

**KUANTUM KUYULARINDA BAĞLANMA ENERJİSİ
VE POLARİZEİLİTE**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

GİZEM ŐEN

Tez Yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Okan AKANKAN

EDİRNE – 2011

T.C
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM KUYULARINDA BAĞLANMA ENERJİSİ
VE POLARİZE BİLİTE

GİZEM ŞEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Tez yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Okan AKANKAN

EDİRNE

2011

T.C
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM KUYULARINDA BAĞLANMA ENERJİSİ
VE POLARİZE BİLİTE

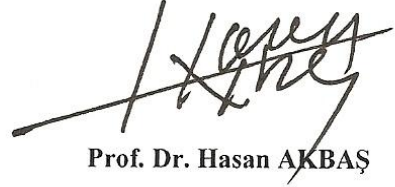
GİZEM ŞEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 19 / 02/2011 tarihinde Aşağıdaki Jüri Tarafından Kabul Edilmiştir.



Yrd. Doç. Dr. Okan AKANKAN
(Danışman)



Prof. Dr. Hasan AKBAŞ
(Üye)



Yrd. Doç. Dr. Cengiz DANE
(Üye)

Yüksek Lisans Tezi

Kuantum Kuyularında Bağlanma Enerjisi Ve Polarizebilite

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Elektrik alan altında, Bir kuantum kuyusunun subband bağlanma ve yabancı atom enerjileri, etkin kütle yaklaşımı göz önüne alınarak ve varyasyonel yöntem kullanılarak hesaplanmıştır. Taban durum dalga fonksiyonlarını kullanarak, polarizasyon ve polarizabilite yabancı atom konumu elektrik alan şiddeti ve kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak hesaplanmıştır.

Polarizasyon ve polarizabilite'nin yabancı atomun konumuna ve hapsedilmenin derecesine bağlı olduğu bulunmuştur. Sonuçlar literatürle uyumludur.

Yıl:2011

Sayfa:62

Anahtar Kelimeler: Kuantum Kuyuları, Elektrik Alan, Dönör, Polarizasyon, Polarizebilite

M. S. Thesis

Binding Energy And Polarizability Quantum Wells

Trakya University, Graduate School of Natural and Applied Science

Department of Physics

SUMMARY

Subband, binding and impurity energies of a GaAs quantum well under an applied electric field have been investigated within a variational procedure and considering the effective mass approximate. Using ground state wave functions, polarization and polarizability have been calculated as a function of the impurity position, electric field strength and well width.

It is found that the polarization and polarizability depend on the impurity position and degree of confinement. The results are in agreement with the literature.

Year:2011

Pages: 62

Keywords: Quantum Well, Electric Field, , Impurity, Polarization, Polarizability

TEŐEKKÜR

Tez yneticiliđimi stlenerek alıŐmalarım sırasında desteđini esirgemeyen, Trakya niversitesi Fen Fakltesi Fizik Blm đretim yesi Yrd. Doç. Dr. Okan AKANKAN' a teŐekkr ederim.

alıŐmalarım esnasında aydınlatıcı bilgilerini ve desteđini esirgemeyen Trakya niversitesi Fen Fakltesi Fizik Blm BaŐkanı Prof. Dr. Hasan AKBAŐ ve Fizik Blm đretim yesi Yrd. Doç.Dr. İlhan ERDOđAN' a yardımlarından dolayı teŐekkr ederim.

Bu alıŐma sresince her trl desteđini esirgemeyen Faik GNDOđDU 'ya teŐekkr ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
SUMMARY.....	ii
TEŞEKKÜRLER.....	iii
İÇİNDEKİLER.....	iv
SİMGELER DİZİNİ.....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	vii
1. GİRİŞ.....	1
2. KUANTUM KUYULARININ OLUŞUMU.....	3
3. SİMETRİK SONSUZ POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLEN BİR ELEKTRONUN ÖZELLİKLERİ	5
3.1. Simetrik Sonsuz Kuantum Kuyusunda Yabancı Atom Problemi.....	11
3.2. Donor Etkisindeki Simetrik Sonsuz Kuantum Kuyusuna Düzgün Elektrik Alan Etkisi.....	15
4. YARI SONLU KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLEN BİR ELEKTRONUN ÖZELLİKLERİ	22
4.1. Yarı Sonlu Kuantum Kuyusunda Yabancı Atom Problemi.....	29

4.2. Donor Etkisindeki Yarı Sonlu Kuantum Kuyusuna Düzgün Elektrik Alan Etkisi.....	33
5. POLARİZASYON VE POLARİZE BİLİTE.....	41
5.1. Simetrik Sonsuz Potansiyelli Kuantum Kuyusunda Polarizasyon Ve Polarizebilite.....	42
5.2. Yarı Sonlu Kuantum Kuyusunda Polarizasyon Ve Polarizebilite.....	51
SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	60
KAYNAKLAR.....	61
ÖZGEÇMİŞ.....	62

SİMGELER DİZİNİ

m^*	Elektronun etkin kütlesi
a_0	Bohr yarıçapı
a^*	Etkin Bohr yarıçapı
R^*	Etkin Rydberg enerjisi
λ	Varyasyonel Parametre
ψ	Dalga fonksiyonu
ε	Dielektrik sabiti
β	Varyasyonel Parametre
η	Hamiltonien ' deki elektrik alan terimi
ξ	Değişken
z_i	Yabancı atomun konumu
ρ	Koordinat değişkeni

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1: Kuantum kuyularının oluşumu.....	3
Şekil 2: Sonsuz potansiyelli kuantum kuyusu.....	5
Grafik 3.1: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda kuyu genişliğine göre elektronun enerjisinin değişimi.....	10
Şekil 3: Yabancı atom etkisi altındaki sonsuz kuantum kuyusu.....	11
Grafik 3.2 : Simetrik sonsuz kuantum kuyusunda bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi.....	14
Şekil 4: Donor etkisi altındaki sonsuz kuantum kuyusuna elektrik alan etkisi.....	15
Grafik 3.3: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda donör enerjisinin enerjisinin $z_i=L/4$ konumundayken elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....	18
Grafik 3.4: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda enerjisinin $z_i=L/4$ konumundayken kuyu genişliğine bağlı değişimi.....	19
Grafik 3.5: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda enerjisinin $z_i=-L/4$ konumundayken elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....	20
Grafik 3.6: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda enerjisinin $z_i=-L/4$ konumundayken kuyu genişliğine bağlı değişimi.....	21
Şekil 5: Yarı sonlu kuantum kuyusu.....	22
Grafik 4.1: Yarı sonlu kuantum kuyusuna hapsedilen elektrona ait taban durumu dalga fonksiyonu.....	27
Grafik 4.2: Yarı sonlu kuantum kuyusunun $L=100, 200 \text{ \AA}$ kuyu genişliklerinde basamak potansiyelinin değişimine göre enerjinin değişimi.....	28

Şekil 6: Yabancı atom etkisi altındaki yarı sonlu kuantum kuyusu.....	29
Grafik 4.3: Yarı sonlu kuantum kuyusunda farklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerjisinin kuyunun genişliğine bağlı değişimi.....	32
Şekil 7: Elektrik alan altında ve donör etkisinde $-L/2$ „de sonsuz $+L/2$ „de V_0 potansiyel engeline sahip olan bir potansiyel kuyusu.....	33
Grafik 4.4: İki farklı elektrik alan altında yarı sonlu kuantum kuyusuna hapsedilen elektrona ait taban durumu dalga fonksiyonu.....	36
Grafik 4.5: Yarı sonlu kuantum kuyusunda enerjisinin $z_i=L/4$ konumundayken kuyu genişliğine bağlı değişimi.....	37
Grafik 4.6: Yarı sonlu kuantum kuyusunda donör enerjisinin donör yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....	38
Grafik 4.7: Yarı sonlu kuantum kuyusunda donör enerjisinin donör yabancı atomu $z_i=-L/4$ konumundayken kuyu genişliğine bağlı değişimi.....	39
Grafik 4.8: Yarı sonlu kuantum kuyusunda donör enerjisinin donör yabancı atomu $z_i=-L/4$ konumundayken elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....	40
Grafik 5.1.1: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyonun yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250$ Å) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....	43
Grafik 5.1.2: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyonun yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken farklı elektrik alan değerleri ($F=0,50,100,150$ kV/cm) için kuyu genişliğine bağlı değişimi.....	44
Grafik 5.1.3: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizabilitenin yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250$ Å) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....	45
Grafik 5.1.4: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizebilitenin yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken farklı elektrik alan değerleri ($F=50,100,150$ kV/cm) için kuyu genişliğine bağlı değişimi.....	46

- Grafik 5.1.5:** Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyonun yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....47
- Grafik 5.1.6:** Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyonun yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken farklı elektrik alan değerleri ($F=0,50,100,150 \text{ kV/cm}$) için kuyu genişliğine bağlı değişimi.....48
- Grafik 5.1.7:** Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizabilitenin yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....49
- Grafik 5.1.8:** Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizabilitenin yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken farklı elektrik alan değerleri ($F=50,100,150 \text{ kV/cm}$) için kuyunun genişliğine bağlı değişimi.....50
- Grafik 5.2.1:** Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = L/4$ konumundayken polarizasyonun farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....52
- Grafik 5.2.2:** Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = L/4$ konumundayken polarizasyonun farklı elektrik alan değerleri ($F=0,50,100,150 \text{ kV/cm}$) için kuyu genişliğine bağlı değişimi.....53
- Grafik 5.2.3:** Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = L/4$ konumundayken polarizabilitenin farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....54
- Grafik 5.2.4:** Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = L/4$ konumundayken polarizabilitenin farklı elektrik alan değerleri ($F=50,100,150 \text{ kV/cm}$) için kuyunun genişliğine bağlı değişimi.....55
- Grafik 5.2.5:** Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken polarizasyonun farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....56

- Grafik 5.2.6:** Antisimetrik yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken polarizasyonun farklı elektrik alan değerleri ($F=0,50,100,150$ kV/cm) için kuyu genişliğine bağlı değişimi.....57
- Grafik 5.2.7:** : Antisimetrik yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken polarizebilitenin farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250$ Å) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi.....58
- Grafik 5.2.8:** Antisimetrik yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken polarizebilitenin farklı elektrik alan değerleri ($F=50,100,150$ kV/cm) için kuyunun genişliğine bağlı değişimi.....59

1.) GİRİŞ

Farklı tür yarıiletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulan düşük boyutlu yapıları kuantum fiziği yardımı ile araştırmak mümkündür. Düşük boyutlu yarı iletken sistemler nanometre (10^{-9} m) boyutunda elektronik ve optoelektronik cihazlardan oluşmaktadır. Bu nanometre boyutlarında elde edilen cihazlar günümüz bilgisayar ve haberleşme endüstrisinde kullanılan devrelerin temellerini oluşturmaktadır. Günümüz teknolojisinde Moleküler Demet Büyütme: MBE (Molecular-beam epitaxy) , Kimyasal Buhar Depolama (CVD) ve Sıvı Faz Büyütme: LPE (Liquid Phase Epitaxy) gibi deneysel teknolojiler ile potansiyel kuyu üretmek mümkün kılınmıştır. Günümüzde bu deneysel teknolojilerle üretilen elektronik devre elemanlarının fiziği; fizik ve elektronik dünyasında çok büyük ilgi görmektedir.

Düşük boyutlu yapıları; kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum kutuları (noktaları) olarak sınıflandırmak mümkündür. Bu sınıflandırılma yapılırken elektronun serbestlik boyutu göz önüne alınır. Elektron; kuantum kuyularında bir boyutta, kuantum tellerinde iki boyutta ve kuantum kutularında ise her üç boyutta sınırlandırılmıştır. Sınırlandırma boyutu göz önüne alınarak, kuantum kuyuları iki boyutlu, kuantum telleri bir boyutlu ve kuantum kutuları sıfır boyutlu yarıiletken sistemler olarak adlandırabilmek mümkündür.

Düşük boyutlu yapıların iletkenliği, malzemeye yabancı atom katılması ile arttırılabilir. Bu nedenle bir yabancı atomun yapıya eklediği ilave elektronun enerji öz durumları ve bağlanma enerjileri yapıyı karakterize eder. Kuantum kuyularında elektrik alanın uygulanması, elektronun dağılımında değişimlere yol açar. Polarizasyon oluşur ve enerji düzeylerinde kaymalar olur. Bu etkiler düşük boyutlu yapının kullanıldığı aygıtın çıkış yoğunluğunun kontrol edilmesinde ve ayarlanmasında kullanılabilir. Ayrıca kuantum enerji durumlarının değişimi ile yabancı atom bağlanma enerjisi de değiştiği için elektrik alan etkisinin incelemesi önemlidir.

Yapılan çalışmalarda etkin kütle yaklaşımında varyasyonel bir yöntem kullanılarak kuantum kuyularında dışarıdan uygulanan bir elektrik alanın yabancı atom bağlanma enerjileri üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Bu çalışmalarda bağlanma

enerjisinin kuyunun geometrik biçimine, yabancı atom konumuna ve uygulanan elektrik alan şiddetine bağlı olarak artma veya azalma gösterdiği gözlenmiştir.

Bu çalışmada bir boyutlu kuantum kuyularına hapsedilen elektronların davranışları incelenmiştir. Kuantum kuyularına hapsedilen bir elektronun taban durum dalga fonksiyonu ve enerjileri bulunmuştur. Elektronun düzgün ve sabit elektrik alana bağlı olarak; simetrik sonsuz ve yarı sonlu kuantum kuyularında nümerik çözümlerde Varyasyonel yöntem kullanılarak hesaplanmıştır. Elektrik alan ve donör etkisinin sistemin Hamiltonyen'ine getirdiği katkılar da verilmiştir. Kuyu içinde bulunan elektrona çeşitli konumlardaki yabancı atomun etkisi ve bağlanma enerjileri araştırılmıştır. Düzgün ve sabit elektrik alan etkisi altında ve donör etkisi sonucunda sahip olduğu enerjileri, deneme dalga fonksiyonları ile yaklaşık olarak bulunmuştur.

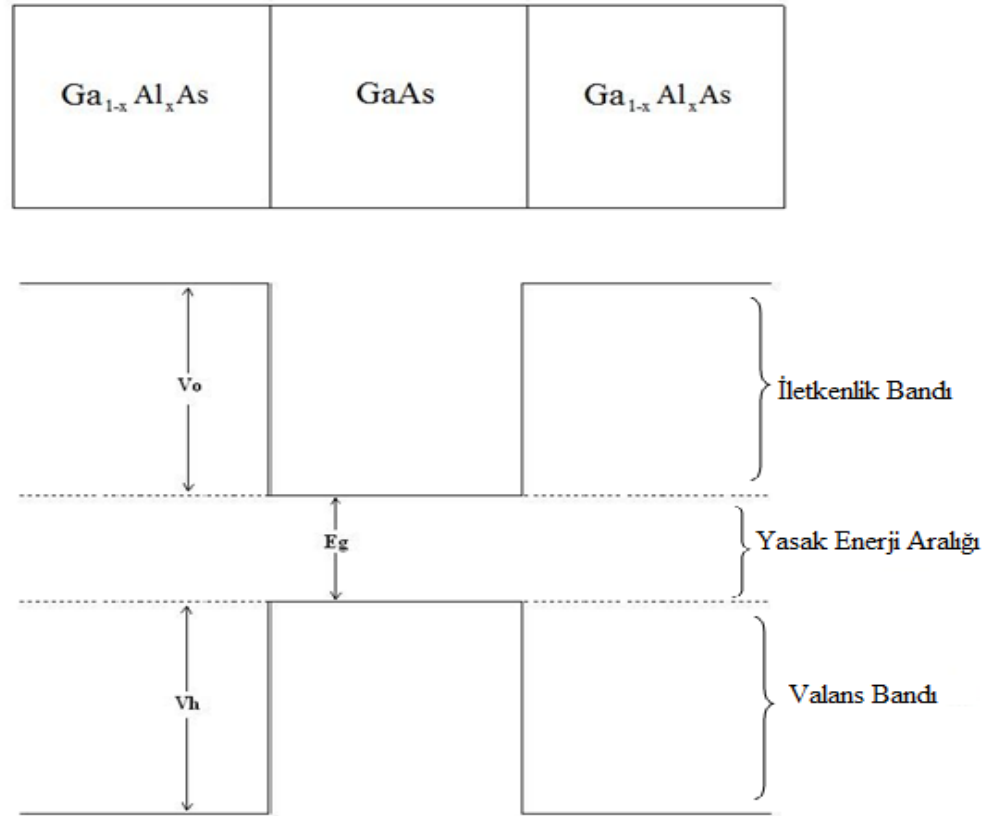
Düşük boyutlu yapılarda elektronun enerji durumlarının incelenmesi Schrödinger denkleminin çözümü ile mümkün olmaktadır. Bu yapılarda analitik çözümlerin bulunması yabancı atom varlığında veya elektrik alan uygulandığında zorlaştığı için nümerik yöntemler kullanılmaktadır. Bu nümerik yöntemler; sonlu farklar yöntemi, varyasyon yöntemi vs.'dir. Biz bu çalışmada varyasyon yöntemini kullandık. Elektrik alan etkisi altındayken kartezyen koordinatlar, donör etkisinde ise işlem kolaylığı açısından silindirik koordinatlar kullanılarak hesaplamalar yapılmıştır.

Son bölümde; tartışma ve sonuçlar verilmiştir. Tartışma ve sonuçlar bölümünde incelediğimiz kuantum kuyularında bağlanma enerjisini; yabancı atomun konumuna, V_0 potansiyel yüksekliğine ve elektrik alan şiddetine bağlı olarak incelenmiştir. Daha sonra elektrik alanın taban durum dalga fonksiyonunu nasıl etkilediği incelenmiştir.

Bu tezdeki nümerik hesaplamalarda, Fortran 77 ile kendi yazdığımız programlar kullanılmıştır.

2.) KUANTUM KUYULARININ OLUŞUMU

Düşük boyutlu yapılar kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktalarıdır. Kuantum kuyusunda elektron tek boyutta potansiyel duvar arasına hapsedilir ve diğer iki boyutta serbestçe hareket eder. Kuantum tellerinde ise elektron iki boyutta potansiyel duvarlar arasında kalır ve tek yönlü hareketi serbesttir. Kuantum noktalarında ise elektron üç boyutta da potansiyel duvarlarla karşılaşır. Bu tanımladığımız yapılar farklı tür yarı iletkenlerin bir araya getirilmesi ile oluşturulurlar.



Şekil 1: Kuantum kuyularının oluşumu

Tek boyutlu bir sistemde $Ga_{1-x}Al_xAs$ ve GaAs malzemeleriyle bir yapı oluşturulduğunda, oluşan yapı için “z” yönündeki potansiyel değişimi şekil-1’ de gösterildiği gibi olur. Buradaki x ifadesi mol kesridir ve yapının oluştuğu malzemelerin (Ga, Al) oranını belirler. Buradaki x’ i kısaca malzemedeki bulunan alüminyum miktarını belirleyen bir değişken olarak tanımlayabiliriz.

İletkenlik ve Valans bandındaki potansiyeller için (V_0, V_h) aşağıdaki bağıntılar kullanılabilir.

$$E_g = (1,555)x + (0,37)x^2$$

$$V_0 = \%60 E_g$$

$$V_h = \%40E_g$$

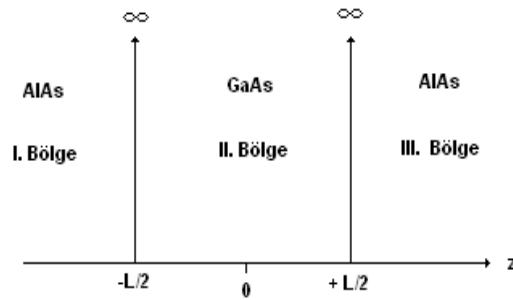
$Ga_{1-x}Al_xAs$ malzemesinde mol kesri $x = 1$ olursa sonsuz potansiyelli kuantum kuyusu elde edilir.

3.) SİMETRİK SONSUZ POTANSİYELLİ KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLEN BİR ELEKTRONUN ÖZELLİKLERİ

Tek boyutlu, L genişliğindeki sonsuz potansiyelli bir kuantum kuyusu içindeki m^* etkin kütleli elektronun dalga denklemi çözülecektir. Böyle bir kuyu için potansiyel dağılımı;

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq \frac{L}{2} \\ \infty, & |z| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.1)$$

şeklindedir. Bu ifadeye göre sonsuz potansiyel kuyusu aşağıdaki gibidir;



Şekil 2: Sonsuz potansiyelli kuantum kuyusu

Kuyunun dışındaki 1. ve 3. bölgelerde m^* etkin kütleli elektron sonsuz potansiyelli enerji duvarlarını aşamayacağından daima kuyu içinde kalacaktır. Yani elektronu temsil eden dalga fonksiyonu $\psi(z)$ sıfır olacaktır. Schrödinger denklemi yalnızca kuyu içinde çözülmelidir.

Kuyunun içinde Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi:

$$H_0\psi(z) = E_n\psi(z) \quad (3.2)$$

$$\left\{\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2}\right\} \psi(z) = E_n\psi(z) \quad (3.3)$$

dir. Uzunluk olarak etkin bohr yarıçapı a^* ve enerji birimi olarak Rydberg enerjisi alınırsa $\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1$ olacağından elektron sonsuz potansiyelli kuantum kuyusuna hapsedildiğinde Schrödinger denklemi:

$$\left\{\frac{-d^2}{dz^2}\right\} \psi(z) = E_n\psi(z) \Rightarrow \left\{\frac{-d^2}{dz^2} - E_n\right\} \psi(z) = 0 \quad (3.4)$$

şeklini alır. Burada $k = \sqrt{E_n}$ olmak üzere dalga fonksiyonu;

$$\psi(z) = A \cos(kz) + B \sin(kz)$$

şeklinde elde edilir.

Bu genel çözüme sınır şartlarını uygularsak:

- $z = -\frac{L}{2}$, de $V(z) = \infty$ olduğundan $\psi_2\left(z = -\frac{L}{2}\right) = 0$ olmalıdır.

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = A \cos\left(-\frac{kL}{2}\right) + B \sin\left(-\frac{kL}{2}\right) = 0$$

ve

$$A \cos\left(\frac{kL}{2}\right) - B \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

- $z = \frac{L}{2}$, de $V(z) = \infty$ olduğundan $\psi_2\left(z = \frac{L}{2}\right) = 0$ olmalıdır.

$$\psi\left(\frac{L}{2}\right) = A \cos\left(\frac{kL}{2}\right) + B \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

ve

$$A \cos\left(\frac{kL}{2}\right) + B \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

elde edilir. Bu denklemleri çözmek için katsayılar determinatına bakılır.

$$\begin{vmatrix} \sin\left(\frac{kL}{2}\right) & \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{kL}{2}\right) & \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \cos\left(\frac{kL}{2}\right) + \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \cos\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

$$2\sin\left(\frac{kL}{2}\right) \cos\left(\frac{kL}{2}\right) = 0 \Rightarrow \sin\left(2\frac{kL}{2}\right) = 0$$

$$kL = n\pi$$

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n=0,1,2,\dots \quad (3.5)$$

Burada k_n ifadesini yerine yazarak;

$$\psi(z) = A \cos\left(\frac{n\pi}{L}z\right) + B \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right) \quad (3.6)$$

Elde edilen bu dalga fonksiyonu için tek ve çift olmak üzere iki tür çözümü vardır.

n çift durum için: $A = 0, B \neq 0$

$$\psi_n^+(z) = A \cos\left(\frac{n\pi}{L}z\right) \quad n=1,3,5,\dots \quad (3.7)$$

n tek durum için: $B = 0, A \neq 0$

$$\psi_n^-(z) = B \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right) \quad n=2,4,6,\dots \quad (3.8)$$

Burada A ve B normalizasyon sabitleridir. Bu sabitler dalga fonksiyonunun normalize edilmesi ile elde edilir.

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi^*(z) \psi(z) dz = 1 \quad (2.9)$$

Dalga fonksiyonlarının normalize edildikten sonraki ifadeleri:

$$\psi_n^+(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L} z\right) \quad n=1,3,5,\dots \quad (3.10)$$

$$\psi_n^-(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} z\right) \quad n=2,4,6,\dots \quad (3.11)$$

elde edilir.

Elektronun enerji özdeğeri ise:

$$E_n = \left(\frac{\langle \psi_n(z) | H_0 | \psi_n(z) \rangle}{\langle \psi_n(z) | \psi_n(z) \rangle} \right) \quad (3.12)$$

bağıntısından hesaplanır, burada sistemin H Hamiltonieni;

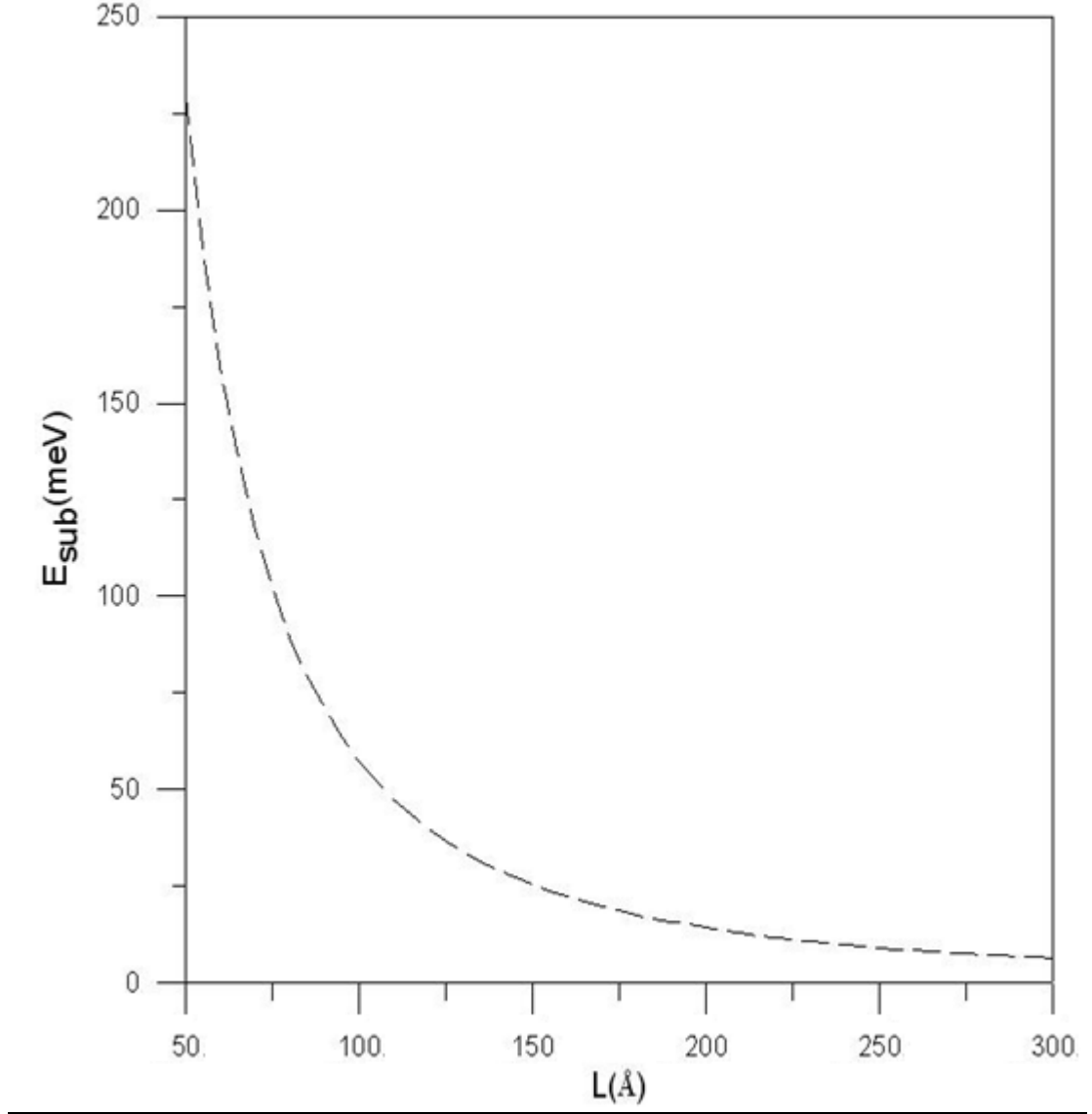
$$H_0 = -\frac{d^2}{dz^2}$$

dir.

Bu sonuçlar doğrultusunda sonsuz potansiyelli kuantum kuyusuna hapsedilen parçacığın alabileceği enerji özdeğerleri n tamsayısına bağlı değişir. Yani enerji değerleri tam sayı katları şeklinde kuantize olmuştur.

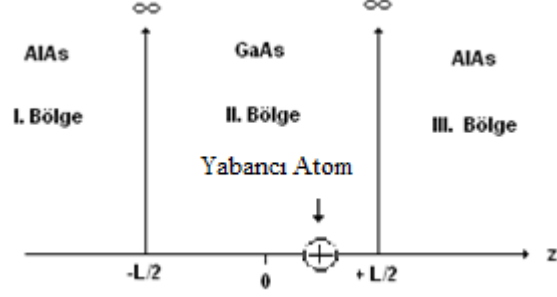
Parçacığın taban durum enerjisi hesaplanmış ve kuyu genişliğine bağlı olarak Grafik 3.1 ' de verilmiştir.

GaAs bölgesine hapsedilmiş elektronun etkin kütlesi $m^*=0,067m_0$ 'dır. burada $m_0=9,11.10^{-31}$ kg serbest elektron kütlesidir. AlAs / GaAs / AlAs kuantum kuyusunda bulunan böyle bir elektronun taban durum enerjisi hesaplanmış ve kuyu genişliğine bağlı olarak Grafik 3.1' de verilmiştir.



Grafik 3.1: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda kuyu genişliğine göre elektronun enerjisinin değişimi

3.1. Simetrik Sonsuz Potansiyelli Kuantum Kuyusunda Yabancı Atom Etkisi



Şekil 3: Yabancı atom etkisi altındaki sonsuz kuantum kuyusu

Sonsuz potansiyelli kuantum kuyusuna yabancı bir atom bulunduğunda, bu atomla elektron arasında bir coulomb etkileşmesinden dolayı bir coulomb potansiyeli oluşur. Buna göre sonsuz kuantum kuyusu içindeki bir elektrona yabancı bir atomun etkisinin olması durumunda Hamiltonyeni;

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} \quad (3.1.1)$$

şeklindedir. Burada;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

kartezyen koordinatlardaki ifadesidir. İşlem kolaylığı açısından kartezyen koordinatlardan silindirik koordinatlara geçildiğinde;

$$x = \rho \cos \theta \quad y = \rho \sin \theta \quad z = z$$

$$\rho^2 = x^2 + y^2$$

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$r = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2}$$

x_i, y_i, z_i yabancı atomun konumu olmak üzere tek boyutlu bir sistem için $x_i=y_i = 0$ olduğundan;

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_i)^2}$$

$$r = \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}$$

alınırsa

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (3.1.2)$$

Uzunluklar a^* ve enerjiler R^* biriminde alındığında $\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1$ ve $\frac{e^2}{\epsilon_0} = 2$ olur. ϵ_0 ortamın dielektrik sabitini ve $r = \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}$ yabancı atomun konumunu göstermektedir. Bu durumda;

$$H_i = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (3.1.3)$$

ve Schrödinger Denklemi

$$H_i \psi_i(\rho, z) = E_i \psi_i(\rho, z)$$

dir.

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \right\} \psi_i(\rho, z) = E_i \psi_i(\rho, z) \quad (3.1.4)$$

Bu diferansiyel denklemin analitik çözümü yoktur. Bu nedenle yaklaşık çözüm yöntemlerinden olan varyasyonel yöntemi kullanıyoruz. Taban durum için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi_i(\rho, z) = N \cos\left(\frac{\pi}{L}z\right) e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (3.1.5)$$

N normalizasyon katsayısı, λ varyasyon parametresidir.

Bu durumlar göz önüne alınarak taban durum enerjisi için,

$$\langle E_1 \rangle = \left(\frac{\langle \psi_i(\rho, z) | H_i | \psi_i(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_i(\rho, z) | \psi_i(\rho, z) \rangle} \right)_{\min} \quad (3.1.6)$$

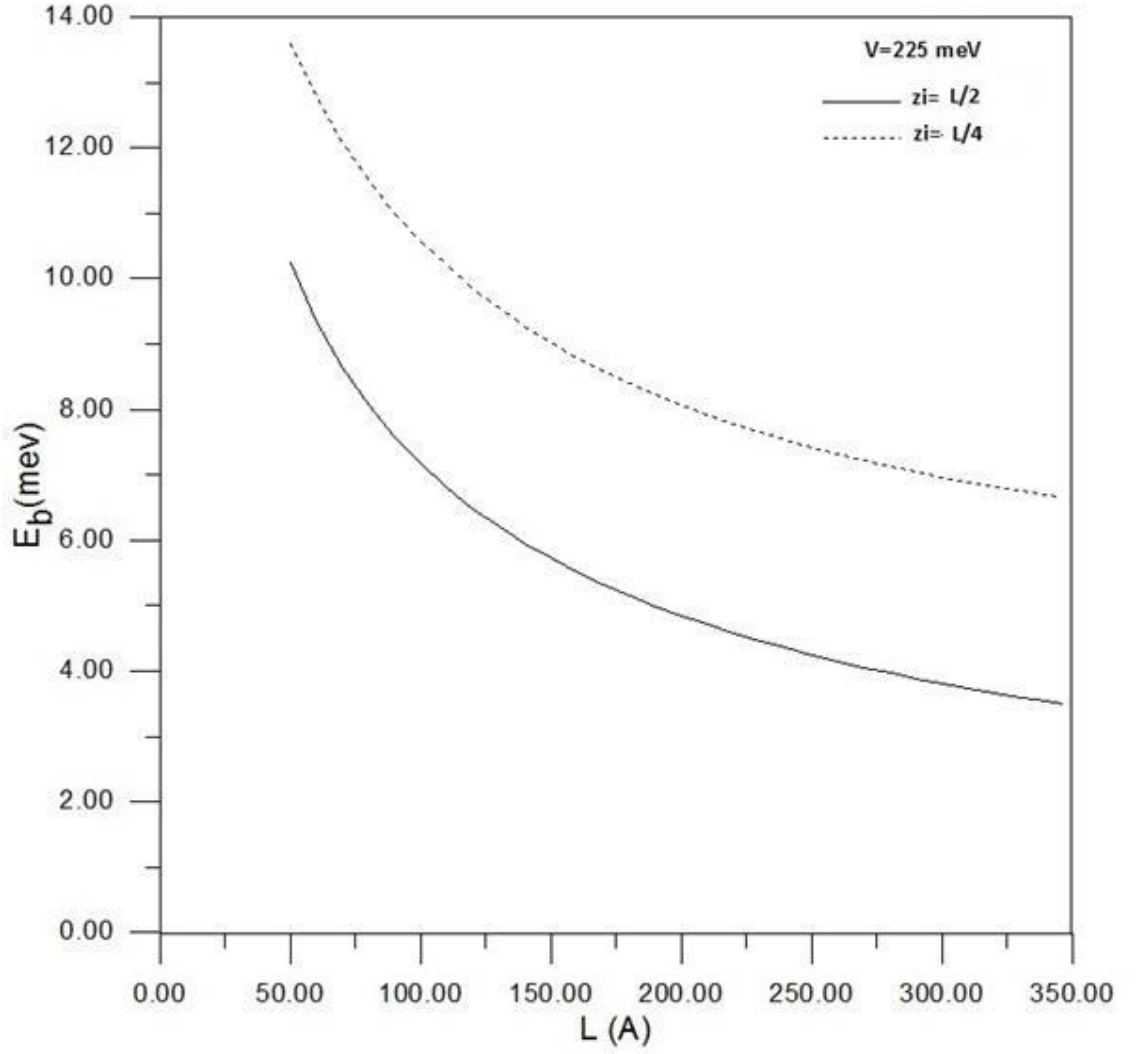
ifadesi yazılır.

Bu durumda elektron için bağlanma enerjisinin tanımı yapılabilir. E_0 yabancı atomun yokluğundaki elektronun taban durum enerjisi, $\langle E_1 \rangle$ yabancı atomun varlığındaki elektronun taban durum enerjisi olmak üzere:

$$E_b = E_0 - \langle E_1 \rangle \quad (3.1.7)$$

olur.

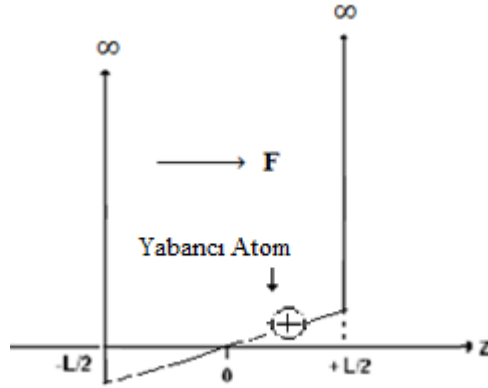
Sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda farklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi Grafik 3.2 'de verilmiştir.



Grafik 3.2 : Simetrik sonsuz kuantum kuyusunda bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi

3.2. Simetrik Sonsuz Potansiyelli Kuantum Kuyusunda Donor Yabancı Atomuna Düzgün Elektrik Alanın Etkisi

İçinde yabancı atom bulunan simetrik sonsuz kuantum kuyusuna “+z” yönünde bir elektrik alan uygulandığında, “F” elektrik alan şiddeti olmak üzere kuyunun şekli aşağıdaki gibi olur.



Şekil 4: Donor etkisi altındaki sonsuz kuantum kuyusuna elektrik alan etkisi

Düzgün elektrik alan altında donör kuantum kuyusu için sistemin Hamiltonieni

$$H_{fi} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + eFz + V(z) \quad (3.2.1)$$

olur. Burada z_i yabancı atomun konumunu göstermektedir.

Hamiltonien $\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1$ alındığında a^* ve R^* biriminde $\eta = eF$ olmak üzere silindirik koordinatlarda Schrödinger Denklemi:

$$H_{fi} \psi_{fi}(\rho, z) = E_{fi} \psi_{fi}(\rho, z) \quad (3.2.2)$$

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z + V(z) \right\} \psi_{fi}(\rho, z) = E_{fi} \psi_{fi}(\rho, z) \quad (3.2.3)$$

şeklinde yazılır. Sonsuz potansiyel kuyusuna hapsedilmiş elektron için $V(z) = 0$ olduğundan denklem;

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z \right\} \psi_{fi}(\rho, z) = E_{fi} \psi_{fi}(\rho, z) \quad (3.2.4)$$

olur. Bu diferansiyel denklemin analitik çözümü yoktur. Taban durum deneme dalga fonksiyonu;

$$\psi_{fi}(\rho, z) = N_2 \cos\left(\frac{\pi}{L} z\right) e^{-\beta z} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (3.2.5)$$

olur. Bu denklemlerde β ve λ varyasyonel parametrelerdir. Donor enerjisi:

$$\langle E \rangle_{fi} = \left(\frac{\langle \psi_{fi}(\rho, z) | H_{fi} | \psi_{fi}(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_{fi}(\rho, z) | \psi_{fi}(\rho, z) \rangle} \right)_{\min \lambda, \beta} \quad (3.2.6)$$

formülünden hesaplanır. Silindirik koordinatlarda hacim elemanı;

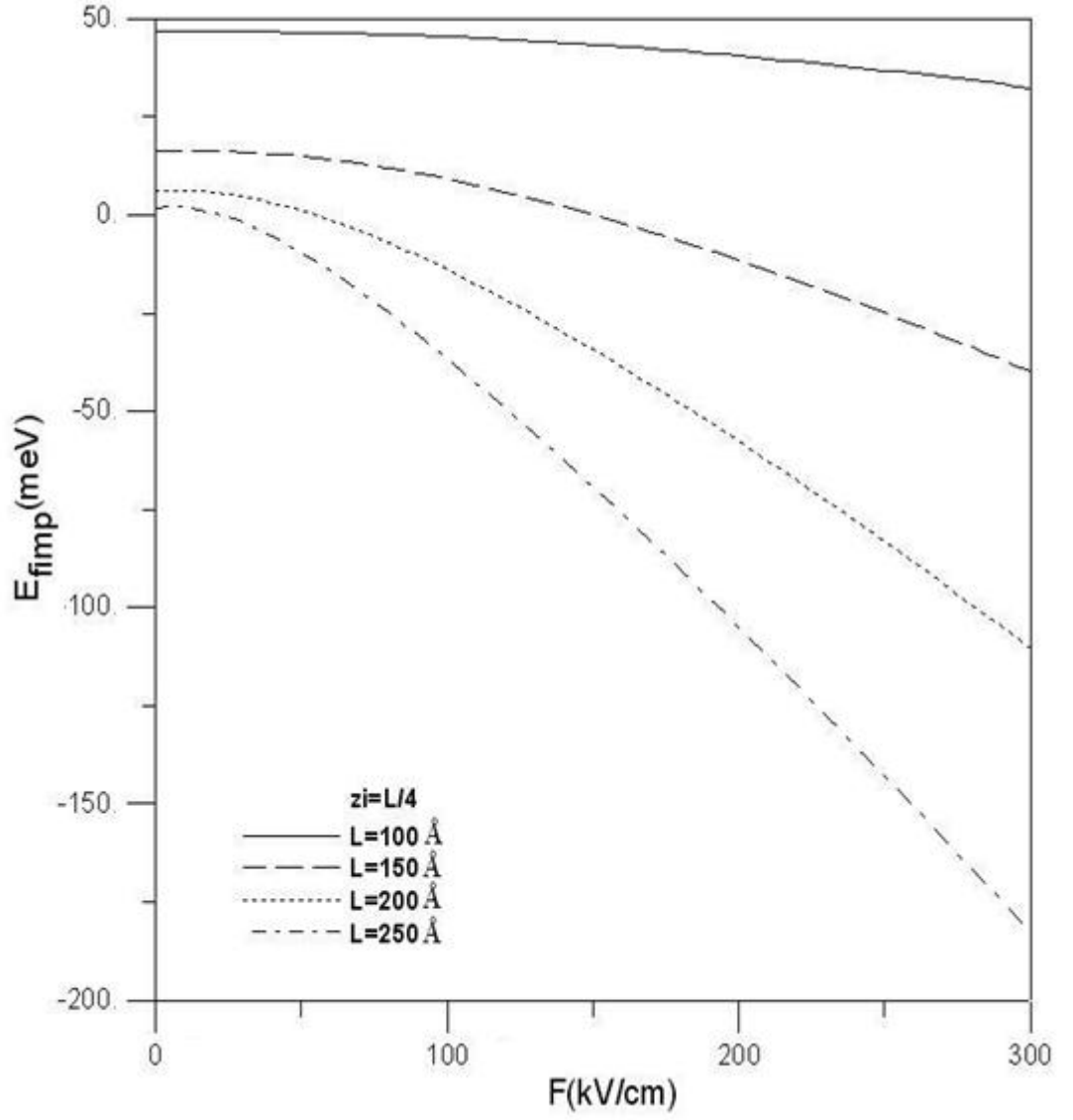
$$dV = \rho d\rho dz d\varphi$$

dir.

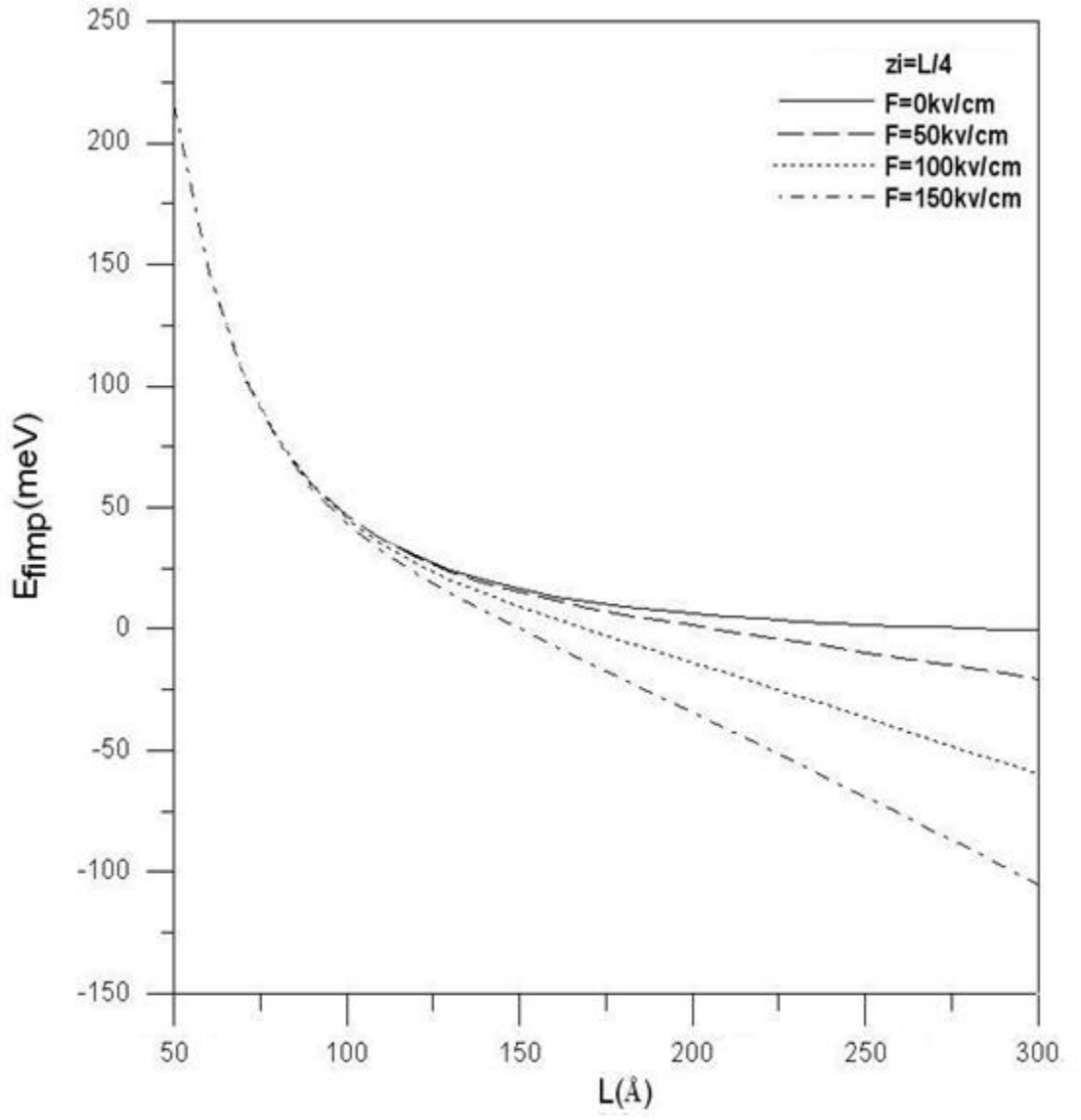
Sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda taban durum enerjisinin $z_i=L/4$ ve $z_i=-L/4$ konumundayken $F=0,50,100,150$ kV/cm elektrik alan şiddetleri altında kuyu genişliğine bağlı değişimi Grafik 3.3 ve Grafik 3.5 ' te verilmiştir.

Sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda taban durum enerjisinin $z_i=L/4$ ve $z_i=-L/4$ konumundayken $L=100,150,200,250 A^0$ kuyu genişliklerinde elektrik alan şiddetine bağlı değişimi Grafik 3.4 ve Grafik 3.6 ' da verilmiştir.

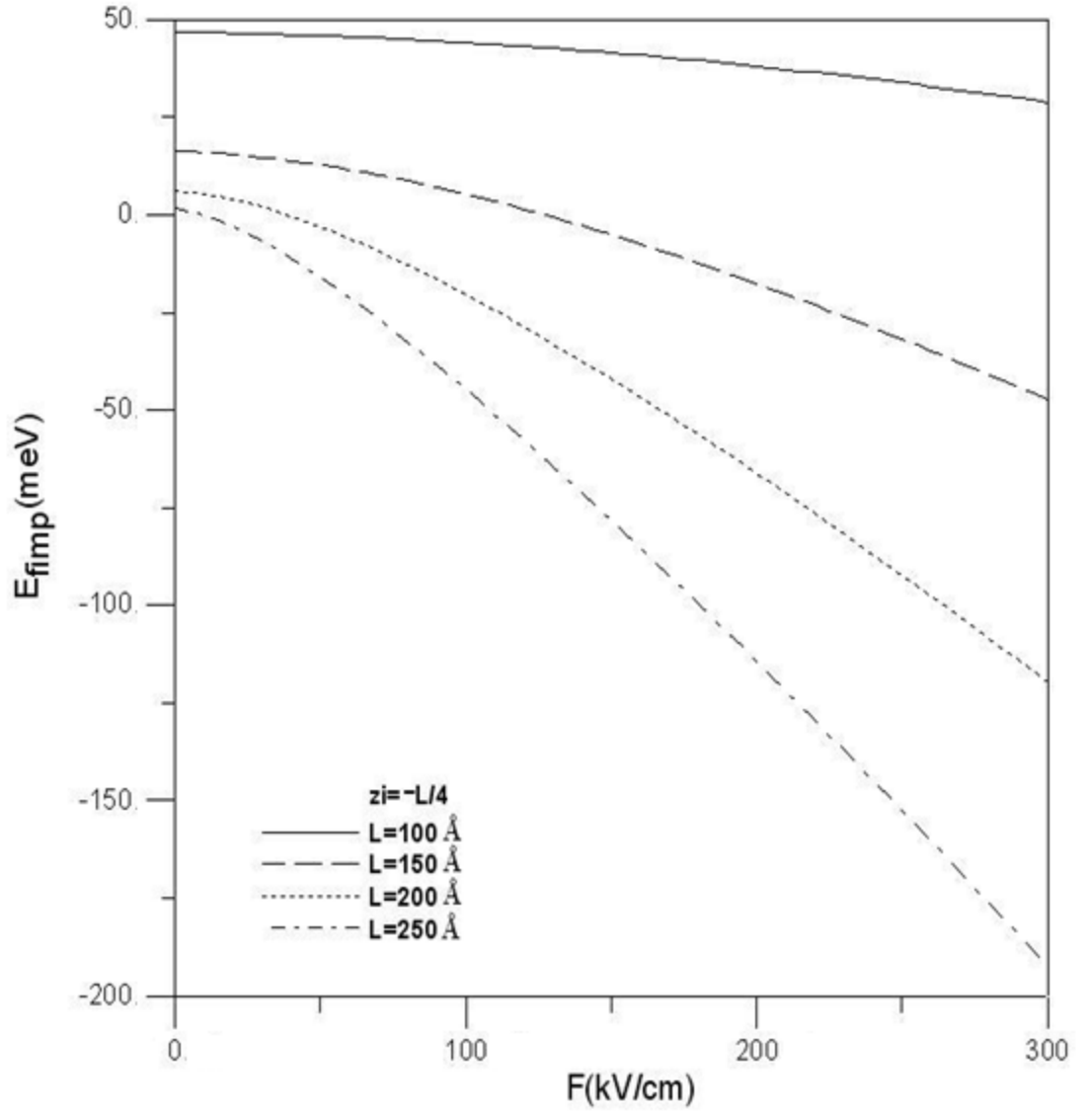
Grafiklerden taban durum enerjilerinin artan elektrik alan ve artan kuyu genişliklerinde azaldığı görülmektedir.



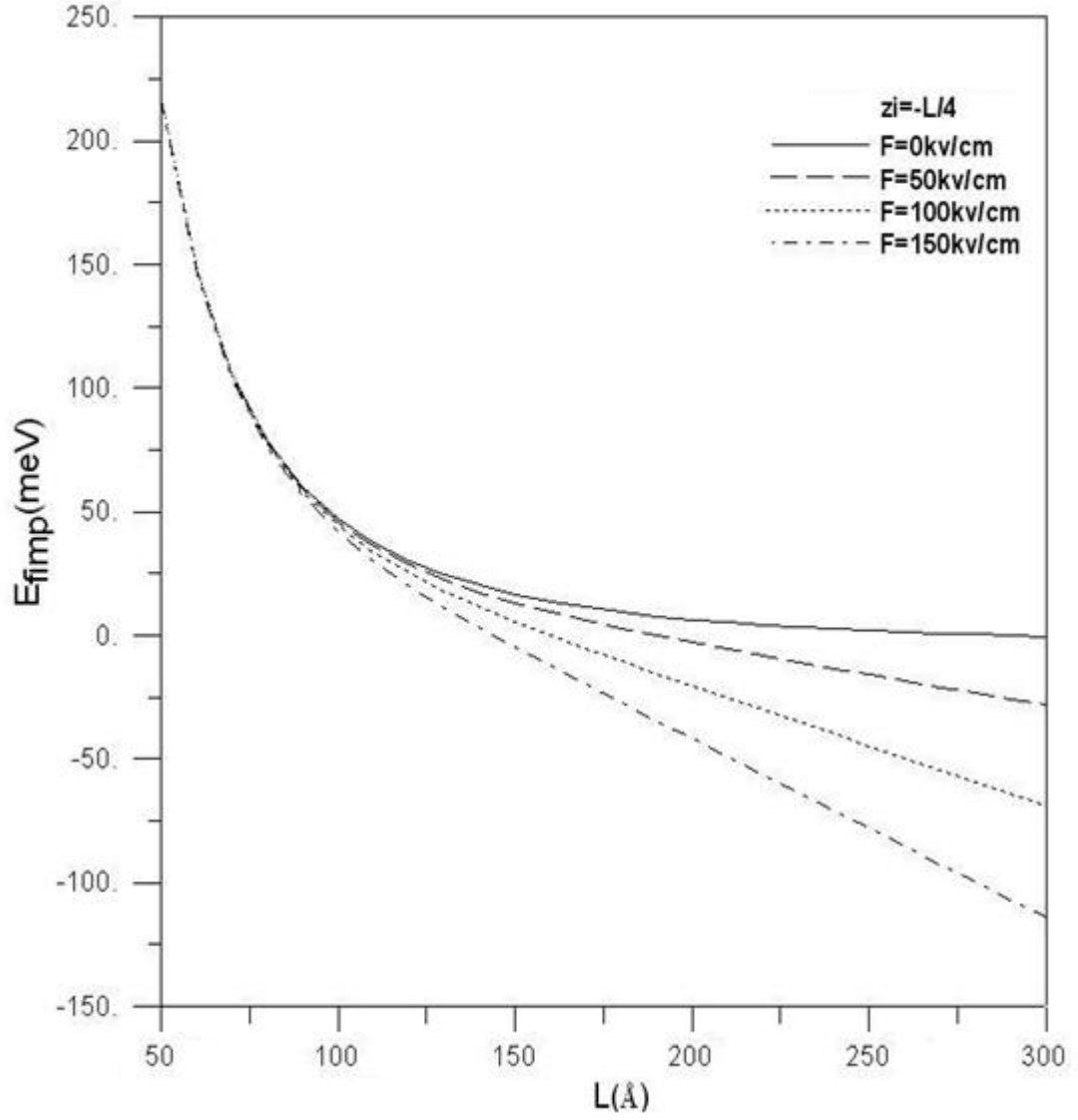
Grafik 3.3: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda donör enerjisinin enerjisinin $z_i=L/4$ konumundayken elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



Grafik 3.4: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda enerjisinin $z_i=L/4$ konumundayken kuyu genişliğine bağlı değişimi.



Grafik 3.5: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda enerjisinin $z_i = -L/4$ konumundayken elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



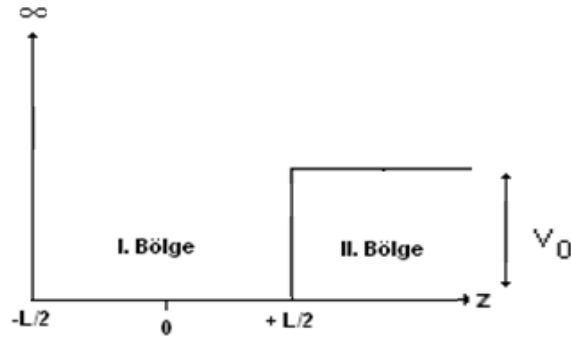
Grafik 3.6: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda enerjisinin $z_i = -L/4$ konumundayken kuyu genişliğine bağlı değişimi

4.) YARI SONLU KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLEN BİR ELEKTRONUN ÖZELLİKLERİ

Tek boyutlu simetrik yarı sonlu bir kuantum kuyusunda m kütleli bir parçacık için Schrödinger denklemi çözülecektir. Bu kuyuya ait olan potansiyel enerji dağılımı;

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & z \leq -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} \\ V_0, & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.1)$$

şeklindedir. Kuyunun şekli aşağıdaki gibi olur.



Şekil 5: Yarı sonlu kuantum kuyusu

Parçacık yarı sonlu bir kuyuda bulunduğundan tamamen kuyu içine hapsolmayacaktır, kuyunun sağındaki engel olan bölgede de bulunabilecektir. Sonsuz kuyuda olduğu gibi yine parçacık kuyunun sol tarafındaki bölgede bulunamayacaktır.

Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi:

$$H_0\psi(z) = E_0\psi(z) \quad (4.2)$$

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right\} \psi(z) = E_0\psi(z)$$

Etkin kütle yaklaşımı altında bu denklem a^* ve R^* biriminde $\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1$ olur.

1. Bölge de a^* , R^* birim sisteminde Schrödinger denklemi:

$$\left\{ \frac{-d^2}{dz^2} + 0 \right\} \psi_1(z) = E_0\psi_1(z) \Rightarrow \left\{ \frac{-d^2}{dz^2} - E_0 \right\} \psi_1(z) = 0 \quad (4.2)$$

olur. Burada; $k_1 = \sqrt{E_0}$ 'dir.

$$\psi_1(z) = A \cos(k_1 z) + B \sin(k_1 z) \quad (4.3)$$

şeklinde elde edilir.

II. Bölge de Schrödinger denklemi:

$$\left\{ \frac{-d^2}{dz^2} + V_0 \right\} \psi_2(z) = E_0\psi_2(z) \Rightarrow \left\{ \frac{-d^2}{dz^2} + V_0 - E_0 \right\} \psi_2(z) = 0 \quad (4.4)$$

olur. Burada; $k_2 = \sqrt{V_0 - E_0}$ 'dir.

$$\psi_2(z) = Ce^{k_2 z} + De^{-k_2 z} \quad (4.5)$$

şeklinde dalga fonksiyonları elde edilmiş olur.

II. bölgede $\psi_2(z)$ dalga fonksiyonu $z = \infty$ için $\psi_2(z = \infty) = 0$ 'dır ve C katsayısı 0 olmalıdır. Dalga fonksiyonunun yeni hali;

$$\psi_2(z) = De^{-k_2 z}$$

olur. Bu dalga fonksiyonlarına sınır şartları uygulanırsa;

- $z \leq -\frac{L}{2}$ bölgesinde $V(z) = \infty$ olduğundan dalga fonksiyonu $\psi_1\left(z = -\frac{L}{2}\right) = 0$ olmalıdır.

$$A \cos\left(-\frac{k_1 L}{2}\right) + B \sin\left(-\frac{k_1 L}{2}\right) = 0 \quad (4.6)$$

$$A = B \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right)$$

Bu durumda $\psi_1(z)$ dalga fonksiyonu Denklem (3.7)'deki gibi olur.

$$\psi_1(z) = B \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right) \cos(k_1 z) + B \sin(k_1 z) \quad (4.7)$$

- $\psi_1(z)|_{z=\frac{L}{2}} = \psi_2(z)|_{z=\frac{L}{2}}$; $z = \frac{L}{2}$ 'de dalga fonksiyonunun sürekliliğinden;

$$B \tan\left(k_1 \frac{L}{2}\right) \cos\left(k_1 \frac{L}{2}\right) + B \sin\left(k_1 \frac{L}{2}\right) = D e^{-k_2 \frac{L}{2}} \quad (4.8)$$

- $\frac{d\psi_1(z)}{dx}\Big|_{z=\frac{L}{2}} = \frac{d\psi_2(z)}{dx}\Big|_{z=\frac{L}{2}}$; $z = \frac{L}{2}$ 'de dalga fonksiyonlarının türevlerinin sürekliliğinden;

$$-B k_1 \tan\left(k_1 \frac{L}{2}\right) \sin\left(k_1 \frac{L}{2}\right) + B k_1 \cos\left(k_1 \frac{L}{2}\right) = -D k_2 e^{-k_2 \frac{L}{2}} \quad (4.9)$$

olur. Denklem (4.8) ve Denklem (4.9) oranlanırsa;

$$\frac{B \tan\left(k_1 \frac{L}{2}\right) \cos\left(k_1 \frac{L}{2}\right) + B \sin\left(k_1 \frac{L}{2}\right)}{-B k_1 \tan\left(k_1 \frac{L}{2}\right) \sin\left(k_1 \frac{L}{2}\right) + B k_1 \cos\left(k_1 \frac{L}{2}\right)} = \frac{D e^{-k_2 \frac{L}{2}}}{-D k_2 e^{-k_2 \frac{L}{2}}}$$

$$k_2 \tan\left(k_1 \frac{L}{2}\right) + k_1 = 0 \quad (4.10)$$

Burada $k_1 = \sqrt{E_0}$ ve $k_2 = \sqrt{V_0 - E_0}$ 'olmak üzere Denklem (4.10);

$$\sqrt{V_0 - E_0} \tan(\sqrt{E_0} L) + \sqrt{E_0} = 0 \quad (4.11)$$

bulunur. Bu denklemi sağlayan enerji değerleri nümerik olarak FORTRAN programı yardımı ile hesaplanmıştır.

Buna göre dalga fonksiyonları:

$$\psi_1(z) = B \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right) \cos(k_1 z) + B \sin(k_1 z) \quad (4.12)$$

ve

$$\psi_2(x) = D e^{-k_2 z} \quad (4.13)$$

olur. Bu denklemlerdeki B ve D sabitleri dalga fonksiyonun normalizasyonu ile elde edilir.

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi_1^*(z) \psi_1(z) dz + \int_{L/2}^{\infty} \psi_2^*(z) \psi_2(z) dz = 1 \quad (4.14)$$

Denklemi kullanılırsa dalga fonksiyonları;

$$\psi(z) = \begin{cases} B \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right) \cos(k_1 z) + B \sin(k_1 z) & -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} \\ B \left(\frac{\sin(k_1 L)}{\cos\left(\frac{k_1 L}{2}\right)} e^{k_2 \frac{L}{2}} \right) e^{-k_2 z} & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.15)$$

olarak elde edilir, burada B katsayısı:

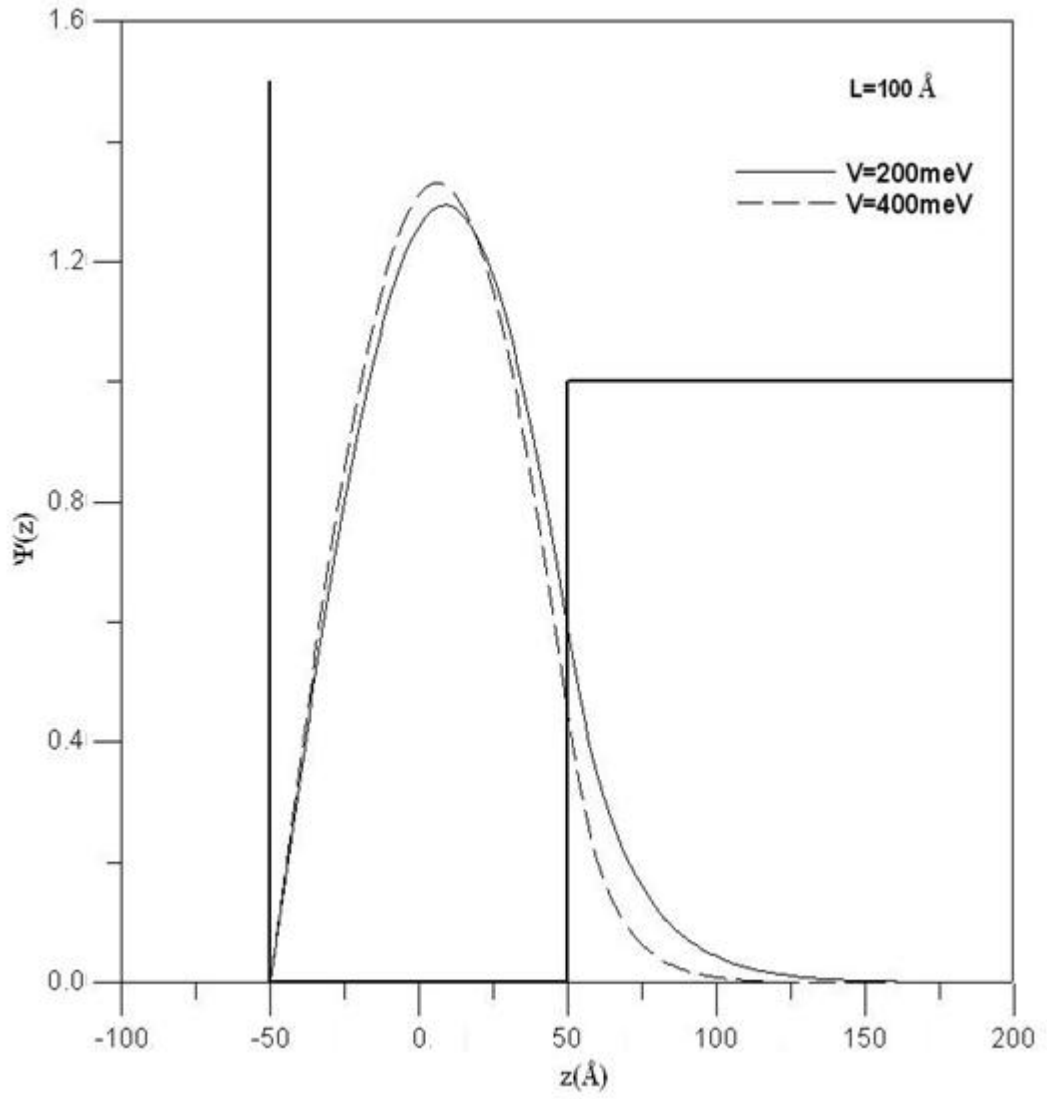
$$B^{-2} = \frac{L}{2} \left(1 - \frac{\sin(k_1 L)}{2k_1 L} + \frac{\sin^2(k_1 L)}{k_2 L} \right) \quad (4.16)$$

'dir.

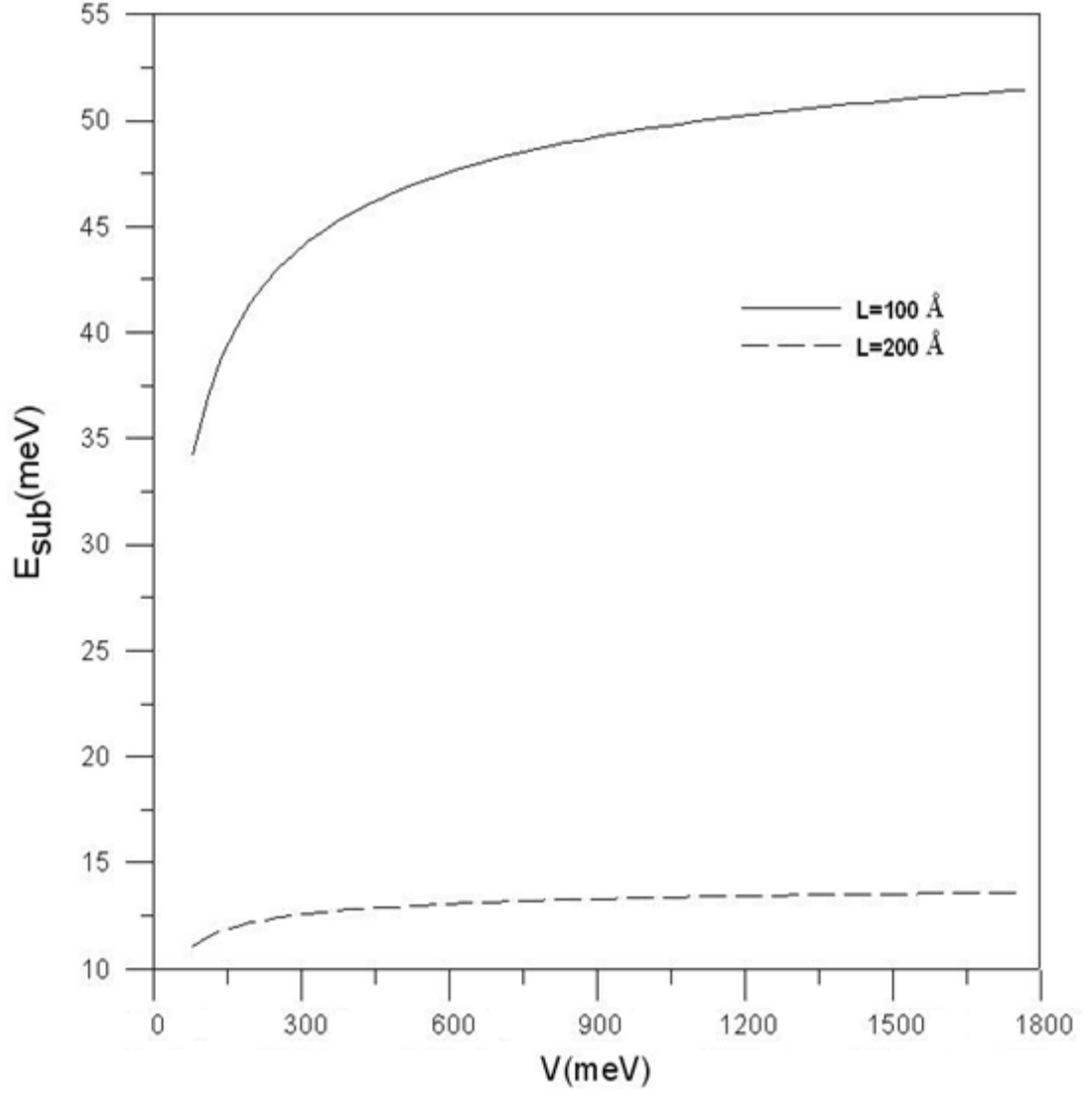
Elektronun taban durum dalga fonksiyonu nümerik olarak hesaplanmış ve $V_0=200,400$ meV potansiyel engelli kuyu için; Denklem (4.10), Denklem (4.14) ve

Denklem (4.15) kullanılarak hesaplanmış ve hesaplanan dalga fonksiyonları Grafik 4.1 'de çizilmiştir.

$L=100,200 \text{ \AA}$ için taban durum enerjisinin V_0 engel potansiyeline bağı olarak hesaplanmış ve V_0 engel potansiyeline bağı deęişimi Grafik 4.2' de verilmiştir. Artan engel potansiyeli ile elektronun enerjisinin arttığı ve onsuz kuantum kuyusundaki enerji deęerine yaklaştığı görölmektedir.

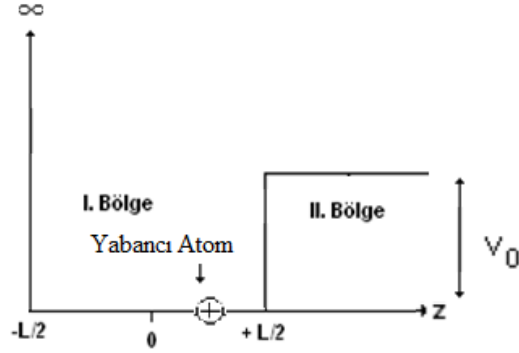


Grafik 4.1: Yarı sonlu kuantum kuyusuna hapsedilen elektrona ait taban durumu dalga fonksiyonu



Grafik 4.2: Yarı sonlu kuantum kuyusunun $L=100, 200 \text{ \AA}$ kuyu genişliklerinde basamak potansiyelinin değişimine göre enerjinin değişimi

4.1. Yarı Sonlu Kuantum Kuyusunda Yabancı Atom Problemi



Şekil 6: Yabancı atom etkisi altındaki yarı sonlu kuantum kuyusu

Yarı sonlu kuantum kuyusu içindeki bir elektrona yabancı bir atomun etkisinin olması durumunda Hamiltonyeni;

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} \quad (4.1.1)$$

Burada

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (4.1.2)$$

dir. Kartezyen den silindirik koordinatlara geçilirse;

$$x = \rho \cos \theta \quad y = \rho \sin \theta \quad z = z$$

$$\rho^2 = x^2 + y^2$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

z_i yabancı atomun konumunu göstermek üzere sistemin Hamiltonieni genel olarak:

$$H_i = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + V(z) \quad (4.1.3)$$

şeklindedir. Hamiltonien ifadesini iki bölge için yazacak olursak;

$$H_{i1} = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} \quad (4.1.4)$$

$$H_{i2} = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + V(z) \quad (4.1.5)$$

Silindirik koordinatlar kullanılarak Schrödinger Denklemi;

$$H_i \psi_i(\rho, z) = E_i \psi_i(\rho, z) \quad (4.1.6)$$

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + V(z) \right\} \psi_i(\rho, z) = E_i \psi_i(\rho, z) \quad (4.1.7)$$

şeklinde yazılır. Bu denklemin tam çözümü olmadığı için varyasyon çözüm yöntemi ile çözülecektir. İki bölge için taban durum deneme dalga fonksiyonları:

$$\psi_{i1}(\rho, z) = N \left\{ \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right) \cos(k_1 z) + \sin(k_1 z) \right\} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (4.1.8)$$

$$\psi_{i2}(\rho, z) = N \left(\frac{\sin(k_1 L)}{\cos\left(k_1 \frac{L}{2}\right)} e^{k_2 \frac{L}{2}} \right) e^{-k_2 z} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (4.1.9)$$

şeklindedir. N normalizasyon katsayısı, λ varyasyon parametresidir.

Taban durum elektronun enerjisi için,

$$\langle E_1 \rangle = \left(\frac{\langle \psi_{i1}(\rho, z) | H_{i1} | \psi_{i1}(\rho, z) \rangle + \langle \psi_{i2}(\rho, z) | H_{i2} | \psi_{i2}(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_{i1}(\rho, z) | \psi_{i1}(\rho, z) \rangle + \langle \psi_{i2}(\rho, z) | \psi_{i2}(\rho, z) \rangle} \right)_{min} \quad (4.1.10)$$

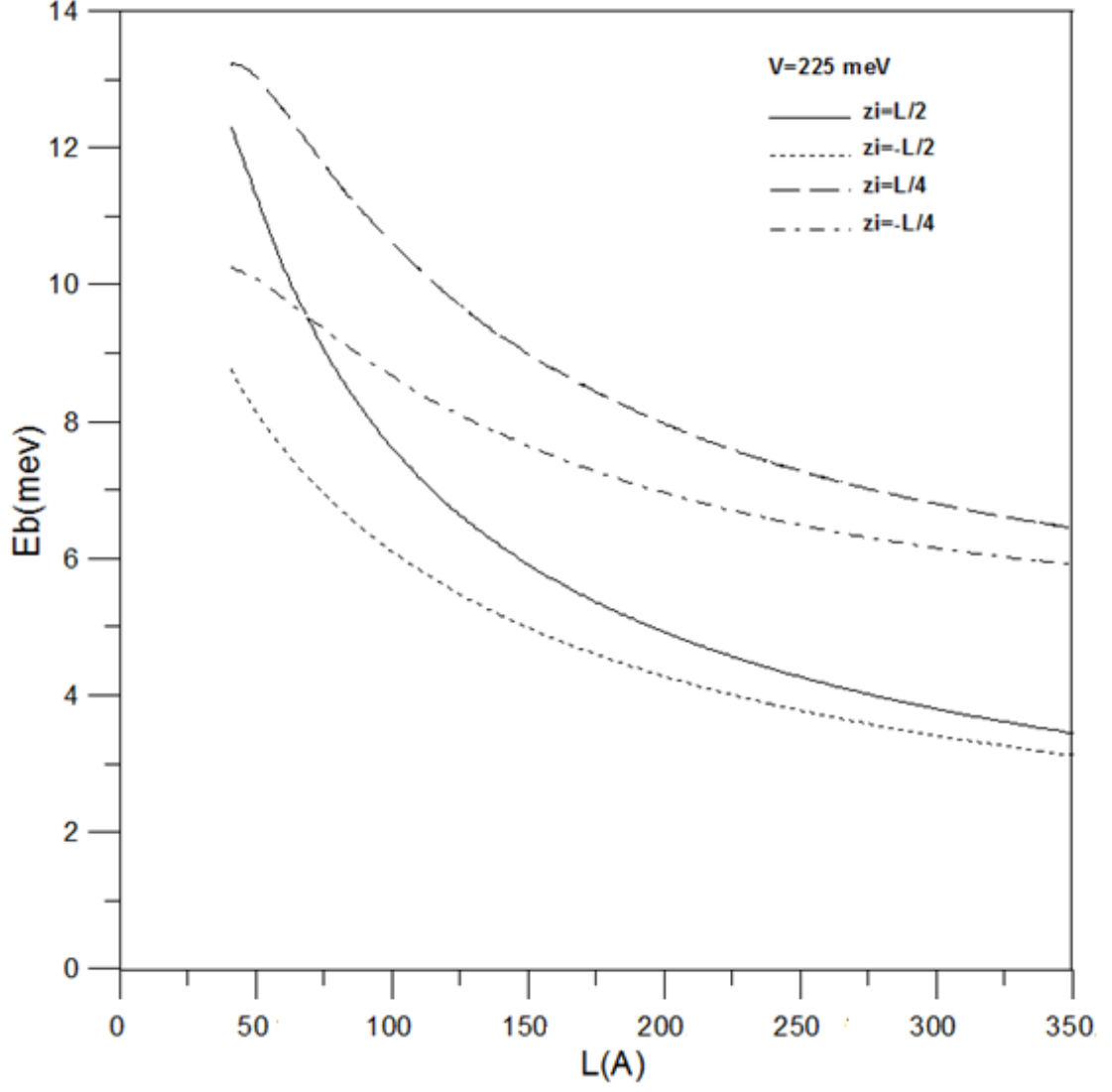
ifadesi yazılır.

E_0 yabancı atomun yokluğundaki elektronun taban durum enerjisi, $\langle E_1 \rangle$ yabancı atomun varlığındaki elektronun taban durum enerjisi olmak üzere bağlanma enerjisi:

$$E_b = E_o - \langle E_1 \rangle \quad (4.1.11)$$

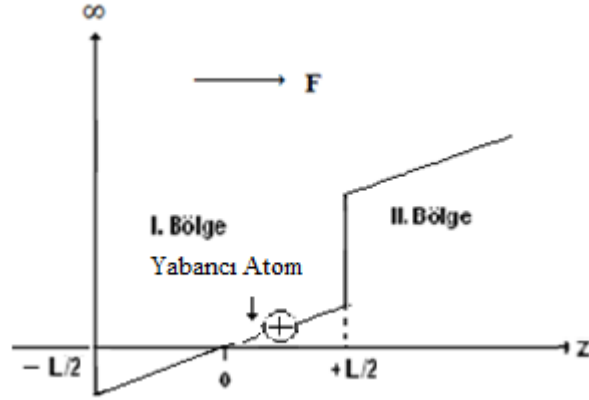
olur.

Farklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerjisinin kuyunun genişliğine bağlı değişimi Grafik 4.3 ' te verilmiştir. Kuyu genişliği arttıkça bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir.



Grafik 4.3: Yarı sonlu kuantum kuyusunda farklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerjisinin kuyunun genişliğine bağlı değişimi

4.2. Donor Etkisindeki Yarı Sonlu Kuantum Kuyusunda Elektrik Alan Etkisi



Sekil 7: Elektrik alan altında ve donör etkisinde $-L/2$ 'de sonsuz, $+L/2$ 'de V_0 potansiyel engeline sahip olan bir potansiyel kuyusu

İçinde donör bulunan yarı sonlu kuantum kuyusuna “+z” yönünde bir elektrik alan uygulandığında, F elektrik alan şiddeti olmak üzere kuyu içine hapsedilmiş olan elektron için silindirik koordinatlarda, a^* ve R^* birimlerinde Hamiltonyen aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$H_{fi} = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z + V(z) \quad (4.2.1)$$

ve Schrödinger Denklemi:

$$H_{fi} \psi_{fi}(\rho, z) = E_{fi} \psi_{fi}(\rho, z) \quad (4.2.2)$$

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z + V(z) \right\} \psi_{fi}(\rho, z) = E_{fi} \psi_{fi}(\rho, z) \quad (4.2.3)$$

olur.

Bu denklemin tam çözümü olmadığından varyasyonel yöntem ile çözülecektir.

Taban durum deneme dalga fonksiyonları;

$$\psi_{fi1}(\rho, z) = N_1 \left\{ \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right) \cos(k_1 z) + \sin(k_1 z) \right\} e^{-\beta z} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (4.2.4)$$

$$\psi_{fi2}(\rho, z) = N_1 \left(\frac{\sin(k_1 L)}{\cos\left(k_1 \frac{L}{2}\right)} e^{k_2 \frac{L}{2}} \right) e^{-k_2 z} e^{-\beta z} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (4.2.5)$$

Burada β ve λ varyasyonel parametrelerdir.

Böyle bir elektronun enerjisi ise,

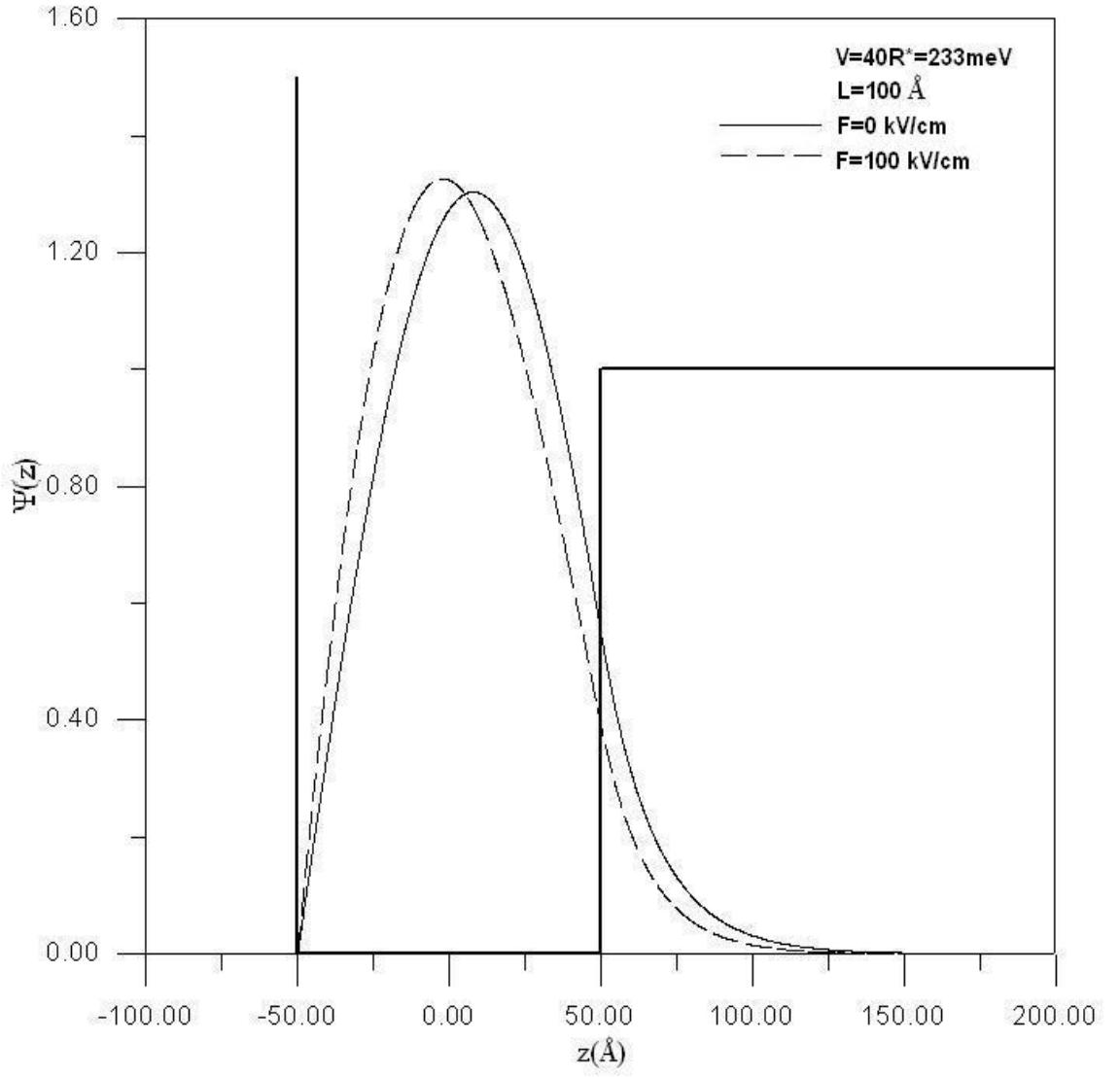
$$\langle E \rangle_{fi} = \left(\frac{\langle \psi_{fi}(\rho, z) | H_{fi} | \psi_{fi}(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_{fi}(\rho, z) | \psi_{fi}(\rho, z) \rangle} \right)_{\min \beta \lambda} \quad (4.2.6)$$

şeklinde olur.

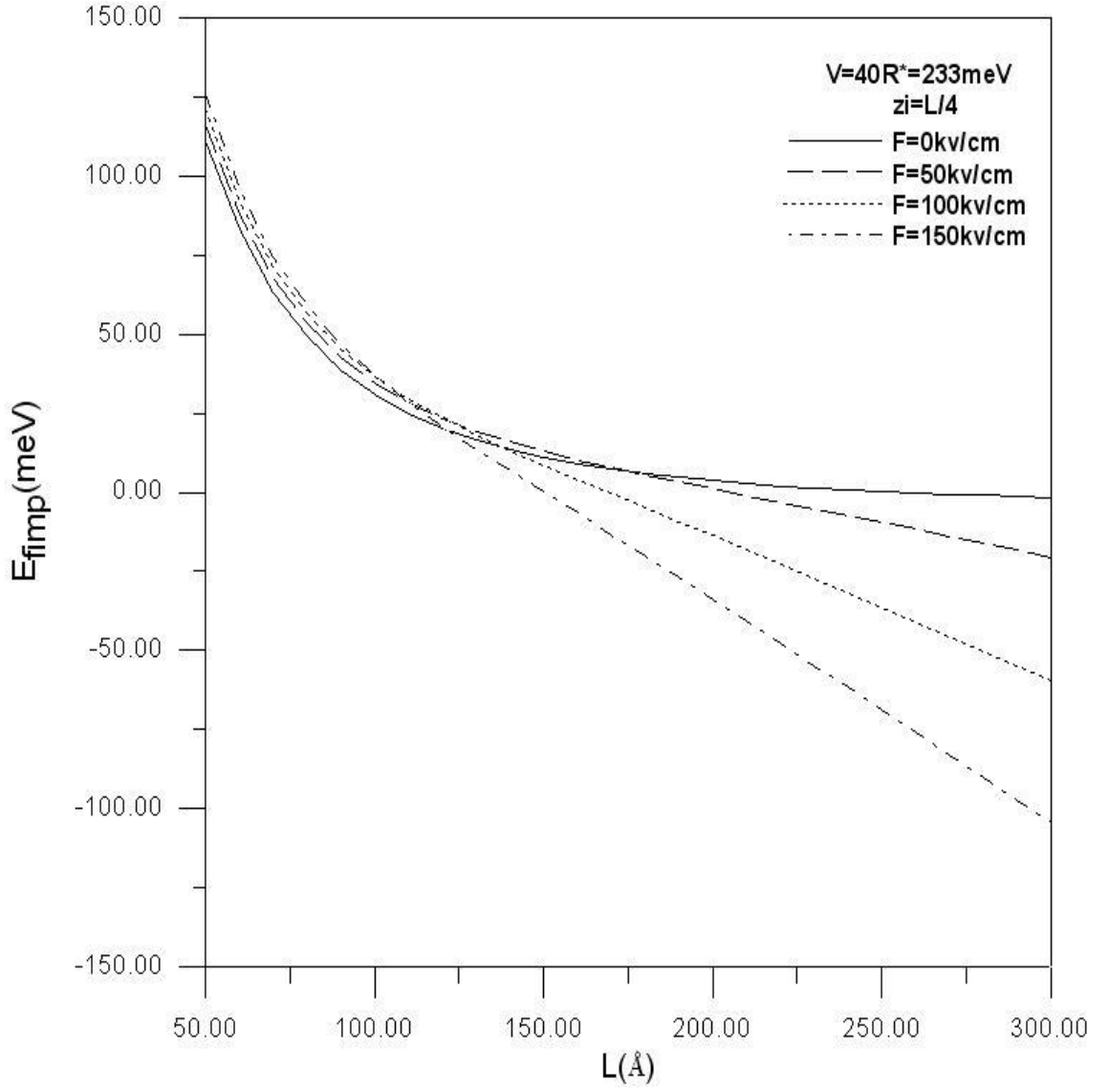
F=0,100 kV/cmı elektrik alan şiddetleri için antisimetrik basamak engelli sonsuz kuantum kuyusuna hapsedilen elektrona ait taban durumu dalga fonksiyonu Grafik 4.4 ' de verilmiştir. Bu grafikten elektrik alanın dalga fonksiyonunu sola kaydırıldığı ve basamak içindeki tünellemeyi azalttığı görülmektedir.

Yarı sonlu kuantum kuyusunda taban durum enerjisinin $z_i=L/4$ ve $z_i=-L/4$ konumundayken F=0,50,100,150 kV/cm elektrik alan şiddetleri altında kuyu genişliğine bağlı değişimi Grafik 4.5 ve Grafik 4.7 ' te verilmiştir.

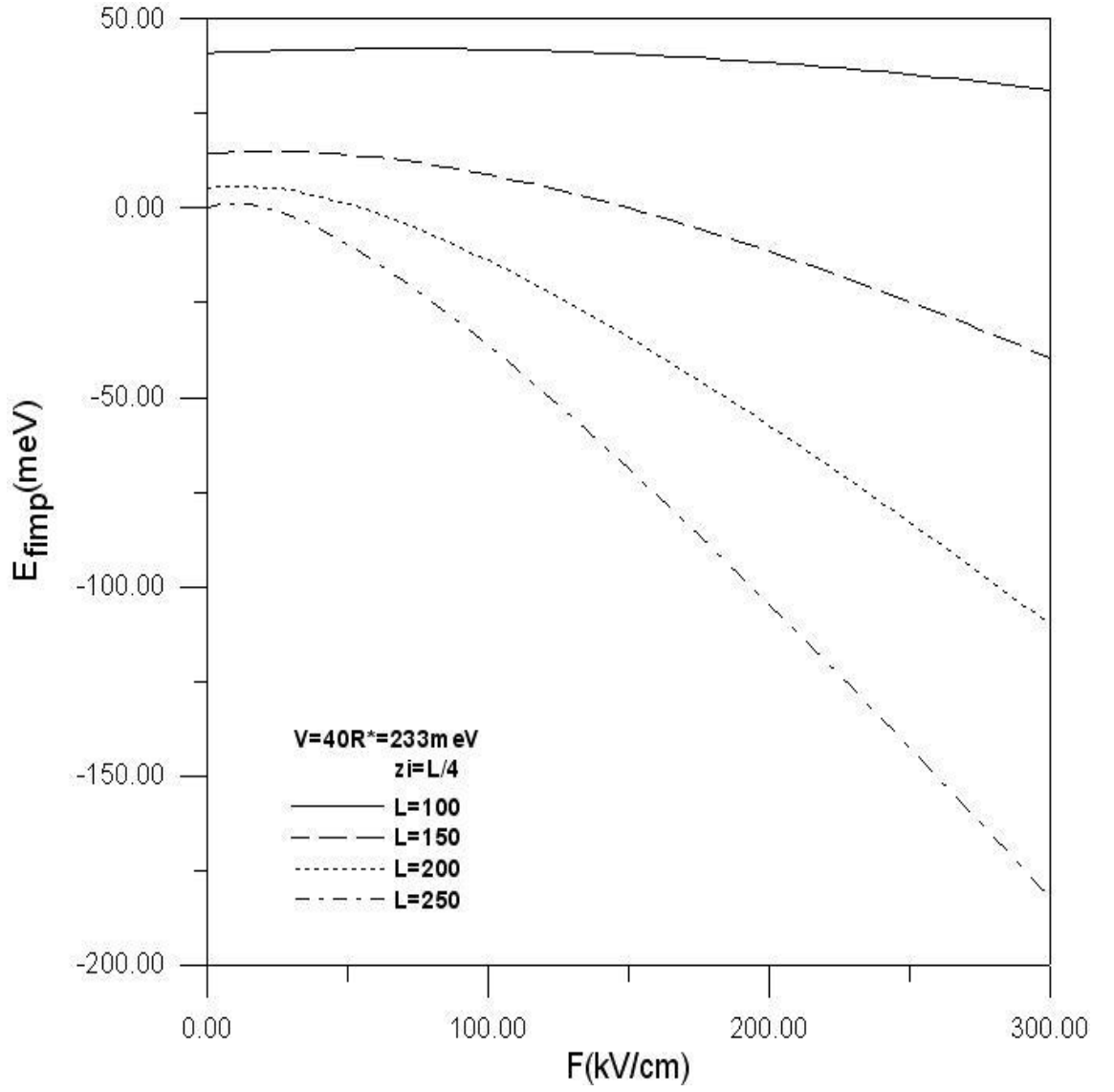
Yarı sonlu kuantum kuyusunda taban durum enerjisinin $z_i=L/4$ ve $z_i=-L/4$ konumundayken $L=100,150,200,250 \text{ \AA}$ kuyu genişliklerinde elektrik alan şiddetine bağlı değişimi Grafik 4.6 ve Grafik 4.8 ' te verilmiştir.



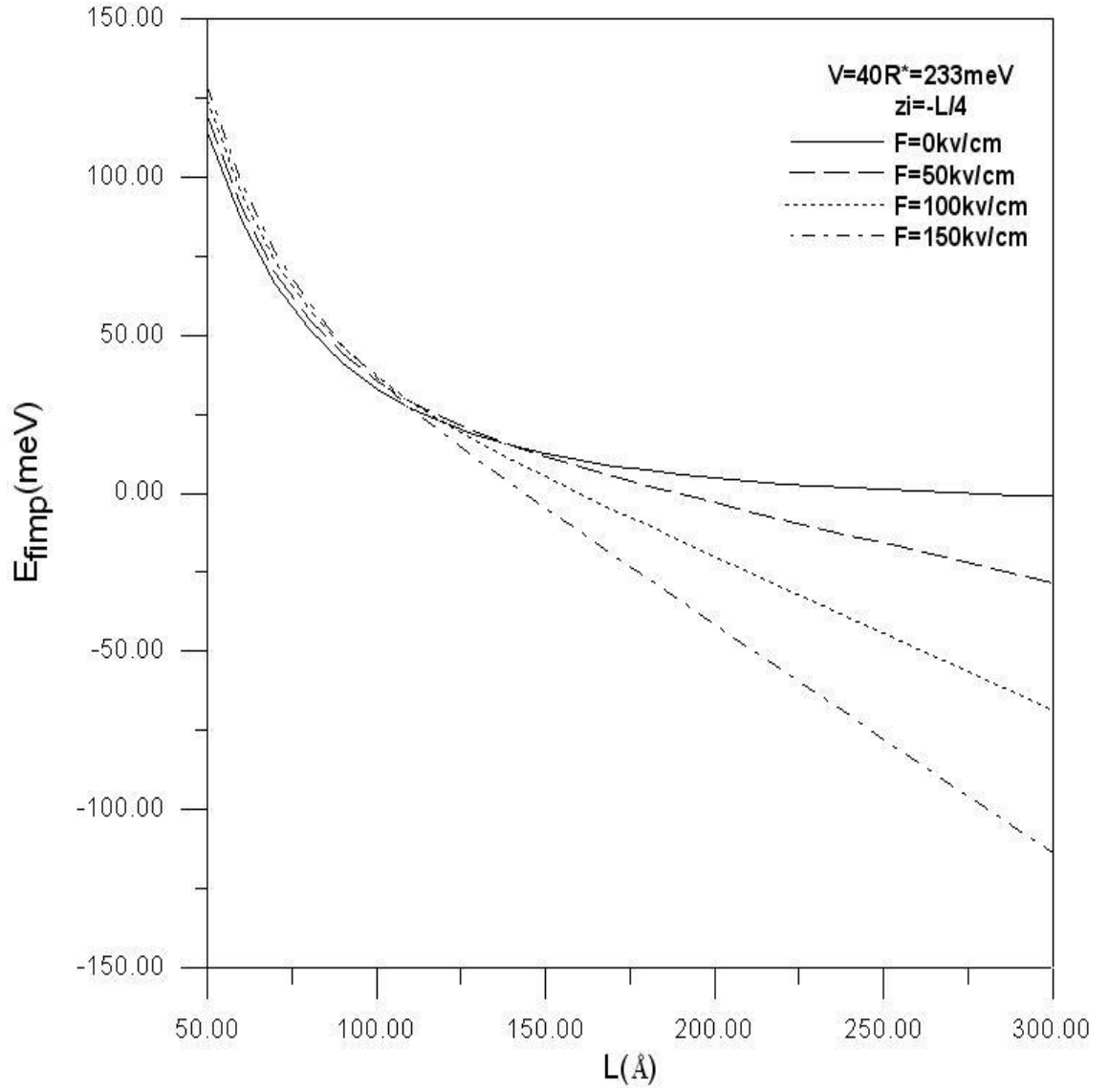
Grafik 4.4: İki farklı elektrik alan altında yarı sonlu kuantum kuyusuna hapsedilen elektrona ait taban durumu dalga fonksiyonu



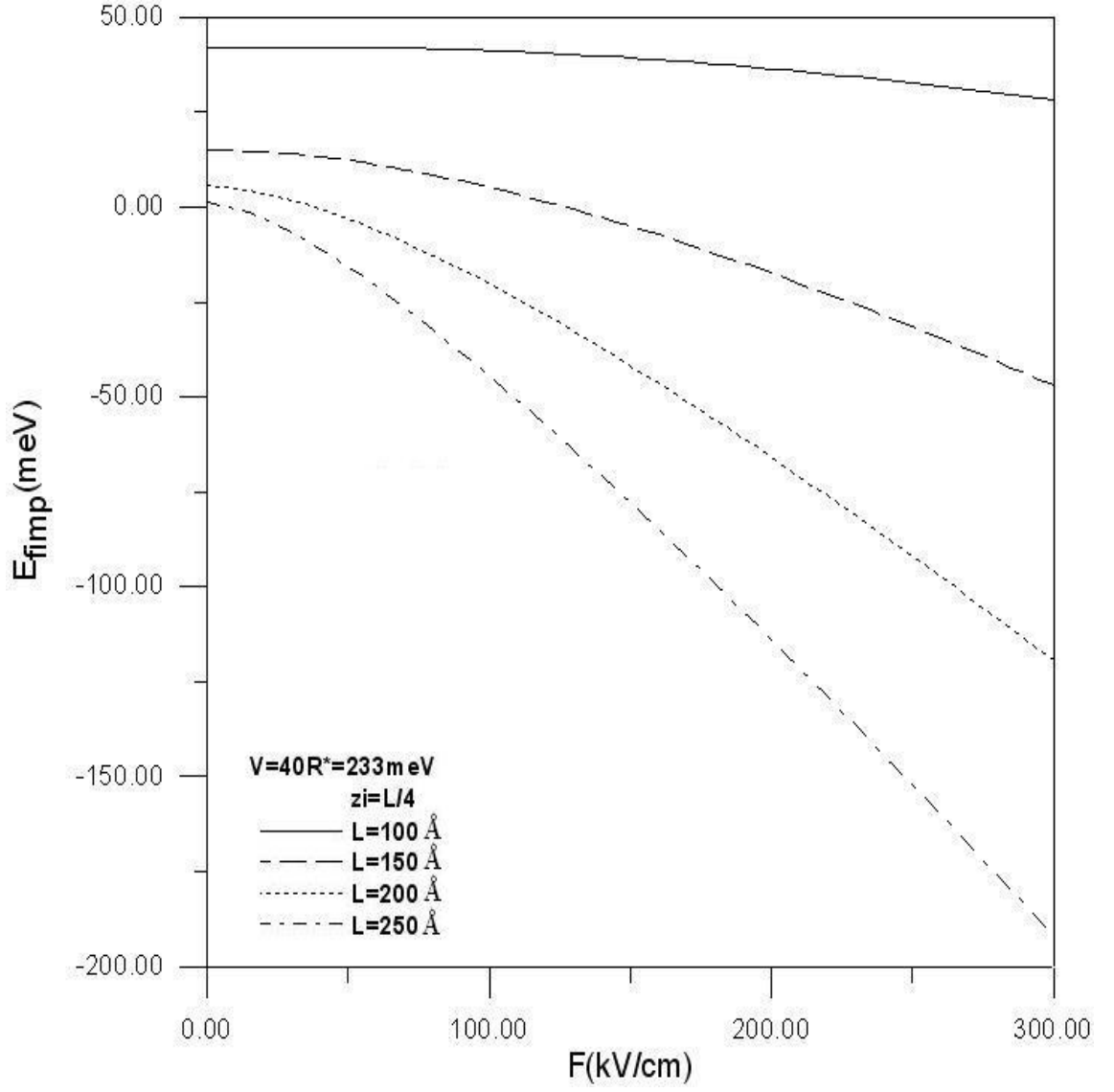
Grafik 4.5: Yarı sonlu kuantum kuyusunda enerjisinin $z_i=L/4$ konumundayken kuyu genişliğine bağlı değişimi



Grafik 4.6: Yarı sonlu kuantum kuyusunda donör enerjisinin donör yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



Grafik 4.7: Yarı sonlu kuantum kuyusunda donör enerjisinin donör yabancı atomu $z_i=-L/4$ konumundayken kuyu genişliğine bağlı değişimi



Grafik 4.8: Yarı sonlu kuantum kuyusunda donör enerjisinin donör yabancı atomu $z_i=-L/4$ konumundayken elektrik alan şiddetine bağlı değişimi

5.) POLARİZASYON VE POLARİZE BİLİTE

Kuantum kuyularına elektrik alanın uygulandığında, elektronun dağılımında değişimlere yol açması ile polarizasyon oluşur ve enerji düzeylerinde kaymalar olur. Bu etkiler düşük boyutlu yapının kullanıldığı aygıtın çıkış yoğunluğunun kontrol edilmesinde ve ayarlanmasında kullanılabilir.

Donor etkisi altında kuyuda elektrik alanın etkisi ile oluşan polarizasyon ;

$$P = \frac{\langle \psi_{f_i}(\rho, z) | -e(z-z_i) | \psi_{f_i}(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_{f_i}(\rho, z) | \psi_{f_i}(\rho, z) \rangle} \Big|_{\text{donor var}}^{F \neq 0} - \frac{\langle \psi_i(\rho, z) | -e(z-z_i) | \psi_i(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_i(\rho, z) | \psi_i(\rho, z) \rangle} \Big|_{\text{donor var}}^{F=0} \quad (5.1)$$

veya,

$$\frac{P}{e} = - \frac{\langle \psi_{f_i}(\rho, z) | z | \psi_{f_i}(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_{f_i}(\rho, z) | \psi_{f_i}(\rho, z) \rangle} \Big|_{\text{donor var}}^{F \neq 0} + \frac{\langle \psi_i(\rho, z) | z | \psi_i(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_i(\rho, z) | \psi_i(\rho, z) \rangle} \Big|_{\text{donor var}}^{F=0} \quad (5.2)$$

ifadelerinden hesaplanır. Bu denklemlerde; $\psi_{f_i}(\rho, z)$ yabancı atom ve elektrik alan etkisi altındaki taban durum dalga fonksiyonu, $\psi_i(\rho, z)$ yabancı atom etkisi altında taban durum dalga fonksiyonudur.

Birim elektrik alan başına polarizasyona polarizabilite denir. Polarizabilite;

$$\alpha = \frac{P}{F} \quad (5.3)$$

şeklindedir.

5.1. Simetrik Sonsuz Potansiyelli Kuantum Kuyusunda Polarizasyon Ve Polarizebilite

Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyon Denklem (5.2) kullanılarak hesaplanacaktır. Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusu için taban durum dalga fonksiyonu ifadeleri;

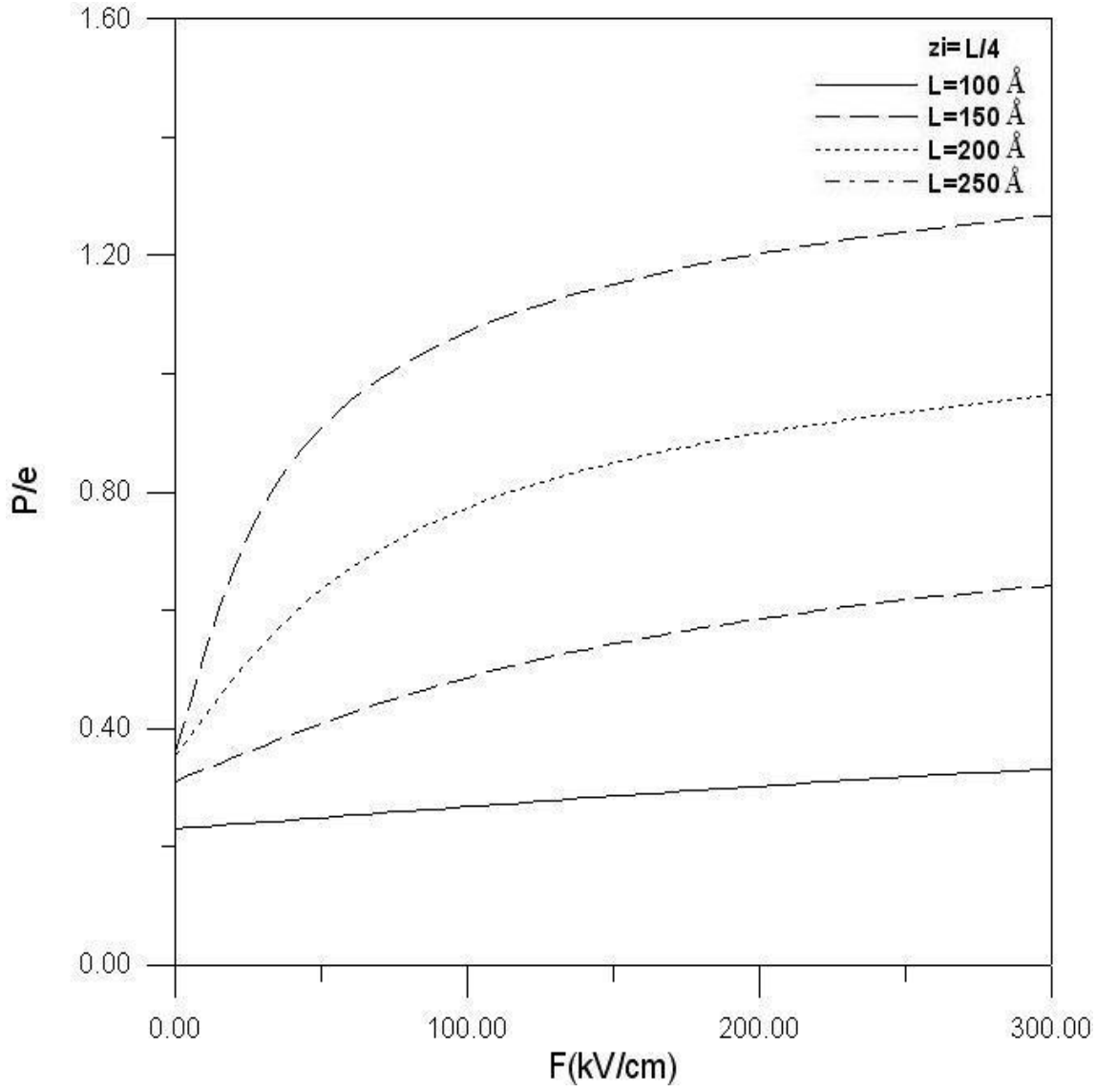
$$\psi_i(\rho, z) = N \cos\left(\frac{\pi}{L}z\right) e^{-\frac{\sqrt{\rho^2+(z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (5.1.1)$$

$$\psi_{fi}(\rho, z) = N_2 \cos\left(\frac{\pi}{L}z\right) e^{-\beta z} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2+(z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (5.1.2)$$

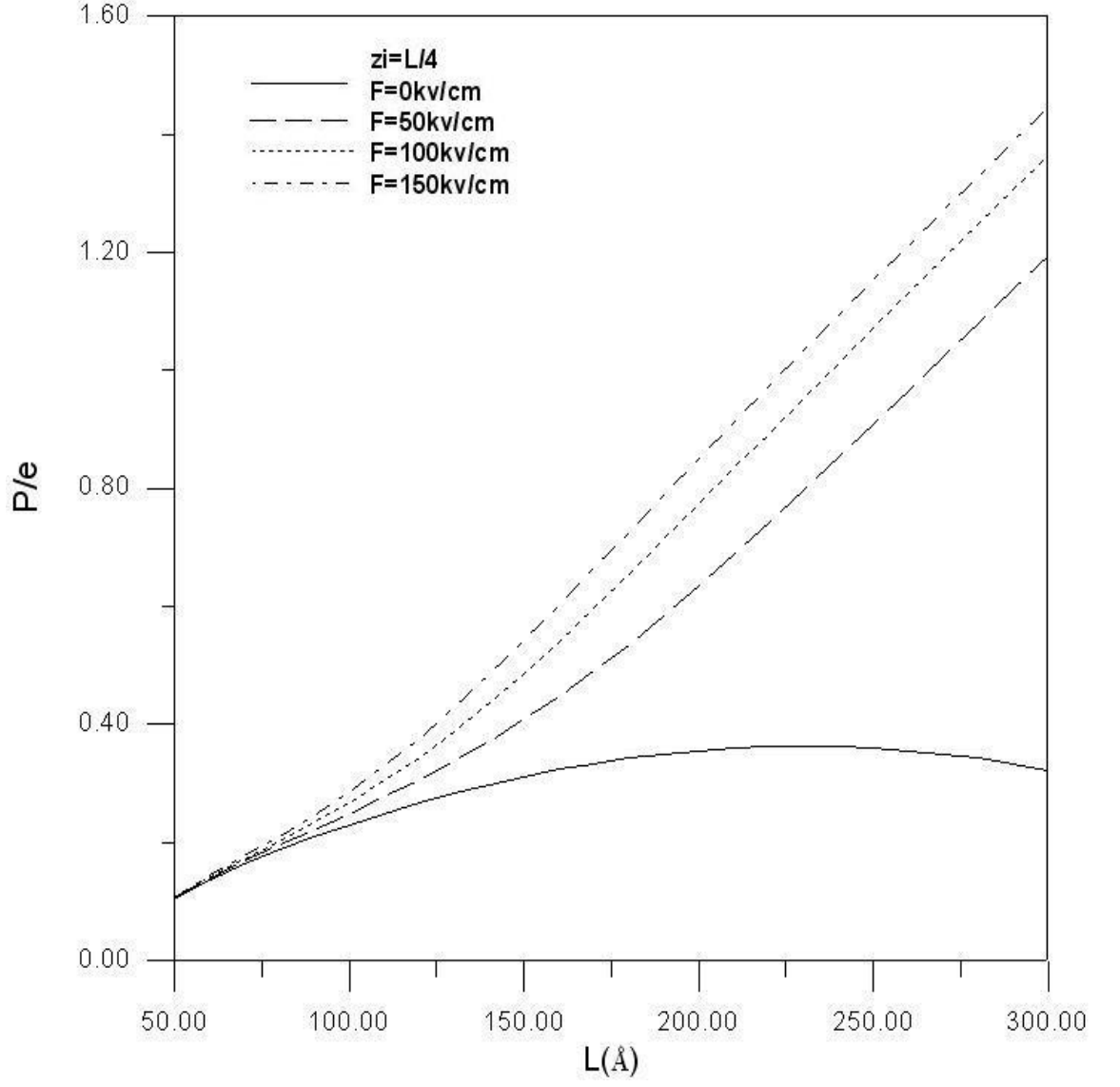
olmak üzere polarizasyon ve polarizebilite hesaplanır. $\psi_i(\rho, z)$ yabancı atom etkisindeki dalga fonksiyonu ve $\psi_{fi}(\rho, z)$ yabancı atom ve elektrik alan etkisi altındaki dalga fonksiyonudur.

Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyon ve polarizebilitenin $z_i=+L/4$ ve $z_i=-L/4$ konumundayken $L=100,150,200,250 \text{ \AA}$ kuyu genişliklerinde elektrik alan şiddetine bağlı değişimi Grafik 5.2.1, Grafik 5.2.5, Grafik 5.2.3 ve Grafik 5.2.7 'da verilmiştir.

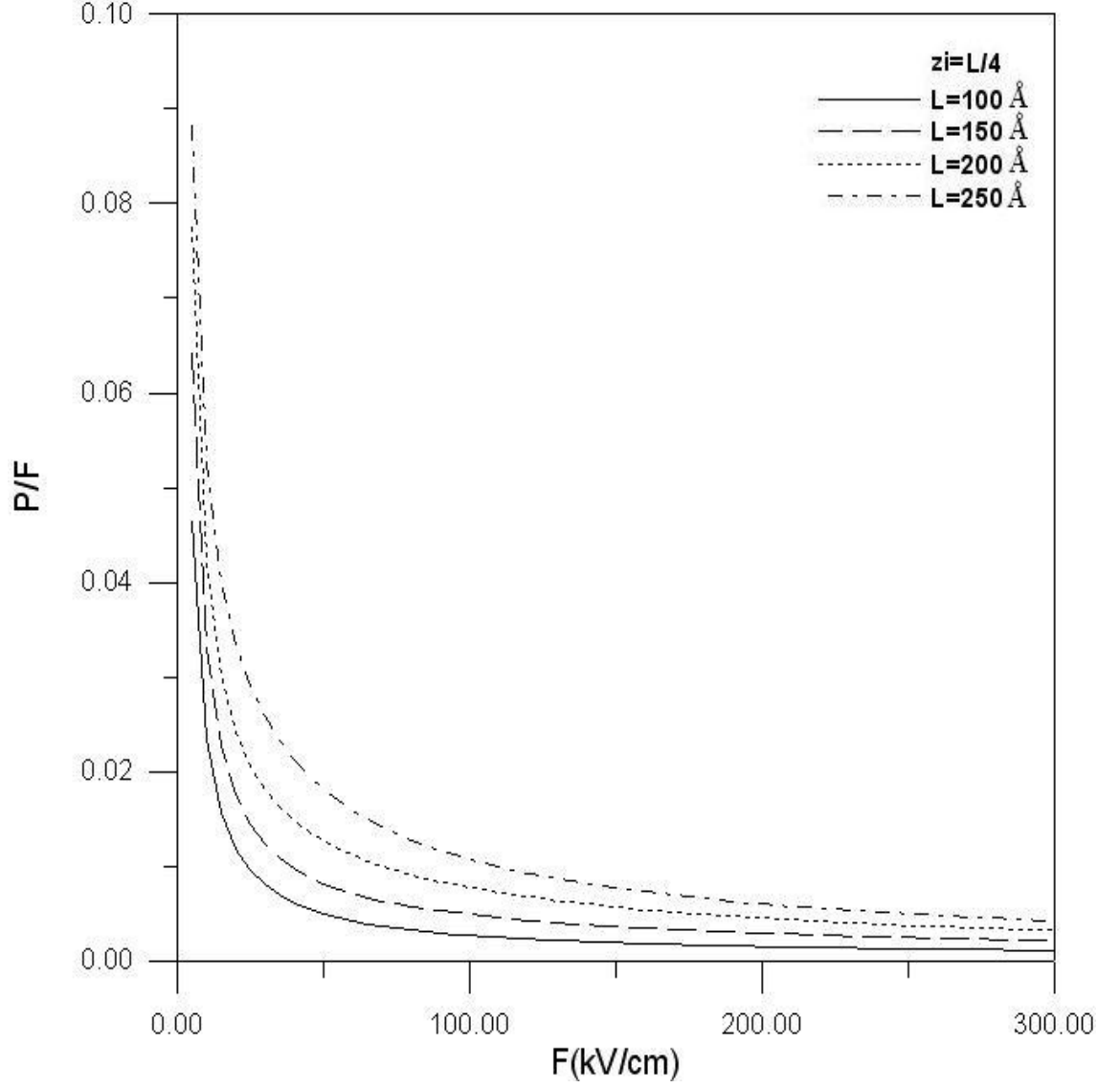
Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyon ve polarizebilitenin $z_i=+L/4$ ve $z_i=-L/4$ konumundayken $F=0,50,100,150 \text{ kV/cm}$ düzgün elektrik alan etkisi altında kuyu genişliğine bağlı değişimi Grafik 5.2.2 ve Grafik 5.2.6 Grafik 5.2.4 ve Grafik 5.2.8 'de verilmiştir.



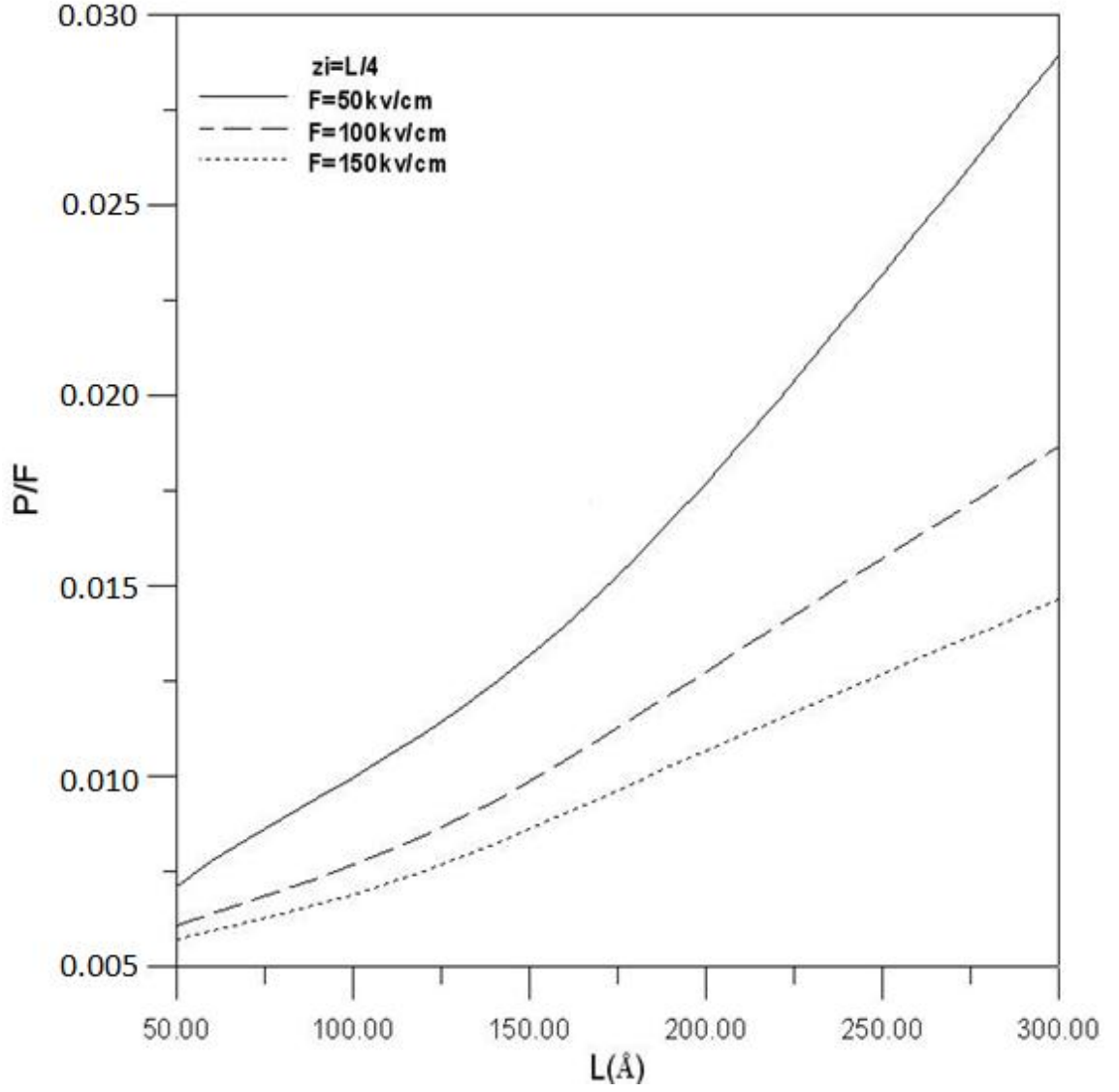
Grafik 5.1.1: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyonun yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250$ Å) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



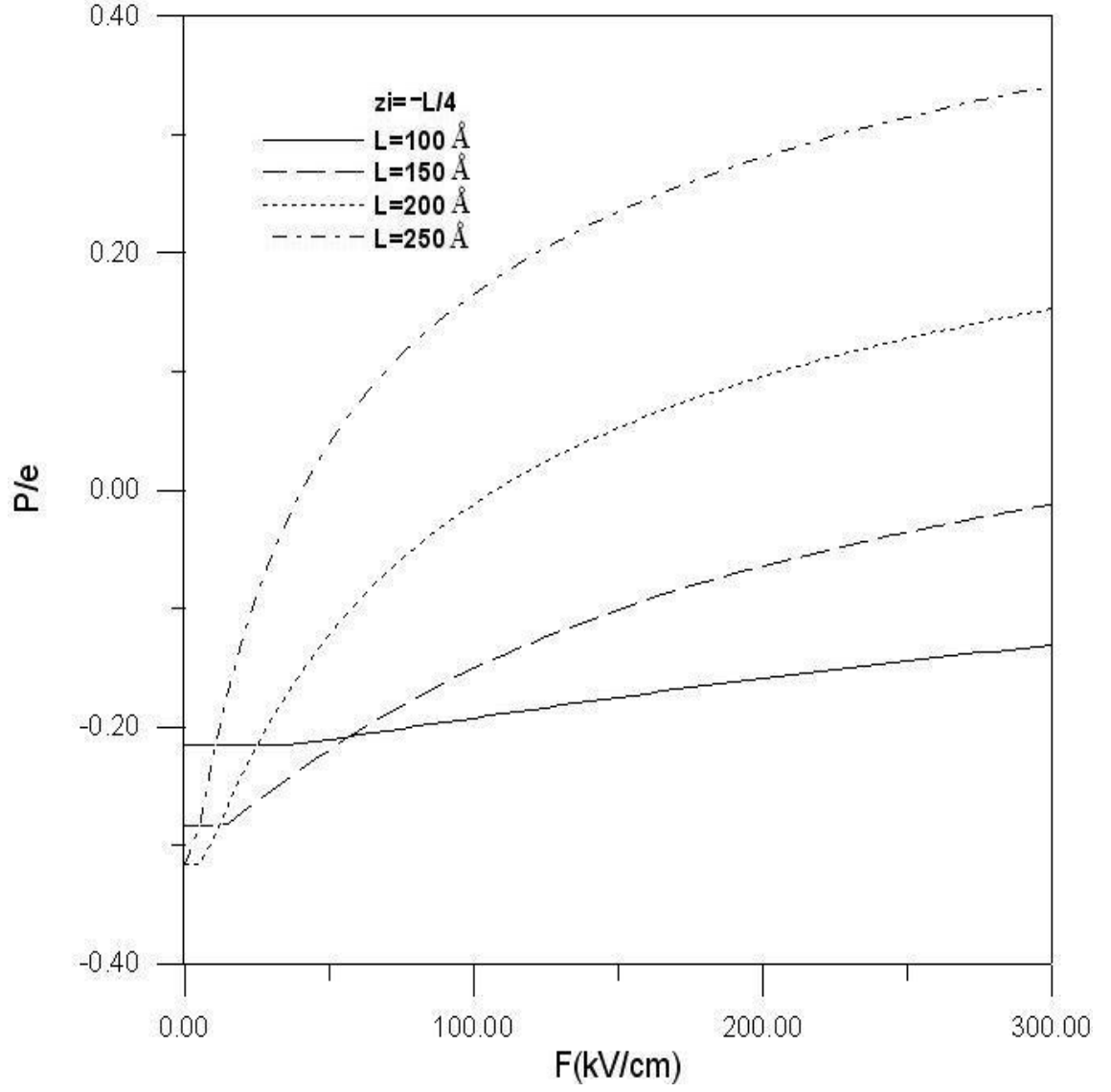
Grafik 5.1.2: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyonun yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken farklı elektrik alan değerleri ($F=0,50,100,150$ kV/cm) için kuyu genişliğine bağlı değişimi



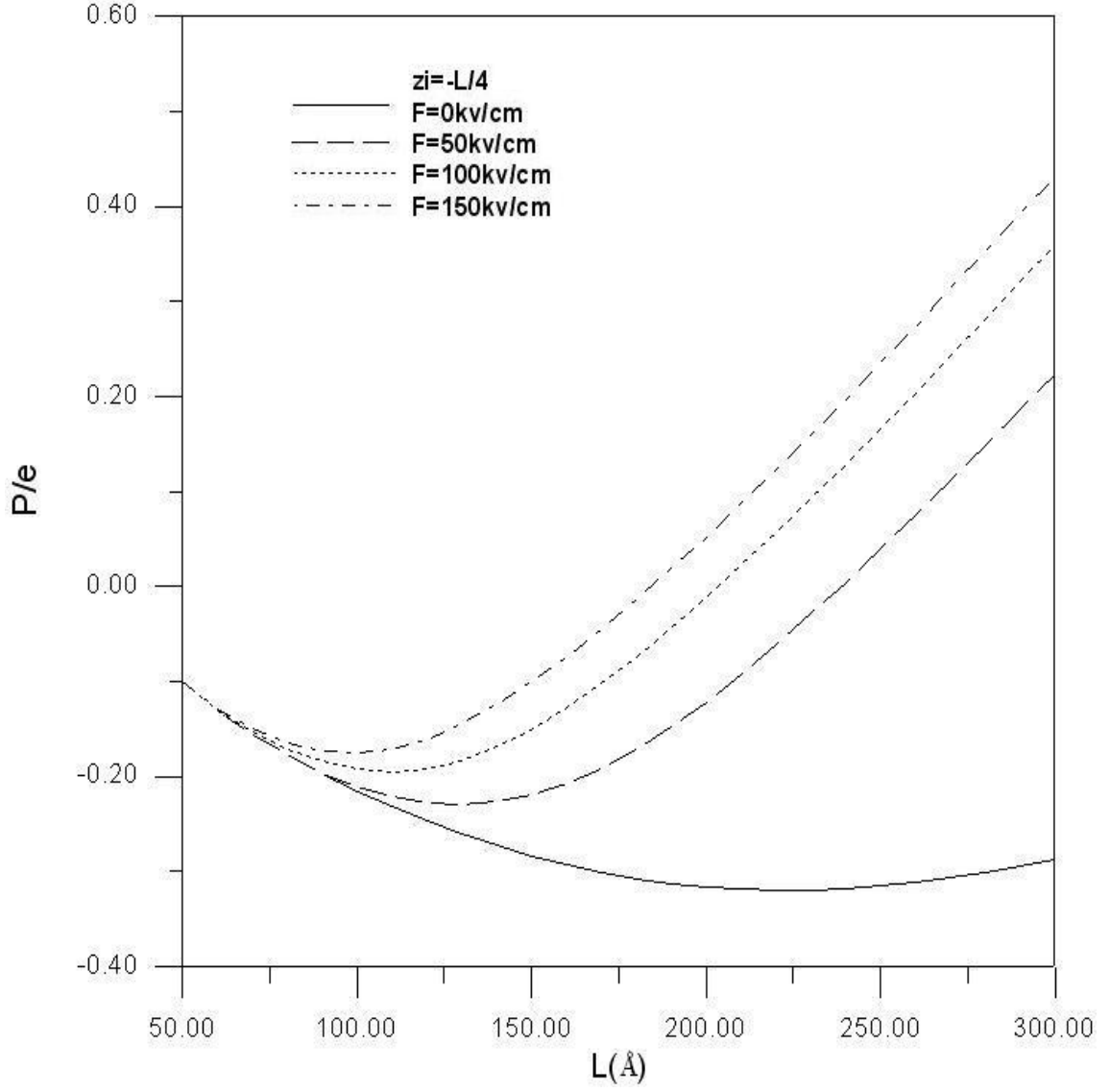
Grafik 5.1.3: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizabilitenin yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250$ Å) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



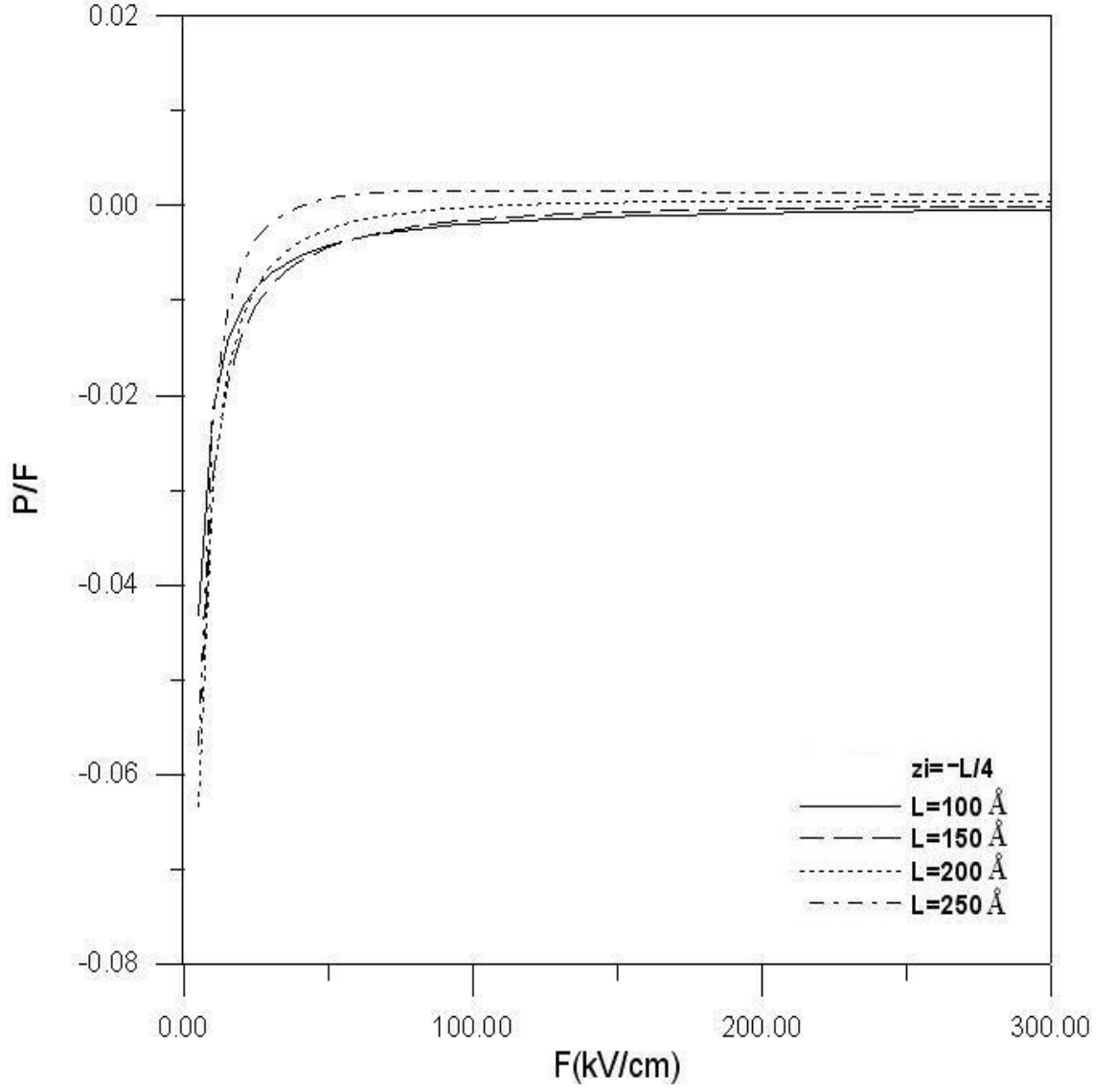
Grafik 5.1.4: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizebilitenin yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken farklı elektrik alan değerleri ($F=50,100,150$ kV/cm) için kuyu genişliğine bağlı değişimi



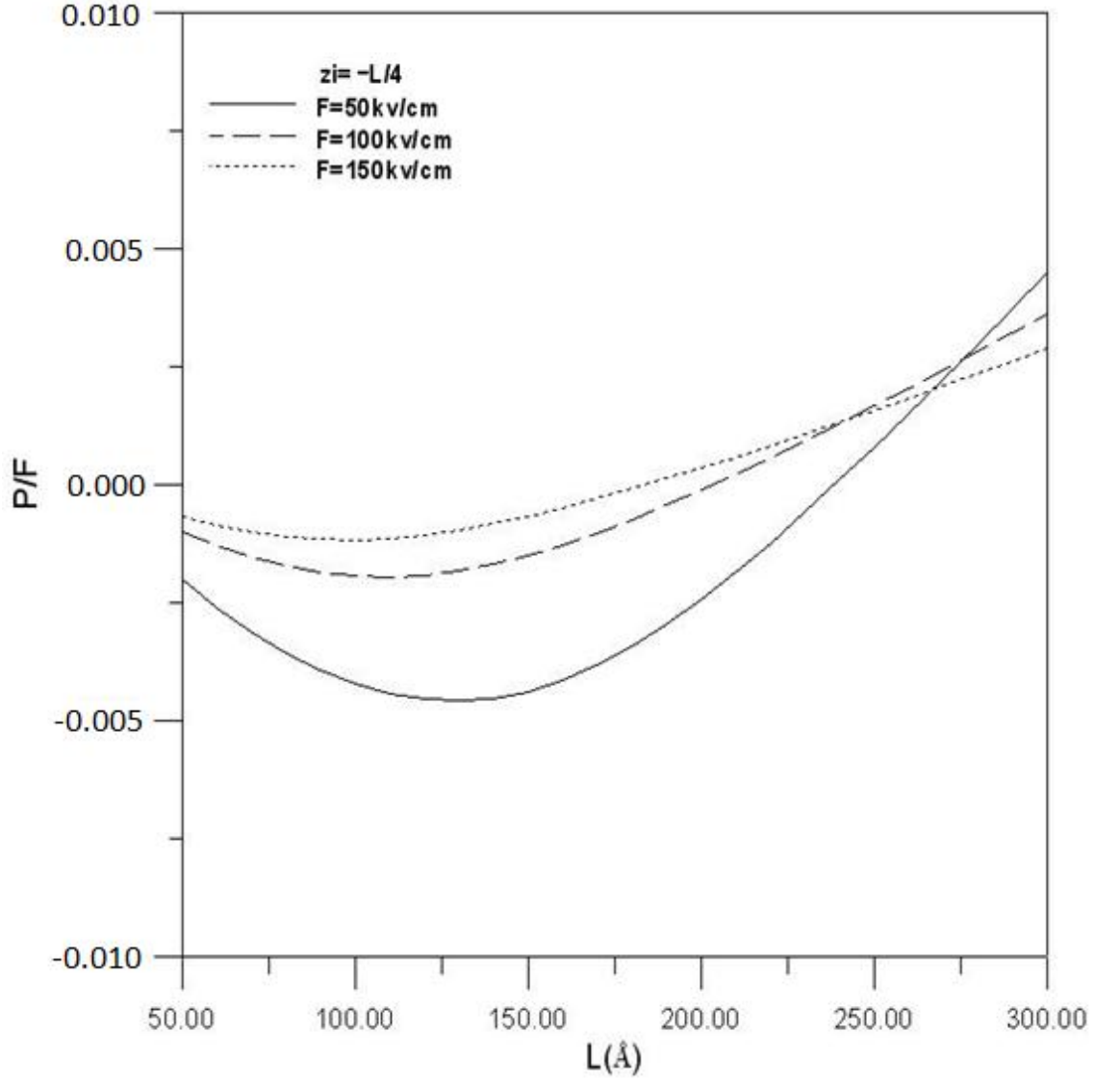
Grafik 5.1.5: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyonun yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



Grafik 5.1.6: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizasyonun yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken farklı elektrik alan değerleri ($F=0,50,100,150 \text{ kV/cm}$) için kuyu genişliğine bağlı değişimi



Grafik 5.1.7: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizabilitenin yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken farklı kuyu genişlikleri ($L=100, 150, 200, 250$ Å) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



Grafik 5.1.8: Simetrik sonsuz potansiyelli kuantum kuyusunda polarizabilitenin yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken farklı elektrik alan değerleri ($F = 50, 100, 150 \text{ kV/cm}$) için kuyunun genişliğine bağlı değişimi

5.2. Yarı Sonlu Kuantum Kuyusunda Polarizasyon Ve Polarizebilite

Yarı sonlu kuantum kuyusunda polarizasyon Denklem (5.2) yardımıyla hesaplanacaktır. Yarı sonlu potansiyelli kuantum kuyusu için taban durum dalga fonksiyonu ifadeleri;

$$\psi_{i1}(\rho, z) = N \left\{ \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right) \cos(k_1 z) + \sin(k_1 z) \right\} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (5.2.1)$$

$$\psi_{i2}(\rho, z) = N \left(\frac{\sin(k_1 L)}{\cos\left(k_1 \frac{L}{2}\right)} e^{k_2 \frac{L}{2}} \right) e^{-k_2 z} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (5.2.2)$$

ve

$$\psi_{fi1}(\rho, z) = N_1 \left\{ \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right) \cos(k_1 z) + \sin(k_1 z) \right\} e^{-\beta z} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (5.2.3)$$

$$\psi_{fi2}(\rho, z) = N_1 \left(\frac{\sin(k_1 L)}{\cos\left(k_1 \frac{L}{2}\right)} e^{k_2 \frac{L}{2}} \right) e^{-k_2 z} e^{-\beta z} e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}}{\lambda}} \quad (5.2.4)$$

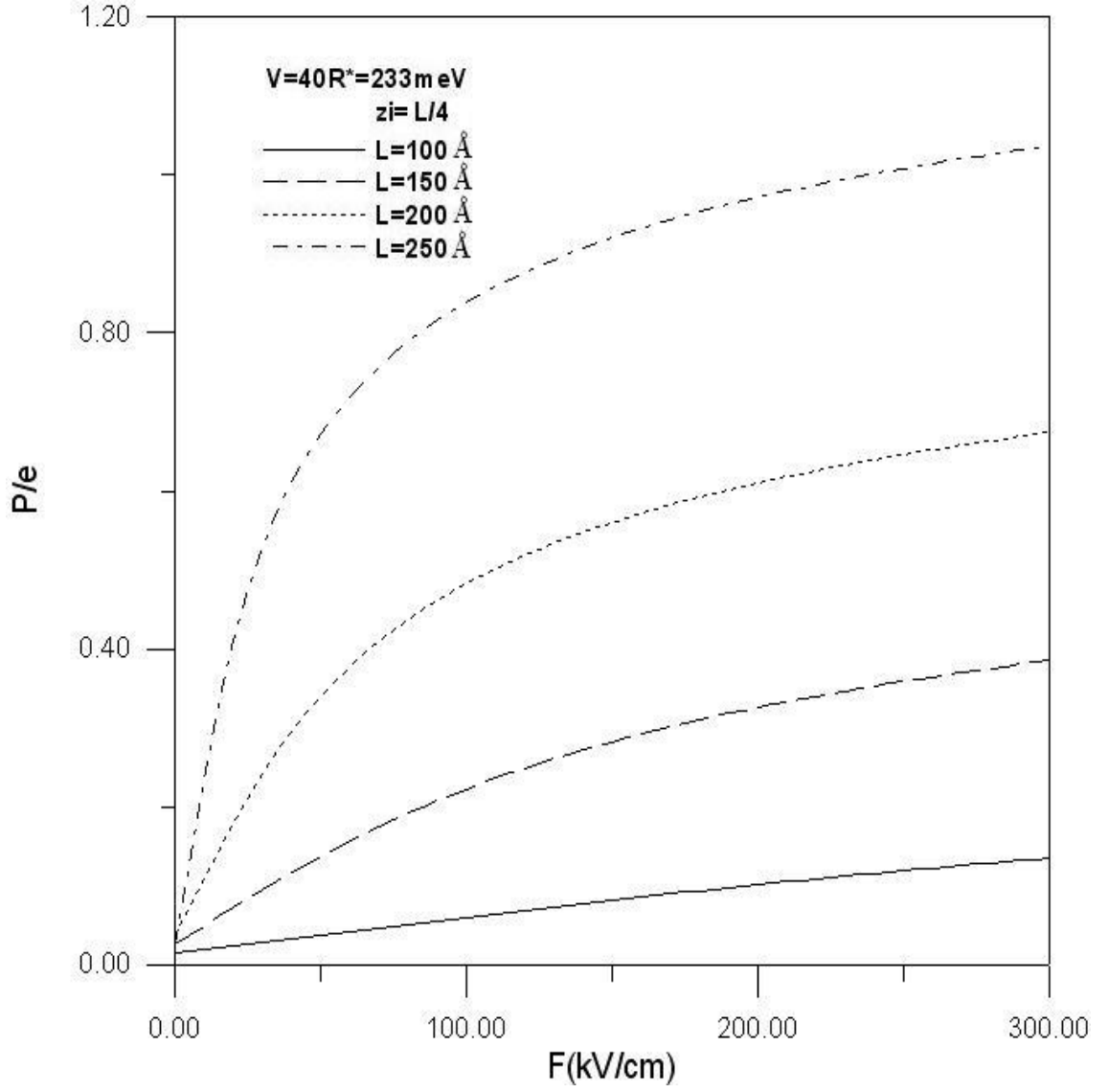
dir. . Birim elektrik alan başına polarizasyon olarak tanımlanan polarizebilite ise;

$$\alpha = \frac{P}{F} \quad (5.2.6)$$

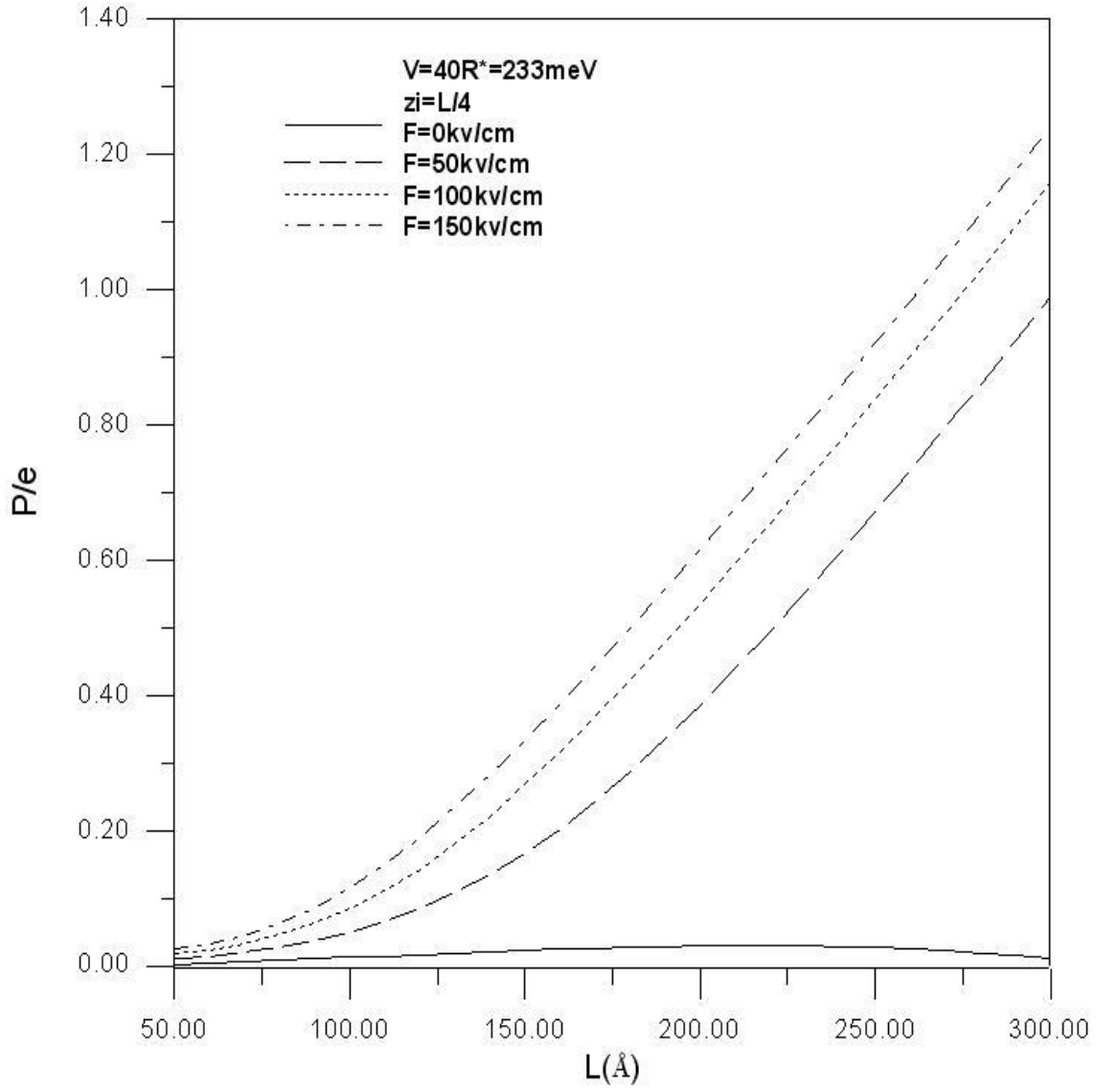
bağıntısından hesaplanır.

Yarı sonlu kuantum kuyusunda polarizasyonun ve polarizebilite $z_i = +L/4$ ve $z_i = -L/4$ konumundayken $L=100,150,200,250 \text{ \AA}$ kuyu genişliklerinde elektrik alan şiddetine bağlı değişimi Grafik 5.3.1 ve Grafik 5.3.5 'te verilmiştir.

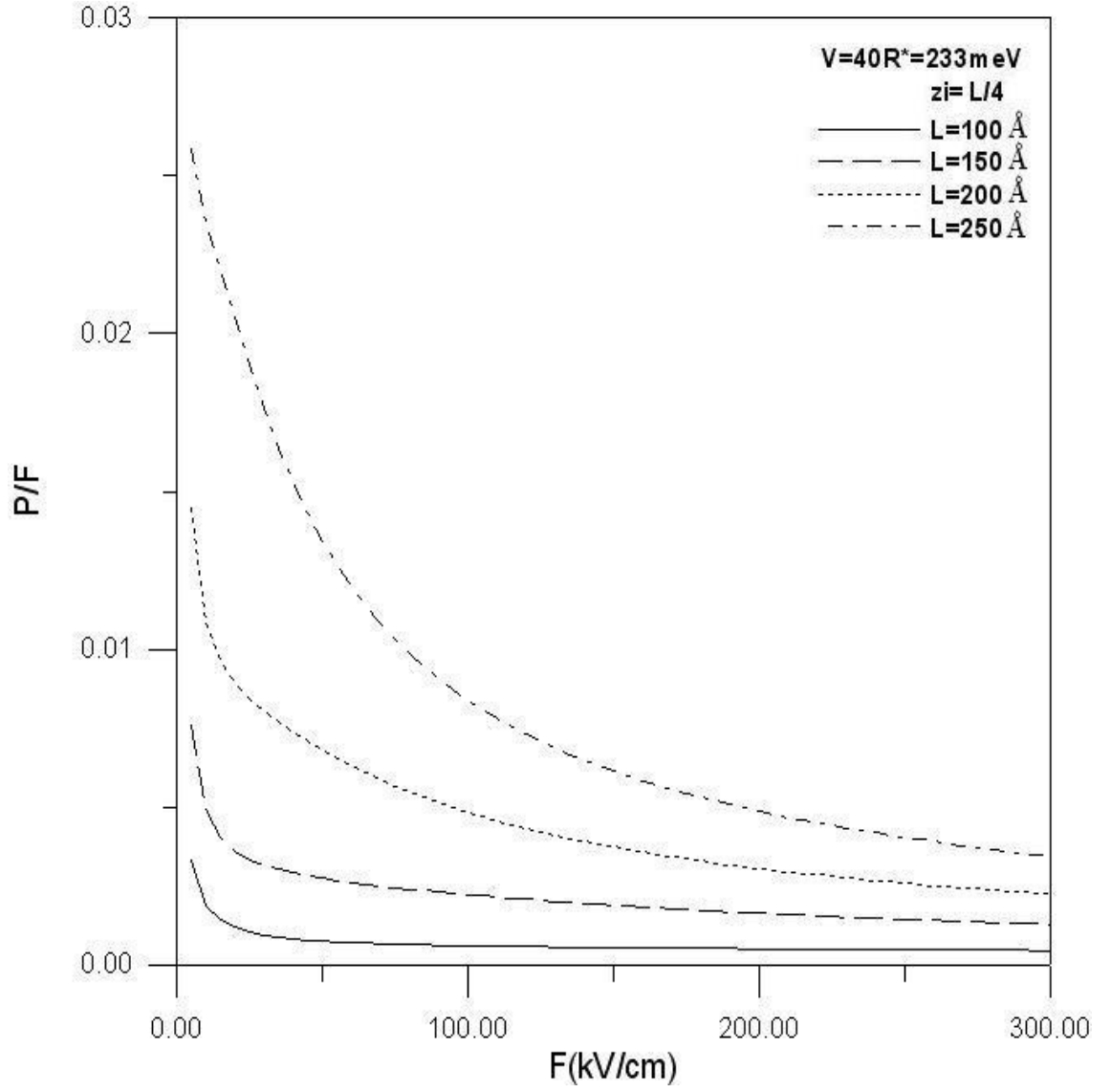
Yarı sonlu kuantum kuyusunda polarizasyon ve polarizebilite $z_i = +L/4$ ve $z_i = -L/4$ konumundayken $F=0,50,100,150 \text{ Kv/cm}$ düzgün elektrik alan etkisi altında kuyu genişliğine bağlı değişimi Grafik 5.3.2 ve Grafik 5.3.6 'te verilmiştir.



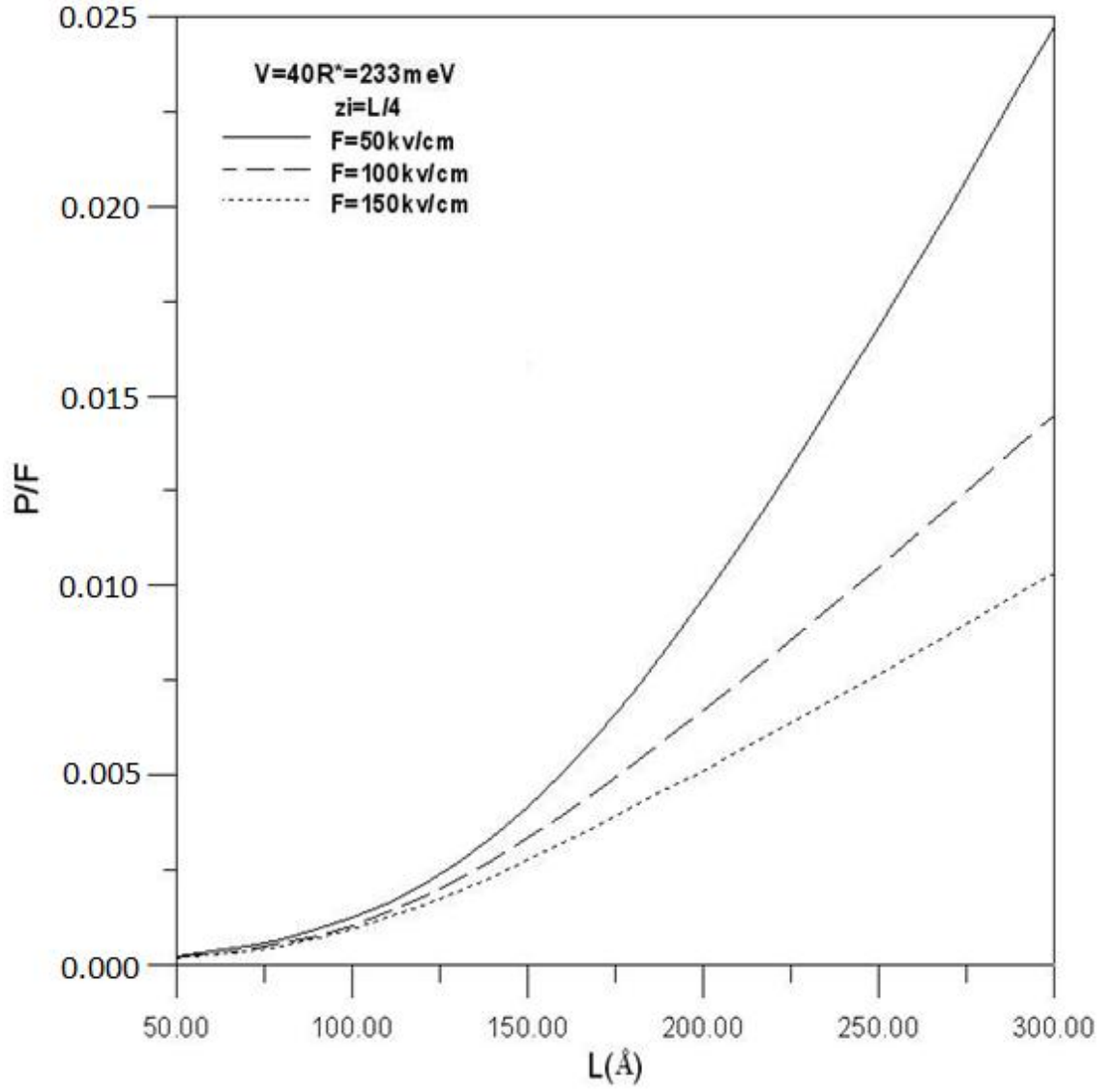
Grafik 5.2.1: Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken polarizasyonun farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



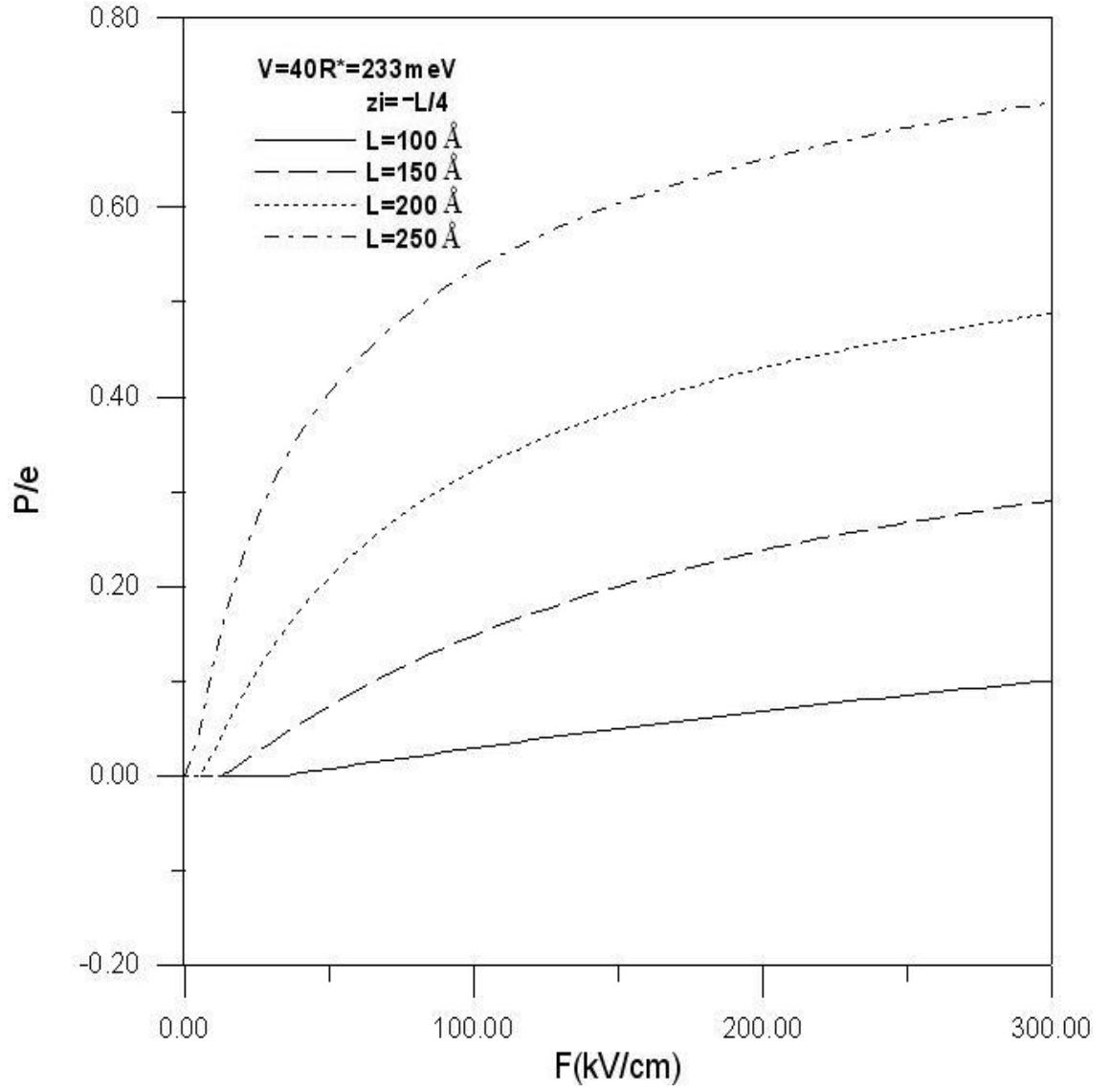
Grafik 5.2.2: Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken polarizasyonun farklı elektrik alan değerleri ($F=0,50,100,150$ kV/cm) için kuyu genişliğine bağlı değişimi



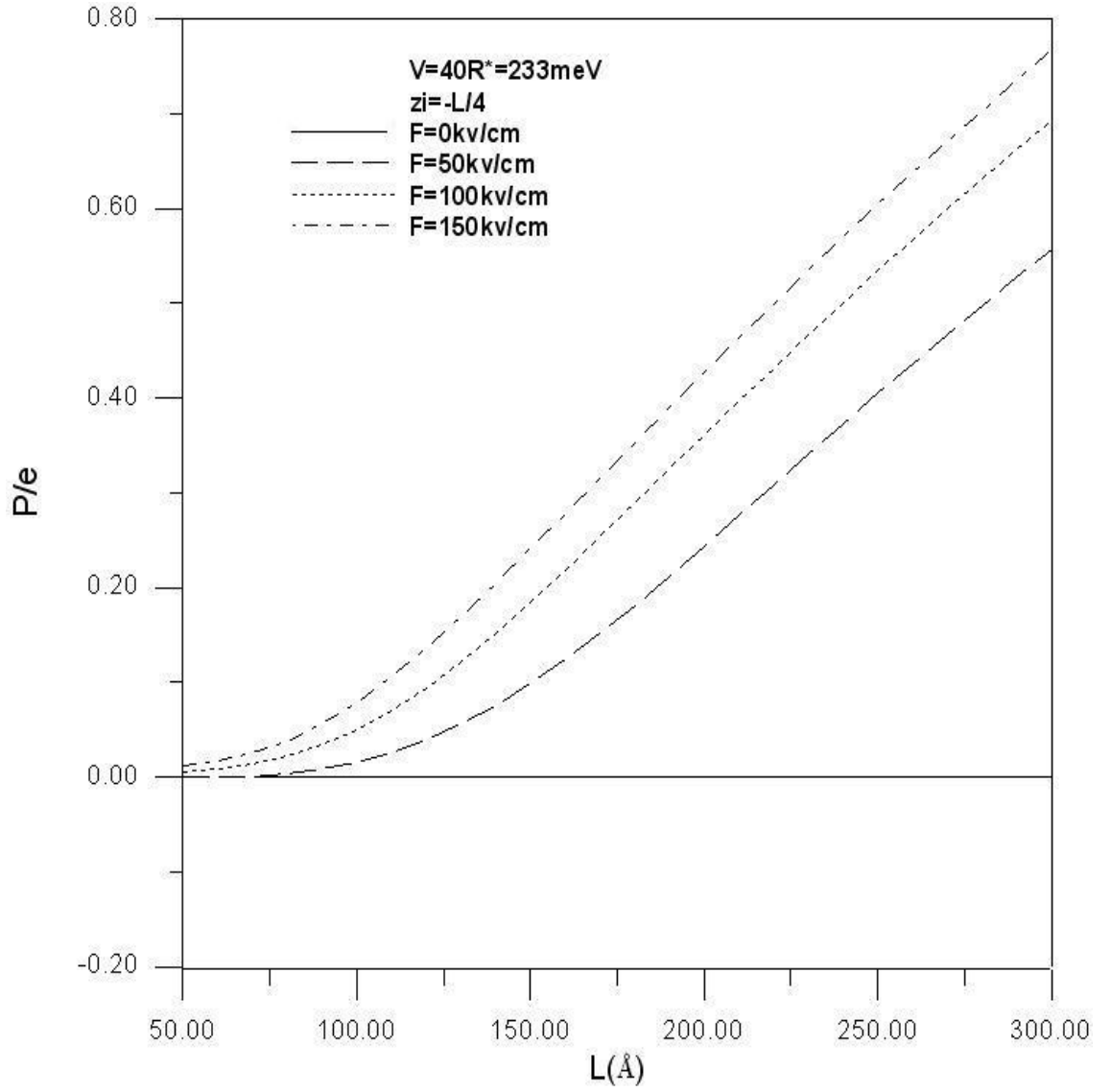
Grafik 5.2.3: Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken polarizabilitenin farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



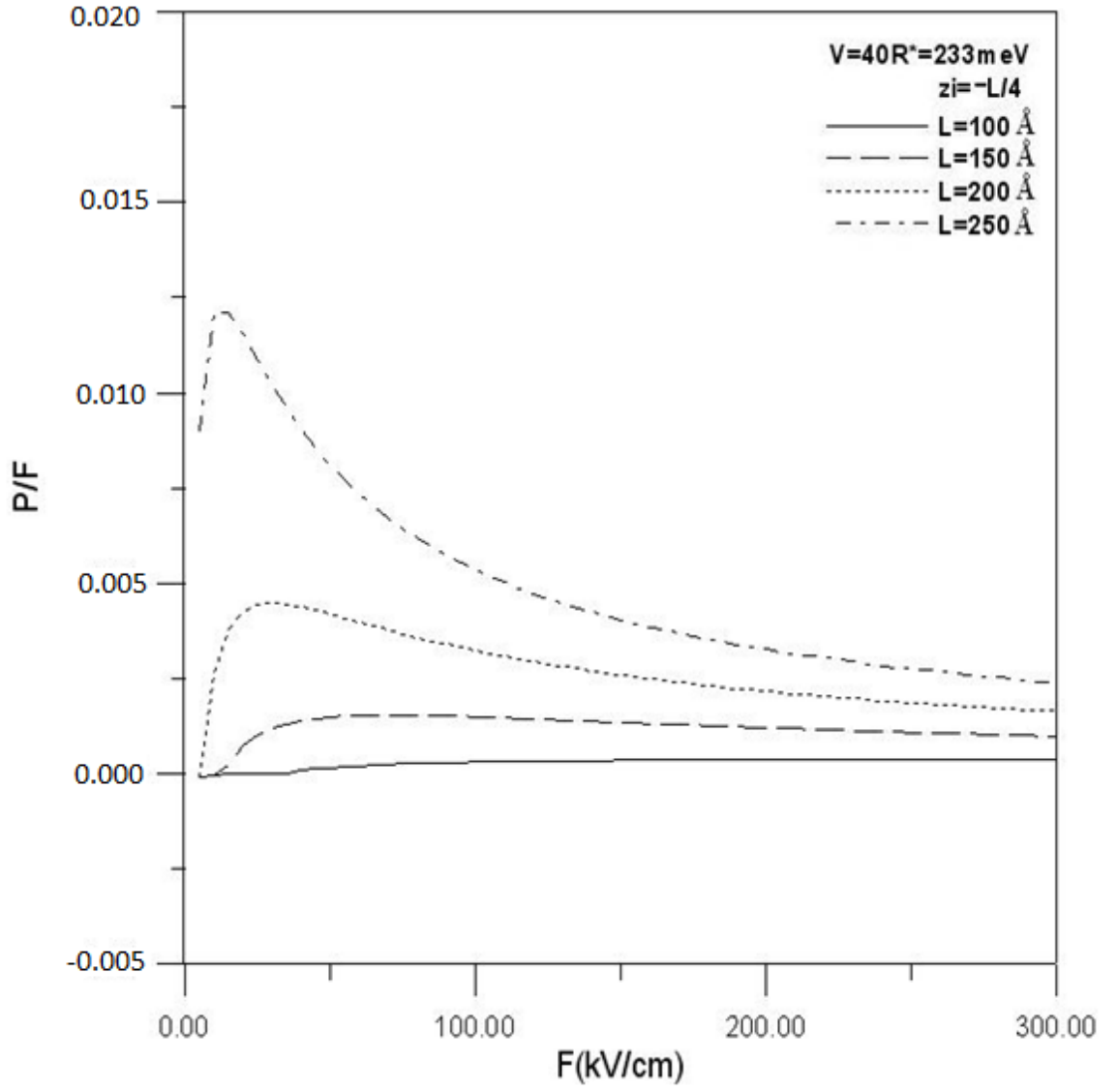
Grafik 5.2.4: Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i=L/4$ konumundayken polarizabilitenin farklı elektrik alan değerleri ($F=50,100,150\text{ kV/cm}$) için kuyunun genişliğine bağlı değişimi



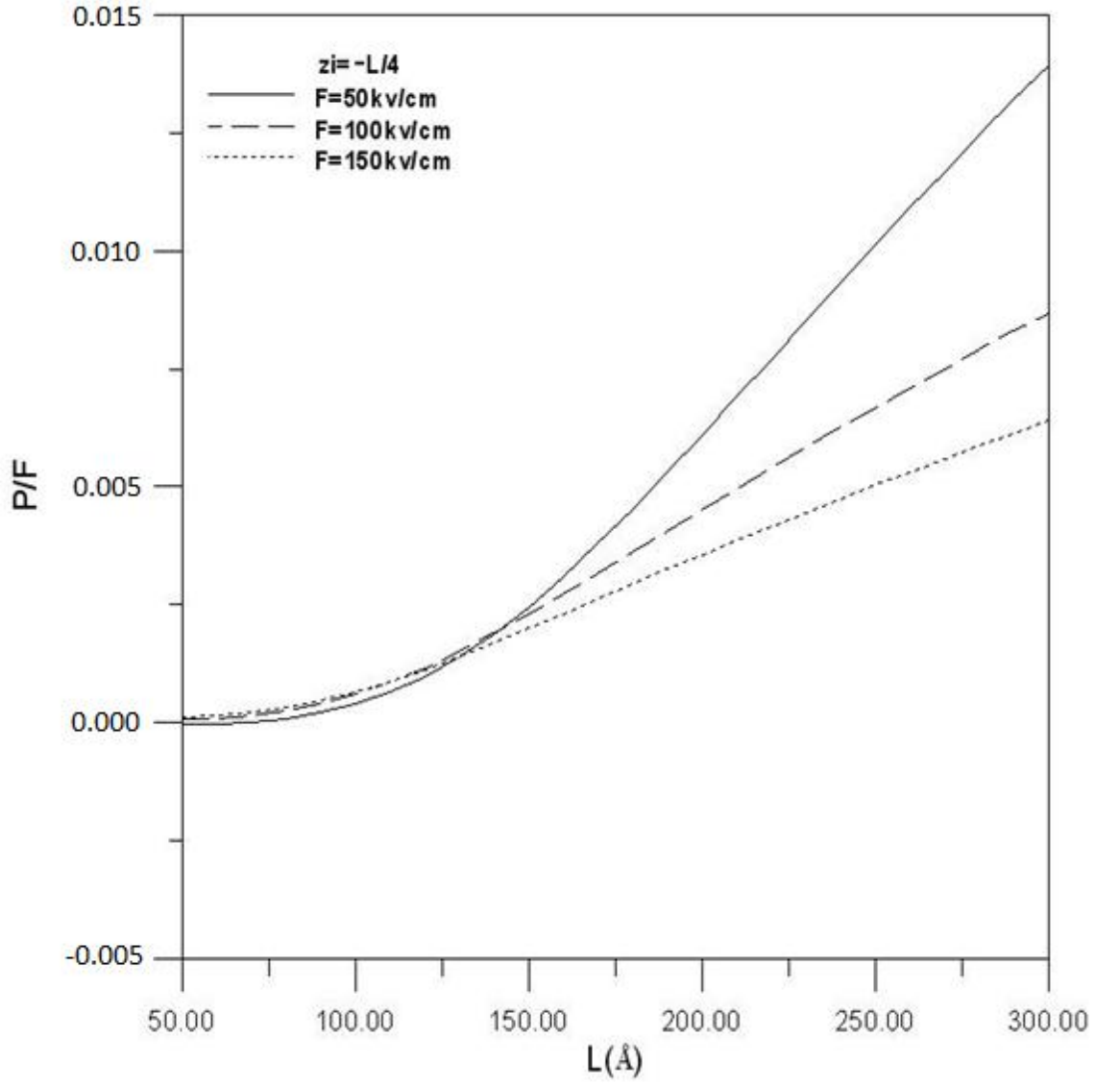
Grafik 5.2.5: Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken polarizasyonun farklı kuyu genişlikleri ($L=100, 150, 200, 250 \text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



Grafik 5.2.6: Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken polarizasyonun farklı elektrik alan değerleri ($F=0,50,100,150$ kV/cm) için kuyu genişliğine bağlı değişimi



Grafik 5.2.7: : Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken polarizebilitenin farklı kuyu genişlikleri ($L=100,150,200,250\text{ \AA}$) için elektrik alan şiddetine bağlı değişimi



Grafik 5.2.8: Yarı sonlu kuantum kuyusunda yabancı atom $z_i = -L/4$ konumundayken polarizabilitenin farklı elektrik alan değerleri ($F=50,100,150$ kV/cm) için kuyunun genişliğine bağlı değişimi

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada düzgün elektrik alan altında $Al_{x_1}Ga_{1-x_1}As|GaAs|Al_{x_2}Ga_{1-x_2}As$ sonsuz, $x_1 = x_2 = 1$, ve yarı sonlu, $x_1 = 1$ ve $0 < x_2 < 1$, kuantum kuyularında donör yabancı atomuna ait bağlanma enerjisi, donör yabancı atomuna ait enerji ve donör elektronunun polarizebilitesi hesaplanmıştır. Bağlanma enerjisinin, donör yabancı atom enerjisinin ve polarizebilitenin kuyu genişliğine, yabancı atomun konumuna ve elektrik alan şiddetine bağlı olarak değiştiği bulunmuştur.

Yapılan hesaplamalarda, genel kural olarak, yabancı atom kuyu kenarlarına yaklaştıkça ve elektrik alan arttıkça bağlanma enerjisinin ve donör yabancı atom enerjisinin azaldığı, polarizebilitenin de şiddetli bir şekilde sifira yaklaştığı bulunmuştur. Aynı zamanda elektrik alan ve kuyu genişliği arttırıldıkça polarizasyonun da arttığı gözlemlenmiştir. Başka bir deyişle hapsedilme ve simetri azaldıkça bağlanma enerjisinin ve donör yabancı atom enerjisinin azaldığı, polarizasyonun arttığı sonucuna ulaşılmıştır.

Bu sonuçlar literatürle uyum içindedir.

KAYNAKLAR

1. AKANKAN O., ERDOGAN I., AKBAS H., 2006, "Spatial electric field effect on the self-polarization in GaAs/AlAs square quantum-well wires", *Physica E*, 35, 217–221
2. AKANKAN O., OKAN S.E., AKBAS H., 2005, "Spatial electric field effect in GaAs–AlAs quantum wires", *Physica E*, 25, 535–538
3. AKBAŞ H., EKMEKÇİ S., AKTAŞ Ş., TOMAK M., 1995, "Electric field effect on shallow impurity states in multiple quantum –well structures", *Tr. J. of Physics*, **19**, 381.
4. AKTAŞ Ş., BOZ F., 2004, "The binding energy of a hydrogenic impurity in triple GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum well-wires under applied electric field", *Trakya Univ. J. Sci.*, **5(2)**, 159.
5. CHAO HT, TRAN THOAI DB., 1995 "Effect of the electric field on a hydrogenic impurity in a quantum-well wire", *Physica B*, **205**, 273.
6. ILAIWI K.F., TOMAK M., 1990, "Polarizabilities of shallow donors in finite barrier quantum wires", *Phys. Rev. B*, **42**, 3132.
7. KARAOĞLU B., 1994, "Kuantum Mekaniğine Giriş", Bilgitek yayıncılık, İstanbul. 80
8. KASAPOĞLU E., SARI H., SOKMEN I., 2003, "Binding energies of shallow donor impurities in different shaped quantum wells under an applied electric field", *Physica B*, 339, 17–22
9. KITTEL C, 1996, "Katıhal Fiziğine Giriş"(Bekir Karaoğlu), 6.basım, 224, BilgiTedyayın., İst.
10. MANUK G., BARSEGHYAN, ALBERT A. KIRAKOSYAN, 2005, "Electronic states in a step quantum well in a magnetic field", *Physica E*, 28, 471–481
11. PACHECO M., BARTICEVIC Z., LATGÉ A., 2001, "Electronic and impurity states in triple quantum wells" *Physica B*, **302-303**, 77.
12. SARI H., KASAPOĞLU E., SÖKMEN I., 2003, "Shallow donors in a triple graded quantum well under electric and magnetic field" *Physica B*, **325**, 300.
13. SARI H., SÖKMEN I., YESILGÜL U., 2004, "Photoionization of donor impurities in quantum wires in a magnetic field" *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **37**, 674.
14. XIAO Z., ZHU J., HE J., 1995, "Impurity binding energy of a cylindrical quantum wire in a magnetic field" *Phys. Status Solidi (b)*, **191**, 401

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Gizem ŞEN

Doğum Yeri ve Yılı : İstanbul-1988

Medeni Hali : Bekar

Öğrenim Durumu:

2004-2008 : T. Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü (Lisans)

2008-2011 :T. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı (Yüksek Lisans)

Konu: Kuantum Kuyularında Bağlanma Enerjisi Ve Polarizebilite.

2008-2011 : T. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı (Yüksek Lisans).

Yayınlar:

1-“Simetrik Ve Antisimetrik Kuantum Kuyularında Elektrik Alan Etkisi: Polarizasyon Ve Polarizabilite” Sunum, Türk Fizik Derneği 27. Fizik Kongresi, İstanbul, 2010.

