

T.C
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**KUANTUM KUYULARINDA ELEKTRON
VE DEŞİĞE ELEKTRİK ALANIN ETKİSİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

İLHAN ERDOĞAN

Tez yöneticisi: Doç.Dr. HASAN AKBAŞ

EDİRNE-1997

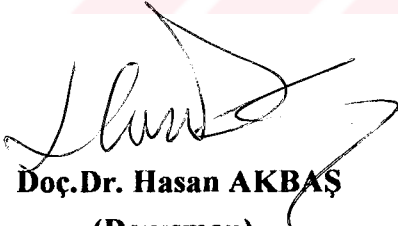
T.C
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

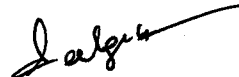
**KUANTUM KUYULARINDA ELEKTRON
VE DEŞİĞE ELEKTRİK ALANIN ETKİSİ**

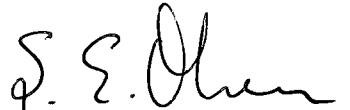
**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

İLHAN ERDOĞAN

Bu Tez 19/08/1997 Tarihinde Aşağıdaki Jüri Tarafından Kabul Edilmiştir.


Doç.Dr. Hasan AKBAS
(Danışman)


Yrd.Doç.Dr. Serap DALGIÇ
(Üye)


Yrd.Doç.Dr. Ş.Erol OKAN
(Üye)

İÇİNDEKİLER

	Sayfa No
ÖZET	i
SUMMARY	ii
TEŞEKKÜR	iii
GİRİŞ	iv
1. SCHRÖDİNGER DENKLEMİ, YAKLAŞIK ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ VE TEK BOYUTLU SİSTEMLER	1
1.1. Schrödinger Denklemi.....	2
1.2. Yaklaşık Çözüm Yöntemleri.....	10
1.2. 1. Pertürbasyon Teorisi.....	10
A) Pertürbasyon Açılımı.....	10
B) 1. Dereceden Pertürbasyon.....	12
C) 2. Dereceden Pertürbasyon.....	14
1.2.2. Varyasyon Yöntemi.....	15
1.3. Tek Boyutlu sistemler.....	19
1.3.1. Simetrik Sonsuz Potansiyel Kuantum Kuyusu İçine Hapsedilmiş Olan Bir Parçacığın Özellikleri.....	19
1.3.2. Simetrik Sonlu Potansiyel Kuantum Kuyusu İçine Hapsedilmiş Olan Bir Parçacığın Özellikleri.....	21
1.3.3. Simetrik Sonsuz Potansiyel Kuantum Kuyusu İçinde Bulunan Parçacığa Elektrik Alanın Etkisi.....	25
1.3.4. Simetrik Sonlu Potansiyel Kuantum Kuyusu İçinde Bulunan Parçacığa Elektrik Alanın Etkisi.....	27
1.3.5. Simetrik Sonlu Potansiyel Kuantum Kuyusu İçinde Bulunan Parçacığa Elektrik Alanın ve yabancı bir atomun(impurity) etkisi.....	29
1.4. Hacim (Bulk) Kristallerinde Verici ve Alıcı Durumlar.....	35
1.4.1. Hacim (Bulk) Kristallerinde Verici Durumlar.....	35
1.4.2. Hacim (Bulk) Kristallerinde Alıcı Durumlar.....	36
1.5. Hacim (Bulk) Kristallerinde Eksitonlar.....	38

1.6.Kuantum Kuyularının Oluřturulması.....	41
1.7.Eksitonlar.....	42
2. NÜMERİK HESAPLAMALAR.....	43
2.1. Simetrik Sonsuz Kuantum Kuyusu İçindeki Elektronun Elektrik Alan Altındaki Özelliklerinin İncelenmesi.....	44
2.2. Simetrik Sonlu Kuantum Kuyusu İçindeki Elektronun ve Deřiđin(hole-bořluk) Elektrik Alan Altındaki Özelliklerinin İncelenmesi.....	47
2.3. Simetrik Sonlu Kuantum Kuyusu İçinde Bulunan Bir Elektronun Elektrik Alanın ve Yabancı Bir Atomun Etkisi.....	53
2.4. Simetrik Olmayan Sonlu Potansiyel Kuantum Kuyusu İçinde Bulunan Elektron ve Deřiđin (bořluđun) Elektrik Alan Altındaki Dalga Fonksiyonlarının Karřılařtırılması.....	59
2.5. GaAs-GaAlAs Kuantum Kuyusunda Eksitonların İncelenmesi (Temel Durumların Hesabı).....	63
3. NÜMERİK HESAPLAMALAR SONUCUNDA BULUNAN GRAFİKLER.....	71
SONUÇ VE TARTIřMA.....	96
KAYNAKLAR.....	99
ÖZGEÇMİř.....	100

ÖZET

Kuantum kuyusu içindeki taşıyıcı elektronların ve boşlukların (deşiklerin) elektronik özelliklerini düzgün elektrik alan altında incelemeyi, elektron vedeşiklerin yabancı bir atomla etkileştiğinde nasıl davrandığının araştırılmasını amaçlayan bir çalışmadır. Bunun yanında elektron-ağırdeşik eksitonunun bağlanma enerjisinin hesaplanması da bu çalışmanın amaçlarındandır. Bu incelemeler varyasyon yöntemi ile yapılmıştır. Çalışmada izlenen yol aşağıdaki gibidir.

I.Bölümde; yaklaşık çözüm yöntemleri ve tek boyutlu sistemler ile yabancı atom problemine hazırlık olarak bir ön bilgi verildi. Ayrıca eksitonlar hakkında bilinen genel bilgiler gözden geçirildi.

II.Bölümde; önceki bölümdeki ön bilgiler göz önünde bulundurularak nümerik hesaplar yapıldı. Elektrik alan altındaki sonlu ve sonsuz kuantum kuyusu içindeki elektronun özellikleri incelendi. Sonlu simetrik potansiyel kuyusunda dadeşikler için nümerik hesaplar yapıldı. Yabancı atomun elektron vedeşik üzerine etkisi nümerik olarak hesaplandı. Elektron vedeşige uygulanan düzgün elektrik alanın etkileri araştırıldı. Daha sonra ise elektron-ağırdeşik eksitonunun bağlanma enerjisi hesaplandı (Varyasyon Yöntemiyle).

III.Bölümde; kullandığımız varyasyon yöntemiyle II.Bölümde yapılan nümerik hesapların sonuçlarını göstermek için grafikler çizildi. Bu grafiklerin tamamı bilgisayarda **fortran-77** dilinde yazılan ve çalıştırılan programlarla çizilmiştir. Bu çalışmada çıkarılan sonuçlarıda tezin son kısmında topladık.

SUMMARY

This thesis aims to investigate the electronic properties of electrons and holes in a quantum well under a uniform electric field, and how these electrons and holes behave when they interact with an impurity placed in the well. Also, the calculation of the binding energy of an exciton created by an electron and a heavy-hole is carried out. A certain variational method is used to obtain all the results.

The work is organized as follows:

In Chapter 1, the essential concepts and the theoretical background to approximation methods and one dimensional systems together with impurity problem are given. Furthermore the exciton phenomenon is also summarized.

Numerical calculations are shown in Chapter 2. The problem of an electron in finite and infinite quantum wells under an electric field is solved. Similar numerical calculations is also carried out for holes in finite symmetrical quantum wells. The implications of an impurity on electrons and holes are described. The effects of a uniform electric field on electrons and holes are also given. Then, the binding energy of electron-heavy hole exciton is variationally found.

Results of the calculations mentioned in Chapter 2 and the conclusions drawn from the work are gathered in Chapter 3.

TEŐEKKÖR

Tez yneticiliđimi Ŗstlenerek, alıŐmalarım sırasında tŖm alıŐma ortamını ve imkanlarını sađlayan, aydınlatıcı bilgilerinin yanında manevi desteđini esirgemeyen Trakya Ŗniversitesi Fen-Edebiyat FakŖltesi Fizik BlŖmŖ Katıhal Fiziđi Anabilim Dalı BaŐkanı sayın hocam Do.Dr. Hasan AKBAŐ'a teŐekkŖr etmekten mutluluk duyarım.

Bu alıŐma sŖresince gerekli olan tŖm imkanları sađlayan Trakya Ŗniversitesi Fen-Edebiyat FakŖltesi Fizik BlŖm BaŐkanı Prof.Dr. S.Askeri BARAN' a ve ders aŐamam sırasında emeđi geen Trakya Ŗniversitesi Fizik BlŖmŖ Ŗđretim Ŗyelerine teŐekkŖr ederim.

GİRİŞ

Çağımız teknolojisindeki gelişmelerin sonucu olarak, laboratuvar MBE (Molecular Beam Epitaxy) ve LPE(Liquid Phase Epitaxy) üretim teknikleri ile kuantum kuyuları özelliğinde elektronik devre elemanları üretilmiştir. Bu tekniklerle bir taban üzerine, birkaç atom kalınlığında farklı yarı iletkenlerin katmanlarını büyütme mümkündür. Günümüzde üretilen elektronik devre elemanlarının fiziği son günlerde fizik ve elektronik dünyasında çok büyük ilgi görmektedir.

Bu çalışmada bir boyutlu kuantum kuyularına hapsedilen elektronların veya deşiklerin davranışları incelenecektir. Bunun yanında kuyu içinde bulunan elektrona veya deşiğe yabancı bir atomun etkisi araştırılacaktır. Bunu takiben elektron ve deşiğin düzgün elektrik alana bağlı olarak nasıl davrandığına, enerji seviyelerinin nasıl değiştiğine bakılacaktır.

En son olarak alt alta iki ayrı kuyuda bulunan bir elektron ve bir deşiğin ekileşmesine bakılacaktır. Eksiton bağlanma enerjisi, deneme dalga fonksiyonlarıyla yaklaşık olarak bulunacaktır.

Burada yapılan nümerik hesaplamaların tamamı varyasyon yöntemi göz önünde bulundurularak yapılmıştır.

1.BÖLÜM

SCHRÖDINGER DENKLEMİ, YAKLAŞIK ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ VE TEK BOYUTLU SİSTEMLER

1.1.SCHRÖDINGER DENKLEMİ

Schrödinger denklemi kuantum fiziğinin en önemli denklemlerinden biridir. Bu denkleme başlangıcı iki şekilde yapabiliriz. Birincisi bu denklemi doğrudan doğruya yazmak, yani onu kuantum fiziğinin varsayımı olarak ele almakla olabilir. İkincisi ise bu denklemin nereden geldiğine ve hangi düşüncelerin ışığı altında ortaya konulduğunu ele almak olabilir. Schrödinger denkleminin çözümlerine "**dalga fonksiyonu**" denir. Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümlerine "**kararlı dalga fonksiyonu**" denir.

Schrödinger denkleminin çözümü olan dalga fonksiyonu $\Psi(\vec{r}, t)$, De Broglie dalgalarının uzay ve zamana bağlı biçimidir. Parçacığı temsil eden Ψ 'nin karesi yani ;

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* \quad (1.1.1)$$

Born tarafından parçacığın "t" anında "r" 'de bulunma olasılığı olarak açıklanmıştır. Bu açıklamanın veya bu yorumun bir öneriden yahut bir varsayımdan daha sağlam bir temeli yoktur. Fakat Max Born'u bu açıklamayı ortaya koymaya götüren düşünce Einstein'ın ışık demeti şiddetini, içindeki fotonların sayısına bağlayan düşüncesiydi. Bundan başka, ışık demeti şiddetini elektirik ve magnetik alanların genliklerinin kareleriyle orantılı olduğu biliniyordu. Bu alanlar Maxwell denklemlerinden türetilen dalga denklemlerini sağlıyorlardı.

Born'un açıklamasını kabul edersek Ψ 'nin değerini sınırlayan güçlü bir açıklama yapabiliriz. İlk olarak, eğer bir parçacık varsa bu parçacığın uzayda herhangi bir yerde bulunma olasılığı bir(1)'dir diyebiliriz. Bu koşulun matematiksel ifadesini (Ψ^* kompleks eşlenik olmak üzere) aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\int \Psi^* \cdot \Psi \cdot dv = 1 \quad (1.1.2)$$

Burada "dv" hacim elemanıdır ve integral tüm uzay üzerindedir. İkinci olarak, verilen bir anda uzayın bir noktasında parçacığın bulunma olasılığının sadece bir değeri vardır. Bu sınırlamanın matematiksel ifadesi, Ψ^2 nin tek değerli olmasıdır. Bundan başka parçacık devamlı varsa, yani yok olmuyorsa onun uzayın herhangi bir yerinde bulunma olasılığı sabit kalmalıdır. Bu söylediklerimizde matematiksel olarak; Ψ^2 nin

uzaysal integralinin zamana göre türevini alarak ifade edebiliriz.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int |\Psi|^2 \cdot dv = 0 \quad (1.1.3)$$

Bu ifade görelî kuantum mekaniği için önemlidir. Öte yandan klasik fiziğe göre yersel momentum " $xp - px = 0$ " dır. Oysa Heisenberg belirsizlik ilkesi,

$$xp - px \neq 0$$

olacağını söylemektedir, çünkü sol taraf eylem boyutundadır. Dolayısıyla sağ tarafta eylem boyutunda olmalıdır. Buna göre aşağıdaki şu denklemi yazabiliriz;

$$xp - px = i \hbar$$

O halde "x" ve "p" leri matris olarak düşünmek gerekir. "x" ve "p" yi işlemci olarak düşündüğümüzde, " $xp - px = i \hbar$ " denklemi için bu işlemcilerin üstüne işlem yapacak bir fonksiyon gerekmektedir. Bu fonksiyona " Ψ " dersek aşağıdaki denklemi yazabiliriz;

$$(xp - px) \Psi = i \hbar \Psi$$

Bu denklem "x" çarpım işlemcisi ve "p" de ;

$$p = i \hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

olarak tanımlanırsa sağlanır. Bunun yanında kinetik enerji ve potansiyel enerjinin toplamı da hamiltonien işlemcimizi verir(1).

Öte yandan klasik fizikte tek boyutlu x-uzayında momentumu "p" ve kütlesi "m" olan bir parçacığı göz önüne alalım. Parçacık serbest, yani bir potansiyel içinde değilse, toplam enerjisi

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (1.1.4)$$

olarak sadece kinetik enerjiden ibarettir. Bu parçacığı "de Broglie" bağıntılarına göre temsil eden dalga paketinin dalga sayısı "k" ve açısal frekansı " ω " cinsinden enerji ve momentumu yazılırsa

$$P = \hbar k \quad \text{ve} \quad E = \hbar \omega \quad (1.1.5)$$

olmalıdır. Bir dalga paketinin düzlem dalgalar cinsinden Fourier açılımı

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} d\mathbf{k} \quad (1.1.6)$$

şeklinde yazılır(2). Bu ifade de enerji ve momentum kullanılırsa

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p\mathbf{x} - Et)} dp \quad (1.1.7)$$

olur. Şimdi bu ifadenin zamana göre 1.türevi ve konuma göre de 2.türevi alınırsa aşağıdaki ifadeleri yazarız ;

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-i}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} E \phi(p) e^{i(p\mathbf{x} - Et)/\hbar} dp \quad (1.1.8)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{-1}{2\pi\hbar^3} \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 \phi(p) e^{i(p\mathbf{x} - Et)/\hbar} dp \quad (1.1.9)$$

Bu iki ifade karşılaştırılırsa, " $E = P^2/2m$ " bağıntısının her bir düzlem dalga bileşeni için sağlanabileceği görülür. Bunun için, herbir ifade uygun katsayılarla çarpıldığında

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (1.1.10)$$

olması gerektiği anlaşılır. Schrödinger serbest parçacık denklemleri denilen bu kısmi diferansiyel denklemler lineerlik koşulunu sağlar ve klasik " $E = P^2/2m$ " bağıntısını verir.

Schrödinger denklemindeki " $E = P^2/2m$ " bağıntısının sağlanması için kısmi türevler alınmıştır. Operatör kavramı açısından bakıldığında, enerji ve momentum operatörleri

$$\begin{aligned}
E &\rightarrow i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \\
\frac{P^2}{2m} &\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\
P &\rightarrow -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}
\end{aligned} \tag{1.1.11}$$

olarak tanımlanırsa, Schrödinger denklemi " $E = p^2/2m$ " bağıntısının kuantal ifadesinden başka birşey değildir

Şimdi, sabit bir " V " potansiyeli içinde hareket eden bir parçacığı ele alalım. Bu parçacığın toplam enerjisi

$$E = \frac{P^2}{2m} + V \tag{1.1.12}$$

olur. Yine "de Broglie" bağıntıları $E = \hbar \omega$ ve $P = \hbar k$ kullanılırsa

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \tag{1.1.13}$$

olmalıdır. Yukarıda verilen kısmi türevlerin yine bu eşitliği sağlaması isteniyorsa

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V \Psi(\vec{r}, t) \tag{1.1.14}$$

olur. Bu denklem iki yönden geliştirilebilir: Üç boyutlu uzayda momentum vektörü $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ ' ye karşılık gelen bir $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ dalgasayısı vektörü tanımlanırsa, dalga paketi ifadesi

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \phi(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} d^3k \tag{1.1.15}$$

olur. Burada " $\vec{k} \cdot \vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z$ " skaler çarpımdır. Bu kez " $E = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m + V$ " olacağından üç tane kısmi türev alınıp toplanırsa

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1.16)$$

ifadesi bulunur.

İkinci olarak, konuma ve zamana göre kısmi türevleri alırken bu ifadede " V " potansiyelinin sabit olduğunu varsaymıştık (aksi halde, " p " momentumunda değişken olurdu ve türevinin alınması gerekirdi). Bu denklemin " $V(\vec{r}, t)$ " gibi hem " t " zamanına ve hem de " \vec{r} " konumuna bağlı potansiyel için de geçerli olduğunu varsayarak **Schrödinger dalga denklemini** elde etmiş oluruz.

Bir sistemin " $\Psi(\vec{r}, t)$ " dalga fonksiyonunun zaman içindeki gelişmesi Schrödinger dalga denklemini ile belirlenir. Bu denklemini yazacak olursak ;

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1.17)$$

Burada ;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.1.18)$$

ifadesiyle laplas operatörü ve toplam enerji " E " nin diferansiyel şekli olan

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \quad (1.1.19)$$

" H " hamiltonien tanımlanırsa, Schrödinger denklemini

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi \quad (1.1.20)$$

olarak da yazılabilir. Bu dalga denkleminin çözümü olan " $\Psi(\vec{r}, t)$ " fonksiyonu, incelenen bir sistem hakkındaki tüm bilgiyi içermektedir.

Schrödinger denklemindeki $V(\vec{r}, t)$ potansiyeli bir çok fiziksel sistemde "t" zamanından bağımsızdır. Böyle durumlarda aşağıdaki Schrödinger denklemi kısmi diferansiyel denklemlerin bilinen değişken ayırma yöntemiyle çözülebilir.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1.21)$$

Bu denklem için ;

$$\Psi(\vec{r}, t) = f(t) \Psi(\vec{r}) \quad (1.1.22)$$

şeklinde, "t" ve " \vec{r} " ye bağımlı bir çözüm aranır. Burada $\Psi(\vec{r}, t)$ ile $\Psi(\vec{r})$ farklı şeylerdir, fakat bu yazılış çok yaygın olduğu için burada da bunu kullanalım. Buna göre;

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{df}{dt} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1.23)$$

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = f \nabla^2 \Psi(\vec{r}) \quad (1.1.24)$$

değerleri Schrödinger denkleminde yerine konulup, eşitliğin her iki tarafı $f(t) \Psi(\vec{r})$ ile bölünürse

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\Psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \right] \quad (1.1.25)$$

olur. Bu eşitliğin sol tarafı sadece "t" değişkenine, sağ tarafı ise sadece " \vec{r} " değişkenine bağlıdır. Bu eşitliği, her "t" ve " \vec{r} " değeri için sağlayabilmenin tek yolu, iki tarafında aynı bir sabite eşit olmasıdır. Bu sabite "E" dersek

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = E \quad (1.1.26)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \right] = E \Psi(\vec{r}) \quad (1.1.27)$$

gibi iki adi diferansiyel denklem bulunur. Birinci denklemin çözümü

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (1.1.28)$$

olur. Diğer denklem ise

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (1.1.29)$$

olur ki bunun çözümü için $V(\vec{r})$ potansiyelinin verilmiş olması gerekir. Buna **zamandan bağımsız Schrödinger denklemi** denir. Eğer $\Psi(\vec{r})$ bulunursa komple çözüm

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \Psi(\vec{r}) \quad (1.1.30)$$

olacaktır.

"E" sabitinin enerji boyutuna sahip olduğu kolayca görülebilir. Ayrıca "E" kompleks değerler alamaz. Çünkü, kompleks bir "E" sabitini " $E = E_r + i E_i$ " şeklinde yazarsak, komple çözümdeki üstel faktör

$$e^{-iEt/\hbar} = e^{-i(E_r + iE_i)t/\hbar} = e^{-iE_r t/\hbar} e^{E_i t/\hbar} \quad (1.1.31)$$

şeklinde, $t \rightarrow \pm \infty$ değerlerinden birinde mutlaka sonsuza gidecektir, dalga fonksiyonu olarak kabul edilemez.

Olasılık yoğunluğu ifadesinde bu çözümü kullanırsak ($\Psi^*(\vec{r}, t)$ kompleks eşlenik olmak üzere) ;

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = e^{iEt/\hbar} \Psi^*(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \Psi(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2 \quad (1.1.32)$$

olduğu görülür, yani olasılık dağılımı zamandan bağımsızdır. Bu durumda, hesaplanan tüm beklenen değerler zamandan bağımsız olacaktır. Daha başka bir deyişle, sistemin fiziksel özellikleri zamanla değişmeyecek, kararlı olacaktır. Bu nedenle $\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \Psi(\vec{r})$ yapısındaki dalga fonksiyonları kararlı durumu temsil eder.

Öte yandan zamandan bağımsız denklemin sol tarafının $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$

hamiltonieni olduğu göz önüne alınırsa

$$H\Psi = E\Psi \quad (1.1.33)$$

yazılabilir. Eşitliğin sol tarafında bir operatör (H), sağ tarafında bir reel sayı (E) yer almaktadır. Lineer cebirde matrisler için bilinen

$$Au = \lambda u \quad (1.1.34)$$

özdeğer denklemi yapısı hatırlanacak olursa (A bir matris, u özdeğer vektörü, λ ise özdeğerdir), **Schrödinger denklemine bir özdeğer denklemi gözüyle bakılabilir.** Hamiltonien operatörünün "E" özdeğerine karşılık gelen özfonksiyonları $\Psi(E)$ olur. Burada da belirli "E" enerjileri için çözüm vardır. Enerji kuantalanması da böylece sağlam bir temele oturmuştur(2).



1.2.YAKLAŞIK ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ

Schrödinger denkleminin tam olarak çözülebildiği önemli fiziksel problemlerin sayısı sınırlıdır. Bu yüzden yaklaşık çözümler kuantum mekaniği uygulamalarında büyük önem taşırlar. **Pertürbasyon** teorisi denilen bir yaklaşımda, çözümler bir seri olarak verilir. Katlı durumlar olup olmadığına göre bu seri çözümleri farklı olur. Diğer bir yaklaşım olan **varyasyon** yönteminde özenerjileri minimize ederek bulmak mümkündür. Öte yandan, radyasyon problemlerinde uyarılmış durumların geçiş olasılıkları hesaplanırken zamana bağlı pertürbasyon yöntemini kullanmak zorunlu olmaktadır(2)

Biz bu tezi hazırlarken varyasyon yöntemini göz önüne aldık ve yaptığımız hesapların hemen hemen tamamında bu yöntemi kullandık.

1.2.1.PERTÜRBASYON TEORİSİ

A) **Pertürbasyon Açılımı** ; Bir sistemin hamiltonien'i (H) için Schrödinger denkleminin

$$H \Psi_n = E_n \Psi_n \quad (1.2.1.A.1)$$

şeklinde olduğunu, bu denklemin analitik olarak çözümlenip Ψ_n öz durumları ve E_n özdeğerlerinin bulunamadığını varsayalım. Eğer bu hamiltonien bir H_0 hamiltonieni ile bir V pertürbasyon teriminin toplamı olarak

$$H = H_0 + V \quad (1.2.1.A.2)$$

şeklinde yazılırsa, yaklaşık bir çözüm bulunabilir. Atom ve molekül fiziğinde karşılaşılan birçok problemde hamiltonien böyle iki kısma gayet doğal bir şekilde ayrılır(2).

H_0 hamiltonieninin özdeğer problemi olan

$$H_0 u_n = \varepsilon_n u_n \quad (1.2.1.A.3)$$

için u_n özfonksiyonları ve ε_n özdeğerleri biliniyor olsun. Gerçek problemin hamiltonienini

$$H = H_0 + \lambda V \quad (1.2.1.A.4)$$

şeklinde bir λ reel parametresine bağlı olarak yazalım(Bu λ parametresi seri açılımını kolaylaştırmak içindir, işlemler yapıldıktan sonra $\lambda = 1$ alınacaktır).

H hamiltonieninin özdeğer ve özfonksiyonları bu λ parametresine bağlı bir seri

olarak arayalım .

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)} \quad (1.2.1.A.5)$$

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i \Psi_n^{(i)} \quad (1.2.1.A.6)$$

Burada $E_n^{(i)}$ ve $\Psi_n^{(i)}$ gerçek enerji ve dalga fonksiyonuna "i" mertebesinden olan katkıları göstermektedir(2). Bu katkılar için bir ifade bulursak, istediğimiz "i" mertebesine kadar olan terimleri ekleyerek gerçek problemi çözeriz. Bu ifadeler (1.2.1.A.1) denkleminde kullanılırsa ;

$$(H_0 + \lambda V)(\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \dots) \quad (1.2.1.A.7)$$

yazılabilir. Bu eşitlikteki terimleri λ parametresinin kuvvetlerine göre yazarsak ;

$$\begin{aligned} & [H_0 \Psi_n^{(0)} - E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}] + \lambda [H_0 \Psi_n^{(1)} + V \Psi_n^{(0)} - E_n^{(0)} \Psi_n^{(1)} - E_n^{(1)} \Psi_n^{(0)}] \\ & + \lambda^2 [H_0 \Psi_n^{(2)} + V \Psi_n^{(1)} - E_n^{(0)} \Psi_n^{(2)} - E_n^{(1)} \Psi_n^{(1)} \Psi_n^{(1)} - E_n^{(2)} \Psi_n^{(0)}] + \dots = 0 \end{aligned}$$

olur. Bu eşitliğin λ parametresinin her değerinde doğru olabilmesi için her bir λ kuvvetinin katsayısı sıfır olmalıdır. Böylece her bir dereceden pertürbasyon çözümleri için ifadeler elde edilir(2);

$$\begin{aligned} & [H_0 - E_n^{(0)}] \Psi_n^{(0)} = 0 \\ & [H_0 - E_n^{(0)}] \Psi_n^{(1)} = [E_n^{(1)} - V] \Psi_n^{(0)} \\ & [H_0 - E_n^{(0)}] \Psi_n^{(2)} = [E_n^{(1)} - V] \Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} \end{aligned} \quad (1.2.1.A.8)$$

Bu denklemler, sırasıyla, 0,1,2,... mertebesinden yaklaşık çözümleri verirler.O halde,

$$E_n^{(0)} = \varepsilon_n \quad (1.2.1.A.9)$$

$$\Psi_n^{(0)} = u_n \quad (1.2.1.A.10)$$

olur.Daha yüksek mertebeden bulacağımız terimler buna eklenecektir.

B) 1. Dereceden Pertürbasyon; Birinci dereceden pertürbasyon denklemini ele aldığımızda, 0.derece çözümleri kullanılırsa

$$\begin{aligned} [H_0 - E_n^{(0)}] \Psi_n^{(1)} &= [E_n^{(1)} - V] \Psi_n^{(0)} \\ [H_0 - \varepsilon_n] \Psi_n^{(1)} &= [E_n^{(1)} - V] u_n \end{aligned} \quad (1.2.1.B.1)$$

yazılır(2). H_0 hamiltonienin özfonksiyonları $\{u_{i,j}\}$ ortonormal bir baz oluşturdukları için her dalga fonksiyonu bu bazda bir seri açılımı olarak yazılabilir. Özel olarak, Ψ_n dalga fonksiyonuna 1.dereceden katkı olan $\Psi_n^{(1)}$ fonksiyonu bu bazda yazılırsa

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_j c_{jn}^{(1)} u_j \quad (1.2.1.B.2)$$

bulunacak $c_{jn}^{(1)}$ katsayıları problemin çözümünü verir. Buna göre 1.derece denklemi

$$[H_0 - \varepsilon_n] \sum_j c_{jn}^{(1)} u_j = [E_n^{(1)} - V] u_n \quad (1.2.1.B.3)$$

$$\sum_j [\varepsilon_j - \varepsilon_n] c_{jn}^{(1)} u_j = [E_n^{(1)} - V] u_n \quad (1.2.1.B.4)$$

olur(Burada $H_0 u_j = \varepsilon_j u_j$ olduğu hatırlanmalıdır). Bu denklemin bir u_i baz vektörüyle skaler çarpımı alınırsa(2)

$$\sum_j [\varepsilon_j - \varepsilon_n] c_{jn}^{(1)} (u_i, u_j) = E_n^{(1)} (u_i, u_n) - (u_i, V u_n)$$

$$\sum_j [\varepsilon_j - \varepsilon_n] c_{jn}^{(1)} \delta_{ij} = E_n^{(1)} \delta_{in} - (u_i, V u_n)$$

$$[\varepsilon_i - \varepsilon_n] c_{jn}^{(1)} = E_n^{(1)} \delta_{in} - (u_i, V u_n) \quad (1.2.1.B.5)$$

olur(Bu ifadelerde ortonormal bazda $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ olduğu kullanılmıştır).

Bu denklemlerden hem enerji hem de dalga fonksiyonuna 1.dereceden katkıları bulabiliriz. $i = n$ seçilirse, eşitliğin sol tarafı sıfır olacağından

$$E_n^{(1)} = (u_n, V u_n) \quad (1.2.1.B.6)$$

bulunur. Bu sonuca göre enerji özdeğerlerine 1.dereceden katkı, pertürbasyon terimi V' nin, H_0 hamiltonieninin u_n öz durumundaki beklenen değeri olur. O halde gerçek enerji özdeğerinin 1.dereceden yaklaşık değeri

$$E_n = \varepsilon_n + (u_n, V u_n) \quad (1.2.1.B.7)$$

olur. Aynı denklemde $i \neq n$ alınırsa dalga fonksiyonuna 1.dereceden katkıyı buluruz. Bu durumda, $(u_i, u_n) = 0$ olacağından

$$[\varepsilon_i - \varepsilon_n] c_{in}^{(1)} = 0 - (u_i, V u_n) \quad (1.2.1.B.8)$$

$$c_{in}^{(1)} = \frac{(u_i, V u_n)}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \quad (i \neq n) \quad (1.2.1.B.9)$$

bulunur. Bu katsayılar cinsinden dalga fonksiyonuna katkı

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} u_i = \sum_{i \neq n} \frac{V_{in}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} u_i \quad (1.2.1.B.10)$$

olur. Burada, $V_{in} = (u_i, V u_n)$ matris elemanıdır.

Sonuç olarak, dalga fonksiyonu ve enerji düzeylerine 1.dereceden yaklaşık çözümler aşağıdaki gibi yazılır ;

$$E_n = \varepsilon_n + V_{nn} \quad (1.2.1.B.11)$$

$$\Psi_n = u_n + \sum_{i \neq n} \frac{V_{in}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} u_i \quad (1.2.1.B.12)$$

Bu sonuncu denklem bize pertürbasyon yaklaşımının hangi koşullarda geçerli olduğuna dair bir fikir vermektedir. Her sonsuz seri açılımında, katsayıları birden küçük olması gerektiğinden

$$\left| \frac{V_{in}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \right| \ll 1$$

$$|V_{in}| \ll |\varepsilon_n - \varepsilon_i|$$

ifadeleri yazılır. Daha açık bir deyişle, pertürbasyon teriminin bir (i, j) matris elemanı, ε_n özdeğerleri arasındaki farktan küçük olmalıdır. Enerji için bulunan denkleme göre de

$$|V_{nn}| \ll |\varepsilon_n|$$

yazılır. Yani, V nin beklenen değeri (veya köşegen matris elemanları) $E_n^{(0)}$ enerji düzeyine kıyasla küçük olmalıdır.

Yukarıdaki c_{ni} katsayıları çözümünde paydadaki $(\varepsilon_n - \varepsilon_i)$ terimine dikkat edelim. Eğer, H_0 hamiltonienli sistemin katlı durumları varsa, herhangi iki i ve n indisi için $\varepsilon_i = \varepsilon_n$ olabilir ve payda sıfır olacağı için seri açılımı geçersiz olur. O halde, buraya kadar verdiğimiz çözümler ancak katlı olmayan durumlar için geçerlidir. Örneğin, tek boyutlu problemlerde bir katlılık söz konusu olmadığından bu yöntem kullanılabilir.

C) 2.Dereceden Pertürbasyon; Bazı durumlarda pertürbasyon terimi V nin $\{u_n\}$ durumları arasında hesaplanan matris elemanları sıfır olabilir. Bu durumda enerji ve dalga fonksiyonuna 1.dereceden katkı oluşmaz ve 2.derece katkılarına bakmak gerekir. Buna göre, (1.2.1.A.8) de verilen denklemleri tekrar yazalım;

$$[H_0 - E_n^{(0)}] \Psi_n^{(2)} = [E_n^{(1)} - V] \Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} \quad (1.2.1.C.1)$$

Bu denklemde 0. ve 1.derece çözümler kullanılırsa

$$(H_0 - \varepsilon_n) \Psi_n^{(2)} = [(\varepsilon_n + V_{nn}) - V] \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} u_i + E_n^{(2)} u_n \quad (1.2.1.C.2)$$

yazılabilir. Yine, $\{u_k\}$ bazında, $\Psi_n^{(2)}$ fonksiyonunu seri açılımı olarak yazıp $c_k^{(2)}$ katsayılarını arayalım:

$$\Psi_n^{(2)} = \sum_k c_{kn}^{(2)} u_k \quad (1.2.1.C.3)$$

Bu çözümü kullandığımızda,

$$[H_0 - \varepsilon_n] \sum_k c_{kn}^{(2)} u_k = [(\varepsilon_n + V_{nn}) - V] \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} u_i + E_n^{(2)} u_n$$

$$\sum_k [\varepsilon_k - \varepsilon_n] c_{kn}^{(2)} u_k = [\varepsilon_n + V_{nn} - V] \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} u_i + E_n^{(2)} u_n \quad (1.2.1.C.4)$$

olur. Bu denklemin de, bir u_j baz vektörüyle skaler çarpımını alıp, ortonormallik özelliği kullanılırsa(2)

$$\begin{aligned} \sum_k [\varepsilon_k - \varepsilon_n] c_{kn}^{(2)} (u_j, u_k) &= [\varepsilon_n + V_{nn}] \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} (u_j, u_i) \\ &\quad - \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} (u_j, V u_i) + E_n^{(2)} u_n \\ \sum [\varepsilon_k - \varepsilon_n] c_{kn}^{(2)} \delta_{jk} &= [\varepsilon_n + V_{nn}] \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} \delta_{ji} - \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} V_{ji} + E_n^{(2)} \delta_{jn} \\ \sum [\varepsilon_k - \varepsilon_n] c_{kn}^{(2)} \delta_{jk} &= [\varepsilon_n + V_{nn}] \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} \delta_{ji} - \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} V_{ji} + E_n^{(2)} \delta_{jn} \\ [\varepsilon_j - \varepsilon_n] c_{jn}^{(2)} &= [\varepsilon_n + V_{nn}] \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} \delta_{ji} - \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} V_{ji} + E_n^{(2)} \delta_{jn} \end{aligned} \quad (1.2.1.C.5)$$

ifadeleri yazılır. Bu denklem sistemi, $c_k^{(2)}$ katsayılarını ve dolayısıyla, enerji ve dalga fonksiyonuna 2.dereceden katkıları verecektir.

Yine, $j = n$ alıp enerji katkılarını arayalım. eşitliğin sol tarafı sıfır olacağı ve "i" indisli 1. toplamın katkısı olmayacağından(2),

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)} V_{ni} \quad (1.2.1.C.6)$$

bulunur. Bir önceki kısımda bulduğumuz $c_{in}^{(1)}$ katsayılarını da kullanırsak

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{|V_{ni}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \quad (1.2.1.C.7)$$

bulunur(Burada V operatörü hermitik olduğundan $V_{in} V_{ni} = V_{ni}^* V_{ni} = |V_{ni}|^2$ özelliğini kullandık). $j \neq n$ aldığımızda $c_j^{(2)}$ katsayılarını buluruz. Buna göre yapılan işlemler sonucunda da

$$c_{jn}^{(2)} = \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_j} \left(\sum_{i \neq n} \frac{V_{ji} V_{in}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \right) - \frac{V_{nn} V_{jn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)^2} \quad (1.2.1.C.8)$$

bulunur. Bu sonuçlara 1. dereceden terimleri de eklersek, sonuç olarak E_n enerjisine ve Ψ_n dalga fonksiyonuna 2. dereceden yaklaşık çözümleri aşağıdaki gibi yazabiliriz;

$$E_n = \varepsilon_n + V_{nn} + \sum_{i \neq n} \frac{|V_{ni}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \quad (1.2.1.C.8)$$

$$\Psi_n = u_n + \sum_{j \neq n} \left[\frac{V_{jn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_j} - \frac{V_{nn} V_{jn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)^2} + \frac{V_{ji} V_{in}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_i)} \right] u_j \quad (1.2.1.C.9)$$

Yukarı dereceden çözümlere gidildikçe ifadelerin daha karmaşık hale geldiği açıkça görülmektedir(2).

1.2.2. VARYASYON YÖNTEMİ

Bu yöntem, karmaşık sistemlerin dalga fonksiyonlarını tahmin etmek ve bu fonksiyonları geliştirmek için bir yol oluşturur. Önce, tahmini olan ve **deneme fonksiyonu** denilen fonksiyonun kalitesinin belirlenmesi için bir kriter ortaya koyar ve sonra bunun nasıl en iyi hale getirileceğini gösterir. Sistemin bir "H" Hamiltonien'i ile belirlendiğini varsayalım ve bu Hamiltonien'in en düşük özdeğeri veya sistemin taban durumuna karşılık gelen enerjisi " E_0 " olsun. Şimdi " Ψ_D " deneme dalga fonksiyonu olmak üzere **Rayleigh oranı** denilen

$$E = \frac{\int \Psi_D^* \cdot H \cdot \Psi_D \cdot dv}{\int \Psi_D^* \cdot \Psi_D \cdot dv} \quad (1.2.2.1)$$

integraline bakarsak, kuşkusuz " Ψ_D " normalize ise (1.2.2.1) denkleminin paydası 1'dir. Varyasyon yöntemine göre herhangi " Ψ_D " için ;

$$E \geq E_0 \quad (1.2.2.2)$$

dir. Burada eşitlik hali ancak " Ψ_D " fonksiyonunun taban durumu dalga fonksiyonunu " Ψ_0 " olduğu zaman sağlanır.

Şimdi bu teoremin ispatını yapalım. Deneme dalga fonksiyonu, Hamiltonien'in bir takım oluşturan gerçek dalga fonksiyonlarının doğrusal bileşimi ;

$$\Psi_D = \sum_n C_n \cdot \Psi_n \quad , \quad H \cdot \Psi_n = E_n \cdot \Psi_n \quad (1.2.2.3)$$

olarak yazılabilir. Buradan da görüleceği gibi ;

$$\begin{aligned} \int \Psi_D^* \cdot (H - E_0) \cdot \Psi_D \cdot dv &= \sum_n \cdot \sum_n \cdot C_n^* \cdot C_n \cdot \int \Psi_n^* \cdot (H - E_0) \cdot \Psi_n \cdot dv \\ &= \sum_n \cdot \sum_n \cdot C_n^* \cdot C_n \cdot (E_n - E_0) \cdot \int \Psi_n^* \cdot \Psi_n \cdot dv \\ &= \sum_n \cdot C_n^* \cdot C_n \cdot (E_n - E_0) \geq 0 \end{aligned} \quad (1.2.2.4)$$

dır. Burada $E_n \geq E_0$ ve $|C_n|^2$ pozitif olduğundan (1.2.4) denkleminin büyük veya eşit sıfırdır. O halde ;

$$\int \Psi_D^* \cdot (H - E_0) \cdot \Psi_D \cdot dv \geq 0 \quad (1.2.2.5)$$

dir ve bu da " $E \geq E_0$ " olduğunun ispatıdır.

Varyasyon teoreminin anlamı, " Ψ_D " deneme fonksiyonu her ne alınırsa alınsın onunla hesaplanan enerjinin, yani **Rayleigh** oranının sistemin gerçek taban durumu enerjisinden hiçbir zaman küçük olmadığına açıklamasıdır. Buna göre "E" nin değeri ne kadar küçükse, bu enerji taban durumu enerjisine o kadar yakındır ve bunun sonucu olarak da, " Ψ_D " deneme fonksiyonu taban durumu dalga fonksiyonuna o kadar yakındır. Bu nedenle, bir sistemin dalga fonksiyonuna ulaşmak için içindeki değişkenleri değiştirilebilen bir deneme fonksiyonu seçilir ve bu değişkenler Rayleigh oranı minimum değerini alıncaya kadar değiştirilir. Sonra "E" yi minimum kılan değişkenlerin değeri en iyi dalga fonksiyonunu oluşturmak için kullanılırlar. Örneğin, P_1 ve P_2 değişkenler olmak üzere ;

$$\Psi_D = x^{P_1} \cdot \exp(-p_2 \cdot x) \quad (1.2.2.6)$$

biçiminde seçilmişse $\left(\frac{\partial E}{\partial P_1}\right)=0$ ve $\left(\frac{\partial E}{\partial P_2}\right)=0$ kılan P_1 ve P_2 değerleri " Ψ_D " deki yerine yazılır. Sonuç olarak, varyasyon yönteminde bir diferansiyel denklem çözülmez, fakat **integral** ve **türev** alınır(1). Kısacası varyasyon yöntemi, taban durumu enerjisini minimize ederek bulmayı amaçlayan bir yöntemdir.



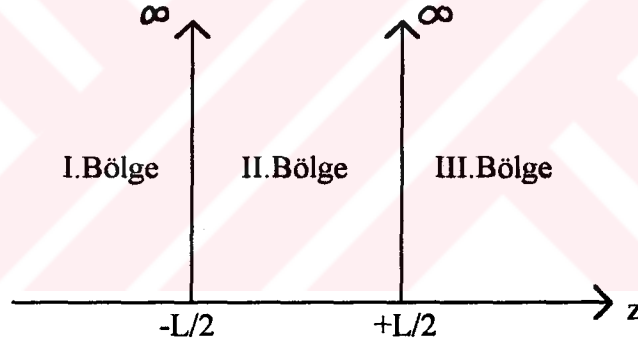
1.3.TEK BOYUTLU SİSTEMLER

1.3.1.SİMETRİK BİR SONSUZ POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLMİŞ OLAN BİR PARÇACIĞIN ÖZELLİKLERİ

İki potansiyel duvarı arasına hapsedilmiş bir parçacığı inceleyelim.Duvar yüksekliğini, ilk önce matematiksel açıdan kolay olması bakımından sonsuz alalım. Bu kuyunun potansiyel fonksiyonu aşağıdaki gibi simetrik olsun;

$$V(z) = \begin{cases} \infty & z \leq -L/2 \\ 0 & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ \infty & z \geq L/2 \end{cases} \quad (1.3.1.1)$$

ve bu ifadeye göre simetrik potansiyel kuyunun şeklini aşağıdaki gibi düşünürsek ($L = 2a$ kuyu genişliği olmak üzere);



Potansiyel enerji " $z = \mp L/2$ " da sonsuz olduğu için parçacığın duvarın dışında olma olasılığı sıfırdır. Buna göre " $\Psi(z)$ " dalga fonksiyonu $|z| > L/2$ için sıfır olmalıdır ve Schrödinger özdeğer denklemini yalnızca kuyunun içinde çözmeliyiz. Bundan başka dalga fonksiyonunun sürekli olması gerektiği için " $\Psi(z)$ " sınır duvarlarında sıfır olmalıdır. Yani " $z = \mp L/2$ " da " $\Psi(z) = 0$ " olmalıdır.Burada Schrödinger denklemini ;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{ve} \quad H.\Psi(z) = E.\Psi(z) \quad (1.3.1.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} = E.\Psi(z) \quad (1.3.1.3)$$

şeklinde yazılır. Buradan da $k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ olmak üzere dalga fonksiyonunu aşağıdaki gibi yazarız ;

$$\Psi(z) = A.Sin(k.z) + B.Cos(k.z) \quad (1.3.1.4)$$

Bu genel çözüm sınır koşullarına uygulanarak ;

$$A.Sin(k.L/2) = 0 \quad (1.3.1.5)$$

$$B.Cos(k.L/2) = 0 \quad (1.3.1.6)$$

bulunur. Sonuç olarak iki tür mümkün çözüm var diyebiliriz. Bu denklemlerden tek ve çift durumlar için aşağıdaki dalga fonksiyonlarını yazarız ;

$$\left(k_n = \frac{n\pi}{L} \text{ ise} \right)$$

$$\Psi_n(z) = B.Cos(k_n z) \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (1.3.1.7)$$

$$\Psi_n(z) = A.Sin(k_n z) \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (1.3.1.8)$$

Burada, "A" ve "B" normalizasyon sabitidir. Burada tek veya çift durumlar için dalga fonksiyonları bire normalize edilebilir(6).

$$\int_{-L/2}^{+L/2} \Psi_n^*(z) \Psi_n(z) dz = 1 \quad (1.3.1.9)$$

Buradan "A" ve "B" sabiti hesaplanabilir. Ayrıca " E_n " enerji özdeğerlerini varyasyon yöntemini kullanarak

$$\langle E_n \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_n(z) | H | \Psi_n(z) \rangle}{\langle \Psi_n(z) | \Psi_n(z) \rangle} \right\} \quad (1.3.1.10)$$

Bu sonuca göre potansiyel kuyusundaki bir parçacığın alabileceği enerji değerleri bir "n" tamsayısına bağlı olarak kesikli değerlerde bulunabilir. Başka bir deyişle kuantize edilmiş enerji düzeyleri oluşur.

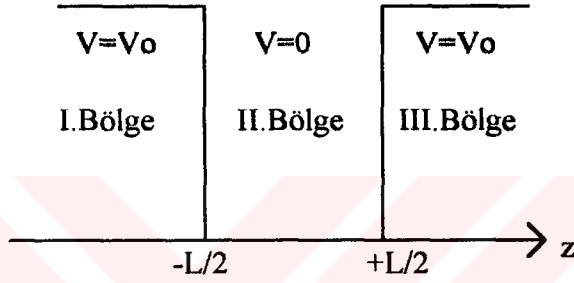
Birçok kuyu probleminde, parçacığın "E" enerjisi duvarın yüksekliğinden çok küçükse, problemi bir sonsuz kuyu varsayıp işlem yapmak kolaylık sağlar, bulunan sonuçlar gerçeğe yakın olur. Örneğin, metallerde iletim elektronları, bir hacim içindeki gaz molekülleri sonsuz kuyuda parçacıklar olarak alınabilirler(2).

1.3.2.SİMETRİK BİR SONLU POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLMİŞ OLAN BİR PARÇACIĞIN ÖZELLİKLERİ

Şimdi kenarları sonsuz olmayan, fakat sonlu basamaklardan oluşan potansiyel kuyusu içinde bulunan parçacığı göz önüne alalım ve parçacık aşağıdaki gibi bir potansiyele hapsedilmiş olsun ;

$$V(z) = \begin{cases} V = 0 & -L/2 \leq z \leq +L/2 \\ V = V_0 & |z| > L/2 \end{cases} \quad (1.3.2.1)$$

Seçtiğimiz bu potansiyel kuyusunun şekli şu şekilde olur ($L = 2a$ olmak üzere);



Burada Hamiltonien'imiz aşağıda ki gibidir ,

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \text{Kinetik Enerji}$$

$$H_1 = V(z) = \text{Potansiyel Enerji}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad (1.3.2.2)$$

Toplam enerji "E" nin " V_0 " dan daha küçük olduğu durumları göz önüne alalım. Buna göre potansiyel kuyusu içinde bulunan " m^* " kütleli parçacığın hareket denklemini II.Bölge için;

$$H. \Psi(z) = E. \Psi(z)$$

$$\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} + E. \Psi(z) = 0$$

şeklinde yazılır. Bu diferansiyel denklem çözüldüğünde parçacığı temsil eden " $\Psi(z)$ "

dalga fonksiyonu $k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ olmak üzere (A ve B sabit sayılardır);

$$\Psi(z) = A.Cos(k.z) + B.Sin(k.z) \quad (1.3.2.3)$$

şeklinde olur.Sınır şartlarından, $\Psi_{çift}(z)$ çift durumların ve $\Psi_{tek}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere;

$$\Psi_{çift}(z) = A Cos(k z)$$

$$\Psi_{tek}(z) = B Sin(k z)$$

İfadeleri elde edilir. I.ve III. Bölgede yani, $|z| > L/2$ bölgesinde ise Schrödinger denklemini aşağıdaki gibi yazılır ;

$$\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} - (V_0 - E). \Psi(z) = 0 \quad (1.3.2.4)$$

Bu denklemin genel çözümü ;

$$\Psi(z) = C.exp(\alpha.z) + D.exp(-\alpha.z) \quad (1.3.2.5)$$

şeklinde dir.Burada "C" ve "D" sabitler olup ;

$$\alpha = \sqrt{\frac{2.m^*}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad (1.3.2.6)$$

olarak alınmıştır($z \leq -L/2$ ve $z \geq L/2$). Sınır şartları düşünüldüğünde "C" nin sıfıra eşit olması gerektiğini, aksi halde dalga fonksiyonunun "z" sonsuza gitmeye başlayınca sınır koşullarını bozarak sonsuza gideceğini hemen görürüz. Buna göre ;

$$\Psi(z) = D.exp(-\alpha.z) \quad z > L/2 \quad (1.3.2.7)$$

elde edilir.Benzer şekilde de ;

$$\Psi(z) = C \cdot \exp(\alpha \cdot z) \quad z < -L/2 \quad (1.3.2.8)$$

elde edilir.

Şimdi potansiyelin " $z = \mp L/2$ " deki süreklilikleri sonludur ve sınır koşulları " $\Psi(z)$ " ve " $d\Psi(z)/dz$ " in ikisinde bu noktalarda sürekli olmasını gerektirir. Böylece sınır koşullarından aşağıdaki denklemler yazılır ,

$$\begin{aligned} A \cos(kL/2) + B \sin(kL/2) &= D \exp(-\alpha L/2) \\ -k A \sin(kL/2) + k B \cos(kL/2) &= -\alpha D \exp(-\alpha L/2) \\ A \cos(kL/2) - B \sin(kL/2) &= C \exp(-\alpha L/2) \\ k A \sin(kL/2) + k B \cos(kL/2) &= \alpha C \exp(-\alpha L/2) \end{aligned} \quad (1.3.2.9)$$

Bu denklemlerden aşağıdaki denklemler elde edilir;

$$\begin{aligned} 2A \cos(kL/2) &= (C + D) \exp(-\alpha L/2) \\ 2kA \sin(kL/2) &= \alpha (C + D) \exp(-\alpha L/2) \\ 2B \sin(kL/2) &= (D - C) \exp(-\alpha L/2) \\ 2kB \cos(kL/2) &= -\alpha (D - C) \exp(-\alpha L/2) \end{aligned} \quad (1.3.2.10)$$

Bu denklemlerden de ;

$$\begin{aligned} k \tan(kL/2) = a \quad C = -D \quad \text{ve} \quad A = 0 \quad \text{değilse} \\ \text{ve} \\ k \cot(kL/2) = -a \quad C = D \quad \text{ve} \quad B = 0 \quad \text{değilse} \end{aligned} \quad (1.3.2.11)$$

denklemleri elde edilir. Bu denklemlerde verilen koşullar aynı anda sağlanmalıdır. Buna göre aşağıdaki koşullar altında iki çözüm takımı olarak şunları elde ederiz ;

$$\begin{aligned} k \tan(kL/2) = \alpha \quad C = D \quad \text{ve} \quad B = 0 \\ \text{ve} \\ k \cot(kL/2) = -\alpha \quad C = -D \quad \text{ve} \quad A = 0 \end{aligned} \quad (1.3.2.12)$$

Bunlar " k ve α " nın tanımlarıyla birlikte, sistemin enerji düzeylerini ve bunlarla ilgili dalga fonksiyonunu belirler.

Böylece $\Psi_{çift}(z)$ çift durumların dalga fonksiyonu ve $\Psi_{tek}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonu olarak düşünülürse, aşağıdaki dalga fonksiyonları elde edilir(I.II.III.Bölge için) ;

Çift durumlar için; " $\Psi_{çift}(z)$ " olmak üzere ;

$$\Psi_{çift}(z) = \begin{cases} A \cos(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(\alpha z) & z \leq -L/2 \text{ (I.)} \\ A \cos(kz) & -L/2 \leq z \leq L/2 \text{ (II.)} \\ A \cos(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(-\alpha z) & z \geq L/2 \text{ (III.)} \end{cases} \quad (1.3.2.13)$$

Tek durumlar için; " $\Psi_{tek}(z)$ " olmak üzere ;

$$\Psi_{tek}(z) = \begin{cases} -A \sin(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(\alpha z) & z \leq -L/2 \text{ (I.)} \\ A \sin(kz) & -L/2 \leq z \leq L/2 \text{ (II.)} \\ A \sin(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(-\alpha z) & z \geq L/2 \text{ (III.)} \end{cases} \quad (1.3.2.14)$$

Burada normalizasyon koşulundan "A" sabiti bulunabilir ;

$$\int_{-\infty}^{-L/2} A^2 \cdot \Psi_1^* \cdot \Psi_1 \cdot dz + \int_{-L/2}^{+L/2} A^2 \cdot \Psi_2^* \cdot \Psi_2 \cdot dz + \int_{+L/2}^{+\infty} A^2 \cdot \Psi_3^* \cdot \Psi_3 \cdot dz = 1 \quad (1.3.2.15)$$

Enerji ise şu şekilde bulunur ($E_{çift}$ çift durumların enerjisi ve E_{tek} tek durumların enerjisi olmak üzere) ;

$$\langle E_{çift} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_{çift}(z) | H | \Psi_{çift}(z) \rangle}{\langle \Psi_{çift}(z) | \Psi_{çift}(z) \rangle} \right\} \quad (1.3.2.16)$$

$$\langle E_{tek} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_{tek}(z) | H | \Psi_{tek}(z) \rangle}{\langle \Psi_{tek}(z) | \Psi_{tek}(z) \rangle} \right\} \quad (1.3.2.17)$$

Burada "tek" ve "çift" durumlar için dalga fonksiyonları seçilir ;böylece "A" katsayısı ve "E" enerjisi bulunur(3).

1.3.3.SİMETRİK BİR SONSUZ POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNDE BULUNAN PARÇACIĞA ELEKTRİK ALANIN ETKİSİ

Sonsuz potansiyel kuantum kuyusu içinde bulunan m^* kütleli parçacığın enjirisini ve dalga fonksiyonunu daha önce bölüm (1.3.1)'de belirtmiştik. Bunlar şu şekilde idi ;

$$\left(k_n = \frac{n \pi}{L} \text{ ise} \right)$$

$$\Psi_n(z) = B \cdot \text{Cos}(k_n z) \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (1.3.3.1)$$

$$\Psi_n(z) = A \text{Sin}(k_n z) \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (1.3.3.2)$$

$$\langle E_n \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_n(z) | H | \Psi_n(z) \rangle}{\langle \Psi_n(z) | \Psi_n(z) \rangle} \right\} \quad (1.3.3.3)$$

Burada, A ve B normalizasyon sabitleridir. Bu kuyuya ve kuyu içindeki parçacığa "+z" yönünde düzgün elektrik alan uygulandığında Hamiltonien'imizi şu şekilde yazabiliriz ("F" elektrik alan şiddeti olmak üzere);

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad \text{ve} \quad H_F = e.F.z \quad (1.3.3.4)$$

$$H = H_0 + H_F \quad (1.3.3.5)$$

olarak yazılırsa ve elektrik alan etkisindeki parçacığın yeni dalga fonksiyonu $\Psi_{yeni}(z)$ olmak üzere, Schrödinger denklemini

$$H \cdot \Psi_{yeni}(z) = E \cdot \Psi_{yeni}(z) \quad (1.3.3.6)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi_{yeni}(z)}{\partial z^2} + V(z) \cdot \Psi_{yeni}(z) + e.F.z \cdot \Psi_{yeni}(z) = E \cdot \Psi_{yeni}(z) \quad (1.3.3.7)$$

şeklinde yazarız. Buradan ; " $\Psi_{yeni}(z)$ " dalga fonksiyonunu ($\Psi_{yeni}^{çift}(z)$ çift durumların, $\Psi_{yeni}^{tek}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere);

$$\Psi_{yeni}^{\text{çift}}(z) = B \text{Cos}(k_n z) \cdot \exp(-\beta \cdot z) \quad (1.3.3.8)$$

$$\Psi_{yeni}^{\text{tek}}(z) = A \text{Sin}(k_n z) \exp(-\beta \cdot z) \quad (1.3.3.9)$$

olarak seçilirse(" β " varyasyonel parametredir), parçacığın "E" enerjisini varyasyon yöntemine göre şu şekilde ifade ederiz(E_{tek} tek durumların enerjisi, $E_{çift}$ durumların enerjisi ise);

$$\langle E_{\text{çift}} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi(z)_{yeni}^{\text{çift}} | H | \Psi_{yeni}^{\text{çift}}(z) \rangle}{\langle \Psi_{yeni}^{\text{çift}}(z) | \Psi_{yeni}^{\text{çift}}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (1.3.3.10)$$

$$\langle E_{\text{tek}} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi(z)_{yeni}^{\text{tek}} | H | \Psi_{yeni}^{\text{tek}}(z) \rangle}{\langle \Psi_{yeni}^{\text{tek}}(z) | \Psi_{yeni}^{\text{tek}}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (1.3.3.11)$$



1.3.4.SİMETRİK BİR SONLU POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNDE BULUNAN BİR PARÇACIĞA ELEKTRİK ALANIN ETKSİ

Sonlu potansiyel kuantum kuyusu içinde bulunan " m^* " kütleli bir parçacığın dalga fonksiyonu ve enerji ifadesini daha önce bölüm (1.3.2)'de belirtmiştik. Dalga fonksiyonları şu şekilde idi ,

Çift durumlar için ;

$$\Psi_{\text{çift}}(z) = \begin{cases} A \cos(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(\alpha z) & z \leq -L/2 \quad (\text{I.}) \\ A \cos(kz) & -L/2 \leq z \leq L/2 \quad (\text{II.}) \\ A \cos(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(-\alpha z) & z \geq L/2 \quad (\text{III.}) \end{cases} \quad (1.3.4.1)$$

Tek durumlar için ;

$$\Psi_{\text{tek}}(z) = \begin{cases} -A \sin(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(\alpha z) & z \leq -L/2 \quad (\text{I.}) \\ A \sin(kz) & -L/2 \leq z \leq L/2 \quad (\text{II.}) \\ A \sin(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(-\alpha z) & z \geq L/2 \quad (\text{III.}) \end{cases} \quad (1.3.4.2)$$

Bu potansiyel kuyusuna ve kuyu içinde bulunan " m^* " kütleli parçacığa "+ z" yönünde düzgün bir elektrik alan şiddeti (F) uygulandığında Hamiltonien şu şekilde yazılır ;

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad \text{ve} \quad H_F = e.F.z \quad \text{olmak üzere}$$

$$H = H_0 + H_F = -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + e.F.z \quad (1.3.4.3)$$

Buradan Schrödinger denklemi($\Psi_{\text{yeni}}(z)$ elektrik alan etkisi altında bulunan m^* kütleli parçacığın dalga fonksiyonu olmak üzere) ;

$$H.\Psi_{\text{yeni}}(z) = E.\Psi_{\text{yeni}}(z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi_{\text{yeni}}(z)}{\partial z^2} + V(z).\Psi_{\text{yeni}}(z) + e.F.z.\Psi_{\text{yeni}}(z) = E.\Psi_{\text{yeni}}(z) \quad (1.3.4.4)$$

şeklinde ifade edilir. Bu denklemden bölüm (1.3.2) de yapılan işlemler göz önünde bulundurularak (varyasyon metodu) ve $\Psi_{yeni}^{çift}(z)$ çift durumların, $\Psi_{yeni}^{tek}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere aşağıdaki yeni dalga fonksiyonları yazılır (I.II.III. Bölge için) ;

Çift durumlar için ;

$$\Psi_{yeni}^{çift}(z) = \begin{cases} N \cos(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(\alpha z) \exp(-\beta z) & z \leq -L/2 \quad (I.) \\ N \cos(kz) \exp(-\beta z) & -L/2 \leq z \leq L/2 \quad (II.) \\ N \cos(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(-\alpha z) \exp(-\beta z) & z \geq L/2 \quad (III.) \end{cases} \quad (1.3.4.5)$$

Tek durumlar için ;

$$\Psi_{yeni}^{tek}(z) = \begin{cases} N \sin(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(\alpha z) \exp(-\beta z) & z \leq -L/2 \quad (I.) \\ N \sin(kz) \exp(-\beta z) & -L/2 \leq z \leq L/2 \quad (II.) \\ N \sin(kL/2) \exp(\alpha L/2) \exp(-\alpha z) \exp(-\beta z) & z \geq L/2 \quad (III.) \end{cases} \quad (1.3.4.6)$$

Burada, N normalizasyon sabiti ve β varyasyonel parametresidir. Elektrik alanının etkisindeki parçacığın enerjisi aynı metotla (varyasyon yöntemi) aşağıdaki gibi ifade edilir (tek durumların enerjisi E_{tek} ve çift durumların enerjisi $E_{çift}$ olmak üzere).

$$\langle E_{çift} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_{yeni}^{çift}(z) | H | \Psi_{yeni}^{çift}(z) \rangle}{\langle \Psi_{yeni}^{çift}(z) | \Psi_{yeni}^{çift}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (1.3.4.7)$$

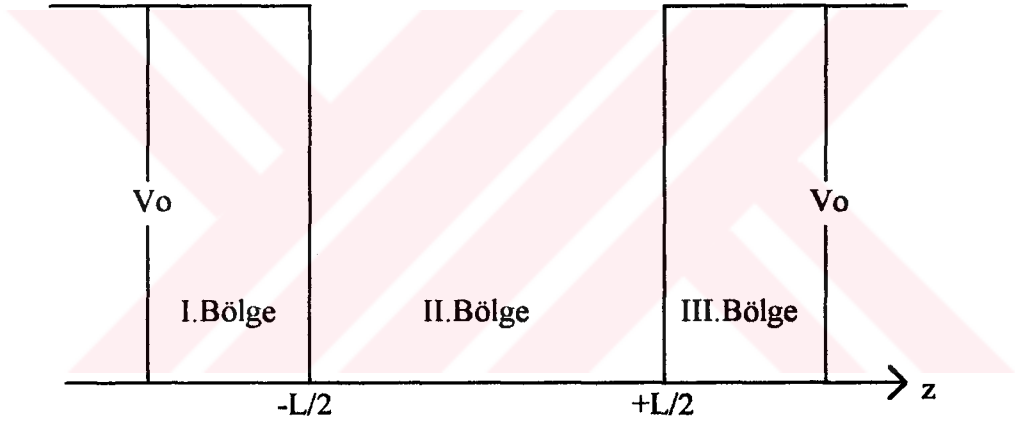
$$\langle E_{tek} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_{yeni}^{tek}(z) | H | \Psi_{yeni}^{tek}(z) \rangle}{\langle \Psi_{yeni}^{tek}(z) | \Psi_{yeni}^{tek}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (1.3.4.8)$$

1.3.5.SİMETRİK BİR SONLU POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNDE BULUNAN BİR PARÇACIĞA ELEKTRİK ALANIN VE YABANCI BİR ATOMUN (IMPURITY) ETKİSİ

Sonlu kuantum kuyusu içinde bir donör(+e yüklü yabancı atom) varsa, enerjisi $E < V_0$ olan elektronda mevcut ise, bu durumda kuyuya +z yönünde bir elektrik alan(F) uygulandığı zamanki duruma bakalım. Burada potansiyelin ($V(z)$) şeklini aşağıdaki gibi seçersek ;

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| \leq L/2 \\ V_0 & |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (1.3.5.1)$$

ve seçtiğimiz bu potansiyele göre aşağıdaki şekli düşünebiliriz;



Önce elektrik alanın ve yabancı atomun parçacığı(elektronu) etkilemediğini farz edelim. Yalnız kuyu potansiyelinin elektrona etkisini göz önüne alalım. Buna göre "H" hamiltonienini yazarsak(H_0 kinetik enerji ve H_1 potansiyel enerji olmak üzere) ;

$$H_0 = \frac{p^2}{2m^*} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.3.5.2)$$

$$H_1 = V(z) \quad (1.3.5.3)$$

$$H = H_0 + H_1 \quad (1.3.5.4)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad (1.3.5.5)$$

Buradan da, Schrödinger denklemini yazarsak ($\Psi(z)$ parçacığı temsil eden dalga fonksiyonu ve "E" toplam enerji olmak üzere) ;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (1.3.5.6)$$

olur. Toplam enerji "E" nin " V_0 " dan daha küçük olduğu durumları göz önüne alalım (II. Bölge). Buna göre parçacığın hareket denkleminin (Schrödinger denklemini)

çözümünden, $k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ olmak üzere

$$\Psi(z) = A \cos(kz) + B \sin(kz) \quad (1.3.5.7)$$

şeklindeki dalga fonksiyonu bulunur. Burada A ve B sabittir. Sınır şartlarından çift ve tek durumlar için ;

$$\Psi_{\text{çift}}(z) = A \cos(kz) \quad (1.3.5.8)$$

$$\Psi_{\text{tek}}(z) = B \sin(kz) \quad (1.3.5.9)$$

dalga fonksiyonları bulunur. I. ve III. Bölgede, yani $|z| > L/2$ bölgesinde Schrödinger denklemini aşağıdaki gibi yazılır;

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} - (V_0 - E) \Psi(z) = 0 \quad (1.3.5.10)$$

Buradan da genel çözüm, $\alpha = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E)}$ olmak üzere

$$\Psi(z) = C \exp(\alpha z) + D \exp(-\alpha z) \quad (1.3.5.11)$$

şeklindedir. Burada C ve D sabittir. Sınır şartlarından da

$$\Psi(z) = D \exp(-\alpha z) \quad z > L/2 \quad (1.3.5.12)$$

$$\Psi(z) = C \exp(\alpha z) \quad z < -L/2 \quad (1.3.5.13)$$

ifadeleri elde edilir. Buradan da çeşitli işlemler yapıldığında(Bölüm 1.3.2' deki gibi);

$$k \tan(k L/2) = \alpha \quad C = D \quad \text{ve} \quad B = 0 \quad (1.3.5.14)$$

$$k \cot(k L/2) = -\alpha \quad C = -D \quad \text{ve} \quad A = 0 \quad (1.3.5.15)$$

denklemleri bulunur. Bu denklemler k ve α 'nın tanımlarıyla birlikte sistemin enerji düzeylerini belirler.

Dalga fonksiyonlarını I.II.ve III.Bölge için anlaşılır bir şekilde yazalım($\Psi_{\text{çift}}(z)$ çift durumların ve $\Psi_{\text{tek}}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonları olmak üzere);

$$\Psi_{\text{çift}}(z) = \begin{cases} N_0 \cos(k L/2) \exp(\alpha L/2) \exp(\alpha z) & z \leq -L/2 \quad (I.) \\ N_0 \cos(k z) & -L/2 \leq z \leq L/2 \quad (II.) \\ N_0 \cos(k L/2) \exp(\alpha L/2) \exp(-\alpha z) & z \geq L/2 \quad (III.) \end{cases} \quad (1.3.5.16)$$

$$\Psi_{\text{tek}}(z) = \begin{cases} N_0 \sin(k L/2) \exp(\alpha L/2) \exp(\alpha z) & z \leq -L/2 \quad (I.) \\ N_0 \sin(k z) & -L/2 \leq z \leq L/2 \quad (II.) \\ N_0 \sin(k L/2) \exp(\alpha L/2) \exp(-\alpha z) & z \geq L/2 \quad (III.) \end{cases} \quad (1.3.5.17)$$

Burada, N_0 normalizasyon sabitidir($A=N_0$). Bölüm (1.3.2)' deki gibi, parçacığın enerjisi tek ve çift durumlar için varyasyon yöntemiyle bulunabilir.

Şimdi bu simetrik potansiyel kuyu içinde bulunan parçacığa "+z" yönünde düzgün bir elektrik alan şiddeti (F) uygulayalım. Elektrik alan şiddetinin Hamiltonien'e etkisi H_F olmak üzere, yeni H' hamiltonienini

$$\begin{aligned} H_F &= e F z \\ H' &= H_0 + H_1 + H_F \end{aligned} \quad (1.3.5.18)$$

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + eFz \quad (1.3.5.19)$$

şeklinde yazarız. Elektrik alanın etkisiyle parçacığın yeni dalga fonksiyonuna çift durumlar için $\Psi_F^{çift}(z)$, tek durumlar için $\Psi_F^{tek}(z)$ diyelim. Buna göre

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + eFz\right) \Psi_F(z) = E \Psi_F(z) \quad (1.3.5.20)$$

şeklindeki Schrödinger denkleminde varyasyon yöntemine göre bölüm(1.3.2)'deki gibi aşağıdaki dalga fonksiyonlarını seçeriz(I.II.veIII.Bölge için);

$$\Psi_F^{çift}(z) = N_F \Psi_{çift}(z) \exp(-\beta z) \quad (1.3.5.21)$$

$$\Psi_F^{tek}(z) = N_F \Psi_{tek}(z) \exp(-\beta z) \quad (1.3.5.22)$$

Burada N_F normalizasyon sabiti ve β minimizasyon sabitidir. Buradan da elektrik alan etkisindeki parçacığın enerjisi(Çift durumların enerjisi $E_F^{çift}$, tek durumların enerjisi E_F^{tek} olmak üzere);

$$\langle E_F^{çift} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_F^{çift}(z) | H' | \Psi_F^{çift}(z) \rangle}{\langle \Psi_F^{çift}(z) | \Psi_F^{çift}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (1.3.5.23)$$

$$\langle E_F^{tek} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_F^{tek}(z) | H' | \Psi_F^{tek}(z) \rangle}{\langle \Psi_F^{tek}(z) | \Psi_F^{tek}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (1.3.5.24)$$

şeklinde yazılır.

Şimdi de, parçacığa elektrik alanın(F) yanında yabancı atomun etkidiğini göz önüne alalım. Bu etkinin hamiltoniene katkısını H_i olarak isimlendirelim. Öyleyse bizim yeni hamiltonienimiz(H^*)

$$H^* = H_0 + H_1 + H_F + H_i \quad (1.3.5.25)$$

şeklinde olacaktır. Coulomb etkileşmesinden dolayı H_i ;

$$H_i = -\frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (1.3.5.26)$$

şeklinde yazılır. Burada " z_i " yabancı atomun konumu ve $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ dir. Bu ifadelerle göre hamiltonienimizi (H'') daha açık olarak;

$$H'' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (1.3.5.27)$$

şeklinde yazılır(12). Buradan da, parçacığa etkiyen elektrik alan ve yabancı atomun etkisiyle Schrödinger denklemini aşağıdaki gibi yazılır(Paçacığın enerjisi E_i ve dalga fonksiyonu $\Psi_i(z)$ olmak üzere);

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \right\} \Psi_i(z) = E_i \Psi_i(z) \quad (1.3.5.28)$$

Bu denklemden, $\Psi_i^{çift}$ çift durumların ve Ψ_i^{tek} tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere

$$\Psi_i^{çift}(z) = N_i \Psi_F^{çift}(z) \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}{\lambda}\right) \quad (1.3.5.28)$$

$$\Psi_i^{tek}(z) = N_i \Psi_F^{tek}(z) \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}{\lambda}\right) \quad (1.3.5.29)$$

dalga fonksiyonları yazılır (varyasyon yöntemine göre). Burada N_i normalizasyon sabiti, λ ise minimizasyon sabitidir. Bu ifadelerle göre parçacığın bağlanma enerjisini aşağıdaki gibi yazılır (E_i parçacığın bağlanma enerjisi, E_F yabancı atomun etkisi yokken ve sadece elektrik alan varken ki enerji olduğuna göre);

$$E_i^{\text{çift}} = E_F^{\text{çift}} - \left(\frac{\langle \Psi_i^{\text{çift}}(z) | H'' | \Psi_i^{\text{çift}}(z) \rangle}{\langle \Psi_i^{\text{çift}}(z) | \Psi_i^{\text{çift}}(z) \rangle} \right)_{\min} \quad (1.3.5.30)$$

$$E_i^{\text{tek}} = E_F^{\text{tek}} - \left(\frac{\langle \Psi_i^{\text{tek}}(z) | H'' | \Psi_i^{\text{tek}}(z) \rangle}{\langle \Psi_i^{\text{tek}}(z) | \Psi_i^{\text{tek}}(z) \rangle} \right)_{\min} \quad (1.3.5.31)$$

Burada, $E_i^{\text{çift}}$ çift durumların ve E_i^{tek} tek durumların bağlanma enerjisidir. Bu işlemler yapıldığında da E_i için;

$$E_i^{\text{çift}} = -\frac{1}{\lambda^2} + \frac{4 P_{\text{çift}}}{\lambda P_{\text{çift}} + 2 Q_{\text{çift}}} \quad (1.3.5.32)$$

$$E_i^{\text{tek}} = -\frac{1}{\lambda^2} + \frac{4 P_{\text{tek}}}{\lambda P_{\text{tek}} + 2 Q_{\text{tek}}} \quad (1.3.5.33)$$

denklemleri bulunur. Buradaki $P_{\text{çift}}, P_{\text{tek}}$ ve $Q_{\text{çift}}, Q_{\text{tek}}$ ifadelerinin açık şekli aşağıdaki gibidir.

$$P_{\text{çift}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left| \Psi_F^{\text{çift}}(z) \right|^2 \exp\left(-\frac{2}{\lambda} |z - z_i|\right) \quad (1.3.5.34)$$

$$P_{\text{tek}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left| \Psi_F^{\text{tek}}(z) \right|^2 \exp\left(-\frac{2}{\lambda} |z - z_i|\right) \quad (1.3.5.35)$$

$$Q_{\text{çift}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left| \Psi_F^{\text{çift}}(z) \right|^2 |z - z_i| \exp\left(-\frac{2}{\lambda} |z - z_i|\right) \quad (1.3.5.36)$$

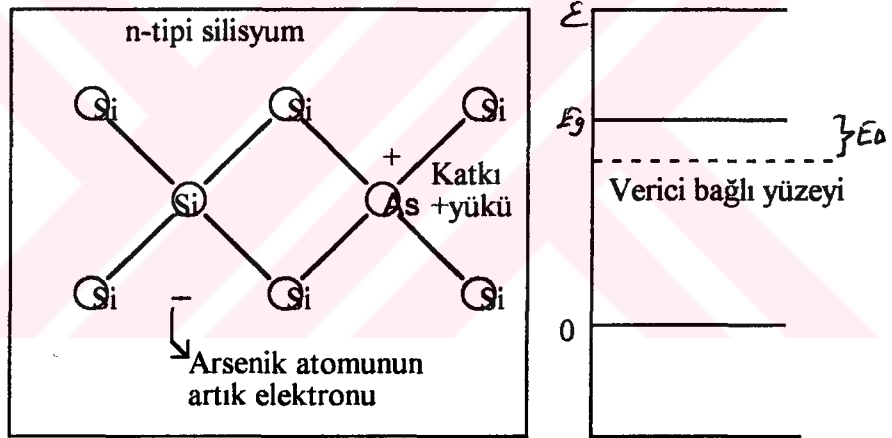
$$Q_{\text{tek}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left| \Psi_F^{\text{tek}}(z) \right|^2 |z - z_i| \exp\left(-\frac{2}{\lambda} |z - z_i|\right) \quad (1.3.5.37)$$

1.4.HACİM(BULK) KRİSTALLERDE VERİCİ VE ALICI DURUMLAR

Bazı katkı maddeleri ve örgü bozuklukları bir yarıiletkenin elektrik özelliklerini çok şiddetli etkiler. Silisyum içinde " $1/10^5$ " oranında bor katıldığı saf silisyumun oda sıcaklığında ki elektrik iletkenliği " 10^3 " misli artar. Bileşik yarı iletkenlerde bileşiklerden birinin atom eksikliği de katkı maddesi gibi davranır; bunlara "**kusurlu yarıiletken**" denir. Bir yarıiletkene katkı atomları ekleme işine de "**aşılama(doping)**" adı verilir.

Silisyum ve germanyum elementleri elmas kristal yapısındadır. Her atom komşu dört atomla "**kovalent bağı**" olup valansı dördür. Valansı beş olan bir katkı elementi, dört "**kovalent bağı**" tamamladıktan sonra geriye bir valans elektronu kalır. Böylece, bir katkı maddesi örgüyü en az bozacak şekilde yerleşmiş olur.

1.4.1.HACİM(BULK) KRİSTALLERDE VERİCİ DURUMLAR



Şekildeki yapıda katkı atomu pozitif yüklü, yani bir elektronunu kaybetmiştir. Valansı beş olan katkı atomları örgüdeki ara konumlara değil normal atomların yerlerine geçerler. Elektron verebilen bu tür katkı atomlarına "**verici**" denir. Kristal bir bütün olarak nötr kalır, çünkü elektron kristal içindedir.

Bu elektron katkı iyonunun " $1/\epsilon.r$ " Coulomb potansiyelinde hareket eder; burada " ϵ " kovalan bir kristal ortamında statik dielektrik sabitidir. " $1/\epsilon$ " çarpanı ortamdaki kutuplaşmadan dolayı yükler arasındaki Coulomb kuvvetinin azalmasını temsil eder. Bu yaklaşım, yörüngelerin atomlar arası uzaklığa göre büyük olduğu ve elektronun yörünge frekansının enerji aralığı " E_g " ye karşılık gelen bir " ω_g " frekansına küçük olduğu durumlarda geçerlidir. "*Si* ve *Ge*" de bu koşullar "*P*, *As* ve *Sb*" vericileri için gayet iyi olarak sağlanmıştır.

Verici katkı atomunun iyonlaşma enerjisi hesaplanırken; hidrojen atomunun Bohr teorisinde gerekli değişiklik yapıp ortamın dielektrik sabiti ve elektronların periyodik potansiyeldeki etkin kütlesi hesaba katılır. Hidrojen atomunun iyonlaşma enerjisi " CGS " birim sisteminde " $-e^4.m/2.\hbar^2$ " , " SI " birim sisteminde ise " $-e^4.m/2.(4.m.\epsilon.\hbar)^2$ " olarak ifade edilir.Yarıiletkenlerde " e^2 " yerine " e^2/ϵ " , " m " yerinede " m_e " etkin kütlesi alınırsa ;

$$(CGS) \quad E_d = \frac{e^2.m_e}{2.\epsilon.\hbar^2} = \frac{(13,6).m_e}{\epsilon^2.m} \quad (ev) \quad (1.4.1.1)$$

ifadesi yarıiletkenlerde verici iyonlaşma enerjisi olur.

Hidrojen atomu taban durumunun Bohr yarıçapı "CGS" biriminde " $\hbar^2/m.e^2$ " dir. Buna göre vericinin Bohr yarıçapı yazılır.

$$(CGS) \quad \alpha_d = \frac{\epsilon.\hbar^2}{m_e/m} = \left(\frac{(0,53).\epsilon}{m_e/m} \right) \quad (A^0) \quad (1.4.1.2)$$

Germanyum ve silisyumda elektronların etkin kütlesinin anizotrop oluşu hesapları zorlaştırır.Ancak verici enerjisinde dielektrik sabitin etkisi daha önemlidir. Çünkü denklemlerde dielektrik sabitinin karesi, etkin kütlenin ise birinci kuvveti yer almaktadır.

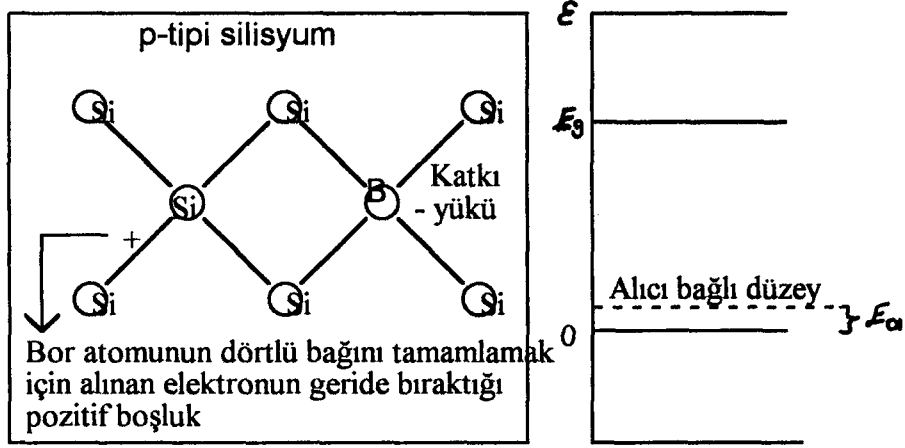
Yarıiletkenin elektrik alanı iletmesi, katkı bandındaki elektronların bir vericiden diğerine atlaması yoluyla olur. Katkı bandı iletimi, eğer ortamda alıcı atomlar varsa, daha düşük katkı yoğunluğunda başlar ve vericilerin bir kısmı her zaman iyonlaşmış durumda olurlar.Bir verici elektronun iyonlaşmış(boş) vericiye atlaması dolu bir vericiye atlamasından daha kolay olur, çünkü yük transferi sırasında iki elektron aynı yerde bulunmuş olamaz.

1.4.2.HACİM(BULK) KRİSTALLERDE ALICI DURUMLAR

Silisyum ve germanyumda beş valanslı bir katkı maddesine nasıl bir elektron bağlı oluyorsa, üç valanslı bir katkı maddesine de bir boşluk bağlı olabilir. "*B, Al, Ga ve In*" gibi üç valanslı katkı atomları, komşu atomlarla kovalan bağlı tamamlayabilmek için valans bandından elektron alıp geride bir boşluk bıraktıkları için " alıcı " olarak adlandırılırlar.

Bir alıcı iyonlaştığında bir boşluğun serbest kalabilmesi için enerji verilmesi gerekir. Bir elektron enerji aldığı anda bandın üst tarafına çıkar, boşluk ise enerji

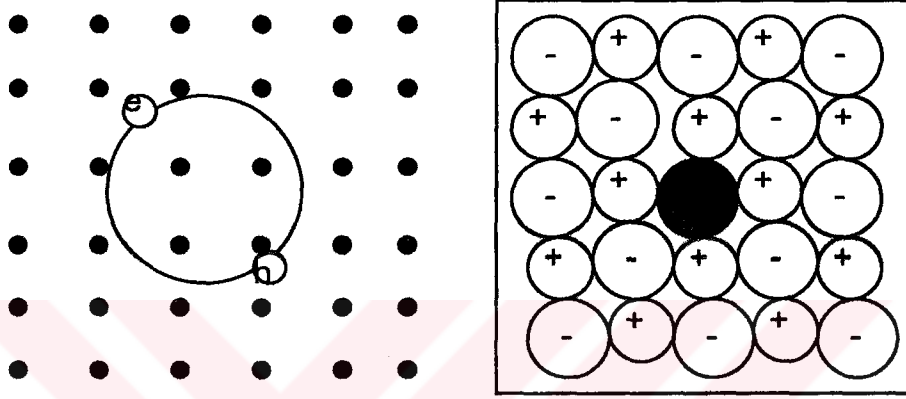
aldığında aşağı iner. Elektronlarda olduğu gibi boşluklar içinde Bohr modeli yaklaşık olarak geçerlidir, ancak valans bandının üst bölgesindeki katlılık etkin kütle hesabını zorlaştırır.



Verici atom sayısı alıcılardan daha fazla ise, vericilerin ısısal iyonlaşması iletkenlik bandına elektronlar aktarır. Bu durumda kristalın iletkenliği elektronlar (negatif yükler) tarafından belirlenir ve bu maddeye "**n-tipi**" yarıiletken denir. Alıcı sayısı daha fazla olduğunda valans bandına boşluklar aktarılır ve iletkenlik boşluklar tarafından belirlendiği için bu maddeye "**P-tipi**" yarıiletken denir.

1.5.HACİM(BULK) KRİSTALLERDE EKSİTONLAR

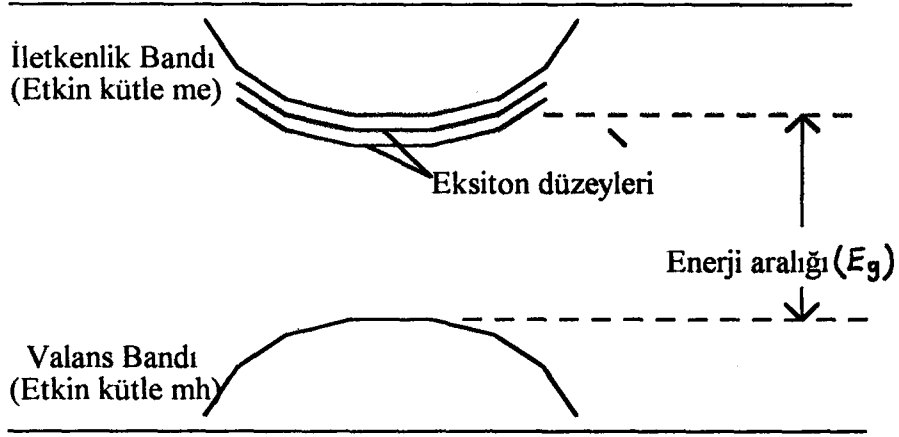
Foton enerjisi band aralığı enerjisinin hemen altında olduğu, yani kristalin saydam olmasını beklediğimiz durumda, yansıma ve soğrulma spektrumları bir yapı gösterir.Bu yapı, soğrulan bir fotonun bağlı bir "elektron-boşluk" çifti meydana getirmesinden kaynaklanır. Elektron ve boşluk arasındaki Coulomb etkileşmesi nedeniyle, tıpkı hidrojen atomundaki elektron ve proton gibi, duruma geçebilirler(4).



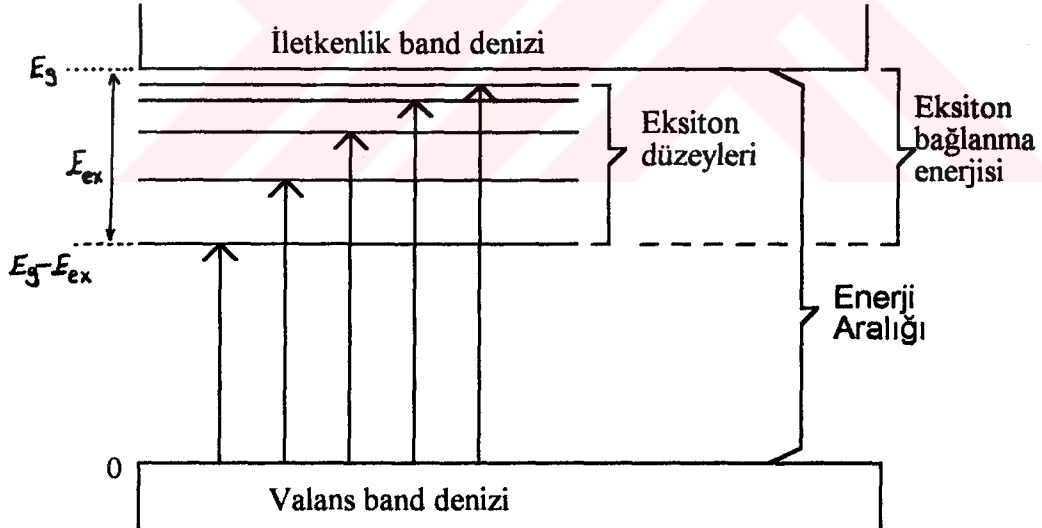
Şekilde görülen elektron boşluk çiftine " **eksiton** " denir. Bir eksiton kristal içinde dolaşıp enerji iletir. Ancak nötr olduğu için elektrik yükü iletmez. Bir elektron ve pozitrondan oluşan pozitronyum parçacığının bir benzeridir.

Eksitonlar her yalıtkan kristalde oluşabilirler. Dolaylı bir band aralığı varsa, doğrudan bir band civarındaki eksitonların serbest elektron ve boşluğa dönüşmesi engellenmiş olabilir.Tüm eksitonlar, en son aşama olan elektronun boşluğa düşüp onu yok etmesi olayına karşı kararsızdırlar.İki eksiton birleşerek "**bieksiton**" denilen komplekslerde oluşabilirler(4).

Kristal ortamında soğrulan bir fotonun enerjisi aralık enerjisinden büyükse her zaman bir elektron ve boşluk çifti oluşur. Doğrudan bir olayda bu sürecin enerjisi " $\hbar \cdot \omega > E_g$ " dir (E_g =Band aralığı).



İletkenlik ve valans band kıyılarının yapısı, eksiton düzeylerinin iletkenlik band kısmına göre durumları yukarıda basit olarak gösterilmiştir. Bir eksiton öteleme kinetik enerjisine sahip olabilir(4).



Bu şekilde doğrudan bir olayda oluşturulan eksitonun enerji düzeyleri gösterilmiştir. Valans bandının üst ucundan olan geçişler oklarla gösterilmiş olup en uzun ok aralık enerjisine karşılık gelir. Serbest bir elektron ve boşluk çifti referans alınırsa eksitonun bağlanma enerjisi " E_{ex} " olur. Mutlak sıfırdaki kristalin soğurma spektrumunda en düşük enerjisi " E_{ex} " değil " $E_g - E_{ex}$ " olur.

Eksitonun bağlanma enerjisi üç yolla ölçülebilir(4);

1) Valans bandından optik geçişlerde, eksiton oluşturulması için gerekli enerji ile, bir serbest elektron ve bir serbest boşluk oluşturulması için gerekli enerjiler arasındaki fark karşılaştırılır.

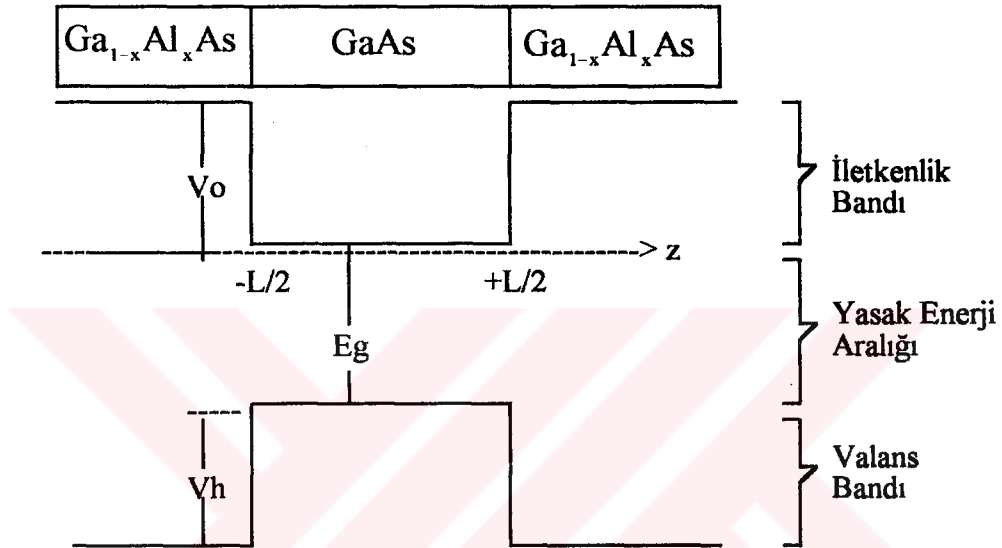
2) Kombinasyon lüminesans deneylerinde, serbest "elektron-boşluk" yokolma enerjisi ile eksiton yokolma enerjisi karşılaştırılır.

3) Foto-iyonlaşma yoluyla eksitonların serbest taşıyıcı durumuna geçişleri (Bu olay ancak yüksek yoğunlukta eksitonlarla sağlanır).



1.6.KUANTUM KUYULARININ OLUŞTURULMASI

$Ga_{1-x}Al_xAs$ ve $GaAs$ malzemeleriyle bir yapı oluşturulduğunda, oluşan yapı için "z" yönündeki potansiyel değişimi aşağıdaki gibi olur. Buradaki "x" ifadesi yapının oluştuğu malzemelerin (Ga, Al) oranını belirler. Yani bir malzeme diğerine göre yüzde kaç daha fazla veya daha az olacaktır. Buradaki "x" malzemede bulunan aliminyum miktarını belirler.

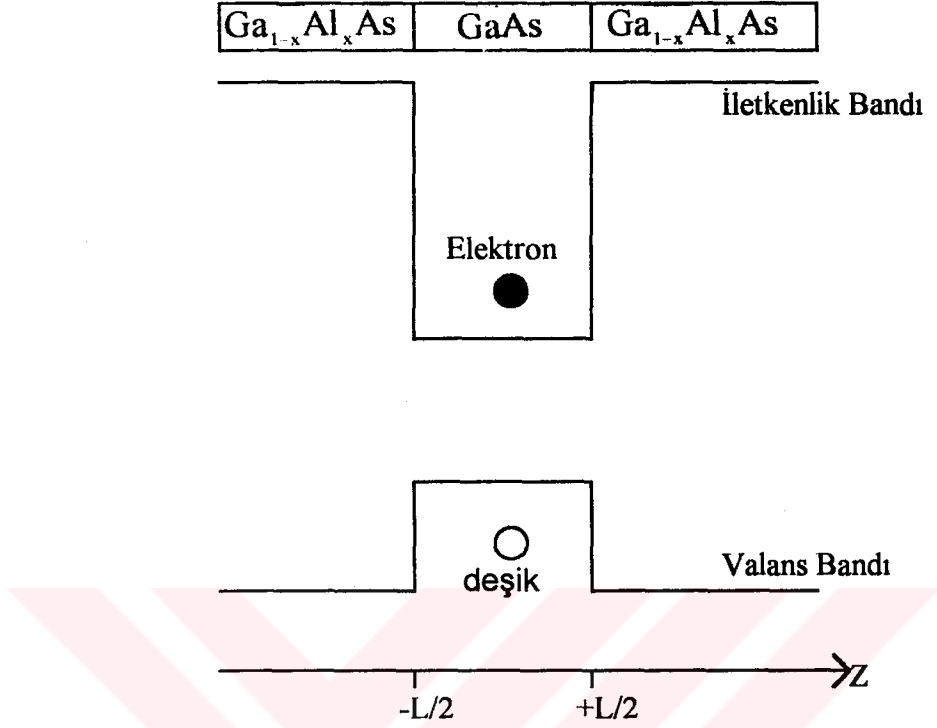


Burada elektron ve boşluklar(holler) göz önüne alınacaktır. İletkenlik ve Valans bandındaki potansiyeller için (V_0, V_h) aşağıdaki bağıntılar kullanılabilir(5-14);

$$\begin{aligned}
 E_g &= (1,555) \cdot x + (0,37) \cdot x^2 \\
 V_0 &= \% 60 \cdot E_g \\
 V_h &= \% 40 \cdot E_g
 \end{aligned}
 \tag{1.6.1}$$

Burada elektronun kütlesi ile boşluğun(holün-deşik) kütlesi farklı olacaktır.

1.7.EKSİTONLAR



ŞEKİL(1.7.1)

Şekil(1.7.1)'de görüldüğü gibi elektronlar ve deşikler GaAs katmanı içine hapsedilmiştir. Elektronlar ve boşluklar arasındaki Coulomb etkileşmesi nedeniyle (hidrojen atomundaki elektron ve proton gibi) bağlı duruma geçebilirler. Bu şekilde bağlı olan elektron-deşik çiftine **eksiton** denir.

Çizilen bu kuantum kuyusunda, elektron boşluk çiftinin "x-y" düzleminde serbest "z" boyunca bağımlı hareket ettiği düşünülürse, eksitonlar karşılıklı merkezsel kuvvetlerin etkisi altında hareket eden iki cisim problemi olarak ele alınabilir. Elektron ve deşiğin kütle merkezleri etrafında merkezsel kuvvet hareketi her zaman bir eşdeğer cisim problemine indirgenebilir(9). Yani indirgenmiş kütle dikkate alınır.

Buradaki elektron ve deşik bağlanması olayına karşılık olarak, elektron-deşik eksitonunun bağlanma enerjisi ortaya çıkar.

2.BÖLÜM

NÜMERİK HESAPLAMALAR

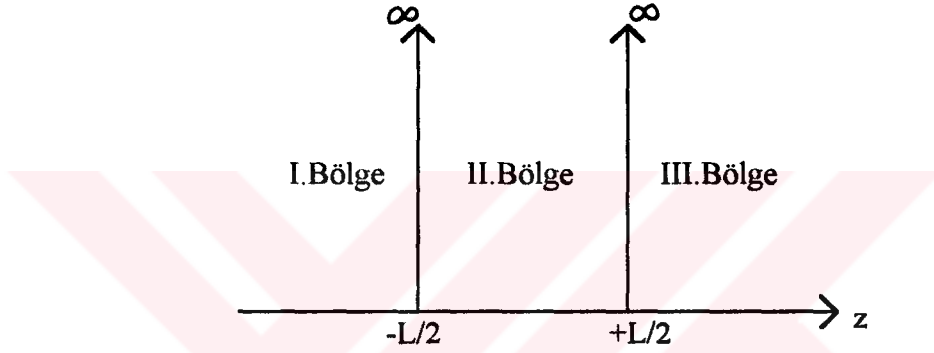


2.1.SİMETRİK BİR SONSUZ KUANTUM KUYUSU İÇİNDEKİ ELEKTRONUN ELEKTRİK ALAN ALTINDAKİ ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Daha önceki bölümlerde edindiğimiz bilgilerimize göre ilk önce potansiyelin şeklini belirleyelim ;

$$V(z) = \begin{cases} \infty & z \leq -L/2 \\ 0 & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ \infty & z \geq L/2 \end{cases} \quad (2.1.1)$$

olsun ve bu ifadeye göre kuyunun şeklini çizelim($L = 2a$ olmak üzere);



Potansiyel enerji " $z = \mp L/2$ " da sonsuz olduğu için parçacığın duvarın dışında olma olasılığı sıfırdır. Buna göre " $\Psi(z)$ " dalga fonksiyonu $|z| > L/2$ için sıfır olmalıdır ve Schrödinger özdeğer denklemini yalnızca kuyunun içinde çözmeliyiz. Bundan başka dalga fonksiyonunun sürekli olması gerektiği için " $\Psi(z)$ " sınır duvarlarında sıfır olmalıdır. Yani " $z = \mp L/2$ " da " $\Psi(z) = 0$ " olmalıdır. Burada Schrödinger denklemini ;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{ve} \quad H.\Psi(z) = E.\Psi(z) \quad (2.1.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} = E.\Psi(z) \quad (2.1.3)$$

şeklinde yazılır. Buradan da dalga fonksiyonunu aşağıdaki gibi yazarız ;

$$k = \left(\frac{2.m^*}{\hbar^2} E \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{ise ;}$$

$$\Psi(z) = A.\sin(k.z) + B.\cos(k.z) \quad (2.1.4)$$

Bu genel çözüm sınır koşullarına uygulanarak ;

$$A.\sin(k.L/2) = 0 \quad (2.1.5)$$

$$B.\cos(k.L/2) = 0 \quad (2.1.6)$$

bulunur. Sonuç olarak iki tür mümkün çözüm var diyebiliriz. Bu denklemlerden tek ve çift durumlar için aşağıdaki dalga fonksiyonlarını yazarız ;

$$\Psi_n(z) = B \cos\left(\frac{n \cdot \pi}{L} z\right) \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.1.7)$$

$$\Psi_n(z) = A \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} z\right) \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.1.8)$$

Burada "B" normalizasyon sabitidir. Bunun yanında kuyuya "+z" yönünde düzgün bir "F" elektrik alanı uygulanırsa Hamiltonien ve Schrödinger denklemi ;

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \text{kinetik enerji}$$

$$H_1 = e \cdot F \cdot z = \eta \cdot z = F' \text{ nin etkisi}$$

$$H = H_0 + H_1$$

olmak üzere ;

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} + \eta \cdot z \cdot \Psi(z) = E \cdot \Psi(z) \quad (2.1.9)$$

şeklinde yazılır. Buradan da varyasyon yöntemine uygun olarak dalga fonksiyonumuzu şu şekilde yazarız (tek ve çift durumlar için)

$$\Psi_n(z) = B \cos\left(\frac{n \cdot \pi}{L} z\right) \cdot \exp(-\beta \cdot z) \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.1.10)$$

$$\Psi_n(z) = A \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} z\right) \cdot \exp(-\beta \cdot z) \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.1.11)$$

Burada "B" normalizasyon sabiti ve " β " varyasyonel parametredir. Parçacığın enerjisininide ;

$$\langle E_n \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_n(z) | H | \Psi_n(z) \rangle}{\langle \Psi_n(z) | \Psi_n(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (2.1.12)$$

şeklinde buluruz.

Biz bu çalışmada, " $L/2$ " yi 50 \AA " alıp taban durum ve birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonlarını çizdik. Ayrıca taban durum ve birinci uyarılmış durum enerjilerinin kuyu genişliğine ve elektrik alan değişimine bağlı grafiklerini çizdik. Bu

hesaplamalarda; $\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1$ alınmıştır. Bu kabullenme, yapılan nümerik işlemlerdeki çok büyük ve çok küçük sayılardan kaçmak için yapılmıştır. Ayrıca " a^* " etkin Bohr yarıçapı, " ϵ " dielektrik sabiti ($\epsilon = 12,5$) ve " m^* " etkin kütle ($m^* = 0,067m_0$) olmak üzere (m_0 , durgun elektron kütesidir) ;

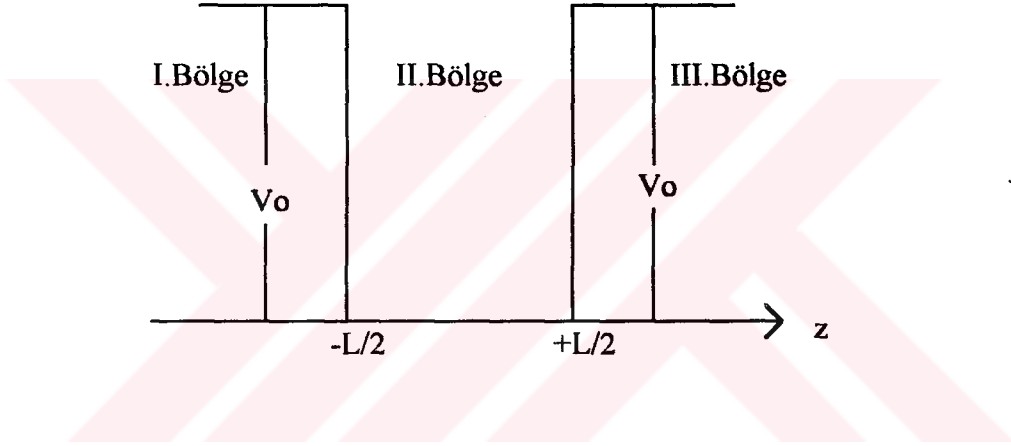
$$R^* = \frac{\hbar^2}{2m^*(a^*)^2} \quad \text{ve} \quad a^* = \frac{\hbar^2 \cdot \epsilon}{m^* \cdot e^2} \quad (2.2.13)$$

ifadeleri ve (2.2.8) denklemleri göz önüne alınarak " $R^* = 5,83 \text{ meV}$ " ve " $a^* = 98,73 \text{ \AA}$ " olarak hesaplanmıştır. Çizdiğimiz bu grafikler 3.Bölümde; $F=0,25,50,75,100 \text{ kV/cm}$ değerleri için " $\Psi_0(z)$ ve " $\Psi_1(z)$ " in " $z(a^*)$ " a bağlı grafikleri sırasıyla (3.1) ve (3.2) de gösterilmiştir. Bunun yanında $F=0$ iken taban durum ve birinci uyarılmış durum enerjilerinin kuyu genişliğine ($L = 2a$) bağlı grafiği (3.3) de ve enerjinin elektrik alana (F) bağlı grafiği (3.4) de gösterilmiştir.

2.2.SİMETRİK BİR SONLU POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNDEKİ ELEKTRONUN VE HOLÜN(BOŞLUK-DEŞİK) ELEKTRİK ALAN ALTINDAKİ ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Şimdi duvarları sonlu olan simetrik bir potansiyel kuyusu ele alalım.Potansiyelimizde aşağıdaki gibi seçelim ve potansiyelin durumuna göre kuyunun şeklini çizelim($L = 2a$ olmak üzere) ;

$$V(z) = \begin{cases} V = 0 & |z| < L/2 \\ V = V_0 & |z| > L/2 \end{cases}$$



Burada sadece kuyunun içinde bir elektron bulunduğu göz önüne alınmıştır. Bölüm (2.1) de ki bilgileri göz önüne alarak sadece elektron için " m^* " etkin kütleini göz önünde bulundurarak işlemler yaptık($m^* = 0.067m_0$), $x=0.3$ değeri için " V_0 " değerini belirledik($V_0=227,88$ meV) ve $L=100 \text{ \AA}$ ' da çalıştık.İlk önce teorik işlemlere bakarsak, Hamiltonien'i şu şekilde ifade edebiliriz ;

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \text{Kinetik Enerji} \\ H_1 &= V(z) = \text{Potansiyel Enerji} \\ H &= H_0 + H_1 \\ H &= -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

Toplam enerji olan "E" nin "Vo" dan daha küçük olduğu durumları göz önüne alalım. İkinci bölgede Schrödinger denklemini ;

$$H. \Psi(z) = E. \Psi(z)$$

$$\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} + E. \Psi(z) = 0 \quad (2.2.2)$$

şeklinde yazarız. Buradan da denklemin genel çözümünü aşağıdaki gibi yazarız(A ve B sabit olmak üzere) ;

$$\Psi(z) = A. \cos(k.z) + B. \sin(k.z) \quad (2.2.3)$$

I. ve III. Bölgede de aynı şekilde düşünersek Schrödinger denklemini ;

$$\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} - (V_0 - E). \Psi(z) = 0 \quad (2.2.4)$$

olarak yazarız. Bu denklemin genel çözümü ise ;

$$\Psi(z) = C. \exp(\alpha.z) + D. \exp(-\alpha.z) \quad (2.2.5)$$

şeklinde yazarız. I. II. ve III. Bölgedeki çözümlerde ;

$$k = \sqrt{\frac{2.m^*}{\hbar^2} E} \quad \text{ve} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2.m^*}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad (2.2.6)$$

ifadeleri bu şekilde ele alınmıştır. Burada "C" ve "D" sabit değerlerdir. Dalga fonksiyonuna bakıldığında "C" sabitinin sıfıra eşit olması gerektiğini aksi halde dalga fonksiyonunun "z" sonsuza gitmeye başlayınca sınır koşullarını bozarak sonsuza gideceğini hemen görürüz. Buna göre ;

$$\Psi(z) = D. \exp(-\alpha.z) \quad z > L/2 \quad (2.2.7)$$

elde edilir. Benzer şekilde de ;

$$\Psi(z) = C \cdot \exp(\alpha \cdot z) \quad z < -L/2 \quad (2.2.8)$$

ifadesi elde edilir. Böylece sınır koşullarından hareket edilerek ;

$$k \cdot \tan\left(\frac{k \cdot L}{2}\right) = \alpha \quad C = D \quad \text{ve} \quad B = 0 \quad (2.2.9)$$

$$k \cdot \cot\left(\frac{k \cdot L}{2}\right) = -\alpha \quad C = -D \quad \text{ve} \quad A = 0 \quad (2.2.10)$$

denklemleri elde edilir. Bunlar " k ve α "nın tanımlarıyla birlikte, sistemin enerji düzeylerini ve bunlarla ilgili dalga fonksiyonunu belirler.

Bu bilgilere göre çift durumlar için aşağıdaki dalga fonksiyonlarını yazarız ($\Psi_{\text{çift}}(z)$ $\Psi_{\text{çift}}(z)$ çift durumların ve $\Psi_{\text{tek}}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere);

$$\Psi_{\text{çift}}(z) = \begin{pmatrix} A \cos\left(\frac{k \cdot L}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{\alpha \cdot L}{2}\right) \cdot \exp(\alpha \cdot z) & \text{I. Bölge} \\ A \cos(k \cdot z) & \text{II. Bölge} \\ A \cos\left(\frac{k \cdot L}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{\alpha \cdot L}{2}\right) \cdot \exp(-\alpha \cdot z) & \text{III. Bölge} \end{pmatrix} \quad (2.2.11)$$

Aynı şekilde tek durumlar için ;

$$\Psi_{\text{tek}}(z) = \begin{pmatrix} -A \sin\left(\frac{k \cdot L}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{\alpha \cdot L}{2}\right) \cdot \exp(\alpha \cdot z) & \text{I. Bölge} \\ A \sin(k \cdot z) & \text{II. Bölge} \\ A \sin\left(\frac{k \cdot L}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{\alpha \cdot L}{2}\right) \cdot \exp(-\alpha \cdot z) & \text{III. Bölge} \end{pmatrix} \quad (2.2.12)$$

Burada "A" normalizasyon sabitidir.

Şimdi potansiyel kuyusuna "+z" yönünde düzgün bir elektrik alan(F) uygulanırsa, Hamiltonien'imiz değişecek ve;

$$H_F = e \cdot F \cdot z = \text{Elektrik alanın getirdiği katkı olmak üzere ;}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + e.F.z \quad (2.2.13)$$

şeklinde yazılacaktır. $\Psi_{yeni}(z)$ kuyu içinde bulunan elektrik alan etkisindeki parçacığı temsil eden dalga fonksiyonu olmak üzere, " $H\Psi_{yeni}(z) = E\Psi_{yeni}(z)$ " denkleminde göre Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır ;

$$-\frac{\hbar^2}{2.m^*} \frac{\partial^2 \Psi_{yeni}(z)}{\partial z^2} + V(z)\Psi_{yeni}(z) + e.F.z\Psi_{yeni}(z) = E\Psi_{yeni}(z) \quad (2.2.14)$$

Buradan da daha önceki düşüncelerin(varyasyon yöntemiyle) ışığı altında dalga fonksiyonları aşağıdaki gibi yazılır;

Çift durumlar için

$$\Psi_{yeni}^{çift}(z) = \left(\begin{array}{ll} A\cos\left(\frac{k.L}{2}\right). \exp\left(\frac{\alpha.L}{2}\right). \exp(\alpha.z). \exp(-\beta z) & \text{I. Böl.} \\ A\cos(k.z). \exp(-\beta z) & \text{II. Böl.} \\ A\cos\left(\frac{k.L}{2}\right). \exp\left(\frac{\alpha.L}{2}\right). \exp(-\alpha.z). \exp(-\beta z) & \text{III. Böl.} \end{array} \right) \quad (2.2.15)$$

Tek durumlar için ;

$$\Psi_{yeni}^{tek}(z) = \left(\begin{array}{ll} -A\sin\left(\frac{k.L}{2}\right). \exp\left(\frac{\alpha.L}{2}\right). \exp(\alpha.z). \exp(-\beta z) & \text{I. Böl} \\ A\sin(k.z). \exp(-\beta z) & \text{II. Böl.} \\ A\sin\left(\frac{k.L}{2}\right). \exp\left(\frac{\alpha.L}{2}\right). \exp(-\alpha.z). \exp(-\beta z) & \text{III. Böl.} \end{array} \right) \quad (2.2.16)$$

Burada "A" normalizasyon sabiti ve " β " varyasyanel parametredir. Enerjiyi ise (E_{tek} tek durumların, $E_{çift}$ çift durumların enerjileri olmak üzere);

$$\langle E_{\text{çift}} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_{\text{yeni}}^{\text{çift}}(z) | H | \Psi_{\text{yeni}}^{\text{çift}}(z) \rangle}{\langle \Psi_{\text{yeni}}^{\text{çift}}(z) | \Psi_{\text{yeni}}^{\text{çift}}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (2.2.17)$$

$$\langle E_{\text{tek}} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_{\text{yeni}}^{\text{tek}}(z) | H | \Psi_{\text{yeni}}^{\text{tek}}(z) \rangle}{\langle \Psi_{\text{yeni}}^{\text{tek}}(z) | \Psi_{\text{yeni}}^{\text{tek}}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (2.2.18)$$

şeklinde buluruz.

Burada biz; işlemlerimizi yaparken çok küçük ve çok büyük sayılarla uğraşmamak için " $\frac{\hbar^2}{2.m^*} = 1$ " alındı ve elektrik alanın etkisini ;

$$H_F = \frac{e.a^*.F}{R^*} z = \eta.z \quad (2.2.19)$$

olarak hesapladık ve bu şekilde işlem yaptık. Bu ifadede ki " a^* " etkin Bohr yarıçapı ve " R^* " da etkin Rydberg enerjisidir. Bunlar da, " ϵ " ($\epsilon = 12,5$) dielektrik sabiti olmak üzere,

$$a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2} \quad (2.2.20)$$

$$R^* = \frac{m^* e^4}{2 \hbar^2 \epsilon^2} \quad (2.2.21)$$

ifadeleri kullanılarak, " $L=100 \text{ \AA}$ " ve " $m^* = 0.067 m_0$ " için, " $a^* = 98,73 \text{ \AA}$ " ve " $R^* = 5,83 \text{ meV}$ " bulunmuştur (m_0 , durgun elektron kütesidir).

Bu verilere göre; $F=0,25,50,75,100 \text{ kV/cm}$ değerleri için taban durum dalga fonksiyonu olan $\Psi_0(z)$ 'in $z(a^*)$ ' ya bağlı grafiği şekil(3.5) 'de ve birinci uyarılmış durumun dalga fonksiyonu olan $\Psi_1(z)$ 'in $z(a^*)$ ' ya bağlı grafiğide şekil(3.6) 'da görülmektedir. $F=0$ için taban durum enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği şekil(3.7)'de, taban durum enerjisinin elektrik alanın değişimine bağlı grafiğide şekil(3.8)'de gösterilmiştir. Bunun yanında, $F=0$ 'daki taban durum enerjisi ile herhangi bir " F " değerindeki taban durum enerjisi arasındaki farkın elektrik alana nasıl bağlı olduğu şekil(3.9)'da ve taban durum enerjisinin aliminyum miktarını gösteren " x "e bağlı grafiğide şekil(3.10)'da gösterilmiştir.

Bu yapılanlardan sonra aynı işlemleri "boşluklar(deşikler)" için yaptık.Bölüm (2.1)' de kuantum kuyularının nasıl oluşturulduğunu söylemiştik.Buna göre, "x=0.3" ve etkin kütlede deşikler için "m^{*} = 0.38 m" aldık. İlk yaptığımız işlemlerde "e" yi elektronlar için "-e" almıştık, fakat hollerde "+e" aldık. Bölüm (2.1)'deki bilgilerin ışığında altında, $a^* = 17,40 A^0$, $R^* = 33,08 meV$ ve $V_h = 151.92 meV$ olarak belirlendi.Yalnız yapılan hesaplar sonucunda, elektrik alanın katkısını gösteren " η " ifadesini ;

$$\eta = -\frac{a^* \cdot F \cdot (0,01)}{R^*} \quad (2.2.22)$$

olarak hesapladık(burada F'nin birimi kV/cm' dir) ve işlemlerimizi ona göre yapıp grafikler çizdik.

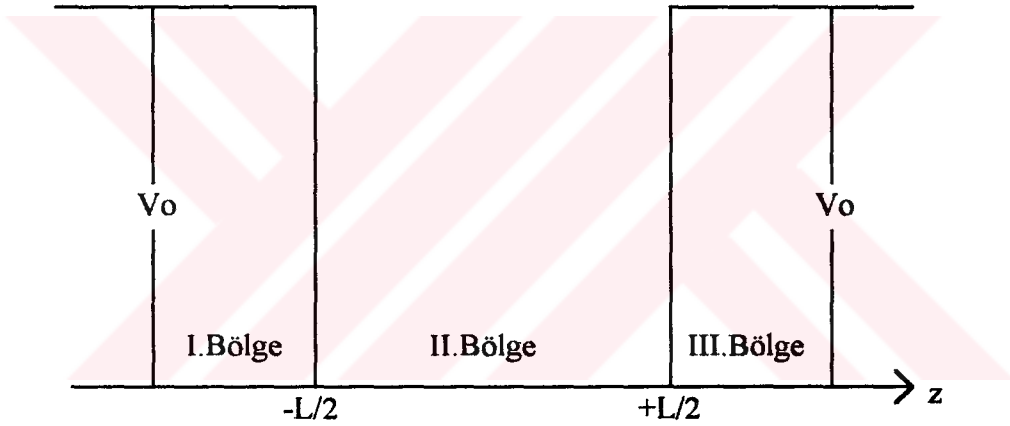
Bu grafikleri, 3.Bölümde gösterdik. Buna göre, F=0,25,50,75,100 kV/cm değerleri için taban durum dalga fonksiyonu olan $\Psi_0(z)$ 'in $z(a^*)$ 'a bağlı grafiği şekil(3.11)' de, birinci uyarılmış durumun dalga fonksiyonu olan $\Psi_1(z)$ 'in $z(a^*)$ 'a bağlı grafigide şekil(3.12)'de gösterilmiştir. F=0 için taban durum enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği şekil(3.13)' de, taban durum enerjisinin elektrik alanın değişimine bağlı grafiğide şekil(3.14)'de gösterilmiştir. F=0' daki taban durum enerjisi ile herhangi bir "F" değerindeki taban durum enerjisi arasındaki farkın elektrik alana nasıl bağlı olduğu şekil(3.15)' de ve taban durum enerjisinin aliminyum miktarına (x) bağlı grafiğide şekil(3.16)' da gösterilmiştir.

2.3.SİMETRİK BİR SONLU POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNDE BULUNAN BİR ELEKTRONA ELEKTRİK ALANIN VE YABANCI BİR ATOMUN (IMPURITY) ETKİSİ

Sonlu simetrik potansiyelli kuantum kuyusu içinde bulunan m^* kütleli bir parçacığa $+z$ yönünde düzgün bir elektrik alanın(F) ve yabancı bir atomun etkidiğini varsayalım. Burada potansiyelin($V(z)$) şeklini aşağıdaki gibi seçersek ;

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| \leq L/2 \\ V_0 & |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (2.3.1)$$

ve seçtiğimiz bu potansiyele göre aşağıdaki şekli düşünebiliriz($L = 2a$ olmak üzere);



İlk önce elektrik alanın ve yabancı atomun parçacığı etkilemediğini farz edelim. Yani yabancı atom potansiyel kuyusu içinde bulunmasın ve elektrik alan(F) şiddeti sıfır olsun. Buna göre "H" hamiltonienini yazarsak(H_0 kinetik enerji ve H_1 potansiyel enerji olmak üzere) ;

$$H_0 = \frac{P^2}{2m^*} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.3.2)$$

$$H_1 = V(z) \quad (2.3.3)$$

$$H = H_0 + H_1 \quad (2.3.4)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad (2.3.5)$$

Buradan da, Schrödinger denklemini yazarsak ($\Psi(z)$ parçacığı temsil eden dalga fonksiyonu ve "E" toplam enerji olmak üzere) ;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (2.3.6)$$

olur. Toplam enerji "E" nin " V_0 " dan daha küçük olduğu durumları göz önüne alalım(II.Bölge). Buna göre parçacığın hareket denkleminin(Schrödinger denklemi)

çözümünden, $k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ olmak üzere

$$\Psi(z) = A \cos(kz) + B \sin(kz) \quad (2.3.7)$$

şeklindeki dalga fonksiyonu bulunur. Burada A ve B sabittir. Sınır şartlarından çift ve tek durumlar için ;

$$\Psi_{\text{çift}}(z) = A \cos(kz) \quad (2.3.8)$$

$$\Psi_{\text{tek}}(z) = B \sin(kz) \quad (2.3.9)$$

dalga fonksiyonları bulunur. I.ve III.Bölgede, yani $|z| > L/2$ bölgesinde Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır;

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} - (V_0 - E) \Psi(z) = 0 \quad (2.3.10)$$

Buradan da genel çözüm, $\alpha = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(V_0 - E)}$ olmak üzere

$$\Psi(z) = C \exp(\alpha z) + D \exp(-\alpha z) \quad (2.3.11)$$

şeklindedir. Burada C ve D sabittir. Sınır şartlarından da

$$\Psi(z) = D \exp(-\alpha z) \quad z > L/2 \quad (2.3.12)$$

$$\Psi(z) = C \exp(\alpha z) \quad z < -L/2 \quad (2.3.13)$$

ifadeleri elde edilir. Buradan da çeşitli işlemler yapıldığında(Bölüm 1.3.2' deki gibi);

$$k \tan(k L / 2) = \alpha \quad C = D \quad \text{ve} \quad B = 0 \quad (2.3.14)$$

$$k \cot(k L / 2) = -\alpha \quad C = -D \quad \text{ve} \quad A = 0 \quad (2.3.15)$$

denklemleri bulunur. Bu denklemler k ve α 'nın tanımlarıyla birlikte sistemin enerji düzeylerini belirler.

Dalga fonksiyonlarını I.II.ve III.Bölge için anlaşılır bir şekilde yazalım($\Psi_{çift}(z)$ çift durumların ve $\Psi_{tek}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonları olmak üzere);

$$\Psi_{çift}(z) = \begin{cases} N_0 \cos(k L / 2) \exp(\alpha L / 2) \exp(\alpha z) & z \leq -L / 2 \quad (I.) \\ N_0 \cos(k z) & -L / 2 \leq z \leq L / 2 \quad (II.) \\ N_0 \cos(k L / 2) \exp(\alpha L / 2) \exp(-\alpha z) & z \geq L / 2 \quad (III.) \end{cases} \quad (2.3.16)$$

$$\Psi_{tek}(z) = \begin{cases} N_0 \sin(k L / 2) \exp(\alpha L / 2) \exp(\alpha z) & z \leq -L / 2 \quad (I.) \\ N_0 \sin(k z) & -L / 2 \leq z \leq L / 2 \quad (II.) \\ N_0 \sin(k L / 2) \exp(\alpha L / 2) \exp(-\alpha z) & z \geq L / 2 \quad (III.) \end{cases} \quad (2.3.17)$$

Burada, N_0 normalizasyon sabitidir($A=N_0$). Bölüm (1.3.2)' deki gibi, parçacığın enerjisi tek ve çift durumlar için (varyasyon yöntemiyle) bulunabilir.

Şimdi bu simetrik potansiyel kuyu içinde bulunan parçacığa "+z" yönünde düzgün bir elektrik alan(F) uygulayalım. Elektrik alanın hamiltoniene etkisi H_F olmak üzere, yeni H' hamiltonienini

$$H_F = e F z \quad (2.3.18)$$

$$H' = H_0 + H_1 + H_F$$

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + e F z \quad (2.3.19)$$

şeklinde yazarız. Elektrik alanın etkisiyle parçacığın yeni dalga fonksiyonuna çift durumlar için $\Psi_F^{çift}(z)$, tek durumlar için $\Psi_F^{tek}(z)$ diyelim. Buna göre

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + eFz\right) \Psi_F(z) = E \Psi_F(z) \quad (2.3.20)$$

şeklindeki Schrödinger denkleminde varyasyon yöntemine göre bölüm(1.3.2)'deki gibi aşağıdaki dalga fonksiyonlarını seçeriz(I.II.veIII.Bölge için);

$$\Psi_F^{\text{çift}}(z) = N_F \Psi_{\text{çift}}(z) \exp(-\beta z) \quad (2.3.21)$$

$$\Psi_F^{\text{tek}}(z) = N_F \Psi_{\text{tek}}(z) \exp(-\beta z) \quad (2.3.22)$$

Burada N_F , normalizasyon sabiti ve β minimizasyon sabitidir. Buradan da elektrik alan etkisindeki parçacığın enerjisi(Çift durumların enerjisi $E_F^{\text{çift}}$, tek durumların enerjisi E_F^{tek} olmak üzere);

$$\langle E_F^{\text{çift}} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_F^{\text{çift}}(z) | H' | \Psi_F^{\text{çift}}(z) \rangle}{\langle \Psi_F^{\text{çift}}(z) | \Psi_F^{\text{çift}}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (2.3.23)$$

$$\langle E_F^{\text{tek}} \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_F^{\text{tek}}(z) | H' | \Psi_F^{\text{tek}}(z) \rangle}{\langle \Psi_F^{\text{tek}}(z) | \Psi_F^{\text{tek}}(z) \rangle} \right\}_{\min} \quad (2.3.24)$$

şeklinde yazılır.

Şimdi de, parçacığa elektrik alanın(F) yanında yabancı atomun etkidiğini göz önüne alalım. Bu etkinin hamiltoniene katkısını H_i olarak isimlendirelim. Öyleyse bizim yeni hamiltonienimiz(H'')

$$H'' = H_0 + H_1 + H_F + H_i \quad (2.3.25)$$

şeklinde olacaktır. Coulomb etkileşmesinden dolayı H_i ;

$$H_i = -\frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (2.3.26)$$

şeklinde yazılır(12). Burada " z_i " yabancı atomun konumu ve $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ dir. Bu ifadelere göre hamiltonienimizi(H'') daha açık olarak;

$$H^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (2.3.27)$$

şeklinde yazarız. Buradan da, parçacığa etkiyen elektrik alan ve yabancı atomun etkisiyle Schrödinger denklemini aşağıdaki gibi yazarız (Paçacığın enerjisi E_i ve dalga fonksiyonu $\Psi_i(z)$ olmak üzere);

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \right\} \Psi_i(z) = E_i \Psi_i(z) \quad (2.4.28)$$

Bu denklemden, $\Psi_i^{çift}$ çift durumların ve Ψ_i^{tek} tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere

$$\Psi_i^{çift}(z) = N_i \Psi_{F^i}^{çift}(z) \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}{\lambda}\right) \quad (2.3.28)$$

$$\Psi_i^{tek}(z) = N_i \Psi_{F^i}^{tek}(z) \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}{\lambda}\right) \quad (2.3.29)$$

dalga fonksiyonları yazılır (varyasyon yöntemine göre). Burada N_i normalizasyon sabiti, λ ise minimizasyon sabitidir. Bu ifadelerle göre parçacığın enerjisini aşağıdaki gibi yazarız (E_i parçacığın enerjisi, E_{F^i} yabancı atomun etkisi yokken ve sadece elektrik alan varken ki enerji olduğuna göre);

$$E_i^{çift} = E_{F^i}^{çift} - \left(\frac{\langle \Psi_i^{çift}(z) | H^* | \Psi_i^{çift}(z) \rangle}{\langle \Psi_i^{çift}(z) | \Psi_i^{çift}(z) \rangle} \right)_{\min} \quad (2.3.30)$$

$$E_i^{tek} = E_{F^i}^{tek} - \left(\frac{\langle \Psi_i^{tek}(z) | H^* | \Psi_i^{tek}(z) \rangle}{\langle \Psi_i^{tek}(z) | \Psi_i^{tek}(z) \rangle} \right)_{\min} \quad (2.3.31)$$

Burada, $E_i^{çift}$ çift durumların ve E_i^{tek} tek durumların enerjisidir. Bu işlemler yapıldığında da E_i için;

$$E_i^{çift} = -\frac{1}{\lambda^2} + \frac{4 P_{çift}}{\lambda P_{çift} + 2 Q_{çift}} \quad (2.3.32)$$

$$E_i^{tek} = -\frac{1}{\lambda^2} + \frac{4 P_{tek}}{\lambda P_{tek} + 2 Q_{tek}} \quad (2.3.33)$$

denklemleri bulunur. Buradaki $P_{çift}$, P_{tek} ve $Q_{çift}$, Q_{tek} ifadelerinin açık şekli aşağıdaki gibidir.

$$P_{çift} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\Psi_F^{çift}(z)|^2 \exp\left(-\frac{2}{\lambda}|z - z_i|\right) \quad (2.3.34)$$

$$P_{tek} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\Psi_F^{tek}(z)|^2 \exp\left(-\frac{2}{\lambda}|z - z_i|\right) \quad (2.3.35)$$

$$Q_{çift} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\Psi_F^{çift}(z)|^2 |z - z_i| \exp\left(-\frac{2}{\lambda}|z - z_i|\right) \quad (2.3.36)$$

$$Q_{tek} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\Psi_F^{tek}(z)|^2 |z - z_i| \exp\left(-\frac{2}{\lambda}|z - z_i|\right) \quad (2.3.37)$$

Biz burada bölüm(2.3)'de elektron için alınan değerlerin aynısını ele aldık ve elektronun enerjisinin kuyu genişliğine ve elektrik alana bağlı grafiklerini çizdik ($V_0=227,88$ meV, $L=100 A^0$, $a^* = 98,73 A^0$, $R^* = 5.83 meV$). Burada yabancı atom ve elektrik alan etkisindeki elektronun bağlanma enerjisinin, elektrik alana göre değişiminin grafiğini şekil(3.17)'de, kuyu genişliğine bağlı değişimini de şekil(3.18)'de gösterdik (Yabancı atomun kütlesi $m_i = 0.38 m_0$ alınmış olup, m_0 durgun elektron kütlesidir).

Bunun yanında elektron yerine boşluğu(deşik) düşündük ve bölüm(2.3)'deki boşluk(deşik) için alınan değerlerin aynısını alıp grafikler çizdik ($V_h=151.92 meV$, $L=100 A^0$, $a^* = 17.40 A^0$, $R^* = 5.83 meV$). Burada da yabancı atom ve elektrik alan etkisindeki elektronun bağlanma enerjisinin, elektrik alana göre değişiminin grafiğini şekil(3.19)'da, kuyu genişliğine bağlı değişiminide şekil(3.20)'de gösterdik. Elektronlar ve boşluklar için $\varepsilon = 12,5$ alınmıştır.

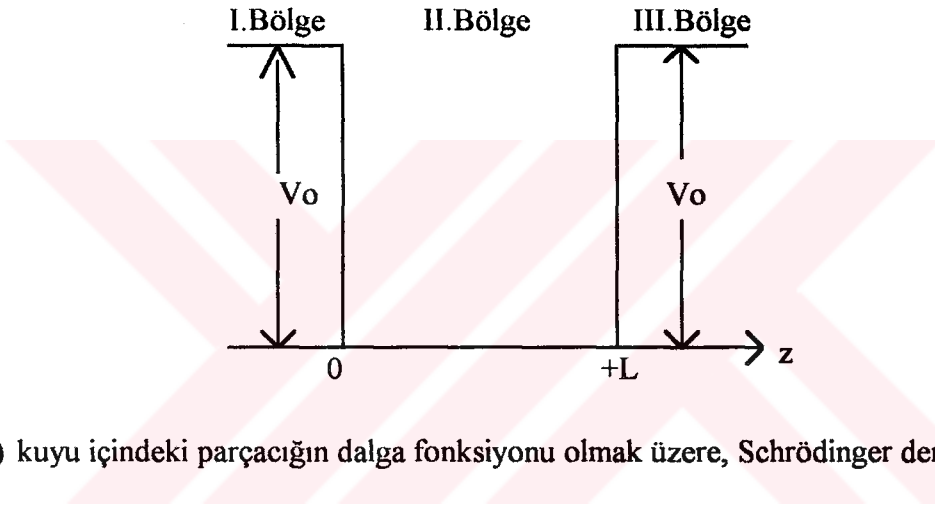
Daha sonra ise aynı mantıkla kuyu genişliğini $V_0=400$ meV olarak nümerik hesaplar yaptık. Aynı zamanda $Z_i = -L/2, -L/4, 0, L/4, L/2$ değerleri için elektronun bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişim grafiğide ($L=200 A^0$) 3.Bölümde şekil(3.21)'de gösterilmiştir(15).

2.4.SİMETRİK OLMAYAN SONLU POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNDE BULUNAN ELEKTRON VE DEŞİĞİN(BOŞLUK) ELEKTRİK ALAN ALTINDAKİ DALGA FONKSİYONLARININ KARŞILAŞTIRILMASI

Şimdi simetrik olmayan, fakat kenarları sonlu olan bir kuantum kuyusu düşünelim. İlk önce bu kuyu içinde bir elektronun bulunduğunu farz edelim. Bu elektron kuyu içinde belli potansiyel ile hapsedilmiş olsun. Bu potansiyeli,

$$V(z) = \begin{cases} V = 0 & 0 \leq z \leq L \\ V = V_0 & 0 \geq z \text{ ve } L \leq z \end{cases} \quad (2.4.1)$$

şeklinde yazalım. Bu potansiyelin şeklini ise aşağıdaki gibi çizeriz,



$\Psi(z)$ kuyu içindeki parçacığın dalga fonksiyonu olmak üzere, Schrödinger denklemini

$$\begin{aligned} \text{I. Bölge} & \quad -\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + V_0\Psi(z) = E\Psi(z) \\ \text{II. Bölge} & \quad -\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z) \\ \text{III. Bölge} & \quad -\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + V_0\Psi(z) = E\Psi(z) \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

şeklinde yazalım. Burada çok büyük ve çok küçük sayılarla uyuşmamak için $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ alındı. Bu denklemin I. ve III. bölgedeki çözümlerine bakacak olursak, $\alpha^2 = V_0 - E$ olmak üzere $\Psi_I(z)$ ve $\Psi_{III}(z)$ taban durum dalga fonksiyonlarını,

$$\begin{aligned}\Psi_I(z) &= A \exp(\alpha z) \\ \Psi_{III}(z) &= B \exp(-\alpha z)\end{aligned}\quad (2.4.3)$$

olarak ifade ederiz. II.Bölgede ise $V_0=0$ olacağından, Schrödinger denklemi,

$$-\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z)\quad (2.4.4)$$

olarak ele alınır. II.Bölgedeki taban durum çözümüne $\Psi_{II}(z)$ dersek, bu çözümde ($k^2 = E$ olmak üzere),

$$\Psi_{II}(z) = C \sin(kz + \Phi)$$

olur. Daha önceki potansiyel kuyusu çözümünde kullandığımız bilgileri hatırlarsak, sınır şartlarında yani $Z=0$ 'da ve $Z=L$ 'de çözümler yaparsak ;

$$\begin{aligned}z = 0 \text{ da} & \quad \alpha \tan(\Phi) = k \\ z = L \text{ de} & \quad -\alpha \tan(kL + \Phi) = k\end{aligned}\quad (2.4.5)$$

denklemlerini buluruz. Bu denklemler k ve α 'nın tanımlarıyla birlikte sistemin enerji düzeylerini ve bunlarla ilgili dalga fonksiyonunu belirler.

Taban durum dalga fonksiyonlarını bire normalize ettiğimizde ise I.II.ve III.Bögedeki dalga fonksiyonları aşağıdaki şekli alır.

$$\begin{aligned}\Psi_I(z) &= C \sin(\Phi) \exp(\alpha z) \\ \Psi_{II}(z) &= C \sin(kz + \Phi) \\ \Psi_{III}(z) &= C \sin(kL + \Phi) \exp(\alpha L) \exp(-\alpha z)\end{aligned}\quad (2.4.6)$$

Taban durum enerjisi ise varyasyon yöntemi kullanılarak bulunur. "H" Hamiltonieni

$$\begin{aligned}H_I &= -\frac{d^2}{dz^2} + V_0 \\ H_{II} &= -\frac{d^2}{dz^2} \quad \text{ise} \\ H_{III} &= -\frac{d^2}{dz^2} + V_0\end{aligned}\quad (2.4.7)$$

$$H = H_I + H_{II} + H_{III}$$

olarak ifade edilirse, "E" Taban durum enerjisi

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \Psi_I(z) | H_I | \Psi_I(z) \rangle}{\langle \Psi_I(z) | \Psi_I(z) \rangle} + \frac{\langle \Psi_{II}(z) | H_{II} | \Psi_{II}(z) \rangle}{\langle \Psi_{II}(z) | \Psi_{II}(z) \rangle} + \frac{\langle \Psi_{III}(z) | H_{III} | \Psi_{III}(z) \rangle}{\langle \Psi_{III}(z) | \Psi_{III}(z) \rangle} \quad (2.4.8)$$

şeklinde yazılır.

Daha sonra ise simetrik olmayan potansiyel kuantum kuyusuna 'z' yönünde düzgün bir elektrik alan şiddeti uygulandığında Schrödinger denklemi

$$\begin{aligned} \text{I. Bölge} \quad & -\frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + V_0 \Psi(z) + eFz = E\Psi(z) \\ \text{II. Bölge} \quad & -\frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + eFz = E\Psi(z) \\ \text{III. Bölge} \quad & -\frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + V_0 \Psi(z) + eFz = E\Psi(z) \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

olarak yazılır. Burada 'F' elektrik alan şiddetidir. Aynı yöntemle (varyasyon yöntemi) I.II.veIII. Bölge için taban durum dalga fonksiyonları ,

$$\begin{aligned} \Psi_I(z) &= C \sin(\Phi) \exp(\alpha z) \exp(-\beta z) \\ \Psi_{II}(z) &= C \sin(kz + \Phi) \exp(-\beta z) \\ \Psi_{III}(z) &= C \sin(kL + \Phi) \exp(\alpha L) \exp(-\alpha z) \exp(-\beta z) \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

olarak yazılır. Burada β varyasyon parametresidir. Elektrik alan varken taban durum enerjisi ise (E_F),

$$\begin{aligned} H^I &= -\frac{d^2}{dz^2} + V_0 + eFz \\ H^{II} &= -\frac{d^2}{dz^2} + eFz \\ H^{III} &= -\frac{d^2}{dz^2} + V_0 + eFz \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

$$\langle E_F \rangle = \left\{ \frac{\langle \Psi_I(z) | H^I | \Psi_I(z) \rangle}{\langle \Psi_I(z) | \Psi_I(z) \rangle} + \frac{\langle \Psi_{II}(z) | H^{II} | \Psi_{II}(z) \rangle}{\langle \Psi_{II}(z) | \Psi_{II}(z) \rangle} + \frac{\langle \Psi_{III}(z) | H^{III} | \Psi_{III}(z) \rangle}{\langle \Psi_{III}(z) | \Psi_{III}(z) \rangle} \right\}_{\min}$$

olarak bulunur.

Burada nümerik işlemlerde yapılanlar şunlardır:

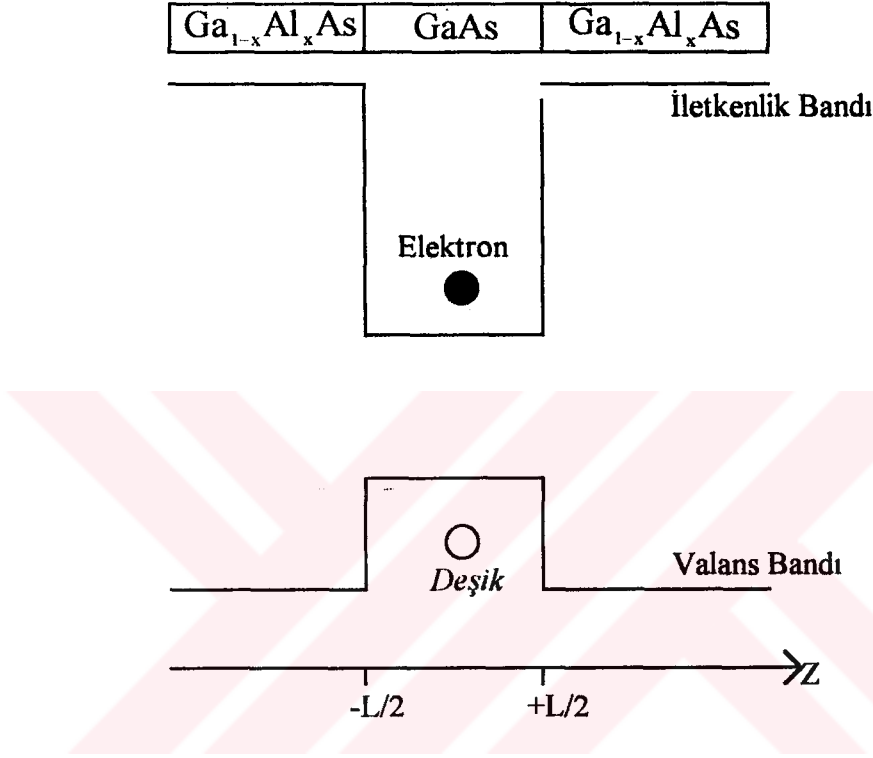
İlk önce simetrik olmayan potansiyel kuyusu içinde bir elektron olduğu düşünülmüştür. Daha sonra ise kuyunun içinde bir boşluğun(deşik) olduğu düşünülmüştür. Elektronlar için etkin Bohr yarıçapı $a^*=98.73 \text{ A}^0$ ve etkin Rydberg enerjisi $R^*=5.83 \text{ meV}$ olarak hesaplanmıştır. Boşluklar(deşikler) için etkin Bohr yarıçapı $a^*=14.7 \text{ A}^0$ ve etkin Rydberg enerjisi $R^*=39.18 \text{ meV}$ olarak hesaplanmıştır. Elektron için yapılan işlemlerin aynısı boşluklar(deşikler) için yapılmıştır. Yapılan işlemlerdeki tek fark şudur: elektronlar için elektron yükü "+e" alınmış, fakat boşluklar (deşikler) için "-e" alınmıştır.

Nümerik işlemlerde $L=30 \text{ A}^0$, $F=100 \text{ kV/cm}$, $V_0=400 \text{ meV}$, $m_0 = 0.067 m_0$ (elektro kütlesi), $m_h = 0.45 m_0$ (deşik kütlesi) olarak ele alınarak hesaplamalar yapılmıştır. Varyasyon parametresinin (β) değeri hesaplanmıştır.

Bu yapılan işlemler sonucunda taban durum dalga fonksiyonunun $z(a^*)$ 'a göre değişimini gösteren grafiğini 3.Bölümde şekil(3.22)'de gösterdik(7). Daha sonra kuyu genişliği olan "L" yi değiştirip ($L=100 \text{ A}^0$), aynı değerler göz önünde bulundurularak taban durum dalga fonksiyonunun $z(a^*)$ 'a göre değişimini şekil(3.23)'de gösterdik(7).

2.5. GaAs - GaAlAs KUANTUM KUYUSUNDA EKSİTONLARIN İNCELENMESİ (TEMEL DURUMLARIN HESABI)

Bu tip kuyularda hem elektronlar hemde deşikler(holler-boşluklar) GaAs katmanı içinde hapsedilmiştir. Bu tip kuantum kuyularında eksiton soğrulması, fotoluminisans ve emisyon görülür(8). Bu tip kuantum kuyularının şekli aşağıdaki gibi çizilebilir.



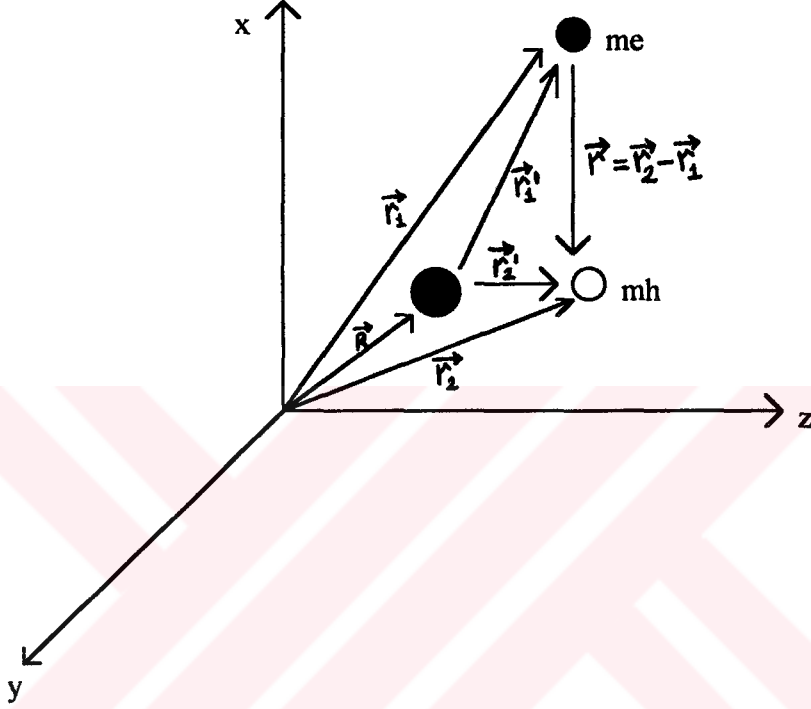
Şekil(2.5.1)

Bu sistemde elektronlar ve boşluklar GaAs içine hapsedilmiştir(kuyu genişliği L' dir). Burada biz varyasyon metodu ile eksiton hamiltonieninin düşük sınır durumlarını hesaplayacağız. Hesapları kolaylaştırmak için elektron ve boşlukların kuyu içinde tamamen hapsedilmiş olduğunu kabul edeceğiz. Yani kuyuların potansiyel derinliğini sonsuz kabul edip yaklaşık hesaplar yapacağız. Kuyuların derinliği sonsuz kabul edildiğinde $Ga_{1-x}Al_xAs$ yapısında aliminyum yoğunluğu geçerli ise çalışılan kuyu shallow donor seviyeleri yaklaşımına uyar(8). Bundan dolayı aliminyum için, serbest elektronun ve daha küçük potansiyel etkisindeki ağır hollerin "z" boyunca hareketinin olduğunu bekleriz. Bu yüzden eksiton bağlanması " L " kalınlığındaki hapsedilme olayı içinde tanımlanmıştır. Bu yaklaşım elektron-hafif boşluk için iyi bir yaklaşım değildir(8).

Yukarıda çizdiğimiz kuantum kuyusunda, elektron-boşluk çiftinin " $x-y$ " düzleminde serbest ve " z " boyunca bağımlı hareket ettiğini kabul ettik. Burada karşılıklı merkezsiz kuvvetlerin etkisi altında hareket eden iki cisim problemini Lagrange formülasyonunun bir uygulaması olarak inceleyeceğiz. Merkezi kuvvet hareketinin bütün problemleri bilinen fonksiyonlar cinsinden integre edilemezler. Bununla beraber,

bu problemin çözümünde geliştirilmiş çeşitli teknikler kullanarak tam bir incelemesini yapalım(9).

Sadece, karşılıklı potansiyel etkiden doğan kuvvetlerin etkisinde bulunan m_e ve m_h gibi iki kütle noktasından meydana gelen bir konservatif sistem ele alalım(9). Burada sanki potansiyel varmış gibi işlemler yapıp daha sonra potansiyeli sonsuz kabul edeceğiz.



Şekil(2.7.2)

Önce iki maddesel nokta arasındaki $\vec{r}_2 - \vec{r}_1$ vektörünün veya aralarındaki $\dot{\vec{r}}_2 - \dot{\vec{r}}_1$ relativ hız vektörünün veya $\vec{r}_2 - \vec{r}_1$ 'in herhangi yüksek mertebeden bir türevinin herhangi bir fonksiyonu olduğu kabul edilecektir(9). Burada $\dot{\vec{r}}_2$ ve $\dot{\vec{r}}_1$ kütle merkezine göre iki maddesel noktanın yer vektörleridir. Böyle bir sistemin serbestlik derecesi 6 'dır ve 6 bağımsız genelleştirilmiş koordinatı vardır. Bu koordinatları kütle merkezinin \vec{R} yer vektörü ile, $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ fark vektörünün bileşenleri olarak seçelim. O halde Lagrange fonksiyonu,

$$L = T(\vec{R}, \dot{\vec{r}}) - V(\dot{\vec{r}}, r, \dots) \quad (2.5.1)$$

olacaktır(9). "T" Kinetik enerjisi bu durumda kütle merkezi hareketinin kinetik enerjisi ile kütle merkezi etrafındaki hareketin "T'" kinetik enerjisinin toplamı olarak yazılabilir. Bu söylediklerimizi,

$$T^I = \frac{1}{2} m_e (\dot{\vec{r}}_1^I)^2 + \frac{1}{2} m_h (\dot{\vec{r}}_2^I)^2 \quad (2.5.2)$$

$$T = \frac{1}{2} (m_e + m_h) (\dot{\vec{R}})^2 + T^I \quad (2.5.3)$$

olarak yazabiliriz. Şeki(2.5.2) ' den de çeşitli işlemler yapıldığında aşağıdaki ifadeleri buluruz(10-11) ;

$$\vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_1 + m_h \vec{r}_2}{(m_e + m_h)}$$

$$\vec{r}_1^I = -\frac{m_h}{m_e + m_h} \vec{r} \quad (2.5.4)$$

$$\vec{r}_2^I = \frac{m_e}{m_e + m_h} \vec{r}$$

Bu bulduğumuz ifadelerin türevlerini kullanarak Kinetik enerji terimini bulabiliriz. Kinetik enerji terimini,

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (2.5.5)$$

$$T = \frac{1}{2} (m_e + m_h) (\dot{\vec{R}})^2 + \frac{1}{2\mu} (\dot{\vec{r}})^2 \quad (2.5.6)$$

olarak buluruz. Potansiyel etkileşme ise $V = -\frac{e^2}{\epsilon r}$ dir. Buradaki ϵ dielektrik sabitidir.

Elektron-boşluk çiftinin "x-y" düzleminde serbest "z" yönünde bağımlı hareket yaptığı düşünülürse,

$$V = -\frac{e^2}{\epsilon \sqrt{(x^2 + y^2 + (z_e - z_h)^2)}} \quad (2.5.7)$$

ifadesi yazılabilir. $H=T+V$ ' den de(9),

$$H = \frac{\bar{P}_x^2 + \bar{P}_y^2}{2(m_e + m_h)} + \frac{\bar{p}_x^2 + \bar{p}_y^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{(x^2 + y^2 + (z_e - z_h)^2)}} \quad (2.5.8)$$

denklemini bulunur. Bu sonuç bir elektron ve bir deşikten oluşan sisteme uygulanırsa, yani eksiton için kullanılırsa, eksiton hamiltonienini için;

$$H_{\text{exc}} = \frac{\bar{p}_{z_e}^2}{2m_e} + \frac{\bar{p}_{z_h}^2}{2m_h} + \frac{\bar{P}_x^2 + \bar{P}_y^2}{2(m_e + m_h)} + \frac{\bar{p}_x^2 + \bar{p}_y^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{(x^2 + y^2 + (z_e - z_h)^2)}} + V(z_e) + V(z_h) \quad (2.5.9)$$

ifadesi yazılır(8). \bar{P}_x ve \bar{P}_y ifadeleri çevrimseldir. Dolayısıyla kütle merkezi ya hareket etmiyor ya da düzgün bir hızla hareket etmektedir. \bar{r} için hareket denklemlerinin hiçbirinde \bar{P}_x ve \bar{P}_y olmayacaktır.

Bundan sonraki bütün incelemelerimizde " H_{exc} " eksiton hamiltonienindeki \bar{P}_x ve \bar{P}_y 'li terimler göz önüne alınmayacaktır. " H_{exc} " Hamiltonienindeki geri kalan

terimler, sabit bir kuvvet merkezinden " \bar{r} " uzaklığında ve kütlesi $\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$ olan bir maddesel noktanın Hamiltonieni olarak beklenen ifadenin aynısıdır. Burada " μ " indirgenmiş küttedir.

O halde iki cisim kütle merkezleri etrafında merkezsel kuvvet hareketi her zaman bir eşdeğer tek cisim problemine indirgenebilir.

Eksiton hamiltonienini bu şekilde bulduktan sonra, eksiton dalga fonksiyonunu bulmaya çalışalım. Elektron ve deşiğin kuyu içinde tamamen hapsedilmiş olarak ele alacağız. Bu yaklaşım elektron-ağır deşik eksiton bağlanma enerjisinin hesaplanmasında doğru olacaktır. Potansiyel duvarları sonsuz kabul edildiğinde Şekil(2.5.1)'den

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| > L/2 \\ \infty & |z| < -L/2, |z| > L/2 \end{cases} \quad (2.5.10)$$

yazılır. Daha önceki bilgilerin ışığında elektron ve boşluk için taban durum dalga fonksiyonları,

$$\begin{aligned} \Psi(z_e) &= C_1 \cos\left(\frac{\pi z_e}{L}\right) \\ \Psi(z_h) &= C_2 \cos\left(\frac{\pi z_h}{L}\right) \end{aligned} \quad (2.5.11)$$

olarak bulunur. Burada C_1 ve C_2 normalizasyon sabitidir. Elektron-boşluk(deşik) çiftinin etkileşmesiyle, **eksiton** hamiltonienini sağlayan taban durum dalga fonksiyonu

$$\Psi_1 = N_1 \cos\left(\frac{\pi z_e}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi z_h}{L}\right) \exp(-\rho / \lambda_1) \quad (2.5.12)$$

$$\Psi_2 = N_2 \cos\left(\frac{\pi z_e}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi z_h}{L}\right) \exp\left[-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}{\lambda_2}\right] \quad (2.5.13)$$

olarak iki farklı deneme fonksiyonu seçilebilir(8). Burada λ_1 ve λ_2 deneme parametreleri ve $\rho^2 = x^2 + y^2$ 'dir. N_1 ve N_2 normalizasyon sabitidir. Eksiton temel bağlı durumu iletkenlik bandındaki E_1 ve valans bandındaki H_1 arasında yer alır. Burada E_1 ve H_1 sırasıyla iletkenlik bandındaki en düşük elektron ve valans bandındaki en düşük deşik (boşluk) enerjileridir.

Elektron-ağır deşik (boşluk) eksiton bağlanma enerjisini hesaplarken, elektron-ağır deşik eksitonu ile elektron-hafif deşik eksitonlarının çiftlenmiş olduğu yani etkileşmeyeceği kabul edilmiştir(8). Ψ_1 dalga fonksiyonu ile ρ^2 ve $|z_e - z_h|$ 'nin beklenen değerlerini hesaplayabiliriz. Bunun yanında N_1 normalizasyon sabiti,

$$N_1 = \sqrt{\frac{8}{L^2 \lambda_1^2 \pi}} \quad (2.5.14)$$

olarak hesaplanır. Şimdi ρ^2 ve $|z_e - z_h|$ 'nin beklenen değerlerini hesaplayalım:

$$\langle \rho^2 \rangle = N_1^2 \int_{-L/2}^{L/2} \cos^2\left(\frac{\pi z_e}{L}\right) dz_e \int_{-L/2}^{L/2} \cos^2\left(\frac{\pi z_h}{L}\right) dz_h \int_0^{\infty} \rho^3 \exp(-2\rho / \lambda_1) d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \quad (2.5.15)$$

Bu işlemler yapıldığında,

$$\langle \rho^2 \rangle = \frac{3\lambda_1^2}{2} \quad (2.5.16)$$

bulunur(8).

$|z_e - z_h|$ 'in beklenen değeri ise,

$$\langle |z_e - z_h| \rangle = N_1^2 \int_0^{\infty} \rho^3 \exp(-2\rho / \lambda_1) d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-L/2}^{L/2} \cos^2\left(\frac{\pi z_e}{L}\right) \cos^2\left(\frac{\pi z_h}{L}\right) |z_e - z_h| dz_e dz_h$$

$$\langle |z_e - z_h| \rangle = \langle \Psi_1 | |z_e - z_h| | \Psi_1 \rangle = L \left[\frac{1}{3} - \frac{5}{4\pi^2} \right] \quad (2.5.17)$$

olarak hesaplanır.

Şimdi eksiton bağlanma enerjisini bulmaya çalışalım. Eksitonun taban durum enerjisinin,

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2L^2} \left\{ \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right\} \quad (2.5.18)$$

olduğu hatırlanırsa, eksiton bağlanma enerjisi (Taban durum= R_1^*);

$$R_1^* = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2L^2} \left\{ \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right\} - \{ \langle \Psi_1 | H_{exc} | \Psi_1 \rangle \}_{\lambda_1 \min} \quad (2.5.19)$$

olarak yazılır.

Nümerik Hesaplamalar İçin Gerekli Bilgiler;

Eksitonun taban durum bağlanma enerjisi hesaplanırken;

$$\begin{aligned} a^* &= \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_e^* e^2}, & a^* &= \frac{\hbar^2 \epsilon}{k m_e^* e^2} \\ R^* &= \frac{e^4 m_e^*}{2 \hbar^2 \epsilon^2}, & R^* &= \frac{k e^4 m_e^*}{2 \hbar^2 \epsilon^2} \end{aligned} \quad (2.5.20)$$

(CGS) (MKS)

eşitliklerinden yararlandık. Burada a^* ve R^* sırasıyla etkin Bohr yarıçapı ve etkin Rydberg enerjisidir (GaAs). GaAs için dielektrik sabiti " $\epsilon = 12.5$ ", elektronun etkin kütlesi " $m_e^* = 0.067 m_0$ " alınmıştır (m_0 durgun elektron kütlesidir). $k = 9 \cdot 10^9$, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ coulomb ve $m_0 = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg' dir. Bu değerlere göre a^* ve R^* ,

$$\begin{aligned} a^* &= 98,9 \text{ \AA} \\ R^* &= 5,83 \text{ meV} \end{aligned} \quad (2.5.21)$$

olarak hesaplanmıştır.

Eksiton Bohr yarıçapı (a_∞) ve Rydberg enerjisi (R_∞);

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mu} &= \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \\ a_\infty &= \frac{\hbar^2 \epsilon}{k \mu e^2} \\ R_\infty &= k^2 \frac{e^4 \mu}{2 \hbar^2 \epsilon^2}\end{aligned}\quad (2.5.22)$$

eşitlikleriyle bulunur. Burada " μ " indirgenmiş kütle ve $m_h^* = 0,45 m_0$ boşluğun (deşğin) etkin kütesidir. Bu eşitlikler hesaplanırsa;

$$\begin{aligned}\mu &= 5,3127 \cdot 10^{-32} \text{ kg} \\ a_\infty &= 113,6 \text{ \AA} \\ R_\infty &= 5,0842 \text{ meV}\end{aligned}\quad (2.5.23)$$

bulunur. Bu hesaplamalar yapıldığına göre şimdi **eksiton hamiltonienini** (H_{exc}) açık bir şekilde yazalım(13);

$$H_{\text{exc}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2}{dz_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \frac{d^2}{dz_h^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (2.5.24)$$

Burada çok büyük ve çok küçük sayılarla uğraşmamak için indirgenmiş atomik birim sistemini **eksiton hamiltonieninde (veya Schrödinger denkleminde)**

kullanalım. Burada $\frac{\hbar^2}{2\mu} = 1$ alındığında;

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m_e^*} &= 0,870403 \\ \frac{\hbar^2}{2m_h^*} &= 0,129593\end{aligned}\quad (2.5.24)$$

değerleri bulunmuştur. Buna göre eksiton hamiltonienini;

$$H_{exc} = -(0,870403) \frac{d^2}{dz_s^2} - (0,129593) \frac{d^2}{dz_h^2} - \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z_s - z_h)^2}} \quad (2.7.25)$$

şeklinde yazarız. Buna göre indirgenmiş atomik birim sisteminde eksitonun taban durum bağlanma enerjisi (R_1^* / R_∞);

$$\frac{R_1^*}{R_\infty} = \left[\frac{\hbar^2 \pi^2}{2L^2} \left\{ \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right\} - \left\{ \langle \Psi_1 | H_{exc} | \Psi_1 \rangle \right\}_{\lambda_1, \min} \right] \frac{1}{R_\infty} \quad (2.5.26)$$

olur. Bu yapılan işlemlerin aynısı Ψ_2 deneme fonksiyonuyla yapıldığında ise eksitonun bağlanma enerjisi (R_2^* / R_∞);

$$\frac{R_2^*}{R_\infty} = \left[\frac{\hbar^2 \pi^2}{2L^2} \left\{ \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right\} - \left\{ \langle \Psi_2 | H_{exc} | \Psi_2 \rangle \right\}_{\lambda_2, \min} \right] \frac{1}{R_\infty} \quad (2.5.27)$$

olarak yazılır.

Eksitonun taban durumdaki bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği (Ψ_1 ve Ψ_2 için), 3.Bölümde şekil(3.24)' de gösterilmiştir.

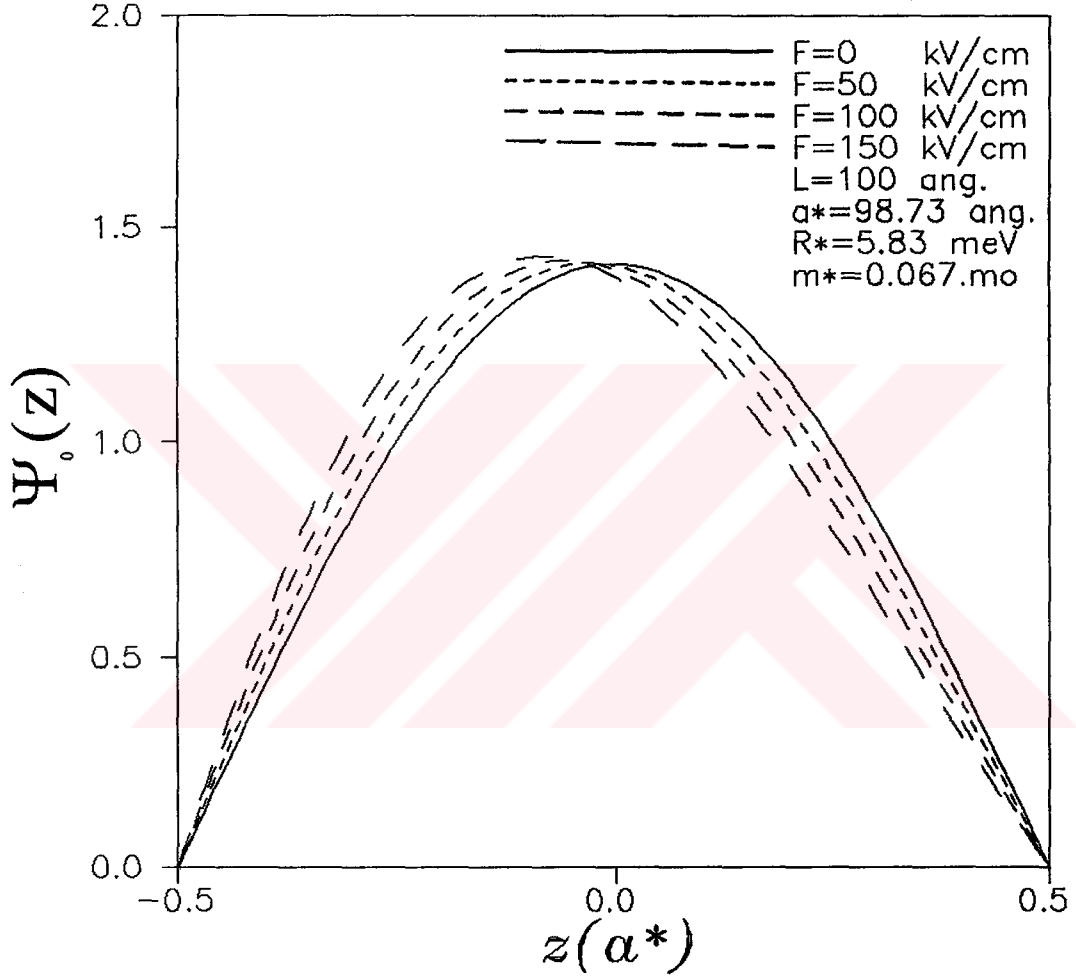
Sonuç olarak "L" sıfıra yaklaşırken, hem Ψ_1 ve hemde Ψ_2 için R^* bağlanma enerjisi $4R_\infty$ ' a yaklaşmaktadır(8). λ_1 ve λ_2 deneme parametreleri $\frac{1}{2}a_\infty$ 'a yaklaşır.

Burada $a_\infty = \frac{\hbar^2 \epsilon}{\mu e^2}$ ve $R_\infty = \frac{e^4 \mu}{2\hbar^2 \epsilon^2}$ dir. $L \leq 1,48a_\infty$ için her iki Ψ_1 ve Ψ_2 deneme fonksiyonları hemen hemen aynı bağlanma enerjisi sonucunu verir. L'nin bu sınır değerinden daha büyük değerlerde Ψ_2 deneme fonksiyonu daha iyi sonuç verir ve "L"nin büyük değerlerinde $R^* = R_\infty$ sınırına ulaşır. Ayrıca büyük L' lerde λ_1 iraksarken λ_2 sonlu değerde kalır.

3.BÖLÜM

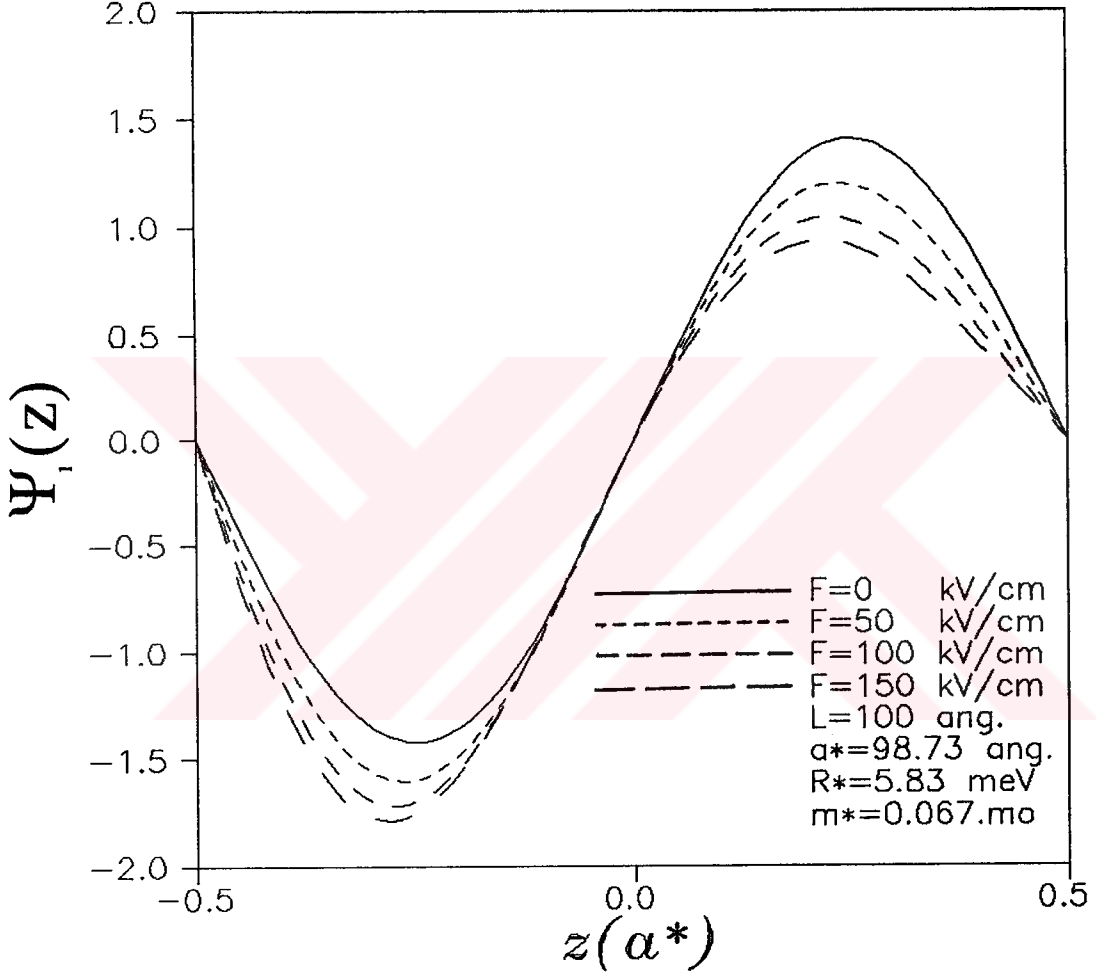
**NÜMERİK HESAPLAMALAR SONUCUNDA ÇİZİLEN
GRAFİKLER**

**BU GRAFİKLER BİLGİSAYARDA FORTRAN-77 DİLİNDE
YAZILAN PROGRAMLARLA ÇİZİLMİŞTİR.**



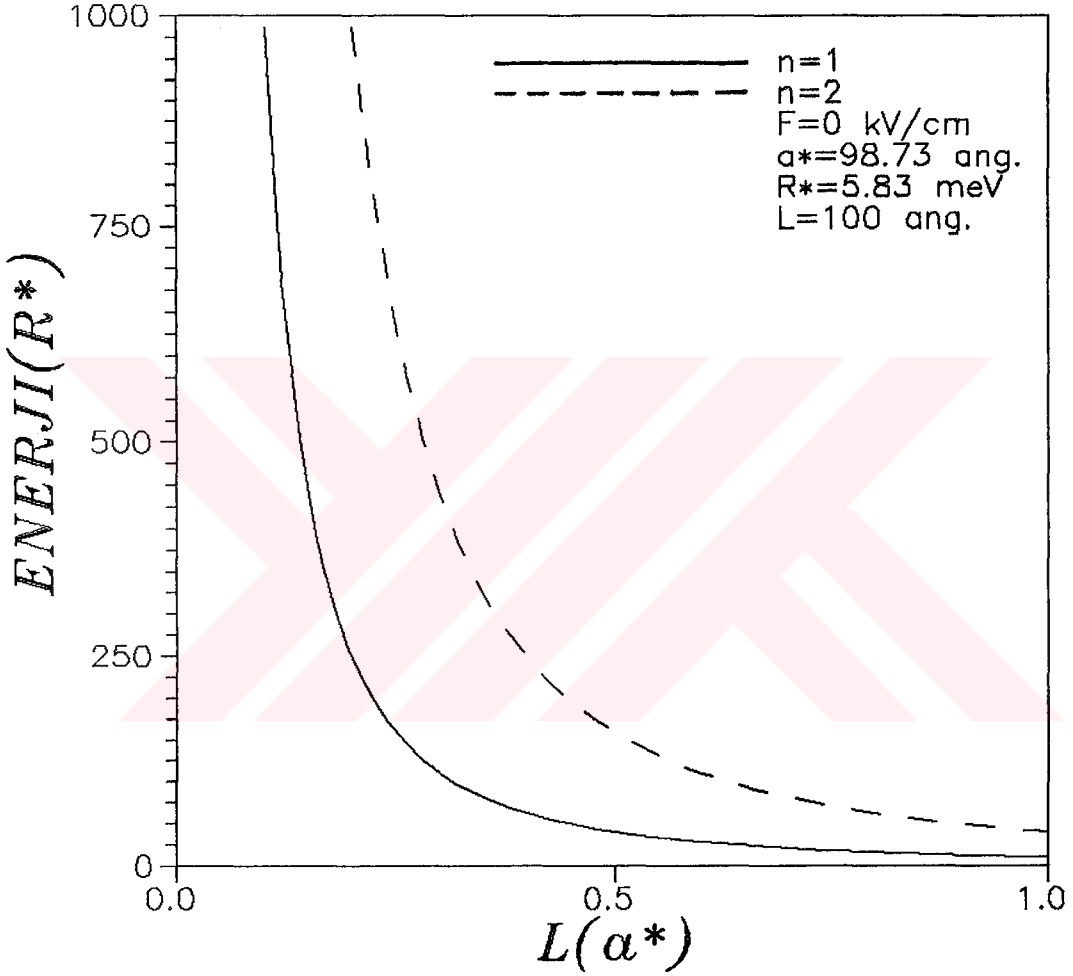
ŞEKİL(3.1).

Simetrik sonsuz potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun (F elektrik alan şiddeti olmak üzere) taban durum dalga fonksiyonunun $Z(a^*)$ 'a göre değişimini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



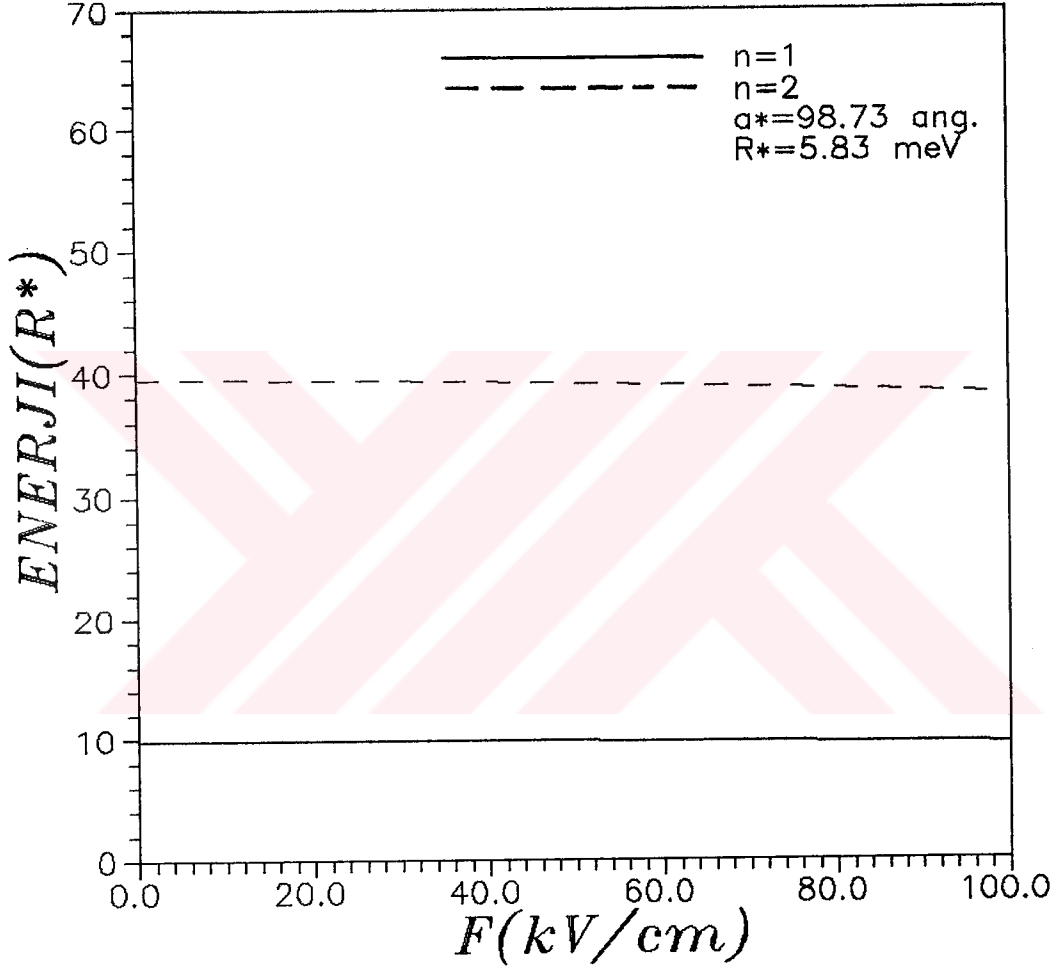
ŞEKİL(3.2).

Simetrik sonsuz potansiyel kuyusuna hapsedilen bir elektronun (F elektrik alan şiddeti olmak üzere) birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonunun $Z(a^*)$ 'a göre değişimini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



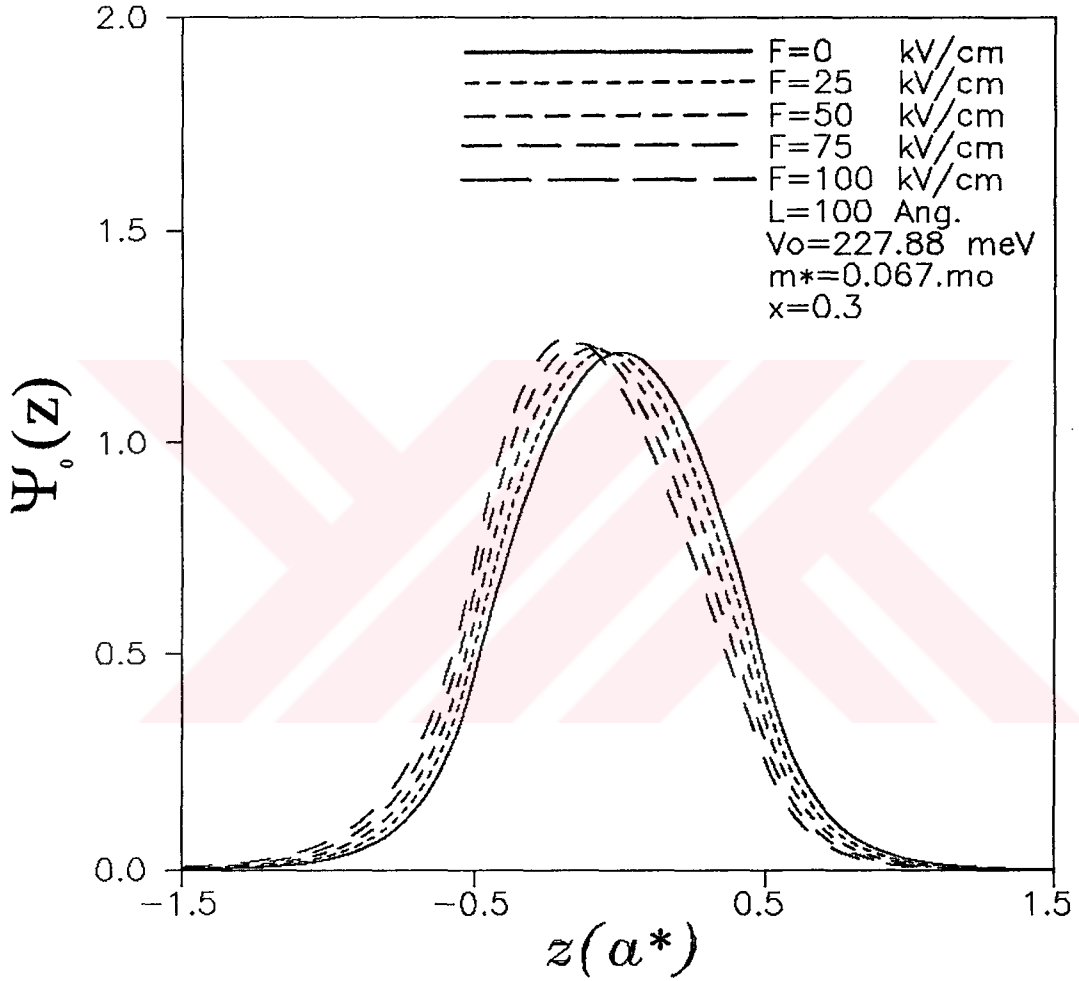
ŞEKİL(3.3).

Simetrik sonsuz potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum enerjisinin ve birinci uyarılmış durum enerjisinin kuyu genişliğine göre nasıl değiştiğini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



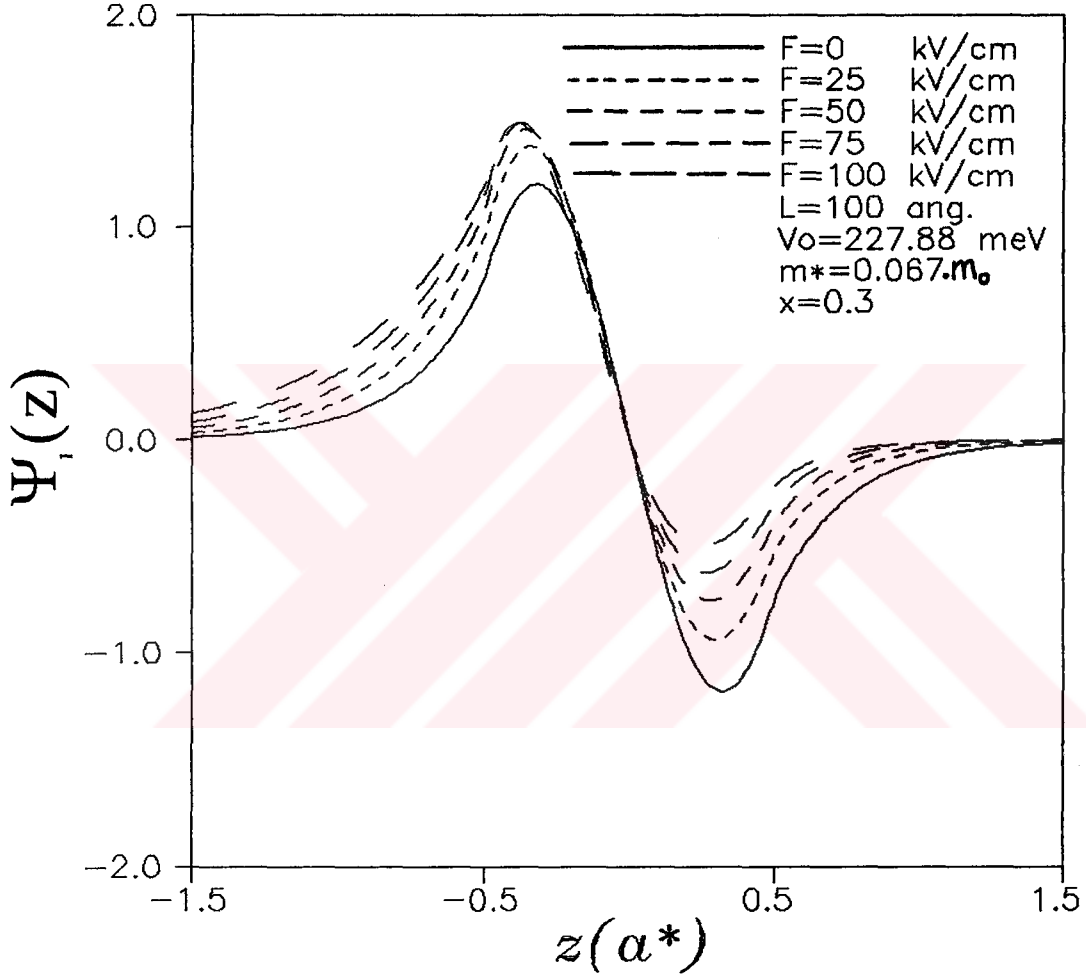
ŞEKİL(3.4).

Simetrik sonsuz potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun (F elektrik alan şiddeti olmak üzere) taban durum enerjisinin ve birinci uyarılmış durum enerjisinin elektrik alan şiddetine göre nasıl değiştiğini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



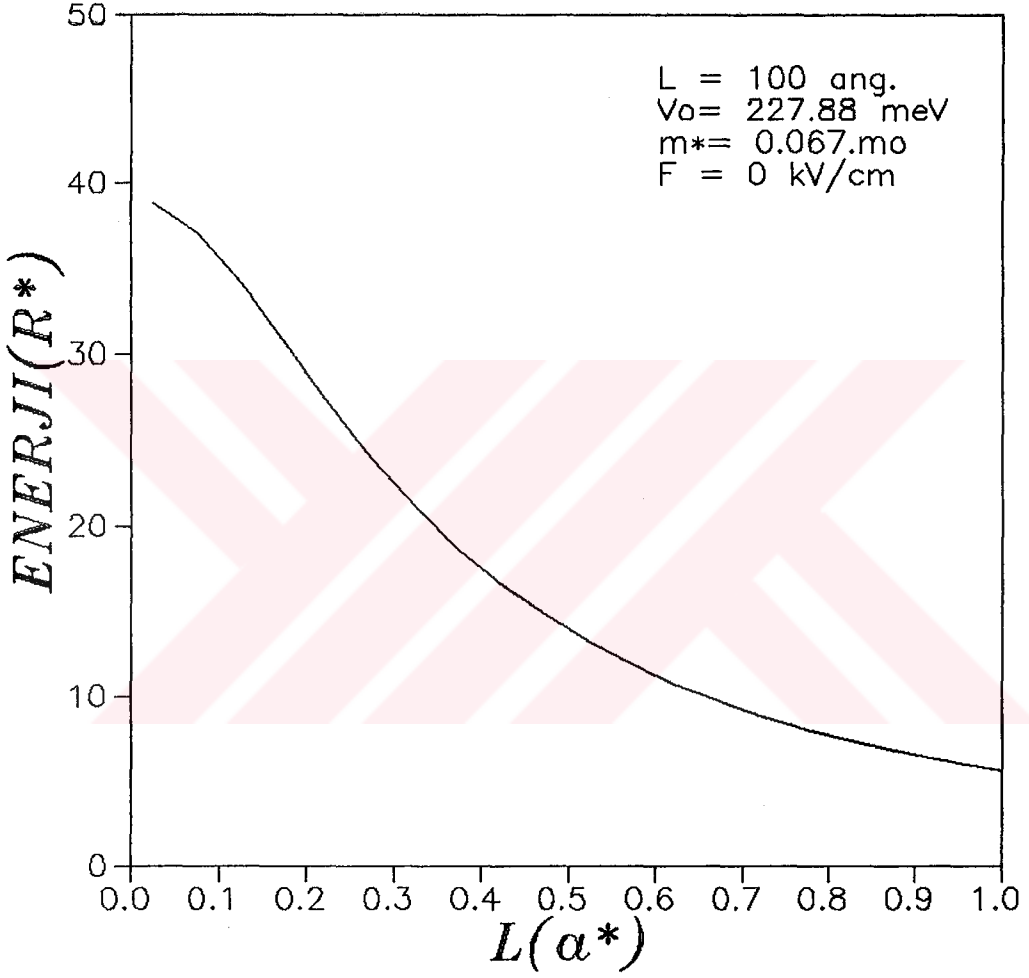
ŞEKİL(3.5).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun (F elektrik alan şiddeti olmak üzere) taban durum dalga fonksiyonunun $Z(a^*)$ 'a göre değişimini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



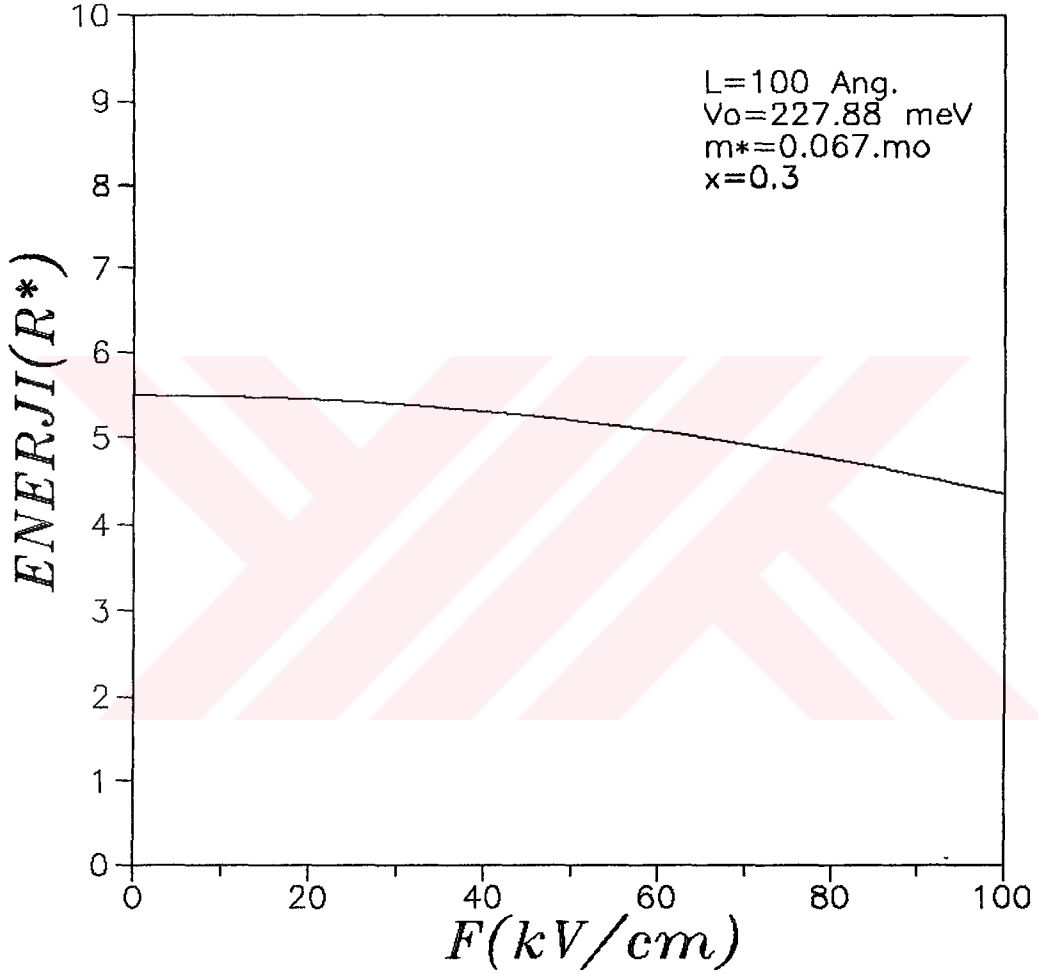
ŞEKİL(3.6).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun (F elektrik alan şiddeti olmak üzere) birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonunun $Z(\alpha^*)$ 'a göre değişimini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



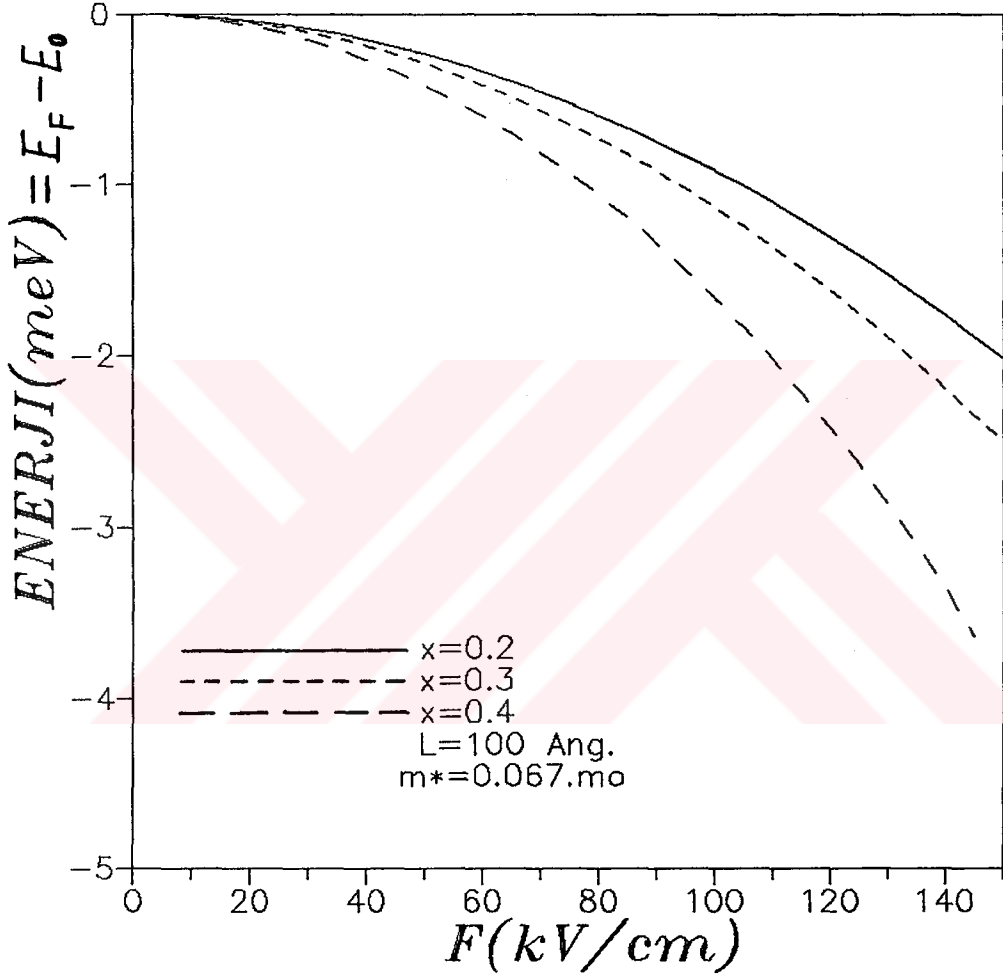
ŞEKİL(3.7).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum enerjisinin kuyu genişliğine göre nasıl değiştiğini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



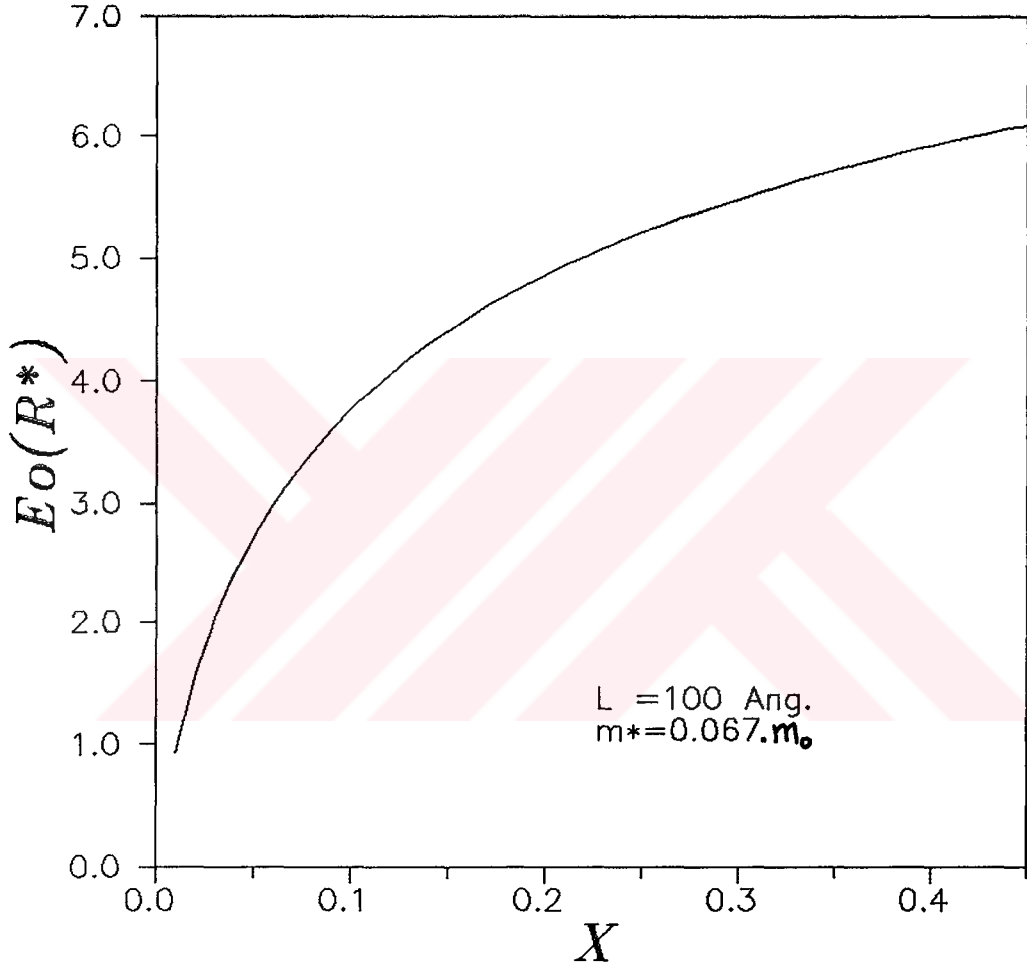
ŞEKİL(3.8).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun (F elektrik alan şiddeti olmak üzere) taban durum enerjisinin elektrik alan şiddetine göre nasıl değiştiğini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



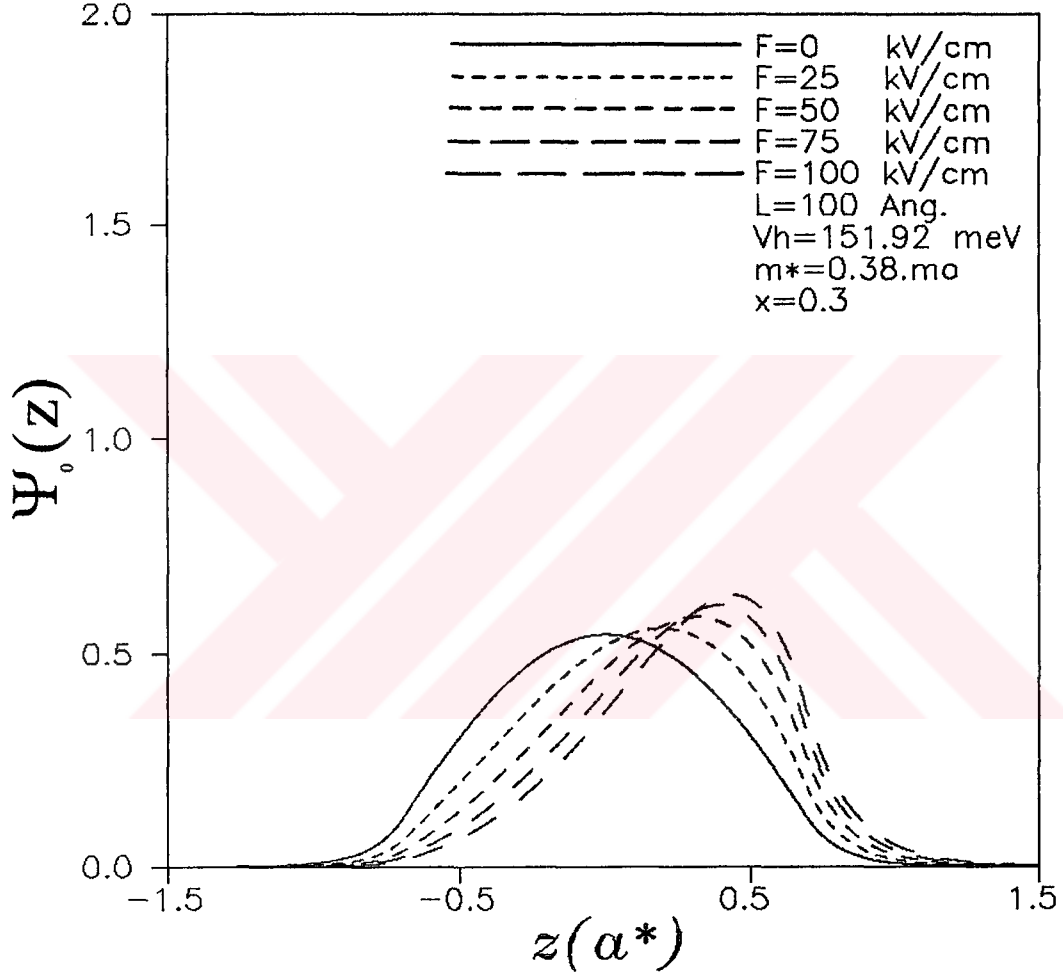
ŞEKİL(3.9).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun elektrik alan şiddeti etkisinde iken sahip olduğu enerjisi ile elektrik alan yokken sahip olduğu enerjisi arasındaki farkın, elektrik alan şiddetine göre (F) nasıl değiştiğini gösteren grafik (varyasyon Yöntemi).



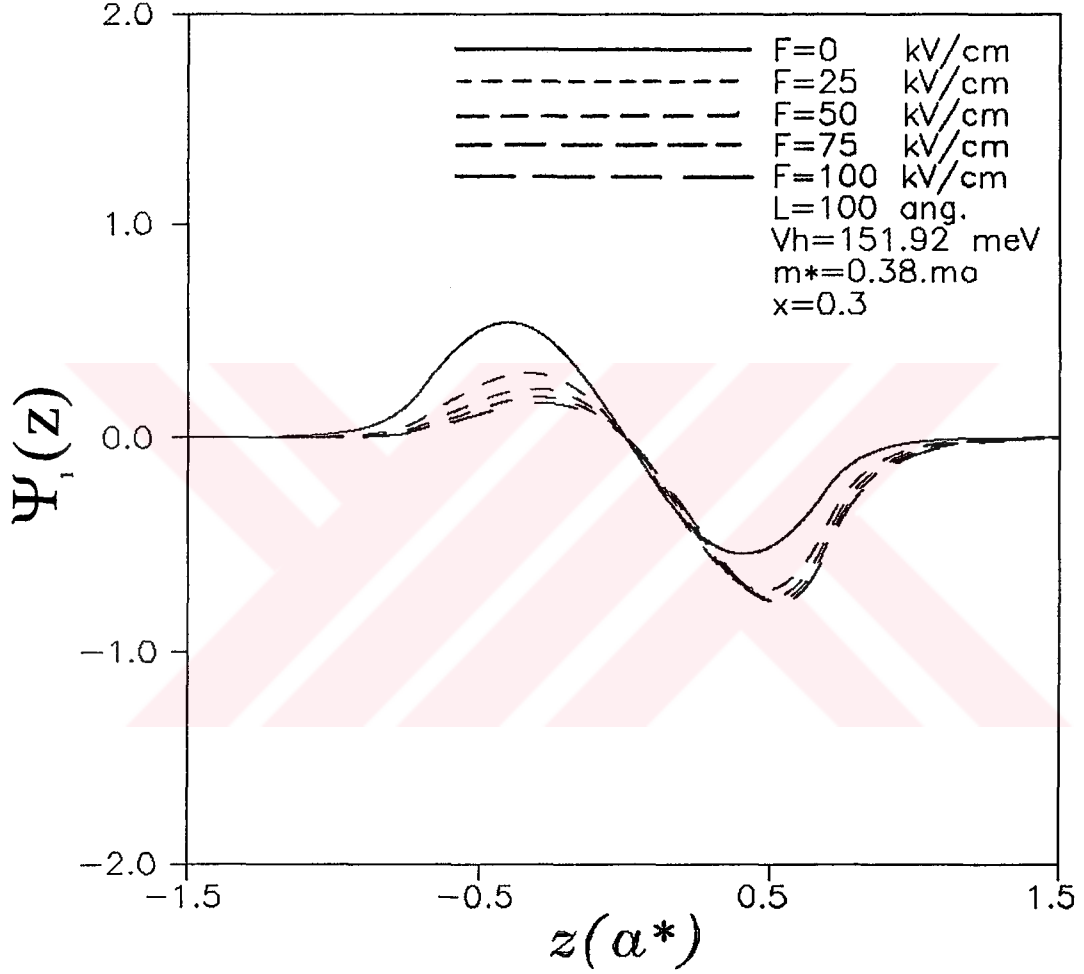
ŞEKİL(3.10).

$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{GaAs}$ ile oluşturulan simetrik bir kuantum kuyusu içine hapsedilen elektronun taban durum enerjisinin " x "e (Aliminyum miktarına) göre nasıl değiştiğini gösteren grafik(varyasyon Yöntemi).



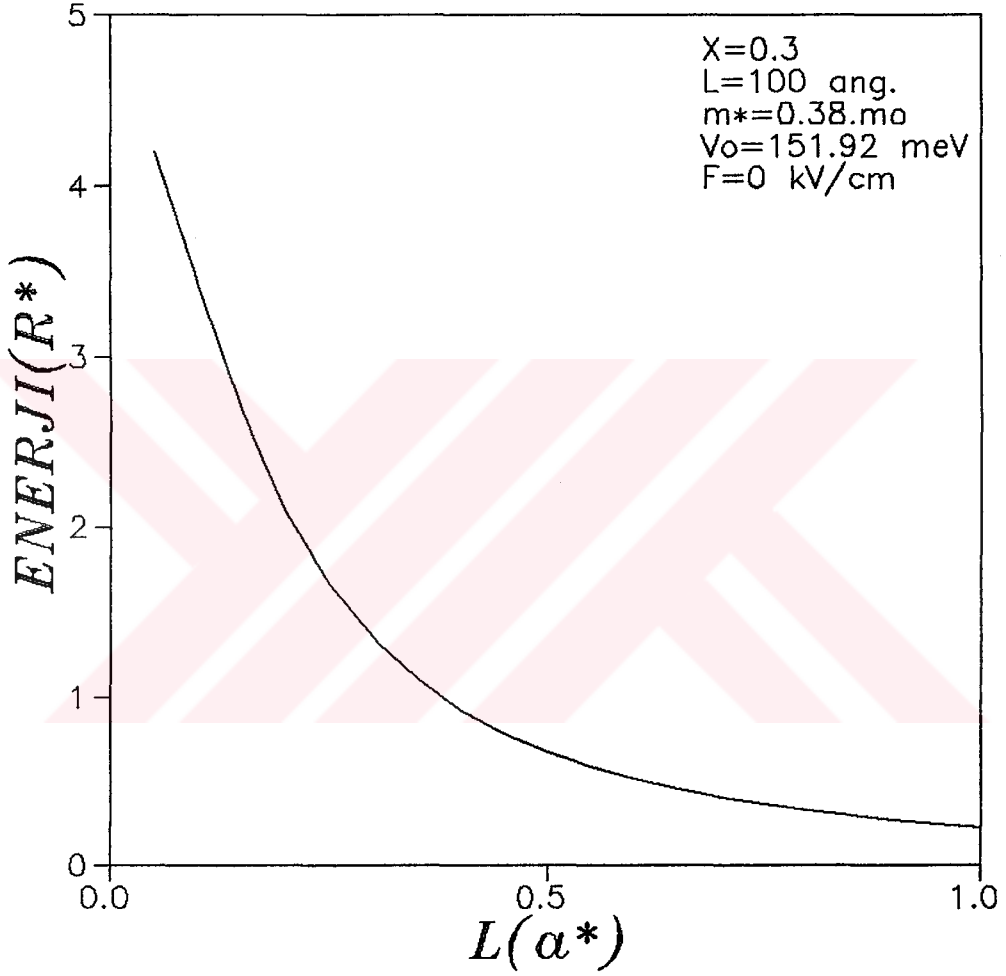
ŞEKİL(3.11).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir deşğin(boşluk-hole) taban durum dalga fonksiyonunun $Z(a^*)$ 'a göre deęişimini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi). F elektrik alan şiddetidir.



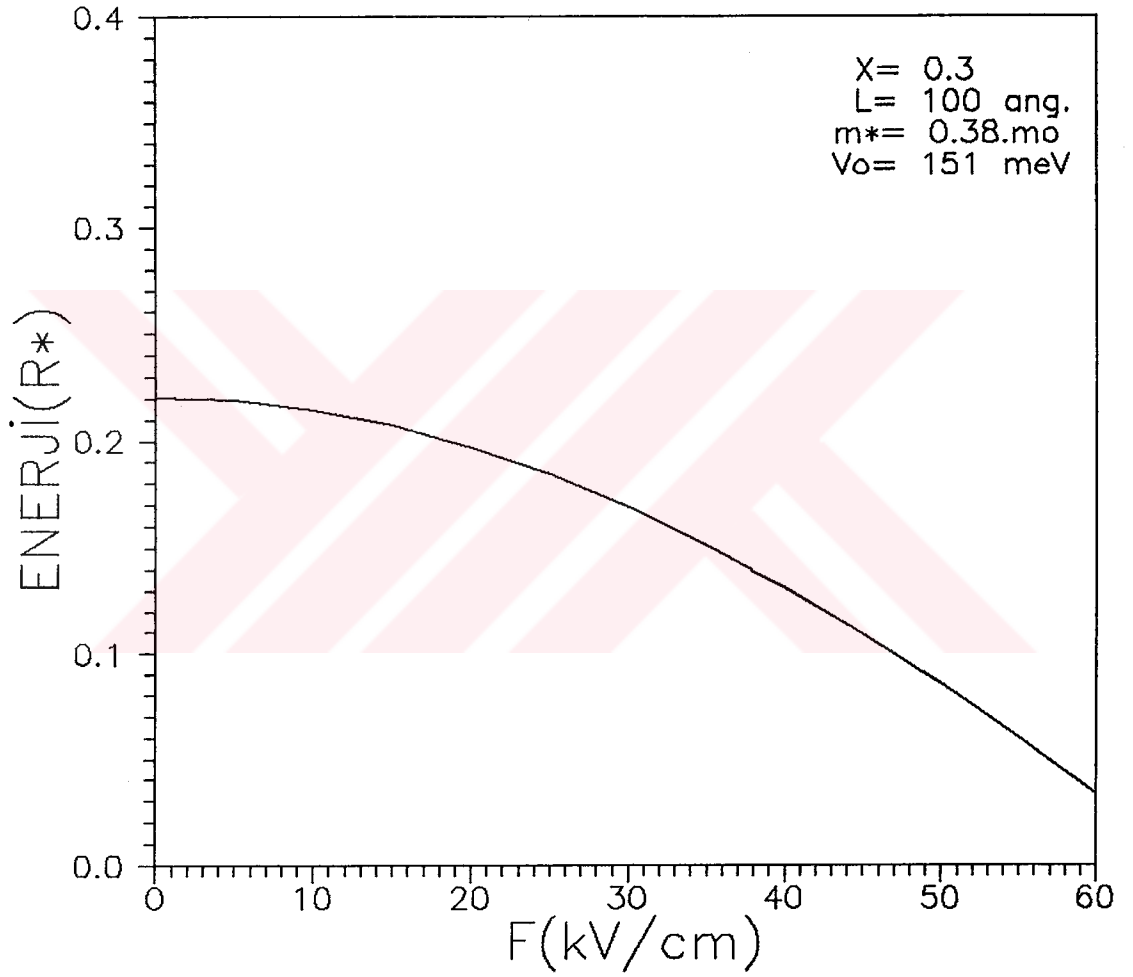
ŞEKİL(3.12).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir deşğin(boşluk-hole) birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonunun $Z(a^*)$ 'a göre deęişimini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi). F elektrik alan şiddetidir.



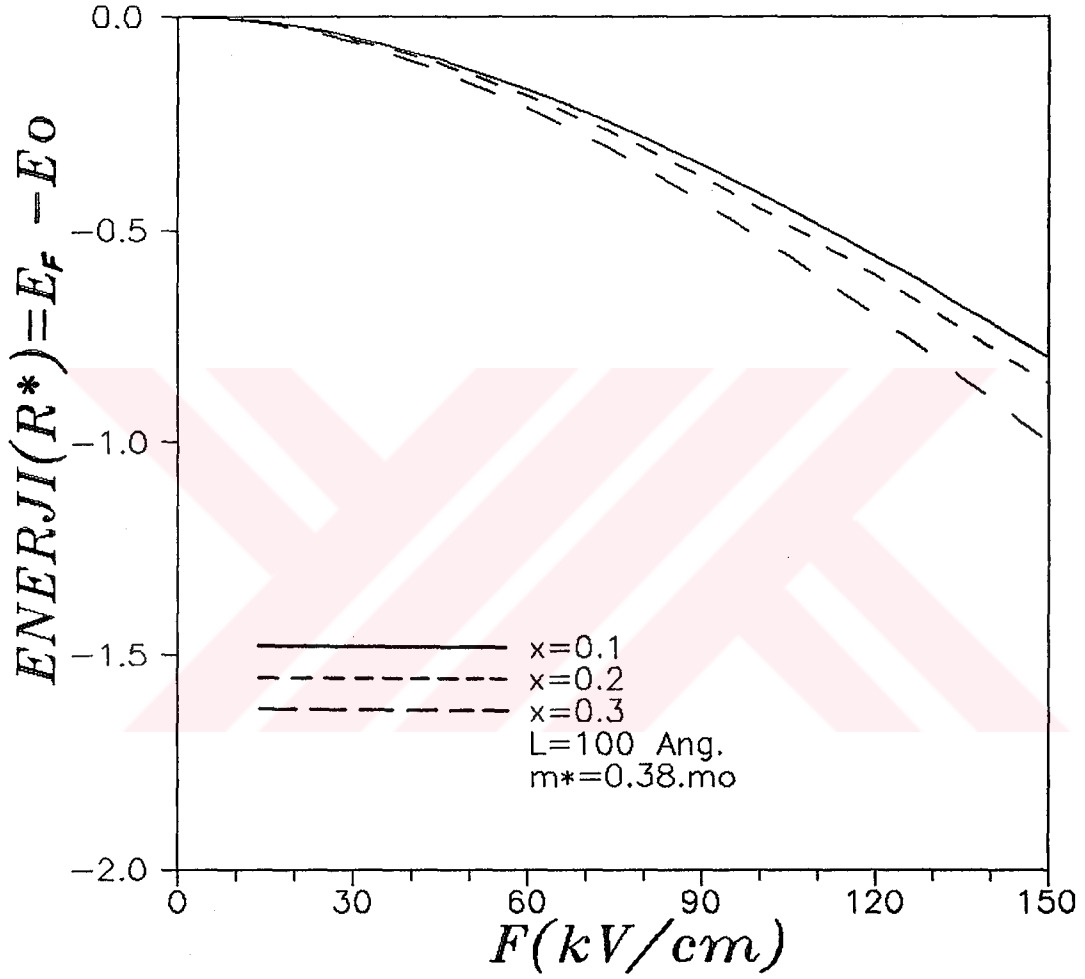
ŞEKİL(3.13).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir deşğin(boşluk-hole) taban durum enerjisinin kuyu genişliğine göre nasıl deęiştđini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



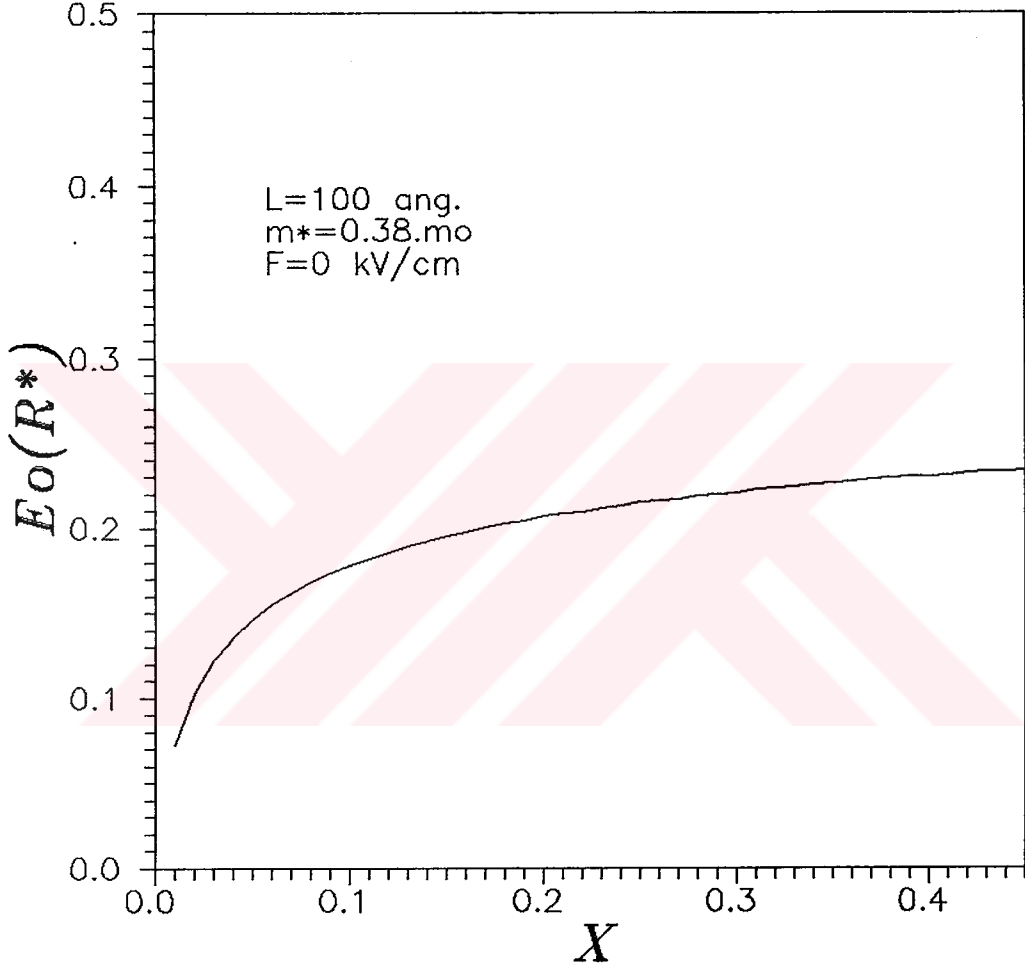
ŞEKİL(3.14).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir deşğin(boşluk-hole) (F elektrik alan şiddeti olmak üzere) taban durum enerjisinin elektrik alan şiddetine göre nasıl deđiştđđini gösteren grafik(Varyasyon Yöntemi).



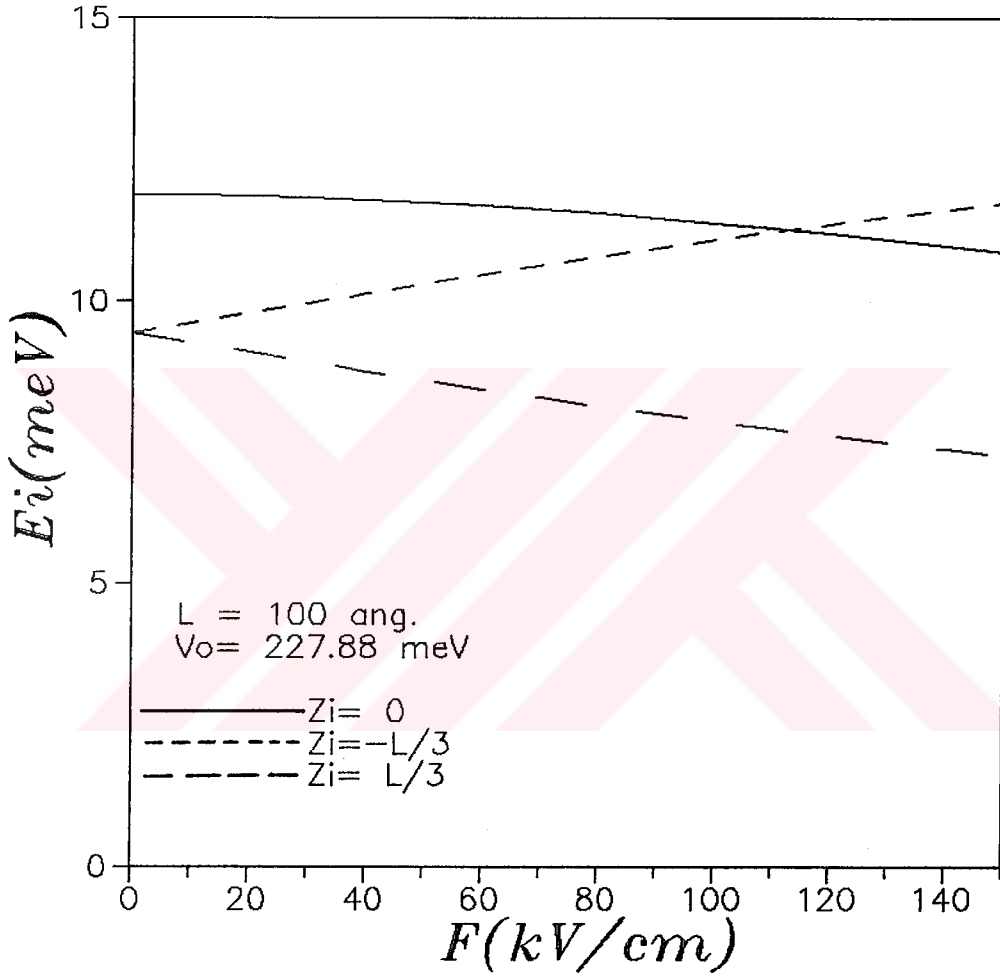
ŞEKİL(3.15).

Simetrik sonlu potansiyel kuyusuna hapsedilen bir deşğin(boşluk-hole), elektrik alan şiddeti etkisinde iken sahip olduđu enerjisi ile elektrik alan yokken sahip olduđu enerjisi arasındaki farkın, elektrik alan şiddetine göre(F) nasıl deđiştđini gösteren grafik(varyasyon Yöntemi).



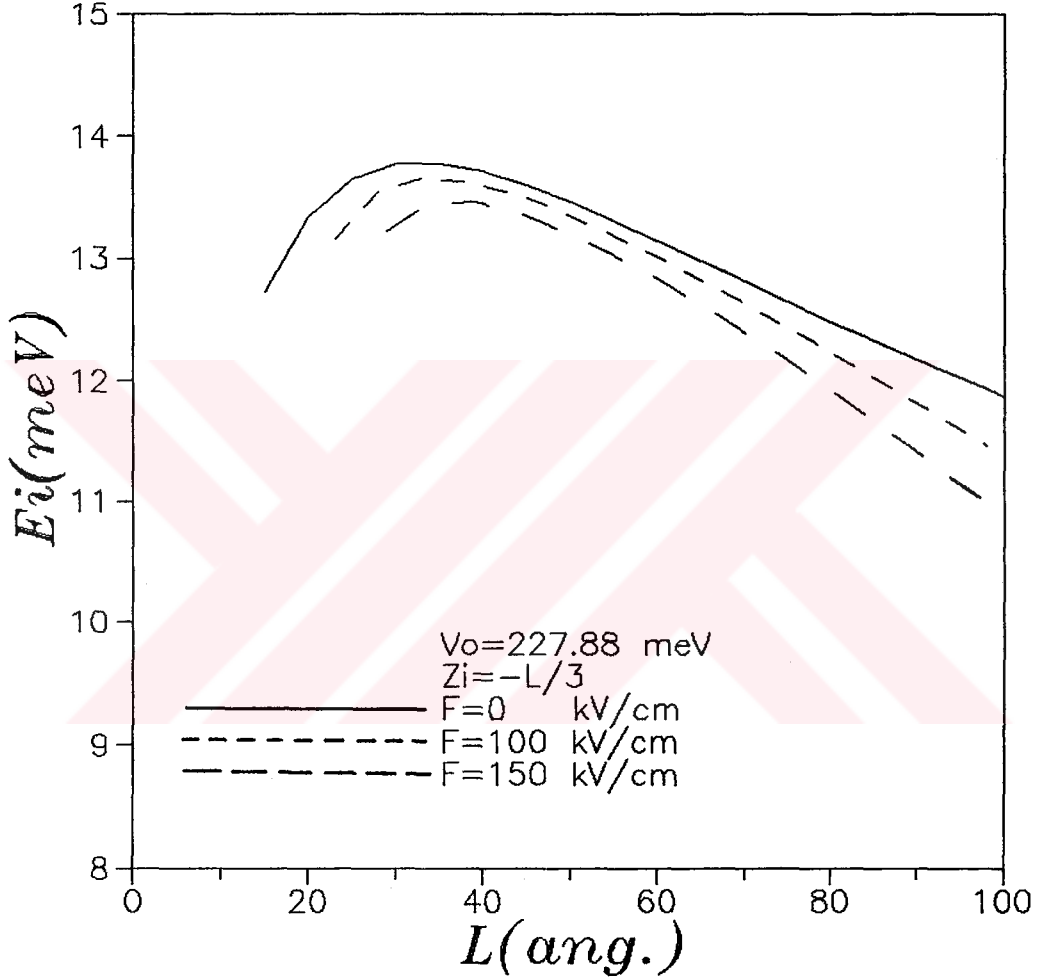
ŞEKİL(3.16).

$Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs$ ile oluşturulan simetrik bir kuantum kuyusu içine hapsedilen deşğin(boşluk-hole) taban durum enerjisinin "x"e (Aliminyum miktarına) göre nasıl deęiştiiğini gösteren grafik(varyasyon Yöntemi).



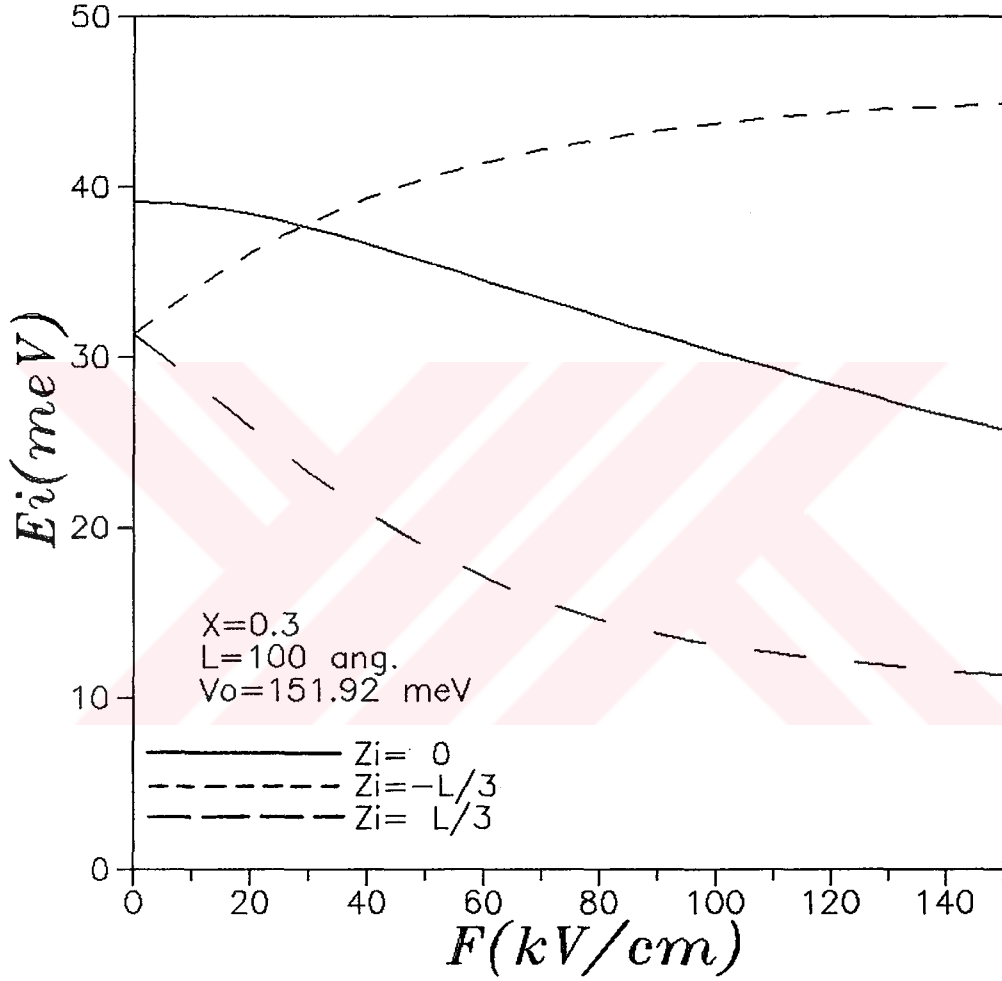
ŞEKİL(3.17).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektron ve bir yabancı atomun etkileşmesiyle oluşan elektronun bağlanma enerjisinin, çeşitli pozisyonlarda(Z_i) elektrik alan şiddetine(F) göre değişimini gösteren grafik(varyasyon Yöntemi).



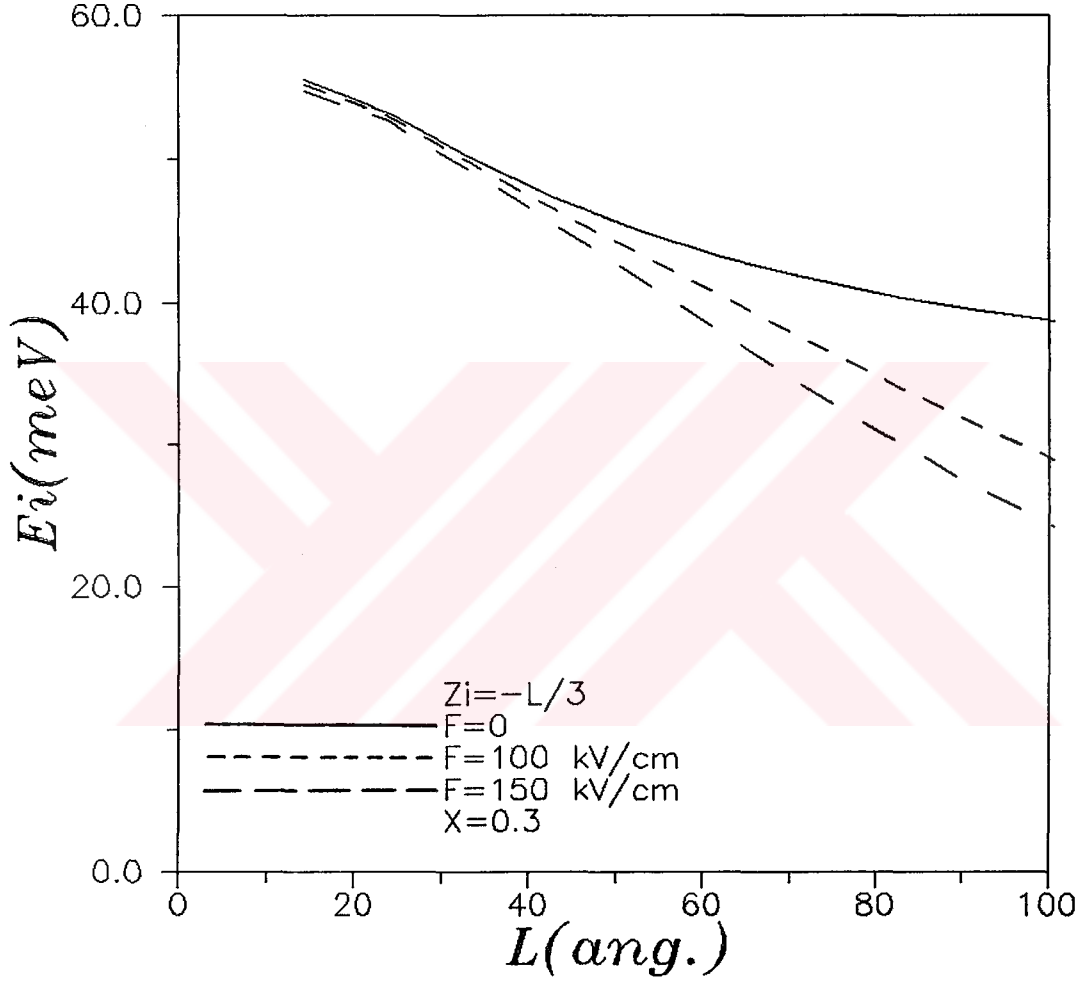
ŞEKİL(3.18).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektron ve bir yabancı atomun etkileşmesiyle oluşan elektronun bağlanma enerjisinin, $F=0,100,150 \text{ kV/cm}$ şiddetindeki elektrik alan değerleri için $Z_i=-L/3$ pozisyonunda kuyu genişliğine göre nasıl değiştiğini gösteren grafik(varyasyon Yöntemi).



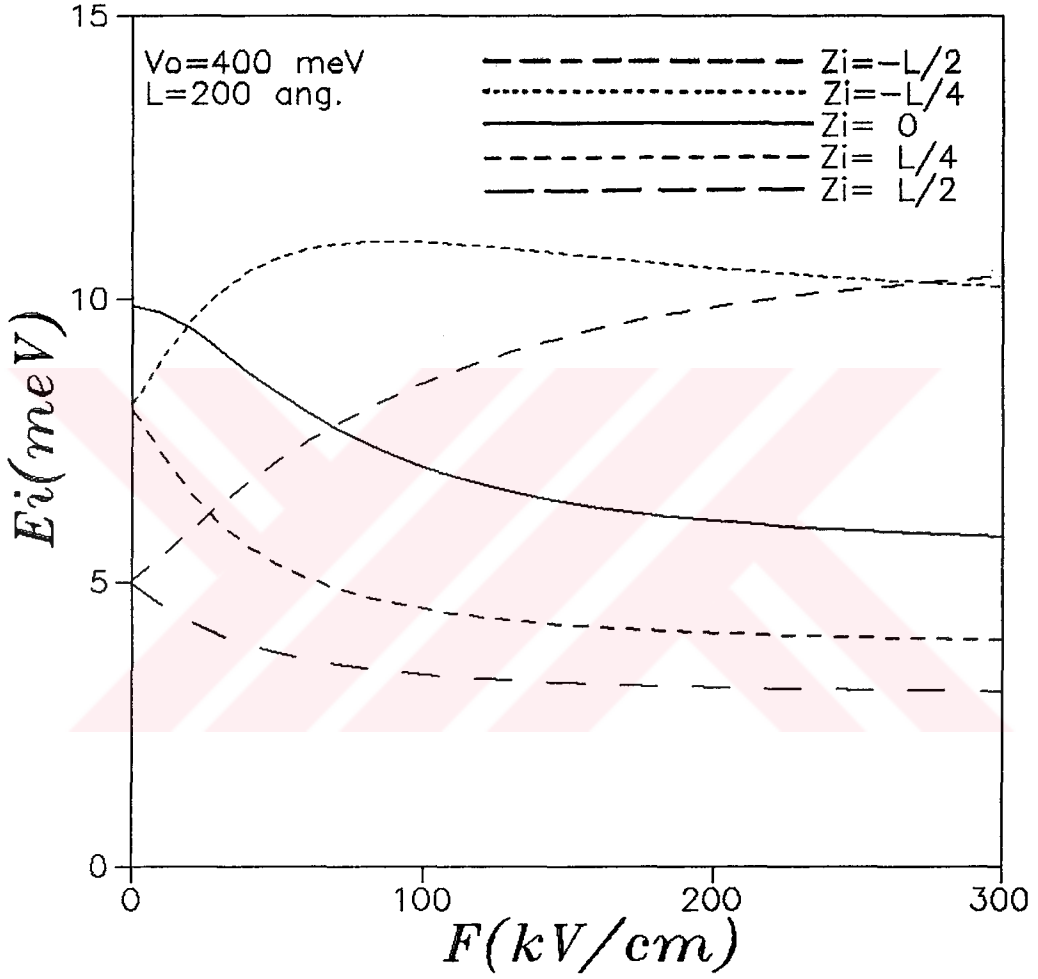
ŞEKİL(3.19).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir deşik(hole) ve bir yabancı atomun etkileşmesiyle oluşan deşiğin bağlanma enerjisinin, çeşitli pozisyonlarda(Z_i) elektrik alan şiddetine(F) göre değişimini gösteren grafik(varyasyon Yöntemi).



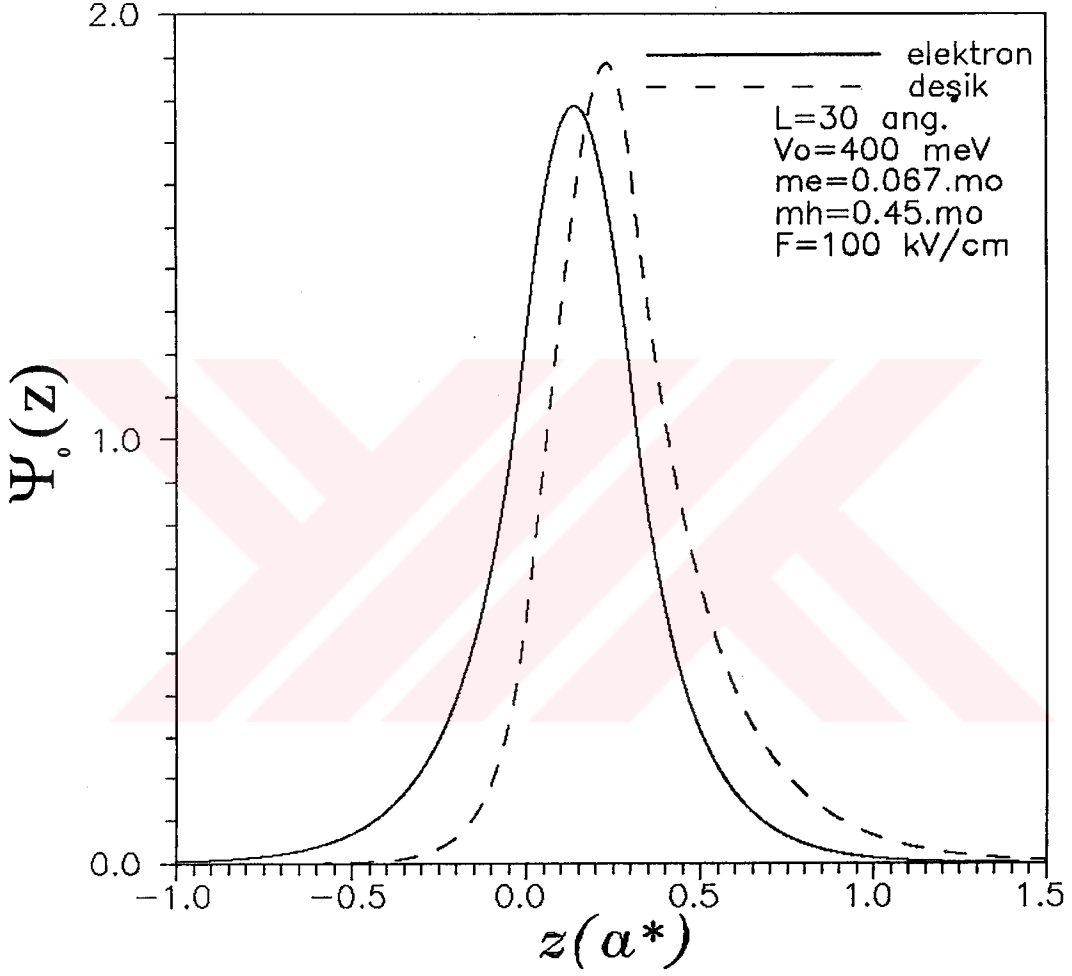
ŞEKİL(3.20).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir deşik(hole) ve bir yabancı atomun etkileşmesiyle oluşan deşik bağlanma enerjisinin, $F=0,100,150 \text{ kV/cm}$ şiddetindeki elektrik alan değerleri için $Z_i=-L/3$ pozisyonunda kuyu genişliğine göre nasıl değiştiğini gösteren grafik(varyasyon Yöntemi).



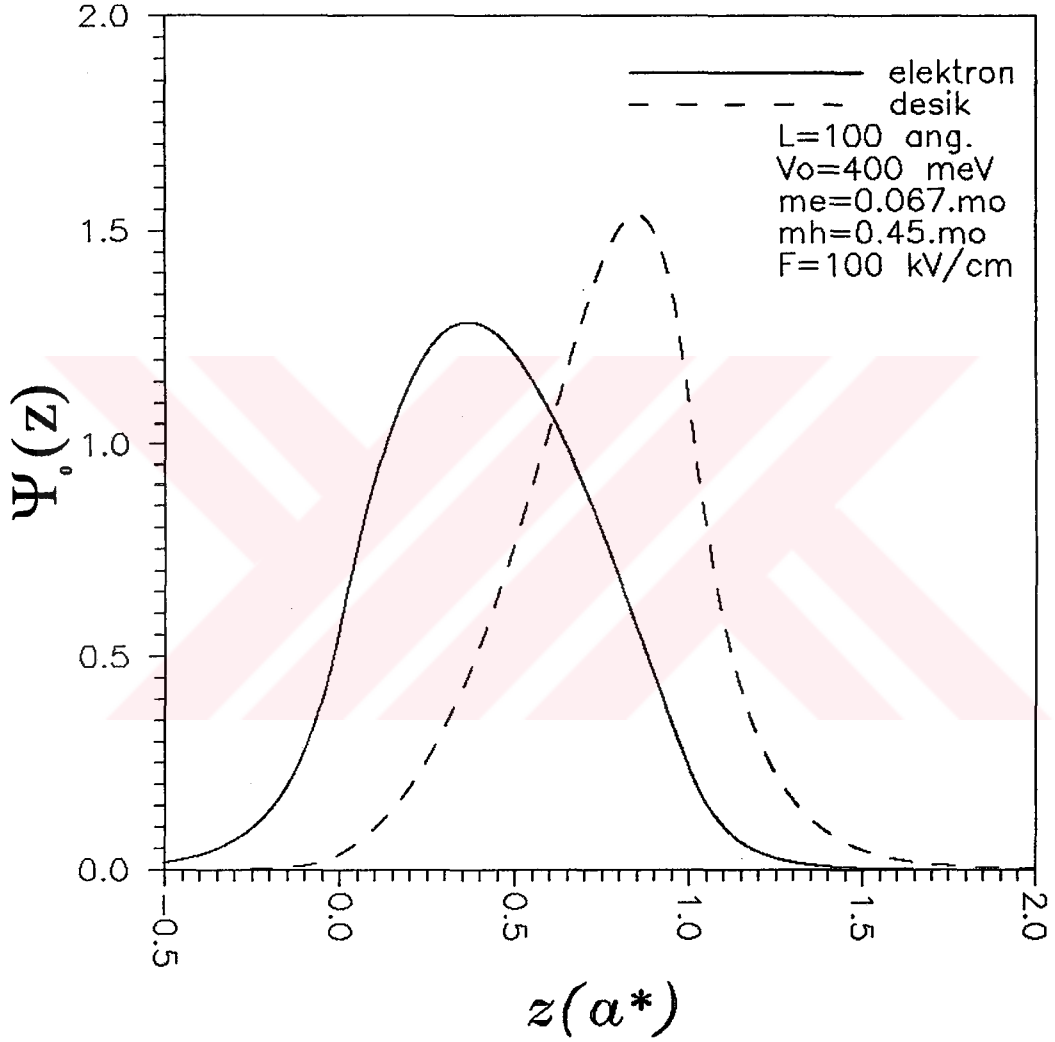
ŞEKİL(3.21).

Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektron ve bir yabancı atomun etkileşmesiyle oluşan elektronun bağlanma enerjisinin, "F" elektrik alanına göre değişimin gösteren grafik(varyasyon Yöntemi). $Z_i = -L/2, -L/4, 0, -L/4, L/2$ pozisyonları için çizilmiştir($L=200$ ang).



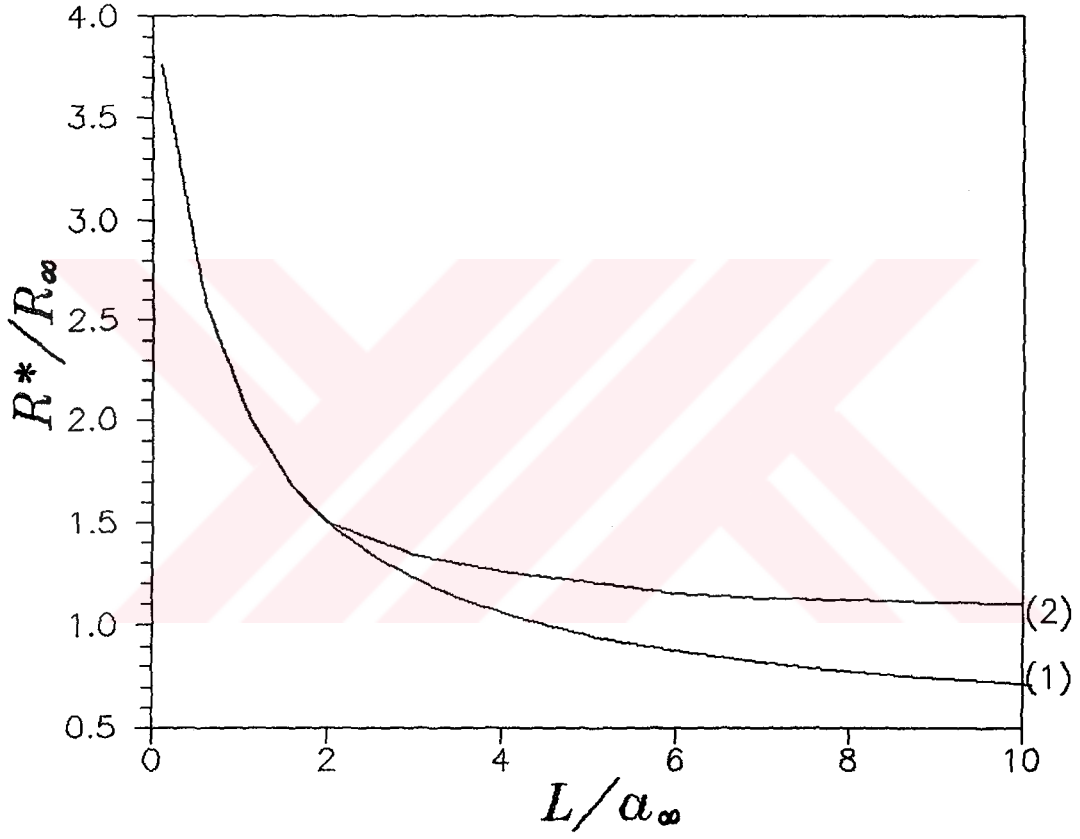
ŞEKİL(3.22).

Simetrik olmayan (L=30 ang.) sonlu kuantum kuyusu içinde bulunan bir elektron ve bir deşğin(elektron ve deşik etkileşmemektedir, ayrı ayrı düşünülmüştür) F=100 kV/cm şiddetindeki elektrik alanının etkisinde bulunan taban durum dalga fonksiyonlarının karşılaştırılması(varyasyon Yöntemi).



ŞEKİL(3.23).

Simetrik olmayan ($L=100$ ang.) sonlu kuantum kuyusu içinde bulunan bir elektron ve bir deşğin(elektron ve deşik etkileşmemektedir, ayrı ayrı düşünölmüştür) $F=100$ kV/cm şiddetindeki elektrik alanın etkisinde bulunan taban durum dalga fonksiyonlarının karşılaştırılması(varyasyon Yöntemi).



ŞEKİL(3.24).

Elektron-ağır deşik eksitonunun Ψ_1 ve Ψ_2 deneme dalga fonksiyonlarıyla bulunan bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre nasıl değiştiğini gösteren grafik(varyasyon Yöntemi). Çalışılan kuyu simetrik sonsuz potansiyel kuyusudur.

SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmanın ilk aşamasında sonlu ve sonsuz kuantum kuyularında hapsedilmiş bir elektronun "E" enerjileri ($E < V_0$) ve Ψ dalgafonksiyonları bilgisayar yardımıyla (Fortran 77) elektrik alan yokken ve elektrik alan varken (varyasyon yöntemi) hesaplanmıştır. Sonsuz ve sonlu kuantum kuyuları için Ψ dalgafonksiyonlarının sonuçları sırası ile şekil(3.1-2) ve şekil(3.5-6)'da verilmiştir. Bu şekillerden görüldüğü gibi elektrik alanın Ψ dalgafonksiyonunu kendi büyüklüğü ile doğru orantılı olarak sola doğru kaydırıldığı gözlenmiştir.

"F" elektrik alanının sıfır olması halinde her iki kuyuda (sonsuz ve sonlu) enerjinin "L" kuyu genişliğine bağlılığı şekil(3.3) ve (3.7)'de verilmiştir. Bu şekillerde, "L" kuyu genişliği arttıkça enerjinin küçüldüğü görülmektedir. Küçük "L"lerde enerjideki düşüş sonsuz kuantum kuyusunda daha hızlı olmaktadır, büyük "L" değerlerinde enerjideki azalma bir doyuma gitmektedir.

$L = 100 \text{ \AA} = 1.0 \times 10^{-8} \text{ cm}$ için $0 \leq F \leq 100 \text{ kV/cm}$ şiddetlerindeki "F" elektrik alanının elektron enerjisine etkisi şekil(3.4) ve (3.8)'de verilmiştir. Her iki kuyuda enerji artan elektrik alanla azalmıştır. Küçük elektrik alanlarda azalma çok az, yaklaşık 50 kV/cm'den büyük elektrik alanlarda enerji azalması daha fazla olmuştur. Bu azalma iki şekil karşılaştırıldığında sonlu kuantum kuyusunda daha fazla olduğu görülmüştür ($L=100 \text{ \AA}$).

Sonlu kuyuda V_0 kuyu derinliğinin üç farklı aliminyum miktarında hesaplanan değeriyle, "F" elektrik alanının elektronun taban durum enerjisine etkisi şekil(3.9)'da verilmiştir. Bu etki " $E_F - E_0$ " şeklinde "F" nin büyüklüğüne bağlı olarak göz önüne alındığında, " $E_F - E_0$ " ın artan "F" ile azaldığı ve en büyük "x" için bu azalmanın daha fazla olduğu görülmektedir. En büyük "x" (yani V_0) için enerjideki farkın diğer ikisine göre en düşük olduğu görülmektedir.

Şekil(3.10)'da, artan V_0 kuyu derinliğine yani artan "x" aliminyum miktarına karşı ($L=100 \text{ \AA}$ 'luk kuantum kuyusunda) " E_0 " elektron taban durum enerjisinin değişimi verilmiştir. Bu şekil, şekil(3.3) ile karşılaştırıldığında, şekil(3.10)'daki büyük "x" değerleri için enerjinin gideceği limitin sonsuz kuantum kuyusundaki (şekil(3.3)) $L=100 \text{ \AA}$ değeriyle aynı olacağı görülmektedir. Başka bir deyimle limit durumunda iki şekil uyum göstermektedir.

Yukarıda elektron için hesaplanan ve çizilen grafikler deşikler içinde tekrarlanmış ve sonuçlar şekil(3.11-12-13-14-15-16)'da verilmiştir. Elektron ve deşikler için bulunan sonuçlar, bir fark dışında benzerdir. Bu fark elektrik alan altındaki Ψ dalgafonksiyonlarında gözlenmiştir. "+z" yönünde uygulanan "F" elektrik alanı

elektronların Ψ dalgafonksiyonunu sola doğru kaydırırken,deşiklerin Ψ dalgafonksiyonunu sağa doğru kaydırmıştır. Bunun nedeni elektronların "-e",deşiklerin "+e" elektrik yüküne sahip olmalarıdır.

Çalışmanın ikinci aşamasında "+e" yüklü yabancı(donor) atomlu sonlu kuantum kuyusunda bir elektronun durumu "F" elektrik alanının etkisi altında donurun üç farklı konumu(pozisyonu) için incelenmiştir. Sonuçlar şekil(3.17-18-19-20)'de verilmiştir. Elektron enerjisinin "F" elektrik alanına bağlılığı üç farklı donör konumu için şekil(3.17)'de gösterilmiştir. Bu şekilden, $Z_i=0$ ve $Z_i=+L/3$ için elektron enerjisinin artan "F" elektrik alanı ile azaldığı, $Z_i=-L/3$ için arttığı görülmektedir. Benzer işlemlerdeşikler için şekil(3.19)'da verilmiş olup, sonuçların elektronlar için bulunan hesaplarla benzer olduğu görülmüştür. $Z_i=-L/3$ donör konumu için elektron vedeşik enerjisinin "L" kuyu genişliğine bağlılığı sırasıyla şekil(3.18) ve (3.20)'de verilmiştir. Küçük "L" kuyu değerleri hariç, enerjiler artan "L" ile azalmıştır. Her iki şekil üç farklı "F" elektrik alanı değeri için çizilmiştir. Sabit bir "L" değeri için büyük "F" değerlerinde "E" enerjisi küçük iken, küçük "F" değerlerinde "E" enerjisi büyüktür. Bu durum şekil(3.8) ve (3.14) ile uyum içindedir. Yabancı atomla ilgili son şeklimiz şekil(3.21)'de verilmiştir. Bu şekilde beş farklı donör konumu ve $L=200 \text{ \AA}$ için elektron enerjisinin "F" elektrik alanına bağlılığı verilmiştir.

Elektron vedeşığe ait ($F=100 \text{ kV/cm}$ şiddetindeki elektrik alanının etkisi altında) Ψ dalgafonksiyonları, iki farklı "L" değerli kuyuda sırası ile şekil(3.22) ve (3.23)'de gösterilmiştir. Sonuçlar daha önceki sonuçlarla uyum içindedir (şekil (3.5) ve (3.11)).

Çalışmanın üçüncü aşamasında elektron-ağırdeşik eksitonu için, eksiton bağlanma enerjisinin "L" kuyu genişliğine bağlılığı şekil(3.24)'te verilmiştir. Bu şekildeki bağlanma enerjisi;

$$\Psi_1 = N_1 \cos\left(\frac{\pi Z_e}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi Z_h}{L}\right) \exp(-\rho / \lambda_1)$$

ve

$$\Psi_2 = N_2 \cos\left(\frac{\pi Z_e}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi Z_h}{L}\right) \exp\left[-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}{\lambda_2}\right]$$

gibi iki farklı deneme dalgafonksiyonu ile hesaplanmıştır. Ψ_1 yaklaşımı Ψ_2 'ye göre basit fakat kaba bir yaklaşımdır. Hesaplamalarda kuantum kuyusunun sonsuz derinliği

kullanılmış olup, eksitonun bağlanma enerjisinin (artan "L" boyunca) küçük "L" lere kuantum kuyusunda bulunan elektron enerjisine benzer olarak azaldığı ve büyük "L" lere doğru bu azalmanın çok yavaşladığı gözlenmiştir.

Bu çalışmada hesaplanan bütün sonuçlar literatür ile uyum içerisindedir. Yaptığımız bu çalışma ikili ve üçlü kuyularda da tekrarlanabilir. İki ve üç boyutta hesaplamalar yapılabilir. Buna benzer bir problem olarakda kuantum telleri ve kuantum noktaları incelenebilir.



KAYNAKLAR

DOKÜMANTASYON MERKEZİ

- (1)- KÖKSAL.F., 1992, "Fenciler İçin Kuantum Kimyası", Samsun, s.27-32,173-175
- (2)- KARAOĞLU.B., 1993, "Kuantum Mekaniğine Giriş", İstanbul, s.62-64
- (3)- RAE.AIM., 1990, "Kuantum Mekaniği", Samsun, s.26-29
- (4)- KITTEL.C., 1996, "Katıhal Fizikine Giriş", İstanbul, s.157-160,224-229
(Çeviri: Bekir KARAOĞLU)
- (5)- BETANCUR.F.J., MIKHAULOV.I.D., 1994, "Simple trial function shallow donor D^0 states in GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well-structures", Coulombia, Phy.Rev.B, Vol.51, Num.8, s.4982
- (6)- BRANSDEN.B.H, JOACHAIN.C.J.,1989, "Atom ve Molekül Fizikçi", Samsun, (Çeviri: Fevzi KÖKSAL, Hasan GÜMÜŞ)
- (7)- BASTARD.G., MENDEZ.E.E., CHANG.L.L., ESAKI.L., 1983, "Variational calculations on quantum well in an electric field", New York, Phy.Rev.B, Vol.28, Num.6, s.3241
- (8)-BASTARD.G., MENDEZ.E.E., CHANG.L.L., ESAKI.L.,1982, "Exciton binding energy in quantum wells", New York, Phy.Rev.B, Vol.26, Num.6, s.197
- (9)-GOLDSTEIN.H., 1974, "Klasik Mekanik", Cambridge, s.70, Çev: Vural Cinemre
- (10)-PARK.D., 1992, "Introduction to the quantum theory third edition", s.183
- (11)-GASIOROWICZ.S., 1974, "Quantum Physics", s.144
- (12)-SPIROS.V., BRONIS and BAJAJ.K.K., 1992, "Calculation of the exciton binding energies type-II GaAs/AlAs quantum-well structures: Application of the perturbation-variational expansion method", Atlanta, Phy.Rev.B, Vol.45, Num.11, s.6271
- (13)-DUGGON.G., RALP.H.I., 1987, "Exciton binding energy in type-II GaAs-(Al,Ga)As quantum-well heterostructures", England, Phy.Rev.B, Vol.35, Num.8, s.4152
- (14)-CHAUDHURI.S., 1983, "Hydrogenic-impurity ground state in GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs multiple-quantum well structures, Dayton, Phy.Rev.B, Vol.28, Num.8, s.4480
- (15)-BRUM.J.A, PRIESTER.C., ALLON.G., 1985, "Electric field dependence of binding energy of shallow donors in GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells", France, Phy.Rev.B, Vol.32, Num.4, s.2378

ÖZGEÇMİŞ

1973 yılının ekim ayında Zonguldak'ın Çaycuma ilçesine bağlı Saltukova kasabasında doğmuşum. İlkokulu Saltukova İlkokulunda, ortaokul ve lise eğitimimi Saltukova Lisesinde tamamladım. 1990 yılında Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girdim ve 1994 yılının haziran ayında mezun oldum. Aynı yıl Trakya Üniversitesi Eğitim Fakültesi Sınıf Öğretmenliği Bölümü'nün açtığı araştırma görevlisi sınavını ve Trakya Üniversitesi Fen-Bilimleri Enstitüsü'nün açtığı yüksek lisans sınavını kazandım. Halen Trakya Üniversitesi Eğitim Fakültesi Sınıf Öğretmenliği Bölümü'nde araştırma görevlisi olarak çalışmaktayım.