

T.C
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**“Ga_{1-x}Al_xAs/AIAs TABANLI KUANTUM KUYULARINA HAPSEDİLMİŞ
OLAN ELEKTRONUN 1s ve 2s DURUMU:NÜMERİK HESAPLAMALAR**

KADER ÇETİNKAYA

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Danışman: Prof. Dr. İlhan ERDOĞAN

EDİRNE- 2021

Kader ÇETİNKAYA' nın hazırladığı **“Ga_{1-x}Al_xAs/AlAs Tabanlı Kuantum Kuyularına Hapsedilmiş Olan Elektronun 1s ve 2s Durumu: Nümerik Hesaplamalar”** başlıklı bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından Fen Bilimleri Anabilim Dalında bir **Yüksek Lisans tezi** olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri (Unvan, Ad, Soyad):

İmza

Prof. Dr. İLHAN ERDOĞAN

Prof. Dr. Aydın ULUBEY

Doç. Dr. METİN BİLGE

Tez Savunma Tarihi 13/01/2021

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

İmza

Danışman: Prof. Dr. İLHAN ERDOĞAN

Tez Danışmanı

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitü Onayı

Doç. Dr. Hüseyin Rıza Ferhat KARABULUT

Fen Bilimleri Enstitü Müdürü

YÜKSEK LİSANS PROGRAMI
T.Ü. FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ FİZİK ANABİLİM DALI
DOĞRULUK BEYANI

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada, tüm verilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini, kullanılan verilerde tahrifat yapılmadığını, tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını, kullanılan tüm literatür bilgilerinin bilimsel normlara uygun bir şekilde kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını ve bu tezin tamamı ya da herhangi bir bölümünün daha önceden Trakya Üniversitesi ya da farklı bir üniversitede tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

...../...../.....
Kader Çetinkaya

Yüksek Lisans Tezi

“Ga_{1-x}Al_xAs/AlAs Tabanlı Kuantum Kuyularına Hapsedilmiş Olan Elektronun 1s ve 2s Durumu: Nümerik Hesaplamalar”

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu çalışmada, Ga_{1-x}Al_xAs / GaAs malzemeleri ile oluşturulan kuantum kuyuları ele alınmıştır. Bu tür kuyulara hapsedilen bir elektronun, taban durum ve uyarılmış durum dalga fonksiyonları ile enerjileri hesaplanmıştır. Ele alınan malzeme ile oluşturulan kuantum kuyularına düzgün dış elektrik alan uygulanmış ve daha sonra yabancı atomun(safsızlık) ve hidrostatik basıncın etkisine bakılmıştır. Etkin kütle yaklaşımı göz önüne alınmış ve varyasyon yöntemi kullanılarak yaklaşık çözümler yapılmıştır. Literatür taraması yapıldıktan ve gerekli bilgiler elde edildikten sonra Fortran dilinde yazdığımız programlarla nümerik hesaplamalar yapılmış ve grafikler çizilmiştir. Hesaplamalar için yazılan Fortran programları da tezde sunulmuştur.

Sonuç tartışma bölümünde, bulunan sonuçlar değerlendirilmiştir. Kuantum kuyularında hapsedilen bir elektronun enerjilerine, dış elektrik alanın, yabancı atomun konumunun ve hidrostatik basıncın etkisi gözlemlenmiştir.

Yıl: 2021

Sayfa Sayısı:119

Anahtar Kelimeler: Yabancı atom, Elektrik alan, Kuantum kuyusu, Bağlanma enerjisi

Master's thesis

"1s and 2s State of Electron Confined to Ga_{1-x}Al_xAs / AlAs Based Quantum Wells:
Numerical Calculations"

Trakya Üniversitesi, institute of science

Department of Physics

SUMMARY

In this study, quantum wells created with Ga_{1-x}Al_xAs / GaAs materials are discussed. The energies of an electron imprisoned in such wells are calculated with ground state and excited state wave functions. A uniform external electric field was applied to the quantum wells formed with the material under consideration and then the effect of the impurity atom and hydrostatic pressure was investigated. The effective mass approach has been taken into consideration and approximate solutions have been made using the variation method. Numerical calculations were made and graphics were drawn with the programs we wrote in Fortran after literature review and necessary information were obtained. Fortran programs written for calculations are also presented in the thesis.

In the conclusion discussion section, the results found are evaluated. The effects of external electric field, impurity atom position and hydrostatic pressure on the energies of an electron trapped in quantum wells have been observed.

Year: 2021

Page:119

Keywords: Impurity, Electric field, Quantum well, Binding energy

TEŐEKKÜR

Çalıőmalarım sırasında bilgi ve tecrübeleriyle bana yardımcı olan danıőmanım sayın Prof. Dr. İlhan ERDOĐAN ‘ a teőekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	iii
SUMMARY	iv
TEŞEKKÜR.....	v
İÇİNDEKİLER	vi
SİMGELER DİZİNİ.....	viii
ŞEKİL DİZİNİ	ix
1. GİRİŞ	1
1.a. Simetrik Kuantum Kuyusu	2
2. Ga As / Al As SİMETRİK SONSUZ KUANTUM KUYUSUNDA BULUNAN BİR ELEKTRONUN İNCELENMESİ.....	4
3. Ga As / Al As SİMETRİK SONSUZ KUANTUM KUYUSUNDA BULUNAN BİR ELEKTRONA DÜZGÜN ELEKTRİK ALANIN ETKİSİ.....	9
4. SİMETRİK SONSUZ KUANTUM KUYUSUNDA BULUNAN BİR ELEKTRONA YABANCI ATOM ETKİSİ	18
5. SONLU KUANTUM KUYUSU	29
5.1. Sonlu Kuantum Kuyusuna Elektrik Alan Etkisi.....	35
5.2. Sonlu Kuantum Kuyusuna Elektrik Alan ve Yabancı Atomun Etkisi	48
5.3. Sonlu Kuantum Kuyusuna Elektrik Alan, Yabancı Atom ve Hidrostatik Basıncın Etkisi.....	54
6. SONLU KUANTUM KUYUSUNDA HAPSEDİLMİŞ OLAN ELEKTRONUN BİRİNCİ UYARILMIŞ (2s) DURUMDA İNCELENMESİ.....	71

SONUÇ ve TARTIŞMA	103
KAYNAKLAR	107
ÖZGEÇMİŞ	109

SİMGELER DİZİNİ

a^*	Etkin Bohr yarıçapı
E	Enerji
F	Elektrik Alan Şiddeti
m^*	Elektronun etkin kütlesi
η	Hamiltonien' deki elektrik alan terimi
R^*	Etkin Rydberg enerjisi
Ψ	Dalga fonksiyonu
ε	Dielektrik sabiti
β	Varyasyonel Parametresi
λ	Varyasyonel Parametresi
P	Hidrostatik basınç

ŞEKİL DİZİNİ

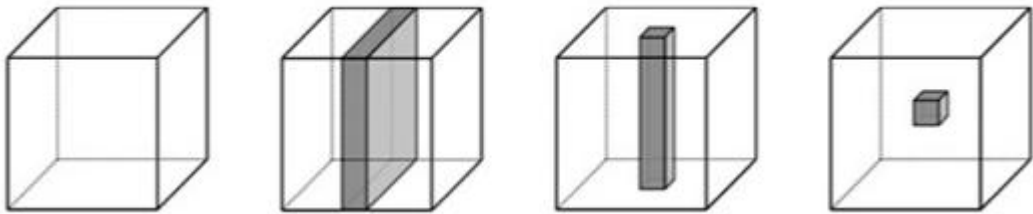
Şekil 1. Düşük Boyutlu Yapılar	1
Şekil 2.1. Simetrik Kuyu	2
Şekil 2.1. Anti simetrik Kuyu	2
Şekil 3.1. Sonsuz Kuantum Kuyusu	2
Şekil 3.2. Sonsuz Kuantum Kuyusu	3
Şekil 3.3. Sonsuz Kuantum Kuyusu	3
Şekil 4. Sonsuz Kuantum Kuyusu	4
Şekil 5. Sonsuz Kuantum Kuyusunda Bulunan Bir Elektronun Dalga Fonksiyonunun Konuma Göre Değişim Grafiği	7
Şekil 6. Sonsuz Kuantum Kuyusunda Bulunan Bir Elektronun Enerjisinin Kuyu Genişliğine Göre Değişim Grafiği	8
Şekil 7. Sonsuz kuantum kuyusuna elektrik alanın etkisi	9
Şekil 8. Enerji minimizasyonu	11
Şekil 9. Üç Farklı Elektrik Alan Değeri İçin Sonsuz Kuantum Kuyusunda Bulunan Bir Elektronun Dalga Fonksiyonunun Konuma Göre Değişim Grafiği	12
Şekil 10. Üç Farklı Elektrik Alan Değeri İçin Sonsuz Kuantum Kuyusunda Bulunan Bir Elektronun Enerjisinin Kuyu Genişliğine Göre Değişim Grafiği	13
Şekil 11. Üç Farklı Kuyu Genişliği İçin Sonsuz Kuantum Kuyusunda Bulunan Bir Elektronun Enerjisinin Elektrik Alana Göre Değişim Grafiği	14
Şekil 12. Silisyum temelli yarıiletken malzeme	18
Şekil 13. Silisyum temelli yarıiletken malzeme	19
Şekil 14. Sonsuz kuantum kuyusunda yabancı atom merkezde	20
Şekil 14.1. Merkezle kuyu duvarı arasında	20
Şekil 14.2. Kuyu duvarına çok yakın	20
Şekil 15. Bağlanma enerjisinin minimizasyonu	23
Şekil 16. Sonsuz Kuantum Kuyusunda Bulunan Bir Elektronun Bağlanma Enerjisinin Kuyu Genişliğine Bağlı Grafiği	28

Şekil 17. Sonsuz Kuantum Kuyusunda Bulunan Bir Elektronun Bağlanma Enerjisinin Yabancı Atomun Konumuna Bağlı Değişim Grafiği	29
Şekil 18. Sonlu kuantum kuyusu.....	31
Şekil 19. Elektrik alan etkisindeki sonlu kuantum kuyusu	37
Şekil 20. Dalga Fonksiyonunun Kuyudaki Konumuna Göre Grafiği	44
Şekil 21. . Enerjinin Kuyu Genişliğine Bağlı Grafiği	49
Şekil 22. Elektrik alan –Yabancı atom etkisindeki sonlu kuantum kuyusu.....	50
Şekil 23. .Bağlanma Enerjisinin Kuyu Genişliğine Göre Değişim Grafiği	54
Şekil 24. . Bağlanma Enerjisinin Yabancı Atomun Konumuna Göre Değişim Grafiği ...	55
Şekil 25. .Bağlanma Enerjisinin Kuyu Genişliğine Göre Değişim Grafiği	71
Şekil 26. Bağlanma Enerjisinin Yabancı Atomun Konumuna Göre Değişim Grafiği.....	72
Şekil 27. . Elektronun Dalga Fonksiyonunun (a^*) a Bağlı Grafiği (2s)	75
Şekil 28. 2s Bağlanma Enerjisinin Kuyu Genişliğine Göre Değişim Grafiği	84
Şekil 29. 2s Bağlanma Enerjisinin Yabancı Atomun Konumuna Göre Değişim Grafiği.....	85

1.GİRİŞ

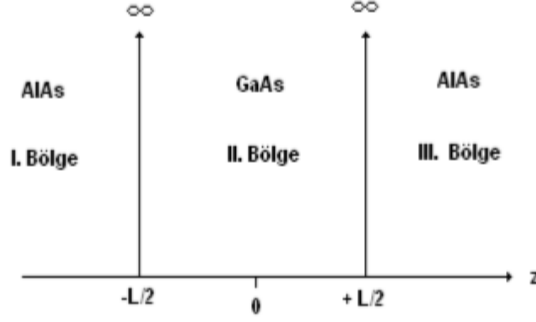
Düşük boyutlu yapılar, farklı bant yapılarına sahip yarıiletkenlerden oluşan malzemelerle oluşturulur. Düşük boyutlu yarı iletken sistemlerin fiziksel özelliklerinin anlaşılabilmesi için son yıllarda bazı yeni fiziksel kavramlar üstünde araştırmalar ve varsayımlar yapılmaktadır. Laboratuvarlarda değişik teknikler ile temeli düşük boyutlu yapılara dayanan elektronik devre elemanları üretilmektedir. Bu üretilen elektronik devre elemanları, elektronik temelli malzeme yapımında kullanılmaktadır. Günümüzde bu tür malzemeler cep telefonları, televizyonlar, fırın, çamaşır makinesi gibi hayatımızı kolaylaştıran tüm elektronik aletlerde kullanılmaktadır.

Kuantum kuyuları, telleri ve noktaları; düşük boyutlu yapıların temellerini oluştururlar. Genellikle elektron hareketinin serbest olduğu yapılar bulk olarak adlandırılır. Serbest elektronlar kuantum kuyularında tek yönde hareket edecek şekilde sınırlandırılmıştır. Örnek olarak; z doğrultusunda potansiyel duvarı gören bir elektronun bu doğrultudaki hareketi sınırlıdır, x ve y doğrultusunda ise serbesttir. Kuantum kuyuları serbestlik derecelerine göre iki boyutludur. Kuantum telinde serbest elektronun hareketi iki yönde sınırlandırılmış olup, diğer yönde elektronun hareketi serbesttir. Elektron iki doğrultuda da potansiyel engelle karşılaşır. Kuantum telleri serbestlik derecelerine göre tek boyutludur. Kuantum noktasında serbest elektronun hareketi tüm doğrultularda sınırlıdır. Her doğrultuda karşılaşacağı bir potansiyel engeli vardır. Kuantum noktaları serbestlik derecelerine göre sıfır boyutludur (Harrison, 2005, Yaman, 2010).

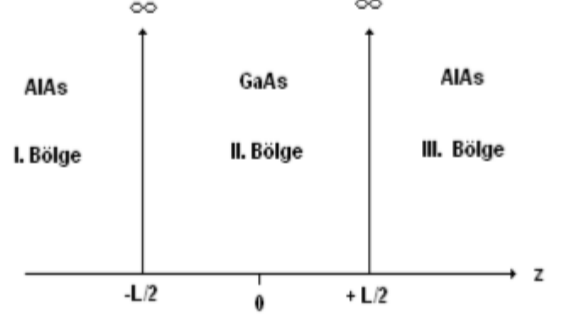


Şekil 1. Düşük Boyutlu Yapılar

Bu çalışmada sonsuz kuantum kuyuları ele alınarak dış elektrik alanın etkisi incelenecektir. Kuyu içinde hapsedilmiş olan elektronun dalga fonksiyonları incelenerek, enerjisine bakılacaktır. Kuantum kuyuları simetrik ve antisimetrik olarak ele alınabilir (Kasalak 2011).



Şekil 2.1. Simetrik Kuyu

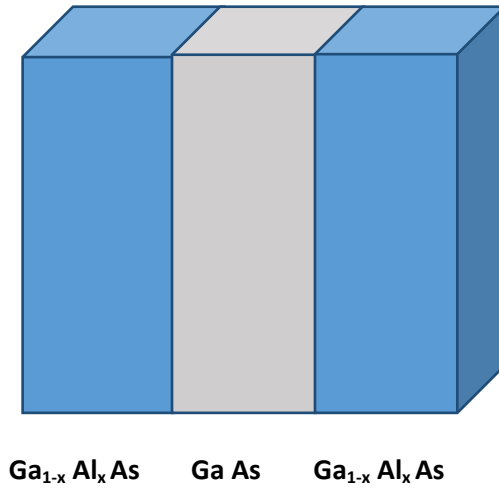


Şekil 2.2. Anti simetrik Kuyu

Bu çalışmada simetrik kuantum kuyusu ele alınmıştır (Yaman, 2010, Şen, 2011).

1.a. Simetrik Kuantum Kuyusu

Kuantum kuyuları iki yarıiletken tabakanın arasına farklı tür yarıiletken tabakanın eklenmesi ile oluşur. Kuantum kuyularına örnek olarak $Ga_{1-x}Al_xAs / GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ yapısı verilebilir.



Ga : Galyum

Al : Alüminyum

As :Arsenik

Bu malzemeler kullanılarak kuantum kuyuları oluşturulur.

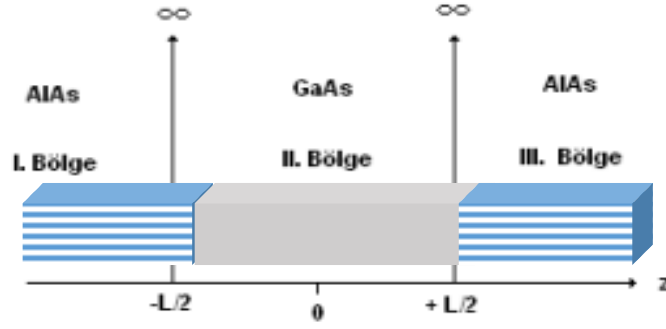
x :Alüminyum miktarını gösterir.

Şekil 3.1. Sonsuz Kuantum Kuyusu

Parçacığın hapsedildiği potansiyel duvarın yüksekliğine göre sonlu ve sonsuz kuantum kuyusu oluşmaktadır.

Kuyuyu oluşturan malzeme $Ga_{1-x}Al_xAs$ şeklinde ele alındığında buradaki x ve $(1-x)$ malzeme bileşenleri ile çarpan durumundadır (Harrison 2005).

$x = 1$ durumunda **Al As** olur ve bu yapı sonsuz kuantum kuyusu olarak bilinir.

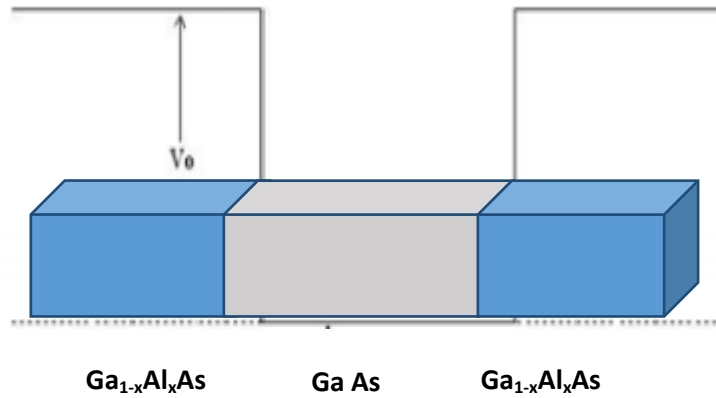


Şekil 3.2. Sonsuz Kuantum Kuyusu

$x = 0$ olduğu durumlarda;

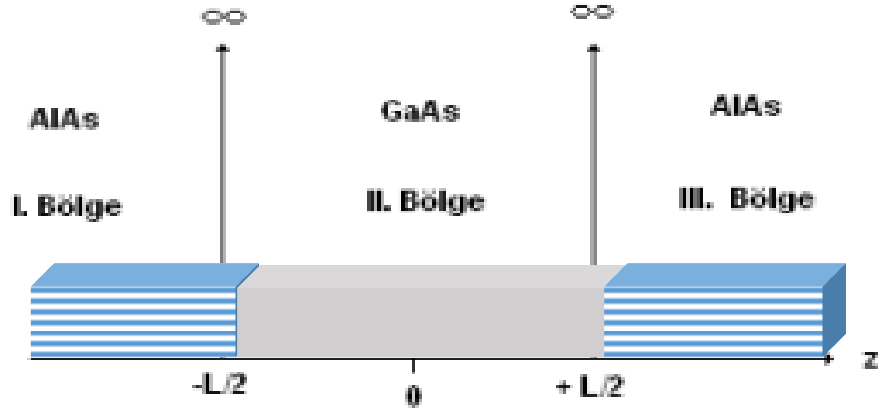
$Ga_{1-0}Al_0As$ burada **Ga As** olur, kenarlarda kullanamayız bu durumda bütün olur yani her yer aynı olur ve kuyu oluşmaz. Bulk malzeme oluşur elektronu hapsedebileceği yapı oluşmaz.

$0 < x < 1$ durumunda ise malzememiz $Ga_{1-x}Al_xAs$ olur ve sonlu kuantum kuyusu oluşur.(Harrison 2005).



Şekil 3.3. Sonsuz Kuantum Kuyusu

2. GaAs / AlAs SİMETRİK SONSUZ KUANTUM KUYUSUNDA BULUNAN BİR ELEKTRONUN İNCELENMESİ



Şekil 4. Sonsuz Kuantum Kuyusu

Şekilde sonsuz kuantum kuyusu içinde bir elektron olduğunu düşünelim. Bu kuyuda I. ve III. bölgelerde potansiyel duvarlarının sonsuz olmasından dolayı elektron bu bölgelere geçemez. Kısaca bu bölgelerde bulunma olasılığı sıfırdır. II. bölgede ise elektron belli bir enerji seviyesinde durmaktadır. Buradaki elektron için Schrödinger denklemini sadece II. Bölgede yazabiliriz. Bu tür kuyu için potansiyel enerji sınırları ve Schrödinger denklemi (Yaman, 2010, Yavuz, 2011, Gu and Huo, 1992) .

$$v(z) = \begin{cases} z < -L/2 & \infty \\ -L/2 \leq z \leq L/2 & 0 \\ z < +L/2 & \infty \end{cases} \quad (2.1)$$

$$H \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (2.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (2.3)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}} \quad D^2 = \frac{d^2}{dz^2} \quad \text{olmak üzere}$$

$$D^2 \Psi(z) + k^2 \Psi(z) = 0 \quad (2.4)$$

biçiminde yazılır. Bu denklemin çözümü

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1 \quad \text{olarak ele alındığında,}$$

a^* etkin Bohr yarıçapı, R^* etkin Rydberg enerjisi olmak üzere;

$$a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* \cdot e^2} \quad , \quad R^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a^{*2}}$$

yazılarak denklemin çözümleri, $k_n = \frac{n\pi}{L}$ olmak üzere

$$\Psi_n(z) = A \cos(k_n z) \quad n=1,3,5,\dots \quad (2.5)$$

$$\Psi_n(z) = B \sin(k_n z) \quad n=2,4,6,\dots \quad (2.6)$$

şeklindedir. Bu çalışmada sadece taban durum ($n=1$) dalga fonksiyonu ele alınmış ve elektronun enerjisi hesaplanmıştır. $n=1$ için kuyu içinde hapsedilen elektronun dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılır (Karaoğlu, 1994, Bulut, 2010).

$$\Psi_1(z) = A \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \quad (2.7)$$

Burada A normalizasyon sabitidir ve bire (1) normlanarak bulunur.

$$\int_{-L/2}^{L/2} \Psi_1^*(z) \Psi_1(z) dz = 1 \quad (2.8)$$

Buradan A sabiti;

$$A^2 \int_{-L/2}^{L/2} \cos^2\left(\frac{\pi z}{L}\right) dz = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

olarak bulunur. A'yı dalga fonksiyonunda yerine yazarsak;

$$\Psi_1(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \quad (2.9)$$

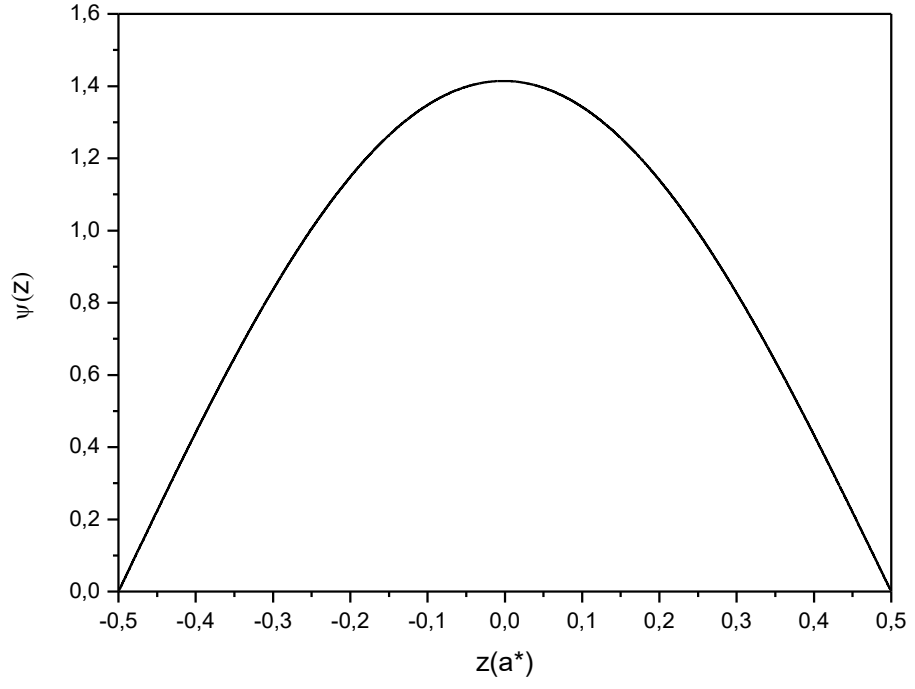
elde ederiz. Elektronun taban durum enerjisini de bu dalga fonksiyonu yardımıyla;

$$E_S = \frac{\langle \Psi_1(z) | H | \Psi_1(z) \rangle}{\langle \Psi_1(z) | \Psi_1(z) \rangle} \quad (2.10)$$

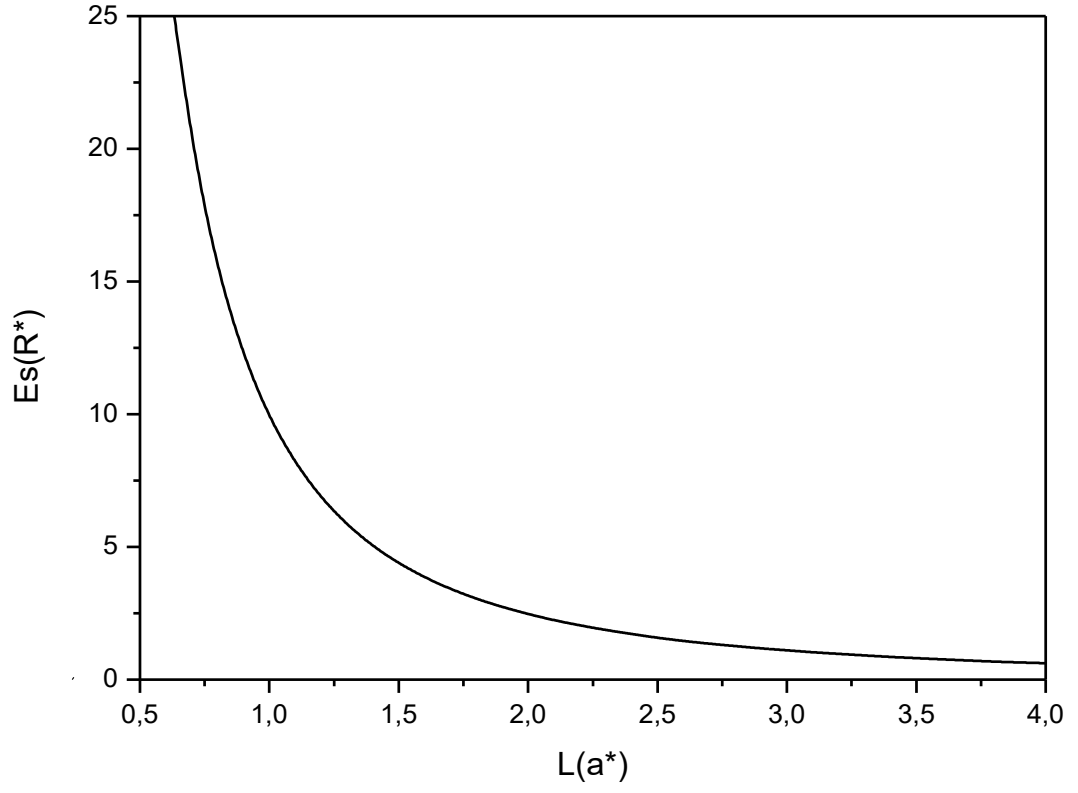
$$E_S = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} n^2 \quad (2.11)$$

olarak buluruz.

Bu çalışmada sonsuz potansiyel kuantum kuyusunda taban durum için dalga fonksiyonları ve enerji grafikleri çizilmiştir. Şekil 1 ve şekil 2 de çizilen grafikler gösterilmiştir (Karaoğlu, 1994, Yaman, 2010, Yavuz, 2011).



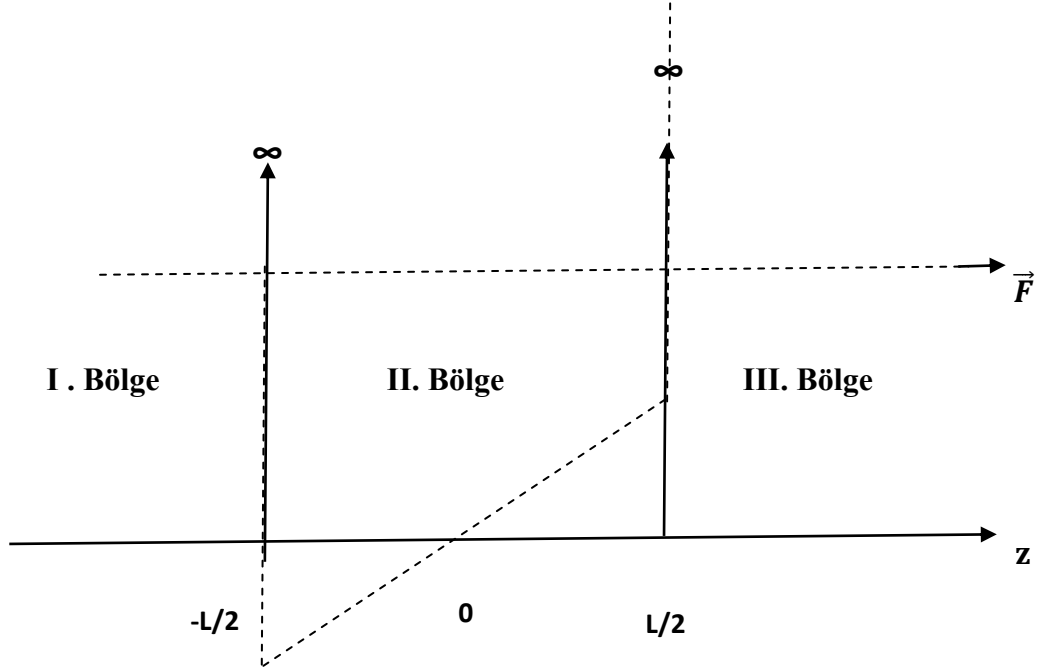
Şekil 5.Sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun dalga fonksiyonunun konuma göre değişim grafiği



Şekil 6.Sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun taban durum enerjisinin kuyu genişliğine göre değişim grafiği

3. Ga As / Al As SİMETRİK SONSUZ KUANTUM KUYUSUNDA BULUNAN BİR ELEKTRONA DÜZGÜN ELEKTRİK ALANIN ETKİSİ

Simetrik sonsuz kuantum kuyusuna dışarıdan düzgün dağılmış elektrik alan uygulandığında kuyunun potansiyel duvarlarının şekli aşağıdaki gibi gösterilebilir.



Şekil 7. Sonsuz kuantum kuyusuna elektrik alanın etkisi

Şekilde gösterilen \vec{F} kuyuya dışarıdan z doğrultusunda uygulanan düzgün elektrik alanı ifade etmektedir. Elektrik alanın \vec{F} olduğu yerde elektrona etki eden elektrik alan kuvvetini \vec{F}_k olarak tanımlarsak (elektron için q yükü $-e$ dir) (Harrison, 2005, Şen, 2011).

$$\vec{F}_k = q \cdot \vec{E} \quad , \quad (3.1)$$

$$\vec{F}_k = -e \vec{F} \quad (3.2)$$

olarak yazabiliriz. Bu denklemde elektrik alanı gösteren \vec{E} yerine \vec{F} yazılmıştır. Bunun sebebi Schrödinger denklemindeki E enerjisi ile elektrik alanı temsil eden \vec{E} ifadesinin karıştırılmamasından dolayıdır. Sonsuz kuantum kuyusunda uygulanan dış elektrik alanın elektron üzerine yaptığı iş $W = -F_k z$ dir. Buradan hareketle

$$W = - \int_0^z (-e) F dz \quad (3.3)$$

$$W = e \cdot F \cdot z \quad (3.4)$$

denklemleri yazılır. Bu bilgilerden yararlanarak sonsuz simetrik kuantum kuyusu için Schrödinger denklemini GaAs bölgesinde yazarız. AlAs bölgesinde Schrödinger denklemini yazamayız. Çünkü kuyu sonsuz potansiyelli olduğundan elektronun AlAs bölgesinde bulunma olasılığı sıfırdır. GaAs bölgesinde Schrödinger denklemini;

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_F(z) + e F z \Psi_F(z) = E \Psi_F(z) \quad , \quad (3.5)$$

olarak yazılır. $\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1$ olarak ele alındığında, a^* etkin Bohr yarıçapı, R^* etkin Rydberg enerjisi olmak üzere; Schrödinger denkleminiz a^* ve R^* biriminde;

$$-\frac{d^2}{dz^2} \Psi_F(z) + \eta \cdot z \cdot \Psi_F(z) = E \Psi(z) \quad , \quad (3.6)$$

haline dönüşür.

Burada $\eta = -\frac{a^* \cdot F \cdot 10^{-2}}{R^*}$ dir. Bu diferansiyel denklemin çözümünde aşağıdaki deneme dalga fonksiyonunu kullanırız, bu fonksiyonlar taban durum için yazılmıştır. (Harrison, 2005, Şen, 2011).

$$\Psi_F(z) = \Psi_1(z)e^{-\beta z} \quad (3.7)$$

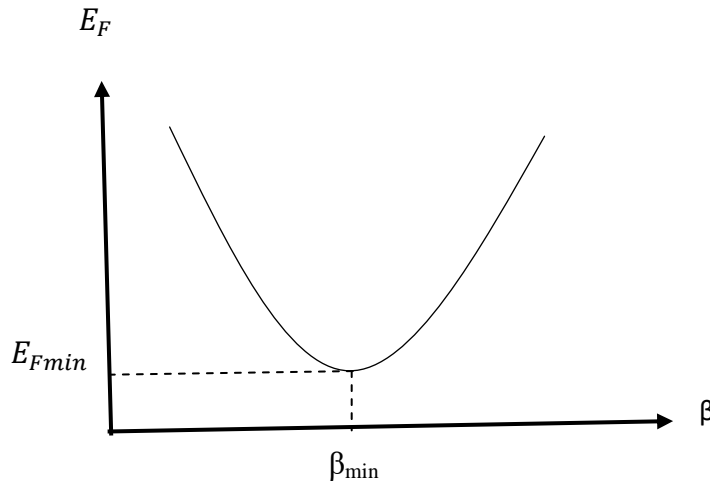
$$\Psi_F(z) = N \cdot \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) e^{-\beta z} \quad (3.8)$$

Bu deneme dalga fonksiyonunda $\Psi_1(z)$, 2. Bölümde belirtilen elektrik alanın olmadığı durumdaki dalga fonksiyonudur. Elektrik alanın varlığındaki dalga fonksiyonumuz ise $\Psi_F(z)$ olarak yazılmıştır. Bu dalga fonksiyonundaki $e^{-\beta z}$ ifadesi elektrik alanın katkısından dolayı yazılmıştır. Buradaki β varyasyon parametresidir (Harrison, 2005, Yaman, 2010, Yavuz, 2011).

Elektrik alan altındaki kuyu içinde bulunan elektron için taban durum enerjisini

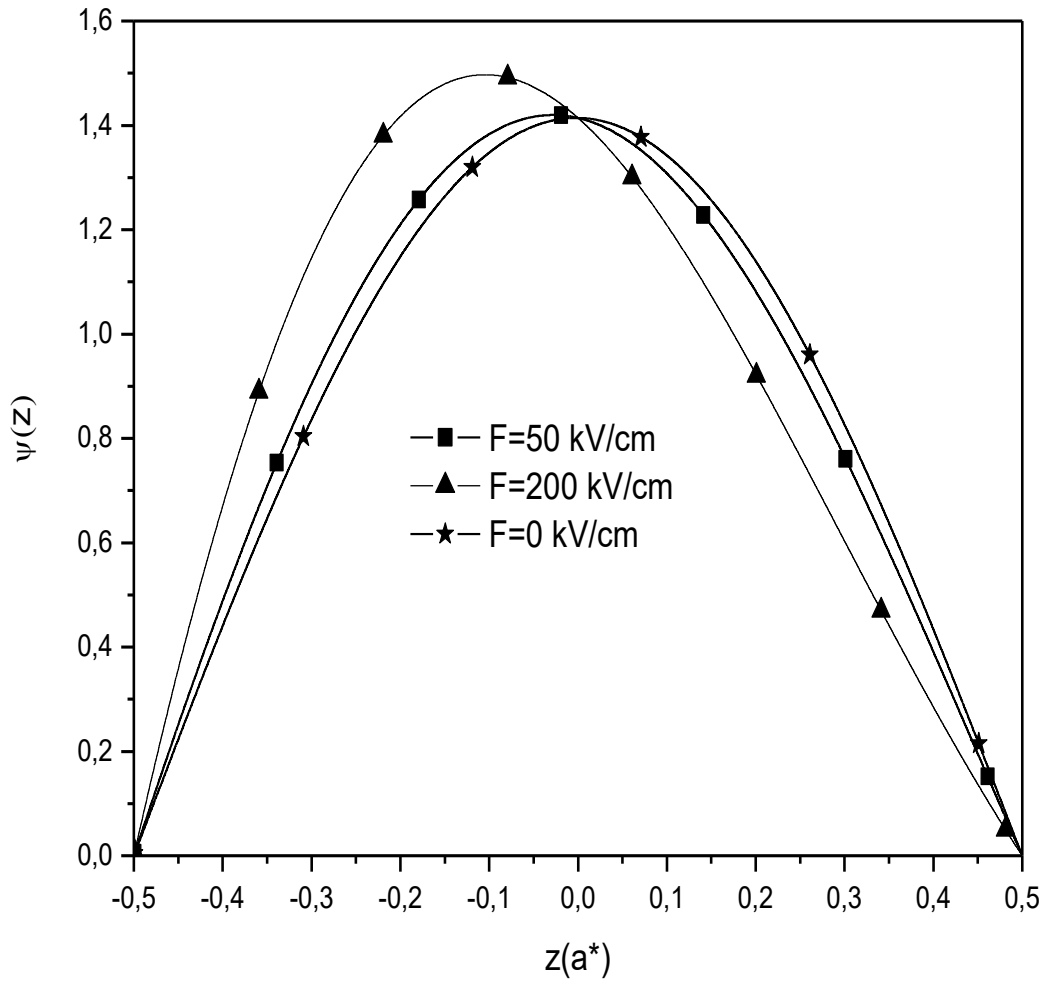
$$E_F = \left[\frac{\langle \Psi_F(z) | H | \Psi_F(z) \rangle}{\langle \Psi_F(z) | \Psi_F(z) \rangle} \right]_{\beta_{min}} \quad (3.9)$$

olarak hesaplanır. E_F enerjisini hesabı varyasyon yöntemi ile yapılır. Bu yöntemde enerji minimize edilir ve β hesaplanır. Varyasyon yönteminde enerjinin minimizasyonu aşağıda verilen şekilde yapılır.



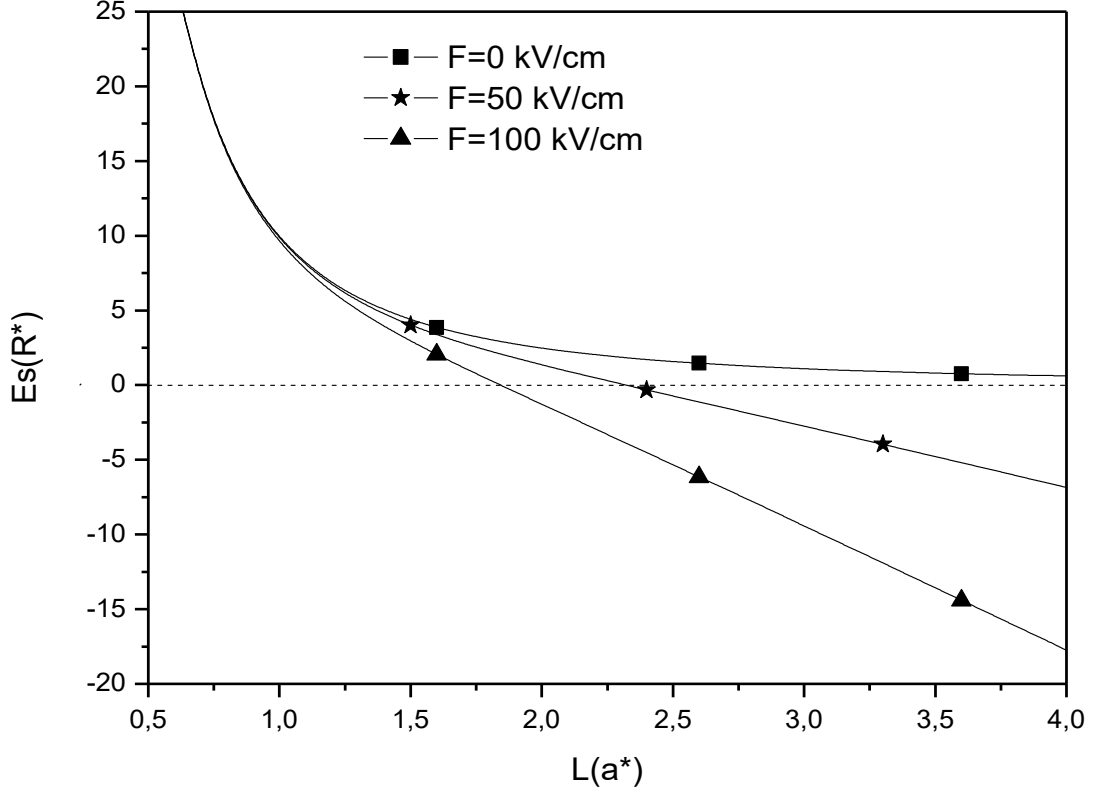
Şekil 8. Enerji minimizasyonu

β deęerleri 0'dan bařlatılarak arttırılır. Sonra E_F deęerlerine bakılır. Sistemdeki minimum enerji bizim aradıęımız enerjidir. Fortran programında bu iřlem yapılarak E_{Fmin} ve β_{min} bulunur. Buradan bulduęumuz β_{min} deęeri, elektron için belirlenen deneme dalga fonksiyonu yerine konularak, dalga fonksiyonları için hesaplamalar yapılabilir. Dalga fonksiyonunun z doęrultusuna gre deęiřim grafięi Őekil 9'da gsterilmiřtir.



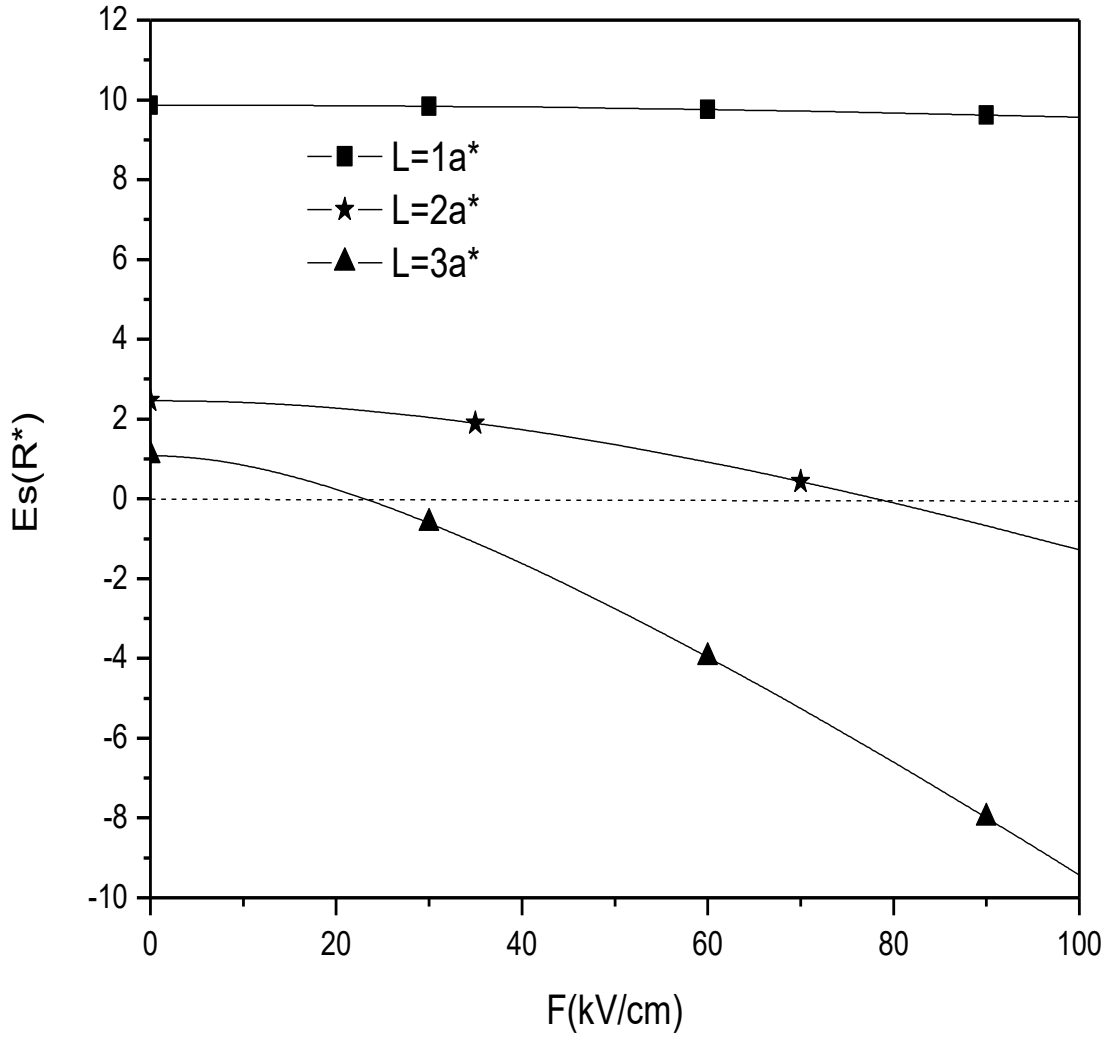
Őekil 9. Ü farklı elektrik alan deęeri için sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun dalga fonksiyonunun konuma gre deęiřim grafięi

Aynı bilgiler doğrultusunda E_S enerjisinin kuyu genişliğine göre grafiği çizilebilir. Bu şekil 10'da gösterilmiştir.



Şekil 10. Üç farklı elektrik alan değeri için sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun enerjisinin kuyu genişliğine göre değişim grafiği

Şekil 10 da yapılan hesaplar sonucunda çizilenleri desteklemek amacıyla şekil 11 çizilmiştir. Şekil 11 deki hesaplarda 3 farklı kuyu genişliği değeri alınmış ve elektronun enerjisinin uygulanan dış elektrik alana göre değişim grafiği gösterilmiştir.



Şekil 11. Üç farklı kuyu genişliği için sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun enerjisinin elektrik alana göre değişim grafiği

Bu üç grafik için aşağıdaki Fortran programı çizilecek grafik türüne göre döngü değişimleri yapılarak kullanılabilir.

```
implicit real*8(a-z)
open(1,file='rrt4.dat')
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
ay=100.0d0
ry=5.830d0
F=80.0d0
eta=F*(0.010d0)*ay/ry
L=0.30d0
88 DL=0.10D0
L=L+DL
ENER1=100000.0D0
beta=-0.00010d0
66 dbeta=0.00010d0
beta=beta+dbeta
    CALL DERS1(L,pi,beta,s1)
    CALL DERS2(L,pi,beta,eta,s2)
    CALL DERS3(L,pi,beta,s3)
    ENER=(S1+S2)/S3
    if(ENER.GT.ENER1) go to 77
    ENER1=ENER
    BETA1=BETA
    GO TO 66
77 write(*,*)'*****'
    write(*,*)'L=',ENER1=',L,ENER1
    write(*,*)'beta=',BETA
    write(1,*)L,ENER
    if(L.lt.2.0d0) go to 88
end
```

CC----- 1 -----

```
      SUBROUTINE DERS1(L,pi,beta,s1)
      implicit real*8(a-z)
      xb=-L/2.0D0
      xs=L/2.0D0
      OFON=0.0d0
      TOP1=0.0D0
      dx=(xs-xb)/1000.0d0
      DO 22 X=XB,XS,DX
      FON=-dexp(-2.0d0*beta*x)*((beta**2.0d0*L**2.0d0-pi**2.0d0)
      $*dcos(pi*x/L)**2.0d0/L**2.0d0+2.0d0*pi*beta*d sin(pi*x/L)
      $*dcos(pi*x/L)/L)
      TOP1=TOP1+(OFOFON+FON)*DX/2.0D0
      OFON=FON
22  CONTINUE
      S1=TOP1
      end
```

C----- 2 -----

```
      SUBROUTINE DERS2(L,pi,beta,eta,s2)
      implicit real*8(a-z)
      xb=-L/2.0D0
      xs=L/2.0D0

      OFON=0.0d0
      TOP1=0.0D0
      dx=(xs-xb)/1000.0d0
      DO 22 X=XB,XS,DX
      psi=dcos(pi*x/L)*dexp(-beta*x)
```

```

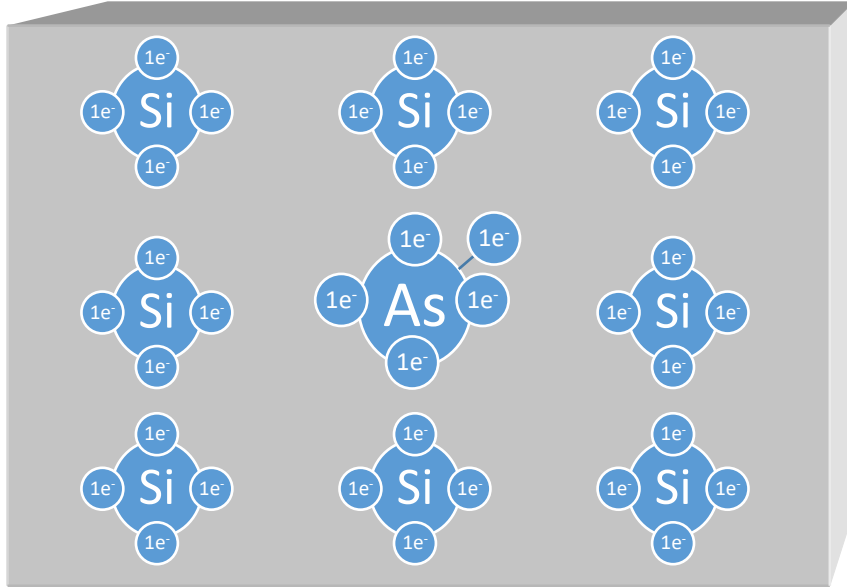
FON=psi*eta*x*psi
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*DX/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
S2=TOP1
END
CC----- 3 -----
SUBROUTINE DERS3(L,pi,beta,s3)
implicit real*8(a-z)
xb=-L/2.0D0
xs=L/2.0D0
OFON=0.0d0
TOP1=0.0D0
dx=(xs-xb)/1000.0d0
DO 22 X=XB,XS,DX
psi=dcos(pi*x/L)*dexp(-beta*x)
FON=psi*psi
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*DX/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
S3=TOP1
end

```

4. SİMETRİK SONSUZ KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLMİŞ BİR PARÇACIĞA YABANCI ATOM ETKİSİ

Yarıiletken malzemelere yabancı atomun katılması ile taşıyıcı sayısı ve malzemenin iletkenliği artırılabilir. Buradaki yarıiletken malzemeye eklenen yabancı atom yarıiletken malzemedeki var olan elektronların bağlanma enerjilerini değiştirir.

Düşük boyutlu yapılarda elektron dar bölge dediğimiz potansiyel duvarları arasında hareket eder ve yabancı atoma yakın olmaya çalışır. Potansiyel duvarları arasındaki sıkışmadan dolayı coulomb etkileşmesinin şiddeti artar. Düşük boyutlu yapılarda yabancı atom, bağlanma enerjilerini değişime uğrattığı için yabancı atom problemi olarak karşımıza çıkar. Yabancı atom probleminin düşük boyutlardaki çözümü büyük öneme sahiptir. Bu durumu daha açık bir şekilde aşağıdaki gibi açıklayabiliriz. Örneğin Si (4 elektron) kullanılarak elde edilen malzeme içine As (5 elektron) katılarak elde edilen bir yapı ile bunu açıklayalım (^0K) (Kittel, 1996).

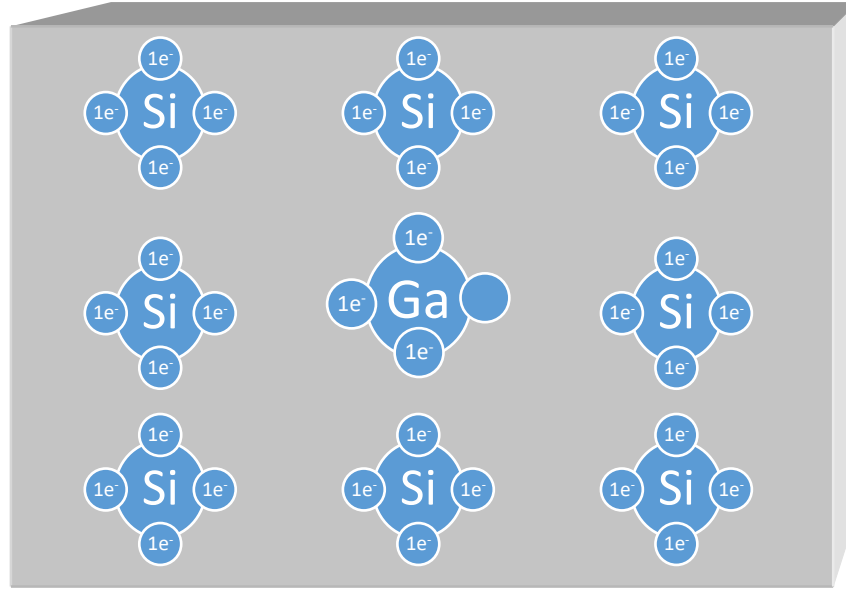


Şekil 12. Silisyum temelli yarıiletken malzeme

Silisyumdan yapılan saf malzemeye As katıldığında bu malzemeyi kirletmiş oluruz. Yani malzemenin saflığı bozulur. Bu yapıda malzemeye katılan (As) atomun 1 elektronu boşta kalır ve diğer atomların (Si) elektronları ile bağ yapmaya çalışır.

Bu bağ yapma durumu atomun elektron vermeye istekli olduğunun göstergesidir. Elektron verebilen bu tür katkı atomlarına verici atom (donor) denir. Burada As beş ve Si ise 4 valans elektronu vardır. As ve Si un dörder elektonu birbirleri arasında kovalan bağ oluşturur. Ancak kalan beşinci elektron boşta kalır ve iletkenliği sağlar. Burada As atomu verici atomdur. Çünkü iletkenlik bandına bir elektron vermiştir. (Kittel, 1996, Bulut 2010).

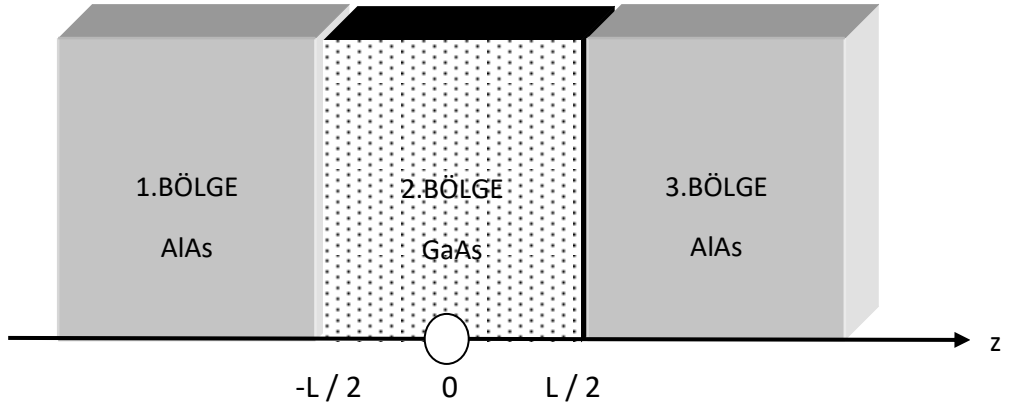
Verici atomun tanımından sonra alıcı atomu tanımlamak için yine Si dan yapılan bir saf malzemeye üç elektronlu bir atom katarak onun safsızlığını bozalım.



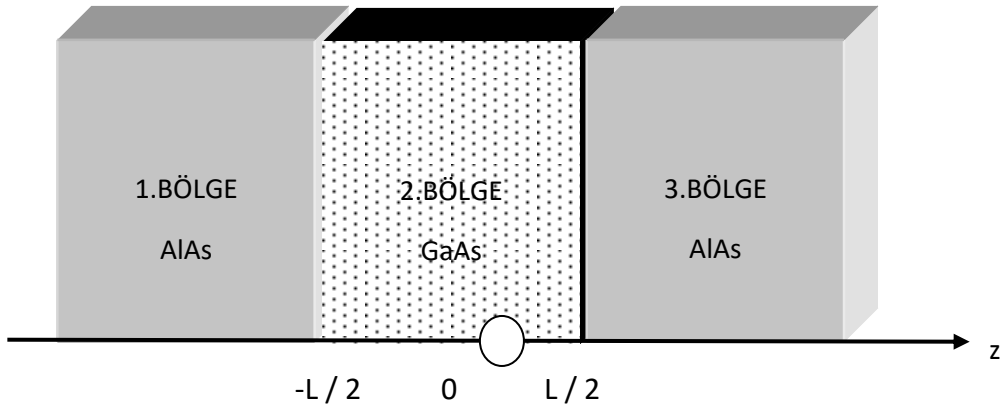
Şekil 13. Silisyum temelli yarıiletken malzeme

Şekilde Si malzemeye Ga katılmıştır. Buradaki katkı atomu olan Ga 3 elektronlu olup komşu atom olan Silisyumdan bir elektron alma eğilimindedir. Bu tür atomlar alıcı atom (acceptor) olarak adlandırılır. Yani elektron almak için bir boşluğu vardır. Bu pozitif boşluk iletkenliğe katkı sağlar. Yani Ga atomu valans bandına bir elektron alır. Bundan dolayı Ga atomuna alıcı atom denir. Bu tür yapılarda sıcaklık arttırıldığında bu pozitif boşluk serbest duruma geçer (Kittel, 1996, Bulut 2010).

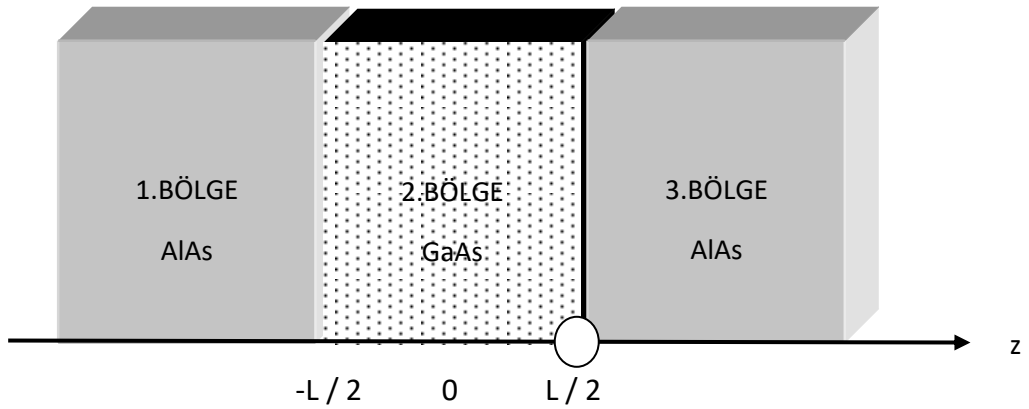
Daha önceki konuda sonsuz kuantum kuyusunda hapsedilmiş olan bir elektrona elektrik alanın etkisi incelenmişti. Şimdi ise yabancı atomun etkisini inceleyelim.



Şekil 14. Sonsuz kuantum kuyusunda yabancı atom merkezde



Şekil 14.1. Merkezle kuyu duvarı arasında



Şekil 14.2. Kuyu duvarına çok yakın

Şekildeki gibi sonsuz potansiyel engelli bir kuantum kuyunun merkezine yabancı (impurity) atom yerleştirildiğinde kuyu içindeki elektron ile yabancı atom arasında etkileşme olur. Bu yabancı atomu kuyunun merkezinden kenara doğru yaklaştırdığımızda kuyu içindeki elektron bu değişimden etkilenecektir. Kuyu sonsuz potansiyel engelli ise içeride hapsedilmiş olan elektronun 1. ve 3. Bölgelere geçme ihtimali yoktur. Kuyu potansiyel duvarları sonlu bir durumda ise o zaman hapsedilmiş elektronun birinci ve üçüncü bölgelerde bulunma ihtimali vardır. Şuanda sonsuz potansiyelli bir kuyu içinde bulunan elektronun yabancı atom ile etkileşmesini ele aldığımızda Schrödinger denklemini a^* ve R^* biriminde

$$\left[-\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) - \frac{2}{r} \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (4.1)$$

olarak yazılır (Bulut 2010).

Bu denklemin çözümü için

$$\psi(x, y, z) = N \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) e^{-\lambda r} \quad (4.2)$$

şeklinde deneme dalga fonksiyonu seçilir. Burada yabancı atom ve elektron arasındaki mesafeyi gösteren r kartezyan koordinatlarda ;

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

şeklinde olup, bizim seçtiğimiz kuyu tipinde potansiyel duvarları sadece z ekseninde mevcut olduğundan $x_i = y_i = 0$ alabiliriz. sonuç olarak r yi

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

şeklinde yazarız.

Bu tip kuyularda silindirik koordinatlarda çalışmak hesaplamaların kolaylığı bakımından daha uygun olacaktır. Silindirik koordinatlarda

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

olmak üzere r'yi

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

şeklinde yazarız.

Aynı şekilde düşünüldüğünde schrödinger denklemi

$$\left[\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \right] \psi(\rho, z) = E \psi(\rho, z) \quad (4.3)$$

şeklinde yazılır.

Deneme dalga fonksiyonu da

$$\psi(\rho, z) = N \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) e^{-\lambda \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (4.4)$$

yazılabilir (Bulut 2010).

λ varyasyon parametreleridir. Yapılan bu işlemlerden sonra elektronun bağlanma enerjisi hesabına geçilebilir. Elektronun bağlanma enerjisi bilimsel çalışmalarda dikkate alınan önemli bir niceliktir. Genellikle bu tanım, yabancı atom etkisinde olmayan elektronun enerjisi ile yabancı atomun etkisindeki elektronun enerjisi arasındaki farka eşit olarak alınır. (Kittel , 1996, Bulut 2010).

Bu durum;

$$E_b = E_s - E_i \quad (4.5)$$

olarak yazılabilir.

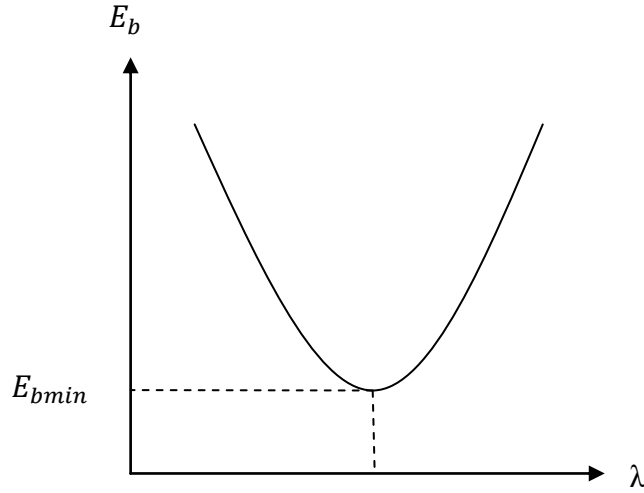
$E_s = \text{Yabancı atomun yokluğunda elektronun enerjisi}$

$E_i = \text{Yabancı atomun varlığında elektronun enerjisi}$

Burada literatürde E_s subband enerjisi olarak alınır. Bağlanma enerjisi daha açık olarak

$$E_b = \left[\frac{\langle \psi(z) | H | \psi(z) \rangle}{\langle \psi(z) | \psi(z) \rangle} \right] - \left[\frac{\langle \psi(\rho, z) | H | \psi(\rho, z) \rangle}{\langle \psi(\rho, z) | \psi(\rho, z) \rangle} \right] \quad (4.6)$$

Burada yaklaşık çözüm yöntemlerinden olan varyasyon yöntemini kullanılarak λ varyasyon parametresini buluruz. Burada bağlanma enerjisinin λ parametresine göre grafiği çizilip, λ parametresi bulunur. Yani bağlanma enerjisi λ parametresine göre minimize edilir (Bulut 2010).



Şekil 15.Bağlanma enerjisinin minimizasyonu

Bu bilgilerin ışığı altında fortran programlama dili ile elektronun bağlanma enerjisini hesaplatan program yazılarak hesaplamalar yapılmış ve aşağıdaki grafikler elde edilmiştir. Yazılan fortran programı aşağıda verilmiştir.

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,K-Z)
open(1,file='ders2.dat')
PI=4.0D0*DATAN(1.0D0)
AY=98.730D0
RY=5.830D0
ZI=(0.0d0)*(L/2.0d0)
L=0.0D0
222 DL=0.10D0
L=L+DL
m=((0.010d0)*AY*F)/(RY)
ENERF1=100000000000.0d0
ENERIMF1=-100000000000.0d0
b=-0.030d0
10 Db=0.010D0
b=b+Db
CALL KENF(L,b,m,PI,ENF1)
CALL KENFA(L,b,PI,ENF2)
ENERF=ENF1/ENF2
IF(ENERF.GT.ENERF1) GO TO 20
ENERF1=ENERF
b1=b
GO TO 10
20 b=b1
ENERF=ENF1/ENF2
write(*,*)'B=,ENERF=', B,ENERF
LAM1=0.20D0
30 DLAM1=0.010D0
LAM1=LAM1+DLAM1
CALL EIMF(L,b,ZI,LAM1,PI,EIF1)
CALL EIMFA(L,b,ZI,LAM1,PI,EIF2)
P=EIF1
Q=EIF2
RR1=(PI*PI)/(L*L)
ENERIMF=RR1-(1.0D0/LAM1**2.0d0)+((4.0D0*P)/(2.0D0*Q+LAM1*P))
write(*,*)'LAM1=,ENERIMF=',LAM1,ENERIMF
IF(ENERIMF.LT.ENERIMF1) GO TO 44
ENERIMF1=ENERIMF
LAM2=LAM1
GO TO 30
c44 B=B
44 ENERF=ENERF1
LAM1=LAM2
ENERIMF=-ENERIMF1
write(1,*)L,ENERIMF
IF(L.GT.2.0d0) GO TO 45
GO TO 222
cccccccccccc-----1
SUBROUTINE KENF(L,b,m,PI,ENF1)

```

```

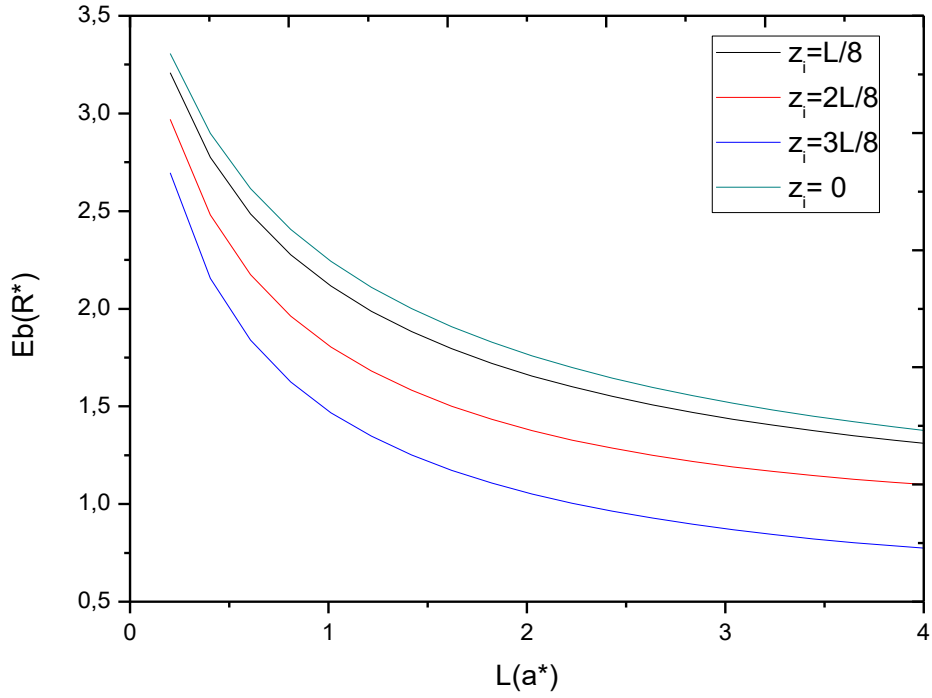
implicit real*8(a-z)
DIMENSION F(501)
sinZbir=-L*0.50d0
sinZiki=L*0.50d0
HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0
IKZ=501
Z0=sinZbir
DO 10 I=1,IKZ
Z=Z0+(I-1)*HZ
F(I)=dexp(-2.0d0*b*z)*((PI**2.0D0-b**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(PI*z/L)
$**2.0D0/L**2.0D0-2.0D0*PI*b*DSIN(PI*z/L)*DCOS(PI*z/L)/L)
$(m*z*DCOS(PI*z/L)*DEXP(-b*z)*DCOS(PI*z/L)*DEXP(-b*z))
10 CONTINUE
BB=0.0D0
DO 30 I=3,IKZ,2
BB=BB+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0
30 CONTINUE
ENF1=BB
i=0.0d0
return
end
cccccccccccc-----2
SUBROUTINE KENFA(L,b,PI,ENF2)
implicit real*8(a-z)
DIMENSION F(501)
sinZbir=-L*0.50d0
sinZiki=L*0.50d0
HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0
IKZ=501
Z0=sinZbir
DO 10 I=1,IKZ
Z=Z0+(I-1)*HZ
F(I)=DCOS(PI*z/L)*DEXP(-b*z)*DCOS(PI*z/L)*DEXP(-b*z)
10 CONTINUE
BB=0.0D0
DO 30 I=3,IKZ,2
BB=BB+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0
30 CONTINUE
ENF2=BB
i=0.0d0
return
end
cccccccccccc-----3
SUBROUTINE EIMF(L,b,ZI,LAM1,PI,EIF1)
implicit real*8(a-z)
DIMENSION F(501)
sinZbir=-L*0.50d0
sinZiki=L*0.50d0

```

```

HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0
IKZ=501
Z0=sinZbir
DO 10 I=1,IKZ
Z=Z0+(I-1)*HZ
F(I)=DCOS(PI*z/L)*DEXP(-b*z)*DCOS(PI*z/L)*DEXP(-b*z)
$*DEXP((-2.0D0/LAM1)*ABS(Z-ZI))
10 CONTINUE
BB=0.0D0
DO 30 I=3,IKZ,2
BB=BB+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0
30 CONTINUE
EIF1=BB
i=0.0d0
return
end
cccccccccccc-----4
SUBROUTINE EIMFA(L,b,ZI,LAM1,PI,EIF2)
implicit real*8(a-z)
DIMENSION F(501)
sinZbir=-L*0.50d0
sinZiki=L*0.50d0
HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0
IKZ=501
Z0=sinZbir
DO 10 I=1,IKZ
Z=Z0+(I-1)*HZ
F(I)=DCOS(PI*z/L)*DEXP(-b*z)*DCOS(PI*z/L)*DEXP(-b*z)*ABS(Z-ZI)
$*DEXP((-2.0D0/LAM1)*ABS(Z-ZI))
10 CONTINUE
BB=0.0D0
DO 30 I=3,IKZ,2
BB=BB+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0
30 CONTINUE
EIF2=BB
i=0.0d0
return
end

```

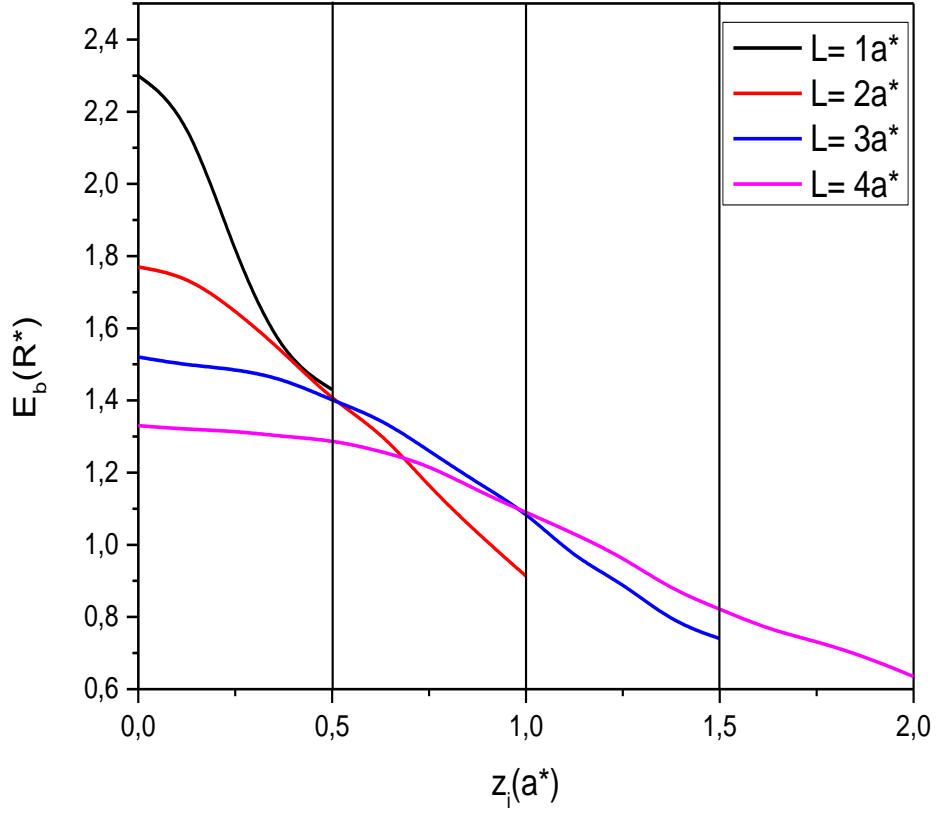


Şekil 16.Sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği. yabancı atomun dört farklı konumu için çizilmiştir.

Şekil 16’da sonsuz kuantum kuyusunda bulunan ve yabancı atom etkisinde olan bir elektronun bağlanma enerjisinin hesapları gösterilmiştir. Burada yabancı atom farklı konumlara yerleştirilip kuyunun genişliği ile oynanmıştır. Kuyu genişledikçe elektronun bağlanma enerjisinin azaldığı gözlemlenmiştir. Yabancı atomun kuyunun duvarına doğru yaklaştıkça bağlanma enerjisinin azaldığı gözlemlenmiştir. Bulunan bu sonuçlar literatür ile uyum içindedir.

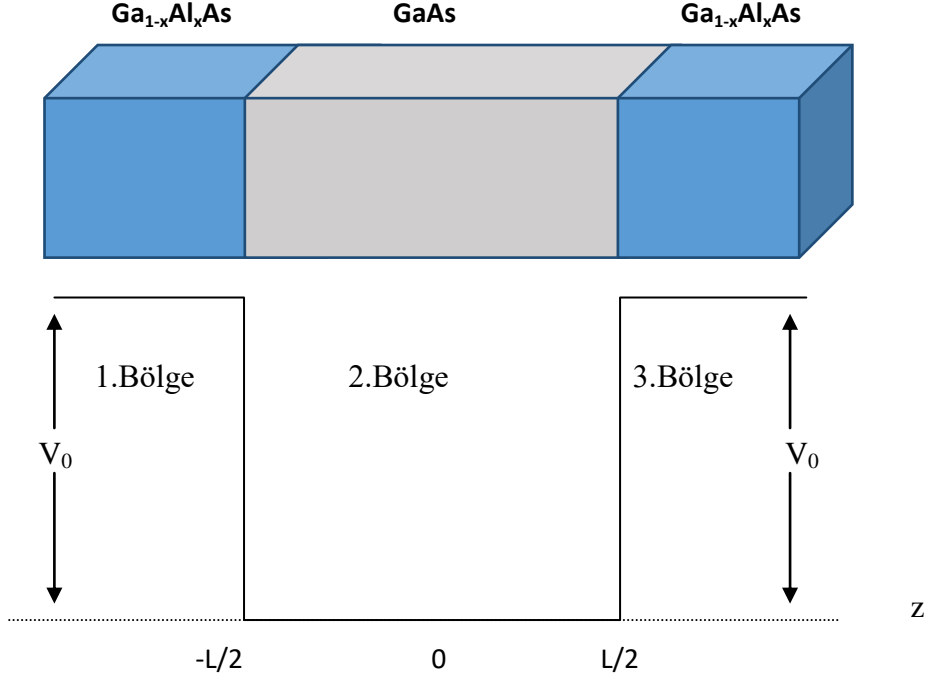
Şekil 17’de yine sonsuz kuantum kuyusunda bulunan yabancı atom etkisi altındaki bir elektronun bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre grafiği çizilmiş ve bulunan sonuçlar desteklenmiştir. Bu şekil yukarıdaki fortran programında kuyu genişliğine göre olan veri döngüsü, yabancı atomun konumuna göre tekrar düzenlenerek çizilmiş ve veriler alınmıştır. Kuyu genişliği için dört farklı değer alınmıştır. Bu grafikte de yabancı atomun konumun kuyu duvarına yaklaştıkça bağlanma enerjisini azalttığını görebiliyoruz. Bunun yanında kuyu genişliğinin artması

ile bağlanma enerjisinin azaldığını gözlemliyoruz. Bu sonuçlarımızda şekil 16'daki gibi literatür ile uyumludur.



Şekil 17. Sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna bağlı değişim grafiği. Kuyu genişliğinin dört farklı konumu için çizilmiştir.

5. SONLU KUANTUM KUYUSU



Şekil 18.Sonlu kuantum kuyusu

Yukarıdaki malzemelerle oluşturulan yapıda bir elektron potansiyel duvarları arasına hapsedilmiştir. Oluşan yapıda üç bölge olup, bu bölgelerde elektronun dalga fonksiyonları ve Hamiltonien'leri aşağıdaki gibi tanımlanmıştır. (Harrison, 2005, Yaman, 2010).

1.Bölge de, $\left(z < -\frac{L}{2}\right), \psi_1(z), H_1$

2.Bölge de, $\left(-\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2}\right), \psi_2(z), H_2$

3.Bölge de, $\left(\frac{L}{2} < z\right), \psi_3(z), H_3.$

Bu tür yapıda potansiyel enerji deęiřimi

$$V(z) = \left\{ \begin{array}{ll} 1. \text{ Bölge, } & V_0 \\ 2. \text{ Bölge, } & 0 \\ 3. \text{ Bölge, } & V_0 \end{array} \right\}$$

řeklinde yazılır. Tanımlanmış olan bölgelerde elektron için Schrödinger denklemleri ařaęıdaki gibi yazılabilir

1.Bölge için ;

$$H_1 \psi_1(z) = E \psi_1(z) \quad (5.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_1(z) + V_0 \Psi_1(z) = E \Psi_1(z) \quad (5.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_1(z) + V_0 \Psi_1(z) - E \Psi_1(z) = 0 \quad (5.3)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} \Psi_1(z) - \frac{2m^*}{\hbar^2} V_0 \Psi_1(z) + \frac{2m^*}{\hbar^2} E \Psi_1(z) = 0 \quad (5.4)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} \Psi_1(z) - \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E) \Psi_1(z) = 0 \quad (5.5)$$

$$k_1^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E), \quad D^2 = \frac{d^2}{dz^2} \text{ olmak üzere } \frac{2m^*}{\hbar^2} = 1 \text{ alınarak } a^* \text{ ve } R^*$$

biriminde

$$\frac{d^2}{dz^2} \Psi_1(z) - (V_0 - E)\Psi_1(z) = 0 \quad (5.6)$$

$$(D^2 - k_1^2) \Psi_1(z) = 0 \quad (5.7)$$

şeklinde yazılır. Bu diferansiyel denklemin çözümü

$\Psi_1(z) = Ae^{k_1(z)} + Be^{-k_1(z)}$ dir. Sonlu kuantum kuyusunun 1. bölgesinde çözüm

$$\Psi_1(z) = Ae^{k_1(z)} \quad , \quad z < -\frac{L}{2} \quad (5.8)$$

olarak ifade edilir. (Harrison, 2005, Yaman, 2010).

2.Bölge için ;

$$H_2 \psi_2(z) = E \psi_2(z) \quad (5.9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_2(z) = E \Psi_2(z) \quad (5.10)$$

$$-\frac{d^2}{dz^2} \Psi_2(z) - \frac{2m^*}{\hbar^2} E \Psi_2(z) = 0 \quad (5.11)$$

$k_2^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} E$, $D^2 = \frac{d^2}{dz^2}$ olmak üzere $\frac{2m^*}{\hbar^2} = 1$ alınarak a^* ve R^* biriminde

$$(D^2 + k_2^2) \Psi_2(z) = 0 \quad (5.12)$$

$$\Psi_2(z) = B \cos(k_2 z) + D \sin(k_2 z) \quad (5.13)$$

2. bölgedeki elektron için dalga fonksiyonu

$$\Psi_2(z) = B \cos(k_2 z)$$

alınır.

3. Bölge için ;

$$H_3 \psi_3(z) = E \psi_3(z) \quad (5.14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_3(z) + V_0 \Psi_3(z) = E \Psi_3(z) \quad (5.15)$$

$$k_3 = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad , \quad D^2 = \frac{d^2}{dz^2} \quad , \quad \frac{2m^*}{\hbar^2} = 1 \quad \text{alınarak} \quad a^* \text{ ve } R^*$$

biriminde

$$(D^2 - k_3^2) \Psi_3(z) = 0 \quad (5.15)$$

Bu denklemin çözümü, $\frac{L}{2} < z$ bölgesi için

$$\Psi_3(z) = C e^{-k_3(z)} \quad (5.16)$$

alınır.

Bu bilgilere dayanarak her üç bölgede $\psi(z)$ dalga fonksiyonumuzu aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\psi(z) = \left\{ \begin{array}{ll} A e^{k_1(z)}, & z < -\frac{L}{2} \\ B \cos(k_2(z)), & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ C e^{-k_3(z)}, & \frac{L}{2} < z \end{array} \right\}$$

Burada A, B, C, katsayıları sınır koşullarından bulunabilir. Dalga fonksiyonumuzun kuyu sınırlarında sürekli olduğunu göz önüne aldığımızda sınır koşullarını

$$z = -\frac{L}{2} \quad \Psi_1\left(-\frac{L}{2}\right) = \Psi_2\left(-\frac{L}{2}\right), \quad \frac{d\Psi_1(z)}{dz}\Big|_{z=-\frac{L}{2}} = \frac{d\Psi_2(z)}{dz}\Big|_{z=-\frac{L}{2}}$$

$$z = \frac{L}{2} \quad \Psi_2\left(\frac{L}{2}\right) = \Psi_3\left(\frac{L}{2}\right), \quad \frac{d\Psi_2(z)}{dz}\Big|_{z=\frac{L}{2}} = \frac{d\Psi_3(z)}{dz}\Big|_{z=\frac{L}{2}}$$

şeklinde yazarız. Buradan A ve C katsayıları için

$$A = B e^{k_1\left(\frac{L}{2}\right)} \cos\left(k_2 \frac{L}{2}\right)$$

$$C = B e^{k_3\left(\frac{L}{2}\right)} \cos\left(k_2 \frac{L}{2}\right)$$

eşitlikleri bulunur. Bunlara göre dalga fonksiyonlarımızı

$$\psi(z) = \left\{ \begin{array}{ll} B e^{k_1 \left(\frac{L}{2}\right)} \cos\left(k_2 \frac{L}{2}\right) e^{k_1 z}, & z < -\frac{L}{2} \\ B \cos(k_2(z)), & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ B e^{k_3 \left(\frac{L}{2}\right)} \cos\left(k_2 \frac{L}{2}\right) e^{-k_3 z}, & \frac{L}{2} < z \end{array} \right\}$$

biçiminde yazarız. Yine sınır koşullarından bulduğumuz transandental denklem yardımı ile ; k_1 , k_2 ve k_3 değerlerini bulabiliriz. Bu denklem biraz işlem yapıldığında ($k_1=k_3$ için)

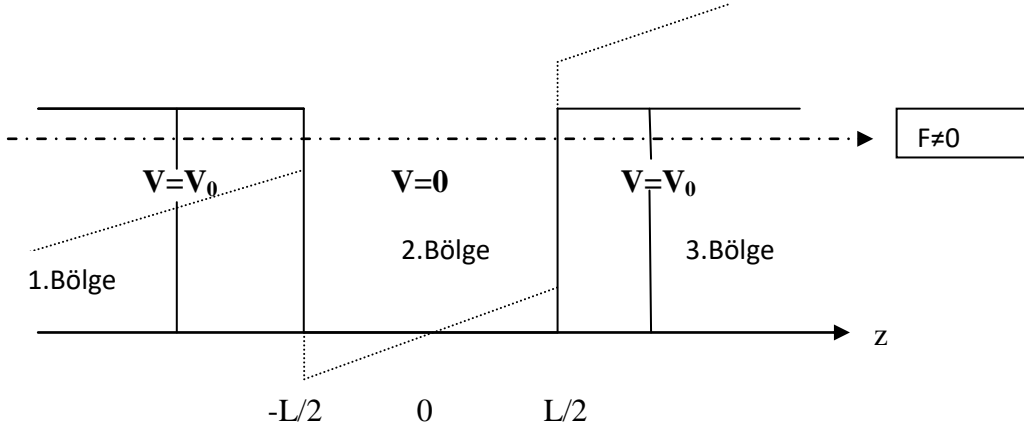
$$k_2 \tan\left(k_2 \frac{L}{2}\right) = k_1$$

şeklinde bulunabilir. Bu katsayılar bulunduktan sonra kuyu içinde bulunan elektronun taban durum enerjisini bulmak için

$$E = \left[\frac{\langle \psi_1(z) | H_1 | \psi_1(z) \rangle + \langle \psi_2(z) | H_2 | \psi_2(z) \rangle + \langle \psi_3(z) | H_3 | \psi_3(z) \rangle}{\langle \psi_1(z) | \psi_1(z) \rangle + \langle \psi_2(z) | \psi_2(z) \rangle + \langle \psi_3(z) | \psi_3(z) \rangle} \right] \quad (5.17)$$

ifadesinden yararlanabiliriz. (Yavuz 2011).

5.1. Sonlu Kuantum Kuyusuna Elektrik Alan Etkisi



Şekil 19. Elektrik alan etkisindeki sonlu kuantum kuyusu

Sonlu kuantum kuyusuna $+z$ yönünde elektrik alan uygulandığında Hamiltonien'e $H_f = e F z$ terimi eklenir. Bu terim elektrik alandan gelen katkıdır. Bu durumda elektrik alanın etkisindeki sonlu bir kuantum kuyusu için yeni Hamiltonien, her bir bölge için

$$1. \text{ bölge için } H_{F1} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 + e F z \quad (5.1.1)$$

$$2. \text{ bölge için } H_{F2} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + e F z \quad (5.1.2)$$

$$3. \text{ bölge için } H_{F3} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 + e F z \quad (5.1.3)$$

şeklinde yazılır. Bu yazılan Hamiltonien'lere göre her bölge için Schrödinger denklemleri

$$1. \text{ bölge için } \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 + e F z \right] \psi_1^F(z) = E \psi_1^F(z) \quad (5.1.4)$$

$$2. \text{ bölge için } \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + e F z \right] \psi_2^F(z) = E \psi_2^F(z) \quad (5.1.5)$$

$$3. \text{ bölge için } \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 + e F z \right] \psi_3^F(z) = E \psi_3^F(z) \quad (5.1.6)$$

olur. Bu kuyu için yazılan bu denklemlerin yaklaşık çözümleri aşağıda ifade edilmiştir. (Akbas,2011, Erdogan,2009)

$$\psi_{el}(z) = \left\{ \begin{array}{l} 1. \text{ Bölge, } N \cos\left(\frac{k_2 L}{2}\right) e^{k_1 L/2} e^{k_1 z} e^{-\beta z} = \psi_1^F(z) \quad z \leq -\frac{L}{2} \\ 2. \text{ Bölge, } N \cos(k_2 z) e^{-\beta z} = \psi_2^F(z) \quad -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ 3. \text{ Bölge, } N \cos\left(\frac{k_2 L}{2}\right) e^{k_3 L/2} e^{-k_3 z} e^{-\beta z} = \psi_3^F(z) \quad z \geq \frac{L}{2} \end{array} \right\} \quad (5.1.7)$$

Bu çözümler kuyu içindeki elektrik alan etkisindeki elektronun dalga fonksiyonudur. Bu dalga fonksiyonları ile elektronun taban durum enerjisi

$$E = \left[\frac{\langle \psi_1^F(z) | H_{F1} | \psi_1^F(z) \rangle + \langle \psi_2^F(z) | H_{F2} | \psi_2^F(z) \rangle + \langle \psi_3^F(z) | H_{F3} | \psi_3^F(z) \rangle}{\langle \psi_1^F(z) | \psi_1^F(z) \rangle + \langle \psi_2^F(z) | \psi_2^F(z) \rangle + \langle \psi_3^F(z) | \psi_3^F(z) \rangle} \right] \quad (5.1.9)$$

ifadesi kullanılarak hesaplanır. Sınır koşullarından bulunan transandental ($k_1=k_3$ için)

$$k_2 \tan\left(k_2 \frac{L}{2}\right) = k_1 \quad (5.1.10)$$

şeklindedir(Yavuz 2011). Bu yazılan denklemler yardımıyla kuyu içindeki elektron için bilgisayarda Fortran programlama dilinde programlar yazılarak, elektrik alan etkisindeki elektronun dalga fonksiyonu ve enerji grafikleri çizilmiştir. Çizilen bu grafikler ve Fortran programları aşağıda verilmiştir.

Dalga fonksiyonunun konuma göre grafiğini çizdiren fortran programı:

```
IMPLICIT REAL*8(A-Z)
open(3,file='sldal3.dat')
SSS=10**(-6.0D0)
RY=5.830D0
V=225.0D0/RY
L=1.0D0
K=1
K=2.52265510D0
DK=0.000000010D0
K=2.52265510D0
DK=0.0000010D0
1K=K+DK
FONK=K*DTAN(K*L/2.0D0)-DSQRT(V-K*K)
CWRITE(1,*)K,FONK
IF(ABS(FONK).LT.SSS) GO TO 2
GO TO 1
2ALFA=DSQRT(V-K*K)
WRITE(*,*) 'K=',FONK=',K,FONK
WRITE(*,*) 'K=',ALFA=',K,ALFA
N1=-DEXP(ALFA*(L-1999999998.0D0))*(DCOS(K*L)/(4.0D0*ALFA)
$+1.0D0/(4.0D0*ALFA))+DCOS(K*L)/(4.0D0*ALFA)+1.0D0/(4.0D0*A
$LF)+DSIN(K*L)/(2.0D0*K)+L/2.0D0+(-DEXP(ALFA*(L-1999999999
$8.0D0))*(DCOS(K*L)/(4.0D0*ALFA)+1.0D0/(4.0D0*ALFA)))+DCOS(
$K*L)/(4.0D0*ALFA)+1.0D0/(4.0D0*ALFA)
No=(1.0d0)/(dsqrt(N1))
CNo=No*No*N1
No=dexp(1.0d0)
WRITE(*,*) 'No=',No
```


$F=100.0D0$
 $DF=0.0D0$
 $7F=F+DF$
 $BETA=0.0D0$
 $DBETA=0.01D0$
 $BETA=BETA+DBETA$
 $N=F/R_Y$
 $e=\text{dexp}(1.0d0)$
 $UT1=e^{*(ALFA*(L-19999999998.0D0)+19999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA$
 $\$*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))-e^{*BETA*($
 $\$(ALFA*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))$
 $UT2=e^{*(ALFA*(L-19999999998.0D0)+19999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.$
 $\$0D0*ALFA*L*(9999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N-V)$
 $\$+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)+L*(2.0D0*ALFA*L*(9$
 $\$9999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N-V)+L*N)/(8.0D0*$
 $\$(ALFA*L-BETA)**2.0d0))-e^{*BETA*(L*(ALFA*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2$
 $\$.0D0*V-L*N)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)+L*(ALFA$
 $\$*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2.0D0*V-L*N)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**$
 $\$2.0D0))$
 $UT3=e^{*BETA*((BETA*K*L*DSIN(K*L)-BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.$
 $\$0D0)/(4.0D0*BETA*L)-BETA*DCOS(K*L)/(4.0D0*L))+e^{*(-BETA)*(BETA*$
 $\$DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+K*DSIN(K*L)/4.0D0+(BETA**2.0D0-K**2.0D0*L**$
 $\$2.0D0)/(4.0D0*BETA*L))$
 $UT4=-L**2.0D0*N*e^{*BETA*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0-BETA**2.0$
 $\$D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)+BETA**2.$
 $\$0D0*K*L*(BETA**2.0D0-2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)+BE$
 $\$TA**5.0D0-BETA**4.0D0+2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0-2.0D0$
 $\$*BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+BETA*K**4.0D0*L**4.0D0-K**4.0D0*$
 $\$L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2$
 $\$.0D0)-L**2.0D0*N*e^{*(-BETA)*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0+BETA**2.0$
 $\$D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)-BETA**2.$
 $\$0D0*K*L*(BETA**2.0D0+2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)+BE$
 $\$TA**5.0D0+BETA**4.0D0+2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+2.0D0$
 $\$*BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+BETA*K**4.0D0*L**4.0D0+K**4.0D0*$
 $\$L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2$
 $\$.0D0)$
 $UT5=e^{*(ALFA*(L-19999999998.0D0)-19999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA$
 $\$*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))-e^{*(-BETA$
 $\$)*((ALFA*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))$
 $UT6=e^{*(-BETA)*(L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)$
 $\$*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)+L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)$
 $\$+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0))-e^{*(ALFA$
 $\$(L-19999999998.0D0)-19999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.0D0*ALFA*L*($
 $\$9999999999.0D0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)*DCOS(K$
 $\$*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)+L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.0D$

$$\$0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA$$

$$\$)**2.0D0))$$

$$AT1=L*e**BETA*(DCOS(K*L)+1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))-L*e**(ALF$$

$$\$A*(L-19999999998.0D0)+19999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS(K*L)+1.0D0$$

$$)/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))$$

$$AT2=L*e**BETA*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)+BETA*K*L*DSIN(K*L)+BETA**2$$

$$2$$

$$$.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.$$

$$\$0D0))-L*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)-BETA*K*L*DSIN(K*L)+BE$$

$$\$TA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*$$

$$\$L**2.0D0))$$

$$AT3=L*e**(-BETA)*(DCOS(K*L)+1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))-L*e**($$$

$$ALFA*(L-19999999998.0D0)-19999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS(K*L)+1.0$$

$$UT=UT1+UT2+UT3+UT4+UT5+UT6$$

$$AT=AT1+AT2+AT3$$

$$Nf=(1.0d0)/(dsqrt(AT))$$

$$EE1=UT/AT$$

C*****

$$5BETA=BETA+DBETA$$

C*****

$$N=F/R$$

$$e=dexp(1.0d0)$$

$$UT1=e**(ALFA*(L-19999999998.0D0)+19999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA$$

$$\$*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))-e**BETA*($$

$$$(ALFA*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))$$

$$UT2=e**(ALFA*(L-19999999998.0D0)+19999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.$$

$$\$0D0*ALFA*L*(9999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N-V)$$

$$\$+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)+L*(2.0D0*ALFA*L*(9$$

$$\$9999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N-V)+L*N)/(8.0D0*$$

$$$(ALFA*L-BETA)**2.0d0))-e**BETA*(L*(ALFA*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2$$

$$$.0D0*V-L*N)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)+L*(ALFA$$

$$\$*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2.0D0*V-L*N)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**$$

$$\$2.0D0))$$

$$UT3=e**BETA*((BETA*K*L*DSIN(K*L)-BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.$$

$$\$0D0)/(4.0D0*BETA*L)-BETA*DCOS(K*L)/(4.0D0*L))+e**(-BETA)*(BETA*$$

$$\$DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+K*DSIN(K*L)/4.0D0+(BETA**2.0D0-K**2.0D0*L**$$

$$\$2.0D0)/(4.0D0*BETA*L))$$

$$UT4=-L**2.0D0*N*e**BETA*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0-BETA**2.0$$

$$\$D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)+BETA**2.$$

$$\$0D0*K*L*(BETA**2.0D0-2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)+BE$$

$$\$TA**5.0D0-BETA**4.0D0+2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0-2.0D0$$

$$*\$BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+BETA*K**4.0D0*L**4.0D0-K**4.0D0*$$

$$\$L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2$$

$$$.0D0)-L**2.0D0*N*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0+BETA**2.0$$

$$\$D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)-BETA**2.$$

```

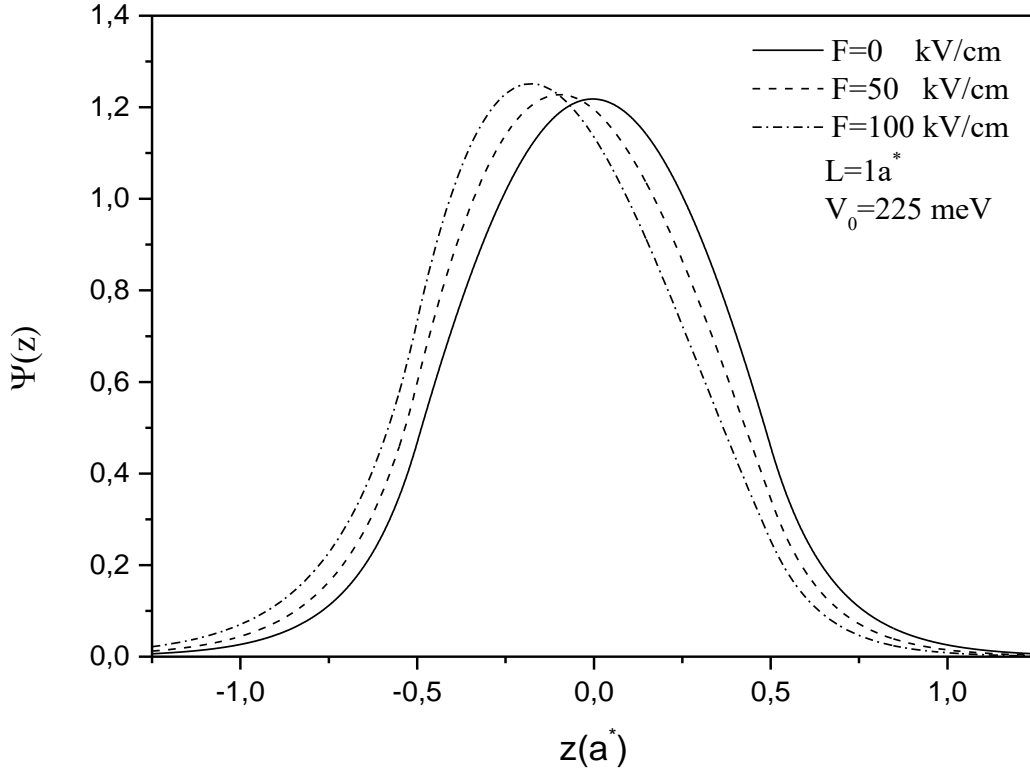
$0D0*K*L*(BETA**2.0D0+2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)+BE
$TA**5.0D0+BETA**4.0D0+2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+2.0D0
*$BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+BETA*K**4.0D0*L**4.0D0+K**4.0D0*
$L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2
$.0D0)
UT5=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA
$L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))-e**(-BETA
$)*((ALFA*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))
UT6=e**(-BETA)*(L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)
*$DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)+L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)
$+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0))-e**(ALFA
$(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.0D0*ALFA*L*(
$9999999999.0D0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)*DCOS(K
$L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)+L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.0D
0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA
$)**2.0D0))
AT1=L*e**BETA*(DCOS(K*L)+1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))-L*e**(ALF
$A*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS(K*L)+1.0D0)
$/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))
AT2=L*e**BETA*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)+BETA*K*L*DSIN(K*L)+BETA**
2
$.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.
$0D0))-L*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)-BETA*K*L*DSIN(K*L)+BE
$TA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*
$L**2.0D0))
AT3=L*e**(-BETA)*(DCOS(K*L)+1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))-L*e**(
$ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS(K*L)+1.0
$D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))
UT=UT1+UT2+UT3+UT4+UT5+UT6
AT=AT1+AT2+AT3
Nf=(1.0d0)/(dsqrt(AT))
EE2=UT/AT
IF(EE2.GT.EE1) GO TO 6
EE1=EE2
GO TO 5
6 X=-1.250D0
DX=0.0010D0
C*****
45IF(X.LT.(-L/2.0D0)) PSI=Nf*DCOS(K*L/2.0D0)*DEXP(ALFA*L/2.0D0)
$*EXP(ALFA*X)*DEXP(-BETA*X)
C*****
IF(X.GE.(-L/2.0D0).AND.X.LE.(L/2.0D0)) PSI=Nf*DCOS(K*X)*DEXP(
$-BETA*X/L)
C*****
IF(X.GT.(L/2.0D0)) PSI=Nf*DCOS(K*L/2.0D0)*DEXP(ALFA*L/2.0D0)

```

```

$*EXP(-ALFA*X)*DEXP(-BETA*X)
C*****
WW=0.30D0/L
WRITE(*,*)X,PSI
WRITE(3,*)X,PSI
X=X+DX
IF(X.LE.1.250D0) GO TO 45
WRITE(*,*) '/////////////////////////////////////'
WRITE(*,*) ' L=',L
WRITE(*,*) ' V0=',V
WRITE(*,*) ' FONK=',FONK
WRITE(*,*) ' K=',K
WRITE(*,*) ' ALFA=',ALFA
WRITE(*,*) ' C1=',C1
WRITE(*,*) ' EE=',EE
WRITE(*,*) ' NORM=',NORM
WRITE(*,*) ' BETA=',BETA
WRITE(*,*) ' F,N=',F,N
WRITE(*,*) '/////////////////////////////////////'
450 END

```



Şekil 20. Dalga fonksiyonunun $z(a^*)$ konumuna göre grafiği

Şekilde elektrik alan altındaki sonlu kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun dalga fonksiyonunun konuma göre çizilen grafiği verilmiştir. Burada elektrik alanın üç farklı değeri için dalga fonksiyonu çizilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi elektrona $+z$ yönünde elektrik alan uygulandığında elektronun konumu (bulunma olasılığı) $-z$ yönünde kaymaktadır. Yani elektrik alandan kaynaklanan elektrikselsel kuvvet elektronu $-z$ yönünde hareket ettirmiştir. Bu grafiğe göre yapılan hesapların doğru olduğu gözlemlenmektedir. Grafikte kuyunun 1. ve 3. bölgesinde çok az ihtimalle bulunabileceği gözlemlenmektedir. Kuyunun ortasında (2. Bölge) bulunma ihtimalinin de çok yüksek olduğunu söyleyebiliriz. Burada $+z$ yönünde uygulanan elektrik alan kuyunu ortasında bulunma ihtimali çok yüksek olan elektronu $-z$ yönüne doğru kaydırarak, kuyunun ortasında bulunma ihtimalini biraz daha değiştirmiştir. Elektronun bulunma olasılığını kuyunun sol tarafına doğru kaydırmıştır. Bu grafikte kuyu genişliği $L=100 \text{ \AA}$, elektrik alan $F=0, 50, 100 \text{ Kv/cm}$ alınmıştır.

Enerjinin kuyu genişliğine göre grafiğini çizdiren fortran programı:

```
IMPLICIT REAL*8(A-Z)
open(3,file='slen3.dat')
SSS=10**(-6.0D0)
RY=5.830D0
V=225.0D0/RY
L=0.30d0
45 dL=0.10D0
L=L+dL
K=0.010d0
DK=0.000000010D0
1 K=K+DK
FONK=K*DTAN(K*L/2.0D0)-DSQRT(V-K*K)
C WRITE(1,*)K,FONK
IF(ABS(FONK).LT.SSS) GO TO 2
GO TO 1
2 ALFA=DSQRT(V-K*K)
WRITE(*,*) 'K=',FONK=',K,FONK
WRITE(*,*) 'K=',ALFA=',K,ALFA
N1=-DEXP(ALFA*(L-1999999998.0D0))*(DCOS(K*L)/(4.0D0*ALFA)
$+1.0D0/(4.0D0*ALFA))+DCOS(K*L)/(4.0D0*ALFA)+1.0D0/(4.0D0*A
$LFA)+DSIN(K*L)/(2.0D0*K)+L/2.0D0+(-DEXP(ALFA*(L-1999999999
$8.0D0))*(DCOS(K*L)/(4.0D0*ALFA)+1.0D0/(4.0D0*ALFA)))+DCOS(
$K*L)/(4.0D0*ALFA)+1.0D0/(4.0D0*ALFA)
No=(1.0d0)/(dsqrt(N1))
CNo=No*No*N1
No=dexp(1.0d0)
WRITE(*,*) 'No=',No
F=100.0D0
DF=0.0D0
7 F=F+DF
BETA=0.0D0
DBETA=0.001D0
BETA=BETA+DBETA
N=F/RY
e=dexp(1.0d0)
UT1=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA
$*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))-e**BETA*(
$(ALFA*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))
UT2=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.
$0D0*ALFA*L*(999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(999999999.0D0*N-V))
```

$$\begin{aligned}
& \$+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)+L*(2.0D0*ALFA*L*(9 \\
& \$999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(999999999.0D0*N-V)+L*N)/(8.0D0* \\
& \$(ALFA*L-BETA)**2.0D0))-e**BETA*(L*(ALFA*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2 \\
& \$.0D0*V-L*N)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)+L*(ALFA \\
& \$*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2.0D0*V-L*N)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)** \\
& \$2.0D0))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
UT3=& e**BETA*((BETA*K*L*DSIN(K*L)-BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2. \\
& \$0D0)/(4.0D0*BETA*L)-BETA*DCOS(K*L)/(4.0D0*L))+e**(-BETA)*(BETA* \\
& \$DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+K*DSIN(K*L)/4.0D0+(BETA**2.0D0-K**2.0D0*L** \\
& \$2.0D0)/(4.0D0*BETA*L))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
UT4=& -L**2.0D0*N*e**BETA*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0-BETA**2.0 \\
& \$D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)+BETA**2. \\
& \$0D0*K*L*(BETA**2.0D0-2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)+BE \\
& \$TA**5.0D0-BETA**4.0D0+2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0-2.0D0 \\
& \$*BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+BETA*K**4.0D0*L**4.0D0-K**4.0D0* \\
& \$L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2 \\
& \$.0D0)-L**2.0D0*N*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0+BETA**2.0 \\
& \$D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)-BETA**2. \\
& \$0D0*K*L*(BETA**2.0D0+2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)+BE \\
& \$TA**5.0D0+BETA**4.0D0+2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+2.0D0 \\
& \$*BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+BETA*K**4.0D0*L**4.0D0+K**4.0D0* \\
& \$L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2 \\
& \$.0D0)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
UT5=& e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA \\
& \$*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))-e**(-BETA \\
& \$)*((ALFA*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
UT6=& e**(-BETA)*(L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N) \\
& \$*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)+L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V) \\
& \$+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0))-e**(ALFA \\
& \$*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.0D0*ALFA*L*(\\
& \$999999999.0D0*N+V)+2.0D0*BETA*(999999999.0D0*N+V)+L*N)*DCOS(K \\
& \$*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)+L*(2.0D0*ALFA*L*(999999999.0D \\
& \$0*N+V)+2.0D0*BETA*(999999999.0D0*N+V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA \\
& \$)**2.0D0))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
AT1=& L*e**BETA*(DCOS(K*L)+1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))-L*e**(ALF \\
& \$A*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS(K*L)+1.0D0) \\
& \$/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
AT2=& L*e**BETA*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)+BETA*K*L*DSIN(K*L)+BETA** \\
& 2 \\
& \$.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2. \\
& \$0D0))-L*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)-BETA*K*L*DSIN(K*L)+BE \\
& \$TA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0* \\
& \$L**2.0D0))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
AT3=& L*e**(-BETA)*(DCOS(K*L)+1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))-L*e**(\\
& \$ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS(K*L)+1.0
\end{aligned}$$

```

$D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))
UT=UT1+UT2+UT3+UT4+UT5+UT6
AT=AT1+AT2+AT3
Nf=(1.0d0)/(dsqrt(AT))
EE1=UT/AT
C*****
5  BETA=BETA+DBETA
C*****
N=F/R Y
e=dexp(1.0d0)
UT1=e**((ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA
*$*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))-e**BETA*(
$(ALFA*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))
UT2=e**((ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.
$0D0*ALFA*L*(999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(999999999.0D0*N-V)
$+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)+L*(2.0D0*ALFA*L*(9
$999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(999999999.0D0*N-V)+L*N)/(8.0D0*
$(ALFA*L-BETA)**2.0d0))-e**BETA*(L*(ALFA*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2
$.0D0*V-L*N)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)+L*(ALFA
*$*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2.0D0*V-L*N)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**
$2.0D0))
UT3=e**BETA*((BETA*K*L*DSIN(K*L)-BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.
$0D0)/(4.0D0*BETA*L)-BETA*DCOS(K*L)/(4.0D0*L))+e**(-BETA)*(BETA*
$DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+K*DSIN(K*L)/4.0D0+(BETA**2.0D0-K**2.0D0*L**
$2.0D0)/(4.0D0*BETA*L))
UT4=-L**2.0D0*N*e**BETA*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0-BETA**2.0
$D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)+BETA**2.
$0D0*K*L*(BETA**2.0D0-2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)+BE
$TA**5.0D0-BETA**4.0D0+2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0-2.0D0
$*BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+BETA*K**4.0D0*L**4.0D0-K**4.0D0*
$L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2
$.0D0)-L**2.0D0*N*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0+BETA**2.0
$D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)-BETA**2.
$0D0*K*L*(BETA**2.0D0+2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)+BE
$TA**5.0D0+BETA**4.0D0+2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+2.0D0
$*BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+BETA*K**4.0D0*L**4.0D0+K**4.0D0*
$L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2
$.0D0)
UT5=e**((ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA
*$*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))-e**(-BETA
$)*((ALFA*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))
UT6=e**(-BETA)*(L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)
$*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)+L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)
$+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0))-e**((ALFA
*$*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.0D0*ALFA*L*(

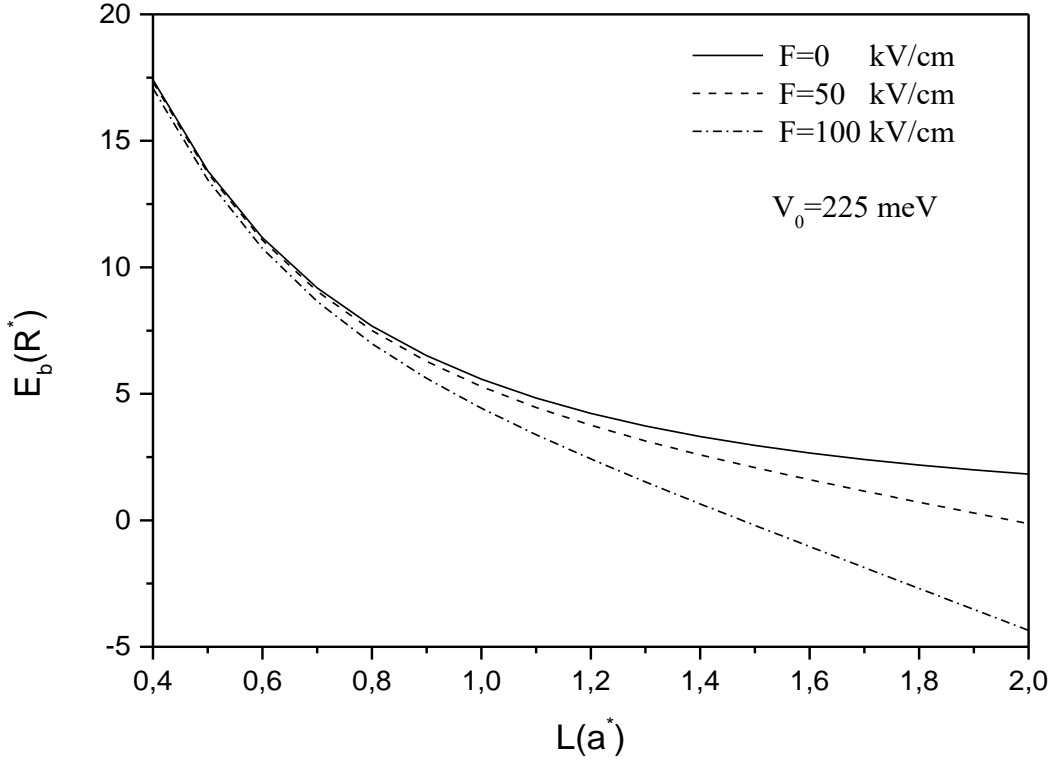
```



```

$9999999999.0D0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)*DCOS(K
$L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)+L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.0D
$0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA
$)**2.0D0))
AT1=L*e**BETA*(DCOS(K*L)+1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))-L*e**(ALF
$A*(L-19999999998.0D0)+19999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS(K*L)+1.0D0)
$/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))
AT2=L*e**BETA*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)+BETA*K*L*DSIN(K*L)+BETA**2
2
$.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.
$0D0))-L*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)-BETA*K*L*DSIN(K*L)+BE
$TA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*
$L**2.0D0))
AT3=L*e**(-BETA)*(DCOS(K*L)+1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))-L*e**(
$ALFA*(L-19999999998.0D0)-19999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS(K*L)+1.0
$D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))
UT=UT1+UT2+UT3+UT4+UT5+UT6
AT=AT1+AT2+AT3
Nf=(1.0d0)/(dsqrt(AT))
EE2=UT/AT
IF(EE2.GT.EE1) GO TO 6
c  WRITE(*,*)'L=',EE1=',L,EE1
EE1=EE2
GO TO 5
6  WRITE(*,*) '/////////////////////////////////////'
WRITE(*,*)L,EE1
WRITE(3,*)L,EE1
WRITE(*,*) '/////////////////////////////////////'
WRITE(*,*) ' L=',L
WRITE(*,*) ' Vo=',V
WRITE(*,*) 'FONK=',FONK
WRITE(*,*) ' K=',K
WRITE(*,*) 'ALFA=',ALFA
WRITE(*,*) 'BETA=',BETA
WRITE(*,*) 'F=',N=',F,N
IF(L.LT.1.950D0) GO TO 45
WRITE(*,*) '/////////////////////////////////////'
END

```



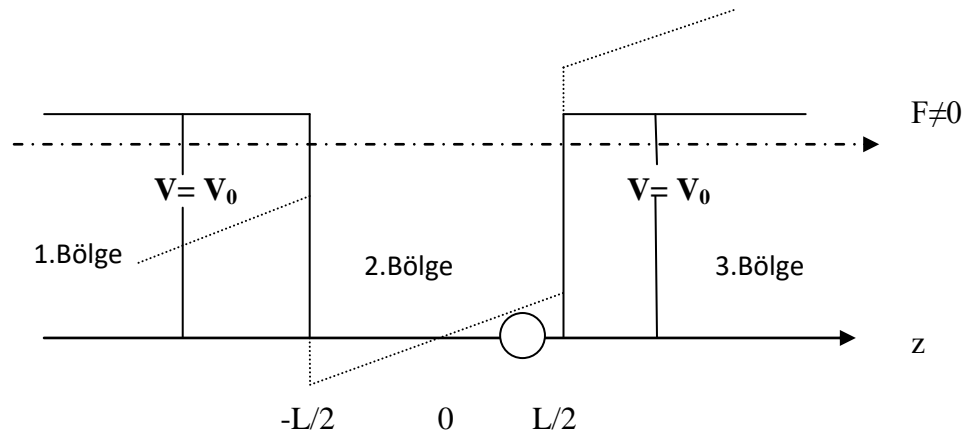
Şekil 21. Bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği

Bu grafikte elektrik alan etkisi altında bulunan kuyudaki bir elektronun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı olarak grafiği çizilmiştir. Grafikten de görüldüğü üzere elektrik alan kuyu içindeki elektronun enerjisini düşürmektedir. Burada elektronun enerjisinin azalmasının nedeni, elektrik alanın kuyunun potansiyel yapısına etkisinden dolayıdır. Elektrik alan kuyudaki elektronun hapsedilmesine etki etmiştir. Bu etki elektronun bağlanma enerjisini azaltmış ve bundan dolayı elektronun atoma bağlılığı azalmıştır. Kuyu genişliğinin ve elektrik alanın bazı değerlerinde enerjinin eksi değerler aldığı görülmektedir. Örneğin kuyu genişliğinin yaklaşık 150 \AA ve elektrik alanın 100 kV/cm olduğu yerde elektronun enerjisi eksi değer almıştır. Bunun nedeni 100 kV/cm elektrik alan değerinin bu kuyunun yapısını bozduğu anlamına gelir. Yani yarıiletken teknolojisi deneylerinde böyle bir kuyu örneğine 100 kV/cm değerinde bir elektrik alan uygulanamayacağını bize söylemektedir. Aynı durumu farklı elektrik

alanlarda, farklı kuyu genişliklerinde görmek mümkündür. Bu tür kuantum kuyu yapılarında elektrik alan şiddeti ve kuyu genişliği büyük öneme sahiptir.

Bu grafikte kuyu genişliğinin artması ile elektronun enerjisinin azaldığı gözlenmektedir. Bu beklenen bir durumdur. Kuyu genişliği arttıkça elektron daha serbest durumdadır, çünkü kuyu duvarları etkisi azalmıştır. Bu nedenle elektronun enerjisinin azalması beklenir.

5.2. Sonlu Kuantum Kuyusuna Elektrik Alan ve Yabancı Atomun Etkisi



Şekil 22. Elektrik alan –Yabancı atom etkisindeki sonlu kuantum kuyusu

Elektrik alan ve yabancı atomun varlığında sonlu kuyuda bulunan elektron için 1., 2. ve 3. Bölgedeki Hamiltonienler aşağıdaki biçimde yazılır. Burada yabancı atomun konumu z_i olarak tanımlanmış ve elektrik alan $+z$ yönünde uygulanmıştır. Burada $-\frac{e^2}{\epsilon r}$ elektronun donör iyonuna göre potansiyel enerjisi olup r elektron iyon mesafesidir. r 'nin silindirik koordinatlarda açık ifadesi $r = \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}$ biçimindedir. Daha önceki konularda belirttiğimiz gibi a^* etkin Bohr yarıçapı, R^* etkin Rydberg enerjisi olmak üzere ($\eta = e F$) elektronun her üç bölge için Hamiltonienler, (Yavuz 2011, Yaman 2010).

$$H_{1F}^i = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z + V_0 \quad (5.2.1)$$

$$H_{2F}^i = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} \quad (5.2.2)$$

$$H_{3F}^i = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z + V_0 \quad (5.2.3)$$

biçiminde yazılır. Buna göre her üç bölge için Schrödinger denklemleri aşağıdaki gibi yazılır.

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z + V_0 \right] \psi_{1F}^i(z, \rho) = E \psi_{1F}^i(z, \rho) \quad (5.2.4)$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z \right] \psi_{2F}^i(z, \rho) = E \psi_{2F}^i(z, \rho) \quad (5.2.5)$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + \eta z + V_0 \right] \psi_{3F}^i(z, \rho) = E \psi_{3F}^i(z, \rho) \quad (5.2.6)$$

Bu denklemler diferansiyel denklemler olup çözümlerini,

$$\psi_{1F}^i(\rho, z) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\rho}{2} \right) \rho^{\rho\rho/2} \rho^{\rho\rho} \rho^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (\rho-\rho\rho)^2}}{\rho}} \rho^{-\rho\rho} \quad (5.2.7)$$

$$\psi_{2F}^i(\rho, z) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\rho}{2} \right) \rho^{\rho\rho/2} \rho^{\rho\rho} \rho^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (\rho-\rho\rho)^2}}{\rho}} \rho^{-\rho\rho} \quad (5.2.8)$$

$$\psi_{3\alpha}(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha\beta}{2} \right)^{1/2} e^{-\alpha\beta} e^{-\sqrt{\rho^2 + (\alpha - \beta)^2}} e^{-\alpha\beta} \quad (5.2.9)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada λ ve β varyasyon parametreleri olup, β elektrik alandan ve λ yabancı atomdan dolayı gelen parametrelerdir ve bu parametreler minimizasyonla hesaplanırlar. Bu çözümler kuyu içindeki elektronu tanımlayan deneme dalga fonksiyonları olup taban durum için yazılmıştır. (Yavuz 2011, Yaman 2010). Bu dalga fonksiyonları ile elektronun enerjisi hesaplanabilir. Elektrik alan ve yabancı atom etkisindeki elektronun enerjisi

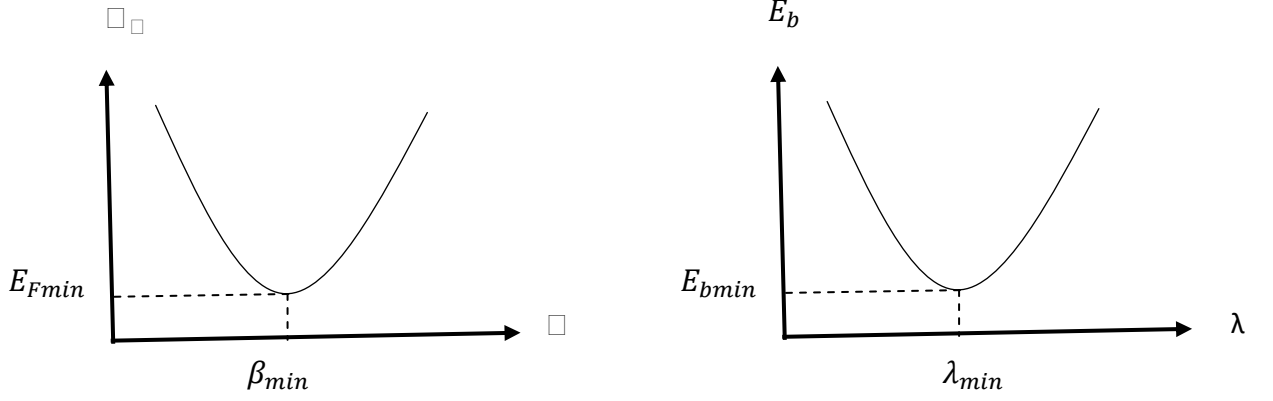
$$E_{\alpha\beta} = \left[\frac{\langle \psi_{1\alpha}(\alpha) | \psi_{1\alpha}(\alpha) \rangle + \langle \psi_{2\alpha}(\alpha) | \psi_{2\alpha}(\alpha) \rangle + \langle \psi_{3\alpha}(\alpha) | \psi_{3\alpha}(\alpha) \rangle}{\langle \psi_{1\alpha}(\alpha) | \psi_{1\alpha}(\alpha) \rangle + \langle \psi_{2\alpha}(\alpha) | \psi_{2\alpha}(\alpha) \rangle + \langle \psi_{3\alpha}(\alpha) | \psi_{3\alpha}(\alpha) \rangle} \right] \quad (5.2.10)$$

biçiminde hesaplanabilir. Bir önceki konuda, yabancı atomun olmadığı ve elektrik alanın olduğu durumdaki (5.1.9) denklemi göz önüne alınarak elektronun bağlanma enerjisi yazılabilir. Bağlanma enerjisini daha önceki konularda tanımladığımız gibi, yabancı atomun varlığındaki elektronun enerjileri ile yabancı atomun yokluğundaki elektronun enerjileri arasındaki farkı bağlanma enerjisi olarak yazabiliriz.

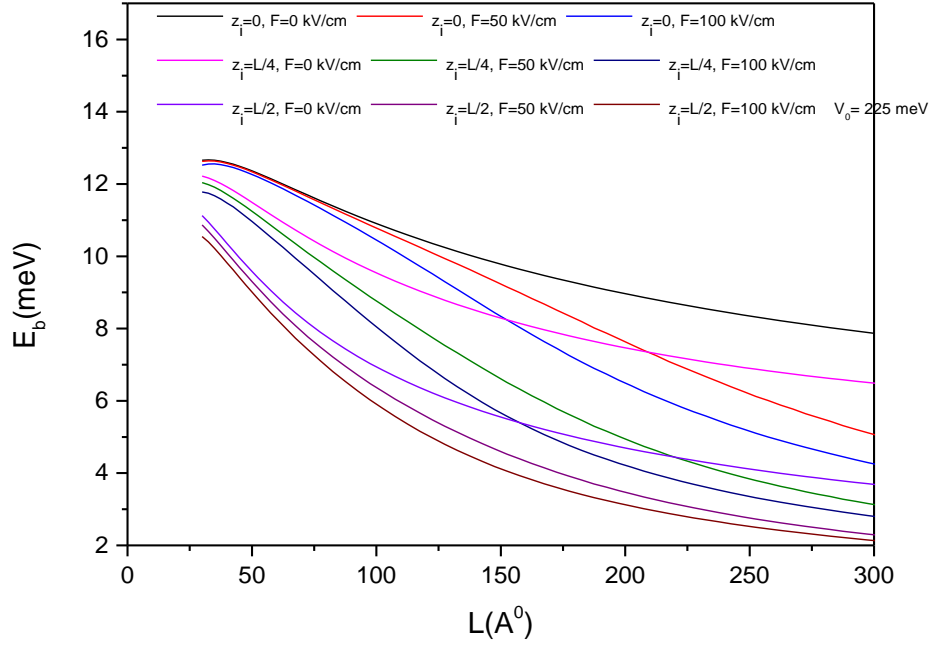
$$E_{\alpha\beta} = E_{\alpha} - E_{\beta}$$

Bu denkleme göre bağlanma enerjisi hesaplanırken transandantal denklem gerekli olacaktır. Bu denklem sınır koşullarında hesaplandığında yine bir önceki konudaki (5.1.10) denklemi ile aynı denklem elde edilecektir. Yani deneme dalga fonksiyonları değişmesine rağmen transandantal denklemi değişmeyecektir. Yeni dalga fonksiyonları ile sınır koşullarında hesap yapıldığında denklemin (5.1.10) denklemi ile aynı olduğu görülür. (Yavuz 2011, Yaman 2010).

Bağlanma enerjisi hesabında iki defa minimizasyon yapılması gerektiğine dikkat edilmelidir. Bu tezdeki hesaplarda önce β minimize edilmiş, daha sonra ise λ minimize edilmiştir.



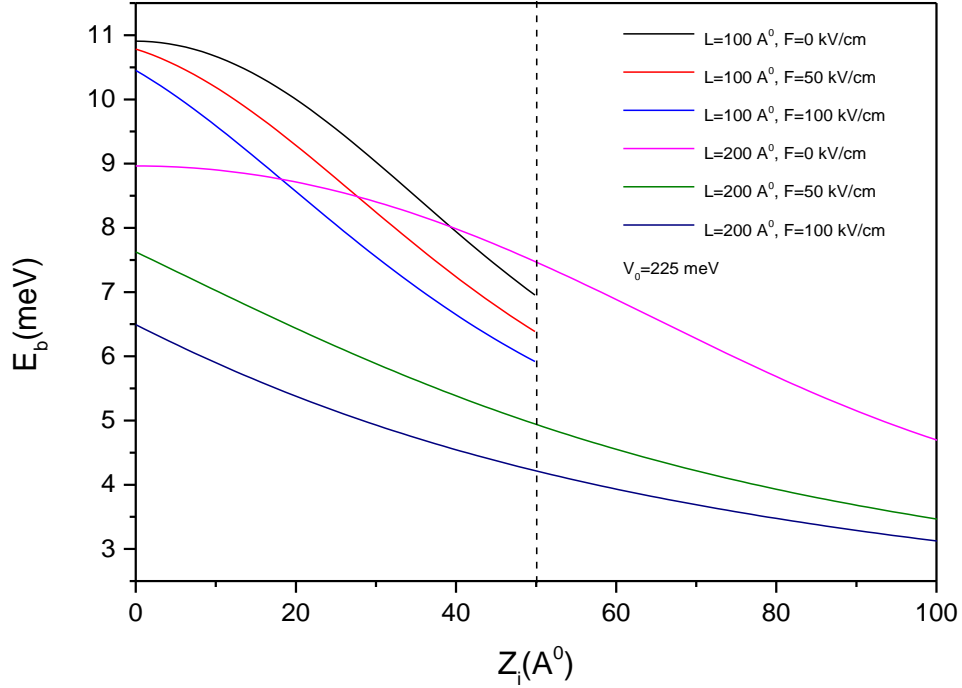
Bu bilgiler doğrultusunda kuyu içindeki elektron için bilgisayarda Fortran programlama dilinde bağlanma enerjilerini hesaplatan programlar yazıp, şekil 23 ve şekil 24 grafiklerini çizdik. Bu grafikleri çizen fortran programı bölüm 5.3 de verilmiş ve grafikler aşağıda gösterilmiştir. Verilen program şekil 23'ü çizdiren programdır. Şekil 24 grafiği çizilirken şekil 23 grafiğinin programı sadece döngü değişimi yapılarak kullanılmış ve şekil 24 grafiği çizilmiştir.



Şekil 23.Bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişim grafiği

Şekil 23’de bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre grafiği verilmiştir. Burada kuyu potansiyel derinliği 225 meV olarak alınmış ve yabancı atomun $z_i = 0, L/4, L/2$ değerleri ve elektrik alanın $F=0, 50, 100$ kV/cm değerleri kullanılarak grafikler çizilmiştir. Kuyu genişliği de 30 A^0 ile 300 A^0 arasında değiştirilmiştir. Kuyu genişliği arttıkça bağlanma enerjisinin azaldığı gözlenmektedir. Bu beklenen bir sonuçtur. Burada yabancı atom merkezde ($z_i=0$) kuyunun kenarında ($z_i=L/2$) ve merkez ile kuyu kenarı arasında olmak üzere ($z_i=L/4$) üç farklı yabancı atom konumu alınmıştır. Grafikten görüldüğü gibi yabancı atom kuyu kenarına doğru kaydıkça bağlanma enerjisinin azaldığı gözlemlenmiştir. Yani yabancı atom kuyu kenarına yaklaştığında elektronun bağlanması azalmıştır. Bunun yanında elektrik alanın artmasıyla bağlanma enerjisinin azaldığı gözlemlenmiştir. Elektrik alan elektronun bağlılığını azaltmıştır. Dar kuyularda bu etkinin daha az olduğu gözlemlenmiştir. Daha geniş kuyularda ise elektrik alan bağlanma enerjisini daha çok azaltmıştır. Şekil 23’de kullanılan yabancı atom konumu ve elektrik alan değerleri elektronun enerjisini düzenli olarak arttırmakta ya da azaltmaktadır. Kullanılan bu değerlerde sistem iyi çalışıyor gibi görünmektedir. Fakat

daha önceki konuda elektrik alanın $F=100$ kV/cm olduğu durumda yapının bozulduğunu gözlemiştik. Çünkü elektronun enerjisi eksi değerlere geçmekteydi.



Şekil 24.Bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişim grafiği

Şekil 24'de bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna bağlı grafiği iki farklı kuyu genişliği için ($L=100$ A⁰, 200 A⁰) çizilmiştir. Yabancı atom merkezden kuyunun kenarına doğru hareket ettirilmiştir. Yine elektrik alanın $F=0, 50, 100$ kV/cm ve kuyu potansiyel değeri $V_0=225$ meV olarak ele alınmıştır. Grafik 10'daki gibi yabancı atomun kuyu kenarına doğru yaklaştıkça azaldığı gözlenmiş olup bu grafik 10 grafiğini desteklemektedir. Şekil 24'de 100 A⁰ 'luk kuyu ile 200 A⁰ 'luk kuyunun grafiği aynı eksenlerde gösterilmiştir. Elektrik alanın artması bağlanma enerjilerini düşürdüğü gözlemlenmiştir. Şekil 23'teki gibi elektrik alanın küçük ve büyük kuyu genişliklerinde bağlanmayı nasıl etkilediği açıkça görülmektedir. Dar kuyuda ($L=100$ A⁰) elektrik alan bağlanma enerjisini düşürmekte daha çok zorlanmaktadır. Bunun nedeni dar kuyuda elektron daha sıkı bağlıdır. $L=200$ A⁰ olan geniş kuyuda bağlanma enerjisi elektrik alan şiddetinin arttırılmasıyla daha hızlı düşmektedir (azalmaktadır). Bu da geniş kuyularda elektronun dar kuyulara göre daha serbest olmasındandır.

5.3. Sonlu Kuantum Kuyusuna Elektrik Alan, Yabancı Atom ve Hidrostatik Basıncın Etkisi

Ga_{1-x}As_x/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda hidrostatik basıncın ve elektrik alan etkilerini inceleyelim. P hidrostatik basınç olmak üzere, etkin kütle yaklaşımı kullanılarak düzgün elektrik alan ve hidrostatik basınç etkisindeki elektron için Hamiltonien aşağıdaki gibi yazılır.

$$\square = -\frac{\hbar^2}{2m^*(\square)} \nabla^2 - \frac{q^2}{\epsilon(\square) \square} + \square \square \square + \square \square(\square, \square) \quad (5.3.1)$$

$$\square = \sqrt{\square^2 + (\square - \square \square)^2}$$

Basıncın etkisiyle kuyusunun genişliği;

$$\square(\square) = \square_0(1 - 1.5082 * 10^{-3} \square) \quad (5.3.2)$$

biçiminde yazılabilir.(A.M.Elbası,1993, H.Akbas,2011, A.Vanitha.2009, I.Erdogan,2009). Hidrostatik basınça bağlı olarak dielektrik sabitinin değişimi

$$\epsilon(\square) = 13.13 - 0.088 \square \quad (5.3.3)$$

şeklindedir. Burada etkin kütle ise

$$m^*(\square) = m^*(0) \square^{0,078 \square} \quad (5.3.4)$$

ifadesi ile hesaplanabilir. Basınç birimi GPa (1kbar = 0.1 GPa) olarak alınmıştır. (A.M.Elbası,1993, H.Akbas,2011, A.Vanitha.2009, I.Erdogan,2009).

Alüminyum konsantrasyonu x ve $\Delta \square \square(\square) = 1.55 \square + 0.37 \square^2$ olmak üzere

Enerji band aralığı $\Delta \square \square(\square, \square) = \Delta \square \square(\square) + \square \square(\square)$ dir. Birimi eV'dur(Akbas,2011).

Bant aralığının basınç katsayısı $\alpha(\square) = -1.3 * 10^{-3}$ eV/kbar olarak yazılır.

Bariyer yüksekliği ve iletim bandının ofset parametresi $Q_{\square} = 0,6$ olup, kuyu potansiyeli $\square_{\square}(\square) = Q_{\square} \Delta \square_{\square}(\square, \square)$ (5.3.5)

olarak yazılabilir(A.John Peter,2008). Bu ifadelere göre sonlu kuyunun potansiyel değişimi

$$\square_{\square}(\square, \square) = \left\{ \begin{array}{ll} \square_0(\square), & \square < \left(-\frac{\square(\square)}{2}\right) \\ 0, & -\frac{\square(\square)}{2} \leq \square \leq \frac{\square(\square)}{2} \\ \square_0(\square), & \frac{\square(\square)}{2} < \square \end{array} \right\}$$

biçiminde yazılabilir. Burada tanımlanan Hamiltonien ile yazılacak Schrödinger denkleminin yaklaşık çözümleri,

$$\square_1 = \sqrt{\frac{2\square^*(\square)\square(\square)}{\hbar^2}} \text{ ve } \square_2 = \sqrt{\frac{2\square^*(\square)[\square_0(\square) - \square(\square)]}{\hbar^2}} \text{ olmak üzere,}$$

$\square(\square, \square)$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} \square_1 \square_2 \left(\square_2 \frac{\square(\square)}{2}\right) \square_1^{\frac{\square(\square)}{2}} \square_1^{\square_1} \square^{-\square_1} \square \left(-\frac{\sqrt{\square^2 + (\square - \square_0)^2}}{\square}\right), & \square < -\frac{\square(\square)}{2} \\ \square_1 \square_2 \left(\square_2 \square\right) \square^{-\square_1} \square \left(-\frac{\sqrt{\square^2 + (\square - \square_0)^2}}{\square}\right), & -\frac{\square(\square)}{2} \leq \square \leq \frac{\square(\square)}{2} \\ \square_1 \square_2 \left(\square_2 \frac{\square(\square)}{2}\right) \square_1^{\frac{\square(\square)}{2}} \square_1^{\square_1} \square^{-\square_1} \square \left(-\frac{\sqrt{\square^2 + (\square - \square_0)^2}}{\square}\right), & \frac{\square(\square)}{2} < \square \end{array} \right.$$

şeklinde yazılabilir. Bunlar kuyudaki elektron için deneme dalga fonksiyonları olup, sınır koşullarından, (Peter,2008, Erdogan,2009)

$$\psi_1 = \psi_2 \tan(\psi_2 \frac{\psi(\psi)}{2})$$

ifadesi bulunur. Bu denkleme transandantal denklem diyoruz. Bu dalga fonksiyonları kullanılarak, elektron için bağlanma enerjisini

$$\psi_0 = \psi_{\text{yabancı}} - \psi_{\text{yabancı},0}$$

biçiminde hesaplayabiliriz. Burada, $\psi_{\text{yabancı}}$ yabancı atomun etkisinin olmadığı ve $\psi_{\text{yabancı},0}$ yabancı atomun etkisinin olduğu enerji değerleridir.

Bu yazılan denklemler yardımıyla kuyu içindeki elektron için bilgisayarda Fortran programlama dilinde programlar yazılarak, elektrik alan ve hidrostatik basıncın etkisindeki elektronun grafikleri çizilmiştir. Çizilen bu grafikler ve Fortran programları aşağıda verilmiştir.

```

IMPLICIT REAL*8 (A-Z)
OPEN(1,FILE='covid5.DAT')
PI=4.0D0*DATAN(1.0D0)
F=50.0D0 !ELEKTRİK ALAN
LL=27.50D0
555 DLL=2.50D0
IF(LL.LT.50.0D0) DLL=2.50D0
IF(LL.GT.50.0D0) DLL=5.0D0
LL=LL+DLL
x=0.30d0 !Aluminyum konsantrosyonu
P1=30.0d0 !P1=kbar biriminde
P=0.10d0*P1 !P=Gpascal biriminde
L=LL*(1.0d0-P*1.50820d0*10**(-3.0d0)) !L= ang.biriminde
MY=0.0670d0*(dexp(0.0780d0*P))
EPSPT=13.130d0-0.0880d0*P !eps= a.u biriminde
DEGX=1.1550d0*x+0.370d0*x*x
DELX=-1.30d0*10**(-3.0d0)*x
DEGXP=DEGX+P1*DELX

```

```

vx=0.60d0*DEGXP*1000.0d0      !VX=meV biriminde
ccc  L=L*0.5290d0              !L= angstrom biriminde
Ayildiz=0.530d0*EPSPT/MY      !angstrom
Ryildiz=(13.60d0*MY)/(EPSPT*EPSPT) !eV
Ryildiz=Ryildiz*1000.0d0      !meV
L=L/Ayildiz                    !L= Ayildiz biriminde
WRITE(*,*)'Ryildiz=',Ryildiz
WRITE(*,*)'Ayildiz=',Ayildiz
WRITE(*,*)'VX= ',VX
WRITE(*,*)'EPSPT= ',EPSPT
WRITE(*,*)'MY= ',MY
WRITE(*,*)'L= ',L
RY=Ryildiz
AY=Ayildiz
V=VX
Vo=V/RY
V1=(Vo)*(1.0D0)
ZI=(1.0D0)*(L/4.0D0)
C-----sonlu kuantum kuyusunda özdeğer hesabı-----
ks1=0.010d0
SAY=0.0D0
E=0.0D0
DE=0.0010D0
3333 E=E+DE
MK1=(Vo-E)/(E)
MK2=(V1-E)/(E)
FONK=DATAN(DSQRT(MK1))+DATAN(DSQRT(MK2))-L*DSQRT(E)
C  WRITE(*,*)'E=',E,FONK='E,FONK
C  WRITE(1,*)E,FONK
IF(DABS(fonk).LT.ks1) GO TO 33
GO TO 3333
33  IF(SAY.GT.5) GO TO 34
DSAY=1.0D0
SAY=SAY+DSAY
E=E-5.0d0*dE
dE=dE/50.0d0

```

```

ks1=ks1/50.0d0
go to 3333
34 K=DSQRT(E)
AL=dsqrt(Vo-E)
AL1=dsqrt(V1-E)

WRITE(*,*)'FONK=',FONK
WRITE(*,*)'Vo= ',Vo
WRITE(*,*)'V1= ',V1
WRITE(*,*)'L= ',L
WRITE(*,*)'E= ',E
WRITE(*,*)'K= ',K
WRITE(*,*)'AL= ',AL
WRITE(*,*)'AL1= ',AL1
cccccccccccc elektrik alan hesaplanıyor ccccccccccccccccccccccccccccc
ELBE1=-10000000000000.0D0
ETA=(AY*F*(0.010D0))/(RY)
BETA=-0.010d0
311 DBETA=0.010d0
BETA=BETA+DBETA
CALL ELEK1(K,AL,ETA,BETA,L,Vo,SON1)
CALL ELEK2(K,ETA,BETA,L,SON2)
CALL ELEK3(K,AL1,ETA,BETA,L,V1,SON3)
CALL ELEK4(K,AL,BETA,L,SON4)
CALL ELEK5(K,BETA,L,SON5)
CALL ELEK6(K,AL1,BETA,L,SON6)
U1=SON1+SON2+SON3
U2=SON4+SON5+SON6
ELBE=E-(U1/U2)
c WRITE(*,*)'BETA=,ELBE=',BETA,ELBE
c WRITE(1,*)BETA,ELBE*RY
c IF(BETA.GT.2) go to 777
c go to 311
IF(ELBE.LT.ELBE1) GO TO 229
ELBE1=ELBE
OBETA=BETA

```

GO TO 311

cc

c229 stop

229 OEBIN=-10000000000000000.0D0

c WRITE(*,*)'OBETA=,ELBE1=',OBETA,ELBE1

c stop

LAM1=0.0d0

334 DLAM1=0.0010D0

LAM1=LAM1+DLAM1

150 CALL PI1(LAM1,ZI,OBETA,L,K,AL,P1)

CALL PI2(LAM1,ZI,OBETA,L,K,P2)

CALL PI3(LAM1,ZI,OBETA,L,K,AL1,P3)

CALL QI1(LAM1,ZI,OBETA,L,K,AL,Q1)

CALL QI2(LAM1,ZI,OBETA,L,K,Q2)

CALL QI3(LAM1,ZI,OBETA,L,K,AL1,Q3)

P=P1+P2+P3

Q=Q1+Q2+Q3

EBIN=(-(1.0D0)/(LAM1*LAM1))+((4.0D0*P)/(LAM1*P+2.0D0*Q))

IF(EBIN.LT.OEBIN) GO TO 881

OEBIN=EBIN

OLAM1=LAM1

GO TO 334

881 EBIN=(-(1.0D0)/(OLAM1*OLAM1))+((4.0D0*P)/(OLAM1*P+2.0D0*Q))

WRITE(*,*)'LL= ',LL

WRITE(*,*)'OBETA= ',OBETA

WRITE(*,*)'OLAM1= ',OLAM1

WRITE(*,*)'OEBIN= ',OEBIN

WRITE(*,*)'LL=,EBIN=',LL,EBIN*RY

WRITE(1,*)LL,EBIN*RY

WRITE(*,*)'-----'

IF(LL.GT.300.0D0) GO TO 777

GO TO 555


```

IKZ=501
Z0=sinZbir
DO 10 I=1,IKZ
Z=Z0+(I-1)*HZ
c??????? deđisken z'dir ?????????????????????????????
F(I)=DABS(DCOS(K*Z))*2.0D0*DEXP((-2.0D0/LAM1)*DABS(Z-ZI))
$(DABS(EXP(-OBETA*Z)))*2.0D0
10 CONTINUE
B=0.0D0
DO 30 I=3,IKZ,2
B=B+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0
30 CONTINUE
P2=B
i=0.0d0
return
end

C>>>>>>>>>>>>>>>P3
SUBROUTINE PI3(LAM1,ZI,OBETA,L,K,AL1,P3)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,J-Z)
DIMENSION F(501)
PI=4.0d0*datan(1.0D0)
sinZbir=L/2.0D0
sinZiki=10.0D0*L

HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0
IKZ=501
Z0=sinZbir
DO 10 I=1,IKZ
Z=Z0+(I-1)*HZ
c??????? deđisken z'dir ?????????????????????????????
F(I)=DABS(DCOS(K*L/2.0D0)*DEXP(AL1*L/2.0D0)*DEXP(-AL1*Z))*2.0D0
$*DEXP((-2.0D0/LAM1)*DABS(Z-ZI))*(DABS(EXP(-OBETA*Z)))*2.0D0
10 CONTINUE
B=0.0D0
DO 30 I=3,IKZ,2

```


B=B+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0

30 CONTINUE

P3=B

i=0.0d0

return

end

CCCCCCCCCCCCC Q INTEGRALI HESAPLANIYOR

C>>>>>>>>>>>>>>>Q1

SUBROUTINE QI1(LAM1,ZI,OBETA,L,K,AL,Q1)

IMPLICIT REAL*8 (A-H,J-Z)

DIMENSION F(501)

PI=4.0d0*datan(1.0D0)

sinZbir=-10.0D0*L

sinZiki=-L/2.0D0

HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0

IKZ=501

Z0=sinZbir

DO 10 I=1,IKZ

Z=Z0+(I-1)*HZ

c???????? deđisken z'dir ?????????????????????????????????????

F(I)=DABS(DCOS(K*L/2.0D0)*DEXP(AL*L/2.0D0)*DEXP(AL*Z))**2.0D0*DEXP
\$((-2.0D0/LAM1)*DABS(Z-ZI))*DABS(Z-ZI)*(DABS(EXP(-OBETA*Z))**2.0D0

10 CONTINUE

B=0.0D0

DO 30 I=3,IKZ,2

B=B+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0

30 CONTINUE

Q1=B

i=0.0d0

return

end

C>>>>>>>>>>>>>>>Q2

```

SUBROUTINE QI2(LAM1,ZI,OBETA,L,K,Q2)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,J-Z)
DIMENSION F(501)
PI=4.0d0*datan(1.0D0)
sinZbir=-L/2.0D0
sinZiki=L/2.0D0
HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0
IKZ=501
Z0=sinZbir
DO 10 I=1,IKZ
Z=Z0+(I-1)*HZ
c??????? deđisken z'dir ?????????????????????????????????????
F(I)=DABS(DCOS(K*Z))*2.0D0*DEXP((-2.0D0/LAM1)*DABS(Z-ZI))
$*DABS(Z-ZI)*(DABS(EXP(-OBETA*Z)))*2.0D0

10 CONTINUE
B=0.0D0
DO 30 I=3,IKZ,2
B=B+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0
30 CONTINUE

Q2=B
i=0.0d0
return
end

```

```

C>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>Q3
SUBROUTINE QI3(LAM1,ZI,OBETA,L,K,AL1,Q3)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,J-Z)
DIMENSION F(501)
PI=4.0d0*datan(1.0D0)
sinZbir=L/2.0D0
sinZiki=10.0D0*L
HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0
IKZ=501
Z0=sinZbir

```

```
DO 10 I=1,IKZ
```

```
Z=Z0+(I-1)*HZ
```

```
c???????? deęisken z'dir ?????????????????????????????
```

```
F(I)=DABS(DCOS(K*L/2.0D0)*DEXP(AL1*L/2.0D0)*DEXP(-AL1*Z))**2.0D0*  
$DEXP((-2.0D0/LAM1)*DABS(Z-ZI))*DABS(Z-ZI)*(DABS(EXP(-OBETA*Z)))*  
$*2.0D0
```

```
10 CONTINUE
```

```
B=0.0D0
```

```
DO 30 I=3,IKZ,2
```

```
B=B+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0
```

```
30 CONTINUE
```

```
Q3=B
```

```
i=0.0d0
```

```
return
```

```
end
```

```
cccccccccccc elektrik alan hesaplanıyopr ccccccccccccccccccccccccc
```

```
C>>>>>>>>>>>>>>ELEK1
```

```
SUBROUTINE ELEK1(K,AL,ETA,BETA,L,Vo,SON1)
```

```
IMPLICIT REAL*8 (A-H,J-Z)
```

```
DIMENSION F(501)
```

```
PI=4.0d0*datan(1.0D0)
```

```
sinZbir=-10.0D0*L
```

```
sinZiki=-L/2.0D0
```

```
HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0
```

```
IKZ=501
```

```
Z0=sinZbir
```

```
DO 10 I=1,IKZ
```

```
Z=Z0+(I-1)*HZ
```

```
c???????? deęisken z'dir ?????????????????????????????
```

```
F(I)=-DCOS(k*L/2.0D0)*DEXP(AL*L/2.0D0)*DEXP(AL*z)*DEXP(-BETA*z)  
$*(DEXP(z*(AL-BETA)+AL*L/2.0D0)*(AL-BETA)**2.0D0*DCOS(k*L/2.0D0))  
$+DCOS(k*L/2.0D0)*DEXP(AL*L/2.0D0)*DEXP(AL*z)*DEXP(-BETA*z)*ETA*z  
$*(DCOS(k*L/2.0D0)*DEXP(AL*L/2.0D0)*DEXP(AL*z)*DEXP(-BETA*z))+
```


end

C>>>>>>>>>>ELEK3

SUBROUTINE ELEK3(K,AL1,ETA,BETA,L,V1,SON3)

IMPLICIT REAL*8 (A-H,J-Z)

DIMENSION F(501)

PI=4.0d0*datan(1.0D0)

sinZbir=L/2.0D0

sinZiki=10.0D0*L

HZ=(sinZiki-sinZbir)/500.0d0

IKZ=501

Z0=sinZbir

DO 10 I=1,IKZ

Z=Z0+(I-1)*HZ

c??????? deđisken z'dir ??????????????????????????????

F(I)=-DCOS(k*L/2.0D0)*DEXP(AL1*L/2.0D0)*DEXP(-AL1*z)

\$*DEXP(-BETA*z)*(DEXP(AL1*L/2.0D0-z*(AL1+BETA))*(AL1+BETA)

***2.0D0*DCOS(k*L/2.0D0))+DCOS(k*L/2.0D0)*DEXP(AL1*L/2.0D0)

\$*DEXP(-AL1*z)*DEXP(-BETA*z)*ETA*z*(DCOS(k*L/2.0D0)

\$*DEXP(AL1*L/2.0D0)*DEXP(-AL1*z)*DEXP(-BETA*z))+DCOS(k*L/2.0D0)

\$*DEXP(AL1*L/2.0D0)*DEXP(-AL1*z)*DEXP(-BETA*z)*V1*(DCOS(k*L/2.0D0)

\$*DEXP(AL1*L/2.0D0)*DEXP(-AL1*z)*DEXP(-BETA*z))

10 CONTINUE

B=0.0D0

DO 30 I=3,IKZ,2

B=B+HZ*(F(I)+4.0D0*F(I-1)+F(I-2))/3.0D0

30 CONTINUE

SON3=B

i=0.0d0

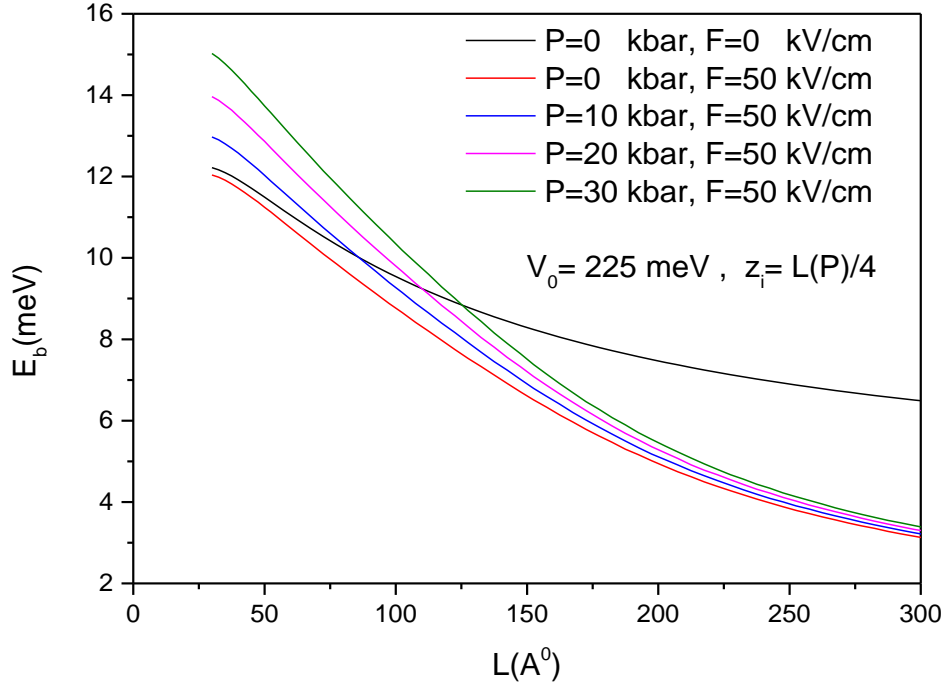
return

end

C>>>>>>>>>>ELEK4

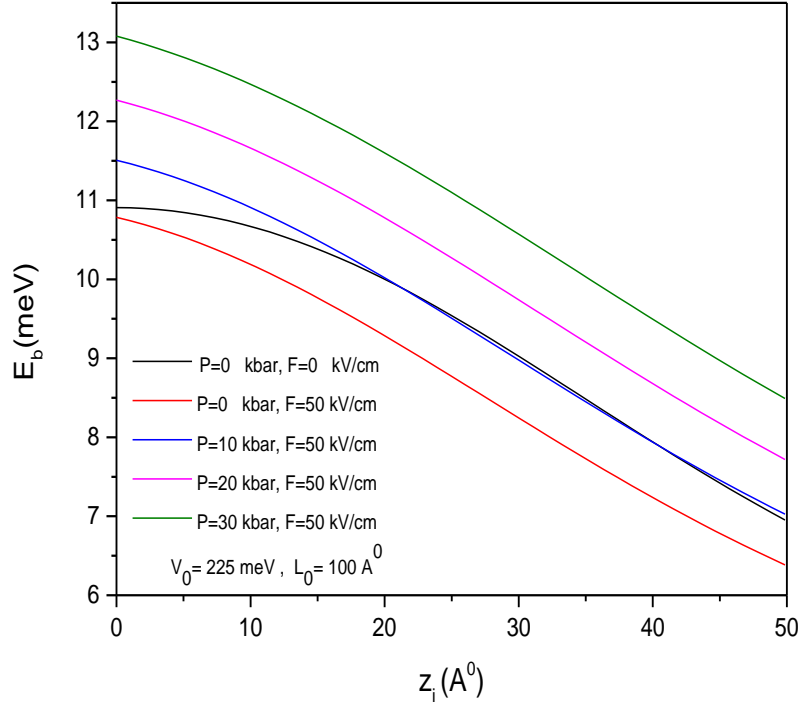
SUBROUTINE ELEK4(K,AL,BETA,L,SON4)

IMPLICIT REAL*8 (A-H,J-Z)



Şekil 25. Bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişim grafiği

İki farklı elektrik alan değeri ve üç farklı hidrostatik basınç değeri için, bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi şekil 25’de verilmiştir. Bu grafikte kuyu genişliği arttıkça bağlanma enerjisinin azaldığı gözlenmektedir. Elektrik alan arttıkça bağlanma enerjisi azalmaktadır. Hidrostatik basınç ise bağlanma enerjisini arttırmaktadır. Bu sonuçlar literatürle uyumludur. Yabancı atomun konumu $z_i = L(P)/4$ ve kuyu duvar potansiyel enerjisi $V_0 = 225$ meV olarak hesaplamalar yapılmıştır.



Şekil 26. Bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişim grafiği

Üç farklı hidrostatik basınç değeri ve iki farklı elektrik alan değeri için, bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna bağlı değişimi şekil 26’da verilmiştir. Bu grafikte yabancı atom kuyu duvarına doğru yaklaştıkça bağlanma enerjisinin azaldığı gözlenmektedir. Elektrik alan arttıkça bağlanma enerjisi azalmaktadır. Hidrostatik basınç ise bağlanma enerjisini arttırmaktadır. Sonuçlar literatürle uyumludur. Kuyu genişliği $L_0 = 100 \text{ Å}$ ve kuyu duvar potansiyel enerjisi $V_0=225 \text{ meV}$ olarak hesaplamalar yapılmıştır.

6. SONLU KUANTUM KUYUSUNDA HAPSEDİLMİŞ OLAN ELEKTRONUN BİRİNCİ UYARILMIŞ (2s) DURUMDA İNCELENMESİ

Bu bölümde sonlu kuantum kuyusunda hapsedilmiş olan elektronun birinci uyarılmış (2s) durumdaki enerjileri hesaplanacaktır. Hesaplamalar kuantum kuyu genişliğinin, yabancı atomun konumunun, hidrostatik basıncın ve elektrik alanın farklı değerleri için yapılacaktır. Daha önceki konulardaki gibi etkin kütle yaklaşımı kullanılarak varyasyon yöntemi kullanılacaktır. Kuantum kuyusundaki bir elektronun hidrostatik basınç ve elektrik alanının etkisi altındaki Hamiltonien'i aşağıdaki gibi ifade edilebilir. (Sucu,2020, Carneviro,1998, Vanitha,2009).

$$\square = -\frac{\hbar^2}{2m^*(\square)} \left[\frac{\square^2}{\square^2} + \frac{1}{\square} \frac{\square}{\square} + \frac{1}{\square^2} \frac{\square^2}{\square^2} + \frac{\square^2}{\square^2} \right] - \frac{\square^2}{\varepsilon(\square)\sqrt{\square^2 + (\square - \square_0)^2}} + \square\square\square\square(\square, \square) \quad (6.1)$$

Bölüm 5.3 de hidrostatik basıncın; kuyu genişliğine, dielektrik sabitine ve etkin kütleyle etkisinin $\square(\square) = \square_0(1 - 1.5082 * 10^{-3}\square)$, $\varepsilon(\square) = 13.13 - 0.088\square$, $\square^*(\square) = \square^*(0)\square^{0,078\square}$ biçiminde olduğunu ifade etmiştik. Burada alüminyum konsantrasyonu “x” ve basınç birimi GPa (1kbar = 0.1 GPa) olarak alınmıştır. Kuyu potansiyelinin de eV biriminde

$$\square_{\square}(\square) = 0,6 \left((1.55\square + 0.37\square^2) + \square(-1.3 * 10^{-3}) \right) \quad (6.2)$$

olduğunu ifade etmiştik(S.Sucu,2020, Carneviro,1998,A.Vanitha,2009). Kuantum kuyusu için potansiyeli,

$$\psi_{\square}(\square, \square) = \left\{ \begin{array}{ll} \psi_0(\square), & \square < -\frac{\square(\square)}{2} \\ 0, & -\frac{\square(\square)}{2} \leq \square \leq \frac{\square(\square)}{2} \\ \psi_0(\square), & \square > \frac{\square(\square)}{2} \end{array} \right\}$$

yazabiliriz. $\kappa = \sqrt{\frac{2m^*(\square)\psi_0(\square)}{\hbar^2}}$ ve $\kappa = \sqrt{\frac{2m^*(\square)[\psi_0(\square) - \psi_0(\square)]}{\hbar^2}}$ olmak üzere kuyunun

her üç bölgesindeki Schrödinger denkleminin yaklaşık çözümlerini aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\psi(\square, \square) = \left\{ \begin{array}{ll} \psi_0(\square) \left(\frac{\psi_0(\square)}{2} \right) e^{-\kappa \frac{\psi_0(\square)}{2}} e^{-\kappa \square} e^{-\kappa \sqrt{\kappa^2 + (\kappa - \psi_0)^2}}, & \square < -\frac{\psi_0(\square)}{2} \\ \psi_0(\square) e^{-\kappa \square} e^{-\kappa \sqrt{\kappa^2 + (\kappa - \psi_0)^2}}, & -\frac{\psi_0(\square)}{2} \leq \square \leq \frac{\psi_0(\square)}{2} \\ \psi_0(\square) \left(\frac{\psi_0(\square)}{2} \right) e^{-\kappa \frac{\psi_0(\square)}{2}} e^{-\kappa \square} e^{-\kappa \sqrt{\kappa^2 + (\kappa - \psi_0)^2}}, & \frac{\psi_0(\square)}{2} < \square \end{array} \right.$$

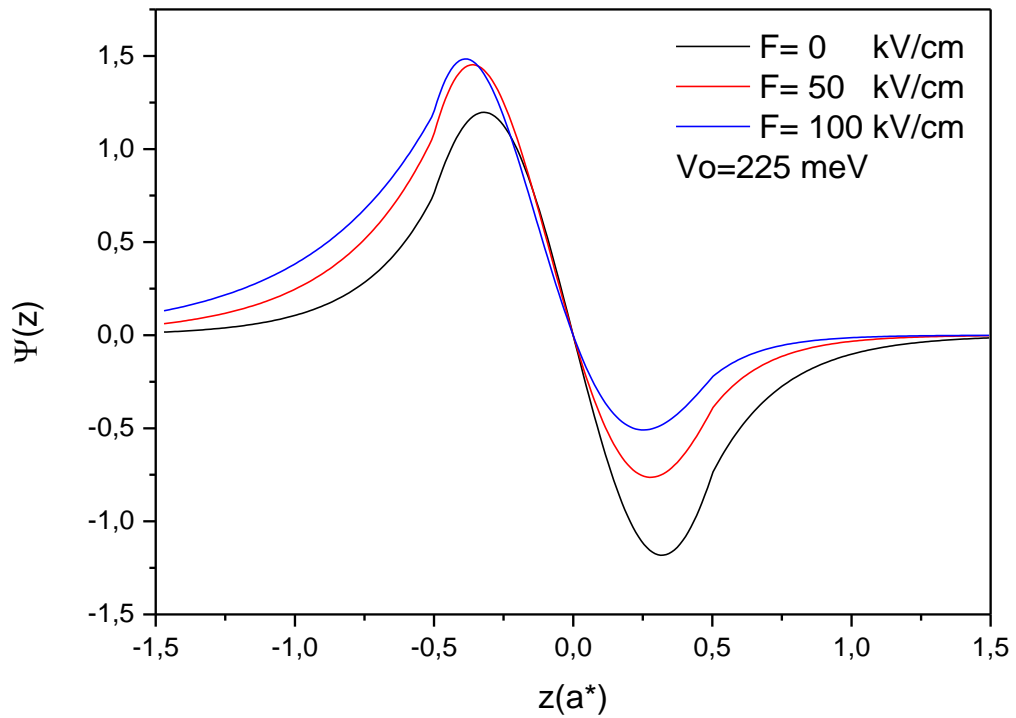
Bu dalga fonksiyonları kuyu içinde bulunan elektronun birinci uyarılmış(2s) durum dalga fonksiyonlarıdır. Sınır koşullarından transandantal denklemimizi $-\kappa = \kappa \psi_0 \left(\frac{\psi_0(\square)}{2} \right)$ olarak buluruz. Yabancı atom etkisindeki kuyu içinde hapsedilmiş elektronun birinci uyarılmış durum enerjisi; elektrik alan ve hidrostatik basınç altında,(Elabsy,21993, Carneiro G.N,1998, Vanitha,2009,Sucu,2020)

$$E_{\square} = \frac{\langle \psi_{\square}(\square, \square) | \hat{H} | \psi_{\square}(\square, \square) \rangle}{\langle \psi_{\square}(\square, \square) | \psi_{\square}(\square, \square) \rangle} \quad (6.3)$$

$$\text{olarak hesaplanır. Bağlanma enerjisi, } E_{\square} = E_0 - E_{\square} \quad (6.4)$$

olarak ifade edilir. Burada, ψ_0 yabancı atomun olmadığı durumda birinci uyarılmış(2s) durumdaki enerjidir, hidrostatik basınç ve elektrik alan etkisi vardır. ψ_0 sınır koşullarından bulunan transandantal denkleminde bulunur. ψ_0 hidrostatik basınç ve elektrik alan altında, yabancı atomun varlığında birinci uyarılmış(2s) durumdaki enerjidir. Sonlu Kuantum kuyusunda bulunan elektron için birinci uyarılmış(2s) durumda bilgisayarda Fortran programlama dilinde programlar yazılarak, elektrik alan ve hidrostatik basıncın etkisindeki elektronun grafikleri çizilmiştir.

Çizilen bu grafikler ve Fortran programları aşağıda verilmiştir.



Şekil 27. Elektronun dalga fonksiyonunun $z(a^*)$ a bağlı grafiği (2s) ,(Elabsy,21993, Carneiro G.N,1998, Vanitha,2009,Sucu,2020)

İlk olarak dış elektrik alan altındaki sonlu kuantum kuyusunda bulunan elektronun 2s durumu dalga fonksiyonu, yabancı atomun yokluğunda ve hidrostatik basıncın sıfır ($P=0$ kbar) olduğu durumda çizilmiş ve şekil 27’de gösterilmiştir. Yapılan işi kontrol etmek amacıyla çizilen bu dalga fonksiyonu, elektronun kuyunun her üç bölgesinde bulunabileceğini gösterir. Buradan elektronun kuyunun hangi bölgesinde bulunabileceğini tahmin edebiliriz.

Bu grafiği çizen Fortran programı aşağıda verilmiştir.

```
IMPLICIT REAL*8(A-Z)
open(1,file='3sil01.dat')
SSS=10**(-6.0D0)
X=0.30D0
Eg=1.1550D0*X+0.370D0*X*X
Vc=0.60d0*(1.1550D0*X+0.370D0*X*X)
Vv=0.40d0*(1.1550D0*X+0.370D0*X*X)
C   AA=224.50D0/(Vc)
PI=4.0D0*DATAN(1.0D0)
HH=6.62618*10**(-34.0D0)
EPS0=12.50D0
BOHRY=5.291770D0*10**(-1.0D0)
MM=0.0670D0

AY=(BOHRY*EPS0)/(MM)
RY=(HH*HH)/(8.0D0*PI*PI*MM*9.109530D0*10**(-31.0D0)*AY*AY
$*10**(-20.0D0))
RY=(RY*10**(3.0D0))/(1.602190D0*10**(-19.0D0))

WRITE(*,*) 'AY=,RY=',AY,RY
WRITE(*,*) 'Vc=,Vv= ',Vc*10**(3.0D0),Vv*10**(3.0D0)
c   STOP
C   V=(Vv*10**(3.0D0))/(RY)
V=(Vc*10**(3.0D0))/(RY)
WRITE(*,*) 'V=',V
L=(100.0d0)/(AY)

K=3.50D0
DK=0.010D0

1   K=K+DK

C   FONK=DSQRT(V-K*K)+(DCOS(K*L/2.0D0)/DSIN(K*L/2.0D0))
```

```

FONK=K*DTAN(K*L/2)+DSQRT(V-K*K)
WRITE(*,*)K,FONK
C   WRITE(1,*)K,FONK
C   IF(K.LT.5) GO TO 1
IF(FONK.GT.0.0D0) GO TO 2
GO TO 1
2   ALFA=DSQRT(V-K*K)
WRITE(*,*) 'K=',FONK=',K,FONK
WRITE(*,*) 'K=',ALFA=',K,ALFA
WRITE(*,*) 'EE1= ',K*K
F=100.0D0
DF=0.0D0
7   F=F+DF
BETA=0.0D0
DBETA=0.010D0
BETA=BETA+DBETA
N=(AY*F*0.010D0)/RY
c   N=F/RY
e=dexp(1.0D0)

UT1=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA
$(L-BETA)/(4.0D0*L)-(ALFA*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L))+e**BETA*(
$(ALFA*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)-(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))
C   WRITE(*,*) '1'
UT2=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.
$0D0*ALFA*L*(9999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N-V)
$(L*N)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)-L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.
$0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N-V)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*
$(ALFA*L-BETA)**2.0D0))+e**BETA*(L*(ALFA*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2
$.0D0*V-L*N)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)-L*(ALFA
$(L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2.0D0*V-L*N)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**
$2.0D0))
C   WRITE(*,*) '2'
UT3=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA
$(L+BETA)/(4.0D0*L)-(ALFA*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L))+e**(-BETA
$)*((ALFA*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)-(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))

```

C WRITE(*,*) '3'

UT4=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.0D0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)-L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.0D0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0))+e**(-BETA)*(L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)-L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0))

C WRITE(*,*) '4'

UT5=e**BETA*(BETA*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)-(BETA*K*L*DSIN(K*L)+BETA**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*L))-e**(-BETA)*(BETA*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+K*DSIN(K*L)/4.0D0-(BETA**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*L))

C WRITE(*,*) '5'

UT6=L**2.0D0*N*e**BETA*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0-BETA**2.0D0+BE
TA*K**2.0D0*L**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)+BETA**2.0D0*K
L(BETA**2.0D0-2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)-BETA**5
.0D0+BETA**4.0D0-2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+2.0D0*BETA
2.0D0*K2.0D0*L**2.0D0-BETA*K**4.0D0*L**4.0D0+K**4.0D0*L**4.
0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2.0D0)
+L**2.0D0*N*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0+BETA**2.0D0+BE
TA*K**2.0D0*L**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)-BETA**2.0D0*K
L(BETA**2.0D0+2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)-BETA**5
.0D0-BETA**4.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0*(2.0D0*BETA**3.0D0+2.0D0*BET
A**2.0D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0))/(8.0D0*BETA
2.0D0*(BETA2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2.0D0)

C WRITE(*,*) '6'

AT1=L*e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*(DCO
SS(K*L)-1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))-L*e**BETA*(DCOS(K*L)-1.0D0)
/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))

C WRITE(*,*) '7'

AT2=L*e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*(DCO
SS(K*L)-1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))-L*e**(-BETA)*(DCOS(K*L)-1.0

```

$D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))
C  WRITE(*,*) '8'
AT3=L*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)-BETA*K*L*DSIN(K*L)-BETA
**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L*
**2.0D0))-L*e**BETA*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)+BETA*K*L*DSIN(K*L)-BE
**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*
**2.0D0))

```

```

WRITE(*,*) '*****'

```

```

UT=UT1+UT2+UT3+UT4+UT5+UT6

```

```

AT=AT1+AT2+AT3

```

```

Nf=(1.0d0)/(dsqrt(AT))

```

```

C  EoF=UT/AT

```

```

EE1=UT/AT

```

```

C*****

```

```

5  BETA=BETA+DBETA

```

```

C*****

```

```

e=dexp(1.0D0)

```

```

UT1=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA
*L-BETA)/(4.0D0*L)-(ALFA*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L))+e**BETA*(
$(ALFA*L-BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)-(ALFA*L-BETA)/(4.0D0*L))

```

```

C  WRITE(*,*) '11'

```

```

UT2=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)*(L*(2.
$0D0*ALFA*L*(9999999999.0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N-V)
$+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)-L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.
$0D0*N-V)-2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N-V)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*
$(ALFA*L-BETA)**2.0D0))+e**BETA*(L*(ALFA*L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2
$.0D0*V-L*N)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**2.0D0)-L*(ALFA
$L*(L*N-2.0D0*V)+BETA*(2.0D0*V-L*N)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L-BETA)**
$2.0D0))

```

```

C  WRITE(*,*) '12'

```

```

UT3=e**(ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)*((ALFA
*L+BETA)/(4.0D0*L)-(ALFA*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L))+e**(-BETA
$)*((ALFA*L+BETA)*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)-(ALFA*L+BETA)/(4.0D0*L))

```

```

C  WRITE(*,*) '13'

```


$$UT4 = e^{(ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)} * (L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.0D0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V) + L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0) - L*(2.0D0*ALFA*L*(9999999999.0D0*N+V)+2.0D0*BETA*(9999999999.0D0*N+V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)) + e^{(-BETA)*(L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0) - L*(ALFA*L*(L*N+2.0D0*V)+BETA*(L*N+2.0D0*V)+L*N)*DCOS(K*L)/(8.0D0*(ALFA*L+BETA)**2.0D0)}$$

C WRITE(*,*) '14'

$$UT5 = e^{BETA*(BETA*DCOS(K*L)/(4.0D0*L) - (BETA*K*L*DSIN(K*L)+BETA**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*L))} - e^{(-BETA)*(BETA*DCOS(K*L)/(4.0D0*L)+K*DSIN(K*L)/4.0D0 - (BETA**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*L))}$$

C WRITE(*,*) '15'

$$UT6 = L**2.0D0*N*e^{BETA*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0-BETA**2.0D0+BE$TA*K**2.0D0*L**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)+BETA**2.0D0*K*L*(BETA**2.0D0-2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)-BETA**5.0D0+BETA**4.0D0-2.0D0*BETA**3.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0+2.0D0*BETA**2.0D0*K**2.0D0*L**2.0D0-BETA*K**4.0D0*L**4.0D0+K**4.0D0*L**4.0D0)/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2.0D0)} + L**2.0D0*N*e^{(-BETA)*(BETA**2.0D0*(BETA**3.0D0+BETA**2.0D0+BE$TA*K**2.0D0*L**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)*DCOS(K*L)-BETA**2.0D0*K*L*(BETA**2.0D0+2.0D0*BETA+K**2.0D0*L**2.0D0)*DSIN(K*L)-BETA**5.0D0-BETA**4.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0*(2.0D0*BETA**3.0D0+2.0D0*BET$A**2.0D0+BETA*K**2.0D0*L**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0))/(8.0D0*BETA**2.0D0*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2.0D0)**2.0D0)}$$

C WRITE(*,*) '16'

$$AT1 = L*e^{(ALFA*(L-1999999998.0D0)+1999999998.0D0*BETA/L)} * (DCO$S(K*L)-1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L-BETA)) - L*e^{BETA*(DCOS(K*L)-1.0D0)} / (4.0D0*(ALFA*L-BETA))$$

C WRITE(*,*) '17'

$$AT2 = L*e^{(ALFA*(L-1999999998.0D0)-1999999998.0D0*BETA/L)} * (DCO$S(K*L)-1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA)) - L*e^{(-BETA)*(DCOS(K*L)-1.0$D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))}$$

```

C   WRITE(*,*) '18'
AT3=L*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)-BETA*K*L*DSIN(K*L)-BETA
$$$2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L*
$*2.0D0))-L*e**BETA*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)+BETA*K*L*DSIN(K*L)-BE
$TA**2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*
$L**2.0D0))

```

```

UT=UT1+UT2+UT3+UT4+UT5+UT6

```

```

AT=AT1+AT2+AT3

```

```

Nf=(1.0d0)/(dsqrt(AT))

```

```

EE2=UT/AT

```

```

IF(EE2.GT.EE1) GO TO 6

```

```

EE1=EE2

```

```

GO TO 5

```

```

6   WRITE(*,*) 'K=',K

```

```

Y=L+(0.50d0)

```

```

X=-L-(0.50d0)

```

```

DX=0.010D0

```

```

WRITE(*,*) 'EE1=',BETA= ',EE1,BETA

```

```

WRITE(*,*) 'Eo=', EoF= ',K*K,Eof

```

```

45  IF(X.LT.(-L/2.0d0)) PSI=Nf*DSIN(K*L/2.0D0)*dexp(ALFA*L/2.0D0)
$*dexp(ALFA*X)*dexp(-BETA*X/L)

```

```

IF(X.GE.(-L/2.0D0).AND.X.LE.(L/2.0D0)) PSI=-Nf*DSIN(K*X)
$dexp(-BETA*X/L)

```

```

IF(X.GT.(L/2.0d0)) PSI=-Nf*DSIN(K*L/2.0D0)*DEXP(ALFA*L/2.0D0)
$dexp(-ALFA*X)*dexp(-BETA*X/L)

```

```

WW=0.30D0/L

```

```

WRITE(*,*)X,PSI

```

```

WRITE(1,*)(X*1.50D0/Y),PSI

```

```

X=X+DX

```

```

IF(X.LE.(L+0.50d0)) GO TO 45

```

```

AT1=L*e**(ALFA*(L-19999999998.0D0)+19999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS
$(K*L)-1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L-BETA))-L*e**BETA*(DCOS(K*L)-1.0D0)/

```

\$4.0D0*(ALFA*L-BETA))

AT2=L*e**(-BETA)*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)-BETA*K*L*DSIN(K*L)-BETA*
\$*2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2
\$.0D0))-L*e**BETA*(BETA**2.0D0*DCOS(K*L)+BETA*K*L*DSIN(K*L)-
BETA*
\$*2.0D0-K**2.0D0*L**2.0D0)/(4.0D0*BETA*(BETA**2.0D0+K**2.0D0*L**2
\$.0D0))

AT3=L*e**(ALFA*(L-19999999998.0D0)-19999999998.0D0*BETA/L)*(DCOS
\$(K*L)-1.0D0)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))-L*e**(-BETA)*(DCOS(K*L)-1.0D0
\$)/(4.0D0*(ALFA*L+BETA))

UT=UT1+UT2+UT3+UT4+UT5+UT6

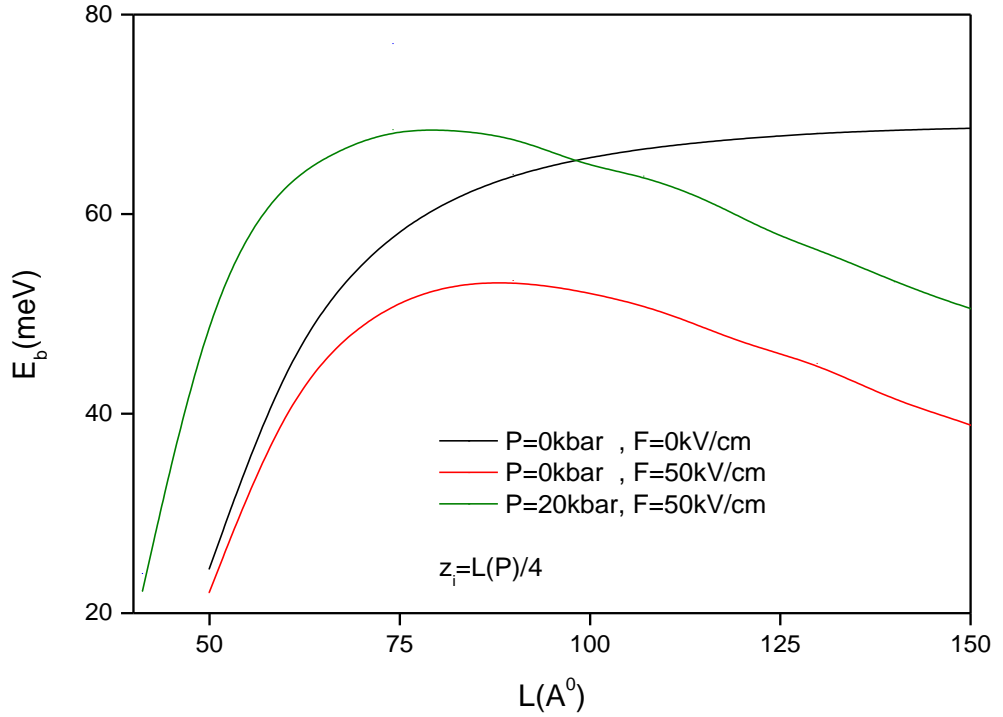
AT=AT1+AT2+AT3

Nf=(1.0d0)/(dsqrt(AT))

WRITE(*,*) 'No=',Nf*Nf*AT

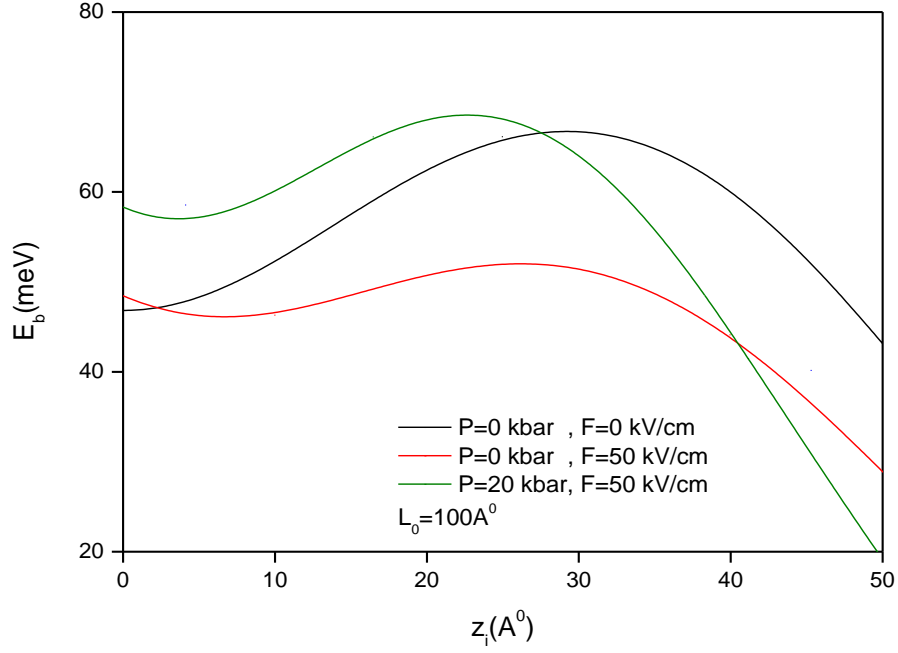
WRITE(*,*) '////////////////////////////////////'

450 END



Şekil 28. 2s bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişim grafiği (Sucu, 2020)

İki farklı elektrik alan değeri ve iki farklı hidrostatik basınç değeri için, 2s uyarılmış durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi şekil 28’de verilmiştir. Bu grafikte kuyu genişliği arttıkça bağlanma enerjisinin arttığı gözlenmektedir. Elektrik alan arttıkça bağlanma enerjisinin 80Å^0 a kadar arttığı ve daha sonra azaldığı görülmektedir. Hidrostatik basınç ise bağlanma enerjisini arttırmaktadır ve 70Å^0 civarında azalmaya başladığını görebiliriz. Uyarılmış durumda bağlanma enerjisinin davranışı buradaki dış etkiler karşısında taban durumla benzer davranışı sergilemektedir. Bu sonuçlar literatürle uyumludur(R). Yabancı atomun konumu $z_i = L(P)/4$ ve kuyu duvar potansiyel enerjisi $V_0=225$ meV olarak hesaplamalar yapılmıştır.



Şekil 29. 2s bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişim grafiği
(Sucu, 2020)

İki farklı elektrik alan ve hidrostatik basınç değeri için, 2s uyarılmış durum bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna bağlı değişimi şekil 29’da verilmiştir. Bu grafikte yabancı atomun konumu kuyu duvarına yaklaştıkça bağlanma enerjisinin önce arttığı ve sonra azaldığı gözlenmektedir. Buradan dış etkiler altındaki elektronun nerede nasıl davrandığını görebiliyoruz. Elektrik alanın ve hidrostatik basıncın artmasıyla bağlanma enerjisi değişimini görüyoruz.. Bu sonuçlar literatürle uyumludur(R). Kuyu genişliği $L_0 = 100 \text{ A}^0$ ve kuyu duvar potansiyel enerjisi $V_0=225 \text{ meV}$ olarak hesaplamalar yapılmıştır. Şekil 28 ve şekil 29’u çizdiren Fortran programı aşağıda verilmiştir.

```

cccccc 2s durumu cccccccccccccccccccccc
implicit real*8(a-z)
open(2,file='kdr4.dat')
c      open(3,file='kddrel.dat')
x=0.3
T=0.0d0 !kelvin
P=20.0d0 !kbar

c-----
A1=dexp(-1.730d0*10**(-3.0d0)*P)
A2=dexp(9.40d0*10**(-5.0d0)*(T-75.60d0))

A3=dexp(-1.730d0*10**(-3.0d0)*P)
A4=dexp(20.40d0*10**(-5.0d0)*(T-300.0d0))

if(T.lt.200.0d0) EPSPT=12.740d0*A1*A2
if(T.ge.200.0d0) EPSPT=13.180d0*A3*A4
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
ms=9.1095340d0*10**(-31.0d0)*10**(-0.0d0) !gr
el=1.60218920d0*10**(-19.0d0) !joule=j
hb=(6.6260d0*10**(-34.0d0))/(2.0d0*pi) !joule.sn

EPT=7.510d0 !eV
delsf=0.3410d0 !eV
EGTST=(1.5190d0)-((5.4050d0*10**(-4.0d0)*T*T)/(T+204.0d0)) !eV
c      EGTST=(1.4250d0) !sadece basic old. bu kısım kullanıldı
EGTPT=EGTST+P*1.260d0*10**(-2.0d0)-P*P*3.770d0*10**(-5.0d0)!eV
c-----a yıldız a*-----
ms1=EPT*((2.0d0/EGTPT)+(1.0d0/(EGTPT+delsf)))
mePT=ms/(1+ms1)
asifir=0.529*EPSPT/(mePT/ms)
ay=asifir
c-----r yıldız ry-----

Ryildiz=(13.60d0*mePT/ms)/(EPSPT*EPSPT) !eV

```

```

ry=Ryildiz*1000.0d0          !meV
c-----potansiyel hesaplanıyor

V=((0.6)*((1.155*x+0.37*x*x)+(-(1.15*1E-4)*x)
&*T+(-(1.3*1E-3)*x)*P)*1000)
c----- basıncın varlığında yeni L değerleri-----
Ls=0.40d0          !angustron
68  DLs=0.10d0
Ls=Ls+DLs
L=Ls*(1-1.5082*10**(-3.0d0)*P)  !a*
F=50.0d0
c 68  DF=5.0D0
c      F=F+DF
eta=(0.010d0*ay/ry)*F
zi=(L/4.0d0)+0.01
k=0.10d0
dk=0.000010d0
10  k=k+dk
fonk1=dsqrt(V-k*k)*dsin(k*L/2.0d0)+k*dcos(k*L/2.0d0)
if(fonk1.lt.0.0d0)goto 20
goto 10
20  alpha=dsqrt(V-k*k)
Ei=100000.0D0
beta=0.010d0
63  dbeta=0.050d0
beta=beta+dbeta
CALL DRS1(V,beta,alpha,K,L,U11)
CALL DRS12(V,beta,eta,alpha,K,L,U12)
U1=U11+U12
CALL DRS2(K,eta,beta,L,U21)
CALL DRS22(beta,eta,K,L,U22)
U2=U21+U22
CALL DRS3(V,beta,alpha,K,L,U31)
CALL DRS32(V,beta,eta,alpha,K,L,U32)
U3=U31+U32
CALL ARS1(alpha,beta,K,L,A1)

```

CALL ARS2(K,beta,L,A2)

CALL ARS3(alpha,beta,K,L,A3)

ES=(U1+U2+U3)/(A1+A2+A3)

IF(es.gt.ei) GO TO 77

ei=es

go to 63

c***** Eİ İMPRUTY ENERJİSİ HESAPLANIYOR

77 ENER2=100000.0D0

lambda=0.050d0

66 dlambd=0.050d0

lambda=lambda+dlambd

C----- 1. BÖLGE -----

CALL integ1(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U11)

CALL integ2(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U12)

CALL integ3(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U13)

U1=U11+U12+U13

C----- 2. BÖLGE -----

CALL integ4(beta,eta,zi,lambda,K,L,U21)

CALL integ5(beta,eta,zi,lambda,K,L,U22)

CALL integ12(beta,eta,zi,lambda,K,L,U23)

U2=U21+U22+U23

C----- 3. BÖLGE -----

CALL integ6(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U31)

CALL integ7(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U32)

CALL integ8(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U33)

U3=U31+U32+U33

C----- NORMALİZASYON -----

CALL integ9(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,I11)

CALL integ10(beta,eta,zi,lambda,K,L,I22)

CALL integ11(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,I33)

ENER=(U1+U2+U3)/(I11+I22+I33)

IF(ENER.GT.ENER2) GO TO 11

ENER2=ENER


```

if(lambda.lt.3) go to 66
  11 Ei=ENER2
EB=ES-Ei
write(2,*)L*ay,Eb*ry
write(*,*)L*ay, Eb*ry
if (L.lt.2.0D0) go to 68

```

END

C----- Eİ İÇİN İNTEGRALLER -----

```

subroutine integ1(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U11)

```

```

implicit real*8(a-z)

```

```

pi=4.0d0*datan(1.0d0)

```

```

sb=0.0d0

```

```

si=10.0d0*L

```

```

sz=-10.0d0*L

```

```

szi=-L/2.0d0

```

```

U11=0.0d0

```

```

ALAN=0.0d0

```

```

ys=0.0d0

```

```

rho=sb

```

```

drho=0.020d0

```

```

1   yi=ys

```

```

rho=rho+drho

```

```

IA=0.0d0

```

```

ALANT=0.0d0

```

```

tys=0.0d0

```

```

z=sz

```

```

dz=0.0050d0

```

```

2   tyi=tys

```

```

z=z+dz

```

```

tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))+z*(2*a
$alpha-2*beta)+alpha*1)*((alpha**2-2*alpha*beta+beta**2+lambda**2)*
$z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2)**(3/2)+2*lambda*z**3*(beta-alpha)+2*
$lambda*z**2*(3*zi*(alpha-beta)-1)-2*lambda*z*(3*zi**2*(alpha-b
$eta)-2*zi+rho**2*(alpha-beta))+2*lambda*(zi**3*(alpha-beta)-z

```

```


$$i^{**2} + z i \rho^{**2} (\alpha - \beta) - \rho^{**2}) * (\cos(k * 1) - 1) / (2 * (z^{**2} - 2 * z$$


$$i * z + z i^{**2} + \rho^{**2})^{**}(3/2))$$


```

```
dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
```

```
ALANT=ALANT+dALANT
```

```
if(z.lt.szi) go to 2
```

```
IA=ALANT
```

```
ys=IA
```

```
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
```

```
ALAN=ALAN+dALAN
```

```
if(rho.lt.si) go to 1
```

```
U11=ALAN
```

```
return
```

```
end
```

```
C-----
```

```
subroutine integ2(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U12)
```

```
implicit real*8(a-z)
```

```
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
```

```
sb=0.0d0
```

```
si=10.0d0*L
```

```
sz=-10.0d0*L
```

```
szi=-L/2.0d0
```

```
U12=0.0d0
```

```
ALAN=0.0d0
```

```
ys=0.0d0
```

```
rho=sb
```

```
drho=0.020d0
```

```
1    yi=ys
```

```
rho=rho+drho
```

```
IA=0.0d0
```

```
ALANT=0.0d0
```

```
tys=0.0d0
```

```
z=sz
```

```
dz=0.0050d0
```

```
2    tyi=tys
```

```
z=z+dz
```

```

tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))+z*(2*a
$pha-2*beta)+alpha*1)*(COS(k*1)-1)/SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho*
$*2))
dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
U12=ALAN
return
end
C-----
subroutine integ3(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U13)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=-10.0d0*L
szi=-L/2.0d0
U13=0.0d0
ALAN=0.0d0
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0
1   yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0
ALANT=0.0d0
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0

```

```

2      tyi=tys
z=z+dz
tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))+z*(2*a
$lpha-2*beta)+alpha*1)*((eta*z+V)/2-(eta*z+V)*COS(k*1)/2))
dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
U13=ALAN
return
end
C-----
subroutine integ4(beta,eta,zi,lambda,K,L,U21)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=-L/2.0d0
szi=L/2.0d0
U21=0.0d0
ALAN=0.0d0
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0
1      yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0
ALANT=0.0d0
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0
2      tyi=tys

```

```

z=z+dz
tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))-2*beta
$*z)*SIN(k*z)*(2*k*(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2)*(beta*SQRT(z**2-2
$*zi*z+zi**2+rho**2)+lambda*(z-zi))*COS(k*z)-((beta**2-k**2+l
$ambda**2)*(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2)**(3/2)+2*beta*lambda*z**3
$-2*lambda*z**2*(3*zi*beta+1)+2*lambda*z*(3*zi**2*beta+2*zi+b
$eta*rho**2))-2*lambda*(zi**3*beta+zi**2+zi*beta*rho**2+rho**2
$))*SIN(k*z))/(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2)**(3/2))

```

```

dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
U21=ALAN
return
end

```

```

c-----
subroutine integ5(beta,eta,zi,lambda,K,L,U22)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=-L/2.0d0
szi=L/2.0d0
U22=0.0d0
ALAN=0.0d0
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0
1    yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0

```

```

ALANT=0.0d0
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0
2    tyi=tys
z=z+dz
tys=rho*(-2*EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))-2*b
$eta*z)*SIN(k*z)**2/SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))

dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
U22=ALAN
return
end

c-----
subroutine integ12(beta,eta,zi,lambda,K,L,U23)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=-L/2.0d0
szi=L/2.0d0
U23=0.0d0
ALAN=0.0d0
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0
1    yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0

```

```

ALANT=0.0d0
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0
2    tyi=tys
z=z+dz
tys=rho*(eta*z*EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))-
$2*beta*z)*SIN(k*z)**2)
dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
U23=ALAN
return
end
subroutine integ6(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U31)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=L/2.0d0
szi=10.0d0*L
U31=0.0d0
ALAN=0.0d0
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0
1    yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0
ALANT=0.0d0
tys=0.0d0

```

```

z=sz
dz=0.0050d0
2      tyi=tys
z=z+dz
tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))-2*z*(a
$lpha+beta)+alpha*1)*((alpha**2+2*alpha*beta+beta**2+lambda**2)*(z*
$*2-2*zi*z+zi**2+rho**2)**(3/2)+2*lambda*z**3*(alpha+beta)-2*la
$mbda*z**2*(3*zi*(alpha+beta)+1)+2*lambda*z*(3*zi**2*(alpha+bet
$a)+2*zi+rho**2*(alpha+beta))-2*lambda*(zi**3*(alpha+beta)+zi
$**2+zi*rho**2*(alpha+beta)+rho**2))*(COS(k*1)-1)/(2*(z**2-2*zi
$*z+zi**2+rho**2)**(3/2)))

dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
U31=ALAN
return
end
C-----
subroutine integ7(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U32)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=L/2.0d0
szi=10.0d0*L
U32=0.0d0
ALAN=0.0d0
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0

```



```

1      yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0
ALANT=0.0d0
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0

2      tyi=tys
z=z+dz

tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))-2*z*(a
$pha+beta)+alpha*1)*(COS(k*1)-1)/SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2
$))

dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT

ys=IA

dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
U32=ALAN
return
end
C-----
subroutine integ8(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,U33)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=L/2.0d0
szi=10.0d0*L

```

```

U33=0.0d0
ALAN=0.0d0

ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0

1    yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0
ALANT=0.0d0
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0

2    tyi=tyi
z=z+dz

tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))-2*z*(a
$ lpha+beta)+alpha*1)*((eta*z+V)/2-(eta*z+V)*COS(k*1)/2))

dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
U33=ALAN
return
end
C-----
subroutine integ9(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,I11)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)

```

```
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=-10.0d0*L
szi=-L/2.0D0
I11=0.0d0
ALAN=0.0d0
```

```
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0
```

```
1    yi=ys
rho=rho+drho
```

```
IA=0.0d0
ALANT=0.0d0
```

```
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0
```

```
2    tyi=tys
z=z+dz
```

```
tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))+z*(2*
$alpha-2*beta)+alpha*1)*(1/2-COS(k*1)/2))
```

```
dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
```

```
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
```

```

I11=ALAN
return
end
C-----
subroutine integ10(beta,eta,zi,lambda,K,L,I22)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=-L/2.0D0
szi=L/2.0D0
I22=0.0d0
ALAN=0.0d0
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0
1   yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0
ALANT=0.0d0
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0
2   tyi=tys
z=z+dz
tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))-2*bet
$a*z)*SIN(k*z)**2)
dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
I22=ALAN

```

```

return
end
c-----
subroutine integ11(V,beta,eta,zi,alpha,lambda,K,L,I33)
implicit real*8(a-z)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
sb=0.0d0
si=10.0d0*L
sz=L/2.0D0
szi=10.0d0*L
I33=0.0d0
ALAN=0.0d0
ys=0.0d0
rho=sb
drho=0.020d0
1    yi=ys
rho=rho+drho
IA=0.0d0
ALANT=0.0d0
tys=0.0d0
z=sz
dz=0.0050d0
2    tyi=tys
z=z+dz
tys=rho*(EXP(-2*lambda*SQRT(z**2-2*zi*z+zi**2+rho**2))-2*z*(
$alpha+beta)+alpha*1)*(1/2-COS(k*1)/2))
dalanT=((tyi+tys)/2.0d0)*dz
ALANT=ALANT+dALANT
if(z.lt.szi) go to 2
IA=ALANT
ys=IA
dalan=((yi+ys)/2.0d0)*drho
ALAN=ALAN+dALAN
if(rho.lt.si) go to 1
I33=ALAN
return

```

end

C-----E0 TABAN DURUM İÇİN İNTEGRALLER-----

SUBROUTINE DRS1(V,beta,alpha,K,L,U11)

implicit real*8(a-z)

zb=-15.0D0*L

zs=-L/2.0D0

OFON=0.0d0

TOP1=0.0D0

dz=(zs-zb)/1000.0d0

DO 22 z=zB,zS,Dz

FON=EXP(z*(2*alpha-2*beta)+alpha*1)*((alpha-beta)**2*COS(k*1)/2

\$(alpha-beta)**2/2)

TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0

OFON=FON

22 CONTINUE

U11=TOP1

END

cc

SUBROUTINE DRS12(V,beta,eta,alpha,K,L,U12)

implicit real*8(a-z)

zb=-15.0D0*L

zs=-L/2.0D0

OFON=0.0d0

TOP1=0.0D0

dz=(zs-zb)/1000.0d0

DO 22 z=zB,zS,Dz

FON=EXP(z*(2*alpha-2*beta)+alpha*1)*((eta*z+V)/2-(eta*z+V)*

\$COS(k*1)/2)

TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0

OFON=FON

22 CONTINUE

U12=TOP1

END

cc

SUBROUTINE DRS2(K,eta,beta,L,U21)

```

implicit real*8(a-z)
zb=-L/2.0D0
zs=L/2.0D0
OFON=0.0d0
TOP1=0.0D0
dz=(zs-zb)/1000.0d0
DO 22 z=zB,zS,Dz
FON=EXP(-2*beta*z)*(2*beta*k*SIN(k*z)*COS(k*z)+(k**2-beta**2)*
$dsin(k*z)**2)
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
U21=TOP1
END

```

C-----

```

SUBROUTINE DRS22(beta,eta,K,L,U22)

```

```

implicit real*8(a-z)
zb=-L/2.0D0
zs=L/2.0D0
OFON=0.0d0
TOP1=0.0D0
dz=(zs-zb)/1000.0d0
DO 22 z=zB,zS,Dz
FON=eta*z*EXP(-2*beta*z)*SIN(k*z)**2
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
U22=TOP1
END

```

cc

```

SUBROUTINE DRS3(V,beta,alpha,K,L,U31)

```

```

implicit real*8(a-z)
zb=L/2.0D0
zs=15.0d0*L
OFON=0.0d0
TOP1=0.0D0

```

```

dz=(zs-zb)/1000.0d0
DO 22 z=zB,zS,Dz
FON=EXP(alpha*1-2*z*(alpha+beta))*((alpha+beta)**2*COS(k*1)/2-
$(alpha+beta)**2/2)
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
U31=TOP1
END
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
SUBROUTINE DRS32 (V,beta,eta,alpha,K,L,U32)
implicit real*8(a-z)
zb=L/2.0D0
zs=15.0d0*L

OFON=0.0d0
TOP1=0.0D0
dz=(zs-zb)/1000.0d0
DO 22 z=zB,zS,Dz
FON=EXP(alpha*1-2*z*(alpha+beta))*((eta*z+V)/2-(eta*z+V)*
$dCOS(k*1)/2)
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
U32=TOP1
END
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
SUBROUTINE ARS1(alpha,beta,K,L,A1)
implicit real*8(a-z)
zb=-15.0D0*L
zs=-L/2.0D0
OFON=0.0d0
TOP1=0.0D0
dz=(zs-zb)/1000.0d0
DO 22 z=zB,zS,Dz
FON=dsin(k*L/2.0d0)**2.0d0*dexp(alpha*L)*dexp(2.0d0*alpha*z)

```



```

$*dexp(-2.0D0*beta*z)
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
A1=TOP1
END

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
SUBROUTINE ARS2(K,beta,L,A2)
implicit real*8(a-z)
zs=L/2.0D0
OFON=0.0d0
TOP1=0.0D0
dz=(zs-zb)/1000.0d0
DO 22 z=zB,zS,Dz
FON=dsin(k*z)*dsin(k*z)*dexp(-2.0D0*beta*z)
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
A2=TOP1
END

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
SUBROUTINE ARS3(alpha,beta,K,L,A3)
implicit real*8(a-z)
zb=L/2.0D0
zs=15.0D0*L
OFON=0.0d0
TOP1=0.0D0
dz=(zs-zb)/1000.0d0
DO 22 z=zB,zS,Dz
FON=dsin(k*L/2.0d0)**2.0d0*dexp(alpha*L)*dexp(-2.0d0*alpha*z)
$*dexp(-2.0D0*beta*z)
TOP1=TOP1+(OFON+FON)*Dz/2.0D0
OFON=FON
22 CONTINUE
A3=TOP1
END

```

7. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tezde, yarıiletken bir malzeme olan $Ga_{1-x}Al_xAs$ / GaAs tipindeki sonsuz ve sonlu kuantum kuyuları çalışılmıştır. Sonsuz ve sonlu kuantum kuyuları için teorik hesaplar tekrar edilmiş ve Fortran programları yazılarak nümerik hesaplamalar yapılmıştır.

Önce daha basit bir yapı olan sonsuz kuantum kuyusuna bakılmıştır. Kuyu içindeki elektronun dalga fonksiyonu ve taban durum enerji grafikleri, sırasıyla şekil 5 ve şekil 6'da verilmiştir. Şekil 5'de sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun dalga fonksiyonunun konuma göre değişim grafiği ve şekil 6'da aynı elektronun taban durum enerjisinin kuyu genişliğine göre değişim grafiği çizilmiştir.

Daha sonra sonsuz kuyuya dış elektrik alan uygulanmış ve sonuçlar şekil 9, şekil 10 ve şekil 11 de verilmiştir. Şekil 9 da farklı dış elektrik alan değerleri için sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun dalga fonksiyonunun $z(a^*)$ konumuna göre değişim grafiği, şekil 10 da üç farklı elektrik alan değeri için sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun enerjisinin kuyu genişliğine göre değişim grafiği, şekil 11 de üç farklı kuyu genişliği için sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun enerjisinin elektrik alana göre değişim grafiği gösterilmiştir. Bu grafiklerde $+z$ yönünde uygulanan dış elektrik alanın etkisi görülmektedir. Elektrik alan taban durum dalga fonksiyonunu $-z$ yönüne doğru kaydırmıştır. Elektrik alan altındaki kuyuda hapsedilmiş olan elektronun taban durum enerjisinin dış elektrik alanla azaldığı gözlemlenmiştir. Bu üç grafikten, dış elektrik alanın geniş kuyularda elektronun taban durum enerjisi üzerinde daha etkili olduğu anlaşılmaktadır. Geniş kuyularda elektron daha serbest olduğu için, bu sonuç beklenen bir sonuçtur.

Şekil 16 da elektrik alanın yokluğunda sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği, yabancı atomun dört farklı konumu için çizilmiştir. Burada yabancı atom farklı konumlara yerleştirilip kuyunun genişliği ile oynanmıştır. Kuyu genişledikçe elektronun bağlanma enerjisinin

azaldığı gözlemlenmiştir. Yabancı atomun kuyunun duvarına doğru yaklaştıkça bağlanma enerjisi azalmaktadır.

Kuyu genişliğinin dört farklı konumu için, sonsuz kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna bağlı değişimi şekil 17 de verilmiştir. Bu grafikte de yabancı atom kuyu duvarına yaklaştıkça bağlanma enerjisini azalttığını görebiliyoruz. Bunun yanında kuyu genişliğinin artması ile bağlanma enerjisinin azalmaktadır.

Şekil 20 de elektrik alan altındaki sonlu kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun dalga fonksiyonunun $z(a^*)$ 'ye göre grafiği verilmiştir. Burada elektrona $+z$ yönünde elektrik alan uygulandığında elektronun konumu (bulunma olasılığı) $-z$ yönünde kaymaktadır. Yani elektrik alandan kaynaklanan elektriksel kuvvet elektronu $-z$ yönünde hareket ettirmiştir. Elektronun kuyunun 1. ve 3. bölgesinde çok az ihtimalle bulunabileceği ve kuyunun ortasında (2. Bölge) bulunma ihtimalinin daha yüksek olduğunu söylenebilir. Elektrik alan elektronun bulunma olasılığını kuyunun sol tarafına doğru kaydırmıştır. Şekil 21 de elektrik alan etkisi altında bulunan kuyudaki bir elektronun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı olarak grafiği verilmiştir. Dış elektrik alanla bağlanma enerjisi düşer. Burada elektronun bağlanma enerjisinin azalmasının nedeni, elektrik alanın kuyunun potansiyel yapısına etkisinden dolayıdır. Bu tür kuantum kuyu yapılarında elektrik alan şiddeti ve kuyu genişliği büyük öneme sahiptir.

Dış elektrik alan altındaki sonlu kuantum kuyusunda bulunan elektronun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre grafiği şekil 23'te verilmiştir. Kuyu genişliği arttıkça bağlanma enerjisinin azaldığı gözlenmektedir. Burada yabancı atom merkezde , kuyunun kenarında ve merkez ile kuyu kenarı arasında olmak üzere üç farklı yabancı atom konumu göz önüne alınmıştır. Yabancı atom kuyu kenarına doğru yaklaştıkça bağlanma enerjisi azalmaktadır. Yabancı atom kuyu kenarına yaklaştığında elektronun bağlanması azalmıştır. Bunun yanında elektrik alanın artmasıyla bağlanma enerjisinin azaldığı görülür. Elektrik alan elektronun bağlılığını azaltmıştır. Dar kuyularda bu etkinin daha az olduğu görülmektedir. Geniş kuyularda, elektrik alan bağlanma enerjisini daha çok azaltmıştır. Yabancı atom konumu ve elektrik alan değerleri elektronun enerjisini düzenli olarak arttırmakta ya da azaltmaktadır.

Şekil 24’de bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna bağlı grafiği çizilmiştir. Yabancı atom merkezden kuyunun kenarına doğru hareket ettirilmiştir. Önceki grafikteki gibi yabancı atomun kuyu kenarına doğru yaklaştıkça azaldığı gözlenir. Elektrik alanın artması bağlanma enerjilerini düşürmektedir. Elektrik alanın küçük ve büyük kuyu genişliklerinde bağlanmayı nasıl etkilediği açıkça görülmektedir. Dar kuyularda elektrik alan bağlanma enerjisini düşürmekte daha çok zorlanmaktadır. Çünkü dar kuyuda elektron daha sıkı bağlıdır. Geniş kuyularda elektronun dar kuyulara göre daha serbest olmasından dolayı, geniş kuyuda bağlanma enerjisi elektrik alan şiddetinin arttırılmasıyla daha hızlı düşmektedir.

Şekil 25 de farklı elektrik alan ve hidrostatik basınç değerleri için, bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi verilmiştir. Kuyu genişliği arttıkça bağlanma enerjisinin azaldığı gözlenmektedir. Elektrik alan arttıkça bağlanma enerjisi azalmaktadır. Hidrostatik basınç ise bağlanma enerjisini arttırmaktadır. Hidrostatik basınç ve elektrik alan altındaki kuyu için, elektronun bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna bağlı değişimi şekil 26 da verilmiştir. Yabancı atom kuyu duvarına doğru yaklaştıkça bağlanma enerjisinin azaldığı gözlenmektedir. Elektrik alan arttıkça bağlanma enerjisi azalmaktadır. Hidrostatik basınç bağlanma enerjisini arttırmaktadır. Basıncın bağlanma enerjisi üzerine etkisinin önemli olduğu görülmektedir.

Dış elektrik alan altındaki sonlu kuantum kuyusunda bulunan elektronun 2s uyarılmış durum dalga fonksiyonu, yabancı atomun yokluğunda ve hidrostatik basıncın sıfır ($P=0$ kbar) olduğu durumda çizilmiş ve şekil 27 de gösterilmiştir. Şekil 28de, farklı elektrik alan ve hidrostatik basınç değerleri için, 2s uyarılmış durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi verilmiştir. Kuyu genişliğinin artmasıyla bağlanma enerjisi artmaktadır. Burada, elektrik alanın artmasıyla bağlanma enerjisinin $80A^0$ a kadar arttığı ve daha sonra azaldığı görülüyor. Hidrostatik basınç bağlanma enerjisini arttırmaktadır ve $70A^0$ civarında azalmaya başladığını görebiliriz. 2s uyarılmış durumda bağlanma enerjisinin davranışı, dış etkiler altında taban durumla benzer davranı sergilemekte fakat aynı değildir. İki farklı elektrik alan ve hidrostatik basınç değeri için, 2s uyarılmış durum bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna bağlı değişimi şekil 29’da verilmiştir. Yabancı atomun konumu kuyu duvarına yaklaştıkça bağlanma enerjisinin önce arttığı ve sonra azaldığı gözlenmektedir. Bu grafikte dış etkiler altındaki elektronun davranışını görebiliyoruz. Elektrik alanın ve hidrostatik

basıncın artmasıyla bağlanma enerjisi deęişimini görüyoruz. Bu çalışmada, şekil 29 u çizdiren Fortran programları verilmiştir.

Sonuç olarak, yabancı atom katkılı sonsuz ve sonlu kuantum kuyularında hapsedilmiş bir elektrona, dış elektrik alan ve hidrostatik basınç etkisi incelenmiştir. Bu etkiler sonucunda Schrödinger denklemleri yazılmıştır. Ele alınan kuyular için Schrödinger denkleminin çözümleri yapılmıştır. Dışarıdan uygulanan elektrik alan, hidrostatik basınç ve yabancı atom katkısının Schrödinger denklemini ve dolayısıyla Hamiltonien'i nasıl deęiştirdiđi gözlemlenmiş ve çözümleri yapılmıştır. Sonuçlar literatürle uyumludur. Nümerik çözümler Fortran programlama dili ile programlar yazılarak yapılmıştır. Kendi yazdığımız ve nümerik sonuçları veren Fortran programları bu tezde açıkça verilmiştir. Hidrostatik basıncın ve dış elektrik alanın, yabancı atom katkılı kuantum kuyularında elektronun taban durum ve birinci uyarılmış durum bağlanma enerjilerine etkisi incelenmiştir. Kayda deđer etkiler gözlemlenmiştir. Bu tezin, kuantum kuyuları ile ilgili araştırma yapanlar için kaynak olarak kullanılacağını umuyoruz.

KAYNAKLAR

- A.M.Elabsy, Hydrostatic-pressure dependence of binding energies for donors in quantum-well heterostructures, *Phys.Scr.*,48,376-378, (1993)
- Aktas Ş., Okan S.E., Erdogan, I., Akbas, H.,Tomak M., Donor binding energies in GaAs quantum wells considering the band nonparabolicity effects and the wavefunction elongation, *Superlattices, Superlattices and Microstructures*, 28, 165-169,(2000).
- A.John Peter, K. Navaneethakrishnan, Simultaneous effects of the pressure and temperature on donors in a GaAlAs/GaAs quantum well, *Superlattices and Microstructures*, 43, 63-71, (2008).
- A.Vanitha, A.John Peter, The effect of nonparabolicity on binding energy of ground and excited states in a corrugated quantum well, *Superlattices and Microstructures*, 46, 679-686, (2009).
- Bulut Pınar, Sonsuz Kuantum Kuyusu ve Diamagnetik Duygunluk, Yüksek Lisans Semineri, Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne, (2010).
- Carneiro G.N., Webwr G.,Binding energies of ground and excited donor states bound to X valleys in GaAs/AlAs type-II quantum wells, *Physical Review B*,58, 7829-7873, (1998).
- Erdogan, I., Akankan, O., Akbas, H., Effects of hydrostatic pressure on the self-polarization in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells under the electric field. *Physica E*, 42, 136-140. (2009).
- Gu Ben-Yuan and Huo Chong-Ru, Calculation of Binding Energies of the Ground and Excited States of a Donor in Quantum Wells: a Functional Variational Approach, *Commun. Theor. Phys.* 17, 303-312, (1992).
- H.Akbas, I.Erdogan, O.Akankan, Hydrostatic pressure effects on impurity states in GaAs/AlAs quantum wells, *Superlattices and Microstructures*, 50, 80-89, (2011).
- Karaoğlu Bekir, Kuantum Mekaniğine Giriş, (Bilgetek Yayıncılık, İstanbul, (1994).

- Kasalak Turgut Fatih, Parabolik Kuantum Noktalarında Elektronların Enerji Spektrumu, Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Isparta, (2011).
- Kittel Charles, Katıhal Fizikine Giriş, (Bilgetek Yayıncılık, İstanbul, 1996).
- Harrison Paul, Quantum wells, wires and dots, Wiley Interscience, second edition, UK, 2005.
- Nithiananthi P., Jayakumar K., Diamagnetic susceptibility of a hydrogenic donor in low lying excited states in a quantum well, Superlattices and Microstructures, 40, 174-179, (2006).
- S. Sucu, S. Minez and I.Erdogan, Self-polarization of a donor impurity for the first excited state in an $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ quantum well, <https://doi.org/10.1007/s12648-020-01829-w>, Published online: 07 September 2020
- Şen Gizem, Kuantum Kuyularında Bağlanma Enerjisi ve Polarizebilite, Yüksek Lisans Semineri, Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne, (2011).
- Yaman Olcay, Kuantum Kuyu ve Tellerine Hapsedilen Elektronun Özellikleri; Elektrik Alan Ve Yabancı Atomun Etkisi, Yüksek Lisans Tezi, Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne, (2010).
- Yavuz Selim, Sonlu Kuantum Kuyusuna Elektrik Alan, Yabancı Atom ve Lazer Etkisi, Yüksek Lisans Semineri, Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne, (2011).

ÖZGEÇMİŞ

8 Ağustos 1984 yılında Kırklareli’nde doğdum. İlkokul ve ortaokulu Kırklareli Kavaklı’da, lise öğrenimimi ise Kırklareli’nde tamamladım. 2002 yılında Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girdim ve 2007 yılında mezun oldum. 2010-2011 eğitim-öğretim yılında Trakya Üniversitesi Eğitim Fakültesinde formasyon eğitimimi tamamladım. 2018 Ocak ayında Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında yüksek lisansa başladım. 2008-2009 yılları arasında Nobel İlaç firmasında tıbbi satış mümessili olarak çalıştım. 2009-2018 yılları arasında çeşitli dersanelerde fizik öğretmenliği yaptım. 2018-2019 yılında Edirne Bahçeşehir Koleji’nde fizik öğretmenliği yaptım. Evli ve bir çocuk annesiyim.