

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM KUYU VE KÜRESEL KUANTUM NOKTASINDA UYARILMIŞ
DURUM BAĞLANMA ENERJİLERİNİN DÖNÜM NOKTALARI

Pınar BULUT

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Danışmanları

I. Doç. Dr. İlhan ERDOĞAN

II. Prof. Dr. Hasan AKBAŞ

EDİRNE-2016

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü onayı



Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Bu tezin Doktora tezi olarak gerekli şartları sağladığımı onaylarım.



Prof. Dr. Sërap DALGIÇ
Anabilim Dalı Başkanı

Bu tez tarafımızca okunmuş olup, kapsamı ve niteliği açısından bir Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.



Prof. Dr. Hasan AKBAŞ
İkinci Tez Danışmanı



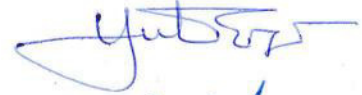
Doç. Dr. İlhan ERDOĞAN
Tez Danışmanı

Bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından Fizik Anabilim Dalında bir Doktora tezi olarak oybirliği / ~~oyçokluğu~~ ile kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Prof. Dr. Yüksel ERGÜN



Prof. Dr. Serbüent YILDIRIM



Prof. Dr. ERTAN ARDA



Doç. Dr. Cengiz DANE



Doç. Dr. İlhan ERDOĞAN (I. Danışman)



Tarih: 25/05/2016

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

İlgili tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını beyan ederim.



25/05/2016

Pinar BULUT

Doktora Tezi

Kuantum Kuyu ve Küresel Kuantum Noktasında Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjilerinin
Dönüm Noktaları

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu tez çalışmasında antisimetrik hapsedici potansiyele sahip $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusu ve sonlu hapsedici potansiyele sahip $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktasının merkezinde yer alan yabancı atomun taban durum ve uyarılmış durum bağlanma enerjileri hidrostatik basınç etkisi altında farklı Alüminyum mol kesirleri için hesaplanmış, $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi için dönüm noktaları belirlenmiştir. Bunlara ek olarak, antisimetrik hapsedici potansiyele sahip $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusunda diamanyetik duygunluk taban durum ve uyarılmış durumlar için hidrostatik basınç ve Alüminyum mol kesri etkilerinin yanı sıra yabancı atomun konumu değiştirilerek hesaplanmıştır. Hesaplamalar etkin kütle yaklaşımı altında varyasyon metodu ile nümerik olarak yapılmıştır. Yapılan hesaplamalar sonucunda bağlanma enerjileri, $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi için dönüm noktaları ve diamanyetik duygunluğun yabancı atomun hapsedildiği düşük boyutlu yapı, yapının genişliği (ya da yarıçapı), elektronun bulunduğu enerji durumu, hidrostatik basınç, Alüminyum mol kesri ve yabancı atomun yapı içerisindeki konumu gibi parametrelere önemli ölçüde bağlı olduğu görülmüştür.

Yıl : 2016

Sayfa Sayısı : 101

Anahtar Kelimeler : Kuantum kuyusu, kuantum noktası, bağlanma enerjisi, dönüm noktası, diamanyetik duygunluk, uyarılmış durumlar, hidrostatik basınç

Doctoral Thesis

Excited State Binding Energy Turning Points in Quantum Well and Spherical Quantum Dot

Trakya University Institute of Natural Sciences

Department of Physics

ABSTRACT

In this thesis, the ground state and a few excited state binding energies of a hydrogenic donor impurity located at the center of the asymmetric $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ quantum well and spherical $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum dot has calculated under the influence of hydrostatic pressure and for different Aluminum concentrations, then $2p_0$ excited state binding energy turning points have obtained. Additionally, the diamagnetic susceptibility of an off-centre hydrogenic donor impurity in ground and a few excited state in asymmetric $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ quantum well has been investigated under applied hydrostatic pressure and for different values of Aluminum concentrations. Calculations are carried out using the effective mass approximation within a variational approach. It has been observed that binding energies, $2p_0$ excited state binding energy turning points and diamagnetic susceptibilities are strongly dependent on the kind of low-dimensional structure that hydrogenic donor impurity has been confined, structure width (or radius), impurity state, hydrostatic pressure, Aluminum concentration and impurity location.

Year : 2016

Number of Pages : 101

Keywords : Quantum well, quantum dot, binding energy, turning point, diamagnetic susceptibility, excited states, hydrostatic pressure

TEŐEKKÜR

Doktora alıőmalarım boyunca bilgi ve tecrübeleriyle yol gösteren danışman hocalarım Do. Dr. Sayın İlhan ERDOĐAN ve Prof. Dr. Sayın Hasan AKBAŐ'a en iten teőekkürlerimi sunarım.

Tez izleme komitesinde yer alan deėerli hocalarım Prof. Dr. Sayın Ertan ARDA ve Do. Dr. Sayın Cengiz DANE'ye ilgi ve önerilerinden dolayı teőekkür ederim.

Namık Kemal Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü deėerli hocalarına anlayıő ve desteklerinden dolayı teőekkür ederim.

Ve aileme, sonsuz teőekkürler...

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	vi
ŞEKİL LİSTESİ	ix
TABLO LİSTESİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR	xi
1 GİRİŞ	1
2 DÜŞÜK BOYUTLU YARI İLETKEN HETEROYAPILAR	4
2.1 Yarı İletken Heteroyapılar	4
2.2 Düşük Boyutlu Yapılar	6
2.2.1. Kuantum Kuyuları	7
2.2.2. Kuantum Telleri	8
2.2.3. Kuantum Noktaları	9
3 FİZİKSEL YAKLAŞIMLAR	11
3.1 Schrödinger Denklemi	11
3.1.1. Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi	11
3.1.2. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi	12
3.2 Varyasyon Metodu	13

3.3	Etkin Kütle Yaklaşımı	15
3.4	Parabolik ve Nonparabolik Çözümler	15
4	KUANTUM KUYULARI VE KÜRESEL KUANTUM NOKTALARI İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİ ÇÖZÜMÜ	17
4.1	Kuantum Kuyuları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü	17
4.1.1.	Sonsuz Kuantum Kuyuları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü	17
4.1.2.	Sonlu Kuantum Kuyuları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü	20
4.2	Küresel Kuantum Noktaları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü	23
4.2.1.	Sonsuz Küresel Kuantum Noktaları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü	27
4.2.2.	Sonlu Küresel Kuantum Noktaları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü	30
5	HİDROSTATİK BASINÇ ETKİSİ ALTINDAKİ KUANTUM KUYULARINDA YABANCI ATOM PROBLEMİ	34
5.1	$GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ Kuantum Kuyusunda Taban Durum Subband Enerjisi	35
5.2	$GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ Kuantum Kuyusunda Taban Durum ve Uyarılmış Durumlar	39
5.3	$GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ Kuantum Kuyusunda Yer Alan Yabancı Atomun Taban Durum ve Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjileri	40
5.4	$GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ Kuantum Kuyusunda Hidrostatik Basınç Etkisi Altında Yer Alan Yabancı Atomun Taban Durum ve Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjileri	47
6	KUANTUM KUYULARINDA DIAMANYETİK DUYGUNLUK	57
6.1	Antisimetrik Hapsedici Potansiyele Sahip $GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ Kuan- tum Kuyusunda Yer Alan Yabancı Atomun Diamanyetik Duygunluğu	57
6.2	Antisimetrik Hapsedici Potansiyele Sahip $GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ Kuan- tum Kuyusunda Hidrostatik Basınç Altında Yer Alan Yabancı Atomun Diamanyetik Duygunluğu	66

6.3	Antisimetrik Hapsedici Potansiyele Sahip $GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ Kuantum Kuyusunda Hidrostatik Basınç Altında Yer Alan Yabancı Atomun Konumunun Diamanyetik Duygunluğa Etkisi	72
7	HİDROSTATİK BASINÇ ETKİSİ ALTINDAKİ KÜRESEL KUANTUM NOKTALARINDA YABANCI ATOM PROBLEMİ	76
7.1	$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Küresel Kuantum Noktasında Taban Durum Subband Enerjisi	76
7.2	$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Küresel Kuantum Noktasında Yer Alan Yabancı Atomun Taban Durum ve Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjileri	78
7.3	Hidrostatik Basınç Etkisi Altındaki $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Küresel Kuantum Noktasında Yer Alan Yabancı Atomun Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjisi	82
7.4	Hidrostatik Basınç Etkisi Altındaki $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Küresel Kuantum Noktasında Yer Alan Yabancı Atomun Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjisine x Alüminyum Mol Kesrinin Etkisi	85
8	SONUÇLAR VE TARTIŞMA	90
	KAYNAKLAR	94
	ÖZGEÇMİŞ	101
	TEZ İLE İLGİLİ BİLİMSEL FAALİYETLER	102

ŞEKİL LİSTESİ

2.1	A ile B yarı iletken kristalleri ve oluşturdukları basit heteroyapının bant yapısı	4
2.2	$Al_xGa_{1-x}As$ ve $GaAs$ yarı iletken kristallerinin oluşturduğu heteroyapı .	5
2.3	$Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyusunun bant yapısı . . .	7
2.4	(a) Sonlu, (b) Sonsuz kuantum kuyusu	8
2.5	$GaAs/AlAs$ Sonsuz kuantum teli	8
2.6	$Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ (a) Silindirik, (b) Küresel, (c) Kübik kuantum noktaları	9
5.1	Taban durum subband enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi	38
5.2	$1s$, $2p_0$, $2p_+$ ve $2p_-$ bağlanma enerjilerinin kuyu genişliğine bağlı değişimi	44
5.3	$1s$ taban durum bağlanma enerjisinin farklı x Al mol kesirleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi	46
5.4	$2p_+$ ve $2p_-$ uyarılmış durumu bağlanma enerjilerinin farklı x Al mol kesirleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi	47
5.5	$2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisinin farklı x Al mol kesirleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi	48
5.6	$1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinin $L = 100A^0$ kuyu genişliğinde basınç ile değişimi	52
5.7	$x_l = x_r = 0.3$ Al mol kesrinde $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisinin $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$ ve $P = 30\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi	53
5.8	$x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ Al mol kesrinde $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisinin $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$ ve $P = 30\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi	54

5.9	$2p_0$ uyarılmış durumu L_{2p_0T} bağlanma enerjisi dönüm noktasının farklı x Al mol kesirleri için hidrostatik basınca bağlı değişimi	55
5.10	$2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi tersinin $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$ ve $P = 30\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi	56
6.1	$1s$ taban durumunda farklı Al mol kesirleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	62
6.2	$2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda farklı Al mol kesirleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	63
6.3	$2p_0$ uyarılmış durumunda farklı Al mol kesirleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	65
6.4	$1s$ taban durumunda $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$ ve $P = 20\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	69
6.5	$2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$ ve $P = 20\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	70
6.6	$2p_0$ uyarılmış durumunda $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$ ve $P = 20\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	71
6.7	$1s$ taban durumunda $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$ ve $P = 20\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ iken diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	72
6.8	$2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$ ve $P = 20\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ iken diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	73
6.9	$2p_0$ uyarılmış durumunda $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$ ve $P = 20\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ iken diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi	74

7.1	1s taban ve $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinin küresel kuantum noktası yarıçapına bağlı değişimi	81
7.2	$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$ ve $P = 30\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için küresel kuantum noktası yarıçapına bağlı değişimi	84
7.3	$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin farklı Al mol kesirleri için küresel kuantum noktası yarıçapına bağlı değişimi	85
7.4	$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktası $2p_0$ uyarılmış durum R_{2p_0T} dönüm noktasının farklı Al mol kesirleri için basınca bağlı değişimi	86
7.5	$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktası $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin farklı Al mol kesirleri için basınca bağlı değişimi	88
7.6	$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktası $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$ ve $P = 30\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için V_0 hapsedici potansiyele bağlı değişimi	89
7.7	$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi tersinin $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$ ve $P = 30\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için küresel kuantum noktası yarıçapına bağlı değişimi	89

TABLO LİSTESİ

2.1	Düşük boyutlu yapıların sınıflandırılması	7
4.1	$l = 0, 1, 2$ için küresel Bessel fonksiyonları	29
4.2	$l = 0, 1, 2$ ve $m = 0, \pm 1, \pm 2$ için Küresel Harmonik fonksiyonları	29
4.3	$l = 0, 1, 2$ için birinci tür küresel Hankel fonksiyonları	32
5.1	Taban durum ve uyarılmış durum n, l, m kuantum sayıları	39
5.2	Hidrostatik basıncın kuyu genişliği, dielektrik sabit ve etkin kütle etkisi	48

SİMGELER VE KISALTMALAR

l	Açısal kuantum sayısı
x	Alüminyum mol kesri
A^0	Angstrom
$a.u.$	Atomik birim
n	Baş kuantum sayısı
ψ	Dalga fonksiyonu
χ_{dia}	Diamanyetik duyunluk
ϵ	Dielektrik sabiti
e	Elektron yükü
m^*	Elektronun etkin kütlesi
m_0	Elektronun serbest kütlesi
a^*	Etkin Bohr yarıçapı
R^*	Etkin Rydberg enerjisi
H	Hamiltonyen
$V(\vec{r})$	Hapsedici potansiyel
P	Hidrostatik basınç
c	Işık hızı
Q_c	İletkenlik bant oranı

L_{2p_0T}	Kuantum kuyusu için dönüm noktası
R_{2p_0T}	Küresel kuantum noktası için dönüm noktası
∇^2	Laplasyen
m	Manyetik kuantum sayısı
N	Normalizasyon kaysayısı
\hbar	Planck sabiti
E_0	Subband enerjisi
E_{b1s}	Taban durum bağlanma enerjisi
Q_v	Valans bant oranı
λ	Varyasyon parametresi
r_i, z_i	Yabancı atom konumu
E_{b2p_0}	$2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi
$E_{b2p_{\pm}}$	$2p_{\pm}$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Yük taşıyıcı hareketinin serbest olduğu boyut sayısına bağlı olarak kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları şeklinde sınıflandırılan düşük boyutlu yapılar son yıllarda üzerinde oldukça çalışılan bir alandır. Normal ölçekte bir yapı (bulk yapı olarak da isimlendirilir) içerisindeki yük taşıyıcılar serbestçe hareket edebilirken, birkaç nanometre ölçeğindeki düşük boyutlu yapılarda hareket sınırlandırılmış olduğundan dolayı kuantum etkileri gözlenir ve bulk değerinden farklı optik ve elektronik özellikler ortaya çıkar. Dolayısı ile düşük boyutlu yapılardaki bu yoğun çalışmaların bir sebebi kuantum fiziği teorisini anlamak iken bir diğer sebebi de laboratuarlarda üretilme imkanı olan bu yapıların istenilen optik ve elektronik özellikte teknolojik uygulamalara imkan sağlamasıdır [1, 2].

Hızla ilerleyen teknoloji ile birlikte düşük boyutlu yapıların uygulamalarını geliştirme ve çeşitlendirme ihtiyacı artmıştır ve bu amaçla bu yapılarda teorik ve deneysel olarak çeşitli etkiler araştırılmış, ilgi çekici sonuçlar ortaya çıkmıştır. Düşük boyutlu yapıda hapsedili elektronun dalga fonksiyonu ve enerjisi dolayısı ile bunlara bağlı fiziksel özellikleri değiştiren bu etkilerin en başında donör yabancı atomu katkısı gelir. Yarı iletken cihazlarda önemli bir role sahip olan yabancı atom enerji seviyeleri ve bağlanma enerjileri, kuantum kuyusundan kuantum noktasına çeşitli yapılarda hesaplanmıştır [3–8]. Donör yabancı atomu gibi çeşitli katkılar hesaplama yöntemlerinde geliştirilmesini sağlamıştır. Varyasyon metodu ve pertürbasyon metodu bu yöntemlere örnektir [9].

Ga, Al, In, Cd, Zn, S ; bant yapısının teknolojik uygulamalara kolay uyarlanabilir olması ve kolay ulaşılabilir olması gibi sebeplerden düşük boyutlu yapıları oluşturmada en çok tercih edilen yarı iletken malzemelerdir. Yabancı atom bağlanma enerjisi tanımı ile birlikte çeşitli yarı iletken malzemeler ile oluşturulan kuantum kuyularında ve özellikle farklı şekillerdeki kuantum tel ve noktalarında bağlanma enerjisi hesaplamaları yapılmıştır

[10, 11]. Oluşturulduğu yarı iletkenin yanı sıra düşük boyutlu yapıların şeklinin yabancı atom bağlanma enerjisi üzerinde etkisi olduğu sonucuna varılmıştır [12]. Hesaplanan bağlanma enerjilerine x Alüminyum mol kesrinin ya da başka bir deyişle hapsedici potansiyelin etkisi de araştırılmıştır. Hapsediciliğin en fazla olduğu sonsuz potansiyele sahip düşük boyutlu yapılarda ve hapsediciliğin x Alüminyum mol kesrine bağlı olarak değiştiği düşük boyutlu yapılarda bağlanma enerjileri hesaplanmıştır [5, 13]. Hapsedici potansiyelin sonlu ve sonsuz olmasının yanı sıra konuma göre antisimetrik olduğu düşük boyutlu yapılarda da yabancı atom bağlanma enerjisi hesaplamaları yapılmıştır [14–16].

Düşük boyutlu yapılarda hapsedicilik üzerindeki bir başka etki ise yabancı atomun yapı içerisindeki konumunun değiştirilmesidir. Yabancı atomun merkezde bulunduğu durumda hesaplanan bağlanma enerjilerinden farklı olarak yabancı atom merkez dışında iken bağlanma enerjileri hesaplanmış ve yabancı atomun konumunun bağlanma enerjisini önemli ölçüde etkilediği görülmüştür [5, 7, 17, 18]. Bunlara ek olarak hidrostatik basıncın, elektronun etkin külesini artırırken dielektrik sabitini azaltmakta ve kuyu genişliğini (ya da yarıçapını) kısaltmakta olduğu deneysel verilerle ortaya konulmuş, yabancı atomun bağlanma enerjisini de değiştireceği beklenmiştir [19]. Bu sebeple hidrostatik basıncın kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktasında bulunan yabancı atomun bağlanma enerjisine etkisi çeşitli çalışmalarla gösterilmiştir [20–22].

Düşük boyutlu yapılarda yabancı atomun bağlanma enerjisi ile ilgili çalışmalarda taban durumun yanı sıra uyarılmış durumlar da incelenmiştir. Uyarılmış durumların özelliklerinin bilinmesi ve enerjilerinin belirlenmesi izinli geçiş enerjilerinin hesaplanmasına imkan sağlar. İzinli geçişlerle ilgili teoriye opto-elektronik aletlerin üretiminde başvurulduğundan literatürde bu konuyla ilgili birçok çalışma mevcuttur [23–26].

Düşük boyutlu yapılarda bağlanma enerjisi hesaplamaları sonucunda bazı durumlarda bağlanma enerjisinin negatif olduğu görülmüş ve negatif bağlanma enerjisi yabancı atomun yapıya bağlı olmaması olarak yorumlanmıştır. Fiziksel olarak anlamlı olan bağlanmanın olduğu durumlardır ve bunları belirlemek amacıyla literatürde çeşitli hesaplamalar yer almaktadır [27–29]. Bu gibi teorik hesaplamalar deneysel çalışmalara yardımcı olmak adına oldukça önemlidir.

Düşük boyutlu yapılarda yabancı atomun bağlanma enerjisinin yanı sıra diamanyetik duygunluğu, elektronun konumunun beklenen değerine bağlı olarak ifade edilmiş ve

manyetik özellikleri araştırılmıştır. Hesaplanan diamanyetik duygunluğa basınç ve x Alüminyum mol kesrinin etkisi ile ilgili çeşitli çalışmalar yapılmıştır [30–32]. Yapılan çalışmalar sonucu, düşük boyutlu yapıların diamanyetik duygunluğunun çeşitli etkilerle kontrol edilerek istenilen değere ulaşabildiği böylece optik ve elektronik uygulamalarına ek olarak manyetik uygulamalara da fayda sağladığı görülmüştür.

Bu tez çalışmasında kuantum kuyu ve küresel kuantum noktalarında yabancı atomun bağlanma enerjisi seviyelerine hidrostatik basınç etkisi incelenmiş ve kuantum kuyularında diamanyetik duygunluk hesaplanmıştır. Çalışmanın ikinci bölümünde, yarı iletken hetero yapılar tanımlanarak, düşük boyutlu yapılar sınıflandırılmıştır.

Üçüncü bölümde, hapsedici potansiyel etkisindeki bir elektron için Schrödinger denklemi yazılmış, yaklaşık çözüm yöntemlerinden biri olan varyasyon metodu açıklanmış ve son olarak elektronun etkin kütesinin parabolik ve non-parabolik yaklaşımları verilmiştir.

Dördüncü bölümde ise sonlu ve sonsuz hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyuları ve küresel kuantum noktalarında yer alan bir elektron için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi analitik olarak çözülmüştür.

Beşinci bölümde, antisimetrik hapsedici potansiyele sahip $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusu için taban durum ve uyarılmış durum bağlanma enerjileri farklı x Alüminyum mol kesirlerinde ve hidrostatik basınç etkisinde hesaplanmış, uyarılmış durum bağlanma enerjisi için dönüm noktası tanımlanmıştır.

Altıncı bölümde, antisimetrik hapsedici potansiyele sahip $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusunda yer alan yabancı atom taban durum ve uyarılmış durumları için diamanyetik duygunluğa x Alüminyum mol kesri, yabancı atomun konumu ve hidrostatik basınç etkisi araştırılmıştır.

Yedinci bölümde ise, sonlu hapsedici potansiyele sahip $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktasında yer alan yabancı atomun taban durum ve uyarılmış durum bağlanma enerjileri farklı hidrostatik basınç ve x Alüminyum mol kesri için hesaplanmış, uyarılmış durum bağlanma enerjisi için dönüm noktası tanımlanmıştır.

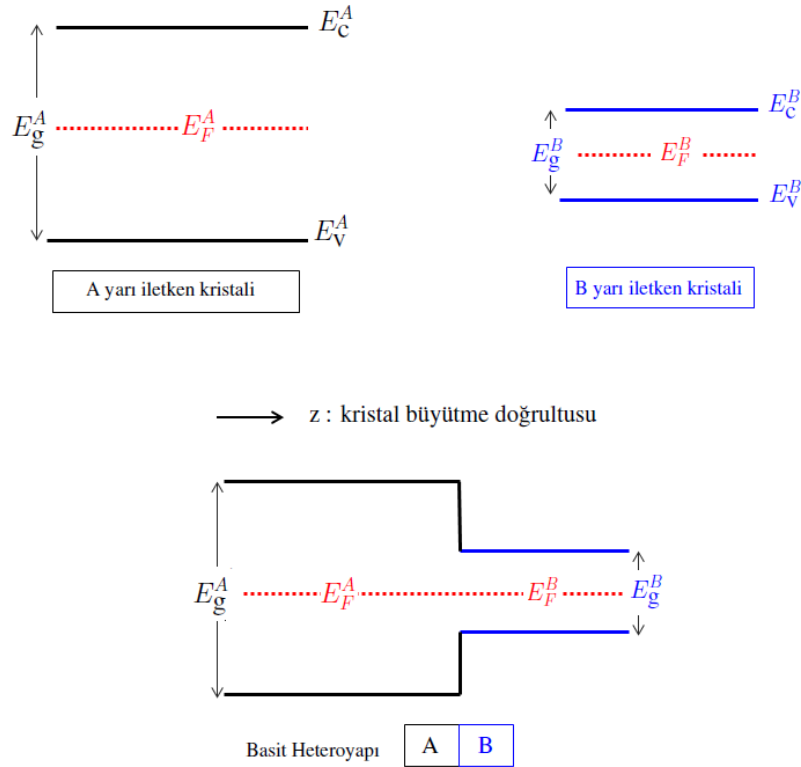
Sekizinci ve son bölümde ise yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen veriler değerlendirilmiş ve önerilerde bulunulmuştur.

BÖLÜM 2

DÜŞÜK BOYUTLU YARI İLETKEN HETEROYAPILAR

2.1. Yarı İletken Heteroyapılar

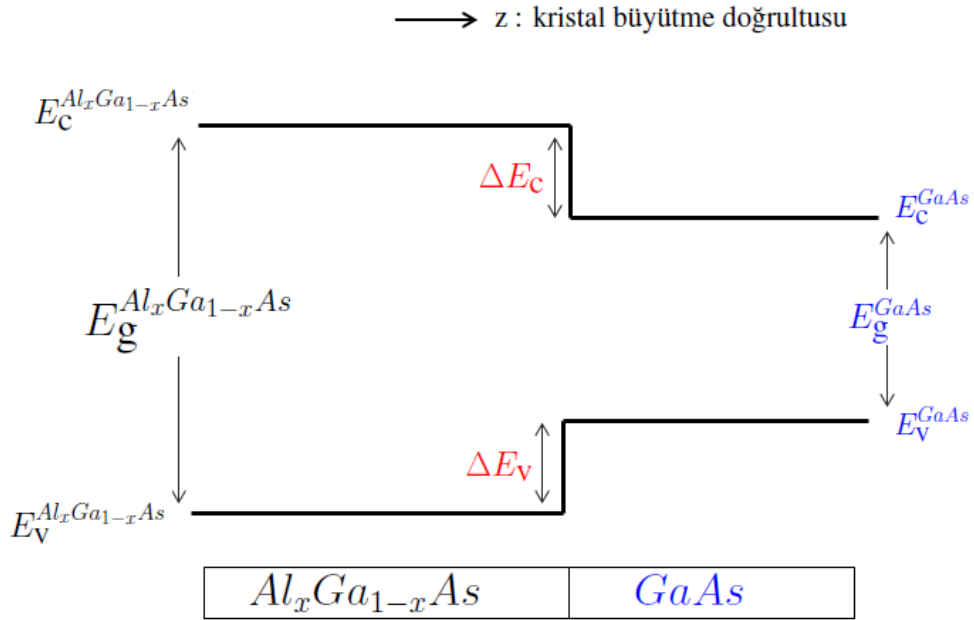
Farklı türden yarı iletkenler ile oluşturulan heteroyapılar, kontrol edilebilir bant aralığına imkan sağladığından dolayı elektronik ve optoelektronikte oldukça önemli bir yere sahiptir. Dolaysız (direkt) bant aralığına sahip yarı iletken heteroyapılar, genellikle periyodik tablonun III. ve IV. grup elementlerinin oluşturduğu yarıiletkenlerden (GaAs, GaAlAs, InAs, InSb ...gibi) elde edilirler [33].



Şekil 2.1. A ile B yarı iletken kristalleri ve oluşturdukları basit heteroyapının bant yapısı

Şekil 2.1 'de verilen yasak bant aralığı E_g^A olan A yarıiletken kristalinin E_g^B gibi farklı yasak bant aralığına sahip B yarı iletken kristali üzerine büyütülmesiyle oluşan yapıya basit yarı iletken heteroyapı denir. A ve B yarı iletken kristallerinin Fermi enerji düzeylerinin hizalanmasıyla oluşan heteroyapıya ait yeni bant yapısında, iki yasak bant aralığı arasındaki enerji farkı bir potansiyel engel oluşturur [34].

Bant yapısını incelemek ve oluşan potansiyel engeli belirlemek amacıyla $GaAs$ yarı iletken kristali üzerine $Al_xGa_{1-x}As$ yarı iletken kristali z eksenini doğrultusunda büyütüldüğünde Şekil 2.2 ile verilen yarı iletken heteroyapı oluşturulur.



Şekil 2.2. $Al_xGa_{1-x}As$ ve $GaAs$ yarı iletken kristallerinin oluşturduğu heteroyapı

Oluşan heteroyapıya ait toplam bant aralığı ΔE_g ile gösterilir ve iki yarı iletkene ait yasak bant aralığı arasındaki farktan hesaplanır.

$$\Delta E_g = E_g^{Al_xGa_{1-x}As} - E_g^{GaAs} \quad (2.1)$$

Deneysel olarak tayin edilen yasak bant aralıkları $GaAs$ için $E_g^{GaAs} = 1,42eV$ iken $Al_xGa_{1-x}As$ için, x Alüminyum konsantrasyonuna bağlı olarak $1,42eV$ ile $2,2eV$ arasında değişmektedir [35]. x Alüminyum konsantrasyonuna ait mol kesridir ve $0 < x < 1$

aralığındadır. ΔE_g 'nin Alüminyum mol kesrine bağlı ifadesi

$$\Delta E_g = 1.155x + 0.37x^2 \quad (eV) \quad (2.2)$$

şeklinde verilir [36].

ΔE_c iletkenlik ve ΔE_v valans bantlarının oluşturduğu potansiyel engellerdir. Q_c iletkenlik bant oranı (conduction band offset parameter) ve Q_v valans bant oranı (valance band offset parameter) olmak üzere;

$$\Delta E_c = Q_c \Delta E_g$$

$$\Delta E_v = Q_v \Delta E_g \quad (2.3)$$

eşitlikleri ile belirlenir. İletkenlik bandındaki potansiyel engel büyüklüğü V_0 ile tanımlanır;

$$V_0 = \Delta E_c$$

$$V_0 = Q_c (1.155x + 0.37x^2) \quad (eV) \quad (2.4)$$

ve benzer şekilde valans bandındaki potansiyel engel büyüklüğü V_h olarak tanımlanır;

$$V_h = \Delta E_v$$

$$V_h = Q_v (1.155x + 0.37x^2) \quad (eV) \quad (2.5)$$

eşitliklerinden yararlanılarak Alüminyum mol kesri x 'e bağlı olarak hesaplanır.

İletkenlik ve valans bant oranları Q_c ve Q_v birbirine yakın ancak farklı değerler alabilir. ΔE_g 'nin %60 ve %40 'ı anlamında $Q_c = 0.6$ ve $Q_v = 0.4$ bant oranları literatürde en çok kullanılan ortalama değerlerdir [37–40].

Eşitlik (2.4) ve (2.5) ile verilen engel potansiyellerindeki Alüminyum mol kesri x için elektroniğe uygulanabilir ideal katkı oranı $0 < x < 0.45$ olarak belirlenmiştir [41]. $x > 0.44$ için $Al_xGa_{1-x}As$ dolaylı (direkt olmayan) bant aralığına sahip olacağından tercih edilmemektedir.

2.2. Düşük Boyutlu Yapılar

Düşük boyutlu yapılar, yük taşıyıcıların (iletkenlik bandı için elektron ve valans bandı için deşik) uzayın belirli bölgesinde engel potansiyeli ile hapsedildiği heteroyapılardır [42].

Bulk yapılar, yük taşıyıcı hareketinin her yönde serbest olduğu, boyutlarının nispeten daha büyük olduğu yapılardır. Bulk yapılarda hapsedicilik etkisi olmadığından enerji spektrumunun sürekli olduğu gözlenir.

Düşük boyutlu yapılarda ise boyutlar de Broglie dalga boyu ($\lambda = h/\sqrt{mk_B T}$) mertebesi kadar küçük olduğundan hapsediciliğin etkisi ile enerjide kuantum etkisi gözlenir ve enerji spektrumu kesiklidir [43].

Yük taşıyıcı (elektron ya da deşik) hareketinin serbest olduğu boyut sayısına bağlı olarak düşük boyutlu yapılar Tablo 2.1'de verildiği gibi kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktası / kutusu olmak üzere başlıca üç grupta incelenir [44].

Tablo 2.1. Düşük boyutlu yapıların sınıflandırılması

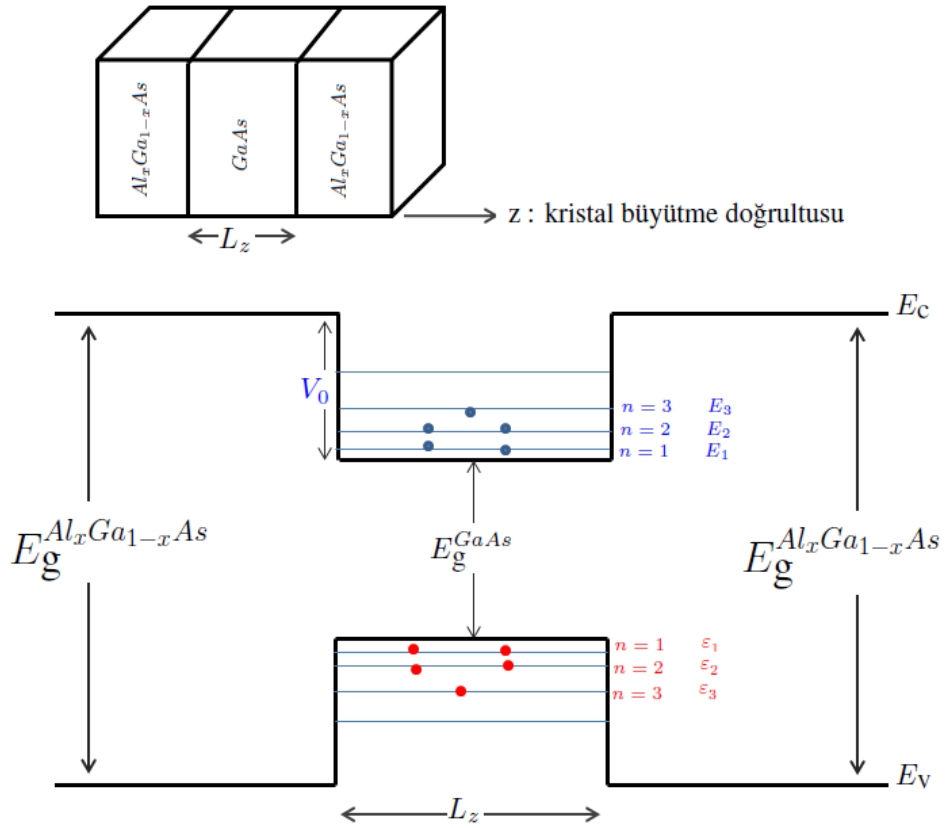
Yapı	Sınırlandırılmış Doğrultu	Serbest Doğrultu
Kuantum Kuyusu	1	2
Kuantum Teli	2	1
Kuantum Noktası	3	0

2.2.1. Kuantum Kuyuları

Yasak bant aralıkları birbirinden farklı iki yarı iletken kristalinden bant aralığı büyük olan yarı iletken kristali üzerine bant aralığı küçük olan, ardından tekrar bant aralığı büyük olan yarı iletken kristalinin sandviç yapıda büyütülmesiyle oluşan heteroyapılara kuantum kuyuları denir.

Yapıyı oluşturan yarı iletken kristallerinin yasak bant aralığındaki bu farktan dolayı, kuantum kuyusu bant yapısında iki engel potansiyeli oluşmuştur. Bu sebepten, düşük bant aralığına sahip yarı iletken kristalin iletim bandındaki elektronlar ve değerlik bandındaki boşluklar kristalin büyütme doğrultusunda hapsedilmiştir [45].

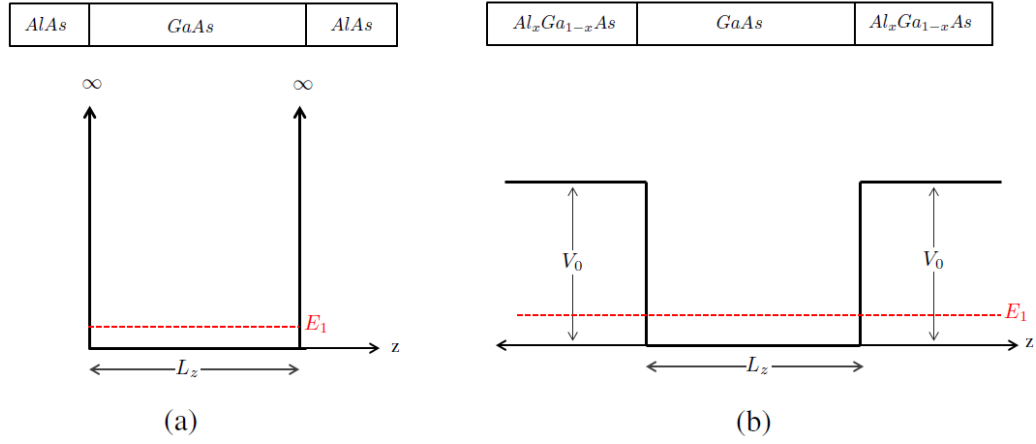
$Al_xGa_{1-x}As$ yarı iletken kristali ve $GaAs$ yarı iletken kristali ile oluşturulan kuantum kuyusunun bant yapısı Şekil 2.3 'de verilmektedir. Kristalin büyütme doğrultusu keyfi olarak z doğrultusu seçilmiştir.



Şekil 2.3. $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyusunun bant yapısı

Yük taşıyıcı olarak elektronlar ile ilgilenildiğinden kuantum kuyusunun iletkenlik

bandını incelemek yeterli olacaktır.



Şekil 2.4. (a) Sonlu, (b) Sonsuz kuantum kuyusu

Kuantum kuyusuna V_0 potansiyel engeli ile hapsedilen bir elektronun hareketi xy düzleminde serbest iken potansiyel duvarlarına dik yani z doğrultusunda sınırlandırılmıştır. Diğer bir deyişle; elektronun xy düzleminde sahip olduğu enerji değerleri sürekli iken z doğrultusundaki enerjisi kesikli (kuantalı) değerler almaktadır.

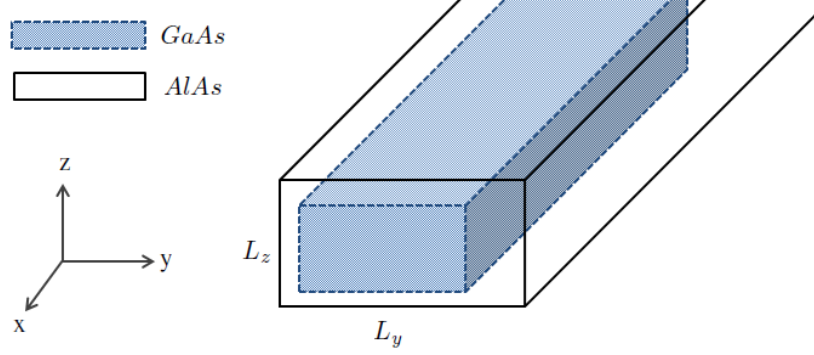
Kuantum kuyularını potansiyel engelin büyüklüğünü belirleyen Alüminyum mol kesri x 'e göre çeşitlendirmek mümkündür. E_1 elektronun taban durum enerjisi olmak üzere; $x = 1$ için $ALAs/GaAs/ALAs$ kuantum kuyusu engel potansiyeli $V_0 \gg E_1$ olacaktır. Bu durumda E_1 'in yanında $V_0 \cong \infty$ seçilebilir ve böyle bir yapı sonsuz kuantum kuyusu olarak bilinir (Şekil 2.4 a) . Benzer şekilde V_0 'ın sonsuz seçilmediği durumlarda oluşan yapılar da sonlu kuantum kuyusu olarak bilinir (Şekil 2.4 b).

Sonsuz ve sonlu kuantum kuyuları sonraki bölümlerde detaylı olarak incelenecektir.

2.2.2. Kuantum Telleri

Kuantum telleri, iletim bandındaki elektronlar ve valans bandındaki deşiklerin hareketinin iki doğrultuda engel potansiyelleri ile sınırlandırılıp bir doğrultuda serbest olduğu yapılardır.

Şekil 2.5 'de verilen kuantum telinde engel potansiyelini tanımlamak gerekirse; x doğrultusunda sıfır olduğu ($V(x) = 0$), y ve z doğrultularında ise kuantum telinin x eksenindeki uzunluğu L_x , y eksenindeki uzunluğu L_y ve z eksenindeki uzunluğu L_z olmak



Şekil 2.5. *GaAs/AlAs* Sonsuz kuantum teli

üzere,

$$V(y, z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq y \leq L_y \quad \text{ve} \quad 0 \leq z \leq L_z \\ \infty, & y < 0, \quad y > L_y \quad \text{ve} \quad z < 0, \quad z > L_z \end{cases} \quad (2.6)$$

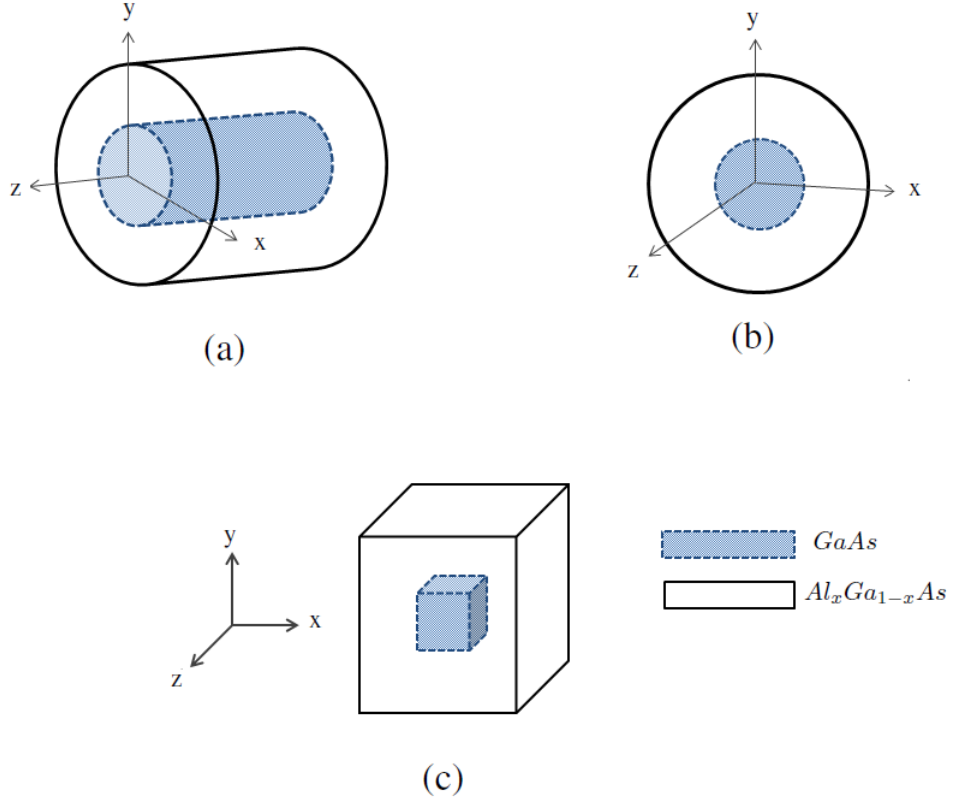
şeklinde tanımlanır [46]. Böyle bir sistem içerisindeki yük taşıyıcıların enerjisi x doğrultusunda sürekli iken y ve z doğrultularında kuantalanmıştır.

2.2.3. Kuantum Noktaları

Kuantum noktaları, iletim bandındaki elektronlar ve valans bandındaki deşiklerin hareketinin her üç doğrultuda da engel potansiyelleri ile sınırlandırıldığı yapılardır. x, y, z doğrultularının her üçündeki hapsedicilikten dolayı yük taşıyıcıların enerjileri de tüm doğrultularda kuantalanmıştır.

Kuantum noktaları, kullanılan malzemeye göre küresel, kübik, silindirik, elipsoid, piramid gibi değişik geometrilerde olabilirler. Silindirik, küresel ve kübik kuantum noktaları Şekil 2.6 'da gösterilmektedir.

Şekil 2.6 'da verilen kuantum noktalarının engel potansiyellerini tanımlamak gerekirse; silindirik kuantum noktasının yarıçapı R ve z eksenindeki uzunluğu L_z olmak üzere;



Şekil 2.6. $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ (a) Silindirik, (b) Küresel, (c) Kübik kuantum noktaları

$$V(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} 0, & \rho \leq R, \quad z < L_z \\ V_0, & \rho > R, \quad z \geq L_z \end{cases} \quad (2.7)$$

şeklinde silindirik koordinatlarda verilir.

Kübik kuantum noktası için, L_x , L_y ve L_z kenar uzunlukları olmak üzere;

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z \\ V_0, & x < 0, x > L_x, \quad y < 0, y > L_y, \quad z < 0, z > L_z \end{cases} \quad (2.8)$$

şeklinde kartezyen koordinatlarda verilirken, küresel kuantum noktası için R yarıçap olmak üzere küresel koordinatlarda radyal doğrultuda aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$V(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} 0, & r \leq R \\ V_0, & r > R \end{cases} \quad (2.9)$$

Kuantum noktalarının boyutları için yine kullanılan malzemeye ve sıcaklığa bağlı bir sınırlama söz konusudur. Örneğin yük taşıyıcıları elektron olan $GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ yarı iletken malzemelerinin oluşturduğu bir küresel kuantum noktasının yarıçapı $4nm < r < 12nm$ iken $InAs/AlGaAs$ yarı iletken malzemelerinden oluşan küresel bir kuantum noktasının yarıçapı $3nm < r < 20nm$ 'dir [47].

Küresel kauntum noktaları sonraki bölümlerde detaylı bir şekilde incelenecektir.

BÖLÜM 3

FİZİKSEL YAKLAŞIMLAR

3.1. Schrödinger Denklemi

Schrödinger dalga denklemi, bir sistemin izinli kuantum durumlarına ait dalga fonksiyonunun uzay ve zamana bağlı değişimini veren kısmi diferansiyel denklemdir. Kinetik ve potansiyel enerjilerin kuantum mekaniğindeki işlemci karşılıkları ile ifade edilerek, incelenen sisteme ait izinli dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerlerini verdiği için bir özdeğer denklemdir [48].

Schrödinger dalga denklemi, zamana bağlı Schrödinger denklemi ve zamandan bağımsız Schrödinger denklemi olmak üzere iki farklı forma sahiptir [49].

3.1.1. Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \quad (3.1)$$

En genel tanımıyla zamana bağlı Schrödinger denklemi (3.1) özdeğer denklemi ile verilir. $\psi(\vec{r}, t)$, tanımlanan sistemdeki parçacığa ait dalga fonksiyonu ya da başka bir deyişle öz fonksiyonu ve \hat{H} , Hamilton işlemcisidir.

$V(\vec{r}, t)$ potansiyelinde hareket eden m kütleli bir parçacığın toplam enerjisi E , kinetik ve potansiyel enerjilerin toplamına eşittir. $\vec{p}^2/2m$ kinetik enerjisi olmak üzere parçacığın toplam enerjisi

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \quad (3.2)$$

şeklinde olacaktır. Momentum işlemcisinin $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ kuantum mekaniksel karşılığı denklem (3.2) 'de yerine yazıldığında \hat{H} Hamilton işlemcisi elde edilir ve zamana bağlı Schrödinger denklemi yeni şeklini alır.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (3.3)$$

Denklem (3.3) ile verilen zamana bağlı Schrödinger denklemi, potansiyelin zamana bağlı olduğu sistemlerdeki parçacığın hareket denklemdir.

3.1.2. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

Parçacığa etkiyen potansiyelin zamana bağlı olmadığı durumlarda Schrödinger denklemi biri uzaya diğeri zamana bağlı iki adet adi diferansiyel denkleme ayrıştırılabilir.

$$\psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) T(t) \quad (3.4)$$

eşitliği ile verilen $\psi(\vec{r}, t)$ öz fonksiyonu zamana bağlı Schrödinger denkleminde yerine yazıldığında;

$$i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{\Psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) \right] \quad (3.5)$$

denklemini elde edilir. Denklemin sol tarafı yalnız t zamanına, sağ tarafı ise yalnız \vec{r} konumuna bağlı olduğundan her iki taraf, toplam enerji olarak tanımlanan aynı E sabitine eşit seçilirse sırası ile

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = E T(t) \quad (3.6)$$

ve

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (3.7)$$

denklemleri elde edilir. Denklem (3.7) zamandan bağımsız Schrödinger denklemidir. Bu denklem çoğu kez

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (3.8)$$

şeklinde de yazılır. Denklem (3.4) 'de verilen $\psi(\vec{r}, t)$ öz fonksiyonunun en genel ifadesi, n izinli kuantum durumlarını ifade etmek üzere

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (3.9)$$

olarak ifade edilirse, denklem (3.7) ya da denklem (3.8) 'un işlevi, herhangi bir $\Psi_n(\vec{r})$ öz fonksiyonlarına karşılık gelen E_n özdeğerlerini bulmaktır [50].

Bu çalışmada; zamandan bağımsız $V(\vec{r})$ potansiyelleri ile ilgilenildiğinden parçacığa ait öz fonksiyon ve özdeğerler zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ile hesaplanacaktır.

3.2. Varyasyon Metodu

Schrödinger denkleminin analitik çözümünün yapılabildiği kuantum sistemleri oldukça kısıtlıdır. Sistem içerisindeki parçacık sayısı ya da parçacığın sahip olduğu potansiyel enerji Schrödinger denkleminin çözümünü zorlaştırabilir.

Tam olarak çözülemeyen Schrödinger denklemleri için yaklaşık çözüm yöntemlerine başvurulur [51]. Yaklaşık çözüm yöntemlerinden biri Varyasyon metodudur [9] ve bu çalışmada zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin nümerik çözümleri Varyasyon

metodu ile bulunacaktır.

\hat{H} Hamiltonu ile tanımlanan bir kuantum sistemi herhangi bir $\Psi_0(\vec{r})$ öz durumunda E_0 özdeğerini alır. Bu sisteme ait zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\hat{H}\Psi_0(\vec{r}) = E_0 \Psi_0(\vec{r}) \quad (3.10)$$

şeklinde olacaktır.

Varyasyon metodu uygulanacak bu sistem herhangi bir $\psi_n(\vec{r}, \lambda)$ öz durumunda $E_n(\lambda)$ özdeğerini alsın. λ pozitif reel parametresi olmak üzere, sistemin yeni durumu için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\hat{H}\Psi_n(\vec{r}, \lambda) = E_n(\lambda) \Psi_n(\vec{r}, \lambda) \quad (3.11)$$

olur. Bu durumda $\Psi_n(\vec{r}, \lambda)$ dalga fonksiyonu (öz durumu) ile tanımlanan kuantum sisteminin $E_n(\lambda)$ enerji özdeğerlerini veren \hat{H} Hamiltonunun beklenen değeri

$$E(\lambda) = \langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \Psi(\vec{r}, \lambda) | \hat{H} | \Psi(\vec{r}, \lambda) \rangle}{\langle \Psi(\vec{r}, \lambda) | \Psi(\vec{r}, \lambda) \rangle} \quad (3.12)$$

ifadesi ile verilir. Denklem (3.12) nümerik olarak hesaplandığında her farklı λ varyasyon parametresi için farklı bir $E_n(\lambda)$ enerjisi bulunur. Minimum enerjiye karşılık gelen λ varyasyon parametresinin kullanılması ile çözülen Schrödinger denklemindeki dalga fonksiyonu kuantum sistemini en iyi tanımlayan $\psi_n(\vec{r}, \lambda)$ dalga fonksiyonudur. Başka bir deyimle

$$E(\lambda) \geq E_0 \quad (3.13)$$

olmak üzere [52].

$$E_{min} = \min_{\lambda} \frac{\langle \Psi(\vec{r}, \lambda) | \hat{H} | \Psi(\vec{r}, \lambda) \rangle}{\langle \Psi(\vec{r}, \lambda) | \Psi(\vec{r}, \lambda) \rangle} \quad (3.14)$$

dir.

3.3. Etkin Kütle Yaklaşımı

Bir elektronun serbest uzaydaki kütlesi (m_0) bilindiği üzere $9.11 \times 10^{-31} kg$ iken kristal bir yapı içerisindeki kütlesi serbest uzaydakinden farklıdır.

Kristal yapı içerisinde periyodik bir örgü potansiyeli etkisinde hareket eden elektrona (ya da deşığe) dışarıdan elektrik veya manyetik alan uygulandığında, elektronun kütlesi en genel anlamda

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (3.15)$$

denkleminde hesaplanır [53]. Burada E elektronun enerjisi, k dalga vektörünün büyüklüğü ve m^* elektronun etkin kütlesidir. Elektronun kristal yapı içerisinde (3.16) denklemi ile verilen etkin kütleyle eşit skaler bir kütle ile hareket ettiği yaklaşıma ise etkin kütle yaklaşımı denir [54].

Etkin kütle genelde serbest uzaydaki kütleyle bağlı olarak ifade edilir. Pozitif ya da negatif olabileceği gibi sonsuz kabul edilebilecek kadar büyükte olabilir. Ayrıca deneysel ölçümler etkin kütlelerin yöne bağlı (anizotropik) olduğunu söylemektedir [55].

Etkin kütle yaklaşımı ile zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (3.16)$$

şeklinde yazılabilir.

3.4. Parabolik ve Nonparabolik Çözümler

Kristal bir yapı içerisindeki bir parçacığın (elektron ya da deşik) etkin kütlesi, kütlelerin enerjiye bağlı olup olmamasına göre parabolik ve non-parabolik olmak üzere iki farklı yaklaşımla incelenir.

Elektronun parabolik yaklaşımla etkin kütlesi m_p^* , iletkenlik bandının minimum noktasındaki kütlesine eşit olarak alınır ve bant yapısının parabolik olduğu kabul edilir [56].

Parabolik yaklaşımla *GaAs* yarı iletken kristalinin iletkenlik bandındaki bir elektronun etkin kütlesi;

$$m_p^* = 0.067m_0 \quad (3.17)$$

m_0 serbest uzaydaki kütlesi olmak üzere (3.18) ile verilir.

Elektronun non-parabolik yaklaşımla etkin kütlesi m_n^* , enerjiye bağlıdır ve bant yapısının parabolik olmadığı kabul edilir [57].

$$m_n^* = a_0 + a_1E + a_2E^2 + a_3E^3 + \dots + a_nE^n \quad (3.18)$$

Denklem (3.18), non-parabolik yaklaşımla kütlenin enerjiye bağlı ifadesini vermektedir [58]. Burada a_n 'ler kristale göre değişen sabitler ve E elektronun enerjisidir.

Non-parabolik yaklaşımla *GaAs* yarı iletken kristalinin iletkenlik bandındaki bir elektronun etkin kütlesi;

$$\frac{m_n^*}{m_0} = 0.067 + (0.0436E + 0.236E^2 - 0.147E^3) \quad (3.19)$$

şeklinde verilir [59–61].

Parabolik ve non-parabolik yaklaşımla *GaAs/AlAs* sonsuz ve *GaAs/Al_xGa_{1-x}As* sonlu kuantum kuyuları [62–64], kuantum telleri [65, 66] ve küresel kuantum noktaları [67–69] ile ilgili çeşitli çalışmalar yapılarak enerji ve etkin kütle değerleri hesaplanmıştır.

Literatürdeki parabolik ve non-parabolik etkin kütle yaklaşım sonuçları karşılaştırıldığında, *GaAs/Al_xGa_{1-x}As* kuantum kuyu genişliğinin (ya da kuantum nokta yarıçapının) 100\AA 'dan küçük olduğu durumlarda m_p^* ve m_n^* 'nin birbirinden farklı olduğu ancak, 100\AA 'dan büyük kuyu genişliklerinde m_p^* ve m_n^* 'nin birbirine çok yakın olduğu, aralarındaki farkın ihmal edilebileceği gözlenmiştir [70].

İşlem kolaylığı açısından, kuyu genişliği 100\AA 'dan büyük seçilerek parabolik yaklaşım tercih edilebilir.

BÖLÜM 4

KUANTUM KUYULARI VE KÜRESEL KUANTUM NOKTALARI İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİ ÇÖZÜMÜ

Bu çalışmada, kuantum kuyuları ve küresel kuantum noktaları ile ilgilenildiğinden, ileriki bölümlerde yararlanmak üzere bu yapılara ait zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümleri incelenecektir.

4.1. Kuantum Kuyuları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü

Kuantum kuyusunda z doğrultusunda engel potansiyelleri ile hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektronun enerjisi bu doğrultuda kuantalanmıştır. Elektronun ait dalga fonksiyonları ve kuantalı enerji seviyeleri (3.16) ile verilen zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin tek boyutta çözümlerinden elde edilir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) \quad (4.1)$$

n izinli kuantum durumlarını göstermek üzere denklem (4.1) kuantum kuyusunun potansiyel fonksiyonu $V(z)$ 'ye göre analitik olarak çözümlenir.

4.1.1. Sonsuz Kuantum Kuyuları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü

z doğrultusundaki sonsuz engel potansiyelli bir kuantum kuyusu için hapsedici $V(z)$ potansiyeli

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| < \frac{L}{2} \\ \infty, & |z| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.2)$$

şeklinde tanımlanır. (4.1) ile verilen zamandan bağımsız Schrödinger denklemi, sonsuz hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusuna hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektron için

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) \quad (4.3)$$

şeklini alır, burada $V(z) = 0$ 'dır ve n izinli kuantum durumlarını göstermektedir.

$$k_n^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} E_n \quad (4.4)$$

tanımlaması ile (4.3) diferansiyel denklemi çözüldüğünde

$$\Psi_n(z) = A \sin(k_n z) + B \cos(k_n z) \quad (4.5)$$

dalga fonksiyonları elde edilir.

$$\Psi_n \left(z = -\frac{L}{2} \right) = \Psi_n \left(z = \frac{L}{2} \right) \quad (4.6)$$

Dalga fonksiyonuna (4.6) eşitliği ile verilen kuantum kuyusu sınır şartı uygulanır ve dalga fonksiyonu n izinli kuantum durumlarına bağlı olarak tanımlanır.

$$\Psi_n(z) = B \cos(k_n z) \quad n; \text{tek}$$

$$\Psi_n(z) = A \sin(k_n z) \quad n; \text{çift} \quad (4.7)$$

Burada; $k_n = n\pi/L$ 'dir. A ve B normalizasyon sabitleri olup

$$\int_{-L/2}^{L/2} \Psi_n^*(z) \Psi_n(z) dz = 1 \quad (4.8)$$

dalga fonksiyonunun normalizasyonundan $A = B = \sqrt{2/L}$ olarak hesaplanır.

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \quad (4.9)$$

E_n enerji özdeğerleri (4.9) eşitliği ile n tam sayısına bağlı olarak bulunur.

Taban durum ($n = 1$) için

$$k_1 = \frac{\pi}{L} \quad (4.10)$$

olup, dalga fonksiyonu

$$\Psi_1(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi}{L} z\right) \quad n=1 \quad (4.11)$$

ve enerji özdeğeri

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \quad (4.12)$$

şeklinde açıkça yazılabilir. Birinci uyarılmış durum ($n = 2$) için

$$k_1 = 2\frac{\pi}{L} \quad (4.13)$$

olup, dalga fonksiyonu

$$\Psi_2(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}z\right) \quad n=2 \quad (4.14)$$

ve enerji özdeğeri

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \quad (4.15)$$

yazılabilir.

4.1.2. Sonlu Kuantum Kuyuları İçin Schrödinger Denklemini Çözümü

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| < \frac{L}{2} \\ V_0, & |z| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.16)$$

$V(z)$ potansiyel fonksiyonuna sahip kuantum kuyusunda hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektron için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi (4.1) ile verilir. Engel potansiyeli V_0 'ın yeteri kadar büyük seçilmediği serbest durumlarda ($V_0 < E_n$) elektronun enerji spektrumu sürekli iken, engel potansiyelinin elektronun enerjisinden büyük olduğu ($V_0 > E_n$) bağlı durumlarda elektronun enerjisi z doğrultusunda kuantalanmıştır. ($V_0 > E_n$) şartı ile (4.2) denklemi;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) , \quad z < -\frac{L}{2}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) , \quad -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} \quad (4.17)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) , \quad z > \frac{L}{2}$$

şeklinde üç ayrı bölgede incelenir. α_n ve k_n için

$$\alpha_n^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n)$$

$$k_n^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} E_n \quad (4.18)$$

tanımlamaları ile (4.17) difreansiyel denklemleri çözümü sonucu dalga fonksiyonları;
 n tek tamsayı ise;

$$\Psi_{n \rightarrow \text{tek}}(z) = \begin{cases} N_1 e^{\alpha_n z}, & z \leq -\frac{L}{2} \\ N_2 \cos(k_n z), & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ N_3 e^{-\alpha_n z}, & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.19)$$

n çift tamsayı ise;

$$\Psi_{n \rightarrow \text{çift}}(z) = \begin{cases} N_1 e^{\alpha_n z}, & z \leq -\frac{L}{2} \\ N_2 \sin(k_n z), & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ N_3 e^{-\alpha_n z}, & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.20)$$

şeklinde bulunur [71]. N_1 , N_2 ve N_3 normalizasyon katsayılarıdır ve

$$\Psi_n(z) = \begin{cases} \Psi_1(z), & z \leq -\frac{L}{2} \\ \Psi_2(z), & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ \Psi_3(z), & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.21)$$

Dalga fonksiyonları (4.21) 'de verildiği gibi $\Psi_1(z)$, $\Psi_2(z)$ ve $\Psi_3(z)$ olarak ifade edilirse,

$$\Psi_1(z) \Big|_{z=-\frac{L}{2}} = \Psi_2(z) \Big|_{z=-\frac{L}{2}} \quad (4.22)$$

$$\Psi_2(z) \Big|_{z=\frac{L}{2}} = \Psi_3(z) \Big|_{z=\frac{L}{2}} \quad (4.23)$$

sınır şartları ile

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(z) \Psi_n(z) dz = 1 \quad (4.24)$$

normalizasyon koşulundan hesaplanır.

$$\frac{d}{dz} \Psi_1(z) \Big|_{z=-\frac{L}{2}} = \frac{d}{dz} \Psi_2(z) \Big|_{z=-\frac{L}{2}} \quad (4.25)$$

$$\frac{d}{dz} \Psi_2(z) \Big|_{z=\frac{L}{2}} = \frac{d}{dz} \Psi_3(z) \Big|_{z=\frac{L}{2}} \quad (4.26)$$

(4.25) ve (4.26) denklemleri ile verilen dalga fonksiyonunun süreklilik şartları ile

$$\alpha_n = k_n \tan \left(k_n \frac{L}{2} \right) \quad n;\text{tek} \quad (4.27)$$

$$-\alpha_n = k_n \cot \left(k_n \frac{L}{2} \right) \quad n;\text{çift} \quad (4.28)$$

denklemleri elde edilir. Bu denklemler *transcendental denklem* olarak bilinir ve grafiksel ya da nümerik çözümleri ile elektronun ilgili kuantum durumuna ait subband enerjisi elde edilir [72].

4.2. Küresel Kuantum Noktaları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü

a yarıçaplı küresel kuantum noktasına hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektronun enerji seviyeleri tüm doğrultularda kuantalanmıştır. Elektronun ait dalga fonksiyonları ve kuantalı enerji seviyeleri (3.16) ile verilen zamandan bağımsız üç boyutlu Schrödinger denkleminin küresel koordinatlarda çözümlerinden elde edilir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{r,\theta,\phi}^2 + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi) \quad (4.29)$$

$V(r)$ radyal olarak uygulanan hapsedici potansiyel, $\Psi(r, \theta, \phi)$ küresel koordinat bileşenlerinin fonksiyonu olarak ifade edilen dalga fonksiyonudur. $\nabla_{r,\theta,\phi}^2$ ise küresel koordinatlarda laplasyen operatörüdür ve denklem (4.29) 'de yerine yazılırsa;

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi(r, \theta, \phi) \\ & + V(r) \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi) \end{aligned} \quad (4.30)$$

denklemleri elde edilir. Dalga fonksiyonu için

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.31)$$

şeklinde radyal ($R_{nl}(r)$) ve açısal ($Y_l^m(\theta, \phi)$) olarak iki ayrı fonksiyon tanımlanarak değişken ayırımı yöntemi kullanılabilir. Burada; n baş kuantum sayısı, l açısal (ya da yörüngesel) kuantum sayısı ve m manyetik kuantum sayısıdır, $n = 1, 2, 3, \dots$, $0 < l < n - 1$ ve $-l < m < l$ değerlerini alabilirler.

(4.31) ile tanımlanan dalga fonksiyonu (4.30) Schrödinger denkleminde yerine yazılır ve denklem $\frac{r^2}{R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)}$ ifadesi ile çarpılırsa

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R_{nl}(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m^*}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] \\ &= -\frac{1}{Y_l^m(\theta, \phi)} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_l^m(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_l^m(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right] \end{aligned} \quad (4.32)$$

şeklinde radyal ve açısal iki kısma ayrılır. Her iki denklem de aynı λ sabitine eşit seçilebilir.

Bu durumda radyal denklem için

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{nl}(r)}{dr} \right) + \frac{2m^*}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] R_{nl}(r) = \lambda R_{nl}(r) \quad (4.33)$$

ve açısal denklem için

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_l^m(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_l^m(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} = -\lambda Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.34)$$

yazılabilir ve bu iki denklemin ayrı ayrı çözümüne bakılır.

$$\hat{L}^2(\theta, \phi)Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.35)$$

$$\hat{L}^2(\theta, \phi)Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 \lambda Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.36)$$

Açısal denklemin çözümleri $Y_l^m(\theta, \phi)$ için (4.35) ve (4.36) ile verilen $\hat{L}^2(\theta, \phi)$ açısal momentum işlemcisinin özdeğer denklemi yazılır. Burada $\hat{L}^2(\theta, \phi)$ işlemcisinin açık ifadesi

$$\hat{L}^2(\theta, \phi) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (4.37)$$

eşitliği ile verilir. Açısal denklemin çözümleri olan $Y_l^m(\theta, \phi)$ *Küresel Harmonik Fonksiyonları* olarak bilinir, θ ve ϕ 'ye bağlı olmak üzere iki ayrı fonksiyon tanımlanarak değişkenlerine ayrılabilir.

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi) \quad (4.38)$$

(4.38) eşitliği (4.34) 'de yerine yazılır ve $\frac{\sin^2 \theta}{\Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)}$ ifadesi ile çarpılırsa θ ve ϕ 'ye bağlı iki denklem elde edilir.

$$\frac{\sin \theta}{\Theta_{lm}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta_{lm}(\theta)}{\partial \theta} \right) + \lambda \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi_m(\phi)} \frac{\partial^2 \Phi_m(\phi)}{\partial \phi^2} \quad (4.39)$$

Bu durumda her iki denklem aynı m^2 sabitine eşit seçilebilir.

$$\frac{d^2 \Phi_m(\phi)}{d\phi^2} + m^2 \Phi_m(\phi) = 0 \quad (4.40)$$

ϕ 'ye bağlı (4.40) denkleminin çözümleri

$$\Phi_m(\phi) \approx e^{\pm im\phi} \quad (4.41)$$

olarak bulunur.

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta_{lm}(\theta) = 0 \quad (4.42)$$

θ 'ya bağlı (4.42) denklemi için $x = \cos(\theta)$ dönüşümü yapılır ve bu dönüşüm altında denklemin yeni şekli

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d\Theta_{lm}(x)}{dx} \right] + \left[\lambda - \frac{m^2}{1-x^2} \right] \Theta_{lm}(x) = 0 \quad (4.43)$$

ile verilir. Bu denklem $\lambda = l(l+1)$ için Asosiye Legendre denklemi olarak bilinir ve çözümleri

$$\Theta_{lm}(x) = P_l^{|m|}(x) \quad (4.44)$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = P_l^{|m|}(\cos \theta) \quad (4.45)$$

olarak bilinen *Asosiye Legendre Polinomlarıdır*.

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{\pm im\phi} \quad (4.46)$$

Sonuç olarak; (4.46) eşitlikleri ifade edilen Küresel Harmonik fonksiyonları açışal denklemin çözümüdür [73].

(4.43) radyal denklemi $\lambda = l(l+1)$ tanımlaması ile düzenlenirse

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{nl}(r)}{dr} + \frac{2m^*}{\hbar^2} \left[(E - V(r)) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) = 0 \quad (4.47)$$

eşitliği elde edilir.

(4.47) denklemi küresel kuantum noktasının potansiyel fonksiyonu $V(r)$ 'ye göre çözülür ve $\Psi(r, \theta, \phi)$ dalga fonksiyonu ile E enerji özdeğerlerine ulaşılır.

4.2.1. Sonsuz Küresel Kuantum Noktaları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a \\ \infty, & r > a \end{cases} \quad (4.48)$$

Potansiyel fonksiyonu (4.48) ile tanımlanan a yarıçaplı sonsuz küresel kuantum noktasına hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektronun (4.47) ile verilen radyal denklemi

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{nl}(r)}{dr} + \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} E - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) = 0 \quad (4.49)$$

olur. E enerji özdeğeri için

$$k_{nl}^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} E \quad (4.50)$$

tanımlanır ve

$$\rho = k_{nl} r \quad (4.51)$$

değişken dönüşümü yapılır.

$$\frac{d^2 R_{nl}(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_{nl}(\rho)}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) R_{nl}(\rho) = 0 \quad (4.52)$$

(4.52) Bessel diferansiyel denklemdir ve çözümü (4.53) ile verilen Bessel fonksiyonlarıdır [74].

$$R_{nl}(\rho) = A j_l(\rho) + B n_l(\rho) \quad (4.53)$$

Burada $j_l(\rho)$ küresel Bessel fonksiyonları ve $n_l(\rho)$ küresel Neumann fonksiyonlarıdır. Küresel kuantum noktasının merkezi $r = 0$ 'da Neumann fonksiyonları sonlu bir değer almamaktadır. Dalga fonksiyonunun sonlu olması koşulu gereği $B = 0$ seçilir.

$$R_{nl}(\rho) = A j_l(\rho) \quad (4.54)$$

Bu durumda (4.49) radyal denkleminin çözümü olan radyal dalga fonksiyonları (4.54) 'de verilen küresel Bessel fonksiyonlarıdır.

Sonsuz küresel kuantum noktasına hapsedilen bir elektronun (4.31) şeklinde tanımlanan dalga fonksiyonu

$$\begin{aligned} \Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) &= R_{nl} Y_l^m(\theta, \phi) \\ &= N_l^m j_l(k_{nl}r) P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{\pm im\phi} \end{aligned} \quad (4.55)$$

olarak açıkça yazılabilir.

Küresel Bessel fonksiyonları ve Asosiye Legendre polinomlarının $l = 0, 1, 2$ ve $m = 0, \pm 1, \pm 2$ kuantum sayıları için aldığı değerler Tablo 4.1 ve Tablo 4.2 'de verilmiştir [48].

Tablo 4.1. $l = 0, 1, 2$ için küresel Bessel fonksiyonları

l	$j_l(x)$
0	$\frac{\sin(x)}{x}$
1	$\frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x}$
2	$\left(\frac{3}{x^2} - 1\right) \frac{\sin(x)}{x} - \frac{3 \cos(x)}{x^2}$

Tablo 4.2. $l = 0, 1, 2$ ve $m = 0, \pm 1, \pm 2$ için Küresel Harmonik fonksiyonları

l	m	$P_l^{ m }(\cos \theta)$
0	0	1
1	0	$\cos(\theta)$
	± 1	$-\sin(\theta)$
2	0	$\frac{1}{2} (3 \cos^2(\theta) - 1)$
	± 1	$-3 \cos(\theta) (1 - \cos^2(\theta))^{1/2}$
	± 2	$3 (1 - \cos^2(\theta))$

Elektronun bulunduğu atomik enerji seviyelerini tanımlayan n , l ve m kuantum sayılarına göre uygun dalga fonksiyonu belirlenir. Örneğin taban durum olarak bilinen $1s$ seviyesinde $n = 1$, $l = 0$ ve $m = 0$ 'dır ve dalga fonksiyonu

$$\Psi_{100}(r) = N_0^0 \frac{\sin(k_{10}r)}{k_{10}r} \quad (4.56)$$

olarak belirlenir [5, 75, 76]. (4.49) denklemindeki N_l^m ve (4.56) denklemindeki N_0^0 normalizasyon katsayısıdır ve

$$\iiint dV \Psi_{nlm}^*(r, \theta, \phi) \Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = 1 \quad (4.57)$$

(4.57) normalizasyon şartından hesaplanır.

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \Big|_{r=a} = 0 \quad (4.58)$$

(4.58) küresel kuantum noktasının yarıçap sınırında ($r = a$) dalga fonksiyonunun sonlu kalması gerektiğini söyler. Bu şartın uygulanması k_{nl} dolayısı ile E enerji özdeğerlerini verir.

4.2.2. Sonlu Küresel Kuantum Noktaları İçin Schrödinger Denklemi Çözümü

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a \\ V_0, & r > a \end{cases} \quad (4.59)$$

Potansiyel fonksiyonu (4.59) ile tanımlanan a yarıçaplı sonlu küresel kuantum noktasına hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektronun radyal denklemi (4.47) ile verilir. $V(r)$ 'nin değerine göre (küre içinde) $r \leq a$ ve (küre dışında) $r > a$ için denklem tekrar yazılır.

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{nl}(r)}{dr} + \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} E - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) = 0 \quad r \leq a \quad (4.60)$$

$r \leq a$ için yazılan (4.60) denklemi aynı zamanda sonsuz küresel kuantum noktasının radyal denklemidir ve çözümleri $k_{nl} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} E}$ olmak üzere

$$R_{nl}(r) = A_j l(k_{nl} r) \quad r \leq a \quad (4.61)$$

şeklinde (4.61) ile verilir.

$r > a$ için $V(r) = V_0$ 'dır ve (4.47) radyal denklemi

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{nl}(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl}(r) - \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E) \right] R_{nl}(r) = 0 \quad (4.62)$$

denkleme dönüşür. Burada

$$\alpha_{nl}^2 = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad (4.63)$$

tanımlaması ile denklemin yeni şekli

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{nl}(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl}(r) - \alpha_{nl}^2 R_{nl}(r) = 0 \quad (4.64)$$

olur. (4.64) denkleminin çözümü

$$R_{nl}(r) = B \frac{j_l(k_{nl}a)}{h_l^{(1)}(i\alpha_{nl}a)} h_l^{(1)}(i\alpha_{nl}r) \quad r > a \quad (4.65)$$

şeklinde verilir [77, 78].

$j_l(k_{nl}a)$ küresel Bessel fonksiyonları ve $h_l^{(1)}(i\alpha_{nl}a)$ ya da $h_l^{(1)}(i\alpha_{nl}r)$ birinci tür küresel Hankel fonksiyonlarıdır.

Birinci tür Hankel fonksiyonlarının $l = 0, 1, 2$ açısız kuantum sayıları için aldığı değerler Tablo 4.3'de verilmiştir [79].

Sonuç olarak; sonlu küresel kuantum noktasına hapsedilen bir elektronun dalga fonksiyonu

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4.66)$$

Tablo 4.3. $l = 0, 1, 2$ için birinci tür küresel Hankel fonksiyonları

l	$h_l^{(1)}(x)$
0	$-\frac{i}{x}e^{ix}$
1	$\left(-\frac{1}{x} - \frac{i}{x^2}\right)e^{ix}$
2	$\left(\frac{i}{x} - \frac{3}{x^2} - \frac{3i}{x^3}\right)e^{ix}$

formunda yazılırsa;

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = N_l^m Y_l^m(\theta, \phi) \begin{cases} j_l(k_{nl}r), & r \leq a \\ \frac{j_l(k_{nl}a)}{h_l^{(1)}(i\alpha_{nl}a)} h_l^{(1)}(i\alpha_{nl}r), & r > a \end{cases} \quad (4.67)$$

elde edilir. Burada $Y_{lm}(\theta, \phi) = P_l^{|m|}(\theta) e^{\pm im\phi}$ olarak verilen küresel Harmonik fonksiyonlardır. N_l^m normalizasyon katsayısıdır ve (4.57) normalizasyon şartından hesaplanır.

Elektronun bulunduğu atomik enerji seviyelerini belirleyen n, l ve m kuantum sayılarına göre uygun dalga fonksiyonu belirlenir. Örneğin $1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$) taban durumu için dalga fonksiyonu (4.68) olarak belirlenir [71, 75, 77, 78, 80].

$$\Psi_{100}(r) = N_0^0 \begin{cases} \frac{\sin(k_{10}r)}{k_{10}r}, & r \leq a \\ \frac{\sin(k_{10}r)}{k_{10}r} e^{\alpha_{10}(a-r)}, & r > a \end{cases} \quad (4.68)$$

$$\Psi_{100}(r) = \begin{cases} \Psi_1(r), & r \leq a \\ \Psi_2(r), & r > a \end{cases} \quad (4.69)$$

olmak üzere, Küresel noktanın yarıçap sınırında ($r = a$) dalga fonksiyonunun sürekli olması şartını veren

$$\left. \frac{d}{dr} \Psi_1(r) \right|_{r=a} = \left. \frac{d}{dr} \Psi_2(r) \right|_{r=a} \quad (4.70)$$

eşitliği uygulandığında transcendental denkleme ulaşılır ve bu denklemin nümerik çözümlerinden enerji özdeğeri elde edilir. Örneğin $1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$) taban durumu için (4.68) dalga fonksiyonu (4.70) koşulunda yerine yazıldığında

$$-k_{10} = \alpha_{10} \tan(k_{10}r) \quad (4.71)$$

transcendental denkleme elde edilir. Denklem k_{10} için çözüldüğünde taban durum subband enerjisine ulaşılır.

BÖLÜM 5

HİDROSTATİK BASINÇ ETKİSİ ALTINDAKİ KUANTUM KUYULARINDA YABANCI ATOM PROBLEMİ

Antisimetrik hapsedici potansiyele sahip $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusu için hapsedici potansiyel

$$V(z) = \begin{cases} V_l(x_l), & z < -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ V_r(x_r), & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (5.1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada x_l ve x_r Alüminyum mol kesirleri

$$x(z) = \begin{cases} x_l, & z < -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ x_r, & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (5.2)$$

şeklinde z konumuna bağlı olarak ifade edilir. $x_l = x_r$ için simetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu, $x_l \neq x_r$ için antisimetrik (simetrik olmayan) hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu elde edilir [81]. $V_l(x_l)$ ve $V_r(x_r)$ engel potansiyelleri

$$V_l(x_l) = Q_c (1.155x_l + 0.37x_l^2) \quad \text{eV}$$

$$V_r(x_r) = Q_c (1.155x_r + 0.37x_r^2) \quad \text{eV} \quad (5.3)$$

eşitliği ile x Alüminyum mol kesrine bağlı olarak verilir. Yasak bant aralığının % 60'ı anlamında $Q_c = 0.6$ alınır [37–40].

z doğrultusunda yerleştirilmiş $V(z)$ antisimetrik hapsedici potansiyeli (5.1) denklemi ile tanımlanan, L uzunluğunda $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ sonlu kuantum kuyusu içine hapsedilen m^* etkin kütesine sahip elektronun enerji seviyeleri incelenecektir.

5.1. $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ Kuantum Kuyusunda Taban Durum Subband Enerjisi

Sonlu kuantum kuyusunda (4.11) eşitlikleri ile verilen Schrödinger denklemi, antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektron için

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_l(x_l) \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) , \quad z < -\frac{L}{2}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) , \quad -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \quad (5.4)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_r(x_r) \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) , \quad z > \frac{L}{2}$$

şeklini alır. (5.4) denklemlerinin çözümü ile $1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$) taban durum dalga fonksiyonu

$$\Psi_0(z) = \begin{cases} B_l e^{\alpha_l z}, & z < -\frac{L}{2} \\ A \cos(kz), & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ B_r e^{-\alpha_r z}, & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (5.5)$$

denklemleri ile verilir [22, 82]. Burada B_l , A ve B_r normalizasyon katsayılarıdır ve (4.16) ve (4.17) eşitlikleri ile verilen dalga fonksiyonlarının $z = \pm \frac{L}{2}$ kuyu sınırlarında süreklilik şartından

$$B_l = A \cos\left(k \frac{L}{2}\right) e^{\alpha_l \frac{L}{2}}$$

$$B_r = A \cos\left(k \frac{L}{2}\right) e^{-\alpha_r \frac{L}{2}} \quad (5.6)$$

olarak belirlenir. Elektronun taban durumda sahip olabileceği en düşük enerji olarak tanımlanan subband enerjisi E_0 ile gösterilmek üzere α_l , k ve α_r

$$\alpha_l = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_l(x_l) - E_0)} \quad (5.7)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} E_0} \quad (5.8)$$

$$\alpha_r = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_r(x_r) - E_0)} \quad (5.9)$$

eşitlikleri ile tanımlanır. Dalga fonksiyonunun (4.19), (4.20) eşitlikleri ile verilen sınır ve süreklilik koşullarından

$$2k \tan\left(k \frac{L}{2}\right) - (\alpha_l + \alpha_r) = 0 \quad (5.10)$$

denklemini elde edilir. $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusuna hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektronun enerji özdeğerleri taban durum dalga fonksiyonunun sınır koşulları ile elde edilen (5.10) denkleminde hesaplanır. Uzunlukların Bohr yarıçapı, enerjilerin Rydberg enerjisi cinsinden ifade edildiği a^*, R^* birim sisteminde $\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1$ 'dir. α_l, k ve α_r (a^*, R^*) birim sisteminde

$$\alpha_l = \sqrt{(V_l(x_l) - E_0)} \quad (5.11)$$

$$k = \sqrt{E_0} \quad (5.12)$$

$$\alpha_r = \sqrt{(V_r(x_r) - E_0)} \quad (5.13)$$

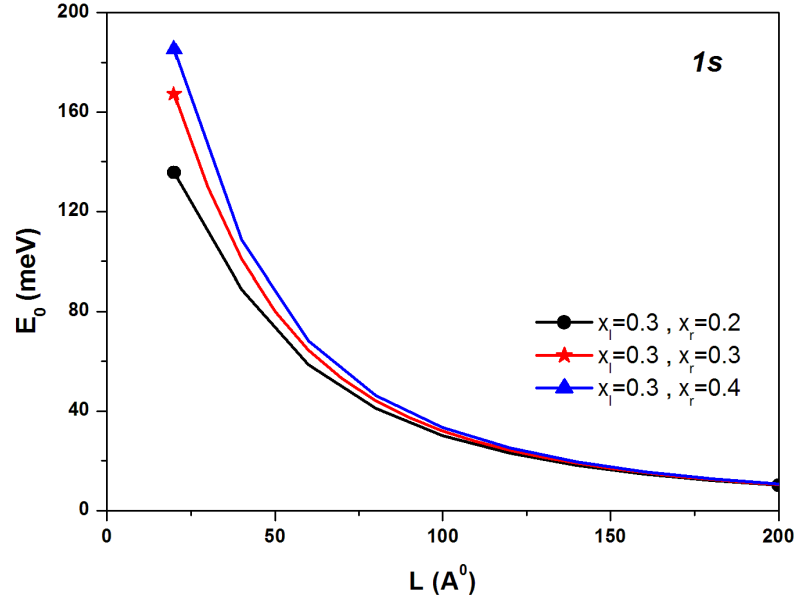
olacaktır. (5.11), (5.12) ve (5.13) ile verilen α_l, k ve α_r (5.10) 'da yerine yazılırsa

$$2\sqrt{E_0} \tan\left(\sqrt{E_0} \frac{L}{2}\right) - \left(\sqrt{(V_l(x_l) - E_0)} + \sqrt{(V_r(x_r) - E_0)}\right) = 0 \quad (5.14)$$

şeklinde E_0 taban durum subband enerjisine bağlı (5.14) denklemini elde edilir. Bu denklem $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ sonlu kuantum kuyusunun transcendental denklemdir. Analitik çözümü mümkün olmayan (5.14) denklemini E_0 için nümerik olarak çözülür.

$GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusunda farklı x_l ve x_r Alüminyum mol kesirleri için taban durum subband enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi Şekil 5.1 ile verilmiştir. Kuyu genişliği A^0 , E_0 enerjisi meV birimlerindedir. (a^*, R^*) Rydberg birim sisteminde enerji birimi

$$R^* = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon_0^2} \quad (5.15)$$



Şekil 5.1. Taban durum subband enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi

uzunluk birimi

$$a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{m^* e^2} \quad (5.16)$$

eşitlikleri Rydberg enerjisi ve Bohr yarıçapına bağlı olarak verilir [83]. *GaAs* için dielektrik sabiti $\epsilon_0 = 13.13$ ve elektronun etkin kütlesi $m^* = 0.067m_0$ 'dır. Bu durumda *GaAs* için $R^* \cong 5.72$ meV ve $a^* \cong 100$ A⁰ olarak hesaplanır. Nümerik hesaplar yabancı atomun kuyu merkezinde ($z_i = 0$) olduğu durum için yapılmıştır. 1s taban durum subband enerjisi eğrileri $V_l(x_l = 0.3) = 227.88$ meV iken $V_r(x_r = 0.2) = 147.48$ meV, $V_l(x_l = 0.3) = 227.88$ meV iken $V_r(x_r = 0.4) = 312.72$ meV antisimetrik potansiyelleri ve $V_l = V_r(x_l = x_r = 0.3) = 227.88$ meV simetrik potansiyeli için elde edilmiştir.

Şekil 5.1 ile verilen E_0 subband enerjisi her üç eğride de artan kuyu genişliği ile azalmaktadır. $L > 200$ A⁰ kuyu genişliklerinde subband enerjisinin çok küçük ve sabit bir değer aldığı görülmektedir. Bunun sebebi geniş kuyularda elektron üzerindeki hapsediciliğin etkisinin çok daha az hissedilir olmasıdır [22]. Kuyu genişliğinin hapsediciliğe etkisini sonsuz hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu taban durum subband enerjisinde analitik olarak göstermek mümkündür. Sonsuz kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektro-

nun enerji özdeğerleri (4.9) denklemi ile verilir. (a^*, R^*) Rydberg birim sisteminde taban durum subband enerjisi $n = 1$ için $E_0 = \frac{\pi^2}{L^2}$ 'dir. Kuyu genişliği L 'nin çok büyük değerlerinde E_0 subband enerjisi sıfıra gider, elektron serbest parçacık gibi davranır. Hapsedici potansiyelin (ya da x Alüminyum mol kesrinin) taban durum subband enerjisine etkisi incelenirse, hapsediciliğin en fazla olduğu $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.3$ Alüminyum mol kesirleri için subband enerjisinin daha büyük olduğu, hapsediciliğin en az olduğu $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.2$ Alüminyum mol kesirleri için subband enerjisinin daha küçük olduğu görülür. Hapsedici potansiyelin etkisi kendisini daha çok kuyu genişliğinin küçük değerlerinde göstermekte, geniş kuyularda Alüminyum mol kesrinin etkisi fark edilebilir olmamaktadır.

5.2. $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ Kuantum Kuyusunda Taban Durum ve Uyarılmış Durumlar

Elektronların enerji seviyeleri n, l, m kuantum sayıları ile isimlendirilir.

Tablo 5.1. Taban durum ve uyarılmış durum n, l, m kuantum sayıları

	n	l	m
<i>Taban durum</i>	$1s$	1	0 0
<i>Uyarılmış durumlar</i>	$2s$	2	0 0
	$2p_0$	2	1 0
	$2p_+$	2	1 +1
	$2p_-$	2	1 -1

Tablo 5.1 'de verildiği gibi $(n = 1, l = 0, m = 0)$ kuantum sayılarına sahip enerji seviyesi $1s$ olarak isimlendirilir. $n = 2$ baş kuantum sayısına sahip enerji seviyeleri uyarılmış durumlardır ve $2s$ ($n = 2, l = 0, m = 0$), $2p_0$ ($n = 2, l = 1, m = 0$), $2p_+$ ($n = 2, l = 1, m = +1$), $2p_-$ ($n = 2, l = 1, m = -1$) olarak isimlendirilen dört seviyeye sahiptir [73]. Bu çalışmada $1s$ taban durumu ile $2p_0, 2p_+$ ve $2p_-$ uyarılmış durumları incelenmiştir.

5.3. $GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ Kuantum Kuyusunda Yer Alan Yabancı Atomun Taban Durum ve Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjileri

Kuantum kuyusu içinde bulunan bir elektronun etkin kütle yaklaşımı ile Hamiltonyeni (5.9) denklemi ile verilir.

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) \quad (5.17)$$

Kuantum kuyusuna donör yabancı atomu eklenirse, kuyu içindeki donör yabancı atomu ve elektron için Hamiltonyen

$$H = H_0 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon |\vec{r} - \vec{r}_i|} \quad (5.18)$$

şeklinde yazılır [58]. (5.18) denklemindeki $-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon |\vec{r} - \vec{r}_i|}$ terimi yabancı atom ile elektron arasındaki Coulomb etkileşiminden kaynaklanan potansiyel enerjidir. Burada ϵ_0 boşluğun dielektrik geçirgenliği, ϵ $GaAs$ yarı iletken kristalinin dielektrik sabiti, \vec{r}_i yabancı atomun konumu, \vec{r} ise elektronun konumudur. Yabancı atom ile elektron arasındaki mesafe

$$|\vec{r} - \vec{r}_i| = \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} \quad (5.19)$$

şeklinde silindirik koordinatlarda verilir. $\rho^2 = x^2 + y^2$ ' dir ve z_i , z doğrultusunda hareket eden yabancı atomun konumudur.

Yabancı atom için Schrödinger denklemi (a^* , R^*) Rydberg birim sistemi ile silindirik koordinatlarda yazılırsa;

$$\left[-\nabla_{\rho,\phi,z}^2 - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} + V(z) \right] \Psi(\rho, \phi, z) = E \Psi(\rho, \phi, z) \quad (5.20)$$

denklemini elde edilir. Burada $\nabla_{\rho,\phi,z}^2$ silindirik koordinatlarda laplasyen operatörüdür.

(5.20) denkleminin analitik çözümü mümkün olmadığından yaklaşık çözüm yöntemlerinden Varyasyon metodu ile nümerik olarak çözülmüştür. Denkleminde $\Psi(\rho, \phi, z)$ deneme dalga fonksiyonlarıdır. (3.15) ile verilen şart gereği, yabancı atomun enerjisi (impurity enerjisi olarak da bilinir)

$$E = \min_{\lambda} \frac{\langle \Psi(\rho, \phi, z) | H | \Psi(\rho, \phi, z) \rangle}{\langle \Psi(\rho, \phi, z) | \Psi(\rho, \phi, z) \rangle} \quad (5.21)$$

denklemini ile hesaplanır. (5.21) eşitliği en küçük enerji özdeğerini sağlayan en küçük λ varyasyon parametresini dolayısıyla doğru deneme dalga fonksiyonu ve doğru yabancı atom enerjilerini belirler.

$$\begin{aligned} \alpha_l &= \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_l(x) - E_0)} \\ k &= \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} E_0} \\ \alpha_r &= \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_r(x) - E_0)} \end{aligned} \quad (5.22)$$

tanımlamaları ile yabancı atom yok iken kuyu içindeki elektronun taban durum dalga fonksiyonu $\Psi_0(z)$,

$$\Psi_0(z) = \begin{cases} A \cos\left(k\frac{L}{2}\right) e^{\alpha_l \frac{L}{2}} e^{\alpha_l z}, & z < -\frac{L}{2} \\ \cos(kz), & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ \cos\left(k\frac{L}{2}\right) e^{\alpha_r \frac{L}{2}} e^{-\alpha_r z}, & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (5.23)$$

şeklindedir.

Varyasyon metodu ile yabancı atom $1s$ taban durum ve $2p_0$ ile $2p_{\pm}$ uyarılmış durum deneme dalga fonksiyonları

$$\Psi(\rho, \phi, z) = \Psi_0(z) G(\rho, \phi, z) \quad (5.24)$$

(5.24) denkleminde uygun n, l, m kuantum sayıları için bulunur. Burada $\Psi_0(z)$ elektronun yabancı atom yokken sahip olduğu $1s$ taban durum dalga fonksiyonu (5.23) ile verilmiştir. $G(\rho, \phi, z)$ fonksiyonları ise

$$G(\rho, \phi, z) = N_{1s} e^{-|\vec{r}-\vec{r}_i|/\lambda_{1s}} \quad 1s : n = 1, l = 0, m = 0 \text{ için} \quad (5.25)$$

$$G(\rho, \phi, z) = N_{2p_0} z e^{-|\vec{r}-\vec{r}_i|/\lambda_{2p_0}} \quad 2p_0 : n = 2, l = 1, m = 0 \text{ için} \quad (5.26)$$

$$G(\rho, \phi, z) = N_{2p_+} \rho e^{i\phi} e^{-|\vec{r}-\vec{r}_i|/\lambda_{2p_+}} \quad 2p_+ : n = 2, l = 1, m = +1 \text{ için} \quad (5.27)$$

$$G(\rho, \phi, z) = N_{2p_-} \rho e^{-i\phi} e^{-|\vec{r}-\vec{r}_i|/\lambda_{2p_-}} \quad 2p_- : n = 2, l = 1, m = -1 \text{ için} \quad (5.28)$$

ifadeleri ile verilir [60, 70]. Burada $N_{1s}, N_{2p_0}, N_{2p_+}$ ve N_{2p_-} ilgili seviyeye ait normalizasyon katsayıları, $\vec{r} - \vec{r}_i$ (5.18) eşitliği ile verilen elektron ile yabancı atom arasındaki mesafe ve $\lambda_{1s}, \lambda_{2p_0}, \lambda_{2p_+}, \lambda_{2p_-}$ ilgili seviyeye ait pozitif ve reel varyasyon parametreleridir.

$1s$ taban durum için yabancı atom enerjisi (5.21) denkleminde

$$E_{1s} = \min_{\lambda_{1s}} \frac{\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-L/2}^{L/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho d\rho dz d\phi \Psi_{1s}^*(\rho, z) H \Psi_{1s}(\rho, z)}{\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-L/2}^{L/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho d\rho dz d\phi \Psi_{1s}^*(\rho, z) \Psi_{1s}(\rho, z)} \quad (5.29)$$

elde edilir. Benzer şekilde $2p_0$ uyarılmış durum yabancı atom enerjisi

$$E_{2p_0} = \min_{\lambda_{2p_0}} \frac{\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-L/2}^{L/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho d\rho dz d\phi \Psi_{2p_0}^*(\rho, z) H \Psi_{2p_0}(\rho, z)}{\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-L/2}^{L/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho d\rho dz d\phi \Psi_{2p_0}^*(\rho, z) \Psi_{2p_0}(\rho, z)} \quad (5.30)$$

tanımlanır. $2p_+$ uyarılmış durum yabancı atom enerjisi

$$E_{2p_+} = \min_{\lambda_{2p_+}} \frac{\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-L/2}^{L/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho d\rho dz d\phi \Psi_{2p_+}^*(\rho, \phi, z) H \Psi_{2p_+}(\rho, \phi, z)}{\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-L/2}^{L/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho d\rho dz d\phi \Psi_{2p_+}^*(\rho, \phi, z) \Psi_{2p_+}(\rho, \phi, z)} \quad (5.31)$$

ve $2p_-$ uyarılmış durum yabancı atom enerjisi

$$E_{2p_-} = \min_{\lambda_{2p_-}} \frac{\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-L/2}^{L/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho d\rho dz d\phi \Psi_{2p_-}^*(\rho, \phi, z) H \Psi_{2p_-}(\rho, \phi, z)}{\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-L/2}^{L/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho d\rho dz d\phi \Psi_{2p_-}^*(\rho, \phi, z) \Psi_{2p_-}(\rho, \phi, z)} \quad (5.32)$$

eşitliklerinden hesaplanır.

$GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun yabancı atom yokken sahip olduğu en düşük enerji olarak tanımlanan $1s$ taban durum subband enerjisi (5.14) denkleminde hesaplanır. Kuantum kuyusunda bulunan yabancı atom enerjisi ise $1s$, $2p_0$, $2p_+$ ve $2p_-$ seviyeleri için sırasıyla (5.29), (5.30), (5.31) ve (5.32) denklemleri ile nümerik olarak hesaplanır.

Kuantum kuyusunda bulunan bir yabancı atomun bağlanma enerjisi E_b ile gösterilsin. Bağlanma enerjisi E_b , taban durum subband enerjisi ile yabancı atomun enerjisinin farkına

eşittir ve

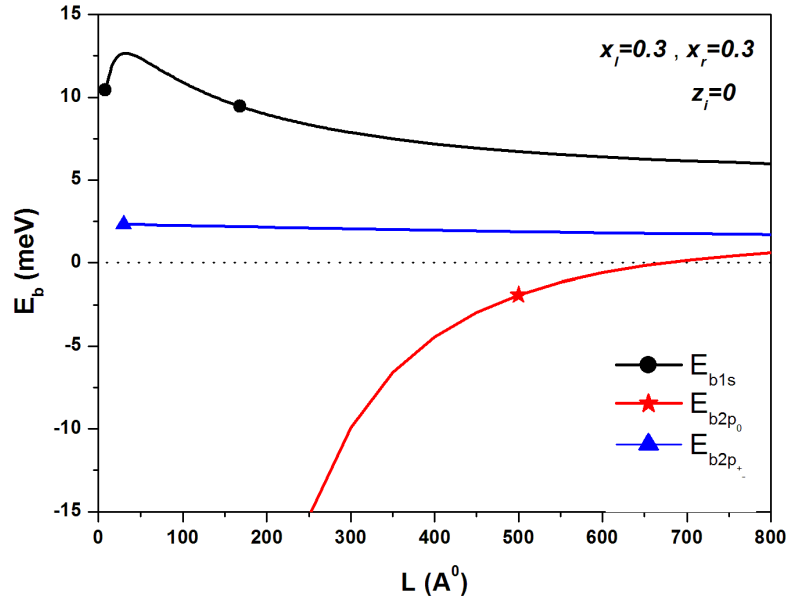
$$E_{b1s} = E_0 - E_{1s} \quad (5.33)$$

$$E_{b2p_0} = E_0 - E_{2p_0} \quad (5.34)$$

$$E_{b2p_+} = E_0 - E_{2p_+} \quad (5.35)$$

$$E_{b2p_-} = E_0 - E_{2p_-} \quad (5.36)$$

eşitlikleri ile ifade edilebilir. Yapılan nümerik hesaplarda yabancı atomun konumu kuantum kuyusu merkezinde ($z_i = 0$) seçilmiştir ve Alüminyum mol kesri $x_l = 0.3$ ile $x_r = 0.3$ simetrik, $x_l = 0.3$ ile $x_r = 0.2$ ve $x_l = 0.3$ ile $x_r = 0.4$ antisimetrik olduğu farklı hapsedici potansiyeller ile çalışılmıştır.

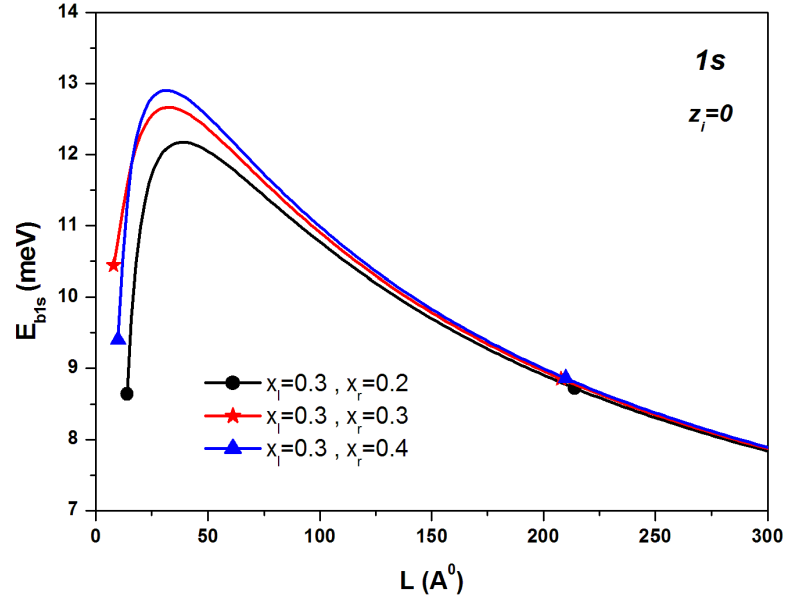


Şekil 5.2. $1s$, $2p_0$, $2p_+$ ve $2p_-$ bağlanma enerjilerinin kuyu genişliğine bağlı değişimi

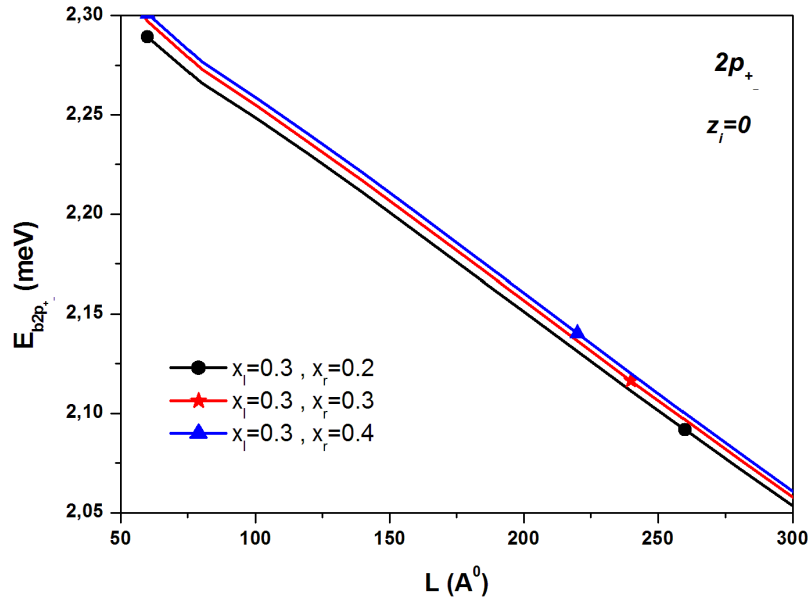
$1s$ taban durum, $2p_0$, $2p_+$ ve $2p_-$ uyarılmış durumları yabancı atom bağlanma enerjilerinin $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ Alüminyum mol kesirleri için simetrik hapsedici potansiyelinde

kuyu genişliğine bağlı değişim grafiği Şekil 5.2 ile verilmektedir. $1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$) taban durum bağlanma enerjisi E_{b1s} 'in artan kuyu genişliği ile artarak bir maksimum değere yükseldiği ardından azaldığı görülmektedir. $2p_+$ ($n = 2, l = 1, m = +1$) ve $2p_-$ ($n = 2, l = 1, m = -1$) uyarılmış durum yabancı atom bağlanma enerjileri E_{b2p_+} ve E_{b2p_-} ayrı ayrı hesaplandığında birbirine çok yakın sonuçlar elde edilmiştir. Bu sebeple bu uyarılmış durumlar literatürde kısaca $2p_{\pm}$ olarak isimlendirilir ve bağlanma enerjileri $E_{b2p_{\pm}}$ olarak gösterilir [60]. $E_{b2p_{\pm}}$ yabancı atom bağlanma enerjisinin kuyu genişliği ile $1s$ taban durum ve $2p_0$ uyarılmış durumuna göre çok daha yavaş değişmektedir. $2p_0$ ($n = 2, l = 1, m = 0$) uyarılmış durum bağlanma enerjisi E_{b2p_0} küçük kuyu genişliklerinde negatif değerler almaktadır ve artan kuyu genişliği ile artarak pozitif değerler almaya başlamaktadır. Pozitif $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi ($E_{b2p_0} > 0$), $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumlarının aksine artan kuyu genişliği ile büyümektedir. Belirli kuyu genişliklerinde pozitif olduğu gözlenen E_{b2p_0} bağlanma enerjisinin negatif değerlerinde bağlanmanın olmadığı, $L > 650A^0$ kuyu genişliğinden sonra bağlı duruma geçtiği bilinir ve E_{b2p_0} 'nın pozitif değerleri ile ilgilenilir. E_{b1s} , $E_{b2p_{\pm}}$ ve E_{b2p_0} bağlanma enerjilerine kuyu genişliği ve Alüminyum mol kesrinin etkisini daha iyi incelemek için bağlanma enerjilerinin kuyu genişliğine bağlı grafikleri ayrı ayrı elde edilmiştir.

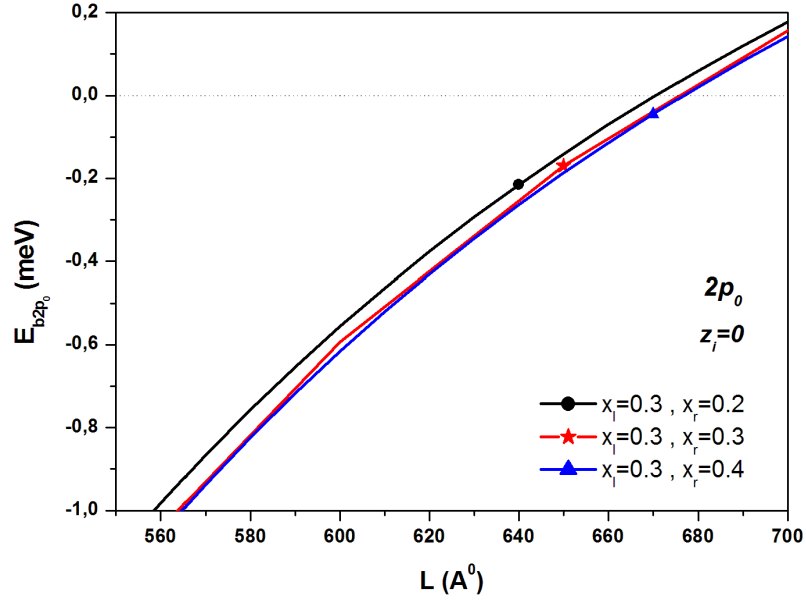
$1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinin kuantum kuyusu genişliğine bağlı değişim grafikleri farklı x_l ve x_r Alüminyum mol kesirleri için Şekil 5.3 ve Şekil 5.4 ile verilmektedir. $1s$ taban durumu bağlanma enerjisi E_{b1s} artan kuyu genişliği ile eksponansiyel olarak azalırken $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi $E_{b2p_{\pm}}$ artan kuyu genişliği ile lineer olarak değişmektedir. Geniş kuyularda yabancı atom üzerindeki hapsedicilik etkisi azaldığından bağlanma enerjisindeki bu değişim beklenen bir sonuçtur. $1s$ taban durum bağlanma enerjisi E_{b1s} , hapsediciliğin en az olduğu $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.2$ Alüminyum mol kesirlerinden $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.3$ Alüminyum mol kesiri ve ardından hapsediciliğin en fazla olduğu $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.4$ Alüminyum mol kesirleri şeklinde artırılması ile artmaktadır. Benzer şekilde $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi $E_{b2p_{\pm}}$ için de Alüminyum mol kesrinin hapsedici potansiyeli artıracak şekilde değişmesi bağlanma enerjisini artırmaktadır. Simetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu için bu sonuç literatürde çeşitli çalışmalar ile desteklenmektedir [61, 84, 85].



Şekil 5.3. $1s$ taban durum bağlanma enerjisinin farklı x Al mol kesirleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi



Şekil 5.4. $2p_+$ ve $2p_-$ uyarılmış durumu bağlanma enerjilerinin farklı x Al mol kesirleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi



Şekil 5.5. $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisinin farklı x Al mol kesirleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi

$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin kuantum kuyusu genişliğine bağlı değişim grafiği farklı x_l ve x_r Alüminyum mol kesirleri için Şekil 5.5 ile verilmektedir. $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinin aksine, hapsedici potansiyeli artıracak yönde değişen Alüminyum mol kesirleri $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin küçülmesine sebep olmaktadır. Bağlı durumlara karşılık gelen pozitif E_{b2p_0} bağlanma enerjisine $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.3$ Alüminyum mol kesirlerinde $L(x_l = x_r = 0.3) = 674.29 \text{ \AA}$ 'den büyük kuyu genişliklerinde ulaşılır. $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.3$ için belirlenen bu kuyu genişliği literatür ile uyum içerisindedir [70]. Enerjinin işaret değiştirdiği kuyu genişliği değerleri dönüm noktası (*turning point*) olarak adlandırılır ve literatürde sıkça çalışılır [4, 27–29, 86–88]. Antisimetrik hapsedici potansiyeye sahip $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusu için dönüm noktaları L_{2p_0T} ile gösterilmek üzere, Alüminyum mol kesirlerinin hapsedici potansiyeli artıracak şekilde değiştirilmesi daha büyük dönüm noktalarına ulaşılmasını, E_{b2p_0} enerjisinin daha geniş kuyularda bağlı olmasını sağlar. Artan hapsedici potansiyelin $2p_0$ bağlanma enerjisini azalttığı bilindiğinden dönüm noktalarındaki bu değişim beklenen bir sonuçtur.

5.4. $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ Kuantum Kuyusunda Hidrostatik Basınç Etkisi Altında Yer Alan Yabancı Atomun Taban Durum ve Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjileri

$GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusunda hidrostatik basınç kuyu genişliği, dielektrik sabit, hapsedici potansiyel ve elektronun etkin kütleinde basıncın büyüklüğüne bağlı olarak değişime sebep olmaktadır. Bu değişim Tablo 5.2 ile incelenmektedir [19].

Tablo 5.2. Hidrostatik basıncın kuyu genişliği, dielektrik sabit ve etkin kütleye etkisi

Basınç (kbar)	$m^*(P)(a.u.)$	$\epsilon(P)(a.u.)$	$L(P)(a.u.)$
0	0.0670	12.65	1887
10	0.0724	11.77	1882
20	0.0783	10.89	1877
30	0.0847	10.01	1872
40	0.0915	9.13	1867

Tablo 5.2 'den görüldüğü gibi hidrostatik basınç elektronun etkin kütleini artırırken dielektrik sabitini azaltmakta ve kuyu genişliğini kısaltmaktadır. Hidrostatik basınç P ile gösterilmek üzere;

$$V(z, P) = \begin{cases} V_l(x_l, P), & z < -\frac{L(P)}{2} \\ 0, & -\frac{L(P)}{2} < z < \frac{L(P)}{2} \\ V_r(x_r, P), & z > \frac{L(P)}{2} \end{cases} \quad (5.37)$$

(5.37) denkleminde $V_l(x_l, P)$ ve $V_r(x_r, P)$ hapsedici potansiyellerinin hidrostatik basınca bağlılığı

$$V_l(x_l, P) = 0.6 [1.155x_l + 0.37x_l^2 + P D(x_l)] \quad \text{eV} \quad (5.38)$$

$$D(x_l) = -1.3 \times 10^{-2}x_l \quad \text{eV/GPa} \quad (5.39)$$

ve

$$V_r(x_r, P) = 0.6 [1.155x_r + 0.37x_r^2 + P D(x_r)] \text{ eV} \quad (5.40)$$

$$D(x_r) = -1.3 \times 10^{-2} x_r \text{ eV/GPa} \quad (5.41)$$

Dielektrik sabitin hidrostatik basınca bağıllığı

$$\epsilon(P) = \epsilon_0 - 0.088P \quad (5.42)$$

burada hidrostatik basınç sıfır iken *GaAs* yarı iletken kristalinin dielektrik geçirgenliği $\epsilon_0 = 13.13$ 'dir.

Elektronun etkin kütesinin hidrostatik basınca bağıllığı

$$m^*(P) = m^*(0) e^{0.078P} \quad (5.43)$$

burada hidrostatik basınç sıfır iken *GaAs* yarı iletken kristaline hapsedilen bir elektronun etkin kütesi $m^*(0) = 0.067m_0$ 'dir.

Kuyu genişliğinin hidrostatik basınca bağıllığı

$$L(P) = L(0) (1 - 1.5082 \times 10^{-3} P) \quad (5.44)$$

eşitlikleri ile verilir. Bu ifadelerde P hidrostatik basıncın birimi *GPa* 'dır [20, 29, 89].

Hidrostatik basınç etkisi altında kuantum kuyusunda yer alan yabancı atom için Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \nabla_{\rho, \phi, z}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon(P) |\vec{r} - \vec{r}_i|} + V(z, P) \right] \Psi(\rho, \phi, z, P) = E(P) \Psi(\rho, \phi, z, P) \quad (5.45)$$

eşitliği ile basınca bağlı olarak yazılır. $\Psi(\rho, \phi, z, P)$ basınca bağlı olarak ifade edilen dalga fonksiyonları ve $E(P)$ basıncın fonksiyonu olarak yabancı atom enerjileridir.

α_l , k ve α_r hidrostatik basınca bağılı olarak

$$\alpha_l(P) = \sqrt{\frac{2m^*(P)}{\hbar^2} [V_l(x_l, P) - E_0(P)]} \quad (5.46)$$

$$k(P) = \sqrt{\frac{2m^*(P)}{\hbar^2} E_0(P)} \quad (5.47)$$

$$\alpha_r(P) = \sqrt{\frac{2m^*(P)}{\hbar^2} [V_r(x_r, P) - E_0(P)]} \quad (5.48)$$

ifade edilmek üzere hidrostatik basınç ile $1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$) taban durumu için dalga fonksiyonu;

$$\Psi_{1s}(\rho, z, P) = N_{1s} \begin{cases} \cos\left(k(P) \frac{L(P)}{2}\right) e^{\alpha_l(P) \frac{L(P)}{2}} e^{\alpha_l(P) z} e^{-|\bar{r}-\bar{r}_i|/\lambda_{1s}}, & z < -\frac{L(P)}{2} \\ \cos(k(P)z) e^{-|\bar{r}-\bar{r}_i|/\lambda_{1s}}, & |z| < \frac{L(P)}{2} \\ \cos\left(k(P) \frac{L(P)}{2}\right) e^{\alpha_r(P) \frac{L(P)}{2}} e^{-\alpha_r(P) z} e^{-|\bar{r}-\bar{r}_i|/\lambda_{1s}}, & z > \frac{L(P)}{2} \end{cases} \quad (5.49)$$

hidrostatik basınç etkisinde yabancı atom enerjisi

$$E_{1s}(P) = \min_{\lambda_{1s}} \frac{\langle \Psi_{1s}(\rho, z, P) | H | \Psi_{1s}(\rho, z, P) \rangle}{\langle \Psi_{1s}(\rho, z, P) | \Psi_{1s}(\rho, z, P) \rangle} \quad (5.50)$$

ve hidrostatik basınç etkisindeki yabancı atomun bağlanma enerjisi ise taban durum subband enerjisi ile yabancı atom enerjisi arasındaki farktan

$$E_{b1s}(P) = E_0(P) - E_{1s}(P) \quad (5.51)$$

eşitliklerinden nümerik olarak basınca bağılı hesaplanır. $E_0(P)$ taban durum subband

enerjisi hidrostatik basınç altında

$$2k(P) \tan \left(k(P) \frac{L(P)}{2} \right) - (\alpha_l(P) + \alpha_r(P)) = 0 \quad (5.52)$$

transcendental denklemden nümerik olarak belirlenir. Hidrostatik basınç etkisi altında $2p_0, 2p_{\pm}$ uyarılmış durum yabancı atom bağlanma enerjileri $E_{b2p_0}(P)$ ile $E_{b2p_{\pm}}(P)$ benzer şekilde (5.50) ve (5.51) denklemleri yardımıyla hesaplanır.

$2p_0$ yabancı atom enerjisi

$$E_{2p_0}(P) = \min_{\lambda_{2p_0}} \frac{\langle \Psi_{2p_0}(\rho, z, P) | H | \Psi_{2p_0}(\rho, z, P) \rangle}{\langle \Psi_{2p_0}(\rho, z, P) | \Psi_{2p_0}(\rho, z, P) \rangle} \quad (5.53)$$

$2p_{\pm}$ yabancı atom enerjisi

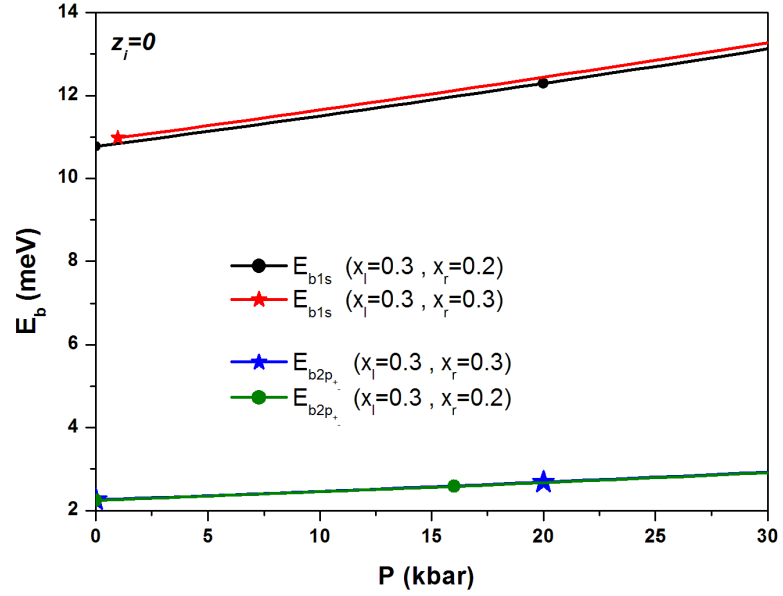
$$E_{2p_{\pm}}(P) = \min_{\lambda_{2p_{\pm}}} \frac{\langle \Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z, P) | H | \Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z, P) \rangle}{\langle \Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z, P) | \Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z, P) \rangle} \quad (5.54)$$

eşitlikleri ile hesaplanır. Uyarılmış durumlara ait bağlanma enerjisi

$$E_{b2p_0}(P) = E_0(P) - E_{2p_0}(P) \quad (5.55)$$

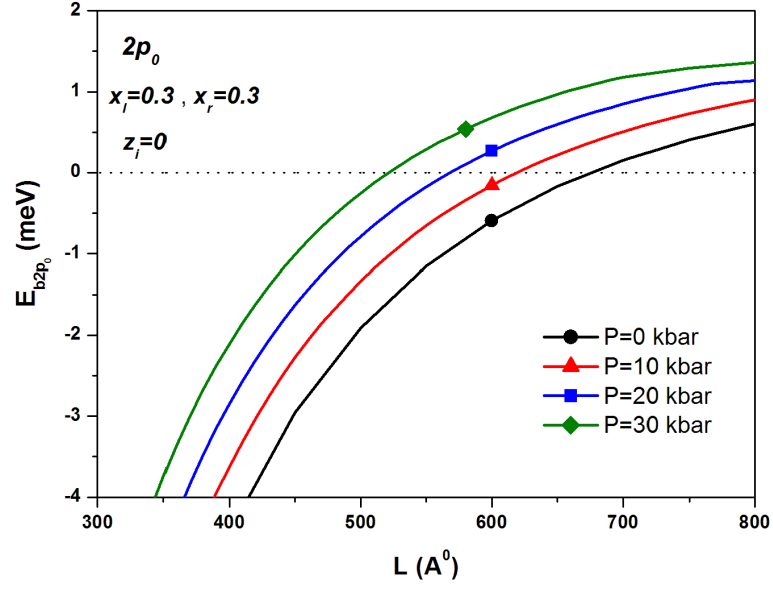
$$E_{b2p_{\pm}}(P) = E_0(P) - E_{2p_{\pm}}(P) \quad (5.56)$$

denklemleri ile P hidrostatik basıncına bağlı olarak hesaplanır.

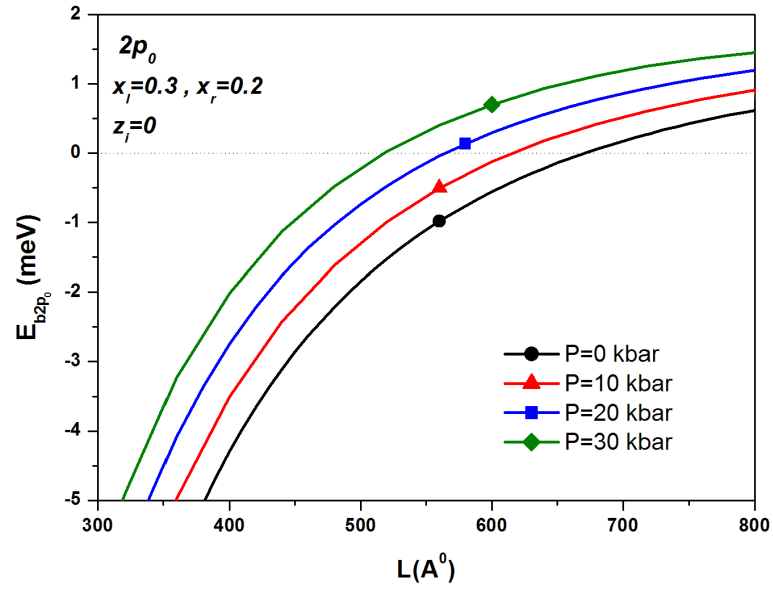


Şekil 5.6. $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinin $L = 100A^0$ kuyu genişliğinde basınç ile değişimi

$1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinin $L = 100A^0$ kuyu genişliğinde $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ Alüminyum mol kesirleri için simetrik ve $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ Alüminyum mol kesirleri için antisimetrik hapsedici potansiyel etkisinde hidrostatik basınca bağlı değişim grafiği Şekil 5.6 ile verilmektedir. $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjileri de hidrostatik basınç ile artmaktadır. Hidrostatik basıncın etkisi $1s$ taban durum bağlanma enerjisi E_{b1s} üzerinde $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi $E_{b2p_{\pm}}$ 'e kıyasla daha fazla hissedilmektedir. Aynı zamanda her iki enerji durumu için de hidrostatik basıncın hapsedici potansiyelden daha etkili olduğu görülmektedir.

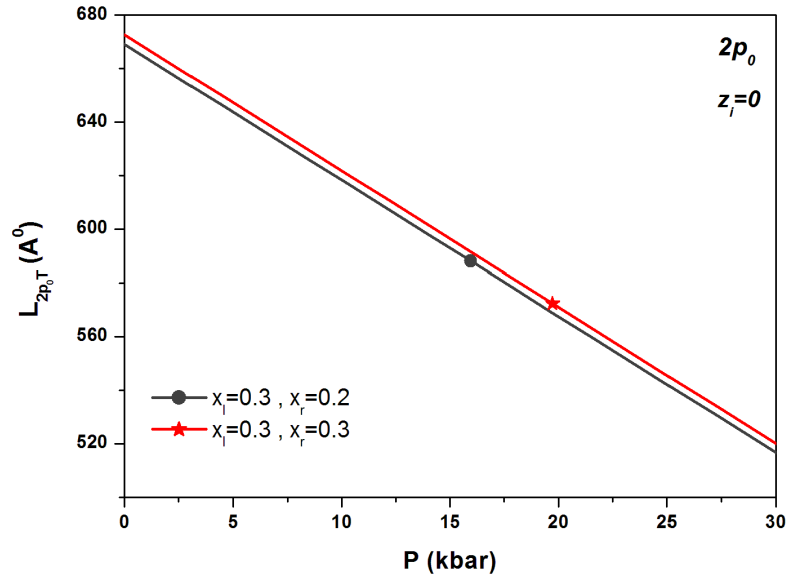


Şekil 5.7. $x_l = x_r = 0.3$ Al mol kesrinde $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisinin $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç değerleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi



Şekil 5.8. $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ Al mol kesrinde $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisinin $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç değerleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi

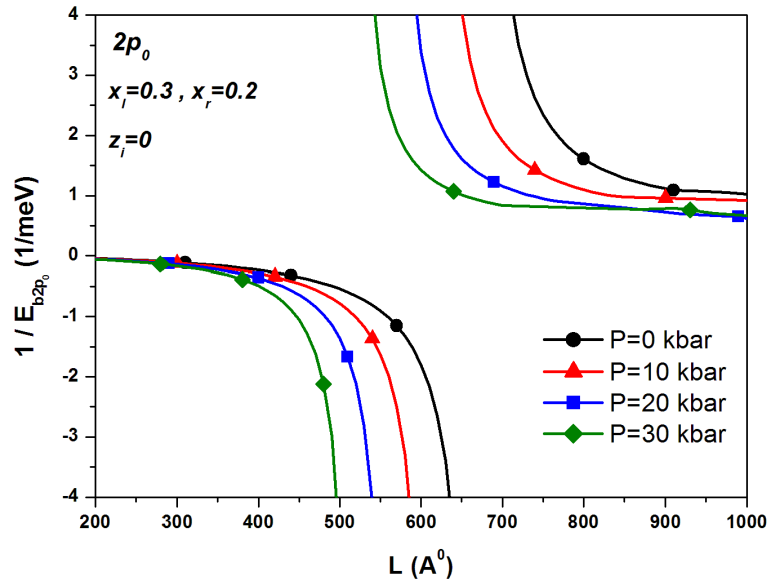
$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi E_{2p_0} 'ın $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç değerleri için kuantum kuyusunun genişliğine bağlı değişim grafiği $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ simetrik Alüminyum mol kesrinde Şekil 5.7 ile ve $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ antisimetrik Alüminyum mol kesrinde Şekil 5.8 ile verilmektedir. Bağlı durumlara karşılık gelen pozitif E_{2p_0} bağlanma enerjisine $P = 0$ kbar için kuyu genişliğinin $L(x_l = x_r = 0.3, P = 0) = 674.29A^0$ 'dan büyük değerlerinde ulaşılır. Hidrostatik basıncın $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar büyüklükleri ile artırılması pozitif E_{2p_0} bağlanma enerjisinin de artmasına sebep olmaktadır. Grafikten çıkarılacak en önemli sonuç ise artan hidrostatik basınç değerleri ile $L(x_l, x_r, P)$ dönüm noktasının daha küçük değerler alması yani E_{2p_0} bağlanma enerjisinin daha küçük kuyu genişliklerinde bağlı duruma ($E_{2p_0} > 0$) geçmesidir. E_{2p_0} bağlanma enerjisi Şekil 5.7 ve Şekil 5.8 karşılaştırıldığında, $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumuna benzer şekilde hidrostatik basıncın etkisinin hapsedici potansiyelden daha baskın olduğu görülür.



Şekil 5.9. $2p_0$ uyarılmış durumu L_{2p_0T} bağlanma enerjisi dönüm noktasının farklı x Al mol kesirleri için hidrostatik basınca bağlı değişimi

Grafikler gösteriyorki $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi dönüm noktası $L(x_l, x_r, P)$ 'nin hidrostatik basınç ve Alüminyum mol kesri ile değişmektedir. $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi dönüm noktası $L(x_l, x_r, P)$ 'nin hidrostatik basınca bağlılığını daha

detaylı incelemek amacıyla $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ antisimetrik ve $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ simetrik Alüminyum mol kesirleri için $L(x_l, x_r, P)$ 'nin hidrostatik basınca bağlı değişim grafiği çizilmiş, Şekil 5.9 ile verilmiştir. Artan hidrostatik basınç değeri ile $L(x_l, x_r, P)$ dönüm noktalarının küçüldüğü görülmektedir ve bu sonuç Şekil 5.8 ile tutarlıdır. Alüminyum mol kesirinin artırılması dönüm noktasının büyük değerler almasına sebep olmaktadır. Grafik, tasarlanmak istenen $2p_0$ bağlanma enerjisi dönüm noktası için belirli bir Alüminyum mol kesirinde basınç değişiminin daha etkili olabileceğini vurgulamaktadır.



Şekil 5.10. $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi tersinin $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç değerleri için kuyu genişliğine bağlı değişimi

$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi dönüm noktası $L(x_l, x_r, P)$ 'nin hidrostatik basınç ile değişimini incelemek için, E_{2p_0} bağlanma enerjisinin tersinin ($1/E_{2p_0}$) kuantum kuyusu genişliğine bağlı değişim grafiği $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ antisimetrik Alüminyum mol kesirinde ve $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç değerleri için Şekil 5.10 'da verilmektedir. Her bir basınç değerinde görüldüğü gibi negatif bağlanma enerjisinin tersi artan kuyu genişliği ile azalmakta ve $L(x_l = 0.3, x_r = 0.2, P)$ dönüm noktalarında sonsuza gitmektedir. Dönüm noktasından büyük kuyu genişliklerinde ($L > L(x_l, x_r, P)$) bağlanma enerjisinin tersi pozitifdir ve dönüm noktalarının yakınında sonsuzdur.

BÖLÜM 6

KUANTUM KUYULARINDA DIAMANYETİK DUYGUNLUK

6.1. Antisimetrik Hapsedici Potansiyele Sahip $GaAs/Al_{x_i,r}Ga_{1-x_i,r}As$ Kuantum Kuyusunda Yer Alan Yabancı Atomun Diamanyetik Duygunluğu

Manyetik duygunluk χ , kaynağının ne olduğu farketmeksizin uygulanan herhangi bir manyetik alan ile manyetik alan sonucu oluşan mıknatıslanma arasındaki orantı katsayısı olarak tanımlanır. Diamagnetik özellikteki maddelerin, net manyetik momenti yoktur ancak harici bir manyetik alan varlığında alana zıt yönde mıknatıslanma gösterirler. Diamanyetik özellik gösteren maddelerde manyetik duygunluk χ oldukça küçük bir değer alır. Mıknatıslanma alana zıt yönde olduğundan dolayı da işareti negatiftir ($\chi_{dia} < 0$).

$GaAs$ yarı iletken bileşiği diamanyetik özellik göstermektedir. $GaAs$ yarı iletken bileşiği ile oluşturulan $GaAs/Al_{x_i,r}Ga_{1-x_i,r}As$ antisimetrik hapsedici potansiyeline sahip kuantum kuyusunda yer alan donör yabancı atomuna ait diamanyetik duygunluk χ_{dia} ile gösterilmek üzere

$$\chi_{dia} = -\frac{e^2}{6m^*\epsilon c^2} \langle r^2 \rangle \quad (6.1)$$

Langevin formülü ile verilir [53]. Burada, e elektron yükü, m^* elektronun etkin kütlesi ($GaAs$ için $m^* = 0.067m_0$), ϵ dielektrik geçirgenlik ($GaAs$ için $\epsilon = 13.13$) ve c ışık hızını göstermektedir. r^2 ise kuyu içerisindeki elektron ile yabancı atom arasındaki mesafedir. z_i yabancı atomun z eksenindeki konumu olmak üzere elektron ile yabancı atom arasındaki mesafe

$$r^2 = \rho^2 + (z - z_i)^2 \quad (6.2)$$

şeklinde silindirik koordinat bileşenleri cinsinden yazılabilir. Bu durumda (6.1) eşitliği

$$\chi_{dia} = -\frac{e^2}{6m^*\epsilon c^2} \langle \rho^2 + (z - z_i)^2 \rangle \quad (6.3)$$

olur [90]. $\langle \rho^2 + (z - z_i)^2 \rangle$ beklenen değeri, $\Psi(\rho, \phi, z)$ yabancı atom dalga fonksiyonu olmak üzere

$$\langle \rho^2 + (z - z_i)^2 \rangle = \frac{\langle \Psi(\rho, \phi, z) | \rho^2 + (z - z_i)^2 | \Psi(\rho, \phi, z) \rangle}{\langle \Psi(\rho, \phi, z) | \Psi(\rho, \phi, z) \rangle} \quad (6.4)$$

eşitliğinden hesaplanır.

Antisimetrik hapsedici potansiyeli

$$V(z) = \begin{cases} V_l(x_l), & z < -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ V_r(x_r), & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (6.5)$$

ile tanımlanan

$$V_l(x_l) = 0.6 (1.155x_l + 0.37x_l^2) \quad \text{eV} \quad (6.6)$$

ve

$$V_r(x_r) = 0.6 (1.155x_r + 0.37x_r^2) \quad \text{eV} \quad (6.7)$$

ifadeleri ile verilen $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusundaki yabancı atom diamanyetik duygunluğu $1s$ taban durum ile $2p_0$ ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumları için hesaplanır.

$1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$) taban durumunda yabancı atom için diamanyetik duyunluk χ_{dia}^{1s} ;

$$\chi_{dia}^{1s} = -\frac{e^2}{6m^*\epsilon c^2} \frac{\langle \Psi_{1s}(\rho, z) | \rho^2 + (z - z_i)^2 | \Psi_{1s}(\rho, z) \rangle}{\langle \Psi_{1s}(\rho, z) | \Psi_{1s}(\rho, z) \rangle} \quad (6.8)$$

$2p_0$ ($n = 2, l = 1, m = 0$) uyarılmış durumunda yabancı atom için diamanyetik duyunluk $\chi_{dia}^{2p_0}$;

$$\chi_{dia}^{2p_0} = -\frac{e^2}{6m^*\epsilon c^2} \frac{\langle \Psi_{2p_0}(\rho, z) | \rho^2 + (z - z_i)^2 | \Psi_{2p_0}(\rho, z) \rangle}{\langle \Psi_{2p_0}(\rho, z) | \Psi_{2p_0}(\rho, z) \rangle} \quad (6.9)$$

ve $2p_{\pm}$ ($n = 2, l = 1, m = \pm 1$) uyarılmış durumunda yabancı atom için diamanyetik duyunluk $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$;

$$\chi_{dia}^{2p_{\pm}} = -\frac{e^2}{6m^*\epsilon c^2} \frac{\langle \Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z) | \rho^2 + (z - z_i)^2 | \Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z) \rangle}{\langle \Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z) | \Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z) \rangle} \quad (6.10)$$

denklemlerinden hesaplanır. $\Psi_{1s}(\rho, z)$, $\Psi_{2p_0}(\rho, z)$ ve $\Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z)$ deneme dalga fonksiyonları

$$\Psi_{1s}(\rho, z) = N_{1s} \Psi_0(z) e^{-\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} / \lambda_{1s}} \quad (6.11)$$

$$\Psi_{2p_0}(\rho, z) = N_{2p_0} \Psi_0(z) z e^{-\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} / \lambda_{2p_0}} \quad (6.12)$$

$$\Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z) = N_{2p_{\pm}} \Psi_0(z) \rho e^{\pm i\phi} e^{-\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} / \lambda_{2p_{\pm}}} \quad (6.13)$$

olarak belirlenir. Burada, yabancı atomun yok iken elektronun taban durum dalga fonksiyonu $\Psi_0(z)$

$$\Psi_0(z) = \begin{cases} \cos\left(k\frac{L}{2}\right) e^{\alpha_l\left(\frac{L}{2}+z\right)}, & z < -\frac{L}{2} \\ \cos(kz), & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ \cos\left(k\frac{L}{2}\right) e^{\alpha_r\left(\frac{L}{2}-z\right)}, & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (6.14)$$

ve α_l, α_r, k için

$$\alpha_l = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} [V_l(x_l) - E_0]} \quad (6.15)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} E_0} \quad (6.16)$$

$$\alpha_r = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} [V_r(x_r) - E_0]} \quad (6.17)$$

eşitlikleri verilir. E_0 , 1s taban durum subband enerjisidir ve 1s dalga fonksiyonunun $z = \pm L/2$ 'deki sınır koşulları ile elde edilen

$$2k \tan\left(k\frac{L}{2}\right) - (\alpha_l + \alpha_r) = 0 \quad (6.18)$$

denkleminde nümerik olarak hesaplanır. Kuyu içerisindeki yabancı atoma ait Hamiltonyen

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon |\vec{r} - \vec{r}_i|} + V(z) \quad (6.19)$$

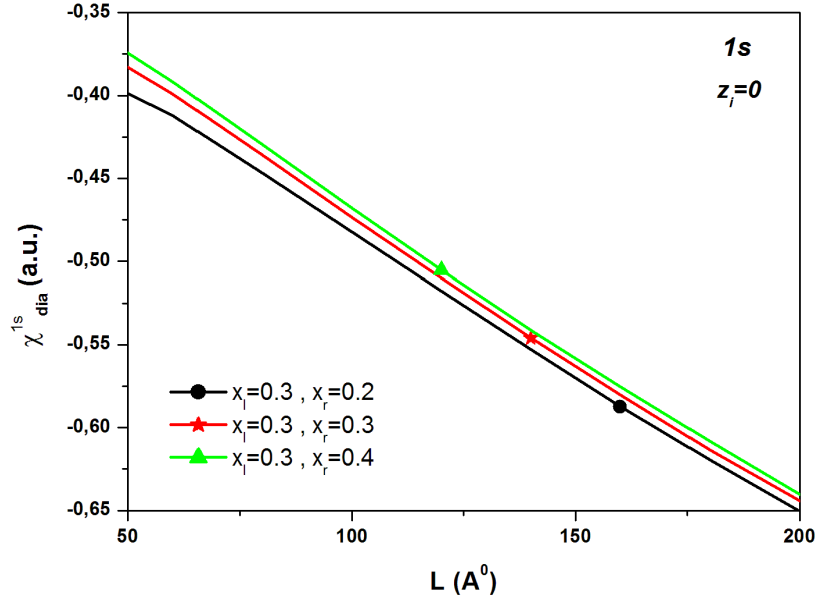
olmak üzere (6.11), (6.12) ve (6.13) denklemleri ile verilen deneme dalga fonksiyonlarında λ_{1s} , λ_{2p_0} ve $\lambda_{2p_{\pm}}$ varyasyon parametreleri

$$E = \min_{\lambda} \frac{\langle \Psi(\rho, \phi, z) | \hat{H} | \Psi(\rho, \phi, z) \rangle}{\langle \Psi(\rho, \phi, z) | \Psi(\rho, \phi, z) \rangle} \quad (6.20)$$

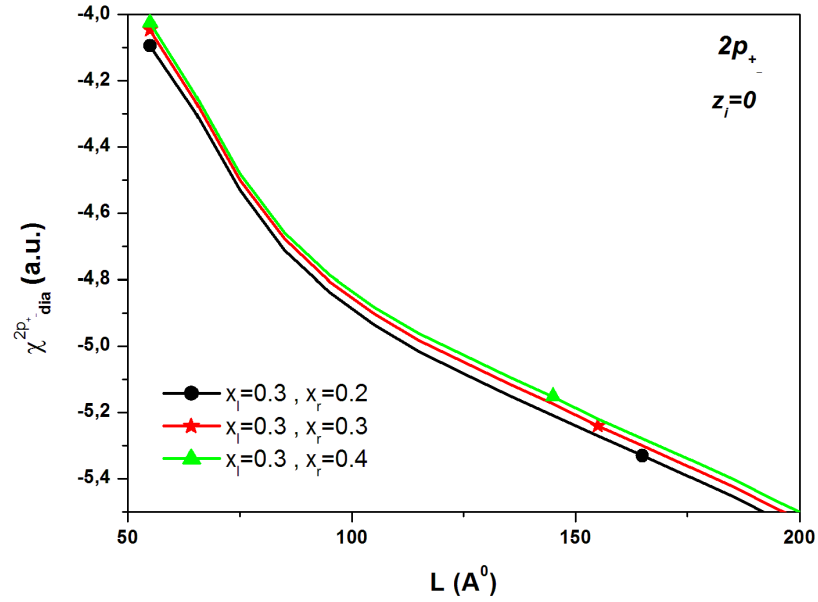
eşitliğinden varyasyon metodu ile nümerik olarak hesaplanır.

Diamanyetik duygunluk boyutsuz bir niceliktir ve $c = 137$, $m_0 = 1$ ve $e = 1$ kabul edilen atomik birimlerde (*a.u.*) hesaplanır [66, 91].

(6.3) denklemi ile verilen diamanyetik duygunluk antisimetrik hapsedici potansiyele sahip $GaAs/Al_{x_1,r}Ga_{1-x_1,r}As$ kuantum kuyusu merkezinde ($z_i = 0$) bulunan yabancı atomun $1s$ taban durum ve $2p_0$, $2p_{\pm}$ uyarılmış durumları için atomik birimlerde fortran programı ile nümerik olarak hesaplanmış, kuantum kuyusu genişliği $L(A^0)$ 'a bağlı değişim grafikleri Şekil 6.1, Şekil 6.2 ve Şekil 6.3 ile verilmiştir.



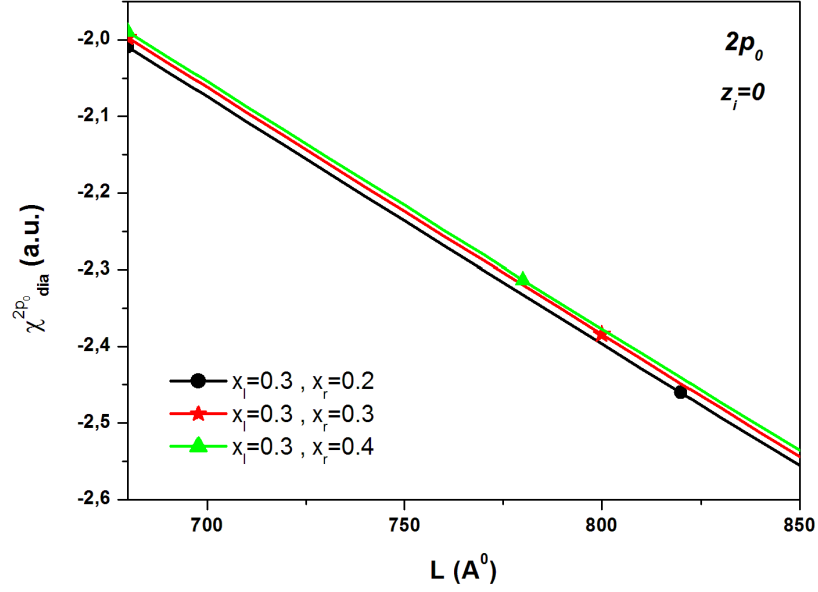
Şekil 6.1. 1s taban durumunda farklı Al mol kesirleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi



Şekil 6.2. 2p_± uyarılmış durumunda farklı Al mol kesirleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi

Şekil 6.1; $1s$ taban durumunda farklı x_l, x_r Alüminyum mol kesirleri için yabancı atoma ait χ_{dia}^{1s} diamanyetik duygunluğunun artan kuyu genişliği ile azaldığı görülmektedir. Sonlu kuatum kuyusundaki diamanyetik duygunluğun bu davranışı, $x = 1$ sonsuz kuantum kuyusundaki davranışı ile aynı özelliktedir [92]. Geniş kuyularda ($L \rightarrow \infty$ limitinde) χ_{dia}^{1s} diamanyetik duygunluğu bulk değeri olarak bilinen $\chi_{bulk}^{1s} = -1.36 a.u.$ değerine ulaşmaktadır [93] ki bu geniş kuyularda hapsediciliğin etkisinin daha az hissedilmesinin bir sonucudur. Hapsedici potansiyelin simetrik olduğu $x_l = x_r = 0.3$ Alüminyum mol kesri için χ_{dia}^{1s} eğrisi ile hapsedici potansiyelin simetrisinin bozulduğu $x_l = 0.3, x_r = 0.2$ ve $x_l = 0.3, x_r = 0.4$ Alüminyum mol kesirleri için χ_{dia}^{1s} eğrileri karşılaştırıldığında; hapsediciliğin en fazla olduğu $x_l = 0.3, x_r = 0.4$ mol kesirleri için taban durum diamanyetik duygunlunun daha büyük olduğu ve benzer şekilde hapsediciliğin en az olduğu $x_l = 0.3, x_r = 0.2$ mol kesirleri için diamanyetik duygunluğun daha küçük değerler aldığı görülmektedir. Grafiğin bir diğer sonucu da kuyu genişliğinin küçük değerleri için farklı Alüminyum mol kesirlerini ifade eden her üç eğri arasındaki farkın daha belirgin olduğu, kuyu genişliğinin artmasıyla bu farkın azaldığıdır.

$2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda farklı x_l ve x_r Alüminyum mol kesirlerinde yabancı atom için $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$ diamanyetik duygunluğunun kuyu genişliğine bağlı değişim grafiği Şekil 6.2 ile verilmektedir. $1s$ taban durum diamanyetik duygunluğu χ_{dia}^{1s} 'e benzer şekilde artan kuyu genişliği ile $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$ uyarılmış durum diamanyetik duygunluğu azalmaktadır ve çok büyük kuyu genişliklerinde ($L \rightarrow \infty$) $2p_{\pm}$ durumu bulk limiti $\chi_{bulk}^{2p_{\pm}} = -7.52 a.u.$ 'ya ulaşmaktadır [30]. $50A^0$ ile $100A^0$ kuyu genişlikleri arasında diamanyetik duygunluktaki azalma $1s$ taban durumunda $|\chi_{dia}^{1s}| \cong 0.2a.u.$ iken $2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda $|\chi_{dia}^{2p_{\pm}}| \cong 1.5a.u.$ olduğu okunabilir. Dolayısıyla artan kuyu genişliği ile azalan hapsediciliğin etkisi $2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda $1s$ taban duruma kıyasla daha büyük olduğu söylenebilir.



Şekil 6.3. $2p_0$ uyarılmış durumda farklı Al mol kesirleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi

$GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusu merkezinde ($z_i = 0$) bulunan yabancı atom için $2p_0$ uyarılmış durumda farklı x_l ve x_r Alüminyum mol kesirlerinde $\chi_{dia}^{2p_0}$ diamanyetik duygunluğunun kuyu genişliğine bağlı değişim grafiği Şekil 6.3 ile verilmiştir. Şekil 5.5 'de $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi E_{b2p_0} 'ın kuyu genişliği ile değişim grafiğinde verildiği üzere, yabancı atom $L > 680\text{Å}$ kuyu genişliklerinde bağlıdır. Dolayısı ile $2p_0$ uyarılmış durumda $\chi_{dia}^{2p_0}$ diamanyetik duygunluğunu kuyu genişliğinin 680Å 'dan büyük değerleri için hesaplamak anlamlıdır [30] ve grafik $L > 680\text{Å}$ için elde edilmiştir. $\chi_{dia}^{2p_0}$ diamanyetik duygunluğu, $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumuna benzer şekilde artan kuyu genişliği ile azalmaktadır. $2p_0$ uyarılmış durumda hapsedici potansiyelin (ya da x Alüminyum mol kesrinin) etkisi $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumuna kıyasla daha az hissedilmektedir. Alüminyum mol kesrinin $x_l = x_r = 0.3$ simetrik durumu ile $x_l = 0.3, x_r = 0.4$ antisimetrik durumları için diamanyetik duygunluk çok yakın değerler almaktadır.

6.2. Antisimetrik Hapsedici Potansiyele Sahip $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ Kuantum Kuyusunda Hidrostatik Basıncı Altında Yer Alan Yabancı Atomun Diamanyetik Duygunluğu

Potansiyel fonksiyonu

$$V(z, P) = \begin{cases} V_l(x_l, P), & z < -\frac{L(P)}{2} \\ 0, & -\frac{L(P)}{2} < z < \frac{L(P)}{2} \\ V_r(x_r, P), & z > \frac{L(P)}{2} \end{cases} \quad (6.21)$$

eşitliği ile verilen P hidrostatik basıncı etkisinde $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusundaki yabancı atomun Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \nabla_{\rho, \phi, z}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon(P) |\vec{r} - \vec{r}_i|} + V(z, P) \right] \Psi(\rho, \phi, z, P) = E(P) \Psi(\rho, \phi, z, P) \quad (6.22)$$

şeklinde yazılır. Burada $|\vec{r} - \vec{r}_i| = \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}$ yabancı atom ile elektron arasındaki mesafe, z_i yabancı atomun z eksenindeki konumudur. Elektronun etkin kütlesi $m^*(P)$, dielektrik sabiti $\epsilon(P)$ ve kuyu genişliği $L(P)$ basıncın fonksiyonu olarak

$$m^*(P) = m^*(0) e^{0.078P} \quad (6.23)$$

$$\epsilon(P) = \epsilon_0 - 0.088P \quad (6.24)$$

$$L(P) = L(0) (1 - 1.5082 \times 10^{-3} P) \quad (6.25)$$

ve $V_l(x_l, P)$ ve $V_r(x_r, P)$ antisimetrik potansiyelleri

$$V_l(x_l, P) = 0.6 [1.155x_l + 0.37x_l^2 + P D(x_l)] \quad \text{eV} \quad (6.26)$$

$$D(x_l) = -1.3 \times 10^{-2} x_l \quad \text{eV/GPa} \quad (6.27)$$

ve

$$V_r(x_r, P) = 0.6 [1.155x_r + 0.37x_r^2 + P D(x_r)] \quad \text{eV} \quad (6.28)$$

$$D(x_r) = -1.3 \times 10^{-2} x_r \quad \text{eV/GPa} \quad (6.29)$$

ifade edilir [20, 29, 89]. Hidrostatik basınç etkisindeki yabancı atom deneme dalga fonksiyonları λ varyasyon parametresine bağlı olarak

$$\Psi_{1s}(\rho, z, P) = N_{1s} \Psi_0(z, P) e^{-\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}/\lambda_{1s}} \quad (6.30)$$

$$\Psi_{2p_0}(\rho, z, P) = N_{2p_0} \Psi_0(z, P) z e^{-\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}/\lambda_{2p_0}} \quad (6.31)$$

$$\Psi_{2p_{\pm}}(\rho, \phi, z, P) = N_{2p_{\pm}} \Psi_0(z, P) \rho e^{\pm i\phi} e^{-\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}/\lambda_{2p_{\pm}}} \quad (6.32)$$

denklemleri ile yazılır. Burada,

$$\Psi_0(z, P) = \begin{cases} \cos\left(k(P) \frac{L(P)}{2}\right) e^{\alpha_l(P)\left(\frac{L(P)}{2}+z\right)}, & z < -\frac{L(P)}{2} \\ \cos(k(P) z), & -\frac{L(P)}{2} \leq z \leq \frac{L(P)}{2} \\ \cos\left(k(P) \frac{L(P)}{2}\right) e^{\alpha_r(P)\left(\frac{L(P)}{2}-z\right)}, & z > \frac{L(P)}{2} \end{cases} \quad (6.33)$$

ve $\alpha_l(P)$, $k(P)$, $\alpha_r(P)$

$$\alpha_l(P) = \sqrt{\frac{2m^*(P)}{\hbar^2} [V_l(x_l, P) - E_0(P)]} \quad (6.34)$$

$$k(P) = \sqrt{\frac{2m^*(P)}{\hbar^2} E_0(P)} \quad (6.35)$$

$$\alpha_r(P) = \sqrt{\frac{2m^*(P)}{\hbar^2} [V_r(x_r, P) - E_0(P)]} \quad (6.36)$$

olacaktır. (6.33) denklemi ile verilen dalga fonksiyonunun sınır koşullarından

$$2k(P) \tan\left(k(P) \frac{L(P)}{2}\right) - (\alpha_l(P) + \alpha_r(P)) = 0 \quad (6.37)$$

denklemini elde edilir ve nümerik çözümü ile $E_0(P)$ taban durum subband enerjisi bulunur.

λ_{1s} , λ_{2p_0} ve $\lambda_{2p_{\pm}}$ varyasyon parametrelerini belirlemek için (6.20) denklemi ile verilen yabancı atom enerjisinin beklenen değeri yazılır ve nümerik olarak çözülür.

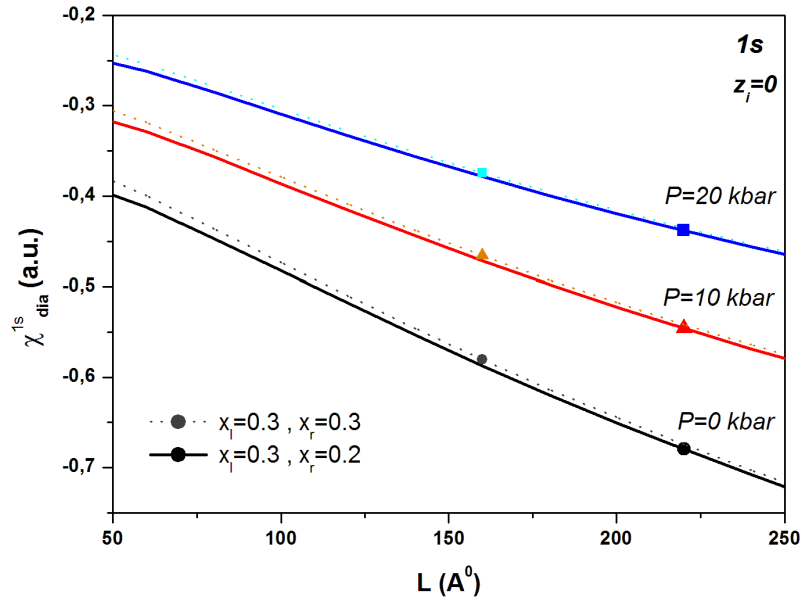
Kuyu içerisindeki yabancı atoma ait diamanyetik duygunluk basıncının fonksiyonu olarak;

$$\chi_{dia}^{1s}(P) = -\frac{e^2}{6m^*(P)\epsilon(P)c^2} \langle r^2(P) \rangle \quad (6.38)$$

eşitliği ile verilir [94]. Burada, yabancı atom ile elektron arasındaki mesafenin karesi için beklenen değer hesabı

$$\langle r^2(P) \rangle = \frac{\langle \Psi(P)(\rho, \phi, z, P) | \rho^2 + (z - z_i)^2 | \Psi(P)(\rho, \phi, z, P) \rangle}{\langle \Psi(P)(\rho, \phi, z, P) | \Psi(P)(\rho, \phi, z, P) \rangle} \quad (6.39)$$

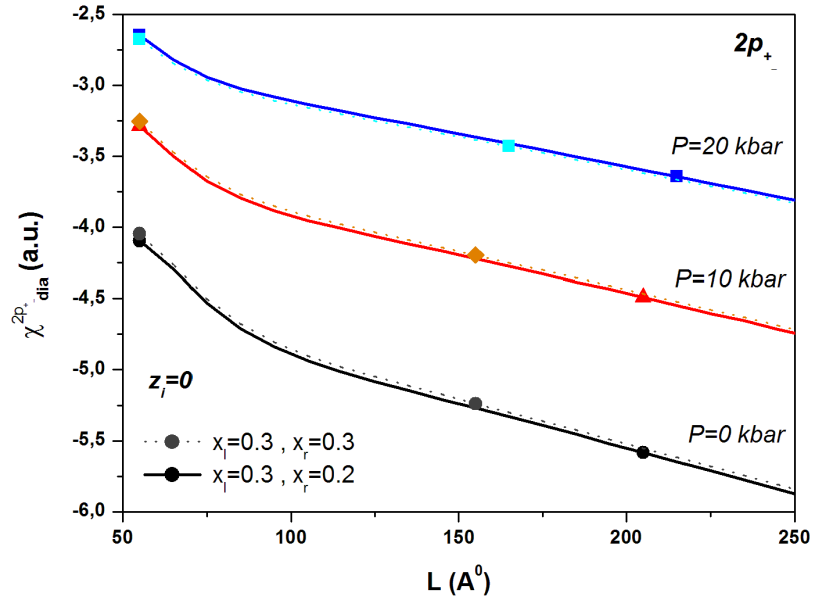
normalize edilmemiş dalga fonksiyonu için (6.39) denklemi ile nümerik olarak hesaplanır. Taban durum ve uyarılmış durumlar için $\chi_{dia}^{1s}(P)$, $\chi_{dia}^{2p_0}(P)$ ve $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}(P)$ diamanyetik duygunlukları (6.38) ile hesaplanır.



Şekil 6.4. 1s taban durumunda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınç değerleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi

1s taban durumunda $GaAs/Al_{x_l, r}Ga_{1-x_l, r}As$ kuantum kuyusu merkezinde ($z_i = 0$) bulunan yabancı atom için $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınç değerleri etkisinde ve $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ antisimetrik ile $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ simetrik

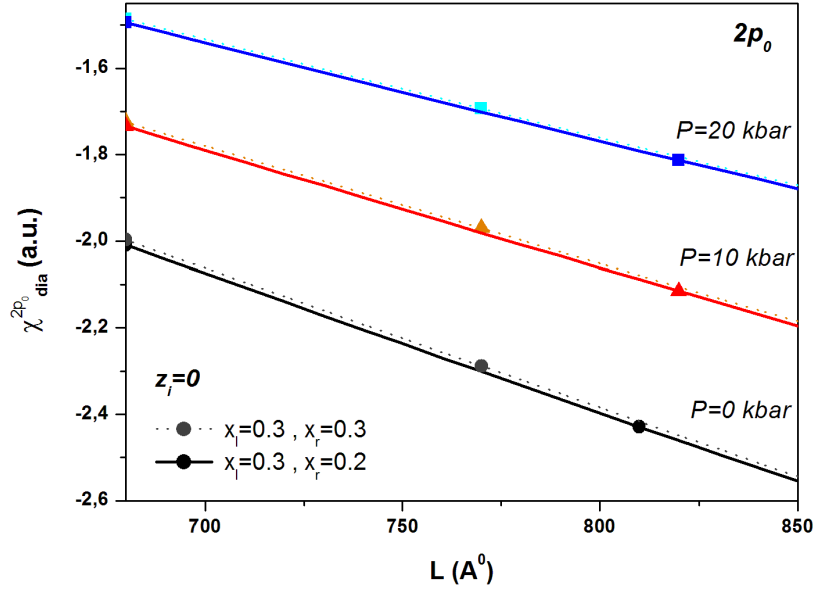
Alüminyum mol kesirlerinde diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişim grafiği Şekil 6.4 ile verilmiştir. $P = 0$ kbar iken $1s$ taban durum diamanyetik duygunluğu χ_{dia}^{1s} 'in artan kuyu genişliği ile azaldığı Şekil 6.1 'den bilinmektedir. $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınçları etkisinde de χ_{dia}^{1s} aynı davranışı göstermekte, kuyu genişliği arttığında değeri azalmaktadır. Hidrostatik basıncın $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar değerleri ile artması hapsediciliği artırdığından dolayı χ_{dia}^{1s} 'in de artışına sebep olmuştur. $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ antisimetrik ile $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ simetrik Alüminyum mol kesirleri için iki eğri birbirine çok yakındır ancak dar kuyularda bu fark daha belirgindir. Bununla birlikte artan hidrostatik basınç ile bu fark azalmaktadır. Hidrostatik basıncın $1s$ taban durumu için diamanyetik duygunluğa etkisinin hapsedici potansiyelden daha baskın olduğu söylenebilir.



Şekil 6.5. $2p_{\pm}$ uyarılmış durumda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınç değerleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi

Şekil 6.5, $2p_{\pm}$ uyarılmış durumda kuantum kuyu merkezinde bulunan yabancı atom için diamanyetik duygunluk $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$ 'nin farklı hidrostatik basınç değerlerinde kuantum kuyu genişliğine bağlı grafiğidir. $1s$ taban durum diamanyetik duygunluğu χ_{dia}^{1s} 'e benzer şekilde artan kuyu genişliği ile azalan $2p_{\pm}$ uyarılmış durum diamanyetik duygunluğu $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$, hidrostatik basınç ile artmaktadır. $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ simetrik Alüminyum mol kesirleri

için bu sonuç literatür ile uyumludur [31]. $1s$ taban durumu diamanyetik duygunluğu χ_{dia}^{1s} 'e göre $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ Alüminyum mol kesirleri için hesaplanan $2p_{\pm}$ uyarılmış durum diamanyetik duygunluğu $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$ ile $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ Alüminyum mol kesirleri için hesaplanan $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$ arasındaki fark hidrostatik basıncın etkisinin yanında yok denecek kadar azdır.

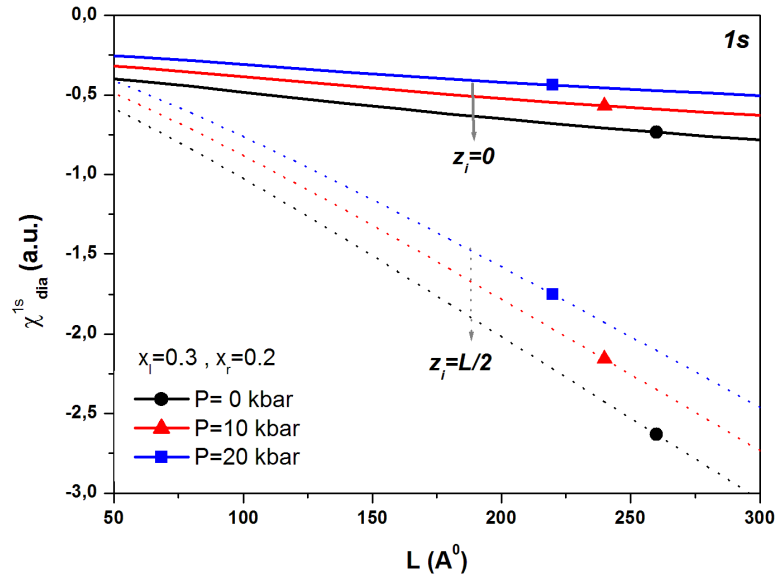


Şekil 6.6. $2p_0$ uyarılmış durumda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınç değerleri için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi

$GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ kuantum kuyusu merkezinde ($z_i = 0$) bulunan yabancı atom için $2p_0$ uyarılmış durumunda simetrik ve antisimetrik hapsedici potansiyellerinde $\chi_{dia}^{2p_0}$ diamanyetik duygunluğunun $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınç değerleri için kuyu genişliğine bağlı değişim grafiği Şekil 6.6 ile verilmiştir. $2p_0$ uyarılmış durumunda yabancı atomun bağlı ($E_{b2p_0} > 0$) olduğu $L > 680 \text{Å}$ kuyu genişlikleri için elde edilen eğrilerde $1s$ taban ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumuna benzer şekilde diamanyetik duygunluk artan kuyu genişliği ile azalırken artan basınç ile büyük değerler almaktadır. $2p_{\pm}$ uyarılmış durumuna benzer olarak $2p_0$ uyarılmış durumu diamanyetik duygunluğuna hidrostatik basıncın etkisi $x_l = 0.3$, $x_r = 0.3$ simetrik ve $x_l = 0.3$, $x_r = 0.2$ antisimetrik şekilde değişen hapsedici potansiyelin etkisinden çok daha fazladır.

6.3. Antisimetrik Hapsedici Potansiyele Sahip $GaAs/Al_{x_l,r}Ga_{1-x_l,r}As$ Kuantum Kuyusunda Hidrostatik Basınç Altında Yer Alan Yabancı Atomun Konumunun Diamanyetik Duygunluğa Etkisi

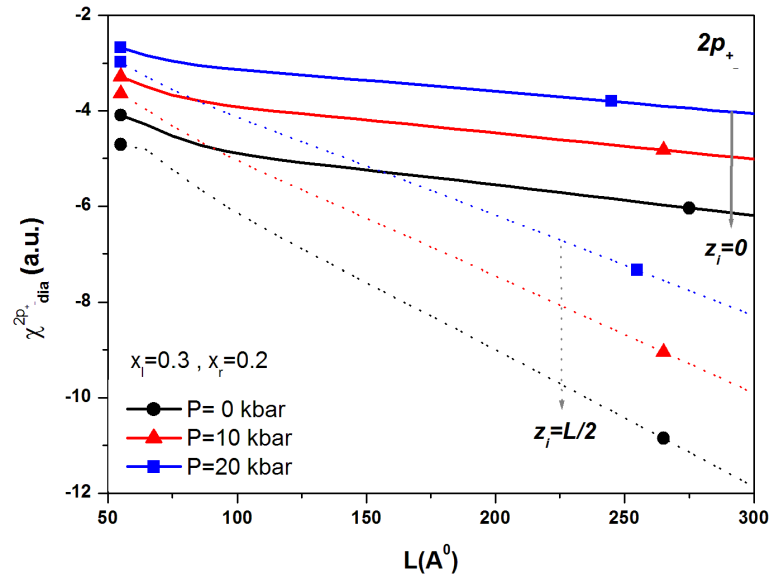
z doğrultusunda $z = -L/2$ ve $z = L/2$ 'de potansiyel duvarları ile sınırlandırılmış kuantum kuyusunda yabancı atom $-\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2}$ aralığında herhangi bir yerde bulunabilir. Diamanyetik duygunluğun hidrostatik basınç ve x Alüminyum mol kesrinin yanı sıra yabancı atomun konumu z_i ile değişimini incelemek amacıyla yabancı atom kuantum kuyusu merkezinde ($z_i = 0$) iken ve kuantum kuyusu kenarında ($z_i = L/2$) iken $1s$ taban durum, $2p_{\pm}$ ve $2p_0$ uyarılmış durumları için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişim grafikleri elde edilmiştir.



Şekil 6.7. $1s$ taban durumunda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınç değerleri için $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ iken diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi

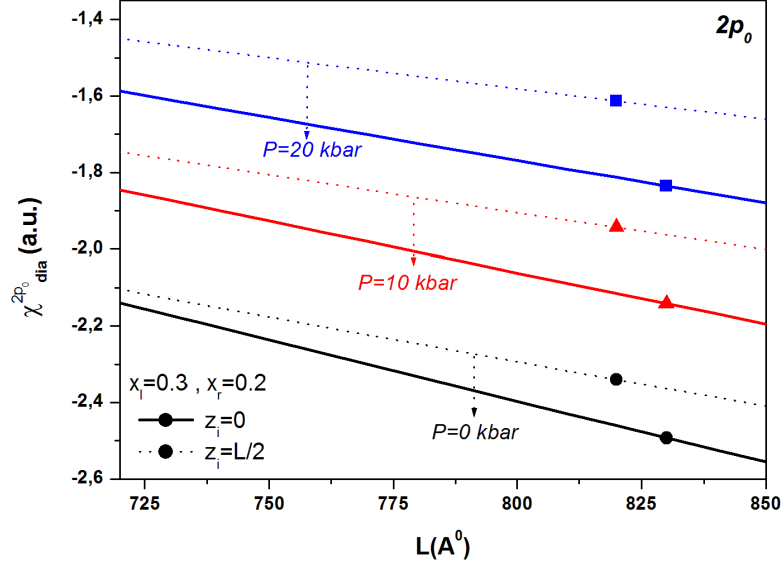
$1s$ taban durumunda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınçları etkisinde $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.2$ Alüminyum mol kesirleri için antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusunda bulunan yabancı atomun χ_{dia}^{1s} diamanyetik duygunluğunun yabancı atomun konumu $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ için kuyu genişliğine bağlı değişim grafiği Şekil 6.7 ile verilmiştir. Yabancı atom kuyu merkezinde ($z_i = 0$) iken χ_{dia}^{1s} diamanyetik

duygunluğunun artan kuyu genişliği ile azaldığı ve artan basınç ile arttığı sonucunu yabancı atom kuyu kenarında ($z_i = L/2$) iken de söylemek mümkündür. $z_i = 0$ iken χ_{dia}^{1s} diamanyetik duygunluğunun artan kuyu genişliği ile değişimi daha az iken $z_i = L/2$ için diamanyetik duygunluğun kuyu genişliği ile değişimi daha fazladır. Grafikten de açıkça görülebileceği üzere, yabancı atomun kuyu merkezinden kenarına konumlandırılması diamanyetik duygunluğun azalmasına sebep olmaktadır. Bu sonuç $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.3$ simetrik hapsedici potansiyel durumu için literatür ile desteklenmektedir [94].



Şekil 6.8. $2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınç değerleri için $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ iken diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi

Şekil 6.8 $2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınçları etkisinde $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.2$ Alüminyum mol kesirleri için anti-simetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusunda bulunan yabancı atomun $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$ diamanyetik duygunluğunun yabancı atomun konumu $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ için kuyu genişliğine bağlı değişim grafiğini vermektedir. $1s$ taban durumuna benzer şekilde $2p_{\pm}$ uyarılmış durumu için $\chi_{dia}^{2p_{\pm}}$ diamanyetik duygunluğu yabancı atom kuantum kuyu kenarında ($z_i = L/2$) konumlandırıldığında merkezde ($z_i = 0$) konumlandırıldığı değerden daha küçüktür. Buna ek olarak sabit bir hidrostatik basınç için kuyu genişliğinin büyük değerlerinde küçük değerlerine kıyasla yabancı atomun konumunun etkisi daha fazladır.



Şekil 6.9. $2p_0$ uyarılmış durumunda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınç değerleri için $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ iken diamanyetik duygunluğun kuyu genişliğine bağlı değişimi

Şekil 6.9, $2p_0$ uyarılmış durumunda $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar ve $P = 20$ kbar hidrostatik basınçları etkisinde $x_l = 0.3$ ve $x_r = 0.2$ Alüminyum mol kesirleri için antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusunda bulunan yabancı atomun $\chi_{dia}^{2p_0}$ diamanyetik duygunluğunun yabancı atomun konumu $z_i = 0$ ve $z_i = L/2$ için kuyu genişliğine bağlı değişim grafiğini vermektedir. $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumlarının aksine yabancı atomun kuyu kenarında ($z_i = L/2$) olması $2p_0$ uyarılmış durumu diamanyetik duygunluğu $\chi_{dia}^{2p_0}$ 'ın değerinin artmasına sebep olmaktadır.

Her üç enerji durumu ($1s, 2p_0, 2p_{\pm}$) için de Alüminyum mol kesri, hidrostatik basınç ve yabancı atomun konumu diamanyetik duygunluk üzerinde etkili parametrelerdir. Diamanyetik duygunluk üzerinde etkili bir başka parametre de kuantum kuyusunu oluşturan yarı iletken malzemedir. *GaAs*, *Si* ve *Ge* gibi farklı yarı iletken kristallerinden oluşan sonsuz kuantum kuyusu için diamanyetik duygunluk hesaplanarak bu etki daha önceki çalışmamızda araştırılmıştır [95]. İstenilen diamanyetik duygunluk büyüklüğüne sahip kuantum kuyusu tasarlamak için bu parametrelerin taban durum ya da uyarılmış durumlara etkilerinden yararlanılabilir.

BÖLÜM 7

HİDROSTATİK BASINÇ ETKİSİ ALTINDAKİ KÜRESEL KUANTUM NOKTALARINDA YABANCI ATOM PROBLEMİ

7.1. $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Küresel Kuantum Noktasında Taban Durum Subband Enerjisi

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a \\ V_0(x), & r > a \end{cases} \quad (7.1)$$

(7.1) hapsedici potansiyeline sahip a yarıçaplı $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktasına hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektronun Hamiltonyeni etkin kütle yaklaşımı ile

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) \quad (7.2)$$

yazılır. (4.23) ile verilen küresel koordinatlardaki üç boyutlu Schrödinger denkleminin çözümü dalga fonksiyonlarını ve enerji özdeğerlerini verir. $1s$ ($n = 0, l = 0, m = 0$) taban durum dalga fonksiyonu için (4.54) radyal denklemi $l = 0$ için çözülür ve taban durum dalga fonksiyonu

$$R_0(r) = N_0 \begin{cases} \frac{\sin(kr)}{r}, & r \leq a \\ \frac{\sin(ka)}{r} e^{\alpha(a-r)}, & r > a \end{cases} \quad (7.3)$$

ulaşılır [71, 75, 77, 78, 80]. Burada k ve α için E_0 taban durum subband enerjisi olmak üzere

$$k = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} E_0} \quad (7.4)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0(x) - E_0)} \quad (7.5)$$

tanımlamaları yapılmıştır ve $V_0(x)$

$$V_0(x) = 0.6 (1.155x + 0.37x^2) \quad (7.6)$$

ifadesi ile x Alüminyum mol kesrine bağlı hapsedici potansiyeldir. Küre yarıçap sınırında ($r = a$) dalga fonksiyonunun sürekli olması şartı uygulanarak

$$\alpha \tan(ka) + k = 0 \quad (7.7)$$

transcendental denklemi yazılır [67, 71]. Bu denklemin E_0 için nümerik çözümü ile taban durum subband enerjisi elde edilir.

7.2. $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Küresel Kuantum Noktasında Yer Alan Yabancı Atomun Taban Durum ve Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjileri

Kuantum noktası merkezinde yer alan donör yabancı atomunun etkin kütle yaklaşımı ile Hamiltonyeni

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{r,\theta,\phi}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} + V(r) \quad (7.8)$$

denklemleri ile verilir [58, 96]. Burada, r elektron ile yabancı atom arasındaki uzaklıktır. Yabancı atom için Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{r,\theta,\phi}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi) \quad (7.9)$$

yazılır. $\nabla_{r,\theta,\phi}^2$ küresel koordinatlarda Laplasyen operatörü ve $\Psi(r, \theta, \phi)$ dalga fonksiyonudur. Dalga fonksiyonunun θ ve ϕ 'ye bağlı açısal kısmın enerji özdeğerlerine katkısı ihmal edilebilecek kadar azdır. Bu sebeple (7.9) denklemini sadece radyal olarak incelemek yeterli olacaktır. (a^*, R^*) Rydberg birim sisteminde radyal diferansiyel denklem [97]

$$\left[-\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r} + V(r) \right] R(r) = E R(r) \quad (7.10)$$

şeklini alır. Analitik çözümü mümkün olmayan (7.10) denklemi varyasyon metodu ile çözülür.

$1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$) taban durumunda (7.10) denklemi $l = 1$ için $R_{1s}(r)$ taban durum dalga fonksiyonu ile E_{1s} taban durum yabancı atom enerjisini verir.

Benzer şekilde $2p_0$ ($n = 2, l = 1, m = 0$) uyarılmış durumunda (7.10) denklemi $l = 2$ için $R_{2p_0}(r)$ uyarılmış durum dalga fonksiyonu ile E_{2p_0} uyarılmış durum yabancı atom enerjisini verir.

$$R_0(r) = N_0 \begin{cases} \frac{\sin(kr)}{r}, & r \leq a \\ \frac{\sin(ka)}{r} e^{\alpha(a-r)}, & r > a \end{cases} \quad (7.11)$$

olmak üzere $1s$ taban durumu ve $2p_0$ uyarılmış durumu için deneme dalga fonksiyonları

$$R_{1s}(r) = R_0(r) f_{1s}(r) \quad (7.12)$$

$$R_{2p_0}(r) = R_0(r) f_{2p_0}(r) \quad (7.13)$$

ve $f(r)$ fonksiyonları

$$f_{1s}(r) = N_{1s} e^{-r/\lambda_{1s}} \quad 1s \text{ için} \quad (7.14)$$

$$f_{2p_0}(r) = N_{2p_0} r e^{-r/\lambda_{2p_0}} \quad 2p_0 \text{ için} \quad (7.15)$$

λ_{1s} ve λ_{2p_0} varyasyon parametrelerine bağılı olarak verilir [27, 98]. $1s$ taban durum ve $2p_0$ uyarılmış durumdaki yabancı atom bağlanma enerjileri

$$E_{b1s} = E_0 - E_{1s} \quad (7.16)$$

$$E_{b2p_0} = E_0 - E_{2p_0} \quad (7.17)$$

eşitliklerinden hesaplanır.

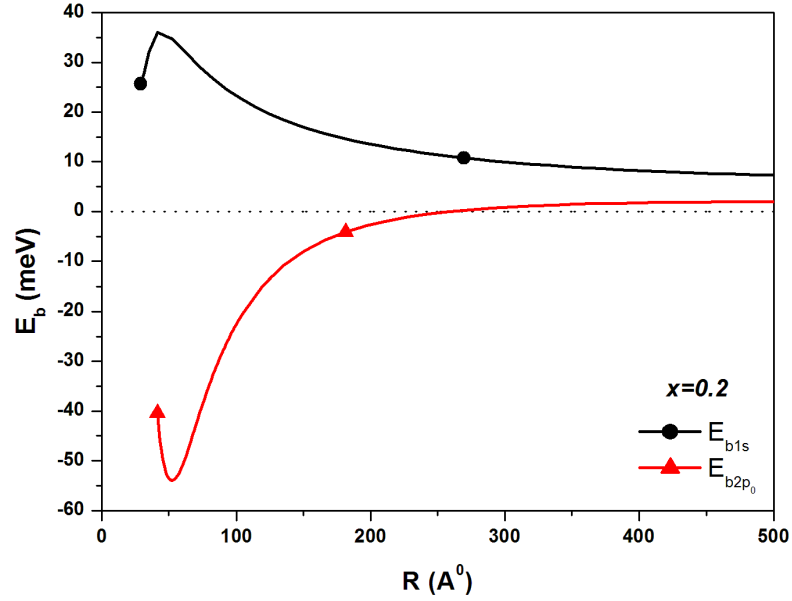
1s taban durum yabancı atom enerjisi

$$E_{1s} = \min_{\lambda_{1s}} \frac{\langle R_{1s}(r) | H | R_{1s}(r) \rangle}{\langle R_{1s}(r) | R_{1s}(r) \rangle} \quad (7.18)$$

ve 2p₀ uyarılmış durum yabancı atom enerjisi

$$E_{2p_0} = \min_{\lambda_{2p_0}} \frac{\langle R_{2p_0}(r) | H | R_{2p_0}(r) \rangle}{\langle R_{2p_0}(r) | R_{2p_0}(r) \rangle} \quad (7.19)$$

eşitlikleri ile varyasyon metodundan nümerik olarak hesaplanır.



Şekil 7.1. $1s$ taban ve $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinin küresel kuantum noktası yarıçapına bağlı değişimi

(7.18) ve (7.19) denklemleri ile verilen $1s$ taban durum ve $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjileri yabancı atom küresel kuantum noktası merkezinde ($z_i = 0$) kabul edilerek ve $x = 0.2$ Alüminyum mol kesri, $GaAs$ için $\epsilon_0 = 13,13$ dielektrik sabiti, $m^* = 0.067m_0$ elektron etkin kütlesi için (a^*, R^*) Rydberg birim sisteminde fortran programı ile nümerik olarak hesaplanmış, küresel noktanın yarıçapı $R(A^0)$ 'na bağlı değişim grafiği Şekil 7.1 'de verilmiştir. Taban durum bağlanma enerjisi E_{b1s} 'in artan küresel nokta yarıçapı ile arttığı, bir maksimum değerden sonra ise azaldığı görülmektedir ve literatür ile uyum içerisindedir [5, 78, 99, 101]. $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi E_{b2p_0} ise artan küresel nokta yarıçapı ile azalarak bir minimum değere ulaşır, ardından artarak pozitif değerler alır. Pozitif $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi ($E_{b2p_0} > 0$), $1s$ taban durumun aksine artan yarıçap değerleri ile artmaktadır. Belirli küresel nokta yarıçap değerleri için negatif, belirli yarıçap değerleri için pozitif olduğu gözlenen E_{b2p_0} uyarılmış durum bağlanma enerjisinin, negatif değerler aldığı küre yarıçaplarında bağlanmanın olmadığı bilinir, pozitif enerji değerleri anlamlıdır. [27, 28].

7.3. Hidrostatik Basınç Etkisi Altındaki $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Küresel Kuantum Noktasında Yer Alan Yabancı Atomun Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjisi

Hidrostatik P basıncı etkisi altında kuantum noktası merkezinde yer alan yabancı atomun Hamiltonyeni

$$H(P) = -\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon(P)r} + V(r, P) \quad (7.20)$$

şeklinde dir. Basınca bağımlı etkin kütle ve dielektrik sabit

$$m^*(P) = m^*(0) e^{0.078P} \quad (7.21)$$

$$\epsilon(P) = \epsilon_0 - 0.088P \quad (7.22)$$

iken $V(r, P)$ hapsedici potansiyeli

$$V(r, P) = \begin{cases} 0, & r \leq a \\ V_0(x, P), & r > a \end{cases} \quad (7.23)$$

olur. Burada $V_0(x, P)$

$$V_0(x, P) = 0.6 [1.155x + 0.37x^2 + P D(x)] \quad \text{eV} \quad (7.24)$$

$$D(x) = -1.3 \times 10^{-2}x \quad \text{eV/GPa} \quad (7.25)$$

eşitliği ile verilir. $a(P)$ kuantum nokta yarıçapı

$$a(P) = a(0) (1 - 1.5082 \times 10^{-3}P) \quad (7.26)$$

denkle mi ile basıncın fonksiyonu olarak verilir [20, 29, 89]. Burada $a(0)$ basınç sıfır iken

küresel noktanın yarıçapıdır.

Hidrostatik basınç etkisinde yabancı atom deneme dalga fonksiyonu $2p_0$ uyarılmış durumu için

$$R_{2p_0}(r) = N_{2p_0} \begin{cases} \frac{\sin(k(P)r)}{r}, & r \leq a(P) \\ \frac{\sin(k(P)a)}{r} e^{\alpha[a(P)-r]}, & r > a(P) \end{cases} \quad (7.27)$$

şeklinde seçilir. $k(P)$ ve $\alpha(P)$ ise

$$k(P) = \sqrt{\frac{2m^*(P)}{\hbar^2} E_0(P)} \quad (7.28)$$

$$\alpha(P) = \sqrt{\frac{2m^*(P)}{\hbar^2} [V_0(x, P) E_0(P)]} \quad (7.29)$$

eşitlikleri yazılabilir. Burada $E_0(P)$ hidrostatik basınç etkisindeki taban durum subband enerjisidir ve

$$\alpha(P) \tan(k(P)a(P)) + k(P) = 0 \quad (7.30)$$

denklemden hesaplanır. $E_{2p_0}(P)$ yabancı atom enerjisi basınca bağlı olarak

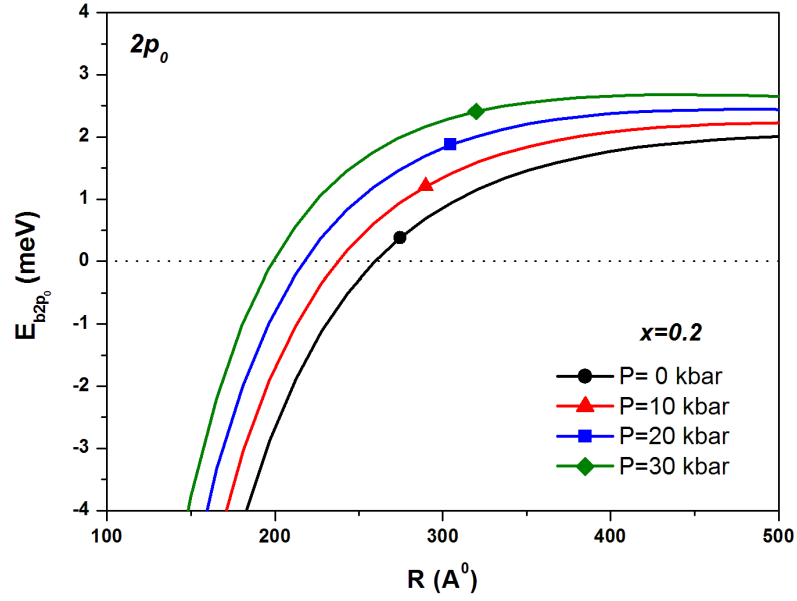
$$E_{2p_0}(P) = \min_{\lambda_{2p_0}} \frac{\langle R_{2p_0}(r, P) | H(P) | R_{2p_0}(r, P) \rangle}{\langle R_{2p_0}(r, P) | R_{2p_0}(r, P) \rangle} \quad (7.31)$$

ifadelerinden elde edilir. $E_{b2p_0}(P)$ yabancı atom bağlanma enerjisinin basınca bağlı tanımı

$$E_{b2p_0}(P) = E_0(P) - E_{2p_0}(P) \quad (7.32)$$

eşitliği ile yapılır.

$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi E_{b2p_0} 'ın $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$

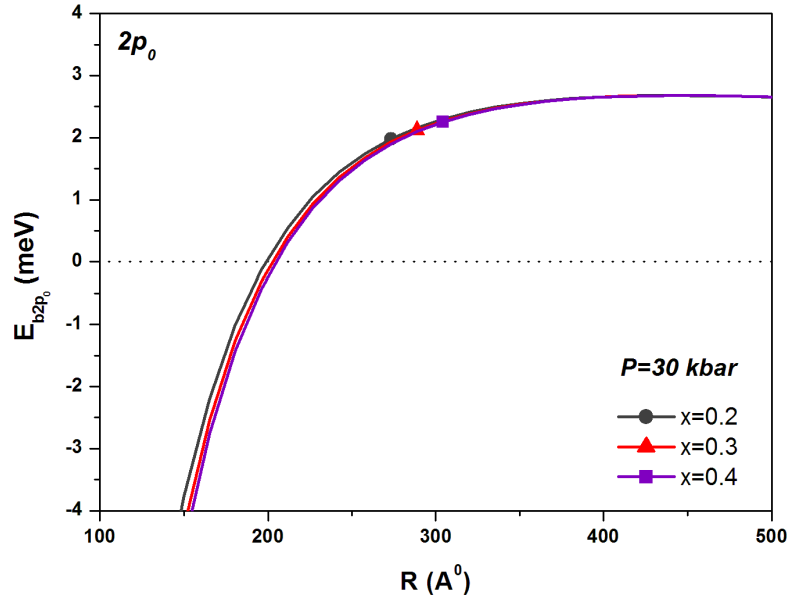


Şekil 7.2. $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç değerleri için küresel kuantum noktası yarıçapına bağlı değişimi

ve $P = 30$ kbar, hidrostatik basınç değerleri için küresel noktanın yarıçapı ile değişim grafiği Şekil 7.2 ile verilmektedir. Bağlı durumlara karşılık gelen pozitif E_{2p_0} uyarılmış durum bağlanma enerjisine $P = 0$ için $R(x = 0.2, P = 0) = 259,65 A^0$ 'dan büyük yarıçap değerlerinde ulaşılır. $P = 0$ için belirlenen bu yarıçap değeri literatür ile uyum içerisindedir [27,28]. Enerjinin işaret değiştirdiği yarıçap değerleri dönüm noktası (*turning point*) olarak adlandırılır ve literatürde sıkça çalışılır [4, 27–29, 86–88]. Hidrostatik basınç hapsediciliği artırarak bağlanma enerjisinde de artışa sebep olmaktadır. $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç değerleri için belirli bir küresel nokta yarıçapından sonra pozitif bağlanma enerjisinin artan basınç ile daha büyük değerler aldığı grafikten görülebilir. $P = 0$ için $R(x = 0.2, P = 0) = 259,65 A^0$ küresel nokta yarıçapında pozitif değerler almaya başlayan $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi basıncın artması ile daha küçük küresel nokta yarıçaplarında pozitif değere geçerek bağlı duruma gelmektedir ki bu hidrostatik basıncın hapsediciliği artırmasından dolayı beklenmektedir.

7.4. Hidrostatik Basıncı Etkisi Altındaki $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Küresel Kuantum Noktasında Yer Alan Yabancı Atomun Uyarılmış Durum Bağlanma Enerjisine x Alüminyum Mol Kesrinin Etkisi

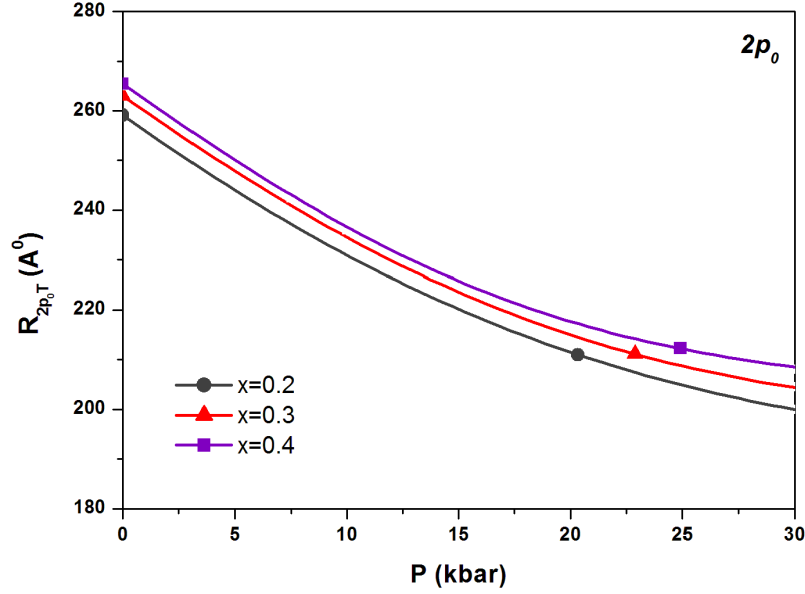
$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi E_{b2p_0} 'ın negatif değerlerden pozitif değerlere işaret değiştirdiği küresel nokta yarıçapları dönüm noktası olarak $R_{2p_0T}(x, P)$ ile gösterilmiştir. Bağlanma enerjisi ve dönüm noktalarında basıncın yanı sıra x Alüminyum mol kesrinin etkisi araştırılmıştır. x Alüminyum mol kesri $x = 0.2$, $x = 0.3$, $x = 0.4$ ve P hidrostatik basıncı $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$ ve $P = 30\text{kbar}$ için çeşitli grafikler elde edilmiştir [100].



Şekil 7.3. $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin farklı Al mol kesirleri için küresel kuantum noktası yarıçapına bağlı değişimi

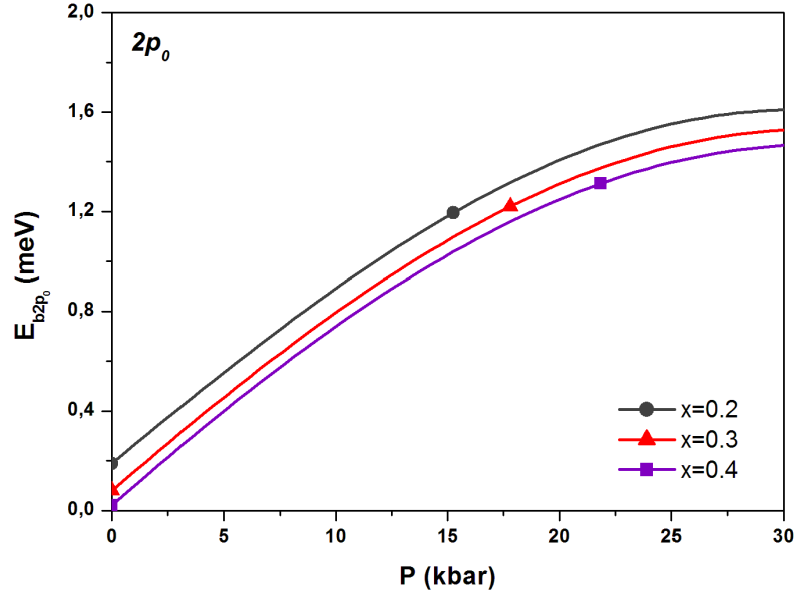
$P = 30\text{kbar}$ hidrostatik basıncı etkisinde $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi E_{b2p_0} 'ın $x = 0.2$, $x = 0.3$ ve $x = 0.4$ Alüminyum mol kesirleri için küresel noktanın yarıçapına bağlı değişimini veren grafik 7.3 'de verilmektedir. x Alüminyum mol kesrinin artması bağlanma enerjisinin küçülmesine sebep olmaktadır. Her üç x değeri için artan yarıçap ile bağlanma enerjisi de artmakta ve küresel nokta yarıçapının 450 Å 'dan daha büyük değerleri için dejenere olarak bağlanma enerjisinin $2,37 \text{ meV}$ değerine ulaşmaktadır.

Küresel noktanın yarıçapına bağlı E_{b2p_0} bağlanma enerjisine hidrostatik basıncın etkisinin hapsedici potansiyelin (ya da x Alüminyum mol kesrinin) etkisine kıyasla daha baskın olduğu gözlenir.

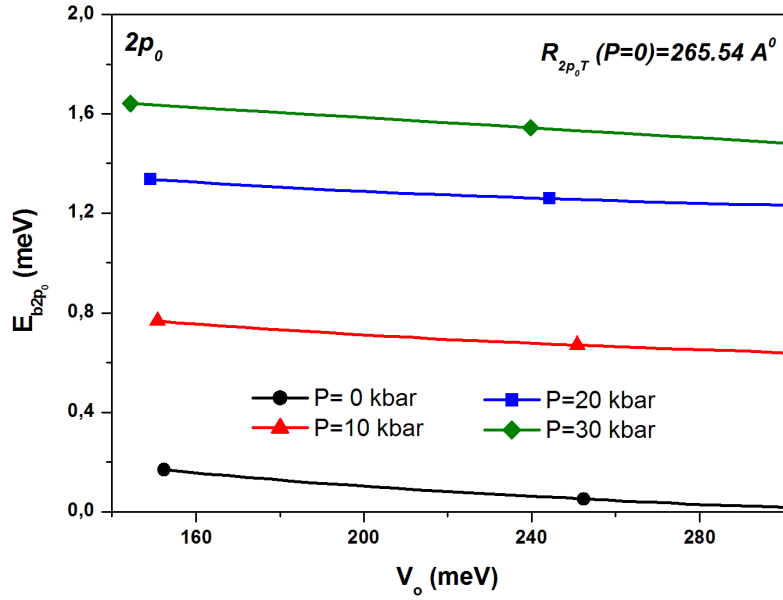


Şekil 7.4. $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktası $2p_0$ uyarılmış durum R_{2p_0T} dönüm noktasının farklı Al mol kesirleri için basınca bağlı değişimi

$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi dönüm noktası $R_{2p_0T}(x, P)$ 'nin x Alüminyum mol kesri ve hidrostatik basınca bağlılığını daha detaylı incelemek amacıyla $x = 0.2$, $x = 0.3$ ve $x = 0.4$ Alüminyum mol kesirleri için $R_{2p_0T}(x, P)$ 'nin hidrostatik basınca bağlı değişim grafiği Şekil 7.4 ile verilmiştir. Artan hidrostatik basınç değerleri ile $R_{2p_0T}(x, P)$ dönüm noktalarının küçüldüğü görülmektedir ve bu sonuç Şekil 7.2 ile verilen grafik ile tutarlıdır. Bununla birlikte x Alüminyum mol kesrinin $x = 0.2$, $x = 0.3$ ve $x = 0.4$ olarak artırılması da dönüm noktasının artmasına sebep olmaktadır. Hidrostatik basıncın küçük değerlerinde her üç eğri arasındaki fark az iken basıncın büyük değerlerinde eğriler arasındaki fark artmıştır. Bu sebeple grafik, tasarlanmak isenen $2p_0$ bağlanma enerjisi dönüm noktası için belirli bir x Alüminyum mol kesrinde basınç değişiminin daha etkili olabileceğini vurgulamaktadır.



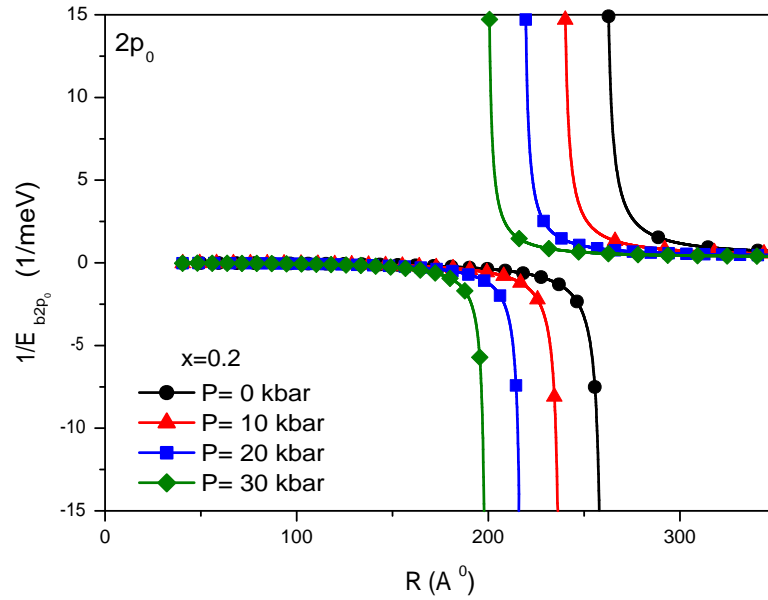
Şekil 7.5. $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktası $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin farklı Al mol kesirleri için basınca bağlı değişimi



Şekil 7.6. $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktası $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç değerleri için V_0 hapsedici potansiyele bağlı değişimi

$2p_0$ bağılı durumlar ($E_{b2p_0} > 0$) için bağlanma enerjisinin $R = 265.54 A^0$ küresel nokta yarıçapında $x = 0.2$, $x = 0.3$ ve $x = 0.4$ Alüminyum mol kesirleri için hidrostatik basınca bağılı deęişim grafięi Şekil 7.5 ile verilmiştir. Her üç eęride de artan basınç ile bağlanma enerjisinin arttığı görülür. $1s$ taban durumunda hapsedici potansiyelin (ya da x Alüminyum mol kesrinin) artırılması taban durum bağlanma enerjisinin artmasına sebep olmaktadır [101]. $2p_0$ uyarılmış durumunda ise $1s$ taban durumun aksine bağlanma enerjisi Şekil 7.3 'den de görüldüğü gibi hapsedici potansiyelin artışı ile azalmaktadır.

Hapsedici potansiyelin $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisine etkisini daha iyi ifade edebilmek adına Şekil 7.6 ile verilen $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç deęerleri için V_0 hapsedici potansiyel ile deęişim grafięi elde edilmiştir. Dört eęride de bağılı durumları ($E_{b2p_0} > 0$) incelemek için küresel nokta yarıçapı $R = 265.54 A^0$ olarak alınmıştır. Grafikten de görüldüğü gibi, artan hapsedici potansiyel ile E_{b2p_0} uyarılmış durum bağlanma enerjisi azalmıştır ve hidrostatik basıncın $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar deęerlerinde artması bağlanma enerjisinde oldukça fark edilebilir bir artışa sebep olmaktadır.



Şekil 7.7. $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi tersinin $P = 0$ kbar, $P = 10$ kbar, $P = 20$ kbar ve $P = 30$ kbar hidrostatik basınç deęerleri için küresel kuantum noktası yarıçapına bağılı deęişimi

$2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi dönüm noktası R_{2p_0T} 'nin hidrostatik basınç ile değişimini incelemek için E_{2p_0} bağlanma enerjisi tersinin $(\frac{1}{E_{2p_0}})$ küresel nokta yarıçapına bağlı değişim grafiği $x = 0.2$ Alüminyum mol kesrinde ve $P = 0\text{kbar}$, $P = 10\text{kbar}$, $P = 20\text{kbar}$ ve $P = 30\text{kbar}$ hidrostatik basınç değerleri için Şekil 7.7 'de verilmektedir. Her bir basınç değerinde negatif bağlanma enerjisinin tersi artan küresel nokta yarıçapları ile azalmakta ve $R_{2p_0T}(x = 0.2, P)$ dönüm noktalarında sonsuza gitmektedir. Dönüm noktasından büyük yarıçap değerlerinde ($R > R_{2p_0T}(x = 0.2, P)$) bağlanma enerjisinin tersi pozitifdir ve dönüm noktalarının yakınında sonsuzdur.

BÖLÜM 8

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında $GaAs/Al_{x_i,r}Ga_{1-x_i,r}As$ antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu içerisine hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektronun taban durum ve uyarılmış durum enerjileri ve diamanyetik duygunluğu kuyu genişliği, x Alüminyum mol kesri, basınç ve yabancı atom konumu gibi parametrelerin etkisinde yaklaşık çözüm yöntemlerinden biri olan varyasyon metodu ile nümerik olarak fortran programında hesaplanmıştır. Kuantum kuyusuna ek olarak m^* etkin kütleli bir elektronun taban durum ve uyarılmış durum enerjileri $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ sonlu hapsedici potansiyele sahip küresel kuantum noktası için de hesaplanmıştır.

Hesaplamalar sonucunda, antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusuna hapsedilen elektronun taban durum subband enerjisinin artan kuyu genişliği ile azaldığı görülmektedir. Bununla birlikte x Alüminyum mol kesrinin hapsedici potansiyeli büyütecek yönde artırılması taban durum subband enerjisinin de artışına sebep olmaktadır. Subband enerjisindeki bu artış kuyu genişliğinin küçük değerlerinde daha fazla hissedilirken kuyu genişliğinin büyük değerlerinde önemini yitirmektedir. Kuantum kuyusundaki yabancı atomun artan kuyu genişliği ve x Alüminyum mol kesri için $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinde subband enerjisine benzer etki görülürken $2p_0$ uyarılmış durumunda yabancı atomun bağlanma enerjisi $1s$ taban ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumlarından farklı davranmaktadır. Bazı kuyu genişliklerinde $2p_0$ uyarılmış durumunda yabancı atom bağlı olmamakta, bağlı durumlarda ise $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi $1s$ taban ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumlarının aksine artan kuyu genişliği ile artmakta, artan x Alüminyum mol kesri için azalmaktadır.

Pozitif bağlanma enerjisi bağlı durum olarak yorumlanmaktadır ve bu çalışmada $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin negatiften pozitive işaret değiştirdiği kuyu genişliği

L_{2p_0T} dönüm noktası olarak adlandırılmış, hapsedici potansiyel ve hidrostatik basınç etkisi altında incelenmiştir. Hapsediciliğin artması L_{2p_0T} dönüm noktalarının büyümesine sebep olmuştur.

Antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusunda hidrostatik basınç; kuyu genişliği, dielektrik sabit, elektronun etkin kütlesi ve hapsedici potansiyel gibi değerleri değiştirdiği bilinmekte bu sebeple bağlanma enerjilerini de etkilemesi beklenmektedir. Artan hidrostatik basınç ek bir hapsedicilik yaratarak $1s$ taban durum ve $2p_0, 2p_{\pm}$ uyarılmış durum bağlanma enerjilerinin artmasına sebep olmuştur. Bununla birlikte $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisi L_{2p_0T} dönüm noktasının da artan hidrostatik basınç ile küçük değerler aldığı ve yabancı atomun daha küçük kuyu genişliklerinde bağlı duruma geçtiği görülmüştür.

Antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusunda bulunan bir yabancı atomun $1s$ taban durum ve $2p_0, 2p_{\pm}$ uyarılmış durumları için diamanyetik duygunluk hesap edilmiştir. Diamanyetik duygunluğun artan kuyu genişliği ile azaldığı ve $L \rightarrow \infty$ limitinde bulk değerine ulaştığı görülmüştür. Diamanyetik duygunluğa x Alüminyum mol kesrinin etkisi incelenmiş, $1s$ taban durum ve $2p_0, 2p_{\pm}$ uyarılmış durumlarda Alüminyum mol kesrinin artışının diamanyetik duygunluğu artırdığı sonucu grafiklerden okunmuştur.

Antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu hidrostatik basınç etkisi altında iken $1s$ taban durum ve $2p_0, 2p_{\pm}$ uyarılmış durumları için diamanyetik duygunluk bağlanma enerjisine benzer şekilde artan hidrostatik basınç değerleri ile artmıştır. Diamanyetik duygunluk üzerinde incelenen bir başka etki de antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu içerisindeki yabancı atomun konumudur. Yabancı atomun kuyu merkezi ve kuyu kenarı olmak üzere iki farklı konumunda $1s$ taban durum ve $2p_0, 2p_{\pm}$ uyarılmış durum diamanyetik duygunlukları hesaplanmıştır. $1s$ taban durum ve $2p_{\pm}$ uyarılmış durumunda yabancı atom kuyu kenarında iken diamanyetik duygunluğun merkeze kıyasla azaldığı, $2p_0$ uyarılmış durumunda ise arttığı görülmüştür.

Sonlu hapsedici potansiyele sahip $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ küresel kuantum noktasına hapsedilen m^* etkin kütleli bir elektron için yapılan hesaplamalar sonucu, kuantum kuyusuna benzer şekilde $1s$ taban durum bağlanma enerjisi artan kuyu genişliği ile azalırken $2p_0$ uyarılmış durum bağlanma enerjisinin bazı küresel nokta yarıçaplarında negatif, belirli yarıçap değerlerinden sonra pozitif olduğu görülür. Küresel kuantum noktası

ile ilgili çalışmamızda $2p_0$ bağlanma enerjisinin negatiften pozitive işaret değiştirdiği R_{2p_0T} dönüm noktaları üzerine odaklandık. Dönüm noktalarından sonraki artan yarıçap değerleri ile $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi $1s$ taban durum bağlanma enerjisinin aksine artmıştır.

Hidrostatik basınç etkisi altındaki sonlu hapsedici potansiyele sahip küresel kuantum noktasında, artan hidrostatik basınç ile pozitif $2p_0$ bağlanma enerjisi artmış ve R_{2p_0T} dönüm noktaları küçük yarıçaplarda ortaya çıkmıştır. Hidrostatik basıncın yarattığı hapsedicilikten dolayı yabancı atomun daha küçük yarıçap değerlerinde bağlı duruma geçmesi beklenen bir durumdur.

Sonlu hapsedici potansiyele sahip küresel kuantum noktasındaki yabancı atomun $2p_0$ uyarılmış durumu pozitif bağlanma enerjisi antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusunda da olduğu gibi, artan x Alüminyum mol kesri ile azalmaktadır. Bununla birlikte $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi dönüm noktası R_{2p_0T} artan x Alüminyum mol kesri ile daha büyük değerler almaktadır.

Antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu ve sonlu hapsedici potansiyele sahip küresel kuantum noktası için L_{2p_0T} ile R_{2p_0T} $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi dönüm noktalarına x Alüminyum mol kesri ve hidrostatik basınç etkileri detaylı olarak incelenmiş ve belirli bir Alüminyum mol kesrinde hidrostatik basınç değişiminin daha etkili olduğu sonucuna varılmıştır. Ayrıca bu iki yapı için L_{2p_0T} ile R_{2p_0T} $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi dönüm noktaları karşılaştırılırsa; $P = 0$ hidrostatik basıncında ve $x = 0.2$ Alüminyum mol kesrinde kuantum kuyusu dönüm noktası $L_{2p_0T} = 666.62A^0$ iken küresel kuantum noktası dönüm noktası $R_{2p_0T} = 259.65A^0$ olarak bulunmuştur. $2p_0$ uyarılmış durumu bağlanma enerjisi kuantum noktasında kuantum kuyusuna göre daha küçük yarıçaplarda bağlı duruma geçmektedir. Bu durum, kuantum noktasında potansiyel engelleri ile sınırlandırma üç doğrultuda da olduğundan hapsediciliğin kuyuya göre daha fazla olmasının bir sonucudur.

Özet olarak, kuyu genişliği (ya da küre yarıçapı), x Alüminyum mol kesri, hidrostatik basınç ve yabancı atomun konumu gibi parametreler antisimetrik hapsedici potansiyele sahip kuantum kuyusu ve sonlu hapsedici potansiyele sahip küresel kuantum noktası taban durum ve uyarılmış durum yabancı atom bağlanma enerjileri üzerinde oldukça etkilidir. Bu gibi etkilerin $1s$ taban durum ve $2p_0$, $2p_{\pm}$ uyarılmış durum enerjileri için araştırılması

izinli geiş enerjilerini hesaplamaya imkan saėlamıřtır. alıřmamızın odaėını oluřturan $2p_0$ uyarılmıř durum baėlanma enerjisi dnm noktalarının nmerik olarak belirlenmesi, optik ve elektronik uygulamalar iin gerekleřtirilen deneysel alıřmalara yardımcı olabilir. Bununla birlikte, diamanyetik duygunluk ile ilgili hesaplamalarımız da dřk boyutlu yapıların manyetik uygulamalarına katkı saėlayabilir. alıřmamızı ileriye tařımak adına elektrik alan, manyetik alan, sıcaklık gibi etkiler altında taban durum ve uyarılmıř durum enerjileri hesaplanabilir. Benzer řekilde $2p_0$ uyarılmıř durum dnm noktası bu etkiler altında incelenebilir ve farklı dřk boyutlu yapılara uyarlanabilir.

KAYNAKLAR

- [1] N.M. Irulayee, K.Navaneethakrisnan, *Diamagnetic susceptibility of a shallow donor in aquantum well*, Physica E, 41, 193-195, (2008).
- [2] E. Ozturk, I. Sökmen, *The effects of hydrostatic pressure on the nonlinear inter-subband transitions and refractive index changes of different QW shapes*, Optics Commun., 285, 5223-5228, (2012).
- [3] J.L. Zhu, X. Chen, *Spectrum and binding of an off-center donor in a spherical quantum dot*, Phys. Rev. B, 50, 7, 4497-4502, (1994).
- [4] D.S. Chuu, C.M. Hsiao, W.N.Mei, *Hydrogenic impurity states in quantum dots and quantum wires*, Physical Review B, 46, 7, 3898-3905, (1992).
- [5] N. Porrás-Montenegro, S.T. Perez-Merchancano, *Hydrogenic impurities in GaAs–(Ga, Al)As quantum dots*, Phys Rev B, 46, 15, 9780-9783, (1992).
- [6] C. Bose, C.K. Sarkar, *Perturbation calculation of donor states in a spherical quantum dot*, Solid State Electronics, 42, 9, 1661-1663, (1998).
- [7] G. Bastard, *Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model*, Phys Rev B, 24, 8, 4714-4722, (1981).
- [8] F.J. Ribeiro, *Impurities in a quantum dot: A comparative study*, Phys Rev B, 50, 7, 4913-4916, (1994).
- [9] J.I. Casaubon, G. Doggett, *Variational principle for a particle in a box*, J. Chem. Edu. , 77, 9, 1221-1224, (2000).
- [10] J.L. Zhu, J.J. Xiong, B.L. Gu *Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs* , Phys. Rev. B, 41, 9, 6001-6007, (1990).
- [11] C.X. Xia, S.Y. Wei, X. Zhao *Built-in electric field effect on hydrogenic impurity in wurtzite GaN/AlGa_xN quantum dot* , Applied Surface Science, 253, 5345-5348, (2007).
- [12] E. Kasapoglu, H. Sari, I. Sökmen, *Binding energies of shallow donor impurities in different shaped quantum wells under an applied electric field*, Physica B, 339, 17-22, (2003).
- [13] C. Bose, K. Midya, M.K. Bose, *Effect of conduction band non-parabolicity on the donor states in GaAs – (Ga, Al)As spherical quantum dots* , Physica E, 33, 116-119, (2006).

- [14] E. Ozturk, *Simultaneous effects of the intense laser field and the electric field on the nonlinear optical properties in GaAs/GaAlAs quantum well*, Optics Communications, 332, 136-143, (2014).
- [15] H. Akbas, C. Dane, I. Erdogan, O. Akankan, *Hydrogenic donor in asymmetric Ga_{1-x_l}Al_{x_l}As/GaAs/Ga_{1-x_r}Al_{x_r}As quantum wells*, Physica E, 60, 196-199, (2014).
- [16] I. Karabulut, U. Atav, H. Safak, M. Tomak, *Second harmonic generation in an asymmetric rectangular quantum well under hydrostatic pressure*, Physica B, 393, 133-138, (2007).
- [17] J.L. Marin, S.A. Cruz, *Enclosed quantum systems: use of the direct variational method*, J. Phys. B at Mol. Opt. Phys., 24, 2899-2907, (1991).
- [18] G. Weber *Density of states and optical-absorption spectra of shallow impurities in quantum wells under the influence of a longitudinal electric field*, Physical Review B, 41, 14, 10 043-10 048, (1990).
- [19] S. Rajashabala, R. Kannan, *Simultaneous effects of hydrostatic pressure and geometry on metal-insulator transition in a cubic quantum dot*, J. Nano- Electron. Phys., 3, 1, 1041-1047, (2011).
- [20] S.G. Jayam, K. Navaneethakrishnan, *Effect of electric field and hydrostatic pressure on donor binding energies in a spherical quantum dot*, Solid-State Communications, 126, 681-685, (2003).
- [21] S.J. Liang, W.F. Xie, *The hydrostatic pressure and temperature effects on a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot*, Eur. Phys. J. B, 81, 79-84, (2011).
- [22] A. J. Peter, K. Navaneethakrishnan, *Simultaneous effects of pressure and temperature on donors in a GaAlAs/GaAs quantum well*, Science Direct, 43, 363-71, (2008).
- [23] A. Latge, N.Porras-Montenegro, M. Dios-Leyva, L.E. Oliveira, *Intradonor absorption spectra under external fields in quantum wells*, Physical Review B, 53, 15, 10 160-10 166, (1996).
- [24] D. Ahn, S. Chuang, *Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field*, IEE Journal of Quantum Electronics, 23, 12, 2196-2204, (1987).
- [25] J. Pan, *Oscillator strengths for optical interband transitions in semiconductor quantum dots*, Physical Review B, 46, 7, 4009-4019, (1992).
- [26] A.R. Jafari, Y. Naimi, S. Davatolhagh, *Optical properties of nano-multi-layered quantum dot: oscillator strength, absorption coefficient and refractive index*, Opt. Quant. Electron., 45, 517-527, (2013).
- [27] E. Sadeghi, *Impurity binding energy of excited states in spherical quantum dot*, Physica E, 41, 1319-1322, (2009).

- [28] E. Sadeghi, G. Rezaie *Effect of magnetic field on the impurity binding energy of the excited states in spherical quantum dot*, Indian Academy of Science, 75, 4, 749-755, (2010).
- [29] A.J. Peter, *The effect of hydrostatic pressure on binding energy of impurity states in spherical quantum dots*, Physica E, 28, 225-229, (2005).
- [30] P. Nithiananthi, K. Jayakumar, *Diamagnetic susceptibility of a hydrogenic donor in low lying excited states in a quantum well*, Science Direct, 40, 174-179, (2006).
- [31] P. Nithiananthi, K. Jayakumar, *Influence of pressure on the diamagnetic susceptibility of a hydrogenic donor in some low-lying excited states in a quantum well*, International Journal of Nanoscience, 6, 1, 37-40, (2007).
- [32] A. M. Jasper, D. Reuben, K. Jayakumar, *Diamagnetic susceptibility of a hydrogenic donor in a quantum dot*, Phys. Stat. Sol. B, 243, 15, 4020-4026, (2006).
- [33] J.T. Calow, P.J. Deasley, S.J.T. Owen, P.W. Webb, *A Review of Semiconductor Heterojunctions*, Journal of Materials Science, 2, 1, 88-96, (1967).
- [34] W.R. Frensley, N.G. Einspruch, *Heterostructures and quantum devices, A volume of VLSI Electronics: Microstructure Science*, (Academic Press, San Diego, 1994).
- [35] Sadao Adachi, *Properties of Aluminium Gallium Arsenide, emis datareviews series No:7*, (INSPEC, London, 1993).
- [36] H.J. Lee, L.Y. Juravel, J.C. Woolley, A.J. SpringThorpe, *Electron transport and band structure of $Ga_{1-x}Al_xAs$ alloys*, Phys. Rev. B, 21, 2, 659-668, (1980).
- [37] J. Lopez-Gondar, J. d'Albuquerque e Castro, L.E. Oliveira, *Electric-field effects on shallow impurity states in $GaAs - (Ga, Al)As$ quantum wells*, Phys. Rev. B, 42, 11, 7069-7077, (1990).
- [38] R.B. Santiago, L.E. Oliveira, J. d'Albuquerque e Castro, *Impurity-related optical absorption from $GaAs - (Ga, Al)As$ quantum wells under an applied electric field*, Phys. Rev. B, 46, 7, 4041-4046, (1992).
- [39] F.M. Peeters, O. Hipolito, *Low dimensional semiconductor structures*, Brazilian Journal of Physics, 22, 3, 183-193, (1992).
- [40] N. Raigozaa, C.A. Duquea, E. Reyes-Gomez, L.E. Oliveira, *Effects of hydrostatic pressure and applied electric fields on the exciton states in $GaAs - (Ga, Al)As$ quantum wells*, Physica B, 367, 267-274, (2005).
- [41] R. Dingle, W. Wiegmann, C.H. Henry, *Quantum states of confined carriers in very thin $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heterostructures*, Physical Review Letters, 33, 14, 827-830, (1974).
- [42] John H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors, an introduction*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).

- [43] Z. Yan, *General thermal wavelength and its applications*, European Journal of Physics, 21, 6, 625-631, (2000).
- [44] Mark Fox, Radu Ispasoiu, *Quantum wells, superlattices, and band-gap engineering*, (Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, Verlag US, 2007).
- [45] M. Bugajski, K. Reginski, *Optical properties of semiconductor quantum wells*, Opto-Electr. Rev. , 4, 3, 83-100, (1996).
- [46] Norman E. Hurt, *Mathematical physics of quantum wires and devices*, (Kluwer Academic Publishers, USA, 2000).
- [47] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, *Quantum dot heterostructures*, (John Wiley & Sons, England, 1999).
- [48] David J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics* (Pearson Prentice Hall, Wesley, 2004).
- [49] J.S. Briggs, J.M. Rost, *On the derivation of time dependent equation of Schrödinger*, Foundation of Physics, 31, 4, 693-712, (2001).
- [50] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-Relativistic theory. vol:3* (Pergamon Press, Oxford, 1977).
- [51] Wolfgang Schweizer, *Numerical quantum dynamics*, (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002).
- [52] F.S. Levin, *An introduction to quantum theory*, (Cambridge University Press, United Kingdom, 2002).
- [53] Charles Kittel, *Introduction to solid state physics, 8th edition*, (John Wiley & Sons, New York, 2005).
- [54] Chihiro Hamaguchi, *Basic semiconductor physics*, (Springer, Heidelberg, 2001).
- [55] Sadao Adachi, *GaAs and related materials*, (World Scientific, Singapore, 1994).
- [56] Marius Grundmann, *The physics of semiconductors, 2nd edition*, (Springer, Heidelberg ,2010).
- [57] U. Ekenberg, *Nonparabolicity effects in a quantum well: sublevel shift, parallel mass, and Landau levels*, Phys Rev B, 40, 11, 7714-7726, (1989).
- [58] Paul Harrison, *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor and nanostructures, 2nd edition*, (John Wiley & Sons, England, 2005).
- [59] A.R. Jeice, Sr.G. Jayam, K.S.J. Wilson, *Effect of temperature and conduction band non-parabolicity on electronic states in a spherical quantum dot*, Indian Journal of Advances in Chemical Science, 3, 2, 185-191, (2015).
- [60] S. Rajashabala, K. Navaneethakrishnan, *Pressure effects on the spin-orbit interactions in low-dimensional quantum well systems*, Physica E, 40, 843-848, (2008).

- [61] K. Jayakumar, S. Balasubramanian, M. Tomak, *Low-lying excited states of a hydrogenic donor and resonant states in a quantum well*, Phys Rev B, 34, 12, 8794-8799, (1986).
- [62] D.F. Nelson, R.C. Miller, D.A. Kleinman, *Band nonparabolicity effects in semiconductor quantum wells*, Phys Rev B, 35, 14, 7770-7773, (1987).
- [63] K.H. Yoo, L.R. Ram-Mohan, D.F. Nelson, *Effect of nonparabolicity in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs semiconductor quantum wells*, Phys Rev B, 39, 17, 12808-12813, (1989).
- [64] P. Csavinszky, A.M. Elabsy, *Effect of the nonparabolicity of the GaAs conduction band on the binding energy of off-center hydrogenic donors in a Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum well*, International Journal of Quantum Chemistry: Quantum Chemistry Symposium, 34, S22, 25-31, (1988).
- [65] G. Safarpour, M. Moradi, M.A. Izadi, M. Novzari, E. Niknam, *The effect of conduction band nonparabolicity on binding energy of a GaAs quantum dot embedded at the center of a Ga_{1-x}Al_xAs nano-wire*, Iranian Journal of Science & Technology, 39, A3, 253-258, (2015).
- [66] C. Rajamohan, A.M.D. Reuben, P. Nithiananthi, K. Jayakumar, *Shape effect of diamagnetic susceptibility of a hydrogenic donor in a nano structured semiconductor systems*, J. Math. Chem. , 44, 743-748, (2008).
- [67] A.R. Jeice, K. Navaneethkrishanan, *Correlation energy in a triplet state of a two electron spherical quantum dot*, Braz. J. Phys., 39, 3, 526-530, (2009).
- [68] A.M. Elabsy, P. Csavinszky, *Effect of nonparabolicity of the GaAs conduction band on the binding energy of a hydrogenic donor in a GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum dot*, Journal of Mathematical Chemistry, 16, 1, 309-313, (1994).
- [69] Y. Li, O. Voskoboynikov, C.P. Lee, S.M. Sze, *Computer simulation of electron energy levels for different shape InAs/GaAs semiconductor quantum dots*, Computer Physics Communications, 141, 1, 66-72, (2001).
- [70] S. Chaudri, K.K. Bajaj, *Effect of nonparabolicity on the energy levels of hydrogenic donors in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well structures*, Phys Rev B, 29, 4, 1803-1806, (1984).
- [71] S. Rajashabala, R. Kannan, *Theoretical investigation on the oscillator strengths of electric dipole transitions in a spherical quantum dot with hydrogenic donor impurity*, International Journal of Nanoscience, 11, 2, 1250020-1250024, (2012).
- [72] Richard L. Liboff, *Introductory quantum mechanics, 4th edition*, (Addison-Wesley, USA, 2002).
- [73] Wolfgang Demtröder, *Atoms, molecules and photons, an introduction to atomic-,molecular- and quantum-physics*, (Springer, Verlag Berlin Heidelberg, 2006).

- [74] Kwong-Tin Tang, *Mathematical methods for engineers and scientists 3*, (Springer, Verlag Berlin Heidelberg, 2007).
- [75] S. Yilmaz, H. Safak, *Oscillator strenghts for the intersubband transitions in a CdS – SiO₂ quantum dot with hydrogenic impurity*, Physica E, 36, 40-44, (2007).
- [76] Y.P. Varshni, *Accurate wavefunctions for the hydrogenic donors in GaAs – (Ga, Al)As quantum dots*, Physics Letters A, 252, 248-250, (1999).
- [77] H.A. Kassim, *Study of shallow donor level binding energies confined in a GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs spherical quantum dot*, Journal of Physics: Condensed Matter, 19, 036204-036217, (2007).
- [78] I.F.I. Mikhail, I.M.M. Ismail, *Hydrogenic impurity in a quantum dot: Comparison between the variational and strong perturbation methods*, Superlattices and Microstructures, 48, 388-400, (2010).
- [79] George Arfken, *Mathematical methods for physicists, 3rd edition*, (Academi Press INC, London, 1985).
- [80] H.E. Ghazi, A. Jorio, *Excited states of hydrogenic-like impurities in InGaN – GaN spherical QD: Electric field effect*, Physica B, 430, 81-83, (2013).
- [81] I. Karabulut, U. Atav, H. Safak, M. Tomak, *Theoretical investigation of intersbband nonlinear optical rectification in Ga_{1-x₁}Al_{x₁}As/GaAs/Ga_{1-x_r}Al_{x_r}As asymmet-ric rectangular quantum wells*, Phys. Stat. Sol. b, 244, 9, 3313-3324, (2007).
- [82] R.L. Greene, K.K. Bajaj, *Binding energy of 2p₀ -like level of a hydrogenic donor in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well structures*, Physical Review B, 31, 6, 4006-4008, (1985).
- [83] A. Latge, N.P. Montenegro, L.E. Oliveira, *Infrared transitions between hydrogenic states in cylindrical GaAs – (Ga, Al)As quantum well-wires*, Physical Review B, 45, 16, 9420-9423, (1992).
- [84] J. Cen, K.K. Bajaj, *Effects of electric and magnetic fields on confined donor states in a dielectric quantum well*, Physical Review B, 48, 11, 8061-8067, (1993).
- [85] R.L. Greene, K.K. Bajaj, *Effect of magnetic field on the energy levels of a hydro-genic impurity center in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well structures*, Physical Review B, 31, 2, 913-918, (1985).
- [86] P.V. Villamil, N.P. Montenegro, *Excited states anti infrared transition energies of a donor impurtiy in a disc shape GaAs quantum dot under the action of an applied magnetic field*, J. Phys: Condens. Matter, 11, 48, 9723-9730, (1999).
- [87] C. Dane, H. Akbas, S. Minez, S. Minez, A. Guleroglu, *Simultaneous effect of elec-tric and magnetic filed in a GaAs/AlAs spherical quantum dot with a hydrogenic impurity*, Physica E, 42, 1901-1904, (2010).

- [88] C. Dane, H. Akbas, S. Minez, S. Minez, A. Guleroglu, K. Kasapoğlu, *The hydrostatic pressure and electric field effects on the normalized binding energy of a hydrogenic impurity in a GaAs/AlAs spherical quantum dot*, Physica E, 44, 186-189, (2011).
- [89] I.Erdoğan, O.Akankan, H. Akbaş, *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).
- [90] E. Kasapoglu, F. Ungan, H. Sari, I. Sökmen, *The diamagnetic susceptibilities of donors in quantum wells with anisotropic effective mass*, Superlattices and Microstructures, 46, 817-822, (2009).
- [91] E. Kilicarslan, S. Sakiroglu, M. Koksal, H. Sari, I. Sökmen, *The effects of magnetic field and dielectric screening on the diamagnetic susceptibility of a donor in a quantum well with anisotropic effective mass*, Physica E, 42, 1531-1535, (2010).
- [92] S. Rajashabala, K. Navaneethakrishnan, *Effect of dielectric screening and position dependent effective mass on donor binding energies and on diamagnetic susceptibility in a quantum well*, Science Direct, 43, 247-261, (2008).
- [93] P. Nithiananthi, K. Jayakumar, *Diamagnetic susceptibility of a hydrogenic donor impurity in low-dimensional semiconducting systems*, Science Direct, 137, 427-430, (2006).
- [94] P. Nithiananthi, K. Jayakumar, *Effect of $\Gamma - X$ band crossover and impurity location on the diamagnetic susceptibility of a donor in a quantum well*, Science Direct, 138, 305-308, (2006).
- [95] H. Akbas, P. Bulut, C. Dane, Y. Skarlatos, *The diamagnetic susceptibility of a hydrogenic donor in two-dimensional semiconductors with anisotropic effective mass of carriers*, Superlattices and Microstructures, 51, 455-461, (2012).
- [96] I.F.I. Mikhail, I.M.M. Ismail and M.M. El Shafee, *Spin-orbit interaction in a spherical quantum dot*, Acta Physica Polonica A, 125, 5, 1197-1205, (2014).
- [97] B.H. Bransden, C.J. Joachain *Quantum mechanics*, (Pearson, Harlow, 2000).
- [98] R.S.D. Bella, K. Navaneethakrishnan, *Donor binding energies and spin orbit coupling in a spherical quantum dot*, Solid State Commun., 130, 773-776, (2004).
- [99] A. Ozmen, Y. Yakar, B. Çakır, U. Atav, *Computation of the oscillator strength and absorption coefficients for the intersubband transitions of the spherical quantum dot*, Optics Commun., 282, 3999-4004, (2009).
- [100] P. Bulut, I. Erdogan, H. Akbas, *Binding energy of 2p-bound state of a hydrogenic donor impurity in a GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs spherical quantum dot under hydrostatic pressure*, Physica E, 63, 299-303, (2014).
- [101] A.J. Peter, K. Navaneethakrishnan, *Hydrogenic donor in a spherical quantum dot with different confinements*, Chin. Phys. Lett., 26, 8, 087302/1 - 087302/4, (2009).

ÖZGEÇMİŞ

1987 yılında Tekirdağ'da dünyaya geldim. Lisans eğitimimi Trakya Üniversitesi Fizik Bölümünde 2009 yılında tamamladım. 2010 yılında Namık Kemal Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nde araştırma görevlisi olarak çalışmaya başladım. Aynı yıl Namık Kemal Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında başladığım yüksek lisans eğitimimden 2012 yılında mezun oldum ve Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında doktora eğitimine başladım. Hala Namık Kemal Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nde araştırma görevlisi olarak çalışmaktayım.

TEZ İLE İLGİLİ BİLİMSEL FAALİYETLER

SCI (Science Citation Index), SSCI (Social Science Citation Index), AHCI (Arts and Humanities Citation Index) tarafından taranan dergilerde yayımlanan teknik not, editöre mektup, tartışma, vaka takdimi ve özet türünden yayınlar dışındaki makaleler:

P. Bulut, I. Erdogan, H. Akbas, *Binding energy of 2p-bound state of a hydrogenic donor impurity in a GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs spherical quantum dot under hydrostatic pressure*, Physica E, 63, 299-303, (2014).

Uluslararası kongre, sempozyum, panel gibi bilimsel toplantılarda sunulacak, programda yer alan özet metin olarak yayınlanan bildiri ya da poster veya gösteri:

P. Bulut, I. Erdogan, H. Akbas, *Binding energy of a hydrogenic donor impurity in a GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum well and spherical quantum dot under hydrostatic pressure*, 9th International Physics Conference of the Balkan Physical Union, 2015, Istanbul/Turkey.

H. Akbas, P. Bulut, C. Dane, *The energy levels, binding energies, and dipole moment in a GaAs/AlAs spherical quantum dot as function of the donor position*, I. International Eurasian Conference on Mathematical Sciences and Applications, 2012, Prishtine/Kosova.