KUANTUM NOKTALARININ SONLU FARKLAR YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMÜ

Yaşam SAFTEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
Danışman: Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ
Edirne-2007

T.C
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM NOKTALARININ SONLU FARKLAR YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMÜ

Yaşam SAFTEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ

EDİRNE-2007

T.C
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM NOKTALARININ SONLU FARKLAR YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMÜ

Yaşam SAFTEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 7 Haziran 2007 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

Yrd. Doc. Dr. Şaban AKTAŞ	**Yrd. Doc. Dr. Mustafa ULAŞ**	**Yrd. Doc. Dr. Erdem UÇAR**
DANIŞMAN	**ÜYE**	**ÜYE**

ÖZET

Bu çalışmada, teknolojik uygulamalarda önemli yer tutan düşük boyutlu yapıların fiziksel özellikleri incelenmiştir. Temel olarak $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu ve noktalarına hapsedilen bir elektronun özellikleri incelenmiştir. Son zamanlarda bu yapıların çözümlerinde sonlu farklar yöntemi kullanılmaya başlanmıştır. Bundan dolayı bu çalışmada sonlu farklar yönteminin düşük boyutlu yapılara nasıl uygulanacağını gösterdik.

Hesaplamalarda efektif kütle yaklaşımı kullanılmıştır. Sonsuz ve sonlu kare kesitli kuantum kuyularının çözümünde ortaya çıkan diferansiyel denklemler analitik , Runge-Kutta ve Sonlu Farklar yöntemiyle çözülmüştür. Taban durum enerjileri hesaplanmış ve karşılaştırılmıştır.

Değişik kesitli kuantum kuyularının taban durumları incelenmiştir. Sisteme elektrik alan uygulandığında ve yabancı atom konulduğunda taban durum enerjileri kuantum kuyu genişliğine bağlı olarak incelenmiştir.

Daha sonra küresel kuantum noktasının çözümü araştırılarak enerji seviyeleri hesaplanmıştır. Bu sisteme yabancı atom konulduğunda ve değişik manyetik alan altında enerji seviyelerindeki değişim incelenmiştir. Son olarak da bu sistemin bağlanma enerjisi bulunmuştur.

SUMMARY

In this work, physically properties of low dimensional structures, which have a great importance in technological applications, are investigated. Basically the properties of an electron confined in the $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum well and quantum dots are investigated. At recent times, using finite difference methods starts for the solutions of these structures. For that reason we showed how the finite difference methods will applicate on low dimensional structures in this work.

The calculations are performed using the effective mass approximation. The differential equations which appeared due to solutions of finite and infinite square cross sectioned quantum well, are solved by analytic, Runge Kutta and finite difference methods. The ground state energies are calculated and compared.

The ground states of different cross sectioned quantum wells are investigated. We investigated the ground state energies of the system due to width of quantum wells when impurity and electric field effects on the system.

And then solution of spherical quantum dot is investigated and energy levels are calculated. We investigated changing of the energy levels under impurity and different magnetic fields affect on the system. At last we found binding energy of this system.

TEŞEKKÜR

Bu çalışmayı gerçekleştirebilmem için bana imkan sağlayıp, tez yöneticiliğini üstlenen, çalışmamın her aşamasında yol gösteren, teşvik ve yardımlarını esirgemeyen, elindeki tüm imkanları sınırsız olarak sunan değerli hocam Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ'a teşekkürlerimi sunmayı zevkli bir görev sayarım.

Bu çalışma süresince gerekli olan tüm imkanları sağlayan Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Hasan AKBAŞ'a, çalışmam boyunca yardımlarını esirgemeyen Yrd. Doç. Dr. Figen BOZ'a ve Öğr. Gör. Abdullah BİLEKKAYA'ya teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca bu tez Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Müdürlüğü tarafından TÜBAP-754 nolu projeyle desteklenmiştir. Trakya Üniversitesi Araştırma Projeleri Müdürlüğüne katkılarından dolayı teşekkür ederiz.

Her zaman yanımda olan ve desteğini esirgemeyen aileme ve arkadaşlarıma sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖZET……i
SUMMARY…….....ii
TEŞEKKÜR……....iii
İÇİNDEKİLER....……...……iv
ŞEKİLLERİN LİSTESİ…...……...……vi
BÖLÜM 1: GİRİŞ……..……1

BÖLÜM 2: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARDA ÇÖZÜMLER……..……6

2.1. Kuantum Kuyularının Oluşturulması……...……...6
2.2. Kuantum Kuyusunun Çözümü…...…….7
2.3. Küresel Simetrik Potansiyelde Kuantum Noktasının İncelenmesi...……15

BÖLÜM 3: SONLU FARKLAR YÖNTEMİ……...……...23
3.1. Diferansiyel Denklemlerin Nümerik Yöntemlerle Çözümü……...……..23
3.1.1. Sonlu Farklar Yöntemi……...……23
3.1.2. Fark Operatörleri……...…….24

BÖLÜM 4: SONLU FARKLAR YÖNTEMİNİN KUANTUM KUYU VE NOKTASINA UYGULANIŞI……..……26
4.1. Kuantum Kuyusunun Sonlu Farklar Yöntemi İle Çözümü……..26
4.1.1. Elektrik Alan Etkisi……...…….31
4.1.2. Yabancı Atom Katkısı...…….33
4.1.2.1. λ Varyasyonel Parametresinin Belirlenmesi……...…...35
4.2. Kuantum Noktasının Sonlu Farklar Yöntemi İle Çözümü..…….53

4.2.1. Küresel Kuantum Noktası İçin Sisteme Manyetik Alan Etkisi.....54
4.2.2. Sonlu Farklar Yöntemi İle Manyetik Alan Etkisinde Küresel
.Noktanın Çözümü……..…….62

SONUÇ VE TARTIŞMA……..……82
KAYNAKLAR……...……84
ÖZGEÇMİŞ……..……86

ŞEKİLLERİN LİSTESİ:

Şekil-1.1: Düşük boyutlu yapılar farklı tür yarı iletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulur. 2
Şekil-1.2: Kuantum kuyusunun bant yapısı. 2
Şekil-1.3: Tek boyutta sınırlama 3
Şekil-1.4: İki boyutta sınırlama 3
Şekil-1.5: Üç boyutta sınırlama 4
Şekil-2.1: Kuantum Kuyusunun Oluşturulması 6
Şekil-2.2: Sonlu Kuantum Kuyusu 7
Şekil-3.1: Farklar Tablosu 24
Şekil-4.1: Sonlu Farklar Yönteminde noktaların gösterimi 27
Şekil-4.2: Sonlu kuantum kuyusuna sonlu farklar yönteminin uygulanışı 28
Şekil-4.3: Sisteme yabancı atom eklediğimiz durum 33
Şekil-4.4: Sisteme elektrik alan altında yabancı atomun katkısı 33
Şekil-4.5: Sonsuz Kare Kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 38
Şekil-4.6: Sonlu Kare Kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 39
Şekil-4.7: Sonsuz kuyuda elektrik alan yokken ilk üç enerji seviyesi için dalga fonksiyonu 40
Şekil-4.8: Sonlu kare kuyuda elektrik alan yokken ilk iki enerji seviyesi için dalga fonksiyonu 41
Şekil-4.9: Parabolik kuyuda elektrik alan yokken ilk iki enerji seviyesi için dalga fonksiyonu 42
Şekil-4.10: Farklı elektrik alan etkisinde sonsuz kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 43
Şekil-4.11: Farklı elektrik alan etkisinde sonlu kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 44
Şekil-4.12: Farklı elektrik alan etkisinde parabol kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 45

Şekil-4.13: Farklı elektrik alan etkisinde sonsuz kuyu için yabancı atomlu taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 47
Şekil-4.14: Farklı elektrik alan etkisinde sonlu kuyu için yabancı atomlu taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 48
Şekil-4.15: Farklı elektrik alan etkisinde parabol kuyu için yabancı atomlu taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 49
Şekil-4.16: Farklı elektrik alan etkisinde sonsuz kuyu için yabancı atomlu taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 50
Şekil-4.17: Farklı elektrik alan etkisinde sonlu kare kuyu için yabancı atomlu taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 51
Şekil-4.18: Farklı elektrik alan etkisinde parabol kuyu için yabancı atomlu taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi 52
Şekil-4.19: Küresel Kuantum Noktası 53
Şekil-4.20: Dalga fonksiyonlarının farklar tablosu üzerindeki gösterimi 65
Şekil-4.21: Sonlu farklar yöntemiyle kuantum noktanın çözümü 74
Şekil-4.22:Yabancı atom eklenmiş durumda sonlu farklar yöntemiyle kuantum noktasının çözümü 76
Şekil-4.23:Bağlanma Enerjisi 78
Şekil-4.24:Sonlu farklar yöntemiyle manyetik alan etkili(B=5) kuantum nokta çözümü 79
Şekil-4.25: Sonlu farklar yöntemiyle manyetik alan etkili(B=10) kuantum nokta çözümü 80
Şekil-4.26: Sonlu farklar yöntemiyle manyetik alan etkili(B=20) kuantum nokta çözümü 81

BÖLÜM 1

GİRİŞ

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

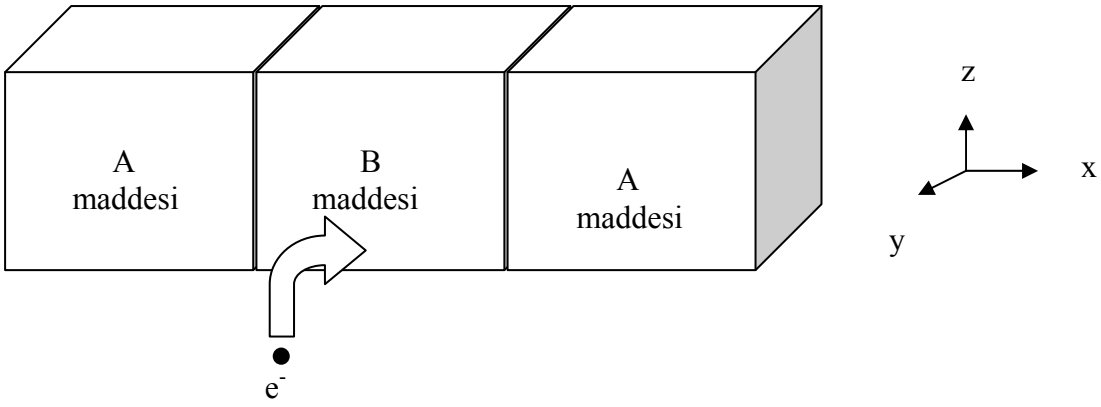
Yarı iletken yapılar, Bardeen ve Brattain tarafından 1947 yılında transistorün keşfedilmesinden bu yana çok hızlı bir şekilde gelişti. Yarı iletken bellekler bize video ve güçlü bilgisayarı getirdi. Günümüz cihazları mikron altı boyutlara küçülmüş ve bir santimetre karelik yongalar üzerine milyonlarca eleman yerleştirmeye olanak sağlamıştır. Bunlara paralel olarak, 1960'larda geliştirilen buhar fazı epitaksi (yunanca. üst üste büyütme) yönteminden yeni kristal büyütme teknolojisi yaratıldı. Bunlar sırasıyla yukarıda da bahsedildiği gibi Moleküler Demet Büyütme, Kimyasal Buhar Depolama, ve Sıvı Faz Büyütme yöntemleridir. Bu yöntemlerle, boyutları 10^{-6} cm'den daha küçük düşük boyutlu yapılar yapma olanağına kavuşuldu.(Ilaiwi ve Tomak,1990).

Bu gelişmeler ışığı altında düşük boyutlu yapı olarak tanımlanan kuantum kuyusu, kuantum kuyu teli ve kuantum noktaları üzerine birçok araştırma yapılmıştır.(Lee ve Spector, 1983; Latge vd.,1992; Ulaş vd., 1997; Latge,1996; Wang ve Berggren, 1998; De Carvalho vd., 1999; Barticevic vd., 2000; Cantele vd., 2000; Manaselyan vd. 2002).

Düşük boyutlu yapılara dışardan uygulanan bir elektrik alan elektron dağılımının bir polarizasyonuna sebep olur ve kuantum enerji durumlarını değiştirir. (Akbaş vd. 1995; Chao vd. 1995; Montes vd. 1998; Aktaş ve Boz, 2004).

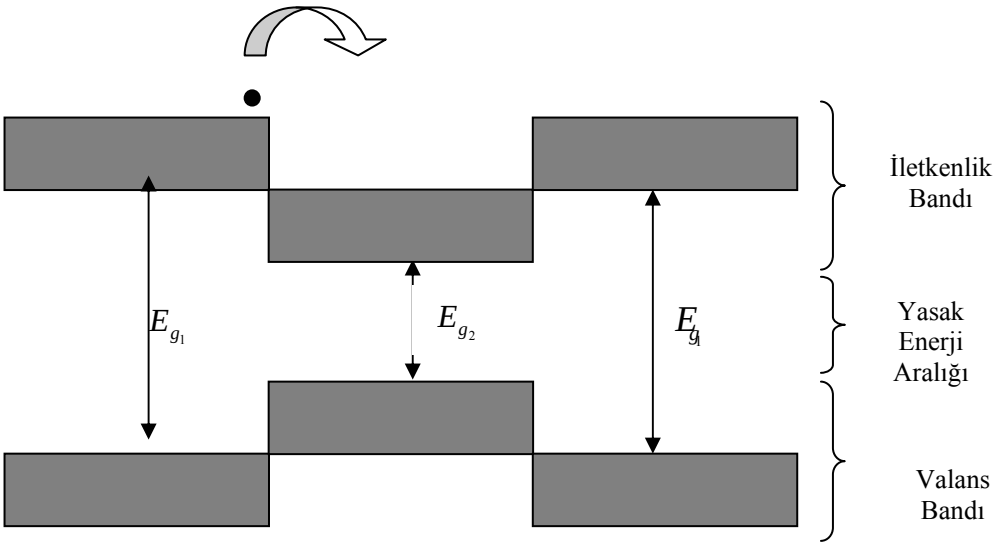
Dışarıdan uygulanan manyetik alanının düşük boyutlu yapıların elektronik özelliklerini değiştirdiği gözlendi. Manyetik alanın yarattığı bu özellik yapının kendisini

değiştirmeden elektronik özelliğini değiştirdiği için önemli bir araştırma alanıdır. (Branis vd. 1993; Riberio vd. 1998;Barticevic vd. 2000; Niculescu 2001; Sarı vd. 2004).



Şekil-1.1:Düşük boyutlu yapılar farklı tür yarı iletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulur.

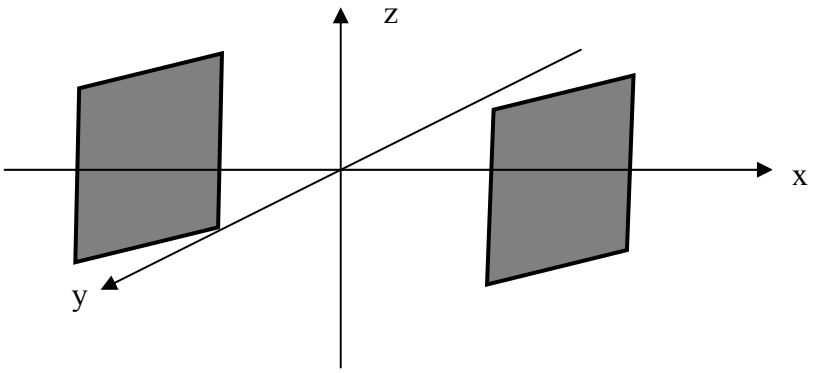
Düşük boyutlu yapılar Şekil-1.1'de gösterildiği gibi farklı tür yarı iletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulur.(C. Kittel, 1996). Şekil-1.2'de kuantum kuyusunun bant yapısı verilmiştir. Bu yapıya bir elektron eklersek, elektronlar düşük enerji seviyelerini tercih etmek isteyeceklerdir.



Şekil-1.2: Kuantum kuyusunun bant yapısı.

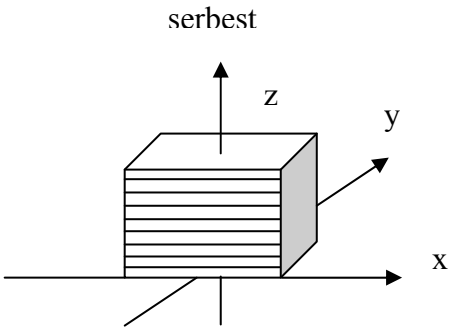
Kuantum kuyusunda serbest elektron hareketi Şekil-1.3'de görüldüğü gibi x yönünde sınırlanmıştır. y ve z yönlerinde ise serbesttir.

Serbest elektronun hareketi, oluşturulacak potansiyel duvarlar yardımı ile sınırlandırılabilir.



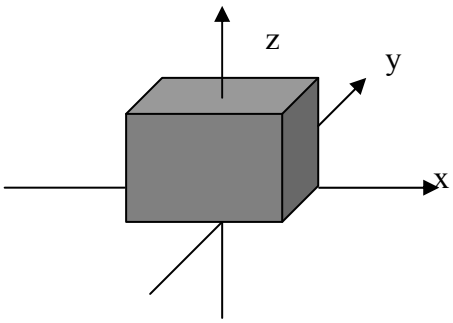
Şekil-1.3: Tek boyutta sınırlama

Şekil-1.4'te gösterildiği gibi elektron hareketi iki boyutta sınırlandırılırsa kuantum teli elde edilmiş olur.



Şekil-1.4: İki boyutta sınırlama

Bir elektronun hareketini Şekil-1.5'teki gibi üç boyutta sınırlarsak kuantum noktasını elde ederiz.



Şekil-1.5: Üç boyutta sınırlama

Bu çalışmada yukarıda tanımlamış olduğumuz düşük boyutlu yapılardan değişik kesitli kuantum kuyusunu ve kuantum noktasını ele alıyoruz. Amacımız daha önce varyasyon, Runge-Kutta gibi nümerik yöntemlerle çözülen bu sistemleri bilgilerimize göre ilk defa bizim tarafımızdan çalışılan farklı bir nümerik yöntem olan sonlu farklar yöntemiyle çözmektir.

İşlemlerimizi yaparken başlangıçta sonsuz ve sonlu kare kesitli kuantum kuyusunun taban durum enerjisi ile kuyu genişliği değişimini 4. mertebe Runge-Kutta nümerik yöntemiyle sonlu farklar yöntemini kullanarak karşılaştırdık. Sonuçlarımızın uyumlu çıktığı görülmüştür. Daha sonra sonlu farklar yöntemini kullanarak değişik kesitli kuantum kuyularında yabancı atom ve elektrik alan varken ve yokken taban durum enerjilerini inceledik.

İkinci olarak da kuantum noktasını sonlu farklar yöntemini kullanarak ele aldık. Burada ise sonlu kuantum noktasının taban durum enerjisi, birinci, ikinci ve üçüncü uyarılmış durumlarını kuantum noktasının yarıçapına bağlı olarak inceledik.

Daha sonra yine sonlu farklar yöntemini kullanarak kuantum noktasının yabancı atom ve manyetik alan varkenki taban durum enerjisi, birinci, ikinci ve üçüncü uyarılmış durumlarını nokta genişliği değişimine göre inceledik.

Son olarak da her iki yapıda da sisteme yabancı atom katılmasıyla, bağlanma enerjilerinin nokta genişliğinin değişimine göre davranışlarını inceledik.

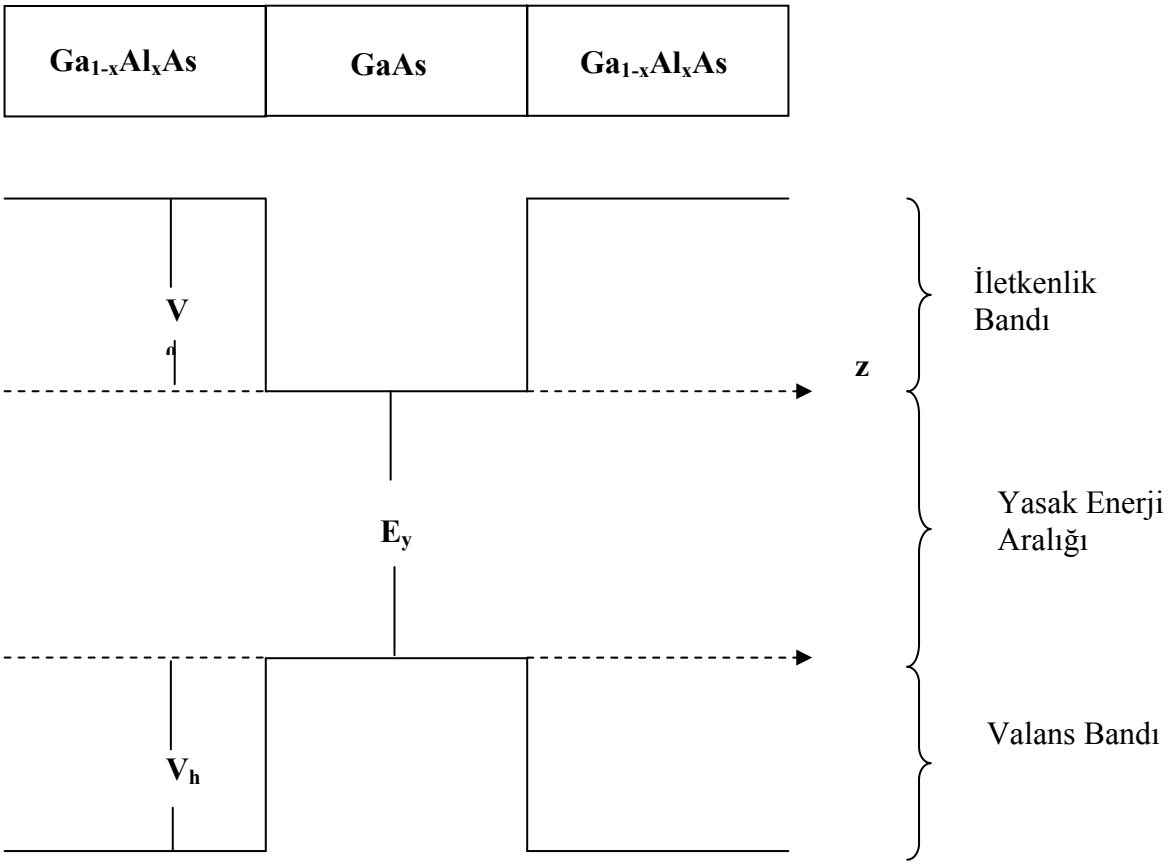
Bu tezdeki nümerik hesaplarda, Fortran 77 programlama dilinde kendi yaptığımız programlar kullanılmıştır.

BÖLÜM 2

DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARDA ÇÖZÜMLER

2.1 KUANTUM KUYULARININ OLUŞTURULMASI

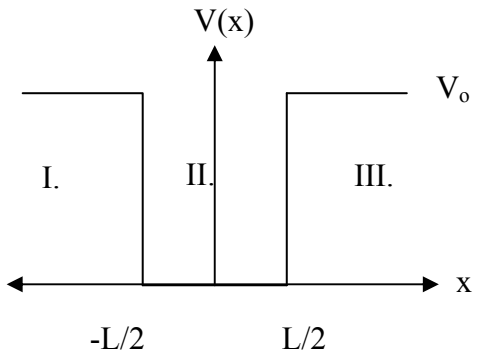
$Ga_{1-x}Al_xAs$ ve GaAs malzemeleriyle bir yapı oluşturulduğunda, oluşan yapı için 'z' yönündeki potansiyel değişimi aşağıdaki gibi olur. Buradaki 'x' ifadesi yapının oluştuğu malzemelerin (Ga,Al) oranını belirler. Yani bir malzeme diğerine göre yüzde kaç daha fazla veya daha az olacaktır. Buradaki 'x' malzemede bulunan alüminyum miktarını belirler.(Erdoğan İ., 1997)



Şekil-2.1 Kuantum Kuyusunun Oluşturulması

2.2 KUANTUM KUYUSUNUN ÇÖZÜMÜ

Kuantum kuyusunda bir elektronun hareketini incelerken Schrödinger dalga denkleminin çözümünü kullanıyoruz. Parçacığın hapsedildiği potansiyel duvarın yüksekliğine göre sonlu kuantum kuyusu ve sonsuz kuantum kuyusu oluşmaktadır. İlk olarak sonlu kuantum kuyusu incelenecektir.



Şekil-2.2 Sonlu Kuantum Kuyusu

Potansiyel fonksiyonu,

$$V(x)=\begin{cases} V_0 & -\infty < x < -L/2 \\ 0 & -L/2 \le x \le L/2 \\ V_0 & L/2 < x < +\infty \end{cases} \tag{2.1}$$

olarak tanımlanır. Dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerleri,

$$\psi(x,y,z)=\psi(x)\psi(y)\psi(z)$$
$$\mathrm{E}=\mathrm{E}_x+\mathrm{E}_y+\mathrm{E}_z \tag{2.2}$$

formundadır.

Burada y ve z boyutlarında herhangi bir sınırlama yapılmıyor. Sadece x boyutunda sınırlama yapıldığından V(y)=0 V(z)=0 olacaktır (Karaoğlu vd., 1993). Bunları göz önüne alarak hamilton fonksiyonunu ve Schrödinger denklemini yazarsak,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}) \tag{2.3}$$

Rydberg birim sistemine göre yazarak düzenlersek, burada $1R^*$=5,83meV a^*=98,7A^o=1a^* ve $\frac{\hbar^2}{2m^*} = R^* a^{*2}$ şeklindedir.

$$(-\nabla^2 + V)\psi(x,y,z) = E_T\psi(x,y,z) \tag{2.4}$$

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\right]\psi(x,y,z) = (E_x+E_y+E_z)\psi(x,y,z) \tag{2.5}$$

$$V(x,y,z) = V(x)+V(y)+V(z) \tag{2.6}$$

(2.5) denklemini elde ederiz. x ,y ve z boyutlarında Schrödinger denklemlerini düzenlersek,

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x) = E_x\psi(x) \tag{2.7}$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2}+0\right]\psi(y) = E_y\psi(y) \tag{2.8}$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2}+0\right]\psi(z) = E_z\psi(z) \tag{2.9}$$

denklemlerini elde etmiş oluruz. Denklem (2.8)'i inceleyecek olursak,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+E_y\right)\psi(y) = 0 \tag{2.10}$$

Burada $E_y = k_y^2$ ve $D^2 = \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ dönüşümleri yapılırsa (Karaoğlu vd., 1993).,

$$\left(D^2 + k_y^2\right)\psi(y) = 0 \tag{2.11}$$

$$\left(D^2 + k_y^2\right) = 0 \qquad \psi(y) \neq 0$$

$$D_{1,2} = \pm i k_y \tag{2.12}$$

$$\begin{aligned} &\psi(y) = Ae^{-ik_y y} + Be^{ik_y y} \\ &\psi(y) = (A+B)\cos(k_y y) + (B-A)i\sin(k_y y) \\ &A + B = A' \qquad (B-A)i = B' \\ &E_y = k_y^2 \end{aligned} \tag{2.13}$$

$\psi(y)$ 'yi düzenlersek,

$$\psi(y) = A'\cos(k_y y) + B'\sin(k_y y) \tag{2.14}$$

biçimindeki $\psi(y)$ dalga fonksiyonunu elde ederiz. Aynı işlemleri denklem (2.9) için tekrarlarsak,

$$\begin{aligned} &\psi(z) = Ce^{-ik_z z} + De^{ik_z z} \quad \text{serbest parçacık} \\ &E_z = k_z^2 \end{aligned} \tag{2.15}$$

$\psi(z)$ 'yi düzenlersek,

$$\psi(z) = C'\cos(k_z z) + D'\sin(k_z z)$$

dalga fonksiyonunu elde ederiz.

(2.7) denkleminin çözümünü incelersek,

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x) = E_x\psi(x) \tag{2.16}$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) - E_x\psi(x) = 0 \tag{2.17}$$

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} - V(x)\psi(x) + E_x\psi(x) = 0 \tag{2.18}$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} - (V(x) - E)\right]\psi(x) = 0 \tag{2.19}$$

$\psi(x)$ dalga fonksiyonu sıfır olamayacağından parantez içindeki ifade sıfır olmalıdır.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} - (V(x) - E) = 0$$

$$\psi(x) \neq 0 \tag{2.20}$$

Burada $(V(x) - E)$ pozitif olmalıdır.

V_o>E olduğunda

I. Bölge;

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} - (V_o - E) = 0 \tag{2.21}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = (V_o - E) \tag{2.22}$$

$(V_o - E) = k_x^2$ ve $D^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ dönüşümü yapılırsa

$$D_{1,2} = \pm k_x \tag{2.23}$$

$$\psi_1(x) = Ae^{k_x x} + Be^{-k_x x} \tag{2.24}$$

$-\infty$ 'da yansıyan dalga olmadığından B=0 olmalıdır,

I. bölge dalga fonksiyonu

$$\psi_1(x) = Ae^{k_x x} \tag{2.25}$$

şeklindedir. Burada $k_x = \sqrt{V_o - E_x}$ eşitliği kullanılmıştır.

II.Bölge;

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} - (V(x) - E_x) = 0 \tag{2.26}$$

$-L/2 < x < L/2$ aralığında potansiyelin $V(x) = 0$ olması nedeniyle

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_x = 0 \tag{2.27}$$

Burada $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = D^2$ ve $E_x = \alpha_x^2$ dönüşümleri yapılırsa,

$$D_{12} = \pm i\alpha_x \tag{2.28}$$

II. bölge çözümü ise,

$$\psi_2(x) = Ce^{-i\alpha_x x} + De^{i\alpha_x x}$$

$$\psi_2(x) = C' \cos\alpha_x x + D' \sin\alpha_x x \tag{2.29}$$

şeklinde olup α_x ifadesi $\alpha_x = \sqrt{E_x}$ şeklindedir.

III. Bölge;

III. Bölgenin çözümü I. Bölgeye benzer olduğundan,

$$\psi_3(x) = Ee^{k_x x} + Fe^{-k_x x} \tag{2.30}$$

şeklinde yazılabilir.

Bu bölgedeki dalga fonksiyonu $+\infty$'a giderken sonsuzdan yansıyan dalga olmaması nedeniyle E=0 olur (Karaoğlu vd., 1993)..

III. bölge çözümü ise,

$$\psi_3(x) = Fe^{-k_x x} \tag{2.31}$$

şeklindedir. Burada $k_x = \sqrt{V_0 - E_x}$ olarak yazılmıştır.

I.,II. ve III. bölgeler için tüm çözümleri yeniden yazarsak,

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} & ; \quad \text{I.Bölge} \\ C^{'}\cos\alpha x + D^{'}\sin\alpha x & ; \quad \text{II.Bölge} \\ Fe^{-kx} & ; \quad \text{III.Bölge} \end{cases} \tag{2.32}$$

$$\begin{aligned} &\psi(y) = A'\cos(k_y y) + B'\sin(k_y y) \\ &E_y = k_y^2 \end{aligned} \tag{2.33}$$

$$\begin{aligned} &\psi(z) = C'\cos(k_z z) + D'\sin(k_z z) \\ &E_z = k_z^2 \end{aligned} \tag{2.34}$$

dalga fonksiyonlarını bulmuş oluruz. A,B,C,D katsayılarını belirlemek için sınır şartlarını uygularız:

Sınır şartları:

$$\begin{aligned} &\psi_1(x) = \psi_2(x) \qquad \psi_2(x) = \psi_3(x) \\ &\psi_1^{'}(x) = \psi_2^{'}(x) \qquad \psi_2^{'}(x) = \psi_3^{'}(x) \end{aligned} \tag{2.35}$$

$$\alpha = \sqrt{E} \tag{2.36}$$

$$k = \sqrt{V_0 - E} \tag{2.37}$$

$$\alpha^2 + k^2 = V_0 \tag{2.38}$$

Beş bilinmeyen (A,B,C,D,E) beş denklem olduğu için daima çözüm vardır.

$$\begin{aligned} & k^2 + \alpha^2 = V_0 \\ & \alpha \tan(\frac{\alpha L}{2}) = k \\ & \sqrt{E} \tan(\frac{\sqrt{E}L}{2}) = \sqrt{V_0 - E} \end{aligned} \tag{2.39}$$

$$\begin{aligned} & k^2 + \alpha^2 = V_0 \\ & -\alpha \cot(\frac{\alpha L}{2}) = k \\ & -\sqrt{E} \cot(\frac{\sqrt{E}L}{2}) = \sqrt{V_0 - E} \end{aligned} \tag{2.40}$$

(2.39) denkleminden uzun işlemler sonucunda E tespit edilir.

Bu çalışmada ise farklı kesitli kuantum kuyuları incelenmiştir. Potansiyel formları aşağıdaki gibidir.

Sonsuz kare kuantum kuyusu:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & -\infty < x < -L/2 \\ 0 & -L/2 \le x \le L/2 \\ \infty & L/2 < x < +\infty \end{cases} \tag{2.41}$$

Sonlu kare kesitli kuantum kuyusu:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -\infty < x < -L/2 \\ 0 & -L/2 \le x \le L/2 \\ V_0 & L/2 < x < +\infty \end{cases} \tag{2.42}$$

Parabol kesitli kuantum kuyusu:

$$V(x)=\begin{cases} V_0 & -\infty < x < -L/2 \\ \dfrac{4V_0}{L^2}x^2 & -L/2 \le x \le L/2 \\ V_0 & L/2 < x < +\infty \end{cases} \tag{2.43}$$

Daha sonraki bölümlerde bu farklı kesitli kuantum kuyuları için kullanılan metot ve çözümler verilmiştir.

2.3 KÜRESEL SİMETRİK POTANSİYELDE KUANTUM NOKTASININ İNCELENMESİ

3 boyutlu uzayda bir $V(\vec{r}) = V(x, y, z)$ potansiyelinde hareket eden bir parçacığın toplam enerjisi;

$$E = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V(x, y, z) \tag{2.44}$$

olur.Schrödinger Denklemi ise;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) \tag{2.45}$$

şeklinde yazılır.

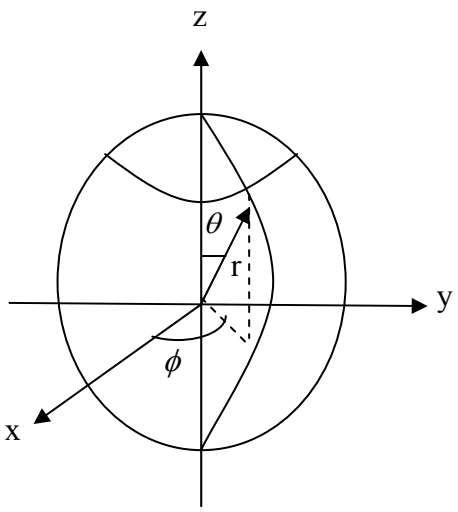
Bu üç değişkenli kısmi diferansiyel denklemin çözümü tek boyutlu problemlere kıyasla oldukça zor olduğundan, potansiyel fonksiyonu küresel simetriye sahipse,

$$V(\vec{r}) = V(r) \qquad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \tag{2.46}$$

şeklinde olur.(burada sadece orijinden r uzaklığına bağlılık vardır.)

Küresel kuyu potansiyeli küresel simetriye sahiptir.Manyetik etkileşme dışında, bilinen tüm potansiyeller küresel simetriktirler. Küresel simetrik bir potansiyelin uyguladığı kuvvet merkezseldir. Merkezsel bir kuvvetin en önemli özelliği ise, açısal momentumun korunumudur. Açısal momentum operatörü hamiltonyenle sıra değiştirme özelliğine sahiptir ve ortak özvektörlere sahiptirler.

Küresel simetriyi en iyi ifade edebileceğimiz koordinat sistemi küresel koordinatlardır. Küresel simetriyi küresel koordinatlarda (r,θ,ϕ) olarak, ifade edersek, burada;



Sınırlar:

$$0 \le r \le \infty$$
$$0 \le \theta \le \pi$$
$$0 \le \phi \le 2\pi$$

şeklinde değişir. Burada r küre yarıçapı, θ kutup açısını, ϕ de boylam açısını ifade eder. Küresel koordinatlarda x, y ve z'nin karşılıkları ise aşağıda gösterildiği gibi yazılmaktadır.

$$\begin{aligned} x &= r.\sin\theta\cos\phi \\ y &= r.\sin\theta\sin\phi \\ z &= r.\cos\theta \end{aligned} \qquad (2.47)$$

Schrödinger denklemini kutupsal koordinatlarda yazmak için önce kısmi türevleri (r,θ,ϕ) değişkenleri cinsinden yazmak gerekir. x değişkeni ile (r,θ,ϕ) değişkenleri arasında zincir kuralı uygulayıp $\partial\psi/\partial x$ operatörü için bunu hesaplarsak ,

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{\partial\psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x}+\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x}+\frac{\partial\psi}{\partial\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x} \tag{2.48}$$

Her kutupsal (r,θ,ϕ) koordinatının her (x,y,z) koordinatına göre kısmi türevinin bulunması gerekir. Burada (r,θ,ϕ) değişkenlerinin (x,y,z) cinsinden ifadesi

$$r^2=x^2+y^2+z^2 \tag{2.49}$$

$$\cos\theta=\frac{z}{r} \tag{2.50}$$

$$\tan\phi=\frac{y}{x} \tag{2.51}$$

şeklindedir. Bu denklemlerin diferansiyelleri alınırsa,

$$rdr=xdx+ydy+zdz \tag{2.52}$$

$$-\sin\theta d\theta=\frac{rdz-zdr}{r^2}=\frac{zxdx+zydy+\left(z^2-r^2\right)dz}{r^3} \tag{2.53}$$

$$\frac{1}{\cos^2\phi}d\phi = \frac{xdy - ydx}{x^2} \tag{2.54}$$

$\partial r/\partial x$ kısmi türevini bulmak için (2.52) bağıntısında y ve z sabit tutulursa (dy=dz=0), (2.52) denkleminden,

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\phi \tag{2.55}$$

(2.53) denkleminden,

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{zx}{r^3\sin\theta} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r} \tag{2.56}$$

(2.54) denkleminden,

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2}\cos^2\phi = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta} \tag{2.57}$$

denklemleri elde edilir. Tüm bu denklemleri (2.48) denkleminde yerine koyarsak,

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial \psi}{\partial \phi} \tag{2.58}$$

denklemini elde ederiz.

Buradan $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2},\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2},\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$ ifadeleri bulunur ve küresel koordinatlarda Schrödinger denklemi elde edilir.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi+V(r)\psi=E\psi \tag{2.59}$$

olarak yazılır. ψ dalga fonksiyonu (r,θ,ϕ) koordinatlarının bir fonksiyonudur.

Potansiyelin sadece r değişkenine bağlı oluşu nedeniyle, değişken ayrımı yöntemini uygularsak,

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi) \tag{2.60}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)+V(r)R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)$$
$$=ER(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi) \tag{2.61}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left\{\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)+\left[\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)\right\}+V(r)R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)$$
$$=ER(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi) \tag{2.62}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)+V(r)R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)$$
$$=ER(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)$$

(2.63)

Bu denklemin her iki tarafını $R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)$'ya bölüp gerekli sadeleştirmeleri yaparsak,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\frac{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}\right]-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\frac{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}+V(r)\frac{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}$$
$$=E\frac{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)}$$

(2.64)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{1}{Y}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]+V(r)=E$$

(2.65)

$-\frac{\hbar^2}{2m^*}$'yi denklemin içine yansıtıp denklemi $-\frac{2m^*}{\hbar^2}r^2$ ile çarparsak ,

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{1}{r^2}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{Y}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]+V(r)=E\right\}*-\frac{2m^*}{\hbar^2}r^2$$

(2.66)

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]-\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}V(r)=-\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}E \tag{2.67}$$

Kısmi türevleri aldıktan sonra, eşitliğin iki tarafını (RY) ile böldüğümüz ve r'ye bağlı terimleri bir tarafa ayırdığımız denklemin son halini yazacak olursak, (burada ilk taraf tek bir değişkene bağlıdır, ikinci tarafsa iki değişkene bağlı olduğundan ∂ şeklinde yazılmıştır.)

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] \tag{2.68}$$

denklemi elde edilir.

Sol tarafta yalnız r değişkenine bağlı, sağ tarafta yalnız (θ,ϕ) değişkenlerine bağlı bir ifadeye eşit olmaktadır. Bu eşitliği her (r,θ,ϕ) değeri için sağlayabilmenin tek yolu, iki tarafın da aynı bir λ sabitine eşit olmasıdır.

Bu denklemi $R(r)$ ve $\mathrm{Y}(\theta,\phi)$ şeklinde düzenlersek radyal ve açıya bağlı Shrödinger denklemlerini elde ederiz.

Radyal denklem:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]R=\lambda R(r) \tag{2.69}$$

Açıya Bağlı Schrödinger denklemi:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}=-\lambda \mathrm{Y} \tag{2.70}$$

(2.69) denklemi daha sonraki bölümde anlatılmış olan sonlu farklar yöntemi ile çözülmüştür.(Karaoğlu B., 1994)

BÖLÜM 3

SONLU FARKLAR YÖNTEMİ

3.1 Diferansiyel Denklemlerin Nümerik Yöntemlerle Çözümü

Ana problem karşımıza çıkan diferansiyel denklemlerin çözümüydü. Her zaman karşımıza elle çözülebilir diferansiyel denklemler çıkmıyor. Kuantum mekaniğinde rastlanan problemlerin çoğunda, sistemin Schrödinger Denklemini analitik olarak çözmek ve enerji düzeyleri ile dalga fonksiyonlarını belirlemek çok zor veya olanaksızdır. Böylece Shrödinger denkleminin doğrudan tam çözümünün yapılmadığı durumlarda, nümerik yöntemlere başvurulur. Bu nümerik metotlardan en çok kullanılanlarından biri de Sonlu Farklar Yöntemidir.(Karaoğlu vd., 1996).

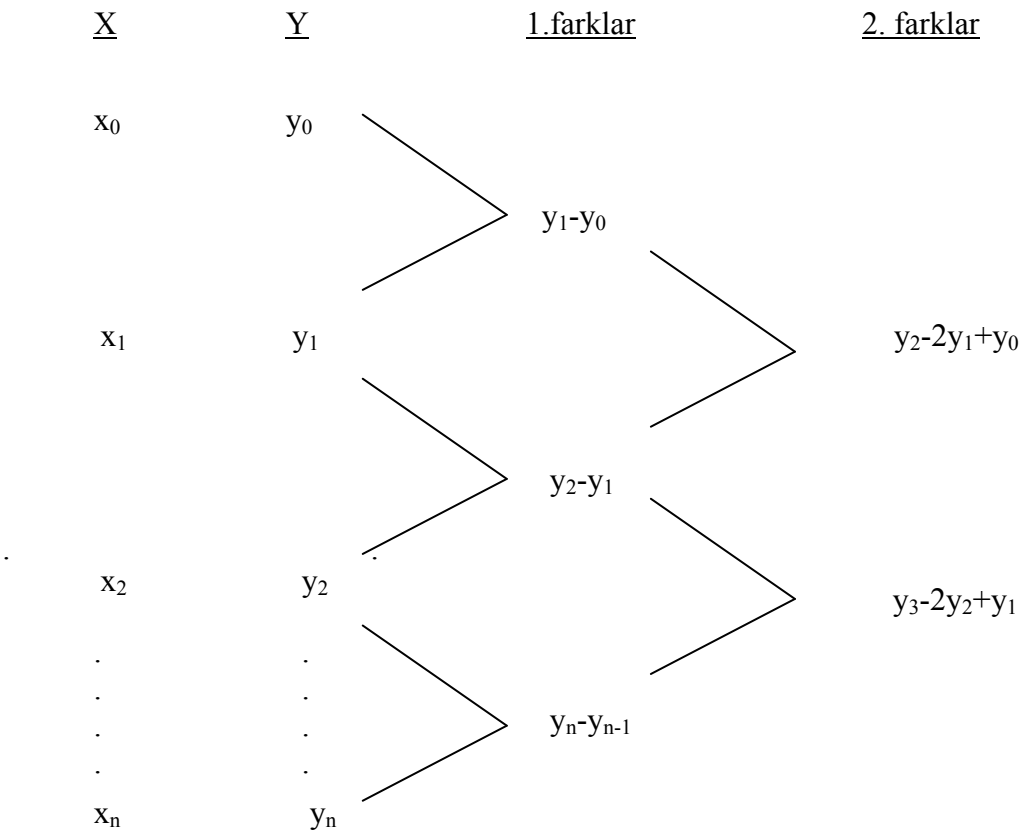
3.1.1 Sonlu Farklar Yöntemi

Sonlu Farklar Yöntemi, farklar tablosu kullanımını gerektiren bir yöntemdir. Genellikle interpolasyon, türev ve integral alma işlemleri fonksiyon yerel olarak bir polinom ile temsil etmeye dayanır. Özellikle türevde fonksiyonun alınacak türev mertebesine kadar türevlenebilir olması gereklidir. İntegralde ise fonksiyonun süreklilik şartı aranmaz (Press W. H. vd., 1992).

Farklar tablosu hem işin özünü anlamamız için hem de bir şekilde sonuçlarda, programın çıktısında tatmin olmadığımız bir şey varsa yeterli delilleri bize sunacaktır.

Bir analitik fonksiyon verildiğinde işlem yapabiliyoruz ama nümerik analizde bu böyle değil. Analitik fonksiyonda çıkan grafiğin sürekli olmasına karşın nümerik analizde farklı bir sonuçla karşılaşıyoruz.

Nümerik yöntemlerin hemen hepsi fonksiyonun en azından yerel olarak analitik olduğu ve bir polinom ile temsil edildiği kabulüne dayanır. Fonksiyonun eşit aralıklarla oluşturulduğunu varsayalım. Bağımsız değişkenin çok düzgün ve eşit aralıklarla ölçüldüğünü düşünelim. Buna göre aşağıdaki tabloyu oluşturabiliriz.



Şekil-3.1:Farklar Tablosu

3.1.2 Fark Operatörleri

Herhangi bir diferansiyel denklem aşağıdaki fark operatörleri yardımı ile sayısal olarak çözümlenebilir. Fark operatörleri aşağıdaki formlarda ifade edilir.

a. İleri fark operatörü (Δ)

$\Delta y(x)=y(x+h)-y(x)$; $x_{i+1}=x_{i+h}$

$\Delta y_0=y_1-y_0$ (3.1)

$\Delta y_1=y_2-y_1$

b. Geri fark operatörü (∇)

$$\nabla y(x)=y(x)-y(x-h)$$
$$\nabla y_n=y_n-y_{n-1} \qquad (3.2)$$
$$\nabla y_1=y_1-y_0$$

c. Merkezi Farklar Formülü (δ)

$$\delta y(x)=y(x+h/2)-y(x-h/2)$$
$$\delta y(x+h/2)=y(x+h)-y(x) \qquad (3.3)$$
$$\delta y_{1/2}=y_1-y_0=\Delta y_0=\nabla y_1$$
$$\delta y_{3/2}=y_2-y_1=\Delta y_1=\nabla y_2$$

BÖLÜM 4
SONLU FARKLAR YÖNTEMİNİN KUANTUM KUYU VE NOKTASINA UYGULANIŞI

4.1 KUANTUM KUYUSUNUN SONLU FARKLAR YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMÜ

Kararlı elektron yörüngelerinin yarıçapları (Taylor vd., Zafaritos vd., 1996)

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_o}{\pi m e^2} \qquad ; \qquad n=1,2,3 \tag{4.1}$$

şeklindedir.

En iç yörüngenin yarıçapına genel olarak, hidrojen atomunun Bohr yarıçapı denir ve a sembolüyle gösterilir (Taylor vd., 1996).

$$a = r_1 = 5{,}3.10^{-11} m = 0.53 A^o \tag{4.2}$$

Bohr yarıçapı formülünde elektron kütlesi (m) yerine, etkin kütle m^*=0,067m (GaAs için) kullanılarak,

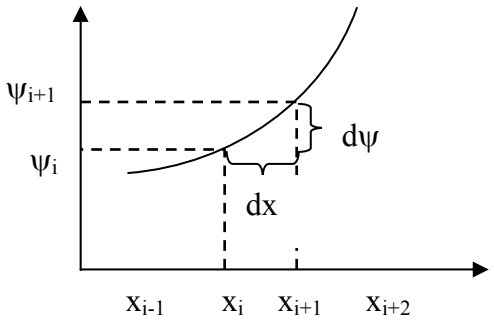
$$a^*=98{,}7A^o=1a^* \tag{4.3}$$

bulunur. Burada malzeme içinde olduğumuzdan dolayı etkin kütle yaklaşımını kullanıyoruz. a^*'ya da etkin Bohr yarıçapı denir. Bu çalışmada Schrödinger denkleminin nümerik çözümlerinde uzunluk birimi olarak etkin Bohr yarıçapı a^* ve enerjiler Rydberg R^* cinsinden yazılmıştır. Burada Rydberg

$$1R^*=5{,}83 \text{ meV} \tag{4.4}$$

dir. Bu birim sistemi hesaplarımızda çok büyük ve çok küçük sayıları dışlamıştır.

Sonlu farklar yöntemini kuantum kuyusunun çözümüne uygularsak, farklı noktalar alınarak birinci ve ikinci türevlerin yazılması aşağıdaki gibi olur.



Şekil-4.1 Sonlu Farklar Yönteminde noktaların gösterimi

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{\Delta\psi}{\Delta x} = \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{x_{i+1} - x_i} + \text{.....} \tag{4.5}$$

Yukarıda görüldüğü gibi ileri farkları belli bir yerde sonladırdık. 'Sonlu Farklar Yöntemi' deyimi de buradan gelir. Yukarıdaki ifadeyi başka bir noktayı alarak yazacak olursak;

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{\Delta\psi}{\Delta x} = \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \tag{4.6}$$

İkinci dereceden yazarsak

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \frac{\Delta}{\Delta x}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) \tag{4.7}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{dx^2} \tag{4.8}$$

Bizim problemimize gelecek olursak,

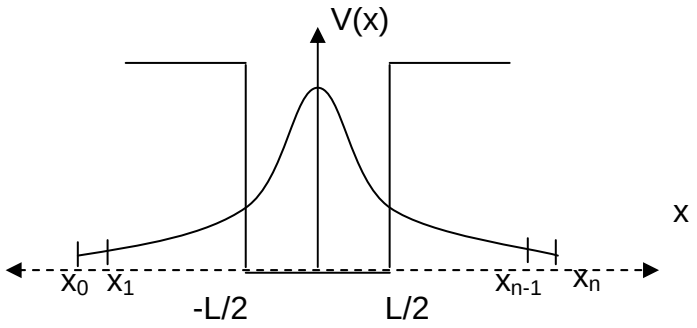
$$-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}}_{a^{*2},R^{*}}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\big(v(x)-E\big)\psi(x)=0 \tag{4.9}$$

çözmemiz gereken denklem,

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\big(v(x)-E\big)\psi(x)=0 \tag{4.10}$$

i. noktadaki durumu için,

$$-\frac{\psi_{i-1}-2\psi_i+\psi_{i+1}}{dx^2}+\big(v(x_i)-E\big)\psi_i=0 \tag{4.11}$$



Şekil-4.2: Sonlu kuantum kuyusuna sonlu farklar yönteminin uygulanışı

Her nokta için (4.11) denklemini yazabiliriz.Başlangıç koşullarından dolayı x_0 ile ψ_0 bilinmektedir ve ψ_0=0'dır.

i=1 için

$$-\frac{1}{dx^2}\left[\psi_0 - 2\psi_1 + \psi_2\right] + \left[v(x_1) - E\right]\psi_1 = 0 \tag{4.12}$$

düzenlersek,

$$-\frac{1}{dx^2}\left[\left(-2 - v(x_1)dx^2\right)\psi_1 + \psi_2\right] = E\psi_1 \tag{4.13}$$

i=2 için

$$-\frac{1}{dx^2}\left[\psi_1 - 2\psi_2 + \psi_3\right] + \left[v(x_2) - E\right]\psi_2 = 0 \tag{4.14}$$

düzenlersek,

$$-\frac{1}{dx^2}\left[\psi_1 + \left(-2 + v(x_2)dx^2\right)\psi_2 + \psi_3\right] = E\psi_2 \tag{4.15}$$

i=3 için

$$-\frac{1}{dx^2}\left[\psi_2 + \left(-2 + v(x_3)dx^2\right)\psi_3 + \psi_4\right] = E\psi_3 \tag{4.16}$$

Her nokta için yazılırsa, N tane denklem türetebilir. Bu denklemleri matris formunda aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$-\frac{1}{dx^2}\underbrace{\begin{bmatrix} -2-v(x_1)dx^2 & 1 & 0 & 0 & . & . & . \\ 1 & -2-v(x_2)dx^2 & 1 & 0 & . & . & . \\ 0 & 1 & -2-v(x_3)dx^2 & 1 & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \end{bmatrix}}_{\text{biliniyor}}\underbrace{\begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ .\\ .\\ \psi_n\end{bmatrix}}_{\text{bilinmeyenler}} = E\begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ .\\ .\\ \psi_n\end{bmatrix}$$

(4.17)

$$-\frac{1}{dx^2}\begin{bmatrix} -2-v(x_1)dx^2 & 1 & 0 & 0 & . & . & . \\ 1 & -2-v(x_2)dx^2 & 1 & 0 & . & . & . \\ 0 & 1 & -2-v(x_3)dx^2 & 1 & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi_2\\ \psi_3\\ .\\ .\\ \psi_n\end{bmatrix} = E\begin{bmatrix}\psi_2\\ \psi_3\\ .\\ .\\ \psi_n\end{bmatrix}$$

(4.18)

Bu matrisi çözen bir program oluşturulursa E_n ve ψ_n kolayca bulunur.Bu yöntemin avantajı çok kısa zamanda ve doğru sonuçlar verebiliyor olmasıdır.

4.1.1 Elektrik Alan Etkisi

Kuantum potansiyel kuyusu içinde bulunan bir elektron, kuyuya dışarıdan F elektrik alanının uygulanmasıyla potansiyel enerji kazanır (Karaoğlu vd., 1993). Elektrik alan x ekseni doğrultusunda ise, elektrona etki eden elektriksel kuvvet,

$$\hat{F} = -eF\hat{x} \tag{4.19}$$

olur. Burada $\hat{x}$ pozitif x ekseni yönündeki birim vektörüdür. Elektronun F elektrik alanından dolayı kazandığı potansiyel enerji,(F; elektrik alanın etkisini gösterdiğinden.F=E olur)

$$V_B(x) = -\int F dx = eFx = eEx \tag{4.20}$$

olur. Burada e pozitif ve serbest elektron yükü büyüklüğündedir. Bu çalışmada yukarıda belirtilen nümerik hesaplardaki kolaylığı sağlamak için elektrik alan kV/cm olarak alınmıştır. Schrödinger nümerik çözümünde potansiyel enerji,

$$eEx = \eta x \tag{4.21}$$

olarak alınmıştır. Burada,

$$\eta = \frac{|e|a^* E}{R^*} = \frac{E}{5{,}83} \tag{4.22}$$

dır. Schrödinger denkleminde bunu uygularsak,

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + v(x)\right]\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \qquad F = 0 \tag{4.23}$$

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + eE_x + v(x)\right]\psi_n^*(x) = E_n^*(x)\psi_n^*(x) \tag{4.24}$$

Yapılması gereken $\left(-\frac{d^2}{dx^2}+v(x)\right)\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$ diferansiyel denklemini çözen programa elektrik alandan gelen potansiyeli eklemek.

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2}+eEx+v(x)\right]\psi_n^F(x)=E_n^F\psi_n^F(x) \tag{4.25}$$

burada $\psi_n^F(x)$ 'daki F elektrik alan olduğunun göstergesidir.

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2}+\frac{a^*E0.01}{R_y^*}x+v(x)\right]\psi_n^F(x)=E_n^F\psi_n^F(x) \tag{4.26}$$

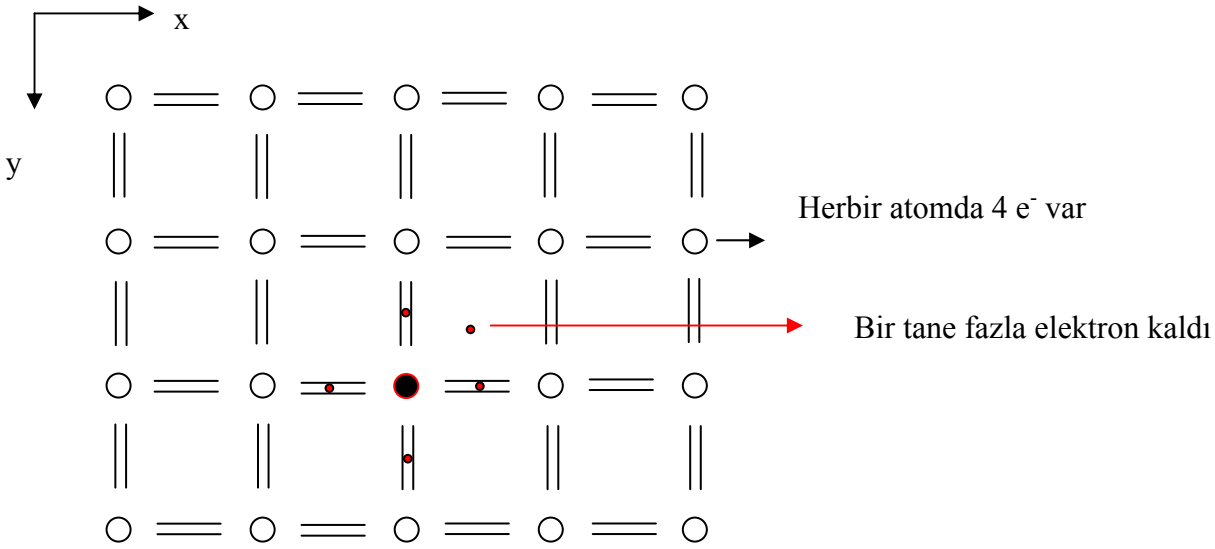
$$\downarrow$$

$$\eta$$

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2}+\eta x+v(x)\right]\psi_n^F(x)=E_n^F\psi_n^F(x) \tag{4.27}$$

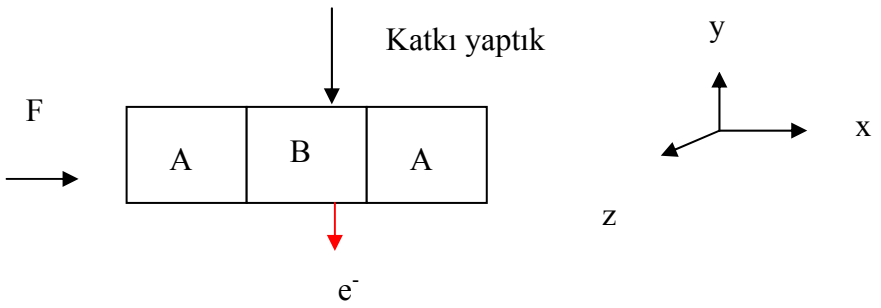
4.1.2 Yabancı Atom Katkısı

Örneğin iki boyutta 4 elektronlu bir sisteme 5 elektronlu bir yabancı atom eklediğimizi varsayalım.



Şekil-4.3:Sisteme yabancı atom eklediğimiz durum

Bir şekilde ortadaki atomu çıkarıp yerine bir başka atom koyarsak (5 değerli!!! Hidrojenimsi) bir elektron boşta kalır (Kittel C., 1996).



Şekil-4.4 Sisteme elektrik alan altında yabancı atomun katkısı

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)+v(x)+v(y)+v(z)-\frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{x^2+y^2+z^2}}+eFx\right]\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \tag{4.28}$$

Burada ε dielektrik sabitidir. Boşlukta ε=1 olur ancak burada arada atomlar olduğu için ε farklı olur. Coulomb etkileşmesi perdelenir. $\frac{\hbar^2}{2m^*}$'daki m^* etkin kütledir. Boşlukta olsa m olarak alırız. Ama burada etrafındaki atomlardan etkilendiğinden m^* olur. Kütleyle oynayarak etrafın etkisini sisteme ekliyoruz. Burada GaAs için m^* $=0{,}067m_o$ olur.

Çözüm hidrojen atomunun çözümlerine benzemeli ve yaklaşık bir yöntem bulunmalıdır.

İlk adımda sistem yabancı atom yokmuş gibi çözülür.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)+v(x)+eFx\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{4.29}$$

Bunu daha önce çözmüştük.

İkinci adımdaysa sisteme yabancı atom koyup yaklaşık bir çözüm önerisinde bulunuruz.

ψ (x,y,z) her iki çözümü de içermeli.

$$\psi_{yeni}(x,y,z)=\psi_0(x)\psi(x,y,z) \tag{4.30}$$

↓ hidrojenimsi bir dalga fonksiyonuna benzemeli

$$\psi_{yeni}(x,y,z)=\psi_0(x)e^{-r/\lambda} \tag{4.31}$$

Burada $-r/\lambda$ hidrojen atomunun çözümünden gelir. $\psi_{yeni}(x,y,z)$ varyasyonel deneme fonksiyonu, λ ise varyasyonel parametredir. λ tespit edilirse problem çözülmüş olur.

4.1.2.1 λ Varyasyonel Parametresinin Belirlenmesi

Sistem minimum enerjiye sahip olmalıdır. Bunu sağlayan da λ varyasyonel parametresidir.

$$\langle E\rangle = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{4.32}$$

$$H = -\nabla^2 + v(x) + \eta x - \frac{2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \tag{4.33}$$

$$\psi(x,y,z) = \psi(x)e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \tag{4.34}$$

$$\langle E\rangle = \left.\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right|_{\lambda_{\min}} \tag{4.35}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\langle\psi(x,y,z)|-\frac{d^2}{dx^2}-\frac{d^2}{dy^2}-\frac{d^2}{dz^2}+v(x)+\eta x-\frac{2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}|\psi(x,y,z)\rangle}{\langle\psi(x,y,z)|\psi(x,y,z)\rangle} \tag{4.36}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\langle \psi(x,y,z)| -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dy^2} - \frac{d^2}{dz^2} + v(x) + \eta x |\psi(x,y,z)\rangle}{\langle \psi(x,y,z)|\psi(x,y,z)\rangle} + \frac{\langle \psi(x,y,z)| -\frac{2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} |\psi(x,y,z)\rangle}{\langle \psi(x,y,z)|\psi(x,y,z)\rangle}$$

(4.37)

$$\psi(x,y,z) = \psi_o(x) e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \tag{4.38}$$

$$\langle E\rangle = \underbrace{\frac{\langle \psi_0(x)| -\frac{d^2}{dx^2} + v(x) + \eta x |\psi_0(x)\rangle}{\langle \psi_0(x)|\psi_0(x)\rangle}}_{E_0} + \underbrace{\frac{\langle \psi(x,y,z)| -\frac{d^2}{dy^2} - \frac{d^2}{dz^2} |\psi_0(x,y,z)\rangle}{\langle \psi(x,y,z)|\psi(x,y,z)\rangle}}_{1/\lambda^2} + \frac{\langle \psi(x,y,z)| -\frac{2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} |\psi(x,y,z)\rangle}{\langle \psi(x,y,z)|\psi(x,y,z)\rangle}$$

(4.39)

$$E_{impurity} = E_0 + \frac{1}{\lambda^2} + \frac{\langle \psi(x,y,z)| -\frac{2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} |\psi(x,y,z)\rangle}{\langle \psi(x,y,z)|\psi(x,y,z)\rangle} \tag{4.40}$$

İstediğimizi elde etmek için (4.40)denkleminin sedece son kısmını çözeriz.

$$E_{imp} = E_0 + \frac{1}{\lambda^2} + \frac{\left\langle \psi_0 e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \middle| -\frac{2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \middle| \psi_0(x) e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \right\rangle}{\left\langle \psi_0(x,y,z) e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \middle| \psi_0(x,y,z) e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \right\rangle} \tag{4.41}$$

silindirik koordinatlarda yazacak olursak,

$$E_{imp} = E_0 + \frac{1}{\lambda^2} + \frac{\int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{2}{\sqrt{x^2+\rho^2}} \right) \left(\psi_0(x) e^{-\frac{\sqrt{\rho^2+x^2}}{\lambda}} \right)^2}{\int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\psi_0(x) e^{-\frac{\sqrt{\rho^2+x^2}}{\lambda}} \right)^2} \tag{4.42}$$

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

$$E_b = E_0 - E_{imp} \tag{4.43}$$

λ 'yı değiştirerek integrali çözüp farklı λ 'lar için E_{imp}'i buluruz.

Sonsuz kare kuyu için taban durum enerjisinin analitik, 4. mertebe Runge Kutta ve sonlu farklar yöntemiyle çözümleri Şekil-4.5'te gösterilmiştir. Sonlu farklar yöntemi çözümleriyle analitik çözümler uyum içerisindedir.

Şekil-4.6'da sonlu kare kuyu için taban durum enerjisinin analitik, Runge Kutta ve sonlu farklar yöntemi olmak üzere her üç yöntemle de çözümleri verilmiştir.

Şekil-4.7'de sonsuz kuyuda elektrik alan yokken ilk üç enerji seviyesi ve dalga fonksiyonları gösterilmiştir.

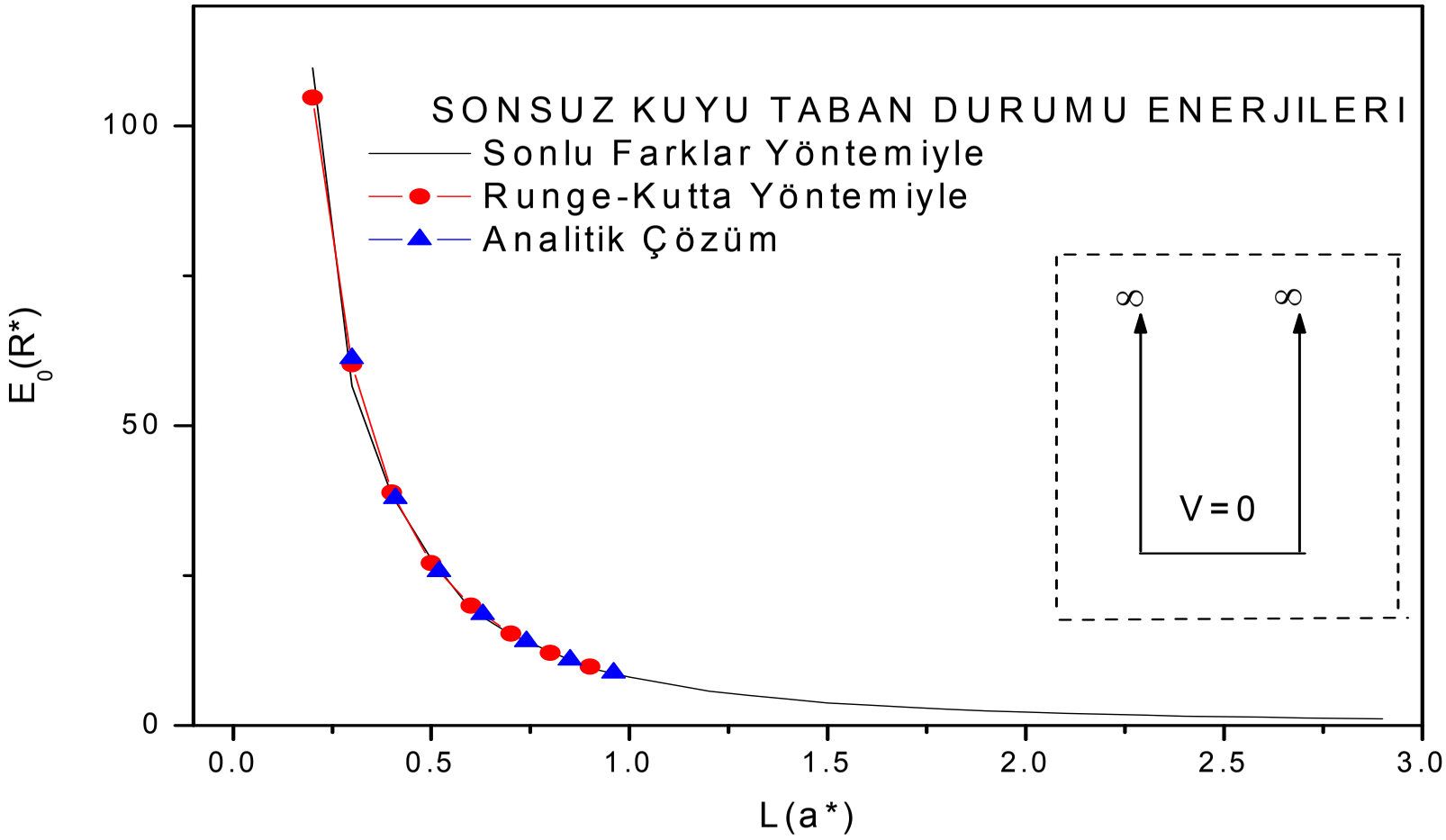
Şekil-4.8'de sonlu kare kuyuda elektrik alan yokkenki ilk iki enerji seviyesi ve dalga fonksiyonları verilmiştir.

Şekil-4.9'te parabolik kuyuda elektrik alan yokkenki ilk iki enerji seviyesi ve dalga fonksiyonu gösterilmiştir.

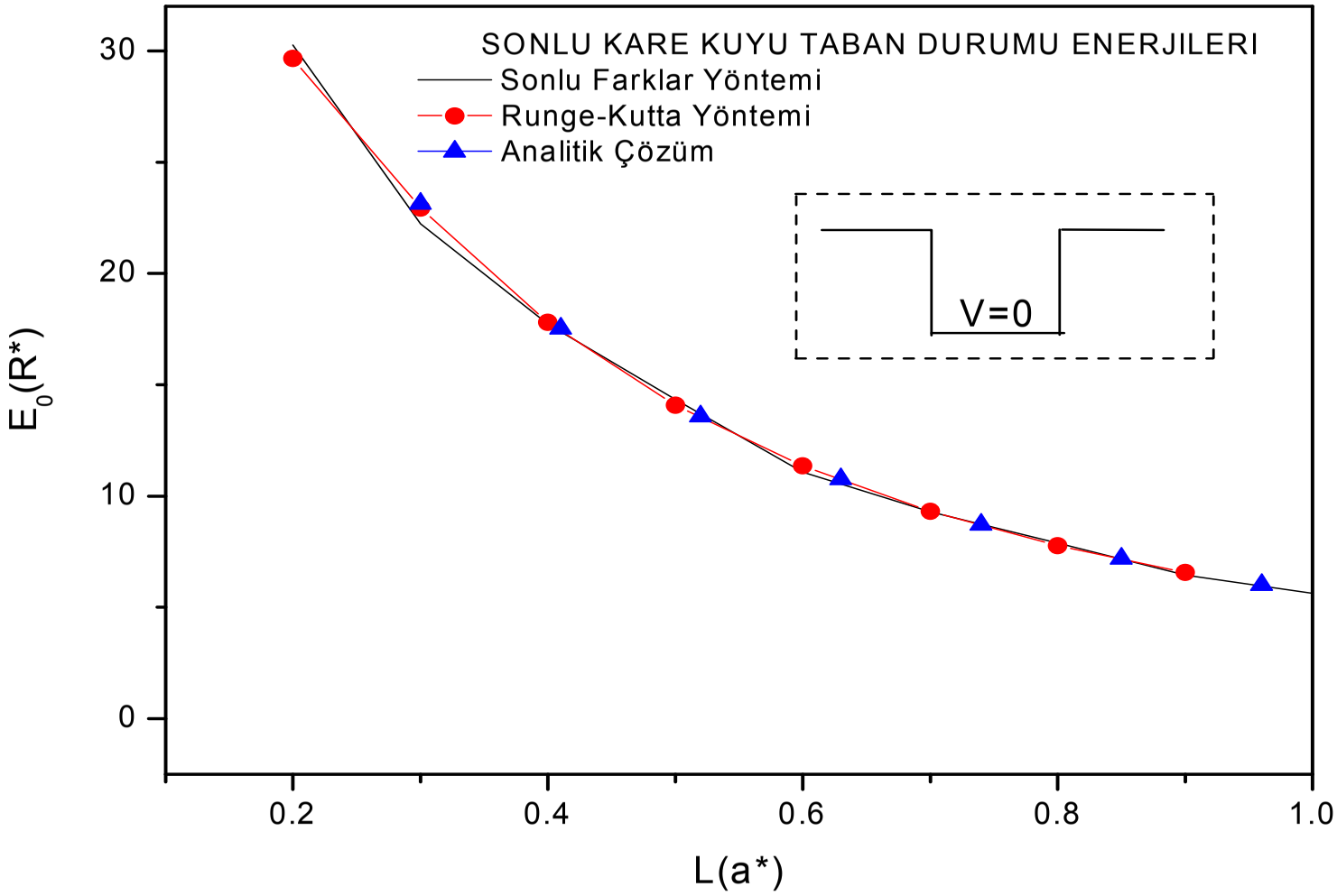
Sonsuz kuyuda farklı elektrik alan etkisi altında taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi Şekil-4.10'da verilmiştir. Bu şekilde kuyu genişliğinin artmasıyla elektrik alan etkisi taban durum enerjisini azaltıcı yöndedir.

Şekil-4.11'de farklı elektrik alan altında sonlu kare kuyunun taban durum enerjisiyle kuyu genişliği verilmiştir. Burada elektrik alan taban durum enerjisini azaltıcı yöndedir.

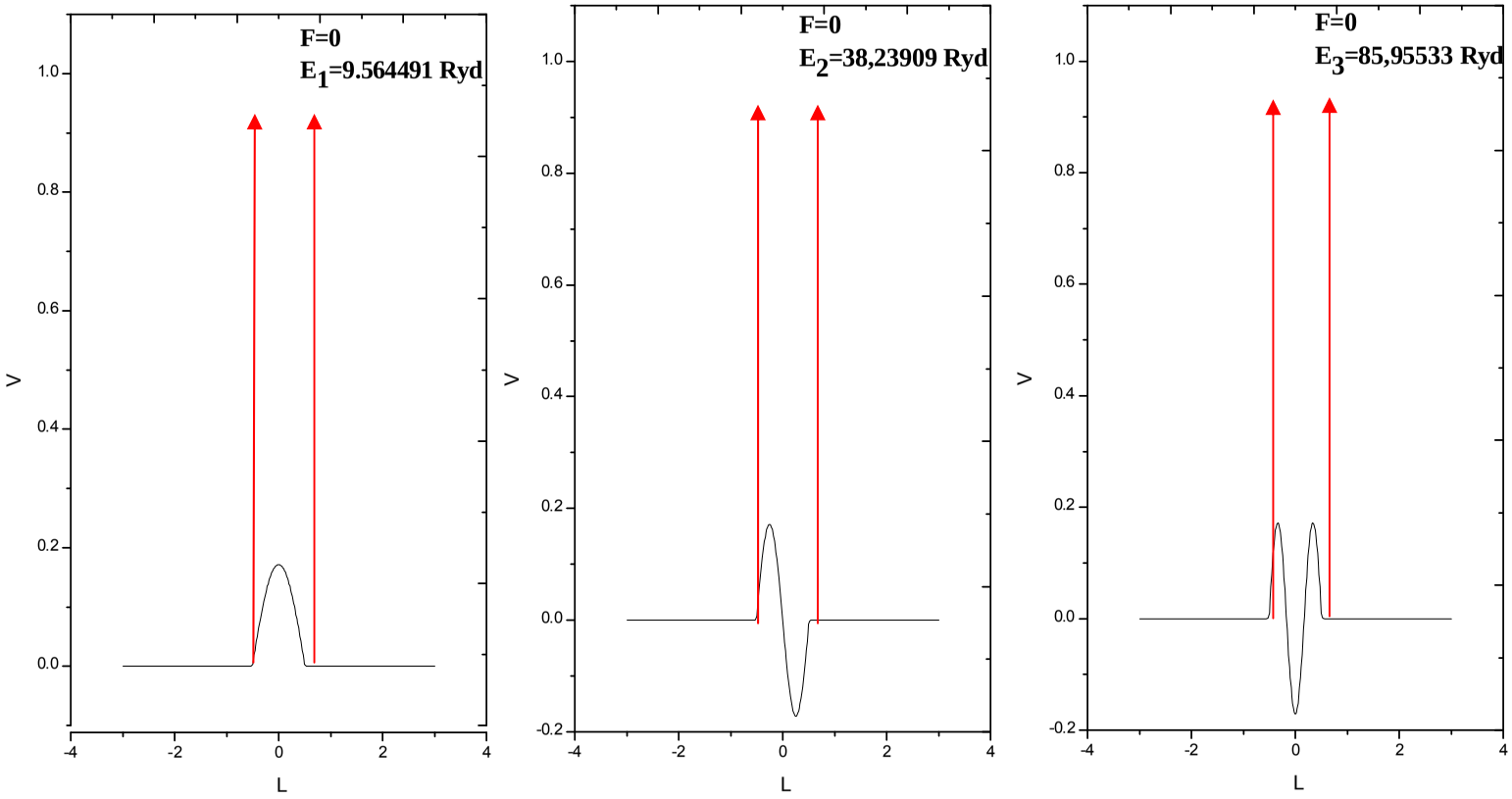
Şekil-4.12'de parabol kuyunun farklı elektrik alan etkisi altında taban durum enerjisiyle kuyu genişliğinin değişimi gösterilmiştir. Küçük kuyu genişliklerinde enerjide hızlı bir azalma ve yaklaşık $1a^*$ genişliğinden büyük kuyularda enerjinin hemen hemen sabit olduğu görülmüştür.



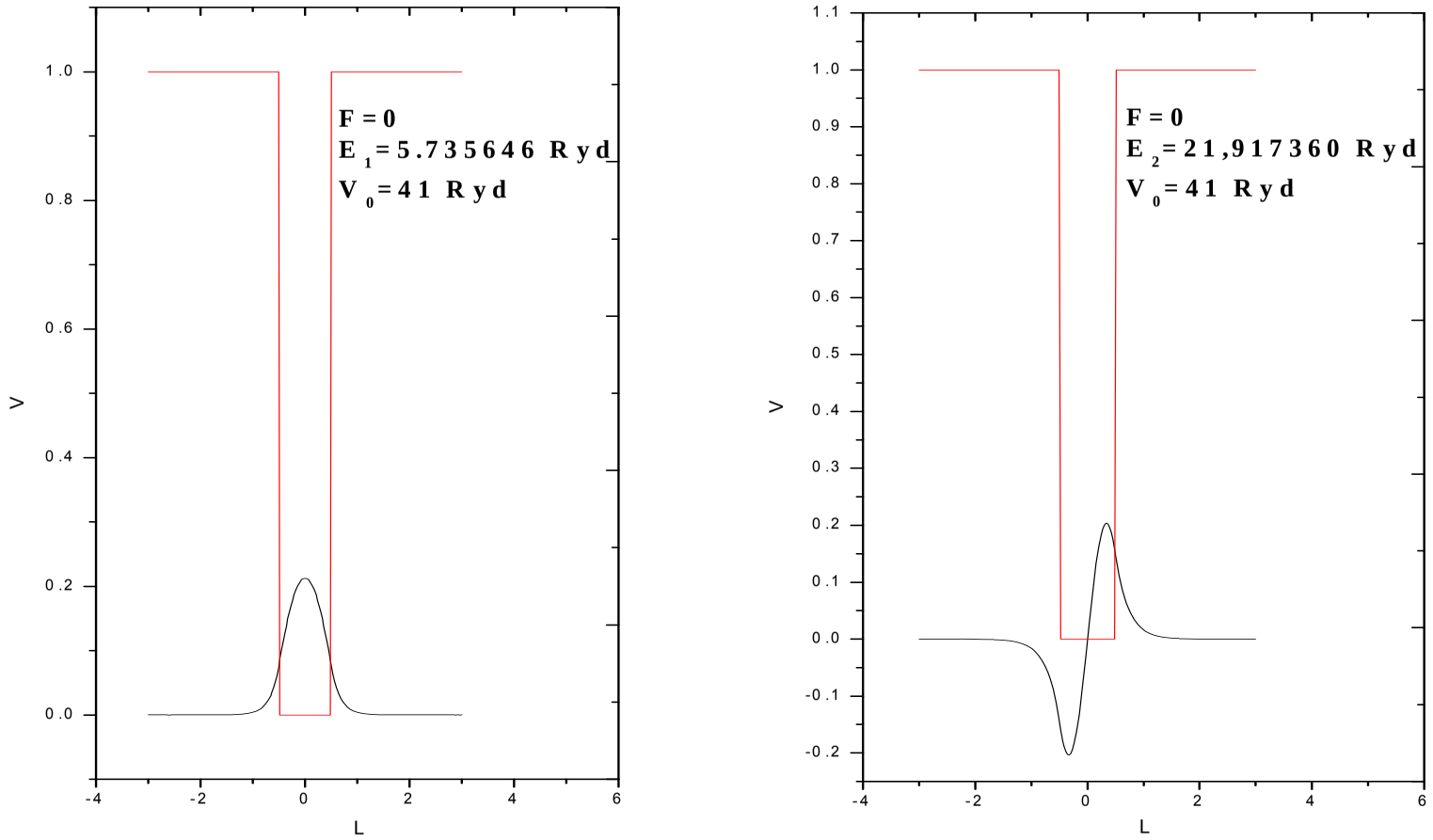
Şekil-4.5 Sonsuz Kare Kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.



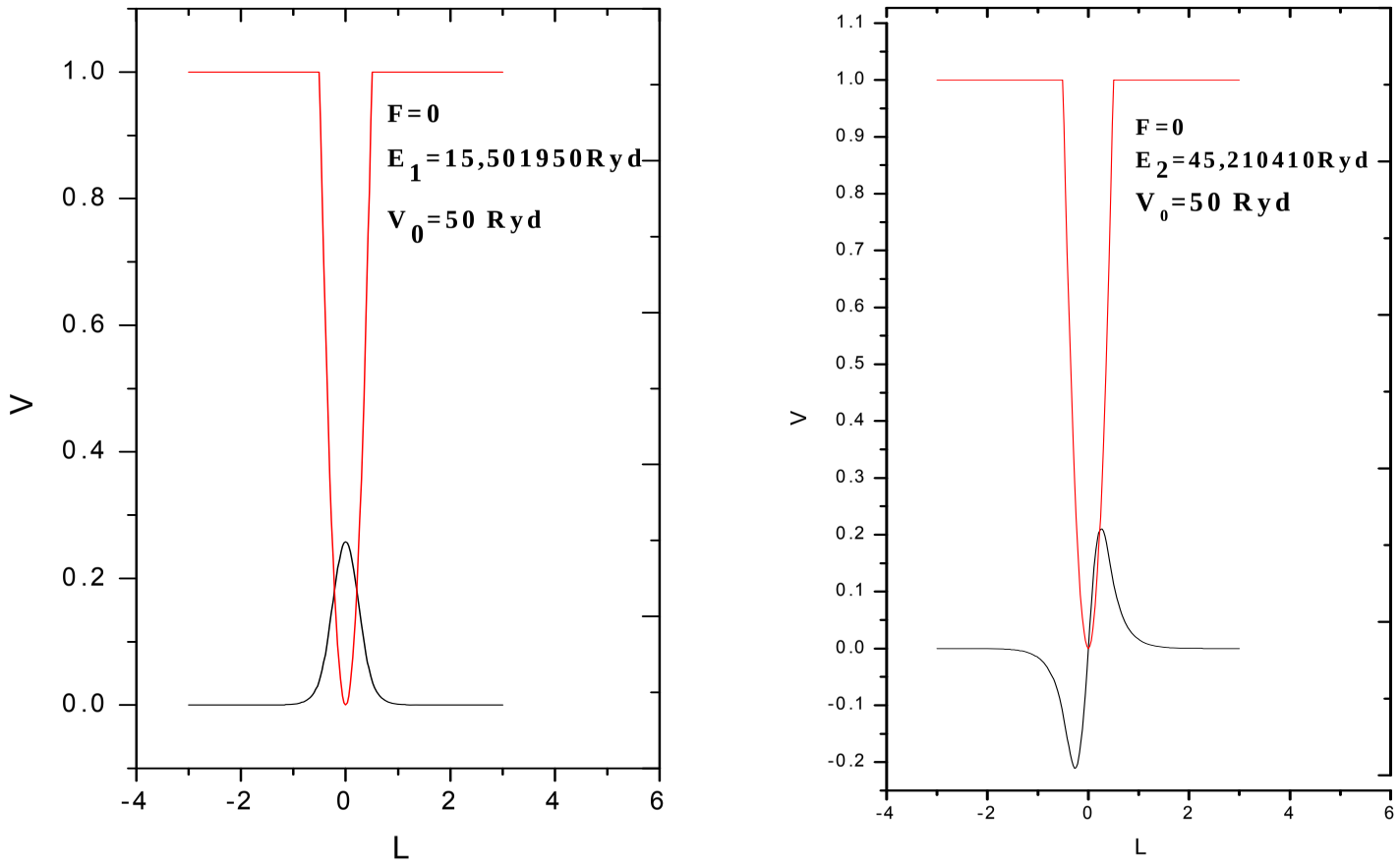
Şekil-4.6 Sonlu Kare Kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.



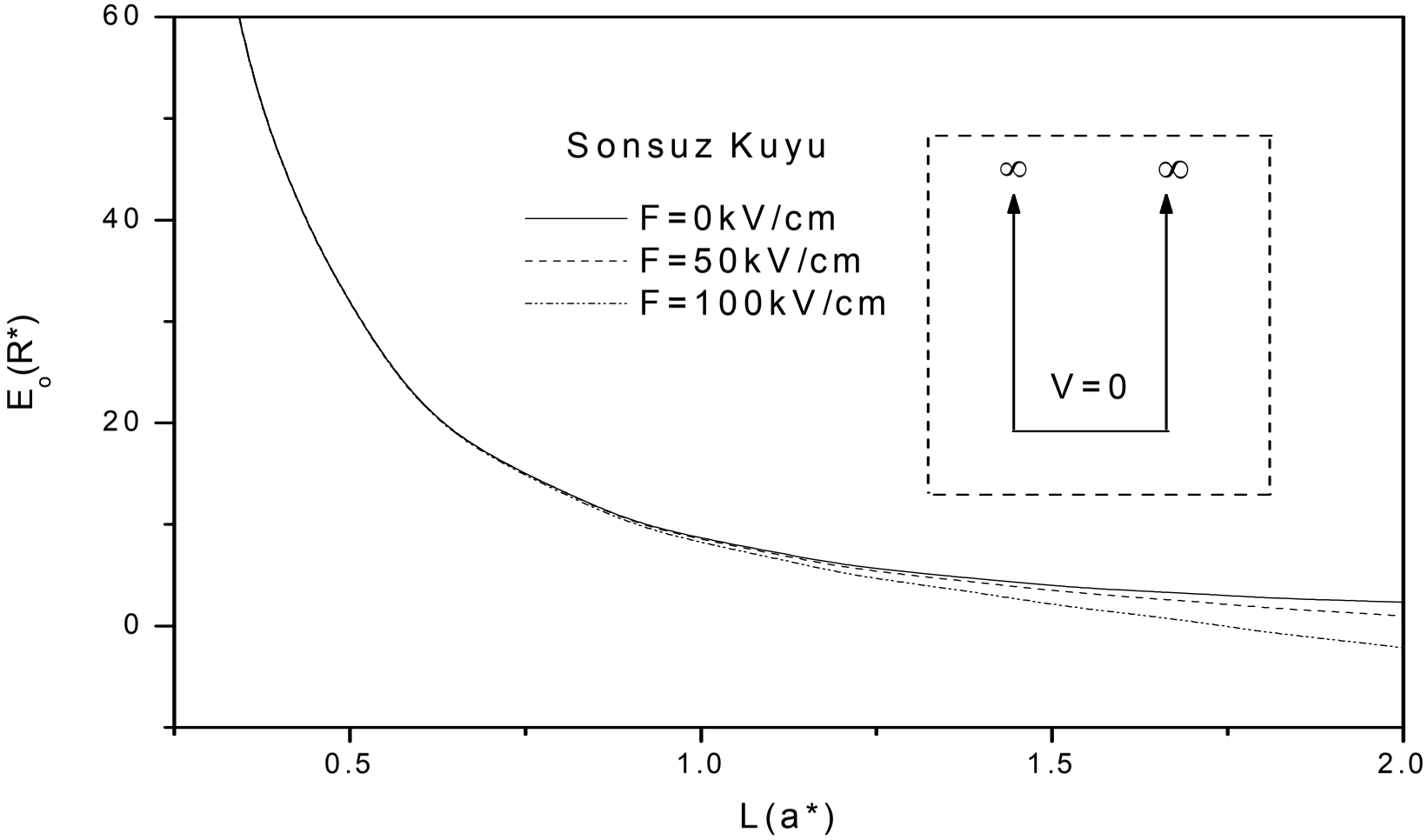
Şekil-4.7 Sonsuz kuyuda elektrik alan yokken ilk üç enerji seviyesi için dalga fonksiyonu.



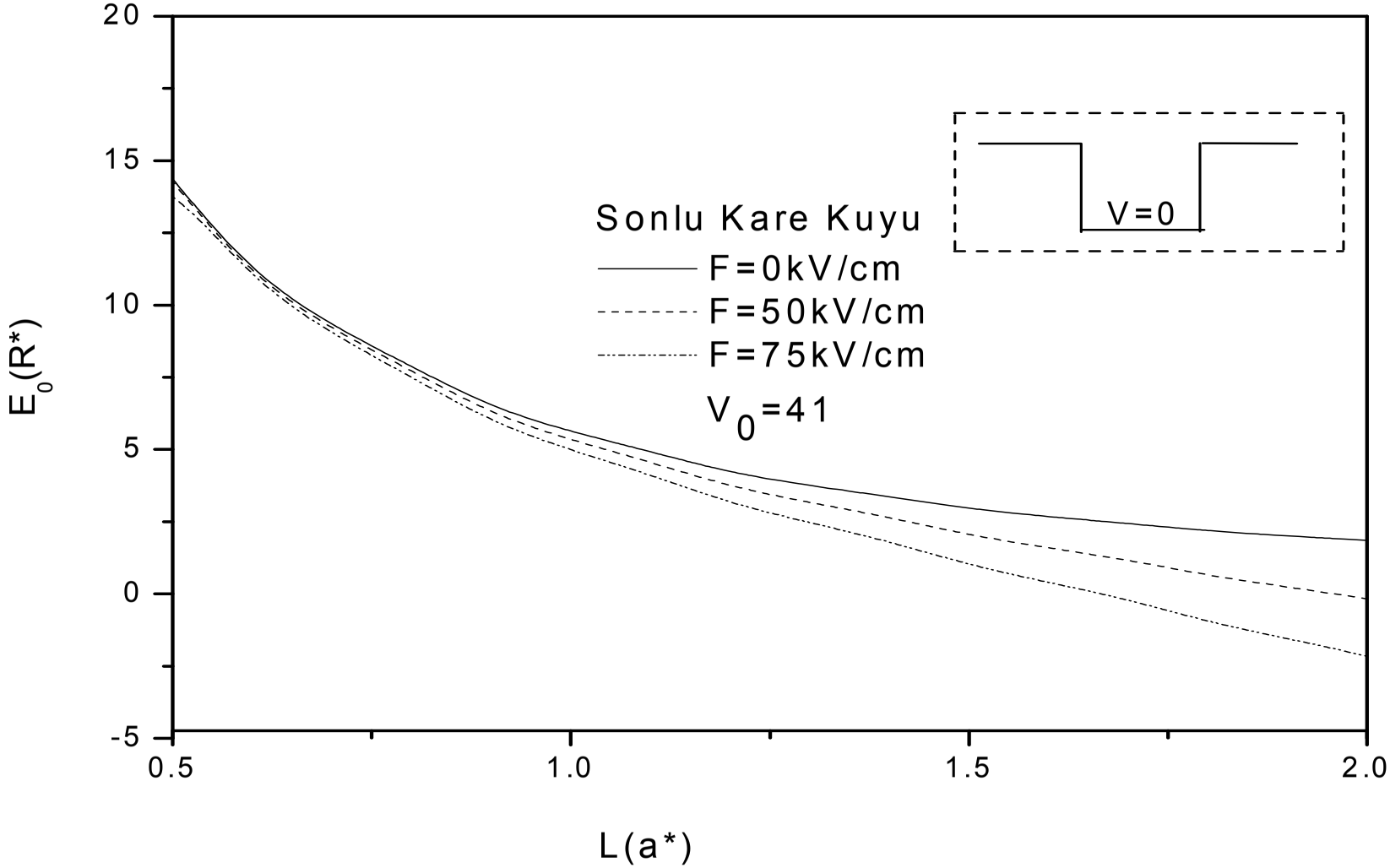
Şekil-4.8 Sonlu kare kuyuda elektrik alan yokken ilk iki enerji seviyesi için dalga fonksiyonu.



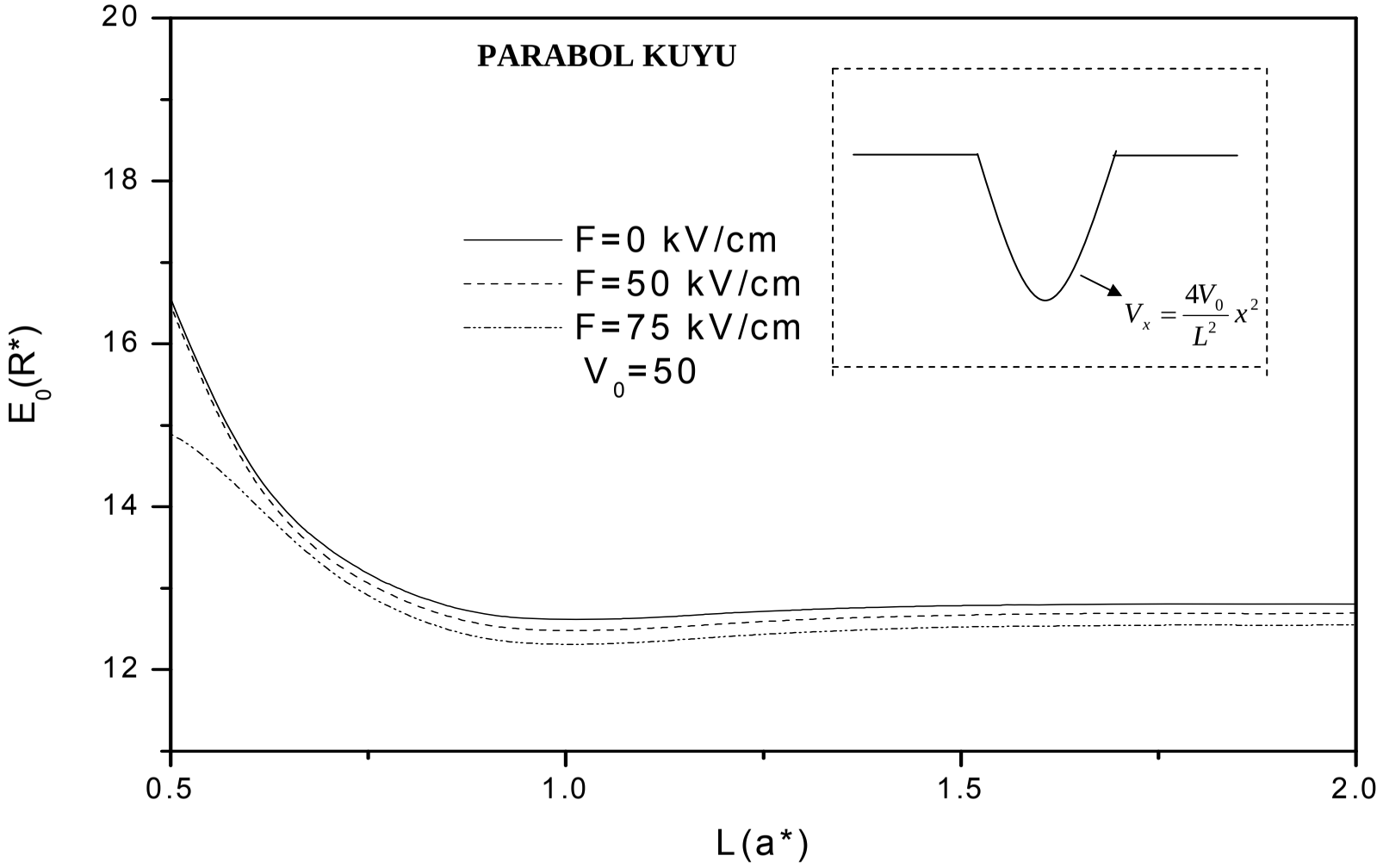
Şekil-4.9 Parabolik kuyuda elektrik alan yokken ilk iki enerji seviyesi için dalga fonksiyonu.



Şekil-4.10 Farklı elektrik alan etkisinde sonsuz kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.



Şekil-4.11 Farklı elektrik alan etkisinde sonlu kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.

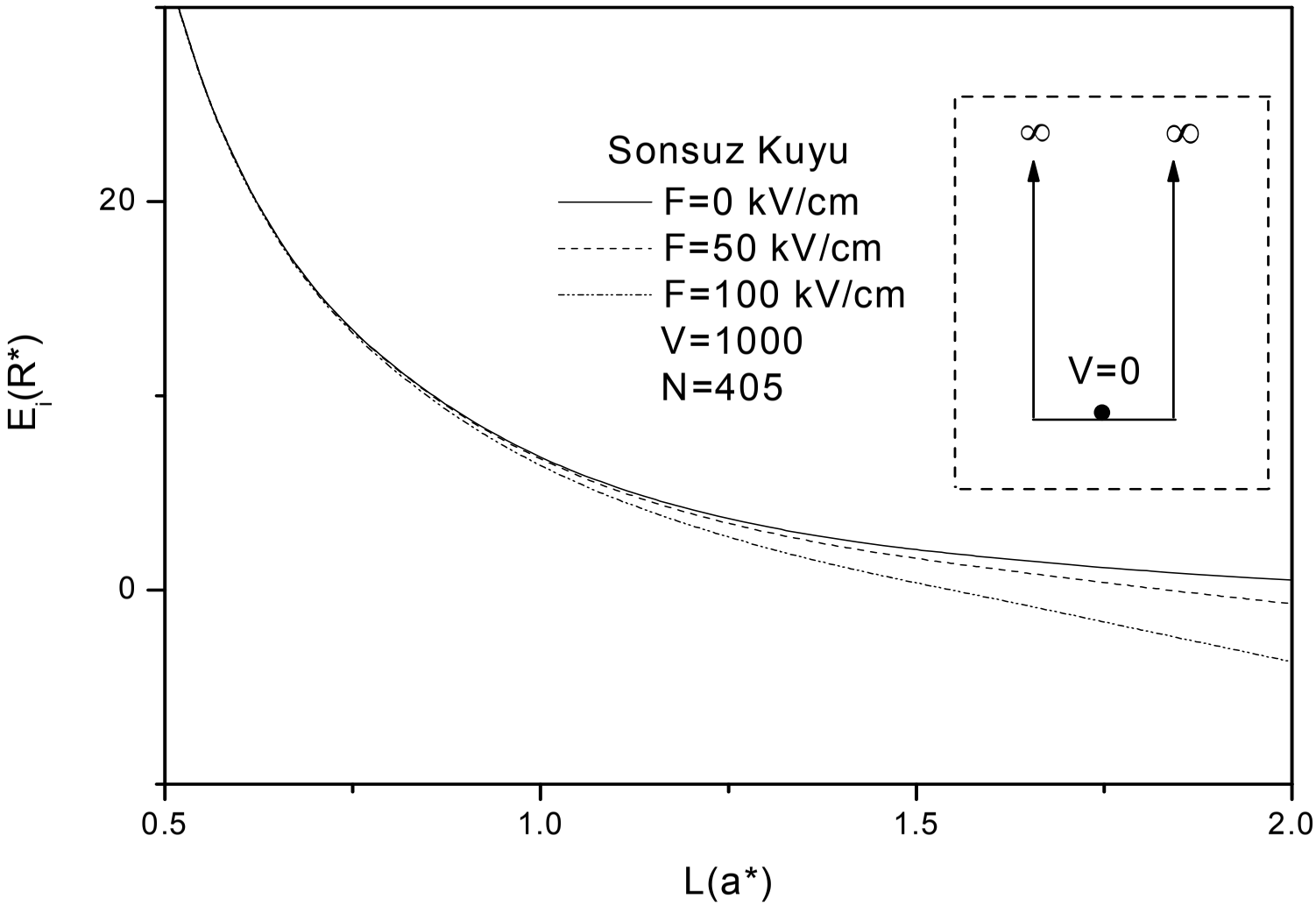


Şekil-4.12 Farklı elektrik alan etkisinde parabol kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.

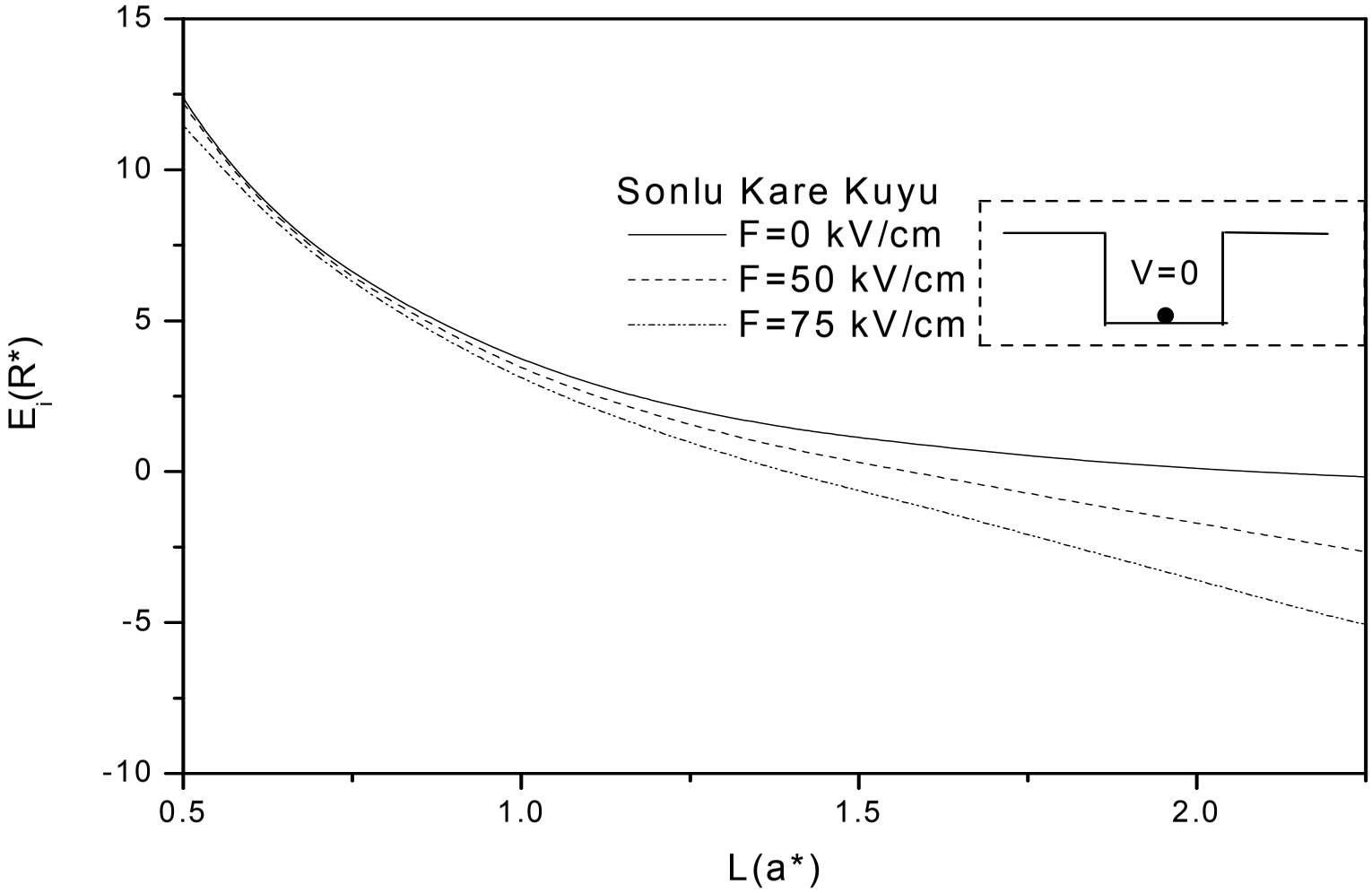
Şekil-4.13’te farklı elektrik alan etkisinde sonsuz kuyu için yabancı atomlu taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi gösterilmiştir.

Şekil-4.14’te sonlu kuyu için ve Şekil-4.15’te parabol kuyu için yabancı atomlu taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi gösterilmiştir.

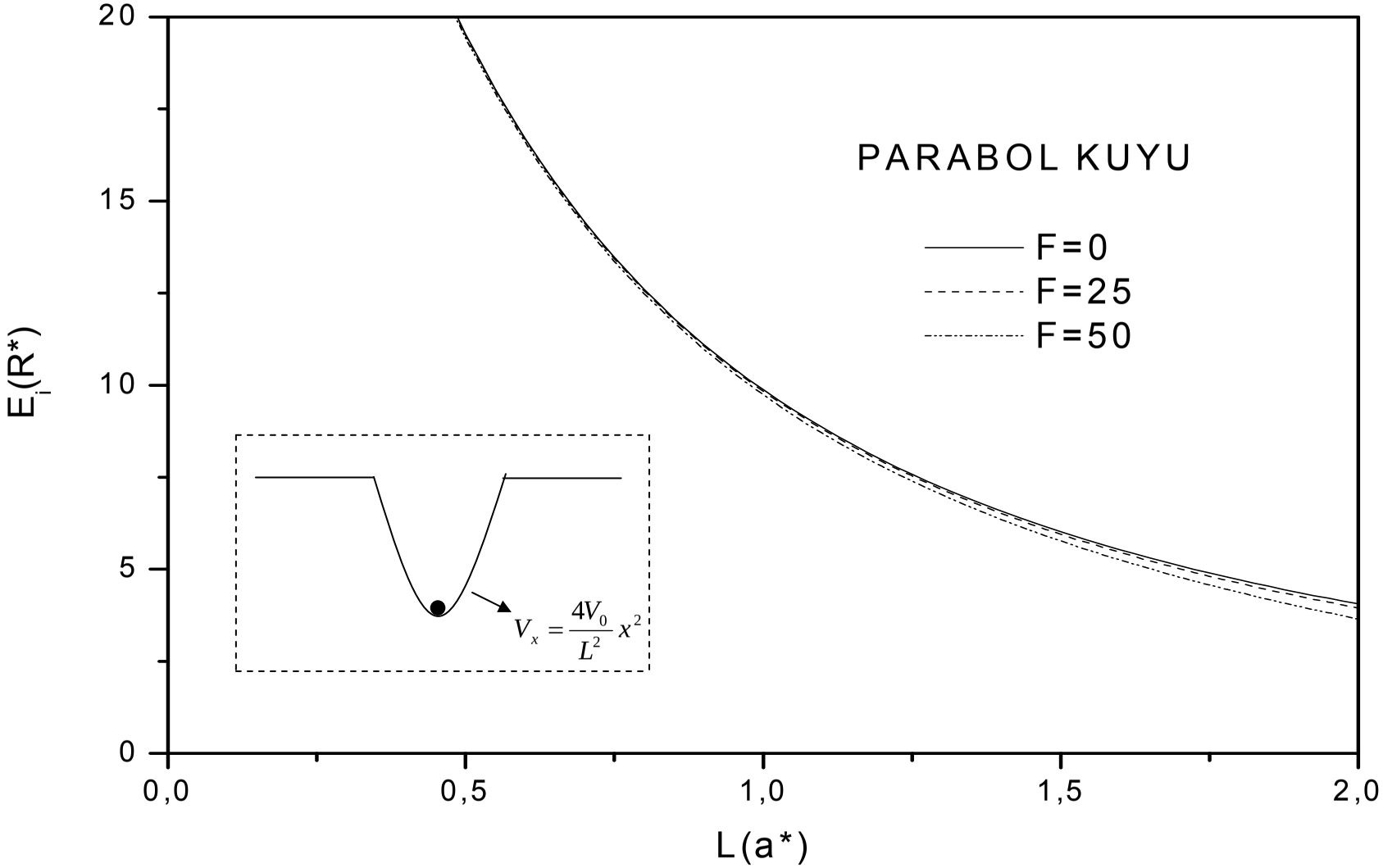
Şekil-4.16, Şekil-4.17 ve Şekil-4.18’de farklı kuyular için elektrik alan etkisi altında taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi verilmiştir.



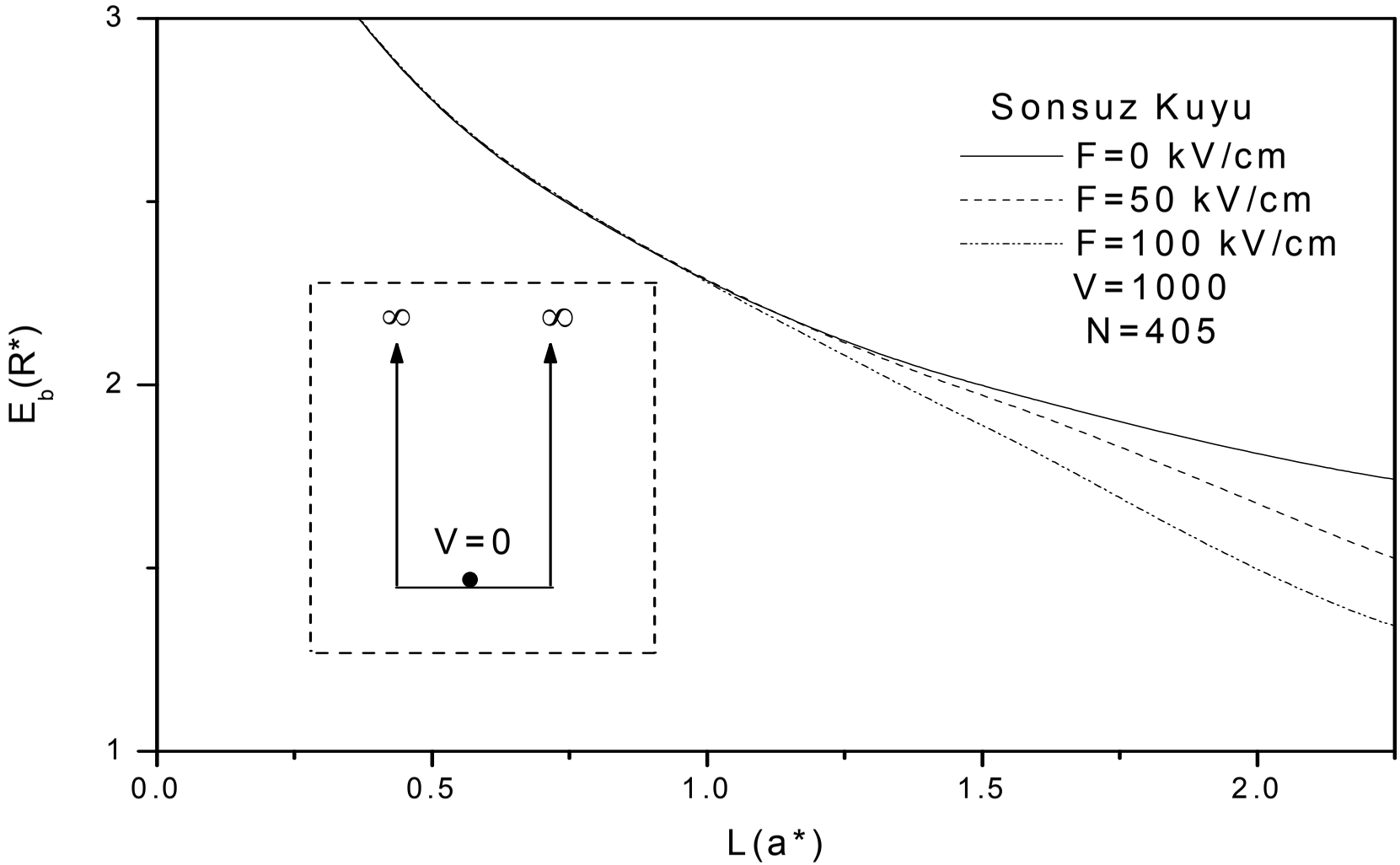
Şekil-4.13 Farklı elektrik alan etkisinde sonsuz kuyu için yabancı atomlu taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.



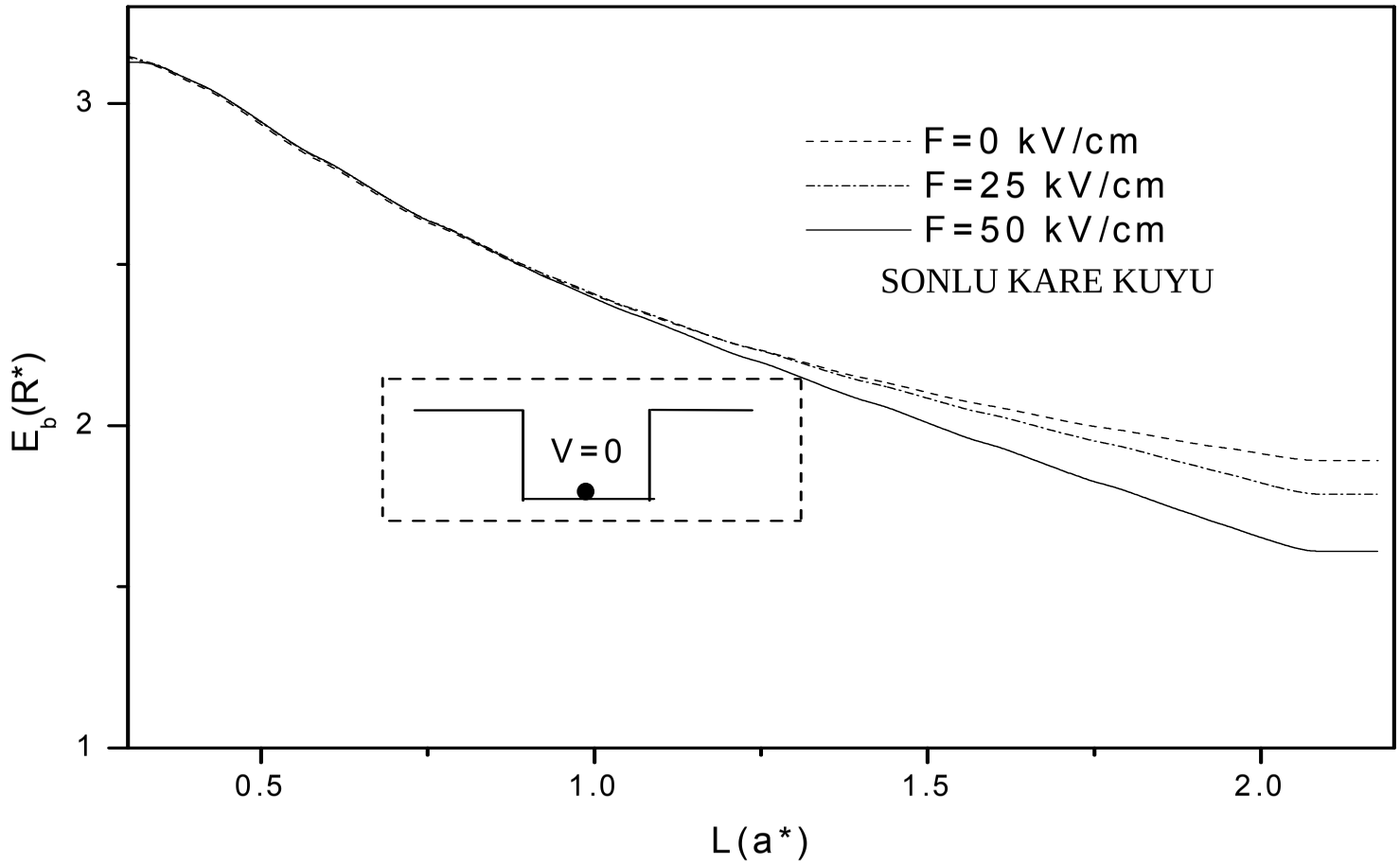
Şekil-4.14 Farklı elektrik alan etkisinde sonlu kuyu için yabancı atomlu taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.



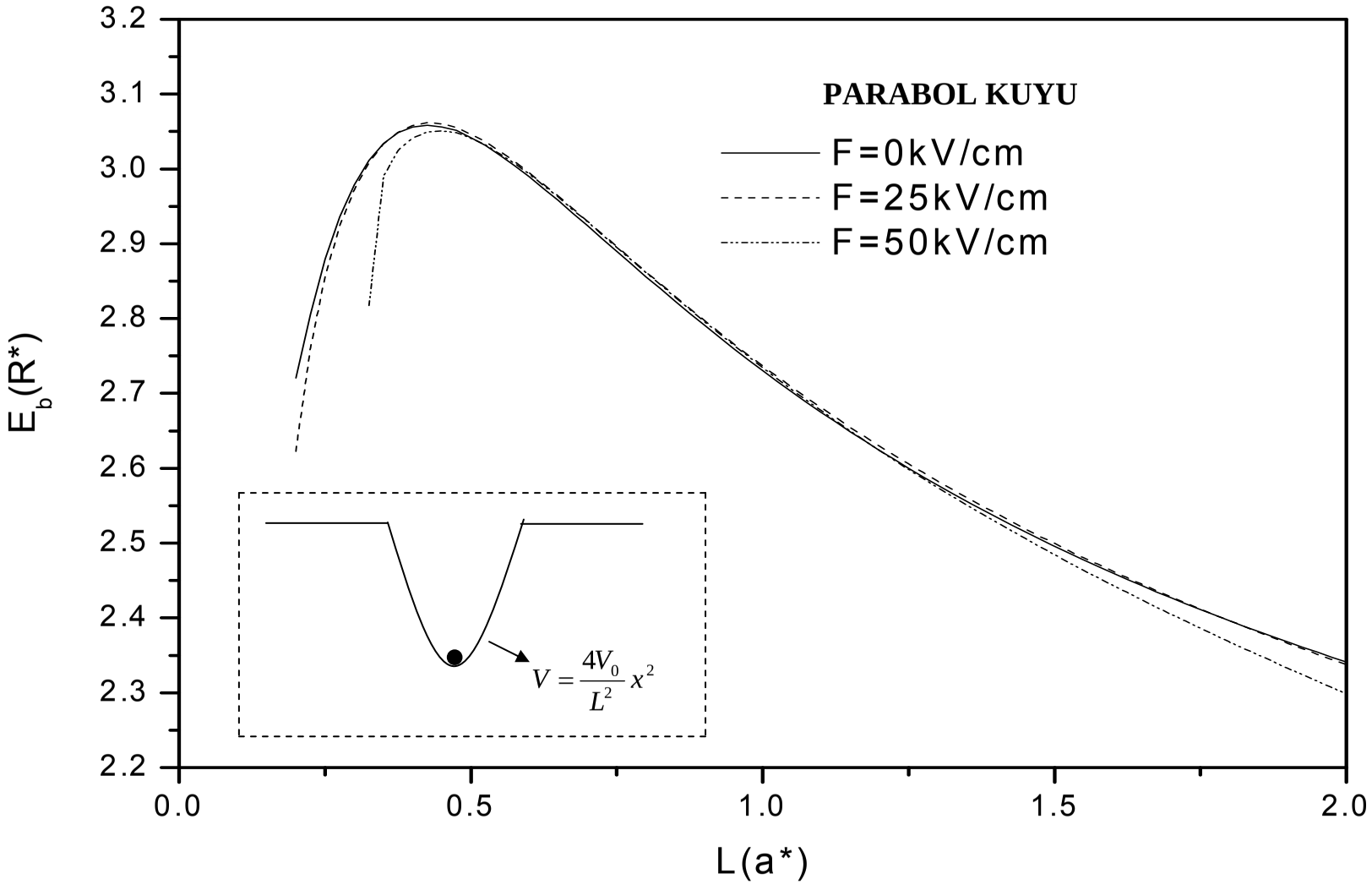
Şekil-4.15 Farklı elektrik alan etkisinde parabol kuyu için yabancı atomlu taban durum enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.



Şekil-4.16 Farklı elektrik alan etkisinde sonsuz kuyu için yabancı atomlu taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.

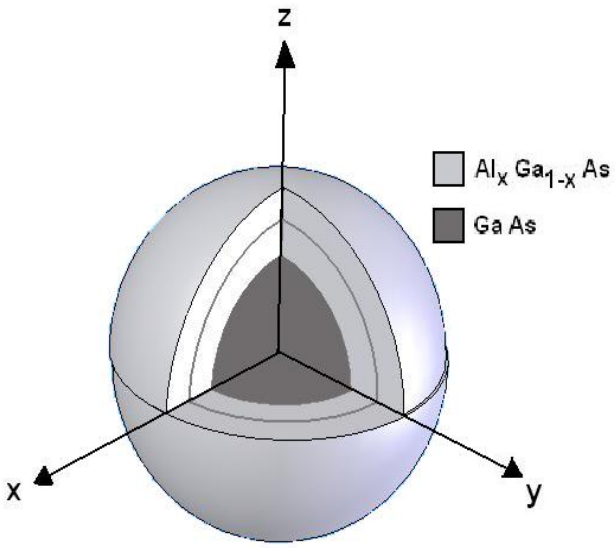


Şekil-4.17 Farklı elektrik alan etkisinde sonlu kare kuyu için yabancı atomlu taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.



Şekil-4.18 Farklı elektrik alan etkisinde parabol kuyu için yabancı atomlu taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğiyle değişimi.

4.2 KUANTUM NOKTASININ SONLU FARKLAR YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMÜ



Şekil-4.19 Küresel Kuantum Noktası

Etrafı $Ga_{1-x}Al_xAs$ ile çevrelenmiş GaAs içinde iyonize olmuş bir verici atom elektronunun hareketi üç boyutta sınırlanmış ise bu sistem GaAs kuantum noktası olarak adlandırılır. Bir kuantum noktası tek bir elektrona veya çok sayıda elektrona sahip olabilir. Elektronların sınırlandırılmasından dolayı noktalardaki enerji seviyeleri atomlarda olduğu gibi kuantize olur. Bu açıdan kuantum noktalarının fiziği, atomik ve nükleer fizikte doğal olarak meydana gelen kuantum olayları ile paralellik gösterir. Kısacası kuantum noktaları kuantum mekaniğinin doğru çalıştığını ispatlayan bir laboratuar gibidir.

Boyutları nanometre mertebesinde olan kuantum noktaları yarıiletken malzemelerden üretilirler. Kuantum noktalarına yabancı atom katılmasıyla iletkenlik kontrollü bir şekilde değişebilir. Bu katkılama işlemi 4 valans elektronlu atomlardan oluşan yapıya 5 valans elektronlu yabancı atom (verici atom) eklenmesiyle gerçekleştirilir. 5 valans elektronlu atom sisteme bir elektron verir ve pozitif yüklü iyon haline geçer. Sisteme verilen bu elektron geride kalan pozitif yüklü iyon arasında halen bağ enerjisi olmasına rağmen bir dış elektrik alan uygulanmasıyla bu elektron iletkenliğe katkıda bulunur. İletkenliği arttıran verici atom elektronunun hareketi değişik

boyutlarda sınırlandırılabilir. Kuantum noktaları küp, küre ve disk biçimli olarak üretilirler. Biz burada küresel kuantum noktasını ele alacağız. (Özkapı B., 2006).

4.2.1 KÜRESEL KUANTUM NOKTASI İÇİN SİSTEME MANYETİK ALAN ETKİSİ

Serbest elektron hareketini üç boyutta sınırlarsak kuantum noktasını etmiş oluruz. Buradaysa sisteme manyetik alan eklediğimiz durumu göz önüne alalım. Manyetik alan parabolik fonksiyon olduğundan, küresel nokta olmasa da elektronu tek boyutta (x yönünde) sınırlayacaktır. Ancak burada küresel nokta olduğu için sistem üç boyutta sınırlanmış olacaktır.

Manyetik alan etkisi altında hamilton denklemi (Karaoğlu B., 1994):

$$H = \frac{1}{2m^*}(\vec{p} + e\vec{A})^2 + V(r) \tag{4.44}$$

Burada, $\vec{A}$ manyetik alan vektörü olarak ifade edilir.

$$\vec{B} = \vec{\nabla} x \vec{A} \tag{4.45}$$

$\vec{B} = B\hat{z}$ yönünde bir manyetik alan uyguladığımızda, manyetik alan vektörünü aşağıdaki şekilde bulabiliriz.

$$\vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} \tag{4.46}$$

$$\vec{B}\vec{k} = \vec{i}\,(\underbrace{\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}}_{0}) - \vec{j}\,(\underbrace{\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z}}_{0}) + \vec{k}\,(\underbrace{\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}}_{B}) \tag{4.47}$$

Bu özellikler tüm koordinat sistemleri için geçerlidir. Manyetik alan vektörünün (vektör potansiyelinin) bileşenlerini öyle seçmeliyiz ki yukarıdaki eşitliği versin.

$$\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = B \tag{4.48}$$

$$\begin{aligned} A_y &= Bx \qquad A_x = 0 \\ A_y &= \frac{1}{2}Bx \qquad A_x = -\frac{1}{2}By \\ A_y &= 0 \qquad A_x = -By \end{aligned} \tag{4.49}$$

şeklinde olabilir.

Manyetik alan vektörünü B'yi verecek şekilde istediğimiz gibi seçebiliriz.(Ayar Dönüşümleri)

Burada önemli olan $\vec{B} = \vec{\nabla} x \vec{A}$'yı sağlamasıdır.

$$\vec{A} = (-\frac{1}{2}By\,, \frac{1}{2}Bx, 0) \tag{4.50}$$

$H = \frac{1}{2m*}(\vec{p} + e\vec{A})^2$ olarak yazmıştık. $\vec{A}$ vektör potansiyelini denklemde yerine koyarsak,

$$H = \frac{1}{2m^*}(\vec{p}^{\,2} + e\vec{p}\vec{A} + e\vec{A}\vec{p} + e^2\vec{A}^2) + V(r) \tag{4.51}$$

$$e\vec{p}\vec{A} + e\vec{A}\vec{p} = 2e\vec{A}\vec{p} \tag{4.52}$$

şeklinde yazarsak

$$\vec{p}\vec{A} = \vec{A}\vec{p} \tag{4.53}$$

denklemini sağlayacaktır.

$$H = \frac{1}{2m^*}(\vec{p}^2 + 2e\vec{A}\vec{p} + e^2\vec{A}^2) \tag{4.54}$$

Burada,

$$\vec{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \text{ve} \quad \vec{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \tag{4.55}$$

olarak tanımlanır.

$$\vec{A}.\vec{p} = (-\frac{1}{2}By\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2}Bx\frac{\partial}{\partial y})(-i\hbar)$$

$$\vec{A}.\vec{p} = \frac{1}{2}B\left[\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)(-i\hbar)\right]$$

$$\vec{A}.\vec{p} = \frac{1}{2}B\left[\left(xp_y - yp_x\right)\right] \tag{4.56}$$

$$\vec{A}.\vec{p} = \frac{1}{2}B(L_z)$$

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4}B^2y^2 + \frac{1}{4}B^2x^2 + 0 \tag{4.57}$$

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4}B^2e^2(x^2+y^2) \tag{4.58}$$

buradan bulduğumuz katkı terimleri $\frac{1}{4}B^2e^2(x^2+y^2)$ ve $\frac{1}{2}B(L_z)$ hamilton denkleminde aşağıdaki gibi yazılır.

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{2e}{2m^*}\frac{1}{2}BL_z + \frac{1}{4}\frac{B^2e^2}{2m^*}(x^2+y^2) + V(r) \tag{4.59}$$

Burada taban durum çalışıldığından m=0 $\left(m = -l,...+l \;\rightarrow l = 0\,(taban\,durum)\right)$ değerini alır ve $\frac{2e}{2m^*}\frac{1}{2}BL_z$ ifadesi gider.Hamilton denkleminin son şeklini yazacak olursak,

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{1}{4}\frac{B^2e^2}{2m^*}(x^2+y^2) + V(r) \tag{4.60}$$

halini alır. Burada p'yi denklemde yerine koyarsak,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + \frac{1}{4}\frac{B^2e^2}{2m^*}\rho^2 + V(r) \tag{4.61}$$

(4.61) denkleminin 1. teriminde $\frac{\hbar^2}{2m^*} \approx a^{*2}R^*$ olarak alınır. Bunu Rydberg birim sistemine çevirerek yazarsak öyle olduğunu kolayca görebiliriz.

$$R^* = \frac{m^*e^4}{2\hbar^2\varepsilon_0^2} \tag{4.62}$$

$$a^* = \frac{\hbar^2\varepsilon_0}{m^*e^2} \tag{4.63}$$

buradan a^* denklemini düzenleyip R^* denkleminde yerine koyarsak,

$$\frac{e^2}{\varepsilon_0} = \frac{\hbar^2}{m^* a^*} \tag{4.64}$$

$$\frac{e^4}{\varepsilon_0^2} = \frac{\hbar^4}{m^{*2} a^{*2}} \tag{4.65}$$

$$R^* = \frac{m^*}{2\hbar^2} \frac{\hbar^4}{m^{*2} a^{*2}} \tag{4.66}$$

$$R^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a^{*2}} \tag{4.67}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = R^* a^{*2} \tag{4.68}$$

$$a^* = 1 \tag{4.69}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = R^* \tag{4.70}$$

olarak bulunur.

Daha sonra (4.61) denkleminin 2. terimini düzenlersek,

$$\frac{e\hbar B}{2m^*} = \gamma R^2 \tag{4.71}$$

buradan,

$$\gamma = \frac{e\hbar B}{2m^* R^*} \tag{4.72}$$

olarak yazılır.

$$\gamma^2 = \frac{e^2\hbar^2 B^2}{4m^{*2}R^{*2}} \tag{4.73}$$

$$\frac{e^2B^2}{2m^*} = \frac{\gamma^2 R^{*2} 2m^*}{\hbar^2} \tag{4.74}$$

Burada $\frac{\hbar^2}{2m^*} = R^* a^{*2}$ şeklinde yazılırsa,

$$\frac{e^2B^2}{2m^*} = \frac{\gamma^2 R^*}{a^{*2}} \tag{4.75}$$

denklemi elde edilir.burada a^* terimi 1 olarak alınıp tüm bulduklarımız Hamilton denkleminde yerine yazılırsa elde edeceğimiz denklem şu şekilde olur.

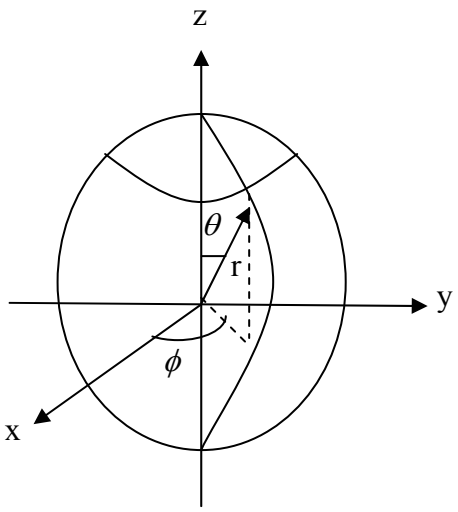
$$H = -\nabla^2 R^* + \frac{1}{4}\gamma^2 R^* \rho^2 + V(r) \tag{4.76}$$

Burada $V'(r) = \frac{V(r)}{R^*}$ olarak alınır.

$$H = -\nabla^2 + \frac{1}{4}\gamma^2 \rho^2 + V'(r) \tag{4.77}$$

Denklemimize manyetik alan katkısından gelen ek terim yukarıda gösterildiği gibi $\frac{1}{4}\gamma^2\rho^2$ terimidir. Burada $\rho^2 = x^2 + y^2$ şeklinde yazılır.

Bulduğumuz denklemi küresel noktaya uygulayabilmek için, küresel koordinatlarda yazarsak,



Sınırlar:

$$0 \le r \le \infty$$
$$0 \le \theta \le \pi$$
$$0 \le \phi \le 2\pi$$

şeklinde değişir.

Burada;

r : Radyal uzaklık

θ : Kutup açısı

ϕ : Boylam açısı

dır. Küresel koordinatlarda x, y ve z'nin karşılıkları ise aşağıda gösterildiği gibi yazılmaktadır.

$$\begin{aligned} x &= r.\sin\theta\cos\phi \\ y &= r.\sin\theta\sin\phi \\ z &= r.\cos\phi \end{aligned} \qquad (4.78)$$

Bunları ρ cinsinden yazacak olursak,

$$\rho^2 = (r\sin\theta\cos\phi)^2 + (r\sin\theta\sin\phi)^2$$
$$\rho^2 = r^2\sin^2\theta\cos^2\phi + r^2\sin^2\theta\sin^2\phi$$

$$\rho^2 = r^2\sin^2\theta(\cos^2\phi + \sin^2\phi)$$
$$\rho^2 = r^2\sin^2\theta \qquad (4.79)$$

şeklinde buluruz.Hamilton denkleminde ρ^2 yerine $r^2 \sin^2\theta$ ifadesini koyarsak,

$$H = -\nabla^2 + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2 + V'(r) \tag{4.80}$$

gelen ek terim aşağıdaki gibi değişecektir.

$$H = -\nabla^2 + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta + V'(r) \tag{4.81}$$

Küresel koordinatlarda hamiltonyene manyetik alan katkısından gelecek ek terim,

$$\frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta \tag{4.82}$$

şeklindedir.

4.2.2 SONLU FARKLAR YÖNTEMİ İLE MANYETİK ALAN ETKİSİNDE KÜRESEL NOKTANIN ÇÖZÜMÜ

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \qquad (4.83)$$

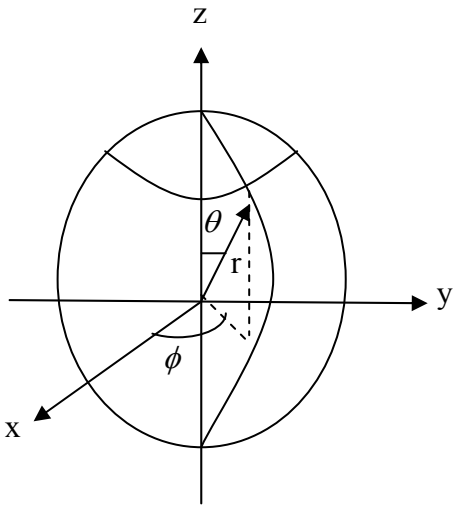
$$\frac{\hbar^2}{2m} \approx R^* a^{*2}$$

$$H = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta-\frac{2}{r} \qquad (4.84)$$

$\frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta \rightarrow$ manyetik alan katkısı

$-\frac{2}{r} \rightarrow$ impurity katkısı

Burada küresel koordinatları ele alarak sınırları kontrol edersek,



$0 \le r \le \infty$

$0 \le \theta \le \pi$

$0 \le \phi \le 2\pi$

$x = r.\sin\theta\cos\phi$

$y = r.\sin\theta\sin\phi$

$z = r.\cos\theta$

z=0 düzleminde çalışmak için,

$\theta = 90^0$ alırsak,

$$\begin{aligned} x &= r.\sin 90^0 \cos\phi \\ y &= r.\sin 90^0 \sin\phi \\ z &= r.\cos 90^0 \end{aligned} \tag{4.85}$$

Burada;

$$\begin{aligned} x &= r\cos\phi \\ y &= r\sin\phi \\ z &= 0 \end{aligned} \tag{4.86}$$

olur.

Böylece hamilton denklemi r ve ϕ'ye bağlı bir denklem olmalıdır.

$$H = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta \tag{4.87}$$

Burada impurityden gelen etkiyi daha sonra eklersek hamilton denklemimizin son hali,

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta\right]\Psi(r,\phi) = (E_r + E_\phi)\Psi(r,\phi) \tag{4.88}$$

$$\left[-\frac{1}{r^2}\left[2r\frac{\partial}{\partial r} + r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right] - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta\right]\Psi(r,\phi) = (E_r + E_\phi)\Psi(r,\phi) \tag{4.89}$$

$$\left[-\frac{2r}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{r^2}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{4}\gamma^2r^2\sin^2\theta\right]\Psi(r,\phi)=(E_r+E_\phi)\Psi(r,\phi)$$

(4.90)

$$\left[-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{4}\gamma^2r^2\sin^2\theta\right]\Psi(r,\phi)=(E_r+E_\phi)\Psi(r,\phi)$$

(4.91)

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{4}\gamma^2r^2\sin^2\theta\right]\Psi(r,\phi)=(E_r+E_\phi)\Psi(r,\phi)$$

(4.92)

MERKEZİ FARKLAR

I. Türev Tanımı $\rightarrow \frac{d\Psi_i}{dx}=\frac{\Psi_{i+1}-\Psi i}{h}$ (4.93)

II. Türev Tanımı $\rightarrow \frac{d^2\Psi_i}{dx^2}=\frac{\Psi_{i-1}-2\Psi_i+\Psi_{i+1}}{h^2}$ (4.94)

İLERİ FARKLAR

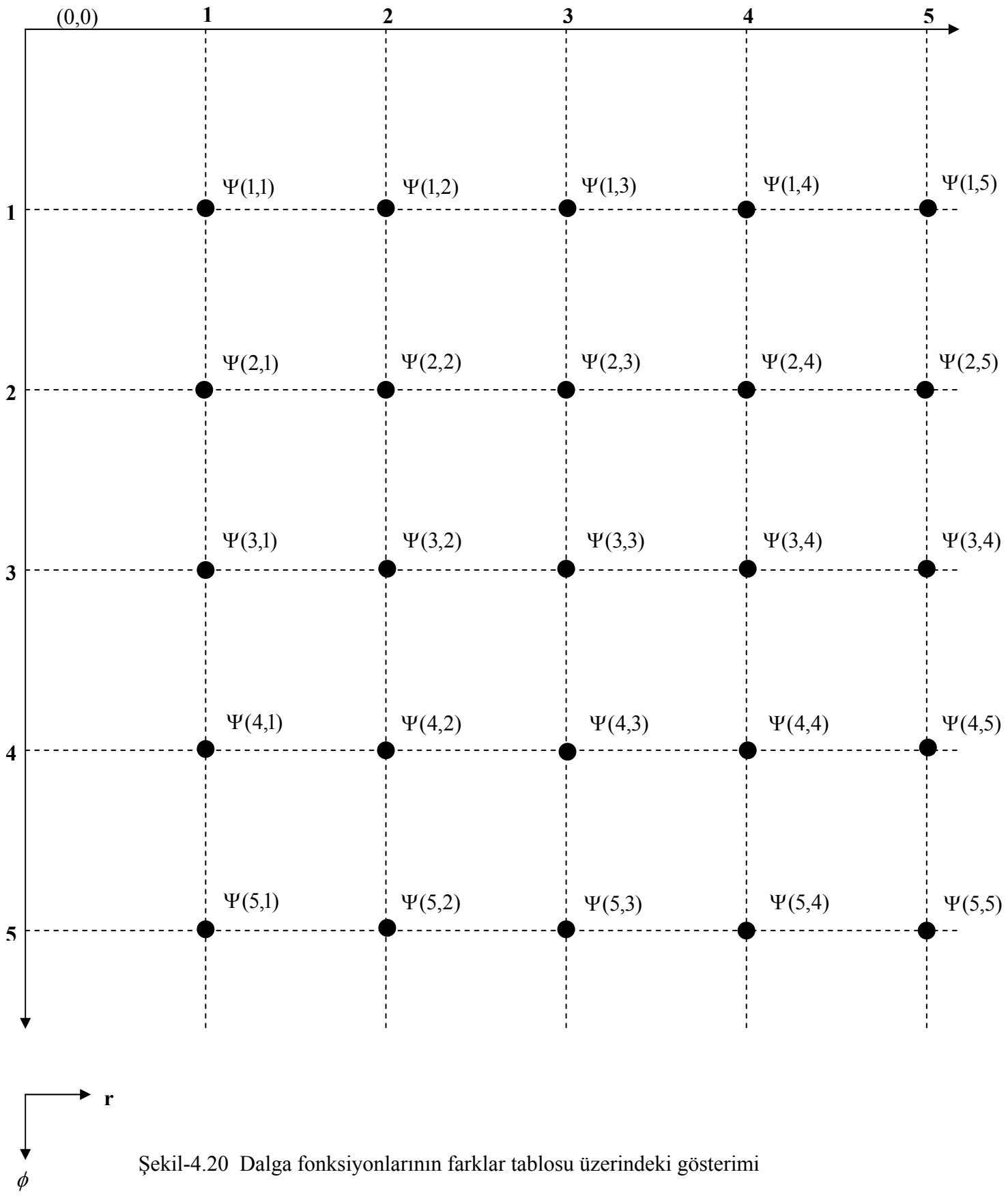
I. Tanım Türevi $\rightarrow \frac{d\Psi_i}{dx}=\frac{\Psi_{i+1}-\Psi_i}{h}$ (4.95)

II. Tanım Türevi $\rightarrow \frac{d^2\Psi_i}{dx^2}=\frac{\Psi_i-2\Psi_{i+1}+\Psi_{i+2}}{h^2}$ (4.96)

GERİ FARKLAR

I. Türev Tanımı $\rightarrow \frac{d\Psi_i}{dx}=\frac{\Psi_i-\Psi_{i-1}}{h}$ (4.97)

II. Türev Tanımı $\rightarrow \frac{d^2\Psi_i}{dx^2}=\frac{\Psi_i-2\Psi_{i-1}+\Psi_{i-2}}{h^2}$ (4.98)



Şekil-4.20 Dalga fonksiyonlarının farklar tablosu üzerindeki gösterimi

Sonlu Farklar Yöntemindeki 1. ve 2. türevleri (r,Φ) tablosuna göre denklemde yerine koyarsak;

$$\mathrm{H}(\phi,r) = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta = \left(E_\phi + E_r\right)\psi(\phi,r) \tag{4.99}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{H}(1,1) = &-\frac{1}{dr^2}\left[\psi(1,1) - 2\psi(1,2) + \psi(1,3)\right] - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(4,1) - 2\psi(1,1) + \psi(2,1)\right] \\ &-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(1,2) - \psi(1,1)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta\psi(1,1) + V(1,1)\psi(1,1) = \left(E_{\phi_1} + E_{r_1}\right)\psi(1,1)\end{aligned} \tag{4.100}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{H}(1,2) = &-\frac{1}{dr^2}\left[\psi(1,1) - 2\psi(1,2) + \psi(1,3)\right] - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(4,2) - 2\psi(1,2) + \psi(2,2)\right] \\ &-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(1,3) - \psi(1,2)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta\psi(1,2) + V(1,2)\psi(1,2) = \left(E_{\phi_1} + E_{r_2}\right)\psi(1,2)\end{aligned} \tag{4.101}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{H}(1,3) = &-\frac{1}{dr^2}\left[\psi(1,2) - 2\psi(1,3) + \psi(1,4)\right] - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(4,3) - 2\psi(1,3) + \psi(2,3)\right] \\ &-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(1,4) - \psi(1,3)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta\psi(1,3) + V(1,3)\psi(1,3) = \left(E_{\phi_1} + E_{r_3}\right)\psi(1,3)\end{aligned} \tag{4.102}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{H}(1,4) = &-\frac{1}{dr^2}\left[\psi(1,3) - 2\psi(1,4) + \psi(1,5)\right] - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(4,4) - 2\psi(1,4) + \psi(2,4)\right] \\ &-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(1,5) - \psi(1,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta\psi(1,4) + V(1,4)\psi(1,4) = \left(E_{\phi_1} + E_{r_4}\right)\psi(1,4)\end{aligned} \tag{4.103}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{H}(1,5) = &-\frac{1}{dr^2}\left[\psi(1,5) - 2\psi(1,4) + \psi(1,3)\right] - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(4,5) - 2\psi(1,5) + \psi(2,5)\right] \\ &-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(1,5) - \psi(1,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta\psi(1,5) + V(1,5)\psi(1,5) = \left(E_{\phi_1} + E_{r_5}\right)\psi(1,5)\end{aligned} \tag{4.104}$$

$$\mathrm{H}(2,1) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(2,1) - 2\psi(2,2) + \psi(2,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(1,1) - 2\psi(2,1) + \psi(3,1)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(2,2) - \psi(2,1)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(2,1) + V(2,1)\psi(2,1) = \left(E_{\phi_2} + E_{r_1}\right)\psi(2,1) \tag{4.105}$$

$$\mathrm{H}(2,2) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(2,1) - 2\psi(2,2) + \psi(2,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(1,2) - 2\psi(2,2) + \psi(3,2)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(2,3) - \psi(2,2)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(2,2) + V(2,2)\psi(2,2) = \left(E_{\phi_2} + E_{r_2}\right)\psi(2,2) \tag{4.106}$$

$$\mathrm{H}(2,3) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(2,2) - 2\psi(2,3) + \psi(2,4)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(1,3) - 2\psi(2,3) + \psi(3,3)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(2,4) - \psi(2,3)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(2,3) + V(2,3)\psi(2,3) = \left(E_{\phi_2} + E_{r_3}\right)\psi(2,3) \tag{4.107}$$

$$\mathrm{H}(2,4) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(2,3) - 2\psi(2,4) + \psi(2,5)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(1,4) - 2\psi(2,4) + \psi(3,4)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(2,5) - \psi(2,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(2,4) + V(2,4)\psi(2,4) = \left(E_{\phi_2} + E_{r_4}\right)\psi(2,4) \tag{4.108}$$

$$\mathrm{H}(2,5) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(2,5) - 2\psi(2,4) + \psi(2,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(1,5) - 2\psi(2,5) + \psi(3,5)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(2,5) - \psi(2,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(2,5) + V(2,5)\psi(2,5) = \left(E_{\phi_2} + E_{r_5}\right)\psi(2,5)$$

(4.109)

$$\mathrm{H}(3,1) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(3,1) - 2\psi(3,2) + \psi(3,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,1) - 2\psi(3,1) + \psi(4,1)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(3,2) - \psi(3,1)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(3,1) + V(3,1)\psi(3,1) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_1}\right)\psi(3,1) \tag{4.110}$$

$$\mathrm{H}(3,2) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(3,1) - 2\psi(3,2) + \psi(3,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,2) - 2\psi(3,2) + \psi(4,2)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(3,3) - \psi(3,2)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(3,2) + V(3,2)\psi(3,2) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_2}\right)\psi(3,2) \tag{4.111}$$

$$\mathrm{H}(3,3) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(3,2) - 2\psi(3,3) + \psi(3,4)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,3) - 2\psi(3,3) + \psi(4,3)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(3,4) - \psi(3,3)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(3,3) + V(3,3)\psi(3,3) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_3}\right)\psi(3,3) \tag{4.112}$$

$$\mathrm{H}(3,4) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(3,3) - 2\psi(3,4) + \psi(3,5)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,4) - 2\psi(3,4) + \psi(4,4)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(3,5) - \psi(3,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(3,4) + V(3,4)\psi(3,4) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_4}\right)\psi(3,4) \tag{4.113}$$

$$\mathrm{H}(3,5) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(3,5) - 2\psi(3,4) + \psi(3,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,5) - 2\psi(3,5) + \psi(4,5)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(3,5) - \psi(3,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(3,5) + V(3,5)\psi(3,5) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_5}\right)\psi(3,5) \tag{4.114}$$

$$\mathrm{H}(4,1) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(4,1) - 2\psi(4,2) + \psi(4,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(3,1) - 2\psi(4,1) + \psi(5,1)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(4,2) - \psi(4,1)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(4,1) + V(4,1)\psi(4,1) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_4}\right)\psi(4,1) \tag{4.115}$$

$$\mathrm{H}(4,2) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(4,1) - 2\psi(4,2) + \psi(4,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(3,2) - 2\psi(4,2) + \psi(5,2)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(4,3) - \psi(4,2)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(4,2) + V(4,2)\psi(4,2) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_2}\right)\psi(4,2) \tag{4.116}$$

$$\mathrm{H}(4,3) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(4,2) - 2\psi(4,3) + \psi(4,4)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(3,3) - 2\psi(4,3) + \psi(5,3)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(4,4) - \psi(4,3)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(4,3) + V(4,3)\psi(4,3) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_3}\right)\psi(4,3) \tag{4.117}$$

$$\mathrm{H}(4,4) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(4,3) - 2\psi(4,4) + \psi(4,5)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(3,4) - 2\psi(4,4) + \psi(5,4)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(4,5) - \psi(4,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(4,4) + V(4,4)\psi(4,4) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_4}\right)\psi(4,4) \tag{4.118}$$

$$\mathrm{H}(4,5) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(4,5) - 2\psi(4,4) + \psi(4,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(3,5) - 2\psi(4,5) + \psi(5,5)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(4,5) - \psi(4,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(4,5) + V(4,5)\psi(4,5) = \left(E_{\phi_3} + E_{r_5}\right)\psi(4,5) \tag{4.119}$$

$$\mathrm{H}(5,1) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(5,1) - 2\psi(5,2) + \psi(5,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,1) - 2\psi(5,1) + \psi(4,1)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(5,2) - \psi(5,1)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(5,1) + V(5,1)\psi(5,1) = \left(E_{\phi_5} + E_{r_4}\right)\psi(5,1) \tag{4.120}$$

$$\mathrm{H}(5,2) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(5,1) - 2\psi(5,2) + \psi(5,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,2) - 2\psi(5,2) + \psi(4,2)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(5,3) - \psi(5,2)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(5,2) + V(5,2)\psi(5,2) = \left(E_{\phi_5} + E_{r_2}\right)\psi(5,2) \tag{4.121}$$

$$\mathrm{H}(5,3) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(5,2) - 2\psi(5,3) + \psi(5,4)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,3) - 2\psi(5,3) + \psi(4,3)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(5,4) - \psi(5,3)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(5,3) + V(5,3)\psi(5,3) = \left(E_{\phi_5} + E_{r_3}\right)\psi(5,3) \tag{4.122}$$

$$\mathrm{H}(5,4) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(5,3) - 2\psi(5,4) + \psi(5,5)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,4) - 2\psi(5,4) + \psi(4,4)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(5,5) - \psi(5,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(5,4) + V(5,4)\psi(5,4) = \left(E_{\phi_5} + E_{r_4}\right)\psi(5,4) \tag{4.123}$$

$$\mathrm{H}(5,5) = -\frac{1}{dr^2}\left[\psi(5,5) - 2\psi(5,4) + \psi(5,3)\right] - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}\left[\psi(2,5) - 2\psi(5,5) + \psi(4,5)\right]$$
$$-\frac{2}{r}\frac{1}{dr}\left[\psi(5,5) - \psi(5,4)\right] + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta\psi(5,5) + V(5,5)\psi(5,5) = \left(E_{\phi_5} + E_{r_5}\right)\psi(5,5) \tag{4.124}$$

Sonlu Farklar Yöntemiyle Kuantum Nokta Çözümün Matris Formu

A4	B1	DR2	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(1,1)
DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(1,2)
0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(1,3)
0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	Ψ(1,4)
0	0	DR2	B3	A6	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	Ψ(1,5)
D	0	0	0	0	A4	B1	DR2	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(2,1)
0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(2,2)
0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(2,3)
0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(2,4)
0	0	0	0	D	0	0	DR2	B3	A6	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(2,5)
0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	A4	B1	DR2	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(9,1)
0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(3,2)
0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	Ψ(3,3)
0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	Ψ(3,4)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	DR2	B3	A6	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	Ψ(3,5)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	A4	B1	DR2	0	0	D	0	0	0	0	Ψ(4,1)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	0	Ψ(4,2)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	0	Ψ(4,3)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	0	D	0	Ψ(4,4)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	DR2	B3	A6	0	0	0	0	D	Ψ(4,5)
0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	A4	B1	DR2	0	0	Ψ(51)
0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	0	Ψ(5,2)
0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	0	Ψ(5,3)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	DR2	A5	B2	Ψ(5,4)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	DR2	B3	A6	Ψ(5,5)

Buradaki katsayılar;

$$A4 = -\frac{1}{dr^2} + \frac{2}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2} + \frac{2}{r}\frac{1}{dr} + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta + V(r,\phi)$$

$$A5 = \frac{2}{dr^2} + \frac{2}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2} + \frac{2}{r}\frac{1}{dr} + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta + V(r,\phi)$$

$$A4 = -\frac{1}{dr^2} + \frac{2}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2} + \frac{2}{r}\frac{1}{dr} + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta + V(r,\phi)$$

$$B1 = \frac{2}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{1}{dr}$$

$$B2 = -\frac{1}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{1}{dr}$$

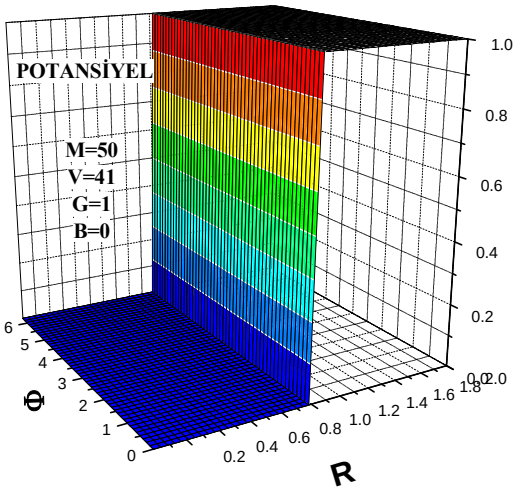
$$B3 = \frac{2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{1}{dr}$$

$$D = -\frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{1}{d\phi^2}$$

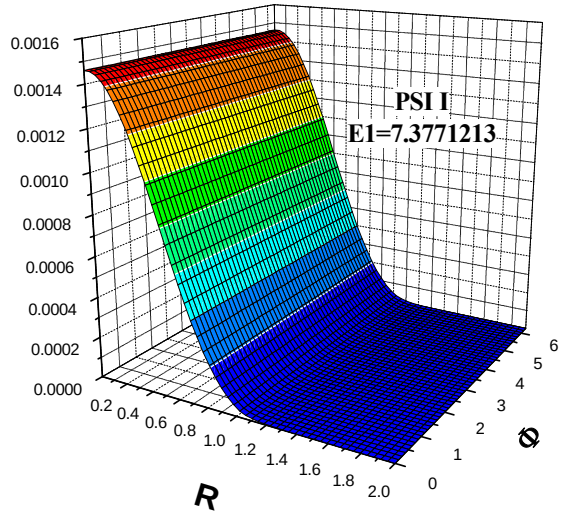
$$DR2 = -\frac{1}{dr^2}$$

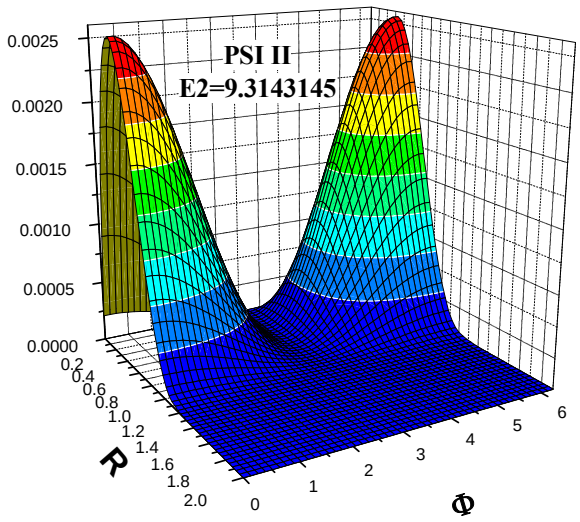
şeklindedir.

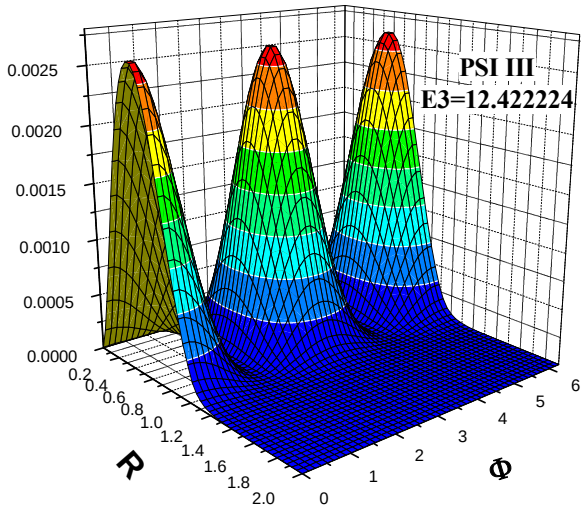
Şekil-4.21'de iki boyutta küresel kuantum noktasının gösterimi ve ilk dört enerjisiyle birlikte dalga fonksiyonlarının iki boyutlu gösterimi vardır. Burada sonlu küresel kuantum noktasının taban durum, 1., 2. ve 3. uyarılmış durumlarının dalga fonksiyonları ve bunların enerji değerleri verilmiştir. Potansiyel yüksekliği 41 R^*, kuyu genişliği ise 1a^* alınmıştır.

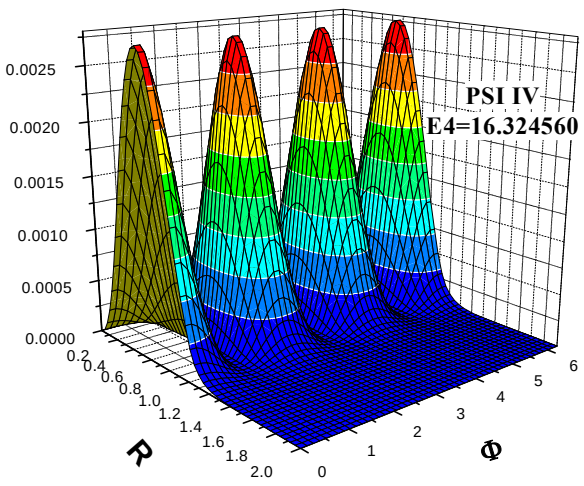


$0<R<\infty$
$0<\Phi<2\pi$
$0<\theta<\pi/2$









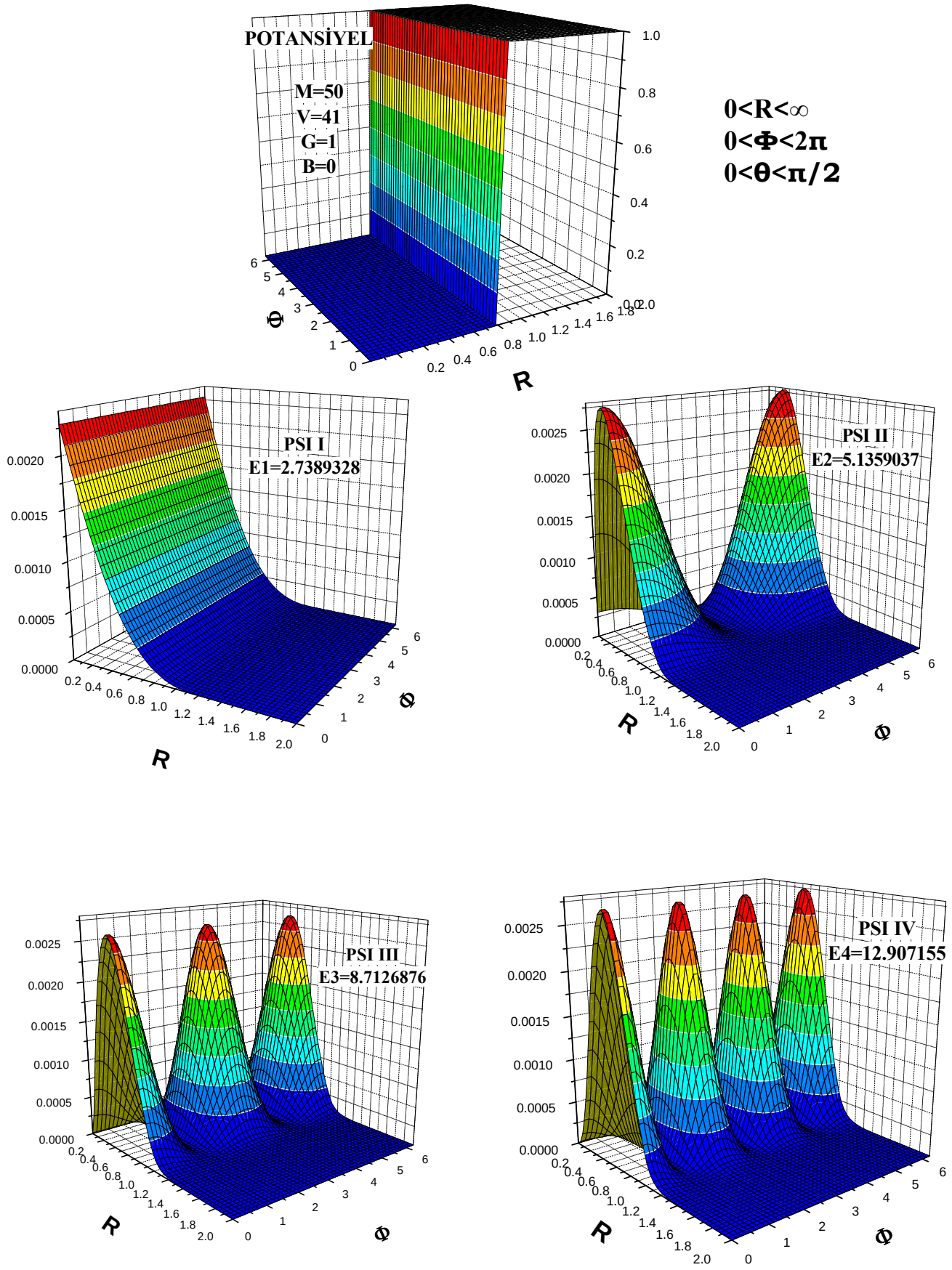
Şekil-4.21 Sonlu farklar yöntemiyle kuantum noktanın çözümü

Sisteme yabancı atom konulduğunda hamilton denklemi aşağıdaki şekilde olur.

$$\mathrm{H}(\phi, r) = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{4}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta - \frac{2}{r} = \left(E_\phi + E_r\right)\psi(\phi, r) \tag{4.125}$$

Bu denklem sonlu farklar yöntemiyle yabancı atom katkısı olmayan kısımlardaki matrisler gibi yeniden ele alınıp tekrardan çözülerek bulunur. Yabancı atom katkısı çözülmek istendiğinde denkleme sadece $-\frac{2}{r}$ terimi gelmektedir.

Şekil-4.22'de ise bu yabancı atom eklenmişkenki ilk enerji seviyeleri dalga fonksiyonlarıyla birlikte iki boyutlu olarak gösterilmiştir. Burada sonlu küresel kuantum noktasının taban durum, 1., 2. ve 3. uyarılmış durumlarının dalga fonksiyonları ve yabancı atom katkısında bunların enerji değerlerindeki değişim verilmiştir. Yabancı atomun eklenmesi enerji seviyelerini düşürmüştür.



Şekil-4.22 Yabancı atom eklenmiş durumda sonlu farklar yöntemiyle kuantum noktasının çözümü

Bağlanma enerjisi yabancı atomun olmadığı andaki enerji ile yabancı atom olduğu andaki enerjiler arasındaki farktır.

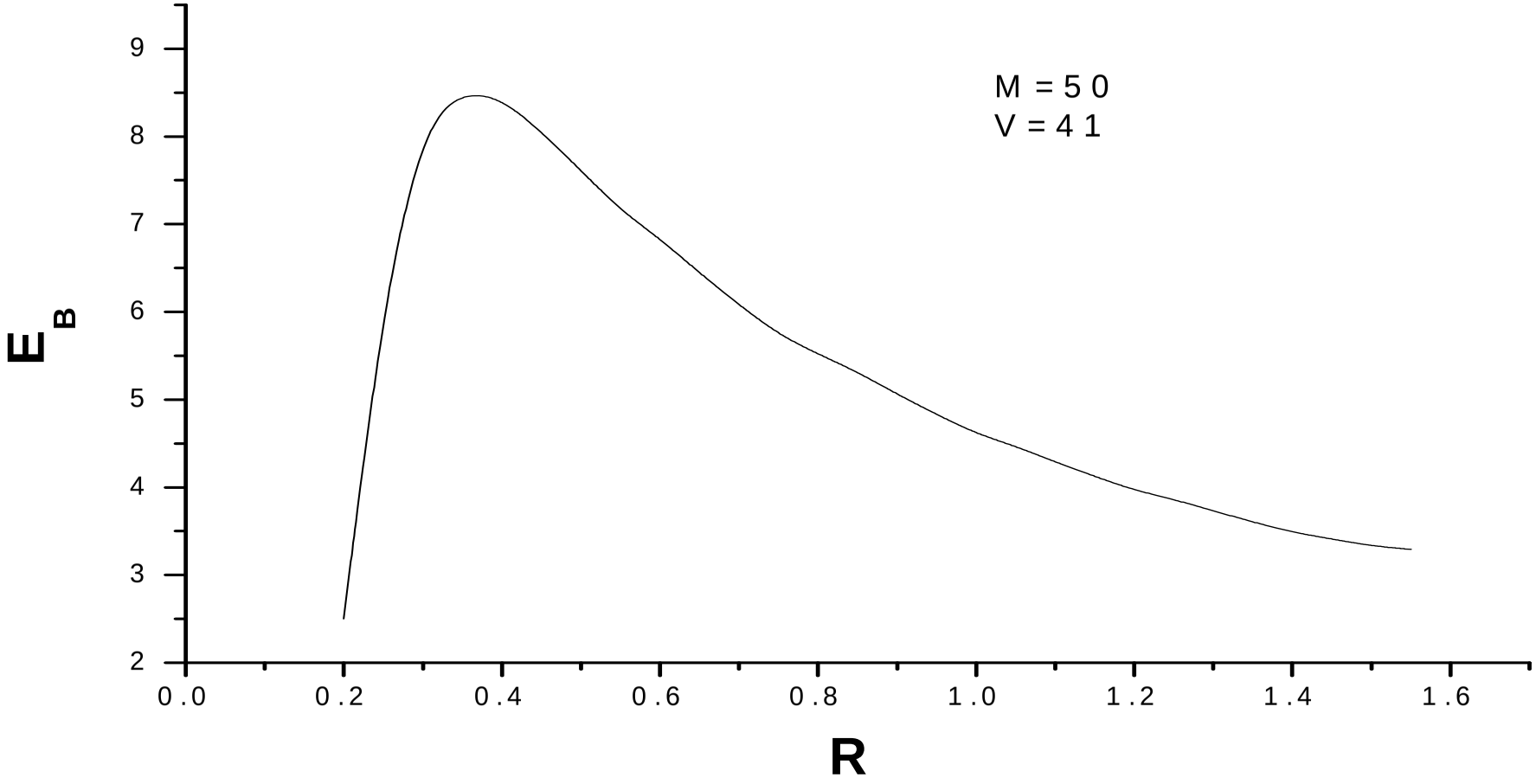
$$E_B=E_0-E_I \tag{4.126}$$

Burada E_B bağlanma enerjisi, E_0 yabancı atom olmadığı andaki enerji ve E_I ise yabancı atom olduğu durumdaki enerjidir.

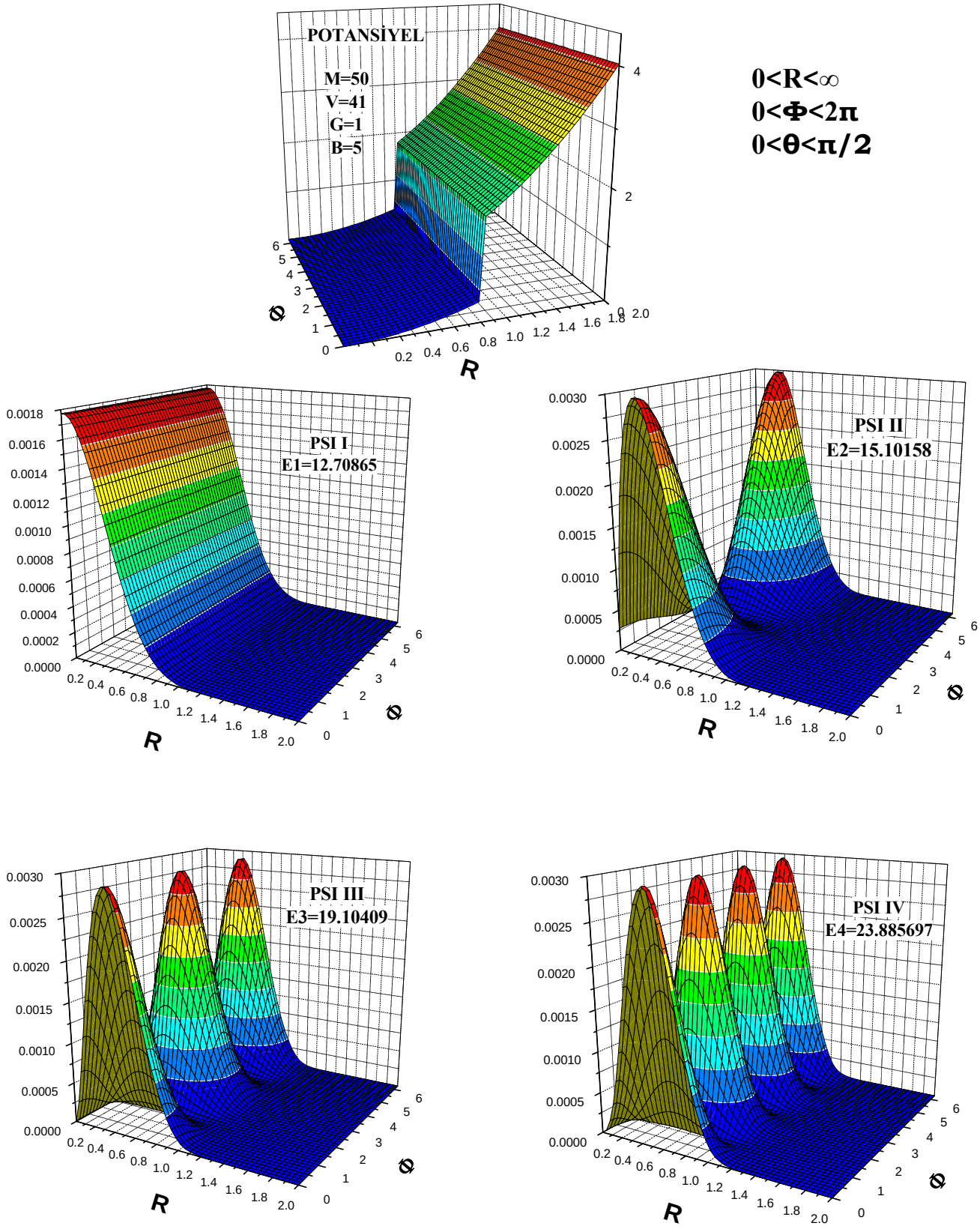
Şekil-4.23'te kuantum noktası genişliğiyle bağlanma enerjisinin değişimi gösterilmiştir.

Bağlanma enerjisindeki değişim görüldüğü gibi en başta artmış kuantum nokta genişliği arttıkça giderek azalmıştır.

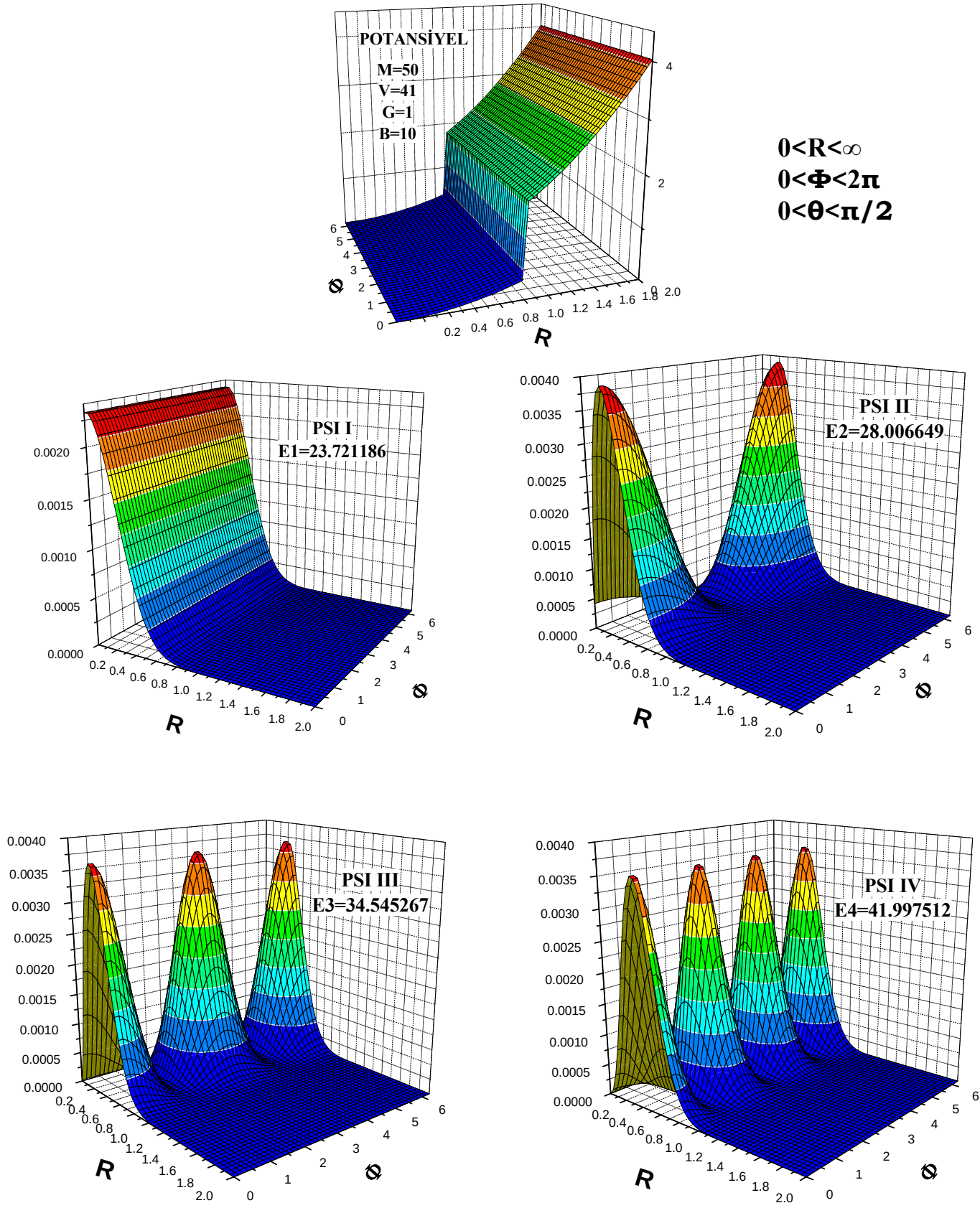
Son olarak da değişik manyetik alanlar etkisi altında kuantum noktasının ilk dört enerji seviyeleriyle birlikte iki boyutlu dalga fonksiyonları Şekil-4.24 (B=5 Tesla) Şekil-4.25 (B=10 Tesla) ve Şekil-4.26 'da (B=20 Tesla için) gösterilmiştir. Manyetik alan arttıkça, enerji seviyeleri yükseltmiştir. Ayrıca manyetik alanın artışı potansiyelin değişmesine, giderek parabolleşmesine sebep olmuştur.



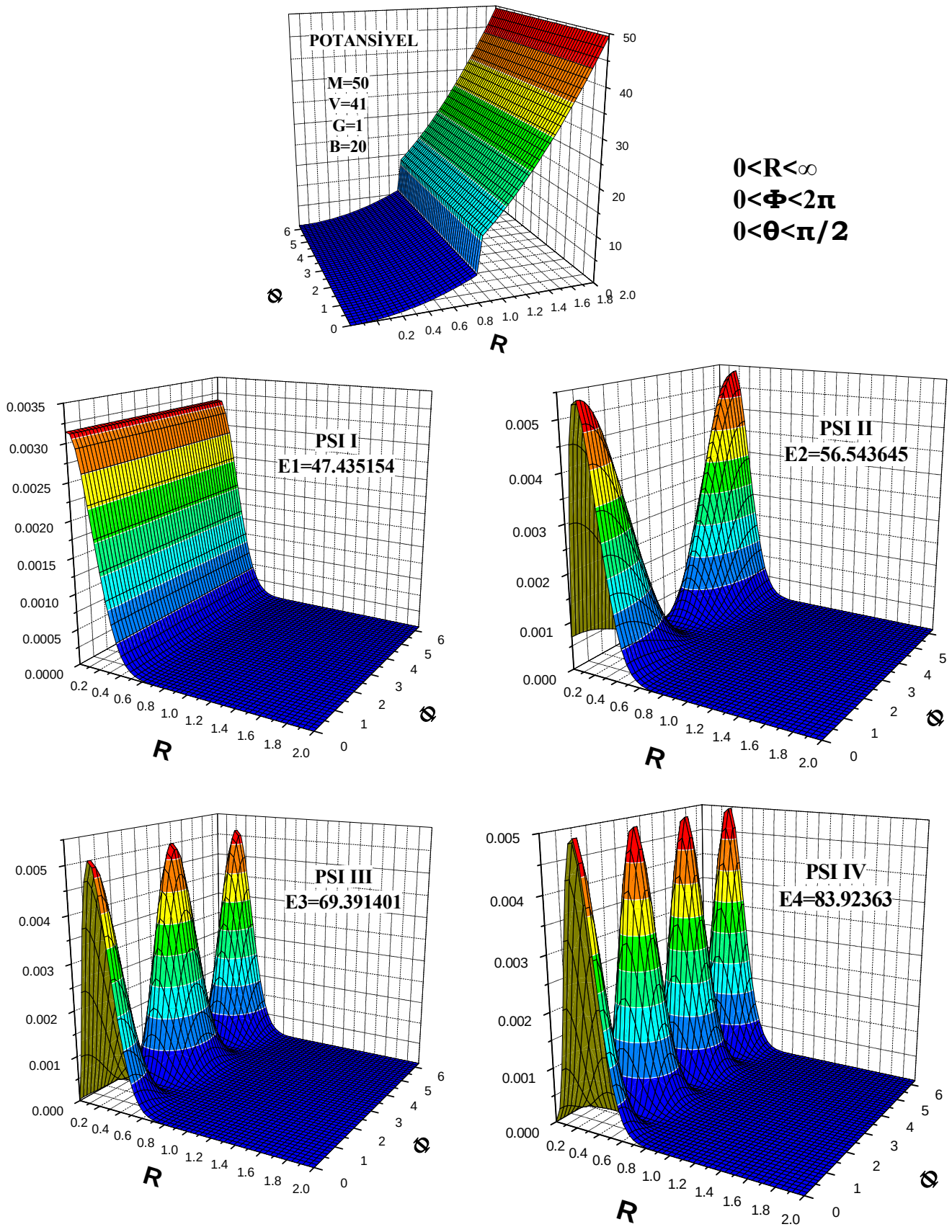
Şekil-4.23 Bağlanma Enerjisi



Şekil-4.24 Sonlu farklar yöntemiyle manyetik alan etkili(B=5) kuantum nokta çözümü



Şekil-4.25 Sonlu farklar yöntemiyle manyetik alan etkili(B=10) kuantum nokta çözümü



Şekil-4.26 Sonlu farklar yöntemiyle manyetik alan etkili(B=20) kuantum nokta çözümü

SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada kuantum noktasının çözümünü ve kuantum kuyu çözümlerinin bir kısmını sonlu farklar yöntemiyle yaptık. Sonlu farklar yöntemini kullanmamızdaki amaç varyasyonel hesaplama yöntemlerine gitmeden çok kısa zamanda ve doğru sonuçlar vererek istediğimiz çözümlere ulaşmamızdır. Her zaman karşımıza elle çözülebilir diferansiyel denklemler çıkmıyor. Bu diferansiyel denklemleri çözmek ve enerji düzeyleri ile dalga fonksiyonlarını bulmak ayrıca bunlara manyetik ve elektrik alan ekleyip oluşan diferansiyel denklemleri çözmek çok zor veya olanaksızdır. Tam çözümün yapılamadığı durumlardaysa yaklaşım yollarına başvurulur. Bu yöntem, bizim karmaşık denklem çözümlerine ve yaklaşımlara götürmeden kısa yoldan istediğimiz sonuca ulaşmamızı sağlar. Bu yöntemle enerji düzeyleri ve dalga fonksiyonlarını karmaşık işlemlere gitmeden kolayca bulduk.

Bu çalışmanın ilk aşamasında sonlu (kare), sonsuz ve parabolik kuantum kuyularında hapsedilmiş bir elektronun ‘E’ enerjileri ($E<V_0$) ve ψ dalga fonksiyonları bilgisayar yardımıyla elektrik alan yokken ve elektrik alan varken sonlu farklar yöntemiyle hesaplanmıştır. Sonlu, sonsuz ve parabolik kuantum kuyuları için potansiyel-konum, dalga fonksiyonu-konum değişimleri şekillerde verilmiştir.

‘F’ elektrik alanının sıfır olmaması ve olması halinde her üç kuyuda (sonlu, sonsuz ve paralel) taban durum enerjisinin E_0 ‘L’ kuyu genişliğine bağlılığı şekillerde gösterilmiştir. ‘L’ kuyu genişliği arttıkça enerjinin küçüldüğü görülmektedir. Küçük ‘L’ lerde enerjideki düşüş sonsuz kuantum kuyusunda daha hızlı olmakta, büyük ‘L’ değerlerinde enerji de azalarak bir doyuma gitmektedir. Her üç kuyuda enerji x doğrultusunda artan elektrik alanla azalmıştır. Küçük elektrik alanlarda azalma çok az, büyük elektrik alanlarda enerji azalması daha fazla olmuştur. Bu azalma sonlu ve sonsuz kuyular karşılaştırıldığında sonlu kuantum kuyusunda daha fazla olduğu görülmüştür. Son olarak da yabancı atom etkinde farklı elektrik alanlar altında her üç kuyu için bağlanma enerjisi incelenmiştir. Sonlu kuyu ve parabol kuyuda bağlanma enerjisi en başta artmış kuyu genişliği arttıkça da giderek düşmüştür. Sonsuz kuyuda ise bağlanma enerjisi kuyu genişliği arttıkça sürekli düşmüştür.

İkinci aşamada ise küresel kuantum noktası ele alınarak ilk dört enerji seviyesi yine bilgisayar yardımıyla yabancı atom etkisi altında ve farklı manyetik alan varken ve yokken sonlu farklar yöntemiyle incelenmiştir.

Manyetik alanın sıfır olması ve olmaması halinde küresel kuantum noktasındaki değişim şekillerde gösterilmiştir. Manyetik alanın eklenmesi ilk dört enerjide de yükselmeye neden olmuştur. Manyetik alanı artırdıkça yükselme de artmıştır. Yabancı atom etkisi altındaysa enerjiler düşmüştür. Bağlanma enerjisindeki değişim ise şekillerden de görüldüğü gibi en başta artmış kuantum nokta genişliği arttıkça giderek azalmıştır.

Bu çalışmada hesaplanan bütün sonuçlar literatür ile uyum içerisindedir. Yaptığımız bu çalışma değişik potansiyellerde, farklı geometrik şekillerdeki kuantum kuyu, kuantum tel ve kuantum noktalarında tekrarlanabilir.

KAYNAKLAR

1. **AKBAŞ H.,EKMEKÇİ S.,AKTAŞ Ş.,TOMAK M.,** 1995, ‘‘Electric field effect on shallow impurity states in multiple quantum-well structure’’, *Tr. J of Physics,* **19**, 381.

2. **AKTAŞ Ş., BOZ F.,** 2004, ‘‘The binding energy of a hydrogenic impurity in triple GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum well-wire under applied electric field ’’, *Trakya Univ. J. Sci.,* **5(2)**, 159.

3. **BARTICEVIC Z., PACHECO M., LATGÉ A.,** 2000, ‘‘Quantum rings under magnetic fields: electronic and optical properties’’ *Phys. Rev. B* **62***,* 6963.

4. **BRANIS S V., LI G., BAJAJ K.K.,** 1993, ‘‘Hydrogenic impurities in quantum wires in the presence of a magnetic field’’ *Phys. Rev. B,* **47**, 1316.

5. **CANTELE G., NINNO D., IADONISI G.,** 2000, ’’Confined states inellipsoidal quantum dots’’ , *Phys.:Condens. Matter,* **12**, 9019.

6. **CHAO HT, TRAN THOAI DB.,** 1995 ‘‘Effect of the electric field on a hydrogenic impurity in a quantum-well wire’’,*Physica B,* **205**, 273.

7. **DE CARVALHO R.R.L., FILHO J.R., FARIAS G.A., FREIRE V.N.,** 1999,’’Band structure of a cylindrical GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ superwire’’, *Superlatt. Microstruct.* **25**, 221.
8. **ERDOĞAN İ.,** 1997,’’Kuantum Kuyularında Elektron ve Deşiğe Elektrik Alanın Etkisi’’ ,Trakya Üniversitesi Yüksek Lisans Tezi.
9. **ILAIWI K.F., TOMAK M.** 1999,’’ Polarizabilities of shallow donors in finite-barrier quantum wires’’.*Phys. Rev. B,* **42**,3132.
10. **KARAOĞLU B.,** 1994,’’ Kuantum Mekaniğine Giriş’’,Bilgitek yayıncılık, İstanbul.
11. **KARAOĞLU B.,** 1996,’’ Fizik ve Mühendislikte Matematik Yöntemler’’,2. basım, Bilgitek yayıncılık, İstanbul.
12. **KITTEL C.,** 1996,’’ Katıhal Fiziğine Giriş’’,(Bekir Karaoğu),6. basım, 224, Bilgitek yayıncılık, İstanbul.

13. LATGÉ A., MONTENEGRO N.P., OLIVEIRA L.E., 1992,'' Photoluminescence study of shallow acceptors in GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ cylindrical quantum-well wires'' *Phys. Rew. B,* **45**, 6742.

14. LATGÉ A., MONTENEGRO N.P., OLIVEIRA L.E., 1992,'' Infrared transitions between hydrogenic states in cylindrical GaAs-(Ga,Al)As quantum-well wires'', *Phys. Rew. B,* **45,** 9420.

15. LEE J., SPECTOR HN, 1983,'' Impurity-limited mobility of semiconducting thin wire'', *J. Appl. Phys.* **54(7)**, 3921.

16. MANASELYAN A.KH., AGHASYAN M. M., KIRAKOSYAN A.A., 2002,'' The mobility of charge carries in a size-quantized coated semiconductor wire'', *Physica E,* **14**, 366.

17. MONTES A., DUQUE C.A., PORRAS-MONTENEGRO N., 1998,'' Density of shallow-donor impurıty states in rectangular cross section GaAs quantum-well wires under applied electric field'', *J. Physc.: Condens Matter,* **11**, 5351-5358.

18. NICULESCU E. GEARBA A., CONE G., NEGUTU C., 2001,'' Magnetic field dependence of the binding energy of shallow donors in GaAs quantum-well wires'' *Superlatt. Microstruct.,* **29**, 319.

19. ÖZKAPI B., 2006,''Hidrojenik Olmayan Yapıların Elektronik Özellikleri'', Trakya Üniversitesi Yüksek Lisans Tezi.

20. PRESS W. H., TEUKOLSKY S. A., VETTERLING W. T., FLANNERY B. P., 1992,'' Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing (second edition)'', Cambridge University Press

21. RIBERIO F.J. BRUNO-ALFONSO A., LATGÉ A. 1998,'' Impurıty-related energies of semiconducting superlattices: Periodicity and magnetic-field effect'' *Phys.* Rev. B., **57**, 13010.

22. SARI H., **SÖKMEN I., YEŞİLGÜL U.,** 2004,'' Photoionization of donor impurities in quantum wires in a magnetic field'' *J. Phys. D: Appl. Phys.,* **37**, 674.

23. TAYLOR J.R.,ZAFARİTOS C., 1996,'' Fizik ve Mühendislikte Modern Fizik'', (Bekir Karaoğlu), Bilgitek yayıncılık, İstanbul.

24. ULAŞ M., AKBAŞ H., TOMAK M., 1997,'' Shallow donors in a quantum well wire: Electric field and geometrical effects'', *Phys. Stat. Sol.,* **200**, 67.

25. WANG C.K., BERGGREN K.F., 1998,''Spontaneous spin polarization in quantum wires'', *Physica E,* **2**, 964.

ÖZGEÇMİŞ

02.11.1984 yılında KKTC'nin Lefkoşa ilçesinin Ortaköy semtinde doğdum. İlköğrenimimi Alaysa İlköğretim okulunda tamamladıktan sonra Gazimağusa Türk Maarif Kolleji'ne girdim. 2001 yılında buradan mezun oldum ve aynı yıl Trakya Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde lisans eğitimime başladım. 2005 yılında Fizik Bölümünden mezun oldum. Yine aynı yıl Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Ana Bilim Dalında Yüksek Lisans öğrenimine başladım.