DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARDA
YABANCI ATOM PROBLEMİ VE EKSİTONLAR

Figen KARACA BOZ

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ

EDİRNE-2005

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARDA YABANCI ATOM PROBLEMİ VE EKSİTONLAR

Figen KARACA BOZ

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ

EDİRNE-2005

T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARDA YABANCI ATOM PROBLEMİ VE EKSİTONLAR

Figen KARACA BOZ

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 11 / 11 /2005 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Hasan AKBAŞ	**Prof. Dr. Ş. Erol OKAN**	**Yrd. Doç Dr. Şaban AKTAŞ**
Üye	**Üye**	**Danışman**

Yrd. Doç Dr. Mehmet YILMAZ	**Yrd. Doç Dr. Aydın CARUS**
Üye	**Üye**

Doktora Tezi
Düşük Boyutlu Yarı İletken Yapılarda Yabancı Atom Problemi ve Eksitonlar
Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu çalışmada, güncel teknolojik uygulamalarda önemli bir yer tutan düşük boyutlu yarı iletken yapıların fiziksel özellikleri incelenmiştir. Temel olarak $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu tellerinde hapsedilen bir elektronun özellikleri çalışılmıştır. Hesaplamalar efektif kütle yaklaşımı içinde varyasyon metodu ve dördüncü-derece Runge Kutta nümerik metodu kullanılarak yapılmıştır. Kuantum kuyu tellerinde iki geometrik yapı üzerinde hesaplamalar yapılmıştır. Bu yapılardan biri dikdörtgen kesitli üçlü $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu teli ve diğeri coaxial $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu telidir. Bu kuantum telleri içinde hapsedilen bir elektrona düzgün uygulanan elektrik ve manyetik alanın etkileri araştırılmıştır. Bağlanma enerjisinin keskin değişimleri, elektronun gördüğü potansiyel enerjiye, yapının boyutlarına, yabancı atomun konumuna, düzgün uygulanan elektrik ve manyetik alan şiddetlerine bağlı olduğu bulunmuştur. Bu yüzden, dışarıdan uygulanan alanlar kuantum tellerinin elektronik ve optik özellikleri üzerine önemli bir etkisi olduğu gösterilmiştir.

Literatürde düşük boyutlu yapıların fiziksel özelliklerini veren birbirinden çok farklı yapı sabitleri(dielektrik sabiti, yasak enerji aralığı formülü ve bant oranı sabitleri) bulunmaktadır. Bu çalışmada kuantum kuyularında deneyle uyumlu en uygun yapı sabitlerini belirlemek için eksiton geçiş enerjilerini nümerik olarak hesaplanmıştır.

Yıl :2005
Sayfa :84
Anahtar Kelimeler: Kuantum Kuyu Teli, Manyetik Alan, Elektrik Alan,Yabancı Atom, Bağlanma Enerjisi

PhD Thesis
The Impurity Problem in Low Dimensional Structures and Excitons
Trakya University, Graduate School of Natural and Applied Science
Department of Physics

SUMMARY

In this work, the physical 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 wires are studied. The calculations are performed using the variational and the fourth-order Runge Kutta numerical methods together within the effective mass approximation. The calculations are focused on two geometrical structures in quantum well wires. The first of this structures is rectangular cross sectional triple GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum well wire and the other is coaxial cylindrical cross sectional GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum well wire. The effects of uniform applied electric and magnetic fields on an electron confined in the quantum wires are investigated. We have found that the sharp changes in the binding energy occurs depending on the magnitude of the potential energy walls, the dimensions of structure, the impurity location and uniform electric and magnetic field strength. Thus, it is seen that the applied external fields are much more effective on the electronic and optical properties of the quantum wires.

In addition, the structure constants such as the dielectric constant, the forbidden energy-gap formula and the band ratio constant have a variety of parameterization in concerning literature. The exciton transition energies in quantum wells are numerically calculated and tested against experimental study.

Year :2005
Pages :84
Keywords: Quantum Well Wire, Magnetic Field, Electric Field, Impurity, Binding Energy.

TEŞEKKÜR

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

Bölüm Başkanımız Prof. Dr. S. Askeri BARAN'a, akademik çalışmayı öğreten yüksek lisans tez hocam Prof. Dr. Hüseyin DİRİM'e ve çalışmam sırasında yardımlarıyla katkıda bulunan bölümümün tüm elemanlarına teşekkürlerimi sunarım.

Her zaman yanımda olan ve desteğini esirgemeyen aileme, sevgili eşim Mesut'a ve kızım Melek Zülal'e benimle sıkıntılara katlandıkları ve manevi desteklerini hep canlı tuttukları için sonsuz teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET.....i

SUMMARY.....ii

TEŞEKKÜR.....iii

İÇİNDEKİLER.....iv

SİMGELER DİZİNİ.....vi

BÖLÜM 1: GİRİŞ.....1

BÖLÜM 2: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARDA GENEL BİLGİLER.....4

2.1. Düşük Boyutlu Yapılarda Hapsedilen Bir Elektronun Özellikleri.....5

2.1.a. $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/ Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyuları.....5

2.1.b. $GaAs/ Al_xGa_{1-x}As$ kuantum telleri.....9

2.1.c. Eksitonlar.....11

2.2. Düşük Boyutlu Yapılarda Yabancı Atom Problemi.....15

2.2.a. Kuantum kuyularında yabancı atom problemi.....15

2.2.b. Kuantum tellerinde yabancı atom problemi.....18

2.3. Düşük Boyutlu Yapılarda Elektrik Alanın Etkisi.....19

2.4. Düşük Boyutlu Yapılarda Manyetik Alanın Etkisi.....20

BÖLÜM 3: SAYISAL YÖNTEMLER.....21

3.1. Varyasyon Yöntemi.....21

3.2. Runge Kutta Yönteminin Kuantum Kuyularına Uygulanması.....23

BÖLÜM 4: SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR.....32

4.1. Dikdörtgen Kesitli Üçlü Kuantum Tellerinde Yabancı Atoma Elektrik Alan Etkisi.....32

4.2. Coaxial Silindirik Kesitli GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ Kuantum Kuyu Tellerinde Yabancı Atoma Manyetik Alan Etkisi.....43

4.3. Coaxial Silindirik Kesitli GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ Kuantum Kuyu Tellerinde Yabancı Atoma Manyetik Alan ve Elektrik Alan Etkisi.....53

4.4. Simetrik ve antisimetrik . $Al_xGa_{1-x}As$/GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyularında eksiton geçiş enerjilerinin nümerik yöntemler kullanılarak hesaplanması.....66

KAYNAKLAR.....78

ÖZGEÇMİŞ.....83

SİMGELER DİZİNİ

m* : Elektronun etkin kütlesi

a* : Etkin Bohr yarıçapı

R* :Etkin Rydberg enerjisi

ε_0 :Dieletrik sabiti

γ :Manyetik alanın boyutsuz değeri

λ :Varyasyonel parametre

a :Varyasyonel parametre

b :Varyasyonel parametre

ψ :Dalga fonksiyonu

xi :Yabancı atomun konumu

yi :Yabancı atomun konumu

zi : Yabancı atomun konumu

ρ i : Yabancı atomun konumu

θ : Kartezyen koordinatlarda x ekseni ile yaptığı açı

φ :Silindirik koordinatlarda açı

η :Hamiltonyendeki elektrik alan terimi

$\mu_{h(l)}$: Heavy(ağır) boşluk ve light(hafif) boşluk için ilerleme yönüyle bağlantılı dik yüzeydeki etkin kütlelerdir

Kısaltmalar

KKT :Kuantum kuyu teli

BÖLÜM 1: GİRİŞ

Yarı iletken yapılar, Bardeen ve Brattain tarafından 1947 yılında transistörü keşfedilmesinden bu yana çok hızlı bir şekilde gelişti. 1970'li yıllarda ise entegre devre devrimi gerçekleştirildi. Yarı-iletken bellekler bize video ve güçlü bilgisayarları 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 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 (KKT) ve kuantum noktaları üzerine bir çok 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). 1980 yıllarda Sakaki'nin çalışmaları KKT'lerin daha iyi anlaşılmasını sağladı. KKT'lerinde öncelikle effektif kütle yaklaşımıyla varyasyon metodu kullanılarak yabancı atomun bağlanma enerjisi çalışıldı(Bryant, 1984; Montenegro vd., 1991; Pokatilov vd., 2000; Mikhailov vd., 2000; Poghosyan ve Demirjian, 2003). Bu çalışmalarda bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna ve yapının geometrisine bağlı olduğu gösterildi.

Düşük boyutlu yapılara dışarıdan 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). Bundan dolayı tezimizde dikdörtgen kesitli üçlü KKT 'inde elektrik alan etkisi altında yabancı atomun bağlanma enerjini inceledik.

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). Bu çalışmalarda tel eksenine paralel uygulanan manyetik alan elektron dağılım olasılığını yapının merkezinde tutmaya çalıştığı gözlenmiştir. Manyetik alan etkisinde hidrojenik yabancı atomun bağlanma enerjisi yabancı atomun konumuna göre artma veya azalma göstermiştir.

Son zamanlarda farklı düşük boyutlu yapılarda elektrik ve manyetik alanın birlikte etkisi incelenmiştir. Latge ve arkadaşları(1996, 2002) elektrik ve manyetik alan altında kuantum kuyularında kızıl ötesi soğurma spektrasını çalışmışlardır. Onların buldukları teorik sonuçlar deneysel magnetospektroskobik ölçümlerle iyi uyum içindedir. Effektif kütle yaklaşımı içinde varyasyon metodunu kullanarak, yabancı atomun bağlanma enerjisi değişik geometrik yapılar için hesaplanmıştır. (Akbaş vd., 1998; Cen ve Bajaj, 1993; Orellana vd., 2003; Sarı vd., 2003). Bu çalışmalarda yabancı atomun bağlanma enerjisi dış manyetik ve elektrik alanların şiddetine ve yapının şekline kuvvetlice bağlı olduğu bulunmuştur. Düşük boyutlu yapılarda elektrik ve manyetik alanın bu etkileri fotodedektör gibi optoelektronik araçların yeni türlerinin fabrikasyonu için çok faydalı olabilir. Biz bu tezde, literatürdeki bu çalışmaları göz önüne alarak üçlü dikdörtgen kesitli ve coaxial(eşmerkezli iç içe geçmiş) silindirik kesitli KKTlerini inceledik. Bu kuantum tellerdeki yabancı atomun bağlanma enerjisindeki değişimleri tel ve bariyer kalınlığına, yabancı atomun konumuna, elektrik ve manyetik alanın şiddetine bağlı olarak hesapladık.

Bu çalışmanın ikinci bölümünde düşük boyutlu yapılardan kuantum kuyusu ve kuantum kuyu telinde hapsedilen bir elektronun taban durum dalga fonksiyonu ve enerjileri bulunmuştur. Bu yapılara yabancı atom katılmasıyla bağlanma enerjisi hesaplamaları tanımlanmıştır. Bu bölümde son olarak elektrik ve manyetik alanın etkisinde dolayı sistemin Hamiltonyen'ine gelen katkılar genel olarak verilmiştir.

Üçüncü bölümde çalışmalarımızda kullandığımız varyasyon yöntemi ve Runge Kutta nümerik yöntemi verilmiştir. Diferansiyel denklem çözüm yöntemi olan Runge-Kutta yönteminin dördüncü ve beşinci derece biçimleri analitik çözümlerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

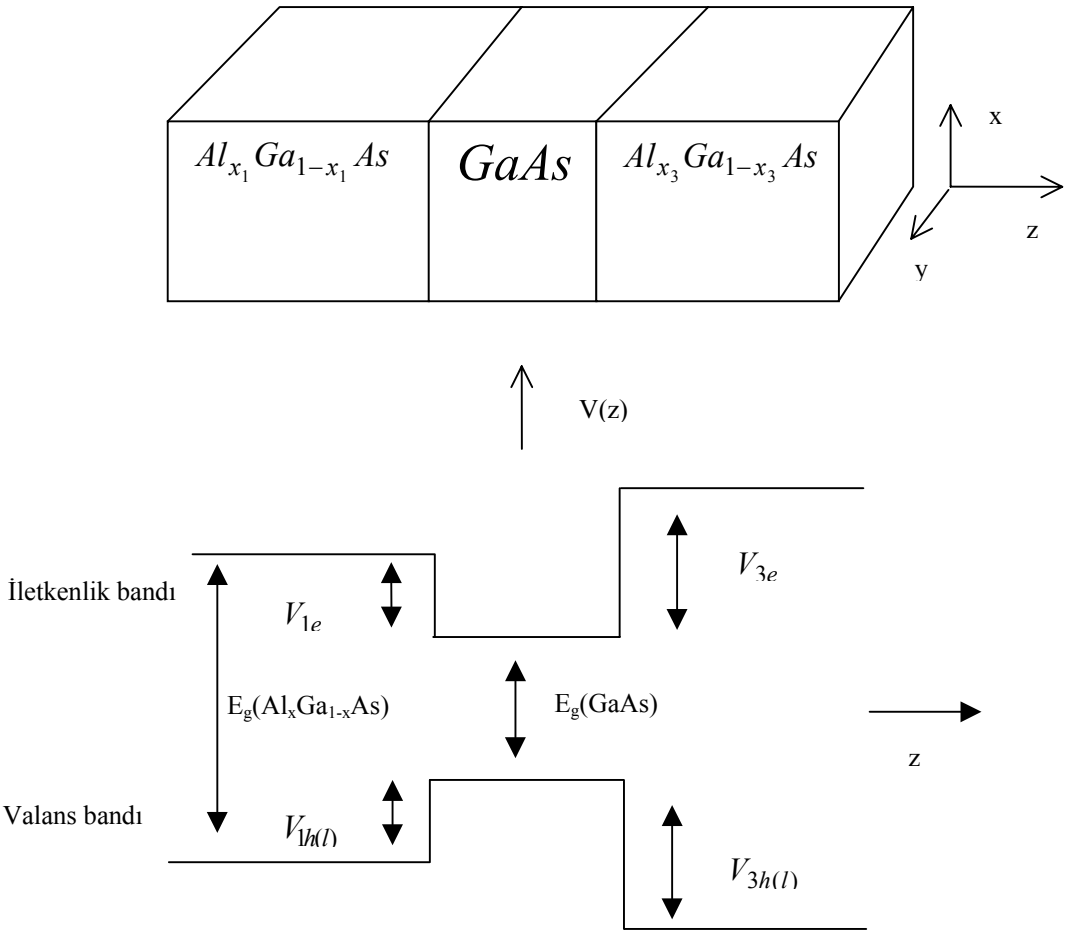
Tezimizin son bölümü tartışma ve sonuçlar kısmına ayrılmıştır. Bu bölümde iki değişik geometrideki kuantum tellerinde bağlanma enerjisi incelenmiştir. Birinci yapı,

bilgilerimize göre ilk defa bizim tarafımızdan çalışılan dikdörtgen kesitli üçlü KKT'idir. Bağlanma enerjisi bariyer kalınlığına, yabancı atomun konumuna, potansiyel yüksekliğine ve dışarıdan uygulanan düzgün elektrik alana bağlı olarak incelenmiştir. İkici yapı daha önceden tanımlanmış olan coaxial silindirik kesitli KKT'idir(Aktaş vd., 2001). Bu yapıda bağlanma enerjisine manyetik alanın etkisi ilk kez bu tezde incelenmiştir. Daha sonra hem manyetik hem de elektrik alan etkisi altında bağlanma enerjisi incelenmiştir. Son olarak, literatürde çok çeşitli değerlere sahip olan yapı sabitlerinin en uygunlarını tespit etmek için kuantum kuyusunda eksiton geçiş enerjilerini çalışılmıştır. Sonuçlarımız diğer bir teorik çalışmanın sonuçlarıyla ve deneysel değerlerle karşılaştırıldığında, bizim sonuçlarımız deneysel değerlerle daha iyi uyumludur. Bu sonuçlara göre kuantum kuyuları için en uygun yapı sabitleri tespit edilmiştir.

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

BÖLÜM 2: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARDA GENEL BİLGİLER

Düşük boyutlu yarı iletken yapılar, teknolojinin gelişmesiyle laboratuarlarda Moleküller Demet Büyütme, Sıvı Faz Büyütme ve Kimyasal Buhar Depolama teknikleriyle üretim mümkün hale gelmiştir. Düşük boyutlu yapılar kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktalarıdır. Kuantum kuyusunda elektron tek boyutta potansiyel duvar arasına hapsedilir ve diğer iki boyutta serbestçe hareket eder. Kuantum tellerinde ise elektron iki boyutta potansiyel duvarlar arasında kalır ve tek yönlü hareketi serbesttir. Kuantum noktalarında ise elektron üç boyutta da potansiyel duvarlarla karşılaşır.



Şekil 2.1: Antisimetrik $Al_{x_1}Ga_{1-x_1}As/GaAs/Al_{x_3}Ga_{1-x_3}As$ kuantum kuyusu.

Bu tanımladığımız yapılar yukarıdaki teknikleri kullanarak, farklı tür yarı iletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulur. Şekil 2.1'de gösterildiği gibi bir kuantum kuyusu $Al_xGa_{1-x}As$ yarı iletkenler arasına GaAs yarı iletkeni yerleştirilerek oluşturulur. Burada x Al konsantrasyonunu göstermektedir. Al konsantrasyonu her iki $Al_xGa_{1-x}As$ yarı iletkeninde aynı ise simetrik kuantum kuyusu, farklı ise antisimetrik kuantum kuyusu oluşur.

2.1. Düşük Boyutlu Yapılarda Hapsedilen Bir Elektronun Özellikleri

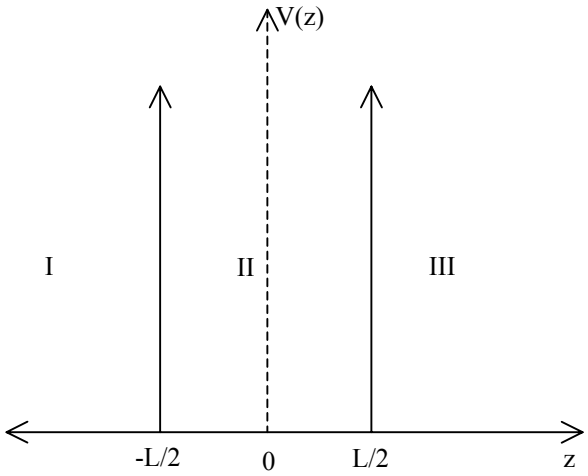
Düşük boyutlu yapılarda hapsedilen bir elektronun özelliklerini incelerken zamandan bağımsız Schrödinger denklemini çözüyoruz. Schrödinger denklem çözümünden dalga fonksiyonlarını ve enerjileri buluyoruz. Burada düşük boyutlu yapılardan kuantum kuyuları ve kuantum telleri incelenecektir.

2.1.a. $Al_xGa_{1-x}As$ /GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyuları

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. Önce sonsuz kuantum kuyusunu incelenecektir. Potansiyel fonksiyonu

$$V(z) = \begin{cases} 0 & -L/2 \le z \le L/2 \\ \infty & diğer\ yerlerde \end{cases} \qquad (2.1)$$

olarak tanımlanır. Şekil 2.2'de tanımladığımız sonsuz kuantum kuyusu için Schrödinger denklemini sadece II. bölge için yazabiliriz. Çünkü $V(z) = \infty$ olduğu yerde elektron bulunamayacağı için dalga fonksiyonu sıfıra eşit olmak zorundadır.



Şekil 2.2: Sonsuz kuantum kuyusu.

II. bölgede $V(z)=0$ için

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2\psi_n(z)}{\partial z^2}=E_n\psi_n(z) \tag{2.2}$$

olur. Bu denklemdeki m^* etkin kütleyi göstermektedir. Bu diferansiyel denklemi çözdüğümüzde dalga fonksiyonu

$$\psi_n(z)=A\sin(k_n z)+B\cos(k_n z) \tag{2.3}$$

olur. $k_n^2=\frac{2m^*E_n}{\hbar^2}$ olarak alınmıştır. z=-L/2 ve z=L/2 duvarlarındaki sınır şartlarını uyguladığımızda

$$\begin{aligned} A\sin(\frac{k_nL}{2})&=0\\ B\cos(\frac{k_nL}{2})&=0 \end{aligned} \tag{2.4}$$

sonuçlarını buluruz. Bu durumda iki mümkün çözüm var diyebiliriz.

$$\psi_n(z) = B\cos(k_n z) \qquad n = 1,3,5,.....$$
$$\psi_n(z) = A\sin(k_n z) \qquad n = 2,4,6,..... \tag{2.5}$$

burada $k_n = \frac{n\pi}{L}$ olarak tanımlanır. Buradaki A ve B katsayıları normalizasyon sabitidir. Bu sabitler dalga fonksiyonunun normalizasyonundan bulunur.

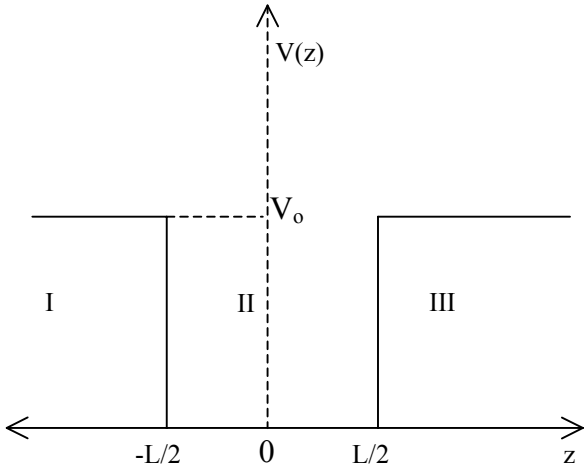
$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi_n^*(z)\psi_n(z)dz = 1 \tag{2.6}$$

Ayrıca E_n enerji özdeğerleri

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}n^2 \tag{2.7}$$

bulunur. Bu sonuca göre, potansiyel kuyusundaki bir parçacığın alabileceği enerji değerleri bir n tamsayısına bağlı olarak kesikli değerlerde bulunabilir.

Şekil 2.3'teki sonlu kuantum kuyusunu göz önüne aldığımızda, potansiyel fonksiyonu



Şekil 2.3: Sonlu kuantum kuyusu.

$$V(z)=\begin{cases}0 & -L/2\le z\le L/2\\ V_0 & \text{diğer yerlerde}\end{cases} \tag{2.8}$$

olarak tanımlanır. Bu durum için Schrödinger denklemini

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2\psi(z)}{\partial z^2}+V(z)\psi(z)=E\psi(z) \tag{2.9}$$

olur. Bu denklemi düzenlersek

$$\frac{\partial^2\psi(z)}{\partial z^2}-(V(z)-E)\frac{2m^*}{\hbar^2}\psi(z)=0 \tag{2.10}$$

olur. Bu diferansiyel denklemin üç bölge için çözüyoruz. I. bölgede $V(z)=V_o$ için dalga fonksiyonu

$$\psi_1(z)=A\exp(\alpha z) \tag{2.11}$$

bulunur. Burada $\alpha^2=\frac{2m^*}{\hbar^2}(V_o-E)$ olarak tanımlanır. II. bölgede $V(z)=0$ için dalga fonksiyonumuz

$$\psi_2(z)=C\cos(k_z z)+D\sin(k_z z) \tag{2.12}$$

olur. Burada $k_z=\frac{2m^*E}{\hbar^2}$ olarak tanımlanır. III. bölgede de $V(z)=V_o$ ‘dır. Bu bölge için dalga fonksiyonu

$$\psi_3(z)=B\exp(-\alpha z) \tag{2.13}$$

olur. α'da yukarıda tanımlandığı şekilde alınır.

Bu çözümlere sınır şartlarını uygularsak k ve α'nın tanımlarıyla birlikte $\psi_{çift}(z)$ çift durumların dalga fonksiyonu ve $\psi_{tek}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonu olarak düşünülür. I., II. ve III. bölge için, $\psi_{çift}(z)$ çift durumların dalga fonksiyonu

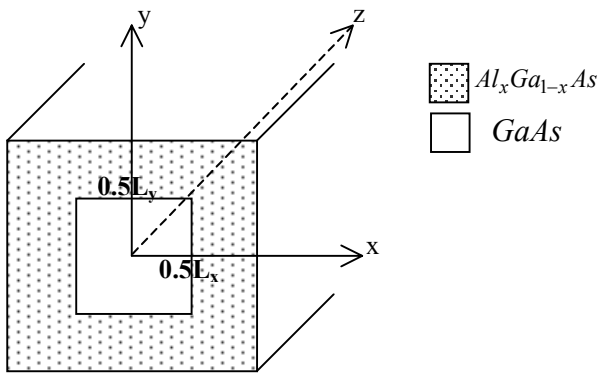
$$\psi_{çift}(z)=\begin{cases} C\exp(\alpha L/2)\cos(k_z L/2)\exp(\alpha z) & -\infty < z < -L/2 \\ C\cos(k_z z) & -L/2 \le z \le L/2 \\ C\exp(\alpha L/2)\cos(k_z L/2)\exp(-\alpha z) & L/2 < z < \infty \end{cases} \quad (2.14)$$

$\psi_{tek}(z)$ tek durumların dalga fonksiyonu

$$\psi_{tek}(z)=\begin{cases} -D\exp(\alpha L/2)\sin(k_z L/2)\exp(\alpha z) & -\infty < z < -L/2 \\ D\sin(k_z z) & -L/2 \le z \le L/2 \\ D\exp(\alpha L/2)\sin(k_z L/2)\exp(-\alpha z) & L/2 < z < \infty \end{cases} \quad (2.15)$$

olur. Buradaki C ve D normalizasyon katsayılarıdır. Dalga fonksiyonlarının normalizasyonu ile bulunur.

2.1.b. GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$ kuantum telleri



Şekil 2.4: Kare kesitli sonsuz kuantum teli.

Kuantum tellerinde elektron iki potansiyel duvar arasına hapsedilmiştir. Örnek olarak şekil 2.4'te kare kesitli bir kuantum teli gösterilmiştir. Burada parçacık x ve y eksenlerinde potansiyel duvarlarla hapsedilmiştir. Böyle bir sonsuz kare kuantum telini göz önüne alalım. Bu tel için potansiyel

$$V(x,y)=\begin{cases}0 & |x|\le L_x/2 \text{ ve } |y|\le L_y/2\\ \infty & |x|>L_x/2 \text{ ve } |y|>L_y/2\end{cases} \tag{2.16}$$

olur. Kuantum teli içinde bulunan bir elektron için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\psi_0(x,y,z)=E_0\psi_0(x,y,z) \tag{2.17}$$

olur. z boyutunda sınırlama olmadığı için elektron bu yönde serbest hareket eder ve diğer boyutlarda kuantize olmuştur. Bundan dolayı dalga fonksiyonu

$$\psi_0(x,y,z)=\psi_0(x,y)\psi_0(z) \tag{2.18}$$

alınarak Schrödinger denklemin çözümü

$$\psi_0(x,y,z)=A\cos\left(\frac{\pi}{L_x}x\right)\cos\left(\frac{\pi}{L_y}y\right)\exp(ik_z z) \tag{2.19}$$

olur. Buradaki A normalizasyon katsayısıdır. Dalga fonksiyonunun normalizasyonundan bulunur. Schrödinger denklem çözümünden elektron için bulunan taban durum enerjisi

$$E_0=\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\left(\frac{\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2\right]+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m^*} \tag{2.20}$$

olur.

Sonlu kuantum telini incelediğimizde potansiyeli aşağıdaki gibi olur.

$$V(x,y)=\begin{cases}0 & |x|\le L_x/2 \;\; ve \;\; |y|\le L_y/2\\ V_0 & |x|> L_x/2 \;\; ve \;\; |y|> L_y/2\end{cases} \tag{2.21}$$

Sonlu kuantum teli için Schrödinger denklemi

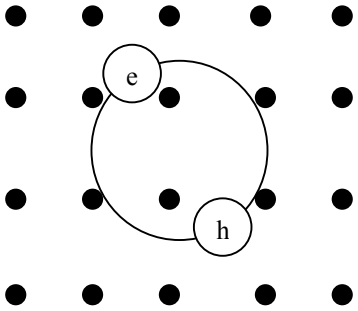
$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\psi(x,y)+V(x,y)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \tag{2.22}$$

yazılır. Bu denklem analitik olarak çözülebilir. Ancak değişik potansiyel profilleri için analitik çözüm mümkün olmamaktadır. Bundan dolayı biz bu diferansiyel denklemi Runge-Kutta nümerik yöntemiyle çözüyoruz. Bu yöntemle taban durum dalga fonksiyonu $\psi_0(x,y,z)$ ve taban durum enerjisi E_0 bulunur.

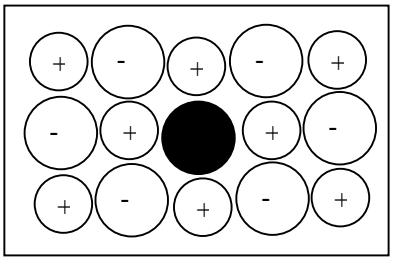
Bizim çalışmalarımız, üçlü dikdörtgen kesitli kuantum teli ve silindirik kuantum teli üzerine olduğundan kuantum noktalarında hapsedilen elektronun özelliklerini incelemedik.

2.1.c. Eksitonlar

Foton enerjisi bant aralığı enerjisinin hemen altında olduğu, yani kristalin saydam olmasını beklediğimiz durumda, yansıma ve soğrulma spektrumları bir yapı gösterir. Bu yapı, soğrulan bir fotonun bağlı bir elektron-boşluk çifti yaratmasından kaynaklanır. Elektron ve boşluk aralarındaki Coulomb etkileşmesi nedeniyle, tıpkı hidrojen atomundaki elektron ve proton gibi, bağlı duruma geçebilirler. Şekil 2.5'de görülen bağlı elektron-boşluk çiftine eksiton adı verilir (Kıttel 1996). Bir eksiton kristal içinde dolaşıp enerji iletebilir. Ancak, nötr olduğu için elektrik yükü iletmez. Bir elektron ve pozitrondan oluşan pozitronyum parçacığının bir benzeridir. Eksitonlar ya zayıf bağlı(Wannier tipi) veya sıkı bağlı(Frenkel tipi) olurlar. Wannier tipi eksitonlarda elektron-boşluk uzaklığı büyükken, Frenkel tipi eksitonlarda bu mesafe küçüktür.



Şekil 2.5 a: Mott-Wannier tipi eksiton zayıf bağlı olup elektron-boşluk uzaklığı örgü sabitine kıyasla büyüktür.

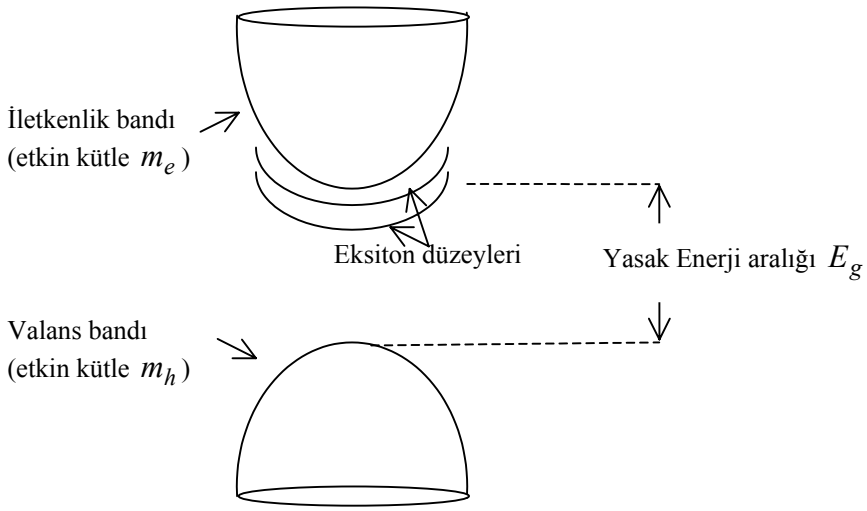


Şekil 2.5 b: İdeal bir Frenkel eksitonu kristal içinde, boşluk elektronun çok yakınında olarak, bir dalga gibi dolaşır.

Dolaylı bir bant aralığı varsa, doğrudan bir bant civarındaki eksitonların serbest elektron ve boşluğa dönüşmesi engellenmiş olabilir. Tüm eksitonlar, en son aşama olan elektronun boşluğa düşüp onu yoketmesi olayına karşı kararsızdırlar.

Kristal ortamında soğrulan bir fotonun enerjisi aralık enerjisinden büyükse her zaman bir elektron ve boşluk çifti oluşturur.

İletkenlik ve valans bant kıyılarının yapısı, eksiton düzeylerinin iletkenlik bant kıyısına göre durumları şekil 2.6'da gösterilir. Bir eksiton öteleme kinetik enerjiye sahip olabilir (Kıttel 1996).



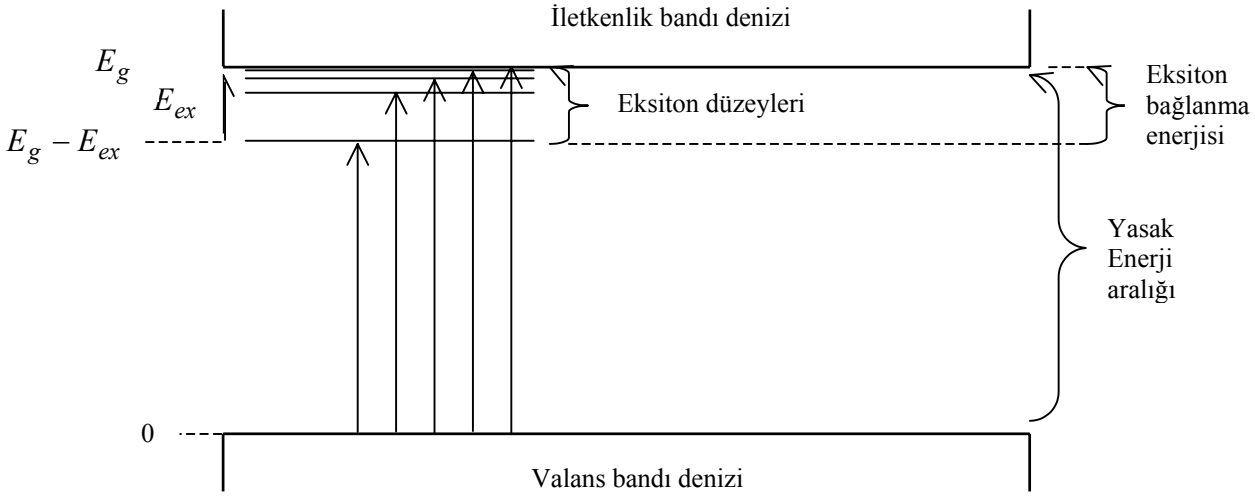
Şekil 2.6: İletkenlik ve valans bant kıyılarının yapısı, eksiton düzeylerinin iletkenlik bant kıyısına göre durumları (Kıttel 1996).

Doğrudan bir olayda yaratılan eksitonun enerji düzeyleri şekil 2.7'de gösterilir. Valans bandının üst ucundan olan geçişler oklarla gösterilmiş olup en uzun ok aralık enerjisine karşılık gelir. Serbest bir elektron ve boşluk çifti referans alınırsa eksitonun bağlanma enerjisi E_{ex} olur.

z boyutunda sınırlandırılmış kuantum kuyusunda bir elektron ve bir boşluktan oluşan sistem göz önüne alındığında, yani eksiton için Hamiltonyen

$$H = H_e + H_{h(l)} + H_{e-h(l)} \tag{2.23}$$

olarak verilir (Akbaş 1998, Aktaş 1998). Burada e elektronu, h heavy(ağır) boşluğu ve l light(hafif) boşluğu belirtmektedir.



Şekil 2.7: Doğrudan bir olayda yaratılan eksitonun enerji düzeyleri.

Denklem (2.23)'deki H_e ve $H_{h(l)}$ açık şekli aşağıda verilmiştir.

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V_e(z_e) \tag{2.24}$$

ve

$$H_{h(l)} = -\frac{\hbar^2}{2m^*_{h(l)}}\frac{\partial^2}{\partial z^2_{h(l)}} + V_{h(l)}(z_{h(l)}) \tag{2.25}$$

Bu Hamiltonyenler kullanılarak, $E_{e(h,l)}$ elektron(boşluk) n. durum enerjileri ve $\psi(z_{e(h,l)})$ n. durum dalga fonksiyonu dördüncü derece Runge-Kutta yöntemi kullanılarak elde edilir. Denklem (2.23)'teki elektron-heavy(light) boşluk etkileşme terimi ise

$$H_{e-h(l)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{h(l)}}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] - \frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{\rho^2 + \left(z_e - z_{h(l)}\right)^2}} \tag{2.26}$$

olarak verilir. Buradaki $\mu_{h(l)}$, heavy(ağır) boşluk ve light(hafif) boşluk için ilerleme yönüyle bağlantılı dik yüzeydeki etkin kütlelerdir. Denklem (2.26)'teki ε ortamın dielektrik sabitidir. Ortama göre değişebilir. Denklem (2.24) ve (2.25)'teki $V_{e(h)}$ bariyer potansiyelidir ve

$$V_{e(h)}(z_{e(h)}) = \begin{cases} V_1 & z < -L/2 \\ 0 & |z| < L/2 \\ V_3 & z > L/2 \end{cases} \tag{2.27}$$

sonlu olarak tanımlanır. Yasak enerji aralığı ΔE_g alüminyum konsantrasyonu x'e bağlı olarak ΔE_g(meV)=$1115\,x + 370\,x^2$ tanımlanır. Buradan iletkenlik bant kıyısı $V_{1(3)}$ ise bu yasak enerji aralığının %60, valans bant kıyısı içinde %40 alınarak bulunur (Walter1989).

Problemin varyasyonel çözümü için deneme fonksiyonu N normalizasyon sabiti ve λ varyasyonel parametre olmak üzere,

$$\psi = N\psi_e(z_e)\psi_h(z_h)e^{-\frac{1}{\lambda}\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \tag{2.28}$$

ile verilir. Eksiton bağlanma enerjisi

$$E_B = E_e + E_{h(l)} - \langle H \rangle_{\lambda_{\min}} \tag{2.29}$$

bağıntısından bulunur. Eksiton geçiş enerjisi

$$E^{tra}_{e-h(l)} = E_g + E_e + E_h - E_B \tag{2.30}$$

olur. Burada E_g kuyunun yasak enerji aralığıdır.

2.2. Düşük Boyutlu Yapılarda Yabancı Atom Problemi

Düşük boyutlu yapılarda taşıyıcı sayısı yarı iletken malzemelere yabancı atomun katılması ile arttırılabilir. Bu katkının yapıya kazandırdığı özellikler gerek uygulamadaki önemi gerekse içerdiği zengin fizik nedeniyle üzerinde çok çalışılan bir araştırma alanıdır (Aktaş 1998, Bastard 1988). Ayrıca, düşük boyutlu yapılarda bir elektron dar bir bölgede hareket eder ve yabancı atoma yakın olmaya çalışır. Bundan dolayı Coulomb etkileşmesinin şiddeti artar ve elektronun bağlanma enerjisi düşük boyutlu yapılarda daha büyük olabilir (Charrour vd. 2000). Bu yüzden kuantum kuyusunda ve kuantum telinde yabancı atom problemini çözüyoruz.

2.2.a. Kuantum kuyularında yabancı atom problemi

Sonsuz kuantum kuyusunda yabancı atom için Hamiltonyen

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \tag{2.31}$$

olur. Bu denklemde ε ortamın dielektrik sabiti olarak tanımlanır. z_i yabancı atomun konumunu gösterir. Bu sistem için Schrödinger denkleminin

$$H\psi_i(\rho,z) = E\psi_i(\rho,z) \tag{2.32}$$

şeklinde yazılabilir. Bu denklemi çözmek için yaklaşık çözüm yöntemlerinden varyasyonu ve Runge-Kutta nümerik yöntemini kullanacağız. Sistemin Hamiltonyen'inin çözümünü kolaylaştırmak için indirgenmiş atomik birimleri kullanıyoruz. Denklem (2.31) sırasıyla uzunluk ve enerji ölçümleri için Bohr yarıçapı $a^*(=\hbar^2\varepsilon/m^*e^2)$ ve Rydberg $R^*(=m^*e^4/2\hbar^2\varepsilon^2)$ indirgenmiş birimlerde aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{\sqrt{\rho^2+(z-z_i)^2}} \tag{2.33}$$

Bu denklemde $\rho^2 = x^2 + y^2$ olarak tanımlanır. Schrödinger denkleminde yerine yazarsak

$$(-\nabla^2 - \frac{2}{\sqrt{\rho^2+(z-z_i)^2}})\psi_i(\rho,z) = E\psi_i(\rho,z) \tag{2.34}$$

olur. Bu denklemi çözmek için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi_i(\rho,z) = N_1\psi_o \exp(-\sqrt{\rho^2+(z-z_i)^2}\,/b) \tag{2.35}$$

alınır. Burada N_1 normalizasyon sabitidir. b ise varyasyon parametresidir. Denklem (2.34) kullanılarak bulunan enerjinin beklenen değerinin minimizasyonundan b kararlaştırılır. ψ_o ise yabancı atom yokken sonsuz kuantum kuyusu için dalga fonksiyonudur. Bu dalga fonksiyonunu denklem (2.5)'te verilmişti. Bu sistem için bağlanma enerjisi

$$E_B = E_o - \left[\frac{\langle\psi_i(\rho,z)|H|\psi_i(\rho,z)\rangle}{\langle\psi_i(\rho,z)|\psi_i(\rho,z)\rangle}\right]_{b_{\min}} \tag{2.36}$$

denklemi kullanılarak elde edilir. Bu E_o sonsuz kuantum kuyusu için denklem (2.7)'de tanımladığımız taban durum enerjisidir.

Denklem (2.8)'de verilen potansiyel etkisindeki sonlu kuantum kuyusunda yer alan yabancı atom için Hamiltonyen

$$\mathrm{H} = -\nabla^2 - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (\mathrm{z} - \mathrm{z_i})^2}} + \mathrm{V(z)} \tag{2.37}$$

olur. Schrödinger denklemi

$$(-\nabla^2 - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} + V(z))\psi_i(\rho, z) = E\psi_i(\rho, z) \tag{2.38}$$

olur. Şekil 2.3'te gösterildiği gibi sonlu kuantum kuyusu üç bölgeden oluşur. Bu üç bölge için Schrödinger denklemini çözmemiz gerekir. Bu yapının taban durum enerjilerini bulabilmek için aşağıdaki deneme dalga fonksiyonlarını kullanıyoruz.

I. bölgede $V(z) = V_0$ için,

$$\psi_{1i}(\rho, z) = N_1 \exp(\alpha z) \exp(-\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} \,/ b)$$

II. bölgede $V(z) = 0$ için

$$\psi_{2i}(\rho, z) = N_2 \cos(kz) \exp(-\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} \,/ b) \tag{2.39}$$

III. bölgede $V(z) = V_0$ için

$$\psi_{3i}(\rho, z) = N_3 \exp(-\alpha z) \exp(-\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} \,/ b)$$

benzer şekilde tek durumlar(1.uyarılmış durumlar) için de dalga fonksiyonları yazılabilir. Burada N_1, N_2 *ve* N_3 normalizasyon katsayılarıdır. $k = \sqrt{E}$ ve $\alpha = \sqrt{V_o - E}$ olarak alınır. Bağlanma enerjisi

$$E_B = E_o - [\frac{\langle \psi_i(\rho,z) | H \ | \psi_i(\rho,z) \rangle}{\langle \psi_i(\rho,z) | \psi_i(\rho,z) \rangle}]_{b_{\min}} \tag{2.40}$$

yukarıdaki denklemden bulunur.

2.2.b Kuantum tellerinde yabancı atom problemi

Sonlu kuantum teli için denklem (2.22)'de tanımlamış olduğumuz Hamiltonyen'e yabancı atomdan dolayı ek bir terim gelir. Rydberg birim sistemine göre sonlu kuantum teli içinde yabancı atomun Hamiltonyen'i

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} + V(x,y) \tag{2.41}$$

olur. $\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}$ elektron ve yabancı atom arasındaki uzaklık olur. Sonlu kuantum telindeki yabancı atom için deneme dalga fonksiyonu olarak

$$\psi_i(x,y,z) = N\psi_o(x,y,z)\exp(-\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/b) \tag{2.42}$$

kullanılır. Yabancı atom yokken ki taban durum için dalga fonksiyonu $\psi_o(x,y,z)$ ve enerji E_o Runge Kutta nümerik yöntemiyle bulunur. Yabancı atom bağlanma enerjisi E_B, elektronun en düşük değeri E_o ve yabancı atom enerjisi arasındaki fark olarak tanımlanır.

$$E_B = E_o - \left[\frac{\langle \psi_i(x,y,z) | H | \psi_i(x,y,z) \rangle}{\langle \psi_i(x,y,z) | \psi_i(x,y,z) \rangle} \right]_{b_{\min}} \tag{2.43}$$

Aynı işlemler denklem (2.17)'deki sonsuz kuantum kuyu teli Hamiltonyen'ine yabancı atomdan dolayı ek bir terim getirilerek yapılabilir.

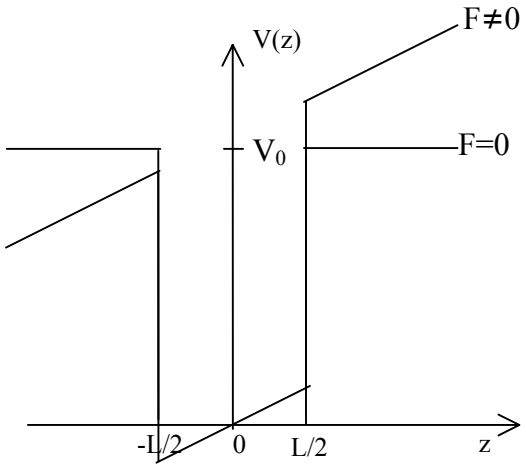
2.3. Düşük Boyutlu Yapılarda Elektrik Alanın Etkisi

Bir yarı iletken devre elemanının davranışı dış elektrik alan altında incelenebilir. Elektrik alanın uygulanmasıyla devre elemanının fiziksel özelliklerinde meydana gelen değişiklikler önemli bir araştırma konusudur(Pfeiffer ve vd. 1999; Okan ve vd. 2000; Park ve vd. 1999; Aichmayr ve vd. 1999). Kristalin büyütülme yönünde uygulanan bir elektrik alan yük taşıyıcılarının dağılımında polarizasyona ve kuantum enerji durumlarında kaymalara sebep olur.

Düşük boyutlu yapılara elektrik alan uyguladığımızda Hamiltonyen'e ek bir terim gelir. Bu terim

$$H^F = |e| Fz \tag{2.44}$$

olur. Burada e elektronun elektrik yüküdür. F ise z yönünde uygulanan düzgün bir dış elektrik alan şiddetini gösterir. Örnek olarak bir kuantum kuyusuna z-yönünde elektrik alana uygulandığında alacağı şekil 2.5'te verilmiştir.



Şekil 2.8: z yönünde uygulana elektrik alan etkisinde kuantum kuyusu.

2.4. Düşük Boyutlu Yapılarda Manyetik Alanın Etkisi

Elektrik alanın etkisine benzer olarak, bir mıknatısın veya elektrik akımının oluşturduğu manyetik alan düşük boyutlu yapılarda etkilidir. Bir manyetik alan altında bulunan bir sistemin içinde hareket eden yüklü parçacığa gravitasyon ve elektriksel kuvvetlerinin yanı sıra bir manyetik kuvvette etki eder. Bundan dolayı son yıllarda düşük boyutlu yapılara düzgün manyetik alan uygulanmaktadır. Bir çok araştırmacı bu konu üzerine çalışma yapmaktadır (Bogomolny ve Rouben 1999; Kasapoğlu vd. 2003; Masale vd. 1992).

Düşük boyutlu yapılara düzgün bir manyetik alan uygulandığında genel Hamiltonyen

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[\vec{P} + \frac{|e|}{c}\vec{A}\right]^2 + V(r) \tag{2.45}$$

olarak ifade edilir. Bu Hamiltonyen'de $\vec{A}$ manyetik alanın vektör potansiyeli ve $\vec{P}$ momentum olarak tanımlanır. Uyguladığımız yapıya göre potansiyel değişebilir.

BÖLÜM 3: SAYISAL YÖNTEMLER

Bu bölümde çalışmalarımızda kullandığımız varyasyon yöntemini ve Runge Kutta nümerik yöntemini inceledik.

3.1. Varyasyon Yöntemi

Bu yaklaşık yöntem, H Hamiltonyen işlemcisini kullanarak sistemin en alçak enerji durumuna karşılık gelen özfonksiyonun biçimi hakkında tahminde buluna bildiğimiz, özdeğer problemlerine uygulanabilir. Varyasyon yöntemi, tahmin ettiğimiz dalga fonksiyonu geliştirmeyi ve taban durumu enerjisini minimize ederek bulmayı amaçlayan bir yöntemdir. Varyasyon yönteminin yararı, başlangıçta iyi bir dalga fonksiyonu tahmin etme yeteneğimize bağlıdır. Fakat, sistemin simetrisi ve diğer fiziksel özellikleri tahminimiz için sık sık yol gösterici olabilir. Varyasyon yöntemi sistemin taban durumdan başka durumların incelenmesine genişletilebilir. Bu yöntemi ayrıntılı olarak aşağıdaki gibi tanımlayabiliriz.

Bir H Hamiltonyen'in özdeğerleri E_n ve özvektörleri $\{U_n\}$ olsun. Taban durumu için

$$HU_o = E_o U_o \tag{3.1}$$

olduğu açıktır. Varyasyon uygulayacağımız sistemin herhangi bir ψ durumunda Hamiltonyen'in beklenen değeri için daima şu eşitsizlik yazılabilir.

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_o \tag{3.2}$$

ψ fonksiyonu normlanmışsa payda bire eşit olur. Yukarıdaki eşitliğin sağlanması için $\psi = U_o$ olduğunda mümkündür. Her ψ durumu $\{U_i\}$ özvektörlerinin süperpozisyonu olarak yazılabileceği için

$$\psi = \sum_i^{\infty} c_i U_i \qquad \sum_c |c_i|^2 = 1 \text{ (Normlanmış } \psi \text{ durumunu alıyoruz.)}$$

$$E = (\psi, H\psi) = \sum_i \sum_j c_i^* c_j (U_i, HU_j) \tag{3.3}$$

$$= \sum_i \sum_j c_i^* c_j E_j (U_i, U_j) = \sum_i \sum_j c_i^* c_j E_j \delta_{ij}$$

$$= \sum_i c_i^* c_i E_i = \sum_i |c_i|^2 E_i$$

olur. Taban durumu her zaman diğer durumlardan daha küçük enerjili olduğu ($E_i \geq E_o$) için, serinin her teriminde E_i yerine E_o alırsak eşitliğin sağ tarafı küçülür.

$$E \geq \sum_i |c_i|^2 E_o = E_o \sum_i |c_i|^2$$

$$E \geq E_o \tag{3.4}$$

Bu eşitliğe göre E değeri ne kadar aşağıya çekilebilirse, taban durumuna o kadar yaklaşılmış olur. Seçilen ψ dalga fonksiyonu (buna deneme fonksiyonu denir.) bir λ parametresi içeriyorsa bulunan E değeri de bu λ parametresine bağlı olur. O halde, E değeri bu λ parametresine göre minimize edilerek taban durumuna iyice yaklaşılır. Bu değişken $\langle H \rangle$'nin mümkün en küçük değerini alıncaya kadar değiştirilir.

$$\psi = \psi(\vec{r}, \lambda)$$

$$E(\lambda) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{3.5}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0$$

Bu yöntem daha genel olarak, (λ_1, λ_2, λ_3,..... λ_n) gibi birden çok parametreyle uygulanabilir (Karaoğlu, 1994; Köksal 1992).

3.2. Runge Kutta Nümerik Yönteminin Kuantum Kuyularına Uygulanması

Diferansiyel denklemleri nümerik olarak çözmede kullanılan bir yöntemdir. Bu yöntem alman matematikçiler Runge ve Kutta tarafında geliştirilmiştir. Bu yöntem yüksek mertebeden karmaşık türevlerin hesaplarını içermektedir. Değişik mertebelerden olan bağıntıları mevcuttur. En çok kullanılan dördüncü ve beşinci mertebe Runge Kutta bağıntılarıdır. Mertebe sayısı yükseldikçe yapılan hata azalır.

Runge-Kutta;

$$y' = f(x, y) \tag{3.6}$$

başlangıç değer problemi için her adımda f(x,y)'nin çeşitli şekillerde hesaplanan değerlerinin kullanıldığı bir yöntem geliştirmişlerdir. Denklem (3.6)'daki denklemin çözümü

$$y_{j+1} = y_j + a_1 k_1 + a_2 k_2 + a_3 k_3 + ... \tag{3.7}$$

olarak kabul ediliyor. Bu denklemdeki k ifadeleri

$$k_1 = hf(x_j, y_j)$$

$$k_2 = hf(x_j + \alpha_1 h,\ y_j + \beta_1 k_1)$$

$$k_3 = hf(x_j + \alpha_2 h,\ y_j + \beta_2 k_2) \tag{3.8}$$

. . .

. . .

$$k_n = hf(x_j + \alpha_{n-1}h,\ y_j + \beta_{n-1}k_{n-1})$$

şeklinde tanımlanır. α ve β birer sabit ve $\alpha, \beta \le 1$ alınarak yeni bir seri ile ifade edilir. Bu seri Taylor serisi değildir kendine özgü bir seridir. Şimdi bu sabitleri bulmaya çalışalım. Öncelikle denklem (3.7) deki fonksiyonu kısa bir aralıkta Taylor serisini yazabiliriz.

$$y_{j+1} = y(x_j + h) = y(x_j) + hy'(x_j) + \frac{1}{2!}h^2 y''(x_j) + \frac{1}{3!}h^3 y'''(x_j)..... \qquad (3.9)$$

Denklem (3.6)'daki ifadesinin x'e göre tam türevlerini aldığımızda

$$\frac{dy'}{dx} = \frac{df}{dx}$$

$$y'' = \frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y} \qquad (3.10)$$

$$y''' = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + f^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial y} + f\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2$$

olur. Bu sonuçları denklem (3.9)'da yerine yazarsak

$$y_{j+1} = y(x_j + h) = y(x_j) + hf + \frac{1}{2!}h^2\left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}\right) + \frac{1}{3!}h^3\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + f^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial y} + f\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2\right)..... \qquad (3.11)$$

olur. Denklem (3.8)'deki k ifadelerini aşağıdaki şekilde seri açılımı yazılabilir.

$$\frac{k_2}{h} = f(x_j + \alpha_1 h,\ y_j + \beta_1 k_1)$$

$$= f + \alpha_1 h \frac{\partial f}{\partial x} + \beta_1 k_1 \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{1}{2!}(\alpha_1^2 h^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2\alpha_1 h \beta_1 k_1 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \beta_1^2 k_1^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}).....$$ (3.12)

gibi diğer k değerleri bulabilir. Bu denklemleri denklem (3.7)'de yerine yazıp denklem (3.11)'deki ifadeyle karşılaştırıldığında iki eşitlik denk olmalıdır. Buradan h mertebelerindeki terimleri eşitleyerek α ve β sabitleri bulunur. Örnek olarak; ikinci mertebe Runge-Kutta formüllerini çıkarmaya çalışalım. Denklem (3.7)'deki ak çarpımı mertebeyi verir. Bundan dolayı

$$y_{j+1} = y_j + a_1 k_1 + a_2 k_2$$ (3.13)

olur. Bu denklemde yukarıda tanımladığımız k_1 ve k_2 değerlerini yerine yazarız.

$$y_{j+1} = y_j + a_1 hf + a_2 h\{f + \alpha_1 h \frac{\partial f}{\partial x} + \beta_1 k_1 \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{1}{2!}(\alpha_1^2 h^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2\alpha_1 h \beta_1 k_1 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \beta_1^2 k_1^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2})\}..$$ (3.14)

Denklem (3.14) ile denklem (3.11) eşitlikleri birbirine denk olmalıdır. Denklem (3.14) h^2 hassasiyetinde, denklem (3.11) ise h^3 hassasiyetindedir. Bu iki denklem h^2 mertebesinde denk olmalıdır. Bu iki denklemin eşitliğinde

$$\left.\begin{aligned} a_1 + a_2 &= 1 \qquad h \text{ mertebedeki terimler} \\ a_2 \alpha_1 &= \frac{1}{2} \\ a_2 \beta_1 &= \frac{1}{2} \end{aligned}\right\} \quad h^2 \text{ mertebesindeki terimler}$$ (3.15)

olur. Burada üç denklem dört bilinmeyen var, bir bilinmeyeni keyfi olarak seçebiliriz.

$$a_1 = a_2 = \frac{1}{2}$$
$$\alpha_1 = \beta_1 = 1 \tag{3.16}$$

olur. İkinci mertebe Runge-Kutta yönteminden sonuç

$$y_{j+1} = y_j + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \tag{3.17}$$

ve

$$k_1 = hf(x_j, y_j)$$
$$k_2 = hf(x_j + h, y_j + k_1) \tag{3.18}$$

olur. Bu yöntem Euler yöntemine göre daha iyi sonuç verir, ancak bunun bir bedeli vardır: her adımda fonksiyonun $f(x,y)$ fonksiyonu iki kez hesaplanacaktır. Burada hata payı h^3 mertebesindedir. Hata payının daha küçük olması için burada izlediğimiz yolla seri açılımlara daha fazla terim katılarak daha üst mertebede Runge-Kutte formülleri çıkarılır (Bayram, 2002). Çalışmalarımızda dördüncü ve beşinci mertebe Runge-Kutta formülleri kullandık.

Dördüncü mertebe Runge-Kutta formülleri

$$y_{j+1} = y_j + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \tag{3.19}$$

ve

$$k_1 = hf(x_j, y_j)$$
$$k_2 = hf(x_j + \frac{h}{2},\ y_j + \frac{k_1}{2})$$
$$k_3 = hf(x_j + \frac{h}{2},\ y_j + \frac{k_2}{2}) \tag{3.20}$$
$$k_4 = hf(x_i + h,\ y_j + k_3)$$

olur (Bloss, 1989; Bayram, 2002). Herkes tarafından tercih edilir ve sonuçlar h^4 mertebesine kadar doğru olarak verir.

Fakat dördüncü dereceden büyük diferansiyel denklemlerin doğruluğunu kanıtlamak için dörtten fazla alt denklemlere ihtiyaç duyulur. Bundan dolayı Runge-Kutta ve Nöyström altı tane alt denklem kullanarak beşinci mertebe Runge-Kutta formüllerini

$$y_{j+1} = y_j + \frac{1}{192}(23k_1 + 125k_3 - 81k_5 + 125k_6) \tag{3.21}$$

ve

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_j, y_j) \\
k_2 &= hf(x_j + \frac{h}{3},\ y_j + \frac{k_1}{3}) \\
k_3 &= hf(x_j + \frac{2h}{5},\ y_j + \frac{6k_2 + 4k_1}{25}) \\
k_4 &= hf(x_i + h,\ y_j + \frac{15k_3 - 12k_2 + k_1}{4}) \\
k_5 &= hf(x_i + \frac{2h}{3},\ y_j + \frac{8k_4 - 50k_3 + 90k_2 + 6k_1}{81}) \\
k_6 &= hf(x_i + \frac{4h}{5}, y_i + \frac{8k_4 + 10k_3 + 36k_2 + 6k_1}{75})
\end{aligned} \tag{3.22}$$

tanımlamışlardır (Evans, 1995).

Biz tezimizde dördüncü ve beşinci mertebe Runge Kutta bağıntılarının sonuçlarını karşılaştırdık. Örnek olarak; analitik olarak çözülen bir sonlu kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun taban durum enerjisini inceledik. Böyle bir yapı bölüm 2'de şekil 2.3'te verilmiştir.

Potansiyel fonksiyonu

$$V(z) = \begin{cases} 0 & -L/2 < z < L/2 \\ V_0 & \textit{diğer yerlerde} \end{cases} \tag{3.23}$$

olarak tanımlanır. Böyle bir sistemin Schrödinger denklemi

$$\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - V(z)\psi(z) + E\psi(z) = 0 \tag{3.24}$$

biçiminde alınır. Bu denklemin analitik çözümü bölüm 2.1.a'da verilmiştir.

İkinci derece olan (3.24) diferansiyel denklemi Runge Kutta yöntemi ile çözebilmemiz için aşağıdaki dönüşümü yapmalıyız.

$$\begin{aligned} \mathrm{y1} &= \psi(\mathrm{z}) \\ \mathrm{y2} &= \frac{\mathrm{d}\psi(\mathrm{z})}{\mathrm{dz}} \\ \mathrm{y3} &= \mathrm{E} \end{aligned} \tag{3.25}$$

Bu dönüşümlerden sonra Schrödinger denklemi

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{dy1}}{\mathrm{dz}} &= \mathrm{y2} \\ \frac{dy2}{dz} &= \frac{2m^*}{\hbar^2}(V(z) - y3)y1 \\ \frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dz}} &= 0 \end{aligned} \tag{3.26}$$

iki tane birbirine bağlı birinci derece diferansiyel denkleme ayrılmış olur. Bu durumda bu iki diferansiyel denkleme dördüncü derece Runge Kutta yöntemi uygulanırsa

$$\begin{aligned} y1_{i+1} &= y1_i + h\left[\frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)\right] \\ y2_{i+1} &= y2_i + h\left[\frac{1}{6}(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4)\right] \end{aligned} \tag{3.27}$$

çözümler yukarıdaki gibi olur. Burada

$$\begin{aligned} K_1 &= F1(z, y1, y2, E, L, V) \\ L_1 &= F2(z, y1, y2, E, L, V) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
K_2 &= F1(z+h/2, y1+K_1/2, y2+L_1/2, E, L, V)\\
L_2 &= F2(z+h/2, y1+K_1/2, y2+L_1/2, E, L, V)\\
K_3 &= F1(z+h/2, y1+K_2/2, y2+L_2/2, E, L, V)\\
L_3 &= F2(z+h/2, y1+K_2/2, y2+L_2/2, E, L, V)\\
K_4 &= F1(z+h, y1+K_3, y2+L_3, E, L, V)\\
L_4 &= F2(z+, y1+K_3, y2+L_3, E, L, V)
\end{aligned}
\tag{3.28}
$$

ile ifade edilir.

Ayrıca beşinci mertebe Runge-Kutta formülleri ise

$$
\begin{aligned}
y1_{i+1} &= y1_i + h\left[\frac{1}{192}(23K_1 + 125K_3 - 81K_5 + 125K_6)\right]\\
y2_{i+1} &= y2_i + h\left[\frac{1}{192}(23L_1 + 125L_3 - 81L_5 + 125L_6)\right]
\end{aligned}
\tag{3.29}
$$

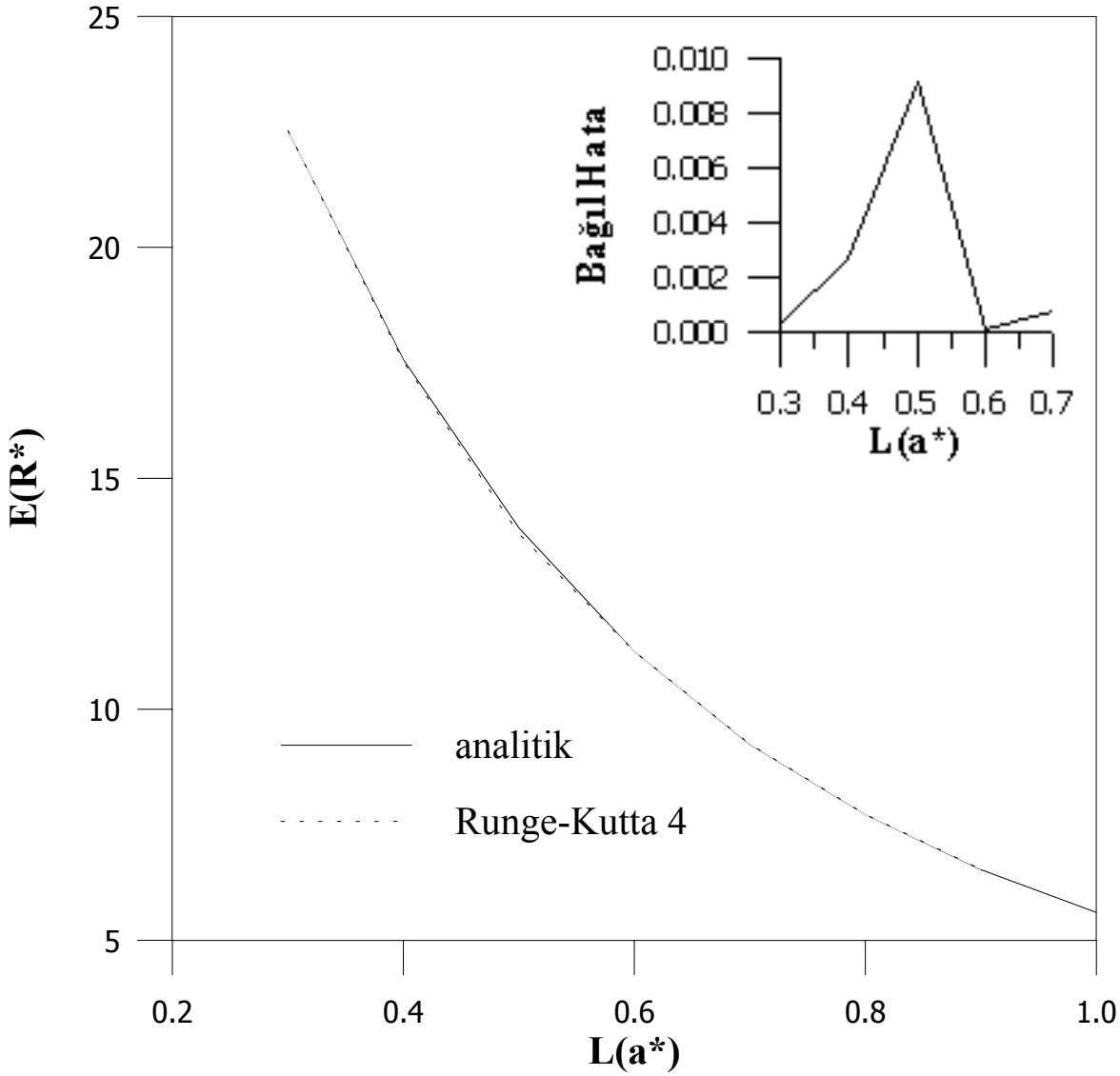
ve

$$
\begin{aligned}
K_1 &= F1(z, y1, y2, E, L, V)\\
L_1 &= F2(z, y1, y2, E, L, V)\\
K_2 &= F1(z+h/3, y1+K_1/3, y2+L_1/3, E, L, V)\\
L_2 &= F2(z+h/3, y1+K_1/3, y2+L_1/3, E, L, V)\\
K_3 &= F1(z+2h/5,\ y1+(6K_2+4K_1)/25,\ y2+(6L_2+4L_1)/25, E, L, V)\\
L_3 &= F2(z+2h/5,\ y1+(6K_2+4K_1)/25,\ y2+(6L_2+4L_1)/25, E, L, V)\\
K_4 &= F1(z+h,\ y1+(15K_3-12K_2+K_1)/4,\ y2+(15L_3-12L_2+L_1)/4, E, L, V)\\
L_4 &= F2(z+h,\ y1+(15K_3-12K_2+K_1)/4,\ y2+(15L_3-12L_2+L_1)/4, E, L, V)\\
K_5 &= F1(z+2h/3,\ y1+(8K_4-50K_3+90K_2+6K_1)/81,\\
&\qquad y2+(8L_4-50L_3+90L_2+6L_1)/81, E, L, V)\\
L_5 &= F2(z+2h/3,\ y1+(8K_4-50K_3+90K_2+6K_1)/81,\\
&\qquad y2+(8L_4-50L_3+90L_2+6L_1)/81, E, L, V)\\
K_6 &= F1(z+4h/5, y1+(8K_4+10K_3+36K_2+6K_1)/75,\\
&\qquad y2+(8L_4+10L_3+36L_2+6L_1)/75, E, L, V)\\
L_6 &= F2(z+4h/5, y1+(8K_4+10K_3+36K_2+6K_1)/75,\\
&\qquad y2+(8L_4+10L_3+36L_2+6L_1)/75, E, L, V)
\end{aligned}
\tag{3.30}
$$

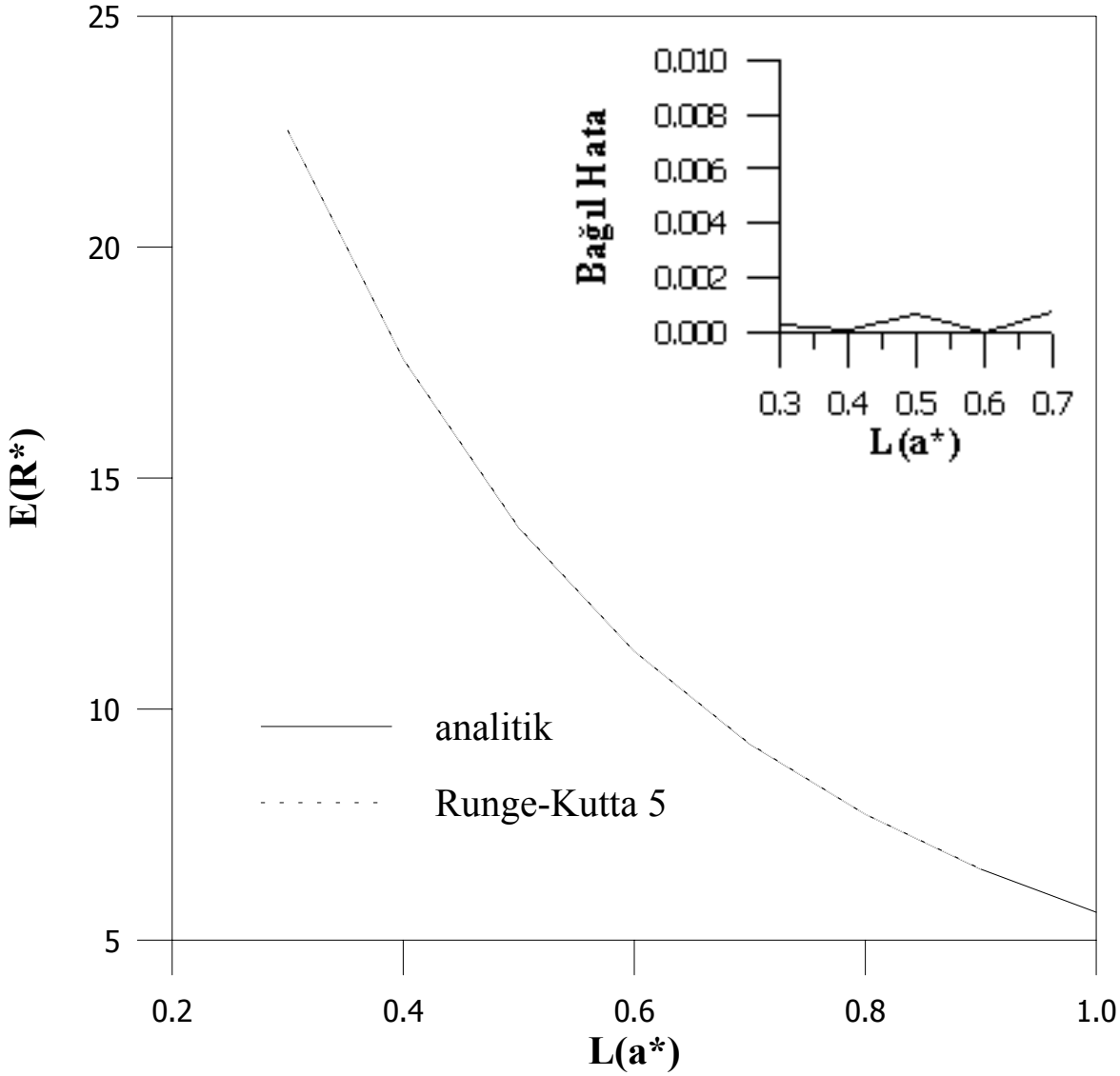
olur. Bu denklemlerdeki F1 ve F2 fonksiyonları

$$F1(z,y1,y2,E)=y2$$
$$F2(z,y1,y2,E)= (V(z)-E)y1 \tag{3.31}$$

şeklindedir. Runge-Kutta dördüncü ve beşinci mertebe yöntemler kullanılarak, sonlu kuantum kuyusundaki elektronun kuyu genişliği ile taban durum enerji değişimi şekil 3.1 ve şekil 3.2'de analitik çözümlerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir.



Şekil 3.1: Sonlu kuantum kuyusunda analitik çözümle dördüncü derece Runge-Kutta çözümünün karşılaştırması.



Şekil 3.2: Sonlu kuantum kuyusunda analitik çözümle beşinci derece Runge-Kutta çözümünün karşılaştırması.

İki şekil karşılaştırıldığında beşinci derece Runge-Kutta formülleri analitik çözüme daha yakın sonuçlar veriyor fakat, her adımda fonksiyon beş kez hesaplandığı için çok işlem yapmak gerekmektedir. Bu bilgisayar hesaplarında çok zaman almaktadır. Bundan dolayı tezimizdeki hesaplamalarda dördüncü derece Runge-Kutta formüllerini kullanmayı tercih ettik.

Bu yöntemin avantajları, programlaması basit, herhangi bir karmaşıklığa neden olmadan adım büyüklüğünü isteğe göre değiştirilmesi, hata oranının çok düşük olması ve çözümün başlangıcında özel hesaplamalar gerektirmemesidir.

BÖLÜM 4. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

Bu bölümde, bölüm 3'te anlatılan analitik ve nümerik yöntemler kullanılarak, değişik kesitli kuantum tellerinde manyetik alan şiddetine, elektrik alan şiddetine, tel kalınlığına ve yabancı atomun konumuna bağlı olarak bağlanma enerjilerinin tespiti ile ilgili hesaplara ve yorumlara yer verilmiştir. Ayrıca literatürde değişik olarak verilen dielektrik sabitinin değerini, yasak enerji aralığının potansiyel yükseklikleri için verilen formülleri ve bariyer oranının yapıya göre en uygun olan değerlerini kararlaştırmak için deneysel verilerle karşılaştırılarak kuantum kuyularında eksiton geçiş enerjilerini nümerik olarak hesaplanmıştır.

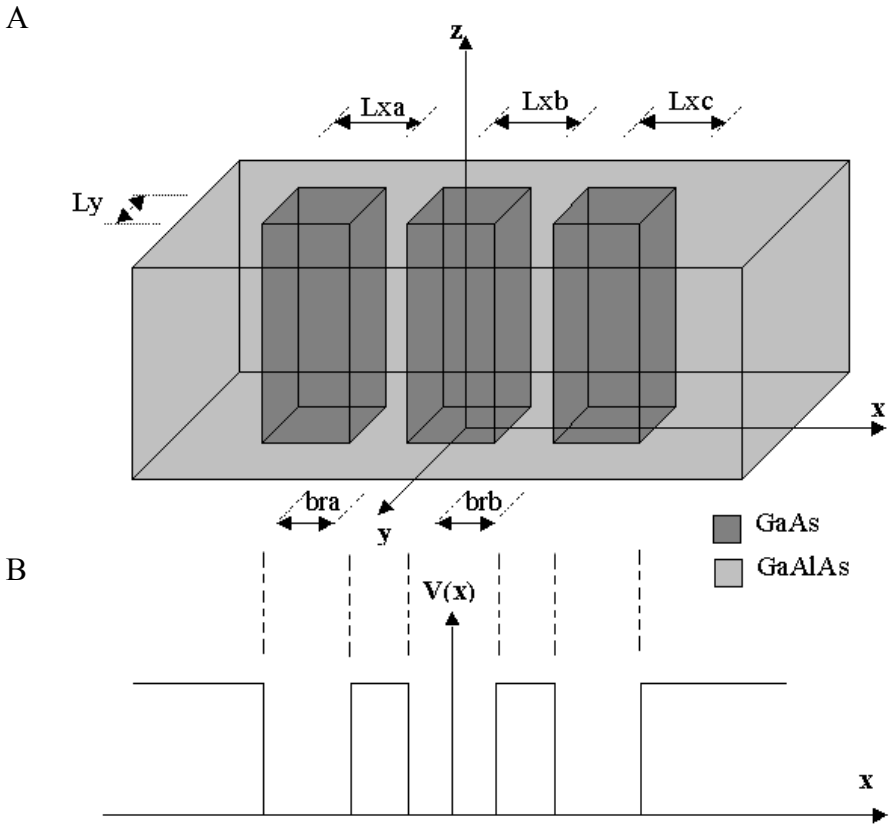
4.1.Dikdörtgen Kesitli Üçlü Kuantum Telinde Yabancı Atoma Elektrik Alanın Etkisi

Bu bölümde, elektrik alan şiddetine, tel kalınlığına ve yabancı atomun konumuna bağlı olarak dikdörtgen kesitli üçlü GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu tellerinde bir hidrojenik yabancı atomun taban durum bağlanma enerjisi hesaplanmıştır. Dikdörtgen kesitli üçlü GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu telinin geometrik yapısı şematik olarak şekil 4.1.A'da gösterilir. Şekil 4.1.B'de, x eksenine göre potansiyel profil kesiti verilir.

Effektif kütle yaklaşımı altında, z boyunca uzanan dikdörtgen kesitli üçlü tel sistemi için Hamiltonyen,

$$H_o = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y)+eF(x\cos\theta+y\sin\theta) \qquad (4.1)$$

burada m^* elektronun effektif kütlesi, F $x-y$ düzleminde uygulanan elektrik alan şiddeti ve θ elektrik alanla x ekseni arasındaki açıdır. Denklem (4.1)'deki sonlu bariyer



Şekil 4.1.A: Dikdörtgen kesitli üçlü kuantum kuyu telinin şematik gösterimi. **B:**Dikdörtgen kesitli üçlü kuantum kuyu telinin x eksenine göre potansiyel profil kesiti.

potansiyeli $V(x,y)$

$$V(x,y)=\begin{cases} 0 & -\frac{Lxb}{2}-bra-Lxa\le x\le -\frac{Lxb}{2}-bra, \quad |y|<\frac{Ly}{2} \\ 0 & -\frac{Lxb}{2}\le x\le \frac{Lxb}{2}, \quad |y|<\frac{Ly}{2} \\ 0 & \frac{Lxb}{2}+brb\le x\le \frac{Lxb}{2}+brb+Lxc, \quad |y|<\frac{Ly}{2} \\ V_0 & \textit{diğer yerlerde}, \end{cases} \tag{4.2}$$

olarak alınabilir. Burada elektron z boyunca serbest hareket eder, fakat x ve y yönünde sınırlandırılmıştır. Taban durum enerjisi E_0 ve taban durum dalga fonksiyonu

$\psi_0(x,y,z)$'nin x ve y bileşenleri dördüncü derece Runge-Kutta nümerik metot kullanılarak bulunur. Bu metot bölüm 3.2'de açıklanmıştı.

$(x_i, y_i, 0)$ noktasındaki yabancı atom için Hamiltonyen

$$H_1 = H_0 - \frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} \tag{4.3}$$

olur, burada ε elektronun hareket ettiği ortamın dielektrik sabitidir. Bu dielektrik sabiti yapının her yerinde eşit olarak alınır. $\left[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2\right]^{1/2}$ taşıyıcı ve yabancı atom arasındaki uzaklık olur. Yabancı atomun taban durumu için deneme dalga fonksiyonu olarak

$$\psi_1(x,y,z) = N_1\psi_0(x,y,z)\exp(-\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/\lambda) \tag{4.4}$$

kullanılır, burada N_1 normalizasyon sabiti ve λ varyasyonel parametresi olur. Bu parametre denklem (4.3)'teki Hamiltonyen'in beklenen değeri E_1'in minimizasyonundan bulunur.

$$E_1 = \left[\frac{\langle\psi_1|H_1|\psi_1\rangle}{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}\right]_{\lambda_{\min}} \tag{4.5}$$

Yabancı atom bağlanma enerjisi Rydberg birim sisteminde yazılabilir. Yabancı atom bağlanma enerjisi E_B, elektronun taban durum E_0 enerjisinden yabancı atom varken ki E_1 enerjisinin arasındaki fark olarak tanımlanır.

$$\begin{aligned} E_B &= E_0 - E_1 \\ &\cong -\frac{1}{\lambda^2} + \frac{2A}{B} \end{aligned} \tag{4.6}$$

burada

$$A = \left\langle \psi_1(x,y,z) \right| \frac{1}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} \left| \psi_1(x,y,z) \right\rangle, \tag{4.7}$$

ve

$$B = \left\langle \psi_1(x,y,z) \right| \left. \psi_1(x,y,z) \right\rangle \tag{4.8}$$

olarak tanımlanır. Denklem (4.7) ve (4.8)de verilen integrallerin açık formu

$$A = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\psi_1^2(x,y) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-2\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/\,\lambda)}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} dz \tag{4.9}$$

ve

$$B = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\psi_1^2(x,y) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-2\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/\,\lambda)\, dz\,. \tag{4.10}$$

olarak verilir. Denklem (4.9) ve (4.10) daki üç katlı integral olduğundan elle çözmek zordur ve bu hesaplar bilgisayarda oldukça çok zaman alır. Bu yüzden z'ye göre olan integrali

$$A' = 2\int_0^{\infty} \frac{\exp(-2\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/\,\lambda)}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} dz \tag{4.11}$$

ve

$$B' = 2\int_0^{\infty} \exp(-2\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/\,\lambda)\, dz\,. \tag{4.12}$$

olarak ayırabiliriz. Modifiye Bessel fonksiyonlarının $K_\upsilon(xt)$ integral gösteriminin tanımı aşağıda verilir(Gradshteyn ve Ryzhik, 1980).

$$K_\upsilon(xt) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\upsilon + \frac{1}{2})} \left(\frac{x}{2t}\right)^{\upsilon} \int_0^{\infty} \frac{\exp(-x\sqrt{t^2 + z^2})}{\sqrt{t^2 + z^2}} z^{2\upsilon} dz\,. \tag{4.13}$$

Bu tanımı kullanarak yukarıdaki integraller

$$A' = 2K_0(2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}/\lambda) \tag{4.14}$$

ve

$$B' = 2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}K_1(2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}/\lambda), \tag{4.15}$$

olur. Burada K_0 ve K_1 sırasıyla sıfır ve birinci derece modifiye Bessel fonksiyonlarıdır. Sonuçta

$$A = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\psi_1^2(x,y)K_0(2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}/\lambda) \tag{4.16}$$

ve

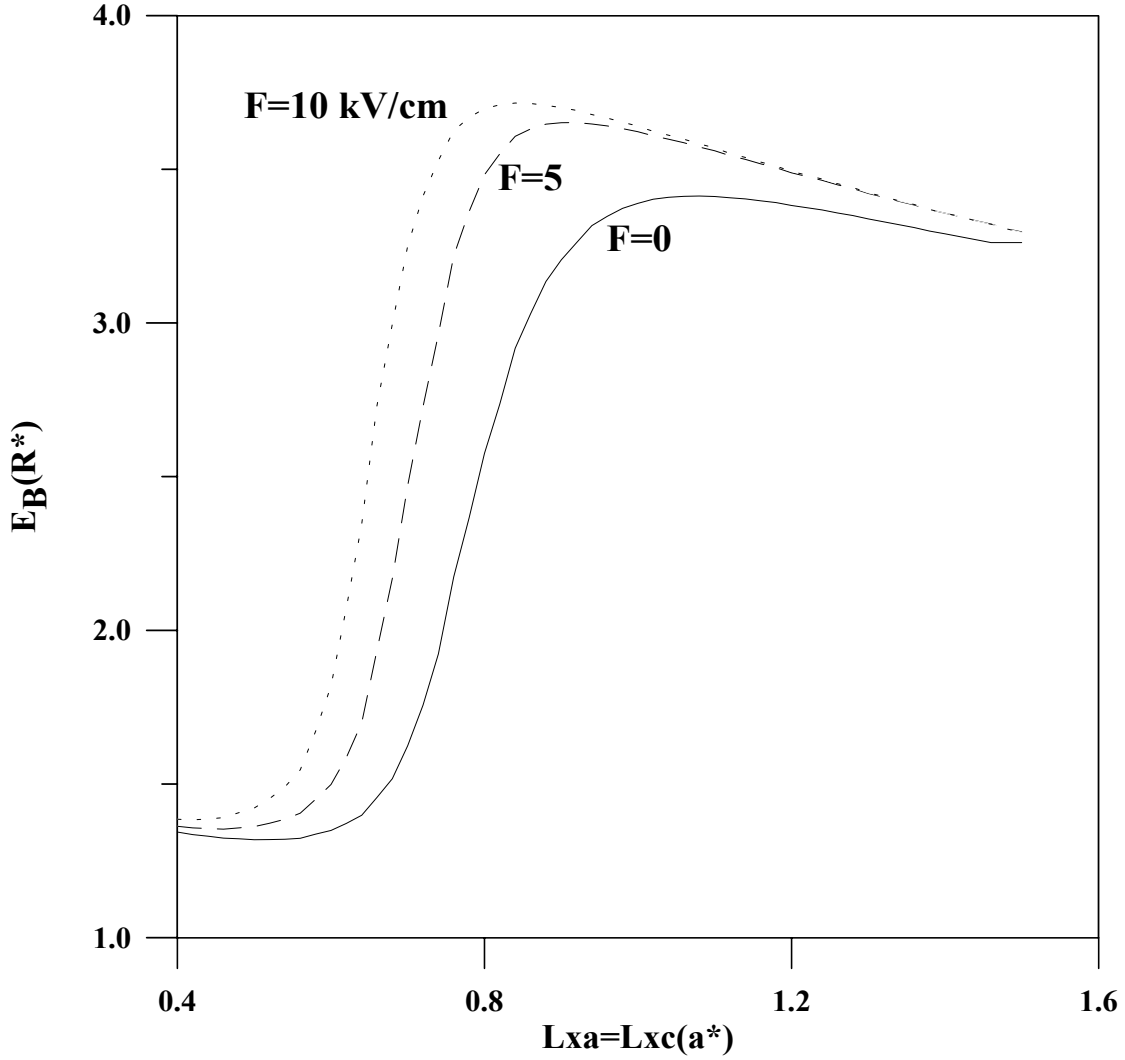
$$B = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\psi_1^2(x,y)\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}K_1(2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}/\lambda) \tag{4.17}$$

olur.

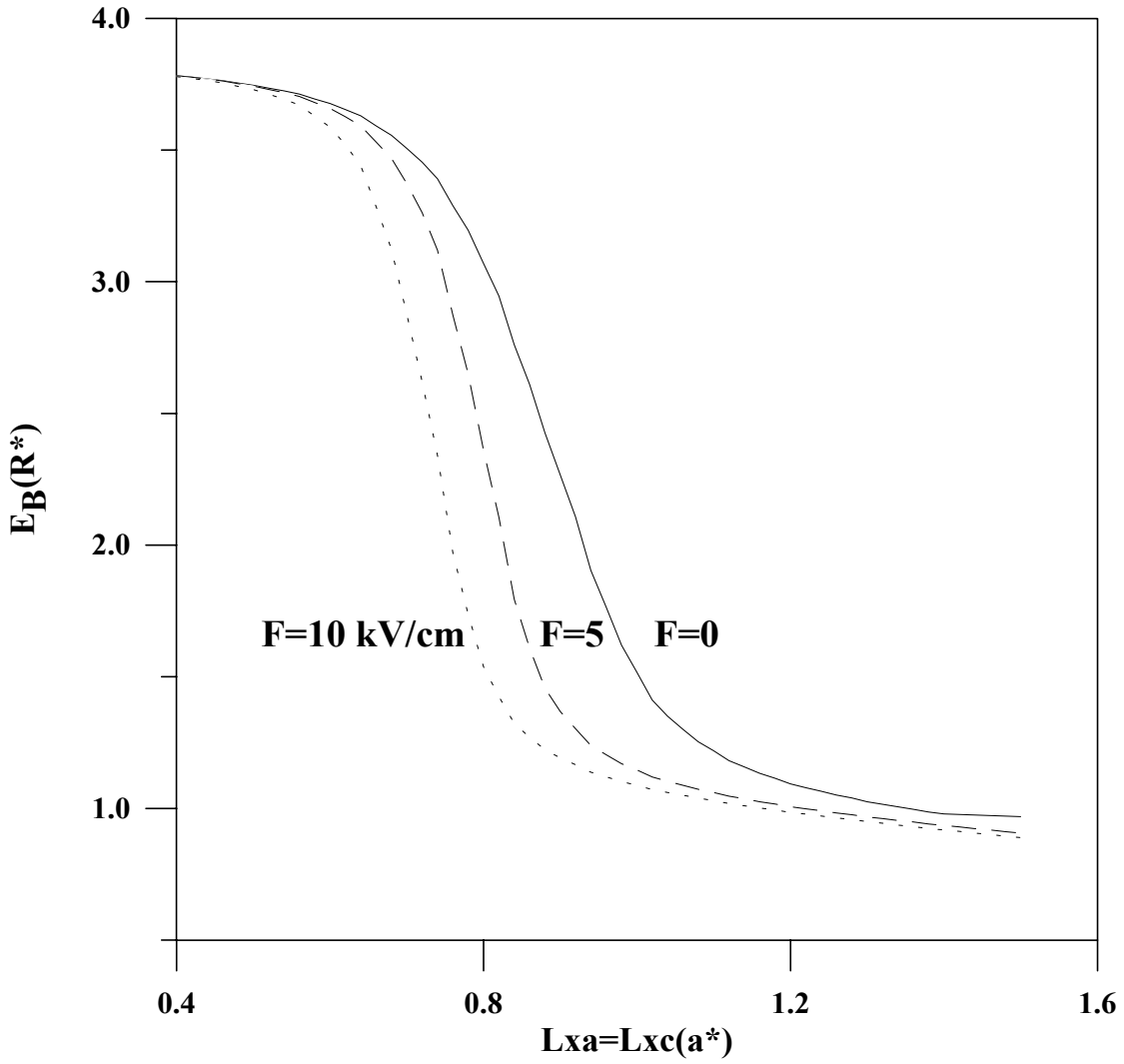
Dikdörtgen kesitli üçlü GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ kuantum telinde yabancı atomun bağlanma enerjisini, elektrik alanın, yabancı atomun konumunun ve tel boyutlarının bir fonksiyonu olarak inceledik. Sonuçlar, sırasıyla uzunluk ve enerji birimleri olan effektif Bohr yarıçapı $a^* = \hbar^2\varepsilon/m^*e^2$ ve effektif Rydberg $R^* = m^*e^4/2\hbar^2\varepsilon^2$ tanımlarıyla gösterilmiştir. Bu birimler GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ üçlü kuantum kuyu telinin içindeki hidrojenik donorlar için $a^* \cong 98$ Å ve $R^* = 5.83$ meV olur. Yaklaşık olarak V=220 meV potansiyel bariyerini karşılayan Al konsantrasyonu x=0.3 olarak seçildi.

Şekil 4.2 ve şekil 4.3'te, elektrik alanlı ve alansız bağlanma enerjileri sırasıyla dış sol ve iç kuantum kuyu telinin merkezine sınırlandırılmış bir hidrojenik yabancı atom için dış kuantum kuyu tel kalınlıklarının bir fonksiyonu olarak gösterilir. Her iki şekilde Lxb=0.8a*, LYi=0 ve bra=brb=0.3 a* sabittir. Lxa=Lxc 0.4a* dan 1.5a* kadar değişir.

Şekil 4.2'de ,yabancı atom sol dış telin merkezinde olur. Lxa=Lxc artarken, F=0 için bağlanma enerjisinde, yabancı atom ile elektron arasındaki zayıf Coulomb



Şekil 4.2: F=0 (düz çizgi), F=5kV/cm (kısa çizgi) ve F=10kV/cm (kırık çizgi) elektrik alan şiddetleri için Lxa=Lxc dış kuantum kuyu tel kalınlıklarının bir fonksiyonu olarak sol dış telin merkezinde yer alan yabancı atomun bağlanma enerjisi.



Şekil 4.3: F=0 (düz çizgi), F=5kV/cm (kısa çizgi) ve F=10kV/cm (kırık çizgi) elektrik alan şiddetleri için Lxa=Lxc dış kuantum kuyu tel kalınlıklarının bir fonksiyonu olarak iç kuantum kuyu telinin merkezinde yer alan yabancı atomun bağlanma enerjisi.

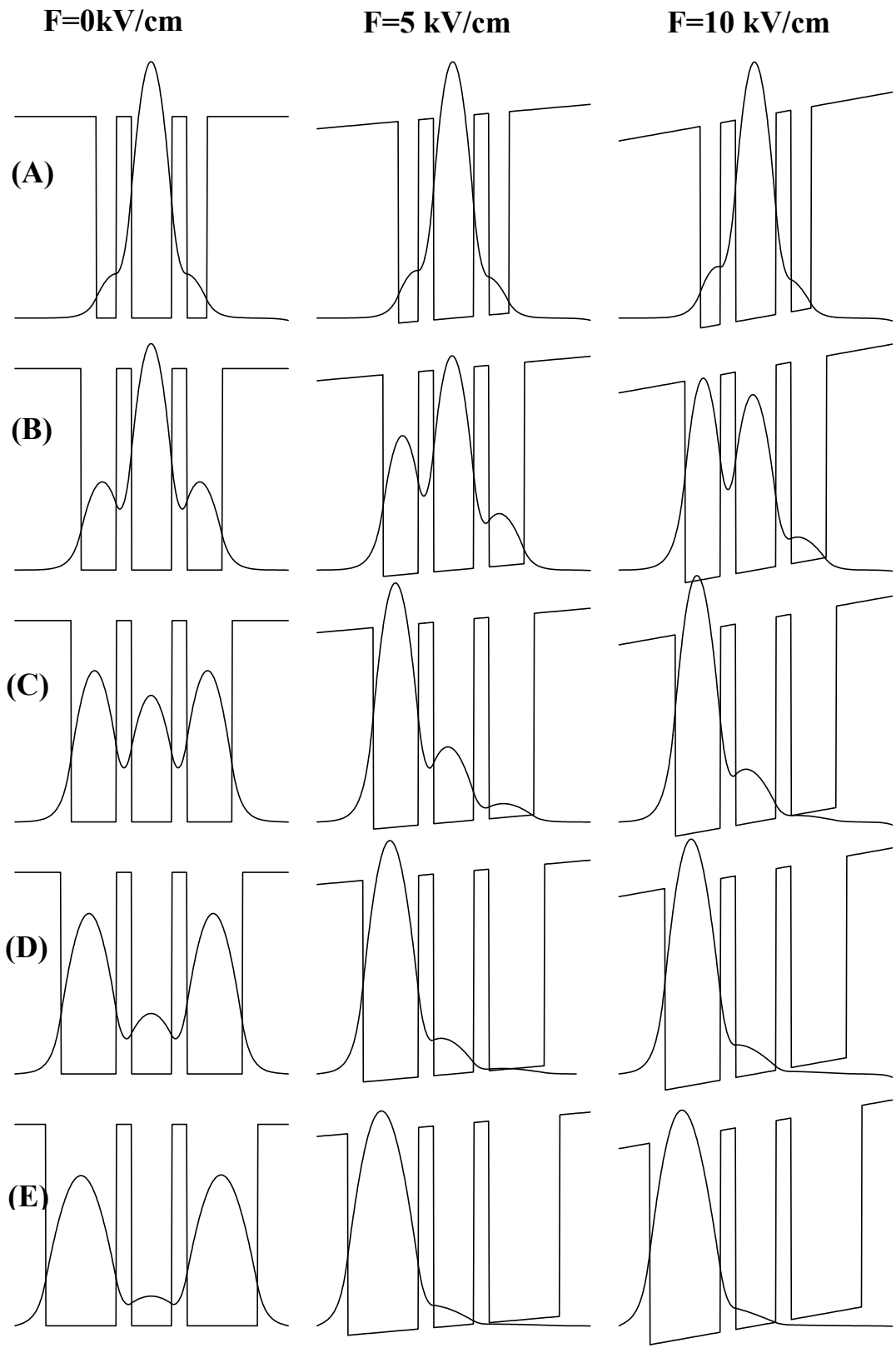
etkileşmesinden dolayı küçük bir azalma gösterir. Başlangıçta dış tellerin kalınlıkları küçükken, dış tellerde elektronun bulunma olasılığı da küçüktür. Bundan dolayı bağlanma enerjisi küçük olmuştur. Lxa=Lxc~0.7a* nin kritik bir değerinde, dış kuantum kuyu tel kalınlıkları iç kuantum kuyu tel kalınlıklarından daha büyük olur. Başlangıçta iç kuantum kuyu teli içinde bulunan elektron tünelleme ile dış kuantum kuyu tellerine geçer ve yabancı atoma yaklaşır. Bu durum bağlanma enerjisinde yaklaşık üç kat bir artışa sebep olur. Sırasıyla F=5kV/cm ve F=10 kV/cm elektrik alanları uygulandığında bağlanma enerjisi elektrik alansız durumla karşılaştırıldığında küçük bir artış gösterir. Sol dış kuantum kuyu telinde elektronun bulunma olasılığının elektrik alan etkisiyle daha çok artmasından kritik geçiş noktası 0.7a* dan 0.6a* değişir.

Şekil 4.3'te, yabancı atom iç telin merkezinde olur. Şekil 4.2'nin tersine, bağlanma enerjisi Lxa=Lxc~0.7a* civarında hızla azalır. Bu beklenen bir davranıştır. Başlangıçta, iç telde elektronun bulunma olasılığı daha yüksekken, dış tel kalınlıklarının artmasıyla birlikte dış tellerdeki elektron bulunma olasılığı artar. Burada bağlanma enerjisi elektronun yabancı atomdan uzaklaşmasından dolayı hızlı bir azalış gösterir.

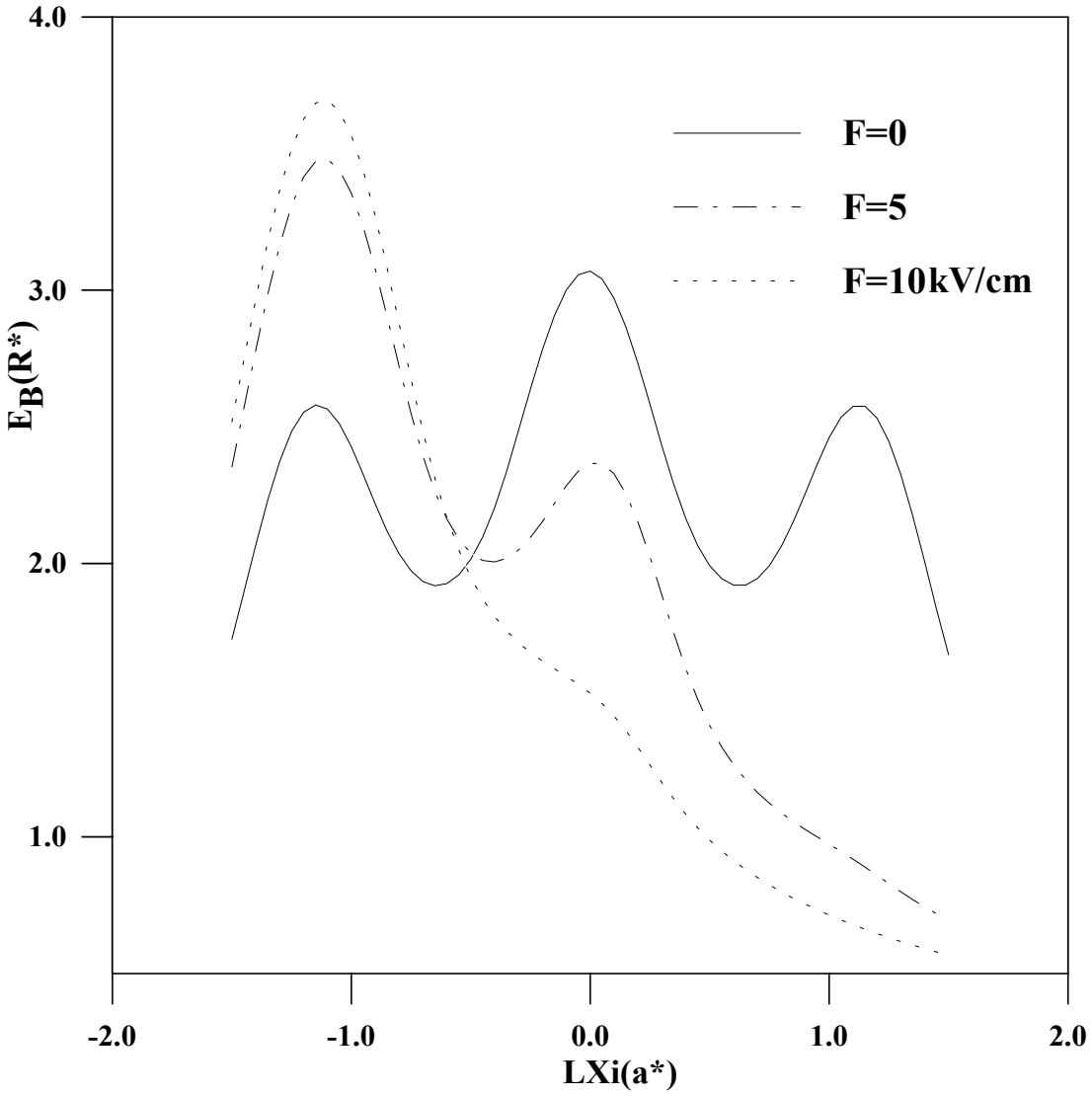
Şekil 4.2 ve şekil 4.3'te gösterilen bağlanma enerjisindeki değişimin nedenini göstermek için, beş farklı dış tel kalınlığını elektrik alanın 0, 5 ve 10 kV/cm değerlerinde x ekseni boyunca elektron olasılık dağılımını şekil 4.4'te verdik. Bu şekilden de görüldüğü gibi elektrik alan yapının şeklini değiştiriyor ve elektron genellikle daha geniş kuantum kuyu telinde yer alıyor. Fakat dış tel kalınlığının büyük olduğu yapılarda elektrik alan etkisiyle elektron sol dış kuantum kuyu telinde yer alıyor.

x ekseni boyunca hidrojenik yabancı atomun konumunun bir fonksiyonu olarak bağlanma enerjisi şekil 4.5 ve şekil 4.6'da gösterilir. Her iki şekilde LYi=0 ve bra=brb=0.3a* sabit olur.

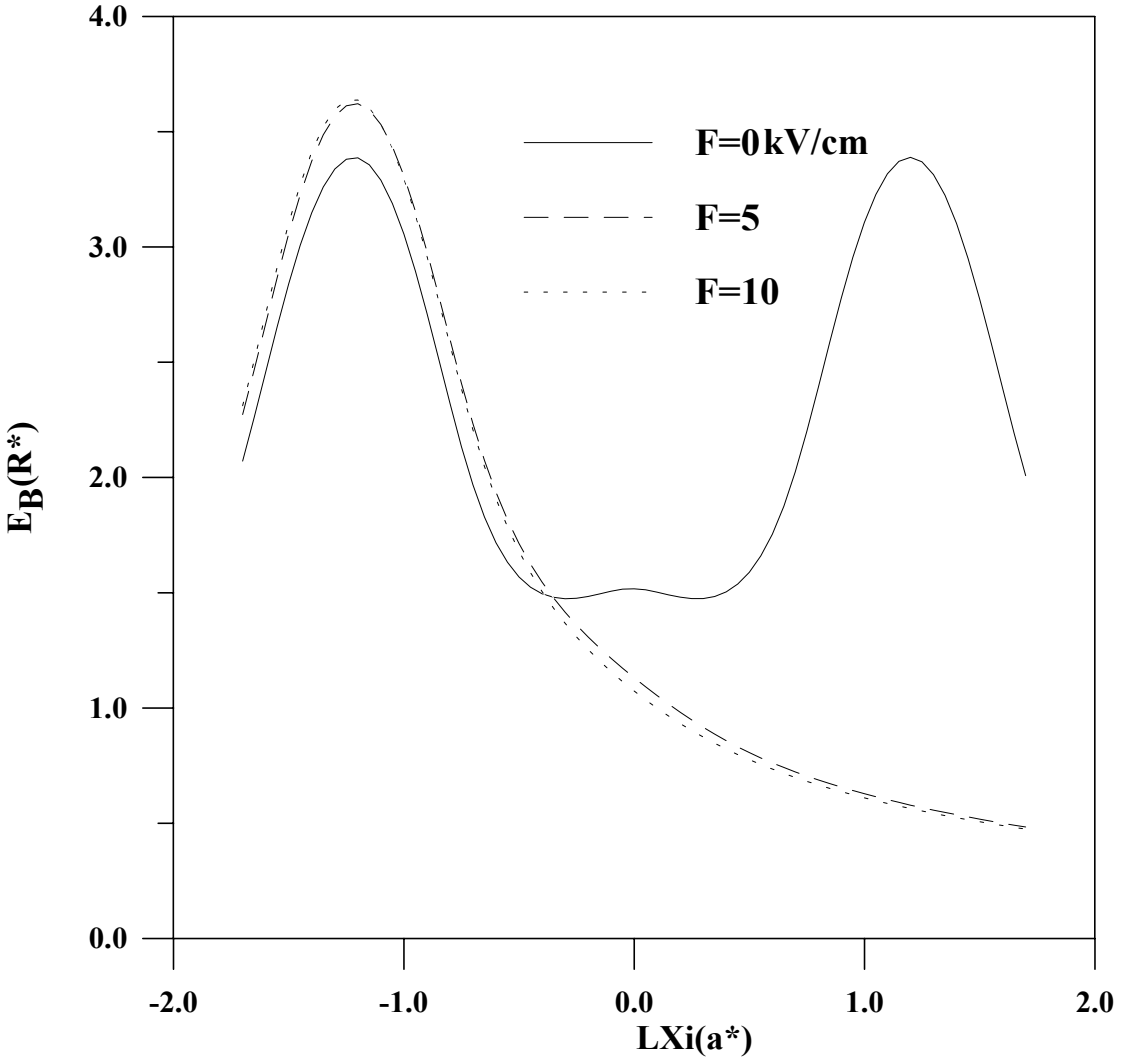
Şekil 4.5'te, kuantum kuyu tel kalınlıkları Lxa, Lxc and Lxb 0.8a* eşittir. Bağlanma enerjisi F=0 için hidrojenik yabancı atomun konumuna bağlı olarak üç pik gösterir. Yabancı atom iç kuantum kuyu telindeyken bağlanma enerjisi maksimum değerini alır. Çünkü elektronun iç telde bulunma olasılığı dış tellerden daha büyüktür. Sisteme F=5kV/cm elektrik alanı uygulandığında , bağlanma enerji basamak basamak azalır. Büyük elektrik alan(F=10kV/cm) altında elektron sol bariyeri kolayca geçer. Bu yüzden, bağlanma enerjisi adım adım azalma göstermez.



Şekil 4.4: x ekseni boyunca beş farklı tel kalınlığı için elektron dağılım olasılığı. V=220meV (**A:**0.4a*, **B:**0.7a*, **C:**0.9a*, **D:**1.1a*, **E:**1.4a*)



Şekil 4.5: Farklı elektrik alanlar için Lxa=Lxc=0.8a*, Lxb=0.8a*, Ly=1a*, bra=brb=0.3a* ile dikdörtgen kesitli kuantum kuyu tel sistemlerinde x yönü boyunca yabancı atomun konumunun bir fonksiyonu olarak hidrojenik yabancı atom için bağlanma enerjisi.



Şekil 4.6: Farklı elektrik alanlar için Lxa=Lxc=1a*, Lxb=0.8a*, Ly=1a* ve bra=brb=0.3a* ile dikdörtgen kesitli kuantum kuyu tel sistemlerinde x yönü boyunca yabancı atomun konumunun bir fonksiyonu olarak hidrojenik yabancı atom için bağlanma enerjisi.

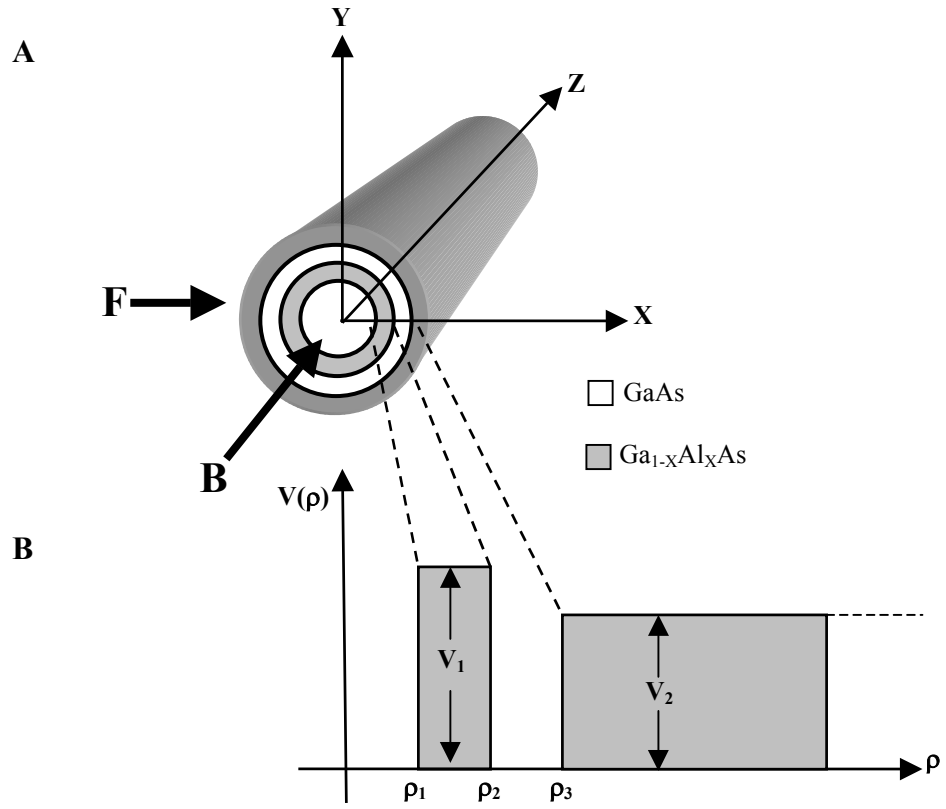
Şekil 4.6'da, dış kuantum kuyu tel kalınlıkları 1a* eşittir. İç kuantum kuyu tel kalınlığı 0.8a* eşittir. Dikdörtgen kesitli üçlü $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu tellerinde elektrik alan yokken, bağlanma enerjisi yabancı atomun konumuna bağlı olarak iki pik gösterir. Çünkü dış kuantum kuyu tel kalınlıkları iç kuantum kuyu tel kalınlığından daha büyük olduğu için dış kuantum kuyu tellerinde elektronun bulunma olasılığı çok büyük olur. Elektrik alan uygulandığı zaman bağlanma enerjisi yabancı atomun konumuna bağlı olarak tek pik gösterir. Bunun nedeni elektrik alan sistemin potansiyel profilini değiştirir ve elektron daha çok sol dış telde olur. Bu şekilde ilginç bir nokta; elektrik alan yokken ve yabancı atom sağ dış telin merkezindeyken, bağlanma enerjisi maksimum değerini alır. Fakat küçük bir elektrik alan uygulanmasıyla bağlanma enerjisi yaklaşık üç kat azalır. İki şekil karşılaştırıldığında, şekil 4.6'daki yapının dış kuantum tel kalınlığı iç kuantum kuyu tel kalınlığından daha büyüktür. Bundan dolayı, elektron dış kuantum kuyu tellerinde bulunmayı tercih eder. Bu özelliklerden dolayı üçlü $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu telleriyle değişik elektronik araçlar yapabilir.

4.2. Coaxial Silindirik Kesitli $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Kuantum Kuyu Tellerinde Yabancı Atoma Manyetik Alan Etkisi

Düzgün manyetik alan etkisinde ve sonlu ve sonsuz potansiyel bariyerinde, silindirik bir kuantum tel içinde yer alan bir yabancı atom için bağlı elektron problemi birçok yazar tarafından ele alınmıştır (Kasapoğlu vd. 2003, Mikhailov vd. 2000, Charrour vd. 2000). Xiao ve çalışma arkadaşları(1995) kuantum kuyu tellerinde kuvvetli pertürbasyonu kullanarak hem manyetik alanın etkisin de hem de manyetik alanın etkisi yokken hidrojenik yabancı atomun bağlanma enerjisini çalıştılar.

Bu çalışmada coaxial silindirik kesitli KKT sistemini inceledik. GaAs silindir telini değişimli olarak saran eşmerkezli $Al_xGa_{1-x}As$ ve GaAs silindirik tabakalarıyla çevrilerek oluşan yapı şekil 4.7.A'da gösterilmiştir. Kesit bölümünü karşılayan potansiyel profili şekil 4.7.B'de verilmiştir. Yapılan çalışmalarda (Aktaş vd. 2001), elektrik alan altında iki farklı yabancı atomun konumu için coaxial silindirik kesitli kuantum kuyu tellerinde bağlanma enerjisi nümerik çözülmüştür. Effektif kütle

yaklaşımı içinde bir varyasyon metoduyla manyetik alan şiddetine ve yabancı atomun konumuna bağlı olarak bağlanma enerjisini hesapladık.



Şekil 4.7.A: Coaxial silindirik kesitli GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ KKT sisteminin şematik gösterimi; **B:**, potansiyel profilinin kesit bölümü.

Şekil 4.7'deki z boyunca uzanan ve silindirik kesite sahip olan coaxial tel için efektif kütle yaklaşımı ve düzgün bir manyetik alan **B**=(0,0,B) altında Hamiltonyen

$$H_0 = \frac{1}{2m^*}\left[\vec{P} + \frac{|e|}{c}\vec{A}\right]^2 + V(\rho) \qquad (4.18)$$

burada

$$V(\rho)=\begin{cases}0 & 0\le\rho\le\rho_1\\ V_1 & \rho_1\le\rho\le\rho_2\\ 0 & \rho_2\le\rho\le\rho_3\\ V_2 & \rho_3\le\rho\le\infty\end{cases} \tag{4.19}$$

olur. Düzgün uygulanan manyetik alan **B** aşağıdaki vektör potansiyeli tarafından tanımlanır.

$$\vec{A}=(0,\frac{1}{2}B\rho,0) \tag{4.20}$$

Sistemin Hamiltonyeni silindirik koordinatlarda sırasıyla uzunluk ve enerji ölçümleri için effektif Bohr yarıçapı a* ve Rydberg R* indirgenmiş birimlerde yazılabilir.

$$H_0=-\nabla^2-i\gamma\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{4}\gamma^2\rho^2+V(\rho) \tag{4.21}$$

Denklem 4.21'deki γ,

$$\gamma=\frac{e\hbar B}{2m^*cR^*} \tag{4.22}$$

olarak tanımlanır.

Elektron dalga fonksiyonları genel formda

$$\psi_0(\rho,\varphi,z)=N_0\exp(ik_z z)\exp(im\varphi)\chi(\rho)\qquad m=0,\pm1,\pm2,.....\pm l \tag{4.23}$$

varsayılır. Burada N_0 normalizasyon sabitidir, k_z elektronların dalga vektörünün z eksen birleşenidir. l yörünge kuantum sayısını ve m manyetik kuantum sayısını gösterir. Telin sınırlandırılmış potansiyel formları ve vektör potansiyel yukarıda verilmiştir. Radyal özfonksiyon χ için Schrödinger denklemi aşağıda gösterilir.

$$-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho\frac{\partial\chi}{\partial\rho})+\left[\frac{m^2}{\rho^2}+k_z^2+m\gamma+\frac{1}{4}\gamma^2\rho^2+V(\rho)-E\right]\chi=0 \qquad (4.24)$$

Bu denklem confluent hypergeometric fonksiyonların terimleriyle çözülebilir (Masale 1999, 2000, 2002). Toplam radyal dalga fonksiyonu ve taban durum enerjisi E_0 (m=0) Runge-Kutta metot kullanılarak nümerik olarak hesaplanır (Bloss 1989). Yapı $\rho_3 = \rho_2$ limitinde tekli kuantum kuyu teline indirgenir. Böylece daha önce yapılan çalışmalarla sonuçlarımızı kontrol etme olanağı sağladık. Bu kontrolde sonuçlarımız önceki çalışmalarla uyum içindedir (Aghasyan ve Kirakosyan 2000).

Bundan sonra, $\rho = \rho_i$ ve $z = 0$'da bir hidrojenik yabancı atom yerleştirildiğinde, Hamiltonyen

$$H_1 = H_0 - \frac{2}{\sqrt{z^2+\left|\vec{\rho}-\vec{\rho_i}\right|^2}} \qquad (4.25)$$

olur. Bu sistemin çözümünde varyasyon yöntemini kullandık. Bağlı elektron için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi_1(\rho,\varphi,z) = N_1\psi_0(\rho,\varphi,z)\exp\left(-\sqrt{z^2+\left|\vec{\rho}-\vec{\rho_i}\right|^2}\Big/b\right) \qquad (4.26)$$

olarak alındı. Burada b varyasyon parametresidir, ki bu denklem 4.25'teki Hamiltonyen'den bulunan E_1'in beklenen değerinin minimizasyonundan bulunur.

Yabancı atomun bağlanma enerjisi effektif Rydberg biriminde

$$\begin{aligned} E_B &= E_0 - E_1 \\ &= -\frac{1}{b^2}+\frac{2I_1}{I_2} \end{aligned} \qquad (4.27)$$

ile

$$I_1 = \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_0^{2\pi} K_0(2\left|\vec{\rho} - \vec{\rho_i}\right| / b)\psi_1^2(\rho,\varphi)d\varphi \tag{4.28}$$

ve

$$I_2 = \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_0^{2\pi} \left|\vec{\rho} - \vec{\rho_i}\right| K_1(2\left|\vec{\rho} - \vec{\rho_i}\right| / b)\psi_1^2(\rho,\varphi)d\varphi \tag{4.29}$$

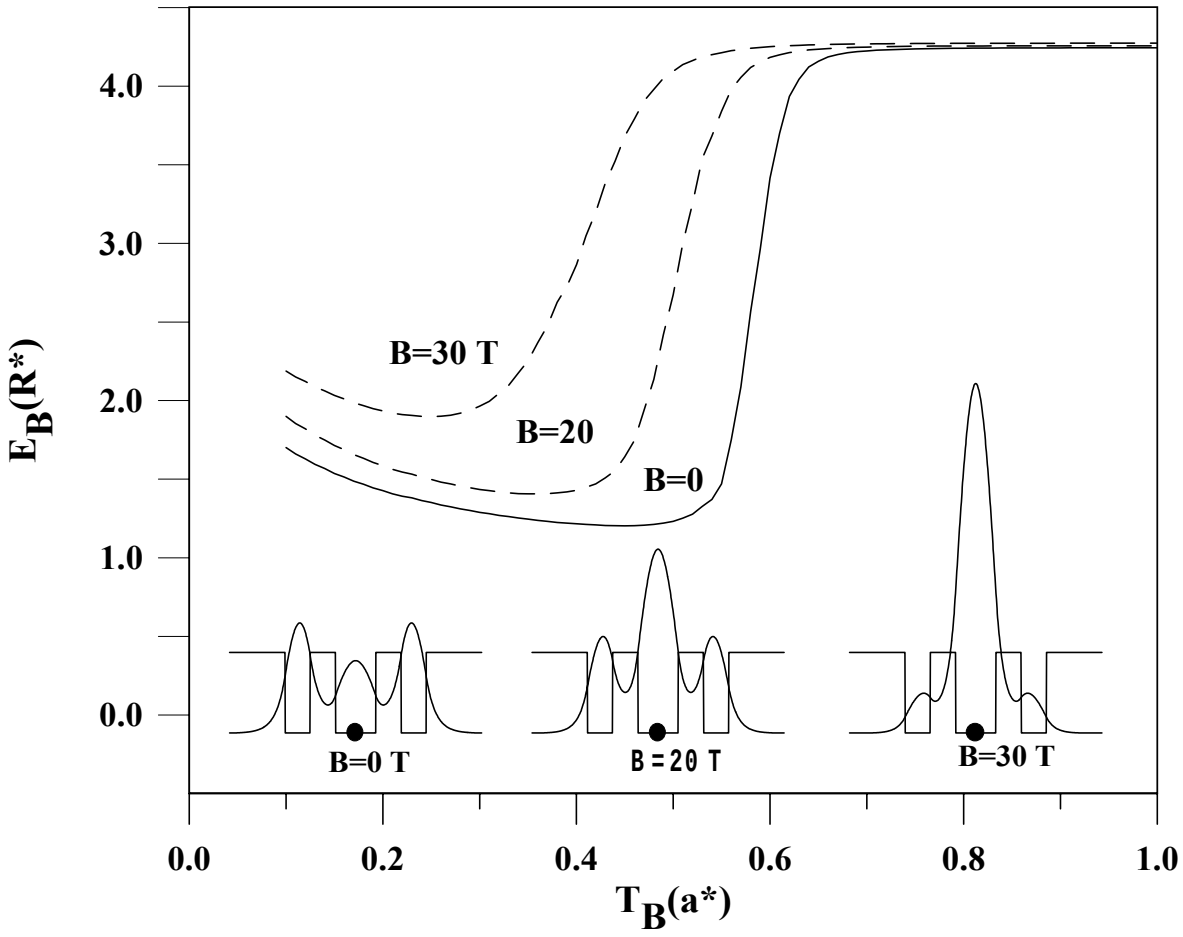
olarak yazılabilir. Burada sırasıyla K_0 ve K_1 sıfır ve birinci derece modified Bessel fonksiyonlarıdır, ve $\left|\vec{\rho} - \vec{\rho_i}\right| = \sqrt{\rho^2 + \rho_i^2 - 2\rho\rho_i \cos\varphi}$ olarak tanımlanır.

Başlangıçta Xiao vd. (1995), Aghasyon ve Kirakosyan (2000) tarafından çalışılan yapıları inşa ettik. Bu yapılarda yabancı atom merkezde yer alır. Xiao vd. (1995), Aghasyon ve Kirakosyan (2000)'ın bulduğu sonuçlarla sonuçlarımızı karşılaştırdık ve uyumlu olduğunu gördük.

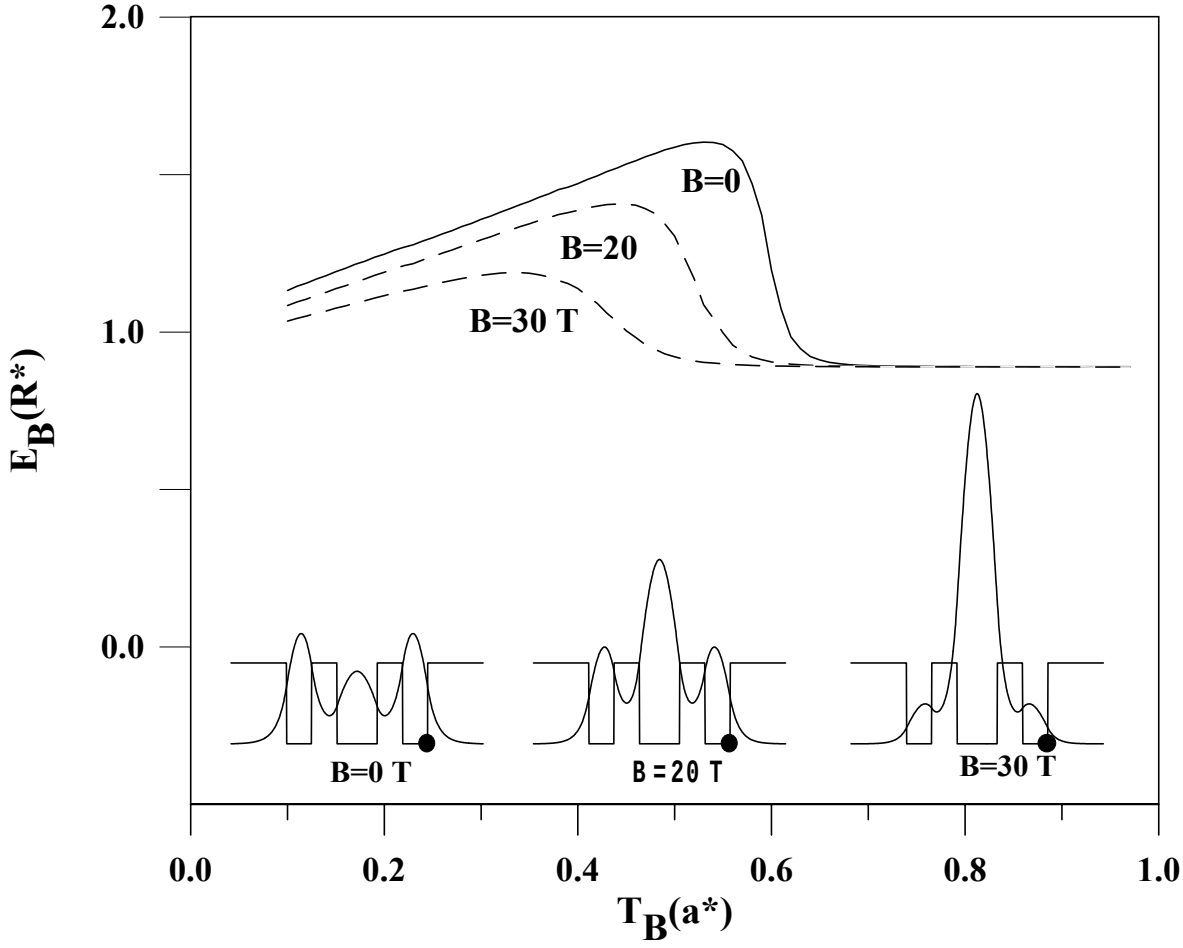
Şekil 4.7'de gösterdiğimiz sistemde, uzunluk ve enerjiyi Rydberg birimlerinde indirgeyerek çalıştık. Burada ε, tel içinde ve bariyerler içinde eşit düşünülerek GaAs dielektrik sabitidir. Bu birimler GaAs/Al_x $Ga_{1-x}As$ kuantum kuyu tellerinde a*≅100 Å ve R*≅5.7 meV olur. Al konsantrasyonu x=0.3 alındı. Bu değer potansiyel bariyerin yaklaşık $V_2 = 224$meV karşı gelir.

Şekil 4.8 ve şekil 4.9'de bir manyetik alanlı ve alansız sırasıyla kuantum kuyu telinin merkezinde ve sağ dış telin kenarında yer alan bir yabancı atom için bağlanma enerjisi T_B bariyer kalınlığının bir fonksiyonu olarak çalışıldı. Her iki şekilde, $T_1 = 0.4a^*$ sabit ve T_B 0.1'den başlayarak artarken T_2 1a*'dan 0'a doğru azalır.

Şekil 4.8'de yabancı atom merkezde yer alır. B=0 için başlangıçta bariyer kalınlığı ince ve dış tel kalınlığı iç tel kalınlığından büyüktür. Bu yüzde kabataslak elektron olasılık dağılımında gösterildiği gibi elektron kuantum kuyu telinin dışında yer alır. T_B artarken, B=0 için yabancı atom ve elektron arasında zayıf Coulomb etkileşmesinden dolayı bağlanma enerjisinde gözle görülür bir azalma oluşur. T_B (≈0.55 a*) kritik değerinde, elektron dış kuantum kuyu telinde uzun süre tutulamaz ve iç kuantum kuyu teline geçer. Bu bağlanma enerjisinde yaklaşık 4 kat artıma sebep olur.



Şekil 4.8: B=0T, B=20 T ve B=30T durumların olasılık dağılımlarıyla birlikte T_B bariyer kalınlığının bir fonksiyonu olarak merkezde yabancı atom için bir elektronun bağlanma enerjisi. $V_1 = V_2$=224 meV.



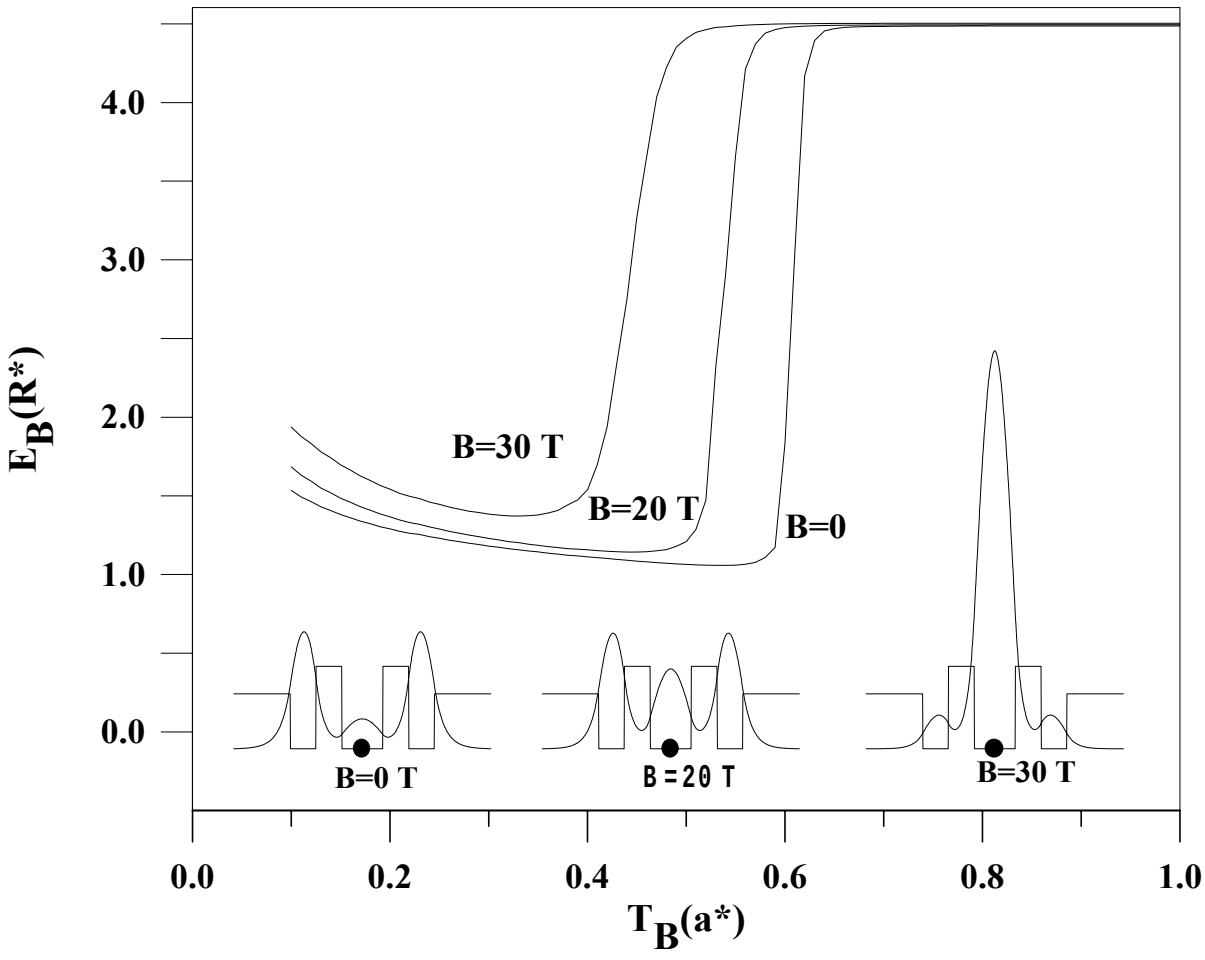
Şekil 4.9: B=0, B=20 T ve B=30T durumların olasılık dağılımlarıyla birlikte T_B bariyer kalınlığının bir fonksiyonu olarak sağ KKTlinin kenarında yer alan yabancı atom için bir elektronun bağlanma enerjisi. $V_1 = V_2$ =224 meV.

B=20T ve B=30T manyetik alan uygulandığında, bağlanma enerjisi Coulomb etkileşmesinden dolayı alansız ile karşılaştırıldığında gözle görülür bir artış gösterir. Manyetik alan iç KKT içinde elektronu tutmayı denediği için kritik bariyer kalınlığında hafifçe daha küçük değere doğru hareket eder. Çünkü elektron B=20 T ve B=30 T için kabaca olasılık dağılımda gösterildiği gibi iç kuantum kuyu teline transfer olur.

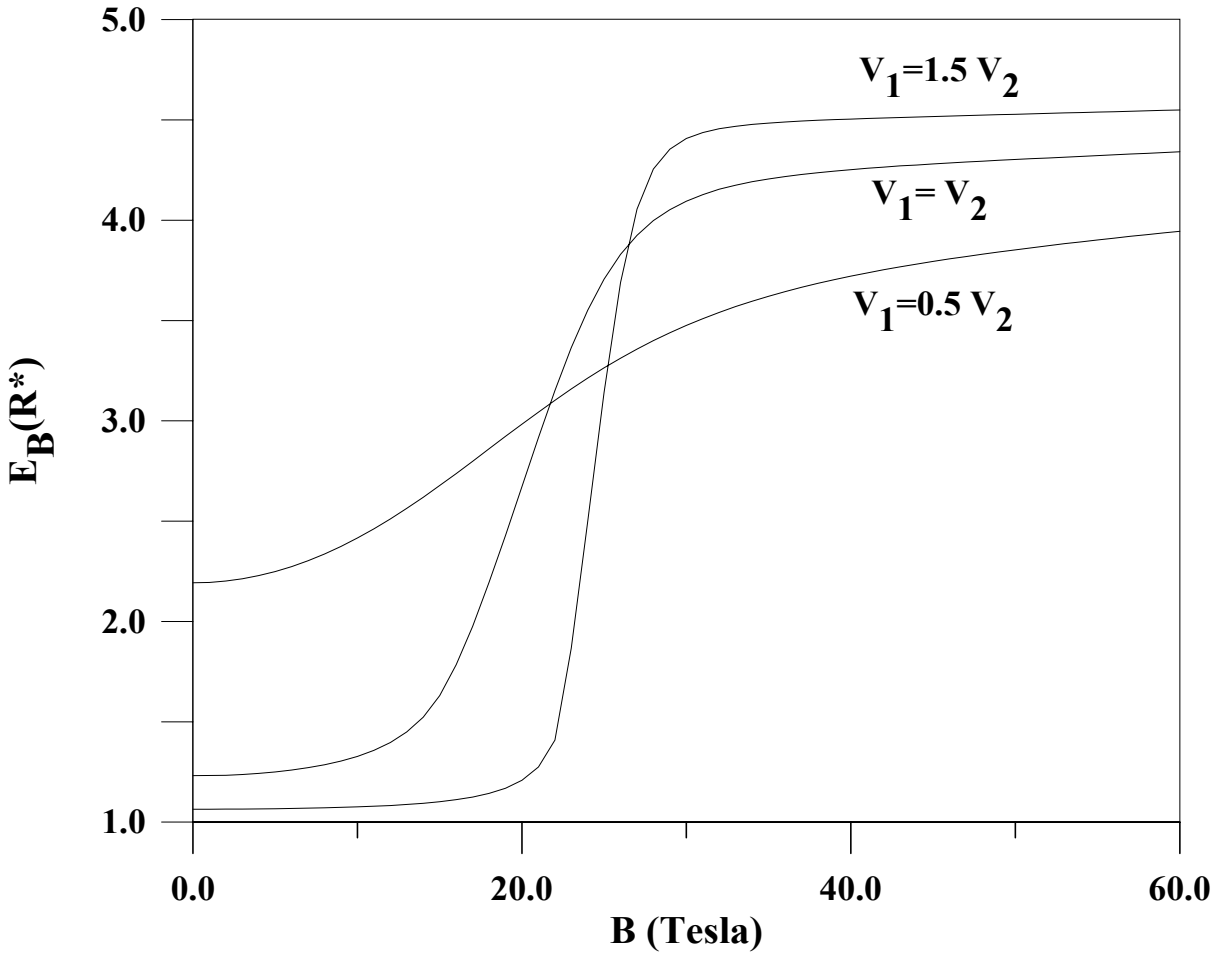
Şekil 4.9'da, yabancı atom dış telin sağ köşesindedir. Manyetik alan olmadığında, şekil 4.8'deki duruma benzemez. Bağlanma enerjisi $T_B \approx 0.55$ a* kritik değerine kadar bariyer kalınlığının artmasıyla yaklaşık lineer artar. Burada bariyer kalınlığının kritik değerine kadar T_2 dış tel kalınlığı T_1 iç tel kalınlığından daha büyüktür. Bundan dolayı elektron dalga fonksiyonu dış kuantum kuyu telinde bulunmaya daha eğilimli olur. Bariyer kalınlığı kritik değerden daha büyük olduğu zaman, elektron iç KKT tünelleyerek bağlanma enerjisindeki keskin azalışa sebep olur. Pozitif z yönünde B=20 T manyetik alan uygulandığında, T_B'nin bağlanma enerjisi üzerine etkisi yabancı atomun merkezdeyken gösterdiği davranışına benzemez. Çünkü manyetik alanın yarattığı kuvvetler dalga fonksiyonunu iç kuantum kuyu telinin merkezine yönlendirir ve yabancı atomdan uzaklaştırır.

Ayrıca, şekil 4.8'den farklı olarak şekil 4.10'da iç bariyer potansiyeli $V_1 = 1.5V_2$ alındı. Bağlanma enerjisi iç bariyer kalınlığına(T_B) bağlı olarak üç değişik manyetik alan altında incelendi. Bu şekilde elektron olasılık dağılımları kabaca gösterildi. Şekil 4.10'da, iç bariyer potansiyeli V_o 'dan 1.5 V_o çıkarıldığında kritik bariyer kalınlığı 0.55a*'dan 0.6a*'a artar. Şekil 4.8'de iç bariyer kalınlığının kritik değerinde bağlanma enerjisi dört kat artarken şekil 4.10'da iç bariyer kalınlığının kritik değerinde bağlanma enerjisi dört buçuk kat artar. Bununla beraber geçiş eğimi daha dik olur. Bu artışların sebebi iç bariyer yüksekliğinin artmasıyla elektron tünelleme olayı daha zorlaşmasındandır. Elektron tünelleme yaptıktan sonra yabancı atomun bulunduğu iç KKT'de daha çok yer almasından dolayı bağlanma enerjisinde bir artış görülür. Manyetik alan uyguladığımızda şekil 4.8'deki gibi benzer sonuçlar çıkmaktadır.

Yabancı atomun merkezdeki durumu için bağlanma enerjisi şekil 4.11'de manyetik alan şiddetinin bir fonksiyonun olarak gösterildi. Burada bariyer kalınlıkları



Şekil 4.10: Merkezde yer alan yabancı atom için manyetik alansız, B=20 T ve B=30T durumların olasılık dağılımlarıyla birlikte T_B bariyer kalınlığının bir fonksiyonu olarak bir elektronun bağlanma enerjisi. $V_1 = 1.5V_2$, V_2 =224 meV.



Şekil 4.11: $V_2 = 224$ meV olarak üç farklı V_1 bariyer potansiyeli ve merkezde yer alan yabancı atom için manyetik alanın bir fonksiyonu olarak bağlanma enerjileri. T_1=0.4 a* (ρ_1=0.4 a*), T_B=0.5 a* (ρ_2=0.9 a*), T_2=0.5a* (ρ_3=1.4a*).

sabittir. En ilginç durum $V_1 = 1.5V_2$ için bulunmuştur. Çünkü bağlanma enerjisi yaklaşık 20 T alan şiddetine kadar sabit kalır ve sonra iç kuantum kuyu teline dalga fonksiyonunun transferinden dolayı keskin bir artış görülür. Şekilde tel potansiyeli $V_1 < V_2$ olduğunda asimetrik bir değişim gözlenir. Bu durumda keskin geçişler daha düz olur. Diğer yönden $V_1 = V_2$ için keskin bir artış vardır, çünkü elektron dalga fonksiyonu dış kuantum kuyu teli içinde sınırlandırılamaz (Boz ve Aktaş, 2005).

4.3. Coaxial Silindirik Kesitli GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ Kuantum Kuyu Tellerinde Yabancı Atoma Manyetik Alan ve Elektrik Alan Etkisi

Bu çalışmada tanımladığımız coaxial silindirik kesitli GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ KKTlerine manyetik alanı ve elektrik alanı birlikte uyguladık. Bölüm 4.2'de tanımladığımız yapıya pozitif x yönünde ve tel eksenine dik elektrik alan uyguladık. Bu sistemin Rdyberg birim sisteminde Hamiltonyen'i

$$H_1 = H_0 + \eta\rho\cos\varphi\,, \tag{4.30}$$

olur. Burada φ silindirik koordinatlarda açıyı tanımlar ve $\eta = |e|a^* F / R^*$; F elektrik alan şiddetidir. Elektrik alan etkisini varyasyon yöntemiyle inceleyeceğiz. Bu durum için deneme dalga fonksiyonu

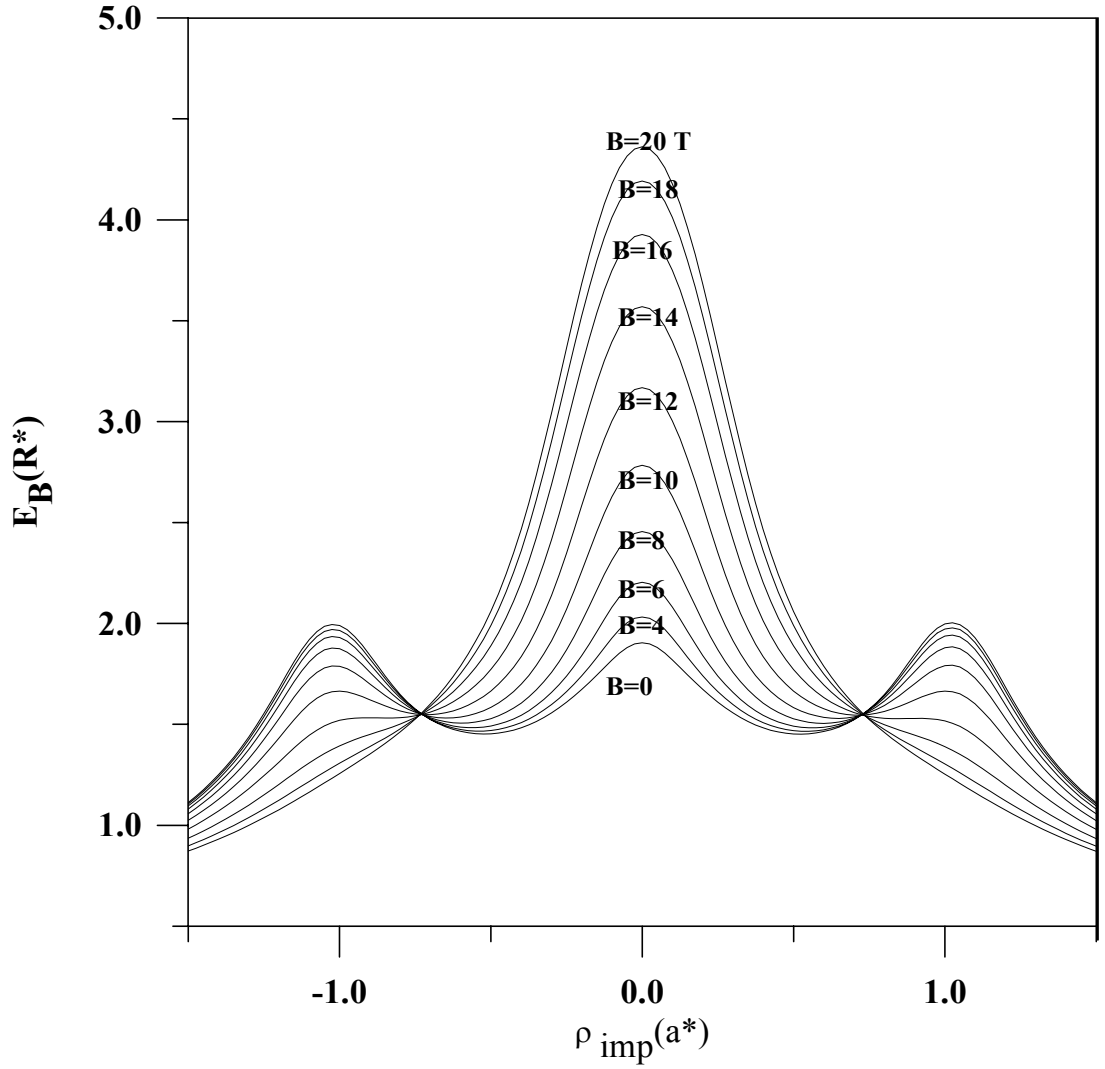
$$\psi_1(\rho,\varphi,z) = N_1\psi_0(\rho,\varphi,z)\exp(-\rho\cos\varphi/a)\,, \tag{4.31}$$

olur. Burada N_1 normalizasyon sabiti ve a varyasyon parametresidir, bu denklem (4.30)'daki Hamiltonyenin $E_1 = \langle\psi_1|H_1|\psi_1\rangle$ beklenen değerinin minimizasyonundan kararlaştırılır. $\psi_0(\rho,\varphi,z)$ 'nin hesaplanması bölüm 4.2'de verilmiştir.

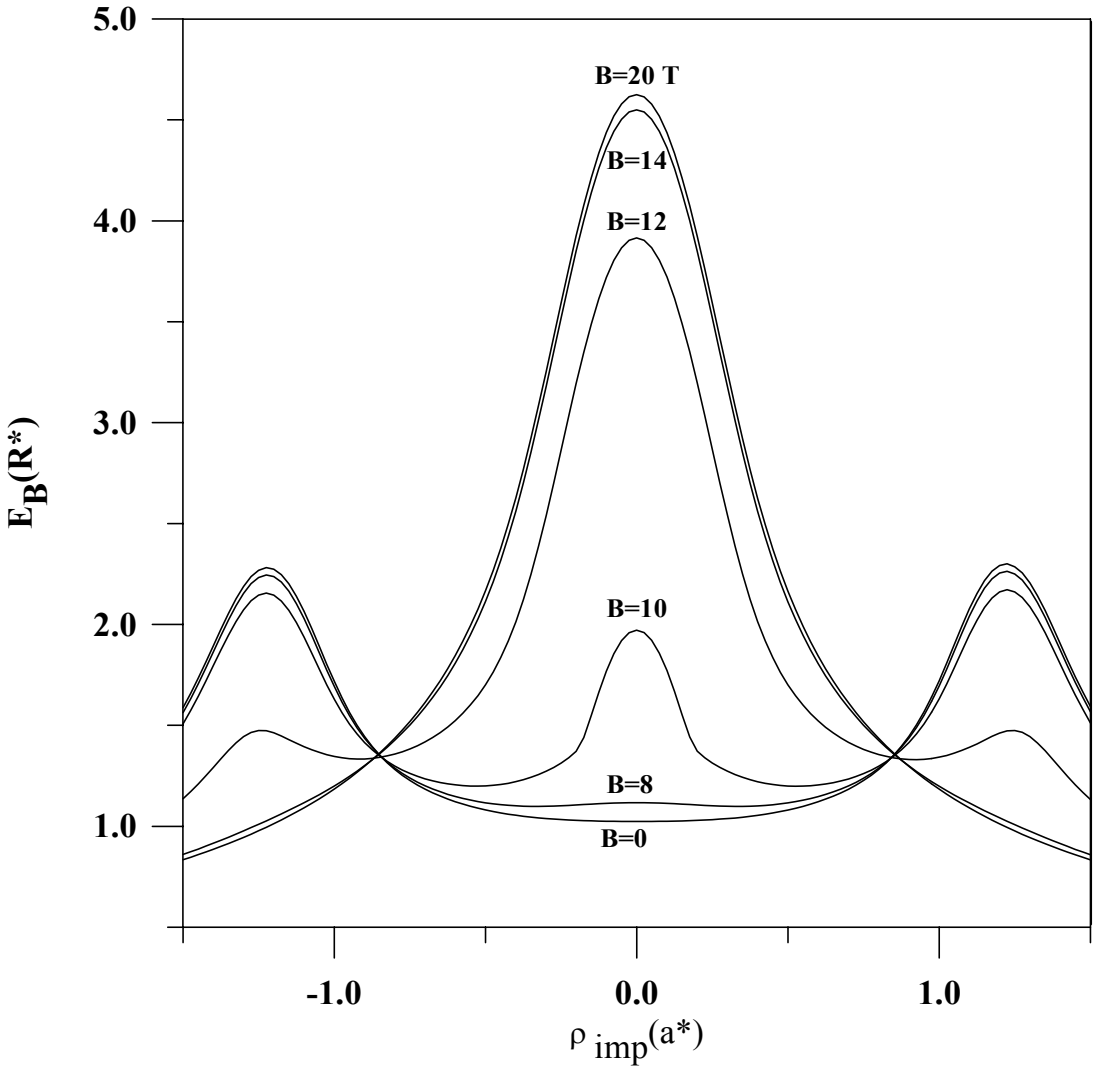
Bundan sonra, $\rho = \rho_i$ ve $z = 0$ 'da yer alan yabancı atomlu sistemin bağlanma enerjisini bölüm 4.2'de anlatılan yolla bulunmuştur.

Çalışılan yapılarda iç tel kalınlığı (T_1) 0.4a* ve dış tel kalınlığı (T_2) 0.4a* olarak alındı. Bölüm 4.2'deki çıkan sonuçlara göre iç bariyer yüksekliği $V_1 = 2V_2$ olarak seçtik. Yaklaşık $V_2 = 224$meV potansiyel bariyerini karşılayan Al konsantrasyonunu x=0.3 olarak aldık. İki yapı tanımladık. Birinci yapıda bariyer kalınlığı T_B=0.4a* (şekil 4.12), ikinci yapıda bariyer kalınlığı T_B=0.6 a* (şekil 4.13) eşit alındı. Başlangıçta, şekil 4.12 ve şekil 4.13'de yabancı atomun konumuna bağlı olarak GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ coaxial silindirik KKTnin taban durum bağlanma enerjisi üzerine manyetik alanın etkisini analiz ettik. Manyetik alanın etkisinden dolayı elektron dalga fonksiyonu iç telde daha sıkıştırılmış olur. Her iki yapı için bağlanma enerjisinin davranışının farkı dikkate değer olduğu gösterilir. B=0 da, Şekil 4.12'de yabancı atomunun konumuna bağlı bağlanma enerjisinde üç pik gösterirken, şekil 4.13'de dış teldeki yabancı atom için iki daha büyük simetrik maksimumlar gözlendi. Bu sonuçlar gösterir ki elektronik dağılım şekil 4.12 ve şekil 4.13'de yapı boyunca dış tele yayılmıştır. Her iki yapıda yabancı atomun pozisyonun bir fonksiyonu olarak bağlanma enerjisi taban durum dalga fonksiyonunun uzaysal dağılımının bir haritası gibi davranır. Beklenildiği gibi iç telin merkezinde yer almış yabancı atom için her iki yapıda uygulanan manyetik alan yabancı atomun bağlanma enerjisinin bir artımına sebep olduğu görüldü. Bununla birlikte, şekil 4.12'de bağlanma enerjisi manyetik alanla orantılı artmasına karşın, şekil 4.13'de bağlanma enerjisi manyetik alanla orantısız artar. Çünkü şekil 4.13'de bariyer kalınlığı şekil 4.12'deki bariyer kalınlığından daha büyüktür.

Bu çalışmaların bir sonucu olarak dış KKT'nin merkezinde yabancı atomun yer alması bağlanma enerjisinin kararlaştırılmasında önemli bir rol oynadığı görülmüştür. Bir elektrik alanın etkisinde farklı yabancı atom pozisyonları için manyetik alanla bağlanma enerjisinin değişimi oldukça farklı olduğunu şekil 4.14 ve 4.15'te inceleyebiliriz. Sonuçlar dış KKTnin sağında yer alan bir yabancı atom için şekil 4.14'te gösterilmiştir. Şekilde açıkça gösterilir ki F=0 için, manyetik alan şiddeti artarken kritik bir değere kadar bağlanma enerjisi yavaşça azalır ve sonra hızlıca bir azalma başlar. B(≈ 11 T) nin kritik değerinde elektron dış KKT linde uzun süre tutulamaz ve iç KKT line geçirilir. Bu bağlanma enerjisinde azalmaya sebep olur. +x yönünde elektrik alan uygulandığında bağlanma enerjisi minimum bir değere kadar



Şekil 4.12: Coaxial silindirik kesitli GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ KKT'de F=0 ve farklı manyetik alan değerleri için bir hidrojenik yabancı atomun bağlanma enerjisi. T_B= 0.4a* ve $T_1 = T_2$=0.4a*. $V_1 = 2V_2$, V_2=224 meV.

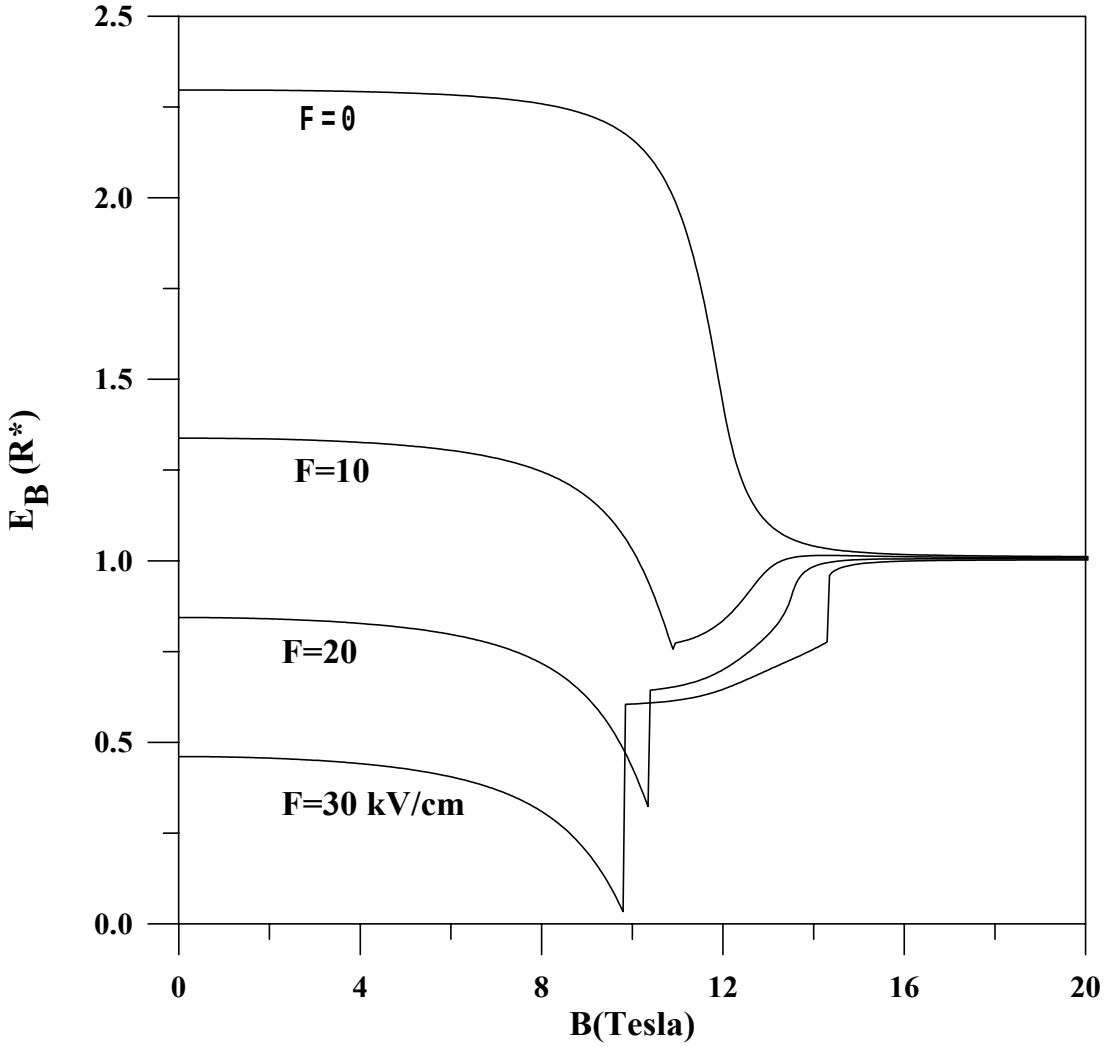


Şekil 4.13: Coaxial silindirik kesitli GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ KKT'de F=0 ve farklı manyetik alan değerleri için bir hidrojenik yabancı atomun bağlanma enerjisi. T_B=0.6 a*, ve $T_1 = T_2$=0.4a*. $V_1 = 2V_2$, V_2=224 meV.

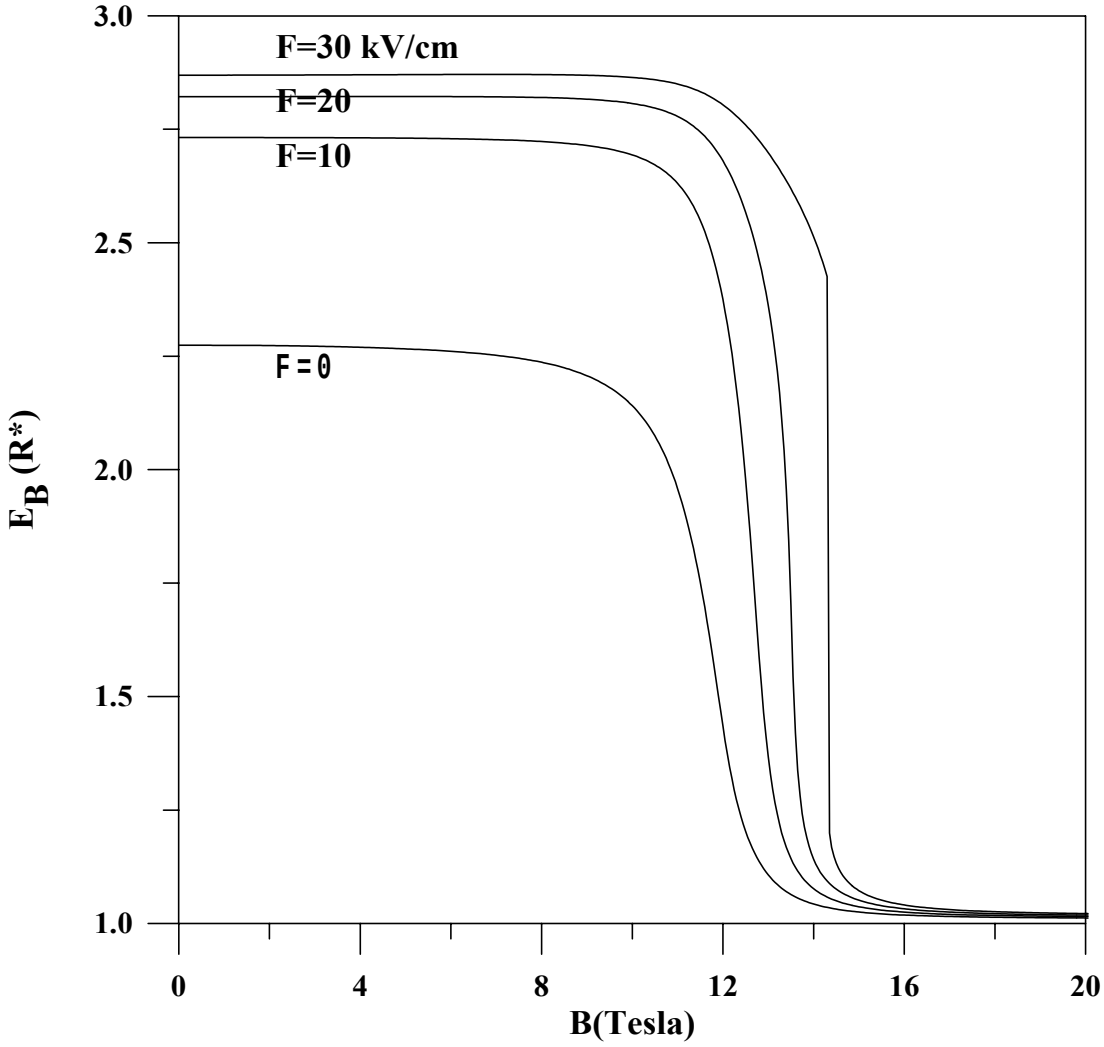
düşer ve sonra keskin artışlar görülür. Bu davranışı aşağıdaki gibi açıklaya biliriz: + x yönünde elektrik alan uygulanırsa elektron çoğunlukla dış KKT'nin sol kenarında sınırlanır. Bu yüzden elektron hidrojenik yabancı atoma uzak olur ve bağlanma enerjisi azalma gösterir. Örneğin, F=30 kV/cm için bağlanma enerjisindeki minimum yaklaşık 10T civarında oluşur. Fakat bu kritik değerden sonra bağlanma enerjisi keskin bir artış gösterir. Çünkü bu manyetik alan elektronu iç KKTna doğru hareket ettirir. Elektron hidrojenik yabancı atom iyonuna yakın olur. Bu kritik alan değerinden sonra bağlanma enerjisi B=14 T kadar yavaşça artar. B=10 T ve B=14 T aralığı için elektrik ve manyetik alan arasında bir savaş olduğu görülür. Bağlanma enerjisi B=14 T için ikinci keskin artışını gösterir. Bu artış manyetik alanın etkisiyle elektron olasılık dağılımını daha çok iç KKTlinde yer almasından dolayıdır.

Şekil 4.15'te, elektrik alanın birkaç değeri ve dış telin solunda yer alan yabancı atom için manyetik alanın bir fonksiyonu olarak bağlanma enerjisinin değişimini gösterildi. Dış KKTnin sağında yer alan yabancı atom için bulunan sonuçlar karşılaştırdığında; F=0 için manyetik alanlı bağlanma enerjisi değişimi dış KKTnin sağdakiyle aynı olduğu şekil 4.15'te görüldü. Bunun nedeni sistemin simetrisinden kaynaklanmaktadır. Yabancı atom dış telin solunda yer aldığında elektrik alanın artmasıyla bağlanma enerjisinin büyüklüğü artar. Beklenildiği gibi elektrik alanın etkisinden dolayı elektron dış KKTlinin solunda yer alır ve yabancı atoma yaklaşır. Bu davranış üçlü kuantum kuyularının sonuçlarıylada uyumludur (Latgé vd. 2002, Pacheco vd. 2001, Sarı vd. 2003). Bununla beraber, manyetik alan artarken bağlanma enerjisi kritik bir değerden sonra azalır. Bu azalma şekil 4.14'ün açıklamasında açık bir şekilde anlatılmıştır.

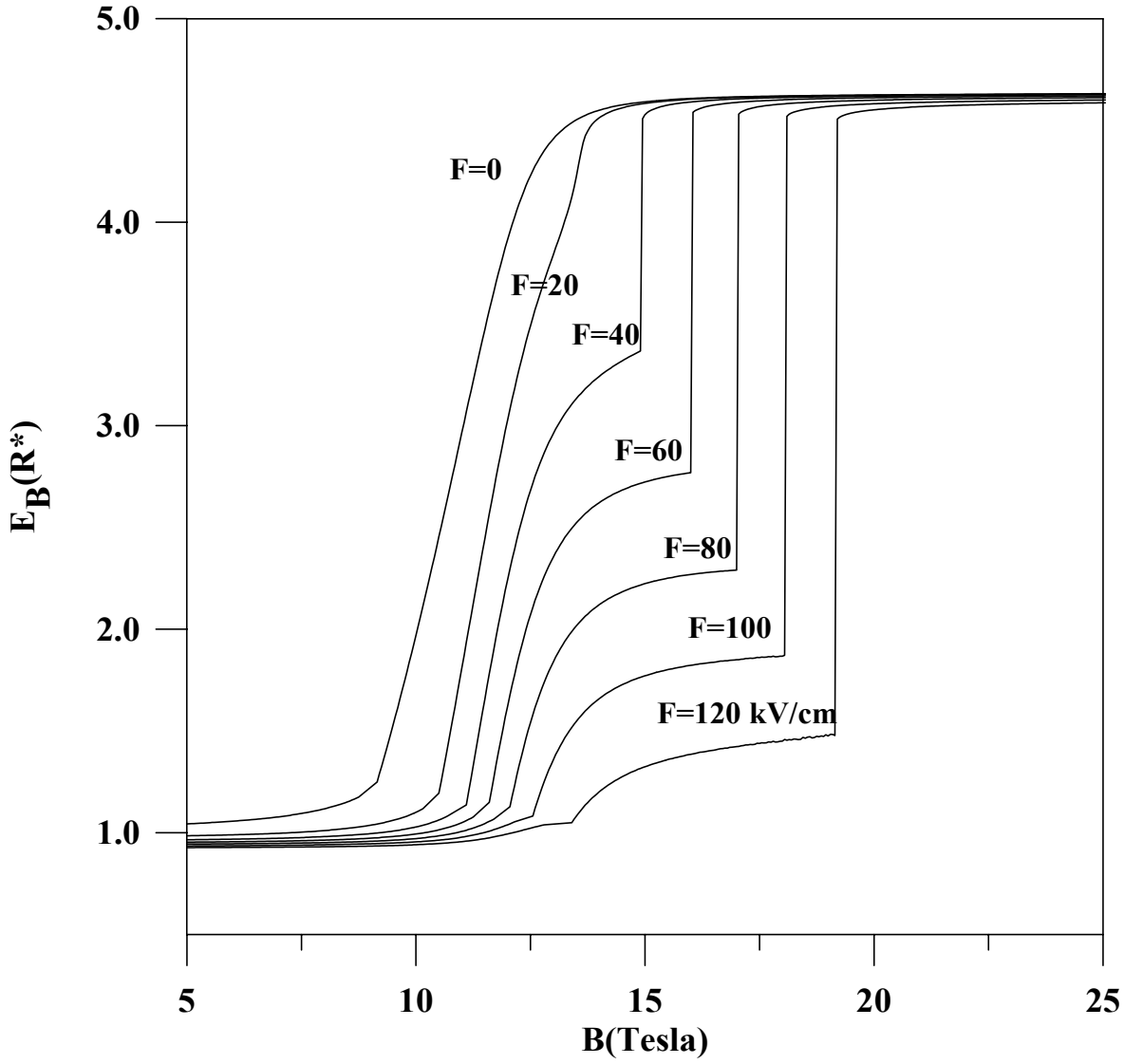
Şekil 4.16'da merkeze yerleştirilmiş yabancı atomun bağlanma enerjisi elektrik alanın birkaç değeri için manyetik alan şiddetinin bir fonksiyonu olarak gösterildi. F=0 için, bağlanma enerjisi manyetik alan şiddetinin kritik bir değerine(≈ 9 T) kadar sabit kaldı. Sonra elektronun iç KKT içine transferi yüzünden hızlı artış görüldü. Elektrik alan uygulandığında, bağlanma enerjisi alansız ile karşılaştırıldığında azalma gösterir. Elektrik alan sol dış KKT içinde elektronu tutmayı çalıştığı için kritik manyetik alan değeri yavaşça daha büyük değere doğru hareket eder. F>= 40 kV/cm için bağlanma enerjisindeki değişim iki aşamalıdır. Bağlanma enerjisi kritik değere kadar hafifçe artar ve sonra keskin artış gözlenir. Elektrik alan etkisinden dolayı elektron sol dış KKTde



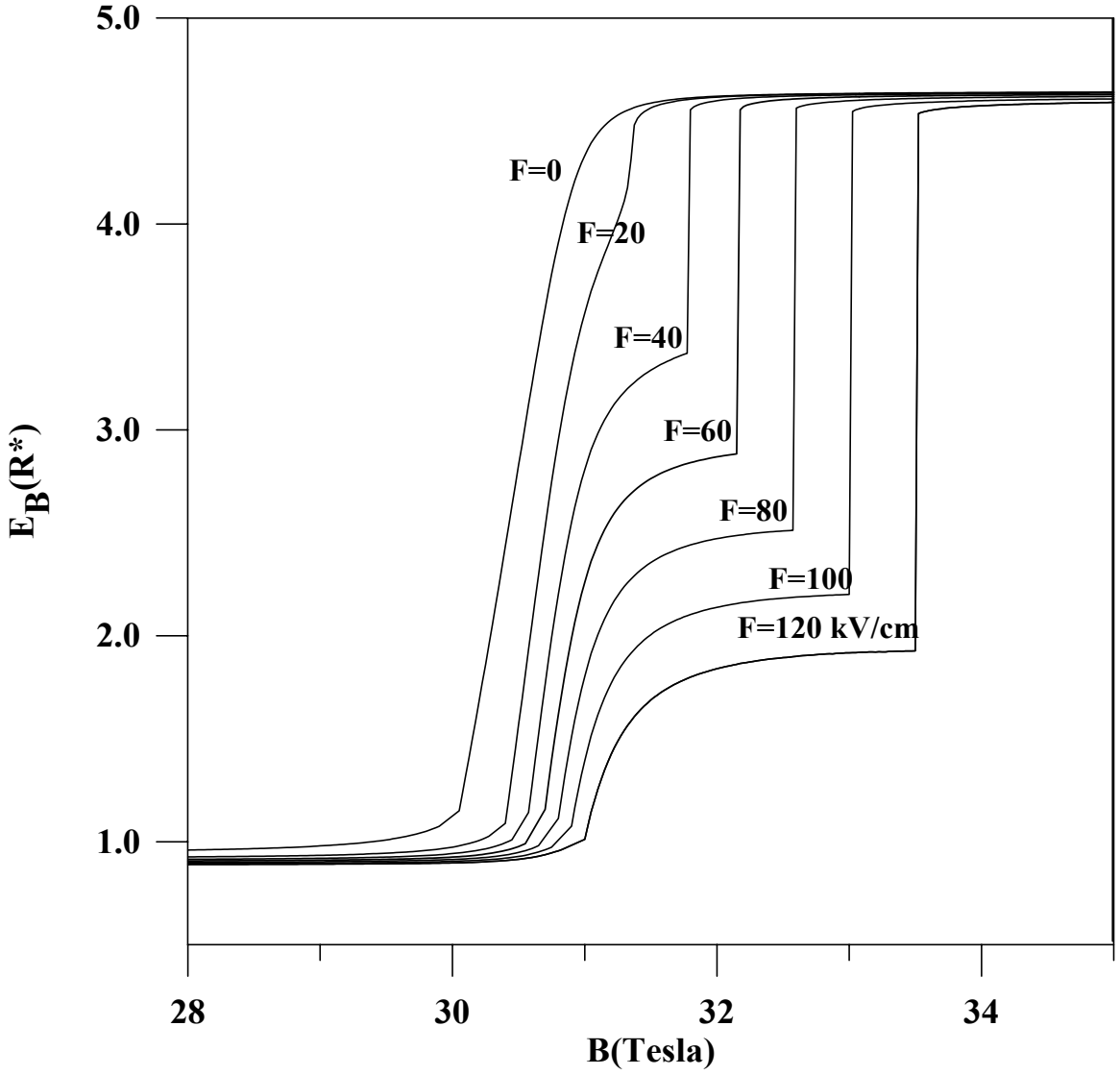
Şekil 4.14: Coaxial dış KKT'nin sağında yer alan yabancı atom için farklı elektrik alanlar etkisinde uygulanan manyetik alanın bir fonksiyonu olarak bağlanma enerjileri. T_B=0.6 a*, ve $T_1 = T_2$=0.4a*. $V_1 = 2V_2$, V_2=224 meV.



Şekil 4.15: Coaxial silidirik kesitli dış KKT'nin solunda yer alan yabancı atom için farklı elektrik alanlar etkisinde uygulanan manyetik alanın bir fonksiyonu olarak bağlanma enerjileri. T_B=0.6 a*, ve $T_1 = T_2$=0.4a*.



Şekil 4.16: Farklı elektrik alanlar için uygulanan manyetik alanın bir fonksiyonu olarak bağlanma enerjileri. Burada yabancı atom telin merkezinde yer alır. T_B=0.6a* ve T_1=T_2=0.4a*. $V_1 = 2V_2$, V_2=224 meV.



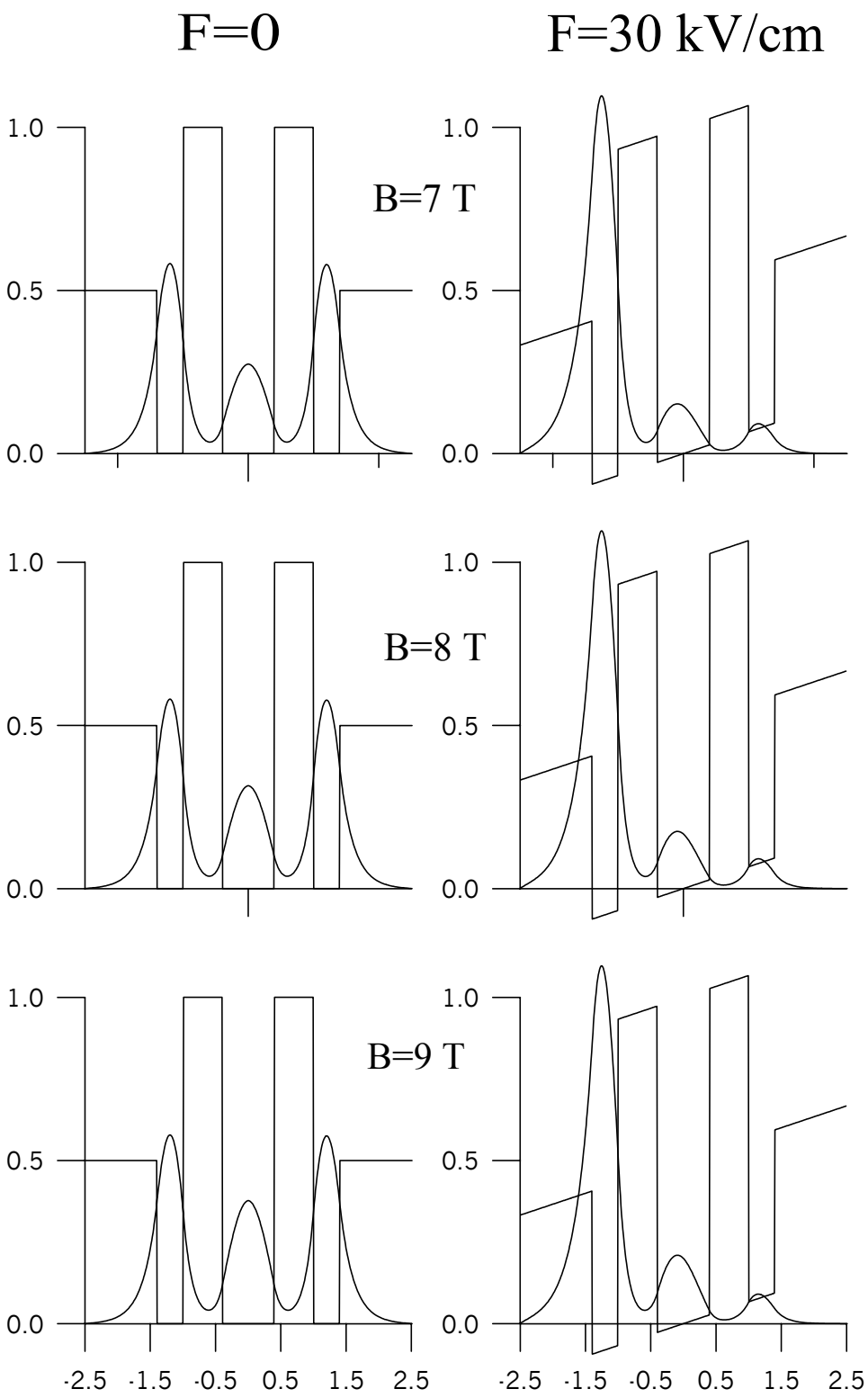
Şekil 4.17: Farklı elektrik alanlar için uygulanan manyetik alanın bir fonksiyonu olarak bağlanma enerjileri. Burada yabancı atom telin merkezinde yer alır. T_B=0.6a*, T_1=0.4a* ve T_2=0.6a*. $V_1 = 2V_2$, V_2=224 meV.

yer almak isterken, kritik manyetik alan değerinden sonra iç KKT geçer. Çünkü manyetik alan etkisinden dolayı elektron dalga fonksiyonu iç telde daha çok yer alır.

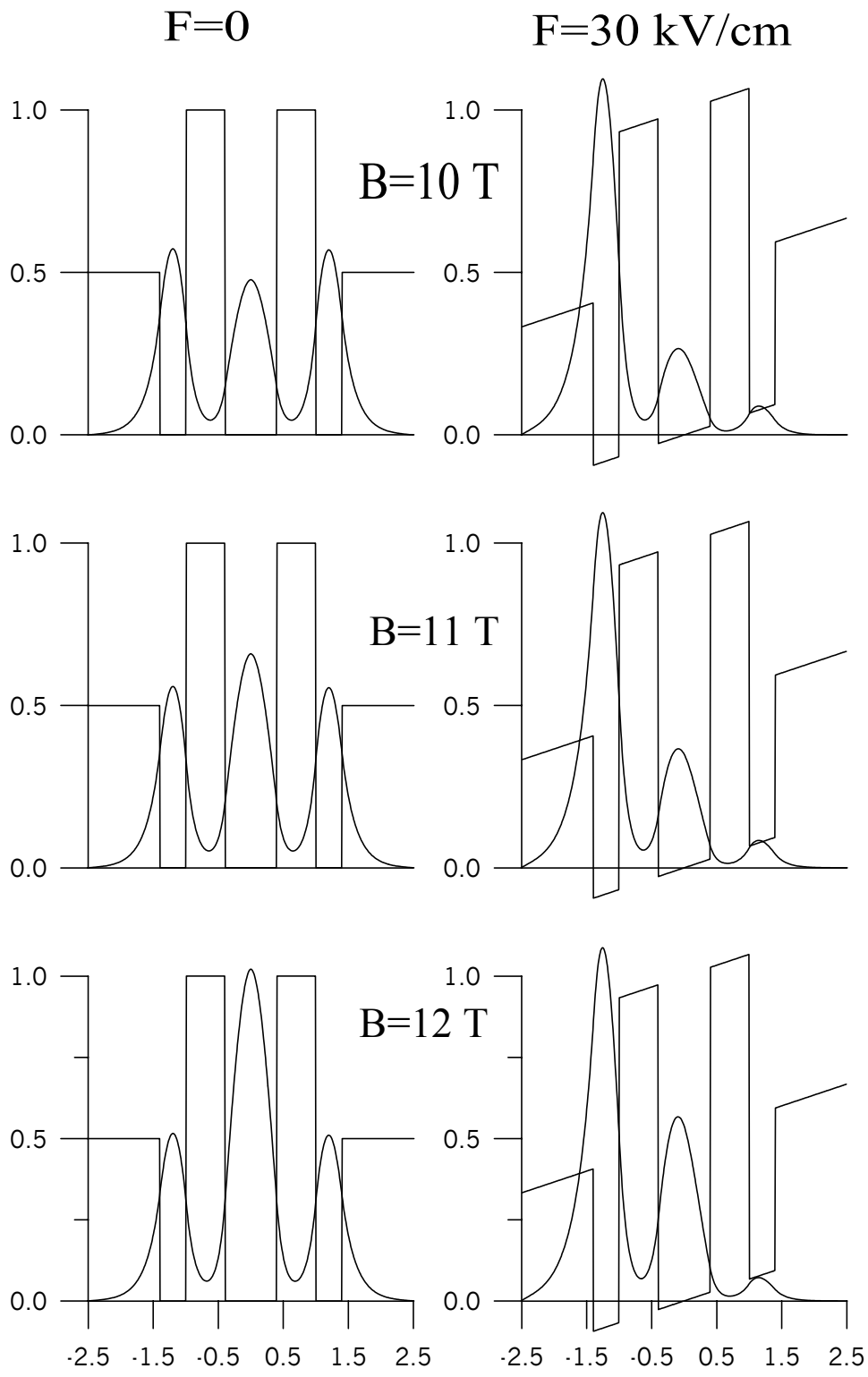
Elektrik alanın farklı değerleri ve iç KKTnin merkezinde yer alan yabancı atom için manyetik alanın fonksiyonu olarak bağlanma enerjileri şekil 4.17'de verilir ve dış tel kalınlığı T_2=0.6a* alınmıştır. Şekil 4.16 ile bu şekil karşılaştırıldığında gördük ki, dış tel kalınlığının artmasından dolayı kritik manyetik alan değeri ilk duruma göre büyük olur ve elektrik alan bağlılığı genelde aynıdır.

Bu şekillerdeki artışların daha iyi anlaşılması için şekil 4.18.a, b, c'de belirli manyetik alan değerleri için elektrik alanlı ve alansız elektron olasılık dağılımları gösterilmiştir.

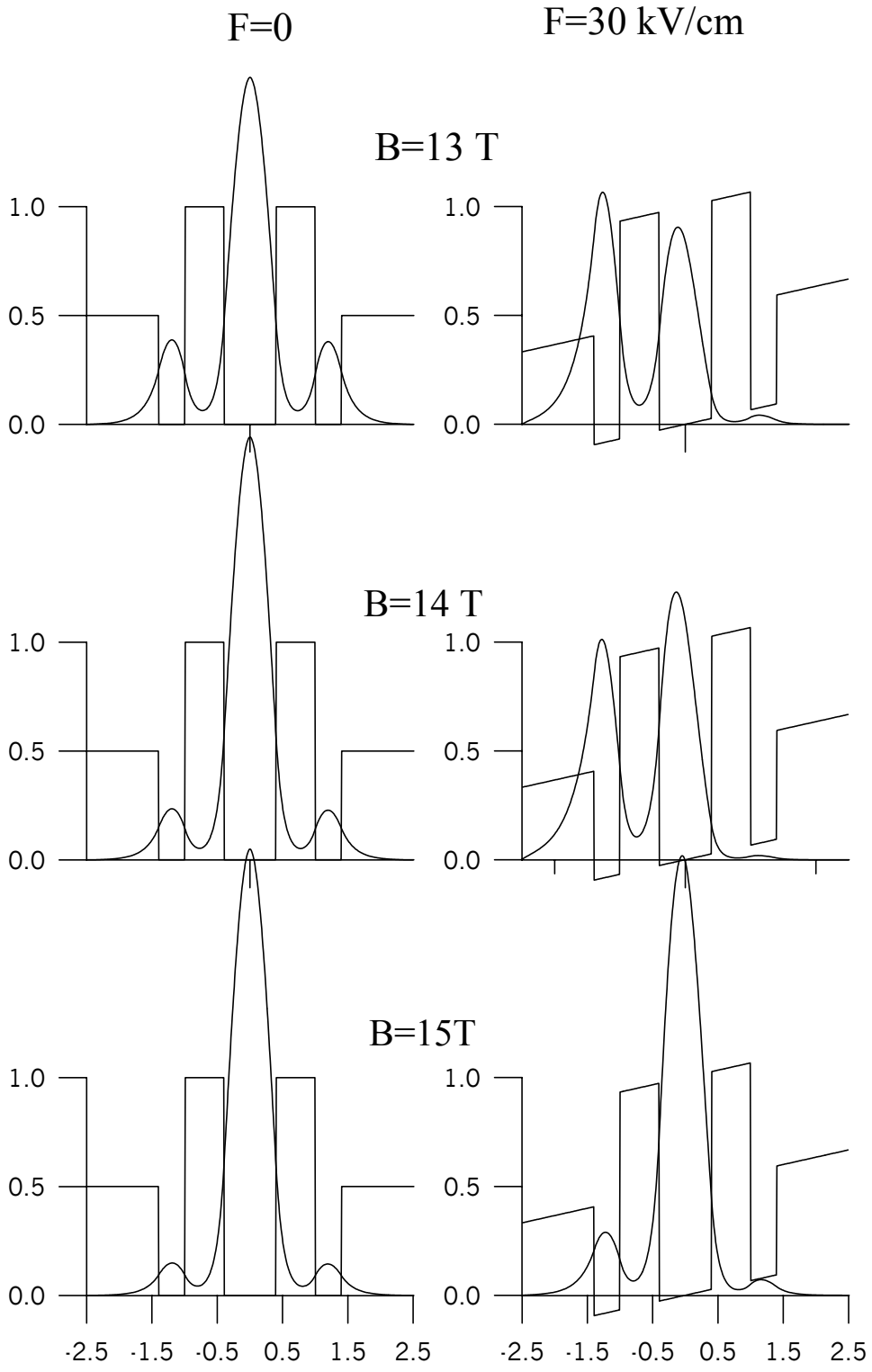
Bu çalışmada, farklı yabancı atom konumları için coaxial silindirik kesitli KKTlerinde hidrojenik yabancı atomun bağlanma enerjisi üzerine dış manyetik ve elektrik alanın etkisinin incelendi. Effektif kütle yaklaşımı içinde, hesaplar bir varyasyon metodu ve diferansiyel denklem çözme yöntemi olan dördüncü derece Runge-Kutta metodu kullanılarak yapıldı. Bağlanma enerjisinin değişimi sadece kuantum sınırlamasına değil yabancı atomun konumuna, elektrik ve manyetik alana şiddetlice bağlı olduğu sonucuna vardık. Dış manyetik ve elektrik alanların şiddeti değiştirilerek, bağlanma enerjisi kuantum telinde yer alan yabancı atomun bir fonksiyonuna bağlı olduğunu gösterdik. Bir genel özellik olarak, coaxial silindirik kesitli KKTleri için uygulanan dış alanlar elektronik ve optik özellikler üzerine önemli bir etki gösterir. Çalışma gelecekte bazı araçların dizaynı ve dışarıdan uygulanan alanların etkisinde farklı şekilli KKTlerinde hidrojenik yabancı atomların uygun davranışını tanımlamak için faydalı olabilir(Aktaş vd. 2005).



Şekil 4.18.a: Manyetik alanın 7, 8 ve 9T değerleri için elektrik alanlı ve elektrik alansız elektron dağılım olasılıkları. T_B=0.6a*, T_1=0.4a* ve T_2=0.4a*. $V_1 = 2V_2$, V_2=224 meV.



Şekil 4.18.b: Manyetik alanın 10, 11 ve 12T değerleri için elektrik alanlı ve elektrik alansız elektron dağılım olasılıkları. T_B=0.6a*, T_1=0.4a* ve T_2=0.4a*. $V_1 = 2V_2$, V_2=224 meV.



Şekil 4.18.c: Manyetik alanın 13, 14 ve 15T değerleri için elektrik alanlı ve elektrik alansız elektron dağılım olasılıkları. T_B=0.6a*, T_1=0.4a* ve T_2=0.4a*. $V_1 = 2V_2$, V_2=224 meV.

4.4. Simetrik ve antisimetrik $Al_{x_1}Ga_{1-x_1}As/GaAs/Al_{x_3}Ga_{1-x_3}As$ kuantum kuyularında eksiton geçiş enerjilerinin nümerik yöntemler kullanılarak hesaplanması

Eksiton geçiş enerjilerini hesaplarken kullandığımız giriş parametrelerinin değerleri (Akbaş vd. 1998): elektronun etkin kütlesi $m_e^* = 0.0665\,m_0$, heavy boşluğun etkin kütlesi $m_h^* = 0.34\,m_0$, light boşluğun etkin kütlesi $m_l^* = 0.094\,m_0$, elektron - heavy(light) boşluk çiftlerinin indirgenmiş kütlesi $\mu_{h(l)} = 0.0421\,m_0$ $(0.0502\,m_0)$. Yasak enerji aralığı GaAs için $E_g = 1.519$ eV alınır. $Al_xGa_{1-x}As$ için $E_g = 1.519 + 1.115\,x + 0.370\,x^2$ eV olur.

Aşağıdaki tablolarda, deneysel olarak verilen kuyu genişlikleri için ve bir başka yöntemle hesaplanan değerlerin kuyu genişlikleri için eksiton geçiş enerjilerini hesapladık. Bu kuyu genişliklerinde dielektrik sabitini ve potansiyelleri farklı aldığımızda eksiton geçiş enerjilerinin nasıl değiştiğini inceledik. Bu çalışmadaki amacımız kuantum kuyuları için en uygun yapı sabitlerini belirlemektir.

İlk olarak 100 Å genişliğinde tek kuantum kuyusunu ele aldık. Bu kuantum kuyusu $x = 0.29$ Al konsantrasyonunda eşit bariyer yüksekliğinde seçilir. Tablo 4.1'de kuyu genişliğini 101.76 Å ve dielektrik sabitini 12.58 alınarak sonuçlarımızı bulduk. Deneysel değerler, bir başka yöntemle hesaplanan değerlerle ve bu çalışmada bulunan değerler karşılaştırmalı olarak gösterildi. Bu deneysel değerlerde 0.0004 hata payı ile çalışılmıştır. Bu tabloda geçiş enerjilerinin etiketi için bir notasyon kullanılır. İlk sayı iletken bant durumunu, ikinci sayı valans bant durumunu ve son H veya L harfleri boşluk türünü tanımlar. Örnek olarak 21H; ilk sayı iletken bantın 2. durumunu, ikinci sayı valans bantın 1. durumunu ve H harfi heavy(ağır) boşluğu tanımlar.

Tablo 4.1: 100 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 101.76 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deneysel Sonuclar[47]	Diğer çalışma[47]	Eps=12.58, L=101.76 Å x=0.29 simetrik kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.551	1.558	1.553	1.553	1.553	1.553	1.553	1.553
11L	1.566	1.573	1.567	1.567	1.567	1.566	1.567	1.566
21L	1.656	1.658	1.655	1.655	1.657	1.655	1.654	1.656
22H	1.663	1.665	1.665	1.664	1.666	1.664	1.663	1.665
22L	1.712	1.716	1.715	1.715	1.715	1.714	1.714	1.713
31H	1.761	1.757	1.753	1.751	1.761	1.750	1.748	1.759
33H	1.817	1.814	1.813	1.811	1.819	1.810	1.808	1.817

Tablo 4.2'de 101.67 Å genişliğinde kuyu ve dielektrik sabiti 13.1 olarak aldığımızda bulduğumuz değerlerle, deneysel ve değişik yöntemle çözülmüş değerler için eksiton geçiş enerjileri verilmiştir.

Tablo 4.2: 100 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 101.67 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deneysel Sonucları[47]	Diğer çalışma[47]	Eps=13,1 L=101.76 Å x=0.29 simetrik kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.551	1.558	1.553	1.553	1.554	1.553	1.553	1.553
11L	1.566	1.573	1.567	1.567	1.567	1.567	1.567	1.567
21L	1.656	1.658	1.656	1.655	1.657	1.655	1.654	1.657
22H	1.663	1.665	1.665	1.664	1.666	1.664	1.663	1.666
22L	1.712	1.716	1.715	1.716	1.715	1.714	1.714	1.714
31H	1.761	1.757	1.753	1.751	1.761	1.750	1.748	1.759
33H	1.817	1.814	1.813	1.811	1.819	1.810	1.808	1.817

Aynı işlemleri deneysel değerin verildiği 100 Å simetrik kuyu için geçiş enerjilerini hesapladık. Tablo 4.3'te; kuyu genişliği 100 Å ve dielektrik sabitini 12.58 alınarak bulunan değerlerimizi, deneysel ve diğer teorik çalışmayla bulunan değerleri gösterdik.

Tablo 4.3: 100 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 100 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları[47]	Diğer çalışma[47]	Eps=12,58 L=100 Å x=0.29 simetrik kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.551	1.558	1.554	1.554	1.554	1.554	1.554	1.554
11L	1.566	1.573	1.568	1.568	1.568	1.568	1.568	1.567
21L	1.656	1.658	1.658	1.658	1.660	1.657	1.657	1.659
22H	1.663	1.665	1.667	1.667	1.669	1.667	1.666	1.668
22L	1.712	1.716	1.719	1.719	1.718	1.718	1.718	1.717
31H	1.761	1.757	1.755	1.753	1.764	1.753	1.750	1.761
33H	1.817	1.814	1.816	1.814	1.824	1.813	1.813	1.821

Tablo 4.4'te 100 Å genişliğinde kuyu ve dielektrik sabiti 13.1 olarak aldığımızda bulduğumuz değerlerle, deneysel ve değişik yöntemle çözülmüş değerler için eksiton geçiş enerjileri verilmiştir.

Tablo 4.4: 100 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 100 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=100 Å x=0.29 simetrik kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.551	1.558	1.554	1.554	1.554	1.554	1.554	1.554
11L	1.566	1.573	1.568	1.568	1.568	1.568	1.568	1.568
21L	1.656	1.658	1.658	1.658	1.660	1.657	1.657	1.659
22H	1.663	1.665	1.668	1.667	1.670	1.667	1.666	1.669
22L	1.712	1.716	1.719	1.719	1.719	1.718	1.718	1.717
31H	1.761	1.757	1.755	1.753	1.764	1.753	1.750	1.761
33H	1.817	1.814	1.816	1.814	1.824	1.813	1.813	1.821

Bu dört tabloyu karşılaştırdığımızda dielektrik sabitinin 12.58 ve kuyu genişliğini 101,76 Å simetrik kuyu için aldığımız değerler deneysel değerlerle uyumlu olduğu görülüyor.

Al konsantrasyonu x_1=0.14 ve x_3=0.31 , bariyer yükseklikleri eşit olmayan 100 Å genişliğinde antisimetrik kuantum kuyusunu ele alıyoruz. Kuyu genişliğinin 100 Å ve dielektik sabitinin 12.58 aldığımız değerlere göre tablo 4.5'te deneysel ve teorik sonuçlar karşılaştırmalı olarak verildi.

Tablo 4.5: 100 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 100 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma[47]	Eps=12,58 L=100 Å x_1=0.14 x_3=0.31 Antisimetrik kuyu					
			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.548	1.554	1.551	1.551	1.551	1.550	1.550	1.550
11L	1.559	1.568	1.563	1.563	1.563	1.562	1.562	1.562
13H	1.601	1.608	1.607	1.607	1.605	1.605	1.605	1.603
21L	1.641	1.645	1.638	1.638	1.641	1.636	1.635	1.638
22H	1.648	1.652	1.648	1.647	1.650	1.645	1.645	1.647
23H	1.678	1.685	1.681	1.681	1.682	1.677	1.677	1.678
22L	1.691	1.695	1.688	1.688	1.687	1.685	1.685	1.684

Tablo 4.6'da aynı kuyu genişliğinde dielektrik sabiti 13.1 aldığımızdaki sonuçlarımızı diğer sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Tablo 4.6: 100 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 100 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=100 Å x_1=0.14 x_3=0.31 Antisimetrik kuyu					
			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.548	1.554	1.551	1.550	1.551	1.550	1.550	1.551
11L	1.559	1.568	1.563	1.563	1.563	1.562	1.562	1.562
13H	1.601	1.608	1.606	1.607	1.605	1.605	1.605	1.603
21L	1.641	1.645	1.639	1.638	1.641	1.636	1.636	1.638
22H	1.648	1.652	1.648	1.648	1.650	1.645	1.645	1.648
23H	1.678	1.685	1.681	1.681	1.682	1.678	1.677	1.678
22L	1.691	1.695	1.689	1.689	1.688	1.685	1.685	1.684

Diğer teorik çalışmada kullanılan 98.9 Å genişliğindeki antisimetrik kuyu için geçiş enerjilerini hesapladık. Tablo 4.7'de; kuyu genişliği 98.9 Å ve dielektrik sabitini 12.58 alınarak bulunan değerlerimizi, deneysel ve diğer teorik çalışmayla bulunan değerleri gösterir.

Tablo 4.7: 100 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 98.9 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=12,58 L=98.9 Å x_1=0.14 x_3=0.31 Antisimetrik kuyu					
			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65Q $_v$=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.548	1.554	1.551	1.551	1.551	1.551	1.551	1.551
11L	1.559	1.568	1.563	1.563	1.563	1.563	1.563	1.563
13H	1.601	1.608	1.608	1.608	1.606	1.606	1.607	1.604
21L	1.641	1.645	1.641	1.640	1.643	1.638	1.637	1.640
22H	1.648	1.652	1.650	1.650	1.652	1.647	1.647	1.650
23H	1.678	1.685	1.684	1.684	1.684	1.680	1.680	1.680
22L	1.691	1.695	1.691	1.691	1.691	1.687	1.687	1.687

Tablo 4.8'de aynı kuyu genişliğinde dielektrik sabiti 13.1 aldığımızdaki sonuçlarımızı diğer sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Tablo 4.8: 100 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 98.9 Å kullanıldı(Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=98.9 Å x_1=0.14 x_3=0.31 Antisimetrik kuyu					
			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.548	1.554	1.551	1.551	1.552	1.551	1.551	1.552
11L	1.559	1.568	1.564	1.564	1.564	1.564	1.564	1.564
13H	1.601	1.608	1.608	1.608	1.606	1.608	1.608	1.606
21L	1.641	1.645	1.641	1.640	1.643	1.641	1.640	1.643
22H	1.648	1.652	1.650	1.650	1.653	1.650	1.650	1.653
23H	1.678	1.685	1.684	1.684	1.684	1.684	1.684	1.684
22L	1.691	1.695	1.691	1.691	1.691	1.691	1.691	1.691

100 Å genişliğindeki antisimetrik kuyu için yaptığımız hesaplarda gördük ki dielektrik sabiti 12.58 ve kuyu genişliği 100 Å antisimetrik kuyu için bulunan sonuçlar deneysel değerlerle daha uyumludur.

50 Å genişliğinde, *Al* konsantrasyonunun x=0.29 olan simetrik kuantum kuyusunu incelenmiştir. Teorik tahmin edilen sınır durumların bütününü içeren geçişler incelenir. Hesaplamalarda kuyu genişliğini 48.1 Å ve dielektrik sabitini 12.58 alınarak geçiş enerjileri tablo 4.9'da gösterildi.

Tablo 4.9: 50 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 48.1 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=12,58 L=48.1 Å x=0.29 Simetrik Kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.619	1.627	1.621	1.621	1.623	1.620	1.620	1.622
11L	1.646	1.659	1.652	1.652	1.651	1.650	1.650	1.650
13H	1.761	1.767	1.746	1.749	1.735	1.743	1.746	1.732
21L	1.819	1.823	1.804	1.802	1.814	1.800	1.798	1.809
22H	1.860	1.859	1.842	1.840	1.850	1.837	1.835	1.845

Tablo 4.10'da 48.1 Å genişliğinde kuyuyu ve dielektrik sabiti 13.1 olarak aldığımızda bulduğumuz değerlerle, deneysel ve değişik yöntemle çözülmüş değerler için eksiton geçiş enerjileri verilmiştir.

Tablo 4.10: 50 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 48.1 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=48.1 Å x=0.29 Simetrik Kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.619	1.627	1.620	1.620	1.622	1.620	1.620	1.622
11L	1.646	1.659	1.652	1.652	1.652	1.651	1.651	1.650
13H	1.761	1.767	1.746	1.749	1.735	1.743	1.746	1.732
21L	1.819	1.823	1.804	1.802	1.814	1.800	1.798	1.809
22H	1.860	1.859	1.842	1.840	1.850	1.837	1.835	1.840

Aynı işlemleri deney sonuçlarında verilen kuyu genişliği 50 Å simetrik kuyu için yapıyoruz. Tablo 4.11 'de kuyu genişliğini 50 Å ve dielektrik sabitini 12.58 alarak yaptığımız sonuçlarla, deneysel sonuç ve diğer teorik sonuçlar verildi.

Tablo 4.11: 50 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 50 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=12,58 L=50 Å x=0.29 Simetrik Kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.619	1.627	1.616	1.616	1.618	1.615	1.615	1.617
11L	1.646	1.659	1.646	1.646	1.646	1.645	1.645	1.645
13H	1.761	1.767	1.743	1.745	1.731	1.739	1.742	1.728
21L	1.819	1.823	1.799	1.797	1.808	1.795	1.793	1.804
22H	1.860	1.859	1.835	1.832	1.843	1.830	1.828	1.838

Kuyu genişliğini 50 Å ve dielektrik sabitini 13.1 alarak bulduğumuz değerlerle, deneysel değerler ve başka çalışmanın değerleri tablo 4.12'de karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Tablo 4.12: 50 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 50 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=50 Å x=0.29 Simetrik Kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.619	1.627	1.617	1.615	1.618	1.616	1.615	1.617
11L	1.646	1.659	1.646	1.646	1.646	1.645	1.645	1.645
13H	1.761	1.767	1.743	1.745	1.731	1.739	1.742	1.728
21L	1.819	1.823	1.799	1.797	1.808	1.795	1.793	1.804
22H	1.860	1.859	1.835	1.832	1.843	1.830	1.828	1.838

Bu dört tabloyu incelediğimizde en iyi sonucu dielektrik sabiti 12.58 olan 50 Å genişliğinde simetrik kuantum kuyusu için hesapladığımız sonuçlar deneysel verilerle uyumludur.

Şimdi 50 Å genişliğinde antisimetrik kuantum kuyusunu inceleyeceğiz. Bu kuyunun *Al* konsantrasyonu x_1=0.13 ve x_3=0.30 olarak alınıyor. Deneysel enerji grafiklerine bakıldığında sınır durumlar, valans bant içinde bir light boşluk durumu ve iki heavy boşluk durumu ve bir iletken bant durumundan oluşur. Bu kuyu ve dielektrik sabiti 12.58 için deneysel ve teorik geçiş enerjileri tablo 4.13'te gösterildi.

Tablo 4.13: 50 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 50 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=12,58 L=50 Å x_1=0.13 x_3=0.30 Antisimetrik Kuyu					
			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.596	1.602	1.598	1.597	1.599	1.596	1.595	1.597
11L	1.615	1.626	1.620	1.620	1.620	1.617	1.617	1.617
12H	1.644	1.652	1.646	1.647	1.643	1.641	1.642	1.638

Tablo 4.14'te 50 Å genişliğinde antisimetrik kuyuyu ve dielektrik sabiti 13.1 olarak aldığımızda bulduğumuz değerlerle, deneysel ve değişik yöntemle çözülmüş değerler için geçiş enerjileri verilmiştir.

Tablo 4.14: 50 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 50 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=50 Å x_1=0.13 x_3=0.30 Antisimetrik Kuyu					
			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.596	1.602	1.598	1.598	1.600	1.596	1.596	1.597
11L	1.615	1.626	1.620	1.620	1.620	1.617	1.617	1.617
12H	1.644	1.652	1.646	1.647	1.643	1.641	1.642	1.638

Bir başka yöntemle hesaplanan değerlerde kullanılan 50.9 Å genişliğindeki antisimetrik kuyu için, tablo 4.15'te, dielektrik sabiti 12.58 alınarak bulunan değerlerimizi ve tablo 4.16'da, ise aynı kuyu genişliğinde dielektrik sabiti 13.1 alınarak

bulunan değerlerimizi, deneysel ve diğer teorik çalışmayla bulunan değerlerle karşılaştırmalı olarak gösterildi.

Tablo 4.15: 50 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 50.9 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=12,58 L=50.9 Å x_1=0.13 x_3=0.30 Antisimetrik Kuyu					
			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.596	1.602	1.596	1.596	1.598	1.596	1.594	1.596
11L	1.615	1.626	1.618	1.618	1.618	1.615	1.615	1.615
12H	1.644	1.652	1.644	1.645	1.641	1.639	1.640	1.637

Tablo 4.16: 50 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 50.9 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=50.9 Å x_1=0.13 x_3=0.30 Antisimetrik Kuyu					
			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.596	1.602	1.597	1.596	1.598	1.595	1.594	1.596
11L	1.615	1.626	1.618	1.618	1.618	1.615	1.615	1.615
12H	1.644	1.652	1.644	1.645	1.641	1.640	1.640	1.637

50 Å genişliğinde antisimetrik kuantum kuyusu için yaptığımız işlemlerde deneysel değerlere en yakın sonucu dielektrik sabiti 12.58 olan 50.9 Å genişliğinde antisimetrik kuantum kuyusu verir.

Son olarak 30 Å genişliğindeki simetrik kuyudaki geçişleri göz önüne alıyoruz. İncelemiş olduğumuz diğer iki kuyuda yaptığımız işlemleri bu kuyuda da yaptık. Deneysel olarak verilen, 33 Å genişliğindeki simetrik kuyuda dielektrik sabitinin 12.58 olarak alınan hesaplamaların sonuçları, deneysel ve başka bir yöntemle çözülen sonuçlar tablo 4.17'de verilmiştir.

Tablo 4.17: 30 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 33 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=12,58 L=33 Å x=0.27 Simetrik Kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.672	1.684	1.669	1.668	1.671	1.667	1.666	1.669
12L	1.703	1.723	1.774	1.776	1.765	1.769	1.771	1.760

Aynı kuyu genişliği için dielektrik sabitinin 13.1 alınarak hesaplamalarımızı diğer sonuçlarla karşılaştırmalı olarak tablo 4.18'de gösterildi.

Tablo 4.18: 30 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 33 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=33 Å x=0.27 Simetrik Kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.672	1.684	1.669	1.668	1.672	1.667	1.666	1.670
12L	1.703	1.723	1.774	1.776	1.765	1.769	1.771	1.760

Bir başka yöntemin çözümlerinde kullanılan genişliği 31.1 Å kuyu için dielektrik sabitinin 12.58 alınarak hesaplamalarımızı diğer sonuçlarla karşılaştırmalı olarak tablo 4.19'de gösterildi.

Tablo 4.19: 30 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 31.1 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=12,58 L=31.1 Å x=0.27 Simetrik Kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.672	1.684	1.677	1.676	1.680	1.675	1.674	1.678
12L	1.703	1.723	1.779	1.781	1.771	1.774	1.776	1.766

Aynı kuyuda dielektrik sabitinin 13.1 alınarak bulunan sonuçlar, deneysel sonuçlar ve bir başka yöntemle bulunan sonuçlar tablo 4.20'de verilmiştir.

Tablo 4.20: 30 Å simetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV). Hesaplamalarda kuyu genişliği 31.1 Å kullanıldı (Parks vd. 1992).

Tanımlamalar	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=13,1 L=31.1 Å x=0.27 Simetrik Kuyu					
			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x)$			$V_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x+(0.370*x^2))$		
			Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	1.672	1.684	1.678	1.677	1.680	1.675	1.674	1.675
12L	1.703	1.723	1.779	1.781	1.771	1.774	1.776	1.774

Bu son dört tabloda deneysel verilerle uyan en iyi sonuçlarımız dielektrik sabiti 13.1 ve kuyu genişliği 31.1 Å simetrik kuantum kuyusu için olan değerlerimizdir.

30 Å genişliğindeki antisimetrik kuantum kuyularını göz önüne alıyoruz. Bu kuyu için işlemlerimizde dielektrik sabitini 12.58 ve değişik kuyu genişlikleri için yapıyoruz. Tablo 4.21'de bizim sonuçlarımız , deneysel sonuçlar ve bir başka yöntemle bulunan sonuçlar karşılaştırmalı olarak veriliyor.

Tablo 4.21: 30 Å antisimetrik kuyu için geçiş enerjileri(eV).

Tanımlamalar	Kuyu Genişliği	Deney Sonuçları [47]	Diğer çalışma [47]	Eps=12,58 L= 30 Å x_1=0.14 x_3=0.29 Antisimetrik Kuyu					
				$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_1)$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.247*x_3)$			$V1_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_1+(0.370*x_1^2))$ $V3_{e,h}=Q_{c,v}*(1.115*x_3+(0.370*x_3^2))$		
				Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35	Q_c=0.61 Q_v=0.39	Q_c=0.60 Q_v=0.40	Q_c=0.65 Q_v=0.35
11H	33.9	1.628	1.636	1.626	1.626	1.628	1.622	1.621	1.624
11H	31.0	1.633	1.643	1.634	1.633	1.636	1.629	1.628	1.631
11L	33.9	1.655	1.661	1.647	1.647	1.647	1.642	1.642	1.641
11L	31.0	1.666	1.668	1.654	1.654	1.654	1648	1.648	1.647

Bütün tabloları incelersek; yasak enerji aralığı yüksek dereceden bir formülle hesaplamış olduğumuz potansiyellerin($V_{e,h}=Q_{c,v}(1.115x+0.37x^2)$) sonuçları deneysel verilerle daha uygun olduğunu görüyoruz. Genelde valans bant kıyısını yasak enerji aralığının %35 ve iletken kıyısınıda %65 alarak yapılan hesaplamalar deneysel verilere daha yakın çıkıyor. Çalışmalarımızda dielektrik sabitini 50 Å büyük kuyular için 12.58, küçük kuyular için 13.1 alırsak daha doğru hesaplamalar yaparız.

Bu çalışmada, değişik genişlikteki simetrik ve antisimetrik kuantum kuyu için eksiton geçiş enerjilerini hesapladık. Sonuçlarımızı tablolarda deneysel verilerle ve bir başka metot kullanılarak bulunan sonuçlarla karşılaştırdık. Genelde, deneysel ölçümler ve bizim hesaplarımız sonucu çıkan değerler arasında çok iyi uyum vardır.

KAYNAKLAR

1. AGHASYAN M.M., KIRAKOSYAN A.A., 2000, “Binding energy of impurity in a size-quantized coated semiconductor wire: role of the dielectric-constant mismatch“, *Physica E*, **8**, 281.

2. AICHMAYR G., JETTER M., VINA L., DICKERSON J.,CAMINO F., MENDEZ E.E., 1999, “Spin-dependent exciton-exciton interaction in quantum wells under an electric field”, *Phys. Stat. Sol.(B)*, **215**, 223.

3. AKBAŞ H., AKTAŞ Ş., OKAN Ş.E., ULAŞ M., TOMAK M., 1998, " Screening effect on the binding energies of shallow donors, acceptors and excitons in finite-barrier quantum wells", *Superlattices and Microstructures*, **23**, 113.

4. AKBAŞ H.,EKMEKÇİ S.,AKTAŞ Ş.,TOMAK M., 1995, ”Electric field effect on shallow impurity states in mıltiple quantum –well structures”, *Tr. J. of Physics*, **19**, 381.

5. AKBAŞ H., AKTAŞ Ş., OKAN Ş.E., ULAŞ M., TOMAK M., 1998, “Acceptor 1s-$2p_{\pm}$ transitions in $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ quantum wells: effects of spatially dependent screening under electric and magnetic fields”, *Phys. Stat. Sol.(b)*, **205**, 537.

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

7. AKTAŞ Ş, OKAN ŞE, AKBAŞ H., 2001, “Electric field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in coaxial $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum well-wires” *Superlattices and Microstructures*, **30**, 129.

8. AKTAŞ Ş., 1998, "Düşük Boyutlu $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ Sistemlerin Elektronik Özellikleri", Doktora Tezi, T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne.

9. AKTAŞ Ş, BOZ FK, DALGIÇ SŞ, 2005, “Electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic donor impurity in a coaxial quantum well wire”, *Physica E,* **28**, 96.

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

11. BASTARD G., 1988, “Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures”s.128-142, Halsted Press, Fransa.

12. BAYRAM M, 2002, “Nümerik Analiz”, s:221-238, Aktif yayınevi, İstanbul.

13. BLOSS W.L., 1989, “Electric field dependence of quantum-well eigen states”, *J. Appl. Phys*. **65(12)**, 4789.

14. 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.

15. BRYANT G.W., 1984, “Hydrogenic impurity states in quantum-well wires” *Phys. Rev. B,* **29**, 6632.

16. BOGOMOLNY E:B:; ROUBEN D:C:; 1999, “Semiclassical description of resonant tunneling”, *Eur. Phys. J. B,* **9**, 695.

17. BOZ FK, AKTAŞ Ş, 2005,”Magnetic field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in coaxial $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum well wires”, *Süperlattices and Microstructures,* **37**, 281.

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

19. CEN J., BAJAJ K.K., 1993, “Effects of electric and magnetic fields on confined donor states in a dielectric quantum well” *Phys. Rev. B,* **48**, 8061.

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

21. CHARROUR R., BOUD-HASSOUNE M., FLIYOU M., NOUGAOUI A., 2000, “Magnetic field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in cylindrical quantum dot”, *Physica B,* **293**, 137.

22. 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.

23. EVANS G., 1995, “Practical Numerical Analysis”, John Wiley Pub.

24. GRADSHTEYN I.S., RYZHIK I.M., 1980, “Table of Integrals, Series and Products”, Academic Press, Florida.

25. ILAIWI K.F., TOMAK M., 1990, “Polarizabilities of shallow donors in finite-barrier quantum wires”, *Phys. Rev. B*, **42**, 3132.

26. KARAOĞLU B., 1994, “Kuantum Mekaniğine Giriş”, Bilgitek yayıncılık, İstanbul.

27. KASAPOĞLU E, SARI H, SöKMEN I, 2003, “Binding energy of hydrogenic impurities in a quantum well under tilted magnetic field”, *Solid State Communications*, **125**, 429.

28. KITTEL C, 1996, “Katıhal Fiziğine Giriş”(Bekir Karaoğlu), 6.basım,224, BilgiTekyayın.,İst.

29. KÖKSAL F, 1992, “Fenciler İçin Kuantum Kimyası”, 173, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Samsun.

30. 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. Rev. B*, **45**, 6742.

31. LATGÉ A., MONTENEGRO N.P., OLIVEIRA L.E., 1992, “Infrared transitionsbetween hydrogenic states in cylindrical GaAs-(Ga,Al)As quantum-well wires”, *Phys. Rev. B,* **45**, 9420.

32. LATGÉ A., PACHECO M., BARTICEVIC M., 2002, “Intra-donor transitions in triple quantum-well structures under external fields” *Semicond. Sci. Techol.,* **17**, 952.

33. LATGÉ A., 1996, “Intradonor absorption spectra under external fields in quantum wells” *Phys. Rev. B,* **53**, 10160.

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

35. MANASELYAN A.KH., AGHASYAN M. M., KIRAKOSYAN A.A., 2002, “The mobility of charge carriers in a size-quantized coated semiconductor wire” *Physica E,* **14**, 366.

36. MASALE M., CONSTANTINOU N.C., TILLEY D.R., 1992, “Single-electron energy subbands of a hollow cylinder in an axial magnetic field” *Phys. Rev. B,* **46,** 15432.

37. MASALE M., 2000, “Oscillator strengths for optical transition in a hollow cylinder" *Physica B,* **292**, 241.

38. MASALE M., 1999, “Optical transitions in a cylindrical quantum wire” *Physica E,* **5**, 98.

39. MASALE M., 2002, “Electron states in quasi-one-dimensional structures; azimuthal applied magnetic field” *Physica Scripta.,* **65**, 459.

40. MIKHAILOV I.D., ESCORCIA R., ORTEGA J.S., 2000, "The binding energies of shallow donor impurities in GaAs-(Ga,Al)As Coaxial Quantum-well wires" *Phys. Status Solidi (b),* **220**, 195.

41. MONTENEGRO N.P., LÓPEZ-GONDAR J., OLIVEIRA L.E., 1991, "Binding energies and density of impurity satates of shallow hydrogenic impurities in cylindrical quantum-well wires" *Phys. Rev. B,* **43**, 1824.

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

43. 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.

44. OKAN Ş.E., AKBAŞ H., AKTAŞ Ş., TOMAK M., 2000, "Binding energies of helium-like impurities in parabolic quantum wells under an applied electric field", *Superlattices and Microstructures*, **28**, 171.

45. ORELLANA P.A., GUEVARA M.L.L., PACHECO M., LATGÉ A., 2003, "Conductance and persistent current of quantum ring coupled to a quantum wire under external fields" *Phys. Rev. B,* **68**, 195321.

46. PACHECO M., BARTICEVIC Z., LATGÉ A., 2001, "Electronic and impurity states in triple quantum wells" *Physica B*, **302-303**, 77.

47. PARKS C., ALONSO R.G., RAMDAS A.K., RAM-MOHAN L.R., DOSSA D., MELLOCH M.R. 1992, "Piezomodulated reflectivity of asymmetric and symmetric $Al_{x1}Ga_{1-x1}As/GaAs/Al_{x3}Ga_{1-x3}As$ single quantum wells", *Phys. Rev. B*, **45(24)**, 14215.

48. PARK J.H., OZAKI S., MORI N., HAMAGUCHI C., 1999, "Effect of ionized impurities on electron tunneling in GaAs/AlGaAs triple quantum wells", *Superlatt. and Microstruc.,* **25**, 445.

49. PFEIFFER U., KIESEL P., GEISSELBRECHT W., DÖHLER G.H., MARANOWSKI K., THRANHARDT A., 1999, "A study of light-hole electro-absorption in AlGaAs parabolic quantum wells, using a novel method", *Superlatt. and Microstruc.,* **25**, 425.

50. POGHOSYAN BZ.H, DEMIRJIAN G.H., 2003, "Binding energy of hydrogenic impurities in quantum well wires of InSb/GaAs" *Physica B,* **338**, 357.

51. POKATILOV E.P., FONOBEROV V.A., BALABAN S.N., FOMIN V.M., 2000, "Electron states in rectangular quantum well wires(single wires, finite and infinite lattices)", *J. Phys:Condens. Matter,* **12**, 9037.

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

53. SAKAKI H., 1980, "Scattering suppression and high-mobility effect of size-quantized electrons in ultrafine semiconductor wire structures", *Jpn. J. appl. Phys.*, **19**, L735.

54. SARI H., KASAPOĞLU E., SÖKMEN I., 2003, "Shallow donors in a triple graded quantum well under electric and magnetic field" *Physica B,* **325**, 300.

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

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

57. WALTER L.B., 1989, "Electric field dependence of quantum-well eigenstates", *J. Appl. Phys.*,**65(12)**, 4789.

58. WANG C.K, BERGGREN K.-F., 1998, "Spontaneous spin polarization in quantum wires" *Physica E,* **2**, 964.

59. XIAO Z., ZHU J., HE J., 1995, "Impurity binding energy of a cylindrical quantum wire in a magnetic field" *Phys. Status Solidi (b),* **191**, 401.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı **:** Figen KARACA BOZ

Doğum Yeri ve Yılı **:** Kırklareli-1976

Medeni Hali **:** Evli

İş Adresi **:** Trakya Üniversitesi, Fen–Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Edirne.

Öğrenim Durumu:

1993-1997 : T. Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü (Lisans)

1997-2000 :T. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı (Yüksek Lisans)

Konu: Etkileşen Bozon Modeli.

2001- : T. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı (Doktora).

Konu: Düşük Boyutlu Yapılarda Yabancı Atom Problemi ve Eksitonlar.

Akademik Görevler:

1998-2000 : T. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı Araştırma Görevlisi

2000- : T. Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü Araştırma Görevlisi

Katıldığı Bilimsel Toplantılar:

1-2 nd International Balkan Workshop on Nuclear Physics, 2001, Edirne

2-First Hellenic-Turkısh International Physics Conference, 2001, Bodrum

Yayınlar:

1-“$^{156\text{-}162}$ Dy İzotoplarının Bazı Elektromanyetik Özelliklerinin Etkileşen Bozon Modeli ile incelenmesi” Trakya Univ. J. Sci., **5(1)**, 63, 2004.

2-“The Binding Energy of a Hydrogenic Impurity in Triple GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ Quantum Well-Wires under Applied Electric Field” Trakya Univ. J. Sci., **5(2)**, 159, 2004.

3-“Magnetic field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in coaxial GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum well wires” Superlattices and Microstructures, **37**, 281, 2005.

4-“ Electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic donor impurity in a coaxial quantum well wire” Physica E, **28**, 96, 2005.

5-"Simetrik ve Antisimetrik $Al_{x1}Ga_{1-x1}As/GaAs/Al_{x3}Ga_{1-x3}As$ Kuantum Kuyularında Eksiton Geçiş Enerjilerinin Nümerik Yöntemler Kullanılarak Hesaplanması" Bildiri, Türk Fizik Derneği 22. Fizik Kongresi, Bodrum, 2004.

6- "Manyetik ve Elektrik Alan Altında Silindirik $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Süper Kuantum Telinde Elektron Enerjisi" Poster, Türk Fizik Derneği 22. Fizik Kongresi, Bodrum, 2004.

7-"Silindirik Simetriye Sahip Yarı Parabolic Kuantum Telinde Elektrik ve Manyetik Alan Etkisinde Yabancı Atomun Bağlanma Enerjisi" Poster, Türk Fizik Derneği 22. Fizik Kongresi, Bodrum, 2004.