T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK FREKANSLI LAZER ALAN ALTINDA SONSUZ KUANTUM KUYUSUNUN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

HÜSNÜ ÖZER

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Danışmanı: PROF.DR. ŞABAN AKTAŞ

EDİRNE-2021

HÜSNÜ ÖZER' in hazırladığı "**YÜKSEK FREKANSLI LAZER ALAN ALTINDA SONSUZ KUANTUM KUYUSUNUN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ"** başlıklı bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından Fizik Anabilim Dalında bir **Yüksek lisans tezi** olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri (Ünvan, Ad, Soyad): İmza

Prof. Dr. Şaban AKTAŞ .....

Prof. Dr. Figen BOZ .....

Dr. Öğr. Üyesi Mustafa ULAŞ .....

Tez Savunma Tarihi: 30/07/2021

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

İmza

Prof. Dr. Şaban AKTAŞ

Tez Danışmanı ……

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

…….

Prof. Dr. Hüseyin Rıza Ferhat KARABULUT

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

T.Ü. FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI YÜKSEK LİSANS PROGRAMI

DOĞRULUK BEYANI

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

30/07/2021

Hüsnü ÖZER

Yüksek Lisans Tezi

Yüksek Frekanslı Lazer Alan Altında Sonsuz Kuantum Kuyusunun Elektronik Özellikleri

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu tez çalışmasında, yüksek frekanslı lazer alan altında, sonsuz iki potansiyel duvar arasındaki bölgede oluşturulan, çeşitli potansiyel profillerine sahip sonsuz kuantum kuyularında hapsolmuş bir elektronun davranışı ve yapının elektronik özellikleri araştırılmıştır.

Bölüm 1'de literatür çalışması yapılmış ve benzer makaleler özetlenmiştir. Bölüm 2'de düşük boyutlu yapıların tanımı, sınıflandırılması, malzemenin genel özellikleri, kuantum kuyularının fiziksel olarak nasıl oluşturulduğu anlatılmıştır ve yapıyı oluşturan yarıiletkenlerin elektroniksel özellikleri incelenmiştir. Bölüm 3'te iki boyutlu kuantum kuyularının sayısal çözümlemesini doğrulamak için önce farklı bariyer yüksekliğine sahip iki farklı kuantum kuyusu teorik olarak çözümlenip daha sonra nümerik çözümler yapılıp ortaya çıkan sonuçlar birbirleriyle kıyaslanmıştır ve hata payları bulunmuştur. Bölüm 4'te dışarıdan uygulanan elektrik ve lazer alanlarının Schrödinger Denklemine getirdiği ek potansiyel katkılar açıklanmıştır. Farklı potansiyel profillerine sahip sonsuz kuantum kuyularında bulunan bir elektronun, bu dış alanlardan nasıl etkilendiği araştırılmıştır.

Bölüm 5’ de farklı profillerdeki sonsuz kuantum kuyusu içinde yer alan elektronun, farklı dış etkiler altında farklı seviyedeki enerjileri, dalga fonksiyonlarındaki ve yabancı atoma bağlanma enerjisindeki değişimleri gözlemlenmiştir, grafik çıktıları elde edilmiştir ve yorumlanmıştır.

Sonuçlarımız literatüre uygundur. Hesaplamalarda analitik çözümün yanı sıra sistemi nümerik olarak çözmeye yarayan sonlu farklar yöntemi (FDM) kullanılmıştır.

Yıl : 2021

Sayfa Sayısı : 111

Anahtar Kelimeler : Lazer, Elektrik Alan, Yabancı Atom ve Sonsuz Kuantum Kuyusu

Master Degree Thesis

Electronic Options of İnfinite Quantum Well Under High Frequency Laser Field

Trakya University Institute of Natural Sciences

Physics Department

ABSTRACT

In this thesis, the behavior of an electron trapped in infinite quantum wells (IQW) with various potential profiles, created in the region between two infinite potential walls under a high frequency laser field, and the electronic properties of the structure were investigated.

In Part 1, a literature study was conducted and similar articles were summarized. In Part 2, the definition, classification of the low-dimensional structures, the general properties of the material, how QW are physically created are explained, and the electronic properties of the semiconductors that make up the structure are examined. In Part 3, two different QW with different barrier heights are theoretically analyzed, and then the numerical solutions are made, and the results are compared, and our margins of error are found to verify the numerical analysis of double-dimensional QW. In Part 4, additional potential contributions to the Schrödinger equation of the electric and laser fields applied from the outside are explained. It was investigated how an electron in IQW with different potential profiles is affected by these external fields.

In Part 5, the changes of the electron in the IQW in different profiles, under different external effects, in the different state energy, wave functions and the energy of binding to the impurity atom, graphic printouts are obtained and interpreted.

Our results are in accordance with the literature. In addition to the analytical solution, the FDM used to solve the system numerically was used in the calculations.

Year : 2021

Number of Pages : 111

Keywords : Laser and Electric Field and Impurity Atom, Infinite Quantum Well

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmamda bana yardımları dokunan ve her daim yanımda olan danışmanım sayın Prof. Dr. Şaban AKTAŞ'a, yardımlarını hiç esirgemeyen bölüm başkanımız sayın Prof. Dr. Figen BOZ'a, yolumuza her daim ışık tutan sayın Prof. Dr. Ş. Erol OKAN'a ve değerli abim sayın Öğr. Gör. Dr. Bahadır BEKAR'a teşekkür ediyorum. Ayrıca düzenleme kısmında yardımlarını esirgemeyen yakınım sayın Dr. Öğr. Üyesi Abdullah BİLEKKAYA'ya çok teşekkür ederim. Son olarak aileme, yakın arkadaşlarıma ve burada sayamadığım herkese sonsuz teşekkürler ediyorum.

İÇİNDEKİLER

Sayfa No:

ÖZET……...iv

ABSTRACT……...….vi

TEŞEKKÜR……..viii

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ…….……...xi

ŞEKİLLER DİZİNİ..……xii

ÇİZELGELER DİZİNİ..……...xv

BÖLÜM 1: GİRİŞ……...1

BÖLÜM 2: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARIN TANIMI……...4

2.1. Düşük Boyutlu Yapıların Sınıflandırılması……....4

2.2. Yarı İletkenlerin Tanımı, Fiziksel yapısı, Genel Özellikleri ve Kullanım Alanları ……6

2.3. Sonsuz Kuantum Kuyusunun Oluşumu, Fiziksel Yapısı ve Çeşitli Üretim Metodları……..8

2.4. Sonsuz Kuantum Kuyusu Oluşturmada Kullanılan Yarıiletken Malzemelerin Yapısı, Elektronik Özellikleri ve Kullanım Alanları …….……10

2.4.1. Galyum(Ga) Atomunun Yapısı, Elektronik Özellikleri ve Kullanım Alanları.....11

2.4.2. Alüminyum(Al) Atomunun Yapısı, Elektronik Özellikleri ve Kullanım Alanları……11

2.4.3. Arsenik(As) Atomunun Yapısı, Elektronik Özellikleri ve Kullanım Alanları……12

BÖLÜM 3: ANALİTİK VE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİN KIYASLANMASI……13

3.1.1. Sonsuz Kuantum Kuyusunun Analitik Çözümü……...13

3.1.2. Sonlu Farklar Metodu ……...……..16

3.1.3. Sonsuz Kuantum Kuyusunun Nümerik Çözümü……..17

3.1.4. İstatiksel Metod Olan Lineer Regrasyon Yönteminin Tanımı…….....20

3.1.5. Sonsuz Kuantum Kuyusunun Analitik Çözümüyle Nümerik Çözümü Arasındaki Farklar……21

3.2.1. Sonsuz Çoklu Kare Kuantum Kuyusu Analitik Çözümü……..23

3.2.2. Sonsuz Çoklu Kare Kuantum Kuyusunun Analitik Çözümüyle Nümerik Çözümü Arasındaki Farklar……58

BÖLÜM 4: KUANTUM KUYULARI ÜZERİNE UYGULANAN DIŞ ETKİLER VE HAMİLTONYEN FONKSİYONUNA KATKILARI……62

4.1. Hamiltonyen Fonksiyonuna Elektrik Alandan Gelen Katkı……...62

4.2. Hamiltonyen Fonksiyonuna Lazer Alandan Gelen Katkı……...63

4.3. Hamiltonyen Fonksiyonuna Elektrik ve Lazer Alanlar Altında İken Yabancı Atomdan Gelen Katkı……..65

BÖLÜM 5: SONUÇLAR VE TARTIŞMA…….....67

5.1. Kuantum Kuyularına Elektrik Alan Etkisi…..……..67

5.2. Kuantum Kuyularına Lazer Alan Etkisi……...75

5.3. Kuantum Kuyularına Elektrik ve Lazer Alan Etkisi……..80

5.4. Kuantum Kuyularına Yabancı Atom Etkisi…….....88

5.5. Bölüm Değerlendirilmesi ve Yorumlanması……91

KAYNAKLAR……...94

ÖZGEÇMİŞ……...96

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

$\hbar$ Planck sabiti

e Elektron yükü

$\psi(z)$ Dalga fonksiyonu

$V(z)$ Yapı içindeki elektronun karşılaştığı potansiyel

m^* Elektronun etkin kütlesi

a^* Etkin bohr yarıçapı

R^* Etkin Rydberg enerjisi

$\vec{A}$ Vektör potansiyeli

$\vec{P}$ Momentum vektörü

H Hamilton fonksiyonu

α_0 Lazer alanın genliği

D_c Düşük boyutlu yapı içerisindeki elektronun kısıtlama derecesi

D_f Düşük boyutlu yapı içerisindeki elektronun serbestlik derecesi

λ Varyasyonel parametresi

N Normalizasyon katsayısı

η Hamiltonyendeki elektrik alan terimi

ε Dielektrik sabiti

$V_{DC}(z, \alpha_0)$ Lazer giydirilmiş potansiyel ifadesi

$V_C(\rho, z, \alpha_0)$ Lazer giydirilmiş Coulomb potansiyeli ifadesi

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Farklı boyutlardaki kuantum nano yapıların gösterimi. Buradaki (a) Yığın(3D), (b) Kuantum Kuyusu(2D), (c) Kuantum Teli(1D), (d) Kuantum Noktası(0D) …….....**5**

Şekil 2.2. Yarı iletken kristallerin z yönünde büyütülmesi ve bu yapının içindeki bir elektronun z yönünde ilerlerken gördüğü potansiyel profili……..**9**

Şekil 3.1. Sonsuz çoklu kuantum kuyusunun potansiyel profili……**13**

Şekil 3.2. Sonlu farklar yönteminin gösterimi……...**16**

Şekil 3.3. Sonlu potansiyel kuyunun gösterimi……..**18**

Şekil 3.4. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren enerji grafiği…….**21**

Şekil 3.5. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren Excel programı kullanılarak yapılan Regrasyon eğri grafiği ……...**22**

Şekil 3.6. Sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunun potansiyel profili……**23**

Şekil 3.7. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren enerji grafiği…….....**59**

Şekil 3.8. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren Excel programı kullanılarak yapılan Regrasyon enerji grafiği…….……....**59**

Şekil 3.9. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren enerji grafiği……..**60**

Şekil 3.10. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren Excel programı kullanılarak çıkartılan Regrasyon eğri grafiği ……..…..**61**

Şekil 5.1. b=200 Å' luk sonsuz kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değerleri……..…….**69**

Şekil 5.2. b=200 Å' luk sonsuz kuantum kuyusu için elektrik alansız (sol sütun) ve elektrik alanın $F = 40\ kV/cm$ değeri (sağ sütun) için ilk beş enerji değerleri ve dalga fonksiyonlarının kareleri……..**70**

Şekil 5.3. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300$ meV′ luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değişimleri……..**72**

Şekil 5.4. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300$meV, $V_0 = 200$ meV, $V_0 = 100$meV, $V_0 = 50$meV sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında E_1 değişimi……...**73**

Şekil 5.5. b=200 Å, a=100 Å , $V_0 = 300$ meV değerinde sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alansız (sol sütun) ve elektrik alanın $F = 40$ kV/cm değeri (sağ sütun) için ilk beş enerji değerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarının kareleri…...**74**

Şekil 5.6. b=200 Å sonsuz kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri……..**76**

Şekil 5.7. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300$meV, $V_0 = 200$ meV, $V_0 = 100$meV, $V_0 = 50$meV, sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında E_1 değişimi……..**77**

Şekil 5.8. b=200 Å' luk sonsuz kuantum kuyusu için ilk beş enerji değerlerinin ve dalga fonksiyonlarının kareleri farkının iki dış alanlar (sol sütün F=0, α_0=0, sağ sütün F=0, α_0=30 Å) altındaki değerleri…….**.....78**

Şekil 5.9. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300$ meV′luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri……..……**79**

Şekil 5.10. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300$ meV, $F = 30$kV/cm′lik sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri ……**.....80**

Şekil 5.11. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300$ meV, $\alpha_0 = 30$ Å ′luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değerleri ……**81**

Şekil 5.12. b=200 Å' luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu, $V_0 = 300$ meV potansiyel yüksekliği için ilk beş enerji değeri ve dalga fonksiyonlarının kareleri, iki dış alanlar (sol sütun F=0, α_0=40 Å, orta sütun F=40 kV/cm, α_0=40 Å sağ sütun F=40 kV/cm, α_0=0) altındaki değerleri ……...**82**

Şekil 5.13. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300\ \text{meV}, \alpha_0 = 50\ \text{Å}$ sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değerleri…….....**84**

Şekil 5.14. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300\ \text{meV}, F = 30\ \text{kV/cm}$′luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri…..……**85**

Şekil 5.15. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 200\ \text{meV}, \alpha_0 = 40\ \text{Å}$ ′luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değerleri……...**86**

Şekil 5.16. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 200\ \text{meV}, F = 50\ \text{kV/cm}$′luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri…….....**87**

Şekil 5.17. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 200\ \text{meV}, V_0 = 300\ \text{meV}, Z_i = 0$ yabancı atomun simetri durumunda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında E_B değişimi ……..…….....**88**

Şekil 5.18. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 200\ \text{meV}, V_0 = 300\ \text{meV}, Z_i = 0$ yabancı atomun simetri durumunda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında E_B değişimi……...**89**

Şekil 5.19. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 150\ \text{meV}, V_0 = 100\ \text{meV}, Z_i = 0$ yabancı atomun simetri durumunda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında E_B değişimi……..**90**

Şekil 5.20. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 150\ \text{meV}, V_0 = 100\ \text{meV}, Z_i = 0$ yabancı atomun simetri durumunda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında E_B değişimi……..….**90**

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. Boyutlara göre kuantum materyalleri sınıflandırılması……**5**

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Günümüzde genellikle düşük boyutlu yapılar gelişen optoelektronik cihazlarda sıkça tercih edilmektedir. Özellikle düşük boyutlu yapıların bir çeşidi olan iki boyutlu (2D) kuantum kuyuları, elektronik aygıtlarda yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Son yıllarda, bu kuantum yapılarına dışarıdan uygulanan lazer alan etkisini araştıran makaleler literatürde yer almaya başlamıştır. Bizim yaptığımız bu tez çalışmasında ise yüksek frekanslı lazer alanın kuyu potansiyel profilini nasıl etkin bir şekilde değiştirdiğini, yapı içine hapsolmuş elektronun davranışının nasıl olacağı ve yapıya uygulanan dış etkiler altında (lazer alan, elektrik alan gibi...) yapıya hapsolmuş elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisindeki değişimleri araştırılmıştır.

Literatürdeki incelemelerden görüldüğü üzere kuantum kuyuları üzerinde çeşitli araştırmalar yapılmış ve dış etkilere maruz bırakılmıştır. Elektrik ve lazer alan (çift etki) etkisine maruz bırakılan yapıya yabancı atom katkısı da yapılarak, elektronun dalga (davranış) fonksiyonlarındaki değişimleri incelenmiş, elektronun ilk seviye enerjisi ve yabancı atoma bağlanma enerjisi araştırılmıştır. Bu bölümde yapılmış olan literatür taramasının ilk kısmında yapıyı düzgün artan lazer alan altında bırakılarak değişimler ele alınacaktır. Lazer alan uygulamalarında Niculescu ve Bejan (2016) farklı şiddete sahip lazer alanların elektronik yapı üzerindeki eşzamanlı etkileri araştırılmışlardır. Elde ettikleri sonuçlar, elektronik yapının iyi uyarılmış asimetriye duyarlı olduğunu göstermiştir. Kuantum kuyusuna lazer alan şiddetini arttırarak uygulamışlardır. Lazer alan uygulandığında kuyu profilinde ve dalga fonksiyonunda büyük bir değişiklik olduğunu gözlemlemişlerdir. Kuyunun yapısal olarak karakteristiği değişmiştir ve yapı içerisindeki elektronun enerji değeri de lazer alan şiddeti arttıkça artış göstermiştir.

Bejan ve Nicelescu (2016) lazer alanı uyguladıktan sonra elektronun olasılık yoğunluğunun ilk duruma göre nasıl değiştiği araştırılmışlardır. Kuyunun tabaka kalınlığının etkisini de incelemişlerdir. Uygulanan lazer alan yapının elektronik ve optik özelliklerini değiştirmiştir. Böylece bu yapılan çalışmalardan çıkan sonuçlar yeni optoelektronik araçlar dizayn etme fırsatını sunmaktadır (Bejan & Nicelescu, 2016).

Literatür taramasının ikinci kısımda ise yapıyı düzgün artan elektrik alan altında bırakılarak değişimler incelenecektir. Akbaş ve Erdoğan (2009) elektrik alanının altındaki kuantum kuyularında GaAs / $GaAl_xAs$'de hidrostatik basıncın polarizasyon üzerindeki etkilerini incelemişlerdir. GaAs / $GaAl_xAs$ kuantum kuyusunda kendiliğinden polarizasyon (SP) üzerindeki elektrik alan etkisini hesaplamış ve yapılan hesaplarda basınçla değişen elektronik etkin kütle, dielektrik sabiti, bariyer yüksekliği, kuyu boyutunu dikkate almışlardır. Hidrostatik basıncın kendiliğinden polarizasyon üzerindeki etkisinin kuyu genişliklerinin ve uygulanan elektrik alanlarının değerine bağlı olduğunu göstermişlerdir (Akbaş & Erdoğan, 2009). Literatürdeki incelemelerden görüldüğü gibi Okan ve Akbaş (2004) da bir elektrik alanında anormal polarizasyon ve GaAs / GaAlAs kuantum kuyularında kendiliğinden polarizasyonunu incelemişlerdir. Bir elektronun sonsuz kuantum kuyularındaki bir elektrik alan altında davranışını araştırmışlardır. Aynı zamanda, yabancı atom elektronu üzerindeki kuyu potansiyelinin etkisi olarak tanımlanabilen öz polarizasyon etkisini, aynı yapılar için incelemişlerdir. Uyarılmış durumlardaki anormal polarizasyon her zaman bir elektrik alanının varlığında bulunmuştur. Ayrıca, dış elektrik alan polarizasyonunun, yapı içindeki konumuna bağlı olarak bir yabancı atom iyonu tarafından yoğunlaştırıldığı veya zayıfladığını göstermişlerdir (Okan & Akbaş, 2004).

Literatürdeki elektrik alan uygulamalarına ek olarak Ersoy ve Karaman (2010) tarafından yalıtılmış sonsuz çoklu kare kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın etkileri incelenmiştir. Hesaplarda kullandıkları fiziksel parametreler m_0 serbest elektron kütlesi olmak üzere, elektron etkin kütlesi $m* = 0.067\ m_0$ dır. Z doğrultusunda (yatay doğ.) ve negatif yönde (sağdan sola doğru) uygulanan elektrik alan düşük boyutlu yapımızın potansiyel profilini bozarak kuyu potansiyelinin sol tarafa doğru yatmasına sebep olmuştur. Farklı elektrik alanının değerler için, kuyu genişlikleri ve potansiyel yükseklikleriyle oynanarak elektronun dalga (davranış) fonksiyonundaki değişimler gözlemlenmiştir. Başlangıçta belli bir değerde kuyu genişliği ve potansiyel yüksekliğine

sahip olan bir kuantum kuyusuna sırasıyla düzgün artış gösteren elektrik alan uygulanınca kuyunun potansiyel profilinin değişimine bağlı olarak dalga fonksiyonlarının yerelleşmesi de değişmiştir. Daha sonra sabit bir elektrik alan altında ve belli bir potansiyel derinlikli bir kuyuda, kuyunun genişliği değiştirilerek incelemişler. Kuyu genişliğinin artması ile enerji düzeylerinin düştüğünü gözlemlemişler. Sonuç olarak Ersoy ve arkadaşları, bir düşük boyutlu yapıyı elektrik alan altında bırakıldığı zaman yapının içine hapsolmuş elektronun davranışındaki ve kuyu profilindeki değişiklikleri göstermişlerdir (Ersoy, Bahar & Karaman, 2010).

Literatür taramasının son kısmında ise yapıyı yabancı atom katkısıyla birlikte lineer bir artış gösteren hem lazer hem de elektrik alan altında bırakılarak değişimler incelenecektir. Elektrik ve lazer Alan uygulamalarına ise Gonzales ve Montenegro (2005) tarafından etkin kütle yaklaşımıyla birlikte çeşitli metotlar kullanarak GaAs / AlGaAs kuantum kuyusu için uygulamalı bir elektrik alanın etkileri teorik bir çalışmayla hesaplanmıştır. Elektrik alan altında E_0 ve E_B taban durum ve bağlanma enerjilerindeki değişimler incelenmiştir. Elektrik alan farklı açıda ve doğrultuda uygulanmıştır. Lazer alan sabit değerdeyken ve yabancı atom katkısıyla düzgün artan elektrik alan uygulandığında E_0'in 0 'ın altına düştüğünü (farklı açı değerleri için) yani parabolik olarak dışa doğru eğim çizerek azaldığı gözlemlenmiştir. E_B ise parabolik olarak içe doğru eğim çizerek düşmüştür. Duque ve Montenegro (2005) bize elektrik alanın uygulama yönünün yanı sıra doğrultusunun da çok önemli olduğunu ve enerjideki değişimlere büyük oranda etki ettiğini göstermişlerdir (Gonzales, Montenegro & Duque, 2005).

Sonuç olarak yapıdaki hapsedilmiş elektronun dalga boylarının, enerjilerinin ve kuyunun potansiyel profilinin dış etkilerle değiştiği gözlemlenmiştir. Ayrıca kuyu genişliğinin değiştirilmesi, farklı yönlerde uygulanan ve farklı eğim açısıyla gelen elektrik alanın yapıya uygulanması yapının iletkenliğini ve yapının elektronik özelliklerinin değiştirdiği sonucuna da ulaşılmıştır. Çıkan sonuçlardan anlaşıldığı üzere yapının elektronik özeliklerinin değişimi sadece dış etkilere bağlı değişmeyip, farklı parametre değerleriyle oynanarak (kuyu genişliği, bariyer yüksekliği gibi..) yapıda bulunan elektronun hareketini değiştirilebileceği sonucuna varılmıştır.

BÖLÜM 2

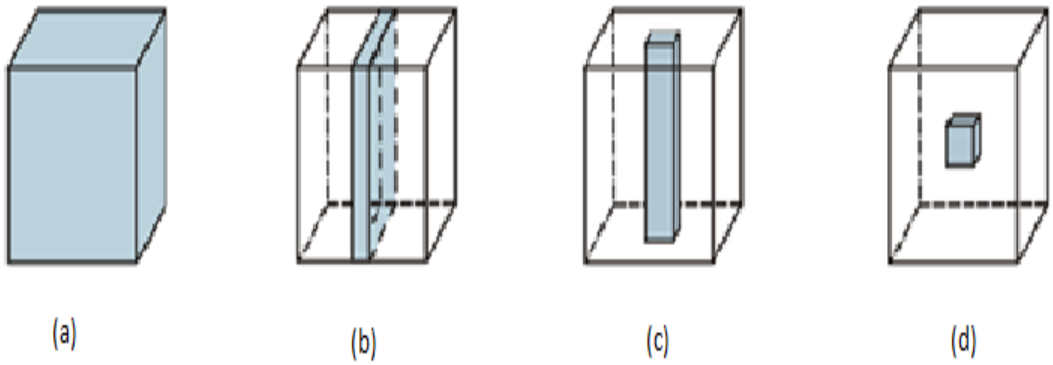
DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARIN TANIMI

Bu bölümde düşük boyutlu yapıların tanımı, sınıflandırılması, malzemenin genel özellikleri, kuantum yapıların oluşumu ve bu yapıda kullanılan malzemelerin fiziksel yapısına ve elektroniksel özelliklerine değinilmiştir. Düşük boyutlu yapıların tanımına kısaca değinirsek; boyut küçültülerek yeni elektriksel, mekanik, kimyasal, manyetik ve optik özellikler tanıtılabilir ve ortaya çıkan yapı daha sonra düşük boyutlu bir yapı (veya sistem) olarak adlandırılır. Parçacıkların genellikle elektronların veya deşiklerin düşük boyutlu bir yapıya hapsedilmesi, davranışlarında ve genellikle kuantum boyutu etkilerinin kategorisine giren boyut etkilerinin oluşumunda önemli bir değişime yol açar. Düşük boyutlu yapıların veya nanoyapıların elektronik özelliklerinin anlaşılması yeni cihazların ve teknolojilerin gelişmesine katkı sağlayabilir.

2.1. Düşük Boyutlu Yapıların Sınıflandırılması

Düşük boyutlu yapılar genellikle sahip oldukları azaltılmış boyutların sayısına göre sınıflandırılır. Buna göre, boyutsallığa bağlı olarak aşağıdaki sınıflandırma yapılabilir; Üç boyutlu (3D) yapı veya yığın yapısı: Parçacık hareketinin sınırlandırılması gerçekleşmez, yani parçacık serbesttir. İki boyutlu (2D) yapı veya kuantum kuyusu: Parçacık hareketinin diğer iki yönde hareket etmesi serbestken, parçacık hareketinin sınırlandırılması bir yönde gerçekleşir. Tek boyutlu (1D) yapı veya kuantum teli: Sınırlama iki yönde gerçekleşir ve sadece tek yönde serbest dolaşım sağlar. Sıfır boyutlu (0D) yapı veya kuantum noktası (bazen “kuantum kutusu” olarak adlandırılır) ve sınırlama her üç yönde de gerçekleşir. Genellikle çalışmalarda,

küçültülmüş-boyutluluk yapılarının hapsedilen yönlerin sayısından ziyade parçacık hareketindeki geri kalan serbestlik dereceleri ile adlandırıldığını belirlemiştir.



Şekil 2.1. Farklı boyutlardaki kuantum nano yapıların gösterimi. Buradaki (a) Yığın(3D), (b) Kuantum Kuyusu(2D), (c) Kuantum Teli(1D), (d) Kuantum Noktası(0D) (www.google.com/search?q=low+dimensional+structures&source=lnms&tb).

Şekil 2.1' de dört farklı boyuttaki kuantum nano yapılardan (düşük boyutlu yapılar) ufak bir kesit gösterilmiştir.

Çizelge 2.1. Boyutlara göre kuantum materyalleri sınıflandırılması.

Sl. No.	Sistem	D_f (serbestlik derecesi)	D_c (sınırlama derecesi)
1	Yığın(Bulk) (3D-üç boyutlu)	3	0
2	Kuantum Kuyusu(2D)	2	1
3	Kuantum Teli (1D-tek boyut)	1	2
4	Kuantum Noktası(0D)	0	3

Çizelge 2.1' de dört temel boyutsal sistem için yığın, kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktaları yapının içinde hapsedilen elektronun serbest hareket edebilme derecesine göre gruplandırmaları yapılmıştır. Burada gösterilen D_f elektron hareketindeki serbestlik derecesinin sayısı, D_c ise elektron hareketinin sınırlamasını temsil etmektedir.

2.2. Yarı İletkenlerin Tanımı, Fiziksel yapısı, Genel Özellikleri ve Kullanım Alanları

Elementler atomların son yörüngesindeki elektron sayısına ve katmanlarına göre farklı gruplara ve periyotlara ayrılarak periyodik tabloya yerleştirilmiştir. Periyodik cetvelde bulunan elementler kararlı bir yapıda bulunmak isterler. Son yörüngesindeki elektron sayısını 2 ve 8'e tamamlayarak dublet veya oktet seviyesine ulaşmaya çalışırlar ve kendisine en yakın asal (soy) gaza benzemeye çalışırlar. Elektron alışverişi yaparak veya elektron ortaklaşa kullanımıyla elementler kendi aralarında iyonik veya kovalent bağlı birleşikler oluştururlar.

Elektrik iletkenliğine göre maddeler üçe ayrılır; İletkenler, yalıtkanlar ve yarıiletkenlerdir. İlk önce günümüzde gelişen elektronik aygıtlarda en çok tercih edilen yarıiletkenlerin tanımından bahsedecek olursak: 'Yarıiletkeni oluşturan atomların etrafında belirli bir yörüngede dönen elektronlar her bir yörünge için bir üst limite sahiptir. Her yörünge için bu üst limit (yörüngede bulunan maksimum elektron sayısı) farklılık gösterir. Eğer atomun son yörüngesinde bulunan değerlik elektron sayısı 4 ise bu atomlardan meydana gelmiş madde yarıiletken olarak tanımlanır. Yarıiletkenlerin tanımına kısaca değindikten sonra yarıiletkenlerin haricinde doğada iletken ve yalıtkanlarda mevcuttur. Örnek verecek olursak; İletkenler: Altın, Gümüş, Bakır, Alüminyum, Çelik, Platin… Yalıtkanlar: Yağmur suyu, saf su, şekerli su, kauçuk, tahta, cam, plastik, hava... Yarıiletkenler: Bakıroksit, galyumarsenid, indiyum, fosfür, germanyum, silisyum, kurşun olarak sıralayabiliriz.

Yarıiletken, yalıtkan ve iletkenlerin her biri farklı bant yapılarına sahiptir. Bizde bu kısımda sırasıyla yarıiletken, yalıtkan ve iletkenlerin sahip olduğu farklı band yapılarını açıklamaya çalışacağız. Periyodik cetvelde bulunan elementlerin atomları ve atomların etrafında dolaşan elektronların davranışlarını kuantum mekaniğinin ilkelerini

kullanarak açıklarsak; Kuantum mekaniğine göre bir atomda kesikli enerji seviyeleri mevcuttur ve bir kristaldeki atom sayısı arttıkça etkileşim oranı yükselir ve enerji seviyeleriyle birlikte band yapısı meydana gelir. Bu bandların çok yakın olanına valans bandı denir veya başka bir deyişle; elektronların her madde içerisindeki hareketi aynı değildir. Atomların yörüngesinde elementin cinsine göre farklı sayıda elektron vardır ve farklı sayıda yörüngeye sahiptir. Her atom kendine özgü özellikler (davranışlar) sergilemektedir ve atomların son yörüngesinde bulunan elektrona valans elektronu ve elektronların bulunduğu bu banda da valans bandı denilmektedir (kuark.org/2014/08/).

Bir de izinli bir band (iletkenlik bandı) mevcuttur burada da elektronlar serbestçe dolaşarak elektrik iletkenliğini sağlamaktadırlar. Elementlerin valans (son yörünge) bandının üst kısmıyla iletkenlik bandı alt kısmı arasındaki boşluğa yasak bant aralığı (bandgap) denir ve E_g ile gösterilir (Bekar, 2018).

Valans bandı elektronlarla kısmen doluysa valans bandıyla iletkenlik bandı arasında bir miktar boşluk bulunmaktadır. İletkenlerin yörüngesinde bulunan elektronlar uyarılma olmadan da veya katkılama yapılmadan da elektron belli enerjiye sahipse iletkenlik bandına geçiş yaparak iletkenliği sağlayabilmektedir. Yalıtkanlarda ise bu durum oldukça farklıdır çünkü yasak bant aralığı çok yüksek olduğu için uyarılmada olsa katkılama da olsa elektron bant aralığını geçemez bu sebeple iletkenlik bandına ulaşamadığı için iletkenliği sağlaması pek mümkün olmamaktadır.

Yarıiletken maddelerin son yörüngesinde bulunan elektronlar belli dış etkiler tarafından (elektrik, lazer, manyetik alan gibi..) uyarıldığında en yüksek enerjiye sahip elektronlar enerji kazanarak valans bandından iletkenlik bandına sıçrama yaparak iletkenliği sağlamaktadır. Bu durum atoma uygulanan dış müdahaleye bağlı olduğu için geçici bir süre söz konusudur. Dış müdahale ortadan kalkınca elektronlar atomlarındaki eski yörüngelerine geri dönüş yaparlar. Yarıiletkene atom katkısı yapılarak da iletkenliği kontrol altına alınabilmektedir. Bir yarıiletkene dışarıdan başka bir yabancı atom (katkı maddesi) eklenmesine katkılama ya da uyarıcı denir (balikesir.edu.tr/kahveci/dersler/te-04.pdf).

Yarıiletkenler, sahip olduğu farklı band yapıları sayesinde günümüz teknolojisinde çok tercih edilmektedir. Yarıiletken malzemelerin atomları simetrik olarak ve düzgün bir şekilde kristal yapı içinde sıralanmıştır. Bu kristal yapısı iki farklı

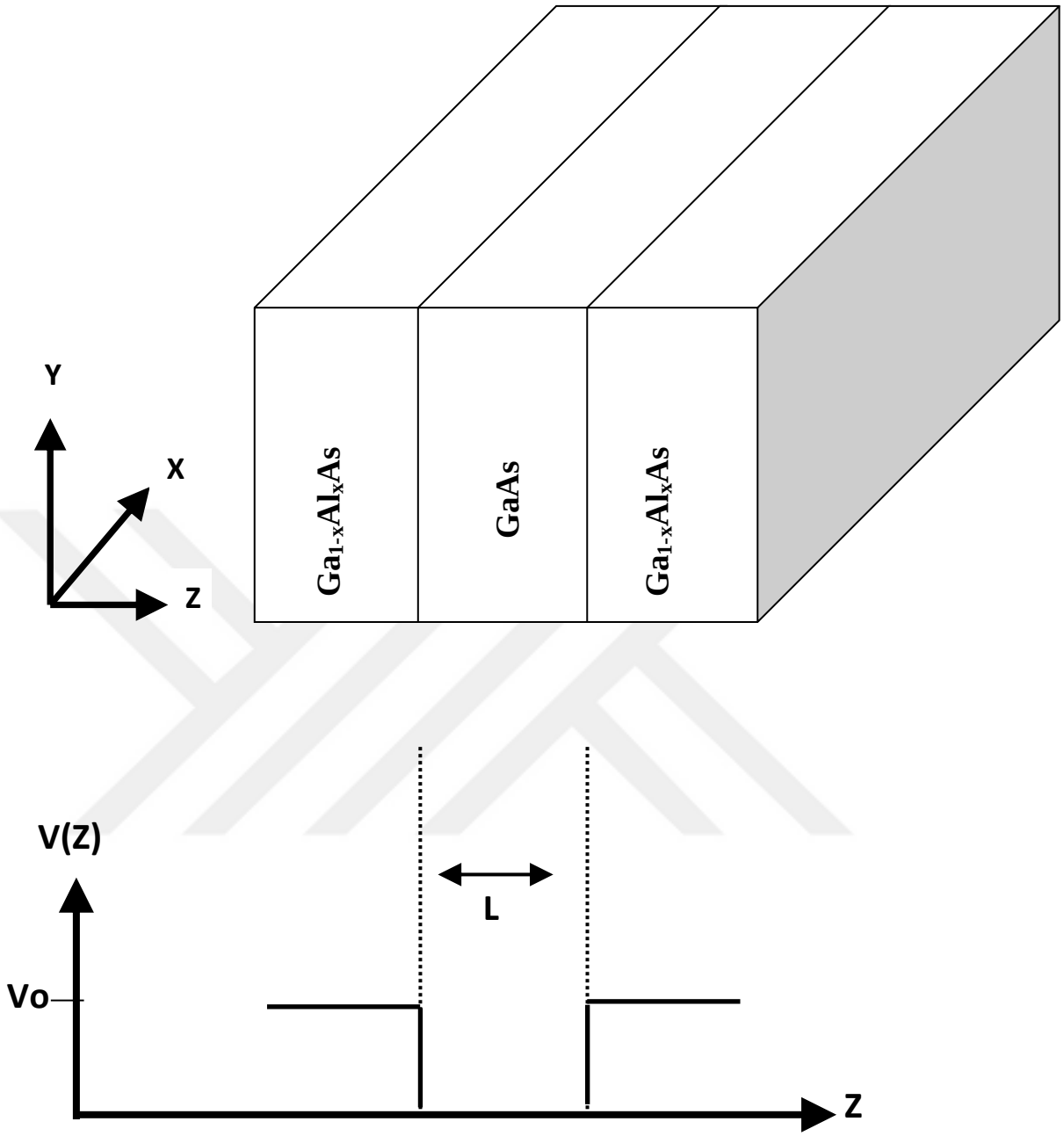
çeşide sahiptir. İlki monokristal (yarıiletkenlerin tabiattan elde edilmesinden sonra saflaştırılması), ikincisi ise polikristal (yarıiletkenlerin tabiattan elde edilmesiyle karmaşık kristal yapıya sahip olması) olarak sınıflandırabiliriz. Germanyum (Ge) ve Silikon (Si) diyot transistörlerin oluşmasında gerekli olan iki farklı tür yarıiletkenlerdir ve düşük boyutlu yapıların oluşumunda kullanılan malzemeler içinde tercih edilen elementlerdir. Bu yarıiletken yapılara dışardan yabancı atom katılarak (indiyum, fosfür gibi) iletkenliği arttırmak mümkün olmaktadır.

Yarıiletkenler farklı alanlarda kullanılabilmektedir. Diyot, transistör, entegre devre yapımında, Galliyum Arsenid (GaAs) ve Indiyum Fosfur (InP) oluşumunda (Bileşik eleman), transistör, led yapımında, güneş enerjisiyle çalışan fotovoltaik piillerin oluşumunda kullanılabilir (slideplayer.biz.tr/slide/2701879/). Ayrıca yarıiletkenler uzay teknolojisinden, cep telefonlarından, gece görüşü kameralarına kadar birçok hassas aletlerin üretiminde yer almaktadır. Yarıiletkenlerin teknolojideki önemi her geçen gün artmaktadır. Yarıiletkenler birleşerek homoyapılar (aynı türde yarıiletken malzemelerin bir araya gelmesiyle oluşan yapılar) ve heteroyapılar (farklı türde yarıiletkenler malzemelerin bir araya gelmesiyle oluşan yapılar) olmak üzere iki farklı tür bileşik yapı oluşturabilirler.

Günümüzde imal edilen farklı türdeki malzemeden oluşmuş yarıiletken yapılar, elektronikte ve optoelektronikte kullanılan araçların imalatında geniş bir ölçüde yer almaktadır. Bu yapılar elektronikte karmaşık entegre devre üretiminde, optoelektronikte ise farklı profilde kuantum kuyularının oluşumunda kullanılabilir.

2.3. Sonsuz Kuantum Kuyusunun Oluşumu, Fiziksel Yapısı ve Çeşitli Üretim Metodları

Kuantum kuyusu; bir elektronun hareket serbestliğini, karşılıklı duran iki potansiyel duvar yardımı ile sınırlandırarak, üç boyuttan iki boyuta düşürülmesi ile oluşturulur. Bu durumda, kuantum kuyusu içeresinde bulunan bir elektron bu sınırlamadan dolayı ayrık enerji değerlerine sahip olur (Bilekkaya, 2008).



Şekil 2.2. Yarı iletken kristallerin z yönünde büyütülmesi ve bu yapının içindeki bir elektronun z yönünde ilerlerken gördüğü potansiyel profili.

Şekil 2.2 'de görüldüğü gibi kuantum kuyuları farklı tür yarıiletken malzemeden oluşan heteroeklem bir yapıya sahiptir. Yasak enerji bandının yüksek olduğu GaAlAs ve yasak enerji bandının daha düşük olduğu GaAs gibi farklı tür malzemelerin biraraya gelmesiyle kuantum kuyuları oluşturulabilir (Yarıiletken yapılar-uadmk).

Eğer Şekil 2.2'de oluşan sonlu kuantum kuyumuzu sonsuz kuantum kuyusuna dönüştürmek istersek kuyunun sol ve sağ tarafındaki Al konsantrasyon oranları isteğe bağlı olarak yükseltilebilir, potansiyel yüksekliği $V_0 = 2000\,\text{meV}$ üstü değerler alınabilir. Böylece bu değerler için düşük boyutlu yapımızın sonsuz kuantum kuyusu gibi davrandığını düşünebiliriz. Bariyer tabakalarının alüminyum içeriği ve büyüme sırasında GaAs katmanının kalınlığını ayarlayarak, kullanıcının özelliklerine göre uyarlanmış elektronik özelliklere sahip kuantum kuyuları oluşturulabilir.

Bu kısımda ise düşük boyutlu yapıların üretim metoduna değineceğiz. Teknolojideki son gelişmeler sonucunda yarı iletken kristaller, atomik tabakalar şeklinde birbirlerinin üzerine kaplanarak ve büyütülerek, birkaç yarıiletken kristal tabakadan oluşmuş yeni bir kristal yapı elde edilmesi mümkün olmuştur. Bu büyütme esnasında kullanılan farklı yarı iletken malzemelerin sırasını ve kalınlıklarını değiştirerek, farklı potansiyel büyüklüklerde ve kalınlıkta kuantum kuyusu veya bariyer sistemleri imal edilebilmektedir (Kuark.org, 2014). Bu tip yapılarda en yaygın olarak kullanılan yarıiletken kristal Galyum-Alüminyum-Arsenide ($Ga_{1-x}Al_xAs$) kristalidir. Alternatif olarak GaAs/GaInAs (Galyum-İndiyum-Arsenide) kristalinde elbette kuantum kuyuları üretiminde malzeme olarak kullanılabilmektedir. Biz bu tezde $Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyusunu kullandığımız için bu malzeme dikkate alınmıştır.

2.4. Sonsuz Kuantum Kuyusu Oluşturmada Kullanılan Yarıiletken Malzemelerin Yapısı, Elektronik Özellikleri ve Kullanım Alanları

Bu tezde kuantum kuyularının oluşması için GaAs (Galyum arsenit) ve Al(GaAs) (Alüminyum galyum arsenit) malzemelerinden oluşturulan düşük boyutlu yapılar çalışılmıştır. Kuantum kuyusu oluşturmada kullanılan bu yarıiletken Galyum (Ga), Alimünyum (Al), Arsenik (As) malzemelerin yapısı, elektronik özellikleri ve kullanım alanları ayrı ayrı sırasıyla ele alınacaktır.

2.4.1. Galyum (Ga) Atomunun Yapısı, Elektronik Özellikleri ve Kullanım Alanları

İlk olarak Galyumu ele alacağız. Galyum elementinin simgesi "Ga", çekirdek yükü 31, nükleon sayısı 69,723'dür (makaleler.com/galyum-nedir-özellikleri). Galyum elementi atomunun son yörüngesinde 3 elektron vardır ve periyodik tabloda III A grubunda yer alan bir kimyasal elementtir (nkfu.com/galyum-nedir, özellikleri).

Galyum kimyasal elementi bir metal olarak sınıflandırılır. Yumuşak, mavi-beyaz metal olan Galyum, gümüşsu, cam benzeri, yumuşak bir metaldir. Periyodik tablodaki metal olmayan metallere yakın durur ve metalik özellikleri çoğu diğer metaller kadar metalik değildir. Galyum donma noktasının altında süper soğutma için güçlü bir eğilime sahiptir. Saf galyum metali gümüşi bir görünüme sahiptir. Galyum katılaşmada % 3.1 oranında genişler, bu nedenle katılaşmayı bozabilen metal veya cam bir kapta saklanmamalıdır. Gallium camı ve porseleni ıslatır ve cam üzerinde parlak bir ayna kaplaması oluşturur (ödevcini.com/galyum-elementi-nedir-özellikleri-simgesi).

Galyumun kullanım alanları oldukça geniştir. Örneğin, Galyum içeren yarı iletkenlerle lazerler ve led lambalardan uzay vasıtaları, teleskoplara kadar geniş bir yelpazede kullanım alanına sahiptir.

2.4.2. Alüminyum (Al) Atomunun Yapısı, Elektronik Özellikleri ve Kullanım Alanları

Alüminyum elementinin sembolü Al şeklindedir. Alüminyum elementinin atom numarası 13'tür ve son yörüngesinde 3 tane değerlik elektronu vardır. Alüminyumun günümüzde önemli bir element olmasının nedenlerinden biride doğada az bulunmasından kaynaklanmaktadır. Yeryüzündeki en hafif metallerden biridir. Demirden neredeyse üç kat daha hafiftir. Aynı zamanda çok güçlü, esnek ve aşınmaya karşı direnç gösteren bir yapıya sahiptir. Çünkü yüzeyi sağlam bir oksit film katmanıyla sarılıdır. Manyetize olmaz, elektrik akımını iyi aktarır ve diğer metallerle çoğuyla alaşımlar meydana getirir (Alüminyum, NKFU). Alüminyumun yükseltgenme basamağı $+1$ ve $+3$ değerlerini alır. Bu metalin kullanım alanı oldukça geniştir.

Günümüzde yaygın olarak kullandığımız cep telefonları, tabletler, bilgisayarlar, elektronik eşyalardan roketlere, füzelere kadar geniş bir kullanım sahasına sahiptir (yesiltaylar.com.tr/tr/blog/aluminyum-nedir-kullanim-alanlari-nerelerdir).

2.4.3. Arsenik(As) Atomunun Yapısı, Elektronik Özellikleri ve Kullanım Alanları

Arsenik, Atom numarası: 33, Sembolü, simgesi: As, Atom ağırlığı: 74,92159, Atom Yarıçapı (pm): 139, Kaynama noktası: 876 K 'dir. Arsenik havada ısıtıldığında, dumanlar sarımsak gibi kokar. Arsenik -3, 0, +3 veya + 5 değerlikli bir elementtir.-3 oksidasyon durumunda arsenik içeren bileşikler arsenidler olarak adlandırılır.+3 oksidasyon halindeki arsenik içeren bileşikler arsenitler olarak adlandırılır. +5 oksidasyon durumunda arsenik içeren bileşikler arsenatlar olarak adlandırılır (ödevcini.com/arsenik-elementinin-kimyasal-ve-fiziksel-özellikleri). Arsenik ise üç allotropu bulunan kimyasal maddelerden biridir ve üç farklı katı biçimde oluşur. Gri arsenik en yaygın olanıdır. Sarı Arsenik ise zayıf bir elektrik iletkeni olup metalik bir parlaklığı yoktur. Son olarak siyah arsenik belli bir aşamadan geçirilerek elde edilebilir. Camsı, kırılgan ve zayıf bir elektrik iletkenliğe sahiptir (bilgihanem.com/arsenik-nedir/).

Arseniğin kullanım alanları oldukça geniştir. Örneğin, zararlı haşereleri yok etmek için kullanılabileceği gibi elektronik sanayinde de kullanılabilmektedirler (bilgifenerim.com/arsenik-nedir/).

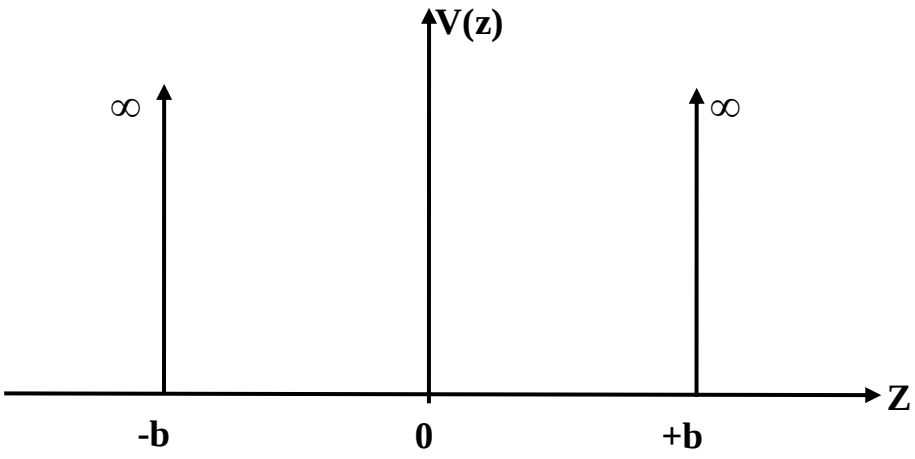
BÖLÜM 3

ANALİTİK VE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİN KIYASLANMASI

Bölüm 3'de önce sonsuz kuantum kuyusunun daha sonra sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunun analitik ve nümerik çözümleri yapılmış ve birbirleriyle kıyaslanıp hata paylarımız bulunmuştur. İki farklı potansiyel profil yapısına sahip sonsuz kuantum kuyularının içine hapsolmuş elektronun dalga denklemlerini iki farklı enerji durumu için ($E > V_o, E < V_o$ için) ilk önce analitik olarak çözülmüştür ve daha sonra da nümerik çözümler için sonlu farklar yöntemine başvurulmuştur.

3.1.1. Sonsuz Kuantum Kuyusunun Analitik Çözümü

Sonsuz kuantum kuyusunun sınırlarını $-b\ ve\ +b$' arası belirleyip Şekil 3.1'deki gibi çizersek



Şekil 3.1. Sonsuz çoklu kuantum kuyusunun potansiyel profili.

elde edilir. Tanım aralığını yazarsak

$$V(z) = \begin{cases} 0 \ , \ |z| < b \\ \infty \ , \ |z| \geq b \end{cases} \tag{3.1}$$

olur. Sonsuz kuantum kuyusunun $-$b ile $+$b arasında zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümü aşağıdaki gibi olur.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \psi(z) = E\, \psi(z) \tag{3.2}$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} E \right) \psi(z) = 0 \tag{3.3}$$

Burada $\psi(z) \neq 0$ olmalı. Geri kalan kısma $\lambda^2 = \frac{d^2}{dz^2}$ ve $k^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} E$ dönüşümü yaparsak

$$\lambda^2 + k^2 = 0 \tag{3.4}$$

ifade edilir. Rydberg birim sisteminde uzunluk birimi olarak etkin Bohr yarıçapı $a^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{m^* e^2}$ ve enerji birimi etkin Rydberg enerjisi $R^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a^{*2}}$ olarak tanımlanır ve $\frac{\hbar^2}{2m^*} = R^* a^{*2}$ kabul edilmiştir. Bu denklemin kökleri $\lambda_{1,2} = \mp ik$ olur. Bu durumda çözüm önerisini aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\psi(z) = A\cos(kz) + B\sin(kz) \tag{3.5}$$

$\psi(z)$ kuyu sınırında $(z = \mp b)$ sıfır değerini almalıdır.

$$\psi(-b) = 0 \quad \rightarrow \quad A\cos(kb) - B\sin(kb) = 0 \tag{3.6}$$

$$\psi(+b) = 0 \quad \rightarrow \quad A\cos(kb) + B\,s\,in(kb) = 0 \tag{3.7}$$

Bu iki denklemi bir kez toplayıp, bir kez de çıkartırsak $2B\sin(kb) = 0$ ve $2A\cos(kb) = 0$ denklemlerini elde ederiz. Bu şartlar altında çözüm önerisi iki şekilde yazılabilir. Birincisi; $A = 0, B \neq 0$ ve $\sin(kb) = 0$ olmalı, ikincisi ise $A \neq 0$ $B = 0$ ve $\cos(kb) = 0$ olmalıdır. Böylece çözüm iki duruma ayrılır (Kılıçoğlu, 2008).

n değerlerine göre

$$\psi_n(z) = B\sin(k_n z) \qquad k_n = \frac{n\pi}{2b} \quad (n = 2,4,6,\dots) \tag{3.8}$$

ve

$$\psi_n(z) = A\cos(k_n z) \qquad k_n = \frac{n\pi}{2b} \quad (n = 1,3,5,\dots) \tag{3.9}$$

ayrı ayrı çözümler elde edilir. Her iki durum içinde enerji değerleri ise

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m^*(2b)^2} \qquad (n = 1,2,3,4,5,\dots) \tag{3.10}$$

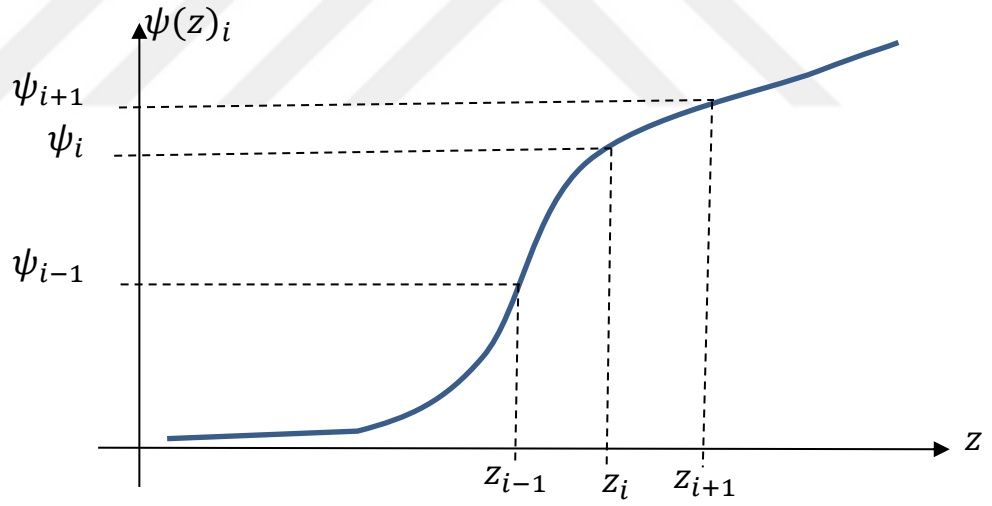
şeklinde olur. A ve B katsayılarını bulabilmek için dalga fonksiyonları bulundukları uzayda normalize edilebilir. Normalizasyon işlemini gerçekleştirirken tek ve çift çözümlerdeki dalga fonksiyonları için $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(z)\ \psi_n(z)\,dz = 1$ eşitliği kullanılabilir. Buradan A ve B katsayıları $1/\sqrt{b}$ olarak bulunur.

3.1.2. Sonlu Farklar Metodu

Biz bu tezde kuantum kuyularına uygulanışının kolaylığı ve daha hızlı çözüme ulaştırdığı için nümerik yöntem olan sonlu farklar yöntemini kullanmayı tercih ettik.

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi(z)}{\mathrm{dz}^2}+(\mathrm{V(z)}-\mathrm{E_z})\psi(z)=0 \tag{3.11}$$

Yukarıdaki diferansiyel denkleminin sayısal çözümü için sonlu farklar metodu kullanılmıştır. Bu metot diferansiyel denklemlerin sayısal çözümlerinde yaygın olarak kullanılır. Bu metot da problemin tanımlı olduğu uzay (z) bölgesi N eşit parçaya bölünür. Bu bölme işlemi sonucunda N+1 tane mech noktası oluşur. Her bir mech noktasında birinci ve ikinci türev tanımları ileri veya geri farklar yardımı ile yaklaşık olarak tanımlayabiliriz.



Şekil 3.2. Sonlu farklar yönteminin gösterimi.

$$\frac{d\psi}{dz}\approx\frac{\Delta\psi}{\Delta z}=\frac{\psi_{i+1}-\psi_i}{z_{i+1}-z_i}+.. \tag{3.12}$$

$$\frac{d\psi}{dz}\approx\frac{\Delta\psi}{\Delta z}=\frac{\psi_i-\psi_{i-1}}{z_i-z_{i-1}}+.. \tag{3.13}$$

Tanımlı uzay bölgesini eşit büyüklükte parçalara böldüğümüz için tüm aralıklar eşit olacağından $dz = z_{i+1} - z_i$ alırız. Aynı mantıkla ikinci türev

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} \approx \frac{d}{dz}\left(\frac{d\psi}{dz}\right) \approx \frac{\Delta}{\Delta z}\left(\frac{d\psi}{dz}\right) \tag{3.14}$$

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} \approx \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{dz^2} \tag{3.15}$$

olarak tanımlanır. Bu tanımları (3.11)' deki diferansiyel denkleminde yerine koyarak herhangi bir i mech noktasında

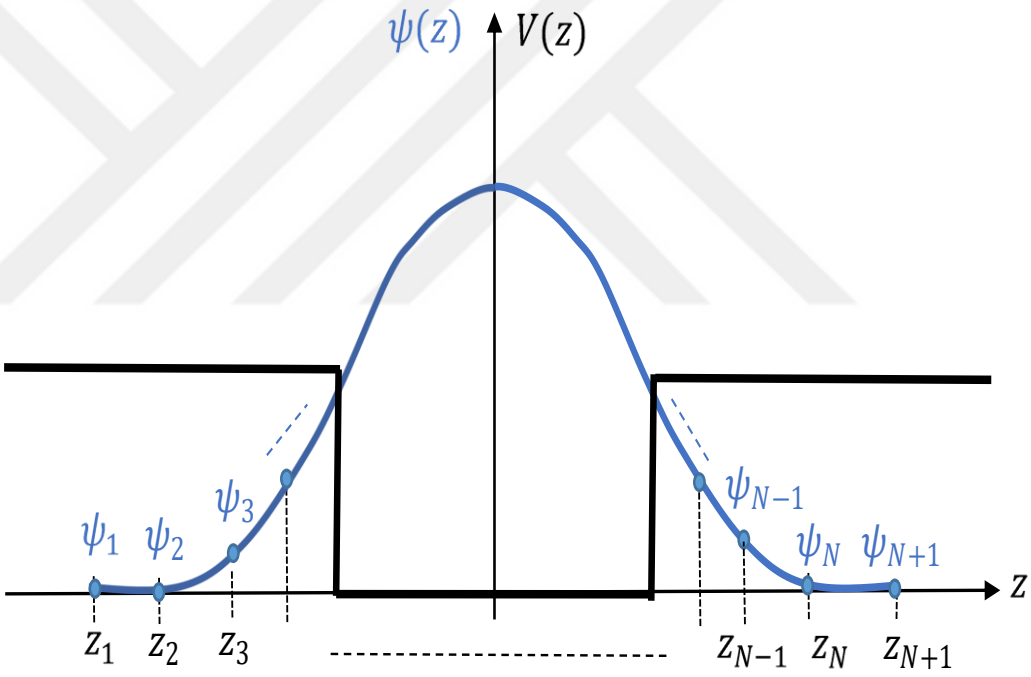
$$-\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{dz^2} + (V(z_i) - E_z)\psi_i = 0 \tag{3.16}$$

yazılabilir.

3.1.3. Sonsuz Kuantum Kuyusunun Nümerik Çözümü

Bu kısımda nümerik çözüm olan sonlu farklar yöntemini kuantum kuyusuna uygulayarak çözümler elde etmeyi amaçladık. Kuyu potansiyelini ayarlayarak sonlu kuantum kuyu veya potansiyel değerini sonsuza yaklaştırıp sonsuz kuantum kuyusu elde ettik. Sonlu farklar metodunu sonuçların daha belirgin çıkması için simetrik sonlu kuantum kuyusu üzerinde çözmeyi uygun gördük. Daha sonraki kısımlarda sonsuz kuantum kuyuları üzerinde bu yöntem kullanılarak çözümler yapılmıştır. Şekil 3.3' de simetrik sonlu kuantum kuyusundan bir kesit verilmiştir. Aşağıdaki gibi sonlu bir potansiyel kuyusunda bulunan bir elektronun çözümü için sonlu farklar yöntemi kullanarak dalga fonksiyonun sürekli değer aldığı gözlemlenmiştir. Böylece sonlu

farklar yöntemi sayesinde dalga fonksiyonunu kesikli değerlere bölerek $\psi_1, \psi_2 \ldots\ldots\ldots \psi_n, \psi_{n+1},$ kadar çözümler elde edilmiştir. Her bir mech noktası grafik üzerinde gösterilerek (işaretlenerek) Şekil 3.3 elde edilmiştir. $\psi_1, \psi_2 \ldots\ldots\ldots \psi_n, \psi_{n+1},$ ve $z_1, z_2 \ldots\ldots\ldots z_n, z_{n+1},$ üst üste çakışarak sürekliliği sağlayan dalga fonksiyonunu her bir mech noktasında çözümü elde edilmiştir. Bütünü parça parça ifade ederek her bir noktadaki denklemi Hamiltonyen fonksiyonu ve Schrödinger denkleminin yardımıyla ifade edilmiştir. Daha sonra çıkan bu parça parça dalga fonksiyon denklemlerini (her nokta için ayrı) belli bir matris formatına sokarak, determinant yardımıyla çözümler elde edilmiştir.



Şekil 3.3. Sonlu potansiyel kuyunun gösterimi.

Fiziksel şartlardan dolayı $i = 1$' den küçük ve $i = N + 1$ ' den büyük mech noktalarında $\psi_0 = 0$ değerlerini alır. Diğer her bir mech noktalarında ise;

$i = 1\ için$ $$\frac{-1}{dz^2}[0 - 2\psi_1 + \psi_2] + [V(z_1) - E_z]\psi_1 = 0 \quad (3.17)$$

$$\frac{-1}{dz^2}[(-2 - V(z_1)dz^2)\psi_1 + \psi_2] = E_z\psi_1 \quad (3.18)$$

$$\Omega_1 = (-2 - V(z_1)dz^2) \quad (3.19)$$

$i = 2\ için$ $$\frac{-1}{dz^2}[\psi_1 - 2\psi_2 + \psi_3] + [V(z_2) - E_z]\psi_2 = 0 \quad (3.20)$$

$$\frac{-1}{dz^2}[\psi_1 + (-2 - V(z_2)dz^2)\psi_2 + \psi_3] = E_z\psi_2 \quad (3.21)$$

$$\Omega_2 = (-2 - V(z_2)dz^2) \quad (3.22)$$

…….

…….

……

$i = N - 1\ için$ $$\frac{-1}{dz^2}[\psi_{N-2} - 2\psi_{N-1} + \psi_N] + [V(z_{N-1}) - E_z]\psi_{N-1} = 0 \quad (3.23)$$

$i = N\ için$ $$\frac{-1}{dz^2}[\psi_{N-1} - 2\psi_N + \psi_{N+1}] + [V(z_N) - E_z]\psi_N = 0 \quad (3.24)$$

$i = N + 1\ için$ $$\frac{-1}{dz^2}[\psi_N - 2\psi_{N+1} + \psi_{N+2}] + [V(z_{N+1}) - E_z]\psi_{N+1} = 0 \quad (3.25)$$

olur. N+1 tane nokta için N+1 tane denklem yazılır (Bekar, 2010). Bu denklemlerden katsayılar matrisi oluşturulmuştur.

$$-\frac{1}{dz^2}\begin{bmatrix}\Omega_1 & 1 & 0 \dots \dots \dots \\ 1 & \Omega_2 & 1 \dots \dots \dots \\ 0 & 1 & \Omega_3 \dots \dots \dots \\ . & . & . \\ . & . & .\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ . \\ \psi_n\end{bmatrix} = E_z \begin{bmatrix}\psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ . \\ \psi_n\end{bmatrix}$$

Bilinenler Bilinmeyenler

(3.26)

Bu matrisi çözen bir Fortran programı yazılarak her bir mech noktasında ψ_i dalga fonksiyonu değerlerini ve bu çözüme eşlik eden E_z enerji değeri bulunmuştur.

3.1.4. İstatiksel Metod Olan Lineer Regrasyon Yönteminin Tanımı

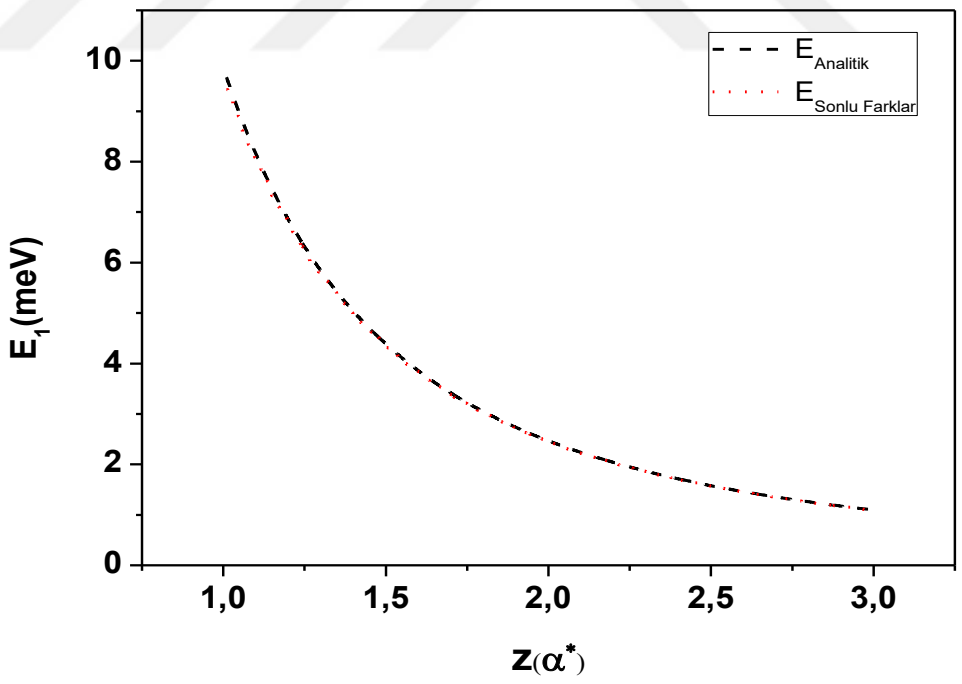
İki farklı değişkeni birbiriyle kıyaslamak için birçok istatiksel metod kullanılmaktadır. En çok kullanılan istatiksel metodlardan birisi Lineer Regrasyon metodu, diğeri ise Non-Lineer Regrasyon metodudur.

Non-Lineer Regrasyon metodu exporansiyel (üstel) ifadeler ve logaritmik ifadeler içermektedir. Çıkan eğriler düzgün artış veya azalış göstermemektedir. Aşağı veya yukarı yöne doğru kavis çizmektedirler ve tam bizim beklentimizi karşılamamaktadırlar. Bu yüzden biz bu tezde bulduğumuz analitik ve nümerik çözümden gelen enerji değerlerini birbiriyle kıyaslamak için Lineer Regrasyon metodunu kullanmayı uygun gördük.

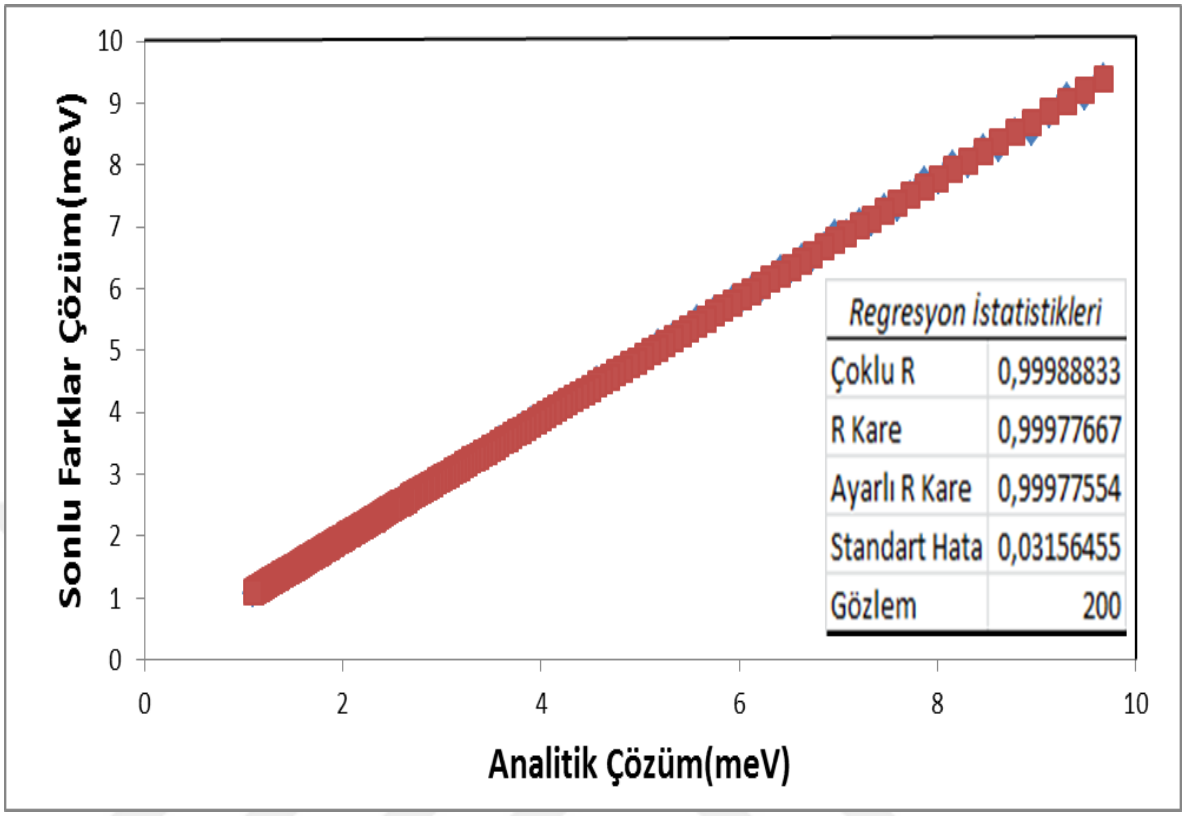
Regresyon analizinde analitik ve nümerik sonuçlardan elde edilen enerji değerleri birbiriyle kıyaslanır ve Regresyon analizi sonucu ortaya çıkan R^2 değeri bize analiz edilen verilerin uyumunu gösterir. R^2 değeri 0 ile 1 arasında değişir. $R^2 = 0$ çıkarsa kötü uyum, $R^2 = 1$ çıkarsa mükemmel uyum anlamına gelir.

3.1.5. Sonsuz Kuantum Kuyusunun Analitik Çözümüyle Nümerik Çözümü Arasındaki Farklar

Bu kısımda ise analitik ve nümerik çözümlerden ayrı ayrı elde edilen elektronun ilk seviye enerji değerleri, kuyu genişliğindeki değişimler baz alınarak birbirleriyle kıyaslanacaktır. Çıkan sonuçlara göre kullandığımız nümerik yöntemin analitik çözüm sonuçlara ne kadar yakın olduğunu gösterilecektir. Bu programda sonsuz kuantum kuyusu oluşturmak için sonsuz potansiyel yüksekliğini yaklaşık $2000meV$ olarak alınmıştır.



Şekil 3.4. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren enerji grafiği.



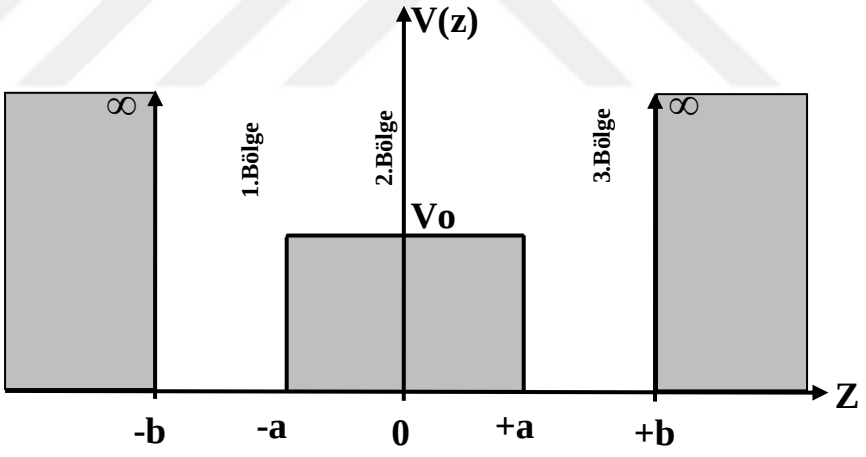
Şekil 3.5. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren Excel programı kullanılarak yapılan Regrasyon eğri grafiği.

Şekil 3.4'de farklı kuyu genişlik değerlerinde hesaplanan kuyunun içine hapsolmuş elektronun ilk seviye enerjisi analitik ve nümerik olarak birbirleriyle kıyaslanmıştır ve iki grafik eğrisi de birbirine yakın çıkmıştır. Analitik ve nümerik sonuçlardan elde edilen enerji değerlerinin regresyon analizi EXCEL 'de yapıldı. Regresyon analizinde Şekil 3.5'de R^2 değeri yaklaşık olarak 0.9997 bulunmuştur. R^2 değeri, bize kullandığımız nümerik hesap yönteminin gerçek çözümlerle ne kadar birbirine yakın olduğunu göstermektedir. Sonuçların birbirine bu kadar yakın çıkması Fortran diliyle yazdığımız programın doğru çalıştığının bir göstergesidir. Program içerisinde yazılan türev, integral, matris ve determinant hesaplarının iyi bir kombinasyonla düzgün bir şekilde çalışmasıyla sonuçlar çok az bir hata payıyla doğru bir şekilde elde edilmiştir. Sonuçlarımız ve yaptığımız bütün hesaplar ve işlemler

literatüre uygundur. Nümerik çözümle elde ettiğimiz sonuçlarla, teorik olarak elde ettiğimiz sonuçlar birbirleriyle uyum içerisindedir.

3.2.1. Sonsuz Çoklu Kare Kuantum Kuyusu Analitik Çözümü

Bu kısımda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunun analitik ve nümerik çözümleri yapılarak birbiriyle kıyaslanmıştır ve hata payımız bulunmaya çalışılmıştır. Eğer hata payımızın ihmal edilebilecek kadar düşükse çözümlerimiz doğru, hata payımız büyükse yaptığımız çözümlerin hatalı olduğunu göstermektedir. Bu kısımda hata payımızın ihmal edilebilecek kadar azlığını umarak nümerik çözüm yöntemi olan sonlu farklar yönteminin farklı kuyu profillerinde de uygulanabilirliğini göstermeyi amaçladık. Bu kısımda Şekil 3.6'da gösterilen ortasında kare potansiyel bulunan sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu gösterilmiştir. Burada kuyu genişliği $b = 200\,\text{Å}$, bariyer genişliği $a = 100\,\text{Å}$ kabul edilmiştir. Şekil 3.6'da tanımlanan sonsuz çoklu kare potansiyel kuantum kuyusunun potansiyel profili



Şekil 3.6. Sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunun potansiyel profili.

$$V(z) = \begin{cases} \infty, & -b < z \; ve + b > z \\ V_0, & -a \leq z \leq +a \\ 0, & diğer\; yerde \end{cases} \tag{3.27}$$

olarak tanımlanır. Bu kuantum kuyusundaki bir elektronun Schrödinger denklemi

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \tag{3.28}$$

olarak ifade edilir. Bu denklemi çözmek için sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu Şekil 3.6'de gösterildiği gibi üç bölgeye ayrılır. Her bölge için çözümler bulunurken E enerjisini $E > V_0$ ve $E < V_0$ halleri için ayrı ayrı incelenir.

$E > V_o$ durumu için 1. bölge de Schrödinger denklemini yazılırsa

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} = E\psi_1(z) \tag{3.29}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} = \frac{-2m^*}{\hbar^2}E\psi_1(z) \tag{3.30}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}E\psi_1(z) = 0, \qquad \frac{2m^*}{\hbar^2}E = k^2 \tag{3.31}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} + k^2\psi_1(z) = 0 \tag{3.32}$$

olur. Bu denklemin çözümünden 1. bölge için dalga fonksiyonu

$$\psi_1(z) = A\,cos(kz) + B\,sin(kz) \tag{3.33}$$

olur. $z = -b$ sınır şartlarından denklem (3.33)' deki dalga fonksiyonun $\psi(-b) = 0$ olması şartından

$$A\,cos(kb) - B\,sin(kb) = 0 \tag{3.34}$$

denklemi elde edilir ve A katsayısını B' ye bağlı olarak

$$A = B\,tan(kb) \tag{3.35}$$

ifade edilir. 1. bölge için dalga fonksiyonunu sadece B katsayısına bağlı olarak

$$\psi_1(z) = B[tan(kb)\,cos(kz) + sin(kz)] \tag{3.36}$$

bulunur.

$E > V_o$ durumu için 2. bölge de Schrödinger denklemini yazılırsa

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_2(z)}{dz^2} + V_o\psi_2(z) = E\psi_2(z) \tag{3.37}$$

olur. Gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_2(z)}{dz^2} = (E - V_o)\psi_2(z) \tag{3.38}$$

$$\frac{d^2\psi_2(z)}{dz^2} = \frac{-2m^*}{\hbar^2}(E - V_o)\psi_2(z) \tag{3.39}$$

$$\frac{d^2\psi_2(z)}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V_o)\psi_2(z) = 0 \tag{3.40}$$

$$\frac{d^2\psi_2(z)}{dz^2} + K^2\psi_2(z) = 0, \;\; K^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V_o) \tag{3.41}$$

elde edilir. Bu denklemin çözümünden 2. bölge için dalga fonksiyonunu

$$\psi_2(z) = C\, cos(Kz) + D\, sin(Kz) \tag{3.42}$$

olarak ifade edilir. $z = -a$' daki 1. ve 2. bölgede dalga fonksiyonları ve türevleri $\psi_1(-a) = \psi_2(-a)\; ve\; \psi_1'(-a) = \psi_2'(-a)$ süreklilik koşullarında birbirine eşit olur.

$$B[tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka)] = C\, cos(Ka) - D\, sin(Ka) \tag{3.43}$$

$$Bk[tan(kb)\, sin(ka) + cos(ka)] = C\, K sin(Ka) + D\, K cos(Ka) \tag{3.44}$$

böylece yukarıdaki iki eşitliği elde etmiş oluruz. 3. Bölge için Schrödinger denklemini çözdüğümüzde

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - E\psi_3(z) = 0 \tag{3.45}$$

olarak yazılır. Enerji ifadesini denklemin sol tarafına atarak gerekli düzenlemeler yapıldığında

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} = E\psi_3(z) \tag{3.46}$$

$$\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} = \frac{-2m^*}{\hbar^2}E\psi_3(z) \tag{3.47}$$

$$\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}E\psi_3(z) = 0 \tag{3.48}$$

$$\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + k^2\psi_3(z) = 0, \qquad \frac{2m^*}{\hbar^2}E = k^2 \tag{3.49}$$

elde edilir. Böylece 3. bölge için dalga fonksiyonunu ifade edersek

$$\psi_3(z) = M\,cos(kz) + N\,sin(kz) \tag{3.50}$$

$$z = +b \quad , \ \psi(+b) = 0 \tag{3.51}$$

olur. Dalga fonksiyonunda yerine yazılırsa

$$M\,cos(kb) + N\,sin(kb) = 0 \tag{3.52}$$

$$M = -N\,tan(kb) \tag{3.53}$$

katsayılar birbiri cinsinden ifade edilir ve 3. bölge için dalga fonksiyonu

$$\psi_3(z) = N[-tan(kb)\,cos(kz) + sin(kz)] \tag{3.54}$$

olur. $z = +a'$ da 2. ve 3. bölgede dalga fonksiyonları ve türevleri süreklilik şartından $\psi_2(a) = \psi_3(a)\ ve\ \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$ olur. Bu şartı dalga fonksiyonlarına uygulandığında

$$N[-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)] = C\,cos(Ka) + D\,sin(Ka) \tag{3.55}$$

$$Nk[tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)] = -C\,Ksin(Ka) + D\,Kcos(Ka) \tag{3.56}$$

elde edilir. Üç bölge için dalga fonksiyonları çözülür. $z = -a'$ için yazılan süreklilik şartından bulunan denklemler

$$B[tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)] = C\,cos(Ka) - D\,sin(Ka) \tag{3.57}$$

$$Bk[tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)] = C\,Ksin(Ka) + D\,Kcos(Ka) \tag{3.58}$$

elde edilir. (3.57) ve (3.58) 'deki iki denklem taraf tarafa bölünürse

$$\frac{[tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)]}{k[tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)]} = \frac{C\,cos(Ka) - D\,sin(Ka)}{C\,Ksin(Ka) + D\,Kcos(Ka)} \tag{3.59}$$

olur. Elde edilen denklemi ortak katsayıları bir yerde toplamak üzere düzenlenirse

$$C\left[\frac{K}{k}sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)(\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right]$$

$$+D\left[\frac{K}{k}cos(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) + sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right]$$

$$= 0 \tag{3.60}$$

bulunur. $z = +a$' daki süreklilik şartından bulunan (3.55) ve (3.56)' daki denklemler taraf tarafa bölünürse aşağıdaki gibi ifade edilir. Böylece

$$\frac{[-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)]}{k[tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)]} = \frac{C\,cos(Ka) + D\,sin(Ka)}{-C\,Ksin(Ka) + D\,Kcos(Ka)} \tag{3.61}$$

elde edilir. (3.61)' daki denklemden gerekli işlemler yapıldıktan sonra C ve D katsayıları ortak paranteze alınarak (3.62)' daki gibi yeni bir denklem elde edilir.

$$C\left[\frac{K}{k}sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,(\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right]$$
$$+D\left[\frac{K}{k}cos(Ka)\,(-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)) - sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right]$$
$$= 0 \tag{3.62}$$

C ve D iki bilinmeyene sahip (3.60) ve (3.62) ' deki denklemlerin ortak bir paydada çözümüne ulaşabilmek için katsayılar determinantı kurulur ve determinantın sonucu

$$\Delta = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \tag{3.63}$$

0 olmalıdır. Bu determinantta a, b, c, d katsayıları sırasıyla aşağıdaki denklemlerde verilir.

$$a=\left[\frac{K}{k}sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))-cos(Ka)(\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))\right] \quad (3.64)$$

$$b=\left[\frac{K}{k}cos(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))+sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))\right] \quad (3.65)$$

$$c=\left[\frac{K}{k}sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))-cos(Ka)\,(\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))\right] \quad (3.66)$$

$$d=\left[\frac{K}{k}cos(Ka)\,(-tan(kb)\,cos(ka)+sin(ka))-sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))\right] \quad (3.67)$$

Bu katsayılar determinantını çözümü

$$-\frac{K^2}{k^2}cos(Ka)\,sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))^2-$$
$$\frac{K}{k}sin(Ka)^2\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))((tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))+$$
$$\frac{K}{k}cos(Ka)^2\,((tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))((tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))+$$
$$cos(Ka)\,sin(Ka)((tan(kb)\,sin(ka)+$$
$$cos(ka))^2=\frac{K^2}{k^2}cos(Ka)\,sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))^2-$$
$$\frac{K}{k}cos(Ka)^2\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))\,((tan(kb)\,sin(ka)+$$
$$cos(ka))+\frac{K}{k}sin(Ka)^2\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))\,(tan(kb)\,cos(ka)-$$
$$sin(ka))-\,sin(Ka)\,cos(Ka)\,((tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))^2 \quad (3.68)$$

olur. Aşağıdaki yarım açı formüllerini kullanırsak

$$(\frac{2K}{k} sin(Ka)^2 - \frac{2K}{k} cos(Ka)^2) = (\frac{2K}{k} (sin(Ka)^2 - (1 - sin(Ka)^2))) \quad (3.69)$$

$$(\frac{2K}{k} sin(Ka)^2 - \frac{2K}{k} cos(Ka)^2) = (\frac{2K}{k} (sin(Ka)^2 - 1 + sin(Ka)^2)) \quad (3.70)$$

$$sin(Ka)^2 + cos(Ka)^2 = 1 \quad (3.71)$$

$$sin(Ka)^2 = 1 - cos(Ka)^2 \quad (3.72)$$

$$(\frac{2K}{k} sin(Ka)^2 - 1 + sin(Ka)^2) = \frac{2K}{k} (2\, sin(Ka)^2 - 1) \quad (3.73)$$

elde edilir. (3.68) denklem tekrardan kullanılarak

$$\frac{2K^2}{k^2} cos(Ka)\, sin(Ka)\, (tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka))^2 + \frac{2K}{k} sin(Ka)^2\, (tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka))((tan(kb)\, sin(ka) + cos(ka)) - \frac{2K}{k} cos(Ka)^2\, (tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka))((tan(kb)\, sin(ka) + cos(ka)) - 2sin(Ka)\, cos(Ka)(((tan(kb)\, sin(ka) + cos(ka))^2) = 0 \quad (3.74)$$

yazılır. Elde edilen denklem

$$aU^2 + bUV + cV^2 = 0 \quad (3.75)$$

ikinci dereceden denklem formatına getirilir. Bu denklemdeki U, V, a, b, c

$$U = (tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka)) \quad (3.76)$$

$$V = (tan(kb)\, sin(ka) + cos(ka)) \tag{3.77}$$

$$a = \frac{2K^2}{k^2} cos(Ka)\, sin(Ka) \tag{3.78}$$

$$b = \frac{2K}{k} (2\, sin(Ka)^2 - 1) \tag{3.79}$$

$$c = -2 sin(Ka)\, cos(Ka) \tag{3.80}$$

olarak tanımlanır. İkinci dereceden iki bilinmeyenli denklem sistemimizin iki farklı çözüm kümesi vardır. Denklem sistemimizin çözüm kümesine ulaşabilmek için diskriminant ifadesi kullanılır. Genel olarak iki farklı çözüm kümesi

$$U = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}\, V \tag{3.81}$$

olarak ifade edilir ve gerekli işlemler yapılırsa

$$b^2 - 4ac = \frac{4K^2}{k^2} (2\, sin(Ka)^2 - 1)^2 + 4.4.\frac{K^2}{k^2} cos(Ka)^2\, sin(Ka)^2 \tag{3.82}$$

$$b^2 - 4ac = \frac{4K^2}{k^2} (2\, sin(Ka)^2 - 1)^2 + 16.\frac{K^2}{k^2} cos(Ka)^2\, sin(Ka)^2 \tag{3.83}$$

$$b^2 - 4ac = \frac{4K^2}{k^2} (4\, sin(Ka)^4 + 1 - 4\, sin(Ka)^2 + 4\, cos(Ka)^2\, sin(Ka)^2 \tag{3.84}$$

$$b^2 - 4ac = \frac{4K^2}{k^2}(4\,sin(Ka)^4 + 1 - 4\,sin(Ka)^2\,(1 - cos(Ka)^2) \tag{3.85}$$

$$b^2 - 4ac = \frac{4K^2}{k^2}(4\,sin(Ka)^4 + 1 - 4\,sin(Ka)^2\,sin(Ka)^2) \tag{3.86}$$

$$b^2 - 4ac = \frac{4K^2}{k^2}(4\,sin(Ka)^4 + 1 - 4\,sin(Ka)^4) \tag{3.87}$$

$$b^2 - 4ac = \frac{4K^2}{k^2}(4\,sin(Ka)^4 + 1 - 4\,sin(Ka)^4) = \frac{4K^2}{k^2} \tag{3.88}$$

olur. İkinci dereceden iki bilinmeyenli denklem sisteminin iki farklı çözümleri katsayılar cinsinden ifade edilirse

$$U = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}\,V \tag{3.89}$$

bulunur. Gerekli işlemler yapılırsa

$$U = \frac{-\frac{2K}{k}(2\sin(Ka)^2 - 1) + \sqrt{4\frac{K^2}{k^2}}}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}\,V \tag{3.90}$$

$$U = \frac{-\frac{2K}{k}(2\sin(Ka)^2 - 1) + \frac{2K}{k}}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}\,V \tag{3.91}$$

$$U = \frac{\frac{2K}{k}(-2\sin(Ka)^2 + 1 + 1)}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}V \tag{3.92}$$

$$U = \frac{\frac{2K}{k}(-2\sin(Ka)^2 + 2)}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}V \tag{3.93}$$

$$U = \frac{\frac{4K}{k}(-\sin(Ka)^2 + 1)}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}V \tag{3.94}$$

$$U = \frac{\frac{4K}{k}(\cos(Ka)^2)}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}V \tag{3.95}$$

$$U = \frac{\frac{4K}{k}\cos(Ka)}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)}V \tag{3.96}$$

$$U = \frac{\cos(Ka)}{\frac{K}{k}\sin(Ka)}V \tag{3.97}$$

$$(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) = \frac{\cos(Ka)}{\frac{K}{k}\sin(Ka)}(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)) \tag{3.98}$$

$$(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\sin(\mathrm{Ka}) = \cos(\mathrm{Ka})\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)) \quad (3.99)$$

$$tan(kb)\,cos(ka)\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\sin(\mathrm{Ka}) - \frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\sin(\mathrm{Ka})\sin(\mathrm{ka}) = \cos(\mathrm{Ka})\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)) \quad (3.100)$$

$$tan(kb)\,cos(ka)\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\sin(\mathrm{Ka}) - \tan(kb)\cos(\mathrm{Ka})\sin(\mathrm{ka}) = \frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\sin(\mathrm{Ka})\,\mathrm{s}\,in(\mathrm{ka}) + \cos(\mathrm{Ka})\cos(\mathrm{ka}) \quad (3.101)$$

$$\tan(kb)(cos(ka)\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\sin(\mathrm{Ka}) - \cos(\mathrm{Ka})\sin(ka)) = \frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\sin(\mathrm{Ka})\,\mathrm{s}\,in(\mathrm{ka}) + \cos(\mathrm{Ka})\cos(\mathrm{ka}) \quad (3.102)$$

elde edilir. Denklem (3.102)' den $tan(kb)$ ifadesi yalnız bırakılırsa

$$\tan(kb) = \frac{\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\sin(\mathrm{Ka})\,\mathrm{s}\,in(\mathrm{ka}) + \cos(\mathrm{Ka})\cos(\mathrm{ka})}{\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}cos(ka)\sin(\mathrm{Ka}) - \cos(\mathrm{Ka})\sin(ka)} \quad (3.103)$$

1.tanjant $tan(kb)$ değeri $sin(ka), sin(Ka)\ ve\ cos(Ka), cos(ka)$ terimlerine bağlı olarak bulunur. Bu aşamadan sonra gerekli işlemler yapıldığında 2.tanjant $tan(kb)$ değerine ulaşılacaktır. Böylece

$$V = (tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)) \quad (3.104)$$

$$U = \frac{-\frac{2K}{k}(2\sin(Ka)^2 - 1) - \sqrt{(4\frac{K^2}{k^2})}}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}V \tag{3.105}$$

$$U = \frac{-\frac{2K}{k}(2\sin(Ka)^2 - 1 + 1)}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}V \tag{3.106}$$

$$U = \frac{-\frac{4K}{k}(\sin(Ka)^2)}{4\frac{K^2}{k^2}\sin(Ka)\cos(Ka)}V \tag{3.107}$$

$$U = \frac{-\sin(Ka)}{\frac{K}{k}\cos(Ka)}V \tag{3.108}$$

$$tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka) = \frac{-\sin(Ka)}{\frac{K}{k}\cos(Ka)}(tan(kb)\,sin(ka) + \cos(ka)) \tag{3.109}$$

$$tan(kb)\,cos(ka)\frac{K}{k}\cos(Ka) - sin(ka)\frac{K}{k}\cos(Ka)$$
$$= -\sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka)$$
$$+ cos(ka) \tag{3.110}$$

$$(tan(kb)\,(\frac{K}{k}\cos(Ka)\,cos(ka) + \sin(Ka)\,sin(ka)) = \frac{K}{k}\cos(Ka)\,sin(ka)$$
$$- sin(Ka)\cos(ka) \tag{3.111}$$

elde edilir. Denklem (3.111)' den $tan(kb)$ değeri yalnız bırakılırsa

$$tan(kb) = \frac{\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\cos(\mathrm{Ka})\, sin(ka) - sin(Ka)\, cos(ka)}{\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{k}}\cos(\mathrm{Ka})\, cos(ka) + sin(Ka)\, sin(ka)} \tag{3.112}$$

2.tanjant $\tan(\mathrm{kb})$ değeri $\sin(\mathrm{ka})$, $\sin(\mathrm{Ka})$ ve $\cos(\mathrm{Ka})$, $\cos(\mathrm{ka})$ terimlerine bağlı olarak bulunur. Bu aşamadan sonra A,B,C,D,M,N katsayıları birbiri cinsinden ifade edilecektir. Böylece

$$D = -\left\{\frac{K}{k}cos(Ka)\,((tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) + sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right\}^{-1} * \left\{\frac{K}{k}sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,((tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right\}C \tag{3.113}$$

$$D = -\left\{\frac{K}{k}cos(Ka)\,((-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)) - sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right\}^{-1} * \left\{\frac{K}{k}sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,((tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right\}C \tag{3.114}$$

$$B = ((tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^{-1} * \Big\{cos(Ka) + sin(Ka)\left[\frac{K}{k}cos(Ka)\,((tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) + sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\right]^{-1} * \left[\frac{K}{k}sin(Ka)((tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\right]\Big\}C \quad (3.115)$$

$$B = ((tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^{-1} * \Big\{cos(Ka) + sin(Ka)\left[\frac{K}{k}cos(Ka)\,((-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)) - sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\right]^{-1} * \left[\frac{K}{k}sin(Ka)((tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\right]\Big\}C \quad (3.116)$$

$$N = ((-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka))^{-1} * \Big\{cos(Ka) - sin(Ka)\left[\frac{K}{k}cos(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) + sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\right]^{-1} * \left[\frac{K}{k}sin(Ka)((tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\right]\Big\}C \quad (3.117)$$

$$N = ((-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka))^{-1} * \Big\{cos(Ka) - \sin(Ka)\left[\frac{K}{k}cos(Ka)\,(-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)) - sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\right]^{-1} * \left[\frac{K}{k}sin(Ka)((tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\right]\Big\}C \quad (3.118)$$

$$A = B\,tan(kb) \quad (3.119)$$

$$M = -N\,tan(kb) \quad (3.120)$$

elde edilir. Düşük boyutlu yapımızın $E > V_o$ durumu için analitik çözümlerine ulaşılmıştır. Bu aşamadan sonra $E < V_o$ durumu için analitik çözümler yapılacaktır. Burada $E < V_o$ durumu için 1. bölge de Schrödinger denklemini yazacağız. Aynı zamanda tünelleme olayına da girmiş olacağız. Bu tez çalışmamızda tünelleme olayı konumuz olmasa da $E < V_o$ ' dan gelecek analitik çözümlerin ve çıkan iki farklı Tanjant değerlerinin üzerinde Hiperbolik fonksiyonun katkısını daha net görebilmek için çözümleri vermeyi uygun gördük. Şekil 3.6'de gösterildiği gibi sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu üç bölgeye ayrılmıştır. Şekil 3.6'de gösterilen düşük boyutlu yapımız için 1. bölgedeki Schrödinger denklemini tekrardan yazarsak

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} + V(z)\psi_1(z) = E\psi_1(z) \quad (3.121)$$

olarak ifade edilir. $E < V_0$ için Schrödinger denklemleri tekrardan çözülürse

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} = E\psi_1(z) \tag{3.122}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} = \frac{-2m^*}{\hbar^2}E\psi_1(z) \tag{3.123}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}E\psi_1(z) = 0, \qquad \frac{2m^*}{\hbar^2}E = k^2 \tag{3.124}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} + k^2\psi_1(z) = 0 \tag{3.125}$$

elde edilir ve 1. bölge için dalga fonksiyonu ifade edilirse

$$\psi_1(z) = A\,cos(kz) + B\,sin(kz) \tag{3.126}$$

denklemi elde edilir ve A katsayısını B katsayısına bağlı olarak ifade edersek

$$A\,cos(kb) - B\,sin(kb) = 0 \tag{3.127}$$

olur. $z = -b$ sınır şartlarından dalga fonksiyonun $\psi(-b) = 0$ olmasından

$$A = B\,tan(kb) \tag{3.128}$$

1. bölge için dalga fonksiyonunu yazarsak aşağıdaki gibi ifade elde edilir. Böylece

$$\psi_1(z) = B[tan(kb)\,cos(kz) + sin(kz)] \tag{3.129}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} + V_o\psi_1(z) = E\psi_1(z) \tag{3.130}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} = (E - V_o)\psi_1(z) \tag{3.131}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} = \frac{-2m^*}{\hbar^2}(E - V_o)\psi_1(z) \tag{3.132}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V_o)\psi_1(z) = 0 \tag{3.133}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} + K^2\psi_1(z) = 0, \;\; K^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V_o) \tag{3.134}$$

olur. Bu durumda

$$-K^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V_o) \tag{3.135}$$

$$\frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V_o) < 0 \tag{3.136}$$

$$\frac{d^2\psi_1(z)}{dz^2} - K^2\psi_1(z) = 0 \tag{3.137}$$

2.bölge için dalga fonksiyonunu ifade edersek aşağıdaki gibi olur. Böylece

$$\psi_2(z) = C\,cosh(Kz) + D\,sinh(Kz) \tag{3.138}$$

$z = -a$' daki 1. ve 2. bölgede dalga fonksiyonları ve türevleri $\psi_1(-a) = \psi_2(-a)$ ve $\psi_1'(-a) = \psi_2'(-a)$ süreklilik koşullarında birbirine eşit olur.

$$B[tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)] = C\,cosh(Ka) - D\,sinh(Ka) \tag{3.139}$$

$$Bk[tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)] = -C\,Ksinh(Ka) + D\,Kcosh(Ka) \tag{3.140}$$

böylece yukarıdaki iki eşitliği elde etmiş oluruz. 3. Bölge için Schrödinger denklemini yazdığımızda

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - E\psi_3(z) = 0 \tag{3.141}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} = E\psi_3(z) \tag{3.142}$$

$$\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} = \frac{-2m^*}{\hbar^2} E\psi_3(z) \tag{3.143}$$

olarak ifade edilir. Yani

$$\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} E\psi_3(z) = 0 \tag{3.144}$$

$$\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + k^2\psi_3(z) = 0, \qquad \frac{2m^*}{\hbar^2} E = k^2 \tag{3.145}$$

elde edilir. Böylece 3. bölge için dalga fonksiyonunu ifade edersek

$$\psi_3(z) = M\,cos(kz) + N\,sin(kz) \tag{3.146}$$

$$z = +b \quad , \ \psi_3(+b) = 0 \tag{3.147}$$

olur. Dalga fonksiyonunda yerine yazılırsa

$$M\,cos(kb) + N\,sin(kb) = 0 \tag{3.148}$$

$$M = -N\,tan(kb) \tag{3.149}$$

katsayılar birbiri cinsinden ifade edilir ve 3. Bölge için dalga fonksiyonu yazılır.

$$\psi_3(z) = N[-tan(kb)\,cos(kz) + sin(kz)] \tag{3.150}$$

$z = +a'$ da 2. ve 3. bölgede dalga fonksiyonları ve türevleri birbirine eşittir. $\psi_2(a) = \psi_3(a)\ ve\ \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$ süreklilik koşullarında birbirine eşit olur. Süreklilik koşulları dalga fonksiyonlarına uygulandığında

$$N[-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)] = C\,cosh(Ka) + D\,sinh(Ka) \tag{3.151}$$

$$Nk[tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)] = C\,Ksinh(Ka) + D\,Kcosh(Ka) \tag{3.152}$$

elde edilir. Üç bölge için dalga fonksiyonları çözülür. $z = -a'$ için yazılan süreklilik şartından bulunan denklemler ifade ederek (3.151) ve (3.152) numaralı denklemleri taraf tarafa bölersek

$$\frac{k[tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)]}{[-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)]} = \frac{C\,Ksinh(Ka) + D\,Kcosh(Ka)}{C\,cosh(Ka) + D\,sinh(Ka)} \tag{3.153}$$

elde edilir. Çıkan denklemleri kendi arasında içler dışlar çarpımı yaparsak

$$[tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)][C\,cosh(Ka) + D\,sinh(Ka)] = \frac{K}{k}[C\,sinh(Ka) + D\,cosh(Ka)][-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)] \tag{3.154}$$

elde edilir. Denklem (3.154)' deki C ve D katsayılırını ortak paranteze alırsak

$$C\left[-\frac{K}{k}sinh(Ka)\,(-tan(kb)\,cos(ka)+sin(ka))+\right.$$
$$\left.cosh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))\right]+$$
$$D\left[-\frac{K}{k}cosh(Ka)\,(-tan(kb)\,cos(ka)+sin(ka))+\right.$$
$$\left.sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))\right]=0 \qquad (3.155)$$

elde edilir. (3.139) ve (3.140) numaralı denklemleri taraf tarafa bölersek

$$\frac{k[tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka)]}{[tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka)]}=\frac{-C\,Ksinh(Ka)+D\,Kcosh(Ka)}{C\,cosh(Ka)-D\,sinh(Ka)} \qquad (3.156)$$

$$[tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka)][C\,cosh(Ka)-D\,sinh(Ka)]$$
$$=\frac{K}{k}[-C\,sinh(Ka)+D\,cosh(Ka)][tan(kb)\,cos(ka)$$
$$-sin(ka)] \qquad (3.157)$$

elde edilir. Denklem (3.157)' deki C ve D katsayılarını ortak paranteze alırsak ve gerekli düzenlemeleri yaparsak

$$C\left[\frac{K}{k}sinh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))+cosh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka)+\right.$$
$$\left.cos(ka))\right]-D\left[\frac{K}{k}cosh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))+\right.$$
$$\left.sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))\right]=$$
$$0 \qquad (3.158)$$

elde edilir. (3.155) ve (3.158) denklemlerin örtüşmesi için katsayılar determinantı sıfır olmalıdır. Bu durumda

$$\Delta = 0 \tag{3.159}$$

olur. (3.155) ve (3.158)'da bulunan C ve D bilinmeyenlerine sahip olan denklemlerin çözüm kümesine ulaşabilmek için katsayılar determinantının kurulması gerekir. Katsayılar determinantının sonucu sıfıra eşittir. Yukarıda elde ettiğimiz ifadeleri katsayılar determinantında yerine koyarsak aşağıdaki gibi yazabiliriz. Böylece

$$\Delta = \begin{vmatrix} e & f \\ g & h \end{vmatrix} = 0 \tag{3.160}$$

0 olmalıdır. Bu determinantta yer alan e, f, g, h katsayılarının karşılığı aşağıdaki denklemlerde verilmiştir. Yani

$$e = \left[\frac{K}{k} sinh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) + cosh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right] \tag{3.161}$$

$$f = \left[\frac{K}{k} cosh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka) - sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right] \tag{3.162}$$

$$g = \left[\frac{K}{k} sinh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) + cosh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right] \tag{3.163}$$

$$h = \left[-\frac{K}{k}cosh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka) - sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right] \quad (3.164)$$

olarak ifade edilebilir. Yukarıdaki katsayılar deteminantı çözerek denklemleri düzenlersek ve aynı katsayılı ifadeleri taraf tarafa toplarsak

$$2\frac{K^2}{k^2}cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^2 +$$
$$2\frac{K}{k}sinh(Ka)^2\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)) +$$
$$2\frac{K}{k}cosh(Ka)^2\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)) +$$
$$2cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) +$$
$$cos(ka))^2 = 0 \quad (3.165)$$

olur. (3.165)'deki denklemi ikinci dereceden denklem formatına getirirsek ve yarım açı formüllerini kullanırsak

$$\frac{K^2}{k^2}2cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^2$$
$$+ 2\frac{K}{k}(cosh(Ka)^2 + sinh(Ka)^2)(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))\,(tan(kb)\,sin(ka)$$
$$+ cos(ka)$$
$$+ 2\,cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))^2$$
$$= 0 \quad (3.166)$$

elde edilir. Gerekli Trigonometrik dönüşümleri yazarsak ve eşitliklerini kullanırsak

$$cosh(Ka)^2 - sinh(Ka)^2 = 1 \tag{3.167}$$

$$sinh(Ka)^2 + 1 = cos\,h(Ka)^2 \tag{3.168}$$

$$\begin{aligned}&\frac{K^2}{k^2}2cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^2\\&+ 2\frac{K}{k}(sinh(Ka)^2 + sinh(Ka)^2 + 1\,)(tan(kb)\,cos(ka)\\&- sin(ka))\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\\&+ 2\,cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))^2\\&= 0\end{aligned} \tag{3.169}$$

elde edilir. Dönüşümleri tekrar denklemde yerine yazarsak

$$\begin{aligned}&\frac{K^2}{k^2}2cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^2 + 2\frac{K}{k}(2sinh(Ka)^2\\&+ 1\,)(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\\&+ 2\,cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))^2\\&= 0\end{aligned} \tag{3.170}$$

$$\begin{aligned}&\frac{K^2}{k^2}2cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^2 + 2\frac{K}{k}(2cosh(Ka)^2\\&- 1\,)(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka)\\&+ 2\,cosh(Ka)\,sinh(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))^2\\&= 0\end{aligned} \tag{3.171}$$

elde edilir. Denklem (3.170) ve denklem (3.171)' de ifade edildiği gibi $cosh(Ka)^2$ cinsindende ifade edilebilir ama biz çözüm kolaylığı açısından $sinh(Ka)^2$ cinsinden

ifade etmeyi uygun gördük ve bu aşamadan sonraki çözümlerimiz çözüm esnekliği açısından $sinh(Ka)^2$ cinsinden yazılmıştır. İkinci dereceden iki bilinmeyenli sadece çarpanlarına ayrılabilen denklemler için aşağıdaki yöntem kullanılabilir. Yani

$$aU^2 + bUV + cV^2 = 0 \tag{3.172}$$

ikinci dereceden denklem formatına getirilir. Bu denklemdeki U, V, a, b, c

$$U = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} V \tag{3.173}$$

$$U^2 = (tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka))^2 \tag{3.174}$$

$$V^2 = (tan(kb)\, sin(ka) + cos(ka)^2 \tag{3.175}$$

elde edilir. a, b, c katsayılarına karşılık gelen ifadeleri yazarsak

$$a = 2\, cosh(Ka)\, sinh(Ka) \tag{3.176}$$

$$b = 2\frac{K}{k}(1 + 2\, sinh(Ka)^2) \tag{3.177}$$

$$c = 2\frac{K^2}{k^2} cosh(Ka)\, sinh(Ka) \tag{3.178}$$

olur. Diger katsayılarda ikinci dereceden iki bilinmeyenli denklem sistemimizdeki geri kalan kısımları ifade ediyor. Öncelikle diskriminant hesaplanırsa

$$b^2 - 4ac = 4.\frac{K^2}{k^2}(1 + 2sinh(Ka)^2)^2 - 4.4.\frac{K^2}{k^2}sinh(Ka)^2\,cosh(Ka)^2) \tag{3.179}$$

$$b^2 - 4ac = 4.\frac{K^2}{k^2}(1 + 2sinh(Ka)^2)^2 - 16.\frac{K^2}{k^2}sinh(Ka)^2\,cosh(Ka)^2) \tag{3.180}$$

olur. İkinci dereceden iki bilinmeyenli denklem sisteminin iki farklı çözümü ifade edilirse

$$U = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}\,V \tag{3.181}$$

bulunur. İkinci dereceden iki bilinmeyenli denklem sisteminde bulunan a, b, c katsayılarına karşılık gelen ifadeler denklem sisteminin çözüm kümesini bulmak için kullandığımız formüldeki yerine yazılırsa

$$U = \frac{-2\frac{K}{k}(1 + 2\,sinh(Ka)^2) - 2\frac{K}{k}\sqrt{(1 + 2\,sinh(Ka)^2)^2 - 4\,sinh(Ka)^2\,cosh(Ka)^2)}}{4\,cosh(Ka)\,sinh(Ka)}V \tag{3.182}$$

$$U = \frac{-2\frac{K}{k}(1 + 2\,sinh(Ka)^2) - 2\frac{K}{k}\sqrt{(1 + 2\,sinh(Ka)^2)^2 - 4\,sinh(Ka)^2\,cosh(Ka)^2)}}{4\,cosh(Ka)\,sinh(Ka)}V \tag{3.183}$$

elde edilir. Gerekli dönüşümler ve işlemler yapıldığında

$$\sqrt{\left(1+2\,sin\,h(Ka)^2\right)^2-4\,sinh(Ka)^2\,cosh(Ka)^2)}$$
$$=\sqrt{1+4\,sinh(Ka)^4+4\,sinh(Ka)^2-4\,sinh(Ka)^2\,cosh(Ka)^2)}$$

(3.184)

$$\sqrt{1+4\,sinh(Ka)^4+4\,sinh(Ka)^2\,(1-cosh(Ka)^2)}$$
$$=\sqrt{1+4\,sinh(Ka)^4-4\,sinh(Ka)^4}$$
$$=1 \qquad (3.185)$$

$$(cos\,h(Ka)^2-sin\,h(Ka)^2)=1 \qquad (3.186)$$

$$U=tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka) \qquad (3.187)$$

$$V=tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka) \qquad (3.188)$$

elde edilir. Çözüm kümelerini bulduktan sonra dalga fonksiyonun katsayılarına daha rahat ulaşılmaktadır. Bu durumda gerekli işlemler yapılırsa

$$\frac{-\frac{4K}{k}\left(1+sinh(Ka)^2\right)}{4\,cos\,h(Ka)\,sin\,h(Ka)} \qquad (3.189)$$

$$(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))=\frac{-\frac{K}{k}\,(1+sinh(Ka)^2)}{cosh(Ka)\,sinh(Ka)}\,(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka))$$

(3.190)

$$(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) = \frac{-\frac{K}{k}cosh(Ka)^2}{cosh(Ka)\,sin\,h(Ka)}(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))$$

(3.191)

$$(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))$$
$$= \frac{-\frac{K}{k}cos\,h(Ka)\,cos\,h(Ka)}{cos\,h(Ka)\,sin\,h(Ka)}(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))$$

(3.192)

$$(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) = \frac{-\frac{K}{k}cos\,h(Ka)}{sin\,h(Ka)}(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))$$

(3.193)

$(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^{*}sin\,h(Ka) = -\frac{K}{k}(cos\,h(Ka)) * (tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))$

(3.194)

$(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))^{*}sin\,h(Ka) = -\frac{K}{k}(co\,s\,h(Ka)) * (tan(kb)\,sin(ka)) - cos(ka) * (\frac{K}{k}(cosh(Ka))$ (3.195)

$(tan(kb)\,cos(ka)\,sinh(Ka) - sin(ka)\,sinh(Ka))= -\frac{K}{k}(cosh(Ka))$

$*(\,tan(kb)\,sin(ka)) - \frac{K}{k}(cosh(Ka))\,cos(ka))$ (3.196)

$(tan(kb)\,cos(ka)\,sinh(Ka) - sin(ka)\,sinh(Ka))$

$$= (\,tan(kb)\,sin(ka)(-\frac{K}{k}(cosh(Ka)) + cos(ka)(-\frac{K}{k}(cosh(Ka))$$

(3.197)

$(tan(kb)\,cos(ka)\,sinh(Ka) + tan(kb)\,sin(ka)(\frac{K}{k}(cosh(Ka)) = sinh(Ka)\,sin(ka) - cos(ka)(\frac{K}{k}(cosh(Ka))$

(3.198)

elde edilir. Denklem (3.198)' deki elde edilen ifadeden $tan(kb)$ değeri çekilirse

$$tan(kb) = \frac{-\frac{K}{k}cosh(Ka)cos(ka) + sinh(Ka)\,sin(ka)}{\frac{K}{k}cosh(Ka)sin(ka) + sinh(Ka)\,cos(ka)} \quad (3.199)$$

1.tanjant olan $tan(kb)$ değeri $sin(ka), sin\,h(Ka)\ \ ve\ \ cos\,h(Ka)\,, cos(ka)$ terimlerine bağlı olarak bulunur. Şimdi ise 2. tanjant değerini bulmak için 2. dereceden denklem sistemizin çözüm kümesi tekrar yazılırsa

$(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka))$

$$= \frac{-2\frac{K}{k}(1 + 2\,sinh(Ka)^2) + 2\frac{K}{k}}{4\,cosh(Ka)\,sinh(Ka)}(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))$$

(3.200)

elde edilir Trigonometrik dönüşümleri kullanırsak

$$-2\,\frac{K}{k}\left(1+2\,sinh(Ka)^2-1\right)=-2\frac{K}{k}(2\,sinh(Ka)^2) \tag{3.201}$$

$$-4\frac{K}{k}(sinh(Ka)^2) \tag{3.202}$$

elde edilir. Gerekli düzenlemeler yapıldığında

$$(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))=\frac{-\frac{K}{k}sinh(Ka)^2}{cosh(Ka)\,sinh(Ka)}(tan(kb)\,sin(ka)+cos(ka)) \tag{3.203}$$

$$(tan(kb)\,cos(ka)-sin(ka))$$
$$=\frac{-\frac{K}{k}\;\;sinh(Ka)}{cosh(Ka)}(tan(kb)\,sin(ka)$$
$$+cos(ka)) \tag{3.204}$$

$$(tan(kb)\,cos(ka)\,cosh(Ka)-sin(ka)\,cosh(Ka)$$
$$=(tan(kb)\,sin(ka)(-\frac{K}{k}\;\;sinh(Ka))$$
$$+cos(ka)(-\frac{K}{k}\;\;sinh(Ka)) \tag{3.205}$$

$$(tan(kb)\,cos(ka)\,cosh(Ka)+(tan(kb)\,sin(ka)\,(\frac{K}{k}\;\;sinh(Ka))$$
$$=cosh(Ka)\,sin(ka)$$
$$-(cos(ka)(\frac{K}{k}\;\;sinh(Ka))$$

(3.206)

elde edilir. Denklem (3.206) 'dan $tan(kb)$ ifadesi çekilirse

$$tan(kb) = \frac{-\frac{K}{k} sin\,h(Ka)\,cos(ka) + cosh(Ka)\,sin(ka)}{\frac{K}{k} sin\,h(Ka)\,sin(ka) + cosh(Ka)\,cos(ka)} \tag{3.207}$$

2.tanjant $tan(kb)$ değeri, $sin(ka)$, $sin\,h(Ka)$ ve $cos\,h(Ka)$, $cos(ka)$ terimlerine bağlı olarak bulunur. Bu aşamadan sonra A, B, C, D, M, N katsayıları birbirleri cinsinden ifade edilecektir. Böylece

$$D = -\left[\frac{K}{k} cos(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) + sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right]^{-1} * \left[\frac{K}{k} sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right] C \tag{3.208}$$

$$D = -\left[\frac{K}{k} cos(Ka)\,(-tan(kb)\,cos(ka) + sin(ka)) - sin(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right]^{-1} * \left[\frac{K}{k} sin(Ka)\,(tan(kb)\,cos(ka) - sin(ka)) - cos(Ka)\,(tan(kb)\,sin(ka) + cos(ka))\right] C \tag{3.209}$$

$$N = (-\tan(kb)\cos(ka) + \sin(ka))^{-1} * \left\{\cosh(Ka) - \sinh(Ka)\left[\left(\sin(Ka)(\tan(kb)\sin(ka) + \cos(ka)) + \frac{K}{k}\cos(Ka)(\tan(kb)\cos(ka) - \sin(ka))\right)\right]^{-1} * \left[-\cos(Ka)(\tan(kb)\,s\,in(ka) + \cos(ka)) + \frac{K}{k}\sin(Ka)(\tan(kb)\cos(ka) - s\,in(ka))\right]\right\} C \quad (3.210)$$

$$N = (-\tan(kb)\cos(ka) + \sin(ka))^{-1} * \left\{\cosh(Ka) - \sinh(Ka)\left[\left(-\sin(Ka)(\tan(kb)\sin(ka) + \cos(ka)) + \frac{K}{k}\cos(Ka)(-\tan(kb)\cos(ka) + \sin(ka))\right)\right]^{-1} * \left[-\cos(Ka)(\tan(kb)\,s\,in(ka) + \cos(ka)) + \frac{K}{k}\sin(Ka)(\tan(kb)\cos(ka) - s\,in(ka))\right]\right\} C \quad (3.211)$$

$$
\begin{aligned}
&B \\
&= (tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka))^{-1} \\
&* \Bigg\{ cosh(Ka) \\
&+ sinh(Ka) \left[\left(sin(Ka)\, (tan(kb)\, sin(ka) + cos(ka)) \right. \right. \\
&\left. \left. + \frac{K}{k} cos(Ka)(tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka)) \right) \right]^{-1} \\
&* \left[-cos(Ka)(tan(kb)\, s\, in(ka) + cos(ka)) + \frac{K}{k} sin(Ka)\, (tan(kb)\, cos(ka) \right. \\
&\left. - s\, in(ka)) \right] \Bigg\} C
\end{aligned} \tag{3.212}
$$

$$
\begin{aligned}
&B \\
&= (tan(kb)\, cos(ka) - sin(ka))^{-1} \\
&* \Bigg\{ cosh(Ka) \\
&+ sinh(Ka) \left[\left(-sin(Ka)\, (tan(kb)\, sin(ka) + cos(ka)) \right. \right. \\
&\left. \left. + \frac{K}{k} cos(Ka)(-tan(kb)\, cos(ka) + sin(ka)) \right) \right]^{-1} \\
&* \left[- cos(Ka)(tan(kb)\, s\, in(ka) + cos(ka)) + \frac{K}{k} sin(Ka)\, (tan(kb)\, cos(ka) \right. \\
&\left. - s\, in(ka)) \right] \Bigg\} C
\end{aligned} \tag{3.213}
$$

$$
A = B\, tan(kb) \tag{3.214}
$$

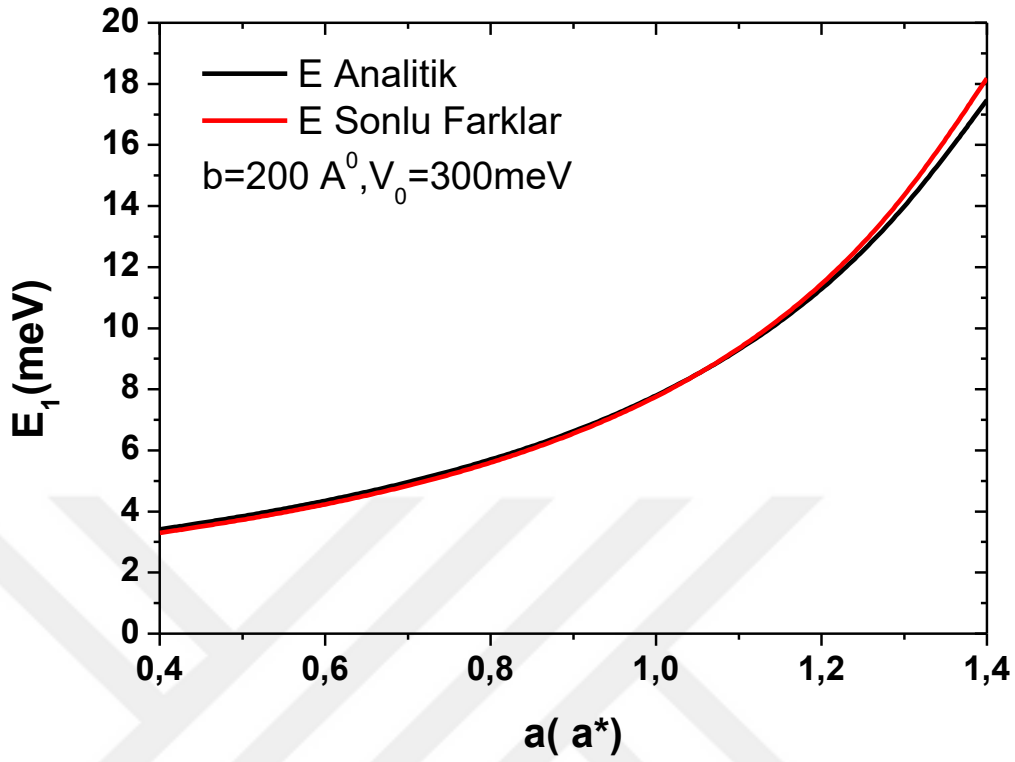
$$
M = -N\, tan(kb) \tag{3.215}
$$

elde edilir. Böylece sonsuz çoklu kare kuantum kuyumuzu $E > V_o$ ve $E < V_o$ iki farklı durum için analitik çözümlerine ulaşmış olduk. Bölüm 3.2.1' de yaptığımız işlemleri kısaca özetleyecek olursak; ilk önce her iki enerji durumu içinde elektrona ait farklı bölgelerdeki dalga fonksiyonlarını tanımladık ve katsayılar yardımıyla dalga fonksiyonlarına ulaştık. Daha sonra katsayıları kullanarak matris düzeni oluşturduk. Bulduğumuz çözümleri 2. dereceden iki bilinmeyenli denklem sistemi formatına dönüştürerek denklem sisteminin çözüm kümesine ulaştık ve 2 adet tanjant değeri elde ettik.

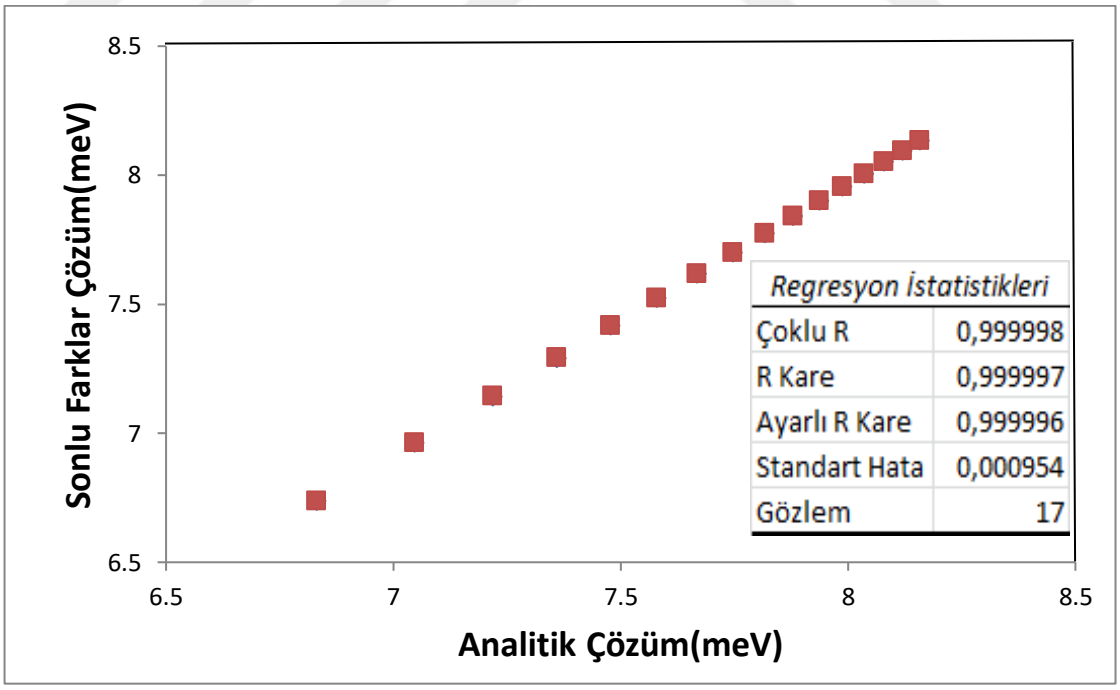
Son olarak kuantum kuyumuzun farklı bölgeleri için yazılan elektronun dalga fonksiyonlarda bulunan A, B, C, D, M, N katsayıların birbirleri cinsinden ifade edilebilmesi sayesinde tüm katsayıları sadece bir tane katsayıya bağlı hale getirdik. Birbiri cinsinden ifade ettiğimiz katsayılara da normalizasyon şartını uyguladık. ψ_1 ' de yer alan A katsayısı 1 kabul edilmiştir.

3.2.2. Sonsuz Çoklu Kare Kuantum Kuyusunun Analitik Çözümüyle Nümerik Çözümü Arasındaki Farklar

Bu kısımda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için analitik çözümler ve sonlu farklar yöntemi kullanılarak nümerik çözümler elde edilmiştir. Burada elde ettiğimiz iki farklı sonucu, yapı içine hapsolmuş elektronun enerji grafiklerini kullanarak birbirleriyle kıyaslayacağız. Analitik ve nümerik çözümler sonucu elde edilen yapı içerisinde hapsolmuş elektronun enerji grafiklerinin kıyaslaması yapılırken, değişken olarak düşük boyutlu yapımızın ortasında simetrik olarak yer alan farklı bariyer yükseklikleri ve genişlikleri baz alınmıştır.

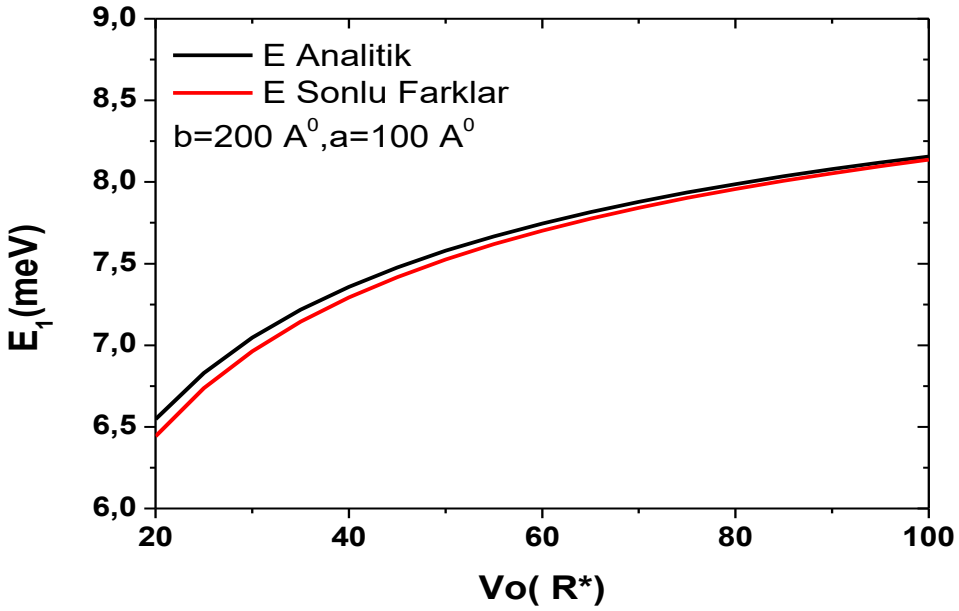


Şekil 3.7. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren enerji grafiği.

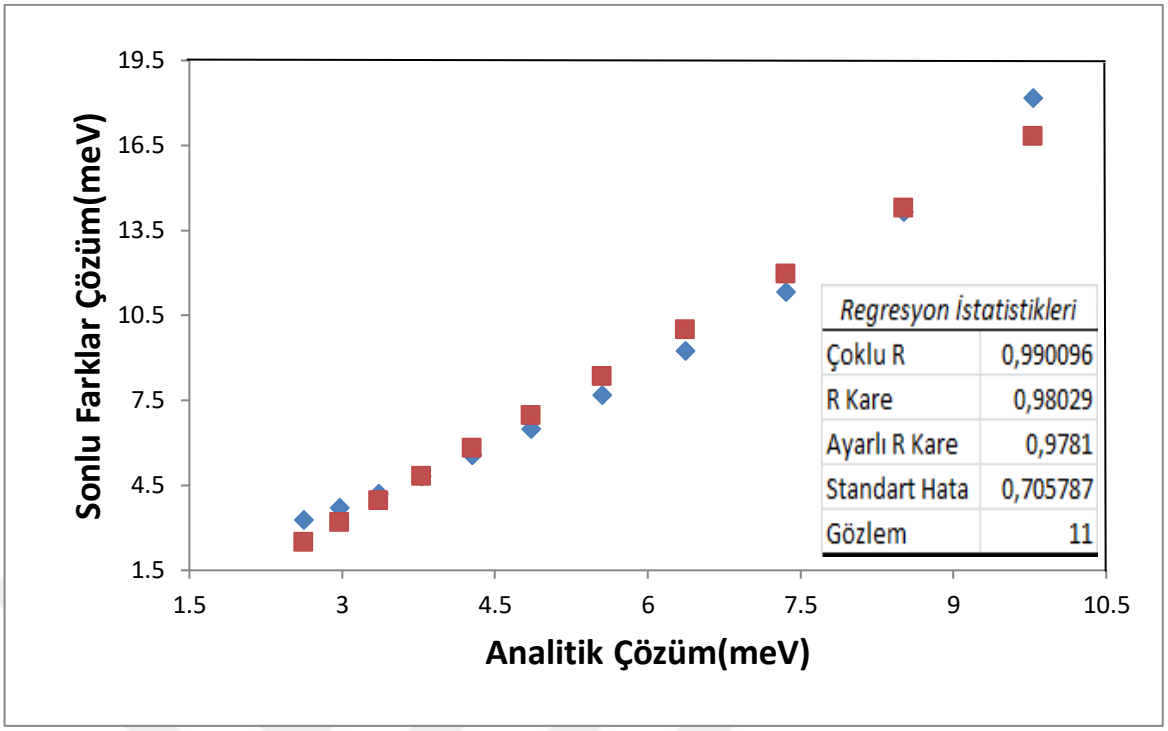


Şekil 3.8. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren Excel programı kullanılarak çıkartılan Regrasyon eğri grafiği.

Şekil 3.7'de ortada kare engeli olan simetrik sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunda farklı kare bariyer genişliğinde $a(a^*)$ değerlerinde elektronun ilk seviyedeki enerjisi, analitik ve nümerik çözümler için kıyaslandığında birbirine oldukça yakın çıkmıştır. Bu sonuç yaptığımız çözümlerin ve kodladığımız bilgisayar kodlarının doğru olduğunu göstermektedir. Şekil 3.8'de yapılan regresyon analizinde ise R^2 değeri yaklaşık olarak 0.999 bulunmuştur. R^2 sonucunun 1'e yakın çıkması sonucun mükemmele yaklaştığının göstergesidir. Çıkan R^2 değeri, bize kullandığımız nümerik hesap yönteminin ve yaptığımız analitik çözümlerimizin birbiriyle uyum içerisinde olduğunu göstermektedir. Sonuçlarımız ve yaptığımız bütün hesaplar ve işlemler literatüre uygundur. Şekil 3.9'da grafikte de görüldüğü gibi V_0 potansiyel değerini $20\ R* - 100\ R*$ arası değiştirerek elektronun ilk seviyedeki enerjisinde değişimleri gözlemledik. Enerji grafiğindeki analitik ve nümerik çözüm eğrilerinin birbirine yakın çıkması çözümlerimizin doğru olduğuna işarettir. Daha sonra Lineer Regrasyon eğrisinde de R^2 değerini hesaplatıp hata oranımızı daha rahat göreceğiz. Şekil 3.9'da yapının ortasında simetrik olarak kare engeli olan sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunda farklı bariyer yüksekliğinde kuyu içine hapsolmuş elektronun ilk enerji durumları kıyaslanması gösterilmiştir.



Şekil 3.9. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren enerji grafiği.



Şekil 3.10. Analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkı gösteren Excel programı kullanılarak çıkartılan Regrasyon eğri grafiği.

Şekil 3.9'da farklı potansiyel yükseklik değerlerinde hesaplanan kuyunun içine hapsolmuş elektronun ilk seviye enerjisi analitik ve nümerik olarak kıyasladık ve iki grafik eğrisi de birbirine yakın çıkmıştır. Daha sonra Şekil 3.10'da yaptığımız regresyon analizinde R^2 değeri yaklaşık olarak 0.9999 bulunmuştur. R^2 nin bu değeri, bize kullandığımız nümerik hesap yönteminin gerçek çözümlerle ne kadar birbirine yakın olduğunu göstermektedir. Hata payımızın az olması Fortran 77'yi kullanarak yazdığımız programın doğru çalıştığının bir göstergesidir. Sonuçlarımız ve yaptığımız bütün hesaplar ve işlemler literatüre uygundur.

BÖLÜM 4

KUANTUM KUYULARI ÜZERİNE UYGULANAN DIŞ ETKİLER VE HAMİLTONYEN FONKSİYONUNA KATKILARI

Bu bölümde farklı potansiyel yapısına sahip sonsuz kuantum kuyularının yüksek frekanslı lazer, yüksek şiddetli elektrik alan altında elektronik özellikleri incelenmiştir ve Hamiltonyen fonksiyonuna dış etkilerden dolayı gelen katkılar incelenmiştir. Daha sonra yapıya yabancı atom eklenerek Hamiltonyen fonksiyonunda bulunan potansiyele getirdiği ek katkı incelenmiştir. Aynı zamanda yapı içine hapsedilen elektronun ilk seviyedeki enerjisi, yabancı atoma bağlanma enerjisi araştırılmıştır.

4.1. Hamiltonyen Fonksiyonuna Elektrik Alandan Gelen Katkı

Bu kısımda etkin kütle yaklaşımında pozitif z-ekseni yönünde düzgün, sabit $\vec{F}$ elektrik alan uygulandığında sistemin Hamiltonyeni

$$H_f = \frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} - eFz + V(z) \tag{4.1}$$

olur. Rydberg birim sisteminde Schrödinger denklemi

$$-\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \eta z\psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \tag{4.2}$$

olarak yazılır. Rydberg birim sisteminde $\frac{\hbar^2}{2m^*} = R^* a^{*2}$ kabul edilmiştir ve ε (dielektrik sabiti) 12.5 alınmıştır. Ayrıca çalışmamızdaki düşük boyutlu yapı için kullanılan parametreler $a^* \cong 100\,\text{Å}$ ve $R^* = 5{,}83\,meV$ olarak hesaplanır. Denklem 4.2' de $\eta = eF$ 'dir ve Rydberg birim sisteminde

$$\eta = \frac{|e|a^* F}{R^*} = \frac{a^* F(kV/cm)0{,}01}{R^*} = \frac{F}{5{,}83} \tag{4.3}$$

olarak tanımlanır (Kılıçoğlu, 2008). Burada $V(z)$ hapsedici potansiyel enerji

$$V(z) = \begin{cases} \infty\,, & -b < z < -a \\ V_0, & -a \le z \le +a \\ \infty, & a < z < b \end{cases} \tag{4.4}$$

olarak tanımlanır. Bu denklem sonlu farklar yöntemi kullanılarak çözüldüğünde elektronun ilk beş seviyedeki enerjisi ve dalga fonksiyonları hesaplanır. Yapılan işlemlerin doğruluğunu kontrol etmek için $-b \le z \le +b$ arasındaki $V_0 = 0$ alınarak yapının ortasında bariyer yüksekliği olmayan sonsuz kuantum kuyusu oluşturulur.

4.2. Hamiltonyen Fonksiyonuna Lazer Alandan Gelen Katkı

Yüksek frekanslı lazer alan etkisinde sonsuz çoklu kare kuantum kuyusundaki bir elektronun Schrödinger denklemi

$$\left[\frac{(\vec{p}+e\vec{A})^2}{2m^*} + V(z)\right]\psi(z,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(z,t) \tag{4.5}$$

elde edilir. Denklem (4.5)' i açarsak

$$\left[\frac{[p^2+\vec{p}\vec{A}+\vec{A}\vec{p}+e^2A^2]}{2m^*}\right]\psi(z,t) = i\hbar\frac{d\psi(z,t)}{dt} \quad (4.6)$$

$$\vec{p}\vec{A} + \vec{A}\vec{p} = 2\vec{p}\vec{A} \quad (4.7)$$

$$\left[\frac{p^2}{2m^*} + \frac{e\vec{A}\vec{p}}{m^*} + \frac{e^2A^2}{2m^*}\right]\psi(z,t) = i\hbar\frac{d\psi(z,t)}{dt} \quad (4.8)$$

olarak tanımlanır. Burada Kramer Henneberger dönüşümü yapılarak $\psi(z,t) \overset{M}{\rightarrow} \hat{\psi}(z,t)$ elde edilir.

$$\psi(z,t) \overset{M}{\rightarrow} K\hat{\psi}(z,t) \quad (4.9)$$

Buradaki K dönüşüm operatörü ise

$$K = exp[ie/m \int_{-\infty}^{t} dt'\, A(t').\partial/\partial z - ie^2/2\,\hbar m \int_{-\infty}^{t} dt' A^2(t')] \quad (4.10)$$

şeklinde ifade edilir. Burada lazer alandan dolayı oluşan vektör potansiyelini $A(t) = A_0\, sin(wt)$ olarak tanımlanır. Lazer alan tarafından Hamiltonyen'in kinetik enerjisine gelen zamana bağlı katkıyı potansiyel enerjiye aktarmak için Kramer Henneberger dönüşümü yapılarak denklem tekrardan yazılırsa (Bekar, 2010);

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{DC}(z,\alpha_0)\right]\hat{\psi}(z,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(z,t) \quad (4.11)$$

olur. Yüksek frekans kriterinde zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{DC}(z,\alpha_0)\right]\hat{\psi}(z) = E\hat{\psi}(z) \tag{4.12}$$

yazılır. Bu denklemdeki $V_{DC}(z,\alpha_0)$ ortama lazer alan giydirilmiş potansiyel olarak ifade edilir ve $\alpha(t) = \alpha_0 \cos(wt)$ eşittir. Böylece

$$V_{DC}(z,\alpha_0) = \frac{w}{2\pi}\int_0^{\frac{2\pi}{w}} V\big(z+\alpha(t)\big)dt \tag{4.13}$$

elde edilir. Lazer alanın genliği

$$\alpha_0 = e\,A_0/m^* w \tag{4.14}$$

olarak tanımlanır. Denklem (4.14)' deki w lazerin açısal frekansını, α_0 lazer alanın genliği, m^* ise elektronun etkin kütlesini, e elektronun yükünü temsil etmektedir.

4.3. Hamiltonyen Fonksiyonuna Elektrik ve Lazer Alanlar Altında İken Yabancı Atomdan Gelen Katkı

Dışardan uygulanan alanların etkisinde, sonsuz çoklu kare kuantum kuyusuna yapı içinde hapsolmuş elektron ile yabancı atom arasında etkileşmeyi içeren Hamiltonyen fonksiyonu

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - |e|Fz + V_{DC}(z,\alpha_0) + V_C(\rho,z,\alpha_0) \tag{4.15}$$

olarak ifade edilir. Hamiltonyendeki ilk iki terim daha önceki bölümlerde tanımlanmıştır. Son terim olan $V_C(\rho, z, \alpha_0)$ lazer giydirilmiş Coulomb potansiyeli olarak tanımlanır. Böylece

$$V_C(\rho, z, \alpha_0) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{\rho^2+(z-z_i+\alpha_0)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\rho^2+(z-z_i-\alpha_0)^2}}\right] \tag{4.16}$$

olarak yazılabilir ve z_i yabancı atomun (z ekseninde) düşük boyutlu yapı içindeki konumudur (Bekar, 2010). Denklem (4.15)'de belirttiğimiz Hamiltonyen fonksiyonuna dış etkilerden dolayı potansiyele gelen katkıları tekrar ifade edersek

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - |e|Fz + \frac{w}{2\pi}\int_0^{\frac{2\pi}{w}} V\big(z+\alpha(t)\big)dt - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{\rho^2+(z-z_i+\alpha_0)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\rho^2+(z-z_i-\alpha_0)^2}}\right] \tag{4.17}$$

elde edilir. Son olarak düşük boyutlu yapının içerisinde hapsolmuş elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisinin hesaplanması için kullanılan genel formülünü yazarsak

$$E_B = E_0 - E_{imp} \tag{4.18}$$

şeklinde ifade edilir. E_0 düşük boyutlu yapımızda bulunan elektronun taban durum enerjisini temsil etmektedir.

BÖLÜM 5

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu bölümde sonsuz kuantum kuyularını önce ayrı ayrı daha sonra aynı anda elektrik ve lazer alan etkisi altında bırakılarak, yabancı atom katkısını da göz önünde bulundurarak, düşük boyutlu yapıların elektronik özellikleri incelenmiştir.

Hesaplamalarda kullanılan fiziksel parametreler Bölüm 3 'de bahsedilmiştir. Biz tekrardan kısaca hatırlatırsak; Al(GaAs) /GaAs sonsuz kuantum kuyusu için kuyu genişliği $b = 200$ Å kabul edilmiştir. F elektrik alanın şiddetini kV/cm, α_0 lazer alanın genliği için Å birim sistemi kullanılmıştır. Kuyu yapısında bulunan elektronun etkin kütle $m^* = 0{,}067\, m_0$ alınmıştır. Farklı kuyu profillerine sahip sonsuz kuantum kuyuların dış etkiler altında kaldığında, yapıdaki elektronun ilk beş seviyedeki enerjileri, dalga fonksiyonları ve yabancı atoma bağlanma enerjileri hesaplanmış ve çıktılar elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar tartışılmıştır ve yorumlanmıştır.

5.1. Kuantum Kuyularına Elektrik Alan Etkisi

Bu kısımda ilk önce sonsuz kuantum kuyusuna daha sonra sonsuz çoklu kare kuantum kuyusuna uygulanan dış elektrik alan etkilerini inceleyeceğiz. İlk olarak daha önceden bölüm 4.1'de bahsettiğimiz gibi sonsuz kuantum kuyusunu elektrik alan altında bırakarak görülen değişimleri araştıracağız. Kuantum kuyumuzun potansiyel profil tanım aralığını tekrar ifade edersek

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| < b \\ \infty & |z| \geq b \end{cases} \tag{5.1}$$

şeklinde tanımlanır. Etkin kütle yaklaşımında pozitif z-ekseni yönünde düzgün, sabit $\vec{F}$ elektrik alan uygulandığında sistemin zamandan bağımsız Hamiltonyeni

$$H_f = \frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} - eFz + V(z) \tag{5.2}$$

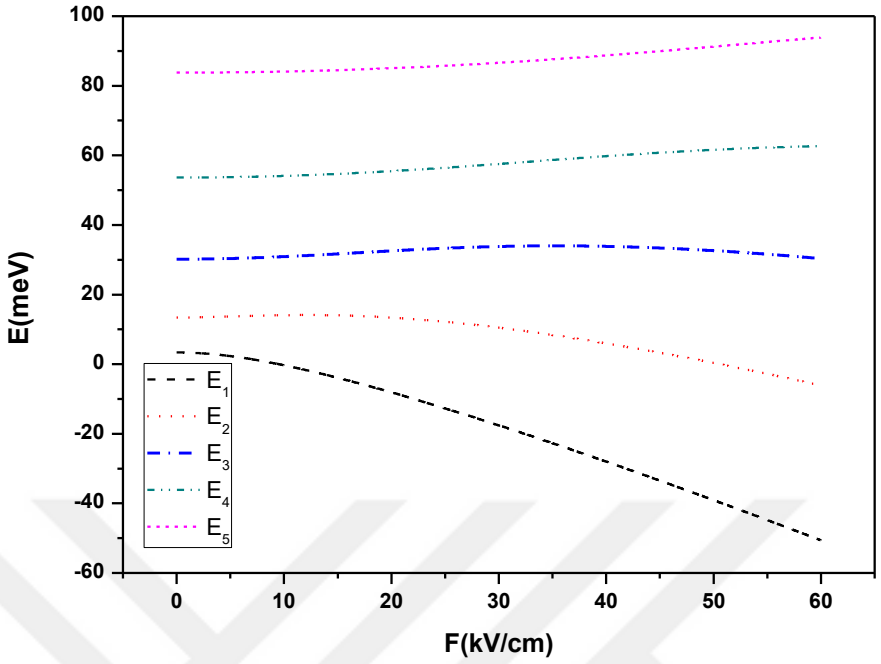
biçimindedir. Rydberg birim sisteminde Schrödinger denklemi

$$-\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \eta z\psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \tag{5.3}$$

olur. İç bölgede v(z)=0 olarak tanımlanır. Burada η

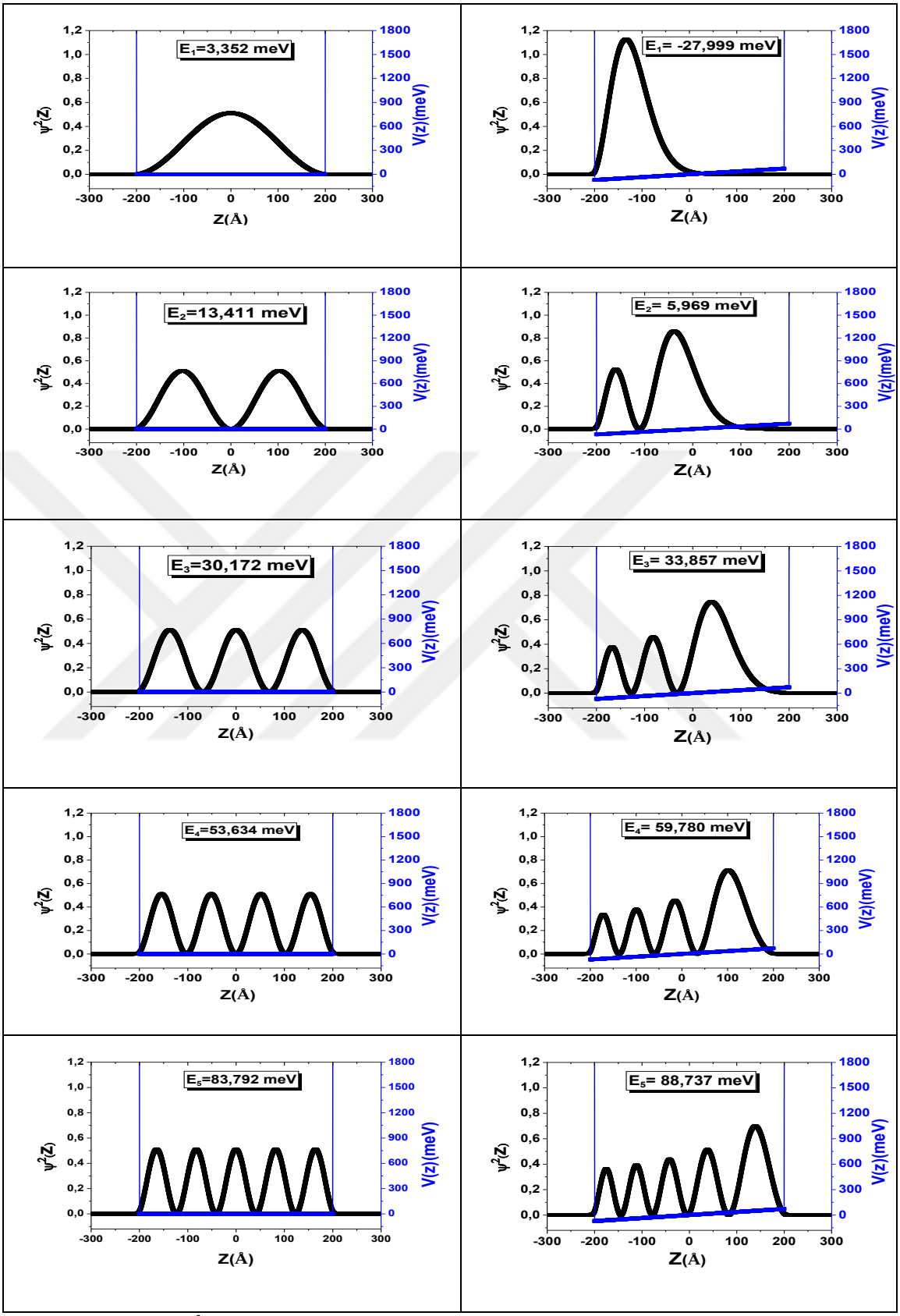
$$\eta = \frac{|e|a^*F}{R^*} \tag{5.4}$$

ifade edilir. Şekil 5.1'de yapının içindeki elektronun ilk beş enerji seviyesi verilmiştir.



Şekil 5.1. b=200 Å' luk sonsuz kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değerleri.

Şekil 5.1'de görüldüğü üzere, elektrik alan şiddetiyle kuyu içine hapsolmuş elektronun ilk iki enerjisinde azalma, diğer enerjilerde ise kademeli artış söz konusudur. Şekil 5.1'deki grafik, elektrik alanın farklı enerji seviyelerinde farklı etkiler oluşturduğunu göstermektedir.



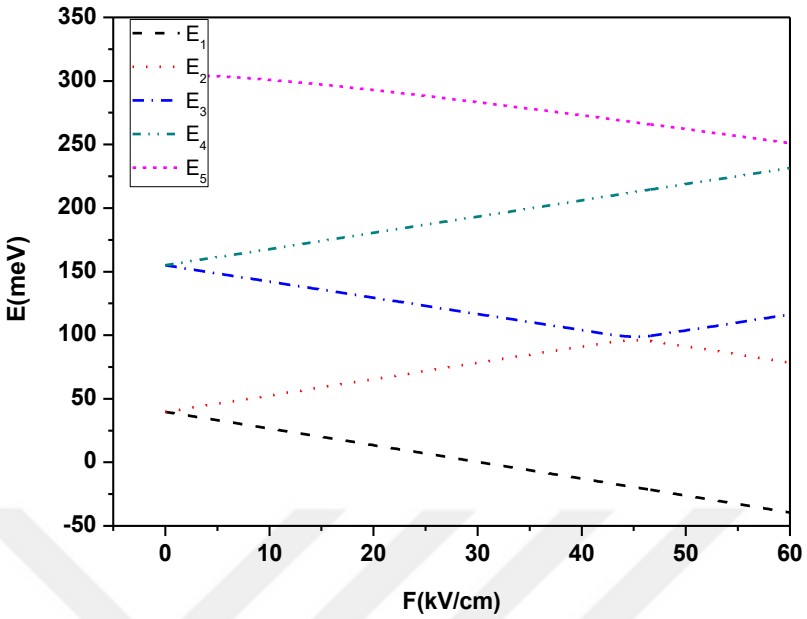
Şekil 5.2. b=200 Å' luk sonsuz kuantum kuyusu için elektrik alansız (sol sütun) ve elektrik alanın $F = 40\ kV/cm$ değeri (sağ sütun) için ilk beş enerji değerleri ve dalga fonksiyonlarının kareleri.

Şekil 5.2'de görüldüğü gibi sol ve sağ sütunlarda, elektrik alan uygulanmışken ve uygulanmamışken, yapı içerisinde bulunan elektronun ilk beş enerji seviyesi için davranış fonksiyonu grafikleri elde edilmiştir. Kuyu genişliği $b = 200$ Å olan Al(GaAs)/GaAs sonsuz kuantum kuyusu, dış alan etkilerinin varlığında ve yokluğunda, yapısındaki elektronun davranışında farklılıklar gözlemlenmiştir. Enerji seviyesiyle elektronun dalga fonksiyonunda bulunan piklerin sayısı arasında doğru orantılı bir değişim göze çarpmaktadır.

Bu kısımda ise sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunu ele alacağız. Kuantum kuyusunun potansiyel profil tanım aralığı

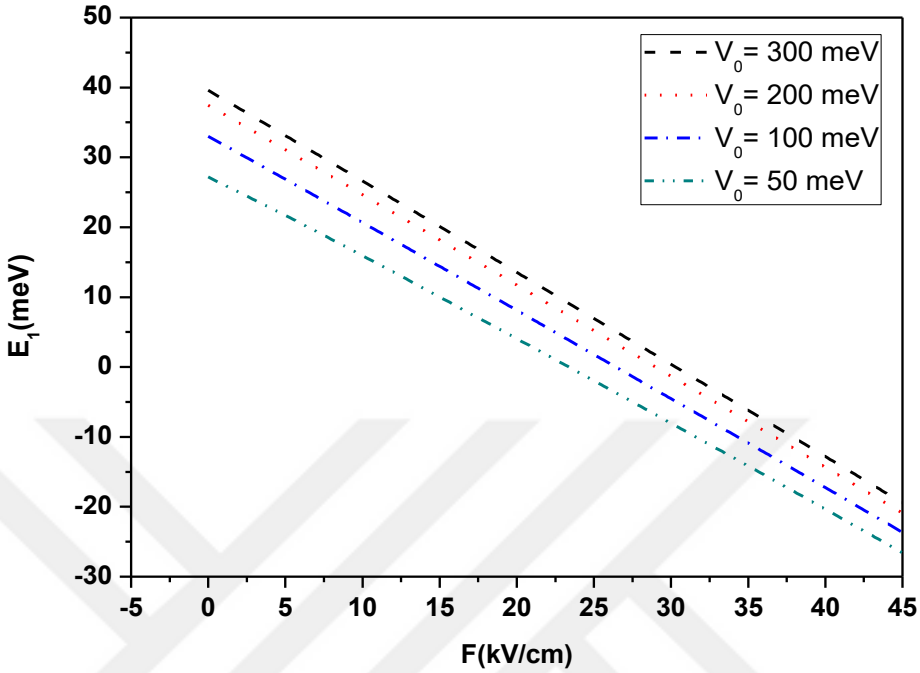
$$V(z) = \begin{cases} \infty, & |z| > b \\ V_0, & |z| \leq a \\ 0, & diğer\ yerlerde \end{cases} \tag{5.5}$$

olarak tanımlanır. Sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu elektrik alan altında bırakıldığında Şekil 5.3' de gösterildiği gibi elektronun ilk beş seviye için enerji değerleri ortaya çıkmıştır.



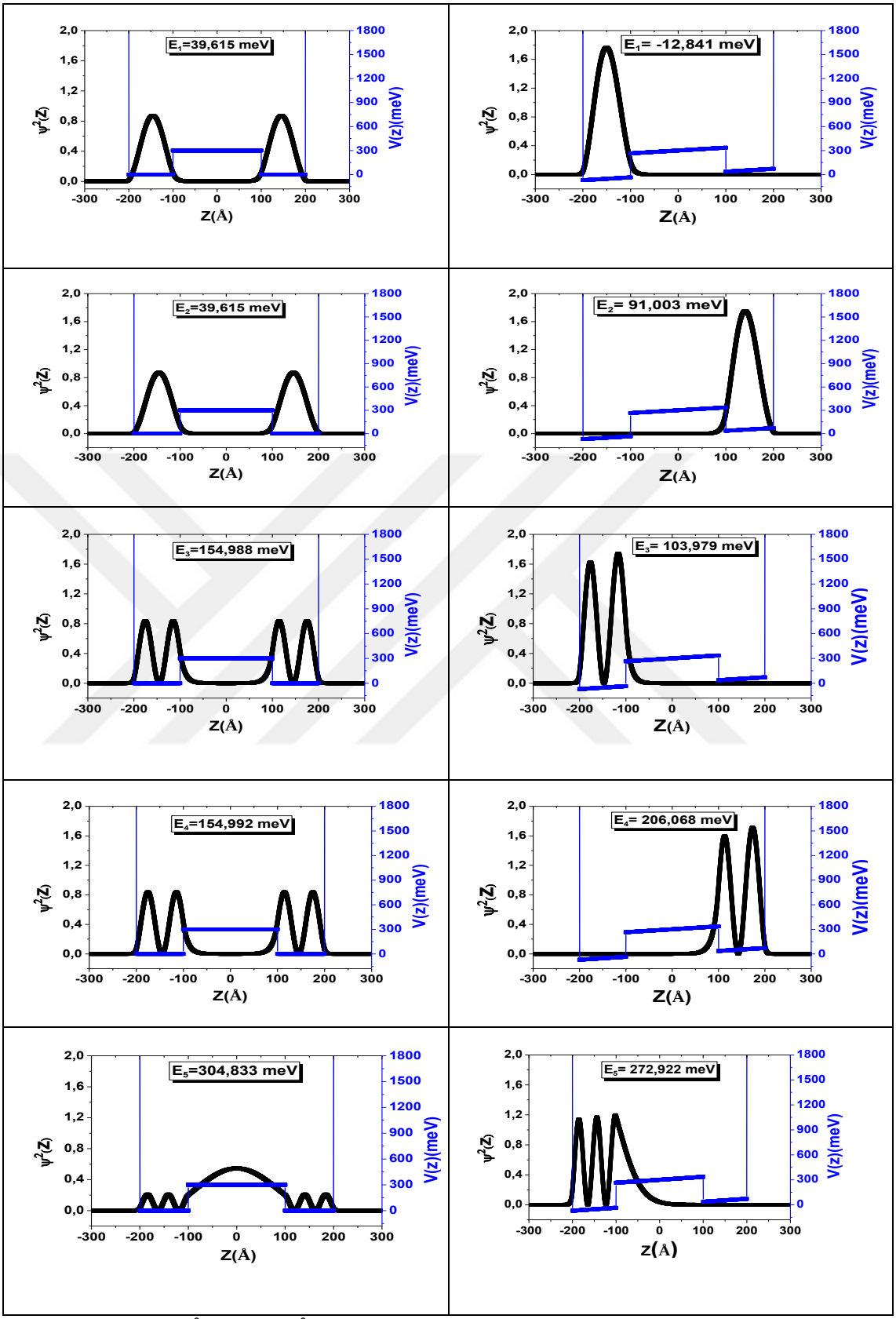
Şekil 5.3. b = 200 Å, a = 100 Å, $V_0 = 300$ meV′ luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değişimleri.

Şekil 5.3'de enerjiler arasında yarılmalar göze çarpmaktadır. E_1 ile E_2 enerji değişim grafiği arasında, belli bir elektrik alan şiddetine kadar ters orantılı bir ilişki bulunmaktadır ve biri artarken, diğerinde azalış görülmektedir. E_3 ve E_4 enerji değerlerinde de aynı şekilde ters orantı görülmektedir. Özellikle E_2 ve E_3 enerji değerlerinde elektrik alanın etkisinden dolayı oluşan farklılıklar belirgin bir şekilde göze çarpmaktadır. İki farklı enerji değişim grafiğindeki enerji değerlerin biri artarak, diğeri azalarak birbirine yaklaşır ve belli bir elektrik alan şiddetinde artan enerji azalmaya, azalan enerji artma eğilimi göstererek ilerlemektedir. Bahsettiğimiz bu etki *starkshift* etkisi olarak adlandırılır. Bu etki $F = 45\ kV/cm$ ile $F = 55\ kV/cm$ arasında rastlanmaktadır.



Şekil 5.4. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300meV, V_0 = 200\,meV, V_0 = 100meV, V_0 = 50meV$ sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında E_1 değişimi.

Şekil 5.4' de görüldüğü üzere, potansiyel duvarı yüksekliği azaldıkça elektronun ilk seviyedeki enerjisi birbirine yakın lineer bir azalış sergilemişlerdir. Elektrik alan şiddeti arttıkça elektronun ilk seviye enerjisi ters orantılı olarak azalmaktadır.



Şekil 5.5. b=200 Å, a=100 Å , $V_0 = 300\,meV$ değerinde sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alansız (sol sütun) ve elektrik alanın $F = 40\,kV/cm$ değeri (sağ sütun) için ilk beş enerji değerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarının kareleri.

Şekil 5.5'de görüldüğü üzere, kuyu genişliği $b = 200\,\text{Å}$ olan ve bariyer yüksekliği $V_0 = 300\,meV$ olan sonsuz çoklu kare kuantum kuyusuna düzgün elektrik alan uyguladığımızda yapıdaki elektronun davranış (dalga) fonksiyonunda soldan sağa doğru simetrik olarak kayma gözlemlenmiştir. E_1 enerji durumundayken elektronun olasılık yoğunluğu yapının ortasında bulunan kare potansiyel engelin sol tarafındayken, E_2 enerji durumunda sağ tarafa doğru kaymıştır. Aynı şekilde E_3 ve E_4 enerji seviyelerinde de aynı durum gözlenmiştir. Yapının ortasında bulunan kare şeklindeki bariyerin hem sağında hem de solunda simetrik bir biçimde bulunan elektronun dalga fonksiyonun tepe sayısı 2'ye çıkmıştır. E_5 seviyede elektronun dalga fonksiyonu sayısı elektrik alan yok iken tepe sayısı 5 iken, elektrik alan varlığında 3 tepe gözlemlenmiştir. Elektronun dalga fonksiyonundaki ortaya çıkan bu anormal değişimler, yapının merkezinde bulunan potansiyel engel ve dış elektrik alan etkilerin ortaya çıkardığı değişimlerden kaynaklanmaktadır.

Yapıya dışarıdan elektrik alan uygulanmadığı zaman ise, E_1 ve E_2 enerji seviyesi için yapının ortasındaki kare engelin iki tarafında elektronun bulunma olasılığı eşit ve birbirine simetrik şekildedir. Aynı zamanda dejenere durum (enerji değerlerinin birbirine yakın olması) söz konusudur. Elektronun E_3 ve E_4 enerji seviyelerinde de bu paralellik devam etmektedir ve bu enerji seviyeleri için de dejenere durum söz konusudur.

5.2. Kuantum Kuyularına Lazer Alan Etkisi

İlk olarak sonsuz kuantum kuyusunun potansiyel profil aşağıdaki gibi tanımlarsak.

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| < b \\ \infty & |z| \geq b \end{cases} \tag{5.6}$$

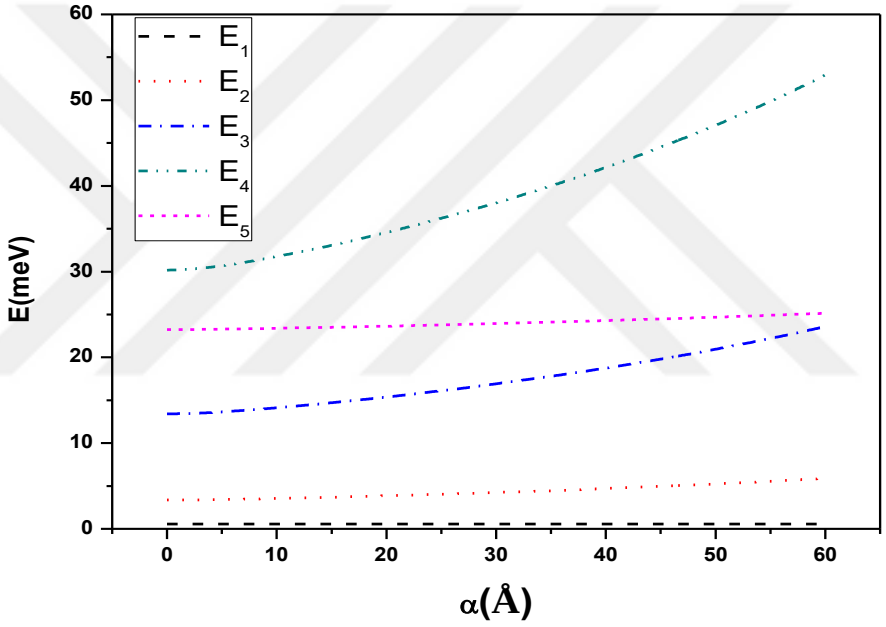
Yüksek frekans kriterinde zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2\psi(z)}{\partial z^2} + V_{DC}(z,\alpha_0)\right]\hat{\psi}(z) = E\hat{\psi}(z) \tag{5.7}$$

olur. Bu denklemdeki $V_{DC}(z,\alpha_0)$ ortama giydirilmiş lazer alan potansiyeli olarak ifade edilir ve

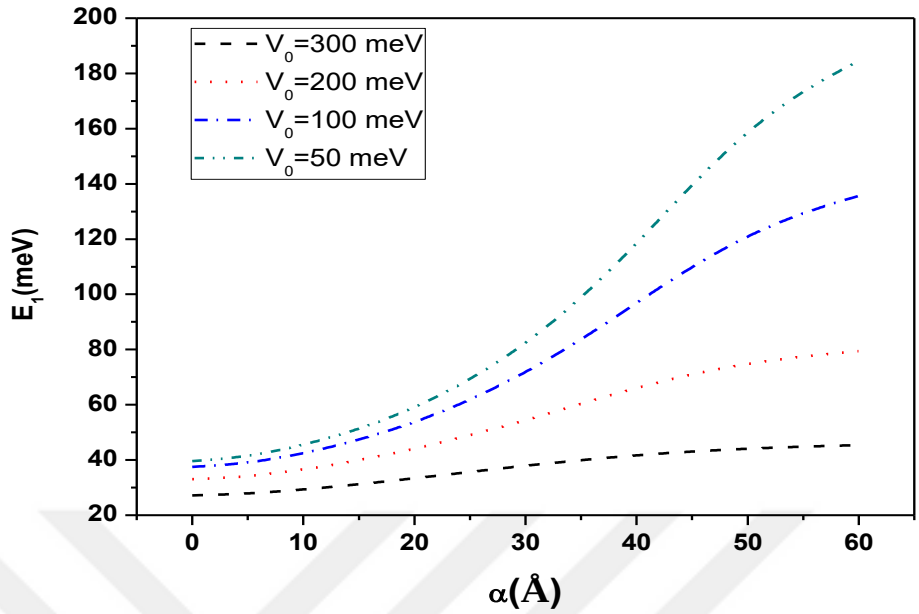
$$V_{DC}(z,\alpha_0) = \frac{w}{2\pi}\int_0^{\frac{2\pi}{w}} V\big(z+\alpha(t)\big)dt \tag{5.8}$$

olarak tanımlanır (Bekar, 2010). Denklem (5.7)' nin içine denklem (5.8)' deki ifade yazılarak, sonlu farklar yöntemi kullanılarak düşük boyutlu yapıda bulunan elektronun dalga fonksiyonları ve enerji seviyeleri hesaplanabilir.



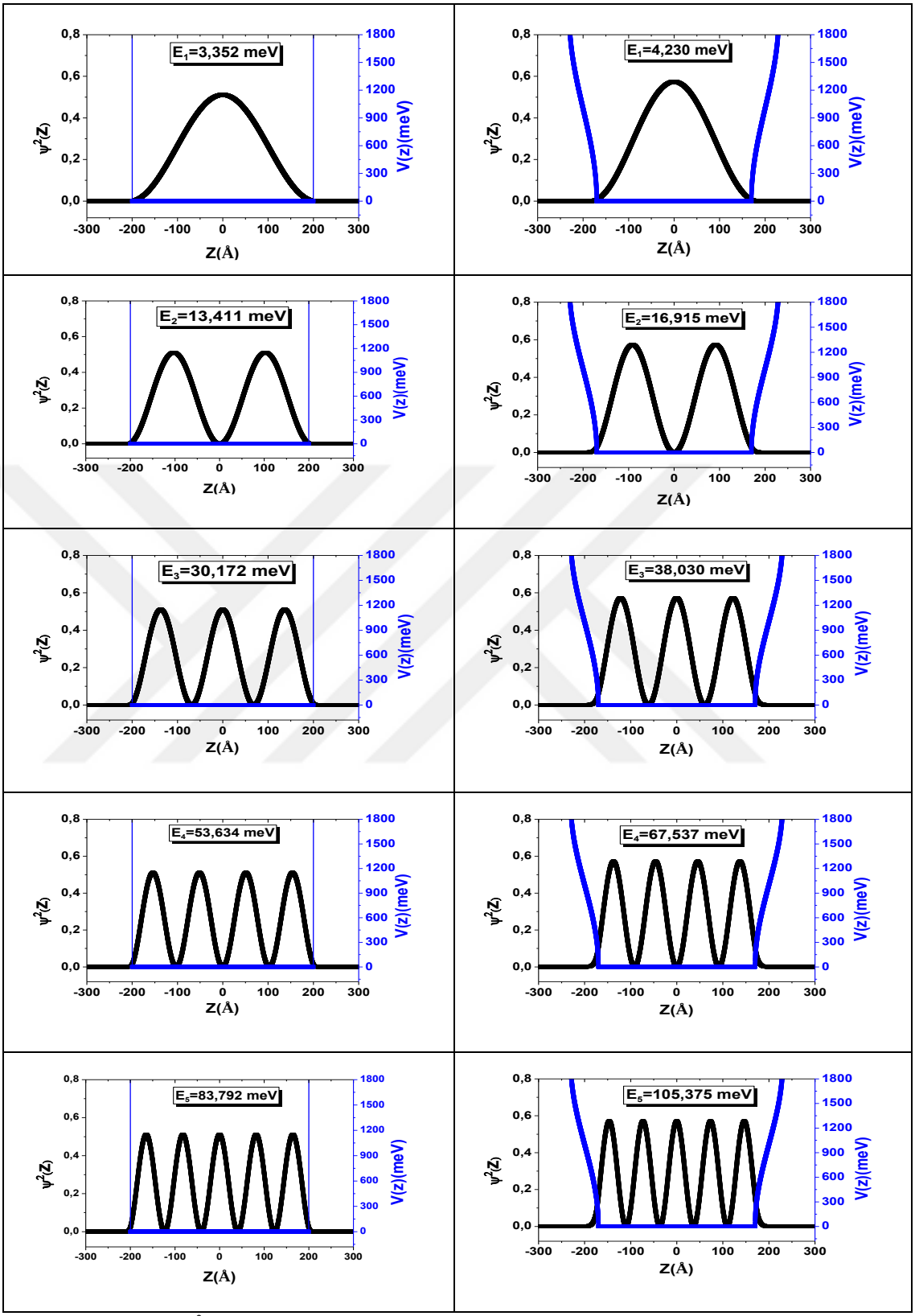
Şekil 5.6. b=200 Å sonsuz kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri.

Bu kısımda yüksek frekanslı lazer alan altında Al(GaAs)/GaAs sonsuz kuantum kuyularına hapsolmuş elektronun enerjileri ve dalga fonksiyonları hesaplanmıştır. Şekil 5.6'da kuyu genişliği $b = 200$ Å olan sonsuz kuantum kuyusu içindeki elektronun ilk beş seviye enerji değerleri uygulanan yüksek frekanslı lazer şiddetine güre parabolik olarak artış göstermektedir.



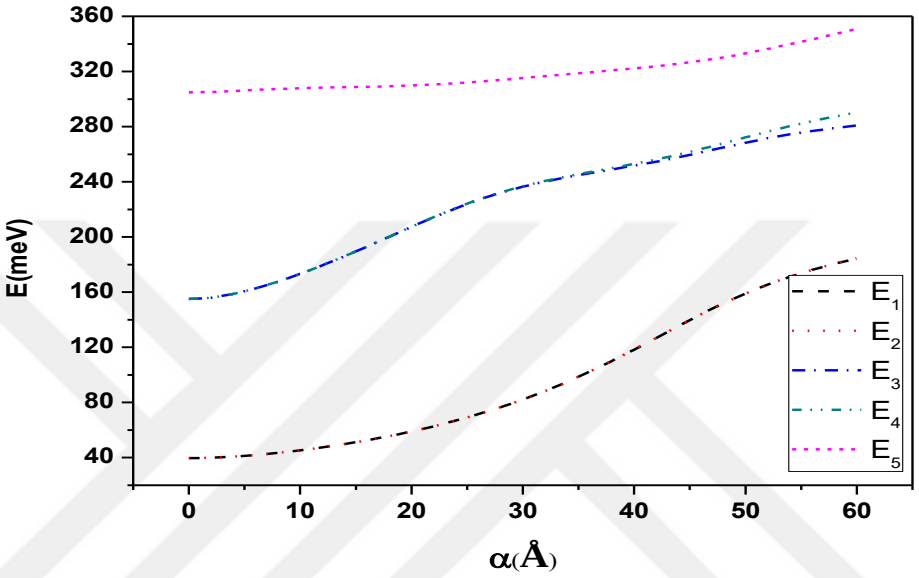
Şekil 5.7. b=200 Å, a=100 $Å$, $V_0 = 300meV, V_0 = 200\,meV, V_0 = 100meV, V_0 = 50meV$, sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında E_1 değişimi.

Şekil 5.7'de görüldüğü gibi potansiyel bariyer yüksekliği azaldıkça ($V_0 = 300\,meV, V_0 = 200\,meV$, $V_0 = 100\,meV$, $V_0 = 50\,meV$ indikçe) E_1'de gerçekleşen değişimler gözlemlenmektedir. Şekil 5.7'de lazer alan genliği arttıkça ve bariyer yüksekliği azaldıkça elektronun ilk seviyedeki enerjisinde artış görülmektedir.



Şekil 5.8. b=200 Å' luk sonsuz kuantum kuyusu için ilk beş enerji değerleri ve dalga fonksiyonlarının kareleri farkının iki dış alanlar (sol sütün F=0, α_0=0, sağ sütün F=0, α_0=30 Å) altındaki değerleri.

Şekil 5.8'de görüldüğü üzere, sonsuz kuantum kuyusunu yüksek frekanslı lazer alan altında bıraktığımız da elektronun enerji seviyelerinde artış ve dalga (davranış) fonksiyonlarında değişim gözlemlenmiştir. Sağ sütundaki grafiklerdeki görüldüğü üzere, uygulanan lazer alanın etkisiyle yapının potansiyel profilinde değişim söz konusudur.



Şekil 5.9. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300\, meV'$luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri.

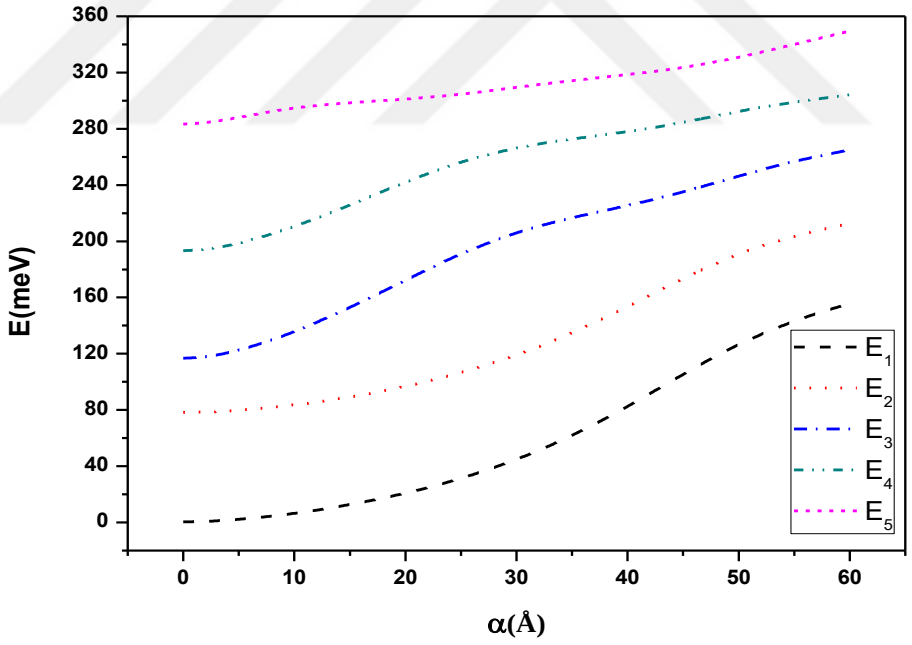
Şekil 5.9'da E_1 ve E_2 enerji değerleri birbirine çok yakın seyretmektedir. Dejenere durum söz konusudur. Aynı şekilde E_3 ve E_4 enerji değerleri de birbirlerine çok yakın seviyededirler ancak E_1ve E_2 enerji seviyeleri ile E_3 ve E_4 enerji seviyeleri arasındaki fark oldukça büyüktür. Son enerji değerinde büyük artış görülmektedir. Lazer alanda dejenere durumun çıkmasının sebebi, lazer alan yapının potansiyel profilini simetrik olarak değiştirmesinden kaynaklanmaktadır. Elektrik alan ise yapının potansiyel profilini antisimetrik olarak değiştirmektedir. Bu yüzden elektrik alan uygulandığında elektronun enerji değerlerinde dejenere duruma rastlanılmamaktadır.

5.3. Kuantum Kuyularına Elektrik ve Lazer Alan Etkisi

Hem elektrik alan hem de yüksek frekanslı lazer alanı altında ki kuantum kuyumuz için Hamiltonyen fonksiyonu

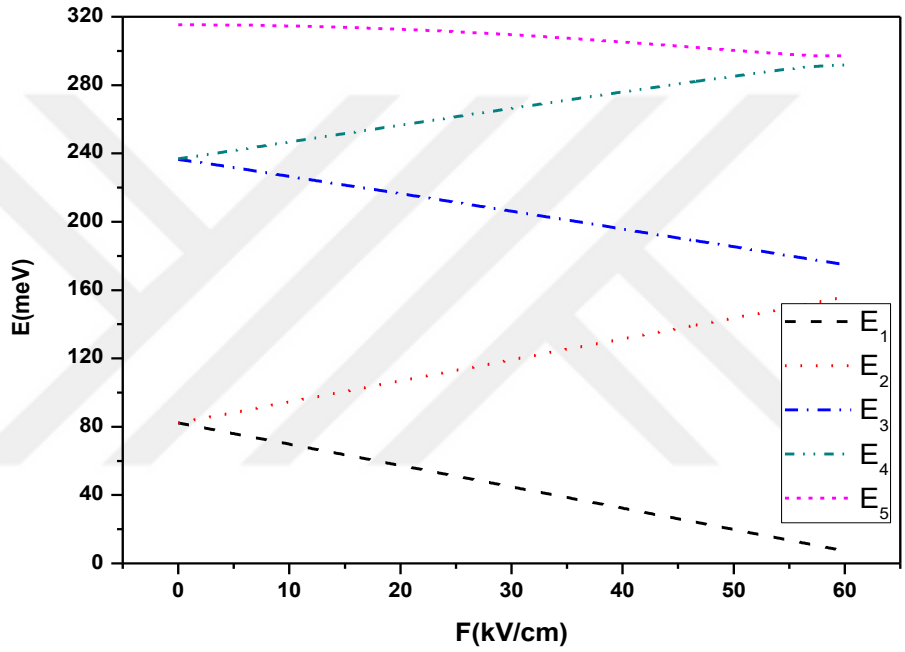
$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} - eFz + V_{DC}(z, \propto_0)\right]\hat{\psi}(z) = E\hat{\psi}(z) \tag{5.9}$$

olur. Rydberg birim sisteminde (5.9)' daki denklem sonlu farklar yöntemi kullanılarak çözülür. Şekil 5.10, Şekil 5.11, Şekil 5.12'de hem elektrik hem de lazer alan altındaki bir elektronun ilk beş enerji seviyeleri hesaplanmış ve dalga fonksiyonlarındaki değişimler gösterilmiştir.



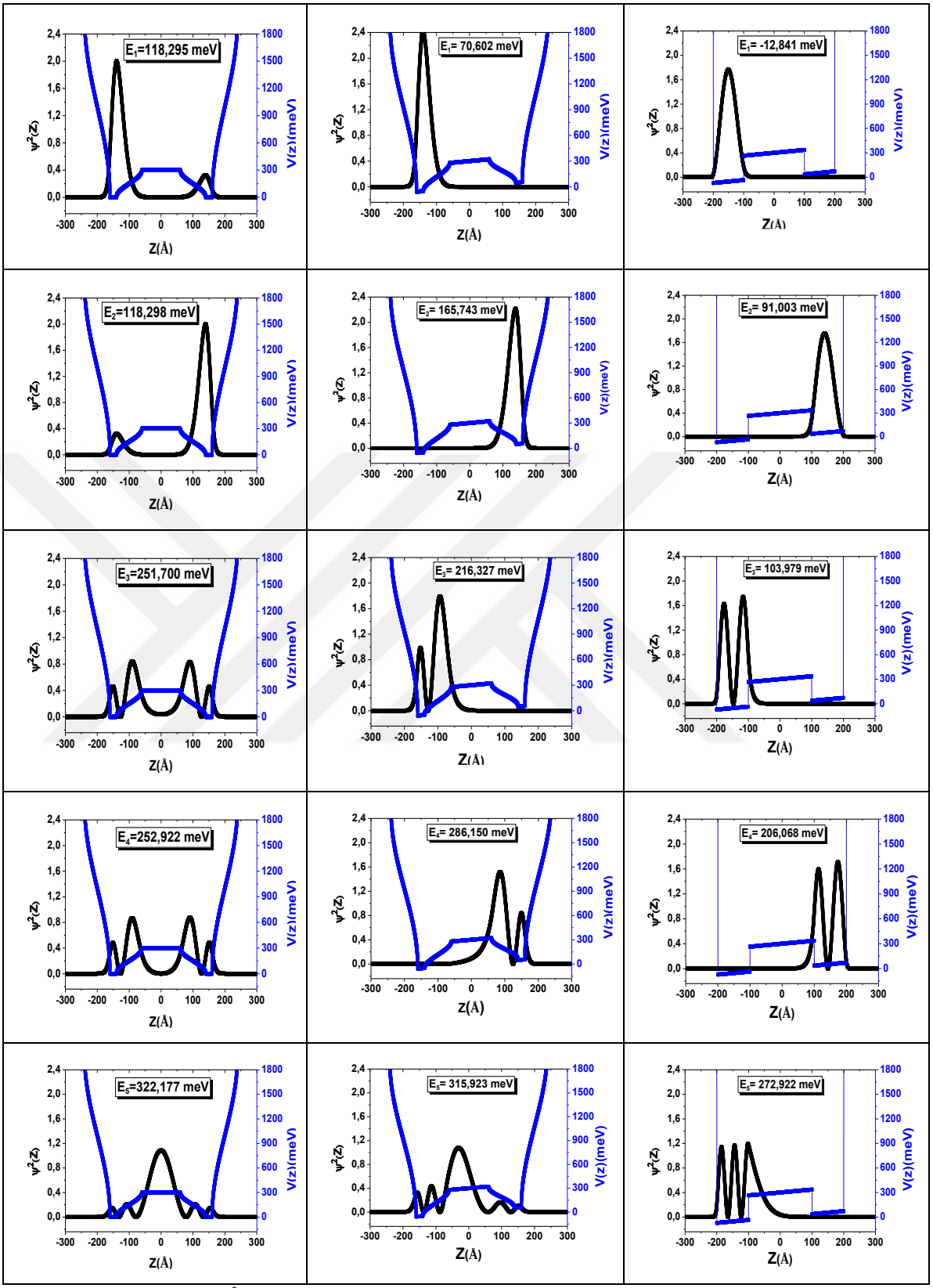
Şekil 5.10. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300\, meV, F = 30kV/cm'$ lik sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri.

Şekil 5.10'da yüksek frekanslı lazer ve sabit elektrik alan altında kuyu genişliği $b = 200$ Å olan ve bariyer yüksekliği $V_0 = 300$ meV olan Al(GaAs)/GaAs kuantum kuyularına hapsolmuş elektronun sahip olduğu farklı seviyedeki enerjileri görülmektedir. Lazer alan genliği arttıkça enerji değerlerinde artış gözlemlenmektedir. Çıkan sonuçlardan yapıyı çift dış etki alan altında bıraktığımızda kuyu içinde bulunan elektronun enerji seviyelerinde büyük oranda artış olabileceği gözlemlenmiştir ve dejenere durumuna rastlanılmamıştır.



Şekil 5.11. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300\,meV, \alpha_0 = 30$ Å $'$luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değerleri.

Şekil 5.11'de görüldüğü gibi sabit lazer alan giydirme parametresi uygulanarak ($\alpha_0 = 30$ Å için) ve elektrik alan şiddeti arttıkça enerji değerlerinde yarılmalar gözlemlenmektedir. Enerjinin tek E_1, E_3, E_5 değerlerinde lineer olarak azalma gözlenirken, enerjinin çift E_2, E_4 değerlerinde lineer (düzgün) bir artış gözlemlenmektedir.

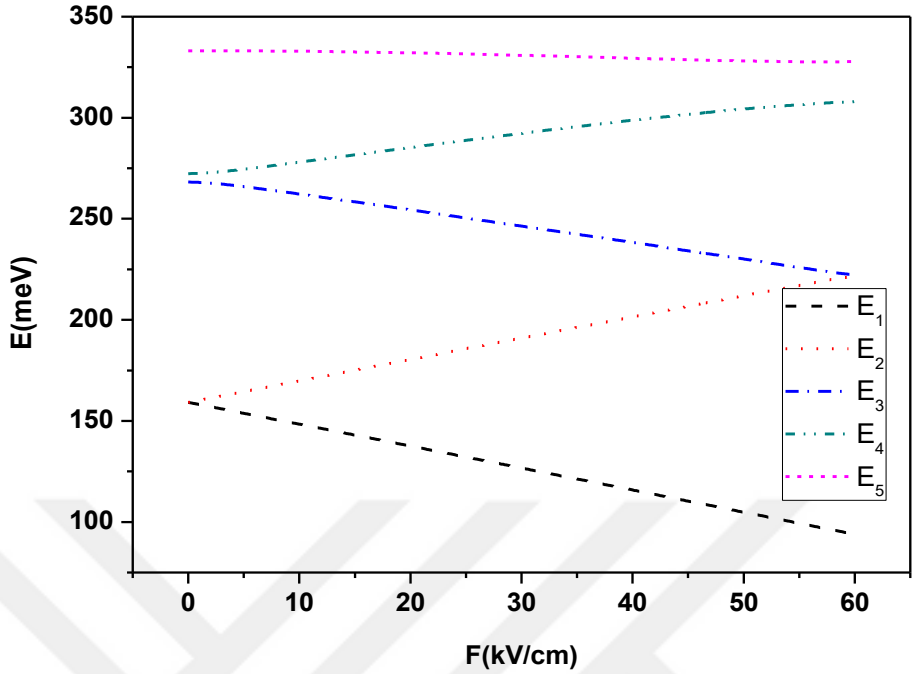


Şekil 5.12. b=200 Å' luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu, $V_0 = 300\,meV$ potansiyel yüksekliği için ilk beş enerji değeri ve dalga fonksiyonlarının kareleri, iki dış alanlar (sol sütun F=0, α_0=40 Å, orta sütun F=40 kV/cm, α_0=40 Å sağ sütun F=40 kV/cm, α_0=0) altındaki değerleri.

Şekil 5.12'de kuyu genişliği $b = 200$ Å olan ve bariyer yüksekliği $V_0 = 300$ meV olan Al(GaAs)/GaAs kuantum kuyusuna hapsolmuş elektronun dalga fonksiyonlarındaki değişimler görülmektedir. Şekil 5.12'de görüldüğü gibi, sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunu belli değerlerde lazer ve elektrik alan altında bıraktığımızda yapıdaki elektronun dalga fonksiyonlarında ne tür değişiklikler olacağı gözlemlenmiştir. Sadece lazer alan giydirme parametresi altında ise E_1, E_2 enerji seviyesindeki dalga fonksiyonlarının karelerinde dejenere durumu gözlemlenmiştir. Ayrıca E_1, E_2 enerji seviyeleri için elektronun dalga fonksiyonunda soldan sağa doğru çapraz olarak simetrik kayma vardır fakat diğer enerji seviyeleri için bu durum söz konusu değildir. Elde ettiğimiz bu sonuç bize, lazer alanın farklı enerji seviyelerindeki elektrona farklı etkiler yapabileceğini göstermektedir. E_3, E_4, E_5 seviyesinde elektronun dalga fonksiyonunda soldan sağa doğru herhangi bir kayma söz konusu değildir.

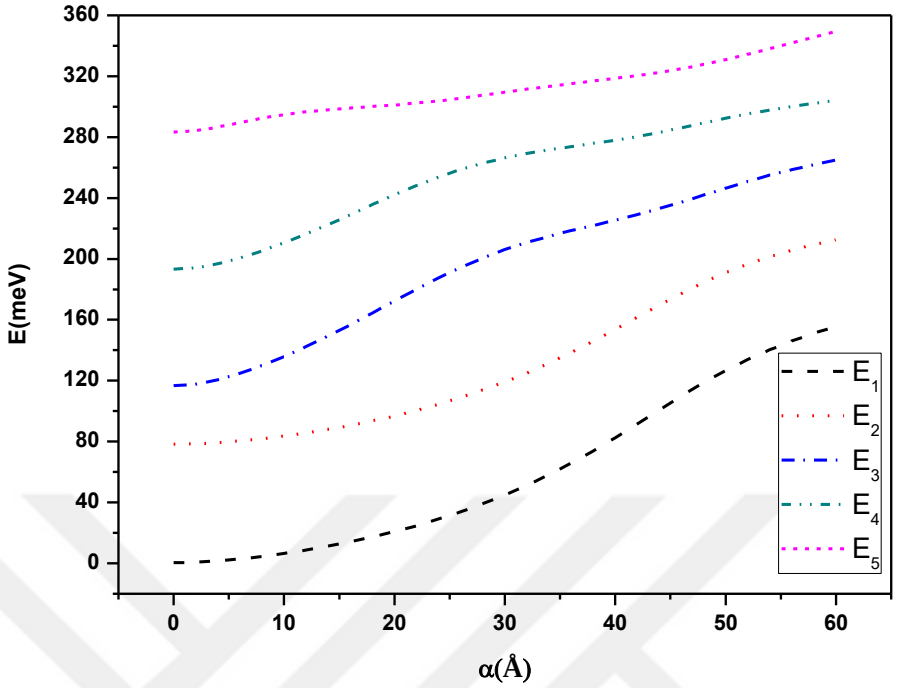
Yapı lazer altında bırakıldığında belli enerji seviyeleri için dejenere durum söz konusudur. Yapıyı sadece elektrik alan altında bıraktığımızda dejenere durum söz konusu değildir. Çünkü lazer alan potansiyel profili simetrik, elektrik alan ise antisimetrik olarak değiştirmektedir.

Yapıyı hem elektrik hem de lazer altında bıraktığımızda dejenere durum söz konusu değildir fakat elektronun dalga fonksiyonunda soldan sağa doğru simetrik olarak kayma söz konusudur. Ayrıca çıkan sonuçlardan anlaşılacağı üzere lazer alan etkisinin, elektrik alan etkisine kıyasla düşük boyutlu yapımızın potansiyel profilini büyük oranda değiştirdiği gözlemlenmiştir.



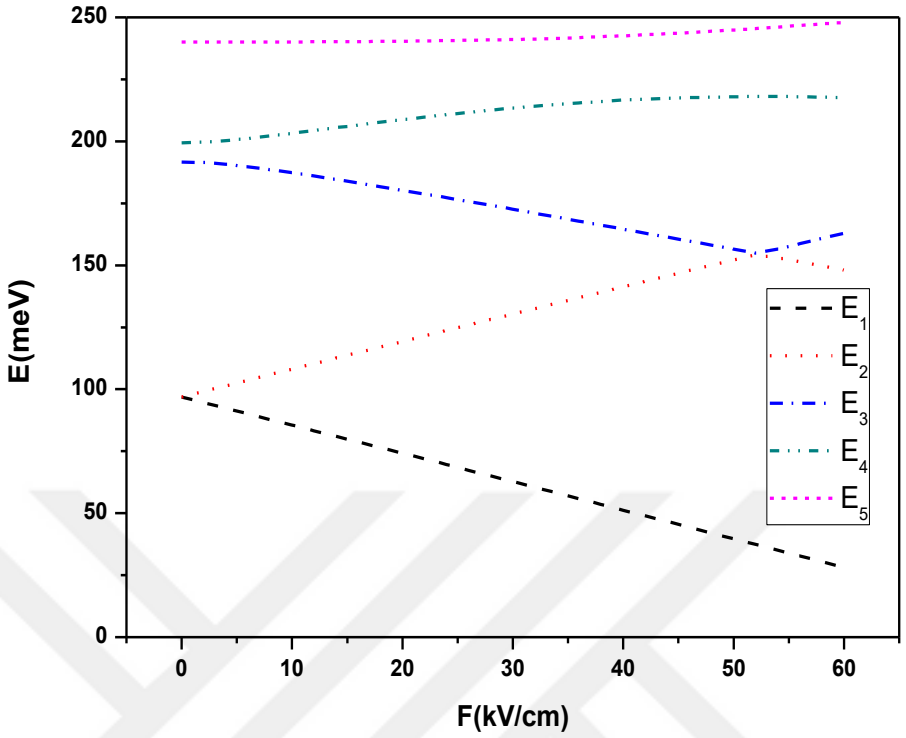
Şekil 5.13. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300\, meV, \alpha_0 = 50$ Å sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değerleri.

Şekil 5.13'de düşük boyutlu yapıdaki hapsolmuş elektronun E_1 ve E_2 enerji seviyesi birbirine ters (zıt) bir şekilde biri artarken diğerinde azalış görülmektedir. Bu yarılma durumu elektronun E_3 ve E_4 enerji seviyelerinde de görülmektedir. Şekil 5.11'de aynı sonuçları elde etmemiz beklenen bir durumdur çünkü yapıya sabit şiddette uygulanan lazer alan altında bırakarak elektrik alan şiddeti düzgün olarak yükseltilmiştir. Aynı dış etkiler Şekil 5.13'de gerçekleştirilmiştir. Şekil 5.11'deki enerji değerlerinin Şekil 5.13'deki enerji değerlerinden düşük çıkmıştır çünkü Şekil 5.13'de lazer alan şiddeti daha yükseğe çıkartılmıştır ve elektrona daha fazla enerji kazandırılmıştır.



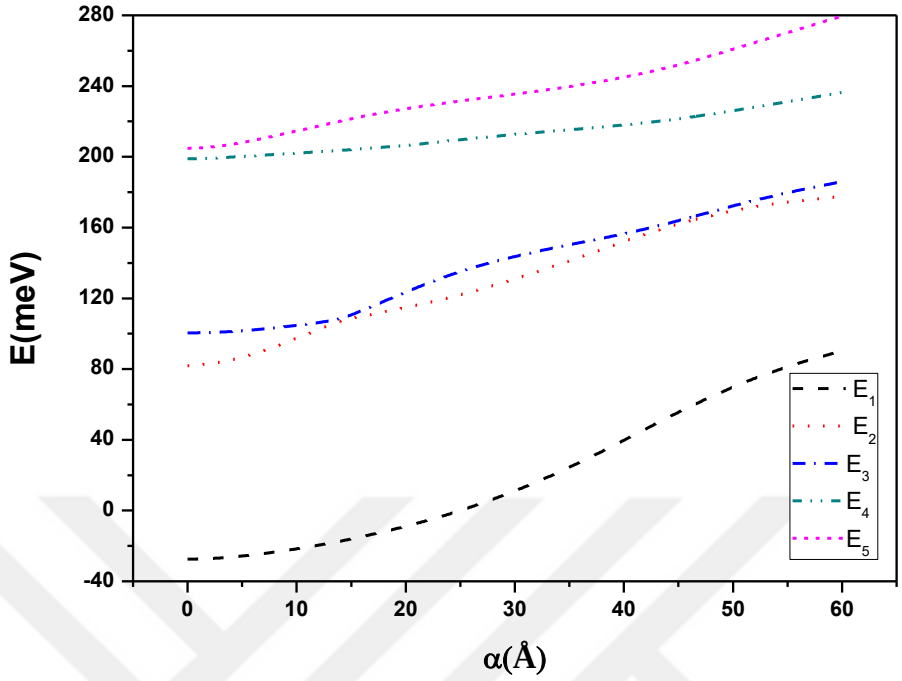
Şekil 5.14. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 300\ \text{meV}, F = 30\ \text{kV/cm}$'luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri.

Şekil 5.14'de, Şekil 5.13'den farklı olarak düşük boyutlu yapı içerisinde yer alan elektronun ilk beş enerji değerleri lazer alan genliği arttıkça artış göstermektedir. Bu değişimde lazer alanın şiddetinin artışından kaynaklanmaktadır.



Şekil 5.15. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 200\,meV, \alpha_0 = 40$ Å 'luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında ilk beş enerji değerleri.

Şekil 5.15'de yapıdaki elektronun E_1 ve E_2 enerji seviyesinde yarılma gözlemlenmiştir ve şekilde olduğu gibi biri artarken diğerinde simetrik olarak azalış görülmektedir. Bu yarılma durumu yapı içerisindeki elektronun E_3 ve E_4 enerji seviyelerinde görülmektedir. Elektrik alanın şiddetinin artması yapıdaki elektronun farklı enerji değerlerinde farklı etkiler yapmaktadır.



Şekil 5.16. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 200\,meV, F = 50\,kV/cm$'luk sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında ilk beş enerji değerleri.

Şekil 5.16'da ise Şekil 5.15'e nazaran elektronun E_2 ve E_3 enerjinin belli bir değerden sonra yine starkshift etkisi görülmektedir. Uygulanan farklı alan değerleri starkshift etkisinin farklı noktalarda (başta ve sonda) görülmesini sağlamıştır. Uygulanan farklı dış etkiler enerji grafiklerinde farklı değişimlere sebep olmaktadır.

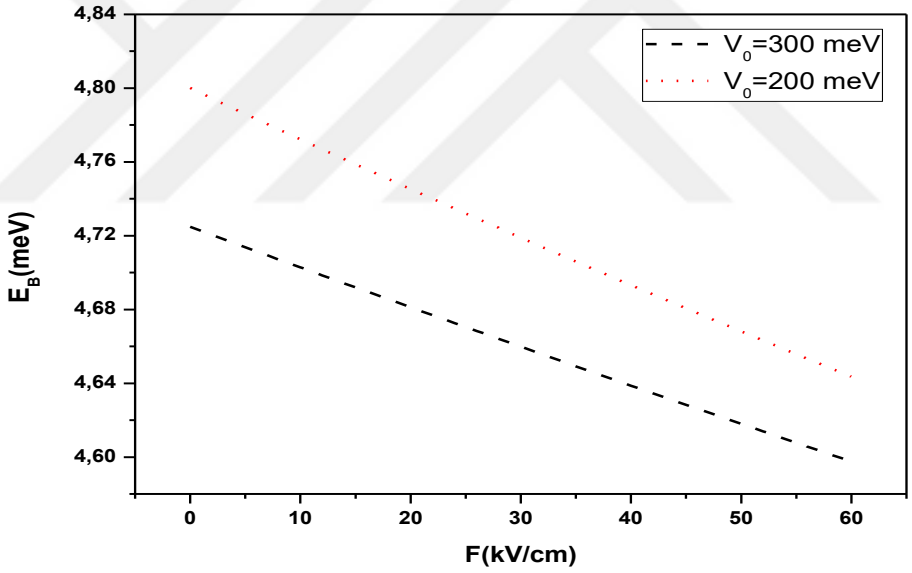
Bu sonuçlarda bize, düşük boyutlu yapıların elektronik özeliklerinin uygun şartlar sağlandığında istediğimiz doğrultuda değiştirebileceğini göstermektedir.

5.4. Kuantum Kuyularına Yabancı Atom Etkisi

Çalıştığımız kuantum kuyusunun potansiyel profilinin tanım aralığını yaparsak;

$$V(z) = \begin{cases} \infty, & -b < z \; ve + b > z \\ V_0, & -a \leq z \leq +a \\ 0, & diğer\ yerde \end{cases} \tag{5.10}$$

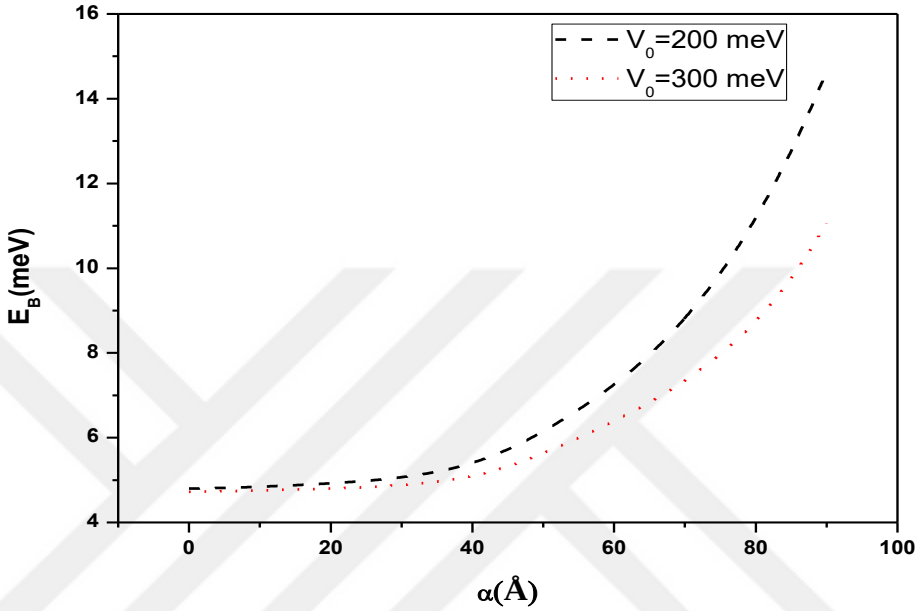
elde edilir. Farklı potansiyel yüksekliklerinde düzgün artan elektrik alan altında değişen yapıdaki elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisindeki değişimi gösteren grafik aşağıda verilmiştir.



Şekil 5.17. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 200\ meV, V_0 = 300\ meV, Z_i = 0$ yabancı atomun simetri durumunda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında E_B değişimi.

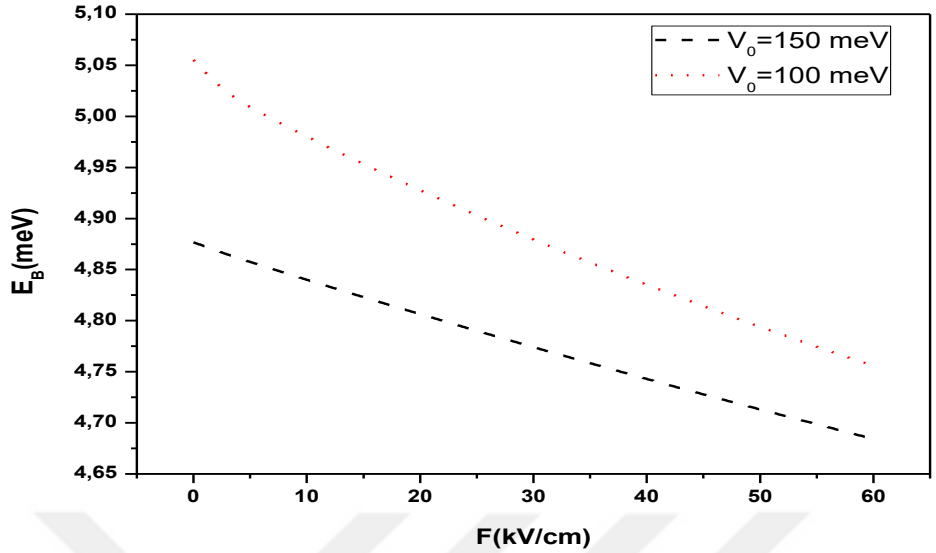
Şekil 5.17'de görüldüğü üzere, kuyu genişliği $b = 200$ Å olan ve iki farklı bariyer yüksekliğinde sırasıyla $V_0 = 200$ meV ve $V_0 = 300$ meV olan Al(GaAs)/GaAs kuantum kuyusuna elektrik alan altında yabancı atom katkısı da yapılarak iki farklı

durum için elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisi değişim diyagramları incelenmiştir. Yabancı atomun konumunu simetrik (tam ortada) alarak bariyer yüksekliği azaldıkça yapı içinde hapsolmuş elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisinin lineer olarak azaldığı gözlemlenmiştir.

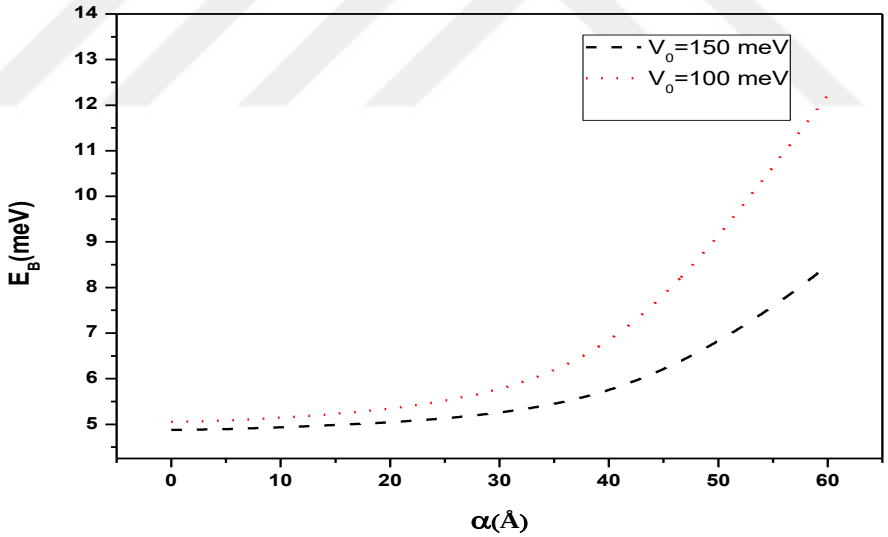


Şekil 5.18. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 200\ meV$, $V_0 = 300\ meV$, $Z_i = 0$ yabancı atomun simetri durumunda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında E_B değişimi.

Şekil 5.17 ve Şekil 5.18' de görüldüğü üzere, sonsuz çoklu kare potansiyel kuyusu için bariyer yüksekliği arttıkça ($V_0 = 200$ meV' den, $V_0 = 300$ meV çıktıkça) yapı düzgün artan elektrik alan altında bırakıldığı zaman E_B (bağlanma enerjisi) değeri zamanla lineer olarak azalma göstermektedir fakat düzgün lazer alan altında bırakıldığında ise E_B değeri zamanla parabolik yükseliş sergilemektedir. Çıkan sonuçlardan da anlaşılacağı üzere farklı dış etkiler ve farklı bariyer yükseklikleri elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisinde farklı etkilere sebep olmaktadır. E_B değerinin artması elektronun yabancı atoma yaklaşması, E_B' nin azalması elektronun yabancı atomdan uzaklaşması anlamına gelmektedir.



Şekil 5.19. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 150\,meV, V_0 = 100\,meV, Z_i = 0$ yabancı atomun simetri durumunda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için elektrik alan altında E_B değişimi.



Şekil 5.20. b=200 Å, a=100 Å, $V_0 = 150\,meV, V_0 = 100\,meV, Z_i = 0$ yabancı atomun simetri durumunda sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu için lazer alan altında E_B değişimi.

Yukarıdaki şekillerde görüldüğü üzere Şekil 5.19'da bariyer yüksekliği azaldıkça ($V_0 = 150\,meV'$ den, $V_0 = 100\,meV$ indikçe) düzgün elektrik alan altında bırakıldığı zaman E_B değeri zamanla azalış göstermektedir ($Z_i = 0$ yabancı atomun

simetri durumunda). Çünkü bariyer yüksekliği arttıkça elektronun yabancı atoma yaklaşması zorlaşacaktır. Bu yüzden elektrik alan altında E_B 'nin değerinin bariyer yüksekliği arttıkça azalması beklenen bir durumdur. Ayrıca elektrik alan elektronu itmektedir ve yabancı atomdan uzaklaştırmaktadır. Şekil 5.20'de lazer alan ise tam tersi etki yapmaktadır. Çıkan grafikler bize elektronun bağlanma enerjisinin belli bir lazer giydirilmiş parametre değerinden sonra parabolik olarak hızlı arttığını, düzgün elektrik alan altında da ise başlangıç değerinden itibaren lineer olarak azaldığını göstermiştir ve yabancı atom katkısının da düşük boyutlu yapının elektronik özelliğini değiştirebileceği sonucuna ulaştırmıştır. Elektrik ve lazer alanın ayrı ayrı uygulandığında aynı malzemeden yapılmış kuyu bile olsa elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisinde farklı etkiler oluşturduğu sonucuna ulaşmamızı sağlamıştır. Böylece çıkan sonuçlar bizlere düşük boyutlu yapılara uygulanan dış etki kontrol altında tutulabilirse, gelişmiş ve duruma göre ayarlanabilir hassas sensörler veya devre elemanları imal edilebileceğini ve farklı optoelektronik araçlar dizayn etme fırsatının mümkün olabileceğini göstermektedir.

Literatürde yapılan çalışmalardan J.W. Gonzales ve arkadaşları yaptığı çalışmalarında ve buldukları sonuçlarda bize elektrik alanın uygulama yönünün, doğrultusunun önemli olduğunu ve yabancı atom katkısının düşük boyutlu yapının elektronik özelliğini değiştirebileceğini göstermişlerdir. Biz de bu tez çalışmamızda yabancı atom katkısının düşük boyutlu yapının elektronik özelliğini değiştirdiğini ve çift dış etki alan altında elektronun davranışının dış alan parametrelerinin değişmesiyle farklılık gösterdiği sonucuna ulaştık. Bulduğumuz sonuçlar literatürde yapılmış çalışmalardan çıkan sonuçlarla paralellik göstermektedir ve örtüşmektedir.

5.5. Bölüm Değerlendirilmesi ve Yorumlanması

Bu tezimizde, düşük boyutlu yapıların farklı potansiyel profillere sahip sonsuz kuantum kuyuları çalışıldı. Sonsuz kuantum kuyumuzu oluşturan malzemeler Al(GaAs)/GaAs yarıiletkenleriydi. Kuyu potansiyel profili olarak sonsuz kuantum kuyusu ve sonsuz çoklu kare kuantum kuyusu incelendi. Kuantum kuyularının içine hapsolmuş elektronun hareketi üzerine araştırmalar yapıldı. Sonsuz kuantum kuyularının elektronik özelliklerini incelemek için m^* etkin kütle yaklaşımıyla birlikte,

Schrödinger denklemi genel hatlarıyla yazıldı ve nümerik çözümler için sonlu farklar yöntemine başvuruldu. Farklı tür yarıiletkenlerin bir araya gelmesiyle oluşan düşük boyutlu yapımızın içine yabancı atom katkısı da yapılarak, yapı içinde bulunan elektronun enerjileri, dalga fonksiyonları ve yabancı atoma bağlanma enerjileri hesaplandı. Yaptığımız hesaplamaların ilk safhasında, farklı potansiyel profillerine sahip sonsuz kuantum kuyularına elektrik alan altında bırakarak yapının içinde hapsolmuş elektronun enerji grafikleri ve davranış fonksiyonlarının değişimi üzerine çalışıldı. Sonsuz kuantum kuyumuza soldan sağa doğru (+ z doğrultusunda) uygulanan elektrik alan şiddeti arttıkça elektronun ilk üç seviyedeki enerjisin de azalma, daha sonraki enerji seviyelerinde kademeli artışlar gözlemlenmiştir. Farklı potansiyel profilli sonsuz kuantum kuyularına elektrik alan şiddetine bağlı olarak enerji diyagramlarındaki değişimlerinde kare kesit bariyer yüksekliğine sahip Al(GaAs)/GaAs yarıiletkenlerinden oluşan sonsuz çoklu kare kuantum kuyusunda starkshift (yapı içindeki elektronun sahip olduğu E_2 ve E_3 enerjilerinin belli bir noktada birbirine yaklaşması, yakın değerler alması ve o noktadan sonra temas etmeden simetrik bir şekilde kıvrılarak birbirinden uzaklaşması) noktası gözlemlenmiştir.

İkinci safhada ise, sonsuz kuantum kuyularına uygulanan yüksek frekanslı lazer alan altında, farklı bariyer yüksekliklerinde kuyunun içine hapsolmuş elektronun enerjisi ve dalga fonksiyonları incelendi. Yukarıdan aşağıya (y doğrultusu boyunca) uygulanan lazer alan altında kuyu potansiyel profilindeki değişimler gözlemlenmiştir. Lazer alan yokken kuyuda ve dalga fonksiyonunda az bir değişik oluyorken, lazer alan uygulandığında kuyunun potansiyel profilinde ve elektronun davranış fonksiyonunda büyük bir değişiklik gözlemlemiştir. Yapıda bulunan hareketi belli yönlerde sınırlı kalmak üzere hapsedilmiş elektronun enerji değeri lazer alan şiddeti arttıkça artış gösterdiği tespit edilmiştir. Bu çalışmalar, düşük boyutlu yapıyı oluşturan malzemenin yapısal özellikleri değiştirilmeden, dışarıdan uygulanan bir lazer yardımı ile yapının elektronik özelliklerinin değiştirilebileceğini göstermiştir.

Üçüncü safhada ise yapıya elektrik ve lazer alan birlikte uygulanmıştır. Yapıya uygulanan dış etkiler altında elektronun enerji ve davranış fonksiyonlarındaki dejenere ve simetri durumlarıyla karşılaşılmıştır ve elektronun ait enerji grafiklerinde yine starkshift noktası gözlemlenmiştir. Elde edilen grafiklerden kuantum kuyusunun farklı

bariyer yüksekliği ve kuyuya etki eden farklı dış etkiler altında kuyu içinde hapsolmuş elektronun enerjisinin farklılık gösterdiği sonucuna ulaşılmıştır.

Son safhada ise, elektrik ve lazer alan altındaki düşük boyutlu yapımıza yabancı atom katkısı yapılarak, yapı içindeki elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisi araştırılmıştır. Elde edilen grafik çıktılarından anlaşıldığı üzere starkshift noktası yapıya sadece elektrik alan altında bıraktığımızda görülmektedir. Eğer yapıyı çift dış etki altında bırakırsak ve starkshift noktasınında görülmesini istiyorsak bu durumda yapının ortasında yer alan bariyer yüksekliğini azaltmamız gerektiği sonucuna ulaşılmıştır.

Literatürde düşük boyutlu yapılara dış alan etkilerinin uygulanmasıyla ilgili birçok çalışma var fakat bizim bu tezde yaptığımız gibi ortada kare bariyere sahip sonsuz çoklu kuantum kuyularına hapsolmuş elektronun dalga fonksiyonlarına ait karmaşık yapılı diferansiyel denklemlerinin ayrıntılı olarak analitik çözümleri ve sonlu farklar yöntemi yardımıyla yapılan nümerik çözümlerin birbirleriyle kıyaslamaları pek fazla bulunmamaktadır. Bu çalışmanın bu noksanlığı gidereceğini umuyoruz.

Son olarak bu tezimizde kullandığımız farklı türden yarıiletken malzemelerin ve farklı potansiyel yüksekliğe sahip düşük boyutlu yapılarımızın analitik ve nümerik olarak çözümlerinin, bu konuda çalışmayı düşünen bilim insanlarımızın önünü aydınlatacağının temennisi içerisindeyiz.

KAYNAKLAR

- Erdogan, I., Akankan, O., & Akbas, H. (2009). Effects of hydrostatic pressure on the self-polarization in GaAs/Ga1− x Alx As quantum wells under the electric field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, *42*(2), 136-140.

- Okan, S. E., Erdoğan, İ., & Akbaş, H. (2004). Anomalous polarization in an electric field and self-polarization in GaAs/AlAs quantum wells and quantum well wires. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, *21*(1), 91-95.

- Bahar, M. K., & Ersoy, A. (2010). Elektrik alan altındaki kare kuantum kuyusunun elektronik özelliklerinin pertürbatif ve analitik yöntem ile incelenmesi. *Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, *14*(1), 55-61.

- Bejan, D., & Niculescu, E. C. (2016). The effects of the intense laser and magnetic fields on the group velocity of light in GaAs/Al0. 3Ga0. 7As near-surface quantum well. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, *75*, 149-155.

- González, J. W., Porras-Montenegro, N., & Duque, C. A. (2006). ELECTRIC FIELD EFFECTS ON THE SHALLOW DONOR IMPURITY STATES IN GaAs-(Ga, Al) As QUANTUM-WELL WIRES. *Revista Colombiana de Física*, *38*(1).

- Gonzales J. W., Porras Montenegro, N. & Duque, C. A. (2005). The Effects of an Applied Electric Field for GaAs / AlGaAs Quantum Well using Various Methods Together with Effective Mass Approach. *Instituto de Física, Universidad de Antioquia. Email verificata su fisica. udea. edu. co.*

- Bilekkaya, A. (2008). *Çoklu Kuantum Tel ve Noktalarının Elektronik Özellikleri*.

- Bekar, B. (2010). "*Lazer alanlar altında kuantum kuyusu içerisindeki atomun incelenmesi*."

- Bekar, B. (2018). "*Azimuthal Manyetik Alan ve Lazer Alan Etkisinde Yarı İletken Kuantum Yapılarının Elektronik ve Optik Özellikleri*."

- Kılıçoğlu, Ö. (2008). "*Kuantum noktalarının elektrik ve manyetik alan altında elektronik özellikleri*"

- "*Arsenik-nedir, özellikleri, kullanım alanları ve çıkarıldığı yerler*." 10 Ocak 2018 tarihinde https://bilgihanem.com adresinden erişildi.

- "*Arsenik-nedir"* https://bilgifenerim.com adresinden erişildi.

- "*Galyum elementi nedir, özellikleri ve simgesi* " 3 Ocak 2018 tarihinde http://www.odevcini.com adresinden erişildi.

- Kaan S., "*Yarıiletkenler ve yarıiletken teknolojisi"* https://slideplayer.biz.tr/slide/2701879 adresinden erişildi.

- "*Galyum-nedir-özellikleri-kullanimi*" 20 ağustos 2019 tarihinde https://www.makaleler.com/ adresinden erişildi.

- "*Arsenik elementinin kimyasal ve fiziksel özellikleri*." http://www.odevcini.com adresinden erişildi.

- "*Aluminyum nedir ve kullanım alanları nerelerdir."* 23 Mayıs 2018 tarihinde https://www.yesiltaylar.com.tr adresinden erişildi.

- "*Galyum-elementi-nedir-özellikleri-simgesi- atom numarasi keşfi*." 09 Ocak 2012 tarihinde https: www.Alüminyum-NKFU.com adresinden erişildi.

- "*Yariiletkenlerin-özellikleri*" 04 Ocak 2014 tarihinde https://www.kuark.org/ adresinden erişildi.

- "*Low+dimensional+structures&source.*"https://www.researchgate.net/journal/Physics-of-Low-Dimensional-Structures-0204-3467 adresinden erişildi.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı: Hüsnü Özer

Medeni Hali: Bekar

Öğrenim Durumu:

2003-2007: Edirne Anadolu Lisesi

2007-2012: T.Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü (Lisans)

2015-2018: T.Ü. Mühendislik Fakültesi, Makine Müh. Bölümü (Lisans)

2014-2019: Anadolu Üni. İktisat Fak., Kamu Yönetimi Bölümü (Lisans)

2012-2021: T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı (YLD)