T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HİDROJENİK OLMAYAN YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

BARIŞ ÖZKAPI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI
DANIŞMAN: YRD. DOÇ. DR. SEYFETTİN DALGIÇ

EDİRNE – 2006

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HİDROJENİK OLMAYAN YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

BARIŞ ÖZKAPI

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMAN: YRD. DOÇ. DR. SEYFETTİN DALGIÇ

EDİRNE-2006

T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HİDROJENİK OLMAYAN YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

BARIŞ ÖZKAPI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Bu Tez 29 / 08 /2006 tarihinde Aşağıdaki Jüri Tarafından Kabul Edilmiştir.

…….	……	…..……..
Yrd. Doç.Dr. Seyfettin DALGIÇ	Yrd. Doç.Dr. Mustafa ULAŞ	Yrd. Doç. Dr. H.R.Ferhat KARABULUT
Danışman	Üye	Üye

ÖZET

Bu çalışmada sonlu kare ve dairesel kesitli GaAs/$Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum tellerinde verici yabancı atomun hidrojenik ve hidrojenik olmayan bağlanma enerjileri üzerine elektrik alan etkileri incelenmiştir. Hidrojenik ve hidrojenik olmayan bağlanma enerjileri, yabancı atom hesaba katılarak elektrik alan, tel genişliği ve Al konsantrasyonunun bir fonksiyonu olarak araştırılmıştır. Sonuçlar verici yabancı atomun merkez yakınlarında bulunması durumunda, hidrojenik olmayan bağlanma enerjisinin hidrojenik bağlanma enerjisinden büyük olduğunu gösterir. İki modelde de merkezdeki verici yabancı atomun bağlanma enerjileri arasındaki fark, merkez dışındaki yabancı atom konumlarına göre, kuantum telinin genişliği azaldıkça daha hızlı artar. Her iki modelde de, verici yabancı atomun bağlanma enerjilerinin uygulanan elektrik alana duyarlılığının aynı olduğu bulunmuştur.

Anahtar Kelimeler: Verici yabancı atom, Kuantum telleri, Elektrik alan

ABSTRACT

In this study, the effect of the electric field on the hydrogenic and non-hydrogenic binding energies of a donor impurty in finite square and cylindirical cross sectional GaAs/$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum well wires (QWWs) are considered. Taking into account the impurity ion, the hydrogenic and non-hydrogenic binding energies are investigated as a function of the electric field, wire width and concantration of Al. The results show that the non-hydrogenic binding energy of donor impurity located around the center is larger than that of the hydrogenic binding energy. The difference in binding energy of on center donor impurty in two regimes increases more rapidly with decreasing QWW width than other impurity positions. It has found that the sensitivity of the applied electric field on the donor binding energies is almost the same in the both regime.

Keywords: Shallow donor impurity, Quantum well wires, Electric field

TEŞEKKÜR

Bana bu çalışma ortamını sağlayan, danışmanlığımı üstlenen ve çalışmamın her adımında bilgilerinden yararlandığım sayın hocam Yrd. Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Bilgisayar Programlarını kullanmamda bana yardımcı olan ve engin bilgilerini benim ile paylaşan sayın hocam Yrd. Doç. Dr. Mustafa ULAŞ'a teşekkür ederim.

Çalışmanın yapıldığı T.Ü. Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Başkanlığı'na ve yardımlarından dolayı Prof. Dr. Serap DALGIÇ'a teşekkür ederim.

Bu çalışma boyunca maddi ve manevi desteğini üzerimden eksik etmeyen değerli AİLEM'e ve Arkadaşım Arş. Gör. Ünal DÖMEKELİ'ye , bilgilerini benimle paylaşan Arkadaşlarım Arş.Gör.Engin ÇİÇEK ve Arş. Gör. Ali İhsan MEŞE'ye teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET i
ABSTRACT ii
TEŞEKKÜR iii
İÇİNDEKİLER iv
ŞEKİLLERİN LİSTESİ vi
1. GİRİŞ 1
2. DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN SİSTEMLER 4
2.1. Kuantum Kuyuları 6
2.1.1. Sonsuz potansiyel kuyusu 7
2.1.2. Sonlu potansiyel kuyusu 9
2.2. Kuantum Tel Kuyular 10
2.2.1. Sonsuz kuantum teli 11
2.2.2. Sonlu kuantum teli 14
2.3. Kuantum Noktaları 16
3. TEORİ 17
3.1. Varyasyon Metodu 17
3.2. Düzgün Elektrik Alan Altında Kare Kesitli Sonlu Kuantum Telinde Hidrojenik ve Hidrojenik Olmayan Yabancı Atom Problemi 19
3.3. Düzgün Elektrik Alan Altında Dairesel Kesitli Sonlu Kuantum Telinde Hidrojenik ve Hidrojenik Olmayan Yabancı Atom Problemi 23
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA 26
4.1. Kare Kesitli Sonlu Kuantum Teli 26
4.2. Dairesel Kesitli Sonlu Kuantum Teli 40
4.3. Sonuçlar 50
KAYNAKLAR 51
ÖZGEÇMİŞ 53

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil 2.1. Dört temel sistemin basit yapıları 6

Şekil 2.2. Ga_{1-x} Al_x As- GaAs- Ga_{1-x} Al_x As kuantum kuyusu 6

Şekil 2.3. Simetrik sonsuz potansiyel kuyusu 7

Şekil 2.4. Simetrik sonlu potansiyel kuyusu 9

Şekil 2.5. Kare kesitli sonsuz kuantum teli 11

Şekil 2.6. Dairesel kesitli sonlu Kuantum teli 13

Şekil 4.1.a) Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerin tel genişliğine göre değişimleri (yabancı atom merkezde) 27

Şekil 4.1.b) Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerin tel genişliğine göre değişimleri (yabancı atom L_{xi}=0.5L ve L_{yi}= 0 konumunda) 28

Şekil 4.1.c) Farklı elektrik alan değerlerinde, bağlanma enerjilerin tel genişliğine göre değişimleri (yabancı atom L_{xi}= L_{yi}= 0.5L konumunda) 29

Şekil 4.2. Elektrik alan uygulanmadan, faklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimi 30

Şekil 4.3.a) Bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimleri (L=0.3a^*) 31

Şekil 4.3.b) Bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimleri (L=0.4a^*) 32

Şekil 4.3.c) Bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimi (L=0.5a^*) 33

Şekil 4.4. Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumlarına göre değişimleri 34

Şekil 4.5.a) Değişik Alüminyum konsantrasyonlarında bağlanma enerjilerinin tel genişliğine göre değişimleri (L_{xi}=L_{yi}=0) 35

Şekil 4.5.b) Değişik Alüminyum konsantrasyonlarında elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimi (L_{xi}=L_{yi}=0.5L) 36

Şekil 4.6. Elektrik alan uygulanmadan bağlanma enerjilerinin Alüminyum konsantrasyonuna göre değişimleri (L_x=L_y=L=0.3a^*) 37

Şekil 4.7.a) Farklı Alüminyum konsantrasyon değerlerinde, bağlanma enerjileri farkının tel genişliğine göre değişimleri ($L_{xi}=L_{yi}=0$) 38
Şekil 4.7.b) Farklı Alüminyum konsantrasyon değerlerinde, bağlanma enerjileri farkının tel genişliğine göre değişimleri ($L_{xi}=L_{yi}=0.5L$) 39
Şekil 4.8.a) Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerin tel yarıçapına göre değişimleri (yabancı atom merkezde) 41
Şekil 4.8.b) Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerin tel yarıçapına göre değişimleri (ρ_i =0.5d) 42
Şekil 4.9. Elektrik alan uygulanmadan, faklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerjisinin tel yarıçapına göre değişimleri 43
Şekil 4.10. Bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimleri. 44
Şekil 4.11. Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimleri 45
Şekil 4.12. Değişik Alüminyum konsantrasyonlarında bağlanma enerjilerinin tel yarıçapına göre değişimleri. 46
Şekil 4.13. Elektrik alan uygulanmadan bağlanma enerjilerinin Alüminyum konsantrasyonuna göre değişimleri 47
Şekil 4.14.a) Farklı Alüminyum konsantrasyon değerlerinde, bağlanma enerjileri farkının tel yarı çapına göre değişimi (ρ_i=0) 48
Şekil 4.14.b) Farklı Alüminyum konsantrasyon değerlerinde, bağlanma enerjileri farkının tel yarı çapına göre değişimi (ρ_i =0.5d) 49

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Son yıllarda nanometre mertebesindeki düşük boyutlu yarıiletken yapılar üzerine yapılan yoğun çalışmalar, bu yapılara olan ilgiyi arttırmış ve birçok araştırmacının ilgisi bu yapılar üzerine yoğunlaşmıştır (Wegschneider vd. 1993, Sakaki ve Noge 1993, Latge vd. 1994, Jhonson 1995, Montes vd. 1997, Montes vd. 1998, Zang ve Xie 2003, Yu vd. 2003, Ulaş vd. 2004, Ulaş vd. 2005, Dalgıç vd. 2005). Molecular Beam Epitaxy (MBE), Liquid Phase Epitaxy (LPE) ve Metal-Organic Chemical Vapor (MOCV) gibi epitaksiyel kristal büyütme tekniklerindeki gelişmeler ile birlikte Quasi-iki-boyutlu (Q2D) kuantum kuyuları, Quasi-bir-boyutlu (Q1D) kuantum telleri ve Quasi-sıfır-boyutlu (Q0D) kuantum noktaları gibi düşük boyutlu yarıiletken yapıların üretimi mümkün hale gelmiştir (Casey ve Panish 1978, Bastard 1981, Hjalmarson 1982, Greene ve Bajaj 1983, Lee ve Spector 1985, Ploog ve Growth 1987, Gumbs ve Salman 1990, Plauth vd. 1991). Düşük boyutlu yarıiletken yapılar optik ve elektronik fiziksel özellikleri yönünden diğer yarıiletkenlerden farklılıklar göstermektedir (Gassard 1986, Berggren 1988). Bu farklılıkların fiziğinin tam olarak anlaşılmasının yeni elektronik devre elemanlarının üretimindeki rolünün büyük olduğu fikri benimsenmiş ve bu durum büyük bir ilgi görmüştür. Örneğin; kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları gibi yapıların yüksek elektron geçişli transistörler gibi bir çok yarıiletken devre elemanının üretiminde uygulanması, çok hızlı bilgisayarların üretilmesine imkan tanımış ve bu konudaki çalışmaların devamını sağlamıştır.

Genel olarak düşük boyutlu yarıiletken yapılar kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak üç ana başlık altında toplanabilirler (Weber 1995, Hassan ve Meshad 1997, Lee ve Spector 1985, Bryant 1985, Brown ve Spector 1985, Yoffe 1993, Bose 1998,). Daha sonraki bölümlerde bu yapılar geniş bir şekilde ele alınacaktır. Boyut kavramı ile burada ifade edilmek istenilen, yük taşıyıcıların (elektron veya boşlukların) serbestçe hareket edebileceği yön sayısıdır. Yük taşıyıcıların hareket edebileceği yön sayısı, yani sistemin boyutu değiştiğinde, sistemin fiziksel özellikleri

de değişim gösterecektir. Kuantum kuyularına en yaygın örnek olarak Ga_{1-x} Al_x As/GaAs/ Ga_{1-x} Al_x As sistemi verilebilir. Bu sistemde iki aynı tür yarıiletken tabakanın arasına farklı bir yarıiletken tabaka yerleştirilmiştir. Kuantum kuyularında yük taşıyıcıların hareketi iki boyutta sınırlanır. Yani yük taşıyıcılar iki boyutta serbest parçacık olarak hareket edebilirlerken, farklı tabakaya doğru (kristal büyütme yönünde) hareket ettiklerinde hareketleri sınırlanır ve enerjileri kuantize olur. Bu yapıların önemli uygulamalarından birisi de tabakaların ard arda sıralanmasıyla oluşturulan süper-örgülerdir.

Yük taşıyıcıların hareketinin bir boyutta sınırlanması ile oluşan sistemlere kuantum telleri adı verilir. Böyle sistemlerde taşıyıcı yani elektron sadece bir yönde hareket edebilirken diğer iki yönde hareketleri sınırlanır ve kuantize olur. $Ga_{1-x}Al_x$ As yarıiletken tabaka ile çerçevelenmiş, kesit geometrisi farklı olabilen GaAs yarıiletken tabakanın oluşturduğu sistemler kuantum tellerine birer örnek teşkil eder. Mikro fabrikasyon tekniklerindeki önemli gelişmeler ile birlikte bu tür yapıların elde edilmesi mümkün hale gelmiştir.

Yük taşıyıcıların hareketinin üç boyutta sınırlandığı sistemler yani sıfır boyutlu sistemler ise kuantum noktaları olarak adlandırılır. Ga_{1-x} Al_x As yarı iletken tabakasının içine yerleştirilen GaAs tabakasıyla oluşturulan sistem kuantum kuyularına iyi bir örnektir.

Kuantum telleri üzerine elektrik alan uygulayarak çeşitli çalışmalar yapılmış ve hidrojenik ve hidrojenik olamayan (non-hidrojenik) bağlanma enerjileri farklı geometriler için incelenmiştir (Oliveira ve Falikov 1986, Ulaş vd. 1997, Ulaş vd. 1998, Csavinszky ve Oyoko 1990, Oyoko 2000, Ulaş vd. 2004, Dalgıç vd. 2005).

Bu tezin amacı sonlu potansiyel enerji fonksiyonuna sahip kare ve dairesel kesitli kuantum tellerindeki elektronun hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda yabancı atoma bağlanma enerjilerinin hesaplanmasına dayanır. Hesaplamalarımızda Efektif kütle yaklaşımı ve Varyasyon metodu kullanılmıştır.

Bu yüksek lisans tezi ana hatları ile şu şekilde düzenlenmiştir; 1. bölümde konuya kısa bir giriş yapılmıştır. Bölüm 2.'de düşük boyutlu yarıiletken sistemler ele alınarak genel açıklamalar verilmektedir. 3. bölümde kullanılan metod açıklanarak elektronun yabancı atoma bağlanma enerji hesaplamaları için kullanılan teoriler

verilmektedir. Son bölüm ise elde edilen sonuçlara ve sonuçların tartışmasına ayrılmıştır.

BÖLÜM 2

DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN SİSTEMLER

Molecular Beam Epitaxy (MBE) ve Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOVCD) gibi epitaksiyel büyütme tekniklerinden yaralanılarak, farklı band aralığına sahip olan yarıiletkenlerin atomik tabakalar halinde birbiri ardına büyütülmesi ile elde edilen yapılar düşük boyutlu yada iki boyutlu yapılar olarak adlandırılır. Bu yapılar, yarıiletkenlerde yük taşıyıcıların (elektron veya boşlukların) kristal büyütme doğrultusunda kuantize olduğu ve diğer iki boyutta serbest olarak hareket edebildiği yapılardır. Düşük boyutlu yarıiletken sistemler yük taşıyıcıların serbest olarak hareket edebildiği yön sayısına göre kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak üç grupta toplanabilirler.

Bir kuantum kuyusunda elektronlar sadece iki uzaysal yönde hareket edebilir ve diğer yöndeki hareketleri ise yasaklanmıştır. Böylece bir kuantum kuyu yapıda elektronlar iki boyutlu elektron gazı sistemi oluşturur. Kuantum kuyusu yüksek iletkenlik bant enerjisine sahip iki yarıiletken tabaka arasına yerleştirilmiş çok ince düz bir yarıiletken tabaka olup, iki malzemenin iletkenlik bandı enerjileri arasındaki fark, elektronları ince bir tabakaya kısıtlar. Genel olarak kuantum kuyuları oluşturmak için malzeme GaAs ve engel olarak kullanılan malzeme ise $Ga_{1-x}Al_xAs$'tir.

Kuantum telleri, kuantum kuyusu içeren bir numunede kazıma yapılarak çok ince çizgiler şeklinde üretilirler. Kuantum tellerinde elektronlar tek bir yönde serbestçe hareket edebilirlerken, diğer iki yöndeki hareketleri sınırlandırılır. Böyle bir sistemde elektronlar bir boyutlu elektron gazı sistemini oluştururlar. Bir kuantum noktasında ise elektronlar hiçbir serbest yöne sahip değillerdir ve bu yüzden sıfır boyutlu yapılar olarak adlandırılırlar.

Yük taşıyıcıların (elektron veya boşlukların) ince yarıiletken bir tabakaya hapsedilmesi ile sağlanan boyuttaki azalmanın, elektronların hareketinde önemli derecede farklılığa sebep olduğu görülür. Bu temel kural elektronların etrafındaki boyutu iki boyutlu kuantum kuyusundan bir boyutlu kuantum teline ve en sonunda sıfır

boyutlu kuantum noktasına düşürmekle geliştirilebilir. Bu durumda boyut, elektronların momentumunda serbestlik derecesini gösterir. Genellikle, bir kuantum kuyusunda elektronlar bir yönde sınırlandırılmışken, bir kuantum telinde iki yönde sınırlandırılmıştır ve böylece serbestlik derecesi bire inmiştir. Bir kuantum noktasında ise elektronlar üç yönde sınırlandırılmış ve böylece serbestlik derecesi sıfıra düşmüştür. Serbestlik derecesi sayısı D_f ve sınırlandırılmış yön sayısı D_c ile gösterilirse tüm katıhal sistemleri için ,

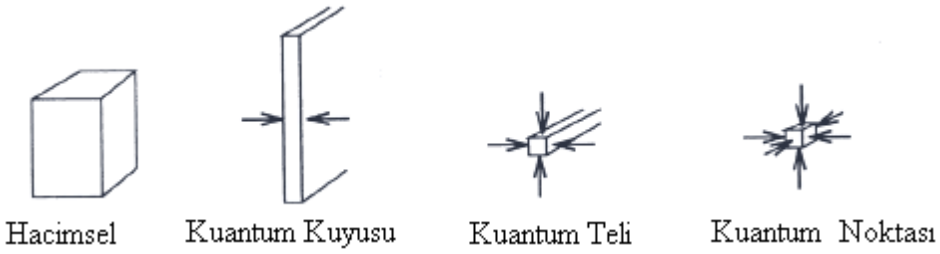
$$D_f + D_c = 3 \tag{2.1}$$

ifadesi yazılabilir. Bu değerler tablo 2.1.' de görülen dört durum için belirtilmiştir. Düşük boyutlu sistemler, D_c sınırlı yönlerin sayısından çok, elektron hareketinde geri kalan serbestlik derecesi sayısı D_f ile isimlendirilmektedir.

Tablo 2.1. Dört temel boyutta sistemler için D_c sınırlı yönlerin sayısı ile beraber elektronların hareketinde D_f serbestlik derecesi sayısı.

Sistem	$\boldsymbol{D_c}$	$\boldsymbol{D_f}$
Hacimsel	0	3
Kuantum kuyusu	1	2
Kuantum Teli	2	1
Kuantum Noktası	3	0

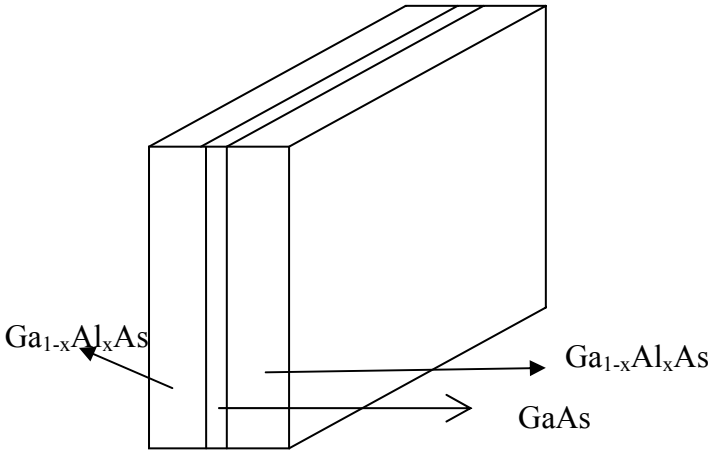
Bu dört temel sistemlerin basit yapıları da şekil 2.1.' de gösterilmiştir. Şimdi bu sistemleri daha ayrıntılı bir biçimde inceleyelim.



Şekil 2.1. Dört temel sistemin basit yapıları

2.1. Kuantum Kuyuları

Kuantum kuyularının oluşturulmasında en çok kullanılan yapı $Ga_{1-x}Al_xAs$ ve Ga As yarıiletkenlerinden oluşan yapıdır. Burada X yarıiletken malzeme içinde bulunan Alüminyum konsantrasyonunu belirleyen bir değişken olarak tanımlanır. Alüminyum konsantrasyonu X, 0 ile 1 arasında değişen değerler alabilir. X değerinin artması ile $Ga_{1-x}Al_x$ As' in band aralığı (Eg) artar. Alüminyum konsantrasyonu X > 0.45 olduğu değerler için Ga_{1-x} Al_x As yarıiletkeni indirek aralıklı, X' in diğer bütün değerleri için direkt aralıklıdır. Şekil 2.2.' de çok ince , dar band aralıklı bir GaAs aktif tabakasının, iki kalın ve daha geniş band aralıklı Ga_{1-x} Al_x As tabakaları arasına sandviçlenmesiyle oluşan kuantum kuyusu gösterilmiştir. Kuantum kuyuları, sahip oldukları potansiyel duvarlarına göre, sonsuz kuantum kuyusu ve sonlu kuantum kuyusu olarak iki başlıkta incelenebilir.



Şekil 2.2. Ga_{1-x} Al_x As- GaAs- Ga_{1-x} Al_x As kuantum kuyusu

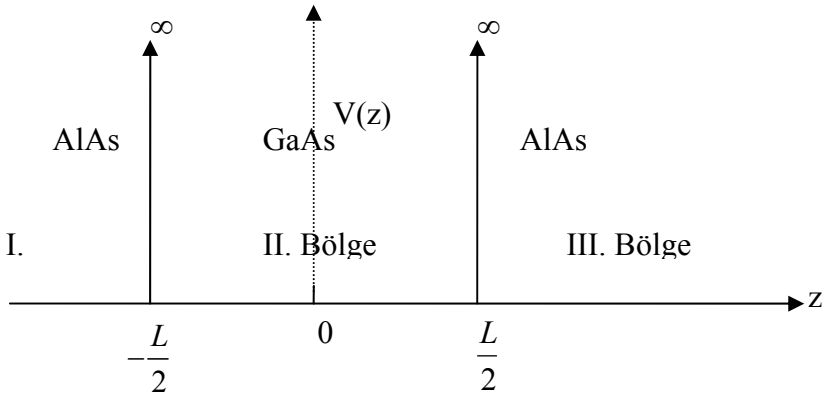
Bu yapıda Ga As tabakasındaki elektronların hareketi sanki bir kuantum kuyusu içinde sınırlanmıştır. İletkenlik bandının kenarları elektronlar için, valans bandının kenarları da boşluklar için bir potansiyel kuyusu oluşturur. GaAs' in band aralığı Ga_{1-x} Al_x As' in band aralığından daha küçüktür. Bu nedenle GaAs bir kuantum kuyusu gibi davranır ve Ga_{1-x} Al_xAs elektron ve boşlukların her ikisi için de bir potansiyel engel oluşturur. Ga As ve Ga_{1-x} Al_xA_S yarıiletkenlerinin band yapılarındaki bu farklılıktan dolayı, sistemin band diyagramında, iletkenlik ve valans bandı kenarları arasındaki geciş bölgesinde süreksizlikler oluşmaktadır.

2.1.1. Sonsuz Potansiyel Kuyusu

Bu yapıda, potansiyel duvarlarının yüksekliği sonsuz kabul edilebilir ve elektronlar iki sonsuz potansiyel duvarı arasına hapsedilirler. Bu tür bir kuyuda hapsedilmiş bir elektronu göz önüne alırsak bu kuyunun potansiyel fonksiyonu,

$$V(z)=\begin{cases}\infty & z\le -\dfrac{L}{2}\\ 0 & -\dfrac{L}{2}<z<\dfrac{L}{2}\\ \infty & z\le \dfrac{L}{2}\end{cases} \qquad (2.2)$$

formunda verilir. *V(z)* potansiyeline sahip bu simetrik sonsuz potansiyel kuyusunun şematik gösterimi Şekil 2.3' te verilmiştir.



Şekil 2.3. Simetrik sonsuz potansiyel kuyusu

Parçacık sonsuz potansiyel yüksekliğine sahip kuyu içinde olduğundan parçacığın I. ve III. bölgelerde, yani kuyu dışında olma olasılığı sıfırdır. Burada *Ψ(z)* dalga fonksiyonu kuyu dışında sıfır olmalı ve Schrödinger denkleminin çözümü sadece II. Bölgede, kuyu içinde olmalıdır. Buna göre simetrik sonsuz potansiyel kuyusu içindeki elektronun Hamiltonyen'i,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} \tag{2.3}$$

olmak üzere Schrödinger denklemi ,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}\Psi(z) = E\Psi(z) \tag{2.4}$$

formunda yazılır. Burada $k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ olup, Schrödinger denkleminin çözümüyle elde edilen dalga fonksiyonu ,

$$\Psi(z) = A\sin(kz) + B\cos(kz) \tag{2.5}$$

ile ifade edilir. Sınır şartlarının uygulanmasıyla parçacığın Enerjisi,

$$E_n = \frac{\pi\ \hbar^2}{2m^*L^2}n^2 \tag{2.6}$$

formunda elde edilir . Burada n=0,1,2,… şeklindeki kuantum sayıları, m^* ise parçacığın etkin kütlesidir. Dalga fonksiyonu için tek ve çift çözümler

$$\psi_n^+(z) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos(\frac{n\pi}{L}z) \qquad n \text{ tek} \tag{2.7}$$

$$\psi_n^-(z) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}z) \qquad n\ çift \tag{2.8}$$

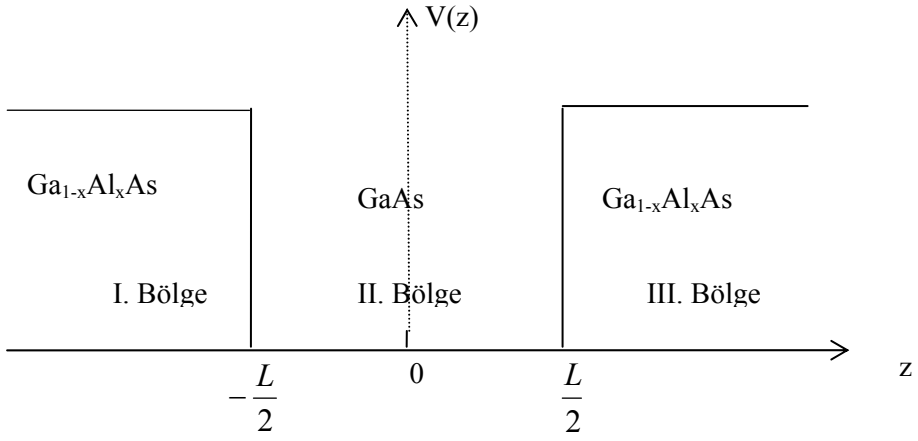
formunda elde edilirler.

2.1.2 Sonlu potansiyel kuyusu

Bu tip kuantum kuyularının potansiyel duvarlarının sonlu bir V_0 değeri aldığı kabul edilir. Bu durumda oluşan kuyuya örnek olarak simetrik sonlu potansiyel kuyusu verilebilir. Böyle bir kuyunun potansiyel fonksiyonu,

$$V(z)=\begin{cases} V_0 & z \le -\dfrac{L}{2} \\ 0 & -\dfrac{L}{2} < z < \dfrac{L}{2} \\ V_0 & z \le \dfrac{L}{2} \end{cases} \tag{2.9}$$

formunda verilir . Bu kuyunun şematik gösterimi ise Şekil 2.4.' de gösterilmiştir.



Şekil 2.4. Simetrik sonlu kuantum kuyusu

Simetrik sonlu kuantum kuyusu içinde göz önüne alınan bir elektron için Hamiltonyen ,

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}+V(z) \tag{2.10}$$

formunda yazılır. Bu Hamiltonyen kullanılarak kuyunun üç bölgesinde Schrödinger

denkleminin çözümü aranır. Uzun matematiksel işlemlerin sonucunda I.,II.,ve III. bölgelerdeki dalga fonksiyonları tek pariteli ve çift pariteli durumlar için,

$$\psi_{tek}(z)=\begin{cases} -A\sin(k_2\frac{L}{2})\exp(k_1\frac{L}{2})\exp(k_1 z) & z\le -\frac{L}{2} \\ A\sin(k_2\frac{L}{2}) & -\frac{L}{2}<z<\frac{L}{2} \\ A\sin(k_2\frac{L}{2})\exp(k_1\frac{L}{2})\exp(-k_1 z) & z\ge \frac{L}{2} \end{cases} \qquad (2.11)$$

$$\psi_{çift}(z)=\begin{cases} A\cos(k_2\frac{L}{2})\exp(k_1\frac{L}{2})\exp(k_1 z) & z\le -\frac{L}{2} \\ A\cos(k_2\frac{L}{2}) & -\frac{L}{2}<z<\frac{L}{2} \\ A\cos(k_2\frac{L}{2})\exp(k_1\frac{L}{2})\exp(-k_1 z) & z\ge \frac{L}{2} \end{cases} \qquad (2.12)$$

formları elde edilir.Burada $k_1=\sqrt{\frac{2m^*(V_0-E)}{\hbar^2}}$, $k_2=\sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ sabitler olup, A ise normalizasyon sabitidir. Aynı zamanda k_1 ve k_2 arasında

$$k_1=k_2\tan(k_2\frac{L}{2}) \qquad \text{veya} \qquad k_1=-k_2\cot(k_2\frac{L}{2}) \qquad (2.13)$$

bağıntısı vardır.

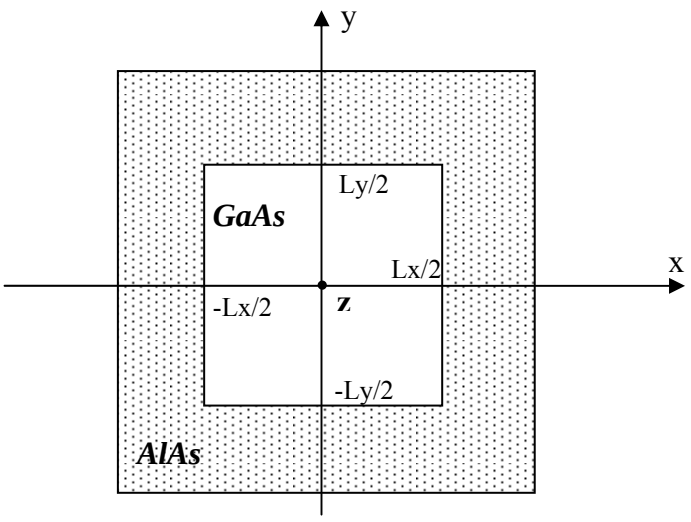
2.2. Kuantum Tel Kuyular

Çok ince kuantum tel kuyuların yapımının mümkün olduğu fikri ilk olarak H. Sakaki tarafından ortaya atılmıştır (Sakaki, 1980). Kuantum telleri, kuantum kuyusu içeren bir malzemede kazıma yapılarak çok ince çizgiler şeklinde üretilirler. Bu yapıların üretiminde de en çok kullanılan malzeme Ga As ve Ga_{1-x} Al_xA_S yarıiletken

malzemeleridir. Boyutları elektronun de Broglie dalga boyu (~500A^{o}) mertebesindeki mikro yapılarda taşıyıcı hareketi iki yönde (x-y) sınırlı iken üçüncü yön (z) doğrultusunda serbesttir. Kuantum telleri de sonsuz kuantum teli ve sonlu kuantum teli olarak iki başlık altında incelenebilir.

2.2.1. Sonsuz kuantum teli

Sonsuz kuantum teli, $Ga_{1-x}\ Al_xA_S$ yarıiletken malzemesindeki Alüminyum konsantrasyonu X=1 seçilmesiyle elde edilir. Al ve Ga malzemeleri arasındaki potansiyel enerji farkı çok yüksek olduğundan elektronun çevresinde sonsuz büyüklükte bir potansiyel enerji engeli görmesine neden olur ve hareketi iki yönde sınırlanır. Bu nedenle elektron sadece tek yönde (z) serbest hareket edebilir (Sakaki 1980, Brum 1985, Narayani ve Sukumar 1994, Ulaş vd 1997, Ulaş vd 1998). Bu yapıların kare ve dairesel kesitli basit şematik gösterimleri sırasıyla Şekil 2.5.' de ve Şekil 2.6.' da gösterilmiştir.



Şekil 2.5. Kare kesitli sonsuz kuantum teli

Şekil 2.5' te görüldüğü gibi AlAs-GaAs yarıiletken malzeme ile kare kesitli sonsuz kuantum telinin ekseni z-ekseni ve kesiti x-y düzlemi olacak şekilde oluşturulmuştur. Bu tel yapı için de hapsolmuş bir elektron göz önüne alınırsa, elektron

GaAs malzeme içinde hapsolmuştur. Elektronun görmüş olduğu potansiyel enerji fonksiyonu,

$$V(x,y)=\begin{cases}0 & |x|\le\frac{L_x}{2}, \quad |y|\le\frac{L_y}{2}\\ \infty & |x|>\frac{L_x}{2}, \quad |y|>\frac{L_y}{2}\end{cases} \tag{2.14}$$

yazılabilir. Böyle bir potansiyel gören, tel içindeki elektron için Hamiltonyen,

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right) \tag{2.15}$$

formunu alır. Schrödinger denkleminin çözümüyle altband enerjileri,

$$E_{nm}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*}\left(\frac{n^2}{L_x^2}+\frac{m^2}{L_y^2}\right) \tag{2.16}$$

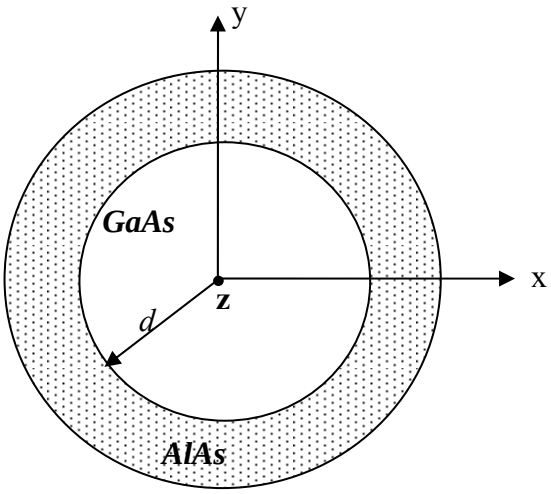
formunda elde edilir. Temel durum için enerji,

$$E_0=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*}\left(\frac{1}{L_x^2}+\frac{1}{L_y^2}\right) \tag{2.17}$$

formunu alır (Brum 1985). Bu temel durum enerjisine karşılık gelen dalga fonksiyonu,

$$\Psi_0(x,y)=N_0\cos\left(\frac{\pi}{L_x}x\right)\cos\left(\frac{\pi}{L_y}y\right) \tag{2.18}$$

formundadır. Burada N_0 Normalizasyon sabitidir.



Şekil 2.6. Dairesel kesitli sonsuz tel

Şekil 2.6.' da ise AlAs-GaAs yarıiletken malzeme ile dairesel kesitli sonsuz kuantum teli, ekseni z-ekseni ve kesiti x-y düzlemi olacak şekilde oluşturulmuştur. Bu tel yapı içindeki bir elektronu göz önüne alınırsa, elektron GaAs malzeme içinde hapsedilir. Elektronun görmüş olduğu potansiyel enerji fonksiyonu,

$$V(\rho,\varphi)=\begin{cases}0 & \rho \le d \\ \infty & \rho > d\end{cases} \tag{2.19}$$

formunu alır. Bu potansiyel engeline sahip tel içindeki bir elektron Hamiltonyeni,

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{d^2}{d\varphi^2}\right)+V(\rho,\varphi) \tag{2.20}$$

formu ile verilir. Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen temel durum dalga fonksiyonu,

$$\Psi_0(\rho,\varphi)=N_0 J_0(r_{10}\rho) \tag{2.21}$$

formundadır. Burada $J_0(r_{10}\rho)$ birinci tür Bessel fonksiyonu olup r_{10} =2.4048.../d dir.

2.2.2. Sonlu kuantum teli

Potansiyel engeli değerinin V_0 gibi sonlu bir değer aldığı durumlarda oluşan kuantum tel kuyu yapıları , sonlu kuantum telleri olarak adlandırılırlar. Bu durumda yük taşıyıcıların tel dışında bulunma olasılıkları vardır. Kare kesitli sonlu bir kuantum tel kuyu için potansiyel enerji fonksiyonu ,

$$V(x,y)=\begin{cases} V_0 & x<-\dfrac{L_x}{2}, \quad y<-\dfrac{L_y}{2} \\ 0 & -\dfrac{L_x}{2}\le x\le\dfrac{L_x}{2}, \quad -\dfrac{L_y}{2}\le y\le\dfrac{L_y}{2} \\ V_0 & \dfrac{L_x}{2}<x\,, \quad \dfrac{L_y}{2}<y \end{cases} \tag{2.22}$$

formunda verilir. Bu yapıdaki bir tel kuyu içindeki elektronun Hamiltonyeni,

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right)+V(x,y) \tag{2.23}$$

formunda yazılır. Böylece elektronun hareketi x ve y yönleri boyunca sınırlı z-yönü boyunca ise serbesttir. Schrödinger denkleminin çözümünden, temel durum için dalga fonksiyonu,

$$\psi_0(x,y)=N_0\begin{cases} \exp(k_2(x+y)) & x<-\dfrac{L_x}{2}, \quad y<-\dfrac{L_y}{2} \\ \cos(k_1x)\cos(k_1y) & -\dfrac{L_x}{2}\le x\le\dfrac{L_x}{2}, \quad -\dfrac{L_y}{2}\le y\le\dfrac{L_y}{2} \\ \exp(-k_2(x+y)) & \dfrac{L_x}{2}<x\,, \quad \dfrac{L_y}{2}<y \end{cases} \tag{2.24}$$

formunda bulunur. Burada N_0 normalizasyon sabiti, $k_1 = \sqrt{\frac{2m^* E_0}{\hbar^2}}$ ve $k_2 = \sqrt{\frac{2m^*(V_0 - E_0)}{\hbar^2}}$ sabitlerdir. Sınır koşullarının uygulanması ile enerji öz değeri için,

$$k_2^2 = k_1^2 \frac{(1-\cos(k_1 L)}{(1+\cos(k_1 L)} \tag{2.25}$$

ifadesi bulunur. Burada $L_x = L_y = L$ alınmıştır.

Silindir kesitli tel kuyu ele alınırsa, Bu yapı için potansiyel enerji fonksiyonu,

$$V(\rho,\varphi) = \begin{cases} 0 & \rho \le d \\ V_0 & \rho > d \end{cases} \tag{2.26}$$

formu ile verilir. Schrödinger denkleminin çözümünden temel durum için dalga fonksiyonu,

$$\Psi_0(\rho,\varphi) = N_0 \begin{cases} J_0(r_{10}\rho) & \rho \le d \\ \dfrac{j_0(r_{10}d)}{K_0(b_{10}d)} K_0(b_{10}\rho) & \rho > d \end{cases} \tag{2.27}$$

formunda elde edilir. Burada $r_{10} = \sqrt{\frac{2m^* E_0}{\hbar^2}}$, $b_{10} = \sqrt{\frac{2m^*(V_0 - E_0)}{\hbar^2}}$, dir.

Bölüm 3' te kare ve dairesel kesitli sonlu kuantum tellerinin hidrojenik ve hidrojenik olmayan (non-hidrojenik) durumlardaki elektronik özellikleri, daha ayrıntılı bir şekilde ele alınacaktır.

2.3. Kuantum Noktaları

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

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

BÖLÜM 3

TEORİ

Fizikte bazı problemlerin analitik çözümü çok zordur. Bunun yerine bazı yaklaşım metotları kullanılarak sayısal hesaplamalar yapılır. Bu tezde de etkin kütle yaklaşımında varyasyon metod kullanılmıştır. Şimdi bu metodu kısaca açıklayalım.

3.1. Varyasyon Metodu

Bu metodta , H Hamiltonyen işlemcisini kullanarak sistemin en düşük enerji seviyesine karşılık gelen öz fonksiyonun biçimi hakkında tahminde bulunulabilen öz değer problemlerine uygulanabilir. Varyasyon metodu, tahmin edilen dalga fonksiyonu kullanılarak taban durum enerjisini minimize etmeyi hedefleyen bir metottur. Bu metodun faydası, başlangıçta uygun bir dalga fonksiyonu belirlenmesine bağlıdır. Dalga fonksiyonu ne kadar iyi seçilirse o kadar doğru sonuca ulaşılır. Dalga fonksiyonunun belirlenmesinde, sistemin simetrisi ve diğer fiziksel özellikleri etkindir. Ayrıca varyasyon metodu ile sistemin temel durumundan başka diğer durumları da incelenebilir.

Bir H Hamiltonyen işlemcisinin öz değerleri E_n ve öz vektörleri de $\{U_n\}$ ise sistemin temel durumu için,

$$HU_0 = E_0U_0 \tag{3.1}$$

ifadesi yazılır. Varyasyon uygulanacak sistemin herhangi bir ψ dalga fonksiyonu için Hamiltonyen'inin beklenen değeri ,

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

formunda yazılabilir. ψ dalga fonksiyonu normalize edilmişse payda bire eşit olur. Bu denklemin sağlanabilmesi $\psi = U_0$ olduğunda mümkündür. Her ψ durumu $\{ U_i \}$ öz vektörlerinin süperpozisyonu olarak

$$\psi = \sum_{i}^{\infty} c_i U_i \tag{3.3}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\sum_{c} |c_i|^2 = 1$ Normalize edilmiş dalga fonksiyonu durumunu gösterir. Sistemin enerjisi,

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

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

$$= \sum_i c_i^* c_i E_i = \sum_i |c_i|^2 E_i \tag{3.4}$$

formunda elde edilir. Temel durum enerjisi her zaman diğer enerjisinden düşük olduğu için ($E_i \geq E_0$), serinin her teriminde E_i yerine E_0 alınırsa,

$$E \geq \sum_i |c_i|^2 E_0 = E_0 \sum_i |c_i|^2$$

$$E \geq E_0 \tag{3.5}$$

ifadesi elde edilir. Bu eşitliğe göre E değeri ne kadar küçültülebilirse, temel duruma o kadar çok yaklaşılmış olunur. Seçilen ψ deneme dalga fonksiyonu bir λ parametresi

içeriyorsa bulunan E değeri de bu λ parametresine bağlı olur. O halde, E değeri bu λ parametresine göre minimize edilerek temel duruma iyice yaklaştırılır. Bu değişken $\langle H \rangle$ ' nin mümkün en küçük değerini alıncaya kadar değiştirilir.

$\psi = \psi(\ , \lambda)$ olmak üzere,

$$E(\lambda) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad , \quad \frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0 \tag{3.6}$$

formunda ifade edilir. Bu yöntem daha genel olarak ($\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots\ldots\ldots \lambda_n$) gibi bir çok parametreye uygulanabilir.

3.2. Düzgün Elektrik Alan Altında Kare Kesitli Sonlu Kuantum Telinde Hidrojenik ve Hidrojenik Olmayan Yabancı Atom Problemi

Kare kesitli kuantum telleri için Kartezyen koordinatları kullanmak uygundur. z yönü boyunca uzanan kare kesitli kuantum teli için potansiyel fonksiyonu, denklem (2.22), sistemin Hamiltonyeni, denklem (2.23)'de ve Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen temel durum için dalga fonksiyonu, denklem (2.24)'de verilmiştir. Bilindiği gibi kare kesitli kuantum telinde $L_x = L_y = L$' dir. Dışarıdan uygulanan düzgün elektrik alanın, bu kuantum tel yapının alt bant enerjilerine etkisini hesaplamak için kullanılan Hamiltonyen,

$$H_1 = H_0 + \eta \left(x \cos\theta + y \sin\theta \right) \tag{3.7}$$

formunda verilir. Burada $\eta = |e|F$ ve F telin dik eksenine uygulanan elektrik alan şiddetidir. θ ise pozitif x-ekseni ve uygulanan elektrik alan arasındaki açıdır. Bu durumda deneme dalga fonksiyonu ,

$$\Psi_1(x,y) = N_1 \, \Psi_0(x,y) \exp\left[-\beta \left(x \cos\theta + y \sin\theta \right) \right] \tag{3.8}$$

formunda tekrar yazılır. Burada N_1, normalizasyon sabiti ve β ise varyasyon parametresidir. Yabancı atomun konumu $(\mathbf{x_i},\mathbf{y_i},0)$ olarak alınırsa , etkin kütle yaklaşımında hamiltonyen,

$$H_h = H_1 - \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{e^2}{\varepsilon_0\sqrt{\left|\mathbf{x}-\mathbf{x_i}\right|^2+\left|\mathbf{y}-\mathbf{y_i}\right|^2+z^2}} \tag{3.9}$$

formunda verilir. Burada alt indis *h*, hidrojenik durumu , ε_0 ise statik dielektrik sabitini gösterir. Bu durumda hapsedilmiş elektron için deneme dalga fonksiyonu,

$$\Psi_h(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z}) = \mathrm{N_h}\,\Psi_1(\mathrm{x},\mathrm{y})\exp\left(-\lambda_h\sqrt{\left|\mathbf{x}-\mathbf{x_i}\right|^2+\left|\mathbf{y}-\mathbf{y_i}\right|^2+z^2}\right) \tag{3.10}$$

formunda tanımlanır. Burada N_h hidrojenik durumda normalizasyon sabiti ve λ_h varyasyon parametresidir. Hidrojenik olmayan verici atom için Hamiltonyen,

$$H_{nh} = H_1 - \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{e^2}{\varepsilon(\mathrm{r})\sqrt{\left|\mathbf{x}-\mathbf{x_i}\right|^2+\left|\mathbf{y}-\mathbf{y_i}\right|^2+z^2}} \tag{3.11}$$

formunda verilir. Burada alt indis *nh* hidrojenik olmayan sistemi gösterir. $\varepsilon(r)$ ise konuma bağlı olarak değişen (uzaysal bağımlı) bir dielektrik fonksiyonu olup,

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathrm{r})} = \frac{1}{\varepsilon_0} + \left(1-\frac{1}{\varepsilon_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{c}\right) \tag{3.12}$$

formunda verilen Hermanson dielektrik fonksiyonu olarak tanımlanır. Burada *c* perdeleme sabitidir ve *c = 0.8 a.u.* veya *0.004286* a^* alınır. $r \to 0$ iken $\varepsilon \to 1$ ve $r \to \infty$ iken $\varepsilon \to \varepsilon_0$ olduğu açıkça görülmektedir (Hermanson 1966, Oliveria ve Falicov 1986, Csavinsky ve Oyoko 2000, Ulaş vd. 2004). Bu durumda yabancı atoma bağlı elektron için deneme dalga fonksiyonu,

$$\Psi_{\mathrm{nh}}(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z}) = \mathrm{N}_{\mathrm{nh}}\,\Psi_1(\mathrm{x},\mathrm{y})\exp\left(-\lambda_{\mathrm{nh}}\sqrt{\left|\mathbf{x}-\mathbf{x_i}\right|^2+\left|\mathbf{y}-\mathbf{y_i}\right|^2+z^2}\right) \tag{3.13}$$

formu ile ifade edilir. Burada N_{nh} ve λ_{nh} hidrojenik olmayan sistem için sırasıyla normalizasyon sabiti ve varyasyon parametresidir. Hidrojenik olmayan yabancı atom için bağlanma enerjisi,

$$E_b^{\,nh} = \left[\frac{\langle\psi_1(x,y)|H_1|\psi_1(x,y)\rangle}{\langle\psi_1(x,y)|\psi_1(x,y)\rangle}\right]_{\beta_{\min}} - \left[\frac{\langle\psi_{nh}(x,y,z)|H_{nh}|\psi_{nh}(x,y,z)\rangle}{\langle\psi_{nh}(x,y,z)|\psi_{nh}(x,y,z)\rangle}\right]_{\lambda nh_{\min}} \tag{3.14}$$

formunda tanımlanır. Bu denklemdeki $\psi_{nh}(x,y,z)$ ifadesinin yerine, $\psi_h(x,y,z)$ ifadesi alınırsa, hidrojenik bağlanma enerjisi de elde edilebilir. Bağlanma enerjisini basit bir formda elde etmek için bir çok matematiksel işlem yapıldıktan sonra hidrojenik olmayan durumda,

$$E_b^{\,nh} = -\lambda^2 + 2\left(\frac{\left[\left(I_1+I_2+I_3\right)+p\left(I_4+I_5+I_6\right)\right]}{\left(I_7+I_8+I_9\right)}\right) \tag{3.15}$$

formunda elde edilir. Buradaki $I_1, I_2, I_3, I_4, I_5, I_6, I_7, I_8$ ve I_9 integralleri sırasıyla,

$$I_1 = \int_{-\infty}^{-\frac{L_x}{2}}\int_{-\infty}^{-\frac{L_y}{2}} \exp\left(2k_2(x+y)\right)K_0\left(2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right)\exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right) \tag{3.16}$$

$$I_2 = \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}}\int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2(k_1x)\cos^2(k_1y)K_0\left(2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right)K_0\exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right) \tag{3.17}$$

$$I_3 = \int_{\frac{L_x}{2}}^{\infty}\int_{\frac{L_y}{2}}^{\infty} \exp\left(-2k_2(x+y)\right) K_0\left(2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right) \exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right)$$

(3.18)

$$I_4 = \int_{-\infty}^{-\frac{L_x}{2}}\int_{-\infty}^{-\frac{L_y}{2}} \exp\left(2k_2(x+y)\right) K_0\left((2\lambda+\frac{1}{c})\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right) \exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right)$$

(3.19)

$$I_5 = \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}}\int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2(k_1x)\cos^2(k_1y) K_0\left((2\lambda+\frac{1}{c})\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right) \exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right)$$

(3.20)

$$I_6 = \int_{\frac{L_x}{2}}^{\infty}\int_{\frac{L_y}{2}}^{\infty} \exp\left(-2k_2(x+y)\right) K_0\left((2\lambda+\frac{1}{c})\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right) \exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right)$$

(3.21)

$$I_7 = \left[\int_{-\infty}^{-\frac{L_x}{2}}\int_{-\infty}^{-\frac{L_y}{2}} \left(\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right)\left(\exp\left(-2k_2(x+y)\right)\right) K_1\left(2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right) \exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right)\right]$$

(3.22)

$$I_8 = \left[\int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}}\int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \left(\cos^2(k_1x)\cos^2(k_1y)\right)\left(\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right) K_1\left(2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right) \exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right)\right]$$

(3.23)

$$I_9 = \left[\int_{\frac{L_x}{2}}^{\infty} \int_{\frac{L_y}{2}}^{\infty} \exp\left(-2k_2(x+y)\right)\left(2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right)K_1\left(2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\right) \right.$$
$$\left. \exp\left(-2\beta\left(x\cos(\theta)+y\sin(\theta)\right)\right) \right] \tag{3.24}$$

formlarındadır ve $p = (1-\varepsilon_0)$ 'dır. Bu integraller içinde bulunan K_0 ve K_1'ler ikinci tür düzeltilmiş Bessel fonksiyonlarıdır.

3.2. Düzgün Elektrik Alan Altındaki Dairesel Kesitli Sonlu Kuantum Telinde Hidrojenik ve Hidrojenik Olmayan Yabancı Atom Problemi

Dairesel kesitli kuantum telleri için silindirik koordinatları kullanmak elverişlidir. z yönü boyunda uzanan dairesel kesitli kuantum telinde potansiyel enerji fonksiyonu denklem (2.26), sistemdeki hamiltonyen, denklem (2.20) ve Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen temel durum için dalga fonksiyonu, denklem (2.27)'de veriliştir. Dışarıdan uygulanan düzgün elektrik alanın bu kuantum tel yapının alt bant enerjilerine etkisini hesaplamak için kullanılan Hamiltonyen,

$$H_1 = H_0 + \eta\,\rho\cos(\varphi-\theta) \tag{3.25}$$

formunda verilir. Burada $\eta = |e|F$ ve F, telin dik eksenine uygulanan elektrik alan şiddetidir. θ ise pozitif x-ekseni ve uygulanan elektrik alan arasındaki açıdır. Bu durumda deneme dalga fonksiyonu ,

$$\Psi_1(\rho,\varphi) = N_1\Psi_0(\rho,\varphi)\exp(-\beta\rho\cos(\varphi-\theta)) \tag{3.26}$$

formunda alınır. Burada N_1, normalizasyon sabiti ve β ise varyasyon parametresidir. Hidrojenik yabancı atomun konumu $\rho = \rho_i$ alınırsa, etkin kütle yaklaşımında Hamiltonyen ,

$$H_h = H_1 - \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{e^2}{\varepsilon_0\sqrt{z^2 + \left|\rho - \rho_i\right|^2}} \tag{3.27}$$

formunu alır. Burada alt indis *h*, hidrojenik durumu , ε_0 ise statik dielektrik sabitini gösterir. Bu durumda hapsedilmiş elektron için deneme dalga fonksiyonu,

$$\Psi_h = N_h\Psi_1(\rho,\varphi)\exp(-\lambda_h\sqrt{z^2 + \left|\rho - \rho_i\right|^2}) \tag{3.28}$$

formunu alır. Burada N_h, hidrojenik sistemdeki normalizasyon sabitini ve λ_h, hidrojenik sistemdeki varyasyon parametresini göstermektedir. Hidrojenik olmayan (non-hidrojenik) verici atom için silindirik koordinatlarda hamiltonyen ,

$$H_{nh} = H_1 - \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{e^2}{\varepsilon(\mathrm{r})\sqrt{z^2 + \left|\rho - \rho_i\right|^2}} \tag{3.29}$$

Kare kesitli kuantum telinde olduğu gibi burada alt indis *nh* hidrojenik olmayan sistemi gösterir. ε(r) ise denklem (3.12)'de verilen Hermanson dielektrik fonksiyonudur. Bu durumda yabancı atoma bağlı elektronun deneme dalga fonksiyonu,

$$\Psi_{nh}(\rho,\varphi,z) = N_h\Psi_1(\rho,\varphi)\exp(-\lambda_{nh}\sqrt{z^2 + \left|\rho - \rho_i\right|^2}) \tag{3.30}$$

formunda bulunur. Burada N_{nh} ve λ_{nh} hidrojenik olmayan (non-hidrojenik) sistem için sırasıyla normalizasyon sabiti ve varyasyon parametresidir. Hidrojenik olmayan yabancı atom için bağlanma enerjisi,

$$E_b^{\,nh} = \left[\frac{\langle\psi_1(\rho,\varphi)|H_1|\psi_1(\rho,\varphi)\rangle}{\langle\psi_1(\rho,\varphi)|\psi_1(\rho,\varphi)\rangle}\right]_{\beta_{\min}} - \left[\frac{\langle\psi_{nh}(\rho,\varphi,z)|H_{nh}|\psi_{nh}(\rho,\varphi,z)\rangle}{\langle\psi_{nh}(\rho,\varphi,z)|\psi_{nh}(\rho,\varphi,z)\rangle}\right]_{\lambda nh_{\min}} \tag{3.31}$$

formunu alır. Bu denklemde $\psi_{nh}(\rho,\varphi,z)$ ifadesinin yerine, $\psi_{h}(\rho,\varphi,z)$ ifadesi yazılırsa hidrojenik bağlanma enerjisi elde edilebilir. Kare kesitli kuantum telinde olduğu gibi, bağlanma enerjisini basit bir formda elde etmek için bir çok matematiksel işlem yapıldıktan sonra hidrojenik olmayan durumda bağlanma enerjisi,

$$E_b^{\,nh} = -\lambda^2 + 2\left(\frac{\left[\left(\dot{I}_1 + B\,\dot{I}_2\right) + p\left(\dot{I}_3 + B\dot{I}_4\right)\right]}{d\left[\left(\dot{I}_5 - \dot{I}_6\right) + B\left(\dot{I}_7 - \dot{I}_8\right)\right]}\right) \tag{3.32}$$

formunda elde edilir. Burada $\dot{I}_1, \dot{I}_2, \dot{I}_3, \dot{I}_4, \dot{I}_5, \dot{I}_6$, $\dot{I}_7$ ve $\dot{I}_8$ integral ifadelerini göstermektedir. Ancak integral ifadeleri çok uzun olduğu için ayrıntılı bir şekilde verilmemiştir. Yine burada $B = \frac{j_0^2(r_{10}d)}{K_0^2(b_{10}d)}$ ve $p = (1-\varepsilon_0)$' dir . d ise tel yarıçapını göstermektedir. Kare telde olduğu gibi basitleştirilmiş bağlanma enerjisi ifadesini kullanarak nümerik hesaplamalar ile sonuca gidilmiştir.

BÖLÜM 4

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında sonlu potansiyel engeline sahip kare ve dairesel kesitli $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum tellerinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda elektronun yabancı atoma bağlanma enerjilerinin hesaplanması yapılmıştır. Bu hesaplamalarda dışarıdan uygulanan düzgün elektrik alan altında elektronun bağlanma enerjileri, kuantum tel genişlikleri, yabancı atom konumları ve konsantrasyon etkileri ele alınmıştır.

Hesaplamalar efektif kütle yaklaşımı ve varyasyon metodu kullanılarak yapılmıştır. Nümerik hesaplamalarda enerjiler etkin Rydberg (R^*) ve uzunluklar etkin Bohr yarıçapı (a^*) biriminde seçilmiştir. Bilindiği gibi ε_0 malzemenin dielektrik sabiti ve m^* elektronun etkin kütlesi olmak üzere $R^* = \frac{e^2}{2\varepsilon_0}$ ve $a^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon_0}{m^* e^2}$ şeklinde verilir. Yine hesaplamalarda $\varepsilon_0 = 12.5(1-x) + 10.1x$, $V_0 = 0.6(1.247x)\ eV$ ve $m^* = 0.067 m_0$ olmak üzere $a^* = 98{,}73\ \overset{o}{A}$ ve $R^* = 5.83 meV$ olarak alınmıştır.

Elde edilen sonuçların detaylı incelemesi iki ana başlık altında olmuştur. Bunlar;

i) Kare kesitli sonlu kuantum telinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan yabancı atom problemi,

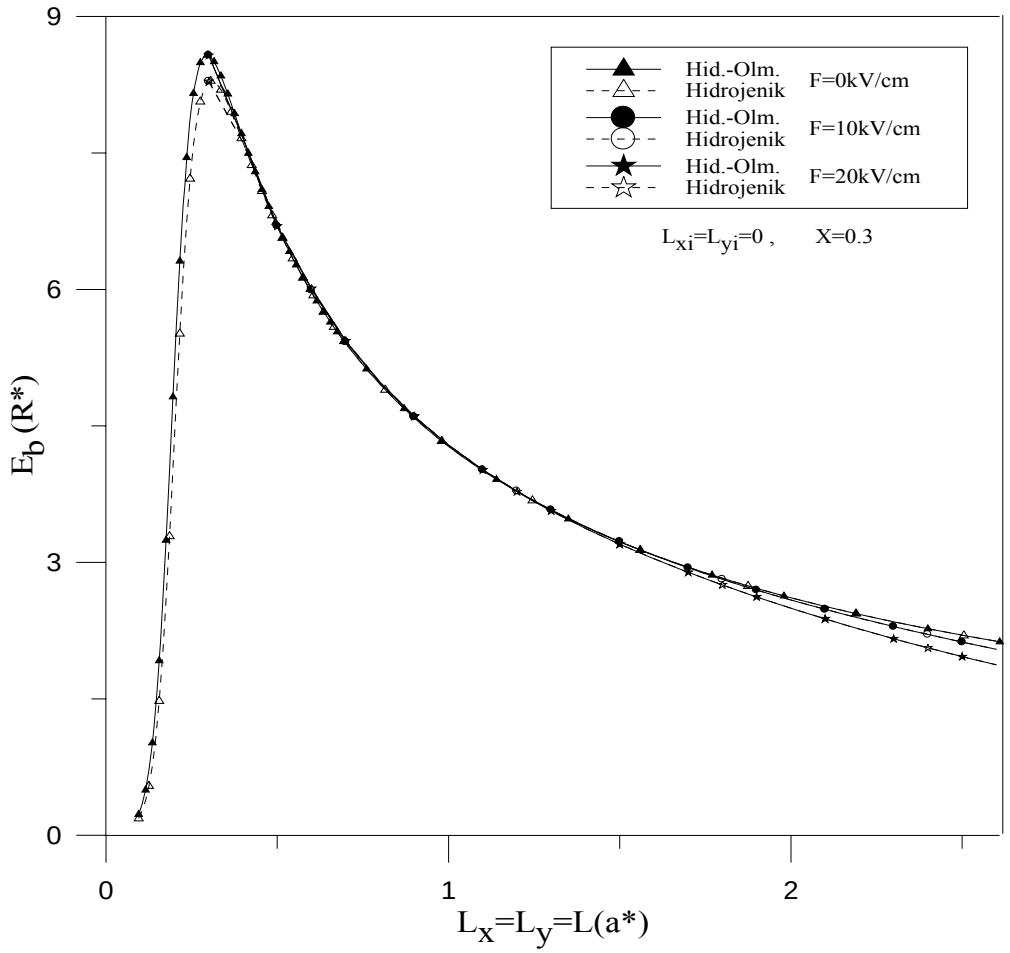
ii) Dairesel kesitli sonlu kuantum telinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan yabancı atom problemidir. Şimdi bu durumları geniş bir şekilde incelemeye çalışalım.

4.1. Kare Kesitli Sonlu Kuantum Teli

Kare kesitli sonlu kuantum telinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan yabancı atom probleminin teorisi Bölüm 3.2' de geniş bir şekilde açıklanmıştır. Yabancı atomun farklı konumlarında ve dışarıdan uygulanan farklı elektrik alanlarda bağlanma

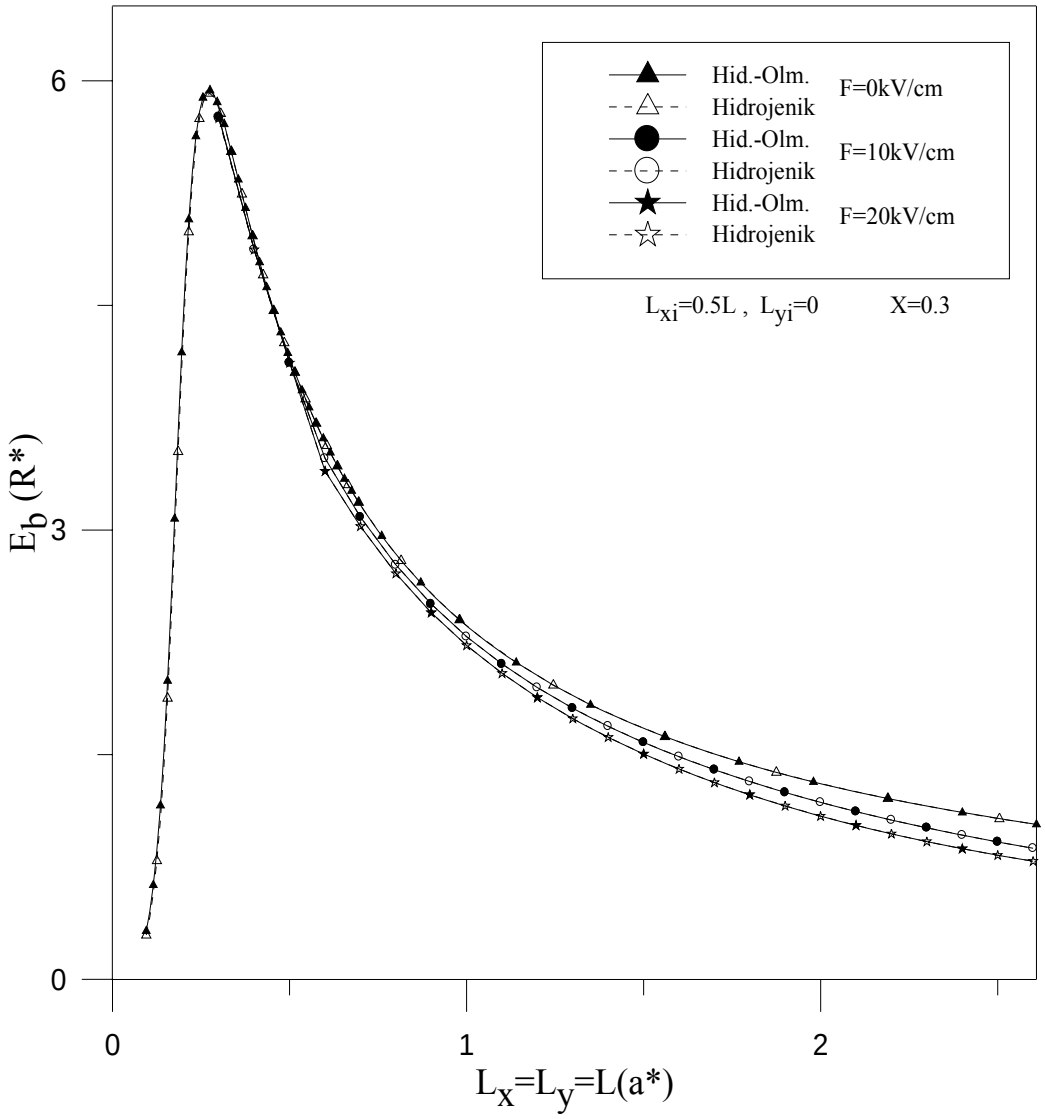
enerjisinin tel genişliğine göre değişimleri, hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlar için incelendi. Şekil 4.1.a), 4.1.b) ve 4.1.c)' de elektronun bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimleri verilmiştir. Her grafikte dışarıdan uygulanan elektrik alan değerleri, 0, 10kV/cm ve 20 kV/cm seçilmiştir. Alüminyum Konsantrasyonu X = 0.3 alınmış ve farklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerji değişimleri incelenmiştir.

Şekil 4.1.a)' da yabancı atom konumu merkezde alınmıştır(L_{xi}=L_{yi}= 0). Şekilden de görüldüğü gibi tel genişliği küçüldükçe hidrojenik ve hidrojenik olmayan bağlanma enerjisi farklılığı azda olsa görülmektedir. Fakat bu bölgede uygulanan elektrik alanın etkisi gözlenmemektedir. Tel genişliği arttıkça hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlardaki bağlanma enerjileri çakışmakta ve uygulanan elektrik alan değerlerine bağlı olarak enerji düşüşü gözlenmektedir.



Şekil 4.1.a) Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerin tel genişliğine göre değişimleri (yabancı atom merkezde).

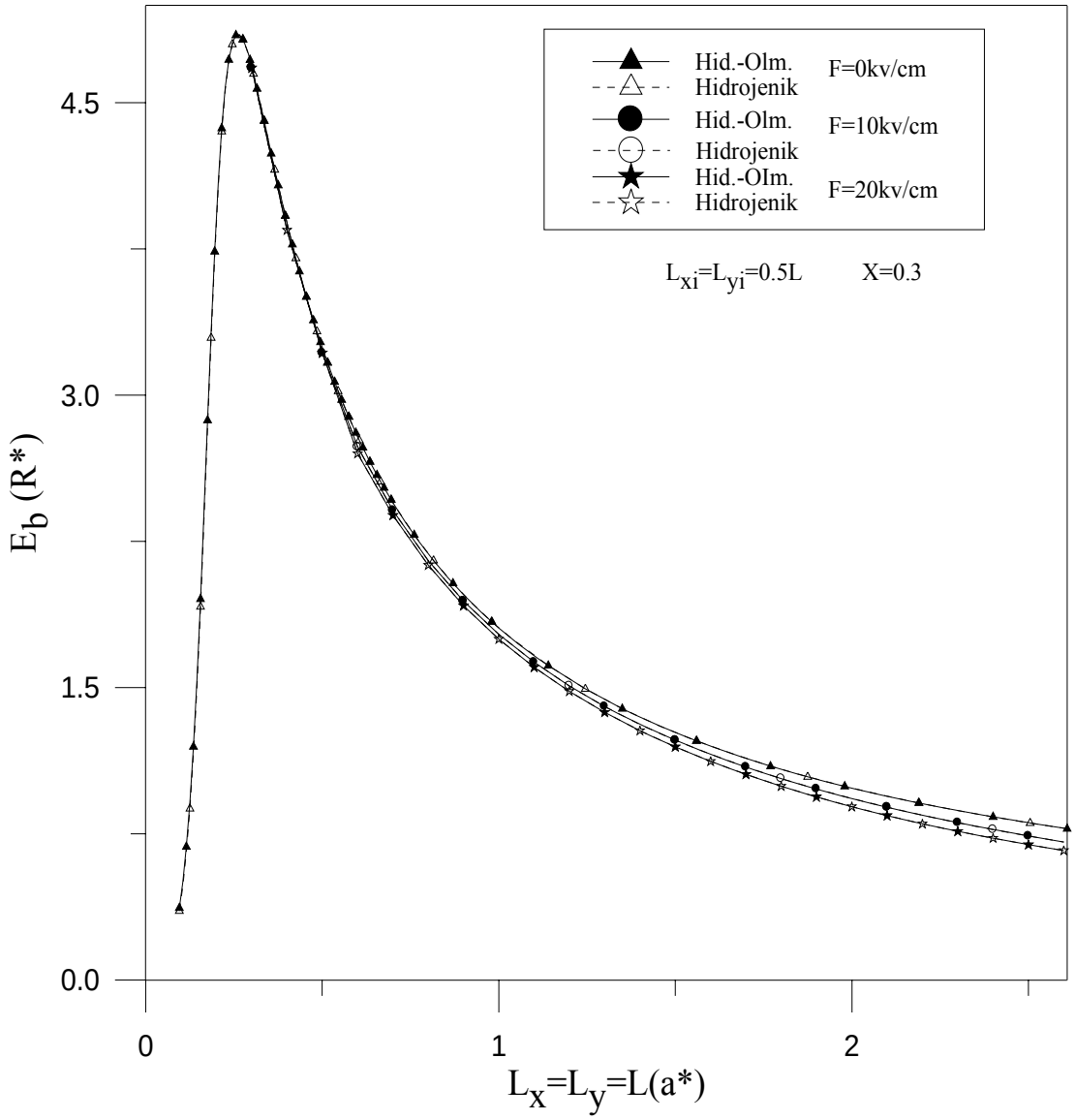
Şekil 4.1.b)' de ise yabancı atom konumu L_{xi}=0.5L ve L_{yi}= 0 alınmıştır. Bu şekil incelendiğinde tel genişliğinin dar bölgesinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjisi yok denecek kadar azdır. Tel genişliği arttıkça bağlanma enerjisindeki değişim Şekil 4.1.a)'da görüldüğü gibidir. Yalnız elektrik alan değerlerine göre bağlanma enerjisindeki düşüş daha belirgindir.



Şekil 4.1.b) Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerin tel genişliğine göre değişimleri (yabancı atom L_{xi}=0.5L ve L_{yi}= 0 konumunda).

Şekil 4.1.c) durumunda yabancı atom konumu L_{xi}=L_{yi}= 0.5L seçilmiştir. Telin dar bölgesinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjisi farkı

tamamen ortadan kalkmıştır. Tel genişliği arttıkça her iki durum üst üste çakışmakta ve elektrik alan değerlerine bağlı olarak enerji düşüşü daha az bir şekilde kendini göstermektedir.

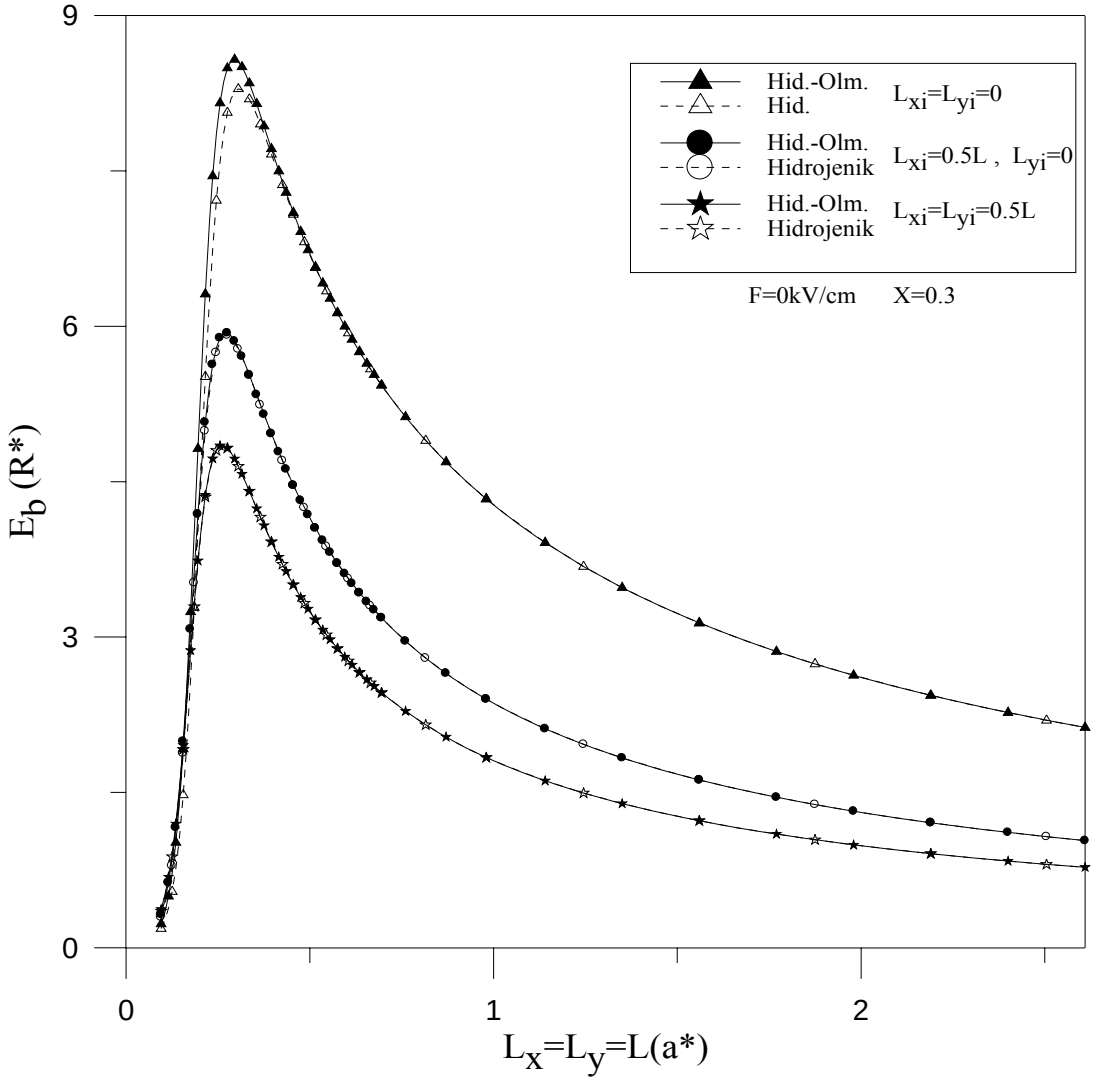


Şekil 4.1.c) Farklı elektrik alan değerlerinde, bağlanma enerjilerin tel genişliğine göre değişimleri (yabancı atom $L_{xi}= L_{yi}= 0.5L$ konumunda).

Şekiller dikkatlice incelendiğinde yabancı atom konumu merkezden uzaklaştıkça, bağlanma enerjisinde keskin bir azalma gözlenmiştir (8.57 Ryd.'den yaklaşık 4.84

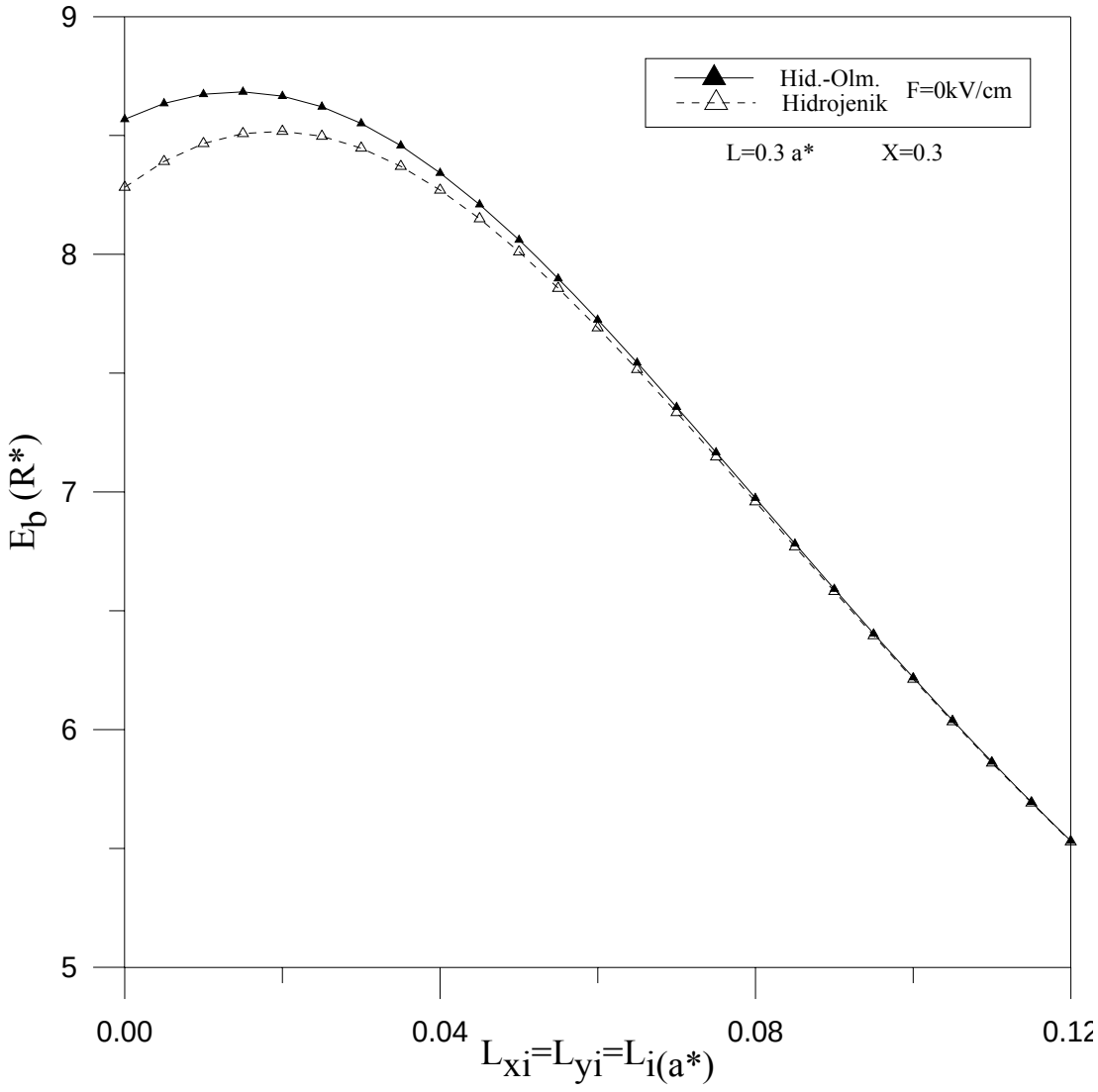
Ryd'e). Aynı zaman da hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjisi farkı ortadan kalkmıştır.

Açıklanan bu özellikleri daha iyi anlayabilmek için Şekil 4.2.' de bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimleri gösterilmiştir. Değişik yabancı atom konumlarında ve elektrik alansız (F=0kV/cm) çizilen bu grafikte hidrojenik olmayan durumda Hermanson dielektrik fonksiyonunun etkisi merkeze yakın yerlerde (telin dar bölgelerinde) kendini göstermektedir.

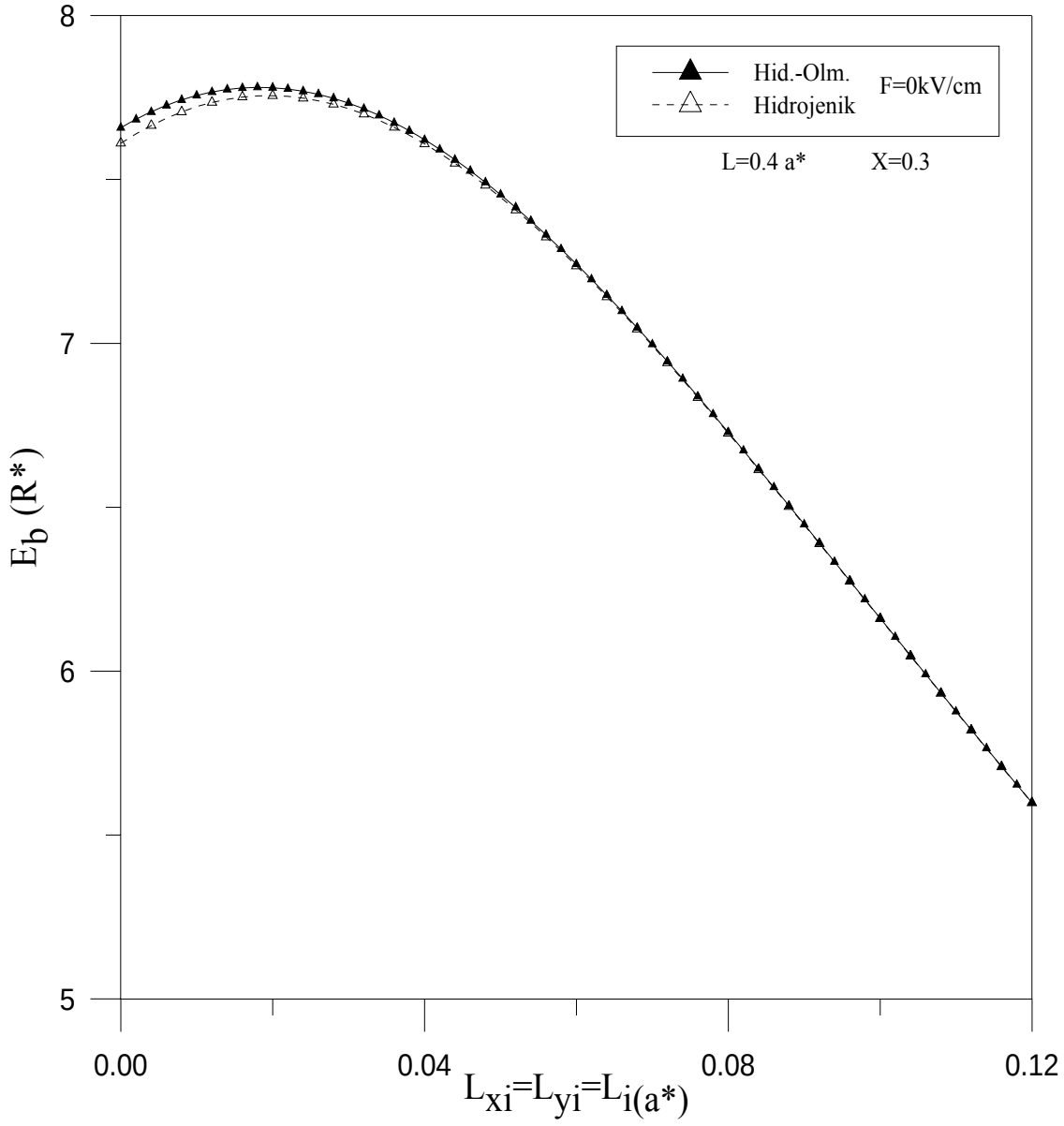


Şekil 4.2. Elektrik alan uygulanmadan, faklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimi

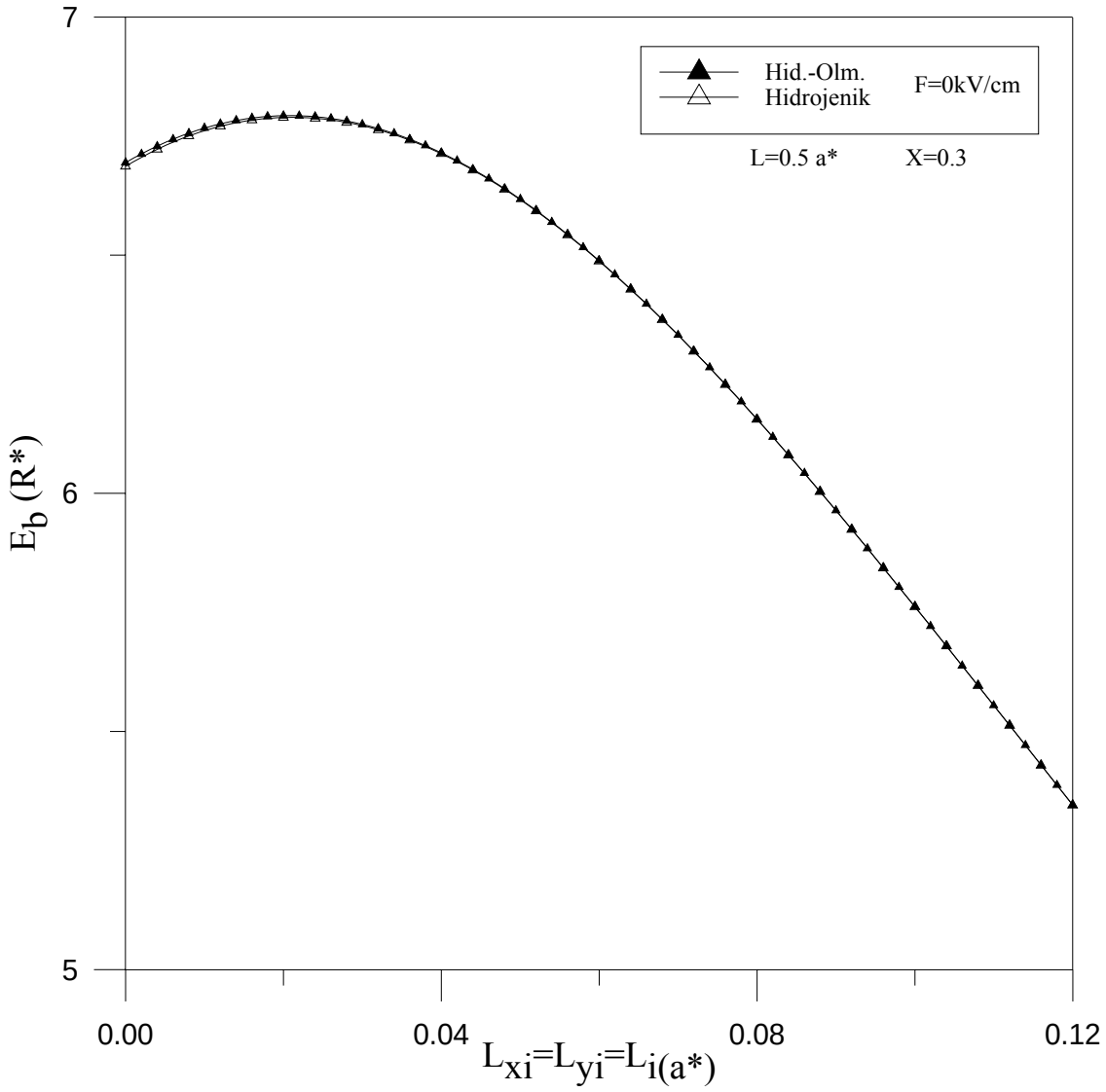
Şekil 4.3.a), 4.3.b) ve 4.3.c)'de elektronun bağlanma enerjisinin yabancı atom konumuna göre değişimleri gösterilmiştir. Bu grafiklerde elektrik alan uygulanmadan sadece telin boyu sırasıyla L=0.3a*, 0.4a* ve 0.5a* seçilerek hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjilerine bakılmıştır. Yabancı atom merkezden köşegen boyunca hareket ettirildiğinde, bağlanma enerjileri belli bir değerden sonra üst üste çakışarak azalırlar. Telin genişliği arttıkça merkeze yakın bölgelerde bu durum arasındaki fark azalır.



Şekil 4.3.a) Bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimleri (L=0.3a*).

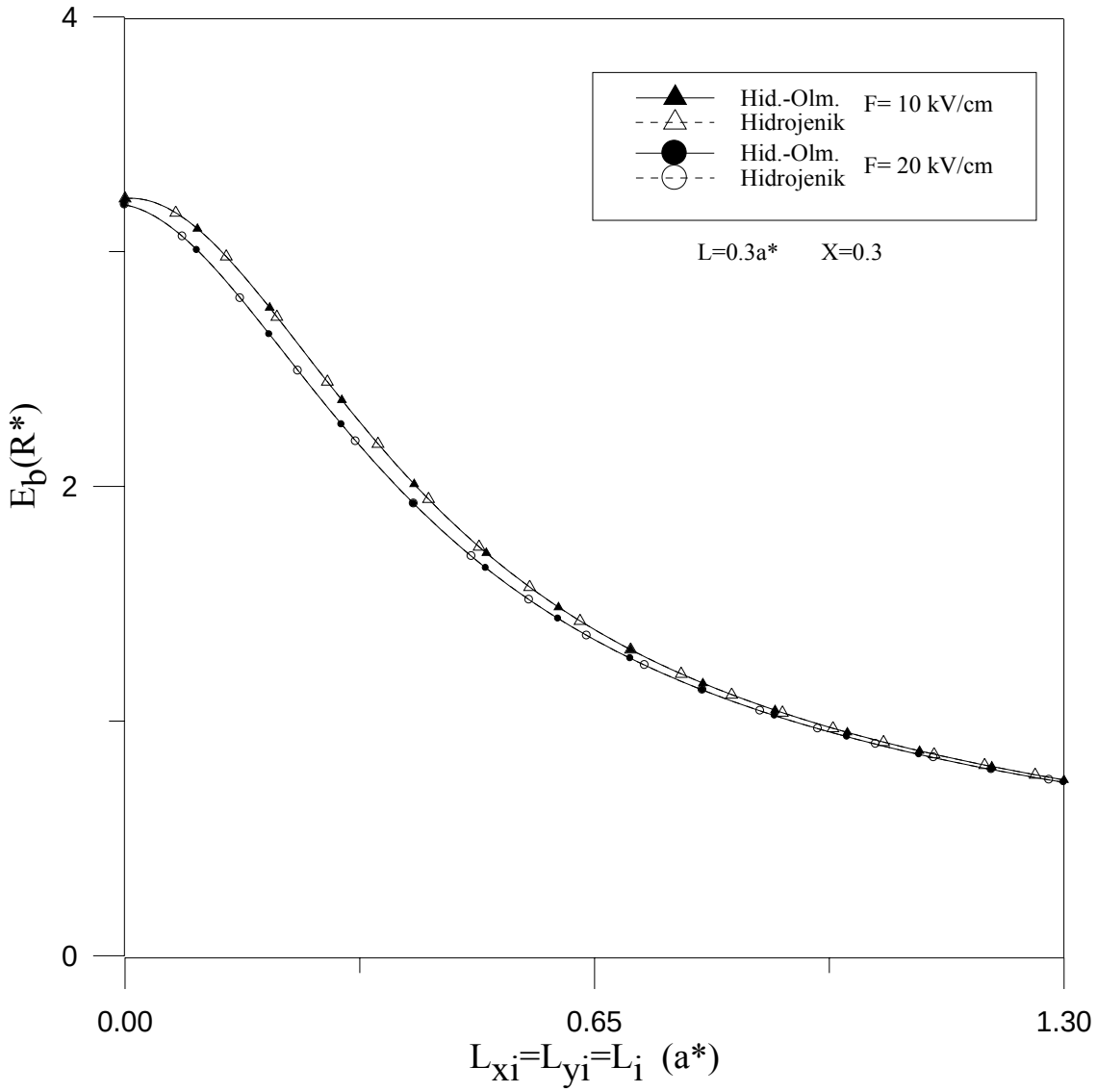


Şekil 4.3.b) Bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimleri (L=0.4a^*)



Şekil 4.3.c) Bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimi (L=0.5a*)

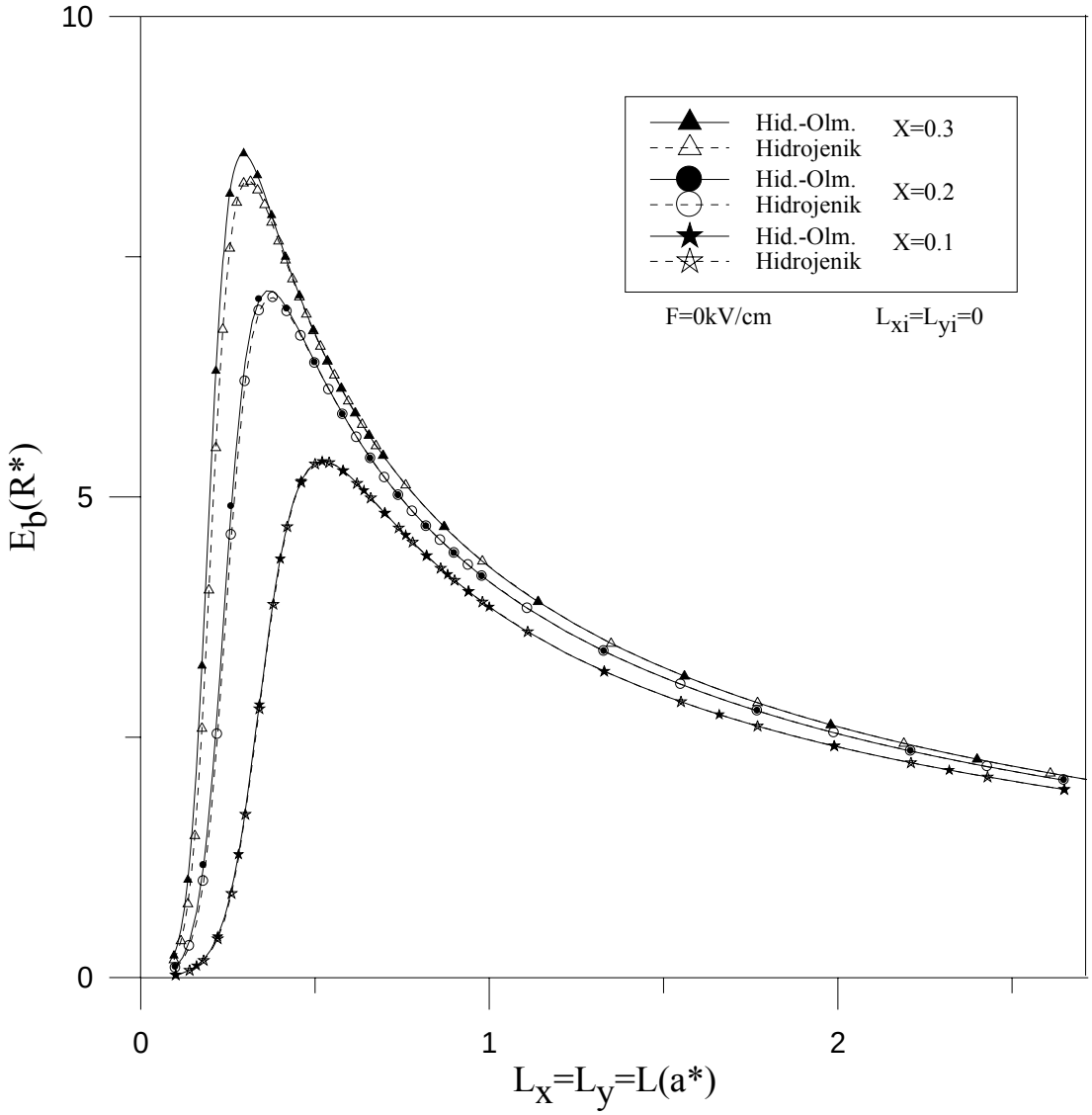
Şekil 4.4.'te farklı elektrik alanlar altında (F=10kV/cm ve F=20kV/cm), elektronun bağlanma enerjisinin yabancı atom konumuna göre değişimleri incelenmiştir. Yabancı atom merkezden köşegen boyunca hareket ettirilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi aynı elektrik alan değeri altında hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjilerinde üst üste çakışma vardır. Yani her iki durumda da aynı davranış gözlenmektedir. Ayrıca yüksek elektrik alan uygulanmasında bağlanma enerjisi azalmaktadır.



Şekil 4.4. Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumlarına göre değişimleri

Şekil 4.5.a) ve 4.5.b)'de elektrik alan uygulanmadan, değişik Alüminyum konsantrasyonlarında (X=0.3, 0.2 ve 0.1) hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimleri incelenmiştir. Şekil 4.5a' da yabancı atom merkezde alınarak ($L_{xi}=L_{yi}=0$) değişik konsantrasyonlarda her iki durum için bağlanma enerjilerine bakılmıştır. Yüksek konsantrasyonlarda Hermanson dielektrik fonksiyonunun etkisi ile hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjisi farkı açık bir şekilde kendini

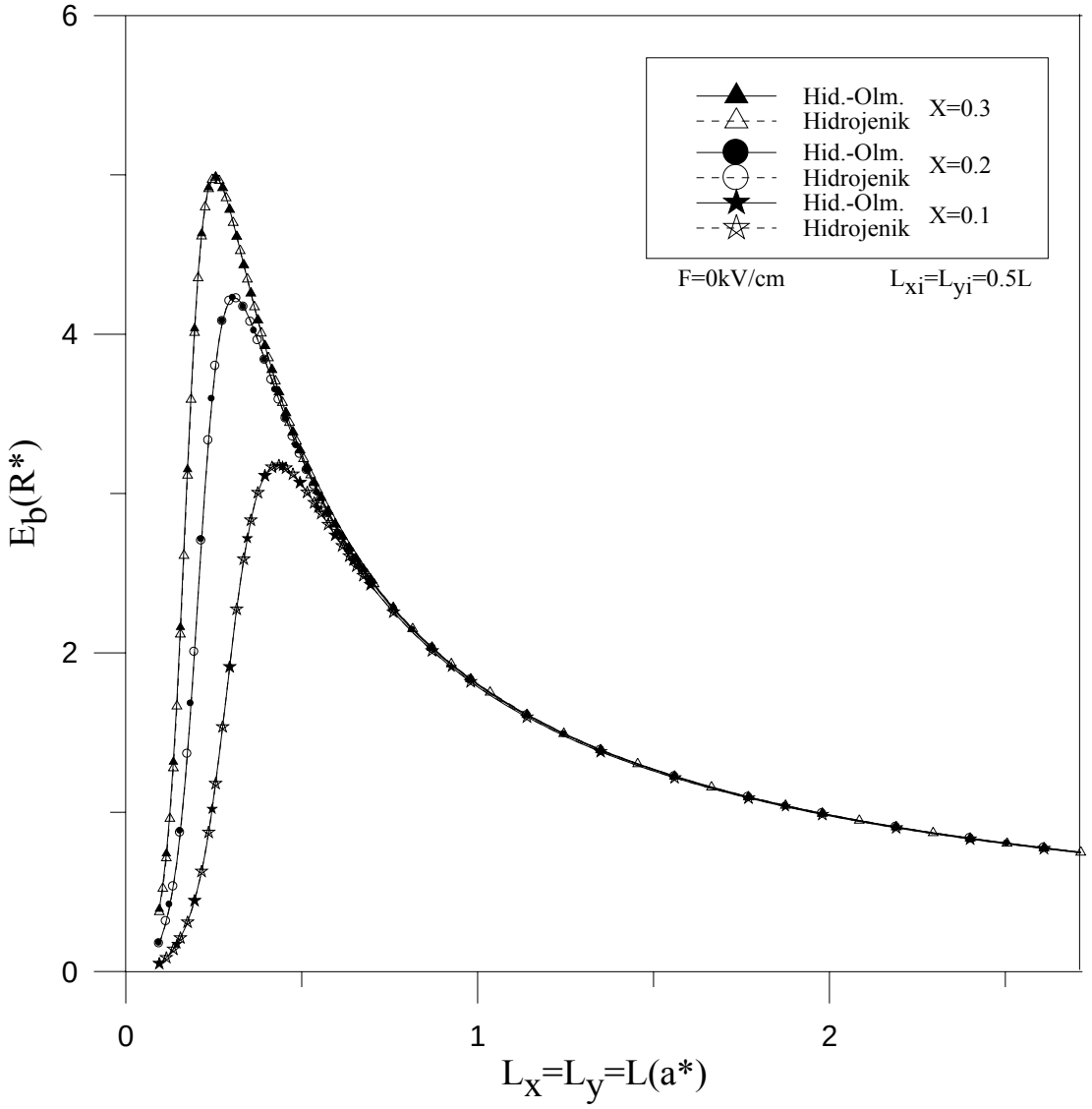
göstermektedir. Örneğin X=0.1 değerinde bu fark tamamen ortadan kalkmaktadır. Ayrıca konsantrasyon küçüldükçe bağlanma enerjisi pikleri sağa doğru kaymaktadır. Telin belirli bir uzunluk değerinden sonra bağlanma enerjileri azalır ve her konsantrasyonda aynı davranışı gösterir.



Şekil 4.5.a) Değişik Alüminyum konsantrasyonlarında bağlanma enerjilerinin tel genişliğine göre değişimleri ($L_{xi}=L_{yi}=0$)

Şekil 4.5.b)'de yabancı atom konumu $L_{xi}=L_{yi}=0.5L$ seçilerek aynı değişimlere bakılmıştır. Konsantrasyon değerleri küçüldükçe enerji pikleri azalmakta ve sağa doğru kaymaktadır. Yaklaşık L=0.7 a^* değerinden sonra bütün konsantrasyonlarda enerji

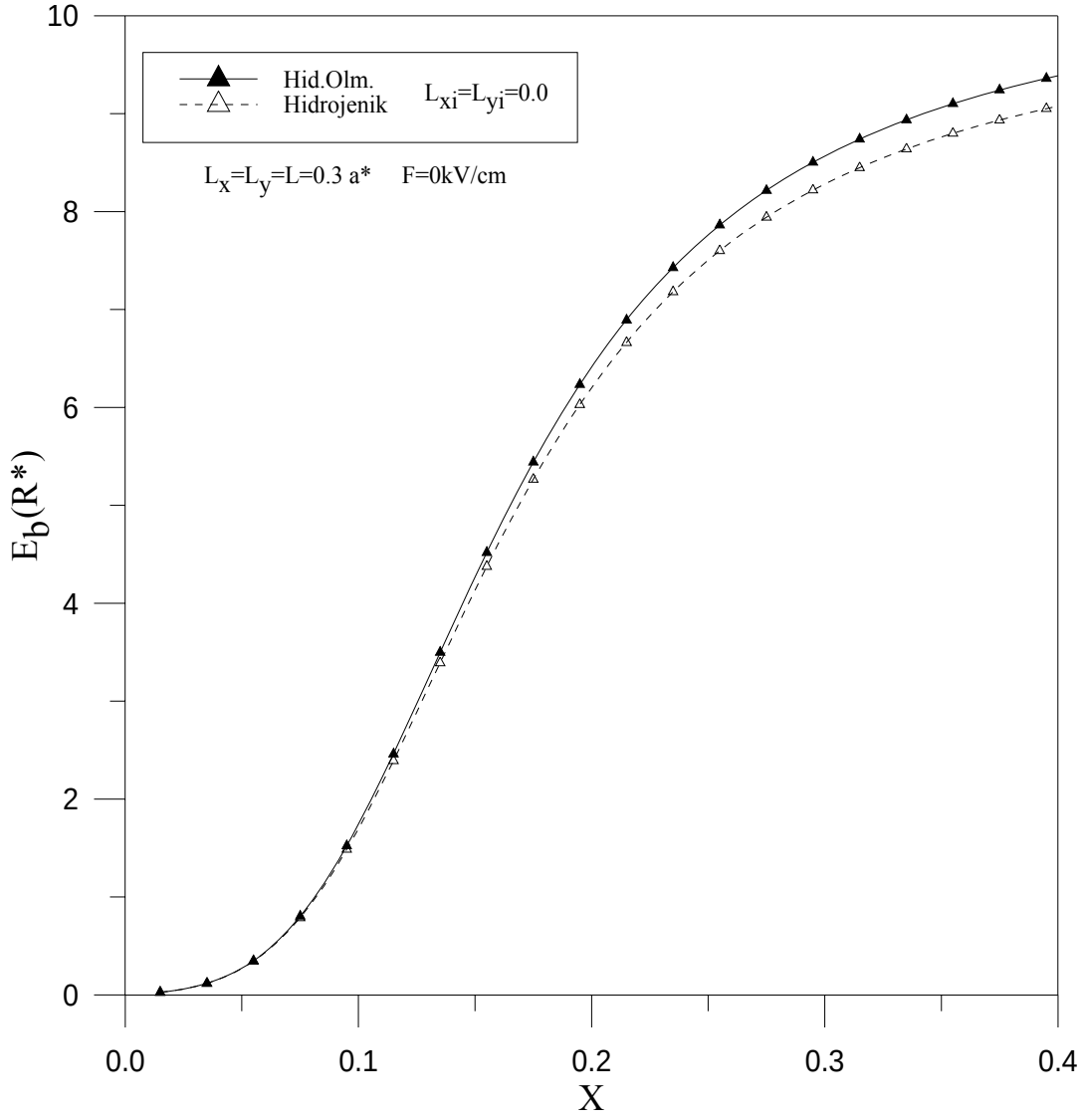
değerleri çakışarak azalmaktadır. Şekil 4.5.b) ile Şekil 4.5.a) karşılaştırıldığında en büyük fark telin merkezine yakın bölgesindeki bağlanma enerji değerleri farkıdır. Örneğin X=0.3 ve yabancı atom merkezde iken (Şekil 4.5.a)) bağlanma enerjisi 8.57 Ryd. olmasına karşın yabancı atom $L_{xi}=L_{yi}=0.5L$ konumunda iken (Şekil 4.5.b)) bağlanma Enerjisi 4.98 Ryd.' dır.



Şekil 4.5.b) Değişik Alüminyum konsantrasyonlarında elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimi ($L_{xi}=L_{yi}=0.5L$).

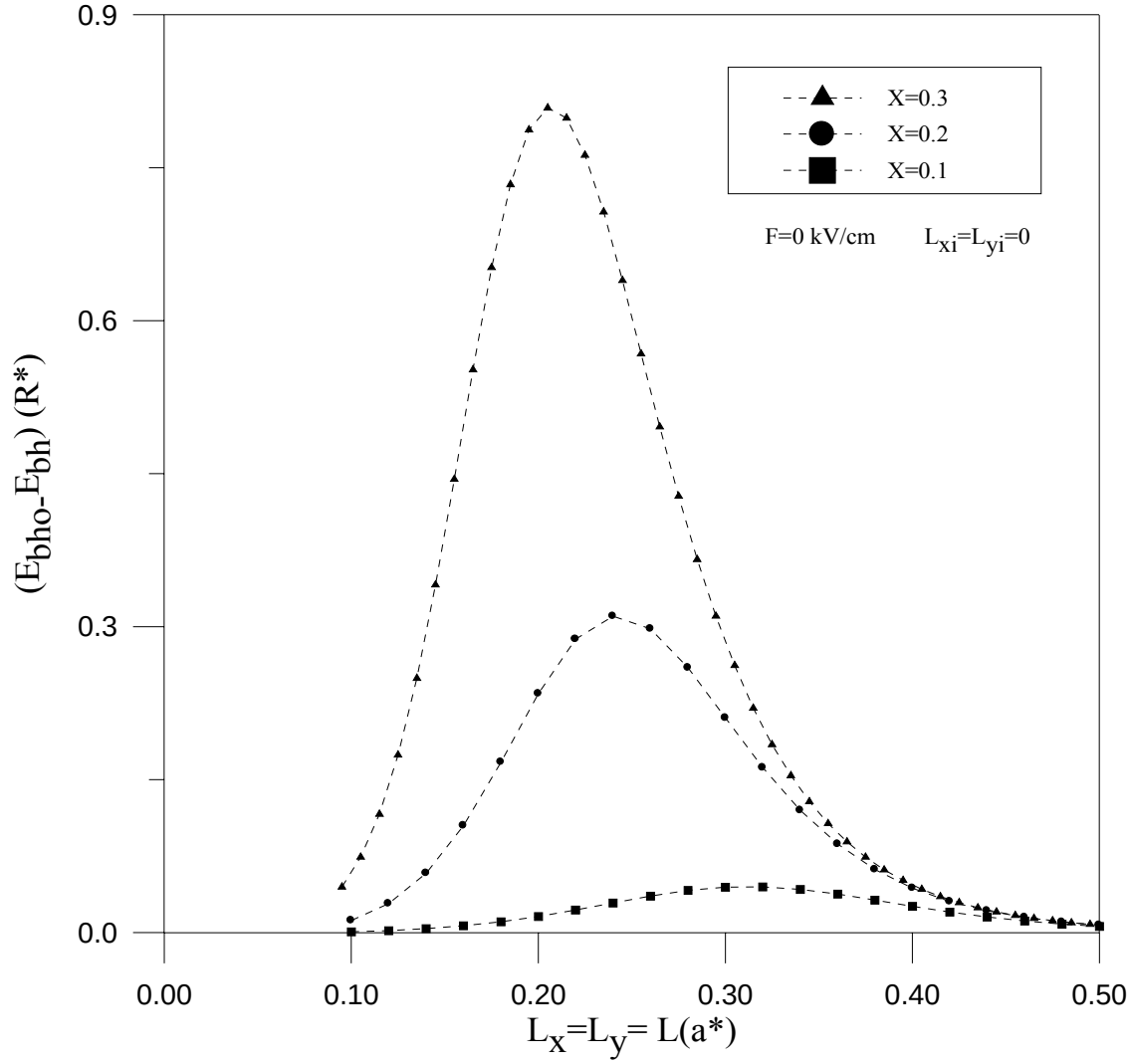
Yabancı atom konumu merkezde olmak üzere elektrik alan uygulanmadan ve $L=0.3a^*$ alınarak hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjisinin Alüminyum konsantrasyonuna göre değişimi Şekil 4.6.'da gösterilmiştir. Şekilden de

görüldüğü gibi belli bir konsantrasyon değerine kadar bağlanma enerjisi iki durum içinde aynı kalmaktadır. Konsantrasyon arttıkça hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda enerji değerleri farklılık göstererek artmaktadır. Hidrojenik olmayan durumda enerji daha büyük değerlere sahiptir. Doğal olarak bunun nedeni kullanılan dielektrik fonksiyonundan kaynaklanmaktadır.



Şekil 4.6. Elektrik alan uygulanmadan bağlanma enerjilerinin Alüminyum konsantrasyonuna göre değişimleri ($L_x=L_y=L=0.3a^*$).

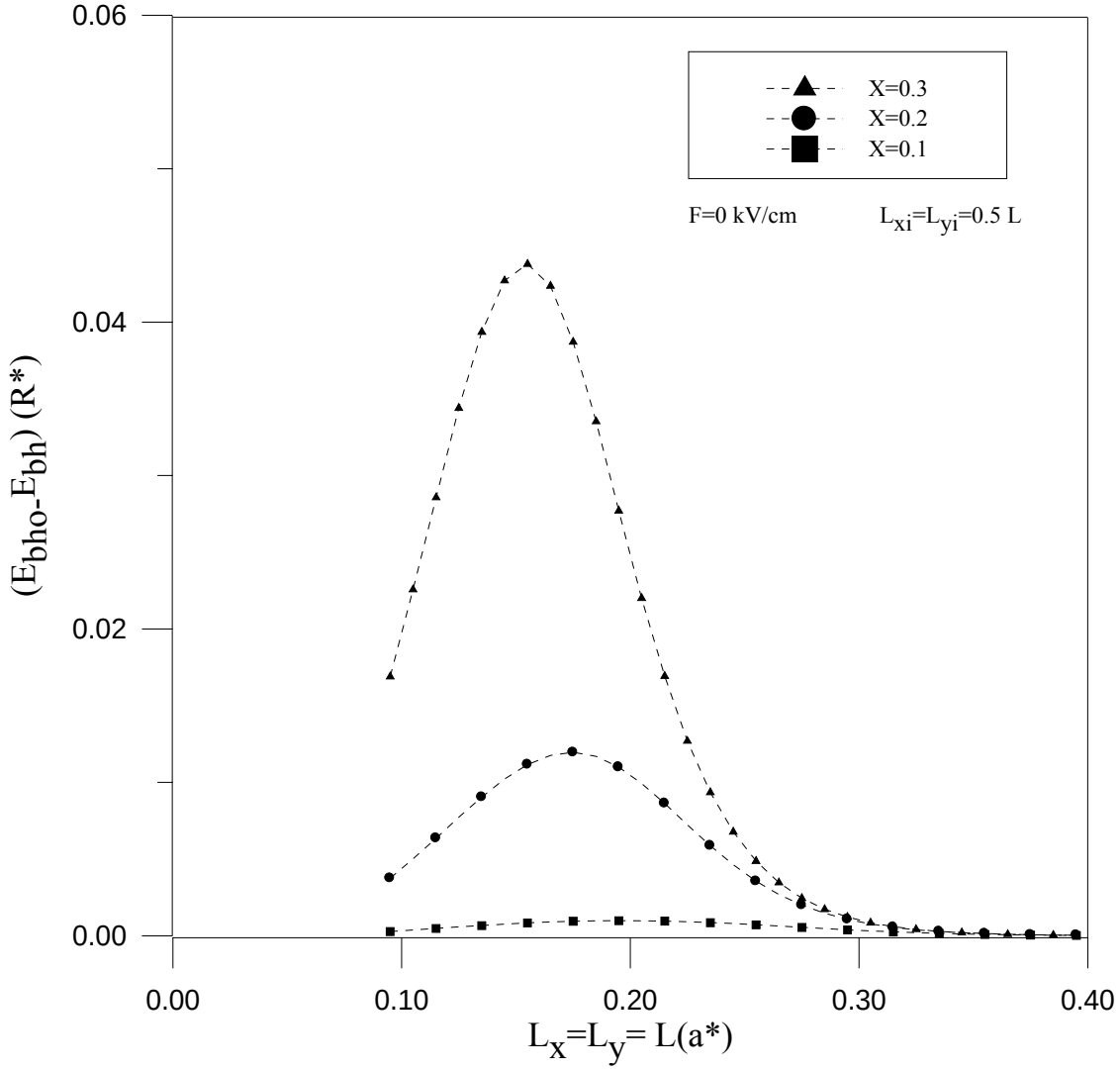
Şekil4.7.a) ve 4.7.b)' de X=0.3, 0.2 ve 0.1 değerlerinde, elektrik alan uygulanmadan (E_{bho}-E_{bh})(R^*) enerji farkının tel genişliğine göre değişimleri verilmiştir. Şekil 4.7a' da yabancı atom merkezde seçilmiştir. Konsantrasyon değerleri küçüldükçe, bağlanma enerjileri arasındaki farkların pikleri telin orta bölgesinde azalmakta ve sağa doğru kaymaktadır.



Şekil 4.7.a) Farklı Alüminyum konsantrasyon değerlerinde, bağlanma enerjileri farkının tel genişliğine göre değişimleri (L_{xi}=L_{yi}=0).

Yabancı atom konumu L_{xi}=L_{yi}=0.5L'de alınmış Şekil 4.7b'de ise benzer özellikler görülmesine karşın bu iki grafik karşılaştırıldığında bağlanma enerjileri

arasındaki fark Şekil 4.7b'de önemsenmeyecek kadar küçüktür. Örneğin X=0.3'te pik yüksekliği 0.043 Ryd. iken (Şekil 4.7b), diğerinde bu değer 0.8 R Ryd. 'dir (Şekil 4.7a).

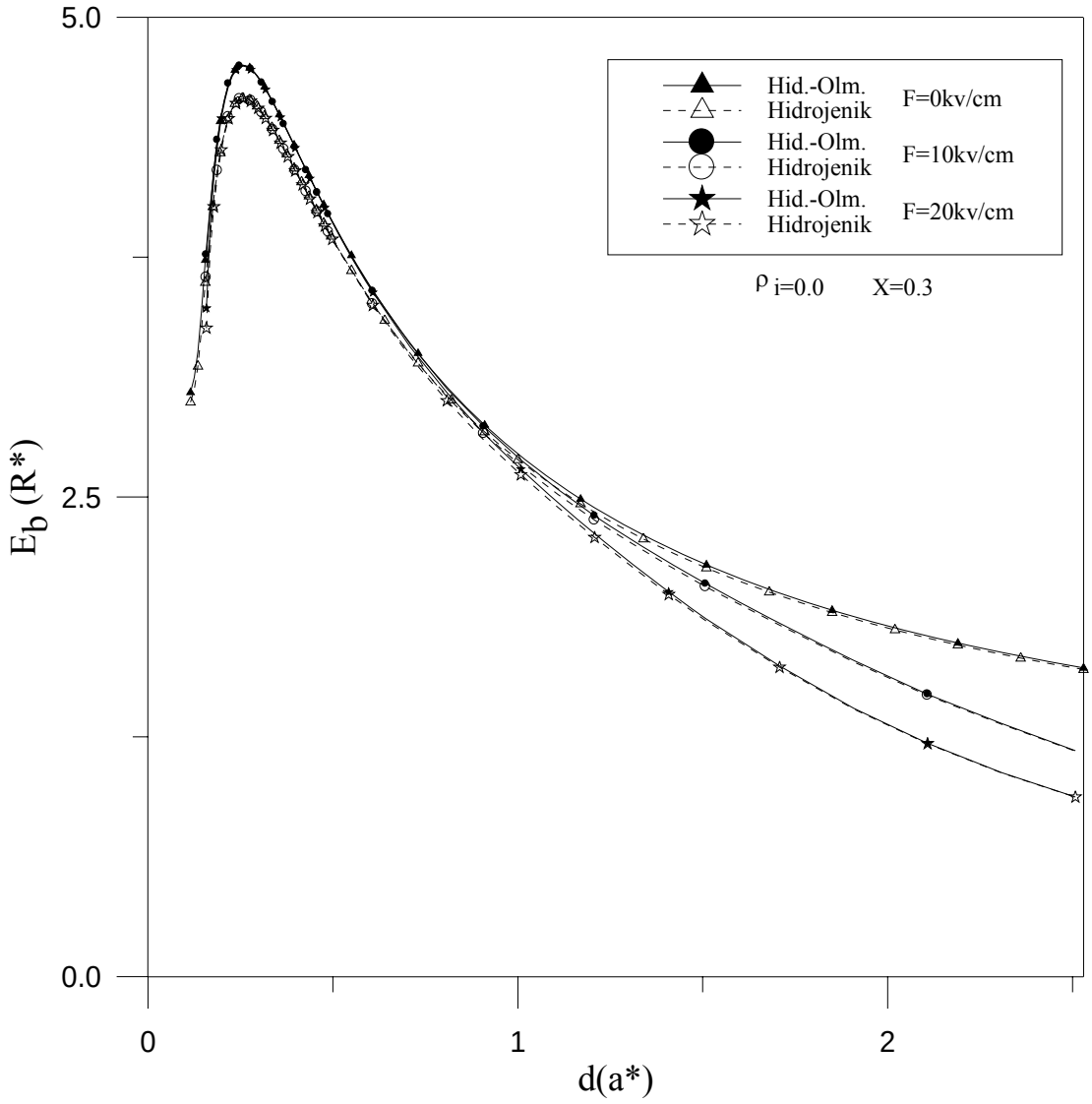


Şekil 4.7.b) Farklı Alüminyum konsantrasyon değerlerinde, bağlanma enerjileri farkının tel genişliğine göre değişimleri ($L_{xi}=L_{yi}=0.5L$).

4.2 Dairesel Kesitli Sonlu Kuantum Teli

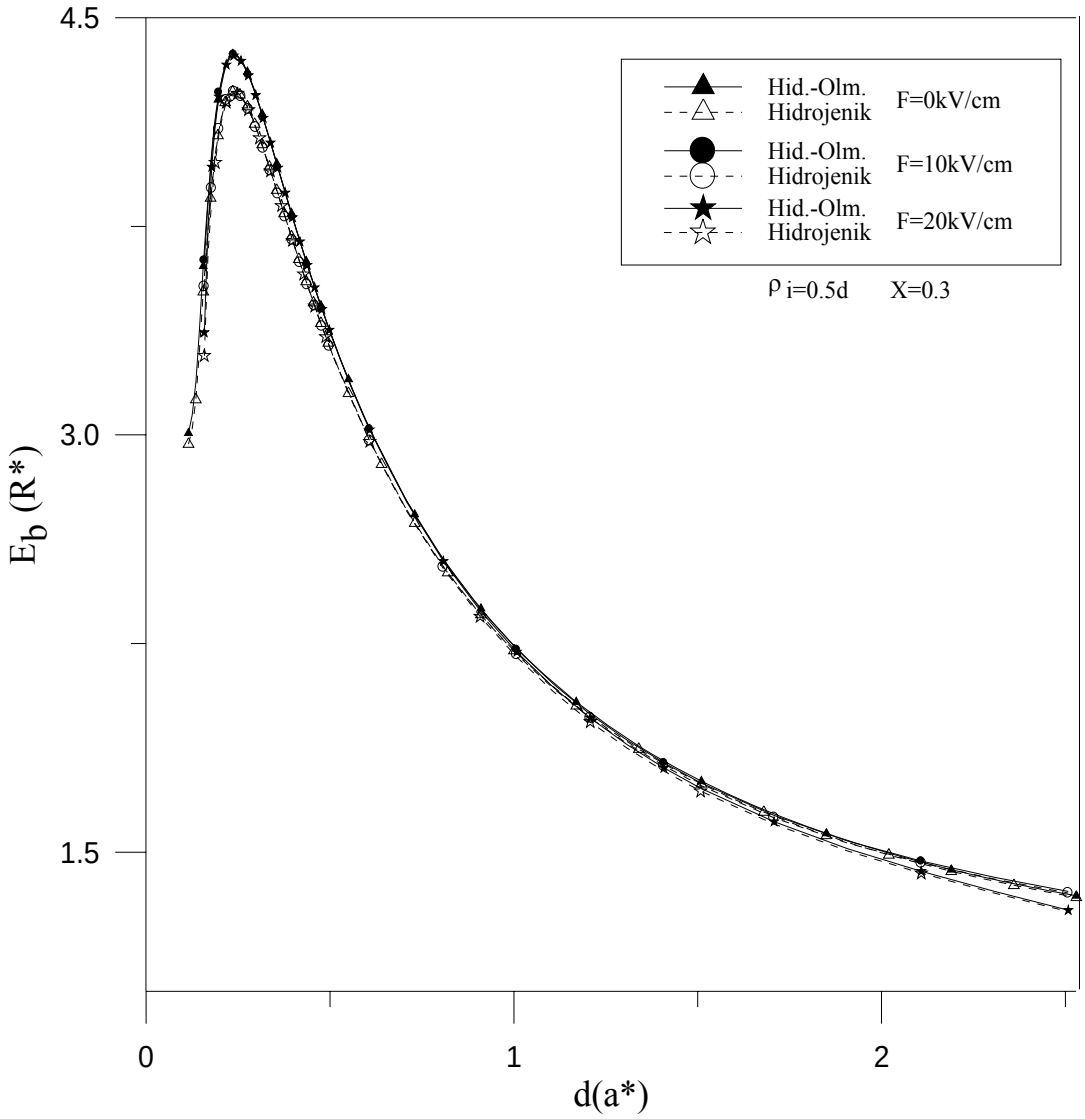
Dairesel kesitli sonlu kuantum telinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan yabancı atom probleminin teorisi bölüm 3.3.'te detaylı bir şekilde açıklanmıştır. Kare kesitli sonlu kuantum telinde olduğu gibi faklı yabancı atom konumlarında ve dışarıdan uygulanan farklı elektrik alanlarda bağlanma enerjisinin tel yarıçapına göre değişimleri hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlar için de incelendi.

Kare kesitli telde olduğu gibi Şekil 4.8.a), 4.8.b)'de elektronun bağlanma enerjisinin tel yarıçapına göre değişimleri gösterilmiştir. Yabancı atom merkezde seçilerek (ρ_i=0) farklı elektrik alanlar altında bağlanma enerjisinin tel yarıçapına göre değişimleri Şekil 4.8.a)'da verilmiştir. Kare kesitli telde görülen benzer özellikler bu grafikte de gözlenmektedir. Tel yarıçapının küçüldüğü bölgelerde hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjileri farkı görülmesine karşılık elektrik alan etkisi görülmemektedir. Tel yarıçapı büyüdükçe hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda enerji üst üste çakışmakta, elektrik alan şiddeti arttıkça bağlanma enerjileri azalmaktadır.



Şekil 4.8.a) Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerin tel yarıçapına göre değişimleri (yabancı atom merkezde).

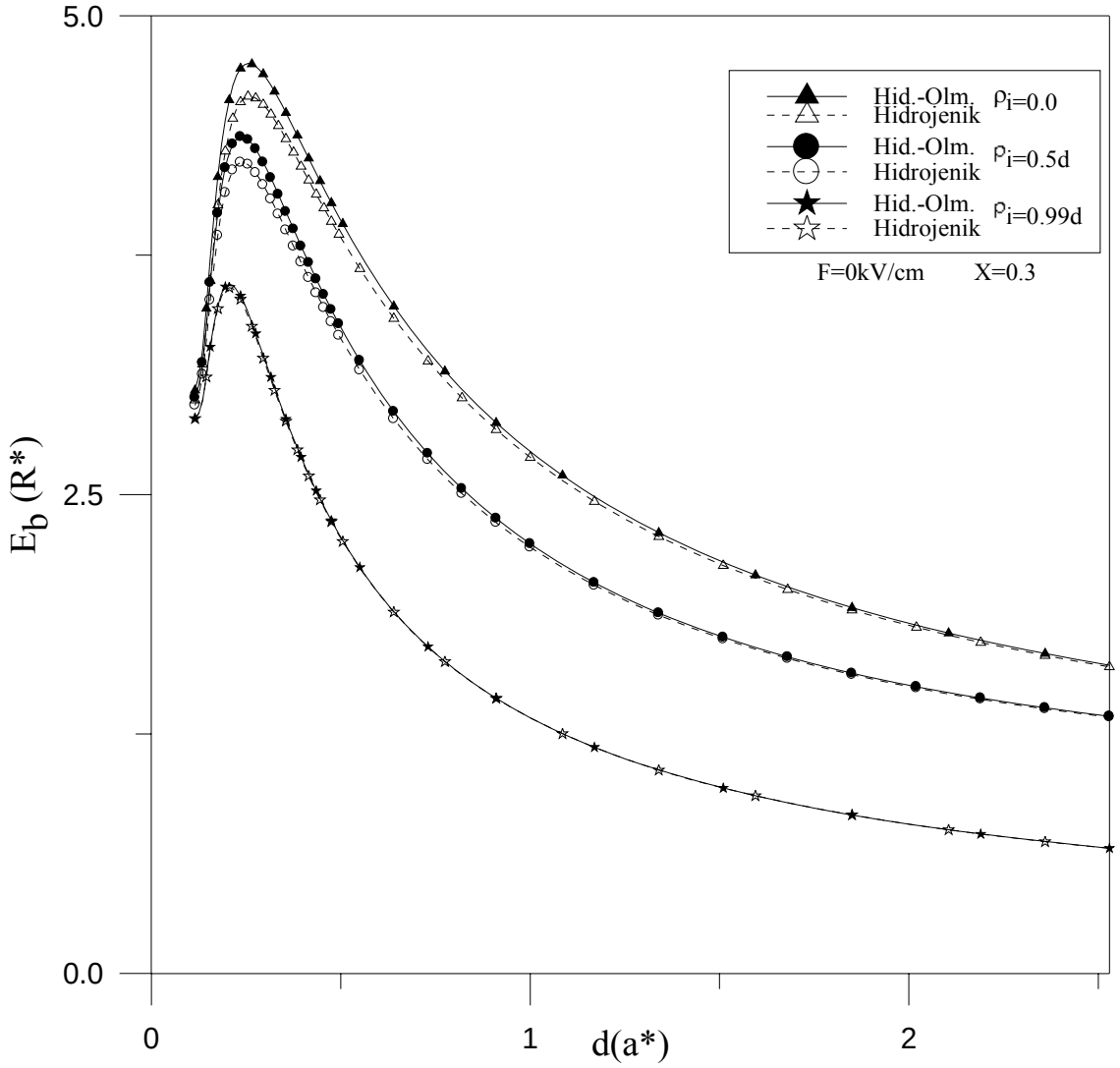
Şekil 4.8.b)'de yabancı atom ρ_i=0.5d konumunda iken aynı değişim gösterilmiştir. Bu şekilden de görüldüğü gibi telin yarıçapı küçüldüğünde hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjileri farklılık göstermektedir. Şekil 4.8.a) ile karşılaştırıldığında burada enerji değeri daha düşük değerde bulunmaktadır. Tel yarıçapı arttıkça, farklı elektrik alanların etkisi azda olsa kendini göstermektedir.



Şekil 4.8.b) Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerin tel yarıçapına göre değişimleri (ρ_i =0.5d).

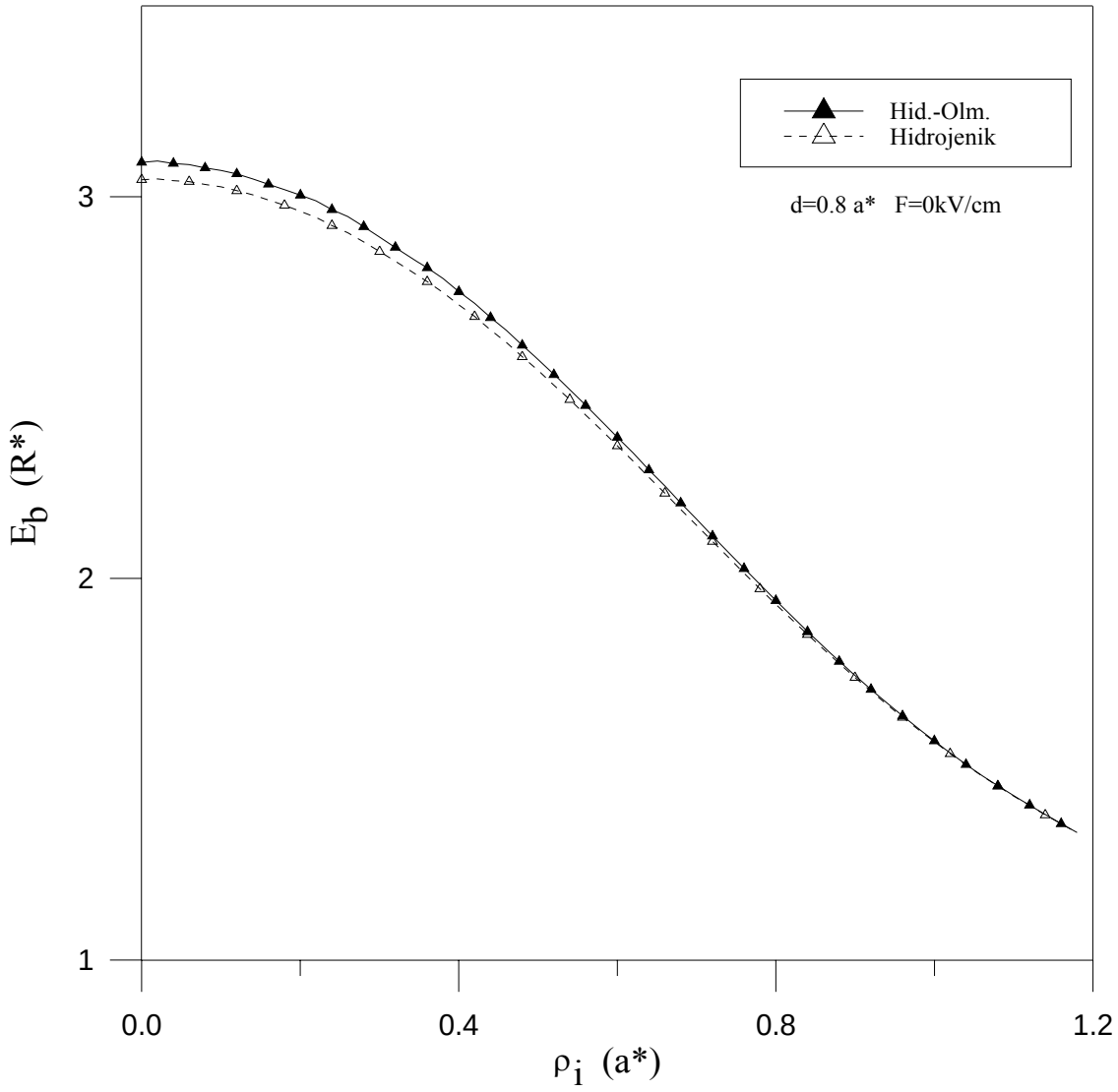
Şekil 4.9.'da ise elektrik alan uygulanmadan değişik yabancı atom konumlarında (ρ_i = 0, ρ_i = 0.5d ve ρ_i = 0.99d) hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjileri telin yarıçapına göre değişimleri karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Şekil dikkatlice incelendiğinde yabancı atom konumu merkezden tel kenarına yaklaştığında (ρ_i = 0.99d) bağlanma enerjisinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlar arasındaki fark ortadan kalkmaktadır. Tel yarıçapı arttırıldığında her iki durum için enerji

azalmakta ve üst üste çakışmaktadır. Bu ise Hermanson Dielektrik fonksiyonun, telin merkezinden uzaklaştıkça etkisinin olmadığını gösterir.



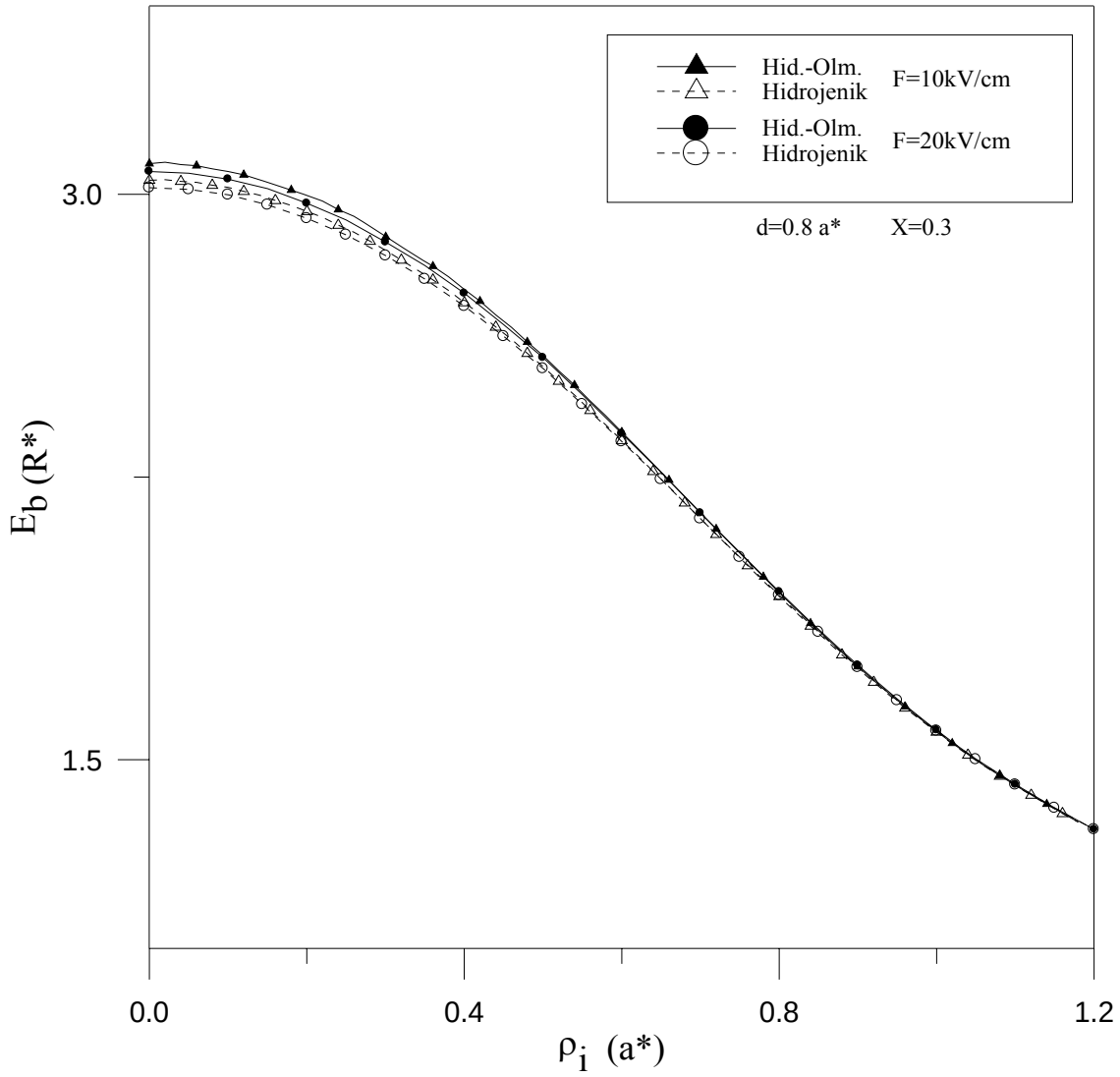
Şekil 4.9. Elektrik alan uygulanmadan, faklı yabancı atom konumlarında bağlanma enerjisinin tel yarıçapına göre değişimleri.

Şekil 4.10.'da tel yarıçapı d=0.8a* seçilerek hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjisinin, yabancı atoma konumlarına göre değişimi gösterilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi yabancı atom konumu merkezden uzaklaştıkça hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumda bağlanma enerjileri farkı azalmakta ve tel yarıçapı dışında üst üste çakışmaktadır.



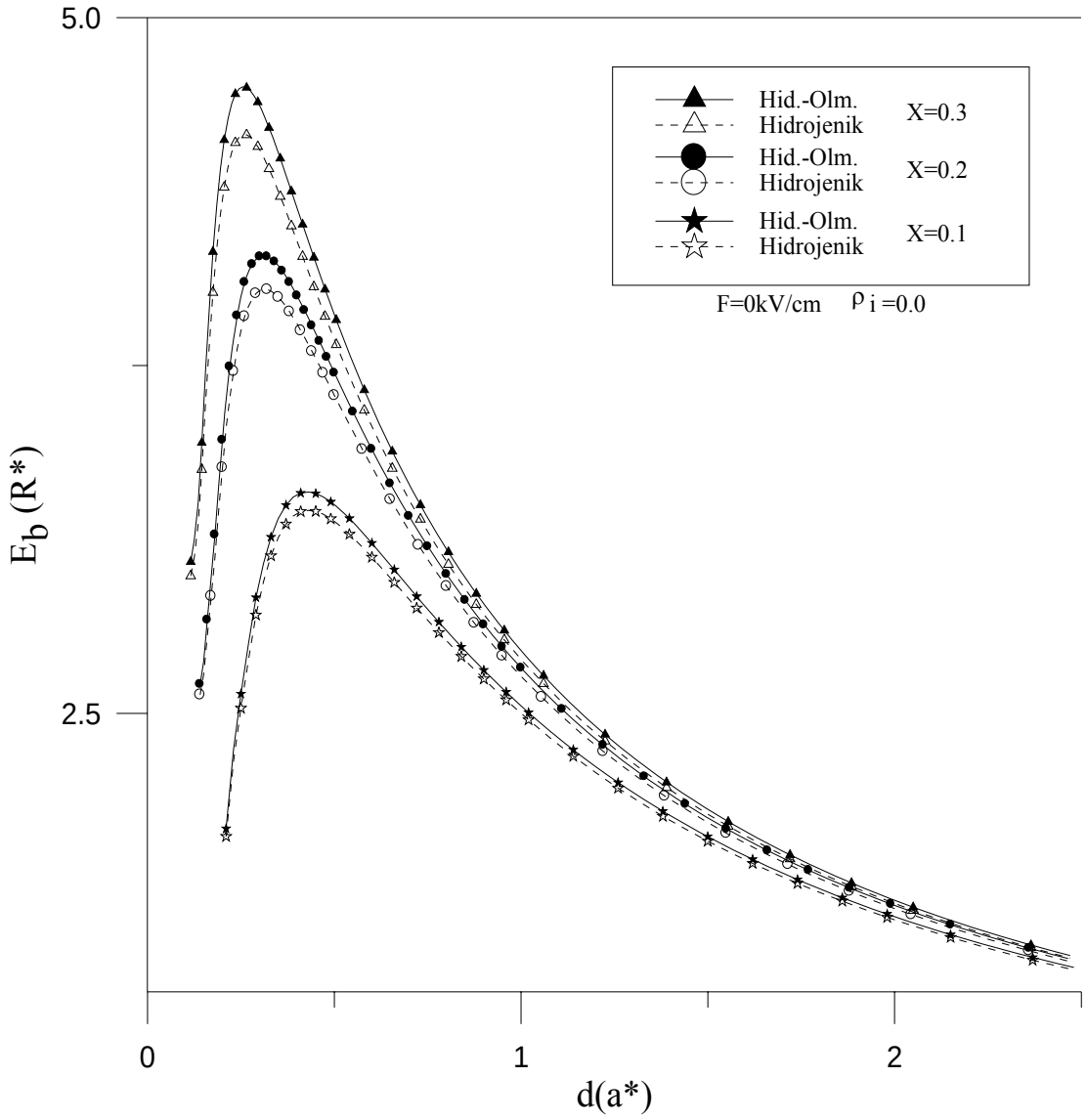
Şekil 4.10. Bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimleri.

Şekil 4.11.'de farklı elektrik alanlar altında bağlanma enerjilerinin yabancı atoma konumuna göre değişimleri verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi yabancı atom konumunun telin merkezine yakın olduğu bölgede hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlardaki bağlanma enerjileri arasında çok küçük bir fark görülmekte, merkezden uzaklaştıkça belli bir konum değerinden sonra bağlanma enerjileri üst üste çakışmaktadır. Elektrik alan etkisi de yabancı atom konumunun tel merkezine yakın olduğu bölgede azda olsa kendini göstermekte ve tel dışına çıktıkça etkisi görülmemektedir.



Şekil 4.11. Farklı elektrik alan değerlerinde bağlanma enerjilerinin yabancı atom konumuna göre değişimleri.

Yabancı atom merkezde ve elektrik alan uygulanmadan, farklı Alüminyum konsantrasyonlarında (X=0.3, 0.2,ve 0.1) hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjisinin tel yarıçapına göre değişimleri Şekil 4.12'de gösterilmiştir. Kare kesitli telde görülen özelliklerin benzerleri burada kendisini göstermiştir. Konsantrasyon değerleri azaldıkça bağlanma enerji pikleri azalmakta ve sağa doğru kaymalar gözlenmektedir.

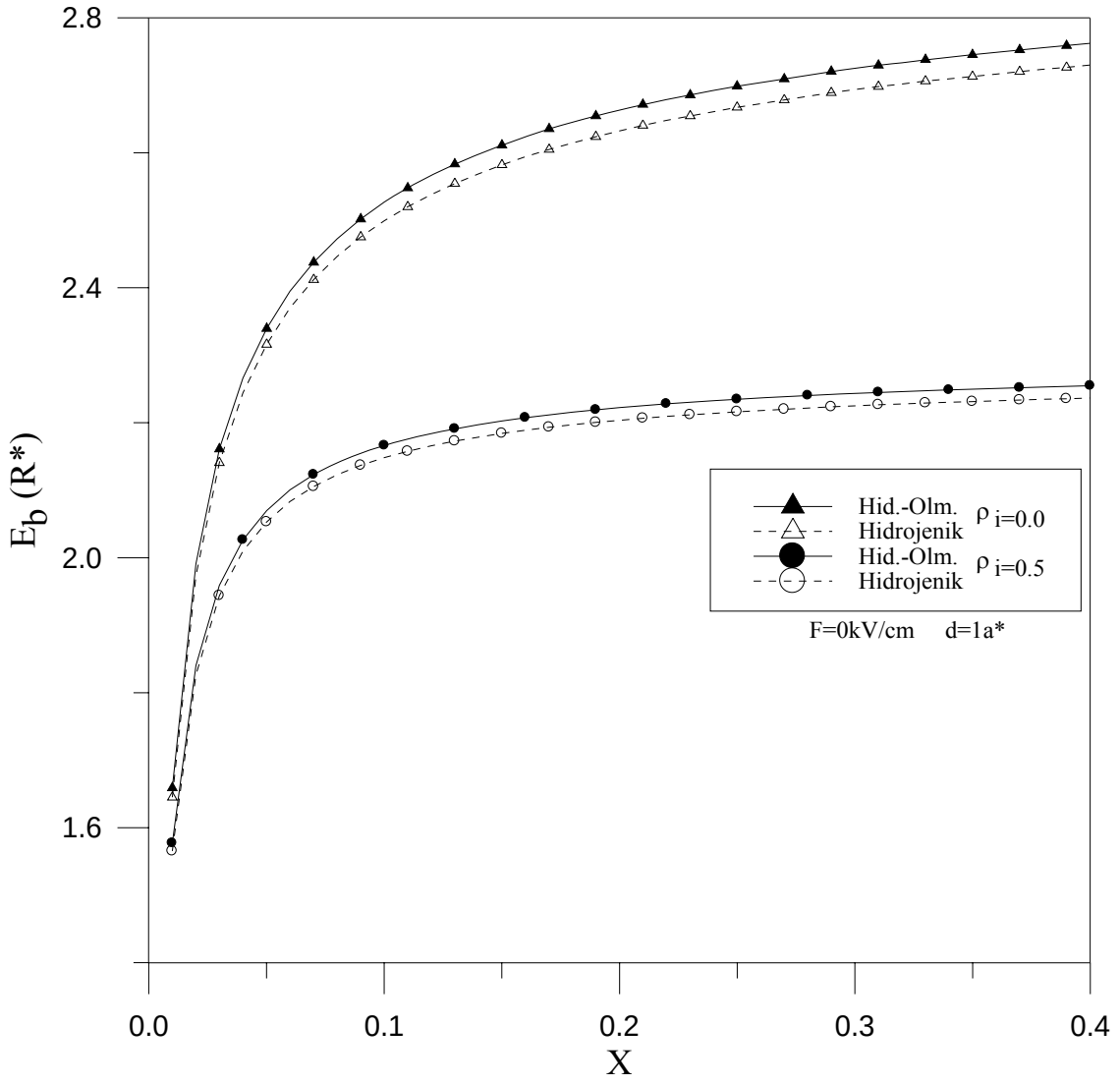


Şekil 4.12. Değişik Alüminyum konsantrasyonlarında bağlanma enerjilerinin tel yarıçapına göre değişimleri

.

Farklı yabancı atom konumlarında (ρ_i =0 ve ρ_i =0.5d) elektrik alan uygulanmadan ve d=1a* alınarak hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjisinin Alüminyum konsantrasyonuna göre değişimi Şekil 4.13.'de gösterilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi belli bir konsantrasyon değerine kadar bağlanma enerjisi iki durum içinde aynı kalmaktadır. Konsantrasyon arttıkça hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda enerji değerleri farklılık göstererek artmaktadır.

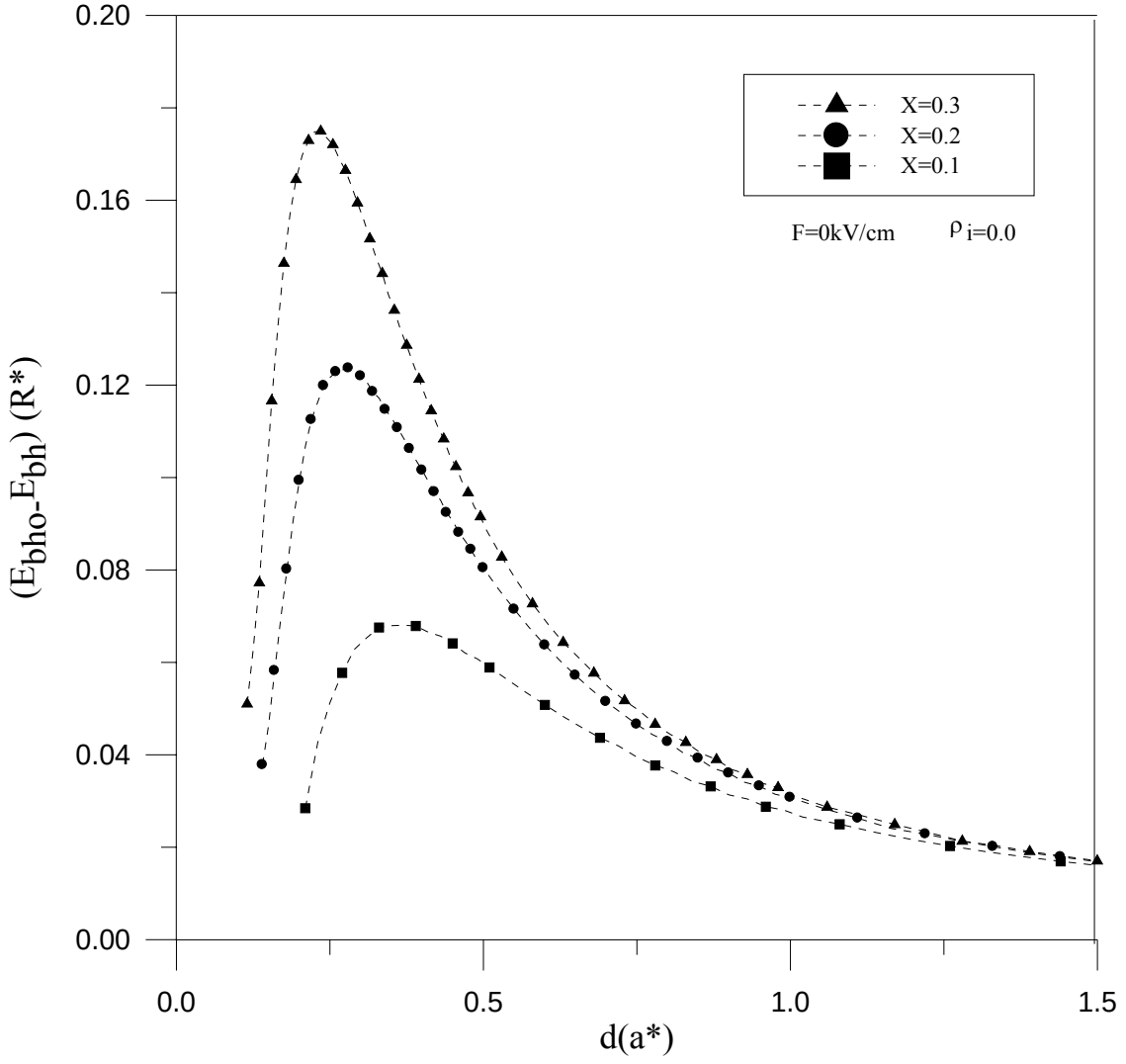
Hidrojenik olmayan durumda enerji daha büyük değerlere sahiptir. Doğal olarak bunun nedeni kullanılan dielektrik fonksiyonundan kaynaklanmaktadır. Farklı yabancı atom konumlarına göre bağlanma enerjileri arasında belirgin farklar görülmektedir.



Şekil 4.13. Elektrik alan uygulanmadan bağlanma enerjilerinin Alüminyum konsantrasyonuna göre değişimleri

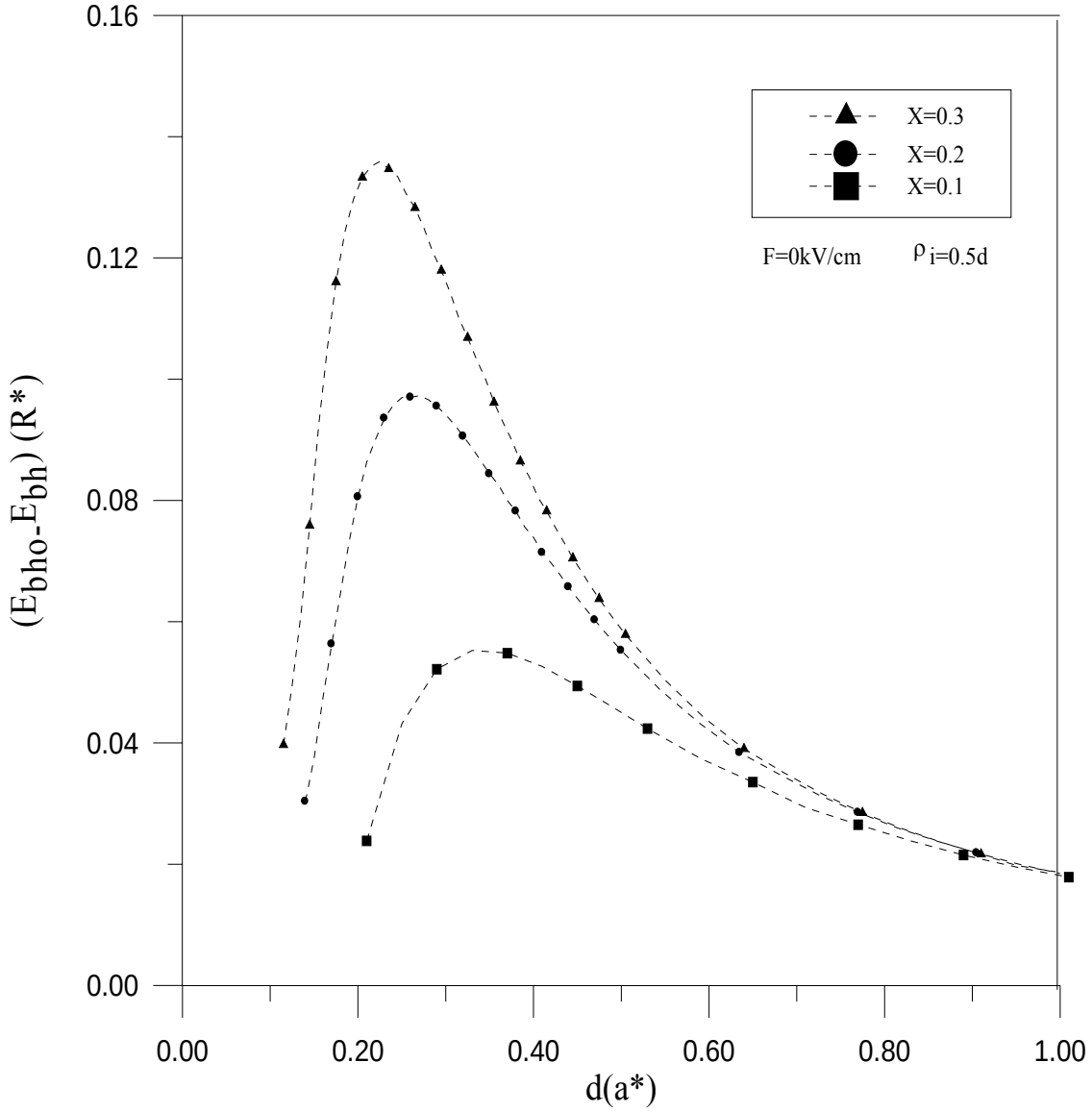
Şekil 4.14.a) ve 4.14.b)'de X=0.3, 0.2 ve 0.1 değerlerinde, elektrik alan uygulanmadan $(E_{bho}-E_{bh})(R^*)$ enerji farkının tel genişliğine göre değişimleri verilmiştir. Şekil 4.14.a)' da yabancı atom merkezde seçilmiştir. Konsantrasyon değerleri

küçüldükçe, bağlanma enerjileri arasındaki farkların pikleri telin orta bölgesinde azalmakta ve sağa doğru kaymaktadır.



Şekil 4.14.a) Farklı Alüminyum konsantrasyon değerlerinde, bağlanma enerjileri farkının tel yarıçapına göre değişimi (ρ_i =0).

Yabancı atom konumu ρ_i =0.5d'de alınmış Şekil 4.14.b)'de ise benzer özellikler görülmesine karşın bu iki grafik karşılaştırıldığında bağlanma enerjileri arasındaki fark Şekil 4.14b'de belirgindir. Örneğin X=0.3'te pik yüksekliği 0.14 Ryd. iken (Şekil 4.14.b)), diğerinde bu değer 0.17 Ryd. ' dir (Şekil 4.14a).



Şekil 4.14.b) Farklı Alüminyum konsantrasyon değerlerinde, bağlanma enerjileri farkının tel yarıçapına göre değişimi (ρ_i =0.5d).

4.3. Sonuçlar

Yapılan bu çalışmada, sonlu kare ve dairesel kesitli GaAs/$Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum tellerinde hidrojenik ve hidrojenik olmayan bağlanma enerjileri incelenmiştir. Bu enerjiler yabancı atom hesaba katılarak, elektrik alan , kuantum tel genişliği ve Al konsantrasyonunun bir fonksiyonu olarak araştırılmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürle uyum içindedir (Brown ve Spector 1985, Bryant 1985, Ulaş vd. 2005). Sonuçlar özetlenirse;

i) Her iki geometride kuantum tel genişliği, arttıkça bağlanma enerjisinin azaldığı görülür. Bu coulomb etkileşmesinin bir sonucudur.

ii) Hidrojenik ve hidrojenik olmayan durumlarda bağlanma enerjileri arasındaki fark ancak dar kuantum telinde görülür. Bu durum $r\rightarrow\infty$ iken $\varepsilon\rightarrow\varepsilon_o$ ve $r\rightarrow 0$ iken $\varepsilon\rightarrow 1$ olmasının bir sonucudur. (Hermanson 1966, Csavinszky ve Oyoko 1990, Sukumar ve Navaneethakrishman 1990, Oyoko 2000)

iii) Geniş kuantum tellerinde, her bir durumda sisteme uygulanan elektrik alan bağlanma enerjilerini azaltma eğilimi gösterir. Bunun nedeni ise elektrik alanın, elektron ve yabancı atomu birbirinden uzaklaştırmak istemesidir.

iv) Yabancı atomun farklı konumları için incelenen bağlanma enerjileri yabancı atom merkezden uzaklaştıkça yine azalma eğilimine girdiği gözlenir. Fakat bu durum, hem dar hem de geniş kuantum tellerinde geçerlidir.

v) Son olarak, tel geometrisinin bağlanma enerjisi üzerinde etkisi vardır. Kare ve dairesel kesitli sonlu kuantum tellerinin kesit alanları eşit olsa da kare kesitli kuantum telinde elektronun daha rahat ve serbest hareket edebildiği bölgeler bulunur. Bulunan sonuçlar literatür çalışmaları ile uyum içindedir (Montes vd. 1998, Ulaş vd. 1998, Kasapoğlu vd. 2002, Dalgıç vd. 2005).

KAYNAKLAR

Bastard G., Phys. Rev. **B24**, 4714 (1981).

Berggren K.F. Int. J. Quantum Chem. **33**, 217 (1988).

Bose C. J. Appl. Phys. **83,** 3098 (1998).

Brown J.W., Spector H.N., J. Appl. Phys. **59(4)**, 1179 (1985).

Brum J.A., Priester C., Allon G., Phys. Rev. **B32(4),** 2378 (1985)

Bryant G.W. Phys. Rev. **B31(12)**, 7812 (1985).

Casey H.J., Panish M.B., Heterostructure Lasers, Bölüm A, S.192, Academic Press. New York (1978).

Csavinszky P., Oyoko H., Phys. Rev. **B43(11)**, 9262 (1990).

Dalgıç S., Ulaş M., Özkapı B., J.Opt. and Adv. Mater. **7(4),** 2041(2005).

Gassard A.C., Miller R.C., Weigmann W., Surf. Sci. **174**, 131 (1986).

Greene R.L., Bajaj K.K., Solid State Commun. **45**, 825 (1983).

Gumbs G., Salman A., Phys. Rev. **B41**, 10124 (1990).

Hassan H.H., N. El-Meshad, Phys. Stat. Sol. (b) **201** , 381 (1997)

Hermanson J., Phys. Rev. **150**, 660 (1966).

Hjalmarson H.P., J. Vac. Sci. Technol. **21**, 524 (1982).

Johnson N.F., J. Phys. Condens. Matters **7**, 965 (1995).

Kasapoğlu E., Sarı H, Sokmen I., Physica **B315**, 261 (2002).

Latge A., de Dios-Leyva M., Oliveria L.E., Phys. Rev. **B49,** 10450 (1994).

Lee .J, Spector H.N., J. Appl. Phys. **57,** 366 (1985).

Montes A., Duque C.A., Porras-Montenegro N., J., Appl. Phys. **81** 7890 (1997).

Montes A., Duque C.A., Montenegro P., Phys. Stat. Sol.(b) **210**, 731 (1998).

Narayani V., Sukumar S., Sol. Stat. Comm. **90(9)** 575 (1994)

Oliveira L.E., Folicov L.M., Phys.Rev. **B34(12)**, 8876 (1986).

Oyoko H. Indian Journal of Pure&Applied Phys. **28**, 512 (2000)

Ploog K., J. Cryst. Growth 81, **304** (1987).

Plaut A.S., Lage H., Grambow P., Heitmann D., von Klitzing K., Ploog K., Phys. Rev. Lett. **67**, 1642 (1991).

Sakaki A. Jpn. J. Appl. Phys. **19(12)**, L735 (1980).

Sakaki H.ve Noge H.(Eds.) Nanostructures and Quantum Effects, Springer, Heidelberg, (1997).

Sukumar B., Navaneethakrishnan K., Sol. Stat. Comm. **74(4)**, 295 (1990).

Ulaş M., Akbaş H., Tomak M., Phys. Stat. Sol.(b) **200**, 67 (1997).

Ulaş M., Akbaş H., Tomak M., Tr. J. of Phys. **22**, 369 (1998).

Ulaş M., Çiçek E., Dalgıç S.S., Phys. Stat. Sol.(b) **241**, 2968 (2004).

Ulaş M., Erdoğan İ.,Çiçek E., Dalgıç S.S., Physica **E25**, 515 (2005).

Wegschneider W., Pfeiffer L.N., Diagnam M.M., Pinchuk A., West K.W., McCall S.L., Hull R., Phys. Rev. Lett. **71,** 4071 (1993).

Yoffe A.D. Adv . Phys. **42K ,** 173 (1993)

Yu Y.B. , Guo K.X. Physica E **18** 492 (2003)

Zhang L., Xie H.J., Phys. Rev. **B68** 235315 (2003) .

ÖZGEÇMİŞ

30.10.1979 yılında Kırklareli Pınarhisar ilçesinin Sütlüce Köyü'nde doğdum. İlköğrenimimi İstanbul Yenibosna ilköğretim okulunda tamamladıktan sonra N.Fazıl Kısakürek Lisesine girdim. 1996 yılında buradan mezun oldum ve aynı yıl Trakya Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde lisans eğitimime başladım. 2001 yılında Fizik Bölümünden mezun oldum . 2004 yılında Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Ana Bilim Dalında Yüksek Lisans öğrenimine başladım. Ve halen bu bölümde Yüksek Lisans öğrenimine devam etmekteyim.