

**T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**BİR KUANTUM KUTUSU İÇERİSİNDEKİ
SAFSIZLIK ENERJİ SEVİYELERİNİN
BELİRLENMESİ**

**ÖZLEM GÜCÜYENER
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
Konya,2006**

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
ÖNSÖZ	iii
İÇİNDEKİLER	iv
1. GİRİŞ	1
2. ÜRETİM TEKNİKLERİ	7
2.1. Asitle Aşındırma Yöntemi	7
2.2. Modüle Edilmiş Elektrik Alan Yöntemi	8
2.3. Yarıiletken Mikrokristaller	10
2.4. Kendiliğinden Büyüme	11
2.5. Kuantum Kuyusu ve Engel Arasında İnterdifüzyon	11
3. MEZOSKOPİK YAPILAR	13
3.1. Kuantum Kuyuları	14
3.1.1. Zarf Fonksiyonu ve Enerji Seviyeleri	15
3.2. Kuantum Telleri	19
3.2.1. Zarf Fonksiyonları ve Enerji Seviyeleri	19
3.3. Kuantum Noktaları	20
3.3.1. Zarf Fonksiyonları ve Enerji Seviyeleri	22
4. SAFSIZLIKLAR	26
4.1. Bulk Malzemede Alıcı ve Vericiler	26
4.2. Heteroyapılarda Bağlanma Enerjisi	29
5. VARYASYONEL YÖNTEM	33
5.1. Giriş	33
5.2. Varyasyonel Yöntem	34
5.3. Varyasyonel Yöntemin Kuantum Mekaniksel Problemlere Uygulanması	37
6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	40
6.1. Bir Boyutlu Harmonik Salımcı	40
6.2. Bir Boyutlu Potansiyel Kuyusu	41
6.3. Hidrojen Atomu	44
6.4. Bir Kuantum Kutu İçerisindeki Safsızlık	46
KAYNAKLAR	53

1.GİRİŞ

Doğa, eskilerin düşündüğü gibi, büyüklerin ve küçüklerin dünyası olarak tanımlanan iki parçadan oluşmaktadır. Büyüklerin dünyası, yani makroskobik evren, genelde klasik fizik kurallarına uygun işliyor ve günlük yaşamımızda kuantum etkilerini hesaba katmamız gerekmiyor. Gözle göremediğimiz küçükler dünyası, yani mikroskobik evren ise tümüyle kuantum fiziğinin emri altında.

İlk zamanlar, makroskopik ve mikroskopik evrenler arasında kalan bölge, kuantum fiziğinden klasik fiziğe düzgün ve sürekli bir geçiş sürecini temsil ettiği için, iyi bir araştırma konusu gibi görünmüyordu. Sharvin ve Sharvin'in Aharonov-Bohm etkisini gözlemek amacıyla yaptıkları deney ise bu öngörünün ne kadar yanlış olduğunu ortaya çıkardı.

Aharonov-Bohm etkisini anlayabilmek için çok sıkı sarılmış bir bobin kullanarak, yalnızca bobinin içine hapsolacak şekilde, bir manyetik akı oluşturduğumuzu varsayalım. Klasik olarak bu bobin etrafında dolanan bir elektron herhangi bir elektromanyetik kuvvet hissetmeyecek ve sonuçta manyetik akıdan kesinlikle etkilenmeyecektir. Oysa kuantum mekaniğine göre elektron dalga fonksiyonunun fazı, bobinin sağından ya da solundan geçmesine bağlı olarak, manyetik akı ile orantılı bir şekilde artacak ya da azalacaktır. Bobinin iki yanından geçen dalgalar yeniden bir araya geldiklerinde farklı fazları nedeniyle bir girişim deseni oluşturacaklardır. 1975 'de Sharvin ve Sharvin çok ince iletken bir silindirin direncini manyetik alanın fonksiyonu olarak ölçerek, aynı olayı katı-hal yapılarında gözlemeye çalıştılar. Fakat aynı etkiyi gözlemleyemediler. Bu sonuç 1980 lerin başında zayıf yerelleşme kuramı ile açıklandı. Zayıf yerelleşme, basitçe, düzensiz bir katıda elektronların iletim özelliklerini, düzensizliklerden saçılmaları aracılığıyla açıklıyan bir modeldir. Elektronları bir yandan klasik mekanikteki gibi nokta parçacıkları olarak düşünmek ve zaman içinde belli yörüngeler üzerinde hareket ettiklerini varsaymak, öte yandan da bir dalga özelliği olan fazlarını hesaba katmak ve

girişim yapabileceklerini de düşünmek gerekir. Kuramsal olarak zayıf yerelleşme etkileri yalnızca makroskopik ile mikroskopik boyutlar arasında bir bölgede ortaya çıkar.

Aharanov-Bohm etkisinin katı-hal yapılarda gözlenmesi, litografi teknikleri kullanılarak, yalıtkan yüzeyler üzerine çizilmiş mikron-altı boyuttaki ince metal filmlerden oluşan devreler kullanarak mümkün olmuştur.

Kuantum mekaniği, kırklı yılların sonunda, transistörün ortaya çıkışından kısa bir süre sonra, katıhal elektroniği üzerinde önemli bir etki yapmaya başladı (Bardeen ve Brattain 1948, Shockleey 1949).

Ellili yılların ortalarında, çok yoğun şekilde katılanmış p-n eklemlerin, Shockleey denklemini sağlayan düzenli (regular) diyotlar gibi davranmadıkları açıkça ortaya çıkmıştı. Leo Esaki ilk kez, bu anormalliklerin (regular diyotlardan sapmaların), elektronların band aralığı üzerinden, n bölgesinden p bölgesine Zener tünellemesinden kaynaklandığı yorumunu getirdi.

Ortaya çıkışından kısa süre sonra tünel diyot çok yüksek tetikleme hızı nedeniyle, elektronikte devrim yapacak bir aygıt olarak karşılanmıştı. Fakat gerekli yüksek katılama düzeyleri ve bu düzeylere I-V karakteristiklerinin duyarlılığı göz önüne alındığında, I-V karakteristiklerinin tekrarlanabilirliğini sağlamanın güç olması, ayrıca Esaki tünelleme kavramını bir transistöre uygulamada karşılaşılan başarısızlık da, tünel diyodun büyük ölçekli elektronik devreler için kullanılma ümidini sona erdirdi.

Altmışlı yılların başlarında yarı iletken lazerin icat edilmesi (Hall ve ark. 1962) ve birbirinden farklı en az iki yarıiletken kullanılarak yapılan eklemlerin (heteroeiklemlerin) ortaya çıkışı (Anderson 1962), kuantum fiziğinin katıhal elektroniğinde gittikçe artan bir role sahip olmasına imkan sağlamıştır. Ayrıca, 1958 yılında, Franz ve Keldysh tarafından yeni bir kuantum olayı olan elektro-soğurma sürecinin keşfi, sadece yarı iletkenler için yeni bir güçlü spektroskopik tekniğin geliştirilmesine yol açmamış, aynı zamanda modülator ve dedektör gibi yeni aygıtların üretilmesine de ortam sağlamıştır.

Yarıiletken aygıtlarda kuantum-boyut etkileri üzerindeki tartışmalar Schrieffer'e kadar uzanır. 1957 de Schrieffer, silisyum MOS yapıdaki bir terslenim tabakasının potansiyel kuyusunda hapsedilmiş bulunan elektronların, eğer taşıyıcı dalgaboyu Si-SiO₂

ara yüzey ile klasik dönüm arasındaki mesafeyle karşılaştırılabilir mertebede ise, klasik olarak davranamayacaklarını ileri sürmüştür.

Arthur ve Cho tarafından altmışlı yıllarda moleküler demet epitaksi (MBE) yönteminin bulunuşu, heteroeklem yapılar kuantum aygıtları alanında, son yirmi yılda benzeri görülmemiş gelişmelere yol açmıştır. Bu epitaksiyel büyütme tekniği, atomik düzeyde keskin ara yüzeylere sahip çok tabakalı heteroeklemlerin gerçekleştirilebilmesine ve günümüzde, en gelişmiş şekli olan III-V alaşımlarına uygulanan elektron demet destekli MBE yöntemi yardımı ile birkaç 10 Å gibi çok kısa mesafeler üzerinde hassas şekilde kontrol edilebilen bileşim ve katkılama profillerinin elde edilebilmesine imkan sağlamaktadır.

1970'lerin başında, kuantum kuyuları olarak adlandırılan, iki boyutta sınırlandırılmış elektronik yapılar üzerinde yeni bir dönem başlamıştır. Kuantum kuyusu, daha yüksek iletim bandı enerjisine sahip, yani daha büyük bant aralıklı düzlem yarıiletken tabakalarla sandviç yapılmış, düşük bant aralıklı düzlem yarıiletken tabakadan oluşan çok ince bir yapıdır. Bu iki yarıiletken malzemenin iletim bandı enerjileri arasındaki fark, elektronu bu ince tabakaya bağlar. İki boyutlu sistemlerin, elektronik ve optoelektronik uygulamalarında ortaya çıkan yeni ilginç özellikleri, araştırmacıların ilgisini çekmektedir. Dolayısıyla, üretim teknolojisinin hızlı şekilde gelişmesine ve yoğun araştırmalar yapılmasına yol açmıştır.

1970'li yıllarda kuantum kuyu süper örgülerde, değişik ilgi çekici fiziksel olaylar gözlenmiş ve literatüre geçmiştir. Esaki ve Tsu'nun (1970) çok kuantum kuyulu süper örgüler üzerindeki çalışmalarının ardından rezonans tünellemesi (Chang ve ark. 1974), modülasyon katkılama (Dingle ve ark. 1978), transport deneyleri (Esaki ve Chang 1974) ve optik soğurma ölçümleri (Dingle ve ark. 1974) sonucu, bu tip kuyulardaki enerji seviyelerinin kesikli olduğuna ilişkin çok sayıda deneysel sonuç ortaya çıkmıştır. Rezonans tünelleme diyodu (Chang ve ark. 1974) ve kuantum kuyu lazeri (Van der Ziel ve ark. 1975), kuantum sınırlama etkisine dayalı olarak çalışan optoelektronik aygıtlara ilk örneklerdir.

Yetmişli yıllarda, MBE ile üretilen malzeme kalitesindeki kararlı gelişme, bu on yılın sonuna doğru önemli fiziksel ilerlemelere ve aygıt gelişmelerine yol açmıştır.

Örneğin, AlGaAs/GaAs sisteminde ara yüzey durum yoğunluklarındaki azalma ve GaAs'de düşük zemin katkılanmasının başarılması 1978'de Dingle ve arkadaşları tarafından hetero-ara yüzeylerin geliştirilmesine paralel olarak, seçici katkılamının ve yüksek elektron mobilitelerinin ortaya çıkmasına imkan sağlamıştır. Bu çalışma 1980'de, seçici katkılanmış heteroeklem transistör (SDHT, aynı zamanda modülasyon katkılı FET ya da MODFET olarak adlandırılır) kavramına ve bu yapının gerçekleştirilmesine zemin hazırlamıştır.

Seksenli yıllar, kuantum mikroyapılardaki eşi görülmemiş gelişmeler ile doludur. MBE'deki gelişmeler devam ederken, kuantum yapıların tasarımına yeni serbestlik dereceleri getiren nanolitografideki hamleler ve yeni kuantum olayları ile aygıtlarının keşfi, malzeme bilimi, fizik ve aygıt teknolojisi arasında güzel karşılıklı bir ilişki ortamı sağlamıştır.

AlGaAs/GaAs çoklu kuantumlu kuyularda sınırlanmış kuantum Stark etkisinin gözlenmesi optik mantık ve hesaplama alanlarında önemli uygulamalara sahip olan yeni iki-durumlu optik tetikleme aygıtlarının üretimine yol açmıştır. Bu aygıtlar, kuantum kuyularındaki durumların iki boyutlu yapısının önemli bir göstergesi olan oda sıcaklığındaki eksiton etkilerinden yararlanırlar.

1984'de Capasso ve Kichl, ilk rezonans tünelleme çift-kutuplu (bipolar) transistörü ortaya attılar ve bu aygıtların ilginç devre uygulamalarına işaret ettiler. Rezonans tünelleme transistörleri, analog-dijital dönüştürücüler, parite kontrol aletleri, frekans katlayıcıları gibi geniş bir devre grubunun oldukça daha az bir karmaşıklığa sahip olacak şekilde (yani normal transistörlerin kullanıldığı bir devreye kıyasla fonksiyon başına daha az transistör içerecek şekilde) gerçekleştirilebilmesine imkan verirler. Rezonans tünelleme sıcak elektron tek-kutuplu (unipolar) transistörün ilk kez ortaya atılmasından kısa süre sonra, Yokohama ve arkadaşları, bu aygıtın düşük sıcaklıktaki (77 K) çalışmasını incelediler ve sekiz normal transistör yerine bu aygıttan sadece bir tanesi ile dışarılayıcı NOR mantık fonksiyonunun kurulabileceğini gösterdiler.

Son yıllarda, mikron-altı (submikron) yapılar için nanolitografi ile sağlanan önemli gelişmeler, kuantum aygıtlarına yeni fırsat alanları açmıştır. Elektron demet litografisi, kuasi-tek boyutlu kuantum yapılarının gerçekleştirilmesine imkan sağlamıştır. Örneğin silisyumdaki kuasi-tek boyutlu MOSFET'ler, Altshuler, Lee ve Store tarafından

öngörülen gelişigüzel kuantum girişiminin oluşturduğu iletkenlikteki genel düzensizlikleri açığa çıkartmıştır. Kısa ve dar bir kanalda (örneğin bir kuantum telinde) hapsedilmiş iki boyutlu bir elektron gazında (magnetik alan yokken) kuantumlu balistik direnç gözlenmesi oldukça heyecan uyandırmıştır.

Elektron demet litografisi ve safsızlıkla oluşturulan düzensizleştirme yöntemleri birlikte kullanılarak, Cibert ve arkadaşları tarafından, kuantum kutuları ve telleri üretilmiştir. Kuantum kutuları yüksek kutuplanabilirlikleri nedeniyle, çok büyük optik lineersizlikler gösterirler.

Son zamanlarda, kuantum kuyuları ve kuantum telleri kullanılarak yüksek elektron mobiliteli transistörler (HEMT), iki boyutlu elektron gazı alan etkili transistör (TEGFET), çok eklemlili alan etkili transistör (HFET), kuantum kuyu lazerleri, MOS ve MOSFET yapılar (Lai ve Das Sarma 1986) gibi uygulamalar gerçekleştirilmiş ve teorik olarak da yoğun şekilde çalışılmıştır.

Elektronların serbest hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırılması, kuantum noktaları olarak adlandırılan, sanki sıfır boyutlu nanoyapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır. İlk kuantum nokta yapı, Texas Instrument Incorporated şirketindeki bilim adamları tarafından gerçekleştirilmiş olup (Reed ve ark. 1986), 250 nm kenar uzunluğu olan kare biçiminde bir geometrik yapıya sahiptir. Daha sonra üretilen kuantum noktaların boyutları 30-45 nm'ye kadar düşürülebilmıştır (Cibert ve ark. 1986, Temkin ve ark. 1987). Teknolojideki bu hızlı gelişmeler, daha sonraları çok değişik geometrilere (küresel, piramit şekilli, kübik, elipsoid vs.) sahip kuantum nokta yapılarının üretimine imkan sağlamıştır (Bimberg ve ark. 1999).

Üç boyuttaki güçlü sınırlandırma sonucunda oluşan kuantum nokta sistemlerinin atomlara benzerliğinden dolayı, yapay atomlar, süper atomlar veya kuantum nokta atomları olarak da adlandırılırlar. Bunların geometrilerinin, boyutlarının, enerji seviyelerinin ve sınırlandırıldıkları elektron sayılarının kontrol edilebilmesi, onları hem fiziksel olarak hem de teknolojik olarak daha da ilgi çekici hale getirmiştir. Kuantum noktaları veya yapay atomlar, son yıllarda teknolojik çalışmaların temeli olmuştur. Kuantum noktalarının keskin durum yoğunluğu, bu sistemleri lazer uygulamaları için çok uygun hale getirmiştir. Kuantum nokta yapıları kullanarak yapılan kızılötesi fotodedektörler (QDIP), tek elektronlu transistörler, hafıza elemanları, kuantum

bilgisayarları gibi deęişik cihaz uygulamaları gerekleřtirilmeye bařlanmıřtır (Ryzhii 1996, Nomoto ve ark. 1998, Choi ve ark.1998 ve Sakaki 1999, Gammon 2000, Sim ve ark. 2004). Bu tr alıřmalar kuantum noktalarının, kuantum mekaniksel iřleyiři hakkında yeni grřler saęlamaktadır. Bu alıřmaların temel amacı, kuantum noktalarının řeklinin, boyutunun, kompozisyonunun ve yerleřiminin istenildięi řekilde dzenlenmesi sonucunda daha kullanıřlı elektronik ve optik, nano lekli materyallerin oluřturulmasıdır.

Son yıllarda, zellikle sonlu sayıda elektron ieren kuantum nokta yapıları byk ilgi ekmektedir. Bu ilginin temel nedeni, retilen teknolojik cihazların boyutlarının kltlmesinin ancak onu oluřturan elektronik devre elemanlarının kltlmesi ile mmkn olabilmesidir. Bu noktada da dřk boyutlu yapılar devreye girmektedir. Dolayısıyla bu yapılar zerinde, hem deneysel hem de teorik olarak yoęun bir řekilde alıřılmaktadır.

Gerek tek elektronlu, gerekse ok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik zelliklerini arařtırmak iin varyasyon yntemi (Banyai ve Koch 1993), pertrbasyon yntemi (Bose 1999), matris křegenleřtirme yntemi (Banyai ve Koch 1993), Monte Carlo teknięi (Banyai ve Koch 1993), yoęunluk fonksiyonel teorisi (DFT) (Stopa 1996), Hartree-Fock yntemi (Reusch ve Grabert 2003) gibi deęişik teknikler kullanılmaktadır. Her bir yntemin, ele alınan probleme ve yapılmak istenen hesaplamalara baęlı olarak birbirinden daha etkin, daha bařarılı olduęu durumlar vardır. Bazen ele alınan problemi tek bir yntemle incelemek yeterli olmaz. Byle durumlarda da birden ok teknięin, problemin farklı ařamalarında ayrı ayrı veya birlikte kullanılması gerekebilir. Son yıllarda genetik algoritma yntemi de kuantum mekaniksel sistemlerin elektronik zelliklerinin arařtırılmasında kullanılmaya bařlanmıřtır.

Bu alıřmada, nanoyapıların genel zellikleri, retim teknikleri ve hesaplama yntemleri zerinde durulduktan sonra sonsuz potansiyel kuyusundaki bir safsızlıęın baęlanma enerjileri, merkezdeki safsızlık durumunda, kuantum kuyusunun boyutları deęiřtirilerek hesaplanmıřtır. Hesaplamalar yapılırken varyasyonel yntem kullanılmıřtır. Elde edilen grafikler ve grafiklerle ilgili yorumlar alıřmanın son blmnde sunulmuřtur. alıřmanın konuya ilgisi olanlara iyi bir zet nitelięinde olacaęı dřnlmektedir.

1.GİRİŞ

Doğa, eskilerin düşündüğü gibi, büyüklerin ve küçüklerin dünyası olarak tanımlanan iki parçadan oluşmaktadır. Büyüklerin dünyası, yani makroskobik evren, genelde klasik fizik kurallarına uygun işliyor ve günlük yaşamımızda kuantum etkilerini hesaba katmamız gerekmiyor. Gözle göremediğimiz küçükler dünyası, yani mikroskobik evren ise tümüyle kuantum fiziğinin emri altında.

İlk zamanlar, makroskopik ve mikroskopik evrenler arasında kalan bölge, kuantum fiziğinden klasik fiziğe düzgün ve sürekli bir geçiş sürecini temsil ettiği için, iyi bir araştırma konusu gibi görünmüyordu. Sharvin ve Sharvin'in Aharonov-Bohm etkisini gözlemek amacıyla yaptıkları deney ise bu öngörünün ne kadar yanlış olduğunu ortaya çıkardı.

Aharonov-Bohm etkisini anlayabilmek için çok sıkı sarılmış bir bobin kullanarak, yalnızca bobinin içine hapsolacak şekilde, bir manyetik akı oluşturduğumuzu varsayalım. Klasik olarak bu bobin etrafında dolanan bir elektron herhangi bir elektromanyetik kuvvet hissetmeyecek ve sonuçta manyetik akıdan kesinlikle etkilenmeyecektir. Oysa kuantum mekaniğine göre elektron dalga fonksiyonunun fazı, bobinin sağından ya da solundan geçmesine bağlı olarak, manyetik akı ile orantılı bir şekilde artacak ya da azalacaktır. Bobinin iki yanından geçen dalgalar yeniden bir araya geldiklerinde farklı fazları nedeniyle bir girişim deseni oluşturacaklardır. 1975 'de Sharvin ve Sharvin çok ince iletken bir silindirin direncini manyetik alanın fonksiyonu olarak ölçerek, aynı olayı katı-hal yapılarında gözlemeye çalıştılar. Fakat aynı etkiyi gözlemleyemediler. Bu sonuç 1980 lerin başında zayıf yerelleşme kuramı ile açıklandı. Zayıf yerelleşme, basitçe, düzensiz bir katıda elektronların iletim özelliklerini, düzensizliklerden saçılmaları aracılığıyla açıklıyan bir modeldir. Elektronları bir yandan klasik mekanikteki gibi nokta parçacıkları olarak düşünmek ve zaman içinde belli yörüngeler üzerinde hareket ettiklerini varsaymak, öte yandan da bir dalga özelliği olan fazlarını hesaba katmak ve

girişim yapabileceklerini de düşünmek gerekir. Kuramsal olarak zayıf yerelleşme etkileri yalnızca makroskopik ile mikroskopik boyutlar arasında bir bölgede ortaya çıkar.

Aharanov-Bohm etkisinin katı-hal yapılarında gözlenmesi, litografi teknikleri kullanılarak, yalıtkan yüzeyler üzerine çizilmiş mikron-altı boyuttaki ince metal filmlerden oluşan devreler kullanarak mümkün olmuştur.

Kuantum mekaniği, kırklı yılların sonunda, transistörün ortaya çıkışından kısa bir süre sonra, katıhal elektroniği üzerinde önemli bir etki yapmaya başladı (Bardeen ve Brattain 1948, Shockleey 1949).

Ellili yılların ortalarında, çok yoğun şekilde katılanmış p-n eklemlerin, Shockleey denklemini sağlayan düzenli (regular) diyotlar gibi davranmadıkları açıkça ortaya çıkmıştı. Leo Esaki ilk kez, bu anormalliklerin (regular diyotlardan sapmaların), elektronların band aralığı üzerinden, n bölgesinden p bölgesine Zener tünellemesinden kaynaklandığı yorumunu getirdi.

Ortaya çıkışından kısa süre sonra tünel diyot çok yüksek tetikleme hızı nedeniyle, elektronikte devrim yapacak bir aygıt olarak karşılanmıştı. Fakat gerekli yüksek katılama düzeyleri ve bu düzeylere I-V karakteristiklerinin duyarlılığı göz önüne alındığında, I-V karakteristiklerinin tekrarlanabilirliğini sağlamanın güç olması, ayrıca Esaki tünelleme kavramını bir transistöre uygulamada karşılaşılan başarısızlık da, tünel diyodun büyük ölçekli elektronik devreler için kullanılma ümidini sona erdirdi.

Altmışlı yılların başlarında yarı iletken lazerin icat edilmesi (Hall ve ark. 1962) ve birbirinden farklı en az iki yarıiletken kullanılarak yapılan eklemlerin (heteroeiklemlerin) ortaya çıkışı (Anderson 1962), kuantum fiziğinin katıhal elektroniğinde gittikçe artan bir role sahip olmasına imkan sağlamıştır. Ayrıca, 1958 yılında, Franz ve Keldysh tarafından yeni bir kuantum olayı olan elektro-soğurma sürecinin keşfi, sadece yarı iletkenler için yeni bir güçlü spektroskopik tekniğin geliştirilmesine yol açmamış, aynı zamanda modölatör ve dedektör gibi yeni aygıtların üretilmesine de ortam sağlamıştır.

Yarıiletken aygıtlarda kuantum-boyut etkileri üzerindeki tartışmalar Schrieffer'e kadar uzanır. 1957 de Schrieffer, silisyum MOS yapıdaki bir terslenim tabakasının potansiyel kuyusunda hapsedilmiş bulunan elektronların, eğer taşıyıcı dalgaboyu Si-SiO₂

ara yüzey ile klasik dönüm arasındaki mesafeyle karşılaştırılabilir mertebede ise, klasik olarak davranamayacaklarını ileri sürmüştür.

Arthur ve Cho tarafından altmışlı yıllarda moleküler demet epitaksi (MBE) yönteminin bulunuşu, heteroeklem yapılar kuantum aygıtları alanında, son yirmi yılda benzeri görülmemiş gelişmelere yol açmıştır. Bu epitaksiyel büyütme tekniği, atomik düzeyde keskin ara yüzeylere sahip çok tabakalı heteroeklemlerin gerçekleştirilebilmesine ve günümüzde, en gelişmiş şekli olan III-V alaşımlarına uygulanan elektron demet destekli MBE yöntemi yardımı ile birkaç 10 Å gibi çok kısa mesafeler üzerinde hassas şekilde kontrol edilebilen bileşim ve katkılama profillerinin elde edilebilmesine imkan sağlamaktadır.

1970'lerin başında, kuantum kuyuları olarak adlandırılan, iki boyutta sınırlandırılmış elektronik yapılar üzerinde yeni bir dönem başlamıştır. Kuantum kuyusu, daha yüksek iletim bandı enerjisine sahip, yani daha büyük bant aralıklı düzlem yarıiletken tabakalarla sandviç yapılmış, düşük bant aralıklı düzlem yarıiletken tabakadan oluşan çok ince bir yapıdır. Bu iki yarıiletken malzemenin iletim bandı enerjileri arasındaki fark, elektronu bu ince tabakaya bağlar. İki boyutlu sistemlerin, elektronik ve optoelektronik uygulamalarında ortaya çıkan yeni ilginç özellikleri, araştırmacıların ilgisini çekmektedir. Dolayısıyla, üretim teknolojisinin hızlı şekilde gelişmesine ve yoğun araştırmalar yapılmasına yol açmıştır.

1970'li yıllarda kuantum kuyu süper örgülerde, değişik ilgi çekici fiziksel olaylar gözlenmiş ve literatüre geçmiştir. Esaki ve Tsu'nun (1970) çok kuantum kuyulu süper örgüler üzerindeki çalışmalarının ardından rezonans tünellemesi (Chang ve ark. 1974), modülasyon katkılama (Dingle ve ark. 1978), transport deneyleri (Esaki ve Chang 1974) ve optik soğurma ölçümleri (Dingle ve ark. 1974) sonucu, bu tip kuyulardaki enerji seviyelerinin kesikli olduğuna ilişkin çok sayıda deneysel sonuç ortaya çıkmıştır. Rezonans tünelleme diyodu (Chang ve ark. 1974) ve kuantum kuyu lazeri (Van der Ziel ve ark. 1975), kuantum sınırlama etkisine dayalı olarak çalışan optoelektronik aygıtlara ilk örneklerdir.

Yetmişli yıllarda, MBE ile üretilen malzeme kalitesindeki kararlı gelişme, bu on yılın sonuna doğru önemli fiziksel ilerlemelere ve aygıt gelişmelerine yol açmıştır.

Örneğin, AlGaAs/GaAs sisteminde ara yüzey durum yoğunluklarındaki azalma ve GaAs'de düşük zemin katkılanmasının başarılması 1978'de Dingle ve arkadaşları tarafından hetero-ara yüzeylerin geliştirilmesine paralel olarak, seçici katkılanmanın ve yüksek elektron mobilitelerinin ortaya çıkmasına imkan sağlamıştır. Bu çalışma 1980'de, seçici katkılanmış heteroeklem transistör (SDHT, aynı zamanda modülasyon katkılı FET ya da MODFET olarak adlandırılır) kavramına ve bu yapının gerçekleştirilmesine zemin hazırlamıştır.

Seksenli yıllar, kuantum mikroyapılardaki eşi görülmemiş gelişmeler ile doludur. MBE'deki gelişmeler devam ederken, kuantum yapıların tasarımına yeni serbestlik dereceleri getiren nanolitografideki hamleler ve yeni kuantum olayları ile aygıtlarının keşfi, malzeme bilimi, fizik ve aygıt teknolojisi arasında güzel karşılıklı bir ilişki ortamı sağlamıştır.

AlGaAs/GaAs çoklu kuantumlu kuyularda sınırlanmış kuantum Stark etkisinin gözlenmesi optik mantık ve hesaplama alanlarında önemli uygulamalara sahip olan yeni iki-durumlu optik tetikleme aygıtlarının üretimine yol açmıştır. Bu aygıtlar, kuantum kuyularındaki durumların iki boyutlu yapısının önemli bir göstergesi olan oda sıcaklığındaki eksiton etkilerinden yararlanırlar.

1984'de Capasso ve Kichl, ilk rezonans tünelleme çift-kutuplu (bipolar) transistörü ortaya attılar ve bu aygıtların ilginç devre uygulamalarına işaret ettiler. Rezonans tünelleme transistörleri, analog-dijital dönüştürücüler, parite kontrol aletleri, frekans katlayıcıları gibi geniş bir devre grubunun oldukça daha az bir karmaşıklığa sahip olacak şekilde (yani normal transistörlerin kullanıldığı bir devreye kıyasla fonksiyon başına daha az transistör içerecek şekilde) gerçekleştirilebilmesine imkan verirler. Rezonans tünelleme sıcak elektron tek-kutuplu (unipolar) transistörün ilk kez ortaya atılmasından kısa süre sonra, Yokohama ve arkadaşları, bu aygıtın düşük sıcaklıktaki (77 K) çalışmasını incelediler ve sekiz normal transistör yerine bu aygıttan sadece bir tanesi ile dışarılayıcı NOR mantık fonksiyonunun kurulabileceğini gösterdiler.

Son yıllarda, mikron-altı (submikron) yapılar için nanolitografi ile sağlanan önemli gelişmeler, kuantum aygıtlarına yeni fırsat alanları açmıştır. Elektron demet litografisi, kuasi-tek boyutlu kuantum yapılarının gerçekleştirilmesine imkan sağlamıştır. Örneğin silisyumdaki kuasi-tek boyutlu MOSFET'ler, Altshuler, Lee ve Store tarafından

öngörülen gelişigüzel kuantum girişiminin oluşturduğu iletkenlikteki genel düzensizlikleri açığa çıkartmıştır. Kısa ve dar bir kanalda (örneğin bir kuantum telinde) hapsedilmiş iki boyutlu bir elektron gazında (magnetik alan yokken) kuantumlu balistik direnç gözlenmesi oldukça heyecan uyandırmıştır.

Elektron demet litografisi ve safsızlıkla oluşturulan düzensizleştirme yöntemleri birlikte kullanılarak, Cibert ve arkadaşları tarafından, kuantum kutuları ve telleri üretilmiştir. Kuantum kutuları yüksek kutuplanabilirlikleri nedeniyle, çok büyük optik lineersizlikler gösterirler.

Son zamanlarda, kuantum kuyuları ve kuantum telleri kullanılarak yüksek elektron mobiliteli transistörler (HEMT), iki boyutlu elektron gazı alan etkili transistör (TEGFET), çok eklemlili alan etkili transistör (HFET), kuantum kuyu lazerleri, MOS ve MOSFET yapılar (Lai ve Das Sarma 1986) gibi uygulamalar gerçekleştirilmiş ve teorik olarak da yoğun şekilde çalışılmıştır.

Elektronların serbest hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırılması, kuantum noktaları olarak adlandırılan, sanki sıfır boyutlu nanoyapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır. İlk kuantum nokta yapı, Texas Instrument Incorporated şirketindeki bilim adamları tarafından gerçekleştirilmiş olup (Reed ve ark. 1986), 250 nm kenar uzunluğu olan kare biçiminde bir geometrik yapıya sahiptir. Daha sonra üretilen kuantum noktaların boyutları 30-45 nm'ye kadar düşürülebilmıştır (Cibert ve ark. 1986, Temkin ve ark. 1987). Teknolojideki bu hızlı gelişmeler, daha sonraları çok değişik geometrilere (küresel, piramit şekilli, kübik, elipsoid vs.) sahip kuantum nokta yapılarının üretimine imkan sağlamıştır (Bimberg ve ark. 1999).

Üç boyuttaki güçlü sınırlandırma sonucunda oluşan kuantum nokta sistemlerinin atomlara benzerliğinden dolayı, yapay atomlar, süper atomlar veya kuantum nokta atomları olarak da adlandırılırlar. Bunların geometrilerinin, boyutlarının, enerji seviyelerinin ve sınırlandırıldıkları elektron sayılarının kontrol edilebilmesi, onları hem fiziksel olarak hem de teknolojik olarak daha da ilgi çekici hale getirmiştir. Kuantum noktaları veya yapay atomlar, son yıllarda teknolojik çalışmaların temeli olmuştur. Kuantum noktalarının keskin durum yoğunluğu, bu sistemleri lazer uygulamaları için çok uygun hale getirmiştir. Kuantum nokta yapıları kullanarak yapılan kızılötesi fotodedektörler (QDIP), tek elektronlu transistörler, hafıza elemanları, kuantum

bilgisayarları gibi deęişik cihaz uygulamaları gerekleřtirilmeye bařlanmıřtır (Ryzhii 1996, Nomoto ve ark. 1998, Choi ve ark.1998 ve Sakaki 1999, Gammon 2000, Sim ve ark. 2004). Bu tr alıřmalar kuantum noktalarının, kuantum mekaniksel iřleyiři hakkında yeni grřler saęlamaktadır. Bu alıřmaların temel amacı, kuantum noktalarının řeklinin, boyutunun, kompozisyonunun ve yerleřiminin istenildięi řekilde dzenlenmesi sonucunda daha kullanıřlı elektronik ve optik, nano lekli materyallerin oluřturulmasıdır.

Son yıllarda, zellikle sonlu sayıda elektron ieren kuantum nokta yapıları byk ilgi ekmektedir. Bu ilginin temel nedeni, retilen teknolojik cihazların boyutlarının kltlmesinin ancak onu oluřturan elektronik devre elemanlarının kltlmesi ile mmkn olabilmesidir. Bu noktada da dřk boyutlu yapılar devreye girmektedir. Dolayısıyla bu yapılar zerinde, hem deneysel hem de teorik olarak yoęun bir řekilde alıřılmaktadır.

Gerek tek elektronlu, gerekse ok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik zelliklerini arařtırmak iin varyasyon yntemi (Banyai ve Koch 1993), pertrbasyon yntemi (Bose 1999), matris křegenleřtirme yntemi (Banyai ve Koch 1993), Monte Carlo teknięi (Banyai ve Koch 1993), yoęunluk fonksiyonel teorisi (DFT) (Stopa 1996), Hartree-Fock yntemi (Reusch ve Grabert 2003) gibi deęişik teknikler kullanılmaktadır. Her bir yntemin, ele alınan probleme ve yapılmak istenen hesaplamalara baęlı olarak birbirinden daha etkin, daha bařarılı olduęu durumlar vardır. Bazen ele alınan problemi tek bir yntemle incelemek yeterli olmaz. Byle durumlarda da birden ok teknięin, problemin farklı ařamalarında ayrı ayrı veya birlikte kullanılması gerekebilir. Son yıllarda genetik algoritma yntemi de kuantum mekaniksel sistemlerin elektronik zelliklerinin arařtırılmasında kullanılmaya bařlanmıřtır.

Bu alıřmada, nanoyapıların genel zellikleri, retim teknikleri ve hesaplama yntemleri zerinde durulduktan sonra sonsuz potansiyel kuyusundaki bir safsızlıęın baęlanma enerjileri, merkezdeki safsızlık durumunda, kuantum kuyusunun boyutları deęiřtirilerek hesaplanmıřtır. Hesaplamalar yapılırken varyasyonel yntem kullanılmıřtır. Elde edilen grafikler ve grafiklerle ilgili yorumlar alıřmanın son blmnde sunulmuřtur. alıřmanın konuya ilgisi olanlara iyi bir zet nitelięinde olacaęı dřnlmektedir.

3.MEZOSKOPİK YAPILAR

Mezoskopik yapılar, mikroskopik ve makroskopik ölçeğin arasındaki orta ölçekte olan yapılardır. Makroskopik ölçek, parçacıkların hareketinin istatistiksel olarak tanımlanabilmesine yetecek mertebedeki boyutlar iken, mikroskopik ölçek ise atom ve molekül mertebesinde yapılardır. Mezoskopik yapılar ise boyutları kabaca 10-1000 Å arasında değişen yapılardır. Bir sistemin mezoskopik bir yapı olabilmesi için sistemin boyutlarından en az birisinin *Fermi dalgaboyundan*, *Faz durulma mesafesinden* veya *Ortalama serbest yoldan* daha küçük olması gerekir.

Mezoskopik sistemlerde taşıyıcılar, bu yapıya ait öteleme simetrisi bir veya daha fazla uzaysal boyutta bozulmaya uğradığından, 3 boyutta serbestçe hareket etme özelliklerini kaybederler ve belirli bir uzaysal bölge içerisine sınırlandırılırlar. Bulk malzemelerde sürekli olan valans ve iletim bandları bu yapılarda birtakım alt bandlara, hatta kesikli enerji seviyelerine ayrılır. Bir bulk malzemede her k momentum değerine karşılık gelen bir enerji değeri ve durum yoğunluğu söz konusu olduğu halde, mezoskopik yapılarda bu süreklilik bozulur ve ancak belirli (kesikli) enerji değerleri ve süresiz durum yoğunlukları oluşur.

Mezoskopik yapılar pratikte taşıyıcıların belirli bir uzaysal bölgeye bir potansiyel engeli yardımıyla sınırlandırılması ile oluşturulur. Bu amaçla, bir matriks malzeme içerisine yarıiletken bir mikrokristal yerleştirilir. Matriks ve yarıiletken malzemelerin E_g farklılığından dolayı ara yüzeyde bir potansiyel engeli oluşur ve bu engel yarıiletken içindeki elektron ve deşiklerin bu bölgede sınırlandırılmasına yol açar.

Mezoskopik yapıların en genel ayırt edici özellikleri;

- a) Bu yapılarda parçacık durum yoğunluğu sürekli değildir.
- b) Boyutları çok küçük olduğundan kuantum mekaniksel etkiler önemli hale gelmeye başlar.
- c) Bu yapıların birçok özelliği, içerdikleri tanecik sayısına çok bağlıdır.

Mezoskopik sistemler üretilirken genellikle yarıiletken malzemeler kullanılır, çünkü metallerde yüksek elektron yoğunluğu nedeniyle kuantum mekaniksel dalgaboyları çok ufak, hemen hemen atomlararası uzaklık düzeyindedir. Oysa yarıiletken ve mikroelektronik teknolojiden yararlanarak yapılan malzemelere dayalı düşük-boyutlu yapılarla, hem parçacıklar arası çarpışmaların olumsuz etkisini oldukça azaltmak, hem de kuantum mekaniksel dalgaboylarını ayarlayarak, büyüklük etkilerini ön plana çıkarmak olasıdır. Yarıiletkenlerde elektronlar metallere göre farklı davranırlar, elektronların alabilecekleri enerji değerleri sürekli değildir, elektronlarla tamamen doldurulmuş valans bandı ile boş durumdaki iletkenlik bandı arasında elektronlar tarafından iletimde kullanılamıyacak bir yasak enerji aralığı vardır.

Mezoskopik (nanoyapı) sistemler çok küçük boyutları nedeniyle oldukça sınırlı sayıda parçacık içerirler. Taşıyıcı hareketinin sınırlandırıldığı boyut sayısına bağlı olarak bir nanoyapı üç ana sınıfta incelenebilir:

- 1) Kuantum Kuyuları
- 2) Kuantum Telleri
- 3) Kuantum Noktaları

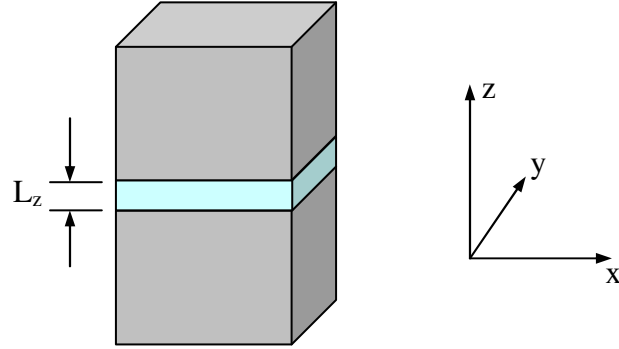
Kuantum kuyuları veya telleri kelimenin tam anlamıyla nanoyapı değildir. Çünkü bu tür yapılarda hala en az bir serbest doğrultu mevcuttur ve bu doğrultuda yapının boyutları nm ölçeğinden çok daha büyüktür. Dolayısıyla bu tür yapılar (en azından bir doğrultu için) prensipte sonsuz elektrona sahip olabildiklerinden, sürekli bir elektron yoğunluğundan söz edilebilir. Bu yapılarda çok-cisim etkileşmeleri göz önüne alınabilir ve parçacıklar arasındaki korelasyon etkileşmeleri bir pertürbasyon terimi olarak değerlendirilebilir.

Kuantum kuyu, tel ve noktalarında potansiyelin sonsuz sınırlandırılma durumunda enerji özdeğerlerinin ve dalga fonksiyonlarının belirlenmesi oldukça kolaydır.

3.1 Kuantum Kuyuları

Kuantum kuyu yapılarda elektronun hareketi bir boyutta sınırlandırılmıştır. Elektronların yalnızca iki boyutta serbest olduğu bu yapılar iki boyutlu elektron gazı

(2DEG) olarak da adlandırılır. Kuantum kuyu yapılar, çok ince bir yarıiletken tabakanın, yasak enerji aralığı daha büyük olan diğer iki yarıiletken arasında sandviç edilmesiyle oluşturulurlar. Yarıiletkenlerin E_g aralıklarının farklı olmasından dolayı elektronlar sadece bu ince düzlemde serbestçe hareket edebilirler.



Şekil 3.1 Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi

$L_x \approx L_y \gg L_z$ olduğu için elektronun hareketi z yönünde sınırlandırılmış ve bu doğrultudaki serbestlik derecesi sıfıra indirgenmiştir.

Parçacığın yapı içerisindeki dalga fonksiyonunu yazarken, elektron x - y yönünde serbest olduğu için sadece bu doğrultularda düzlem dalga fonksiyonu seçebiliriz;

$$\psi(r) = \frac{e^{i(k_x x + k_y y)}}{L} f_n(z) U(k, r) \quad (3.1)$$

Burada $f_n(z)$ sınırlamanın olduğu doğrultudaki hareketi temsil eden zarf fonksiyonudur ve parçacık bu doğrultuda hareket serbestliğine sahip olmadığından kararlı veya durgun dalga formundadır.

Parçacık x ve y yönlerinde serbest olduğu için o yönlerde enerji alt bandları oluşur ama z yönünde enerji kesikli değerler alır.

3.1.1 Zarf Fonksiyonu Ve Enerji Seviyeleri

$f_n(z)$ fonksiyonu ve enerji seviyelerinin çözümü Schrödinger denkleminde bulunur. Önce Schrödinger denklemini ve sınırlamanın olduğu yöndeki potansiyeli yazıp bunu kuantum well yapı için verilen genel dalga fonksiyonuna uygularsak aradığımız sonuca ulaşabiliriz. Schrödinger denkleminin genel ifadesi;

$$[H+V_c(z)]\Psi(r)=E\Psi(r) \quad (3.2)$$

şeklindedir. z yönünde sınırlama olduğu için Schrödinger denklemini z yönü için çözmeliyiz. Potansiyelin kuyu içinde sıfır diğer yerlerde ise sonsuz olduğu durumu göz önüne alalım.

$$\hbar k_z \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

dönüşümü yapılırsa ve sadece z yönündeki sınırlandırıcı potansiyele Schrödinger denklemini uygulanırsa;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) \right] f(z) = E_z f(z) \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E_z - V_c(z)] f(z) = 0 \quad (3.4)$$

Burada E_z , z boyunca hareketin enerjisidir. Eğer potansiyel engelleri sonsuz yükseklikte ise, kuyu içinde $V_c=0$ olur. Potansiyelin sonsuz olduğu yerde dalga fonksiyonu sıfıra eşit olmak zorundadır.

Kuyu içinde potansiyelin sıfır olduğu duruma bakarsak;

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z) + \frac{2m_e}{\hbar^2} E_z f(z) = 0 \quad (3.5)$$

Burada

$$\frac{2m_e}{\hbar^2} E_z = k_z^2 \quad (3.6)$$

niceliği tanımlanırsa,

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z) + k_z^2 f(z) = 0 \quad (3.7)$$

elde edilir. Bu tip bir denklemin çözümü;

$$f(z) = A \sin(k_z \cdot z) + B \cos(k_z \cdot z) \quad (3.8)$$

şeklindedir.

Bu genel denklemden A ve B sabitlerini bulurken, sınırlandırıcı potansiyelimiz simetrik olduğu için tek ve çift çözümleri göz önüne alabiliriz.

$z=0$ da $V_c(z)$ simetrikse;

$$\begin{aligned} \psi_\xi &= B \cos(k_z \cdot z) \\ \psi_\eta &= A \sin(k_z \cdot z) \end{aligned} \quad (3.9)$$

yazabiliriz. Tek boyutta normalizasyon şartı;

$$\int dr \psi_\xi^* \psi_\xi = 1 \quad (3.10)$$

uygulanırsa

$$\int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz B^2 \cos^2(k_z \cdot z) = 1 \quad (3.11)$$

$$\int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz A^2 \sin^2(k_z \cdot z) = 1 \quad (3.12)$$

Buradan

$$B = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \quad (3.13)$$

ve

$$A = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \quad (3.14)$$

bulunur. Ayrıca

$$z = \frac{L_z}{2}, \quad \psi_z = 0 \quad (3.15)$$

ve

$$z = -\frac{L_z}{2}, \quad \psi_z = 0 \quad (3.16)$$

sınır şartlarından z boyunca momentumun

$$k_z = \frac{n_z \pi}{L_z} \quad n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (3.17)$$

şeklinde kesikli değerler aldığı görülür. Bu durumda kuyu içindeki kesikli enerji seviyeleri yani enerji özdeğerleri

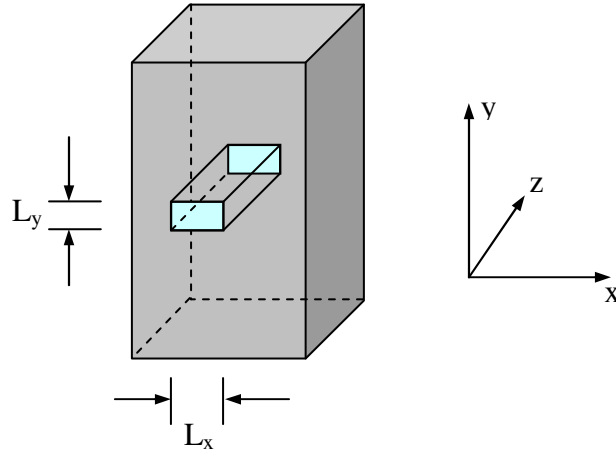
$$E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_z^2}{2m_e L_z^2} \quad (3.18)$$

şeklinde olur ve parçacığın toplam enerjisi aşağıdaki gibidir.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[k_x^2 + k_y^2 + \frac{n_z^2 \pi^2}{L_z^2} \right] \quad (3.19)$$

3.2 Kuantum Telleri

Bir önceki kısımda, elektronun hareketinin bir boyutta sınırlandırılıp diğer iki boyutta serbest parçacık gibi davrandığı yapıyı, yani kuantum kuyusunu inceledik. Bu kesimde iki boyutta sınırlandırılan bir yapıyı, yani kuantum telini inceleyeceğiz. Bir kuantum teli, Şekil 3.2’de görüldüğü gibi elektronun hareketinin iki doğrultuda (x,y) sınırlandırıldığı dolayısıyla tek bir doğrultuda serbest parçacık gibi davranabildiği nano ölçekli yapılardır. Böyle bir sistem içindeki bir elektron, tek bir serbestlik derecesiyle karakterize edilir.



Şekil 3.2 Bir kuantum telinin şematik gösterimi

$L_x \approx L_y \ll L_z$ olduğu için parçacık z doğrultusu boyunca serbestçe hareket edebilir. Parçacığın hareketi x ve y yönlerinde kararlı dalgalarla temsil edilir;

$$\psi(k, r) = f_n(x)f_n(y) \frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L}} U(k, r) \quad (3.30)$$

3.2.1 $f_n(x)$, $f_n(y)$ ve Enerji Seviyeleri

x ve y yönünde sınırlandırma olduğu için Schrödinger denklemini bu yönlerde çözmeliyiz. Potansiyelin tel kenarlarında sıfır ve dışarıda ise sonsuz olduğu durumu göz önüne alalım. Kuantum kuyuları için yapılan işlemler x ve y doğrultuları için tekrarlanırsa;

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \cos(k_x \cdot x) + \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin(k_x \cdot x) \quad (3.31)$$

$$\psi(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \cos(k_y \cdot y) + \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin(k_y \cdot y) \quad (3.32)$$

olarak kolayca bulunur. Bu durumda toplam enerji ise

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n_x \pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 + k_z^2 \right] \quad (3.33)$$

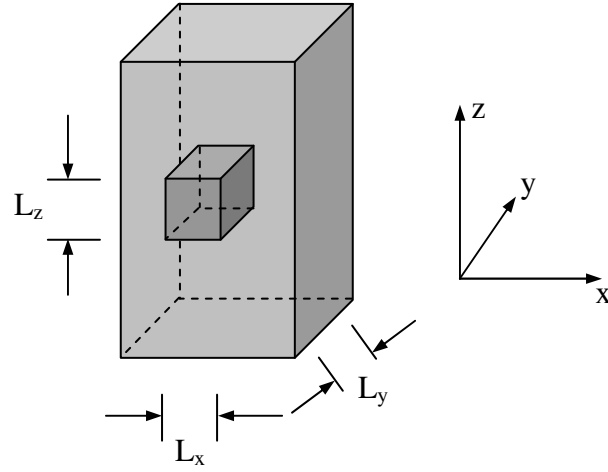
şeklinde ifade edilir.

3.3 Kuantum Noktaları

Şu ana kadar elektronun bir yada iki doğrultuda sınırlandırıldığı yarıiletken heteroyapılar göz önüne alındı. Bu yapılardaki elektronun enerji spektrumu, bir veya iki boyutta kesikli hale geliyordu. Bu ise durumların yoğunluğunu çok ciddi bir şekilde

değiştirmektedir (Mitin ve ark. 1999). Fakat bu yapılarda parçacık en az bir doğrultuda serbest bir şekilde hareket edebilmektedir.

Kuantum nokta yapılarda elektronun hareketi üç boyutta sınırlandırılmıştır. Elektronun hareketini temsil eden dalga fonksiyonunda zarf fonksiyonlarının hepsi kararlı dalga formundadır. Eğer boyutlardan herhangi biri diğerlerinden biraz büyükse, o doğrultuda çok az etkili düzlem dalga formunda bir fonksiyon gelir.



Şekil 3.3 Bir kuantum noktasının şematik gösterimi

$L_x \approx L_y \approx L_z$ nanometre boyutlarındadır.

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = f_n(x) f_n(y) f_n(z) U(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (3.34)$$

Bu yapı için üç boyutta da enerjiler kesiklidir ve buna bağlı olarak durum yoğunlukları da kesiklidir.

Üç boyutta güçlü bir sınırlamanın sonucu olarak kuantum nokta sistemler atomlara benzerler ve bu yüzden sık sık yapay atomlar, süper atomlar ve kuantum noktası olarak adlandırılırlar. Kuantum noktalarını bu denli sıradışı yapan sebepler; şekillerini, boyutlarını, enerji seviyelerini ve bağlı elektronlarının sayısını kontrol edebilme olanağıdır.

Şimdi kenar uzunlukları a, b, c olan bir kübik yarıiletken içerisinde tek bir elektron örneğini göz önüne alalım. Ve bu en basit durum için analitik olarak enerji özdeğerlerini belirleyelim. Bu örnekte kübik yapıyı sınırlandıran V_r potansiyelinin iki farklı durumunu ele alalım. Önce potansiyelin nokta içerisinde sıfır, dışarıda ise sonsuz olduğu basit durum, ardından ise yine nokta içerisinde sıfır, kübik nokta yüzeylerinde ise sabit bir V_0 değerinde olduğu durum ele alarak her iki sistem için yapıyı tanımlayan Schrödinger denklemi, elektronun hareketini tanımlayan dalga fonksiyonu ve fonksiyona ilişkin enerji özdeğerlerini belirleyelim.

3.3.1 $f_n(x)$, $f_n(y)$, $f_n(z)$ Fonksiyonları ve Enerji Seviyeleri

Potansiyelin üç boyutta da nokta kenarlarında sıfır ve nokta dışında sonsuz olduğu durumu göz önüne alalım. Yine potansiyelin sonsuz olduğu yerde dalga fonksiyonu sıfır olacağından, potansiyelin sıfır olduğu nokta içindeki çözümlere bakalım.

Schrödinger denklemini tek boyutta x, y ve z doğrultularında ayrı ayrı ele alırsak,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E_x f(x) = 0 \quad (3.35)$$

ve

$$k_x^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_x \quad (3.36)$$

tanımlamaları altında genel çözüm

$$f(x) = A \sin(k_x \cdot x) + B \cos(k_x \cdot x) \quad (3.37)$$

olarak bulunur. A ve B sabitlerini bulmak için genel denklemi tek ve çift fonksiyonlara ayırıp normalizasyon koşulunu uygularsak

$$B = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \quad (3.38)$$

ve

$$A = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \quad (3.39)$$

bulunur. Sınır şartlarını uygularsak

$$k_x = \frac{2n_x\pi}{L_x} \quad n_x = 1,2,3,\dots \quad (3.40)$$

elde edilir. Aynı şekilde y ve z doğrultularında az önce yapılan işlemler tekrarlanarak benzer denklemlerin bulunacağı açıktır. Enerji ifadesi ise;

$$E = \frac{h^2}{2m} \left[\left(\frac{2n_x\pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{2n_y\pi}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{2n_z\pi}{L_z} \right)^2 \right] \quad (3.41)$$

şeklinde kesiklidir.

Şimdi de potansiyelin kuyu dışında sabit bir değere sahip olduğu durumu göz önüne alalım ve önce tek boyutlu potansiyelleri tanımlayalım.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L_x \\ V_0 & x > L_x \end{cases}$$

$$V(y) = \begin{cases} 0 & 0 < y < L_y \\ V_0 & y > L_y \end{cases} \quad (3.42)$$

$$V(z) = \begin{cases} 0 & 0 < z < L_z \\ V_0 & z > L_z \end{cases}$$

Potansiyelleri bu şekilde tanımladıktan sonra her birini ayrı ayrı tek boyutta potansiyel engeli problemi olarak ele alabiliriz.

$0 < x < L_x$ aralığında $V(x)=0$ olduğu için,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_1(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E_x \psi_1(x) = 0 \quad (3.43)$$

ve çözüm olarak

$$\psi_1(x) = A \sin(k_x \cdot x) + B \cos(k_x \cdot x) \quad (3.45)$$

elde edilir.

$x > L_x$ bölgesinde $V(x) = V_0$ olduğu için Schrödinger denklemi

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_2(x) - \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E_x] \psi_2(x) = 0 \quad (3.46)$$

şeklinde yazılır ve bu denklemde

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \quad (3.47)$$

değişkeni tanımlanırsa denklemin çözümü

$$\psi_2(x) = C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x} \quad (3.48)$$

olarak bulunur. $x \rightarrow \infty$ limitinde $\psi_2 \rightarrow 0$ olmalıdır. Bu yüzden $C=0$ dır. Yani

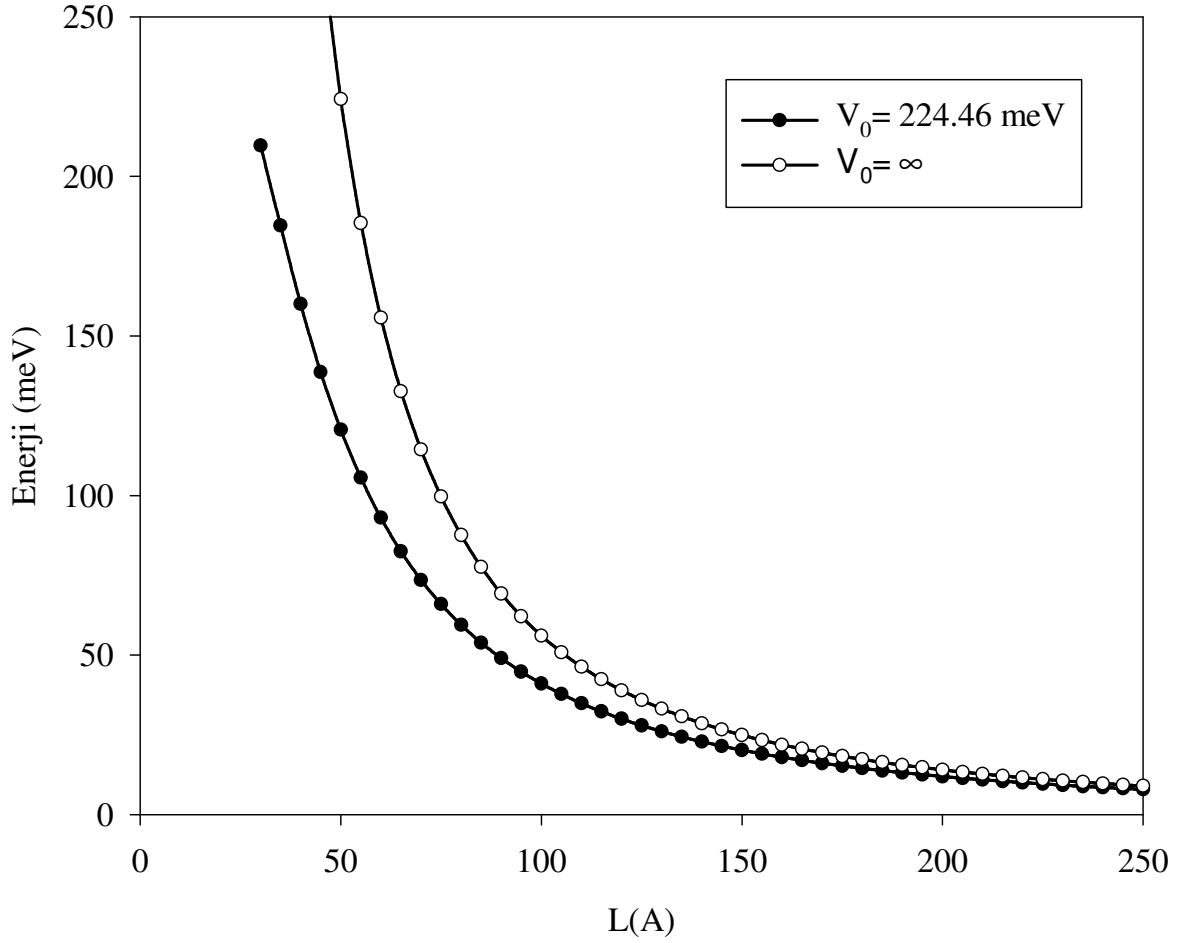
$$\psi_2(x) = D e^{-\alpha x} \quad (3.49)$$

bulunur. ψ_1 'i tek ve çift çözümler olarak ikiye ayırarak süreklilik şartını uygularsak, tek çözümler için;

$$k \cot kL_x = -\alpha \quad (3.50)$$

çift çözümler içinse;

$$k \tan kL_x = \alpha \quad (3.51)$$



olarak bulunur. Bu tanjant ve kotanjantlı ifadelerin çözümleri enerji özdeğerlerini verir.

Şekil 3.4 GaAs/AlGaAs kuantum kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliği ile değişimi

Yukarıdaki grafik oda sıcaklığında GaAs/AlGaAs için sonlu ve sonsuz potansiyel durumları için hesaplanmıştır. Sonlu potansiyel değeri için $V_0=224.46$ meV alınmıştır.

Kuantum nokta boyutları azaltıldıkça uzaysal sınırlandırma etkileri çok daha önemli hale gelir ve elektronun kinetik enerjisi artma eğilimi gösterir. $L \rightarrow 0$ limitinde enerji asimptotik olarak sonsuza gider. Kuantum yapının boyutları arttırıldıkça enerji azalacaktır. Grafikten görüldüğü gibi potansiyelin sonsuz olduğu durumda enerji özdeğerleri yapının boyutlarıyla daha keskin bir azalma gösterir ve $L \rightarrow \infty$ limitinde enerji sıfıra gider. Sınırlandırıcı sabit bir potansiyelin olması durumunda enerji değişimi yine benzer bir davranış gösterir ancak potansiyelin ∞ olması durumuna göre daha üst enerjilere doğru kaymıştır. $L \rightarrow \infty$ limitinde sonlu bir enerji değerine doğru asimptotik olarak yaklaşır.

4.SAFSIZLIKLAR

4.1 Bulk Malzemede Alıcı ve Vericiler

Elektronik malzemeler olarak yarıiletkenlerin kullanılmasındaki en önemli teknolojik etken, safsızlıkları doğrudan örgü içine yerleştirme kabiliyetidir. Bu, mühendislerin ihtiyaçlarını karşılayacak biçimde elektronik özelliklerin düzenlenmesine imkan verir. Komşu atomlarla kimyasal bağ oluşturmak için gerekli sayıdan daha fazla ilave elektrona sahip atomlar kolaylıkla iyonize olur, böylece kristale elektron verirler. Böyle atomlara donör (verici) denir. Diğer taraftan, kimyasal bağları oluşturmak için gerekli elektron sayısından daha az elektrona sahip olan safsızlık atomları örgü içine yerleştirilebilir. Bu atomlar valans bantta boşluk yaratarak komşu bağlardan elektron alabilirler. Bu tip atomlar akseptörler (alıcı) olarak bilinirler. Bu boşluk örgü içinde serbesttir ve iletkenliğe katkıda bulunur. Aynı örgünün farklı bölgelerini akseptör ve donör atomları ile katkılandırarak ilk transistorün temelini oluşturan p-n kavşağı elde edilir. Burada ilgilendiğimiz yarıiletken heteroyapılarda safsızlık seviyelerinin özellikleridir. Bu seviyeler, malzemelerin elektronik ve optik özellikleri ile ilişkilidir.

Şekil 4.1 Bulk yarıiletkende bir donurun şematik gösterimi

Düz örgü $\{100\}$ düzlemini tanımlar. Silikondaki donora bir örnek, grup 5 elementi fosfordur. Galyum Arsenit veya Kadmiyum Tellurit gibi yarıiletken bileşiklerde, dopant katyonun yerini işgal eder. Şekil 4.1'deki atomlar sırasıyla galyum veya kadmiyumdur. GaAs'te tipik donör silikondur. 4. grup elementi Si, 3. grup elementi Ga'dan bir tane fazla elektrona sahiptir ve bunu örgüye verir.

Bu nötr donör-elektron çiftinin bağlanma enerjisi;

$$E_{D^0} = -\frac{m_e^4 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2} \quad (4.1)$$

ve Bohr yarıçapı

$$\lambda = \frac{4\pi\epsilon_r\epsilon_0\hbar^2}{m_e^* e^2} \quad (4.2)$$

Bu durumda donör atomun kütlesi, elektronun kütlesinden çok büyüktür. GaAs için tipik değerler (etkin kütle için $m_e^* = 0,067m_0$ ve statik dielektrik sabiti için $\epsilon_r = 13,18$) kullanılacak olursa,

$$E_{D^0} = -5,3 \text{ meV} \quad \text{ve} \quad \lambda = 103A^0$$

değerleri bulunur. Bu değer deneysel olarak ölçülen 5,8 meV değerine çok yakındır.

CdTe için $m_e^* = 0,096m_0$ ve $\epsilon_r = 10,6$ alınırsa,

$$E_{D^0} = -11,7 \text{ meV} \quad \text{ve} \quad \lambda = 58A^0$$

elde edilir.

Bu basit hesaplamalar sonucu bulunan Bohr yarıçapı önemli bir sonuç verir. GaAs in örgü sabiti 5,65 Å dır, dolayısıyla 103 Å lük uzunluk donordan elektron yörüngesine herhangi bir çap boyunca 18 birim hücreyi ifade eder. Başka bir ifadeyle, her yüzey merkezli kübik birim hücre dört örgü noktası veya sekiz atom içerir ve hacmi $A_o^3=(5,65 \text{ Å})^3$ tür ve bundan dolayı bir atom tarafından işgal edilen hacim A_o^3 dir. Buna göre, λ yarıçaplı küresel elektron yörüngedeki atomların sayısı,

$$\text{Atomların sayısı} = \frac{4\pi\lambda^3/3}{A_o^3/8} \quad (4.3)$$

ile verilir. GaAs için bu değer 203000 atom kadardır. Bu sayı biraz büyük bir sayı gibi gözükmemektedir ve bundan dolayı ϵ_r nin bulk değerini kullanmaktaki haklılığı gösterir. Daha az atom içeren, daha küçük Bohr yarıçaplı sistemler için, kristalin elektromagnetik özelliklerinin bulk yapıdan biraz farklı olacağı açıktır ve ϵ_r değerini seçerken dikkatli olmak gerekir. Statik ϵ_s ve sonsuz ϵ_∞ arasında paralellik sağlamak için gereken permitivite, detaylı deneysel çalışmayla eksiton bağlanma hesaplamalarının karşılaştırılmasıyla yakın zamandaki bir çalışmada gösterilmiştir. Düşük sıcaklıklarda, örgü titreşimleri azdır bu yüzden elektronlar donorlara bağlı kalırlar. Bununla beraber, sıcaklık örgü içindeki fonon sayısını arttırdığı için iyonize olur, bundan dolayı elektronları kristalin iletkenlik bandına bırakır.

İlk bakışta, p tipi malzemedeki alıcıların direkt ilişkisi yukarıdaki denklemlerle tarif edilebilir gibi görünmekle birlikte, deşik kütesinin elektron kütesinden çıkarılmasıyla bağlanma enerjisi negatif yüklü alıcıya bağlı deşiğe işaret eder. Alıcıya bağlı deşik için hydrogenic model şunu verir;

$$E_{A^0} = -\frac{m_h^* e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2}$$

$$\lambda = \frac{4\pi\epsilon_r \epsilon_0 \hbar^2}{m_h^* e^2}$$

ve sayısal deęerler kullanılırsa,

$$E_{A^0} = -49.0meV \quad \text{ve} \quad \lambda = 11 \text{ \AA}$$

elde edilir.

Verici durumun aksine, bu deęerler deneysel deęerlerle aynı deęildir. Gerçekten, uygulamada alıcı durum birçok nedenden dolayı daha karmaşıktır. İlk olarak, çoęunlukla Γ minimumdaki valans bandı (hafif ve ağır deşiklere karşılık gelen) iki dejenere durum içerir ve hangi etkin kütlelerin hesaba katılacağı, deşğin hafif ve ağır deşik durumlarının karışımı olup olmadığı açık deęildir. Bununla beraber, etkin kütlelerdeki bağlanma potansiyelinin etkisini deęiştirerek, çoęunlukla bu dejenere kuantum kuyularında kırılabılır. İkinci olarak, daha büyük ağır deşik kütlesi daha küçük λ Bohr yarıçapı etkisine sahiptir yani yukarıda hesaplanan yarıçaptan görüleceęi gibi deşik yörüngeleri merkezi Coulomb potansiyeline daha yakındır.

4.2 Heteroyapılarda Bağlanma Enerjisi

Bir donor, kuantum kuyu içersine yerleřtirildiğinde, fazladan iki serbestlik derecesinden dolayı durum bulk yapıya göre daha karmaşıktır. Bu durum için Hamiltoniyen şöyle yazılabilir;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r'} \quad (4.4)$$

Elektron ve donor arasındaki konum deęişkeni şöyle tanımlanır;

$$r'^2 = x^2 + y^2 + (z - r_d)^2 = x^2 + y^2 + z'^2 \quad (4.5)$$

Burada r_d , z doğrultusunda donörün yerini gösterir. x - y düzleminin merkezi kolaylık olması açısından donör atomunun yeri olarak tanımlanmıştır. Ayrıca m^* etkin kütlesi, analizdeki sadeleştirmelere olanak vermesi için sabit kabul edilmiştir.

Schrödinger denkleminin çözümünü varyasyonel metot çerçevesinde bulmaya çalışalım. Genel tercih dalga fonksiyonu için iki terimin çarpımı şeklinde bir deneme fonksiyonu seçmektir.

$$\Psi = \psi(z)e^{-\frac{r'}{\lambda}} \quad (4.6)$$

Burada λ varyasyonel parametredir. Denklemi şöyle yazarsak;

$$\Psi = \chi(z)\xi(x, y, z - r_d) \quad (4.7)$$

Hamiltoniyenden görüleceği üzere $\nabla^2\Psi$ yi bulmak gerekecektir.

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} [\chi(z)\xi(x, y, z - r_d)] \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\chi(z) \frac{\partial \xi}{\partial x} \right] = \chi \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} \quad (4.9)$$

y ve z içinde aynı işlemler yapılır.

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \chi}{\partial z} \xi + \chi \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} \xi + 2 \frac{\partial \chi}{\partial z} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \chi \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} \quad (4.11)$$

Böylece

$$\nabla^2\Psi = \left(\nabla_z^2 \chi \right) \xi + 2 \nabla_z \chi \nabla_z \xi + \chi \nabla^2 \xi \quad (4.12)$$

Schrödinger denklemini (4.4) denkleminde verilen Hamiltoniyene göre tekrar düzenlenirse;

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \nabla_z^2 \chi(z) \right\} \xi + 2\nabla_z \chi(z) \nabla_z \xi + \chi(z) \nabla^2 \xi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r'} \chi(z) \xi + V(z) \chi(z) \xi \\
 & = E \chi(z) \xi
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

elde edilir.

Burada E sistemin toplam enerjisidir. Donor bağlanma enerjisi E_{D^0} , bu enerji ile heteroyapıda donor yokken ki elektronun standart bağlanma enerjisi arasındaki farka eşittir. Donor yokken kuyu içerisindeki elektronun taban durum enerjisi E_1 ise;

$$E_{D^0} = E - E_1 \tag{4.14}$$

ile verilir. Serbest hidrojen atomunda taban durum dalga fonksiyonu küresel simetrik ve $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ olmak üzere $e^{-\frac{r}{\lambda}}$ biçiminde verilir. Burada λ Bohr yarıçapıdır. Bu ifade aynı zamanda bulk yapılarıdaki donörler için de kullanılan formdur. Fakat kuantum kuyularda z doğrultusunda bir kayıp olacağından küresel simetriklikten söz edilemez. Dolayısıyla hydrogenic terim şöyle alınabilir;

$$\xi(x, y, z - r_d) = e^{-\frac{r''}{\lambda}} \tag{4.15}$$

Burada r'' ; x , y ve $(z - r_d)$ nin bir fonksiyonudur. λ sistemin toplam enerjisini minimize edecek varyasyon parametresidir. Bu ifade (4.13) denkleminde yerine konulacak olursa,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \left[\nabla_z^2 \chi(z) \right] e^{-\frac{r''}{\lambda}} + 2 \nabla_z \chi(z) \nabla_z e^{-\frac{r''}{\lambda}} + \chi(z) \nabla^2 e^{-\frac{r''}{\lambda}} \right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r'} \chi(z) e^{-\frac{r''}{\lambda}} \quad (4.16)$$

$$+ V(z) \chi(z) e^{-\frac{r''}{\lambda}} = E \chi(z) e^{-\frac{r''}{\lambda}}$$

$e^{-\frac{r''}{\lambda}}$ ile çarpılarak ve x-y düzlemi üzerinden integral alınarak denklem aşağıdaki gibi düzenlenebilir;

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \left[\nabla_z^2 \chi(z) \right] I_1 + 2 \nabla_z \chi(z) I_2 + \chi(z) I_3 \right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r'} \chi(z) I_4 \quad (4.17)$$

$$+ V(z) \chi(z) I_1 = E \chi(z) I_1$$

Buradaki I_j integralleri (j=1,2,3,4) aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$I_1 = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{2r''}{\lambda}} dx dy \quad (4.18)$$

$$I_2 = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{r''}{\lambda}} \nabla_z e^{-\frac{r''}{\lambda}} dx dy \quad (4.19)$$

$$I_3 = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{r''}{\lambda}} \nabla^2 e^{-\frac{r''}{\lambda}} dx dy \quad (4.20)$$

$$I_4 = \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{2r''}{\lambda}}}{r'} dx dy \quad (4.21)$$

Schrödinger denkleminde [Denk.4.17] geri dönersek;

$$\nabla_z^2 \chi(z) I_1 + 2 \nabla_z \chi(z) I_2 + \chi(z) \left\{ I_3 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon} I_4 - \frac{2m^*}{\hbar^2} [V(z) - E] I_1 \right\} = 0 \quad (4.23)$$

sonucu elde edilir. E enerjisi bu ifadelerin çözümlenmesi ile elde edilir.

5.VARYASYONEL YÖNTEM

5.1 Giriş

Kuantum mekaniksel bir sistemin fiziksel özelliklerini belirlemek için, Schrödinger denkleminin yazılması gerekir. Bunun için de, ele alınan sistemin özelliklerine bağlı olarak etkin kütle yaklaşımı gibi bazı fiziksel yaklaşımlar kullanılarak Schrödinger denklemi yazılır. Denklem yazılırken ayrıca sistemin tek ya da çok parçacıklı oluşuna göre yine bir takım yaklaşımlar yapmak kaçınılmaz hale gelir. Göz önüne alınan problemin matematiksel modelini oluştururken kuantum mekaniğinin temel varsayımlarına dikkat edilmeli ve bu varsayımlara aykırı bir yaklaşım yapılmamalıdır.

Çok parçacıklı bir sistemin enerji ve dalga fonksiyonlarını belirlemek için çok değişik yöntemler geliştirilmiştir. Bu yöntemler genelde saf nümerik ve saf analitik olmak üzere iki ana sınıfta incelenebilir. Saf analitik yöntemlerde temel çıkış noktası, sistemi tanımlayan temel Schrödinger denkleminin oluşturulması ve bu denklemin çözümü olabilecek dalga fonksiyonlarının salt matematiksel yöntemlerle araştırılmasına dayanır. Nümerik yöntemleri ise temelde iki kategoride incelemek mümkündür. Bunlar tam nümerik yöntem ile varyasyonel yöntemler olarak isimlendirilebilir. Her ne kadar tüm nümerik yöntemler doğası gereği varyasyonel temele dayansa da, analitik dalga fonksiyonunun belirli parametrelere göre optimize edildiği varyasyonel yöntemler ile değişken boyutlarda seçilebilen bir lineer alt uzaya ait varyasyonel test fonksiyonlarının kullanıldığı yöntemleri birbirinden ayırt etmek gerekir.

Varyasyonel yöntem ile tam nümerik yöntem arasındaki temel farklılık nümerik yöntem yaklaşımının iterasyona dayalı yakınsama özelliğinde yatar. Nümerik süreçlerin tanımlandığı lineer alt uzayın boyutu artırılarak yakınsamanın sayısal bakımdan güvenilir biçimde kontrol edilebilmesi mümkündür. Varyasyonel yöntemlerde oluşabilecek hataların kontrol edilebilmesi sayısal yöntemlere göre daha sınırlıdır. Ancak bu yöntemler hala kapalı analitik ifadelerin elde edilebilmesi için çok kullanışlı bir araç rolü görmektedir. Varyasyonel olarak elde edilen sonuçların geçerliliğinin diğer yöntemlerle, örneğin sayısal tam sonuçlarla, karşılaştırılarak kontrol edilmesinde fayda vardır.

Kuantum mekaniksel sistemlerin dalga fonksiyonlarının ve enerji özdeğerlerinin belirlenmesinde kullanılan yöntemler bunlardan ibaret değildir. Hem nümerik yaklaşımların hem varyasyonel prensiplerin hem de temel analitik ifadelerin birlikte değişik biçimlerde kullanıldığı çok farklı yaklaşım yöntemleri geliştirilmiştir. Bunlara örnek olarak teorik temele dayalı Grup Teori veya Hartree Yöntemleri, varyasyonel ağırlıklı kuantum Monte-Carlo Tekniği ve istatistiksel yaklaşımların ağırlıklı biçimde kullanıldığı ve son zamanlarda büyük ilgi çekmeye başlayan Genetik Algoritma yaklaşımı verilebilir. Bu çalışmada bir kuantum kutu içerisinde tek parçacık ve safsızlık sistemlerinin enerji özdeğerleri inceleneceği için hesaplama yöntemleri arasında varyasyonel yöntem üzerinde daha ağırlıklı olarak durulacak ve enerji özdeğerleri hem analitik olarak hem de basit varyasyonel yöntemle belirlenmeye çalışılacaktır.

5.2 Varyasyonel Yöntem

Bir sisteme ait özellikleri belirleyen parametrelerde küçük değişimler yapılması durumunda, sistemin genelinde meydana gelen değişimleri belirlememizi sağlayan yöntem **Değişim** yada **Varyasyon** hesabı adı verilir. Varyasyon tekniği ile fen bilimlerinde herhangi bir parametre değerinin diğer bir takım parametrelere göre nasıl değiştiğini anlamamızı sağlayan çok yönlü ve kullanışlı bir yöntemdir (Bayın, 2000).

Tabiatta bulunan sistemlerin tümü toplam enerjisini minimum yapacak şekilde hareket eder veya kendilerini geliştirirler. Bir başka deyişle tüm sistemler minimum enerji düzeyinde yani kararlı halde bulunurlar ya da karalı halde bulunma eğilimindedirler. Dolayısı ile ek bir çaba harcamadan hiçbir sistemin kararlılığı bozulamaz veya kararsızlığı korunamaz (Önem, 1998).

Bir $y = f(x)$ fonksiyonun birinci türevini sıfır yapan, $(y' = f'(x) = 0)$, x_0 noktasında, bu fonksiyon bir ekstremuma sahiptir. Bu ekstremum noktasının maksimum mu yoksa minimum mu olduğunu anlamak için fonksiyonun ikinci türevinin işareti incelenir.

$y'' = f''(x) > 0$ ise x_0 noktasında bir minimum vardır. $y'' = f''(x) < 0$ ise x_0 noktasında bir maksimum vardır. $y'' = f''(x) = 0$ ise x_0 noktası bir dönüm noktasıdır. Eğer verilen fonksiyon $z = f(x, y)$ şeklinde çok değişkenli ise ilk olarak

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = 0 \quad \text{ve} \quad \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = 0 \quad (5.1)$$

denklemlerinin kök değerleri (x_0, y_0) belirlenir. Daha sonra da

$$\Delta = \left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} \right]_{x_0, y_0} \left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} \right]_{x_0, y_0} - \left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} \right]_{x_0, y_0}^2 \quad (5.2)$$

denkleminin işareti incelenir. Eğer $\Delta = 0$ ise fonksiyon belirsizdir. $\Delta < 0$ ise ele alınan nokta dönüm noktasıdır. $\Delta > 0$ ise fonksiyon bir ekstremuma sahiptir ve bu ekstremum noktasının maksimum mu yoksa minimum mu olduğunu anlamak için

$$\left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} \right]_{x_0, y_0} \quad \text{veya} \quad \left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} \right]_{x_0, y_0} \quad (5.3)$$

denkleminin türev sonuçlarının işaretine bakılır. Bu durumda

$$\left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} \right]_{x_0, y_0} \quad \text{yada} \quad \left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} \right]_{x_0, y_0} > 0 \quad \text{ise maksimum}$$

$$\left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} \right]_{x_0, y_0} \quad \text{yada} \quad \left[\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} \right]_{x_0, y_0} < 0 \quad \text{ise minimum}$$

eşitsizlikleri yazılır. Bir bağımlı değişken olduğunda varyasyon hesabı genellikle

$$J[y(x)] = \int_{x_1}^{x_2} f(y, y_x, x) dx \quad (5.4)$$

şeklinde verilen bir integralin değeri ekstremum (maksimum yada minimum) yapan $y(x)$ fonksiyonunun bulunmasını içerir. İntegral ifadesinden de görüleceği üzere integrali alınan f , sırasıyla y , y_x ve x 'e bağlı bir fonksiyondur. Burada y_x y 'nin x e göre birinci türevidir. Bu ifadeye ki J ise, bulunması istenen $y(x)$ fonksiyonuna bağlı bir fonksiyondur. Buradaki amaç, Şekil 5.1 de görüldüğü gibi, (x_1, y_1) ve (x_2, y_2) noktalarından geçen olası birçok $y(x)$ fonksiyonundan J değerini minimum yapan fonksiyonun bulunmasıdır. Gerçekte (x_1, y_1) ve (x_2, y_2) noktalarından geçen sonsuz tane yol vardır. Verilen herhangi bir yol ile gerçek yol arasındaki fark y 'nin varyasyoneli olarak bilinir ve δy ile gösterilir. Bu varyasyonel x 'e bağlı olacağından $\eta(x)$ ile gösterilir.

Şekil 5.1 Varyasyonel hesap yardımı ile belirlenmeye çalışılan yol etrafındaki sapmalar ve bu sapmaların $J[y(x)]$ fonksiyoneline etkisi

Varyasyonun büyüklüğü α gibi çok küçük bir skaler parametreyle ifade edilirse (x_1, y_1) ve (x_2, y_2) noktaları arasındaki rastgele bir fonksiyon,

$$y(x, \alpha) = y(x, 0) + \alpha \eta(x) + o(\alpha^2) \quad (5.5)$$

şeklinde yazılabilir. $y(x, \alpha = 0)$, J integralini minimum yapan fonksiyondur. Bu fonksiyona göre varyasyon ilkesi

$$\delta y = y(x, \alpha) - y(x, 0) = \alpha \eta(x) \quad (5.6)$$

olur. Bu tanımdan hareketle J integrali α parametresine bağlı olarak

$$J(\alpha) = \int_{x_1}^{x_2} f[y(x, \alpha), y_x(x, \alpha), x] dx \quad (5.7)$$

şeklinde yazılabilir (Bayın, 2000). Son yazılan ifade yardımıyla $J(\alpha)$ fonksiyonunun ekstremum (yani minimum) değeri sayısal çözümleme yardımı ile belirlenebilir.

O halde enerji değeri ne kadar küçültülürse taban durum enerjisine o kadar yaklaşımış olur. Dikkate alınan dalga fonksiyonu bir λ değişkeni içeriyorsa, enerji bu λ değişkenine göre minimize edilerek taban enerji durumuna iyice yaklaşılır.

5.3 Varyasyonel Yöntemin Kuantum Mekaniksel Problemlere Uygulanması

Kuantum mekaniğinin birçok uygulamasında Schrödinger denklemi tam olarak çözülemez ve pertürbasyon metodu için uygun bir başlangıç noktası olacak ve iyi bir yaklaşıklık verecek, pertürbe olmamış durumu temsil eden bir hamiltonyen bulunamaz. O zaman, hamiltonyenin özdeğerinin eşitliği problemine dayalı bir genel yaklaşım metodu olan varyasyonel metodu kullanmak gerekir.

Varyasyon yöntemi, taban durumu enerjisini minimize ederek bulmayı amaçlayan bir yöntemdir. Pertürbasyon yönteminin uygulanamadığı, yani hamiltonyenin

$$H=H_0+V \quad (5.8)$$

şeklinde iki terime ayrılmadığı durumlarda uygulanabilir.

Bir H hamiltonyeninin özdeğerleri E_n ve özvektörleri $\{U_n\}$ olsun. Bu durumda taban durumu için

$$\begin{aligned} HU_0 &= E_0 U_0 \\ E_0 &= [U_0, HU_0] \end{aligned}$$

olacağı açıktır. Bu sistemin herhangi bir ψ durumunda hamiltonyenin beklenen değeri için daima şu eşitsizlik yazılabilir:

$$E = \langle H \rangle = \frac{(\psi, H\psi)}{(\psi, \psi)} \geq E_0 \quad (5.9)$$

Eşitlik ancak $\psi = U_0$ olduğunda mümkündür. Bu eşitsizliğin ispatı kolaydır. Her ψ durumu için $\{U_i\}$ özvektörlerinin süperpozisyonu olarak yazılabileceği için

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{i=0}^{\infty} C_i U_i & \sum_i |C_i|^2 &= 1 & \text{(normlanmış } \psi \text{ durumları alıyoruz)} \\ E = (\psi, H\psi) &= \sum_i \sum_j C_i^* C_j (U_i, HU_j) = \sum_i \sum_j C_i^* C_j E_j (U_i, U_j) \\ &= \sum_i \sum_j C_i^* C_j E_j \delta_{ij} = \sum_i C_i^* C_i E_i = \sum_i |C_i|^2 E_i \end{aligned} \quad (5.10)$$

bulunur. Taban durumu her zaman diğer durumlardan daha küçük enerjili olduğu ($E_i \geq E_0$) için, serinin her teriminde E_i yerine E_0 alırsak eşitliğin sağ tarafı küçülür:

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

$$E \geq E_0 \quad (5.11)$$

Bu eşitsizliğe göre E değeri ne kadar aşağıya çekilebilirse, taban durumuna o kadar yaklaşmış olur. Seçilen dalga fonksiyonu (deneme fonksiyonu da denir) bir λ parametresi içeriyorsa, bulunan E değeri de bu λ parametresine bağlı olur. O halde, E değeri bu λ parametresine göre minimize edilerek taban durumuna iyice yaklaşılır:

$$\psi = \psi(\vec{r}, \lambda) \quad (5.12)$$

$$E(a) = \frac{(\psi, H\psi)}{(\psi, \psi)} \quad \frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0 \quad (5.13)$$

Bu yöntem daha genel olarak, $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ gibi birden çok parametreyle de uygulanabilir. Eğer deneme fonksiyonu $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ gibi çok sayıda varyasyon parametresi içeriyorsa, enerji her bir varyasyon parametresine göre minimize edilerek bulunur:

$$\psi = \psi(\vec{r}, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda_1} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \lambda_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{\partial E}{\partial \lambda_n} = 0$$

$$E = E(\vec{r}, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \quad (5.15)$$

6.SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu bölümde, bir önceki bölümde anlatılan varyasyonel yöntemin kuantum mekaniksel sistemlere uygulanmasına ilişkin bir takım örnekler verilecektir. Açıklayıcı olması açısından öncelikle iyi bilinen üç basit fiziksel süreç için varyasyonel yöntemin nasıl uygulandığı ayrıntılı biçimde anlatılacaktır. Bu üç temel örneğin ardından, bir kuantum kutu içerisinde safsızlık problemi ele alınarak, bu tip bir yapıda taban durum ve bağlanma enerjilerinin varyasyonel yöntem yardımı ile elde edilişi açıklanacak ve elde edilen sonuçlar grafikler ile verilerek yorumlanacaktır.

6.1. Bir boyutlu harmonik salıncı

Bir boyutlu harmonik salıncı için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = Ne^{-\lambda x^2} \quad (6.1)$$

ile verilir. Diğer taraftan tek boyutlu bir harmonik salıncı için Hamiltoniyen

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (6.2)$$

şeklindedir. Bu harmonik salıncının enerji özdeğerleri varyasyonel yöntem çerçevesinde elde edilecek olursa

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$
$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] e^{-\lambda x^2}$$

$$\begin{aligned}\langle \psi | H | \psi \rangle &= \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \left(\frac{\lambda \hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\lambda} \right) \\ \langle \psi | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2\lambda x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} \\ E &= \frac{\lambda \hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\lambda}\end{aligned}\tag{6.3}$$

bulunur. Bulunan enerjiyi minimum yapan λ deęerinde birinci turevin sıfır olması gerekir. O halde

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \lambda} &= \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8\lambda^2} = 0 \\ \lambda &= \frac{m\omega}{2\hbar}\end{aligned}\tag{6.4}$$

elde edilir. Son bulunan λ ifadesi, Denk.(6.3) de yerine yazılırsa taban durum enerjisi

$$E = \frac{1}{2} \hbar\omega\tag{6.5}$$

şeklinde elde edilir (Karaođlu, 1994).

6.2. Bir boyutlu potansiyel kuyusu

Bir boyutta potansiyel kuyusu içinde hareket eden parçacık örneđini inceleyelim. Göz önüne alınan yapı için potansiyel fonksiyonu

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ V_0 & |x| > 0 \end{cases}\tag{6.6}$$

şeklinde olacaktır. Bu tip bir yapı içerisindeki bir parçacık için deneme dalga fonksiyonu $0 < x < a$ aralığında

$$\psi_1 = A \sin(k_x x) e^{-\lambda x}$$

ve $|x| > 0$ aralığında ise

$$\psi_2 = B e^{-ik_x x} e^{-\lambda x}$$

şeklinde verilebilir. Hamiltoniyen ise

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

biçimindedir. Buna göre $0 < x < a$ aralığında beklenen değer hesaplanırsa;

$$\begin{aligned} (\psi, H \psi) &= \int_0^a dx A \sin(k_x x) e^{-\lambda x} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] A \sin(k_x x) e^{-\lambda x} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_0^a \sin(k_x x) e^{-\lambda x} \left[\frac{d^2}{dx^2} \right] \sin(k_x x) e^{-\lambda x} dx \end{aligned} \quad (6.7)$$

Gerekli türevler alınarak düzenlemeler yapılırsa integral şu hale dönüştürülür;

$$(\psi, H \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \left[(\lambda^2 - k_x^2) \int_0^a \sin^2(k_x x) e^{-2\lambda x} dx - 2\lambda k_x \int_0^a \sin(k_x x) \cos(k_x x) e^{-2\lambda x} dx \right]$$

Bu ifadedeki ilk integral için

$$\int e^{ax} \sin^n bx dx = \frac{e^{ax} \sin^{n-1} bx}{a^2 + n^2 b^2} (a \sin(bx) - nb \cos(bx)) + \frac{n(n-1)b^2}{a^2 + n^2 b^2} \int e^{ax} \sin^{n-2}(bx) dx$$

özdeşliği ve $a = -2\lambda$, $b = k_x$, $n=2$ değerleri kullanılırsa;

$$\int_0^a \sin^2(k_x x) e^{-2\lambda x} dx = \frac{e^{-2\lambda x} \sin k_x x}{(-2\lambda)^2 + 4k_x^2} (-2\lambda \sin(k_x x) - 2k_x \cos(k_x x)) + \frac{2k_x^2}{4\lambda^2 + 4k_x^2} \int_0^a e^{-2\lambda x} dx$$

bulunur. Yine ikinci integral için

$$\int e^{ax} \sin(bx) \cos(cx) dx = \frac{e^{ax}}{2} \left[\frac{a \sin(b+c)x - (b+c) \cos(b+c)x}{a^2 + (b+c)^2} + \frac{a \sin(b-c)x - (b-c) \cos(b-c)x}{a^2 + (b-c)^2} \right]$$

özdeşliği ve $a = -2\lambda$, $b = c = k_x$ değerleri kullanılırsa;

$$\int_0^a \sin(k_x x) \cos(k_x x) e^{-2\lambda x} dx = \frac{e^{-2\lambda a}}{2} \left[\frac{-2\lambda \sin k_x a - 2k_x \cos 2k_x a}{4\lambda^2 + 4k_x^2} \right] - \frac{1}{2} \left[\frac{-2k_x}{4\lambda^2 + 4k_x^2} \right]$$

bulunur. Bu ifadelerden $0 < x < a$ aralığında enerji değeri için ise

$$E_1 = \frac{(\psi, H \psi)}{(\psi, \psi)} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\lambda^2 - k_x^2) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2\lambda k_x [e^{-2\lambda a} (-\lambda \sin 2k_x a - k_x \cos 2k_x a) + k_x]}{e^{-2\lambda a} \sin k_x a (-2\lambda \sin k_x a - 2k_x \cos k_x a) - \frac{k_x^2}{\lambda} (e^{-2\lambda a} - 1)}$$

elde edilir. $x > a$ aralığında beklenen değer aşağıdaki gibidir;

$$(\psi, H \psi) = \int_a^\infty dx B e^{-ik_x x} e^{-\lambda x} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] B e^{-ik_x x} e^{-\lambda x} \quad (6.8)$$

Gerekli düzenlemeler yapılırsa;

$$(\psi, H\psi) = B^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\lambda^2 + 2ik_x \lambda - k_x^2) + V_0 \right] \frac{1}{2\lambda} (e^{-2\lambda a} - 1)$$

bulunur. Bu aralıktaki enerji değeri yine

$$E_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\lambda^2 + 2ik_x \lambda - k_x^2) + V_0 \quad (6.9)$$

olarak bulunur. Sonuçta sistemin toplam enerjisi aşağıdaki gibidir.

$$E_1 + E_2 = -\frac{\hbar^2}{m} (\lambda^2 - k_x^2) - \frac{\hbar^2}{m} ik_x \lambda + V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2\lambda k_x [e^{-2\lambda a} (-\lambda \sin 2k_x a - k_x \cos 2k_x a) + k_x]}{e^{-2\lambda a} \sin k_x a (-2\lambda \sin k_x a - 2k_x \cos k_x a) - \frac{k_x^2}{\lambda} (e^{-2\lambda a} - 1)} \quad (6.10)$$

şeklindedir. $\frac{\partial}{\partial \lambda} (E_1 + E_2) = 0$ eşitliğinden enerjiyi minimum yapan λ değeri bulunur.

6.3. Hidrojen atomu

Hidrojen atomundaki bir elektron için hamiltoniyen

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.11)$$

biçiminde verilebilir. Burada atomik birimleri kullanmak daha kullanışlı olacaktır; $\hbar = m = |e| = 4\pi\epsilon_0 = 1$. Bu durumda enerji hartree (1 hartree \cong 27.21 eV) ve uzunluk bohr yarıçapı (1 bohr \cong 0.5292 Å) cinsinden verilir. Atomik birimleri kullanarak hamiltoniyeni tekrar yazarsak

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} \quad (6.12)$$

Özdeğer problemi $H\psi_n = e_n\psi_n$ dir ve en küçük özdeğer $e_0 = -\frac{1}{2}$ dir. Normalize edilmiş dalga fonksiyonu ise aşağıdaki gibidir;

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \quad (6.13)$$

Tam çözümü bildiğimiz için varyasyonel metodu kullanarak hesaplamaların sonuçlarını karşılaştırabiliriz. Varyasyonel metodu aşağıdaki deneme fonksiyonu için uygularsak;

$$\phi = \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\lambda r^2} \quad (6.14)$$

Enerji aşağıdaki gibi hesaplanabilir;

$$E(\lambda) = \langle \phi | H | \phi \rangle = \frac{3\lambda}{2} - 2 \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/2} \quad (6.15)$$

λ nın minimum değerini bulmak için bu ifadenin λ ya göre türevini alırsak;

$$\lambda = \frac{8}{9\pi} \cong 0.283 \quad (6.16)$$

bulunur. λ nın bu değeri için enerjinin beklenen değeri ise aşağıdaki gibidir.

$$E\left(\lambda = \frac{8}{9\pi}\right) = -\frac{4}{3\pi} \cong -0.424 \quad (6.17)$$

Görüleceği gibi bu değer, tam analitik çözüm olan $e_0 = -\frac{1}{2}$ değerine oldukça yakındır.

6.4. Bir kuantum kutu içerisindeki safsızlık

Önceki kesimlerde iyi bilinen üç basit fiziksel duruma varyasyonel yöntemin uygulanmasına ilişkin üç adet örnek verilmiştir. Ele alınan örnekler görüleceği gibi nispeten basit ve analitik çözümleri zaten mevcut olan örneklerdir ve konunun daha iyi anlaşılması amacı ile sunulmuştur. Varyasyonel yöntemin esas uygulama alanı ise, analitik çözümü mevcut olmayan problemler içindir.

Bu kesimde sonsuz potansiyel engeline sahip bir kuantum kutu içerisinde yer alan hidrojenik bir safsızlık problemi ele alınacak ve bu probleme varyasyon yöntemi uygulanarak, safsızlık bağlanma enerjileri elde edilecektir.

Göz önüne alınan yapı, kenar uzunlukları L_x , L_y ve L_z olan ve dışarısında potansiyelin sonsuz, içerisinde ise sıfır seçildiği bir kuantum kutusu içerisindeki safsızlığa bağlı bir elektron olup, bu sistem için etkin kütle Hamiltoniyeni

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon \tilde{r}} + V(x, y, z) \quad (6.18)$$

şeklinde verilebilir. Burada $V(x, y, z)$ potansiyeli

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{L_x}{2}, \quad |y| < \frac{L_y}{2}, \quad |z| < \frac{L_z}{2} \\ \infty & \text{Kutu dışında} \end{cases} \quad (6.19)$$

şeklinde seçilmiştir. Safsızlığın olmadığı durumda Denk.(18) in öz fonksiyonları ve öz değerleri analitik olarak aşağıdaki gibi elde edilebilir:

$$\psi(x, y, z) = \varphi_x(x) \varphi_y(y) \varphi_z(z) \quad (6.20)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_{nx}^2 + k_{ny}^2 + k_{nz}^2) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n_x \pi}{L_x} + \frac{n_y \pi}{L_y} + \frac{n_z \pi}{L_z} \right) \quad (6.21)$$

Buradaki $\varphi_x(x)$ zarf fonksiyonu

$$\varphi_x(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L_x}} \cos(k_{nx}) & n_x \text{ tek} \\ \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin(k_{nx}) & n_x \text{ çift} \end{cases} \quad (6.22)$$

şeklindedir. $\varphi_y(y)$ ve $\varphi_z(z)$ için de benzer fonksiyonlar söz konusudur.

Eğer kutu içerisinde bir safsızlık mevcut ise, bu durumda Coulombik etkileşme nedeniyle Schrödinger denklemi değişkenlerine ayrıştırılamayacağından öz fonksiyonlar için bir deneme dalga fonksiyonu seçilir ve varyasyon yöntemi uygulanır. Bu amaçla seçilen deneme dalga fonksiyonu

$$\psi(x, y, z, \lambda) = N \varphi_x(x) \varphi_y(y) \varphi_z(z) e^{-\lambda r} \quad (6.23)$$

biçiminde olup burada N normalizasyon sabiti ve λ varyasyon parametresidir ve enerjinin minimizasyonu ilkesi yardımı ile belirlenir. Böyle bir yapı içerisinde elektronun safsızlığa bağlanma enerjisinin belirlenmesi önemlidir. Bağlanma enerjisi, safsızlığın olmadığı durumdaki elektronun toplam enerjisi ile safsızlığın olduğu durumdaki toplam enerjiler arasındaki fark olarak tanımlanır ve

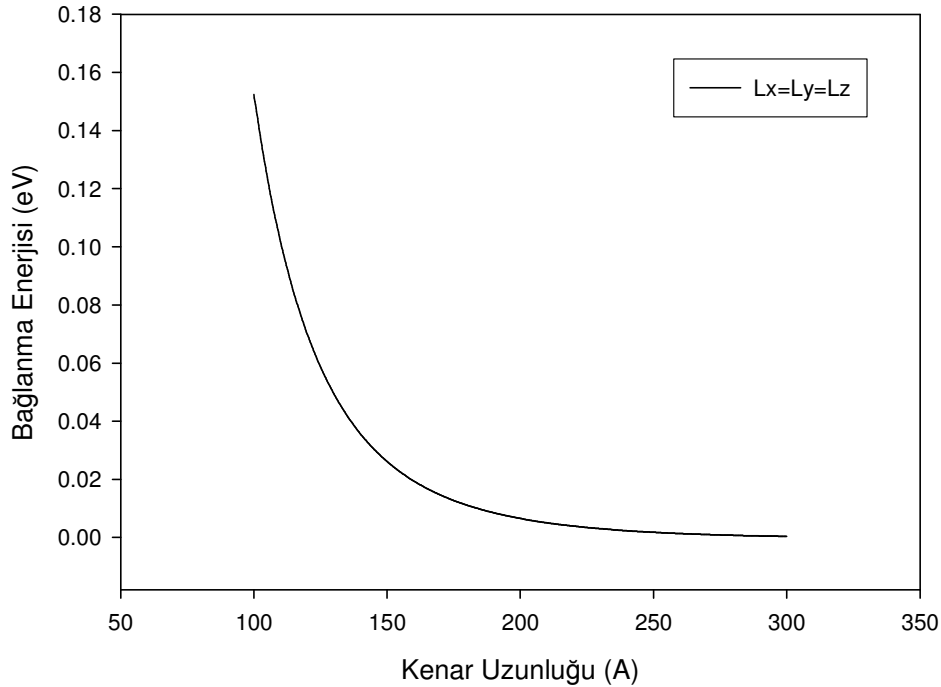
$$E_b = E - \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \quad (6.24)$$

şeklinde verilir.

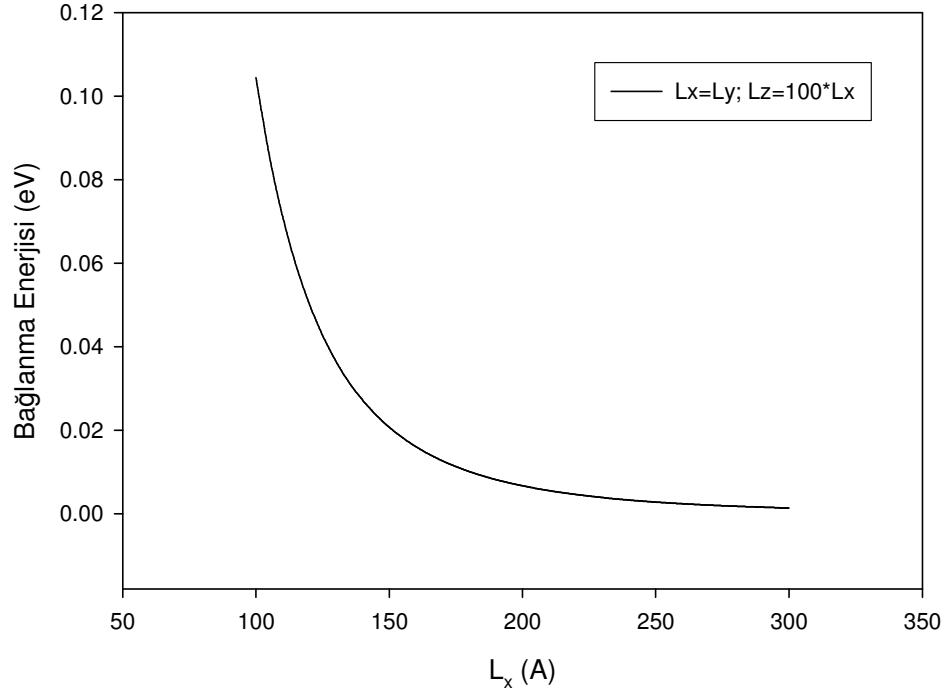
Sayısal hesaplamalarda atomik birimler kullanılmış olup bu birimlerde $\hbar = 1$, $m_o = 1$, $4\pi\epsilon_o = 1$ alınır. Bu birimler kullanıldığında malzeme parametreleri ise elektron etkin kütlesi $m^*=0,0667$, etkin Bohr yarıçapı $a^*=100 \text{ \AA}$ ve etkin Rydberg enerjisi $Ry^*=5.72 \text{ meV}$ olacaktır. Aşağıdaki grafiklerde bir kuantum kutusu içerisindeki safsızlığa bağlı elektron için varyasyon yöntemi yardımı ile elde edilen bağlanma enerjileri, kutu boyutlarına bağlı olarak verilmektedir.

Şekil 6.1 de tüm kenarları birbirine eşit bir kuantum kutusu içerisindeki bir safsızlık için bağlanma enerjisinin kenar uzunluğu ile değişimi görülmektedir. Bağlanma enerjisi küçük kenar uzunluklarında yüksek bir değerden başlamakta ve kenar uzunluğu ile düzgün biçimde azalma göstermektedir. Bu beklenen bir durumdur.

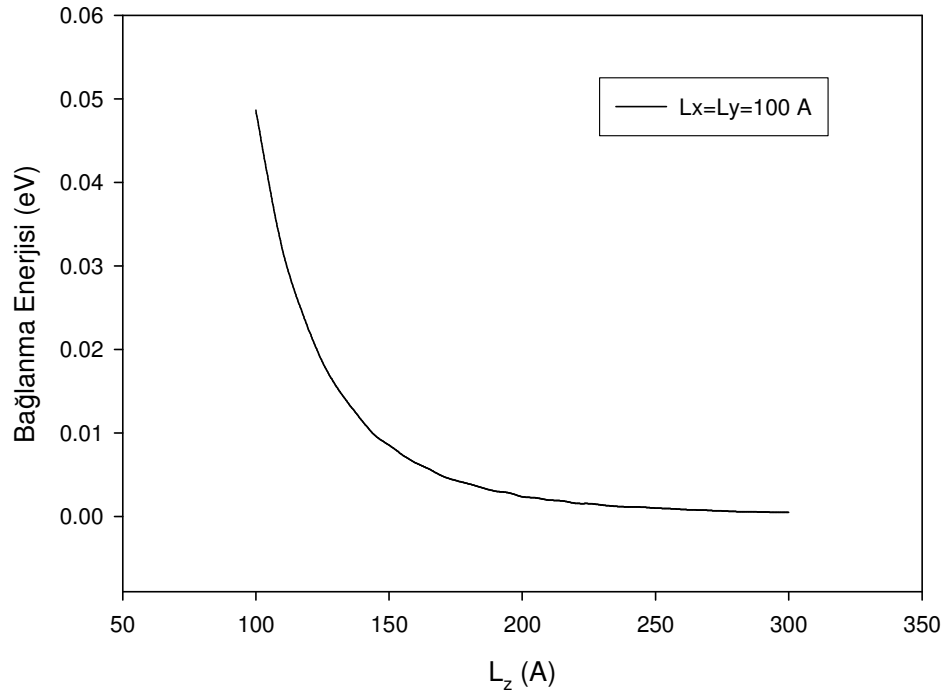
Şekil 6.2 de ise iki kenarı birbirine eşit bir kutu içerisinde safsızlık bağlanma enerjisinin değişimi görülmektedir. Üçüncü kenar daima diğer kenarların 100 katı bir uzunlukta tutulmuştur. Yani yapı bir anlamda kuantum tel yapıya benzemektedir. Görüldüğü gibi böyle bir yapıda (kuantum telde) bağlanma enerjisi daha düşük bir değerdedir. Genel değişim benzerdir ancak enerjiler daha küçüktür. Zaten kuantum tel yapıda bağlanma enerjisinin daha düşük olması beklenir. Sabit tutulan iki kenar uzunluklarının en büyük değer aldığı noktada z yönündeki uzunluk (L_z boyutu) yaklaşık 30000 Å'ya ulaşmaktadır ki bu boyut yapının bulk özelliklere yaklaşmasına neden olur.



Şekil 6.1 Kenar uzunlukları eşit bir kuantum kutusu içerisindeki safsızlığın bağlanma enerjisinin kutu boyutları ile değişimi.



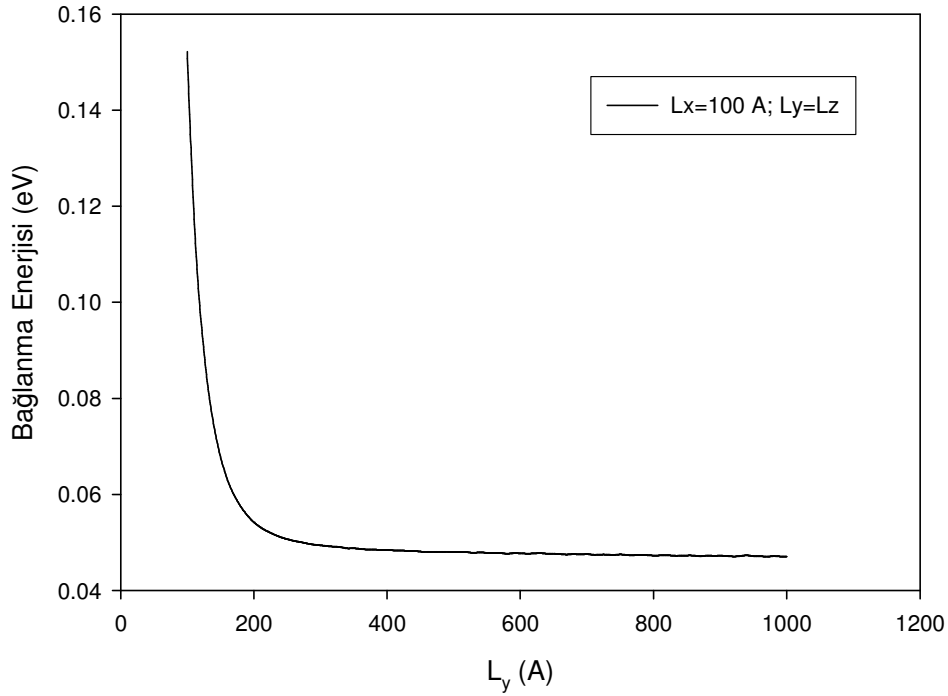
Şekil 6.2 İki kenarı birbirine eşit bir kuantum kutusu içerisindeki safsızlığın bağlanma enerjisinin kenar boyutu ile değişimi.



Şekil 6.3 İki kenarı birbirine eşit ve sabit bir değerde bir kuantum kutusu içerisindeki safsızlığın bağlanma enerjisinin diğer kenar boyutu ile değişimi. (L_z diğer kenarların 3 katına kadar çıkarılmıştır.)

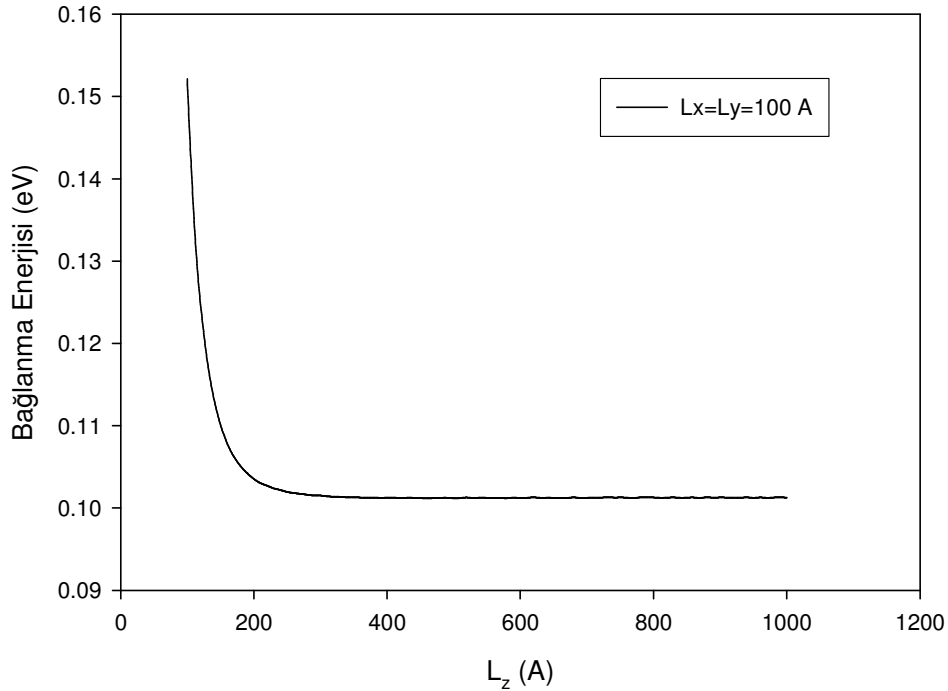
Şekil 6.3 de, iki kenarı birbirine eşit ve sabit bir değerde (100 \AA) tutulan bir kuantum kutusu içerisinde safsızlık bağlanma enerjisinin üçüncü kenar uzunluğu ile değişimi görülmektedir. Diğer kenar boyutu sabit tutulan boyutun 3 katı uzunluğa kadar değiştirilmiştir. Yapı bir anlamda kuantum kuyuya benzemiş olmakla birlikte kenar uzunlukları arasındaki fark fazla büyük olmadığından hala kutu özelliği daha baskındır. Bağlanma enerji değerleri diğer durumlardan çok daha küçük bulunmuştur.

Benzer bir yapı için sonuçlar şekil 6.4 de görülmektedir. Yine iki kenar birbirine eşit tutulmuştur. Ancak burada diğer kenar sabit bir değerde tutulmakla birlikte eşit alınan kenar uzunlukları birlikte değiştirilmiştir. Yapı bir anlamda bir kutu yapıdan kuantum kuyusuna geçiş durumunu göstermektedir. Grafiğin ilk kısımları kutu davranışının daha baskın olduğu bölgelerdir dolayısıyla enerji değerleri daha önce bulunan (Şekil 1) değerler ile yakındır. Ancak yatay eksende ilerledikçe iki boyut birlikte büyüdüğü için yapı daha çok bir kuantum kuyusuna benzemeye başlar ve enerji değişimi görüleceği gibi çok daha keskin ve hızlıdır.

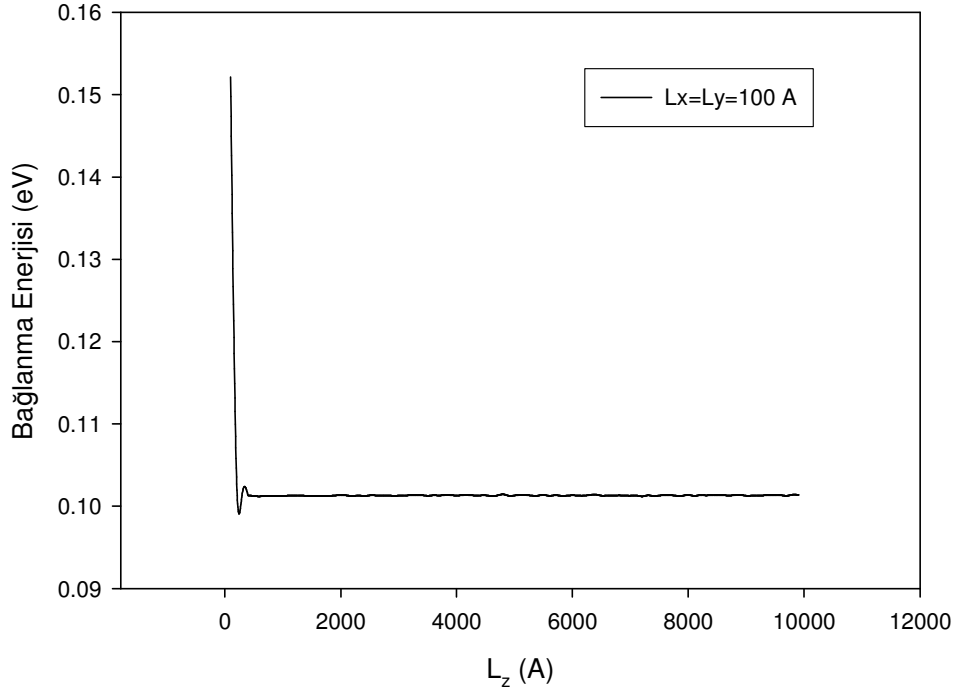


Şekil 6.4 Bir kenar uzunluğu sabit ve diğer iki kenarı birbirine eşit kuantum kutusu içerisindeki safsızlığın bağlanma enerjisinin kenar boyutu ile değişimi.

Şekil 6.5 de ise tam tersi bir geçiş görülmektedir. Şekil, iki kenarı birbirine eşit ve sabit bir değerde tutulan bir yapıda diğer kenarın değişimi ile bağlanma enerjisinin değişimini göstermektedir. Yapı başlangıçta kenar uzunlukları birbirine eşit tam bir kuantum kutusudur. Elde edilen enerji değerleri de zaten bunu göstermektedir. Diğer kenar uzunluğunun artması ile yine kuantum tel yapıya doğru bir değişim söz konusudur. Ancak bu grafikte üçüncü kenar sadece 10 katına kadar çıkarılmıştır. Dolayısıyla yapıyı yine kuantum kutusu olarak ele almak mümkündür. Aynı değişim Şekil 6.6 da çok daha büyük kenar uzunlukları için verilmiştir. Bu şekilde z yönündeki kenar uzunluğu 100 katına kadar çıkarılarak 10000 Å değerine ulaşılmıştır, bu yapı artık bir kuantum tel olarak ele alınabilir. Grafikten görüldüğü gibi, çok büyük L_z boyutlarında bağlanma enerjisi yaklaşık sabit bir değere yakınsamaktadır. Yani bu bölgede artık bağlanma enerjisinin uzunlukla değişimi çok küçük olup yaklaşık aynı değerdedir. Bulk limit durumuna karşılık gelen bu durum sadece tel yapıda değil, kuyu yapılarda da aynen gözlenmektedir.



Şekil 6.5 İki kenarı birbirine eşit ve sabit bir kuantum kutusu içerisindeki safsızlığın bağlanma enerjisinin diğer kenar boyutu ile değişimi. (L_z diğer kenarların 10 katına çıkarılmıştır.)



Şekil 6.6 İki kenarı birbirine eşit ve sabit bir kuantum kutusu içerisindeki safsızlığın bağlanma enerjisinin diğer kenar boyutu ile değişimi.

Bir kuantum kutusu içerisinde safsızlık bağlanma enerjilerinin kutu boyutları ile değişimlerinin verildiği yukarıdaki şekillerde görülen genel davranış, kenar uzunluklarından birisinin veya ikisinin diğerlerinden daha büyük olduğu durumlarda, safsızlık bağlanma enerjisi de küçük değerler almaktadır. Ayrıca boyutlardan birisinin (veya ikisinin) çok büyük olması durumunda bağlanma enerjisinin değişimi oldukça yavaş ve sabit bir değere yakınsayacak şekilde olmaktadır. Bu, daha önce de ifade edildiği gibi beklenen bir durumdur ve bulk limit haline işaret eder. Hesaplamalarda sonsuz potansiyel sınırlandırma durumu ele alınmıştır. Her ne kadar bu potansiyel gerçekçi yapılarıdaki durum ile tam bir uygunluk göstermese de, deneysel olarak elde edilen birçok kuantum yapıda sınırlandırıcı potansiyelin yeterince büyük olması halinde göz önüne alınabilecek bir yaklaşımdır ve halen teorik birçok çalışmada, taşıyıcıların hareketinin modellenmesinde kullanışlı bir model olarak kullanılmaktadır.

KAYNAKLAR

Akman, N. and Tomak, M. , 1999, Physica E 4:277-285

Banyai, L. and Koch, S. W. , 1993, Semiconductor Quantum Dots, World Scientific Publishing Co. , Singapore

Bellessa, J. and Combessot, M. , 1999, Solid State Communications 111:275-280

Bolcotto, P. G. and Proetto, C. R. , 1999, Physical Review B 59:19

Bose, C. and Sarkar, C. K. ,2000,Phys. Stat. Sol. 218:461

Chuu, D. S. ,Hsia, C. M. And Mei, W. N. ,1992, Physical Review B 46:7

Deng, Z. , Yang, X. and Gu, S. ,1993, Solid State Communications 86:6

Esaki, L. and Chang, L. L. , 1974,Phys. Rev. Lett. 33:495-498

Harrison, P. , Qunatum Wells,Wires and Dots, John Wiley & Sons LTD, England, p.213-230

Hsiao, C. M. , Mei, W. N. and Chuu, D. S. ,1992, Solid State Communications 81:10

Jacak, L. ,Hawrylak, P. and Wojs, A. ,1998, Qunatum Dots, Springer, Germany

Johnson, N. F. ,1995, Quantum Dots:few-body,low dimensional systems, Journal of Physics:Condensed.Mattersb 7:965-989

Karaođlu, B. ,1994, Kuantum Mekaniđine Giriř, BilgiTek Yayıncılık, İstanbul

Lomestain, R. and Fishman G. ,1993,Physical Review B 49:3

Lozano-Cetina, J. C. and Porras-Montenegro N. , 1998 , Phys. Stat. Sol. 210:717

Mendez, E. E. , Esaki, L. and Wang, W. L. , 1986, Phys. Rev. B 33:2893-2896

Reed, M. A. , 1993, Quantum Dots, Scientific American January 98-103

Şahin, M. , 2005, Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, Selçuk Ün. , Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya

Sali, A. , Fliyou, M. , Satori, H. And Loumrhari, H. , 2002 , Phys. Stat. Sol. 232 :2

Sali, A. , Fliyou, M. , Satori, H. And Loumrhari, H. , 1999 , Phys. Stat. Sol. 211 :661

Shankar, R. And Murthy, M. V. N. , 2000, Physical Review B , 62:16

Springborg, M. , 2000, Methods of electronic structure calculations, John-Wiley, Germany

Yılmaz, S. , 2004, Küresel Kuantum Noktalarında Safsızlık Problemi, Selçuk Ün. , Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya