

154262

154262



**KUANTUM TELLERİNDE HİDROJEN TÜRÜ YABANCI  
ATOMLARIN BAĞLANMA ENERJİLERİNİN GÖRELİ  
OLARAK İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI**

**ALİ İHSAN MEŞE**

**Tez Yöneticisi: Doç.Dr. Ş.Erol OKAN**

**EDİRNE - 2004**

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

**KUANTUM TELLERİNDE HİDROJEN TÜRÜ YABANCI ATOMLARIN  
BAĞLANMA ENERJİLERİNİN GÖRELİ OLARAK İNCELENMESİ**

**ALİ İHSAN MEŞE**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**Tez yöneticisi: Doç.Dr. Ş.Erol OKAN**

**2004**  
**EDİRNE**

T.C  
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM TELLERİNDE HİDROJEN TÜRÜ YABANCI ATOMLARIN  
BAĞLANMA ENERJİLERİNİN GÖRELİ OLARAK İNCELENMESİ

ALİ İHSAN MEŞE

YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 5 /07/ 2004 tarihinde Aşağıdaki Jüri Tarafından Kabul Edilmiştir.



Doç.Dr. Erol OKAN  
(Danışman)



Prof.Dr. S.Askeri BARAN  
(Üye)



Yrd.Doç.Dr. Cengiz DANE  
(üye)

## ÖZET

GaAs\AlAs sonsuz kuantum tellerinde bir yabancı atomun relativistik çözümleri bağlanma enerjisinin bulunması için kullanılmıştır. Bu bağlamda subband (yabancı atomuz,elektrik alansız) çözümleri bulunmuş ve elektrik alan uygulanmasıyla elektron enerjisi varyasyonel olarak hesaplanarak bağlanma enerjisine ulaşılmıştır.

Tel geometrisi olarak silindirik ve kare kesitli kuantum telleri seçilmiş ve aradaki farklılıklar vurgulanmıştır. Hesaplamalar gerektiğinde Fortran dilinde yazılan programlarla nümerik olarak gerçekleştirilmiştir.

## SUMMARY

The relativistic solutions of an impurity atom are used to find the binding energy in GaAs/AlAs infinite quantum well wires. In this context, the subband energies are first calculated, and then the binding energy is obtained variationally by the electron energy under an applied electric field.

Cylindrical and square cross sectional quantum wires have been chosen as the wire geometry and their differences on the binding energy are emphasized. The calculations, if needed, have been carried out numerically with genuine computer programmes in Fortran language.

## TEŞEKKÜR

Tez yöneticiliđimi üstlenerek, çalışmalarım sırasında tüm çalışma ortamını ve imkanlarını sağlayan, aydınlatıcı bilgilerinin yanında manevi desteđini esirgemeyen, Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Katıhal Fiziđi Anabilim Dalı Başkanı Doç.Dr. Ş Erol OKAN'a teşekkür ederim.

Çalışmalarım esnasında aydınlatıcı bilgilerini ve desteđini esirgemeyen Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü emekli Öğretim üyesi Prof.Dr. Hasan Akbaş'a ve Araş.Gör.Dr. İlhan Erdoğan'a yardımlarından dolayı teşekkür ederim.

Bu çalışma süresince gerekli olan tüm imkanları sağlayan ve ders aşamam sırasında emeđi geçen Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyelerine teşekkür ederim.

# İÇİNDEKİLER

Giriş.....	1
1. Kuantum Telleri.....	3
1.1. Sonsuz Kuantum Telleri.....	4
1.1.a) Sonsuz Kuantum Telinde Yabancı Atom.....	6
1.1.b) Sonsuz Kuantum Telinde Yabancı Atom Probleminin Relativistik Çözümü.....	8
1.1.c) Yarıiletken Tellerde. Yabancı Atom (impurity) Varken Bağlanma Enerjisi.....	17
1.1.d) Yabancı Atomun Konumuna Bağımlılık.....	24
2.1.a) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Silindirik Kuantum Telinde Elektron .....	27
2.1.b) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Silindirik Kuantum Telinde Hidrojen Atomunun Davranışının Schrödinger Denklemi İle Çözümü.....	28
2.1.c) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Silindirik Kuantum Telinde. Relativistik Hidrojen Atomunun Davranışı.....	30
2.1.d) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Silindirik Kuantum Telinde Yabancı Atom Varlığında Hidrojen Atomunun Davranışının Klein-Gordon Denklemi İle Çözümü.....	32
2.2.a) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Kare Kesitli Kuantum Telinde Schrödinger Denklemi İle Hidrojen Atomunun Davranışının Belirlenmesi.....	43
2.2.b) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Kare Kesitli Kuantum Telinde Schrödinger Denklemi İle Yabancı Atom Varlığında Hidrojen Atomunun Davranışının Belirlenmesi.....	45
2.2.c) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Kare Kesitli Kuantum Telinde Relativistik Hidrojen Atomunun Davranışı.....	47
2.2.d) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Kare Kesitli Kuantum Telinde Yabancı Atom Varlığında Hidrojen Atomunun Davranışının Klein-Gordon Denklemi İle Çözümü.....	50
Sonuç ve Tartışma.....	57
Kaynaklar.....	59
Özgeçmiş.....	61

## SİMGELER

$m^*$	Elektronun etkin kütlesi
$a_0$	Bohr yarıçapı
$a^*$	Etkin Bohr yarıçapı
$R^*$	Etkin Rydberg enerjisi
$\lambda$	Minimizasyon sabiti
$\psi$	Dalga Fonksiyonu
$\epsilon$	Dielektrik sabiti
$\theta$	Açı değeri
$\eta$	Hamiltoniendeki elektrik alan terimi
$\rho$	Koordinat değişkeni
$x_i$	Yabancı atomun konumu
$y_i$	Yabancı atomun konumu
$\beta$	Elektrik alan sabiti
$\rho_0$	Silindirik Koordinatta yabancı atom konumu

## GİRİŞ

Günümüzde düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin araştırılması kuantum fiziği ile açıklanabilen davranışlara sahip yeni elektronik devre elemanlarının üretilmesini mümkün kıldığından büyük bir ilgi çekmektedir. Düşük boyutlu yarıiletken sistemler literatürdeki birçok varsayımları ve deneysel sonuçları doğrulamak için ayrı bir test alanı oluşturmaktadır. Ayrıca son yıllarda bu sistemlerin fiziksel özelliklerinden yararlanarak bazı yeni fiziksel kavramlar üstünde araştırmalar ve varsayımlar yapılmaktadır. Düşük boyutlu yarıiletken sistemlerden oluşan nanometre ( $10^{-9} m$ ) boyutunda elektronik ve optoelektronik cihazlar günümüz bilgisayar ve haberleşme endüstrisinde kullanılan devrelerin temel yapıtaşlarını oluşturmaktadır. Bu cihazların fiziğinin ve çalışma prensiplerinin bilinmesi, bu sistemlerin daha ayrıntılı olarak incelenmesiyle mümkündür.

Kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum kutuları (noktaları) düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin geometrik sınıflandırılmasını oluştururlar. Bu sınıflandırma yapılırken taşıyıcı yükün hareketinin kaç boyutta sınırlı ve kaç boyutta serbest tutulduğu göz önüne alınır. Kuantum kuyularında taşıyıcı yükün hareketi bir boyutta, kuantum tellerinde iki boyutta ve kuantum kutularında ise her üç boyutta sınırlandırılmıştır. Taşıyıcı yükün serbest olarak hareket edebileceği boyut sayısı göz önüne alınarak, kuantum kuyuları iki boyutlu, kuantum telleri bir boyutlu ve kuantum kutuları da sıfır boyutlu yarıiletken sistemler olarak adlandırılırlar. Bu sistemlerde taşıyıcı yük ,elektron, boşluk veya eksiton olabilir.

Son yıllarda kristal büyütme teknolojisinde sağlanan gelişmeler, yarıiletkenler fiziği ve uygulamaları için geniş bir ufuk açmıştır. Bu sayede hassas bir kontrol altında bir atomik tabaka üzerine diğer bir atomik tabaka yerleştirilerek yarıiletken kristal büyütmesi yapılabilmektedir. Bu yolla elde edilen iki boyutlu sistemler kuantum kuyu lazerleri, yeni diyod ve transistörlerin yapımına öncülük etmiştir. Bir ve sıfır boyutlu yarıiletken sistemlerin fiziksel özelliklerinden yararlanarak yeni uygulamaların başını da kuantum tel ve kuantum kutu lazerleri gelmektedir. Kuantum telleri için önemli bir potansiyel uygulama da kuantum bilgisayarıdır.

Günümüzde nanoteknolojik üretim tekniklerindeki gelişmeler sayesinde geometrileri ve boyutları De Broglie dalga boyuyla karşılaştırılabilen kuantum telleri üretimi mümkündür. Böylece silindir, kare ve dikdörtgen biçimli kuantum telleri elde edilebilir. Bunlar farklı atomik tabakaların belli bir sınırlayıcı potansiyel altında birleştirilmesi ile gerçekleştirilir.

Düşük boyutlu yapıların iletkenliği yapıldığı yarıiletken malzemeye yabancı atomlar katılması ile artırılabilir. Bu yüzden bir yabancı atomun yapıya eklediği ilave elektronun (ya da deşğin) enerji öz durumları ve bağlanma enerjileri yapıyı karakterize eder. Kuantum tellerinde elektrik alanın uygulanması, yük taşıyıcıların dağılımında deęişimlere yol açar. Polarizasyon oluşur ve enerji düzeylerinde kaymalar olur.

Kuantum tellerinde relativistik olarak yabancı atom elektronun enerji öz değerlerini, silindir ve kare yapıda elektrik alan etkisini incelemek bu yapıların bağlanma enerjilerinin bulunması çalışmanın içeriğini oluşturmaktadır.



## 1.KUANTUM TELLERİ

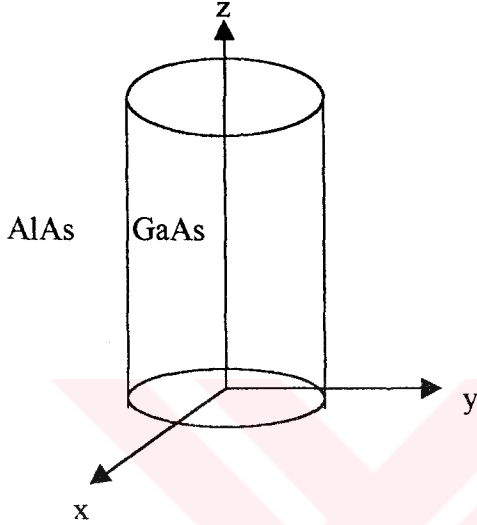
Eğer etrafı  $Ga_{1-x}Al_xAs$  ile çevrelenmiş GaAs içinde iyonize olmuş bir verici atomun elektronunun hareketi iki boyutta sınırlı bir boyutta serbest ise bu sistem GaAs kuantum teli olarak adlandırılır. Başka bir deyişle kuantum tellerinde elektronun hareketi uygulanan engel potansiyeli ile iki boyutta sınırlanıp bir boyutta serbesttir.

Bir kuantum teli tek bir elektrona veya çok sayıda elektrona sahip olabilir. Elektronların sınırlandırılmasından dolayı kuantum tellerindeki enerji seviyeleri atomlarda olduğu gibi kuantize olur. Bu bakımdan kuantum tellerinin fiziği, atomik ve nükleer fizikte doğal olarak meydana gelen kuantum olayları ile paralellik gösterir.

Kuantum telleri yarıiletken malzemeden üretilirler ve nanometre mertebesinde boyutlara sahiptirler. Kuantum tellerine yabancı atom katılmasıyla iletkenlik kontrollü bir şekilde değiştirilebilir. Bu katkılama işlemi,örneğin 4 valanslı atomlardan oluşan kristal yapıya dışardan 5 valanslı yabancı atom(verici) eklenmesiyle gerçekleştirilebilir. 5 valanslı atom sisteme bir elektron verir ve pozitif yüklü iyon haline geçer. Sisteme verilen bu elektron ile geride kalan pozitif yüklü iyon arasında küçük bir bağ enerjisi olmasına rağmen bir elektrik alan uygulanmasıyla elektron iletkenliğe katkıda bulunur. İletkenliği artıran verici atomun elektronunun hareketi telin geometrisine bağlı olarak da sınırlandırılabilir. Kuantum telleri silindir, kare ve dikdörtgen biçimli olarak üretilebilirler.

## 1.1 SONSUZ KUANTUM TELİ

Silindirik kesitli bir kuantum kuyu teli x-y düzleminde aşağıdaki gibi gösterilebilir. Böylece bir telin içinde



x-y düzleminde sonsuz kuantum teli

yer alan elektron 'z' doğrultusunda serbest, x-y düzlemi içindeki dairesel kesiti sınırlayan sonsuz enerji duvarları (GaAs bölgede) ile hapsedilmiştir.  $V(r)$  sınırlayıcı potansiyel için [1]

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \rho < d \\ \infty & \rho \geq d \end{cases} \quad (1.1.1)$$

yazılabilir. Böyle bir potansiyeli gören ve tel içinde bulunan elektronun non-relativistik çözümü için hamilton fonksiyonu

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r) \quad (1.1.2)$$

olur. Schrödinger denkleminin çözümünden elektron için elde edilen subband enerjileri taban durumda

$$E_{10} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \alpha_{10}^2 \quad (1.1.3)$$

olur. Bu enerjinin elde edildiği dalga fonksiyonu,

$$\psi_0(\rho) = N_0 J_0(\alpha_{10} \rho) \quad (1.1.4)$$

dir.  $J_0$  birinci tür Bessel fonksiyonudur ve  $\alpha_{10}$  bu Bessel fonksiyonunun köküdür. Burada  $N_0$  ise normalizasyon sabitidir.



### 1.1.a) Sonsuz Kuantum Telinde Yabancı Atom

Telin GaAs bölgesinin  $z=0$  düzleminde yer alan yabancı atomun konumu  $\rho_i = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$  ile ifade edilir. Sonsuz kuantum teli içinde elektronun hamilton fonksiyonu,

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\chi_0 \sqrt{(\rho - \rho_i)^2 + z^2}} + V(r) \quad (1.1.a.1)$$

dir.

$$H\psi(\rho, z) = E\psi(\rho, z) \quad (1.1.a.2)$$

Schrödinger denklemi kullanıldığında  $a^*$  etkin Bohr yarıçapı ve  $R^*$  etkin Rydberg enerjisi birimlerinde,

$$\left( -\nabla^2 - \frac{2}{\sqrt{(\rho - \rho_i)^2 + z^2}} \right) \psi(\rho, z) = E\psi(\rho, z) \quad (1.1.a.3)$$

elde edilir. Bu denklemin tam çözümü yoktur. Bu yüzden yaklaşık çözüm yöntemlerinden olan varyasyon kullanılabilir. Hamilton fonksiyonu

$$H = H_0 - \frac{2}{\sqrt{(\rho - \rho_i)^2 + z^2}}$$

biçiminde ayrıştırırsak

$$H_0\psi(\rho) = E\psi(\rho)$$

ve

$\psi_0(\rho) = N_0 J_0(\alpha_{10}\rho)$  olduğu hatırlanarak denklem (1.1.a.3)'ün temel durumdaki çözümü için  $\psi(\rho, z)$  deneme fonksiyonu,

$$\psi_1(\rho, z) = N_0 J_0(\alpha_{10}\rho) \exp(-\lambda \sqrt{(\rho - \rho_i)^2 + z^2}) \quad (1.1.a.4)$$

olarak seçilir. Enerji özdeğerleri

$$\langle E_1 \rangle = \min_{\lambda} \left( \frac{\langle \psi_1(\rho, z) | H | \psi_1(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_1(\rho, z) | \psi_1(\rho, z) \rangle} \right) \quad (1.1.a.5)$$

denklemden belirlenir. Donor elektronu için bağlanma enerjisi,

$$E_{b1} = E_0 - \min_{\lambda} \left( \frac{\langle \psi_1(\rho, z) | H | \psi_1(\rho, z) \rangle}{\langle \psi_1(\rho, z) | \psi_1(\rho, z) \rangle} \right) \quad (1.1.a.6)$$

yazılır. Bu ifade matematik işlemler sonucu taban durum için,

$$E_{b1} = -\lambda^2 + \frac{2A}{yC} \quad (1.1.a.7)$$

(1.1.a.7)denklemindeki A ve C integralleri

$$A = \int_0^1 t dt J_0(xt) K_0(2\lambda y |t - t_0|) \quad (1.1.a.8)$$

$$C = \int_0^1 t dt J_0(xt) |t - t_0| K_1(2\lambda y |t - t_0|) \quad (1.1.a.9)$$

dir. Burada  $K_0$  ve  $K_1$  ikinci tür modifiye bessel fonksiyonlarıdır.

### 1.1.b) Sonsuz Kuantum Telinde Yabancı Atom Probleminin Relativistik Çözümü

Nonrelativistik kuantum teli çözümlerinde tel genişliği  $y \rightarrow 0$  bağlanma enerjisi sonsuza gidiyor. Bu problemi relativistik çözümle aşılmıştır. [2]

d yarıçaplı sonsuz silindirik telin potansiyelini denklem (1.1.1) de vermiştik. Şimdi elektronun özdeğer ve özfonksiyonlar spektrumlarını

$$(m^{*2} s^4 + s^2 \vec{p}^2) \psi(\rho) = (E + m^* s^2)^2 \psi(\rho) \quad (1.1.b.1)$$

Klein-Gordon denkleminden bulalım. Silindirik koordinatlarda  $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$  [7] veriliyor.

$$\vec{p}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (1.1.b.2)$$

ve

$\psi = \psi(\rho, \varphi, z)$  olsun. Böylece,

$$-s^2 \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = \left[ (E + m^* s^2)^2 - m^{*2} s^4 \right] \psi \quad (1.1.b.3)$$

$z$ 'ye bağlı kısmı

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \psi_1(z) \psi_2(\rho, \varphi) \quad (1.1.b.4)$$

diklik koşulundan ayrıştıralım.

$$-s^2 \hbar^2 \left( \psi_1 \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \rho^2} + \frac{\psi_1}{\rho} \frac{\partial \psi_2}{\partial \rho} + \frac{\psi_1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \varphi^2} + \psi_2 \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} \right) = \left[ (E - m^* s^2)^2 - m^{*2} s^4 \right] \psi_1 \psi_2 \quad (1.1.b.5)$$

denklem(1.1.b.5)'i soldan sağa  $\frac{1}{\psi_1 \psi_2}$  ile çarpalım.

$$-s^2 \hbar^2 \left( \frac{1}{\psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho \psi_2} \frac{\partial \psi_2}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2 \psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\psi_1} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} \right) = \left[ (E + m^* s^2)^2 - m^{*2} s^4 \right] \quad (1.1.b.6)$$

(-) işaretini dikkate alarak denklemi

$$\frac{1}{\psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho \psi_2} \frac{\partial \psi_2}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2 \psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \varphi^2} = \frac{1}{\psi_1} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} + \frac{1}{s^2 \hbar^2} \left[ (E - m^* s^2)^2 - m^{*2} s^4 \right] = k^2 \quad (1.1.b.7)$$

eşitliğinin sağlanabilmesi için  $(\rho, \varphi)$  ve  $(z)$  bağımsız değişkenlerine ayrılan iki denklemin aynı  $k^2$  sabitine eşit olması gerekir. Böylece;

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} + \left\{ \frac{1}{s^2 \hbar^2} \left[ (E + m^* s^2)^2 - m^{*2} s^4 \right] - k^2 \right\} \psi_1 = 0 \quad (1.1.b.8)$$

$$-\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi_2}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \varphi^2} = k^2 \psi_2 \quad (1.1.b.9)$$

denklemleri elde edilir. Denklem(1.1.b.8)'den

$$k_z^2 = \frac{1}{s^2 \hbar^2} \left[ (E - m^* s^2)^2 - m^{*2} s^4 \right] - k^2 \quad (1.1.b.10)$$

seçimiyle

$$\frac{d^2 \psi_1(z)}{dz^2} + k_z^2 \psi_1(z) = 0 \quad (1.1.b.11)$$

böyle bir diferansiyel denklemin çözümlerinden biri

$$\psi_1(z) = A_1 \exp(ik_z z) \quad (1.1.b.12)$$

dir. Burada  $A_1$  normalizasyon sabitidir. Normalizasyon sabitini hesaplırsak dalga fonksiyonu

$$\psi_1(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_z z) \quad (1.1.b.13)$$

olarak bulunur.

Denklem (1.1.b.9)'de

$$\psi_2(\rho, \varphi) = \psi_3(\rho) \psi_4(\varphi) \quad (1.1.b.14)$$

dönüşümü yapılırsa

$$-\psi_4 \frac{d^2 \psi_3}{d\rho^2} - \frac{\psi_4}{\rho} \frac{d\psi_3}{d\rho} - \frac{\psi_3}{\rho^2} \frac{d^2 \psi_4}{d\varphi^2} = k^2 \psi_3 \psi_4 \quad (1.1.b.15)$$

bu denklemi  $\frac{\rho^2}{\psi_3 \psi_4}$  ile çarpıp düzenlersek  $z$ 'in ayrışmasına benzer şekilde

$$\frac{\rho^2}{\psi_3} \frac{d^2 \psi_3}{d\rho^2} + \frac{\rho}{\psi_3} \frac{d\psi_3}{d\rho} + k^2 \rho^2 = -\frac{1}{\psi_4} \frac{d^2 \psi_4}{d\varphi^2} = m^2 \quad (1.1.b.16)$$

bulunur. Sonuç olarak

$$\rho^2 \frac{d^2 \psi_3(\rho)}{d\rho^2} + \rho \frac{d\psi_3(\rho)}{d\rho} + (k^2 \rho^2 - m^2) \psi_3(\rho) = 0 \quad (1.1.b.17)$$

ve

$$\frac{d^2 \psi_4(\varphi)}{d\varphi^2} + m^2 \psi_4(\varphi) = 0 \quad (1.1.b.18)$$

denklemleri elde edilir. Denklem (1.1.b.18)'in çözümü yapılırsa

$$\psi_4(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \quad (1.1.b.19)$$

biçimine sahiptir.

Denklem (1.1.b.17) 'de  $u = k\rho$  dönüşümü yaparsak,

$$u^2 \frac{d^2 \psi_3}{du^2} + u \frac{d\psi_3}{du} + (u^2 - m^2) \psi_3 = 0 \quad (1.1.b.20)$$

Bessel Diferansiyel Denklemi elde edilir. [3] Tekil (Singularite) noktaları belirlemek için

denklem (1.1.b.20)'yi  $\frac{1}{u^2}$  ile çarpalım ve  $\psi_3 = R$  diyelim.

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \frac{1}{u} \frac{dR}{du} + \left(1 - \frac{m^2}{u^2}\right) R = 0$$

$$\tilde{P}_1(u) \quad \tilde{P}_2(u)$$

$$P_1(u) = \frac{1}{u} \Rightarrow P_1(0) = \frac{1}{0} = \infty$$

$u=0$  da tekillik vardır.

$$P_2(u) = 1 - \frac{m^2}{u^2} \Rightarrow P_2(0) = -\frac{m^2}{0} = \infty$$

(1.1.b.21)

Denklem (1.1.b.20)'nin

$$R(u) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^{\beta+j} \quad (1.1.b.22)$$

biçiminde kuvvet çözümleri vardır. [3]

Bu durumda,

$$\frac{dR}{du} = \sum_{j=0}^{\infty} (\beta + j) a_j u^{\beta+j-1}$$

$$\frac{d^2 R}{du^2} \sum_{j=0}^{\infty} (\beta + j)(\beta + j - 1) a_j u^{\beta + j - 2}$$

olur. Denklem (1.1.b.20)'de yerine yazılırsa,

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(\beta + j)(\beta + j - 1) + (\beta + j) - m^2] a_j u^{\beta + j} + \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^{\beta + j + 2} = 0 \quad (1.1.b.23)$$

şeklinde düzenlenmiş olur.  $j+2=i$  olsun. Buradan  $j=i-2$  'yi denklem (1.1.b.23) 'de ikinci terime yerleştirelim.

Burada  $a_{-1}$   $a_{-2}$  gibi yani  $j < 2$  değerinde katsayılar tanımsızdır. Böylece serinin ilk terimi  $a_0$  olarak alınır.

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(\beta + j)(\beta + j - 1) + (\beta + j) - m^2] a_j u^{\beta + j} + \sum_{j=2}^{\infty} a_{i-2} u^{\beta + i} \quad (1.1.b.24)$$

Denklem (1.1.b.24) 'ün çözümü yapılırsa

$$a_{2j} = \frac{m!(-1)^j}{2^{2j} j!(m+j)!} a_0 \quad (1.1.b.25)$$

genel çözümü elde edilir.

Tam sayılar için  $\Gamma(n+1) = n!$   $n = 0,1,2,3..$  [3] bağıntısını kullanırsak

$$m! = \Gamma(m+1) = \Gamma(\beta+1)$$

$$(m+j)! = \Gamma(m+j+1)$$

olur. Bu ifadeleri denklem (1.1.b.25) de yerine yazarsak,

$$a_{2j} = \frac{(-1)^j \Gamma(m+1)}{2^{2j} j! \Gamma(m+j+1)} a_0 \quad (1.1.b.26)$$

bulunur. Bu ifadeyi denklem (1.1.b.23) 'deki u 'nun kuvveti türünden yazmak için

$2^\beta$  ile çarpıp bölelim.

$$a_{2j} = \frac{2^\beta (-1)^j \Gamma(m+1)}{2^{2j+\beta} j! \Gamma(j+m+1)} a_0 \quad (1.1.b.27)$$

Denklem (1.1.b.27) 'yi

$$J_m(u) = \left(\frac{u}{2}\right)^m \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(j+m+1)} \left(\frac{u}{2}\right)^{2j} \quad (1.1.b.28)$$

Bessel artan serisine [3] dönüştürmek için

$a_0 = \frac{1}{2^\beta \Gamma(\beta + 1)}$  seçimi yapılırsa

$$a_{2j} = \frac{(-1)^j}{2^{2j} 2^\beta j! \Gamma(j + m + 1)} \quad (1.1.b.29)$$

olur. Bu katsayı denklem (1.1.b.22) deki çözümlerde yerine yazılırsa (öncelikle çift değerleri göz önüne aldığımızdan  $R(u) = \sum_{j=0}^{\infty} a_{2j} u^{\beta+2j}$  olduğunu dikkate alınarak)

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{2^{2j} 2^\beta j! \Gamma(j + m + 1)} u^{\beta+2j} = \left(\frac{u}{2}\right)^\beta \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(j + m + 1)} \left(\frac{u}{2}\right)^{2j} \quad (1.1.b.30)$$

yani  $\beta = m$  için  $J_m(u)$  Bessel fonksiyonu elde edilir. Eğer  $\beta = -m$  için yukarıdaki işlemler yinelenirse

$$J_{-m}(u) = \left(\frac{u}{2}\right)^{-m} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(m + j + 1)} \left(\frac{u}{2}\right)^{2j} \quad (1.1.b.31)$$

çözümü elde edilir.

Bu  $J_m(u)$  ve  $J_{-m}(u)$  çözümleri  $m$ . mertebeden birinci Bessel fonksiyonlarıdır ve  $u$  'nun tüm sonlu değerleri için yakınsaktır.  $J_m(u)$  ve  $J_{-m}(u)$  arasındaki ilişki

$$J_m(u) = (-1)^m J_{-m}(u) \quad (1.1.b.32)$$

dir. [3]

Bu çözümlere  $\pm m$  'ci mertebeden birinci Bessel fonksiyonu denir. Bu seriler  $x$ 'in tüm sonlu değerleri için yakınsaktır. Eğer  $m$  tam sayı değilse bu iki  $J_{\pm m}(u)$  çözümü ikinci mertebeden olan Bessel diferansiyel denkleminin çizgisel bağımsız bir çiftini oluştururlar. Bununla beraber,  $m$  bir tam sayı ise, bu çözümlerin çizgisel bağımlı oldukları bilinmektedir. Gerçekten de  $m=n$  gibi bir tam sayı için, yukarıda da görüleceği üzere

$$J_m(u) = (-1)^m J_{-m}(u)$$

eşit olduğu görülüyor.

Bessel fonksiyonunun  $m$ 'nin tüm değerleri için  $J_m(u)$  ve  $Y_m(u)$  gibi iki lineer çözümü vardır. Biri

$$Y_m(u) = \frac{\cos m\pi J_m(u) - J_m(u)}{\sin m\pi} \quad (1.1.b.33)$$

dir..  $m$ 'nin tam sayı ve tam sayı olmayan değerleri için inceleyelim.

$m$  tam sayı değil ise;

$\sin m\pi \neq 0$  o halde  $Y_m(u), J_m(u)$  ve  $J_{-m}(u)$ 'nin lineer kombinasyonudur. Ama  $J_m(u)$  ve  $J_{-m}(u)$  lineer bağımsız çözümlerdir. O halde  $J_m(u)$  ve  $Y_m(u)$  bağımsız çözümler olmalıdır.  $Y_m(u) \neq \infty$

$m$  tam sayı ise;

$\sin m\pi = 0$  ve  $\cos m\pi = (-1)^m$  o halde

$$\cos m\pi J_m(u) - J_{-m}(u) = (-1)^m J_m(u) - (-1)^m J_m(u) = 0 \quad (1.1.b.34)$$

olur.

$Y_m(u)$  da  $\frac{0}{0}$  belirsizliği ortaya çıkar. Bu sorunu şöyle çözebiliriz. (L'Hospital kuralına göre)

$$Y_m(u) = \lim_{m \rightarrow n} Y_n(u) \quad (1.1.b.35)$$

$$Y_m(u) = \lim_{m \rightarrow n} \frac{\cos n\pi J_n(u) - J_{-n}(u)}{\sin n\pi}$$

$$Y_m(u) = \frac{\left\{ \left( \frac{-\partial}{\partial n} \right) [\cos n\pi J_n(u) - J_{-n}(u)] \right\}_{n=m}}{\left[ \left( \frac{\partial}{\partial n} \right) \sin n\pi \right]_{n=m}}$$

$$Y_m(u) = \frac{\left[ -\pi \sin n\pi J_n(u) + \cos n\pi \left( \frac{\partial}{\partial n} \right) J_n(u) - \left( \frac{\partial}{\partial n} \right) J_{-n}(u) \right]_{n=m}}{[\pi \cos n\pi]_{n=m}}$$

$$Y_m(u) = \frac{1}{\pi} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial n} \right) J_n(u) - (-1)^n \left( \frac{\partial}{\partial n} \right) J_{-n}(u) \right]_{n=m} \quad (1.1.b.36)$$

Biz burada iki şeyi gösterdik. Birincisi yukarıdaki denklemle diferansiyel denklemin çözümü olduğunu, ikincisi,  $J_m(u)$  'dan bağımsız çözüm olduğunu gösterdik.

Şimdi Bessel denklemini  $J_m(u)$  cinsinden yazarsak;

$$u^2 \frac{d^2 J_m(u)}{du^2} + u \frac{dJ_m(u)}{du} + (u^2 - m^2)J_m(u) = 0 \quad (1.1.b.37)$$

elde edilir.

$m$  tam sayı olduğu için denklem (1.1.b.32) 'yi kullanabiliriz. Bu durumda;

$$u^2 \frac{d^2 Y_m(u)}{du^2} + u \frac{dY_m(u)}{du} + (u^2 - m^2)Y_m(u) = 0 \quad (1.1.b.38)$$

denklemini elde ederiz. Denklem (1.1.b.38)  $Y_m(u)$  'nun Bessel denkleminin  $m$ . dereceden çözümü olduğunu gösteriyor. Şimdi  $Y_m(u)$  'nun çözümünü seriye açılmış olarak yazarsak,

$$Y_m(u) = \frac{2}{\pi} \left\{ \ln \frac{u}{2} + \nu - \frac{1}{2} \sum_{m=0}^n \frac{1}{m} \right\} J_m(u) - \frac{1}{\pi} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{1}{j!(m+j)!} \left( \frac{u}{2} \right)^{2j+m} \\ \sum_{n=1}^j \left\{ \frac{1}{n} + \frac{1}{n+m} \right\} - \frac{1}{\pi} \sum_{j=0}^{m-1} \frac{(m-j-1)!}{j!} \left( \frac{u}{2} \right)^{-m+2j} \quad (1.1.b.39)$$

$\nu \rightarrow$  Euler sabiti [3]

$$u=0 \text{ ise } Y_m(u) = \frac{2}{\pi} \left( \ln 0 + \nu - \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m} \right) J_m(u) = \infty \quad (1.1.b.40)$$

$J_m(u)$  çözümünü seriye açarsak;

$$J_m(u) = \frac{u^m}{2^m \Gamma(m+1)} \left\{ 1 - \frac{u^2}{2(2m+2)} + \frac{u^4}{2.4(2m+2)(2m+4)} - \dots \right\} \quad (1.1.b.41)$$

$u=0$  koyduğumuzda  $J_m(u) \neq \infty$  oluyor.

Sonuç olarak  $m$  bir tam sayı olduğundan çizgisel bağımsız bir çözüm daha bulmak gerekiyor. Bu nedenle  $m$  bir tam sayı olmasa bile  $J_{\pm m}(u)$  çifti yerine  $J_m(u)$  ve  $Y_m(u)$  fonksiyonlarını almak alışkanlık haline gelmiştir. Burada  $Y_m(u)$  fonksiyonuna Neumann fonksiyonu yada ikinci tür Bessel fonksiyonu denir.

$$N_m(u) = \frac{J_m(u) \cos m\pi - J_{-m}(u)}{\sin m\pi} \quad (1.1.b.42)$$

Tam sayı olmayan  $m$  'ler için,  $N_m(u)$  'nun  $J_m(u)$  'dan çizgisel bağımsız olduğu açıktır.  $m \rightarrow$  Tam sayı limitinde ve  $Y_m(u)$   $J_m(u)$  'dan çizgisel bağımsızdır ve logaritma içerir. Seri temsili denklem (1.1.b.39) gösterilmiştir.

Sonuç olarak  $R(u) = R(k\rho)$  için genel çözüm;

$$R(\rho) = AJ_m(k\rho) + Y_m(k\rho) \quad (1.1.b.43)$$

olur.  $\rho = 0$ 'da  $R(k\rho)$  sonlu kalmalıdır.

$Y_m(k\rho)$  yani Neumann fonksiyonu  $\rho = 0$  da sonsuz olduğunu belirtmiştik. O halde  $B=0$  olması gerekir. Buna göre,

$$R(\rho) = AJ_m(k\rho) \quad (1.1.b.44)$$

olur.  $\rho = R_0$  sınır şartında  $R(kR_0) = 0$  olmalıdır.

$$R(R_0) = AJ_m(kR_0) = 0 \quad (1.1.b.45)$$

Buradan Bessel fonksiyonunun kökleri nümerik olarak bulunup  $k$  değerlerine geçilir. Başka bir deyişle  $k$  sadece aşağıdaki özel değerlerle sınırlıdır.

$$k_{nm} = \frac{u_{nm}}{R_0} \quad n = 0,1,2,3... \quad (1.1.b.46)$$

$u_{nm}$  Bessel fonksiyonunun köküdür.

$$R(kR_0) = AJ_m\left(\frac{u_{nm}}{R_0}R_0\right) = AJ_m(u_{nm}) \quad (1.1.b.47)$$
$$R(k\rho) = AR\left(\frac{u_{nm}}{R_0}\rho\right)$$

çözümü bulunur.  $R(\rho)$ 'yu normalize edersek,

$$R(k\rho) \equiv R(\rho) = \frac{1}{\left(\frac{R_0^2}{2}\right)^{\frac{1}{2}} J_{m+1}(u_{nm})} J_m\left(\frac{u_{nm}}{R_0}\rho\right) \quad (1.1.b.48)$$

olarak bulunur. Şimdi  $\phi(\varphi)$ 'yi normalize edersek,

$$\phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \quad (1.1.b.49)$$

olduğunu görüyoruz. Son olarak  $\psi_1(z)$ 'i normalize edersek,

$$\psi_1(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_2 z) \quad (1.1.b.50)$$

olur. Şimdi artık  $\psi(\rho, \varphi, z)$ 'i yazabiliriz.

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \frac{\exp(im\varphi) \exp(ik_z z) J_m\left(\frac{u_{nm}}{R_0} \rho\right)}{(\pi L R_0^2)^{\frac{1}{2}} J_{m+1}(u_{nm})} \quad (1.1.b.51)$$

$$k_z = \frac{u_{nm}}{R_0} = \alpha_{nm} \text{ denklem (1.1.b.46)'dan ve}$$

$$\alpha_{nm} := \frac{\lambda_{nm}}{d} \text{ ve } R_0 = d \text{ dersek}$$

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \frac{\exp(im\varphi) \exp(ik_z z) J_m(\alpha_{nm} \rho)}{(\pi L d^2)^{\frac{1}{2}} J_{m+1}(\alpha_{nm} d)} \quad (1.1.b.52)$$

olur.

Artık parçacığın enerjisi için bir ifade bulabiliriz. denklem (1.1.b.10) tekrar yazılırsa,

$$k_z^2 = \frac{1}{s^2 \hbar^2} \left[ (E + m^* s^2)^2 - m^{*2} s^4 \right] - k^2$$

$$k_z^2 + k^2 = \frac{1}{s^2 \hbar^2} \left[ (E + m^* s^2)^2 - m^{*2} s^4 \right]$$

$$s^2 \hbar^2 (k_z^2 + k^2) + m^{*2} s^4 = (E + m^* s^2)^2$$

$$(E + m^* s^2) = \sqrt{m^{*2} s^4 + s^2 \hbar^2 (k_z^2 + k^2)}$$

$$E = \varepsilon + \varepsilon_z = k_z^2 + k^2 \text{ yazılırsa}$$

$$\text{denklem (1.1.b.46)'dan } \varepsilon = k^2$$

$$\varepsilon_z = \varepsilon_{nm} = k_{nm}^2 = \frac{u_{nm}^2}{R_0^2} = \alpha_{nm}$$

temel durum enerjisi,

$$E_0(d) = -m^* s^2 \sqrt{m^{*2} s^4 + s^2 \hbar^2 (k^2 + \alpha_{nm}^2)} \quad (1.1.b.53)$$

olarak elde edilir.

### 1.1.c) Yarıiletken Tellerde Yabancı Atom (İmpurity) Varken Bağlanma Enerjisi

Yarıiletken tellerde elektronların etkileşmesi sonucu telde oluşan Coulomb potansiyeli

$$U(\rho, z) = -\frac{e^2}{\chi\sqrt{\rho^2 + z^2}} \quad (1.1.c.1)$$

ile ifade edilir. [1]

Bu etkileşme sonucu Klein-Gordon denklemini

$$\left(m^*s^4 + s^2\vec{p}^2\right)\psi_0(\rho, z) = \left[E + m^*s^2 + U(\rho, z)\right]\psi_0(\rho, z) \quad (1.1.c.2)$$

yazılabiliriz. [1]

Burada  $E + m^*s^2 = \varepsilon$  [2] dersek Klein-Gordon denkleminin biçimi

$$\left(m^*s^4 + s^2\vec{p}^2\right)\psi_0(\rho, z) = \left[\varepsilon + U(\rho, z)\right]\psi_0(\rho, z) \quad (1.1.c.3)$$

olur. Taban durumunda ( $m=0, n=1$ ) varyasyonel yöntem kullanarak dalga fonksiyonunu şu şekilde seçebiliriz.

$$\psi_0(\rho, z) = \begin{cases} N_0 J_0(\alpha_{10}\rho) \exp(-\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2}) & \rho < d \\ 0 & \rho \geq d \end{cases} \quad (1.1.c.4)$$

seçebiliriz.  $\lambda$  varyasyonel parametredir. N ise normalizasyon sabitidir. Normalizasyon sabiti ,

$$\int_0^d \int_0^{2\pi} \int_0^\infty N^2 J_0^2(\alpha_{10}\rho) \exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2}) \rho d\rho d\varphi dz = 1 \quad (1.1.c.5)$$

denkleminde bulunabilir.  $\varphi$ 'ye göre integre edelim.

$$N^2 2\pi \int_0^d \int_0^\infty J_0^2(\alpha_{10}\rho) \exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz = 1 \quad (1.1.c.6)$$

denklem (1.1.c.6)'yı tek katlı integrale dönüştürmek istersek

$$\int_0^\infty \exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz = \rho K_1(2\lambda\rho) \quad (1.1.c.7)$$

eşitliğini kullanırız.  $K_0$  ve  $K_1$  ikinci tür modifiye Bessel fonksiyonu olarak tanımlanmıştır. [3]

$$N^2 2\pi \int_0^d J_0(\alpha_{10}\rho) K_1(2\lambda\rho) d\rho = 1 \quad (1.1.c.8)$$

$$K_0(2\lambda\rho) = \int_0^\infty \frac{\exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2})}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \quad (1.1.c.9)$$

eşitliğini göz önüne alırsak;

$$\frac{dK_0(2\lambda\rho)}{d2\lambda} = -\rho K_1(2\lambda\rho) \text{ eşit olduğunu görürüz. Bu eşitliği kullanırsak normalizasyon}$$

sabitini

$$N^{-2} = -2\pi \frac{dA}{d\lambda}$$

(1.1.c.10)

olarak bulunuz. Burada A integrali;

$$A = \int_0^d J_0(\alpha_{10}\rho) K_0(2\lambda\rho) \rho d\rho \quad (1.1.c.11)$$

Şimdi Klein-Gordon denkleminin her iki tarafını  $\frac{1}{2m^*s^2}$  ile bölersek,

$$\left( \frac{m^*s^2}{2} + \frac{\vec{p}^2}{2m^*} \right) \psi(\rho, z) = \frac{1}{2m^*s^2} (\varepsilon + U(\rho, z))^2 \psi(\rho, z) \quad (1.1.c.12)$$

olarak yazarız. Kinetik enerjinin beklenen değerini hesaplayalım,

$$\langle T \rangle = \langle \psi(\rho, z) | \frac{\vec{p}^2}{2m^*} | \psi(\rho, z) \rangle \quad (1.1.c.13)$$

denklem (1.1.b.2) de  $\vec{p}^2$  ifadesini kullanalım. Bu işlemleri yaparken hidrojen atomu dalga fonksiyonunun;

$d \rightarrow \infty$  için üç boyutlu

$d \rightarrow 0$  için ise bir boyutlu yaklaşımları kullanılır.

$d \rightarrow \infty$  ise  $\exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2})$  ifadesini  $\exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2})$  şeklinde alınır.

$d \rightarrow 0$  ise  $\exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2})$  ifadesi yerine  $\exp(-2\lambda|z|)$  ifadesini yazabiliriz.

Bu yaklaşımlar sonunda kinetik enerjinin beklenen değerini hesaplamalar sonunda

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*}(\alpha_{10} + \lambda^2) \quad (1.1.c.14)$$

olarak bulunur.

Şimdi de potansiyel enerjinin beklenen değerini bulalım.

$$\langle V_e \rangle = \langle \psi(\rho, z) | V | \psi(\rho, z) \rangle \quad (1.1.c.15)$$

dir. Bu denklemi açık olarak yazacak olursak,

$$\langle V_e \rangle = \frac{\varepsilon}{m^* s^2} \underbrace{\langle \psi(\rho, z) | U(\rho, z) | \psi(\rho, z) \rangle}_B + \frac{1}{2m^* s^2} \underbrace{\langle \psi(\rho, z) | U(\rho, z) | \psi(\rho, z) \rangle}_C \quad (1.1.c.16)$$

olur. B ifadesinde gerekli işlemler yapılırsa sonucu;

$$B = -\frac{\varepsilon}{m^* s^2} \frac{4\pi e^2 N^2 A}{\chi} \quad (1.1.c.17)$$

olarak buluruz aynı işlemleri C ifadesi için tekrarlırsak,

$$C = \frac{4\pi\lambda N^2 e^4}{m^* s^2 \chi^2} G \quad (1.1.c.18)$$

olur. C ifadesi içerisinde yer alan,

$$\int_0^\infty \frac{\exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2})}{\rho^2 + z^2} dz = 2\lambda G \quad \text{eşitliği yazabiliriz. [1] Burada G integrali hypergeometric}$$

fonksiyonlar türünden ifadesi,

$$G = \int_0^d J_0^2(\alpha_{10}\rho) K_0(2\lambda\rho) {}_1F_2\left(\left\{1\right\}, \left\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \lambda^2 \rho^2\right) \rho d\rho \\ + 2\lambda \int_0^d J_0^2(\alpha_{10}\rho) K_1(2\lambda\rho) {}_1F_2\left(\left\{1\right\}, \left\{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \lambda^2 \rho^2\right) \rho^2 d\rho \quad (1.1.c.19)$$

olarak yazılır.  $[1]_p F_q(\{a\}, \{b, c\}, \{z\})$  genelleştirilmiş hypergeometric fonksiyondur.

$$\int_0^{\infty} \frac{\exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2})}{\rho^2 + z^2} dz = 2\lambda G \text{ eşitliğinin her iki tarafını nümerik olarak hesaplırsak}$$

aşağıdaki tabloda verdiğimiz değerleri elde edilir.

		$\int_0^{\infty} \frac{\exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2})}{\rho^2 + z^2} dz$	$2\lambda G$
$\lambda = 1$	L=1	0.536	0.411
	L=2	0.445	0.266
$\lambda = 0.9$	L=1	0.549	0.392
	L=2	0.460	0.257
$\lambda = 0.8$	L=1	0.563	0.371
	L=2	0.476	0.247

Aradaki bu farkı gidermek için biz şöyle bir denklem öneriyoruz,

G integralini  $G = 2\lambda G_2 + G_1$  olarak ifade edersek,

$$\int_0^{\infty} \frac{\exp(-2\lambda\sqrt{\rho^2 + z^2})}{\rho^2 + z^2} dz = 2\lambda[2\lambda G_2 + (S-1)G_1] \quad (1.1.c.20)$$

Burada S sabit bir sayıdır. Böylece belirli tel genişliği ve  $\lambda$  değerinde S'in ne olması gerektiğini bulabiliyoruz ve iki ifadenin eşitliği sağlanmış olunur.

Potansiyel enerjinin beklenen değerini yazarsak

$$\langle V_e \rangle = B + C$$

$$\langle V_e \rangle = -\frac{\epsilon^2}{m^* s^2} \frac{e^2 4\pi N^2 A}{\chi} + \frac{4\pi \lambda N^2 e^4}{m^* s^2 \chi^2} G \quad (1.1.c.21)$$

olarak bulunur. Enerji ifadesini yazarsak,

$$\left( \frac{\epsilon^2 - m^* s^4}{2m^* s^2} \right) = \left[ \frac{\hbar^2}{2m^*} (\alpha_{10} + \lambda^2) - \frac{\epsilon^2}{m^* s^2} \frac{e^2 4\pi N^2 A}{\chi} + \frac{4\pi \lambda N^2 e^4}{m^* s^2 \chi^2} G \right] \quad (1.1.c.22)$$

elde edilir. Denklem (1.1.c.22) de gerekli işlemler yapılırsa yabancı atom enerjisi,

$$E_i(d) = -m^* s^2 - \frac{4\pi e^2 N^2 A}{\chi} + \sqrt{m^* s^4 + s^2 \hbar^2 (\alpha_{10} + \lambda^2) + \left(\frac{4\pi e^2 N^2 A}{\chi}\right)^2 + \frac{8\pi \lambda N^2 e^4}{\chi^2} G} \quad (1.1.c.23)$$

elde edilir. Hidrojen atomunun bağlanma enerjisi

$$E_b(d) = E_0(d) - E_i(d) \quad (1.1.c.24)$$

ya da açık olarak,

$$E_b(d) = \frac{4\pi N^2 e^2 A}{\chi} + \sqrt{m^* s^4 + s^2 \hbar^2 \alpha_{10}^2} - \sqrt{m^* s^4 + s^2 \hbar^2 (\alpha_{10}^2 + \lambda^2) + \left(\frac{4\pi N^2 e^2 A}{\chi}\right)^2 + \frac{8\pi \lambda N^2 e^4}{\chi^2} G} \quad (1.1.c.25)$$

bulunur.

Enerji ifadesini  $R^*$ (etkin Rydberg enerjisi) ve uzunluğu  $a^*$ (etkin Bohr yarıçapı) cinsinden

yazmak için boyut değişikliği yaparsak  $y = \frac{d}{a^*}$ ,  $\lambda = \lambda a^*$ ,  $\alpha = \alpha_{10} a^*$ ,  $x = \alpha_{10} d = 2.4048$

ve  $\rho = td$   $\gamma = \frac{e^2}{\hbar s \chi}$  GaAs için ( $m^* = 0.067 m_0$ ,  $\chi = 98$ ) dönüşümleri sonucunda bağlanma enerjisi,

$$E_b(y) = \frac{2c}{y f} + \sqrt{\frac{4}{\gamma^4} + \frac{4}{\gamma^2} \alpha^2} - \sqrt{\frac{4}{\gamma^4} + \frac{4}{\gamma^2} (\alpha^2 + \lambda^2) + \frac{4c^2}{y^2 f^2} + \frac{8\lambda c_0 + f_0}{y f}} \quad (1.1.c.26)$$

olarak yazılır. Burada  $c, f, c_0, f_0$  integralleri aşağıda gösterildiği gibidir.

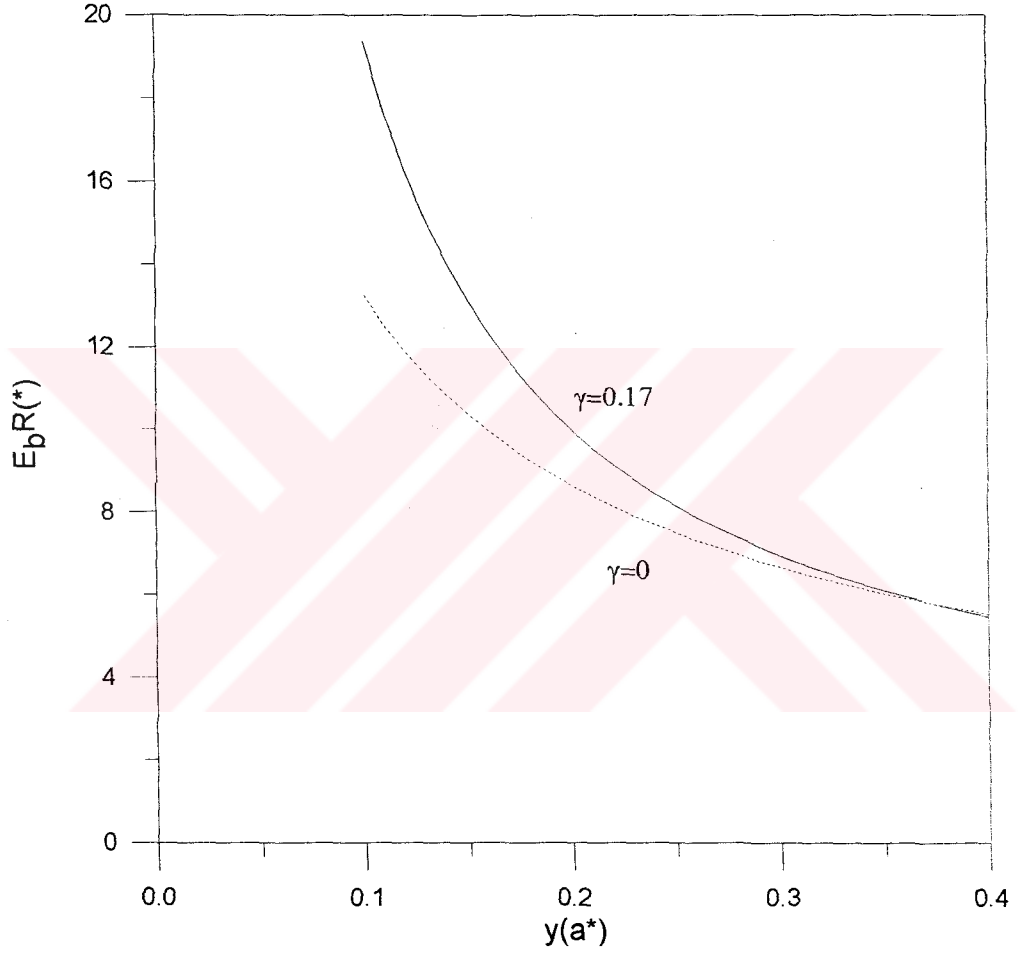
$$c = \int_0^1 J_0^2(xt) K_0(2\lambda yt) dt \quad (1.1.c.27)$$

$$f = \int_0^1 J_0^2(xt) K_1(2\lambda yt) t^2 dt \quad (1.1.c.28)$$

$$c_0 = \int_0^1 J_0^2(xt) K_0(2\lambda yt) {}_1F_2\left(\left\{1\right\}, \left\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \lambda^2 y^2 t^2\right) dt \quad (1.1.c.29)$$

$$f_0 = 2\lambda y \int_0^1 J_0^2(xt) K_1(2\lambda yt) {}_1F_2\left(\left\{1\right\}, \left\{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \lambda^2 y^2 t^2\right) t^2 dt \quad (1.1.c.30)$$

Yabancı atom telin merkezindeyken bağlanma enerjisinin telin genişliğine göre değişimi Şekil 1 de gösterildi. Burada ince tellerde bağlanma enerjisinin telin genişliği arttıkça azaldığını ve belli genişlikten sonra parabolik ( $\gamma = 0.17$ ) ne non-parabolik  $\gamma = 0$  değerlerin aynı olduğunu görüyoruz.



Şekil 1. Bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimi relativistik ( $\gamma = 0.17$  ve non-relativistik  $\gamma = 0$  )

### 1.1.d)Yabancı Atomun Konumuna Bağımlılık

Yabancı atomun  $z=0$  düzlemindeki konumu  $\rho_0$  ise;

$$\psi(\rho, z) = N \int_0^d \int_0^{2\pi} \int_0^\infty J_0(\alpha_{10}\rho) \exp(-2\lambda\sqrt{(\rho-\rho_0)^2 + z^2}) \rho d\rho d\varphi dz \quad \rho < d \quad (1.1.d.1)$$

$$0 \quad \rho \geq d$$

olarak seçebiliriz. (1.1.c) bölümünde yaptığımız gibi normalizasyon sabitini hesaplarsak,

$$N^{-2} = -2\pi \frac{dA'}{d\lambda} \quad (1.1.d.2)$$

burada, A integrali

$$A' = \int_0^d K_0(2\lambda|\rho - \rho_0|) J_0^2(\alpha_{10}\rho) \rho d\rho \quad (1.1.d.3)$$

dir.  $|\rho - \rho_0|$  alınmasının sebebi  $\rho < \rho_0$  ve  $\rho > \rho_0$  değerlerinde dalga fonksiyonunun çok büyük değerlere ulaşip sonsuza gitmesini önlemek içindir. (1.1.c) bölümünde yaptığımız yöntemin aynısını burada uygularsak bağlanma enerjisini

$$E_b'(y) = \frac{2c'}{y f'} + \sqrt{\frac{4}{\gamma^4} + \frac{4}{\gamma^2} \alpha^2} - \sqrt{\frac{4}{\gamma^4} + \frac{4}{\gamma^2} (\alpha^2 + \lambda^2)} + \left(\frac{2c'}{y f'}\right)^2 + \frac{8\lambda}{y} \left(\frac{c_0' + f_0'}{f'}\right) \quad (1.1.d.4)$$

yazabiliriz. Burada  $t_0 = \frac{\rho_0}{d}$  olmak üzere sırasıyla  $c', f', c_0'$  ve  $f_0'$  integralleri,

$$c' = \int_0^1 J_0^2(xt) K_0(2\lambda y|t - t_0|) t dt \quad (1.1.d.5)$$

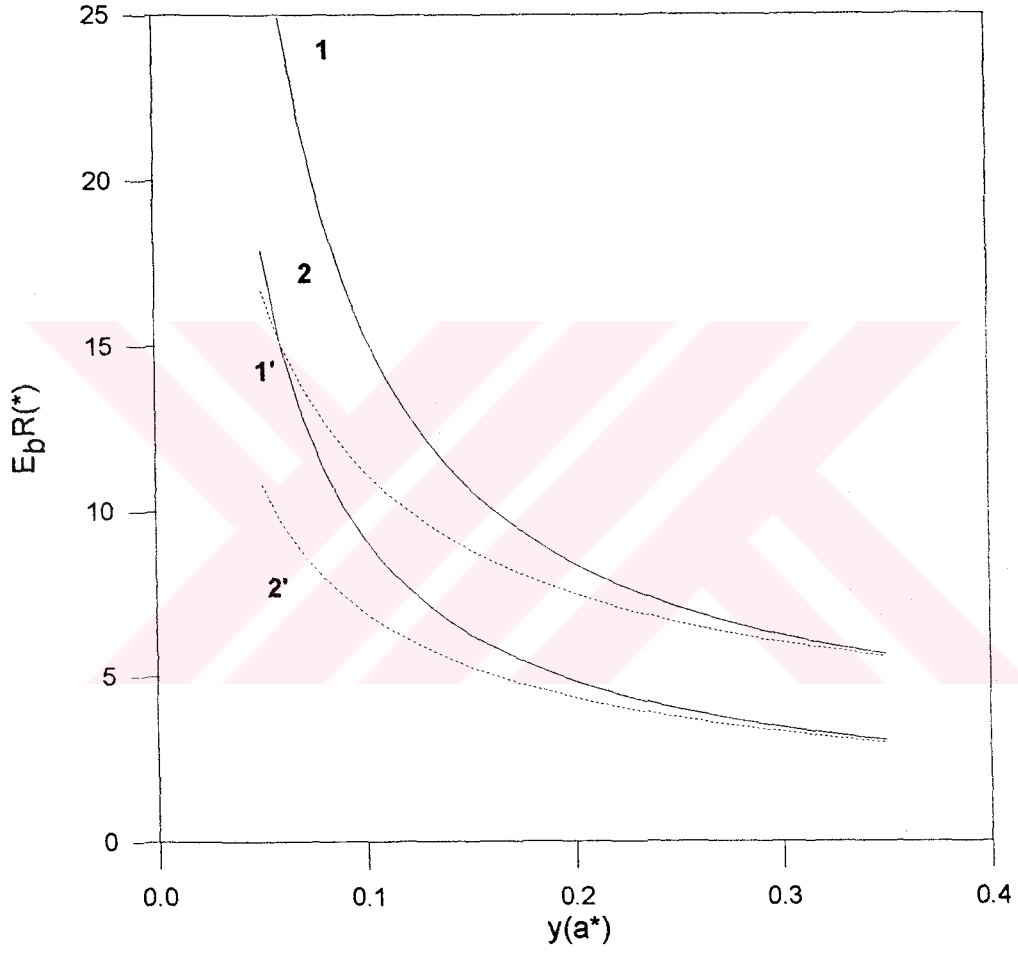
$$f' = \int_0^1 J_0^2(xt) K_1(2\lambda y|t - t_0|) |t - t_0| t dt \quad (1.1.d.6)$$

$$c_0' = \int_0^1 J_0^2(xt) K_0(2\lambda y|t - t_0|) {}_1F_2\left(\{1\}, \left\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \lambda^2 y^2 |t - t_0|^2\right) t dt \quad (1.1.d.7)$$

$$f_0' = \int_0^1 J_0^2(xt) K_1(2\lambda y|t - t_0|) {}_1F_2\left(\{1\}, \left\{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \lambda^2 y^2 |t - t_0|^2\right) |t - t_0| t dt \quad (1.1.d.8)$$

Bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişik yabancı atom konumuna göre değişimini Şekil 2 de gösterildi. Burada 1 ve 2 de ( $\gamma = 0.17$ ), 1 de ( $t_0 = 0.5$ ) 2 de ( $t_0 = 1$ ) 1' ve 2' de ( $\gamma = 0$ ), 1' de ( $t_0 = 0.5$ ) ve 2' de ( $t_0 = 1$ ) olmak üzere gösterilmiştir.





**Şekil 2** Bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişik yabancı atom konumlarında relativistik ve non-relativistik olarak değişimi gösteriyor.

## 2.1.a)Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Silindirik Kuantum Telinde Elektron

Düzgün elektrik alan gören kuantum telinde önce Schrödinger çözümlere bakalım. Elektrik alan yokken ki çözümleri Bölüm 1.1.a) da göstermiştik. x doğrultusunda elektrik alan varlığında Hamilton fonksiyonu,

$$H_1 = H_0 + \eta\rho \cos\phi \quad (2.1.a.1)$$

olarak verilir. [4]

$$H_0 = \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(r) \quad \text{denklem(1.1.2) olarak verilmişti. } V(r)$$

potansiyeli denklem(1.1.1) de tanımlandığı gibidir. Elektronu ait Schrödinger denklemi

$$H_1\psi(\rho, \phi, z) = E_1\psi(\rho, \phi, z) \quad (2.1.a.2)$$

olur Schrödinger denkleminin çözümlerinden deneme dalga fonksiyonu

$$\psi(\rho, \phi, z) = \begin{cases} NJ_0(\alpha_{10}\rho) \exp(-\beta\rho \cos\phi) & \rho < d \\ 0 & \rho \geq d \end{cases} \quad (2.1.a.3)$$

olarak verilir. Burada  $\beta$  elektrik alan parametresidir. [4] denklem(2.1.a.3) deneme dalga fonksiyonu ile Schrödinger denklemi çözülürse  $R^*$  ve  $a^*$  birim sisteminde taban durum enerjisi,

$$E_1 = -\beta^2 - 2\beta \left( \frac{2.4048}{d} \right) \frac{I_1}{I_2} + \eta d \frac{I_3}{I_2} \quad (2.1.a.4)$$

olarak bulunur. Burada  $I_1, I_2$  ve  $I_3$  integalleri sırasıyla,

$$I_1 = \int_0^1 J_0(xt) J_1(xt) \exp(-2\beta dt \cos\phi) t \cos\phi dt \quad (2.1.a.5)$$

$$I_2 = \int_0^1 J_0^2(xt) \exp(-2\beta dt \cos\phi) t dt \quad (2.1.a.6)$$

$$I_3 = \int_0^1 J_0^2(xt) \exp(-2\beta dt \cos\phi) t^2 \cos\phi dt \quad (2.1.a.7)$$

dir.

## 2.1.b) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonuz Silindirik Kuantum Telinde Hidrojen Atomunun Davranışının Schrödinger Denklemi ile Çözümü

Düzgün elektrik alan gören kuantum telinde önce Schrödinger çözümlerine bakalım. Elektrik alan yokken yabancı atom problemi çözümleri Bölüm (1.1.a) de göstermiştik.  $x$  doğrultusunda elektrik alan varlığında ise Hamilton fonksiyonu,

$$H_2 = H_1 - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{(\rho - \rho_0)^2 + z^2}} \quad (2.1.b.1)$$

olur. [4]

Elektrona ait Schrödinger denklemi

$$H_2 \psi(\rho, \varphi, z) = E_2 \psi(\rho, \varphi, z) \quad (2.1.b.2)$$

dir. Çözüm için kullanılan deneme dalga fonksiyonu

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} NJ_0(\alpha_{10}\rho) \exp(-\beta\rho \cos\varphi) \exp(-\lambda\sqrt{(\rho - \rho_0)^2 + z^2}) & \rho < d \\ 0 & \rho \geq d \end{cases} \quad (2.1.b.3)$$

olarak verilir.

Böylece,  $R^*$  ve  $a^*$  birim sisteminde yabancı atom enerjisi,

$$E_2 = \lambda^2 - \beta^2 + \eta d \frac{I_4}{I_7} - 2\beta \left( \frac{2.4048}{d} \right) \left( \frac{I_5}{I_7} \right) - \frac{2 I_6}{d I_7} \quad (2.1.b.4)$$

olarak hesaplanır. Burada sırasıyla,  $I_4, I_5, I_6$  ve  $I_7$  integrallerinde

$$|\vec{\rho} - \vec{\rho}_0| = \sqrt{t^2 + t_0^2 - 2tt_0 \cos\varphi} \quad (2.1.b.5)$$

yazıldı. [5]

$$I_4 = \int_0^{1/2\pi} \int_0^{2\pi} \left[ J_0^2(xt) \exp(-2\beta dt \cos\varphi) K_1(2\lambda d \sqrt{t^2 + t_0^2 - 2tt_0 \cos\varphi}) \right. \\ \left. \right) t^2 \cos\varphi \sqrt{t^2 + t_0^2 - 2tt_0 \cos\varphi} dt d\varphi \quad (2.1.b.6)$$

$$I_5 = \int_0^{1/2\pi} \int_0^{2\pi} \left[ J_0(xt) J_1(xt) \exp(-2\beta dt \cos\varphi) K_1(2\lambda d \sqrt{t^2 + t_0^2 - 2tt_0 \cos\varphi}) \right. \\ \left. \right) t \cos\varphi \sqrt{t^2 + t_0^2 - 2tt_0 \cos\varphi} dt d\varphi \quad (2.1.b.7)$$

$$I_6 = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta dt \cos \varphi) K_0(2\lambda d \sqrt{t^2 + t_0^2 - 2tt_0 \cos \varphi}) t \, dt d\varphi \quad (2.1.b.8)$$

$$I_7 = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta dt \cos \varphi) K_1(2\lambda d \sqrt{t^2 + t_0^2 - 2tt_0 \cos \varphi}) t \sqrt{t^2 + t_0^2 - 2tt_0 \cos \varphi} \, dt d\varphi \quad (2.1.b.9)$$

olarak bulunur. Bağlanma enerjisi  $E_b = E_1 - E_2$  olarak tanımlanır.

Eğer  $\rho < \rho_0$  ve  $\rho > \rho_0$  yaklaşımını yapıp çözümlerimizi  $I_0(2\lambda\rho), I_1(2\lambda\rho)$  Modified Bessel fonksiyonları cinsinden yazsaydık Şekil 6 daki gibi elektrik alan varlığında bağlanma enerji için beklenmedik bir sonuç ortaya çıkıyor. Bu sonuç kare kesitli tel çözümü ile karşılaştırdığımızda uyumsuzluk gösteriyor. Bu uyumsuzluğu çözmek için denklem (2.1.b.5) deki yaklaşımı kullanırsak kare kesitli tel çözümleri ile uyum içinde olduğunu görüyoruz.

### 2.1.c) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonuz Silindirik Kuantum Telinde Relativistik Hidrojen Atomunun Davranışı

Düzgün elektrik alan gören kuantum telinde önce Relativistik çözümlere bakalım. Elektrik alan yokken çözümleri Bölüm (1.1.b) da göstermiştik. ( $x = \rho \cos \varphi$ ) doğrultusunda elektrik alan uygulandığında Klein-Gordon denkleminin çözümlerini inceleyelim. Elektrik alan terimi  $\eta = |e|F$  olarak alınır. Bu durumda genel denklemi yazacak olursak Klein-Gordon denklemi;

$$(m^* s^4 + s^2 \vec{p}^2) \psi(\rho, \varphi, z) = (\varepsilon + \eta \rho \cos \varphi)^2 \psi(\rho, \varphi, z) \quad (2.1.c.1)$$

dir. Burada  $\varepsilon = E_3 + m^* s^2$  alınmıştır. Deneme dalga fonksiyonunu

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} NJ_0(\alpha_{10} \rho) \exp(-\beta \rho \cos \varphi) & \rho < d \\ 0 & \rho \geq d \end{cases} \quad (2.1.c.2)$$

olarak seçebiliriz.  $\vec{p}^2$  operatörünü denklem (1.1.b.2) de tanımlamıştık. Gerekli işlemleri yapılırsa kinetik enerjinin beklenen değerini,

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ (\alpha_{10} - \beta^2) - 2\alpha_{10}\beta \left( \frac{I_8}{I_9} \right) \right] \quad (2.1.c.3)$$

olarak bulunur. Burada  $I_8$  ve  $I_9$  integralleri,

$$I_8 = \int_0^d \int_0^{2\pi} J_0(\alpha_{10} \rho) J_1(\alpha_{10} \rho) \exp(-2\beta \rho \cos \varphi) \cos \varphi \rho d\rho d\varphi \quad (2.1.c.4)$$

$$I_9 = \int_0^d \int_0^{2\pi} J_0^2(\alpha_{10} \rho) \exp(-2\beta \rho \cos \varphi) \rho d\rho d\varphi \quad (2.1.c.5)$$

Aynı işlemleri potansiyel enerjinin beklenen değeri için yaparsak,

$$\langle V_e \rangle = 2\varepsilon \eta \left( \frac{I_{10}}{I_9} \right) + \eta^2 \left( \frac{I_{11}}{I_9} \right) \quad (2.1.c.6)$$

elde edilir. Burada  $I_{10}$  ve  $I_{11}$  integralleri,

$$I_{10} = \int_0^d \int_0^{2\pi} J_0^2(\alpha_{10}\rho) \exp(-2\beta\rho \cos\varphi) \cos\varphi \rho^2 d\rho d\varphi \quad (2.1.c.7)$$

$$I_{11} = \int_0^d \int_0^{2\pi} J_0^2(\alpha_{10}\rho) \exp(-2\beta\rho \cos\varphi) \cos^2\varphi \rho^3 d\rho d\varphi \quad (2.1.c.8)$$

olarak yazılır.  $E_3 = \langle T \rangle + \langle V_e \rangle$  enerji ifadesini düzenlersek,

$$E_3(d) = -m^* s^2 + \eta \left( \frac{I_{10}}{I_9} \right) \quad (2.1.c.9)$$

$$\sqrt{m^{*2} s^4 + s^2 \hbar^2 \left[ \alpha_{10}^2 - \beta^2 - 2\alpha_{10}\beta \frac{I_8}{I_9} \right] + \eta^2 \frac{I_{11}}{I_9} + \eta^2 \left( \frac{I_{10}}{I_9} \right)^2}$$

bulunur.

## 2.1.d) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonuz Silindirik Kuantum Telinde Yabancı Atom Varlığında Hidrojen Atomunun Davranışının Klein-Gordon Denklemi ile Çözümü

Düzgün elektrik alan gören kuantum telinde önce relativistik çözümleri bulalım. Elektrik alan yokken yabancı atom problemi çözümlerini Bölüm (1.1.c) de göstermiştik. x doğrultusunda elektrik alan varlığında Klein-Gordon denklemi,

$$(m^* s^4 + s^2 \bar{p}^2) \psi_1(\rho, \varphi, z) = (\varepsilon + U(\rho, z) + \eta \rho \cos \varphi)^2 \psi_1(\rho, \varphi, z) \quad (2.1.d.1)$$

şeklinde yazılır. burada  $\varepsilon = E_4 + m^* s^2$  dir. x doğrultusunda elektrik alan varlığında deneme dalga fonksiyonunu yazarsak,

$$\psi_1(\rho, \varphi, z) = N J_0(\alpha_{10}) \exp(-\beta \rho \cos \varphi) \exp(-\lambda \sqrt{(\rho - \rho_0)^2 + z^2}) \quad \rho < d \quad (2.1.d.2)$$

olarak yazılır. Burada  $\beta$  elektrik alan parametresi ve  $\lambda$  varyasyon parametresidir. Bölüm (1.1.c) de yaptığımız yaklaşımları burada kullanırsak kinetik enerjinin beklenen değerini,

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \alpha_{10}^2 + \lambda^2 - \beta^2 - 2\alpha_{10}\beta \frac{I_{12}}{I_{13}} \right] \quad (2.1.d.3)$$

olarak hesaplanır. Burada  $I_{12}$  ve  $I_{13}$  integralleri,

$$I_{12} = \int_0^d \int_0^{2\pi} J_0(\alpha_{10}\rho) J_1(\alpha_{10}\rho) \exp(-2\beta\rho \cos \varphi) K_1(2\lambda|\bar{\rho} - \bar{\rho}_0|) |\bar{\rho} - \bar{\rho}_0| \cos \varphi \rho d\rho d\varphi \quad (2.1.d.4)$$

$$I_{13} = \int_0^d \int_0^{2\pi} J_0^2(\alpha_{10}\rho) \exp(-2\beta\rho \cos \varphi) K_1(2\lambda|\bar{\rho} - \bar{\rho}_0|) |\bar{\rho} - \bar{\rho}_0| \rho d\rho d\varphi \quad (2.1.d.5)$$

olarak düzenlenir. Bölüm (2.1.c) de yaptığımız gibi potansiyel enerjinin beklenen değerini hesaplırsak,

$$\langle V_e \rangle = \eta^2 \frac{I_{14}}{I_{13}} - \frac{2\alpha\eta^2}{\chi} \frac{I_{15}}{I_{13}} + 2\varepsilon\eta \frac{I_{16}}{I_{13}} - \frac{2\eta e^2}{\chi} \frac{I_{17}}{I_{13}} + \frac{2\lambda e^4}{\chi^2} \frac{I_{18}}{I_{13}} \quad (2.1.d.6)$$

olarak bulunur.  $E_4(d) = \langle T \rangle + \langle V_e \rangle$  enerjisi

$$\begin{aligned}
E_4(d) = & -\frac{e^2 I_{15}}{\chi I_{13}} + \eta \frac{I_{16}}{I_{13}} - m^* s^2 \\
& + \sqrt{m^* s^2 + s^2 \hbar^2 \left[ \alpha_{10}^2 + \lambda^2 - \beta^2 - 2\beta\alpha_{10} \frac{I_{12}}{I_{13}} \right] + \frac{2\lambda e^4 I_{18}}{\chi^2 I_{13}} + \eta^2 \frac{I_{14}}{I_{13}}} \\
& + \sqrt{-\frac{2\eta e^2 I_{17}}{\chi I_{13}} - \frac{2\eta e^2 I_{15} I_{16}}{\chi I_{13} I_{13}} + \frac{e^4 \left( \frac{I_{15}}{I_{13}} \right)^2}{\chi^2} + \eta^2 \left( \frac{I_{16}}{I_{13}} \right)^2}
\end{aligned} \tag{2.1.d.7}$$

dir. Bağlanma enerjisi

$E_b(d) = E_3(d) - E_4(d)$  olarak tanımlanırsa  $a^*$  ve  $R^*$  birim sisteminde,

$$\begin{aligned}
E_b = & 2y \frac{I_{10}}{I_9} + \frac{2 I_{15}}{y I_{13}} - \eta y \frac{I_{16}}{I_{13}} \\
& + \sqrt{\frac{4}{\gamma^4} + \frac{4}{\gamma^2} \left[ \alpha^2 - \beta^2 - 2\alpha\beta \frac{I_8}{I_9} \right] + \eta^2 y^2 \frac{I_{11}}{I_9} + \eta^2 y^2 \left( \frac{I_{10}}{I_9} \right)^2} \\
& - \sqrt{\frac{4}{\gamma^4} + \frac{4}{\gamma^2} \left[ \alpha^2 + \lambda^2 - \beta^2 - 2\alpha\beta \frac{I_{12}}{I_{13}} \right] + \frac{8\lambda I_{18}}{y I_{13}} + \eta^2 y^2 \frac{I_{14}}{I_{13}}} \\
& - \sqrt{-4\eta \frac{I_{17}}{I_{13}} - 4\eta \frac{I_{15} I_{16}}{I_{13} I_{13}} + \frac{4 \left( \frac{I_{15}}{I_{13}} \right)^2}{y^2} + \eta^2 y^2 \left( \frac{I_{16}}{I_{13}} \right)^2}
\end{aligned} \tag{2.1.d.8}$$

bulunur. Burada,

$$I_8 = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0(xt) J_1(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) \cos \varphi t dt d\varphi \tag{2.1.d.9}$$

$$I_9 = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) t dt d\varphi \tag{2.1.d.10}$$

$$I_{10} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) \cos \varphi t^2 dt d\varphi \tag{2.1.d.11}$$

$$I_{11} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) \cos^2 \varphi t^3 dt d\varphi \tag{2.1.d.12}$$

$$I_{12} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0(xt) J_1(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) K_1(2\lambda y |\vec{r} - \vec{r}_0|) |\vec{r} - \vec{r}_0| \cos \varphi t dt d\varphi \tag{2.1.d.13}$$

$$I_{13} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) K_1(2\lambda y |\bar{t} - \bar{t}_0|) |\bar{t} - \bar{t}_0| t dt d\varphi \quad (2.1.d.14)$$

$$I_{14} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) K_1(2\lambda y |\bar{t} - \bar{t}_0|) |\bar{t} - \bar{t}_0| \cos^2 \varphi t^3 dt d\varphi \quad (2.1.d.15)$$

$$I_{15} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) K_0(2\lambda y |\bar{t} - \bar{t}_0|) t dt d\varphi \quad (2.1.d.16)$$

$$I_{16} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) K_1(2\lambda y |\bar{t} - \bar{t}_0|) |\bar{t} - \bar{t}_0| \cos \varphi t^2 dt d\varphi \quad (2.1.d.17)$$

$$I_{17} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) K_0(2\lambda y |\bar{t} - \bar{t}_0|) \cos \varphi t^2 dt d\varphi \quad (2.1.d.18)$$

$$I_{18} = \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) K_0(2\lambda y |\bar{t} - \bar{t}_0|) F_2\left(\{1\}, \left\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \lambda^2 y^2 |\bar{t} - \bar{t}_0|\right) t dt d\varphi \\ + 2\lambda y \int_0^1 \int_0^{2\pi} J_0^2(xt) \exp(-2\beta yt \cos \varphi) K_1(2\lambda y |\bar{t} - \bar{t}_0|) F_2\left(\{1\}, \left\{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \lambda^2 y^2 |\bar{t} - \bar{t}_0|\right) |\bar{t} - \bar{t}_0| t dt d\varphi \quad (2.1.d.19)$$

Relativistik ve non-relativistik çözümleri kullanarak bağlanma enerji ifadelerini bulduk. Bağlanma enerjinin tel genişliğine göre değişimini relativistik ve non-relativistik olarak karşılaştırdık. Şekil 3 de sabit elektrik alan değerleri altında (yabancı atom merkezde) bağlanma enerjinin tel genişliğine göre değişimini çizdik. Kesikli çizgiler non-relativistik çözümler düz çizgiler relativistik çözümleri gösterir. A ve C de  $F = 0$ , B ve D de ise

$$F = 20 \left( \frac{kV}{cm} \right)$$

Şekil 3 1) da ince kesitli silindirik sonsuz kuantum telinde relativistik ve non-relativistik çözümler karşılaştırıldı. Kesikli çizgiler non-relativistik çözümler düz çizgiler relativistik çözümleri gösterir. Relativistik ve non-relativistik çözümde üstteki sonuçlar  $F = 0$

için, alttaki sonuçlar  $F = 200 \left( \frac{kV}{cm} \right)$  içindir. Çok dar tellerde relativistik çözümde bağlanma

enerjisi daha büyük bulunmakta Bohr yarıçapına yakın değerlerden sonra daha küçük olmaktadır.

Şekil 4 de sabit tel genişliğinde ( $y=2a^*$ ) bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişimini (yabancı atom merkezde) relativistik ve non-relativistik çözümleri karşılaştırdık. Kesikli çizgiler non-relativistik düz çizgiler relativistik çözümleri gösterir.

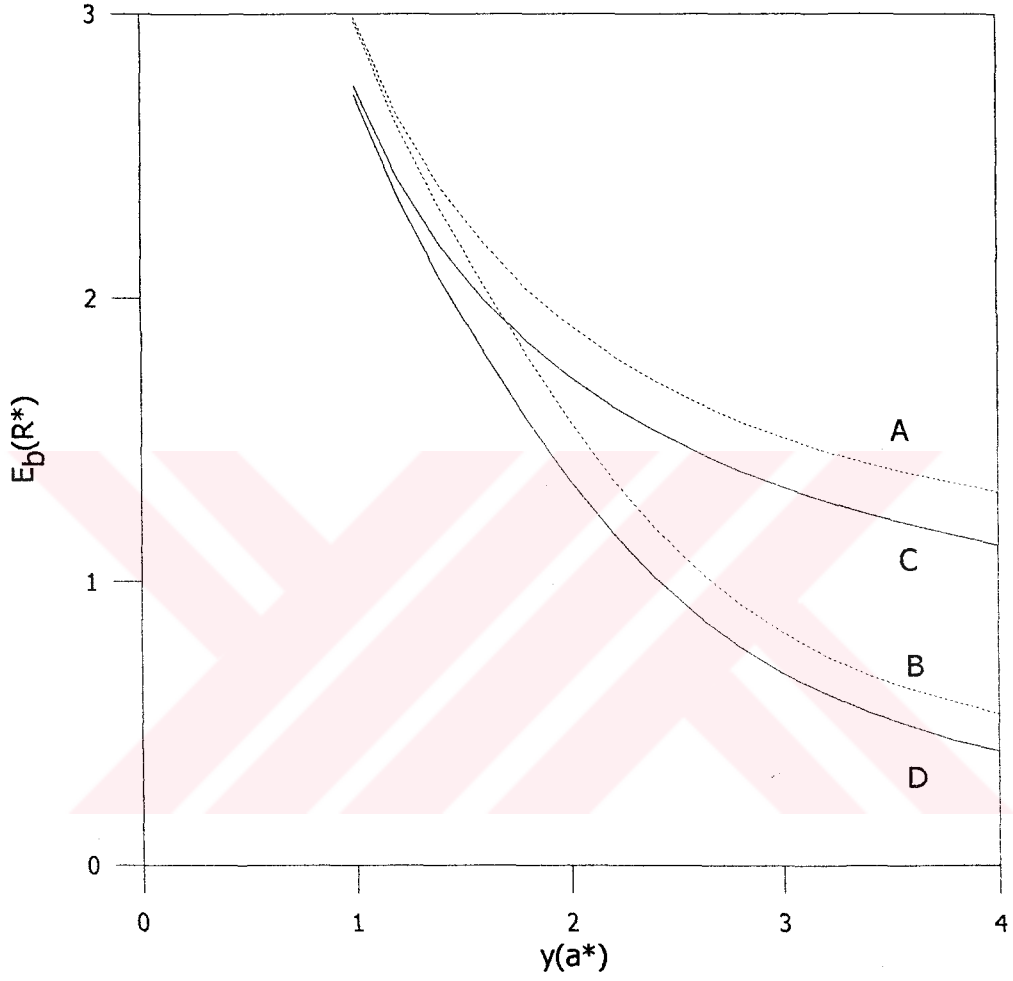
Şekil 4 1) da ince kesitli silindirik sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişimini tel genişliği  $y=0.35a^*$  (A ve B ) ve  $y=0.5a^*$  (C ve D) için incelenmiştir.  $y=0.35a^*$  için relativistik çözümün bağlanma enerjisi büyük,  $y=0.5a^*$  için daha küçük olduğu gösterilmiştir.

Şekil 5 de ise sabit tel genişliğinde ve elektrik alan altında bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişimini çizdik. A ve C de  $F = 0$ , B ve D ise  $F = 20 \left( \frac{kV}{cm} \right)$  olarak seçilmiştir. Kesikli çizgiler non-relativistik düz çizgiler relativistik çözümleri gösterir.

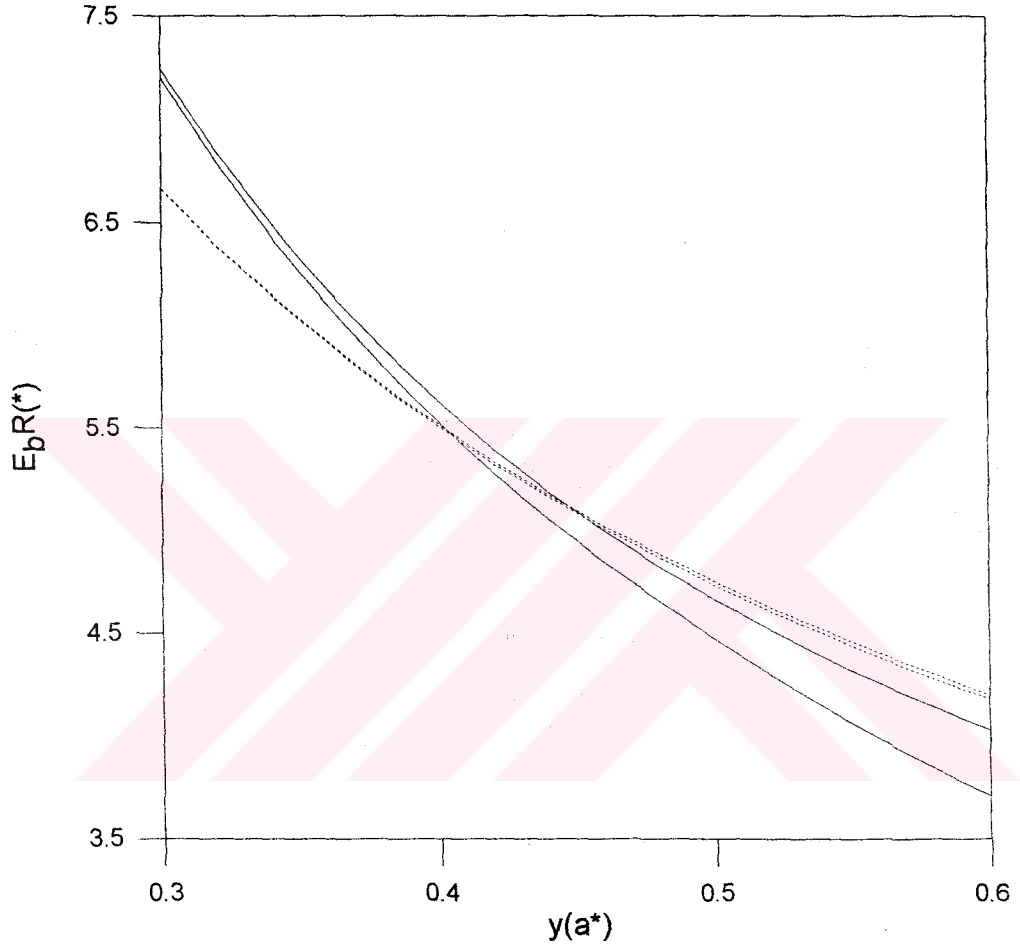
Şekil 5 1) da ise bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişimi  $0.5a^*$  tel genişliğinde A ve C de  $F = 0$ , B ve D de  $F = 200 \left( \frac{kV}{cm} \right)$  değerlerine incelenmiştir.

Şekil 6 da Kesikli çizgiler non-relativistik düz çizgiler relativistik çözümleri gösterir.

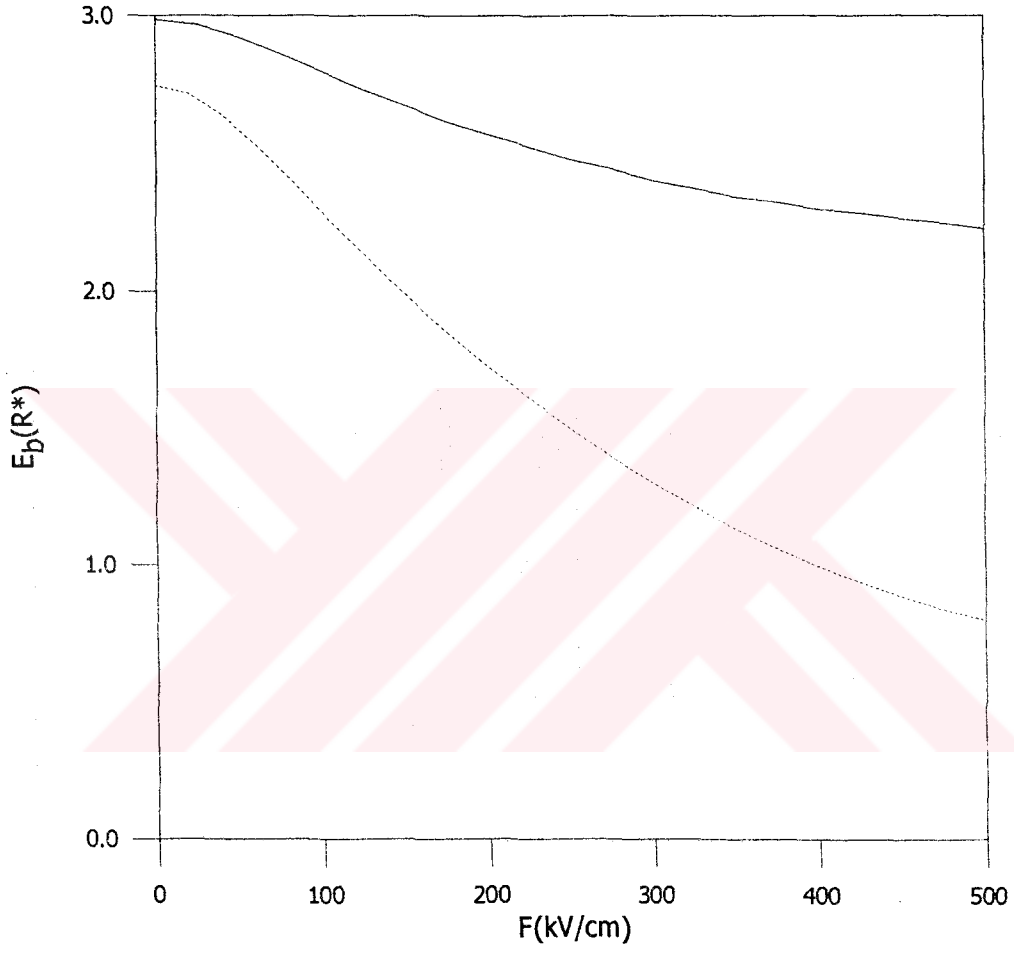
Burada Şekil 5 deki çözümlerle aynı sonuçları bulmayı beklerken A durumunda ( $F = 20 \left( \frac{kV}{cm} \right)$ ) kare kesitli tel yapıdan farklı sonuç veriyor. [4] Burada D de olduğu gibi bir karakter bekliyorduk. Bu farklılık  $\rho < \rho_0$  ve  $\rho > \rho_0$  yaklaşımı sonucu denklemleri  $I_0(2\lambda\rho), I_1(2\lambda\rho)$  Modifiye Bessel denklemleri ile ifade etmemizden ortaya çıkıyor. Bu farklılığı ortadan kaldırmak için Şekil 5 de denklem (2.1.b.5) yaklaşımını kullandık. B ve C de  $F = 0$ , A ve D ise  $F = 20 \left( \frac{kV}{cm} \right)$  olarak seçilmiştir. Tel genişliği Şekil 5 ile aynı alınmıştır.



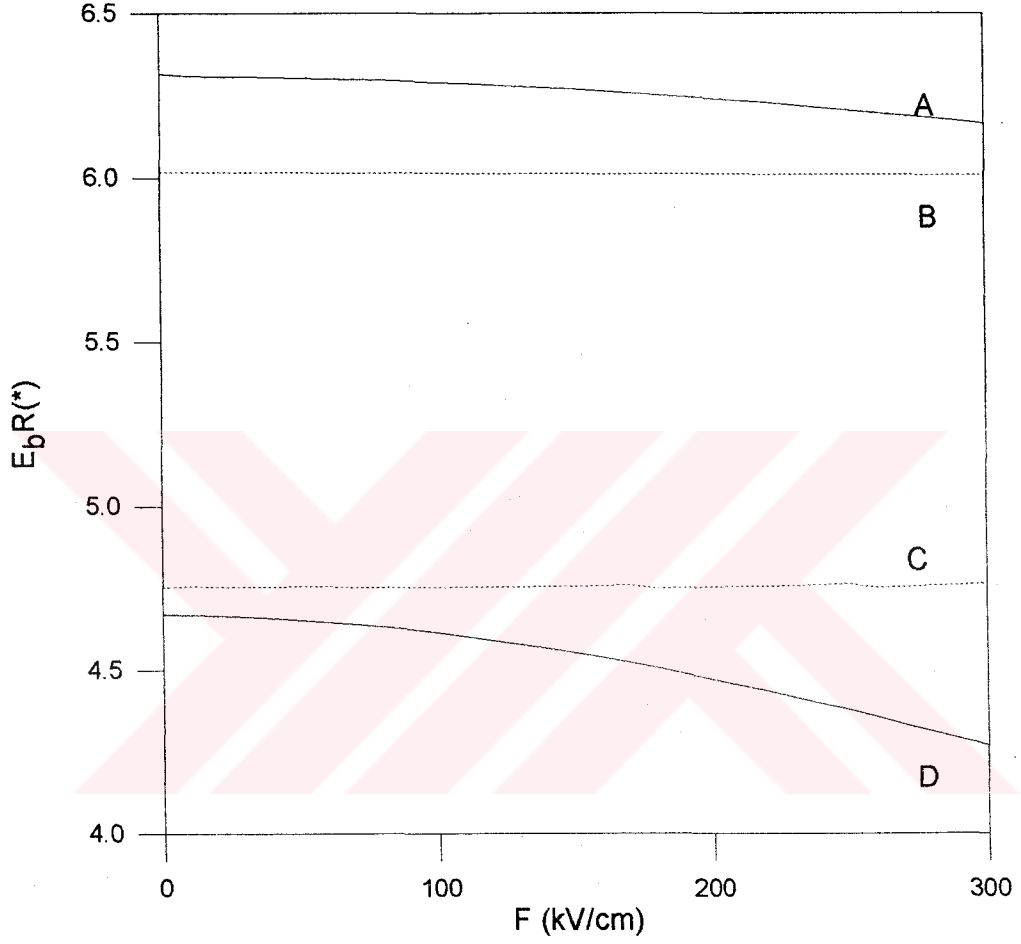
**Şekil 3** Silindirik sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin telin genişliğine göre değişiminin relativistik ve non- relativistik olarak karşılaştırılması.



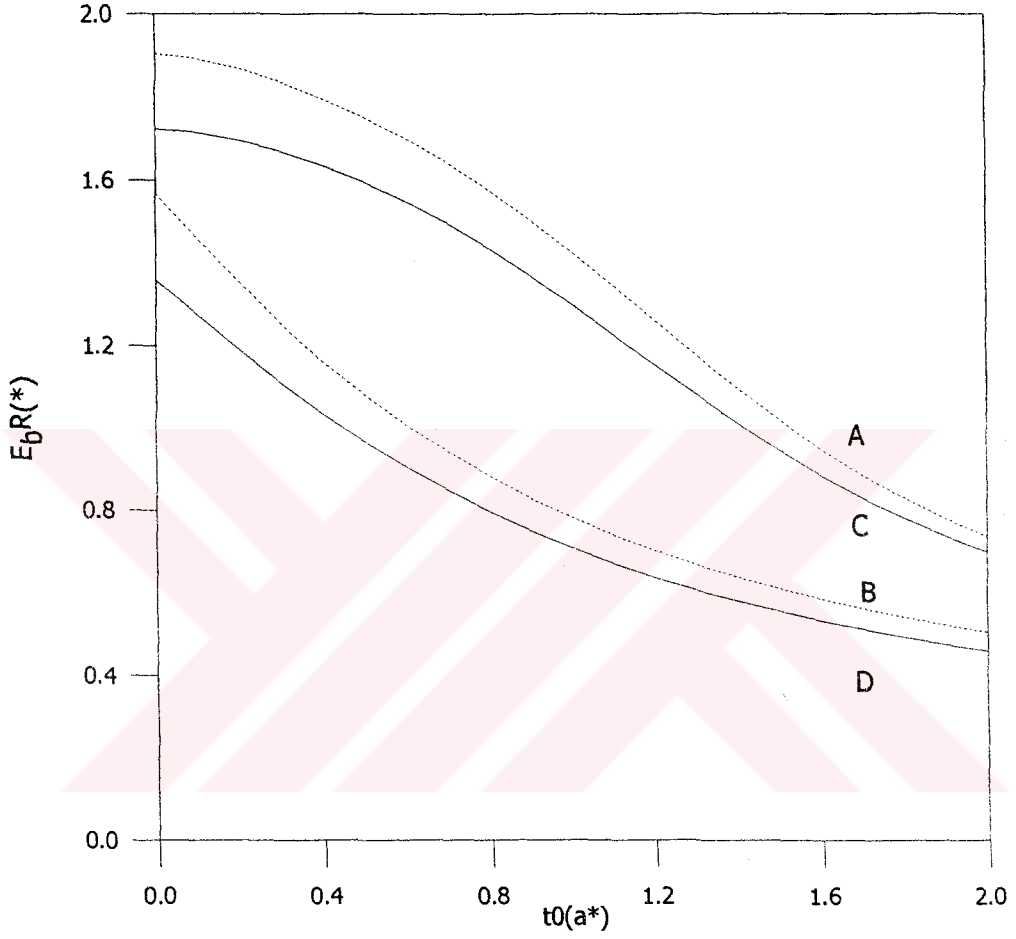
**Şekil 3 1)** İnce kesitli silindirik sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin telin genişliğine göre değişiminin relativistik ve non- relativistik olarak karşılaştırılması.



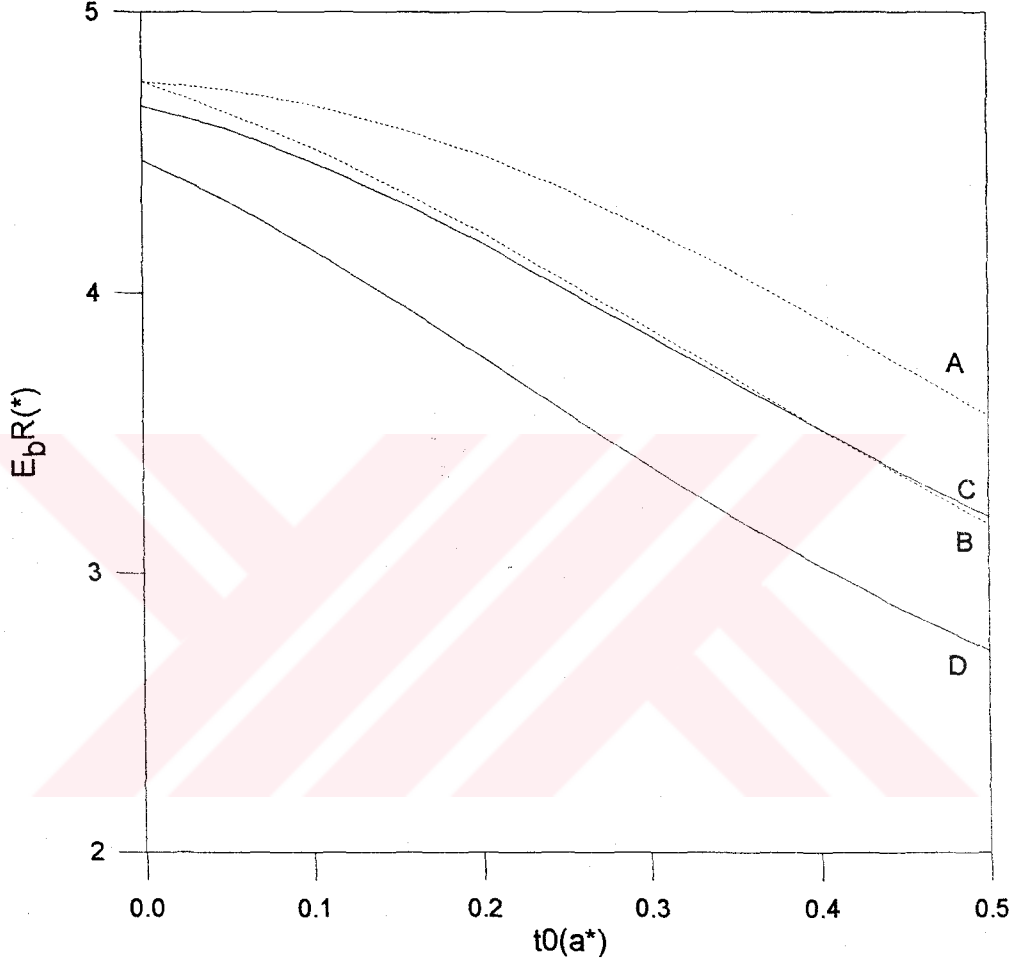
**Şekil 4** Silindirik sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişiminin relativistik ve non-relativistik karşılaştırılması.



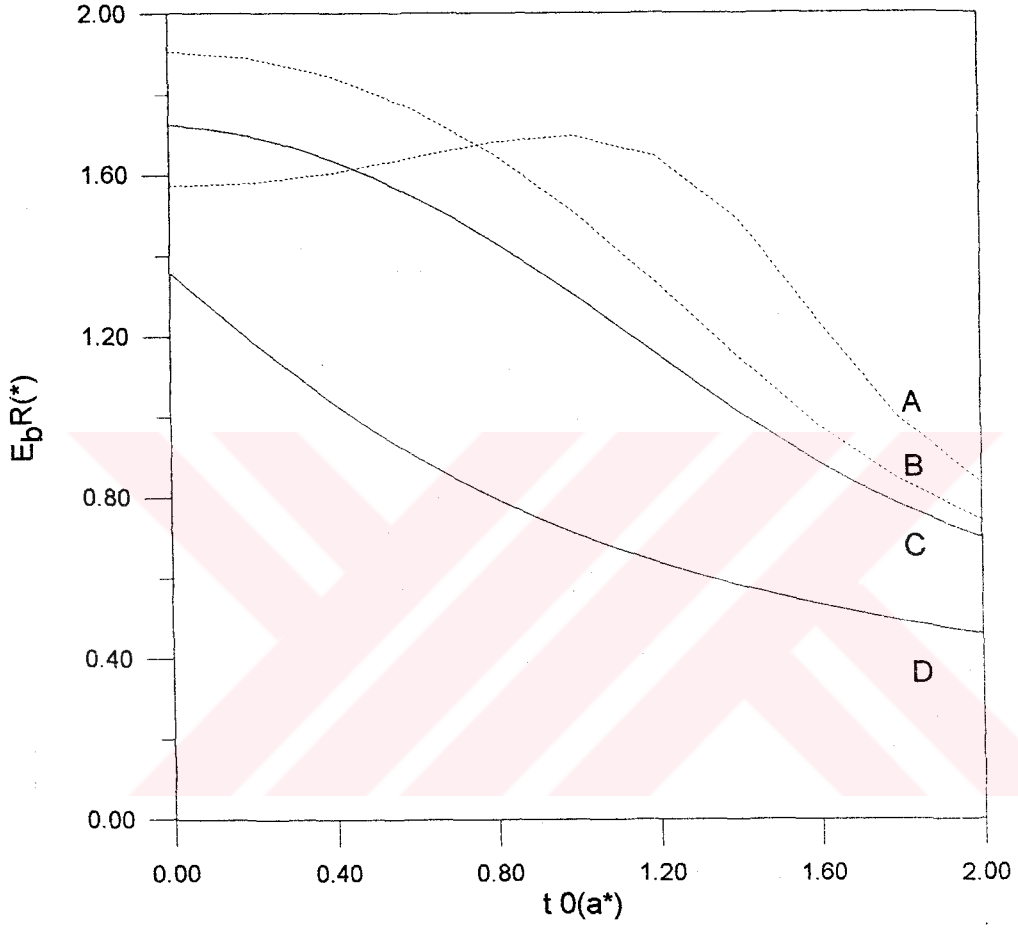
**Şekil 4 1)** İnce kesitli silindirik sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişiminin relativistik ve non-relativistik karşılaştırılması.



**Şekil 5** Silindirik sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişiminin relativistik ve non-relativistik karşılaştırılması.



Şekil 5 1) İnce kesitli silindirik sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişiminin relativistik ve non-relativistik karşılaştırılması.



**Şekil 6.**Relativistik ve non-relativistik çözüm kullanılarak bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişimi.

## 2.2.a) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Kare Kesitli Kuantum Telinde Schrödinger Denklemi ile Hidrojen Atomunun Davranışının Belirlenmesi

Taban durumda tele düzgün elektrik alan gören kuantum telinde önce non-relativistik çözümlere bakalım. Elektrik alanı  $x$  doğrultusunda uygularsak Schrödinger denkleminin çözümlerine bakalım. Burada  $(x \cos \theta + y \sin \theta)$  elektrik alanın kare telde genel ifadesidir. Biz sadece  $x$  doğrultusunda uyguluyoruz. Silindirik çözümlerde bir boyutta elektrik alan uygulamıştık kare çözümlerde de bir boyutta elektrik alan uyguluyoruz. ( $x$  doğrultusunda) Elektrik alan terimi  $\eta = |e|F$  olarak alınır. Bu durumda Schrödinger denklemi,

$$-\left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] + V(x, y) + \eta(x \cos \theta + y \sin \theta) \right\} \psi(x, y) = E_0 \psi(x, y) \quad (2.2.a.1)$$

burada potansiyel [6]

$$V(x, y) = \begin{cases} \infty & x, y \geq \left| \frac{L_{x,y}}{2} \right| \\ 0 & x, y \leq \left| \frac{L_{x,y}}{2} \right| \end{cases} \quad (2.2.a.2)$$

Hamilton fonksiyonu,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \eta(x \cos \theta + y \sin \theta) \quad (2.2.a.3)$$

olarak tanımlanır. Dalga fonksiyonunu,

$$\psi(x, y) = \cos \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi y}{L_y} \exp(-\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) \quad (2.2.a.4)$$

şeklinde yazılır. Burada  $L_x$  ve  $L_y$ , telin genişliğidir. Kare tel olduğu için  $L_x = L_y = L$  olarak yazılabilir. Elektronun dış elektrik alan altında enerjisini,

$$E_0 = \frac{\langle \psi(x, y) | H_0 | \psi(x, y) \rangle}{\langle \langle \psi(x, y) | | \langle \psi(x, y) | \rangle} \quad (2.2.a.5)$$

denklemi ile buluruz. Gerekli işlemler sonucunda,

$$E_0 = \frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} - \beta^2 - 2\beta\pi \left( \frac{\cos\theta}{L_x} \frac{A}{B} + \frac{\sin\theta}{L_y} \frac{C}{B} \right) + \eta \cos\theta \frac{D}{B} + \eta \sin\theta \frac{E}{B} \quad (2.2.a.6)$$

olarak bulunur. Buradaki integralleri sırasıyla,

$$A = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \sin \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta)) dx dy \quad (2.2.a.7)$$

$$B = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta)) dx dy \quad (2.2.a.8)$$

$$C = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \sin \frac{\pi y}{L_y} \cos \frac{\pi y}{L_y} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta)) dx dy \quad (2.2.a.9)$$

$$D = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta)) x dx dy \quad (2.2.a.10)$$

$$E = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta)) y dx dy \quad (2.2.a.11)$$

olarak yazılırlar.

## 2.2.b) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Kare Kesitli Kuantum Telinde Schrödinger Denklemi ile Yabancı Atom Varlığında Hidrojen Atomunun Davranışının Belirlenmesi

Taban durumunda tele düzgün elektrik alan gören kuantum telinde önce non-relativistik çözümlere bakalım. Elektrik alanı x doğrultusunda(  $\theta$  elektrik alanının tel eksenine ile yaptığı açı)uygularsak Schrödinger denkleminin çözümlerine bakalım. Silindirik çözümlerde bir boyutta elektrik alan uygulamıştık kare çözümlerde de bir boyutta elektrik alan uyguluyoruz.(x doğrultusunda) Elektrik alan terimi  $\eta = |e|F$  olarak alınır. Schrödinger denklemi,

$$\left( - \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(x, y) + U(x, y, z) + \eta(x \cos \theta + y \sin \theta) \right\} \psi(x, y, z) = E_1 \psi(x, y, z) \right) \quad (2.2.b.1)$$

[4] Coulomb potansiyeli,

$$U(x, y, z) = \frac{-e^2}{\chi \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2}} \quad (2.2.b.2)$$

Burada  $x_i, y_i$  yabancı atomun konumunu belirtir. Bu durumda hamilton fonksiyonu,

$$H_1 = H_0 - \frac{-e^2}{\chi \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2}} \quad (2.2.b.3)$$

[14] olarak tanımlanır. Deneme dalga fonksiyonunu,

$$\psi_1(x, y, z) = N \cos \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi y}{L_y} \exp(-\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) \exp(-\lambda \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2}) \quad (2.2.b.4)$$

olarak seçilir.

$$E_1 = \frac{\langle \psi_1(x, y, z) | H_1 | \psi_1(x, y, z) \rangle}{\langle \psi_1(x, y, z) | \psi_1(x, y, z) \rangle} \quad (2.2.b.5)$$

$$E_b = E_0 - \min_{\lambda} \frac{\langle \psi_1(x, y, z) | H_1 | \psi_1(x, y, z) \rangle}{\langle \psi_1(x, y, z) | \psi_1(x, y, z) \rangle}$$

bulunur. Bölüm (2.2.a) da yaptığımız işlemleri burada yaparsak yabancı atomun taban durumdaki enerjisi,

$$E_1 = \frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} + \lambda^2 - \beta^2 - 2\beta\pi \left( \frac{\cos\theta}{L_x} \frac{A'}{B'} + \frac{\sin\theta}{L_y} \frac{C'}{B'} \right) + \eta \cos\theta \frac{D'}{B'} + \eta \sin\theta \frac{E'}{B'} - 2 \frac{F'}{B'} \quad (2.2.b.6)$$

olarak bulunur. Sırasıyla integralleri yazarsak,

$$A' = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \sin \frac{\pi x}{L_x} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta))}{\exp(-2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})} dx dy dz \right] \quad (2.2.b.7)$$

$$B' = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta))}{\exp(-2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})} dx dy dz \right] \quad (2.2.b.8)$$

$$C' = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi y}{L_y} \sin \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta))}{\exp(-2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})} dx dy dz \right] \quad (2.2.b.9)$$

$$D' = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta))}{\exp(-2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})} x dx dy dz \right] \quad (2.2.b.10)$$

$$E' = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta))}{\exp(-2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})} y dx dy dz \right] \quad (2.2.b.11)$$

$$F' = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos\theta + y \sin\theta)) \exp(-2\lambda\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} dx dy dz \right] \quad (2.2.b.12)$$

Bağlanma enerjisini,  $E_b = E_0 - E_1$  olarak tanımlamıştık. Bağlanma enerjisini hesaplamak için varyasyon yöntemini kullanıyoruz.

## 2.2.c) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Kare Kesitli Kuantum Telinde Relativistik Hidrojen Atomunun Davranışı

Tele Düzgün elektrik alan gören kuantum telinde önce Relativistik çözümlere bakalım. Elektrik alanı  $(x \cos \theta + y \sin \theta)$  doğrultusunda uygularsak Klein-Gordon denkleminin çözümlerine bakalım. Silindirik çözümlerde bir boyutta elektrik alan uygulamıştık kare çözümlerde de bir boyutta elektrik alan uyguluyoruz.(x doğrultusunda) Elektrik alan terimi  $\eta = |e|F$  olarak alınır. Bu durumda genel denklemi yazacak olursak Klein-Gordon denklemi;

$$(m^* s^4 + s^2 \bar{p}^2) \psi(x, y) = (\varepsilon + \eta(x \cos \theta + y \sin \theta))^2 \psi(x, y) \quad (2.2.c.1)$$

olur. Kartezyen koordinatlarda  $\bar{p}^2$  operatörü,

$$p^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (2.2.c.2)$$

dir.  $\varepsilon$  ve N sabitleri bölüm (2.1.c) de tanımlandı. Deneme dalga fonksiyonunu,

$$\psi(x, y) = N \cos \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi y}{L_y} \exp(-\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) \quad (2.2.c.3)$$

olarak alınır. [4]

Matematiksel işlemler sonucunda kinetik enerjinin beklenen değerini,

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} - \beta^2 - 2\beta\pi \left( \frac{\cos \theta}{L_x} \frac{I_{19}}{I_{20}} + \frac{\sin \theta}{L_y} \frac{I_{21}}{I_{20}} \right) \right] \quad (2.2.c.4)$$

bulunur.  $L_x$  ve  $L_y$  sonsuz kare telin kenar uzunluklarıdır. Sırasıyla  $I_{19}$ ,  $I_{20}$ ,  $I_{21}$  integralleri,

$$I_{19} = \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \sin \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) dx dy \quad (2.2.c.5)$$

$$I_{20} = \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) dx dy \quad (2.2.c.6)$$

$$I_{21} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi y}{L_y} \sin \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) dx dy \quad (2.2.c.7)$$

olarak bulunur.

Kinetik enerjinin beklenen değerini hesaplarken yaptığımız işlemlerin aynısını potansiyel enerjinin beklenen değeri için de yaparsak

$E_0 = \langle T \rangle + \langle V_e \rangle$  enerji ifadesini,

$$E_0 = \eta \cos \theta \frac{I_{25}}{I_{20}} + \eta \sin \theta \frac{I_{26}}{I_{20}}$$

$$\left[ m^* s^4 + s^2 \hbar^2 \left[ \frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} - \beta^2 - 2\beta \pi \left( \frac{\cos \theta}{L_x} \frac{I_{19}}{I_{20}} + \frac{\sin \theta}{L_y} \frac{I_{21}}{I_{20}} \right) \right] \right. \quad (2.2.c.8)$$

$$+ \eta^2 \cos^2 \theta \frac{I_{22}}{I_{20}} + \eta^2 \sin^2 \theta \frac{I_{23}}{I_{20}} + 2\eta^2 \cos \theta \sin \theta \frac{I_{24}}{I_{20}} + \eta^2 \cos^2 \theta \left( \frac{I_{25}}{I_{20}} \right)^2$$

$$\left. + \eta^2 \sin^2 \theta \left( \frac{I_{26}}{I_{20}} \right)^2 + 2\eta^2 \cos \theta \sin \theta \frac{I_{25}}{I_{20}} \frac{I_{26}}{I_{20}} \right]$$

bulunur. Sırasıyla integraller,

$$I_{22} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) x^2 dx dy \quad (2.2.c.9)$$

$$I_{23} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) y^2 dx dy \quad (2.2.c.10)$$

$$I_{24} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) xy dx dy \quad (2.2.c.11)$$

$$I_{25} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) x dx dy \quad (2.2.c.12)$$

$$I_{26} = \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) y dx dy \quad (2.2.c.13)$$



## 2.2.d) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonuz Kare Kesitli Kuantum Telinde Yabancı Atom Varlığında Hidrojen Atomunun Davranışının Klein-Gordon Denklemi ile Çözümü

Düzgün elektrik alan gören kuantum telinde önce relativistik çözümlere bakalım. Elektrik alan yokken yabancı atom problemi çözümleri Bölüm (2.2.c) de göstermiştik. Elektrik alan varlığında Klein-Gordon denklemi,

$$(m^* s^4 + s^2 \vec{p}^2) \psi_1(x, y, z) = (\varepsilon + U(x, y, z) + \eta(x \cos \theta + y \sin \theta))^2 \psi_1(x, y, z) \quad (2.2.d.1)$$

olarak yazılır. Burada  $U(x, y, z)$  coulomb potansiyeli,

$$U(x, y, z) = \frac{-e^2}{\chi \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2}} \quad (2.2.d.2)$$

olarak tanımlanır. Deneme dalga fonksiyonu,

$$\psi_1(x, y, z) = N' \cos \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi y}{L_y} \exp(-\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) \exp(-\lambda \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2}) \quad (2.2.d.3)$$

olarak seçilebilir.  $N'$  normalizasyon sabitidir. Bölüm (2.2.d) de yaptığımız işlemlerin aynılarını burada tekrarlırsak  $E_1$  iyanizasyon enerjisini,

$$E_1 = \eta \cos \theta \frac{I_{33}}{I_{28}} + \eta \sin \theta \frac{I_{34}}{I_{28}} - \frac{e^2 I_{35}}{\chi I_{28}} + \left[ m^* s^4 + s^2 \hbar^2 \left[ \frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} + \lambda^2 - \beta^2 - 2\beta\pi \left( \frac{\cos \theta I_{27}}{L_x I_{28}} + \frac{\sin \theta I_{29}}{L_y I_{28}} \right) \right] + \eta^2 \cos^2 \theta \frac{I_{30}}{I_{28}} + \eta^2 \sin^2 \theta \frac{I_{31}}{I_{28}} + 2\eta^2 \cos \theta \sin \theta \frac{I_{32}}{I_{28}} - \frac{2e^2 \eta \cos \theta I_{36}}{\chi I_{28}} - \frac{2e^2 \eta \sin \theta I_{37}}{\chi I_{28}} + \frac{e^4 I_{38}}{\chi^2 I_{28}} + 2\eta^2 \cos \theta \sin \theta \frac{I_{33} I_{34}}{I_{28} I_{28}} + \frac{e^4}{\chi^2} \left( \frac{I_{35}}{I_{28}} \right)^2 - \frac{2e^2 \eta \cos \theta I_{33} I_{35}}{\chi I_{28} I_{28}} - \frac{2e^2 \eta \sin \theta I_{34} I_{35}}{\chi I_{28} I_{28}} + \eta^2 \cos^2 \theta \left( \frac{I_{33}}{I_{28}} \right)^2 + \eta^2 \sin^2 \theta \left( \frac{I_{34}}{I_{28}} \right)^2 \right] \quad (2.2.d.4)$$

olarak bulunur. Bağlanma enerjisini,

$$E_b = E_1 - E_0 \text{ olarak bölüm (2.1.d) de tanımlamıştık.}$$

İntegraller sırasıyla,

$$I_{27} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \left[ \frac{\sin \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta))}{\exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})} dx dy dz \right] \quad (2.2.d.5)$$

$$I_{28} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta))}{\exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})} dx dy dz \right] \quad (2.2.d.6)$$

$$I_{29} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos \frac{\pi y}{L_y} \sin \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta))}{\exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})} dx dy dz \right] \quad (2.2.d.7)$$

$$I_{30} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta))}{\exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}) x^2} dx dy dz \right] \quad (2.2.d.8)$$

$$I_{31} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta))}{\exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}) y^2} dx dy dz \right] \quad (2.2.d.9)$$

$$I_{32} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta))}{\exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}) xy} dx dy dz \right] \quad (2.2.d.10)$$

$$I_{33} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta))}{\exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}) x} dx dy dz \right] \quad (2.2.d.11)$$

$$I_{34} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta))}{\exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}) y} dx dy dz \right] \quad (2.2.d.12)$$

$$I_{35} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) \exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} dx dy dz \quad (2.2.d.13)$$

$$I_{36} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) \exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} x dx dy dz \quad (2.2.d.14)$$

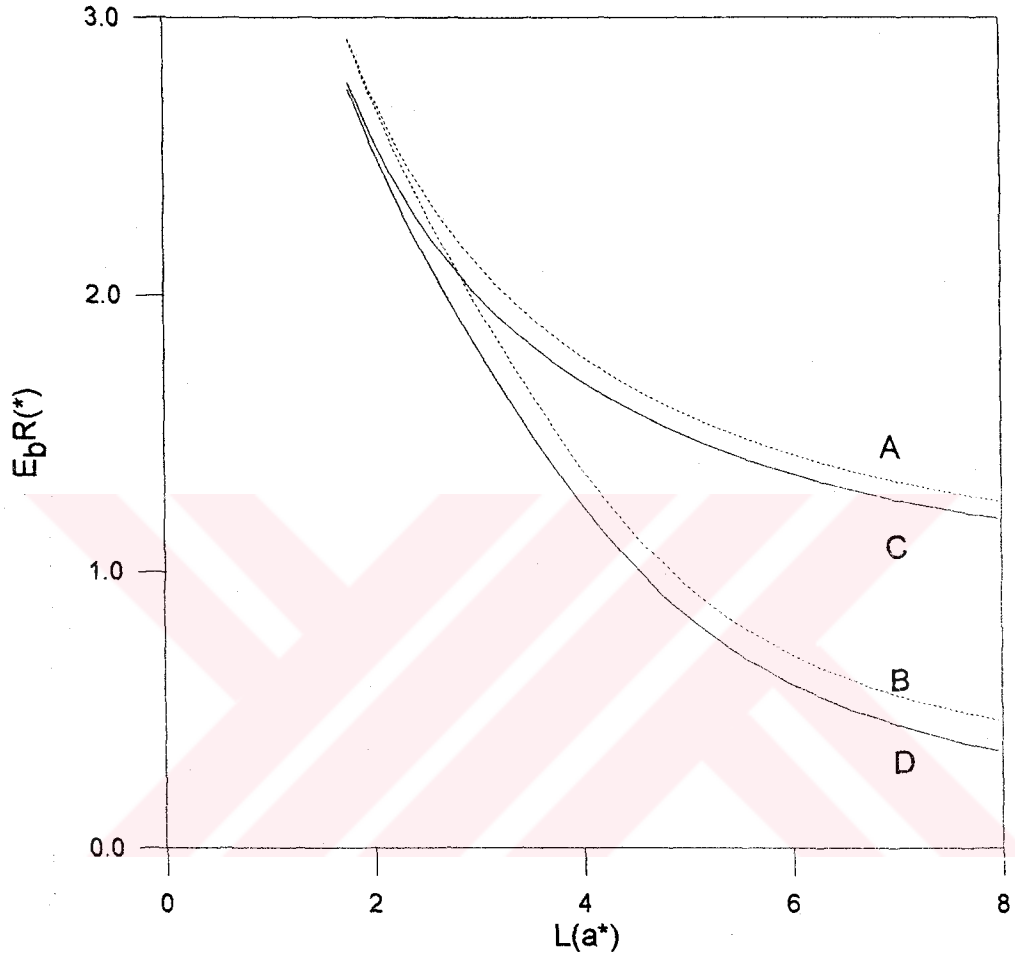
$$I_{37} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) \exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} y dx dy dz \quad (2.2.d.15)$$

$$I_{38} = \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos^2 \frac{\pi x}{L_x} \cos^2 \frac{\pi y}{L_y} \exp(-2\beta(x \cos \theta + y \sin \theta)) \exp(-2\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2})}{((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2)} dx dy dz \quad (2.2.d.16)$$

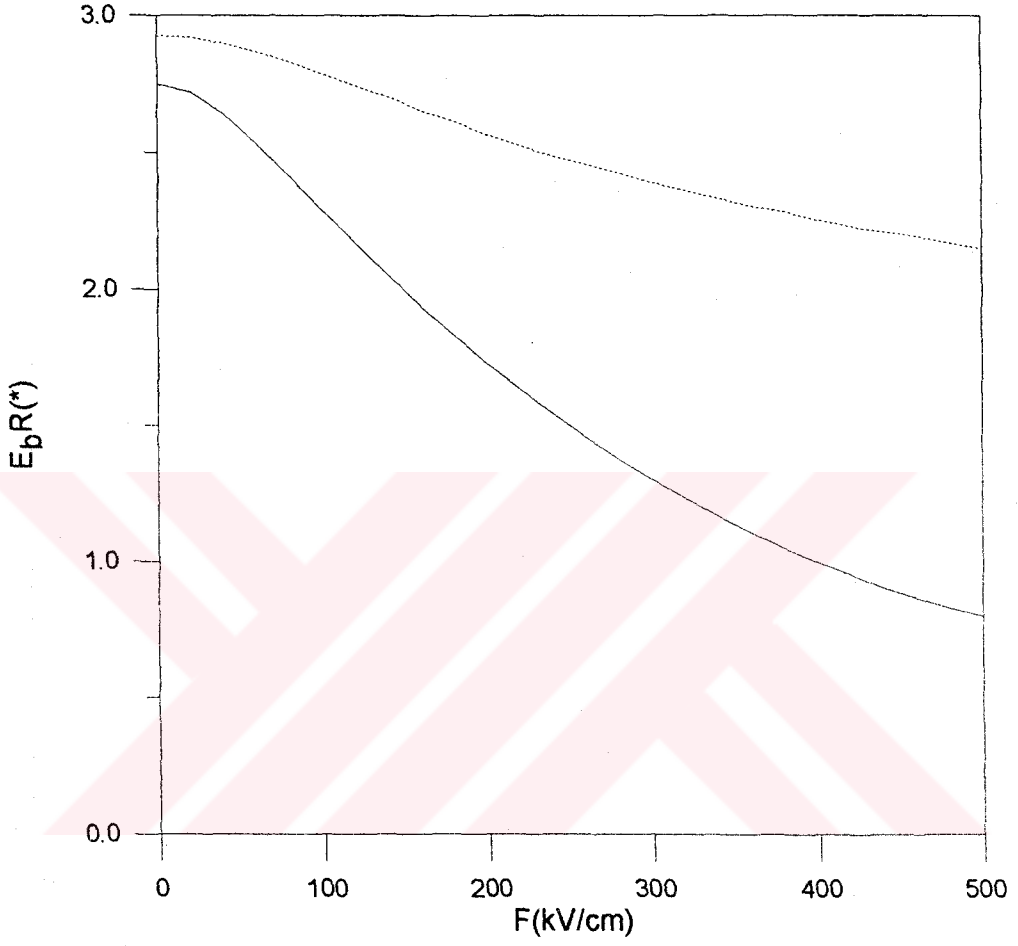
Kare kesitli sonsuz kuantum telinde relativistik ve non-relativistik çözümleri kullanarak bağlanma enerjisi ifadelerini bulduk. Bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimini relativistik ve non-relativistik olarak karşılaştırdık. Şekil 7 de sabit elektrik alan değerleri altında (yabancı atom merkezde) bağlanma enerjisinin tel genişliğine göre değişimini çizdik. Kesikli çizgiler non-relativistik çözümler düz çizgiler relativistik çözümleri gösterir. A ve C de  $F = 0$  , B ve D de ise  $F = 20 \left( \frac{kV}{cm} \right)$

Şekil 8 de sabit tel genişliğinde ( $L = \sqrt{\pi}$ ) bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişimini (yabancı atom merkezde) relativistik ve non-relativistik çözümleri karşılaştırdık. Kesikli çizgiler non-relativistik düz çizgiler relativistik çözümleri gösterir.

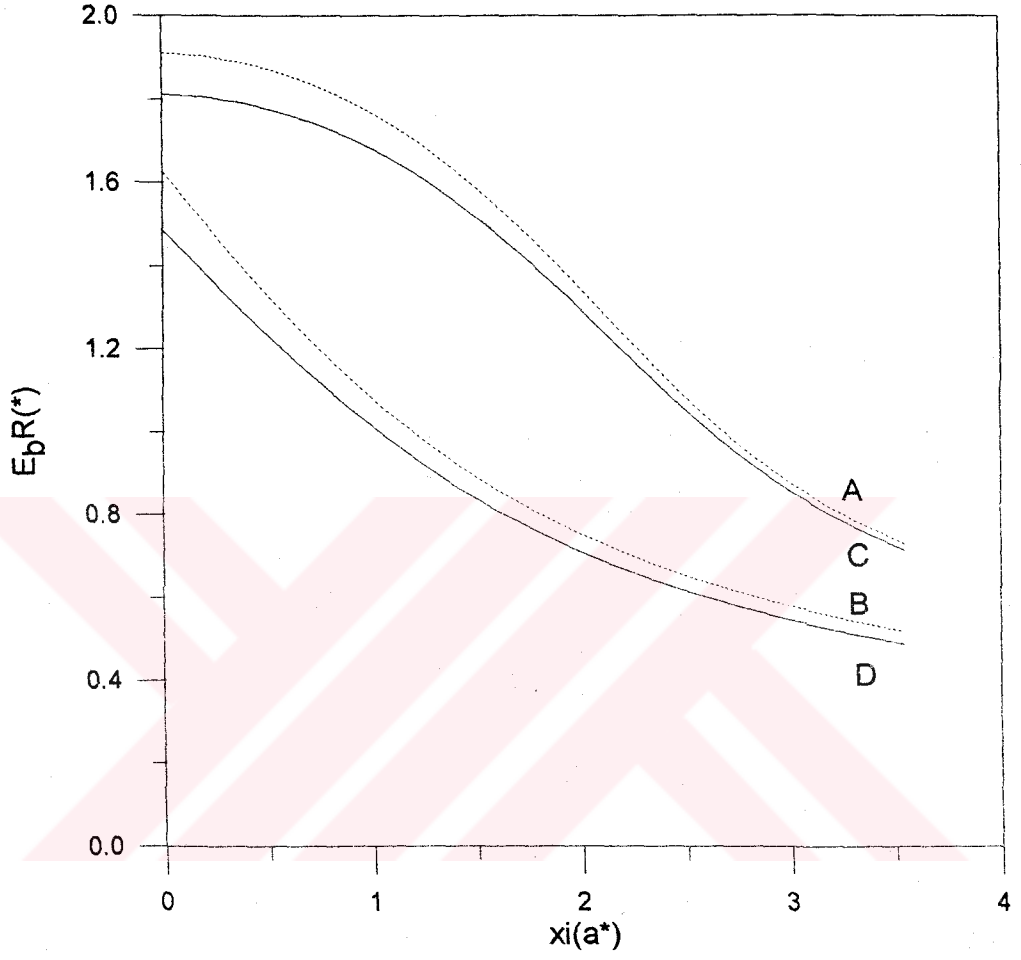
Şekil 9 de ise sabit tel genişliğinde  $L = 2\sqrt{\pi}$  ve elektrik alan altında bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişimini çizdik. A ve C de  $F = 0$ , B ve D ise  $F = 20\left(\frac{kV}{cm}\right)$  olarak seçilmiştir. Kesikli çizgiler non-relativistik düz çizgiler relativistik çözümleri gösterir.



**Şekil 7** Kare kesitli sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin telin genişliğine göre değişiminin relativistik ve non- relativistik olarak karşılaştırılması.



**Şekil 8** Kare kesitli sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişiminin relativistik ve non-relativistik karşılaştırılması.



**Şekil 9** Kare kesitli sonsuz kuantum telinde bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumuna göre değişiminin relativistik ve non-relativistik karşılaştırılması.

## SONUÇ VE TARTIŞMA

Silindirik GaAs kuantum telinde, sistemin taban durum enerjisi ve yabancı atom bağlanma enerjisi relativistik ve non-relativistik olarak araştırılmıştır. Sisteme sonsuz potansiyel uygulanması durumu ele alınmış ve bu durumda sistemin enerjisi incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar önceki çalışmalarla [1] uyum içindedir. Silindirik GaAs kuantum telinin boyutları arttırıldığında, taban durum enerjisi ve yabancı atomun bağlanma enerjisinin her ikisinin birden azaldığı görülmüştür. Bu azalma düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin ortak özelliğidir. Burada tel genişliğinin artması elektronun yabancı atom Coulomb alanını daha az hissetmesine yol açarak bağlanma enerjisini azaltmaktadır. Sisteme elektrik alan uygulanması durumunda, artan elektrik alan şiddeti ile birlikte yabancı atom bağlanma enerjisinin ve taban durum enerjisinin azaldığı görülmektedir. Bu sonuçlar da literatür ile uyum içindedir. [4] Bu azalma daha büyük tel genişlikleri için daha da belirgin hale gelmektedir. Sisteme uygulana elektrik alan polarizasyonda ve taban durum enerjilerinde kaymalara neden olmaktadır. Ayrıca elektrik alan, elektronu yabancı atomdan uzaklaşmaya zorladığı için bağlanma enerjisi azalmaktadır.

Silindirik GaAs kuantum teli için yabancı atomun bağlanma enerjisi, yabancı atom telin merkezinde ve merkezin dışındaki durumlarda Şekil 1 ve Şekil 2 de gösterilmiştir. Bu sonuçlar silindirik kuantum telinin genişliğinin artmasıyla birlikte, yabancı atomun bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir. Sonuçlar [13] ile uyum göstermektedir. Aynı şekilde elektrik alan uyguladığımızda silindirik ve kare kesitli kuantum telinde tel genişliğini arttırdığımızda yabancı atomun bağlanma enerjisinin azaldığı Şekil 3, Şekil 3.1, Şekil 4, Şekil 4.1, Şekil 5, Şekil 5.1, Şekil 6, Şekil 7 Şekil 8 ve Şekil 9 da görülmektedir. Şekil 3, Şekil 3.1, Şekil 4, Şekil 4.1, Şekil 5, Şekil 5.1, Şekil 6, Şekil 7 Şekil 8 ve Şekil 9 de sonsuz silindirik ve kare kesitli kuantum telinde relativistik ve non-relativistik çözümlerle bağlanma enerjisi karşılaştırılmıştır. Sonuçlar [8-9-10-11-12] referansları ile uyum içindedir. Her iki çözümde de yabancı atom merkezde ve merkezin dışındaki durumlarda bağlanma enerjisine bakılmıştır. İnce (Bohr yarıçapından küçük) sonsuz kuantum telinde relativistik çözüm kullanarak bulunan bağlanma enerjisinin daha büyük olduğu görülmüştür. [1]

Buradaki alıřmalar; silindirik ve kare kesitli sonsuz kuantum tellerinde relativistik özüm kullanarak hem elektrik alan hem de manyetik alan varlıęında arařtırılabilir. Tařıyıcı yük olarak eksiton veya bořluk seildięinde enerji durumlarındaki deęiřimler de arařtırılabilir.



## KAYNAKLAR

- [1] AVETİSYAN AA, DJOTYAN AP, KAZARYAN EM, POGHOSYAN BG. Binding energy of hydrogen-like impurities in a thin semiconductor wire with complicated dispersion law Phys. Status solid. B 218 (2) 441-447 2000
- [2] HOROLD N. AND JOHNSON LEE. Relativistik one-dimensional hydrogen atom Am. J. Phys. 53 (3) 1985
- [3] MILTON ABROMOWITZ AND IRENE A. STEGUN Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables National Bureau of standards Applied Mathematics Series 55 1964
- [4] M. ULAŞ, H. AKBAŞ AND MEHMET TOMAK. Shallow donors in a quantum well wire: Electric and geometrical effects. Tr. J. of Physics 22 (1998), 369-375.
- [5] AKTAS S OKAN SE AKBAS H. Electric field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in coaxial  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  quantum well-wires. Superlattice Microst. 30 (3) 129-134 2001
- [6] A. MONTES AND C. A. DUQUE N. PORRAS-MONTENEGRO. The binding energies of shallow donor impurities in GaAs quantum-well wires under applied electric fields. J. Appl. Phys. 81 (12) 1997
- [7] BEKİR KARAOĞLU Kuantum mekaniğine giriş Bilgi tek yayıncılık 1994
- [8] HUY THIEN CAO, D. B. TRAN THOAI Effect of the electric field on a hydrogenic impurity in a quantum-well wire Physica B 205 273-278 1995
- [9] C. A. DUQUE, A. MONTES, A. L. MORALES Binding energy and polarizability in GaAs-(Ga,As)As quantum-well wires Physica B 302-303 (2001) 84-87
- [10] A. MONTES AND C. A. DUQUE N. PORRAS-MONTENEGRO Electric field effects on the states of a donor impurity in rectangular cross-section vacuum/GaAs/vacuum quantum-well wires Journal of Appl. Phys. 84 (3) 1998

- [11] A.MONTES AND C.A.DUQUE N.PORRAS-MONTENEGRO Binding energy of the ground and first few excited states of a shallow-donor impurity in rectangular – cross-sectional area GaAs quantum-well wires under applied electric field. Phys.stat.sol.210 731 1998
- [12] C.A.DUQUE ,A.MONTES , A.L.MORALES ANDN.PORRAS-MONTENEGRO Effects of an applied electric field on the binding energy of shallow donor impurities in GaAs low-dimensional systems J.Phys.Matter 9 (1997) 5977-5987
- [13] A.JOHN PETER,K.NAVANEETHAKRISHNAN Semiconductor-metal transition in a square quantum wire system Physica E 15 (2002)153-158
- [14] D.B.TRAN.THOAI,QUY CUONG NINH AND HUY THIEN CAO Polarizability of a hydrogenic in a quantum-well wire:effect of finite barrier height and nonsquare cross-section Solid State Communications Vol. 104 no.1 11-15 1997

## ÖZGEÇMİŞ

1981 yılında Manisa da doğdum. İlk,orta ve lise öğrenimimi Manisa da tamamladım. 1997 yılında Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girdim ve 2001 yılında mezun oldum. Aynı yıl Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünün açtığı yüksek lisans programına girdim ve aynı yıl Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde araştırma görevlisi olarak göreve başladım.

