

**KUANTUM NOKTALARINDA
GEOMETRİK ETKİLER**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

SERPİL ARDALI

Tez Yöneticisi: Prof. Dr. Ş. Erol OKAN

EDİRNE - 2005

T.C
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM NOKTALARINDA
GEOMETRİK ETKİLER

SERPİL ARDALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Tez yöneticisi: Prof.Dr. Ş. Erol OKAN

2005

EDİRNE

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

**KUANTUM NOKTALARINDA
GEOMETRİK ETKİLER**

SERPİL ARDALI

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

Bu tez / / 2005 tarihinde Aşağıdaki Jüri Tarafından Kabul Edilmiştir.

**Prof.Dr. Ş. Erol OKAN
(Danışman)**

**Prof.Dr. Hasan AKBAŞ
(Üye)**

**Yrd.Doç. Dr. Cengiz DANE
(Üye)**

Yüksek Lisans Tezi
Kuantum Noktalarında Geometrik Etkiler
Trakya Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Hedef, kuantum noktalarının sahip olduğu geometrinin elektron enerjisi üzerindeki etkisinin incelenmesidir. Kübik ve silindirik kuantum noktalarındaki bağlanma enerjisi uygulanan bir dış elektrik alan altında varyasyonel olarak hesaplanmıştır. Sonuçlar farklı geometrilerin karşılaştırılması ile bağlanma enerjisi üzerindeki boyut ve geometrik etkilerin irdelenmesinde kullanılmıştır.

Yıl:2005
Sayfa:60

Anahtar Kelimeler: Kuantum noktaları, yabancı atom bağlanma enerjisi, varyasyonel dalga fonksiyonu

M. S. Thesis
Geometrical Effects in Quantum Dots
Trakya University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

SUMMARY

The scope is the investigation of the effect of the geometry of the quantum dots on the electron energy. The binding energy in cubic and cylindrical quantum dots variationally calculated with the application of an external electric field. The results are used in the explanation of the size and the geometrical effects on the binding energy by comparing the different geometries.

Year:2005
Pages:60

Keywords: Quantum dots, impurity binding energy, variational wavefunction

TEŐEKKÜR

Tez yneticiliđimi stlenerek, alıŐmalarım sırasında tm alıŐma ortamını ve imkanlarını sađlayan, aydınlatıcı bilgilerini esirgemeyen, Trakya niversitesi Fen-Edebiyat Fakltesi Fizik Blm Katıhal Fiziđi Anabilim Dalı BaŐkanı Prof. Dr. Ő. Erol OKAN 'a teŐekkr ederim.

alıŐmalarım esnasında aydınlatıcı bilgilerini ve desteđini esirgemeyen AraŐ. Gr. Ali İhsan MEŐE' ye teŐekkr ederim.

Bu alıŐma sresince gerekli olan tm imkanları sađlayan ve ders aŐamam sırasında emeđi geen Trakya niversitesi Fen-Edebiyat Fakltesi Fizik Blm đretim yelerine teŐekkr ederim

İÇİNDEKİLER

Giriş.....	1
Kuantum Kutuları.....	3
BÖLÜM 1	
1) Küp Biçimli Kuantum Kutusu.....	4
1.1) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Potansiyel Engelli Küp Biçimli Kuantum Kutusu.....	6
1.2) Yabancı Atom Varlığında Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Potansiyel Engelli Küp Biçimli Kuantum Kutusu.....	13
BÖLÜM 2	
2.1)Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Potansiyel Engelli Silindir Biçimli Kuantum Noktası.....	25
2.2)Yabancı Atom Varlığında Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Potansiyel Engelli Silindir Biçimli Kuantum Noktası.....	34
Sonuç ve Tartışma.....	57
Kaynaklar.....	59
Özgeçmiş.....	60

SİMGELER

m^*	Elektronun etkin kütlesi
a_0	Bohr yarıçapı
a^*	Etkin Bohr yarıçapı
R^*	Etkin Rydberg enerjisi
I	Minimizasyon sabiti
Y	Dalga fonksiyonu
e	Dielektrik sabiti
b	Elektrik alan sabiti

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 de bir test alanı oluşturmuşlardır. Ayrıca son yıllarda bu sistemlerin fiziksel özelliklerinden yararlanarak bazı yeni fiziksel kavramlar üstünde araştırmalar ve varsayımlar yapılmaktadır. Düşük boyutlu yarı iletken 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 sınıflandırılma 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 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 tabakanın yerleştirilerek yarıiletken kristal büyütmesi yapılabilmektedir. Bu yolla elde edilen iki boyutlu sistemler kuantum kuyu lazerleri ve yeni diyod ve transistörlerin yapımına öncülük etmiştir. Bir ve sıfır boyutlu yarıiletken sistemlerin fiziksel özelliklerinden yararlanarak yeni uygulamaların yapılması da gündemdedir. Bu uygulamaların başında da kuantum tel ve kuantum kutu lazerleri gelmektedir. Kuantum kutu lazerlerinin henüz ortaya çıkmasına rağmen, kısa zamanda yeni elemanların üretimi için kilit rol oynayacağı umulmaktadır. Kuantum kutuları için önemli bir potansiyel uygulama da kuantum bilgisayarlarıdır.

Günümüzde, nanoteknolojik üretim tekniklerindeki gelişmeler sayesinde geometrileri ve karakteristik boyutları de Broglie dalga boyuyla karşılaştırılabilen kuantum kutularının üretimi mümkündür. Böylece küp, küre veya silindir biçimli kuantum kutuları 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 kutularında geometrik etkiler yabancı atomun enerji öz durumlarını ve bağlanma enerjilerini deęiştirir. Farklı geometrideki kuantum kutularında bu enerji öz durumları ve bağlanma enerjileri de farklıdır. Bundan dolayı geometrik etkiler, kuantum kutularından elde edilen elektronik ve optoelektronik devre elemanlarının çıkış yoğunluklarının ve iletkenliklerinin kontrol edilmesinde ve ayarlanmasında kullanılacak özellikleri ortaya çıkarırlar. Kuantum kutularında elektrik alanın uygulanması, yük taşıyıcılarının dağılımında deęişimlere yol açar. Polarizasyon oluşur ve enerji düzeylerinde kaymalar olur. Kuantum kutularının elektrik alanın uygulanması ile meydana gelen fiziksel özelliklerinden yararlanarak daha iyi devre elemanları geliştirilebilir.

Kuantum kutularının sahip olduęu silindir ve küp biçiminin bir yabancı atom elektronunun enerji öz deęerlerini incelemek , silindirik ve kübik yapıda elektrik alan etkisini irdelemek bu çalışmanın içeriğini oluşturmaktadır.

KUANTUM KUTULARI

Eğer etrafı *GaAlAs* ile çevrelenmiş GaAs içinde iyonize olmuş bir verici atom iyonize edildiğinde elektronunun hareketi her üç boyutta da sınırlanır. Bu sistem GaAs kuantum kutusu olarak adlandırılır.

Bir kuantum kutusu tek bir elektrona veya çok sayıda elektrona sahip olabilir. Kuantum kutularının boyutları ve içerdikleri elektronların sayısı tam olarak kontrol edilebilir. Elektronların sınırlandırılmasından dolayı kuantum kutularındaki enerji seviyeleri atomlarda olduğu gibi kuantize olur. Bu bakımdan kuantum kutularının fiziği, atomik ve nükleer fizikte doğal olarak meydana gelen kuantum olayları ile paralellik gösterir. Bununla birlikte atomlardan farklı olarak kuantum kutuları kolayca elektrotlarla birleştirilebilir ve böylece atomik özelliklerin araştırılmasında mükemmel araçları oluştururlar.

Kuantum kutuları yarı iletken malzemelerden üretilirler ve nanometre mertebesinde boyutlara sahiptirler. Kuantum kutularına yabancı atom katılmasıyla iletkenlik kontrollü bir şekilde değiştirilebilir. Bu katkılama işlemi 4 valanslı atomlardan oluşan yapıya dışarıdan 5 valanslı yabancı atom (verici) eklenmesiyle gerçekleştirilir. 5 valanslı atom sisteme bir elektron verir ve pozitif yüklü iyon haline geçer. Sisteme verilen bu elektron ile geride kalan pozitif yüklü iyon arasında halen bağ enerjisi olmasına rağmen bir dış elektrik alan uygulanmasıyla bu elektron iletkenliğe katkıda bulunur. İletkenliği arttıran verici atomun elektronunun hareketi değişik boyutlarda sınırlandırılabilir. Kuantum kutuları küp, küre veya silindir biçimli olarak üretilirler.

BÖLÜM-1

1. Küp Biçimli Kuantum Kutusu

Şekil 1) Küp Biçimli GaAs Kuantum Kutusu

Şekil 1.1 'deki etrafı *GaAlAs* ile çevrelenmiş küp biçimli GaAs kuantum kutusunu ele alalım. Kutunun merkezinde iyonize olmuş bir verici atomun (donor) bulunduğunu varsayalım. Bu sisteme dışarıdan z doğrultusunda bir elektrik alan uygulandığında sistemin Hamilton fonksiyonu aşağıdaki gibi verilir. (Elangovan vd., 1992)

$$H_1 = H_0 - \frac{e^2}{er} \quad (1.1.1)$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + eFz + V_w \quad (1.1.2)$$

Bu Hamilton fonksiyonundaki $-\frac{\eta^2}{2m^*}\nabla^2$ terimi kinetik enerjii, $\frac{e^2}{er}$ terimi Coulomb etkileşmesini, V_w terimi sınırlayıcı potansiyeli ve eFz terimi ise elektrik alan etkisini göstermektedir. m^* elektron etkin kütlesi, e GaAs için dielektrik sabiti, F uygulanan elektrik alan şiddeti ve V_w sistemin sınırlayıcı engel potansiyeli aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$V_w = \begin{cases} 0 & ; |x| \leq L/2 \\ 0 & ; |y| \leq L/2 \\ 0 & ; |z| \leq L/2 \\ V_0 & ; \text{diğer yerler} \end{cases} \quad (1.1.3)$$

Sistemin enerji öz değerlerini elde etmek için Schrödinger öz değer denkleminin çözülmesi gerekir. Bu enerji öz değerinden yararlanarak verici atomun bağlanma enerjileri elde edilebilir.

1.1) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Potansiyel Engelli Küp Biçimli Kuantum Kutusu

Kübik kuantum kutusuna sonsuz bir potansiyel engelin ($V_0 = \infty$) uygulandığını varsayalım. Kübik kuantum kutusuna dışarıdan z doğrultusunda bir elektrik alan uygulanıyor. Bu durumda Schrödinger denkleminin analitik çözümü güç olduğundan varyasyonel yöntem kullanılır. Varyasyonel yöntemde sistem için bir deneme dalga fonksiyonu alınarak çözüm aranır. Buna göre, varyasyonel yaklaşımda kübik kuantum kutusu için dalga fonksiyonu $\mathcal{Y}_0(x, y, z)$ aşağıdaki gibi seçilir: (Elangovan vd., 1992)

$$\mathcal{Y}_0(x, y, z) = N_0 \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} \quad (1.1.4)$$

Burada N_0 normalizasyon katsayısı ve b varyasyonel parametredir. Normalizasyon katsayısını bulmak için dalga fonksiyonunu bire normalize etmemiz gerekir. Buna göre,

$$\langle \mathcal{Y}_0(x, y, z) | \mathcal{Y}_0(x, y, z) \rangle = N_0^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} dx dy dz = 1$$

$$\langle \mathcal{Y}_0(x, y, z) | \mathcal{Y}_0(x, y, z) \rangle = N_0^2 A_1 = 1$$

$$N_0 = \frac{1}{\sqrt{A_1}} \quad (1.1.5)$$

olarak bulunur. Sistemin enerji öz değerlerini bulmak için Schrödinger öz değer denklemini ($H_0 Y_0 = E_0 Y_0$) çözmemiz gerekir. Buna göre Denklem (1.1.2)' deki Hamilton fonksiyonunu kullanarak;

$$E_0 = \left(\frac{\langle Y_0(x, y, z) | H_0 | Y_0(x, y, z) \rangle}{\langle Y_0(x, y, z) | Y_0(x, y, z) \rangle} \right)_{\min b} \quad (1.1.6)$$

bağlantısı bize sistemin enerji özdeğerini verir. Böylece ,

$$E_0 = \left(\frac{\langle Y_0(x, y, z) | H_0 | Y_0(x, y, z) \rangle}{\langle Y_0(x, y, z) | Y_0(x, y, z) \rangle} \right)_{\min b} = \left\langle -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 \right\rangle + \langle eFz \rangle$$

$$E_0 = T_{11} + T_{12} \quad (1.1.7)$$

olarak yazılabilir. T_{11} ifadesi kartezyen koordinatlarda yazılırsa;

$$T_{11} = \left\langle -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 \right\rangle = -\frac{\eta^2}{2m^*} \langle \nabla^2 \rangle = -\frac{\eta^2}{2m^*} \left(\left\langle \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\rangle \right) \quad (1.1.8)$$

T_{11} ifadesindeki kısmi türevler hesaplanırsa;

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = N_0 \left(-\frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} \right) \quad (1.1.9)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = N_0 \left(-\frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} \right) \quad (1.1.10)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = N_0 \left(\begin{array}{l} -\frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} \\ + 2 \frac{p}{L} b \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} \\ + b^2 \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} \end{array} \right) \quad (1.1.11)$$

Bu türevler T_{11} ' de yerine yazılırsa;

$$T_{11} = -\frac{\eta^2}{2m^*} \left[3 \frac{p^2}{L^2} - b^2 - \frac{2pb}{L} \frac{A_2}{A_1} \right] \quad (1.1.12)$$

olarak hesaplanır. Burada A_2 integrali aşağıdaki gibidir.

$$A_2 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-2bz} dx dy dz \quad (1.1.13)$$

Benzer şekilde T_{12} ifadesi de yazılırsa,

$$T_{12} = \langle eFz \rangle = eF \langle z \rangle \quad (1.1.14)$$

$$T_{12} = eF \frac{A_3}{A_1} \quad (1.1.15)$$

olarak elde edilir. Burada A_3 integrali

$$A_3 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} z \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} dx dy dz \quad (1.1.16)$$

şeklindedir. Sistemin enerji özdeğerleri, bulunan (1.1.12) ve (1.1.15) ifadelerinin (1.1.7) bağıntısında yerine yazılmasıyla elde edilir. Buna göre R^* ve a^* birim sisteminde taban durum enerjisi

$$E_0 = 3 \frac{p^2}{L^2} - b^2 - \frac{1}{A_1} \left[\frac{2pb}{L} A_2 - eFA_3 \right] \quad (1.1.17)$$

şeklinde bulunur.

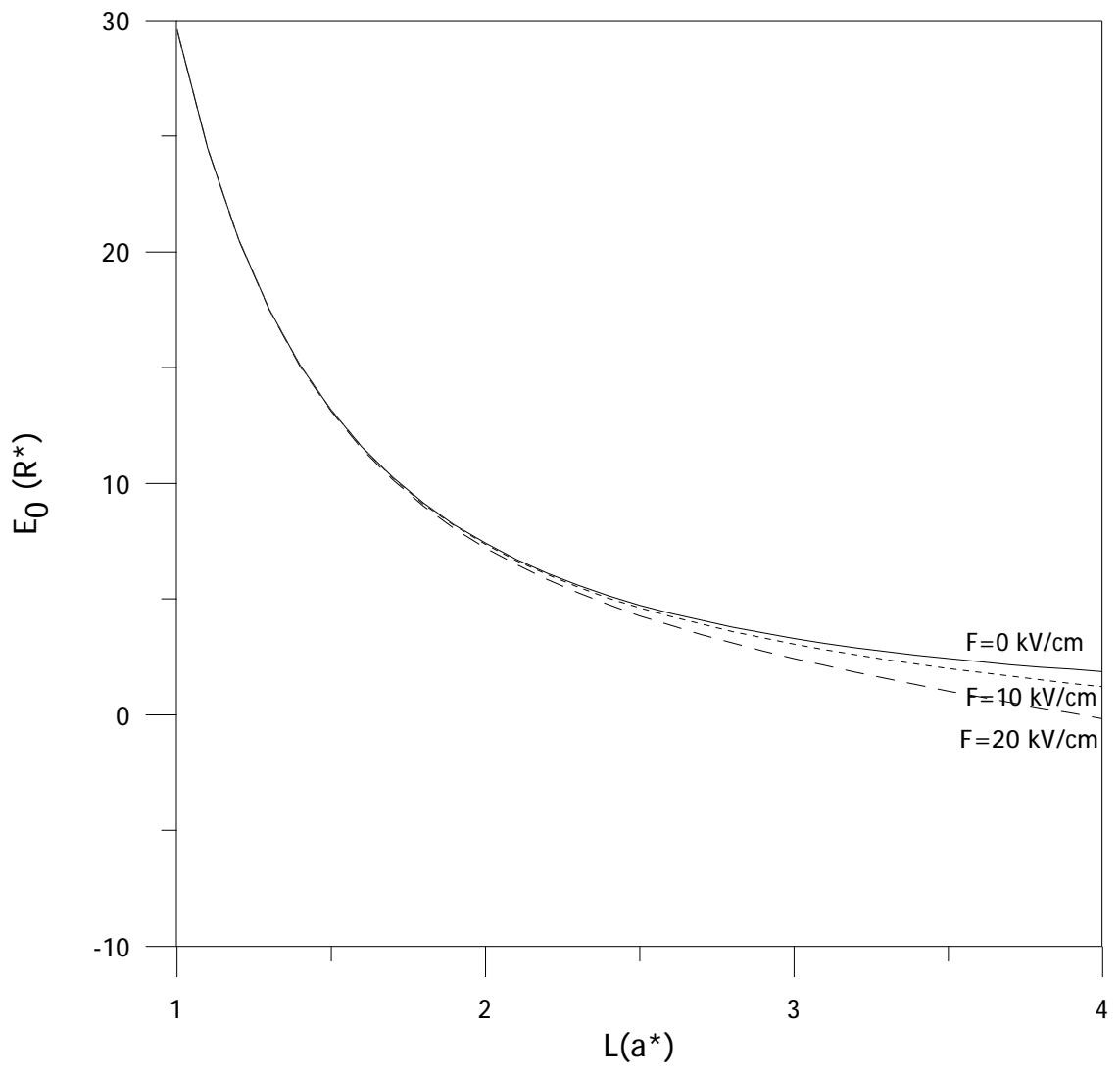
Şekil 1.1 'de kübik bir kuantum noktasında hapsedilen bir elektronun taban durum alt bant enerjilerinin (E_0) elektrik alan olmaksızın ve $F=10$ (kV/cm) ve $F=20$ (kV/cm) elektrik alan şiddetlerinde küpün hacmine bağlı davranışı gösterilmiştir.

$V = 8a^{*3}$ ($L=2a^*$) limitine kadar E_0 enerjisinde önemli bir ayırım gözlenmezken, bu hacimden büyük noktalarda elektrik alan şiddetine bağlı olarak bir azalma gözlenmektedir.

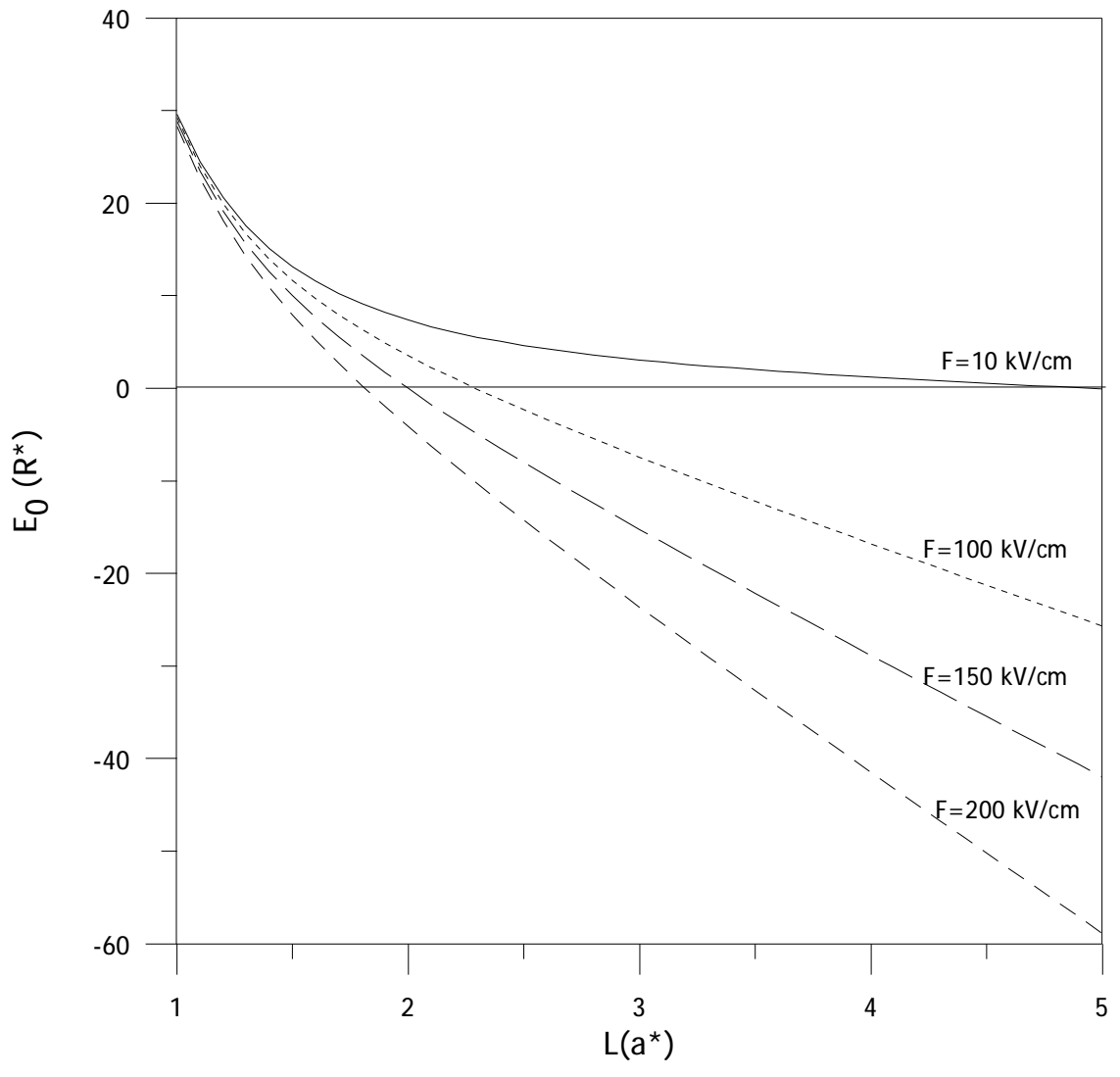
Şekil 1.2, Şekil 1.1 'deki aynı parametreyi incelemektedir. $F=100$ (kV/cm) ve daha

büyük şiddetli elektrik alanlar için $L=2 a^*$ 'dan büyük noktalarda E_0 enerjisinin yani alt bant enerjilerinin yok olduğu belirlenmiştir.

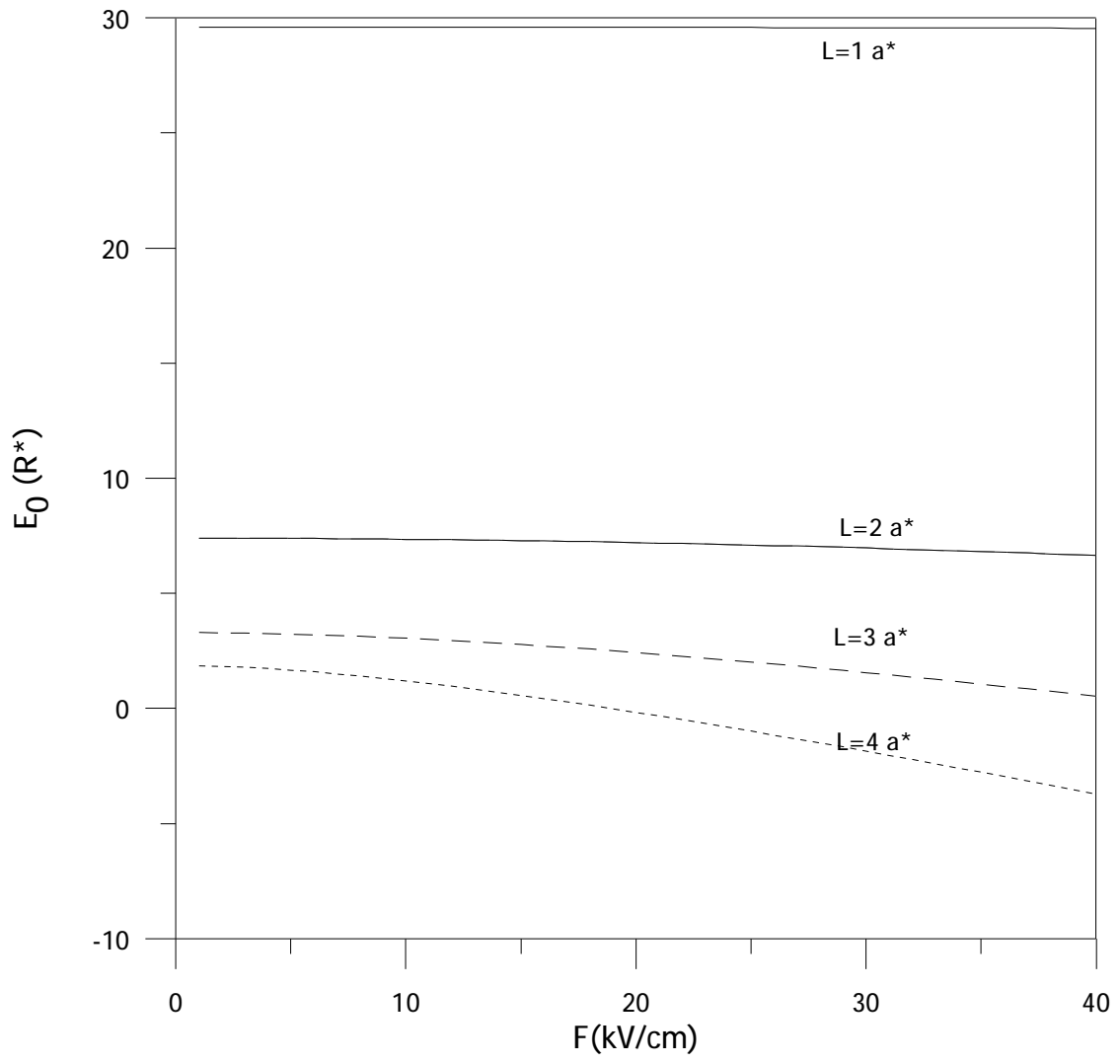
Şekil 1.3 ise E_0 enerjisinin farklı boyutlardaki kübik kuantum noktaları için davranışını F elektrik alan şiddetinin fonksiyonu olarak sergilemektedir. $F=40$ (kV/cm) sınırında E_0 enerjisi $L=4 a^*$ boyutundaki nokta için yok olmaktadır.



Şekil 1.1) K p biimli kuantum kutusunda sabit elektrik alan deęerleri altında taban durum enerjisinin kutu geniřlięi ile deęiřimi.



Şekil 1.2) K p biimli kuantum kutusunda sabit elektrik alan deęerleri altında taban durum enerjisinin kutu geniřlięi ile deęiřimi.



Şekil 1.3) Küp biçimli kuantum kutusunda taban durum enerjisinin, elektrik alan şiddetine göre değişim grafiği.

1.2) Yabancı Atom Varlığında Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Potansiyel Engelli Küp Biçimli Kuantum Kutusu

Yabancı atom varlığında, z doğrultusunda düzgün elektrik alan gören sonsuz potansiyel engelli küp biçimli kuantum kutusunda Schrödinger denklemini varyasyonel yöntemle çözümlerine bakalım. Çözüm için kullanılan deneme dalga fonksiyonunu

$$y_1(x,y,z) = N_1 \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \quad (1.2.1)$$

olarak verilir (Elangovan vd., 1992). Burada N_1 normalizasyon katsayısı, l ve b

varyasyonel parametreler ve $r = \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}$ şeklindedir.

Normalizasyon katsayısının bulunması için dalga fonksiyonun bire normalize edilmesi gerekir. Buna göre;

$$\langle y_1(x, y, z) | y_1(x, y, z) \rangle = N_1^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz = 1$$

$$\langle y_1(x, y, z) | y_1(x, y, z) \rangle = N_1^2 A_4 = 1$$

$$N_1 = \frac{1}{\sqrt{A_4}} \quad (1.2.2)$$

olarak bulunur. Sistemin enerji özdeğerini bulmak için Schrödinger özdeğer denkleminin ($H\mathcal{Y}_1 = E_1\mathcal{Y}_1$) çözülmesi gerekir. Buna göre Denklem (1.1.1)'deki Hamilton fonksiyonunu kullanarak enerji özdeğerleri,

$$E_1 = \left(\frac{\langle \mathcal{Y}_1(x, y, z) | H_1 | \mathcal{Y}_1(x, y, z) \rangle}{\langle \mathcal{Y}_1(x, y, z) | \mathcal{Y}_1(x, y, z) \rangle} \right)_{\min I} \quad (1.2.3)$$

denkleminde belirlenir. Böylece;

$$E_1 = \left(\frac{\langle \mathcal{Y}_1(x, y, z) | H_1 | \mathcal{Y}_1(x, y, z) \rangle}{\langle \mathcal{Y}_1(x, y, z) | \mathcal{Y}_1(x, y, z) \rangle} \right)_{\min I} = \left(\left\langle -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 \right\rangle + \left\langle \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\rangle + \langle eFz \rangle \right) \quad (1.2.4)$$

$$E_1 = T_{13} + T_{14} + T_{15} \quad (1.2.5)$$

olarak yazılabilir. T_{13} ifadesi kartezyen koordinatlarda yazılırsa;

$$T_{13} = \left\langle -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 \right\rangle = -\frac{\eta^2}{2m^*} \langle \nabla^2 \rangle = -\frac{\eta^2}{2m^*} \left(\left\langle \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\rangle \right) \quad (1.2.6)$$

biçimine dönüşür. Bu ifadede öncelikle kısmi türevlerin hesaplanması gerekir.

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(N_1 \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \right) \quad (1.2.7)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial x^2} = N_1 \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \begin{array}{l} -I \frac{(x-x_i)}{r} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ -\frac{p}{L} \sin \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\} \quad (1.2.8)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial x^2} = N_1 \left(-\frac{\partial x_1}{\partial x} - \frac{\partial x_2}{\partial x} \right) \quad (1.2.9)$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial x} = \left\{ \begin{array}{l} -I \frac{[(y-y_i)^2 + (z-z_i)^2]}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ +I^2 \frac{(x-x_i)^2}{r^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ +I \frac{(x-x_i)}{r} \frac{p}{L} \sin \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\} \quad (1.2.10)$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial x} = \left\{ \begin{array}{l} -\frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ +I \frac{(x-x_i)}{r} \frac{p}{L} \sin \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\} \quad (1.2.11)$$

(1.2.10) ve (1.2.11) ifadelerindeki kısmi türevler (1.2.9) ifadesinde yerine yazılırsa,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial x^2} = N_1 \left\{ \begin{array}{l} -I \frac{(y - y_i)}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ -I \frac{(z - z_i)}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ -I^2 \frac{(x - x_i)^2}{r^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ + 2 \frac{p}{L} I \frac{(x - x_i)}{r} \sin \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ - \frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \end{array} \right\} \quad (1.2.12)$$

elde edilir ve buradan,

$$\left\langle \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\rangle = -\frac{p^2}{L^2} + \frac{1}{A_4} \left[-I(A_5 + A_6) + I^2 A_7 + \frac{2pl}{L} A_8 \right] \quad (1.2.13)$$

elde edilir. Burada A_5, A_6, A_7 ve A_8 integralleri aşağıdaki gibidir.

$$A_5 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(y - y_i)^2}{r^3} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-21r} dx dy dz \quad (1.2.14)$$

$$A_6 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(z - z_i)^2}{r^3} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.15)$$

$$A_7 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(x - x_i)^2}{r^2} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.16)$$

$$A_8 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(x - x_i)}{r} \cos \frac{px}{L} \sin \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.17)$$

Benzer şekilde;

$$\frac{\partial^2 y}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(N_1 \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \right) \quad (1.2.18)$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial y^2} = N_1 \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \begin{array}{l} -l \frac{(y - y_i)}{r} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ -\frac{p}{L} \cos \frac{px}{L} \sin \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\} \quad (1.2.19)$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial y^2} = N_1 \left(-\frac{\partial y_1}{\partial y} - \frac{\partial y_2}{\partial y} \right) \quad (1.2.20)$$

$$\frac{\partial y_1}{\partial y} = \left\{ \begin{array}{l} -I \frac{[(x-x_i)^2 + (z-z_i)^2]}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ + I^2 \frac{(y-y_i)^2}{r^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ + I \frac{(y-y_i)p}{r} \cos \frac{px}{L} \sin \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \end{array} \right\} \quad (1.2.21)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial y} = \left\{ \begin{array}{l} -\frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ + I \frac{(y-y_i)p}{r} \cos \frac{px}{L} \sin \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \end{array} \right\} \quad (1.2.22)$$

(1.2.21) ve (1.2.22) ifadeleri (1.2.20) ifadesinde yerine yazılırsa,

$$\frac{\partial^2 y}{\partial y^2} = N_1 \left\{ \begin{array}{l} -I \frac{(x-x_i)}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ -I \frac{(z-z_i)}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ -I^2 \frac{(y-y_i)^2}{r^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ + 2 \frac{p}{L} I \frac{(y-y_i)}{r} \cos \frac{px}{L} \sin \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ -\frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \end{array} \right\} \quad (1.2.23)$$

elde edilir ve buradan,

$$\left\langle \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\rangle = -\frac{p^2}{L^2} + \frac{1}{A_4} \left[-I(A_6 + A_9) + I^2 A_{10} + \frac{2pl}{L} A_{11} \right] \quad (1.2.24)$$

elde edilir. Burada A_9, A_{10} ve A_{11} integralleri aşağıdaki gibidir.

$$A_9 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(x-x_i)^2}{r^3} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.25)$$

$$A_{10} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(y-y_i)^2}{r^2} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.26)$$

$$A_{11} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(y-y_i)}{r} \cos^2 \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.27)$$

Benzer şekilde z' ye göre de kısmi türevler hesaplanırsa,

$$\frac{\partial^2 y}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(N_1 \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \right) \quad (1.2.28)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial z^2} = N_1 \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \begin{array}{l} -b \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ -\frac{p}{L} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ -l \frac{(z - z_i)}{r} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\} \quad (1.2.29)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial z^2} = N_1 \left(-\frac{\partial z_1}{\partial z} - \frac{\partial z_2}{\partial z} - \frac{\partial z_2}{\partial z} \right) \quad (1.2.30)$$

$$\frac{\partial z_1}{\partial z} = \left\{ \begin{array}{l} +b^2 \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ +b \frac{p}{L} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ +bl \frac{(z - z_i)}{r} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\} \quad (1.2.31)$$

$$\frac{\partial z_2}{\partial z} = \left\{ \begin{array}{l} +b \frac{p}{L} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ -\frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ +l \frac{(z - z_i)}{r} \frac{p}{L} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\} \quad (1.2.32)$$

$$\frac{\partial z_3}{\partial z} = \left\{ \begin{array}{l} -l \frac{[lr(z-z_i)^2 - (x-x_i)^2 - (y-y_i)^2]}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + bl \frac{(z-z_i)^2}{r} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + l \frac{(z-z_i)p}{r} \cos \frac{px}{L} \sin \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\} \quad (1.2.33)$$

(1.2.31), (1.2.32) ve (1.2.33) kısmi türevleri (1.2.30) ifadesinde yerine yazılırsa,

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial z^2} = N_1 \left\{ \begin{array}{l} + b^2 \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + 2b \frac{p}{L} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + 2bl \frac{(z-z_i)}{r} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ - \frac{p^2}{L^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + 2l \frac{(z-z_i)p}{r} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + l^2 \frac{(z-z_i)^2}{r^2} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ - l \frac{(x-x_i)^2}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ - l \frac{(y-y_i)^2}{r^3} \cos \frac{px}{L} \cos \frac{py}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right\}$$

elde edilir ve buradan;

$$\left\langle \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\rangle = -\frac{p^2}{L^2} + b^2 + \frac{1}{A_4} \left[\frac{2pb}{L} A_{12} + 2bl A_{13} + \frac{2pl}{L} A_{14} + l^2 A_{15} - l(A_9 + A_5) \right] \quad (1.2.35)$$

Burada A_{12}, A_{13}, A_{14} ve A_{15} integralleri aşağıdaki gibidir.

$$A_{12} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.36)$$

$$A_{13} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(z - z_i)}{r} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.37)$$

$$A_{14} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(z - z_i)}{r} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos \frac{pz}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.38)$$

$$A_{15} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(z - z_i)^2}{r^2} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.39)$$

Kinetik enerjinin beklenen deęeri

$$T_{13} = -\frac{\eta^2}{2m^*} \left[I^2 + b^2 - 3\frac{p^2}{L^2} + \frac{1}{A_4} \left(\frac{2pl}{L} (A_8 + A_{11} + A_{14}) + \frac{2pb}{L} A_{12} \right) \right] \quad (1.2.40)$$

olarak elde edilir. Burada A_{16} ve A_{17} integralleri ařaęıdaki gibidir.

$$A_{16} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{1}{r} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.41)$$

$$A_{17} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{(z - z_i)}{r} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz \quad (1.2.42)$$

Benzer řekilde (1.2.4) baęıntısındaki T_{14} ve T_{15} ifadeleri hesaplanırsa.

$$T_{14} = \left\langle -\frac{e^2}{4pee_0 r} \right\rangle = -\frac{e^2}{4pee_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$$

$$T_{14} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} N_1^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{1}{r} \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz$$

$$T_{14} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{A_{16}}{A_4} \quad (1.2.43)$$

Elektrik alanın z doğrultusunda uygulandığını kabul etmiştik Bu durumda,

$$T_{15} = \langle eFz \rangle = eF \langle z \rangle$$

$$T_{15} = eFN_1^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} z \cos^2 \frac{px}{L} \cos^2 \frac{py}{L} \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} dx dy dz$$

$$T_{15} = eF \frac{A_{18}}{A_4} \quad (1.2.44)$$

şeklinde elde edilir. Sistemin enerji özdeğerleri, bulunan (1.2.40), (1.2.43) ve (1.2.44)

ifadelerinin (1.2.4) bağıntısında yerine yazılmasıyla elde edilir. R^* ve a^* birim sisteminde

$$\langle E_1 \rangle = 3 \frac{p^2}{L^2} - I^2 - b^2 + \frac{1}{A_4} \left[\begin{array}{l} 2(I-1)A_{16} - \frac{2pl}{L} (A_8 + A_{11} + A_{14}) \\ - \frac{2pb}{L} A_{12} - 2blA_{17} + eFA_{18} \end{array} \right] \quad (1.2.45)$$

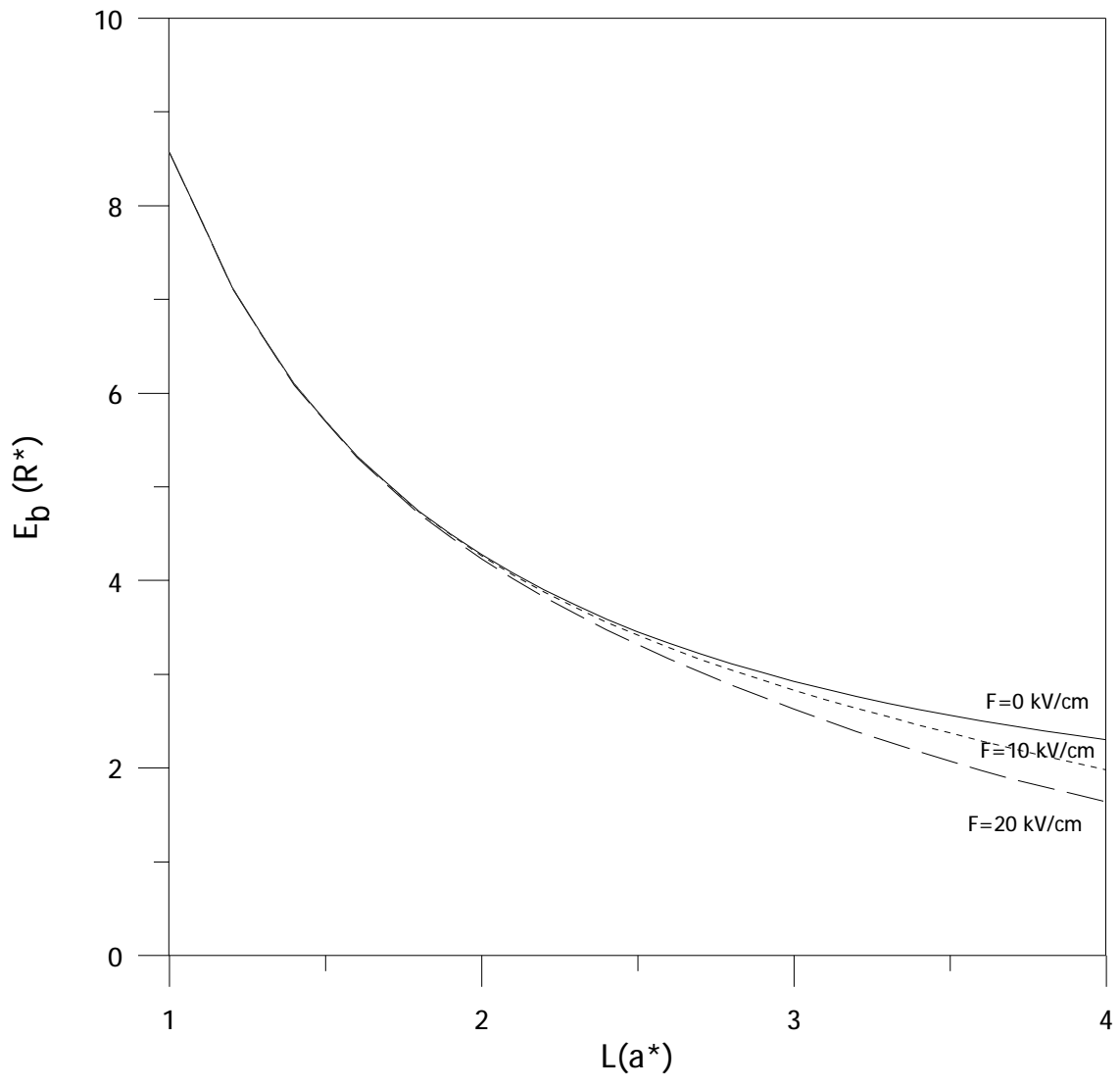
olarak elde edilir. Yabancı atom bağlanma enerjisi ise;

$$E_b = E_0 - \left(\frac{\langle \mathbf{y}_1(x, y, z) | H_1 | \mathbf{y}_1(x, y, z) \rangle}{\langle \mathbf{y}_1(x, y, z) | \mathbf{y}_1(x, y, z) \rangle} \right)_{\min I} \quad (1.2.46)$$

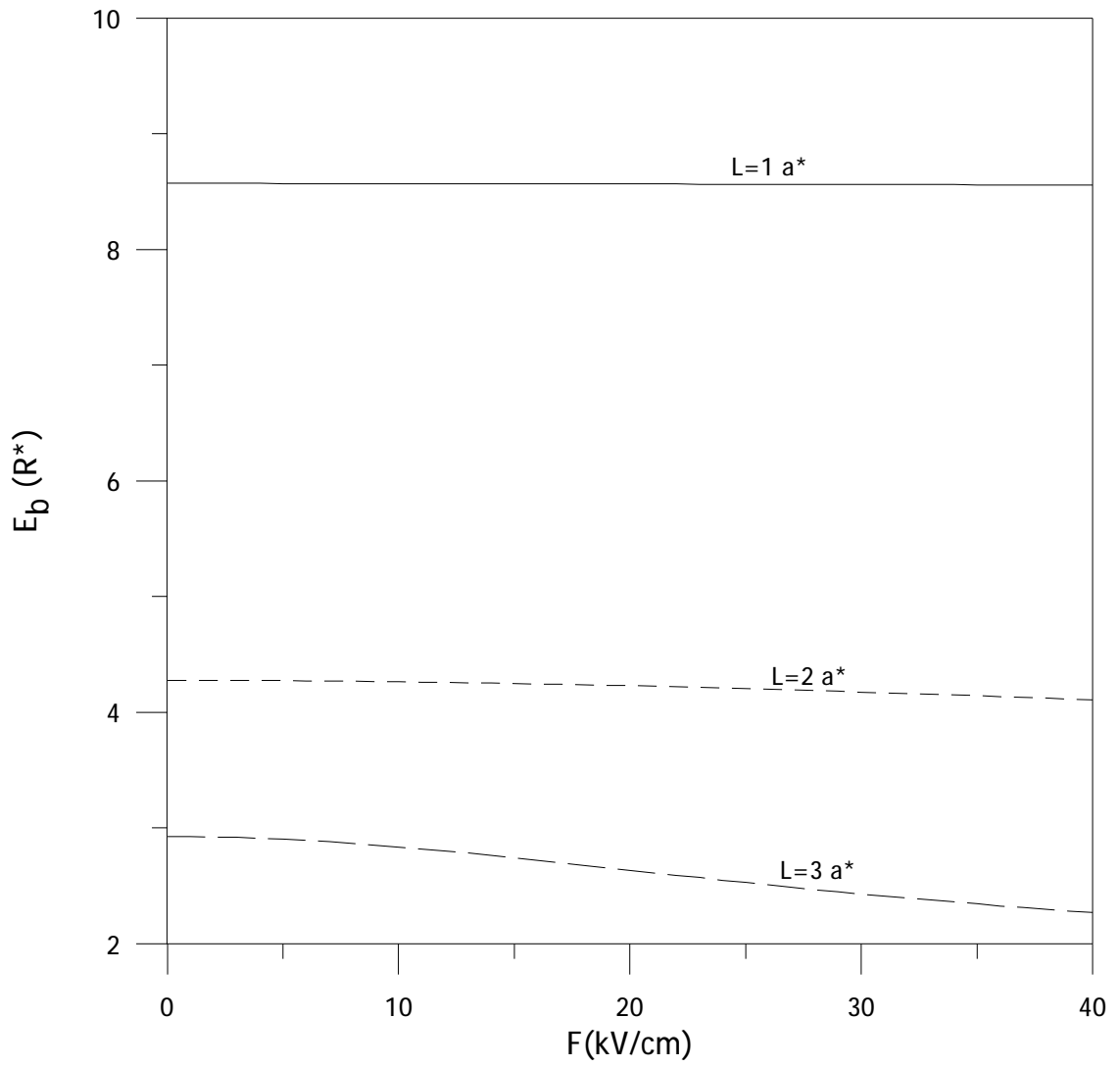
bağıntısından bulunur.

Şekil 1.4 'te yabancı atom kutunun merkezindeyken sabit elektrik alan değerleri altında bağlanma enerjisinin kutu genişliğine göre değişimi gösterildi. Burada kutunun genişliği ve elektrik alan şiddeti attıkça bağlanma enerjisinin azaldığını görüyoruz.

Şekil 1.5 'te yabancı atom kutunun merkezindeyken sabit kutu genişlikleri için bağlanma enerjilerinin elektrik alan şiddetine göre değişimi gösterilmiştir. Her iki grafikte de kuantum noktalarının E_b bağlanma enerjisine ait karakteristik davranışları gözlenmektedir.



Şekil 1.4) K p biimli kuantum kutusunda yabancı atom baėlanma enerjisinin kutu geniřliėi ile deėiřimi.



Şekil 1.5) Küp biçimli kuantum kutusunda yabancı atom bağlanma enerjisinin, elektrik alan şiddeti ile değişimi.

BÖLÜM-2

2.1) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Potansiyel Engelli Silindir Biçimli Kuantum Noktası

Düzgün elektrik alan gören silindir biçimli kuantum noktasında Schrödinger denkleminin varyasyonel yöntemle çözümlerine bakalım. z doğrultusunda uygulanan elektrik alan varlığında Hamilton fonksiyonu,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + |e|Fz + V(r, z) \quad (2.1.1)$$

olarak verilir (Duque vd. , 1997) Bu Hamilton fonksiyonundaki $-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2$ terimi kinetik enerjiyi, $V(r, z)$ terimi sınırlayıcı potansiyeli ve eFz terimi ise elektrik alan etkisini göstermektedir. m^* elektron etkin kütlesi, F uygulanan elektrik alan şiddetidir. $V(r, z)$ sistemin sınırlayıcı engel potansiyeli aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$V(r, z) = \begin{cases} 0 & , \quad r < R, |z| < L/2 \\ \infty & , \quad r \geq R, |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (2.1.2)$$

Burada R ve L sırasıyla silindirin yarıçapı ve uzunluğudur. Elektronun ait Schrödinger denklemi

$$H_0 y_0(r, z) = E_0 y_0(r, z) \quad (2.1.3)$$

şeklindedir. Schrödinger denkleminin çözümlerinden elde edilen deneme dalga fonksiyonu

$$y_0 = \begin{cases} N_0 J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} & , \quad r < R, |z| < L/2 \\ 0 & , \quad r \geq R, |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (2.1.4)$$

olarak verilir (Vivas-Moreno vd. , 1998). Burada b elektrik alan parametresi, J_0 birinci tür Bessel fonksiyonu, a_{10} bu Bessel fonksiyonunun kökü ve N_0 normalizasyon katsayısıdır. Normalizasyon katsayısını bulmak için dalga fonksiyonunun birine normalize edilmesi gerekir. Buna göre,

$$\langle y_0(r, z) | y_0(r, z) \rangle = N_0^2 \int_0^R \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} J_0^2(a_{10} r) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} r dr dz = 1 \quad (2.1.5)$$

burada, R^* ve a^* birim sistemini kullanmak için boyut değişikliği yaparsak

$$r = R t, x = a_{10} R = 2.4048, l = l a^*, b = b a^* \text{ ve } a = a_{10} a^* \text{ dönüşümleri sonucunda}$$

$$\langle \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) | \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) \rangle = N_0^2 \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} R^2 t dt dz = 1 \quad (2.1.6)$$

$$\langle \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) | \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) \rangle = N_0^2 C_1 = 1 \quad (2.1.7)$$

$$N_0 = \frac{1}{\sqrt{C_1}} \quad (2.1.8)$$

olarak bulunur. Sistemin enerji özdeğerlerini bulmak için (2.1.3) ifadesindeki Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Buna göre,

$$E_0 = \left(\frac{\langle \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) | H_0 | \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) \rangle}{\langle \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) | \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) \rangle} \right)_{\min b} \quad (2.1.9)$$

bağıntısı sistemin enerji öz değerlerini verir. Böylece,

$$E_0 = \left(\frac{\langle \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) | H_0 | \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) \rangle}{\langle \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) | \mathbf{y}_0(\mathbf{r}, z) \rangle} \right)_{\min b} = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \right\rangle + \langle eFz \rangle \quad (2.1.10)$$

$$E_0 = T_{21} + T_{22} \quad (2.1.11)$$

olarak yazılabilir. T_{21} ifadesi silindirik koordinatlarda yazılırsa

$$T_{21} = \left\langle -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 \right\rangle = -\frac{\eta^2}{2m^*} \langle \nabla^2 \rangle \quad (2.1.12)$$

$$T_{21} = -\frac{\eta^2}{2m^*} \left(\left\langle \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial f^2} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\rangle \right) \quad (2.1.13)$$

şeklinde olur. (2.1.9) ifadesindeki kısmi türevler hesaplanırsa,

$$\frac{\partial^2 y_0}{\partial r^2} = -a_{10} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} + \frac{a_{10}}{r} J_1(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} \quad (2.1.14)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial y_0}{\partial r} = -\frac{a_{10}}{r} J_1(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} \quad (2.1.15)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 y_0}{\partial f^2} = 0 \quad (2.1.16)$$

$$\frac{\partial^2 y_0}{\partial z^2} = \left(\begin{array}{l} -\frac{p^2}{L^2} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} + 2\frac{p}{L} b J_0(a_{10} r) \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} \\ + b^2 J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} \end{array} \right) \quad (2.1.17)$$

Bu türevler (2.1.13) ifadesinde yerine yazılırsa kinetik enerjinin beklenen değeri aşağıdaki gibi olur.

$$T_{21} = \left[\frac{p^2}{L^2} + a^2 - b^2 - \frac{2pb}{L} \frac{C_2}{C_1} \right] \quad (2.1.18)$$

Burada C_2 integrali aşağıdaki gibidir.

$$C_2 = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} J_0^2(xt) \cos \frac{pz}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-2bz} R^2 t dt dz \quad (2.1.19)$$

Benzer şekilde T_{22} ifadesini de yazılırsa,

$$T_{22} = \langle eFz \rangle = eF \langle z \rangle \quad (2.1.20)$$

$$T_{22} = eFN_0^2 \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} z J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} R^2 t dt dz \quad (2.1.21)$$

$$T_{22} = eF \frac{C_3}{C_1} \quad (2.1.22)$$

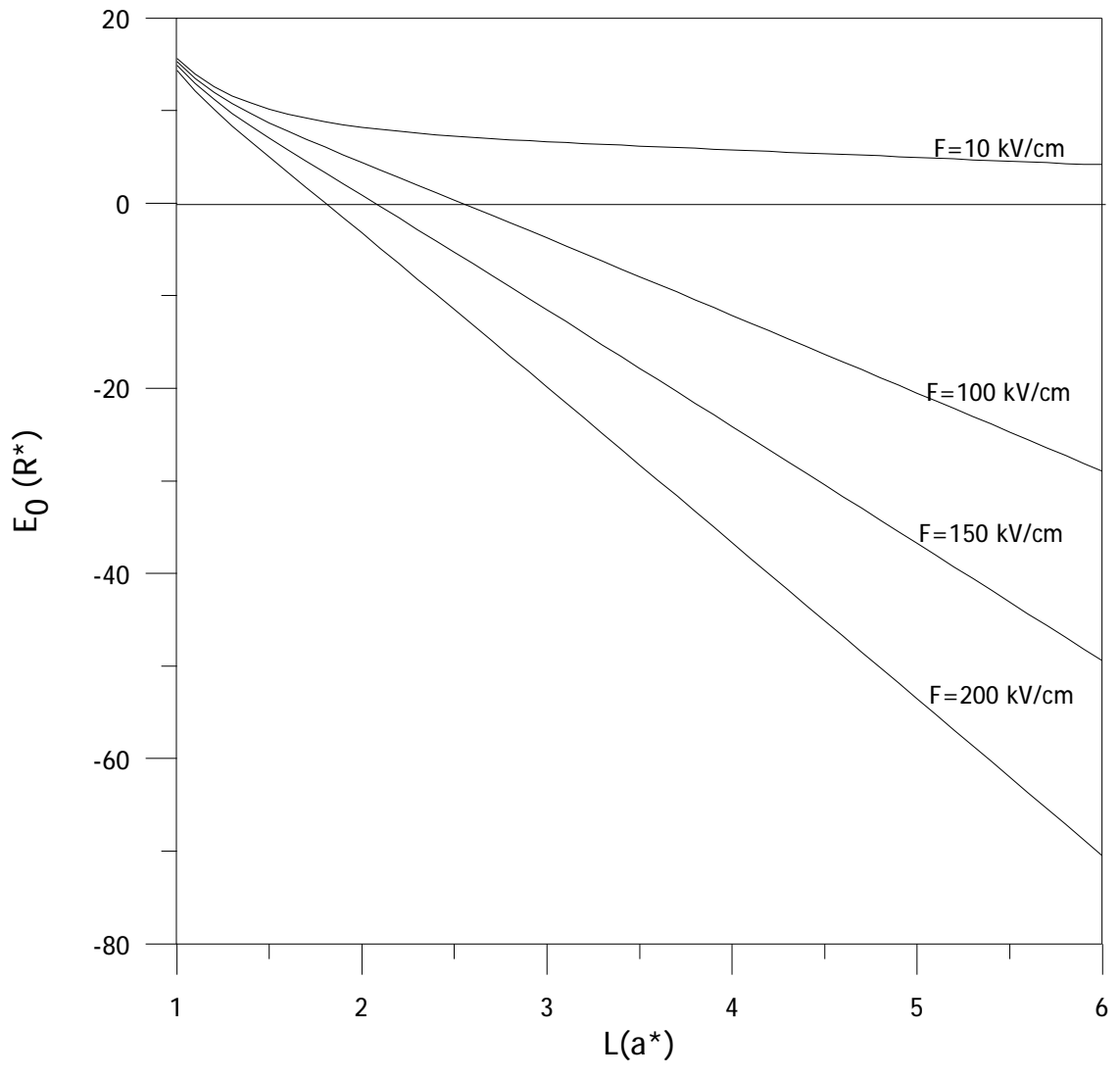
şeklinde olur. Sistemin enerji öz değerleri, bulunan (2.1.18) ve (2.1.22) ifadelerinin (2.1.11) bağıntısında yerine yazılmasıyla elde edilir. Buna göre, R^* ve a^* birim sisteminde taban durum enerjisi

$$E_0 = \left[\frac{p^2}{L^2} + \left(\frac{2.2028}{R} \right)^2 - b^2 - \frac{1}{C_1} \left(\frac{2pb}{L} C_2 - eFC_3 \right) \right] \quad (2.1.23)$$

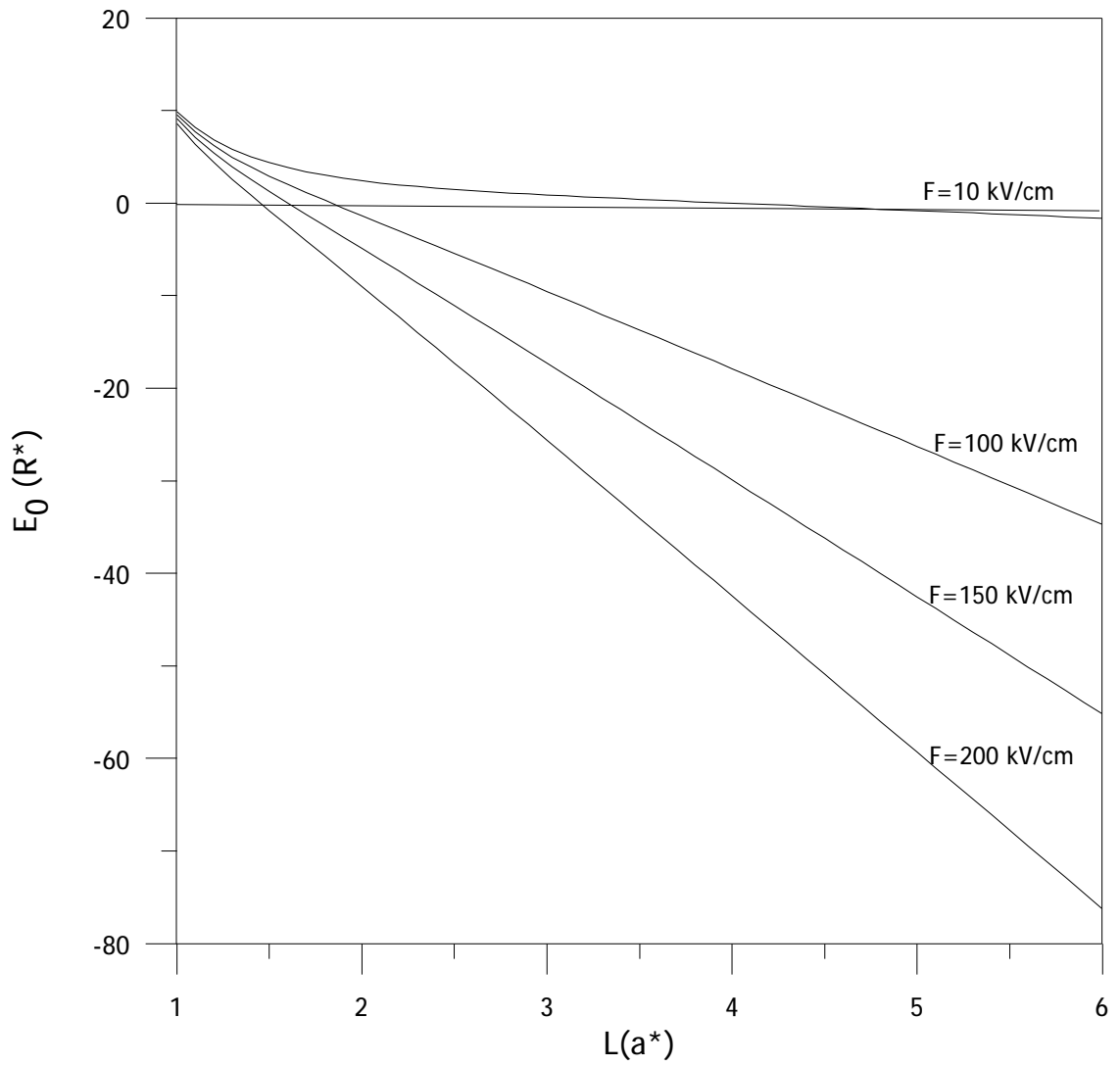
şeklinde bulunur.

Şekil 2.1 'de $R=1$ a* ve Şekil 2.2 'de $R=30$ a* yarıçapları için sabit elektrik alan değerleri altında taban durum enerjilerinin silindirin boyuna göre değişimleri gösterilmiştir. Burada silindirin boyu arttıkça taban durum enerjisinin azaldığı gözlenmektedir.

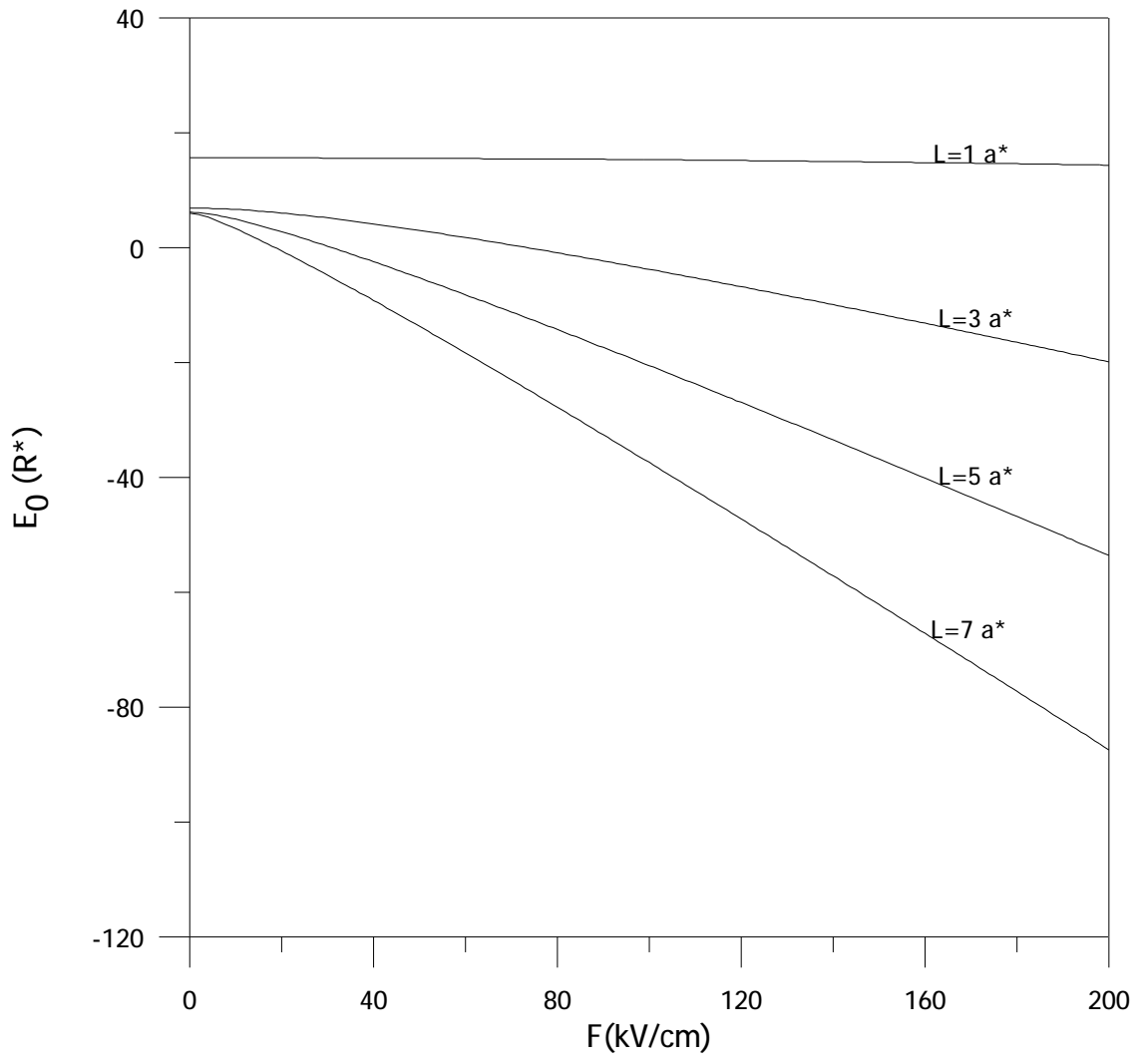
Şekil 2.3 'de $R=1$ a* ve Şekil 2.4 'de $R=30$ a* için taban durum enerjisinin elektrik alan şiddetine göre değişimi gösterilmiştir. Silindirik kuantum noktası için Şekil 2.1, Şekil 2.2, Şekil 2.3 ve Şekil 2.4 'de sergilenen bu E_0 davranışları, Şekil 1.1, Şekil 1.2 ve Şekil 1.3 kübik geometrileri için gösterilen davranışlardan nicelik olarak farklılıklar göstermekle birlikte nitelik olarak herhangi bir ayrıma sahip değildir.



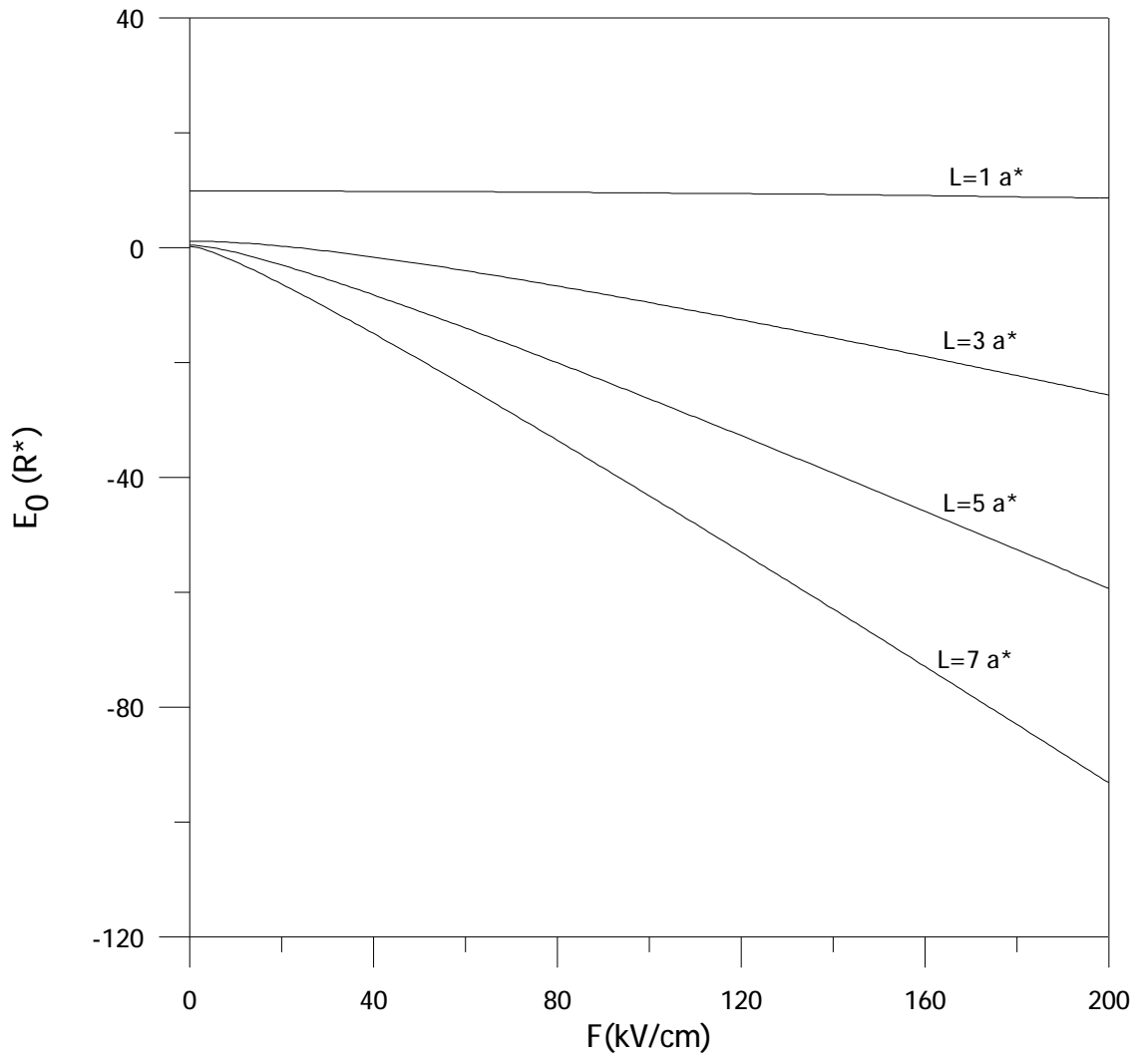
Şekil 2.1) Silindirik kuantum kutusunun taban durum enerjisinin silindirin boyu ile deęişimi. ($R=1 \text{ a}^*$)



Şekil 2.2) Silindirik kuantum kutusunun, taban durum enerjisinin silindirin boyu ile değişimi ($R=30 a^*$)



Şekil 2.3) Silindir biçimli kuantum kutusunda taban durum enerjisinin elektrik alan şiddeti ile değişimi ($R=1 \text{ a}^*$)



Şekil 2.4) Silindir biçimli kuantum kutusunda taban durum enerjisinin elektrik alan şiddeti ile değişimi ($R=30 a^*$)

2.2) Yabancı Atom Varlığında Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Potansiyel Engelli Silindir Biçimli Kuantum Noktası

Yabancı atom varlığında, z doğrultusunda düzgün elektrik alan gören silindir biçimli kuantum noktasında Schrödinger denkleminin varyasyonel yöntemle çözümlerine bakalım. Bu sistem için Hamilton fonksiyonu,

$$H_1 = -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 + |e|Fz - \frac{e^2}{er} + V(r, z) \quad (2.2.1)$$

olarak verilir (Duque vd. , 1997). Bu Hamilton fonksiyonundaki $-\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2$ terimi kinetik

enerjiyi, eFz terimi elektrik alan etkisini, $-\frac{e^2}{er}$ terimi Coulomb etkileşmesini ve $V(r, z)$

terimi sınırlayıcı potansiyeli göstermektedir. m^* elektron etkin kütlesi, F uygulanan elektrik alan şiddetidir. $V(r, z)$ sistemin sınırlayıcı engel potansiyeli, denklem (2.1.2)' de ifade edildiği gibidir. Elektronun ait Schrödinger denklemi

$$H_1 \psi_1(r, z) = E \psi_1(r, z) \quad (2.2.2)$$

şeklinde dir. Schrödinger denkleminin çözümlerinden elde edilen deneme dalga fonksiyonu

$$y_1 = \begin{cases} N_1 J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} & , \quad r < R, |z| < L/2 \\ 0 & , \quad r \geq R, |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (2.2.3)$$

olarak verilir (Vivas-Moreno vd. , 1998). Burada l ve b varyasyonel parametreler, J_0 birinci tür Bessel fonksiyonu, a_{10} bu Bessel fonksiyonunun kökü, N_1 normalizasyon katsayısı ve $r = \sqrt{r^2 + z^2}$ şeklindedir. Normalizasyon katsayısını bulmak için dalga fonksiyonunun bire normalize edilmesi gerekir. Buna göre;

$$\langle y_1(r, z) | y_1(r, z) \rangle = N_1^2 \int_0^R \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} J_0^2(a_{10} r) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} r dr dz = 1 \quad (2.2.4)$$

burada, R^* ve a^* birim sistemini kullanmak için boyut değişikliği yaparsak

$r = Rt$, $x = a_{10}R = 2.4048$, $l = la^*$, $b = ba^*$ ve $a = a_{10}a^*$ dönüşümleri sonucunda

$$\langle y_1(r, z) | y_1(r, z) \rangle = N_1^2 \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz = 1 \quad (2.2.5)$$

$$\langle y_1(r, z) | y_1(r, z) \rangle = N_1^2 C_4 = 1 \quad (2.2.6)$$

$$N_1 = \frac{1}{\sqrt{C_4}} \quad (2.2.7)$$

olarak bulunur. Sistemin enerji özdeğerlerini bulmak için (2.2.2) ifadesindeki Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Buna göre,

$$E_1 = \left(\frac{\langle \mathbf{y}_1(\mathbf{r}, z) | H_1 | \mathbf{y}_1(\mathbf{r}, z) \rangle}{\langle \mathbf{y}_1(\mathbf{r}, z) | \mathbf{y}_1(\mathbf{r}, z) \rangle} \right)_{\min l} \quad (2.2.8)$$

$$E_1 = \left(\frac{\langle \mathbf{y}_1(\mathbf{r}, z) | H_1 | \mathbf{y}_1(\mathbf{r}, z) \rangle}{\langle \mathbf{y}_1(\mathbf{r}, z) | \mathbf{y}_1(\mathbf{r}, z) \rangle} \right)_{\min l} = \left\langle -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 \right\rangle + \langle eFz \rangle + \left\langle -\frac{e^2}{er} \right\rangle \quad (2.2.9)$$

$$E_1 = T_{23} + T_{24} + T_{25} \quad (2.2.10)$$

olarak yazılabilir. T_{23} ifadesi silindirik koordinatlarda yazılırsa,

$$T_{23} = \left\langle -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 \right\rangle = -\frac{\eta^2}{2m^*} \langle \nabla^2 \rangle \quad (2.2.11)$$

$$T_{23} = -\frac{\eta^2}{2m^*} \left(\left\langle \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\rangle \right) \quad (2.2.12)$$

şeklinde olur. T_{23} ifadesindeki kısmi türevler hesaplanırsa,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}_1}{\partial \mathbf{r}^2} = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \left(N_1 J_0(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \right) \quad (2.2.13)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}_1}{\partial \mathbf{r}^2} = N_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\begin{array}{c} -\mathbf{a}_{10} J_1(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \\ -I \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)}{r} J_0(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \end{array} \right) \quad (2.2.14)$$

(2.2.14) ifadesi aşağıdaki gibi yazılırsa,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}_1}{\partial \mathbf{r}^2} = N \left(\frac{\partial \mathbf{r}_1}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{r}_2}{\partial \mathbf{r}} \right) \quad (2.2.15)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}_1}{\partial \mathbf{r}} = \left(\begin{array}{c} -\mathbf{a}_{10}^2 J_0(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \\ + \frac{\mathbf{a}_{10}}{r} J_1(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \\ + I \mathbf{a}_{10} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)}{r} J_1(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \end{array} \right) \quad (2.2.16)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}_2}{\partial \mathbf{r}} = \left(\begin{array}{c} -I \frac{z^2}{r^3} J_0(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \\ + I \mathbf{a}_{10} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)}{r} J_1(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \\ + I^2 \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2}{r^2} J_0(\mathbf{a}_{10} \mathbf{r}) \cos \frac{\mathbf{p}z}{L} e^{-b_z} e^{-l r} \end{array} \right) \quad (2.2.17)$$

bulunur.(2.2.16) , (2.2.17) kısmi türevleri (2.2.15) denkleminde yerine yazılırsa,

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial r^2} = N \left(\begin{array}{l} -a_{10}^2 J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ + \frac{a_{10}}{r} J_1(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ + 2I a_{10} \frac{(r-r_0)}{r} J_1(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ - I \frac{z^2}{r^3} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \\ + I^2 \frac{(r-r_0)^2}{r^2} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-1r} \end{array} \right) \quad (2.2.18)$$

elde edilir ve buradan,

$$\left\langle \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right\rangle = -a^2 + \frac{1}{C_4} [aC_5 + 2I aC_6 - IC_7 + I^2 C_8] \quad (2.2.19)$$

elde edilir. Burada $C_5, C_6, C_7, ve C_8$ integralleri aşağıdaki gibidir.

$$C_5 = \int_0^1 \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{1}{r} J_0(xt) J_1(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-21r} R^2 t dt dz \quad (2.2.20)$$

$$C_6 = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{r}{r} J_0(xt) J_1(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.21)$$

$$C_7 = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{z^2}{r^3} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.22)$$

$$C_8 = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{r^2}{r^2} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.23)$$

Benzer şekilde;

$$\frac{1}{r} \frac{\partial y_1}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(N_1 J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \right) \quad (2.2.24)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial y_1}{\partial r} = N_1 \left(\begin{array}{l} -\frac{a_{10}}{r} J_1(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ -I \frac{(r-r_0)}{r} \frac{1}{r} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right) \quad (2.2.25)$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right\rangle = \frac{1}{C_4} [-aC_5 - IC_9] \quad (2.2.26)$$

elde edilir. Burada C_9 integrali aşağıdaki gibidir.

$$C_9 = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{1}{r} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.27)$$

Dalga fonksiyonunda f , ye bağıllık olmadığı için,

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial f^2} \right\rangle = 0 \quad (2.2.28)$$

olur. Benzer şekilde;

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(N_1 J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \right) \quad (2.2.29)$$

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial z^2} = N_1 \frac{\partial}{\partial z} \left(\begin{array}{l} -\frac{p}{L} J_0(a_{10} r) \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ -b J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ -l \frac{z}{r} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right) \quad (2.2.30)$$

(2.2.30) ifadesi aşağıdaki gibi yazılırsa

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial z^2} = N_1 \left(\frac{\partial z_1}{\partial z} + \frac{\partial z_2}{\partial z} + \frac{\partial z_3}{\partial z} \right) \quad (2.2.31)$$

$$\frac{\partial z_1}{\partial z} = \begin{pmatrix} -\frac{p^2}{L^2} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + b \frac{p}{L} J_0(a_{10} r) \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + l \frac{p}{L r} J_0(a_{10} r) \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{pmatrix} \quad (2.2.32)$$

$$\frac{\partial z_2}{\partial z} = \begin{pmatrix} b^2 J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + b \frac{p}{L} J_0(a_{10} r) \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + bl \frac{z}{r} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{pmatrix} \quad (2.2.33)$$

$$\frac{\partial z_3}{\partial z} = \begin{pmatrix} -l \frac{(r-r_0)^2}{r^3} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + l \frac{p}{L r} J_0(a_{10} r) \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + bl \frac{z}{r} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ l^2 \frac{z^2}{r^2} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{pmatrix} \quad (2.2.34)$$

elde edilir. (2.2.32), (2.2.33) ve (2.2.34) ifadelerindeki kısmi türevler (2.2.30) ifadesinde yerine yazılırsa,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}_1}{\partial z^2} = N_1 \left(\begin{array}{l} -\frac{p^2}{L^2} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + 2b \frac{p}{L} J_0(a_{10} r) \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + 2l \frac{p}{L} \frac{z}{r} J_0(a_{10} r) \sin \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ b^2 J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ + 2bl \frac{z}{r} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ - l \frac{(r-r_0)^2}{r^3} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \\ l^2 \frac{z^2}{r^2} J_0(a_{10} r) \cos \frac{pz}{L} e^{-bz} e^{-lr} \end{array} \right) \quad (2.2.35)$$

olarak bulunur. Buradan

$$\left\langle \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\rangle = -\frac{p^2}{L^2} + b^2 + \frac{1}{C_4} \left[\frac{2pb}{L} C_{10} \frac{2pl}{L} C_{11} + 2bl C_{12} - l C_{13} + l^2 C_{14} \right] \quad (2.2.36)$$

elde edilir. Burada $C_{10}, C_{11}, C_{12}, C_{13}$ ve C_{14} integralleri aşağıdaki gibidir.

$$C_{10} = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} J_0^2(xt) \cos \frac{pz}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.37)$$

$$C_{11} = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{z}{r} J_0^2(xt) \cos \frac{pz}{L} \sin \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.38)$$

$$C_{12} = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{z}{r} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.39)$$

$$C_{13} = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{r^2}{r^3} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.40)$$

$$C_{14} = \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{z^2}{r^2} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.41)$$

(2.2.19), (2.2.26) ve (2.2.36) ifadeleri (2.2.12) denkleminde yerine yazılırsa

$$T_{23} = \left[\begin{array}{l} \frac{p^2}{L^2} + a^2 - b^2 - l^2 \\ \frac{1}{C_4} \left(2l a C_6 + 2(l-1)C_9 - \frac{2pb}{L} C_{10} - \frac{2pl}{L} C_{11} - 2bl C_{12} \right) \end{array} \right] \quad (2.2.42)$$

olarak elde edilir. Benzer şekilde (2.2.10) bağıntısındaki T_{24} ve T_{25} ifadeleri hesaplanırsa,

$$T_{24} = \langle eFz \rangle = eF \langle z \rangle \quad (2.2.43)$$

$$T_{24} = eFN_1^2 \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} z J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.44)$$

$$T_{24} = eF \frac{C_{15}}{C_4} \quad (2.2.45)$$

Benzer şekilde,

$$T_{25} = \left\langle -\frac{e^2}{er} \right\rangle = -\frac{e^2}{er} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \quad (2.2.46)$$

$$T_{25} = -\frac{e^2}{e} N_1^2 \int_0^1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{1}{r} J_0^2(xt) \cos^2 \frac{pz}{L} e^{-2bz} e^{-2lr} R^2 t dt dz \quad (2.2.47)$$

$$T_{25} = -\frac{e^2 C_9}{e C_4} \quad (2.2.48)$$

Sistemin enerji özdeğerleri, bulunan (2.2.42), (2.2.45) ve (2.2.48) ifadelerinin (2.2.10) bağıntısında yerine yazılmasıyla elde edilir. Buna göre R^* ve a^* birim sisteminde

$$\langle E_1 \rangle = \left[\begin{array}{l} \frac{p^2}{L^2} + a^2 - b^2 - l^2 \\ \frac{1}{C_4} \left(2l a C_6 + 2(l-1)C_9 - \frac{2pb}{L} C_{10} - \frac{2pl}{L} C_{11} - 2bl C_{12} + eFC_{15} \right) \end{array} \right] \quad (2.2.49)$$

şeklinde elde edilir. Yabancı atom bağlanma enerjisi ise;

$$E_b = E_0 - \left(\frac{\langle y_1(r, z) | H_1 | y_1(r, z) \rangle}{\langle y_1(r, z) | y_1(r, z) \rangle} \right)_{\min l} \quad (2.2.50)$$

bağıntısından bulunur.

Şekil 2.5 'de silindirik kuantum kutusunda $R=1 a^*$ için, sabit elektrik alan değerleri altında bağlanma enerjilerinin silindirin yüksekliğine göre değişimleri gösterilmiştir. Şekil 2.6 'da silindirik kuantum kutusunda $L=4 a^*$ için, sabit elektrik alan değerleri altında bağlanma enerjilerinin silindirin yarıçapına göre değişimleri gösterilmiştir. Her iki grafikte de silindirin boyutu arttıkça bağlanma enerjilerinin azaldığını görüyoruz.

Şekil 2.7'de Silindirik kuantum noktasının merkezinde bulunan yabancı atomun bağlanma enerjisinin farklı silindir yarıçapları ve yükseklikleri için elektrik alan şiddetine göre değişimi çizilmiştir. Burada farklı nokta geometrilerinin bağlanma enerjisi üzerindeki etkileri görülmektedir. Dar yapılı silindirik kuantum kutusunda bağlanma enerjisi daha büyük bulunmakta ve elektrik alan etkisi büyük olmaktadır.

Şekil 2.8 'de $V = 1a^{*3}$ hacminde silindir ve küp biçimli kuantum kutusunun bağlanma enerjilerinin elektrik alan şiddetiyle değişimi gösterilmiştir. Burada silindirin boyutları $L = 1a^{*}$ ve $R = 0.565a^{*}$ olarak ve küpün boyutları $L = 1a^{*}$ olarak alınmıştır.

Şekil 2.9 'da silindir ve küp biçimli kuantum kutusunun hacmi $V = 4a^{*3}$ olarak alınmıştır.

Burada silindirin boyutları $L = 1.59a^{*}$ ve $R = 0.895a^{*}$ olarak ve küpün boyutları

$L = 1.59a^{*}$ olarak seçilmiştir. Şekil 2.10 'da silindir ve küp biçimli kuantum kutusunun

hacmi $V = 6a^{*3}$ olarak alınmıştır. Burada silindirin boyutları $L = 1.82a^{*}$ ve $R = 1.02a^{*}$

olarak ve küpün boyutları $L = 1.82a^{*}$ olarak seçilmiştir. .Elektrik alan şiddeti $F=70$

kV/cm değerinde bağlanma enerjilerinin eşit olduğu gözlenmiştir. Şekil 2.11 'de silindir ve

küp biçimli kuantum kutusunun hacmi $V = 8a^{*3}$ olarak alınmıştır. Burada silindirin

boyutları $L = 2a^{*}$ ve $R = 1.12a^{*}$ olarak ve küpün boyutları $L = 2a^{*}$ olarak seçilmiştir.

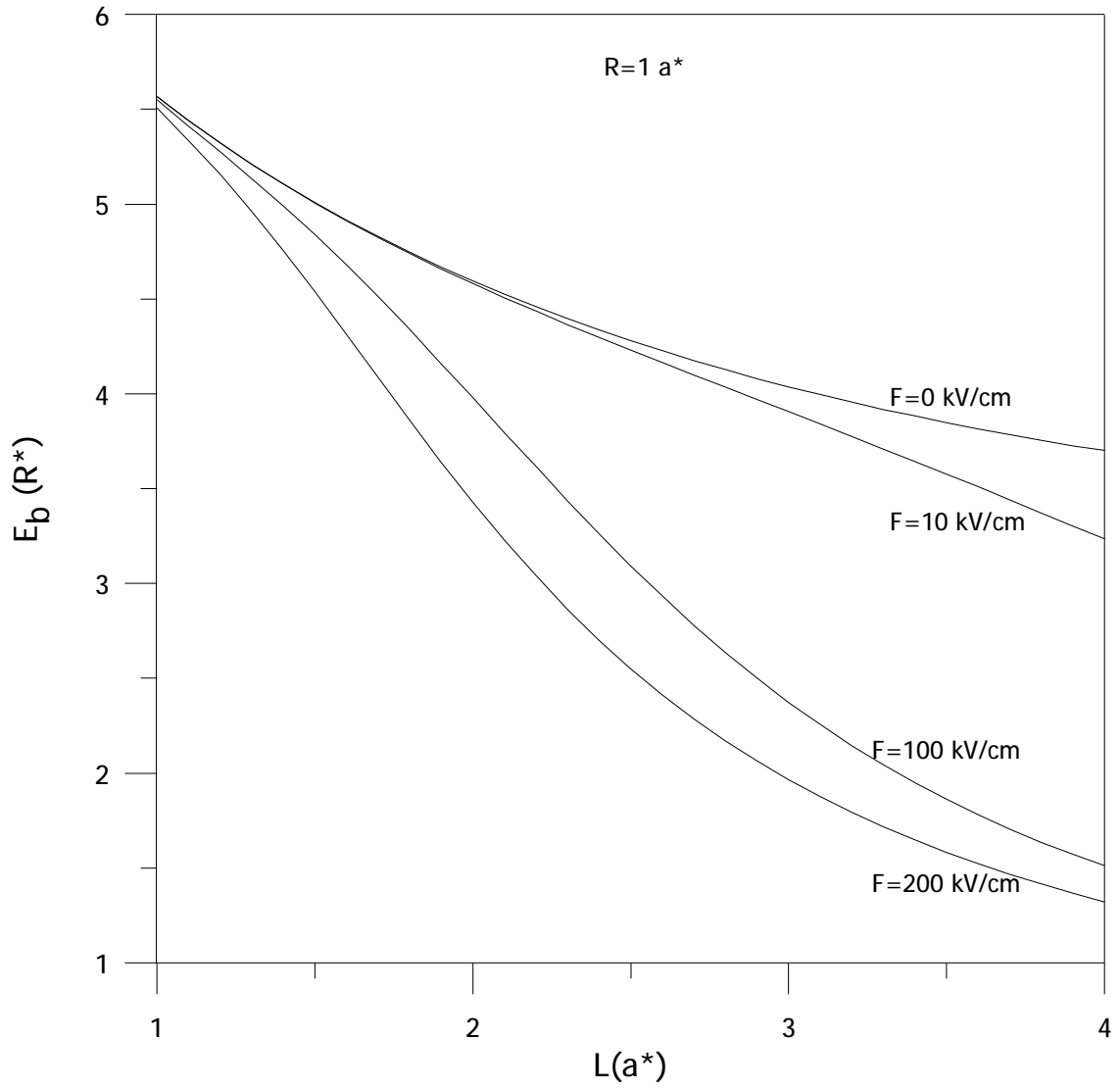
Şekil 2.12' de Kübik ve silindirik kesitli kuantum noktasındaki elektronun yabancı atoma bağlanma enerjilerinin farkı $V = 4a^{*3}$ ve $V = 6a^{*3}$ hacimleri için elektrik alan değişimine göre çizilmiştir. $V = 6a^{*3}$ hacminde elektrik alan şiddetinin $F=70$ kV/cm değeri için bağlanma enerjileri arasında ki fark sıfırın altına düşmektedir. Bu durum Şekil 2.10 ile uyum içindedir.

Şekil 2.13 'de silindir ve küp biçimli kuantum noktasının bağlanma enerjisinin nokta hacmine göre değişim grafiği $F=20$ kV/cm değeri için, Şekil 2.14'te ise $F=100$ kV/cm değeri için çizilmiştir.

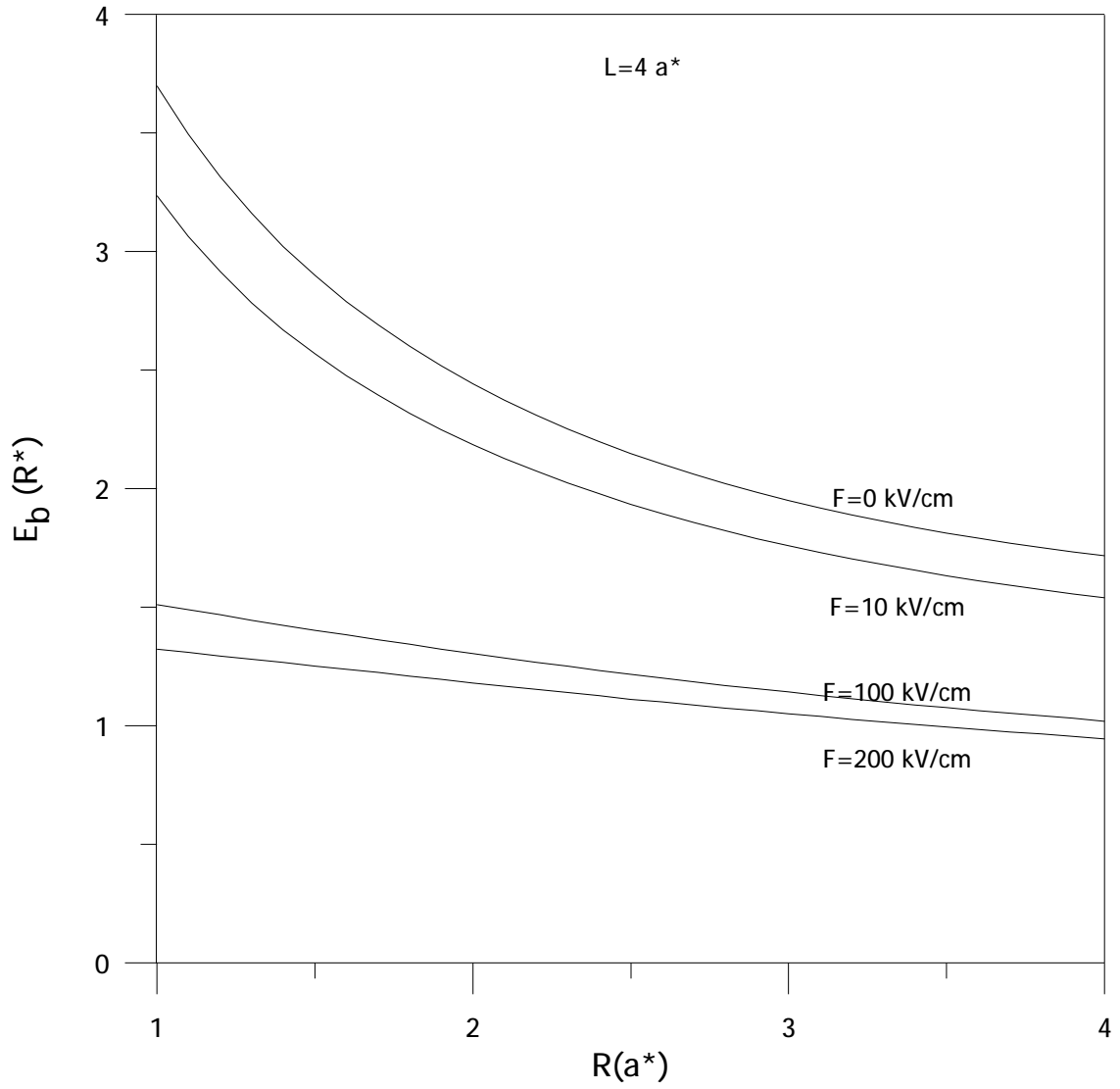
Şekil 2.15'te kübik ve silindirik kesitli kuantum noktasındaki elektronun yabancı atoma bağlanma enerjilerinin farkı $F=20$ kV/cm ve $F=100$ kV/cm değerleri için nokta hacmine göre çizilmiştir.

Şekil 2.16 'da silindirik kuantum kutusunun farklı yarıçap ve uzunluk değerleri için, elektrik alanın $F=100$ kV/cm değeri için bağlanma enerjisinin silindirin hacmine göre değişimi gösterilmiştir. **a)** $L=1 a^{*}$ 'da sabit tutulup R yarıçapı attırılmıştır, **b)** $L=0.5 a^{*}$ 'da sabit tutulup R yarıçapı attırılmıştır, **c)** $R=1 a^{*}$ 'da sabit tutulup L yüksekliği attırılmıştır ve

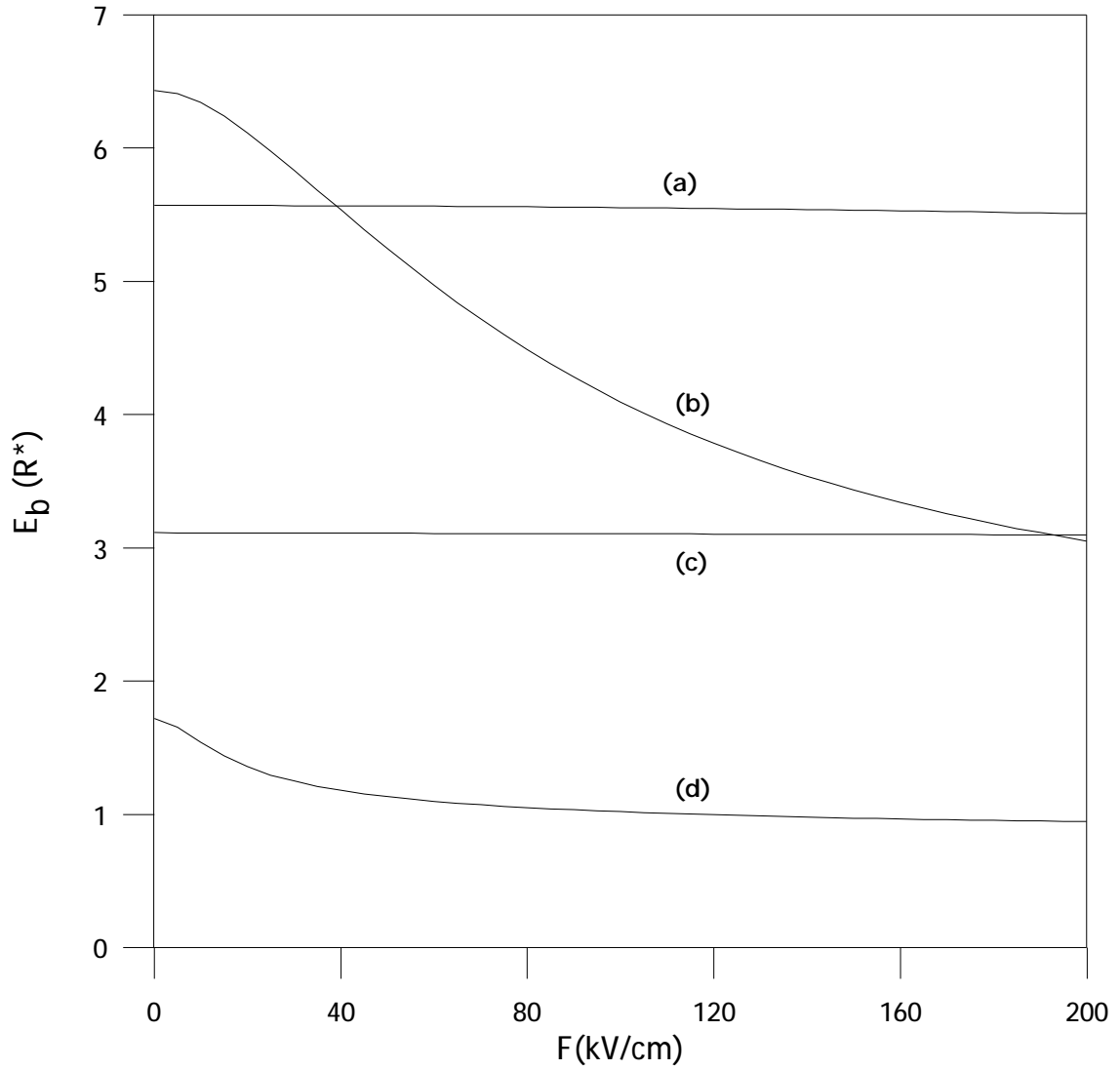
son olarak **d**) $R=0.5643 a^*$ 'da sabit tutulup L yüksekliđi attırılmıřtır.



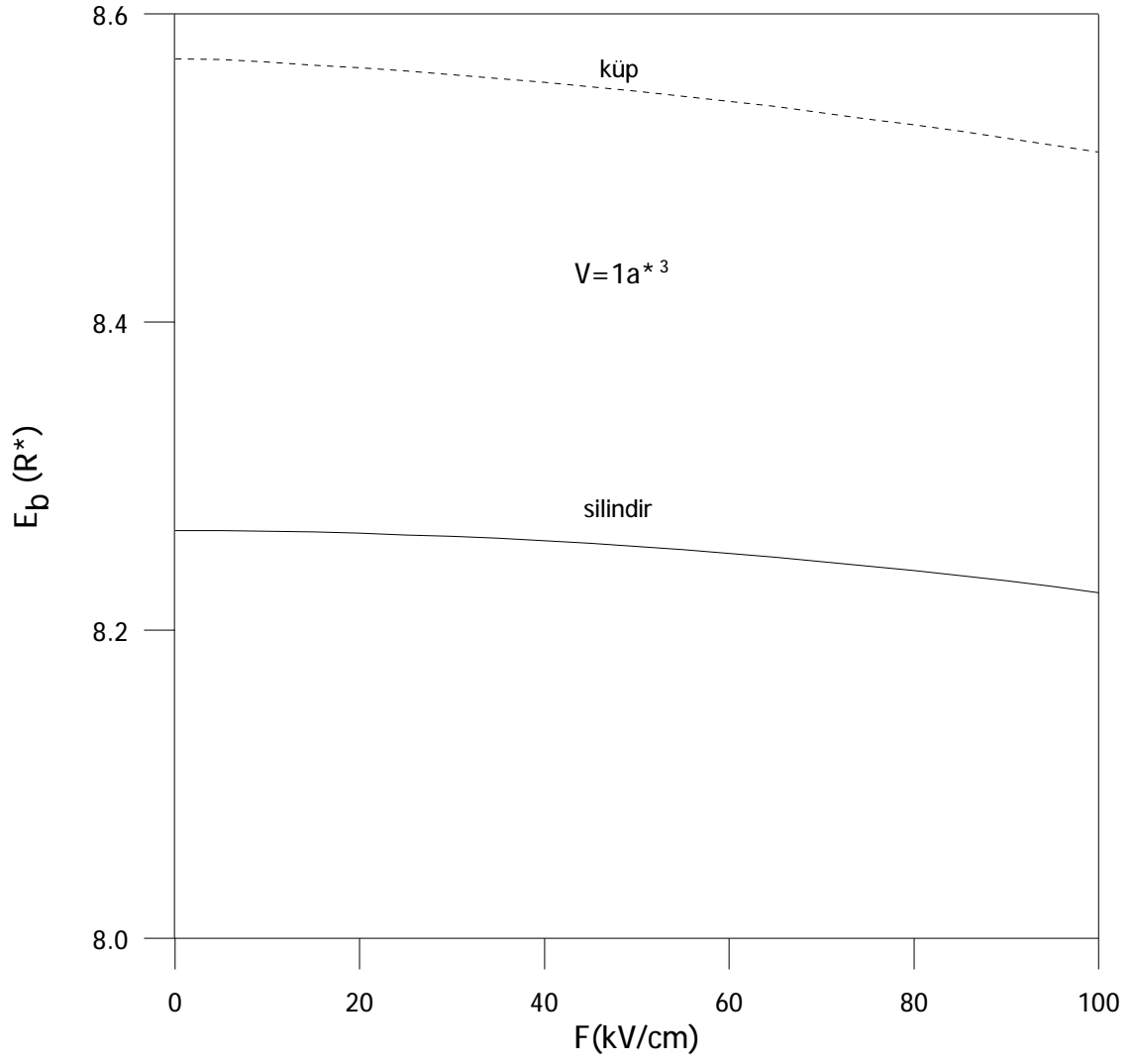
Şekil 2.5) Silindirik kuantum kutusunda farklı elektrik alan şiddetleri için, yabancı atom bağlanma enerjisinin silindirin boyuna göre değişim grafiği



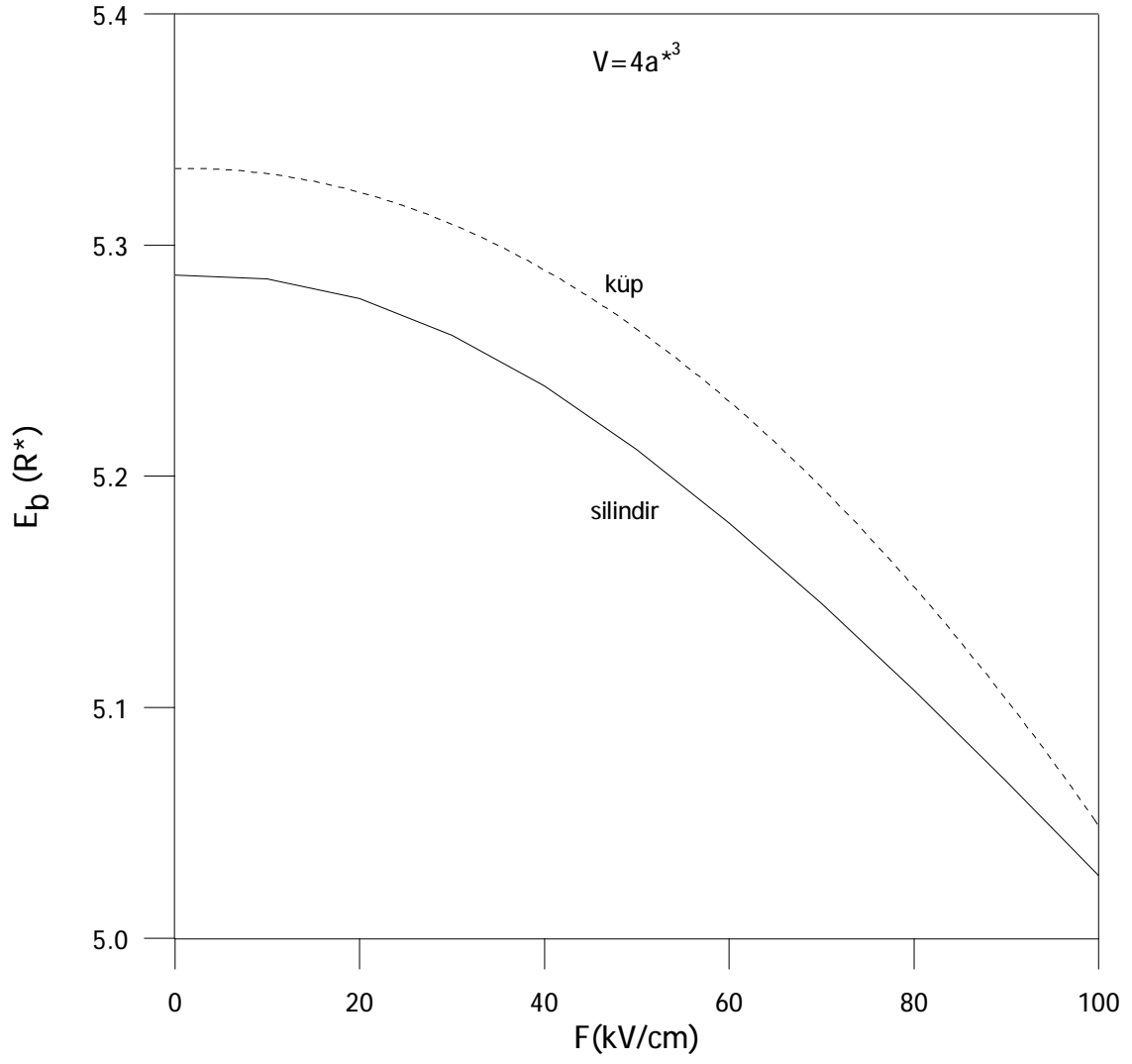
Şekil 2.6) Silindirik kuantum kutusunda farklı elektrik alan şiddetleri için, yabancı atom bağlanma enerjisinin silindir yarıçapına göre değişim grafiği



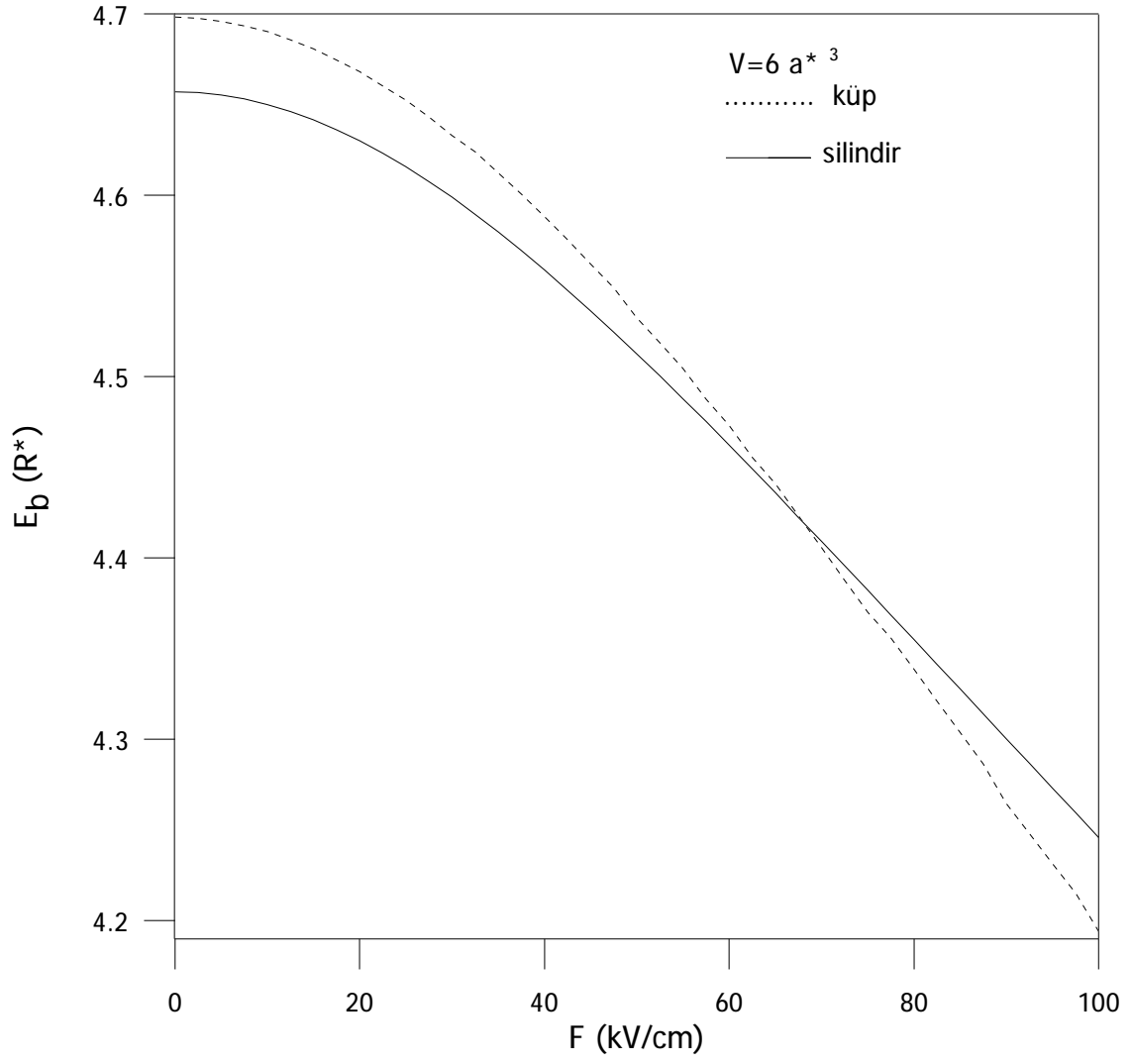
Şekil 2.7) Silindirik kuantum noktasının merkezinde bulunan yabancı atomun bağlanma enerjisinin farklı silindir yarıçapları ve yükseklikleri için elektrik alan şiddetine göre değişimi. **a)** $L=1 \text{ a}^*$, $R=1 \text{ a}^*$, **b)** $L=2.5 \text{ a}^*$, $R=0.5 \text{ a}^*$, **c)** $L=0.5 \text{ a}^*$, $R=2.5 \text{ a}^*$, **d)** $L=4 \text{ a}^*$, $R=4 \text{ a}^*$.



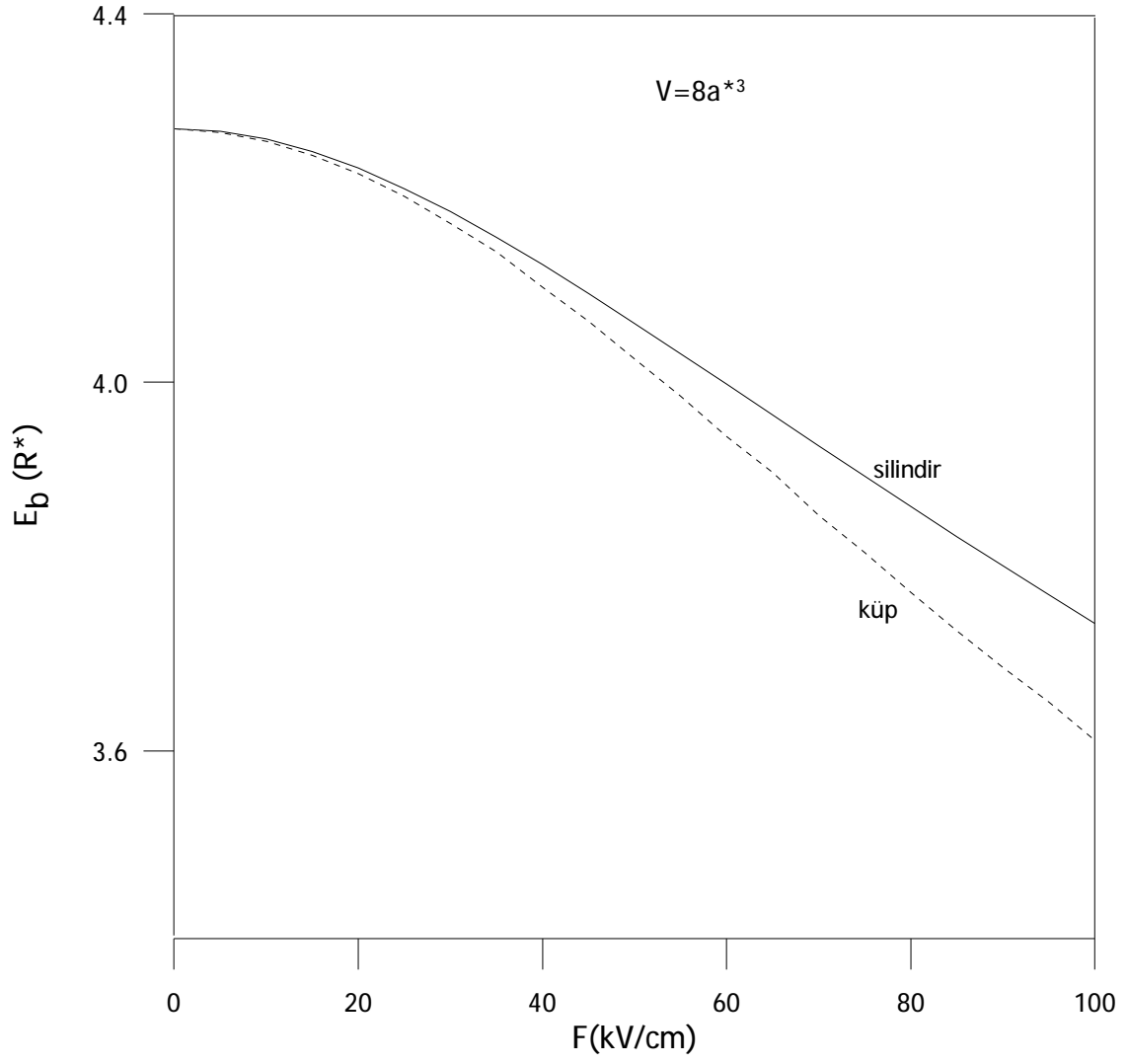
Şekil 2.8) Eşit hacimde bulunan silindir ve küp biçimli kuantum kutularının bağlanma enerjilerinin elektrik alan şiddetine göre değişimi.



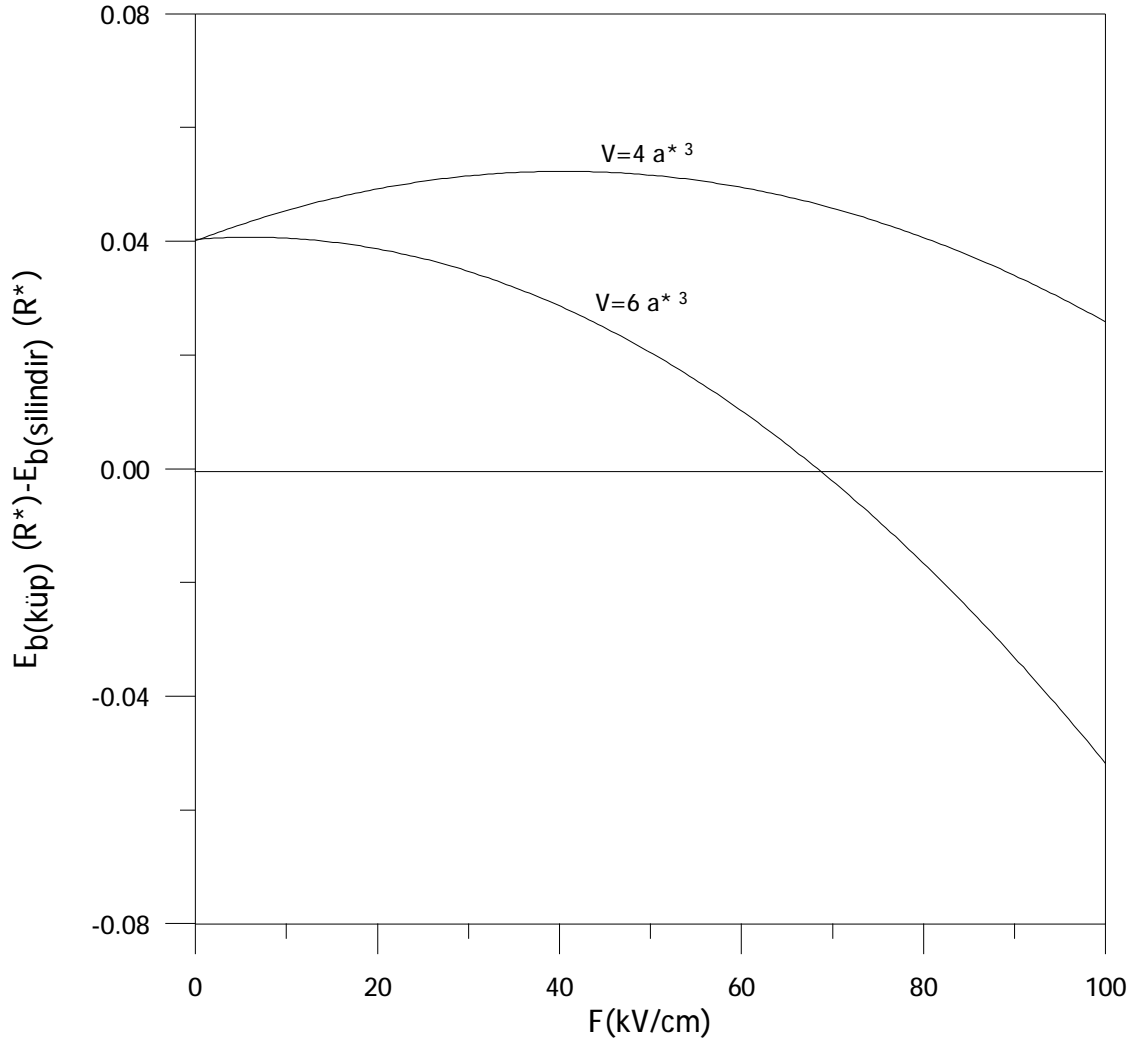
Şekil 2.9) Eşit hacimde bulunan silindir ve küp biçimli kuantum kutularının bağlanma enerjilerinin elektrik alan şiddetine göre değişimi.



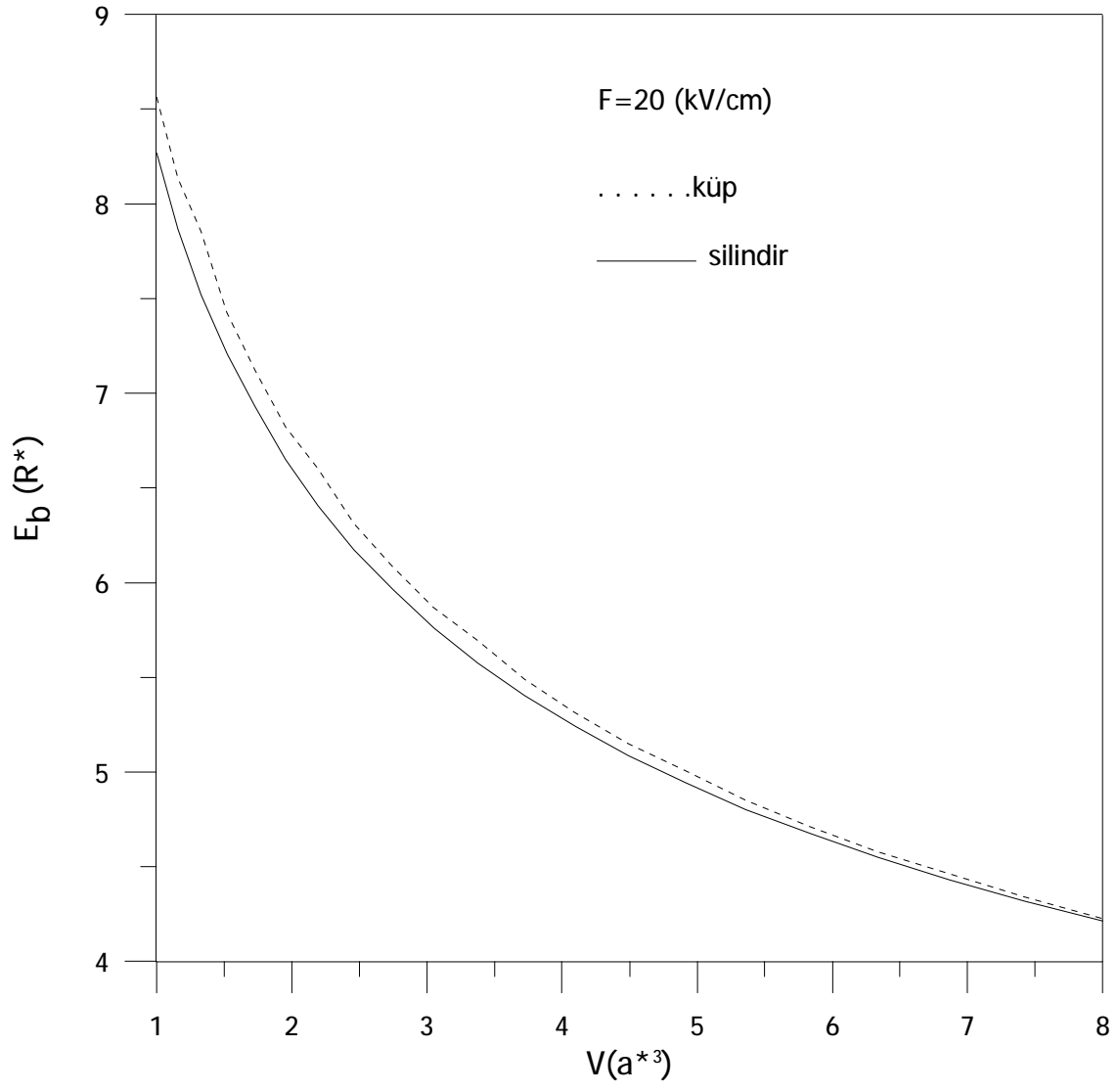
Şekil 2.10) Eşit hacimde bulunan, silindir ve küp biçimli kuantum kutularının bağlanma enerjilerinin elektrik alan şiddetine göre değişimi.



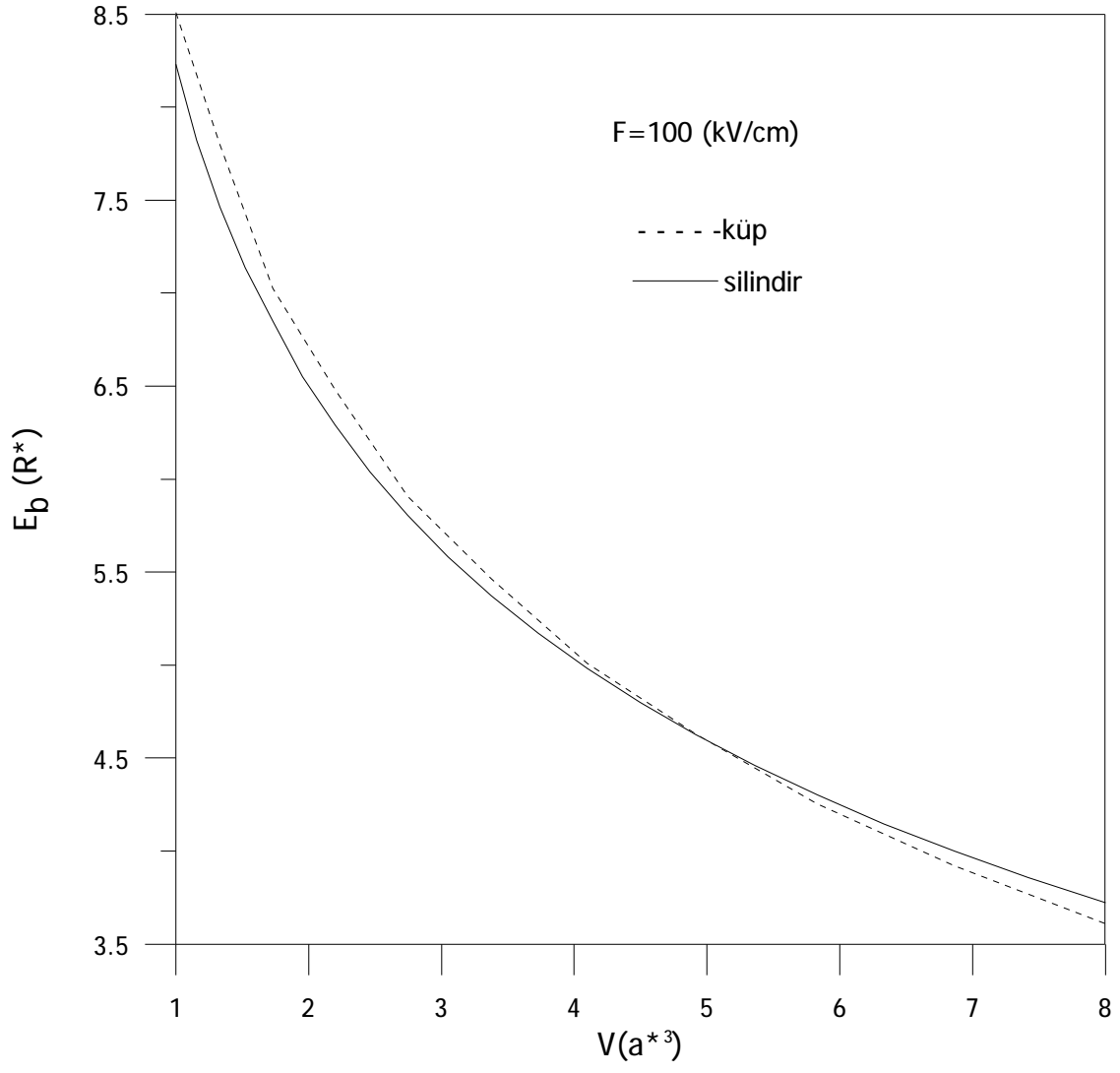
Şekil 2.11) Eşit hacimde bulunan, silindir ve küp biçimli kuantum kutularının bağlanma enerjilerinin elektrik alan şiddetine göre değişimi.



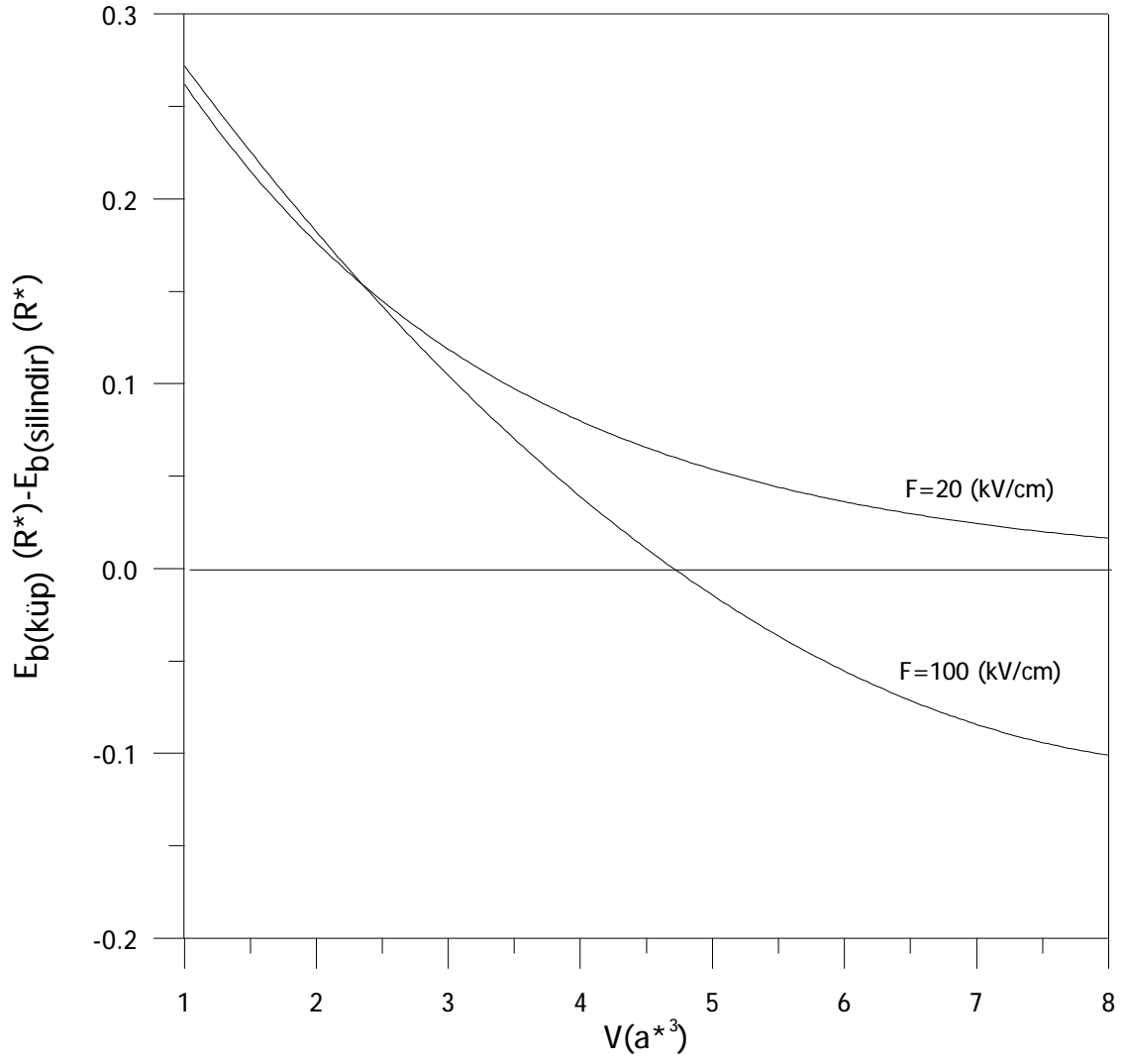
Şekil 2.12) Kübik ve silindirik kesitli kuantum noktasındaki elektronun yabancı atoma bağlanma enerjilerinin farkının değişik nokta hacimleri için elektrik alanın fonksiyonu olarak değişim grafiği



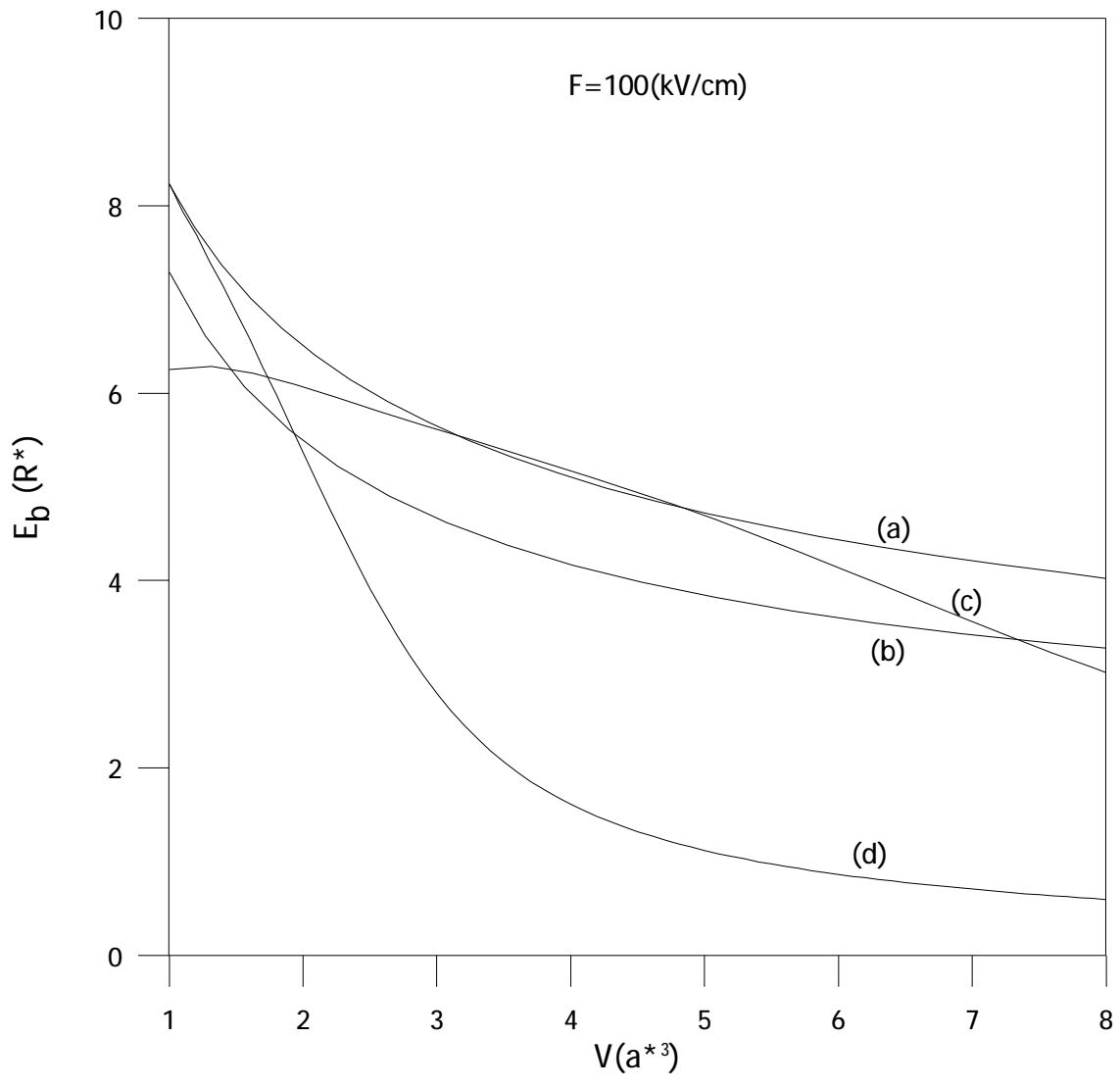
Şekil 2.13) Silindir ve küp biçimli kuantum noktasının bağlanma enerjisinin nokta hacmine göre değişim grafiği.



Şekil 2.14) Silindir ve küp biçimli kuantum noktasının bağlanma enerjisinin nokta hacmine göre değişim grafiği.



Şekil 2.15) Kübik ve silindirik kesitli kuantum noktasındaki elektronun yabancı atoma bağlanma enerjileri farkının nokta hacmine göre değişim grafiği.



Şekil 2.16) Silindirik kuantum noktasında farklı yarıçap ve uzunluk değerleri için bağlanma enerjisinin nokta hacmine göre değişim grafiği. **a)** $L=1 a^*$ (sabit), **b)** $L=0.5 a^*$ (sabit), **c)** $R=1 a^*$ (sabit), **d)** $R=0.5643 a^*$ (sabit)

SONUÇ VE TARTIŞMA

Kübik ve silindirik GaAs kuantum kutusunda, sistemin taban durum enerjileri ve yabancı atom bağlanma enerjileri araştırılmıştır. Sisteme sonsuz potansiyel uygulanması durumu ele alınmış ve bu durumda sistemin enerjisi incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar önceki çalışmalarla (Elangovan vd. ,1992) ve (Duque vd., 1997) uyum içindedir. Kübik ve silindirik GaAs kuantum kutularının boyutları arttırıldığında, taban durum enerjisi ve yabancı atomun bağlanma enerjisinin her ikisinin birden azaldığı görülmüştür. Bu azalma düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin ortak özelliğidir. Burada kutu 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 azalma daha büyük kutu genişlikleri için daha da belirgin hale gelmektedir. Sisteme uygulanan elektrik alan polarizasyonda ve taban durum enerjilerinde kaymalara neden olmaktadır. Ayrıca elektrik alan, elektronu yabancı atomdan uzaklaşmaya zorladığı için bağlanma enerjisi azalmaktadır.

Kübik GaAs kuantum kutusu için sistemin taban durum enerjileri ve yabancı atom bağlanma enerjileri Şekil 1.1, Şekil 1.2 ve Şekil 1.4 'de , silindirik GaAs kuantum kutusu için sistemin taban durum enerjileri ve yabancı atom bağlanma enerjileri Şekil 2.1, Şekil 2.2, Şekil 2.5 ve Şekil 2.6 'da görülmektedir. Bu sonuçlardan kübik ve silindirik kuantum kutularının genişliğinin artmasıyla birlikte, sistemin taban durum enerjilerinin ve yabancı atom bağlanma enerjilerinin azaldığı görülmektedir. Sonuçlar (Elangovan vd. ,1992) ve (Duque vd., 1997) ile uyum göstermektedir. Aynı şekilde taban durum enerjileri ve yabancı atom bağlanma enerjilerinin elektrik alan şiddetine göre değişimi kübik kuantum kutusu için Şekil 1.3 ve Şekil 1.5 'de, silindirik kuantum kutusu için Şekil 2.3, Şekil 2.4 ve Şekil

2.7 'de görülmektedir. Şekil 2.8, Şekil 2.9, Şekil 2.10 ve Şekil 2.11 'de eşit hacimde bulunan küp ve silindir biçimli kuantum kutularının bağlanma enerjilerinin elektrik alan şiddetine göre değişimi karşılaştırıldı. Şekil 2.12 'de kübik ve silindirik kuantum kutularının bağlanma enerjileri arasındaki farkın elektrik alan şiddetine göre değişimi $V = 4a^3$ ve $V = 6a^3$ hacimleri için görülmektedir. Şekil 2.13 ve Şekil 2.14 'de küp ve silindir biçimli kuantum kutularının bağlanma enerjilerinin kutu hacmine göre değişimleri karşılaştırıldı. Şekil 2.15 'de küp ve silindir biçimli kuantum noktalarında elektronun yabancı atoma bağlanma enerjileri farkının nokta hacmine göre değişimi $F=20$ (kV/cm) ve $F=100$ (kV/cm) değerleri için karşılaştırıldı. Şekil 2.16 'da silindirik kuantum noktasında bağlanma enerjisinin nokta hacmine göre değişimi farklı yarıçap ve uzunluk değerleri için karşılaştırıldı.

Sonuç olarak kuantum noktalarında farklı geometriler seçilmesinin alt bant ve bağlanma enerjilerinde önemli bir farklılık sergilemediği anlaşılmaktadır. Ancak elektronu temsil eden dalga fonksiyonunun sınırlandırıldığı boyutlar büyük önem taşımaktadır. Şekil 2.16 'da bu durum açık olarak gözlenebilmektedir. Silindirin yüksekliği azaltıldığında ve yarıçap büyütüldüğünde bağlanma enerjisi azalmayla birlikte bir davranış farklılığı göstermez. Öte yandan yarıçap $R=1 a^*$ yani Bohr yarıçapı seçilip yükseklik değiştirilerek sınırlama azaltıldığında (Şekil 2.16.c) bağlanma enerjisinin davranışı karakter farklılığı gösterir. Aynı durum $R=0.5643 a^*$ (yarım Bohr yarıçapı) seçilerek dalga fonksiyonu sıkıştırıldığında bağlanma enerjisinde çok hızlı bir düşüşe yol açmaktadır. Bu davranışlar ise dalga fonksiyonunun nokta tarafından nasıl sınırlandırıldığının önem taşıdığını ispatlar.

Buradaki çalışmalar; kübik ve silindirik kuantum kutusunda magnetik alanın etkisi araştırılabilir. Kübik ve silindirik kuantum kutusunda yabancı atomun konumu değiştirilebilir. Taşıyıcı yük olarak eksiton veya boşluk seçildiğinde enerji durumlarındaki değişimlerde araştırılabilir.

KAYNAKLAR

- ELANGO VAN A. , NAVANEETHAKRISHNAN K. Polarizability of a donor in a quantum box. *Solid State Communications*. 83, 635,1992.
- DUQUE C A. , MONTES A. , MORALES A. L. , PORRAS-MONTENEGRO N. Effect of an applied electric field on the binding energy of shallow donor impurities in GaAs low-dimensional systems. *J. Phys. Condens. Matter* 9 (1997), 5977-5987
- VIVAS-MORENO J. J. , PORRAS-MONTENEGRO N. The Effects of Quantum Confinement and Magnetic Fields on the Binding Energy of Hydrogenic Impurities in Low-Dimensional System. *Phys. Stat. Sol. (b)* 210,723 (1998)
- CHARROUR R. , BOUHASSOUNE M. , FLIYOU M. , NOUGAOUI A. Magnetic field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in cylindrical quantum dot. *Physica B* 293 (2000) 137-143
- MESE A. I. , OKAN S. E. Binding energy of relativistic hydrogenic impurities in cylindrical quantum well wires under an applied electric field. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 1-7 (2004)/DOI 10.1002/pssb.200402100
- EL-SAID M. Donors and Excitons in a Parabolic Quantum Dot; an Algebraic Operator Method. *Tr. J. of Physics* 19 (1995), 1542-1549
- BASTARD G. , MENDEZ E. E. Variational calculations on a quantum well in an electric field. *Physical Reviews*. B28, 3241, 1989
- EL-SAID M. Study of the energy level-crossing in GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ quantum dots. *Solid State Communications*. 97, 971, 1996
- KUMAR A. , LAUX S. E. , STERN F. Electron states in GaAs quantum dot in magnetic field. *Physical Reviews*. B42, 5166, 1990
- VARSHNI Y. P. Simple wavefunction for an impurity in a parabolic quantum dot. *Superlattices and Microstructures*. 23, 1, 1998

ÖZGEÇMİŐ

1980 yılında Edirne' de doğdum. İlk ve orta öğrenimimi Yüksel Yeşil İlköğretim Okulunda, lise öğrenimimi ise Edirne Lisesinde tamamladım. 1998 yılında Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girdim ve 2002 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.