

**KUANTUM KUYULARINDA  
VARYASYONEL VE AIRY ÇÖZÜMLERİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI**

**ASLI KIZILAY**

**Tez Yöneticisi: Prof. Dr. Hasan AKBAŞ**

**EDİRNE - 2005**

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

**KUANTUM KUYULARINDA**  
**VARYASYONELVE AİRY ÇÖZÜMLERİ**

**ASLI KIZILAY**

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

**Tez yöneticisi: Prof.Dr. Hasan AKBAŞ**

**2005**

**EDİRNE**

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

**KUANTUM KUYULARINDA  
VARYASYONELVE AİRY ÇÖZÜMLERİ**

**ASLI KIZILAY**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI**

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

**Prof.Dr.Hasan AKBAŞ  
(Danışman)**

**Prof.Dr.Ş. Erol OKAN  
(Üye)**

**Yrd.Doç. Dr. Cengiz DANE  
(Üye)**

## TEŐEKKÜR

Tez yneticiliđimi stlenerek, alıŐmalarım sırasında tm alıŐma ortamını ve imkanlarımı sađlayan, aydınlatıcı bilgilerini esirgemeyen, Trakya niversitesi Fen-Edebiyat Fakltesi Fizik Blm Genel Fizik Anabilim Dalı BaŐkanı Prof. Dr. Hasan AKBAŐ'a teŐekkr ederim.

alıŐmalarım esnasında aydınlatıcı bilgilerini ve desteđini esirgemeyen Trakya niversitesi Fen-Edebiyat Fakltesi Fizik Blm Katıhal Fiziđi Anabilim Dalı BaŐkanı Prof. Dr. Ő. Erol OKAN'a da ayrıca teŐekkr ederim.

alıŐmalarım esnasında aydınlatıcı bilgilerini ve desteđini esirgemeyen Yrd. Doç. Dr. İlhan ERDOĐAN' a 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.

Tez alıŐmalarım sırasında tm manevi desteđini benden esirgemeyen aileme teŐekkr ederim.

## ÖZET

Bu teorik çalıřmada , GaAs-  $Ga_{1-x}Al_x$  As kuantum kuyularında hapsedilmiş bir elektron incelendi. Varyasyonel yaklaşım ve Airy çözümleri kullanılarak etkin kütle yaklaşımında sabit elektrik alanın etkisini hesapladık.

GaAs bölgesinde yerleşmiş donör yabancı atomunun bağlanma enerjisi Varyasyonel yaklaşım yoluyla hesaplandı.

Teorik sonuçlarımız literatürle uyum içindedir.

## SUMMARY

In this a theoretical study an electron confined in GaAs- $Ga_{1-x}Al_x$ As quantum wells is considered. We have calculated the effect of constant electric field in effective-mass approximation using Variational approach and Airy solution.

Binding energy of donor impurity located in GaAs region have calculated through the variational approach.

Our theoretical results are in agreement with literature.

## İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	
..i	
SUMMARY.....	
ii	
TEŞEKKÜRLER.....	ii
i	
İÇİNDEKİLER.....	i
v	
SİMGELER.....	
v	
GİRİŞ.....	
1	
1.1 ) Simetrik Sonsuz Potansiyel Kuantum Kuyusu İçine Hapsedilmiş Olan Bir Parçacığın Özellikleri.....	2
1.2 ) Anti-Simetrik Sonsuz Potansiyel Kuantum Kuyusu İçine Hapsedilmiş Olan Bir Parçacığın Özellikleri.....	13
2.) Simetrik Bir Sonlu Potansiyel Kuantum Kuyusu İçine Hapsedilmiş Olan Bir Parçacığın Özellikleri.....	19
3.1 ) Düzgün Elektrik Alan Gören Simetrik Sonsuz Kuantum Kuyusu İçinde Hapsedilen Elektron Ait Schrödinger Denkleminin Varyasyonel Yöntemle Çözümü.....	28
3.2 ) Düzgün Elektrik Alan Gören Simetrik Sonlu Kuantum Kuyusu İçinde Hapsedilen Elektron Ait Schrödinger Denkleminin Varyasyonel Yöntemle Çözümü.....	36
4.) Düzgün Elektrik Alan Gören Sonsuz Kuantum Kuyusuna Hapsedilen Elektron ve Airy Çözümleri.....	43
5.1) Düzgün Elektrik Alan Gören $-L/2$ ' den $+L/2$ ' ye kadar Sonsuz $+L/2$ ' den Sonsuza $V_0$ Potansiyeline Sahip Kuantum Kuyusuna Hapsedilen Parçacığın Varyasyonel Yöntemle İncelenmesi.....	48
5.2) Düzgün Elektrik Alan Gören $-L/2$ ' den $+L/2$ ' ye kadar Sonsuz	

+L/2 ‘ den Sonsuza Vo Potansiyeline Sahip Kuantum Kuyusuna Hapsedilen Parçacık Ve Airy Çözümleri.....	54
<b>6.1)</b> Sonsuz Kuantum Kuyusunda Yabancı Atom Problemi.....	63
<b>6.2)</b> Sonlu Kuantum Kuyusunda Yabancı Atom Problemi.....	68
Sonuç ve Tartışma.....	72-
73	
Kaynaklar.....	7
4	
Özgeçmiş.....	7
5	

## SİMGELER

$m^*$	Elektronun etkin kütlesi
$a_0$	Bohr yarıçapı
$a^*$	Etkin Bohr yarıçapı
$R^*$	Etkin Rydberg enerjisi
$l$	Varyasyonel Parametre
$y$	Dalga fonksiyonu
$e$	Dielektrik sabiti
$b$	Varyasyonel Parametre
$h$	Hamiltonien ' deki elektrik alan terimi
$x$	Değişken
$z_i$	Yabancı atomun konumu
$r$	Koordinat değişkeni

## GİRİŞ

MBE (Molecular-beam epitaxy) , metal organic vapor ve LPE (Liquid Phase Epitaxy) gibi son yıllarda hızla gelişen deneysel teknoloji ince bir potansiyel kuyu üretmeyi mümkün kılar. Hacim elemanında valans bantlarının farklılığından dolayı taşıyıcılar potansiyel kuyusunda hapsedilebilir. Günümüzde bu deneysel teknolojiyle üretilen elektronik devre elemanlarının fiziği son günlerde fizik ve elektronik dünyasında çok büyük ilgi görmektedir.

Bu çalışmada bir boyutlu kuantum kuyularına hapsedilen elektronların davranışları incelenecektir. Ayrıca elektronun düzgün elektrik alana bağlı olarak ; simetrik sonsuz , sonlu ve  $-L/2$  'de sonsuz  $+L/2$  ' de  $V_0$  potansiyel engeline sahip kuantum kuyularında nasıl davrandığına , enerji seviyelerinin nasıl değiştiğine Varyasyonel olarak ve Airy fonksiyonu ile bakılacak. Bunun yanında kuyu içinde bulunan elektrona çeşitli konumlardaki yabancı atomun etkisi araştırılacaktır.

Elektronun , elektrik alan ve yabancı atom etkisi sonucunda sahip olduğu enerjileri , deneme dalga fonksiyonları ile yaklaşık olarak bulunacaktır.

## 1.1) SİMETRİK SONSUZ POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLMİŞ OLAN ELEKTRONUN ÖZELLİKLERİ

İki sonsuz yükseklikteki potansiyel duvarı arasına hapsedilmiş bir parçacığı inceleyelim. Bu kuyunun potansiyel fonksiyonu aşağıdaki gibi simetrik olsun;

$$V(z) = \begin{cases} 0 ; & |z| < L/2 \\ \infty ; & |z| > L/2 \end{cases} \quad (1.1.1)$$

ve bu ifadeye göre simetrik sonsuz potansiyel kuyusunun şekli aşağıdaki gibi olur ;

Şekil 1.1) Simetrik sonsuz potansiyel kuyusu

Potansiyel enerji ' $z = \pm L/2$ ' de sonsuz olduğundan parçacığın duvarların dışında bulunma olasılığı sıfırdır. Buna göre  $\psi(z)$  dalga fonksiyonu  $|z| > L/2$  için sıfır olmalıdır ve Schrödinger denklemi sadece kuyu içinde çözülmelidir.

$-L/2$  ' den  $L/2$  ' ye sonsuz potansiyel kuyusu içinde bir  $m^*$  etkin kütleli ve  $-e$  elektron yüklü bir parçacığın Schrödinger denklemi ;

$$H = -\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad (1.1.2)$$

H Hamiltonien ' i olmak üzere ,

$$Hy(z) = Ey(z) \quad (1.1.3)$$

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2 y(z)}{\partial z^2} + V(z)y(z) = Ey(z)$$

Elektron sonsuz kuantum kuyusunda hapsedilmişse kuyu içinde elektronun potansiyel enerjisi  $V=0$  olmak üzere Schrödinger denklemi ;

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2 y(z)}{\partial z^2} = Ey(z) \quad (1.1.4)$$

şeklinde olur.

$$\frac{\partial^2 y(z)}{\partial z^2} = -\frac{2m^*}{\eta^2} Ey(z)$$

Burada  $k^2 = \frac{2m^*}{\eta^2} E$  dersek ;

$$\frac{\partial^2 y(z)}{\partial z^2} + k^2 y(z) = 0$$

olur. Bu denklemi çözecek olursak ;

$$(D^2 + k^2)y(z) = 0 \Rightarrow (D^2 + k^2) = 0 \Rightarrow D^2 = -k^2 \Rightarrow D = \pm ik$$

$$\begin{aligned} y(z) &= C_1 e^{ikz} + C_2 e^{-ikz} \\ &= C_1 \cos(kz) + C_1 i \sin(kz) + C_2 \cos(kz) - C_2 i \sin(kz) \end{aligned}$$

$$y(z) = B \cos(kz) + A \sin(kz) \tag{1.1.5}$$

elde edilir. Bu genel çözüme sınır koşullarını uygularsak ;

$$y(L/2) = 0$$

$$y(-L/2) = 0$$

$$y(z = L/2) = B \cos\left(\frac{kL}{2}\right) + A \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

$$y(z = -L/2) = B \cos\left(\frac{kL}{2}\right) - A \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

elde edilir. Bu denklemi çözmek için katsayılar determinantına bakarız.

$$\begin{vmatrix} \sin\left(\frac{kL}{2}\right) & \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{kL}{2}\right) & \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \sin\left(\frac{kL}{2}\right)\cos\left(\frac{kL}{2}\right) + \cos\left(\frac{kL}{2}\right)\sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

$$2\sin\left(\frac{kL}{2}\right)\cos\left(\frac{kL}{2}\right) = 0 \Rightarrow \sin\left(2\frac{kL}{2}\right) = 0$$

$$2\frac{kL}{2} = n\pi$$

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

ve ( $L=2a$  olmak üzere)

$$k^2 = \frac{n^2\pi^2}{4a^2} = \frac{2m^*E}{\hbar^2}$$

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{8m^*a^2}n^2$$

$$E_n = \frac{\pi^2}{4a^2}n^2$$

(1.1.6)

$E_n$  enerjisi elde edilir.

$$y(z) = B\cos(kz) + A\sin(kz)$$

$$y(z) = B\cos\left(\frac{n\pi}{L}z\right) + A\sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right)$$

Yukarıdaki  $\mathcal{Y}(z)$  dalga fonksiyonu içinde iki tür çözüm var diyebiliriz. Tek ve çift durumlar için aşağıdaki dalga fonksiyonları elde edilebilir ;

**$n=tek için$**   $A=0, B \neq 0$

$$y_n^+(z) = B \cos\left(\frac{np}{L} z\right)$$

Burada B katsayısı normalizasyondan  $\int_{-\infty}^{\infty} |y(z)|^2 dz = 1$  bulunur.

$$B^2 \int_{-\infty}^{\infty} \cos^2 \frac{np}{L} z dz = 1$$

$$B^2 \int_{-a}^a \frac{1}{2} \left(1 + \cos 2 \frac{np}{L} z\right) dz = 1$$

$$\frac{B^2}{2} \left\{ z \Big|_{-a}^a + \frac{L}{2np} \sin 2 \frac{np}{L} z \Big|_{-a}^a \right\} = 1$$

$$\frac{B^2}{2} \{2a\} = 1$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

(1.1.7)

Elde ettiğimiz normalizasyon sabiti dalga fonksiyonunda yerine yazılırsa;

$$y_n^+(z) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{np}{L} z\right)$$

$$y_n^+(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{np}{L} z\right) \quad n=1,3,5,\dots \quad (1.1.8)$$

elde edilir. N çift durumlar içinde aynı işlemler yapılırsa ;

**n çift için** ; A ≠ 0, B=0

$$y_n^-(z) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{np}{L} z\right)$$

$$y_n^-(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{np}{L} z\right) \quad n=2,4,6,\dots \quad (1.1.9)$$

elde edilir.[1]

Ayrıca  $E_n$  enerjisinin beklenen değerini kullanarak ta ;

$$E = \left( \frac{\langle y_n(z) | H | y_n(z) \rangle}{\langle y_n(z) | y_n(z) \rangle} \right) \quad (1.1.10)$$

bulabiliriz.

Bu sonuca göre potansiyel kuyusundaki bir parçacığın alabileceği enerji değerleri bir “n” tamsayısına bağlı olarak kesikli değerlerde bulunabilir. Başka deyişle kuantize

edilmiş enerji düzeyleri oluşur.

Nümerik hesaplarda uzunluklar  $a^*$  etkin Bohr yarıçapı enerjiler  $R^*$  etkin Rydberg biriminde seçilmiştir. Bu birim sisteminde ;

$$R^* = \frac{\eta^2}{2m^* a^{*2}} \quad ve \quad a^* = \frac{\eta^2 e}{m^* e^2} \quad (1.1.11)$$

dir. Burada  $e$  ve  $m^*$ , GaAs kristalinde sırasıyla dielektrik sabiti ve elektronun etkin kütesidir. Hesaplarda  $e = 12.5$ ,  $m^* = 0.067m_0$ ,  $a^* = 98.73A^0$ ,  $R^* = 5.83 meV$  alınmıştır.

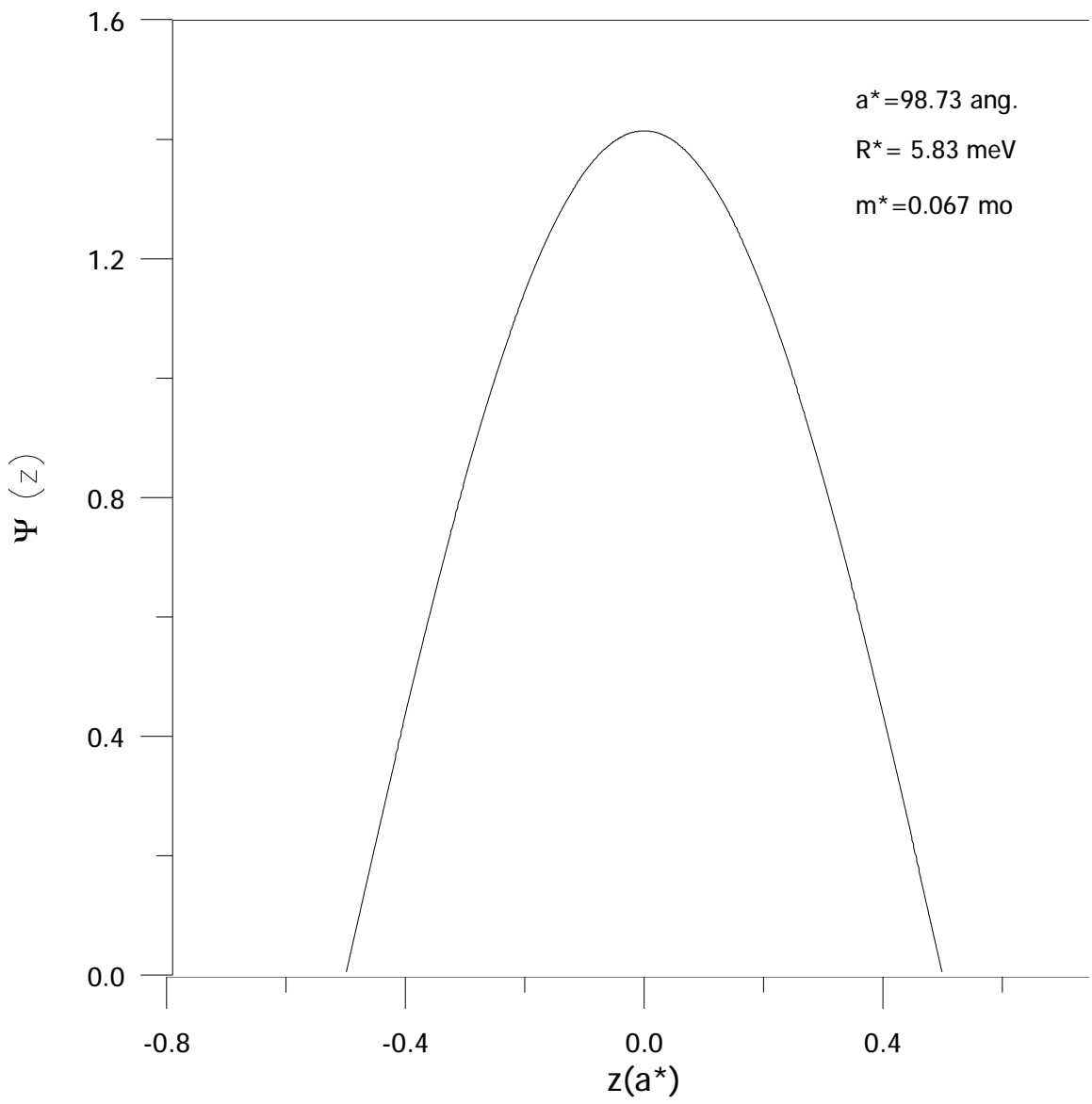
Elektronun taban durum dalga fonksiyonu nümerik olarak hesaplanmış ve kuyu genişliğine bağlı olarak şekil 1.1.1 ' de verilmiştir.

Elektronun taban durum enerjisi hesaplanmış ve kuyu genişliğine bağlı olarak şekil 1.1.2 ' de verilmiştir.

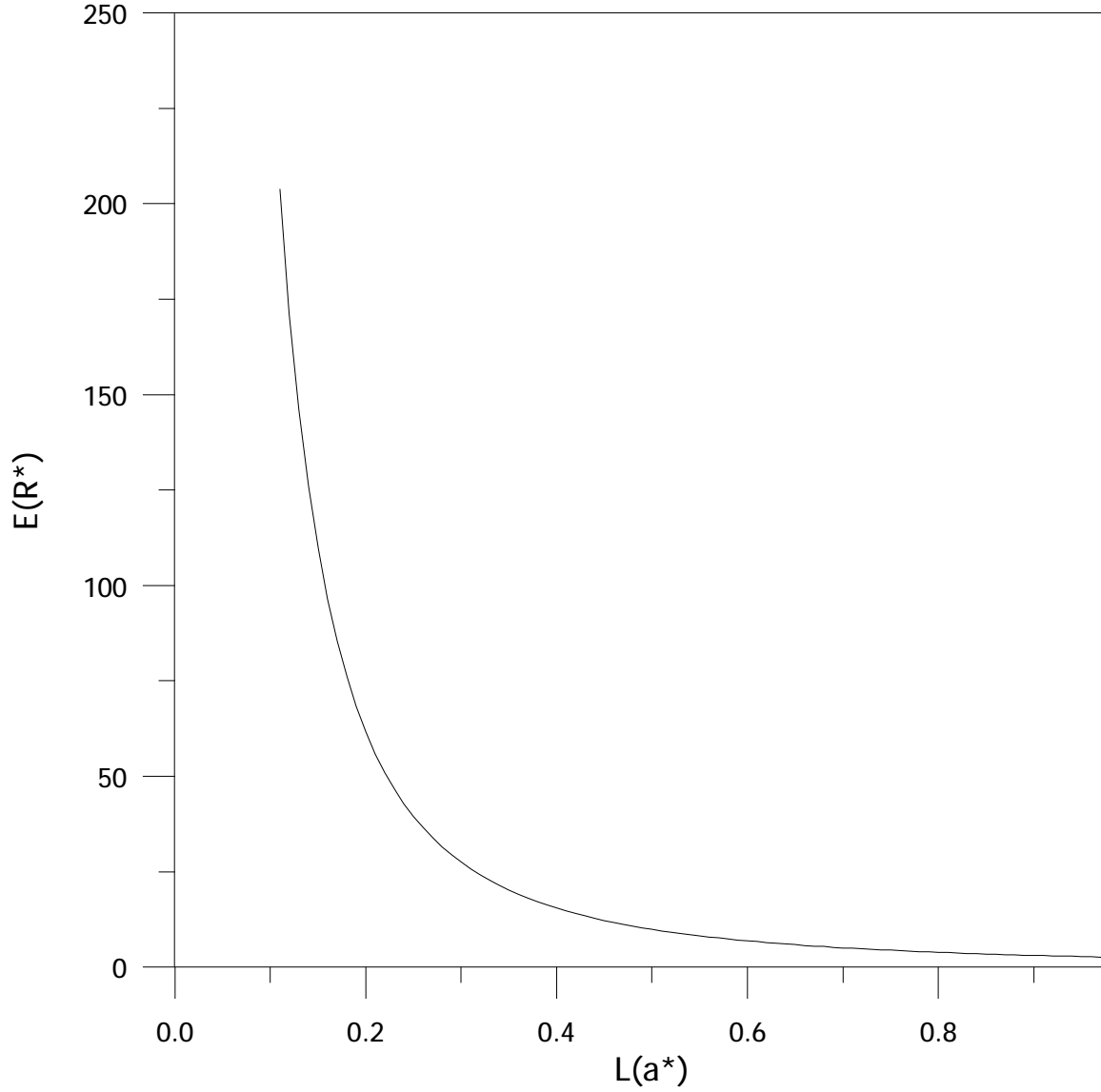
Elektronun birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonu nümerik olarak hesaplanmış ve şekil 1.1.3 ' te verilmiştir.

Elektronun birinci uyarılmış durum enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimini gösteren grafik şekil 1.1.4 ' te verilmiştir.

Elektronun taban durum ve birinci uyarılmış durum enerjilerinin kuyu genişliğine bağlı grafiği karşılaştırmalı olarak şekil 1.1.5 ' te gösterilmiştir.

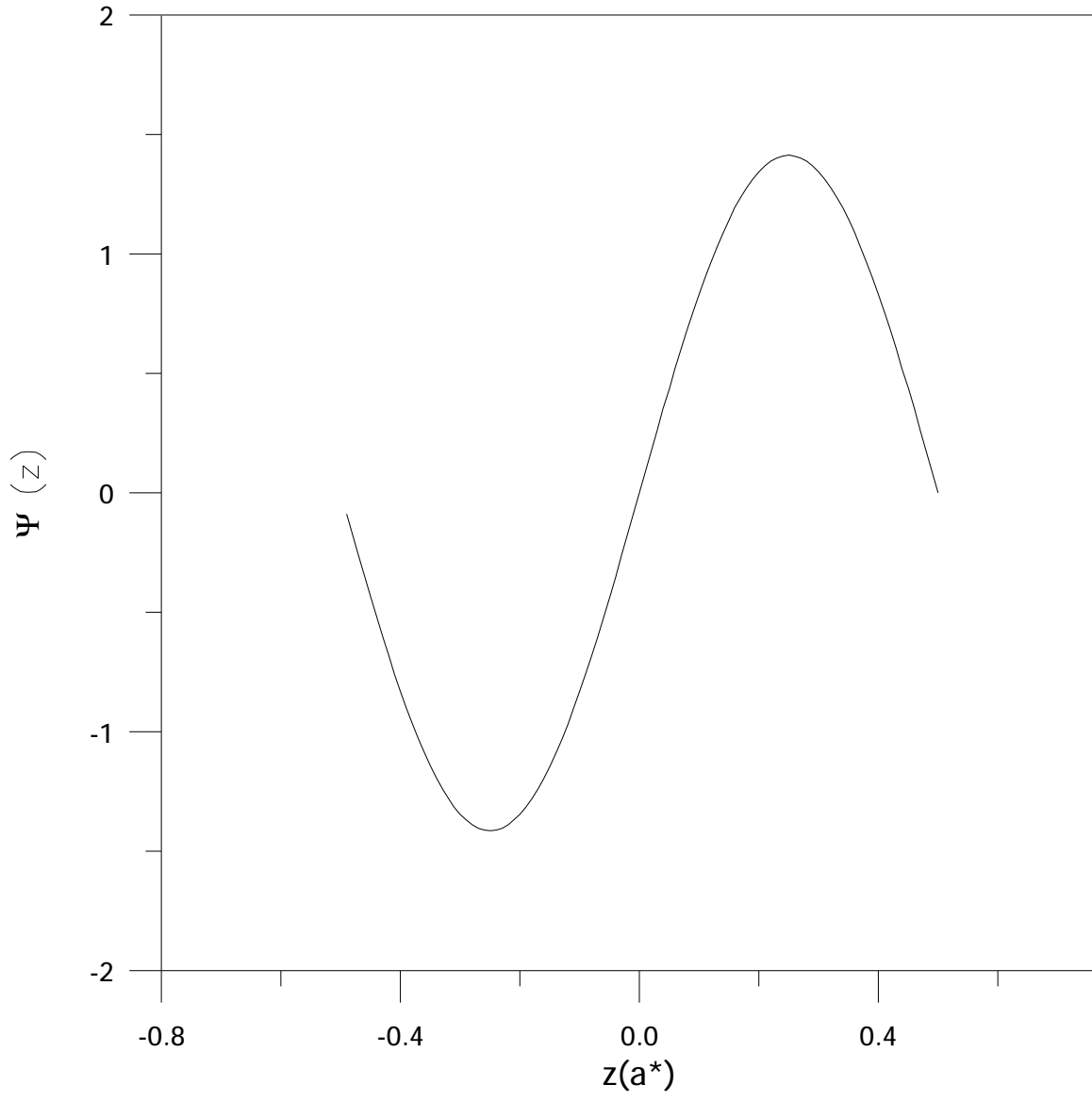


**Şekil 1.1.1)** Simetrik sonsuz potansiyel kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum dalga fonksiyonunun  $z(a^*)$  ile deęişimini gösteren grafik.

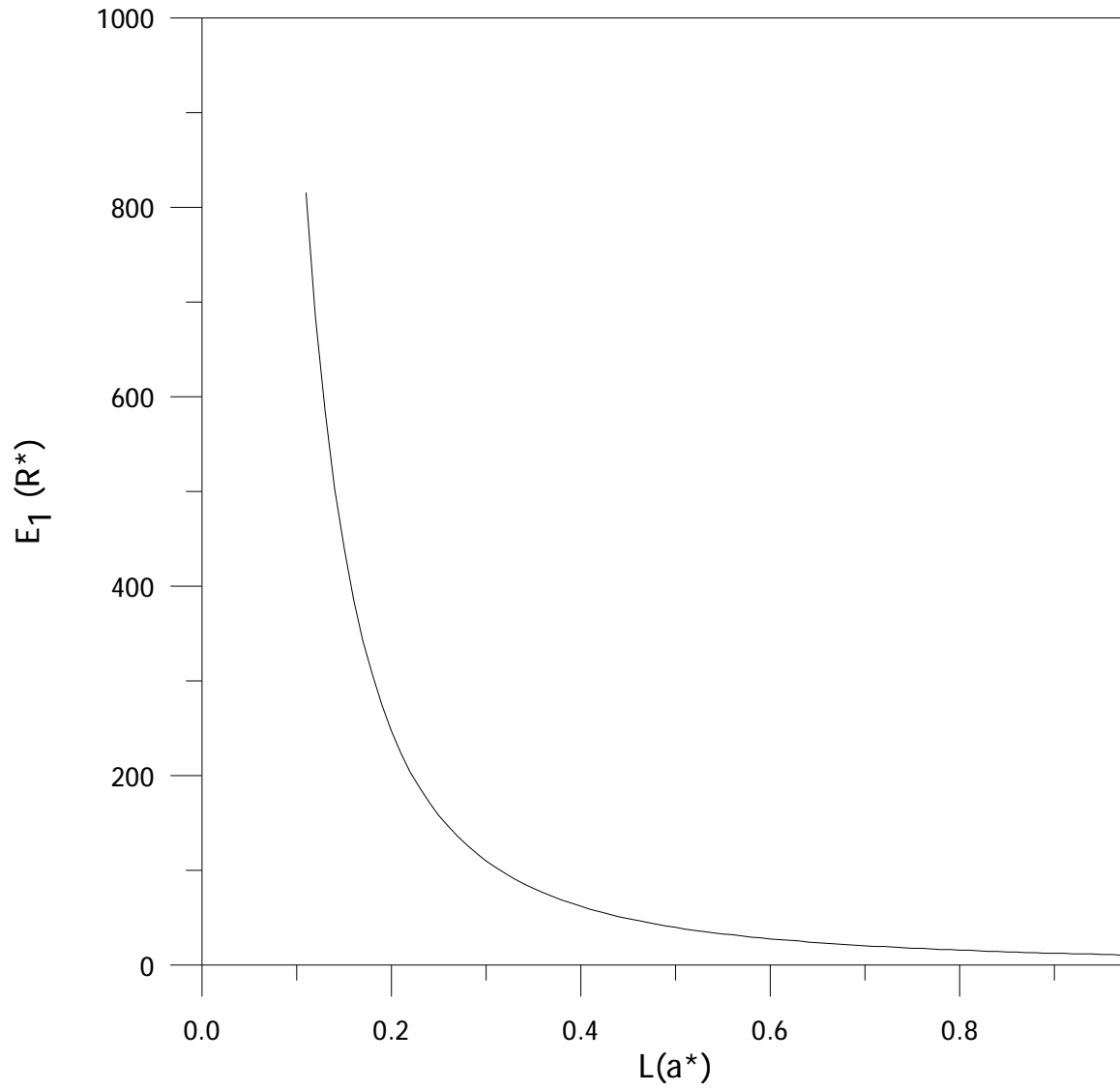


**Şekil 1.1.2 )** Simetrik sonsuz potansiyel kuyusuna hapsedilen bir

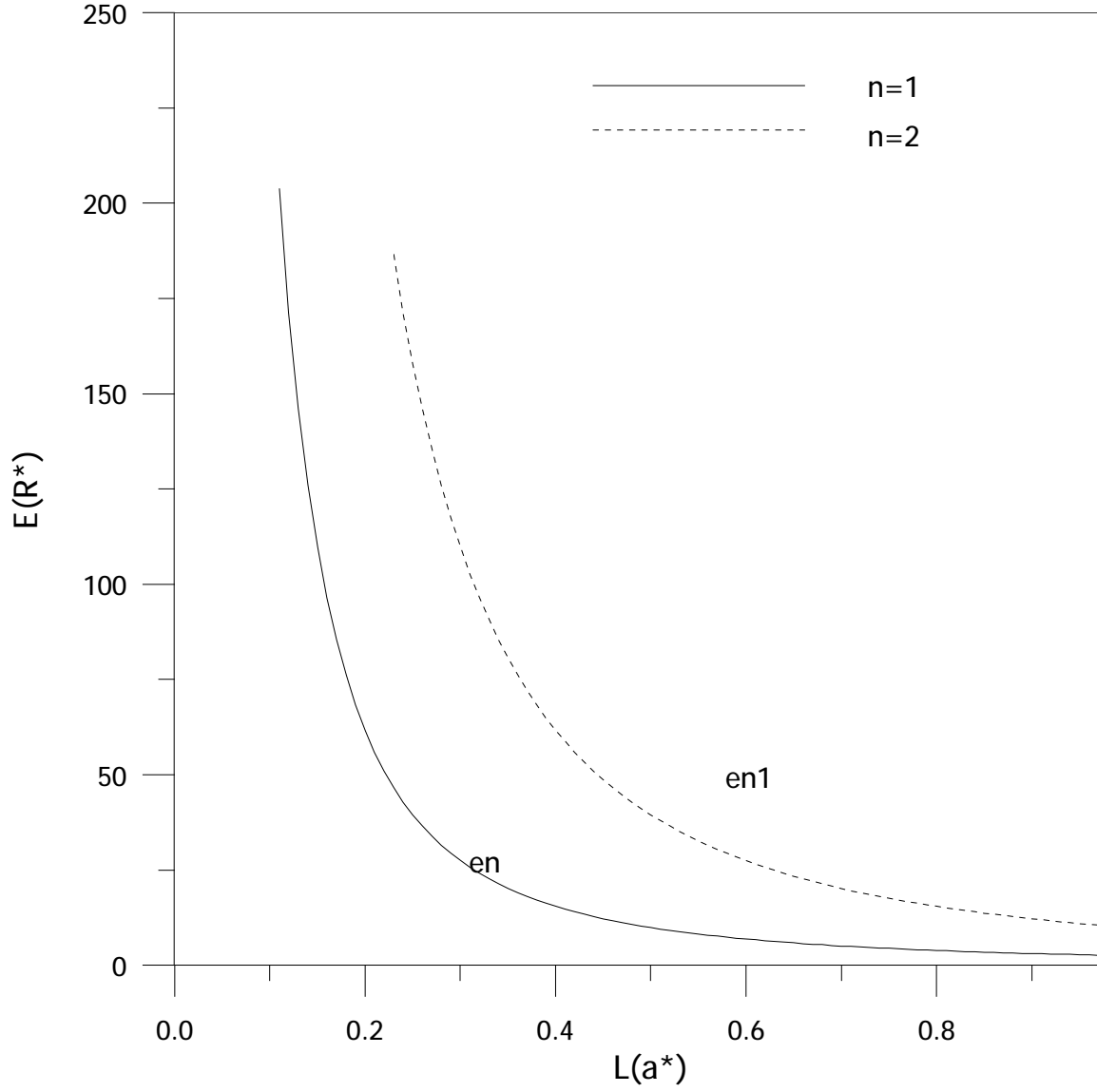
elektronun taban durum enerjisinin  $L(a^*)$  kuyu genişliğine göre değişimini gösteren grafik.



**Şekil 1.1.3** ) Sonsuz potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonunun  $z(a^*)$  ile değişimini veren grafik.



**Şekil 1.1.4)** Simetrik sonsuz potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun birinci uyarılmış durum enerjisinin  $L(a^*)$  kuyu genişliğine göre değişimini veren grafik.



**Şekil 1.1.5)** Simetrik sonsuz potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum ve birinci uyarılmış durum enerjilerinin  $L(a^*)$  kuyu genişliğine göre değişimini veren grafik.

## 1.2) ANTI SİMETRİK SONSUZ POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNE

## HAPSEDİLMİŞ OLAN ELEKTRONUN ÖZELLİKLERİ

Şekil 1.2 ) Anti simetrik sonsuz potansiyel kuyusu

$$V(z) = \begin{cases} 0 & ; & 0 < z < L \\ \infty & ; & z > L ; z < 0 \end{cases} \quad (1.2.1)$$

Anti simetrik sonsuz potansiyel kuyusu içinde  $V(z)$  potansiyelini gören  $m^*$  etkin kütleli,  $-e$  yüklü elektron için Schrödinger denklemi ;

$$H = -\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad (1.2.2)$$

H Hamiltonien ' i olmak üzere ,

$$Hy(z) = Ey(z) \quad (1.2.3)$$

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2 y(z)}{\partial z^2} + V(z)y(z) = Ey(z)$$

Kuyu içinde  $V(z)=0$  olduğundan ,

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \mathbf{y}(z)}{\partial z^2} = E \mathbf{y}(z) \quad (1.2.4)$$

şeklinde yazılır.

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}(z)}{\partial z^2} = -\frac{2m^*}{\eta^2} E \mathbf{y}(z)$$

Burada  $k^2 = \frac{2m^*}{\eta^2} E$  dersek ;

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}(z)}{\partial z^2} + k^2 \mathbf{y}(z) = 0$$

olur. Bu denklemi çözecek olursak ;

$$(D^2 + k^2) \mathbf{y}(z) = 0 \Rightarrow (D^2 + k^2) = 0 \Rightarrow D^2 = -k^2 \Rightarrow D = \pm ik$$

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(z) &= C_1 e^{ikz} + C_2 e^{-ikz} \\ &= C_1 \cos(kz) + C_1 i \sin(kz) + C_2 \cos(kz) - C_2 i \sin(kz) \end{aligned}$$

$$\mathbf{y}(z) = A \cos(kz) + B \sin(kz) \quad (1.2.5)$$

elde edilir. Bu genel çözüme sınır koşullarını uygularsak ;

$$y(0) = y(L) = 0$$

$$y(z = 0) = A \cos(0) + B \sin(0) = 0$$

$$A = 0; B \neq 0$$

$$y(z) = B \sin(kz) \tag{1.2.6}$$

ve

$$y(z = L) = 0 = B \sin(kL)$$

$$\sin(kL) = 0$$

$$kL = n\pi$$

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \tag{1.2.7}$$

elde edilir. Ayrıca ( $L=2a$  olmak üzere) ;

$$k^2 = \frac{n^2 \pi^2}{4a^2} = \frac{2m^* E}{\hbar^2}$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m^* a^2} n^2$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m^* a^2} n^2 \tag{1.2.8}$$

“n” ‘ e bağılı enerji özdeğeri de elde edilebilir.

Burada dalga fonksiyonundaki B katsayısı normalizasyondan  $\int_{-\infty}^{\infty} |y(z)|^2 dz = 1$  bulunur.

$$B^2 \int_0^{2a} \sin^2 \frac{np}{2a} z dz = 1$$

$$B^2 \int_0^{2a} \frac{1}{2} (1 - \cos 2 \frac{np}{2a} z) dz = 1$$

$$\frac{B^2}{2} \left\{ z \Big|_0^{2a} - \frac{2a}{2np} \sin 2 \frac{np}{2a} z \Big|_0^{2a} \right\} = 1$$

$$\frac{B^2}{2} \{2a\} = 1$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{a}} \tag{1.2.9}$$

elde ettiğimiz normalizasyon sabitini dalga fonksiyonunda yerine yazarsak;

$$y(z) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{np}{2a}\right)z \tag{1.2.10}$$

elde ederiz.

Ayrıca  $E_n$  enerjisinin beklenen değerini kullanarak ta ;

$$E = \left( \frac{\langle y_n(z) | H | y_n(z) \rangle}{\langle y_n(z) | y_n(z) \rangle} \right) \tag{1.2.11}$$

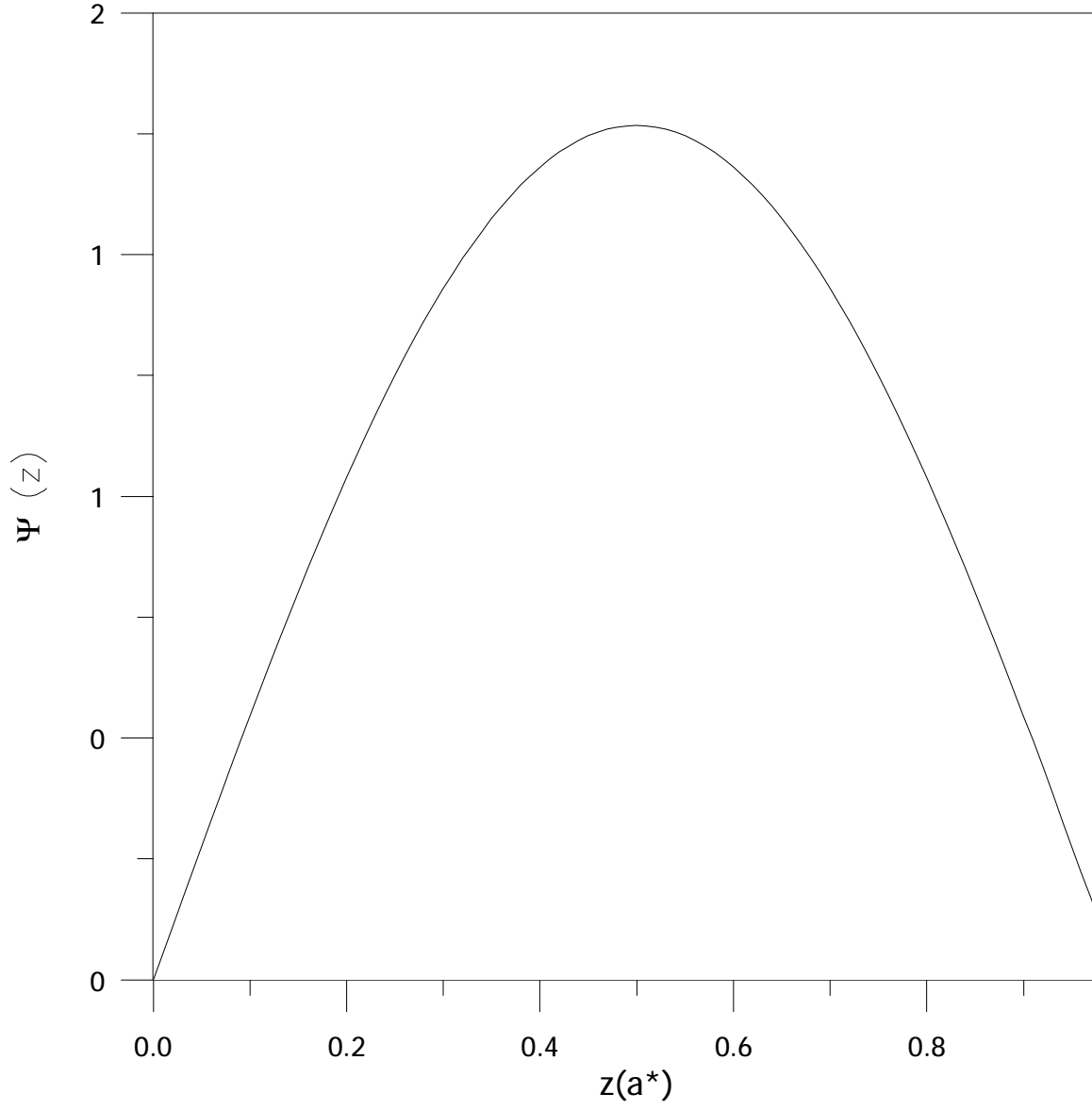
bulabiliriz.

Bu sonuca göre potansiyel kuyusundaki bir parçacığın alabileceği enerji değerleri bir “n” tamsayısına bağlı olarak kesikli değerlerde bulunabilir. Başka deyişle kuantize edilmiş enerji düzeyleri oluşur.

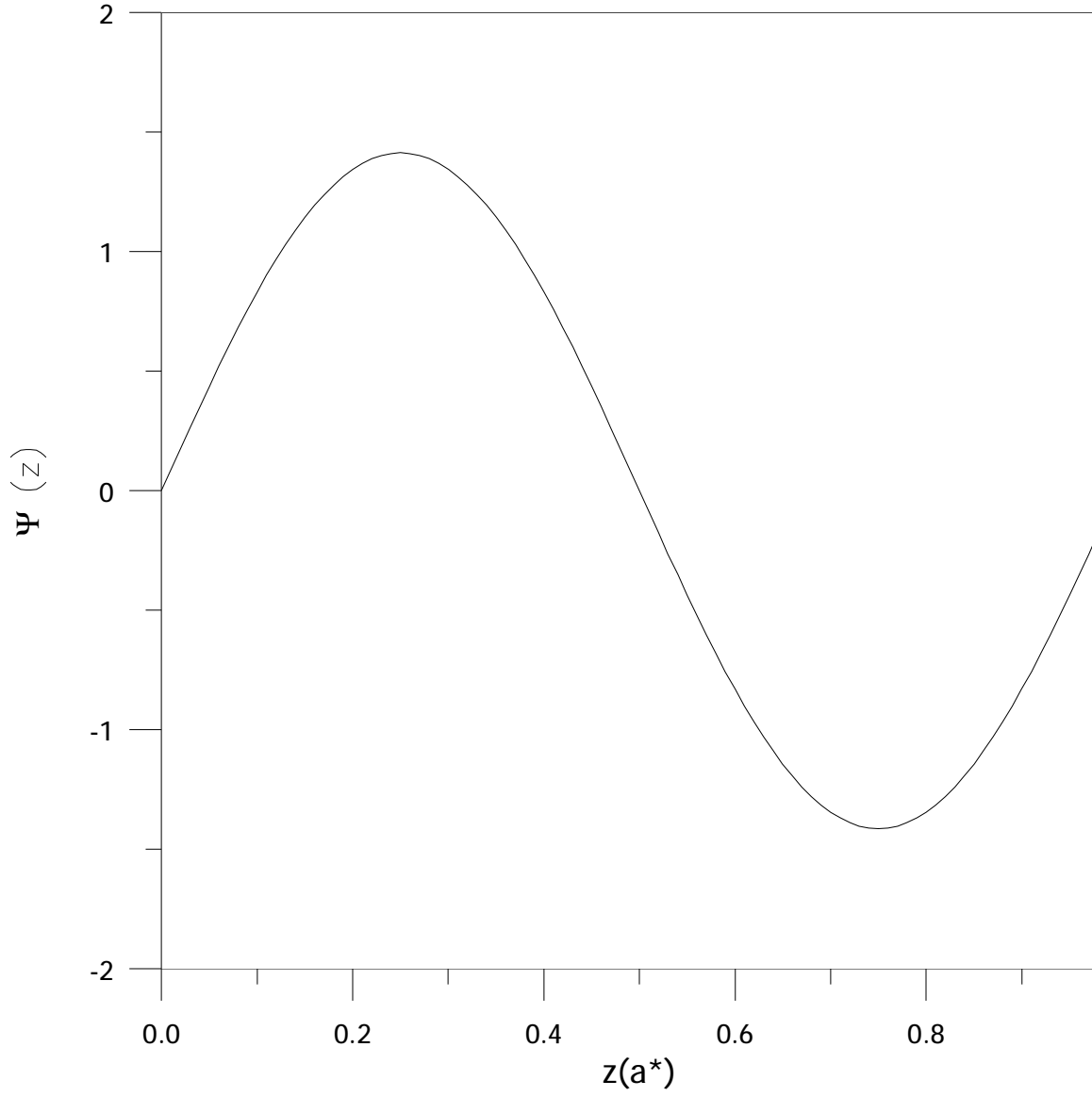
Elektronun taban durum dalga fonksiyonu nümerik olarak hesaplanmış ve grafiği şekil 1.2.1 ‘ de verilmiştir.

Elektronun birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonu nümerik olarak hesaplanmış

ve grafiđi Őekil 1.2.2 ' de verilmiŐtir



**Şekil 1.2.1)** Anti simetrik sonsuz kuantum kuyusunda hapsedilen bir elektronun taban durum dalga fonksiyonunu gösteren grafik.



**Şekil 1.2.2)** Anti simetrik sonsuz potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilmiş bir elektronun birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonunu gösteren grafik.

## 2. ) SİMETRİK BİR SONLU POTANSİYEL KUANTUM KUYUSU İÇİNE HAPSEDİLMİŞ OLAN ELEKTRONUN ÖZELLİKLERİ

Sonlu kuantum kuyusu içinde bulunan elektronu göz önüne alalım ve kuyu içinde hapsedilmiş elektronun gördüğü  $V(z)$  potansiyeli ;

$$V(z) = \begin{cases} 0 & ; & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ V_0 & ; & |z| > L/2 \end{cases} \quad (2.1)$$

Şekil 2 ) Simetrik sonlu potansiyel kuyusu

Genişliği  $L = 2a^*$  olan bir potansiyel kuyusu içinde  $z=0$  ' a göre simetriktir. Enerjisi  $E$  olan bir elektronun sağladığı zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ;

$$Hy(z) = Ey(z) \quad (2.2)$$

dir. Burada  $H$  Hamiltonyendir:

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2}$$

$$H_1 = V(z)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \quad (2.3)$$

' $E$ ' enerjisinin ' $V_0$ ' potansiyelinden daha küçük olduğu yani bağlı durumları göz önüne alalım. Buna göre potansiyel kuyusuna hapsedilmiş elektronun **II. Bölge içindeki** Schrödinger denklemi ;

$$Hy(z) = Ey(z)$$

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{d^2 y_2(z)}{dz^2} = Ey_2(z)$$

şeklinde yazılır. Burada  $k_2 = \sqrt{\frac{2m^*}{\eta^2} E}$  olmak üzere , diferansiyel denklemi çözüldüğünde ;

$$y_2(z) = A \cos(k_2 z) + B \sin(k_2 z) \quad (2.4)$$

elde edilir. Sınır şartlarından  $y_{çift}(z)$  çift durumların ve  $y_{tek}(z)$  tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere ;

$$y_{çift}(z) = A \cos(k_2 z)$$

$$y_{tek}(z) = B \sin(k_2 z)$$

ifadeleri elde edilir. I.ve III. Bölgelerinde yani,  $|z| > L/2$  bölgesinde ise Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır ;

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{d^2 y(z)}{dz^2} + V_0 y(z) = Ey(z)$$

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{d^2 y(z)}{dz^2} + (V_0 - E)y(z) = 0$$

$$\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{d^2 y(z)}{dz^2} - (V_0 - E)y(z) = 0 \quad (2.5)$$

Bu denklemin genel çözümü ;

$$y(z) = Ce^{k_1 z} + De^{-k_1 z} \quad (2.6)$$

şeklindedir. Burada C ve D sabitler olmak üzere ;

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m^*}{\eta^2} (V_0 - E)} \quad (2.7)$$

olarak alınmıştır. Sınır şartları düşünüldüğünde ,  $z > L/2$  için, “C” ‘ nin sıfıra eşit olması gerektiğini , aksi takdirde dalga fonksiyonunun “z” sonsuza gitmeye başlayınca sınır koşullarını bozarak sonsuza gideceğini görebiliriz. Bu durumda III. Bölge dalga fonksiyonu ;

$$y_3(z) = De^{-k_1 z} \quad z > L/2 \quad (2.8)$$

şeklinde elde edilir. Benzer şekilde de I. Bölge dalga fonksiyonu ;

$$y_1(z) = Ce^{k_1 z} \quad z < -L/2 \quad (2.9)$$

elde edilir.

Şimdi potansiyelin “ $z = \pm L/2$ ” deki süreklilikleri sonludur ve sınır koşulları” $y(z)$ ”

$\frac{dy(z)}{dz}$   
ve “  $\frac{dy(z)}{dz}$  ” in ikisinin de bu noktalarda sürekli olması gerektirir. Böylece sınır

koşullarından aşağıdaki denklemler elde yazılır ;

$$A \cos(k_2 L / 2) + B \sin(k_2 L / 2) = D \exp(-k_1 L / 2)$$

$$-k_2 A \sin(k_2 L / 2) + k_2 B \cos(k_2 L / 2) = -k_1 D \exp(-k_1 L / 2)$$

$$A \cos(k_2 L / 2) - B \sin(k_2 L / 2) = C \exp(-k_1 L / 2)$$

$$k_2 A \sin(k_2 L / 2) + k_2 B \cos(k_2 L / 2) = k_1 C \exp(-k_1 L / 2) \quad (2.10)$$

Bu denklemlerden de

$$k_2 \tan(k_2 L / 2) = k_1$$

$$k_2 \cot(k_2 L / 2) = -k_1 \quad (2.11)$$

elde edilir.

Böylece  $Y_{çift}(z)$  çift durumların dalga fonksiyonu ve  $Y_{tek}(z)$  tek durumların dalga fonksiyonu olarak düşünülürse ; I.,II.,III.Bölgelerdeki dalga fonksiyonları aşağıdaki gibi yazılır;

$$Y_{çift}(z) = \left\{ \begin{array}{ll} A \cos(k_2 L / 2) \exp(k_1 L / 2) \exp(k_1 z) & z \leq -L / 2 \\ A \cos(k_2 z) & -L / 2 \leq z \leq L / 2 \\ A \cos(k_2 L / 2) \exp(k_1 L / 2) \exp(-k_1 z) & z \geq L / 2 \end{array} \right\} \quad (2.12)$$

$$y_{tek}(z) = \begin{cases} -A \sin(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(k_1 z) & z \leq -L/2 \\ A \sin(k_2 z) & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ A \sin(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(-k_1 z) & z \geq L/2 \end{cases} \quad (2.13)$$

Burada A sabiti normalizasyon koşulundan bulunabilir ;

$$\int_{-\infty}^{-L/2} A^2 y_1^* \cdot y_1 dz + \int_{-L/2}^{L/2} A^2 y_2^* \cdot y_2 dz + \int_{L/2}^{+\infty} A^2 y_3^* \cdot y_3 dz = 1 \quad (2.14)$$

Enerji ise  $E_{\text{çift}}$  durumların dalga fonksiyonu ve  $E_{\text{tek}}$  tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere şu şekilde bulunur ;

$$E_{\text{çift}} = \left\{ \frac{\langle y_{\text{çift}}(z) | H | y_{\text{çift}}(z) \rangle}{\langle y_{\text{çift}}(z) | y_{\text{çift}}(z) \rangle} \right\} \quad (2.15)$$

$$E_{\text{tek}} = \left\{ \frac{\langle y_{\text{tek}}(z) | H | y_{\text{tek}}(z) \rangle}{\langle y_{\text{tek}}(z) | y_{\text{tek}}(z) \rangle} \right\} \quad (2.16)$$

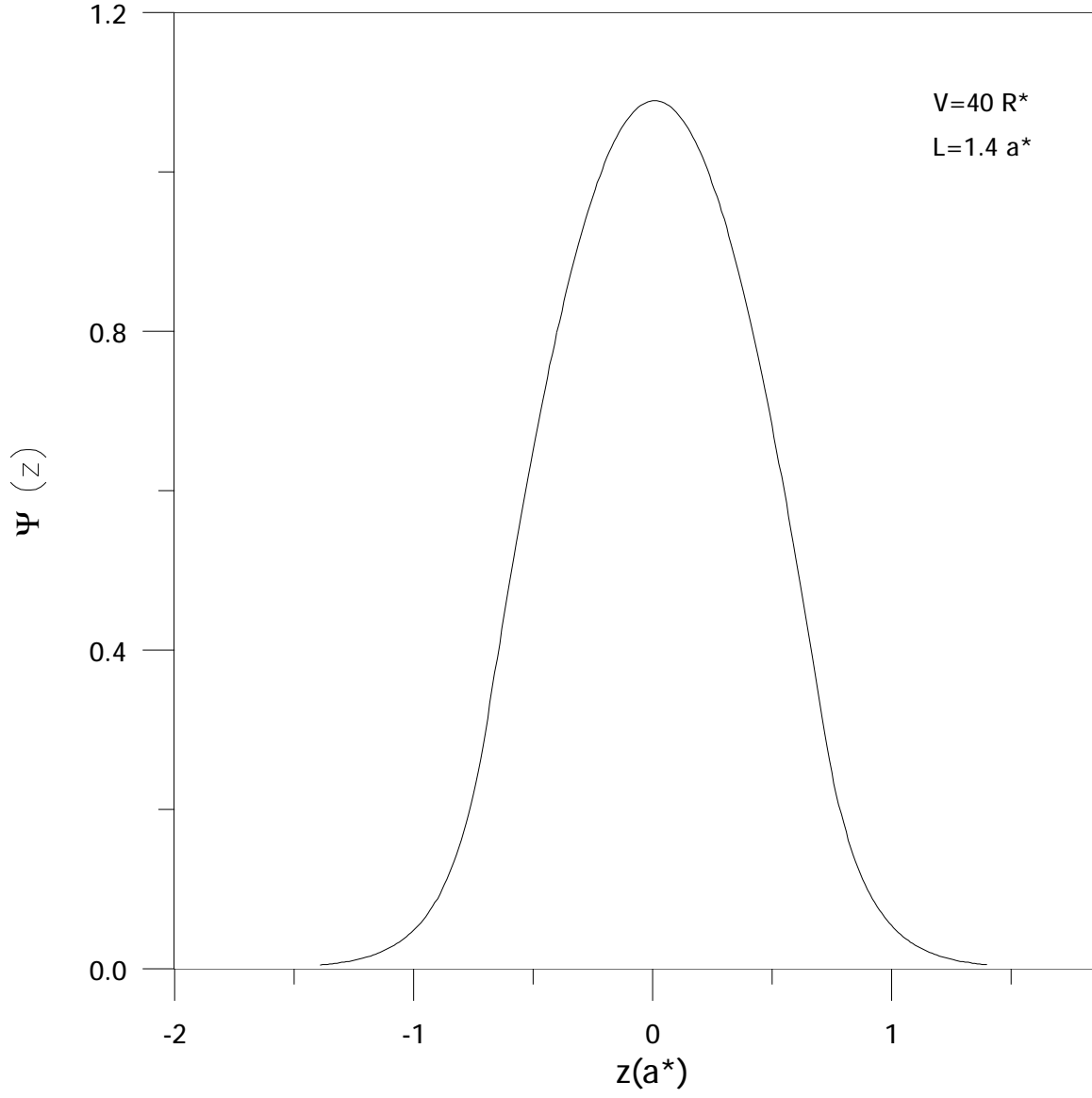
Elektronun taban durum dalga fonksiyonunun grafik 2.1 ' de verilmiştir.

Elektronun taban durum enerjisi nümerik olarak hesaplanmış ve kuyu genişliğine bağlı değişimi şekil 2.2 'de gösterilmiştir.

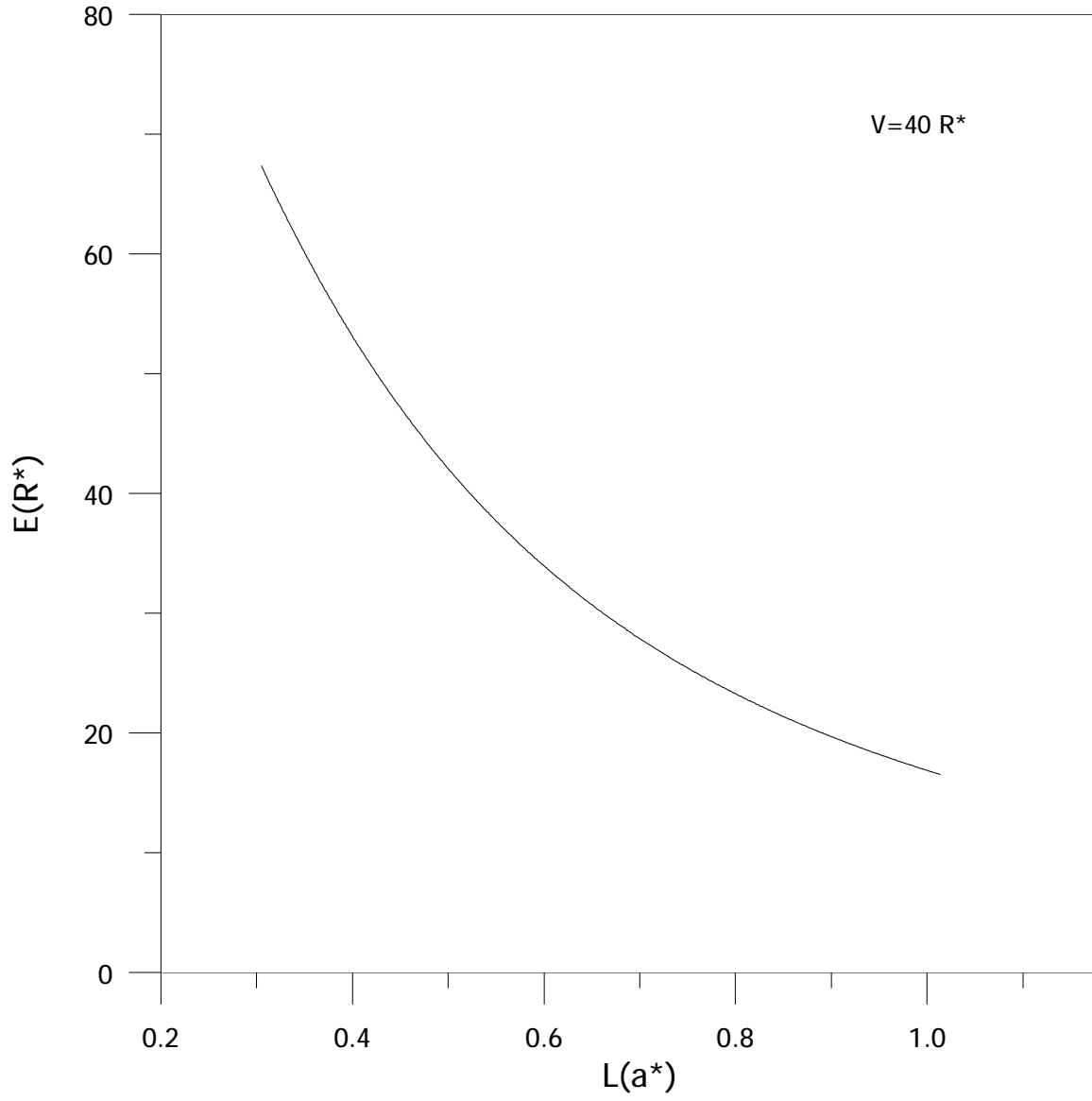
Elektronun farklı engel yüksekliklerine bağlı olarak , elektronun engel içinde bulunma olasılığının L kuyu genişliğine bağlı grafiği şekil 2.3 ' te verilmiştir.[2]

Elektronun farklı kuyu genişliklerine bağlı olarak , elektronun engel içinde bulunma olasılığının  $V(R^*)$  kuyu engeline bağlı grafiği şekil 2.4 ' te verilmiştir.

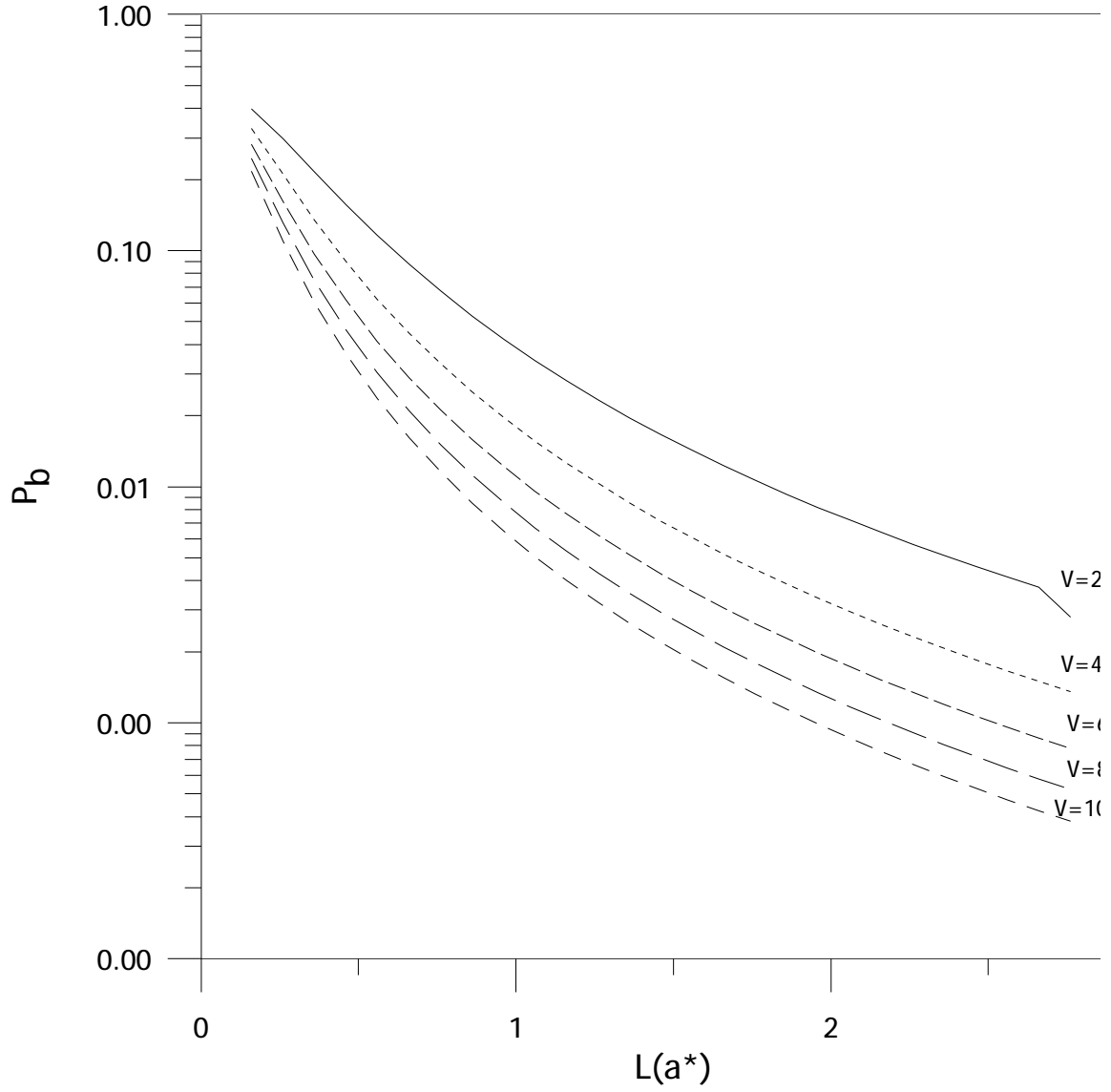




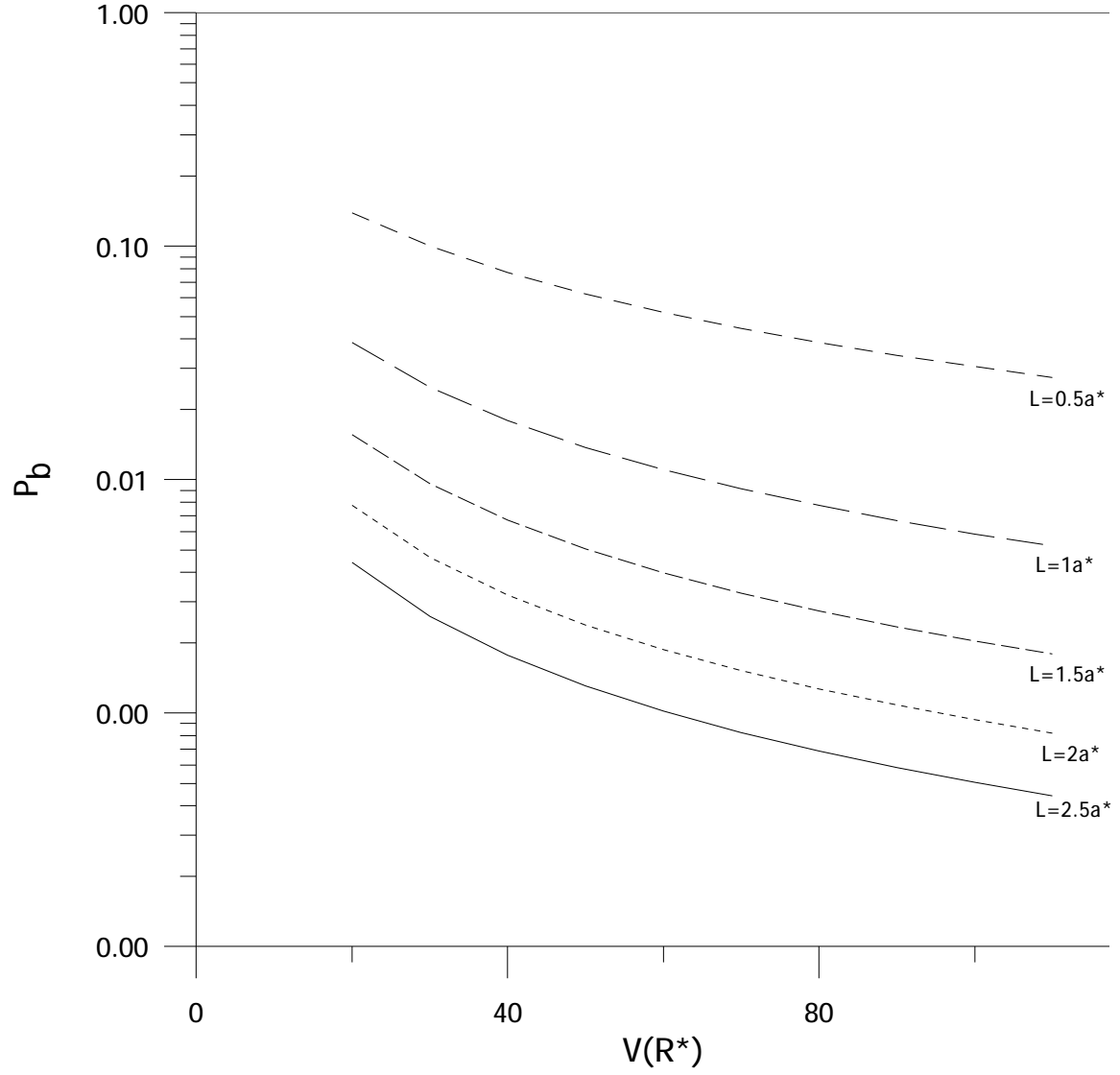
**Şekil 2.1)** Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum dalga fonksiyonunun grafiği.



**Şekil 2.2 )** Simetrik sonlu potansiyel kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum enerjisinin  $L(a^*)$  kuyu genişliğine göre değişimini gösteren grafik.



**Şekil 2.3)** Simetrik sonlu potansiyel kuyusunda , farklı engel yüksekliklerine karşılık, parçacığın engel içinde bulunma olasılığının  $L(a^*)$  kuyu genişliğine göre değişimi.



**Şekil 2.4)** Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusunda , farklı kuyu genişliklerine karşılık , parçacığın engel içinde bulunma olasılığının  $V(R^*)$  kuyu engeline göre değişimi.

### 3.1.)DÜZGÜN ELEKTRİK ALAN GÖREN SİMETRİK SONSUZ KUANTUM KUYUSU İÇİNDE HAPSEDİLEN ELEKTRONA AİT SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN VARYASYONEL YÖNTEMLE ÇÖZÜMÜ

Şekil 3.1.1 ) Simetrik sonsuz kuantum kuyusu

Sonsuz potansiyel kuantum kuyusu içinde bulunan  $m^*$  etkin kütleli bir elektronun enerjisini ve dalga fonksiyonunu daha önce bölüm (1.1) ' de şu şekilde verilmişti ;

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \text{ olmak üzere ;}$$

$$y_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k_n z) \quad n=1,3,5,\dots \quad (3.1.1)$$

$$y_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n z) \quad n=2,4,6,\dots \quad (3.1.2)$$

$$E = \left( \frac{\langle y_n(z) | H | y_n(z) \rangle}{\langle y_n(z) | y_n(z) \rangle} \right) \quad (3.1.3)$$

Böyle bir kuyuya “+z” yönünde düzgün elektrik alan uygulandığında ,“F ”elektrik

alan şiddeti olmak üzere, kuyu içinde hapsedilen bu elektron için Hamiltonien ' imizi şu şekilde yazabiliriz ;

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad \text{ve} \quad H_F = eFz \quad (3.1.4)$$

$$H = H_0 + H_F \quad (3.1.5)$$

Düzgün “ $F$ ” elektrik alan gören potansiyel kuyunun yeni şeklide ;

Şekil 3.1.2 ) Düzgün  $F$  elektrik alanı gören simetrik sonsuz potansiyel kuyusu

olur. Böyle bir kuyuda elektrik alan etkisindeki parçacığın yeni dalga fonksiyonu  $y_{yeni}(z)$  olmak üzere , Schrödinger denklemi ; [3]

$$Hy_{yeni}(z) = Ey_{yeni}(z) \quad (3.1.6)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 y_{yeni}(z)}{\partial z^2} + V(z)y_{yeni}(z) + eFzy_{yeni}(z) = Ey_{yeni}(z) \quad (3.1.7)$$

yazılır. Sonsuz potansiyel kuyusuna hapsedilmiş elektron için  $V(z)=0$  olduğuda düşünülürse ;

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \mathbf{y}_{yeni}(z)}{\partial z^2} + eFz \mathbf{y}_{yeni}(z) = E \mathbf{y}_{yeni}(z) \quad (3.1.8)$$

olur. Bu denklemin analitik çözümü yoktur. Denklem yaklaşık olarak çözülecektir. Burada yaklaşık çözümlerden Varyasyonel Yöntem kullanılacaktır. Bu yönteme göre de  $\mathcal{Y}_{yeni}(z)$  deneme dalga fonksiyonu ;

$$\mathcal{Y}_{yeni}(z) = \mathcal{Y}_{eski}(z) \exp(-bz)$$

olarak seçilir. Burada  $\mathcal{Y}_{eski}(z)$

$$\mathcal{Y}_{eski}^{çift}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k_n z) \quad , \quad \mathcal{Y}_{eski}^{tek}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n z) \quad \text{olmak üzere ;}$$

$$\mathcal{Y}_{yeni}^{çift}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k_n z) \exp(-bz) \quad (3.1.9)$$

$$\mathcal{Y}_{yeni}^{tek}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n z) \exp(-bz) \quad (3.1.10)$$

olarak seçilir. Burada  $b$  Varyasyonel parametredir. Parçacığın “E” enerjisini Varyasyon Yöntemine göre ise şu şekilde ifade ederiz.

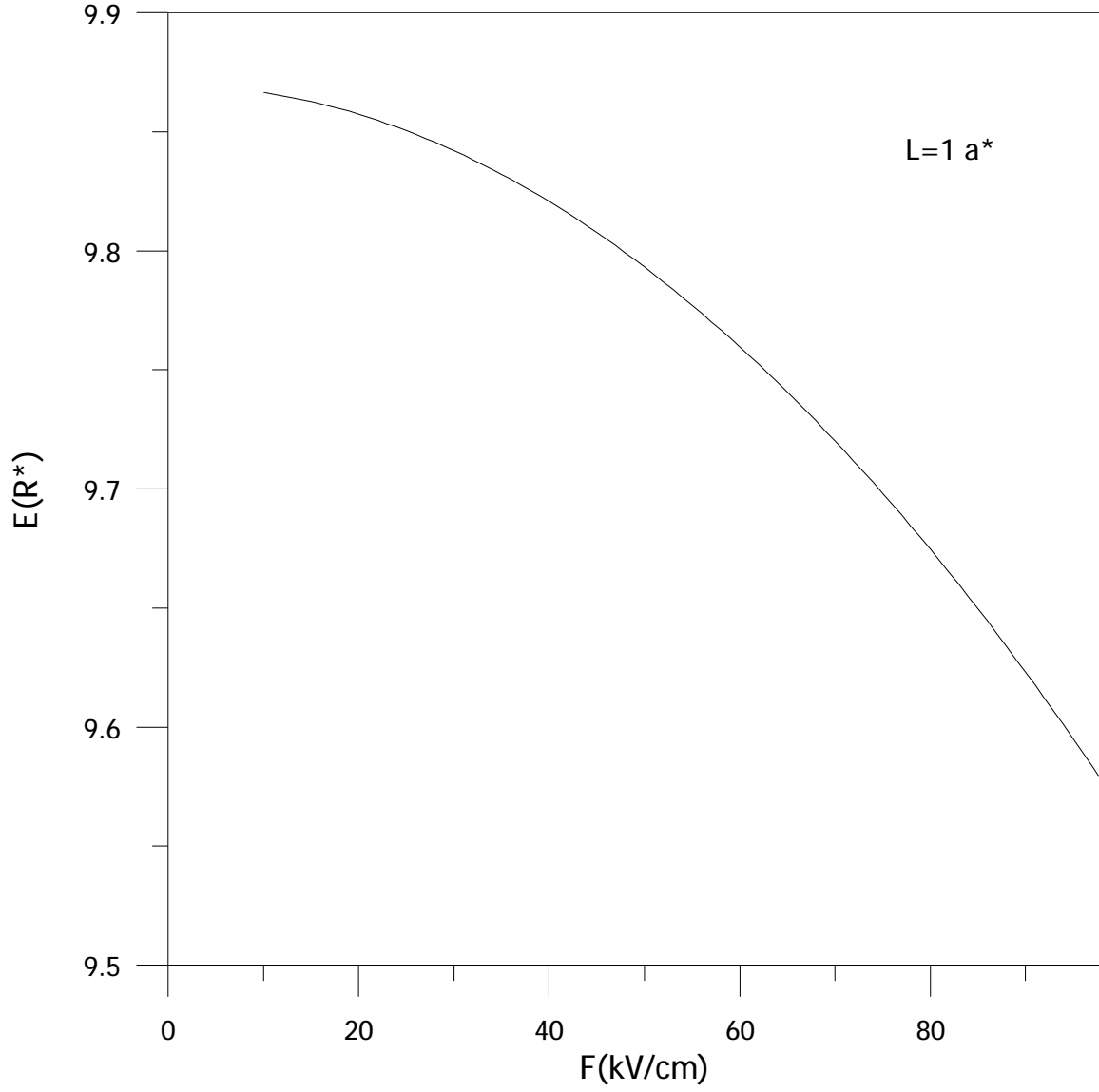
$$\langle E_{çift} \rangle = \left( \frac{\langle \mathcal{Y}_{yeni}^{çift}(z) | H | \mathcal{Y}_{yeni}^{çift}(z) \rangle}{\langle \mathcal{Y}_{yeni}^{çift}(z) | \mathcal{Y}_{yeni}^{çift}(z) \rangle} \right)_{\min} \quad (3.1.11)$$

$$\langle E_{tek} \rangle = \left( \frac{\langle y_{yeni}^{tek}(z) | H | y_{yeni}^{tek}(z) \rangle}{\langle y_{yeni}^{tek}(z) | y_{yeni}^{tek}(z) \rangle} \right)_{\min} \quad (3.1.12)$$

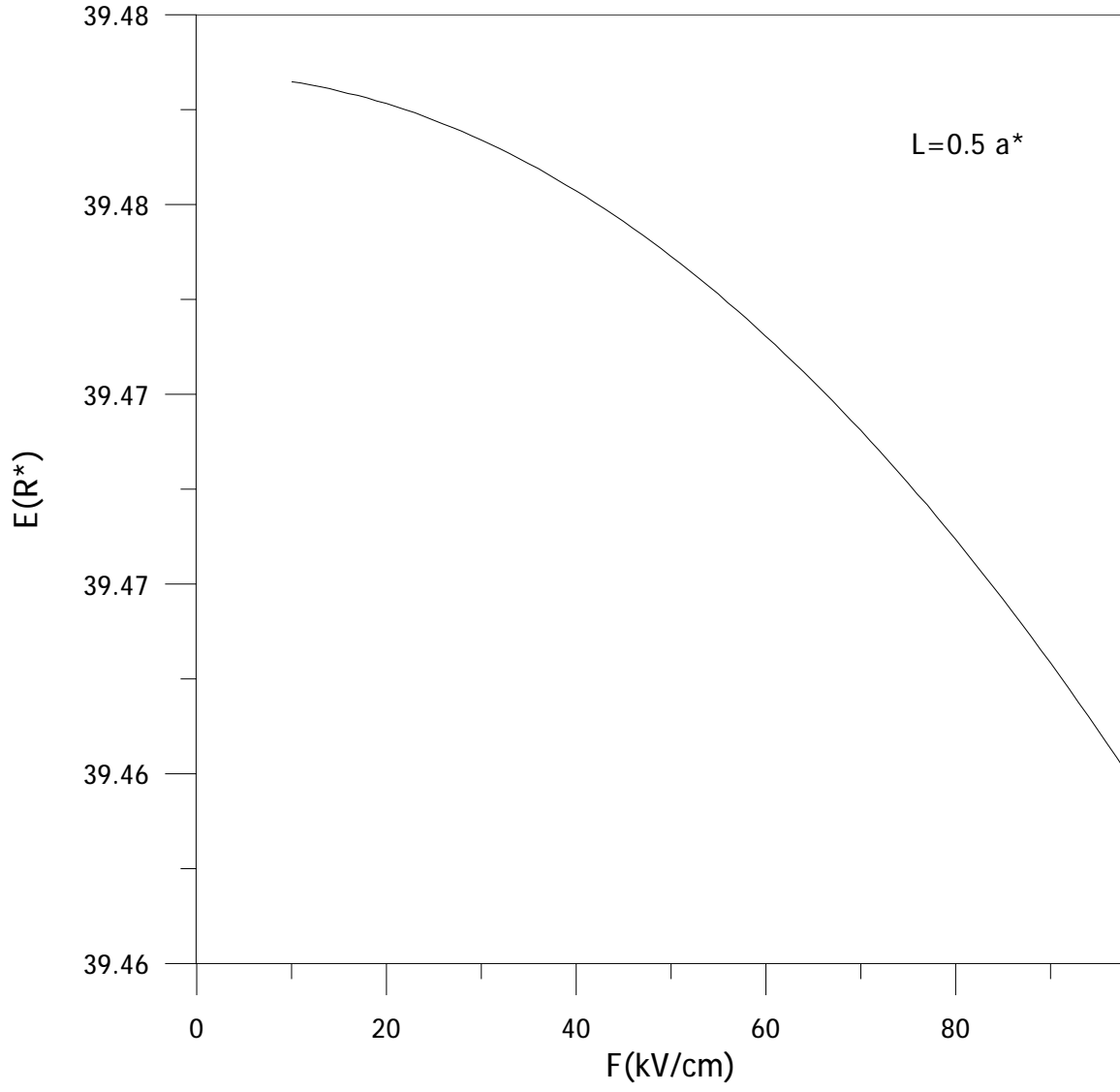
$E_{tek}$  tek durumların enerjisi ,  $E_{çift}$  çift durumların enerjisini ifade etmektedir.

Elektronun düzgün F elektrik alan şiddeti altında taban durum enerjisi nümerik olarak hesaplanmış ve  $L=0.5a^*$ ,  $L=1a^*$ ,  $L=1.5a^*$  kuyuları için “E” enerjisinin “F” elektrik alan şiddetine bağlı değişimleri şekil 3.1.1 ,şekil 3.1.2 , şekil 3.1.3 ‘ te , şekil 3.1.4 ‘ te ise bir arada verilmiştir.

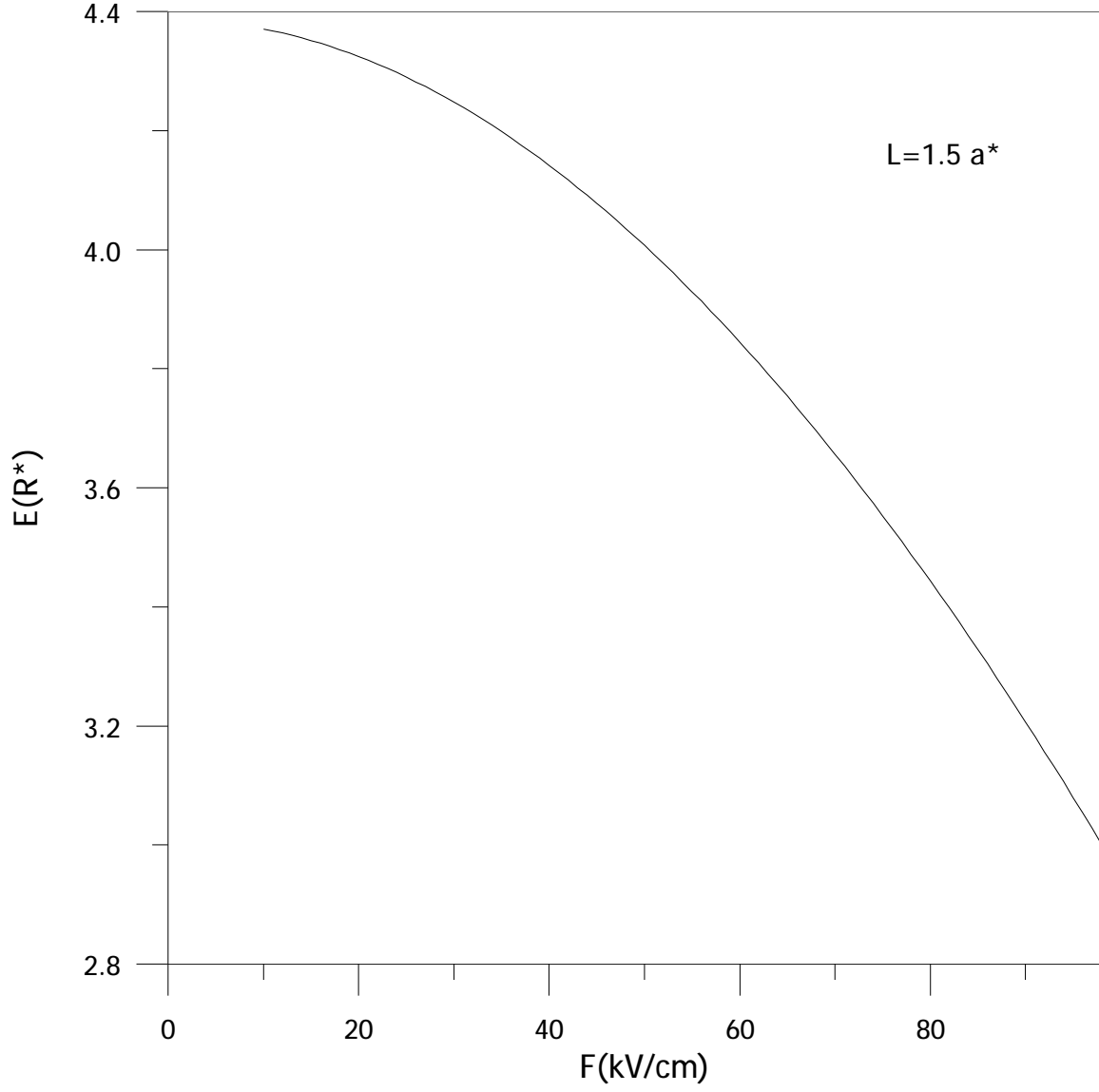
Elektronun taban durum dalga fonksiyonunun , farklı F(kV/cm) elektrik alan şiddetlerine göre grafikleri şekil 3.1.5 ‘ te gösterilmiştir.



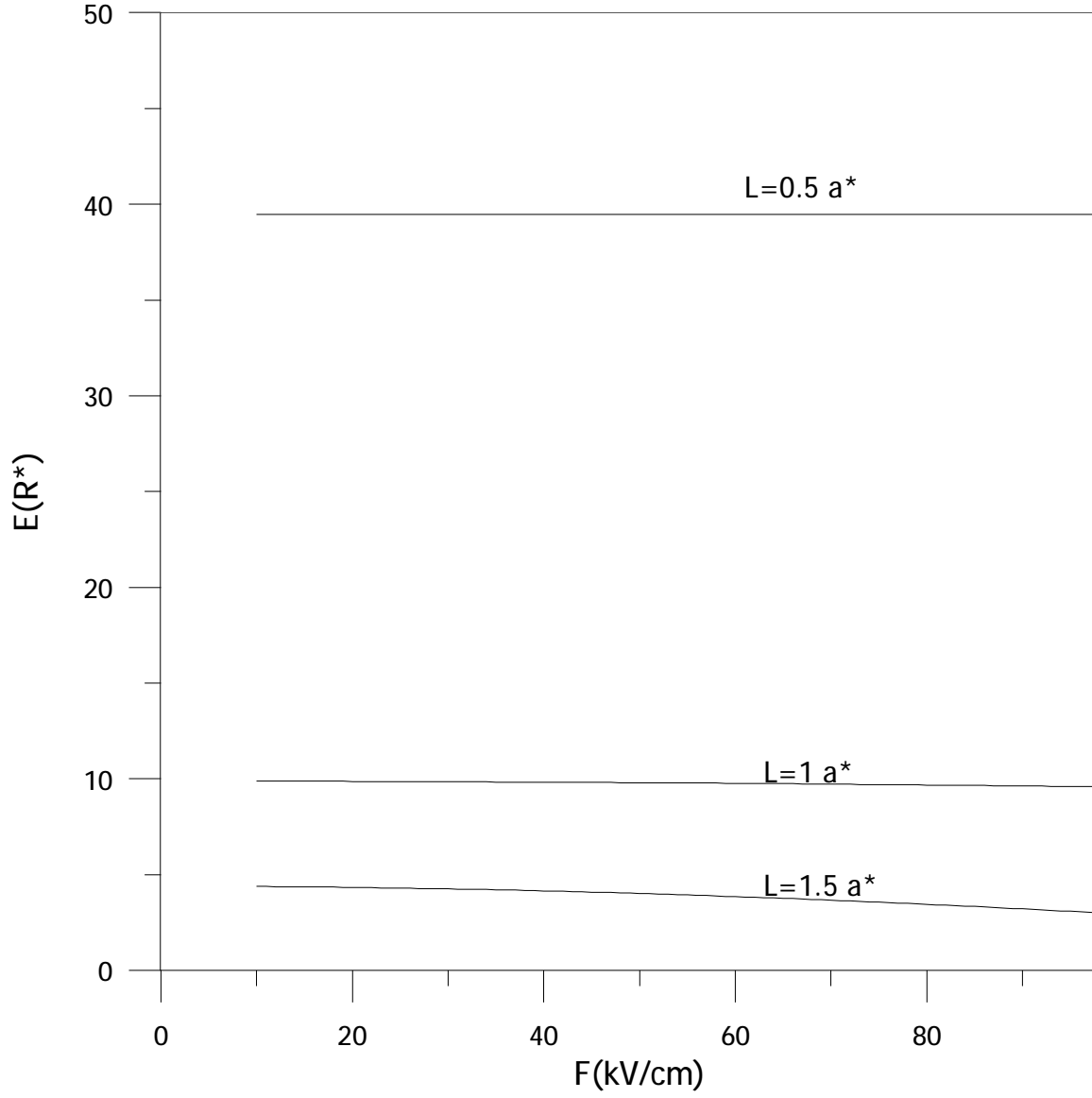
**Şekil 3.1.1)** Simetrik sonsuz potansiyel kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum enerjisinin  $F$  elektrik alan şiddeti ile değişimini gösteren grafik. ( $L=1a^*$ )



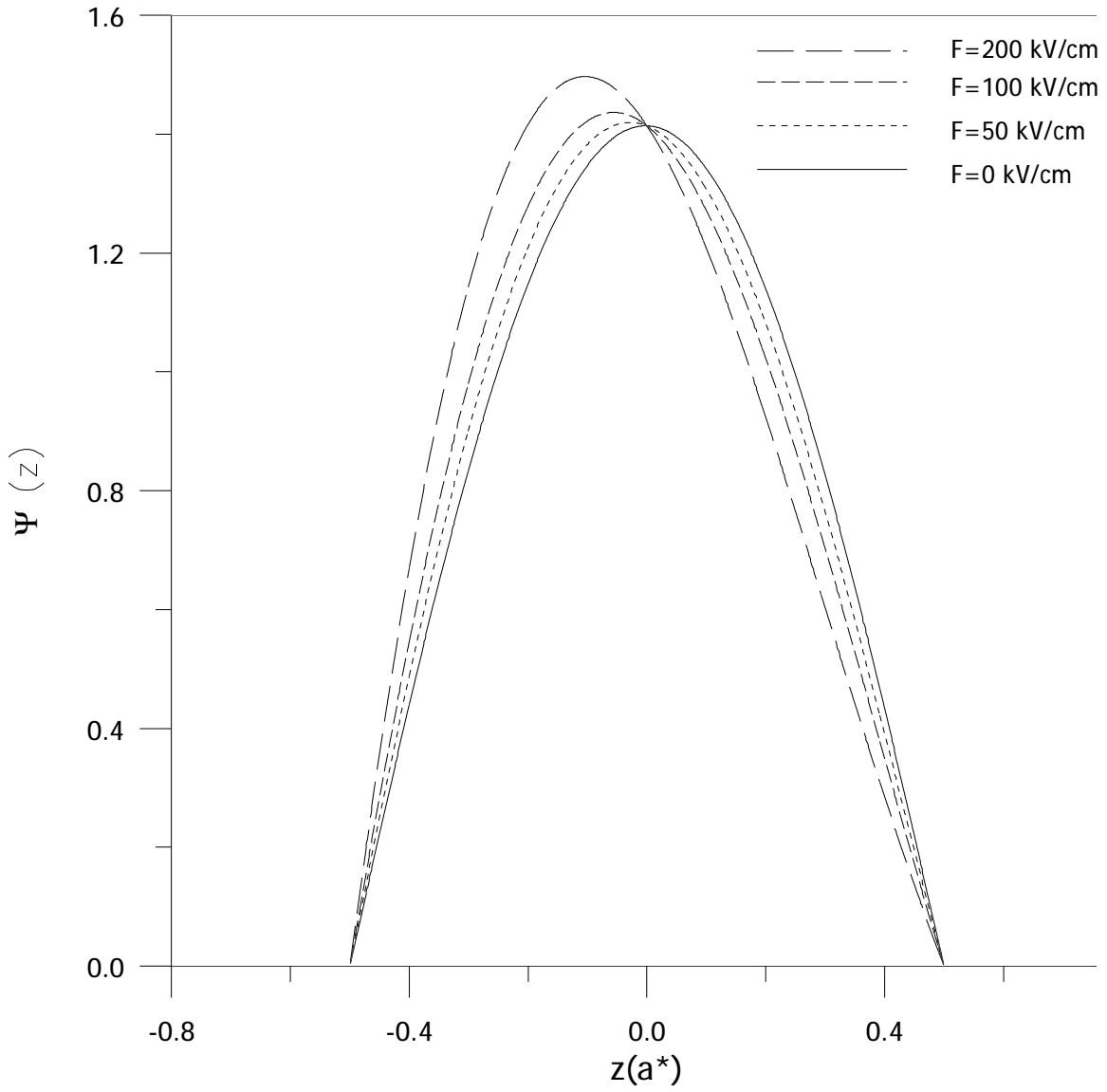
**Şekil 3.1.2)** Simetrik sonsuz potansiyel kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum enerjisinin  $F$  elektrik alan şiddeti ile değişimini gösteren grafik. ( $L=0.5a^*$ )



**Şekil 3.1.3)** Simetrik sonsuz potansiyel kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum enerjisinin  $F$  elektrik alan şiddeti ile değişimini gösteren grafik. ( $L=1.5a^*$ )



**Şekil 3.1.4** ) Simetrik sonsuz potansiyel kuantum kuyularına ( $L=0.5a^*$ ,  $L=1a^*$ ,  $L=1.5a^*$ ) hapsedilmiş elektronun taban durum enerjilerinin  $F$  elektrik alan şiddetine bağlı değişimi gösteren grafik.



**Şekil 3.1.5 )** Farklı  $F$  elektrik alan şiddetleri gören simetrik sonsuz potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum dalga fonksiyonlarını

gösteren grafik.

### 3.2.)DÜZGÜN ELEKTRİK ALAN GÖREN SİMETRİK SONLU KUANTUM KUYUSU İÇİNDE HAPSEDİLEN ELEKTRONA AİT SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN VARYASYONEL YÖNTEMLE ÇÖZÜMÜ

Şekil 3.2.1 ) Simetrik sonlu potansiyel kuyusu

Sonlu potansiyel kuantum kuyusu içinde bulunan “m\*” etkin kütleli bir parçacığın dalga fonksiyonu ve enerji ifadesi daha önce bölüm (2) ‘ de belirtmiştik. Dalga fonksiyonları şu şekilde bulunmuştu ;

Çift durumlar için ;

$$y_{\text{çift}}(z) = \left\{ \begin{array}{ll} A \cos(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(k_1 z) & z \leq -L/2 \\ A \cos(k_2 z) & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ A \cos(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(-k_1 z) & z \geq L/2 \end{array} \right\} \quad (3.2.1)$$

Tek durumlar için ;

$$y_{tek}(z) = \begin{cases} -A \sin(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(k_1 z) & z \leq -L/2 \\ A \sin(k_2 z) & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ A \sin(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(-k_1 z) & z \geq L/2 \end{cases} \quad (3.2.2)$$

Bu potansiyel kuyusuna ve kuyu içinde bulunan “m\*” etkin kütleli elektrona “+z” yönünde düzgün bir  $\vec{F}$  elektrik alanı uygulanırsa Hamiltonien şu şekilde yazılabilir ;

$$H_0 = -\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad \text{ve} \quad H_F = eFz \quad (3.2.3)$$

$$H = H_0 + H_F \quad (3.2.4)$$

Buradan Schrödinger denklemi ,  $y_{yeni}(z)$  elektrik alan etkisi altındaki m\* etkin kütleli elektronun dalga fonksiyonu olmak üzere ;

$$Hy_{yeni}(z) = Ey_{yeni}(z) \quad (3.2.5)$$

$$-\frac{\eta^2}{2m^*} \frac{\partial^2 y_{yeni}(z)}{\partial z^2} + V(z)y_{yeni}(z) + eFzy_{yeni}(z) = Ey_{yeni}(z) \quad (3.2.6)$$

şeklinde ifade edilir. Bu denklemlerin bölüm (2) ‘ de Varyasyon Yöntemiyle yapılan işlemler göz önüne alınarak ve  $y_{yeni}^{çift}(z)$  çift durumların dalga fonksiyonu ,  $y_{yeni}^{tek}(z)$  tek durumların dalga fonksiyonu olmak üzere aşağıdaki gibi yeni dalga fonksiyonları yazılır.

Çift durumlar için;

$$y_{yeni}^{çift}(z) = \left\{ \begin{array}{ll} A \cos(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(k_1 z) \exp(-bz) & z \leq -L/2 \\ A \cos(k_2 z) \exp(-bz) & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ A \cos(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(-k_1 z) \exp(-bz) & z \geq L/2 \end{array} \right\} \quad (3.2.7)$$

Tek durumlar için ;

$$y_{yeni}^{tek}(z) = \left\{ \begin{array}{ll} -A \sin(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(k_1 z) \exp(-bz) & z \leq -L/2 \\ A \sin(k_2 z) \exp(-bz) & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ A \sin(k_2 L/2) \exp(k_1 L/2) \exp(-k_1 z) \exp(-bz) & z \geq L/2 \end{array} \right\} \quad (3.2.8)$$

Burada A normalizasyon sabiti ve  $b$  Varyasyonel parametredir . Elektrik alanın etkisindeki parçacığın Varyasyon yöntemi ile bulunan enerjisi ise aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\langle E_{çift} \rangle = \left( \frac{\langle y_{yeni}^{çift}(z) | H | y_{yeni}^{çift}(z) \rangle}{\langle y_{yeni}^{çift}(z) | y_{yeni}^{çift}(z) \rangle} \right)_{\min} \quad (3.2.9)$$

$$\langle E_{tek} \rangle = \left( \frac{\langle y_{yeni}^{tek}(z) | H | y_{yeni}^{tek}(z) \rangle}{\langle y_{yeni}^{tek}(z) | y_{yeni}^{tek}(z) \rangle} \right)_{\min} \quad (3.2.10)$$

$E_{tek}$  tek durumların enerjisi ,  $E_{çift}$  çift durumların enerjisini ifade etmektedir.

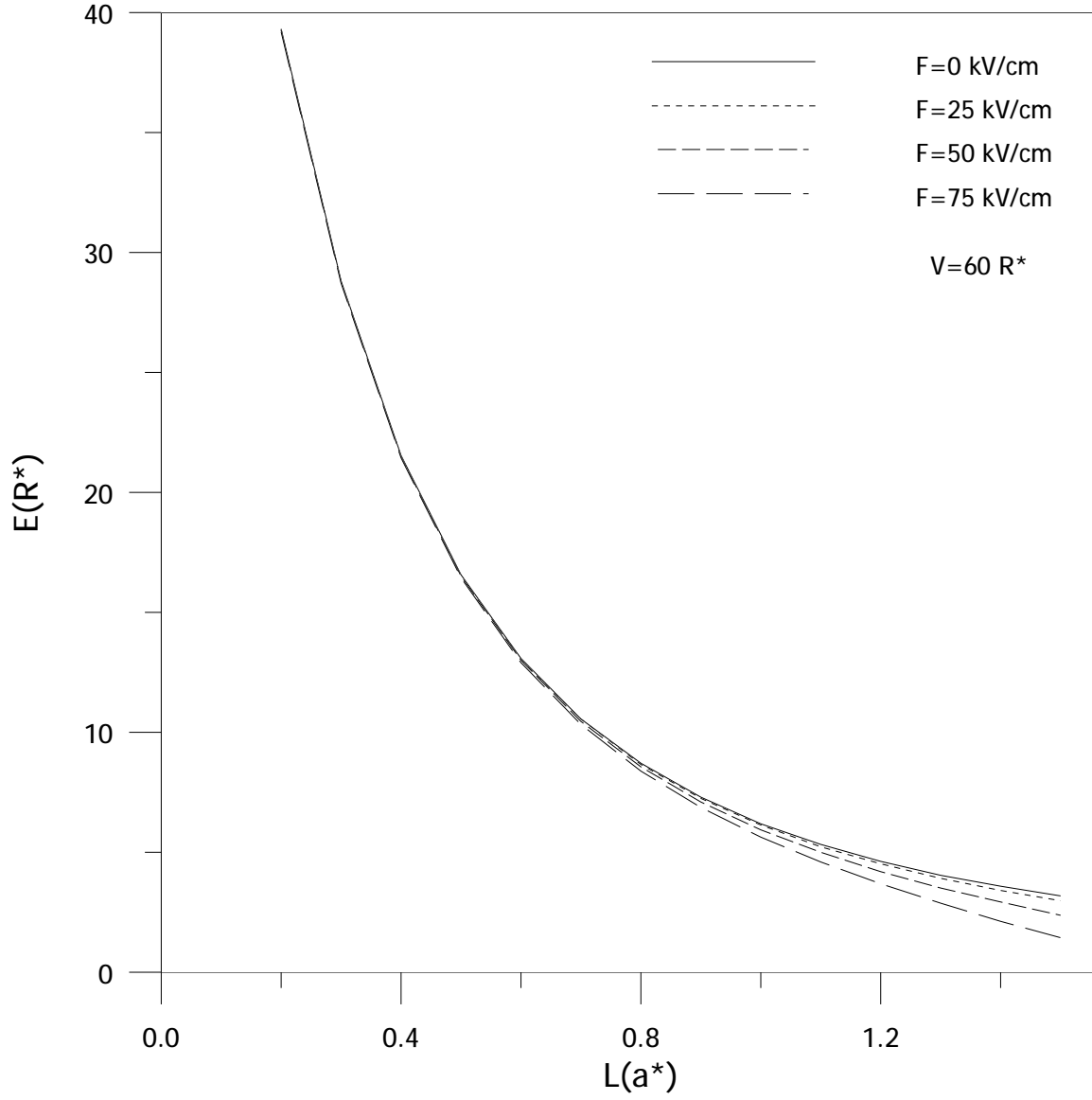
Elektronun taban durum enerjisi nümerik olarak hesaplanmış ve farklı F (kV/cm) elektrik alan şiddetleri altında L(a\*) kuyu genişliğine bağlı grafiği şekil 3.2.1 ' de

verilmiştir.

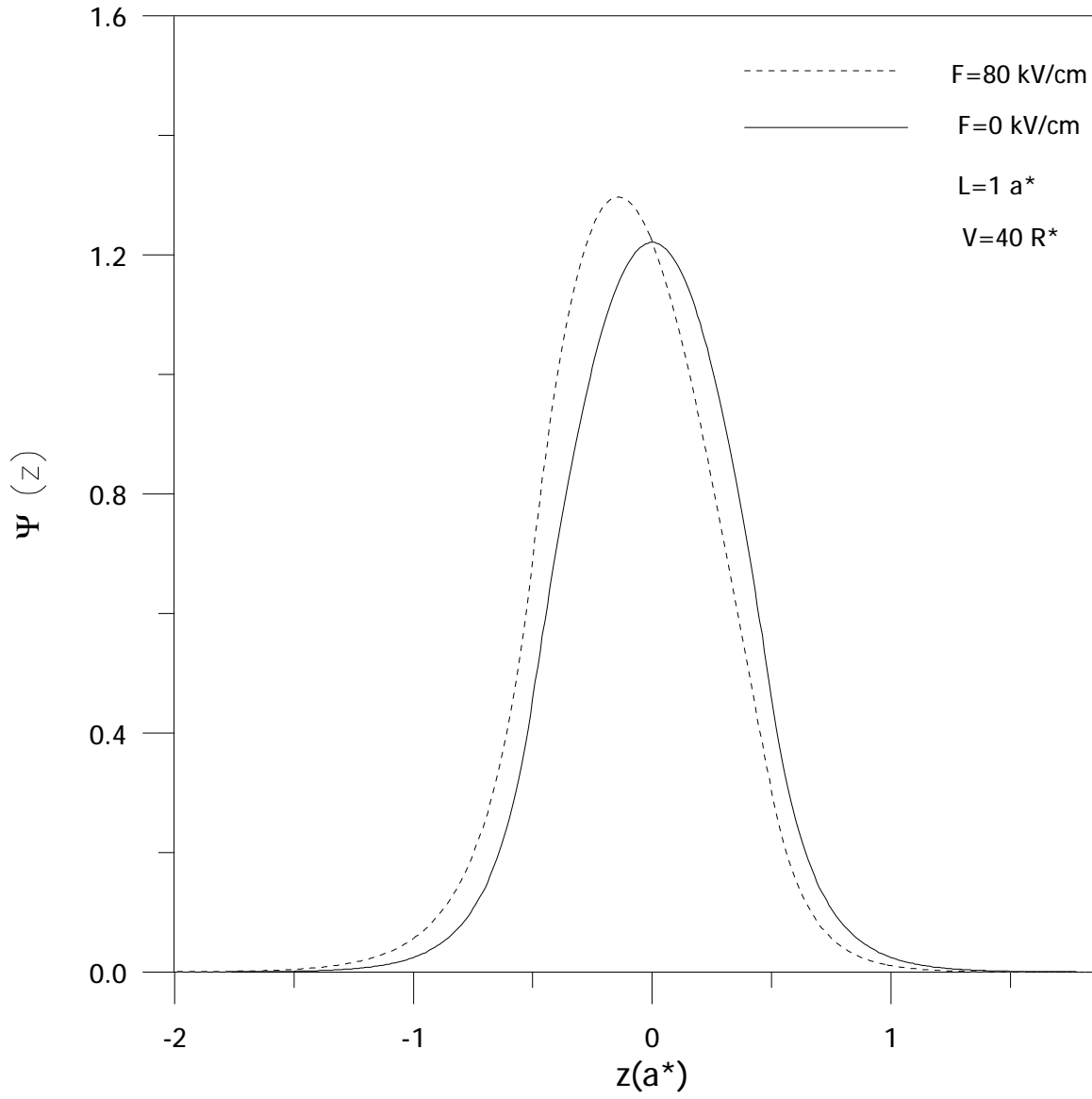
Elektronun taban durum dalga fonksiyonunun ,  $F=0$  ve  $F=80$  kV/cm elektrik alan şiddetlerine ve  $L=1a^*$  ,  $V=40R^*$  değerlerinde grafikler şekil 3.2.2 ' de verilmiştir.

Elektronun ,farklı  $F=0,25,50,75$  kV/cm elektrik alan şiddetlerine ve  $L=1a^*$  değerine göre ,engel içinde bulunma olasılığının  $V(R^*)$  kuyu engeline göre değişimini veren grafik şekil 3.2.3 ' te verilmiştir.

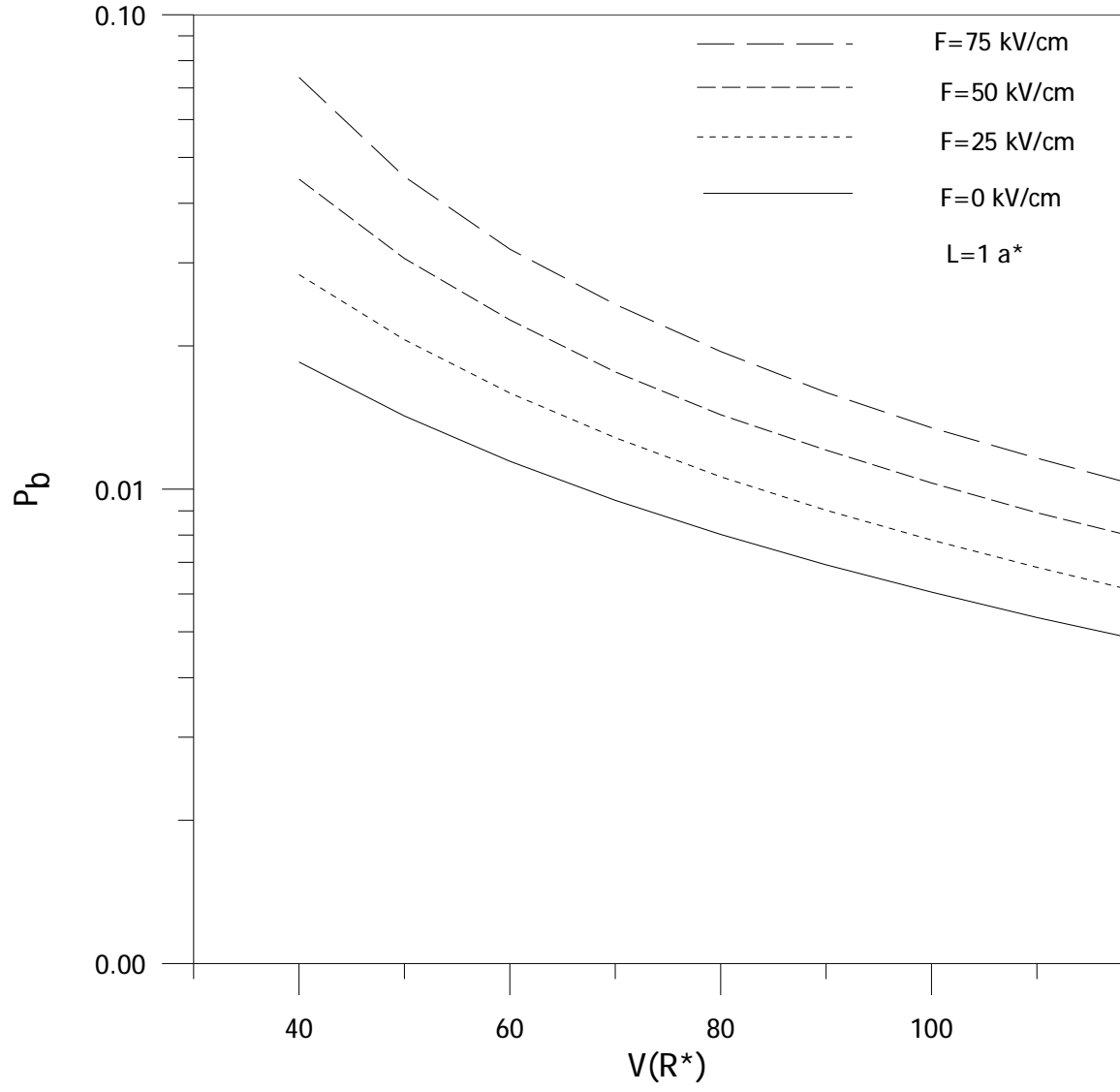
Elektronun ,farklı  $F=0,25,50,75$  kV/cm elektrik alan şiddetlerine ve  $V=40R^*$  değerine göre ,engel içinde bulunma olasılığının  $L(a^*)$  kuyu genişliğine göre değişimini veren grafik şekil 3.2.4 ' te verilmiştir



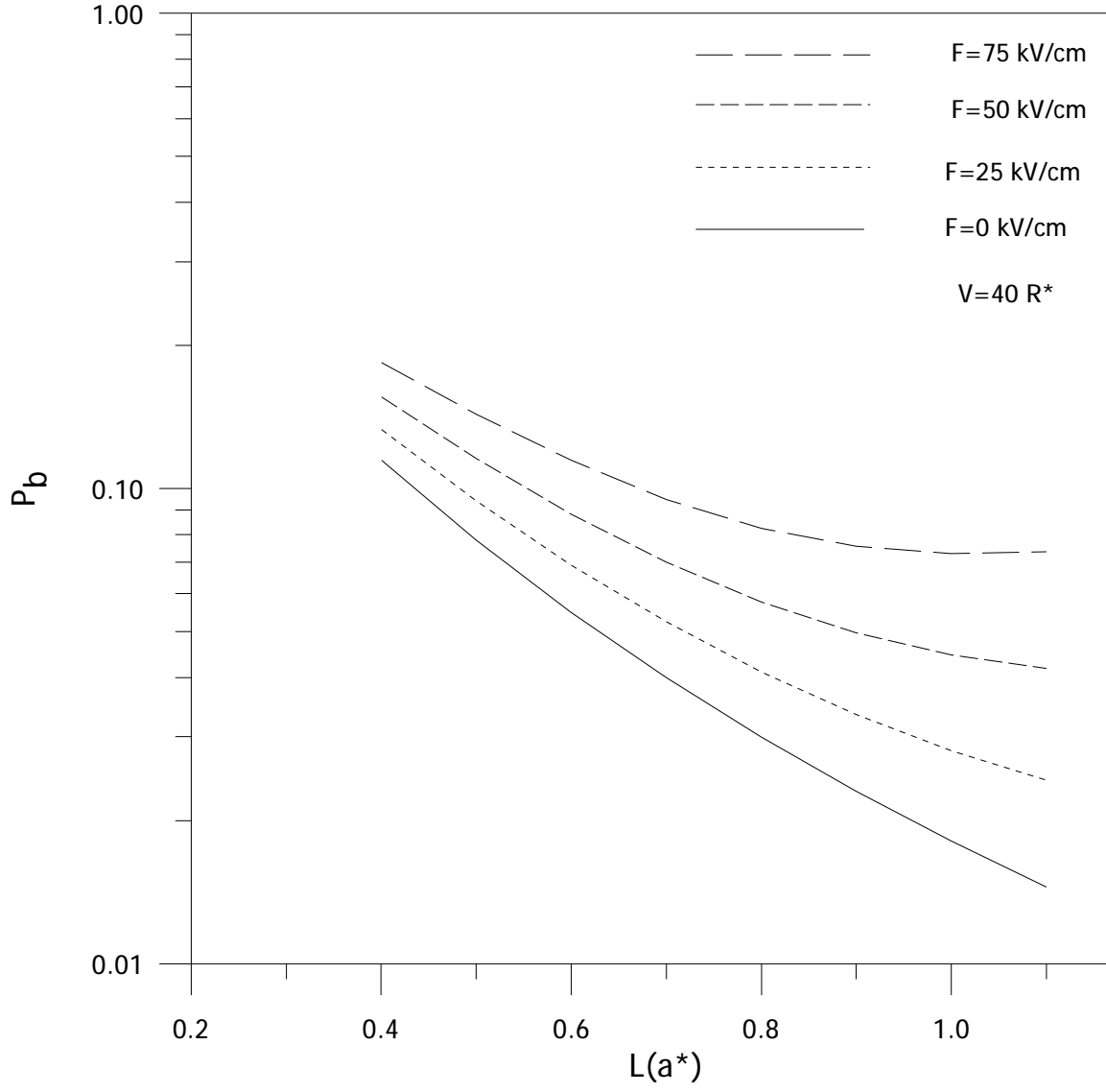
**Şekil 3.2.1** Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun ( $F$  elektrik alan şiddeti olmak üzere) taban durum enerjisinin , farklı  $F$ (kV/cm) elektrik alan şiddetlerine göre, $L(a^*)$  kuyu genişliğiyle değişimini gösteren grafik. (Varyasyon yöntemi ile)



**Şekil 3.2.2)** Elektrik alan gören simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusuna hapsedilen bir elektronun taban durum dalga fonksiyonlarını gösteren grafik. (Varyasyon yöntemi ile)



**Şekil 3.2.3)** Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusunda , farklı  $F$  elektrik alan şiddetlerine göre, parçacığın engel içinde bulunma olasılığının  $V(R^*)$  kuyu engeline göre değişimini veren grafik.



**Şekil 3.2.4)** Simetrik sonlu potansiyel kuantum kuyusunda , farklı F elektrik alan şiddetlerine göre, parçacığın engel içinde bulunma olasılığının  $L(a^*)$  kuyu genişliğine göre değişimini veren grafik.

#### 4.) DÜZGÜN ELEKTRİK ALAN GÖREN SONSUZ KUANTUM KUYUSUNA HAPSEDİLEN ELEKTRON VE AIRY ÇÖZÜMLERİ

Sonsuz kuantum kuyusuna '+z' eksenini doğrultusunda yani enerji duvarlarına dik doğrultuda düzgün  $\vec{F}$  elektrik alanı uygulanırsa , kuyunun böyle bir elektrik alan altındaki durumu şekildeki gibi olur.

Şekil4.1) "+z" doğrultusunda  $\vec{F}$  elektrik alan gören simetrik sonsuz kuantum kuyusu

Kuyu içine hapsedilen elektronun Hamiltonyen'i  $a^*$  ve  $R^*$  biriminde

$$H = -\frac{d^2}{dz^2} + hz + V(z) \quad (4.1)$$

olur. Burada  $V(z)$  ;

$$V(z) = \begin{cases} 0 & ; \quad |z| < L/2 \\ \infty & ; \quad |z| > L/2 \end{cases} \quad (4.2)$$

ve  $h = \frac{(0.01)a^* F(kV/cm)}{R^*}$  'dir. Böyle bir elektronun sağladığı Schrödinger denklemi,

$$Hy(z) = Ey(z) \quad (4.3)$$

veya

$$\left[ -\frac{d^2}{dz^2} + hz + V(z) \right] y(z) = Ey(z) \quad (4.4)$$

olur. Bu denklemde

$$a = hL^3$$

$$e = EL^2$$

$$u = \frac{z}{L}$$

dönüşümleri yapılırsa ,

$$\frac{d^2 y}{du^2} - (-e + au)y = 0 \quad (4.5)$$

elde edilir. Bu denklemi ;

$$x = a^{1/3}u - ea^{-2/3} \quad (4.6)$$

değişkenine bağlı olarak ifade edersek ;

$$a^{2/3} \frac{d^2 y(x)}{dx^2} - (au - e)y(x) = 0$$

veya

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} - (a^{1/3}u - ea^{-2/3})y(x) = 0$$

veya

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} - xy(x) = 0 \quad (4.7)$$

Airy diferansiyel denklemi elde edilir[4]. Bu denklemin çözümleri ;

$$y(x) = aAi(x) + bBi(x) \quad (4.8)$$

şeklindedir. Sınır şartları kullanılırsa,

$$z_1 = -L/2 \quad \text{ve} \quad z_2 = +L/2$$

için

$$u_1 = -1/2 \quad \text{ve} \quad u_2 = 1/2$$

ve

$$x_1 = a^{1/3}(-1/2) - ea^{-2/3}$$

$$x_2 = a^{1/3}(1/2) - ea^{-2/3}$$

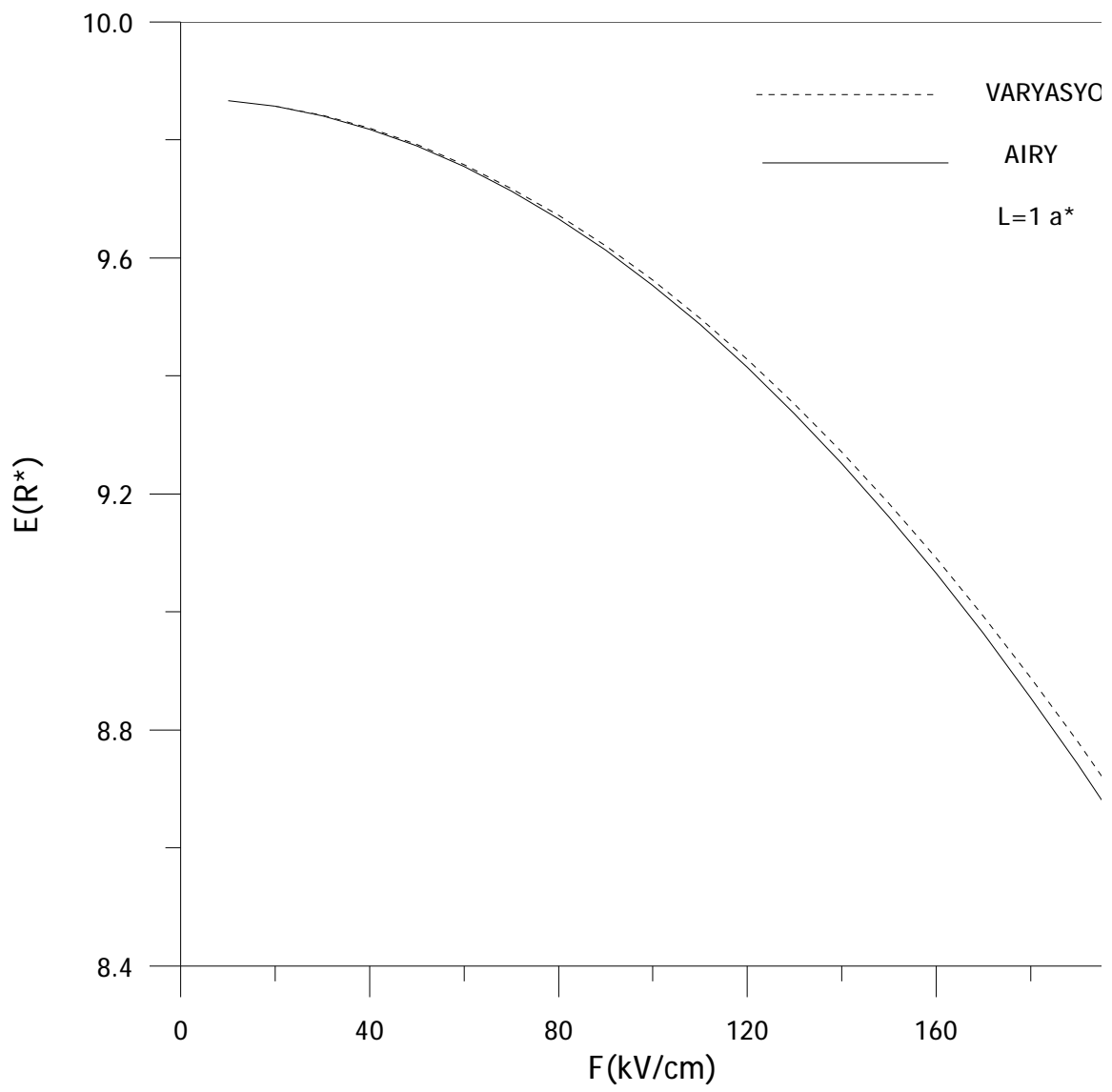
olur. Bu son iki eşitlikten,

$$Ai(x_1)Bi(x_2) - Ai(x_2)Bi(x_1) = 0 \quad (4.9)$$

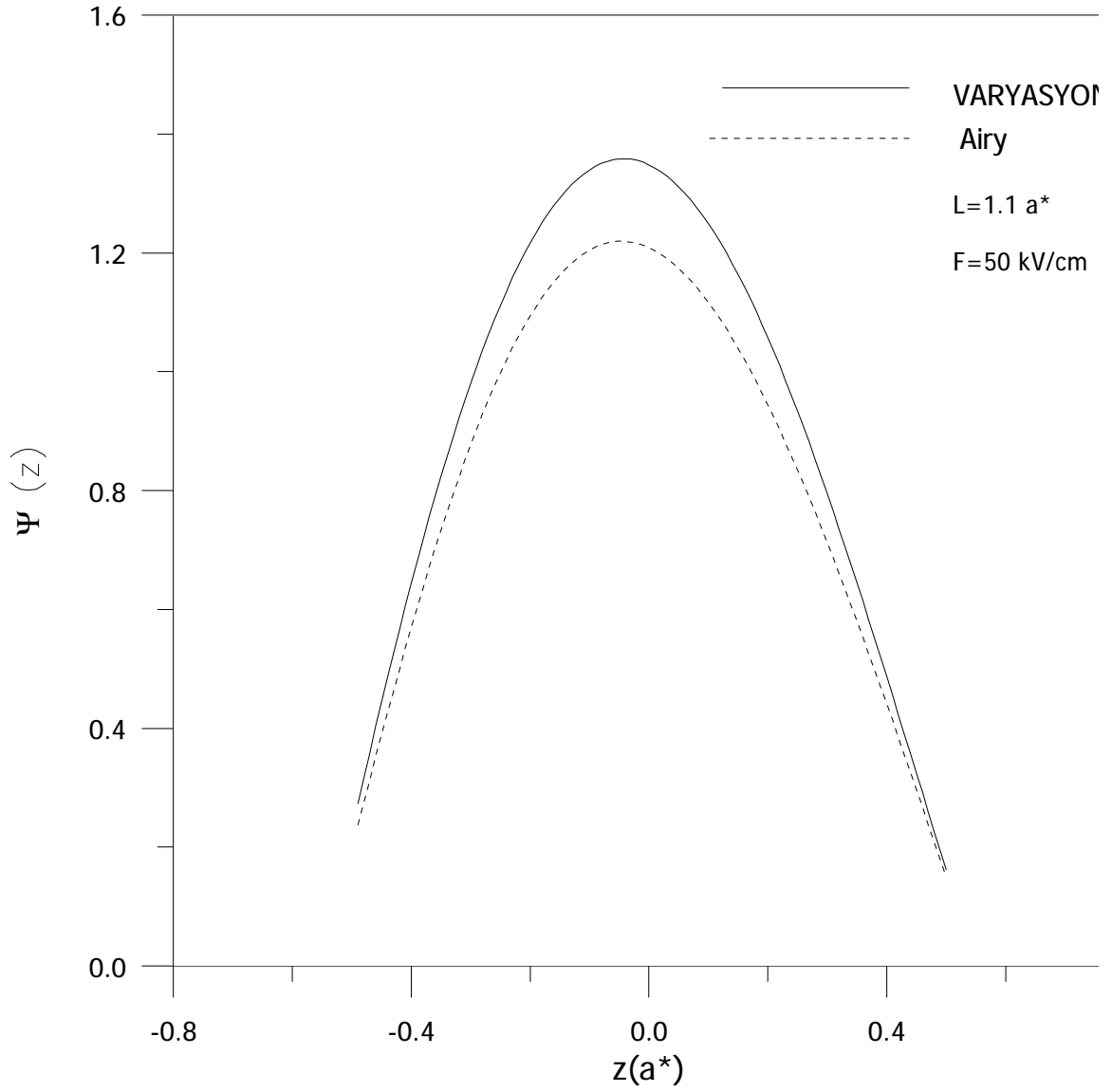
elde edilir. Bu denklemden 'e' enerjisi bilgisayarda nümerik olarak hesaplanır. Denklem (4.9) 'u sağlayan en küçük 'e' taban duruma , ikinci küçük 'e' birinci uyarılmış duruma karşılık karşılık gelir. Biz taban duruma karşı gelen 'e' değerlerini bilgisayarda hesaplayıp aşağıdaki grafiklerimizi elde ettik:

Elektronun Airy fonksiyonları ve Varyasyon yöntemi ile çözülen taban durum enerjisinin karşılaştırmalı olarak F elektrik alan şiddetine bağlı değişimini gösteren grafik şekil 4.1 ' de verilmiştir.

Elektronun Airy fonksiyonları ve Varyasyon yöntemi ile çözülen taban durum dalga fonksiyonlarının karşılaştırmalı olarak gösteren grafik şekil 4.2 ' de verilmiştir



**Şekil 4.1)** Airy fonksiyonları ve Varyasyon yöntemi ile çözülen simetrik sonsuz kuantum kuyusunda taban durumdaki enerjinin,  $F$  (kV/cm) elektrik alan şiddetine bağlı değişimini gösteren grafik.



**Şekil 4.2 )** Airy fonksiyonları ve Varyasyon Yöntemle çözülen elektronun taban durum dalga fonksiyonlarının karşılaştırmalı olarak değişimi gösteren grafik.

**5.1 ) DÜZGÜN ELEKTRİK ALAN GÖREN -L/2 ‘den +L/2 ‘ ye KADAR SONSUZ ,  
+L/2 den SONSUZA V<sub>0</sub> POTANSİYEL ENGELİNE SAHİP KUANTUM KUYUSU  
İÇİNE HAPSEDİLEN ELEKTRONUN VARYASYONEL YÖNTEMLE  
İNCELENMESİ**

Şekil 5.1.1)-L/2 ‘de sonsuz ,+L/2 ‘de V<sub>0</sub> potansiyel engeline sahip olan bir potansiyel kuyu

a bölgesinde elektrik alan  $\vec{F} = 0$  iken ,elektron için a\* ve R\* birim sisteminde Schrödinger denklemi;

$$-\frac{d^2 y_a(z)}{dz^2} + 0 = E y_a(z) \quad (5.1.1)$$

şeklindedir. Bu denklemin çözümü olan  $y_a(z)$  dalga fonksiyonu ise ;

$$(D^2 + k_1^2) y_a(z) = 0 \Rightarrow D^2 = -k_1^2 \Rightarrow D = \mu i k_1 ; k_1 = \sqrt{E}$$

$$y_a(z) = A_1 e^{ik_1 z} + B e^{-ik_1 z}$$

$$y_a(z) = A \cos k_1 z + B \sin k_1 z \quad (5.1.2)$$

şeklinde elde edilir.

b bölgesinde elektrik alan  $\vec{E} = 0$  iken Schrödinger denklemi ;

$$-\frac{d^2 y_b(z)}{dz^2} + V_0 y_b(z) = E y_b(z) \quad (5.1.3)$$

şeklindedir. Eğer bu denklemi çözersek ,

$$\frac{d^2 y_b(z)}{dz^2} - (V_0 - E) y_b(z) = 0$$

$$(D^2 - k_2^2) y_a(z) = 0 \Rightarrow D^2 = k_2^2 \Rightarrow D = \pm k_2; k_2 = \sqrt{V_0 - E}$$

$$y_b(z) = C e^{-k_2 z} + D e^{k_2 z}$$

$$y_b(z) = C e^{-k_2 z} \quad (5.1.4)$$

şeklinde (5.1.4) ile gösterdiğimiz b bölgesindeki bir elektronun dalga fonksiyonunu elde ederiz.

Şimdi sınır koşullarını kullanalım. İlk önce  $z = -L/2$  sınır koşulunu kullanırsak,

$$\begin{aligned}
y(z = -l/2) = 0 &= A \cos k_1(-l/2) + B \sin k_1(-l/2) \\
&= 0 = A \cos k_1(l/2) - B \sin k_1(l/2)
\end{aligned}$$

$$A = B \frac{\sin(k_1 l/2)}{\cos(k_1 l/2)} \quad (5.1.5)$$

A sabitini elde ederiz.  $z = l/2$  sınır koşulunu kullanırsak ;

$$y_a(z = l/2) = y_b(z = l/2)$$

$$y(z = l/2) = A \cos k_1 l/2 + B \sin k_1 l/2 = C e^{-k_2 l/2} \quad (5.1.6)$$

$$y'_a(z = l/2) = y'_b(z = l/2)$$

$$-k_1 A \sin k_1 l/2 + k_1 B \cos k_1 l/2 = -k_2 C e^{-k_2 l/2} \quad (5.1.7)$$

elde edilir. Denklem (5.1.5) 'te elde ettiğimiz A sabitini (5.1.6) ve (5.1.7) denklemlerinde yerine yazarsak ;

$$A \cos k_1 l/2 + B \sin k_1 l/2 = C e^{-k_2 l/2}$$

$$B \frac{\sin(k_1 l/2)}{\cos(k_1 l/2)} \cdot \cos(k_1 l/2) + B \sin k_1 l/2 = C e^{-k_2 l/2}$$

$$2B \sin k_1 l/2 = C e^{-k_2 l/2} \quad (5.1.8)$$

ve

$$-k_1 A \sin k_1 \frac{L}{2} + k_1 B \cos k_1 \frac{L}{2} = -k_2 C e^{-k_2 \frac{L}{2}}$$

$$-k_1 B \frac{\sin(k_1 \frac{L}{2})}{\cos(k_1 \frac{L}{2})} \sin k_1 \frac{L}{2} + k_1 B \cos k_1 \frac{L}{2} = -k_2 C e^{-k_2 \frac{L}{2}}$$

$$-k_1 B \frac{\sin^2(k_1 \frac{L}{2})}{\cos(k_1 \frac{L}{2})} + k_1 B \cos k_1 \frac{L}{2} = -k_2 C e^{-k_2 \frac{L}{2}}$$

$$k_1 B \frac{\sin^2(k_1 \frac{L}{2}) - \cos^2(k_1 \frac{L}{2})}{\cos(k_1 \frac{L}{2})} = k_2 C e^{-k_2 \frac{L}{2}}$$

(5.1.9)

elde edilir. Denklem (5.1.8) ' i denklem (5.1.9)' a oranlarsak ,

$$\frac{2B \sin k_1 \frac{L}{2}}{k_1 B \frac{\sin^2(k_1 \frac{L}{2}) - \cos^2(k_1 \frac{L}{2})}{\cos(k_1 \frac{L}{2})}} = \frac{C e^{-k_2 \frac{L}{2}}}{k_2 C e^{-k_2 \frac{L}{2}}}$$

$$2k_2 \sin k_1 \frac{L}{2} = k_1 \frac{\sin^2(k_1 \frac{L}{2}) - \cos^2(k_1 \frac{L}{2})}{\cos(k_1 \frac{L}{2})}$$

$$2k_2 \sin(k_1 \frac{L}{2}) \cos(k_1 \frac{L}{2}) = k_1 (\sin^2(k_1 \frac{L}{2}) - \cos^2(k_1 \frac{L}{2}))$$

buradan dönüşümler kullanılarak,

$$k_2 \sin(k_1 L) = -k_1 \cos(k_1 L)$$

$$k_2 = -k_1 \frac{\cos(k_1 L)}{\sin(k_1 L)} \quad (5.1.10)$$

bulunur.

Şekil4.2.2) “+z” doğrultusunda düzgün  $\vec{F}$  elektrik alan gören  $-L/2$  ‘de sonsuz ,  $+L/2$  ‘de  $V_0$  potansiyel engeline sahip potansiyel kuyu

Şimdi “+z” doğrultusunda düzgün ve  $F$  şiddetinde bir elektrik alan uygulayalım . -e yüklü bir elektronun  $W$  enerjisi ,

$$W = eFz$$

olur.

Düzgün elektrik alan gören kuantum kuyusunun “a” bölgesinde hapsedilmiş bir elektron için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ;

$$-\frac{d^2 y_a(z)}{dz^2} + eFz y_a(z) = E y_a(z) \quad (5.1.11)$$

şeklinde dir. Buradan bu denklemi sağlayan  $y_a(z)$  deneme dalga fonksiyonu Varyasyonel çözüm yöntemine göre ;

$$y_a(z) = (A \cos k_1 z + B \sin k_1 z) e^{-bz} \quad (5.1.12)$$

şeklinde seçilir. A,B katsayıları ise sınır koşullarından bulunacak olan normalizasyon sabitleridir. İlk önce  $z=-L/2$  sınır koşulunu uygularsak ;

$$\begin{aligned} y(z = -L/2) = 0 &= (A \cos k_1(-L/2) + B \sin k_1(-L/2)) \exp(-bz) \\ &= 0 = A \cos k_1(L/2) - B \sin k_1(L/2) \end{aligned}$$

$$A = B \frac{\sin(k_1 L/2)}{\cos(k_1 L/2)} \quad (5.1.13)$$

A katsayısını elde ederiz.  $H_a$  Hamiltonien'i ,

$$H_a = -\frac{d^2}{dz^2} + hz \quad (5.1.14)$$

şeklindedir. “b” bölgesindeki zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ise ;

$$-\frac{d^2 y_b(z)}{dz^2} + V_0 y_b(z) + hz y_b(z) = E y_b(z) \quad (5.1.15)$$

olur. Bu denklemi sağlayan  $y_b(z)$  dalga fonksiyonu ise ,

$$y_b(z) = C e^{-k_2 z} e^{-bz} \quad (5.1.16)$$

şeklindedir. Burada  $z=L/2$  sınır koşulunu uygularsak ,

$$y(z = l/2) = (A \cos k_1 l/2 + B \sin k_1 l/2) \exp(-bz) = C e^{-k_2 l/2} \exp(-bz) \quad (5.1.17)$$

$$C = 2B \sin(k_1 l/2) \exp(k_2 l/2) \quad (5.1.18)$$

C normalizasyon katsayısını elde ederiz. Burada  $b$  Varyasyonel parametredir. Bu bölgedeki  $H_b$  Hamiltonien'i ise ,

$$H_b = -\frac{d^2}{dz^2} + hz + V_0 \quad (5.1.19)$$

şeklindedir . Böyle bir elektronun enerjisi ise şu şekilde bulunur.

$$\langle E \rangle = \left[ \frac{\langle y | H | y \rangle}{\langle y | y \rangle} \right]_{\min}$$

$$\langle E \rangle = \left[ \frac{\langle y_a | H_a | y_a \rangle + \langle y_b | H_b | y_b \rangle}{\langle y_a | y_a \rangle + \langle y_b | y_b \rangle} \right]_{\min} \quad (5.1.20)$$

**5.2 ) DÜZGÜN ELEKTRİK ALAN GÖREN -L/2 ‘den +L/2 ‘ ye KADAR SONSUZ ,  
+L/2 den SONSUZA  $V_0$  POTANSİYEL ENGELİNE SAHİP KUANTUM KUYUSU  
İÇİNE HAPSEDİLEN BİR ELEKTRON VE AIRY ÇÖZÜMLERİ**

Şekil 5.2.1) “+z” doğrultusunda düzgün  $\vec{F}$  elektrik alan gören -L/2 ‘de sonsuz ,+L/2 ‘de  $V_0$  potansiyel engeline sahip potansiyel kuyu

“+z” doğrultusunda düzgün  $\vec{F}$  elektrik alan gören sonsuz potansiyel kuantum kuyusu içindeki bir elektronun Airy diferansiyel çözümleri bölüm (4) ‘ te incelenmişti. Sonsuz kuantum kuyusundaki Airy çözümleri şu şekildeydi ;

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} - xy(x) = 0 \quad (5.2.1)$$

Bu denklemin çözümleri ise ;

$$y(x) = aA_i(x) + bB_i(x) \quad (5.2.2)$$

şeklinde idi. Şimdi bu çözümleri “a” ve “b” bölgeleri için ayrı ayrı yazalım .

$$y_a(x) = CA_i(x) + DB_i(x) \quad (5.2.3)$$

$$y_b(x) = GA_i(m) \quad (5.2.4)$$

Daha önce bölüm (4) ‘ te  $x$  ‘ yi ;

$$x = a^{1/3}u - ea^{-2/3}$$

şeklinde tanımlamıştık. Sınır koşullarında  $x$  ‘ yi kullanırsak ;

$$x_1 = a^{1/3}(-\frac{L}{2}) - a^{-2/3}E \quad (5.2.5)$$

$$x_2 = a^{1/3}(+\frac{L}{2}) - a^{-2/3}E \quad (5.2.6)$$

$$m = a^{1/3}(+\frac{L}{2}) - a^{-2/3}(E - V_0) \quad (5.2.7)$$

elde ederiz.  $z=-L/2$  sınır koşulunu kullanırsak ;

$$y_a(z = -L/2) = 0 \quad (5.2.8)$$

$$CA_i(x_1) + DB_i(x_1) = 0 \quad (5.2.9)$$

$$\frac{D}{C} = -\frac{A_i(x_1)}{B_i(x_1)} \quad (5.2.10)$$

sabitini elde ederiz.  $z=+L/2$  sınır koşulunu kullanır ;

$$y_a(z = L/2) = y_b(z = L/2)$$

$$CA_i(x_2) + DB_i(x_2) = GA_i(m) \quad (5.2.11)$$

$$CA_i'(x_2) + DB_i'(x_2) = GA_i'(m) \quad (5.2.12)$$

ve denklem (5.2.11) ' i denklem (5.2.12) ' ye oranlarsak ;

$$\left[ A_i(x_2) + \frac{D}{C} B_i(x_2) \right] A_i'(m) - \left[ A_i'(x_2) + \frac{D}{C} B_i'(x_2) \right] A_i(m) = 0 \quad (5.2.13)$$

elde ederiz. Bulduğumuz bu denklemden 'E' enerjisi bilgisayarda nümerik olarak hesaplarız. Denklemi sağlayan en küçük 'E' taban duruma karşılık gelir.

Elektronun Varyasyon yöntemi ile bulunan taban durum dalga fonksiyonun, farklı  $F = 50, 100, 200, 300$  kV/cm elektrik alan şiddetlerine göre grafikleri şekil 5.1.1 ' de verilmiştir.

Elektronun Airy Fonksiyonu ile bulunan taban durum dalga fonksiyonun, farklı  $F = 50, 100, 200, 400$  kV/cm elektrik alan şiddetlerine göre grafikleri şekil 5.2.1 ' de verilmiştir.

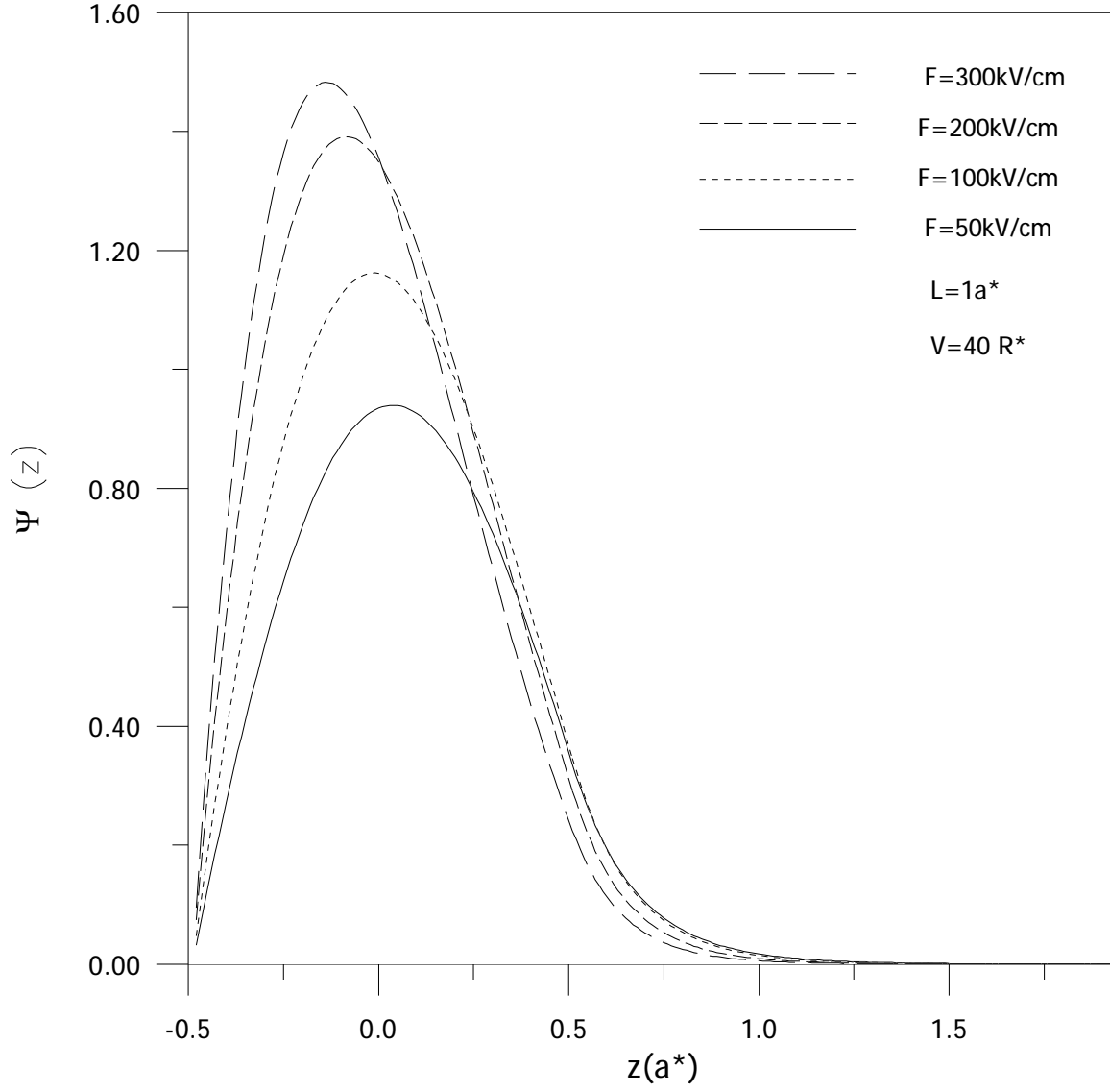
Elektronun Varyasyon yöntemi ve Airy fonksiyonu ile çözülen taban durum enerjisinin  $F$  (kV/cm) elektrik alan şiddetine bağlı değişimini gösteren grafik şekil 5.2.2 ' de verilmiştir.

Elektronun Varyasyon yöntemi ve Airy fonksiyonu ile çözülen taban durum

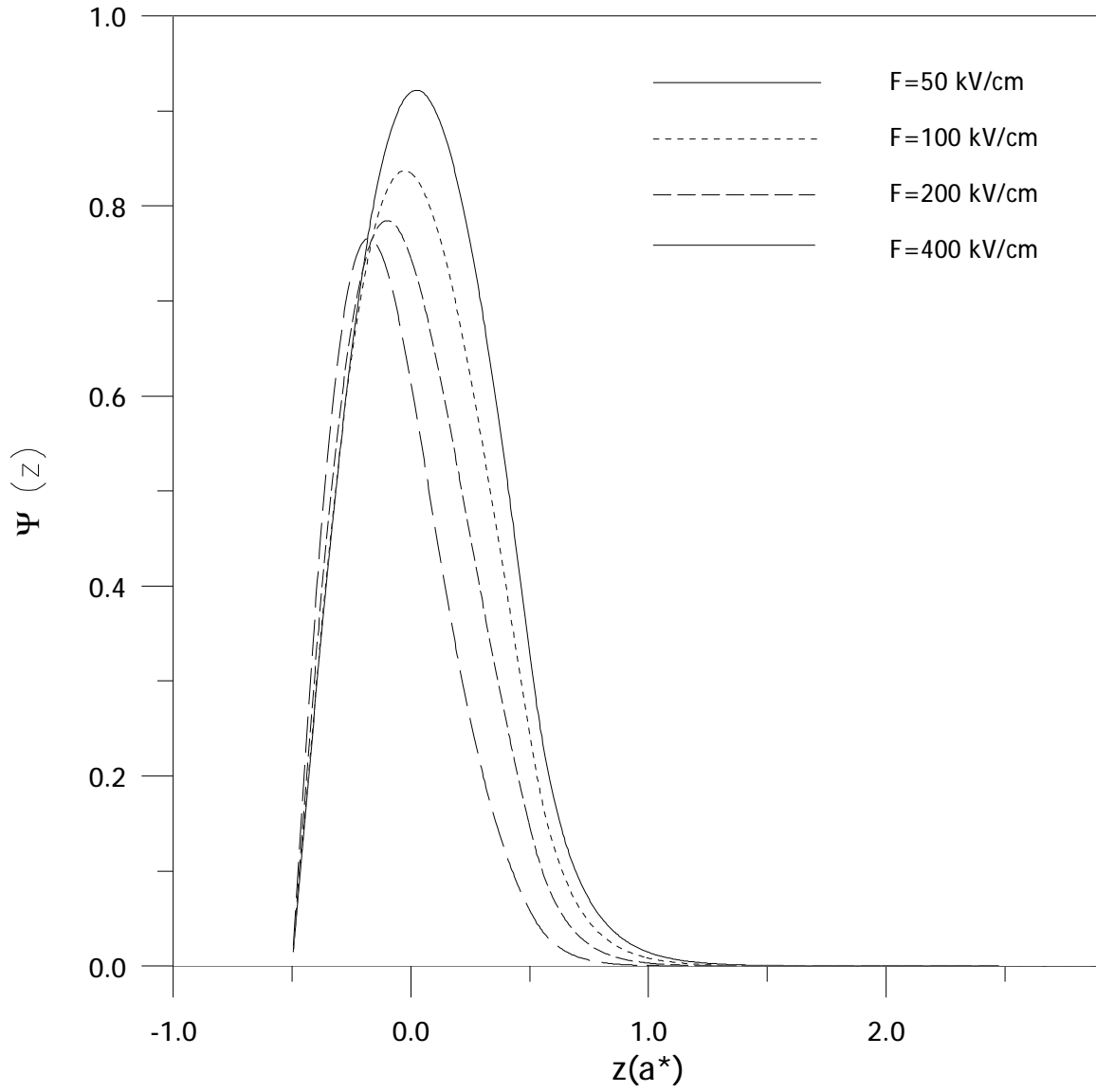
dalga fonksiyonlarının karřılařtırılmal olarak grafikleri Őekil 5.2.3 ‘ de verilmiřtir.

Elektronun Varyasyon yontemi ile cözölen engel içinde bulunma olasılıđının , farklı  $F=0,25,50,75$  kV/cm elektrik alan řiddetlerine ve  $L=0.3 a^*$  deđerine göre,  $V(R^*)$  kuyu engeline göre deđiřimi veren grafik Őekil 5.1.2 ‘ de gösterilmiřtir.

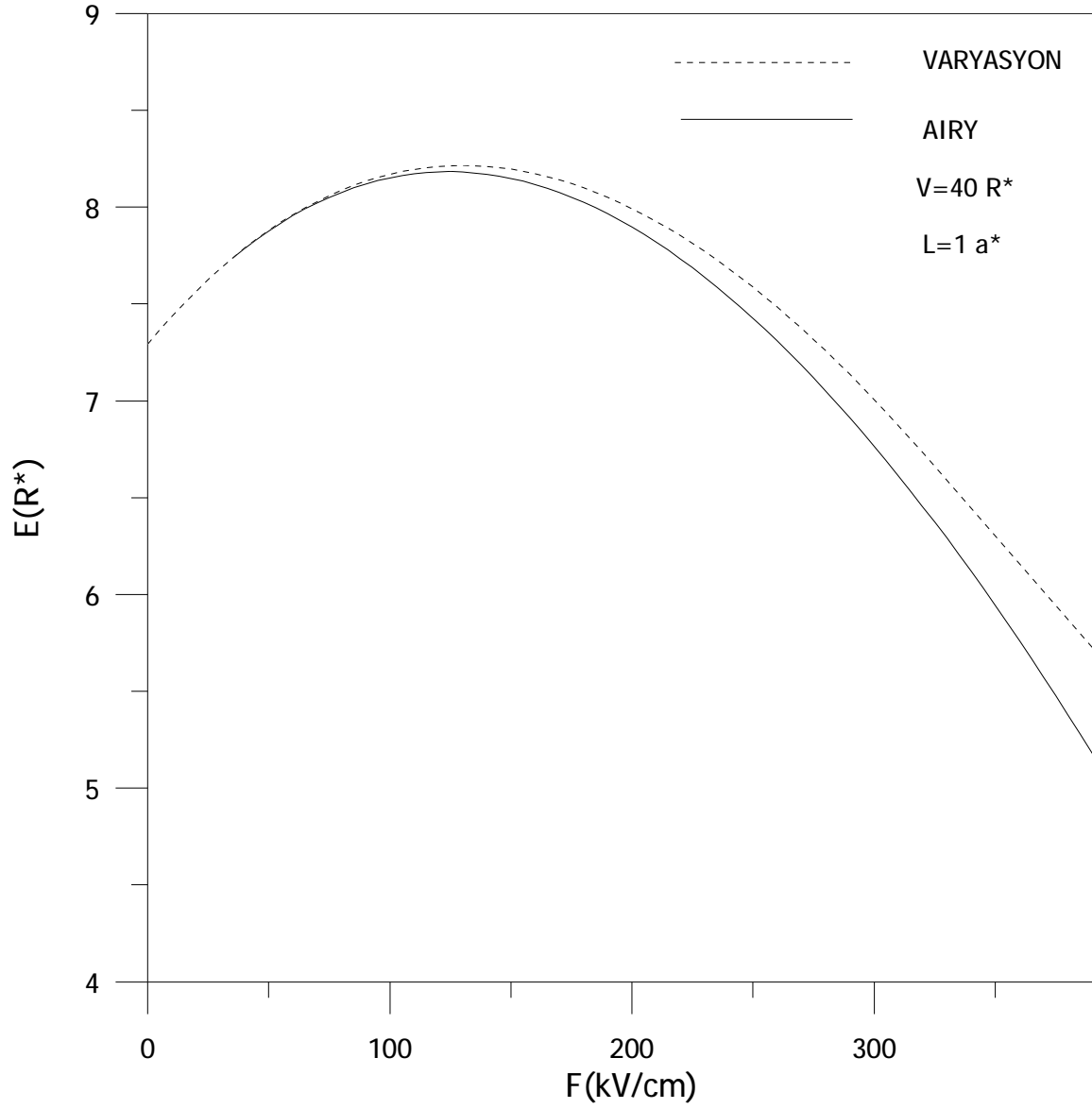
Elektronun Varyasyon yontemi ile cözölen engel içinde bulunma olasılıđının , farklı  $F=0,25,50,75$  kV/cm elektrik alan řiddetlerine göre,  $L(a^*)$  kuyu geniřliđine göre deđiřimi veren grafik Őekil 5.1.3 ‘ de gösterilmiřtir



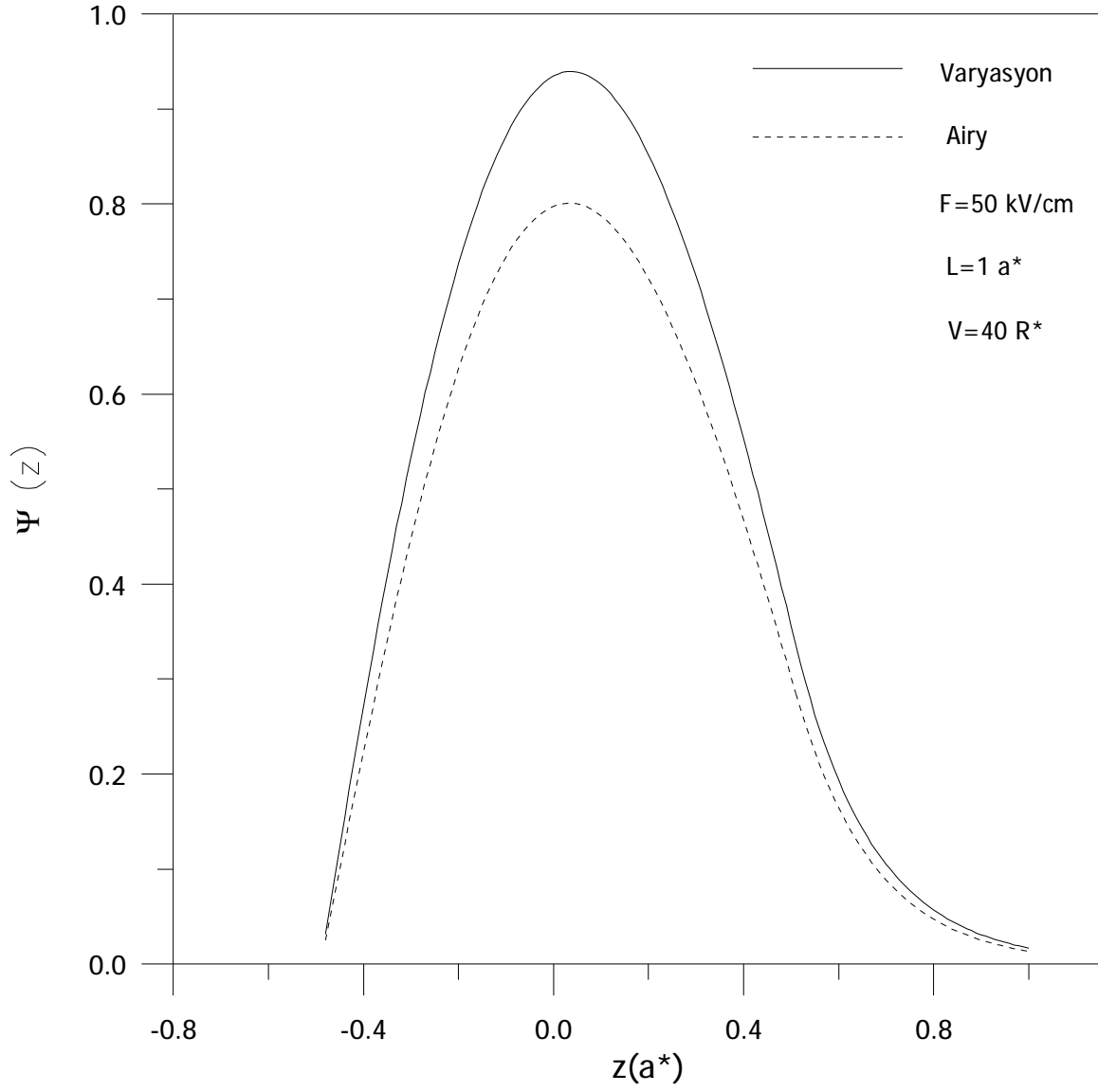
**Şekil 5.1.1** )  $-L/2$  'de sonsuz,  $+L/2$  'de  $V_0$  potansiyel engeline sahip kuantum kuyusunda bir elektronun taban durum dalga fonksiyonlarının ,farklı  $F$  elektrik alan şiddetleri için, grafikleri.(Varyasyon Yöntemi ile)



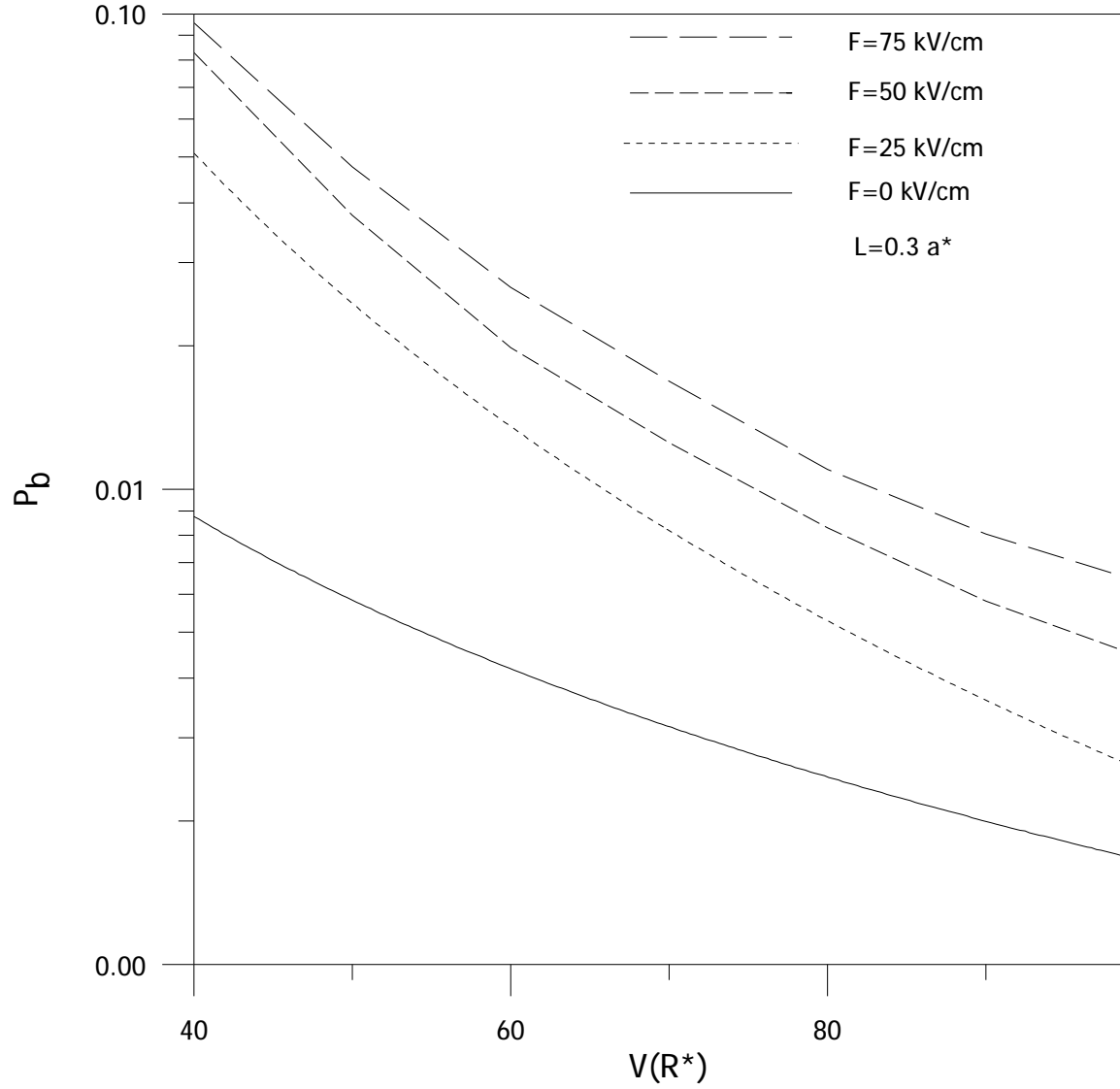
**Şekil 5.2.1** )  $-L/2$  'de sonsuz , $+L/2$  'de  $V_0$  potansiyel engeline sahip kuantum kuyusunda bir elektronun taban durum dalga fonksiyonlarının ,farklı  $F$  elektrik alan şiddetleri için grafikleri.(Airy Fonksiyonu ile)



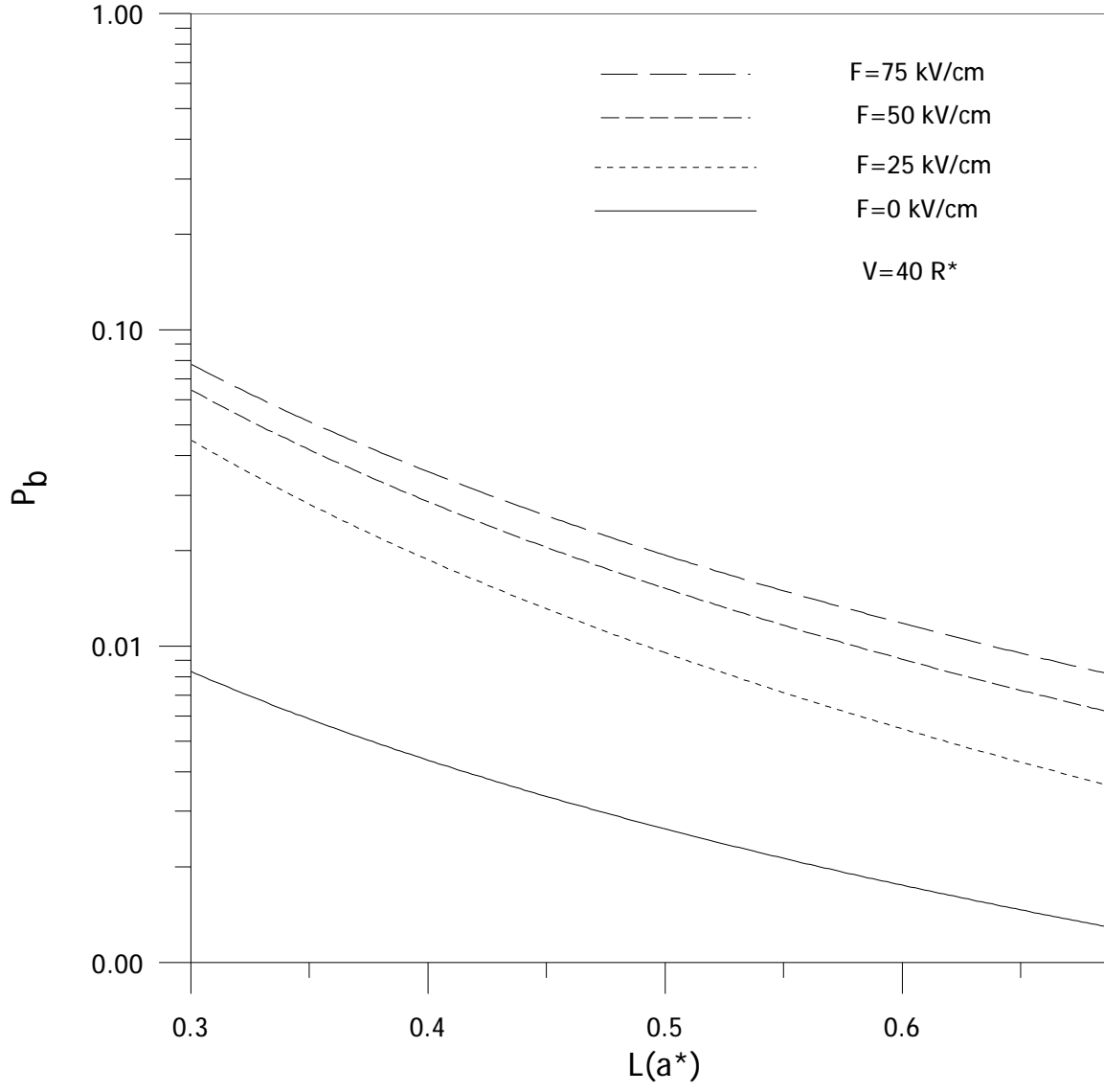
**Şekil 5.2.2** ) Airy Fonksiyonu ve Varyasyon Yöntemi ile çözülen,  $-L/2$  'de sonsuz,  $+L/2$  'de  $V_0$  potansiyel engeline sahip kuantum kuyusunda bir elektronun taban durum enerjisinin,  $F$  elektrik alan şiddeti olmak üzere,  $F$ (kV/cm) elektrik alan şiddetiyle değişimini gösteren grafik.



**Şekil 5.2.3)** Elektronun Varyasyon Yöntemi ve Airy Fonksiyonu ile çözülen taban durum dalga fonksiyonlarının karşılaştırmalı olarak değişimini veren grafik



**Şekil 5.1.2)** Varyasyon Yöntemi ile çözülen,  $-L/2$  'de sonsuz,  $+L/2$  'de  $V_0$  potansiyel engeline sahip kuantum kuyusunda bir elektronun engel içinde bulunma olasılığının,  $F$  elektrik alan şiddeti olmak üzere farklı  $F$  elektrik alan şiddetlerine göre,  $V(R^*)$  kuyu engeline göre değişimini veren grafik.



**Şekil 5.1.3** ) Varyasyon Yöntemi ile çözülen,  $-L/2$  'de sonsuz,  $+L/2$  'de  $V_0$  potansiyel engeline sahip kuantum kuyusunda bir elektronun engel içinde bulunma

olasılığının,  $F$  elektrik alan şiddeti olmak üzere farklı F elektrik alan şiddetlerine göre, L(a\*) kuyu genişliğine göre değişimini veren grafik.

### 6.1.)SONSUZ KUANTUM KUYUSUNDA YABANCI ATOM PROBLEMİ

Sonsuz kuantum kuyusu içindeki bir elektrona yabancı bir atomun etkisinin olması durumunda Hamiltonien ' i ;

$$H = -\frac{\eta^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{e_0 \sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}} \quad (6.1.1)$$

olur. Burada  $\frac{\eta^2}{2m^*} = 1$  alınır; uzunluk a\* ve enerji R\* birimlerine dönüşür.  $z_i$  yabancı atomun konumunu göstermektedir. Çalışmalarımızda  $z_i$  için  $0 < z_i < L/2$  aralığı seçilmiştir. Schrödinger denklemi ,a\* ve R\* birimlerinde ;

$$Hy_i(r, z) = Ey_i(r, z) \quad (6.1.2)$$

$$-\frac{\partial^2 y_i(r, z)}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} y_i(r, z) - \frac{2y_i(r, z)}{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}} = Ey_i(r, z) \quad (6.1.3)$$

şeklinde yazılır. Bu denklemin tam çözümü yoktur. Çözüm için , yaklaşık çözüm yöntemi olan Varyasyon çözüm yöntemini kullanabiliriz. (6.1.3) denkleminin çözümü olarak, aşağıdaki deneme dalga fonksiyonunu ;

$$y_{i1}(\mathbf{r}, z) = N y_0(z) \exp\left(-\frac{r}{I}\right)$$

veya

$$y_{i1}(\mathbf{r}, z) = N \cos\left(\frac{p}{L} z\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}}{I}\right) \quad (6.1.4)$$

seçebiliriz. Bu taban durum için deneme dalga fonksiyonudur. Burada  $y_0(z)$  yabancı atomun yokluğundaki taban durum dalga fonksiyonu, N normalizasyon katsayısı,  $I$  ise minimizasyon sabitidir.

Birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonu da  $y_2(\mathbf{r}, z)$  ;

$$y_{i2}(\mathbf{r}, z) = N y_1(z) \exp\left(-\frac{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}}{I}\right)$$

veya

$$y_{i2}(\mathbf{r}, z) = N_1 \sin\left(\frac{2p}{L} z\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}}{I}\right) \quad (6.1.5)$$

şeklinde seçilebilir. Burada  $y_1(z)$  yabancı atomun yokluğundaki birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonu,  $N_1$  normalizasyon katsayısı ve  $I$  ise minimizasyon sabitidir.

Bu dalga fonksiyonları göz önüne alınarak taban durum ve birinci uyarılmış durumda elektronun enerjisi için ;

$$\langle E_1 \rangle = \frac{\langle \mathbf{y}_{i1}(\mathbf{r}, z) | H | \mathbf{y}_{i1}(\mathbf{r}, z) \rangle}{\langle \mathbf{y}_{i1}(\mathbf{r}, z) | \mathbf{y}_{i1}(\mathbf{r}, z) \rangle} \quad (6.1.6)$$

$$\langle E_2 \rangle = \frac{\langle \mathbf{y}_{i2}(\mathbf{r}, z) | H | \mathbf{y}_{i2}(\mathbf{r}, z) \rangle}{\langle \mathbf{y}_{i2}(\mathbf{r}, z) | \mathbf{y}_{i2}(\mathbf{r}, z) \rangle} \quad (6.1.7)$$

ifadeleri yazılabilir. Burada elektronun bağlanma enerjisinin tanımı yapılırsa ;  $E_0$  yabancı atomun yokluğundaki elektronun taban durum enerjisi olmak üzere ;

$$E_{b1} = E_0 - \langle E_1 \rangle \quad \text{taban durum} \quad (6.1.8)$$

$$E_{b2} = E_{01} - \langle E_2 \rangle \quad \text{1. uyarılmış durum} \quad (6.1.9)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumlar için genel bir çözüm yapıldığında , bağlanma enerjisi için ;

$$E_b = \max_I \left[ -\frac{1}{I^2} + \frac{4P}{2Q + IP} \right] \quad (6.1.10)$$

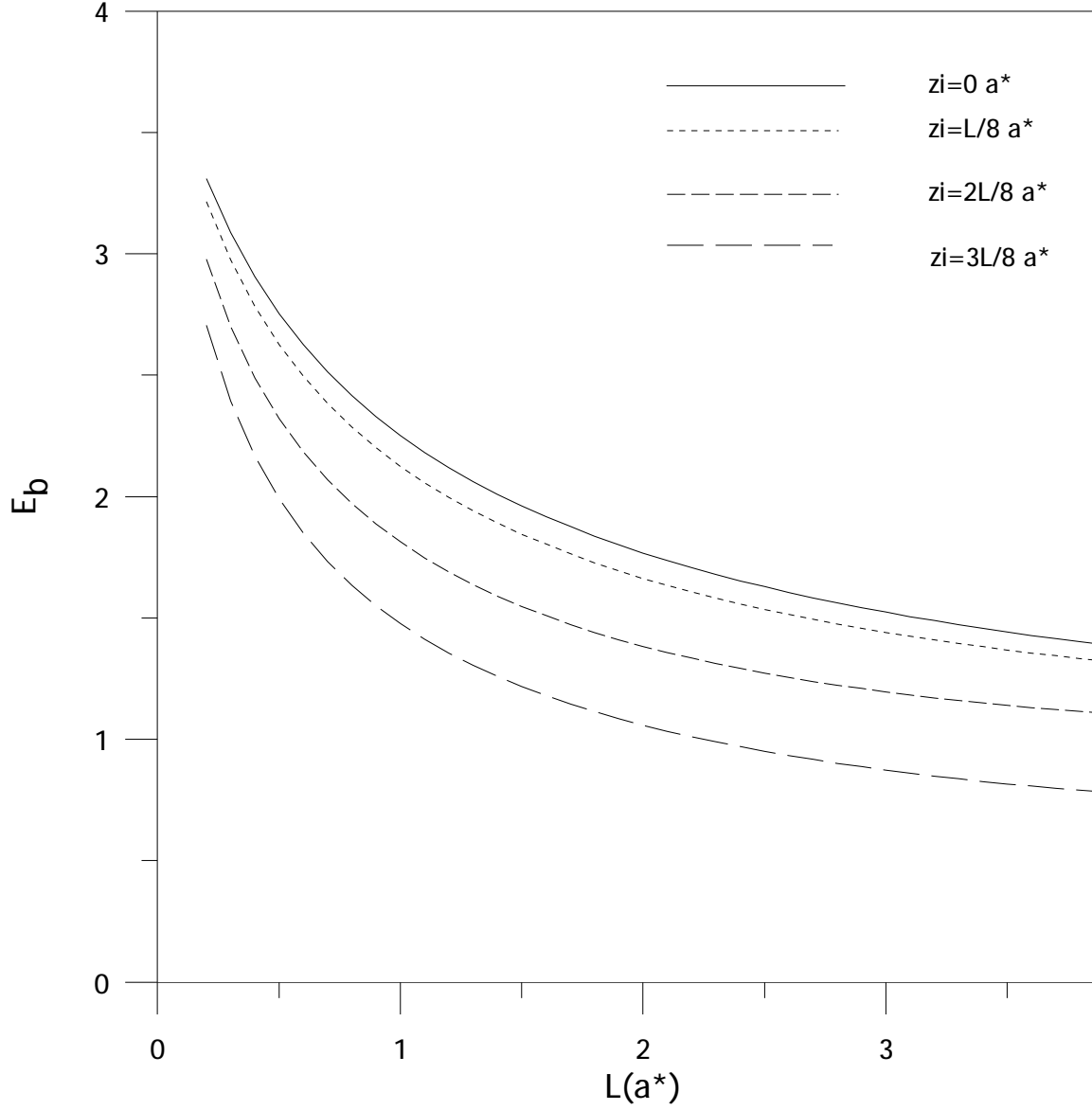
ifadesi bulunur.[5] P ve Q integralleri aşağıda verilmiştir.

$$P = \int_{-L/2}^{L/2} dz \mathbf{y}^2(z) \exp\left(\frac{-2|z - z_i|}{I}\right) \quad (6.1.11)$$

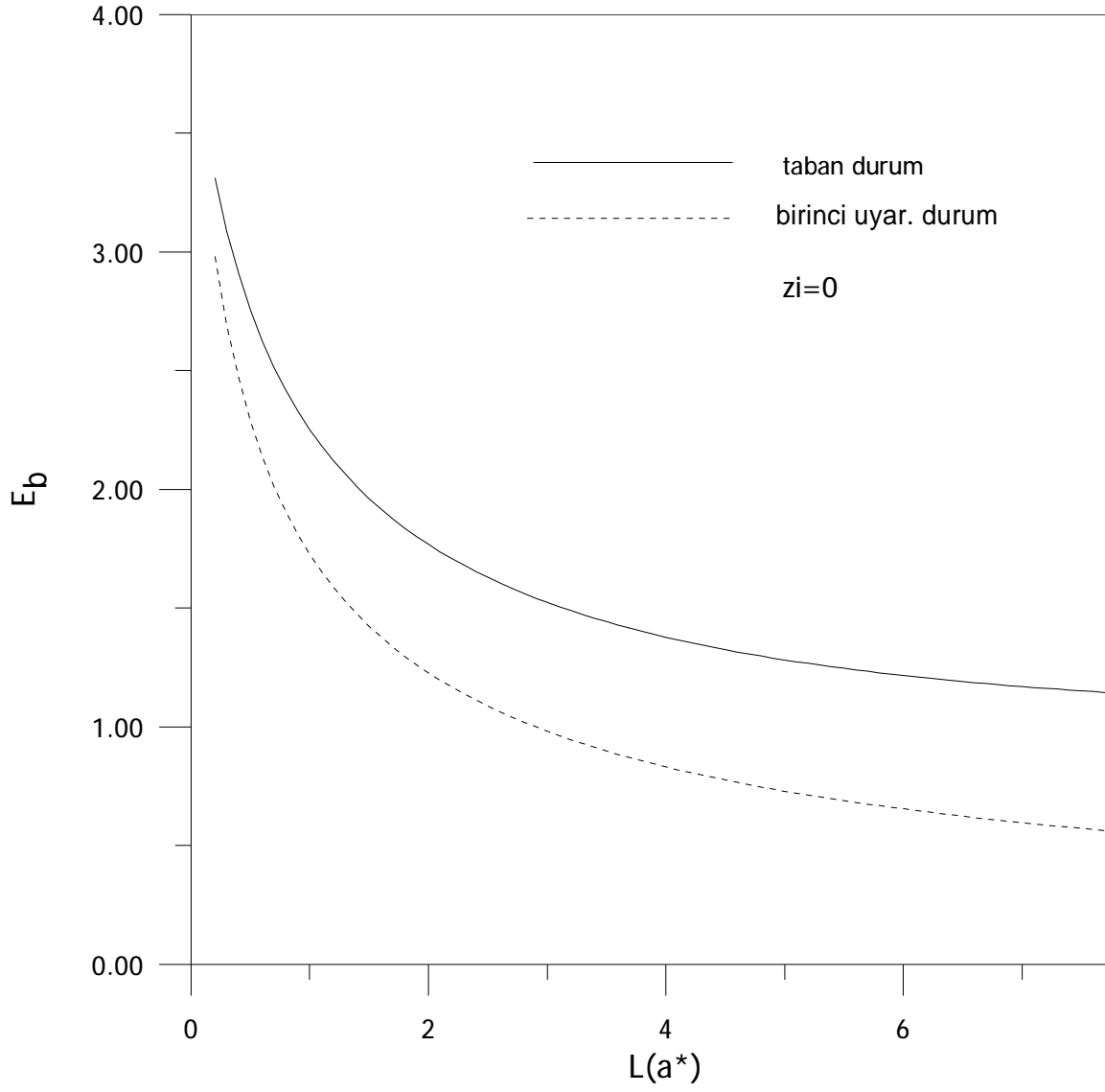
$$Q = \int_{-L/2}^{L/2} dz y^2(z) |z - z_i| \exp\left(\frac{-2|z - z_i|}{I}\right) \quad (6.1.12)$$

$z_i$  için  $z_i = 0, L/8, 2L/8, 3L/8$  şeklinde dört farklı değerleri için elektronun taban durum bağlanma enerjileri hesaplanmış ve kuyu genişliğine bağlı grafiği şekil 6.1.1 'de verilmiştir.

Sonsuz kuyuda  $z_i = 0$  konumunda bulunan yabancı atom etkisi altındaki bir elektronun taban ve birinci uyarılmış durum bağlanma enerjileri hesaplanmış ve kuyu genişliğine bağlı grafiği şekil 6.1.2 'de verilmiştir.



**Şekil 6.1.1** ) Sonsuz kuantum kuyusunda bulunan yabancı atom etkisindeki bir elektronun , yabancı atomun konumunun ( $z_i$ ) farklı dört değeri için taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği.



**Şekil 6.1.2)** Simetrik sonsuz kuantum kuyusunda  $z_i=0$  konumunda bulunan yabancı atom etkisindeki elektronun taban ve birinci uyarılmış durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği.

## 6.2.)SONLU KUANTUM KUYUSUNDA YABANCI ATOM PROBLEMİ

Şekildeki gibi bir simetrik sonlu potansiyel kuyusundaki potansiyel enerji ifadesi aşağıdaki gibi tanımlamak mümkündür ;

$$V = \begin{cases} V_0 & z \leq -L/2 \\ 0 & -L/2 \leq z \leq +L/2 \\ V_0 & z \geq +L/2 \end{cases}$$

Böyle bir kuantum kuyusu içinde yabancı atomun olması halinde kuyu içinde hapsedilmiş elektronun Hamiltonien ' i a\* ve R\* ' a uygun olarak ;

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{2}{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}} + V(z)$$

olur. Burada '  $z_i$  ' yabancı atomun konumunu göstermektedir. Çalışmalarımızda

$0 < z_i < +L/2$  aralığı seçilmiştir. Verilen bu bilgiler ve daha önceki bilgilere dayanarak , I.,

II. Ve III. Bölgeler için sistemin hareket denklemleri yani Schrödinger denklemleri ;

$$-\frac{\partial^2 y_I(r, z)}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial y_I(r, z)}{\partial r} - \frac{2y_I(r, z)}{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}} + V_0 y_I(r, z) = E y_I(r, z)$$

$$-\frac{\partial^2 y_{II}(r, z)}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial y_{II}(r, z)}{\partial r} - \frac{2y_{II}(r, z)}{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}} = E y_{II}(r, z)$$

$$-\frac{\partial^2 y_{III}(r, z)}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial y_{III}(r, z)}{\partial r} - \frac{2y_{III}(r, z)}{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}} + V_0 y_{III}(r, z) = E y_{III}(r, z)$$

biçiminde olur. Bu denklemlerin tam çözümü yoktur. Çözüm için yaklaşık çözüm yöntemi olan Varyasyon çözüm yöntemini kullanabiliriz. Bu yaklaşık çözüm yöntemi için , deneme fonksiyonları aşağıdaki gibi alınabilir.

$$y_I(r, z) = N_I \exp(+az) \exp\left(-\frac{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}}{l}\right)$$

$$y_{II}(r, z) = N_{II} \cos(kz) \exp\left(-\frac{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}}{l}\right) \quad (6.2.1)$$

$$y_{III}(r, z) = N_{III} \exp(-az) \exp\left(-\frac{\sqrt{r^2 + (z - z_i)^2}}{l}\right)$$

Bu fonksiyonlar taban durum dalga fonksiyonlarıdır. Burada  $N_I$ ,  $N_{II}$  ve  $N_{III}$

Normalizasyon katsayıları ve  $I$  minimizasyon sabitidir. Ayrıca  $a$  ve  $k$  sabitleri

$$a = \sqrt{V_0 - E} \quad \text{ve} \quad k = \sqrt{E}$$

olarak alınmıştır. Sınır şartlarından ;

$$N_I = N_{II} \cos(kL/2) \exp(+aL/2)$$

ve

$$a = k \tan(kL/2)$$

bulunur.

Elektronun bağlanma enerjisi bütün durumlar için (n enerji seviyesini ve  $E_0$  yabancı atomun olmadığı durumdaki elektronun enerjisini göstermek üzere ) ;

$$E_b = E_0 - \min_I \left[ \frac{\langle y_{I_n}(\mathbf{r}, z) | H_I | y_{I_n}(\mathbf{r}, z) \rangle + \langle y_{II_n}(\mathbf{r}, z) | H_{II} | y_{II_n}(\mathbf{r}, z) \rangle + \langle y_{III_n}(\mathbf{r}, z) | H_{III} | y_{III_n}(\mathbf{r}, z) \rangle}{\langle y_{I_n}(\mathbf{r}, z) | y_{I_n}(\mathbf{r}, z) \rangle + \langle y_{II_n}(\mathbf{r}, z) | y_{II_n}(\mathbf{r}, z) \rangle + \langle y_{III_n}(\mathbf{r}, z) | y_{III_n}(\mathbf{r}, z) \rangle} \right] \quad (6.2.2)$$

olur.

Denklem (6.2.1) ' deki dalga fonksiyonları ;

$$f(z) = \begin{cases} A \exp(+az) & z < -L/2 \\ B \cos(kz) & -L/2 \leq z \leq +L/2 \\ C \exp(-az) & z > L/2 \end{cases} \quad (6.2.3)$$

olur. Denklem (6.2.2) ,uzun işlemlerden sonra ;

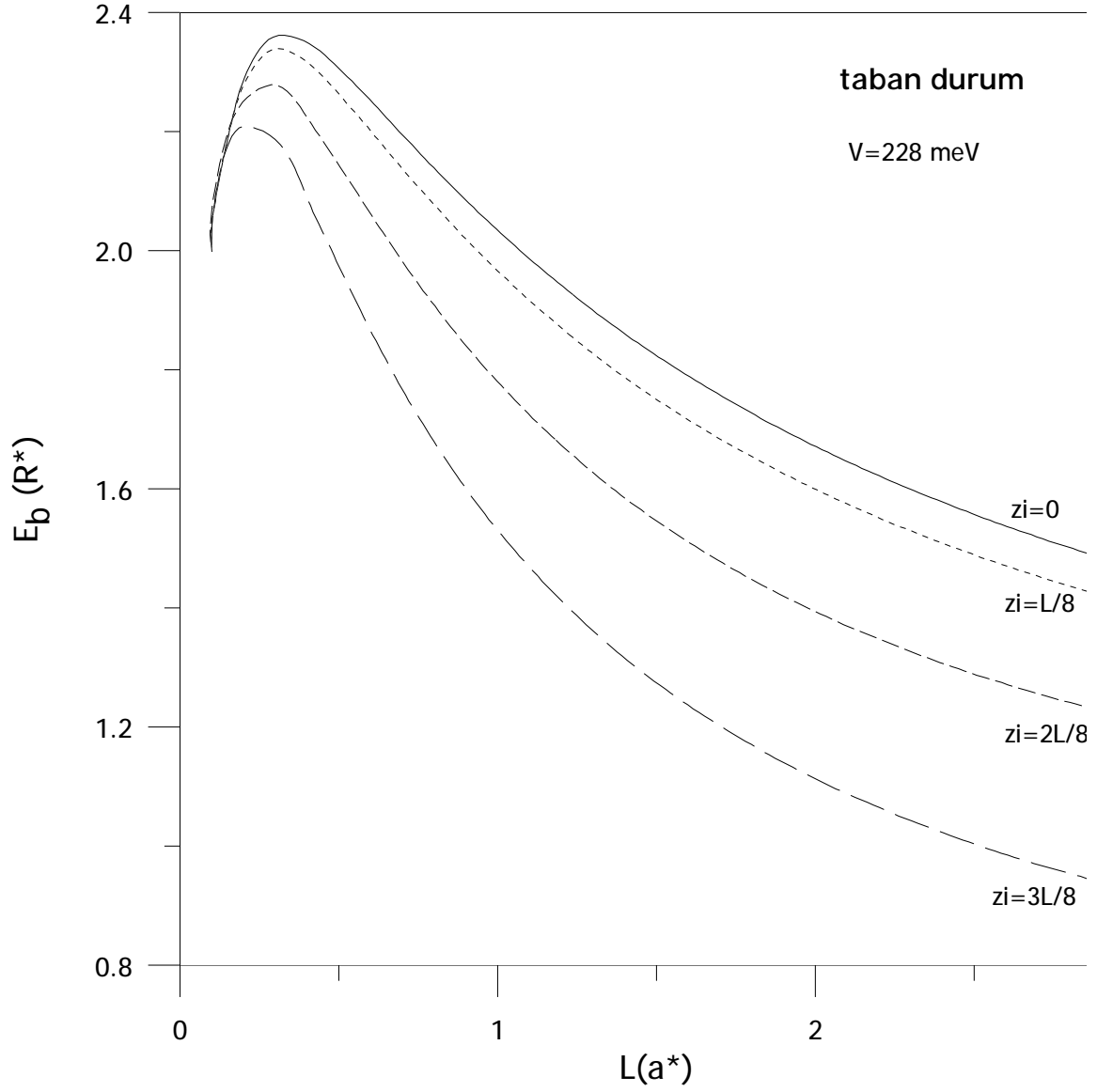
$$E_b = \max_I \left[ -\frac{1}{I^2} + \frac{4P}{2Q + IP} \right] \quad (6.2.4)$$

ye dönüşür.[5] Temel durum için P ve Q integralleri aşağıda verilmiştir.

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} dz f^2(z) \exp\left(\frac{-2|z - z_i|}{I}\right) \quad (6.2.5)$$

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} dz f^2(z) |z - z_i| \exp\left(\frac{-2|z - z_i|}{I}\right) \quad (6.2.6)$$

$z_i = 0, L/8, 2L/8, 3L/8$  konumlarında bulunan yabancı atom etkisi altındaki elektronun taban durumunda bağlanma enerjisinin  $L(a^*)$  kuyu genişliğine bağlı grafiğini şekil 6.2.1) ' de verilmiştir.  $V_0 = 39 R^*$  olarak alındı.



**Şekil 6.2.1)** Sonlu simetrik kuantum kuyusunda bulunan yabancı atom etkisindeki elektronun taban durum bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı grafiği. (Farklı dört 'z<sub>i</sub>' değeri için gösterildi.)

## SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmanın I. ve II. Bölümlerinde sonlu ve sonsuz kuantum kuyularında hapsedilmiş bir elektronun “E” enerjileri ( $E < V_0$ ) ve  $Y(z)$  dalga fonksiyonları Varyasyon Yöntemi ile hesaplanmıştır. Sonsuz ve sonlu kuantum kuyusunda enerjinin “L” kuyu genişliğine bağlılığı şekil (1.1.5) ‘ te ve şekil (2.2) ‘ de verilmiştir. Bu şekillerde , “L” kuyu genişliği arttıkça enerjinin küçüldüğü görülmektedir. Küçük “L” değerlerinde enerjideki düşüş sonsuz kuantum kuyusunda daha hızlı olmaktadır.

Sonsuz kuantum kuyusunda farklı  $L=0.5a^*$ ,  $1a^*$ ,  $1.5a^*$  değerleri için  $0 \leq F \leq 100$  kV/cm şiddetlerindeki “F” elektrik alanın elektron enerjisine etkisi şekil (3.1.1) , şekil (3.1.2) , ,şekil (3.1.3) ve şekil (3.1.4) ‘ te gösterilmiştir. Enerji , artan elektrik alanla azalmıştır. Ayrıca kuyu genişliği arttıkça enerjinin daha küçük değerlerden başlayarak elektrik alanla azaldığı görülmüştür.

Sonlu kuantum kuyusunda ise şekil (3.2.1) ‘ de , uygulanan farklı  $F=0,25,50,75$  kV/cm elektrik alan şiddetlerine karşılık enerjinin kuyu genişliğine bağlı grafiği verilmiştir. Elektrik alan şiddeti arttıkça belli bir “L” değerinden sonra yarımaların olduğu görülmüştür.

Sonlu ve sonsuz kuantum kuyuları için  $Y(z)$  dalga fonksiyonlarının sonuçları sırası ile şekil (3.1.5) ve şekil (3.2.2) ‘ de verilmiştir. Grafiklerden görüldüğü gibi elektrik alanın  $Y(z)$  dalga fonksiyonunu kendi büyüklüğü ile doğru orantılı olarak sola doğru kaydıracağı gözlenmiştir.

Sonlu kuantum kuyusunda şekil (3.2.4) ‘de ,farklı “F” elektrik alan şiddetlerine bağlı olarak , elektronun kuyu dışında bulunma olasılığının “L” kuyu genişliğine bağlı grafiği verilmiştir.Grafikte görüldüğü üzere kuyu genişliği arttıkça elektronun kuyu dışında bulunma olasılığı azalmakta ve sonlu kuantum kuyu sonsuz kuantum kuyusuna dönüşmektedir. Şekil(3.2.3)’ te ise “ $V_0$ ” kuyu engeline göre elektronun bulunma olasılığı verilmiştir. Engel yüksekliği arttıkça elektronun kuyu dışında bulunma olasılığı azalmakta ve sonlu kuantum kuyusu sonsuz kuantum kuyusuna dönüşmektedir.

Şekil (4.1) ve şekil (4.2)’ te ise , sonsuz kuantum kuyusunda Varyasyon Yöntemi ve Airy Fonksiyonu ile yapılan çözümler karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Şekil (4.1) ‘ de

enerjinin “F” elektrik alan şiddetine göre , şekil (4.2) ‘ de ise dalga fonksiyonunun değişim grafikleri verilmiştir. Her iki yöntemle de sonuçların birbirine yakın olduğu görülmektedir.

V.Bölümde ise ;  $-L/2$  ‘ de sonsuz ,  $+L/2$  ‘ de “Vo” potansiyel engeline sahip bir kuyuda tüm hesaplar hem Varyasyon Yöntemi hem de Airy Fonksiyonu ile tekrar edilmiş ve grafikler bölüm sonunda verilmiştir. Şekil (5.1.1) ve şekil (5.2.1) ‘ de ,çeşitli “F” elektrik alan şiddetlerine göre,  $\mathcal{Y}(z)$  dalga fonksiyonlarının sola doğru kaydığı gözlenmiştir. Şekil (5.2.2) ‘ de enerjinin “F” elektrik alan şiddeti ile değişimi karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Enerjinin küçük “F” elektrik alan değerlerinde önce arttığı daha sonra ise uygun olarak azaldığı görülmüştür. Şekil ( 5.1.2) ve şekil (5.1.3) ‘ te Varyasyon Yöntemi ile çözülen kuyu dışında bulunma olasılığının sırasıyla “Vo” kuyu engeline ve “L” kuyu genişliğine göre çeşitli “F” elektrik alan şiddetlerine bağlı olarak verilmiştir.

VI.Bölümde sonsuz ve sonlu kuantum kuyularında bulunan yabancı atom etkisindeki bir elektronun bağlanma enerjilerinin kuyu genişliklerine göre grafikleri verilmiştir.

Sonuçlar literatürle uyum içerisinde dir.

## ÖZGEÇMİŞ

14.08.1979 yılında Edirne' nin Büyük DÖLLÜK köyünde doğdum. İlk ve orta öğrenimimi Fevzi Paşa İlköğretim Okulunda başlayıp , Trakya Birlik ilköğretim okulunda devam ettim., lise öğrenimimi ise Edirne Lisesinde tamamladım. 1998 yılında Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girdim ve 2002 yılında bölüm birincisi olarak tamamladım. 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.