

DOKUZ EYLÜL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**DÜZGÜN DİK MAGNETİK ALAN VE DÜZGÜN
ENİNE ELEKTRİK ALAN ALTINDA İKİ
BOYUTLU ELEKTRON GAZININ ELEKTRONİK
YAPISI**

Dilek ULAŞ

Kasım, 2013
İZMİR

**DÜZGÜN DİK MAGNETİK ALAN VE DÜZGÜN
ENİNE ELEKTRİK ALAN ALTINDA İKİ
BOYUTLU ELEKTRON GAZININ ELEKTRONİK
YAPISI**

Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

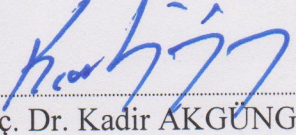
Dilek ULAŞ

Kasım, 2013

İZMİR

YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU

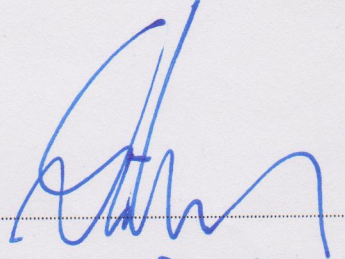
DİLEK ULAŞ, tarafından YARD. DOÇ. DR. KADİR AKGÜNGÖR yönetiminde hazırlanan “DÜZGÜN DİK MAGNETİK ALAN VE DÜZGÜN ENİNE ELEKTRİK ALAN ALTINDA İKİ BOYUTLU ELEKTRON GAZININ ELEKTRONİK YAPISI” başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.


Yard. Doç. Dr. Kadir AKGÜNGÖR

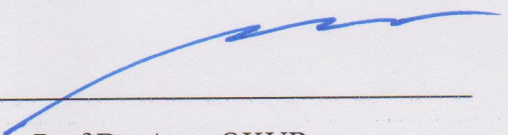
Yönetici


Prof. Dr. Mehmet Kadir YUCERAKOŞ

Jüri Üyesi


Prof. Dr. İsmail İSKMEN

Jüri Üyesi


Prof. Dr. Ayşe OKUR

Müdür

Fen Bilimleri Enstitüsü

TEŞEKKÜR

Bu tezi hazırlarken gerek teorik çalışmalarda gerekse nümerik işlemlerde bana yardımlarını ve desteklerini esirgemeyen insanlara bir teşekkür borçluyum.

Öncelikle, tez hocam olan Yard. Doç. Dr. Kadir AKGÜNGÖR'e teşekkür ederim. Özellikle nümerik hesaplamalar yapmaya çalışırken zorlandığım yerlerde saatlerce benimle ilgilenererek bana çok yardımcı olduğu için ve ayrıca pozitif düşünceleriyle de hep destek olduğu için ona sonsuz teşekkürlerimi sunuyorum.

Prof. Dr. İsmail SÖKMEN ve Doç. Dr. Serpil ŞAKİROĞLU'na yardımlarından dolayı minnettarım.

Tezin kontrol aşamasında tüm içtenliğiyle her konuda destek olan, eksiklerimi tamamlamada bana çok yardımcı olan Araş. Gör. Özde BAKAK'a çok teşekkür ediyorum.

Destegi esirgemeyen ve her zaman çok yardımcı olan Araş. Gör. Dr. Sevil SARIKURT'a çok teşekkür ediyorum.

Her zorlukta arkamda olduklarını daima bildiğim başta babam İlyas POLAT ve annem Fikriye POLAT olmak üzere eşim Rıza ULAŞ'a ve manevi kardeşim Ruhan ERDİVAN'a çok teşekkür ederim.

Dilek ULAŞ

DÜZGÜN DİK MAGNETİK ALAN VE DÜZGÜN ENİNE ELEKTRİK ALAN ALTINDA İKİ BOYUTLU ELEKTRON GAZININ ELEKTRONİK YAPISI

ÖZ

Bu çalışmada, iki boyutlu elektron gazının elektronik yapısı incelendi. Bu amaçla iki boyutlu elektron gazının tanımı yapıldıktan sonra sisteme ait hamiltonyen ifadesi türetildi. Başlangıçta hamiltonyen ifadesi vektör potansiyeli ve Landau ayar dönüşümleriyle beraber anlatıldı. Sistem sırasıyla serbest parçacık durumu, kuşatma potansiyeli ve elektrik alan varlığındaki durumları incelendi ve bu üç durumdaki sisteme ait enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları analitik olarak hesaplandı. Daha sonra green fonksiyon ifadesinin tanımı yapılarak üç durum içinde hamiltonyenin çözümünde kullanılacak olan green fonksiyon ifadesi elde edildi. Sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak enerji değerleri hesaplandı ve enerji grafikleri çizildi. Elde edilen çözüm ve grafikler literatürdeki makalelerle karşılaştırıldı ve sonuçların uyumlu olduğu görüldü. Elektrik alan varlığında üretilen enerji grafiği diğer çalışmalarla karşılaştırıldığında kenarlarındaki keskin çıkışlar yerine daha yumuşak çıkışlar olduğu görüldü.

Çalışmaların uyumlu olduğu görüldükten sonra sistemin hem kuşatma potansiyeli hem de elektrik alan varlığındaki durumu incelendi ve sisteme ait hamiltonyen ifadesi analitik olarak türetildi. Hamiltonyenin çözümünde kullanılacak olan green fonksiyon ifadesi analitik olarak elde edildi. Son olarak sisteme ait hamiltonyen ifadesi boyutsuz hale getirilerek sonlu elemanlar yöntemi kullanıldı ve sisteme ait enerji grafiği elde edildi. Diğer çalışmalardan farklı olarak daha yüksek bir elektrik alan değerinde grafik enerji değerleri üretti.

Anahtar Kelimeler: İki boyutlu elektron gazı, Green fonksiyonları, sonlu elemanlar yöntemi.

ELECTRONIC STRUCTURE OF THE TWO-DIMENSIONAL ELECTRON GAS IN THE UNIFORM PERPENDICULAR MAGNETIC FIELD AND UNIFORM TRANSVERSE ELECTRIC FIELD

ABSTRACT

In this study, the electronic structure of two-dimensional electron gas was examined. For this purpose, the definition of two-dimensional electron gas with the Hamiltonian of the system after the statement was derived. Initially the Hamiltonian expression via vector potential and Landau gauge transformations were described. Then the system of free particle states, the confining potential and the electric field cases were examined in the presence and in these three cases the energy eigenvalues and eigenfunctions of the system was calculated analytically. Then the definition of Green's functions in three cases to be used in the solution of the Hamiltonian Green's functions expression was obtained. Using the finite element method the system of energy was calculated and the energy graphics were plotted. The resulting solutions and graphics were compared with articles in the literature, and the results were found compatible. The energy produced in the presence of electric field in comparison with other studies the edges of graphic sharp outputs rather than was found to be soft outputs.

After studies found to be consistent of the system both the confining potential and in the presence of electric field cases were investigated and express the Hamiltonian of the system was derived analytically. Green's function to be used in the solution of the Hamiltonian expression was obtained analytically. Finally The Hamiltonian of the system by making the dimensionless expression finite element method was used and was obtained energy graphic of the system. Unlike other studies energy of graphic values higher than an electric field produced.

Keywords: Two-dimensional electron gas, Green's functions, finite element method.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU.....	ii
TEŞEKKÜR	iii
ÖZ	iv
ABSTRACT	v
ŞEKİLLER LİSTESİ	viii
BÖLÜM BİR – GİRİŞ	1
BÖLÜM İKİ – İKİ BOYUTLU ELEKTRON GAZI	4
BÖLÜM ÜÇ – SİSTEMLE İLGİLİ TEORİK HESAPLAMALAR	8
3.1 Temel İfadeler	8
3.1.1 Vektör Potansiyeli Tanımı	8
3.1.2 Green Fonksiyonun Tanımı	12
3.1.3. Yerel Durumların Yoğunluğu ve Green Fonksiyonu	13
3.1.4 Dirac Delta ve Green Fonksiyonları	16
3.1.5 Vektör Potansiyeli Ayar Dönüşümü Hesapları	18
3.2 Sonlu Elemanlar Yöntemi.....	19
BÖLÜM DÖRT – SİSTEMİN GREEN FONKSİYONU	27
4.1 Sistemin Tanıtılması	27
4.1.1 Kuşatma Potansiyeli ve Elektrik Alan Altında Sistemin İncelenmesi	30
BÖLÜM BEŞ – SİSTEMİN BOYUTSUZLAŞTIRILMASI VE SAYISAL ÇÖZÜMÜ	34

5.1 Elektrik Alan ve Kuşatma Potansiyeli Altında Sistemin Hamiltonyeninin Boyutsuzlaştırılması	34
BÖLÜM ALTI – SONUÇLAR	39
KAYNAKLAR	41

ŞEKİLLER LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 2.1 Metal oksit yarı iletkenin yapısı.....	5
Şekil 2.2 GaAs/AlGaAs tipi malzemenin yapısı	6
Şekil 2.3 Kuantum kuyusu, kuantum teli, kuantum noktası.....	6
Şekil 3.1 Kuantum teli	8
Şekil 3.2 İki düğüm noktalı global elemanın gösterimi	22
Şekil 5.1 Potansiyel uygulandığında.....	36
Şekil 5.2 Potansiyel uygulanıp kuvvet uygulanmadığında	36
Şekil 5.3 Elektrik Alan uygulandığında	37
Şekil 5.4 Potansiyel uygulanmayıp kuvvet uygulandığında	37
Şekil 5.5 Potansiyel ve kuvvet uygulandığında.....	38

BÖLÜM BİR

GİRİŞ

Son yıllarda hem yarı iletken heteroyapıların hem de iki boyutlu elektron gazının fiziğiyle ilgili yapılan çalışmaların ilerlemesi birçok alanda gelişme sağlamıştır. Bu gelişmeler ayrıca teknolojik ilerlemenin de temel taşları olmuştur. Yarı iletken heteroyapıların fiziğiyle ilgili çalışmalar, birçok alanda nanoteknolojik aygıtların kullanımını da hızlandırmış oldu. Ayrıca bu yapılar diyot, entegre, güneş pilleri ve transistör gibi yapılarda da kullanıldığı için araştırma konusu olarak güncelliğini her zaman korumaktadır (Shah, Torres, Tscharnier, Wyrsch ve Keppner, 1999; Gray ve Meyer, 1992).

İki boyutlu elektron gazı, metal oksit yarı iletken (MOS) transistörlerde (Chang, 2007) ve metal oksit yarı iletken alan etkili (MOSFET) transistörlerin yapısında kullanılmaktadır. MOSFET'ler (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor), güç harcamaları düşüktür ve mekanik dayanımları fazladır (Seonghoon, 2006). İki boyutlu elektron gazı, metal oksit yarı iletken transistörlerinin balistik taşınımında kullanılmaktadır (van Wees ve diğer, 1988).

İki boyutlu elektron gazı sisteminin hamiltonyeninin çözülmesinde Sıkı Bağlama Yöntemi (Cresti, Grosso ve Parravicini, 2005), Varyasyonel Monte Carlo Yöntemi (Imada, ve Takahashi, 1984), Sonlu Elemanlar Yöntemi (Huttuon, 2004) ve daha birçok yöntem kullanılabilir. Bu çalışmada nümerik hesaplamalarda hem işlem kolaylığı sağlaması hem de çözümleme hızı açısından Sonlu Elemanlar Yöntemi kullanıldı.

Diğer taraftan analitik olarak iki boyutlu elektron gazı sisteminin hamiltonyeninin çözümü Green fonksiyonlarıyla yapıldı (Cresti ve diğer, 2005; Duffy, 2001). Sistemin hem serbest uzayda hem de kuşatma potansiyeli altında ve elektrik alan altındaki davranışının çözümünde sınır koşulları bakımından olumlu sonuçlar verdiği için Green fonksiyonları kullanıldı. Bu tezde sayısal hesaplamaların yanında Cresti'nin geliştirdiği analitik çözümler türetildi.

Bilim dünyasındaki çalışmalar incelendiğinde iki boyutlu elektron gazının düzgün manyetik alanda kuşatma potansiyeli altındaki çalışmaların yanında düzgün olmayan manyetik alan altındaki davranışıyla ilgili çalışmalarda mevcuttur. Son yıllarda metaloksit yarı iletken alan içindeki silikon yüzeyinde sıkıştırılmış elektronların etki ettiği transistörler (MOSFET) Thouless (1981) tarafından incelenmiştir. Burada Thouless, manyetik alan altında iki boyutlu dejenere olmuş elektron gazı ile ilgili çalışmıştır. Bu amaçla bu makalede de yüksek manyetik alan altında iki boyutlu elektron gazı sisteminde farklı değerlerdeki potansiyellerin etki ettiği elektronlar araştırılmıştır. Sıfır sıcaklıkta bu potansiyeller, Hall voltajını değiştirmemektedir. Teorik çalışmalarda Green fonksiyonlarından yararlanılmıştır.

Kukushin ve arkadaşlarının (1988) makalesinde mikroelektronik çalışmalarda ve önemli bir konu olan kuantum hall olayını açıklamada kullanılan iki boyutlu elektron gazı yapıları incelenip bu bağlamda MOS denilen metal yalıtkan yapılar ve heteroyapıların içindeki elektron ve boşlukların yapısı araştırılmıştır. Bu konuyla ilgili son çalışmalara bakıldığında teorik ve deneysel araştırmalar manyetik alan altında iki boyutlu elektron gazı yoğunluğuna yönelmiş olup gerçek sistemlerde, durum yoğunluğunun enerji dağılımına etkisinin farklı faktörler içerdiğini bulmuşlardır.

Düzgün manyetik alan dışında düzgün olmayan bir manyetik alan sisteme dahil edildiğinde eğri yani bükülmüş iki boyutlu elektron gazı elde edilmiş olur ve enerji grafiklerinde de iki bükülme görülmüştür. Foden ve arkadaşlarının (1994) yaptığı çalışmalarda bu eğri içindeki elektron davranışları düzgün olmayan manyetik alan varlığında elektron iletim özellikleriyle ilgili bilgiler vermekte olup kuantum teli veya başka diğer yapıların oluşturulup araştırılmasında bu durumdan kaynaklanan iki boyutlu elektron gazının içindeki bir boyutta dalgalanmalar ve sonlu ayrılmalar incelenmektedir. Manyetik alan yokluğunda iki boyutlu elektron gazının eğikliği potansiyel değişime yol açtığı ve ayrıca tek boyutta elektronun hareketini kısıtladığı görülür.

Bir diğerk makalede Xiaguang (1996) dik manyetik alan altında iki boyutlu etkileşen elektron gazının Green fonksiyon ifadelerini çalıştı. Teoremler ilgili sağlamalar yaptıktan sonra iki boyutlu elektron gazı içeren elektron-elektron ve elektron-fonon etkileşimi içinde sağlamalar yapılmıştır.

Bu tezde iki boyutlu elektron gazının Hamiltonyeni elektrik alan ve manyetik alan varlığında yazılıp Cresti ve diğerlerinin (2005) çalışması takip edilerek Green fonksiyonu analitik olarak üretildi. Daha sonra Hamiltonyen sonlu elemanlar yöntemiyle sayısal olarak çözüldü.

Tezi yazarken 2. bölümünde yarı iletken heteroyapılar tanıtıldı ve bu sistemler üzerine yapılan teorik çalışmalar özetlendi. Ayrıca sistemin nümerik olarak çözümünde kullanılabilecek yöntemlerden örnekler verilip işlem kolaylığı ve hızı bakımından sonlu elemanlar yönteminin kullanıldığından bahsedildi.

Tezin 3. bölümünde iki boyutlu elektron gazı sisteminin hamiltonyeni (serbest parçacık iken) yazıldı. Manyetik alan için yazılan vektör potansiyelinin tanımı yapıp nasıl hesaplandığından bahsedildi. Vektör potansiyeli için ayar dönüşümü hesapları verildi. Green fonksiyon ifadesinin tanımı yapıldıktan sonra sonlu elemanlar yöntemi anlatıldı.

Tezin 4. bölümünde ise iki boyutlu elektron gazı sisteminin Green fonksiyonu kuşatma potansiyeli, elektrik alan ve manyetik alan altındaki davranışı analitik olarak hesaplandı. Çözümünde kullanılan Green fonksiyonun, sıcaklığın çok çok küçük ve çok çok büyük olduğu durumlardaki ifadesi çıkartıldı.

Tezin 5. bölümünde çözümlenecek olan Hamiltonyen boyutsuzlaştırıldı ve sayısal çözümlerin sonuçları verildi.

BÖLÜM İKİ

İKİ BOYUTLU ELEKTRON GAZI

Yarı iletkenlerin keşfi ve kullanılmasıyla bilim ve teknolojiye yeni bir döneme geçilmiş oldu. Bu yapıların optik ve elektronik özellikleri birçok alanda kullanım kolaylığı sağlamıştır. Örnek olarak; telekominikasyon, bilgisayar, mikroişlemciler, diyot, transistör, entegre ve güneş pilleri örnek verilebilir. (Shah, Torres, Tscharnier, Wyrsh ve Keppner, 1999; Gray ve Meyer, 1992).

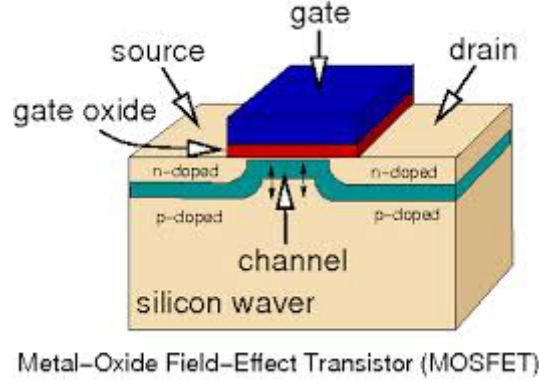
Metallerin birçoğu ve yarı iletkenlerde elektronlar (veya boşluklar) üç uzamsal boyutta özgür bir şekilde hareket edebilmektedir. Eğer bu özgürlük belirli yönlerde kısıtlanırsa sistemin boyutu azalmış olur. Örneğin, iki boyutlu sistem için elektronlar bir düzlem içinde hareket edebilir (Seonghoon, 2006).

Yarı iletken bir yüzeyin üzerine ince tabakalı yapılar koyarak genişletme düşüncesi, modern yarı iletken teknolojinin gelişmesiyle mümkün hale geldi. Bu teknolojinin en önemli uygulamalarından biri de iki boyutlu elektron gazı olarak (2BEG) nitelenen iki boyutlu bir alanda elektron hareketinin sıkıştırılmasıdır (Chang, 2007).

İki boyutlu elektron gazına örnek olarak iki tip çalışılıp geliştirildi. Bunlardan ilki metal oksit yarıiletken (MOSFET) yapılarıdır. Şekil (2.1) 'de görüldüğü gibi bu band diyagramında, kanala bir voltaj uygulanmıştır. Buradaki metalik kanal bir yarı iletkenle bir dielektrik katman olan SiO_2 tarafından ayrılmaktadır. Sonuç olarak, yarı iletken içinde bükülen bir bant oluşur. Yeterli büyük bir kanal voltajı için, bu bükülmeye düzgün yarı iletken band aralığı oluşur. Yapının içinde dielektrik ve yarı iletken yüzeyin yakınında zıt işaretleyici taşıyıcılarla birlikte bir inversiyon katmanı oluşur. Bu katman iki boyutlu elektron gazı olarak tanımlanır.

İki boyutlu elektron gazına bir diğer örnekte GaAs/AlGaAs 'dir. Şekil (2.2) 'de görüldüğü gibi GaAs'den daha geniş bir bant aralığına sahip AlGaAs malzemesi

kullanılmaktadır. Modulasyon oluşum katkılı bu heteroyapı bir inversiyon tabakası meydana getirir.

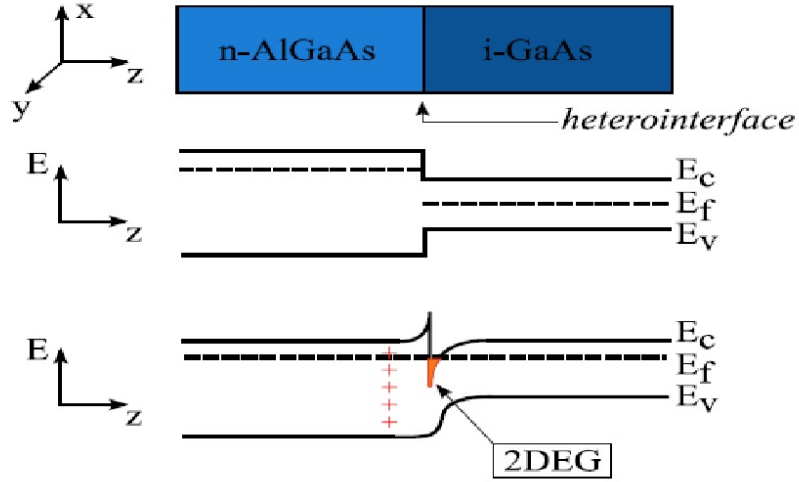


Şekil 2.1 Metal oksit yarı iletkenin yapısı (Nicollian ve Brews, 1982)

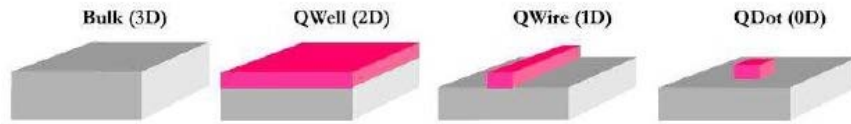
Düzgün olarak doplanmış AlGaAs katmanı, Fermi düzeyine doğru hareket ederken 2BEG inversiyon katmanında oluşmuştur. Son yıllarda, düşük boyutlu sistemler içinde kuantum iletimi çalışılması için 2BEG formunda modüle edilmiş heteroyapılar kullanılmaktadır. 2BEG için elektron yoğunluğu en az $180 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ dir. Bu durum yüksek taşıyıcı hareketliliğine yol açar. Bu yapılarda taşınırılık $107 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ iken MOS tipi yapılarda bu değer $105 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ civarındadır. Bu tarz yapılar örneğin küçük aygıtların içinde balistik taşımada kullanılır (Wees ve diğer., 1988).

İki boyutlu elektron gazı (2BEG), çok parçacık fiziği içindeki temel problem olmakla beraber birçok önemli uygulamalara da sahiptir. Örneğin; bakır-oksit düzlemleri içindeki elektron hareketleri, süperiletken malzemelerin içindeki yüksek iletim-sıcaklığı açıklamak için bir yol olarak düşünülmektedir (Tanatar ve Ceperly, 1988). İki boyutlu elektron gazı sıkıştırılabilmektedir. Yarı iletkenler boyutlarına göre isimlendirilmektedir (Harrison, 2005). Şekil (2.3) 'te de görüldüğü üzere bunlar; iki boyutlu kuantum kuyusu (Binney, 2008), bir boyutta kuantum teli (Lüscher ve diğer., 2002) ve sıfır boyutta kuantum noktasıdır (Binney, 2008). Sıfır boyut derken hareketin üç boyutta (hareket alanı) sınırlandırıldığı ifade edilir.

Elde edilen iki boyutlu elektron gazı sisteminin fiziksel özelliklerini belirlemek üzere teorik çalışmalar yoğunlaşmıştır.. Bu konuyla ilgili birçok model ve yöntem bulunmaktadır (Tanatar ve Ceperly 1988).



Şekil 2.2 GaAs/Al GaAs tipi malzemenin yapısı (Chang, 2007).



Şekil 2.3 Kuantum kuyusu, kuantum teli, kuantum noktası.

Kullanılan yöntemlere örnek olarak; sıfır sıcaklıkta 2BEG'in başlangıç durum özellikleri çeşitli yaklaşımlar altında rastgele faz yaklaşımı (random-phase approximation, RPA), merdiven diyagramları toplamı (summation of ladder diagram) (Kenworthy ve Ter Haar, 1961) ve ayrıca varyasyonel Monte Carlo (VMC) hesaplamaları da dalga fonksiyonunun enerjisini hesaplamada kullanılır (Imada ve Takahashi, 1984).

Bunların yanında sıkı bağlama yöntemi (tight binding method) de kullanılmaktadır (Yamauchi, Takahasi ve Arakowa, 1991). Bir diğer yöntem olan ve

bu tezde de kullanılan sonlu elemanlar yöntemi, sistemin dalga fonksiyonunu hesaplamada ve enerji özdeğerlerini bulmada oldukça kolaylık sağlayan bir yöntemdir (Searles ve Felsobuki, 1988).

Kuantum tellerinin optik özellikleriyle ilgili araştırmaları Yi ve Dagli (1995) yaparken sonlu elemanlar yöntemiyle ilgili olarak Kojimo ve diğerleri (1989) geometrik yapıya sahip bir kuantum teli için enerji seviyelerini ve dalga fonksiyonlarını hesaplamışlardır.

BÖLÜM ÜÇ

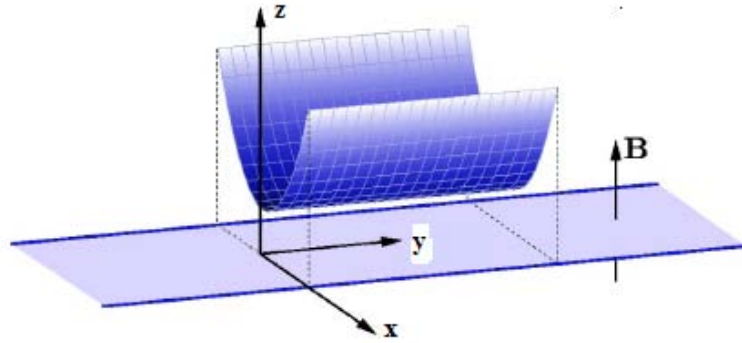
SİSTEMLE İLGİLİ TEORİK HESAPLAMALAR

3.1 Temel İfadeler

Düzgün manyetik alanda iki boyutlu elektron gazı için Hamiltonyen yazılacak olunursa;

$$H = \frac{1}{2m} (p_x + A_x)^2 + \frac{1}{2m} (p_y + A_y)^2 \quad (3.1)$$

Burada $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ z doğrultusundaki $\mathbf{B}$ manyetik alanının vektör potansiyelidir (Maksym, ve Chakraborty, 1990). Şekil 3.1 'de görüldüğü gibi z-doğrultusunda manyetik alan uygulandığında elektronun hareket serbestliği azalmakta ve sistem kuantum teline dönüşmektedir.



Şekil 3.1 Kuantum teli (Debald ve Kramer, 2005)

3.1.1 Vektör Potansiyeli Tanımı

Manyetik alan korunumsuz olduğundan skaler bir potansiyel olarak tanımlanamamaktadır. Teorik olarak potansiyel gibi davranan bir vektör değeri tanımlanıp manyetik alanın türevi şeklinde gösterilir (Griffiths, 1999). Bu gösterime

vektör potansiyeli adı verilir. Vektör potansiyeliyle manyetik alanın arasındaki ilişkiye bakılacak olunursa (Tiago, Carvalho, ve Aguiar, 1996);

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{A} = \alpha \times \mathbf{r} \quad (3.3)$$

(3.3)'teki eşitliği (3.2) 'de yerine yazalım:

$$\mathbf{B} = \nabla \times (\alpha \times \mathbf{r}) \quad (3.4)$$

elde edilir.

Manyetik alanla vektör potansiyeli arasındaki ilişki matematiksel olarak gösterilirse;

$$B_i = \epsilon_{ijk} \partial_j \times (\epsilon_{kmn} \alpha_m \times_n)_k$$

$$B_i = \epsilon_{ijk} \epsilon_{kmn} \alpha_m \delta_{jn}$$

$$B_i = \epsilon_{ijk} \epsilon_{mjn} \alpha_m$$

$$B_i = 2\delta_{im} \alpha_m$$

$$\alpha_i = \frac{1}{2} B_i$$

Buna göre;

$$\frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{1}{2} B \hat{z} \times (x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z})$$

$$\frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{1}{2} B \times (x\hat{y} - y\hat{x})$$

$$\frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{B}{2} (-y, x, 0) \quad (3.5)$$

Bir vektör potansiyeline fonksiyon eklendiğinde yeni bir vektör potansiyeli elde edilebilir. Bu, manyetik alanın değerini değiştirmez (Jackson ve Okun 2001).

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{B}{2} (-y, x, 0) + \nabla X(\mathbf{r})$$

$$\vec{X}(\mathbf{r}) \text{ Harmonik fonsiyon}$$

$$\mathbf{A}_s(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_1(\mathbf{r}) + X_{1s}(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

$$X_{1s} = \frac{B_{xy}}{2} \frac{B}{2} (-y, x, 0) = \mathbf{A}_1(\mathbf{r}) + \frac{B}{2} (y, x, 0)$$

X_{1s} denklemi (3.6) eşitliğinde yerine yazılırsa $\mathbf{A}_1(\mathbf{r})$ eşitliği bulunur:

$$\mathbf{A}_1(\mathbf{r}) = B(-y, 0, 0) \quad (3.7)$$

$\mathbf{A}_2(\mathbf{r})$ ifadesi de aynı şekilde bulunur:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_2(\mathbf{r}) &= \mathbf{A}_1(\mathbf{r}) + \nabla X_{12}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{A}_2(\mathbf{r}) &= B(-y, 0, 0) + B(y, x, 0) \\ \mathbf{A}_2(\mathbf{r}) &= B(0, x, 0) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Hamiltonyen denklemini tekrar yazalım:

$$H = \frac{1}{2m} (p_x + A_x)^2 + \frac{1}{2m} (p_y + A_y)^2$$

Uygulanan potansiyel y doğrultusunda olduğundan işlem kolaylığı için 1.Landau Ayarı kullanılır:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1(\mathbf{r}) &= B(-y, 0, 0) \\ \{A_x &= By \quad A_y = 0 \quad p_x = \hbar k_x\} \\ H &= \frac{1}{2m} (p_y)^2 + \frac{1}{2m} (\hbar^2 (k_x)^2 - 2\hbar B(k_x y) + B^2 y^2) \\ H &= \frac{1}{2m} (p_y)^2 + \frac{1}{2m} \frac{m^2}{m^2} B^2 \left(\frac{\hbar^2 (k_x)^2}{B^2} - \frac{2\hbar}{B} (k_x y) + y^2 \right) \\ H &= \frac{1}{2m} (p_y)^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - Y)^2 \end{aligned} \quad (3.9)$$

Burada ω_c siklotron rezonans frekansı, Y salınımların merkezi ve l_0 uzunluk birimi (manyetik uzunluk) sırasıyla,

$$\omega_c = \frac{eB}{mc} \quad , \quad Y = \frac{\hbar c}{eB} k_x \equiv l_0^2 k_x \quad , \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} \quad (3.10)$$

şeklindedir (Gulebaglan, Sokmen, Siddiki, ve Gerhardts, 2011). Özdeğerler;

$$E_{nk_x} = E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.11)$$

özdeğerlere karşı gelen öz fonksiyonlar,

$$\phi_{nk_x}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \phi_n(y - Y) \quad (3.12)$$

Burada L_x teorik olarak elektronların hapsedildiği düşünülen dikdörtgen kutunun x yönündeki uzunluğudur (Cresti, Gross, ve Parravicini, 2005). ϕ_n normalize Hermite fonksiyonlarıdır.

Burada enerji seviyeleri k_x e bağlı olmayıp izinli k_x değerleri $-\frac{L_y}{2} \leq l_0^2 k_x \leq \frac{L_y}{2}$ dir.

Her bir Landau seviyesinin $N_L(B)$ dejenereliği yazılacak olursa;

$$\begin{aligned} k_x L_x &= 2\pi n_x \\ dk_x L_x &= 2\pi dn_x \quad , \quad dn_x = 1 \\ N_L(B) &= \frac{L_x}{2\pi} \int_{-\frac{L_y}{2l_0^2}}^{+\frac{L_y}{2l_0^2}} dk_x = \frac{L_x L_y}{2\pi l_0^2} \equiv \frac{e}{hc} BS \end{aligned} \quad (3.13)$$

Hesaplanan özdeğer ve özfonksiyonlar kullanılarak, manyetik Green fonksiyonu yazılırsa;

$$G_n^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{nk_x} \frac{\phi_{nk_x}(\mathbf{r}) \phi_{nk_x}^*(\mathbf{r}')}{E + i\eta - E_{nk_x}} \quad (3.14)$$

Burada $\mathbf{r} = (x, y)$ ve $\mathbf{r}' = (x', y')$ iki boyutlu vektörler ve η sonsuz küçük pozitif büyüklüktür.

$$G_n^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{L_x} \sum_n \sum_Y e^{\frac{iY(x-x')}{l_0^2}} \frac{\phi_n(y-Y) \phi_n(y'-Y)}{E + i\eta - E_n} \quad (3.15)$$

Y üzerinden (örneğin k_x) ayırık toplamalar $L_y \rightarrow \infty$ limitinde integralle değiştirilebilir. Böylece;

$$G_n^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{L_x L_y}{2\pi l_0^2} \sum_n \frac{1}{E + i\eta - E_n} \int_{-\infty}^{+\infty} dY e^{\frac{iY(x-x')}{l_0^2}} \phi_n(y-Y) \phi_n(y'-Y)$$

elde edilir. Bu ifade, düzgün manyetik alan içinde yüklü bir parçacığın iki boyutlu Green fonksiyonunun temel ifadesidir. Green fonksiyonunun teorik olarak ne anlama geldiği bir sonraki bölümde verilecektir.

3.1.2 Green Fonksiyonun Tanımı

Green fonksiyonları homojen olmayan lineer diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılır (Metalidis, 2007).

$$a_n(x) \frac{d^n y(x)}{dx^n} + \dots + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(y) = f(x), \quad (3.16)$$

şeklinde bir diferansiyel denklemi olsun. Eşitliğin sağ tarafındaki ifade $Ly(x)$ olarak gösterilsin yani lineer diferansiyel operatör $y(x)$ 'e etkiyor.

$$Ly(x) = f(x)$$

Bu ifadenin $a \leq x \leq b$ aralığında sınır şartlarını sağlayan genel $G(x, x')$ (Green fonksiyonu) çözümü mevcuttur ve çözümü,

$$y(x) = \int_a^b G(x, x') f(x') dx', \quad (3.17)$$

şeklinde verilir. Burada x' integrasyon değişkenidir. Eğer lineer diferansiyel operatörü (3.17) eşitliğinde her iki tarafına uygulanırsa;

$$Ly(x) = \int_a^b [LG(x, x')] f(x') dx' = f(x) \quad (3.18)$$

Dirac delta fonksiyonunun $a \leq x \leq b$ için

$$f(x) = \int_a^b \delta(x - x') f(x') dx' \quad (3.19)$$

özelliklerinden,

$$LG(x, x') = \delta(x - x'), \quad (3.20)$$

ifadesi elde edilir.

3.1.3 Yerel Durumların Yoğunluğu ve Green Fonksiyonu

Sistemin Schrödinger denklemi;

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_\alpha(\mathbf{r}) = E_\alpha\psi_\alpha(\mathbf{r}) \quad (3.21)$$

ile verildiğine göre Hamiltonyen operatörünün özfonksiyonları ($\psi_\alpha(\mathbf{r})$) bu özdeğer denkleminde elde edilebilir.

$$(E_\alpha - \hat{\mathcal{H}})\psi_\alpha(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.22)$$

Özdeğer denklemine konjuge olan Green fonksiyonu ifadesi:

$$(E - \hat{\mathcal{H}}) G(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.23)$$

Özfonksiyonlar tam bir ortonormal set olarak tanımlanabilir (Tiago, de Carvalho, ve de Aguiar, 1996). Dolayısıyla Green fonksiyonu, benzer şekilde, dalga fonksiyonlarının tam bir seti olarak (3.24) eşitliğindeki gibi yazılabilir:

$$G(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \mathcal{G}_{\alpha}(\mathbf{r}') \quad (3.24)$$

$$\mathcal{G}_{\alpha}(\mathbf{r}') \rightarrow \sum_{\beta} \mathcal{G}_{\alpha\beta} \psi_{\beta}^*(\mathbf{r}')$$

$$G(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \mathcal{G}_{\alpha\beta} \psi_{\beta}^*(\mathbf{r}')$$

$$(E - \hat{\mathcal{H}}) \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \mathcal{G}_{\alpha\beta} \psi_{\beta}^*(\mathbf{r}') = \delta \quad (3.25)$$

(3.25) denklemini sol taraftan $\psi_{\gamma}^*(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonu ile sağ taraftan ise $\psi_{\lambda}(\mathbf{r}')$ çarpıp $\int d^d \mathbf{r} \int d^d \mathbf{r}'$ integrasyonları yapılırsa;

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \beta} \left[E \int d^d \mathbf{r} \psi_{\gamma}^*(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) - \int d^d \mathbf{r} \psi_{\gamma}^*(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\mathcal{H}} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \right] \mathcal{G}_{\alpha\beta} \int d^d \mathbf{r}' \psi_{\beta}^*(\mathbf{r}') \psi_{\lambda}(\mathbf{r}') \\ = \int d^d \mathbf{r} \int d^d \mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\gamma}^*(\mathbf{r}) \psi_{\lambda}(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\sum_{\alpha, \beta} [E \delta_{\gamma\alpha} - \hat{\mathcal{H}}_{\gamma\alpha}] \mathcal{G}_{\alpha\beta} \delta_{\beta\lambda} = \delta_{\gamma\lambda}$$

$$\sum_{\alpha} [E \delta_{\gamma\alpha} - \hat{\mathcal{H}}_{\gamma\alpha}] \mathcal{G}_{\alpha\lambda} = \delta_{\gamma\lambda}$$

$$[E \hat{1} - \hat{\mathcal{H}}] \hat{\mathcal{G}} = \hat{1} \quad (3.27)$$

Dolayısıyla Green fonksiyonunun klasik ifadesi elde edilir:

$$\hat{\mathcal{G}}(E) = (E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}})^{-1} \quad (3.28)$$

Dirac notasyonu kullanılarak Green fonksiyonunun operatörler cinsinden ifadesi (kuantum notasyonu) yazılabilir (Duffy, 2001).

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle \psi_\alpha^*(\mathbf{r}) = \langle \alpha | \mathbf{r} \rangle \quad (3.29)$$

ifadesi kullanarak (3.28) eşitliği elde edilir.

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{\mathcal{G}}(E) | \beta \rangle \quad (3.30)$$

$$G(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha, \beta} \psi_\alpha(\mathbf{r}) \mathcal{G}_{\alpha, \beta} \psi_\beta^*(\mathbf{r}') = \sum_{\alpha, \beta} \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle \mathcal{G}_{\alpha, \beta} \langle \beta | \mathbf{r}' \rangle$$

$$\sum_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1 \quad (3.31)$$

$$|\alpha\rangle = \int d^d \mathbf{r}' \psi_\alpha(\mathbf{r}') \underbrace{\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle}_{\Rightarrow \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle \psi_\alpha(\mathbf{r})}$$

olduğuna göre,

$$G(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \hat{\mathcal{G}}(E) | \mathbf{r}' \rangle \quad (3.32)$$

eşitliği bulunur.

$$\hat{\mathcal{G}}(E) = (E - \hat{\mathcal{H}})G = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Rightarrow \langle \mathbf{r} | (E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}) \hat{\mathcal{G}} | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle$$

$$\langle \mathbf{r} | (E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}) \hat{\mathcal{G}} - \hat{I} | \mathbf{r}' \rangle = 0$$

$$\hat{\mathcal{G}}(E) = (E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}})^{-1} \quad (3.33)$$

eşitliği elde edilir.

3.1.4 Dirac Delta ve Green Fonksiyonları

Dirac-delta fonksiyonu;

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{(x^2 + \epsilon^2)} \right] \quad (3.34)$$

eşitliğindeki gibi tanımlansın. Dolayısıyla öncelikle

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x^2 + \epsilon^2}$$

integrasyonuna bakılması gerekir.

$$z^2 + \epsilon^2 = 0 \rightarrow z = \mp i\epsilon \quad (\epsilon > 0)$$

$$I = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^{+R} f(z) dz + \int_{C_R} f(z) dz = 2\pi i \text{Res}[f(z), z = i\epsilon] \quad (3.35)$$

$$\int f(z) dz \rightarrow 0 \text{ ise, } \text{Res}[f(z), z = i\epsilon] = (z - i\epsilon) \frac{1}{(z - i\epsilon)(z + i\epsilon)} \Big|_{z=i\epsilon} = \frac{1}{2i\epsilon}$$

bulunur. (3.35) eşitliğinde yerine yazılırsa I ifadesi elde edilir.

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x^2 + \epsilon^2} = 2\pi i \text{Res}[f(z), z = i\epsilon] = 2\pi i \frac{1}{2i\epsilon} = \frac{\pi}{\epsilon} \quad (3.36)$$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{(x^2 + \epsilon^2)} \right] = 1 ; \quad \epsilon > 0$$

Dirac-delta fonksiyonu için

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (3.37)$$

eşitliğine göre,

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{(x^2 + \epsilon^2)} \quad (3.38)$$

elde edilir. (3.38) eşitliğindeki kesirli ifade ikiye ayrılarak sadeleştirilir.

$$A + B = 0 \rightarrow B = -A$$

$$1 = i(-A + B) \rightarrow 1 = i(-2A)$$

$$\Rightarrow A = -\frac{1}{2i} ; B = \frac{1}{2i}$$

$$\delta(x) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2i} \left[\frac{1}{x+i\epsilon} - \frac{1}{x-i\epsilon} \right] \quad (3.39)$$

$$\delta(x) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{2i} \left[\frac{1}{x+i0^+} - \frac{1}{x-i0^+} \right] \quad (3.40)$$

Dirac delta fonksiyonu operatörler cinsinden ifade edilecek olunursa;

$$\delta(E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{2i} \left[\frac{1}{(E+i0^+)\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}} - \frac{1}{(E-i0^+)\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}} \right] \quad (3.41)$$

Burada parantezin içerisindeki ilk terim Geri (Retarded) Green fonksiyonu, ikinci terim ise İleri (Advanced) Green fonksiyonu olarak tanımlanır.

$$\hat{\mathcal{G}}(E \pm i0^+) = \frac{1}{(E \pm i0^+)\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}} \quad (3.42)$$

$$\hat{\mathcal{G}}^\pm(E) = \hat{\mathcal{G}}(E \pm i0^+) \quad (3.43)$$

Retarded Green fonksiyonu;

$$\hat{\mathcal{G}}^{(+)} \rightarrow \hat{\mathcal{G}}^{(R)} = \frac{1}{(E+i0^+)\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}} \quad (3.44)$$

Advanced Green fonksiyonu;

$$\hat{\mathcal{G}}^{(-)} \rightarrow \hat{\mathcal{G}}^{(A)} = \frac{1}{(E - i0^+) \hat{I} - \hat{\mathcal{H}}} \quad (3.45)$$

$$\delta(E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{2i} [\hat{\mathcal{G}}^{(+)} \rightarrow \hat{\mathcal{G}}^{(-)}] \left(\odot g^{\pm} = a \pm ib \rightarrow \frac{1}{2i} [(a + ib) - (a - ib)] = b \right)$$

$$\delta(E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\hat{\mathcal{G}}^{(+)}(E)] \quad (3.46)$$

Yerel durumlar yoğunluğu ile sistemin Green fonksiyonu arasındaki bağıntı ise

$$D(E, \mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\langle \mathbf{r} | \hat{\mathcal{G}}^{(+)}(E) | \mathbf{r} \rangle] \quad (3.47)$$

denklemindeki gibi elde edilir.

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathcal{G}}^{(+)}(E) | \mathbf{r} \rangle = G^{(+)}(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \quad (3.48)$$

$$\delta(E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{2i} [\hat{\mathcal{G}}^{(+)} - \hat{\mathcal{G}}^{(-)}] \cdot \frac{\mathbf{i}}{\mathbf{i}} = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{2i} [\hat{\mathcal{G}}^{(+)} - \hat{\mathcal{G}}^{(-)}]$$

$$A = i (\hat{\mathcal{G}}^{(+)} - \hat{\mathcal{G}}^{(-)})$$

tanımı altında;

$$\delta(E\hat{I} - \hat{\mathcal{H}}) = \frac{1}{2\pi} A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \quad (3.49)$$

eşitliği yazılabilir. Burada; $A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ spektral fonksiyondur ($\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ üzerinden tanımlı).

3.1.5 Vektör Potansiyeli İçin Ayar Dönüşümü Hesaplamaları

Hamiltonyen eşitliğinde yazılan vektör potansiyeline eklenen fonksiyon, hamiltonyen denkleminin değerini değiştirmemektedir (Jackson, ve Okun 2001). Bu

sayede denklemin çözümüne yardımcı olacak şekilde herhangi bir Landau ayarından bir diğerine geçiş yapılabilir. Bu, ayar dönüşümleri olarak tanımlanır (Ueta, 1992).

$$\langle \mathbf{r} | \tilde{G} | \mathbf{r}' \rangle \equiv \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = e^{-ie[\chi(\mathbf{r}) - \chi(\mathbf{r}')] / \hbar} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \quad (3.50)$$

II. Landau ayarı için bu ifade kullanılırsa;

$$G_I^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{4I_0^2} + \frac{i(y + y')(x - x')}{2I_0^2} \right] \frac{1}{2\pi I_0^2} \sum_n \frac{\text{Ln} \left[\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2I_0^2} \right]}{E + i\eta - En}$$

$$\chi_{12} = Bxy \quad B = \frac{\hbar}{el_0^2}$$

$$\frac{i}{2I_0^2} (xy + xy' - x'y' - 2xy + 2x'y')$$

$$G_I^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{4I_0^2} + \frac{i(y - y')(x + x')}{2I_0^2} \right] \times \frac{1}{2\pi I_0^2} \sum_n \frac{\text{Ln} \left[\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2I_0^2} \right]}{E + i\eta - En} \quad (3.51)$$

Green fonksiyon ifadesinin modülü alındığında değer yine aynı olacaktır (Cresti, Grosso, ve Parravicini, 2005).

$$|G_I^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)| = e^{-\frac{\xi^2}{4}} \frac{1}{2\pi I_0^2} \left| \sum_n \frac{\text{Ln} \left(\frac{\xi^2}{2} \right)}{E - En} \right| \quad (3.52)$$

3.2 Sonlu Elemanlar Yöntemi

Sonlu elemanlar metodu (Finite Element Method), çeşitli sistemlerin nümerik hesaplamaları için kullanılmaktadır. Lineer veya lineer olmayan örneğin; sıvı mekaniği, ses, biyomekanizma, sıvı transferi gibi problemlerde olumlu sonuçlar

verebilmektedir. Düzenli geometriye sahip olmayan, durağan durumlarda, zamana bağlı özdeğer problemlerinde ve karmaşık olan sınır koşulları altında bu yöntemle oldukça doğru değerler elde edilmektedir.

Sonlu elemanlar metodunda, temel fonksiyonlar basit alt bölgelere (set) bölünür. Her bir alt sete sonlu eleman veya global eleman adı verilir. Burada, çalışma bölgesinin sonlu sayıda alt çalışma bölgesine ayırma işlemi süreksizliği ifade etmektedir. Her bir eleman bir diğer elemana bağlı olduğu düğüm noktaları (nod) vardır. Bu iki nod arasındaki alana lokal eleman adı verilir. Kapalı bir alan boyunca elemanlar toplanarak çözüm sürekli hale gelmiş olur.

Sonlu elemanlar metodunda yapılmaya çalışılan fiziksel bölgeyi parçalara ayırma işlemidir. Küçük bölgelerdeki çözümler komşu bölgelerle eklenerek daha doğru olan genel çözümler elde edilir. Eleman sayısı arttıkça yani fiziksel bölge ne kadar çok alt bölgelere ayrılırsa çözümün hassaslığı ve doğruluğu da o kadar artar. Sisteme ait algoritmanın oluşturulması için ilk olarak çalışılan bölge alt bölgelere ayrılır ve her bölge için baz fonksiyonu yazılır. Yazılan baz fonksiyonları sistemin fonksiyonuna eklenir. Sınır koşulları altında sistemin fonksiyonu çözümlenir. Çözülen fonksiyonla da her bir alt bölgeye ait fonksiyon çözümlenmiş olur. Bu tezde, Güneş (2009), Urgan (2010) ve Yeşilgül' ün (2010) geliştirdiği sonlu elemanlar yöntemi algoritması takip edilecektir.

İnterpolasyon, bilinen veri noktalarının farklı bir dizi aralığında yeni veri noktaları oluşturmak için kullanılan bir yöntemdir. Global element için, d-boyutta skaler doğrusal alan şu şekilde tanımlanır:

$$F(x) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_dx_d \quad (3.53)$$

- Matris $\{\{A\}\}$
- Sütun Matrisi $\{A\}$
- Satır Matrisi $\{A\}^T$

$$\begin{aligned}\{F\}^T &= (F_1 \ F_2 \ \dots \ F_{d+1}) \\ \{a\}^T &= (a_0 \ a_1 \ \dots \ a_d)\end{aligned}$$

V_d , global elementin d-boyuttaki hacim elemanı olarak tanımlanırsa, skaler alan, nod ve katsayıların çarpımı şeklinde yazılabilir:

$$\{F\} = \{\{x\}\} \cdot \{a\} \quad (3.54)$$

$$Det(\{\{x\}\}) = d! V_d \quad (3.55)$$

Değeri bilinmeyen a_i katsayısının çözümünün genel formu şu şekilde gösterilir:
 F_i , katsayılar cinsinden tekrar yazalım;

$$F(x) = F_1 L_1(x) + F_2 L_2(x) + \dots + F_{d+1} L_{d+1}(x) \quad (3.56)$$

$i = 1, 2, \dots, d, d+1$ ve $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$. Burada L adında yeni bir alan koordinatı tanımlanır. Alan koordinatları aşağıdaki koşulları yerine getirmeleri gerekmektedir.

$$L_i(x(j)) = \delta_{i,j} \quad (3.57)$$

$$\sum_{i=1}^{d+1} L_i(x) = 1 \quad (3.58)$$

$$\sum_{k=1}^{d+1} L_k(x(i)) L_k(x(j)) = \delta_{i,j} \quad (3.59)$$

$$i, j, k = 1, 2, \dots, d, d+1; x = (x_1, x_2, \dots, x_d).$$

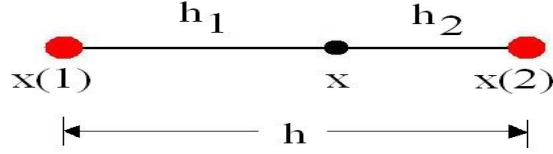
Alan koordinatlarının kısmi türevi;

$$\frac{\partial L_i(x)}{\partial x(j)} = \frac{1}{d! V_d} (-)^{i-1} (-)^j \times$$

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1(1) & x_2(1) & \cdot & x_{j-1}(1) & x_{j+1}(1) & \cdot & x_d(1) \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & x_1(i-1) & x_2(i-1) & \cdot & x_{j-1}(i-1) & x_{j+1}(i-1) & \cdot & x_d(i-1) \\ 1 & x_1(i+1) & x_2(i+1) & \cdot & x_{j-1}(i+1) & x_{j+1}(i+1) & \cdot & x_d(i+1) \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & x_1(d+1) & x_2(d+1) & \cdot & x_{j-1}(d+1) & x_{j+1}(d+1) & \cdot & x_d(d+1) \end{vmatrix} \quad (3.60)$$

elde edilir.

Bir boyutta iki düğüm noktalı bir global eleman şekildeki gibi gösterilir:



Şekil 3.2 İki düğüm noktalı global elemanın gösterimi

$$h_1 = x - x(1), h_2 = x(2) - x, h = x(2) - x(1)$$

$$h = h_1 + h_2$$

$$I = \frac{h_1}{h} + \frac{h_2}{h}, \quad I = L_1 + L_2$$

$$d = 1, \quad V_1 = (x(2) - x(1))$$

L_1 ve L_2 'yi matris formunda yazalım:

$$L_1 = \frac{1}{V_1} \begin{vmatrix} 1 & x \\ 1 & x(2) \end{vmatrix} = \frac{(x(2) - x)}{(x(2) - x(1))}$$

$$L_2 = \frac{1}{V_1} \begin{vmatrix} 1 & x(1) \\ 1 & x \end{vmatrix} = \frac{(x - x(1))}{(x(2) - x(1))}$$

Tüm alanı kapsayan interpolasyon fonksiyonları, sadece küresel unsurları kapsayan şekil fonksiyonları açısından tanımlanmıştır.

$N_1(x) = L_1(x), N_2(x) = L_2(x), N_i(x(j)) = \delta_{i,j}, (i, j = 1, 2)$. İki boyutta veya üç boyutta da yazılabilir ancak burada kullanılmadığı için yazılmadı. V_d , d-boyutta hacim elemanı olmak üzere,

$$\begin{aligned} V_d &= \int dx_1 \int dx_2 \int dx_3 \dots \int dx_d dx_1 dx_2 \dots dx_d \\ &= J \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 \int_0^{1-L_1-L_2} dL_3 \dots \int_0^{1-L_1-L_2-\dots-L_{d-1}} dL_d \end{aligned}$$

alan koordinatları sınır olarak kısıtlanırsa;

$$I = L_1 + L_2 + \dots + L_d + L_{d+1}$$

J Jakobiyen olmak üzere;

$$V_d = J \frac{1}{d!} \Rightarrow J = d! V_d$$

şeklinde tanımlanır.

Sonlu elemanlar yöntemini Schrödinger denkleminde uygulayabilmek için ilk önce boyutsuz tek-parçacık hamiltonyeni düşünülür. Bu hamiltonyenin genel bir $V(\mathbf{r})$ potansiyeli olacak. Burada $H\psi = E\psi$ denkleminin çözümü, uygulanan fiziksel bölgenin bir bölümünün başlangıcı olarak elde edilir.

Eğer N_{tot} , birbirine geçmiş bölge içindeki total nodların numarası olarak tanımlanırsa, interpolasyon fonksiyonları (bölgenin genişliği) $\phi_n(\mathbf{r})$ 'in seti şeklinde verilir.

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N_{tot}} \psi_n \phi_n(\mathbf{r}) \quad (3.61)$$

$$\phi_i(\mathbf{r}(j)) = \delta_{i,j}$$

$(i, j = 1, 2, \dots, N_{tot})$. Seçilen dalga fonksiyonunun matris notasyonu şu şekilde verilir:

$$\{\phi(\mathbf{r})\}^T = (\phi_1(\mathbf{r}), \phi_2(\mathbf{r}), \phi_3(\mathbf{r}), \dots, \phi_N(\mathbf{r}))$$

$$\{\psi\}^T = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_N)$$

buna göre,

$$\psi(\mathbf{r}) = \{\phi(\mathbf{r})\}^T \cdot \{\psi\}^T \quad (3.62)$$

eşitliği elde edilir.

N_{tot} 'in numarası, değişken parametre olan ψN_{tot} Galerlian metoduyla elde edilir (Zienkiewicz, Taylor, ve Zhu, 2005). Burada temel prensip, Schrödinger denklemini istenilen $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonuyla yazmaktır. Bunun için, ilk önce dalga fonksiyonunun hermitiyeni Schrödinger denklemiyle soldan çarpılır ve sonra değişken parametreler minimum olacak şekilde integre edilir. $\psi(\mathbf{r})^\dagger = \{\psi\}^\dagger \{\phi(\mathbf{r})\}$ ifadesi kullanılarak Galerlian elde edilir.

$$G = \int_{\Omega} \psi(\mathbf{r})^\dagger (H - \epsilon)(\mathbf{r}) d\Omega \quad (3.63)$$

Dalga fonksiyonunun hermitiyeniyle çarpıldığında Galerlian (3.48) 'teki gibi yazılır:

$$G = \{\psi\}^\dagger \cdot \left[\int_{\Omega} \{\phi(\mathbf{r})\} (H - \epsilon) \{\phi(\mathbf{r})\}^T d\Omega \right] \cdot \{\psi\} \quad (3.64)$$

$(\psi, \psi^\dagger)$ dalga fonksiyonu kümesi minimum G değeri verebilmesi için, enerji özdeğerleri için $\partial G / \partial \psi^\dagger$ olur. Buna göre;

$$\left[\int_{\Omega} \{\phi\} (H - \epsilon) \{\phi\}^T d\Omega \right] \cdot \{\psi\} = 0 \quad (3.65)$$

Hamiltonyen ifadesi açıkça yazılmadan önce kinetik enerji terimine bakalım. Kinetik terimin birinci integrasyonundan sonra Hamiltonyen;

$$-\int_{\Omega} \{\phi\} \cdot \nabla_a^2 \{\phi\}^T \cdot d\Omega = \int_{\Omega} \nabla_a \{\phi\} \cdot \nabla_a \{\phi\}^T \cdot d\Omega - \int_{\Gamma} \{\phi\} \cdot \nabla_a \{\phi\}^T \cdot d\Gamma$$

şeklini alır. İstenilen dalga fonksiyonunun ve onun konjugesi, sistemin sınır koşullarında sıfır olması gerekir, bu yüzden ikinci katkı gelmez. Hamiltonyenin açık hali, değişken G'nin tanımını içinde şu şekilde yazılır;

$$\left[\int_{\Omega} d\Omega \left[\frac{1}{2} \nabla_a \{\phi\} \cdot \nabla_a \{\phi\}^T + \{\phi\} V(\mathbf{r}) \{\phi\}^T \right] \right] \cdot \{\psi\} = \epsilon \left[\int_{\Omega} d\Omega \{\phi\} \{\phi\}^T \right]$$

Matris formda tekrar yazalım:

$$\{\{K\}\} \cdot \{\psi\} = \epsilon \{\{M\}\} \cdot \{\psi\} \quad (3.66)$$

$\{\{K\}\}$ esneklik matrisi ve $\{\{M\}\}$ kütle matrisidir. Açık haliyle (3.51) ve (3.52) 'deki haliyle gösterilir:

$$\{\{K\}\} = \int_{\Omega} d\Omega \left[\frac{1}{2} \nabla_a \{\phi\} \cdot \nabla_a \{\phi\}^T + \{\phi\} V(\mathbf{r}) \{\phi\}^T \right] \quad (3.67)$$

$$\{\{M\}\} = \int_{\Omega} d\Omega \{\phi\} \{\phi\}^T \quad (3.68)$$

Tüm çalışma uzayı üzerinden bütün integraller, çalışılan uzaydaki elemanların integrali üzerinden toplamı şeklinde gösterilir:

$$\int_{\Omega} d\Omega = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} d\Omega_e \quad (3.69)$$

Global eleman esneklik matrisi $\{\{k_e\}\}$ ve global eleman kütle matrisi $\{\{m_e\}\}$ olmak üzere,

$$\{\{k_e\}\} = \int_{\Omega_e} d\Omega_e \left[\frac{1}{2} \nabla_d \{N\} \cdot \nabla_d \{N\}^T + \{N\} V(\mathbf{r}) \{N\}^T \right] \quad (3.70)$$

$$\{\{k_e\}\} = \sum_{e=1}^{N_e} \{\{k_e\}\} \quad (3.71)$$

$$\{\{m_e\}\} = \int_{\Omega_e} d\Omega_e \{N\} \{\phi N\}^T \quad (3.72)$$

$$\{\{m_e\}\} = \sum_{e=1}^{N_e} \{\{m_e\}\} \quad (3.73)$$

$\{\phi\}$ tüm uzayın interpolasyon fonksiyonudur. $\{N\}$ ise interpolasyon uzayının global elementi veya şekil fonksiyonlarıdır.

BÖLÜM DÖRT

SİSTEMİN GREEN FONKSİYONU

4.1 Sistemin Tanıtılması

Tezin amaçlarından ilki düzgün enine elektrik alan ve düzgün dik parabolik kuşatma potansiyeli altında iki-boyutlu elektron gazının analitik olarak incelenmesi ve Green fonksiyon ifadesinin yazılmasıdır. Bunun için ilk aşamada Cresti ve çalışma arkadaşlarının makalesinden de faydalanılarak sistemde serbest parçacık varken, sonrasında sadece kuşatma potansiyeli uygulandığında ve sadece elektrik alan uygulandığında sistemin Hamiltonyenini ve Green fonksiyon ifadeleri türetildi (Cresti, Grosso ve Parravicini, 2005). Bunların üzerine bu tez kapsamında Cresti'nin çalışmasına (2005) ek olarak kuşatma potansiyeli ve elektriksel alanın aynı anda sistemde olması durumundaki Green fonksiyon ifadesi analitik olarak türetildi. V_{pot} , kuşatma potansiyeli; F , elektrik alan ve B , manyetik alan olmak üzere işlemlerde kullanıldı.

Buna göre; manyetik alan varlığında yani kuşatma potansiyeli ve elektrik alan olmayıp elektron serbest parçacık halinde iken; ($V_{pot}=0$, $F=0$)

$$H = \frac{1}{2m^*} (p_y)^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - Y)^2 \quad (4.1)$$

Sistemin özdeğerleri;

$$E_{nk_x} = E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.2)$$

özdeğerlere karşı gelen öz fonksiyonlar,

$$\phi_{nk_x}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \phi_n(y - Y) \quad (4.3)$$

şeklinde elde edilir. Burada ω_c siklotron rezonans frekansı, Y salınımların merkezi ve l_0 uzunluğun doğal birimi (manyetik uzunluk) sırasıyla,

$$\omega_c = \frac{eB}{mc} \quad , \quad Y = \frac{\hbar c}{eB} k_x \quad , \quad p_x = \hbar k_x \quad , \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}}$$

Birinci Landau ayarında manyetik Green fonksiyonu ifadesi;

$$G_I^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{4I_0^2} + \frac{i(y + y')(x - x')}{2I_0^2} \right] \frac{1}{2\pi I_0^2} \sum_n \frac{Ln \left[\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2I_0^2} \right]}{E + i\eta - En}$$

İkinci olarak manyetik alan varlığında parçacığa sadece parabolik kısıtlayıcı bir potansiyel uygulandığında; ($V_{pot} \neq 0$, $F=0$)

$$H = \frac{1}{2m^*} (p_y)^2 + \frac{1}{2} m\omega^{*2} Y^2 + \frac{1}{2} m\omega_{av}^2 (y - \frac{\omega_c^2}{\omega_{av}^2} Y) \quad (4.4)$$

$$\omega_{av}^2 = \omega_0^2 + \omega_c^2$$

$$\omega^{*2} = \frac{\omega_0^2 \omega_c^2}{\omega_{av}^2}$$

Sistemin özdeğerleri;

$$E_{nk_x} = E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{av} + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 \quad ; \quad m^* = m \frac{\omega_{av}^2}{\omega_0^2} = m \left(1 + \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \right)$$

özdeğerlere karşı gelen öz fonksiyonlar,

$$\phi_{nk_x}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \phi_n(y - Y) \quad (4.5)$$

şeklinde elde edilir. Green fonksiyon ifadesi ($E \gg E_n$) durumunda Green fonksiyon;

$$Y_0 = \sqrt{\left(\frac{E - E_n}{p} \right)} \quad (4.6)$$

$$G_n^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \begin{cases} \left(\frac{-i\pi}{pY_0} \right) e^{\frac{iY_0(x-x')}{l_0}} \phi_n^{av}(y - sY_0) \phi_n^{av}(y' - sY_0), & x - x' \gg 0 \\ 0, & x - x' \ll 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

bulunur. Üçüncü durum, parçacığa sadece elektrik alan uygulandığında; ($V_{pot} = 0$, $F \neq 0$)

$$v_d = c \frac{F}{B}$$

$$m\omega_c v_d \equiv m \left(\frac{eB}{mc} \right) c \frac{F}{B} \equiv eF$$

olmak üzere,

$$H = \frac{1}{2m^*} (p_y)^2 + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \left(y - Y + \frac{v_d}{\omega_c} \right)^2 + eFY + \frac{1}{2} mv_d^2 \quad (4.8)$$

hamiltonyen ifadesi yazılır. Buna göre sistemin özdeğeri;

$$E_{n k_x} = E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + eFY - \frac{1}{2} mv_d^2 \quad (4.9)$$

ve özdeğerlere karşı gelen öz fonksiyonlar,

$$\phi_{n k_x}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \phi_n \left(y - Y + \frac{v_d}{\omega_c} \right) \quad (4.10)$$

yazılır. Green fonksiyon ifadesi ($E \gg E_n$) durumunda Green fonksiyon ifadesi;

$$Y_0 = \frac{1}{eF} \left(E - E_n + \frac{1}{2} mv_d^2 \right)$$

için;

$$G_n^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \begin{cases} \left(\frac{-i\pi}{eF} \right) e^{\frac{iY_0(x-x')}{l_0}} \phi_n \left(y - Y_0 + \frac{v_d}{\omega_c} \right) \phi_n \left(y - Y_0 + \frac{v_d}{\omega_c} \right), & x - x' \gg 0 \\ 0, & x - x' \ll 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

elde edilir.

4.1.1 Kuşatma Potansiyeli ve Elektrik Alan Altında Sistemin İncelenmesi

Bu tez kapsamında kuşatma potansiyeli ve elektrik alan varlığında sistemin hamiltonyeni ($V_{pot} \neq 0, F \neq 0$) ;

$$H = \frac{1}{2m} (p_x + A_x)^2 + \frac{1}{2m} (p_y + A_y)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2 + eFy \quad (4.12)$$

şeklinde yazılır. Birinci Landau ayarına göre;

$$H = \frac{1}{2m} (p_x - \frac{eB}{c} y)^2 + \frac{1}{2m} (p_y)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2 + eFy$$

$$H = \frac{1}{2m} (p_y)^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - Y)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2 + eFy \quad (4.13)$$

3. bölümde tanımlandığı şekilde kuşatma potansiyelinin frekansı ω_0 ve siklotron frekansı ω^* kullanılarak ve çözümlemede kolaylık olması açısından averaj frekansı ω_{av} ve indirgenmiş frekans da ω^* tanımlanırsa Hamiltonyen ifadesi,

$$\omega_{av}^2 = \omega_0^2 + \omega_c^2$$

$$\omega^{*2} = \frac{\omega_0^2 \omega_c^2}{\omega_{av}^2}$$

$$H = \frac{1}{2m^*} (p_y)^2 + \frac{1}{2} m \omega_{av}^2 \left(y - \frac{\omega_c^2}{\omega_{av}^2} Y \right) + \frac{1}{2} m \omega^{*2} Y^2 + eFy \quad (4.14)$$

$$v_d = c \frac{F}{B}$$

$$m \omega_c v_d \equiv m \left(\frac{eB}{mc} \right) c \frac{F}{B} \equiv eF \quad (4.15)$$

yazılır. Buna göre sistemin özdeğeri;

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar k_x^2}{2m^*} + \frac{\omega_c^2}{2\omega_{av}^2} \left(eFY - \frac{1}{2} m v_d^2\right) \quad (4.16)$$

ve özdeğerlere karşı gelen öz fonksiyonlar,

$$\phi_{nk_x}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \phi_n \left(y - \frac{\omega_c^2}{\omega_{av}^2} Y + \frac{\omega_c v_d}{\omega_{av}^2}\right) \quad (4.17)$$

Bu durumda Green fonksiyon ifadesi;

$$G_n^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{L_x} \sum_n \sum_Y e^{\frac{iY(x-x')}{l_0^2}} \frac{\phi_n \left(y - \frac{\omega_c^2}{\omega_{av}^2} Y + \frac{\omega_c v_d}{\omega_{av}^2}\right) \phi_n \left(y' - \frac{\omega_c^2}{\omega_{av}^2} Y + \frac{\omega_c v_d}{\omega_{av}^2}\right)}{E + i\eta - E_{nY}}$$

olarak yazılır. İşlem kolaylığı açısından s gibi bir değer tanımlansın. $\frac{\omega_c^2}{\omega_{av}^2} = s$ olmak üzere kuantum kuyusunun y -doğrultusundaki uzunluğu sonsuz alınırsa yani $L_y \rightarrow \infty$ Green fonksiyon ifadesindeki Y toplamı integrale dönüşür.

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{2\pi l_0^2} \times \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{\frac{iY(x-x')}{l_0^2}} \left(\frac{\phi_n \left(y - \frac{\omega_c^2}{\omega_{av}^2} Y + \frac{\omega_c v_d}{\omega_{av}^2}\right) \phi_n \left(y' - \frac{\omega_c^2}{\omega_{av}^2} Y + \frac{\omega_c v_d}{\omega_{av}^2}\right)}{E + i\eta - E_{nY}} \right)$$

İntegral içindeki payda kısmı aşağıdaki gibi yazılır ve E_{nY} değeri açılarak gösterilirse:

$$E + i\eta - E_{nY} = E + i\eta - E_n - pY^2 - \frac{\omega_c^2}{2\omega_{av}^2} \left(eFY - \frac{1}{2} m v_d^2\right)$$

şeklini alır. Green fonksiyon ifadesinin son hali (4.15) ‘teki halini alır:

$$G^R(r, r'; E) = \frac{1}{2\pi l_0^2} \times \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{\frac{iY(x-x')}{l_0^2}} \left(\frac{\phi_n^{av} \left(y - sl_0^2 Y_0 + s \frac{v_d}{\omega_c} \right) \phi_n^{av} \left(y' - sl_0^2 Y_0 + s \frac{v_d}{\omega_c} \right)}{E + i\eta - E_{nY}} \right) \quad (4.18)$$

$E \ll E_n$ için y ve y' değerleri alt enerji seviyelerinde çok küçük olduğundan sabit gibi düşünülüp Y değeri ikisinin toplamı şekline yazılır:

$$\dot{Y} = \frac{1}{2} (y + y') \quad (4.19)$$

Buna göre integral içindeki Y değeri sabit olup integralden çıkar. Payda kısmı düzenlenirse:

$$E + i\eta - E_{nY} \approx -|E - E_n| + eFs\dot{Y} - \frac{1}{2} m\omega^{*2} \dot{Y}^2 - \frac{1}{2} msu_d^2 \quad (4.20)$$

şeklini alır. Green fonksiyon ifadesi buna (4.17) eşitliği de kullanılarak $E \ll E_n$ koşulunda yazılırsa;

$$G^R(r, r'; E) = \left(\frac{1}{-|E - E_n| + eFs\dot{Y} - \frac{1}{2} m\omega^{*2} \dot{Y}^2 - \frac{1}{2} msu_d^2} \right) \times \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{\frac{iY(x-x')}{l_0^2}} \phi_n^{av} \left(y - sY + s \frac{v_d}{\omega_c} \right) \phi_n^{av} \left(y' - sY + s \frac{v_d}{\omega_c} \right) \quad (4.21)$$

elde edilir. $E \gg E_n$ koşulunda Y değişken olur ve integral içinde kalır.

$$p = \frac{1}{2} m\omega^{*2}$$

$$Y_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{eFs}{p}\right)^2 - 4\left(\frac{\frac{1}{2}msv_d^2}{p} - \frac{(E - E_n)}{p} - \frac{i\eta}{p}\right)} \quad (4.22)$$

Green fonksiyon ifadesi;

$$G_n^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \begin{cases} \left(\frac{-i\pi}{pY_0}\right) e^{\frac{iY_0(x-x')}{\hbar\omega}} \phi_n^{av}\left(y - sY_0 + s\frac{v_d}{\omega_c}\right) \phi_n^{av}\left(y - sY_0 + s\frac{v_d}{\omega_c}\right), & x - x' \gg 0 \\ 0, & x - x' \ll 0 \end{cases}$$

bulunur. İki boyutlu elektron gazı sistemine sırasıyla kuşatma potansiyeli ve elektrik alan verildiğinde, üçüncü durumda da her ikisi sisteme verildiğinde sisteme ait hamiltonyen incelenmiştir. Sonrasında da hamiltonyene ait Green fonksiyon ifadeleri türetilmiştir. Her durumda Y_0 değeri enerjiye, elektrik alana ve frekansa bağlı olarak farklı değerler üretti. Dolayısıyla Green fonksiyonundaki ϕ_n değerlerinin değiştiği görülmüştür. Kuşatma potansiyeli ve elektrik alan varlığında sistem Y merkezinden $s\frac{v_d}{\omega_c}$ kadar kaydığı görülmektedir.

BÖLÜM BEŞ

SİSTEMİN BOYUTSUZLAŞTIRILMASI VE SAYISAL ÇÖZÜMÜ

5.1 Elektriksel Alan ve Kuşatma Potansiyeli Altında Sistemin Hamiltonyeninin Boyutsuzlaştırılması

Tezin ikinci kısmında ise, elektriksel kuvvet ve kuşatma potansiyeli altında iki boyutlu elektron gazı sisteminin elektronik yapısını sayısal olarak incelemektir. İlk olarak hamiltonyen denklemini yazıp boyutsuzlaştırıp sonlu elemanlar yöntemiyle enerji değerleri elde edilecektir. Sonrasında enerjinin grafiklerini çizdirip daha önceki çalışmalarla karşılaştırılacaktır. Elektrik alan ve kuşatma potansiyeli altında sistemin hamiltonyeni aşağıdaki gibi yazılır:

$$H = \frac{1}{2m} (p_x + A_x)^2 + \frac{1}{2m} (p_y + A_y)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2 + eFy \quad (5.1)$$

Burada, $A=A(-eBy,0,0)$ (1.Landau Ayarı) için ;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - Y)^2 + \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + eFy \quad (5.2)$$

Hamiltonyeni boyutsuzlaştırmak için gerekli olan datalar:

Uzunluk paramatresi: b_0

$$b_0^2 = \frac{\hbar}{m^* \omega_0} \quad (5.3)$$

Enerji parametresi: E_0

$$E_0 = \hbar \omega_0 \quad (5.4)$$

$$y = b_0 \xi \quad \Rightarrow \quad dy = b_0 d\xi$$

$$\frac{d}{dy} = \frac{1}{b_0} \frac{d}{d\xi} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{d\xi} = D_\xi$$

$$\frac{d^2}{dy^2} = \frac{1}{b_0^2} \frac{d^2}{d\xi^2} \Rightarrow \frac{d^2}{d\xi^2} = D_\xi^2$$

$$Y = b_0 \xi_0 \Rightarrow (y - Y)^2 = (\xi - \xi_0)^2 b_0^2$$

$$k_x = \frac{1}{b_0} k_x b_0$$

$$\mathbb{K}_0 = k_x b_0$$

$$k_x = \frac{1}{b_0} \mathbb{K}_0$$

Boyutsuz hale getirilen Hamiltonyen ifadesi;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{b_0^2} D_\xi^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (\xi - \xi_0)^2 b_0^2 + \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m b_0^2} \mathbb{K}_0^2 + eF \xi b_0 \quad (5.5)$$

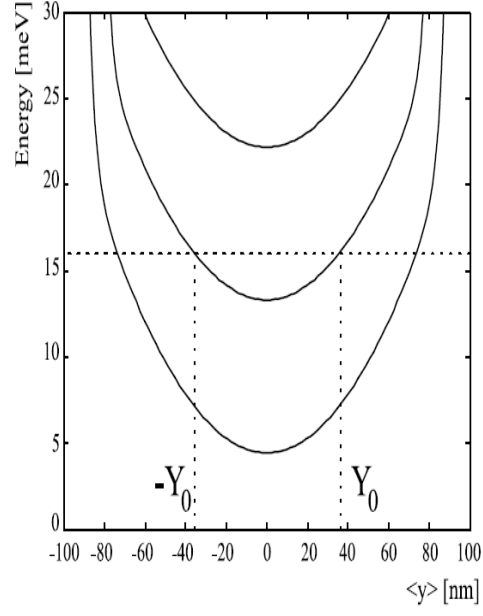
p_ξ boyutsuz kanonik momentum terimi olmak üzere;

$$\frac{H}{\hbar \omega_0} = \left[-\frac{1}{2} p_\xi^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 (\xi - \xi_0)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \mathbb{K}_0^2 + \frac{b_0}{\hbar \omega_0} eF \xi \right] \quad (5.6)$$

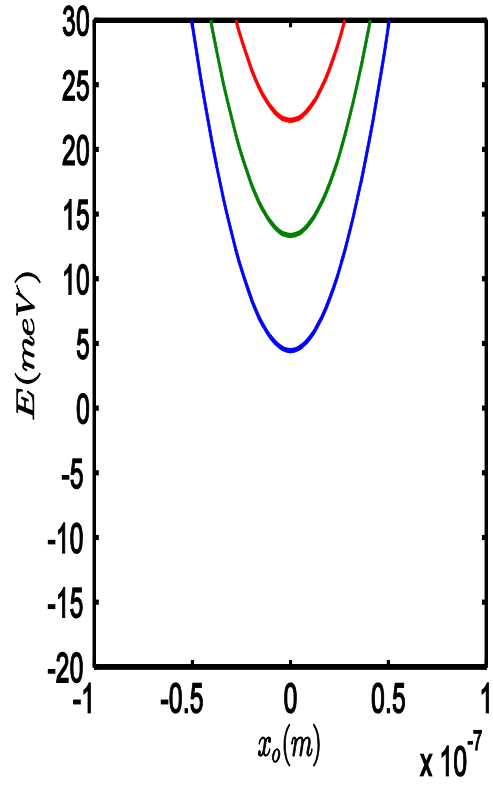
Güneş (2009), Ungan (2010) ve Yeşilgül (2010)' ün yazdığı kodlara eklemeler getirerek türetilen sistemin hamiltonyenine ait enerji değerleri üretildi. Global eleman sayısı 10 ve sistemde kuantum kuyusunun uzunluğu 200 nm alındı. Çalışan bölge 30'a bölünerek toplamda 300 tane eleman için sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak enerji değerleri üretildi.

Şekil 5.1 'de Cresti ve arkadaşlarının, sisteme sadece kuşatma potansiyeli uygulandığında ürettiği grafik görülmektedir.

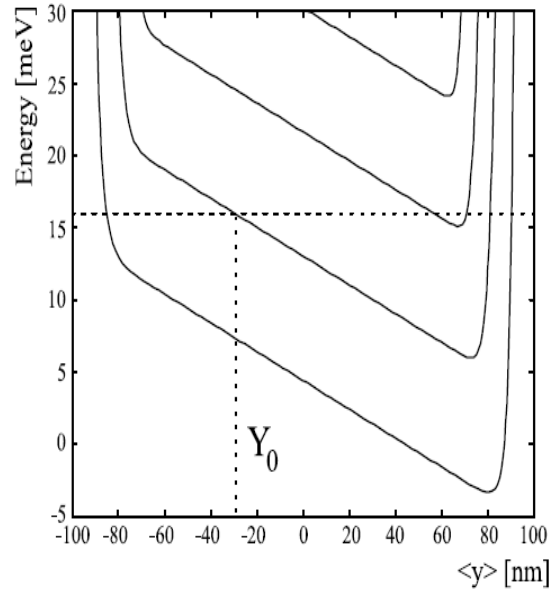
Şekil 5.2 'de ise bu çalışmada elde edilen [-50 nm; 50 nm] aralığında Cresti ile aynı değerleri ürettiği görülmektedir. Şekil 5.3 'te Cresti ve çalışma arkadaşlarının sadece elektrik alan varlığında ürettiği grafik görülmektedir. Grafikte kenarlarda keskin çıkışlar olduğu görülüyor.



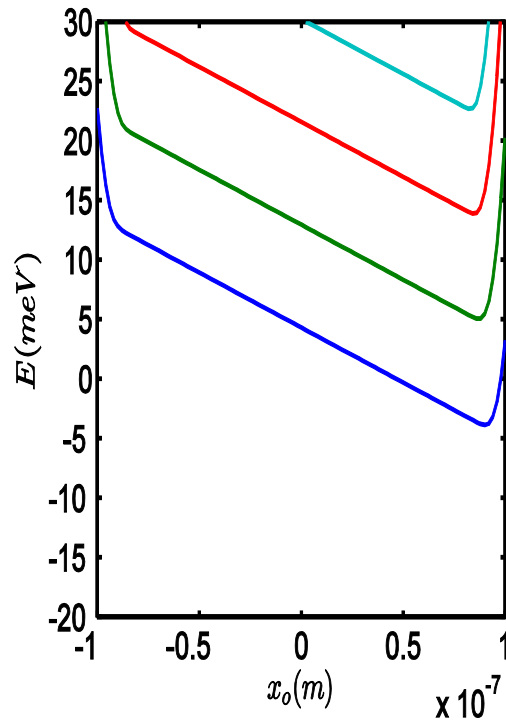
Şekil 5.1 Kuşatma potansiyeli varken (Cresti, Grosso ve Parravicini, 2005)



Şekil 5.2 Potansiyel uygulanıp kuvvet uygulanmadığında $b_0 = 23 \text{ nm}$

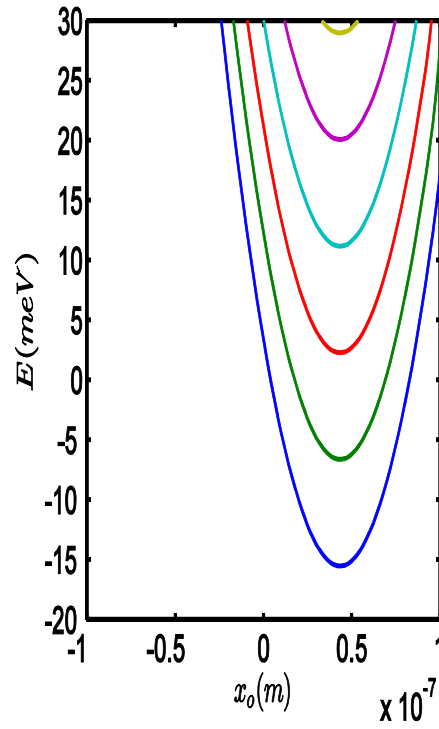


Şekil 5.3 Elektrik alan uygulandığında (Cresti, Grosso ve Parravicini, 2005)



Şekil 5.4 Potansiyel uygulanmayıp kuvvet uygulandığında $F = 0,4 \times 10^5$ N/c, $b_0=23$ nm

Şekil 5.4 'te ise bu çalışmanın sonucu olarak daha yumuşak çıkışlar olduğu görülüyor. İlk enerji değeri bu grafikte -5 'in üstünde değer aldığı görüldü, 2. ve 3. enerji değerlerinin de aynı olduğu görülmektedir. Şekil 5.5 'e bakılacak olunursa, hem potansiyel hem de elektrik alan varlığında sistemin enerji düzeylerinin grafiği çizildi. Burada $F = 10^6 \text{ N/c}$ iken değer vermektedir. Diğer hesaplamalarda elektrik alanın varlığında potansiyel yokken $F = 10^5 \text{ N/c}$ değerinde grafikler elde edilmiştir.



Şekil 5.5 Potansiyel ve kuvvet uygulandığında $F = 0,4 \times 10^6 \text{ N/c}$, $b_0 = 23 \text{ nm}$

BÖLÜM ALTI

SONUÇLAR

Bu tezin amacı, iki boyutlu elektron gazının elektronik yapısını incelemektir. Bu amaçla ilk olarak sisteme ait özdeğer ve özfonksiyon bilgilerini veren Schrödinger denklemi çözülüp bu denklemle çiftlenimli, Green fonksiyon ifadesi analitik çıkarılmıştır. Daha sonra hamiltonyenin boyutsuz hale getirilip sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak enerji değerlerini sayısal olarak hesaplanmıştır.

Tezde önce sistemin daha iyi anlaşılabilmesi için yarı iletken heteroyapıların tanımı yapıp yarı iletken malzemeler örnek verilerek açıklanmıştır. Daha sonra iki boyutlu elektron gazı sisteminin yapısı Wees ve diğerlerinin makalesinin yardımıyla (1988) GaAs/AlGaAs tipi malzemesi ve şekillerle beraber (Nicollian ve Brews, 1982) açıklanmıştır. İki boyutlu elektron gazına ait hamiltonyen yazılıp açıklandı. Bu ifade için gerekli olan vektör potansiyeli (Jackson ve Okun 2001), Landau ayar dönüşümlerinin (Ueta, 1992) tanımlarının yanında hamiltonyenin çözümünde kullanılacak olan Green fonksiyon ifadesinin de tanımı yapıldı (Metalidis, 2007). Son olarak nümerik hesaplamalarda kullanılacak olan sonlu elemanlar yöntemi Güneş (2009), Urgan (2010) ve Yeşilgül (2010) 'ün çalışmalarıyla beraber açıklandı.

Analitik olarak iki boyutlu elektron gazı sistemi incelenirken Cresti ve diğerlerinin (2005) çalışmaları takip edilerek ilk olarak parçacık serbest halde ilerlerken yani sadece manyetik alan varlığındaki durumuna bakılarak sistemin hamiltonyen ifadesi çıkartıldı. Sırasıyla sistemde kuşatma potansiyeli ve elektrik alan uygulandığında sistemin davranışına ait hamiltonyen ifadesi yazıldı. İki boyutlu elektron gazı bir düzlem içinde hareket ettiği düşünülerek düzlemin iki kenarından biri olan L_x uzunluğu $[-100\text{nm}, 100\text{nm}]$ aralığında olmak üzere toplamda 200nm alındı. L_y uzunluğu sonsuz alınarak seri toplam ifadesi integral haline getirilip Green fonksiyon ifadesi enerjinin çok küçük ve çok büyük değerleri için üretildi. Çıkan sonuçların Cresti ve diğerlerinin (2005) makalesiyle karşılaştırıldı ve sonuçların uyumlu olduğu görüldü. Daha sonra çalışmanın devamında sistem, y-ekseni doğrultusunda elektrik alan ve kuşatma potansiyeli altında ve z-ekseni doğrultusunda

manyetik alan varlığında nasıl davrandığı analitik olarak incelendi ve sistemle ilgili hamiltonyen ifadesi yazıldı. Hamiltonyenin çözümünde kullanılacak olan Green fonksiyonun integral ifadesi de analitik olarak çıkarılıp enerjinin çok küçük ve çok büyük değerlerindeki Green fonksiyon ifadesi sınır koşullarına bağlı olarak üretilmiş oldu.

Tezin son kısmı, nümerik olarak sistemin hamiltonyeninin incelenmesidir. Bu amaçla, elektrik alan ve kuşatma potansiyeli altında yazılan hamiltonyen boyutsuz hale getirildi. Sonlu elemanlar yönteminde tanımlanan global eleman numarası 10 olarak alındı. Kuantum kuyusunun x yönündeki uzunluğu 200 nm olarak alındı. Enerji parametresi $E_0 = 2,133$ meV ve uzunluk parametresi $b_0 = 23$ nm kullanılarak, boyutsuz hale getirilen hamiltonyen denklemini sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak enerji değerleri elde edildi. Nümerik olarak elde edilen bu değerler grafiklerle gösterildi. Grafikler bu konuyu çalışan Cresti ve diğerlerinin (2005) yazmış olduğu makalesiyle karşılaştırıldı ve aynı sonuçlar elde edildi.

Sırasıyla kuşatma potansiyeli ve elektrik alan uygulandığında sistemin enerji düzeylerini veren grafikler Cresti ve diğerlerinin (2005) çalışmasıyla uyumlu olduğu görülmektedir. Fakat, sadece elektrik alan varlığında sistemin hamiltonyeni yazılıp çizilen grafikte bir farklılık olduğu görüldü. Cresti ve diğerlerinin (2005) makalesindeki enerji grafiğinde kenarlarda keskin çıkışlar olmasına rağmen şekil (5.4) te de görüldüğü üzere $F = 0,4 \times 10^5$ Newton/coulomb daha yumuşak çıkışlar olduğu görülmüştür. Dolayısıyla bu durum sınır değerleri daha geniş bir aralıkta değer üretebilmiş oldu şeklinde yorumlanabilir. Şekil (5.5)'e bakılacak olunursa burada, hem elektrik alan varlığında hem de kuşatma potansiyeli altında sistemin ürettiği enerji değerlerini veren grafik çizildi. Bu grafikte önemli nokta $F = 0,4 \times 10^6$ N/c değeri için grafik değer üretilmiştir. Diğer grafiklerde daha düşük değer olan $F = 0,4 \times 10^5$ değeri alınmaktadır. Negatif enerji değerleri -20 değerlerine kadar indiği görüldü.

KAYNAKLAR

- Arda, B., ve Diwu, H. (2012). *Quantum dot lasers*. Bitirme Tezi: Rochester Üniversitesi.
- Binney, J., ve Skinner, D. (2008). *The physics of quantum mechanics* (2. Baskı) (10-45). Oxford: Copella Archieve.
- Chang, H. (2007). *Quantum transport in low dimensional electronic systems* (2. Baskı) (5-9) New York: UMI.
- Cresti, A., Grosso, G., ve Parravicini, G. P. (2005). Analytic and numeric Green's functions for a two-dimensional electron gas in an orthogonalmagnetic field. *Annals of Physics*, 321, 1075-1091.
- de Picciotto, R., Storer, H. L., Pfeiffer, L. N., Baldwin, K. W., ve West, K. W. (2001). Four-terminal resistance of a ballistic quantum wire. *Nature Physics*, 411, 51-54.
- Debald, S., ve Kramer, B. (2005). Rashba effect and magnetic field in semiconductor quantum wires. *Physical Review B*, 71, (115322).
- Duffy, D. J. (2001). *Green's functions with applications* (2. Baskı) (1-55). New York: CRC.
- Foden, C. L., Leadbeater, M. L., ve Burroughes, J. H. (1994). Quantum magnetic confinement in a curved two-dimensional electron gas. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 6, L127-L134.
- Galperin, Y. M. (1998). *Quantum transport*, Yüksek Lisans Tezi: Lund Üniversitesi.

- Gray, P. R., ve Meyer, R. G. (1992). *Analysis and Design of Integrated Circuits* (3. Baskı). New York: John Wiley.
- Griffiths, D. J. (1994). *Introducton to quantum mechanics* (2. Baskı) (201-239). America: Prentice Hall.
- Griffiths D. J. (1999). *Introduction to electrodynamics* (3. Baskı) (160-193). New Jersey: Prentice Hall.
- Gulebaglan, S. E., Sokmen, İ., Siddiki, A., ve Gerhardts, R. R. (2011). *Local density of two-dimensional electron systems under strong in-plane electric and perpendicular magnetic fields*, arXiv:1105.2026.
- Güneş, M. (2009). *Hidrostatik basınç altında düşük boyutlu yarı iletken sistemlerin elektronik ve optik özellikleri*. Yüksek Lisans Tezi : Cumhuriyet Üniversitesi.
- Harrison, P. (2005). *Quantum wells, wires and dots theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures* (2. Baskı) Ukrayna: Wiley Interscience.
- Hartree, D. R. (1928). The calculation of atomic structures. *Proceedings of Cambridge Philosophical Society*, 24, (89), 113-143.
- Hutton, D. V. (2004). *Fundamentals of finite element analysis* (2. Baskı) (1-13). New York: The McGraw Hill.
- Imada, M., ve Takahashi, M. (1984). Quantum Monte Carlo Simulation of a Two Dimensional Electron System -Melting of a Wigner Crystal- . *Journal of the Physical Society of Japan*, 53, 3770-3781.
- Jackson, J. D., ve Okun, L. B. (2001). *Historical roots of gauge invariance*, Lawrence Berkeley National Laboratory, 47066.

- Johnson, M. H. ve Lipmann, B. A. (1949). Motion in a constant magnetic field. *Physical Review*, 76, 6.
- Jones, R. O., ve Gunnarsan, O. (1989). The density functional formalism, its applications and prospects. *Reviews of Modern Physics*, 61, 689-746.
- Kenworhy, D. J., ve Ter Haar, D. (1961). On the summation of ladder diagrams in the diagrams in the theory of superconductivity. *Physica Elsevier*, 27, 12, 1189-1192.
- Kojimo, K., Mitsunga, K., ve Kyuma, K. (1989). Calculation of two dimensional quantum-confined structures using the finite element method. *Applied Physics Letter*, 55, 882-884.
- Kouwenhoven L. P., van der Marel, D., ve diğer. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, 60, 848.
- Kukushkin, I. V., Meshkov, S. V., ve Timofeev, V. B. (1988). Two-dimensional electron density of states in a transverse magnetic field. *Solide State Physics*, 155, 219-264.
- Leadley, D. R., (1997). *Reduced dimensional structures*. (21 Mayıs 2013), <http://homepages.warwick.ac.uk/~phsbn/2deg.htm>.
- Lüscher, S., Held, R., Fuhrer, A., Heinzl, T., Ensslin, K., Bichler, M., ve diğer. (2002). Electronic properties of AFM-defined semiconductor nanostructures: Quantum wires and single electron transistors. *Physical of Low Dimensional Systems*, 215-222.
- Maksym, P. A., ve Chakraborty, T. (1990). Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions. *Physical Review Letters*, 65, 1.

- Metalidis, G. (1990). *Electronic transport in mesoscopic systems*. Doktora Tezi: ULB Sanchsen-Anhalt.
- Kouwenhoven L. P., van der Marel, D., ve diğer. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, 60, 848.
- Mizel, A., ve Cohen, M. L. (1997). Green's function approach to quantum confinement. *Physical Review B*, 57, 16.
- Nicollian, E.H., ve Brews J.R. (1982). *MOS/metal oxide semiconductor/ physics and technology* (sayfa 920). New York, Wiley-Interscience.
- Parr, R. G. ve Yang, W. (1989). *Density-functional theory of atoms and molecules* (3. Baskı) (47-66). New York: Oxford University Press.
- Robotik Sistem (2013). *MOSFET Nedir ? Çeşitleri, özellikleri nedir ?* . 09 Ekim 2013, <http://robotiksistem.com>.
- Sakurai, J. J. (1967). *Advanced quantum mechanics* (3. Baskı) (45-155). Los Angeles: Wesley.
- Searles, D. J., ve von Nagy-Felsobuki, E.I. (1988). Numerical experiments in quantum physics: Finite element method. *Annals of Physics*, 56, 444-448.
- Seonghoon, J. (2006). *Modeling of Quantum Transport in Nano-Scale MOSFET Devices*. Doktora Tezi: School of Electrical Engineering and Computer Science College of Engineering Seoul National University.
- Shah, A., Torres, P., Tscharnner, R., Wyrsh, N., ve Keppner, H. (1999). Photovoltaic Technology: The case for Thin-Film Solar Cells. *Science*, 285, 5428, 692-698.

- Tanatar, B., ve Ceperley, D. M. (1988). Ground state of the two-dimensional electron gas. *Physical Review B*, 39,8.
- Thouless, D. J. (1981). Localisation and two-dimensional Hall effect. *Journal of Physical Chemistry: Solide State Physics*, 14, 3475-3480.
- Tiago, M. L., de Carvalho, T. O., ve de Aguiar M. A. M. (1996). Boundry integral method for quantum billiards in a constant magnetic field. *Physical Review E*, 55, 1.
- Tongay, S. (2004). *Silicon and carbon based nanowires*. Yüksek Lisans Tezi: Bilkent Üniversitesi.
- Tsuneya, A., Fowler, A. B., ve Stern, F. (1982). Electronic proopties of two-dimensional systems. *Review of Modern Physics*, 54, 2.
- Ueta, T. (1992). Green's functions of a charged particles in magnetic fields. *Journal of Physical Society Japan*, 12, 4314.
- Ungan, F. (2010). *Yoğun lazer alanı altında GaInAs/GaAs kuantum kuyularındaki donör safsızlık atomlarının bağlanma enerjileri*. Yüksek Lisans Tezi: Cumhuriyet Üniversitesi.
- Xiaguang W. (1996). Green's function of a two-dimensional interacting electron gas in a perpendicular magnetic field. *Physical Review B*, 54, 11.
- Yamauchi, T., Takahasi, Y. T., ve Arakawa, Y. (1991). Tight binding analysis for quantum wire lasers and quantum wire infrared detectors. *The Institute of Electrical and Electronics Engineers Journal of Quantum Electron*, 27, 1817-1823.

Yeşilgöl, Ü. (2010). *GaInAs/GaAs kuyularında ekzitonik yapının yoğun lazer alanı yaklaşımı altındaki davranışı*. Yüksek Lisans Tezi: Cumhuriyet Üniversitesi.

Yi, J. C., ve Dagli, N. (1995). Finite element analysis of valance band structure and optical properties of quantum-wire arrays on vicinal substrates. *The Institute of Electrical and Electronics Engineers Journal of Quantum Electron*, 31, 208 - 218.

Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., ve Zhu, J. Z. (2005). *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals* (5. Baskı). İspanya: Planta Tree.