



**T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
İLERİ TEKNOLOJİLER ANABİLİM DALI**

**KUANTUM KUYULARININ FARKLI POTANSİYEL
PROFİLLERİ İÇİN OPTİK VE ELEKTRONİK
ÖZELLİKLERİNİN HESAPLANMASI**

(Yüksek Lisans Tezi)

Terlan ZERBALIYEV

**Danışman
Dr. Öğr. Üyesi Raşit ÇAKIR**

**RİZE
2023**

KABUL VE ONAY

Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, İleri Teknolojiler Anabilim Dalında, Dr. Öğr. Üyesi Raşit ÇAKIR danışmanlığında, Terlan ZERBALİYEV tarafından hazırlanan *Kuantum Kuyularının Farklı Potansiyel Profilleri için Optik ve Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması* adlı bu tez çalışması, 06/06/2023 tarihinde yapılan savunma sınavı sonucunda oy birliği/oy çokluğuyla başarılı bulunarak jürimiz tarafından **Yüksek Lisans Tezi** olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Ünvanı, Adı SOYADI

İmza

Başkan

:

Prof. Dr. Vagif NEVRUZOĞLU

Üye

:

Prof. Dr. Hasan YILDIRIM

Üye

:

Dr. Öğr. Üyesi Raşit ÇAKIR

ETİK BEYAN

İleri Teknolojiler Tezli Yüksek Lisans Programından mezun olmak üzere teslim ettiğim “Kuantum Kuyularını Farklı Potansiyel Profilleri için Optik ve Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması” adlı tezim, bilim ve araştırma etiği prensiplerine riayet edilerek tarafımdan yazılmıştır.

Tez çalışmamda, başka kaynaklardan aktarılan bütün bilgi ve alıntılar, Enstitünüz Tez Yazım Kılavuzuna uygun olarak açıkça gösterilmiştir. Kaynağı gösterilenler dışında kalan bütün bilgiler uygun araştırma yöntemi kullanılarak tarafımdan edinilmiş ve esere bu şekilde yansıtılmıştır. Şahsıma ait olmayan hiçbir bilgi, kasıt veya kusurlar, şahsıma aitmiş gibi gösterilmemiştir. İnternet kaynakları dâhil, sahibine/kaynağına atıf yapılmaksızın hiçbir bilgi kullanılmamıştır. Aksinin ortaya çıkması halinde doğacak bütün hukuki, idari, akademik ve etik sorumluluk tarafıma ait olacaktır. Eserin tesliminden sonra herhangi bir zamanda, bilim etiğine aykırılık tespit edilmesi ve / veya eserimle ilgili intihal veya intihal şeklinde anlaşılabilecek bir durumun ortaya çıkması halinde; Üniversiteniz ve eğitim kadronuzun hiçbir şekilde sorumlu tutulmayacağını hür irademle kabul, beyan ve taahhüt ederim.

06 /06/2023

Terlan ZERBALİYEV

ÖN SÖZ

Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulan bu çalışmada, kuantum kuyularının farklı potansiyel profilleri için optik ve elektronik özellikleri hesaplanmış ve açıklanmıştır.

Son yıllarda üzerinde çalışılan kuantum kuyularının elektriksel ve optik özellikleri teknolojide, sahada ve birçok alanlarda kendini göstermektedir.

Bu çalışmada, kuantum mekaniğinin tarihsel gelişmesi, etkin kütle, iletkenlik ve valans bandı, Schrödinger dalga denklemi ve sonlu farklar yöntemi açıklanmıştır. Sonlu ve sonsuz kare kuyu, harmonik osilatör, Helman, Kratzer-Fues, Pöschl Teller, Razavy, Rosen Morse ve Wood-Saxon potansiyellerinin enerji değerleri ve karşılık gelen dalga fonksiyonları hesaplanmıştır.

Türkiye Cumhuriyeti Devleti'nin sağladığı imkânlar çerçevesinde, Azerbaycan'dan Türkiye'ye gelerek, yüksek lisansımı bu güzel ülkede yapma fırsatı buldum. Bana bu imkânı veren Türkiye Cumhuriyeti Devleti'ne ve bana her adımda yardımcı olan Türk insanına sonsuz şükranlarımı sunmak istiyorum.

Bu çalışma süreci boyunca daima yanımda olan ve benden hiç bir zaman desteğini esirgemeyen değerli danışmanım Dr. Öğr. Üyesi Raşit ÇAKIR'a teşekkür ederim. Ayrıca bana her alanda yardımcı olan bilgi ve tecrübelerini benimle paylaşmaktan çekinmeyen değerli hocalarım Prof. Dr. Eyüp Fahri KESKENLER, Doç. Dr. Ercüment YÜZÜAK, Doç. Dr. Kaan KARAOĞLU ve Prof. Dr. Vagif NEVRUZOĞLU'na çok teşekkür ederim. Bana her zaman inanan ve her daim arkamda duran aileme, babama, amcama ve değerli arkadaşlarıma çok teşekkür ederim.

Terlan ZERBALİYEV

2023/RİZE

İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY	I
ETİK BEYAN.....	II
ÖN SÖZ	III
İÇİNDEKİLER	IV
ÖZET	VI
ABSTRACT.....	VII
KISALTMALAR.....	VIII
TABLolar LİSTESİ.....	X
ŞEKİLLER LİSTESİ	XII
GİRİŞ	1
1. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR VE ÖZELLİKLERİ	5
1.1 Düşük Boyutlu Yapıların Sınıflandırılması	6
1.2 Yarıiletkenler	7
1.2.1 Yarıiletken Malzemelerin Sınıflandırılması.....	9
1.2.2 GaAs Yarıiletken Malzemesinin Özellikleri.....	10
1.2.3 AlGaAs Yarıiletken Malzemesinin Özellikleri.....	12
1.3 Kuantum Sınırlı Yapılar.....	13
1.3.1 Kuantum Kuyular.....	14
1.3.2 Sonlu Kuantum Kuyular	17
1.3.3 Sonsuz Kuantum Kuyular	19
2. SCHRÖDİNGER DENKLEMİ	21
2.1 Schrödinger Dalga Denklemi.....	21
2.2 Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi	24
3. ENERJİ BANT TEORİSİ.....	26
3.1 Elektron Davranışının İki Örneği	26
3.1.1 Serbest Elektron	26
3.1.2 Elektronun Potansiyel Kuyudaki Durumu	28
3.2 İletkenlik ve Valans Bandı.....	29
3.3 Kristalde Elektronun Etkin Kütlesi.....	33
4. SONLU FARKLAR YÖNTEMİ	35

4.1 Ayırıklaştırılmış Schrödinger Denkleminin Matris Çözümü.....	35
5. HESAPLAMALAR	38
5.1 Sonlu Kare Potansiyel.....	38
5.1.1 Teori.....	38
5.1.2 Hesaplama.....	39
5.2 Harmonik Osilatör Potansiyeli.....	42
5.2.1 Teori.....	42
5.2.2 Hesaplama.....	43
5.3 Pöschl-Teller Potansiyeli	45
5.3.1 Teori.....	47
5.3.2 Hesaplama.....	47
5.4 Razavy Potansiyeli.....	50
5.4.1 Teori.....	50
5.4.2 Hesaplama.....	51
5.5 Wood-Saxon Potansiyeli.....	56
5.5.1 Teori.....	57
5.5.2 Hesaplama.....	57
5.6 Rosen – Morse Potansiyeli	60
5.6.1 Teori.....	61
5.6.2 Hesaplama.....	62
5.7 Helman Potansiyeli	66
5.7.1 Teori.....	67
5.7.2 Hesaplama.....	68
5.8 Kratzer – Fues Potansiyeli	72
5.8.1 Teori.....	73
5.8.2 Hesaplama.....	74
5.9 Absorpsiyon Katsayısı	76
6. SONUÇ.....	83
KAYNAKÇA.....	84

Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Ana Bilim Dalı : İleri Teknolojiler
Tez Türü : Yüksek Lisans Tezi
Danışman : Dr. Öğr. Üyesi Raşit ÇAKIR
Hazırlayan : Terlan ZERBALİYEV
Yıl : 2023
Sayfa Sayısı : 105

ÖZET

KUANTUM KUYULARININ FARKLI POTANSİYEL PROFİLLERİ İÇİN OPTİK VE ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN HESAPLANMASI

Bu tez çalışmasında farklı potansiyel profilleri için kuantum kuyularının optik ve elektronik özellikleri hesaplandı. Bundan başka tezde sonlu ve sonsuz kuantum kuyular, Schrödinger denklemi, iletkenlik ve valans bandı gibi konulara değinildi. Bu tezde sonlu kare potansiyeli, harmonik osilatör potansiyeli, Pöschl-Teller potansiyeli, Razavy potansiyeli, Wood-Saxon potansiyeli, Rosen-Morse potansiyeli, Helman potansiyeli ve Kratzer-Fues potansiyeli için kuantum kuyuların optik ve elektronik özellikleri hesaplandı ve açıklandı. Hesaplamalar bilgisayar ortamında Python yazılım programı kullanılarak yapıldı. Hesaplamalarda sonlu farklar yöntemi kullanılarak matris denklemleri elde edildi. Her potansiyel profili için enerji ve dalga fonksiyonlarının grafiği çizildi. Bundan başka hesaplamalarda kuantum kuyusunun bir kaç özellikleri değiştirilerek grafikler karşılaştırıldı ve sonuçlar açıklandı. Bu potansiyel profillerinin kullanım amaçları geniş ve kapsamlı şekilde tez çalışmasında verildi.

Anahtar Kelimeler: Pöschl-Teller potansiyeli, Razavy potansiyeli, Wood-Saxon potansiyeli, Rosen-Morse potansiyeli, Helman potansiyeli, Kratzer-Fues potansiyeli

Recep Tayyip Erdogan University Institute of Graduate Studies

Department : Advanced Technologies

Thesis Type : Master Thesis

Supervisor : Asst. Prof. Dr. Raşit ÇAKIR

Author : Terlan ZERBALIYEV

Year : 2023

Pages : 105

ABSTRACT

CALCULATION OF OPTIC AND ELECTRONIC PROPERTIES OF QUANTUM WELLS FOR DIFFERENT POTENTIAL PROFILES

In this thesis, the electronic and optical properties of quantum wells were calculated for different potential profiles. Moreover, in this thesis, subjects such as finite and infinite quantum wells, Schrodinger equation, conductivity and valance band were mentioned. In this thesis, optical and electronic properties of quantum wells for finite square potential, harmonic oscillator potential, Pöschl-Teller potential, Razavy potential, Wood-Saxon potential, Rosen Morse potential, Helman potential and Kratzer-Fues potential are calculated and explained. Calculations were performed in computer environment by means of Python software program. Matrix equations were obtained by using the finite difference method in the calculations. Graph of different energy and wave functions were plotted for each potential profile. Moreover, in calculations, a few properties of the quantum well were changed and the results were explained. The usage purposes of these potential profiles were given in a wide and comprehensive way in the thesis.

Keywords: Pöschl-Teller potential, Razavy potential, Wood-Saxon potential, Rosen Morse potential, Helman potential and Kratzer-Fues potential

KISALTMALAR

a_i	: Hamilton matrisini oluřturacak deęer
b_i	: Hamilton matrisini oluřturacak deęer
c_i	: Hamilton matrisini oluřturacak deęer
e^-	: Elektron
E	: Paręacıęın toplam enerjisi
E_g	: Yasak band aralıęı
E_f	: Fermi seviyesi
$\vec{k}$	: Paręacıęın dalga vektörü
L	: Kuyu geniřlięi
m	: Paręacıęın kütlesi
m_0	: Serbest elektronun kütlesi
m^*	: Elektronun etkin kütlesi
n	: Enerji seviyesi
$\vec{p}$	: Paręacıęın momentumu
T	: Sıcaklık
t	: Zaman
V	: Potansiyel fonksiyonu
V_0	: Bariyer potansiyeli
ΔV_{CB}	: İletkenlik band oranı
ΔV_{VB}	: Valans band oranı
ΔV	: Potansiyel farkı
ψ	: Paręacıęın dalga fonksiyonu
ω	: Açısal frekans
$\hbar$	: Planck sabiti
∇^2	: Laplasyen operatörü
LPE	: Sıvı Faz Büyütme
CVD	: Kimyasal Buhar Depolama
MBE	: Moleküler Demet Epitaksi
D_r	: Serbestlik Derecesi

D_c	: Sınırlandırma Derecesine
Ga	: Galyum
As	: Arsenik
Al	: Alüminyum
GaAs	: Galyum Arsenit
AlGaAs	: Alüminyum Galyum Arsenit
Si	: Silisyum
InP	: İndiyum Fosfat
GaN	: Galyum Nitrat



TABLÖLAR LİSTESİ

Tablo 1 Dr serbestlik derecesi ve Dc sınırlandırma derecesine göre kuantum materyallerinin sınıflandırılması.....	7
Tablo 2 Periyodik cetvelde yarıiletkenler ile ilgili olan bölüm.....	9
Tablo 3 Sonlu kare potansiyelinin sonlu farklar yöntemi ile hesaplandıktan sonra alınan enerji değerleri	41
Tablo 4 Harmonik osilatör potansiyelinin sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla hesaplanmasından alınan ilk üç enerji seviyelerinin değerleri	44
Tablo 5 Pöschl-Teller potansiyel tipleri	46
Tablo 6 Pöschl-Teller potansiyelinde $k = 1.2, k = 2, k = 3, \eta = 2$ katsayıları ve $L = 100 \text{ Å}$ kuyu genişliği için hesaplanan enerji özdeğerleri	50
Tablo 7 $A = 2, M = 1$ olduğunda Razavy potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri	53
Tablo 8 $A = 2, M = 2$ olduğunda Razavy potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri	54
Tablo 9 $A = 2, M = 3$ olduğunda Razavy potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri	56
Tablo 10 $\gamma = 10 \text{ Å}$ olduğunda Wood-Saxon potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri	59
Tablo 11 $\gamma = 0.1 \text{ Å}$ olduğunda Wood-Saxon potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri	60
Tablo 12 $\eta = 0.015 \text{ Å}, V1 = 75 \text{ meV}$ ve $V2 = 250 \text{ meV}$ olduğunda Rosen Morse potansiyeli için hesaplanan ilk dört enerji özdeğerleri	64
Tablo 13 $\eta = 0.015 \text{ Å}, V1 = 150 \text{ meV}$ ve $V2 = 250 \text{ meV}$ olduğunda Rosen Morse potansiyeli için hesaplanan ilk dört enerji özdeğerleri	64
Tablo 14 $\eta = 0.0075 \text{ Å}, V1 = 75 \text{ meV}$ ve $V2 = 250 \text{ meV}$ olduğunda Rosen Morse potansiyeli için hesaplanan ilk dört enerji özdeğerleri	66
Tablo 15 $\eta = 0.01 \text{ Å} - 1$ ve $V0 = 312 \text{ meV}$ olduğunda Helman potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri	70
Tablo 16 $\eta = 0.03 \text{ Å} - 1$ ve $V0 = 312 \text{ meV}$ olduğunda Helman potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri	70

Tablo 17 $\eta = 0.01\text{\AA}^{-1}$ ve $V_0 = 148\text{ meV}$ olduğunda Helman potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri 71

Tablo 18 $V_0 = 256.258\text{ meV}$, $r_0 = 100\text{ \AA}$ olduğunda Kratzer-Fues potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri 75



ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1 Kuantum nano yapılar.	7
Şekil 2 GaAs bileşiğinin değerlilik bant yapısı.....	11
Şekil 3 GaAs bileşiğinin kristal yapısı	12
Şekil 4 Kuantum Kuyusunun Bant Yapısı.....	15
Şekil 5 Tekli Kuantum Kuyusunun Şematik Gösterimi	16
Şekil 6 Çoklu Kuantum Kuyusunun Şematik Gösterimi.....	16
Şekil 7 Sonlu kare kuantum kuyusunun basit modeli.....	17
Şekil 8 Sonsuz kuantum kuyusunun basit modeli	19
Şekil 9 Serbest bir elektron için E-k değişimi	27
Şekil 10 Kutudaki parçacık modeli	29
Şekil 11 Metalde, Yarı iletken ve yalıtıkta, valans ve iletkenlik bandı	31
Şekil 12 Gerçek uzayda yasak enerji aralığı ve Fermi seviyesi	32
Şekil 13 Yasak enerji aralıklı olan yarı iletken.....	33
Şekil 14 GaAs hesaplamalardan elde edilen bant yapısı.....	34
Şekil 15 GaAs ve AlAs malzemelerinden hazırlanmış sonlu kuantum kuyusunun bant yapısı.....	38
Şekil 16 Hesaplanmış GaAs ve AlAs malzemelerinden yapılmış sonlu kare potansiyel kuyusu.....	40
Şekil 17 GaAs ve AlAs malzemelerinden yapılmış sonlu kare potansiyel kuantum kuyusunun ilk iki enerji seviyelerine karşılık gelen dalga fonksiyonları ve potansiyelinin grafiği	41
Şekil 18 GaAs ve AlAs malzemesinden hazırlanmış harmonik osilatör potansiyelli kuantum kuyusunun ilk üç enerji seviyelerine uygun gelen dalga fonksiyonlarının grafiği.....	45
Şekil 19 $k = 1, 2, 3$ ve $\eta = 2$ değerlerine göre elde edilen Pöschl-Teller potansiyel grafiği	49
Şekil 20 $A = 2$ ve $M = 1$ için dalga fonksiyonunun aslılık grafiği	53
Şekil 21 $A = 2$ ve $M = 2$ için dalga fonksiyonunun aslılık grafiği	54
Şekil 22 $A = 2$ ve $M = 3$ için dalga fonksiyonunun karesinin grafiği	55
Şekil 23 GaAs/AlAs Kuantum kuyusu için Wood-Saxon potansiyelinin grafiği.....	59

Şekil 24 Rosen-Morse kuantum kuyusu ve ilk en düşük dört enerji özdeğerlerinin karesine karşılık gelen dalga fonksiyonlarının grafiği.....	63
Şekil 25 Rosen-Morse kuantum kuyusu ve ilk en düşük dört enerji özdeğerlerinin karesine karşılık gelen dalga fonksiyonlarının aslılık grafiği	65
Şekil 26 <i>GaAs/AlAs</i> kuantum kuyusunun Hellman potansiyeli ile hesaplanmış ilk iki enerji seviyelerinin karesine uygun gelen dalga fonksiyonlarının karesinin grafiği .	69
Şekil 27 <i>GaAs/AlAs</i> kuantum kuyusunun Hellman potansiyeli ile hesaplanmış ilk iki enerji seviyelerinin karesine uygun gelen dalga fonksiyonlarının karesinin grafiği .	70
Şekil 28 Kratzer-Fues kuantum kuyusunun ilk iki enerji özdeğerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarının aslılık grafiği	75
Şekil 29 Sonlu kare kuyu için lineer absorpsiyon katsayısı.	78
Şekil 30 Sonlu parabolik kuyu için lineer absorpsiyon katsayısı	78
Şekil 31 Pöschl-Teller potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı	79
Şekil 32 Razavy potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı.....	79
Şekil 33 Wood-Saxon potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı	80
Şekil 34 Rosen-Morse potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı	81
Şekil 35 Helman potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı	81
Şekil 36 Kratzer-Fues potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı.....	82

GİRİŞ

İnsanoğlu doğduktan ölene kadar yaşam hayatı boyunca her şeyi merak eder. Artık bu merak yirmi birinci yüzyılda daha da ilerlemiş ve malzemelerin artık atomik boyuttaki özelliklerini inceleyebilecek şekle gelmiştir (Aydoğan, 2011). Atomik boyutta olan katı haldeki malzemelerin incelenmesi artık yirmi birinci yüzyılın vazgeçilmezi olmuştur.

Teknolojide üretilen elektronik cihazların temeli diyotlar, transistörler ve mikro işlemcilerden oluşmaktadır (Çelik, 2005). Bu aygıtların temeli ise yarıiletkenlerden oluşmaktadır. Buradan yola çıkarak diyebiliriz ki, yarıiletkenler hayati önem taşımaktadır. Teknolojinin ilerlemesi ile yarıiletkenler de gelişmektedir. Son yıllarda ise teknolojiye söz sahibi olmanın önemli unsurlarından biri de gelişmiş yarıiletken teknolojisine sahip olmaktır.

1947 yılında transistör keşif edildi ve bundan sonra yarıiletken yapılar daha da gelişmeye başladı. 1970 yılında entegre devriminden sonra yarıiletkenler üzerinde yapılan çalışmalar sonucunda, yarıiletken belleklerden video ve güçlü bilgisayarlar hazırlandı (Boz, 2005). Son yıllarda teknolojinin gelişmesi ile alakadar olarak cihazlarda çok küçük yongalar üzerine milyonlarca eleman yerleştirmek mümkündür. 1960 yıllarında artık kristal büyütme teknikleri yavaş yavaş yaranmağa başladı. Moleküler Demet Büyütme, Kimyasal Buhar Depolama ve Sıvı Faz Büyütme yöntemleri vasıtasıyla 10^{-6} (cm) den daha da küçük yapılar yapma olanağı sağlandı (İlaili ve Tokmak, 1990). Yarıiletkenler teknolojinin gelişmesi ile elektronik ve iletişim teknolojisinin temel yapı taşını oluşturmakla beraber, elektrik, elektronik, fotovoltaiik, fotokatalitik ve ince film teknolojisinde önemli rol oynamaktadır.

Yarıiletkenler, iletkenler ile yalıtkanlar arasında yer alırlar. Ancak dış etkilere maruz kaldıklarında ise iletkenlik özelliği kazanabilirler. Normal koşullarda tabiatla basit eleman halinde olurlar. Ancak laboratuvarında ise bileşik halinde olabilirler.

Yarıiletkenler veya yalıtkanlar, küçük ebattaki metaller katıların farklı biçimleridir. Yarıiletken malzemelerin bazı özellikleri katılama işlemleri vasıtasıyla değiştirilebilir. Bu özellikler yarıiletkenin elektriksel, optik veya manyetik özellikleridir. Elektriksel, optik veya manyetik özelliklere sahip olan yarıiletken malzemeler elektronikte çok önemli yere sahiptir (Aydoğan, 2011).

Artık bu özellikler ve araştırmalar sonucunda dünya tarihinde Schrödinger, Heisenberg, Bohr ve Dirac gibi bilim adamları tarafından Kuantum Mekaniği adlı yeni bir bilim felsefesi yaratıldı (Karaoğlu, 2008). Bu bilim felsefesinin yaratılması ile artık normal fizikte olmayan kuantum kuyusu, kuantum teller, kuantum noktacıklar, kuantumlama, sonlu-sonsuz kuantum kuyular, Schrödinger denklemi ve başka anlayışlar ortaya çıktı.

On dokuzuncu yüzyılın sonları yirminci yüzyılın başlarında, tüm fiziksel olayların açıklanmasında Klasik Fizik teorilerinin yeterli olduğu biliniyordu (Karaoğlu, 2008). Newton Yasaları, Maxwell Denklemleri sırasıyla mekanik olayları, elektrik ve optik olayları açıklayabiliyordu. O zamanlarda daha yeni başlamış olan İstatistik Mekanik teorisi de termodinamik olayları açıklayabiliyordu (Karaoğlu, 2008).

Yirminci yüzyılın başlarında klasik fizik teorilerinin mikroskobik sistemlerin incelenmesinde yetersiz kaldığı ortaya çıktı. Yapılmış olan deneysel çalışmalar aynı yıllarda klasik çerçeve ile uyumsuzluk göstermeğe başladılar. Aynı yıllarda mevcut olan teoriler yapılmış olan deneysel gözlemleri açıklamakta yetersiz kalıyordu (Erbil, 1991). Bir kaç yıl süren arayışın sonunda bilim insanları yeni bir fiziğin temelini attılar (Karaoğlu, 2008). Yeni fiziğin bu temellerini Schrödinger, Heisenberg, Bohr ve Dirac gibi bilim adamları attı. Kuantum Mekaniği denilen yeni bir bilim felsefesi yaratıldı. Kuantum Mekaniği adlı yeni bir bilim felsefesi yaratıldıktan sonra klasik fizik kavramlarının çoğu değişmek zorunda kaldı (Aydoğan, 2011). Anlaşılması zor olan kuantumlama, kuantum kuyusu, belirsizlik ilkesi ve olasılık yorumu gibi yeni kavramlar fiziğe girdi.

Kuantum kuyu yapılar düşük boyutlu sistemler olarak adlanır ve bu sistemler vasıtasıyla yeni devre tasarımları yaratılmıştır. Bu sistemler elektronikte ve optoelektronik de genişlikle kullanılmaktadır ve bunun için bu sistemler hakkında geniş bir bilgiye sahip olmak gerekmektedir. Kuantum kuyular iki yarı iletken malzeme arasına yerleştirilmiş ince bir yarı iletken tabakasından oluşmaktadır.

Kuantum kuyuları büyüttüğümüzde kesikli enerji seviyelerine sahip olduğunu görebiliriz ve bu seviyeler arasında optik geçişler mümkündür. Bu geçişler valans bandı içerisinde iletkenlik bandı içerisine olursa bu geçişlere bantlar arası geçiş denir (Çakıcı, 2013). Valans veya iletkenlik bantlarından kendi alt bantlarına geçiş olursa

ise bu geçişlere alt bantlar arası geçişler denir. Son yıllarda kuantum kuyularında olan bant arası geçişler teknolojiye büyük yaygınlıkla kullanılmaktadır.

Günümüzde artık kuantum kuyuların birçok kullanım alanları mevcuttur. Işık yayan ve lazer diyotları gibi birçok optoelektronik cihazlarda kuantum kuyular kullanılmaktadır. Teknolojinin ilerlemesiyle kuantum kuyuların kullanım alanları artmıştır ve bilim insanları tarafından kuantum kuyulardaki alt bantlar arası geçişler, lineer ve lineer olmayan optik özellikleri büyük bir ilgiye neden olmuştur (Aytekin vb, 2012).

Düşük boyutlu sistemler üzerine uygulanan dış alan etkisi kadar mekâna bağlı olarak değişen etkin kütle de önemlidir. Düşük boyutlu yapıların elektronik özelliklerini araştırırken genellikle sabit etkin kütleli yapılara bakılıyor, ancak periyodik olmayan yapılarda ise bu geçerli olmuyor (Kohn, 1957). Bunun nedeni sabit etkin kütle ile hesaplanan katmanlı heteroyapılarda katmanlar arasında yüzeye yakın yerlerde hesaplamaların farklılık göstermesidir (Kasapoğlu vb, 2021). Bu nedenle düşük boyutlu sistemlerde gerçekçi potansiyel profili oluşturmak için konuma bağlı olarak değişen etkin kütle kullanılmalıdır. Böyle sistemlerde konuma bağlı olarak değişen etkin kütle kullanılacaksa Schrödinger denklemi üzerinde bir kaç değişiklikler etmek lazımdır. Dünya genelinde birçok bilim insanları konuma bağlı olarak değişen etkin kütle için Schrödinger denklemini çözmüşlerdir. Herling ve başkaları konuma bağlı olarak değişen etkin kütlenin parabolik kuantum kuyularının optik özellikleri üzerinde olan etkisini incelemiştir (Herling vb, 1992). Yu ve başkaları Morse potansiyelini konuma bağlı etkin kütle vasıtasıyla Schrödinger denklemini çözerek incelemiştir (Yu vb, 2004).

Bu tez çalışmasında da kuantum kuyularına farklı potansiyel profilleri uygulanarak onların optik ve elektronik özellikleri hesaplanmıştır. Kuyular GaAs, AlGaAs ve AlAs malzemelerinden yapılmıştır. Farklı potansiyel profiller için sonlu farklar yönteminden istifade ederek özenerjiler ve özfonksiyonlar hesaplanmıştır. Hesaplamalarda sabit etkin kütle kullanılmıştır. Tüm hesaplamalar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla yapılmıştır. Hesaplama sonuçlarının ve grafiklerin doğruluğu kaynaklar ile karşılaştırılmış ve benzeri sonuçlar elde edilmiştir. Her bir potansiyel profili için başlangıç enerji değerleri ve dalga fonksiyonları bulunmuştur. Bu potansiyel profillerinin nerede kullanıldığına dair

alışmalar aparılmış ve ilgili bölümlere yazılmıştır. Elde edilen tüm grafiklerin açıklamasında ilgili bölümlere yazılmıştır.

Bundan başka bu tez alışmasının birinci bölümünde düşük boyutlu yapılar, onların sınıflandırılması, yarıiletkenler ve onların sınıflandırılması, GaAs ve AlGaAs yarıiletken malzemelerin özellikleri, sonlu ve sonsuz kuantum kuyular hakkında geniş bir bilgi verilmiştir.

Tezin ikinci bölümünde bu hesaplamaların temeli olan Schrödinger dalga denklemi ve zamandan bağımsız Schrödinger denklemi hakkında geniş bir bilgi verilmiştir.

Tezin üçüncü bölümünde elektronların davranış şekilleri, iletkenlik ve valans bandı, kristalde elektronun etkin kütlesi hakkında bilgiler verilmiştir.

Tezin dördüncü bölümünde bu hesaplamaların ana kısmını oluşturan sonlu farklar yöntemi hakkında geniş bir biçimde bilgi verilmiştir. Farklı potansiyel profilleri için olan hesaplamaların hepsi sonlu farklar yöntemine dayanmaktadır.

Tezin beşinci bölümünde ise hesaplamalar kısmı yer almaktadır. Hesaplamalarda sonlu kare potansiyel, harmonik osilatör potansiyeli, Pöschl-Teller potansiyeli, Razavy potansiyeli, Wood-Saxon potansiyeli, Helman potansiyeli, Rosen-Morse potansiyeli, Kratzer-Fues potansiyeli gösterilmiştir. Bu potansiyel profilleri ayrı ayrı başlıklar altında hesaplanmış ve doğru sonuçlar elde edilmiştir. Her bir başlığın altında uygun olarak ilgili bölüm geniş bir şekilde anlatılmış ve nasıl hesaplama yapılmasına dair bilgiler yer almıştır.

Tüm bu hesaplamalar bize kuantum kuyuların ve yarıiletkenlerin hayatımızda ne kadar önemli rol oynadığını bize göstermektedir. Bu kuantum kuyular farklı optoelektronik cihazlarda ve yeni teknolojide sıklıkla kullanılmaktadır ve bilim insanları bu bilgiler üzerinde hayla daha alışmağa devam etmektedir.

Bu tez alışmasında Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Kütüphane ve Dokümantasyon Daire Başkanlığı Merkez Kütüphanesi, Ulusal Tez Merkezinden konuyla ilgili geçmiş yıllarda yayınlanmış olan yüksek lisans ve doktora tezleri, internet üzerinden bir sıra sitelerden ve ders notlarından, konuyla ilgili olan yurtdışı ve yurtiçi makale ve kitaplardan istifade edilmiştir.

1. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR VE ÖZELLİKLERİ

Türleri farklı olan yarıiletkenlerin bir araya getirilmesi sonucunda düşük boyutlu yapılar oluşmaktadır. Kristal büyütme yönteminde yarı iletkenler bir atomik tabaka üzerine başka bir atomik tabaka yerleştirilerek büyütülebilmektedir (Gündoğdu, 2011). Bu yapılar günümüzde nano yapılar olarak da adlandırılır ve yarı iletken malzemelerden üretilmektedir. Bu yapılar farklı bir deyimle serbest halde hareket eden elektronlara bir sınırlama getirmesi ile oluşan yapılardır (Üstün, 2011). “Elektron ve deşiklerin” kolay kontrol edilmesi, bu düşük boyutlu yapıların yarı iletken malzemelerden üretilmesinde en büyük etkenlerden biridir (Çakıcı, 2013). Düşük boyutlu yapıların hem elektronik, hem de optik özellikleri düşük boyut etkileri gösterdiği için son yıllarda bilim insanları tarafından bu yapılar merak ve araştırma konusu olmuştur. Günümüzde farklı kristal büyütme yöntemleri vasıtasıyla bu düşük boyutlu yapılar elde edilebilmektedir.

Sıvı Faz Büyütme (LPE), Kimyasal Buhar Depolama (CVD) ve Moleküler Demet Epitaksi (MBE) yöntemleri vasıtasıyla düşük boyutlu yapılar elde edilebilmektedir (Boz, 2005). Bu kristal büyütme yöntemleri vasıtasıyla boyutu 10^{-6} cm den küçük olan düşük boyutlu yapılar üretilmektedir. Bu yöntemler vasıtasıyla üretilen düşük boyutlu yapıların elektronik ve optik özellikleri halen daha yaygın olarak araştırılmaktadır. Düşük boyutlu yapılar üzerinde ilk çalışma Esaki ve Tusi tarafından gerçekleştirilmiştir (Esaki vb, 1969).

Kristal büyütme tekniklerinden en etkin olanı Moleküler Demet Epitaksidir(MBE). Bu yöntem vasıtasıyla yüksek hassasiyetli yarıiletken malzemeler üretmek mümkündür. Günümüzde diyotlar, görüntü dönüştürücüler, kuantum kuyu ve kuantum noktaları moleküler demet epitaksi yöntemi ile en iyi şekilde üretilmektedir. Bu yöntem vasıtasıyla büyütülen yarı iletken malzemeler içerisinde büyütülme esnasında yaranan kirlilikler en az seviyeye indirilebilmektedir (Boyras, 2021). Çok saf düşük boyutlu yapılar dolayısıyla bu sistem vasıtasıyla oluşturulmaktadır (Kınacı vb, 2013).

Düşük boyutlu yapıların deneysel olarak oluştura bilinmesi için, bu yapılar içerisinde hareket eden taşıyıcıların hareketini sınırlamak lazımdır. Taşıyıcıların hareketinin bu tür sınırlandırılması kuantum kuyular (Quantum Well) (Ungan vb,

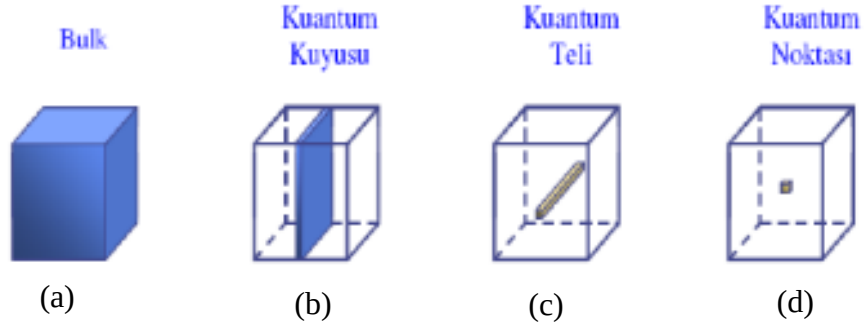
2012), kuantum telleri (Quantum Well Wire) (Harrison vb, 2016)ve kuantum noktaları (Quantum Dots) (Jiang vb, 1999) olarak adlandırılır. Son yıllarda kuantum kuyular, kuantum teller ve kuantum noktacıklar üzerinde birçok arařtırmalar aparılmıřtır (Akbař vb, 1995).

Günümüzde elektronik devre elemanlarının üretilmesi düşük boyutlu yapılar vasıtasıyla mümkündür. Düşük boyutlu yapılar vasıtasıyla bu elektronik devre elemanları üretilbildiđi için bu gün oldukça çok merak edilen arařtırma konusu olmuřtur. Bilgisayarlarda ve haberleřme teknolojisinde kullanılan nanometre boyutunda olan elektronik ve optoelektronik cihazlar düşük boyutlu yarı iletken sistemlerden oluřmaktadır. Bu cihazlar bilgisayar ve haberleřme endüstrisinde kullanılan devrelerin temel yapı tařlarını oluřturmaktadır.

Fiziksel olayların açıklanabilmesi için günümüzde de düşük boyutlu yapılar üzerinde birçok arařtırmalar mevcuttur (Amca vb, 2000).

1.1 Düşük Boyutlu Yapıların Sınıflandırılması

Literatürde düşük boyutlu yapılar hareket halinde olan parçacığın sınırlandırılmasına göre tanımlanırlar (Bekar, 2018). Düşük boyutlu yapılar genellikle sahip oldukları boyut sayısına göre sınıflandırılırlar. Bu sınıflandırmalar boyutsallığa bađlıdır ve ařađıdaki sınıflardan oluřmaktadır (Özer, 2021). Üç boyutlu yapılar (3D): Bu yapılarda parçacık serbest halde olur ve boyut sınıflandırılması gerçekteřmez. İki boyutlu yapılar (2D): Bu yapılar kuantum kuyu yapılar olarak da adlandırılır. Parçacık hareketli diđer iki yönde serbest olur, ancak parçacığın sınırlandırılması bir yönde bař verir ve kuantum kuyular olarak ifade edilir (Adıyaman, 2013). Tek boyutlu yapılar (1D): Bu yapılar kuantum teller olarak adlandırılır. Bu yapılarda kuantum kuyu yapıların aksine sınırlandırmalar iki yönde gerçekteřmektedir diđer iki yönde ise serbest halde dolařım sađlanır (Küçük, 2013). Sıfır boyutlu yapılar (0D): Bu yapılar kuantum nokta yapılar olarak adlandırılır. Kuantum nokta yapılarında olan sınırlandırmalar her üç yönde gerçekteřmektedir ve bu yapılara bazen kuantum kuyu yapılar da deniliyor (Özdemir, 2022). Son yıllarda bu yapılar üzerinde hem teorik hem de deneysel çalıřmalar yapılmaktadır ve bu çalıřmalar oldukça ilgi çekmektedir.



Şekil 1 Kuantum nano yapılar.

Şekil 1 de (a) Bulk yani yığın (3D), (b) Kuantum kuyusu (2D), (c) Kuantum teli (1D), (d) Kuantum noktası (0D).

Şekil 1 de kuantum nano yapılar gösterilmiştir (Sırlı, 2015). Bu yapıların sınıflandırılması tablo halinde Tablo 1 de gösterilmektedir. Tablo 1 de dört temel boyutsal sistem verilmiştir. Bu boyutsal sistemlere göre bulk, kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktasında hapsedilen elektronun serbestlik D_r ve sınırlandırma derecesine D_c göre gruplaştırılması verilmiştir.

Tablo 1 D_r serbestlik derecesi ve D_c sınırlandırma derecesine göre kuantum materyallerinin sınıflandırılması

No:	Sistem	D_r (Serbestlik Derecesi)	D_c (Sınırlama Derecesi)
1	Bulk(Yığın), (3D-üç boyutlu)	3	0
2	Kuantum kuyusu, (2D – iki boyutlu)	2	1
3	Kuantum teli, (1D – tek boyutlu)	1	2
4	Kuantum noktası, (0D – sıfır boyutlu)	0	3

1.2 Yarıiletkenler

Elektriksel iletkenliklerine göre katı halde olan malzemeler yarıiletken, iletken ve yalıtkan olmak üzere üç farklı gruba bölünürler. Her bir katı farklı enerji bant yapısına sahiptir. Bu bant yapısı katıların elektriksel özelliklerini belirlerler. Söz konusu olan yarıiletkenler katıların en önemli sınıflarından biridir ve bu yarıiletkenlerin iletkenlikleri metal ve yalıtkanlar arasında olur. Yarıiletkenler üzerinde ilk çalışmalar 1920. yıllarda başlamıştır ve 1947 yılında Ge transistörünün

icat edilmesi ile birlikte bu çalışma alanları daha da genişlenmeğe başlamıştır (Karakulak, 2010). Bazı zamanlar metaller gibi ve bazı zamanlar ise yalıtkanlar gibi davranabilirler. Bu maddeler sıcaklığın artması ile iletkenlikleri artmakta olan maddelerdir. Bu maddelerin iletkenlikleri katkılama yolu ile de artabilmektedir (Köse, 2009). Yarıiletkenlerin bu özellikleri günümüzde onları çok önemli kılmaktadır. Günümüzün teknolojisinde birçok elektronik devrelerin yapı taşlarını oluşturmaktadır ve harekette olan yüklerin kaynağını oluşturur ve onların denetlenmesini sağlar.

Yarı iletken atomunun etrafında elektronlar vardır ve bu elektronlar kendi yörüngelerinde bir üst limite sahiptirler. Bu üst limitler elektronların yörüngeleri için farklılık gösterebilir. Atomun son yörüngesinde bulunan elektronların sayısı 4 olursa bu o demektir ki, bu atomdan yaranan madde yarıiletken olarak tanımlanır (Özer, 2021).

Elektronların bulunduğu en yüksek enerjili bant değerlilik bandı ve elektronların serbest halde hareket ettiği bant ise iletkenlik bandıdır. Bu bantlar arasında kalan hisse ise yasak enerji bandı adlanır ve bu yasak enerji bandı yarıiletkenlerin birçok özelliklerinin tanımlanmasında önemli rol oynar (Liu vb, 2000).

Yarıiletken malzemenin atomunun etrafında olan elektronlar bir dış etkenin etkisine maruz kaldığında bu elektronlar yüksek enerjiye sahip olur ve valans bandından iletkenlik bandına sıçrama yaparak kendi iletkenliklerini sağlamaktadırlar. Bu dış etkiler ortadan kalkınca ise kendi elektronlar kendi valans bandına dönmektedir.

Si ve Ge yarıiletkenlere en iyi örneklerden biridir. Bu yarıiletkenlere doğal yarıiletkenler denilir ve bu yarıiletkenler üzerinde çalışmalar sonucunda diyotlarda, transistörlerde, bütünleşmiş devre elemanları üretilebilmektedir. Diğer yarıiletkenler ise doğada saf olarak bulunmazlar. Bunlar yapay olarak yüksek teknoloji cihazlar vasıtasıyla üretilebilmektedirler. Bu yarıiletkenler ikili, üçlü ve dörtlü alaşımlar formasında üretilir. İndiyum fosfat (InP) ve galyum arsenik (GaAs), galyum nitrür (GaN) gibi ikili bileşik, GaAsP, InGaN gibi üçlü ve InGaAlAs gibi dörtlü alaşımlar halinde üretilmektedirler (Çetin, 2010). Bu yarıiletkenler foton detektörlerinde, ışık yayan diyotlarda, lazerlerde ve yüksek hızlı transistörlerin elektronik ve optoelektronik cihazların üretimlerinde geniş bir şekilde kullanılmaktadırlar. Genel olarak teknolojiye en çok yarıiletken malzemeler tercih edilmektedir. Bunun en başlıca sebepleri küçük hafif ve verimli olması ile yanı sıra yarıiletkenlerin yüksek elektro-optik özellikleridir (Boylestad vb, 2012).

Yarıiletkenlerin atomları simetrik kristal yapıya sahiptirler. İki tür kristal yapılar mevcuttur. Bunlar monokristal (yarıiletkenlerin doğal olarak elde edilmesinden sonra saflaştırılması) ve polikristal (doğal olarak elde edilen yarıiletkenlerin karmaşık kristal yapıya sahip olması) yapılarıdır. Ge ve Si düşük boyutlu yapıların oluşmasında kullanılan malzemelerdir. Bu malzemelere yabancı atomlar katılarak iletkenliği artırmak mümkündür (Bekar, 2018).

1.2.1 Yarıiletken Malzemelerin Sınıflandırılması

Son yıllarda yarıiletkenler üzerinde aparılan çalışmalar sonucunda yarıiletkenler farklı optoelektronik cihazların ayrılmaz parçası olmuştur. Bu yarıiletken malzemelerin bazıları doğada elementsel olarak bulunur. Diğer yarıiletken malzemeler doğada bulunan elementsel yarıiletken malzemelerin yapay büyütmeye teknikleri vasıtasıyla bileşik haline gelirler. Bu tip yarıiletkenler bileşiklerin elementleri Tablo 2 de verilmiştir (Asar, 2009).

Tablo 2 Periyodik cetvelde yarıiletkenler ile ilgili olan bölüm

Periyot	II Sütun	III Sütun	IV Sütun	V Sütun	VI Sütun
2	--	B	C	N	O
3	Mg	Al	Si	P	S
4	Zn	Ga	Ge	As	Se
5	Cd	İn	Sn	Sb	Te
6	Hg	--	Pb	--	--

Yarıiletkenler genel olarak üç ana başlık altında gruplandırılır.

Elementsel yarıiletkenler: Bu tip yarıiletkenler doğada saf halde bulunmaktadır ve Ge, Si gibi aynı element atomlarından oluşmaktadır. Burada atomlar bir birine kovalent bağlar vasıtasıyla bağlanmaktadır (Öztürk, 2018).

Bileşik yarıiletkenler: Doğada bulunmayan yarıiletkenlerdir ve GaAs, AlAs, InAs, InP ve GaN gibi iki elementlerin birleşmesinden ortaya çıkıyor. Bu yarıiletkenler kristal bağlanma, kovalent bağlanma ve iyonik bağlanmanın bir birleşmesidir. Bu birleşme elektronegatiflikteki farklılıklardan dolayı ortaya çıkıyor. GaAs yarıiletken malzemesinin optik ve elektronik özellikleri insanlar tarafından iyi anlaşıldığı için optoelektronik uygulama tekniklerinde sıklıkla kullanılmaktadır (Yu vb, 1996).

Alaşım yarıiletkenler: Bu tip yarıiletkenlerde bileşiğe üçüncü bir element katılır. $Al_xGa_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}N$ bileşikleri bunlara örnektir. Bu alaşımlardaki x ilgili elementin alaşımdaki mol miktarını gösterir. Üçlü alaşımlarla

birlikte drtl alařımlarda elde etmek mmkndr. $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$, $Ga_xAl_{1-x}As_yP_{1-y}$ gibi alařımlar elde etmek mmkndr. l alařımlarda olduęu gibi burada da x ve y ilgili elementin alařımdaki mol miktarını gsterir (Schroder, 2006).

Bileřik ve alařım yarıiletkenleri retebilmek iin ok sayıda teknik geliřmiřtir. Bu tekniklerin en bařlıca olanları, Kimyasal Buhar Birikimi (CVD), Metal Organik Kimyasal Buhar Birikimi (MOCVD) ve Molekler Demet Epitaksi (MBE) teknikleridir. Bu teknikler vasıtasıyla periyodik tabloda olan III-V, II-VI ve IV-VI gruplarındaki elementler kendilerine uygun olan bileřimler ile alıřma amacına ynelik yarıiletken kristal yapılar retmek mmkndr.

1.2.2 GaAs Yarıiletken Malzemesinin zellikleri

GaAs malzemesinde ilk olarak Ga elementinin zelliklerine bakalım. Ga elementi kimyasal bir elementtir ve periyodik tablonun III A gurubunda yer almaktadır. Ga kimyasal elementinin son yrngesinde 3 elektron yer almaktadır, ekirdek yk 31, nkleon sayısı 69.723 dr (Eskiye, 2019).

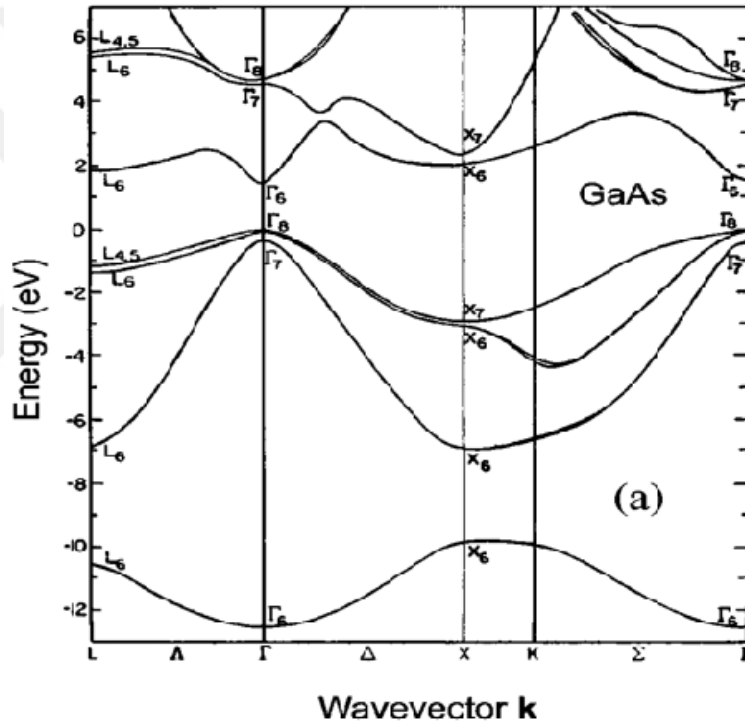
Sınıflandırılmada Ga kimyasal elementi metal olarak sınıflandırılır. Ancak periyodik tabloda metal olmayan kimyasal elementlere daha yakın durur. Ga kimyasal elementi gmřs, cam benzeri, yumřak bir metaldir ve oęu metalik zellikleri metal kimyasal elementlerinin zellikleri ile aynı deęildir. Ga kimyasal elementini lazerler, teleskoplarda uzay aralarında kullanılan geniř kullanım alanlarına sahip olan bir elementtir (Yazıcı vb, 2021).

Arsenik elementi As olarak iřaret edilir. Atom numarası 33, atom aęırlıęı 74,92159, atom yarıapı 139 pm 'dir. As kimyasal elementini 876 K de kaynamaęa bařlıyor ve kaydadıęında sarımsak kokusu veriyor. As kimyasal malzemesi doęada  farklı formada bulunur. Gri arsenik, sarı arsenik ve siyah arsenik olarak  formada bulunur. Gri As en yaygın olarak bulunan arsenik formasıdır, sarı arsenik metalik parlaklıęa sahip deęildir, siyah arsenik ise bir ka ařamadan geerek elde edilebilir (Karaca, 2018). As kimyasal elementi elektronik sanayide ve zararlı hařeratları yok etmekte geniř bir řekilde kullanılmaktadır.

Ga ve As arasındaki baęlanma tam olarak kovalent baę deyildir. GaAs bileřięindeki elementler farklı olduęundan dolayı elektron daęılımı simetrik deęildir.

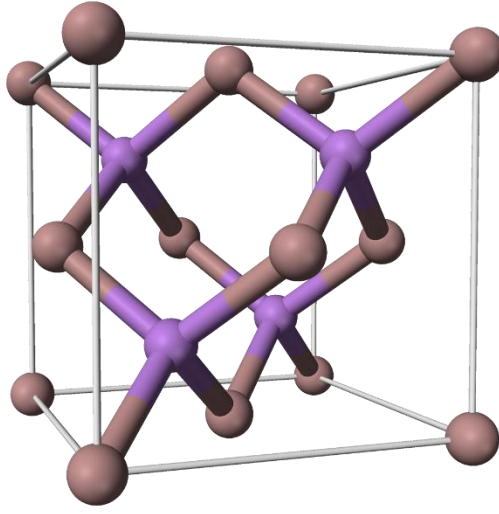
Simetrik olmadığından dolayı bileşikteki atomların birinde elektrik yükü fazlalığı bulunur ve bu yüzden bileşikteki bağ “Heteropolar” olarak adlanır. GaAs bileşiminde As kimyasal elementinin daha büyük bir negatifliği vardır, Ga kimyasal elementinin ise pozitif bir elektrik yük fazlalığı vardır (Dikici, 1984).

Aşağıda Şekil 2 de GaAs in değerlilik bant yapısı gösterilmiştir (Aydoğan, 2011). Bu bant yapısına baktığımızda $k = 0$ noktasına denk gelen bantların bir biri ile çakıştığını görmek mümkündür. Bu çakışma bantlar arası dejenerasyondan dolayı baş verir. Bu iki banda dikkatle baktığımızda üsteki bandın etkin kütlelerinin, alttaki bandın etkin kütlelerinden daha büyük olduğunu görmekteyiz. Bunun sebebi etkin kütlelerin bant eğrilikleri ile ters orantılı olmasıdır.



Şekil 2 GaAs bileşiminin değerlilik bant yapısı

GaAs bileşiminin kristal yapısı Çinko Sülfür kristal yapısıdır. Çinko Sülfürün kristal yapısının elmas kristal yapısından farkı çinko sülfürde baz atomlarından birinin farklı bir atom olmasıdır. Şekil 3 de GaAs bileşiminin kristal yapısı gösterilmiştir (Çetin, 2010).



Şekil 3 GaAs bileşiğinin kristal yapısı

GaAs bileşiğinin bir çok teknolojik uygulama alanları vardır. Sıcaklık ölçme, basınç ölçme, ışık şiddetini ölçme gibi birçok alanlarda kullanılmaktadır (Kızılkaya, 2012). Sıcaklığın arması ile GaAs malzemesinin iletkenliği artır ve sıcaklık ölçüm cihazlarında sıcaklığa duyarlı aletlerin yapılmasında geniş bir şekilde kullanılmaktadır. Kovalent bağların düşük olması sonucunda basınç olduğu zaman atomlar bir birine yaklaşır. Bu da GaAs malzemesinin basında duyarlı cihazların temel yapısında kullanılmasına izin verir. Günümüzde ışık fotonlarının enerjisi ile GaAs yarıiletken malzemesinin elektronları uyarılabilir. Bunun sonucunda da ışık şiddeti devrede akacak olan foton miktarına bağlıdır.

1.2.3 AlGaAs Yarıiletken Malzemesinin Özellikleri

Al doğada az bulunmasından dolayı günümüzde en önemli elementlerden biridir. Al elementinin son yörüngesinde 3 tane değerlilik elektronu vardır ve atom numarası 13 dür. Al elementi normal metallerden üç kat daha hafiftir ve yer yüzünde hafif metallerden biridir. Alüminyum elementi oldukça esnek yapıya sahiptir ve aşınmalara karşı dirençlilik gösterir. Çoğu metaller ile birleşerek alaşımlar meydana getirir ve elektrik geçirgenliği daha güçlüdür. Günümüzde çok geniş bir kullanım alanlarına sahiptir. Bilgisayarlar, cep telefonları, elektronik eşyalardan füzelere kadar çok geniş ve yaygın kullanım alanına sahiptir (Yeşiltay, 2018).

Üçlü veya dörtlü alaşımlar elde etmek için iki veya daha fazla bileşik bir araya getirilmelidir. Vegard yasası vasıtasıyla bu alaşımların örgü sabitlerini bulmak mümkündür. Bu yasaya göre ana malzemenin örgü sabitlerinin birbirine doğrusal şekilde eklenmesi ile sonuç olan alaşımların örgü sabiti bulunur (Kınacı, 2009).

Düzgün bir alaşım oluşturmak istediğimizde elektronegatifliği ve atom yarıçapı birbirine benzer yarıiletkenler kullanılmazsa, alaşımda örgü uyumsuzluğu sorunu ortaya çıkar ve odacıklı yapıların oluşmasına neden olur. Elektronegatifliği ve atom yarıçapı birbirine benzer yarıiletkenler kullanıldığında ise homojen tabakalı yapılar ortaya çıkar ve düzgün bir alaşım oluşmuş olur (Kınacı, 2009). AlGaAs alaşımlarının sonsuz olarak büyütülebilmemesinin nedeni GaAs ve AlAs'ın örgü sabitlerinin birbirine çok uyumlu olması ve çinko sülfür yapıda birim hücresinin olmasıdır.

Kristal büyütme işlemlerinde en önemli noktalardan biri de alaşımları oluşturan yarıiletkenlerin örgü sabitlerinin birbirine yakın olmasıdır. Bazen kristal büyütme işlemlerinde yanlış yerleşmelerin (dislokasyonlar) meydana gelmesinin sebebi, farklı örgü sabitlerine sahip olan yarıiletken tabakaların büyütülmesidir (Singleton, 2009).

Kristal büyütme işleminde gerilmenin olmasının sebebi, büyütülen yarıiletken tabakanın örgü sabitinin onun alt tabakasının örgü sabitinden küçük olmasıdır. Böyle bir durumda kristal tabakada aşağıya doğru daralma başlar buda kristalde gerilmeye neden olur. Bu işlemin aksi olduğu halde ise kristalde yukarıya doğru daralma başlar. Bu işleme ise sıkışma denilir (Başak, 2009).

1.3 Kuantum Sınırlı Yapılar

Katıların ebadına her zaman bağlı olarak katıların optik özellikleri bazen çok küçük yapılarda farklılık gösterebilir (Fox, 2001). Örneğin, yakut kristalinin ebadı ne kadar büyük veya ne kadar küçük olursa olsun yine de kırmızı renktedir. Ama yarı iletken katkılı camlarda bu farklıdır. Yarı iletken mikro kristaller vasıtasıyla renksiz camın rengini değiştirebiliriz.

Tablo 1 de kuantum sınırlamalı yapıların özet olarak adları verilmiştir (Fox, 2001). Bu adların sıralaması elektronların hangi boyutta hapsedilmesine bağlıdır. Bu hapsedilme boyutları bir, iki ve üç boyutludur.

Tablo 1 de kuantum sınırlamalarının serbestlik dereceleri de gösterilmiştir. Külçe yarı iletkeninde elektronlar ve holler kendi bantları içerisinde hareket ederler

(Pehlivanoğlu, 2009). Bunun içinde serbestlik derecesinin sayısı üçtür. Aynı şekilde kuantum kuyularda bir doğrultuda hapsedildiği için iki tane serbestlik derecesine sahiptirler ve iki boyutlu malzemedirler. Kuantum noktacıktaki ise sıfır boyutlu fiziğe sahiptir (Pehlivanoğlu, 2009). Kuantum teller ise bir boyutlu fiziğe sahiptirler.

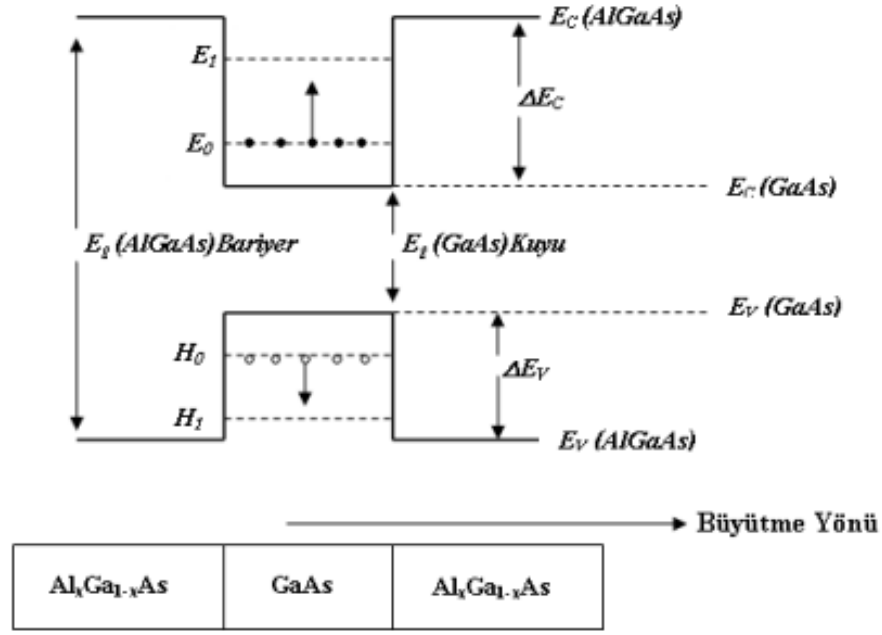
Bu sınırlamaları elde etmek için çok küçük kristal boyutları bazı özel teknikler vasıtasıyla elde etmek gerekir (Fox, 2001).

- Kuantum kuyu yapıları epitaksiyel kristal büyütme tekniği ile elde edilir (Karakulak, 2010).
- Kuantum kuyu yapıların örnek altık üzerine epitaksiyel büyütülmesi ile kuantum tel yapıları elde edilir.
- Kuantum nokta yapıları ise kendiliğinden büyüme tekniği ile yapılır (Pehlivanoğlu, 2009).

1.3.1 Kuantum Kuyular

Kuantum kuyular Esaki ve Tusi tarafından 1970 yılında ilk defa elde edilmiştir (Fox, 2001). Optik özelliklere sahip oldukları için kuantum kuyular optoelektronik çalışmalarda kullanılır (Başer vb, 2014).

Küçük yasak bant aralığına sahip yarıiletkenlerin büyük bant aralığına sahip yarıiletkenlerin arasına yerleştirilmesi yolu ile elde edilen yapılara kuantum kuyu yapıları denilir (Adıyaman, 2013).



Şekil 4 Kuantum Kuyusunun Bant Yapısı

Şekil 4 e baktığımızda kuantum kuyu yapısının elektronların bir yönde hapis edip (z-doğrultusu), diğer iki yönde (x-y doğrultusu) ise serbest hareketini sağladığını görebiliriz (Conny vb, 2006). Enerji seviyelerinin farklı değerler almasının ve elektronların büyüme yönü boyunca kuantize olmasının sebebi kuantum kuyusunun çok küçük olmasıdır (Razeghi, 2002). Kızılötesi fotodetektör yapısı kuantum kuyusu kullanılarak elde edilen en temel devrelerden biridir (Nag, 2001).

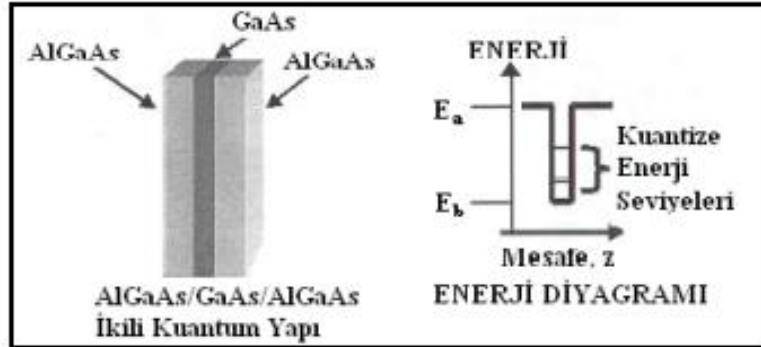
Kuantum kuyusunun kalınlığı $5 - 20 \text{ nm} = 5 - 20 \cdot 10^{-9} \text{ m}$ civarındadır (Fox, 2001). Bulk büyüklüğünün 1 cm civarında olduğunu düşünelim. Bu ince yapıdan dolayı kuantum etkileri görülür.

Kuantum kuyuları genel olarak GaAs malzemesinden yapılır. Kuantum kuyusunun sınırları yani bariyerleri ise $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ malzemesinden yapılır. Burada x mol miktarıdır. Buradaki alüminyum miktarını potansiyel duvarı belirler. $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ malzemesinde Al konsantrasyonu aynı ise simetrik, farklı ise asimetrik kuyu oluşur (Harrison vb, 2016).

Kuantum kuyular yapısına göre iki yere bölünür.

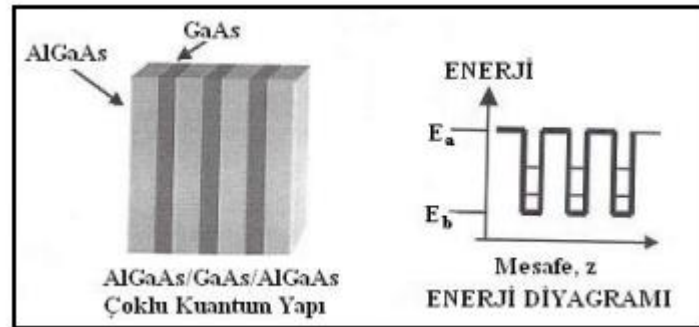
Tekli kuantum kuyu yapısı ikili, üçlü ve dörtlü yarıiletken malzemelerin bir tabaka üzerinde ultra ince çoklu epitaksiyel büyüme yöntemi ile elde edilir (Denizli, 2006). Bunlara misal olarak, InP/GaAs , $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$, Si/Ge tekli kuantum kuyu

örnekleri verilebilir. Şekil 5 de tekli kuantum kuyusunun şematik gösterimi verilmiştir (Asar, 2009).



Şekil 5 Tekli Kuantum Kuyusunun Şematik Gösterimi

Çoklu kuantum kuyu yapısı – yarıiletken tabakaların bir birinin üzerine büyütüldüğü yapılardır. Geniş bant aralığına sahip olan yarıiletkenler, kuantum kuyusu içerisindeki elektronlarla iletişim sağlayan bir bariyer rolünü oynar. Çoklu kuantum kuyusunun şematik gösterimi Şekil 6 da verilmiştir (Asar, 2009).



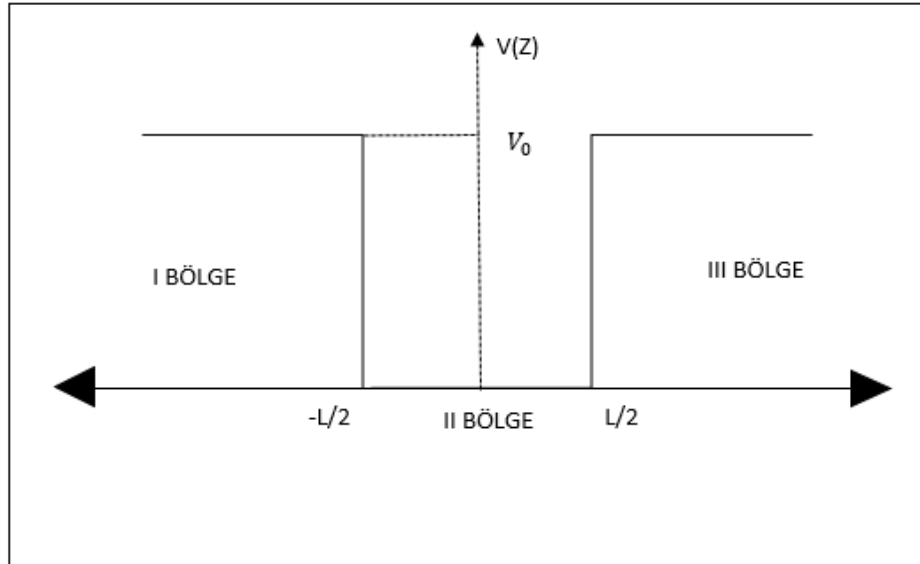
Şekil 6 Çoklu Kuantum Kuyusunun Şematik Gösterimi

Kuantum kuyular, kuantum teller ve kuantum noktacıklar düşük boyutlu sistemler olarak adlanır. Bu sistemler üzerinde son yıllarda deneysel çalışmalar sonucunda, bu sistemler son yıllarda teknolojiye büyük bir dikkat çekmektedir. Bu malzemelerde malzemenin geometrisi, parametreleri ve uygulandığı dış alan doğru seçilirse, bu malzemelerin elektronik ve optik özellikleri deney amacına göre ayarlanabilir ve optoelektronik cihazlarda yeni uygulama olarak kullanılabilir (Kasapoğlu vb, 2021). Son yıllarda bu yapılar, elektrik, manyetik ve yoğun lazer alanları altında araştırılmış ve halen daha araştırılmaktadır. Bu kapsamlı araştırmalar

sonucunda yukarıda bahsedilen her hangi bir düşük boyutlu sistemin potansiyelinin hesaplanıp incelenmesinin amacı, onun elektronik özelliklerini en iyi şekilde incelemek ve optoelektronik cihazlarda kullanmaktır (Restrepo vb, 2018). Farklı potansiyellere sahip kuantum kuyularda malzeme büyütme teknikleri son yıllarda gelişmeler sayesinde simetrik veya asimetrik, tek veya çift, çoklu kuantum kuyular kapsamlı bir şekilde araştırılmıştır. Son yıllarda daha geniş bir şekilde araştırılmış ve kullanışlı bir geometriğe ve tipik özelliklere sahip olan kuantum kuyular, elektronik ve optik özelliklerin hesaplanması sonucunda elde edilmiştir. Bu kuantum kuyular atomlar arası etkileşim ve potansiyel fonksiyonları kullanılarak elde edilmiştir (Tietz, 1963).

1.3.2 Sonlu Kuantum Kuyular

Elektronlar sonlu kuantum kuyular içerisine hapis edildiklerinde kesikli enerji seviyelerine sahip olurlar. Şekil 7 de sonlu kuantum kuyusunun basit olarak modeli verilmiştir (Boz, 2005). Burada L sonlu kuantum kuyusunun genişliği, V ise sonlu kuantum kuyusunun bariyer yüksekliğidir. Şekil 7 de gösterilen sonlu kuantum kuyusunda üç bölge mevcuttur. Her bölge için Schrödinger denklemi ve ona bağlı olan $\sin$ ve $\cos$ çözümleri verilmiştir.



Şekil 7 Sonlu kare kuantum kuyusunun basit modeli

Bu üç bölge için Schrödinger denklemlerini yazalım (Harrison vb, 2016).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V\psi(z) = E\psi(z) \quad z \leq -\frac{L}{2} \quad (1.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = E\psi(z) \quad -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \quad (1.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V\psi(z) = E\psi(z) \quad z \geq \frac{L}{2} \quad (1.3)$$

I Bölge için çözüm (Kıtay, 2012):

$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2} \psi(z)$ veya $\frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = k^2 \psi(z)$ bu şekilde yazılır. Burada k pozitif bir sayıdır ve aşağıdaki gibi yazılır.

$$k = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} \quad (1.4)$$

Bu bölge için genel çözüm ise aşağıdaki gibi yazılır.

$$\psi(z) = A\exp(-kz) + B\exp(kz) \quad (1.5)$$

II Bölge için çözüm (Kıtay, 2012):

$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(z)$ veya $\frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = -k^2 \psi(z)$ bu şekilde yazılır. Burada k pozitif bir sayıdır ve aşağıdaki gibi yazılır.

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (1.6)$$

Bu bölge için genel çözüm ise aşağıdaki gibi yazılır.

$$\psi(z) = A\cos(kz) + B\sin(kz) \quad (1.7)$$

III Bölge için çözüm (Kıtay, 2012):

$$\psi(z) = A\exp(-kz) + B\exp(kz) \quad (1.8)$$

Denklem (1.8) III bölgenin çözümüdür. Bu bölge için genel çözüm ise aşağıda verilmiştir.

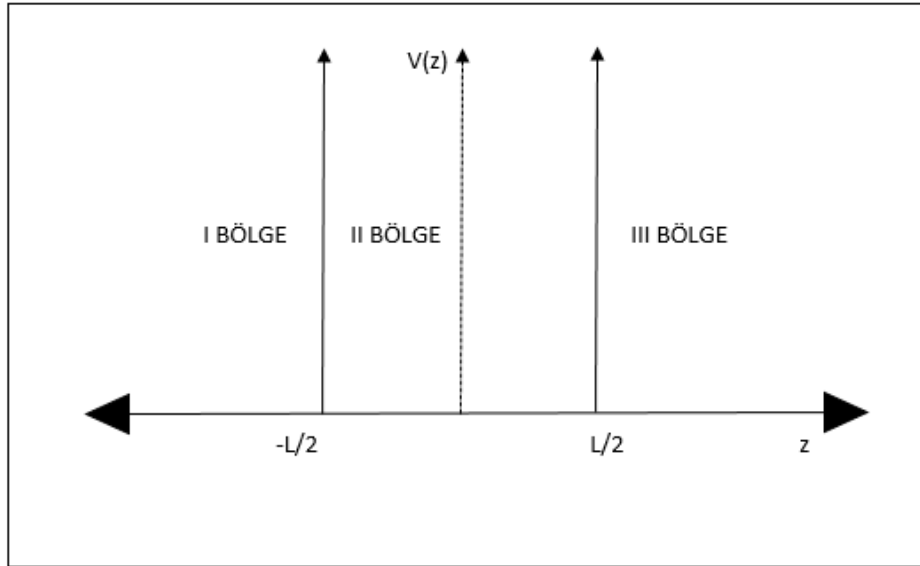
$$\psi(z) = B\exp(kz) \quad (1.9)$$

Bu bölgelerin çözümlerini ve genel çözümlerini bulduktan sonra bölgeler için dalga fonksiyonlarının çözümleri aşağıdaki gibi olacaktır.

$$\psi(z) = \begin{cases} B \exp(kz) & z \leq -\frac{L}{2} \\ A \cos(kz) & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ B \exp(-kz) & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (1.10)$$

1.3.3 Sonsuz Kuantum Kuyular

Kuantum kuyular iki karşılıklı duvar vasıtasıyla elektronun hareketini sınırlar ve üç boyuttan iki boyuta düşürülmesi ile oluşur. Kuyu içerisinde sınırlanmadan dolayı bu elektron enerji değerine sahip olur (Kaya, 2008). Şekil 8 de sonsuz kuantum kuyusunun basit modeli verilmiştir (Boz, 2005).



Şekil 8 Sonsuz kuantum kuyusunun basit modeli

Şekil 8 den de görüldüğü gibi I ve III bölgelerde potansiyel sonsuzdur. Potansiyel bu bölgelerde sonsuz olduğu için elektronların bu bölgelerde bulunma olasılığı sıfırdır. Elektronlar yalnız II bölgede hapsedilmiştir (Karaoğlu, 1994).

Sonsuz kuantum kuyusunun tüm bölgelerinde Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (1.11)$$

II bölgede potansiyel sonsuz olduğu için $V(z) = 0$ olacaktır ve (1.11) denklemi aşağıdaki hale gelecektir.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = E\psi(z) \quad (1.12)$$

(1.12) denkleminde $k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar}}$ kullanarsak dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi olur.

$$\psi(z) = A\cos k_z z + B\sin k_z z \quad (1.13)$$

(1.13) denkleminde sınır koşulları uygulanırsa dalga fonksiyonlarının çözümleri aşağıdaki gibi olur.

$$\psi(z) = \begin{cases} A\cos \frac{k_z L}{2} + B\sin \frac{k_z L}{2} & z = L/2 \\ A\cos \frac{k_z L}{2} - B\sin \frac{k_z L}{2} & z = -L/2 \end{cases} \quad (1.14)$$

2. SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Bir parçacığın durumu klasik mekanikte, x koordinatı ve p momentumu ile belirlenir. Bir parçacığın zaman içinde durumunun nasıl geliştiği Newton'un 2. Yasası $\vec{F} = m\vec{a}$ ile belirlenir (Ortakaya, 2011). Bu denklem hareket denklemidir. Yani, $t = 0$ anındaki momentum ve konum biliniyorsa bu diferansiyel denklemin çözümü bize t zaman anındaki konum ve momentumu verecektir.

Kuantum Mekaniğinin bir kaç postulatı vardır (Karaoğlu, 2008). Bunlardan birincisi: Bir parçacığın $\psi(\vec{r}, t)$ dalga fonksiyonu ile parçacığın t zaman anındaki durumunu belirtmek mümkündür.

Kuantum mekaniğinde böyle bir denklemin aşağıda belirtilmiş özelliklere sahip olması gerekmektedir (Karaoğlu, 2008):

- Verilmiş olan t zaman anına göre yeni yaratılacak olan denklem birinci dereceden diferansiyel denklem olmalıdır.
- Ψ fonksiyonunun lineer ve homojen bir diferansiyel denklemi olan bu denklem, bazı özelliklere sahip olmalıdır. Bu özelliklerden biri de dalgaların süperpozisyon özelliğidir.
- Yaratılacak olan bu denklem bir sıra yasalara uymalıdır. Bu yasalardan biri de enerji korunumu yasasıdır.

Bu koşullar vasıtasıyla Schrödinger dalga denklemi kolaylıkla kurulabilir. Deneysel çalışmalar sonucunda bu koşullara cevap veren başka denklemlerde bulunabilirdi. Ancak deneysel verilerin alınmasında Schrödinger denklemi doğru olduğu için aradan 60 küsur yıl geçmesine rağmen başka denklemler bulunamamıştır (Karaoğlu, 2008).

2.1 Schrödinger Dalga Denklemi

Tek boyutlu bir x -uzayı düşünelim. Bu x -uzayında parçacık götürelim. Bu parçacığın kütlesi m ve momentumu p olsun.

Bu parçacık serbest halde olursa, yani bu parçacık bir potansiyel içinde değilse bu parçacığın toplam enerjisi aşağıdaki gibi yazılır (Karaoğlu, 2008):

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (2.1)$$

Bu denklemde E -kinetik enerji, p -parçacığın momentumu, m -parçacığın kütlesidir. Bu parçacık dalga sayısı k ve açısal frekansı ω cinsinden yazılırsa enerjisi ve momentumu aşağıdaki gibi olur (Ortakaya, 2011):

$$p = \hbar k \quad (2.2)$$

$$E = \hbar \omega \quad (2.3)$$

Dalga paketleri Fourier açılımı vasıtasıyla düzlem dalgalar cinsinden yazılabilir (Dereli, 1988). Bu açılımda enerji ve momentum kullanılabilir. Bu Fourier açılımı aşağıdaki gibi olur:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{\frac{i(px-Et)}{\hbar}} dp \quad (2.4)$$

(2.4) denkleminin zamana göre 1. ve konuma göre 2. türevini alalım:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-i}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} E \phi(p) e^{\frac{i(px-Et)}{\hbar}} dp \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{-1}{2\pi\hbar^3} \int_{-\infty}^{\infty} p^2 \phi(p) e^{\frac{i(px-Et)}{\hbar}} dp \quad (2.6)$$

(2.5) ve (2.6) denklemleri birbiri ile karşılaştırıldığında, her bir düzlem dalga için (2.1) ifadesinin doğru olduğu görülür. Bunun için her bir denklem uygun katsayılarla çarpıldığına bir kısmi diferansiyel denklem ortaya çıkar (Karaoğlu, 2008).

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (2.7)$$

(2.7) denklemine kısmi diferansiyel Schrödinger serbest parçacık denklemi deniliyor (Ortakaya, 2011). (2.1) bağlantısını sağlayabilmek için enerji ve momentum operatörleri aşağıdaki gibi yazılır. Schrödinger dalga denklemi (2.1) ifadesinin kuantumsal yazılımıdır (Karaoğlu, 2008).

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.8)$$

$$\frac{p^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (2.9)$$

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.10)$$

(2.11) ifadesinde sabit V potansiyeli içinde hareket eden parçacığın enerjisi verilmiştir:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (2.11)$$

(2.11) denkleminde (2.2) ve (2.3) ifadelerini eklersek denklem aşağıdaki şekli alır (Ortakaya, 2011):

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \quad (2.12)$$

Eşitlik ortaya çıkması için (2.12) ifadesinde kısmi türevleri yazalım. Alınan (2.13) denklemi genişletilebilir:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi(\vec{r}, t) \quad (2.13)$$

Momentum vektörüne $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ karşılık gelen dalga sayısı vektörü $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ olursa üç boyutlu uzayda dalga paketi aşağıda gösterildiği şekilde olur (Karaoğlu, 2008):

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi^3} \int \phi(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3 k \quad (2.14)$$

Üç boyutlu uzayda Schrödinger denklemi almak için üç tane türev alınıp toplanmalıdır (Karaoğlu, 2008). Sonuçta aşağıdaki ifade elde edilecektir.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi(\vec{r}, t) \quad (2.15)$$

Sabit bir V potansiyelinin olduğunu ele alarak dalga fonksiyonunun zamana ve konuma göre kısmi türevlerini aldık. Konuma bağlı olan $V = (r)$ potansiyeli için Schrödinger dalga denklemini yazdık. Schrödinger denklemi vasıtasıyla $\psi(\vec{r}, t)$ dalga fonksiyonunda zamana göre belirlemek mümkündür (Karaoğlu, 2008):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) \quad (2.16)$$

(2.16) Schrödinger denkleminde $\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right)$ ifadesi Laplasyen operatörü adlanır (Ortakaya, 2011):

$$\nabla^2 = \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) \quad (2.17)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \quad (2.18)$$

(2.18) denklemi Hamiltonyen operatörüdür (Denizli, 2006). Bu operatör toplam E enerjisinin diferansiyel şeklidir. Schrödinger denklemi hamiltonyen operatörü ile yazılırsa aşağıdaki şekli alır (Adıyaman, 2013):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (2.19)$$

(2.19) denkleminin çözümü sistem hakkındaki bilgileri içeren $\psi(\vec{r}, t)$ fonksiyonudur.

2.2 Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

Birçok fiziksel sistemlerde t zamanından bağımsız olan $V(\vec{r})$ potansiyelli Schrödinger denkleminin çözümü değişkenlere ayırma yöntemidir (Karaoğlu, 2008). Zamandan bağımsız olan Schrödinger denkleminin yazılışı aşağıdaki gibidir (Adıyaman, 2013).

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) \quad (2.20)$$

$$\psi(\vec{r}, t) = f(t)\psi(\vec{r}) \quad (2.21)$$

(2.21) ifadesine değişken ayırma yöntemi deniliyor. Bu yöntemde t ve $\vec{r}$ ye bağlı çözümler vardır:

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{df}{dt} \psi(\vec{r}) \quad (2.22)$$

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = f \nabla^2 \psi(\vec{r}) \quad (2.23)$$

(2.22) ve (2.23) ifadelerini Schrödinger denkleminde yerine koyup, denklemin her iki tarafını (2.21) ifadesine bölsek aşağıdaki gibi ifade alınır:

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) \right] \quad (2.24)$$

(2.24) ifadesinin sol tarafı t değişkenine, sağ tarafı $(\vec{r})$ değişkenine bağlıdır. Bu eşitliliği sağlamanın tek yolu, hem sol hem de sağ tarafın aynı sabite eşit olmasıdır. Bu sabite ise E sabiti deniliyor:

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = E \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{\psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) \right] = E \quad (2.26)$$

Her iki denklemin (2.25) ve (2.26) çözümlerine bakalım. Bu denklemlerin çözümleri sırası ile aşağıdaki gibi verilmiştir:

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (2.27)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.28)$$

(2.28) denkleminin çözümü için $V(\vec{r})$ potansiyelinin verilmiş olması gerekir. (2.28) denklemin zamandan bağımsız Schrödinger denklemi deniliyor (Adıyaman, 2013). Bu denklemin çözümü $\psi(\vec{r})$ bulunursa, aşağıdaki gibi olur (Karaoğlu, 2008):

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\vec{r}) \quad (2.29)$$

E sabiti bir enerji boyutuna sahiptir ve kompleks değerler alamaz. Eğer kompleks değer alırsa $E = E_r + iE_i$ şeklinde olur. Bu şekilde yazılırsa kompleks çözümdeki üstel faktör $t \rightarrow \pm$ değerlerinin birinde sonsuz olacaktır ve bu dalga fonksiyonu gibi kabul edilemez (Karaoğlu, 2008).

Olasılık yoğunluğu ifadesinde (2.29) ifadesini kullanırsak aşağıdaki gibi sonuç alınır:

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) = e^{+\frac{iEt}{\hbar}} \psi^*(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 \quad (2.30)$$

(2.30) sonucundan görüldüğü gibi olasılık dağılımı zamandan bağımsızdır (Karaoğlu, 2008). Buradan elde edilen sonuca göre, elde edilen tüm değerler ve sistemin fiziksel özellikleri zamandan bağımsız olup zamana göre değişmeyecektir yani kararlı olacaktır.

3. ENERJİ BANT TEORİSİ

3.1 Elektron Davranışının İki Örneği

Elektronlar farklı malzemeler içerisinde farklı tarzda hareket veya tepki gösterebilirler. Yani elektronlar serbest halde, atomda veya kristalde farklı hareket ve tepki gösterebilirler (Aydoğan, 2011).

İlk olarak elektronun basit modelde hareketini öğrenip daha sonra elektronun atomda veya kristalde hareketini öğrenmek lazımdır. Yani bir yarı iletken kristalinde elektronların hareketini öğrenmeden önce, elektronların serbest veya kutu şeklindeki potansiyel kuyusundaki durumunu öğrenmek lazımdır.

3.1.1 Serbest Elektron

Elektron ismi Yunancadan türetilmiştir ve İngiliz fizikçisi Stoney tarafından ilk defa 1894 yılında kullanılmıştır (Hermann vb, 2000). Elektronlar bir sıra yollar ile üretilmektedir. Serbest elektron adı verilen bu elektronlar gaz boşalmalarından katot ışınları olarak üretilmiştir. Bu üretilme atom fiziğinin ilk zamanlarında olan üretilmelerdendir. Daha sonra ise gelişmeler sonucunda serbest elektronlar kablolardan termoiyonik salma kullanımıyla elde edilmiştir. Serbest elektronların bu tür elde edilmesi günümüzde de kullanılmaktadır. Bu tür serbest elektronların elde edilmesinin en başlıca avantajlarından biri onların kolaylıkla odaklanabilme ve ivmelendirilebilmesidir (Hermann vb, 2000).

Atom çekimine maruz kalmayan, çevresi ile etkileşmeyen ve sabit bir potansiyel içinde hareket eden elektron serbest elektron olarak adlandırılır (Kıtay, 2012). Zamandan bağımsız olan ve sabit V potansiyeli için bir boyutlu kristale göre Schrödinger denklemi yazılabilir. İlk olarak üç boyuttaki denklem için Schrödinger denklemi yazıp daha sonra tek boyuta indirgeyelim (Durlu vb, 1992):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + [V(x, y, z) - E] \psi(x, y, z) = 0 \quad (3.1)$$

Burada m etkin kütle, E (sabit) elektronun enerjisidir.

Zamandan bağımsız olan ve sabit V potansiyeli için yazılmış Schrödinger denkleminde potansiyel sıfıra eşitlenebilir (Alhamade, 2012). (3.1) denklemi aşağıdaki gibi yazılır:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (3.2)$$

$$\psi(x) = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx) \quad (3.3)$$

(3.3) denklemi, (3.2) denkleminin çözümüdür. (3.3) ifadesinde olan e^{ikx} +x yönünde hareket eden elektronu, e^{-ikx} ise $-x$ yönünde hareket eden elektronu tanımlar (Aydoğan, 2011). Bu denklemlerde olan k ve E aşağıdaki ifadeler ile bulunur:

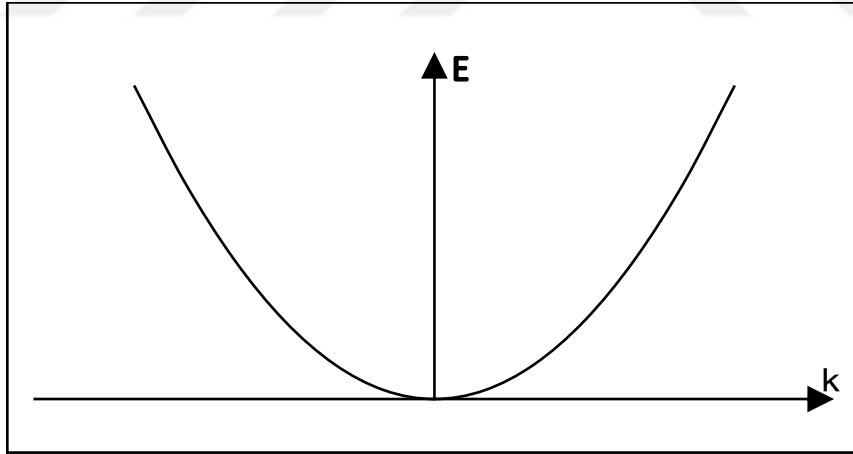
$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ ve } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.4)$$

Burada k ters uzaya ait vektördür. Ancak bir boyutlu uzayda da skaler sayı gibi uygulanabilir.

(3.3) ifadesinde elektronların +x yönünde hareket ettiğini ele alarak $\psi(x) = C_1 \exp(ikx)$ ifadesini dalga fonksiyonuna uygularsak aşağıdaki ifadeyi almış oluruz (Aydoğan, 2011):

$$p_x \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx} = C_1 \hbar k e^{ikx} = \hbar k \psi(x) \quad (3.5)$$

(3.5) ifadesinden çıkan sonuca göre k sayısının içinde $\hbar$ çarpımının bulunduğu bir momentuma eşit olduğunu görebiliriz.



Şekil 9 Serbest bir elektron için E-k değişimi

Serbest elektronun enerjisi, çıkan sonuçlar göre, Şekil 9 da görüldüğü gibi parabolik fonksiyondur. Bu grafikte, aynı enerji seviyelerine sahip elektronlar k ve $-k$ momentumuna sahip elektronlardır. Bu elektronlar aynı momentum değerlerine sahiptir. Ancak zıt yönlerde hareket ederler.

k aslında uzaysal vektör olarak adlanır. Ancak k değerini dalga vektörü olarakda adlandırmak mümkündür. Üç boyuttaki düzlem dalga hareketini aslında $\exp(jkr)$ terimi temsil eder. Buradan çıkan sonuca göre uzaysal dalga boyu $\lambda = \frac{2\pi}{|k|}$ şöyle yazılır.

3.1.2 Elektronun Potansiyel Kuyudaki Durumu

İncelenmiş olan serbest elektrondan sonra bir potansiyel içindeki elektron parçacığını inceleyelim.

Şekil 10 da görüldüğü gibi, sonsuz bir potansiyel kuyuda bir elektron parçacığı düşünelim (Aydoğan, 2011). Elektronun sonsuz potansiyel kuyudaki durumu, pozitif yüklü çekirdeğin elektronu çekme kuvveti gibi elektronu tuzaklayan sonsuz potansiyel kuyusundaki elektronun durumuna benzer (Aydoğan, 2011).

Elektron kuyunun içerisinde hapsedilir ve sınır şartları $\psi(x \leq 0) = \psi(x \geq a) = 0$ bu şekilde olur. Burada $0 \leq x \leq a$ ve $V = 0$ şartı vardır. Kuyu içerisinde zamandan bağımsız Schrödinger denklemi aşağıdaki şekilde yazılabilir (Alhamade, 2012).

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \text{ ve } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (3.6)$$

İkinci dereceden diferansiyel denklemin çözümü aşağıdaki gibi olur (Adıyaman, 2013):

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (3.7)$$

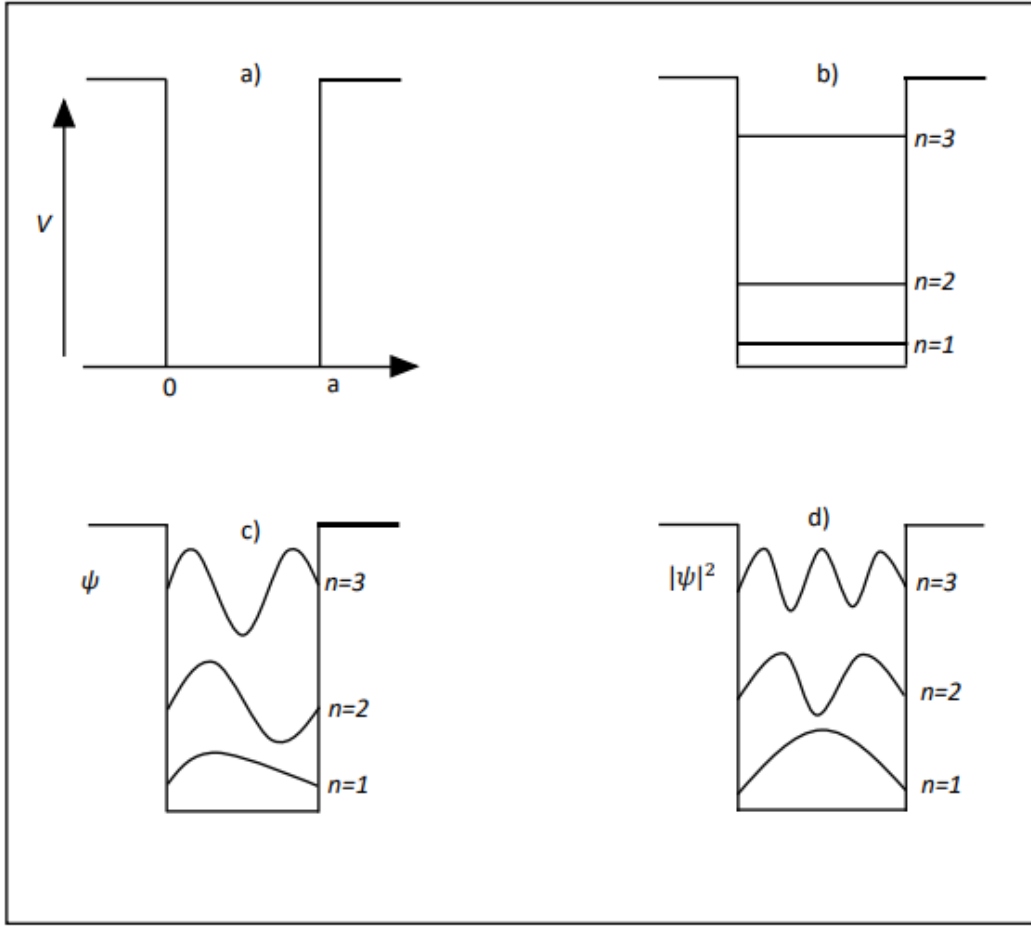
$\psi(x = 0) = 0$ oldukça bu şart ilk sınır şartı adlanıyor ve burada $B = 0$ olur. $\psi(x = a) = 0$ oldukça bu şart ikinci sınır şartı olarak adlandırılır ve burada $A \sin(ka) = 0$ olur. Buradan çıkan sonuca göre k aşağıdaki ifadeye eşit olur.

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (3.8)$$

(3.8) ifadesine göre dalga fonksiyonu ψ ve elektronun enerjisi E aşağıdaki ifadelerle eşit olur:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (3.9)$$

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (3.10)$$



Şekil 10 Kutudaki parçacık modeli

Şekil 10 *a* – Potansiyel kuyunun geometrisi, *b* – Enerji seviyeleri, *c* – Dalga fonksiyonları, *d* – Olasılık yoğunluklarını gösterir (Aydoğan, 2011).

Kutu içindeki elektronun durumu serbest halde olan elektronun durumu ile benzemektedir, her iki sonuçta da enerji momentumun karesinin bir fonksiyonudur (Gezci, 1992). k ve E serbest elektron durumunda istenilen değer alabiliyordu. Ancak kutudaki parçacık modelinde E ve k ayrık değerler alır. Potansiyel kuyunun genişliği ne kadar büyük olursa ($a \rightarrow \infty$), k ayrık değerleri birbirlerine o kadar yaklaşır.

3.2 İletkenlik ve Valans Bandı

Atomlar kimyasal reaksiyonlara atomların en dış kabuğundaki elektronlar vasıtasıyla girerler. Atom çekirdeğine yakın olan elektronlar ise atom çekirdeğinde olan elektrostatik çekim kuvvetinden dolayı kimyasal reaksiyonlara girmezler.

Kristallerdeki atomlar da birbiri ile atomların en dış kabuğundaki elektronlar vasıtasıyla elektriksel iletim olayına geçerler (Aydoğan, 2011). Atomlar arasındaki bağı oluşturmaktan sorunlu bulunan elektronlar en son bantta bulunurlar ve en yüksek enerji seviyesine sahiptirler. En düşük bantlar atom çekirdeğine bağlı olan $1s^2$ elektronları gibi iç enerji içerirler.

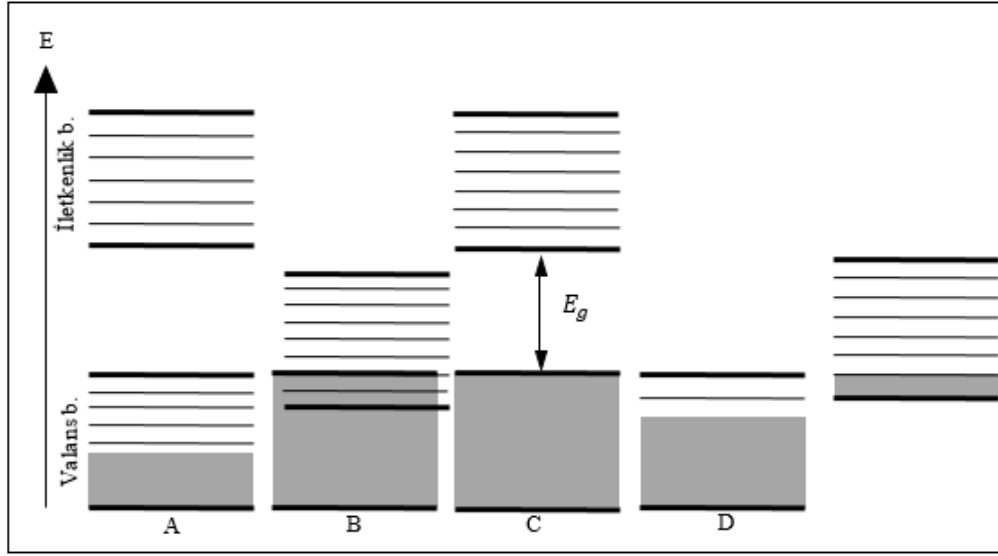
En yüksek bantlar ise elektron içermezler. Elektron içeren en son bant ise Valans bandı adlanır ve bu bant atomlar arası kovalent bağ oluşturan elektronlar içerir (Mckelvey, 1996).

Valans bandının hemen üzerinde yer alan bant ise İletkenlik bandıdır. Düşük sıcaklıklarda yarı iletkenlerde bu bant boştur ve düşük sıcaklıklarda elektron içermezler (Mckelvey, 1996).

Sıcaklık arttıkça valans bandındaki olan elektronlar atom çekirdeği ile bağı kopartacak kadar enerjiye sahip olurlar ve iletkenlik bandında serbest hareket etmek için iletkenlik bandına atlarlar (Kuru, 2010). İletkenlik bandı ile valans bandı arasındaki enerji farkı yasak aralığı veya bant aralığı olarak adlandırılır ve E_g ile gösterilir (Aydoğan, 2011).

Atomların periyodik tablodaki yerine göre Şekil 11 de gösterildiği gibi durumlar oluşabilir (Aydoğan, 2011).

- A: Düşük sıcaklıklarda ($T = 0$) valans bandı kısmen elektronlarla doludur.
- B: Düşük sıcaklıklarda ($T = 0$) valans bandı tamamen elektronlarla doludur. Amma görüldüğü gibi bir sonraki enerji bandı valans bandının üzeri ile çakışmaktadır. Yani yasak bant aralığı ($E_g < 0$) sıfırdan küçüktür.
- C: Valans bandı tamamen elektronlarla doludur ve iletkenlik bandı ile çakışan elektronlar yoktur. Yani yasak bant aralığı ($E_g > 0$) sıfırdan büyüktür.
- D: Valans bandında elektronlar hemen hemen yoktur. İletkenlik bandı bir az elektronlarla doludur.



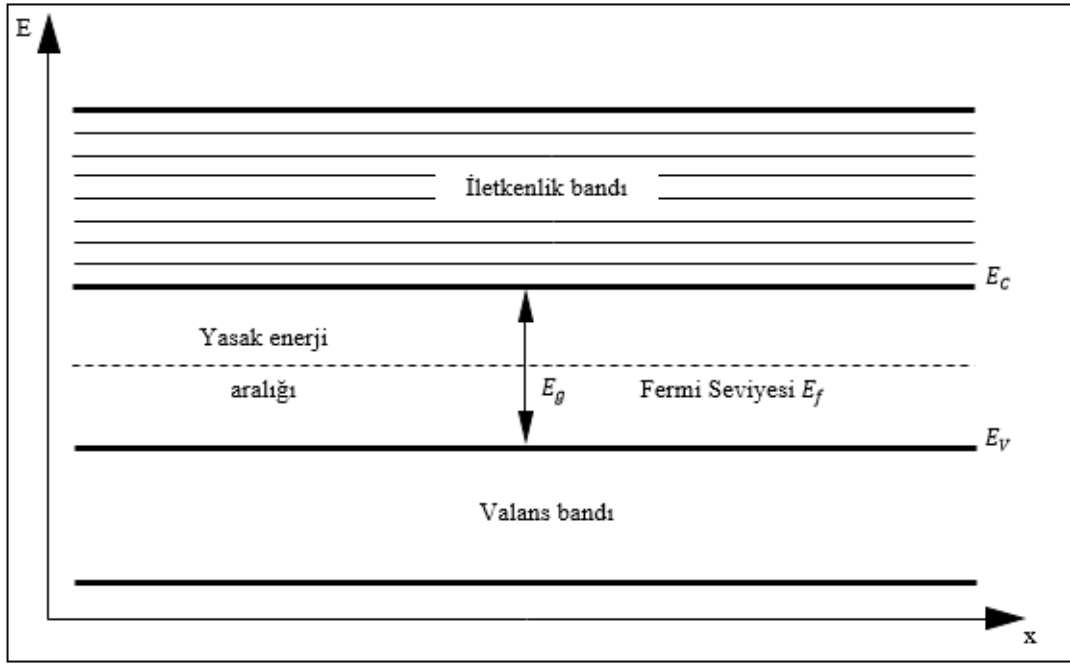
Şekil 11 Metalde, Yarı iletkende veya yalıtıkanda, valans ve iletkenlik bandı

Şekil 11 de görüldüğü gibi A ve B durumlarında en yüksek enerji seviyeli elektron küçük bir enerji alarak hemen atomu terk edebilir ve kristalde hareket edebilir (Aydoğan, 2011). Bu malzemelere metaller denir. C durumunda ise valans bandındaki elektronun iletkenlik bandına geçmesi için enerjinin bir kısmı iletkenlik bandına geçen elektrona verilmelidir. Bu malzemeler ise yarı iletken veya yalıtkanlardır. D durumunda bantlardan biri dolu iken diğeri boş olur. İletkenlik bandının dibi valans bandının tepesinin bir az aşağısındadır. Bu tür malzemelere yarımetaldir (Aydoğan, 2011).

Yalıtkan ve yarı iletken arasındaki fark enerji bant aralığı E_g miktarıdır (Kuru, 2010). Yarı iletkende E_g , 2 eV dan daha küçüktür. Oda sıcaklığında, elektronun ışıık fotonları ile uyarılması, elektronlara valans bandından iletkenlik bandına geçmek için yeterli enerji verir. Genel olarak bazı yarı iletkenlerin yasak enerji aralıkları; Galyum arsenik 1.42 eV, germanyum 0.67 eV, silisyum 1.12 eV dir (Aydoğan, 2011). Yalıtkanlar yarı iletkenlerden daha büyük yasak enerji bant aralığına sahip oldukları için oda sıcaklığında elektronların iletkenlik bandına çıkması mümkün değildir.

Gerçek uzayda iletkenlik bandı, valans bandı ve yasak enerji seviyelerini gösterelim. Şekil 12 de x – kristalde fiziksel bir mesafe, E_v valans bandının maksimum enerji seviyesi, E_c iletkenlik bandının minimum enerji seviyesidir

(Aydoğan, 2011). Şekil 12 de yasak enerji bandı aralığında Fermi seviyesini E_f görüyoruz. Fermi seviyesi düşük sıcaklıkta ($T = 0$) elektronun maksimum enerjisidir.

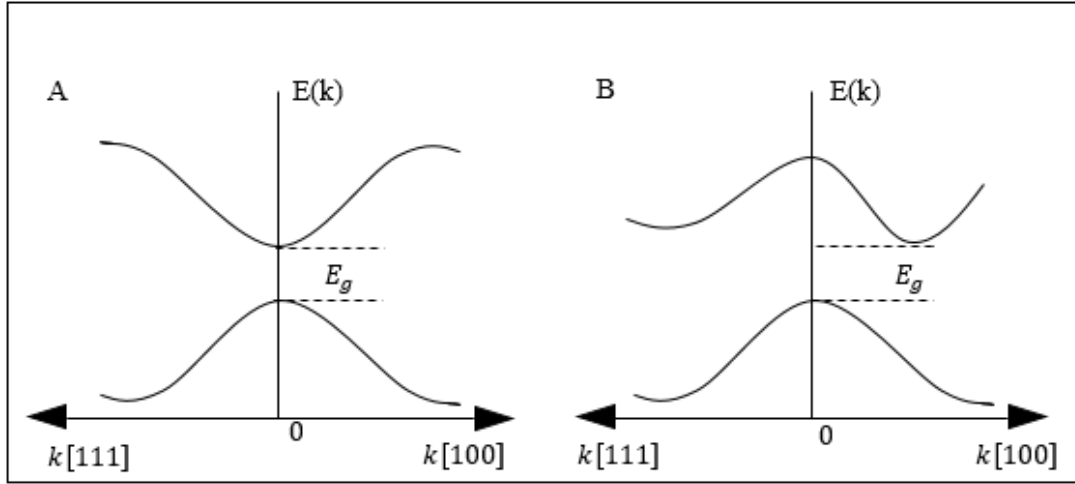


Şekil 12 Gerçek uzayda yasak enerji aralığı ve Fermi seviyesi

Bu sıcaklığa baktığımızda fermi seviyesinin altında kalan valans bandının tamamen elektronlarla dolu, fermi seviyesinin üzerindeki iletkenlik bandının ise tamamen elektronlarla boş olduğunu görürüz. Fermi seviyesi yasak enerji bandında olmasına bakmayarak elektronlarla dolu olması ihtimaliyeti %50 dir (Alhamade, 2012).

Şekil 13 de enerji bant diyagramları verilmiştir. Bu diyagramlar bize yarı iletkenlerin bazı özelliklerini söyleme imkânı sağlar (Aydoğan, 2011). Şekil 13 A da minimum enerjiye sahip olan iletkenlik bandı ve maksimum enerjiye sahip olan valans bandı aynı k değerine sahiptir. Bu tür yarıiletkenlere direkt yasak enerji aralıklı yarı iletken denilir (Aydoğan, 2011). Bu türün özellikleri daha çok GaAs ile bileşik oluşturan yapıları kapsar. Bu türde elektronlar momentumu bozmadan valans bandından iletkenlik bandına geçebilirler. Şekil 13 B de ise görüldüğü gibi iletkenlik bandının minimumu ile valans bandının maksimumu bir fark oluşturuyor (Aydoğan, 2011). Bu fark k değerleri ile ölçülüyor. Bu tür yarı iletkenler direkt olmayan yasak

enerji aralıklı yarı iletkenlerdir (Aydoğan, 2011). Bu tür yarı iletkenlerde momentum farkı olmadan elektron valans bandından iletkenlik bandına geçiş yapamaz.



Şekil 13 Yasak enerji aralıklı olan yarı iletken

3.3 Kristalde Elektronun Etkin Kütlesi

Önceki bölümlerden çıkan sonuca göre katılarda olan elektronun kütlesi ile serbest halde olan elektronun kütlesinin aynı olduğunu kabul ettik. Ancak deneysel veriler sonucunda katılarda olan elektronun kütlesinin serbest halde olan elektronun kütlesinden farklı olduğu görülür.

Deneysel verilerin sonucunda katılarda olan elektronun kütlesine etkin kütle denilir ve m^* ile gösterilir (Alhamade, 2012). Serbest halde olan elektronun kütlesi ise m_0 ile gösterilir. m^* in m_0 den farkı $\frac{m^*}{m_0}$ oranından bulunabilir (Alhamade, 2012). Bu fark bazen birden büyük ve bazen de birden küçük olabilir. Birden büyük olmasının sebebi bir kristalde hızlandırılan elektron atomlarla çarpışması ve bu çarpışma sonucunda da elektronun yavaşlamasıdır. Birden küçük olmasının sebebi ise başka bir kristalde olan elektron dalgası bu kristalde elektrik alanının tepkisini artırmak için aynı fazda olmasıdır (Durlu, 1992).

Bir elektronun kütlesi $m = F/a$ ile bulunur. Bu eşitlikte a elektronun ivmesidir. Bir kristalde olan elektrona ise her hangi bir dış kuvvet uygulanırsa buradaki elektron ona farklı tepki gösterecektir. Her zaman serbest halde olan elektronun kütlesi kristalde olan elektronun kütlesinden farklı olacaktır (Aydoğan, 2011):

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow m = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} \quad (3.11)$$

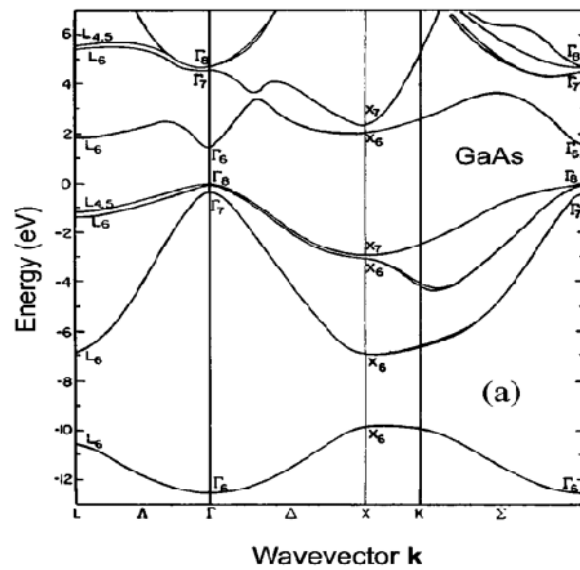
(3.11) denkleminde elektronun etkin kütlesini tanımladık. Bu denklemin sağ tarafındaki terimleri kullanarak enerji bandı içerisindeki elektronun etkin kütlesi aşağıdaki gibi yazılır:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} \quad (3.12)$$

Bu denklemden görüldüğü gibi bir kristalde olan elektronun etkin kütlesi serbest halde olan elektronun etkin kütlesi gibi sabit değildir. k ve E değerlerine bağlıdır. Sonuca baktığımızda kütle farklı enerji bantlarında farklı değerler aldığını görebiliriz.

- 1) Elektron enerji bandının üst yarısında yer alırsa etkin kütle negatiftir.
- 2) Elektron enerji bandının alt yarısında yer alırsa etkin kütle pozitifdir.
- 3) Elektron bir enerji bandının ortasına yakın bir yerde yer alırsa etkin kütle sonsuz olma eğilimindedir. Çünkü başlangıçta $k = 0$ da olan elektron bir elektrik alanında hızlandırıldıkça kütlesi gittikçe artar ve $k = \frac{\pi}{2a}$ da sonsuz olur (Aydoğan, 2011).

Kristallerdeki enerji bantlarının birbirinden oldukça farklı, karmaşık oluşunu ve farklı karakteristik özellikler sergilediklerini biliyoruz. Şekil 14 de Galyum Arseniğin hesaplamalar sonucunda elde edilen enerji bant yapısı gösterilmiştir (Aydoğan, 2011).



Şekil 14 GaAs hesaplamalardan elde edilen bant yapısı

4. SONLU FARKLAR YÖNTEMİ

Karşıma çıkan diferansiyel denklemlerin ana problemlerinden biri de onların çözümleridir. Bu diferansiyel denklemler her zaman elle çözüle bilmemektedir. Kuantum mekaniğinde de Schrödinger denkleminin her zaman analitik çözümü yoktur. Böyle durumlarda analitik çözüm yerine numerik çözümlere başvurulur. Bu numerik metotlardan en başlıcası Sonlu Farklar Yöntemidir (Karaoğlu, 1996).

4.1 Ayırıklaştırılmış Schrödinger Denkleminin Matris Çözümü

Schrödinger denkleminin her zaman analitik çözümü yoktur. Bunun yerine sayısal çözümler kullanılmaktadır. Kuantum kuyu yapılarının incelenmesinde ve hesaplama kısmında pek çok sayısal çözümler kullanılmaktadır. Bu tez çalışmasında ise sonlu farklar yöntemine dayanan hesaplar üzerinde durulacaktır. Schrödinger denkleminde fark denklemlerini kullanarak bu denklemi matris formuna dönüştüreceğiz.

Aşağıda ikinci dereceden türev fark denklemi olarak yazılmıştır (Çelik, 2018):

$$\frac{d^2 f}{dz^2} \approx \frac{f(z + 2\Delta z) - 2f(z) + f(z - 2\Delta z)}{(2\Delta z)^2} \quad (4.1)$$

(4.1) denkleminde $d^2 f/dz^2$ olduğundan $2\Delta z \rightarrow \Delta z$ dönüşümü yapılabilir ve ayırıklaştırılmış Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi olur:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \Psi}{dz^2} + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (4.2)$$

(4.2) denkleminde $z = 10^{-10} z'$, $E = 10^{-3} |e| E'$, $V = 10^{-3} |e| V'$, $m^* = mm_0$ dir. Bu eşitlikleri (4.2) denkleminde yerine koyup hesapladık da aşağıdaki ifade alınır:

$$-\frac{\hbar^2 10^{23}}{2mm_e |e|} \left(\frac{d^2 \Psi}{dz^2} \right) + V' \Psi = E' \Psi \quad (4.3)$$

(4.3) ifadesinde $(\hbar^2 10^{23})/(2m_e |e|) = C$ dir. (4.3) denklemini Δz ve C ile yazarsak aşağıdaki ifadeyi buluruz:

$$-\frac{C}{m(\Delta z)^2} (\Psi(z - \Delta z) - 2\Psi(z) + \Psi(z + \Delta z)) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (4.4)$$

(4.4) denkleminde $z_{min} < z < z_{max}$ değerleri Δz ile artarak ayırık değerler almaktadır (Harrison vb, 2016). Bunların yerine $i = 0,1,2,3 \dots N$ olarak indis kullanıldığında $z_0, z_1 \dots z_{N-1}, z_N$ ve bunlara karşılık gelen ayırık değerler

$\Psi_0, \Psi_1 \dots \Psi_{N-1}, \Psi_N$ gibi olur. Bu ayrık değerler ve indisleri Schrödinger denkleminde yerine koysak aşağıdaki ifade alınır:

$$-\frac{C}{m(\Delta z)^2} \Psi_{i-1} + \left(\frac{2C}{m(\Delta z)^2} + V_i \right) \Psi_i - \frac{C}{m(\Delta z)^2} \Psi_{i+1} = E \Psi_i \quad (4.5)$$

(4.5) ifadesini a_i, b_i ve c_i şeklinde yazarsak (4.6) ifadesini almış oluruz (Harrison vb, 2016):

$$a_i \Psi_{i-1} + b_i \Psi_i + c_i \Psi_{i+1} = E \Psi_i \quad (4.6)$$

(4.6) ifadesinden çıkan sonuçlara göre aşağıdaki eşitlikler alınmaktadır:

$$a_i = -\frac{C}{m(\Delta z)^2} = -\frac{\hbar^2 10^{23}}{2m_0 |e| m(\Delta z)^2} = c_i \quad (4.7)$$

(4.7) ifadesinde a_i ve c_i sabittir ve i -ye bağlı değildir:

$$b_i = \frac{2C}{m(\Delta z)^2} + \Psi_i = -2a_i + \Psi_i \quad (4.8)$$

(4.8) ifadesinde olan b_i değeri Ψ_i ile değişen değerdir.

(4.7) ve (4.8) ifadeleri kullanılarak bu denklemler bir matris denklemi olarak yazılabilir (Harrison vb, 2016):

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_i & b_i & c_i & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_i \\ \vdots \\ \Psi_{N-1} \\ \Psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_i \\ \vdots \\ \Psi_{N-1} \\ \Psi_N \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

Matrisin diyagonal ve diyagonalın sağ ve sol tarafındaki ifadeler sıfırdan farklıdır. Matriste diğer ifadeler ise sıfırdır. Sistemin tüm özdeğerlerini konumlandırmak için doğrudan çözülebilir bir matris özdeğer problemi vardır. Bu matris bir özdeğer matrisidir. $N \times N$ ölçüde olan kare matrisin özdeğerleri E_n enerjisi ile ve her enerji değerlerine karşılık gelen Ψ_n öz fonksiyonları ile verilir.

Burada en düşük enerjileri yani $E_n < V_0$ bağlı çözümlerdir ve bu enerjiler kuyunun içerisindeki bağlı durumlar içindir.

(4.9) matrisinde $a_{i+1} = c_i$ olduğundan ve 3 ana köşegeni boyunca sıfırdan farklı terimler içerdiğinden bu matris simmetrik matris sayılır (Harrison vb, 2016). Bu matrisler hızlı sayısal algoritmalar kullanılarak çözülebilir. Bu tez çalışmasında ise Python bilgisayar programı kullanılarak bu çözümler elde edilmiştir.

Matris yöntemi tekrarlanan arama süreci gibi çözümler bulmaz. Bu yöntem makine hassasiyetine yönelik çözümler bulur (Harrison vb, 2016). Yani bu yöntemde sayısal hatalar daha az olur. Bu yöntemle hesaplanan dalga fonksiyonları sınırlarda ayrılamaz.

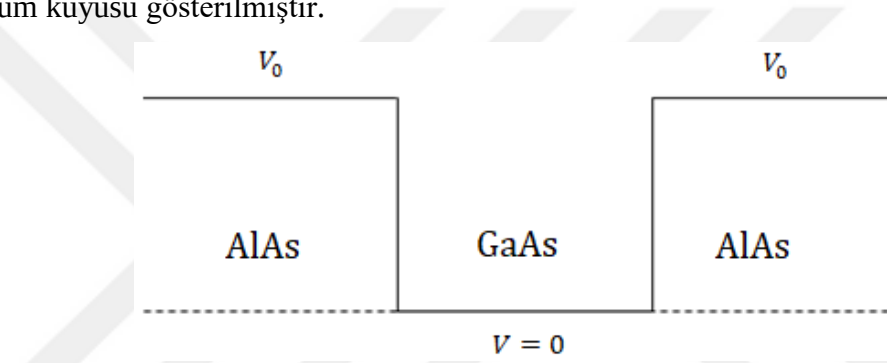
Schrödinger denklemi bir özdeğer denklemidir. Bunun içinde tüm dalga fonksiyonları yani özvektörler birbirine dik olmalıdır ve normalizasyon koşulu sağlanmalıdır.



5. HESAPLAMALAR

5.1 Sonlu Kare Potansiyel

Kuantum kuyuları farklı malzemelerden yapılabilir. Kuyuda ve bariyerlerde farklı malzemeler kullanılabilir. Bu hesaplamada kuyu GaAs, bariyerler ise AlAs malzemesinden yapılmış ve sonlu kare potansiyel kuantum kuyusu seçilmiştir. Kuantum kuyuları çözülürken analitik ve numerik hesaplama şekillerinden istifade edilir. Sonlu kare potansiyel kuantum kuyusunun ise analitik çözümü olsa da enerji seviyeleri ve onlara uygun gelen dalga fonksiyonları numerik olarak çözülecektir. Aşağıdaki şekilde GaAs ve AlAs malzemelerinden yapılmış sonlu kare potansiyel kuantum kuyusu gösterilmiştir.



Şekil 15 GaAs ve AlAs malzemelerinden hazırlanmış sonlu kuantum kuyusunun bant yapısı

Nümerik olarak sonlu kare potansiyel kuantum kuyusunu çözüldüğünde sonlu farklar yönteminden istifade edilir. Araştırmacılar her hangi bir konuyu araştırdığında karşılına birçok diferansiyel denklemler çıkmıştır. Bu diferansiyel denklemleri birçok numerik yollar vasıtasıyla çözmüşler. Sonlu farklar yöntemi de diferansiyel denklemlerin çözüm yöntemlerinden biridir.

5.1.1 Teori

Schrödinger denklemini sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla çözdüğümüzde aşağıdaki formül alınır.

$$a_i\psi_{i-1} + b_i\psi_i + c_i\psi_{i+1} = E\psi_i \quad (5.1)$$

Burada a_i ve c_i sabittir, i indisine bağlı değildir ve b_i ise V_i potansiyeline bağlı olarak değişir ve aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$a_i = -\frac{C}{m(\Delta z)^2} = -\frac{\hbar^2 10^{23}}{2m_0 |e| m(\Delta z)^2} = c_i$$

$$b_i = \frac{2C}{m(\Delta z)^2} + V_i = -2a_i + V_i$$
(5.2)

Sonlu farklar yöntemi kullanılarak bu ifadelerden $N \times N$ ölçüde matris denklemi oluşturulur. Denklem (5.2) de olan b_i ifadesi matris denkleminin diyagonal elementleri a_i ve c_i ise diyagonalin altındaki ve üstündeki terimlerdir. Genel olarak matris denklemi aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_i & b_i & c_i & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix}$$
(5.3)

Denklem (5.3) simetrik matris denklemdir ve hızlı şekilde algoritmalar vasıtasıyla çözülebilir. Bazen kuyu genişliğine bağlı olarak matris yöntemi ile olan çözümler analitik yöntemle olan çözümlerden daha hızlı olur (Paul vb, 2016).

Matris yönteminde bulunan sayısal hatalar daha azdır bunun sebebi hesaplanan makinenin hassasiyetine bağlıdır. Sınır koşulları matrisin kendisinin içerisinde olduğundan dolayı hesaplama sonuçlarında dalga fonksiyonları sınırlarda ayrılmaz.

Dalga fonksiyonlarının matematiksel özellikleri karşılaştırılın sayısal yöntemin doğru olup olmadığı test edilebilir. Schrödinger denklemi bir özdeğer denklemdir ve hesaplama sonucunda elde edilen dalga fonksiyonları yani özvektörler bir birine dik formatta olmalıdır. Bundan başka hesaplamalarda normalizasyon koşulu sağlanmalıdır.

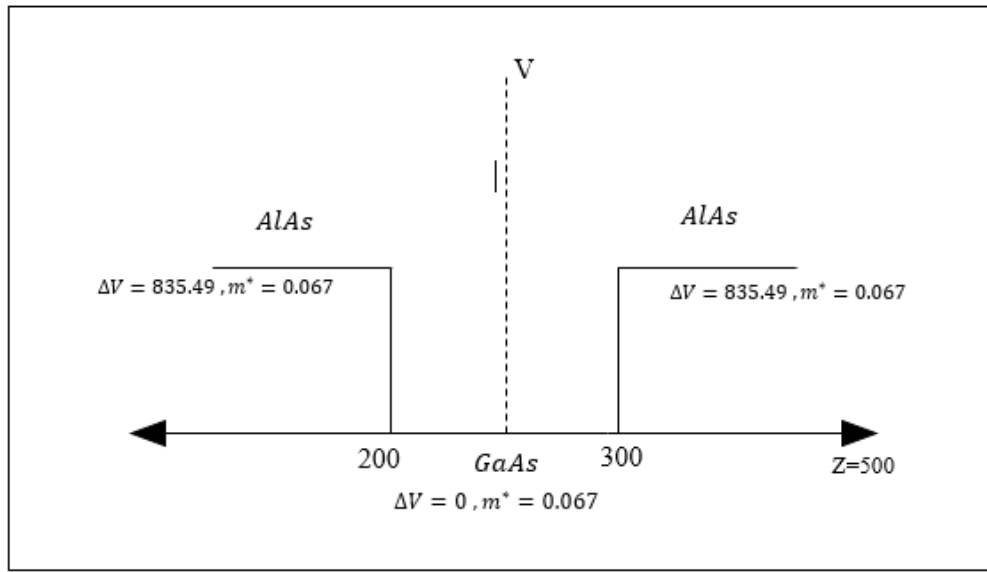
5.1.2 Hesaplama

Tezin bu kısmında sonlu kare potansiyel kuantum kuyusunun ilk iki enerji seviyeleri ve bu enerji seviyelerine uygun gelen dalga fonksiyonları hesaplanmıştır. Tüm hesaplamalar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla yapılmıştır.

Hesaplamalar GaAs ve AlAs malzemelerinden yapılmış sonlu kare potansiyel kuyusu üzerinde aparılmıştır. Kuyu genişliği $100\text{\AA}$, bariyer genişliği $200\text{\AA}$ olarak hesaplanmıştır. Etkin kütle $m^* = 0.067m_0$ olarak seçilmiştir. Genel olarak

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için $V = 0.67 \times (1.426) \times 10^3$ meV formülünden potansiyel hesaplanır. Burada 0.67 iletkenlik bandı yüzdesidir. Bariyerde AlAs için konsantrasyon $x = 1$ olur ve bariyerdeki potansiyel değeri $V_B = 1790.91$ meV hesaplanır. Kuyuda GaAs için konsantrasyon $x = 0$ olur ve kuyudaki potansiyel değeri $V_K = 955.42$ meV hesaplanır. Kuyu potansiyelini referans olarak sıfır alırsak bariyer potansiyeli $V_0 = 1.79091 - 0.95542 = 835.49$ meV olur.

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & z < -L/2 \\ 0 & -L/2 < z < L/2 \\ V_0 & L/2 < z \end{cases} \quad (5.4)$$

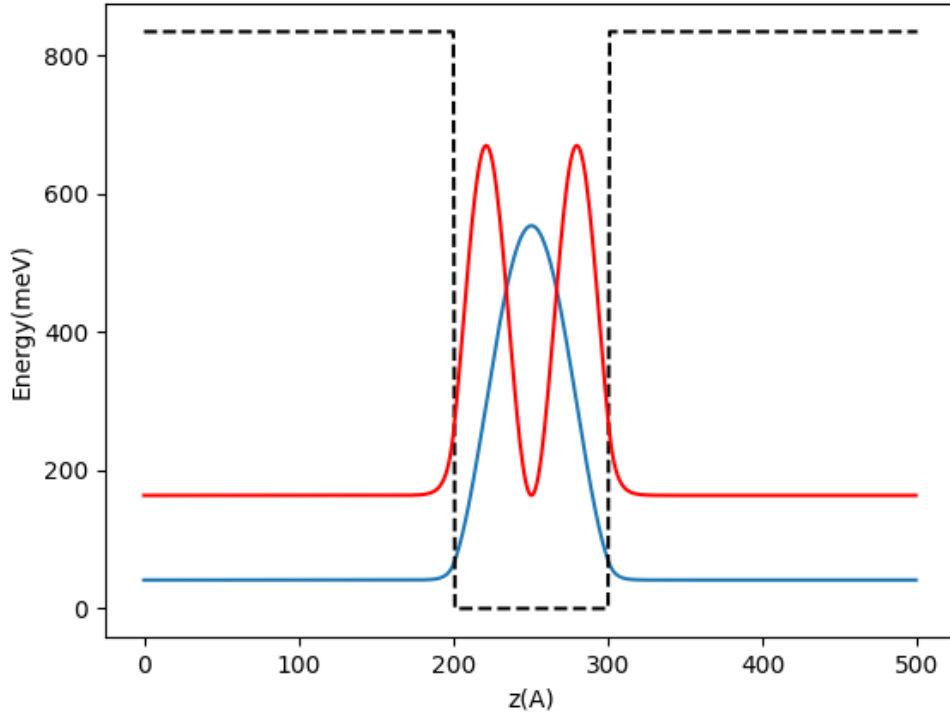


Şekil 16 Hesaplanmış GaAs ve AlAs malzemelerinden yapılmış sonlu kare potansiyel kuyusu

Hesaplamalarda ilk olarak matris denklemini oluşturan a_i , b_i ve c_i elementleri hesaplanmış ve matris denklemi kurulmuştur. Hesaplamalarda kuantum kuyusunun büyüme yönü yani z eksenini $(0,500)$ aralığında seçilmiş ve $\Delta z = 1$ olarak kabul edilmiştir.

$$\begin{bmatrix} 114675.60 & -56920.30 & & & \\ -56920.30 & 114675.60 & -56920.30 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56920.30 & 113840.60 & -56920.30 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56920.30 & 114675.60 \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

Bilgisayar ortamında Python yazılım programında matris denklemi yazıldıktan sonra özdeğer ve özfonksiyonları bulundu. Kare potansiyelin ilk iki enerjisine karşılık gelen $|\psi|^2$ dalga fonksiyonlarının karesinin grafiği çizilmiştir.



Şekil 17 *GaAs ve AlAs* malzemelerinden yapılmış sonlu kare potansiyel kuantum kuyusunun ilk iki enerji seviyelerine karşılık gelen dalga fonksiyonları ve potansiyelinin grafiği

Şekil 17 de Mavi renk $|\psi_1|^2$, kırmızı renk $|\psi_2|^2$, çizgili siyah reng ise kuyu potansiyeli içindir. Hesaplamalar sonucunda alınan bu grafik dalga fonksiyonlarının karesidir. Hesaplamalar sonucunda *GaAs* ve *AlAs* malzemelerinden yapılmış sonlu kuantum kuyusunun ilk dört enerji seviyesinin değerleri aşağıdaki tabloda gösterilmiştir.

Tablo 3 Sonlu kare potansiyelinin sonlu farklar yöntemi ile hesaplandıktan sonra alınan enerji değerleri

Enerji seviyesi, n	Enerji, E_n
1	41,26
2	163,74
3	362,62
4	624,00

Tüm hesaplamalar bilgisayar ortamında Python programı vasıtasıyla yapılmıştır. Hesaplamalarda kullanılan parametreler “Quantum Wells, Wires and

Dots” kitabından alınmış ve hesaplamaların doğruluğunu test etmek için sonuçlar karşılaştırılmıştır ve benzeri sonuçlar elde edilmiştir.

Hesaplama sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla matris denklemi kuruldu ve matris denkleminin sonlu kare kuantum kuyusunun çözümlerinde öneminden bahsedildi. Daha sonra matris denklemi kullanılarak dalga fonksiyonları ve ona uygun gelen ilk iki enerji seviyelerinin grafiği çizildi.

5.2 Harmonik Osilatör Potansiyeli

Harmonik osilatör de potansiyel uzunluğa göre bir parabol fonksiyonudur. Bu fonksiyonu elde etmek için $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ malzemesinde x konsantrasyonu $[0,1]$ arasında uygun biçimde değiştirilir ve potansiyel yer değişiminin karesine bağlı olarak değişir (Eisberg, 1961).

Harmonik osilatör potansiyeli fizikte yaygın olarak kullanılan bir potansiyeldir. Moleküllerin salınımları yaklaşık olarak harmonik osilatör potansiyeliyle incelenir. Deneysel veriler sonucunda harmonik osilatör potansiyeli hafif çekirdekler için, kare kuyu potansiyeli ise ağır çekirdekler için daha uygun olduğu görülmüştür (Tulum, 2013).

5.2.1 Teori

Harmonik osilatör potansiyelinin formülü aşağıdaki gibidir.

$$V(z) = \frac{1}{2}kz^2 \quad (5.6)$$

Burada k osilatör sabitidir z kuyunun genişliğidir. Kuantum parçacığının harmonik osilatör potansiyeli içerisindeki davranışı normal elektronun kare kuyu içerisindeki davranışından farklıdır.

Harmonik osilatör potansiyelinde kuantum kuyusunun bariyer uzunluğunu b kuyu genişliğini a ile versek denklem (5.6) deki k değeri aşağıdaki formülden çıkan sonuca eşit olacaktır (Harrison vb, 2016).

$$k = \Delta V_{CB}(E_g^{AlAs} - E_g^{GaAs})8(x_{mak} - x_{min})\frac{1}{a^2} \quad (5.7)$$

Bu çalışmada sonlu harmonik osilatör kuyusu hesabı yapıldı. Bariyerlerde potansiyel sabit V_0 değeri ve kuyuda harmonik osilatör potansiyeli alındı.

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & z < -L/2 \\ \frac{1}{2}kz^2 & -L/2 < z < L/2 \\ V_0 & L/2 < z \end{cases} \quad (5.8)$$

Harmonik osilatör potansiyeli hesaplandıktan sonra sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla matris denklemi kurulur.

$$a_i = -\frac{C}{m(\Delta z)^2} = -\frac{\hbar^2 10^{23}}{2m_0 |e| m(\Delta z)^2} = c_i \quad (5.9)$$

$$b_i = \frac{2C}{m(\Delta z)^2} + V_i = -2a_i + V_i$$

Sonlu farklar yöntemi kullanılarak bu ifadelerden $N \times N$ ölçüde matris denklemi oluşturulur. Denklem (5.9) de olan b_i ifadesi matris denkleminin diyagonalı a_i ve c_i ise diyoganelin altındaki ve üstündeki terimlerdir. Genel olarak matris denklemi aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & a_i & b_i & c_i & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} & \\ & & & & a_N & b_N & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad (5.10)$$

5.2.2 Hesaplama

Harmonik osilatör potansiyelli kuantum kuyu GaAs ve AlAs malzemelerinden hazırlanmıştır. Bariyerler AlAs, kuyu GaAs malzemesinden hazırlanmıştır. Harmonik osilatör potansiyelini hesaplamak için ilk önce denklem (5.6) deki k değerini bulmak gerekir. Hesaplamalarda kuyunun genişliği $a = 100\text{\AA}$, bariyerin uzunluğu $b = 200\text{\AA}$ olarak alınmıştır. Denklem (5.7) deki $x_{max} = 1$ ve $x_{min} = 0$ olarak alınmıştır. Kuantum kuyusunun büyüme yönü $[-250, 250]$ olarak ve $\Delta z = 1$ olarak alınmıştır. (5.7) denklemine göre k değerini hesapladığımızda $k = 0.668392$ alınır.

Harmonik osilatör potansiyelini kuyu genişliğine göre hesapladıktan sonra sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde matris denklemi kurulur ve aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{bmatrix} 114675.60 & -56920.30 & & & \\ -56920.30 & 114675.60 & -56920.30 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56920.30 & 113848.60 & -56920.30 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56920.30 & 114675.60 \end{bmatrix} \quad (5.11)$$

Bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla harmonik osilatör potansiyelinin enerji seviyeleri bulunmuş ve aşağıdaki tabloda verilmiştir.

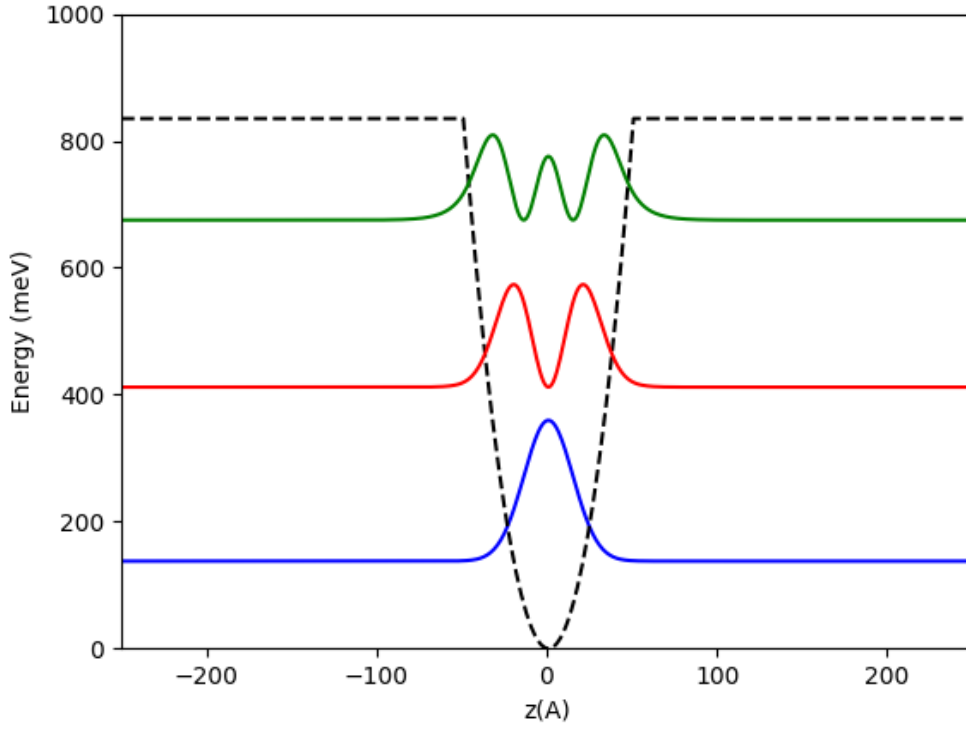
Tablo 4 Harmonik osilatör potansiyelinin sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla hesaplanmasından alınan ilk üç enerji seviyelerinin değerleri

Durum indeksi, n	Özdeğer, $E_n(\text{meV})$
1	137.46
2	411.70
3	674.99

Hesaplanmış olan bu enerji seviyelerine uygun gelen $|\psi|^2$ grafikleri de şekil 18 de gösterilmiştir.

Tablo 4 de en düşük üç enerji seviyeleri gösterilmektedir. Tabloda gösterilmiş değerleri almak için kuyu genişliği $100\text{\AA}$ ve bariyer genişliği ise $200\text{\AA}$ olarak alınmış ve etkin kütle $m^* = 0.067m_0$ olarak alınmıştır. Bariyerler AlAs olduğu için $x = 1$ için $V_0 = 835.49 \text{ meV}$ olur. Kuyunun minimum değeri sıfır alınmıştır.

Bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla harmonik osilatör potansiyelinin, enerji değerleri ve buna uygun gelen dalga fonksiyonlarının grafiği çizilmiştir.



Şekil 18 *GaAs* ve *AlAs* malzemesinden hazırlanmış harmonik osilatör potansiyelli kuantum kuyusunun ilk üç enerji seviyelerine uygun gelen dalga fonksiyonlarının grafiği

Sonsuz harmonik osilatör kuyusunda enerji seviyeleri eşit olarak artar. Burada bariyerlerdeki sonlu potansiyelden dolayı enerji seviyelerindeki fark azalmaktadır. Hesaplama da istifade edilmiş veriler “Quantum Wells, Wires and Dots” kitabından alınmış ve sonuçlar karşılaştırılmıştır. Sonuç olarak benzeri sonuçlar elde edilmiştir.

Hesaplamalar için bilgisayar ortamında Python programı yazılmıştır. İlk olarak harmonik osilatör potansiyeli hesaplandı. Daha sonra bu potansiyelden istifade ederek sonlu farklar yöntemi ve Python yazılım programı vasıtasıyla enerji değerleri ve dalga fonksiyonunun grafiği çizildi.

5.3 Pöschl-Teller Potansiyeli

Pöschl-Teller potansiyeli ilk defa G.Pöschl ve E.Teller tarafından 1933 yılında “Harmonik olmayan salınıcılar için Kuantum Mekaniksel Yaklaşımlar” adlı makalede yer aldı (Yanar, 2012). Burada olan potansiyel durumuna bağlı olarak Pöschl-Teller potansiyelinin farklı türleri vardır. Bu tez çalışmasında Trigonometrik Pöschl-Teller

potansiyeli vasıtasıyla kuantum kuyuların optik özellikleri incelenmiştir. Tez çalışmasında GaAs/AlAs kuantum kuyusu için sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 5 Pöschl-Teller potansiyel tipleri

POTANSİYEL ADLARI	BİÇİMLERİ
Trigonometrik Pöschl-Teller Potansiyeli (Pöschl & Teller, 1933)	$V(z) = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \left[\frac{k(k-1)}{\sin^2(\beta z)} + \frac{\eta(\eta-1)}{\cos^2(\beta z)} \right]$
Süper simetrik Değiştirilmiş Pöschl-Teller Potansiyeli (Diaz, Negro, Nieto, & Roas-Ortiz, 1999)	$V(z) = \alpha^2 \left[\frac{k(k+1)}{\sinh^2 \alpha z} - \frac{\gamma(\gamma-1)}{\cosh^2 \alpha z} \right]$
Hiperbolik (Modifiye) Pöschl-Teller Potansiyeli (Flügge, 1994)	$V(z) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{\gamma(\gamma-1)}{\cosh^2 \alpha z}$
q Parametrelili Hiperbolik Pöschl-Teller Potansiyeli (Arda, Ramazan, & Cevdet, 2010)	$V(z) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{\gamma(\gamma-1)}{\cosh_q^2 \alpha z}$
Genelleştirilmiş Pöschl-Teller Potansiyeli (Tao Chen, Yong-Feng Diao, & Chun-Sheng Jia, 2009)	$V(z) = V_1 \frac{1}{\sinh^2 \alpha z} - V_2 \frac{\cosh \alpha z}{\sinh \alpha z}$
q Parametrelili Genelleştirilmiş Pöschl-Teller Potansiyeli (Gao-Feng Wei & Shi-Hai Dong, “The spin symmetry for deformed generalized Pöschl-Teller potential”, 2009)	$V(z) = V_1 \frac{1}{\sinh_q^2 \alpha z} - V_2 \frac{\cosh_q \alpha z}{\sinh_q \alpha z}$
İkinci-Tip Pöschl-Teller Potansiyeli (Gao-Feng Wei & Shi-Hai Dong, 2010)	$V(z) = -\frac{A(A+\alpha)}{\cosh^2 \alpha z} - \frac{B(B-\alpha)}{\sinh^2 \alpha z}$

Son yıllarda kuantum kuyuların ve düşük boyutlu sistemlerin optik özelliklerinin incelenmesi dünya genelinde ilgi çekmeğe başladı. Bu çalışmalarda genellikle optik doğrulama, elektro optik etki ve üçüncü dereceden optik özellikler daha çok incelenmiştir. Bu tez çalışmasının bu bölümünde GaAs kuantum kuyusunun optik özellikleri Pöschl-Teller potansiyeli vasıtasıyla incelenmiştir.

Pöschl-Teller potansiyeli asimetri derecesine sahiptir. Bu asimetri derecesi ayarlanabilir ve buna karşılık gelen Schrödinger denklemi analitik olarak çözülebilir (Yıldırım vb, 2015). Ayarlanabilir asimetrik potansiyelle doğrusal olmayan optik özellikler incelenebilir.

G. Pöschl ve E. Teller 1933 yılında Schrödinger denklemini Pöschl-Teller potansiyeli vasıtasıyla çözmüştür ve sonuç olarak enerji bağlantısı elde etmişlerdir. Bu enerji bağlantısı bağlı durumları betimleyen bir enerji bağlantısıdır (Pöschl vb, 1933). Shishan Dong ve Shi-Hai Dong 2001 yılında Schrödinger denklemini faktörizasyon yöntemini kullanarak değişken Pöschl-Teller potansiyeli için çözmüştür. Sonuç olarak özdeğer vektörleri ile özfonksiyonları bulmuşlardır (Dong vb, 2002). S. Cruz ve Y.

Cruz 2008 yılında Schrödinger denklemini hiperbolik ve trigonometrik Pöschl-Teller potansiyeli için çözmüşlerdir ve sonuç olarak koherent durumlar elde edilmiştir (Cruz vb, 2008). 2009 yılında Wen-Chao Qiang ve arkadaşları Schrödinger denklemini çözerek saçılma durumlarını bulmuşlardır. Bu sonuç ikinci Pöschl-Teller potansiyeli için elde edilmiştir (Qiang vb, 2009). Chen Chang-Yuan ve arkadaşları 2012 yılında yapılan çalışmalarda Schrödinger denkleminde değiştirilmiş Pöschl-Teller potansiyelini kullanmıştır. Sonuç olarak analitik çözümler vasıtasıyla dalga fonksiyonlarını hipergeometrik fonksiyonlar olarak yazmıştır (Chen vb, 2012).

5.3.1 Teori

Pöschl-Teller potansiyelinde potansiyel fonksiyonu aşağıdaki gibi verilir (Yıldırım vb, 2005):

$$V(z) = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \left[\frac{k(k-1)}{\sin^2(\beta z)} + \frac{\eta(\eta-1)}{\cos^2(\beta z)} \right] \quad (5.12)$$

Denklem $k, \eta > 1$ olmalıdır. Burada z büyüme yönüdür. Bu denklem trigonometrik Pöschl-Teller denklemi olarak adlanır. Bu $V(z)$ denklemi üç parametreden oluşur. Bu parametreler k, η ve β dir. Burada $k = \eta$ olduğunda simetrik bir denklem olur. Buradaki denklemde $\beta = \pi/2L$ alınır. Denklemdaki z değerleri ise kuyunun büyüme yönünü gösterir. Bu çalışmada (5.12) denklemi kullanılarak k ve z değerlerine göre ilk önce Pöschl-Teller potansiyelleri bulunmuştur ve z nokta sayısına göre $N \times N$ ölçüde bir matris kurulmuştur.

5.3.2 Hesaplama

Potansiyelleri bulmak için (5.12) denkleminde etkin kütle $m^* = 0.067$, kuyunun uzunluğu $L = 100\text{\AA}$, kuyunun z değerleri $[0,100]$ aralığında alınmıştır ve artış miktarı $\Delta z = 1$ olarak seçilmiştir. Katsayılar $\eta = 2$ değeriyle beraber $k = 1.2$, $k = 2$ ve $k = 3$ değerleri alındı. Hesaplamalarda sonlu farklar yöntemi kullanılmıştır. Şekil 19 da elde edilmiş grafikler gösterilmiştir.

Her z noktası ve k değerlerine göre potansiyel değerleri bulunduktan sonra sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde matris kuruldu. Matrisin elementleri aşağıdaki formüller vasıtasıyla hesaplandı.

$$a_i = -\frac{C}{m\Delta z^2} = c_i, \quad (5.13)$$

$$b_i = \frac{2C}{m\Delta z^2} + V_i$$

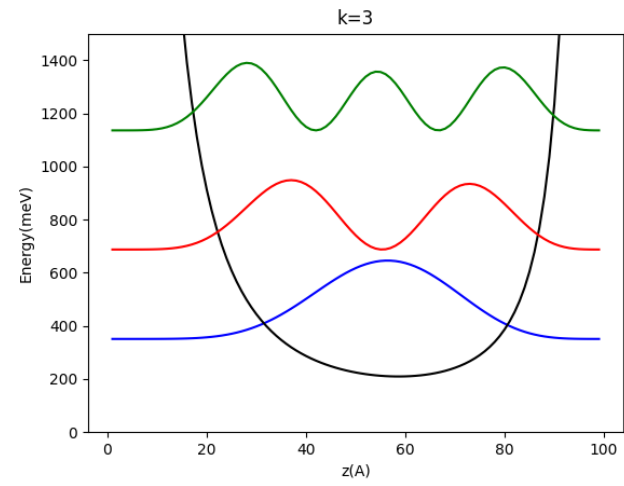
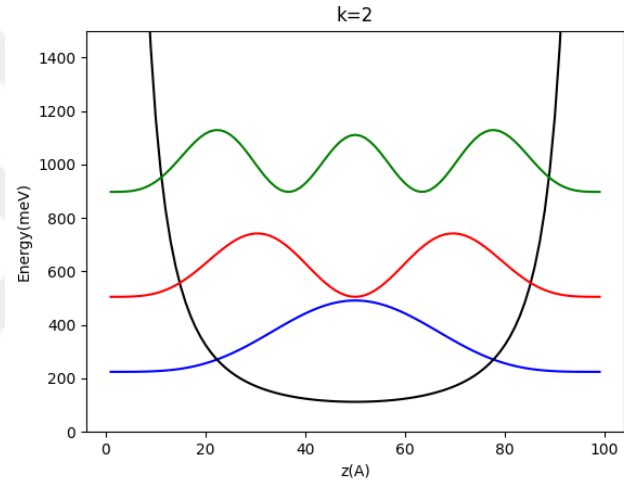
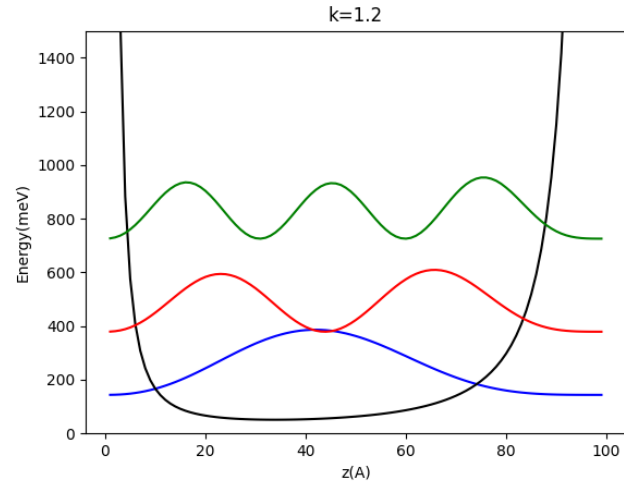
Burada a_i , c_i , b_i matrisi oluşturan elementlerdir; b_i matrisin diyagonal terimleridir ve a_i ve c_i ise diyagonalin altındaki ve üstündeki terimleridir. Artış miktarı $\Delta z = 1$ olduğu için $\Delta z^2 = 1$ olacaktır. Matrisin diyagonalı $V(z)$ potansiyeliyle değişir.

Hesaplarda $k = 1.2$, $k = 2$ ve $k = 3$ olduğunda matris denklemi sırasıyla aşağıdaki gibi elde edildi. Matris denklemlerini oluşturduktan sonra bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla özfonksiyonlar ve özenerji değerleri bulundu.

$$\begin{bmatrix} 117171.95 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 117171.95 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & -56865.40 & 113795.28 & -56865.40 & \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 227474.34 \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

$$\begin{bmatrix} 142200.96 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 142200.96 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & -56865.40 & 113845.87 & -56865.40 & \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 227499.04 \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

$$\begin{bmatrix} 199085.07 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 199085.07 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & -56865.40 & 113959.06 & -56865.40 & \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 227555.18 \end{bmatrix} \quad (5.16)$$



Şekil 19 $k = 1.2, k = 2, k = 3$ ve $\eta = 2$ değerlerine göre elde edilen Pöschl-Teller potansiyel grafiği

Burada mavi çizgiler E_1 , kırmızı çizgiler E_2 , yeşil çizgiler E_3 enerji seviyelerine karşı gelen dalga fonksiyonlarıdır. Şekil 19 dan da görüldüğü gibi Pöschl-Teller potansiyeli k değerlerine bağlı olarak farklılıklar gösterebilir. Burada $k = \eta$ için potansiyel eğri $\beta(z) = \pi/4$ etrafında simetrik hale gelir. Potansiyel eğri $k > \eta$ olduğunda sağa, $k < \eta$ olduğunda sola kayar. Bu grafiklerde olan dalga fonksiyonlarının şekillerinin parabolik dalga fonksiyonlarının şekillerine benzediği gözlemlenebilir. Bunun nedeni potansiyelin minimum değeri etrafındaki davranışından kaynaklanır (Zhang vb, 2003).

Tablo 6 Pöschl-Teller potansiyelinde $k = 1.2, k = 2, k = 3, \eta = 2$ katsayıları ve $L = 100\text{\AA}$ kuyu genişliği için hesaplanan enerji özdeğerleri

k	$E_0(\text{meV})$	$E_1(\text{meV})$	$E_2(\text{meV})$
1.2	143.46	378.79	725.41
2	224.46	504.93	897.12
3	350.74	687.27	1135.61

Sonuç olarak trigonometrik Pöschl-Teller potansiyeli k değerlerine göre hesaplandı. Bilgisayar ortamında yazılan Python programı vasıtasıyla özenerji ve özfonksiyonları bulundu. Bu sonuçlar vasıtasıyla Pöschl-Teller potansiyelinin dalga fonksiyonlarının grafiği çizildi. Elde edilen bu grafikler “Nonlinear optical properties of a Pöschl-Teller quantum well” makalesinde olan grafikler ile karşılaştırıldı ve aynı sonuçlar elde edildi (Yıldırım vb, 2005).

5.4 Razavy Potansiyeli

Bu hesaplamada Razavy potansiyeli sabit etkin kütleli kuantum kuyular için hesaplandı. İncelediğimiz kuantum kuyusunda dalga fonksiyonlarını ve enerji seviyelerini hesaplama için kullanılan yöntem bilgisayar ortamında Python yazılım programıdır ve doğruluk derecesi oldukça yeterlidir. Elde edilen özdeğer diferansiyel denklemini çözmek için sonlu farklar yöntemi kullanılmıştır.

5.4.1 Teori

Değişken etkin kütleli Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi gösterilir (Liv b, 2017).

$$-\left[\frac{\hbar^2}{2m(z)}\right]\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \frac{d}{d(z)}\left[\frac{\hbar^2}{2m(z)}\right]\frac{d\psi(z)}{dz} + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (5.17)$$

Burada $m(z)$ değişken etkin kütle, $V(z)$ Razavy potansiyelidir ve aşağıdaki gibi gösterilir (Kasapoğlu vb, 2021).

$$V(z) = V_0 \left[A \cosh\left(\frac{z}{D}\right) - M \right]^2 \quad (5.18)$$

Burada z kuantum kuyusunun büyüme yönünü, V_0 potansiyelin minimum seviyesi A ve M sabit parapetlerdir. Kuantum kuyular bu parametrelerin değerlerine bağlı olarak farklı şekiller alabilir. $A > M$ olduğunda kuantum kuyu yüksek enerji değerine sahip olan parabolik kuantum kuyusuna, $A = M$ olduğunda kuantum kuyu geniş tabanlı tek kuantum kuyusuna, $A < M$ olduğunda ise kuantum kuyusu birleştirilmiş çift kuantum kuyusuna dönüşür (Kasapoğlu vb, 2021). A ve M parametreleri hesaplama amaçlı değiştirilebilir. Burada D parametrik kuantum kuyusunun genişliğidir. Hesaplamalarda sabit kütleli kuantum kuyusu incelenmiştir.

Sabit kütleli kuantum kuyusu incelendiği için sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla matris denklemi oluşturulmuştur. Matris denkleminin elementleri aşağıdaki gibidir.

$$a_i = -\frac{C}{m(\Delta z)^2} = c_i, \quad (5.19)$$

$$b_i = \frac{2C}{m(\Delta z)^2} + V_i$$

Burada C normalizasyon sabitidir. b_i matrisin diyagonalı, a_i ve c_i ise diyagonalın sol ve sağ elementleridir. Bu elementleri matriste yerine koyduğumuzda matris aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_i & b_i & c_i & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

5.4.2 Hesaplama

Hesaplamalarda kullanılan parametreler $V_0 = 228 \text{ meV}$, $m^* = 0.067m_0$, $D = 50 \text{ Å}$, $C = 3809.9821$. Bu parametreler $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ kuantum kuyusuna karşılık gelir. Büyüme yönü z $[-100,100]$ aralığında ve $\Delta z = 1$ olarak alınmıştır. Bu parametreler “Effects of intense laser field and position dependent effective mass in

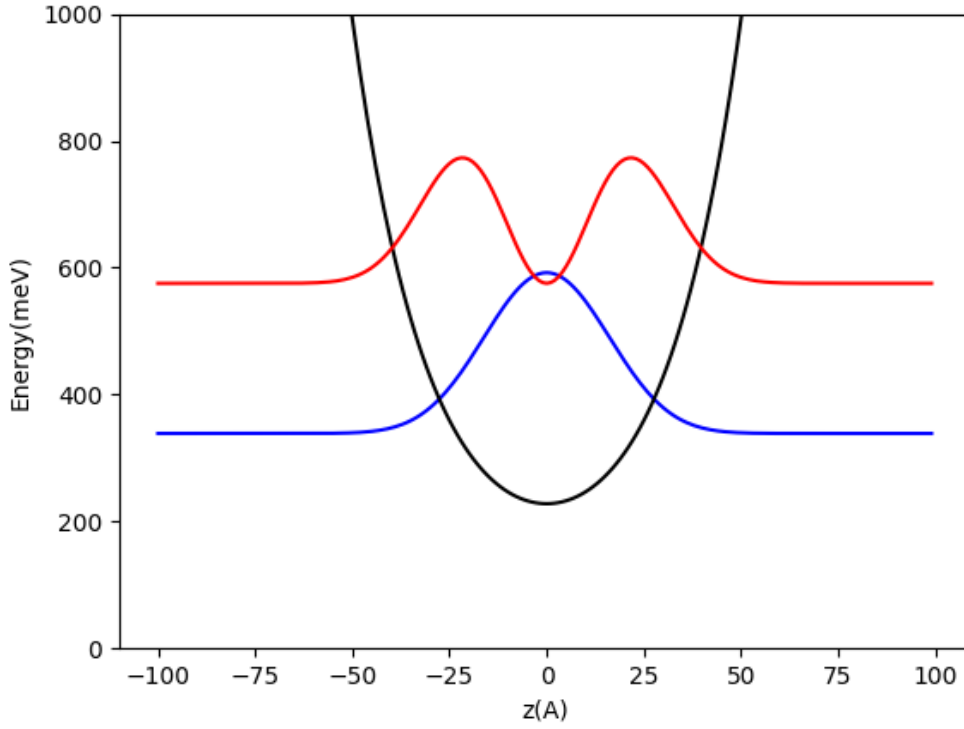
Razavy quantum wells and quantum dots” makalesinden alınmıştır (Kasapoğlu vb, 2021).

Razavy potansiyelini hesaplariken A ve M değerlerine bağlı olarak üç duruma bakılmıştır. A ve M değerleri sabit değerler olduğu için istenilen sayıyı almak mümkündür. Bu sayıları almak dalga fonksiyonlarının potansiyel kuyu içerisindeki farklılıklarını göstermek için önemlidir. Bu tez çalışmasında üç farklı değerler için hesaplamalar yapılmıştır. Tüm hesaplar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla yapılmıştır.

Birinci durum $A = 2, M = 1$ değerlerine göre hesaplanmıştır. Bu değerler (5.18) denkleminde yerine koyulup daha sonra Razavy potansiyelleri z büyüme yönüne bağlı olarak bulunmuştur. Potansiyeller bulunduktan sonra sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçede simetrik bir matris denklemi kurulmuştur.

$$\begin{bmatrix} 123013.78 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 123013.78 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 114008.34 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 123013.78 \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

(5.21) matris denklemini kurduktan sonra Python yazılım programı vasıtasıyla enerjiler ve dalga fonksiyonları bulunmuştur.



Şekil 20 $A = 2$ ve $M = 1$ için dalga fonksiyonunun aslılık grafiği

Burada mavi çizgi E_1 , kırmızı çizgi E_2 enerji seviyelerine uygun gelen dalga fonksiyonlarının karesi ve siyah çizgi Razavy potansiyelinin z den aslılık grafiğidir. Şekil 20 de $A > M$ olduğu zaman için tek potansiyel kuyusu oluşur. Bu kuyunun $z = 0$ da enerjisi $V(0) = V_0(A - M)^2$ olur. $A - M = m$ olduğunda, m 'nin değeri arttıkça kuyunun dibi karesel olarak daralır, kuyu genişliği azalır.

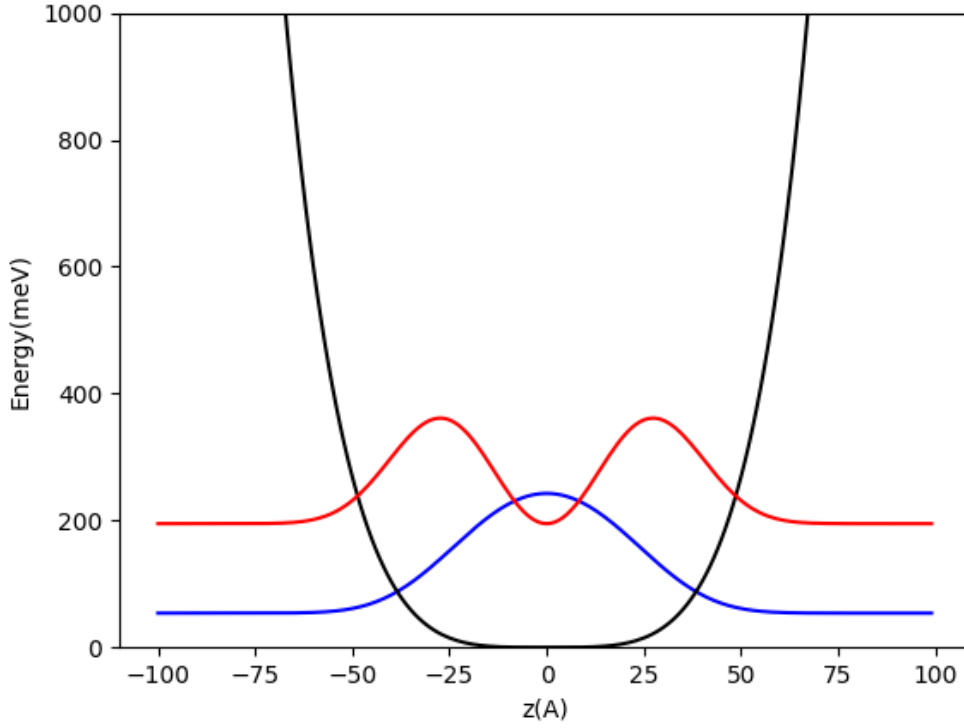
Tablo 7 $A = 2, M = 1$ olduğunda Razavy potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	E_n (meV)
1	338.70
2	575.31

Tablo 7 de gösterilen enerji özdeğerleri uygun olarak şekil 20 deki dalga fonksiyonlarının y eksenı boyunca başlangıç değerlerine uygun gelir.

İkinci durum $A = 2, M = 2$ değerlerine göre hesaplanmıştır. Şekil 21 de $A = M$ olduğu için potansiyel kuyusu, $z = 0$ da düz hale gelir. Değerlere göre Razavy potansiyelleri hesaplandıktan sonra $N \times N$ ölçüde simetrik matris denklemi kurulmuştur.

$$\begin{bmatrix} 120332.13 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 120332.13 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & -56865.40 & 113731.18 & -56865.40 & \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 120332.13 \end{bmatrix} \quad (5.22)$$



Şekil 21 $A = 2$ ve $M = 2$ için dalga fonksiyonunun aslılık grafiği

Burada mavi çizgi E_1 , kırmızı çizgi E_2 enerji seviyelerine uygun gelen dalga fonksiyonlarının karesi ve siyah çizgi Razavy potansiyelinin grafiğidir. Tablo 8 de ise hesaplamalar sonucunda elde edilmiş Razavy potansiyelinin $A = 2$ ve $M = 2$ değerlerine göre ilk iki enerji özdeğerleri gösterilmiştir. Şekil 21 de gösterilen dalga fonksiyonlarının karesinin grafiği bu enerji değerlerine uygun gelmektedir.

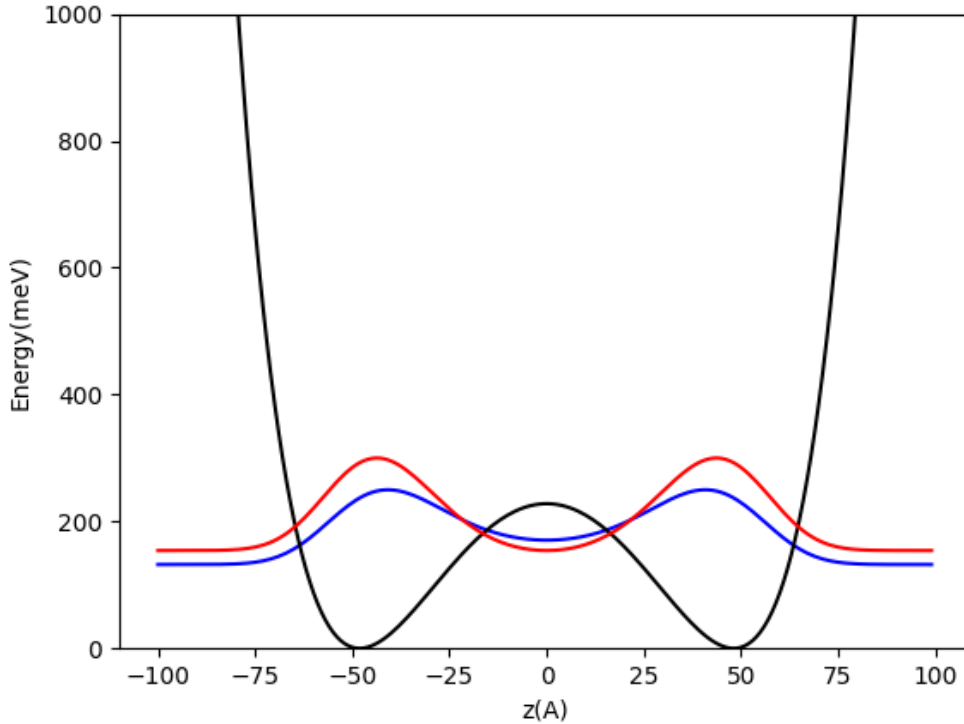
Tablo 8 $A = 2, M = 2$ olduğunda Razavy potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	E_n (meV)
1	53.96
2	194.95

Üçüncü durum $A = 2, M = 3$ değerlerine göre hesaplanmıştır. Değerlere göre Razavy potansiyelleri hesaplandıktan sonra $N \times N$ ölçüde simetrik matris denklemi kurulmuştur.

$$\begin{bmatrix} 118106.48 & -56865.408 & & & \\ -56865.40 & 118106.48 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & -56865.40 & 113944.24 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & -56865.40 & 118106.48 \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

Şekil 22 de $A = 2, M = 3$ değerlerine göre dalga fonksiyonlarının karesinin grafiği verilmiştir. Bu grafikte $A < M$ olduğu için potansiyel kuyusu, $z = 0$ da bir maksimum değere sahiptir. $z = \pm z_0$ noktasında kuyunun minimum değerleri $A \cosh\left(\frac{z_0}{D}\right) - M = 0$ ile hesaplanır. Bu durumda kuantum kuyusunun yapısı iki minimuma ve bariyerin yüksekliğine bağlı olduğu için, kuyu çift kuantum kuyusu olur. $M - A = n$ olduğunda n değeri arttıkça bariyer yüksekliği ve minimumlar arası mesafe artar. M değeri artarsa ve n değeri sabit olursa minimumlar arasındaki mesafe azalır, ancak bariyerin yüksekliği sabit kalır. Bu durumda iki potansiyel kuyu arasındaki bağlantı artar.



Şekil 22 $A = 2$ ve $M = 3$ için dalga fonksiyonunun karesinin grafiği

Burada mavi çizgi E_1 , kırmızı çizgi E_2 enerji seviyelerine uygun gelen dalga fonksiyonlarının karesi ve siyah çizgi Razavy potansiyelinin z den aslılık grafiğidir.

Tablo 9 da ise hesaplamalar sonucunda elde edilmiş Razavy potansiyelinin $A = 2$ ve $M = 3$ değerlerine göre ilk iki enerji özdeğerleri gösterilmiştir. Şekil 22 de gösterilen dalga fonksiyonlarının karesinin grafiği bu enerji değerlerine uygun gelmektedir.

Tablo 9 $A = 2, M = 3$ olduğunda Razavy potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	E_n (meV)
1	132.13
2	154.15

Bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla Razavy potansiyelleri hesaplandı. Potansiyeller hesaplanırken (5.18) denkleminde olan A ve M değerleri ayrı-ayrı alındı. A ve M değerlerinden aslı olarak farklı Razavy potansiyelleri hesaplandı. Sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde simetrik matris denklemi kuruldu. Bu denklem kurulurken sabit etkin kütleden istifade edildi ve istifade edilen tüm değerler $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ için hesaplandı. Python yazılım programı vasıtasıyla elde edilen değerlerden dalga fonksiyonunun aslılık grafikleri oluşturuldu. $A = 2, M = 1$ ve $M = 3$ değerlerine göre grafikler elde edildi. Şekil 20 $A > M$, Şekil 21 $A = M$, Şekil 22 $A < M$ değerleri için grafikler verildi. Bu değerlerden aslı olarak simetrik ve çift kuantum kuyusu elde edildi. Hesaplamalarda istifade edilen değerler ve sonuçlarda alınan grafikler “Effects of intense laser field and position dependent effective mass in Razavy quantum wells and quantum dots” adlı makalede olan sonuçlar ile karşılaştırıldı ve benzeri sonuçlar elde edildi.

5.5 Wood-Saxon Potansiyeli

Wood-Saxon potansiyeli ilk defa ağır çekirdeğin ve bir nükleonun etkileşimini açıklamak için Wood ve Saxon tarafından ortaya koyulmuştur (Saxon vb, 1954). Bu hesaplamada Wood-Saxon potansiyeli vasıtasıyla kuantum kuyusunun elektronik özellikleri hesaplanmıştır. Etkin kütle yaklaşımı ve zarf dalga fonksiyonu vasıtasıyla Wood-Saxon kuantum kuyusunun enerjileri ve dalga fonksiyonları hesaplanır (Restrepo vb, 2015). Wood-Saxon kuantum kuyusundaki elektronun hapsedilmesi elektrik ve manyetik alanları uygulandığında değişebilir.

Optoelektronik nano yapılı her hangi bir cihazın temel özelliği kuantum kuyusunun enerji seviyeleridir. Burada yapı büyüdüğünde enerji seviyelerinin düzenini değiştirmek zordur (Restrepo vb, 2015). Malzemenin fiziksel yapısını

değiştirmeden enerji seviyelerinin düzenini değiştirmenin farklı yöntemleri vardır. Bu yöntemlerden biri Wood-Saxon potansiyelini kullanmaktır (Xie, 2009). Wood-Saxon potansiyeli iki ayarlanabilir parametreye sahiptir. Buda elde edilen sonuçların doğruluk olasılığını artırır (Xie, 2009). Dolayısıyla bu hesaplamada Wood-Saxon potansiyeli vasıtasıyla kuantum kuyuların optik özellikleri açıklanmıştır.

5.5.1 Teori

Wood-Saxon potansiyeli yoğun lazer alanı altında hesaplanmıştır. Lima ve diğerleri yoğun lazer alanı olmadan Wood-Saxon potansiyelini aşağıdaki gibi tanımlamışlardır (Lima vb, 2009).

$$V_{ws}(z) = \frac{V_0}{1 + \exp[(Z_0 - z)/\gamma]} + \frac{V_0}{1 + \exp[(Z_0 + z)/\gamma]} \quad (5.24)$$

Burada $Z_0 = L/2$, L kuantum kuyusunun genişliği, γ bariyer eğimliliğini tanımlayan parametre ve $z = 0$ kuyunun merkezidir. Hesaplama olan kuantum kuyusu GaAs/AlAs malzemelerinden hazırlanmıştır. Kuantum kuyusunda enerji seviyeleri ve onların dalga fonksiyonları sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla bilgisayar ortamında Python yazılım programı ile bulunmuştur.

Sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde matris denklemi kurulmuştur.

$$\begin{aligned} a_i &= -\frac{C}{m(\Delta z)^2} = c_i, \\ b_i &= \frac{2C}{m(\Delta z)^2} + V_i \end{aligned} \quad (5.25)$$

Burada a_i , b_i , c_i matrisi oluşturan elementlerdir. b_i matrisin diyogonal elementi, a_i ve c_i ise diyoganelin solunda ve sağında yerleşen sabit elementlerdir. Dolayısıyla matris denklemi aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_i & b_i & c_i & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

5.5.2 Hesaplama

Bu hesaplamada GaAs/AlAs kuantum kuyusunun optik özellikleri Wood-Saxon potansiyeline göre hesaplanmıştır. Wood-Saxon potansiyeli vasıtasıyla

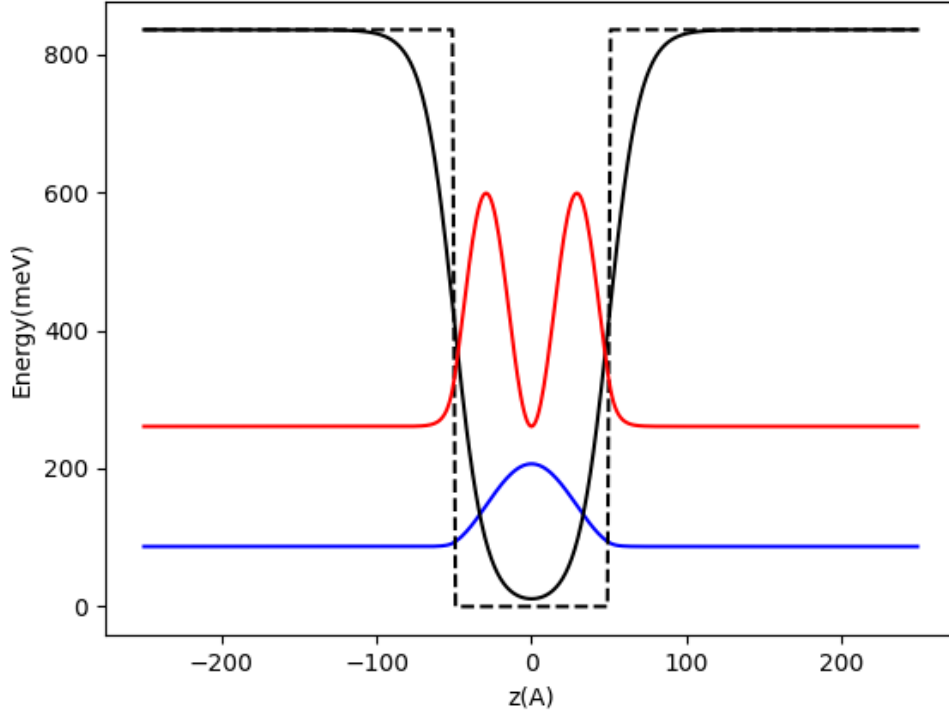
kuyunun dalga fonksiyonlarının karelerinin grafikleri oluşturulmuştur. Hesaplamaların doğruluğunu kontrol etmek için ilk başta değerler “Intense laser field effects on a Wood–Saxon potential quantum well” makalesinden alınmış ve sonuçlarda elde edilen grafikler bu makaledeki grafikler ile karşılaştırılmıştır. Daha sonra hesaplamalar GaAs/AlAs kuantum kuyusuna göre aparılmıştır. Hesaplamalarda istifade edilen değerler $V_0 = 835.49$ meV, $m^* = 0.067m_0$ (m_0 serbest elektronun kütlesi), $L = 100$ Å, $Z_0 = L/2$ olduğu için $Z_0 = 50$ Å olacaktır. Bariyer genişliği ise 200 Å olarak seçilmiştir. Hesaplamalarda kuyunun z büyüme koordinatı $[-250, 250]$, $\Delta z = 1$ olarak alınmıştır.

Wood-Saxon potansiyel formülündeki γ değerini $\gamma = 10$ Å alırsak bu değer hesaplama sonuçları için makul bir değer anlamına gelir. Bu değer yeni nesil teknolojilerde tipik bir difüzyon uzunluğuna karşılık gelir (Gossner vb, 1995). $\gamma = 0.1$ Å olduğunda sonlu kare kuantum kuyusuna yaklaşır ve elde edilen enerji özdeğerleri sonlu kare potansiyel kuyuda elde edilen enerji özdeğerleri ile benzer olacaktır.

İlk olarak (5.24) denkleminde $\gamma = 10$ Å alındı ve Wood-Saxon potansiyeli z büyüme yönüne göre hesaplandı. Daha sonra sonlu farklar yöntemi kullanılarak matris denkleminin elementleri hesaplandı ve $N \times N$ ölçüde matris denklemi kuruldu.

$$\begin{bmatrix} 114566.30 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 114566.30 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 113758.93 & -56865.40 \\ & & & & \ddots \\ & & & & -56865.40 & 114566.30 \end{bmatrix} \quad (5.27)$$

Matris kurulduktan sonra bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla dalga fonksiyonlarının aslılık grafiği oluşturuldu.



Şekil 23 *GaAs/AlAs* Kuantum kuyusu için Wood-Saxon potansiyelinin grafiği

Şekil 23 de mavi çizgi E_1 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonunun karesinin, kırmızı çizgi E_2 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonunun karesinin, siyah çizgi $\gamma = 10 \text{ Å}$ olduğunda Wood-Saxon potansiyelinin grafiği ve kesikli siyah çizgi ise $\gamma = 0.1 \text{ Å}$ olduğunda Wood-Saxon potansiyelinin grafiğidir. Farklı elektrik ve manyetik alanları uygulandığında kuyu farklı şekiller alabilir. Şekil 23 deki dalga fonksiyonlarının grafiği $\gamma = 10 \text{ Å}$ için yapılmıştır. Grafikdende görüldüğü gibi simetrik kare potansiyel kuyu elde edilmiştir.

Tablo 10 $\gamma = 10 \text{ Å}$ olduğunda Wood-Saxon potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	$E_n \text{ (meV)}$
1	86.85
2	260.85

Daha öncede söylenildiği gibi $\gamma = 0.1 \text{ Å}$ olduğunda kuyu kare kuyu haline gelir ve enerji özdeğerleri sonlu kare kuantum kuyusunda elde edilmiş enerji

özdeğerlerine benzerlik teşkil eder. Tablo 11 ve Tablo 3 karşılaştırıldığında bu benzerliği görmek mümkündür.

Tablo 11 $\gamma = 0.1 \text{ \AA}$ olduğunda Wood-Saxon potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	$E_n \text{ (meV)}$
1	41.27
2	163.77

Wood-Saxon potansiyeli hesaplandıktan sonra bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla dalga fonksiyonları hesaplandı ve grafiği çizildi. Sonuç olarak bu hesaplamalarda γ bariyer eğimliliğinin değerine göre dalga fonksiyonlarının grafiği çizildi ve $\gamma = 0.1 \text{ \AA}$ olduğunda dikdörtgen kuantum kuyusu elde edildi. Farklı elektrik ve manyetik alanlarda yoğunlaştırılmış lazer etkisi vasıtasıyla bu kuyular farklı şekiller alabilir (Restrepo vb, 2015).

5.6 Rosen – Morse Potansiyeli

Yüksek kaliteli yarıiletken heteroyapılar Metal Organik Kimyasal Buhar Biriktirme ve Moleküler Işın Epitaksi yöntemleri vasıtasıyla üretilmektedir (Türkoğlu, 2021). Bu yüksek kaliteli yarıiletken heteroyapılar kuantum kuyular olarak adlandırılır. Bu yöntemler vasıtasıyla parabolik, kare, yarı parabolik, simetrik ve asimetrik, ters parabolik, V potansiyeli, Rosen-Morse, Pöschl-Teller, Morse gibi farklı geometrilere sahip kuantum kuyular elde edilir (Hien vb, 2020). Bu kuantum kuyuların hepsi önemli fiziksel özelliklere sahiptir. Bu fiziksel özelliklerden en önemlisi enerji seviyeleri arasında olan optik özelliklerdir. Bu yarı iletken kuantum kuyuları farklı geometri şekillerine sahiptir ve bu şekillerde elektronun kuyu içerisinde durumunu etkiler. Farklı geometriye sahip yarıiletken kuantum kuyuları farklı alt bant enerji seviyelerine sahiptir ve bu enerji seviyelerinde ilk enerji seviyesi ile taban enerji seviyesi arasındaki fark küçüktür. Bu yapılar büyük dipol matris elemanlarına sahiptirler. Bu özellikler bu yapıların optik özelliklerini büyük oranda etkiler (Türkoğlu, 2021). Bu fiziksel özelliklere sahip olan bazı lazerler, fotodiyotlar, optik anahtarlar gibi optoelektronik aygıtlar bu yarıiletken kuantum kuyuları vasıtasıyla üretilmektedir (Nakamura vb, 1993). Kuantum kuyuların elektronik özelliklerini incelerken bazen dış etkileri de dikkate almak gerekir ve bunun üzerinde halen daha önemli çalışmalar yapılmaktadır. Yoğun lazer alanı altında kuantum kuyuların

özelliklerinin incelenmesi her geçen gün daha da gelişmektedir. Nano-fabrikasyon alanında gelişmeler sonucunda, son yıllarda kuantum kuyuların özelliklerinin incelenmesi daha da kolaylaşmıştır (Rezaei vb, 2010).

Çalışmanın bu kısmında Rosen-Morse potansiyelinden istifade edilerek GaAs/AlAs kuantum kuyusunun elektronik özellikleri incelenmiştir. Hesaplamalar yapılırken dış etkiler hesaba katılmamıştır. Etkin kütle ve parabolik bant yaklaşımı çerçevesinde öz-enerjiler ve öz-fonksiyonlar hesaplanmıştır ve sonuç olarak dalga fonksiyonlarının karelerinin grafiği elde edilmiştir.

5.6.1 Teori

Çalışmanın bu kısmının amacı Rosen Morse potansiyeli vasıtasıyla kuantum kuyusunun elektronik özelliklerinin incelenmesidir. $V_{RM}(z)$ Rosen-Morse potansiyeli aşağıdaki gibi gösterilir (Rosen vb, 1932).

$$V_{RM}(z) = -V_1 \text{sech}^2(\eta z) + V_2 \tanh^2(\eta z) \quad (5.28)$$

Burada V_1 ve V_2 Rosen Morse kuantum kuyusunda derinlik potansiyelleridir, η ise kuantum kuyusunun genişlik parametresi, z ise kuantum kuyusunun büyüme yönüdür.

Çalışmanın bu kısmında özenerjiler ve özfonksiyonlar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla hesaplanmıştır. Rosen-Morse potansiyelleri V_1, V_2 ve η değerlerine göre hesaplandıktan sonra sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde matris denklemleri kurulmuştur. Hesaplamalar yapılırken dış etkiler hesaba katılmamıştır.

$$a_i = -\frac{C}{m(\Delta z)^2} = c_i, \quad (5.29)$$

$$b_i = \frac{2C}{m(\Delta z)^2} + V_i$$

Burada a_i, b_i, c_i matrisi oluşturan elementlerdir. b_i matrisin diyagonalı, a_i ve c_i ise diyagonalın sol ve sağ tarafında olan sabit elementlerdir.

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_i & b_i & c_i & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

5.6.2 Hesaplama

Hesaplamalarda kuantum kuyusu GaAs malzemesinden bariyerler ise AlAs malzemesinden yapılmıştır. GaAs/ AlAs kuantum kuyusunun elektriksel özellikleri Rosen-Morse potansiyeli vasıtasıyla açıklanmıştır. Tüm hesaplamalar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla hesaplanmıştır. Hesaplamalarda istifade olunan değerler “The laser field controlling on the nonlinear optical specifications of the electric field-triggered Rosen-Morse quantum well” adlı makaleden götürülmüştür ve sonuçlar karşılaştırılmıştır.

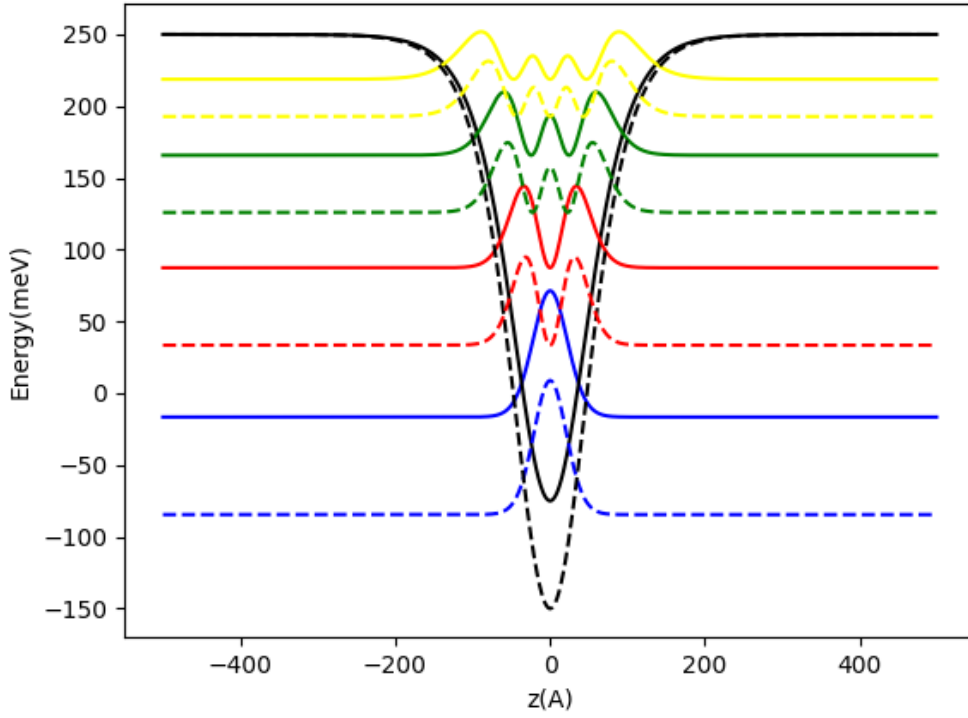
Sonuçlar V_1, V_2 ve η değerlerine bağlı olarak iki durumda hesaplanmıştır. Tüm hesaplamalarda Rosen-Morse kuantum kuyusunun büyüme yönü $z(-500,500)$ ve $\Delta z = 1$, etkin kütle $m^* = 0.067m_0$ (m_0 elektronun kütlesidir) olarak götürülmüştür.

Birinci durumda $V_1 = 75$ meV , $V_2 = 250$ meV ve $\eta = 0.015 \text{ \AA}$ olarak götürülmüştür. V_1 in ikinci bir değeri ise $V_{1,2} = 150$ meV olarak götürülmüştür. Yani birinci durumda η ve V_2 değerleri sabit olarak kalacak ve hesaplama V_1 değerlerine göre hesaplanacaktır. (5.28) denkleminde $V_1 = 75$ meV ve $V_{1,2} = 150$ meV değerine göre hesaplanmış matris denklemi aşağıdaki gibi olmuştur.

$$\begin{bmatrix} 113980.81 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 113980.81 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 113691.62 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 113980.81 \end{bmatrix} \quad (5.31)$$

$$\begin{bmatrix} 113980.81 & -56865.40 & & & \\ -56920.30 & 113980.81 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 113825.30 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 113980.81 \end{bmatrix} \quad (5.32)$$

Python yazılım programında matris denkleminde kodlar vasıtasıyla Rosen-Morse kuantum kuyusunun enerji özdeğerlerinin karesine uygun gelen dalga fonksiyonlarının karelerinin grafiği çizildi.



Şekil 24 Rosen-Morse kuantum kuyusu ve ilk en düşük dört enerji özdeğerlerinin karesine karşılık gelen dalga fonksiyonlarının grafiği

Burada Düz çizgiler $V_1 = 75$ meV, kesikli çizgiler $V_{1,2} = 150$ meV, $V_2 = 250$ meV ve $\eta = 0.015 \text{ \AA}$ dur. Şekil 24 de siyah çizgiler Rosen-Morse potansiyelinin grafiği, mavi çizgiler E_1 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiği, kırmızı çizgiler E_2 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiği, yeşil çizgiler E_3 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiği, sarı çizgiler E_4 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiğini gösterir. Grafikten de görüldüğü gibi V_1 potansiyeli 75 meV dan 150 meV a artığında Rosen-Morse kuantum kuyusunda bağlı durumların enerji seviyeleri artır. Burada olan enerji boşlukları V_1 potansiyelinin artması ile derinleşir ve buda rezorans enerjilerinde maviye kaymağa sebep olur. Bu artış ikinci ve üçüncü harmonik nesil elemanlarının azalmasına sebep olur. İkinci ve üçüncü harmonik nesil genlikleri azalır. Aşağıdaki tablolarda V_1 değerlerine göre Rosen Morse potansiyelinin ilk dört enerji özdeğerleri gösterilmiştir

Tablo 12 $\eta = 0.015 \text{ \AA}$, $V_1 = 75 \text{ meV}$ ve $V_2 = 250 \text{ meV}$ olduğunda Rosen Morse potansiyeli için hesaplanan ilk dört enerji özdeğerleri

n	$E_n \text{ (meV)}$
1	-16.59
2	-46.18
3	87.40
4	165.81

Tablo 13 $\eta = 0.015 \text{ \AA}$, $V_1 = 150 \text{ meV}$ ve $V_2 = 250 \text{ meV}$ olduğunda Rosen Morse potansiyeli için hesaplanan ilk dört enerji özdeğerleri

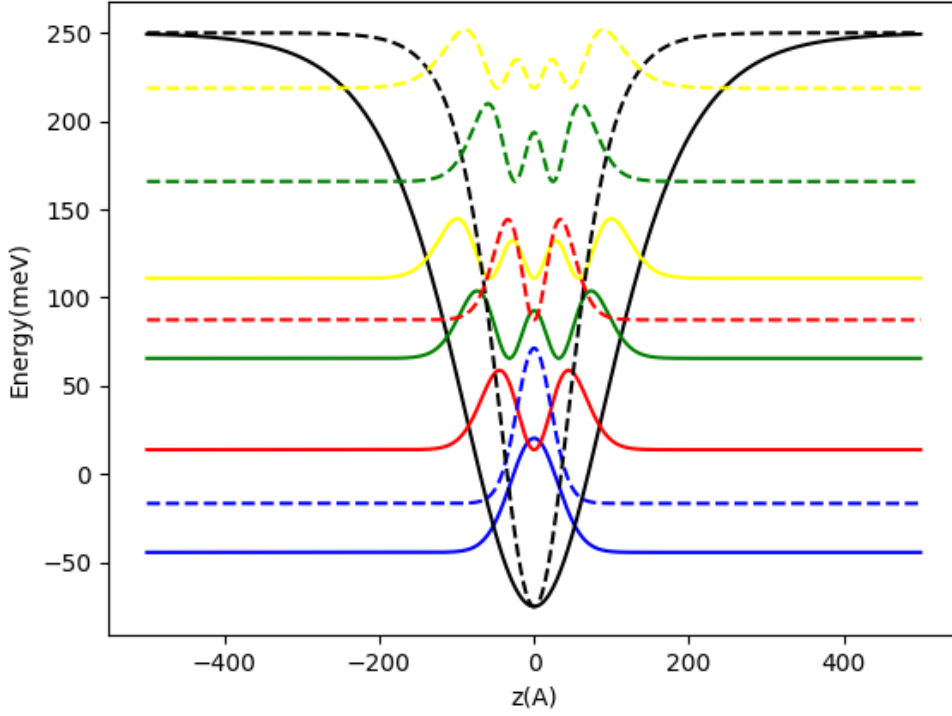
n	$E_n \text{ (meV)}$
1	-84.57
2	33.47
3	125.92
4	192.80

İkinci durumda ise $V_1 = 150 \text{ meV}$, $V_2 = 250 \text{ meV}$ sabit olarak götürülmüştür. Bura hesaplamalar η değerlerine göre değişecektir. $\eta = 0.0075 \text{ \AA}$ ve $\eta = 0.015 \text{ \AA}$ değerlerine göre hesaplamalar ayrılmış Rosen-Morse potansiyelleri hesaplanmıştır. Bu değerlere göre matris denklemleri sırasıyla aşağıdaki gibi verilir.

$$\begin{bmatrix} 113980.08 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 113980.08 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 113666.97 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 113980.08 \end{bmatrix} \quad (5.33)$$

$$\begin{bmatrix} 113980.81 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 113980.81 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 113655.88 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 113980.81 \end{bmatrix} \quad (5.34)$$

Şekil 25 de Rosen-Morse kuantum kuyusunun η değerlerine göre dalga fonksiyonlarının ve ilk en düşük dört enerji seviyelerinin grafiği çizildi.



Şekil 25 Rosen-Morse kuantum kuyusu ve ilk en düşük dört enerji özdeğerlerinin karesine karşılık gelen dalga fonksiyonlarının aslılık grafiği

Burada Düz çizgiler $\eta = 0.0075 \text{ \AA}$, kesikli çizgiler $\eta = 0.015 \text{ \AA}$, $V_1 = 75 \text{ meV}$ ve $V_2 = 250 \text{ meV}$. Şekil 25 siyah çizgiler Rosen-Morse potansiyelinin aslılık grafiği, mavi çizgiler E_1 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiği, kırmızı çizgiler E_2 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiği, yeşil çizgiler E_3 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiği, sarı çizgiler E_4 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiğini gösterir. Grafikten de görüldüğü gibi maviye kaymanın sebebi Rosen-Morse kuantum kuyusunun daralmasıdır. Bu daralma η değerine bağlı olarak değişir. η değerinin artması rezonans genliğinde azaltır. η değerinin azalması ile enerji boşlukları daralmış daha kararlı bir hale gelmiş, enerji boşluklarının daralması ise rezonans maviye kaymağa sebep olmuştur. Bu halde kuantum kuyuların daralması rezonans üzerinde dalgalanmaya neden olur.

Aşağıdaki tablolarda η değerlerine göre Rosen Morse potansiyelinin ilk dört enerji özdeğerleri gösterilmiştir

Tablo 14 $\eta = 0.0075 \text{ \AA}$, $V_1 = 75 \text{ meV}$ ve $V_2 = 250 \text{ meV}$ olduğunda Rosen Morse potansiyeli için hesaplanan ilk dört enerji özdeğerleri

n	$E_n \text{ (meV)}$
1	- 44.31
2	13.84
3	65.68
4	110.97

Rosen-Morse potansiyel formülü kullanılarak GaAs/AlAs kuantum kuyusunun elektronik özellikleri açıklandı. Hesaplamalar iki durumda yapıldı. Birinci durumda hesaplamalar V_1 potansiyelinin aldığı değerlere göre, ikinci durumda ise η nün aldığı değerlere göre hesaplamalar yapıldı. Sonuç olarak grafiklerden de görüldüğü gibi V_1 potansiyelinin artması kuantum kuyusunun çekiciliğinin artmasına ve rezonans frekanslarında maviye kaymağa yol açtı. η değerlerinin artması ise kuantum kuyusunun çekiciliğinin azalmasına yol açtı. İkinci ve üçüncü harmonik nesil genlikleri V_1 ve η değerlerinin artması ile azaldı.

Tüm hesaplamalar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla yapılmıştır. Hesaplamalarda kullanılan değerler “The laser field controlling on the nonlinear optical specifications of the electric field-triggered Rosen-Morse quantum well” adlı makaleden götürülmüş ve sonuçlar karşılaştırılmıştır benzeri sonuçlar elde edilmiştir (Ungan vb, 2020). Rosen-Morse potansiyeli son yıllarda gelişmiş nano-fabrikasyon yöntemleri vasıtasıyla üretilir ve optik özellikleri cihaz tasarımlarında kullanılır.

5.7 Helman Potansiyeli

GaAs/AlAs malzemelerinden hazırlanmış kuantum kuyusunun elektronik özellikleri teorik olarak incelenmiştir. Bu elektronik özellikler Helman potansiyeli vasıtasıyla araştırılmıştır. Bu hesaplamalarda dış etkenler dikkate alınmamıştır. Helman potansiyeli formülünde olan V_0 ve η değerleri değiştirilerek kuyunun optik özellikleri üzerindeki etkisi araştırılmıştır. Bu hesaplamaları yapmak için Schrödinger denklemi Helman potansiyel formülüne göre çözülmüş ve sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla dalga fonksiyonları ve ona karşılık gelen enerji seviyeleri hesaplanmış ve grafiği çizilmiştir.

Son yıllarda kuantum kuyular, kuantum noktacıklar ve kuantum teller gibi asimetrik kuantum yapılarının optik özellikleri hem teorik hem de deneysel olarak

hesaplanmıştır. Son yıllarda bazı yöntemler vasıtasıyla kuantum kuyularının farklı şekilleri incelenmiştir. Moleküler epitaksi ve kimyasal buhar biriktirme yöntemleri vasıtasıyla farklı şekillere sahip kuantum kuyular günümüzde incelenmektedir (Azeza vb, 2011). Kuantum kuyularının bu şekillerini kullanarak, metaforik veya modülasyon teknikleri vasıtasıyla farklı potansiyel çeşitleri elde edilebilir (Durmuşlar vb, 2021).

Kuantum kuyularında olan potansiyel profilleri elektrik ve manyetik alanlarının etkisi ile değişebilir (Durmuşlar vb, 2021). Elektik alanlarının doğru şekilde uygulanması sonucunda kuyuda elektronlar daha düşük bölgelere doğru gider ve dalga fonksiyonları ve enerji seviyelerinin konumunu etkiler.

Son yıllarda kuantum kuyularının optik özelliklerini hesaplamak için birçok teorik ve deneysel çalışmalar yapılmıştır. V şekilli kuantum kuyular üzerinde çalışmalar (Karimi vb, 2014), parabolik kuantum kuyular üzerinde çalışmalar (Kasapoğlu vb, 2017) ve dereceli kuantum kuyular üzerinde yapılmış olan çalışmalar (Öztürk vb, 2014) örnek verilebilir.

Bu hesaplamada Helman potansiyeline sahip olan kuantum kuyuların enerji seviyeleri incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar vasıtasıyla yeni nesil kuantum kuyuları tasarlanabilir (Durmuşlar vb, 2021).

5.7.1 Teori

Hesaplamanın bu bölümünde Helman potansiyeli vasıtasıyla kuantum kuyuların dalga fonksiyonları ve enerji seviyelerinin nasıl hesaplandığı araştırılmıştır. $V_{IQHP}(z)$ Hellman potansiyelidir ve aşağıdaki ifade ile yazılır (Mathe vb, 2021).

$$V_{IQHP}(z) = -\frac{V_0}{\eta z} + \frac{V_0}{\eta^2 z^2} \exp(-\eta z) \quad (5.35)$$

Burada V_0 ve η ayarlanabilir fiziksel sabitlerdir. Bu hesaplamada Helman potansiyel formülü vasıtasıyla z büyüme yönü boyunca potansiyeller hesaplandı. Bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla ve sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde matris denklemi kuruldu. Aşağıda matris denkleminin elementleri ve matris denkleminin bu elementler vasıtasıyla yazılımı verilmiştir.

$$a_i = -\frac{C}{m(\Delta z)^2} = c_i ,$$

$$b_i = \frac{2C}{m(\Delta z)^2} + V_i \quad (5.36)$$

Burada C normalizasyon sabitidir. b_i matrisin diyoganali, a_i ve c_i ise diyoganalin sol ve sağ elementleridir. Bu elementleri matriste yerine koyduğumuzda matris aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_i & b_i & c_i & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad (5.37)$$

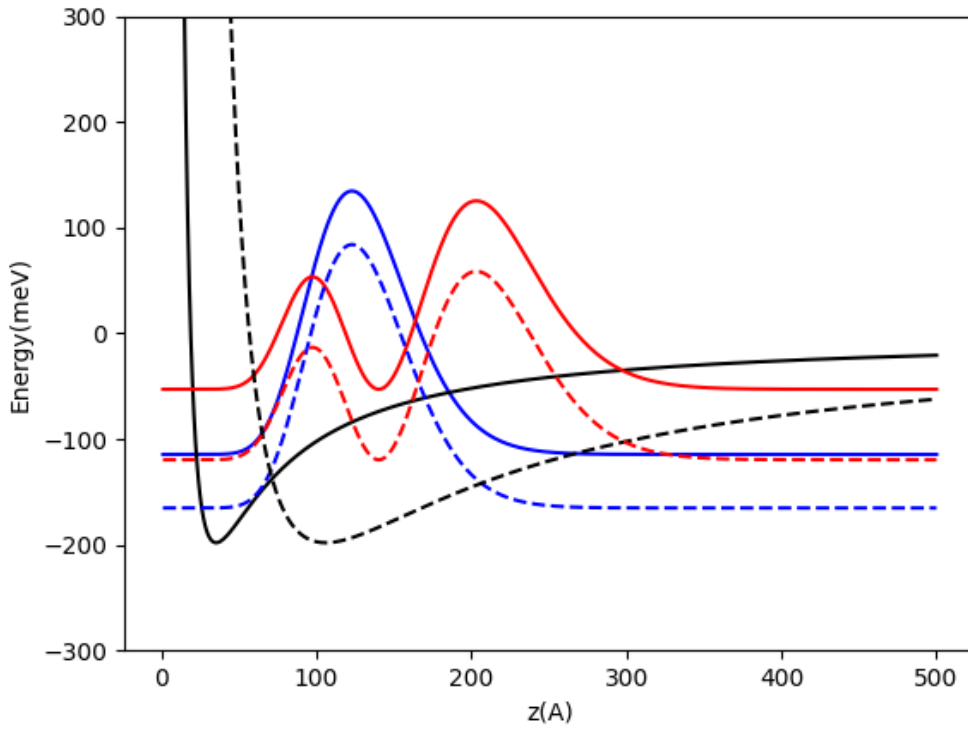
5.7.2 Hesaplama

Bu hesaplamada GaAs/AlAs kuantum kuyusunun Hellman potansiyeli vasıtasıyla optik özellikleri hesaplanmıştır. Hesaplamalarda elektronun etkin kütlesi $m^* = 0.067m_0$ olarak seçilmiştir. V_0 potansiyeli ve η ayarlanabilir sabitler olduğu için farklı değerler için hesaplanmıştır. Helman potansiyelini hesapladıktan sonra sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde matris denklemi kuruldu ve Python yazılım programı vasıtasıyla dalga fonksiyonlarının grafiği çizildi ve sonuçlar “Nonlinear optical properties of a quantum well with inversely quadratic Hellman potential” makalesinde olan sonuçlar ile karşılaştırıldı aynı sonuçlar elde edildi (Durmşlar vb, 2021).

İlk olarak (5.35) denklemi $V_0 = 312 \text{ meV}$, $\eta = 0.01 \text{ Å}^{-1}$, $\eta = 0.03 \text{ Å}^{-1}$ olarak hesaplandı. Hesaplamalarda kuyu genişliği $L = 10000 \text{ Å}$ ve $\Delta z = 1$ olarak seçilmiştir. Ancak kuyu genişliğinin bu kadar büyük olması dalga fonksiyonlarının grafiğinin iyi görülmemesine yol açar. Bunun için de z büyüme yönü grafikte $[0,500]$ gösterilmiştir. Burada η kuantum kuyusunun etkin genişliği, V_0 ise bariyer engelidir. Şekil 26 da kesikli çizgiler $\eta = 0.01 \text{ Å}^{-1}$ ve $V_0 = 312 \text{ meV}$ değerleri için gösterilmiştir. Düz çizgiler ise $\eta = 0.03 \text{ Å}^{-1}$ ve $V_0 = 312 \text{ meV}$ değerleri için gösterilmiştir.

Şekil 26 da her iki kırmızı çizgi taban durum enerjisini ve bu enerjiye uygun gelen olasılık enerji yoğunluklarını gösterir, mavi çizgiler ise ilk uyarılmış enerjileri ve bu enerjilere uygun gelen ilk olasılık enerji durum yoğunluklarını gösterir. Siyah çizgiler Hellman potansiyelinin büyüme yönündeki grafiğini gösterir. Şekil 26 da her hangi bir dış elektrik ve manyetik alanın etkisi olmadan hesaplanmış dalga fonksiyonlarının karelerinin grafikleridir. Bu grafik iki η değeri için hesaplanmış sınırlandırma potansiyellerini ve en düşük enerji seviyelerini ve bu seviyeler uygun

gelen olasılık yoğunluklarını içerir. Birinci parametre artıkça sistemin hapsedme potansiyeli derinleşir ve kuantum kuyunun genişliği azalır. Bunun sonucunda iki en düşük enerji seviyeleri bir birlerinden aralanmağa başlar. Bu ilk değer $\eta = 0.03\text{\AA}^{-1}$ olduğunda kuantum kuyusu daha da daralır ama bunun sonucu olarak ise ilk iki seviyedeki enerjiler bir birlerine yaklaşımağa başlar. Aslında kuantum kuyusu genişlediğinde elektronlar E_1 ve E_2 değerlerindeki aldıkları uyumsal sınırlamayı kaybeder (Aytekin vb, 2012).



Şekil 26 *GaAs/AlAs* kuantum kuyusunun Hellman potansiyeli ile hesaplanmış ilk iki enerji seviyelerinin karesine uygun gelen dalga fonksiyonlarının karesinin grafiği

Şekil 26 da verilmiş grafiği almak için Hellman potansiyelleri hesaplandı ve sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde matrisi denklemi elde edildi. Elde edilmiş matris denklemi $\eta = 0.01\text{\AA}^{-1}$ ve $V_0 = 312$ meV için aşağıdaki gibi verilir.

$$\begin{bmatrix} 862997.77 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 862997.77 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 113913.55 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 113980.49 \end{bmatrix} \quad (5.38)$$

Bu verilere uygun olarak Helman potansiyelli kuantum kuyusunun ilk iki enerji özdeğerleri Tablo 15 da verilmiştir.

Tablo 15 $\eta = 0.01\text{\AA}^{-1}$ ve $V_0 = 312\text{ meV}$ olduğunda Helman potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	$E_n (\text{meV})$
1	- 165.25
2	- 119.65

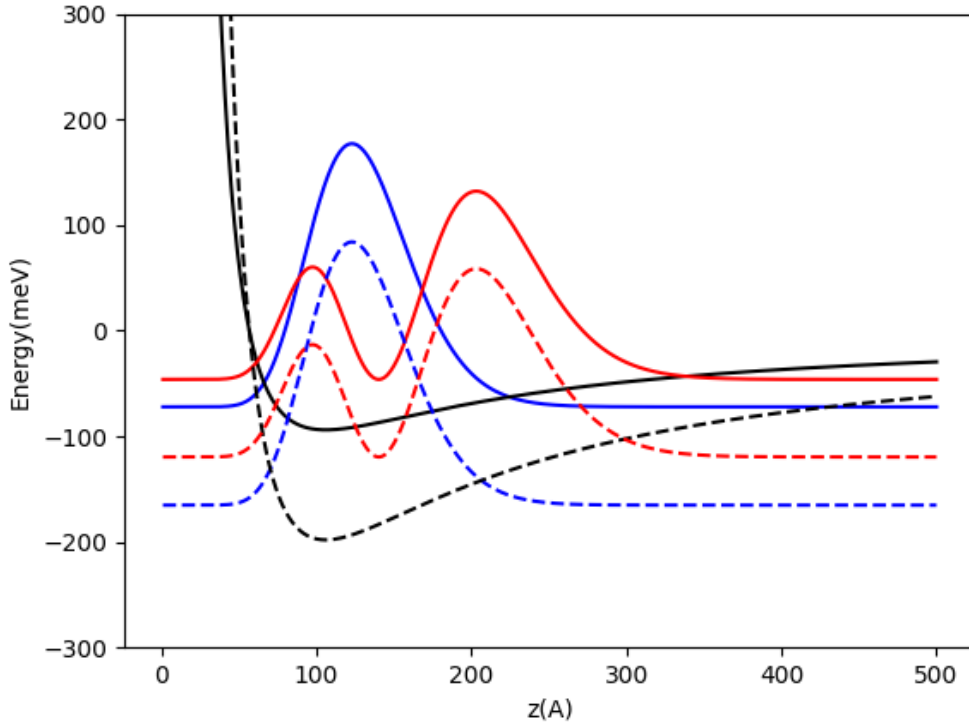
$\eta = 0.03\text{\AA}^{-1}$ ve $V_0 = 312\text{ meV}$ için matris denklemleri aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{bmatrix} 190462.40 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 190462.40 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 113999.84 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 114022.01 \end{bmatrix} \quad (5.39)$$

Bu verilere uygun olarak da Helman potansiyelli kuantum kuyusunun ilk iki enerji özdeğerleri Tablo 16 da verilmiştir.

Tablo 16 $\eta = 0.03\text{\AA}^{-1}$ ve $V_0 = 312\text{ meV}$ olduğunda Helman potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	$E_n (\text{meV})$
1	- 114.59
2	- 52.93



Şekil 27 $GaAs/AlAs$ kuantum kuyusunun Helman potansiyeli ile hesaplanmış ilk iki enerji seviyelerinin karesine uygun gelen dalga fonksiyonlarının karesinin grafiği

Şekil 27 de her iki kırmızı çizgi taban durum enerjisini ve bu enerjiye uygun gelen olasılık enerji yoğunluklarını gösterir, mavi çizgiler ise ilk uyarılmış enerjileri ve bu enerjilere uygun gelen ilk olasılık enerji durum yoğunluklarını gösterir. Siyah çizgiler Hellman potansiyelinin büyüme yönünden aslılık grafiğini gösterir.

Şekil 27 de V_0 potansiyelinin kuyunun enerji alt bantları üzerinde ve dalga fonksiyonları üzerinde olan etkisi incelenmiştir. Bu durumda $\eta = 0.01\text{\AA}^{-1}$ olarak sabit olarak tutulmuş ancak V_0 potansiyelleri iki farklı değer almıştır. $V_0 = 148\text{ meV}$ olduğunda kuyunun hapsedilme potansiyeli azalır ancak, kuantum kuyusunun genişliği sabit kalır. Grafikte $V_0 = 148\text{ meV}$ olduğunda E_1 ve E_2 değerlerinin yükseldiğini ve dalga fonksiyonlarını büyüttüğü görülür. Bu kuantum kuyusunda $V_0 = 148\text{ meV}$ den daha az olmamasında dikkat edilmedi, çünkü daha az olursa kuantum kuyusu düzleşir ve bağlı dalga fonksiyonları kalmaz. Bu değerler için de kuyu genişliği $L = 10000\text{ \AA}$ ve $\Delta z = 1$ olarak seçilmiştir. Ancak kuyu genişliğinin bu kadar büyük olması dalga fonksiyonlarının görülmemesine yol açar. Bunun için de z büyüme yönü grafiklerde $[0,500]$ seçilmiştir. $\eta = 0.01$ ve $V_0 = 148\text{ meV}$ için matris denklemi aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{bmatrix} 469152.32 & -56865.40 & & & \\ -56865.40 & 469152.32 & -56865.40 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -56865.40 & 113814.20 & -56865.40 \\ & & & \ddots & \\ & & & -56865.40 & 113849.25 \end{bmatrix} \quad (5.40)$$

Bu verilere uygun olarak da Helman potansiyelli kuantum kuyusunun ilk iki enerji özdeğerleri Tablo 17 de verilmiştir.

Tablo 17 $\eta = 0.01\text{\AA}^{-1}$ ve $V_0 = 148\text{ meV}$ olduğunda Helman potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	$E_n (\text{meV})$
1	- 72.17
2	- 46.18

Bu hesaplamada Hellman potansiyeline sahip GaAs kuantum kuyusunun elektronik özellikleri hesaplandı. Hesaplamalarda dış elektrik ve manyetik alan olmayan durumlar göz önünde bulundu. Hellman potansiyelinde olan η ve V_0 gibi değişken fiziksel sabitlerin kuantum kuyunun elektronik özelliklerine tesiri açıkça gösterildi. Bu hesaplamada Hellman potansiyeline sahip bir kuantum kuyusunun elektronik özellikleri üzerinde en büyük etkinin η ve V_0 gibi fiziksel sabitlere bağlı

olduğu açıkça görülmektedir. Kısaca özetlemek gerekirse ayarlanabilir bu fiziksel sabitler, enerji spektrumu ve dalga fonksiyonlarını kolayca değiştirebilir veya ayarlayabilir.

Sonuç olarak bu hesaplamada Hellman potansiyeline sahip bir kuantum kuyusunun elektronik özelliklerine dış elektrik ve manyetik alan, ayarlanabilir fiziksel sabitlerin nasıl etki ettikleri kısaca açıklandı. Hesaplamalarda kullanılan değerler “Nonlinear optical properties of a quantum well with inversely quadratic Hellman potential” adlı makaleden alındı ve sonuçlar karşılaştırıldı benzeri sonuçlar elde edildi (Durmuşlar vb, 2021). Tüm hesaplamalar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla hesaplandı.

5.8 Kratzer – Fues Potansiyeli

Kratzer potansiyeli ilk defa 1920 yılında Kratzer tarafından hazırlanmıştır (Kratzer, 1920). İki atomlu molekül yapılarında ve onların tanımlanmasında Kratzer potansiyeli oldukça önemlidir. Bunun için de Kratzer potansiyeline ait birçok çalışmalar mevcuttur. Dünya genelinde birçok bilim insanları Kratzer potansiyelini farklı durumlar için hesaplamışlar (Özfıdan, 2018). Klein – Gordon ve Schrödinger denklemleri Kratzer potansiyeli vasıtasıyla çözülmüştür (Yasuk vb, 2007), Schrödinger denkleminin Laplace dönüşümü Kratzer potansiyeli vasıtasıyla hesaplanmıştır (Sever vb, 2012), Kratzer potansiyeli vasıtasıyla tam kuantumlama yöntemi ile Schrödinger denklemleri çözüldü (Kasri vb, 2011). Molekül ve kuantum kimyasında Kratzer potansiyeli önemli rol oynamaktadır. Molekül yapılarını ve bu moleküllerin etkileşiminin incelenmesinde Kratzer potansiyeli oldukça önemlidir. Kratzer potansiyelinin molekül fiziğindeki önemlerinden dolayı bu konuda birçok çalışmalar mevcuttur (Ortakaya, 2011). Günümüzde ileriye dönük teknolojilerin temelini oluşturan düşük boyutlu yarı iletken sistemlerin elektronik ve optik özelliklerinin incelenmesi son yıllarda daha da artmıştır.

Birçok bilim insanları bu konuda farklı hesaplamalar yapmıştır. Farklı sınırlanma potansiyeli geometrisine sahip kuantum kuyuları özellikleri incelenmiştir. Yapılan bu çalışmaların çoğunluğunda kuantum kuyusunun optiksel özelliklerinin sınırlanma potansiyeli vasıtasıyla değişmesi sonucu ortaya koyulmuştur. Bu kuantum kuyu yapıları daha çok kristal büyütme yöntemi vasıtasıyla üretilir (Ungan vb, 2019).

Yarı iletken bantların belirli geometrisi bu kuantum kuyu yapılarının hem doğrusal hem de doğrusal olmayan optik özelliklerini etkiler. Yarı iletken kuantum kuyularında elektronun hapsedilmesine ait birçok kuyuların şekilleri vardır. Kratzer-Fues kuantum kuyusu son zamanlarda elektron hapsedilmesine göre araştırma konusu olmuştur (Dehyar vb, 2016). Kratzer – Fues kuantum kuyusu ilk başlarda hidrojen halojenlerinin dönme spektrumlarının incelenmesi için kullanılmıştır (Kratzer, 1920). Daha sonra ise iki atomlu molekül spektrumlarının incelenmesi için kullanılmaya başladı (Fues, 2006).

Bu hesaplamada Kratzer-Fues potansiyeli vasıtasıyla GaAs/AlAs kuantum kuyusunun dış etkilere maruz kalmadan optik ve elektronik özellikleri incelenmiştir. Etkin kütle ve zarf dalga fonksiyonları yaklaşımı kullanılarak dış etki alanı olmadan Kratzer-Fues kuantum kuyusunun elektriksel ve optiksel özellikleri incelendi.

5.8.1 Teori

Bir kuantum kuyusunun GaAs/AlAs malzemesinden hazırlandığını ve bu kuantum kuyusunun sınırlayıcı potansiyellerinin Kratzer-Fues potansiyeli vasıtasıyla hesaplandığını varsayalım. Böyle bir kuantum kuyusu Kratzer-Fues kuantum kuyusu adlanır. Dışardan elektrik, manyetik ve lazer etkileri kuyu içerisinde hapsedilmiş elektronun hareketine etki edecektir. Ancak bu hesaplamada dış etkiler sıfır olarak kabul edilmiştir. $V_{KF}(z)$ Kratzer-Fues potansiyelidir ve aşağıdaki gibi verilir.

$$V_{KF}(z) = -V_0 \left(\frac{2r_0}{z} - \frac{r_0^2}{z^2} \right) \quad (5.41)$$

Denklem (5.41) de V_0 Kratzer-Fues potansiyelinin bariyer yüksekliği, z kuantum kuyusunun büyüme yönü, r_0 ise Kratzer-Fues potansiyelinin dip noktasıdır.

Kratzer-Fues potansiyellerini (5.41) denklemine göre kuyunun büyüme yönü vasıtasıyla bulduktan sonra sonlu farklar yöntemi kullanılarak $N \times N$ ölçekde matris denklemi kuruldu. Bu matris denkleminde istifade ederek bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla Kratzer-Fues kuantum kuyusunun dalga fonksiyonlarının ve onlara uygun gelen enerji değerlerinin grafiği kuruldu. Matris denklemi aşağıdaki formül ile verilir.

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_i & b_i & c_i & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad (5.42)$$

Denklem (5.42) de verilen a_i, b_i ve c_i matris elemanları adlanır. a_i ve c_i matrisin sabit elemanları, b_i ise matrisin diyagonal elemanı adlanır ve aşağıdaki gibi gösterilir.

$$a_i = -\frac{C}{m(\Delta z)^2} = c_i, \quad (5.43)$$

$$b_i = \frac{2C}{m(\Delta z)^2} + V_i$$

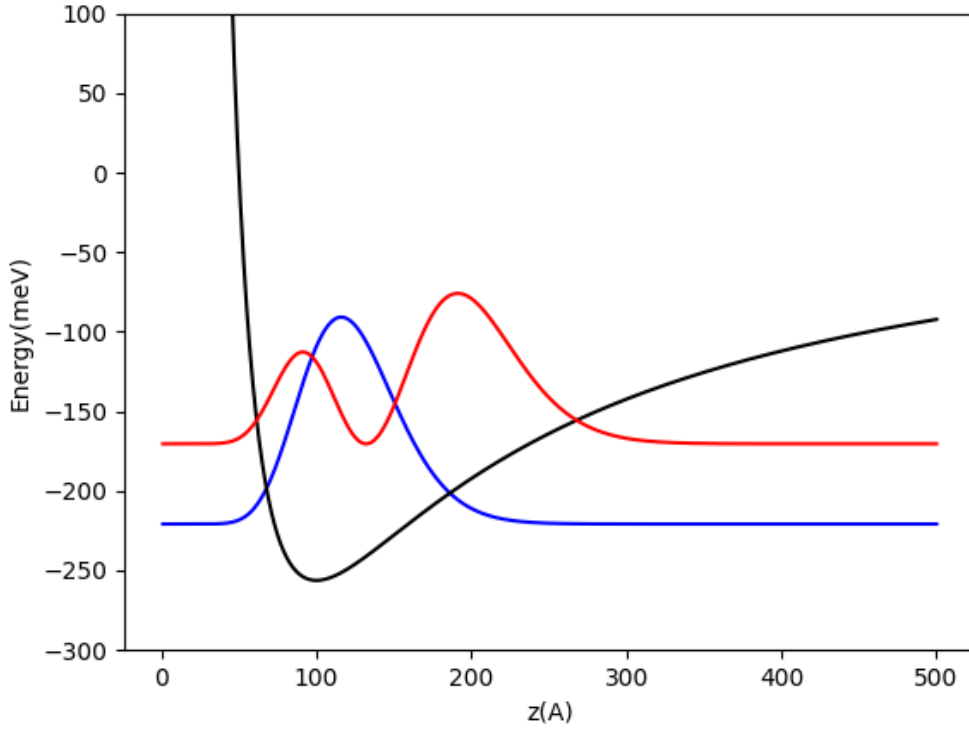
5.8.2 Hesaplama

Bu hesaplamada Kratzer-Fues kuantum kuyusunun elektronik özellikleri hesaplanmıştır. Hesaplamalarda kullanılan parametreler $V_0 = 256.258$ meV, $m^* = 0.067m_0$, $r_0 = 100$ Å ve $\Delta z = 1$ olarak alınmıştır. Hesaplamalarda kuantum kuyusunun z büyüme yönü $[0,500]$ arasında götürülmüştür. Hesaplamalarda kullanılan tüm parametreler “The nonlinear optical properties of GaAs-based quantum wells with Kratzer–Fues confining potential: Role of applied static fields and non-resonant laser radiation” adlı makaleden götürülmüş ve elde edilen sonuçlar makalede olan sonuçlar ile karşılaştırılmıştır (Ungan vb, 2019).

Hesaplamalarda ilk olarak Kratzer-Fues potansiyeli (5.41) denklemi vasıtasıyla hesaplanmıştır. Kratzer-Fues potansiyeli hesaplandıktan sonra sonlu farklar yöntemi vasıtasıyla $N \times N$ ölçüde matris denklemi kuruldu ve aşağıdaki gibi yazıldı.

$$\begin{bmatrix} 729006.27 & -56865.40 & & & & \\ -56865.40 & 729006.27 & -56865.40 & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & -56865.40 & 113815.38 & -56865.40 \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & -56865.40 & 113894.813 \end{bmatrix} \quad (5.44)$$

Matris denklemi kurulduktan sonra Python programında kodlar vasıtasıyla enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları bulundu ve grafikleri kuruldu. Grafikte dalga fonksiyonlarına uygun gelen minimum ilk iki enerji seviyelerinin grafiği çizilmiştir.



Şekil 28 Kratzer-Fues kuantum kuyusunun ilk iki enerji özdeğerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarının aslılık grafiği

Burada siyah çizgi Kratzer-Fues potansiyelinin, mavi çizgi E_1 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin, kırmızı çizgi E_2 enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonun karesinin grafiğidir. Şekil 28 de Kratzer-Fues kuantum kuyusunun genişliği hafif şekilde azalmıştır. Bu azalma ile birlikte kuyuda potansiyel kuyu tabanında küçük bir kayma olmuştur. Bu değişikliklere rağmen potansiyel enerjilerde çok az değişiklik olmuştur. Enerji seviyeleri daha büyük değerlere kaydırılır ancak enerji farkları değişmiyor. Eğer kuyuya dışardan manyetik, elektrik veya lazer etki etseydi bu etkiler kuantum kuyusunda eğilmelere neden olacaktı. Aşağıdaki tabloda Kratzer-Fues potansiyelli kuantum kuyusunun ilk iki enerji özdeğerleri verilmiştir.

Tablo 18 $V_0 = 256.258 \text{ meV}$, $r_0 = 100 \text{ Å}$ olduğunda Kratzer-Fues potansiyeli için hesaplanan ilk iki enerji özdeğerleri

n	$E_n \text{ (meV)}$
1	- 220.82
2	- 170.43

Bu hesaplamada GaAs/AlAs malzemesinden hazırlanmış kuantum kuyusunun Kratzer-Fuez potansiyeli vasıtasıyla elektronik özellikleri incelendi. Hesaplamalarda dış etkiler yani, manyetik, elektrik ve lazer etkileri sıfır olarak kabul edildi. Tüm hesaplamalar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla yapıldı. Hesaplamalarda kullanılan veriler ve elde edilen sonuçlar “The nonlinear optical properties of GaAs-based quantum wells with Kratzer–Fues confining potential: Role of applied static fields and non-resonant laser radiation” adlı makaledeki sonuçlar ile karşılaştırıldı ve benzeri sonuçlar elde edildi (Ungan vb, 2019). Elde edilen sonuçlara göre Kratzer-Fues potansiyelli yarı iletken tabanlı hetero yapıların bant içi optik özelliklerini modellemenin bir yolu olacağı düşünülmüştür.

5.9 Absorpsiyon Katsayısı

Kuantum kuyulu kızılötesi fotodetektörlerde iki tip absorpsiyon vardır. Bu absorpsiyonlardan birinci olanı değerlilik bandı ile iletkenlik bandı arasındadır. Bu bantlar arasındaki geçişler kesikli enerji seviyeleri arasında olur. Bu bantlar arası geçişlerde absorpsiyon enerjisi bantlar arası geçişlerden her zaman daha yüksek olur. Sonuç olarak ortaya çıkan yeni bant aralığına etkin bant aralığı denilir. Kuantum kuyularının taban enerjileri ile kuyu malzemesinin bant aralığının toplamı etkin bant aralığının enerjisidir.

Absorpsiyonun ikinci tipinde ise geçişler iletkenlik bandı ile değerlilik bandı arasında yer alan enerji seviyeleri arasında olur. Bu geçişlerde yaranan enerji seviyeleri ise alt bantlar olarak adlandırılır.

Düşük boyutlu kuantum mekanik sistemlerde bir optik bantlar arası geçiş fotoabsorpsiyon denir. Bu işlem bir fotonun soğurulmasıyla alt durumdan üst duruma geçmesiyle oluşur. Birinci dereceden Lineer absorpsiyon katsayısı şöyle tanımlıdır.

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \frac{\omega}{n_r c \epsilon_0} \frac{\sigma_s \hbar \Gamma_0 |\mu_{12}|^2}{(E_{12} + \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_0)^2} \quad (5.45)$$

Burada ω kuantum kuyusuna gelen lazerin açısal frekansıdır. Ayrıca $n_r = \sqrt{\epsilon_r}$ kuyunun kırılma indisi, ϵ_r kuyunun dielektrik sabiti, ϵ_0 vakum geçirgenlik sabiti, c ışık hızı, σ_s kuyudaki yüzey elektron yoğunluğu, $\hbar$ indirgenmiş Planck sabiti, Γ_0 gevşeme süresinin tersi, $E_{12} = E_2 - E_1$ ilk iki seviyenin enerji farkı ve $\mu_{ij} = \langle \psi_i | e z | \psi_j \rangle$ dipol matris elemanıdır (Çakır, 2021).

İlk olarak α fonksiyonunu meV birimiyle enerji cinsinden yazacağız. Fonksiyonu $\alpha(\hbar\omega)$ şeklinde yazmak için $\hbar\omega = xe10^{-3}$ ile değişken değişimi yapacağız. Diğer fiziksel değerleri $E_{12}(\text{meV})$, $z(\text{\AA})$, $\Gamma_0(\text{ps}^{-1})$ ve $\sigma(10^{22}\text{m}^{-2})$ birimleriyle yazacağız

$$E_{12} = E'_{12}e10^{-3} \quad \Gamma_0 = \Gamma'_010^{12} \quad \sigma_s = \sigma'_s10^{22} \quad z = z'10^{-10} \quad (5.46)$$

Dipol matris elemanı $\mu_{12} = \langle \psi_1 | ez | \psi_2 \rangle = e \langle \psi_1 | z | \psi_2 \rangle = e | z_{12} |$ olur. Absorpsiyon fonksiyonu şöyle olur.

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \frac{\omega}{n_r c \epsilon_0} \frac{1}{\hbar \Gamma_0} \frac{\sigma_s |\mu_{12}|^2}{\left(\frac{E_{12} + \hbar\omega}{\hbar \Gamma_0} \right)^2 + 1} = \omega \frac{1}{n_r c \epsilon_0} \frac{\sigma_s}{\hbar \Gamma_0} |\mu_{12}|^2 \left[\left(\frac{E_{12} + \hbar\omega}{\hbar \Gamma_0} \right)^2 + 1 \right]^{-1} \quad (5.47)$$

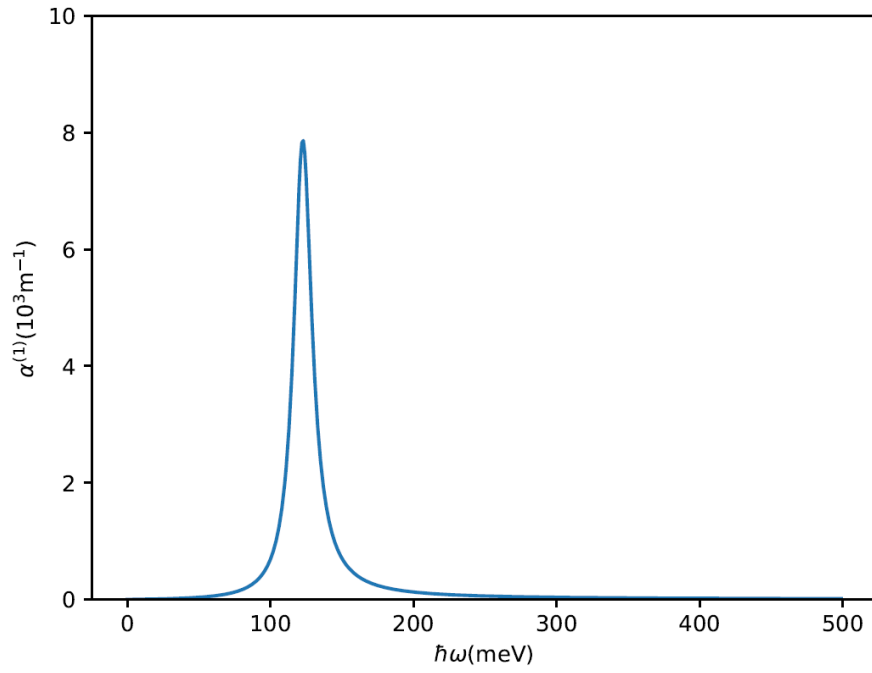
$$\alpha^{(1)}(x) = \frac{xe10^{-3}}{\hbar} \frac{1}{n_r c \epsilon_0} \frac{\sigma'_s 10^{22}}{\hbar \Gamma'_0 10^{12}} e^2 |z'_{12}|^2 10^{-20} \left[\left(\frac{E'_{12}e10^{-3} + xe10^{-3}}{\hbar \Gamma'_0 10^{12}} \right)^2 + 1 \right]^{-1} \quad (5.48)$$

$$\alpha^{(1)}(\hbar\omega) = x \frac{\sigma'_s}{n_r \Gamma'_0} \frac{e^3 10^{-13}}{\hbar^2 c \epsilon_0} |z'_{12}|^2 \left[\left(\frac{e}{\hbar \Gamma'_0 10^{15}} \right)^2 (E'_{12} + x)^2 + 1 \right]^{-1} \quad (5.49)$$

Burada z_{12} değeri $z(\text{\AA})$ boyunca her kuyuya ait hesaplanmış normalize edilmiş dalga fonksiyonları kullanılarak aşağıdaki integrale hesaplanır.

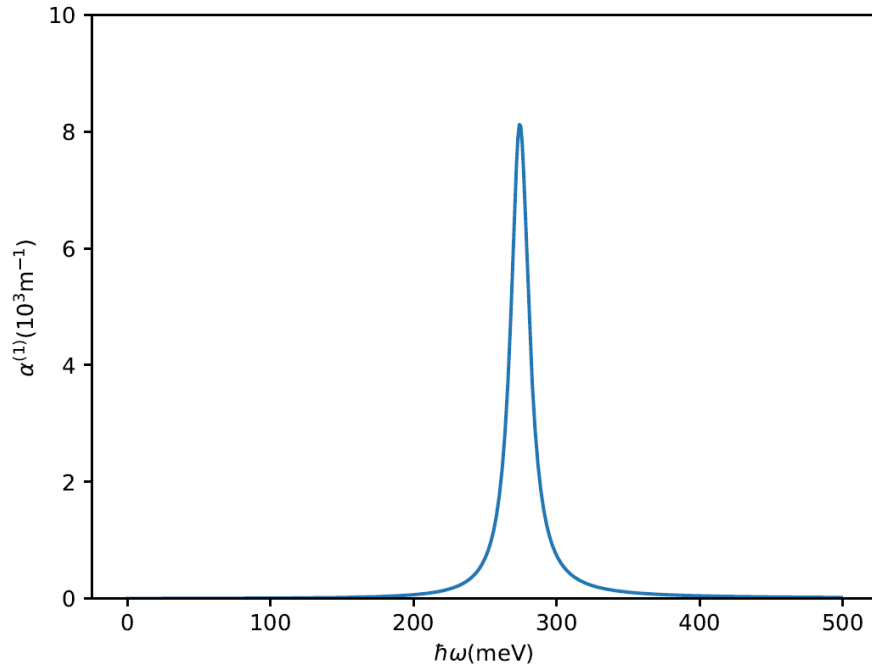
$$z_{12} = \int \psi_1 z \psi_2 dz \approx \sum_i (\psi_1)_i z_i (\psi_2)_i \quad (5.50)$$

Enerji farkı E_{12} karşılık gelen kuyuların ilk iki seviyesinin hesaplanmış E_1 ve E_2 enerji değerleridir. Hesaplamalarda $\sigma_s = 3 \times 10^{22}\text{m}^{-2}$, $\hbar\Gamma_0 = 60 \text{ meV}$, $n_r = 3.2$ alındı. Her potansiyel için lineer absorpsiyon fonksiyonu $\alpha^{(1)}(\hbar\omega)$ hesaplandı. Her biri için grafikler aşağıdaki gibidir.



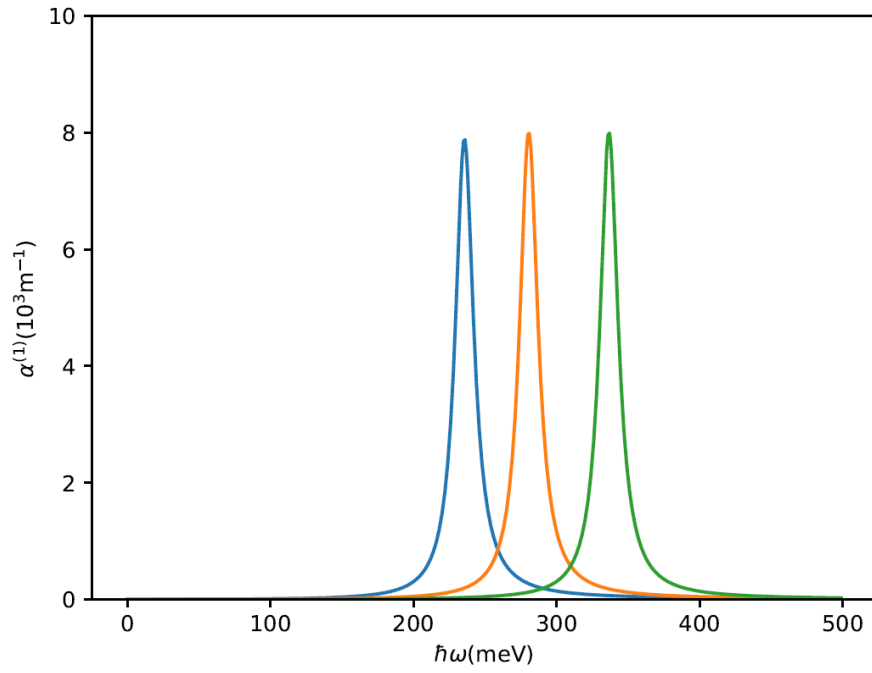
Şekil 29 Sonlu kare kuyu için lineer absorpsiyon katsayısı.

Kuyu genişliği $L = 100 \text{ Å}$ ve bariyer potansiyeli $V_0 = 835.49 \text{ meV}$ alınmıştır.



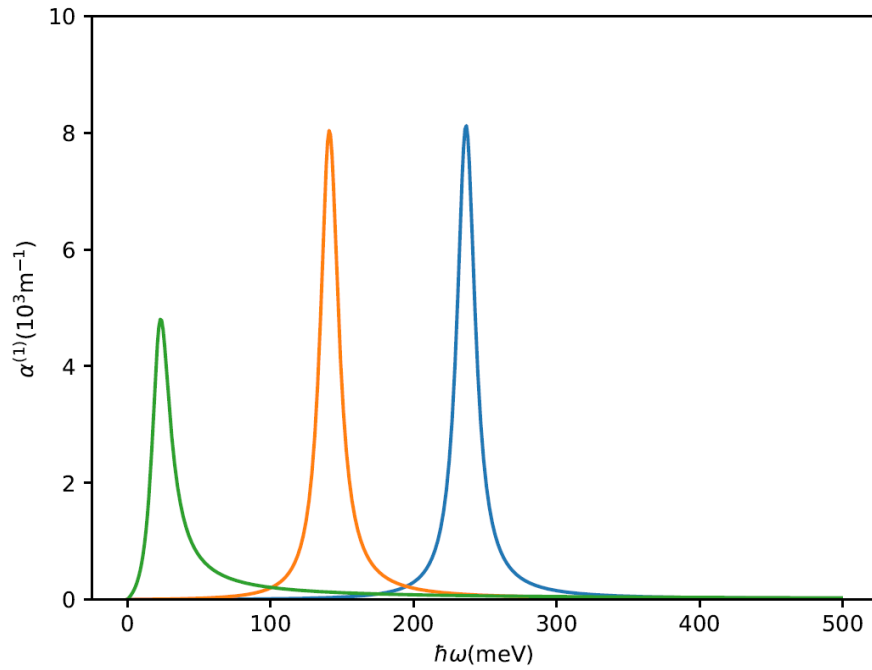
Şekil 30 Sonlu parabolik kuyu için lineer absorpsiyon katsayısı

Kuyu genişliği $L = 100 \text{ Å}$ ve bariyer potansiyeli $V_0 = 835.49 \text{ meV}$ alınmıştır.



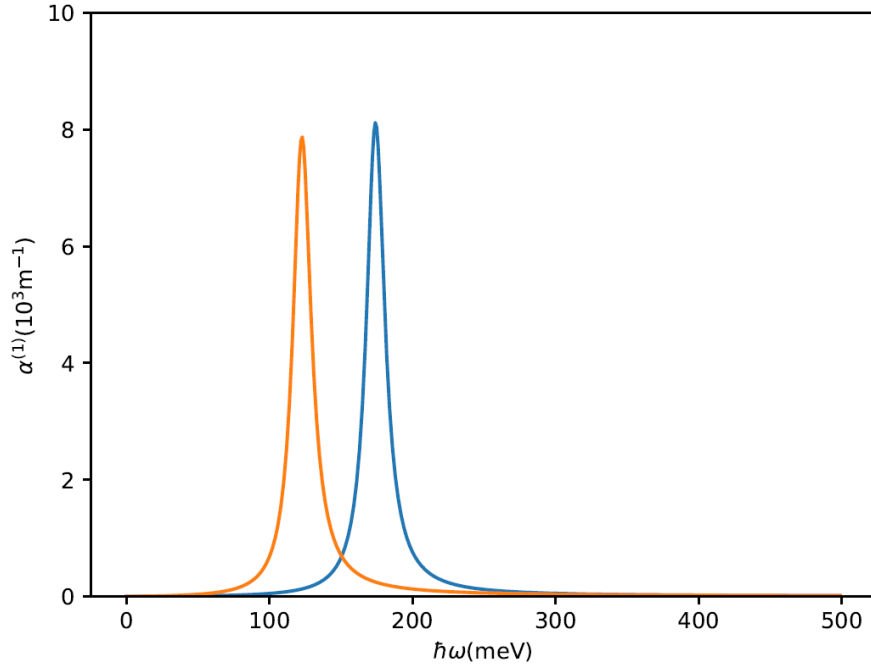
Şekil 31 Pöschl-Teller potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı

Potansiyel parametreleri $\eta = 2$ ile $k = 1.2$ (mavi), $k = 2$ (turuncu) ve $k = 3$ (yeşil) alınmıştır.



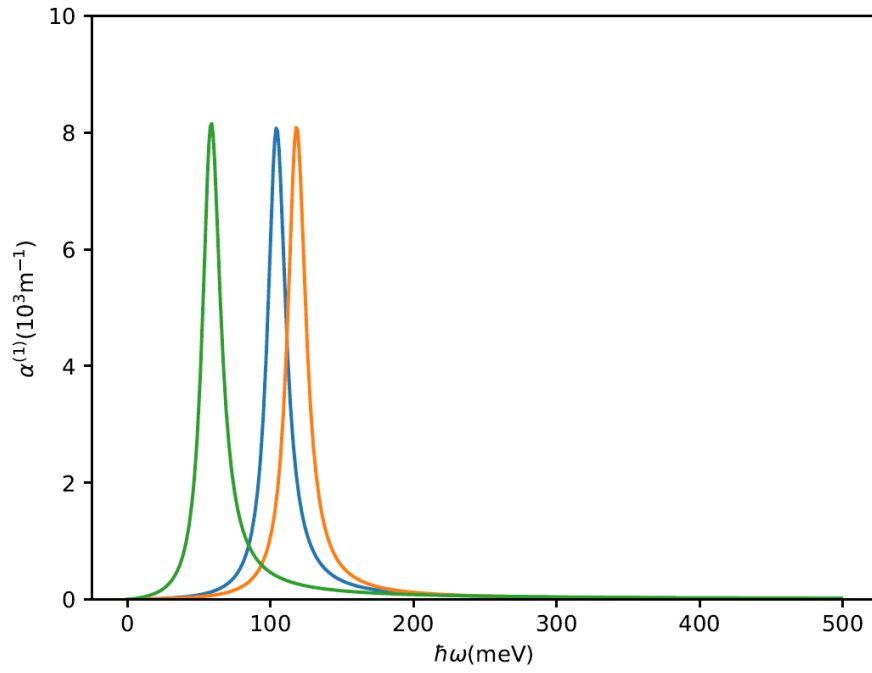
Şekil 32 Razavy potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı

Potansiyel parametreleri $A = 2$ ile $M = 1$ (mavi), $M = 2$ (turuncu) ve $M = 3$ (yeşil) alınmıştır.



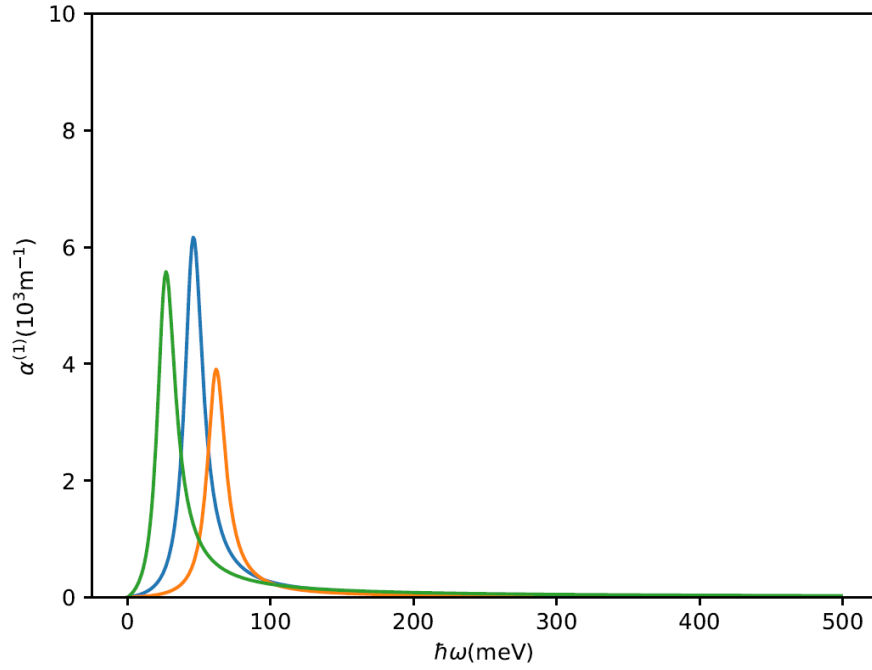
Şekil 33 Wood-Saxon potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı

Kuyu genişliği $L = 100 \text{ Å}$ ve bariyer potansiyeli $V_0 = 835.49 \text{ meV}$ alınmıştır. Potansiyel parametreleri $\gamma = 10$ (mavi) ve $\gamma = 0.1$ (turuncu) alınmıştır.



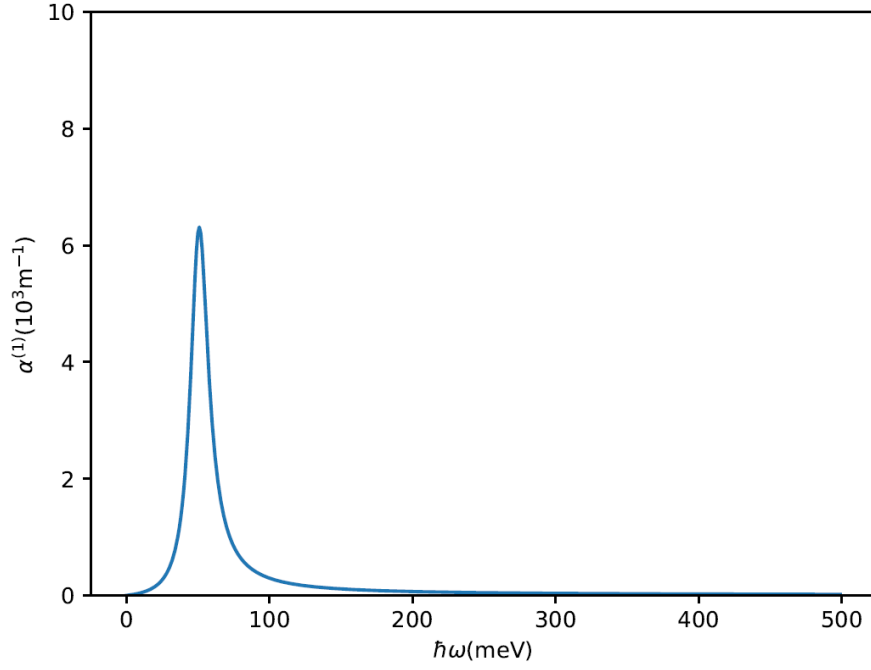
Şekil 34 Rosen-Morse potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı

Potansiyel parametreleri $\eta = 0.015$, $V_1 = 75 \text{ meV}$ ve $V_2 = 250 \text{ meV}$ (mavi), $\eta = 0.015$, $V_1 = 150 \text{ meV}$ ve $V_2 = 250 \text{ meV}$ (turuncu) ve $\eta = 0.0075$, $V_1 = 75 \text{ meV}$ ve $V_2 = 250 \text{ meV}$ (yeşil) alınmıştır.



Şekil 35 Helman potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı

Potansiyel parametreleri $\eta = 0.01$ ve $V = 312 \text{ meV}$ (mavi), $\eta = 0.03$ ve $V = 312 \text{ meV}$ (turuncu) ve $\eta = 0.01$ ve $V = 148 \text{ meV}$ (yeşil) alınmıştır.



Şekil 36 Kratzer-Fues potansiyel kuyusu için lineer absorpsiyon katsayısı

Potansiyel parametreleri $V_0 = 256.258 \text{ meV}$ and $r_0 = 100 \text{ Å}$ alınmıştır.

6. SONUÇ

Bu tez çalışmasında kuantum kuyuların farklı potansiyel profilleri için optik ve elektronik özellikleri hesaplandı. Hesaplamalarda sonlu farklar yöntemi kullanıldı. Bu yöntemin kullanılmasındaki amaç kısa zaman süresinde doğru sonuçların elde edilmesidir. Her zaman karşımıza analitik çözülebilir diferansiyel denklemler çıkmamaktadır. Ayrıca bu diferansiyel denklemlerden dalga fonksiyonlarını bulmak da zordur. Sonlu farklar yöntemi elverişli ve kolaydır. Tüm hesaplamalar bilgisayar ortamında Python yazılım programı vasıtasıyla hesaplandı. Hesaplamalara geçmeden önce tezin giriş kısmında kuantum mekaniği ve yarıiletkenlerin tarihsel gelişmeleri hakkında geniş bilgi verildi. Daha sonra tezde sonlu ve sonsuz kuantum kuyular, Schrödinger denklemi, iletkenlik ve valans bandı gibi konulara değinildi.

Hesaplamalar sekiz farklı potansiyel profiller için ayrılmıştır. Bu potansiyel profilleri sonlu kare potansiyel, harmonik osilatör potansiyeli, Pöschl-Teller potansiyeli, Razavy potansiyeli, Wood-Saxon potansiyeli, Rosen Morse potansiyeli, Helman potansiyeli ve Kratzer-Fues potansiyelidir. Her bir potansiyel profilleri için farklı hesaplamalar ve farklı sonuçlar elde edildi. Bu potansiyel profillerin hayatımızda olan önemi ve nerelerde kullanıldığı her bir potansiyel profil için ayrı ayrı yazıldı. Sonuçlardan emin olmak için bu potansiyel profillerde kullanılan kuantum kuyularının genişliği değiştirildi ve bir birileri ile karşılaştırıldı. Sonuç olarak her bir potansiyel profiller için enerji özdeğerleri ve onla karşılık gelen kare potansiyel grafikleri çizildi. Optik özellikleri için ise absorpsiyon katsayıları hesaplandı ve grafikleri kuruldu.

Bu farklı potansiyel profilleri için kuyular GaAs/AlAs yarıiletken malzemelerinden hazırlanmıştır. Kuyu genişlikleri ve bariyer uzunlukları her bir potansiyel profil için farklılıklar gösterebilir. Genel olarak bu potansiyel profilleri optoelektronik cihazların ve yeni nesil teknolojilerin temelini kapsamaktadır. Teknoloji daha da ilerledikçe bu profillerin uygulama alanları daha da büyümektedir.

KAYNAKÇA

- Adıyaman, R. (2013). *GaAs/GaAlAs kuantum kuyusu* (Master's thesis, Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Ahn, D., ve Chuang, S. L. (1987). Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 23(12), 2196-2204.
- Akbaş, H., Ekmekçi, S., Aktaş, Ş., ve Tokmak, M. (1995). 'Electric field effect on shallow impurity states in multiple quantum-well structure. *Tr. J. Of Physics*, 19, 381.
- Alhamade, H. T. (2012). *Düşük Boyutlu Yarıiletken Hetroyapılarda Fotoiletkenlik Olayları* (Master' thesis, İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Arda, A., ve Sever, R. (2012). Non-central potentials, exact solutions and Laplace transform approach. *Journal of Mathematical Chemistry*, 50, 1484-1494.
- Arda, A., Sever, R., ve Tezcan, C. (2010). Analytical solutions to the Klein–Gordon equation with position-dependent mass for q-parameter Pöschl–Teller potential. *Chinese Physics Letters*, 27(1), 010306.
- Amca, R., Ergün, Y., Sökmen, I., ve Sari, H. (2000). Electronic energy spectra in a multiple quantum well within external electric and tilted magnetic fields. *Semiconductor science and technology*, 15(11), 1087.
- Asar, T. (2009). *GaInP ve InGaAs kuantum kuyulu güneş pillerinin (QWSC) üretimi* (Master's thesis, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Aydoğan, Ş. (2011). Katıhal Fiziği, 1. baskı. *Nobel Yayın Dağıtım, Ankara*.
- Aytekin, O., Turgut, S., ve Tomak, M. (2012). Nonlinear optical properties of a Pöschl–Teller quantum well under electric and magnetic fields. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 44(7-8), 1612-1616.
- Azeza, B., Sfaxi, L., M'ghaieth, R., Fouzri, A., ve Maaref, H. (2011). Growth of n-GaAs layer on a rough surface of p-Si substrate by molecular beam epitaxy (MBE) for photovoltaic applications. *Journal of Crystal Growth*, 317(1), 104-109.
- Bekar, B. (2019). Lazer alan etkisinde farklı geometrilere sahip GaAs/al (Gaas) ve Gan/al (Gan) kuantum yapılarının elektronik ve optik özellikleri.
- Başak, H. (2009). *Akım Transiyent Spektroskopisi Yöntemi İle Yarıiletken Yapıların İncelenmesi* (Master' thesis, İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).

- Başer, P., Toprak, M. A., ve Elagöz, S. GaAs/GaInAs Kuantum Kuyularının Elektronik Enerji Spektrumu. *Marmara Fen Bilimleri Dergisi*, 26(4), 152-162.
- Bilekkaya, A. (2008). *Çoklu kuantum tel ve noktalarının elektronik özellikleri* (Master's thesis).
- Boyd, R. W., Lindo, E. G., Weeks, L. D., ve McLemore, M. R. (2020). On racism: a new standard for publishing on racial health inequities. *Health Affairs Forefront*.
- Boylestad, R. L., ve Nashelsky, L. (2012). *Electronic devices and circuit theory*. Prentice Hall.
- Boyraz, H. (2021). *Farklı Al Katkısına Bağlı Olarak Simetrik ve Asimetrik GaAlAs/GaAs Yapılarının Değişimi* (Master's thesis, Sivas Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Boz, F. K. (2005). Düşük boyutlu yapılarda yabancı atom problemi ve eksitonlar. *Trakya Üniversitesi, Doktora Tezi*.
- Cruz, S. C., Kuru, Ş., ve Negro, J. (2008). Classical motion and coherent states for Pöschl–Teller potentials. *Physics Letters A*, 372(9), 1391-1405.
- Chen, C. Y., Lu, F. L., ve You, Y. (2012). Scattering states of modified Pöschl–Teller potential in D-dimension. *Chinese Physics B*, 21(3), 030302.
- Chen, T., Diao, Y. F., ve Jia, C. S. (2009). Bound state solutions of the Klein–Gordon equation with the generalized Pöschl–Teller potential. *Physica Scripta*, 79(6), 065014.
- Esaki, L., Tsu, R., ve Ludeke, R. (1969). Photoconductivity in Disordered Nickel-Oxide Films. *Physical Review Letters*, 23(17), 977.
- Çakıcı, M. S. (2013). *Elektrik Alan Etkisi Altında Çoklu Kuantum Kuyu Yapılarının Optiksel Özellikleri* (Master' thesis, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Çakır, R. (2021). Polarization Effects on Intersubband Absorption in GaN/ZnGeN₂ Quantum Wells. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 11(4), 2772-2781.
- Çelik, A. (2018). Schrödinger Denkleminin Sonlu Fark Yöntemi Çözümünde Chebyshev Noktaları Kullanımı. *Sinop Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi*, 3(1), 53-62.
- Çelik, V. (2005). *Moleküler demet epitaksi tekniğiyle üretilen Al_{0.6}Ga_{0.4}As/GaAs tekli kuantum kuyulu yapının optiksel ve yapısal özellikleri* (Master's thesis, Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).

- Çetin, S. Ş. (2010). *GaAsP/GaAs ve InGaN/GaN pn Eklem Yapılarının Optik Ve Yapısal Özelliklerinin İncelenmesi* (Doctoral dissertation, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Dehyar, A., Rezaei, G., ve Zamani, A. (2016). Electronic structure of a spherical quantum dot: Effects of the Kratzer potential, hydrogenic impurity, external electric and magnetic fields. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 84, 175-181.
- Denizli, T. (2006). *GaIn/GaAs kuantum kuyulu yapılarda alaşım düzensizliği ve arayüzey pürüzlülüğü saçılması* (Master's thesis, Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Dereli, T. (1988). Kuantum mekaniği 2. cilt. *Metu Press Yayını*
- Diaz, J. I., Negro, J., Nieto, L. M., ve Rosas-Ortiz, O. (1999). The supersymmetric modified Pöschl-Teller and delta well potentials. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 32(48), 8447.
- Dikici, M. (1993). *Katıhal fiziğine giriş*. Ondokuz Mayıs Üniversitesi.
- Durlu, N. T. (1992). *Katıhal fiziğine giriş*. Bilim Yayınları.
- Durmus, A., ve Yasuk, F. (2007). Relativistic and nonrelativistic solutions for diatomic molecules in the presence of double ring-shaped Kratzer potential. *The Journal of chemical physics*, 126(7), 074108.
- Dong, S., ve Dong, S. H. (2002). An alternative approach to study the dynamical group for the modified Pöschl–Teller potential. *Czechoslovak Journal of Physics*, 52, 753-764.
- Fues, E. (1926). Das eigenschwingungsspektrum zweiatomiger moleküle in der undulationsmechanik. *Annalen der Physik*, 385(12), 367-396.
- Kasapoglu, E., Sari, H., Sökmen, I., Vinasco, J. A., Laroze, D., ve Duque, C. A. (2021). Effects of intense laser field and position dependent effective mass in Razavy quantum wells and quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 126, 114461.
- Erbil, H. (1991). "Kuantum Fiziği". Türkiye, İzmir: Ege Üniversitesi Yayını.
- Eisberg, R. M. (1961). Fundamentals of modern physics.
- Flügge, S. (1994). *Practical quantum mechanics* (Vol. 177). Springer Science & Business Media.
- Fox, M. (2002). Optical properties of solids.

- Gündoğdu, F. (2011). *Sonsuz ve yarı sonlu kuantum kuyularında bağlanma enerjisi ve self polarizasyon* (Master's thesis, Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Gezici, S. (1992). Katıhal fiziği, İTÜ yayınları
- Harrison, P., ve Valavanis, A. (2016). *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons.
- Hansson, C., ve Kishore Rachavula, K. (2006). Comparative study of infrared photodetectors based on quantum wells (QWIPS) and quantum dots (QDIPS).
- Herling, G. H., ve Rustgi, M. L. (1992). Spatially dependent effective mass and optical properties in finite parabolic quantum wells. *Journal of applied physics*, 71(2), 796-799.
- Hermann, H., Wolf, H. C., ve Haken, H. (2000). Modern Methods of Optical Spectroscopy. *The Physics of Atoms and Quanta: Introduction to Experiments and Theory*, 385-402.
- Hien, N. D., Dinh, L., ve Anh, N. T. T. (2020). Influence of confined optical phonons on the magneto-optical properties in parabolic quantum wells. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 145, 109501.
- Ilaiwi, K. F., ve Tomak, M. (1990). Polarizabilities of shallow donors in finite-barrier quantum wells. *Physical Review B*, 42(5), 3132.
- Jiang, X., Li, S. S., ve Tidrow, M. Z. (1999). Study of intersubband transition in quantum dots and quantum dot infrared photodetectors. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 5(1-2), 27-35.
- Jiang, Y., Dong, S. H., ve Sun, G. H. (2004). Series solutions of the Schrödinger equation with position-dependent mass for the Morse potential. *Physics Letters A*, 322(5-6), 290-297.
- Karaoğlu, B. (1994). *Kuantum Mekaniğine Giriş*., Bilgitek yayıncılık.
- Karaoğlu, B. (1996). *Fizik ve mühendislikte matematik yöntemler*. Seçkin.
- Karaoğlu, B. (2008). *Kuantum mekaniğine giriş*. Seçkin.
- Karaca, E. (2018, Ocak, 10). Arsenik nedir? Özellikleri, Kullanım alanları ve Çıkarıldığı yerler. *Bilgihanem*. <https://bilgihanem.com/arsenik-nedir/>
- Karakulak, T. (2010). *GaAs/AlGaAs Tabanlı Kuantum Kuyularının Tem (Geçirimli Elektron Mikroskobu) İle Analizi* (Doctoral dissertation, Anadolu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Köse, E. (2009). *Farklı kuantum kuyularının elektrik alan altında davranışları* (Master's thesis, Fen Bilimleri Enstitüsü).

- Karimi, M. J., ve Vafaei, H. (2014). Intense laser field effects on the linear and nonlinear intersubband optical properties in a strained InGaN/GaN quantum well. *Physica B: Condensed Matter*, 452, 131-135.
- Kasapoglu, E., Urgan, F., ve Yesilgul, U. (2017). The effects of the intense laser field on the optical properties of the asymmetric parabolic quantum well. *Optical and Quantum Electronics*, 49, 1-8.
- Kasri, Y., ve Chetouani, L. (2011). Application of the exact quantization rule for some noncentral separable potentials. *Canadian Journal of Physics*, 86(9), 1083-1089.
- Keyin, L., Guo, K., Jiang, X., ve Hu, M. (2017). Effect of position-dependent effective mass on nonlinear optical properties in a quantum well. *Optik*, 132, 375-381.
- Kınacı, B. (2009). *InxGa1-xAs/GaAs Çoklu Kuantum Kuyu Yapısının MBE Tekniği ile Büyütülmesi: Yapısal ve Optik Özelliklerinin İncelenmesi* (Master's thesis, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Kınacı, B., Bengi, A., Asar, T., Çetin, S., Mammadov, T., ve Özçelik, S. (2013). *InxGa1-xAs/GaAs Çoklu Kuantum Kuyu Yapısının MBE Tekniği ile Büyütülmesi: Yapısal ve Optik Özelliklerinin İncelenmesi*.
- Kitay, Y. (2012). *GaAs/AlGaAs tabanlı kuantum kuyularında karanlık akım hesapları* (Master's thesis, Karabük Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Kratzer, A. (1920). Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe. *Zeitschrift für Physik*, 3, 289-307.
- Kuru, H. (2010). *GaAs/AlGaAs tabanlı kuantum kuyularının optiksel ve elektriksel karakterizasyonu* (Master's thesis, Anadolu Üniversitesi).
- Kohn, W. (1957). Shallow impurity states in silicon and germanium. *Solid state physics*, 5, 257-320.
- Küçük, S. (2013). *Yarı-parabolik kuantum kuyusunda lineer ve lineer olmayan optik özelliklerin incelenmesi/Investigation of linear and nonlinear optical properties in semi-parabolic quantum well* (Doctoral dissertation).
- Kızılkaya, K. (2012). *InGaAs/InP ve InGaAs/GaAs Kuantum Kuyulu Güneş Hücrelerinin Üretimi ve Karakterizasyonu* (Master's thesis, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Lima, F. M. S., Amato, M. A., Nunes, O. A. C., Fonseca, A. L. A., Enders, B. G., ve Da Silva, E. F. (2009). Unexpected transition from single to double quantum well potential induced by intense laser fields in a semiconductor quantum well. *Journal of Applied Physics*, 105(12).
- Liu, H. C., ve Capasso, F. (Eds.). (2000). *Intersubband transitions in quantum wells: Physics and device applications* (Vol. 1). Academic press.

- Máthé, L., Onyenegecha, C. P., Farcaş, A. A., Pioraş-Ţimbolmaş, L. M., Solaimani, M., ve Hassanabadi, H. (2021). Linear and nonlinear optical properties in spherical quantum dots: Inversely quadratic Hellmann potential. *Physics Letters A*, 397, 127262.
- McKelvey, J. P. (1996). *Solid state and semiconductor physics*. Harper & Row.
- Nag, B. R. (2001). *Physics of quantum well devices* (Vol. 7). Springer Science & Business Media.
- Nakamura, S., Senoh, M. S. M., ve Mukai, T. M. T. (1993). P-GaN/N-InGaN/N-GaN double-heterostructure blue-light-emitting diodes. *Japanese Journal of Applied Physics*, 32(1A), L8.
- Ortakaya, S. (2011). *Laplace integral dönüşümü ile Schrödinger denkleminin çözümleri* (Master's thesis, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Öztürk, O. (2018). *Üçlü GaAlAs/GaAs ve GaInAs/GaAs nano yapıların elektronik özellikleri* (Master's thesis, Sivas Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Ozturk, E., ve Sokmen, I. (2014). Nonlinear intersubband transitions in square and graded quantum wells modulated by intense laser field. *Chinese Physics Letters*, 31(12), 127301.
- Özfidan, A. (2018). *N- Boyutta Spin-0 ve Spin-1/2 Parçacıkların Relativistik Davranışlarına Merkezci Olmayan Potansiyellerin Etkisi* (Master's thesis, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Özer, H. (2021). *Yüksek frekanslı lazer alan altında sonsuz kuantum kuyusunun elektronik özellikleri* (Master's thesis, Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Özdemir, T. (2022). *Trigonometrik kuşatma potansiyeline sahip kuantum kuyularındaki optik tepkiler* (Master's thesis, Sivas Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Üstün, T. (2011). *Kuantum Nokta Temelli Bellek Yapılarda Kuantum Noktalarının Elektronik Yapısının Derin Seviye Geçiş Spektroskopisi İle Belirlenmesi* (Master's thesis, Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Pehlivanoğlu, C. (2009). *Kuantum nokta yapılarının elektronik özelliklerinin incelenmesi* (Master's thesis, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Pöschl, G., ve Teller, E. (1933). Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators. *Zeitschrift für Physik*, 83(3-4), 143-151.
- Restrepo, R. L., Morales, A. L., Akimov, V., Tulupenko, V., Kasapoglu, E., Ungan, F., ve Duque, C. A. (2015). Intense laser field effects on a Woods-Saxon potential quantum well. *Superlattices and Microstructures*, 87, 143-148.

- Restrepo, R. L., González-Pereira, J. P., Kasapoglu, E., Morales, A. L., ve Duque, C. A. (2018). Linear and nonlinear optical properties in the terahertz regime for multiple-step quantum wells under intense laser field: electric and magnetic field effects. *Optical Materials*, 86, 590-599.
- Rezaei, G., Mousazadeh, Z., ve Vaseghi, B. (2010). Nonlinear optical properties of a two-dimensional elliptic quantum dot. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 42(5), 1477-1481.
- Razeghi, M. (2002). *Fundamentals of solid state engineering* (p. 30). New York: Springer.
- Rosen, N., ve Morse, P. M. (1932). On the vibrations of polyatomic molecules. *Physical Review*, 42(2), 210.
- Sırlı, A. (2015). *Asimetrik yarı parabolik kuantum kuyuların elektronik ve optik özellikleri* (Doctoral dissertation, Bozok Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Schroder, D. K. (2006). *Semiconductor material and device characterization*. John Wiley ve Sons.
- Singleton, J. (2009). *Band theory and electronic properties of solids*. Oxford University Press.
- Türkoglu, A. (2021). Rosen-Morse Kuantum Kuyusunun Safsızlıkla İlgili Doğrusal Olmayan Optik Özellikleri. *Bilecik Şeyh Edebalı Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi*, 8(2), 596-603.
- Tietz, T. (1963). Potential-energy function for diatomic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 38(12), 3036-3037.
- Tulum, F. (2013). *En düşük enerjili 1-seviyelerinin elektrik dipol özelliklerinin incelenmesi* (Doctoral dissertation, Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü)
- Turkoglu, A., Dakhlaoui, H., Durmuslar, A. S., Mora-Ramos, M. E., ve Ungan, F. (2021). Nonlinear optical properties of a quantum well with inversely quadratic Hellman potential. *The European Physical Journal B*, 94(5), 111.
- Ungan, F., Yesilgul, U., Kasapoglu, E., Sari, H. ve Sökmén, I. (2012). The effects of hydrostatic pressure and intense laser field on the linear and nonlinear optical properties of a square quantum well. *Optics Communications*, 285(3), 373-377.
- Ungan, F., Martínez-Orozco, J. C., Restrepo, R. L., ve Mora-Ramos, M. E. (2019). The nonlinear optical properties of GaAs-based quantum wells with Kratzer–Fues confining potential: role of applied static fields and non-resonant laser radiation. *Optik*, 185, 881-887.

- Ungan, F., ve Bahar, M. K. (2020). The laser field controlling on the nonlinear optical specifications of the electric field-triggered Rosen-Morse quantum well. *Physics Letters A*, 384(19), 126400.
- Qiang, W. C., Chen, W. L., ve Wei, G. F. (2009). The scattering states of the l-wave Schrödinger equation with the second Pöschl–Teller-like potential. *Physica Scripta*, 79(2), 025005.
- Wittmann, F., Gossner, H., ve Eisele, I. (1995). Silicon nanoelectronic devices with delta-doped layers. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 6, 336-340.
- Wei, G. F., ve Dong, S. H. (2010). A novel algebraic approach to spin symmetry for Dirac equation with scalar and vector second Pöschl-Teller potentials. *The European Physical Journal A*, 43(2), 185-190.
- Wei, G. F., ve Dong, S. H. (2009). The spin symmetry for deformed generalized Pöschl–Teller potential. *Physics Letters A*, 373(29), 2428-2431.
- Woods, R. D., ve Saxon, D. S. (1954). Diffuse surface optical model for nucleon-nuclei scattering. *Physical Review*, 95(2), 577.
- Xie, W. (2009). A study of an exciton in a quantum dot with Woods–Saxon potential. *Superlattices and Microstructures*, 46(4), 693-699.
- Yanar, H. (2012). *Bir Boyutta Pöschl – Teller Potansiyelinde Göreli Parçacıkların Bağlı Durumları* (Master's thesis, Mersin Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Yıldırım, H., ve Tomak, M. (2005). Nonlinear optical properties of a Pöschl-Teller quantum well. *Physical Review B*, 72(11), 115340.
- Yu, P. Y. (1996). Electronic properties of defects. *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*, 149-192.
- Zhao, Q., Aiqi, S., You, J. F., Kria, M., Guo, K. X., Feddi, E., ... ve Yuan, J. H. (2020). Influence of position-dependent effective mass on the nonlinear optical properties in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ single and double triangular quantum wells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 115, 113707.
- Zhang, L., ve Xie, H. J. (2003). Electric field effect on the second-order nonlinear optical properties of parabolic and semiparabolic quantum wells. *Physical Review B*, 68(23), 235315.