



Atf için / For Citation: A. Babanlı, V. Sabyrov, "1D Kaantum Telin Ortalama Enerjisi ve Öz Isısı", *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fen Dergisi*, 15(1), 73-79, 2020.

## 1D Kuantum Telin Ortalama Enerjisi ve Öz Isısı

Arif BABANLI <sup>1</sup>, Vepa SABYROV <sup>\*2</sup>

<sup>1</sup> *Süleyman Demirel Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 32000, Isparta, Türkiye*

<sup>2</sup> *Süleyman Demirel Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 32000, Isparta, Türkiye*

\*yazışılan yazar e-posta: [sabyroww@gmail.com](mailto:sabyroww@gmail.com)

(Alınış / Received: 19.11.2019, Kabul / Accepted: 03.03.2020, Yayınlanma / Published: 31.05.2020)

**Özet:** Bu çalışmada InAs yarıiletken heteroyapıdan oluşan bir boyutlu kuantum telin Rashba spin-orbital etkileşimi ve tel eksenine dik yönde yönelmiş manyetik alan etkisinde elektronların ortalama enerjisi ve öz ısısı teorik olarak araştırıldı. Sistemin dağılım fonksiyonu hesaplandı. Kuantum tel sistemin ortalama enerjisi, öz ısısı sıcaklığa göre grafiği oluşturuldu ve manyetik alanın şiddetine göre değişimi incelendi. Buna göre kuantum telin elektronlarının ortalama enerjisi, sıcaklık artmakta ve belli bir sıcaklıktan sonra sabit bir değere yaklaşmaktadır. Manyetik alanın şiddetinin artması veya azalması ortalama enerjinin sıcaklığa göre sabit değerini değiştirmektedir. Kuantum teldeki elektronların öz ısısı düşük sıcaklıkta maksimum değere ulaşmakta ve artan sıcaklıkla birlikte sıfıra gitmektedir. Elektronların öz ısısı sıcaklığa göre manyetik alanın farklı değerlerinde farklı maksimum tepe noktaları vermektedir.

**Anahtar kelimeler:** Rashba spin-orbital etkileşimi, 1D kuantum tel, Termodinamik nicelikler.

## The Mean Energy and Specific Heat of the 1D Quantum Wires

**Abstract:** In this study, Rashba spin-orbital interaction of one dimensional quantum wire consisting of InAs semiconductor heterostructure and the mean energy and specific heat of electrons in the direction of the magnetic field directed perpendicular to the wire axis were investigated. The partition function of the system was calculated. The mean energy of the quantum wire system and its specific heat were plotted according to the temperature and the variation of the magnetic field according to the intensity was examined. Accordingly, the mean energy of the electrons of the quantum wire increases with increasing temperature and approaches a fixed value after a certain temperature. Increasing or decreasing the intensity of the magnetic field changes the constant value of the average energy relative to the temperature. The specific heat of the electrons in the quantum wire shows the maximum peak value at low temperature, then progressively advances towards zero. The specific heat of the electrons gives different maximum peaks at different values of the magnetic field according to the temperature.

**Key words:** Rashba SOI, 1D quantum wire, Thermodynamic quantities.

## 1. Giriş

Son yıllarda yarıiletken heteroyapıların üzerinde yapılan araştırmalar yeni elektronik cihazların gelişmesine ve üretilmesine neden oldu. Günümüzde hayatımızı kolaylaştıran çok katlamalı heteroyapı güneş bataryaları, tasarruflu olan ışık yayan LED diyotlar, yüksek frekanslı bipolar transistörler, alan etkili transistörler heteroyapılardan oluşmaktadır. Normal p-n tipli yarıiletkenlere göre heteroyapıların genel parametreleri, yani yarıiletkenlerin band aralığı, yük taşıyıcıların etkin kütlesi, elektron enerji spektrumu ve hareketliliği avantajlardan oluşmaktadır. Heteroyapılar ile ilgili ilk teorik araştırma Kroemer tarafından yapılmıştır [1]. Kroemer kendi çalışmasında p-n homogeçişlere göre heteroyapılarda heterogeçişlerin yüksek enjeksiyon verimliliği olabilir diye hipotezini öne sürdü. Buna ilaveten Kroemer çift katlamalı heteroyapıdan lazer yapılabilir diye fikri ortaya attı [2]. Birkaç yıl sonra AlGaAs-GaAs [3] heteroyapıdan ilk oda sıcaklığında çalışan düşük eşik lazeri (low threshold laser) [4,5], ışın yayan diyot, heteroyapıdan oluşan güneş foto elementleri, bipolar transistörler [6] oluşturulmuştur. İlerideki çalışmalar, kuantum kuyularının ve pratik uygulamalarının incelenmesine ek olarak, birçok bilim insanının daha küçük boyutlara sahip kuantum telleri ve kuantum noktalarının çalışmasına ilgi duymasını sağlamıştır. Kuantum tellerde yük taşıyıcı iki yönde sınırlıdır ve sadece tel eksenini boyunca serbestçe hareket edebilen kuantum sistemidir. Tel eksenine göre elektronun enerjisi sabit kalır ama eksene dik yönde enerjisi kesikli değerleri alır. Kuantum tellerin ilk deneysel ve teorik çalışmaları [7] makalesinde araştırılmıştır. [8] çalışmasında teorik olarak kuantum telin optik ve geçirgenlik özellikleri incelenmiştir. Kuantum telli heteroyapılardaki en önemli temel fiziksel olaylardan biri tek boyutlu elektron gazı, keskin tepe noktasına sahip olan durum yoğunluk fonksiyonu ve eksiton bağlanma enerjisinin artış göstermesidir. Katılarda özellikle heteroyapılarda spin-yörünge etkileşimi nedeniyle spin dejenerasyonunun kaldırılmasına getirir. Bu fiziksel olaya Rashba etkisi denir [9-12]. Rashba spin-orbital etkisi spintornik cihazlarının [13] fiziksel temelini oluşturmaktadır. Kuantum telin Rashba spin-orbital ve manyetik alan etkisini optik, spin ve simetrik özelliklerini [14] çalışmasında teorik olarak araştırılmıştır. Kuantum telin termodinamik özellikleri Khordad tarafından incelenmiştir [15]. Khordad kendi çalışmasında dağılım fonksiyonunu  $\mathbf{k}$  dalga vektörüne bağlı olarak elde etmiştir. Bu ise termodinamik niceliklerin dalga sayısına bağlı olarak değiştiği anlamına gelmektedir. Bilindiği üzere termodinamik nicelikler dalga sayısından bağımsızdır. Biz kendi çalışmamızda Rashba spin-orbital etkileşimi ve  $z$  yönünde yönelmiş sabit  $\mathbf{B}$  alana maruz kalmış bir boyutlu kuantum telin dağılım fonksiyonu  $\mathbf{k}$  dalga vektöründen bağımsız olarak hesaplandı ve buna göre sistemin termodinamik nicelikleri incelendi. Sistemin öz ısısı, ortalama enerjisi sıcaklığa göre ve  $\mathbf{B}$ 'nin farklı değerlerinde grafikleri çizildi.

## 2. Materyal ve Metot

### 2.1 Hamiltonyen ve Enerji spektrumu

1D kuantum tel sisteminin Rashba spin-orbital etkileşimi ve  $B$  alan içinde elektronun Hamiltonyeni

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2 + \frac{\alpha}{\hbar}[\boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A})]_z + \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_z \quad (1)$$

olarak yazılabilir [14,16]. Burada  $\mathbf{p}$  momentum operatörü,  $e$  elektronun yükü, manyetik alanın vektör potansiyeli  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  Pauli matris vektörü,  $m$  etkin kütle,  $\omega_0$

sınırlandırıcı potansiyelinin frekansı,  $g$  lande faktörü,  $\mu_B$  Bohr magnetonu,  $B$  manyetik alan,  $\alpha$  Rashba parametresi. Bu Hamiltonyen için Schrödinger denkleminin çözümü aşağıdaki gibidir [17]:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \Omega}{2ml_0^2} \left( \left( 2n + 2 - \frac{l_0^2 k^2}{\Omega} \left( \frac{l_0^4}{l_B^4 \Omega^2} - 1 \right) \right) \pm \sqrt{\left( \frac{n+1}{2} \right) \left( \zeta_1 \sqrt{\Omega} + \frac{\zeta_1}{\Omega} \right)^2 + \left( \frac{l_0^2 m g \mu_B B}{\hbar^2 \Omega} - 1 \right)^2} \right) \quad (2)$$

ya-da denklem 2 aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$E_n = C_0 \left( (2n + 2 - a) + \sqrt{\left( \frac{n+1}{2} \right) b + d} \right) \quad (3)$$

Burada şu kısıtlamalar yapılmıştır:

$$b = \left( \frac{l_0 \sqrt{\Omega}}{l_S \Omega} + \frac{l_0^3}{l_B^2 l_S \Omega^{\frac{3}{2}}} \right)^2, \quad d = \left( \frac{\left( \frac{l_0}{l_B} \right)^2 g m}{\Omega} - 1 \right)^2 \quad (4)$$

$$a = \frac{(l_0 k)^2}{\Omega} \left( \frac{\left( \frac{l_0}{l_B} \right)^4}{\Omega^2} - 1 \right)$$

$$C_0 = \frac{\hbar^2 \Omega}{2ml_0^2}, \quad \Omega = \sqrt{1 + \frac{l_0^4}{l_B^4}}, \quad \omega_c = \frac{eB}{m} \quad (5)$$

$$l_S = \frac{\hbar^2}{2m\alpha}, \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}, \quad l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} \quad (6)$$

denklem 6'deki son üç ifade kuantum telin boyutsuz uzunluklarını karakterize eder [14].

### 2.1 Dağılım fonksiyonu

Kuantum telin dağılım fonksiyonu, denklem 7 ile hesaplanır:

$$Q = \sum_{n=0}^N e^{-\beta E_n} \quad (7)$$

Denklem 7’de  $E_n$  yerine denklem 3’ deki değeri yazılır.

$$Q = \sum_{n,k} e^{\beta C_0 a} e^{-\beta C_0 \left( (2n+2) + \sqrt{\left(\frac{n+1}{2}\right)b+d} \right)} \quad (8)$$

Bu ifade-de toplama  $k$  ve  $n$  kuantum sayılarına bağlıdır. Eğer toplamada  $k$ ’ya bağlı terimleri ve  $n$  kuantum sayısına bağlı terimleri ayrı toplamalar olarak yazılırsa, denklem 9,

$$Q = \sum_k e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m\Omega^2}} \sum_n e^{-\beta C_0 \left( [2n+2] + \sqrt{\left(\frac{n+1}{2}\right)b+d} \right)} \quad (9)$$

yazılabilir. Burada  $k$ ’ya bağlı toplama, integrale dönüştürülür ve  $dk \rightarrow dx$  değişimi yapılır [18,19].

$$\frac{L_y}{\pi} \int_0^K e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m\Omega^2} \beta} dk \rightarrow \frac{L_y m \omega_0^2 \Omega^2}{\pi \hbar \omega_c} \int_0^{\frac{L_x}{2}} e^{-\frac{m x^2 \Omega^2 \omega_0^4 \times \beta}{2 \omega_c^2}} dx \quad (10)$$

Denklem 10’da  $x$ ’in değeri,

$$x = \frac{\omega_c \hbar k}{m \omega_0^2 \Omega^2}$$

eşittir [17]. Gerekli matematiksel işlemlerden son denklem 10’un integrali hesaplanarak aşağıdaki değeri elde ederiz,

$$\frac{L_y m \omega_0^2 \Omega^2}{\pi \hbar \omega_c} \int_0^{\frac{L_x}{2}} e^{-\frac{m x^2 \Omega^2 \omega_0^4 \times \beta}{2 \omega_c^2}} dx = \frac{L_y \sqrt{\Omega^3}}{2 \sqrt{\pi} l_0 \sqrt{\beta C_0}} \text{Erf} \left[ \frac{\sqrt{\Omega} l_B^2 L_x}{2 l_0^3} \sqrt{\beta C_0} \right] \quad (11)$$

Burada Erf(x) olasılık fonksiyonudur,  $L_y$  ve  $L_x$  kuantum telin boyuna ve enine uzunluklarıdır. Denklem 9’da  $n$  kuantum sayısına bağlı toplam Euler-Maclaurin toplama formülü kullanarak [20,21].

$$\sum_{n=0}^N f(n) = \int_0^N f(x) dx - \frac{1}{2} (f(N+1) - f(0)) \quad (12)$$

integrale dönüştürülür ve çözülür. Sonuçta denklem 9’un hesabı, Rashba spin-orbital ve z ekseninde yönelmiş manyetik alanında olan kuantum telin dağılım fonksiyonu denklem 13 elde ederiz:

$$Q = \frac{F}{\sqrt{\xi}} \text{Erf}[P\sqrt{\xi}] \left( \frac{1}{2} (e^{-H\xi} - e^{-\Lambda\xi}) + \frac{1}{8\xi} (4e^{-I\xi} - 4e^{-\Gamma\xi} + e^{\Delta\xi} \sqrt{b\pi} \sqrt{\xi} (\text{Erf}[Z\sqrt{\xi}] - \text{Erf}[\theta\sqrt{\xi}])) \right) \quad (13)$$

Burada kolaylık açısından boyutsuz parametrelerde şu kısıtlamalar,

$$F = \frac{\Omega\sqrt{\Omega}}{2\sqrt{\pi}} L_y, \quad P = \frac{\sqrt{\Omega}}{2y^2} L_x, \quad \xi = \beta C_0 \quad (14)$$

$$H = 2 + \frac{\sqrt{C1}}{\sqrt{2}}, \quad \Lambda = 4 + 2n + \frac{\sqrt{b + 2d + b(1 + n)}}{\sqrt{2}} \quad (15)$$

$$I = \frac{1}{2} (4 + \sqrt{2}\sqrt{C1}), \quad Z = \frac{(b + 4\sqrt{2}\sqrt{C1})}{4\sqrt{b}} \quad (16)$$

$$\Gamma = \frac{1}{2} (8 + 4n + \sqrt{2}\sqrt{b + C1 + bn}), \quad \Delta = -2 + \frac{b}{16} + \frac{2C1}{b} \quad (17)$$

$$\theta = \frac{(b + 4\sqrt{2}\sqrt{b + C1 + bn})}{4\sqrt{b}} \quad (18)$$

yapılmıştır.

### 3. Bulgular

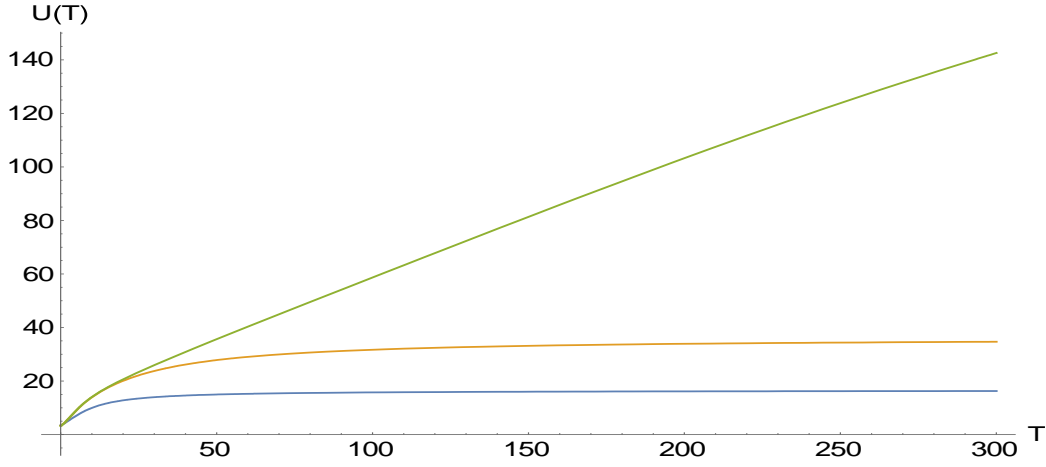
InAs kuantum telin termodinamik niceliklerini hesaplamak için  $g = -8$ , yük taşıyıcıların etkin kütlesi  $m = 0.04m_0$ , parabolik potansiyelin etkin mesafe uzunluğu  $l_0 = 100\text{nm}$ , rashba sabiti  $\alpha = 0.375 \text{ eVnm}$  ve  $N = 10$  değerleri kullanılmıştır [15]. Telin boyuna uzunluğu  $L_y = 400\text{nm}$  ve enine uzunluğu  $L_x = 4\text{nm}$  olarak alınmıştır [17,22]. Kuantum telinin ortalama enerjisi, öz ısı aşağıdaki formüllerle hesaplanmaktadır.

$$U = -\frac{\partial}{\partial \xi} \text{Ln}Q \quad C = \frac{\partial}{\partial T} \text{Ln}Q \quad (19)$$

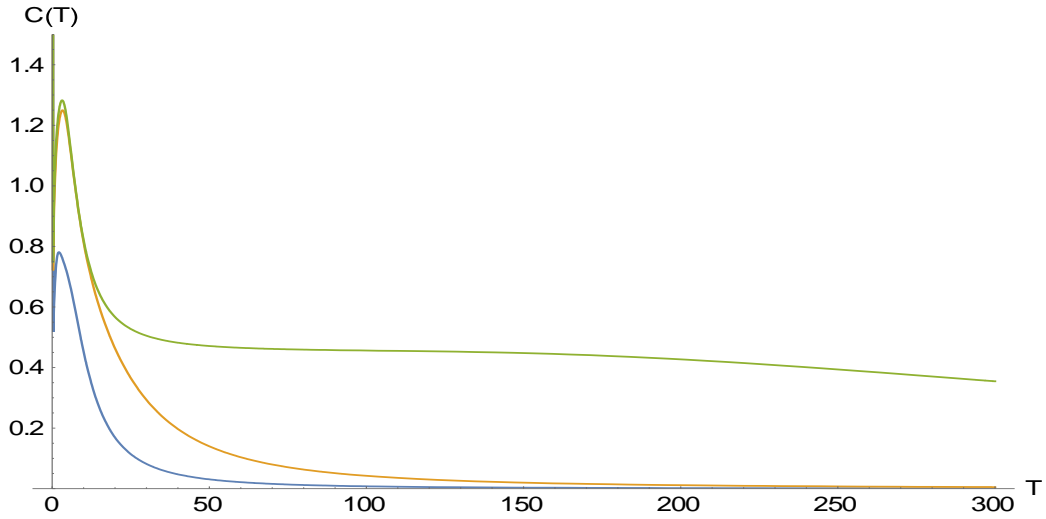
Bu formüllere, yukarıda elde ettiğimiz dağılım fonksiyonu denklem 13 yerine koyarak kuantum telin ortalama enerjisi ve öz ısısı sıcaklığa bağlı grafikleri çizilir.

Şekil 1'de InAs tipi yarıiletken kuantum tellerinde elektronların ortalama enerjisinin sıcaklığa göre değişimi gösterilmiştir. Bu grafikte  $L_y = 400\text{nm}$  ve enine uzunluğu  $L_x = 4\text{nm}$  olan kuantum telin manyetik alan içinde  $l_0 = 100\text{nm}$  olmak üzere  $l_B = l_0$ ,  $l_B = 2l_0$ ,  $l_B = 4l_0$  ve Rashba parametresi  $\alpha = 0.375 \text{ eVnm}$  değerlerine bakılmıştır. Grafikten görüldüğü gibi ortalama enerji düşük sıcaklıklarda bir artış göstermektedir ama sıcaklık arttıkça eğriler asimptotik bir değere yaklaşmaktadır. Örneğin,  $l_B = l_0$  eşit

durumunda sistemin ortalama enerjisi  $U = 20J$  değerine ulaşmaktadır. Şekil 2’de InAs tipi yarıiletken kuantum tellerinde elektronların öz ısısının sıcaklığa göre değişimi gösterilmiştir. Kuantum telin öz ısısı  $l_B = 2l_0$ ,  $l_B = 4l_0$  değerlerindeki eğriler hemen hemen aynı tepe noktasına denk gelmektedir. Ama sıcaklık arttıkça  $l_B = 2l_0$  değerindeki eğri  $l_B = 4l_0$  eğrisine göre hızlı bir şekilde sifıra doğru ilerlemektedir.



**Şekil 1.** InAs tipi yarıiletken kuantum tellerinde elektronların ortalama enerjisinin sıcaklığa göre değişimi. Burada  $l_B = l_0$ ,  $l_B = 2l_0$ ,  $l_B = 4l_0$  sırasıyla mavi, turuncu ve yeşil renkli eğrilerini göstermektedir.



**Şekil 2.** InAs tipi yarıiletken kuantum tellerinde elektronların öz ısısının sıcaklığa göre değişimi. ( $l_B = l_0$ ,  $l_B = 2l_0$ ,  $l_B = 4l_0$  sırasıyla mavi, turuncu ve yeşil renkli eğrilerini göstermektedir).

#### 4. Sonuç ve Yorum

Bu çalışmada InAs tipi yarıiletken kuantum telin Rashba spin-orbital etkileşimi ve manyetik alanda elektronların dağılım fonksiyonu hesaplandı ve bundan yararlanarak termodinamik niceliklerin sıcaklığa göre değişimi incelendi. Kuantum telin ortalama enerjisi sıcaklık arttıkça artmakta ve sabit bir değere yaklaşmaktadır. Sistemin öz ısısı sıcaklık arttıkça maksimum değere ulaşır sonra azalmaktadır.

## Arařtırmacıların Katkı Oranı Beyanı

Vepa SABYROV: Arařtırma, Orijinal Taslak Yazımı.

Arif BABANLI: Arařtırma, Dođrulama, İnceleme ve D zenleme.

## Destek ve Teřekk r Beyanı

Bu alıřmanın yazarları olarak herhangi bir destek ve teřekk r beyanımız bulunmadıđını bildiririz.

## atıřma Beyanı

Bu alıřmanın yazarları olarak herhangi bir atıřma beyanımız bulunmadıđını bildiririz.

## Etik Kurul Onayı ve/veya Aydınlatılmıř Onam Bilgileri

Bu alıřmanın yazarları olarak herhangi bir etik kurul onayı ve/veya aydınlatılmıř onam bilgileri beyanımız bulunmadıđını bildiririz.

## Kaynaka

- [1] H. Kroemer, "Quasi-electric and quasi-magnetic fields in non-uniform semiconductors," *RCA Review*, 18, 332-342, 1957.
- [2] H. Kroemer, "A proposed class of heterjunction injection lasers," *Proc. IEEE*, 51, 1782-1783, 1963.
- [3] H. S. Rupprecht, I. M. Woodall, G. D. Pettit, "Efficient visible electroluminescence at 300°k from  $ga_{1-x}al_xas$   $p-n$  junctions grown by liquid-phase epitaxy," *Appl. Phys. Lett.*, 11, 81, 1967.
- [4] J.I. Alferov, B.M. Andreew, M.K. Turkan, E.L. Portnoy, "Injection lasers based on heterojunctions in an AlAs-GaAs system with a low lasing threshold at room temperature," *FTP*, 3, 1328, 1969.
- [5] I. Hayashi, M. B. Panish, P. W. Foy, and S. Sumski. "Junction lasers which operate continuously at room temperature," *Appl. Phys. Lett.*, 17, 109, 1970.
- [6] H. Kroemer, "Theory of a wide-gap emmitter for transistors," *Proc. IRE*, 45, 1535-1537, 1957.
- [7] P. M. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan, and W. Wiegman, "Toward quantum well wires: Fabrication and optical propoties," *Appl. Phys. Lett.*, 41, 635, 1982.
- [8] S. Simhony, E. Kapon, T. Colas, D. M. Hwang, and N. G. Stoffel, "Vertically stacked multiple-quantum-wire semiconductor diode lasers," *Appl. Phys. Lett.*, 59, 2225, 1991.
- [9] E. I. Rashba and Al. L. Efros, "Orbital mechanisms of electron-spin manipulation an electric field," *Phys. Rev. Lett.*, 91, 126405, 2003.
- [10] E. I. Rashba, "Properties of semiconductors with an extremum loop," *Sov. Phys. Solid. State*, 2, 1109-1122, 1960.
- [11] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, "Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy," *JETP Lett.*, 39, 78, 1984.
- [12] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effect is Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Berlin: Springer, 2003, ch 6.
- [13] D. Bercioux and P. Lucignano, "Quantum transport in Rashba spin-orbit materials: a review," *Rep. Prog. Phys.*, 78, 106001, 2015.
- [14] S. Debal, B. Kramer, "Rashba effect and magnetic field in semiconductor quantum wires," *Phys. Rev.*, B71, 115322, 2005.
- [15] R. Khordad, H. R. Rastegar Sadehi, "Low temperature behavior of thermodynamic properties of 1D quantum wire under the Rashba spin-orbit interaction and magnetic field," *Solid State Communication*, 269, 118-124, 2018.
- [16] X. W. Zhang, J. B. Xia, "Rashba spin-orbit coupling in InSb nanowires under transverse electric field," *Phys. Rev.*, B 74, 075304, 2006.
- [17] A. Gharati, R. Khordad, "Effects of magnetic field and spin-orbit interaction on energy levels in 1D quantum wire: analytical solution," *Optic. Quant. Electron*, 44, 425, 2012.
- [18] F. M. Gashimzade, A. M. Babayev, H. A. Gasanov, "Thermopower of a semiconductor film with parabolic potential in a strong magnetic field," *Solid State Physics*, 43, 10, 1850-1852, 2001.
- [19] B. M. Askerov, *Electron Transport Phenomena in Semiconductors*. Moscow: Nauka, 1985, ch. 6.
- [20] G. M. Fikhtengolts, *Differential and integral calculus*. Moscow: Nauka, 1969, 7th ed, ch 12.
- [21] P. Graham, D. Knuth, O. Patashnik, *Concrete Mathematics*. Moscow: Mir, 1998, ch 2.
- [22] M. P. Stopa, S. D. Sarma, "Parabolic-quantum-well self consistent electronic structure in a longitudinal magnetic field: Subband depopulation," *Phys. Rev. B* 40 (14), 10048(R), 1989.