

ELEKTRİK ALAN ALTINDAKİ KARE KUANTUM KUYUSUNUN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN PERTÜRBATİF VE ANALİTİK YÖNTEM İLE İNCELENMESİ

Mustafa Kemal BAHAR , Ahmet ERSOY

Karamanoğlu Mehmetbey Üniversitesi, Kamil Özdağ Fen Fakültesi Fizik Bölümü, 70100, Karaman-TÜRKİYE

mkbahar@kmu.edu.tr

ÖZET

Bu çalışmada yalıtılmış kare kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın etkileri pertürbatif ve analitik yöntem ile incelendi. Pertürbatif yöntem kullanılarak kuantum kuyusundaki enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları bulundu. Daha sonra analitik yöntem ile elektrik alan etkileri incelendi, pertürbatif ve analitik yöntemin sonuçları karşılaştırıldı. Sonuçların ikisinin de birbiriyle uyuşmasının yanısıra, dışarıdan uygulanan elektrik alanının sistemin elektronik özelliklerini önemli bir şekilde değiştirdiği görüldü.

Anahtar Kelimeler: Dalga fonksiyonu, kuantum kuyusu, pertürbasyon teorisi, analitik çözüm, elektrik alan etkisi.

INVESTIGATION BY PERTURBATIVE AND ANALYTICAL METHOD OF ELECTRONIC PROPERTIES OF SQUARE QUANTUM WELL UNDER ELECTRIC FIELD

ABSTRACT

In this study, the effects of applied electric field on the isolated square quantum well was investigated by analytic and perturbative method. The energy eigen values and wave functions in quantum well were found by perturbative method. Later, the electric field effects were investigated by analytic method, the results of perturbative and analytic method were compared. As well as both of results fit with each other, it was observed that externally applied electric field changed importantly electronic properties of the system.

Key Words: Wave function, quantum well, perturbation theory, analytic solution, electric field effect.

I. GİRİŞ

Külçe yapılardan farklı olarak, düşük boyutlu yapılarda gözlenen yüksek mobilite düşük boyutlu yapılarla ilgili çalışmalar yapmayı daha fazla ilgi odağı haline getirmiştir. Statik elektrik alanın etkileri de son yıllarda büyük bir ilgi alanı olmuştur. Statik elektrik alanın katılarda elektronik durumlar üzerindeki etkileri ve yük taşıyıcılarının bir boyutlu potansiyel içine kuşatılmaları kesikli enerji durumlarının oluşmasını sağlar. Bu durum ise elektronik yapıda önemli değişmelere neden olur. Düşük boyutlu sistemler üzerinde ilk çalışma Esaki ve Tsu tarafından yapılmıştır [1]. Düşük boyutlu yapılar üzerine elektrik alan

etkilerinin incelenmesi safsızlıklar, elektrik alan, manyetik alan gibi durumlar altında yapılmıştır [2, 8]. Kuantum kuyularına uygulanan elektrik alanın incelenmesi farklı matematiksel yöntemler kullanmak suretiyle mümkündür. Dirac delta kuantum kuyusu gibi farklı potansiyel profilli kuantum kuyuları üzerine de öz uyumlu gibi matematiksel yöntemler kullanılarak incelemeler yapılmıştır [9]. Düşük boyutlu yapılarda elektronun enerji öz durumlarının ve dalga fonksiyonlarının incelenmesi "Schrödinger Denklemi"nin çözümüyle mümkün olmaktadır. Bununla birlikte, bu yapılara uygulanan elektrik alan altında analitik çözümlerin yapılması zor olsa da imkansız değildir.

Bu çalışmada ise büyütme yönüne paralel olarak uygulanan elektrik alan altında L_0 genişlikli V_0 potansiyel derinliğine sahip tekli bir kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın etkilerini incelerken pertürbasyon yönteminden faydalanılmıştır. Daha sonra elektrik alanın etkisi analitik yöntem kullanılarak “Schrödinger Denklemi”nin doğrudan çözülmesi ile incelenmiştir.

II. YÖNTEM

Kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın etkileri “sonlu farklar yöntemi”, “öz uyumlu (self consistent) hesap yöntemleri”, “pertürbatif ve analitik yöntem” ile incelenebilir. Literatürde “sonlu farklar yöntemi” ve “öz uyumlu hesap yöntemleri” bu konu üzerine kullanılmıştır. Çok aşına olduğumuz pertürbasyon yöntemi ise bu konu üzerine uygulanmış fakat etkileri ayrıntılı olarak incelenmemiştir. Olaya sadece çok yüzeysel olarak bakılmıştır. Analitik yöntem yardımıyla sistemi temsil eden “Schrödinger Denklemi”ni çözmek matematiksel olarak zor olduğu için tercih edilmemektedir. Bu çalışmada yapılan iş, kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın etkilerini pertürbatif ve analitik yöntem ile inceleyip çözümlerini bulmak olmuştur. Pertürbatif ve analitik yöntemin matematiksel algoritması Mathematica Programında yapılmış ve sonuçları ayrıntılı olarak incelenmiştir. Bu çalışma için Mathematica Programında oluşturulan algoritma, elektrik alanın etkilerini grafiklerde otomatik olarak verecek şekilde hazırlanmıştır. Sonuçlar kısmında şekiller incelendiği zamanda anlaşılacağı üzere Mathematica Programında oluşturulan algoritma çok hassas ve doğru sonuçlar vermiştir. Programda bir kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın etkileri, farklı elektrik alan yönlerinde ve değerlerinde, farklı kuyu genişliklerinde, farklı potansiyel derinliklerinde çok hassas bir şekilde incelenebilir. Bunun için yapılması gereken, programdaki bazı giriş parametrelerini ve ilgili yerleri değiştirmek olacaktır. Yani, yazılan algoritma tablo ve şekillerden de anlaşılacağı gibi çok hassas ve doğru sonuçlar veren hazırlanması biraz teferruatlı ama kullanımı pratik bir algoritmadır. Programın yazılım mantığı kuantum kuyusuna etkiyen başka türlü etmenlerinde birkaç değişiklik yaparak incelenebilmesine olanak verecek şekilde ileriye dönüklük amacı taşımaktadır.

Etkin kütle yaklaşımında, bir sistemdeki elektronlar için enerji düzeyleri ve dalga fonksiyonları, uygun bir Hamiltonyen ile Schrödinger Dalga Denkleminin çözümlerini sağlamaktadır.

Elektrik alan etkisinin de hesaba katıldığı bir boyutlu Schrödinger Dalga Denklemi ;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + eFx\right]\Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x) \quad (1)$$

şeklinindedir. Burada F (kV/cm) elektrik alan şiddeti,

$V(x)(= V_0)$ ise elektron için x ekseninde seçilmiş olan potansiyel değeridir. m^* ise elektronun etkin kütesidir.

Öncelikli yöntem olarak Schrödinger Dalga Denklemini analitik olarak çözmek yerine pertürbatif bir yaklaşımda bulunacağız.

Elektrik alan uygulandıktan sonra sistemin Hamiltonyeni H için Schrödinger Denklemi,

$$H\Psi_n = E_n \Psi_n \quad (2)$$

şeklinde olur.

Pertürbatif yaklaşım yapabilmek için H Hamiltonyeni iki parçaya ayrılır.

$$H = H_0 + V \quad (3)$$

Burada H_0 elektrik alan uygulanmadan önceki sistemin Hamiltonyeni olup çözümü kolaylıkla bulunabilir. V ifadesine ise uygulanan elektrik alanın, Hamiltonyen ifadesine getirdiği küçük bir pertürbasyon terimi olarak bakılabilir.

Bu durumda,

$$H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} \quad (4)$$

denkleminin çözümü sonucu bulunan $\Psi_n^{(0)}$ özfonksiyonu ve $E_n^{(0)}$ enerji özdeğeri,

$$\Psi_n^{(0)} = \Psi_0$$

$$E_n^{(0)} = \varepsilon_0$$

olur. Buradaki ε_0 taban durum enerji özdeğeri, Ψ_0 ise taban durum dalga fonksiyonudur.

Bu çalışmada pertürbasyon etkisinin 1. ve 2. derece katkıları incelenmiştir. 1. ve 2. derece pertürbasyon etkisi durumunda, sistemin enerji düzeylerine 1. dereceden katkı sonucu yeni enerji düzeyi,

$$E_n = \varepsilon_0 + V_{nn} \quad (5)$$

olur. $V=e.F.x$ olmak üzere, yukarıdaki
 $V_{nn} = (\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})$ matris elemanıdır.

2. dereceden katkı sonucu yeni enerji düzeyi,

$$E_n = \varepsilon_0 + V_{nn} + \sum_{i \neq n} \frac{|V_{in}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \quad (6)$$

olur. Sistemin bütün enerji düzeyleri toplamda 1. ve 2. dereceden katkı kadar kayma gösterirler.

Sistemin dalga fonksiyonları 1. ve 2. dereceden pertürbatif katkı sonucu,

$$\Psi_n = \Psi_0 + \sum_{i \neq n} \left[\frac{V_{jn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_j} - \frac{V_{nn}V_{jn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)^2} + \sum_{i \neq n} \frac{V_{ji}V_{in}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_i)} \right] \Psi_j^{(0)} \quad (7)$$

olur.

3. dereceden pertürbasyon etkisinin ise görsellikte çok az etki göstereceği tahmin edildiği için hesaplanması uygun görülmedi.

Diğer bir yöntem ise, “analitik çözüm yöntemi”dir. eFx şeklindeki bir elektrik alan etkisinin, Schrödinger Denklemindeki yaptığı değişiklik sonucu Schrödinger Denklemi,

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2}(V(x) + eFx - E)\Psi(x) = 0 \quad (8)$$

haline dönüşür.

$$x' = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{V(x) - E}{(eF)^{\frac{2}{3}}} - (eF)^{\frac{1}{3}} x \right] \quad (9)$$

şeklinde bir x' tanımlanırsa Schrödinger Dalga Denklemi,

$$\frac{d^2\Psi(x')}{dx'^2} - x'\Psi(x') = 0 \quad (10)$$

olur.

Bu diferansiyel denklemin çözümü ise,

$$\Psi(x') = AAiryAi(x') + BAiryBi(x') \quad (11)$$

şeklinde Airy fonksiyonlarından oluşur.

III. SONUÇ VE TARTIŞMA

Hesaplarımızda kullandığımız fiziksel parametreler m_0 serbest elektronun kütlesi olmak üzere, elektronun etkin kütlesi $m^* = 0.067 m_0$ dir. Bu çalışmada Şekil 5 hariç bütün şekiller ve Tablo 1'deki veriler “Mathematica Programı” kullanılarak elde edilmiştir. Şekil 1.a'da görüldüğü gibi x doğrultusunda uygulanan pozitif değerlikli elektrik alan kuantum kuyusunun şeklini değiştirerek kuyu potansiyelinin sol tarafa doğru eğrilmesine neden olur. Bu yüzden sol taraftaki engele doğru bir sızma gerçekleşir. $F=0$ için taban durum dalga fonksiyonu ve doğal olarak olasılık yoğunluğu $x=0$ 'da merkezlenirken elektrik alanın uygulanmasıyla taban durum dalga fonksiyonu ve doğal olarak olasılık yoğunluğu sanki sol engelde sözde bir kuantum kuyusu varmış gibi sol engel tarafında lokalize olmaya başlar. Şekil 1.a'da $V_0=100$ meV'lik ve $L_0=90$ Å'luk bir kuantum kuyusuna sırasıyla 20, 40, 60 ve 80 kV/cm'lik elektrik alan uygulanınca kuyunun potansiyel profilinin değişimine bağlı olarak dalga fonksiyonlarının yerleşmesi de değişmiştir. En sağdaki dalga fonksiyonu kuyuya elektrik alan uygulanmadan önceki taban durum dalga fonksiyonudur. Uygulanan elektrik alanın artışına paralel olarak yeni dalga fonksiyonları, diğer bir deyişle, pertürbe olmuş dalga fonksiyonları ok yönünde aşağıdan yukarı doğru gösterilmektedir. Görüldüğü gibi uygulanan elektrik alan değeri arttıkça dalga fonksiyonuna gelen pertürbatif katkıda arttığı için dalga fonksiyonlarının yerleşmesi de sol tarafa doğru olmuştur.

Şekil 1.b'de ise Şekil 1.a'dan farklı olarak negatif değerlikli elektrik alan uygulanmıştır. Bunun sonucu kuyu sağ tarafa doğru eğrilmiştir. Pozitif ve negatif değerlikli elektrik alan uygulanması sonucu meydana gelen olaylar birbirinin simetridir.

Şekil 2'de ise $F=60$ kV/cm'lik elektrik alan altında $V_0=100$ meV potansiyel derinlikli bir kuyu, kuyunun genişliği

değiştirilerek incelenmiştir. Şekil 2’de pertürbe olan ve olmayan dalga fonksiyonları görülmektedir. Kuyu potansiyel profili üzerinde aşağıdan yukarıya doğru kuyu genişliği $L_0=90, 100, 110$ ve 120 \AA olarak artmaktadır. Bu potansiyel profilleri içinde yerleşen dalga fonksiyonlarının tepe noktası kuyunun genişliğinin artırılması ile kuyu tabanına doğru alçalmaktadır. Dolayısıyla da kuyu genişliğinin artması enerji düzeylerinin düşmesi anlamına gelir. Sol taraftaki dalga fonksiyonları ise pertürbe olmuş dalga fonksiyonlarıdır. Pertürbe olmuş dalga fonksiyonlarının tepe noktası da aynen pertürbe olmayan dalga fonksiyonlarının tepe noktası gibi kuyu genişliğinin artması nedeniyle kuyu tabanına doğru alçalmaktadır. Yine elektrik alan etkisi ile sol tarafta daha fazla bir yerleşme vardır.

Şekil 3’te $V_0=370 \text{ meV}$ ’lik potansiyel derinliğine ve $L_0=90 \text{ \AA}$ genişliğine sahip bir kuantum kuyusuna $F=80 \text{ kV/cm}$ ’lik bir elektrik alan uygulanmıştır. Verilen bu değerlere göre kuyudaki ilk üç enerji düzeyine karşılık gelen birinci (taban durum) , ikinci ve üçüncü dalga fonksiyonları görülmektedir. Taban durum dalga fonksiyonu incelendiği zaman pertürbasyon etkisi sonucu dalga fonksiyonunun sola doğru lokalize olduğu anlaşılmaktadır. İkinci ve üçüncü dalga fonksiyonlarının ise tepe noktalarının elektrik alan uygulanmadan önceki durumlarına göre yukarı doğru bir miktar çıktığı anlaşılmaktadır. Ancak, sol engel tarafına doğru yerleşme taban durumundaki dalga fonksiyonunda olduğu kadar belirgin değildir. Çünkü, kuyu tabanındaki eğrilme pertürbasyon etkisiyle incelenmiştir ve pertürbasyon etkisi küçük bir etki olduğu için bu değişiklikten en fazla taban durumu etkilenir.

Kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın pertürbatif olarak incelenmesi elektrik alanın her değeri için mümkün olmaz. Buna pertürbasyon teorisinin fiziksel yorumunun yanı sıra matematiksel kuralları da izin vermez.

Pertürbatif katkı,

$$\sum_{i \neq n} \frac{V_{in}}{E_n - E_i} \Psi_i^{(0)} \quad (12)$$

olduğu için her sonsuz seri açılımında katsayıların birden küçük olması gerekir. Yani, $\frac{V_{in}}{E_n - E_i} \ll 1$ olacaktır. V ’nin beklenen değeri yani enerjiye gelen pertürbatif katkı taban durum enerjisinden büyük olamaz. Bu nedenlerden ötürü bu çalışmada kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alan sadece belirli bir değere kadar incelenmiştir. Verilen bu

parametrelerde elektrik alanın alacağı maksimum değer yaklaşık olarak 110 kV/cm bulunmuştur.

Şekil 4’te ise negatif değerlikli bir elektrik alanın kuantum kuyusuna uygulanması sonucu, kuyu yine eğrilmiş ve eğrilen tarafa doğru taban durum dalga fonksiyonu lokalize olmuştur. Sonuç itibarıyla Şekil 4’ün diğerlerinden farkı yoktur. Ancak, bu sefer çözümde pertürbasyon etkisi kullanılmamış ve bu sonuç Schrödinger Denkleminin analitik olarak çözülmesi ile elde edilmiştir. Dolayısıyla pertürbatif yöntem ile analitik yöntemin çok benzer sonuçlar verdiği anlaşılmıştır.

Şekil 5’te $V_0=50 \text{ meV}$ potansiyel derinliğine ve farklı genişliklere sahip kuantum kuyularına uygulanan $F=20 \text{ kV/cm}$ elektrik alan altında analitik ve pertürbatif yöntem kullanılarak elde edilmiş olan enerji özdeğerleri karşılaştırılmıştır. Şekil 5’te görüldüğü gibi kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın pertürbatif yöntem ve analitik yöntem ile incelenmesi sonucu bulunan enerji düzeyleri birbirine çok yakındır.

Tablo 1 incelendiği zaman uygulanan elektrik alan değeri arttırıldıkça enerjiye gelen pertürbasyon katkısında artmaktadır ve bütün enerji düzeyleri ortalama olarak toplam pertürbasyon katkısı kadar kayma göstermiştir.

Sonuç olarak, bir kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanı pertürbasyon ve analitik yöntem ile inceledik. Uygulanan elektrik alan potansiyel profillerini, enerji seviyelerini ve elektronların kuşatılmalarını belirli ölçüde değiştirmektedir. Bu değişim ise elektrik alanın ancak belirli değerler arasında olması şartıyla pertürbasyon yöntemi ile incelenebilir. Aynı şekilde bu değişim Schrödinger Denkleminin analitik olarak çözülmesiyle de incelenebilir. Düşük boyutlu yapılar üzerine elektrik alanın etkilerinin incelenmesi önemlidir. Çünkü bir yarıiletken kristalde taşıyıcıların hareketlerini kısıtlayabilmek veya arttırabilmek yarıiletken alet yapımları için önemlidir.

IV. KAYNAKLAR

- [1]- L. Esaki and R. Tsu, (1969), “Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors”, IBM Res. Note, RC-2414.
- [2]- BLOSS W.L., (1989), “Electric field dependence of quantum-well eigen states”, J.Appl.Phys. **65** (12) , 4789.
- [3]- OKAN S.E., AKBAS.H., AKTAS S., TOMAK M., (2000), “Binding energies of heliumlike impurities in parabolic quantum wells under an applied electric field”, Superlatts and Microstructs, **23**, 113.

[4]- S. AKTAS, A. BILEKKAYA and S.E. OKAN, (2008), "The Energy Spectrum for an electron in quantum well wires with different shapes under the electric and magnetic field", Physica E40, **2703-2708**.

[5]- A. BILEKKAYA, S. AKTAS, S.E. OKAN, F.K. BOZ, (2008), "Electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic impurity in quantum well wires with different shapes", Superlatts and Microstructs, **96-105**.

[6]- AKBAS H., EKMEKCI S., AKTAS S. , TOMAK M., (1995), "Electric field effect on shallow impurity states in multiple quantum-well structure", Tr.J.Of Physics, **19**, 381.

[7]- AKTAS S., OKAN S.E., AKBAS H., (2001), "Electric field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in coaxial GaAs quantum-well wires", Superlatt. and Microstruct., **39**, 129.

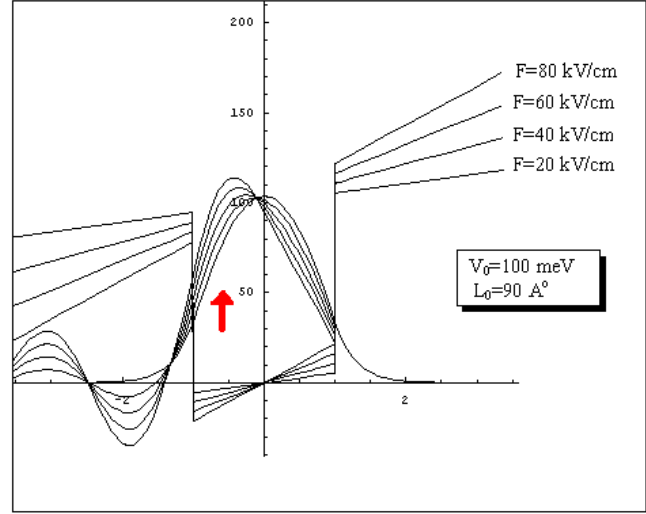
[8]- DUQUE C.A., MONTES A., MORALES A.L., (2001), "Binding energy and polarizability in GaAs quantum well wires", Physica B, **302**, 84.

[9]- E. ÖZTURK, M.K. BAHAR, and I. SOKMEN, (2008), "Subband structure of p-type delta-doped GaAs as dependent on the acceptor concentration and the layer thickness", European Physics Journal-Applied Physics, **41**, 195.

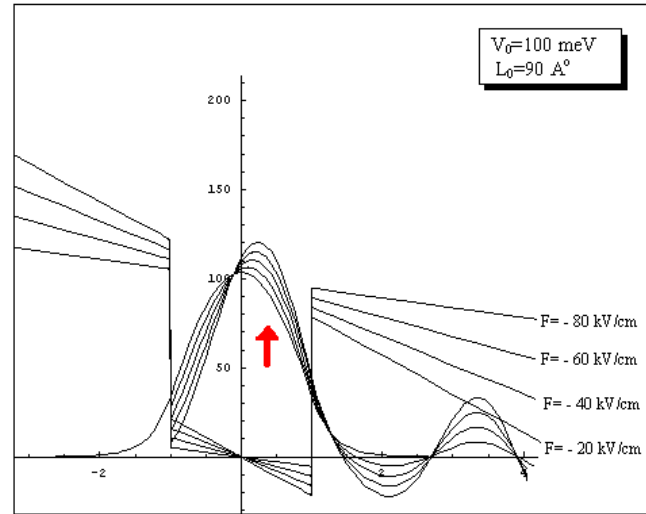
[10]- KARAĞLU B., (2008), "Kuantum Mekanigine Giriş", Seçkin Yayıncılık, Ankara

[11]- HARRISON P., (2005), "Quantum Wells, Wires and Dots", Copyright 2005 John Wiley & Sons Ltd.

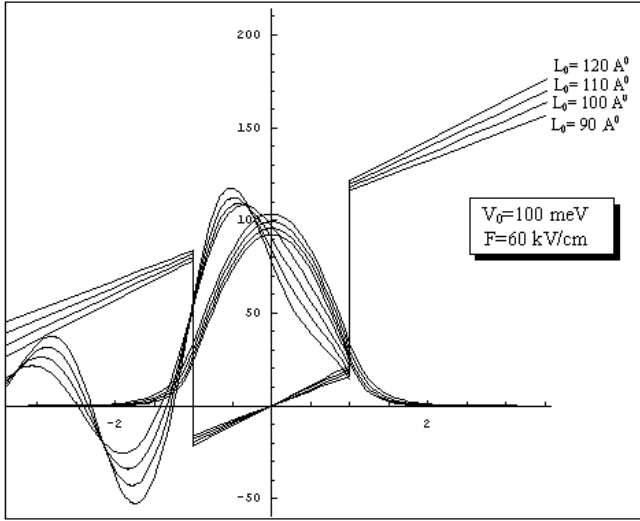
V. ŞEKİLLER



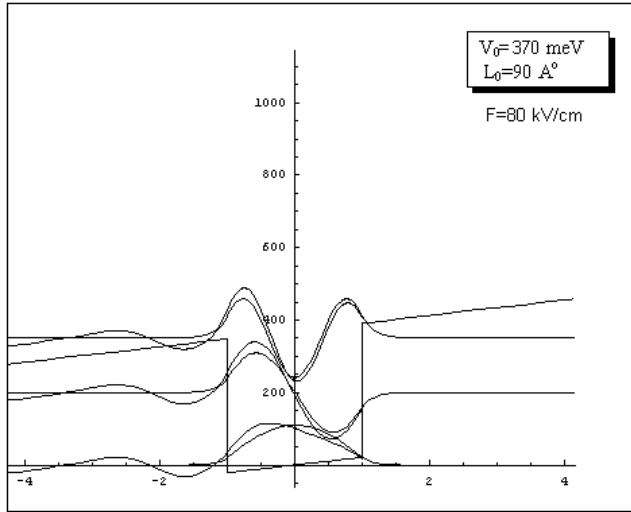
Şekil 1. a) $V_0=100$ meV potansiyel derinliğine ve $L_0=90 \text{ Å}$ genişliğine sahip bir kuantum kuyusu için sırasıyla $F=20, 40, 60, 80$ kV/cm uygulanan elektrik alan altında aşağıdan yukarıya doğru (ok yönünde) pertürbe olan taban durum dalga fonksiyonları



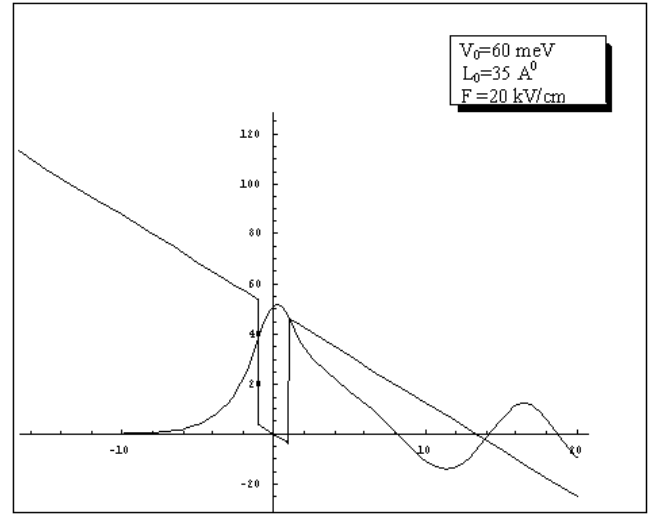
Şekil 1. b) $V_0=100$ meV potansiyel derinliğine ve $L_0=90 \text{ Å}$ genişliğine sahip bir kuantum kuyusu için sırasıyla $F= -20, -40, -60, -80$ kV/cm uygulanan elektrik alan altında aşağıdan yukarıya doğru (ok yönünde) pertürbe olan taban durum dalga fonksiyonları



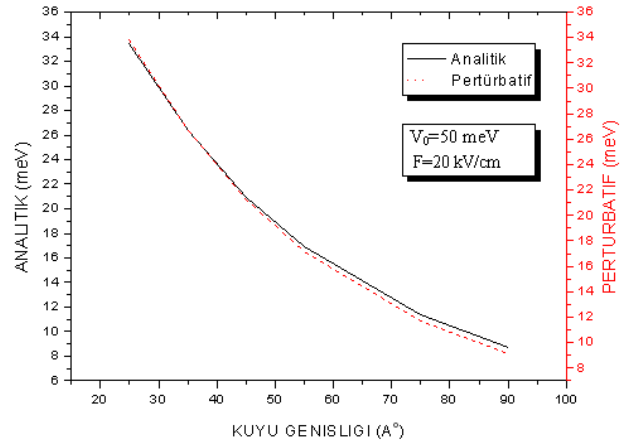
Şekil 2. $V_0=100$ meV potansiyel derinliğine ve sırasıyla $L_0=90, 100, 110, 120$ \AA^0 genişliğine sahip bir kuantum kuyusuna $F=60$ kV/cm uygulanan elektrik alan altında aşağıdan yukarıya doğru pertürbe olan taban durum dalga fonksiyonları ve yukarıdan aşağıya elektrik alan uygulamadan önceki taban durum dalga fonksiyonları



Şekil 3. $V_0=370$ meV potansiyel derinliğinde ve $L_0=90$ \AA^0 genişliğine sahip bir kuantum kuyusuna uygulanan $F=80$ kV/cm elektrik alan altında sistemin birinci (taban durum), ikinci ve üçüncü dalga fonksiyonları ve elektrik alan uygulanmadan önceki birinci, ikinci ve üçüncü dalga fonksiyonları



Şekil 4. $V_0=50$ meV potansiyel derinliğine ve $L_0=35$ \AA^0 genişliğine sahip bir kuantum kuyusuna uygulanan $F=20$ kV/cm elektrik alan altında analitik çözüm yöntemi ile elde edilmiş olan taban durum dalga fonksiyonu



Şekil 5. $V_0=50$ meV potansiyel derinliğine ve farklı genişliklere sahip kuantum kuyularına uygulanan $F=20$ kV/cm elektrik alan altında analitik ve pertürbatif yöntem kullanılarak elde edilmiş olan enerji özdeğerlerinin karşılaştırılması

Tablo 1 $L_0=90 \text{ \AA}$ genişliğinde ve $V_0=100 \text{ meV}$ derinliğinde olan bir kuantum kuyusuna etkiyen $F=20, 40, 60, 80 \text{ kV/cm}$ elektrik alan değerleri için 1. ve 2. dereceden pertürbatif katkılar ve katkılı enerji düzeyleri

	E_1 (meV)	E_2 (meV)	E_3 (meV)	1.Katkı (meV)	2.Katkı (meV)	Toplam Katkı (meV)	Katkılı E_1 (meV)	Katkılı E_2 (meV)	Katkılı E_3 (meV)
F=20 kV/cm	10.7784	41.9007	86.9449	1.94929	-0.00036	1.94893	12.7277	43.8496	88.8939
F=40 kV/cm	10.7784	41.9007	86.9449	3.89859	-0.00145	3.89713	14.677	45.7978	90.8421
F=60 kV/cm	10.7784	41.9007	86.9449	5.84788	-0.00328	5.84459	16.6263	47.7452	92.7895
F=80 kV/cm	10.7784	41.9007	86.9449	7.79717	-0.00583	7.79113	18.5756	49.692	94.7363