

**DÖNME GRUBUNA GÖRE
DEĞİŞMEZ KALAN DİFERANSİYEL
DENKLEMLER KULLANILARAK
KANE TİPİ YARI İLETKEN KÜRESEL
KUANTUM NOKTALARINDA
ELEKTRON VE HOLLERİN
ENERJİ SPEKTRUMLARININ
HESAPLANMASI**

YAZAR: DR. MUSTAFA BALCI

EDİTÖR: VEPA SABYROV

EĞİTİM
yayınevi

**DÖNME GRUBUNA GÖRE DEĞİŞMEZ KALAN DİFERANSİYEL DENKLEMLER
KULLANILARAK KANE TİPİ YARI İLETKEN KÜRESEL KUANTUM NOKTALARINDA
ELEKTRON VE HOLLERİN ENERJİ SPEKTRUMLARININ HESAPLANMASI**

Yazar: Dr. Mustafa Balcı

Editör: Vepa Sabyrov

Yayınevi Grubu Genel Başkanı: Yusuf Ziya Aydoğan (yza@egitimyayinevi.com)

Genel Yayın Yönetmeni: Yusuf Yavuz (yusufyavuz@egitimyayinevi.com)

Sayfa Tasarımı: Kübra Konca Nam

Kapak Tasarımı: Eğitim Yayınevi Tasarım Birimi

T.C. Kültür ve Turizm Bakanlığı

Yayıncı Sertifika No: 76780

E-ISBN: 978-625-385-557-4

1. Baskı, Aralık 2025

Kütüphane Kimlik Kartı

**DÖNME GRUBUNA GÖRE DEĞİŞMEZ KALAN DİFERANSİYEL DENKLEMLER
KULLANILARAK KANE TİPİ YARI İLETKEN KÜRESEL KUANTUM NOKTALARINDA
ELEKTRON VE HOLLERİN ENERJİ SPEKTRUMLARININ HESAPLANMASI**

Yazar: Dr. Mustafa Balcı

VII+63 s., 160x240 mm

Kaynakça var, izin yok.

E-ISBN: 978-625-385-557-4

Copyright © Bu kitabın Türkiye'deki her türlü yayın hakkı Eğitim Yayınevi'ne aittir. Bütün hakları saklıdır. Kitabın tamamı veya bir kısmı 5846 sayılı yasanın hükümlerine göre kitabı yayımlayan firmanın ve yazarlarının önceden izni olmadan elektronik/mechanik yolla, fotokopi yoluyla ya da herhangi bir kayıt sistemi ile çoğaltılamaz, yayımlanamaz.

EĞİTİM
yayınevi

Yayınevi Türkiye Ofis: İstanbul: Eğitim Yayınevi Tic. Ltd. Şti., Atakent mah.
Yasemen sok. No: 4/B, Ümraniye, İstanbul, Türkiye

Konya: Eğitim Yayınevi Tic. Ltd. Şti., Fevzi Çakmak Mah. 10721 Sok. B Blok,
No: 16/B, Safakent, Karatay, Konya, Türkiye
+90 332 351 92 85, +90 533 151 50 42
bilgi@egitimyayinevi.com

Yayınevi Amerika Ofis: New York: Egitim Publishing Group, Inc.
P.O. Box 768/Armonk, New York, 10504-0768, United States of America
americaoffice@egitimyayinevi.com

Lojistik ve Sevkiyat Merkezi: Kitapmatik Lojistik ve Sevkiyat Merkezi, Fevzi Çakmak Mah.
10721 Sok. B Blok, No: 16/B, Safakent, Karatay, Konya, Türkiye
sevkiyat@egitimyayinevi.com

Kitabevi Şubesi: Eğitim Kitabevi, Şükran mah. Rampalı 121, Meram, Konya, Türkiye
+90 332 499 90 00
bilgi@egitimkitabevi.com

İnternet Satış: www.kitapmatik.com.tr
bilgi@kitapmatik.com.tr

EĞİTİM YAYINEVİ
GRUBU

EĞİTİM
yayınevi

SALON
yayınevi

kitapmatik
Eğitimci Kitapları

Kitapmatik
Yayıncılık

EĞİTİM
kitabevi

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
İÇİNDEKİLER	III
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	IV
SİMGELER DİZİNİ.....	V
ÖN SÖZ	VII
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK ÖZETİ.....	11
3. MATERYAL VE YÖNTEM	15
4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA.....	48
5. SONUÇ	59
KAYNAKLAR	60

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 1. Kuantum nanoyapılar ve bu yapılar da durum yoğunluğunun enerjiye bağlı değişimi.....	7
Şekil 2. GaAs tipli yarıiletkenlerin $k=0$ noktası etrafında bant oluşumu	16
Şekil 3. Elektronların ve hafif deşiklerin yarıçapa bağlı enerji spektrumu grafiği	51
Şekil 4. Ağır deşiklerin enerji spektrumunun yarıçapa bağlı değişim grafiği	53
Şekil 5. Elektronlar için yarıçapa bağlı ϵ/ϵ_g grafiği.....	56
Şekil 6. Deşikler için yarıçapa bağlı ϵ/ϵ_g grafiği ...	57

SİMGELER DİZİNİ

Γ	Brillouin bölgesinin merkezi
l	Bandların tam açısal momentum sayısı
m	Kuantum sayısı
τ	Bandların numarası
$f_{l,m,\tau}$	Bandlara ait dalga fonksiyonu
f	Bessel fonksiyonu
h	Plank sabiti
ε	Enerji
ε_g	Yasak enerji aralığı (k=0 noktası ile elektron bandı arasındaki)
E_0	Yasak enerji aralığı (k=0 noktası ile ağır deşiklere ait bant arasındaki)
ε_h	Ağır deşiklerin enerjisi
ε_{lh}	Hafif deşiklerin enerjisi
k	Dalga vektörü
C_l^τ	Bantlar arası etkileşim sabiti
χ	Bantlara ait enerji
J	Bessel fonksiyonu

- I Küresel Bessel fonksiyonu
- C_n Diferansiyel denklemin çözümünden gelen Bessel sabiti
- m_e Elektronun etkin kütlesi
- m_h Ağır deşiklerin etkin kütlesi
- m_{lh} Hafif deşiklerin etkin kütlesi
- P Birinci iletim bandı ile valans bandının etkileşim sabiti
- R İkinci iletim bandı ile valans bandının etkileşim sabiti

ÖN SÖZ

Bu kitapta, Kane tipi yarı iletken kuantum noktalarında yük taşıyıcılarının dalga fonksiyonları ve enerji spektrumları teorik olarak hesaplanmıştır. Kitap, 2064-YL-09 No'lu proje ile Süleyman Demirel Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Yönetim Birimi Başkanlığı tarafından maddi olarak desteklenen, yazarın yüksek lisans tezini yazarken ortaya koyduğu teorik bulguları içermektedir. Yük taşıyıcılarının enerji spektrumlarını ve dalga fonksiyonlarını hesaplamak için dönme grubuna göre değişmez kalan birinci mertebeden diferansiyel denklemler sisteminden yararlanılmıştır. Denklemlerde valans bandı ve iki iletkenlik bandı olmak üzere üç bant yapısı esas alınmıştır. Elektronların, hafif deşiklerin ve ağır deşiklerin enerjilerinin kuantum noktalarının yarıçapına bağlı değişimi araştırılmıştır.

Dr. Mustafa BALCI

Isparta, 2025

1. GİRİŞ

Hızla gelişen teknolojiye bağılı olarak hesaplama teknikleri son zamanlarda gelişmiş ve bunun sonucunda bilgisayarların hesaplama hızı (10^9Hz) yükselmiş ve mikro sistemlerin büyüklüğüne (10^{-7}m) bağılı olara ileri bir seviyeye ulaşmıştır. Klasik fizik yasalarının uygulanabildiğı mikro dünyanın sınırı olan 10^{-7}m ' yi aştığımızda ve bilgisayarların hesaplama hızlarını artırdığımızda yepyeni bir fiziksel dünyaya ulaşırız. Bu fiziksel dünya nano dünyadır. Nano dünya bizlere daha önceki bilinen mikro dünyadan farklı fiziksel anlamlar sunmaktadır. Bu temel fark; nano dünyada, mikro dünyada bulunmayan kuantum etkilerinin bulunmasıdır. Bu nedenle günümüzde kullandığımız teknolojik cihazlar şimdiye kadar kullanılan ilkelere farklı olarak yeni ilkelere dayanarak çalışmaktadır.

Nano kelime anlamıyla ifade edilecek olursa; herhangi bir fiziksel büyüklüğün bir milyarda biri olarak tanımlanır. Nanoyapılar uzunluk olarak (10^{-9}metre) bakıldığında yaklaşık olarak 10-100 atomluk bir sisteme karşılık gelmektedir. Bu boyuttaki sistemlerde mikro sistemlere göre farklı fiziksel özellikler gözlemlenmektedir. Nanobilim ve nanoteknoloji olarak

adlandırılan bu yeni özellikler, yaklaşık 15 yıldır dünyada ülkelerinin askeri, sivil ve teknoloji stratejilerini belirler duruma gelmiştir.

Nano seviyesinde, malzemelerin fiziksel özellikleri değişmektedir. Makroskopik ölçekten tamamen farklı olup birçok yeni ve yararlı özellikler ortaya çıkmaktadır. Örnek olarak iletim özelliklerinin (momentum, enerji ve kütle) artık sürekli değil kesikli değerler alacağı söylenebilir. Benzer şekilde optik, elektronik, manyetik ve kimyasal özelliklerinde de klasik değil kuantum özellikleri gözlemlenmektedir. Maddeleri nanometre seviyesinde işleyerek ortaya çıkan yeni özellikleri kullanarak, nano-ölçekte yeni teknolojik aygıt ve malzemeler yapmak mümkün olmuştur. Örneğin tarama tünelleme ve atomik kuvvet mikroskoplarını kullanarak yüzey üzerindeki atomları iterek birbirlerinden ayırmak, istenilen şekillerde yerleştirmek mümkün olmuştur. Nanoteknolojiyi 19. yüzyılda gerçekleşen Sanayi Devrimi'ne eşdeğer kabul edebiliriz. Bu yeni devrim, bilim ve teknolojide yeni bir çağ açmıştır. Bu yeni dönemde atom ve moleküllerle oynayarak tek molekülden oluşan transistörler ve elektronik aygıtlar elde edilmiştir. Halen çalışmalar devam etmekte ve geliştirilmektedir. Yapılan bütün çalışmalar elektronik,

fizik, kimya, malzeme bilimi, optik, uzay bilimleri ve tıp alanlarında büyük bir çılgır açmıştır.

İçinde bulunduğumuz döneme damgasını vuran nanoteknoloji kuantum fiziğinin uygulamalarının bir sonucudur. Kuantum fiziğinin uygulamalarından faydalanılarak çalışma ilkeleri kuantum etkilerine bağlı olarak şekillenen yeni cihazlar üretilmesi hedeflenmektedir. Yarıiletkenler elektroniğinde kuantum mühendisliğinin uygulanması sonucu yapay kuantum noktaları ve yapay kuantum telleri elde edilmiştir. Böylece yeni elektronik cihazların ve malzemelerin elde edilmesi mümkün olmuştur. Gelecekte de bu yeni teknolojiden faydalanılarak süper bilgisayarlara mikroskop altında bakılabilecek, insan vücudundaki hastalıklı dokuları bulup iyileştiren nanorobotlar oluşturulabilecektir. İnsan beyni hafızasına ek nanohafızalarla güçlendirilebilecektir. Kirliliği önleyen nano parçacıklar ile çevre kirliliğinin önüne geçilebilecektir. Malzeme biliminde daha hafif ve daha dayanıklı malzemeler elde edilebilecek. Halen kullanılmakta olan malzemelerden, yaklaşık olarak birim ağırlık başına 50 kat daha hafif olabilecek ve kullanım ömürleri bugün- kilerinden daha uzun olacaktır. Sanayi alanında kir tutmayan ve

temizlenebilen boyalar üretilmiştir. Üzerinde sıvı tutmayan ve kırıışmayan kumaşlar elde edilmiştir. Tıp alanında geliştirilecek nano robotlar ameliyat yapabilecek ve hastalıklı dokuları bulup iyileştirebilecektir. Ayrıca hastalıklar daha ilk safhalarında teşhis edilebilecek ve tedavisi hastalık aktif hale geçmeden yapılabilir. Nano teknoloji ile kirliliği önleyen nano parçacıklar ile çevre kirliliğinin de önüne geçmek mümkün olacaktır. Nanoteknoloji ile ulusal güvenlikte alanında da yeni gelişmeler sağlanabilmekte savunma sanayinin de haberleşmede ve gizlilik konularında ilerlemeler gözlenmektedir. Malzeme bilimiyle birlikte daha hafif ve daha dayanıklı yeni askeri teçhizatlar üretilmektedir.

Nanobilim ve nanoteknolojinin merkezinde düşük boyutlarda baskın hale geçen boyut, sınır ve kuantum etkileri gibi temel fizik araştırması içeren konuların yanında, atomik boyutlarda görüntülemeye deneysel yöntemlerin geliştirilmesi, Angström altı (10^{-10} metreden küçük) boyutlarda ölçüm yapabilme teknikleri, düşük boyutlarda istenilen özelliklerde malzeme üretebilmeyi mümkün kılar. Bu yöntem, kızılaltı ve morötesi radyasyonlara tepkisi kontrol edilebilir malzeme ve aygıt geliştirme yöntemidir.

Bilgisayar çağının başları olan 1950’lerden bu yana yaklaşık her 18 ayda bir bilgisayar performansının iki katına çıktığı ve büyüklüğünün yarıya indiği düşünülürse (Moore kuralı) 2020 yılına ulaşıldığında bu kurala göre bilgisayar boyutları molekül boyutuna ulaşacaktır. Günümüzde 80 milyon transistörle bir işlemci, 2015 yılında 5 milyar transistör den oluşacaktır.

Boyuta göre kuantumlanmış enerji durumlarının son yıllarda, bilginin üretilmesi ve kaydedilmesi teknolojisinde uygulanılabilirliği tartışılmaya başlanmıştır. Bilginin alınması, işlenmesi, korunması ve geri kullanımını sağlayan bilgi sistemlerindeki gelişmeler göz önüne alındığında, nano-yapılarda meydana gelen kuantum etkilerinin denetlenme kapasitesi önem taşımaktadır. Nanoyapılarda bilginin kodlanması için üç önemli kuantum etkisi; yük taşıyıcıların enerjisinin boyuta göre kuantumlanması, girişim ve tünel olayı incelenmelidir. Büyüklükleri 1 nm mertebesinde olan atomlar sistemi (kuantum noktası) elektronların lokalizasyona uğradıklarından enerji spektrumları da kuantumludur. Bu nedenle kuantum noktaları yapay atomlar olarak kabul edilmektedir. Dolayısıyla A_3B_5 ve A_2B_6 tipli Kane tipi yarıiletkenlerle oluşturulan yapay kuantum yapılarında kuantum

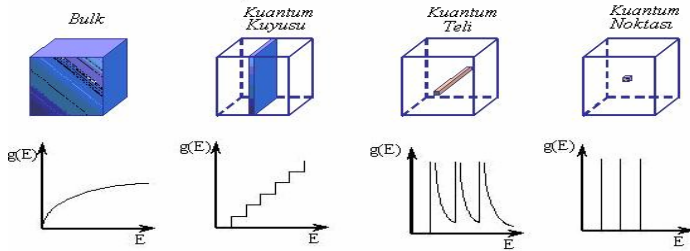
etkilerini incelemek çok önemlidir. Bu şekilde bilgiyi işleme hızı oldukça artarken enerji kullanımı çok az olacaktır. Nanoteknoloji devriminin insanlığın yakın geleceğinde yaratacağı değişiklik sadece ana hatlarıyla tahmin edilebilir. (Çıracı vd., 2004)

Nano teknolojisinin sadece başlangıcında olduğumuzu unutmamalıyız. Bu teknoloji ile nereye kadar gidebileceğimizi kestirmek mümkün değildir. Sadece yakın gelecekle ilgi tahminde bulunabiliriz.

İnce bir yarıiletken tabakasında yük taşıyıcılarının (elektron ve hol) sınırlandırılması sonucu boyutta küçülmenin yarıiletkenin davranışlarında köklü bir değişikliğe neden olduğu görülmektedir. Boyutların küçülmesiyle elde edilen iki boyutlu kuantum kuyuları, tek boyutta kuantum telleri ve boyutsuz kuantum noktalarıdır. Burada yük taşıyıcıların serbestlik derecesi ile sınırlanma yönlerinin toplamı katı sistemlerde üç olmalıdır. Bu yapıların boyutları de Broglie dalga boyu mertebesinde olduğundan enerji kuantumlanır ve boyuta göre kuantumlanmış pek çok enerji seviyesi gözlenir. Bu sebeple son zamanlarda kuantum nanoyapıların enerji spektrumlarını ve optik özelliklerini hem teorik hemde

deneysel olarak araştırmak çok popüler bir alan olmuştur (Bimberg vd., 2001).

Yapılar incelendiğinde enerjileri ve birim enerji aralığındaki izinli durumların sayısını veren durum yoğunluğu ile ilgili şunlar ifade edilebilir. Bulk yapılarda boyutlarda sınırlama olmadığı için enerji ve durum yoğunluğu sürekli dir. Tek boyutta sınırlama ile elde edilen kuantum kuyuları iki boyutlu kristaller olup enerji bir boyutta kuantumlanmıştır. İki boyutta kuantumlanma sonucu kuantum telleri elde edilmekte ve enerji iki boyutta kuantumlanmaktadır. Düşük boyutlarda x,y,z yönlerinde sınırlandırma sonucunda boyutsuz kuantum noktaları elde edilmektedir. Bu yapıda ise enerji üç boyutta da kuantumlanmıştır. Durum yoğunluğunun kuantum nanoyapılarda enerjiye bağlı değişimi Şekil 1.1.'de gösterilmektedir(Harrison, 1999;



Şekil 1. Kuantum nanoyapılar ve bu yapılar da durum yoğunluğunun enerjiye bağlı değişimi

Kuantum yapılarda durum yoğunluğunun enerjiye bağlı değişim grafiklerini; bulk yapılar, kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları için ifade edilmiştir. Bulk yapılarda, elektronun hareketi serbesttir ve enerji spektrumu sürekli dir. Birim enerji aralığındaki izinli durum sayısını veren durum yoğunluğu da sürekli olur. Kuantum kuyularında, toplam enerji, sınırlandırılan doğrultu ile buna dik olan doğrultuda ki düzlemlerin toplam kinetik enerjisini ifade etmektedir. Durum yoğunlu bu durumda her bir basamağı n 'inci alt banda karşılık gelen bir merdiven şeklinde oluşur. İki boyutta sınırlandırma ile elde edilen kuantum tellerinde enerji, sınırlandırılan seviyeler ile sınırlandırılmayan tel boyunca sürekli olan enerjilerin toplamıdır. Durum yoğunluğu ise her bir alt bandın tabanında birbirinden ayrılır ve enerjinin artması ile azalır. Kuantum noktalarında ise üç boyutta sınırlama olduğundan enerji tamamen kuantumlanmıştır. Durum yoğunluğu ise delta fonksiyonunun sınırlı bir serisi olmuştur.

Nanoyapılarla ilgili çalışmalar daha çok Kane tipi yarıiletkenler (InAs, GaAs, InSb, HgTe) temellidir. Düşük boyutlu sistemlerdeki deneysel çalışmalarda, yasak bant aralığı küçük olan yarıiletkenler kullanılırken, yarıiletkenlere ait gerçek bant yapısının

kullanılması gerekir. Çünkü basit parabolik bant yapısı gerçek yarıiletkenlerin optik ve elektronik özellikleri için yeterli değildir. Ancak nitel bir tanımlama elde etmek için yeterli olmaktadır. Nanokristallerin optik özellikleri elektronlar ve deşikler arasındaki geçişler sonucu meydana gelir. Bu sebeple yük taşıyıcılarına ait enerji seviyeleri bu yarıiletkenlerde bulunan gerçek bant yapısı dikkate alınarak hesaplanmalıdır (Efros ve Rosen, 1998).

Kane modeli yarıiletkenlerde yük taşıyıcılarının enerji spektrumunu elde etmek amacıyla iletkenlik bandı ile hafif deşikler ve spin-yörüngesel parçalanma deşiklerinden oluşan üç bandın etkileşmesi dikkate alınarak kurulmuştur. Bantlar arası etkileşme Kane parametresi olarak tanımlanan P matris elemanı ile karakterize edilmektedir.(Askerov, 1970)

Dönme grubuna göre değişmeyen birinci mertebeden diferansiyel denklemleri kullanarak, üç bant modeli (valans bandı ve iki iletkenlik bandı) dikkate alınarak, spin orbital etkileşmesi ihmal edilerek, GaAs tipi yarıiletken kuantum noktalarında yük taşıyıcılarının enerji spektrumlarının yarıçapa bağlı değişiminin ele

alındığı bu çalışma literatürde ilk defa bu tez tarafından incelenmiştir.

Kitap bölüm olarak hazırlanmıştır. Giriş bölümü ve kaynak özetlerinin ardından üçüncü bölümde materyal ve yöntem kısmında iki iletkenlik bandı ve valans bandı dikkate alınarak Dönme grubuna göre değişmez kalan diferansiyel denklemler yazılacaktır. Diferansiyel denklemlerin çözümleri Küresel Bessel fonksiyonları olacaktır. Dördüncü bölüm, araştırma bulguları ve tartışma bölümünde, GaAs tipi yarıiletken kuantum noktaları için küresel Bessel dalga fonksiyonlarının sınır koşullarından yararlanılarak yük taşıyıcılarının enerjileri yarıçapa bağlı olarak incelenecektir.

2. KAYNAK ÖZETİ

Spin-yörüngesel etkileşmesinin ve elektronların g-faktörüne olan katkısı, Kiselev ve arkadaşları tarafından araştırılmıştır. Elektronların g-faktörü hesaplanırken elektronların, hafif deşiklerin ve valans bandının kompleks yapısının parabolik olmamasını dikkate alan üç bantlı Kane modeli kullanılmıştır. Bu model enerji bant yapısını, Brillouin bölgesinin Γ noktası etrafında tanımlar. Kuantum telleri ve kuantum noktaları için elektron g-faktörü değerleri GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ hetero sistemine ait parametreler kullanılarak pertürbasyon teorisi ile hesaplanmıştır (Kiselev vd., 1996).

Genel olarak elektriksel iletkenlik, elektrik alanını bir kaynak, yük taşıyıcıların hareketini bir tepki olarak gören yaklaşımlardan hesaplanır. Yük taşıyıcılarının akışından başlayan ve örneğin kenarlarında sürdürülen ve daha sonra yüklerin nasıl oluştuğunu, alanların nasıl geliştiğini hesaplayan alternatif bir yaklaşım düzensiz sistemlerin davranışlarının incelenmesinde kabul görmüştür. Landauer (1987), bu yaklaşıma ait üzerinde az durulmuş sonuçları analiz etmiştir.

Efros ve Rosen (1998), küresel yarıiletken nanokristallerde elektron ve deşiklerin boyuta göre kuantumlanmış enerji seviyelerinin boyuta bağlı değişimi üzerine çalışmışlardır. Çalışmalarında kuantum enerji seviyeleri için iletkenlik ve valans bantlarının etkileşimini dikkate alan ve küresel sekiz bantlı Pidgeon ve Brown modelini içeren analitik bir kuram geliştirmişlerdir. Yasak enerji aralığı küçük olan yarıiletkenlerde bantlar arası etkileşiminin ihmal edilemeyeceğini göstermişlerdir. Hesaplamalar dar yasak enerji aralıklı InSb için, orta yasak enerji aralıklı CdTe ve geniş yasak enerji aralıklı CdS nanokristalleri için sunulmuştur.

Gashimzade vd. (2000), A^3B^5 ve A^2B^6 tipli yarı iletken küresel kuantum noktalarında serbest yük taşıyıcılarının enerji spektrumlarının kuantum noktalarının yarıçapına bağlılığını çalışmışlardır. Kuantum noktalarında yük taşıyıcılarının enerji spektrumunu hesaplamak için rotasyon grubuna göre değişmez kalan denklemlerin elde edilmesinde kullanımlı bir yöntemin üstün yanları gösterilmiştir. Küresel InAs kuantum noktasının ve yasak bant aralığı sıfır olan (HgTe) ile yasak bant aralığı dar olan (Cd₁₋

$x\text{Hg}_x\text{Te}$; $x < 0,16$) kuantum noktalarının enerji öz durumlarının hesaplanması sunulmuştur.

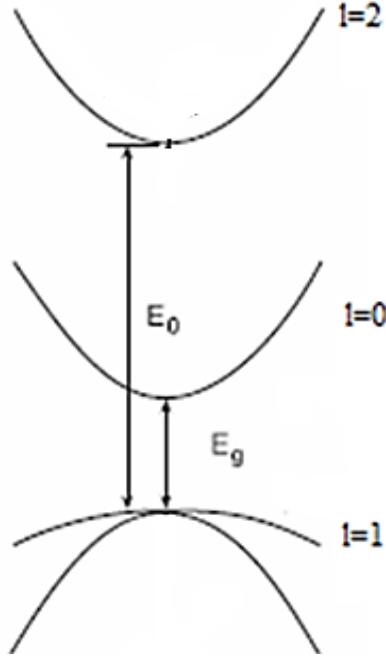
Ekimov, Onushchenko, Plyukhin ve Efros (1984), optik spektroskopi metotları CuCl mikrokristallerinin enerji spektrumlarının kuantum boyutunda araştırılmasında kullanılmıştır. Valans bandının karmaşık yapısı için uyarılmalarına izin veren kuantum büyüklüğünde bir teori geliştirildi. Deney sonuçları ile karşılaştırılması enerji bant parametreleri, CuCl kristalinde enerji spektrumu tanımlanıyor. Aslında büyüklüğü üç boyutlu bir potansiyel duvarını gösteren dielektrik matris yarıiletken mikro kristalde parçacıkların hareket alanını sınırlar. Dolayısıyla mikro kristalde yalnız parçacıkların serbest hareketi kuantumlanmış enerji spektrumlarının kesin değerleri için mümkündür.

Sercel, Efros ve Rosen (1999), bu çok bantlı efektif kütle teorisinde açık ve kapalı yarıiletken nanokristallerde esas boşluk durumlarının varlığı uygulanmıştır. Bu durumlar shockley-like yüzey durumlarından meydana geliyor. Bu çalışma çok yönlü bant efektif kütle yaklaşımı içindeki kendine özgü nanokristal durumların yeni sınıfı tanımlanmaktadır. Bunların kendine özgü yasak bant aralıkları vardır.

Energileri büyüklüğe bağlıdır ve bu valans bandının kenarları ile iletkenlik bandı arasındaki harekettir. Esasında anlaşılan bu durumlar kusurlu noktalarla ilişkili değil, ya saflığı bozan yada yüzey ile ilişkilidir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu çalışmada GaAs tipli yarıiletkenlerin küresel kuantum noktalarında yük taşıyıcılarının enerji spektrumları tayin edilecektir. Basit parabolik bant modeli yarıiletken nanoyapıların enerji spektrumlarını tam ifade edememektedir. GaAs tipi yarıiletkenlerin iletkenlik bandı, yalnız bandın $k=0$ noktasının yakın çevresinde paraboliktir. Bu sebeple basit parabolik bant modeli yarıiletkenlerin optik özelliklerini detaylı öğrenmek için yeterli değildir. Nanoyapıların optik özelliklerini deşikler ve elektronlar arasındaki geçiş zamanı ortaya çıkarır. GaAs tipi yarıiletkenlerin optik özelliklerini araştırmak için valans bandının karmaşıklığını ve valans bandı ile iletkenlik bandı arasındaki etkileşmeyi dikkate alan yeni çok bantlı bir model kurulması gerekmektedir. Bu çalışmada çok bantlı model, dönme grubuna göre değişmez kalan birinci mertebeden diferansiyel denklemler sisteminden yararlanılarak yapılmıştır (Gelfand, 1958; Lyubarskiy, 1957).



Şekil 2. GaAs tipli yarıiletkenlerin $k=0$ noktası etrafında bant oluşumu

Şekil 3.1.'de GaAs tipli yarıiletkenlerin Brillouin bölgesi merkezi Γ noktası etrafında bant yapısı gösterilmiştir. Bantlar iki simge ile belirtilmektedir (l, τ). Burada ilk simge (l) bantların tam açısal momentum kuantum sayısını, ikinci simge (τ) bant numarasını ifade etmektedir. Yaptığımız çalışmada $\tau=1$, $l=1$ bandı valans bandını göstermektedir. Bu bant dejenere olan ağırdeşikler ve hafifdeşikler ifade eder. İletkenlik bantları ise

$\tau=0$, $l=0$ ve $\tau=2$, $l=2$ numaralı bantlarla ifade edilmektedir.

Çok bantlı modelde, dönme grubuna göre değişmez kalan birinci mertebeden diferansiyel denklemler sisteminden yararlanılarak yük taşıyıcılarının dalga fonksiyonları ve enerji spektrumları bulunacaktır. Küresel kuantum noktalarında ve bulk yapılarda bantların radyal fonksiyonları için yazılmış diferansiyel denklemler sisteminden yararlanılacaktır.

Radyal fonksiyonlar için diferansiyel denklemler sistemi,

$$\sum_{\tau'} C_{l,l-1}^{\tau,\tau'} \left[\frac{\sqrt{(l^2 - m^2)} \frac{df_{l-1,m,\tau'}^{l_0}}{dr} - \frac{(l-1)\sqrt{(l^2 - m^2)}}{r} f_{l-1,m,\tau'}^{l_0} - \frac{1}{2r} \sqrt{(l+m-1)(l+m)} \sqrt{(l-m+1)(l+m)} f_{l-1,m-1,\tau'}^{l_0} - \frac{1}{2r} \sqrt{(l-m-1)(l-m)} \sqrt{(l+m+1)(l-m)} f_{l-1,m+1,\tau'}^{l_0} \right] +$$

$$C_{l,l}^{\tau,\tau'} \left[m \frac{df_{l,m,\tau'}^{l_0}}{dr} + \frac{m}{r} f_{l,m,\tau'}^{l_0} + \frac{1}{2r} \sqrt{(l-m+1)(l+m)} \sqrt{(l-m+1)(l+m)} f_{l,m-1,\tau'}^{l_0} - \frac{1}{2r} \sqrt{(l+m+1)(l-m)} \sqrt{(l+m+1)(l-m)} f_{l,m+1,\tau'}^{l_0} \right] +$$

$$C_{l,l+1}^{\tau,\tau'} \left[\sqrt{((l+1)^2 - m^2)} \frac{df_{l+1,m,\tau'}^{l_0}}{dr} + \frac{(l+2)\sqrt{((l+1)^2 - m^2)}}{r} f_{l+1,m,\tau'}^{l_0} + \frac{1}{2r} \sqrt{(l-m+2)(l-m+1)} \sqrt{(l-m+1)(l+m)} f_{l+1,m-1,\tau'}^{l_0} - \frac{1}{2r} \sqrt{(l+m+2)(l+m+1)} \sqrt{(l+m+1)(l-m)} f_{l+1,m+1,\tau'}^{l_0} \right] +$$

$$i\chi f_{l,m,\tau'}^{l_0}(r) = 0 \quad (3.1)$$

şeklinde tanımlanır. (3.1) denklemler sistemi keyfi sayıda bandı dikkate alarak yazılmıştır. Bu bantlardaki yük taşıyıcıların dalga fonksiyonları ve enerji spektrumları, yazılan diferansiyel denklemler sisteminden elde edilen denklemlerin çözümlenmesiyle mümkün olacaktır.

Bu denklemler sisteminde, χ , bantlara ait enerji sabitidir. $C_{l\tau}^{\tau\tau'}$ katsayıları bantlar arası etkileşme sabitleridir. Burada l bantların tam açısal momentum kuantum sayısını, τ ise bant numarasını ifade etmektedir. $f_{l,m,\tau}$ bulunmak istenen dalga fonksiyonlardır. Fonksiyonlar l, m, τ alt indisleriyle ifade edilecektir. Tam açısal momentum değerleri l , kuantum sayılarım ve bantların numarası τ ile gösterilmektedir.

Diferansiyel denklemlerde, tam açısal momentum değerleri $l=0, 1, 2$ kuantum değerleri $m= -2, -1, 0, 1, 2$ ve bant numaraları $\tau= 0, 1, 2$ değerleri kullanılarak dokuz diferansiyel denklem elde edilir.

$$C_{0,1}^{0,1} \left[\frac{df_{0,0,0}(r)}{dr} + \frac{2}{r} f_{1,0,1} + \frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_0(l_0+1)} f_{1,-1,1}(r) + \frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_0(l_0+1)} f_{1,1,1}(r) \right] + i\chi_1 f_{0,0,0}(r) = 0 \quad (3.2)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{0,0,0} \right] +$$

$$C_{1,2}^{1,2} \left[\frac{\sqrt{3}}{r} \frac{df_{2,-1,2}}{dr} + \frac{3\sqrt{3}}{r} f_{2,-1,2} + \frac{\sqrt{3}}{r} \sqrt{(l_o+2)(l_o-1)} f_{2,-2,2} + \frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{2,0,2} \right] + i\chi_2 f_{1,-1,1} = 0 \quad (3.3)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[\frac{\partial f_{0,0,0}}{\partial r} \right] + C_{1,2}^{1,2} \left[\frac{2\partial f_{2,0,2}}{\partial r} + \frac{6}{r} f_{2,0,2} + \frac{\sqrt{6}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{2,-1,2} + \frac{\sqrt{6}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{2,1,2} \right] + i\chi_2 f_{1,0,1} = 0 \quad (3.4)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{0,0,0} \right] +$$

$$C_{1,2}^{1,2} \left[\frac{\sqrt{3}}{r} \frac{\partial f_{2,1,2}}{\partial r} + \frac{3\sqrt{3}}{r} f_{2,1,2} + \frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{2,0,2} + \frac{\sqrt{3}}{r} \sqrt{(l_o+2)(l_o-1)} f_{2,2,2} \right] + i\chi_2 f_{1,1,1} = 0 \quad (3.5)$$

$$C_{2,1}^{2,1} \left[-\frac{\sqrt{3}}{r} \sqrt{(l_o-1)(l_o+2)} f_{1,-1,1} \right] + i\chi_3 f_{2,-2,2} = 0 \quad (3.6)$$

$$C_{2,1}^{2,1} \left[\sqrt{3} \frac{\partial f_{1,-1,1}}{\partial r} - \frac{\sqrt{3}}{r} f_{1,-1,1} - \frac{\sqrt{6}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{1,0,1} \right] + i\chi_3 f_{2,-1,2} = 0 \quad (3.7)$$

$$C_{2,1}^{2,1} \left[\frac{2}{r} \frac{\partial f_{1,0,1}}{\partial r} - \frac{2}{r} f_{1,0,1} - \frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{1,-1,1} - \frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{1,1,1} \right] + i\chi_3 f_{2,0,2} = 0 \quad (3.8)$$

$$C_{2,1}^{2,1} \left[\sqrt{3} \frac{\partial f_{1,1,1}}{\partial r} - \frac{\sqrt{3}}{r} f_{1,1,1} - \frac{\sqrt{6}}{2r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{1,0,1} \right] + i\chi_3 f_{2,1,2} = 0 \quad (3.9)$$

$$C_{2,1}^{2,1} \left[-\frac{\sqrt{3}}{r} \sqrt{(l_o-1)(l_o+2)} f_{1,1,1} \right] + i\chi_3 f_{2,2,2} = 0 \quad (3.10)$$

Elde edilen bu denklemler valans bandı ve iki iletkenlik bandı göz önüne alınarak yazılmıştır. Dejenere olan ağırdeşiklerin dalga fonksiyonlarını elde etmek için $l=2$ bandına ait dalga fonksiyonları, (3.6), (3.7), (3.8), (3.9) ve (3.10) denklemlerinden elde edilir.

$$f_{2,2,2} = \frac{C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\frac{\sqrt{3}}{r} \sqrt{(l_o - 1)(l_o + 2)} f_{1,1,1} \right] \quad (3.11)$$

$$f_{2,1,2} = -\frac{C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\frac{\sqrt{3} \left(\frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \right) f_{1,1,1} - \frac{\sqrt{6}}{2r} \sqrt{l_o(l_o + 1)} f_{1,0,1} \right] \quad (3.12)$$

$$f_{2,0,2} = -\frac{C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\frac{2 \left(\frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \right) f_{1,0,1} - \frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o + 1)} (f_{1,-1,1} + f_{1,1,1}) \right] \quad (3.13)$$

$$f_{2,-1,2} = -\frac{C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\frac{\sqrt{3} \left(\frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \right) f_{1,-1,1} - \frac{\sqrt{6}}{2r} \sqrt{l_o(l_o + 1)} f_{1,0,1} \right] \quad (3.14)$$

$$f_{2,-2,2} = \frac{C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\frac{\sqrt{3}}{r} \sqrt{(l_o - 1)(l_o + 2)} f_{1,-1,1} \right] \quad (3.15)$$

Bu dalga fonksiyonlarını (3.2), (3.3), (3.4) ve (3.5) denklemlerinde yerine yazılsın.

$$\begin{aligned} & C_{0,1}^{0,1} \left[\frac{\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) f_{1,0,1} + \frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o + 1)} (f_{1,-1,1} + f_{1,1,1}) \right] + i\chi_1 f_{0,0,0} = 0 \quad (3.16) \\ & C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_o(l_o + 1)} f_{0,0,0}^l \right] + \\ & \frac{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\left(-3 \frac{d^2}{dr^2} - \frac{6}{r} \frac{d}{dr} + \frac{6}{r^2} + \frac{3}{r^2} (l_o + 2)(l_o - 1) + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{1}{2r^2} l_o(l_o + 1) + \frac{i\chi_3 i\chi_2}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}} \right) f_{1,-1,1} + \right. \end{aligned}$$

$$\sqrt{2}\sqrt{l_o(l_o+1)}\left(\frac{1}{2r}\frac{d}{dr}+\frac{4}{r^2}\right)f_{1,0,1}+\frac{1}{2r^2}l_o(l_o+1)f_{1,1,1}=0 \quad (3.17)$$

$$C_{1,0}^{1,0}\left[\frac{\partial f_{0,0,0}}{\partial r}\right]+\frac{C_{1,2}^{1,2}C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3}\left[(-4\frac{d^2}{dr^2}-\frac{8}{r}\frac{d}{dr}+\frac{8}{r^2}+\frac{3}{r^2}l_o(l_o+1)+\right. \\ \left.\frac{i\chi_2i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2}C_{2,1}^{2,1}}\right)f_{1,0,1}+\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{l_o(l_o+1)}(-\frac{1}{r}\frac{d}{dr}+\frac{7}{r^2})(f_{1,-1,1}+f_{1,1,1})]=0 \quad (3.18)$$

$$C_{1,0}^{1,0}\left[-\frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_o(l_o+1)}f_{0,0,0}\right]+ \\ \frac{C_{2,1}^{2,1}C_{1,2}^{1,2}}{i\chi_3}\left[\left(-3\frac{d^2}{dr^2}-\frac{6}{r}\frac{d}{dr}+\frac{6}{r^2}+\frac{1}{2r^2}l_o(l_o+1)+\right)f_{1,1,1}+\right. \\ \left.\frac{3}{r^2}(l_o-1)(l_o+2)+\frac{i\chi_2i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2}C_{2,1}^{2,1}}\right)f_{1,1,1}+\left.\sqrt{2}\sqrt{l_o(l_o+1)}\left(\frac{1}{2r}\frac{d}{dr}+\frac{4}{r^2}\right)f_{1,0,1}+\frac{1}{2r^2}l_o(l_o+1)f_{1,-1,1}\right]=0 \quad (3.19)$$

(3.16), (3.17), (3.18) ve (3.19) denklemleri düzenlenirse,

$$C_{0,1}^{0,1}\left[\left(\frac{d}{dr}+\frac{2}{r}\right)f_{1,0,1}+\right. \\ \left.\frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_o(l_o+1)}(f_{1,-1,1}+f_{1,1,1})\right]+i\chi_1f_{0,0,0}=0 \quad (3.20)$$

$$C_{1,0}^{1,0}\left[-\frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_o(l_o+1)}f_{0,0,0}\right]+$$

$$\frac{C_{1,2}^{1,2}C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3}\left[(-3\frac{d^2}{dr^2}-\frac{6}{r}\frac{d}{dr}+\frac{7l_o^2+7l_o}{2r^2}+\frac{i\chi_3i\chi_2}{C_{1,2}^{1,2}C_{2,1}^{2,1}})f_{1,-1,1}+\right.$$

$$\left.\sqrt{2}\sqrt{l_o(l_o+1)}\left(\frac{1}{2r}\frac{d}{dr}+\frac{4}{r^2}\right)f_{1,0,1}+\frac{1}{2r^2}l_o(l_o+1)f_{1,1,1}\right]=0 \quad (3.21)$$

$$C_{1,0}^{1,0}\left[\frac{\partial f_{0,0,0}}{\partial r}\right]+$$

$$\frac{C_{1,2}^{1,2}C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3}\left[(-4\frac{d^2}{dr^2}-\frac{8}{r}\frac{d}{dr}+\frac{3l_o^2+3l_o+8}{r^2}+\frac{i\chi_2i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2}C_{2,1}^{2,1}})f_{1,0,1}+\right.$$

$$\left.\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{l_o(l_o+1)}(-\frac{1}{r}\frac{d}{dr}+\frac{7}{r^2})(f_{1,-1,1}+f_{1,1,1})\right]=0 \quad (3.22)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\sqrt{2}}{2r} \sqrt{l_0(l_0+1)} f_{0,0,0} \right] +$$

$$\frac{C_{2,1}^{2,1} C_{1,2}^{1,2}}{i\chi_3} \left[\left(-3 \frac{d^2}{dr^2} - \frac{6}{r} \frac{d}{dr} + \frac{7l_0^2 + 7l_0}{2r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}} \right) f_{1,1,1} + \right.$$

$$\left. \sqrt{2} \sqrt{l_0(l_0+1)} \left(\frac{1}{2r} \frac{d}{dr} + \frac{4}{r^2} \right) f_{1,0,1} + \frac{1}{2r^2} l_0(l_0+1) f_{1,-1,1} \right] = 0 \quad (3.23)$$

şeklinde dört denklem elde edilir. Bu denklemleri kullanarak ağır deşiklerin dalga fonksiyonları ve enerji spektrumları bulunabilir.

Ağır deşiklerin katlı dalga fonksiyonlarını elde etmek için (3.20), (3.21), (3.22), (3.23) denklemleri kullanılır. Ağır deşiklerin ilk dalga fonksiyonu grubunu ve enerji spektrumunu bulmak için (3.23) denkleminde (3.21) denklemini çıkarılır.

$$\frac{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left(-3 \frac{d^2}{dr^2} - \frac{6}{r} \frac{d}{dr} + \frac{6l_0^2 + 6l_0}{2r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}} \right) (f_{1,-1,1} - f_{1,1,1}) = 0$$

$$-3 \frac{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(l_0^2 + l_0)}{r^2} - \frac{1}{3} \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}} \right\} (f_{1,-1,1} - f_{1,1,1}) = 0 \quad (3.24)$$

(3.24) denklemini, Bessel diferansiyel denklemine benzemektedir.

Bessel diferansiyel denklemi (Abramowitz, 1964),

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l_0(l_0+1)}{r^2} + k^2 \right) f = 0 \quad (3.25)$$

şeklindedir. Buradaki Bessel fonksiyonu ise

$$f = C \frac{J_p(r)}{r^2} \quad (3.26)$$

dir. Diferansiyel denklemden,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l_0(l_0+1)}{r^2} + \frac{1}{3} \frac{\chi_2 \chi_3}{|C_{1,2}^{1,2}|^2}\right)(f_{1,-1,1} - f_{1,1,1}) = 0 \quad (3.27)$$

enerji spektrumu ve dalga fonksiyonu, Bessel diferansiyel denkleminin çözümünde aranmalıdır. Dalga vektörü,

$$k_h^2 = \frac{1}{3} \frac{\chi_2 \chi_3}{|C_{1,2}^{1,2}|^2} \quad (3.28)$$

(3.28) denkleminde, $\chi_2 = -\varepsilon$, $\chi_3 = E_0 - \varepsilon$ ve $|C_{1,2}^{1,2}|^2 = R^2$ değerleri yerine yazılırsa,

$$k_h^2 = \frac{1-\varepsilon(E_0-\varepsilon)}{3 R^2} = \frac{1}{3} \frac{\varepsilon(E_0-\varepsilon)}{R^2} \quad (3.29)$$

burada, $E_0 \gg \varepsilon$ olduğu için $\varepsilon - E_0 \cong -E_0$ olarak alınabilir. Böylece enerji ifadesi,

$$\varepsilon = -\frac{3R^2 k_h^2}{E_0} = \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \quad (3.30)$$

deşikler için enerji spektrumunu ifade etmektedir.

$(f_{1,-1,1} - f_{1,1,1})$ fonksiyonunun çözümünü ise (3.26)daki Bessel fonksiyonundan,

$$f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} = C_{h2} \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(k_h r)}{r^2} \quad (3.31)$$

olarak ağırdeşiklerin dalga fonksiyonu elde edilmiş olur.

Böylece katlı ağır deşikler için birinci dalga fonksiyonu grubunda $f_{1,-1,1} - f_{1,1,1}$ dalga fonksiyonu bulunmuş oldu. Diğer dalga fonksiyonları denklemde bulunmadığı için $f_{0,0,0} = 0, f_{1,0,1} = 0, f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} = 0$ dır. Bu durumda ağır deşiklerin birinci dalga fonksiyonu grubu;

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ J_{l+\frac{1}{2}}(k_h r) \\ \frac{1}{r^2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

dir. Bessel fonksiyonundan küresel Bessel fonksiyonuna dönüşümü(Abramowitz, 1964),

$$J_{l+\frac{1}{2}}(k_h r) = \sqrt{\frac{2k_h r}{\pi}} I_l(k_h r) \quad (3.33)$$

dir. Küresel Bessel dalga fonksiyonu grubu ise

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ C_{h2} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

şeklinde olur. Ağır deşikler için birinci grup küresel Bessel dalga fonksiyonları bulunmuş oldu.

Şimdi katlı olan ağır deşiklerin, ikinci grup dalga fonksiyonlarını elde etmek için (3.21), (3.23) denklemlerini toplayalım.

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\sqrt{2}}{r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{0,0,0} \right] + \frac{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\left(-3 \frac{d^2}{dr^2} - \frac{6}{r} \frac{d}{dr} + \frac{7l_o^2 + 7l_o}{2r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}} \right) (f_{1,1,1} + f_{1,-1,1}) + \sqrt{2} \sqrt{l_o(l_o+1)} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) f_{1,0,1} + \frac{1}{2r^2} l_o(l_o+1) (f_{1,-1,1} + f_{1,1,1}) \right] = 0 \quad (3.35)$$

Denklem düzenlenirse,

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\sqrt{2}}{r} \sqrt{l_o(l_o+1)} f_{0,0,0} \right] + \frac{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\left(-3 \frac{d^2}{dr^2} - \frac{6}{r} \frac{d}{dr} + \frac{4l_o^2 + 4l_o}{r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}} \right) (f_{1,1,1} + f_{1,-1,1}) + \sqrt{2} \sqrt{l_o(l_o+1)} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) f_{1,0,1} \right] = 0 \quad (3.36)$$

elde edilir. Şimdi (3.20), (3.22) ve (3.36) denklemleri, $\alpha = \sqrt{2} \sqrt{l_o(l_o+1)}$ ve $\varphi = (f_{1,1,1} + f_{1,-1,1})$ değişken dönüşümleri yapılarak tekrar yazılırsa,

$$C_{0,1}^{0,1} \left[\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) f_{1,0,1} + \frac{\alpha}{2r} \varphi \right] + i\chi_1 f_{0,0,0} = 0 \quad (3.37)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\alpha}{r} f_{0,0,0} \right] + \frac{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\left(-3 \frac{d^2}{dr^2} - \frac{6}{r} \frac{d}{dr} + \frac{4l_o^2 + 4l_o}{r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}} \right) \varphi + \alpha \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) f_{1,0,1} \right] = 0 \quad (3.38)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[\frac{\partial f_{0,0,0}}{\partial r} \right] + \frac{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}{i\chi_3} \left[\left(-4 \frac{d^2}{dr^2} - \frac{8}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3l_o^2 + 3l_o + 8}{r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}} \right) f_{1,0,1} + \frac{\alpha}{2} \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{7}{r^2} \right) \varphi \right] = 0 \quad (3.39)$$

Ağır deşikler için denklemleri çözerken dikkate alınması gereken ilk şart, ağır deşiklerin elektron bandıyla ($l=0$ bandı) olan etkileşmelerinin ihmal edilmesidir. Böylece $f_{0,0,0} = 0$ olur.

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r}\right)f_{1,0,1} + \frac{\alpha}{2r}\varphi = 0 \quad (3.40)$$

$$\left(-3\frac{d^2}{dr^2} - \frac{6}{r}\frac{d}{dr} + \frac{4l_o^2 + 4l_o}{r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}\right)\varphi + \frac{\alpha}{r}\left(\frac{d}{dr} + \frac{8}{r}\right)f_{1,0,1} = 0 \quad (3.41)$$

$$\left(-4\frac{d^2}{dr^2} - \frac{8}{r}\frac{d}{dr} + \frac{3l_o^2 + 3l_o + 8}{r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}\right)f_{1,0,1} + \frac{\alpha}{2r}\left(-\frac{d}{dr} + \frac{7}{r}\right)\varphi = 0 \quad (3.42)$$

Denklemlerden anlaşılıyor ki katlı olan ağır deşiklerin ikinci grup dalga fonksiyonlarında $f_{1,0,1}$ ve φ fonksiyonları bulunmaktadır. (3.40) denkleminde φ fonksiyonu çekilirse,

$$\varphi = -\frac{2r}{\alpha}\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r}\right)f_{1,0,1} \quad (3.43)$$

olur. φ fonksiyonu (3.42) denkleminde yerine yazılsın.

$$\left(-4\frac{d^2}{dr^2} - \frac{8}{r}\frac{d}{dr} + \frac{3l_o^2 + 3l_o + 8}{r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}\right)f_{1,0,1} + \frac{\alpha}{2r}\left(-\frac{d}{dr} + \frac{7}{r}\right)\left(-\frac{2r}{\alpha}\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r}\right)f_{1,0,1}\right) = 0 \quad (3.44)$$

Türev alınırsa,

$$\left(-4\frac{d^2}{dr^2} - \frac{8}{r}\frac{d}{dr} + \frac{3l_o^2 + 3l_o + 8}{r^2} + \frac{i\chi_2 i\chi_3}{C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}\right)f_{1,0,1} + \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{4}{r}\frac{d}{dr} - \frac{14}{r^2}\right)f_{1,0,1} = 0 \quad (3.45)$$

denklemleri toplanırsa,

$$-3\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l_o^2 + l_o - 2}{r^2} + \frac{\chi_2 \chi_3}{3C_{1,2}^{1,2} C_{2,1}^{2,1}}\right)f_{1,0,1} = 0 \quad (3.46)$$

şeklinde elde edilir. Diferansiyel denkleminin çözümü de Bessel diferansiyel denkleminde aranmalıdır. Dalga vektörü (3.28) denklemindeki gibi

$$k_h^2 = \frac{1}{3} \frac{\chi_2 \chi_3}{|C_{1,2}^{1,2}|^2}$$

dir. (3.29) denklemlerinden,

$$k_h^2 = \frac{1 - \varepsilon(E_0 - \varepsilon)}{3 R^2} = \frac{1}{3} \frac{\varepsilon(\varepsilon - E_0)}{R^2}$$

$E_0 \gg \varepsilon$ olduğu için $\varepsilon - E_0 \cong -E_0$ olarak alınabilir.

Böylece enerji ifadesi (3.30) dan,

$$\varepsilon = -\frac{3R^2 k_h^2}{E_0} = \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h}$$

olur. $f_{1,0,1}$ fonksiyonunun Bessel denkleminde çözümü,

$$f_{1,0,1} = C_{h1} \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(k_h r)}{r^{\frac{3}{2}}} \quad (3.47)$$

şeklinde bulunur. (3.47) fonksiyonu (3.43) denkleminde yazılarak, φ fonksiyonu,

$$\varphi = -\frac{2r}{\alpha} \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) C_{h1} \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(k_h r)}{r^{\frac{3}{2}}} \quad (3.48)$$

hesaplanacak olursa, türev almak için

$$\frac{d}{dz} \left(J_p(z) \right) = \frac{p}{z} J_p(z) - J_{p+1}(z) \quad (3.49)$$

$$z = k.r$$

$$dz = k.dr \quad (3.50)$$

denklemini kullanılır. Böylece,

$$\frac{d}{dr} \left(C_{h1} \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{r^{\frac{3}{2}}} \right) = -\frac{3}{2} r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) + r^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{l+\frac{1}{2}}{r} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - k J_{l+\frac{3}{2}}(kr) \right) \quad (3.51)$$

ifadesi (3.48) denkleminde yazılarak φ fonksiyonu elde edilir.

$$\varphi = C_{h1} \frac{2}{\alpha} ((-1-1) r^{-\frac{3}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(k_h r) + r^{-\frac{1}{2}} k J_{l+\frac{3}{2}}(k_h r)) \quad (3.52)$$

Böylece ağır deşikler için dalga fonksiyonları $f_{1,0,1}$ ve φ bulunmuş oldu. Diğer dalga fonksiyonları olmadığı için $f_{0,0,0} = 0$ ve $f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} = 0$ dır. Ağır deşikler için ikinci grup dalga fonksiyonları,

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ C_{h1} \frac{2}{\alpha} ((-1-1) r^{-\frac{3}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(k_h r) + r^{-\frac{1}{2}} k J_{l+\frac{3}{2}}(k_h r)) \\ C_{h1} \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(k_h r)}{r^{\frac{3}{2}}} \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

şeklinde bulunur. Buradan(3.33) deki küresel Bessel dönüşümü yapılırsa,

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ C_{h1} \frac{2}{\alpha} ((-1-1) r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) + k_h^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_h r)) \\ C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) \end{bmatrix} \quad (3.54)$$

Böylece ağır deşikler için ikinci grup küresel Bessel dalga fonksiyonu grubu bulunmuş oldu. Katlı ağır deşiklere ait iki küresel Bessel dalga fonksiyonları grubu (3.34), (3.54) ve enerji değeri (3.30) bulunmuştur.

Elektronların ve hafif deşiklerin fonksiyonlarını ve enerjilerini bulmak için ilk dokuz denklemden (3.2), (3.3), (3.4), (3.5) denklemlerini tekrar yazalım.

$$\begin{aligned}
 & C_{0,1}^{0,1} \left[\begin{aligned} & \frac{df_{0,0,0}}{dr}(r) + \frac{2}{r}f_{1,0,1} + \\ & \frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_0(l_0+1)}f_{1,-1,1}(r) + \\ & \frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_0(l_0+1)}f_{1,1,1}(r) \end{aligned} \right] + i\chi_1 f_{0,0,0}(r) = 0 \\
 & C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_0(l_0+1)}f_{0,0,0} \right] + C_{1,2}^{1,2} \left[\begin{aligned} & \sqrt{3}\frac{df_{2,-1,2}}{dr} + \frac{3\sqrt{3}}{r}f_{2,-1,2} + \\ & \frac{\sqrt{3}}{r}\sqrt{(l_0+2)(l_0-1)}f_{2,-2,2} \\ & + \frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_0(l_0+1)}f_{2,0,2} \end{aligned} \right] + i\chi_2 f_{1,-1,1} = 0 \\
 & C_{1,0}^{1,0} \left[\frac{\partial f_{0,0,0}}{\partial r} \right] + C_{1,2}^{1,2} \left[\begin{aligned} & \frac{2\partial f_{2,0,2}}{\partial r} + \\ & \frac{6}{r}f_{2,0,2} + \\ & \frac{\sqrt{6}}{2r}\sqrt{l_0(l_0+1)}f_{2,-1,2} + \\ & \frac{\sqrt{6}}{2r}\sqrt{l_0(l_0+1)}f_{2,1,2} \end{aligned} \right] + i\chi_2 f_{1,0,1} = 0 \\
 & C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_0(l_0+1)}f_{0,0,0} \right] + \\
 & C_{1,2}^{1,2} \left[\begin{aligned} & \sqrt{3}\frac{\partial f_{2,1,2}}{\partial r} + \\ & \frac{3\sqrt{3}}{r}f_{2,1,2} + \\ & \frac{\sqrt{2}}{2r}\sqrt{l_0(l_0+1)}f_{2,0,2} + \\ & \frac{\sqrt{3}}{r}\sqrt{(l_0+2)(l_0-1)}f_{2,2,2} \end{aligned} \right] + i\chi_2 f_{1,1,1} = 0
 \end{aligned}$$

denklemleri kullanılarak elektronların ve hafif deşiklerin fonksiyonları ve enerji spektrumları bulunacaktır.

Bunun için öncelikle ağır deşiklere ait $l=2$ bandıyla olan etkileşimleri ihmal edilecektir.

Denklemlerden $\alpha = \sqrt{2} \sqrt{l_0(l_0 + 1)}$ ve $\varphi = (f_{1,1,1} + f_{1,-1,1})$ dönüşümleri yapılırsa, (3.2), (3.3), (3.4), (3.5) denklemleri,

$$C_{0,1}^{0,1} \left[\frac{df_{0,0,0}}{dr}(r) + \frac{2}{r} f_{1,0,1} + \frac{\alpha}{2r} \varphi \right] + i\chi_1 f_{0,0,0}(r) = 0 \quad (3.55)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\alpha}{2r} f_{0,0,0} \right] + i\chi_2 f_{1,-1,1} = 0 \quad (3.56)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[\frac{\partial f_{0,0,0}}{dr} \right] + i\chi_2 f_{1,0,1} = 0 \quad (3.57)$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\alpha}{2r} f_{0,0,0} \right] + i\chi_2 f_{1,1,1} = 0 \quad (3.58)$$

denklemlerden (3.56) ve (3.58) denklemlerini toplamı,

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\alpha}{r} f_{0,0,0} \right] + i\chi_2 \varphi = 0 \quad (3.59)$$

şeklinededir. Denklemden $f_{0,0,0}$ fonksiyonu çekilirse,

$$f_{0,0,0} = \frac{i\chi_2 r}{C_{1,0}^{1,0} \alpha} \varphi \quad (3.60)$$

olur. Fonksiyonu(3.57) denkleminde yerine yazılırsa,

$$C_{1,0}^{1,0} \left[\frac{d}{dr} \left(\frac{i\chi_2 r}{C_{1,0}^{1,0} \alpha} \varphi \right) \right] + i\chi_2 f_{1,0,1} = 0 \quad (3.61)$$

denklem,

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) \varphi + \frac{\alpha}{r} f_{1,0,1} = 0 \quad (3.62)$$

şeklinde olur. Denklemden $f_{1,0,1}$ fonksiyonu çekilirse,

$$f_{1,0,1} = -\frac{r}{\alpha} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) \varphi \quad (3.63)$$

dir. $f_{1,0,1}$ fonksiyonu (3.36) denkleminde yerine yazılırsa,

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\alpha}{r} f_{0,0,0} \right] + \frac{|C_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3} \left[\left(-\frac{3d^2}{dr^2} - \frac{6}{r} \frac{d}{dr} + \frac{4l_0^2 + 4l_0}{r^2} + \frac{i\chi_3 i\chi_2}{|C_{1,2}^{1,2}|^2} \right) \varphi + \frac{\alpha}{r} \left(\frac{d}{dr} + \frac{8}{r} \right) \left\{ -\frac{r}{\alpha} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) \varphi \right\} \right] = 0 \quad (3.64)$$

denklemini düzenlersek,

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\alpha}{r} f_{0,0,0} \right] - 4 \frac{|C_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l_0(l_0+1)-2}{r^2} - \frac{i\chi_3 i\chi_2}{4|C_{1,2}^{1,2}|^2} \right] \varphi = 0 \quad (3.65)$$

denklemden,

$$\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l_0(l_0+1)-2}{r^2} = K^2 \quad (3.66)$$

notasyonu yazılırsa,

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\alpha}{r} f_{0,0,0} \right] - 4 \frac{|C_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3} \left[K^2 - \frac{i\chi_3 i\chi_2}{4|C_{1,2}^{1,2}|^2} \right] \varphi = 0 \quad (3.67)$$

olur. $f_{1,0,1}$ değerini (3.20) denkleminde yerine yazarsak,

$$C_{1,0}^{1,0} \left[\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) f_{1,0,1} + \frac{\alpha}{2r} \varphi \right] + i\chi_1 f_{0,0,0} = 0$$

$$C_{1,0}^{1,0} \left[\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) \left[-\frac{r}{\alpha} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) \varphi \right] + \frac{\alpha}{2r} \varphi \right] + i\chi_1 f_{0,0,0} = 0 \quad (3.68)$$

denklemden türev ifadesi alınarak, düzenlenirse,

$$-C_{1,0}^{1,0} \frac{r}{\alpha} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l_0(l_0+1)-2}{r^2} \right] \varphi + i\chi_1 f_{0,0,0} = 0 \quad (3.69)$$

denklemini elde ederiz. (3.66) denklemindeki

$$\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l_0(l_0+1)-2}{r^2} = K^2$$

dönüşümünü, (3.69) denkleminde yazalım.

$$-C_{1,0}^{1,0} \frac{r}{\alpha} K^2 \varphi + i\chi_1 f_{0,0,0} = 0 \quad (3.70)$$

Denklemde her tarafı $-C_{1,0}^{1,0} \frac{r}{\alpha}$ ifadesine bölersek,

$$K^2 \varphi - \frac{\alpha}{rC_{0,1}^{0,1}} i\chi_1 f_{0,0,0} = 0 \quad (3.71)$$

Elde edilen(3.67), (3.71) denklemlerini yazalım.

$$C_{1,0}^{1,0} \left[-\frac{\alpha}{r} f_{0,0,0} \right] - \frac{4|C_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3} \left[K^2 - \frac{i\chi_3 i\chi_2}{4|C_{1,2}^{1,2}|^2} \right] \varphi = 0$$

$$K^2 \varphi - \frac{\alpha}{rC_{0,1}^{0,1}} i\chi_1 f_{0,0,0} = 0$$

(3.67) denklemden $f_{0,0,0}$ fonksiyonunu çekip,

$$f_{0,0,0} = -\frac{4r|C_{1,2}^{1,2}|^2}{\alpha i\chi_3 C_{1,0}^{1,0}} \left[K^2 - \frac{i\chi_3 i\chi_2}{4|C_{1,2}^{1,2}|^2} \right] \varphi \quad (3.72)$$

(3.71) denkleminde yerine yazılırsa,

$$K^2 \varphi + \frac{\alpha 4r|C_{1,2}^{1,2}|^2 i\chi_1}{rC_{0,1}^{0,1} i\chi_3 C_{1,0}^{1,0} \alpha} \left[K^2 - \frac{i\chi_3 i\chi_2}{4|C_{1,2}^{1,2}|^2} \right] \varphi = 0 \quad (3.73)$$

Buradan K^2 parantezine alınarak,

$$K^2 \varphi \left(1 + \frac{4|C_{1,2}^{1,2}|^2 i\chi_1}{|C_{0,1}^{0,1}|^2 i\chi_3} \right) - \frac{i\chi_1 i\chi_2}{|C_{1,0}^{1,0}|^2} \varphi = 0 \quad (3.74)$$

$$\left\{ K^2 \left(-\frac{|C_{1,0}^{1,0}|^2}{i\chi_1} - \frac{4|C_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3} \right) + i\chi_2 \right\} \varphi = 0 \quad (3.75)$$

denkleminde her tarafı $\left(-\frac{|c_{1,0}^{1,0}|^2}{i\chi_1} - \frac{4|c_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3}\right)$ bölersek,

$$\left\{K^2 - \frac{i\chi_2}{\frac{|c_{1,0}^{1,0}|^2}{i\chi_1} + \frac{4|c_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3}}\right\}\varphi = 0 \quad (3.76)$$

denklemini elde edilir. (3.66) notasyonunda ki K^2 değeri (3.76) da yerine yazılırsa,

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l_0(l_0+1)-2}{r^2} - \frac{i\chi_2}{\frac{|c_{1,0}^{1,0}|^2}{i\chi_1} + \frac{4|c_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3}}\right\}\varphi = 0 \quad (3.77)$$

şeklinde diferansiyel denklem elde edilir. Diferansiyel denklemin çözümü Bessel fonksiyonunda aranırsa, φ dalga fonksiyonu,

$$\varphi = C_1 \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{r^{\frac{3}{2}}} \quad (3.78)$$

olur. Buradan (3.33) küresel Bessel fonksiyonuna dönüştürülürse,

$$\varphi = C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) \quad (3.79)$$

dir. (3.77) denkleminde dalga vektörü,

$$k^2 = -\frac{i\chi_2}{\frac{|c_{1,0}^{1,0}|^2}{i\chi_1} + \frac{4|c_{1,2}^{1,2}|^2}{i\chi_3}} \quad (3.80)$$

dalga vektörünü düzenlenirse,

$$k^2 = \frac{\chi_1 \chi_2}{|c_{1,0}^{1,0}|^2 \left(1 + \frac{\chi_1^4 |c_{1,2}^{1,2}|^2}{\chi_3 |c_{1,0}^{1,0}|^2}\right)} \quad (3.81)$$

elde edilir. (3.81) denkleminde $\chi_1 = (\varepsilon_g - \varepsilon)$, $\chi_2 = -\varepsilon$, $\chi_3 = E_0 - \varepsilon$, $|C_{1,2}^{1,2}|^2 = R^2$ ve $|C_{1,0}^{1,0}|^2 = p^2$ değerleri yerlerine yazılsın.

$$k^2 = \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon)(-\varepsilon)}{p^2 \left(1 + \frac{4R^2(\varepsilon_g - \varepsilon)}{p^2(E_0 - \varepsilon)} \right)} \quad (3.82)$$

olur. (3.82) denkleminde,

$$k^2 \left[p^2 + 4R^2 \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon)}{(E_0 - \varepsilon)} \right] = \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g) \quad (3.83)$$

burada $E_0 \gg \varepsilon$ olduğu için $E_0 - \varepsilon \cong E_0$ olarak alınabilir.

$$k^2 \left[p^2 + 4R^2 \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon)}{E_0} \right] = \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g) \quad (3.83)$$

ε ile ε_g arasındaki ilişki, $\varepsilon = \varepsilon_g + \sigma$ olsun. Burada $\varepsilon_g \gg \sigma$ ise

$$k^2 p^2 + 4k^2 R^2 \frac{\varepsilon_g}{E_0} - 4k^2 R^2 \frac{\varepsilon}{E_0} = \sigma \varepsilon_g \quad (3.84)$$

olur. Ağır deşiklerle etkileşmesi ihmal edilecek kadar küçük olduğu için $R^2 = 0$ kabul edilebilir. Bu durumda denklem,

$$k^2 p^2 = \sigma \varepsilon_g \quad (3.85)$$

olur. Buradan (3.85) denkleminde σ değeri,

$$\sigma = \frac{k^2 p^2}{\varepsilon_g} = \frac{k^2 \hbar^2}{2m_e} \quad (3.86)$$

buradan $k^2 p^2$ çekilirse,

$$k^2 p^2 = \frac{k^2 \hbar^2}{2m_e} \varepsilon_g \quad (3.87)$$

dir. (3.30) denkleminde R^2 değeri çekilerek,

$$R^2 = \frac{\hbar^2 E_0}{6m_h} \quad (3.88)$$

ile (3.87) teki $k^2 p^2$ değerleri (3.84) denkleminde yazılırsa,

$$\frac{k^2 \hbar^2}{2m_e} \varepsilon_g + 4k^2 \frac{E_0 \hbar^2}{6m_h} \frac{\varepsilon_g - \varepsilon}{E_0} = \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g) \quad (3.89)$$

Denklem sadeleştirilirse,

$$\frac{k^2 \hbar^2}{2m_e} \varepsilon_g + \frac{2k^2 \hbar^2 (\varepsilon_g - \varepsilon)}{3m_h} = \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g) \quad (3.90)$$

$$\frac{k^2 \hbar^2}{2m_e} \varepsilon_g + \frac{2k^2 \hbar^2 (\varepsilon_g)}{3m_h} - \frac{2k^2 \hbar^2 (\varepsilon)}{3m_h} = \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g) \quad (3.91)$$

ε enerji parantezine alınırsa,

$$k^2 \hbar^2 \varepsilon_g \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h} \right) = \varepsilon^2 + \varepsilon(-\varepsilon_g + \frac{2k^2 \hbar^2}{3m_h}) \quad (3.92)$$

denklemin çözümü için,

$$\varepsilon^2 + \varepsilon \left(-\varepsilon_g + \frac{2k^2 \hbar^2}{3m_h} \right) + k^2 \hbar^2 \varepsilon_g \left(-\frac{1}{2m_e} - \frac{2}{3m_h} \right) = 0 \quad (3.93)$$

ikinci dereceden ε denkleminin kökleri bulanarak, bir tanesi elektronların enerjisini diğeri ise hafif deşiklerin enerji değerini verecektir.

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{k^2 \hbar^2}{3m_h} \pm \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2k^2 \hbar^2}{3m_h}}{2} \right)^2 + k^2 \hbar^2 \varepsilon_g \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h} \right)} \quad (3.94)$$

Böylece elektronların ve hafif deşiklerin enerji değerlerini bulmuş olduk. Enerjinin köklerinden,

$$\varepsilon_e = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{(kr)^2 \hbar^2}{3m_h r^2} + \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2(kr)^2 \hbar^2}{3m_{lh}}}{2r^2}\right)^2 + \frac{(kr)^2 \hbar^2 \varepsilon_g}{r^2} \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h}\right)} \quad (3.95)$$

ifadesi elektronlar için enerji değerini,

$$\varepsilon_{lh} = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{(kr)^2 \hbar^2}{3m_h r^2} - \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2(kr)^2 \hbar^2}{3m_{lh}}}{2r^2}\right)^2 + \frac{(kr)^2 \hbar^2 \varepsilon_g}{r^2} \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h}\right)} \quad (3.96)$$

ifadesi ise hafif deşiklerin enerji değerini ifade etmektedir.

Elektronlar ve hafif deşiklerin fonksiyonlarından $f_{1,0,1}$ dalga fonksiyonunu bulmak için (3.63) denkleminde, (3.78) denklemindeki φ fonksiyonu yazılırsa,

$$f_{1,0,1} = -\frac{r}{\alpha} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) C_1 \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{r^{\frac{3}{2}}} \quad (3.97)$$

(3.49) ve (3.50) deki türev işlemi uygulanırsa,

$$f_{1,0,1} = -\frac{r}{\alpha} C_1 \left(\begin{array}{c} -\frac{3}{2} r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) + \\ r^{-\frac{3}{2}} \left[\frac{1+\frac{1}{2}}{r} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - k J_{l+\frac{3}{2}}(kr) \right] + \\ r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \end{array} \right) \quad (3.98)$$

denklem düzenlenirse,

$$f_{1,0,1} = -\frac{C_1}{\alpha} \left(l r^{-\frac{3}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - k r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{3}{2}}(kr) \right) \quad (3.99)$$

olur. Böylece $f_{1,0,1}$ dalga fonksiyonunu da bulunmuş oldu. Bulunan ϕ ve $f_{1,0,1}$ değerlerini (3.37) denkleminde yerine yazılsın.

$$C_{0,1}^{0,1} \left[\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) \left(-\frac{C_1}{\alpha} \left(l r^{-\frac{3}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - k r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{3}{2}}(kr) \right) \right) + \frac{\alpha}{2r} C_1 \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{r^{\frac{3}{2}}} \right] + i\chi_1 f_{0,0,0} = 0 \quad (3.100)$$

$f_{0,0,0}$ fonksiyonu çekilirse,

$$f_{0,0,0} = -\frac{C_{0,1}^{0,1}}{i\chi_1} \left[\left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) \left\{ -\frac{C_1}{\alpha} \left(l r^{-\frac{3}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - k r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{3}{2}}(kr) \right) \right\} + \frac{\alpha}{2r} C_1 \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{r^{\frac{3}{2}}} \right] \quad (3.101)$$

(3.49) ve (3.50) deki türev uygulanması ile

$$f_{0,0,0} = \frac{C_{0,1}^{0,1} C_1}{i\chi_1 \alpha} \left[l r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) + l^2 r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - k^2 r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - \frac{\alpha^2}{2} r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \right] \quad (3.102)$$

Böylece $f_{0,0,0}$ fonksiyonu,

$$f_{0,0,0} = \frac{C_{0,1}^{0,1} C_1}{i\chi_1 \alpha} \left[l r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) + l^2 r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - k^2 r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - \frac{2l(l+1)}{2} r^{-\frac{5}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \right] \quad (3.103)$$

düzenlenirse,

$$f_{0,0,0} = \frac{C_{0,1}^{0,1}}{i\chi_1} \frac{C_1}{\alpha} [-k^2 r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr)] \quad (3.104)$$

$f_{0,0,0}$ fonksiyonu elde edilmiş oldu. Elektronların ve hafif deşiklerin dalga fonksiyonlarında $f_{1,-1,1} - f_{1,1,1}$ fonksiyonu bulunmadığı için değeri sıfırdır. Böylece elektronların ve hafif deşiklerin Bessel fonksiyonları,

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1}}{i\chi_1} \frac{C_1}{\alpha} [-k^2 r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr)] \\ 0 \\ C_1 \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{r^{\frac{3}{2}}} \\ -\frac{C_1}{\alpha} (l r^{-\frac{3}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - k r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{3}{2}}(kr)) \end{bmatrix} \quad (3.105)$$

bulunmuş oldu. (3.33) teki dönüşüm kullanılarak küresel Bessel fonksiyonları elde edilir.

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1}}{i\chi_1} \frac{C_1}{\alpha} [-k^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_l(kr)] \\ 0 \\ C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) \\ -\frac{C_1}{\alpha} (l r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) - k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(kr)) \end{bmatrix} \quad (3.106)$$

Elde edilen Bessel ve küresel Bessel dalga fonksiyonlarından elektronlara ait dalga fonksiyonları yazılırsa,

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1} C_{e1}}{i\chi_1 \alpha} [-k_e^2 r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(k_e r)] \\ 0 \\ C_{e1} \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(k_e r)}{r^{\frac{3}{2}}} \\ -\frac{C_{e1}}{\alpha} (l r^{-\frac{3}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(k_e r) - k_e r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{3}{2}}(k_e r)) \end{bmatrix} \quad (3.107)$$

Küresel Bessel denklemlerine dönüştürülürse,

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1} C_{e1}}{i\chi_1 \alpha} [-k_e^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_l(k_e r)] \\ 0 \\ C_{e1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_e}{\pi}} I_l(k_e r) \\ -\frac{C_{e1}}{\alpha} (l r^{-1} \sqrt{\frac{2k_e}{\pi}} I_l(k_e r) - k_e^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_e r)) \end{bmatrix} \quad (3.108)$$

Hafif deşiklerin Bessel fonksiyonları ise

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1} C_{lh}}{i\chi_1 \alpha} [-k_{lh}^2 r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(k_{lh} r)] \\ 0 \\ C_{lh} \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(k_{lh} r)}{r^{\frac{3}{2}}} \\ -\frac{C_{lh}}{\alpha} (l r^{-\frac{3}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(k_{lh} r) - k_{lh} r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{3}{2}}(k_{lh} r)) \end{bmatrix} \quad (3.109)$$

dir. Küresel Bessel fonksiyonlarına dönüşümü,

$$\begin{bmatrix} f_{0,0,0} \\ f_{1,-1,1} - f_{1,1,1} \\ f_{1,-1,1} + f_{1,1,1} \\ f_{1,0,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1} C_{lh}}{i\chi_1 \alpha} [-k_{lh}^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_l(k_{lh} r)] \\ 0 \\ C_{lh} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_{lh}}{\pi}} I_l(k_{lh} r) \\ -\frac{C_{lh}}{\alpha} (l r^{-1} \sqrt{\frac{2k_{lh}}{\pi}} I_l(k_{lh} r) - k_{lh}^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_{lh} r)) \end{bmatrix} \quad (3.110)$$

olarak bulunur. Böylece elektronların ve hafif deşiklerin küresel Bessel fonksiyonları bulunmuş oldu. Şimdi (3.82) denkleminde faydalanılarak elektronların ve

hafif deşiklerin enerji değerleri elde edilsin. Burada ikinci bantla olan etkileşim ihmal edilirse, $R=0$ olarak alınabilir,

$$k^2 = \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon)(-\varepsilon)}{p^2 \left(1 + \frac{4R^2(\varepsilon_g - \varepsilon)}{p^2(E_0 - \varepsilon)}\right)} = \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon)(-\varepsilon)}{p^2} \quad (3.111)$$

Bu denklem elektronlar ve hafif deşikler için yazılacak olursa.

$$k_e^2 = \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon_e)(-\varepsilon_e)}{p^2 \left(1 + \frac{4R^2(\varepsilon_g - \varepsilon_e)}{p^2(E_0 - \varepsilon_e)}\right)} = \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon_e)(-\varepsilon_e)}{p^2} \quad (3.112)$$

$$k_{lh}^2 = \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon_{lh})(-\varepsilon_{lh})}{p^2 \left(1 + \frac{4R^2(\varepsilon_g - \varepsilon_{lh})}{p^2(E_0 - \varepsilon_{lh})}\right)} = \frac{(\varepsilon_g - \varepsilon_{lh})(-\varepsilon_{lh})}{p^2} \quad (3.113)$$

Böylece ağır deşiklerin, hafif deşiklerin ve elektronların küresel Bessel dalga fonksiyonlarını ve enerji denklemleri bulunmuş oldu. Şimdi elde edilen katlı olan ağır deşiklerin, elektronların ve hafif deşiklerin (3.34), (3.54) ve (3.106) küresel Bessel dalga fonksiyonları yazılsın.

$$\begin{bmatrix} 0 \\ C_{h2} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ C_{h1} \frac{2}{\alpha} ((-1-1) r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) + k_h^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_h r)) \\ C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1} C_1}{i\chi_1 \alpha} [-k^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_l(kr)] \\ 0 \\ C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) \\ -\frac{C_1}{\alpha} (l r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) - k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(kr)) \end{bmatrix}$$

Elde edilen küresel Bessel dalga fonksiyonları için sınır koşulları belirlenmeli ve fonksiyonlarının küresel Bessel denklemlerinde çözümleri aranmalıdır. Kuntum noktaları için Küresel Bessel fonksiyonlarının sınır şartı potansiyelin kuantum noktası içerisinde sıfır, dışarısında ise sonsuz olmasıdır.

$$D_1 \begin{bmatrix} 0 \\ C_{h2} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} +$$

$$D_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ C_{h1} \frac{2}{\alpha} \left((-1-1) r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) + k_h^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_h r) \right) \\ C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) \end{bmatrix} +$$

$$D_3 \begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1} C_1}{i\chi_1 \alpha} \left[-k^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_1(kr) \right] \\ 0 \\ C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_1(kr) \\ -\frac{C_1}{\alpha} \left(l r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_1(kr) - k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(kr) \right) \end{bmatrix} = 0 \quad (3.114)$$

bu denklemin çözümü için birinci satırdan gelen denklem,

$$-D_3 \frac{C_{0,1}^{0,1} C_{e1}}{i\chi_1 \alpha} \left[k^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_l(kr) \right] = 0 \quad (3.115)$$

dir. Denklemin çözümünden, elektronlar ve hafif deşikler için enerji spektrumunun yarıçapa bağlı değişim grafiği elde edilecektir. Bunun için (3.94) denklemindeki elektronlara ve hafif deşiklere ait enerji denklemini kullanılacaktır.

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{k^2 \hbar^2}{3m_h} \pm \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2k^2 \hbar^2}{3m_{lh}}}{2} \right)^2 + k^2 \hbar^2 \varepsilon_g \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h} \right)}$$

(3.95) denklemi,

$$\varepsilon_e = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{(kr)^2 \hbar^2}{3m_h r^2} + \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2(kr)^2 \hbar^2}{3m_{lh}}}{2r^2} \right)^2 + \frac{(kr)^2 \hbar^2 \varepsilon_g}{r^2} \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h} \right)}$$

elektronlar için enerjinin yarıçapa bağlı değişimini ifade ederken. (3.96) denklemi ise

$$\varepsilon_{lh} = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{(kr)^2 \hbar^2}{3m_h r^2} - \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2(kr)^2 \hbar^2}{3m_{lh}}}{2r^2} \right)^2 + \frac{(kr)^2 \hbar^2 \varepsilon_g}{r^2} \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h} \right)}$$

hafif deşiklerin yarıçapa bağlı enerjisi denklemini ifade etmektedir.

(3.114) denkleminin ikinci satırlarından gelen denklem,

$$D_1 C_{h2} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) = 0 \quad (3.116)$$

dır. Bu denklemin çözümü ile ağır deşiklerin enerji spektrumunun yarıçapa bağlı değişim grafiğini bulmak mümkün olacaktır. Küresel Bessel denkleminin grafiğinin elde edilebilmesi için k_h ve $(k_h r)^2$ değerleri, (3.29) ve (3.30) denklemlerinden faydalanılarak bulunur.

$$\begin{aligned} k_h^2 &= \frac{1}{3} \frac{\chi_2 \chi_3}{|C_{1,2}^{1,2}|^2} = \frac{1 - \varepsilon(E_0 - \varepsilon)}{R^2} \\ \varepsilon &= -\frac{3R^2 k_h^2}{E_0} = -\frac{k_h^2 \hbar^2}{2m_h} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m_h} = \frac{3R^2}{E_0} \\ \varepsilon &= -\frac{k_h^2 \hbar^2}{2m_h} \frac{r^2}{r^2} = -\hbar^2 \frac{(k_h r)^2}{2m_h} \frac{1}{r^2} \end{aligned} \quad (3.117)$$

Boyuta göre diğer kuantumlanmış hallerin enerji spektrumları aşağıdaki matrisin çözülmesiyle bulunacaktır.

$$\begin{bmatrix} D_2 C_{h1} \frac{2}{\alpha} \left((-l-1) r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) + k_h^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_h r) \right) & D_3 C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) \\ D_2 C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) & -D_3 \frac{C_1}{\alpha} \left(l r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) - k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(kr) \right) \end{bmatrix} = 0 \quad (3.118)$$

bu matrisin çözümü için,

$$\begin{aligned} & [D_2 C_{h1} \frac{2}{\alpha} ((-l-1) r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) + k_h^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_h r))] \cdot \\ & \left[-D_3 \frac{C_1}{\alpha} \left(l r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) - k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(kr) \right) \right] - \\ & [D_3 C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr)] \cdot [D_2 C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r)] = 0 \quad (3.119) \end{aligned}$$

şeklinde iç çarpımı alınmalıdır.

$$D_2 D_3 \frac{2 C_{h1} C_{e1}}{\alpha^2} \frac{2}{\pi} \left[\begin{aligned} & (l+1) r^{-1} (k_h k)^{\frac{1}{2}} I_l(k_h r) l r^{-1} I_l(kr) - \\ & (l+1) r^{-1} k_h^{\frac{1}{2}} I_l(k_h r) k^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(kr) - \\ & k_h^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(k_h r) l r^{-1} k^{\frac{1}{2}} I_l(kr) + k_h^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(k_h r) k^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(kr) \end{aligned} \right]$$

$$D_3 D_2 C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) = 0 \quad (3.120)$$

şeklinde bulunur. Denklem,

$$\begin{aligned} & D_2 D_3 \frac{C_{h1} C_1}{l(l+1)} \frac{2}{\pi} \left[\begin{aligned} & l(l+1) (k_h k)^{\frac{1}{2}} r^{-2} I_l(k_h r) I_l(kr) - \\ & (l+1) r^{-1} k_h^{\frac{1}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_l(k_h r) I_{l+1}(kr) - \\ & l r^{-1} k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{1}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_l(kr) + \\ & k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_{l+1}(kr) \end{aligned} \right] - \\ & \frac{2 C_1 C_{h1}}{\pi} r^{-2} (k_h k)^{\frac{1}{2}} I_l(k_h r) I_l(kr) = 0 \quad (3.121) \end{aligned}$$

düzenlenirse,

$$D_2 D_3 \frac{C_{h1} C_1}{l(l+1)} \frac{2}{\pi} \left[\begin{array}{c} -(l+1) r^{-1} k_h^{\frac{1}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_l(k_h r) I_{l+1}(kr) - \\ l r^{-1} k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{1}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_l(kr) + \\ k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_{l+1}(kr) \end{array} \right] = 0 \quad (3.122)$$

elde edilen denklem bize l değerinin sıfırdan farklı değerler alması gerektiğini gösteriyor. l=0 değeri için çözüm olmayacaktır. Bu nedenden dolayı tam açısız momentum kuantum sayısı l=1.2.3.4... değerlerini alabilecektir. Denklemin çözümünde,

$$-(l+1) r^{-1} k_h^{\frac{1}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_l(k_h r) I_{l+1}(kr) - \\ l r^{-1} k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{1}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_l(kr) + k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_{l+1}(kr) = 0 \quad (3.123)$$

olarak alınır. Denklemin grafiğini çizmek için öncelikle, $k_h r$ ve kr değerleri, belirlenmelidir.

$$k_h r = \sqrt{-\frac{2m_h \varepsilon}{\hbar^2}} r^2 \quad (3.124)$$

$$kr = \sqrt{\frac{2m_e \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g)}{\hbar^2 \varepsilon_g}} r^2 \quad (3.125)$$

Denklemin çözümü için küresel Bessel denklemleri kullanılacaktır. Küresel Bessel denkleminin grafiği, elde edilerek grafikteki kestiği ilk noktalar tespit edilir.

$$Plot[SphericalBessel \left[l+1, \sqrt{\frac{2m_e \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g)}{\hbar^2 \varepsilon_g}} \right] \times \\ SphericalBessel \left[l+1, \sqrt{-\frac{2m_h \varepsilon}{\hbar^2}} \right] -$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{l}{\sqrt{\frac{2m_e \epsilon(\epsilon - \epsilon_g)}{\hbar^2 \epsilon_g}}} \text{SphericalBessel} \left[l, \sqrt{\frac{2m_e \epsilon(\epsilon - \epsilon_g)}{\hbar^2 \epsilon_g}} \right] x \\
 & \text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{-\frac{2m_h \epsilon}{\hbar^2}} \right] - \\
 & \frac{l + 1}{\sqrt{-\frac{2m_h \epsilon}{\hbar^2}}} \text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{\frac{2m_e \epsilon(\epsilon - \epsilon_g)}{\hbar^2 \epsilon_g}} \right] x \\
 & \text{SphericalBessel} \left[l, \sqrt{-\frac{2m_h \epsilon}{\hbar^2}} \right] = 0, \left\{ \frac{\epsilon}{\epsilon_g}, 1 \right\} \quad (3.126)
 \end{aligned}$$

Küresel Bessel de kesilen noktaların bulunmasının ardından, bu noktalar ile elektronların enerji spektrumu yarı çapa bağlı olarak değerleri elde edilecektir.

$$\begin{aligned}
 & \text{FindRoot}[\text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{\frac{2m_e \epsilon(\epsilon - \epsilon_g)}{\hbar^2 \epsilon_g}} r^2 \right] x \\
 & \text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{-\frac{2m_h \epsilon}{\hbar^2}} r^2 \right] - \\
 & \frac{l}{\sqrt{\frac{2m_e \epsilon(\epsilon - \epsilon_g)}{\hbar^2 \epsilon_g}} r^2} \text{SphericalBessel} \left[l, \sqrt{\frac{2m_e \epsilon(\epsilon - \epsilon_g)}{\hbar^2 \epsilon_g}} r^2 \right] - \\
 & \text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{-\frac{2m_h \epsilon}{\hbar^2}} r^2 \right] - \\
 & \frac{l + 1}{\sqrt{-\frac{2m_h \epsilon}{\hbar^2}} r^2} \text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{\frac{2m_e \epsilon(\epsilon - \epsilon_g)}{\hbar^2 \epsilon_g}} r^2 \right] x
 \end{aligned}$$

$$SphericalBessel \left[l, \sqrt{-\frac{2m_h \varepsilon}{\hbar^2}} r^2 \right] = 0, \left\{ \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}, 1, 3 \right\} \quad (3.127)$$

Bu denklemde $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} > 1$ değerleri ile küresel Bessel denkleminde elektronların yarıçapa bağlı $\varepsilon/\varepsilon_g$ rafığı, $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} < 0$ değerleri ise deşiklerin yarıçapa bağlı $\varepsilon/\varepsilon_g$ rafığı elde edilecektir.

4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA

Yapılan çalışmada, GaAs tipi yarıiletken kuantum noktalarının yük taşıyıcılarının enerji spektrumlarını elde etmek için dönme grubuna göre değişmez kalan birinci dereceden diferansiyel denklemler sistemi kullanılmıştır. Ağırdeşiklerin enerji spektrumları ikinci dereceden katlıdır (4.1), (4.2).

$$\begin{bmatrix} 0 \\ C_{h2} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ C_{h1} \frac{2}{\alpha} ((-1 - 1) r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) + k_h^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_h r)) \\ C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Hafifdeşiklerin ve elektronların fonksiyonları (3.106) ise,

$$\begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1}}{i\chi_1} \frac{C_1}{\alpha} [-k^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_1(kr)] \\ 0 \\ C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_1(kr) \\ -\frac{C_1}{\alpha} (1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_1(kr) - k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(kr)) \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Elde edilen fonksiyonlar ile kuantum noktaları için sınır koşulları belirlenecektir. Kuantum noktası için

fonksiyonların sınır şartı, kuantum noktasının içinde potansiyelin sıfır, yüzeyindense sonsuz olmasıyla sağlanır. Öğleyse sınır şartını uygulayarak enerji spektrumlarını bulmalıyız. D_1 , D_2 , D_3 , matris sabitlerini kullanarak sınır koşulunu aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\begin{aligned}
 & D_1 \begin{bmatrix} 0 \\ C_{h2} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \\
 & D_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ C_{h1} \frac{2}{\alpha} \left((-1-1) r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) + \right. \\ \left. k_h^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_h r) \right) \\ C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_1(k_h r) \end{bmatrix} + \\
 & D_3 \begin{bmatrix} \frac{C_{0,1}^{0,1}}{i\chi_1} \frac{C_1}{\alpha} \left[-k^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_l(kr) \right] \\ 0 \\ C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) \\ -\frac{C_1}{\alpha} \left(l r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) - k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(kr) \right) \end{bmatrix} = 0 \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

Yukarıdaki denklemin birinci satırlardan gelen denklem,

$$-D_3 \frac{C_{0,1}^{0,1}}{i\chi_1} \frac{C_1}{\alpha} \left[k^{\frac{5}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_l(kr) \right] = 0 \quad (4.5)$$

dir. Denklemin çözümüyle elektronlar ve hafif deşikler için enerji spektrumunun yarıçapa bağlı değişim grafiği elde edilecektir. Bunun için (3.94) denklemindeki elektronlara ve hafif deşiklere ait enerji denklemi kullanılacaktır.

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{k^2 \hbar^2}{3m_h} \pm \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2k^2 \hbar^2}{3m_{lh}}}{2} \right)^2 + k^2 \hbar^2 \varepsilon_g \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h} \right)}$$

denklemlerden,

$$\varepsilon_e = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{(kr)^2 \hbar^2}{3m_h r^2} + \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2(kr)^2 \hbar^2}{3m_{lh}}}{2r^2} \right)^2 + \frac{(kr)^2 \hbar^2 \varepsilon_g}{r^2} \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h} \right)}$$

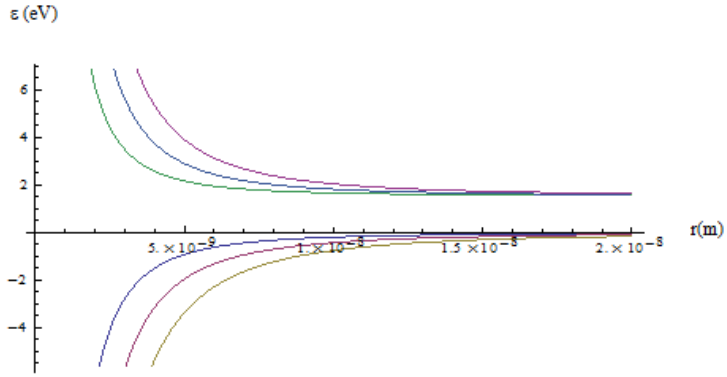
elektronlar için enerjinin yarıçapa bağlı değişimini, (3.96) denklemi,

$$\varepsilon_{lh} = \frac{\varepsilon_g}{2} - \frac{(kr)^2 \hbar^2}{3m_h r^2} - \sqrt{\left(-\frac{\varepsilon_g + \frac{2(kr)^2 \hbar^2}{3m_{lh}}}{2r^2} \right)^2 + \frac{(kr)^2 \hbar^2 \varepsilon_g}{r^2} \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{2}{3m_h} \right)}$$

ise hafif deşiklerin yarıçapa bağlı enerjisi denklemini ifade etmektedir.

GaAs yarıiletkeni için elektronların ve hafif deşiklerin enerji spektrumlarını yarıçapa bağlı grafiğini elde etmek için denklemlerde; $\varepsilon_g = 1.52$ eV , $\hbar = 1.05457 \times 10^{-34}$ J.s, $(kr)^2 = (7.7252)^2$ eV/N ($r = 20 \times 10^{-10}$ m değeri için), $(kr)^2$ değerleri yarıçapa bağlı olarak değişmektedir. Elektronun etkin kütlesi $m_e = 0.065 \times 9.1093 \times 10^{-31}$ kg=

5.9211×10^{-32} kg, hollerin etkin kütlesi $m_h = 0.4 \times 9.1093 \times 10^{-31}$ kg = 3.6437×10^{-32} kg ve $m_{lh} = 0.065 \times 9.1093 \times 10^{-31}$ kg = 5.921×10^{-32} kg dır. Kuantum noktasının yarıçapı ise 2×10^{-9} m ile 2×10^{-8} m arasında alınmıştır. Bu şartlar altında elektronların ve hafifdeşiklerin yarıçapa bağlı enerji spektrumu grafiği şekliindedir.



Şekil 3. Elektronların ve hafifdeşiklerin yarıçapa bağlı enerji spektrumu grafiği

Grafikte de görüldüğü gibi kuantum noktasının yarıçapı küçüldükçe elektronların enerjisi artmakta, hafifdeşiklerin enerjisi azalmaktadır. Yasak bant aralığı kuantum noktasının yarıçapına bağlı olarak değiştiği görülmektedir. Yarıçap azaldıkça yasak bant aralığı artmakta ve enerji seviyeleri kesikli hal almaktadır. Yarıçapın artmasıyla bulk yapıya gidilmekte, yasak bant aralığı azalmaktadır. Elektronların enerjisi azalmakta ve

hafif deşiklerin enerjisi artmaktadır. Enerji seviyeleri yarıçapın artmasıyla birlikte birbirine yaklaşmakta ve yasak bant aralığı sabit kalmaktadır. Yarıçapın artması ile enerji seviyeleri sürekli hale gelmektedir.

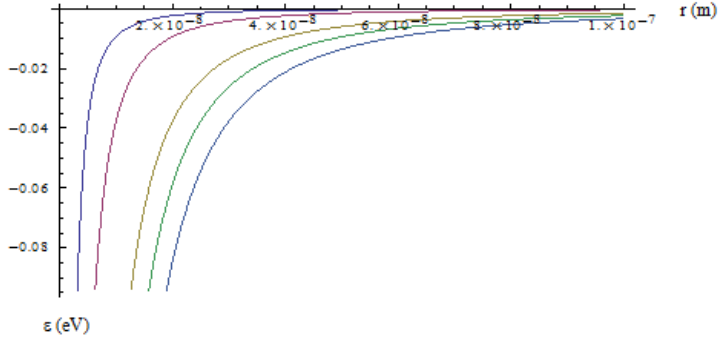
(3.114) denkleminin ikinci satırlarından gelen ifade,

$$D_1 C_{h2} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) = 0 \quad (4.6)$$

dır. Bu denklemin çözümü ile ağır deşiklerin enerji spektrumunun yarıçapa bağlı değişim grafiğini bulmak mümkün olacaktır. Küresel Bessel denkleminin grafiğinin elde edilebilmesi için k_h ve $(k_h r)^2$ değerleri, (3.29) ve (3.30) denklemlerinden faydalanılarak bulunur.

$$\begin{aligned} k_h^2 &= \frac{1}{3} \frac{\chi_2 \chi_3}{|C_{1,2}^{1,2}|^2} = \frac{1 - \varepsilon(E_0 - \varepsilon)}{3R^2} \\ \varepsilon &= -\frac{3R^2 k_h^2}{E_0} = -\frac{k_h^2 \hbar^2}{2m_h} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m_h} = \frac{3R^2}{E_0} \\ \varepsilon &= -\frac{k_h^2 \hbar^2 r^2}{2m_h r^2} = -\hbar^2 \frac{(k_h r)^2}{2m_h r^2} \end{aligned} \quad (4.7)$$

(3.117) denkleminde; $\hbar = 1.05457 \times 10^{-34} \text{ J.sn}$, $(k_h r)^2 = 3.141592 \text{ eV/N}$ ($r = 5 \times 10^{-10} \text{ m}$), bu değer yarıçapa bağlı olarak değişmektedir. Ağır deşiklerin etkin kütlesi $m_h = 0.4 \times 9.1093 \times 10^{-31} \text{ kg} = 3.6437 \times 10^{-31} \text{ kg}$ dır. Enerjinin yarıçapa bağlı grafiğinin çiziminde yarıçap, $5 \times 10^{-10} \text{ m}$ ile $1 \times 10^{-7} \text{ m}$ arasında alınmıştır.



Şekil 4. Ağır deşiklerin enerji spektrumunun yarıçapa bağlı değişim grafiği

Ağır deşiklerin enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimini veren grafikte, yarıçapın azalması ile ağır deşiklerin enerjisi azalmakta ve enerji kesikli değerler almaktadır. Enerji seviyeleri belirginleşmektedir. Yarıçap arttıkça enerji artmakta, enerji seviyeleri arasındaki mesafe azalmaktadır. Boyuta göre diğer kuantumlanmış hallerin enerji spektrumları aşağıdaki (3.118) matrisinin çözülmesiyle bulunacaktır.

$$\begin{bmatrix} D_2 C_{h1} \frac{2}{\alpha} \left((-1-1) r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) + k_h^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(k_h r) \right) & D_3 C_1 r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) \\ D_2 C_{h1} r^{-1} \sqrt{\frac{2k_h}{\pi}} I_l(k_h r) & -D_3 \frac{C_1}{\alpha} \left(l r^{-1} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} I_l(kr) - k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_{l+1}(kr) \right) \end{bmatrix} = 0$$

bu matrisin çözümü,

$$D_2 D_3 \frac{C_{h1} C_1}{l(l+1)} \frac{2}{\pi} \begin{bmatrix} -(l+1) r^{-1} k_h^{\frac{1}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_l(k_h r) I_{l+1}(kr) - \\ l r^{-1} k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{1}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_l(kr) + \\ k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_{l+1}(kr) \end{bmatrix} = 0 \quad (4.8)$$

dır. Elde edilen denklem bize l değerinin sıfırdan farklı değerler alması gerektiğini gösteriyor. l=0 değeri için çözüm olmayacaktır. Bu nedenden dolayı tam açısal momentum kuantum sayıları olarak l=1,2,3,4,5 değerlerini alacaktır. Denklemin çözümünde,

$$-(l+1) r^{-1} k_h^{\frac{1}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_l(k_h r) I_{l+1}(kr) - \\ l r^{-1} k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{1}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_l(kr) + k_h^{\frac{3}{2}} k^{\frac{3}{2}} I_{l+1}(k_h r) I_{l+1}(kr) = 0 \quad (4.9)$$

olarak alınır. Denklemin grafiğini çizmek için öncelikle, $k_h r$ ve kr değerleri, belirlenmelidir.

$$k_h r = \sqrt{-\frac{2m_h \varepsilon}{\hbar^2}} r^2 \quad (4.10)$$

$$k_e r = \sqrt{\frac{2m_e \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g)}{\hbar^2 \varepsilon_g}} r^2 \quad (4.11)$$

Bu denklemlerde sabit değerler olan; $\varepsilon_g = 2.4353 \times 10^{-12} \text{erg}$ $\hbar = 1.0551 \times 10^{-27} \text{erg.s}$, elektronun etkin kütlesi $m_e = 0.065 \times 9.1093 \times 10^{-28} \text{gr} = 5.9211 \times 10^{-29} \text{gr}$ ve hollerin etkin kütlesi $m_h = 0.4 \times 9.1093 \times 10^{-28} \text{gr} = 3.6437 \times 10^{-28} \text{gr}$ dır. Yarıçap $30 \times 10^{-8} \text{ cm}$ ile $300 \times 10^{-8} \text{ cm}$ arasında değerler almakta ve tam açısal momentum kuantum sayıları l=1,2,3,4,5 değerleri için küresel Bessel

fonksiyonu yarıçapa bağlı enerji spektrumları elde edilecektir. Değerler yerlerine yazılarak, $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}$ oranının küresel Bessel denkleminde kestiği ilk noktalar tespit edilir.

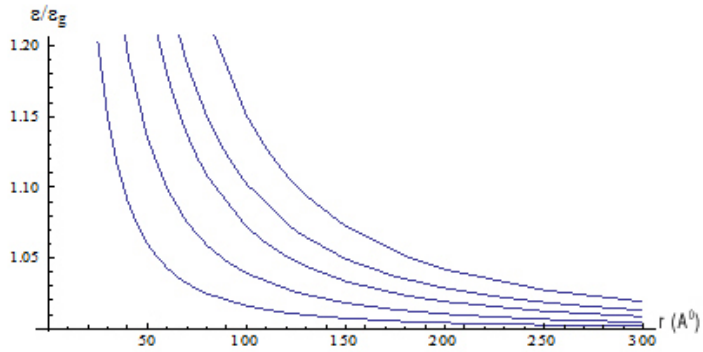
$$\begin{aligned}
 & \text{Plot[SphericalBessel}\left[l+1, \sqrt{\frac{2m_e\varepsilon(\varepsilon-\varepsilon_g)}{\hbar^2\varepsilon_g}}\right] \times \\
 & \text{SphericalBessel}\left[l+1, \sqrt{-\frac{2m_h\varepsilon}{\hbar^2}}\right] - \\
 & \frac{l}{\sqrt{\frac{2m_e\varepsilon(\varepsilon-\varepsilon_g)}{\hbar^2\varepsilon_g}}} \text{SphericalBessel}\left[l, \sqrt{\frac{2m_e\varepsilon(\varepsilon-\varepsilon_g)}{\hbar^2\varepsilon_g}}\right] \times \\
 & \text{SphericalBessel}\left[l+1, \sqrt{-\frac{2m_h\varepsilon}{\hbar^2}}\right] - \\
 & \frac{l+1}{\sqrt{-\frac{2m_h\varepsilon}{\hbar^2}}} \text{SphericalBessel}\left[l+1, \sqrt{\frac{2m_e\varepsilon(\varepsilon-\varepsilon_g)}{\hbar^2\varepsilon_g}}\right] \times \\
 & \text{SphericalBessel}\left[l, \sqrt{-\frac{2m_h\varepsilon}{\hbar^2}}\right] = 0, \left\{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}, 1\right\}] \quad (4.12)
 \end{aligned}$$

Küresel Bessel de kesilen noktaların bulunmasının ardından, bu noktalar ile elektronların enerji spektrumu yarıçapa bağlı olarak değerleri elde edilecektir.

$$\text{FindRoot[SphericalBessel}\left[l+1, \sqrt{\frac{2m_e\varepsilon(\varepsilon-\varepsilon_g)}{\hbar^2\varepsilon_g}}r^2\right] \times$$

$$\begin{aligned}
 & \text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{-\frac{2m_h \varepsilon}{\hbar^2}} r^2 \right] - \\
 & \frac{1}{\sqrt{\frac{2m_e \varepsilon (\varepsilon - \varepsilon_g)}{\hbar^2 \varepsilon_g}} r^2} \text{SphericalBessel} \left[l, \sqrt{\frac{2m_e \varepsilon (\varepsilon - \varepsilon_g)}{\hbar^2 \varepsilon_g}} r^2 \right] - \\
 & \text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{-\frac{2m_h \varepsilon}{\hbar^2}} r^2 \right] - \\
 & \frac{l + 1}{\sqrt{-\frac{2m_h \varepsilon}{\hbar^2}} r^2} \text{SphericalBessel} \left[l + 1, \sqrt{\frac{2m_e \varepsilon (\varepsilon - \varepsilon_g)}{\hbar^2 \varepsilon_g}} r^2 \right] \times \\
 & \text{SphericalBessel} \left[l, \sqrt{-\frac{2m_h \varepsilon}{\hbar^2}} r^2 \right] = 0, \left\{ \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}, 1, 3 \right\} \quad (4.14)
 \end{aligned}$$

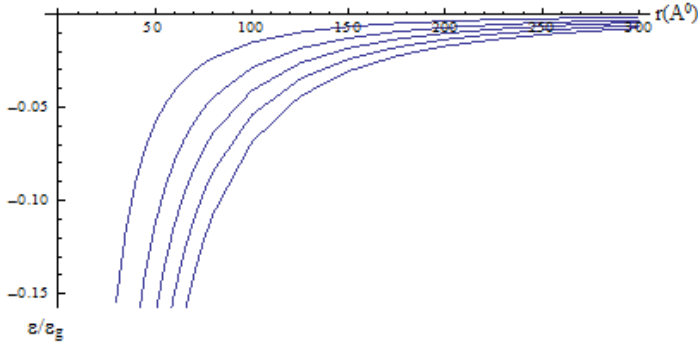
Elde edilen $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}$ değerleri birden büyük ve sıfırdan küçük değerler olmaktadır. Bu değerlerden $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} > 1$ değerleri elektronların yarıçapa bağlı grafiğini vermektedir.



Şekil 5. Elektronlar için yarıçapa bağlı $\varepsilon/\varepsilon_g$ grafiği

Grafiğe göre, yarıçap arttıkça $\varepsilon/\varepsilon_g$ oranı bire yaklaşmakta, enerji seviyeleri arasındaki genişlik azalmakta ve bulk yapıya gidilmektedir. Böylece enerji sürekli hale gelmekte ve elektronların enerjisi yarıçapın artması ile azalmaktadır. Yarıçap azaldıkça $\varepsilon/\varepsilon_g$ oranı artmakta ve elektronların enerjisi artmaktadır. Böylece enerji seviyeleri kuantumlanmakta ve yasak bant aralığı artmaktadır.

Şimdi $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} < 0$ değerleri, hollerin yarıçapa bağlı $\varepsilon/\varepsilon_g$ grafiğini vermektedir.



Şekil 6. Deşikler için yarıçapa bağlı $\varepsilon/\varepsilon_g$ grafiği

Grafiğe göre yarıçap arttıkça, $\varepsilon/\varepsilon_g$ oranı sıfıra yaklaşmakta, deşiklerin enerjisi artmakta, yasak bant aralığı azalmakta, bulk yapıya gidilmektedir. Yarıçap arttıkça enerji seviyeleri arasındaki genişlik azalmakta bulk yapıda enerji seviyeleri sürekli hale gelmektedir.

Yarıçap azaldıkça (nanoyapılarda), yasak bant aralığı genişlemekte enerji seviyeleri kuantumlanmaktadır. Yarıçapın azalması ile elektronların enerjisi artmakta, hollerin enerjisi azalmaktadır.

5. SONUÇ

Üç bant modeli (valans bandı ve iki iletkenlik bandı) dikkate alınarak dönme grubuna göre değişmez kalan birinci mertebeden diferansiyel denklemler sistemi kullanılarak küresel Bessel fonksiyonları ve yarıçapa bağlı enerji spektrumları hesaplanmıştır. GaAs tipi yarıiletken kuantum noktalarında yük taşıyıcılarının enerji spektrumları yarıçapa göre değişmektedir. Makro yapılarda (Bulk yapı), enerji seviyeleri sürekliyken nanoyapılara gidildikçe enerji seviyeleri kuantumlanmakta ve buna bağlı olarak farklı fiziksel özellikler gözlenmektedir. Yük taşıyıcılarının enerjisi yarıçapa bağlı olarak değişmektedir. Yarıçapın artması ile elektronların enerjisi azalmakta, hafifdeşiklerin ve ağırdeşiklerin artmaktadır. Yarıçapın azalması ile elektronların enerjisi artmakta, hafifdeşikler ve ağırdeşiklerin enerjisi artmaktadır.

KAYNAKLAR

- Abromowitz M., 1964. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Matematical Tables, 355s
- Askerov, B.M., 1970. Kinetic Effects in Semiconductors. Nauka, 358. Leningrad.
- Bimberg, D., Grundman, M., Ledentsov, M., 2001. Quantum Dot Heterostructures. JOHN WILEY, New York.
- Çakmaktepe, Ş., 2006. Kane Tipi Yarıiletken Kuantum Çubuklarında Yük Taşıyıcılarının Enerji Spektrumları. Fizik Anabilim Dalı, 3s. Isparta
- Çıracı, S., 2004. Nanobilim ve Nanoteknoloji Stratejileri. Ankara Tübitak yayını, 26s.
- Efros, AI. L., Rosen M; 1998. Quantum size level structure of narrow-gap semiconductor nanocrystals: Effect of bant coupling. Physical Review B 58, Number 11, 7120-7135, Washington.
- Efros, AI. L., Rosen M., 1999. Intrinsic Gap Semiconductor Nanocrystals. Physical Review Letters, Number 12, Volume 83,2394-2397.

Harrison, P., 1999. Quantum Wells, Wires and Dots.

John Wiley and Sons Ltd, Chichester

Kiselev, A.A., Ivchenko, E.L., 1996. Kuantum

telleri ve kuantum noktalarında elektron

g-faktörü. Pismo JETF 67, 1, 41-45

Landauer, R.Z., 1987. Electrical transport in open and

closed systems, Phys.B:cond Matter 68 (1987),

217-228, Newyork