

Kane Tipi Kuantum Halkalarında Elektronların Etkin g -Çarpanı

Arif Babanlı^{1,*}, Deniz Türköz Altuğ²

¹Süleyman Demirel Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 32260, Isparta, Türkiye

²Süleyman Demirel Üniversitesi, Hidrojen Teknolojileri Araştırma Uygulama Merkezi, 32260, Isparta, Türkiye

*Yazışılan yazar e-posta: arifbabanlı@sdu.edu.tr

Alınış: 05 Mayıs 2014, Kabul: 18 Ağustos 2014

Özet: Bu çalışmada, iki eş eksenli Kane tipi yarıiletken kuantum halkası dikkate alındı. İç bölgedeki kuantum halkasının sınırında geçirgen delta potansiyeli varken, dış bölgedeki kuantum halkası sınırında sonsuz potansiyel engeli vardır. Dış sabit magnetik alan, halkanın eksenini yönünde seçilmiştir. Spin yarıılma çarpanı olarak tanımlanan etkin g -çarpanı, elektronun potansiyel şiddetinin (Ω) fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Ω nın pozitif değerlerinde, etkin g -çarpanının arttığı bulunmuştur. Elektronun enerjisinin, m magnetik kuantum sayısına göre değişiminde ise osilasyonlar gözlenmiştir.

Anahtar kelimeler: Kane tipi yarıiletken kuantum halkası, g -çarpanı

Effective g -Factor of Electrons in the Kane Type Quantum Rings

Abstract: In this study, two coaxial Kane type semiconductor quantum rings have been taken into consideration. When inner quantum ring has penetrable delta potential barrier on the boundary, outer ring has infinite potential barrier on the boundary. Applied uniform magnetic field directed along the axis of rings. We have calculated g -factor as a function of potential strength of electron, where g -factor is spin splitting factor. It has been obtained that the effective g -value of the electrons increases with increasing of the positive value of Ω . We have seen the oscillations that the energy of electron according to varying of the magnetic quantum number m .

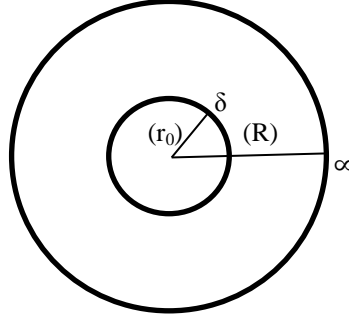
Key words: Kane type semiconductor quantum ring, g -factor

1. Giriş

Son yıllarda kuantum kuyuları, telleri ve noktaları gibi kuantum yapılar yoğun bir şekilde çalışılmaktadır [1]. Çok küçük yarıiletken mikro yapılarda elektronların hareketleri çok ilginç kuantum taşınma olaylarına sebep olmaktadır [2]. Elektronların bir taraftan diğer tarafa geçişleri nano yapıların elektronik ve optik özellikleri açısından önemli ve güncel çalışma konularındandır. Çünkü yarıiletkenler kullanılarak yapılan elektronik aygıtların çalışma prensibi tünel olayı ve elektriksel iletkenlik olayıyla yakından ilgilidir. Tünel ve iletkenlik olayları incelenirken öncelikle yük taşıyıcılarının enerjileri ve dalga fonksiyonları bilinmelidir. Yarıiletken nano-yapılarla ilgili çalışmalar için III-V tipi yarıiletkenler kullanılır. A^3B^5 tipi yarıiletkenlerde elektronların enerji spektrumu iletim bandının minimum değerinin yakınında paraboliktir. Minimum değerinden uzaklaştıkça paraboliklik bozulur. Dolayısıyla bu tip yarıiletkenleri temel alan çalışmalarda A^3B^5 yarıiletkenlere ait basit parabolik band yapısının yanında gerçek band yapısının da dikkate alınması büyük önem taşımaktadır. Kane modeli yasak band aralığı küçük ve güçlü spin-orbital etkileşmeye sahip yarıiletkenlerin iletkenlik ve valans bandının parabolik olmadığını ortaya koyan, III-V tipi yarıiletkenlerin gerçek band yapısını temsil eden bir modeldir [3].

Bu çalışmada iki aynı merkezli kuantum halkaları göz önünde bulundurulmuştur. İç bölgedeki kuantum noktasının yüzeyinde geçirgen delta potansiyel, dış bölgede ise sonsuz potansiyel engel olduğu dikkate alınarak elektronların enerjisi Kane modelinde hesaplanmıştır.

2. Teori



Şekil 1. Aynı merkezli kuantum halkaları

Bu çalışmada; içteki kuantum halkasının yüzeyi geçirgen delta potansiyeli, dışta ise sonsuz potansiyel engel olduğu göz önünde bulundurulmuştur (Şekil1).

Problemin geometresine uygun olarak kutupsal koordinatlarda Schrödinger denklemini çözelim;

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m(E)} \Delta - E + Ur_0\delta(r - r_0) \right\} \psi(r, \varphi) = 0 \quad (1)$$

Burada δ ; Dirac delta fonksiyonu, $Ur_0\delta(r - r_0)$; yüzeyi geçirgen tabakadaki potansiyeli göstermektedir. Kane tipi yarıiletkenlerde etkin kütle band parametreleri ile bağıntısı aşağıdaki gibidir.

$$\frac{\hbar^2}{2m(E)} = \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E+E_g} + \frac{1}{E+E_g+\Delta} \right) \quad (2)$$

P; momentum operatörünün iletkenlik ve valans bandları etkileşiminden kaynaklanan matris elemanıdır. E_g ; yasak band aralığını ve Δ ; spin-orbital etkileşmesi sonucu ortaya çıkan aralığı ifade etmektedir. Dalga fonksiyonunu aşağıda yazıldığı gibi seçelim.

$$\psi(r, \varphi) = e^{-il\varphi} \cdot R_l(r) \quad (3)$$

Burada l ; azimutal kuantum sayısıdır. $R_l(r)$ Radyal dalga fonksiyonu için aşağıdaki denklem bulunur.

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l^2}{r^2} + \frac{2m(E)}{\hbar^2} (E - Ur_0\delta(r - r_0)) \right\} R_l(r) = 0 \quad (4)$$

Bu diferansiyel denklemin iç ve dış bölgeler için çözümünü aşağıdaki gibidir.

$$R(r) = AJ_l(kr) \quad r < r_0 \quad (5)$$

$$R(r) = BJ_l(kr) + CY_l(kr) \quad r > r_0 \quad (6)$$

Burada $J_l(kr)$, $Y_l(kr)$ sırasıyla birinci ve ikinci tip Bessel fonksiyonudur. Sınır koşullarına göre $r=R$ de dalga fonksiyonu sıfırdır.

$$B J_l(kR) + CY_l(kR) = 0 \quad (7)$$

Buradan,

$$\frac{C}{B} = -\frac{J_l(kR)}{Y_l(kR)} \quad (8)$$

İç kısım için sınır koşulunu yazalım,

$$AJ_l(kr_0) = BJ_l(kr_0) + CY_l(kr_0) \quad (9)$$

$$\frac{\partial R_l(r)}{\partial r} \Big|_{r>r_0} - \frac{\partial R_l(r)}{\partial r} \Big|_{r<r_0} = \frac{2m(E)}{\hbar^2} U_{r_0} R_l(r_0) \quad (10)$$

(9) denklemini (10) da kullanırsak ve her iki tarafı $R_l(r_0)$ a bölersek;

$$\frac{B J'_l(kr_0) + CY'_l(kr_0)}{B J_l(kr_0) + CY_l(kr_0)} - \frac{J'_l(kr_0)}{J_l(kr_0)} = \frac{2m(E)}{\hbar^2} U_{r_0} \quad (11)$$

elde edilir. Eşitlik(11) u kullanarak $\frac{C}{B}$ ifadesini bulursak aşağıdaki denklemi elde ederiz.

$$\frac{C}{B} = \frac{J_l^2(kr_0)}{Y'_l(kr_0) J_l(kr_0) - Y_l(kr_0) J'_l(kr_0) - \frac{2m(E)}{\hbar^2} U_{r_0} Y_l(kr_0) J_l(kr_0)} \frac{2m(E)}{\hbar^2} U_{r_0} \quad (12)$$

Denklem (12) deki Wronskian;

$$Y'_l(z) J_l(z) - Y_l(z) J'_l(z) = \frac{2}{\pi z} \quad (13)$$

gibidir. (12) Denkleminde (13) Denklemini kullanırsak ve pay ve paydayı $\frac{2m}{\hbar^2} U_{r_0} = \Omega$ ye bölersek;

$$\frac{C}{B} = \frac{J_l^2(kr_0)}{\frac{2}{\pi d \Omega} - Y_l(kr_0) J_l(kr_0)} \quad (14)$$

buluruz. Burada $d = \frac{(\Delta + E + E_g)(E + E_g)(2\Delta + 3E)}{(2\Delta + 3E + 3E_g)E_g(\Delta + E_g)}$, $\frac{2m_0}{\hbar^2} U_{r_0} = \Omega$ ile gösterilmiştir. Eşitlik (8) ve Eşitlik (14) ü eşitleyerek elektronların enerjisini hesaplamak için aşağıdaki denklem bulunur.

$$\frac{J_l^2(kr_0)}{\frac{2}{\pi d \Omega} - Y_l(kr_0) J_l(kr_0)} = -\frac{J_l(kR)}{Y_l(kR)} \quad (15)$$

2.1. Magnetik Alan Uygulandığında

Kane denklemlerinden [4] (Bkz formül 1 ve 2 eşitliğinde 3-8 denklemlerini yerine koyup 15 ve 16 eşitliklerinden) faydalanarak spin yukarı ve spin aşağı iletkenlik bandı için iki denklem elde etik. z-ekseni boyunca sabit magnetik alan uygulandığında, vektör potansiyeli aşağıdaki gibi seçilmiştir.

$$\vec{A} = \left(-\frac{Hy}{2}, \frac{Hx}{2}, 0\right) \quad (16)$$

$$\left(-E + \frac{p^2}{3} \left(\frac{2}{E+E_g} + \frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\right) \times \left(-\nabla^2 + \lambda_H L_z + \frac{1}{4} \lambda_H^2 \rho^2\right) \pm \frac{p^2 \lambda_H}{3} \left(\frac{1}{E+E_g} - \frac{1}{E+E_g+\Delta}\right) C_{1,2} = 0 \quad (17)$$

Burada L_z , momentum operatörünün z- bileşeni ve $\rho^2=x^2+y^2$ dir. Silindirik koordinatlarda denklem (17) i çözersek $C_{1,2}$ aşağıdaki gibi bulunur.

$$C_{1,2} = A e^{im\varphi + ik_z z} \times e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} \Phi_{1,2}(\xi) \quad (18)$$

Radyal fonksiyon $\Phi(\xi)$ yi aşağıdaki gibi bulduk.

$$\xi \frac{d^2 \Phi}{d\xi^2} + (|m+1-\xi|) \frac{d\Phi}{d\xi} - a\Phi = 0 \quad (19)$$

Denklem (19) konfluent hipergeometrik fonksiyon için Kummer eşitliğinin kanonik halidir [5]. Burada $\xi=\rho^2/2l_H^2$ boyutsuz değişkendir. Bu denklemin çözümü aşağıdaki gibidir.

$$\Phi_1(\xi) = C_0 F(a, b, \xi) \quad \rho < a \quad (20)$$

$$\Phi_2(\xi) = C_1 F(a, b, \xi) + C_2 U(a, b, \xi) \quad \rho > a \quad (21)$$

Eşitlik (20-21) deki C_0 , C_1 ve C_2 sabittir, $F(a, b, \xi)$ ve $U(a, b, \xi)$ konfluent hipergeometrik fonksiyon ve hipergeometrik fonksiyonun parametreleri aşağıdaki gibidir.

$$a = \frac{1}{2} + \frac{m}{2} + \frac{|m|}{2} + \frac{1}{2} k_z^2 l_H^2 - \frac{3E}{\hbar\omega_0} \frac{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}{(3E+3E_g+2\Delta)E_p} \pm \frac{\Delta}{2(3E+3E_g+2\Delta)} \quad (22)$$

ve $b=|m|+1$, $\omega_0=eH/m_0c$; serbest elektron için siklatron frekansı, $l_H = \sqrt{\hbar c/eH}$; magnetik uzunluk ve $E_p=(2m_0/\hbar^2)P^2$ dir. İçi boş silindirin enerji spektrumu azimuthal kuantum sayısı m ve radial kuantum sayısı n ile gösterilir ve iki spin için taban düzeyi $\sigma=\pm 1/2(E_{nm\sigma})$ dir. Denklem (22) için her bir Landau seviyesi iki taban spin seviyesine ayrılır.

Sınır koşullarının ilki $r=R$ de dalga fonksiyonu sıfırdır. İlk sınır koşulundan;

$$\Phi_2(\xi) = 0 \quad (23)$$

dır ve buradan

$$\frac{C_1}{C_2} = -\frac{U(a, b, R^2/2l_H^2)}{F(a, b, R^2/2l_H^2)} \quad (24)$$

elde edilir. İkinci sınır koşulumuz ise $r = r_0$ da dalga fonksiyonu sürekli, birinci türevi ise sürekli değildir. Bu iki koşulu birleştirirsek;

$$\frac{\partial \Phi(\xi)}{\partial \rho} \Big|_{\rho > r_0} - \frac{\partial \Phi(\xi)}{\partial \rho} \Big|_{\rho < r_0} = \frac{2m(E)}{\hbar^2} U a \Phi_{l_H}(r_0^2 / 2l_H^2) \quad (25)$$

(25) Denkleminin elde ederiz. Bu durumda (25) Denkleminin her iki tarafında $\Phi_{l_H}(r_0^2 / 2l_H^2)$ ye bölersek,

$$\frac{C_1 F_{l_H}(a, b, \xi) + C_2 U_{l_H}(a, b, \xi)}{C_1 F_{l_H}(a, b, \xi) + C_2 U_{l_H}(a, b, \xi)} - \frac{F_{l_H}(a, b, \xi)}{F_{l_H}(a, b, \xi)} = \frac{2m(E)}{\hbar^2} U r_0 \quad (26)$$

Elde edilir. Buradan bulacağımız $\frac{C_2}{C_1}$;

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{F_{l_H}^2(a, b, r_0^2 / 2l_H^2)}{W - U_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2) F_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2)} \frac{2mE}{\hbar^2} U r_0^2 \quad (27)$$

dir. Eşitlik (28) de Wronskian;

$$W = U'_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2) F_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2) - U_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2) F'_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2) \quad (28)$$

dir. Buradaki U ve F ifadeleri hipergeometrik fonksiyonlardır. Hipergeometrik fonksiyonlar için Wronskian'ın ifadesi aşağıdaki gibidir.

$$W = -\frac{\Gamma[b]}{\Gamma[a]} (r_0^2 / 2l_H^2)^{-b} e^{(r_0^2 / 2l_H^2)} \quad (29)$$

Burada Γ ; Gamma fonksiyonudur. Eşitlik (28) de, $\frac{C_2}{C_1}$ ifadesinde bazı kısaltmalar yapılarak aşağıdaki gibi sade bir biçimde yazdık. Bu sadeleştirmeyi yaparken $\frac{2m_0}{\hbar^2} U r_0^2 = \Omega$ ile, $d = \frac{(\Delta + E + E_g)(E + E_g)(2\Delta + 3E)}{(2\Delta + 3E + 3E_g)E_g(\Delta + E_g)}$ ile gösterdik. Eşitlik (28) in son hali aşağıdaki gibi oldu.

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{F_{l_H}^2(a, b, r_0^2 / 2l_H^2)}{\frac{W r_0^2}{2l_H^2 d \Omega} - U_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2) F_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2)} \quad (31)$$

Birinci sınır koşulundan elde ettiğimiz Eşitlik (24) deki $\frac{C_2}{C_1}$ ifadesi ile ikinci sınır koşulundan elde ettiğimiz Eşitlik (31) deki $\frac{C_2}{C_1}$ birbirine eşitleyerek elektronun enerjisini hesaplamak için aşağıdaki ifadeyi buluruz.

$$\frac{F_{l_H}^2(a, b, r_0^2 / 2l_H^2)}{\frac{W r_0^2}{2l_H^2 d \Omega} - U_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2) F_{l_H}(a, b, r_0^2 / 2l_H^2)} = -\frac{F(a, b, R^2 / 2l_H^2)}{U(a, b, R^2 / 2l_H^2)} \quad (32)$$

Dış magnetik alanla spini $\pm 1/2$ olan elektronik düzeylerin etkileşimiyle, serbest elektronun spin yarılması g-çarpanı ile tanımlanır. Katılarda örgü potansiyeli ile

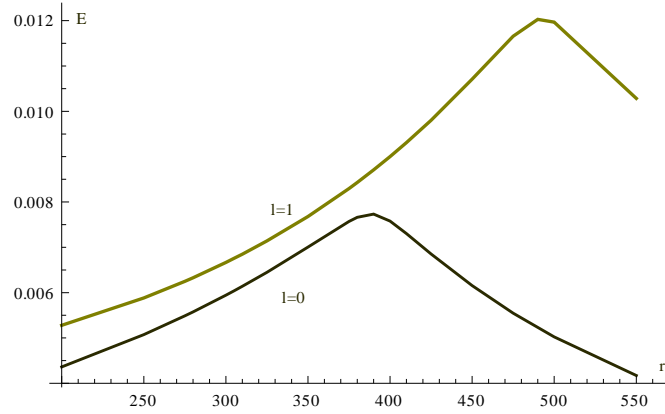
etkileşim, serbest elektron için g-çarpanında önemli değişikliklere sebep olur. Sistem boyutu 3D den 2D ye düşürüldüğünde büyüklük kuantizasyon etkileri yük taşıyıcılarının g-çarpanında önemli değişikliklere sebep olur. g-çarpan boyutundaki azalma yarıiletkenin band yapısındaki değişiklik hakkında sayısal bilgiler verir. Etkin g-çarpan taban bandlarının Zeeman yarılmasından belirlenebilir:

$$g = \frac{E\uparrow - E\downarrow}{\mu_B H} \quad (33)$$

Burada $E \uparrow$ ve $E \downarrow$ +z ve -z yönlerindeki spin için elektron enerjileridir.

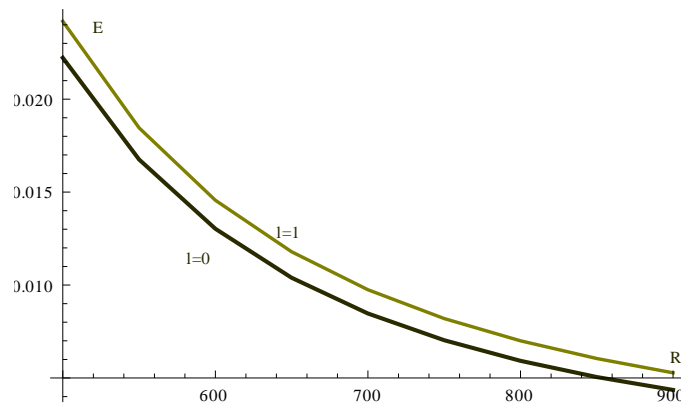
3. Bulgular

Kuantum halkalarında dış yarıçap sabitken, iç yarıçapın değişmesiyle elektronların enerjisindeki değişim Şekil 2 de olduğu gibidir.



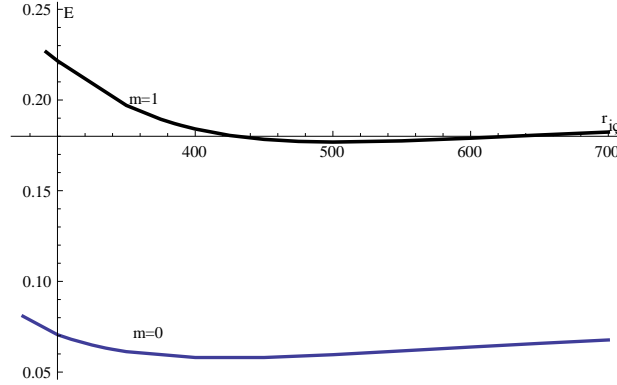
Şekil 2. Kuantum halkalarının dış yarıçapı sabitken, iç yarıçapının değişmesiyle elektronun enerjisinin değişimi $\Omega=30$, $B=0$

İç yarıçapı sabitken dış yarıçapın değişmesiyle elektronların enerjisindeki değişimi Şekil 3 göstermektedir.



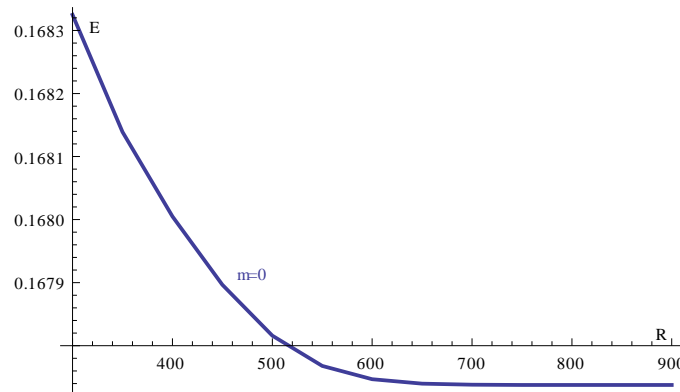
Şekil 3. Kuantum halkalarında iç yarıçap sabitken dış yarıçapın değişmesiyle elektronların enerjisinin değişimi $\Omega=30$, $B=0$

Kuantum halkalarında magnetik alan uygulandığında dış yarıçap sabitken, iç yarıçapın değişmesiyle elektronların enerjisindeki değişim Şekil 4 de olduğu gibidir.



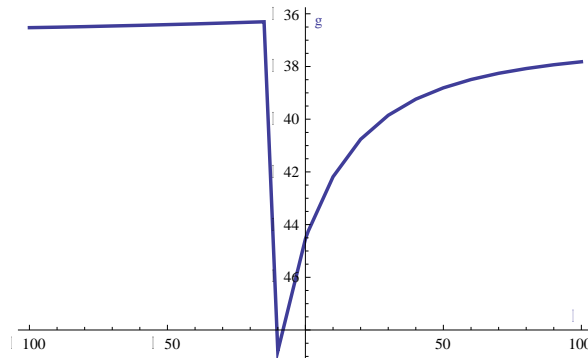
Şekil 4. Kuantum halkalarının dış yarıçapı sabitken, iç yarıçapının değişmesiyle elektronun enerjisinin değişimi $\Omega=30$, $B=4T$

Magnetik alan uygulandığında iç yarıçapı sabitken, dış yarıçapın değişmesiyle elektronların enerjisindeki değişimi Şekil 5 göstermektedir.



Şekil 5. Kuantum halkalarında iç yarıçapı sabitken dış yarıçapın değişmesiyle elektronların enerjisinin değişimi $\Omega=30$, $B=4T$

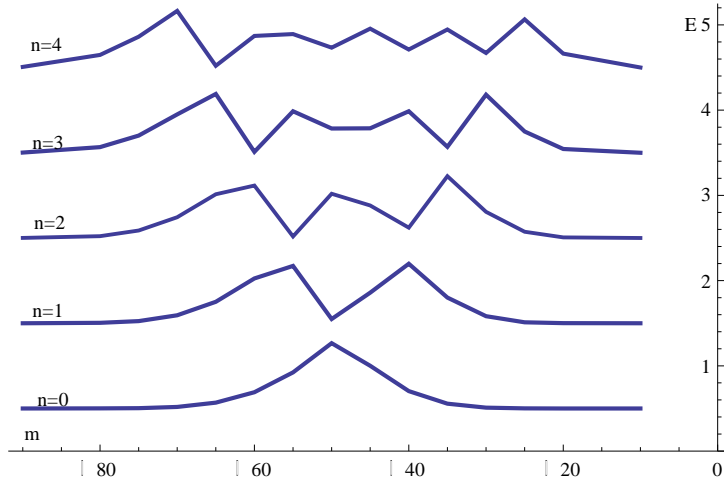
Şekil 6 elektronun etkin g-çarpan değerinin potansiyel şiddet (Ω) in fonksiyonu olarak değişimini göstermektedir.



Şekil 6. g-çarpanının, potansiyel şiddete göre değişimi. $\Omega=30$, $B=4T$

Şekil 6 de görüldüğü gibi potansiyel şiddetin negatif değerlerinde nispeten sabitken, potansiyel şiddetin pozitif değerleri için g -çarpanının değeri artmaktadır. (Yani; şeklin 1. Kısımında potansiyel kuyu görüntüsündeyken, ikinci kısmında ise potansiyel bariyeri göstermektedir.)

Şekil 7 de potansiyel şiddet $\Omega=100$ değerinde, elektronun enerjisinin, m magnetik kuantum sayısına göre değişimi $n=0, 1, 2, 3$ ve 4 radyal kuantum sayılarında incelenmiştir.



Şekil 7. Sabit dış magnetik alanda, potansiyel şiddet $\Omega=100$ iken, m magnetik kuantum sayısına göre elektronun enerji spektrumu (radyal kuantum sayısı $n=0, 1, 2, 3$ ve 4 için) $B=4T$

4. Sonuç ve Yorum

Magnetik alan yokken; iç ve dış bölgedeki sınır koşullarından yararlanarak elektronların enerjisinin iç bölgenin yarıçapına bağlı değişiminde maksimum olduğu gösterilmiştir (Şekil 2). Dış bölgenin yarıçapı arttıkça, elektronların enerjisi azalmaktadır (Şekil 3). Magnetik alan uygulandığında ise; İç ve dış bölgedeki sınır koşullarından yararlanarak elektronların enerjisinin iç bölgenin yarıçapına bağlı değişiminde minimum olduğu gösterilmiştir (Şekil 4). Dış bölgenin yarıçapı arttıkça, elektronların enerjisi azalmaktadır (Şekil 5). Şekil 6 da görüldüğü gibi potansiyel şiddetin negatif değerlerinde az değişme varken, potansiyel şiddetin pozitif değerleri için g -çarpanının değeri artmaktadır. (Yani; şeklin 1. Kısımında potansiyel kuyu görüntüsündeyken ikinci kısmında ise potansiyel bariyeri göstermektedir.) Şekil 7 de sabit dış magnetik alanda potansiyel şiddet $\Omega=100$ iken, m magnetik kuantum sayısına göre elektronun enerjisinin n radyal kuantum sayılarında $n+1$ maksimum olacak şekilde osilasyonlar gözlenmiştir [6]. Bu çalışmada yapılan hesaplamalar hafif deşik ve spin orbital etkileşme sonucu parçalanmış deşikler için de yapılabilir.

Teşekkür ve Bilgi

Bu çalışma Adım Fizik Günleri III 2014'de sözlü olarak sunulmuştur.

Kaynaklar

[1] Chakraborty T., 1999. Quantum Dots, Elsevier, Amsterdam, p. 348.

- [2] Beenakker C.W.J., Van Houten H., 1991. Quantum transport in semiconductor nanostructures, *Solid State Physics*, 44: 1.
- [3] Altuğ D.T., 2011. Kane Tipi Kuantum Anti-Tellerinde Rashba Spin-Orbital Parçalanması, Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Doktora Tezi, 82 s.
- [4] Gashimzade F.M., Babayev A.M., Çakmak S., Çakmaktepe Ş., 2004. Energy spectrum of carriers in Kane-type hollow cylinder, *Physica E*, 23, 177-182.
- [5] M. Abramovich, A. Stengun, 1965. Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, p.504,
- [6] Olendski O., Kim C.S., 1996. A cylindrical δ -potential in external magnetic fields: a model for semiconductor nanostructures, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 8: 2197- 2208.

Deniz Türköz Altuğ e-posta: denizturkoz@sdu.edu.tr