T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ASİMETRİK KUANTUM KUYU YAPILARININ LİNEER OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

İbrahim KARABULUT
DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
Konya, 2008

ÖZET

Doktora Tezi

ASİMETRİK KUANTUM KUYU YAPILARININ LİNEER OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

İbrahim KARABULUT

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman : Doç. Dr. Haluk ŞAFAK

2008, 102 Sayfa

Jüri : Prof. Dr. Mehmet TOMAK
Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
Prof. Dr. Ülfet ATAV
Doç. Dr. Haluk ŞAFAK
Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN

Bu çalışmada, asimetrik kuantum kuyu yapılarının lineer olmayan optik özellikleri teorik olarak incelenmiştir. Bunun için, farklı sınırlandırıcı potansiyellere sahip kuantum kuyu yapılar göz önüne alınmıştır. Bu yapıların elektronik ve lineer olmayan optik özellikleri analitik ve nümerik olarak çalışılmıştır. İkinci ve üçüncü mertebe lineer olmayan optiksel özellikler yoğunluk matris formalizmi kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplanan optiksel süreçler şunlardır: Optiksel doğrultma, ikinci harmonik üretimi, üçüncü harmonik üretimi, lineer olmayan soğurma katsayısı ve şiddete bağlı kırılma indisi. Hesaplamalarda, kuyu genişliği, bariyer yüksekliği, sınırlandırıcı potansiyel frekansı ve elektrik alan gibi parametrelerin ve eksitonun etkileri de araştırılmıştır.

Anahtar Kelimeler : Kuantum kuyuları, optiksel doğrultma, ikinci harmonik üretimi, üçüncü harmonik üretimi, eksitonik etkiler

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

INVESTIGATION OF NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF ASYMMETRIC QUANTUM WELL STRUCTURES

İbrahim KARABULUT

Selcuk University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Haluk ŞAFAK

2008, 102 Page

Jury : Prof. Dr. Mehmet TOMAK
Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
Prof. Dr. Ülfet ATAV
Assoc. Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Assist. Prof. Dr. Berna GÜLVEREN

In this study, the nonlinear optical properties of asymmetric quantum well structures are investigated theoretically. For this purpose, the quantum well structures having different confining potentials are taken into consideration. The electronic and the nonlinear optical properties of these structures are studied analytically and numerically. Second and third order nonlinear optical properties are calculated using the density matrix formalism. The calculated optical processes include optical rectification, second harmonic generation, third harmonic generation, nonlinear absorption coefficient and the intensity-dependent refractive index. In our calculations, the effects of the exciton and the parameters such as well width, barrier height, confining potential frequency and electric field are also investigated.

Key Words : Quantum wells, optical rectification, second harmonic generation, third harmonic generation, excitonic effects

ÖNSÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Doktora tezi olarak sunulan bu çalışmada, asimetrik kuantum kuyu yapılarının lineer olmayan optik özellikleri teorik olarak incelenmiştir.

Yarıiletken kuantum kuyularının lineer olmayan optik özellikleri hem fiziksel hem de teknolojik açıdan son yıllarda önemli bir araştırma alanı haline gelmiştir. Bu durum, böylesi süreçlerin kuantum kuyu kızıl ötesi fotodetektörleri ve kuantum kuyu lazerleri gibi cihaz uygulamaları için son derece önemli olmasından kaynaklanır. Asimetrik kuantum kuyu yapılarının lineer olmayan optik özellikleriyle ilgili yapılan bu çalışma, bu alanda ülkemizde gerçekleştirilmiş ilk çalışmalardan birisi olup gelecek çalışmalar için yararlı olabilecek bir kaynak niteliğindedir.

Bu çalışma süresince, bilgi ve tecrübeleri ile bana her konuda yardımcı olan danışmanım Doç. Dr. Haluk ŞAFAK' a en içten teşekkürlerimi sunarım. Yine bu tez çalışmam süresince, derin bilgi ve birikimiyle bana yol gösteren, desteğini ve inancını üzerimden hiç eksik etmeyen değerli hocam Prof. Dr. Mehmet Tomak' a en içten teşekkürlerimi sunarım. Yine bu çalışma süresince, birlikte çalışmaktan çok zevk aldığım ve kendisinden çok şey öğrendiğim değerli hocam Prof. Dr. Ülfet ATAV' a, yardım ve desteğinden dolayı da Yrd. Doç. Dr. Atilla GÜLEÇ hocama çok teşekkür ederim.

Çalışmalarım sırasında hiçbir zaman destek ve teşviklerini esirgemeyen Selçuk Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü elemanlarına teşekkür ederim.

Son olarak, bu tez çalışmam boyunca desteğini, inancını ve sevgisini benden hiç eksik etmeyen başta sevgili eşim Elife' ye ve maddi–manevi tüm destekleri için aileme en içten sevgi ve şükranlarımı sunarım.

İÇİNDEKİLER

ÖZET i

ABSTRACT ii

ÖNSÖZ iii

1. GİRİŞ 1

2. YARIİLETKEN HETEROYAPILAR 6

2.1. Giriş 6

2.2. Heteroyapıların Genel Özellikleri 6

2.3. Yarıiletken Heteroyapıların Elektronik Yapısı 11

2.3.1. Tek Band Zarf Fonksiyon Yaklaşımı 12

3. NL OPTİK 17

3.1. Giriş 17

3.2. NL Optiksel Süreçlerin Tanımları 17

3.3. Kuantum Mekaniğinin Yoğunluk Matris Formalizmi 19

3.3.1. Yoğunluk Matris Denkleminin Pertürbasyon Çözümü 23

4. İKİNCİ MERTEBE NL OPTİKSEL SÜREÇLER 27

4.1. Giriş 27

4.2. Kuantum Kuyularındaki İkinci Mertebe NL Optiksel Süreçler 27

4.2.1. SHG Katsayısı 31

4.2.2. OR Katsayısı 32

5. ÜÇÜNCÜ MERTEBE NL OPTİKSEL SÜREÇLER 35

5.1. Giriş 35

5.2. THG Katsayısı 35

5.3. Lineer ve Üçüncü Mertebe NL Soğurma Katsayıları 36
5.4. Şiddete Bağlı Kırılma İndis Değişimi 38

6. ASİMETRİK DİKDÖRTGEN KUANTUM KUYUSUNUN NL OPTİK ÖZELLİKLERİ 40

6.1. Giriş 40
6.2. Asimetrik Dikdörtgen Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı 40
6.3. Asimetrik Dikdörtgen Kuantum Kuyusunda SHG Katsayısı 45
6.4. Asimetrik Dikdörtgen Kuantum Kuyusunda OR Katsayısı 50
6.5. Asimetrik Dikdörtgen Kuantum Kuyusunda Lineer ve NL Soğurma Katsayıları 53
6.6. Sonuçlar ve Tartışma 56

7. YARI-PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNUN NL OPTİK ÖZELLİKLERİ 57

7.1. Giriş 57
7.2. Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı 57
7.3. Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda OR Katsayısı 59
7.4. Eksiton 61
7.4.1. Yarı-parabolik Sınırlandırıcı Potansiyeldeki Eksitonik Seviyeler 62
7.4.2. SHG Katsayısı 64
7.4.3. THG Katsayısı 66
7.4.4. Lineer ve NL Soğurma Katsayıları 67
7.4.5. Kırılma İndisindeki Lineer ve NL Değişimler 71
7.5. Sonuçlar ve Tartışma 74

8. SONLU YARI-PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNUN NL OPTİK ÖZELLİKLERİ 75

8.1. Giriş 75

8.2. Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı 75

8.3. Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda OR Katsayısı 77

8.4. Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda SHG Katsayısı 79

8.5. Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda THG Katsayısı 80

8.6. Elektrik Alan Etkisi Altındaki Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı 82

8.7. Elektrik Alan Etkisi Altındaki Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda OR Katsayısı 84

8.8. Elektrik Alan Etkisi Altındaki Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda Lineer ve NL Soğurma Katsayıları 85

8.9. Elektrik Alan Etkisi Altındaki Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda Şiddete Bağlı Kırılma İndisi 86

8.10. Sonuçlar ve Tartışma 87

9. YORUM ve ÖNERİLER **89**

KAYNAKLAR **92**

Bu Tez Çalışmasından Çıkan Yayınlar

Yurtdışı Yayınlar:

1. İ. Karabulut, H. Şafak, M. Tomak "Nonlinear optical rectification in asymmetrical semiparabolic quantum wells" Solid State Communications **135**, 735 (2005).

2. İ. Karabulut, H. Şafak "Nonlinear optical rectification in semiparabolic quantum wells with an applied electric field" Physica B **368**, 82 (2005).

3. İ. Karabulut, Ü. Atav, H. Şafak "Comment on "Electric field effect on the second-order nonlinear optical properties of parabolic and semiparabolic quantum wells" Physical Review B **72**, 207301 (2005).

4. İ. Karabulut, Ü. Atav, H. Şafak, M. Tomak "Theoretical investigation of intersubband nonlinear optical rectification in $Al_{xl}Ga_{1-xl}As/GaAs/Al_{xr}Ga_{1-xr}As$ asymmetric rectangular quantum wells" Physica Status Solidi B **244**, 3313 (2007).

5. İ. Karabulut, Ü. Atav, H. Şafak, M. Tomak "Second harmonic generation in an asymmetric rectangular quantum well under hydrostatic pressure" Physica B **393**, 133 (2007).

6. İ. Karabulut, Ü. Atav, H. Şafak, M. Tomak "Linear and nonlinear intersubband optical absorptions in an asymmetric rectangular quantum well" European Physical Journal B **55**, 283 (2007).

7. İ. Karabulut, H. Şafak, M. Tomak "Intersubband resonant enhancement of the nonlinear optical properties in compositionally asymmetric and interdiffused quantum wells" Journal of Applied Physics **103**, 103116 (2008).

8. İ. Karabulut, H. Şafak, M. Tomak "Excitonic effects on the nonlinear optical properties of small quantum dots "
Journal of Physics D: Applied Physics **41**, 155104 (2008).

Uluslararası Bildiriler:

1. İ. Karabulut, H. Şafak, M. Tomak 23rd International Physics Congress 13-16 September 2005, Muğla, Turkey.

1. GİRİŞ

Band aralık mühendisliği ve moleküler ışın epitaksi (MBE) yöntemi kullanılarak dalga fonksiyonları ve enerji seviyelerinin değiştirilmesi yarıiletken kuantum yapıların dizayn edilmesinde önemli rol oynamaktadır (Liu ve Cappaso 2000). Yarıiletken kuantum yapılarda, yapıyı oluşturan malzemelerin band aralıklarındaki farklılıklardan kaynaklanan potansiyel tarafından taşıyıcıların hareketi belirli boyutlarda sınırlandırılır. Taşıyıcıların hareketinin tek boyutta sınırlandırıldığı durum kuantum kuyu yapılarına, iki ve üç boyutta sınırlandırıldığı durumlarda sırasıyla, kuantum tel ve kuantum nokta yapılarına karşılık gelir.

Kuantum kuyuları, büyük band aralıklı iki yarıiletken malzeme arasına yerleştirilmiş daha küçük band aralıklı ince bir yarıiletken tabakadan oluşur. Elektron ve deşikler sırasıyla, iletim ve valans bandı içerisinde sınırlandırılmıştır Kuantum kuyuları büyütme doğrultusunda kesikli enerji seviyelerine sahip olup bu seviyeler arasında optiksel geçişler mümkündür. Eğer valans bandı içerisindeki enerji seviyelerinden iletim bandı içerisindeki seviyelere bir geçiş olursa bu, *bandlar arası* (Interband-IB) geçiş olarak adlandırılır. Eğer geçişler aynı band içerisindeki enerji seviyeleri arasında olursa, bu geçişlere de *alt-bandlar arası* (Intersubband-ISB) geçişler denir. Son yıllarda, kuantum kuyularındaki ISB geçişler hem fiziksel hem de teknolojik açıdan önemli bir çalışma konusu haline gelmiştir. Bu durum, bu tür geçişlerin büyük dipol matris elemanlarına (1-3 nm) ve osilatör şiddetlerine (f ~ 15-20) sahip olmasından kaynaklanır (West ve Eglash 1985). Kuantum kuyularındaki ISB geçişlerle ilgili araştırmalar kuantum kuyu kızılötesi fotodetektörü ve kuantum cascade lazeri gibi çeşitli cihazların gelişimine neden olmuştur (Mosely *ve ark.* 2004). Bu tür cihazlar, yüksek hız ve verimliliğin yanı sıra boyutsal olarak da küçük olduğundan yarıiletken aygıtlara göre oldukça avantajlıdırlar.

Son yıllardaki malzeme büyütme tekniklerinde yaşanan önemli gelişmelerin sonucunda kuantum telleri ve kuantum noktaları gibi yapıların üretilmesi de günümüzde mümkün hale gelmiştir. Gerek üretim kolaylığı gerekse de potansiyel şeklinin ayarlanmasındaki kolaylıklar nedeniyle kuantum kuyuları diğer yapılarla kıyaslandığında ISB cihaz uygulamaları için oldukça caziptir.

MBE yöntemindeki gelişmelerin sonucunda kuantum heteroyapılarla ilgili araştırmalar yaklaşık 30 yıl önce başladı. Bu teknik kullanılarak GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ heteroyapılarının çok ince tabakalarını (100 Å dan daha küçük) hazırlamak mümkün hale gelmiştir. Bir yarıiletken kuntum kuyusundaki kesikli enerji seviyelerinin varlığı deneysel olarak 1974 yılında gösterildi (Dingle *ve ark.* 1974). Kuantum kuyularında ISB geçişlerle ilgili daha önceden bazı teorik çalışmalar yapılmış olmakla birlikte böylesi geçişlerin ilk deneysel gözlemi bir GaAs/AlGaAs kuantum kuyusunda West ve Eglash tarafından gerçekleştirilmiştir (West ve Eglash 1985). Bu deneysel gözlemden sonra farklı sınırlandırıcı potansiyele sahip heteroyapılar için ISB geçişlerle ilgili hem deneysel hem de teorik birçok çalışma yapıldı.

Lineer olmayan (Nonlinear-NL) optik, ışığın etkisiyle malzemenin optik özelliklerinin değişmesi sonucunda ortaya çıkan olguyu araştırır. Sadece lazer ışığı bir malzemenin optik özelliklerini değiştirmeye yetecek kadar şiddete sahiptir. İlk çalışan lazerin icadından kısa zaman sonra, ikinci harmonik üretimi deneysel olarak gözlenmiştir (Franken *ve ark.* 1961). Bu gözlem NL optik konusunun başlangıcı olarak kabul edilir.

Bir yarıiletken kuantum kuyusundaki ISB geçişlerle ilgili dipol matris elemanlarının değerleri yaklaşık olarak kuyu genişliğiyle aynı mertebelerdedir. Yani, bu dipol matris elemanlarının büyüklükleri birkaç nm civarındadır. İkinci mertebe optiksel alınganlıklar dipol matris elemanlarının kübüyle orantılı olduğundan asimetrik kuantum kuyularında büyük ikinci mertebe NL optiksel özellikler beklenir. Gerçekte bu durum ilk olarak bir Morse potansiyeli için teorik olarak gösterildi ve bu potansiyel için yarıiletken malzemelerin sahip olduğundan çok daha büyük ikinci mertebe alınganlıklar elde edildi (Gurnick ve DeTemple 1983). Daha sonra, elektrik alan etkisi altındaki GaAs/AlGaAs kuantum kuyusunda ikinci mertebe alınganlıklar deneysel olarak ölçüldü (Fejer *ve ark.* 1989). Yarıiletken kuantum kuyularının sınırlandırıcı potansiyelinin kolaylıkla kontrol edilebilmesi nedeniyle farklı potansiyellere sahip kuantum kuyu yapılarında ikinci mertebe NL optik özellikler yoğun biçimde çalışıldı.

İkinci mertebe süreçlere benzer şekilde üçüncü mertebe NL optiksel süreçler de dipol matris elemanlarına bağlıdır. Bu nedenle, kuantum kuyu yapılarında büyük üçüncü mertebe NL süreçlerin de elde edilmesi beklenir. İkinci mertebe süreçlerle

karşılaştırıldığında matris elemanlarındaki farklılıklar nedeniyle üçüncü mertebe süreçler hem simetrik hem de asimetrik potansiyele sahip yapılarda gözlenebilir (Lien *ve ark.* 1994, Li 1996). Ancak yapılan çalışmalarla büyük üçüncü mertebe alınganlık elde etmek için sınırlandırıcı potansiyelin asimetrisinin yararlı olduğu görülmüştür (Radovanovic *ve ark.* 2001). Genel olarak kuantum kuyu yapılarında büyük NL alınganlıkar iki yolla elde edilebilir. Birinci yol, sınırlandırıcı potansiyeli ayarlayarak matris elemanlarının maksimum değerlerini elde etmektir. İkinci yol, matris elemanlarının değerlerini maksimum yaparken gönderilen ışığın frekansının kuantum kuyusundaki ardışık enerji seviyeleri arasındaki geçiş frekanslarına eşit olduğu rezonans durumlarını yakalamaktır. İkinci yoldan elde edilen NL alınganlıklar ilk yolla elde edilenlerden çok daha büyük olmalarına rağmen hem büyük matris elemanlarına sahip hem de rezonans şartlarını sağlayan kuantum kuyularını elde etmenin zor olacağı açıktır.

Rezonans şartlarını sağlamaksızın sadece matris elemanlarının değerlerini artırmaya dayalı olarak NL optiksel özelliklerin incelenmesiyle ilgili çeşitli çalışmalar yapılmıştır (Zhang *ve ark.* 2006, Yıldırım ve Tomak 2006a). Bu çalışmaların çoğunda ya idealleştirilmiş potansiyele ya da sabit sınırlandırıcı potansiyele sahip yapılar kullanılmıştır (Yıldırım ve Tomak 2005, Park *ve ark.* 1999). Dolayısıyla hem deneysel olarak üretilebilir hem de sınırlandırıcı potansiyelin ayarlanabildiği yapılar NL optiksel uygulamalar için son derece önemli olacaktır. Sonlu asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusu böylesi uygulamalar için mükemmel bir adaydır.

Bu tez çalışmasının ilk amacı, büyük matris elemanlarına sahip fakat rezonans şartlarının sağlanmadığı asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunda ikinci ve üçüncü mertebe NL optiksel süreçleri incelemektir. Asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunda yapı parametreleri ile oynanarak sınırlandırıcı potansiyelin asimetrisi artırılabilir, azaltılabilir ve hatta sınırlandırıcı potansiyel simetrik hale getirilebilir. Dolayısıyla, bu kuyu modeli ayarlanabilir asimetrinin etkilerini çalışmak için de mükemmel bir adaydır. Asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunun NL optiksel özellikleri literatürde hiç çalışılmamış olup bu tez çalışmasında optiksel doğrultma (Optical Rectification-OR) katsayısı (Karabulut *ve ark.* 2007a), ikinci harmonik

üretim (Second Harmonic Generation-SHG) katsayısı (Karabulut *ve ark.* 2007b), lineer ve NL soğurma katsayıları hesaplanmıştır (Karabulut *ve ark.* 2007c).

Literatürde, rezonans şartlarının sağlandığı kuantum kuyu yapılarının NL optik özelliklerinin incelenmesiyle ilgili de çeşitli çalışmalar yapılmış olup bu yapılar; elektrik alan etkisi altındaki kare kuyu (Khurgin 1999), basamaklı kuantum kuyusu (Rosencher ve Bois 1991), ikili ve üçlü kuantum kuyularıdır (Almogy ve Yariv 1995). Ancak bu tür asimetrik yapılar çok esnek değildir ve sadece malzeme parametrelerinin çok özel değerleri için rezonans şartlarını sağlarlar. Dolayısıyla, istenilen enerji bölgesinde büyük NL optik özellikler elde etmek için malzeme parametrelerinin geniş aralığında rezonans şartlarını sağlayan kuantum kuyularına ihtiyaç vardır. Yarı-parabolik kuantum kuyuları böylesi amaçlar için mükemmel bir adaydır. Deneysel olarak üretilebilir olması ve analitik çözümlere sahip olması böylesi bir kuyunun diğer önemli avantajlarıdır.

Bu tez çalışmasının ikinci amacı, yarı-parabolik kuantum kuyularında ikinci ve üçüncü mertebe NL optiksel özellikleri incelemektir. Başlangıçta idealleştirilmiş bir yarı-parabolik kuyu modeli göz önüne alındı. Bu tür bir kuyunun elektronik yapısı, harmonik osilatör çözümleri kullanılarak analitik olarak elde edilebilir. Göz önüne alınan yarı-parabolik kuyu içerisinde eksitonun ve elektronun sınırlandırıldığı durumlar için ikinci ve üçüncü mertebe NL optiksel özellikler ayrı ayrı hesaplanmış ve her iki durum için elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır (Karabulut *ve ark.* 2008a). Daha sonra, NL optiksel uygulamalar için bir sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusu göz önüne alınmıştır. Sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusu deneysel olarak üretilebilir daha gerçekçi bir model olup bu yapıda NL optiksel özelliklerin incelenmesi son derece yararlı olacaktır. Bu yapı için enerji seviyeleri ve zarf dalga fonksiyonları iyi bilinen Numerov yöntemi kullanılarak nümerik olarak elde edilmiştir. Daha sonra, potansiyel yüksekliği ve kuyu genişliği gibi parametrelerin OR, SHG ve üçüncü harmonik üretim (Third Harmonic Generation-THG) katsayılarına etkileri incelenmiştir (Karabulut *ve ark.* 2008b). Son olarak, elektrik alan etkisi altındaki sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunda OR, lineer ve NL soğurma katsayıları ve şiddete bağlı kırılma indisi gibi optiksel süreçler incelenmiştir. İlgili NL optiksel süreçlere pozitif ve negatif yönlü elektrik alanın etkileri detaylı olarak çalışılmıştır.

Tez çalışmasının bundan sonraki bölümünde, yarıiletken heteroyapılar hakkında genel bilgi verilecektir. Üçüncü bölümde, NL optikten bahsedilecektir. Dördüncü bölümde, yoğunluk matris formalizmi kullanılarak OR ve SHG gibi ikinci mertebe süreçler için açık ifadeler verilecektir. Beşinci bölümde, THG, lineer ve NL soğurma katsayıları ve kırılma indis değişimleri gibi üçüncü mertebe süreçler için açık ifadeler verilecektir. Altıncı bölümde, asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusuyla ilgili hesaplamalar ve elde edilen sonuçlar verilecektir. Yedinci bölümde, idealleştirilmiş yarı-parabolik kuantum kuyusunda elektron ve eksitonun sınırlandırıldığı durumlar için ikinci ve üçüncü mertebe NL optiksel süreçlerle ilgili hesaplama sonuçları verilecektir. Daha sonraki bölümde ise sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusundaki NL optiksel süreçlerle ilgili hesaplama sonuçlarıyla aynı yapıya elektrik alan uygulanması durumundaki sonuçlar verilecektir. Son bölümde ise genel bir tartışma yapılacaktır.

2. YARIİLETKEN HETEROYAPILAR

2.1. Giriş

Bu bölümde, öncelikli olarak yarıiletken heteroyapıların genel özellikleri ve bu yapıların büyütme teknikleri tartışılacaktır. Daha sonra, yarıiletken heteroyapıların elektronik yapısı ve bununla ilişkili zarf fonksiyon yaklaşımından kısaca bahsedilecektir.

2.2. Heteroyapıların Genel Özellikleri

Elektronun dalga fonksiyonuyla kıyaslandığında etkin olarak sonsuz kabul edilen bir yarıiletken kristal için etkin kütle yaklaşımı geçerli olup bu yaklaşım çerçevesinde Schrödinger denklemi,

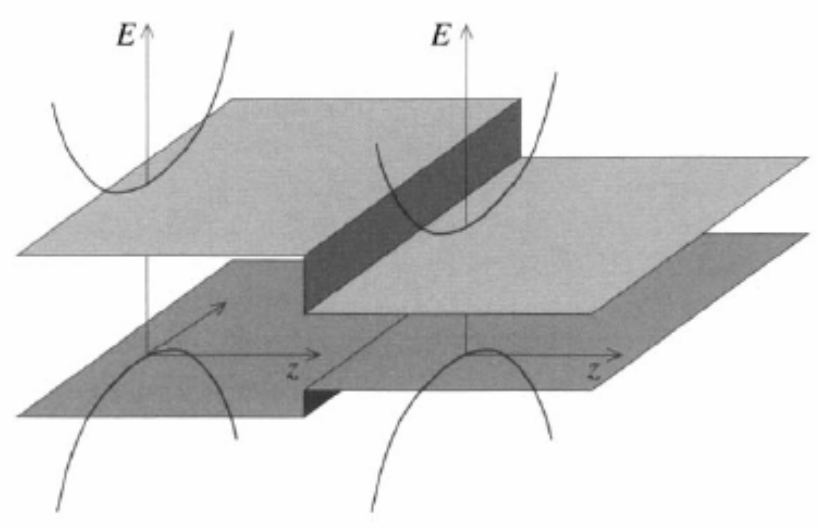
$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) = E\psi(z) \tag{2.1}$$

ifadesiyle verilir. İki farklı yarıiletken malzemenin bir araya getirilmesiyle oluşturulan bir heteroeklemde, etkin kütle konumun bir fonksiyonu olduğundan, Schrödinger denklemi her bir malzeme için ayrı ayrı geçerlidir. Heteroeklemi oluşturan yarıiletken malzemelerin band aralıklarındaki farklılıklar sabit bir potansiyele neden olur. Şekil 2.1' de farklı band aralıklarına sahip iki yarıiletkenin bir araya getirilmesiyle oluşturulan bir heteroeklem görülmektedir.

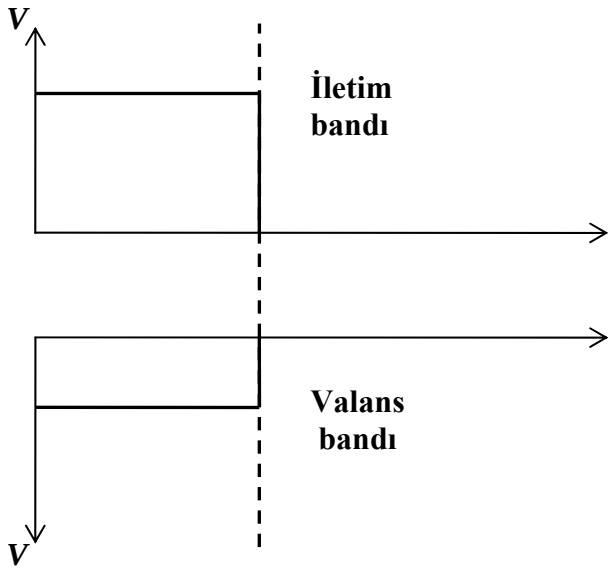
Malzemeler arasındaki etkin kütle farklılıklarının göz önüne alınmadığı bir durum için Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \tag{2.2}$$

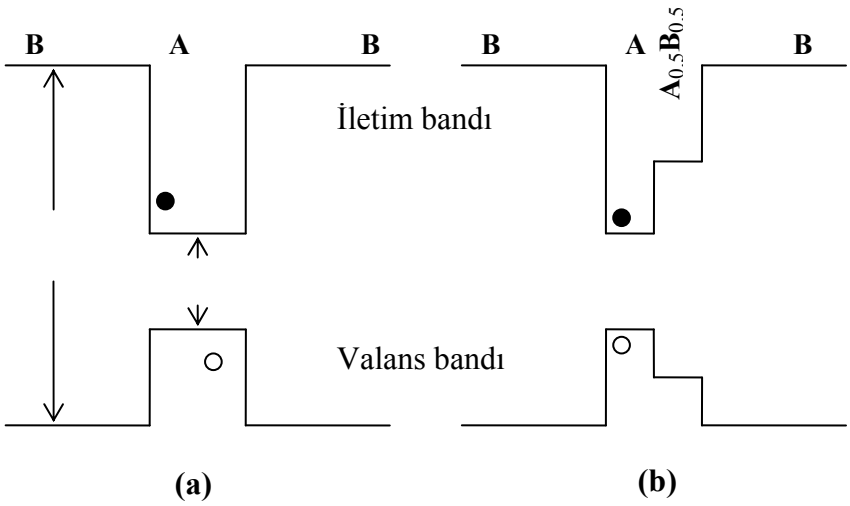
ifadesiyle verilir. Heteroeklemdeki band süreksizliklerini gösteren bir boyutlu $V(z)$ potansiyeli Şekil 2.2' de görülmektedir.



Şekil 2.1. İki farklı yarıiletken malzemenin bir araya getirilmesinden oluşmuş bir heteroeklem.



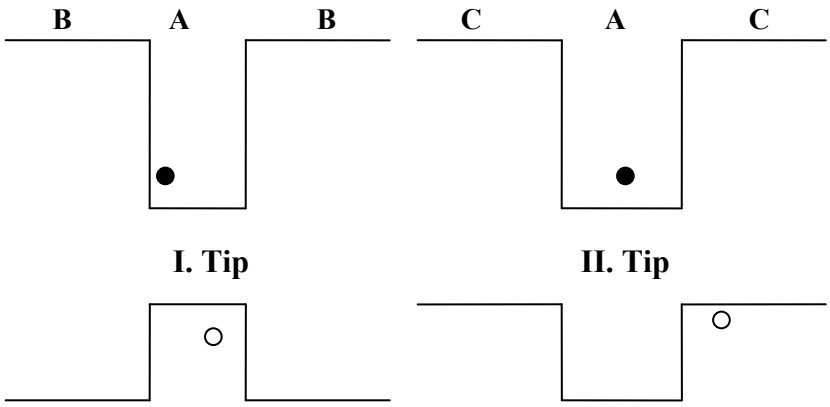
Şekil 2.2. İletim ve valans bandındaki bir boyutlu $V(z)$ potansiyeli.



Şekil 2.3.a. Tekli kuantum kuyusu **b.** Asimetrik basamaklı kuantum kuyusu.

Heteroyapılar, birden fazla heteroeklemin bir araya getirilmesinden oluşur. Şekil 2.3.a, dar band aralığına sahip bir A malzemesinin daha geniş band aralığına sahip iki B malzemesi arasına yerleştirildiği bir yapıyı göstermektedir. Bu yapı, iki heteroeklemin bir araya getirilmesinden oluşur ve tekli kuantum kuyusu olarak adlandırılır. Şekil 2.3.a ve b' deki koyu noktalar elektronları açık noktalar ise deşikleri göstermektedir. Çok sayıda yarıiletken tabaka kullanılarak farklı sınırlandırıcı potansiyele sahip heteroyapılar oluşturmak mümkündür. Şekil 2.3.b' de A ve B malzemeleri arasına bir alaşımın eklenmesiyle oluşturulmuş asimetrik basamaklı kuantum kuyusu görülmektedir. Tabaka sayısı artırılarak simetrik ve asimetrik çift kuantum kuyuları, çoklu kuantum kuyuları ve süperörgüler gibi daha kompleks yapıları oluşturmak da mümkündür. Çoklu kuantum kuyu ve süperörgü yapılar, etkileşme yönüyle, birbirlerine göre farklılık gösterirler. Çoklu kuantum kuyu yapılar, birbirlerinden izole edilmiş (yani etkileşmeyen) tekli kuantum kuyuların bir araya gelmesinden oluşurken süperörgü yapılar birbirleriyle etkileşen çok sayıdaki kuantum kuyudan oluşur (Harrison 2005).

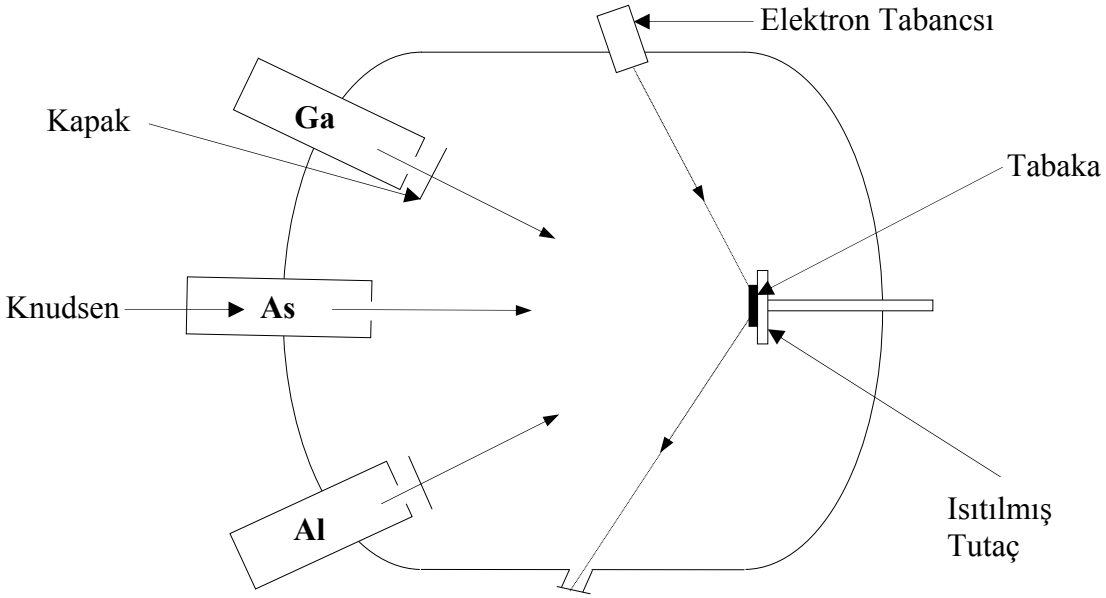
Yukarıda sözü edilen yapıların tamamı I. tip sistemlere örnektir. Bu tip sistemlerde, bir malzeme kendisinden daha geniş band aralığına sahip malzemeler arasına yerleştirilmiştir ve bunun sonucunda elektron ve deşik aynı tür malzeme



Şekil 2.4. I. ve II. tip kuantum kuyuları.

içerisinde sınırlandırılmıştır. Dolayısıyla bu tipteki bir heteroyapıda daha hızlı bir yeniden birleşme süreci gerçekleşir. II. tip sistemlerde ise A ve C malzemelerinin band aralıkları, iletim ve valans bandındaki kuantum kuyularının farklı malzemelerde oluşacağı şekilde düzenlenmiştir. Bu durum, elektron ve deşiklerin farklı yarıiletken tabakalarda sınırlandırılmasıyla sonuçlanır. Dolayısıyla bu tip heteroyapılardaki yeniden birleşme süreci, daha uzun zamanda gerçekleşir (Harrison 2005). Şekil 2.4' de her iki tipteki kuantum kuyuları görülmektedir.

Günümüzde bu tip heteroyapıları büyütmek için yaygın olarak kullanılan iki metod vardır. Bunlardan ilki moleküler ışın epitaksi (Molecular Beam Epitaxy, MBE) yöntemi, diğeri metal organik kimyasal buhar depozisyonu (Metal-Organic Chemical Vapour Deposition, MOCVD) dur. MBE yöntemi temelde oldukça basit bir metod olup bu cihazın basitleştirilmiş şeması Şekil 2.5' de görülmektedir. Heteroyapının büyütüleceği tabaka, yaklaşık olarak, 5×10^{-11} mbar basınç altında bir buharlaştırıcı içerisindeki ısıtılmış tutaç üzerine yerleştirilir. Heteroyapıyı oluşturan elementler (ki burada Ga, As ve Al olmak üzere), delikleri tabakaya bakan ocaklarda buharlaştırılır ve oluşan buhar kapaklar tarafından engellenir. Knudsen olarak adlandırılan ocaklardan çıkan moleküller, çarpışma yapmaksızın bir doğru boyunca ilerleyen moleküler bir demet oluşturur. Kapakların açılmasıyla birlikte büyütme süreci başlar ve her bir element akışı ocakların sıcaklığıyla kontrol edilir.



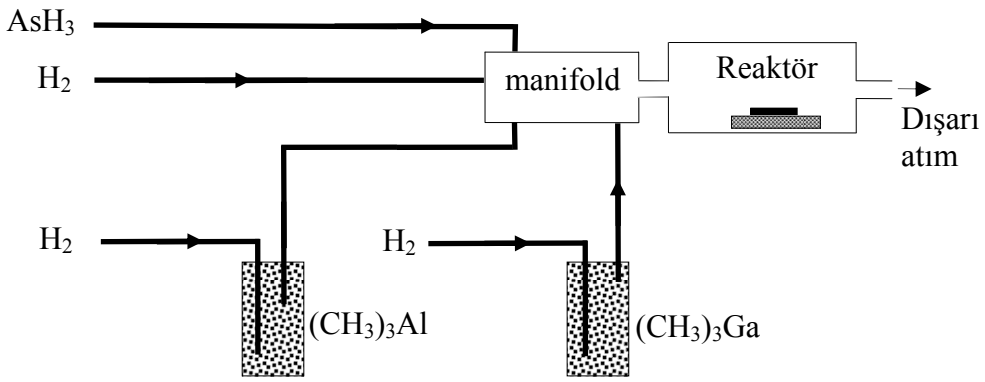
Şekil 2.5. MBE cihazı.

MBE yönteminin en önemli avantajı, bu yöntemi kullanarak farklı malzemeler arasında oldukça dik eklemlerin oluşturulabilmesidir. Ancak maliyeti, üretim için yeterince uygun olmaması ve yavaş bir süreç olması bu yöntemin en önemli dezavantajlarıdır.

Heteroyapıları büyütmek için kullanılan bir diğer metot da MOCVD' dur. MOCVD yöntemi, basitçe, Şekil 2.6' da gösterilmektedir. Şekilden de kolaylıkla görülebileceği gibi büyütülecek olan tabaka ısıtılmış blok üzerine yerleştirilmiştir ve gazların bileşimi büyütülen malzeme bileşimini kontrol edebilmek için hızlıca değiştirilebilir. GaAs' ın büyütülebilmesi için gereken temel kimyasal reaksiyon,

$$(CH_3)_3 Ga + AsH_3 \overset{650\ ^oc}{\rightarrow} GaAs \downarrow +3CH_4 \qquad (2.3)$$

şeklinde verilir.



Şekil 2.6. MOCVD reaktörünün basitleşmiş diyagramı.

MOCVD yöntemi, hem hızlı hem de ticari üretim açısından oldukça başarılı bir yöntemdir. Ancak, bu yöntemin kimyasal bir yöntem olmasından kaynaklanan ciddi güvenlik problemleri de mevcuttur (Davies 1999).

2.3. Yarıiletken Heteroyapıların Elektronik Yapısı

Yarıiletkenlerin elektronik yapı teorisi, farklı bandlardaki elektronlar için etkin kütle tanımına ve Γ noktası civarındaki elektronik dalga fonksiyonlarının Bloch fonksiyonları cinsinden ifade edilmesine olanak sağlar. Bu teori temelde dış etkileri içermeyen Pauli Hamiltoniyenine dayalıdır. Dolayısıyla bu teorinin, malzemedeki uzaysal değişimlerin Bloch fonksiyonlarında ve $V(\vec{r})$ kristal potansiyelinde değişimlere neden olduğu yarıiletken heteroyapılar için geçerli olmayacağı açıktır. Dış alanın etkileri göz önüne alındığında, Pauli Hamiltoniyeni fiziksel durumun doğru açıklamasını yapmakta başarısız olmakla birlikte bu Hamiltoniyeni kullanarak elde edilen sonuçların tümüyle yararsız olduğunu söylemekte yanlış olacaktır. Malzeme bileşimindeki değişimlerin ve dış alanın etkileri, ilgili Hamiltoniyene bir pertürbasyon terimi olarak ilave edilebilir. Bunun sonucunda yarıiletken kristal için elde edilen sonuçlar genel olarak eksiksiz bir formalizimle heteroyapılar içinde kullanılabilir.

2.3.1. Tek Band Zarf Fonksiyon Yaklaşımı

Bu yaklaşımdaki temel amaç, bir yarıiletken heteroyapıdaki tek band içerisindeki bir parçacığın (elektron ya da deşik) dalga fonksiyonu için bir ifade bulmaya çalışmaktır. Yarıiletken kristal malzemelerin elektronik yapı teorisinden farklı olarak bu yaklaşım, hem dış alanların etkilerini hem de malzeme bileşimindeki değişimlerin sonucunda ortaya çıkan etkileri içerir. Bu etkilerin sonucunda potansiyelde meydana gelen değişimi tam olarak tanımlamak için yarıiletken Hamiltoniyenine ilave bir terim eklemek gerekir. Bu etkilerin Pauli Hamiltoniyenine eklenmesi durumunda,

$$\hat{H} = \left\{ \frac{\hat{P}^2}{2m_*} + V(\vec{r}) + \phi(\vec{r}) \right\} = \hat{H}_0 + \phi(\vec{r}) \tag{2.4}$$

elde edilir. $V(\vec{r})$ kristal potansiyeli, aynı zamanda, spin-yörünge etkileşme terimini içermektedir. Hamiltoniyen ifadesindeki uzaysal olarak değişen $\phi(\vec{r})$ potansiyelinin varlığı, kristal simetrisini bozar ve bunun sonucunda yarıiletken malzemelerin Bloch fonksiyonları artık heteroyapı Hamiltoniyeninin çözümleri olmayacaktır. Eğer $\phi(\vec{r})$ potansiyeli H_0 Hamiltoniyenine bir pertürbasyon terimi olarak ilave edilirse, yapının dalga fonksiyonları Bloch fonksiyonları cinsinden yazılabilir:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = \sum_{m,\vec{k}} \chi_{m,\vec{k}}(\vec{r},t) \left| m,k \right\rangle . \tag{2.5}$$

Denk. (2.5)' deki Bloch fonksiyonları, $\left| m,k \right\rangle = u_{m\vec{k}}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})}$ şeklinde tanımlanır. Bu Hamiltoniyen ifadesi için ilgili Schrödinger denklemi,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi_{m,\vec{k}}(\vec{r},t) = \sum_{n',k'} \left\langle n,k \left| \hat{H}_0 + \phi(\vec{r}) \right| n',k' \right\rangle \chi_{n,\vec{k}}(\vec{r},t) \tag{2.6}$$

şeklinde yazılabilir. Bloch fonksiyonları Hamiltoniyenin pertürbe olmamış kısmını sağlar ve bu nedenle Denk. (2.6),

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi_{m,\vec{k}}(\vec{r},t)=E_m(\vec{k})\chi_{m,\vec{k}}(\vec{r},t)+\sum_{n',k'}\left\langle n,k\left|\phi(\vec{r})\right|n',k'\right\rangle\chi_{n,\vec{k}}(\vec{r},t) \tag{2.7}$$

haline gelir. Denk. (2.7)' deki Bloch fonksiyonları birim hücre üzerinden normalizedir. Denk. (2.7)' deki $\chi_n(\vec{r},t)$ açılım katsayıları zarf fonksiyonları olarak adlandırılır ve bu fonksiyonlar, $\phi(\vec{r})$ ölçeğinde Bloch fonksiyonlarını değiştirirler. Dolayısıyla eğer potansiyel konumun yavaş değişen bir fonksiyonuysa zarf fonksiyonları da aynı zamanda konumun yavaş değişen bir fonksiyonu olacaktır. $\phi(\vec{r})$ potansiyel fonksiyonu, Denk. (2.7)' deki ikinci terim vasıtasıyla yarıiletken bandların baz setlerini birbirleriyle ilişkilendirir. Eğer Bloch fonksiyonlarının bu ilişkisi sıfıra gitseydi bu durumda sadece zarf fonksiyonlarını içeren bir Schrödinger denklemi elde edilecek ve bu denklemde tekli izole edilmiş bir bandtaki tek bir parçacığın hareketini tanımlayacaktı. Bu durumda zarf fonksiyonları Bloch fonksiyonlarından bağımsız biçimde tanımlanabilir ve parçacıkların dalga fonksiyonları,

$$\psi(\vec{r},t)=\sum_{\vec{k}}\xi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\left|\vec{k}\right\rangle \tag{2.8}$$

ile verilen düzlem dalgalar biçiminde ifade edilebilir. Bu ifadedeki $\left|\vec{k}\right\rangle$ düzlem dalgaları gösterir ve $\left|\vec{k}\right\rangle=e^{i(\vec{k}.\vec{r})}$ şeklinde tanımlanır. Eğer zarf fonksiyonları kristal potansiyelini içermeyen bir Hamiltoniyeni,

$$\hat{H}=\frac{\hat{P}^2}{2m^*}+\phi(\vec{r}) \tag{2.9}$$

sağlarsa bu durumda ilgili Schrödinger denklemi,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k}'} \left\langle k \left| \frac{(-i\nabla)^2}{2m^*} + \phi(\vec{r}) \right| k' \right\rangle \xi_{\vec{k}'}(\vec{r},t) . \tag{2.10}$$

şeklinde yazılabilir. $\left|\vec{k}\right\rangle$' nın ortagonalliğinden dolayı bu denklem,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = E(\vec{k}) \xi_{\vec{k}}(\vec{r},t) + \sum_{\vec{k}'} \left\langle k \left| \phi(\vec{r}) \right| k' \right\rangle \xi_{\vec{k}'}(\vec{r},t) \tag{2.11}$$

ifadesine dönüşür. Denk. (2.7) ve (2.11) karşılaştırıldığında iki denklemin,

$$\left\langle n,k \left| \phi(\vec{r}) \right| n',k' \right\rangle = \left\langle k \left| \phi(\vec{r}) \right| k' \right\rangle \delta_{n,n'} \tag{2.12}$$

koşulu sağlanırsa özdeş olacağı açıktır. Denk. (2.12) zarf fonksiyon yaklaşımını tanımlayıcı bir bağıntı olup aynı zamanda yaklaşımın geçerlilik aralığını belirler. Denk. (2.12), zarf fonksiyon yaklaşımının tam olarak geçerli olabilmesi için, potansiyel nedeniyle $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ Bloch fonksiyonları arasında bir çiftlenim olmaması gerektiğini ifade eder. Denklemin sol tarafındaki terimler integral formunda yazılırsa çiftlenim daha iyi anlaşılabilir:

$$\left\langle n,k \left| \phi(\vec{r}) \right| n',k' \right\rangle = \int_V (dr)^3 u^*_{n\vec{k}}(\vec{r}) u_{n'\vec{k}'}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}) . \tag{2.13}$$

Bu denklemdeki integral, kristalin tüm hacmi üzerinden alınmalıdır. Bloch fonksiyonları kristal örgüyle aynı periyodikliğe sahip olduğundan kristal hacmi üzerinden herhangi bir integral, kristalin birim hücreleri üzerinden bir toplam olarak düşünülebilir. Bu durumda Denk. (2.13),

$$\left\langle n,k \left| \phi(\vec{r}) \right| n',k' \right\rangle = \sum_{\vec{R}} \int_{\Omega_{\vec{R}}} (dr)^3 u^*_{n\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) u_{n'\vec{k}'}(\vec{r}+\vec{R}) e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}+\vec{R}) \tag{2.14}$$

haline gelir. $\Omega_{\vec{R}}$, $\vec{R}$ noktasındaki birim hücrenin hacmini gösterir. $\vec{R}$ konum vektörü birim hücreleri indislemektedir. Göz önüne alınan $\vec{k}$ uzayının alanı Γ noktası civarındaki küçük bir bölgeye sınırlandırılmıştır ve bu nedenle $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$, $\vec{k}$' dan bağımsız olarak düşünülebilir. Dahası, $\phi(\vec{r})$ potansiyelide birim hücre içerisinde hemen hemen hiç değişmez ve sabit olarak kabul edilebilir (Bastard 1988). Tipik olarak birim hücrenin boyutu 5Å ve cihaz boyutlarıda mikron mertebelerindedir. Bu nedenle birim hücre boyunca potansiyelin değişimi genelde çok küçüktür ve potansiyel terimi integral dışına çıkarılabilir. *m* inci hücre için integral ifadesi,

$$\int_{\Omega_m}(dr)^3 u^*_{n\vec{k}}(\vec{r}_m)u_{n'\vec{k}'}(\vec{r}_m)e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_m}\phi(\vec{r}_m)\approx e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_m}\phi(\vec{r}_m)\int_{\Omega_{\vec{R}}}(dr)^3 u^*_{n\vec{k}}(\vec{r}_m)u_{n'\vec{k}'}(\vec{r}_m), \qquad (2.15)$$

ile verilir. Bloch fonksiyonları birim hücre boyunca ortogonal ve normalizedir. Bu nedenle, Denk. (2.15)' teki integral Dirac Delta fonksiyonu biçiminde yazılabilir:

$$\int_{\Omega_m}(dr)^3 u^*_{n\vec{k}}(\vec{r}_m)u_{n'\vec{k}'}(\vec{r}_m)e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_m}\phi(\vec{r}_m)\approx \delta_{n,n'}e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_m}\phi(\vec{r}_m). \qquad (2.16)$$

Bu ifade Denk. (2.13)' de yerine yazıldığında sonuç ifade,

$$\begin{aligned}\langle n,k|\phi(\vec{r})|n',k'\rangle &\approx \delta_{n,n'}\sum_m \phi(\vec{r}_m)e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_m}\\ &\approx \delta_{n,n'}\int_V (dr)^3\phi(\vec{r})e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} = \delta_{n,n'}\langle k|\phi(\vec{r})|k'\rangle\end{aligned} \qquad (2.17)$$

haline gelir. Bu denklem zarf fonksiyon yaklaşımının yukarıda verilen yaklaşımlar altında geçerli olduğunu göstermektedir. Çoğu III-V grubu malzeme için,

$$E_c(\vec{k}) = E_{c0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \qquad (2.18)$$

ile verilen enerji bandlarının parabolikliği sözkonusudur. Bu durumda Schrödinger denklemi,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\xi_{\vec{k}}(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2}\left[\nabla\cdot\frac{1}{m^*(\vec{r})}\nabla\xi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\right]+(E_{c0}+\phi(\vec{r}))\xi_{\vec{k}}(\vec{r},t) \tag{2.19}$$

şeklinde verilir. Burada zarf fonksiyon yaklaşımının sadece izole tek bir bant (iletim bandı) için geçerli olduğuna dikkat edilmelidir. Valans bandın göz önüne alındığı durumda deşik seviyelerini tam olarak tanımlayabilmek için baz seviyeleri arasındaki çiftlenim göz önüne alınmalıdır.

Heteroyapı dalga fonksiyonlarının zarf fonksiyonları cinsinden yazıldığı Hamiltoniyen ifadesi elde edildikten sonra, zarf fonksiyonlarının iki malzeme arasındaki arayüzeyde uyması gereken sınır koşullarının belirlenmesi gerekir. Ben-Daniel Duke modelinde Hamiltoniyen ifadesi (Bastard 1988),

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{m^*(z)}\frac{d}{dz}\right)+\phi(z)\right)\psi(z)=E\psi(z) \tag{2.20}$$

şeklinde tanımlanır. Bu ifadedeki zarf fonksiyonları herhangi bir arayüzeyde aşağıda verilen sınır şartlarını sağlamak zorundadır:

$$\begin{aligned}\psi(z_l)&=\psi(z_r)\\ \frac{1}{m_l^*}\psi'(z_l)&=\frac{1}{m_r^*}\psi'(z_r)\,.\end{aligned} \tag{2.21}$$

Denk. (2.21), hem dalga fonksiyonlarının hem de dalga fonksiyonlarının etkin kütleye bölünmüş birinci türevlerinin arayüzeylerde sürekli olması gerektiğini ifade eder. Burada dikkat edilmesi gereken önemli bir nokta, zarf fonksiyon yaklaşımı $\phi(\vec{r})$ potansiyel fonksiyonunun konumla yavaş değiştiği durum için türetilmesine rağmen, bu yaklaşım keskin arayüzeyler için de oldukça başarılı sonuçlar vermektedir (Bastard 1988).

3. NL OPTİK

3.1. Giriş

Bu bölümde, genel olarak NL optiksel alınganlıkların kuantum mekaniksel teorisiyle ilgilenilecektir. NL optiksel alınganlıkların açık ifadelerini elde etmek için kuantum mekaniğinin temel prensiplerinden faydalanılacaktır. Alınganlık ifadelerinin elde edilmesi iki açıdan oldukça önemlidir. İlk olarak, bu ifadeler alınganlığın fonksiyonel biçimini gösterir ve bu fonksiyonel ifadelerden yararlanılarak alınganlıkların dipol matris elemanları ve atomik enerji seviyeleri gibi parametrelere bağlılığı kolaylıkla anlaşılabilir. İkinci olarak, bu ifadeler NL alınganlıkların nümerik değerlerini elde etmek için de kullanılabilir. Bu bölümde, ikinci ve üçüncü mertebe alınganlıklar için açık ifadeler, genel *n* seviyeli kuantum mekaniksel bir sistem için, elde edilecektir.

3.2. NL Optiksel Süreçlerin Tanımları

NL optikte, temel olarak ışığın etkisiyle malzemenin optiksel özelliklerinin değişmesi sonucunda ortaya çıkan olguyla ilgilenilir. Sadece lazer ışığı bir malzemenin optik özelliklerini önemli ölçüde değiştirebilir. NL optik kavramı, uygulanan alan kuvvetine malzeme tepkisinin NL biçimde bağlı olmasından ortaya çıkmıştır.

NL optiksel özellikleri tam olarak tanımlayabilmek için bir malzemeye uygulanan optiksel alan kuvveti $\boldsymbol{E}(t)$ ile malzemede oluşan $\boldsymbol{P}(t)$ kutuplanması arasındaki ilişkiden faydalanılır. Lineer optikte bu ilişki,

$$\boldsymbol{P}(t) = \chi^{(1)}\, \boldsymbol{E}(t) \tag{3.1}$$

şeklinde tanımlanır. Bu ifadedeki $\chi^{(1)}$ sabiti, lineer alınganlık olarak adlandırılır. NL optikte ise bu ilişki,

$$\boldsymbol{P}(t) = \chi^{(1)}\,\boldsymbol{E}(t) + \chi^{(2)}\,\boldsymbol{E}^2(t) + \chi^{(3)}\,\boldsymbol{E}^3(t) + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots...$$
$$\cong \boldsymbol{P}^{(1)}(t) + \boldsymbol{P}^{(2)}(t) + \boldsymbol{P}^{(3)}(t) + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (3.2)$$

şeklinde verilir. Bu ifadede, $\chi^{(2)}$ ve $\chi^{(3)}$ sırasıyla ikinci ve üçüncü mertebe NL alınganlıkları gösterir.

Burada dikkat edilmesi gereken önemli bir nokta Denk. (3.1) ve (3.2)'yi yazarken bazı kabullerin yapılmış olmasıdır (Bloembergen 1996, Boyd 2003, Shen 2003). Bu kabüller :

i) $\boldsymbol{P}(t)$ ve $\boldsymbol{E}(t)$, skaler nicelikler olarak kabul edilmiştir. Bu durumda alınganlıklar birer sabite dönüşür.

ii) Herhangi bir t anındaki kutuplanma, elektrik alan kuvvetinin sadece o andaki değerine bağlıdır.

iii) Anlık tepki yaklaşımı, ortamın kayıpsız ve dispersiyonsuz olduğu anlamına gelir.

iv) Genellikle NL alınganlıklar, uygulanan alan frekansına bağlı olmakla birlikte anlık tepki yaklaşımı göz önüne alındığında alınganlıklar frekanstan bağımsız hale gelirler.

Uygulanan alanın monokromatik yani,

$$\boldsymbol{E}(t) = E\cos\omega t \quad (3.3)$$

ile verildiği bir durum için, kutuplanma ifadesi,

$$P(t) = \frac{1}{2}\chi^{(2)}E^2 + \left(\chi^{(1)}E + \frac{3}{4}\chi^{(3)}E^3\right)\cos\omega t + \frac{1}{2}\chi^{(2)}E^2\cos 2\omega t + \frac{1}{4}\chi^{(3)}E^3\cos 3\omega t \quad (3.4)$$

şeklinde yazılır.

Denk. (3.4)'deki ilk terim frekanstan bağımsız olup malzeme içerisinde statik bir alan oluşturur. Bu süreç, *optiksel doğrultma* (Optical Rectification-OR) olarak adlandırılır. Denk. (3.4)'deki parantez içerisindeki terim, uygulanan alanın frekans

değerine eşit frekansta bir katkıyı gösterir ve bu terim, kırılma indisine NL bir katkı verir. Denk. (3.4)'deki üçüncü terim uygulanan alanın frekans değerinin iki katı büyüklüğünde frekansa sahip bir radyasyon üretimine neden olur. Bu süreç ise *ikinci harmonik üretimi* (Second Harmonic Generation-SHG) olarak adlandırılır. Denk. (3.4)'deki son terim ise uygulanan alan frekansının üç katı büyüklüğünde frekansa sahip bir radyasyonu tanımlar ve bu süreç, *üçüncü harmonik üretimi* (Third Harmonic Generation-THG) olarak adlandırılır (Bloembergen 1996, Boyd 2003, Shen 2003).

3.3. Kuantum Mekaniğinin Yoğunluk Matris Formalizmi

Bu bölümde, kuantum mekaniğinin yoğunluk matris formalizmini kullanarak, NL optiksel alınganlıklar için ifadeler elde edilecektir. Kuantum mekaniğinde, *s* durumundaki bir sistemin fiziksel özelliklerinin tümü $\psi_s(r,t)$ dalga fonksiyonuyla tanımlanır ve bu dalga fonksiyonu,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_s(r,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi_s(r,t) \tag{3.5}$$

ifadesi ile verilen Schrödinger denklemini sağlar. Denk. (3.5)'deki $\psi_s(r,t)$ dalga fonksiyonu, baz fonksiyonları cinsinden,

$$\psi_s(r,t) = \sum_n C_n^s(t) u_n(r) \tag{3.6}$$

şeklinde yazılabilir. Bu denklemdeki $C_n^s(t)$ açılım katsayısı, *s* seviyesinde olduğu bilinen bir atomun, *t* zamanında *n* inci enerji seviyesinde bulunma olasılık genliğini verir. Denk. (3.6), Denk. (3.5)'de yerine yazılırsa,

$$i\hbar \sum_n \frac{dC_n^s(t)}{dt} u_n(r) = \sum_n C_n^s(t) \hat{H} u_n(r) \tag{3.7}$$

denklemi elde edilir. Bu ifadenin her iki tarafı $u_m^*(r)$ ile çarpılıp tüm uzay üzerinden integre edildiğinde, $H_{mn} = \int u_m^*(r)\hat{H}u_n(r)d^3r$ olmak üzere,

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_m^s(t) = \sum_n H_{mn} C_n^s(t) \tag{3.8}$$

ifadesi bulunur.

Kuantum mekaniğinden bilindiği gibi, herhangi bir gözlenebilir niceliğin beklenen değeri, sistemin dalga fonksiyonu kullanılarak hesaplanabilir. Kuantum mekaniğinin temel postülası, herhangi bir *A* gözlenebilir niceliğine bir Hermityen $\hat{A}$ operatörünün karşılık geldiğini ifade eder. Bu durumda *A* gözlenebilir niceliğinin beklenen değeri,

$$\langle A \rangle = \int \psi_s^* \hat{A} \psi_s d^3r \tag{3.9}$$

şeklinde tanımlanır. Bu ifade açılım katsayılarına bağlı olarak, $A_{mn} = \langle u_m | \hat{A} | u_n \rangle$ olmak üzere,

$$\langle A \rangle = \sum_{mn} C_m^{s*} C_n^s A_{mn} \tag{3.10}$$

şeklinde yazılabilir.

Eğer sistemin başlangıç seviyesi ve sistemle ilgili Hamiltoniyen operatörü bilinirse, yukarıda tanımlanan formalizm, sistemin gözlenebilirlerinin tümünün zamanla değişimini tam olarak tanımlar. Bununla birlikte, sistemin tam durumunun bilinmediği bazı durumlarda, yoğunluk matris formalizmi sistemi istatistiksel anlamda tanımlamak için kullanılabilir.

Sistemin *s* seviyesinde bulunma olasılığını $p(s)$ ile gösterelim. Bu nicelik kuantum mekaniksel olasılıktan ziyade klasik olasılık olarak kabul edilebilir.

Gerçekte $p(s)$, sistemin kuantum mekaniksel durumu ile ilgili bilgi eksikliğini göstermektedir. Bu durumda, sistemin yoğunluk matris elemanları,

$$\rho_{nm} = \sum_s p(s) C_m^{s*} C_n^s \tag{3.11}$$

ile tanımlanır. Bu ilişki sembolik olarak,

$$\rho_{nm} = \overline{C_m^* C_n} \tag{3.12}$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifadedeki üst çizgi, sistemin olası tüm durumları üzerinden bir ortalamayı yani topluluk ortalamasını göstermektedir.

Yoğunluk matris formalizmi, herhangi bir gözlenebilir niceliğin beklenen değerini hesaplamak için kolaylıkla kullanılabilir. Sistemin tam durumunun bilinmediği hallerde beklenen değer, sistemin tüm olası durumları üzerinden ortalama alınarak elde edilebilir,

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_s p(s) \sum_{nm} C_m^{s*} C_n^s A_{mn} \ . \tag{3.13}$$

Bu ifade, Denk. (3.11)'de verilen tanım göz önüne alınarak,

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_{nm} \rho_{nm} A_{mn} = tr(\hat{\rho}\hat{A}) \tag{3.14}$$

şeklinde yazılabilir. Denk. (3.11)'in zamana göre türevi alınırsa,

$$\dot{\rho}_{nm} = \sum_s \frac{dp(s)}{dt} C_m^{s*} C_n^s + \sum_s p(s) \left(C_m^{s*} \frac{dC_n^s}{dt} + \frac{dC_m^{s*}}{dt} C_n^s \right) \tag{3.15}$$

ifadesi elde edilir. Bu ifadede $p(s)$'nin zamanla değişmediği kabul edilirse, denklemdeki ilk terim sıfır olur. Ayrıca olasılık genliklerinin zamanla değişimi için Schrödinger denklemi kullanılırsa, bu denklem,

$$\dot{\rho}_{nm} = \sum_s p(s) \frac{i}{\hbar} \sum_\nu (C_n^s C_\nu^{s*} H_{\nu m} - C_m^{s*} C_\nu^s H_{n\nu}) \tag{3.16}$$

haline gelir. Denk. (3.11) ile verilen yoğunluk matrisinin tanımı göz önüne alınarak, Denk.(3.16)'dan,

$$\dot{\rho}_{nm} = \frac{i}{\hbar} (\hat{\rho}\hat{H} - \hat{H}\hat{\rho})_{nm} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]_{nm} \tag{3.17}$$

denklemi elde edilir. Bu denklemdeki $\hat{H}$ Hamiltoniyen operatörü, $\hat{H}_0$ pertürbe olmamış Hamiltoniyen ile $\hat{H}_{\text{int}}$ etkileşme Hamiltoniyenin toplamından oluşur. Bu durumda yoğunluk matris operatörü Lioville denklemi olarak bilinen,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}, \hat{\rho}\right]_{nm} \tag{3.18}$$

hareket denklemini sağlar. Denk. (3.18), etkileşmelerin sonucunda yoğunluk matrisinin zamanla nasıl değiştiğini tanımlar. Bununla birlikte, yukarıdaki formalizimde hala göz önüne alınmayan bazı etkileşmeler vardır. Buna örnek olarak, atomlar arası çarpışmalardan kaynaklanan etkileşmeler verilebilir. Bu tür etkileşmeler, sistemin durumunda bir değişime ve $dp(s)/dt$'nin sıfırdan farklı olmasına neden olur. Yukarıdaki formalizme, böylesi etkiler, Denk. (3.18)'e doğrudan bir sönüm terimi eklenerek dahil edilebilir. Bu durumda hareket denklemi,

$$\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[H_0 + H_{\text{int}}, \rho\right]_{nm} - \Gamma_{nm} (\rho_{nm} - \rho_{nm}^{(eq)}) \tag{3.19}$$

haline gelir. Bu denklemde, Γ_{nm}, $|n\rangle$ ve $|m\rangle$ seviyeleri arasındaki bozulma hızı olup $\Gamma_{nm} = \Gamma_{mn}$ olduğu kabul edilmiştir. $\rho_{nm}^{(eq)}$ ise yoğunluk matrisinin termal dengedeki değerini göstermektedir.

3.3.1. Yoğunluk Matris Denkleminin Pertürbasyon Çözümü

İlgilendiğimiz fiziksel sistemler için Denk. (3.19)'un analitik bir çözümü yoktur ve bundan dolayı, bu denklemi çözmek amacıyla pertürbasyon tekniğinden faydalanılır. Denk. (3.19)'daki etkileşme Hamiltoniyeni elektrik dipol yaklaşımı kullanılarak,

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\hat{\mu} \cdot \boldsymbol{E}(\text{t}) \tag{3.20}$$

ifadesiyle tanımlanabilir. Bu ifadedeki $\hat{\mu} = (-er)$, elektrik dipol moment operatörünü göstermektedir. Denk. (3.19) yeniden düzenlenirse,

$$\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = -i\omega_{nm}\rho_{nm} + \frac{1}{i\hbar}\sum_{\nu}\{(H_{\text{int}})_{n\nu}\rho_{\nu m} - \rho_{n\nu}(H_{\text{int}})_{\nu m}\} - \Gamma_{nm}(\rho_{nm} - \rho_{nm}^{eq}) \tag{3.21}$$

ifadesi elde edilir. Bu denklemin pertürbasyon çözümünü elde etmek için denklemdeki H_{int} terimi λH_{int}'le değiştirilir. λ parametresi pertürbasyon kuvvetini belirleyen bir parametre olup bu parametre 0 ile 1 arasında değer alır. λ=1 değeri gerçek fiziksel duruma karşılık gelir. Denk. (3.21)'in λ'nın kuvvet serisi cinsinden bir çözümünün olduğunu ve bu çözümün,

$$\rho_{nm} = \rho_{nm}^{(0)} + \lambda\,\rho_{nm}^{(1)} + \lambda^2\,\rho_{nm}^{(2)} + \ldots\ldots\ldots\ldots \tag{3.22}$$

şeklinde verildiğini kabul edelim. Eğer Denk. (3.22), Denk (3.21)'in bir çözümüyse, bu durumda λ' nın her bir kuvvetinin önündeki katsayılar birbirine eşit olmak zorundadır. Buradan yola çıkarak

$$\frac{\partial \rho_{nm}^{(0)}}{\partial t} = -i\omega_{nm}\rho_{nm}^{(0)} - \Gamma_{nm}(\rho_{nm}^{(0)} - \rho_{nm}^{(eq)}), \tag{3.23}$$

$$\frac{\partial \rho_{nm}^{(1)}}{\partial t} = -(i\omega_{nm} + \Gamma_{nm})\rho_{nm}^{(1)} + \frac{1}{i\hbar}\left[H_{\text{int}}, \rho^{(0)}\right]_{nm}, \tag{3.24}$$

$$\frac{\partial \rho_{nm}^{(2)}}{\partial t} = -(i\omega_{nm} + \Gamma_{nm})\rho_{nm}^{(2)} + \frac{1}{i\hbar}\left[H_{\text{int}}, \rho^{(1)}\right]_{nm}, \tag{3.25}$$

denklemler kümesi elde edilir. Bu denklemler kümesi, çiftlenimli lineer diferansiyel denklemlerden oluşur ve $\rho_{nm}^{(0)}$ elde edildiğinde, herhangi *k* ıncı mertebe $\rho_{nm}^{(k)}$ da belirlenebilir. Denk. (3.23)' ün kararlı durum çözümü,

$$\rho_{nm}^{(0)} = \rho_{nm}^{(eq)} \tag{3.26}$$

şeklinde alınabilir. Denk. (3.24)'ün integrali alındığında,

$$\rho_{nm}^{(1)} = \int_{-\infty}^{t} \frac{1}{i\hbar}[H_{\text{int}}(t'), \rho^{(0)}]_{nm}\, e^{\{(i\omega_{nm}+\Gamma_{nm})(t'-t)\}} dt' \tag{3.27}$$

elde edilir. Benzer biçimde, daha yüksek mertebeden terimlerde elde edilebilir. Yoğunluk matris denklemlerinin ilk uygulaması olarak, lineer alınganlık terimi hesaplanacaktır. Uygulanan alanın,

$$E(t) = \sum_{p} E(\omega_p) e^{-i\omega_p t} \tag{3.28}$$

ifadesiyle verildiği bir durum için, Denk. (3.20), (3.27) ve (3.28)'i kullanarak $\rho_{nm}^{(1)}$ için,

$$\rho_{nm}^{(1)}(t) = (\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)}) \sum_{p} \frac{\mu_{nm} \cdot E(\omega_p) e^{-i\omega_p t}}{\hbar[(\omega_{nm} - \omega_p) - i\Gamma_{nm}]} \tag{3.29}$$

ifadesi elde edilir. $\rho_{nm}^{(1)}$ için elde edilen bu ifadeyi kullanarak daha yüksek mertebe terimleri elde etmek mümkündür. Malzemede oluşan kutuplanmanın, $P = N\langle \mu \rangle$ olduğu göz önüne alındığında lineer kutuplanma terimi için,

$$P^{(1)} = N \cdot tr(\rho^{(1)} \mu) \tag{3.30}$$

ifadesi yazılabilir. Denk (3.30) ve $P^{(1)} = \chi^{(1)} E$ ilişkisi kullanılırsa lineer alınganlık için,

$$\chi_{ij}^{(1)}(\omega_p) = N \sum_{nm} (\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)}) \frac{\mu_{mn}^{i} \mu_{nm}^{j}}{\hbar[\omega_{nm} - \omega_p - i\Gamma_{nm}]} \tag{3.31}$$

eşitliği elde edilir. Benzer biçimde ikinci ve üçüncü mertebe NL alınganlıklarda kolaylıkla elde edilebilir (Boyd 2003). Gerekli ara işlemler yapıldığında elde edilen sonuç ifadeler,

$$\begin{aligned}
\chi_{ijk}^{(2)}(\omega_p + \omega_q, \omega_q, \omega_p) &= \frac{N}{2\hbar^2} \sum_{mn\nu} (\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{\nu\nu}^{(0)}) \\
&\times \left\{ \frac{\mu_{mn}^{i} \mu_{n\nu}^{j} \mu_{\nu m}^{k}}{[(\omega_{nm} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{nm}][(\omega_{\nu m} - \omega_p) - i\Gamma_{\nu m}]} \right. \\
&+ \frac{\mu_{mn}^{i} \mu_{n\nu}^{k} \mu_{\nu m}^{j}}{[(\omega_{nm} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{nm}][(\omega_{\nu m} - \omega_q) - i\Gamma_{\nu m}]} \\
&- \frac{\mu_{n\nu}^{i} \mu_{mn}^{j} \mu_{\nu m}^{k}}{[(\omega_{\nu n} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{\nu n}][(\omega_{\nu m} - \omega_p) - i\Gamma_{\nu m}]} \\
&\left. - \frac{\mu_{n\nu}^{i} \mu_{mn}^{k} \mu_{\nu m}^{j}}{[(\omega_{\nu n} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{\nu n}][(\omega_{\nu m} - \omega_q) - i\Gamma_{\nu m}]} \right.
\end{aligned} \tag{3.32}$$

$$\chi^{(3)}_{kjih}(\omega_p+\omega_q+\omega_r,\omega_r,\omega_q,\omega_p)=\frac{N}{\hbar^3}P_I$$
$$\times\sum_{nm\nu l}\{(\rho^{(0)}_{mm}-\rho^{(0)}_{ll})$$
$$\times\frac{\mu^k_{mn}\mu^j_{n\upsilon}\mu^i_{\upsilon l}\mu^h_{lm}}{[(\omega_{nm}-\omega_p-\omega_q-\omega_r)-i\Gamma_{nm}][(\omega_{\nu m}-\omega_p-\omega_q)-i\Gamma_{\nu m}][(\omega_{lm}-\omega_p)-i\Gamma_{lm}]}$$
$$-(\rho^{(0)}_{ll}-\rho^{(0)}_{\nu\nu})$$
$$\times\frac{\mu^k_{mn}\mu^j_{n\upsilon}\mu^i_{lm}\mu^h_{\nu l}}{[(\omega_{nm}-\omega_p-\omega_q-\omega_r)-i\Gamma_{nm}][(\omega_{\nu m}-\omega_p-\omega_q)-i\Gamma_{\nu m}][(\omega_{\nu l}-\omega_p)-i\Gamma_{\nu l}]}$$
$$-(\rho^{(0)}_{\nu\nu}-\rho^{(0)}_{ll})$$
$$\times\frac{\mu^k_{mn}\mu^j_{\nu m}\mu^i_{nl}\mu^h_{l\nu}}{[(\omega_{nm}-\omega_p-\omega_q-\omega_r)-i\Gamma_{nm}][(\omega_{n\nu}-\omega_p-\omega_q)-i\Gamma_{n\nu}][(\omega_{l\nu}-\omega_p)-i\Gamma_{l\nu}]}$$
$$+(\rho^{(0)}_{ll}-\rho^{(0)}_{nn})$$
$$\times\frac{\mu^k_{mn}\mu^j_{\nu m}\mu^i_{l\nu}\mu^h_{nl}}{[(\omega_{nm}-\omega_p-\omega_q-\omega_r)-i\Gamma_{nm}][(\omega_{n\nu}-\omega_p-\omega_q)-i\Gamma_{n\nu}][(\omega_{nl}-\omega_p)-i\Gamma_{nl}]} \qquad (3.33)$$

olarak bulunur. Denk. (3.33)'deki P_I, permütasyon operatörünü göstermektedir ve $\omega_p,\omega_q,\omega_r$ giriş frekanslarının tüm olası permütasyonları üzerinden ortalama alındığını ifade eder. Giriş frekansıyla birlikte *h*, *j*, *i* indisleri de aynı zamanda permütasyona uğrarlar. Bu alınganlık ifadeleri kullanılarak, farklı sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum kuyularının NL optik özellikleri kolaylıkla hesaplanabilir. Daha sonraki bölümlerde bu hesaplamalar yapılacaktır.

4. İKİNCİ MERTEBE NL OPTİKSEL SÜREÇLER

4.1. Giriş

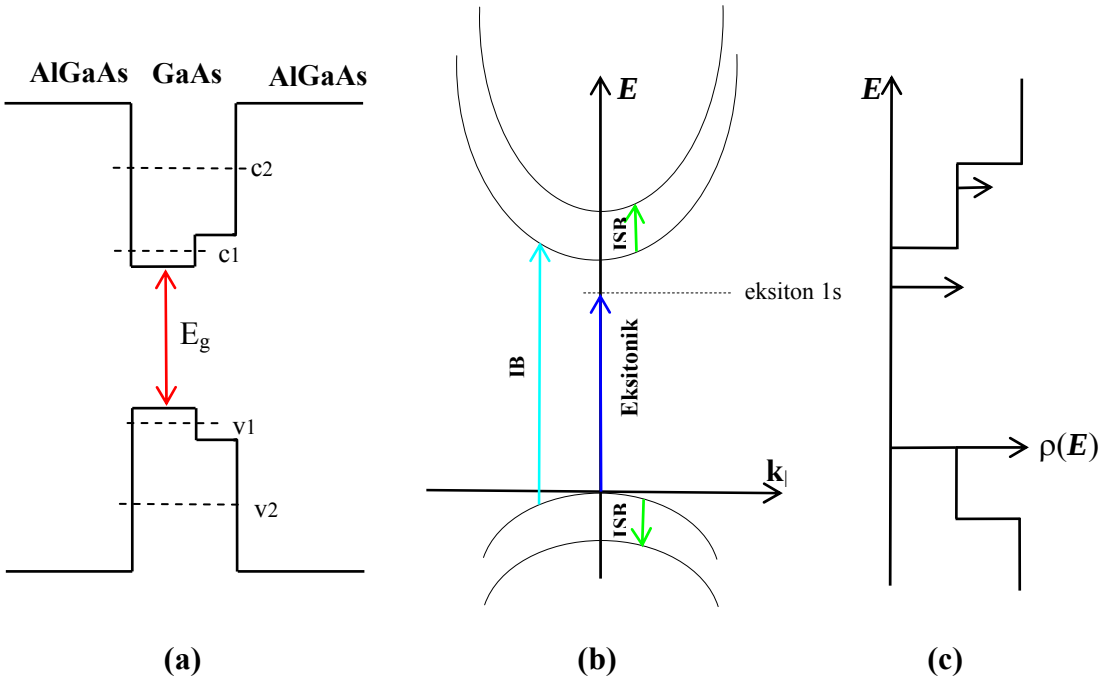
Bu bölümde, öncelikle, ikinci mertebe NL optiksel süreçlerle ilgili geçmişte ve günümüzde yapılan çalışmalardan kısaca bahsedilecek, daha sonra, yoğunluk matris formalizmi kullanılarak yarıiletken kuantum kuyularındaki SHG ve OR gibi ikinci mertebe süreçler için açık ifadeler verilecektir.

4.2. Kuantum Kuyularındaki İkinci Mertebe NL Optiksel Süreçler

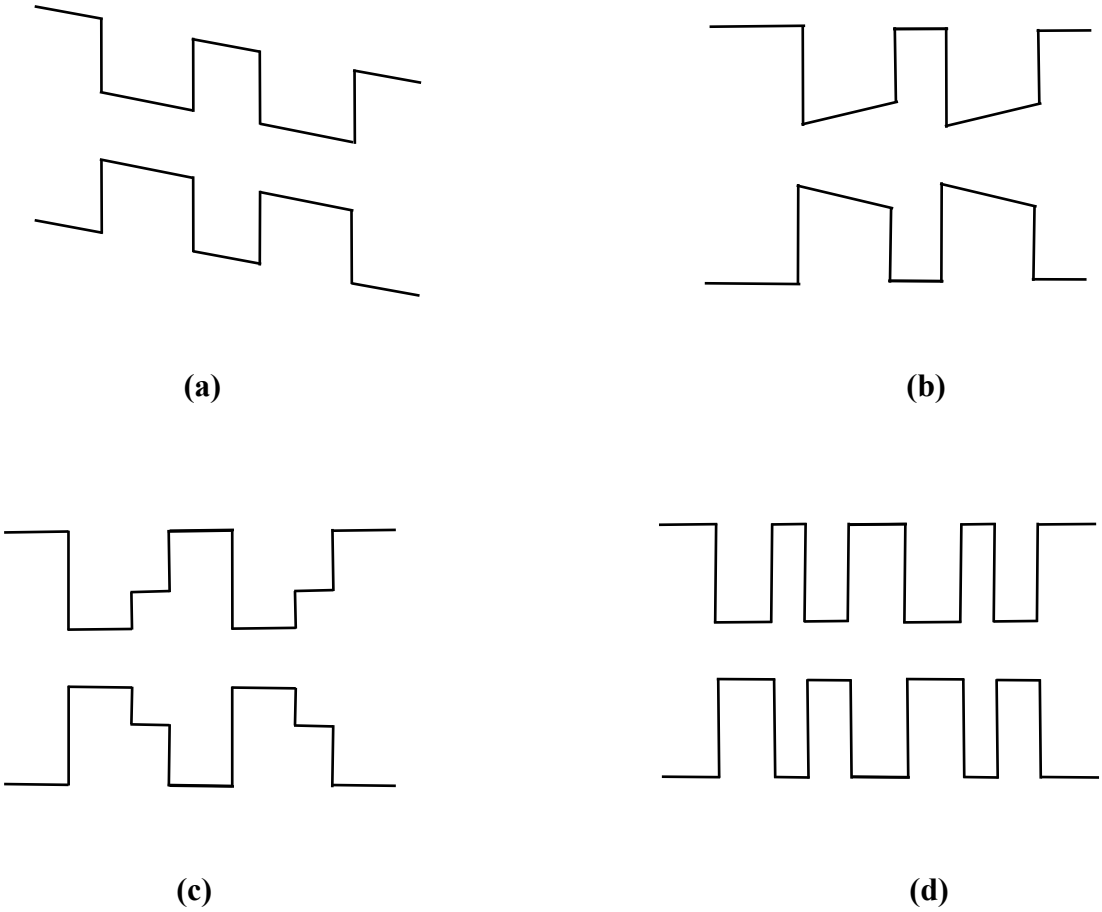
Bölüm 3' de, ikinci mertebe alınganlıkların, dipol matris elemanlarının kübüyle orantılı olduğu görülmüştü. Bu matris elemanlarının değerleri yapı büyüklüğüyle doğrudan ilişkili olduğundan, yapının büyüklüğünü artırarak büyük NL alınganlıklar elde etmek mümkündür. Bu amaçla başlangıçta oldukça büyük polimer malzemeler kullanılmasına rağmen polimer tabanlı optiksel cihazları geleneksel optoelektronik cihazlarla tümleştirmenin mümkün olmaması nedeniyle bu yöndeki araştırmalar farklı alanlara kaydırıldı. 1970'li yılların sonlarına doğru yarıiletken büyütme tekniklerinde yaşanan önemli gelişmelerin sonucunda kuantum kuyuları gibi eşsiz elektronik ve optik özelliklere sahip düşük boyutlu yarıiletken malzemeler üretildi (Weisbuch ve Vinter 1991). Şekil 4.1.a 'da görülen bir asimetrik GaAs/AlGaAs basamaklı kuantum kuyusunun iletim ve valans bandı içerisindeki taşıyıcılar, yüksek band aralıklı bir AlGaAs malzemesinden oluşturulan bariyerlerle çevrili daha düşük band aralıklı GaAs içerisinde sınırlandırılmıştır. Bir kuantum kuyusunun sınırlandırıcı potansiyel profili, kuantum telleri ve kuantum noktaları gibi diğer düşük boyutlu yapıların potansiyel profilleriyle karşılaştırıldığında, daha kolay kontrol edilebilir. Bu sınırlandırıcı potansiyelin etkisiyle kuantum kuyularındaki durum yoğunluğu Şekil 4.1.c'de gösterildiği gibi basamaklı hale gelir ve bunun sonucunda da soğurma spektrumu önemli ölçüde değişir. Gerçekte bu tür değişimlerin asıl nedeni, kuantum kuyularının büyütme doğrultusu boyunca öteleme

simetrisinin olmamasıdır. Bu durum, kuantum kuyularında, bandlar arası (IB), eksitonik ve altbandlar arası (ISB) geçişleri izinli hale getirir (Khurgin 1999).

Etkin kütle yaklaşımı göz önüne alındığında, sadece *z* doğrultusu boyunca kutuplu elektromanyetik radyasyon, iletim bandı içerisindeki ISB geçişlerine neden olabilir (Allen *ve ark.* 1976). Ancak, bu konuyla ilgili daha ayrıntılı hesaplamalardan, düzlemde kutuplu radyasyondan kaynaklanan geçişlerin de tamamen yasak olmamalarına rağmen bu tür geçişlerin şiddetinin, *z* doğrultusu boyunca kutuplu geçişlerin şiddetiyle karşılaştırıldığında çok küçük olduğu görülmektedir. ISB geçiş dipol matris elemanlarının büyüklükleri kuyu genişliğiyle aynı mertebede olup IB matris elemanlarının değerlerinden birkaç kat daha büyüktür. Temelde bu iki geçiş türü için alınganlık değerleri arasındaki fark, matris elemanlarının büyüklüklerinden değil ISB geçiş enerjilerinin IB geçiş enerjilerinden çok daha küçük olmasından kaynaklanır (Rosencher *ve ark.* 1996).



Şekil. 4.1. Yarıiletken kuantum kuyuları: **a.** band yapısı, **b.** düzlemde dispersiyon ve optiksel geçişler, **c.** durum yoğunluğu.



Şekil 4.2. Asimetrik yarıiletken kuantum kuyuları: **a.** elektrik alan etkisindeki kuantum kuyu, **b.** eğimli band aralığına sahip kuantum kuyu, **c.** basamaklı kuantum kuyu ve **d.** asimetrik çift kuantum kuyu.

Simetrik kuantum kuyularındaki optik geçişler için seçim kuralları son derece basittir. Zarf fonksiyonlarının örtüşmesiyle orantılı IB geçişleri sadece aynı parite durumuna sahip seviyeler arasında izinliyken ISB dipol matris elemanlarıyla orantılı geçişler, sadece, zıt pariteli seviyeler arasında mümkündür. Doğal olarak ISB geçişlerinden kaynaklanan sıfırdan farklı ikinci mertebe alınganlıklar elde etmek simetrik kuantum kuyularında mümkün değildir. Bu nedenle büyük ikinci mertebe alınganlıklar elde etmek için sınırlandırıcı potansiyelin simetrisinin bozulması gerekir. Potansiyel profilindeki asimetri, ya dışarıdan bir elektrik alan uygulanarak ya da içsel olarak asimetrinin çeşitli formlarına sahip yapılar büyütülerek elde

edilebilir. Şekil 4.2'de çeşitli yollardan elde edilmiş asimetrik kuantum kuyu yapıları görülmektedir.

ISB geçişlerin dipol matris elemanları IB dipol matris elemanlarından çok daha büyük olduğundan ISB geçişleriyle ilişkili ikinci mertebe optiksel alınganlıklar IB geçişleriyle ilişkili alınganlıklardan çok daha büyük olacaktır. Bu durum ilk olarak, Gurnick ve DeTemple (1983) tarafından bir asimetrik Morse potansiyeli için ortaya atıldı ve bu potansiyelin yarıiletken malzemeninkinden 10-100 kat daha büyük bir alınganlığa sahip olduğu görüldü. Khurgin (1989) deneysel olarak üretilebilir asimetrik kuantum kuyu yapılarında SHG, lineer elektro-optik etki (LEOE) ve OR gibi ikinci mertebe süreçlerin kuantum kuyu boyutlarına ve yapı bileşimlerine bağlılıklarını inceledi. İkinci mertebe alınganlıkların ilk deneysel gözlemi, Fejer *ve ark.* (1989) tarafından elektrik alan etkisi altındaki GaAs/AlGaAs kuantum kuyusu için gerçekleştirildi ve GaAs'ın alınganlık değerinin 73 kat büyüklüğünde bir SHG katsayısı elde edildi. Bu çalışmanın ardından Rosencher *ve ark.* (1989) tarafından bir basamaklı asimetrik GaAs/AlGaAs kuantum kuyusunda SHG katsayısının değeri 760 nm/V olarak hesaplandı. Aynı yapı için SHG katsayısının değeri 720 nm/V olarak ölçüldü (Boucaud *ve ark.* 1990). Sirtori *ve ark.* (1991) tarafından NL optiksel uygulamalar için bir AlGaAs/GaInAs asimetrik çift kuantum kuyu modeli göz önüne alındı ve bu modelde 48 nm/V değerinde bir SHG katsayısı elde edildi. Bu çalışmalara ilaveten ikinci mertebe optiksel süreçlere uygulanan dış alanın etkileriyle ilgili de çok sayıda çalışma yapıldı (Tsang *ve ark.* 1988, Tsang *ve ark.* 1990, Dave 1994, Huang *ve ark.* 1995, Liu *ve ark.* 2000, Zhang ve Xie 2003, Wang 2005). Daha sonraki yıllarda, band aralık mühendisliğine dayalı olarak ikinci mertebe alınganlıkların optimizasyonu ile ilgili de çeşitli çalışmalar yapıldı (Rosencher ve Bois 1991, Almogy ve Yariv 1995, Milanovic *ve ark.* 1996, Tomic *ve ark.* 1997a, Tomic *ve ark.* 1997b, Indjin *ve ark.* 1998, Gmachl *ve ark.* 2003, Radovanovic *ve ark.* 2004, Khachatrian *ve ark.* 2007).

Yukarıda bahsedilen çalışmaların çoğunda, 100 meV civarında geçiş enerjilerine ve 10^{-12} cm^{-2} den küçük yüzey elektron yoğunluklarına sahip kuantum kuyular göz önüne alınmıştır. Bu tür kuantum yapılarda depolarizasyon ve eksitonik etkiler, enerji aralıklarına küçük düzeltmeler getireceğinden ihmal edilebilir. Fakat, ISB enerji aralığı 100 meV den küçükse eksitonik etkiler, düşük elektron

yoğunluklarında bile önemli hale gelir. Depolarizasyon etkileri de, özellikle, yüksek elektron yoğunluklarında dikkate alınmalıdır (Zaluzny 1995a). İkinci mertebe NL optik özelliklere eksitonik etkilerden gelen katkılarla ilgili literatürde pek çok çalışma vardır (Baskoutas *ve ark.* 2006, Baskoutas *ve ark.* 2007, Karabulut *ve ark.* 2008a). Bewley *ve ark.* (1993) tarafından bir yarı-parabolik kuantum kuyusundaki rezonans dışı SHG katsayısı deneysel olarak ölçülmüş ve elektron-elektron etkileşmesinin SHG hesaplamalarında göz önüne alınması gerektiği sonucu bulunmuştur. Daha sonra, hem depolarizasyon hem de eksitonik etkileri içerecek şekilde SHG ifadesi düzeltilmiştir (Zaluzny 1995b, Zaluzny 1996, Huang 1996, Bondarenko ve Zaluzny 2000). Yukarıda bahsedilen çalışmaların asıl amacı, kuantum kuyu yapılarında ISB geçişleriyle ilişkili büyük OR ve SHG katsayıları elde edebilmektir. Büyük OR ve SHG katsayıları, cihaz uygulamaları için son derece önemlidir. Daha sonraki kesimlerde yoğunluk matris formalizmini kullanarak bu katsayılar için analitik ifadeler verilecektir.

4.2.1. SHG Katsayısı

Daha önceden de bahsedildiği gibi potansiyel profilindeki asimetri ikinci mertebe alınganlıklar için oldukça önemlidir. Kuantum kuyularında SHG katsayısını hesaplamak için kullanılan iki farklı yaklaşım vardır. Bunlardan ilki, iki seviyeli bir kuantum kuyusundaki tekli rezonans ($2\hbar\omega \approx E_{10}$) durumunda elde edilen SHG katsayısıdır (Tsang *ve ark.* 1988). Bir önceki bölümde verilen yoğunluk matris formalizmini kullanarak iki seviyeli bir sistemdeki SHG katsayısı,

$$d^{(2)}(2\omega) = \frac{q^3 \sigma_s}{\varepsilon_0} \frac{\left|\mu_{01}\right|^2 (\mu_{11} - \mu_{00})}{(2\hbar\omega - E_{10} - i\hbar\Gamma_{10})(\hbar\omega - E_{10} - i\hbar\Gamma_{10})} \tag{4.1}$$

şeklinde elde edilir (Dave 1994, Karabulut *ve ark.* 2007b, Yıldırım ve Tomak 2005). Denk. (4.1)' in yazılmasında, uygulanan optiksel alanın kuantum kuyusunun büyütme doğrultusu (yani, z ekseni) boyunca kutuplu olduğu, sadece taban durumunun elektronlar tarafından işgal edildiği ve $\Gamma_{10} = \Gamma_0$ olduğu kabulleri

yapılmıştır. Denk. (4.1)' deki σ_s taban durumdaki elektron yoğunluğu, *q*, elektron yükünü, Γ_0 ve Γ_1, sırasıyla, taban ve uyarılmış durum için durulma oranı olup $\mu_{ij} = \langle \psi_i | z | \psi_j \rangle$ ve $\mu_{ii} = \langle \psi_i | z | \psi_i \rangle$ $(i, j = 0, 1)$.

SHG katsayısını hesaplamak için kullanılan bir diğer yaklaşımda, üç seviyeli bir kuantum kuyusundaki çift rezonans ($\hbar\omega \approx E_{10} \approx E_{21}$) durumunu göz önüne almaktır. Bu durumda SHG katsayısı (Rosencher ve Bois 1991, Zhang ve Xie 2003, Karabulut *ve ark.* 2005a, Nevou *ve ark.* 2006),

$$\chi^{(2)}(2\omega) = \frac{q^3 \sigma_s}{\varepsilon_0} \frac{\mu_{01}\mu_{12}\mu_{20}}{(\hbar\omega - E_{10} - i\hbar\Gamma_{10})(2\hbar\omega - E_{20} - i\hbar\Gamma_{20})} \tag{4.2}$$

ile verilir. Bu ifadede, $E_{ij} = E_i - E_j$ ve $\mu_{ij} = \langle \psi_i | z | \psi_j \rangle$ $(i, j = 0, 2)$ şeklinde tanımlanır. Denk. (4.1) ile karşılaştırıldığında Denk. (4.2)' den elde edilen SHG katsayısı daha büyüktür. Bu durum, her iki SHG katsayısının rezonans değerlerindeki oranına bakılarak kolaylıkla görülebilir. Bu oran,

$$\left| \frac{\chi^{(2)}_{pik}(2\omega)}{d^{(2)}_{pik}(2\omega)} \right| \cong \frac{1}{2} \left| \frac{\mu_{01}\mu_{12}\mu_{20}}{\mu_{01}^2(\mu_{11} - \mu_{00})} \right| \frac{E_{10}}{\hbar\Gamma_0} \tag{4.3}$$

şeklinde verilir. Denk. (4.3)' ü yazarken yine $\Gamma_{10} = \Gamma_{20} = \Gamma_0$ kabul edilmiştir. Denk. (4.3)' de E_{10}, $\hbar\Gamma_0$' dan çok büyük olduğundan diğer çarpanların katkısı bile göz önüne alınmadığında $\chi^{(2)}_{pik}(2\omega) >> d^{(2)}_{pik}(2\omega)$ olur. Ancak çift rezonans durumunu sağlayan yapıların elde edilmesinin de oldukça zor olacağı açıktır.

4.2.2. OR Katsayısı

Daha önceden tanımlandığı gibi OR katsayısı, Denk. (3.4)' deki ilk terim (yani, $\frac{1}{2}\chi^{(2)}E^2$) olup bu katsayı kutuplanmaya sıfır frekanslı bir katkı verir. OR katsayısının ilk deneysel gözlemleri 1960' lı yıllarda kristaller için yapıldı (Bass *ve*

ark. 1962, Ward 1966). Bu yöndeki araştırmalar 1980' li yılların sonlarına doğru yarıiletken kristal malzemeler üzerine yoğunlaştı. Bu araştırmaların sonucunda yarıiletkenlerde terahertz (THz) tepkilerin üretilmesindeki başarılar nedeniyle THz gücünü artırmak için kuantum kuyularındaki iki zarf seviyesi arasındaki geçişle ilişkili büyük dipol matris elemanlarının avantajlarından yararlanma yoluna gidildi. Kuantum kuyularında OR katsayısının ilk deneysel gözlemi Rosencher *ve ark.* (1989) tarafından yapıldı. Bu çalışma basamaklı GaAs/AlGaAs kuantum kuyusunda gerçekleştirildi ve 5.25×10^{-6} m/V luk bir OR katsayısı ölçüldü. Daha sonra, bir GaAs/AlGaAs asimetrik çift kuantum kuyusu için 8-12 μm aralığında OR katsayısı 1.62×10^{-3} m/V olarak ölçüldü (Rosencher *ve ark.* 1990).

SHG katsayısında olduğu gibi OR katsayısı elde etmek içinde kuantum kuyularının asimetrik sınırlandırıcı potansiyele sahip olması gerekir. Büyük OR katsayıları, sadece band aralık mühendisliği ve ilgili matris elemanları çarpımının optimize edilmesiyle mümkündür (Rosencher ve Bois 1991, Tomic *ve ark.* 1997b, Karabulut *ve ark.* 2005b, Yıldırım ve Tomak 2005, Karabulut *ve ark.* 2007a). Yoğunluk matris formalizmini kullanarak iki seviyeli bir sistem için OR katsayısı,

$$\chi^{(2)}(0)=\frac{4q^3\sigma_s\left|\mu_{01}\right|^2(\mu_{11}-\mu_{00})}{\varepsilon_0\hbar^2}\times\frac{\omega_{01}^2\left(1+\dfrac{\Gamma_1}{\Gamma_0}\right)+(\omega^2+\Gamma_1^2)\left(\dfrac{\Gamma_1}{\Gamma_0}-1\right)}{[(\omega_{01}-\omega)^2+\Gamma_1^2][(\omega_{01}+\omega)^2+\Gamma_1^2]} \qquad (4.4)$$

şeklinde verilir (Rosencher ve Bois 1991). Bu ifade de $\omega_{01}=\dfrac{E_1-E_0}{\hbar}$ şeklinde tanımlanır. Yine, SHG katsayısını elde ederken yapılan kabuller burada da aynen geçerlidir. OR katsayısı maksimum değerini $\hbar\omega\approx E_{10}$ rezonans koşulunda alır ve bu değer $\Gamma_0 << \Gamma_1 << \omega_{01}$ koşulunda,

$$\chi_{pik}^{(2)}(0)=2\frac{q^3\tau_0\tau_1}{\varepsilon_0\hbar^2}\sigma_s\left|\mu_{01}\right|^2(\mu_{11}-\mu_{00}) \qquad (4.5)$$

ile verilir. $\Gamma_i=1/\tau_i$ (i =0, 1) şeklinde tanımlanır ve τ_i, i. seviyenin durulma zamanını temsil etmektedir. Deneysel ölçümler kuantum kuyuları için durulma

zamanının pikosaniye (ps) mertebelerinde olduğunu göstermektedir (West ve Eglash 1985).

5. ÜÇÜNCÜ MERTEBE NL OPTİKSEL SÜREÇLER

5.1. Giriş

Bir yarıiletken kuantum kuyusunda taşıyıcıların sınırlandırılması, kesikli enerji seviyelerinin oluşmasına ve optiksel soğurma spektrumunda belirgin bir değişime yol açar. Bu tür iki boyutlu sistemlerin en belirgin özelliği kuantize ISB geçişlerin mümkün olmasıdır. Bu tür geçişler oldukça büyük dipol matris elemanlarına ve dar band genişliğine sahiptirler. Bu nedenle bu tip yapılarda büyük üçüncü mertebe NL optiksel süreçler elde edilir. Bu bölümde, üçüncü harmonik üretimi, NL soğurma ve şiddete bağlı kırılma indisi gibi üçüncü mertebe NL süreçler için yoğunluk matris formalizmi kullanılarak açık ifadeler verilecektir.

5.2. THG Katsayısı

Son yıllarda band aralık mühendisliği yardımıyla yarıiletkenlerin optiksel ve taşınım özelliklerinin ayarlanmasıyla ilgili pek çok çalışma yapılmıştır. Bu yöntem aynı zamanda çok büyük NL alınganlıklara sahip kuantum kuyu yapılar oluşturmak içinde kullanılabilir. Genel olarak ISB geçişleriyle ilgili NL alınganlıklar, aynı dalgaboyu aralığındaki yarıiletken alınganlıklarına göre iki nedenden dolayı daha büyüktür: İlk olarak, $\chi^{(n)}$, n+1 tane dipol matris elemanının çarpımıyla orantılı olup bu matris elemanlarının değerleri artırılarak büyük alınganlıklar elde edilebilir. İkinci olarak, kuantum kuyularının potansiyel biçimiyle oynanarak çoklu rezonans durumları yakalanıp bunun sonucunda büyük alınganlıklar elde edilebilir. Walrod *ve ark.* (1991) tarafından ilk olarak GaAs/AlGaAs süperörgüsünde üçüncü mertebe alınganlık 5.6×10^{-13} m^2/V^2 olarak ölçüldü. Sirtori *ve ark.* (1992) tarafından MBE yöntemiyle büyütülen bir AlInAs/GaInAs çiftlenimli kuantum kuyusu için üçlü rezonans THG katsayısı 1.0×10^{-14} m^2/V^2 olarak ölçüldü . Daha sonra aynı yapı için düşük sıcaklıklarda bu değer 4.0×10^{-14} m^2/V^2 'ye kadar yükseltildi (Capasso *ve ark.* 1994). Heyman *ve ark.* (1994) tarafından iki seviyeli bir kuantum kuyusu için THG

katsayısı deneysel olarak gözlendi. Aynı yıl, sonlu parabolik kuantum kuyusunda THG alınganlığının rezonans artışı teorik olarak gösterildi (Huang ve Lien 1994). Zaluzny ve Bondarenko (1996) tarafından kuantum kuyularındaki THG katsayısına depolarizasyon etkisinin katkısı teorik olarak incelendi.

Bölüm 3' deki yoğunluk matris formalizmi kullanılarak ve Denk. (3.33) dört seviyeli bir sistem için genişletilerek THG alınganlığı,

$$\chi^{(3)}(3\omega)=\frac{q^4\sigma_s}{\varepsilon_0}\frac{\mu_{01}\mu_{12}\mu_{23}\mu_{30}}{(\hbar\omega-E_{10}-i\hbar\Gamma_{10})(2\hbar\omega-E_{20}-i\hbar\Gamma_{20})(3\hbar\omega-E_{30}-i\hbar\Gamma_{30})} \quad (5.1)$$

olarak bulunur (Zaluzny 1992a, Zaluzny 1993a, Huang ve Lien 1994, Zaluzny ve Bondarenko 1996). Yine Denk. (5.1)'i yazarken bir önceki bölümde SHG ve OR'yi elde ederken kullanılan yaklaşımlar geçerlidir. Denk. (5.1)' den açıkça görülebileceği gibi enerji seviyelerinin eşit aralıklarla sıralandığı durumda THG katsayısının en büyük değeri elde edilir.

5.3. Lineer ve Üçüncü Mertebe NL Soğurma Katsayısıları

Bir yarıiletken kuantum kuyusundaki kesikli seviyelerin varlığı deneysel olarak 1974 yılında gösterildi (Dingle *ve ark.* 1974). Bu kesikli seviyeler arasındaki geçişlerle ilgili ilk çalışma West ve Eglash (1985) tarafından yapıldı. Bu çalışmada, bir GaAs kuantum kuyusunun iletim bandı içerisindeki ISB optiksel soğurma katsayısı deneysel olarak ölçüldü ve çok büyük dipol kuvvetine sahip dar band aralıklı bir pik gözlendi. Daha sonra, elektrik alanın etkisi altındaki bir kuantum kuyusunda ISB optiksel soğurma katsayısı teorik olarak incelendi (Ahn ve Chuang 1987a). Kuantum kuyularındaki ISB geçişlerine dayalı NL soğurma katsayısının incelenmesiyle ilgili ilk çalışmalar Yuen (1983), Ahn ve Chuang (1987b) tarafından gerçekleştirildi. Ahn ve Chuang (1987b) ISB durulma zamanını içeren yoğunluk matris formalizmini kullanarak bir sonsuz kuantum kuyusu için NL soğurma katsayısını hesapladılar ve sonuçta optiksel alan şiddetinin artmasıyla soğurma pikinin azaldığını gördüler. Kuantum kuyularındaki ISB optiksel geçişler malzemenin soğurma katsayısında ve kırılma indisinde önemli değişimlere yol açar

(Zaluzny 1992b). Böylesi değişimler, lazer yükselteçleri (Capasso *ve ark.* 1986), fotodetektörler (Levine *ve ark.* 1987, Levine *ve ark.* 1989) ve yüksek hızlı elektro-optiksel modülatörler (Karunasiri *ve ark.* 1990, Martinet *ve ark.* 1992) gibi cihaz uygulamaları için son derece önemlidirler. Dolayısıyla, bu tür lineer ve NL optiksel süreçlerin yapısal parametrelere ve elektrik alana bağlılıkları da cihaz uygulamaları için son derece hayati olacaktır. Soğurma katsayısı ile alınganlık arasındaki ilişki,

$$\alpha(\omega) = \omega\left(\frac{\mu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \mathrm{Im}(\varepsilon_0 \chi(\omega)), \tag{5.2}$$

ifadesi ile verilir. Bu ifadede, μ, malzemenin manyetik geçirgenliğini, ε ise elektriksel geçirgenliğin reel kısmını göstermektedir. Lineer ve NL soğurma katsayıları sırasıyla Denk. (5.2)' ye $\chi^{(1)}(\omega)$ ve $\chi^{(3)}(\omega)$ ' nın katkılarıyla tanımlanır. Lineer ve NL alınganlıklar için analitik ifadeler, sırasıyla,

$$\chi^{(1)}(\omega) = \frac{1}{\varepsilon_0}\frac{\sigma_s \left|\mu_{10}\right|^2}{(E_{10} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{10})}, \tag{5.3}$$

ve

$$\begin{aligned}\chi^{(3)}(\omega) = -\frac{1}{\varepsilon_0}&\frac{\sigma_s \left|\mu_{10}\right|^2 \left|E\right|^2}{(E_{10} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{10})} \\ &\times\left[\frac{4\left|\mu_{10}\right|^2}{(E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} - \frac{(\mu_{11} - \mu_{00})^2}{(E_{10} - i\hbar\Gamma_{10})(E_{10} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{10})}\right]\end{aligned} \tag{5.4}$$

şeklinde verilir. Denk. (5.3) ve Denk. (5.4) göz önüne alındığında lineer soğurma katsayısı için,

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}}\frac{\left|\mu_{10}\right|^2 \sigma_s \hbar\Gamma_{10}}{(E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} \tag{5.5}$$

ve NL soğurma katsayısı için de,

$$\alpha^{(3)}(\omega,I) = -2\omega\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}}\left(\frac{I}{\varepsilon_0 n_r c}\right)\frac{|\mu_{10}|^4 \sigma_s \hbar\Gamma_{10}}{\left[(E_{10}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{10})^2\right]^2} \times\left(1-\frac{|\mu_{11}-\mu_{00}|^2}{4|\mu_{10}|^2}\times\frac{\left\{(E_{10}-\hbar\omega)^2-(\hbar\Gamma_{10})^2+2(E_{10})(E_{10}-\hbar\omega)\right\}}{(E_{10})^2+(\hbar\Gamma_{10})^2}\right) \tag{5.6}$$

ifadeleri elde edilir (Ahn ve Chuang 1987b, Li 1998, Yıldırım ve Tomak 2005, Yıldırım ve Tomak 2006b, Karabulut *ve ark.* 2007c). Toplam soğurma katsayıda lineer ve NL soğurma katsayılarının toplamı olarak yani,

$$\alpha(\omega,I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega,I) \tag{5.7}$$

şeklinde verilir.

5.4. Şiddete Bağlı Kırılma İndis Değişimi

Çoğu optiksel malzemenin kırılma indisi, malzeme boyunca yayılan ışığın şiddetine bağlıdır. Kırılma indisinin şiddete bağlılığından kaynaklanan ilginç NL optiksel süreçler ortaya çıkar. Bu süreçlerden bazıları, ışığın kendi kendine odaklanması (self focusing of light), optiksel çift kararlılık (optical bistability) ve optiksel anahtarlama (optical switching) olarak sayılabilir (Boyd 2003). Kuantum kuyularında hem IB hem de ISB geçişlerle ilgili kırılma indis değişimleri yoğun biçimde çalışılmıştır. Kare kuyuda (Khurgin ve Li 1993, Li ve Khurgin 1993), asimetrik tekli kuantum kuyusunda (Dave 1993) ve son zamanlarda da Pöschl Teller kuantum kuyusunda (Yıldırım ve Tomak 2006c) NL kırılma indis değişimleri incelenmiştir.

Kırılma indisindeki değişim ile alınganlık arasındaki ilişki,

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r} = \mathrm{Re}\left(\frac{\chi(\omega)}{2n_r^2} \right) \tag{5.8}$$

şeklinde verilir (Kuhn *ve ark.* 1991). Denk. (5.7) ile verilen ilişki ve yoğunluk matris formalizmi kullanılarak kırılma indisindeki lineer ve NL değişimler için analitik ifadeler elde edilebilir. Kırılma indisindeki lineer değişim için bu ilişki,

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{1}{2n_r^2 \varepsilon_0} \left|\mu_{10}\right|^2 \sigma_s \left[\frac{E_{10} - \hbar\omega}{(E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} \right] \tag{5.9}$$

ile verilirken kırılma indisindeki NL değişim için de,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} = -\frac{\mu c}{4n_r^3 \varepsilon_0} \left|\mu_{10}\right|^2 \frac{\sigma_s I}{\left[(E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2\right]^2} \Big[& 4(E_{10} - \hbar\omega)\left|\mu_{10}\right|^2 \\ & - \frac{(\mu_{11} - \mu_{00})^2}{(E_{10})^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} \Big\{ (E_{10} - \hbar\omega)\left[E_{10}(E_{10} - \hbar\omega) - (\hbar\Gamma_{10})^2\right] \\ & - (\hbar\Gamma_{10})^2 (2E_{10} - \hbar\omega) \Big\} \Big] \end{aligned} \tag{5.10}$$

ifadesi elde edilir (Kuhn *ve ark.* 1991). Kırılma indisindeki toplam değişimde,

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} \tag{5.11}$$

şeklinde tanımlanır.

6. ASİMETRİK DİKDÖRTGEN KUANTUM KUYUSUNUN NL OPTİK ÖZELLİKLERİ

6.1. Giriş

Bu bölümde, NL optiksel uygulamalar için bir asimetrik dikdörtgen kuantum kuyu modeli göz önüne alınacaktır. Böyle bir kuantum kuyusunun NL optiksel özellikleri daha önceden incelenmemiştir. Bu kuyu modelinin elektronik yapısı, etkin kütle yaklaşımı altında bir boyutlu Schrödinger denklemi çözülerek elde edilecektir. Bu çözümün sonunda elde edilen enerji özdeğerleri ve zarf dalga fonksiyonları kullanılarak ikinci ve üçüncü mertebe NL optiksel süreçler hesaplanacaktır. Elde edilen nümerik sonuçlar, literatürde çalışılan diğer kuantum kuyularının sonuçlarıyla karşılaştırılacaktır.

6.2. Asimetrik Dikdörtgen Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı

Bölüm 2' den hatırlanacağı gibi bir kuantum kuyusundaki enerji seviyeleri ve bunlara karşılık gelen zarf dalga fonksiyonları,

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{m^*(z)}\frac{d\phi_n(z)}{dz}\right)+V(z)\phi_n(z)=E_n\phi_n(z) \tag{6.1}$$

ifadesi ile verilen bir boyutlu Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilir. Bu ifadedeki $V(z)$, sınırlandırıcı potansiyeli; $m^*(z)$, etkin kütleyi ve $\phi_n(z)$ ' ler de zarf fonksiyonlarını göstermektedir. Göz önüne aldığımız model için $V(z)$ sınırlandırıcı potansiyeli,

$$V(z)=\begin{cases}V_l, & z<-L/2\\ 0, & -L/2\le z\le L/2\\ V_r, & z>L/2\end{cases} \tag{6.2}$$

şeklinde tanımlanır. Bu ifadedeki z, büyütme doğrultusunu; l ve r indisleri de sırasıyla sol ve sağ bariyer malzemelerine ait ilgili parametreleri göstermektedir. Göz önüne alınan kuantum kuyu modelinde, kuyu malzemesi olarak GaAs; bariyer malzemesi olarak da $Al_{xi}Ga_{1-xi}As$ (i = l, r) kabul edilmiştir. Sınırlandırıcı potansiyeldeki asimetri,

$$x(z)=\begin{cases} x_l, & z<-L/2 \\ 0, & -L/2\le z\le L/2 \\ x_r, & z>L/2 \end{cases} \tag{6.3}$$

olacak şekilde farklı Al oranlarına sahip üç farklı tabakayla oluşturulur. Dolayısıyla, Denk. (6.3) ile verilen oranlarla oynanarak sınırlandırıcı potansiyelin asimetrisi artırılabilir, azaltılabilir ve hatta bu potansiyel simetrik hale ($x_l = x_r$) getirilebilir. Böylesi bir kuantum kuyu modelinin önemli bir avantajı da önceki bölümlerde bahsedilen büyütme teknikleri kullanılarak kolaylıkla üretilebilir olmasıdır. Bu nedenle asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunun optiksel özelliklerinin incelenmesi son derece önemli olacaktır. Literatürden bildiğimiz kadarıyla böylesi bir yapı yoğun biçimde çalışılmamakla birlikte polaron enerjisi ve etkin kütlesinin hesaplanmasıyla ilgili bazı çalışmalar yapılmıştır (Bibik *ve ark.* 2003, Shi *ve ark.* 1997).

Sınırlarda $\phi_n(z)$ ve $\phi_n'(z)/m^*(z)$' in sürekliliğini kullanarak Denk. (6.1) her bir tabakada tam olarak çözülebilir. Bu durumda Denk. (6.1)' in zarf fonksiyon çözümü için,

$$\phi_n(z)=N_n\cdot\begin{cases} \sin\theta_l \sin\left(\dfrac{q_nL}{2}+\theta_r\right)e^{p_{\ln}(z+L/2)}, & z<-L/2 \\ \sin\left(\dfrac{q_nL}{2}+\theta_r\right)\sin\left[q_n\left(z+\dfrac{L}{2}\right)+\theta_l\right] & -L/2\le z\le L/2 \\ \sin\theta_r \sin\left(\dfrac{q_nL}{2}+\theta_l\right)e^{-p_{rn}(z-L/2)}, & z>L/2 \end{cases} \tag{6.4}$$

ve enerji özdeğerleri için de,

$$tg(q_n L) = \frac{q_n m_w (m_l p_{rn} + m_r p_{\ln})}{q_n^2 m_l m_r - p_{\ln} p_{rn} m_w^2} \tag{6.5}$$

ifadesi elde edilir (Karabulut *ve ark.* 2007a). Bu ifadede,

$$\theta_i = \arcsin \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{p_{in}^2 m_w^2}{q_n^2 m_i^2}}} \tag{6.6.a}$$

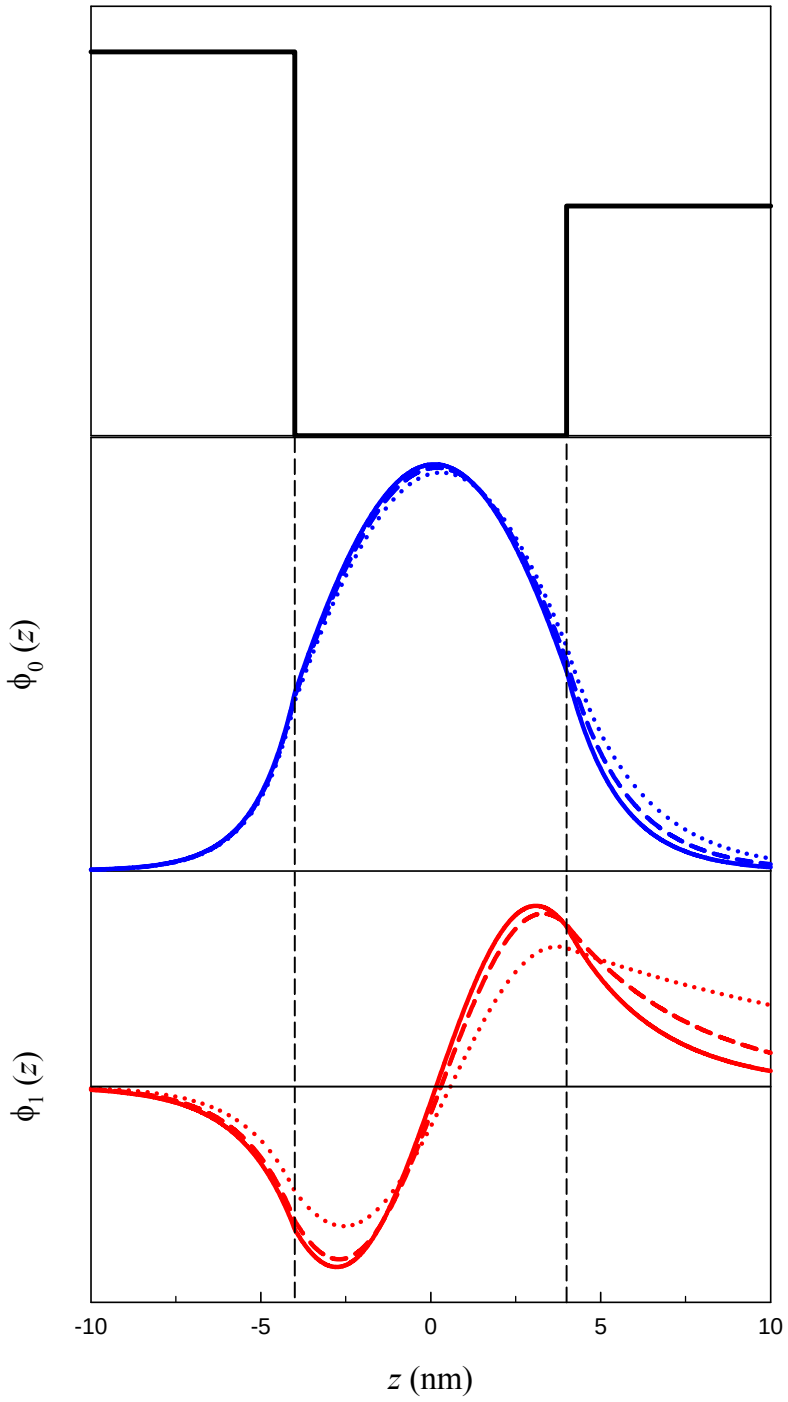
$$p_{in} = \sqrt{2m_i (V_i - E_n)} \big/ \hbar \tag{6.6.b}$$

$$q_n = \sqrt{2m_w E_n} \big/ \hbar \tag{6.6.c}$$

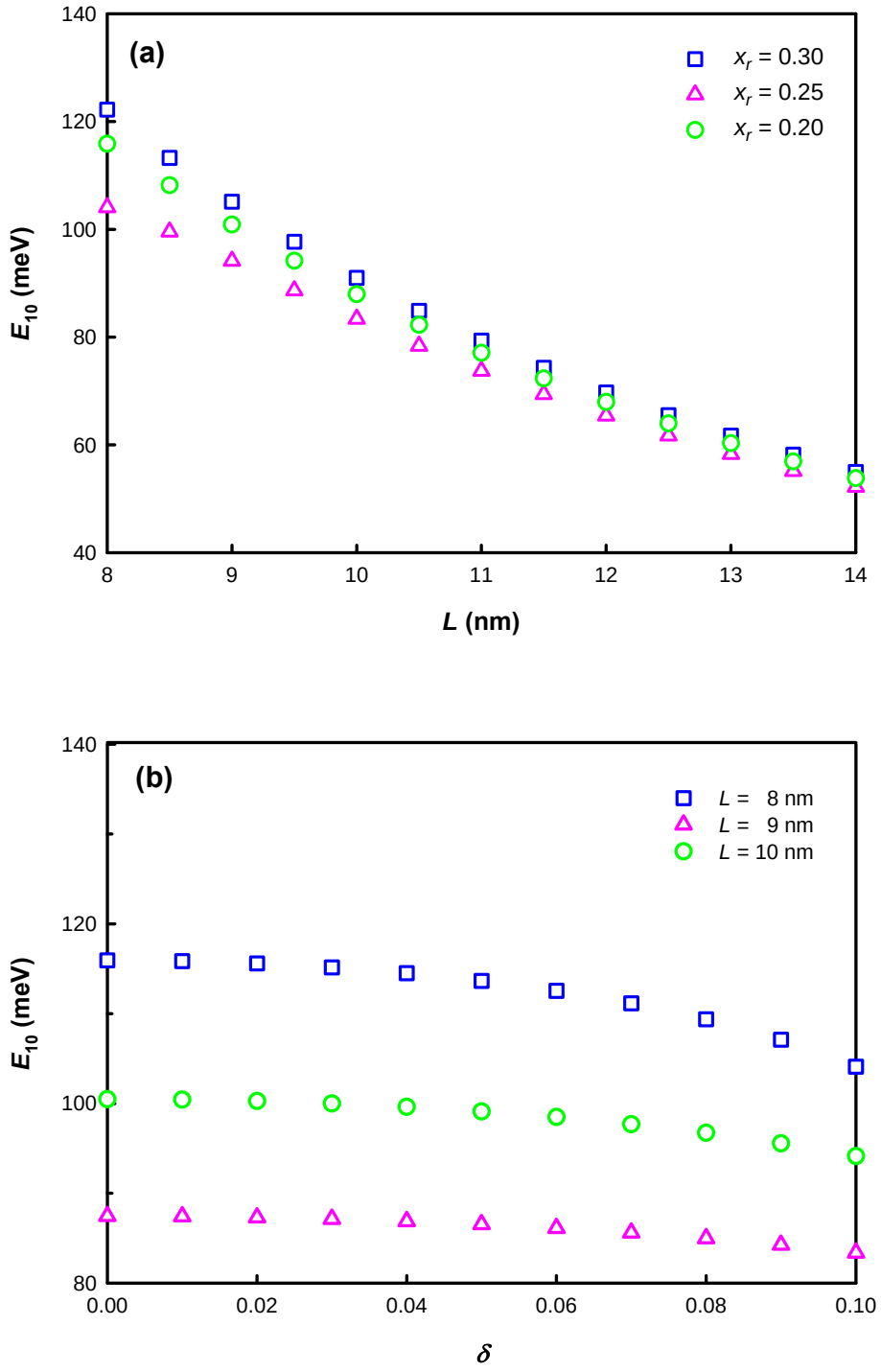
ve N_n' de normalizasyon sabitidir.

Hesaplamalarda etkin kütle ve sınırlandırıcı potansiyelin değerleri için sırasıyla, $m_i = m_0$ ($0.0665+0.0835x_i$) ve $V_i = 600\times(1.155x_i + 0.37\,x_i^2)$ meV (i = l, w, r) kullanılmıştır.

Şekil 6.1' de farklı asimetri durumları için potansiyel profili ve ilk iki bağlı durumun normalize dalga fonksiyonları görülmektedir. Şekilden de kolaylıkla görülebileceği gibi x_r' nin azalan değerleriyle potansiyel profilinin asimetrisi artar ve asimetrideki bu artışta dalga fonksiyonlarını etkiler. Beklenildiği gibi bu etki kuyunun üst taraflarına yakın olan ilk uyarılmış durumda kendini daha fazla hissettirmektedir.



Şekil 6.1. Asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki bağlı durumun dalga fonksiyonları (x_l = 0.40 ve L = 8 nm). Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, x_r' nin 0.30, 0.25 ve 0.20 olduğu durumlara karşılık gelir.



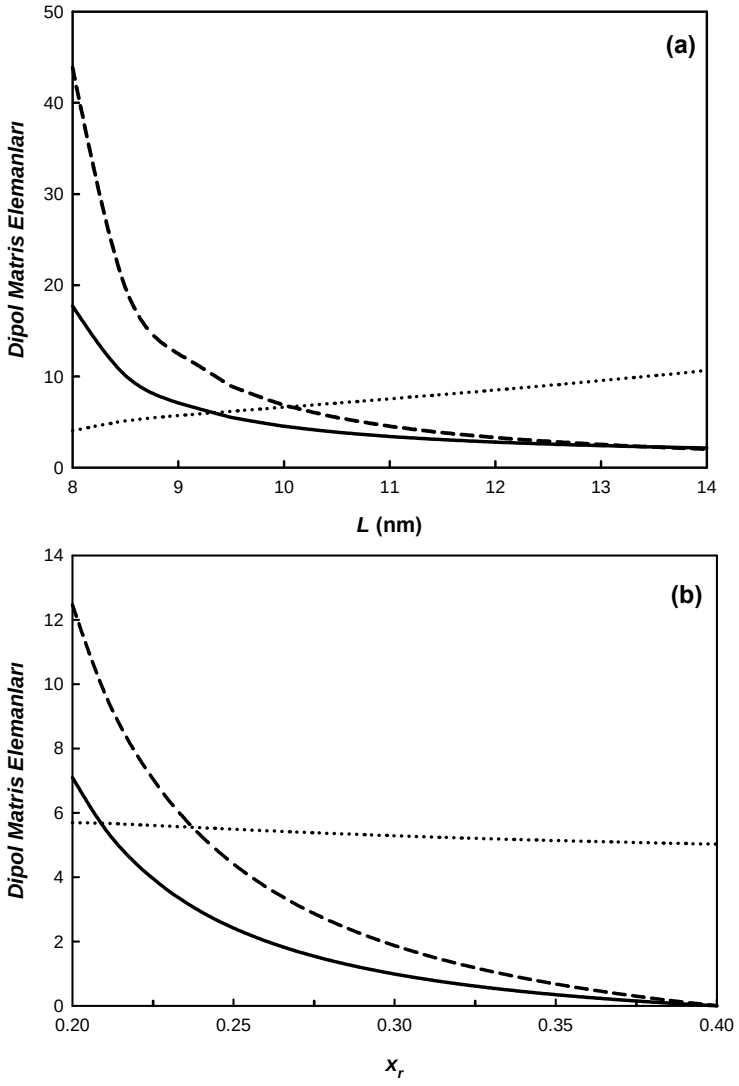
Şekil 6.2. a. Taban durum ve ilk uyarılmış durum arasındaki enerji farkı E_{10}' ın L ile değişimi.

b. E_{10}' ın δ parametresi ile değişimi.

Şekil 6.2' de sırasıyla kuyu genişliği L ve δ parametresinin fonksiyonu olarak taban durum ve uyarılmış durum arasındaki enerji farkı E_{10} görülmektedir. Sol ve sağ bariyerlerdeki stokiometrik oranlar sırasıyla, $x_l = 0.3+\delta$ ve $x_r = 0.3-\delta$ olacak şekilde tanımlanmıştır. Buradaki δ, $0 \le \delta \le 0.1$ aralığında değerler alıp kuantum kuyusunun asimetrisini ayarlamak için tanımlanmıştır. $\delta = 0$ durumunda, yapı simetrik hale gelir ve $\delta \to 0.1$' e yaklaştıkça yapının asimetrisi artar. Şekilden E_{10}' ın kuyu genişliğiyle önemli ölçüde değiştiği fakat asimetriyle çok fazla değişmediği görülmektedir. Ancak asimetrinin E_{10}' a etkisi daha dar kuyular için biraz daha önemli hale gelir. Beklenildiği gibi L' deki artış enerji seviyelerinin birbirlerine yaklaşmalarına ve bunun sonucunda da E_{10}' ın azalmasına neden olmaktadır. Dolayısıyla E_{10}' ın kuyu genişliğine böylesi bir bağlılığı istenilen enerji aralığında NL optiksel spektrumlar elde etmek için oldukça önemli olacaktır.

6.3. Asimetrik Dikdörtgen Kuantum Kuyusunda SHG Katsayısı

Daha önceden de tartışıldığı gibi kuantum kuyu potansiyelinin asimetrisi ikinci mertebe NL optiksel süreçler için son derece önemlidir. Göz önüne aldığımız sonlu asimetrik kuyu oldukça gerçekçi bir model olup deneysel olarak kolaylıkla üretilebilir. Bu kuyu modelinin en önemli avantajlarından biri bariyer malzemesindeki Al oranıyla oynanarak potansiyelin asimetrisinin ayarlanabilir olmasıdır. SHG ve OR gibi ikinci mertebe süreçlere ayarlanabilir asimetrinin etkilerini incelemek oldukça yararlı olacaktır. Asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunda SHG katsayısını hesaplamak için Bölüm 4' de bahsedilen tekli rezonans durumu ve potansiyel kuyusu içerisindeki ilk iki bağlı durum göz önüne alınmıştır. Bu durumun nedeni asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunda çift rezonans durumunu elde etmenin mümkün olmamasıdır. Hesaplamalarda kullanılan parametreler; $\sigma_s = 3\times10^{16}$ cm^{-3} ve $\Gamma_0 = \Gamma_1 = 1/0.14$ ps^{-1}. İki seviyeli bir kuantum kuyusunda SHG katsayısı için Denk. (4.1) ile verilen ifade incelendiğinde SHG katsayısının doğrudan $\mu_{01}^2 \cdot (\mu_{11} - \mu_{00})$ terimiyle orantılı olduğu görülmektedir.



Şekil 6.3.a. μ_{01}^2 (10^{-18} m^2), $(\mu_{11}-\mu_{00})$ (10^{-10} m) ve $\mu_{01}^2\cdot(\mu_{11}-\mu_{00})$ (10^{-27} m^3)' ın kuyu genişliğiyle değişimi ($x_l = 0.40$ ve $x_r = 0.20$).

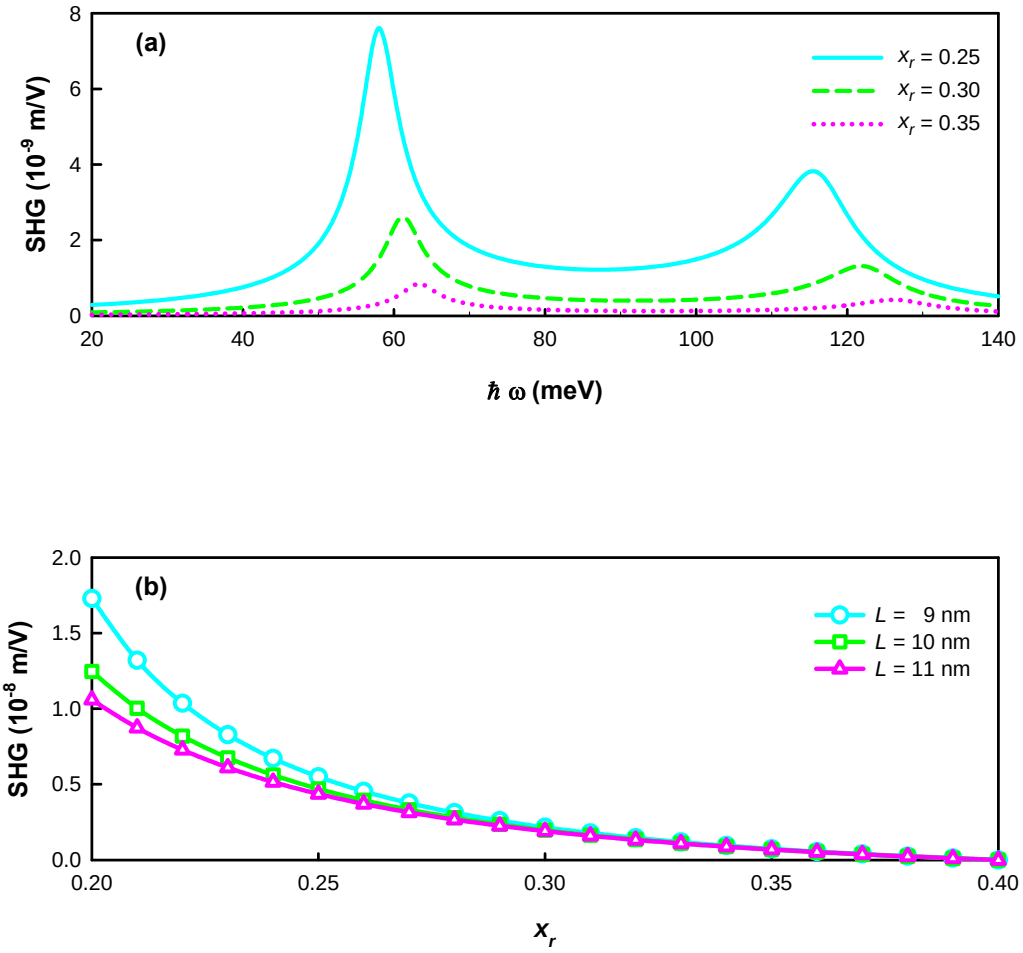
b. μ_{01}^2 (10^{-18} m^2), $(\mu_{11}-\mu_{00})$ (10^{-10} m) ve $\mu_{01}^2\cdot(\mu_{11}-\mu_{00})$ (10^{-27} m^3)' ın x_r ile değişimi ($x_l = 0.40$ ve $L = 9$ nm). Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, $\mu_{01}^2\cdot(\mu_{11}-\mu_{00})$, $(\mu_{11}-\mu_{00})$ ve μ_{01}^2 matris elemanlarına karşılık gelir.

Dolayısıyla bu terimdeki her bir çarpanın kuyu genişliği ve asimetrisi gibi yapısal parametrelere bağlılığı SHG katsayısının ilgili yapısal parametrelere bağlılığını gösterecektir.

Şekil 6.3.a' da μ_{01}^2, $(\mu_{11}-\mu_{00})$ ve $\mu_{01}^2\cdot(\mu_{11}-\mu_{00})$' ın x_l = 0.4 ve x_r = 0.2 için kuyu genişliğiyle değişimi görülmektedir. Artan kuyu genişliğiyle μ_{01}^2 yavaşça artmakta fakat $(\mu_{11}-\mu_{00})$ terimi ise hızlı biçimde azalmaktadır. $(\mu_{11}-\mu_{00})$, kuantum kuyusunun asimetrisiyle ilgili bir terim olup kuyu genişliğinin artmasıyla kuyunun asimetrisinin azalacağı açıktır. Yapılan nümerik hesaplamalardan $(\mu_{11}-\mu_{00})$ teriminin μ_{01}^2 ile karşılaştırıldığında çok daha büyük olduğu görülmüştür. Bu nedenle SHG katsayısının L ile değişimini, baskın olan $(\mu_{11}-\mu_{00})$' ın değişimi belirler.

Şekil 6.3.b' den μ_{01}^2, $(\mu_{11}-\mu_{00})$ ve $\mu_{01}^2\cdot(\mu_{11}-\mu_{00})$' ın x_l = 0.4 ve L = 9 nm olduğu durumda x_r ile değişimi görülmektedir. Asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunun yapısı gereği x_r' nin artmasıyla potansiyel kuyusunun asimetrisi azalmakta ve $x_l = x_r$ = 0.4 olduğunda ise kuantum kuyusu simetrik hale gelmektedir. Şekilden de kolaylıkla görülebileceği gibi simetrik durum için $(\mu_{11}-\mu_{00})$ terimi sıfır olur. Bu durum simetrik kuantum kuyularında SHG katsayısının elde edilemeyeceği sonucunu doğrulamaktadır. Beklenildiği gibi x_r' nin azalması yani potansiyel asimetrisinin artmasıyla $(\mu_{11}-\mu_{00})$' da önemli oranda artar. Ayrıca şekilden μ_{01}^2 teriminin x_r' deki değişimlerle önemli ölçüde değişmediği görülmektedir.

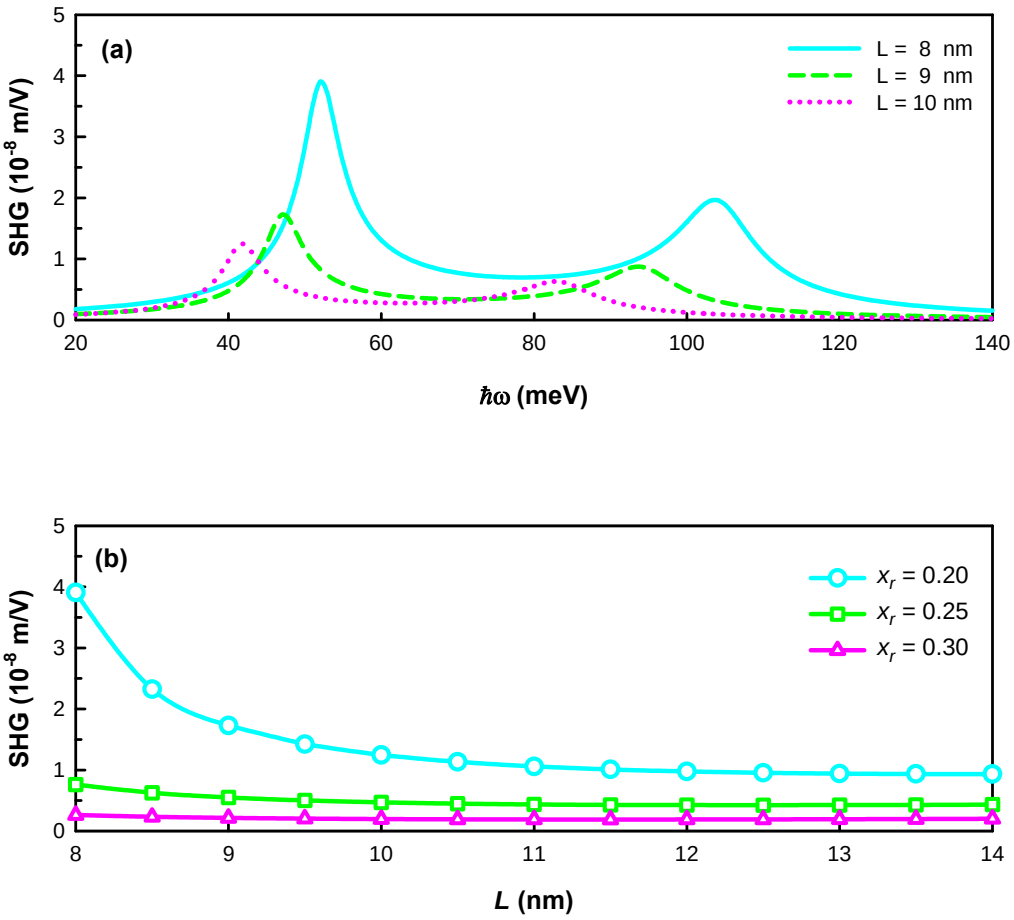
Şekil 6.4.a' da x_l = 0.4, L = 8 nm ve üç farklı x_r değeri için SHG katsayısının foton enerjisi $\hbar\omega$ ile değişimi görülmektedir. Şekilden SHG spektrumunun iki rezonans pikine sahip olduğu görülür. Düşük enerjili pik $2\hbar\omega = E_{10}$ rezonans durumundan kaynaklanırken yüksek enerjili pik $\hbar\omega = E_{10}$ rezonans durumundan kaynaklanır. Artan x_r değerleriyle (yani, azalan asimetriyle) SHG katsayısının pik değerlerinin azaldığı ve pik pozisyonlarının da hafifçe yüksek enerjilere (maviye) doğru kaydığı görülmektedir. Bu maviye kaymanın nedeni ise daha önceden açıklandığı gibi x_r ile E_{10} arasındaki ilişkidir.



Şekil 6.4.a. SHG katsayısının üç farklı x_r değeri için foton enerjisi $\hbar\omega$ ile değişimi ($x_l = 0.4$ ve $L = 8$ nm).

b. SHG katsayısının pik değerinin üç farklı L değeri için x_r ile değişimi ($x_l = 0.4$).

Şekil 6.4. b' de $2\hbar\omega = E_{10}$ rezonans durumundaki SHG katsayısının pik değerinin üç farklı L değeri için x_r ile değişimi görülmektedir. Beklenildiği gibi x_r'nin artmasıyla SHG katsayılarının pik değerleri azalmaktadır ve $x_l = x_r = 0.4$ durumunda bu katsayılar sıfır olmaktadır. Dolayısıyla kuyunun asimetrisinin, büyük SHG katsayısı elde etmek için ne kadar önemli olduğu görülmektedir. Ayrıca şekilden L' nin artmasıyla SHG katsayılarının pik değerlerinin azaldığı da kolaylıkla görülebilir.



Şekil 6.5.a. SHG katsayısının üç farklı L değeri için foton enerjisi $\hbar\omega$ ile değişimi ($x_l = 0.4$ ve $x_r = 0.2$).

b. SHG katsayısının pik değerinin üç farklı x_r değeri için L ile değişimi ($x_l = 0.4$).

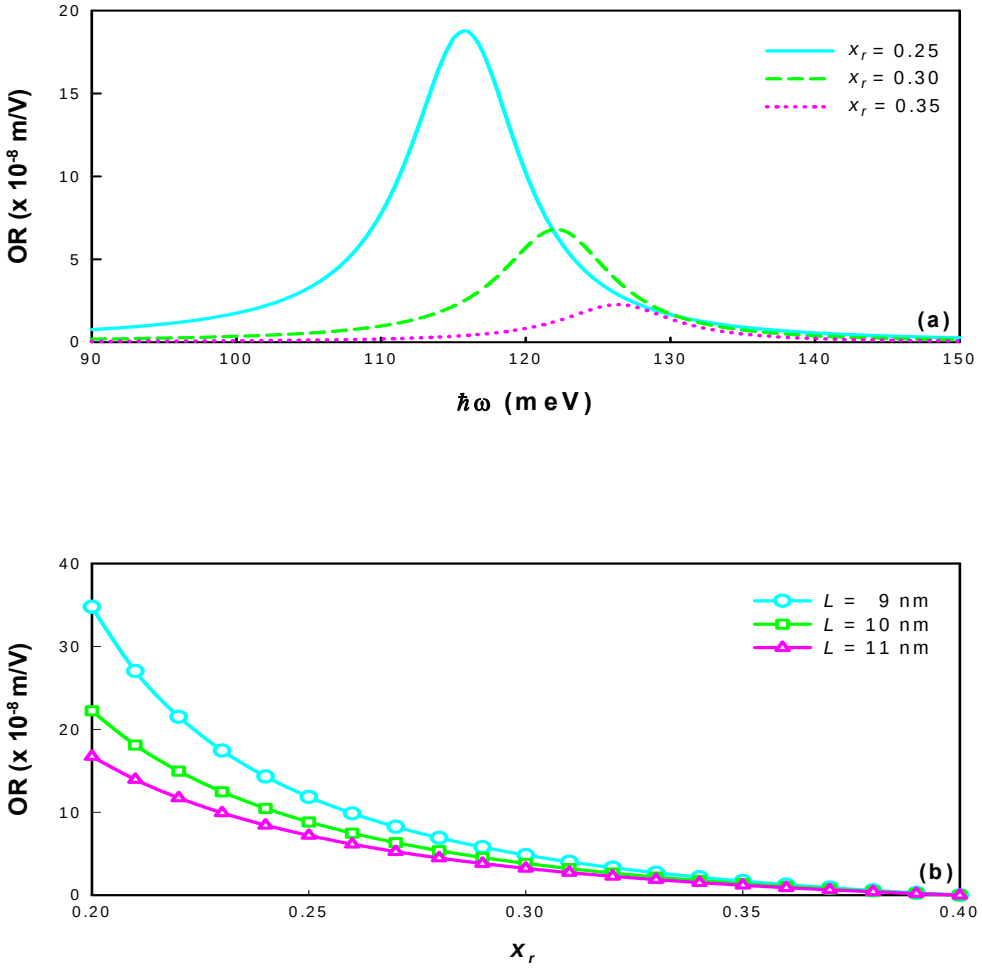
Şekil 6.5.a' da $x_l = 0.4$, $x_r = 0.2$ ve üç farklı L değeri için SHG katsayısının foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. L' nin artan değerleriyle SHG katsayısının pik değerleri azalır ve pik pozisyonları da düşük enerjilere (kırmızıya) doğru kaymaktadır. SHG katsayısının pik değerlerinin artan L ile azalmasının nedeni $(\mu_{11} - \mu_{00})$ teriminin L ile azalmasıdır. Ayrıca spektrumun artan L değerleriyle kırmızıya doğru kayması enerji seviyelerinin birbirlerine yaklaşmalarından kaynaklanır.

Şekil 6.5.b' de $2\hbar\omega = E_{10}$ rezonans durumundaki SHG katsayısının pik değerinin üç farklı x_r değeri için L ile değişimi görülmektedir. Şekilden SHG katsayısının pik değerlerinin yapısal parametrelere sıkıca bağlı olduğu kolaylıkla görülebilir. İkinci mertebe NL optiksel özelliklerin yapısal parametrelere böylesi bir bağlılığı cihaz uygulamaları için son derece önemlidir. Asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunda SHG katsayısı için elde edilen değer hem GaAs' ın hem de Pöschl-Teller kuantum kuyusunun SHG alınganlıklarından daha büyüktür (Zaluzny 1996, Yıldırım ve Tomak 2005).

6.4. Asimetrik Dikdörtgen Kuantum Kuyusunda OR Katsayısı

Kuantum kuyu yapılarında, SHG katsayısında olduğu gibi büyük OR katsayısı elde etmek için de potansiyelin asimetrisi oldukça önemlidir. Bu nedenle göz önüne aldığımız ayarlanabilir asimetriye sahip kuantum kuyu modelinde OR katsayısının hesaplanması da yararlı olacaktır. Kuantum kuyularında ISB geçişlere dayalı OR katsayısının hesaplanmasıyla ilgili yapılan ilk çalışmalardan birinde bir asimetrik basamaklı kuantum kuyu modeli göz önüne alınmıştır (Rosencher ve Bois 1991). Göz önüne aldığımız asimetrik dikdörtgen kuantum kuyu modeli Rosencher ve Bois (1991) tarafından çalışılan asimetrik basamaklı kuantum kuyusuna benzemekle birlikte iki model arasında önemli farklılıklar vardır. Rosencher ve Bois tarafından yapılan çalışmada asimetrik basamaklı kuantum kuyusunun sonsuz bariyer yüksekliğine sahip olduğu kabul edilmiş ve ayrıca hesaplamalarda etkin kütlenin konuma bağlılığı göz önüne alınmamıştır. Dolayısıyla göz önüne aldığımız asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusu, asimetrik basamaklı kuantum kuyusuna kıyasla daha gerçekçi bir modeldir.

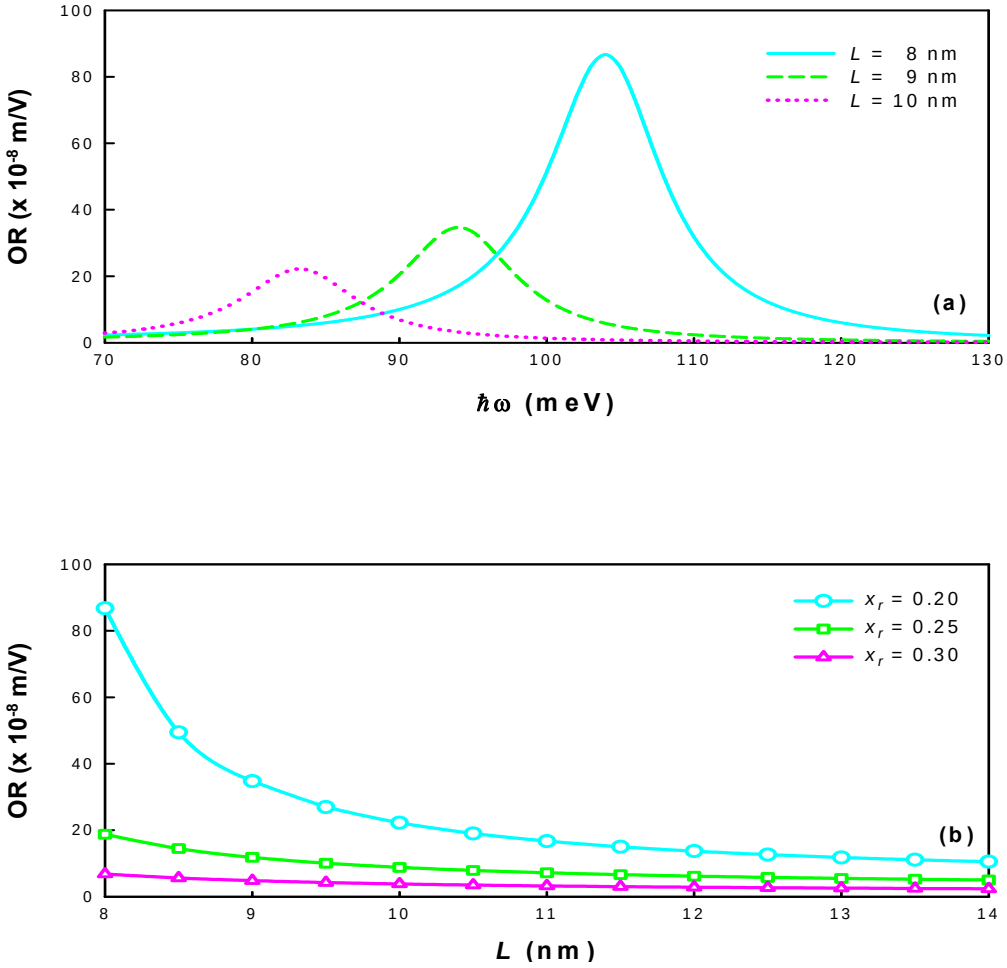
Denk.(4.4) ve Denk.(4.5) incelendiğinde OR katsayısının büyüklüğü iki seviyeli bir sistemdeki SHG katsayısı gibi $\mu_{01}^2 \cdot (\mu_{11} - \mu_{00})$ terimiyle orantılıdır. Dolayısıyla SHG katsayısı gibi OR katsayısı da yapısal parametrelere sıkı biçimde bağlı olacaktır.



Şekil 6.6.a. OR katsayısının üç farklı x_r değeri için foton enerjisi $\hbar\omega$ ile değişimi ($x_l = 0.4$ ve $L = 8$ nm).

b. OR katsayısının pik değerinin üç farklı L değeri için x_r ile değişimi ($x_l = 0.4$).

Şekil 6.6.a' da üç farklı x_r değeri için OR katsayısının foton enerjisi ile değişimi verilmiştir. Yine artan asimetriyle OR katsayısının pik değerinin arttığı ve pik pozisyonlarının da düşük enerjilere doğru kaydığı görülmektedir. Şekil 6.6.b' de OR katsayısının $\hbar\omega = E_{10}$ rezonans durumundaki pik değerinin üç farklı L değeri için x_r ile değişimi görülmektedir. Şekilden OR katsayısının pik değerlerinin yapısal parametrelere sıkıca bağlı olduğu kolaylıkla görülebilir.



Şekil 6.7.a. OR katsayısının üç farklı L değeri için foton enerjisi $\hbar\omega$ ile değişimi ($x_l = 0.4$ ve $x_r = 0.2$).

b. OR katsayısının pik değerinin üç farklı x_r değeri için L ile değişimi ($x_l = 0.4$).

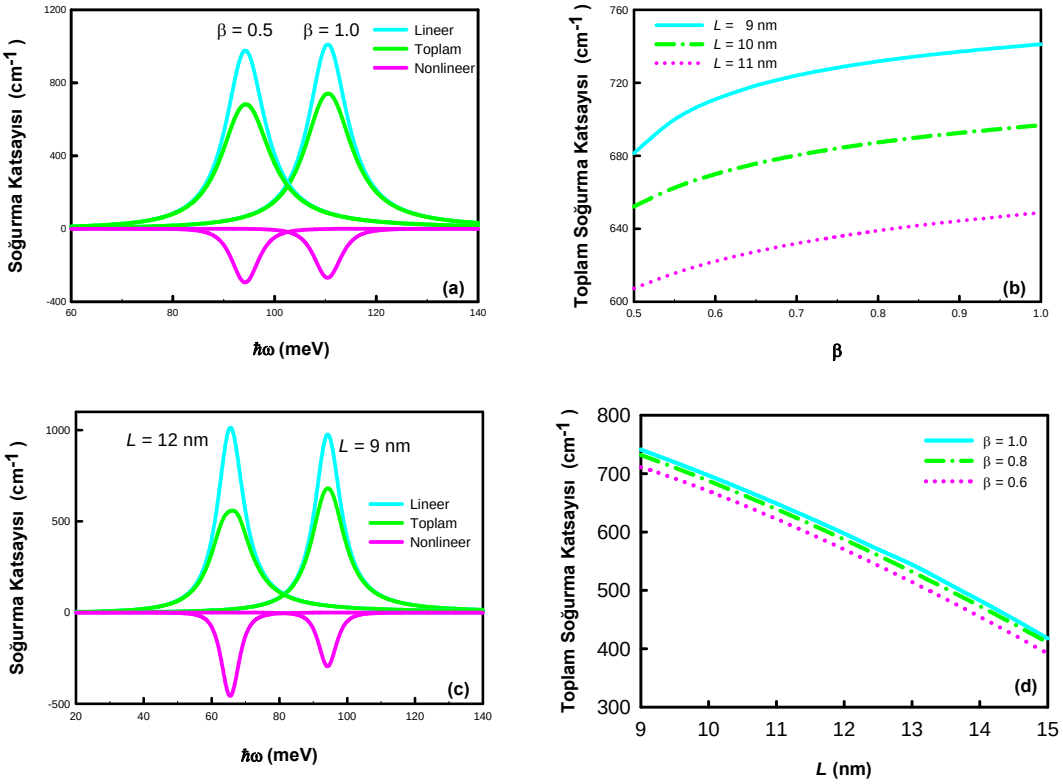
Şekil 6.7.a' da üç farklı L değeri için OR katsayısının foton enerjisi ile değişimi verilmiştir. SHG katsayısına benzer biçimde OR katsayısı da artan L ile azalır ve spektrum kırmızı bölgeye doğru kayar. OR katsayısının pik değerlerinin L ile değişimi Şekil 6.7.b' de daha açık biçimde görülmektedir. Bu davranışların nedeni daha önceden de bahsedildiği gibi L ile $(\mu_{11} - \mu_{00})$ terimi arasındaki ilişkidir. Asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunda OR katsayısı için elde edilen değer GaAs' ın OR katsayısından çok daha büyüktür (Karabulut *ve ark.* 2007a).

6.5. Asimetrik Dikdörtgen Kuantum Kuyusunda Lineer ve NL Soğurma Katsayıları

Bu kesimde, iki seviyeli bir asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusu için lineer ve NL optiksel soğurma katsayılarıyla ilgili hesaplamalar yapılacaktır. İki seviyeli bir sistem için, Denk. (5.4) ve Denk. (5.5) ile verilen açık ifadeler kullanılarak lineer ve NL optiksel soğurma katsayıları kolaylıkla hesaplanabilir. Hesaplamalarda kullanılan parametreler; $\sigma_s = 3\times10^{16}$ cm^{-3}, $\Gamma_0 = 1/0.14$ ps^{-1}, $n_r = 3.2$ ve $x_l = 0.4$ olup elde edilen sonuçların daha kolay anlaşılabilir olması için $\beta = x_l/x_r$ şeklinde bir asimetri parametresi tanımlanmıştır.

İlk olarak, β ve L gibi yapı parametrelerinin lineer, NL ve toplam soğurma katsayılarına etkileri incelenecektir. Şekil 6.8.a, $I = 0.5$ MW/cm^2, $L = 9$ nm ve iki farklı β değeri için lineer [$\alpha^{(1)}(\omega)$], NL [$\alpha^{(3)}(\omega,I)$] ve toplam [$\alpha(\omega,I)$] soğurma katsayılarının foton enerjisiyle değişimini göstermektedir. Şekilden de kolaylıkla görülebileceği gibi $\chi^{(1)}$ teriminden gelen büyük lineer katkı, $\chi^{(3)}$ teriminden kaynaklanan NL katkıya göre ters işaretlidir. Dolayısıyla toplam soğurma katsayısı NL soğurma katsayısından gelen katkıyla önemli ölçüde azalır. Bu nedenle, özellikle yüksek optiksel şiddette çalışan sistemlerin soğurma spektrumunun hesaplanmasında hem lineer hem de NL soğurma katsayılarından gelen katkılar göz önüne alınmalıdır. Ayrıca lineer soğurma katsayısı β ile artarken NL soğurma katsayısı β ile hemen hemen hiç değişmez. Lineer soğurma katsayısındaki bu artış aynı zamanda toplam soğurma katsayısının da artmasına neden olur. Ayrıca Şekil 6.8.a' dan, β' daki artışın soğurma spektrumunun mavi bölgeye doğru kaymasına neden olduğu görülür. Bu durum daha önceden de belirtildiği gibi β ile E_{10} arasındaki ilişkiden kaynaklanır.

Toplam soğurma katsayısına β parametresinin etkisini daha açık biçimde görebilmek için β' nın fonksiyonu olarak toplam soğurma katsayısının pik değeri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar üç farklı L değeri için Şekil 6.8.b' de verilmiştir. Şekilden, β' nın artan değerleriyle toplam soğurma katsayısının arttığı görülür.



Şekil 6.8.a. Lineer, NL ve toplam soğurma katsayılarının iki farklı β değeri için foton enerjisi $\hbar\omega$ ile değişimi (I = 0.5 MW/cm^2 ve L = 9 nm).

b. Toplam soğurma katsayısının pik değerinin üç farklı L değeri için β parametresiyle değişimi (I = 0.5 MW/cm^2).

c. Lineer, NL ve toplam soğurma katsayılarının iki farklı L değeri için foton enerjisi $\hbar\omega$ ile değişimi (I = 0.5 MW/cm^2 ve β = 0.5).

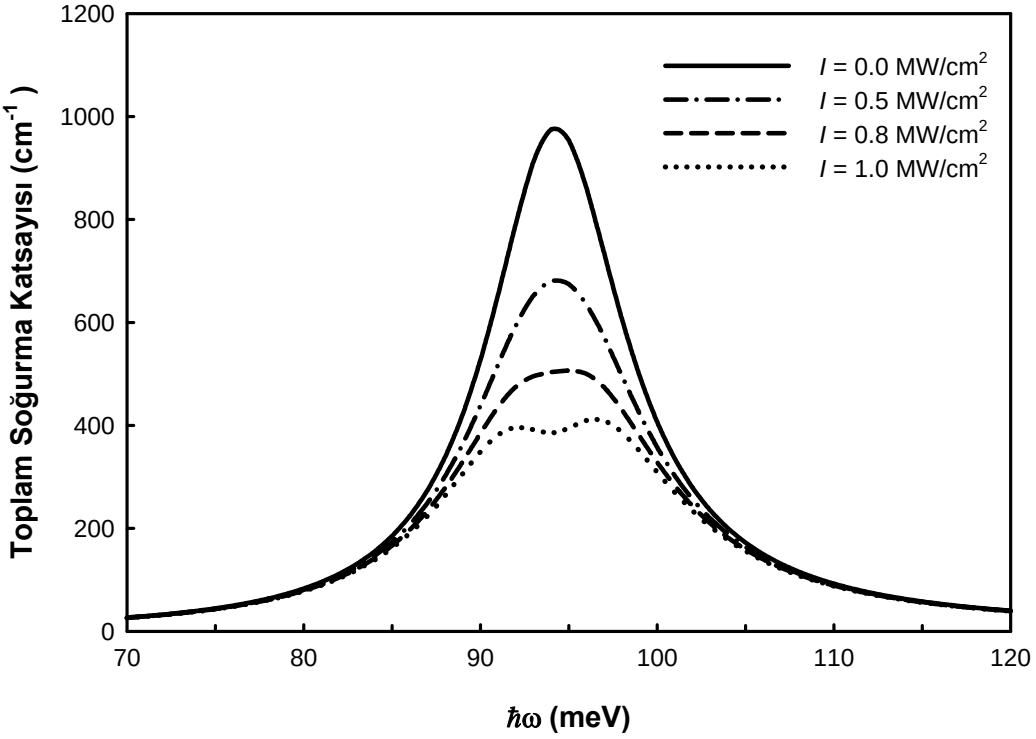
d. Toplam soğurma katsayısının pik değerinin üç farklı β değeri için L ile değişimi (I = 0.5 MW/cm^2).

Şekil 6.8.c' de I = 0.5 MW/cm^2, β = 0.5 ve iki farklı L değeri için, lineer, NL ve toplam soğurma katsayıları foton enerjisinin fonksiyonu olarak verilmiştir. Kuyu genişliği arttıkça lineer ve NL soğurma katsayılarının pik değerlerinin arttığı görülür. Ancak NL soğurma katsayısındaki artış lineer soğurma katsayısındaki artışa göre daha büyüktür ve bu nedenle toplam soğurma katsayısının pik değeri artan L ile

azalır. Burada dikkat edilmesi gereken önemli bir nokta L' deki artışın soğurma spektrumunun kırmızı bölgeye doğru kaymasına neden olmasıdır.

Kuyu genişliğinin toplam soğurma katsayısına etkisini daha açık biçimde görebilmek için L' nin fonksiyonu olarak toplam soğurma piki hesaplanmıştır. İlgili sonuçlar Şekil 6.8.d' de verilmiştir. Şekil 6.8.d' de büyük L değerleri için soğurma spektrumunda bir doyum durumu elde edilmesi ilginçtir. L = 9 nm ve β = 1 için soğurma spektrumunun pik değeri 761 cm^{-1} iken L = 15 nm ve β = 1 için bu değer 418 cm^{-1} dir.

Yukarıda elde edilen sonuçlardan soğurma spektrumunun hem pik değerinin hem de pik pozisyonunun yapısal parametrelere sıkıca bağlı olduğu görülür. Sonuç olarak, asimetrik dikdörtgen kuantum kuyularında oldukça büyük soğurma katsayısı elde etmek amacıyla küçük kuyu genişliğine sahip daha simetrik yapılar kullanılmalıdır.



Şekil 6.9. Toplam soğurma katsayısının dört farklı optiksel şiddet değeri için foton enerjisi $\hbar\omega$ ile değişimi.

Şekil 6.9' da $\beta = 0.5$, $L = 9$ nm ve dört farklı optiksel şiddet değeri için foton enerjisinin fonksiyonu olarak soğurma katsayısı verilmiştir. Optiksel şiddetin artmasıyla toplam soğurma piki önemli ölçüde azalır. Bu nedenle özellikle yüksek şiddet değerlerinde NL (şiddete bağlı) soğurma katsayısı ihmal edilmemelidir. Ayrıca optiksel şiddet belli bir değere ulaştığında soğurma spektrumunda bir doyum durumu gözlenir. Şekilden, bu doyumun $I = 0.8$ MW/cm^2 civarında gözükmeye başladığı kolaylıkla görülebilir.

6.6. Sonuçlar ve Tartışma

Bu bölümde, iki seviyeli bir asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunda SHG, OR, lineer ve NL soğurma katsayıları gibi NL optiksel özellikler hesaplandı. Göz önüne alınan yapı sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip olup deneysel olarak üretimi son derece kolaydır. Bu yapıdaki dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri için ifadeler, etkin kütle farklılıkları dikkate alınarak türetilmiştir. Potansiyel asimetrisi ve kuyu genişliği gibi parametrelerin ilgili NL optiksel özelliklere etkileri detaylı olarak çalışılmıştır. Sonuç olarak, hem potansiyel asimetrisinin hem de kuyu genişliğinin nolineer optiksel özellikleri önemli ölçüde etkilediği görülmüştür. Ayrıca, yüksek optiksel şiddet değerlerinde soğurma spektrumuna NL soğurma katsayısından gelen katkıların göz ardı edilmemesi gerektiği görülmüştür.

7. YARI-PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNUN NL OPTİK ÖZELLİKLERİ

7.1. Giriş

Bu bölümde, NL optiksel uygulamalar için bir asimetrik yarı-parabolik sınırlandırıcı potansiyel modeli göz önüne alınacaktır. Bu tip potansiyel içerisindeki enerji seviyeleri, eşit aralıklarla sıralanmaktadır. Bu durum büyük ikinci ve üçüncü mertebe alınganlıklar elde etmek için gereken rezonans şartlarının sağlanmasına neden olur. İlk olarak, böylesi bir potansiyel içerisindeki ilk iki seviye göz önüne alınarak OR katsayısı hesaplanacaktır. Daha sonra aynı potansiyel içerisinde hem elektronun hem de elektron-deşik çiftinin (eksiton) sınırlandırıldığı durumlar için SHG, THG, lineer ve NL soğurma katsayıları ve kırılma indis değişimleri hesaplanacak ve her iki durum için elde edilen sonuçlar karşılaştırılacaktır.

7.2. Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı

Kuantum kuyularındaki enerji seviyeleri ve zarf dalga fonksiyonları, Denk. (6.1) ile verilen bir boyutlu etkin kütle Schrödinger denklemi çözülerek elde edilebilir. Göz önüne alınan yarı-parabolik kuyu için $V(z)$ sınırlandırıcı potansiyeli,

$$V(z)=\begin{cases}\dfrac{1}{2}m_e^*\omega_0^2 z^2, & z\geq 0\\ \infty, & z<0\end{cases} \tag{7.1}$$

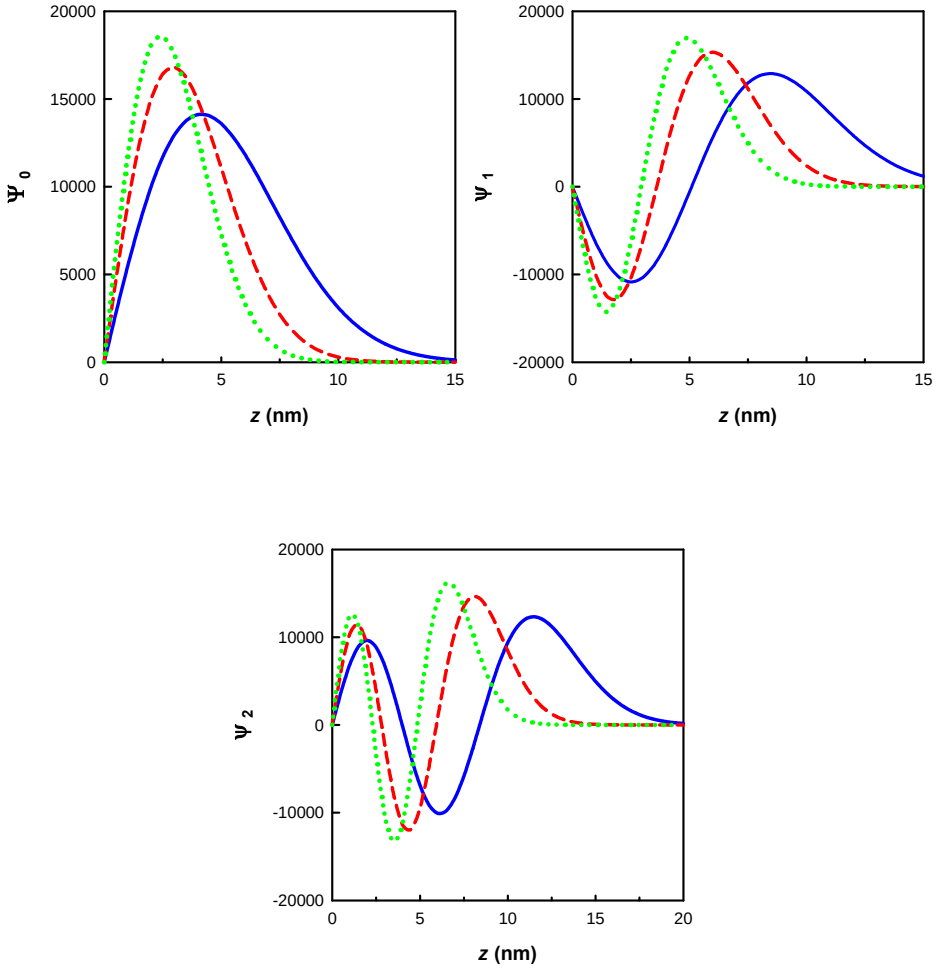
ile verilir. Bu ifadedeki m_e^*, elektronun etkin kütlesini ve ω_0, sınırlandırıcı potansiyel frekansını göstermektedir. Bu sınırlandırıcı potansiyel için Denk. (6.1), harmonik osilatör çözümleri ve z = 0' daki süreklilik şartları kullanılarak analitik olarak çözülebilir. Sonuç olarak zarf fonksiyonları için,

$$\psi_n(z)=N_n\exp(-\alpha^2 z^2/2)H_{2n+1}(\alpha z) \tag{7.2}$$

ve enerji özdeğerleri için de,

$$E_n = \left(2n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad (n = 0, 1, 2, \ldots\ldots) \tag{7.3}$$

elde edilir. Denk. (7.2)' deki $\alpha = (m_e^*\omega_0/\hbar)^{1/2}$, $N_n = \left[\sqrt{\pi}\, 2^{2n}(2n+1)!/\alpha\right]^{-1/2}$ ve $H_{2n+1}(\alpha z)$, (2*n*+1)' inci mertebeden Hermite polinomudur.

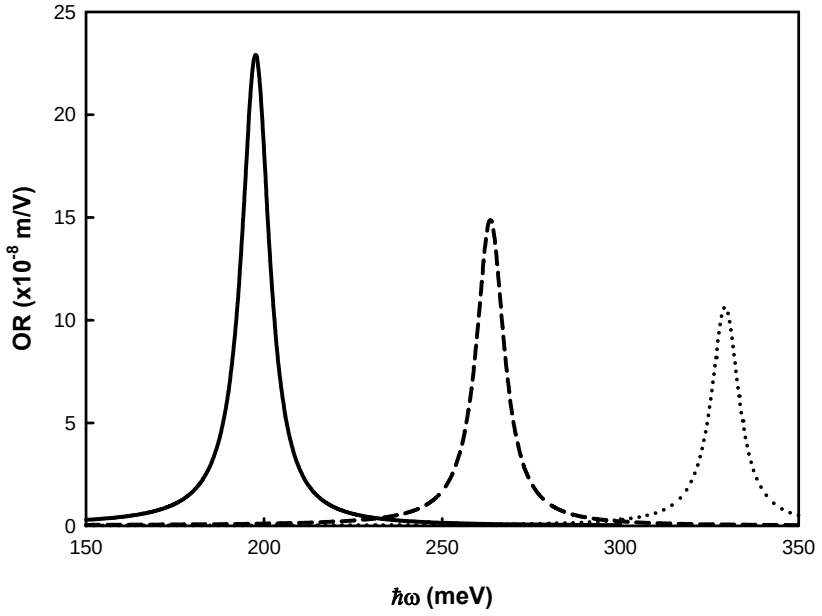


Şekil 7.1. Yarı-parabolik kuantum kuyusundaki ilk üç seviyenin normalize dalga fonksiyonları. Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, ω_0 ' ın 1.0×10^{14} s^{-1}, 2.0×10^{14} s^{-1} ve 3.0×10^{14} s^{-1} değerlerine karşılık gelir.

Şekil 7.1' de üç farklı ω_0 değeri için ilk üç seviyenin normalize dalga fonksiyonları görülmektedir. Hesaplamalarda etkin kütle için $m_e^* = 0.067 m_0$ değeri kullanılmıştır. Beklenildiği gibi ω_0' daki artış dalga fonksiyonlarının uzaysal olarak daralmasına neden olmaktadır.

7.3. Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda OR Katsayısı

Bu kesimde, iki seviyeli bir yarı-parabolik kuantum kuyusu için OR katsayısı hesaplanacaktır. Göz önüne alınan model potansiyel yapısal olarak asimetriye sahip olup sınırlandırıcı potansiyel frekansıyla oynanarak potansiyelin asimetrisi ayarlanabilir. Dolayısıyla ω_0' ın uygun değerleri için büyük OR katsayısı elde etmek mümkündür.

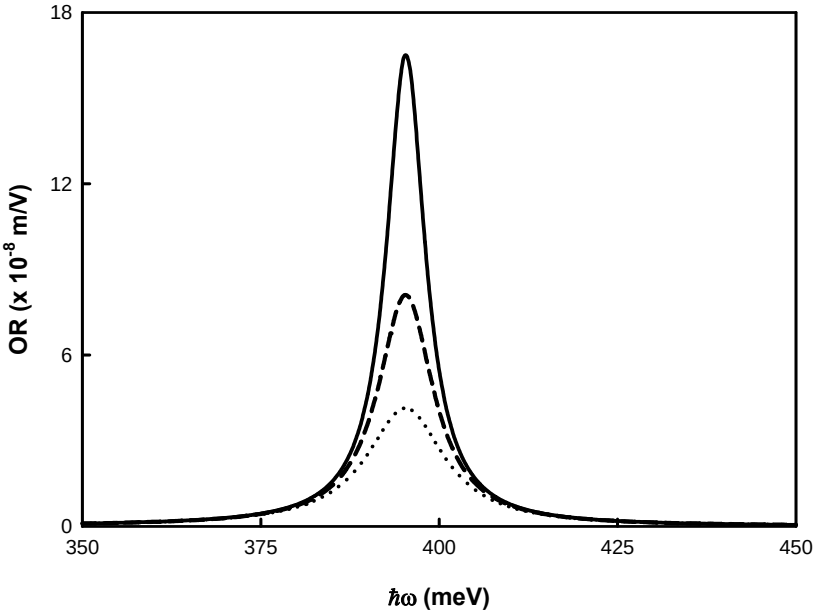


Şekil 7.2. OR katsayısının üç farklı ω_0 değeri için foton enerjisi ile değişimi. Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, ω_0' ın $1.5\times10^{14}\ s^{-1}$, $2.0\times10^{14}\ s^{-1}$ ve $2.5\times10^{14}\ s^{-1}$ değerlerine karşılık gelir.

Bölüm 4' de OR katsayısı için verilen ifade ve bir önceki kesimde verilen zarf dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri kullanılarak ilgili katsayı kolaylıkla hesaplanabilir. Hesaplamalarda; $\sigma_s = 3\times10^{22}\,m^{-3}$ ve $\Gamma_0 = \Gamma_1 = 1/0.14$ ps^{-1} seçildi.

Şekil 7.2' de, üç farklı ω_0 değeri için OR katsayısının foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. Şekilden ω_0 arttıkça OR katsayısının pik değerinin azaldığı ve pik pozisyonununda mavi bölgeye doğru kaydığı görülür. Yarı-parabolik kuantum kuyusunda ardışık enerji seviyeleri arasındaki fark birbirine eşit ve değeri $2\hbar\omega_0$ dır. Dolayısıyla ω_0' daki artışla bu fark artacaktır. Bu durum, OR spektrumunun artan ω_0 değerleriyle yüksek enerjilere kaymasının nedenidir. Yarı-parabolik kuyuda OR katsayısı için elde edilen değer Pöschl-Teller kuantum kuyusunun OR katsayısından çok daha büyüktür (Yıldırım ve Tomak 2005).

Şekil 7.3' de, üç farklı durulma zamanı τ için OR katsayısının $\hbar\omega$ ile değişimi görülmektedir. Şekilden, durulma zamanının OR katsayısına büyük etkisinin olduğu görülür.

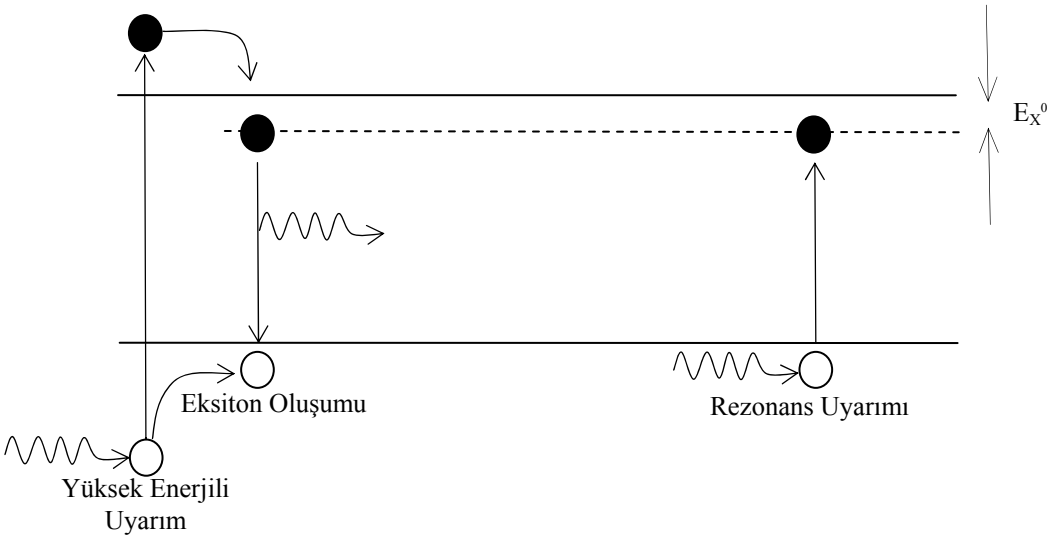


Şekil 7.3. OR katsayısının üç farklı durulma zamanı için foton enerjisi ile değişimi. Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, τ ' nun 0.2 ps, 0.14 ps ve 0.1 ps değerlerine karşılık gelir.

Durulma zamanı arttıkça OR katsayısının pik değeri önemli ölçüde artar ve spektrum daha dar hale gelir. Γ durulma oranı, durulma zamanının tersi olup spektrumun yarı genişliğiyle orantılıdır. Dolayısıyla, τ arttıkça (yani, Γ azaldıkça) spektrumun daralması normaldir. Γ parametresi sadece kuantum kuyunun yapıldığı malzemelere değil aynı zamanda sistemin sıcaklığı, elektron-safsızlık ve elektron-fonon etkileşmeleri gibi süreçlere de bağlıdır. Bu nedenle, kuantum kuyularında NL optiksel süreçleri eksiksiz olarak tanımlayabilmek için bu tür etkiler de hesaplamalarda göz önüne alınmalıdır.

7.4. Eksiton

Band aralığıyla karşılaştırılabilir büyüklükteki enerjilere sahip fotonlar, bir yarıiletken malzeme üzerine gönderilirse komşu atomlar arasındaki atomik bağları oluşturan elektronlar tarafından bu fotonlar soğurulabilir. Dolayısıyla bu elektronların, kristal içerisinde hareket etmesine ve serbest kalmasına yetecek kadar enerji sağlanmış olur. Katıların band teorisine göre bu durum, band aralığı boyunca bir elektronun valans bandından iletim bandına uyarılması olarak tanımlanır.



Şekil 7.4. Eksitonun rezonans dışı ve rezonans üretiminin şematik gösterimi.

Yarıiletken üzerine gönderilen fotonun enerjisi band aralığından daha büyük ise iletim bandı içerisinde bir serbest elektron ve valans band içerisinde de bir boş durum oluşur. Valans band içerisindeki *deşik* olarak adlandırılan bu boşluk sanki pozitif yüklü bir parçacık gibi davranır ve iletim bandındaki elektronla bir bağ oluşturur. Bu iki parçacık arasındaki çekici potansiyel, elektron ve deşiğin toplam enerjisinde bir azalmaya yol açar. Bu bağlı elektron-deşik çifti *eksiton* olarak adlandırılır. Band aralığından biraz daha düşük enerjili fotonlar elektronlar tarafından soğurulursa bu durum, doğrudan eksiton oluşumuna neden olur ve *rezonans uyarımı* olarak adlandırılır. Deşik kütlesi, elektronun kütlesine kıyasla çok daha büyük olduğundan bu iki parçacıklı sistem Hidrojen atomuna benzer. Eksitonlar oldukça kararlı yapıda olup yüzlerce ps mertebelerinden ns mertebelerine kadar uzun ömürlere sahip olabilirler.

7.4.1. Yarı-parabolik Sınırlandırıcı Potansiyeldeki Eksitonik Seviyeler

Yarı-parabolik sınırlandırıcı potansiyel içerisindeki eksiton için etkin kütle Hamiltoniyen ifadesi,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*}\frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_0^e(z_e) + V_0^h(z_h) - \frac{e^2}{\varepsilon|z_e - z_h|}, \quad (z_e, z_h > 0) \tag{7.4}$$

ile verilir. Bu ifadede, *e* ile elektron ve *h* ile de deşik gösterilmektedir. m_e^* ve m_h^*, sırasıyla, elektron ve deşiğin etkin kütleleri; ε, bağıl dielektrik sabiti ve $V_0^i(z_i)$, yarı-parabolik sınırlandırıcı potansiyeldir.

Bu çalışmada, sadece, elektron ve deşiğin aynı osilatör frekanslı yarı-parabolik potansiyeller içerisinde sınırlandırıldığı durum göz önüne alınmıştır. Bu durumda, Denk. (7.4), kütle merkezi ve bağıl koordinatlar cinsinden,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial Z^2} + \frac{1}{2}M\omega_0^2 Z^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 z^2 - \frac{e^2}{\varepsilon|z|} \tag{7.5}$$

şeklinde yazılabilir. Burada, $M = m_e^* + m_h^*$, toplam kütleyi; $\mu = m_e^* m_h^* / M$, indirgenmiş kütleyi; $Z = \left(m_e^* z_e + m_h^* z_h\right) / M$, kütle merkezi hareket koordinatını ve $z = z_e - z_h$, bağıl hareket koordinatını göstermektedir. Denk. (7.5)' den kütle merkezi ve bağıl koordinatların hareketlerinin birbirinden ayrılabildiği kolaylıkla görülebilir. Bu durumda sistemi tanımlayan toplam dalga fonksiyonu,

$$\Psi(z_e, z_h) = \Phi(Z)\phi(z) \tag{7.6}$$

şeklinde yazılabilir. Sistemin toplam enerjisi de,

$$E = E_Z + E_z \tag{7.7}$$

ile verilir. Kütle merkezi hareketiyle ilgili dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri sırasıyla,

$$\Phi(Z) = N_l \exp(-\alpha^2 Z^2/2) H_{2l+1}(\alpha Z) \tag{7.8}$$

$$E_Z = \left(2l + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad (l = 0, 1, 2, \ldots\ldots) \tag{7.9}$$

ile verilir. Bu ifadedeki, $\alpha = \sqrt{M\omega_0/\hbar}$, $N_l = \left[\sqrt{\pi}\, 2^{2l}(2l+1)!/\alpha\right]^{-1/2}$ ve H_{2l+1}, (2*l*+1)' inci mertebeden Hermite polinomudur. Bağıl hareketle ilgili dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 z^2 - \frac{e^2}{\varepsilon|z|}\right]\phi(z) = E_z\phi(z) \tag{7.10}$$

ile verilen denklemin çözümlerinden elde edilir. Denk. (7.10), Coulomb teriminin ihmal edildiği kuvvetli sınırlandırma durumu için analitik olarak çözülebilir. Yapılan hesaplamalarda, yarı-parabolik potansiyele sahip yapının boyutu etkin Bohr

yarıçapından küçük olacak şekilde seçilmiştir. Bu nedenle, kuvvetli sınırlandırma yaklaşımı güvenle kullanılabilir (Que, 1992). Bu durumda, bağıl hareketle ilgili dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri, sırasıyla,

$$\phi(z) = N_n \exp\left(-\beta^2 z^2/2\right) H_{2n+1}(\beta z) \tag{7.11}$$

$$E_z = \left(2n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad (n = 0, 1, 2, \ldots) \tag{7.12}$$

ile verilir. Burada, $\beta = \sqrt{\mu\omega_0/\hbar}$, $N_n = \left[\sqrt{\pi}\, 2^{2n}(2n+1)!/\beta\right]^{-1/2}$ ve H_{2n+1}, (2*n*+1)' inci mertebeden Hermite polinomudur.

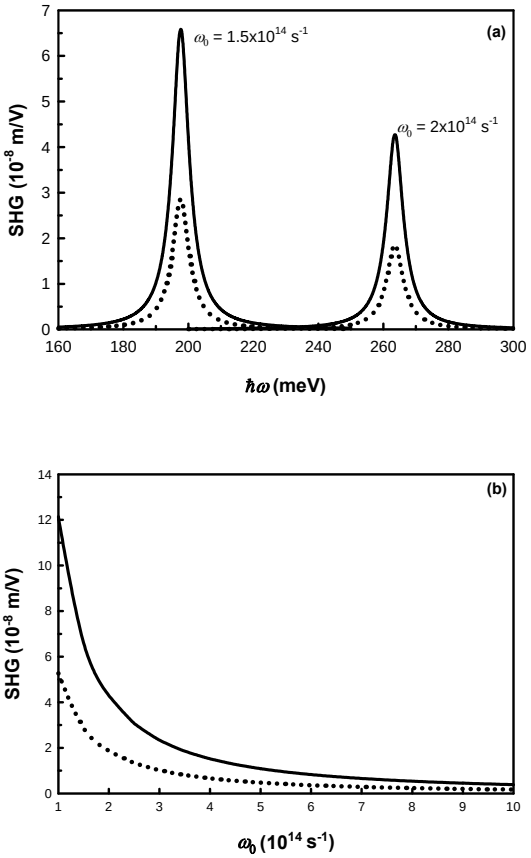
Yukarıda verilen ifadelerden de görülebileceği gibi eksitonik seviyelerle elektronik seviyeler arasında önemli ölçüde farklılıklar vardır. Dolayısıyla bu farklılıklar NL optik özelliklerde de önemli değişimlere neden olacaktır. Bir sonraki kesimde, yarı-parabolik potansiyel içinde sadece elektronun sınırlandırıldığı durum ile eksitonun sınırlandırıldığı durum için SHG, THG, lineer ve NL soğurma katsayıları ve kırılma indis değişimleri gibi NL optiksel özellikler hesaplanacak ve her iki durum için elde edilen sonuçlar arasındaki farklılıklar tartışılacaktır. Kuyu malzemesi olarak GaAs seçilmiştir ve nümerik hesaplamalarda kullanılan parametreler; $\sigma_s = 3\times10^{22}\, m^{-3}$, $m_e^* = 0.067 m_0$, $m_h^* = 0.09 m_0$, $n_r = 3.2$ ve $\Gamma_0 = \Gamma_1 = 1/0.14$ ps^{-1}.

7.4.2. SHG Katsayısı

Burada, öncelikli olarak, yarı-parabolik sınırlandırıcı potansiyel içerisindeki ilk üç seviye göz önüne alınarak SHG katsayısı hesaplanacaktır. Bir önceki kesimde verilen dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri kullanılarak eksitonun göz önüne alındığı durumdaki SHG katsayısı [$\chi^{(2)}(2\omega)$] ile elektronun göz önüne alındığı durumdaki SHG katsayısı [$\overline{\chi}^{(2)}(2\omega)$] arasında, $\gamma = \left(1 + \frac{m_e^*}{m_h^*}\right)$ olmak üzere,

$$\chi^{(2)}(2\omega)=\gamma^{3/2}\,\bar{\chi}^{(2)}(2\omega) \tag{7.13}$$

ile verilen analitik ifade elde edildi (Karabulut *ve ark.* 2008a). Denk. (7.13)' den eksiton ve elektron için elde edilen SHG katsayıları arasındaki ilişkinin, sadece, elektron ve deşiğin etkin kütlelerine bağlı olduğu görülür. Denk. (7.13)' deki $\gamma^{3/2}$, nin değeri yaklaşık olarak 2.3 tür. Dolayısıyla eksiton için elde edilen SHG katsayısı elektron için elde edilen katsayının yaklaşık 2.3 katıdır. Eksitonun ve ω_0' ın SHG katsayısına etkilerini daha net olarak görmek için bazı nümerik hesaplamalar yapıldı.



Şekil 7.5.a. SHG katsayısının iki farklı ω_0 değeri için foton enerjisi ile değişimi.

b. SHG pik değerlerinin ω_0' la değişimi. Sürekli ve noktalı çizgiler sırasıyla, eksitonlu ve elektronlu duruma karşılık gelir.

Şekil 7.5.a iki farklı ω_0 değeri için SHG katsayılarının $\hbar\omega$ ile değişimini göstermektedir. Şekil 7.5.b' de SHG pik değerlerinin ω_0 ile değişimi görülmektedir. Şekildeki sürekli ve noktalı çizgiler sırasıyla, eksitonlu ve elektronlu durumlar için SHG katsayılarını göstermektedir. Şekilden, eksitonik etkilerin SHG spektrumunda herhangi bir kaymaya neden olmadığı fakat spektrumun pik değerlerinde Denk. (7.13)' de öngörülen artışa neden olduğu görülür. Ayrıca, ω_0' ın artan değerleriyle SHG pik değerlerinin azaldığı ve pik pozisyonlarının da mavi bölgeye doğru kaydığı görülebilir.

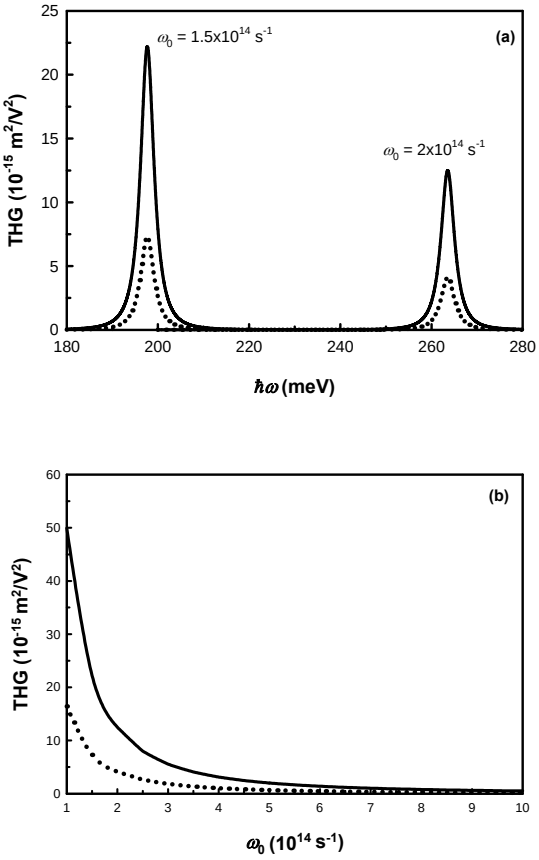
7.4.3. THG Katsayısı

Bu kesimde, yarı-parabolik sınırlandırıcı potansiyel içerisindeki ilk dört seviye göz önüne alınarak THG katsayısı hesaplanacaktır. Eksitonlu [$\chi^{(3)}(3\omega)$] ve elektronlu [$\overline{\chi}^{(3)}(3\omega)$] durumlar için THG katsayıları arasında,

$$\chi^{(3)}(3\omega)=\gamma^2\overline{\chi}^{(3)}(3\omega) \tag{7.14}$$

ilişkisi elde edildi (Karabulut *ve ark.* 2008a). Bu ifadedeki γ^2' nin değeri yaklaşık olarak 3 tür. Dolayısıyla eksitonlu durumdaki THG katsayısı elektronlu durumdaki katsayıdan yaklaşık 3 kat daha büyüktür. Sınırlandırıcı potansiyel frekansı ve eksitonun THG katsayısına etkilerini daha açık biçimde görebilmek için bazı nümerik hesaplamalar yapıldı.

Şekil 7.6.a iki farklı ω_0 değeri için THG spektrumunu göstermektedir. Şekil 7.6.b' de, spektrumun pik değerlerinin ω_0'la değişimi görülmektedir. Şekilden, ω_0'ın THG spektrumunun hem pik pozisyonlarını hem de pik değerlerini önemli ölçüde değiştirdiği kolaylıkla görülebilir. Ayrıca Denk. (7.14)' den elde edilen sonuç Şekil 7.6.a' dan da görülebilir.



Şekil 7.6.a. THG katsayısının iki farklı ω_0 değeri için foton enerjisi ile değişimi.

b. THG pik değerlerinin ω_0' la değişimi. Sürekli ve noktalı çizgiler sırasıyla, eksitonlu ve elektronlu duruma karşılık gelir.

7.4.4. Lineer ve NL Soğurma Katsayıları

Bu kesimde, yarı-parabolik sınırlandırıcı potansiyele sahip yapıdaki lineer ve NL soğurma katsayıları hesaplanacaktır. Eksitonlu $[\alpha^{(1)}(\omega)]$ ve elektronlu $[\overline{\alpha}^{(1)}(\omega)]$ durumlar için lineer soğurma katsayıları arasında,

$$\alpha^{(1)}(\omega)=\gamma\,\overline{\alpha}^{(1)}(\omega) \tag{7.15}$$

ve NL soğurma katsayıları arasında da,

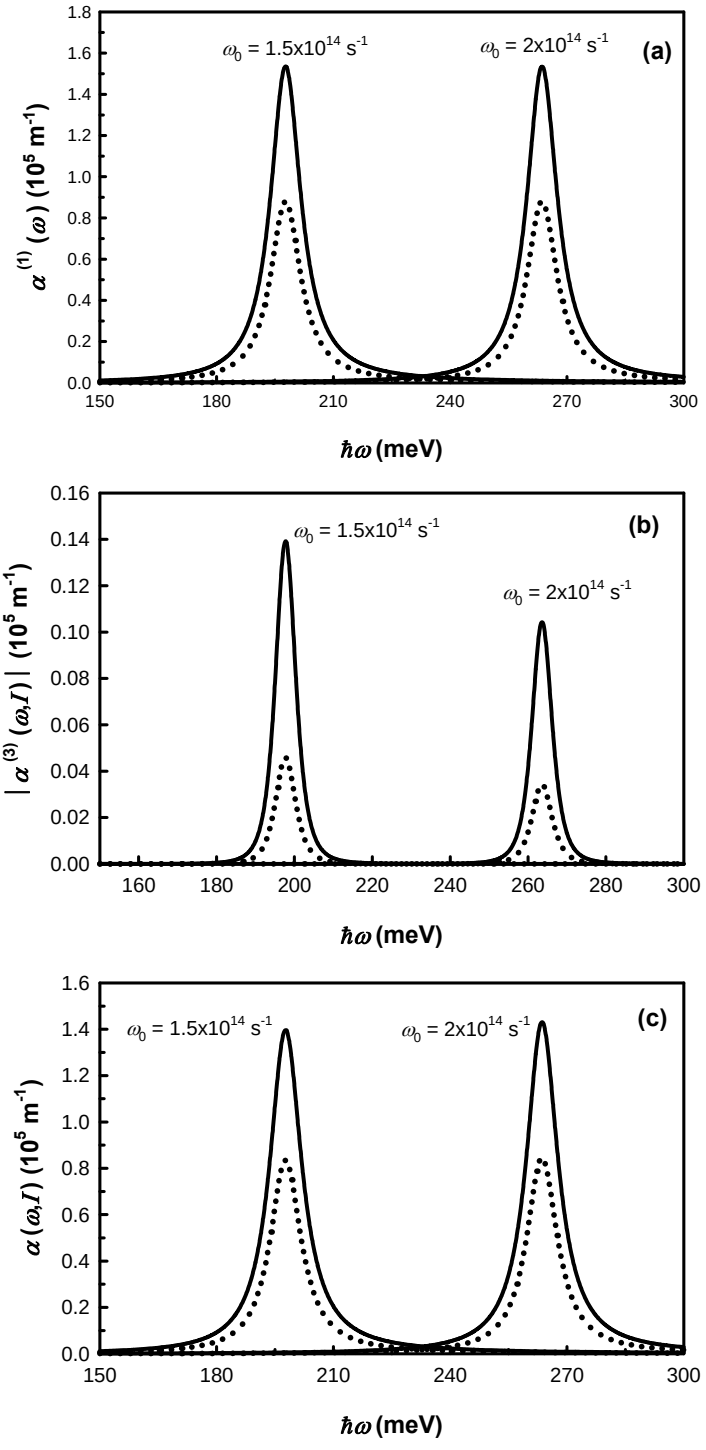
$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = \gamma^2 \, \bar{\alpha}^{(3)}(\omega, I) \tag{7.16}$$

ifadeleri elde edildi (Karabulut *ve ark.* 2008a). Dolayısıyla her iki durumdaki toplam soğurma katsayıları arasındaki ilişki,

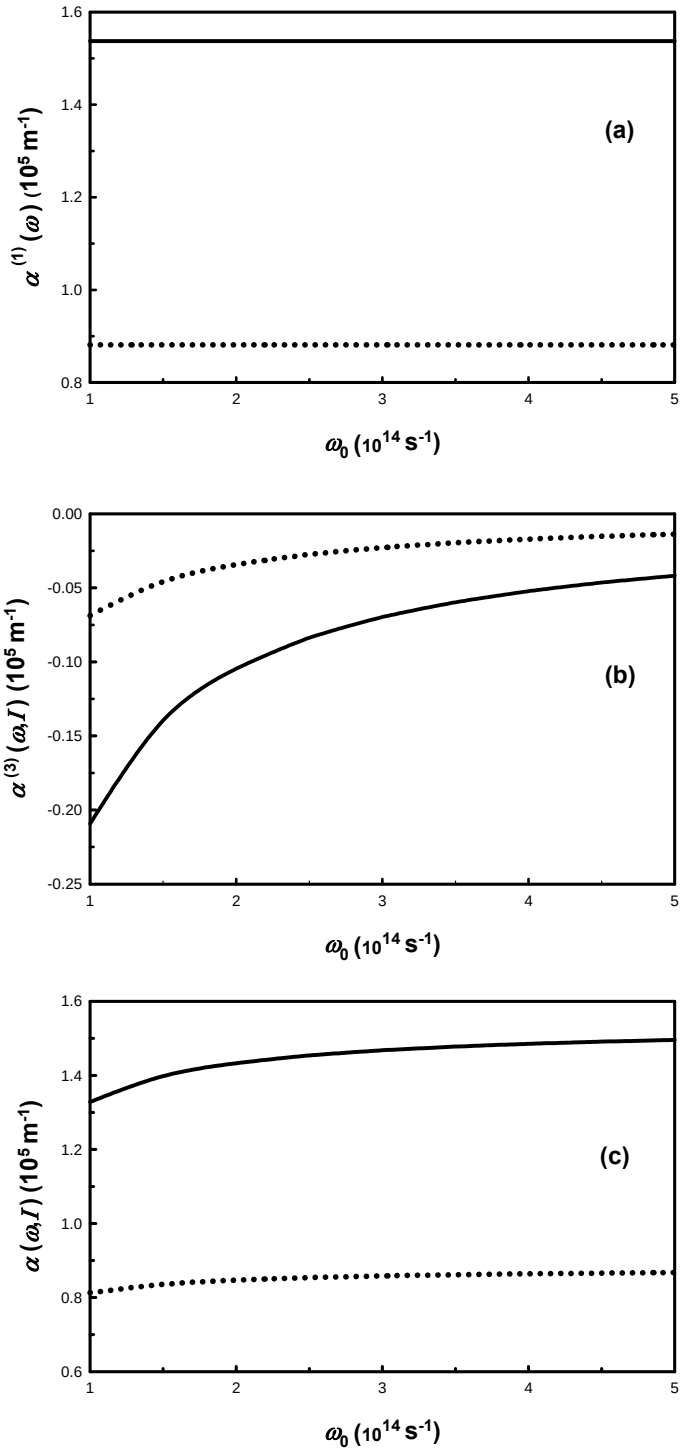
$$\alpha(\omega, I) = \gamma \, \bar{\alpha}^{(1)}(\omega) + \gamma^2 \, \bar{\alpha}^{(3)}(\omega, I) \tag{7.17}$$

ile verilir. Bu ifadedeki γ' nın değeri yaklaşık 1.74 dür. Elde edilen bu analitik sonuçlardan eksitonik etkilerin lineer soğurma katsayısını 1.74 kat NL soğurma katsayısını da 3 kat artırdığı görülür.

Şekil 7.7' de, lineer, NL ve toplam soğurma katsayılarının iki farklı ω_0 değeri için $\hbar\omega$ ile değişimi görülmektedir. Şekilden, ω_0' ın artmasıyla lineer soğurma katsayısının hemen hemen hiç değişmediği fakat NL soğurma katsayısının ise azaldığı görülür. NL soğurma katsayısındaki bu azalma, toplam soğurma katsayısının artmasına neden olur. İlgili katsayıların pik değerlerinin ω_0' la değişimi de Şekil 7.8' de görülmektedir. Yukarıda yapılan açıklamalar, Şekil' 7.8' den daha net olarak görülebilir.



Şekil 7.7. Lineer, NL ve toplam soğurma katsayılarının iki farklı ω_0 değeri için foton enerjisi ile değişimi. Sürekli ve noktalı çizgiler sırasıyla, eksitonlu ve elektronlu duruma karşılık gelir (I = 0.2 MW/cm^2).



Şekil 7.8. Lineer, NL ve toplam soğurma katsayılarının pik değerlerinin ω_0 ' la değişimi. Sürekli ve noktalı çizgiler sırasıyla, eksitonlu ve elektronlu duruma karşılık gelir (I = 0.2 MW/cm^2).

7.4.5. Kırılma İndisindeki Lineer ve NL Değişimler

Bu kesimde, yarı-parabolik sınırlandırıcı potansiyel için kırılma indisindeki lineer ve NL değişimler hesaplanacaktır. Eksitonlu ve elektronlu durumların kırılma indislerindeki lineer değişimler arasında,

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \gamma \frac{\Delta \overline{n}^{(1)}(\omega)}{n_r} \tag{7.18}$$

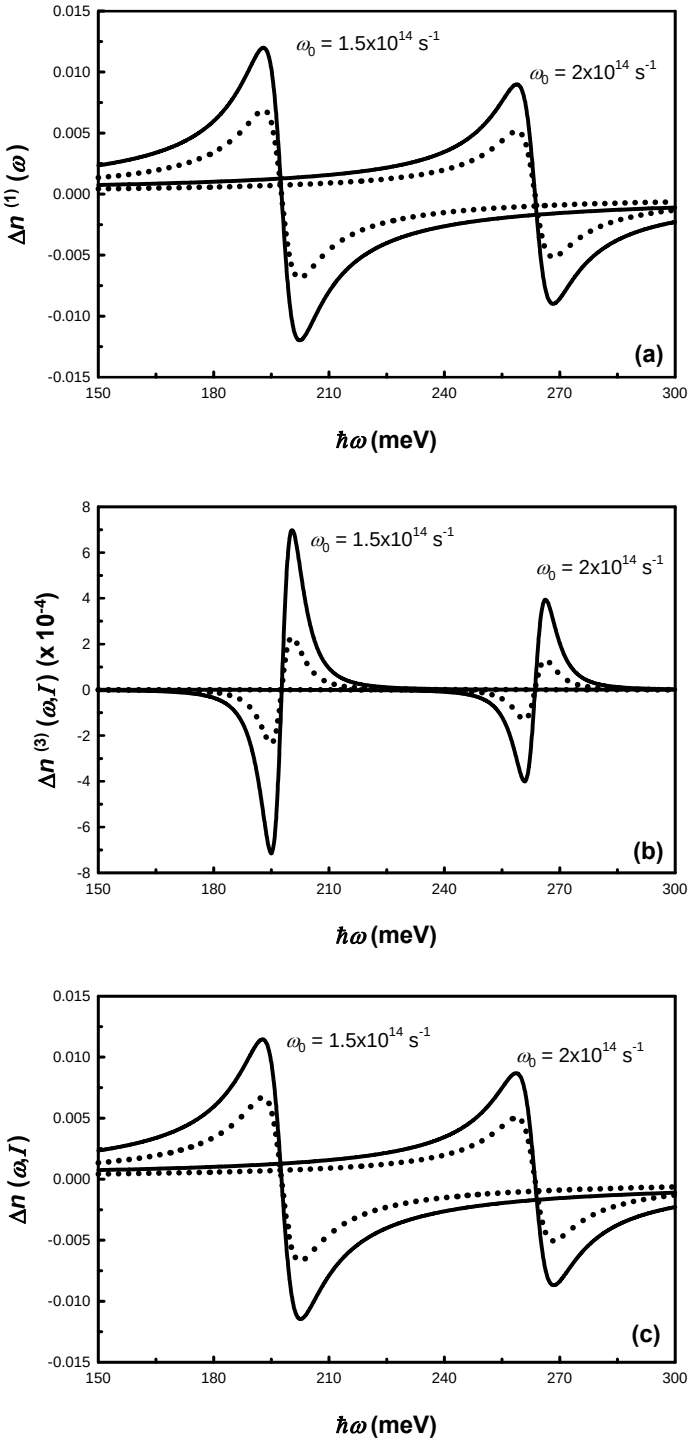
ve NL değişimler arasında da,

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} = \gamma^2 \frac{\Delta \overline{n}^{(3)}(\omega, I)}{n_r} \tag{7.19}$$

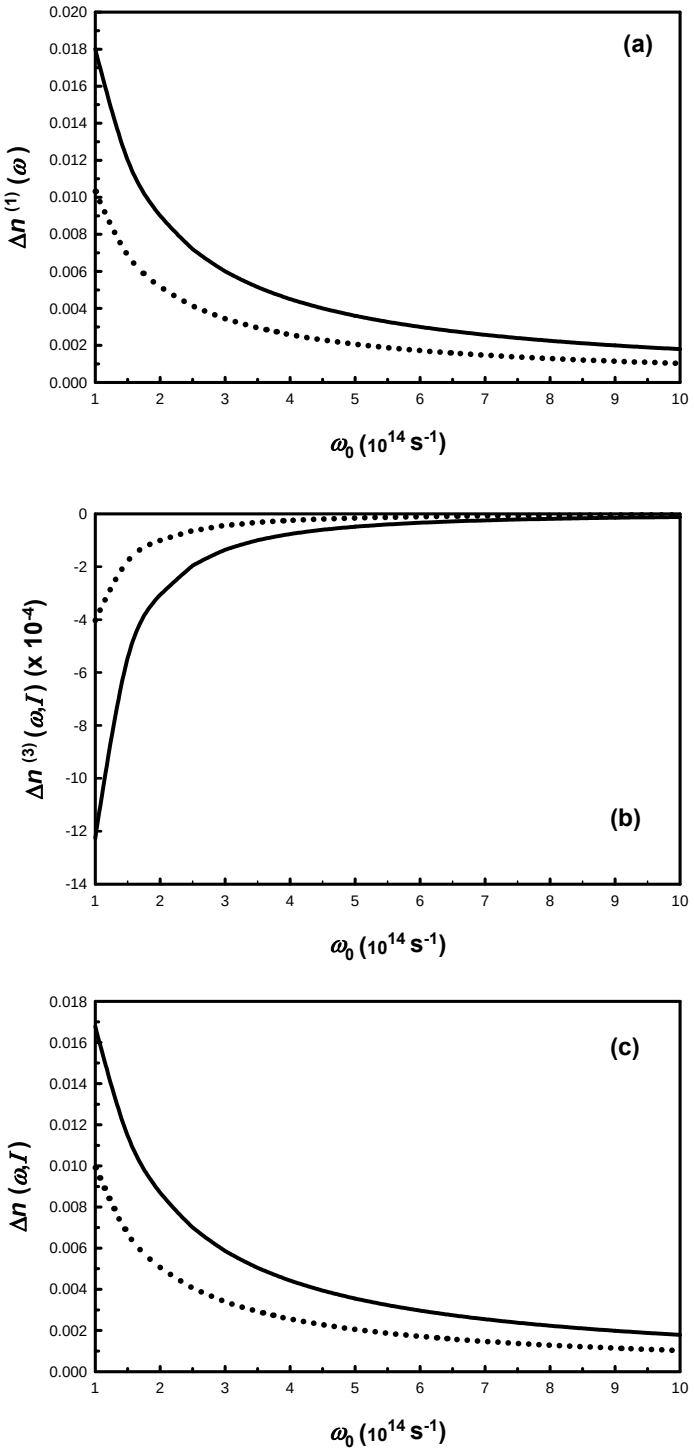
ifadeleri elde edildi (Karabulut *ve ark.* 2008a). Denk. (7.18) ve Denk. (7.19)' dan, kırılma indislerindeki toplam değişimler arasındaki ilişkinin,

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \gamma \frac{\Delta \overline{n}^{(1)}(\omega)}{n_r} + \gamma^2 \frac{\Delta \overline{n}^{(3)}(\omega, I)}{n_r} \tag{7.20}$$

ifadesi ile verileceği görülür. Bu analitik ifadelerden, eksitonik etkilerin kırılma indisindeki ilgili değişimleri artırdığı görülür. Kırılma indisindeki değişimlere hem eksitonların hem de ω_0' ın etkilerini daha net görmek için bazı nümerik hesaplamalar yapıldı. Elde edilen sonuçlar Şekil 7.9 ve Şekil 7.10'da verilmiştir. Yukarıda elde edilen açık analitik sonuçlar sayısal sonuçlarla doğrulanmıştır. Ayrıca, ω_0' ın artmasıyla lineer, NL ve toplam kırılma indis değişimlerinin de azaldığı kolaylıkla görülebilir.



Şekil 7.9. Kırılma indisindeki lineer, NL ve toplam değişimlerin iki farklı ω_0 değeri için foton enerjisi ile değişimi. Sürekli ve noktalı çizgiler sırasıyla, eksitonlu ve elektronlu duruma karşılık gelir (I = 0.2 MW/cm^2).



Şekil 7.10. Kırılma indisindeki lineer, NL ve toplam değişimlerin pik değerlerinin ω_0 ' la değişimi. Sürekli ve noktalı çizgiler sırasıyla, eksitonlu ve elektronlu duruma karşılık gelir (I = 0.2 MW/cm^2).

7.5. Sonuçlar ve Tartışma

Bu bölümde, NL optiksel uygulamalar için bir yarı-parabolik potansiyel modeli göz önüne alınmıştır. Bu potansiyel için dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri harmonik osilatör çözümleri kullanılarak analitik olarak elde edilebilir. Bu potansiyel modelinin en önemli avantajı, ardışık enerji seviyeleri arasındaki farkların birbirlerine eşit olmasıdır. Bu durum, büyük optiksel alınganlıklar elde etmek için gereken rezonans şartlarının sağlanmasına neden olur. Öncelikli olarak, yarı-parabolik potansiyel içerisinde elektronun sınırlandırıldığı durum için OR katsayısı hesaplanmıştır. Daha sonra aynı yapı içerisinde hem elektronun hem de eksitonun sınırlandırıldığı durumlar için SHG, THG, lineer ve NL soğurma katsayıları ve kırılma indis değişimleri hesaplanmış ve her iki durum için elde edilen NL alınganlıklar arasında açık analitik ifadeler elde edilmiştir. Bu analitik ifadelerin doğrudan elektron ve deşiğin kütleleriyle orantılı olduğu bulunmuştur. Sonuç olarak, eksitonik etkilerin NL optiksel özellikleri önemli ölçüde artırdığı ve artan mertebelerle bu etkinin daha da önemli hale geldiği görülmüştür.

8. SONLU YARI-PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNUN NL OPTİK ÖZELLİKLERİ

8.1. Giriş

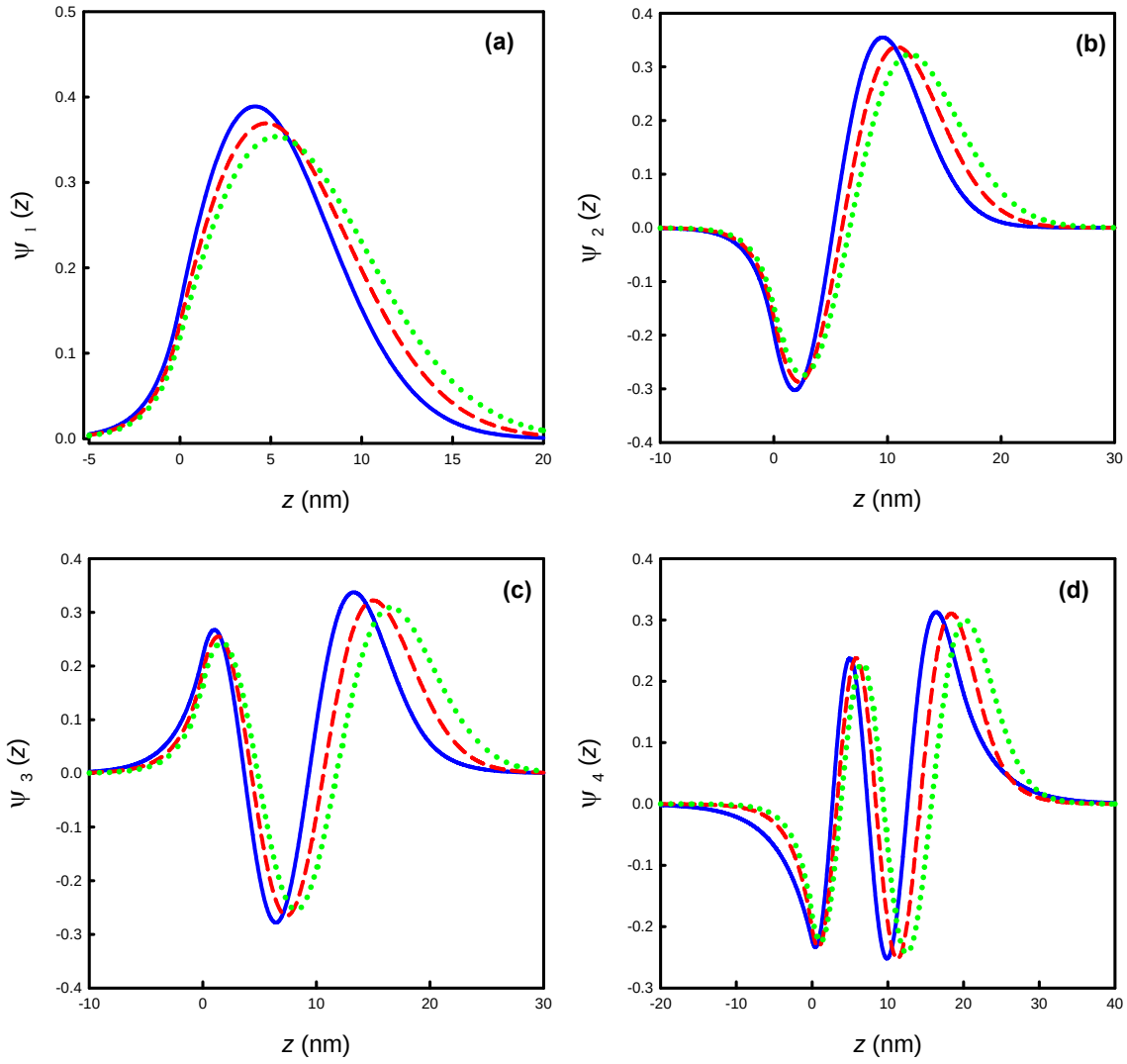
Bu bölümde, ilk olarak, sonlu yarı-parabolik sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum kuyusundaki OR, SHG ve THG gibi NL optiksel özelliklere kuyu genişliği ve bariyer yüksekliği gibi yapısal parametrelerin etkileri çalışılacaktır. Daha sonra, yine aynı yapıda OR katsayısına, lineer ve NL soğurma katsayılarına ve kırılma indis değişimlerine pozitif ve negatif yönlü elektrik alan etkileri incelenecektir. Kuantum kuyusundaki enerji özdeğerleri ve zarf dalga fonksiyonları bir boyutlu Schrödinger denkleminin nümerik çözümünden elde edilecektir. Optiksel alınganlıklar için elde edilen sonuçlar ayrıntılı olarak tartışılacaktır.

8.2. Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı

Göz önüne alınan $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyusu için sınırlandırıcı potansiyel,

$$V(z)=\begin{cases} V_0 & z<0 \\ V_0\dfrac{z^2}{L^2} & 0\le z\le L \\ V_0 & z>L \end{cases} \tag{8.1}$$

ile verilir. Burada, z, büyütme doğrultusunu; L, kuyu genişliğini ve V_0, bariyer yüksekliğini göstermektedir. Denk. (8.1) ile verilen potansiyele sahip kuantum kuyusundaki enerji seviyeleri ve zarf dalga fonksiyonları bir boyutlu Schrödinger denkleminin nümerik çözümünden elde edilebilir. Schrödinger denklemini nümerik olarak çözmek için oldukça yaygın olarak kullanılan Numerov yönteminden faydalanıldı (Pang 2006). Hesaplamalarda etkin kütle için; $m^*(z)=0.067\,m_0$ değeri kullanıldı.



Şekil 8.1. Sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusundaki ilk dört bağlı seviyenin normalize dalga fonksiyonları. Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, L' nin 20 nm, 25 nm ve 30 nm değerlerine karşılık gelir.

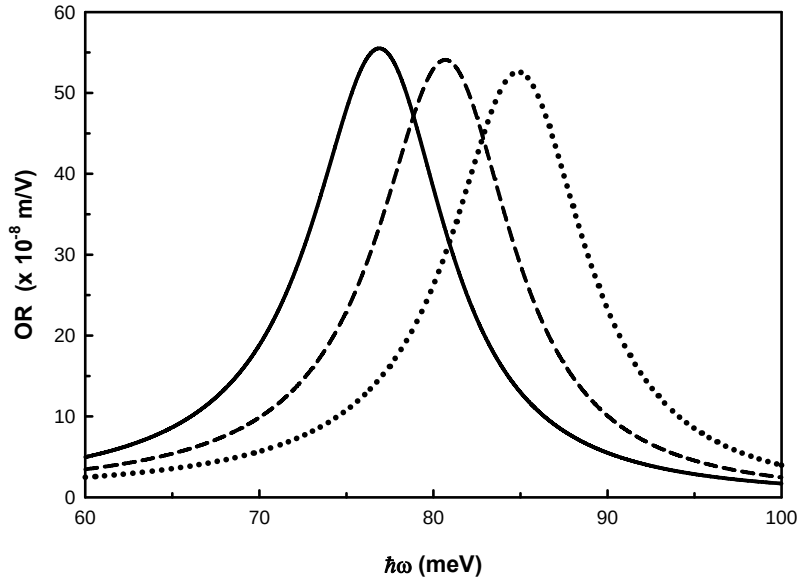
Sonlu yarı-parabolik potansiyele sahip kuantum kuyusundaki ilk dört bağlı durumun normalize dalga fonksiyonları, üç farklı L değeri ve V_0 = 312 meV için Şekil 8.1' de görülmektedir. Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, L' nin 20 nm, 25 nm ve 30 nm değerlerine karşılık gelir. Şekilden, kuyu genişliği arttıkça dalga fonksiyonlarının uzaysal olarak sağ tarafa kaydığı açıkça görülebilir.

Enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları elde edildikten sonra yoğunluk matris formalizmi kullanılarak ilgili NL alınganlıklar kolaylıkla hesaplanabilir.

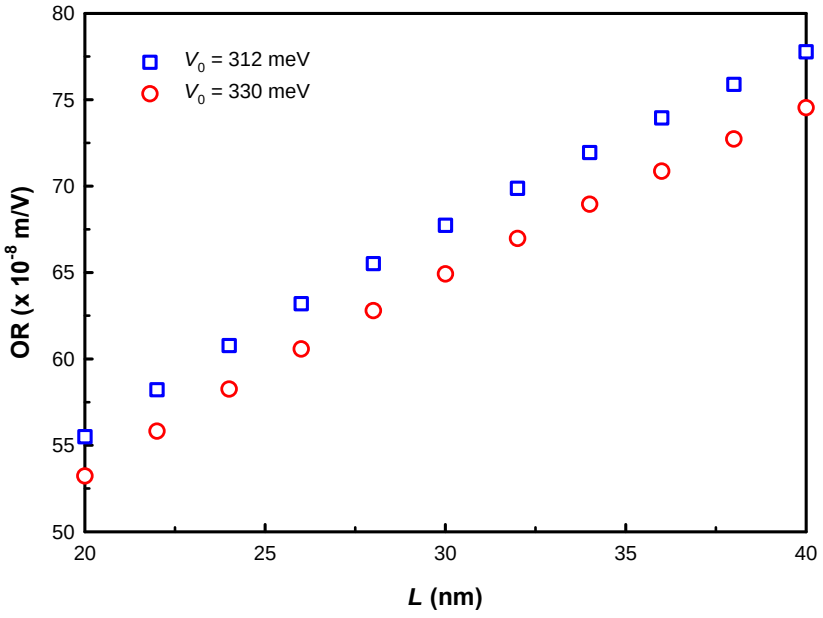
8.3. Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda OR Katsayısı

Bu kesimde, sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusu içerisindeki ilk iki seviye göz önüne alınarak OR katsayısı hesaplandı. Hesaplamalarda elektron tabaka yoğunluğu (ρ_{2D}) için 3.8×10^{10} cm^{-2}, Γ_0 = 1/0.14 ps^{-1} ve $\sigma_s = \rho_{2D}/L$ alındı (Karabulut *ve ark.* 2008b).

Şekil 8.2' de, üç farklı L değeri ve V_0 = 312 meV için OR katsayısının $\hbar\omega$ foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. Artan L değerleriyle OR katsayısının pik değerinin arttığı kolaylıkla görülebilir. Bu durum, L' nin artmasıyla göz önüne alınan yapının daha asimetrik hale gelmesinden kaynaklanır. L' deki artış ayrıca, pik pozisyonunun kırmızıya doğru kaymasına neden olur. OR katsayısının pik değerine L' nin etkisini daha açık biçimde görebilmek için Şekil 8.3' de iki farklı V_0 değeri için ilgili katsayının pik değerinin L ile değişimi verilmiştir. Şekilden, OR katsayısının L ile hemen hemen lineer olarak arttığı görülür. Ayrıca V_0' daki artışın OR katsayısının pik değerini azalttığı görülebilir.



Şekil 8.2. OR katsayısının üç farklı kuyu genişliği için foton enerjisi ile değişimi (V_0 = 312 meV). Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, L' nin 20 nm, 19 nm ve 18 nm değerlerine karşılık gelir.

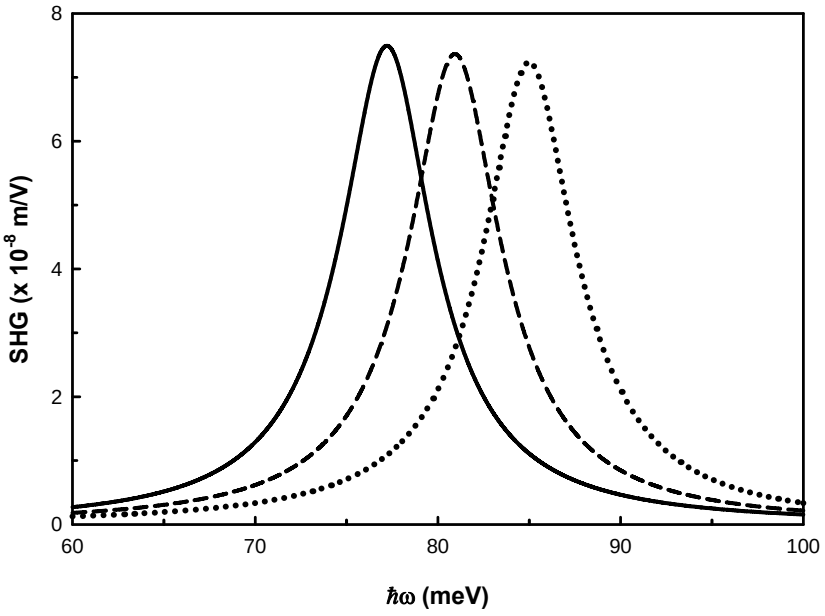


Şekil 8.3. OR katsayısının pik değerinin iki farklı V_0 değeri için kuyu genişliği ile değişimi.

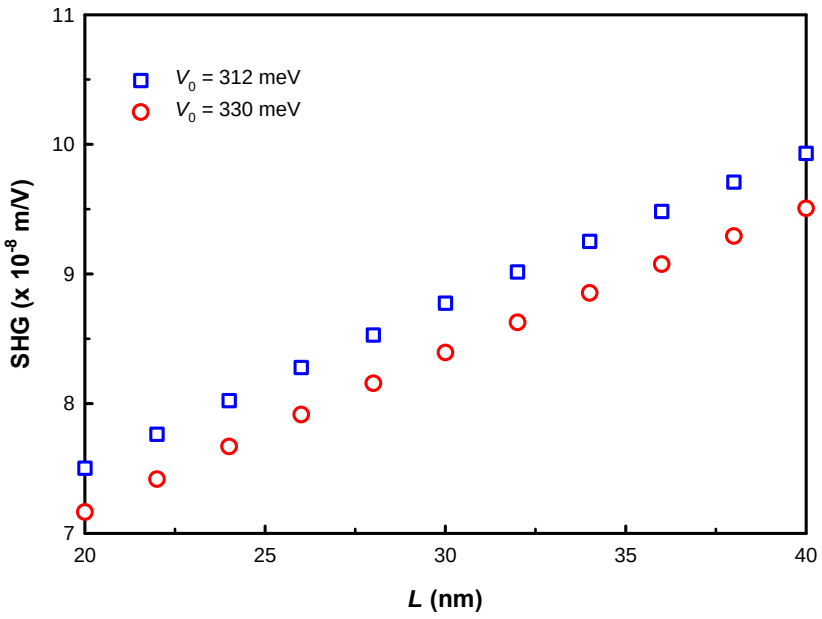
8.4. Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda SHG Katsayısı

Bu kesimde, sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusundaki ilk üç seviye göz önüne alınarak SHG katsayısı hesaplandı. Yapılan nümerik hesaplamalardan, bu yapı içerisindeki ardışık enerji seviyeleri arasındaki farkın birbirine eşit olduğu görüldü. Bu durum SHG katsayısı için ikili rezonans şartının sağlanmasına neden olur. Dolayısıyla sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunda elde edilen SHG katsayısı çok büyük olacaktır.

Şekil 8.4' de, üç farklı L değeri ve V_0 = 312 meV için SHG katsayısının foton enerjisi ile değişimi verilmiştir. Ayrıca, Şekil 8.5' de, iki farklı V_0 değeri için SHG pik değerinin L ile değişimi görülmektedir. Her iki şekilden, hem kuyu genişliğinin hem de potansiyel yüksekliğinin SHG katsayısını önemli ölçüde değiştirdiği görülür.



Şekil 8.4. SHG katsayısının üç farklı kuyu genişliği için foton enerjisi ile değişimi (V_0 = 312 meV). Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, L' nin 20 nm, 19 nm ve 18 nm değerlerine karşılık gelir.

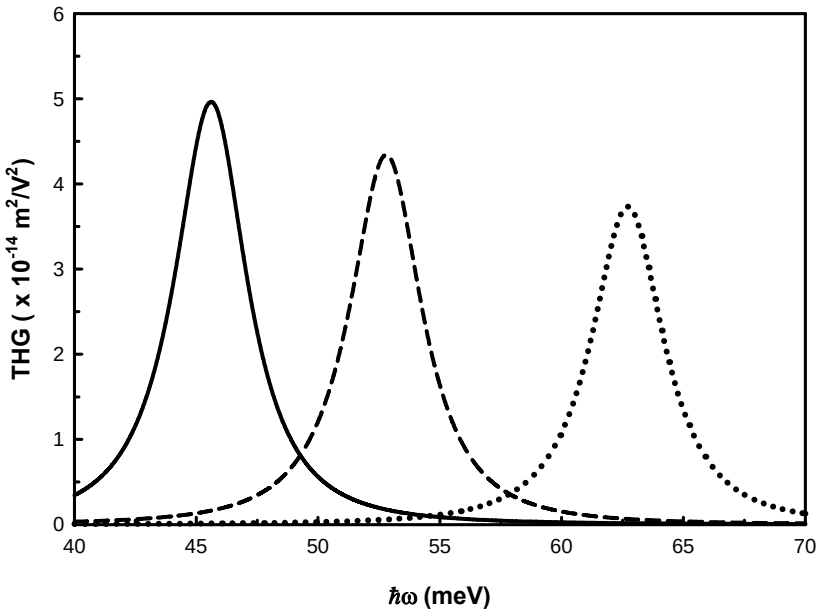


Şekil 8.5. SHG katsayısının pik değerinin iki farklı V_0 değeri için kuyu genişliği ile değişimi.

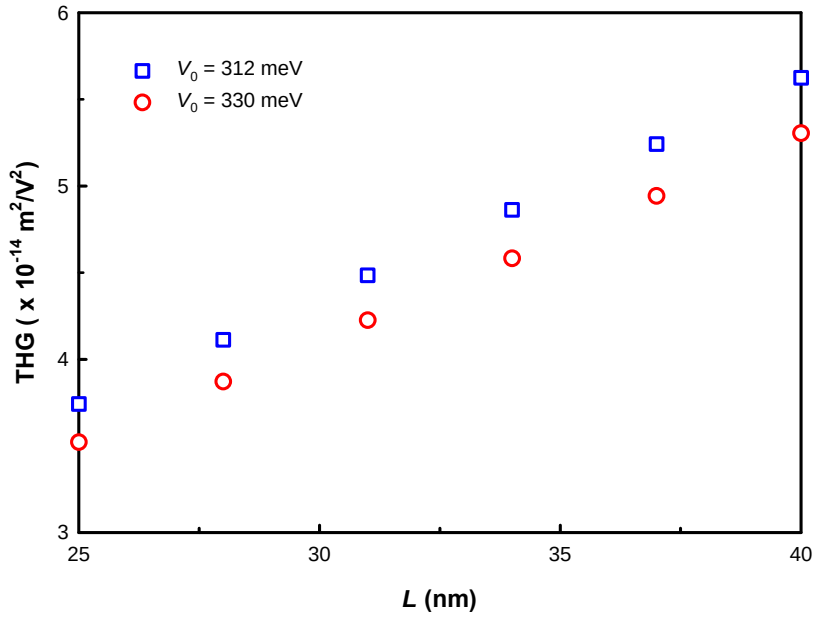
8.5. Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda THG Katsayısı

Daha önceden de belirtildiği gibi sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunda enerji seviyeleri yaklaşık olarak eşit aralıklarla sıralanmaktadır. Bu nedenle sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunda, ikinci mertebe süreçlere benzer şekilde büyük üçüncü mertebe NL süreçlerin de elde edilmesi beklenir. Bu kesimde de, yapı içerisindeki ardışık ilk dört seviye göz önüne alınarak THG katsayısı hesaplandı.

Şekil 8.6, THG katsayısının üç farklı L değeri için foton enerjisi ile değişimini göstermektedir. Şekil 8.7' de de, THG pik değerinin iki farklı V_0 değeri için L ile değişimi görülmektedir. Şekil 8.6 ve 8.7' den, THG katsayısının L ile arttığı fakat V_0 ile azaldığı görülür. Dolayısıyla, sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunda büyük THG katsayısı elde etmek için küçük bariyer yüksekliğine ve büyük kuyu genişliğine sahip yapılar kullanılmalıdır.



Şekil 8.6. THG katsayısının üç farklı kuyu genişliği için foton enerjisi ile değişimi (V_0 = 312 meV). Sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla, L' nin 35 nm, 30 nm ve 25 nm değerlerine karşılık gelir.



Şekil 8.7. THG katsayısının pik değerinin iki farklı V_0 değeri için kuyu genişliği ile değişimi.

8.6. Elektrik Alan Etkisi Altındaki Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı

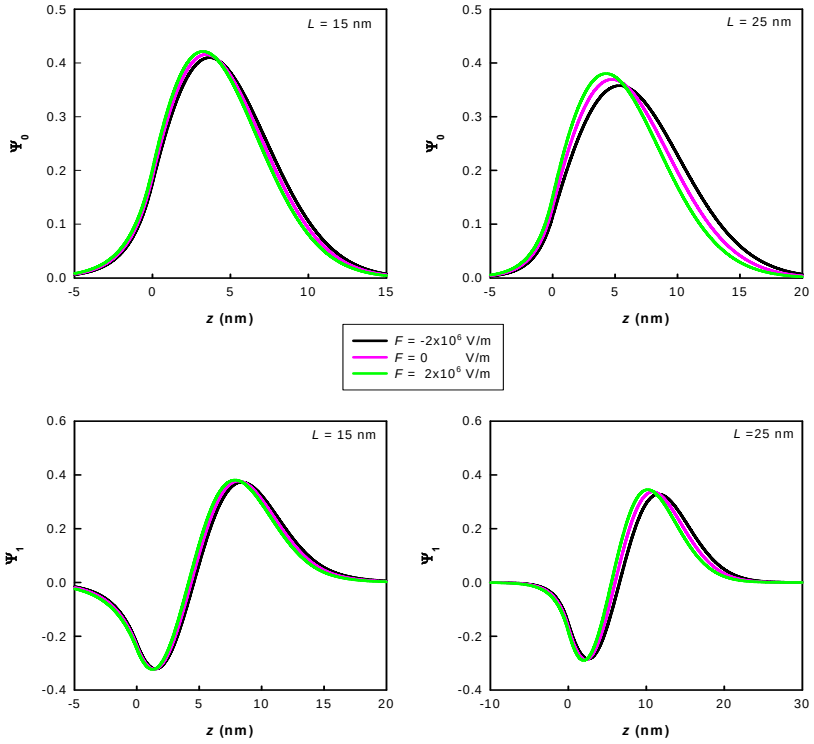
Bu kesimde, sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunun elektronik yapısına elektrik alanın etkisi çalışılacaktır. Böylesi bir durum için elektronik yapı,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)}\frac{d^2\psi_n(z)}{dz^2}+V(z)\psi_n(z)+qFz\psi_n(z)=E_n\psi_n(z) \tag{8.2}$$

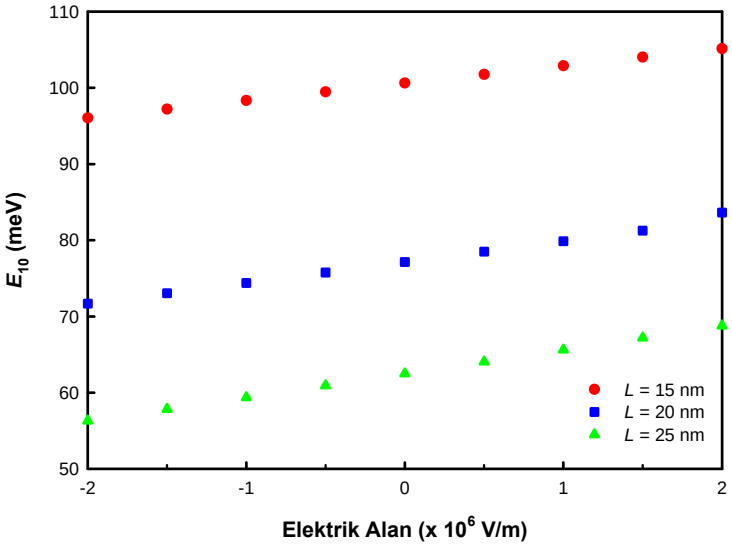
ile verilen Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilir. Bu ifadedeki $V(z)$, Denk. (8.1) ile verilen sonlu yarı-parabolik potansiyeli; F, kuantum kuyusunun büyütme (z) doğrultusu boyunca uygulanan elektrik alanı ve q, elektron yükünü göstermektedir. Denk. (8.2), Numerov yöntemi kullanılarak kolaylıkla çözülebilir. Hesaplamalarda, hem pozitif hem de negatif yönlü elektrik alan göz önüne alınmıştır.

Şekil 8.8' de üç farklı elektrik alan için ilk iki seviyenin normalize dalga fonksiyonları görülmektedir. Şekilden de kolaylıkla görülebileceği gibi elektrik alanın etkisi daha büyük kuyu genişliklerinde kendini hissettirmektedir.

Şekil 8.9' da, ilk iki seviye için enerji seviyeleri arasındaki farkın (E_{10}) elektrik alanla değişimi görülmektedir. Şekilden, artan L değerleriyle E_{10}' ın azaldığı fakat elektrik alanla E_{10}' ın arttığı görülür. Ayrıca, büyük L değerleri için elektrik alanın E_{10}' a etkisi daha belirginleşir.



Şekil 8.8. Sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusundaki ilk iki bağlı seviyenin normalize dalga fonksiyonları.

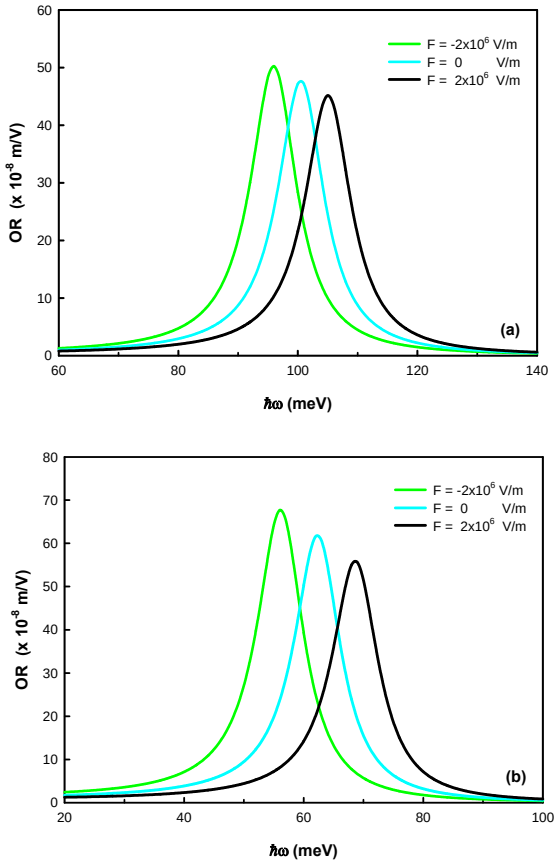


Şekil 8.9. Sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusundaki ilk iki bağlı seviyenin enerji farkının elektrik alanla değişimi.

8.7. Elektrik Alan Etkisi Altındaki Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda OR Katsayısı

Bu kesimde, sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusundaki ilk iki seviye göz önüne alınarak OR katsayısının elektrik alanla değişimi incelenecektir.

Şekil 8.10'da üç farklı elektrik alan değeri için OR katsayısının foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. Şekil 8.10.a ve b' de, kuyu genişlikleri sırasıyla, 15 nm ve 25 nm olarak seçilmiştir.



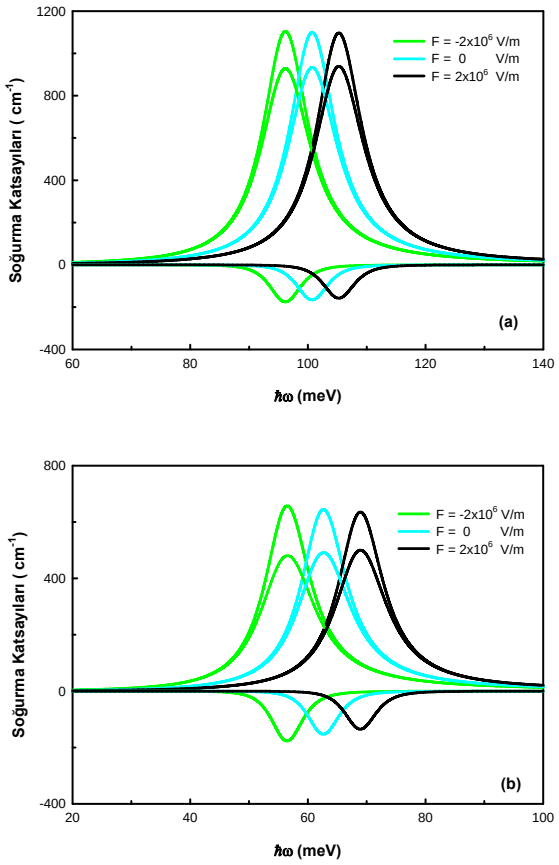
Şekil 8.10. OR katsayısının üç farklı elektrik alan için foton enerjisi ile değişimi. **a.** L = 15 nm ve **b.** L = 25 nm.

Şekilden, pozitif yönlü elektrik alanın OR katsayısını azalttığı fakat negatif yönlü alanın ise ilgili katsayıyı artırdığı görülür. Bu durum, negatif yönlü elektrik alanın etkisiyle yapının asimetrisinin artmasından ve pozitif yönlü alanın etkisiyle de yapının asimetrisinin azalmasından kaynaklanır. Elektrik alanın OR spektrumuna etkisi büyük L değerlerinde daha belirgin hale gelmektedir. Ayrıca, OR spektrumu, negatif yönlü alanın etkisiyle düşük enerjilere doğru kayarken pozitif yönlü alanın etkisiyle yüksek enerjilere doğru kaymaktadır. Göz önüne alınan yarı-parabolik potansiyele sahip yapıda OR piki için elde edilen değerler hem GaAs'ın hem de literatürde çalışılan pek çok yapının alınganlık değerinden çok daha büyüktür (Zaluzny 1993b).

8.8. Elektrik Alan Etkisi Altındaki Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda Lineer ve NL Soğurma Katsayıları

Bu kesimde, sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusundaki ilk iki seviye göz önüne alınarak lineer ve NL soğurma katsayılarının elektrik alanla değişimi incelenecektir. Hesaplamalarda hem pozitif hem de negatif yönlü elektrik alanın etkileri göz önüne alınacaktır.

Şekil 8.11'de üç farklı elektrik alan değeri için lineer, NL ve toplam soğurma katsayılarının foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. Şekil 8.11' a ve b' de, kuyu genişlikleri sırasıyla, 15 nm ve 25 nm olarak seçilmiştir. L = 15 nm için, elektrik alanın soğurma katsayılarını önemli ölçüde değiştirmediği fakat L = 25 nm için, elektrik alanın etkisinin biraz daha önemli hale geldiği görülür.

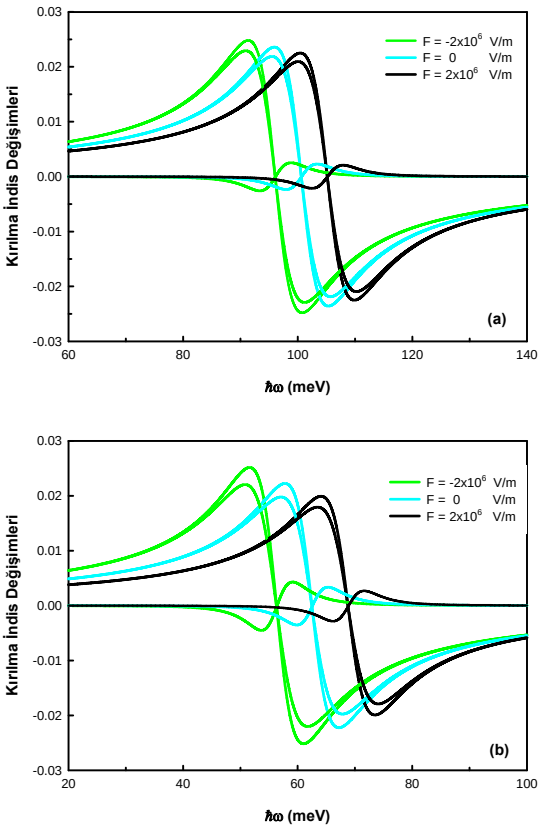


Şekil 8.11. Lineer, NL ve toplam soğurma katsayılarının üç farklı elektrik alan için foton enerjisi ile değişimi. **a.** L = 15 nm ve **b.** L = 25 nm.

8.9. Elektrik Alan Etkisi Altındaki Sonlu Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda Şiddete Bağlı Kırılma İndisi

Bu kesimde, sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunun kırılma indisindeki lineer, NL ve toplam değişimlere elektrik alanın etkisi incelenmiştir.

Şekil 8.12' de üç farklı elektrik alan için foton enerjisinin fonksiyonu olarak kırılma indisindeki lineer, NL ve toplam değişimler görülmektedir. Şekil 8.12.a ve b' de, kuyu genişlikleri sırasıyla, 15 nm ve 25 nm olarak seçilmiştir. Şekilden, lineer, NL ve toplam kırılma indis değişimlerine elektrik alanın etkisinin L = 25 nm için daha belirgin olduğu görülür.



Şekil 8.12. Kırılma indisindeki lineer, NL ve toplam değişimler. **a.** L = 15 nm ve **b.** L = 25 nm.

8.10. Sonuçlar ve Tartışma

Bu bölümde, NL optiksel uygulamalar için bir sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusu göz önüne alınmıştır. Bu kuantum kuyusu, deneysel olarak üretilmiş olup büyük SHG ve THG katsayıları elde etmek için gerekli olan rezonans şartlarını da sağlamaktadır (Bewley *ve ark.* 1993). Öncelikli olarak, sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunun elektronik yapısı Numerov yöntemi kullanılarak çözülmüştür. Daha sonra, bu yapıda, OR, SHG ve THG gibi NL optiksel süreçlere kuyu genişliği ve bariyer yüksekliği gibi yapısal parametrelerin etkileri çalışılmıştır. Sonuç olarak, yapısal parametrelerin ilgili optiksel süreçleri önemli ölçüde etkilediği görülmüştür. Bundan sonraki kısımda, pozitif ve negatif yönlü elektrik alanın etkisi altındaki sonlu

yarı-parabolik kuantum kuyu modeli optiksel uygulamalar için düşünülmüştür. Bu yapı içerisindeki ilk iki seviye göz önüne alınarak OR katsayısına, lineer ve NL soğurma katsayılarına ve kırılma indis değişimlerine elektrik alanın etkileri çalışılmıştır. Sonuç olarak, pozitif ve negatif yönlü elektrik alanın etkisiyle kuantum kuyusunun asimetrisinin ayarlanabildiği görülmüştür. Göz önüne alınan kuantum kuyusunda ilgili optiksel alınganlıklar için çok büyük değerler elde edilmiştir.

9. YORUM ve ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, yarıiletken kuantum kuyularındaki ISB geçişlerle ilgili çeşitli NL optiksel özellikler incelenmiştir. NL optiksel alınganlıklar için açık analitik ifadeler, yoğunluk matris formalizmi kullanılarak elde edilmiştir. OR, SHG gibi ikinci mertebe süreçlerle THG, lineer ve NL soğurma katsayıları ve kırılma indis değişimleri gibi üçüncü mertebe süreçlere kuyu genişliğinin, bariyer yüksekliğinin, eksitonun ve elektrik alanın etkileri detaylı olarak çalışılmıştır.

Asimetrik kuantum kuyuları NL optikte son derece önemlidir. OR ve SHG gibi ikinci mertebe NL alınganlıklar sadece asimetrik yapılarda elde edilebilirler. Üçüncü mertebe NL alınganlıklar hem simetrik hem de asimetrik kuantum kuyularında gözlenebilmelerine rağmen potansiyel profilindeki asimetri büyük üçüncü mertebe alınganlıklar elde etmede yararlı olur. Kuantum kuyularındaki asimetri iki yolla elde edilebilir. Birinci yol, MBE ve MOCVD gibi büyütme tekniklerini kullanarak asimetrik potansiyele sahip yapılar üretmektir. İkinci yol ise kuantum kuyusunun büyütme doğrultusu boyunca elektrik alan uygulamaktır. Bu tür asimetrik kuantum kuyularında büyük NL alınganlıklar elde etmenin çeşitli yolları vardır. İlk yol, potansiyelin asimetrisiyle oynanarak ilgili dipol matris elemanlarının maksimum değerlerini elde etmektir. İkinci yol, büyük dipol matris elemanları elde etmeye çalışırken gönderilen ışığın frekansının kuantum kuyusunun ardışık enerji seviyeleri arasındaki geçiş frekanslarına eşit olduğu rezonans durumlarını yakalamaktır. İkinci yoldan elde edilen alınganlık değerleri ilk yolla elde edilen değerlerden çok daha büyük olmasına rağmen rezonans şartlarını sağlayan yapıların elde edilmesi çok güçtür. Rezonans şartlarını sağlamaksızın sadece dipol matris elemanlarını ve bunun sonucunda da optiksel alınganlıkları artırmaya yönelik literatürde çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Ancak yapılan çalışmaların çoğunda ya idealleştirilmiş kuantum kuyuları ya da sabit asimetrili kuantum kuyuları kullanılmıştır.

Tez çalışmasının ilk aşamasında, NL optiksel uygulamalar için bir asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusu göz önüne alınmıştır. Bu yapı hem deneysel olarak üretilebilir olması hem de asimetrisinin esnek olması nedeniyle oldukça önemlidir. Asimetrik didörtgen kuantum kuyusunun elektronik yapısı bir boyutlu Schrödinger denklemi çözülerek elde edilmiştir. Hesaplamalarda hem etkin kütle farklılıkları hem

de sonlu bariyer yüksekliği göz önüne alınmıştır. Asimetrik dikdörtgen kuantum kuyusunun iletim bandı içerisindeki ilk iki seviye dikkate alınarak SHG, OR, lineer ve NL soğurma katsayıları hesaplanmıştır. Kuyu genişliği ve potansiyel asimetrisi gibi parametrelerin ilgili NL optiksel özelliklere etkileri detaylı olarak incelenmiştir. Sonuç olarak, yapısal parametrelerin ilgili süreçleri önemli ölçüde etkilediği görülmüştür.

Tez çalışmasının ikinci aşamasında, hem rezonans şartlarını sağlayan hem de büyük dipol matris elemanlarına sahip asimetrik yarı-parabolik kuantum kuyuları NL optiksel uygulamalar için düşünülmüştür. Öncelikle, idealleştirilmiş bir yarı-parabolik kuantum kuyu modeli göz önüne alınmıştır. Bu yapı için enerji seviyeleri ve zarf dalga fonksiyonları harmonik osilatör çözümleri kullanılarak analitik olarak elde edilmiştir. Bu analitik çözümler ilgili optiksel süreçleri açıklamada oldukça yararlı olmuştur. Öncelikle, yarı-parabolik kuantum kuyusunda ilk iki seviye göz önüne alınarak OR katsayısı hesaplanmıştır. Daha sonra, aynı yapı içerisinde elektronun ve eksitonun sınırlandırıldığı durumlar için sırasıyla, SHG, THG, lineer ve NL soğurma katsayıları ve kırılma indis değişimleri hesaplandı. Her iki durum için ilgili alınganlıklar arasında açık analitik ifadeler elde edildi. Sonuç olarak, eksitonun göz önüne alındığı durumdaki alınganlıkların elektronun göz önüne alındığı durumdaki alınganlıklardan daha büyük olduğu görüldü. Bir sonraki bölümde, NL optiksel uygulamalar için bir sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusu göz önüne alındı. Bu model, idealleştirilmiş yarı-parabolik kuyuya göre daha gerçekçi olup deneysel olarak da üretilmiştir. Bu nedenle, bu yapının NL optiksel özelliklerinin incelenmesi oldukça yararlıdır. Sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunun elektronik yapısı, Schrödinger denkleminin nümerik çözümünden elde edildi. Elde edilen sonuçlardan bu yapı içerisindeki enerji seviyelerinin de eşit aralıklarla sıralandığı görülmüştür. Dolayısıyla kuyu genişliği ve bariyer yüksekliği gibi yapı parametrelerinin geniş bir aralığı için rezonans şartları sağlanmaktadır. Bu durum, istenilen enerji aralığında büyük optiksel alınganlıklar elde etmek için oldukça önemlidir. Sonlu yarı-parabolik kuantum kuyusunda iki, üç ve dört seviye göz önüne alınarak sırasıyla, OR, SHG ve THG katsayıları hesaplanmıştır. Literatürle karşılaştırıldığında ilgili katsayılar için çok büyük değerler elde edilmiştir.

Ayrıca, yapı parametrelerinin ilgili alınganlıkları önemli ölçüde etkilediği görülmüştür.

Son olarak, yine aynı sonlu yarı-parabolik kuyuda NL optiksel süreçlere pozitif ve negatif yönlü elektrik alanın etkileri çalışılmıştır. Yapı içerisindeki ilk iki seviye göz önüne alınarak OR, lineer ve NL soğurma katsayıları ve kırılma indis değişimleri hesaplanmıştır. Sonuçta, elektrik alanın ilgili optiksel süreçleri önemli ölçüde etkilediği görülmüştür. Ayrıca, çift yönlü elektrik alanın etkisiyle yapının asimetrisinin artırılıp azaltılabildiği görülmüştür. Elektrik alanla potansiyel asimetrisi arasındaki böylesi bir ilişki optiksel uygulamalar için son derece önemli olacaktır.

Sonuç olarak, farklı kuantum kuyu modelleri kullanılarak NL optiksel özelliklere yapısal parametrelerin, eksitonun ve elektrik alanın etkileri detaylı olarak incelenmiştir. Hesaplamalarda elektron yoğunluğu yeterince düşük seçilmiş olup bunun sonucunda elektronlar arası etkileşmelerin NL optiksel süreçlere katkıları göz önüne alınmamıştır.

Bundan sonraki aşamada, elektrik alanın yanı sıra dış manyetik alanın da NL optiksel süreçlere etkileri çalışılabilir. Ayrıca, elektron yoğunluğunun daha yüksek değerleri için elektronlar arasındaki etkileşmelerin katkıları da incelenebilir.

Yine bu tez çalışmasındaki bütün hesaplamalarda kuantum kuyu yapılar kullanılmış olup bundan sonraki yapılacak çalışmalarda kuantum telleri ve kuantum noktaları gibi yapıların NL optik özellikleri çalışılabilir.

KAYNAKLAR

Ahn, D., Chuang, S. L. 1987a Intersubband optical absorption in a quantum well with an applied electric field. Physical Review B 35:4149.

Ahn, D., Chuang, S.L. 1987b Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field. IEEE Journal of Quantum Electronics 23:2196.

Almogy, G., Yariv, A. 1995 Resonantly-enhanced nonlinear optics of intersubband transitions. Journal of Nonlinear Optical Physics 4:401.

Allen, S.J., Tsui, D.C., Vinter, B. 1976 On the absorption of infrared radiation by electrons in semiconductor inversion layers. Solid State Communications 20:425.

Baskoutas, S., Paspalakis, E., Terzis, A. 2006 Effects of excitons in nonlinear optical rectification in semiparabolic quantum dots. Physical Review B 74:153306.

Baskoutas, S., Paspalakis, E., Terzis, A. 2007 Excitonic effects in nonlinear optical rectification in small semi-parabolic quantum dots. Physica Status Solidi C 4:292.

Bass, M., Franken, P. A., Ward, J. F., Weinreich, G. 1962 Optical Rectification. Physical Review Letters 9:446.

Bastard, G. 1988 Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Editions de Physique, Paris.

Bewley, W. W., Felix, C. L., Plombon, J. J., Sherwin, M. S., Sundaram, M., Hopkins, P. F., Gossard, A. 1993 Far infrared second harmonic generation in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heterostructures: perturbative and nonperturbative response. Physical Review B 48:2376.

Bibik, A. I., Gerlach, B., Smondyrev, M. A. 2003 Large polaron in an asymmetrical rectangular quantum well. Physica Status Solidi B 237:186.

Bloembergen, N. 1996 Nonlinear Optics. World Scientific, Singapore.

Bondarenko. V., Zaluzny, M. 2000 Second-harmonic generation in quantum wells: the role of many-body effects. Physica E 7:212.

Boucaud, P., Julien, F. H., Yang, D. D., Lourtioz, J. M., Rosencher, E., Bois, Ph., Nagle, J. 1990 Detailed analysis of second harmonic generation near 10.6 μm in GaAs/AlGaAs asymmetric quantum wells. Applied Physics Letters 57:215.

Boyd, R. W. 2003 Nonlinear Optics. Academic Press, San Diego.

Capasso, F., Mohammed, K., Cho, A. Y. 1986 Resonant tunneling through double barriers, perpendicular quantum transport phenomena in superlattice, and their device applications. IEEE Journal of Quantum Electronics 22:1853.

Capasso, F., Sirtori, C., Cho, A. Y. 1994 Coupled quantum well semiconductors with giant electric field tunable nonlinear optical properties in the infrared. IEEE Journal of Quantum Electronics 30:1313.

Dave, D. P. 1993 Enhanced refractive index change in asymmetrical quantum wells with an applied electric field. Journal of Applied Physics 74:6872.

Dave, D.P. 1994 Enhanced field control of second-harmonic generation in compositionally asymmetrical quantum wells. Journal of Applied Physics 75:12.

Davies, J. H. 1999 The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction. Cambridge University Press, USA.

Dingle, R., Wiegmann, W., Henry, C. 1974 Quantum states of confined carriers in very thin $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heterostructures. Physical Review Letters 33:827.

Fejer, M. M., Yoo, S. J. B., Byer, R. L., Harwit, A., Harris, Jr., J. S. 1989 Observation of extremely large quadratic susceptibility at 9.6-10.8 μm in electric-field-based AlGaAs quantum wells. Physical Review Letters 62:1041.

Franken, P.A., Hill, A.E., Peters, C.W., Weinreich, G. 1961 Generation of optical harmonics. Physical Review Letters 7:118.

Gmachl, C., Belyanin, A., Sivco, D.L., Peabody, M.L., Owschimikow, A., Sergent, M., Capasso, F., Cho, A.Y. 2003 Optimized second harmonic generation in quantum cascade lasers. IEEE Journal of Quantum Electronics 39:1345.

Gurnick, M.K., DeTemple, T.A. 1983 Synthetic nonlinear semiconductors. IEEE Journal of Quantum Electronics 19:791.

Harrison, P. 2005 Quantum Wells, Wires and Dots. Second Edition. John Wiley & Sons, New York, USA.

Heyman, J. N., Craig, K., Galdrikan, B., Sherwin, M. S., Campman, K., Hopkins, P. F., Fafard, S., Gossard, A. C. 1994 Resonant harmonic generation and dynamic screening in a double quantum well. Physical Review Letters 72:2183.

Huang, Y. M., Lien, C. S. 1994 The enhancement of optical third harmonic susceptibility in a parabolic quantum well by triple resonance. Journal of Applied Physics 75:3223.

Huang, D. 1996 Formula for Coulomb effect on the nonlinear optical responses in quantum wells. Physical Review B 53:13645.

Huang, Y., Wang, C., Lien, C. 1995 Electric field enhancement and extinguishment of optical second harmonic generation in asymmetric coupled quantum wells. IEEE Journal of Quantum Electronics 31:1717.

Indjin, D., Ikonic, Z., Milanovic, V., Radovanovic, J. 1998 Optimization of resonant second and third order nonlinearities in step and continuously graded semiconductor quantum wells. IEEE Journal of Quantum Electronics 34:795.

Karabulut, İ., Şafak, H., Tomak, M. 2008a Excitonic effects on the nonlinear optical properties of small quantum dots. Journal of Physics D: Applied Physics 41:155104.

Karabulut, İ., Şafak, H., Tomak, M. 2008b Intersubband resonant enhancement of the nonlinear optical properties in compositionally asymmetric and interdiffused quantum wells.Journal of Applied Physics 103:103116.

Karabulut, İ., Atav, Ü., Şafak, H., Tomak, M. 2007a Theoretical investigation of intersubband nonlinear optical rectification in $Al_{xl}Ga_{1-xl}As/GaAs/Al_{xr}Ga_{1-xr}As$ asymmetric rectangular quantum wells. Physica status solidi B 244:3313.

Karabulut, İ., Atav, Ü., Şafak, H., Tomak, M. 2007b Second harmonic generation in an asymmetric rectangular quantum well under hydrostatic pressure. Physica B 393:133.

Karabulut, İ., Atav, Ü., Şafak, H., Tomak, M. 2007c Linear and nonlinear intersubband optical absorptions in an asymmetric rectangular quantum well. European Physical Journal B 55:283.

Karabulut, İ., Atav, Ü., Şafak, H. 2005a Comment on “Electric field effect on the second order nonlinear optical properties of parabolic and semiparabolic quantum wells. Physical Review B 72:207301.

Karabulut, İ., Şafak, H., Tomak, M. 2005b Nonlinear optical rectification in asymmetrical semiparabolic quantum wells. Solid State Communications 135:735.

Karabulut, İ., Şafak, H. 2005c Nonlinear optical rectification in semiparabolic quantum wells with an applied electric field. Physica B 368:82.

Karunasiri, R. P. G., Mii, Y. J., Wang, K. L., 1990 Tunable infrared modulator and switch using Stark shift in step quantum wells. IEEE Electron Device Letters 11:227.

Khachatrian, A.Zh., Sedrakian, D.M., Badalyan, V.D., Khoetsyan, V.A. 2007 Efficient second harmonic generation in a double quantum well structure. Semiconductors 41:66.

Khurgin, J. B. 1989 Second order intersubband nonlinear optical susceptibilities of asymmetric quantum well structures. Jornal of The Optical Society of America B 6:1673.

Khurgin, J. B., Li, S. 1993 Two photon absorption and nonresonant nonlinear index of refraction in the intersubband transitions in the quantum wells. Applied Physics Letters 62:126.

Khurgin, J. B. 1999 Second-order nonlinearities and optical rectification. Semiconductor Semimetals 59:1.

Kuhn, K.J., Iyengar, G.U., Yee, S. 1991 Free carrier induced changes in the absorption and refractive index for intersubband optical transitions in $Al_xGa_{1-x}As$/GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells. Journal of Applied Physics 70:5010.

Levine, B. F., Choi, K. K., Bethea, C. G., Walker, J., Malik, R. J. 1987 New 10 μm infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling GaAlAs superlattices. Applied Physics Letters 50:1092.

Levine, B. F., Hasnain, G., Bethea, C. G., Chand, N. 1989 Broadband 8-12 μm high sensitivity GaAs quantum well infrared photodetector. Applied Physics Letters 54:2704.

Li, S., Khurgin, J. B. 1993 Two photon confined to continuum intersubband transitions in the semiconductor heterostructures. Journal of Applied Physics 73:4367.

Li, E.H. 1996 Interdiffusion as a means of fabricating parabolic quantum wells for the enhancement of the nonlinear third-order susceptibility by triple resonance. Applied Physics Letters 69:460.

Lien, C., Huang, Y., Wang, J., 1994 Triply resonant enhancement of third-order nonlinear optical susceptibility in compositionally asymmetric coupled quantum wells. Journal of Applied Physics 76:1008.

Liu, A., Chuang, S.L., Ning, C.Z. 2000 Piezoelectric field-enhanced second-order nonlinear optical susceptibilities in wurtzite GaN/AlGaN quantum wells. Applied Physics Letters 76:333.

Liu, H.C., Cappaso, F. 2000 Intersubband transitions in quantum wells: Physics and device applications I. Academic Press, San Diego.

Martinet, E., Luc, F., Rosencher, E., Bois, Ph., Delaitre, S. 1992 Electrical tunability of infrared detectors using compositionally asymmetric GaAs/AlGaAs multi quantum wells. Applied Physics Letters 60:895.

Milanovic, V., Ikonic. Z., Indjin, D. 1996-II Optimization of resonant intersubband nonlinear optical susceptibility in semiconductor quantum wells: The coordinate transform approach. Physical Review B 53:10887.

Mosely, T.S., Belyanin, A., Gmachl, C., Sivco, D.L., Peabody, M.L., Cho, A.Y. 2004 Third harmonic generation in a quantum cascade laser with monolithically integrated resonant optical nonlinearity. Optics Express 12:2972.

Nevou, L., Tchernycheva, M., Julien, F., Raybaut, M., Godard, A., Rosencher, E., Guillot, F., Monroy, E. 2006 Intersubband resonant enhancement of second harmonic generation in GaN/AlN quantum wells. Applied Physics Letters 89:151101.

Pang, T. 2006 An introduction to computational physics Second Edition Cambridge University Pres, New York USA.

Park, T., Gumbs, G., Chen, Y.C. 1999 Properties of the second–order nonlinear optical susceptibility $\chi^{(2)}$ in asymmetric undoped AlGaAs/InGaAs double quantum wells. Journal of Applied Physics 86:1467.

Que, W., 1992 Excitons in quantum dots with parabolic confinement. Physical Review B 45:11036.

Radovanovic, J., Milanovic, V., Ikonic, Z., Indjin, D. 2004 Quantum well shape optimization of continuously graded $Al_xGa_{1-x}N$ structures by combined supersymmetric and coordinate transform methods. Physical Review B 69:115311.

Radovanovic, J., Milanovic, V., Ikonic, Z., Indjin, D. 2001 Global optimization of intersubband resonant third harmonic generation in semiconductor quantum-well structures. Solid State Communications 118:145.

Rosencher, E., Bois, Ph., Nagle, J., Costard, E., Delaitre, S. 1989 Observation of nonlinear optical rectification at 10.6 μm in compositionally asymmetrical AlGaAs multiquantum wells. Applied Physics Letters 55:1597.

Rosencher, E., Bois, Ph., Nagle, J., Delaitre, S. 1989 Second harmonic generation by intersubband transitions in compositionally asymmetric MQWs. Electronics Letters 25:1063.

Rosencher, E., Bois, Ph., Vinter, B., Nagle, J., Kaplan, D. 1990 Giant nonlinear optical rectification at 8-12 μm in asymmetric coupled quantum wells. Applied Physics Letters 56:1822.

Rosencher, E., Bois, Ph. 1991 Model system for optical nonlinearities-asymmetric quantum wells. Physical Review B 14:11315.

Rosencher, E., Fiore, A., Vinter, B., Berger, V., Bois, Ph., Nagle, J. 1996 Quantum engineering of optical nonlinearities. Science 271:168.

Shen, Y. R. 2003 The Principles of Nonlinear Optics. John Wiley& Sons, USA.

Shi, J. J., Zhu, X. Q., Liu, Z. X., Pan, S. H., Li, X. U. 1997 Polaron effects in asymmetric semiconductor quantum wells. Physical Review B 55:4670.

Sirtori, C., Capasso, F., Sivco, D. L., Chu, S. N. G., Cho, A. Y. 1991 Observation of large second order susceptibility via intersubband transitions at lamda approximately 10μm in asymmetric coupled AlInAs/GaInAs quantum wells. Applied Physics Letters 59:2302.

Sirtori, C:, Capasso, F., Sivco, D. L, Cho, A. Y. 1992 Giant, triply resonant, third-order nonlinear susceptibility in coupled quantum wells. Physical Review Letters 68:1010

Tomic, S., Milanovic, V., Ikonic, Z. 1997a Optimization of intersubband resonant second-order susceptibility in asymmetric graded $Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells using supersymmetric quantum mechanics. Physical Review B 56:1033.

Tomic, S., Milanovic, V., Ikonic, Z. 1997b Optimization of nonlinear optical rectification in quantum wells using the supersymmetric quantum mechanics. Optics Communications 143:214.

Tsang, L., Ahn, D., Chuang, S. L. 1988 Electric field control of optical second harmonic generation in a quantum well. Applied Physics Letters 52:697.

Tsang, L., Chuang, S. L., Lee, S. M. 1990 Second order nonlinear optical susceptibility of a quantum well with an applied electric field. Physical Review B 41:5942.

Walrod, D., Auyang S. Y., Wolff, P. A., Sugimoto, M. 1991 Observation of third order optical nonlinearity due to intersubband transitions in AlGaAs/GaAs superlattices. Applied Physics Letters 59:2932.

Wang, G. 2005 Third-harmonic generation in cylindrical parabolic quantum wires with an applied electric field. Physical Review B 72:155329.

Ward, J. F. 1966 Absolute measurement of an optical rectification coefficient in ammonium dihydrogen phosphate. Physical Review 143:569.

Weisbuch, C., Vinter, B. 1991 Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals and Applications. Academic Press, USA.

West, L.C., Eglash, S.J. 1985 First observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction band of a GaAs quantum well. Applied Physics Letters 46:1156.

Yıldırım, H., Tomak, M. 2005 Nonlinear optical properties of a Pöschl-Teller quantum well. Physical Review B 72:115340.

Yıldırım, H., Tomak, M. 2006a Third harmonic generation in a quantum well with adjustable asymmetry under an electric field. Physica status solidi B 243:4057.

Yıldırım, H., Tomak, M. 2006b Optical absorption of a quantum well with an adjustable asymmetry. European Physical Journal B 50:559.

Yıldırım, H., Tomak, M. 2006c Intensity-dependent refractive index of a Pöshl-Teller quantum well. Journal of Applied Physics 99:093103.

Yuen, S. J. 1983 Fast relaxing absorptive nonlinear refraction in superlattices. Applied Physics Letters 43:813.

Zaluzny, M. 1992a Coulomb enhancement of the third-order optical nonlinearities in quantum wells. Applied Physics Letters 61:2509.

Zaluzny, M. 1992b Intersubband absorption line shape in tunneling superlattices. Applied Physics Letters 60:1486.

Zaluzny, M. 1993a Influence of the depolarization effect on the nonlinear intersubband absorption spectra of quantum wells. Physical Review B 47:3995.

Zaluzny, M. 1993b Saturation of intersubband absorption and optical rectification in asymmetric quantum wells. Journal of Applied Physics 74:4716.

Zaluzny, M, Bondarenko, V. 1996 Influence of the depolarization effect on third-harmonic generation in quantum wells. Journal of Applied Physics 79:6750.

Zaluzny, M. 1995a On the doubly resonant difference frequency mixing in an asymmetric quantum well structure. Journal of Applied Physics 78:2868.

Zaluzny, M. 1995b Influence of the depolarization effect on second-harmonic generation in asymmetric quantum wells. Physical Review B 51:9757.
Zaluzny, M. 1996 On second harmonic generation in nonparabolic quantum wells. Acta Physica Polonica A 90:1118.

Zhang, X., Xiong, G., Feng, X. 2006 Well width dependent third-order optical nonlinearities of a ZnS/CdSe cylindrical quantum dot quantum well. Physica E 33:120.

Zhang, L., Xie, H. 2003 Electric field effect on the second-order nonlinear optical properties of parabolic and semiparabolic quantum wells. Physical Review B 68:235315.