T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÇOK TABAKALI KUANTUM NOKTA YAPILARDA FOTOİYONLAŞMA TESİR KESİTİNİN HESAPLANMASI

Firdes TEK

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
KONYA, 2010

T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÇOK TABAKALI KUANTUM NOKTA YAPILARDA FOTOİYONLAŞMA TESİR KESİTİNİN HESAPLANMASI

FİRDES TEK

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 23/02/ 2010 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
(Üye)

Doç. Dr. Ahmet ERDİNÇ
(Üye)

Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN
(Danışman)

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ÇOK TABAKALI KUANTUM NOKTA YAPILARDA FOTOİYONLAŞMA TESİR KESİTİNİN HESAPLANMASI

Firdes TEK

Selçuk Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN
2010, 69 sayfa

Jüri: Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Doç. Dr. Ahmet ERDİNÇ
Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN

Bu çalışmada, çok tabakalı bir kuantum nokta yapıdaki hidrojen tipi bir safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesiti hesaplanmıştır. Bunun için iç içe geçmiş, merkezinde donor safsızlığı bulunan küresel GaAs/AlGaAS kuantum nokta yapısı göz önüne alınmıştır. İç kuantum nokta yarıçapı R_1, bariyer kalınlığı R_2 ve kuyu genişliği R_3 ile bağlanma enerjisinin ve fotoiyonlaşma tesir kesitinin değişimi ve ayrıca fotoiyonlaşma tesir kesitinin gelen normalize foton enerjisine göre değişimi incelenmiştir. Elektronik yapı hesaplamaları etkin kütle yaklaşımı altında, sonlu farklar yöntemiyle gerçekleştirilmiştir. Oluşturulan fark denklemleri Shooting yöntemiyle çözülerek, enerji seviyeleri ve bu enerji seviyelerine karşılık gelen radyal dalga fonksiyonları belirlenmiştir.

ANAHTAR KELİMELER: Kuantum noktası, Fotoiyonlaşma tesir kesiti, Donor bağlanma enerjisi

ABSTRACT

M.Sc. Thesis

CALCULATION OF PHOTOIONOZATION CROSS SECTION IN MULTI-LAYERED QUANTUM DOT

Firdes TEK

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

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN
2010, 69 pages

Jury: Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Assoc. Prof. Dr. Ahmet ERDİNÇ
Assoc. Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN

In this study, the photoionization cross section of a hydrogenic impurity which is in a multi-layered quantum dot has been calculated. For this purpose, engaged (core-shell-well-shell) spherical GaAs/AlGaAs quantum dot which has contained on-center impurity has been considered. The binding energy and the photoionization cross section have been studied as a function of core radius R_1, barrier thickness R_2 and well width R_3. In addition, variation of photoionization cross section with the normalized photon energy has been investigated. The electronic structure calculation has been performed by finite difference method in effective mass approximation. The energy levels and corresponding wave functions have been determined by these finite difference equations solving with shooting method.

KEY WORDS: Quantum dot, Photoionization cross section, Donor binding energy

ÖN SÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans tezi olarak sunulan bu çalışmada, çok tabakalı kuantum nokta yapılarda fotoiyonlaşma tesir kesiti teorik olarak incelenmiştir.

Teknolojideki gelişmelerle birlikte üretilmesi mümkün hale gelen tekli yarıiletken kuantum nokta yapılar teknolojide kullanılmaya başlanmış olup, temel fiziksel özellikleri daha iyi bilinir olmuştur. Bununla birlikte, çok tabakalı kuantum nokta yapıların elektronik ve optik özellikleri henüz tam olarak anlaşılmış değildir. Dolayısıyla bu tez çalışmasında, çok tabakalı kuantum nokta yapıdaki bir hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesiti ayrıntılı bir biçimde tabaka kalınlıklarına ve gelen ışığın enerjisine bağlı olarak araştırılmıştır.

Tez yöneticiliğimi üstlenerek çalışmamın her aşamasında, bilgi ve deneyimleri ile bana her konuda yardımcı olan ve zaman ayıran danışman hocam Sayın Doç. Dr. Mehmet Şahin ve ailesine en içten teşekkürlerimi sunarım

Ayrıca, tez çalışmamın başlangıcından bitimine kadar desteklerini ve aydınlatıcı bilgilerini esirgemeyen değerli hocalarım Prof. Dr. Haluk Şafak, Prof. Dr. Hamdi Şükür Kılıç ve Yrd. Doç. Dr. Ö.Faruk Yüksel'e teşekkürlerimi sunarım.

Yine bu tez çalışması boyunca beni en baştan beri gece-gündüz, hafta sonu demeden sabıla destekleyen sevgili eşime ve maddi-manevi destekleri için sevgili aileme de en içten şükranlarımı sunarım.

İÇİNDEKİLER

ÖZET……..… iii

ABSTRACT ……. iv

ÖNSÖZ ……..…… v

İÇİNDEKİLER …… vi

ŞEKİLLER DİZİNİ ……. viii

1. GİRİŞ 1

2. DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN HETEROYAPILAR 6

2.1. Yarıiletken Malzemeler ……... 6

2.2. Katkılama …… 7

2.2.1. Donor (Verici) Atomlarıyla Katkılama ……. 8

2.2.2. Akseptör (Alıcı) Atomlarıyla Katkılama ……..…… 10

2.3. Yarıiletken Heteroyapılar ..…….…… 11

2.3.1. Kuantum Kuyusu ….…… 13

2.3.2. Kuantum Telleri ……. 15

2.3.3. Kuantum Noktası …..…… 16

2.4. Kuantum Noktası Üretim Teknikleri ……...……...…… 18

2.4.1. Kimyasalla Eritme Tekniği …...…… 18

2.4.2. Elektrik Alan Modülasyonu Yöntemi …...…… 19

2.4.3. Yarıiletken Mikrokristaller …...…… 19

2.4.4. Kendiliğinden Büyüme Yöntemi …..…… 19

3. MODEL VE TEORİ 21

3.1. Etkin Kütle Yaklaşımı …...…….…… 21

3.2. Sonlu Farklar Yöntemi …...…… 22

3.2.1 Merkezi Fark Formülleri …… 24

3.3. Küresel Kuantum Noktası ….…….. 26

3.4. Çok Tabakalı Kuantum Nokta Yapı …..…… 29

3.5. Hidrojenik Safsızlık …… 31

3.6. Yarıiletken Malzemelerin Elektromanyetik Işınımla Etkileşmesi ……. 33

3.6.1. Elektromanyetik Alan Altındaki Yüklü Parçacıkların Geçiş Hızları …….. 35

3.6.2. Soğurma …… 38

3.7. Dipol Yaklaşıklığı …..…… 40

3.8. Fotoiyonlaşma Tesir Kesiti …….. 43

4. HESAPLAMA SONUÇLAR 45

4.1. Giriş …… 45

4.2. Safsızlığın Bağlanma Enerjilerinin Kuantum Nokta Yarıçapıyla Değişimi …….. 45

4.3. Fotoiyonlaşma Tesir Kesiti …… 53

4.3.1. Fotoiyonlaşma Tesir Kesitinin Tabaka Kalınlıklarına Bağlılığı … 54

4.3.2. Fotoiyonlaşma Tesir Kesitinin Gelen Foton Enerjisine Bağlılığı .. 60

5. YORUM VE TARTIŞMA 65

KAYNAKLAR 66

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. İletken, yalıtkan ve yarıiletken malzemelerin enerji bant diyagramları ……. 6

Şekil 2.2. Si kristali içerisinde akseptör ve donor atomları ile yapılan katkılama sonucu oluşan safsızlık enerji düzeyleri …….. 8

Şekil 2.3. Si kristali içindeki As safsızlık atomu ile yapılan katkılama ……... 9

Şekil 2.4. Bant yapısı üzerinde katkılamanın gösterimi ……... 10

Şekil 2.5. Si kristali içindeki Alüminyum safsızlık atomu ile yapılan katkılama …….. 10

Şekil 2.6. Düşük boyutlu yapılar farklı tür yarı iletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulur ……. 13

Şekil 2.7. Kuantum kuyusunun şematik gösterimi ……... 13

Şekil 2.8. Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi ……. 14

Şekil 2.9. Bir kuantum telinin şematik gösterimi ……. 16

Şekil 2.10. Kuantum noktanın şematik gösterimi …….. 17

Şekil 3.1. Sonlu farklar yöntemi ile bir fonksiyonun gösterilmesi …….. 22

Şekil 3.2. Dalga fonksiyonu ψ'nin n parçaya bölünmesi ……. 24

Şekil 3.3. Sonlu potansiyel basamağına sahip tek bir küresel kuantum nokta yapı ve potansiyel profili ……. 26

Şekil 3.4. Çok tabakalı küresel kuantum nokta yapısının şematik gösterimi ... 29

Şekil 3.5. Çok tabakalı kuantum noktasının potansiyel profili …… 30

Şekil 3.6. (a) Hidrojen atomu (b) Külçe bir yarıiletken içerisindeki yüksüz safsızlık …… 32

Şekil 4.1. Yüksüz hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin iç kuantum nokta yarıçapı R_1'e göre değişimi ……. 46

Şekil 4.2. $R_1=0,3a_0^*$ sabit ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_2 bariyer kalınlığına göre değişimi …… 47

Şekil 4.3. $R_1=0,6a_0^*$ sabit ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_2 bariyer kalınlığına göre değişimi …… 48

Şekil 4.4. $R_1=0,9a_0^*$ sabit ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_2 bariyer kalınlığına göre değişimi …… 49

Şekil 4.5. $R_1=0,6a_0^*$ ve $R_2=0,8a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_3 kuyu genişliğine göre değişimi …..……. 50

Şekil 4.6. $R_1=0,6a_0^*$ ve $R_2=1,0a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_3 kuyu genişliğine göre değişimi …… 50

Şekil 4.7. $R_1=0,8a_0^*$ ve $R_2=1,0a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_3 kuyu genişliğine göre değişimi …… 51

Şekil 4.8. $R_1=0,8a_0^*$ ve $R_2=1,2a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_3 kuyu genişliğine göre değişimi …… 52

Şekil 4.9. $R_2=R_1+0,4a_0^*$ ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin, R_1 çekirdek yarıçapı ile değişimi ……... 55

Şekil 4.10. $R_1=0,3a_0^*$ ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_2 bariyer genişliğine göre değişimi …… 55

Şekil 4.11. $R_1=0,5a_0^*$ ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_2 bariyer genişliğine göre değişimi …… 57

Şekil 4.12. $R_1=1,8a_0^*$ ve $R_3= R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_2 bariyer genişliğine göre değişimi …… 57

Şekil 4.13. $R_1=0,8a_0^*$ ve $R_2=1,0a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_3 kuyu genişliğine göre değişimi …… 58

Şekil 4.14. $R_1=0,8a_0^*$ ve $R_2=1,2a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_3 kuyu genişliğine göre değişimi …… 59

Şekil 4.15. $R_2=0,7\ a_0^*$, $R_3=1,1\ a_0^*$ ve R_1'nin farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, normalize foton enerjisine göre değişimi ……... 60

Şekil 4.16. $R_2=R_1+0,4a_0^*$, $R_3=R_2+0,4\ a_0^*$ ve R_1'in farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, normalize foton enerjisine göre değişimi ……. 61

Şekil 4.17. $R_2=R_1+0,4a_0^*$, $R_3=R_2+0,4a_0^*$ ve $E_s=\hbar\omega/(E_f-E_i)$'in farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, R_1 çekirdek yarıçapına göre değişimi ……... 62

Şekil 4.18. $R_1=0,6a_0^*$, $R_3=R_2+0,4\ a_0^*$ ve R_2'nin farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, normalize foton enerjisine göre değişimi ……... 62

Şekil 4.19. $R_1=0,6a_0^*$, $R_2=0,8a_0^*$ ve R_3'ün farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, normalize foton enerjisine göre değişimi ……... 64

1. GİRİŞ

Teknolojideki son gelişmeler, düşük boyutlu yarıiletken kuantum nano yapıların üretilmesini mümkün hale getirmiştir. Farklı özellik ve işlevlerdeki devre elemanlarının çok küçük hacim içerisine yerleştirilebilmeleri, yüksek entegrasyon, yüksek hız ve düşük güç tüketimi, elektrik ve optik sinyallerin işlenmesi gibi teknolojide, teknik kapasiteye ve sitemlere olan talepler nano yapılı düşük boyutlu sistemlerin üretilmesini tetiklemiştir. Bu ilerlemenin en önemli nedenlerinden birisi haberleşme ve iletişim teknolojisinde görülen hızlı değişim, diğeri ise değişik özel uygulamaların geliştirdiği deneysel ve teorik çalışmalardır. Nano yapılar üzerindeki çalışmalar kimya, fizik, moleküler biyoloji, malzeme bilimi ve mühendislik gibi çok geniş bir alana yayılmış bulunmaktadır. Sonlu boyutlara sahip olan nano yapılar, az sayıda elektron içerirler. Elektronlar ara yüzeye yakın çok ince bir tabaka içerisinde sınırlandırılabilir ve safsızlıklardan uzaysal olarak ayrılabilirler. Bu şekilde bir sınırlandırma sonucu, elektronun mobiltesi önemli ölçüde artar (Mitin ve ark. 1999).

Daha büyük band aralıklı düzlem yarıiletken tabakalarla sandviç yapılmış, düşük band aralıklı düzlem yarıiletken tabakadan oluşmuş çok ince yapılar, kuantum kuyusu olarak adlandırılırlar. Kuantum kuyularında elektronun hareketi bir doğrultuda sınırlandırılmış olmakla birlikte iki boyutta serbest parçacık gibi davranır. Diğer taraftan, kuantum teli olarak adlandırılan yapılarda ise elektronun hareketi iki boyutta sınırlandırılmış olmasına karşın bir boyutta serbest parçacık olarak hareket eder (Jacak ve ark. 1998, Petroff ve ark. 1982).

Mikro üretim teknolojisindeki son gelişmeler, daha büyük band aralıklı yarıiletken malzemeler içerisinde, birkaç nanometre çapında sanki sıfır boyutlu kuantum noktalarının üretilmesini mümkün hale getirmiştir (Sali ve ark. 2002). Böyle küçük sistemlerde elektron ve deşikler, üç boyutta hapsedilmiştir ve bu yapıların boyutlarına bağlı olarak az sayıda enerji seviyeleri vardır. Her üç uzaysal boyutta kesikli olan bu yapılar, kuantum noktası olarak adlandırılır. Bu yapıların pek çok özellikleri, atomların özelliklerine benzedikleri için yapay atom olarak da adlandırılır. Kuantum nokta yapı ilk olarak, Texas Insturument Incorporated şirketindeki bilim adamları tarafından 250 nm

kenar uzunluklu kare geometrili bir kuantum kutusuydu (Reed ve ark. 1986). Daha sonraki yıllarda üretilen kuantum noktalarının boyutları 30-45 nm'ye kadar küçülmüştür (Cibert ve ark. 1986, Temkin ve ark. 1987). Teknolojideki gelişmeler, zamanla çok değişik geometrilere (kübik, elipsoid, piramid şekilli, küresel, vs.) sahip kuantum nokta yapıların üretimine imkan sağlamıştır (Bimberg ve ark. 1999).

Kuantum noktaların içinde elektronik durumlar oldukça hassastır. Çoğu fiziksel özellikleri için, kuantum noktalardaki elektron sayısı çok önemlidir. Çünkü elektronların sayılarının artmasıyla, elektron-elektron etkileşmeleri önemli hale gelir ve etkin potansiyel değişir. Elektron-elektron etkileşmeleri, enerji seviyelerini yükseltirken, kuantum nokta içindeki bir donor safsızlığı da, aksine bu enerji seviyelerinin değerini küçültür. Kuantum noktalardaki sınırlandırma potansiyeli, elektronların sayısı ve safsızlıkların varlığı, bu yapıların elektriksel ve optiksel özelliklerini önemli bir şekilde değiştirir (Şahin 2008).

Kuantum kuyu veya kuantum tel yapılar kelimenin tam anlamıyla nano yapı değildirler. Çünkü bu yapılarda, hala en az bir serbestlik doğrultusu mevcuttur ve bu doğrultuda, yapının boyutları nanometre ölçeğinden çok daha büyüktür. Dolayısıyla bu tür yapılar, prensipte (en azından bir doğrultu için) sonsuz elektrona sahip olabileceklerinden sürekli bir elektron yoğunluğundan söz edilebilirken, elektron sayısının çok küçük olduğu kuantum noktalarında, parçacık hareketi tüm doğrultularda sınırlandırıldığından, sürekli bir enerji bandından söz edilemez. Enerji seviyeleri bir atoma benzer biçimde kesiklidir. Bunun için bu yapılar kuantum kuyusu ve kuantum tellerine göre daha avantajlı hale gelirler (Mitin ve ark. 1999).

Hidrojenik safsızlık problemi, düşük boyutlu sistemlerin birçok elektronik ve optik özelliklerinin anlaşılmasında, oldukça faydalı ve öğretici bir modeldir. Kuantum kuyu ve kuantum teline göre kuantum nokta yapılarda hidrojenik safsızlık, daha güçlü sınırlama ve daha büyük bağlanma enerjisi sergiler (Greene ve Bajaj 1983, Buczko ve Bassani 1996, Jiang ve Mccombe 1998, Şahin ve Tomak 2005).

Kuantum nokta içinde sınırlandırılmış hidrojenik safsızlık problemine, hem deneysel hem de teorik olarak çalışılmıştır. De Groot ve Temseidem (1946), küresel bir kuantum noktasının merkezindeki hidrojenik safsızlığı andıran küresel bir kuyu içerisine hapsedilmiş hidrojen atomunu göz önüne alarak, Schrödinger denklemini nümerik olarak çözüp, küresel kuyunun yarıçapının bir fonksiyonu olarak, elektronun safsızlığa bağlanma enerjilerini belirlemişlerdir. Chu, Hsiao ve Wei (1992) bu problemi, sonsuz derin potansiyel kuyusunda confluent hipergeometrik fonksiyonlarla çözmüşlerdir. Elde ettikleri enerjiler, Groot ve Temseidem'ın buldukları enerji ile aynıdır. Bu iki grup, sonsuz potansiyel kuyusundaki sınırlandırma durumunu, sadece kuyunun merkezindeki safsızlığı dikkate alarak çözümleme yapmışlardır.

1990'lı yıllarda, değişik bölgelerdeki radyal eşitsizliklerinin değişik seri formlarını kullanarak, sonlu küresel kare kuyu potansiyelindeki donor durumlarının tam çözümlerini nümerik yöntem kullanılarak elde edilmiştir (Zhu 1989). Zhu, Chen ve ark. (1990-1994), seri açılımı kullanarak kuantum noktasının merkezindeki bir safsızlığın bağlanma enerjisinin ve bağlanma enerjisinin maksimum değerinin, potansiyel bariyer yüksekliğine sıkı bir şekilde bağlı olduğunu göstermişlerdir. Bu problemi, merkezi dışında (off-center) safsızlık bulunan küresel kuantum noktası problemine, lineer varyasyonel yöntem kullanarak genişletmişlerdir. Porras-Montenegro ve Peréz-Merchancano (1992), varyasyonel yaklaşım kullanarak, hem sonsuz hem de sonlu sınırlandırılmış potansiyel kuyu modelleri için, nokta yarıçapının fonksiyonu olarak küresel kuantum noktasının merkezindeki safsızlığın bağlanma enerjilerini hesaplamışlar ve bu çalışmalarını kuantum noktasını içerisindeki safsızlığın konumunu dikkate alarak tekrar incelemişlerdir. Ribeiro ve Latgé (1994), varyasyonel yöntem kullanarak kübik GaAs kuantum noktasındaki safsızlığın taban durum bağlanma enerjisini, kuantum noktasının hacminin ve safsızlığın konumunun fonksiyonu olarak hesaplamışlardır.

Diğer taraftan, kuantum heteroyapılardaki donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesiti de, üzerinde yaygın olarak çalışılan problemlerden biridir. Düşük boyutlu elektronik sistemlerde, fotoiyonlaşma tesir kesitinin foton enerjisine bağlılığı, genellikle

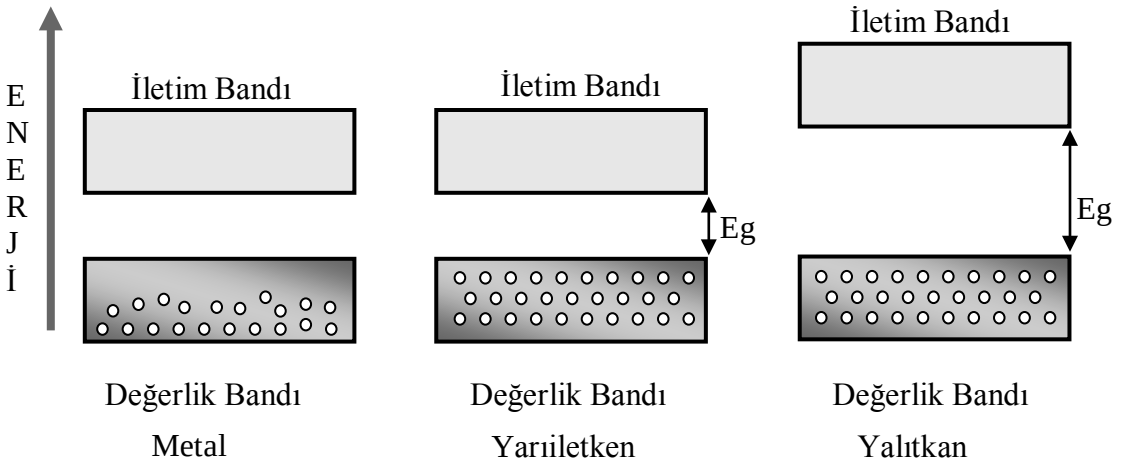
safsızlığın taban durumu dalga fonksiyonu ile verilir (Sali 2002). Üç boyutlu külçe (bulk) yarıiletkenlerde hidrojenik safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesiti, ilk defa Lax tarafından 1946 yılında araştırılmıştır. Takikawa ve ark. (1989), metal organik kimyasal buhar makinesiyle geliştirilen AlGaAs/GaAs çoklu kuantum kuyularındaki, fotoiyonlaşma tesir kesitini, derin tuzaklardan alt bandlara geçişler yardımıyla teorik ve deneysel olarak incelemişlerdir. Bu çalışmalarında oluşan fotoiyonlaşma tesir kesitinin, fotoiyonlaşma eşik enerjisine, genliğe ve uyarma enerjisine bağlılığını, derin seviye çekirdek potansiyelini bir delta fonksiyonu varsayarak hesaplamışlardır. Ilaiwi ve Tomak (1990), külçe yarıiletkenlerdeki safsızlıkları kullanılarak, farklı safsızlık potansiyelleri için fotoiyonlaşma tesir kesitinin foton enerjisine bağlılığını incelemişlerdir. El Said ve Tomak (1990-1992), uygulanan manyetik alan, kuyu genişliği ve uyarılma enerjisinin bir fonksiyonu olarak, sonsuz engelli kuantum kuyusundaki sığ donorlar için fotoiyonlaşma tesir kesitini hesaplamışlardır. Diğer bir çalışmaları ise ışığın kutuplanma etkisidir. Aynı araştırmacılar, diğer bir çalışmalarında uyarıcı ışığın x doğrultusunda kutuplandığı kabul edilerek sonsuz bariyerli GaAs/GaAlAs kuantum kuyusundaki donorlar için fotoiyonlaşma tesir kesitinin foton enerjisine bağlılığını incelemişlerdir. Ayrıca El-Said ve Ilaiwi (1995), sonlu bariyerli bir kuantum kuyusu içerisindeki donor safsızlığı için, fotoiyonlaşma tesir kesitinin, foton enerjisine spektral bağlılığını, kuyunun z doğrultusu boyunca kutuplanmış bir ışık kullanılarak çalışmıştır. El-Kawni ve Tomak (1992), bir önceki hesaplamaları farklı fiziksel şartlar altında, hem sonlu hem sonsuz sınırlandırıcı potansiyel kullanarak heteroeklemlere genişletmişlerdir. Ilawi ve El-Said (1995), sığ donorlar için sonlu engelli kuantum kuyularında, manyetik alan ve kuyunun genişliğinin bir fonksiyonu olarak, fotoiyonlaşma tesir kesitinin foton enerjisine bağlılığını araştırmışlardır. Sali ve ark. (1997), sınırlandırılmış farklı potansiyeller için kuantum tellerindeki bir hidrojenik safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesitinin foton enerjisine bağlılığını incelemişlerdir. Daha sonra varyasyonel metodu kullanılarak, safsızlığın konumu ve boyutunun bir fonksiyonu olarak sonsuz engelli kuantum kutusundaki fotoiyonlaşma tesir kesitinin foton enerjisine bağlılığı araştırılmıştır (Sali ve ark. 2002). Ham ve Lee (2004), sonsuz bir kuyu modeli kullanarak, silindirik kuantum telindeki bir hidrojenik safsızlığın tesir

kesitini araştırmışlardır. Ham ve Spector (2003), hem sonsuz hem sonlu potansiyel engelleri için, safsızlık konumu ve kuantum noktasının yarıçapının bir fonksiyonu olarak, küresel kuantum noktalarda fotoiyonlaşma tesir kesitinin, fotonların polorizasyon ve enerjilerine bağlılığını hesaplamışlardır. Ayrıca bu çalışmalarında tesir kesitinin merkezdeki bir safsızlık için fotonların polarizasyonlarından bağımsız olduğunu, merkez dışındaki bir safsızlık içinde foton alanlarının polarizasyonuna bağlı olduğunu göstermişlerdir.

2. DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN HETEROYAPILAR

2.1. Yarıiletken Malzemeler

Katı bir malzeme ilk olarak iletken ve yalıtkan olmak üzere iki sınıfta gruplandırılır. İletken malzemeler, serbest yükleri bulunan ve elektriksel iletkenliği iyi olan, bakır, gümüş gibi metalik katılardır. Yalıtkanlar ise, serbest yükleri bulunmayan ve elektriksel iletkenliği zayıf olan, plastik, tahta, cam gibi malzemelerdir. Sınıflandırmaya band teorisi açısından bakıldığı zaman durumun biraz daha farklı olduğu görülmektedir. Band teorisi açısından katılar sınıflandırıldığı zaman, iletken ve yalıtkan malzemelerin yanında üçüncü bir malzeme olan yarıiletken malzemelerden bahsedilebilir. Şekil 2.1'de her üç malzeme türüne ait enerji band yapısı görülmektedir.



Şekil 2.1. İletken, yalıtkan ve yarıiletken malzemelerin enerji band diyagramları.

Yukarıdaki şekilden görüldüğü gibi iletken malzemelerde valans bandı kısmen dolu iken, yalıtkan ve yarıiletken malzemelerde tamamen doludur. Diğer taraftan, yalıtkan malzemelerdeki yasak enerji aralığı, yarıiletkenlerdeki yasak enerji aralığından çok daha büyüktür. Yalıtkanların yasak enerji aralığı 5-10 eV mertebesinde iken, yarıiletkenlerin yasak enerji aralığı 1-4 eV mertebesindedir (Cafer 2000). Bununla ilgili olarak Çizelge 2.1'de bazı yarıiletken malzemelerin T=0 K ve T=300 K'deki yasak enerji aralıkları verilmiştir.

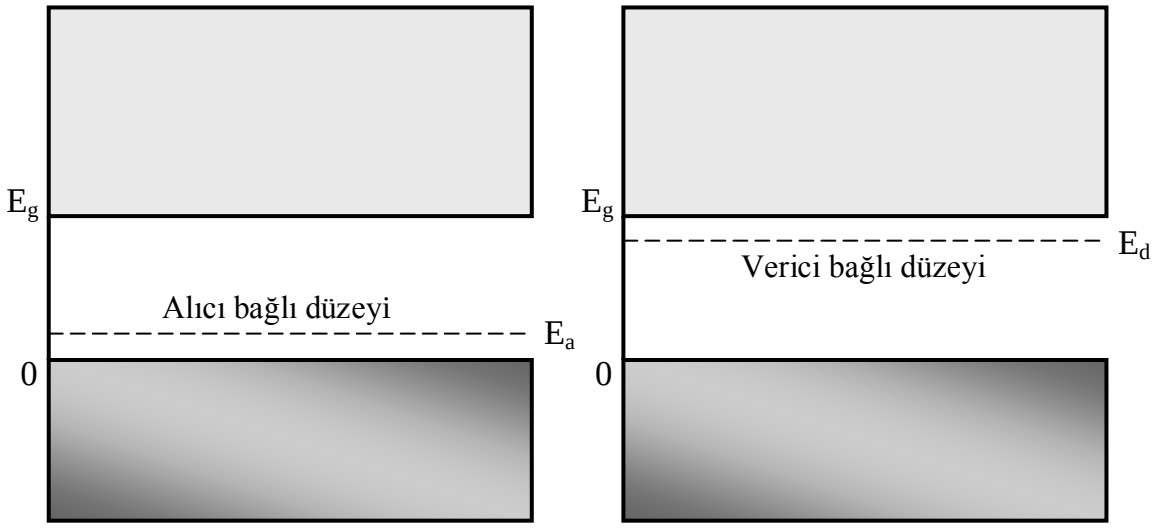
Katıların en önemli ve ilginç sınıfını oluşturan yarıiletkenler, iletkenlikleri metaller ve yalıtkanlar arasında olan, sıcaklığın artmasıyla iletkenlikleri artan maddelerdir. Diğer önemli bir özellikleri ise, katkılama (doping) yoluyla iletkenliklerinin kontrol edilebilmesidir. Bu özellikleriyle yarıiletkenler, günümüzde birçok elektronik devrenin ve çeşitli düzeneklerin temel yapıtaşlarını oluşturarak, hareketli yüklerin kaynağını sağlamak için kullanılır ve yüklerin aktığı, denetlendiği ortamı oluşturur.

Çizelge 2.1. Bazı yarıiletkenlerin enerji aralığı değerleri (Kittel 1996).

Kristal	E_g **(eV)**	
	0 K	**300K**
Si	1,17	1,11
Ge	0,744	0,66
InP	1,42	1,27
GaP	2,32	2,25
GaAs	1,52	1,43
CdS	2,582	2,42
CdTe	1,607	1,44
ZnO	3,436	3,2
ZnS	3,91	3,6

2.2. Katkılama

Yarıiletken bir malzemeye, malzeme içerisindeki deşik yoğunluğu ya da elektron yoğunluğunu artırmak amacıyla kontrollü miktarda safsızlık atomunun eklenmesine katkılama denir. Safsızlık atomları yarıiletkenin elektriksel özelliklerini önemli ölçüde etkiler. Kristal içerisine giren yabancı atomlar, kristal içerisinde safsızlık enerji düzeylerinin oluşmasına neden olur. Oluşan bu safsızlık enerji düzeylerinden dolayı, kristal içerisindeki yük taşıyıcılarının hareketlerinde önemli değişiklikler görülür (Ferendeci 1991, Davies 1999, Mitin ve ark. 1999).

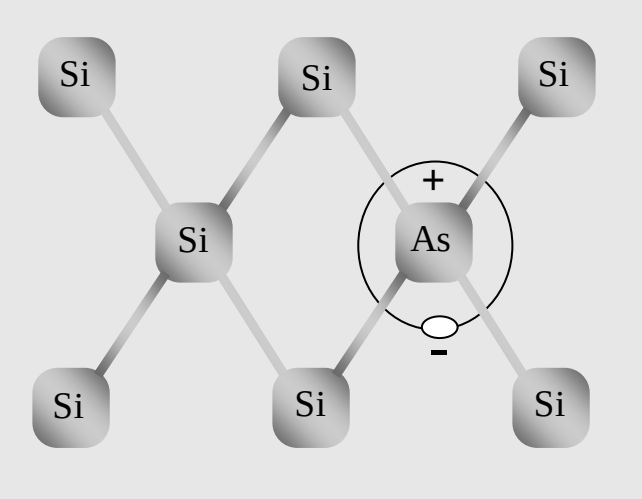


Şekil 2.2. Si kristali içerisinde akseptör ve donor atomları ile yapılan katkılama sonucu oluşan safsızlık enerji düzeyleri

Yabancı atomların bir yarıiletken malzemeye katkılanmasıyla, yasak enerji aralığında, elektronların bulunabileceği enerji seviyeleri oluşur. Bu enerji seviyeleri, tuzak seviye olarak adlandırılır. Katkılanan atomun valans elektron sayısı, yarıiletken malzemeyi oluşturan atomların valans elektron sayısından fazla ise, yasak enerji aralığında donor enerji seviyeleri oluşur ve katkılanan yabancı atoma da donor denir. Donor enerji seviyeleri, iletim bandının hemen altındadır. Eğer katkılanan atomun valans elektron sayısı, yarıiletken malzemeyi oluşturan valans elektron sayısından az ise bu durumda yasak enerji aralığında valans bandının hemen üzerinde tuzak seviyeler oluşur. Bu seviyeler akseptör seviyesi denir. Katkılanan bu özellikteki atoma ise akseptör adı verilir (Yılmaz 2004).

2.2.1. Donor (Verici) Atomlarıyla Katkılama

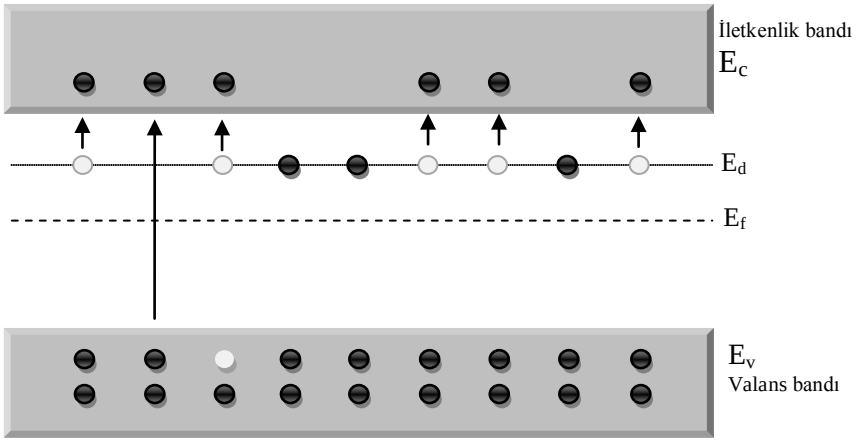
Si atomu IV. Grup elementtir ve safsızlık içermemesi durumunda nötr bir malzemedir. Son yörüngesinde dört valans elektronu bulunan yarıiletkenlere, +5 değerlikli fosfor, arsenik veya antimon atomlarının eklenmesiyle yapılan katkılardır.



Şekil 2.3. Si kristali içindeki As safsızlık atomu ile yapılan katkılama (Kittel 1996)

Bu tür yarıiletkenlere n tipi yarıiletkenlerde denir. Bu tip katkılama yapıldığında +5 değerlikli atomun son yörüngesindeki elektronun dördü komşu atomların elektronlarıyla kovalent bağ kurarken beşinci elektron, atomla zayıf bağ kurar ve nispeten serbest bir elektron gibi davranır. Kurulan zayıf bağ nedeni ile bu elektron, kolaylıkla iletkenlik bandına geçebilecek durumdadır. Bu elektronun bağlanma enerjisi kadar bir enerjinin atoma verilmesi ile elektron iletkenlik bandına çıkar ve maddenin iletkenliğine katkıda bulunur (Cafer 2000).

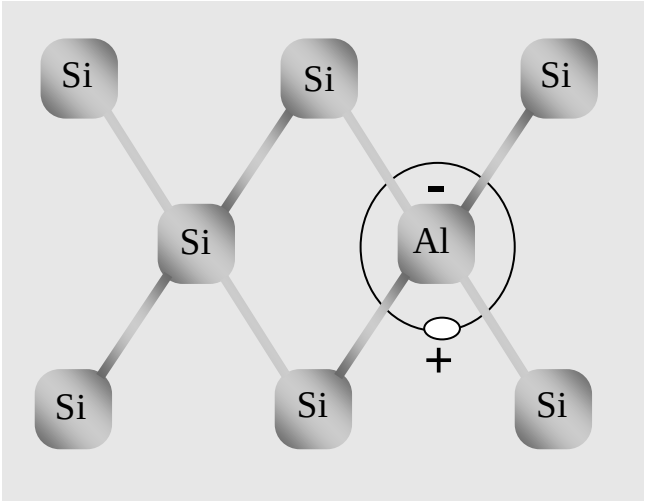
As'in beşinci elektronu bağlanma enerjisi E_d; iletkenlik bandı ile valans bandının enerji seviyeleri arasındadır. Eğer bu bağlı elektronlar sıcaklık yada ışık etkisiyle E_d enerji kazanırsa iletkenlik bandına geçerler. $E_d << E_i$ olduğundan sıcaklık önce donor elektronlarını iletkenlik bandına çıkarır. Ayrıca donor konsantrasyonu elektron konsantrasyonundan çok daha büyük olduğundan iletkenlik dominant olarak bu safsızlık elektronları tarafından sağlanır (Cafer 2000).



Şekil 2.4. Band yapısı üzerinde katkılamanın gösterimi

2.2.2. Akseptör (Alıcı) Atomlarıyla Katkılama

Silisyum atomlarının arasına bu kez +3 değerlikli alüminyum atomları eklenir. Bu durumda alüminyum atomlarının son yörüngesindeki üç elektron, Si atomlarının son yörüngesindeki elektronlarının üçü ile bağ yapar. Alüminyum bağlarını tamamlayabilmesi için komşu Si atomlarının birinden bir elektron alması gerekir. Bu durumda elektronun geldiği yerde yani valans bandında bir boşluk (deşik) oluşur.



Şekil 2.5. Si kristali içindeki Al safsızlık atomu ile yapılan katkılama (Kittel 1996)

Oluşan boşluk komşu silisyum atomundan atlayan bir elektron tarafından doldurulurken bu atomda oluşan boşlukta başka bir komşu silisyum atomu tarafından doldurulur. Böylece elektron hareketine zıt yönlü bir boşluk hareketi meydana gelir. Dolayısıyla, valans bandında da deşikler akım iletimine katkıda bulunmuş olur. Bu tür safsızlık atomlarına akseptör (alıcı) atomları adı verilir (Cafer 2000).

2.3. Yarıiletken Heteroyapılar

Yarıiletken yapılar, p-n, n^+-n eklemleri gibi genelde aynı malzemeler arasında eklem oluşturarak üretilir. Aynı malzemeden üretilen eklemler, homoeklem olarak isimlendirilir. Eğer eklem birden fazla farklı malzemeler kullanılarak yapılırsa, böyle eklemlere de heteroeklem adı verilir.

Yarıiletken heteroyapılar, iki veya daha çok farklı yarıiletken yapının, ortak bir kristal yapıda uyum içinde üretilmesiyle oluşturulur. Bir yarıiletkenin heteroyapı oluşturabilmesi için, yarıiletkenin örgü sabiti ile, eklemi oluşturan diğer yarıiletkenin örgü sabitleri arasındaki farkın çok az olması gerekmektedir. Modern malzeme üretme teknikleriyle bu heteroeklemler, aşırı biçimde dik (keskin) bir geçiş bölgesine sahip olacak şekilde üretilebilmektedirler. En basit heteroyapı, iki farklı yarıiletken malzeme arasında gerçekleştirilen bir heteroeklemdir. En iyi bilinen heteroyapılardan birisi SiO_2/Si heteroeklemidir. Bu eklemin ara yüzeyinde kusur yoğunluğu oldukça düşüktür. Bunun yanında GaAs/AlGaAs, GaInAs/InP, GaInAs/AlInAs, GaSb/AlSb, GaN/AlN, InN/GaN sınıfı heteroyapıları teknolojide yaygın biçimde kullanılmaktadır.

Doğadaki tüm yapılar boyutlarına göre üç ana grupta sınıflandırılır:

a) Mikroskopik Yapılar; boyutları atom ve molekül mertebesinde (~1 Å) olan yapılardır

b) Makroskobik Yapılar; parçacıkların hareketinin istatiksel olarak tanımlanabilmesine yetecek mertebede boyutlara sahip yapılardır.

c) Mezoskopik Yapılar; mikroskobik yapılar ile makroskopik yapılar arasında yer alan ve boyutları yaklaşık olarak 10–1000 Å arasında değişen yapılardır.

Bir sistemin mezoskopik yapı olarak adlandırılabilmesi için, sistemin boyutlarından en az birisinin Fermi dalga boyu, faz durulma mesafesi veya ortalama serbest yol gibi karakteristik uzunluklardan daha küçük olması gerekir (Şahin 2005)

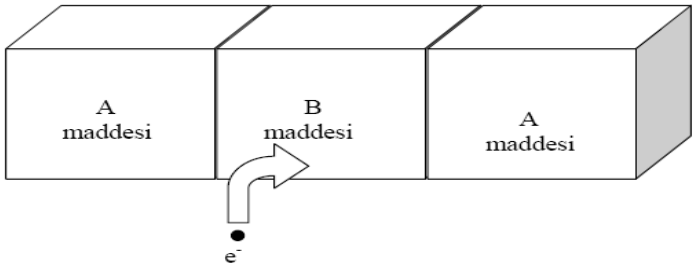
Düşük boyutlu sistemlerde elektron ve deşikler, bu yapıya ait öteleme simetrisi uzaysal boyutta kırıldığından, 3 boyutta serbestçe hareket etme özelliklerini kaybederler ve belirli bir uzaysal bölge içerisine sınırlanırlar. Külçe malzemelerde valans ve iletim bandları sürekli iken, düşük boyutlu malzemelerde valans ve iletim bandları alt bandlara veya kesikli enerji seviyelerine ayrılabilir. Bir külçe malzemede her k momentum değerine karşılık gelen bir enerji değeri ve durum yoğunluğu olduğu halde, mezoskopik yapılarda bu süreklilik bozulur ve kesikli enerji değerleri ve süreksiz durum yoğunlukları oluşur.

Mezoskopik yapılar, taşıyıcıların belirli bir uzaysal bölgeye bir potansiyel engeli yardımıyla sınırlandırılması ile oluşur. Bu amaçla büyük yasak enerji aralıklı bir yarıiletken malzeme içerisine, daha düşük band aralıklı başka bir yarıiletken malzeme yerleştirilir. Bu iki yarıiletken malzemelerin E_g farklılığından dolayı, ara yüzeyde bir potansiyel engeli oluşur ve bu engel, yarıiletken içindeki elektron ve deşiklerin bu bölgede sınırlandırılmasına yol açar. Düşük boyutlu sistemler (nanoyapılar), elektron ve deşiklerin hareketlerinin sınırlandırıldığı boyut sayısına bağlı olarak 3 ana grupta incelenebilirler (Mitin 1999, Davies 1999) Bunlar:

1. Kuantum kuyuları (2-boyutlu sistemler)
2. Kuantum telleri (1-boyutlu sistemler)
3. Kuantum noktaları (0-boyutlu sistemler)

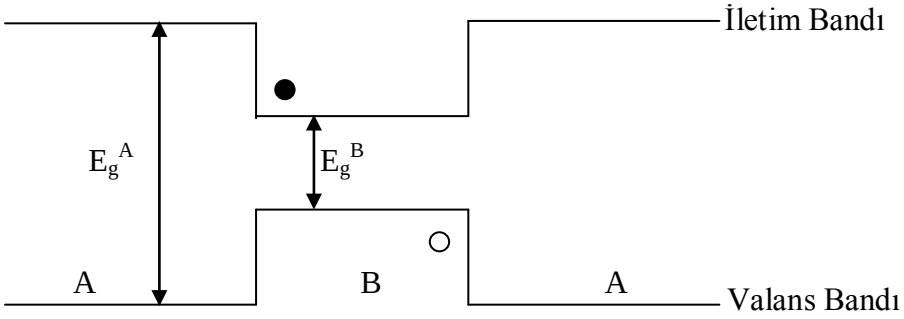
2.3.1. Kuantum Kuyusu

Taşıyıcı yükün bir boyutta sınırlandırıldığı, diğer 2 boyutta serbest parçacık olarak hareket edebildiği yapılar kuantum kuyuları olarak adlandırılır. Elektronların 2 boyutta serbest kaldığı bu yapılar aynı zamanda 2 boyutlu elektron gazı olarak da adlandırılır. Bu yapılar, yasak enerji aralığı küçük olan B gibi bir yarıiletken malzemenin yasak enerji aralığı daha büyük olan A gibi bir yarıiletken malzemeden oluşan iki tabaka arasına yerleştirilirse, bir çift heteroeklem oluşur.



Şekil 2.6. Düşük boyutlu yapılar farklı tür yarı iletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulur (Kittel 1996).

Yasak enerji aralığı küçük olan B tabakası kuantum özelliklerinin gözlenebilmesine yetecek kadar ince yapılırsa bu yapı "tek kuantum kuyu" olarak adlandırılır. Eğer böyle bir yapıda herhangi bir yük taşıyıcı varsa, bu taşıyıcılar enerjilerini sıfır yapmaya çalışır ve böylelikle elektron ve deşikler kuantum kuyusu içinde toplanır.

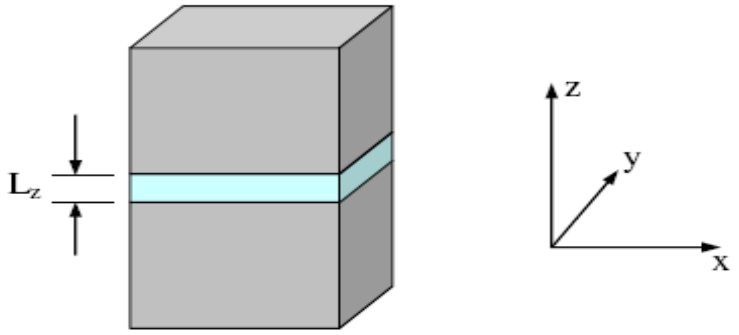


Şekil 2.7. Kuantum kuyusunun şematik gösterimi

Düşük boyutlu yapılara hapsedilen bir elektronun özellikleri incelenirken, zamandan bağımsız Schrödinger denklemini çözülerek, elektronun enerji özdeğeri ve dalga fonksiyonu elde edilir. Parçacığın kuyu içerisindeki dalga fonksiyonu yazılırsa, elektron x-y yönünde serbest olması dikkate alınarak, sadece bu doğrultularda düzlem dalga fonksiyonu seçilebilir. yani,

$$\psi(x,y,z) = e^{ik_x x + ik_y y}\varphi(z) \tag{2.1}$$

şeklinde yazılabilir.



Şekil 2.8. Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi

Parçacık x ve y yönlerinde serbest olduğu için, o yönlerde enerji alt bandları oluşurken z yönünde enerji kesikli değerler alır. Öncelikle Schrödinger denklemi ve sınırlamanın olduğu yöndeki potansiyel yazılır. Kuantum kuyu için verilen Schrödinger denkleminin genel ifadesi;

$$[H + V(z)]\psi(r) = E\psi(r) \tag{2.2}$$

şeklindedir. Z yönünde sınırlama olduğu için Schrödinger denklemi, z yönü için çözülmelidir. Bu durumda z yönü için Schrödinger denklemi;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z)\right]\varphi(z) = E\varphi(z) \tag{2.3}$$

şeklindedir. Burada E, z boyunca hareketin enerjisidir. Eğer potansiyel engeli sonsuz yükseklikte ise, kuyu içinde V=0 olur. Potansiyelin sonsuz olduğu yerde dalga fonksiyonu sıfıra eşit olmak zorundadır. Kuyu içinde potansiyelin sıfır olduğu duruma bakılırsa ve $\frac{2m_e}{\hbar^2}E = k^2$ niceliği tanımlanırsa,

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi(z) + k^2\varphi(z) = 0 \qquad (2.4)$$

İfadesi elde edilir. Kuyu sınırlarında, sınır şartları uygulanırsa, z boyunca momentum ifadesi;

$$k_z = \frac{n_z\pi}{L_z} \qquad n_z = 1,2,3,..... \qquad (2.5)$$

şeklinde kesikli değerler aldığı görülür. Bu durumda kuyu içindeki kesikli enerji seviyeleri yani enerji özdeğerleri;

$$E_z = \frac{\hbar^2\pi^2 n_z^2}{2m_e L_z^2} \qquad (2.6)$$

şeklinde olur ve parçacığın toplam enerjisi;

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[k_x^2 + k_y^2 + \frac{n_z^2\pi^2}{L_z^2}\right] \qquad (2.7)$$

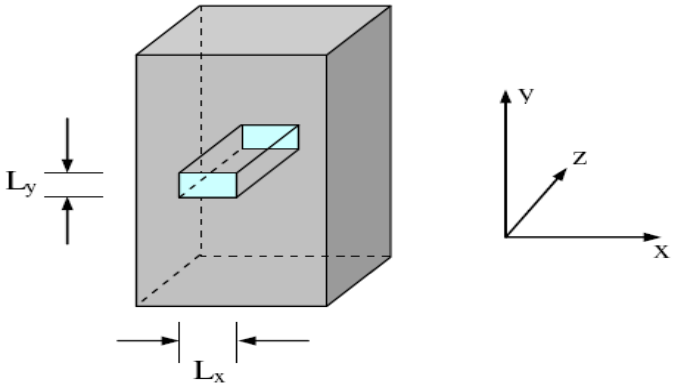
elde edilebilir (Dragoman ve Dragoman 1999, Mitin ve ark. 1999, Davies 1999).

2.3.2. Kuantum Telleri

Düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin geometrik sınıflandırılması yapılırken, yükün kaç boyutta sınırlı ve kaç boyutta serbest tutulduğu göz önüne alınmaktadır. Elektronun hareketinin iki boyutta sınırlandırılıp, bir boyutta serbest kaldığı bu yapılar kuantum teli olarak adlandırılır. Bu yapı içerisinde elektronun dalga fonksiyonu;

$$\psi(x,y,z) = e^{ik_z z}\varphi(x,y) \qquad (2.8)$$

şeklindedir. Elektronun hareketi x,y doğrultusunda sınırlandırılır.



Şekil 2.9. Bir kuantum telinin şematik gösterimi

x ve y yönünde sınırlandırma olduğu için, Schrödinger denklemi bu yönlerde çözülmelidir. Potansiyelin tel kenarlarında sıfır ve dışarıda ise sonsuz olduğu durumu göz önüne alarak, kuantum kuyuları için yapılan işlemler x ve y doğrultuları için tekrarlanırsa;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi(x,y)=E\varphi(x,y) \tag{2.9}$$

olarak bulunur. Bu durumda toplam enerji ise

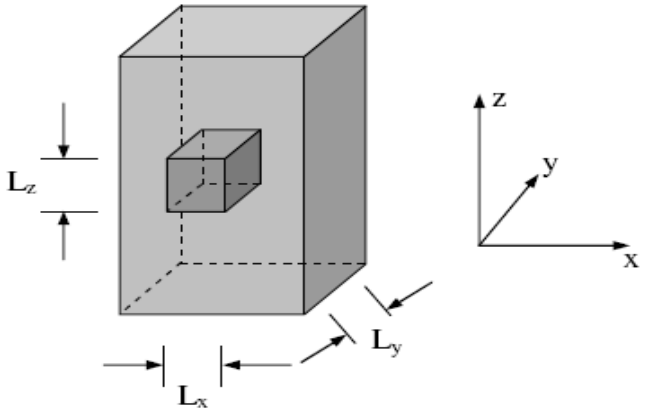
$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2+k_z^2\right] \tag{2.10}$$

şeklinde ifade edilir (Dragoman ve Dragoman 1999, Mitin ve ark. 1999, Davies 1999).

2.3.3. Kuantum Noktası

Kuantum kuyusunda ve kuantum tellerinde elektronun hareketi en az bir doğrultuda sınırlandırılırken, diğer doğrultularda serbest kalmaktaydı. Bu yapılar en az bir

doğrultuda serbest kaldıkları için enerji seviyeleri o doğrultularda sürekli değer alır. Bu yapılar, bu yüzden tam anlamıyla bir nanoyapı değillerdir. Elektronun mümkün olan tüm yönlerde hareketinin sınırlandırıldığı yapılar, kuantum nokta yapılardır. Kuantum nokta yapılarda sürekli bir enerji bandından söz edilemez, enerji seviyeleri kesiklidir.



Şekil 2.10. Kuantum noktanın şematik gösterimi

Şekil 2.10'daki elektronun hareketi x,y ve z yönlerinde potansiyel engelleri ile hapsedilmiştir. Burada bir elektronun hareketi için potansiyel bariyerlerini tüm doğrultularda sonsuz olduğu kabul edilerek, kuantum noktası için potansiyel ifadesi;

$$V(x,y,z)=\begin{cases}0 & |x|\le L_x/2 \quad |y|\le L_y/2 \quad |z|\le L_z/2\\ \infty & |x|> L_x/2 \quad |y|> L_y/2 \quad |z|> L_z/2\end{cases} \tag{2.11}$$

şeklindedir. Kuantum noktasındaki bir elektron için Schrödinger dalga denklemi yazılırsa;

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z)=E\ \psi\ (x,y,z) \tag{2.12}$$

Dalga fonksiyonu ise;

$$\psi\ (x,y,z) = A\cos\left(\frac{n\pi}{L_x}x\right)\cos\left(\frac{n\pi}{L_y}y\right)\cos\left(\frac{n\pi}{L_z}z\right) \tag{2.13}$$

şeklinde olup, dalga vektörü bileşenleri

$$k_x = \frac{n\pi}{L_x}, k_y = \frac{n\pi}{L_y} \text{ve } k_z = \frac{n\pi}{L_z}$$

şeklinde kesikli olur. Bu durumda toplam enerjide kesiklidir.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{n\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L_y}\right)^2\right] \tag{2.14}$$

şeklinde ifade edilir (Dragoman ve Dragoman 1999, Mitin ve ark. 1999, Davies 1999).

2.4. Kuantum Noktası Üretim Teknikleri

Teknolojik gelişmelerden ve üretim tekniklerinin farklılıklarından faydalanarak, çeşitli şekillerde (düzlemsel, piramit, küresel elipsoid) kuantum noktaları üretmek mümkündür (Bimberg ve ark. 1999). Burada bu üretim tekniklerinden birkaçına değinilecektir.

2.4.1. Kimyasalla Eritme Tekniği

Bu teknik, iki boyutlu elektron gazı içeren bir yapıdan, kuantum noktası elde edilmesidir. Kuantum noktası üretim tekniklerinden ilkidir (Reed ve ark. 1986). Yüzeyi polimer maskeyle kaplı olan birden fazla kuantum kuyusu içeren malzeme, iyon demetine maruz bırakılır. Nanoyapının sınırlarını ve şeklini, iyon demetinin uygulandığı bölge belirler. Elektron demeti yardımıyla seçilen bölgenin yüzeyi temizlenir. Tüm yüzey altın ya da benzeri bir metal tabaka ile kaplanır. Özel bir çözücü kullanılarak, polimer film ve bu film üzerindeki koruyucu metal tabaka çıkartılır ve ışına maruz kalmış bölgeler dışında kalan numunenin, temiz yüzeyi elde edilmiş olur. Metal tabaka

ile kaplı olan kısım dışında numunenin diğer yüzeyleri, kimyasal eritme yöntemiyle eritilir. Asit ile eritilen bu bölgelerden sonra boyutları 10-100 nanometre mertebesinde, küçük bir sütun biçiminde kuantum noktaları elde edilir ve elektron bu yapı içerisine hapsedilir (Reed 1993, Jacak ve ark. 1998, Jacak 2000).

2.4.2. Elektrik Alan Modülasyonu Yöntemi

Litografik yöntem olarak bilinen elektrik alan modülasyonu yöntemi, kuantum kuyusu üzerine oldukça küçük elektrotlar yerleştirme esasına dayanır. Elektrotlara uygun bir gerilim uygulanması ile gerilim uygulanan elektrotlar arasında uzaysal olarak modüle edilmiş bir elektrik alan oluşur ve bu alan elektronları küçük bir alan içerisine hapseder. Asit ile aşındırma yöntemiyle elde edilen kuantum nokta yapılarda kenar kusurları oluşurken, elektrik alan modülasyonu yönteminde malzemeye bağlı kenar kusuru oluşmaz (Jacak ve ark. 1998, Jacak 2000).

2.4.3. Yarıiletken Mikrokristaller

Yarıiletken mikrokristaller tekniğiyle kuantum noktalarının elde edilmesi, cam gibi dielektrik malzemeler içerisine yarıiletken mikrokristallerin belirli oranlarda yerleştirilmesi ile mümkündür. Yüksek sıcaklıklarda ve belirli oranlarda CdS, CuCl, CdSe, CuBr gibi bileşikler silkat cam bileşiklerle ısıtılır. Isıtmanın süresine ve sıcaklığın büyüklüğüne bağlı olarak istenilen genişlik ve şekilde kuantum nokta yapılar elde edilir (Ekimov ve ark. 1985).

2.4.4. Kendiliğinden Büyüme Yöntemi

Kendiliğinden büyüme yönteminin avantajlarından birisi, eritme yönteminde olduğu gibi malzeme yüzeyinde herhangi bir maske oluşturmaya gerek yoktur. Kuantum kuyuyu oluşturan tabakalardan, altta bulunan tabaka ile üste yer alan

kristalleşecek malzemenin örgü sabitleri arasındaki fark çok fazla ise ilk olarak kristalleşen tabaka örgü sabiti alt tabakanın örgü sabitine eşit boyutta oluncaya kadar kristalleşmeye devam eder. Bu boyut aşıldığında tabaka içinde önemli bir gerilme meydana gelir ve bu gerilme birbirleri ile aynı boyutlarda, çok küçük kuantum noktalarının elde edilmesine olanak sağlar. Diğer üretim tekniklerine göre avantajları elde edilen kuantum noktaların boyutlarının çok küçük olması (çapları yaklaşık 30 nm), şekil ve büyüklüklerinin hemen hemen homojen olması ve noktaların kenar kusurlarının olmamasıdır (Petroff ve DenBaars, 1994, Vvedensky 2001).

3. MODEL VE TEORİ

3.1. Etkin Kütle Yaklaşımı

Serbest haldeki bir elektron ile kristal bir örgü içerisindeki bir elektronun kütleleri birbirinden farklıdır. Kristal yapı içerisinde elektronun sahip olduğu kütle, etkin kütledir. Serbest halde v hızı ile hareket eden bir elektronun kinetik enerjisi;

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \tag{3.1}$$

şeklinde verilir. k dalga vektörü olmak üzere; v hızıyla hareket eden bir parçacığın momentumu;

$$p = \hbar k \tag{3.2}$$

şeklinde tanımlanır. Momentum ile kütle doğru orantılı olduğu için, elektronun kristal bir örgü içerisindeki momentumu ile serbest haldeki momentumu birbirinden farklıdır.

Eğer elektron, periyodik bir potansiyel içerisinde hareket ediyorsa ki bu katılarda kristal potansiyeli olarak adlandırılır, o zaman p momentumuna, kristal potansiyelin momentumu denir. Elektron, malzeme içerisinde hareket ederken kristal potansiyeline bağlı olduğundan, k momentumuda kristal potansiyeline bağlıdır. Bir malzeme içerisinde dolaşan bir elektrona, dışarıdan herhangi bir kuvvet etki ederse elektronun hareket denklemi;

$$F_{dış} + F_{iç} = m\frac{dv}{dt} = ma \tag{3.3}$$

şeklinde yazılır. Buradaki iç kuvvetler ise, örgü atomlarının oluşturduğu kristal potansiyelinin elektrona uyguladığı net kuvvettir. Örgü atomlarının oluşturduğu kuvvet ile dışarıdan uyguladığımız kuvvetide içerisinde kapsayacak bir kuvvet denklemi aşağıdaki gibi yazabilir:

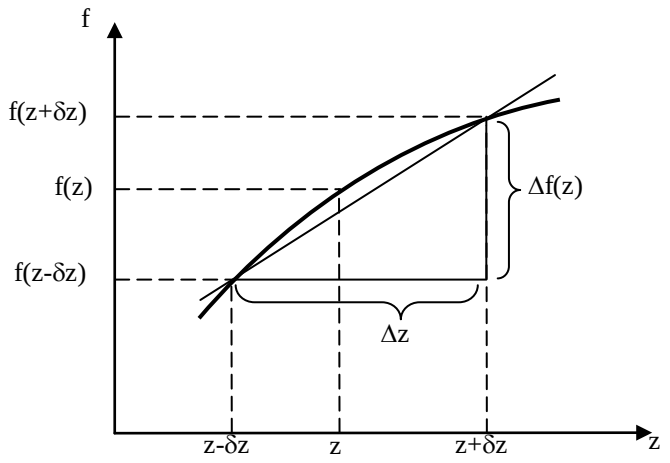
$$F_{dış} = m^* \frac{dv}{dt} = m^* a \tag{3.4}$$

Burada m* iç kuvvet etkisini de içeren etkin kütledir ve elektronun üzerine etkiyen iç kuvvetlerin etkisini de içerir. (Ferendeci 1991)

3.2. Sonlu Farklar Yöntemi

Karşımıza her zaman analitik olarak çözülebilir diferansiyel denklemler çıkmaz. Kuantum mekaniğindeki problemlerin çoğunda, sistemin Schrödinger denklemini analitik olarak çözmek çok zor ya da imkânsızdır. Shrödinger denkleminin doğrudan tam çözümünün yapılamadığı durumlarda, Sonlu Farklar Yöntemi gibi nümerik yöntemler kullanılır.

Genellikle interpolasyon, türev ve integral alma işlemleri, fonksiyonu yerel olarak öz polinom ile temsil etmeye dayanır. Özellikle türev alma işleminde fonksiyonun, alınacak türev mertebesine kadar türevlenebilir olması gereklidir.



Şekil 3.1. Sonlu farklar yöntemi ile bir fonksiyonun gösterilmesi

Sonlu farklar yönteminde fonksiyonun 1. ve 2. dereceden türevi dikkate alınır. Şekil 3.1'de herhangi bir fonksiyonun birinci dereceden türevi tanımlanmaktadır. Buna göre 1. mertebeden türev;

$$\lim_{\Delta z \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta z} = \frac{\partial f}{\partial z} \tag{3.5}$$

şeklinde olup, bu ifade sonlu fark denklemleriyle yazıldığında

$$\frac{\partial f}{\partial z} \approx \frac{\Delta f}{\Delta z} = \frac{f(z+\Delta z) - f(z-\Delta z)}{2\delta z} \tag{3.6}$$

ifadesi elde edilir. İkinci dereceden türev ifadesi ise;

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \approx \frac{\left.\frac{\partial f}{\partial z}\right|_{z+\delta z} - \left.\frac{\partial f}{\partial z}\right|_{z-\delta z}}{2\delta z} \tag{3.7}$$

şeklinde olup, bunu daha açık şekilde yazacak olursak, 1.dereceden türev ifadesinin sonlu farklar formu kullanılarak;

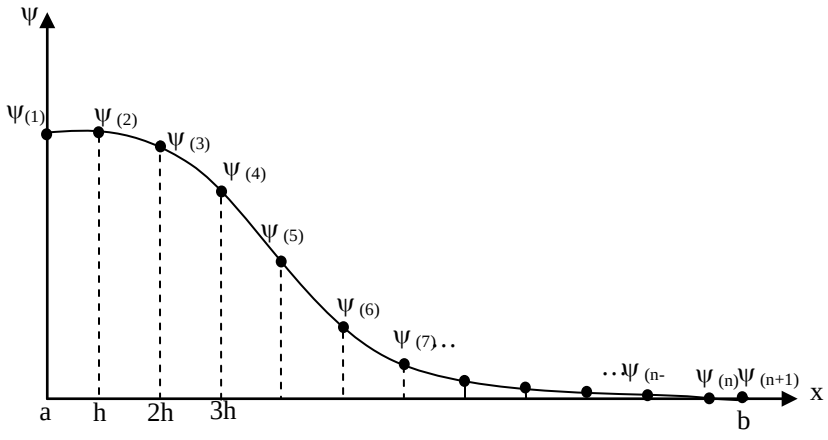
$$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \approx \frac{f(z+2\delta z) - 2f(z) + f(z-2\delta z)}{(2\delta z)^2} \tag{3.8}$$

sonucuna varılır. Buradaki δz, iki örgü noktası arasındaki uzunluktur ve $2\delta z$ yerine δz konularak, sonlu farklar yönteminin ikinci dereceden türevi basitçe;

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \approx \frac{f(z+2\delta z) - 2f(z) + f(z-2\delta z)}{(\delta z)^2} \tag{3.9}$$

şeklinde yazılabilir (Harrison 1999).

Herhangi bir diferansiyel denklem sonlu fark operatörleri yardımı ile çözülebilir. Bu fark operatörleri ileri fark, geri fark ve merkezi fark operatörleri şeklinde birbirinden çok az farklı birkaç şekilde yazılabilmektedir. Fakat, bu çalışmada merkezi fark formülleri kullanılacaktır.



Şekil 3.2. Dalga fonksiyonu ψ'nin n parçaya bölünmesi

3.2.1. Merkezi Fark Formülleri

Merkezi fark formülleri kullanılarak herhangi bir $f(z)$ fonksiyonunun 1. ve 2. mertebe türev ifadeleri;

$$f'(z)=\frac{f(z+\Delta z)-f(z-\Delta z)}{2\Delta z} \tag{3.10}$$

$$f''(z)=\frac{f(z-\Delta z)-2f(z)+f(z+\Delta z)}{(\Delta z)^2} \tag{3.11}$$

şeklinde yazılabilir.

Kuantum kuyusunda bulunan bir elektronun Schrödinger denklemini etkin kütle yaklaşımında

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \tag{3.12}$$

olup, buradaki ψ dalga fonksiyonunun ikinci dereceden türev ifadesi sonlu fark denklemleriyle

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{\psi_{i-1}-2\psi_i+\psi_{i+1}}{h^2} \tag{3.13}$$

şeklinde yazılır. Buradaki i indisleri Şekil 3.2'de görüldüğü gibi N parçacığa bölünen

gerçek uzaydaki her bir noktaya karşılık gelen dalga fonksiyonunun indisleridir. Bu ifade Schrödinger denkleminde yerine yazılırsa;

$$-\frac{\psi_{i-1}-2\psi_i+\psi_{i+1}}{h^2}+\frac{2m^*h^2}{\hbar^2}\left(V(x)-E\right)\psi_i=0 \qquad (3.14)$$

ifadesi elde edilir (Harrison 1999). Bundan sonra yapılacak iş, sonlu fark denklemleriyle yazılan bu Schrödinger denklemini verilen potansiyelde, uygun sınır değerlerini sağlayacak şekilde çözmektir. Bunun için, özdeğer denklemini, başlangıç değer problemine dönüştürüp çözüm yapılabilmesini sağlayan shooting yöntemi kullanılacaktır. Bu yöntemde yukarıdaki son ifade

$$\psi_{i+1}=\left[\frac{2m^*}{\hbar^2}h^2(V_i-E)+2\right]\psi_i-\psi_{i-1} \quad (i=2....n+1) \qquad (3.15)$$

şeklinde yazılır. Buradaki, dalga fonksiyonunun ψ_i ve ψ_{i-1} değerleri ile E enerjisi için ilk değerler başlangıç değeri olarak girilir. Bu başlangıç değerleri seçilirken kuantum mekaniğinin varsayımlarından birisi olan, dalga fonksiyonunun ∞'daki değerinin sıfır olması şartı gereği, ilk değer $\psi_{i-1}=0$ ve $\psi_i=1$ olarak seçilir. Enerji değerini belirlemek için yarılama yöntemi kullanılacağı için sistemin olası gerçek enerji değerini kapsayacak şekilde iki başlangıç değeri girilir. Bütün bu başlangıç değerleri kullanılarak, Denk.(3.15) i=2'den başlamak üzere yakınsama şartı sağlanıncaya kadar iteratif olarak çözülür. Yakınsama şartı sağlandığında sistemin enerji özdeğerleri ve bu özdeğerlere karşılık gelen özfonksiyonları belirlenmiş olur. Bu yöntemde yakınsama kriteri olarak

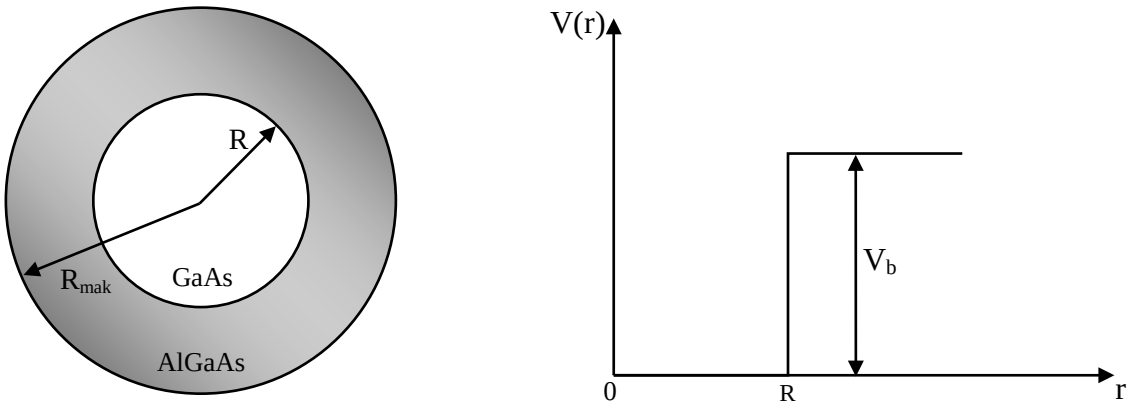
$$\psi(\infty,E)\to 0$$

şeklinde dalga fonksiyonun diğer uçta da sıfıra gitme şartı kullanılır (Harrison 1999). Dolayısıyla bu ifadenin sayısal işlemlerdeki karşılığı

$$\psi(N+1,E)\to 0$$

şeklindedir.

3.3. Küresel Kuantum Noktası



Şekil 3.3. Sonlu potansiyel basamağına sahip tek bir küresel kuantum nokta yapı ve potansiyel profili (Şahin 2005)

Küresel bir kuantum noktasındaki tek elektronun davranışını anlayabilmek için, şekilde gösterilen R yarıçaplı bir küresel kare kuyu içerisindeki tek elektronun hareketini incelemek yeterli olacaktır (Banyai ve Koch 1993). Küresel potansiyel kuyu içerisinde hareket eden bir parçacık için Schrödinger dalga denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi + V(r)\psi = E\psi \tag{3.16}$$

şeklindedir. Küresel koordinatlarda Schrödinger denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\psi + V(r)\psi = E\psi \tag{3.17}$$

şeklinde verilir (Karaoğlu 1994). Burada, $V(r)$ elektron hareketinin küresel bir kuantum noktası içerisinde sınırlandırılan sonlu potansiyel engelidir. Burada ilk olarak bu potansiyelin içeride ($r \le R$) sıfır ve dışarıda ($r > R$) sonsuz olduğu durumu, yani;

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \le R \\ \infty & r > R \end{cases} \tag{3.18}$$

göz önüne alınarak analitik bir çözüm yapılacaktır. Küresel koordinatlarda dalga fonksiyonu, (r,θ,φ) değişkenlerinin fonksiyonu olup, değişken ayrımı yöntemi kullanılarak;

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi) \tag{3.19}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $Y(\theta,\varphi)$ açısal kısım olup çözümü, n baş kuantum sayısı, ℓ yörünge açısal momentum kuantum sayısı ve m manyetik kuantum sayılarına bağlıdır. $R(r)$ ise dalga fonksiyonun radyal kısmıdır. Kısmi türevlerini aldıktan sonra eşitliğin iki tarafını $R(r)Y(\theta,\varphi)$ ile bölüp ve r'ye bağlı terimleri bir tarafa ayrılırsa;

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right] \tag{3.20}$$

olur. Eşitliğin sol tarafındaki radyal Schrödinger denkleminin ayrıntılı çözümü için, $V(r)$ potansiyelinin bilinmesi gerekir. Eşitliğin sağ tarafındaki küresel harmonikler için $V(r)$ potansiyeli yoktur. Eşitliğin sağlanabilmesi için her iki tarafında bir sabite eşitlenmesi gerekir. O halde tüm küresel simetrik potansiyeller için dalga fonksiyonunun açısal bağlılığı, $Y(\theta,\varphi)$ fonksiyonuyla belirlenmiş olacaktır. (3.20) eşitliğini herhangi bir sabite eşitleyip çözersek küresel harmoniklere bağlı kısım $\ell(\ell+1)$ açısal momentum özdeğerini verir. Gerekli düzenlemeler yapılırsa denklem (3.20);

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left(k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R(r)=0 \tag{3.21}$$

şeklinde düzenlenir. $k=\sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ ve $\rho=kr$ şeklinde boyutsuz bir değişken tanımlanırsa radyal Schrödinger denklemi ;

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left(1-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)R=0 \tag{3.22}$$

haline dönüşür. Bu diferansiyel denklem Bessel diferansiyel denklemi olarak bilinir. Bu denklemin Küresel Bessel ve Küresel Neumann toplamı şeklinde bir çözümü vardır (Karaoğlu, 1994).

Bu tip bir denklemin genel çözümü;

$$y(x) = Aj_n(x) + Bn_n(x) \tag{3.23}$$

şeklindedir. Dolayısıyla denklem (3.22) de verilen denklemin çözümü;

$$R(\rho) = Aj_\ell(\rho) + Bn_\ell(\rho) \tag{3.24}$$

olur. Bu dalga fonksiyonları, her yerde sonlu değer alan bir fonksiyondur. r = 0 noktasında, Neumann fonksiyonları ıraksak olduğundan B=0 olarak alınır. Böylece küresel kuyu içindeki bir parçacığın ℓ ye bağlı dalga fonksiyonu;

$$R_\ell(r) = Aj_\ell(kr) \tag{3.25}$$

olur. Bunun r=0 deki çözümü yakınsaktır. r=R sınırında ise potansiyel sonsuz olduğundan $j_\ell(kR)=0$ sınır şartı olmalıdır. Dolayısıyla ℓ'nin değerlerine göre elde edilecek Bessel fonksiyonlarının köklerinden, parçacığın kuyu içerisindeki enerji değeri bilinebilir (Karaoğlu 1994).

ℓ=0 durumunda;

$j_\ell(kR) = \dfrac{\sin(kR)}{kR} = 0$ olması için $kR = n\pi$ olması gerektiğinden $k = n\pi/R$ olur.

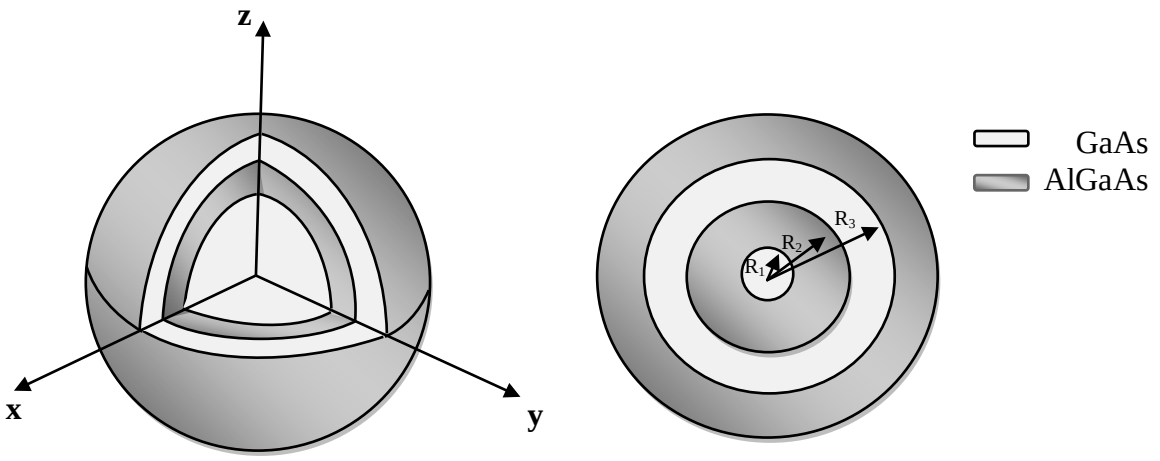
Buradan da

$$E_{n,0} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m^*R^2} \tag{3.26}$$

olarak bulunur.

3.4. Çok Tabakalı Kuantum Nokta Yapı

Çok tabakalı kuantum nokta yapı genel olarak, aralarında belli bir mesafe bulunan, iç içe geçmiş iki küresel kabuk gibi göz önüne alınabilir. Böyle bir yapının şematik gösterimi Şekil 3.4'de görülmektedir. Şekilden görüldüğü gibi çok tabakalı kuantum nokta yapı iki GaAs nokta yapı içerir. Bu yapılar iç içedir ve aralarında GaAlAs tabakası bulunmaktadır. Sistemin tamamının çevresi yine GaAlAs ile kaplanmıştır. GaAlAs tabakaları, GaAs kuantum noktalar arasında Şekil 3.5'de görüldüğü gibi sonlu potansiyel engelleri oluşturur. Böylece dalga fonksiyonlarının merkezdeki GaAs ile dıştaki GaAs kuantum noktaları arasında geçişi mümkün hale gelmektedir (Aktaş ve Boz 2008, Boz ve ark. 2009). Kürenin iç yarıçapı $R_{iç}=R_1$, bariyerin kalınlığı $T_B=R_2-R_1$ ve kuyu bölgesinin yarıçapı (dış kuantum noktası) $R_d=R_3-R_2$ dir.

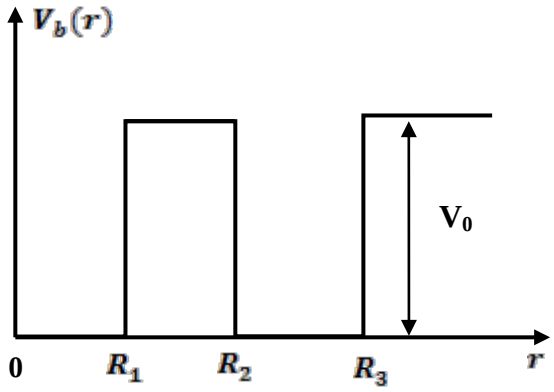


Şekil 3.4. Çok tabakalı küresel kuantum nokta yapısının şematik gösterimi

Çok tabakalı kuantum nokta yapısında, bir elektronlu sistem göz önüne alındığında, Hamiltoniyen ifadesi;

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2}{d\varphi^2}\right\}+V(r) \tag{3.27}$$

biçiminde verilir.



Şekil 3.5. Çok tabakalı kuantum noktasının potansiyel profili

Buradaki V(r) potansiyelinin matematiksel ifadesi;

$$V(r)=\begin{cases} 0 & , \quad 0<r\le R_1 \\ V_0 & , \quad R_1<r<R_2 \\ 0 & , \quad R_2\le r\le R_3 \\ V_0 & , \quad r>R_3 \end{cases} \tag{3.28}$$

biçiminde yazılır. Göz önüne alınan çok tabakalı kuantum noktasının Potansiyel ifadesi küresel simetriktir. Bundan dolayı dalga fonksiyonu açısal ve radyal kısımlara ayrılabilir. Bu durumda sistemin Hamiltoniyeni;

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right\}+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m^*r^2}+V(r)-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r} \tag{3.29}$$

dir. Burada son terimdeki Z, safsızlığın yükünü göstermekte olup, safsızlığın olmaması durumunda Z=0 ve hidrojenik safsızlığın olması durumunda ise Z=1 olarak alınır. Dolayısıyla yarçapa bağlı (radyal) Schrödinger denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_{nl}(r)+\left(\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m^*r^2}+V(r)\right)R_{nl}(r)=E_{nl}R_{nl}(r) \tag{3.30}$$

şeklinde olur. Buradaki Rnl(r) ifadesi, daha önce bahsedildiği gibi dalga fonksiyonunun radyal bileşenini temsil etmektedir.

Shooting yöntemiyle bu denklem çözülmek istendiğinde yine indisli değişkenler cinsinden yazılacak olursa

$$R(i+1)=\left(\frac{r}{r+h}\right)\left(2+\frac{2m^{*}h^{2}}{\hbar^{2}}\left(V(i)+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^{2}}{2m^{*}r^{2}}-E-\frac{Ze^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}\varepsilon_{r}r}\right)\right)R(i)-\left(\frac{r-h}{r+h}\right)R(i-1) \quad (3.31)$$

şekline dönüşür. Burada *i* indisi *i*=2' den *i*= n+1'e kadar değerler almaktadır. Shooting yöntemi, özdeğer denklemini başlangıç değer problemine dönüştürerek çözüm yapmamıza imkan sağlar. Burada, yukarıda daha önce bahsedildiği gibi, R(1) ve R(2) değerleri uygun sınır şartları göz önüne alınarak başlangıç değerleri olarak verilir. Yine E enerjisi için bir başlangıç değeri girilerek iteratif olarak çözüme→gidilir. r ∞ limitinde R(r,E) → 0 limiti, aranılan çözüme karşılık gelecektir. Yani göz önüne alınan yapı için R(n+1,E)→ 0 şartı, aranılan dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerine karşılık gelen çözüm olacaktır. Böylece Schrödinger denklemi sayısal olarak çözülmüş olacaktır.

3.5. Hidrojenik Safsızlık

Yarıiletken bir malzemenin kristal örgüsü içerisine bir safsızlığın doğrudan yerleştirilmesi, bu malzemenin elektronik özelliklerini değiştirir. Yarıiletkenin kristal örgüsü içerisine konulan yabancı bir atom, çevresindeki komşu atomlarla kimyasal bağ yapar. Yarıiletkenle bağ yapmak için yabancı atom, gerekenden daha fazla elektrona sahipse, bu atomun fazlalık elektronları kolayca iyonize olur ve iyonize olan bu elektronlar kristale geçer. Böyle elektron vermeye yakın atomlar donor atomlar olarak isimlendirilir. Eğer safsızlık atomlarının, komşu atomlarla bağ yapabilmek için yeteri kadar elektronları yoksa kristal örgü içerisinde yakın bir bağdan elektron alabilir. Bunun sonucunda valans bandında boş bir durum meydana gelir. Bu tip elektron almaya yakın atomlar ise akseptör olarak isimlendirilir (Harrison 1999).

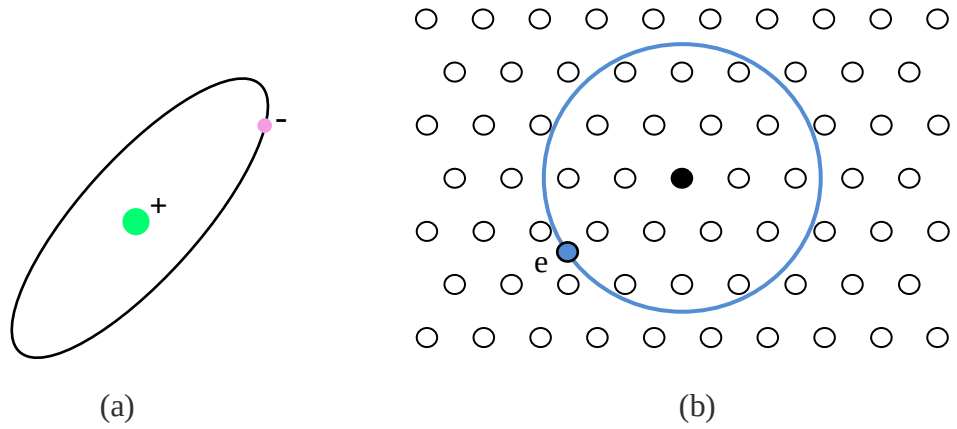
IV. grup elementi olan Silisyum içerisine V. grup elementi olan fosfor katkılandığında, donor safsızlığı oluşmaktadır. Bileşik yarıiletkenlere katkılanan bir donor safsızlığı bir artı yük merkezi gibi davranır. Bu tür bileşik yarıiletkenlere GaAs ve

CdTe örnek olarak verilebilir. Şekil 3.6'daki örgü atomları, Galyum ya da Kadmiyum atomları olabilir. GaAs bileşik yarıiletkeni içerisine katkılanan Silisyum tipik bir donor safsızlığı oluşturur. Yüksek As basıncı altında kristal büyütme sırasında Silisyum Şekil 3.6'daki gibi bir Ga atomunun yerine geçer. IV. grup elementi olan Silisyum III. Grup elementi olan Ga'dan bir fazla elektrona sahiptir ve bu fazla olan elektronu örgüye bırakır. (Harrison 1999).

Örgüye bırakılan fazlalık elektronuna, merkezdeki artı yüklerden dolayı bir Coulomb potansiyeli etki eder. Etkin kütle yaklaşımı altında, böyle bir sistem için Schrödinger denklemi,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r}\right)\psi = E\psi \qquad (3.32)$$

şeklindedir. Bu denklem hidrojen atomu için yazılan Schrödinger denklemine oldukça benzemektedir. Burada ε_0 boşluğun dielektrik geçirgenliği, ε_r ortamın dielektrik geçirgenliği, r ise yabancı atom (safsızlık) ve elektron arasındaki mesafedir (Harrison 1999, Mitin ve ark. 1999).



(a) (b)

Şekil 3.6. (a)Hidrojen atomu (b)Külçe bir yarıiletken içerisindeki yüksüz safsızlık

Kuantum noktasının merkezinde bulunan bir safsızlık için Schrödinger denklemine sınırlandırıcı potansiyeli ve pozitif bir Coulomb merkezi gibi davranan safsızlık potansiyelinin de yazılması gerekir. Bu durumda, küresel bir kuantum noktasının merkezinde bulunan bir hidrojenik safsızlık için Schrödinger denklemi;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r}+V(r)\right)\psi=E\psi \tag{3.33}$$

şeklinde yazılır. Kuantum noktası içindeki yüksüz hidrojen tipi safsızlığın enerji seviyeleri ve karşılık gelen dalga fonksiyonları buradaki Schrödinger denkleminin çözümü ile belirlenir.

3.6. Yarıiletken Malzemelerin Elektromanyetik Işınımla Etkileşmesi

Işıkla atomun etkileşmesi incelenirse göz önünde bulundurulacak üç süreç vardır. Bunlardan ilki, klasik olarak titreşen bir yükün kendiliğinden ışıma yapması gibi bir atomda foton yayımlayarak uyarılmış durumdan daha küçük enerji durumuna kendiliğinden geçiş yapmasıdır. Bu duruma, kendiliğinden yayılma (yayma) denir. İkincisi, atomun ışık demetinden foton soğurarak, düşük düzeyden daha üst düzeye geçiş yapmasıdır. Sonuncusu ise atomların, uygulanan ışık alanının etkisi ile fotonlar yayabilmesidir. Buna uyartılma yayılması denir ve kendiliğinden yayılmadan farklıdır (Bransden ve Joachain 1999). Burada, ikinci durum yani soğurma süreci üzerinde durulacaktır

Yarıiletkenlerde, elektromanyetik radyasyonlar ile taşıyıcıların etkileşimleri sonucu optiksel soğurmalara neden olan farklı mekanizmalar vardır. Karakteristik bir yarıiletkende, en yüksek dolu valans bandı ile en düşük boş iletkenlik bandı arasında yasaklanmış enerji aralıkları oluşur. Yasak enerji aralığı, bu iki bandı birbirinden ayırır. Direkt band aralığına sahip yarıiletkenlerde, iletkenlik bandının minimumu ile valans bandının maksimumu k uzayının aynı noktasına uzanır. Örneğin GaAs ve InSb direk band aralığına sahip tipik bir yarıiletkendir. Ge, Si ve AlAs gibi yarıiletkenler ise direk olmayan band aralığına sahiptirler. Kristalin elektronik durumları ile alanın etkileşimi hem bandlar arası hemde iç band geçişlerine neden olabilir. Sonlu sıcaklıklarda yarıiletkenler için uzun dalga boylu ışınlarda (infrared bölgesi) serbest parçacık soğurumu vardır. Serbest taşıyıcı, fotonun enerjisini soğurduğu zaman, ilk ve son durumlar arasında mümkün olan birçok olası geçişler vardır. Fotonların enerjisi $\hbar\omega$,

enerji band aralığı E_g'den daha büyüktür. Valans bandındaki bir elektron bir foton soğurabilir ve iletkenlik bandının boş bir durumuna geçiş yaparak arkasında bir boşluk bırakır. Bu boşluklar valans bandında pozitif yüklü parçacık gibi davranırlar. Bu durum, bandlar arası optiksel soğurma olarak adlandırılır. Çünkü elektron bir enerji bandından, yarıiletkenin daha yüksekte bulunan enerji bandına geçiş yapar (Ham 2001).

Bir atomik sistemdeki elektronun geçiş olasılığı, Fermi'nin Altın Kuralı kullanılarak hesaplanır. Yarıiletken kuantum nanoyapıların enerji band aralığındaki geçişlerde karmaşık teoriksel hesaplamalar olmasına rağmen, atomik sistemlerdeki elektronik geçişler, bu karmaşık yapıları anlamamıza daha yardımcı olur. Kuantum mekaniğinde ilk durumdan son duruma birim zaman başına geçiş olasılığının hesaplanması, Fermi'nin Altın Kuralı ile aşağıdaki gibidir;

$$\Gamma_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{f}\left|\langle f|V|i\rangle\right|^2 \delta(E) \tag{3.34}$$

Burada $E = E_f - E_i \mp \hbar\omega$ ile verilir. E_f parçacığın son, E_i ise ilk durum enerjisidir. $\langle f|V|i\rangle$ son ve ilk durumlar arasındaki geçişlerin matris elemanıdır. V parçacıklar arasındaki saçılma (etkileşme) potansiyelidir. Burada $\langle f|$, son durum dalga fonksiyonu ve $|i\rangle$ ise ilk durum dalga fonksiyonudur. Aradaki işaretin + veya – olması fotonun soğurulması veya yayılımına göre değişir (Ham 2001).

İlk seviye taban durumu ise, soğurum sürecinde taban durumundaki bir kristalin optiksel uyarım spektrumunun dikkate alınması gerekir. Direkt band geçişleri için, ilk ve son durumlar arasında enerji ve momentum korunumludur. Fakat burada fotonun momentumu elektronun momentumuna nazaran ihmal edilebilir (Mc Lean 1960).

Dingle (1975)'de kuantum kuyularındaki izinli geçişler için bandlar arası optiksel soğurumunun sonuçlarını araştırmıştır. Fotonun enerjisi yasak band aralığı enerjisinden daha az ise, serbest parçacık valans ve iletkenlik bandlar arasında direk geçiş yapamayabilir. Bu durumda serbest parçacık, ya foton soğurarak varsayılan duruma geçer ya da kristal kusurları veya fononlardan saçılarak aynı band içindeki

gerçek durumlara geçiş yapabilir. Buna rağmen iletkenlik ve valans bandlar arasında geçişler oluşmayabilir. Geçişler aynı band içindeki alt bandlar arasında meydana gelebilir (Ham 2001).

3.6.1. Elektromanyetik Alan Altındaki Yüklü Parçacıkların Geçiş Hızları

Elektromanyetik alandaki hidrojen tipi bir atomu tanımlamak için, Ze yüklü M kütleli çekirdeğin varlığı hesaba katılacaktır. M kütlesi elektronun kütlesi yanında çok büyük olduğu için, ışığın alanı ile çekirdek alanı arasındaki etkileşme ihmal edilebilir. İndirgenmiş kütle etkilerini ihmal edilecek ve elektron ile çekirdek arasındaki $-Ze^2/(4\pi\varepsilon_0)r$ elektrostatik Coulomb potansiyelini Hamiltoniene dahil edilecektir. Uygulanan ışığın alanı ise bir $\vec{A}$ vektör potansiyeli cinsinden tanımlanabilir. Elektromanyetik alanda hidrojen tipi bir atom için zamana bağlı Schrödinger denklemi;

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\vec{r},t\right)=\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla}+e\vec{A}\right)-\frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r}\right]\Psi\left(\vec{r},t\right) \tag{3.35}$$

burada $\vec{p}=-i\hbar\vec{\nabla}$ yazıldı. Ayar koşullarından ötürü;

$$\vec{\nabla}\left(\vec{A}\psi\right)=\vec{A}\left(\vec{\nabla}\psi\right)+\left(\vec{\nabla}\vec{A}\right)\psi$$

$$=\vec{A}\left(\vec{\nabla}\psi\right) \tag{3.36}$$

şeklinde olur. (Bransden ve joachin 1999, 2000) Ayar koşulları $\vec{A}$ üzerine başka koşul koyulmasına izin verir. Ayar koşulunu $\vec{\nabla}\vec{A}=0$ seçilir. Bunun anlamı $\vec{\nabla}$ ve $\vec{A}$ komute etmektedir. Bu koşulları kullanarak (3.35) denklemi;

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\vec{r},t\right)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r}-\frac{i\hbar e}{m}\vec{A}\vec{\nabla}+\frac{e^2}{2m}A^2\right]\Psi\left(\vec{r},t\right) \tag{3.37}$$

olarak yazılabilir. $\vec{A}$ ya göre lineer olan terimler karşılaştırıldığında A^2 li kısım küçük olduğu için bu terimi sıfır alınır ve lineer terime küçük bir pertürbasyon olarak bakılır. Fotonlara göre bu belli bir zamanda yalnızca bir fotonun yayınlandığı, ya da soğurulduğu anlamına gelir. A^2 li terimi ihmal ederek zamana bağlı Schrödinger denklemi;

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[H_0+H'(t)\right]\psi \tag{3.38}$$

olarak yazılır. Burada

$$H_0=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r} \tag{3.39}$$

dış alan yokken, bir elektronlu atomu tanımlayan zamana bağlı hidrojen tipi Hamiltoniendir ve

$$H'(t)=\frac{-i\hbar e}{m}\vec{A}.\vec{\nabla} \tag{3.40}$$

ise $\vec{A}$ vektör potansiyeli açıkça zamana bağlı olan bir pertürbasyondur. Pertürbe olmamış ψ_k durumunda;

$$H_0\psi_k=E_k\psi_k \tag{3.41}$$

denkleminin çözümü, normalize edilmiş hidrojen tipi dalga fonksiyonudur. ψ_k özfonksiyonları tam set olduğu için, zamana bağlı Schrödinger denklemi (3.38)'in normalize olduğu varsayılan genel çözümü;

$$\Psi=\sum_k C_k(t)\psi_k(\vec{r})e^{-iE_kt/\hbar} \tag{3.42}$$

olarak yazılabilir. Buradaki toplam hidrojen tipi ψ_k özfonksiyonların hem kesikli hem de sürekli takımı üzerindedir. C_k katsayıları $\lambda=1$ için;

$$\frac{dC_b(t)}{dt}=(i\hbar)^{-1}\sum_k H'_{bk}(t)C_k(t)e^{i\omega_{bk}t} \tag{3.43}$$

Burada;

$$H'_{bk}(t) = \left\langle \Psi_b \left| H'(t) \right| \Psi_k \right\rangle \qquad (3.44)$$

$$= \int \Psi_b^*(\vec{r}) H' \Psi_k(\vec{r}) dr$$

$$\omega_{bk} = (E_b - E_k)/\hbar$$

Sistemin başlangıçta Ψ_a dalga fonksiyonu ile tanımlanan enerjisi E_a olan, iyi tanımlanmış bir kararlı durumda bulunduğunu ve ışık pulsunun t=0 anında açıldığı varsayılırsa, buna göre başlangıç koşulları;

$C_k(t \le 0) = \delta_{ka}$ ile verilir ve H' pertürbasyonuyla birinci mertebeden

$$C_b^{(1)}(t) = (i\hbar)^{-1} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega bat'} dt'$$

$$= \frac{e}{m} \int_0^t \left\langle \Psi_b \left| \vec{A} \vec{\nabla} \right| \Psi_a \right\rangle e^{i\omega bat'} dt' \qquad (3.45)$$

elde edilir. Burada,

$$\omega_{ba} = (E_b - E_a)/\hbar$$

$$\left\langle \Psi_b \left| \vec{A} \vec{\nabla} \right| \Psi_a \right\rangle = \int \Psi_b^*\left(\vec{r}\right) \vec{A}.\vec{\nabla} \Psi_a\left(\vec{r}\right) d\vec{r} \text{ dir.}$$

$$C_b^{(1)} = \frac{-e}{m} \int_{\hbar\omega} d\omega \vec{A}_0(\omega) \left[e^{i\delta\omega} \left\langle \Psi_b \left| e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{\varepsilon} \vec{\nabla} \right| \Psi_a \right\rangle \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba} - \omega)t'} + e^{-i\delta\omega} \left\langle \Psi_b \left| e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{\varepsilon} \nabla \right| \Psi_a \right\rangle \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba} + \omega)t'} \right] \qquad (3.46)$$

Denklem (3.46)'da t' üzerindeki ilk integral $\omega_{ba} \cong \omega$ yani $E_b \cong E_a + \hbar\omega$ olmadıkça ihmal edilecektir. Böylece atomun son durumunun ilk durumundakinden daha büyük enerjiye sahip olduğu ve ışıktan $\hbar\omega$ enerjili bir fotonun soğurulduğu görülür (Bransden ve Joachain 1999, 2000).

3.6.2. Soğurma

İncelemeye, soğurmayı tanımlayan (3.46) denkleminin ilk terimi ile başlayalım. Işığın koherent olduğu gerçeğini kullanarak t anında sitemin b durumunda bulunma olasılığının;

$$\left|C_b^{(1)}(t)\right|^2 = 2\int_{\Delta\omega} d\omega \left[\frac{eA_0(\omega)}{m}\right]^2 \left|M_{ba}(\omega)\right|^2 F(t,\omega-\omega_{ba}) \tag{3.47}$$

olduğu görülür. Burada M_{ba} matris elemanları

$$M_{ba} = \left\langle \Psi_b \left| e^{i\vec{k}\vec{r}}\, \hat{\varepsilon}\vec{\nabla} \right| \Psi_a \right\rangle$$

$$= \int \Psi_b^*(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}\, \hat{\varepsilon}\vec{\nabla}\Psi_a(\vec{r}) dr \tag{3.48}$$

olarak tanımlanır ve $\omega = kc$ olduğu göz önünde bulundurulur. $\tilde{\omega} = \omega - \omega_{ba}$ konulduğunda (3.47)'de gözüken $F(t,\tilde{\omega})$ fonksiyonu

$$F(t,\tilde{\omega}) = \frac{1-\cos\tilde{\omega}t}{\tilde{\omega}^2} \tag{3.49}$$

olarak ifade edilebilir. Özellikle büyük t'ler için $F(t,\tilde{\omega})$ fonksiyonu $\tilde{\omega} = 0$ da yani $\omega = \omega_{ba}$ da keskin bir maksimuma sahiptir. Öyleyse $A_0{}^2(\omega)$ ve $\left|M_{ba}(\omega)\right|^2$ gibi yavaş değişen büyüklükler için $\omega = \omega_{ba}$ yerleştirilebilir ve bu çarpanları (3.47)'deki integral dışına alınabilir ve ω üzerinde integrasyonun sınırları $\pm\infty$ 'a genişletilebilir. Buna göre

$$\left|C_b^{(1)}(t)\right|^2 = 2\left[\frac{eA_0(\omega_{ba})}{m}\right]^2 \left|M_{ba}(\omega_{ba})\right|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} F(t,\tilde{\omega}) d\omega \tag{3.50}$$

olur.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(t,\tilde{\omega}) d\omega = t\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi i \tag{3.51}$$

ifadesini kullanarak;

$$\left|C_b^{(1)}(t)\right|^2 = 2\pi\left[\frac{eA_0(\omega_{ba})}{m}\right]^2 \left|M_{ba}(\omega_{ba})\right|^2 t \qquad (3.52)$$

elde ederiz. Böylece $\left|C_b^{(1)}(t)\right|^2$ olasılığı zamanla doğrusal olarak artar ve soğurma için W_{ba} geçiş hızı;

$$W_{ba} = \frac{d}{dt}\left|C_b^{(1)}(t)\right|^2 = 2\pi\left[\frac{eA_0(\omega_{ba})}{m}\right]^2 \left|M_{ba}(\omega_{ba})\right|^2 \qquad (3.53)$$

olarak tanımlanabilir. $I(\omega)$ birim açısal frekans başına şiddet cinsinden;

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{m^2 c}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{I(\omega_{ba})}{\omega_{ba}^{\ 2}}\left|M_{ba}(\omega_{ba})\right|^2 \qquad (3.54)$$

yazılabilir.

Atom başına, demetten enerji soğurma hızı $(\hbar\omega_{ba})W_{ba}$ dır. $I(\omega_{ba})$ ile bölünen ve (atom başına) enerji soğurma hızı olan bir "soğurma tesir kesiti" σ_{ab} tanımlamak yerinde olur.

$$\sigma_{ab} = \frac{4\pi^2\alpha\hbar^2}{m^2\omega_{ba}}\left|M_{ba}(\omega_{ba})\right|^2 \qquad (3.55)$$

Burada $\alpha = \left(e^2/4\pi\varepsilon_0/\hbar c\right) = 1/137$ ince yapı sabitidir. Frekansları ω_{ba} olan gelen fotonların akısı , $I(\omega_{ba})$ nın $\hbar\omega_{ba}$ ya bölünmesiyle elde edildiğinden σ_{ab} tesir kesiti, birim atom başına birim zamandaki geçiş olasılığı ω_{ba}'nın gelen foton akısına oranı olarak tanımlanabilir. σ_{ab} tesir kesiti, alan boyutuna sahiptir ve göz önüne alınan atomda, saniyede her birinin enerjisi $\hbar\omega_{ba}$ olan göz önüne alınan atomla ışınımdan aynı sayıda foton soğurabilen, demete dik olarak yerleştirilmiş soğurucu madde diskinin alanıdır. (Bransden ve Joachain 1999, 2000).

3.7. Dipol Yaklaşıklığı

$M_{ba} = \left\langle \Psi_b \left| e^{i\vec{k}\vec{r}}\, \hat{\varepsilon}\vec{\nabla} \right| \Psi_a \right\rangle = \int \Psi_b^*(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}\, \hat{\varepsilon}\vec{\nabla}\Psi_a(\vec{r}) d\vec{r}$ denklemindeki matris elemanları birçok uygulamada

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = 1 + (i\vec{k}\vec{r}) + \frac{1}{2}(i\vec{k}\vec{r})^2 + ... \tag{3.56}$$

biçiminde alınarak basitleştirilebilir. Örnek olarak optiksel geçişler durumu incelenirse, atomik dalga fonksiyonları, atomun ilk Bohr yarıçapı yani 1Å mertebesindeki uzaklıklara uzanır. Öte yandan optiksel geçişlere eşlik eden dalga boyları birkaç bin Å mertebesindedir. Öyleyse $(\vec{k}\vec{r})$ niceliği r<1Å olmasından dolayı küçüktür ve yukarıdaki matris denkleminde $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ yerine 1 alınabilir. Bu, atom boyunca gecikme etkilerini ihmal etmek demek olur. Buna elektrik dipol yaklaşıklığı denir ve bu yaklaşıklık sayesinde denklem (3.48);

$$M_{ba} = \hat{\varepsilon}.\left\langle \Psi_b \left| \nabla \right| \Psi_a \right\rangle$$

$$= \hat{\varepsilon}.\frac{i}{\hbar}\left\langle \Psi_b \left| \vec{p} \right| \Psi_a \right\rangle$$

$$= \hat{\varepsilon}.\frac{im}{\hbar}\left\langle \Psi_b \left| \dot{r} \right| \Psi_a \right\rangle \tag{3.57}$$

olur Çünkü $\vec{p} = m\dot{\vec{r}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ dır. Şimdi dinamik r değişkenine Heisenberg hareket denklemi uygulanırsa

$$\frac{dr}{dt} = (i\hbar)^{-1}[\vec{r}, H_0] \tag{3.58}$$

elde ederiz. Burada, pertürbasyon kuramıyla çalışıldığı için H yerine H_0 yerleştirildi ve buna göre;

$$\left\langle \Psi_b \left| \dot{\vec{r}} \right| \Psi_a \right\rangle = (i\hbar)^{-1} \left\langle \Psi_b \left| \vec{r} H_0 - H_0 \vec{r} \right| \Psi_a \right\rangle$$

$$= (i\hbar)^{-1} (E_a - E_b) \left\langle \Psi_b \left| \vec{r} \right| \Psi_a \right\rangle \qquad (3.59)$$

elde edilir. Bu terim daha gerçekçi bir gösterimle

$\vec{p}_{ba} = im\omega_{ba} \vec{r}_{ba}$ yazılır. Burada

$$\vec{p}_{ba} = \left\langle \Psi_b \left| \vec{p} \right| \Psi_a \right\rangle = m \left\langle \Psi_b \left| \dot{\vec{r}} \right| \Psi_a \right\rangle \qquad (3.60)$$

ve

$\vec{r}_{ba} = \left\langle \Psi_b \left| \vec{r} \right| \Psi_a \right\rangle$ dır.

Bu şekilde M_{ba} 'yı tanımlarsak;

$$M_{ba} = -\frac{m\omega_{ba}}{\hbar} \hat{\varepsilon}.\vec{r}_{ba} \qquad (3.61)$$

biçiminde ifade etmemize yardımcı olur. Elektrik dipol yaklaşıklığındaki soğurma için geçiş hızı, denklem (3.54)'e $kA_0(\omega) = 0$ ifadesi yerleştirilerek elde edilebilir. Yani;

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{c\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) (\omega_{ba}) \left| \hat{\varepsilon}.\vec{r}_{ba} \right|^2 \qquad (3.62)$$

dir. Bu aşamada $\vec{D} = -e\vec{r}$ elektrik dipol momenti ve onun $\vec{D}_{ba} = -e\vec{r}_{ba}$ matris elemanını ortaya koymak uygundur. Buna göre denklem (3.62) 'nin son hali;

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{c\hbar^2} \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \right) I(\omega_{ba}) \left| \hat{\varepsilon} \vec{D}_{ba} \right|^2 \qquad (3.63)$$

olur.

$\hat{\varepsilon}\vec{D}_{ba}$ niceliği b ile a arasında $\hat{\varepsilon}$ doğrultusundaki elektrik dipol momenti bileşenidir. $\vec{D}_{ba}$ sıfır olmuyorsa, geçişin izinli olduğu söylenir. Eğer $\vec{D}_{ba}$ sıfırsa, geçiş yasaklanmıştır. Geçiş yasak olduğu zaman manyetik dipol, elektrik kuadrapol, ve diğer

geçişlere karşılık gelen Denklem (3.56)'daki seri daha yüksek terimler sıfır olmayabilir, fakat geçiş oranı izinli geçişlerden çok daha küçük olacaktır. Eğer M_{ba} denklem (3.48)'deki yaklaşıklık yapılmamış biçimde sıfır olursa, bu geçişin tam anlamıyla yasaklanmış olduğu söylenir. Ancak geçişler, iki fotonun eşit olarak soğurması yoluyla veya pertürbasyon kuramındaki daha yüksek mertebeli süreçlerle bile oluşabilir. (Bransden ve Joachain 1999, 2000). Eğer ϕ yı ε ile r_{ba} vektörleri arasındaki açı olarak tanımlarsak;

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{c\hbar^2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right) I(\omega_{ba}) \left|\vec{r}_{ba}\right|^2 \cos^2\theta \tag{3.64}$$

yazabiliriz. Burada $\left|\vec{r}\right|^2 = \left|x\right|^2 + \left|y\right|^2 + \left|z\right|^2$ dır. Kutuplanmamış izotropik ışınım için $\hat{\varepsilon}$ nin yönelimi gelişigüzel olacağından ve $\cos^2\theta$ yerine ortalama değeri olarak 1/3 yerleştirileceğinden,

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{3c\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right) I(\omega_{ba}) \left|\vec{r}_{ba}\right|^2$$

$$= \frac{4\pi^2}{3c\hbar^2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right) I(\omega_{ba}) \left|\vec{D}_{ba}\right|^2 \tag{3.65}$$

elde edilmiş olur (Bransden ve Joachain 1999, 2000).

3.8. Fotoiyonlaşma Tesir Kesiti

Fotoiyonlaşma süreci bir safsızlığa bağlı bir elektronun ışıkla uyarılması sonucu, safsızlıkla bağını koparark serbest hale geçmesi olarak tanımlanabilir. Bir donor safsızlığının taban durumunda yer alan bir elektron, $\hbar\omega$ enerjili bir foton soğurarak, iletim bandında bir son duruma geçiş yapabilir. Bu geçişin gerçekleşmesi için $\hbar\omega$ uyarılma enerjisinin, belirli bir başlangıç eşik enerjisinden daha büyük olması gerekir. Fotoiyonlaşma tesir kesiti, sınırlandırma potansiyeli ve foton enerjisine bağlıdır. Dipol yaklaşımındaki Fermi'nin altın kuralından başlayarak, külçe bir yarıiletken durumundaki gibi;

$$\sigma(\hbar\omega)=\left(\frac{4}{3}\pi^2\alpha\right)\hbar\omega\left(\frac{n_r}{\varepsilon}\right)\left(\frac{F_{eff}}{F_0}\right)^2\sum_f\left|\left\langle\Psi_f\left|\vec{r}\right|\Psi_i\right\rangle\right|^2\delta(E_f-E_i-\hbar\omega) \qquad (3.66)$$

ile verilir. Burada n_r yarıiletkenin kırılma indisi, ε ortamın dielektrik geçirgenliği, $\alpha=e^2/\hbar c$ ince yapı sabiti, $\hbar\omega$ fotonun enerjisi, F_{eff}/F_0 gelen fotonun etkin elektrik alanının, ortamın ortalama elektrik alanına oranıdır. $\left\langle\psi_f\left|e\vec{r}\right|\psi_i\right\rangle$ ifadesi ilk ve son durumları arasındaki dipol matris elemanıdır. ψ_f ve ψ_i dalga fonksiyonları son ve ilk seviyelerin dalga fonksiyonları, E_f ve E_i ise bu seviyelere karşılık gelen enerji değerleridir. Buradaki enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları, shooting yöntemi hesaplaması sonucu elde edilen enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlarıdır.

Küresel kuantum nokta yapılarda, elektronun hidrojenik safsızlıktan iyonlaştıktan sonra geçiş yapacağı son enerji seviyesi, seçim kurallarıyla ($\Delta\ell=\mp1$) belirlenir. Buna göre, 1s safsızlık seviyesi taban durum olarak alınırken, safsızlığın olmadığı durumdaki bir elektronun 1p enerji seviyesi son durum olarak alınır (Şahin 2008). Bu yaklaşımın fiziksel gerekçeleri literatürde yeterince açıklanmıştır (El-Said ve Tomak 1990, 1992, El-Kawni ve Tomak 1992, Sali ve ark. 1997, Sali ve ark. 2002).

Denk.(3.66) ile verilen fotoiyonlaşma tesir kesitini hesaplamak için denklemdeki F_{eff}/F_0 ifadesini hesaplamak çok zor olduğu için ve fotoiyonlaşma tesir kesitinin şeklinde herhangi bir etkisi olmadığı için 1 olarak alınır. Aynı zamanda, başlangıç ve

son durum dalga fonksiyonları (ψ_i ve ψ_f), shooting yönteminden elde edilen radyal dalga fonksiyonlarının ($R_{n,\ell}(r)$) küresel harmoniklerle ($Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$) çarpılmasıyla (yani $R_{n,\ell}Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$) elde edilir. Denklem (3.66)'daki δ fonksiyonu dar bir Lorentz çizgi şekliyle yerdeğiştirir.

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{\hbar\Gamma}{\pi\left\{\left[\hbar\omega - (E_f - E_i)\right]^2 + (\hbar\Gamma)^2\right\}} \tag{3.67}$$

Burada Γ safsızlığın Lorentz çizgi genişliğidir ve $0{,}1\ R_y^*$ (etkin Rydberg enerjisi) olarak alınmıştır.

4. HESAPLAMA SONUÇLARI

4.1. Giriş

Bu bölümde, 3. Bölüm'de bahsedilen çok tabakalı bir küresel kuantum noktasındaki hidrojenik bir safsızlığın bağlanma enerjileri ve fotoiyonlaşma tesir kesitleri ile ilgili hesaplama sonuçları verilmiştir. Enerji seviyeleri ve bu seviyelere karşılık gelen dalga fonksiyonlarının belirlenmesinde shooting yöntemi kullanılmıştır. Hesaplamalarda $m=e=\hbar=1$ olan atomik birim sistemi kullanılmıştır. Burada malzeme parametreleri olarak GaAs/AlGaAs kuantum noktasına ait malzeme parametreleri kullanılmış olup $\varepsilon_{GaAs}=13{,}18\varepsilon_0$ ve $m^*_{GaAs}=0{,}067m_0$, $\varepsilon_{AlGaAs}=12{,}8\varepsilon_0$ ve $m^*_{AlGaAs}=0{,}088m_0$'dır. Buradaki ε_0 boşluğun dielektrik geçirgenliği ve m_0 serbest elektronun kütlesidir. Dolayısıyla GaAs için etkin Bohr yarıçapı $a_0^* = \dfrac{4\pi\varepsilon\hbar^2}{e^2 m^*}$ ve etkin Rydberg enerjisi ise $R_y^* = \dfrac{e^4 m^*}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon^2}$ dir. Bunların sayısal değerleri yaklaşık olarak $a_0^* \cong 100$Å ve $R_y^* \cong 5{,}25$ meV'tur. Sınırlandırıcı potansiyelin yüksekliği $V_0=228$ meV olarak alınmıştır.

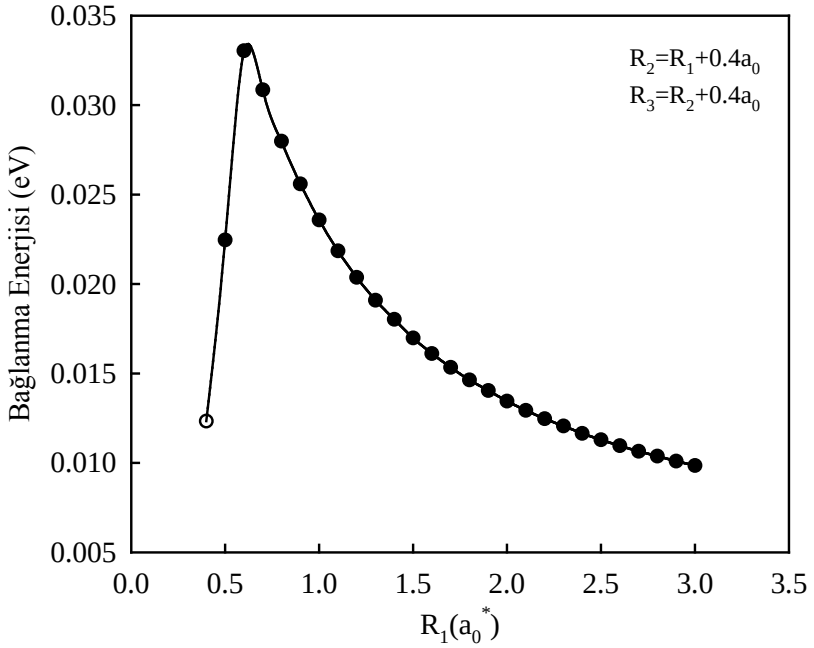
4.2. Safsızlığın Bağlanma Enerjilerinin Kuantum Nokta Yarıçapıyla Değişimi

Kuantum nokta sistemlerinde yüksüz hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisi E_b, safsızlığın olmadığı durumdaki bir elektronun taban durum enerjisi ile, safsızlığın olduğu durumdaki taban durum enerjisi arasındaki fark olarak

$$E_b(D^0) = E_{10} - E_{10}(D^0) \qquad (4.1)$$

şeklinde tanımlanır (Chuu ve ark. 1992). Burada E_{10} safsızlığın olmadığı durumdaki taban durum enerjisi ve $E(D^0)$ ise donor safsızlığının taban durum enerjisidir.

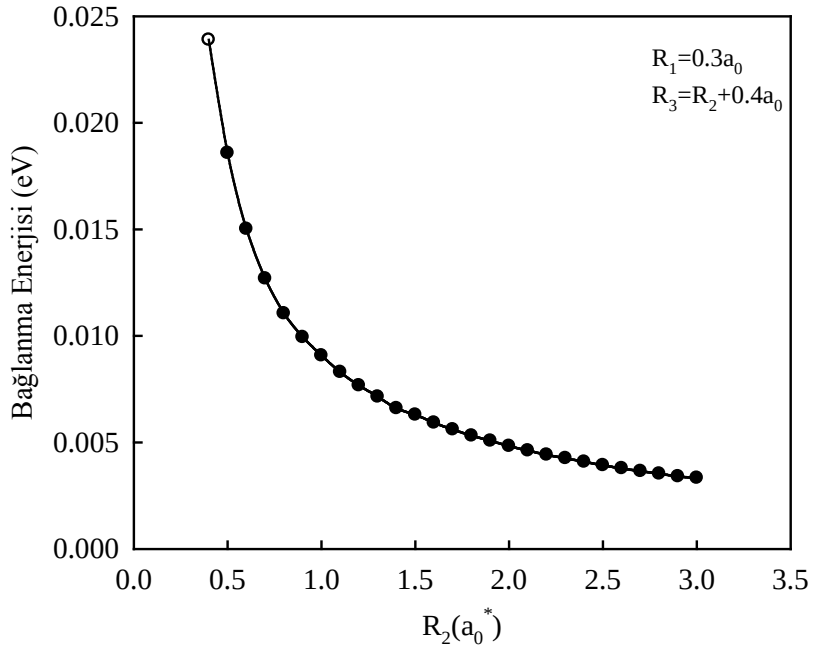
Şekil 4.1'de, hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisinin R_1 iç kuantum nokta yarıçapıyla değişimi görülmektedir. Bariyer kalınlığı R_2 ve kuyu genişliği R_3 kalınlıkları sabit olup, $R_2=R_1+0{,}4\,a_0^*$ ve $R_3=R_2+0{,}4\,a_0^*$'dır. Grafikten görüldüğü gibi, artan R_1 iç kuantum nokta yarıçapıyla bağlanma enerjisi hızlı bir şekilde artmaktadır.



Şekil 4.1. Yüksüz hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin iç kuantum nokta yarıçapı R_1'e göre değişimi.

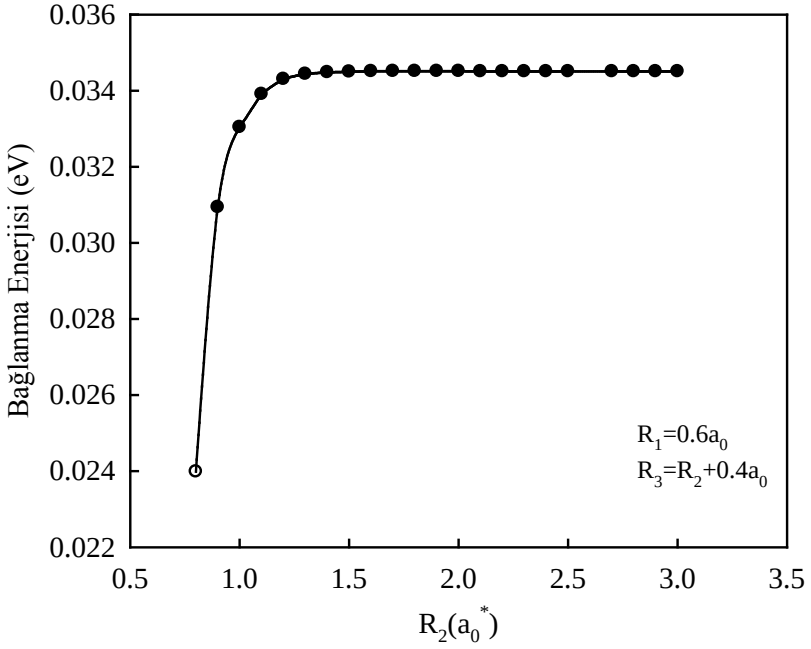
R_1=0,6 a_0^* civarında maksimum değerine ulaşmakta ve bu yarıçap değerinden sonra artan kuantum nokta yarıçapıyla birlikte yavaş bir şekilde azalmakta ve sabit bir değere doğru gitme eğilimi sergilemektedir. Bu sonuç şu şekilde açıklanabilir: İç kuantum noktasının (çekirdek) yarıçapı çok küçükken, safsızlığın olduğu ve olmadığı durumda elektronun dış kuantum noktasında (kuyu) bulunma olasılıkları, kinetik enerjinin baskın olması sebebiyle daha fazladır. Dolayısıyla safsızlığın çekici Coulomb etkisi oldukça az hissedilmekte ve bunun sonucu olarakta bağlanma enerjisi küçük olmaktadır. Çekirdek yarıçapı arttıkça kinetik enerjinin etkisi azalmakta ve safsızlığın çekici Coulomb potansiyeli daha belirgin olmaya başlamaktadır. Bu ise, bağlanma enerjisinde bir artış olarak kendini göstermektedir. Bağlanma enerjisinin maksimum olduğu noktada ise, Coulomb potansiyelinin çekici etkisiyle birlikte duvarlar, elektronun safsızlığa yaklaşmasına dolayısıyla, bağlanma enerjisinin artması yönünde bir rol oynamaktadır. Daha büyük yarıçaplarda ise, duvarların elektronu safsızlığa yaklaştırma şeklindeki etkisi azalmakta ve bağlanma enerjisi külçe (bulk) değerlerine doğru yaklaşmaktadır.

Bu sonuç, literatürdeki tek kuantum noktalarındaki bağlanma enerjisi ile ilgili çalışmalarla uyum içindedir (Porras-Montenegro ve Perez-Merchancano 1992, Deng ve ark. 1994, Şahin ve Tomak 2005).



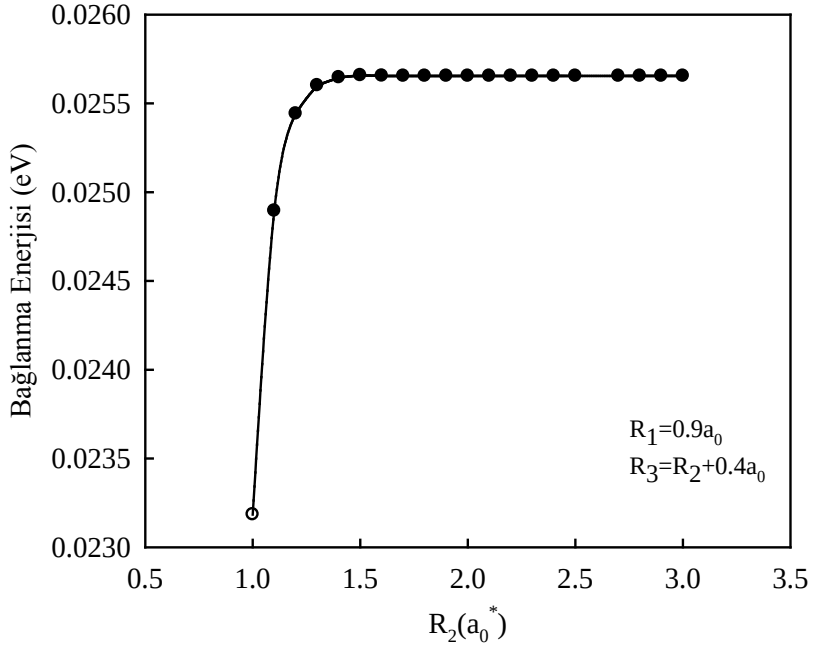
Şekil 4.2. $R_1=0,3a_0^*$ sabit ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_2 bariyer kalınlığına göre değişimi.

Şekil 4.2'de hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisinin, bariyer kalınlığı R_2 ile değişimi görülmektedir. İç kuantum nokta yarıçapı R_1 ve kuyu genişliği R_3 sabit olup, $R_1=0,3a_0^*$ ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$'dır. Grafikten görüldüğü gibi, artan bariyer kalınlığı R_2 ile bağlanma enerjisi hızlı bir şekilde azalmaktadır. $R_2=0,8a_0^*$ dan itibaren bağlanma enerjisinin değişim hızı yavaşlamakta, bu yarıçap değerinden sonra artan kuantum nokta yarıçapıyla birlikte yavaş bir şekilde azalmakta ve sabit bir değere doğru gitme eğilimi sergilemektedir. Bu ise beklenen bir sonuçtur. Çünkü R_2 birinci engel genişliği yeterince küçük olunca, kuyu bölgesindeki elektron safsızlığın etkisini daha çok hissetmekte, engel genişliği artarken safsızlığın etkisi azalmakta ve dolayısıyla bağlanma enerjisi artan R_2 değeriyle azalmaktadır.



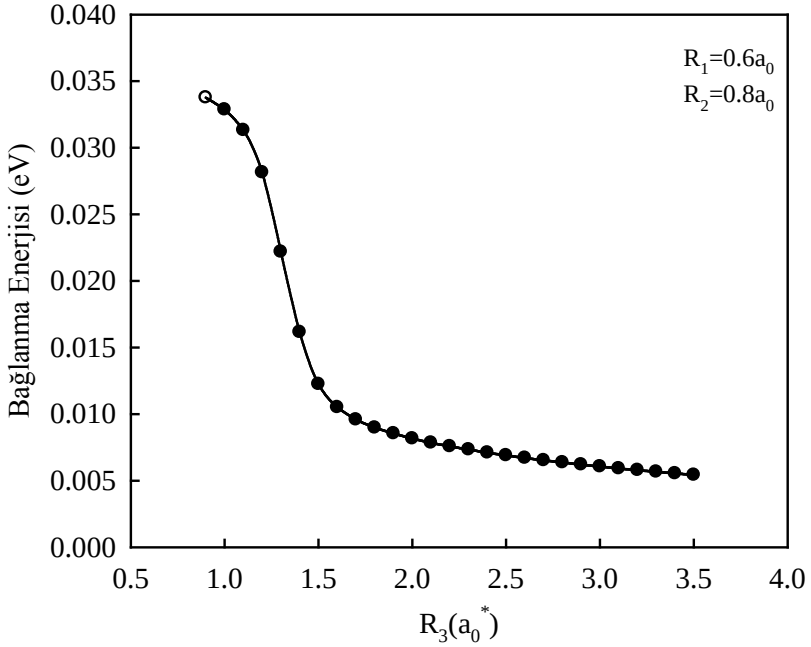
Şekil 4.3. $R_1=0,6a_0^*$ sabit ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_2 bariyer kalınlığına göre değişimi.

Şekil 4.3 ve Şekil 4.4, Şekil 4.2'den farklı olarak sırasıyla $R_1=0,6a_0^*$ ve $R_1=0,9a_0^*$ için çizilmiştir. Görüldüğü gibi, değişim Şekil 4.2'den tamamen farklı bir davranış sergilemektedir. Şekillerden görüldüğü gibi, küçük R_2 değerlerinde bağlanma enerjisi, artan bariyer kalınlığı R_2 ile hızlı bir şekilde artmaktadır. Bunun sebebi R_2 bariyer kalınlığı arttıkça elektronun kuyu bölgesinde bulunma olasılığı azalmakta ve bu bariyer kalınlığı bağlanma enerjisi üzerinde artırıcı bir rol oynamaktadır. Bariyer kalınlığının yaklaşık $R_2 = 1,2a_0^*$'dan sonraki değerlerinde elektron kuyu bölgesini artık neredeyse hiç hissedemediği için bağlanma enerjisi sabit kalmaktadır. Benzer durum Şekil 4.4'de gözlenmektedir.

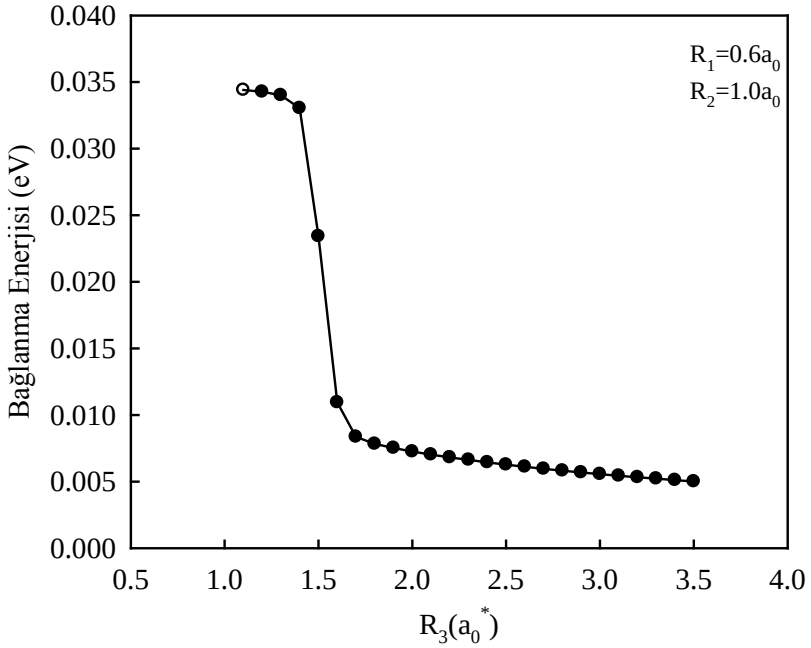


Şekil 4.4. $R_1=0,9a_0^*$ sabit ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_2 bariyer kalınlığına göre değişimi.

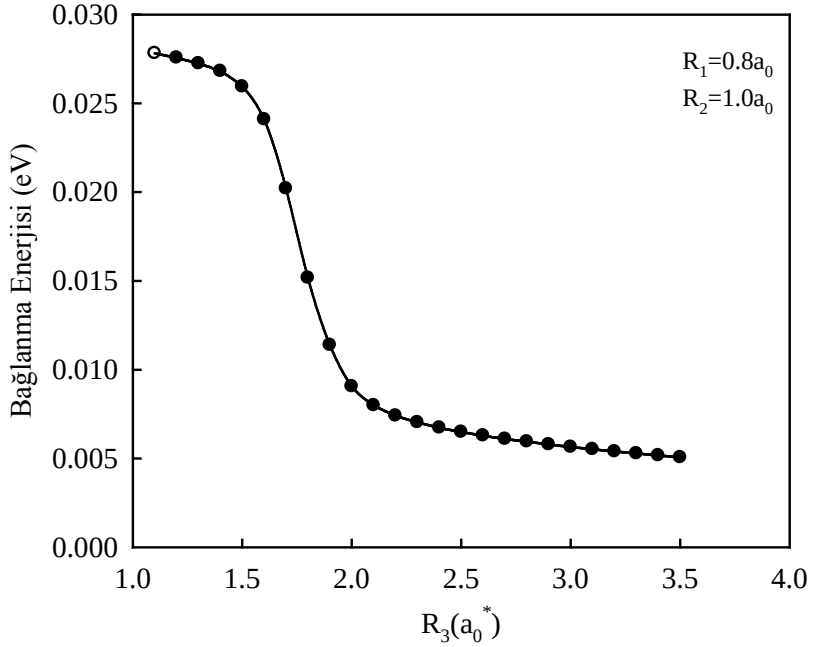
Şekil 4.5, Şekil 4.6, Şekil 4.7 ve Şekil 4.8'de hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisinin, bariyer kalınlığı R_3 ile değişimi görülmektedir. İç kuantum nokta yarıçapı R_1 ve kuyu genişliği R_2 sabit olup, Şekil 4.5'de $R_1=0,6a_0^*$ ve $R_2=0,8a_0^*$ dır. Grafikten görüldüğü gibi bağlanma enerjisi, artan R_3 kuyu yarıçapıyla hızlı bir azalma eğilimi göstermektedir. $R_3=0,9\text{-}1,5a_0^*$ değeri aralığında artan R_3 değerleriyle bağlanma enerjisi yavaş bir şekilde azalmaktadır. $R_3=1,5a_0^*$ değerinden itibaren bağlanma enerjisi çok daha yavaş bir şekilde ve sabit bir değere gitme eğilimi sergilemektedir. Şekil 4.6'da $R_1=0,6a_0^*$ ve $R_2=1,0a_0^*$'dır. Grafikten görüldüğü gibi bağlanma enerjisi, artan R_3 kuyu yarıçapıyla daha hızlı bir azalma göstermektedir. $R_3=1,1\text{-}1,4a_0^*$ değerlerinde ve aralığında artan R_3 değerleriyle bağlanma enerjisi çok yavaş bir şekilde azalmaktadır. $R_3=1,4a_0^*$'den itibaren bağlanma enerjisi sert ve hızlı bir şekilde azalmaktadır. $R_3=1,7a_0^*$'den itibaren bağlanma enerjisi yavaş bir şekilde azalarak sabit bir değere gitme eğilimi göstermektedir. Şekil 4.7'de, $R_1=0,8a_0^*$ ve $R_2=1,0a_0^*$'dır.



Şekil 4.5. $R_1=0,6a_0^*$ ve $R_2=0,8a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_3 kuyu genişliğine göre değişimi.



Şekil 4.6. $R_1=0,6a_0^*$ ve $R_2=1,0a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_3 kuyu genişliğine göre değişimi.

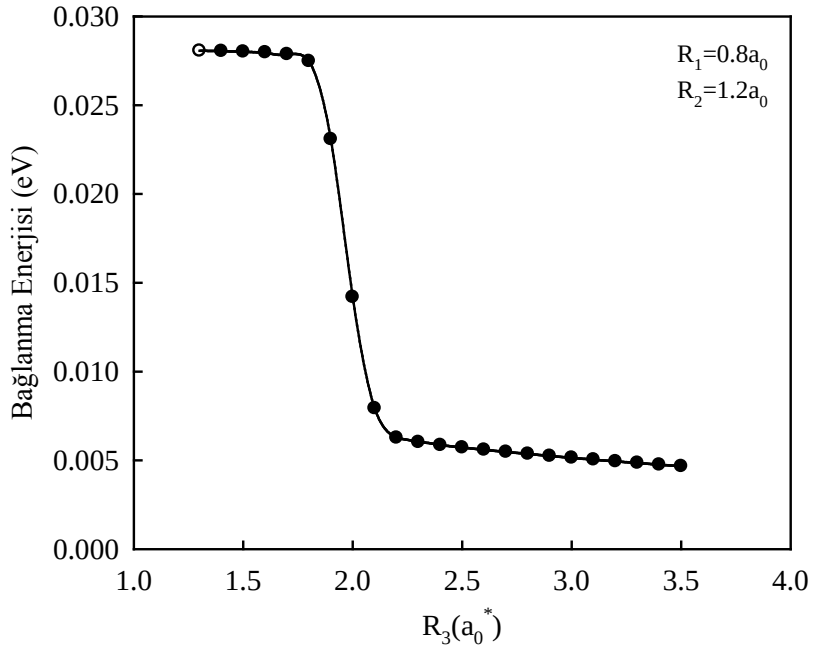


Şekil 4.7. $R_1=0,8a_0^*$ ve $R_2=1,0a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_3 kuyu genişliğine göre değişimi.

Grafikten görüldüğü gibi, bağlanma enerjisi, artan R_3 kuyu yarıçapıyla daha hızlı bir azalma eğilimi göstermektedir. $R_3=1,1a_0^*$ değerinden itibaren bağlanma enerjisi yavaş bir şekilde azalmaktadır. $R_3=1,6a_0^*$'dan itibaren bağlanma enerjisi yumuşak ve hızlı bir şekilde azalmaktadır. $R_3=2,0a_0^*$'dan itibaren bağlanma enerjisi yavaş bir şekilde azalarak sabit bir değere gitme eğilimi sergilemektedir. Şekil 4.8'de $R_1=0,8a_0^*$ ve $R_2=1,2a_0^*$ dır. Grafikten görüldüğü gibi, bağlanma enerjisi, artan R_3 kuyu yarıçapıyla daha hızlı bir azalma eğilimi göstermektedir. $R_3=1,3a_0^*$ den $R_3=1,7a_0^*$ arasında kalan değerlerde bağlanma enerjisi yaklaşık olarak aynıdır. $R_3=1,8a_0^*$'dan itibaren bağlanma enerjisi hızlı ve sert bir şekilde azalmaktadır. $R_3=2,2a_0^*$ değerinden bağlanma enerjisi yavaş bir şekilde azalarak sabit bir değere gitme eğilimi sergilemektedir. Yine Şekil 4.6 ve Şekil 4.8 den görüldüğü gibi engel bölgesinin genişliği daha da artırıldığında bağlanma enerjisinin R_3 ile değişimi çok daha hızlı olmaktadır.

Bu durumların fiziksel sebebi şu şekilde açıklanabilir. R_1 ve R_2 sabitken, R_3'ün değişken olması durumunda, şekillerden görüldüğü gibi R_3'ün küçük değerlerinde

bağlanma enerjisi en yüksek değerlerindedir. Bu durumda kuyu bölgesi çok küçük olduğu için elektronun çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı çok yüksek olmaktadır. Buna bağlı olarak safsızlığın etkisi, taban durum enerjisi üzerinde çok fazla olmakta ve bunun sonucunda bağlanma enerjisi de büyümektedir. Artan R_3 değeri ile elektronun kuyu bölgesinde bulunma olasılığı artmakta ve dolayısıyla, kuantum noktasının merkezinde bulunan safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinin etkisini daha az hissetmektedir. Bu ise bağlanma enerjisinin azalmasına sebep olmaktadır. Kuyu bölgesinin daha da genişlemesi ile elektron, safsızlığın olduğu ve olmadığı durumda neredeyse tamamen kuyu bölgesinde lokalize olmakta ve bağlanma enerjisi külçe değerlerine doğru yaklaşmaktadır.



Şekil 4.8. $R_1=0,8a_0^*$ ve $R_2=1,2a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisinin, R_3 kuyu genişliğine göre değişimi.

4.3. Fotoiyonlaşma Tesir Kesiti

Gelen foton enerjisinin başlangıç ve son seviyeler arasındaki farka eşit olması durumunda (yani eşik enerjisi veya rezonans durumu), Denk. (3.66)'dan da görüldüğü gibi foton enerjisi ve dipol matris elemanı dışındaki tüm terimler fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerine sadece bir sabit şeklinde katkıda bulunup, biçimini belirlemede etkili olmazlar. Bu rezonans durumunda (yani $\hbar\omega=E_f-E_i$) Lorentz çizgi şeklini veren matematiksel ifade $1/\pi\hbar\Gamma$ şeklinde bir sabit olur. Bununla birlikte ilk ve son seviyeler arasındaki enerji farkı ve bu seviyelerin dalga fonksiyonlarının örtüşme integrali yani dipol matris elemanı fotoiyonlaşma tesir kesitinin şeklini belirlemede etkin rol oynar.

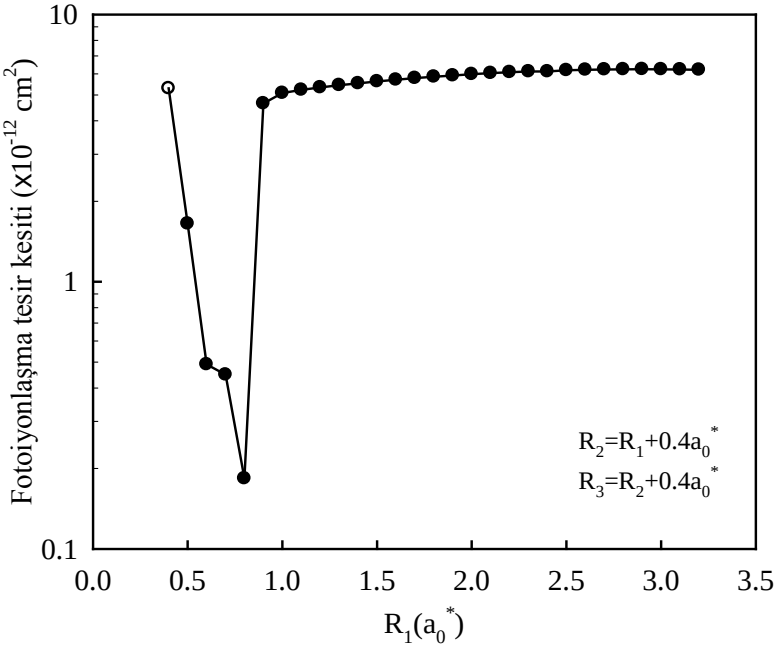
Tek bir kuantum noktası göz önüne alındığında, çok küçük kuantum nokta yarıçaplarında örtüşme terimi küçük fakat seviyeler arasındaki fark büyüktür. Çünkü bu durumda, safsızlığın taban durum enerji seviyesi ve dalga fonksiyonu, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinden dolayı, kuyu içinde kuantum noktasının merkezindeki safsızlık civarında lokalize olmaktadır. Buna ilaveten, safsızlığın olmadığı durumdaki uyarılmış enerji seviyesi ve bu seviyenin dalga fonksiyonu, kuyu dışında sürekli bölgede oluşmaktadır. Fakat nokta yarıçapı büyütülmeye başlandığında, uyarılmış durum da kuyu içerisinde yani bağlı durum olamaya başlamaktadır. Dolayısıyla, ilk ve uyarılmış seviyeler arasındaki fark azalırken, dalga fonksiyonlarının örtüşmesi büyümektedir. Kuantum nokta yarıçapı daha da büyütüldüğünde, uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu üzerinde herhangi bir sınırlama olmamasına rağmen, safsızlık atomunun çekici Coulomb potansiyeli taban durum dalga fonksiyonu üzerinde bazı sınırlamalar getirmektedir. Bu süreç, büyük kuantum noktalarındaki örtüşme üzerinde negatif rol oynar (Şahin 2008).

Çok tabakalı kuantum noktalarındaki fiziksel süreç, tek bir kuantum noktasındaki fiziksel süreçten daha farklıdır. Bu kapsamda ilk olarak, fotoiyonlaşma tesir kesitinin tabaka kalınlıklarına bağlılığı ile ilgili sonuçlar verilecektir. Daha sonra, gelen foton enerjisine bağlılığı ile ilgili sonuçlar verilecek ve olası fiziksel süreçler tartışılacaktır.

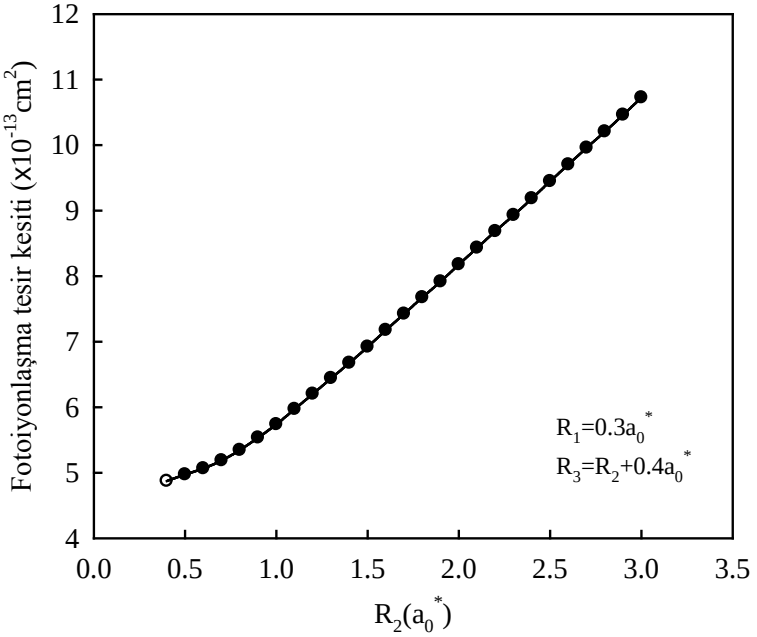
4.3.1. Fotoiyonlaşma Tesir Kesitinin Tabaka Kalınlıklarına Bağlılığı

Şekil 4.9'da fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin çekirdek yarıçapı R_1 ile değişimi gösterilmiştir. Bu pik değeri gelen foton enerjisinin ilk ve son seviye arasındaki enerji farkına eşit olması durumuna karşılık gelmektedir. Şekilden görüldüğü gibi fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değeri $R_1=0,4a_0^*$ de maksimum iken artan R_1 değeri ile çok hızlı bir şekilde düşmekte ve $R_1=0,8a_0^*$ değerinde minimuma ulaşmaktadır. $R_1=0,9a_0^*$ olduğunda yine çok keskin bir şekilde yükselmekte ve bundan sonraki R_1 değerlerinde hemen hemen sabit kalmaktadır. Bu durum şöyle açıklanabilir: Çok küçük R_1 çekirdek yarıçap değerlerinde gerek taban seviyenin gerekse uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonları kuyu bölgesinde lokalize olmakta, bu ise örtüşme terimini büyütmektedir. R_1'in büyümesi ile hidrojenik safsızlığın dalga fonksiyonu, safsızlığın çekici Coulomb etkisinden dolayı çekirdek bölgesine doğru lokalize olmaya başlarken, uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu hala kuyu bölgesinde lokalizedir. Bu ise örtüşme integralinin değerini düşürmektedir. Dolayısıyla $R_1=0,8a_0^*$ 'a kadar devam eden bu süreç fotoiyonlaşma tesir kesitini en küçük değerine kadar düşürmektedir. $R_1=0,9a_0^*$'dan itibaren uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonunda kuantum noktasının çekirdek bölgesinde lokalize olmaya başlaması ile örtüşme terimi dolayısıyla dipol matris elemanı tekrar büyümeye başlamaktadır. Bu ise fotoiyonlaşma tesir kesitinin değerini artırıcı bir rol oynar.

Şekil 4.10'da çekirdek yarıçapı $R_1=0,3a_0^*$ sabit ve $R_3=R_2+0,4$ olmak üzere fotoiyonlaşma tesir kesitinin bariyer kalınlığı R_2 ile değişimi görülmektedir. Şekilden görüldüğü gibi fotoiyonlaşma tesir kesiti R_2 ile düzgün olarak artmaktadır. Benzer değişim $R_1=0,4a_0^*$ değeri içinde gözlenmiştir. Bu değişimin fiziksel sebebi küçük R_1 değerlerinde taban seviye ve uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonlarının kuyu bölgesinde lokalize olması ve artan R_2 bariyer kalınlığıyla çekirdek bölgesinde bulunma olasılığının tamamen azalması ve sonuçta elektrik dipol teriminin daha da büyümesi şeklinde izah edilebilir. Dipol momentin büyümesi fotoiyonlaşmanın büyümesine neden olmaktadır

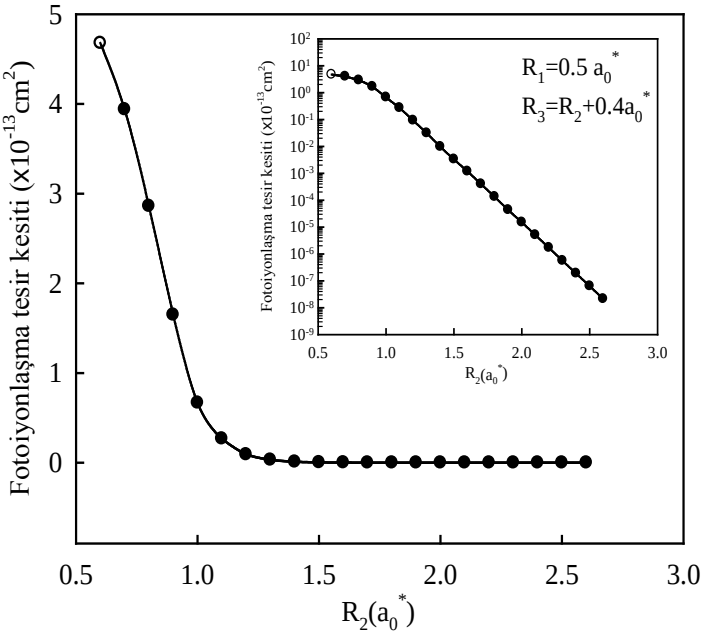


Şekil 4.9. $R_2=R_1+0,4a_0^*$ ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin, R_1 çekirdek yarıçapı ile değişimi.

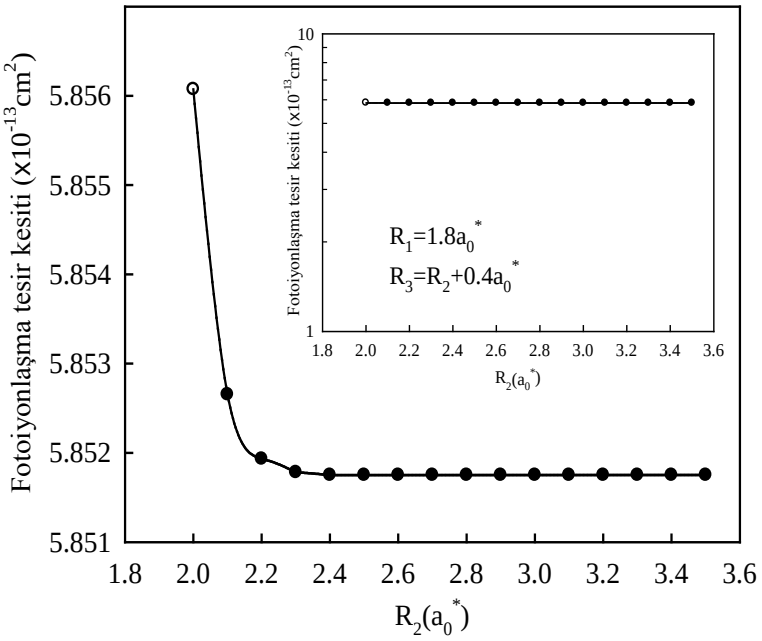


Şekil 4.10. $R_1=0,3a_0^*$ ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_2 bariyer genişliğine göre değişimi.

$R_1=0,5a_0^*$ yapıldığında ise fotoiyonlaşma tesir kesitinin R_2 bariyer kalınlığı ile değişimi tamamen farklı bir davranış göstermektedir. Bu durumda fotoiyonlaşma tesir kesiti R_2 ile hızlı bir şekilde azalmakta ve $R_2=1,2a_0^*$ değerinden sonra çok küçük bir değere yaklaşık sabit olarak gitmektedir. Benzer değişimler R_1'in $0,5a_0^*$'den büyük değerlerinde de gözlenmiştir. Bu değişimin fiziksel sebebi şu şekilde açıklanabilir. $R_1=0,5a_0^*$ iken taban durumu dalga fonksiyonu, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinden dolayı, kuantum noktasının çekirdek bölgesinde lokalizedir. R_2'nin küçük değerlerinde üst seviyenin dalga fonksiyonunun çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı yüksektir. Bu ise örtüşmenin dolayısıyla dipol matris elemanının büyük olması anlamındadır. Dolayısıyla küçük R_2 değerlerinde fotoiyonlaşma tesir kesiti değerleri büyük olmaktadır. Bariyer kalınlığı yani R_2'nin artması kuyu bölgesinde lokalize olan uyarılmış seviyeye ait dalga fonksiyonunun çekirdek bölgesinde tünelleme olasılığını azaltacak dolayısıyla dalga fonksiyonunun örtüşmesi küçülecektir. Buda fotoiyonlaşma tesir kesitinin artan bariyer kalınlığı ile azalmasına sebep olmaktadır.

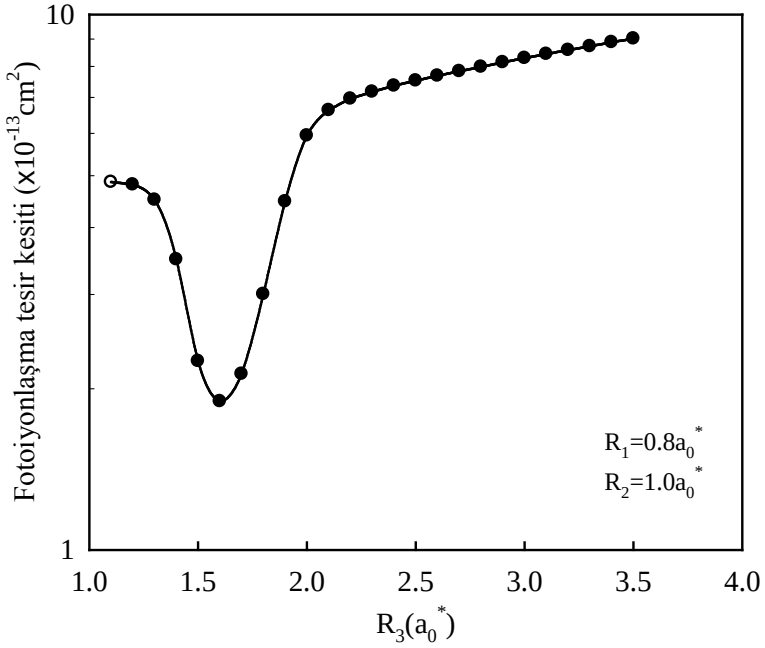


Şekil 4.11. $R_1=0,5a_0^*$ ve $R_3=R_2+0,4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_2 bariyer genişliğine göre değişimi.



Şekil 4.12. $R_1=1{,}8a_0^*$ ve $R_3= R_2+0{,}4a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_2 bariyer genişliğine göre değişimi.

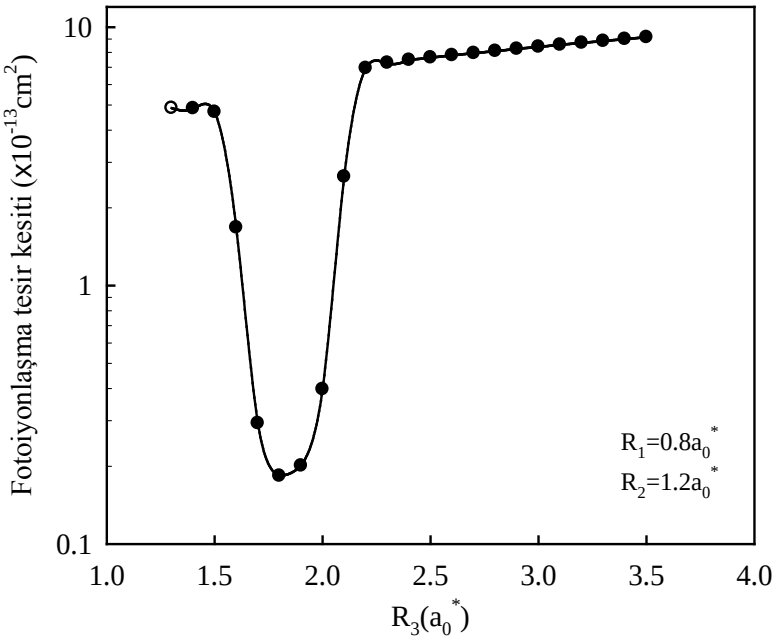
R_1'in çok büyük değerlerinde hem taban seviyelerin hem de uyarılmış seviyelerin dalga fonksiyonları çekirdek bölgesinde lokalize olduğu için fotoiyonlaşma tesir kesitinin R_2' kalınlığına çok fazla bağlılığı kalmayacaktır. Bu durum için Şekil $R_1=1{,}8a_0^*$ 4.12'de görülmektedir. Şekilden görüldüğü gibi fotoiyonlaşma tesir kesitinin değeri R_2'den hemen hemen bağımsız olup $5{,}85\text{x}10^{-13}$ cm^2 civarında sabit bir değerdedir. Bu durum yarı-logaritmik çizimde çok net bir şekilde görülmektedir.



.

Şekil 4.13. $R_1=0{,}8a_0^*$ ve $R_2=1{,}0a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_3 kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 4.13'de $R_1=0{,}8a_0^*$, $R_2=1{,}0a_0^*$ için fotoiyonlaşma tesir kesitinin R_3 kuyu genişliği ile değişimi görülmektedir. Şekil 4. 14'de ise aynı grafik bariyer kalınlığı $R_2=1{,}2a_0^*$ için çizilmiştir. Her iki şekil birden incelendiğinde fotoiyonlaşma tesir kesiti başlangıçta R_3 ile hemen hemen sabit kalmakta sonra biraz daha hızlı bir azalma eğilimi göstermektedir. $R_2=1{,}2a_0^*$olması durumunda bu azalma çok daha büyük olmaktadır. Fotoiyonlaşma tesir kesiti bir minimum değere ulaştıktan sonra artan R_3 değeri ile yeniden artma eğilimine girmektedir. Bu artış yine $R_2=1{,}2a_0^*$ olması durumunda $R_2=1{,}0a_0^*$durumuna göre daha büyük olmaktadır. Fotoiyonlaşma tesir kesiti, $R_2=1{,}0\ a_0^*$ durumunda, $R_3=2.1a_0^*$ değerinden itibaren düzgün bir artış sergilerken, $R_2=1{,}2a_0^*$ durumunda, $R_3=2.2\ a_0^*$'dan itibaren hemen hemen sabit olarak kalmıştır.



Şekil 4.14. $R_1=0{,}8a_0^*$ ve $R_2=1{,}2a_0^*$ iken hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin R_3 kuyu genişliğine göre değişimi.

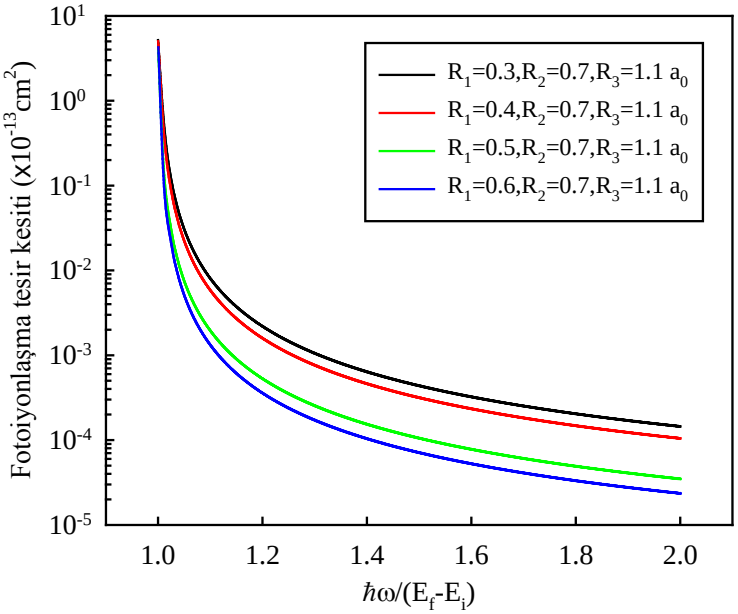
Bu değişimin fiziksel sebebi şu şekilde açıklanabilir: R_3 'ün küçük değerlerinde yani kuyu bölgesinin dar olduğu durumda hem safsızlığın olduğu durumda taban seviyenin dalga fonksiyonu, hemde safsızlığın olmadığı durumdaki uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu kuantum noktasının çekirdek bölgesine lokalize olması sebebiyle dalga fonksiyonlarının örtüşmesi buna bağlı olarak dipol matris elemanının değeri büyüktür. Kuyu bölgesi genişlemeye devam edince yani R_3'ün artmasıyla, uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonunu kuyu bölgesinde daha fazla lokalize olmaktadır. Bu ise örtüşmenin azalmasına sebep olur. Bu azalma $R_2=1{,}2a_0^*$olması durumunda çok daha fazladır. Çünkü, kuyu bölgesinde lokalize olan dalga fonksiyonunun bariyer genişliğinden dolayı kuantum noktasının çekirdek bölgesinde tünelleme yapma miktarı $R_2=1{,}0\ a_0^*$durumuna göre çok daha azdır. R_3'ün daha da artmasıyla gerek taban durum enerji seviyesi, gerekse uyarılmış durum enerji seviyesi, elektronun kuyu bölgesinde olması halinde lokalize olur. Buna bağlı olarak da fotoiyonlaşma tesir kesiti yeniden büyümeye başlar.

4.3.2. Fotoiyonlaşma Tesir Kesitinin Gelen Foton Enerjisine Bağlılığı

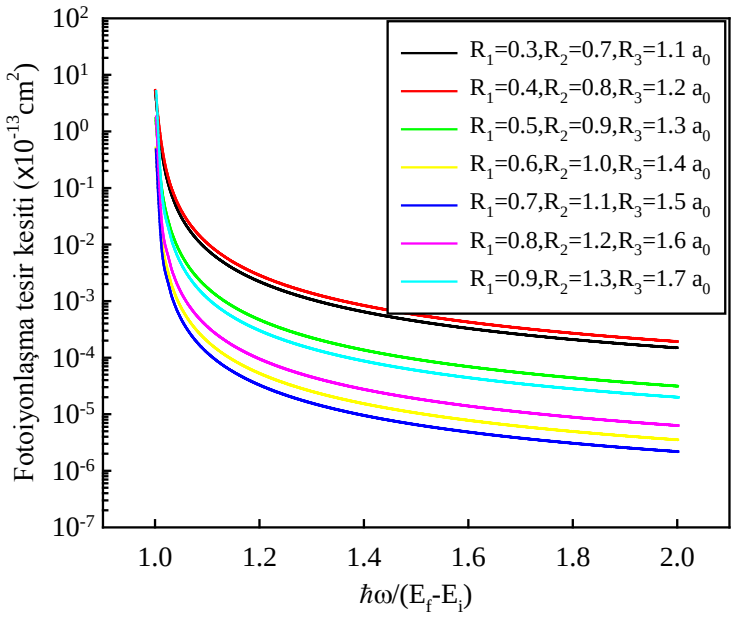
Bir önceki kısımda rezonans durumundaki fotoiyonlaşma tesir kesitinin yarıçaplarla değişimi ayrıntılı olarak incelendiği için, bu kısımda, gelen foton enerjisinin ilk ve son seviyeler arasındaki farktan daha büyük olması durumunda, fotoiyonlaşma tesir kesitinin değişimi farklı R_1, R_2 ve R_3 değerleri için incelenmiştir. Gelen foton enerjisinin rezonans enerjisinden daha büyük olması durumunda, fotoiyonlaşma tesir kesitinin şeklinin belirlenmesinde dipol matris elemanının yanı sıra, enerji seviyeleri arasındaki fark ve Dirac-delta fonksiyonu da etkili olacaktır.

Şekil 4.15'de R_2=0,7 a_0^*, R_3=1,1 a_0^* değerlerinde sabit iken, farklı R_1 çekirdek yarıçaplarında fotoiyonlaşma tesir kesitinin normalize foton enerjisinin fonksiyonu olarak değişimi gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi maksimum fotoiyonlaşma, eşik foton enerjisine karşılık gelmekte ve artan foton enerjisi ile azalmaktadır. R_1 büyürken büyük foton enerjilerine doğru gidildikçe fotoiyonlaşma tesir kesiti küçülmektedir. Bu durum şu şekilde açıklanabilir: R_1 çekirdek yarıçapının küçük olması durumunda, hem taban durum dalga fonksiyonu hem de uyarılmış durum dalga fonksiyonu kuyu bölgesine lokalizedir. Bu ise örtüşme terimini (dipol matris elemanını) büyük yapmaktadır. Dolayısıyla fotoiyonlaşma tesir kesiti, foton enerjisi ile küçük çekirdek yarıçaplarında daha büyük olmaktadır. Burada R_2 ve R_3 sabit olduğu için R_1'deki artış aynı zamanda bariyer kalınlığındaki incelmeye (azalmaya) karşılık gelmektedir. Dolayısıyla safsızlığın dalga fonksiyonu üzerindeki etkisi, incelen bariyer kalınlığı ile artmaktadır. Bu ise dalga fonksiyonlarının örtüşmesini azaltmaktadır. Bunun sonucu olarak da R_1 arttıkça fotoiyonlaşma tesir kesiti normalize foton enerjisiyle azalmaktadır.

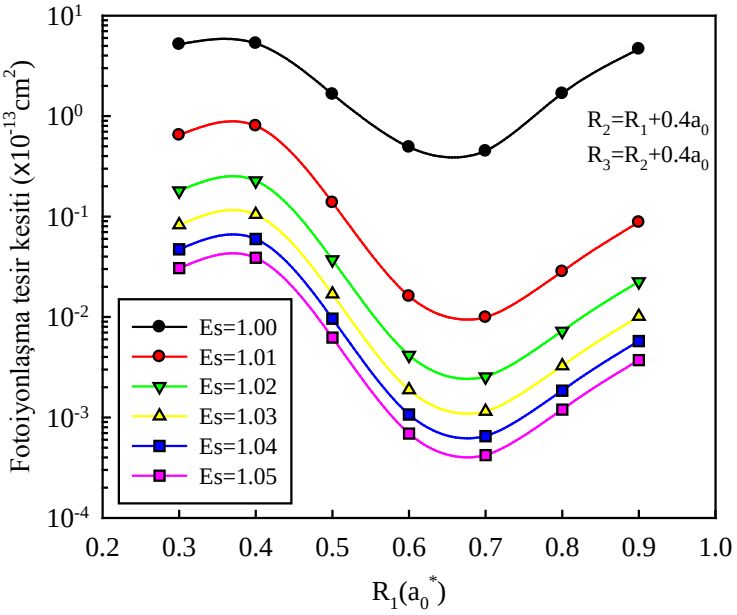
Şekil 4.16'da fotoiyonlaşma tesir kesitinin $R_2=R_1+0,4a_0^*$, $R_3=R_2+0,4a_0^*$ değerlerinde sabit iken, farklı R_1 çekirdek yarıçaplarında normalize foton enerjisinin fonksiyonu olarak değişimi gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi $R_1=0,4a_0^*$'ın $R_1=0,3a_0^*$'e göre fotoiyonlaşma tesir kesiti biraz daha büyüktür. Bununla birlikte $R_1=0,8a_0^*$'in $R_1=0,7a_0^*$'ye göre ve $R_1=0,9a_0^*$'un $R_1=0,6a_0^*$'ya göre fotoiyonlaşma tesir kesiti daha büyüktür. Yine şekilden görüldüğü gibi maksimum fotoiyonlaşma eşik foton enerjisine karşılık gelmekte ve artan foton enerjisi ile azalmaktadır. Görüldüğü gibi fotoiyonlaşma tesir kesitinin R_1 ile tek yönlü bir değişimi gözlenmemektedir.



Şekil 4.15. R_2=0,7 a_0^*, R_3=1,1 a_0^* ve R_1'nin farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, normalize foton enerjisine göre değişimi.



Şekil 4.16. R_2=R_1+0,4a_0^*, R_3=R_2+0,4a_0^* ve R_1'in farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, normalize foton enerjisine göre değişimi



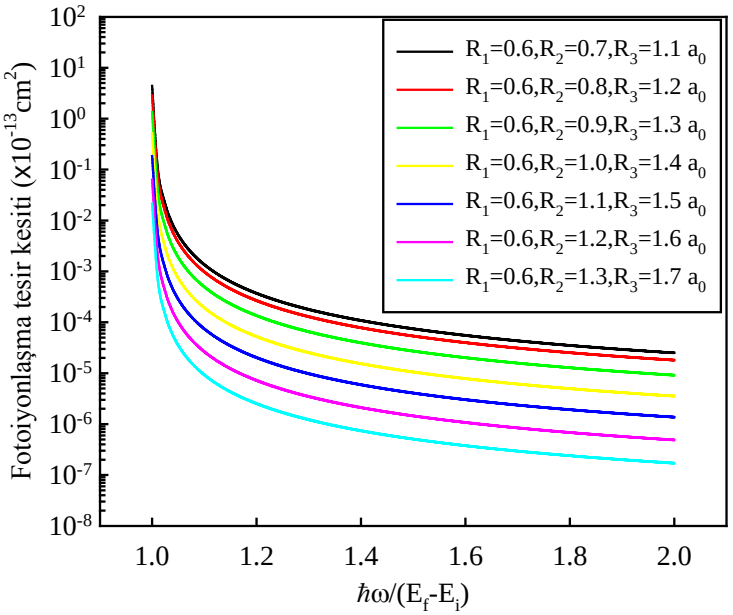
Şekil 4.17. $R_2=R_1+0{,}4a_0^*$, $R_3=R_2+0{,}4a_0^*$ ve $E_s=\hbar\omega/(E_f-E_i)$'in farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, R_1 çekirdek yarıçapına göre değişimi

Bunu daha iyi anlamak için, Şekil 4.17'de fotoiyonlaşma tesir kesitinin R_1 ile değişimi normalize foton enerjilerinin farklı değerleri için çizilmiştir. Şekil 4.17'den görüldüğü gibi gelen foton enerjisinin gerek rezonans durumunda (yani $E_s=1$) gerekse daha büyük olması durumlarında fotoiyonlaşma tesir kesitinin R_1 ile değişimi, benzer davranışlar sergilemektedir. Yani fotoiyonlaşma tesir kesiti artan R_1 ile azalma eğilimi göstermekte, R_1'in $0{,}7a_0^*$değerinde minimum olmakta ve daha ileriki artışlarda yeniden artmaktadır. Bu değişimin fiziksel sebebi şu şekilde açıklanabilir: R_1'in küçük değerlerinde, yani iç kuantum nokta yarıçapının dar olduğu durumda, hem safsızlığın olduğu durumda taban seviyesinin dalga fonksiyonu, hemde safsızlığın olmadığı durumdaki uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu kuyu bölgesinde lokalize olması sebebiyle dalga fonksiyonlarının örtüşmesi, buna bağlı olarak dipol matris elemanının değeri büyüktür. R_1'in büyümesi ile hidrojenik safsızlığın dalga fonksiyonu, safsızlığın çekici Coulomb etkisinden dolayı çekirdek bölgesine doğru lokalize olmaya başlarken, uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu hala kuyu bölgesinde lokalizedir. Bu ise örtüşme

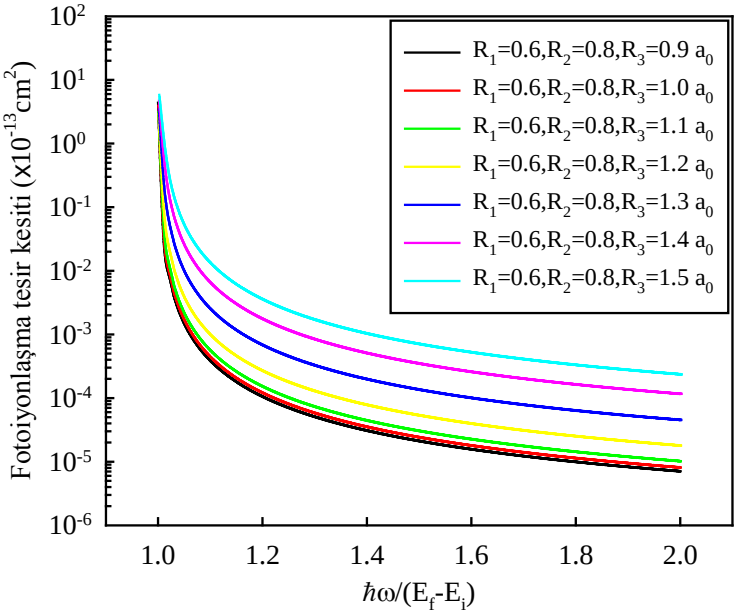
integralinin değerini düşürmektedir. R_1'in $0,7a_0^*$ değerinde örtüşme integralinin değeri minimum olmakta, dolayısıyla fotoiyonlaşma tesir kesitinin değeri de minimum olmaktadır. R_1'in $0,8a_0^*$ ve daha ileri artan R_1 değerlerinde uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonunda kuantum noktasının çekirdek bölgesinde lokalize olmaya başlaması ile örtüşme terimi dolayısıyla dipol matris elemanı tekrar büyümeye başlamaktadır. Bu ise fotoiyonlaşma tesir kesitinin değerini artırıcı bir rol oynar.

Şekil 4.18'de $R_1=0,6a_0^*$, $R_3=R_2+0,4a_0^*$ değerlerinde sabit iken, farklı R_2 bariyer kalınlığında fotoiyonlaşma tesir kesitinin normalize foton enerjisinin fonksiyonu olarak değişimi gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi maksimum fotoiyonlaşma, eşik foton enerjisine karşılık gelmekte ve artan foton enerjisi ile azalmaktadır. R_2 büyürken büyük foton enerjilerine doğru gidildikçe fotoiyonlaşma tesir kesiti küçülmektedir. $R_1=0,6a_0^*$ iken taban durum dalga fonksiyonu, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinden dolayı, kuantum noktasının çekirdek bölgesinde lokalizedir. R_2'nin küçük değerinde uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonunun çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı yüksektir. Bu ise örtüşmenin dolayısıyla dipol matris elemanının büyük olması anlamındadır. Dolayısıyla küçük R_2 değerlerinde, fotoiyonlaşma tesir kesitinin değerleri büyük olmaktadır. Bariyer kalınlığı yani R_2'nin artması kuyu bölgesinde lokalize olan uyarılmış seviyeye ait dalga fonksiyonunun çekirdek bölgesinde tünelleme olasılığını azaltacak ve dolayısıyla dalga fonksiyonun örtüşmesi küçülecektir. Bunun sonucu olarak da R_2arttıkça fotoiyonlaşma tesir kesiti normalize foton enerjisiyle azalmaktadır.

Şekil 4.19'de $R_1=0,6a_0^*$, $R_2=0,8a_0^*$ değerlerinde sabit iken, farklı R_3 kuyu genişliğinde fotoiyonlaşma tesir kesitinin normalize foton enerjisinin fonksiyonu olarak değişimi gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi maksimum fotoiyonlaşma, eşik foton enerjisine karşılık gelmekte ve artan foton enerjisi ile azalmaktadır. Şekilden görüldüğü gibi R_3 kuyu genişliği artıkça, büyük foton enerjilerine gidildikçe fotoiyonlaşma tesir kesiti artmaktadır. Kuyu bölgesi genişlemesi yani R_3'ün artmasıyla, enerji seviyeleri birbirine yaklaşacağından rezonans dışı değerlerde dirac delta fonksiyonunun değeri büyüyecektir. Bu büyüme fotoiyonlaşma tesir kesitinin rezonans dışındaki değerlerinde artışa sebep olacaktır. Bu yüzden büyük foton enerjili durumlarda artan R_3 ile birlikte fotoiyonlaşma tesir kesiti artacaktır.



Şekil 4.18. R_1=0,6a_0^*, R_3=R_2+0,4 a_0^* ve R_2'nin farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, normalize foton enerjisine göre değişimi.



Şekil 4.19. R_1=0,6a_0^*, R_2=0,8a_0^* ve R_3'ün farklı değerleri için hidrojenik donor safsızlığının fotoiyonlaşma tesir kesitinin, normalize foton enerjisine göre değişimi.

5. YORUM ve TARTIŞMA

Bu çalışmada, çok tabakalı yarıiletken küresel kuantum noktasındaki hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisi ve fotoiyonlaşma tesir kesiti hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalarda GaAs/AlGaAs malzemelerinin parametreleri kullanılmıştır. Çünkü bu malzemelerin etkin kütleleri, dielektrik katsayıları ve band yapıları gibi birçok fiziksel özellikleri iyi bilinmektedir.

Hesaplamalar etkin kütle yaklaşımında gerçekleştirilmiştir. Elektronik yapı hesaplamasında Schrödinger denkleminin sayısal çözümü sonlu farklar yöntemi ve shooting metoduyla yapılmıştır. Bunun için Fortran 90'da bir kod yazılmıştır. Yazılan bir kodla, küresel simetrik bir kuantum noktası içerisinde bulunan bir elektronun enerji özdeğerleri ve radyal dalga fonksiyonları tamamen sayısal olarak belirlenmiştir.

Sonraki aşamada, hidrojenik donor safsızlığının bağlanma enerjisi, tabaka kalınlıklarına bağlı olarak ayrı ayrı incelenmiştir. Sonuçta, bağlanma enerjisinin tabaka kalınlıklarına sıkı bir şekilde bağlı olduğu gözlenmiştir.

Bir sonraki aşamada, gelen ışığın enerjisinin ilk ve ikinci seviyeler arasındaki farka eşit olması durumuna karşılık gelen fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin tabaka kalınlığına göre değişimi incelenmiştir. Hesaplamalar sonucunda fotoiyonlaşma tesir kesitinin pik değerinin tabaka kalınlıklarına güçlü bir şekilde bağlı olduğu gözlenmiştir.

Son olarak, fotoiyonlaşma tesir kesitinin gelen ışığın enerjisiyle değişimi yine farklı tabaka kalınlıklarında incelenmiştir. Buradan da fotoiyonlaşmanın en yüksek değerinin gelen fotonun, eşik enerjisine eşit olması durumunda oluştuğu ve artan foton enerjisiyle hızlı bir şekilde azaldığı görülmüştür.

Bulunan tüm sonuçların litetatürdeki tek kuantum noktalarındaki fotoiyonlaşma çalışmalarıyla uyum içinde olduğu gözlenmiştir. Bu tezle, literatürdeki çok tabakalı kuantum nokta yapılardaki fotoiyonlaşma tesir kesitiyle ilgili eksikliğin doldurulacağı düşünülmektedir. Bundan sonraki aşamada, çok tabakalı kuantum nokta yapılardaki hidrojenik safsızlığın fotoiyonlaşma tesir kesiti üzerinde dış elektrik ve manyetik alanların etkisi araştırılabilir.

KAYNAKLAR

Aktaş, Ş., Boz, F. K. 2008 Physica E 40: 753.

Banyai, L., Koch, S. W. 1993 Semiconductor Quantum Dots. World Scientific Rublishing Co. Pte. Ltd. Singapore.

Bimberg, D., Grundmann, M., Ledentsov, N. N. 1999 Quantum dot heterostructures. John Wiley & Sons Ltd, Chichester.

Boz, F. K., Aktaş, S., Bilekkaya, A., Okan, S. E. 2009 Applied Surface Science 255: 6561.

Bransden, B. H., Joachain, C. J. 1999 (Çeviri: Köksal F. ve Gümüş H.) Atom ve Molekül Fiziği, Bilim Yayıncılık, Ankara.

Bransden, B. H., Joachain,C. J. 2000 Quantum Mechanics. Pearson Education Ltd., Dorchester.

Buczko, R., Bassani, F. 1996 Physical Review B: 54, 2667.

Cafer, T. 2000 Katıhal Elektroniği. Yıldız Teknik Üniversitesi Vakfı Basım –Yayın Merkezi, İstanbul.

Chu, D. S., Hsiao, C. M. ve Wei, W. N. 1992 Physical Review B 46: 3898.

Cibert, J., Petroff, P. M., Dolan, G. J., Pearton, S. J., Gossard, A. C., English, J. H. 1986 Applied Physics Letters 49: 1275.

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

De Groot, S. R., Temseidem, C. A. 1946 Physica 12: 669.

Dragoman, D., Dragoman, M. 1999 Optical analogue structures to mesoscopic devices . Prosgress in Quantum Electronics 23: 131.

Ekimov, A. I., Efros, A. L., Onushchenko A. A. 1985 Quantum size effect in semiconductor microcrystals. Solid State Communications 56: 921.

El-Kawni, M. I., Tomak, M. 1992 Surface Science 260: 319.

El-Said, M., Tomak, M. 1992 Solid State Communications 82: 721.

El-Said, M., Tomak, M. 1990 Journal of Physics and Chemistry of Solids 52: 603.

Ferendeci, A. M. 1991 Physical Foundations Of Solid State and Electron Devices. McGraw-Hill, Hightstown

Greene, R. L., Bajaj, K. K. 1983 Solid State Communications 45: 825.

Ham, H., Lee, C. J. 2004 Journal of Applied Physics 96: 335.

Ham, H. 2001 Ph. D. Thesis, Illinois Institute of Technology, Chicago.

Ham, H., Spector, H. N. 2003 Journal of Applied Physics 93: 3900.

Harrison, P. 1999 Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. John Wiley & Sons, Inc., New York.

Ilaiwi, K. F., El-Said, M. 1995 Physica Status Solidi B 187: 93.

Ilaiwi, K. F., Tomak, M. 1990 Journal of Physics and Chemistry of Solids 51: 361.

Jacak, L. 2000 European Journal of Physics 21: 487.

Jacak, L., Hawrylak, P., Wojs, A. 1998 Quantum dots. Springer Verlag, Berlin Hiedelberg.

Jiang, Z. X., McCombe B. D., Hawrylak, P. 1998 Physical Review Letters 81: 3499.

Karaoğlu, B. 1994 Kuantum Mekaniğine Giriş. Bilgi-Tek Yayıncılık, İstanbul.

Kittel, C. 1996 (Çeviri: Karaoğlu, B.) Katıhal Fiziğine Giriş. Güven Kitap Yayın Dağıtım, İstanbul.

Lax, M., in Proceedings of the 1954 Atlantic City Conference on Photoconductivity, edited by Breckenridge, R. G., Russell, B. R. ve Hahn, E. E. (Wiley, New York, 1956).

McLean, T. O., Gibson, A.F. 1960 Progress in Semiconductors, ed, John Wiley and Sons, New York.

Mitin, V. V., Kochelap, V. A., Stroscio, M. A. 1999 Quantum Heterostructures: Microelectronics and optoelectronics. Cambridge University Press, Cambridge.

Petroff, P. M., Denbaars, S. P. 1994 Superlattices and Microstructures 15: 15.

Petroff, P. M., Gassard, A. C., Logan, R. A., Wiegmann, W. 1982 Applied Physics Letters 41: 635.

Porras-Montenegro, N., Perez-Merchancano, S. T. 1992 Physical Review B 46: 9780.

Reed, M. A. 1993 Quantum dots. Scientific American 268: 118.

Reed, M. A., Bate, R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W. M., Lee, J. W., Smith, H. D. 1986 Journal of Vacuum Science & Technology B 4: 358.

Ribeiro F. J., Latge, A. 1994 Physical Review B: 50, 4913.

Şahin, M. 2008 Physical Review B 77: 045317.

Şahin, M., 2005 Doktora Tezi Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.

Şahin, M., Tomak, M. 2005 Physical Review B 72: 125323.

Sali, A., Fliyou, M., Loumrhari, H. 1997 Physica B 233: 196.

Sali, A., Satori, H., Fliyou, M., Loumrhari, H. 2002 Physica Status Solidi B 232: 209.

Takikawa, M. , Kelting, K., Brunthaler, G., Takeshi, M., Komena, J., 1989 Journal of Applied Physics 65: 3937.

Temkin, H., Dolan, G. J., Panish, M. B., Chu, S. N. G. 1987 Applied Physics Letters 50: 413.

Vvendensky, D. D. 2001 Epitaxial Growth of Semiconductor "Low-dimensional Semiconductor Structures: Fundamentals and Device Applications, Ed.: Barnham K. and Vvedensky D. D." Cambridge University Press, Cambridge.

Yılmaz, S., 2004 Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.

Zhu, J.L. 1989 Physical Review B 39: 8780.

Zhu, J.L., Xiong, J.J., Gu, B.L. 1990 Physical Review B 41: 6001.

Zhu, J.L., Zhao, J.H., Xiong, J.J. 1994 Physical Review B 50: 1832.