



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÇOK TABAKALI CdSe/ZnS YARIİLETKEN KUANTUM NOKTA NANOKRİSTALLERİNDE EKZİTONLAR

Abdurrahman AKTÜRK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Haziran - 2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

II – VI YARIİLETKEN KUANTUM NOKTA NANOKRİSTALLERİNDE EKZİTONLAR

Abdurrahman AKTÜRK

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN

2013, 76 Sayfa

Jüri

Prof. Dr. Ülfet ATAV
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN

Bu tez çalışmasında, çok tabakalı bir kuantum nokta içerisindeki, tekli, ikili, negatif ve pozitif yüklü ekzitonların elektronik ve optik özellikleri tabaka kalınlıklarına bağlı olarak sistematik bir biçimde incelenmiştir. Bunun için, Schrödinger - Poisson denklemleri öz-uyumlu bir şekilde etkin kütle yaklaşımında tümüyle sayısal olarak çözülmüştür. İkili ekziton ve yüklü ekziton yapıların hesaplamalarında, aynı tür parçacıklar arasındaki kuantum mekaniksel çok parçacık etkileşmeleri yerel yoğunluk yaklaşımı altında (LDA) hesaba katılmıştır. Bu sistemlere ait toplam enerjiler, bağlanma ve geçiş enerjileri, örtüşme integrallari, osilatör şiddetleri ve yaşam süreleri gibi elektronik ve optik özellikleri tabaka kalınlıklarının fonksiyonu olarak belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar, tabaka kalınlıklarına bağlı olarak ayrıntılı bir şekilde analiz edilmiş ve olası fiziksel nedenleri tartışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Ekziton, ikili ekziton, yüklü ekiztonlar, ekziton hayat süresi, tip-I kuantum noktası, osilatör şiddeti

ABSTRACT

MS THESIS

EXCITONS IN MULTILAYERED CdSe/ZnS SEMICONDUCTOR QUNATUM DOT NANOCRYSTALS

Abdurrahman AKTÜRK

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF SELÇUK UNIVERSITY
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE
IN PHYSICS DEPARTMENT

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN

2013, 76 Pages

Jury

Prof. Dr. Ülfet ATAV
Prof. Dr. Haluk Şafak
Assoc. Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN

In this thesis, the electronic and optical properties of single exciton, biexction and trions have been investigated systematically depending on layer thicknesses. For this purpose, the Schrödinger and Poisson equations have been solved self-consistently and full numerically in the frame of the effective mass approximation. The quantum mechanical many-body interactions between in the same kinds of particles have been taken into account in local density approximation (LDA). The electronic and optical properties, such as, total energies, binding energies and transition energies, overlap integrals, oscillator strengths and lifetimes have been determined as a function of layer thicknesses. The results have been analyzed in a detail depending on layer thicknesses and probable physical reasons have been discussed.

Keywords: Exciton, biexciton, charged excitons, exciton lifetime, type-I quantum dot, oscillator strength

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur.

Lisans ve Yüksek lisans eğitimim boyunca bana rehberlik eden bilgi ve tecrübesini benimle paylaşan, günün her saatinde benimle ilgilenen, yardımcı olan danışman hocam Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN'e çok teşekkür ederim.

Ayrıca bu çalışma boyunca bana yardımcı olan Prof. Dr. Ülfet ATAV, Prof. Haluk Şafak, Dr. A. Emre Kavruk'a ve her konuda bana yardımcı olan yol gösteren bölüm hocalarıma teşekkür ederim.

Son olarak tüm eğitim yaşantım boyunca maddi ve manevi olarak beni destekleyen aileme ve arkadaşlarıma şükranlarımı sunarım.

Abdurrahman AKTÜRK
KONYA-2013

Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 109T729 nolu proje kapsamında desteklenmiştir.

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **ix**

1. GİRİŞ VE KAYNAK ARAŞTIRMASI **1**

2. YARIİLETKEN KUANTUM NANO YAPILAR **6**

2.1. Giriş 6

2.2. Katıların Enerji Band Yapısı 6

2.3. Etkin Kütle Kavramı 7

2.3. Yarıiletken Kuantum Hetero Yapılar 9

2.4. Tip-I Kuantum Hetero Yapılar 11

3. EKZİTONLAR **13**

3.1. Giriş 13

3.2. Hacimli Bir Yarıiletken Malzemede Ekzitonlar 13

3.2.1. Wannier – Mott ekzitonları 13

3.2.2. Frenkel ekzitonları 14

3.3. Ekziton ve Hidrojen Atomunun Yapısal Benzerliği 15

3.4. Kuantum Noktasındaki Ekzitonların Elektronik Özellikleri 17

3.4.1. Tekli ekziton 17

3.4.2. Yüklü ekzitonlar 18

3.4.3. İkili ekzitonlar 19

3.5. Tek, İkili ve Yüklü Ekzitonların Optik Özellikleri 20

4. HESAPLAMA YAKLAŞIMLARI VE YÖNTEMLERİ **23**

4.1. Giriş 23

4.2.Etkin kütle Uyuşmazlığı 23

4.3. Hartree Yaklaşımı 24

4.4 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) 26

4.5 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) 27

4.6. Fark Denklemleri 29
4.7. Matris Köşegenleştirme Yöntemi 31

5. BULGULAR ve TARTIŞMA 35

5.1. Giriş 35
5.2.Tekli, İkili ve Yüklü Ekzitonlar 35
5.2.1. Tekli ekziton (Exciton) 36
5.2.2. İkili ekziton (Biexciton) 41
5.2.3 Yüklü ekzitonlar (Trions) 46
5.3. Çok Tabakalı Bir Kuantum Noktasındaki Tekli, İkili ve Yüklü Ekzitonların Elektronik ve Optik Özellikleri 47

6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER 58

KAYNAKLAR 60

ÖZGEÇMİŞ 66

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

h	Planck sabiti
$\hbar$	İndirgenmiş Planck sabiti
m_0	Serbest elektronun kütlesi
m^*	Etkin kütle
m_e^*	Elektronun etkin kütlesi
m_h^*	Deşiğin etkin kütlesi
e	Birim yük
q_e	Elektronun yükü
q_h	Deşiğin yükü
ε_0	Boşluğun dielektrik geçirgenliği
ε	Dielektrik katsayısı
κ	Malzemenin dielektrik geçirgenliği
a_0	Bohr yarıçapı
a_0^*	Etkin Bohr yarıçapı
R_y	Rydberg enejisi
R_y^*	Etkin Rydberg enerjisi
μ	İndirgenmiş kütle
c	Işığın boşluktaki hızı

1. GİRİŞ VE KAYNAK ARAŞTIRMASI

Bir yarıiletken kristal, bir fotonla uyarıldığında, eğer fotonun enerjisi yeterince büyük ise, valans bandındaki bir elektronu iletim bandına taşır ve elektron deşik çifti ayrılarak akıma katkıda bulunur. Ancak fotonun enerjisi, elektron ve deşiği ayıracak kadar büyük değilse, elektron ve deşikten oluşan bağlı bir yapı oluşur (Frenkel, 1931; Wannier, 1937; Mott, 1938). Bir elektron ve bir deşiğin, çekici bir Coulomb etkileşmesiyle birbirine bağlandıkları ve beraber hareket ettikleri bu yapı Frenkel (1936) tarafından ekziton (exciton) olarak adlandırılmıştır. 1930'lu yıllarda hacimli (bulk) kristallerde gözlenen ekziton yapısı, kuantum noktalarında teorik olarak ilk defa Efros ve Efros (1982) tarafından incelenmiştir. Bu teorik çalışmayı takiben taban durum enerjilerini daha iyi bir şekilde hesaplamak için, iyileştirilmiş varyasyonel şemalar kullanarak hesaplamalar yapılmıştır (Takagahara 1987, Kayanuma 1988).

Sonraki yıllarda, yarı iletken teknolojisinin gelişmesiyle beraber, kuantum nokta yapılar üretilebilir hale gelmiştir. Norris ve Bawendi (1990), CdSe kuantum noktalarındaki ekziton yapıların elektronik ve optik özelliklerini yapının boyutlarına bağlı olarak teorik ve deneysel olarak incelemişlerdir. Daha sonra ise çekirdek – kabuk kuantum nokta yapılarının sentezlenmesi (Dabbousi ve ark., 1997) sonucunda ekzitonlar, bu kuantum noktalarında incelenmeye başlanmıştır. 2000'li yıllara gelindiğinde gerek kuantum noktaların daha kaliteli bir şekilde sentezlenmesi ve gerekse hesaplama yöntemlerinin iyileştirilmesi sonucu teorik ve deneysel çalışmaların sonuçları çok daha uyumlu hale gelmiştir.

Ekziton sisteminin çözümü için etkin kütle yaklaşımı kullanılarak çeşitli teorik ve deneysel çalışmalar yapılmıştır (Shumway ve ark., 2001; Brovelli ve ark. 2011). Etkin kütle yaklaşımında yapılan bu çalışmalar, ekziton yapılarının daha iyi anlaşılmasında oldukça yarar sağlamıştır.

Daha sonra, yarı deneysel psödo potansiyel yöntemi ve kuantum Monte Carlo yöntemleri kullanılarak ekziton ve ikili ekziton yapılar incelenmiş (Tsuchiya, 2000; Shumway ve ark., 2001) ve deneylerle daha uyumlu sonuçlar elde edilmiştir. Günümüzde ise tek ekzitonların, ikili ekzitonların ve yüklü ekzitonların elektronik ve optik özelliklerinin incelenmesi çok ilgi çekici bir şekilde devam etmektedir.

Son yıllarda yarıiletken teknolojisindeki gelişmelere bağlı olarak, özellikle kuantum nokta yapıların kullanım alanları, araştırmalar farklılaştıkça artmaktadır. Kuantum noktaların bu uygulama alanlarına, tıbbi görüntüleme konusunda floresans

ışıma yapan kuantum nokta yapılar kullanılması örnek olarak verilebilir (Sattler 2011). Kolloidal kuantum nokta yapılar, optik özellikleri açısından hastalıkların tanı ve teşhisinde benzersiz avantajlara sahiptir. Bu özellikler, moleküler ve hücre biyolojisi görüntülemelerinde floresans özellikleri sayesinde tespit yapmaya olanak sağlamıştır (Nie ve ark., 2004). Kuantum nokta yapılar, nano boyutlarda olmalarından dolayı moleküllerin hareketlerini bozmadan ve biyokimyasal özelliklerini değiştirmeden hücre içinde ve yüzeyinde, biyomoleküllerle etkileşime girebilirler (Sattler, 2011). Böylece kolloidal kuantum noktalar peptitler gibi biyolojik moleküllere kolayca bağlanabilirler. Yani kuantum noktalar, istenen hücreye yüzey modifikasyonu yapabilmektedir. Sonuç olarak, moleküllerin probları gibi hücre ve moleküllerle beraber hareket eden nokta yapılar sayesinde, geleneksel floresan ölçümleriyle bireysel ve hücresel moleküllerin takibi yapılabilmektedir (Simon ve ark., 2003; Bruchez ve ark., 2004). Kuantum nokta yapılar, karmaşık sistemlerin hareketlerini gerçek zamanlı olarak takip etmeye olanak sağlamıştır. Özellikle, kanserli hücrelerin belirlenmesi çalışmalarında son zamanlarda kuantum nokta yapılar, etkin olarak kullanılmaya başlanmıştır (Nie ve ark., 2004) .

Kuantum noktaların, yeni nesil güneş pillerinin üretilmesinde büyük ümit vaat etmektedir. Güneş enerjisini elektrik enerjisine dönüştürmek için yapılan teorik hesaplamalara göre, güneş ışığının %93'ünden daha fazlası elektrik enerjisine dönüştürülebilir (Eychmüller ve ark., 1993). Bu nedenle güneş enerjisi verimini artırmak için bu limit, çok güçlü bir motivasyon sağlamaktadır. Tarihsel olarak bakıldığında şimdiye kadar üç farklı tipte güneş hücreleri araştırılmış ve geliştirilmiştir. Birinci nesil (silisyum tek kristal tabanlı) güneş hücrelerinin maliyetinin yüksek olmasından dolayı, daha sonra ikinci nesil (ince film tabanlı) güneş pilleri üzerinde çalışılmıştır. Ancak bu güneş pillerinin maliyetinin düşük olmasının yanı sıra verimide düşük olmuştur. Hem maliyeti düşük, hem de verimi yüksek güneş hücrelerinin yapılması için üçüncü nesil (nano kristal tabanlı) fotovoltaik cihazların araştırmalarına başlanmış ve bu çalışmalar fotovoltaik alanına yeni bir soluk kazandırmıştır. Nano kristallerin yasak enerji aralıkları, güneş ışığının tüm spektrumunu soğurmak için uygundur. Ayrıca gelişmiş (arttırılmış) iyonlaşma etkisi soğrulan her foton başına birden fazla ekziton yapısının oluşumuna yol açar (Schaller ve Klimov, 2004; Schaller ve ark., 2006; Beard ve ark., 2007). Her ne kadar çoklu ekziton üretimi sonucu kuantum verimi %700'lerde elde edilmiş olsa da foto akım kuantum verimliliği %100'den fazla elde edilememiştir (Nozik, 2005). Fotonla uyarma sonucunda oluşan ekzitonların akıma katkıda bulunabilmeleri için elektron – deşik çiftinin yeniden

birleşmeden önce ayrılması gerekir. Bu ayrışma üç şekilde mümkün olur: İlk olarak kuantum noktanın çekirdek bölgesinden kabuk bölgesine tünelleme yoluyla veya sıcaklığa bağlı etkilerle, ikinci olarak, termiyonik yayma ile (thermionic emmision), üçüncü olarak dışardan bir elektrik alan uygulanarak elektron – deşik çifti ayrılabilir (Etteh ve Harrison, 2002; Appenzeller ve ark., 2004). Güneş hücrelerinin en ideal çalışma koşullarının belirlenebilmesi için elektron deşik çiftinin yeniden birleşme süresi ile tünelleme zamanının karşılaştırılması gerekir. Güneş hücrelerinin verimliliği için bu derece önemli olan tünelleme zamanı; kuantum noktanın boyutuna, geometrisine ve sınırlandırma bariyerine sıkı bir şekilde bağlıdır (Yu ve ark., 2005).

Kuantum noktaların diğer bir uygulama alanı da kuantum nokta lazerlerdir. Kuantum noktasında ışık ile uyarma yoluyla oluşan elektron – deşik çifti, yeniden birleştiğinde bir foton yayar ve bu şekilde çok sayıda aynı kuantum nokta yapının uyarılmasıyla kuantum nokta lazerler elde edilmiş olur. 1970'lerde başlayan kuantum kuyu lazer fikri, R.Dingle ve C.H.Henry (1976) tarafından ilk olarak kuantum kuyu lazer patentini alarak gerçekleştirmiştir. Daha sonra ilk kuantum nokta lazer üretilmiştir (Ledentstov ve ark., 1994).

Yukarıda çeşitli uygulama alanları verilen kuantum noktalarının, istenilen elektronik ve optik özelliklerini belirlemek için, dalga fonksiyonlarını, örtüşme integrallerini ve yaşam süreleri gibi faktörlerin hesaplanması gereklidir. Kuantum nokta içerisindeki elektron ve deşiklerin hareketleri hakkında temel bilgiyi parçacıkların dalga fonksiyonları verir (Klimov, 2006; He ve ark., 2007). Kuantum nokta yapının şekli ve büyüklüğü, taşıyıcıların dalga fonksiyonlarının dağılımı üzerinde önemli bir rol oynar (Klimov, 2006). Bu durum kuantum noktalarını araştırılmasını cazip hale getiren temel nedenlerden biridir. Kuantum nokta içerisinde oluşan elektron deşik çiftinin arasındaki Coulomb etkileşmesi de, yine elektron ve deşik dalga fonksiyonlarını ve enerji seviyelerini etkileyen olaylardan biridir (Klimov, 2006). Ayrıca iki elektron bir deşikten ya da iki deşik bir elektrondan meydana gelen yüklü ekizton sistemlerinde, elektronlar ve deşikler arasındaki Coulomb etkileşmeleri, ekizton sistemindeki taşıyıcılara oranla, parçacıkların dalga fonksiyonlarını oldukça değiştirmektedir (Dalgarno ve ark., 2008).

Kuantum nokta içerisindeki taşıyıcıların enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonlarının değişimi, taşıyıcılar arasındaki örtüşme integrallerini, osilatör şiddetlerini ve yaşam sürelerinin değişimini sıkı bir şekilde etkiler. Ekziton sistemindeki örtüşme integrali, elektron ve deşiğin birbirine göre hareketini uzaysal olarak tanımlayan bir kavramdır (Balet ve ark., 2004). Yani örtüşme integralinin

büyüklüğünün artması, ekziton sistemindeki elektron ve deşiğin daha koherent bir şekilde hareket ettiği anlamına gelir (Yoffe, 1993). Enerji seviyeleri ve örtüşme integralleri osilatör şiddetinin belirlenmesinde kullanılır (Şahin ve ark., 2012; Dalgarno ve ark., 2008) . Osilatör şiddeti ise elektronik geçiş yoğunluğu ile ilgili bir kavramdır (Sattler, 2011). Bu kavram, en önemli optiksel özelliklerden biri olan yaşam süresinin hesaplanmasında da belirleyicidir. Ekzitonların yaşam süreleri, kuantum sınırlandırma etkisine yani, kuantum noktanın boyutuna güçlü bir şekilde bağlıdır (Fonoberov ve Balandin, 2004). Bu açıdan, kuantum noktalarındaki taşıyıcıların yaşam sürelerinin kuantum kuyu boyutu ile ayarlanabilir olması sebebiyle, lazer uygulamaları geliştirilmesi için son derece önemlidir (Chan ve ark, 2004, Sundar ve ark., 2004).

Bu tez çalışmasında, çok tabakalı kuantum nokta içerisindeki ekzitonlar, ikili ekzitonlar ve yüklü ekziton sistemlerinin elektronik ve optik özellikleri incelenmiştir. Çekirdek/kabuk katman yapısına sahip kuantum nokta yerine çekirdek/kabuk/kuyu yapısına sahip kuantum noktasının seçilme sebebi, optik ve elektronik özelliklerinin daha fazla kontrol edilebilir olmasıdır. Taşıyıcıların sahip oldukları enerjiler ve sisteme ait optik dinamiklerin hem çekirdek yarıçapıyla, hem de kabuk kalınlığı ve kuyu genişliği ile kontrol edilebilir olması, bu yapıların en önemli avantajıdır (Jaskolski ve Bryant, 1998; Schoos ve ark, 1994). Çok tabakalı kuantum noktalarla ilgili ilk deneysel çalışma CdSe/HgS/CdSe kunatum noktasının sentezlenmesiyle başlamıştır (Eychmüller ve ark., 1993). Ancak bu çalışmada optik özelliklerin kuyu genişliği ve kabuk kalınlığına bağlı olan değişimleri, nanokristalin sentezlenmesindeki zorluklar sebebiyle gözlemlenememiştir (Schrier ve ark., 2006). Kimyasal sentezlemedeki problemler daha sonraki yıllarda çözülmüş ve CdS/CdSe/CdS, CdSe/ZnS/CdSe, ve ZnS/CdS/ZnS, gibi çok tabakalı yapılar, oldukça iyi kalitede üretilmiştir (Little ve ark., 2001; Ivanov ve ark. 2004; Battaglia ve ark, 2005). Aynı yıllarda sınırlandırma potansiyeli sonsuz alınarak ve elektron deşik arasındaki etkileşme ihmal edilerek Haus ve ark. (1993) tarafından ilk teorik çalışma rapor edilmiştir. Bu çalışmadan sonra, sonlu sınırlandırma potansiyeline sahip, elektron ve deşik arasındaki etkileşmeyi göz önüne alan, daha gerçekçi teorik bir çalışma yapılmıştır (Schoos ve ark., 1994).

Bu çalışmada, çok tabakalı bir kuantum nokta içerisindeki, tekli, ikili, negatif ve pozitif yüklü ekzitonların elektronik ve optik özellikleri ayrıntılı bir biçimde incelenmiştir. Bunun için, Schrödinger – Poisson denklemleri öz-uyumlu bir şekilde etkin kütle yaklaşımında tümüyle nümerik olarak çözülmüştür. İkili ekziton ve yüklü ekziton yapıların hesaplamalarında, aynı tür parçacıklar arasındaki kuantum mekaniksel

çok parçacık etkileşmeleri, yerel yoğunluk yaklaşımı altında (LDA) hesaba katılmıştır. Elde edilen sonuçlar, tabaka kalınlıklarına bağlı olarak ayrıntılı bir şekilde analiz edilmiş ve olası fiziksel nedenleri tartışılmıştır.

Tezin geri kalan kısmı aşağıdaki şekilde organize edilmiştir: İkinci bölümde, yarıiletken kuantum nano yapılar genel hatlarıyla anlatılmış olup nano yapıların türleri aralarındaki benzerlik ve farklılıklar incelenmiştir. Ayrıca, etkin kütle kavramı ve tip-I kuantum noktaları da bu bölümde anlatılmıştır. Üçüncü bölümde, ekzitonik yapıların çeşitleri ve bu yapılara ait elektronik ve optik özelliklerin belirlenmesinde kullanılan formüllere yer verilmiştir. Dördüncü bölümde, bu tez çalışmasında incelenen ekzitonik yapıların, teorik olarak çözülüp analiz edilebilmesi için, Hartree yaklaşımı, yerel yoğunluk yaklaşımı, matris köşegenleştirme gibi yöntemlerin, ekzitonik sistemlere uygulanması anlatılmıştır. Beşinci bölümde ise kullanılan nano kristale ait, potansiyel profili, bu yapı içerisindeki ekzitonik sistemlerin çözüm şemaları ve tabaka kalınlıklarına bağlı olarak incelenen yapılardaki temel fiziksel özelliklerinin değişimleri anlatılmıştır. Son bölümde ise yapılan bu tez çalışmasının genel değerlendirilmesi ve gelecekte yapılacak olan daha hassas bilimsel çalışmalara rehberlik edebilecek öneriler yer almaktadır.

2. YARIİLETKEN KUANTUM NANO YAPILAR

2.1. Giriş

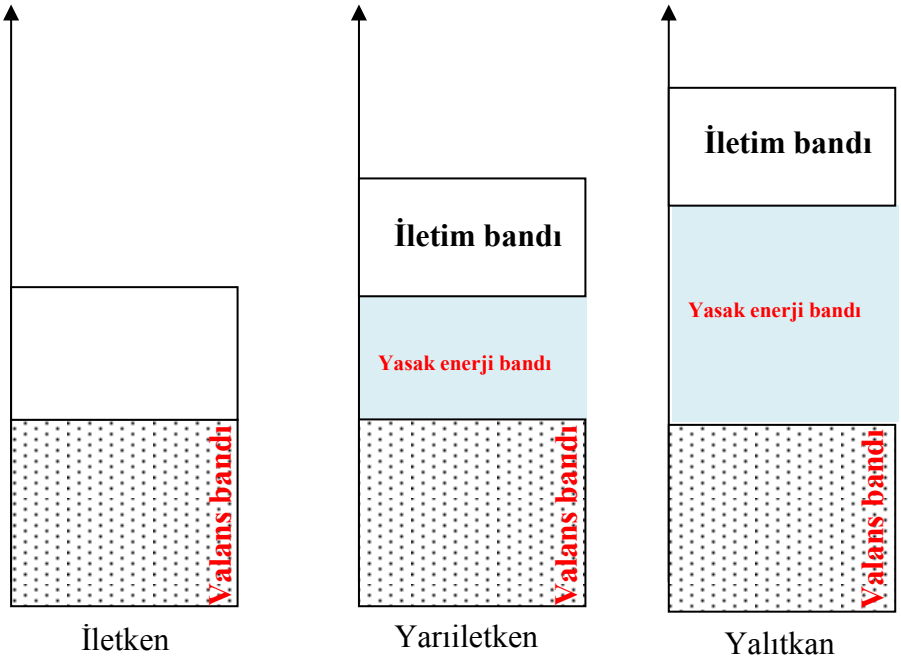
Bu bölümde, kuantum nano yapıların oluşum süreçleri bant yapıları, nano yapıların türleri aralarındaki benzerlik ve farklılıklar incelenmiştir. Katıların band yapısından başlanarak, nano sistemlerin çözümünü kolaylaştıran etkin kütle kavramı ve bu yapılara uygulanması, nano yapıların temel dinamiklerinde etkin rol oynayan süreçlerin incelenmesi gibi durumlar açıklanmıştır.

2.2. Katıların Enerji Band Yapısı

Bir maddenin iletkenliğini belirleyen en önemli faktör, bu maddeyi oluşturan atomların son yörüngesindeki elektron sayısıdır. Bu son yörüngedeki elektronlara valans elektronu adı verilir (Lipparini, 2003; Fox, 2001). Valans elektronları, atomun çekirdeğine zayıf olarak bağlıdırlar. Bu elektronlar, ısı, ışık ve elektriksel etki altında kolayca atomdan ayrılırlar. Son yörüngesinde (valans bandında) 1, 2 ve 3 elektron bulunduran malzemeler iletkendirler (Davies, 1998; Adachi, 2005). İletkenlerde elektronlara çok küçük bir uyarma yapılmasıyla, elektronlar kolay bir şekilde serbest hale geçerler. Yalıtkan malzemelerde ise atomlarının son yörüngeleri doludur. Ayrıca yalıtkan malzemelerde yasak enerji aralığı yaklaşık olarak 5-10 eV civarındadır. Bu nedenle elektronlar iletkenlik bandına geçemez ve akıma katkıda bulunamazlar (Fox, 2001).

Yarıiletkenler ise iletkenlikleri metallerle yalıtkanlar arasında yer alan, birçok fiziksel özelliğinin katkılama yardımı ile hassas bir biçimde kontrol edilebildiği ve taşıyıcı yoğunluğu, özdirenç gibi özelliklerinin sıcaklık benzeri dış etkilerle önemli ölçüde değişme gösterdiği malzemelerdir (Kittel, 2004; Fox, 2001).

Yarıiletkenlerin yasak enerji aralıkları yaklaşık olarak 0.3 – 1.0 eV arasında değişir. Isı, ışık vb. gibi dış etkilerle yarıiletken malzemede bulunan elektronlar, yasak enerji aralığının dar olmasından dolayı kontrollü bir şekilde iletim bandına geçiş yapabilirler. Yarıiletkenlerde iletim bandına geçecek olan bu elektronların kontrolünün esnek olması, bu malzemeleri şu anda kullanılan elektronik cihaz ve materyallerde önemli pay sahibi yapmıştır (Harrison, 2005; Kittel, 2004). Şekil 2.1'de band aralığına göre sınıflandırılmış iletken, yarıiletken ve yalıtkan malzemeler görülmektedir (Kittel, 2004).



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

Yarıiletken malzemeleri önemli kılan özelliklerden bir diğeri de, bir yarıiletken herhangi bir dış etki ile uyarıldığında, iletkenlik bandına geçen elektronun arkasında bir boşluk (deşik) bırakmasıdır. Bu deşik ve elektron çifti malzeme içerisinde birbirinden bağımsız veya birbirine bağlı olarak hareket eder. Pozitif yüklü deşik ve negatif yüklü elektronun malzeme içerisindeki birbirlerine bağlı olarak hareketleri, son yıllarda önemli bir inceleme alanı olmuştur.

2.3. Etkin Kütle Kavramı

Kristal içerisindeki elektron veya deşikler tamamen serbest olarak hareket etmezler. Çünkü elektronlar veya deşikler, kristaldeki periyodik örgü potansiyeli ile etkileşim halindedirler. Etkin kütle yaklaşımı, temel olarak elektron veya deşiklerin serbest haldeki kütlesi ile kristal içerisindeki kütlesinin farklı olması gerektiği düşüncesine dayanır (Manasreh, 2005; Harrison , 2005). Elektron için serbest elektron kütlesi m_0 olarak, etkin kütle ise m^* olarak gösterilir. Serbest bir elektron için enerji ve momentum ifadeleri;

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar \boldsymbol{k}^2}{2m_0} \tag{2.1}$$

$$\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k} \tag{2.2}$$

şeklinde tanımlanır. Bu ifadede $\hbar$ indirgenmiş Planck sabiti, **k** dalga vektörüdür. Elektron bir dalga paketi olarak kabul edildiğinde elektron hareketini tanımlamak için grup hızı;

$$\boldsymbol{v_g} = \frac{\partial \omega}{\partial \boldsymbol{k}} \tag{2.3}$$

şeklindedir. Bu elektrona bir $\boldsymbol{F}$ kuvveti uygulandığında elektronun hareketi klasik olarak;

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{v_g} \tag{2.4}$$

şeklinde verilir. Enerji değerini maksimum yapan dalga vektörü $\boldsymbol{k_0}$ olsun. Bu ifade $\boldsymbol{k_0}$ civarında seriye açılırsa;

$$E(\boldsymbol{k}) \approx E(\boldsymbol{k_0}) + \frac{1}{2}\frac{d^2E(\boldsymbol{k_0})}{d\boldsymbol{k}^2}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k_0})^2 \tag{2.5}$$

elde edilir. Bu ifadede ikinci terimin katsayısı;

$$\frac{1}{2}\frac{d^2E(\boldsymbol{k_0})}{d\boldsymbol{k}^2} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \tag{2.6}$$

ifadesine eşittir. $E = \hbar\omega$ ifadesinin ω'ya göre türevi alınırsa;

$$\partial\omega = \frac{\partial E}{\hbar} \tag{2.7}$$

elde edilir. Bu ifade Denk.(2.3)'te yerine yazılırsa;

$$\boldsymbol{v_g} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{k}} \tag{2.8}$$

ifadesi türetilmiş olur. Bu ifade $\boldsymbol{k_0}$ civarında;

$$\boldsymbol{v_g} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{k}} \approx \frac{\hbar(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k_0})}{m^*} \tag{2.9}$$

olarak yazılır (Manasreh, 2005). Böylece elektrona uygulanan kuvvet sonucunda ortaya çıkan ivme

$$\boldsymbol{a} = \frac{\partial \boldsymbol{v_g}}{\partial t} = \frac{\hbar}{m^*}\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial t} = \frac{1}{m^*}\frac{\partial \hbar \boldsymbol{k}}{\partial t} = \frac{1}{m^*}\frac{\partial \boldsymbol{p}}{\partial t} = \frac{1}{m^*}\boldsymbol{F} \tag{2.10}$$

şeklinde bulunur. Grup hızının zamana göre ilk türevi alındığında;

$$\frac{\partial \boldsymbol{v_g}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{k}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}}\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}}\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v_g} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}}\boldsymbol{F}\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{k}}\right) = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial \boldsymbol{k^2}}\boldsymbol{F} \tag{2.11}$$

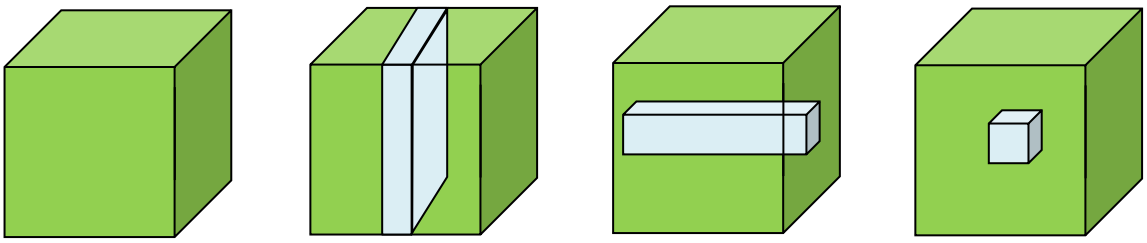
ifadesi elde edilir. Sonuç olarak, Denk.(2.10) Denk.(2.11)'de yerine yazıldığında bir kristal içindeki elektronun etkin kütle ifadesi;

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial \boldsymbol{k^2}}\right)^{-1} \tag{2.12}$$

olarak elde edilir (Manasreh, 2005, Harrison, 2005).

2.3. Yarıiletken Kuantum Hetero Yapılar

Düşük boyutlu kuantum yapılar içerisinde elektronlar ve deşiklere ait enerji seviyeleri, sınırlandırma etkileri sebebiyle kesikli hale gelir. Bu yapılar içerisindeki taşıyıcıların sınırlandırmasına göre dört gruba ayrılır. Bu yapıların şematik gösterimi Şekil 2.2'de verilmiştir (Harrison, 2005). Şekil 2.2'de verilen ilk şekil hiçbir yönde sınırlandırmanın olmadığı, dolayısıyla taşıyıcıların serbest hareket ettiği hacimsel (bulk) malzemedir. Böyle bir yapıda taşıyıcıların enerjileri kesikli değildir. Yani üç boyutta da sınırlandırma söz konusu olmadığı için, kuantumlu değildir. İkinci şekil ise iki yönde sınırlandırmanın olmadığı, sadece bir yönde sınırlandırmanın söz konusu olduğu kuantum kuyusudur. Bir yönde sınırlandırmanın olmadığı, yani taşıyıcıların iki yönde sınırlı hareket edebildiği yapı kuantum teli olarak tanımlanır. Bu yapılar içerisindeki taşıyıcıların enerji seviyeleri kuantumludur. Son şekil ise üç yönde de sınırlandırmanın olduğu ve taşıyıcıların üç yönde sınırlandırıldığı, kuantum noktasıdır (Harrison, 2005).



Şekil 2.2. Düşük boyutlu kuantum yapılar; üç yönde de sınırlandırılmayan ilk şekil, hacimsel malzeme, bir boyutta sınırlandırılmış ikinci şekil kuantum kuyu, iki boyutta sınırlandırılan üçüncü şekil kuantum teli, üç boyutta sınırlandırılan son şekil ise kuantum noktasını temsil etmektedir

Hacimsel malzeme için hiçbir yönde sınırlandırma olmadığı için, malzeme içerisindeki taşıyıcılar birer serbest parçacıktır. Bu nedenle enerji değerleri üç yönde de süreklidir. Hacimsel malzemeler içerisindeki taşıyıcılar için enerji ifadesi;

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) \tag{2.13}$$

olarak verilir. Bu ifade de $\hbar$ indirgenmiş Planck sabiti, m^* malzeme içerisindeki taşıyıcının etkin kütlesi ve k_x, k_y, k_z sırasıyla x, y ve z yönlerindeki dalga vektörleridir.

Şekil 2.2.'de gösterilen kuantum kuyusu x yönünde sınırlandırılmış olsun, bu malzeme için enerji değerleri sınırlandırılmayan y ve z yönlerinde hacimsel malzemedeki gibi sürekliyken, sınırlandırılan yönde enerji değerleri kesikli yani kuantumludur. Kuantum kuyusu için enerji ifadesi;

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_y^2 + k_z^2\right) + E_x \tag{2.14}$$

olarak verilir. Bu denklemdeki E_x ifadesi x yönündeki kesikli enerji değerlerini ifade eder. E_x daha açık şekli;

$$E_x = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)^2 \tag{2.15}$$

biçimindedir (Harrison, 2005, Davies, 1998). Bu ifade de n_x baş kuantum sayısı, L_x taşıyıcının x yönündeki hareket edebildiği genişliktir. Kuantum teli için enerji ifadesi (y ve z yönlerinde sınırlandırılmış);

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^2\right) + E_y + E_z \tag{2.16}$$

olarak verilir. Bu denklemdeki E_y ve E_z enerji ifadeleri

$$E_y = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2 \tag{2.17}$$

$$E_z = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2 \tag{2.18}$$

şeklindedirler (Harrison, 2005, Davies, 1998).

Kuantum noktaları ise günümüzde en çok üzerinde araştırma yapılan yapılardır. Kuantum noktalarının tercih edilme sebebi üç yönde de enerji değerlerinin kesikli olmasıdır. Bu özelliklerinden dolayı yapay atomlar olarak da adlandırılır. Bir kuantum noktası için enerji ifadesi;

$$E = E_x + E_y + E_z \tag{2.19}$$

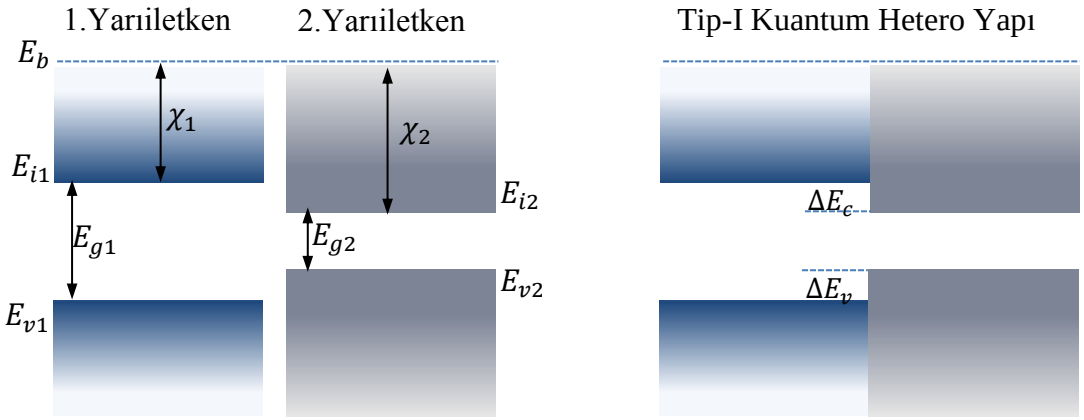
olarak verilir. Sırasıyla x, y ve z yönlerindeki enerji ifadeleri;

$$E_{x,y,z} = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{n_{x,y,z}\pi}{L_{x,y,z}}\right)^2 \tag{2.20}$$

olarak verilirler (Harrison, 2005, Manasreh, 2005, Davies, 1998).

2.4. Tip-I Kuantum Hetero Yapılar

Kuantum hetero yapılar, dar yasak enerji aralığına sahip bir yarı iletken üzerine daha geniş yasak enerji aralığına sahip başka bir yarıiletkenin büyütülmesi sonucu elde edilir. Tip-I kuantum yapısı oluşumu Şekil 2.3'te görüldüğü gibidir.



Şekil 2.3. Tip-I kuantum hetero yapıların oluşum şeması

Şekil 2.3'ün sol panelinde E_{g1}, E_{g2} yasak enerji aralığına sahip iki yarıiletkenin birleştirilmeden önceki enerji band şeması verilmiştir. Burada χ_1, birinci yarıiletkenin elektron afinitesi, χ_2 ikinci yarıiletkenin elektron afinitesi, E_b boşluğun (vakumun) enerji seviyesi, E_{i1} ve E_{i2} sırasıyla birinci ve ikinci yarıiletkenlerin iletkenlik bandı

enerjileri, E_{v1} ve E_{v2} ise sırasıyla birinci ve ikinci yarıiletkenlerin valans band enerjilerini göstermektedir. Bu iki yarıiletken birleştirildiğinde Şekil 2.3'ün sağ panelinden de görüldüğü gibi eklem noktalarında potansiyel enerji farkları oluşur. ΔE_c iletim band seviyeleri arasında oluşan potansiyel enerji farkı, ΔE_v ise Valans band seviyeleri arasında oluşan potansiyel enerji farkıdır. ΔE_c, ΔE_v ifadeleri aşağıdaki gibi elde edilir (Davies, 1998, Sattler, 2011).

$$\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2 \tag{2.21}$$

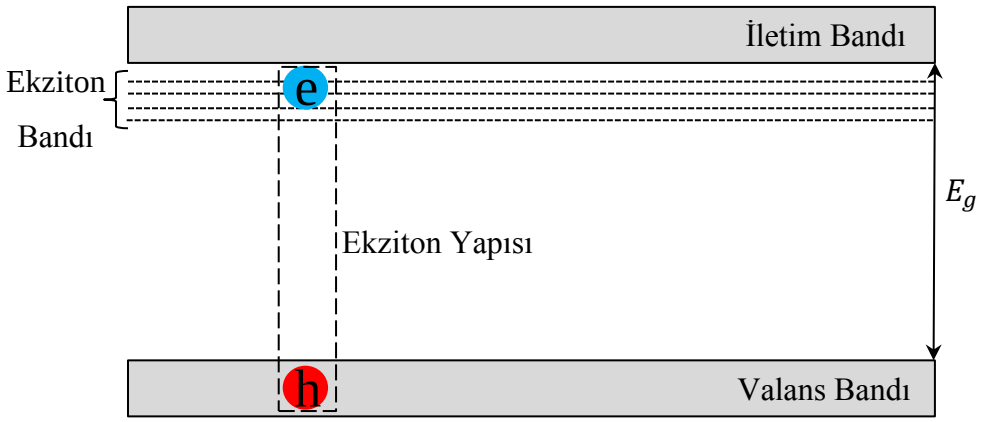
$$\Delta E_v = \left(E_{g2} - E_{g1}\right) - \Delta E_c \tag{2.22}$$

Tip-I kuantum hetero yapının valans bandından iletim bandına bir elektronun uyarılması sonucu, elektron ΔE_c deşik ise ΔE_v potasiyel enerjisi tarafından hapsedilmiş olur. Tip-I kuantum hetero yapı denmesinin sebebi, elektron ve deşiğin aynı malzemenin içinde sınırlandırılmasından dolayıdır (Sattler, 2011, Harrison, 2005).

3. EKZİTONLAR

3.1. Giriş

Ekziton yapısı, bir elektron ve bir deşiğin aralarında çekici bir Coulomb etkileşmesi olması sebebiyle, elektron – deşik çifti olarak ortak hareketi sonucu oluşan yapıdır (Kittel 2004; Harrison 2005). Kısaca, elektron – deşik çiftinin Coulomb etkileşmesiyle bağlı olma durumudur. Tekli ekzitonlar yük olarak nötrdür ve bu nedenle elektriksel iletime katkıda bulunmaz ancak enerji iletebilirler (Kittel, 2004; Fox, 2001).



Şekil 3.1. Ekziton yapısının oluşum şeması

Şekil 3.1'de tekli bir ekzitonun oluşum süreci verilmiştir (Manasreh, 2005). Bu şekil incelediğinde uyarılan bir elektronun iletim bandının hemen altında bulunan kararsız ekziton enerji seviyelerinden birine geçiş yaparken, valans bandında elektronun bırakmış olduğu boşluk (deşik) pozitif bir yük gibi davranır ve elektron ile beraber örgü içerisinde hareket ederler.

3.2. Hacimli Bir Yarıiletken Malzemede Ekzitonlar

3.2.1. Wannier – Mott ekzitonları

Şekil 3.2 a'da şematik olarak gösterilen Wannier-Mott ekzitonları aşağıdaki özelliklere sahiptirler.

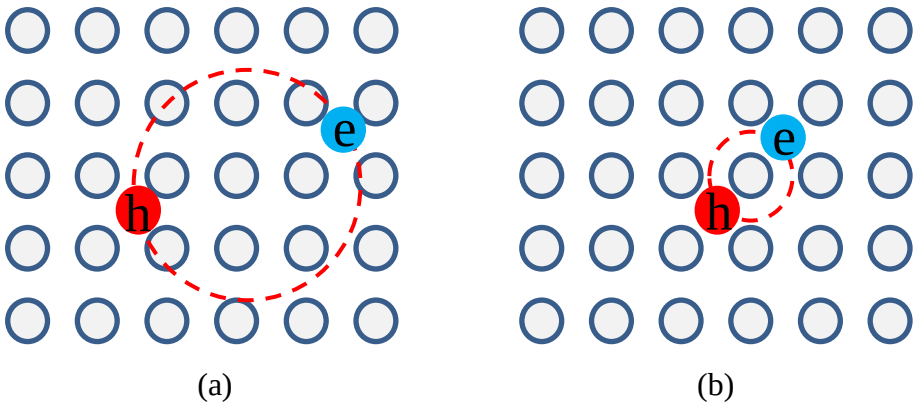
- ❖ Bu tip ekzitonlar zayıf Coulomb etkileşimleriyle bağlıdırlar.
- ❖ Dielektrik katsayısı büyük olan yarı iletken malzemelerde gözlemlenirler.

- Bu ekziton çeşidi, hidrojen atomuna benzer.
- Wannier – Mott, ekzitonları yarıçapı birkaç birim hücreyi kapsayacak genişliktedir.
- Serbest ekziton olarak ta adlandırılırlar.
- Wannier – Mott ekzitonları, düşük bağlanma enerjilerine sahiptirler. Yaklaşık olarak 0.01 eV bağlanma enerjisine sahiptirler (oda sıcaklığı enerji değeri yaklaşık olarak 0.025 eV'dir). Bu durumda oda sıcaklığında bu ekziton çeşidi gözlenmez. Gözlenebilmesi için düşük sıcaklığa ihtiyaç duyulur (Fox, 2001).

3.2.2. Frenkel ekzitonları

Şekil 3.2 b'de şematik olarak gösterilen frenkel ekzitonları aşağıdaki özelliklere sahiptirler.

- Frenkel ekzitonları, güçlü Coulomb etkileşimleriyle bağlıdırlar.
- Frenkel ekzitonları, güçlü Coulomb etkileşmesine sahip olduğu için, yarıçapı örgü sabitine yakındır.
- Sıkı bağlı ekziton olarak da adlandırılırlar.
- Bu ekziton tipi yalıtkan kristallerde ve moleküler kristallerde gözlenirler.
- Frenkel ekzitonları, yaklaşık olarak 0.1 - 1 eV arasında yüksek bağlanma enerjilerine sahiptirler.
- Oda sıcaklığında gözlemlenirler (Fox, 2001).



Şekil 3.2. Ekziton çeşitleri (a) Wannier-Mott ekzitonu (b) Frenkel ekzitonu

Yukarıda sıralanan ekziton çeşitlerinin yanı sıra bağlı ekziton (safsızlık atomu etkisinde), yüzey ekzitonları, ikili ekzitonlar, yüklü ekziton, ve üçlü ekzitonlar gibi çeşitleri de vardır.

3.3. Ekziton ve Hidrojen Atomunun Yapısal Benzerliği

Hidrojen atomu ve tekli ekziton yapısı incelendiğinde, yapısal olarak birbirine çok benzediği görülür. Hidrojen atomu, merkezde pozitif yüklü proton ve onun çevresinde ki orbitalde dolanan elektrondan oluşur. Benzer olarak bir ekziton da pozitif yüklü deşik ve elektrondan oluşur ve tıpkı Hidrojen atomundakine benzer bir şekilde, aralarında çekici bir Coulomb etkileşmesi sonucu beraber hareket ederler (Kittel, 2004; Manasreh, 2005).
Bohr atom modeline göre Hidrojen atomu için;

$$F_{coulomb} = F_{merkezcil} \tag{3.1}$$

olarak verilir. Bu ifadenin açık hali;

$$k\,\frac{e^2}{r^2} = \frac{m_0 v^2}{r} \tag{3.2}$$

şeklindedir. Bu ifadede, r elektron ile proton arasındaki mesafe, m_0 elektronun kütlesi, e elektronun yükü ve boşluk için, $k = 4\pi\varepsilon_0$'dır. Bohr atom modelinin ikinci postlülasında; elektronlar çekirdek etrafında açısal momentumları $h/2\pi$'nin tam katı olacak şekilde dolanırlar yani;

$$m_0 v r = n\frac{h}{2\pi} \tag{3.3}$$

şeklinde ifade edilir. Bu denklemde, n baş kuantum sayısıdır ve n=1, 2, 3… değerlerini alır. Hidrojen atomu için enerji ifadesi ise elektronun kinetik enerjisi ile Coulomb çekici etkileşme enerjisinin toplamından oluşur (Manasreh, 2005).

$$E_n = \frac{1}{2} m_0 v^2 - k\frac{e^2}{r} \tag{3.4}$$

yazılan son denklemde $m_0 v^2$ ifadesi Denk. (3.2)' den çekilirse enerji ifadesi;

$$E_n = -\frac{2\pi^2 k^2 e^4 m_0}{h^2 n^2} \tag{3.5}$$

haline gelir. Hidrojen atomu için n=1 durumunda; $\frac{2\pi^2 k^2 e^4 m_0}{h^2}$ ifadesi bir Rydberg olarak tanımlanır (Fox, 2001; Manasreh, 2005; Bransden ve Joachain, 2000). Son olarak Denk. (3.3)'ün karesi alınırsa ve Denk. (3.2)' de yerine yazılırsa;

$$r = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{m_0 e^2} = a_0 \tag{3.6}$$

ifadesi elde edilir. Bu ifadeye Bohr yarıçapı denir (Aygün ve Zengin, 1994; Ihn, 2010).

Hidrojen atomunda elektronun kütlesi, protonun kütlesinden 1836 kat daha hafiftir. Bu nedenle Bohr atom modelinde protonlar hareketsiz yük olarak alınmıştır. Oysa ekziton yapısında, elektronun kütlesi ancak deşiğin birkaç katı daha hafiftir. Bu nedenle deşikler hareketsiz yükler gibi alınamaz. Sonuç olarak, ekziton yapısında elektron ve deşiğin beraber hareketinden dolayı sistemi tanımlayan kütle olarak, iki cisim probleminde tanımlanan indirgenmiş kütle kullanılır (Davies, 1998).
Ekziton sistemi için indirgenmiş kütle;

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \tag{3.7}$$

olarak tanımlanır (Levine, 2000; Bransden ve Joachain, 2000). Yazılan son denklemde m_e^*, m_h^* sırasıyla elektron ve deşiğin etkin kütleleri, μ ise ekziton sisteminin indirgenmiş kütlesidir. Şimdi Hidrojen atomu için yapılan tanımlamalara benzer şekilde ekziton yapısı için etkin Bohr yarıçapı;

$$a_0{}^* = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0\varepsilon}{\mu e^2} \tag{3.8}$$

şeklinde ifade edilir. Hidrojen atomu için tanımlanan Bohr yarıçapından iki farklılık söz konusudur; elektron kütlesi yerine μ indirgenmiş kütlesi ve ekzitonun boşlukta değil malzeme ortamında olmasından dolayı, dielektrik geçirgenlik, ε'nun kullanılmasıdır. Benzer şekilde etkin enerji;

$$E_n = \frac{2\pi^2 e^4 \mu}{h^2 n^2 \varepsilon^2} \tag{3.9}$$

olarak tanımlanır. Son olarak, yazılan enerji ifadesinden etkin Rydberg enerjisi kolaylıkla;

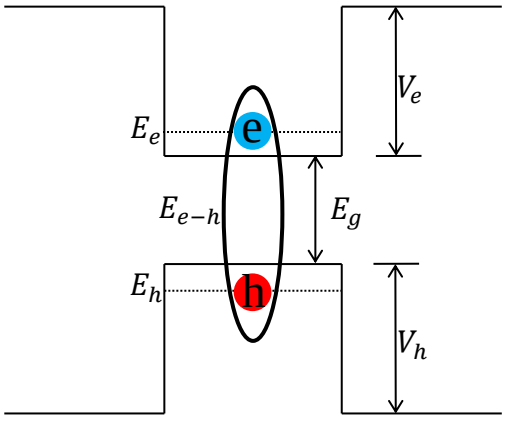
$$R_y^* = \frac{2\pi^2 k^2 e^4 \mu}{h^2 \varepsilon^2} \tag{3.10}$$

yazılabilir (İhn, 2010). Hidrojen atomu için tanımlanan Rydberg değerinden farklı olarak ortamın dielektrik katsayısı ve indirgenmiş kütle formülde yer almıştır. Sonuç olarak, görüldüğü gibi ekziton ile hidrojen atomu yapısal olarak birbirine oldukça benzemektedir.

3.4. Kuantum Noktasındaki Ekzitonların Elektronik Özellikleri

3.4.1. Tekli ekziton

Bir kuantum nokta içerisindeki bir elektron ve bir deşikten meydana gelen tek bir ekzitonun şematik gösterimi, Şekil 3.3'te verilmiştir.



Şekil 3.3. Yarıiletken iki malzemenin eklem yapılması sonucu oluşan bir kuantum noktasındaki tek ekzitonun şematik gösterimi

Şekil 3.3.'te gösterilen ekziton yapısı için toplam enerji ifadesi,

$$E_X = E_g + E_e + E_h - E_{e-h} \tag{3.11}$$

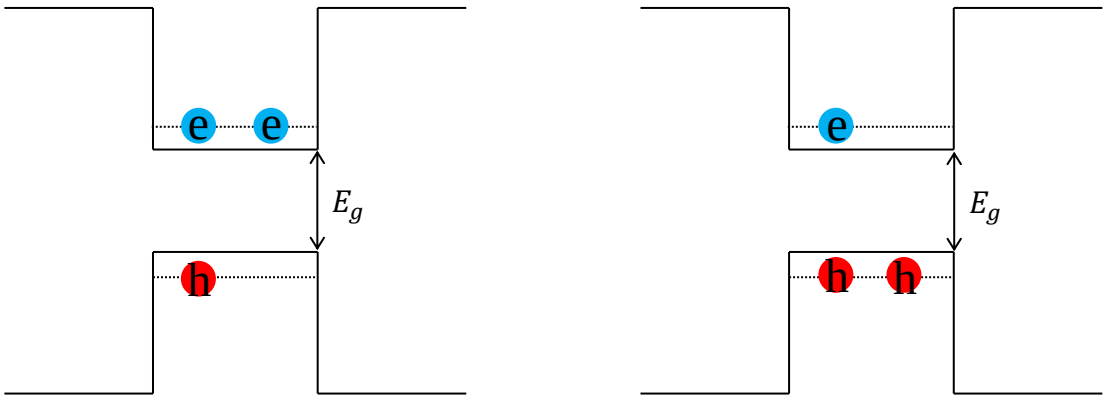
olarak verilir (Sattler, 2011). Bu denklemde E_X, ekziton yapısının toplam enerjisi, E_g yasak enerji aralığı, E_e ve E_h sırasıyla elektron ve deşiğin enerjileri, E_{e-h} ise elektron – deşik arasındaki Coulomb enerjisidir. Tekli bir ekizton için geçiş enerjisi, toplam enerji ifadesine eşittir. Ekziton için bağlanma enerjisi ifadesi ise;

$$E_b(X) = E_{e0} + E_{h0} - E_X \tag{3.12}$$

olarak tanımlanır (Tsuchiya, 2000). Bu ifadede $E_b(X)$ ekzitonun bağlanma enerjisi, E_{e0} ve E_{h0} ise elektron ve deşiğin aralarında hiçbir Coulomb etkileşmesi olmadığı durumdaki tek parçacık enerjileridir. Son olarak yazılan denklem incelendiğinde, aslında bağlanma enerjisi olarak tanımlanan enerjinin, elektron – deşik arasındaki çekici Coulomb enerjisi olduğu açıktır.

3.4.2. Yüklü ekzitonlar

İki elektron, bir deşikten meydana gelen sistem negatif yüklü ekziton veya negatif trion olarak bilinir. Bu yapı Şekil 3.4'ün sol panelinde görülmektedir. Benzer biçimde iki deşik ve bir elektrondan meydana gelen yapı, pozitif yüklü ekziton (pozitif trion) olarak tanımlanır. Böyle bir yapı Şekil 3.4'ün sağ panelinde görülmektedir.



Şekil 3.4. Yüklü ekzitonların şematik gösterimi; sol panelde negatif yüklü ekzitonun (negatif trion) ve sol panelde pozitif yüklü ekzitonun (pozitif trion) şematik gösterimi

Sırasıyla negatif ve pozitif yüklü ekzitonlar için toplam enerji ifadeleri;

$$E_{X^-} = E_g + E_e + E_h + E_{e-e} - E_{e-h} \tag{3.13}$$

$$E_{X^+} = E_g + E_e + E_h + E_{h-h} - E_{e-h} \tag{3.14}$$

olarak tanımlanır. Bu ifadelerde, E_{X^-} ve E_{X^+} , sırasıyla negatif ve pozitif ekzitonların toplam enerjilerini ifade eder. E_{e-e} negatif yüklü ekzitonda elektron – elektron arasındaki itici Coulomb enerjisini, E_{h-h} ise pozitif yüklü ekzitondaki deşikler arasındaki itici Coulomb enerjisini ifade eder. Bu yapılar için bağlanma enerjisi ifadeleri;

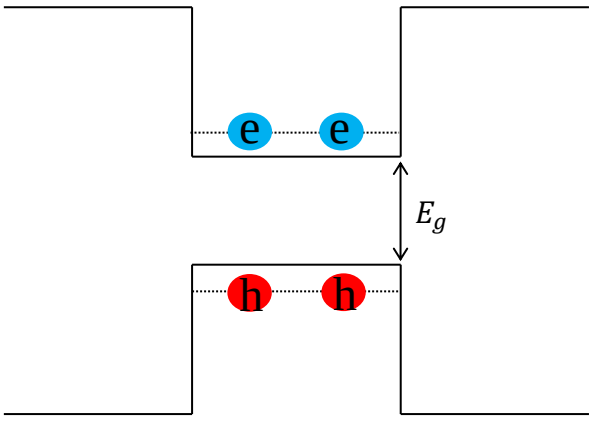
$$E_b(X^-) = (E_X + E_{e0}) - E_{X^-} \quad (3.15)$$

$$E_b(X^+) = (E_X + E_{h0}) - E_{X^+} \quad (3.16)$$

olarak tanımlanır (Tsuchiya, 2000). $E_b(X^-)$ ve $E_b(X^+)$ sırasıyla negatif ve pozitif yüklü ekzitonların bağlanma enerjisi, E_{e0} ve E_{h0} ise sırasıyla elektron ve deşiğin, aralarında hiçbir Coulomb etkileşmesi olmadığı durumdaki tek parçacık enerjileridir.

3.4.3. İkili ekzitonlar

İki elektron ve iki deşikten meydana gelen, başka bir deyişle aralarında etkileşim bulunan iki ekziton yapısına ikili ekziton (Biexciton) denilmektedir. Bu yapı Şekil 3.5'te gösterildiği gibidir.



Şekil 3.5. Bir kuantum noktası içerisindeki ikili ekziton (biexciton) yapısı

Yukarıda gösterilen ikili ekziton yapısı için toplam enerji ve bağlanma enerjisi ifadeleri sırasıyla;

$$E_{XX} = E_g + E_e + E_h + E_{h-h} + E_{e-e} - E_{e-h} \quad (3.17)$$

$$E_b(XX) = 2E_X - E_{XX} \quad (3.18)$$

şeklinde tanımlanırlar. E_{e-e} ve E_{h-h} sırasıyla elektron – elektron ve deşik – deşik arasındaki itici Coulomb enerjisidir. E_{e-h} ifadesi ise bu dört parçacık arası toplam çekici Coulomb enerjisini temsil eder

3.5. Tek, İkili ve Yüklü Ekzitonların Optik Özellikleri

Ekzitonik yapılardan yararlanarak yapılan uygulamaların çoğunda, bu sistemlerin ışıma özellikleri yani optik özelliklerinden yararlanılır. Bu nedenle bu yapıların optik özelliklerini belirlemek son derece önemlidir. İnterband ve intraband geçişler incelendiğinde, geçişlerin enerji durumları, dalga fonksiyonları ve simetri özellikleri gibi faktörlere bağlı olduğu görülür (Sattler, 2011). Bu geçişleri tanımlamak için osilatör şiddeti ve örtüşme integralleri kavramları kullanılır. Örtüşme integralleri ekziton yapısındaki elektron ve deşiğin kuantum noktası içerisindeki bulunma olasılık yoğunluğuyla ilgili bir tanımdır. Ekzitonik sistemler için örtüşme integrali;

$$\theta_{e-h} = \left| \int d^3 r \psi_e(r) \psi_h(r) \right|^2 \tag{3.19}$$

olarak verilir (Klimov ve ark., 2011). Bu ifade de ψ_e sistemde geçiş yapan elektronun ψ_h ise deşiğin dalga fonksiyonudur. Osilatör şiddeti ise elektronik geçiş yoğunluğu ile ilgili bir kavramdır (Sattler, 2011). İncelenen ekzitonik yapılar için osilatör şiddeti;

$$f_i = \frac{2}{m_0 E} \sum_j |< u_{c0}|p|u_{v0} >|^2 \left| \int d^3 r \psi_e(r) \psi_h(r) \right|^2 \tag{3.20}$$

olarak verilir (Laheld ve Einevoll 1997). Bu ifadede u_{c0} ve u_{v0} sırasıyla iletim ve valans bandındaki Bloch dalga fonkisyonlarıdır. $\psi_e(r)$ ve $\psi_h(r)$ elektron ve deşik için etkin kütle yaklaşımında elde edilen zarf fonksiyonlarıdır. m_0 serbest elektronun boşluktaki kütesi, E ise incelenen ekzitonik yapı için geçiş enerjisidir. Osilatör şiddeti ifadesindeki Kane matris elemanı;

$$|< u_{c0}|p|u_{v0} >| = \frac{m_0 E_p}{4} \tag{3.21}$$

şeklinde de yazılabilir (Madarasz 1994). Bu ifade kullanılarak ekzitonlar için osilatör şiddeti,

$$f_i = \frac{E_p}{2E}\left|\int d^3r\psi_e(r)\psi_h(r)\right|^2 \tag{3.22}$$

$$f_i = \frac{E_p}{2E}\theta_{e-h} \tag{3.23}$$

biçiminde yazılabilir (Sahin ve ark 2012). Bu eşitlikte E_p kristalin periyodikliğini, yani Bloch dalga fonksiyonlarını içeren Kane enerjisidir (Sahin ve ark 2012; Dalgarno ve ark. 2008). Şekil 3.3 incelendiğinde ekziton için elektron – deşik yeniden birleşmesi için tek olasılık söz konusuyken, Şekil 3.5 incelendiğinde ikili ekziton sisteminde ise iki farklı durum için iki farklı olasılık mevcuttur. Birinci durum, ikili ekziton sistemi bağlı durumda iken, $e_1 - h_1$, $e_2 - h_2$, $e_1 - h_2$ ve $e_2 - h_1$ dört faklı olasılıkla yeniden birleşme olabilir. İkinci durumda ise, ikili ekziton yapısı bağlı değilken bu sistem sanki birbirinden izole iki tekli ekziton gibi davranır. Bu durum da yalnızca $e_1 - h_1$, $e_2 - h_2$ yeniden birleşmelerinin gözlenme olasılığı en yüksektir. Trion sistemlerinde yeniden birleşme olasılıkları, ikili ekziton yapısındakine benzerdir. Yüklü ekziton sistemlerinde bağlı bir yapı oluşuyorsa iki olası durum, bağlı bir yapı oluşmuyorsa tek bir olası durum söz konusudur. Bu nedenle elektronik geçiş yoğunluğu olarak tanımlanan osilatör şiddeti ifadesine bu olası durumlar yansıtılmalıdır. Bu durumda osilatör şiddeti, yeniden birleşme olasılıkları da göz önünde bulundurularak;

$$f_i = A\frac{E_p}{2E}\left|\int d^3r\psi_e(r)\psi_h(r)\right|^2 \tag{3.24}$$

şeklinde düzenlenebilir. Bu ifade de A değişkeni, incelenen ekzitonik sistemdeki olası yeniden birleşme durumlarının sayısını temsil etmektedir.

Ekzitonik sistemlerin ışıma özelliklerinin, kuantum nokta yarıçapıyla büyük ölçüde kontrol edilebilir olması nedeniyle bu yapıların soğurma spektrumlarının belirlenmesi son derece önemlidir. Ekzitonlar için sağurma katsayısını belirlemek için kullanılan genel form;

$$\alpha\,(\hbar\omega\,) \propto \sum_i f_i\delta_i\,(\hbar\omega - E^i) \tag{3.25}$$

şeklindedir (Şahin ve ark., 2012). Bu ifade de f_i osilatör şiddeti, E^i geçiş enerjisi, $\hbar\omega$ ise sistemi uyarmak için gönderilen fotonun sahip olduğu enerjidir. δ çizgi şekli (line shape) için,

$$\alpha = \frac{1}{\pi\hbar\Gamma}\operatorname{sech}\left(E - \frac{\hbar\omega}{\hbar\Gamma}\right) \tag{3.26}$$

fonksiyonu seçilmiştir. Bu ifade de $\hbar\Gamma$ çizgi genişliği (broadening) faktörüdür.

Ekzitonik yapılar, çeşitli uygulamaların (lazerler, tıbbi görüntüleme, sensörler vb.) geliştirilebilmesi için saptanması gereken değerlerden biri de ekzitonlar için hayat süresidir. İncelenen ekzitonik yapılar için yaşam süresi;

$$\tau = \frac{6\pi\varepsilon_0 m_0 c^3 \hbar^2}{e^2 n \beta_s E f} \tag{3.27}$$

$$\beta_s = \frac{3\varepsilon}{\varepsilon_{NQD} + 2\varepsilon} \tag{3.28}$$

olarak verilir (Sahin ve ark., 2012). Bu ifadelerde ε_0 boşluğun dielektrik geçirgenliği, m_0 serbest elektronun kütlesi, c ışığın boşluktaki hızı, e elektronun yükü, n kırılma indisi, β_s perdeleme faktörü, E incelenen sistem için geçiş enerjisi, f ise osilatör şiddetidir. Denk. (3.28)'de verilen perdeleme faktörü ifadesinde ε ve ε_{NQD} sırasıyla çözücü ve kuantum nokta nanokristalin optik dielektrik sabitleridir.

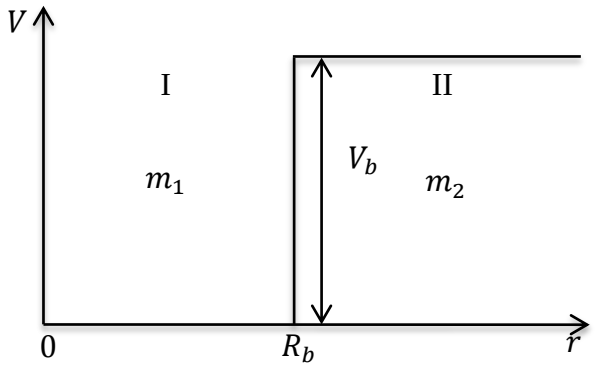
4. HESAPLAMA YAKLAŞIMLARI VE YÖNTEMLERİ

4.1. Giriş

Tek bir ekziton yapısı, bir hidrojen atomuna yapısal olarak çok benzerdir. Ancak hidrojen atomu için yapılan çözümde proton kütlesinin elektrondan çok daha ağır olması sebebiyle hareketsiz olarak kabul edilir. Sistemdeki hareketli parçacığın elektron olduğu kabul edilir. Böylece sistemdeki Coulomb potansiyeli tek bir değişkene bağlı olarak yazılır. Hidrojen atomu için böyle etkili bir kabul varken bile, bu sistem için Schrödinger denklemini analitik olarak çözmek oldukça zordur. Ekziton sisteminde ise hem elektron hem de deşik kütleleri birbiriyle kıyaslanabilir durumdadır. Bu nedenle elektron – deşik etkileşmesi iki parçacığın birbirine bağımlı hareketi göz önüne alınarak çözülmelidir. Ancak iki parçacıklı tekli ekziton sitemi için bile bu potansiyelin analitik bir ifadesi yoktur. Bu nedenle iki ve daha fazla parçacığa sahip sistemlerin çözümü için çeşitli yaklaşımlar yapmak kaçınılmaz hale gelmiştir. Bu yaklaşım yöntemleri ve problemi ele alış biçimleri bu bölümde verilmiştir.

4.2.Etkin kütle Uyuşmazlığı

Kuantum nokta heteroyapılar, en az iki farklı yarıiletken malzemenin eklem yapılmasıyla meydana gelmektedir. Farklı malzemeler farklı dielektrik katsayılarına, band yapılarına, örgü sabitlerine ve farklı etkin kütle değerlerine sahiptir. Sonlu potansiyele sahip bir kuantum nokta yapıda, elektronun bariyer bölgesine de nüfuz etme durumu söz konusu olacağından, Schrödinger denkleminin çözülmesinde etkin kütle değişiminin göz önüne alınması önemlidir.



Şekil 4.1. Sonlu potansiyele sahip kuantum nokta yapı

Şekil 4.1.'deki yarıçapı R_b, bariyer potansiyeli V_b olan çekirdek – kabuk yapılı bir kuantum nokta için Schrödinger denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla^2\psi_1(r) = E\psi_1(r) \qquad r < R_b \tag{4.1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla^2\psi_2(r) + V_b\psi_2(r) = E\psi_2(r) \qquad r \geq R_b \tag{4.2}$$

şeklinde yazılır. ψ_1, I. bölgedeki, ψ_2 ise II. bölgedeki dalga fonksiyonudur. Kuantum mekaniksel olarak, süreklilik için iki temel şartın sağlanması gerekir. Birinci şart $r = r_b$ olduğu anda dalga fonksiyonları;

$$\psi_1|_{r=r_b} = \psi_2|_{r=r_b} \tag{4.3}$$

şeklinde sürekli olmalıdır. İkinci şart olarak, eğer etkin kütleler I. ve II. bölgede aynı ise;

$$\left.\frac{\partial\psi_1}{\partial r}\right|_{r=r_b} = \left.\frac{\partial\psi_2}{\partial r}\right|_{r=r_b} \tag{4.4}$$

şeklinde dalga fonksiyonlarının türevleri de sürekli olmalıdır. I. ve II. bölgedeki etkin kütleler farklı ise bu durumda dalga fonksiyonlarının türevlerinin sürekliliği;

$$\left.\frac{1}{m_1}\frac{\partial\psi_1}{\partial r}\right|_{r=r_b} = \left.\frac{1}{m_2}\frac{\partial\psi_2}{\partial r}\right|_{r=r_b} \tag{4.5}$$

şeklinde verilir. Bu sınır şartı, literatürde Ben Daniel-Duke (1966) süreklilik şartı olarak bilinir.

4.3. Hartree Yaklaşımı

Hartree yaklaşımı, çok elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonlarını, tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazma temeline dayanan bir yaklaşımdır (Eisberg, 1961). Yani N elektrona sahip bir sistemin Schrödinger denklemini, tek bir elektron için yazılan Schrödinger denklemine indirger. N elektronlu bir sistem için Hartree yaklaşımında dalga fonksiyonları;

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \dots \vec{r}_N) = \phi(\vec{r}_1)\phi(\vec{r}_2)\phi(\vec{r}_3) \dots \phi(\vec{r}_N) \quad (4.6)$$

şeklinde ifade edilirler (Eisberg, 1961, Hartree, 1955). Hartree yaklaşımında enerji seviyelerinin bulunması için, elektronlar arası etkileşme direkt olarak alınmaz. Bunun yerine, göz önüne alınan elektron için ortamdaki diğer parçacıkların oluşturduğu ortalama bir etkileşim potansiyel alınır (Barnham ve Vvedensky, 2001, Hartree, 1955). Sonuç olarak incelenen elektron hem yapının sınırlandırma potansiyeli ile hem de ortamdaki diğer parçacıkların oluşturduğu ortalama potansiyelle etkileşecektir. Tek elektrona sahip bir sistem için Schrödinger dalga denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \quad (4.7)$$

olarak verilir. Bu ifadede, V kuantum noktasının sınırlandırma potansiyelidir. Çok elektronlu bir sistem için Schrödinger denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i + V - e\phi_{e-e}\psi_i = E_i\psi_i \quad (4.8)$$

şeklinde yazılır. Bu denklemde, ψ_i ve E_i sırasıyla tek elektron dalga fonksiyonları ve enerjilerini temsil eder. ϕ_{e-e} yapıdaki elektronların oluşturduğu elektrostatik Coulomb potansiyeli veya Hartree potansiyeli olarak adlandırılır. ϕ_{e-e} statik potansiyel olduğu için, elektronun yükü ile çarpılarak enerji boyutuna getirilir ve Denk. (4.8)'deki gibi Schrödinger denklemine dahil edilir. Bu ϕ_{e-e} potansiyeli Hartree potansiyeli olarak ta adlandırılır. Bu Hartree potansiyeli için Poisson denkleminin çözülmesi gerekir. Böyle bir sistem için Poisson denklemi;

$$\nabla[\kappa(r)\nabla\phi_{e-e}(r)] = -\rho(r) \quad (4.9)$$

şeklinde verilir. Bu denklemde $\rho(r)$ yük yoğunluğudur. ε_0 ise boşluğun dilektrik geçirgenliğidir. $\kappa(r) = \varepsilon(r)\varepsilon_0$ ise yarıiletken malzemenin dielektrik geçirgenliğidir. $\kappa(r)$ formülden de görüldüğü malzemlerin $\varepsilon(r)$'sine bağlıdır.

Yani burda Hartree potansiyeli bulunurken iki malzemenin eklem noktasındaki dielektrik geçirgenlikleri, tıpkı etkin kütle süreksizliğinde olduğu gibi, sınır noktalarında sürekli olmalıdır. Poisson denkleminin çözülmesinde bu durum özellikle dikkate alınmıştır. Bir kuantum noktası için yük yoğunluğu;

$$\rho(r) = -e\sum_{i=1}^{N}|\psi_i(r)|^2 \tag{4.10}$$

olarak ifade edilir. Burada N, toplam elektron sayısıdır. Hartree yaklaşımı yapılarak öz-uyumlu olarak çözülen bu problemde, sistemin toplam enerji ifadesi;

$$E_T = \sum_{i=1}^{N}\left(E_i - \frac{1}{2}\int \psi_i^* \phi_{e-e}\psi_i\right) \tag{4.11}$$

olarak elde edilir (See ve ark., 2002). Hartree yaklaşımı çok elektronlu sistemin Schrödinger denklemini tek elektronlu sistemin Schrödinger denklemine indirger.

4.4 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)

Hatree yaklaşımı tek başına kullanıldığında ikiden fazla elektrona sahip bir sistemin temel dinamiklerini belirlemek için yetersiz kalır (See ve ark., 2002). Çok parçacığa sahip bir sistemde, parçacıklar arası etkileşmelerin de, göz önüne alınması gerekir. Bu nedenle 1964'te Hohenberg ve Kohn yoğunluk fonksiyonel teorisini geliştirdiler. Bu teoride, moleküler temel seviye durumları için, enerji, örgü sabitleri, dış potansiyel (ortamdaki parçacıklardan kaynaklanan) ve elektronik özelliklerinin elektronun olasılık yoğunluğu kullanılarak ifade edilebileceğini gösterdiler. (Hohenberg ve Kohn, 1964; Levine 2000). Bu yaklaşımda enerji fonksiyonelini minimum yapan elektron yoğunluğu sistem için temel enerji seviyesini olarak belirlenir. Yoğunluk fonksiyonelleri teorisine göre bir sistemin taban durumu için toplam enerji fonksiyoneli;

$$E[n(\vec{r})] = \int n(\vec{r})V(\vec{r})d^3r + F[n(\vec{r})] \tag{4.12}$$

olarak tanımlanır. $F[n(\vec{r})]$ fonksiyoneli evrensel bir fonksiyoneldir. $F[n(\vec{r})]$ fonksiyoneli evrenselliği hiçbir parçacık sayısına ve $V(\vec{r})$ potansiyeline bağlı olmamasından kaynaklanır (Koch ve Holthausen, 2001; Hohenberg ve Kohn 1964). Hohenberg ve Kohn daha sonra DFT için varyasyonel teoremi ortaya atmışlardır. N elektrona sahip sistem için bir deneme yoğunluğu $n_{tr}(\vec{r})$ tanımlansın varyasyon teoremi

için $\int n_{tr}(\vec{r})\, d^3r = N$ ve $n_{tr}(\vec{r}) \geq 0$ şartını karşılamalıdır. Bu durumda deneme yoğunluğu kullanılarak çözülen sistemde bulunan toplam enerji sistemin gerçek enerjisine eşit ya da daha büyük olmalıdır. (Levine, 2000; Parr ve Yang, 1989) Bu durum;

$$E_0[n_0(\vec{r})] \leq E_{tr}[n_{tr}(\vec{r})] \tag{4.13}$$

olarak ifade edilir (Parr ve Yang, 1989). Bu ifadede E_0, $n_0(\vec{r})$ sırasıyla sistemin gerçek taban durum enerjisi ve yoğunluğudur. Sonuç olarak Hohenberg ve Kohn denklemleri kullanılarak sistemin geçek taban enerjisinin bulunması tamamen $n_{tr}(\vec{r})$ deneme yoğunluğunun $n_0(\vec{r})$ eşit olmasına bağlıdır.

4.5 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA)

Hohenberg ve Kohn tarafından ortaya atılan yerel yoğunluk fonksiyonellerinde asıl problem, Denk. (4.12)'de gösterilen $F[n(\vec{r})]$ fonksiyoneli biçiminin tam olarak bilinmemesidir. Bu nedenle 1965'te Kohn ve Sham $F[n(\vec{r})]$ fonksiyoneli için;

$$F[n(\vec{r})] = T_s[n(r)] + \frac{e^2}{2}\iint \frac{n(r)n(r')}{4\pi\kappa|r-r'|} d^3r d^3r' + E_{xc}[n(r)] \tag{4.14}$$

ifadesini önermişlerdir (Thijssen, 1999; Parr ve Yang, 1989). Bu ifadede ilk terim hiçbir etkileşme etkisinde bulunmayan parçacığın kinetik enerjisi, ikinci terim elektron – elektron arasındaki etkileşim potansiyeli ve son terim ise değiş – tokuş (exchange) ve korelasyon (correlation) enerji terimidir. Tek parçacık kinetik enerji terimi;

$$T_s[n(r)] = \sum_{i=1}^{N} \int \psi_i^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi_i \tag{4.15}$$

şeklinde ifade edilir. Sonuç olarak Kohn-Sham teoremine göre;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + V_{etkin}\psi(r) = E\psi(r) \tag{4.16}$$

olarak yazılır (Thijssen, 1999; Parr ve Yang, 1989; Kohn ve Sham, 1965). Bu ifade Kohn-Sham denklemi olarak da bilinir. Bu denklemdeki etkin potansiyel terimi,

$$V_{etkin} = V(r) + e^2 \int \frac{n(r')}{4\pi\kappa|r - r'|} d^3r' + V_{xc} \tag{4.17}$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifadedeki son terim değiş – tokuş ve korelasyon potansiyeli olarak açıklanır. Bu durumda yeni toplam enerji ifadesi;

$$E_T = \sum_{i=1}^{N} E_i - \frac{e^2}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{4\pi\kappa|r - r'|} d^3r d^3r' + E_{xc}[n(r)] - \int V_{xc}[n(r)]\, n(r) d^3r \tag{4.18}$$

olarak verilir (Thijssen, 1999; Parr ve Yang, 1989). Son denklemdeki değiş - tokuş ve korelasyon enerji ve potansiyel ifadeleri sırasıyla;

$$E_{xc}[n(r)] = E_x[n(r)] + E_c[n(r)] \tag{4.19}$$

olarak yazılabilirler (Parr ve Yang 1989). Değiş – tokuş ve korelasyon için bir çok değişik tanımlama yapılmıştır. Bu çalışmada değiş – tokuş için Wigner ve Seitz'in türettiği değiş – tokuş enerji ifadesi,

$$E_x[n(r)] = -\frac{e^2}{4\pi\kappa} \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/4} \int n(r)^{4/3} d^3\tau \tag{4.20}$$

olarak tanımlanır. Değiş – tokuş potansiyeli ise;

$$V_x[n(r)] = -\frac{e^2}{4\pi\kappa} \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/4} n(r)^{1/3} \tag{4.21}$$

şeklinde tanımlanır (Thijssen, 1999; Parr ve Yang, 1989). Benzer şekilde Korelasyon ifadeleri için 1981'de Perdew ve Zunger tarafından önerilen denklemler kullanılmıştır. Korelasyon enerjisi için;

$$E_c = \frac{e^2}{4\pi\kappa} (Alnr_s + B + Cr_s lnr_s Dr_s) \qquad r_s < 1 \tag{4.22}$$

$$E_c = \frac{e^2}{4\pi\kappa} \frac{\gamma}{1 + \beta_1\sqrt{r_s} + \beta_2 r_s} \qquad r_s \geq 1 \tag{4.23}$$

olarak verilir. Korelasyon potansiyeli ise;

$$V_c = \frac{e^2}{4\pi\kappa}\left(Alnr_s + B - \frac{A}{3} + \frac{2}{3}Cr_s lnr_s + \frac{1}{3}(2D - C)r_s\right) \qquad r_s < 1 \qquad (4.24)$$

$$V_c = E_c \frac{1 + \frac{7}{6}\beta_1\sqrt{r_s} + \frac{4}{3}\beta_2 r_s}{1 + \beta_1\sqrt{r_s} + \beta_2 r_s} \qquad r_s \geq 1 \qquad (4.25)$$

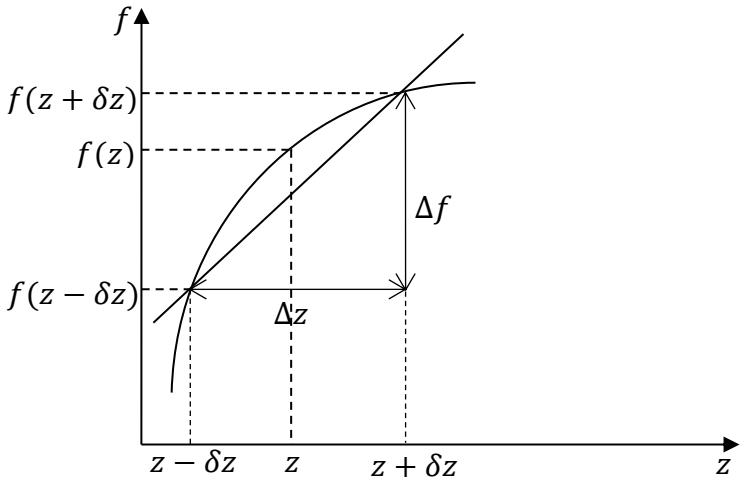
şeklinde verilir. Bu denklemlerde kullanılan parametreler; $A = 0.311$, $B = -0.048$, $C = 0.0020$, $D = -0.0116$, $\gamma = -0.1423$, $\beta_1 = 1.0529$, $\beta_2 = 0.3334$ olarak verilir. r_s ise Wigner – Seitz hücresinin yarıçapı olup

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n(r)}\right)^{1/3} \qquad (4.26)$$

ifadesiyle verilir (Parr ve Yang 1989).

4.6. Fark Denklemleri

Herhangi bir $f(z)$ fonksiyonu, Şekil 4.2'de görüldüğü gibi bir eğri olsun. Bu fonksiyona $+\delta z$ artması verilirse fonksiyonun bu noktadaki değeri $f(z + \delta z)$ olur.



Şekil 4.2. Bir fonksiyonun birinci türevi

Diğer taraftan $-\delta z$ artması verildiği zaman fonksiyonun bu noktadaki değeri $f(z - \delta z)$ olur ve $\Delta z \to 0$ giderken limit alınırsa;

$$\lim_{\Delta z \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta z} = \frac{df}{dz} \qquad (4.27)$$

ve eğer bu limit tanımlı bir değer ise bu ifade $f(z)$ fonksiyonun birinci dereceden türevi olur (Harrison, 2005). Merkezi fark denklemleriyle bu türev ifadesi,

$$\frac{df(z)}{dz} \approx \frac{\Delta f(z)}{\Delta z} = \frac{f(z+\delta z) - f(z-\delta z)}{(z+\delta z) - (z-\delta z)} \tag{4.28}$$

şeklinde yazılır. Bu ifade biraz daha düzenlenirse,

$$\frac{df(z)}{dz} \approx \frac{\Delta f(z)}{\Delta z} = \frac{f(z+\delta z) - f(z-\delta z)}{2\delta z} \tag{4.29}$$

şeklinde ifade edilebilir.

Benzer olarak birinci türev için ileri ve geri fark denklemleri sırasıyla,

$$\frac{df(z)}{dz} \approx \frac{\Delta f(z)}{\Delta z} = \frac{f(z+\delta z) - f(z)}{\delta z} \tag{4.30}$$

$$\frac{df(z)}{dz} \approx \frac{\Delta f(z)}{\Delta z} = \frac{f(z) - f(z-\delta z)}{\delta z} \tag{4.31}$$

şeklinde verilir. Merkezi fark denklemleriyle ikinci dereceden türev,

$$\frac{d^2 f}{dz^2} \approx \frac{\left.\frac{df(z)}{dz}\right|_{z+\delta z} - \left.\frac{df(z)}{dz}\right|_{z-\delta z}}{2\delta z} \tag{4.32}$$

olarak tanımlanır. Bu ifade daha açık şekilde;

$$\frac{d^2 f}{dz^2} \approx \frac{\left[\frac{f(z+2\delta z) - f(z)}{2\delta z}\right] - \left[\frac{f(z) - f(z-2\delta z)}{2\delta z}\right]}{(2\delta z)} \tag{4.33}$$

olarak yazılabilir (Harrison, 2005). Son olarak yazılan denklem biraz daha düzenlenirse

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} \approx \frac{f(z+2\delta z) - 2f(z) + f(z-2\delta z)}{(2\delta z)^2} \tag{4.34}$$

şeklinde yazılabilir. (δz), z yönündeki çok küçük bir değişimdir. Son olarak elde edilen denklemde $2\delta z$ yerine δz yazılırsa;

$$\frac{d^2f}{dz^2} \approx \frac{f(z+\delta z) - 2f(z) + f(z-\delta z)}{(\delta z)^2} \tag{4.35}$$

elde edilir (Harrison, 2005). δz adımı çok küçük bir değişimdir bu ifade yeterince iyi bir yaklaşıklık olduğundan eşitlik olarak yazılırsa;

$$\frac{d^2f}{dz^2} = \frac{f(z+\delta z) - 2f(z) + f(z-\delta z)}{(\delta z)^2} \tag{4.36}$$

ifadesi elde edilir. Yukarda tanımlanan birinci ve ikinci türev ifadeleri indisli değişkenler cinsinden yeniden tanımlanacak olursa;

$f(z) = f(i)$

$f(z+\delta z) = f(i+1)$

$f(z-\delta z) = f(i-1)$

$h = i\,\delta z$

şeklinde indisli hale getirilir. Denk. (4.29), Denk. (4.30) ve Denk (4.31) sırasıyla indisli olarak yazılacak olursa;

$$\frac{df(z)}{dz} \approx \frac{\Delta f(z)}{\Delta z} = \frac{f(i+1) - f(i-1)}{2h} \tag{4.37}$$

$$\frac{df(z)}{dz} \approx \frac{\Delta f(z)}{\Delta z} = \frac{f(i+1) - f(i)}{h} \tag{4.38}$$

$$\frac{df(z)}{dz} \approx \frac{\Delta f(z)}{\Delta z} = \frac{f(i) - f(i-1)}{h} \tag{4.39}$$

ifadeleri elde edilir. Denk. (4.36) indisli şekilde yazılırsa;

$$\frac{d^2f(z)}{dz^2} = \frac{f(i+1) - 2f(i) + f(i-1)}{(h)^2} \tag{4.40}$$

elde edilir.

4.7. Matris Köşegenleştirme Yöntemi

Matris köşegenleştirme yöntemi Schrödinger dalga denklemini çözmek amacıyla, yaygın olarak kullanılan yöntemlerden biridir. Bu yöntem kısaca Schrödinger dalga denklemini matris formunda yazmaya dayanır. Bu yöntemde Heisenberg tarafından fiziksel büyüklükleri temsil eden operatörler matrislerle ifade etmiştir. A gibi

bir operatörün beklenen değeri Heisenberg matris mekaniğinde bir matris elemanına karşılık gelmektedir (Aygün ve Zengin, 1994). Bir A operatörünün beklenen değeri;

$$\langle\psi_m|A|\psi_n\rangle = \int \psi_m{}^* A\psi_n dV \tag{4.41}$$

olarak tanımlanır. Bu ifadenin Heisenberg mekaniğindeki gösterimi;

$$A_{mn} = \langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle = \int \psi_m{}^* \hat{A}\psi_n dV \tag{4.42}$$

gibi bir matris elemanına karşılık gelmektedir. Benzer olarak bu işlem Hamiltonyen ifadesine uygulanırsa;

$$H_{mn} = \langle\psi_m|\hat{H}|\psi_n\rangle = \int \psi_m{}^* \hat{H}\psi_n dV \tag{4.43}$$

şeklinde ifade edilir. Bu denklemde m,n =1, 2, 3…N kadar değerler alabilir. Hamiltonyen operatörünün her matris elemanı, uzayı geren iki baz vektörü arasındaki beklenen değerini vermektedir. ψ_m, ψ_n fonksiyonları ortonormal olmalıdır (Levine, 2000). Yani hem normalize hem de birbirine dik olmalıdır (Aygün ve Zengin 1994; Levine 2000). Yani fiziksel büyüklükleri temsil eden bir operatörün öz-fonksiyonları bu operatörün uzayını geren ortonormal baz vektörlerini oluşturur (Aygün ve Zengin 1994). Denk. (4.43) matris formunda yazılırsa;

$$H_{mn} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \cdots & H_{2n} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & \cdots & H_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{m1} & H_{m2} & H_{m3} & \cdots & H_{mn} \end{pmatrix} \tag{4.44}$$

ifadesi şeklinde gösterilir. Daha önce her matris elemanın aslında beklenen değer ifadesine eşit olduğu Denk. (4.42)'de gösterilmişti. Bu ifadeden yola çıkılarak Denk. (4.43)'te verilen ifade kullanılarak düzenlenirse;

$$H_{mn} = \begin{pmatrix} \langle\psi_1|\hat{H}|\psi_1\rangle & \langle\psi_1|\hat{H}|\psi_2\rangle & \langle\psi_1|\hat{H}|\psi_3\rangle & \cdots & \langle\psi_1|\hat{H}|\psi_n\rangle \\ \langle\psi_2|\hat{H}|\psi_1\rangle & \langle\psi_2|\hat{H}|\psi_2\rangle & \langle\psi_2|\hat{H}|\psi_2\rangle & \cdots & \langle\psi_2|\hat{H}|\psi_n\rangle \\ \langle\psi_3|\hat{H}|\psi_1\rangle & \langle\psi_3|\hat{H}|\psi_2\rangle & \langle\psi_3|\hat{H}|\psi_3\rangle & \cdots & \langle\psi_3|\hat{H}|\psi_n\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle\psi_m|\hat{H}|\psi_1\rangle & \langle\psi_m|\hat{H}|\psi_2\rangle & \langle\psi_m|\hat{H}|\psi_3\rangle & \cdots & \langle\psi_m|\hat{H}|\psi_n\rangle \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

matrisi elde edilir. Schrödinger denklemi artık alternatif bir yöntem olan matris mekaniği ile çözülebilir.

Küresel koordinatlarda Schrödinger dalga denkleminin radyal kısmı için matris yöntemini kullanarak çözmek için, öncelikle Schrödinger dalga denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 R(r) + V(r)R(r) = ER(r) \quad (4.46)$$

şeklinde yazılır. Bu ifadede $R(r)$ radyal dalga fonksiyonu, $V(r)$ sınırlandırma potansiyelidir. Bu ifade daha açık bir şekilde yazılırsa;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}\right) + VR(r) = ER(r) \quad (4.47)$$

denklemi elde edilir. Bu ifadede dalga fonksiyonu uzayını h aralıklı aralıklara bölerek, sonlu fark denklemleriyle yeniden yazmak için, bu ifadedeki birinci ve ikinci türev ifadelerinin yerine daha önce yazılan Denk. (4.37) ve Denk. (4.40)'taki ifadeler kullanılırsa;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\frac{R_{i+1} - 2R_i + R_{i-1}}{h^2}\right) + \left(\frac{2}{r}\left(\frac{R_{i+1} - R_{i-1}}{2h}\right)\right)\right) + VR_i = ER_i \quad (4.48)$$

elde edilir. Sınırlandırma potansiyeli şimdilik $V = 0$ alınır ve ilk parantezin içerisi r ile çarpılıp bölünür, ikinci parantez içi ise h ile çarpılıp bölünürse;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{r}{r}\left(\frac{R_{i+1} - 2R_i + R_{i-1}}{h^2}\right) + \frac{h}{h}\left(\frac{R_{i+1} - R_{i-1}}{rh}\right)\right] = ER_i \quad (4.49)$$

şeklinde yazılmış olur. son denklem biraz daha düzenlenirse;

$$-\frac{\hbar^2}{2mh^2}\left[\frac{r(R_{i+1}-2R_i+R_{i-1})+h(R_{i+1}-R_{i-1})}{r}\right]=ER_i \tag{4.50}$$

olarak yazılabilir. Aynı ifadeler ortak paranteze alınırsa;

$$-\frac{\hbar^2}{2mh^2}\left[\frac{(r+h)}{r}R_{i+1}+\frac{(r-h)}{r}R_{i-1}-2R_i\right]=ER_i \tag{4.51}$$

şeklinde yazılmış olur. $i=2$ için R_1 ve $i=N$ için R_{N+1}'in katsayıları 0 alınırsa;

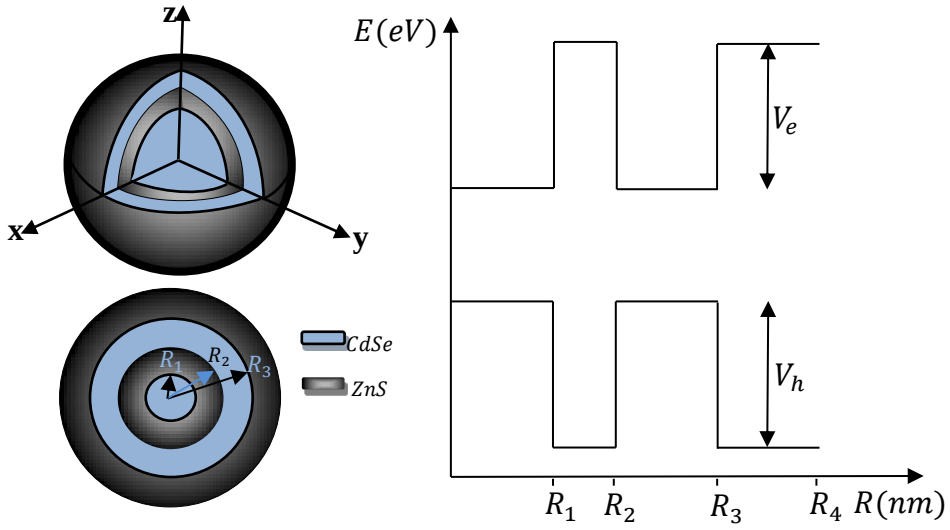
$$-\frac{\hbar^2}{2mh^2}\begin{pmatrix} -2 & \frac{(r+h)}{r} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{(r-h)}{r} & -2 & \frac{(r+h)}{r} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{(r-h)}{r} & -2 & \frac{(r+h)}{r} & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{(r-h)}{r} & -2 & \frac{(r+h)}{r} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} R_2 \\ R_3 \\ R_4 \\ \vdots \\ R_N \end{pmatrix}=E\begin{pmatrix} R_2 \\ R_3 \\ R_4 \\ \vdots \\ R_N \end{pmatrix} \tag{4.52}$$

özdeğer denkleminin matris formu elde edilir. Bu matrisin özdeğerleri bize göz önüne alınan kuantum sisteminin enerji değerlerini, özfonksiyonları ise bu enerji değerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarını veriri. Böylece göz önüne alınan kuantum sistemi tamamen sayısal olarak çözülmüş olur.

5. BULGULAR ve TARTIŞMA

5.1. Giriş

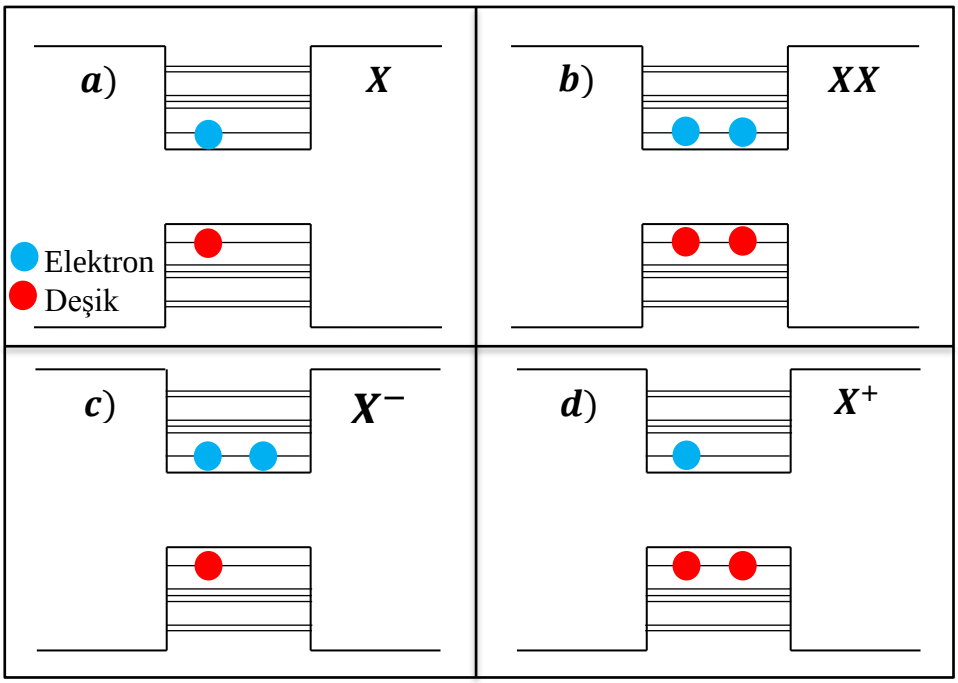
Bu çalışmada göz önüne aldığımız kuantum noktası, Şekil 5.1'in sol panelinde görüldüğü gibi eş merkezli kürelerden oluşan çok tabakalı bir yapıdır. En içteki R_1 yarıçaplı çekirdek bölgesinin üzeri, daha büyük band aralıklı bir yarıiletken malzeme ile kaplanmış olup, kalınlığı $T_s = R_2 - R_1$'dir. Elde edilen bu yapı yeniden daha küçük band aralıklı ve $T_w = R_3 - R_2$ kalınlıklı malzeme ile kaplanarak kuyu bölgesi oluşturulur. Tüm yapı, son olarak kuyu bölgesindeki sınırlandırmanın sağlanabilmesi için yüksek band aralıklı malzeme içerisine gömülür. Bu şekilde elde edilen çok tabakalı yapının potansiyel profili Şekil 5.1'in sağ panelinde görülmektedir. Burada, çekirdek ve kuyu bölgesi malzemeleri için $CdSe$, bariyer malzemeleri için ZnS'in parametreleri kullanılmıştır.



Şekil 5.1. CdSe/ZnS/CdSe/ZnS çekirdek/kabuk çok tabakalı küresel kuantum noktasının şematik gösterimi ve potansiyel profili

5.2.Tekli, İkili ve Yüklü Ekzitonlar

Bu kısımda tekli, ikili ve yüklü ekzitonların, oluşumları, parçacıklar arası etkleşimleri ve ayrıca bu yapıların elektronik elektronik ve optik özelliklerinin belirlenmesi için yapılan yaklaşım ve sayısal çözümler anlatılacaktır Bu tezde, incelenen ekzitonik yapılar Şekil 5.2'de verilmiştir.



Şekil 5.2. a) tekli ekziton, b) ikili ekziton c) negatif yüklü ve d)pozitif yüklü ekiztonun şematik gösterimi

5.2.1. Tekli ekziton (Exciton)

Bir elektron ve bir deşiğin aralarında çekici bir Coulomb etkileşmesiyle bağlı olduğu, elektron ve deşiğin bu çekici bağ sayesinde beraber hareketi sonucu oluşan yapı literatürde ekziton olarak tanımlanır ve X ile gösterilir. Şekil 5.2.'de sol üstte ekziton yapısı gösterilmiştir. Küresel bir kuantum nokta içerisindeki tekli ekizton sistemi için radyal Schrödinger dalga denklemi Denk. 5.1'de verilmiştir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}_e\left(\frac{1}{m_e^*(r_e)}\vec{\nabla}_e\right)-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}_h\left(\frac{1}{m_h^*(r_h)}\vec{\nabla}_h\right)-\frac{e^2}{\kappa|\vec{r}_e-\vec{r}_h|}+V_e(r_e)+V_h(r_h)\right]\psi_{n,l,m}(\vec{r}_e,\vec{r}_h)=$$
$$\varepsilon_{n,l,m}\psi_{n,l,m}(\vec{r}_e,\vec{r}_h) \qquad (5.1)$$

olarak yazılır. Bu denklemde ilk iki terim sırasıyla sistemdeki elektron ve deşik için kinetik enerji terimlerini, üçüncü terim ise elektron – deşik arasındaki çekici Coulomb potansiyelini temsil eder. $V_e(r_e)$ ve $V_h(r_h)$ sırasıyla elektron ve deşik için sınırlandırıcı potansiyellerini temsil etmektedir. Ekziton sisteminin dalga fonksiyonu $\psi_{n,l,m}(\vec{r}_e,\vec{r}_h)$ ile enerji seviyeleri ise $\varepsilon_{n,l,m}$ ile temsil edilir.

Ancak bu ifadeyi analitik olarak çözmek imkansız olmakla beraber direkt nümerik olarak çözmek de kolay değildir. Bu nedenle bu ifadenin çözümü için Hartree

yaklaşımı kullanılarak, elektronun, deşiğin oluşturmuş olduğu ortalama bir potansiyel etkisinde hareket ettiği, deşiğin ise ortamdaki elektronun oluşturduğu ortalama bir potansiyelde hareket ettiği düşüncesinden yola çıkarak radyal Schrödinger denklemi elektron ve deşik için sırasıyla,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}_r\left(\frac{1}{m_e^*(r)}\vec{\nabla}_r\right)+V_e(r)-q_e\Phi_h(r)\right]R_{n,l}^e(r)=\varepsilon_{n,l}^e R_{n,l}^e(r) \tag{5.2}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}_r\left(\frac{1}{m_h^*(r)}\vec{\nabla}_r\right)+V_h(r)-q_h\Phi_e(r)\right]R_{n,l}^h(r)=\varepsilon_{n,l}^h R_{n,l}^h(r) \tag{5.3}$$

olarak yazılır (Sahin ve ark. 2012). $\Phi_h(r)$ deşiğin oluşturduğu, $\Phi_e(r)$ ise elektronun oluşturduğu Hartree potansiyelidir. $R_{n,l}^e(r)$ elektron için, $R_{n,l}^h(r)$ ise deşiğin radyal dalga fonksiyonlarını temsil eder. $\varepsilon_{n,l}^e$ elektronun sahip olduğu, $\varepsilon_{n,l}^h$ ise deşiğin sahip olduğu enerjiyi göstermektedir (Şahin ve ark. 2012). Son olarak verilen bu iki denklemde, q_e ve q_h sırasıyla elektron ve deşiğin elektriksel yükleridir. Çok tabakalı kuantum nokta yapı için Schrödinger denklemi çözülürken kuantum mekaniksel süreklilik şartının sağlanması için BenDaniel-Duke sınır şartı uygulanmıştır (Luo ve ark. 2009; Peleshchak ve Bachynsky 2009). Şekil 5.1'deki göz önüne alınan potansiyel profiline göre, Denk. (5.2) ve Denk. (5.3) ile verilen ifadeler için BenDaniel-Duke sınır şartları

$$\frac{1}{m_{e,h}^{(CdSe)}}\frac{\mathrm{d}R_{n,l}^{e,h}(r)}{\mathrm{dr}}\bigg|_{r=R_1,R_3}=\frac{1}{m_{e,h}^{(ZnS)}}\frac{\mathrm{d}R_{n,l}^{e,h}(r)}{\mathrm{dr}}\bigg|_{r=R_1,R_3} \tag{5.4}$$

$$\frac{1}{m_{e,h}^{(ZnS)}}\frac{\mathrm{d}R_{n,l}^{e,h}(r)}{\mathrm{dr}}\bigg|_{r=R_2}=\frac{1}{m_{e,h}^{(CdSe)}}\frac{\mathrm{d}R_{n,l}^{e,h}(r)}{\mathrm{dr}}\bigg|_{r=R_2} \tag{5.5}$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu ifadelerde $m_{e,h}^{(CdSe)}$ ve $m_{e,h}^{(ZnS)}$ sırasıyla elektron ve deşiğin $CdSe$ ve ZnS materyalleri içerisindeki etkin kütleleridir. Tekli ekziton sistemi için Poisson denklemi çözülmesi sonucunda elektron ve deşik için Hartree potansiyelleri belirlenir. Elektron ve deşikler için sırasıyla Poisson denklemi, ara yüzey polarizasyonlarını da içerecek şekilde;

$$\nabla\kappa(\mathrm{r})\nabla\Phi_e=-\mathrm{q_e}\rho_\mathrm{e}(\mathrm{r}) \tag{5.6}$$

$$\nabla\kappa(\mathrm{r})\nabla\Phi_h = -\mathrm{q_h}\rho_\mathrm{h}(\mathrm{r}) \tag{5.7}$$

olarak verilir (Sahin ve ark. 2012). Bu iki denklemde $\kappa(\mathrm{r})$ olarak verilen elektron ve deşiğin içinde hareket ettiği malzemenin dielekrik geçirgenliğidir. $\rho_\mathrm{e}(\mathrm{r})$ ve $\rho_\mathrm{h}(\mathrm{r})$ sırasıyla elektron ve deşik yoğunluklarıdır. Elektron ve deşik için Denk. (5.2) ve Denk. (5.3)'ün çözülmesi sonucunda bulunan radyal dalga fonksiyonları kullanılarak yoğunluklar elde edilir. Elektron ve deşik için yoğunluklar sırasıyla

$$\rho_\mathrm{e}(\mathrm{r}) = \frac{1}{4\pi}\sum_{l=0}^{p} 2(2l+1)\sum_{n=1}^{np}\left|R^{e}_{n,l}(r)\right|^2 + \frac{1}{4\pi}\mathrm{q}\left|R^{e}_{nq,lq}(r)\right|^2 \tag{5.8}$$

$$\rho_\mathrm{h}(\mathrm{r}) = \frac{1}{4\pi}\sum_{l=0}^{p} 2(2l+1)\sum_{n=1}^{np}\left|R^{h}_{n,l}(r)\right|^2 + \frac{1}{4\pi}\mathrm{q}\left|R^{h}_{nq,lq}(r)\right|^2 \tag{5.9}$$

olarak verilir (Sahin ve ark. 2009). Bu ifadelerde $2(2l+1)$ spin ve manyetik dejenerelikleri, p ve np sırasıyla, tam dolu kabukların açısal momentum kuantum sayısı ve baş kuantum sayısıdır. q son durumda kalan elektron veya deşik sayısı, nq ve q ise son durumdaki açısal momentum kuantum sayılarıdır. Tek ekziton durumunda bu yoğunluk ifadesi sadece son terimden ibaret olup elektron ve deşik için,

$$\rho_\mathrm{e}(\mathrm{r}) = \frac{1}{4\pi}\left|R^{e}_{1,0}(r)\right|^2 \tag{5.10}$$

$$\rho_\mathrm{h}(\mathrm{r}) = \frac{1}{4\pi}\left|R^{h}_{1,0}(r)\right|^2 \tag{5.11}$$

şeklini alır.

Şekil 5.2 gösterilen tekli ekziton sistemi incelendiğinde elektron, sadece sınırlandırıcı potansiyel $V_e(r)$ ve deşiğin oluşturduğu $-q_e\Phi_h(r)$ potansiyelinin etkisindedir. Benzer şekilde deşik ise sınırlandırıcı $V_h(r)$ ve elektronun oluşturduğu $-q_h\Phi_e(r)$ potansiyellerinin etkisinde hareket eder. Ekzitonlarla ilgili çalışmalar incelendiğinde elektron – deşik arasında çok küçükte olsa bir değiş – tokuş etkisi söz konusudur (Mlinar ve Zunger 2009; Bester ve ark. 2003; Brovelli ve ark., 2011). II – VI yarıiletkenlerinde elektron – deşik arasındaki değiş – tokuş enerjisi çok küçük bir değer olduğu için yapılan hesaplamalarda ihmal edilmiştir. Bu çalışmada da kullanılan CdSe yapısı için elektron deşik arasındaki değiş – tokuş enerjisi yaklaşık olarak 0.13 meV değerindedir (Brovelli ve ark., 2011; Chamarro ve ark., 1996). Bu nedenle yaptığımız

hesaplamalarda bu enerjiyi ihmal ettik. Tek Ekziton sisteminin elektronik ve optik özelliklerini belirlemek için Denk. (5.2), (5.3) ve Denk. (5.6), (5.7) denklemleri öz-uyumlu (self-consistent) bir şekilde çözülür. Şekil 5.3'te bu öz-uyumlu çözümde takip edilen ana basamaklar, bir akış diyagramı üzerinde gösterilmiştir. Başlangıç basamağında, herhangi bir etkileşme olmaksızın birbirinden izole edilmiş bir elektron ve deşiğin Schrödinger denklemi ayrı ayrı çözülür. Böylece sadece sınırlandırıcı potansiyel içinde hareket eden bir elektron ve deşiğin enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları belirlenmiş olur. Başlangıç dalga fonksiyonları, Denk. (5.10) ve Denk. (5.11)'de kullanılarak elektron ve deşik için olasılık yoğunluk dağılımları belirlenir. Öz-uyumlu döngünün birinci adımında, bu olasılık yoğunluklarıyla Denk. (5.6) ve (5.7)'de verilen Poisson denklemleri çözülerek elektrostatik Hartree potansiyelleri belirlenir. İkinci adımda ise birinci adımda belirlenen bu potansiyeller, Schrödinger denklemlerinde yerine konarak, denklemler çözülür ve yeni enerji değerleri ve dalga fonksiyonları belirlenir. Artık bu yeni enerji değerleri ve dalga fonksiyonları, elektron – deşik arasındaki çekici Coulomb potansiyelin etkilerini de içermektedir. Üçüncü adımda yakınsaklık kontrolü yapılır. Yeterli yakınsama sağlanırsa iterasyon orda kesilir. Eğer yeterli yakınsama sağlanmamışsa, en son elde edilen dalga fonksiyonları kullanılarak yeni yük yoğunlukları belirlenir ve birinci adıma geri dönülür. Bu döngü, yeterli yakınsama sağlanıncaya kadar devam ettirilir. Yakınsama sağlandıktan sonra döngüden çıkılarak elektronik ve optik özellikler belirlenir.

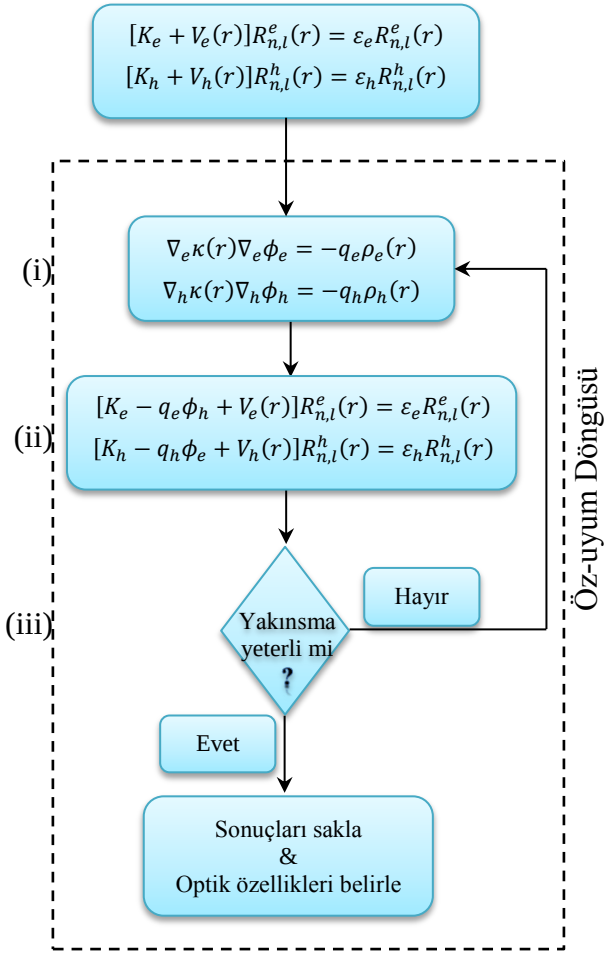
Schrödinger denklemlerinin çözümü, tamamen sayısal olarak matris köşegenleştirme tekniği kullanılarak yapılmıştır. Bunun için öncelikle incelenen yapı gerçek uzayda ve radyal doğrultuda h aralıklarla N parçaya bölünmüştür. Bundan sonraki aşamada, Schrödinger denklemleri, sonlu fark denklemleri kullanılarak N tane denklem takımı elde edilmiştir. Bu denklem sisteminin katsayılar matrisi oluşturulmuş ve böylece

$$H\psi = E\psi \tag{5.12}$$

özdeğer denklemi matris formuna getirilmiş olur. Bu matrisin özdeğer ve özvektörlerinin belirlenmesi için ALGLIB kütüphanesi kullanılmıştır. Burada şunu belirtmek gerekir ki; çekirdek/kabuk sınırında etkin kütle uyuşmazlığı göz önüne alınmış ve BenDaniel-Duke sınır şartı sağlanmıştır.

Elektrostatik potansiyellerin belirlenmesinde de benzer bir yol takip edilerek Poisson denklemleri yine gerçek uzayda ve radyal doğrultuda kesikli hale getirilmiş ve yine bir katsayılar matrisi oluşturulmuştur. Poisson denklemi bir sınır değer problemi olduğu için ve iki uçta potansiyelin değerleri bilindiği için, elde edilen bu üçlü köşegen (tridiagonal) matris, Gauss yok etme yöntemiyle çözülerek potansiyel profili belirlenmiştir. Burada da, çekirdek/kabuk sınırındaki dielektrik katsayı uyuşmazlığı dikkate alınmış ve hesaplamalar içerisine dahil edilmiştir. Böylece görüntü yüklerin oluşturdukları potansiyeller de göz önüne alınmıştır.

İkinci adımda birinci adım sonucunda elde edilen dalga fonksiyonları kullanılarak yoğunluklar elde edilir. Elektron ve deşik için elektrostatik potansiyellerin belirlenmesi amacıyla, ikici adımda elde edilen yoğunluklar kullanılarak, Poisson denklemi çözülür. Üçüncü adımda ise ikinci adımda belirlenen çekici Coulomb potansiyelleri Schrodinger dalga deklemine yazılır. Sonuç olarak ekziton sistemindeki bütün etkileşmelerin dahil edildiği denklem çözülür.



Şekil 5.3. Tekli ekziton sisteminin elektronik ve optik özelliklerinin belirlenmesi için izlenilen çözüm şeması

Tekli ekziton için toplam enerji (Geçiş enerjisi) ifadesi;

$$E_{tot}^{X} = E_g + \varepsilon^e + \varepsilon^h - \varepsilon^{e-h} \tag{5.13}$$

olarak verilir (Şahin ve ark., 2012; Sattler 2011). Bu denklemde E_g elektron ve deşiğin hapis olduğu malzemenin yasak enerji aralığıdır. ε^e, ε^h sırasıyla elektron ve deşik için Denk.(5.2) ve Denk(5.3)'ün öz-uyumlu bir şekilde çözülmesi sonucunda bulunan enerji değerleridir. ε^{e-h} ise elektron – deşik arasındaki çekici Coulomb enerjisidir. Yapılan öz-uyumlu çözüm sonucunda elektron ve deşik için hesaplanan enerjilerin içerisinde çekici Coulomb terimi iki kez hesaplanmıştır. Bu nedenle toplam enerjinin doğru hesaplanması için bir Coulomb terimi düşülmelidir. Ekziton sistemi için çekici Coulomb enerjisi,

$$\varepsilon^{e-h} = -\frac{\left(\varepsilon_0^e - \varepsilon^e + \varepsilon_0^h - \varepsilon^h\right)}{2} \tag{5.14}$$

olarak verilir (Sahin ve ark. 2009). Bu ifadede ε_0^e ve ε_0^h sırasıyla, öz-uyumlu döngüye girmeden önce başlangıç basamağında herhangi bir Coulomb etkileşmesi olmaksızın hesaplanan, elektron ve deşiğin enerji değerleridir. Ekziton bağlanma enerjisi,

$$E_b\,(X) = \varepsilon_0^e + \varepsilon_0^h - E_{tot}^{X} \tag{5.15}$$

olarak tanımlanır (Tsuchiya 2000). Bağlanma enerjisi II – VI yarıiletkneleri için yaklaşık olarak $10 - 200\ meV$ arasında değişmektedir (Shumway ve ark. 2001; Bawendi ve ark. 1990, Fafard ve ark. 1995).

5.2.2. İkili ekziton (Biexciton)

İkili ekziton sistemi, Şekil 5.2.(b)'de gösterilmiştir. Bu yapı XX ile gösterilir. Bu sistemi temsil eden, radyal Schrödinger denklemi açık bir formda Takagahara'nın (1989) yaptığı çalışmada aşağıdaki gibi verilmiştir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\left(\nabla_{e_1}^2+\nabla_{e_2}^2\right)-\frac{\hbar^2}{2m_h^*}\left(\nabla_{h_1}^2+\nabla_{h_2}^2\right)+\frac{e^2}{\kappa\left|\vec{r}_{e_1}-\vec{r}_{e_2}\right|}+\frac{e^2}{\kappa\left|\vec{r}_{h_1}-\vec{r}_{h_2}\right|}-\frac{e^2}{\kappa\left|\vec{r}_{e_1}-\vec{r}_{h_1}\right|}\right.$$
$$\left.-\frac{e^2}{\kappa\left|\vec{r}_{e_1}-\vec{r}_{h_2}\right|}-\frac{e^2}{\kappa\left|\vec{r}_{e_2}-\vec{r}_{h_1}\right|}-\frac{e^2}{\kappa\left|\vec{r}_{e_2}-\vec{r}_{h_2}\right|}\right]\psi_{n,l,m}\left(\vec{r}_{e_1},\vec{r}_{e_2},\vec{r}_{h_1},\vec{r}_{h_2}\right)$$
$$=\varepsilon_{n,l,m}\psi_{n,l,m}\left(\vec{r}_{e_1},\vec{r}_{e_2},\vec{r}_{h_1},\vec{r}_{h_2}\right) \quad (5.16)$$

Bu denklemde, sistemdeki iki elektron ve iki deşik için dört kinetik enerji terimi vardır. İkili ekziton yapısında elektron – deşik arasındaki dört çekici etkileşmenin yanı sıra, elektron – elektron ve deşik – deşik arasındaki itici etkileşme terimleri de denklemde yer almaktadır. Ancak bu ifadeyi analitik olarak çözmek mümkün değildir. Bu denklemi nümerik olarak da çözmek kolay değildir. Bu nedenle Hartree yaklaşımı yapılarak bu Schrödinger denklemini elektron ve deşikler için tek parçacık denklemleri olarak sırasıyla;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}_r\left(\frac{1}{m_e^*(r)}\vec{\nabla}_r\right)+V_{etkin}^e(r)\right]R_{n,l}^e(r)=\varepsilon_{n,l}^e R_{n,l}^e(r) \quad (5.17)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}_r\left(\frac{1}{m_h^*(r)}\vec{\nabla}_r\right)+V_{etkin}^h(r)\right]R_{n,l}^h(r)=\varepsilon_{n,l}^h R_{n,l}^h(r) \quad (5.18)$$

olarak verilir. Bu ifadelerde ilk terim sırasıyla elektron ve deşikler için kinetik enerji terimidir. Son olarak yazılan $V_{etkin}^e(r)$ ve $V_{etkin}^h(r)$ sırasıyla elektron ve deşiğin içinde bulunduğu etkin potansiyelleridir. Bu potansiyellerin açık hali,

$$V_{etkin}^e(r)=-q_e\Phi_h(r)+q_e\Phi_e(r)+V_e(r)+V_{xc}^{e-e}[\rho_e(r)] \quad (5.19)$$

$$V_{etkin}^h(r)=-q_h\Phi_e(r)+q_h\Phi_h(r)+V_h(r)+V_{xc}^{h-h}[\rho_h(r)] \quad (5.20)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu ifadelerde $q_e\Phi_h(r)$ ifadesi deşiklerin elektron üzerinde oluşturduğu çekici Coulomb potansiyel enerjisi, $q_h\Phi_e(r)$ ise elektronların deşik üzerinde oluşturdukları çekici Coulomb potansiyel enerjisidir. $q_e\Phi_e(r)$ ve $q_h\Phi_h(r)$ ifadeleri sırsıyla elektron–elektron ve deşik–deşik arasındaki itici Coulomb potansiyel enerjileridir. $V_e(r)$ ve $V_h(r)$ sırasıyla elektron ve deşikler için sınırlandırma potansiyelleridir. Hartree yaklaşımı çok parçacık etkilerini ihmal eder bu nedenle bu eksikliğin giderilmesi ve gerçekçi çözüm için değiş–tokuş ve korelasyon (exchange – correlation) etkilerini içeren $V_{xc}^{e-e}[\rho(r)]$ ve $V_{xc}^{h-h}[\rho(r)]$ potansiyelleri, Denk. (5.17) ve

Denk. (5.18)'e son potansiyel terimi olarak dahil edilmiştir (Perdew ve Zunger 1981). İkili ekziton sistemi için de tıpkı tekli ekziton yapısındaki gibi elektronlar ile deşikler arasında bir değiş – tokuş enerjisi söz konusudur. Ancak elektron – deşik arasındaki bu değiş – tokuş enerjisi, elektron – elektron veya deşik – deşik arasındaki değiş – tokuş enerjisi ile karşılaştırıldığında çok küçük bir değere sahiptir (Mlinar ve Zunger, 2009; Bayer ve ark., 2000; Hawrylak, 2001). İkili ekziton sisteminin temel fiziksel özelliklerini belirlemek için Şekil 5.4'te görüldüğü gibi iki döngülü bir süreç izlendi. Bu sürecin başlangıç basamağında, tek ekziton hesaplamasında olduğu gibi, parçacıklar arası herhangi bir etkileşmenin olmadığı durumdaki tek parçacık elektron ve deşik enerjileri hesaplanmaktadır. Başlangıç adımı sonunda herhangi bir Coulomb etkileşmesini içermeyen toplam enerjiler,

$$E_0^e = 2\varepsilon_0^e \tag{5.21}$$

$$E_0^h = 2\varepsilon_0^h \tag{5.22}$$

denklemlerinden hesaplanır. Bu ifadelerdeki indis 0 rakamı, başlangıç adımını temsil etmektedir.

Birinci öz-uyumlu döngüde sadece çekici coulomb etkileşmesinin göz önüne alındığı bir hesaplama gerçekleştirilmektedir. Yani, Denk. (5.17) ve (5.18)'deki itici coulomb etkileri ile değiş – tokuş ve korelasyon etkileri göz ardı edilmiştir. Bu çevrimde yakınsama sağlandıktan sonra toplam enerjiler,

$$E_1^e = 2\varepsilon_1^e \tag{5.23}$$

$$E_1^h = 2\varepsilon_1^h \tag{5.24}$$

ifadelerinden belirlenir.

Çift ekziton yapısındaki elektronlar ile deşikler arasındaki net çekici Coulomb enerjisi, Denk. (5.21), (5.22), (5.23) ve (5.24) yardımıyla,

$$E^{e-h} = -\frac{(\varepsilon_e^0 - \varepsilon_e + \varepsilon_h^0 - \varepsilon_h)}{2} \tag{5.25}$$

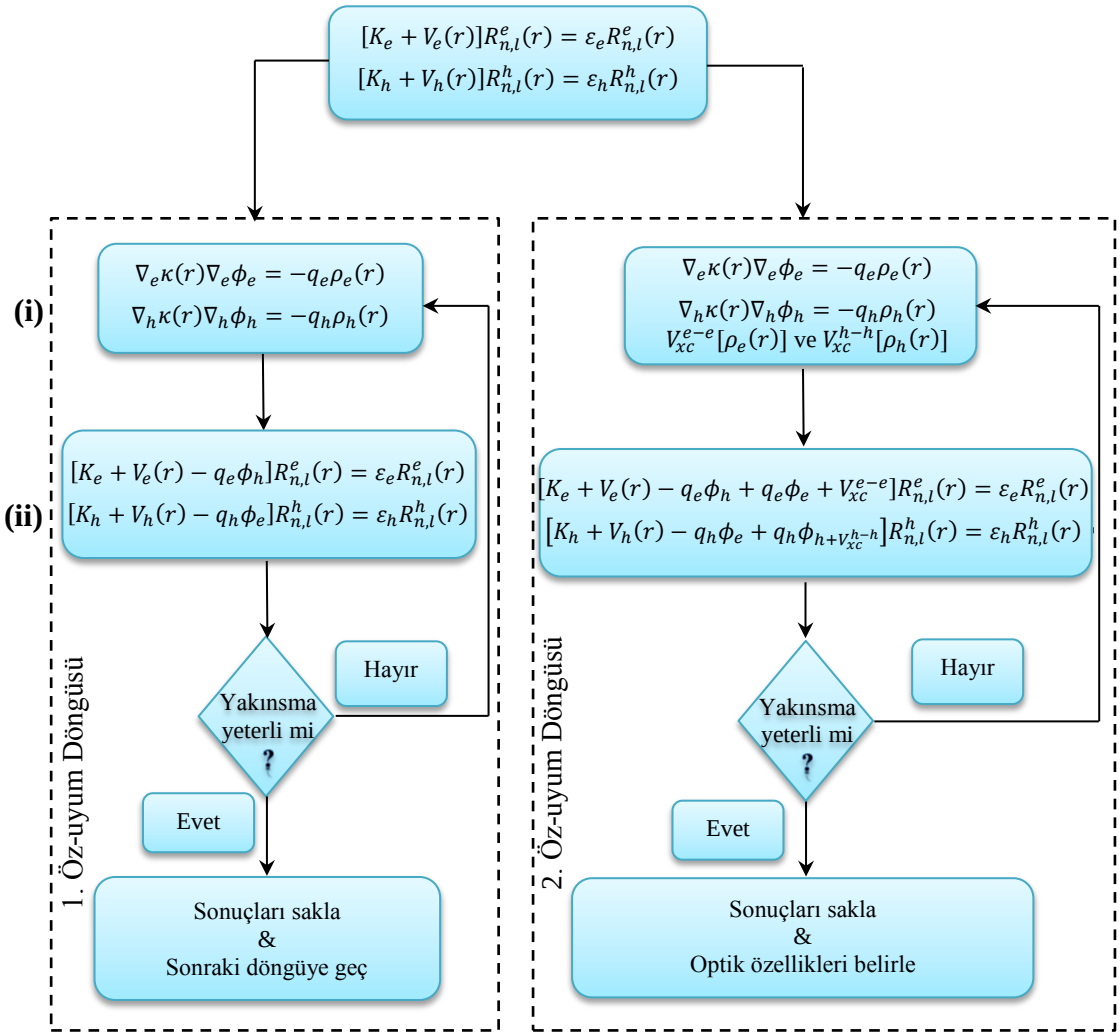
ifadesinden hesaplanır.

İkinci öz-uyumlu hesaplama döngüsünde ilkinden farklı olarak, itici coulomb ile değiş – tokuş ve korelasyon enerjileri de öz-uyumlu hesaba katılır. Yakınsama sağlandıktan sonra yeni toplam enerjiler

$$E_2^e = 2\varepsilon_2^e \tag{5.26}$$

$$E_2^h = 2\varepsilon_2^h \tag{5.27}$$

ifadelerinden hesaplanır. Son olarak yakınsama kontrolü yapılır. Eğer yakınsama yeterli ise işlem sonlandırılır. Yakınsma yeterli değilse, ikinci adıma dönülerek yeteri yakınsama sağlanıncaya kadar iterasyona devam edilir.



Şekil 5.4. Tip-I kuantum noktasındaki ikili ekziton için Poisson-Schrödinger denklemlerinin öz-uyumlu çözülmesinde takip edilen ana basamaklar.

İkili ekizton yapısının nihai toplam enerjisi

$$E_{tot}^{XX} = 2E_g + E_2^e + E_2^h - E^{e-h} + \frac{q_e}{2}\int \Phi_e \rho_e(r) d^3r + \frac{q_e}{2}\int \Phi_h \rho_h(r) d^3r + E_{xc}^{e-e}[\rho_e(r)] + E_{xc}^{h-h}[\rho_h(r)] - \int \rho_e(r) V_{xc}^{e-e} d^3r - \int \rho_h(r) V_{xc}^{h-h} d^3r \quad (5.28)$$

ifadesinden hesaplanır.

İkili ekziton sistemi için bağlanma enerji ifadesi,

$$E_b(X) = 2E_{tot}^X - E_{tot}^{XX} \quad (5.29)$$

olarak verilir (Shumway ve ark. 2001; Osovsky ve ark. 2009). İkili ekziton bağlanma enerjisinin pozitif olması iki tekli ekziton arasındaki çekici Coulomb potansiyelinin, itici Coulomb potansiyelinden daha baskın olma durumuna karşılık gelir. Ancak ekzitonun bağlanma enerjisi daima bağlı olmasına rağmen, İkili ekzitonda ise elektron – elektron ve deşik – deşik arasındaki iki itici etkiye karşılık elektron – deşik arasında bulunan dört tane karmaşık çekici etkileşme sebebiyle İkili ekziton bağlanma enerjisi kuantum nokta boyutu, sınırlandırma potansiyeli gibi faktörlere bağlı olarak ikili ekziton sistemi bağlı ya da bağlı olmayan durumlar gözlenebilir (Rodt ve ark. 2003). Standart pertürbasyon yaklaşımı ile yapılan ikili ekzitonların çözümlerinde ekziton – ekziton arasındaki iticilik elde edilememekte ve küçük yarıçaplarda da ikili ekziton yapısı bağlanmaktadır (Banyai 1989). Bu nedenle ikili ekziton yapısının bağlanma enerjisi için daha doğru sonuçlar elde etmek amacıyla karmaşık ve zor olan daha yüksek mertebeden pertürbasyon terimleri gereklidir (Brovelli ve ark. 2011, Bryant 1990). Bu çalışmada kullanılan yöntemle hesaplanan sonuçlar, literatürdeki çalışmalarla karşılaştırıldığında tekli ve ikili ekzion sonuçlarının uyumlu olduğu görülmüştür (Abbarchi ve ark. 2010; Sahin ve ark. 2009; Shumway ve ark. 2001; Tsuchiya 2000). Böylece yüksek mertebe pertürbasyon yaklaşımı uygulamaya gerek kalmadan ikili ekziton yapıları için daha kolay ve doğru sonuçlar elde edilmiştir. ikili ekziton için geçiş enerjisi;

$$E(XX) = E_{tot}^{XX} - E_{tot}^X \quad (5.30)$$

olarak ifade edilir.

5.2.3 Yüklü ekzitonlar (Trions)

Şekil 5.4(c)'de gösterilen, iki elektron ve bir deşikten oluşan sistem negatif yüklü ekziton veya negatif trion olarak adlandırılır ve X^- ile gösterilir. Şekil 5.4(d)'de verilen yapı ise iki deşik bir elektrondan meydana gelen pozitif yüklü ekziton (pozitif trion)'dur ve X^+ ile temsil edilir. Trionların Schrödinger denklemi, tekli ekziton Schrödinger denklemine benzer olup, negatif trion için, Denk. (5.2)'ye elektronlar arası itici Coulomb potansiyeli ve elektronlar arasındaki V_{xc}^{e-e} değiş – tokuş ve korelasyon potansiyel terimleri, ilave edilir. Pozitif trion için ise, Denk.(5.3)'e deşikler arasındaki itici Coulomb potansiyeli ve deşikler arasındaki V_{xc}^{h-h} değiş – tokuş ve korelasyon potansiyel terimleri ilave edilerek Şekil 5.4'te gösterilen çözüm şemasına benzer bir yol izlenir. Çözüm şemaları arasındaki fark, negatif trion yapısındaki deşik için Denk. (5.18)'deki tek bir parçacık olması dolayısıyla, itici Coulomb terimi ve değiş – tokuş korelasyon potansiyelleri düşer. Bu yapıdaki elektronlar için ise Denk. (5.17)'deki denklem geçerlidir. Benzer biçimde pozitif yüklü ekiztondaki, elektron için Denk. (5.17)'deki itici potansiyel terimi, değiş – tokuş ve korelasyon potansiyel terimleri düşer. Denk. (5.18) de bu yapıdaki deşikler için geçerlidir.

Sonuç olarak Negatif ve pozitif trionlar için toplam enerji ifadeleri sırasıyla,

$$E_{tot}^{X^-} = E_g + E_2^e + \varepsilon_2^h - E_{X^-}^{e-h} + \frac{q_e}{2}\int \Phi_e \rho_e(r) d^3r + E_{xc}^{e-e}[\rho_e(r)] - \int \rho_e(r) V_{xc}^{e-e} d^3r \tag{5.31}$$

$$E_{tot}^{X^+} = E_g + E_2^h + \varepsilon_2^e - E_{X^+}^{e-h} + \frac{q_h}{2}\int \Phi_h \rho_h(r) d^3r + E_{xc}^{h-h}[\rho_h(r)] - \int \rho_h(r) V_{xc}^{h-h} d^3r \tag{5.32}$$

olarak verilirler. Bu ifadelerde ilk terim yasak enerji aralığı, ikinci ve üçüncü terimler trion sistemlerindeki elektron ve deşiklerin sahip olduğu enerjilerdir. Dördüncü terimler ise elektron – deşik arasındaki çekici etkileşmelerdir. Trionlar için toplam çekici Coulomb enerjisi, ikili ekziton yapısı için yapılan hesaplamaya benzerdir. Bu sistemler için öncelikle sadece çekici etkileşmelerin olduğu durumda enerji değerleri hesaplanır. Bu enerjiler ile Şekil 5.4'te, ilk döngüde belirlenen enerji değerleri arasındaki fark toplam çekici Coulomb enerjilerini vermektedir.

Negatif ve pozitif ekzitonlardaki elektron ve deşik arasındaki çekici coulomb enerjileri,

$$E_{X^-}^{e-h} = -\frac{(E_e^0 - E_e^1 + \varepsilon_h^0 - \varepsilon_h^1)}{2} \tag{5.33}$$

$$E_{X^-}^{e-h} = -\frac{(\varepsilon_e^0 - \varepsilon_e^1 + E_h^0 - E_h^1)}{2} \tag{5.34}$$

ifadeleriyle belirlenir. Bu iki yapı için bağlanma enerjileri ifadeleri,

$$E_b(X^-) = E_{tot}^X + \varepsilon_e^0 - E_{tot}^{X^-} \tag{5.35}$$

$$E_b(X^+) = E_{tot}^X + \varepsilon_h^0 - E_{tot}^{X^+} \tag{5.36}$$

şeklinde tanımlanırlar (Tsuchiya 2000).

5.3. Çok Tabakalı Bir Kuantum Noktasındaki Tekli, İkili ve Yüklü Ekzitonların Elektronik ve Optik Özellikleri

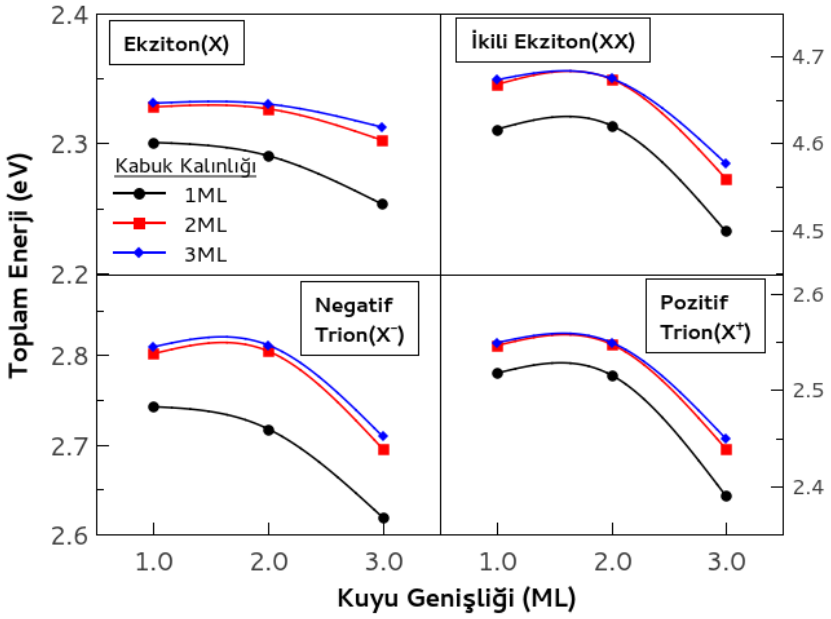
Bu çalışmada çekirdek yarıçapı $R_1 = 1.7$ nm olan ve Şekil 5.1'in sağ panelinde gösterilen potansiyel profiline sahip çok tabakalı CdSe/ZnS/CdSe/ZnS kauantum noktası içerisindeki X, XX, X^- ve X^+ yapılarına ait elektronik ve optik özellikleri, engel ve kuyu genişliklerine bağlı olarak incelenmiştir. Bu yapıların, analizi için bölüm 5.2'de anlatılan çözüm şemaları kullanılarak, sistemleri temsil eden Schrödinger dalga denklemleri çözülmüştür.

Tabaka kalınlıkları monolayer (ML) cinsinden tanımlanmıştır. CdSe için 1 monolayer kalınlık yaklaşık olarak 0.56 nm, ZnS için ise 0.50 nm olarak alınmıştır (Sahin ve ark. 2012). Yapılan hesaplamalarda atomik birimler kullanılmış olup, indirgenmiş Plank sabiti $\hbar = 1$, serbest elektronun kütlesi $m_0 = 1$ birim yük $e = 1$ olarak alınmıştır.

CdSe/ZnS/CdSe/ZnS çok tabakalı yapısı için Çizelge 5.1'de verilen materyal parametreleri kullanılarak bu yapı için Denk. (3.10) ifadesinden, etkin Rydberg değeri $R_y^* = 15.86$ meV ve Denk. (3.8) ifadesinden etkin Bohr yarıçapı $a_0^* = 48.78$ Å olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 5.1. Çok tabakalı yapıyı oluşturan materyallere ait olan gerekli parametreler (Sahin ve ark. 2012)

Materyal	m_e^*	m_h^*	κ	$E_g\ (eV)$
CdSe	$0.13m_0$	$0.48m_0$	9.3	1.75
ZnS	$0.28m_0$	0.49	8.1	3.75

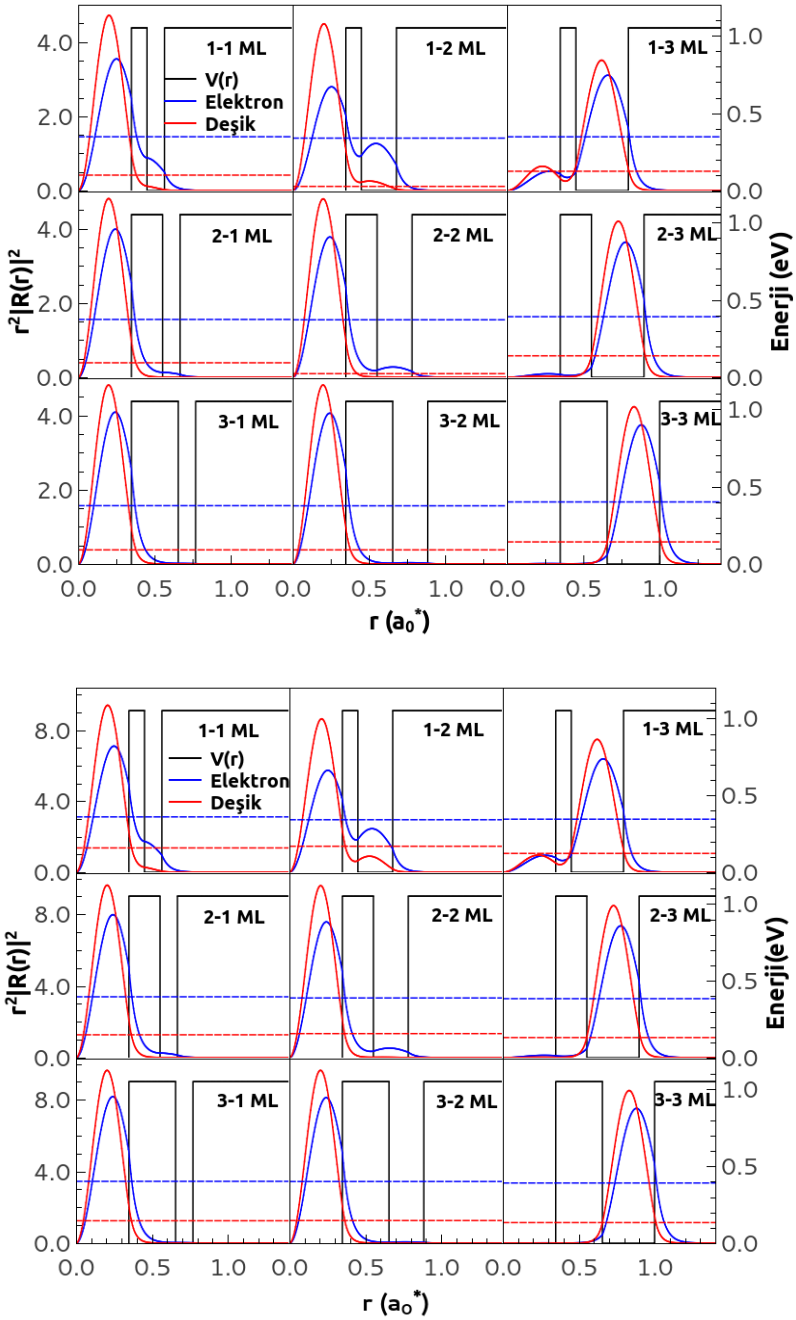


Şekil 5.5. Tekli, İkili ekziton, negatif ve pozitif trion sistemlerinin toplam enerji değerlerinin tabaka kalınlıklarına göre değişimi

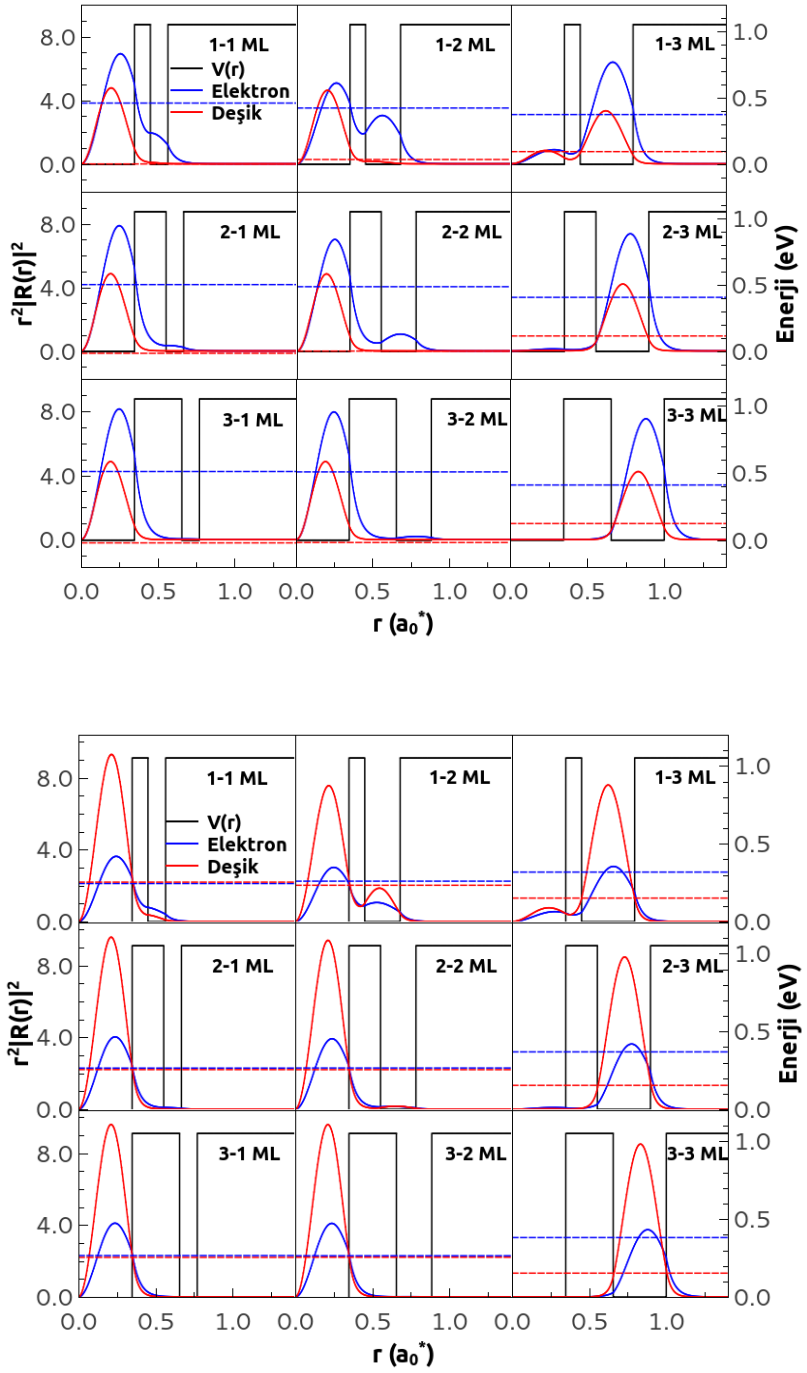
İncelenen tüm sistemler için, toplam enerjinin gösterildiği Şekil 5.5'teki grafiklerinin açıklanması için kullanılan K-L ML şeklindeki rakamlardan K (K=1, 2, 3 ML) kabuk (ZnS) genişliğini ve L (L=1, 2, 3 ML) ise kuyunun (CdSe) monolayer cinsinden kalınlığını temsil etmektedir. Öz-uyumlu elektronik yapı hesaplamaları sonunda toplam enerjiler ve tek parçacık dalga fonksiyonları belirlenmiştir. Tekli, ikili ve yüklü ekziton sistemleri için Şekil 5.5'te gösterilen toplam enerji grafikleri incelendiğinde genel anlamda, incelenen tüm yapıların toplam enerjilerinde, kuyu genişliği arttıkça bir azalma olduğu görülür. Kuantum mekaniksel olarak boyutların büyütülmesi sonucunda, enerjinin azalması beklenen bir durumdur.

Diğer taraftan aynı toplam enerjiler, artan kabuk genişliği ile bir yere kadar artmaktadır. Şekilden de görüldüğü gibi 1-L (L=1, 2, 3) ML durumlarındaki enerjiler, 2-L ML yapılarındaki enerjilerden daha küçüktür. Bu durum, ince kabuklu yapıda çekirdek-kuyu bölgeleri arasındaki tünelleme mekanizmalarıyla açıklanabilir. Kabuk kalınlığı artınca, Şekil 5.6 ve 5.7'den de görülebileceği gibi bu tünelleme olayı daha zor hale gelmekte ve parçacıklar daha çok bir bölgede hapsolmaktadırlar. Bu durumda kabuk kalınlığının daha da artması çok ciddi bir etki oluşturmamaktadır. Bu yüzden 3-L ML yapılarındaki toplam enerjiler, 2-L ML yapılarındaki enerjilerle neredeyse aynı değerlere sahip olmaktadırlar. Şekil 5.6 ve 5.7'de verilen yoğunluk dağılımı grafiklerinden gözlenen bir diğer önemli durum, deşikler arasındaki itici Coulomb etkileşmesinin daha az etkin olmasıdır. Şöyle ki; örneğin X^- ve X^+'nın 1-2 ve 2-2 ML

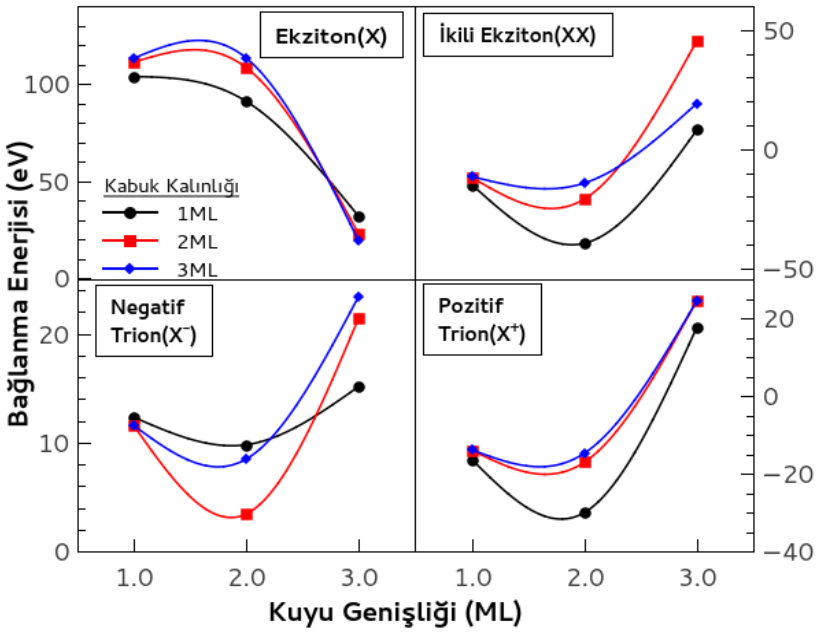
durumlarına baktığımızda, X^-elektronun kuyu bölgesine çok daha fazla tünelleme yaptığı görülür. Bunun nedeni, elektronlar arasındaki Coulomb itmesidir. Buna karşılık olarak, X^+'daki deşikler arasındaki itici etkileşme negatif triondaki elektronlara yaptırdığı kadar, tünelleme yaptıramamaktadır. Bu durum, deşiklerin kütlelerinin, elektronlara göre daha büyük olmasından kaynaklanmaktadır.



Şekil 5.6. Üst panelde Ekziton, alt panelde ise ikili ekziton sistemlerindeki elektron ve deşiğin tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunlukları dağılımı görülmektedir. Kesikli çizgiler tek parçacık enerjilerine karşılık gelmektedir.



Şekil 5.7. Üst panelde negatif trion, alt panelde ise pozitif trion sistemlerindeki elektron ve deşiğin tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunlukları dağılımı görülmektedir. Kesikli çizgiler tek parçacık enerjilerine karşılık gelmektedir.



Şekil 5.8. Ekziton, ikili ekziton ve yüklü ekzitonların bağlanma enerjilerinin bariyer kalınlığına ve kuyu genişliğine göre değişimi

Çok tabakalı yapı içerisindeki, tekli, ikili ve yüklü ekzitonların bağlanma enerjileri Şekil 5.8'de verilmiştir. Grafik incelendiğinde ekziton yapısı için, kuyu genişliğinin arttırılması sonucunda bağlanma enerjilerinin düştüğü, diğer yapılarda ise çekici ve itici Coulomb etkileşmeleri sebebiyle bağlanma enerjileri önce azalmış, daha sonra kuyu genişliğinin arttırılmasıyla bağlanma enerjilerinin tekrar arttığı görülmektedir. Bağlanma enerjilerinin tabaka kalınlıklarına göre değişimi, olasılık yoğunlukları incelenerek açıklanabilir. Tekli ve ikili ekzitonların bağlanma enerjileri için kuyu ve bariyer genişliklerinin 1 ML olduğu durum incelenirse, ekziton yapısı Şekil 5.6'nın üst panelinden görüldüğü gibi çekirdek bölgesinde lokalize olduğu için güçlü bir çekici Coulomb enerjisine, dolaysıyla yüksek bağlanma enerjisine sahiptir.

Diğer taraftan ikili ekziton yapısı için Şekil 5.6'nın alt paneli incelendiğinde, elektron ve deşik yoğunluğu neredeyse tamamıyla çekirdekte bulunmasına rağmen, aynı parçacıklar arasındaki itici etkileşmeler farklı tür parçacıklar arasındaki etkileşmelerden güçlü olduğu için bağlanma olmaz yani bağlı bir yapı meydana gelmez.

1-2 durumunda ekziton yapısı için bulunma olasılıkları incelenirse, elektronun belirgin şekilde kuyu bölgesinde bulunma olasılığı artarken, deşiğin kütlesinin elektrona göre ağır olması sebebiyle çok az bir miktar tünelleme yapabildiği görülür. Bu nedenle elektron ve deşik uzaysal olarak biraz ayrışmış durumdadır. Bunun sonucunda ekziton sisteminin bağlanma enerjisi 1-1 durumuna göre biraz azalmıştır. Aynı bariyer ve kuyu genişliği için, ikili ekziton sistemindeki elektronların kuyu bölgesinde bulunma

olasılıkları, belirgin şekilde artmıştır. Deşikler ise kütlelerinin büyük olmasına rağmen aralarında güçlü bit itici etkileşme olduğu için elektronlarla kıyaslanacak kadar kuyu bölgesine tünelleme yapmışlardır. Çekirdek yarıçapının dar olması sebebiyle, elektron-elektron ve deşik deşik arasındaki güçlü itici etkileşme sonucunda bağlanma enerjisi, 1-1 ML durumuna göre daha fazla azalmıştır. Kabuk kalınlıkları arttırıldığı zaman, yani 2-1 ve 3-1 ML yapılarında, elektron ve deşiğin kuyu bölgesine tünellemesi neredeyse sıfır olmaktadır. Bu tek ekziton yapısının bağlanma enerjisini çok az yükseltirken, XX'in bağlanma enerjisinde herhangi bir değişikliğe neden olmamaktadır.

1-3 durumu X ve XX için incelendiğinde bariyerin dar olması kuyu genişliğinin ise neredeyse çekirdek yarıçapı kadar geniş olması sebebiyle, Şekil 5.6'da görüldüğü gibi elektron ve deşiğin kuyu bölgesinde bulunma olasılıkları, çekirdek bölgesinde bulunma olasılıklarından daha fazladır. Bu olayın sebebi, enerjinin minimumluğu ilkesi gereği elektron ve deşiğin kuyu bölgesinde lokalize olmalarından kaynaklanır. Sonuç olarak ekziton yapısında bağlanma enerjisi 1-3 durumunda düşerken İkili ekziton yapısında ise elektron ve deşikler arasındaki çekici etkileşmeler, itici etkileşmelere baskın gelmeye başlar ve bu nedenle pozitif bağlanma enerjisine sahip, bağlı ikili ekziton yapısı oluşur.

2-1 durumunda elektron ve deşikler tamamen çekirdek bölgesinde bulundukları için, ekziton yapısında 1-1 durumundan daha güçlü bir bağlanma söz konusu olurken, ikili ekziton yapısında ise, taşıyıcıların artan kabuk kalınlığı ile kuyu bölgesine tünelleme olasılıkları azaldığı için itici etkileşmeler baskın durumdadır. Bu sebeple ikili ekzitonda bağlanma enerjisi negatif değer almaktadır. Kuyu genişliğinin 2 ML olduğu durumda ise elektronlar, kütlelerinin hafifliği nedeniyle bir miktar kuyu bölgesine tünelleme yapmışlardır. Bu nedenle her iki yapı içinde bağlanma enerjileri azalmaktadır.

2-3 durumunda ise ekziton ve ikili ekziton yapısındaki taşıyıcılar, neredeyse tamamen kuyu bölgesinde bulunurlar. Bu durumda ekziton yapısında bağlanma azalır, ikili ekziton yapısı için ise kuyu bölgesinde elektron – deşik arasındaki çekici etkileşme etkin rol oynamaya başladığı için bağlı bir yapı meydana gelmektedir.

3-1 ve 3-2 durumlarında elektron ve deşikler bariyer bölgesi tarafından baskılandıkları için tamamen çekirdekte lokalize olmuşlardır. Bu nedenle ekziton ve ikili ekziton yapılarında bağlanma enerjisinin değeri fazla değişmez. Son olarak 3-3 durumunda ise kuyu genişliği arttığı için elektron ve deşikler 2-3 durumundaki gibi

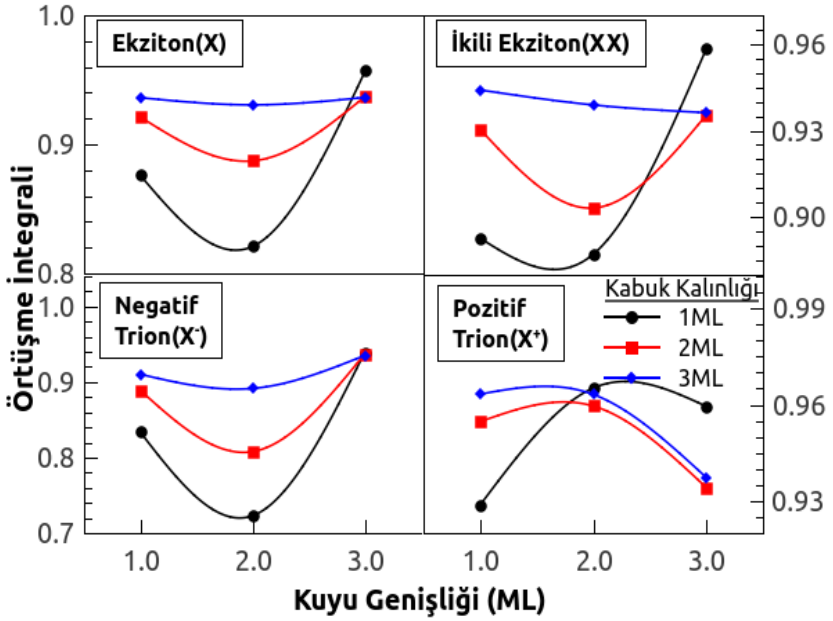
kuyu bölgesinde bulunmaktadırlar. Bu durumda ekziton ve ikili ekziton yapılarının bağlanma enerjileri, 2-3 durumu ile benzerdir.

Yüklü ekzitonlar için bağlanma enerjileri Şekil 5.8'in alt panelinde verilmiştir. Negatif trion için 1-1, 1-2 durumları Şekil 5.7'nin üst panelinden incelendiğinde, kuyu genişliğinin 2 ML olduğu durumda elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılıkları belirgin şekilde artarken, deşik ise kütlesinin büyük ve enerjisinin de küçük olması sebebiyle çekirdek bölgesinde lokalize olur. Sonuç olarak elektronlar ve deşik uzaysal olarak ayrışır ve bağlanma enerjisi 1-1 durumuna göre azalır.

Şekil 5.7'nin alt panelinden görüldüğü gibi, pozitif trion için 1-1 durumunda elektron ve deşiklerin kuyu bölgesinde bulunma olasılıkları hemen hemen aynıdır. 1-2 durumunda ise deşiklerin kendi aralarındaki itici etkileşmeleri sebebiyle kuyu bölgesinde, elektronlara göre, daha fazla bulunma olasılığına sahip olduğu görülmektedir. Bu itici etki sebebiyle 1-1 durumuna göre 1-2 durumunda bağlanma enerjisi biraz daha azalmaktadır. 1-3 durumuna bakıldığında ise negatif trion ve pozitif trion yapıları için, benzer bir şekilde bağlanma enerjisinin arttığı görülür. Bu olayın temel sebebi kuyu genişliğinin çekirdek yarıçapı kadar geniş olmasından dolayı ve bariyerin ise dar olması sebebiyle elektronlar ve deşikler aralarındaki çekici etkileşmeden kaynaklanan ortak bir hareket sergilerler. Bu nedenle her iki yapıda da bağlanma enerjisi artar.

2-1 ve 2-2 durumları karşılaştırıldığında, negatif trion yapısındaki elektronların bulunma olasılıkları kuyu genişliği 2 ML olduğunda, kuyu bölgesinde bir miktar artmaktadır. Deşik ise çekirdek bölgesinde kaldığı için bağlanma enerjisinde bir azalmaya sebep olur. Benzer bir durum pozitif trion için de geçerlidir. Deşik-deşik arasındaki itici etkileşme sebebiyle deşikler kuyu bölgesine tünelleme yaparken, elektron – deşik arasındaki çekici etkileşmeden dolayı elektron da bir miktar kuyu bölgesine tünelleme yapar. Sonuç olarak bağlanma enerjisinde çok küçük bir azalma görülür.

2-3 durumunda ise hem negatif hem de pozitif trion kuyu bölgesinde bulunur. Bu durumda her iki yapı için de elektron – deşik arasındaki çekici etkileşme aynı tür parçacıklar arasındaki itici etkileşmelerden daha güçlü duruma geldiği için bağlanma enerjileri artar. Bariyer genişliğinin sabit, kuyu genişliğinin ise değişken olarak alındığı, 3-L ile gösterilen durumlarda ise yüklü ekziton sistemlerindeki parçacıkların olasılık yoğunluk dağılımları 2-L durumlarına çok benzemektedir. Sonuç olarak bu benzerlik bağlanma enerjilerine de yansımıştır.



Şekil 5.9. Üst panelde solda ekziton, sağda ikili ekziton, alt panelin solunda negatif trion sağında ise pozitif trionun örtüşme integralleri kuyu genişliği ve kabuk kalınlıklarına göre değişimi

Örtüşme (overlap) integralleri, osilatör şiddeti ve yaşam süreleri gibi optik özellikleri belirlemek için kullanılır. Şekil 5.9'da incelenen sistemlere ait örtüşme integrallerinin tabaka kalınlıklarına göre değişimi verilmiştir. Şekil 5.7'nin üst panelinden ekziton ve alt panelinden ikili ekziton sistemi için 1-1 ve 1-2 durumları incelenirse; 1-1 durumunda ekziton yapısı çekirdek bölgesinde bulunurken, 1-2 durumunda elektron kuyu bölgesine de tünelleme yapar deşik ise çekirdek bölgesinde kalır. Bu nedenle Şekil 5.9 incelendiğinde örtüşme integrali 1-1 durumuna göre azaldığı görülür. Aynı durumlar için ikili ekziton yapısında örtüşme integralinde 1-2 durumunda 1-1 durumuna göre çok küçük bir azalma meydana geldiği görülür. Çünkü ikili ekziton yapısında 1-2 durumunda elektron ve deşikler kuyu bölgesine hemen hemen aynı miktarda tünelleme yaparlar. 1-3 durumunda ise her iki sistemde de örtüşme integrallerinin belirgin şekilde arttığı görülür.

Bunun sebebi her iki yapıda bulunan elektron ve deşiklerin aynı bölgelerde bulunma olasılıklarına sahip olmalarıdır. Şekil 5.9'da ekziton ve ikili ekziton için 2-L için örtüşme integrallerinin değişim eğrileri oldukça birbirine benzemektedir. Bu durumun sebebi, 2-1 durumunda elektron ve deşikler tamamen çekirdek bölgesinde ve 2-3 olduğunda ise tamamen kuyu bölgesinde lokalize oldukları için örtüşme integrallerinin değerleri birbirine çok yakındır. Ancak 2-2 durumunda her iki yapıdaki elektronlar, çok az da olsa, kuyu bölgesinde de bulunduklarından dolayı her iki sistem

içinde örtüşme integralleri azalmaktadır. 3-L olması halinde ise elektron ve deşikler aynı bölgelerde lokalize oldukları için her iki yapı için de örtüşme integrallerinde çok fazla değişim gözlenmez.

Yüklü ekzitonlar için örtüşme integralleri Şekil 5.9'un sol alt (negatif trion) ve sağ alt (pozitif trion) panelinde görülmektedir. Negatif trionlar için örtüşme integrallerindeki değişim Şekil 5.7'nin üst panelindeki yoğunluk dağılımları kullanılarak açıklanabilir. Buna göre 1-1 ve 1-2 durumları incelendiğinde, 1-2 durumunda deşik, çekirdek bölgesinde lokalize olurken elektron, kabuk bölgesinde de bulunma olasılığına sahiptir. Sonuç olarak elektronlar ve deşik 1-1 durumuna göre uzaysal olarak biraz ayrılmış durumdadırlar. Bu sebeple dalga fonksiyonlarının örtüşmeleri azalmıştır. 1-3 durumunda ise elektronlar ve deşik neredeyse tamamen kabuk bölgesinde bulunurlar. Bu nedenle örtüşme integralinin değeri, 1-2 durumuna göre artmıştır. 2-1 için taşıyıcılar neredeyse tamamen çekirdek bölgesinde, 2-3 olması halinde ise taşıyıcılar tamamen kabuk bölgesinde bulunurlar. 2-2 durumunda ise elektron kabuk bölgesinde bir miktar bulunma olasılığına sahipken, deşik kütlesinin daha büyük olması sebebiyle çekirdek bölgesinde bulunur. Bu nedenle 2-1 ve 2-3 durumlarında dalga fonksiyonlarının örtüşmeleri yüksek, 2-2 durumunda ise düşüktür. 3-L durumlarında ise taşıyıcılar aynı bölgelerde lokalize oldukları için örtüşme integrallerinde belirgin bir değişme gözlenmez.

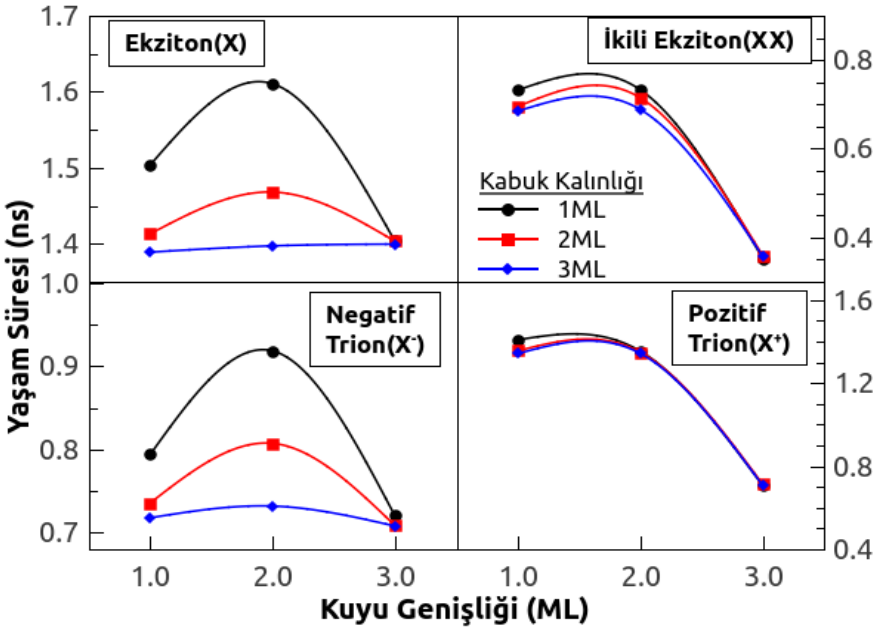
Pozitif trion yapısı için 1-1 ve 1-2 durumları, Şekil 5.7'nin alt paneli incelendiğinde, 1-2 durumunda elektron ve deşikler hem çekirdek hem de kabuk bölgesinde bulunma olasılığına sahiptirler. Bu nedenle 1-1 durumuna göre örtüşmeler artmıştır. 1-3 durumunda ise elektron ve deşik büyük olasılıkla kabuk bölgesinde bulunurlar. Sonuç olarak 1-2 durumuna göre, 1-3 durumunda örtüşme integralinde çok küçük bir azalma görülmektedir. Fakat pozitif triondaki değişimlerin sayısal değeri çok büyük değildir. Çünkü deşikler, ağırlıkları nedeniyle, negatif triondaki elektronlar kadar kabuk bölgesinde tünelleme yapamazlar. 2-1, 2-2 ve 3-1, 3-2 durumlarında örtüşme integrallerinde fark edilir bir değişim görülmemektedir. Bu durum, elektron ve deşiğin tamamen çekirdek bölgesinde bulunmasından kaynaklanır. 2-3 ve 3-3 durumlarında ise elektron ve deşik tamamen kabuk bölgesinde bulundukları örtüşme integrallerinde bir miktar azalma görülmektedir.

Overlap integrallerinin belirlenmesinin ardından, önemli optik özelliklerden biri de yaşam süresidir. Tekli, ikili ve yüklü ekzitonlar için yaşam süreleri, Şekil 5.10'da verilmiştir. Hayat süreleri, Denk. (3.27) ifadesi yardımıyla hesaplanmıştır.

Çizelge 5.2. Tekli, ikili yüklü ekzitonların geçiş enerjilerinin ve osilatör¸ şiddetlerinin tabaka kalınlıklarına bağlı olarak değişimleri

Kabuk-Kuyu (ML)	Geçiş Enerjisi (eV)				Osilatör Şiddeti			
	X	XX	X^-	X^+	X	XX	X^-	X^+
1-1	2.301	2.315	2.288	2.317	6.663	13.490	12.753	7.012
1-2	2.290	2.330	2.280	2.320	6.275	13.319	11.086	7.274
1-3	2.253	2.245	2.238	2.235	7.437	29.888	14.679	15.019
2-1	2.328	2.340	2.316	2.342	6.924	13.915	13.433	7.132
2-2	2.326	2.347	2.323	2.343	6.671	13.464	12.168	7.164
2-3	2.302	2.257	2.281	2.277	7.124	29.006	14.372	14.350
3-1	2.331	2.342	2.319	2.344	7.028	14.106	13.737	7.189
3-2	2.330	2.344	2.321	2.345	6.998	14.012	13.435	7.186
3-3	2.312	2.264	2.289	2.288	7.085	28.941	14.298	14.339

Denklemden de anlaşılacağı gibi, yaşam süresi için osilatör şiddeti ve geçiş enerjisi asıl belirleyici unsurlardır. Çizelge 5.2'de incelenen bütün sistemler için geçiş enerjileri ve osilatör şiddetleri verilmiştir. Bu çizelgedeki sonuçlar kullanılarak, tabaka kalınlıklarına bağlı olarak yaşam sürelerinin değişimi yorumlanacaktır. Tekli ve ikili ekziton sistemleri için Çizelge 5.2 incelendiğinde 1-1 ve 1-2 durumları karşılaştırıldığında, 1-2 durumunda, osilatör şiddetleri her iki sistemde de belirgin olarak azalmıştır. Geçiş enerjilerinde ise belirgin bir değişim yoktur. Bu sebeple 1-2 durumunda 1-1 durumuna göre yaşam süreleri daha uzun olmuştur. 1-3 durumunda ise ekziton sisteminin geçiş enerjisinde çok az bir azalma gözlenirken, osilator şiddeti ise belirgin olarak artmıştır. Bu nedenle yaşam süresi azalmıştır. 1-1 ve 1-2 durumlarında ikili ekziton sisteminde bağlı bir yapı meydana gelmezken, 1-3 durumunda bağlı bir yapı oluşur. Bu durumda elektron-deşik yeniden birleşmesinde dört olası durum söz konusu olacağı için, osilatör şiddeti yaklaşık olarak 1-1 ve 1-2 durumlarının iki katı olur, bu durumda yaşam süresi azalır. Ekziton sisteminde 2-L durumları için osilatör şiddetleri ve geçiş enerjileri benzer değişimler gösterdiği için yaşam süresi eğrileri de benzemektedir. Ancak 2-L durumları için hesaplanan osilatör şiddeti, 1-L durumlarına göre daha büyük değerler aldığı için yaşam süreleri daha kısa olmaktadır. 3-L durumlarında ise geçiş enerjileri ve osilatör şiddetlerinde fark edilir bir değişim olmadığı için yaşam süreleri de fazla değişmemiştir.



Şekil 5.10. tekli, ikili ve yüklü ekzitonların tabaka kalınlıklarına göre yaşam sürelerinin değişimi

İkili ekziton yapısında 2-L ve 3-L durumları için yaşam sürelerindeki değişim eğrileri, 1-L durumlarındaki yaşam sürelerinin değişimi birbirine çok benzemektedir. Çünkü 2-1, 2-2 ve 3-1, 3-2 durumlarında bağlı bir yapı meydana gelmezken 2-3 ve 3-3 durumlarında bağlı bir yapı meydana gelmektedir. Bu sebeple yaşam sürelerinin değişim eğrileri birbirine benzemektedir.

Negatif yüklü ekziton sistemi için yaşam süreleri Şekil 5.10'dan incelendiğinde negatif trion yapısı ile ekziton sisteminin yaşam sürelerinin kuyu genişliğine bağlı olarak değişimi birbirine çok benzerdir. Bu durumun sebebi iki sistemde de geçiş enerjileri ve osilatör şiddetlerindeki değişimin benzer olmasıdır. Yaşam sürelerinin arasındaki fark ekziton sisteminin yaşam sürelerinin negatif triona göre daha uzun olmasıdır. Bu durumun temel nedeni ise negatif trion sisteminin osilatör şiddettinin ekziton yapısının osilatör şiddettinden daha yüksek olmasıdır. Pozitif trion yapısının yaşam süresinde ise ikili ekziton sistemindekine benzer bir değişim söz konusudur. Pozitif trion yapısında da ikili ekziton sistemindeki gibi sadece K-3 durumlarında bağlı bir yapı oluşmakta, dolayısıyla ikili ekziton yapısındakine benzer değişimler meydana gelmektedir. Bu nedenle yaşam sürelerin değişimleri benzerlik göstermektedir.

6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Yapılan bu tez çalışmasında CdSe/ZnS/CdSe/ZnS çok tabakalı kuantum noktası içerisindeki, X, XX, X^- ve X^+ sistemler için elektronik ve optik özelliklerin tabaka kalınlıklarına bağlı olarak değişimi ayrıntılı bir biçimde incelenmiştir. Bunun için, Schrödinger - Poisson denklemleri öz-uyumlu bir şekilde etkin kütle yaklaşımında sayısal olarak çözülmüştür. İkili ekziton ve yüklü ekziton yapıların hesaplamalarında, aynı tür parçacıklar arasındaki kuantum mekaniksel çok parçacık etkileşmeleri yerel yoğunluk yaklaşımı altında (LDA) hesaba katılmıştır. Çok tabakalı kuantum noktalarında daha önce incelenmemiş olan yüklü ekziton ve ikili ekziton yapılarının, dalga fonksiyonları, enerji seviyeleri, taşıyıcılar arasındaki Coulomb etkileşmeleri, osilatör şiddetleri ve yaşam süreleri gibi temel nicelikler analiz edilmiştir. Hesaplanan bu niceliklerin, bu konuda yapılacak deneysel çalışmaları tetikleyeceği beklenmektedir.

Bu tez çalışmasında, ekzitonik sistemlerin analizi için geliştirilen çözüm şemaları, taşıyıcılar arasındaki etkileşimleri deneysel çalışmalarla oldukça uyumlu bir şekilde elde ederken, standart pertürbasyon yaklaşımı ile yapılan ikili ekzitonların çözümlerinde ekziton – ekziton arasındaki iticilik elde edilememekte ve küçük yarıçaplarda da ikili ekziton yapısı bağlanamamaktadır (Banyai 1989). Bu nedenle ikili ekziton yapısının bağlanma enerjisi için daha doğru sonuçlar elde etmek amacıyla karmaşık ve zor olan daha yüksek mertebeden pertürbasyon terimleri gereklidir (Brovelli ve ark. 2011, Bryant 1990). Bu çalışmada geliştirilen yöntem sayesinde, ekzitonik sistemlerin çözümleri yüksek mertebeden pertürbasyon terimlerine gerek kalmadan yapılabilmektedir.

İncelenen ekzitonik sistemlerin, elektronik ve optik özelliklerinin kuantum nokta yarıçapı sabit tutulurken, kabuk kalınlığı ve kuyu genişliğine etkin bir biçimde bağlı olduğu, sonuçların incelenmesiyle beraber ortaya çıkmıştır. Böylece, çok tabakalı yapıda istenilen özelliklerin elde edilebilmesi, hem kuantum nokta yarıçapına, hem de kabuk kalınlığı ve kuyu genişliği ile ayarlanabileceği gösterilmiştir. Sonuç olarak bu özelliklerin ayarlanabilir olması, kuantum nokta lazerler gibi uygulama alanlarının hızla gelişimine yol açacaktır.

İkili ve yüklü ekzitonların toplam ve bağlanma enerjileri, örtüşme integralleri, yaşam süreleri bu çalışmada detaylı olarak incelenmiş, bu niceliklerdeki değişimlerin oluşum mekanizmalarının fiziksel açıklamaları yapılmıştır. Böylece literatürde, bu yapılar ile ilgili eksik olan boşluk doldurulmuştur.

Bu çalışmanın daha gerçekçi sonuçlar verebilmesi ve deneylerle daha fazla uyum içerisinde olabilmesi için elektron ve deşik için kullanılan sınırlandırma potansiyelleri, deneysel verilere göre güncellenmelidir. Ayrıca bu çalışmada kullanılan yöntemler, daha kesin sonuçlar veren yöntemlerle değiştirilerek daha hassas sonuçlar elde edilebilir.

Bundan sonra yapılacak olan teorik çalışmalarda, ekzitonik sistemlerin uyarılmış seviyeleri incelenip elektronik ve optik özellikleri belirlenebilir. Ayrıca daha fazla taşıyıcıya sahip üçlü, dörtlü, beşli ve altılı ekzitonlar gibi yapılar için araştırmalar gerçekleştirilebilir. Özellikle çoklu ekzitonlar üzerinde şimdiye kadar çok fazla incelenmemiş olan sıcaklık etkileri, elektrik ve manyetik alan gibi etkiler göz önüne alınarak yeni çalışmalar yapılabilir.

KAYNAKLAR

Abbarchi, M., Kuroda, T., Mano, T., Sakoda, K., Mastrandrea, C.A., Vinattieri, A., 2010, Energy renormalization of exciton complexes in GaAs quantum dots, *Physical Review B*, 82, 201301(R)-4.

Adachi, S., 2005, Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors Wiley, England.

Appenzeller, J., Radosavljevic, M., Knoch, J. ve Avouris, Ph., 2004, Tunneling Versus Thermionic Emission in One-Dimensional Semiconductors, *Physical Review letters*, 92, 048301-4.

Aygün, E., Zengin M., 1994, Kuantum Fiziği, *Bilim Yayınevi*, Ankara.

Balet, S., Ivanov, A., Piryatinski, A., Achermann, M. ve Klimov, V. I., 2004, Inverted Core/Shell Nanocrystals Continuously Tunable between Type-I and Type-II Localization Regimes, *Nano Letters*, 4, 1485-1488.

Banyai, L. P., L., 1989, Asymptotic biexciton ‘‘binding energy’’ in quantum dots, *Physical Review B*, 39, 8022 -8024.

Barenco, A. ve Dupert, M.A., 1995, Quantum many-body states of excitons in a small quantum dot, *Physical Review B*, 52, 2776-2778.

Barnham K., Vvedensky,D.D., 2001, Low-dimensional Semiconductor Structures, Cambridge University Press, 79-122.

Battaglia, D., Blackman B., ve Peng, X., 2005, Coupled and Decoupled Dual Quantum Systems in One Semiconductor Nanocrystal, *Journal of the American Chemical Society*, 127, 10889-10897.

Bawendi, M. G., Steigerwald, M. L., ve Brus, L. E., 1990, The Quantum-Mechanics of Larger Semiconductor Clusters (Quantum Dots), *Annual Review of Physical Chemistry*, 41, 477-496.

Bayer, M., Stern, O., Hawrylak, P., Fafard, S., ve Forchel, A., 2000, Hidden symmetries in the energy levels of excitonic 'artificial atoms', *Nature* 405, 923.

Beard, M.C., Knutsen, K.P., Yu, P., Luther, J. M., Song Q., Metzger, W. K., Ellingson, R. J., Nozik, A. J., 2007, Multiple Exciton Generation in Colloidal Silicon Nanocrystals, Nano Letters 7, 2506-2512.

BenDaniel, D. J., Duke C. B., 1996, Space charge effects on electron tunneling problem for a single-electron transistor, *Physical Review B*, 61, 4461-4464.

Bester, G., Nair, S. ve Zunger, A., 2003, Pseudopotential calculation of the excitonic fine structure of million-atom self-assembled In1-xGaxAs/GaAs quantum dots, , *Physical Review B*, 67, 161306(R).

Brasden, A., Joachin, C.J., 2000, Quantum Mechanics, *Prentice-Hall*, *Harlow*, 19-26, 351-367.

Brovelli, S., Schaller, R. D., Crooker, S. A., Garcia - Santamaria F., Chen, Y., Viswanatha, R., Hollingsworth, J. A., Htoon, H. , ve Klimov, V. I. , 2011, Nano-engineered electron–hole exchange interaction controls exciton dynamics in core–shell semiconductor nanocrystals, *Nature Communication*, 2, 280.

Bryant, G.W., 1990, Biexciton binding in quantum boxes, *Physical Review B*, 41, 1243-1246.

Chamarro, M., Gourdon, C., Lavallard, P., Lublinskaya O., ve Ekimov, A.I., 1996, Enhancement of electron-hole exchange interaction in CdSe nanocrystals: A quantum confinement effect *Physical Review B*, 53, 1336-1342.

Chan, Y.,Caruge, J-M., Snee P.T., Bawendi, MG., 2004, Multiexcitonic two-state lasing in a CdSe nanocrystal laser, *Applied Physics Letters*, 85, 2451-2664.

Dabbousi, B.O., Rodriguez-Viejo, J., Mikulec, F.V., Heine, J.R., 1997, (CdSe)ZnS Core−Shell Quantum Dots: Synthesis and Characterization of a Size Series of Highly Luminescent Nanocrystallites, *J. Phys. Chem*. B, 101, 9463-9475.

Dalgarno, P.A., Smith, J.M., McFarlane, J. Gerardot, B.D., Karrai, K., Badolato, A.,Petroff, P.M., ve Warburton, R.J., 2008, Coulomb interactions in single charged self-assembled quantum dots: Radiative lifetime and recombination energy *Physical Review B*, 77, 245311-8.

Davies, J. H., 1998, The physics of low – dimensional semiconductors, *Cambridge University Press*, 64-69,100-143,397-406.

Efros, A.L., Efros, Al.L., 1982, Interband absorption of light in a semiconductor sphere, *Soviet physics Semiconductors*, 16, 772-775.

Eisberg, R. M., 1961, Fundamentals of Modern Physics, *Wiley*, New York.

Etteh, N.E.I. ve Harrison O., 2002, First principles calculations of the dark current in quantum well infrared photodetectors, *Physica E*, 13, 381-384.

Eychmüller, A., Mews, A., ve Weller, H., 1993, A quantum dot quantum well: CdS/HgS/CdS, *Chemical Physics Letters* 208, 59-62.

Frenkel, J., 1931, On the transformation of light into heat in solids II, *Physical Review*, 37, 1276-1294.

Frenkel, J., 1936, on the absorption of light and trapping electrons and positive holes in crystalline dielectrics, *Physikalische Zeitschrift der Sowjet*union 9, 158-186.

Fafard, S., Leon, R., Leonard, D., Merz, J. L., ve Petroff, P. M., 1995, Phonons and radiative recombination in self-assembled quantum dots, *Physical Review B*, 52, 5752-5755.

Fonoberov, V. A., Balandin, A. A., 2004 Radiative lifetime of excitons in ZnO nanocrystals: The dead-layer effect, *Physical Review B*, 70, 195410-5.

Fox, M., 2001, Optical Properties of Solids, *Oxford University Press*, New York, 24 – 88.

Gao, X., Cui, Y., Levenson, R. M., Chung, L. W. K., Nie, S., 2004, In-vivo cancer targeting and imaging with semiconductor quantum dots, *Nature Biotechnology*, 22, 969-976.

Harrison P., 2005, Quantum Well, Wires and Dots, *John Wiley & Sons*, New York, 189-217.

Hartree, D.R., 1955, The Calculation Of Atomic Structures, John Wiley & Sons,New York, 1-20.

Hawrylak, P., 2001, Excitonic artificial atoms in a quantum dot, *Physica E*, 9, 94-98.

He, L., Bester, G., Su Z., Zunger, A., Calculation of near-field scanning optical images of exciton, charged-exciton, and multiexciton wave functions in self-assembled InAs/GaAs quantum dots, 2007, *Physical Review B*, 76, 035313-7.

Hohenberg, P., Kohn, W., 1964, Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136 B864–B871.

İhn, T., 2010, Semiconductor Nanostructures, *Oxford University Press*, 140-180.

Ivanov, S. A., Nanda, J., Piryatinski, A., Achermann, M., Balet, L. P., Bezel, I. V., Anikeeva, P. O., Tretiak, S. ve Klimov, V. I., 2004, Light Amplification Using Inverted Core/Shell Nanocrystals: Towards Lasing in the Single-Exciton Regime, *The Journal of Physical Chemistry B* 108, 10625-10630.

Jaiswal, J. K., Mattoussi, H., Mauro, J. M., Simon, S. M., 2003, Long-term multiple color imaging of live cells using quantum dot bioconjugates, *Nature Biotechnology*, *21*, *47-51*.

Jaskolski, W ve Bryant, G.W., 1998, Multiband theory of quantum-dot quantum wells: Dim excitons, bright excitons, and charge separation in heteronanostructures, *Physical Review B*, 57, R4237- R4240.

Kayanuma Y., 1988, Quantum-size effects of interacting electrons and holes in semiconductor microcrystals with spherical shape, *Physical Review B*, 38, 9797-9805.

Kirstaedter, N., Ledentsov, N. N., Grundmann, M., Bimberg, D., Richter, Ruvimov, U. S. S., Werner, P., Heydenreich, J., Ustinov, V. M., Maximov, M .V., Kopev, P. S.,

Alferov, Zh. I., 1994, Low threshold, large T_0 injection laser emission from (InGa)As quantum dots, *Electronics Letters*, 30, 1416.

Kittel C., 2004, Introduction to Solid State Physics, *John Wiley & Sons*, New York, 1-24, 176-189, 305-333.

Klimov, V. I., 2006, Mechanisms for Photogeneration and Recombinationof Multiexcitons in Semiconductor Nanocrystals:Implications for Lasing and Solar Energy Conversion, *The Journal of Physical Chemistry B*, 110, 16827-16845.

Koch, W., Holthausen, M. C., 2001, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley-VCH, 33-59.

Kohn, W., Sham, L. J., 1965, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Physical Review*, 140, A1133-A1138.

Laheld, U. E. H., Einevoll, G.T., 1997, Excitons in CdSe quantum dots, *Physical Review*, B 55, 5184-5204.

Ledentsov, N. N., Ustinov, V. M., Zhukov, A. E., Maximov, M. V., Tabatadze, I. G. ve Kopev, P. S., 1994, Optical properties of heterostructures with InGaAs-GaAs quantum clusters, *Semiconductors*, 28, 832.

Levine, I.N., 2000,Qunatum Chemsitry, *Prentice-Hall,Inc*., New Jersey, 130-134, 198-201.

Lipparini, E., 2003, Modern many-particle physics, World scientific, 48-52.

Little, R. B., El-Sayed, M. A., Bryant, G. W., ve Burke, S., 2001, Formation of quantum-dot quantum-well heteronanostructures with large lattice mismatch: ZnS/CdS/ZnS, *The Journal of Chemical Physics* 114, 1813-10.

Luo, J.W., Bester, G., Zunger, A., 2009, Long- and short-range electron–hole exchange interaction in different types of quantum dots, *New Journal Of Physics*, 11, 123024-11.

Madarasz, F.L., 1994, Prediction of giant $\chi(3)$ values from a calculation of excitonic nonlinear optical properties in rectangular GaAs quantum-well wires, *Physical Review B*, 49, 13528- 13541.

Manasreh, O., 2005, Semiconductor Heterojunctions and Nanostructures, *The McGraw-Hill*, 1-99, 225-235.

Mlinar V., Zunger A., 2009, Internal electronic structure and fine structure of multiexcitons in semiconductor quantum dots, *Physical Review B*, 80, 205311-15.

Mott, N.F, 1938, On the absorption of light by crystals, *Proceedings of the Royal Society A, 167, 384-391.*

Nie, S., Gao, X., Cui, Y., Levenson, R. M., Chung, L. W. K., 2004, In-vivo cancer targeting and imaging with semiconductor quantum dots, *Nature Biotechnology*, 22, 969-976.

Norris, D.J., Bawendi, M.G., 1996, Measurement and assignment of the size-dependent optical spectrum in CdSe quantum dots, *Physical Review B*, 53,16338-16346.

Nozik, A. J., 2005, Exciton Multiplication and Relaxation Dynamics in Quantum Dots: Applications to Ultrahigh-Efficiency Solar Photon Conversion, *Inorganic Chemstry*, 44, 6893-6899.

Osovsky, R., D. Cheskis, Kloper, V., Sashchiuk, A., Kroner, M., ve Lifshitz, E., 2009, Influence of the Electron-Cation Interaction on Electron Mobility in Dye-Sensitized ZnO and TiO2 Nanocrystals: A Study Using Ultrafast Terahertz Spectroscopy, *Physical Review Letters*, 102, 197401-4.

Peleshchak, R.M., Bachynsky I.Ya., 2009, Electric properties of the interface quantum dot – matrix, *Condensed Matter Physics*, 12, 215-223.

Parr, R. G., Yang, W., 1989, Density-Functional Theory of Atoms and Molacules, *Oxford University Press*, 47-70, 142-169.

Perdew J.P., Zunger A., 1981, Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Physical Review B*, 23, 5048–5079.

Riva, C., Peeters, F.M., ve Varga, K., 2001, Magnetic field dependence of the energy of negatively charged excitons in semiconductor quantum wells, *Physical Review B*, 63, 115302-9.

Rodt, S., Heitz, R., Schliwa, A., Sellin, R. L., Guffarth, F. ve Bimberg, D., 2003, Repulsive exciton-exciton interaction in quantum dots, *Physical Review B*, 68, 035331-4.

Sahin, M., Nizamoglu S., Kavruk, A. E., ve Demir, H. V., 2009, Self-consistent computation of electronic and optical properties of a singleexciton in a spherical quantum dot via matrix diagonalization method, *Journal of Applied Physics*, 106, 043704-5.

Sahin, M., Nizamoglu S., Yerli O., ve Demir, H. V., 2012, Reordering orbitals of semiconductor multi-shell quantum dot-quantum well heteronanocrystals, *Journal of Applied Physics*, 111, 023713, 023719.

Sattler, K. D., 2011, Handbook of Nanophysics, Nanoparticles and Quantum Dots, *CRC Press*, New York, 35-1,35-14.

Schaller, R. D., ve Klimov, V. I., 2004, High Efficiency Carrier Multiplication in PbSe Nanocrystals: Implications for Solar Energy Conversion, *Physical Review Letters*, 92, 186601.

Schaller, R. D., Sykora, M., Pietryga, J. M., Klimov, V. I., 2006, Seven Excitons at a Cost of One: Redefining the Limits for Conversion Efficiency of Photons into Charge Carriers, *Nano Letters* 6, 424-429.

Schoos, D., Mews, A., Eychmüller, A., Weller, H, 1994, Quantum–dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment, *Physical Review* B 49, 17072-17078.

Schrier, J., ve Wang, L. W., 2006, Electronic structure of nanocrystal quantum-dot quantum wells, *Physical Review*, B 73, 245332-6.

See, J., Dollfus, P., Galdin, S., 2002, Comparison of a density functional theory and a Hartree treatment of silicon quantum dot, *Journal of Applıed Physıcs*, 92, 3142-3146.

Shumway, J., Franceschetti, A., ve Zunger, A., 2001, Correlation versus mean-field contributions to excitons, multiexcitons, and charging energies in semiconductor quantum dots, *Physical Review B*, 63, 155316-13.

Sundar, V., Eisler, H.J., Deng, T., Chan, Y., Thomas, E.L. ve Bawendi, M.G., 2004, Soft-Lithographically Embossed, Multilayered Distributed-Feedback Nanocrystal Lasers, *Advanced Materials*, 16, 2137-2141.

Takagahara, T., 1987 ,Excitonic optical nonlinearity and exciton dynamics in semiconductor quantum dots, *Physical Review B*, 36, 9293-9396.

Takagahara, T., 1989, Biexciton states in semiconductor quantum dots and their nonlinear optical properties, *Physical Review B*, 39, 10206- 10231.

Thijssen, J. M., 1999, Computational Physics, *Cambridge University Press*, 94-140.

Tsuchiya, T., 2000, Biexcitons and charged excitons in quantum dots: a quantum Monte Carlo study, *Physica E*, 7 470 – 474.

Wannier, G. H., 1937, The structure elektronic excitation levels in insulating crystals, *Physical Review*, 52, 191-197.

Wu, X., Bruchez, M. P., 2004,Labeling cellular targets with semiconductor quantum dot conjugates, *Methods in Cell Biology*, 75, 171.

Yoffe, A. D., 1993, Low-dimensional systems: quantum size effects and electronic properties of semiconductor microcrystallites (zero-dimensional systems) and some quasi-two-dimensional systems, *Advances In Physics*, 42, 173-266.

Yu, Z., Guo, L., Krauss, T., Silcox, J., 2005, Shell Distribution on Colloidal CdSe/ZnS Quantum Dots, *Nano Letters* 5, 565-570.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Abdurrahman AKTÜRK
Uyruğu : T.C
Doğum Yeri ve Tarihi : Midyat – 02/08/1988
Telefon : 05362238919
Faks :
e-mail : akturkabdurrahman@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	:	Mensucat Santral Lisesi, Zeytinburnu, İstanbul	2005
Üniversite	:	Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2010
Yüksek Lisans	:	Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	-

YABANCI DİL: İngilizce

İŞLETİM SİSTEMLERİ

Windows (XP, 7)
Unix işletim sistemleri (Ubuntu, Mint, Pardus, Manjaro Linux)

PROGRAMLAMA DİLLERİ

C/C++
Fortran
Microsoft Quickbasic

PROGRAM BİLGİSİ

Microsoft Office
Tex maker
Qtiplot
Sigmaplot
Gnuplot
Geany

YAYINLAR

Aktürk, A., Şahin, M., Koç, F., Erdinç, A., "A detailed investigation of electronic and optical properties of exciton, biexciton and charged excitons in a multi-shell quantum dot-quantum well heterostructure" (The Journal of Chemical Physics'e gönderildi 2013).

BİLDİRİLER

2011, CdSe Çok tabakalı CdSe/ZnS/CdSe kuantum nokta içerisinde bulunan ekziton ve trionların optik özellikleri, A. AKTÜRK, F. KOÇ, M. ŞAHİN, A. ERDİNÇ, 13. Ulusal Optik, Elektronik-Optik ve Fotonik Toplantısı, Bilkent, ANKARA.

2011, Çok tabakalı CdSe/ZnS kuantum nokta içerisinde bulunan ikili ekzitonların optik özellikleri, A. AKTÜRK, F. KOÇ, A. ERDİNÇ, M. ŞAHİN, 18. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı, ODTÜ, ANKARA.

2011, Tip-II CdSe/CdTe bir kuantum nokta nanokristal yapıdaki çoklu ekzitonların optik özellikleri, F. KOÇ, A. AKTÜRK, M. ŞAHİN, A. ERDİNÇ, 13. Ulusal Optik, Elektronik-Optik ve Fotonik Toplantısı, Bilkent, ANKARA.

2011, Tip-II kuantum nokta nanokristal yapılardaki ekziton ve ikili ekzitonların optik özellikleri, F. KOÇ, A. AKTÜRK, M. ŞAHİN, A. ERDİNÇ, 18. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı, ODTÜ, ANKARA.