



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÇOK TABAKALI BİR KÜRESEL KUANTUM NOKTASININ ELEKTRONİK YAPISI VE ÇİZGİSEL OLMAYAN OPTİKSEL ÖZELLİKLERİ

Hasan Cihat İSLAMOĞLU

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Mayıs-2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ÇOK TABAKALI BİR KÜRESEL KUANTUM NOKTASININ ELEKTRONİK YAPISI VE ÇİZGİSEL OLMAYAN OPTİKSEL ÖZELLİKLERİ

Hasan Cihat İSLAMOĞLU

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Haluk ŞAFAK

2013, 62 Sayfa

Jüri
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Doç. Dr. İbrahim KARABULUT
Yrd. Doç. Dr. Ersin BOZKURT

Bu çalışmada, hem tek elektronlu tekli bir küresel kuantum noktasının hem de çok elektronlu çok tabakalı küresel bir kuantum noktasının elektronik ve çizgisel olmayan optiksel özellikleri teorik olarak incelendi. Hidrojenik safsızlığın etkisi de hesaplamalarda göz önüne alındı. Sonlu farklar metoduna dayalı matris köşegenleştirme tekniği kullanılarak sayısal hesaplamalar gerçekleştirildi. Elde edilen sonuçlar hem kuantum noktasının yapısal parametrelerinin hem de hidrojenik safsızlığın optiksel özellikleri önemli ölçüde etkilediği göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: Küresel kuantum noktası, hidrojenik safsızlık, sonlu farklar yöntemi

ABSTRACT

MS THESIS

THE ELECTRONICAL STRUCTURE AND NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF CORE-SHELL A SPHERİCAL QUANTUM DOT

Hasan Cihat İSLAMOĞLU

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

Advisor: Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
2013, 62 Pages

Jury
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Associate Prof. Dr. İbrahim KARABULUT
Assistant Prof. Dr. Ersin BOZKURT

In this study, the electronic and nonlinear optical properties of both single spherical quantum dot with one electron and of multilayer spherical quantum dot with many electrons are investigated theoretically. The effect of hydrogenic impurity is also taken into account in the calculations. The numerical calculations are performed using the finite difference method based on matrix diagonalization technique. The results obtained show that both the structural parameters of quantum dot and the hydrogenic impurities dramatically effect the optical properties.

Keywords: Spherical quantum dot, hydrogenic impurity, finite difference methods.

ÖNSÖZ

Bu çalışmayı gerçekleştirebilmem için bana imkân sağlayıp, çalışmamın her aşamasında yol gösteren, teşvik ve yardımlarını esirgemeyen, elindeki tüm imkânları sınırsız olarak sunan değerli hocam Doç. Dr. İbrahim KARABULUT'a teşekkürlerimi sunmayı zevkli bir görev sayarım.

Bu çalışmada tez danışmanlığımı üstlenen sayın hocam Prof. Dr. Haluk ŞAFAK'a teşekkür ederim. Beraber çalışmakta mutluluk duyduğum değerli grup arkadaşım Mustafa Sena ÇAKICI'ya teşekkür ederim.

Ayrıca her zaman yanımda bulunan aileme saygı ve sevgilerimi sunarım.

Hasan Cihat İSLAMOĞLU

KONYA-2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **ix**

1. GİRİŞ **1**

2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR **3**

2.1 Kuantum Noktalarının Yapısı 4
2.2. Tek Bir Küresel Kuantum Noktası 6
2.3. Çok Tabakalı Yarıiletken Küresel Kuantum Noktası 9
2.4. Düşük Boyutlu Yapılarda Yabancı Atom Problemi 11

3. SAYISAL YÖNTEMLER **13**

3.1. Varyasyon Yöntemi 13
3.2. Sonlu Farklar Yöntemi 15
3.3. Fark Operatörleri 15
3.3.1. İleri fark operatörü: 15
3.3.2. Geri fark operatörü: 15
3.3.3. Merkezi fark operatörü: 16
3.4. Sonlu Farklar Yönteminin Kuantum Noktasına Uygulanışı 16

4. ÇİZGİSEL OLMAYAN OPTİK **19**

4.1. Lineer ve Üçüncü Mertebe NL Soğurma Katsayıları 19
4.2. Lineer ve Üçüncü Mertebe NL Kırılma İndis Değişimi 20
4.3. Şiddete Bağlı NL Soğurma Katsayısı ve Kırılma İndisi 21

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR **26**

5.1. Tek Bir Küresel Kuantum Noktasındaki Sonuçlar 26
5.1.1. Elektronik Sonuçlar 26
5.1.2. Soğurma Katsayısı Değişimleri 29
5.1.3. Kırılma İndisi Değişimleri 32
5.2. Çok Tabakalı Yarıiletken Küresel Kuantum Noktasındaki Sonuçlar 34
5.2.1. Elektronik Sonuçlar 35
5.2.2. Elektron Yoğunlukları 39
5.2.3. Soğurma Katsayıları 42
5.2.4. Kırılma İndis Değişimleri 45

6. YORUM ve ÖNERİLER **48**

KAYNAKLAR 50

ÖZGEÇMİŞ..... 53

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

m^* : Elektronun etkin kütlesi

ε_s : Statik dielektrik sabiti.

R, ϕ : Dalga fonksiyonu.

E : Enerji.

V : Potansiyel enerji yüksekliği.

$\hbar$: İndirgenmiş planck sabiti.

e : Elektronun yükü.

σ : Elektron yoğunluğu.

M_{fi} : Geçiş matris elemanı.

n : Kırılma indisi.

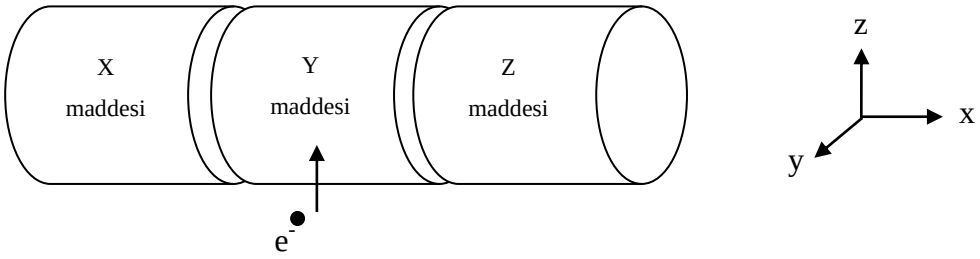
α : Soğurma katsayısı.

1. GİRİŞ

Günümüzde düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin araştırılması kuantum fiziği ile açıklanabilen davranışlara sahip yeni elektronik devre elemanlarının üretilmesini mümkün kıldığından büyük bir ilgi çekmektedir. Düşük boyutlu yarıiletken sistemler literatürdeki birçok varsayımları ve deneysel sonuçları doğrulamak için de bir test alanı oluşturmuşlardır.

Nanometre ölçeğindeki düşük boyutlu sistemler, son yıllarda yoğun madde fiziğinde yeni bir araştırma alanı oluşturmaktadır. Kuantum kuyuları, telleri ve noktaları gibi bu düşük boyutlu sistemlerin üretimindeki teknolojik ilerlemeler daha ileri aygıtları üretebilmeyi mümkün kılmıştır. Elektronları kuantum mekaniksel olarak tüm uzaysal yönlerde hapsedilir ve böylelikle çok küçük yarıiletken yapılar elde edilir. Bu yapılarda doğal uzunluk ölçeği birkaç nanometre basamağındadır ve çoğunlukla sıfır boyutlu cisimler veya kuantum noktaları olarak adlandırılır. Bu ölçekteki bir sistemde kuantum etkileri kendini güçlü olarak gösterir (Kervan, 2004). Bu nedenle de kuantum noktaları, alışılmış benzerlerinden oldukça değişik yeni fiziksel etkiler göstermektedir. Bu yüzden son zamanlarda kuramsal ve deneysel araştırmaların çoğunda bu sistemlerin çeşitli fiziksel özelliklerini anlamak ve incelemek için çalışılmaktadır. Bu özelliklerin başında da elektronik özellikleri gelmektedir.

Düşük boyutlu yapılar Şekil 1.1'de de gösterildiği gibi farklı tür yarıiletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulmaktadır (Kittel, 1996). Kristal büyütme teknolojisinde sağlanan gelişmeler ile yarıiletkenler çok hassas bir biçimde bir atomik tabaka üzerine başka bir atomik tabaka yerleştirilerek büyütülebilmektedir. Bu yöntemler sırasıyla Moleküler Demet Büyütme, Kimyasal Buhar Depolama, ve Sıvı Faz Büyütme yöntemleridir. Bu yöntemlerle, boyutları 10^{-6} cm'den daha küçük düşük boyutlu yapılar yapma olanağına kavuşuldu (Ilaiwi ve Tomak,1999). Bu gelişmeler ışığı altında düşük boyutlu yapı olarak tanımlanan kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktaları üzerine bir çok araştırma yapılmıştır (Lee ve Spector, 1983; Latgé vd. ,1992; Ulaş vd., 1997; Latgé,1996; Wang ve Berggren, 1998; Barticevic vd., 2000; Cantele vd., 2000). Düşük boyutlu yapıların elektronik ve optik özellikleri halen yaygın olarak araştırılmaktadır. Optiksel özellikler kuantum kuyu yapılarında daha sık çalışılmakla birlikte kuantum nokta yapılarında da önemli çalışmalar yapılmıştır (Baskoutas ve Karabulut, 2008; Karabulut ve ark., 2008). Günümüzde düşük boyutlu yarıiletken yapıların araştırılması kuantum fiziği ile açıklanabilen davranışlara sahip yeni



Şekil 1.1. Düşük boyutlu yapılar farklı tür yarıiletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulur.

elektronik devre elemanlarının üretilmesini mümkün kıldığından büyük ilgi çekmektedir. Düşük boyutlu yarıiletken sistemlerden oluşan nanometre boyutunda elektronik ve optoelektronik cihazlar günümüz bilgisayar ve haberleşme endüstrisinde kullanılan devrelerin temel yapıtaşlarını oluşturmaktadır.

Düşük boyutlu yapıların akım iletiminde en önemli etken olan elektron veya deşik yoğunluğu yapıya yabancı atom katılmasıyla kontrollü bir biçimde artırılabilir. Bu katkının yapıya kazandırdığı özellikler gerek uygulamadaki önemi gerekse içerdiği zengin fizik nedeniyle son derece ilgi gören bir araştırma konusu olmuştur.

Bu tez çalışmasında, ilk olarak içerisinde tek elektron bulunduran tek bir yarıiletken kuantum noktası modeli göz önüne alınmıştır. Bu modelin elektronik yapısı, sonlu farklar metodu ile elde edilmiştir. Elektronik yapıda nokta yarıçapının etkileri ile safsızlığın olduğu ve olmadığı durum için detaylı olarak çalışılmıştır. Bu elektronik sonuçları kullanarak detaylı olarak optiksel özellikler incelendi. İkinci aşama olarak içerisinde çok elektron bulunduran çok tabakalı yarıiletken kuantum noktası göz önüne alınmıştır. Bu model için enerji ve bu enerjilere karşılık gelen dalga fonksiyonları sonlu farklar metodu ile etkin kütle yaklaşımı altında çözülmüştür. Safsızlığın olduğu (Z=1) ve safsızlığın olmadığı (Z=0) durumda, taban durum ve uyarılmış durumlara ait enerji seviyeleri, dalga fonksiyonları gibi elektronik özelliklerin tabaka kalınlıklarıyla değişimine bakıldıktan sonra, bulunan elektronik özellikleri kullanarak optiksel özellikler ayrıntılı olarak incelenmiştir.

Tez çalışmasının ikinci bölümde, düşük boyutlu yarıiletken yapılarla ilgili genel bilgiler verilmiştir. Üçüncü bölümde, sayısal yöntemlerden bahsedilmiştir. Dördüncü bölüm, çizgisel olmayan optik ile ilgidir. Beşinci bölümde elde edilen sonuç ve tartışmalar verilmiştir.

2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR

Düşük boyutlu yapılar, genel anlamıyla kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak sınıflandırılırlar. Kuantum telleri olarak adlandırılan bir boyutlu yapılara elektronları, teknolojideki çok önemli gelişmeler sonucu sınırlandırmak mümkün hale gelmiştir. Kuantum telindeki elektronlar iki yöndeki hareketleri sınırlandırılmıştır, tek bir yönde ise serbestçe hareket ederler. Böyle bir elektron sistemi, bir boyutlu elektron gazı olarak adlandırılır (Chuu ve ark., 1992).

Kuantum noktasında elektronlar hiçbir serbestlik yönüne sahip değildir. Bir kuantum noktasının hapsedilme uzunluğu üç yönde de aynı basamaktaysa üç boyutlu kuantum noktası olarak adlandırılır. Elektronların veya deşiklerin, ince bir yarı iletken katmana hapsedilmesiyle sağlanan boyuttaki azalmanın elektron hareketinde önemli değişikliklere yol açtığı görülür. Elektronların çevresindeki boyutu, iki boyutlu kuantum kuyusundan bir boyutlu kuantum teline, oradan da sıfır boyutlu kuantum noktasına azaltmakla geliştirilebilir. Bu durumda boyut, elektronların hareketindeki serbestlik derecesi sayısını gösterir. Genellikle bir kuantum kuyusundaki elektronlar bir yönde sınırlandırılmış olmasına karşın, kuantum telinde iki yönde sınırlandırılmıştır. Böylece serbestlik derecesi bire inmiştir. Kuantum noktasındaki elektronlarsa, her üç yönde de sınırlandırılmış olduğundan, serbestlik derecesi sıfıra inmiştir. Serbestlik derecesi,"S"; sınırlandırılmış yönlerin sayısı, "H" ile gösterilirse, bütün katıhal sistemleri için,

$$S+H=3 \tag{2.1}$$

eşitliği yazılabilir (Harrison, 2005). Dört olası durum Tablo 1.1'de gösterilmiştir. İndirgenmiş boyutlu sistemleri, sınırlandırılmış yönlerin H sayısından ziyade elektron hareketinde geri kalan S serbestlik derecesi sayısıyla adlandırmak adet olmuştur.

Tablo 1.1. Çeşitli yapılar için, sınırlandırılmış yön ve serbestlik derecesi sayıları

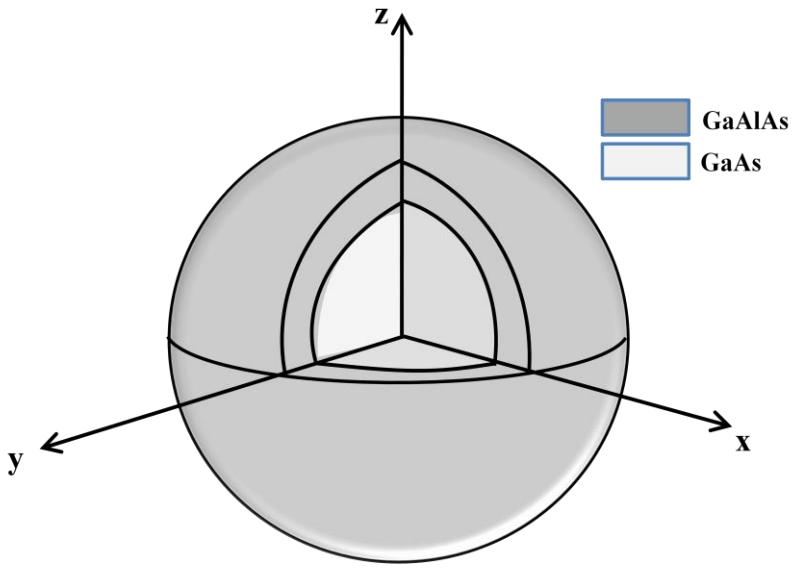
Sistem	Sınırlandırma Sayısı	Serbestlik Derecesi
Hacimsel	0	3
Kuantum kuyusu	1	2
Kuantum teli	2	1
Kuantum noktası	3	0

2.1 Kuantum Noktalarının Yapısı

Kuantum noktaları, üç uzay boyutunda kuantum mekaniksel olarak sınırlandırılmış sıfır boyutlu sistemlerdir. Bu yapılarda doğal uzunluk ölçeği dev atomlarla benzer ölçülürde, birkaç nanometre basamağındadır. Tıpkı doğal atomlar gibi istenildiğinde değiştirilebilen elektron sayısı içerir. Enerji düzeyleri kararlı olup spektrumu kesiklidir. Bu yüzden kuantum noktaları kimi kez yapay atom olarak da anılır. Tıpkı doğal bir atomdaki gibi bir kuantum noktasında da elektronlar merkezcil bir yere doğru çekime uğrar. Başka bir deyişle, bu kuantum noktasında elektronlar aslında bir potansiyel kuyusuna hapsedilmiştir.

Son yıllarda, kuantum noktalarına olan ilginin artmasının nedenlerinden birincisi doğal uzunluk ölçeğinin nanometre basamağında olmasıdır. Bu nedenle kuantum noktasına kuantum mekaniğinin çalışıldığı bir laboratuar gibi de bakılır. İkincisi, belki daha da önemlisi, kuantum nokta sistemlerinin çok ilginç ve aynı zamanda hacimsel benzerlerinden oldukça değişik birçok fiziksel etki göstermeleridir. Ayrıca kuantum nokta yapılarını iki ve üç boyutta anlamak olanaklıdır; bu yapılar değişik biçim ve ölçülerde üretilebilir. Bu örnek esnekliği ve yeni fiziksel etkiler kuantum nokta yapılarının çok hızlı sistemler olan mikro elektronik aygıtlardaki uygulaması açısından umut verici kılar.

Kuantum noktaları, üç yönde sınırlandırılmış nanoyapılar olduğu için kuantum kuyusu ve kuantum tellerinden mantıksal olarak ilerlemeyi gösterir. 1970'lilerin başlarında boyutu ikiye sınırlandırılmış kuantum kuyuları olarak adlandırılan sistemlerin elektronik yapıları üzerinde araştırmalar başladı. Böyle bir kuantum kuyusunda elektronlar yalnızca iki uzaysal yönde hareket edebilir. Diğer yöndeki hareket sınırlandırılmıştır. Bu yüzden kuantum kuyu yapısında, elektronlar iki boyutlu elektron gazı oluşturuyor denir. Kuantum kuyusu, yüksek enerjili iletkenlik bandına sahip iki yarıiletken katman arasına yerleştirilmiş, çok ince, düz bir yarıiletken



Şekil 2.1. Küresel kuantum noktasının şematik gösterimi.

katmandan oluşur. İki malzemenin yasak enerjileri arasındaki fark, elektronları ince bir katmana hapseder. Genel olarak kuantum kuyuları oluşturmak için kullanılan malzeme, GaAs'dır. Bariyer olarak kullanılan malzeme de $Al_{1-x}Ga_xAs$' dır. Kuantum kuyuları, çeşitli aygıtlarda kullanılmaktadır. CD çalarlarda kullanılan lazer diyotlar ile uydu televizyonlarında kullanılan mikrodalga alıcılar bunlara örnektir (Jie, 2002).

Şekil 2.1 de verilen küresel kuantum noktasında elektron x,y ve z yönlerinde potansiyel engelleri ile sınırlandırılmıştır.

Sonlu kuantum noktasının potansiyeli,

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & |x| \le \frac{L_x}{2} \quad ,|y| \le \frac{L_y}{2} \quad ,|z| \le \frac{L_z}{2} \\ V_0 & |x| > \frac{L_x}{2} \quad ,|y| > \frac{L_y}{2} \quad ,|z| > \frac{L_z}{2} \end{cases} \tag{2.2}$$

biçimindedir ve sonlu kuantum noktası için Schrödinger denklemini

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \tag{2.3}$$

olarak yazılır. Bu denklem analitik olarak çözülebilir. Ancak bir çok potansiyel profili için analitik çözüm çok zor veya imkânsız olabilmektedir. Böyle durumlarda sonlu

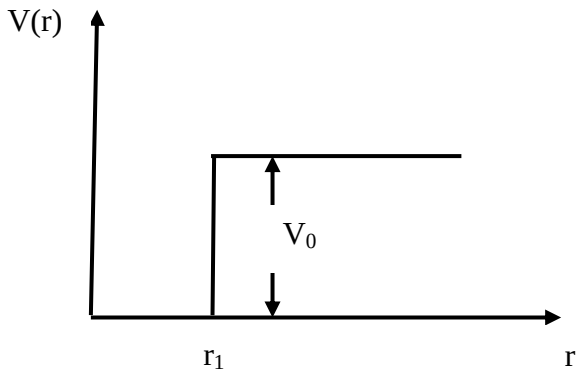
farklar yöntemi gibi nümerik yöntemler kullanılabilir. Bu yöntem bir sonraki başlıkta incelenecektir.

Kuantum noktaları, birçok yöntem kullanılarak üretilebilir. Ancak başlıca amaç, elektronları küçük bir bölgeye sınırlandırmaktır. Bu sınırlandırılmayı yapmanın bir yolu, örneğin metal plâkayı yalıtıcıyla kaplayarak malzemenin sınırlarını kullanmaktır. Aynı zamanda, elektrik alan uygulanarak elektronların hareketleri yarıiletken içinde küçük bir bölgeye kısıtlanabilir. Kuantum noktalarını üretmek için kullanılan yöntemlerin çoğunda başlangıç noktası, yarıiletken bir kuantum kuyusunda iki boyutlu elektron gazının oluşturulmasıdır. Bir kuantum nokta yapısı şimdi ek sınırlamalar elde edilerek, böyle bir sistemden üretilebilir.

2.2. Tek Bir Küresel Kuantum Noktası

Bu bölümde tek bir küresel bir kuantum noktasında tek elektronun davranışını inceleyeceğiz, Şekil 2.2'de gösterilen r_1 yarıçaplı bir küresel kare kuyu içindeki bir elektronun hareketi göz önüne alınmıştır (Banyai ve Koch, 1993).

Şekil 2.2'de gösterilen küresel potansiyel kuyusu içerisinde hareketli bir parçacık için Schrödinger denkleminin küresel koordinatlarda



Şekil 2.2. Küresel bir kare kuyu potansiyeli

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+V(r)+\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi=E\psi \quad (2.4)$$

ifadesi yazılır. Burada $\psi(r,\theta,\varphi)$ dalga fonksiyonuna değişken ayrımı yöntemini uyguladığımızda,

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi) \quad (2.5)$$

şeklinde bir çözüm bulunabilir. Bazı işlemler yapıldıktan sonra, eşitliğin her iki tarafı $R(r)Y(\theta,\varphi)$ ile bölünüp, r'ye bağlı terimler bir tarafa ayrılırsa, Denk. (2.6) elde edilir.

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right] \quad (2.6)$$

eşitliğin sol tarafı radyal Schrödinger denklemidir ve çözülebilmesi için V(r) potansiyelinin bilinmesi gerekir (Karaoğlu, 1994).

Denk. (2.6) ile verilen eşitliği çözebilmek için bir λ gibi bir sabite eşitlenip çözülme yoluna gidilir, burada bu sabit için özel bir değer verilecektir, çünkü; küresel harmoniklere bağlı kısmın $\ell(\ell+1)$ açısal momentum özdeğerlerini verdiği görülür. Bu durumda radyal Schrödinger denkleminde $\lambda=\ell(\ell+1)$ özdeğeri yerine konulursa,

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m^*r^2}\right]R(r)=0 \quad (2.7)$$

ifadesi elde edilir.

Denk. (2.7) ile verilen ifadeye özel bir potansiyel tanımlanarak sonsuz derin küresel bir potansiyel kuyusu için analitik olarak çözülebilir. Bu durumda potansiyel ifadesi

$$V(r)=\begin{cases}0 & r\le r_1\\ \infty & r>r_1\end{cases} \quad (2.8)$$

şeklinde seçilir, radyal Schrödinger denklemi küresel koordinatlarda

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\left[\frac{2m^*E}{\hbar^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R(r)=0 \tag{2.9}$$

şeklinde olur. Bu denklemi daha sadece ve açık olarak yazabilmek için iki tane sabit tanımlayacağız;

$$k=\frac{2m^*E}{\hbar^2} \quad ve \quad \rho=kr \tag{2.10}$$

dönüşümünü Denk. (2.9) da kullanarak

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho}+\left[1-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R(\rho)=0 \tag{2.11}$$

ifadesini elde ederiz. Bu denklem küresel Bessel diferansiyel denklemine benzediği için bu tip bir denklemin genel çözümü

$$y(x)=Aj_n(x)+Bn_n(x) \tag{2.12}$$

şeklindedir. Dolayısıyla Denk. (2.11) ile verilen denklemin çözümü,

$$R(\rho)=Aj_\ell(\rho)+Bn_\ell(\rho) \tag{2.13}$$

olur. Bu dalga fonksiyonları, r = 0 noktasında Neumann fonksiyonları ıraksak olduğundan B = 0 alınır. Buradan da küresel kuyu içindeki bir parçacığın ℓ'ye bağlı dalga fonksiyonu

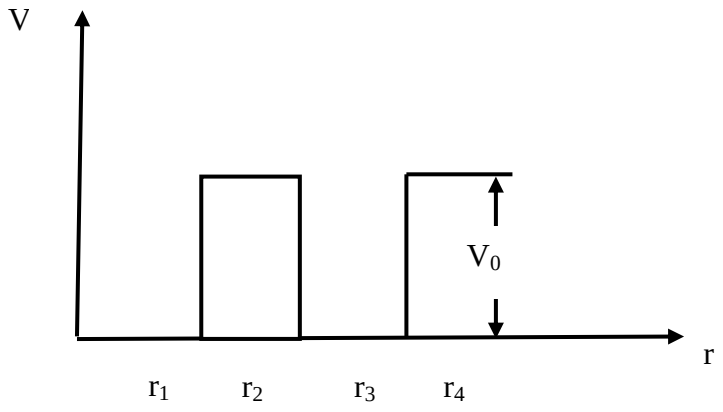
$$R_\ell(r)=A_\ell j_\ell(kr) \tag{2.14}$$

olur. (2.14) denkleminin r = 0'daki çözümü yakınsaktır. r = r_1 sınırında ise potansiyel sonsuz olduğundan $j_\ell(kr_1)=0$ sınır şartı olmalıdır. Buradan yola çıkarak, ℓ'nin değerlerine göre elde edilecek Bessel fonksiyonlarının köklerinden, parçacığın kuyu içerisindeki enerji özdeğerleri belirlenebilir.

2.3. Çok Tabakalı Yarıiletken Küresel Kuantum Noktası

Bu bölümde hesaplamalarımızda etrafı $Ga_{1-x}Al_xAs$ ile çevrelenmiş GaAs içinde iyonize olmuş bir verici atom elektronunun hareketi üç boyutta sınırlanmış GaAs kuantum noktasını kulacağız. Teknolojide ilerlemeler sonucunda araştırmacılar farklı şekillerdeki kuantum nokta yapıları ile çok tabakalı küresel kuantum noktaların üretimini de başarmışlardır. Çok tabakalı kuantum noktasında bir elektronu tutmak için bir potansiyel duvarı olması yeterlidir. Bu sınırlandırıcı potansiyel temelde, kuantum nokta yapısının geometrik şekliyle ilişkilidir.

Çok tabakalı yarıiletken kuantum nokta yapıya ait potansiyel profili, Şekil 2.2'de gösterilmiştir. Bu sistemin çözebilmek için, sisteme ait Hamiltoniyen eşitliği ve buna bağlı olarak Schrödinger denklemini yazacağız. Bu denklemi gerekli yaklaşım yöntemleri ve hesaplama teknikleri ile çözeceğiz. Bunun sonucunda, sisteme ait enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları gibi elektronik özelliklerini bulacağız. Çok elektronlu sisteme ait radyal Schrödinger denklemi safsızlık teriminin de katkısıyla Denk.(2.4)'de benzer formda aşağıdaki gibi yazılabilir:



Şekil 2.2. Çok tabakalı küresel kuantum nokta yapının potansiyel profili

$$-\frac{\hbar}{2}\left(\frac{d}{dr}\frac{1}{m^*(r)}\frac{d}{dr}\right)R(r) + \left[V(r) - \frac{Ze^2}{4\pi\kappa(r)r} + \frac{\hbar^2}{2m^*(r)}\left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) - e\Phi_{\varepsilon-\varepsilon} + V_{xc}\right]R(r) = ER(r) \quad (2.15)$$

Burada, m^* konuma bağlı elektronun etkin kütlesi, Z safsızlık yükü , ℓ açısal momentum kuantum sayısı $\Phi_{\varepsilon-\varepsilon}$ elektronlar arasındaki Hartree potansiyeli, $V(r)$ sınırlandırıcı potansiyeli, V_{xc} değiş tokuş korelasyon potansiyelidir. V_{xc} değiş tokuş korelasyon potansiyeli

$$V_{xc}[n(r)] = V_x[n(r)] + V_c[n(r)] \quad (2.16)$$

Değiştokuş potansiyeli

$$V_x = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} n(r)^{1/3} \quad (2.17)$$

ile tanımlanır. Korelasyon potansiyelini tanımlamak için önce

$$r_s = \left[\frac{3}{4\pi n(r)}\right]^{1/3} \quad (2.18)$$

Wigner-seitz yarıçapı olarak tanımlanır. Korelasyon potansiyeli de

$$V_c = \begin{cases} \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\left[A\ln r_s + B - \dfrac{A}{3} + \dfrac{2}{3}Cr_s\ln r_s + \dfrac{1}{3}(2D-C)r_s\right], & r_s < 1 \\ \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\left[\dfrac{\gamma}{1+\beta_1\sqrt{r_s}+\beta_2 r_s}\dfrac{1+\frac{7}{6}\beta_1\sqrt{r_s}+\frac{4}{3}\beta_2 r_s}{1+\beta_1\sqrt{r_s}+\beta_2 r_s}\right], & r_s \geq 1 \end{cases} \quad (2.19)$$

biçiminde tanımlanır (Perdew ve Zunger, 1981).

Burada tanımlanan sabitler ise

$$\begin{aligned} A &= 0{,}0311 & \gamma &= -0{,}1423 \\ B &= -0{,}048 & \beta_1 &= 1{,}0529 \\ C &= 0{,}0020 & \beta_2 &= 0{,}3334 \\ D &= -0{,}0116 \end{aligned} \tag{2.20}$$

şeklinde tanımlanır (Ceperley ve Alder, 1980).
Hartree potansiyeli Poisson denklemiyle

$$\nabla^2 \Phi_{\varepsilon-\varepsilon} = \frac{e n_\varepsilon(r)}{\kappa(r)} \tag{2.21}$$

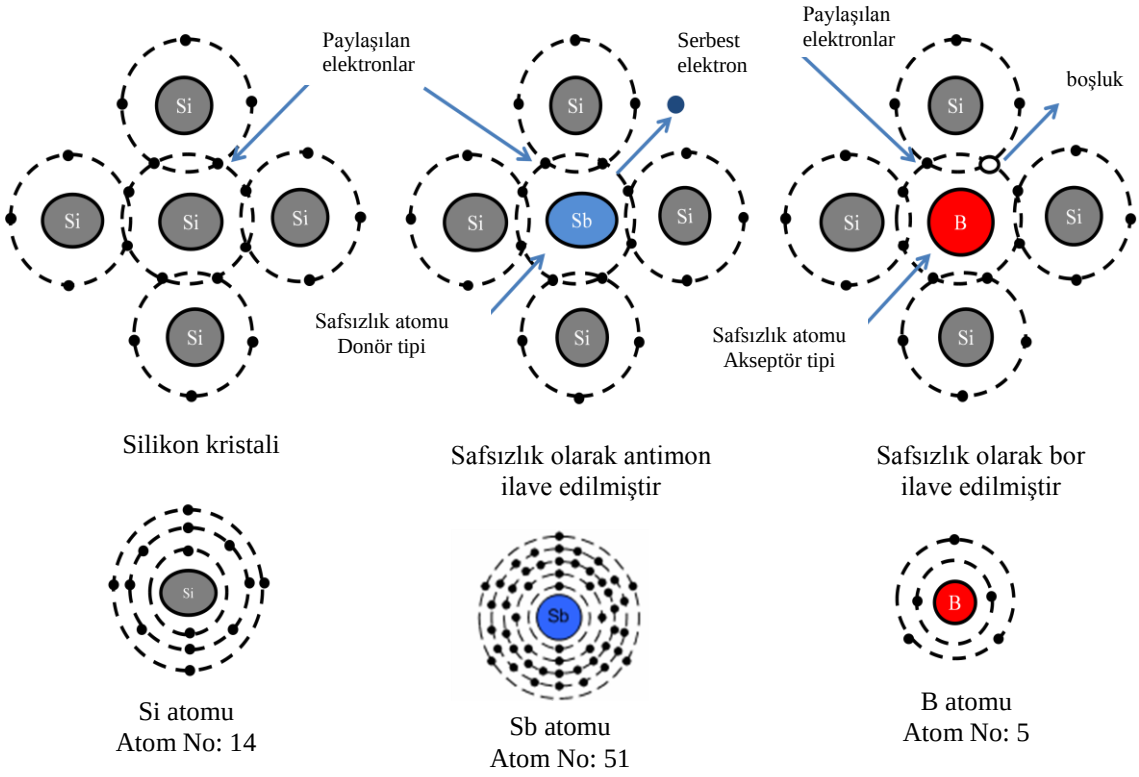
verilir. Burada, $n_\varepsilon(r)$ elektron yoğunluğu, $\kappa(r)$ yapının dielektrik katsayısı.
Elektron yoğunluğu ifadesi

$$n_\varepsilon(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{p} 2(2\ell+1) \sum_{n=1}^{np} \left|R_{n,\ell}(r)\right|^2 + \frac{1}{4\pi} q \left|R_{nq,\ell q}(r)\right|^2 \tag{2.22}$$

şeklinde verilir. $2(2\ell+1)$ spin ve manyetik dejenerelikler, *p* ve *np* sırasıyla tam dolu durumların açısal momentum kuantum sayısı ve baş kuantum sayısı, q en son durumdan kalan elektronların sayısı, nq, ve ℓq sırasıyla son durumdaki baş kuantum sayısı ve açısal momentum kuantum sayısı (Şahin ve Tomak, 2005).

2.4. Düşük Boyutlu Yapılarda Yabancı Atom Problemi

Yarıiletken bir malzemenin kristal örgüsü içerisine bir safsızlığın doğrudan yerleştirilmesi, bu malzemenin elektronik özelliklerini değiştirir ve taşıyıcı sayısı arttırılabilir. Bu katkının yapıya kazandırdığı özellikler gerek uygulamadaki önemi gerekse içerdiği zengin fizik nedeniyle üzerinde çok çalışılan bir araştırma alanıdır (Aktaş, 1998; Bastard, 1988). Yarıiletken kristal örgüsü içine konulan yabancı bir atom, çevresindeki komşu atomlarla bağ yapar. Bu durumu bir örnekle açıklayacak olursak



Şekil 2.3. Saf silikon kristali, verici safsızlık antimon atomu ve alıcı safsızlık bor atomunun yapısını ve yarı iletkenlerin dokusunu gösteren diyagramlar.

Şekil 2.3. de görülen IV. Grup elementi olan Silisyuma V. Grup elementi olan Antimonun (Sb) kristal örgüsündeki bir silikon atomu ile yer değiştirmesi durumunda yapıya bir tane bağlı olmayan elektron konulmuş olur. Bu elektron kolayca iyonize olur ve iyonize olan bu elektron kristale geçer. Böyle elektron vermeye yatkın, Antimon (Sb) gibi, atomlar donor atomlar olarak adlandırılır. Eğer safsızlık atomu diyagramda verilen Şekil 2.3. de görüldüğü gibi III. Grup elementi olan Bor (B) eklenirse bu durumda komşu atomlarla bağ yapabilmek için gerekli olan elektronları yoktur. Böylelikle kristal örgü içerisinde yakın bir bağdan elektron alabilir. Bunun sonucunda valans bandında boş bir durum meydana gelir. Bu tip, Bor (B) gibi elektron almaya yatkın atomlar akseptör olarak adlandırılır (Montenegro ve Merchancano, 1992).

3. SAYISAL YÖNTEMLER

Kuantum mekaniğinde karşımıza çıkan problemlerin çoğunda, sistemin Schrödinger denklemini analitik olarak çözmek çok zor veya imkânsızdır. Bu durumda sayısal yöntemlere başvurulur. Bu yöntemlerden bazıları varyasyon ve sonlu farklar yöntemleridir. Varyasyon yöntemi sonlu farklar yöntemine göre daha karmaşık olduğu için biz bu çalışmamızda sonlu farklar yöntemini kullandık. Sonlu farklar yönteminin her türlü geometrik biçimdeki kuantum noktasına uygulanabilme avantajı vardır. Sonuç olarak bu yöntemle bir fiziksel problemi temsil eden iki boyutlu diferansiyel denklemler hızlı bir şekilde nümerik olarak çözülebilmektedir.

3.1. Varyasyon Yöntemi

Varyasyon yöntemi başlangıçta tahmin ettiğimiz dalga fonksiyonunu geliştirmeyi ve taban durum enerjisi minimize ederek bulmayı amaçlayan bir yöntemdir. Bu yaklaşık yöntem sistemin en düşük enerji durumuna karsı gelen öz fonksiyonun biçimi hakkında tahminde bulunabildiğimiz özdeğer problemlerine uygulanabilir.

Bir H Hamiltoniyenin özdegerleri E_n ve özvektörleri U_n olsun. Taban durumu için

$$HU_0 = E_0 U_0 \tag{3.1}$$

dır. Varyasyon işlemini uygulayacağımız sistemin herhangi bir ψ durumunda Hamiltoniyenin beklenen değeri için aşağıdaki eşitlik yazılabilir.

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \tag{3.2}$$

ψ fonksiyonu normalize ise payda bire eşit olur. Yukarıdaki eşitlik ancak $\psi = U_0$ durumunda mümkündür. Her ψ durumunda $\{U_i\}$ özvektörlerinin süperpozisyonu olarak yazılabileceği için

$$\psi = \sum_i^{\infty} c_i U_i \qquad \sum_i |c_i|^2 = 1 \quad \text{(Normlanmış } \psi \text{ durumu)} \tag{3.3}$$

$$\begin{aligned} E &= (\psi, H\psi) = \sum_i \sum_j c_i^{*} c_j (U_i, HU_j) \\ &= \sum_i \sum_j c_i^{*} c_j E_j (U_i, U_j) = \sum_i \sum_j c_i^{*} c_j E_j \delta_{ij} \\ &= \sum_i c_i^{*} c_i E_i = \sum_i |c_i|^2 E_i \end{aligned} \tag{3.4}$$

olur. Her zaman taban durumu diğer durumlardan küçük enerjili olduğu $(E_i \geq E_0)$ için, serinin her teriminde E_i yerine E_0 alırsak eşitliğin sağ tarafı küçülür.

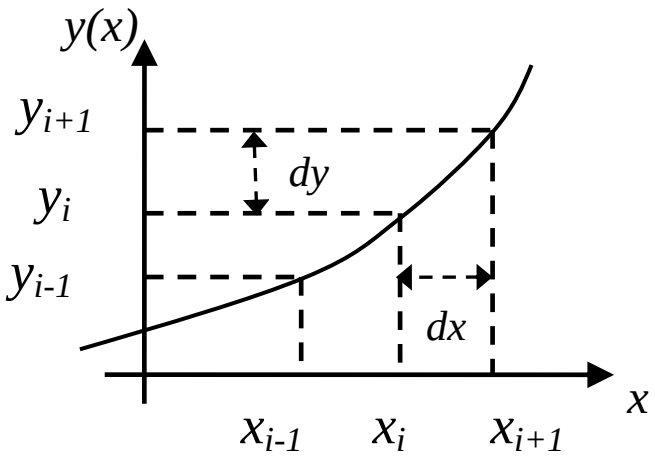
$$\begin{aligned} E &\geq \sum_i |c_i|^2 E_0 = E_0 \sum_i |c_i|^2 \\ E &\geq E_0 \end{aligned} \tag{3.5}$$

bu eşitliğe göre E değeri ne kadar aşağı çekilebilirse, taban durumuna o kadar yaklaşılmış olunur. Seçilen ψ deneme dalga fonksiyonu bir λ parametresine bağlı ise, E değeri bu λ parametresine göre nimimize edilerek taban durumuna iyice yaklaşılır. Bu değişken $\langle H \rangle$ 'nin mümkün en küçük değerini alıncaya kadar değiştirilir.

$$\begin{aligned} &\psi = \psi(\vec{r}, \lambda) \\ &E(\lambda) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \\ &\frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Bu yöntem daha genel olarak $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, ..., \lambda_n)$ gibi birden çok parametreyle uygulanabilir (Karaoğlu, 1994; Köksal, 1992).

3.2. Sonlu Farklar Yöntemi



Şekil 3.1. Sonlu farklar yöntemi ile fonksiyonun gösterimi.

Sonlu farklar yöntemi, analitik olarak çözümü mümkün olan veya olmayan diferansiyel denklemlerin çözümlerini sayısal olarak elde etmemizi sağlayan yaklaşık bir yöntemdir.

3.3. Fark Operatörleri

Herhangi bir diferansiyel denklem aşağıdaki fark operatörleri yardımı ile sayısal olarak çözümlenebilir. Fark operatörleri aşağıdaki formlarda ifade edilir;

3.3.1. İleri fark operatörü:

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x} \tag{3.7}$$

$$y_i'' = \frac{y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}}{\Delta x^2} \tag{3.8}$$

3.3.2. Geri fark operatörü:

$$y_i' = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x} \tag{3.9}$$

$$y_i'' = \frac{y_i - 2y_{i-1} + y_{i+2}}{\Delta x^2} \tag{3.10}$$

3.3.3. Merkezi fark operatörü:

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x} \tag{3.11}$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_i - y_{i-1}}{\Delta x^2} \tag{3.12}$$

3.4. Sonlu Farklar Yönteminin Kuantum Noktasına Uygulanışı

Hidrojenik safsızlık içeren sonlu küresel kuantum noktasında sınırlandırılmış tek elektron için radyal Schrödinger denklemi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\right)R(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)\right]R(r) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_s r}R(r) = E_r R(r) \tag{3.13}$$

biçiminde verilir. Bu denklemde 1. ve 2. türevlerin zorluğu göz önüne alınarak aşağıdaki dönüşümle bu denklemi daha sade bir şekilde yazabiliriz. Bu dönüşüm

$$\phi(r) \equiv R(r)r \tag{3.14}$$

(3.14) denklemini (3.13)'deki denklemde yazarak ve bazı matematiksel işlemlerden sonra (3.13) denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\phi(r)}{dr^2} + \left[V(r) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_s r} - E\right]\phi(r) + \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\phi(r) = 0 \tag{3.15}$$

denklemine dönüşecektir.

Bu denklemi elde ettikten sonra yukarıda verilen fark operatör denklemlerinden merkezi fark operatörü kullanılarak (3.15) denkleminde yerine yazacağız. (3.15) denklemindeki ikinci türev ifadesi;

$$\frac{d^2\phi(r_j)}{dr^2} = \frac{\phi(r_{j-1}) - 2\phi(r_j) + \phi(r_{j+1})}{h_0^2} \tag{3.16}$$

biçiminde yazılabilir.

Bu ifadeyi (3.15) denkleminde yerine yazarak

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{\phi(r_{j-1}) - 2\phi(r_j) + \phi(r_{j+1})}{h_0^2}\right] + \left[V(r) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_s r} - E\right]\phi(r_j) + \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\phi(r_j) = 0 \tag{3.17}$$

(3.17) denklemini tekrar düzenleyerek

$$-\frac{\hbar^2}{2m^* h_0}\phi(r_{j-1}) + \left[\frac{\hbar^2}{m^* h_0} + V(r_j) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_s r} - E + \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\phi(r_j) - \frac{\hbar^2}{2m^* h_0}\phi(r_{j+1}) = 0 \tag{3.18}$$

denklemi elde edilir.

(3.18) denkleminin katsayılarını aşağıdaki sabitlere atayarak tekrar yazacağız. Bu katsayılar aşağıdaki gibidir.

$$A = \frac{\hbar^2}{2m^* h_0} \tag{3.19}$$

$$B = \frac{\hbar^2}{m^* h_0} + V_j - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_s r} + \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$$

(3.19) ifadelerini kullanarak, (3.18) denklemini

$$-A_{j-1}\phi(r_{j-1}) + (B_j - E)\phi(r_j) - C_{j+1}\phi(r_{j+1}) = 0 \tag{3.20}$$

biçiminde yazarız.

(3.20) denkleminde j = 1, 2, 3, . . . , *N* arasında değiştirerek

$$\begin{bmatrix} (B_1 - E) & -A_2 & 0 & . & . \\ -A_2 & (B_2 - E) & -A_3 & . & . \\ 0 & -A_3 & (B_3 - E) & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & -A_{N-1} & (B_{N-1} - E) & -A_N \\ . & . & . & -A_N & (B_N - E) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ . \\ \phi_{N-1} \\ \phi_N \end{bmatrix} = 0 \tag{3.21}$$

biçimindeki simetrik üç bant matrisi elde ederiz. Bu matrisin özdeğerleri sistemin enerjilerine matrisin özvektörleri ise sistemin dalga fonksiyonlarına karşılık gelir.

4. ÇİZGİSEL OLMAYAN OPTİK

4.1. Lineer ve Üçüncü Mertebe NL Soğurma Katsayıları

Bir yarıiletken kuantum kuyusundaki kesikli seviyelerin varlığı deneysel olarak 1974 yılında gösterildi (Dingle ve ark. 1974). Bu kesikli seviyeler arasındaki geçişlerle ilgili ilk çalışma West ve Eglash (1985) tarafından yapıldı. Bu çalışmada, bir GaAs kuantum kuyusunun iletim bandı içerisindeki ISB (intersubband) optiksel soğurma katsayısı deneysel olarak ölçüldü ve çok büyük dipol kuvvetine sahip dar band aralıklı bir pik gözlendi. Daha sonra, elektrik alanın etkisi altındaki bir kuantum kuyusunda alt bantlar arası ISB optiksel soğurma katsayısı teorik olarak incelendi (Ahn ve Chuang 1987a). Kuantum kuyularındaki ISB geçişlerine dayalı NL (nonlineer- çizgisel olmayan) soğurma katsayısının incelenmesiyle ilgili ilk çalışmalar Yuen (1983), Ahn ve Chuang (1987b) tarafından gerçekleştirildi. Ahn ve Chuang (1987b) ISB durulma zamanını içeren yoğunluk matris formalizmini kullanarak bir sonsuz kuantum kuyusu için NL soğurma katsayısını hesapladılar ve sonuçta optiksel alan şiddetinin artmasıyla soğurma pikinin azaldığını gördüler. Kuantum kuyularındaki ISB optiksel geçişler malzemenin soğurma katsayısında ve kırılma indisinde önemli değişimlere yol açar (Zaluzny 1992). Böylesi değişimler, lazer yükselteçleri (Capasso ve ark. 1986), fotodetektörler (Levine ve ark. 1987, Levine ve ark. 1989) ve yüksek hızlı elektro-optiksel modülatörler (Karunasiri ve ark. 1990, Martinet ve ark. 1992) gibi cihaz uygulamaları için son derece önemlidirler. Dolayısıyla, bu tür lineer ve NL optiksel süreçlerin yapısal parametrelere ve elektrik alana bağlılıkları da cihaz uygulamaları için son derece hayati olacaktır.

Kuantum nokta yapılarının band içi optiksel geçişleri de son yıllarda yoğun biçimde çalışılmaktadır. Bu geçişlere dayalı lineer ve çizgisel olmayan optiksel süreçleri incelenmekte oldukça önemlidir. Bu çalışmada bir küresel kuantum noktası için böylesi hesaplamalar yapılacaktır. Bu amaç için yoğunluk matris formalizmi kullanılacaktır.

Lineer, çizgisel olmayan ve toplam soğurma katsayıları için analitik ifadeler

$$\alpha^{(1)}(\upsilon) = 2\pi\upsilon\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}}\frac{\sigma_s e^2\left|M_{fi}\right|^2\hbar\Gamma_{fi}}{\left[\left(h\upsilon - \Delta E_{fi}\right)^2 + \left(\hbar\Gamma_{fi}\right)^2\right]^2} \tag{4.1a}$$

(4.1b)

$$\alpha^{(3)}(\upsilon, I) = -4\pi\upsilon\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}}\frac{\sigma_s I e^4\left|M_{fi}\right|^4\hbar\Gamma_{fi}}{n_r\varepsilon_0 c\left[\left(h\upsilon - \Delta E_{fi}\right)^2 + \left(\hbar\Gamma_{fi}\right)^2\right]^2}$$

(4.1c)

$$\alpha(\upsilon, I) = \alpha^{(1)}(\upsilon) + \alpha^{(3)}(\upsilon, I)$$

biçiminde verilir (Xie, 2010).

4.2. Lineer ve Üçüncü Mertebe NL Kırılma İndis Değişimi

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

Kuantum nokta yapıların band içi optiksel geçişlerine dayalı kırılma indisi değişimleri de son yıllarda yoğun biçimde çalışılmaktadır.

Lineer, çizgisel olmayan ve toplam soğurma katsayıları için analitik ifadeler

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{\sigma_s e^2 \left|M_{fi}\right|^2}{2n_r^2} \frac{\left(E_{fi} - \hbar\omega\right)}{\left(E_{fi} - \hbar\omega\right)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} \tag{4.2a}$$

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} = -\frac{\sigma_s e^4 \left|M_{fi}\right|^4 \mu c I}{n_r^3 \varepsilon_0} \frac{\left(E_{fi} - \hbar\omega\right)}{\left[\left(E_{fi} - \hbar\omega\right)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2\right]^2} \tag{4.2b}$$

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} \tag{4.2c}$$

biçiminde verilir (Rezaei ve ark., 2010).

4.3. Şiddete Bağlı NL Soğurma Katsayısı ve Kırılma İndisi

Bu kesimde çizgisel olmayan süreçleri incelemek için, iki seviyeli bir sistemde, kuantum mekaniğinin yoğunluk matris formalizmi kullanılacaktır. Yoğunluk matris denklemlerini kararlı durumda çözülecek ve sonuçta şiddete bağlı soğurma katsayısı ve kırılma indisine ait açık ifadeler elde edilecektir (Spyridon ve ark., 2010; Paspalakis ve ark., 2008; Galdrikan ve Birnir, 1996). İki seviye yaklaşımı altında bir elektromanyetik alanın etkisi altında kuantum nokta sisteminin dinamiği,

$$\widehat{H} = \hbar\omega_0(|j\rangle\langle j|) - \mu E'(t)(|i\rangle\langle j| + |j\rangle\langle i|) \tag{4.3}$$

Hamiltoniyeni ile tanımlanır. Burada, $|i\rangle$ ve $|j\rangle$ başlangıç ve sonuç seviyeleri göstermektedir. μ iki seviye arasındaki geçiş matris elemanı olup $\mu = \langle i|ez|j\rangle$ şeklinde tanımlanır. Ayrıca $E'(t) = \frac{E_0}{2\epsilon_0}(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})$ dır. Bir elektromanyetik alanla etkileşen kuantum nokta sisteminin dinamiği çizgisel olmayan yoğunluk matris denklemleriyle tanımlanır:

$$\dot{\sigma}(t) = \frac{\sigma_{10}(t)}{T_2} - i\delta\sigma_{10}(t)\Delta(t) \tag{4.4}$$

$$\dot{\Delta}(t) = 2i\Omega_0\sigma_{10}(t) - 2i\Omega_0\sigma_{10}^{*}(t) - \frac{\Delta(t) - 1}{T_1} \tag{4.5}$$

Maksimum Rabi frekansı için $\Omega_0 = -\frac{\mu_{10}E_0}{2\hbar}$ ve $\delta = \omega_{10} - \omega$ ise

Kararlı durumda (4.4) denklemi, (4.6) denklemi haline gelir.

$$\sigma_{10} = \frac{\Omega_0\Delta}{\delta - \frac{i}{T_2}} \tag{4.6}$$

Benzer biçimde kararlı durumda (4.4) denklemi (4.5) denklemin de kullanılarak;

$$\Delta = \frac{1}{\left[1 + \frac{4T_1T_2\mu_{10}^2E_0^2}{4\hbar^2(\delta^2T_2^2 + 1)}\right]} \tag{4.7}$$

elde edilir. $E_s = \frac{\hbar^2}{T_1T_2\mu_{10}^2}$ tanımı kullanılarak; (4.7) denklemi

$$\Delta = \frac{1}{\left[1 + \frac{E_0^2/E_s^2}{(\delta^2T_2^2 + 1)}\right]} \tag{4.8}$$

haline dönüşür. Optiksel şiddet için $I = \frac{nc\varepsilon_0}{2}|E_0^2|$ ve doyum şiddeti için de

$I_s = \frac{nc\varepsilon_0}{2}|E_s^2|$ kullanılarak yukarıdaki denklemden

$$\Delta = \frac{1}{\left[1 + \frac{I/I_s}{(\delta^2T_2^2 + 1)}\right]} \tag{4.9}$$

sonucuna ulaşılır.

Alınganlık için

$$\chi = \frac{2P}{E_0} = -\frac{2N_v\mu_{10}\sigma_{10}}{E_0} = \frac{N_v\mu_{10}^2 T_2}{\varepsilon_0\hbar}\Delta\frac{1}{\delta T_2 - 1} \tag{4.10}$$

ifadesi elde edilir. Buradan yola çıkarak,

$$\chi = \frac{N_v\mu_{10}^2 T_2}{\varepsilon_0\hbar}\cdot\frac{\delta T_2 + i}{\delta^2 T_2^2 + 1 + I/I_s} \tag{4.11}$$

elde edilir.

Düşük şiddet limitinde $\left(I/I_s \ll 1\right)$; seriye açarak

$$\chi \simeq \frac{N_v\mu_{10}^2 T_2}{\varepsilon_0\hbar}\left[\frac{i + \delta T_2}{1 + \delta^2 T_2^2} - \frac{i + \delta T_2}{(1 + \delta^2 T_2^2)^2}\frac{I}{I_s}\right] \tag{4.12}$$

elde edilir.

$$\chi \simeq \chi^{(1)} + \frac{3}{4}\chi^{(3)}E_0^2 \tag{4.13}$$

olduğundan dolayısıyla

$$\chi^{(1)} = \frac{N_v\mu_{10}^2 T_2}{\varepsilon_0\hbar}\frac{i + \delta T_2}{1 + \delta^2 T_2^2}$$

$$\chi^{(3)} = -\frac{4N_v\mu_{10}^4 T_1 T_2^2}{3\varepsilon_0\hbar^3}\left(\frac{i + \delta T_2}{(1 + \delta^2 T_2^2)^2}\right) \tag{4.14}$$

elde edilir.

Soğurma katsayısı, alınganlığa bağlı olarak (4.15) denklemi gibi tanımlanır.

$$\alpha(\omega, I) = \frac{\omega}{nc} Im\big(\chi(\omega, I)\big) \tag{4.15}$$

Buradan yola çıkarak soğurma katsayısı için,

$$\alpha(\omega, I) = \frac{N_v \mu_{10}^2 T_2 \omega}{nc\varepsilon_0 \hbar} \frac{1}{\delta^2 T_2^2 + 1 + I/I_s} \tag{4.16}$$

sonuç ifadesi elde edilir. $\alpha_{max} = \frac{N_v \mu_{10}^2 T_2 \omega}{nc\varepsilon_0 \hbar}$ tanımı kullanılarak,

$$\alpha(\omega, I) = \alpha_{max} \frac{\hbar^2/T_2^2}{(E_{10} - \hbar\omega)^2 + \hbar^2/T_2^2\,(1 + I/I_s)} \tag{4.17}$$

elde edilir. $\tilde{\Gamma}_2^2 = \Gamma_2^2(1 + I/I_s)$ ve $\hat{\delta} = E_{10} - \hbar\omega$ tanımları kullanılarak,

$$\alpha(\omega, I) = \alpha_{max} \frac{\tilde{\Gamma}_2^2}{\hat{\delta}^2 + \tilde{\Gamma}_2^2} \cdot \frac{1}{1 + I/I_s} = \alpha_{max} G(\omega, I) \tag{4.18}$$

elde edilir.

Düşük doyum limitinde $\left({}^{I}/_{I_s} \ll 1\right)$; seriye açarak

$$G(\omega, I) = \frac{\Gamma_2^2}{\hat{\delta}^2 + \tilde{\Gamma}_2^2}\left[1 - \frac{\Gamma_2^2}{\hat{\delta}^2 + \tilde{\Gamma}_2^2}(I/I_s) + \left(\frac{\Gamma_2^2}{\hat{\delta}^2 + \tilde{\Gamma}_2^2}\right)^2 (I/I_s)^2\right] \tag{4.19}$$

elde edilir. Bu limitte soğurma katsayısı için ise;

$$\alpha(\omega, I) = \alpha_{max} \frac{\Gamma_2^2}{\hat{\delta}^2 + \tilde{\Gamma}_2^2}\left[1 - \frac{\Gamma_2^2}{\hat{\delta}^2 + \tilde{\Gamma}_2^2}(I/I_s) + \left(\frac{\Gamma_2^2}{\hat{\delta}^2 + \tilde{\Gamma}_2^2}\right)^2 (I/I_s)^2\right] \tag{4.20}$$

ifadesi elde edilir.

Soğurma katsayısını benzer şekilde kırılma indisini de hesaplanabilir. Kırılma indis değişimi alınganlığa bağlı olarak;

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{1}{2n_r^2} Re[\chi(\omega, I)] \tag{4.21}$$

şeklinde tanımlanır. Buradan yola çıkarak kırılma indis değişimi için,

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{N_v \mu_{10}^2 \delta T_2^2}{2n_r^2 \varepsilon_0 \hbar} \frac{1}{\delta^2 T_2^2 + 1 + I/I_s} \tag{4.22}$$

elde edilir. Bu denklem yeniden düzenlenerek;

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{N_v \mu_{10}^2}{2n_r^2 \varepsilon_0} \frac{(E_{10} - \hbar\omega)}{(E_{10} - \hbar\omega)^2 + \hbar^2/T_2^2 \, (1 + I/I_s)} \tag{4.23}$$

denklemine ulaşılır. Sonuç olarak kırılma indis değişimi için,

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{N_v \mu_{10}^2}{2n_r^2 \varepsilon_0 \Gamma_2^2} \frac{\widehat{\delta} \widetilde{\Gamma}_2^2}{\left(\widehat{\delta}^2 + \widetilde{\Gamma}_2^2\right)} \frac{1}{(1 + I/I_s)} \tag{4.24}$$

elde edilir.

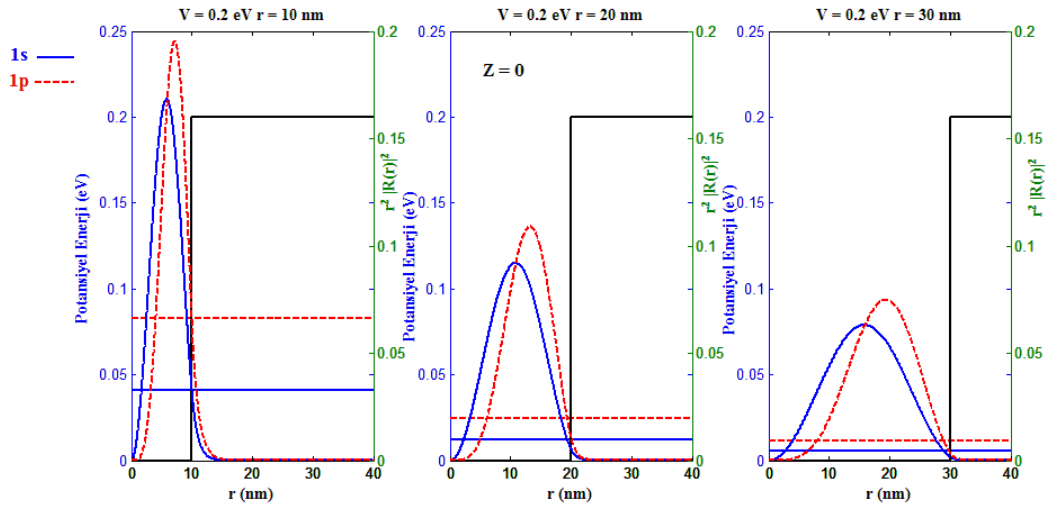
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

Bu bölümde, 3. bölümde anlatılan analitik ve sayısal yöntemler kullanılarak, safsızlık içeren sonlu küresel kuantum noktasının elektronik yapısının ayrıntılı incelendi. Daha sonra elektronik özellikleri kullanarak çizgisel olmayan optiksel özellikler ayrıntılı olarak incelendi ve yorumlandı. Daha sonra çok tabakalı küresel kuantum noktasında elektronik özellikler ve elektronik özellikleri kullanarak çeşitli çizgisel olmayan optiksel özellikler detaylıca incelendi. Hesaplamalar etkin kütle yaklaşımı içinde sonlu farklar yöntemi kullanılarak yapılmıştır.

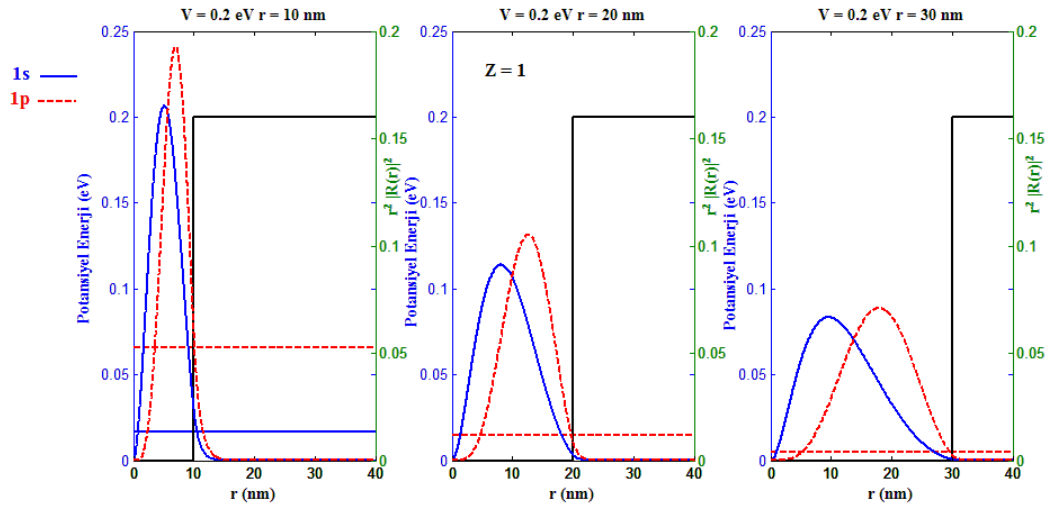
5.1. Tek Bir Küresel Kuantum Noktasındaki Sonuçlar

Bu bölümde, denklem (3.13) ile verilen hidrojenik safsızlık içeren sonlu küresel kuantum noktasında sınırlandırılmış tek elektron için radyal Schrödinger denklemi çözülerek elektronik sonuçlar elde edildi. Elde edilen bu sonuçlar ile (4.1) ve (4.2) denklem sistemleri kullanılarak çizgisel olmayan optiksel özellikler incelendi.

5.1.1. Elektronik Sonuçlar



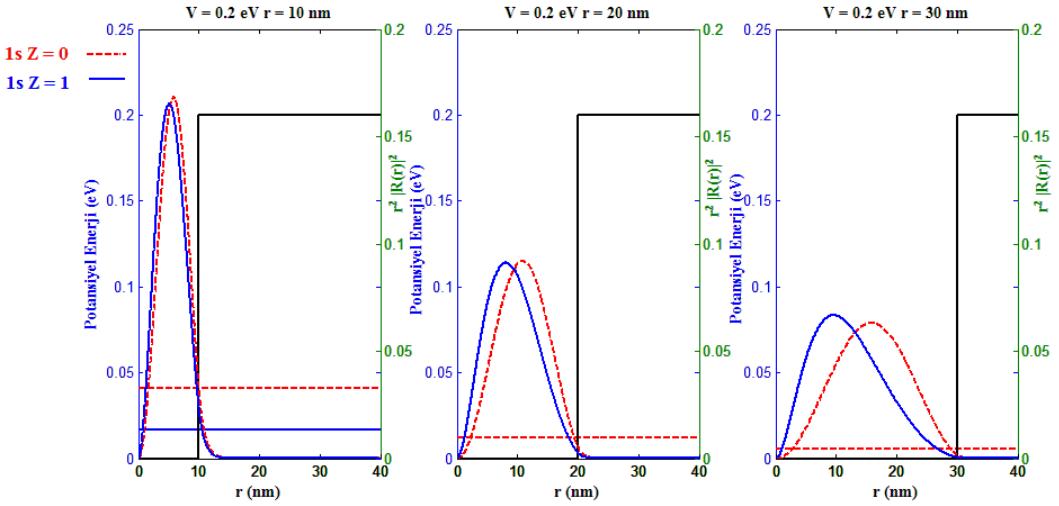
Şekil 5.1. Sonlu küresel kuantum noktasındaki üç farklı nokta yarıçapı için 1s ve 1p seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerji özdeğerleri.



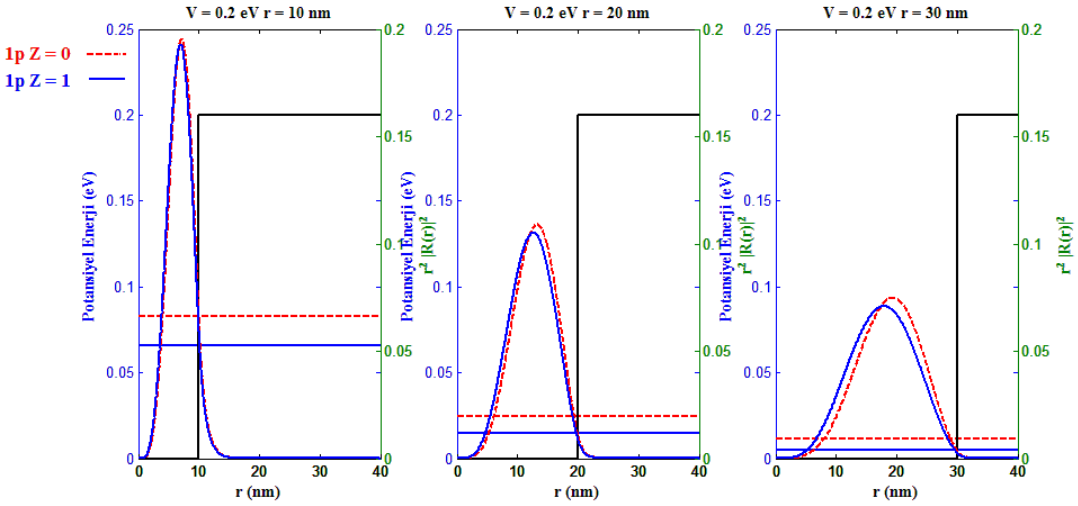
Şekil 5.2. Sonlu küresel kuantum noktasındaki üç farklı nokta yarıçapı için safsızlık içeren 1s ve 1p seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerji özdeğerleri.

Şekil 5.1 de üç farklı nokta yarıçapı için safsızlık içermeyen 1s ve 1p seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerjileri görülmektedir. Nokta yarıçapı arttıkça, seviyelerin kuyu bölgesine daha fazla sınırlandırıldığı görülmüştür. Ayrıca, artan nokta yarıçapı ile enerji seviyelerinin değerleri ve iki seviye arasındaki enerji farkı azalmaktadır.

Şekil 5.2 de üç farklı nokta yarıçapı için safsızlık içeren 1s ve 1p seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerjileri görülmektedir. Şekil 5.1 deki gibi nokta yarıçapı arttıkça, seviyelerin kuyu bölgesine daha fazla sınırlandırıldığı görülmüştür. Şekil 5.1 den farkı safsızlık varken ki durum olmadığı duruma göre kuyu bölgesine daha da fazla sınırlandırıldığı görülmüştür. Ayrıca, artan nokta yarıçapı ile enerji seviyelerinin değerleri ve iki seviye arasındaki enerji farkı azalmaktadır.



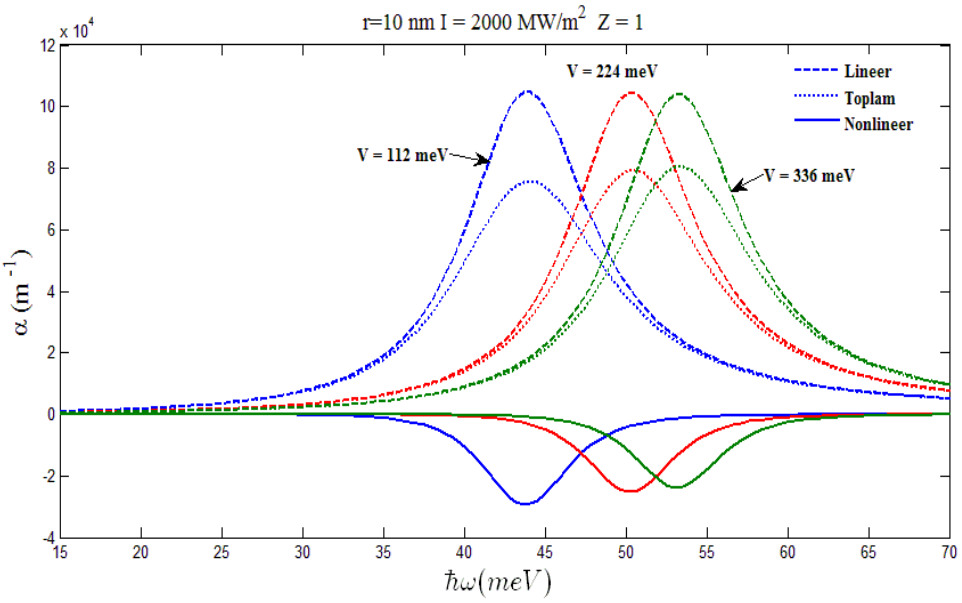
Şekil 5.3. Sonlu küresel kuantum noktasındaki üç farklı nokta yarıçapı için safsızlık varken ve yokken ki durumdaki 1s seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerji özdeğerleri.



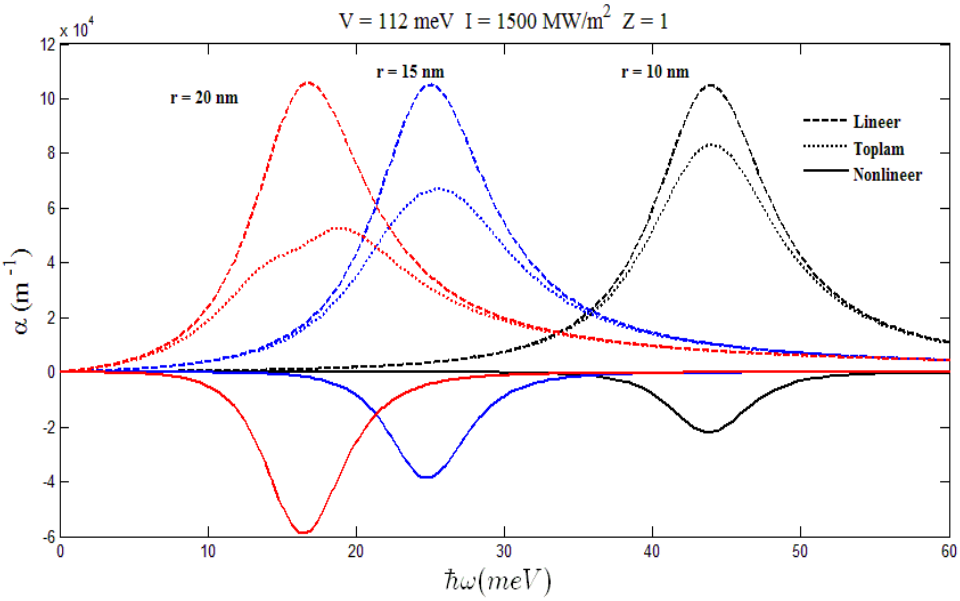
Şekil 5.4. Sonlu küresel kuantum noktasındaki üç farklı nokta yarıçapı için safsızlık varken ve yokken ki durumdaki 1p seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerji özdeğerleri.

Şekil 5.3 de safsızlığın 1s seviyesine etkisi görülmektedir. Safsızlığın etkisi ile, 1s durumunun nokta merkezine yaklaştığı kolaylıkla görülebilir. Ayrıca, safsızlığın etkisinin artan nokta yarıçapıyla daha belirginleştiği de şekilden kolaylıkla görülebilir. Aynı durum 1p seviyesi için verilen Şekil 5.4 te de görülüyor. Ancak, safsızlığın 1p seviyesine etkisi 1s durumuna etkisinden çok daha zayıftır.

5.1.2. Soğurma Katsayısı Değişimleri



Şekil 5.5. Lineer, çizgisel olmayan ve toplam soğurma katsayılarının üç farklı potansiyel yüksekliği için foton enerjisi ile değişimi.

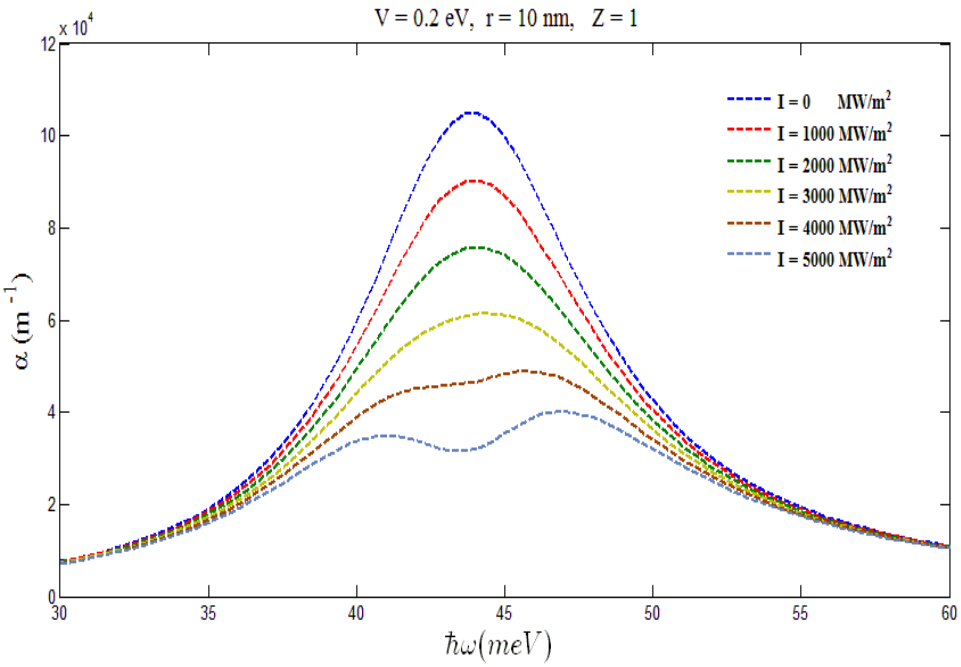


Şekil 5.6. Lineer, çizgisel olmayan ve toplam soğurma katsayılarının üç farklı nokta yarıçapı için foton enerjisi ile değişimi.

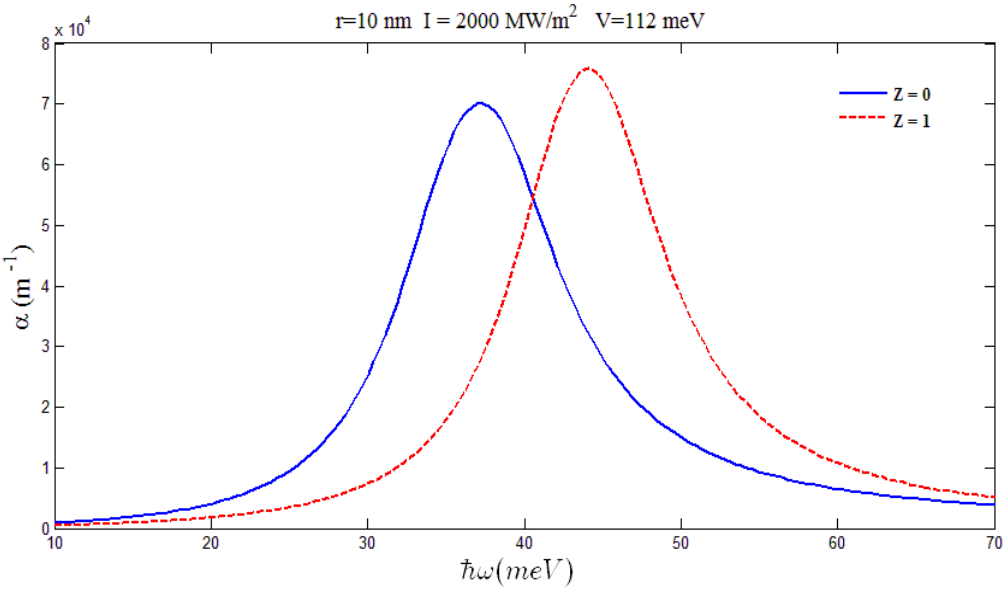
Şekil 5.5 de görüleceği gibi potansiyel yüksekliği pik pozisyonlarını önemli ölçüde değiştirmektedir. Potansiyel yüksekliği arttıkça foton enerjisi yüksek enerjilere doğru kaymaktadır. Şekilden, lineer soğurma katsayısının pik değerinin potansiyel yüksekliği ile önemli ölçüde değişmediği görülmüştür. Bununla birlikte, çizgisel olmayan soğurma pikleri ise artan potansiyel yüksekliği ile azalmaktadır. Çizgisel

olmayan piklerdeki böylesi bir azalmada toplam soğurma piklerini de artırmaktadır. Elde edilen bu sonuçlar literatürdeki diğer teorik sonuçlarla da oldukça tutarlıdır.

Şekil 5.6 lineer, çizgisel olmayan ve toplam soğurma katsayılarının üç farklı yarıçap değeri için foton enerjisi ile değişimini göstermektedir. Yarıçap değerindeki artışla foton enerjileri kırmızı bölgeye doğru kaymaktadır. Bu durum, artan yarıçaplarla 1s ve 1p seviyelerinin birbirine yaklaşmasından kaynaklanır. Kuantum nokta yarıçapının soğurma pikleri üzerine etkisi şekilden de kolaylıkla görülebilir. Yarıçaptaki artış, lineer soğurma piklerini önemli ölçüde değiştirmemektedir. Ancak çizgisel olmayan soğurma pikleri artan yarıçap değerleriyle önemli ölçüde artmaktadır. Bu durum, toplam soğurma piklerinin önemli ölçüde azalmasına neden olur.



Şekil 5.7. Toplam soğurma katsayısının altı farklı optiksel şiddet değeri için foton enerjisi ile değişimi.

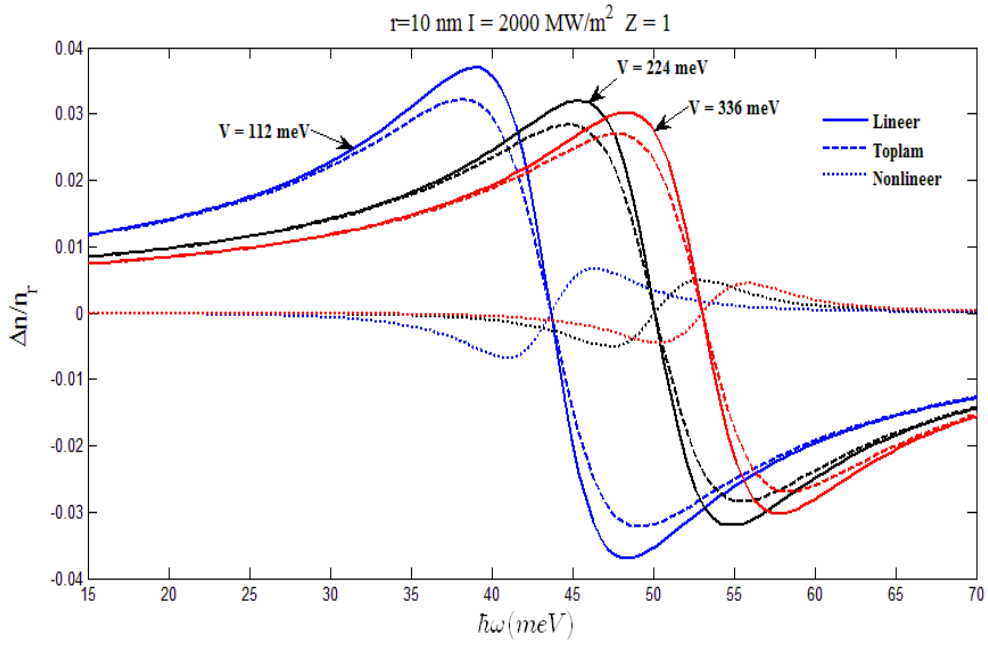


Şekil 5.8. Toplam soğurma katsayısının safsızlık olduğu ve olmadığı durum

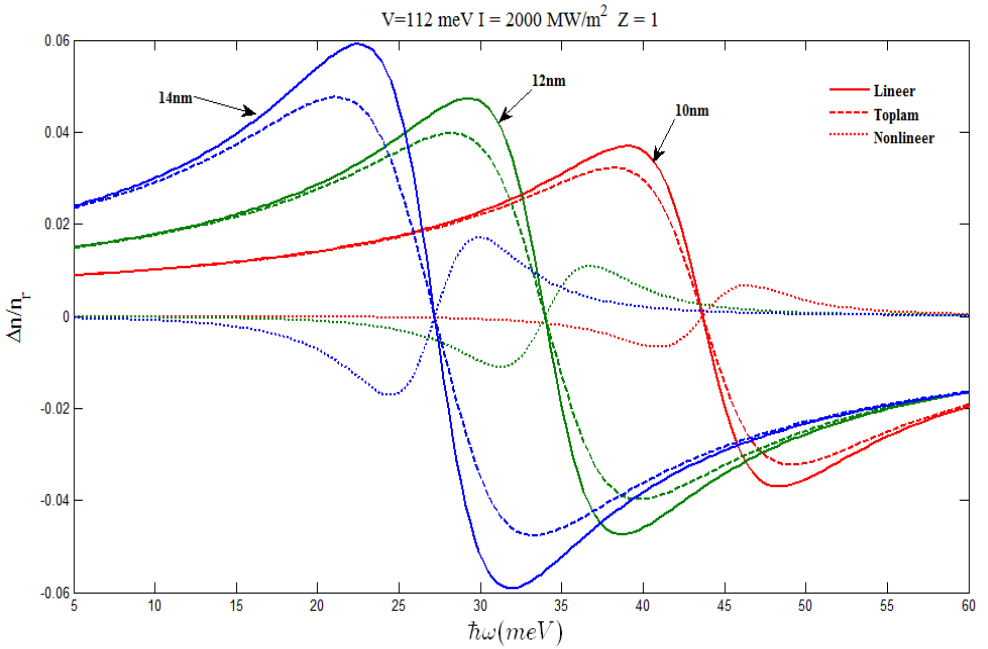
Şekil 5.7 de görüleceği gibi, toplam soğurma katsayısı artan şiddet değerleriyle beklenildiği gibi azalmaktadır. Bu durumun nedeni, lineer soğurma katsayısının optiksel şiddetten bağımsız olmasına rağmen çizgisel olmayan soğurma katsayısının optiksel şiddete bağlılığıdır. Artan optiksel şiddet çizgisel olmayan soğurma katsayısının artmasına bu durum da toplam soğurma katsayısının azalmasına neden olur. Ayrıca, şekilden soğurma katsayısının belli bir şiddet değerinden sonra doyuma ulaştığı görülmüştür. Bu durum özellikle kızılötesi bölgede çalışan cihaz uygulamaları açısından oldukça önemlidir.

Şekil 5.8 de görüleceği gibi, toplam soğurma katsayısı safsızlık varken ki durumda daha büyüktür. Bu durum şöyle açıklanabilir; safsızlıktan dolayı 1s ve 1p seviyeleri nokta merkezine yaklaşacaktır ve bunun sonucunda da bu seviyelerle alakalı dipol matris elemanının değeri artacaktır. Matris elemanındaki bu artış da soğurma pikini artıracaktır. Ayrıca, safsızlığın olduğu durumdaki foton enerjisi safsızlığın olmadığı durumdaki enerjiden daha büyük olup bu durum da safsızlık varlığında 1s seviyesinin 1p den nokta merkezine doğru daha fazla çekilmesinden kaynaklanır. Bunun sonucunda da safsızlık ilgili enerji seviyeleri arasındaki farkın büyümesine neden olur.

5.1.3. Kırılma İndisi Değişimleri



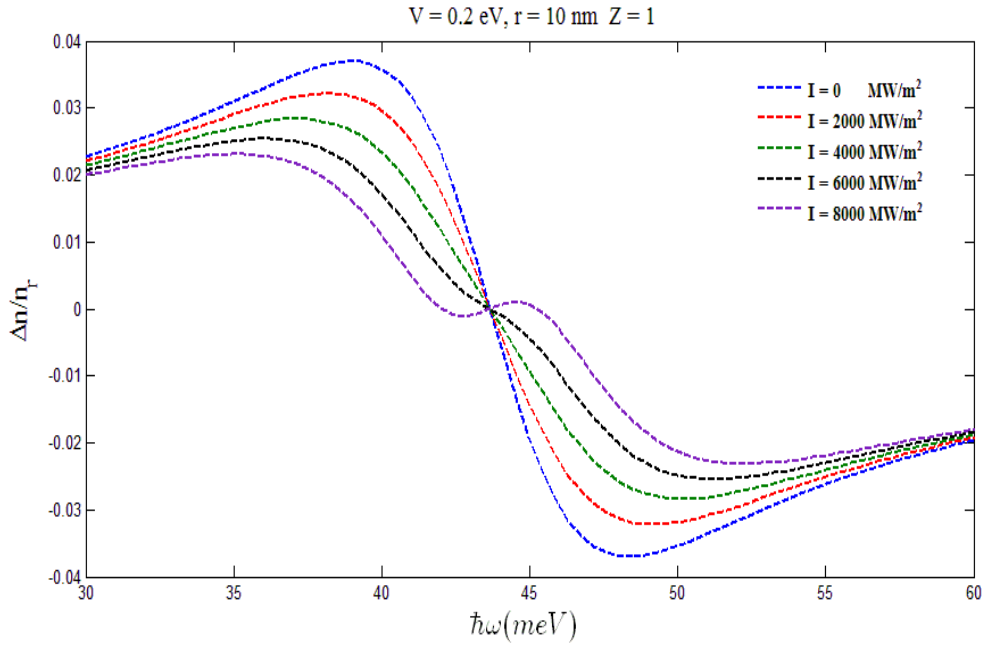
Şekil 5.9. Lineer, çizgisel olmayan ve toplam kırılma indislerinin üç farklı potansiyel yüksekliği için foton enerjisi ile değişimi.



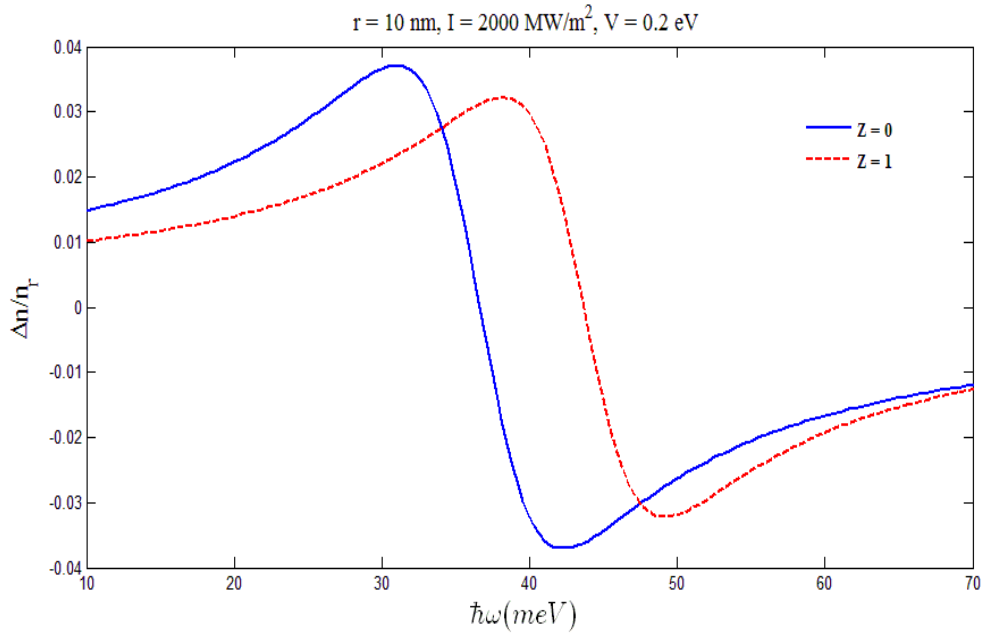
Şekil 5.10. Lineer, çizgisel olmayan ve toplam kırılma indis değişimlerinin üç farklı nokta yarıçapı için foton enerjisi ile değişimi.

Şekil 5.9’ da görüleceği gibi potansiyel yüksekliği hem kırılma indis pikleri hem de pik pozisyonlarını önemli ölçüde değiştirmektedir. Potansiyel yüksekliği arttıkça foton enerjisi yüksek enerjilere doğru kaymaktadır. Şekilden, hem lineer hem de çizgisel olmayan kırılma indisinin pik değerlerinin potansiyel yüksekliği ile önemli ölçüde azaldığı görülmüştür. Bununla birlikte, lineer pikteki azalma çizgisel olmayan pikteki azalmadan daha büyük olup buda toplam kırılma indis pikinin azalmasıyla sonuçlanır.

Şekil 5.10 da görüleceği gibi nokta yarıçapı hem kırılma indis pikleri hem de pik pozisyonlarını önemli ölçüde değiştirmektedir. Nokta yarıçapı arttıkça foton enerjisi spektrumun soluna doğru kaymaktadır. Şekilden, hem lineer hem de çizgisel olmayan kırılma indisinin pik değerlerinin nokta yarıçapı ile önemli ölçüde azaldığı görülmüştür. Bununla birlikte, lineer pikteki azalma çizgisel olmayan pikteki azalmadan daha büyük olup buda toplam kırılma indis pikinin azalmasıyla sonuçlanır.



Şekil 5.11. Toplam kırılma indisinin beş farklı optiksel şiddet için foton enerjisi ile değişimi.



Şekil 5.12. Toplam kırılma indisinin safsızlık varken ve yokken ki karşılaştırması.

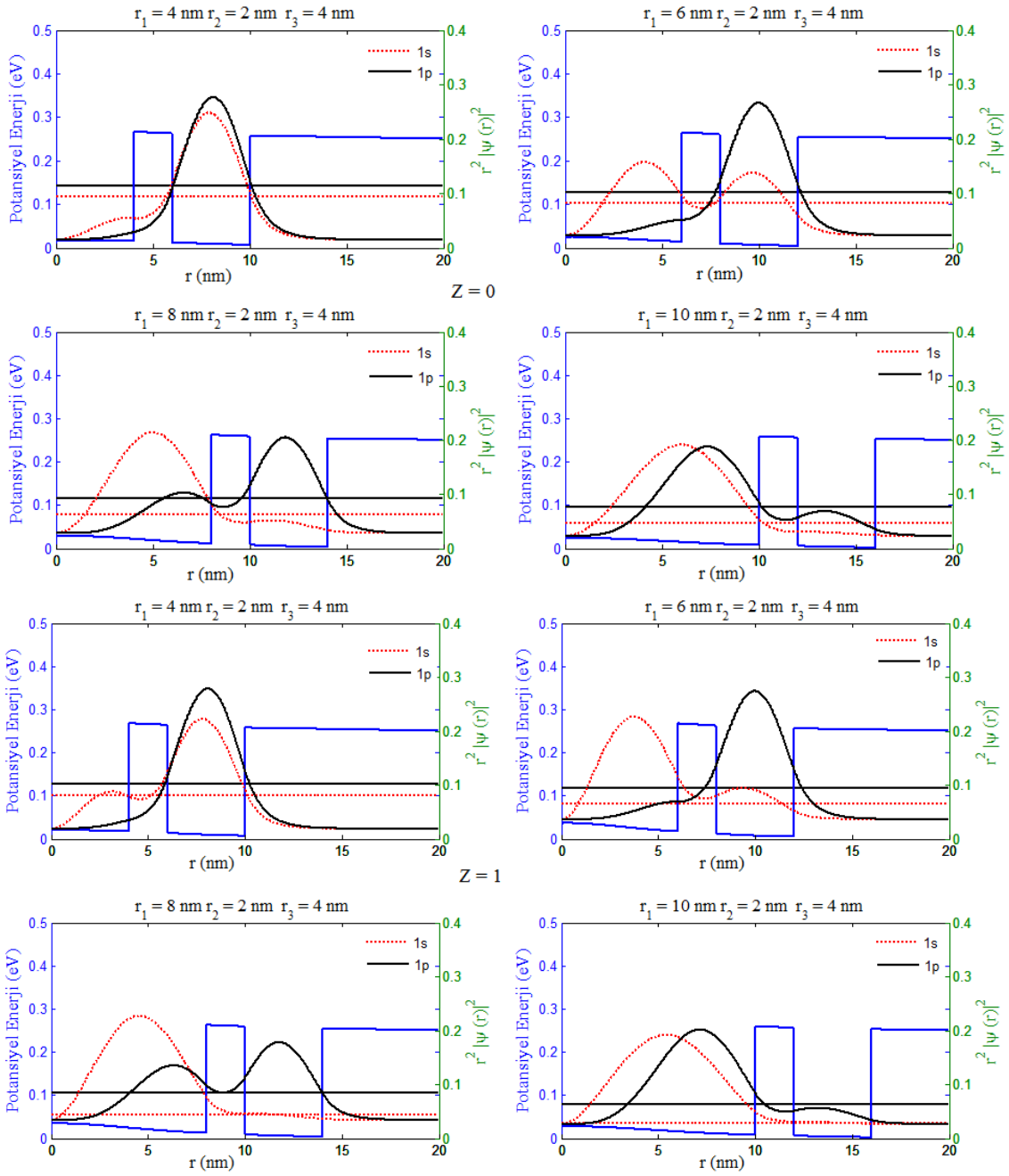
Şekil 5.11 kırılma indisinin optiksel şiddetle değişimini göstermektedir. Artan şiddet değerleriyle, beklenildiği gibi kırılma indisi azalmaktadır. Bu durumun nedeni, lineer kırılma indisinin optiksel şiddetten bağımsız olmasına rağmen çizgisel olmayan kırılma indisinin optiksel şiddete bağlılığıdır. Artan optiksel şiddet çizgisel olmayan kırılma indisinin artmasına bu durum da toplam kırılma indisinin azalmasına neden olur. Şiddete bağlı kırılma indisi özellikle cihaz uygulamalarında oldukça önemlidir.

Şekil 5.12 toplam kırılma indisine safsızlık etkisini göstermektedir. Şekilden de görüleceği gibi safsızlık varken bu değişim, beklenildiği gibi yüksek enerjilere doğru kaymaktadır. Buradaki ilginç bir nokta ise safsızlık etkisi ile kırılma indisindeki azalmadır. Bu azalma, safsızlığın etkisi ile enerji farkının artmasına dayandırılabilir. Çünkü kırılma indis denklemlerinden de görüleceği gibi bu değişim enerji farkı ile ters orantılı olup bundan dolayı da safsızlık etkisi kırılma indisini azaltmaktadır.

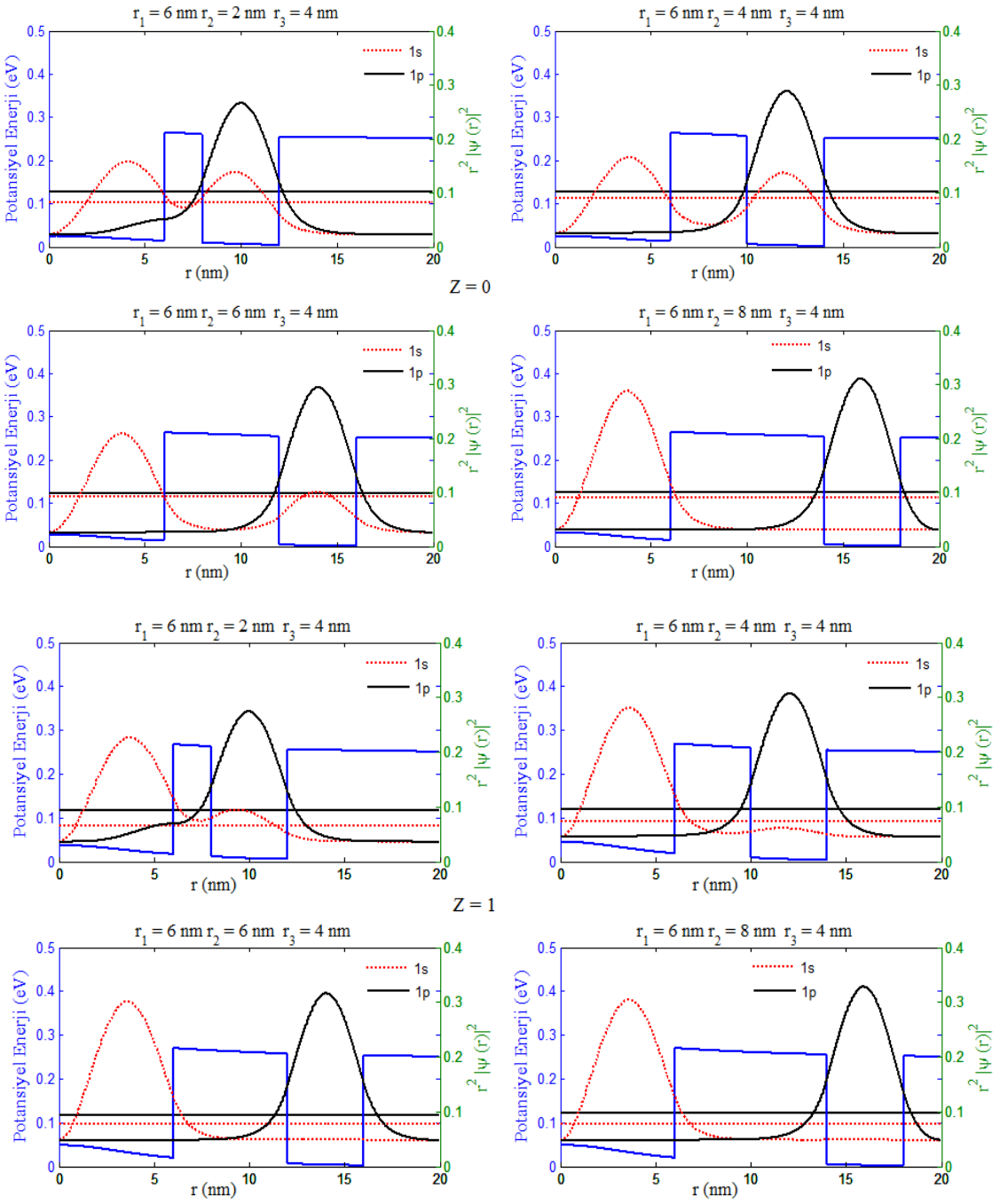
5.2. Çok Tabakalı Yarıiletken Küresel Kuantum Noktasındaki Sonuçlar

Bu bölümde, denklem (2.15) ile verilen çok elektronlu sisteme ait safsızlık terimini de içeren radyal Schrödinger denklemi öz-uyumlu çözüm metodu ile çözülerek elektronik sonuçlar elde edildi. Elektronik sonuçları (4.20) ve (4.24) denklemlerinde kullanarak çizgisel olmayan optiksel özellikler ayrıntılı olarak incelendi.

5.2.1. Elektronik Sonuçlar



Şekil 5.13. Dört farklı çekirdek genişliği için safsızlığın olmadığı (Z =0) ve olduğu durumdaki (Z = 1) 1s ve 1p seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerji özdeğerleri.

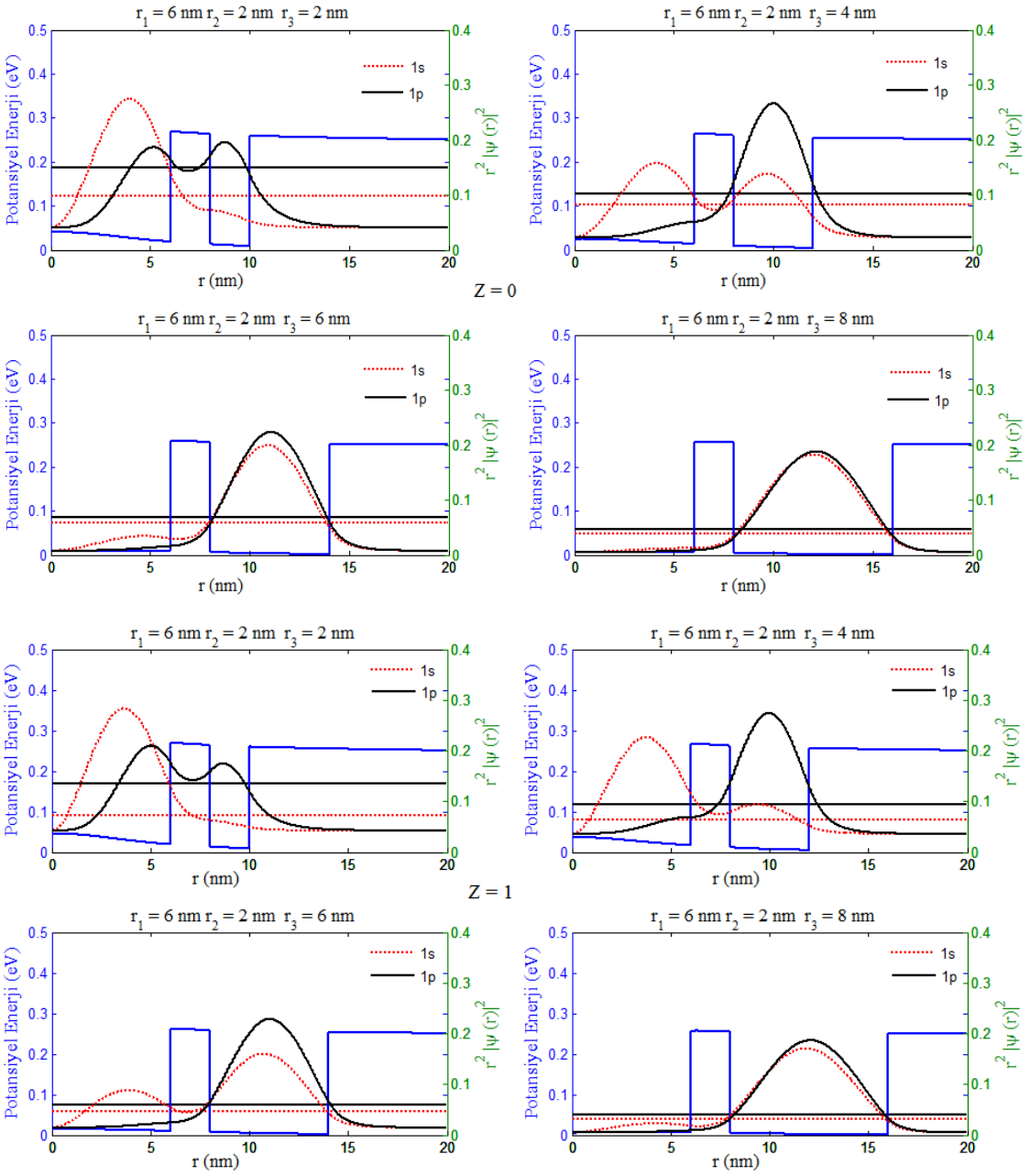


Şekil 5.14 Dört farklı bariyer genişliği için safsızlığın olmadığı (Z =0) ve olduğu durumdaki (Z = 1) 1s ve 1p seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerji özdeğerleri.

Şekil 5.13'de Z = 0 durumunda ve r_1 = 4 nm değeri için hem taban hem de uyarılmış durum olasılık yoğunlukları büyük ölçüde kuyu bölgesinde lokalize olmuştur. Artan çekirdek genişliğiyle birlikte beklenildiği gibi önce taban durum daha sonrada uyarılmış durum olasılık yoğunluklarının çekirdek bölgesinde lokalize olmaya başladığı görülür. Sonuç olarak, r_1 = 10 nm değeri için taban durum olasılık yoğunluğunun tamamının uyarılmış durum olasılık yoğunluğunun ise büyük bir kısmının çekirdek bölgesine yerleştiği görülür. Z = 1 durumunda ise safsızlığın etkisiyle artan çekirdek

yarıçapıyla taban ve uyarılmış durum olasılık yoğunluklarındaki kuyu bölgesinden çekirdek bölgesine geçişler daha hızlı olmaktadır. Ayrıca, artan çekirdek yarıçap değerleriyle iki seviye arasındaki enerji farkının büyüdüğü ve bu durumun beklenildiği gibi Z = 1 durumunda daha açık olduğu görülmektedir.

Şekil 5.14'de, r_2 = 2 nm için, Z = 0 durumunda taban durum olasılık yoğunluğu hem çekirdek hem de kuyu bölgesine yerleşmiş iken uyarılmış durum olasılık yoğunluğu büyük ölçüde kuyu bölgesine yerleşmiştir. Bariyer genişliğinin artan değerleriyle taban durum için olasılık yoğunluğunun değeri çekirdek bölgesinde artarken bu değer uyarılmış durum için kuyu bölgesinde artmaktadır. Sonuç olarak, r_2 = 8 nm için taban durum olasılık yoğunluğu büyük ölçüde çekirdek bölgesine yerleşirken uyarılmış durum için olasılık yoğunluğu kuyu bölgesine yerleşmektedir. Z = 1 durumunda ise yukarıda anlatılana oldukça benzer bir senaryo gerçekleşmektedir. Safsızlığın olduğu durumda, elektronlar safsızlığın etkisiyle merkeze doğru çekilecek ve bu durum beklenildiği gibi taban durumu uyarılmış durumdan daha fazla etkileyecektir. Bu sonuç yukarıdaki şekilden de kolaylıkla görülebilir. Z = 1 durumundaki taban durum olasılık yoğunluğu Z = 0 durumuyla karşılaştırıldığında daha küçük bariyer genişliklerinde tümüyle çekirdek bölgesinde lokalize olacaktır. Örneğin, safsızlığın olduğu durumda, r_2 = 6 nm değeri için taban durum olasılık yoğunluğunun tamamen çekirdek bölgesinde lokalize olduğu görülür.

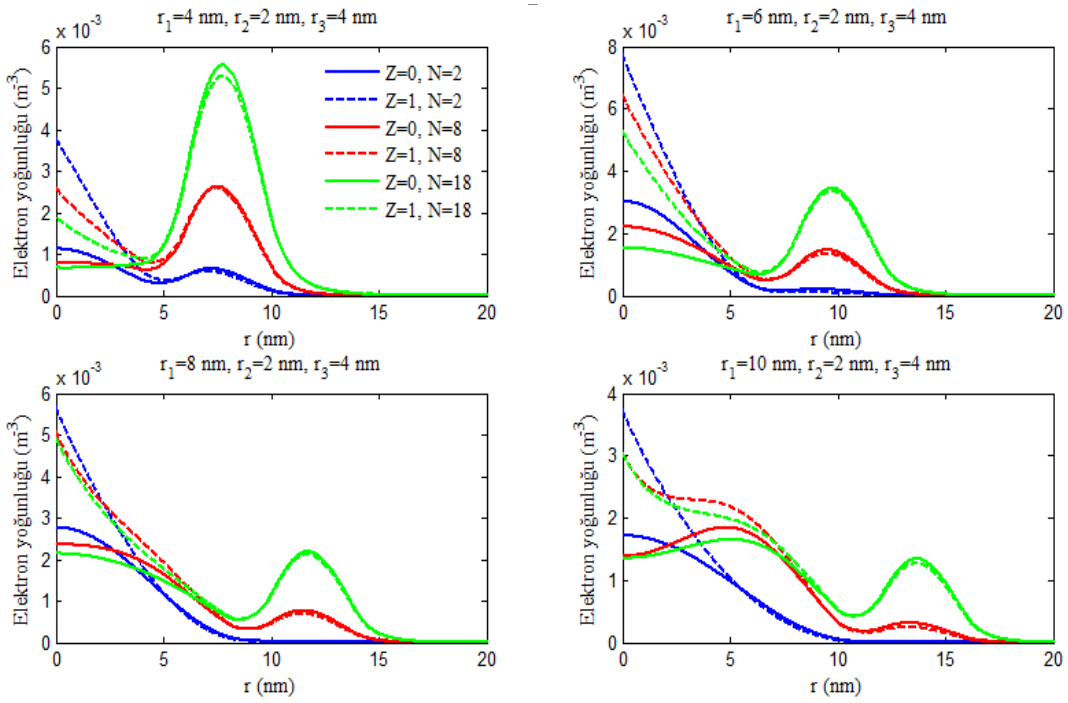


Şekil 5.15. Dört farklı kuyu genişliği için safsızlığın olmadığı (Z =0) ve olduğu durumdaki (Z = 1) 1s ve 1p seviyelerinin olasılık yoğunlukları ve enerji özdeğerleri.

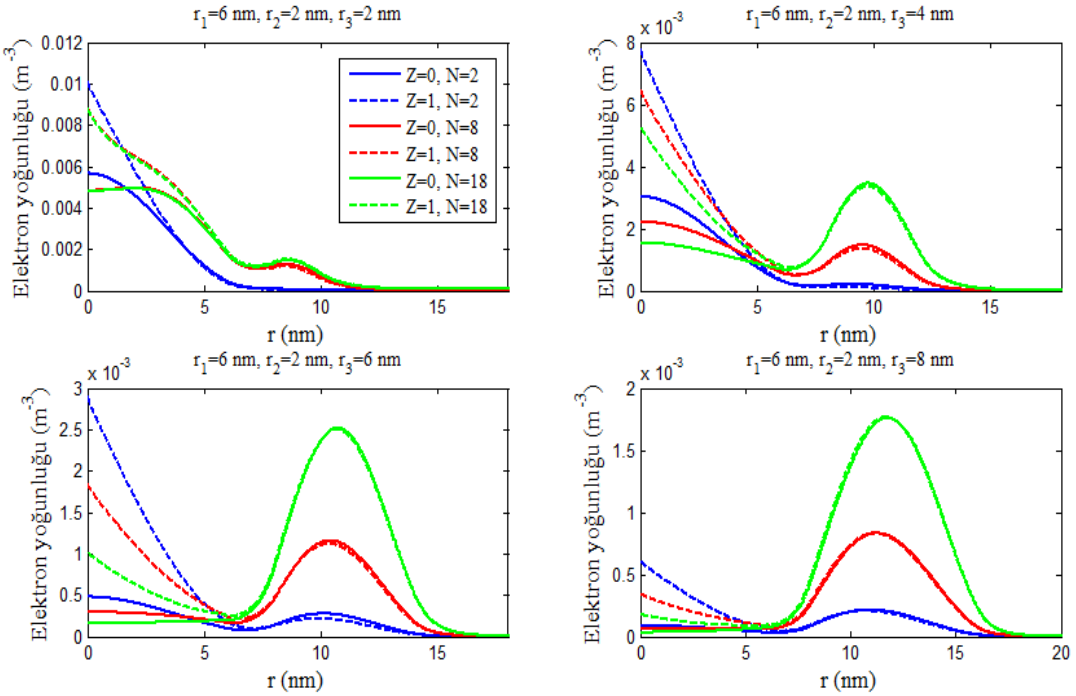
Şekil 5.15' den hem Z = 0 hem de Z = 1 durumunda, artan kuyu genişliğiyle enerji seviyeleri arasındaki farkın önemli ölçüde azaldığı görülmektedir. Ayrıca, Z = 1 durumundaki enerji farkının beklenildiği gibi Z = 0 durumundaki enerji farkından daha büyük olduğu görülmektedir. Bu durum, safsızlığın beklenildiği gibi 1s seviyesini 1p seviyesinden daha çok etkilemesinden kaynaklanmaktadır. Şekil 5.15' den aynı zamanda, elektron-elektron etkileşmesinden kaynaklanan potansiyel profilindeki bükülmelerde kolaylıkla görülmektedir. Safsızlığın olmadığı ve olduğu durumda, r_3 = 2

nm değeri için taban durum olasılık yoğunluğu çekirdek bölgesinde daha büyük değere sahip iken uyarılmış durum olasılık yoğunluğu ise hem çekirdek hem de kuyu bölgesinde yer almaktadır. Artan kuyu genişliğiyle birlikte hem taban hem de uyarılmış durum olasılık yoğunlukları kuyu bölgesine doğru kaymakta olup Z = 1 durumumda bu kaymalar safsızlığın etkisiyle Z = 0 durumundakinden daha yavaş olmaktadır. r_3 = 8 nm değeri için Z = 0 ve Z = 1 durumları arasında bir farklılık dikkat çekmektedir. Z = 0 da, hem taban hem de uyarılmış durum olasılık yoğunlukları tamamen kuyu bölgesine yerleşmiş iken Z = 1 durumunda taban durum olasılık yoğunluğu safsızlığın etkisiyle çekirdek bölgesinde küçük de olsa bir değere sahiptir.

5.2.2. Elektron Yoğunlukları



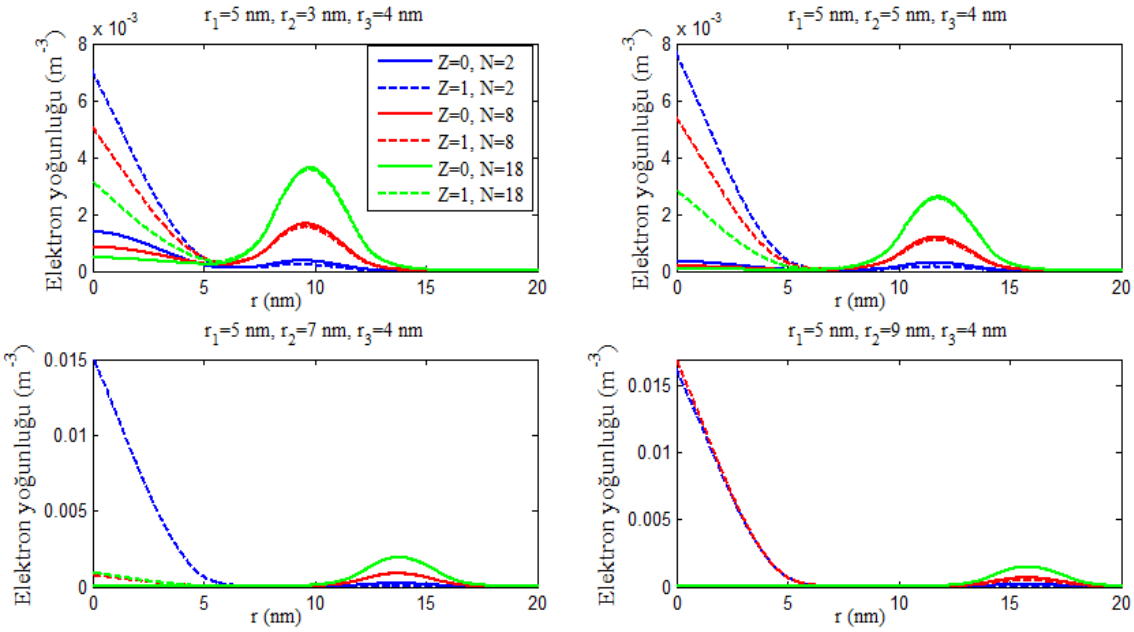
Şekil 5.16. Üç farklı elektron sayısı ve çekirdek yarıçapı için safsızlığın olmadığı (Z =0) ve olduğu durumdaki (Z = 1) elektron yoğunlukları.



Şekil 5.17. Üç farklı elektron sayısı ve kuyu yarıçapı için safsızlığın olmadığı (Z =0) ve olduğu durumdaki (Z = 1) elektron yoğunlukları.

Şekil 5.16'dan çekirdek yarıçapının artan değerleriyle elektron yoğunluğunun, kuyu bölgesindeki değeri azalırken bunun sonucunda çekirdek bölgesindeki değerinin arttığı görülür. Beklenildiği gibi tüm durumlarda elektron yoğunluğunun merkezdeki değeri safsızlığın olduğu durumda daha büyüktür. Ayrıca elektron sayısı arttıkça, elektron yoğunluğunun kuyu bölgesindeki değeri de artmaktadır. Bu durum artan elektron sayısıyla elektronlar arasındaki itici etkileşmenin artmasının bir sonucudur.

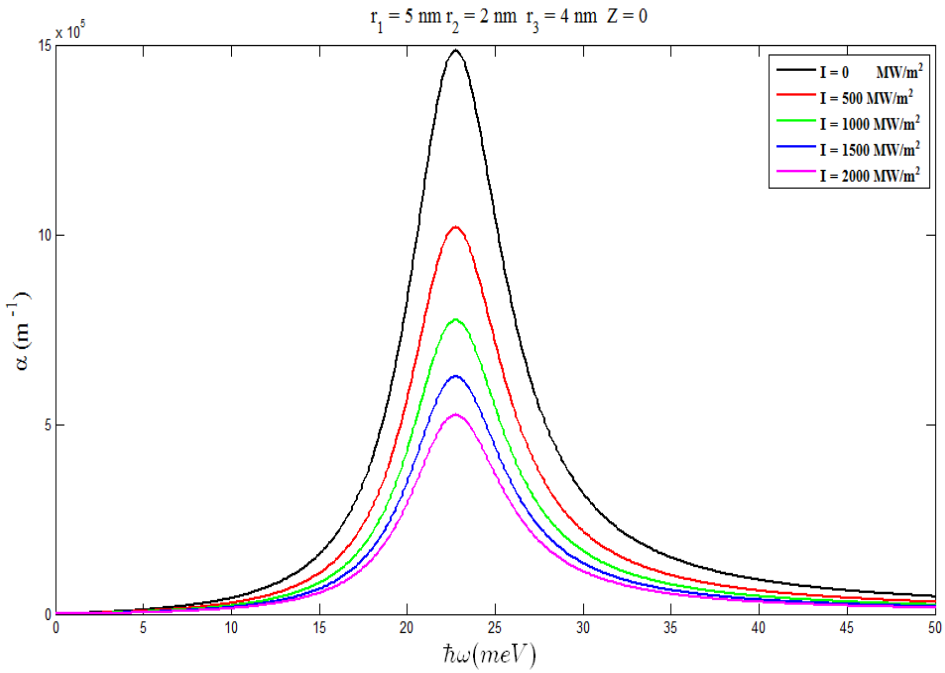
Şekil 5.17'den kuyu yarıçapının artan değerleriyle elektron yoğunluğunun, kuyu bölgesindeki değeri artarken bunun sonucunda çekirdek bölgesindeki değerinin azaldığı görülür. Beklenildiği gibi tüm durumlarda elektron yoğunluğunun merkezdeki değeri safsızlığın olduğu durumda daha büyüktür. Ayrıca bu değer artan elektron sayısıyla da azalmaktadır.



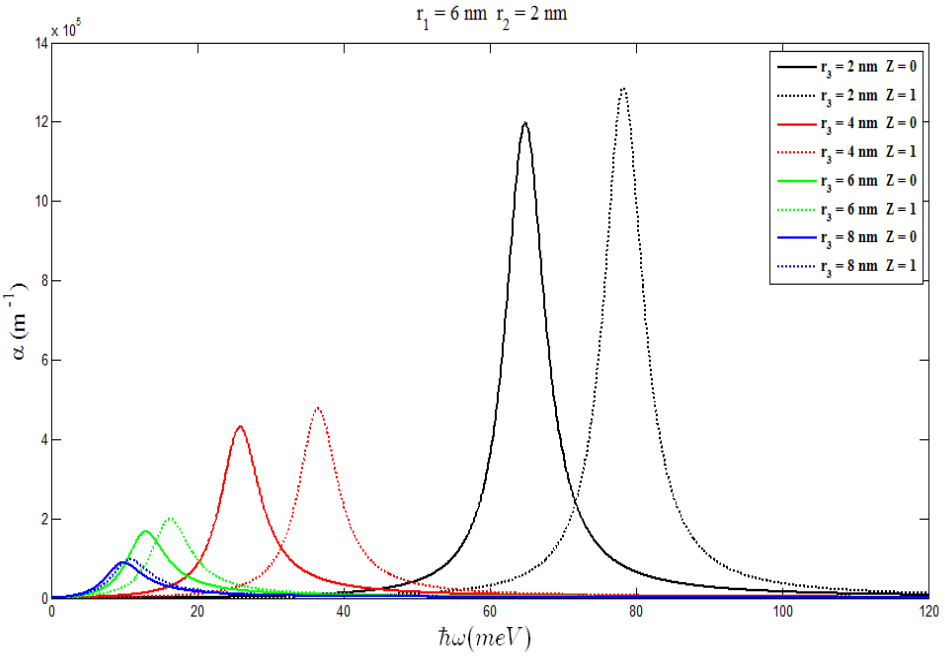
Şekil 5.18. Üç farklı elektron sayısı ve bariyer yarıçapı için safsızlığın olmadığı (Z =0) ve olduğu durumdaki (Z = 1) elektron yoğunlukları.

Şekil 5.18'den bariyer yarıçapının artan değerleriyle elektron yoğunluğunun, çekirdek bölgesindeki değeri artarken bunun sonucunda kuyu bölgesindeki değerinin azaldığı görülür. Bu durum artan bariyer yarıçapıyla elektronların çekirdek bölgesinden kuyu bölgesine tünelleme yapma olasılığının azalmasından kaynaklanır. Beklenildiği gibi tüm durumlarda elektron yoğunluğunun merkezdeki değeri safsızlığın olduğu durumda daha büyüktür.

5.2.3. Soğurma Katsayıları



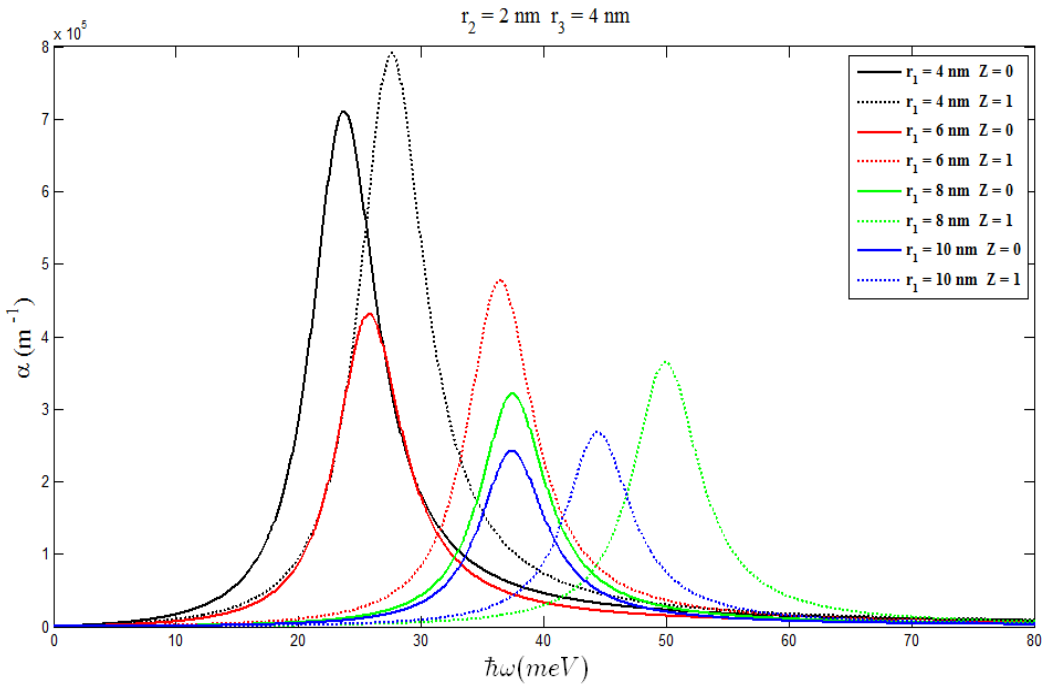
Şekil 5.19. Beş farklı optiksel şiddet değeri için soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi.



Şekil 5.20. Dört farklı kuyu yarıçap değeri için soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi.

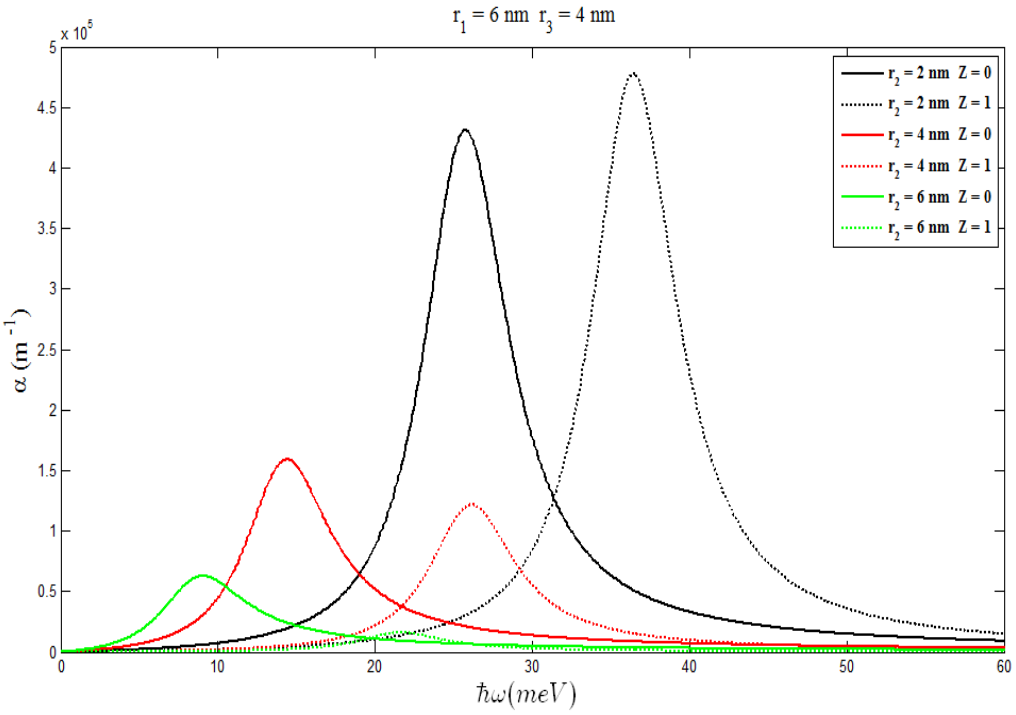
Şekil 5.19'da beş farklı optiksel şiddet değeri için soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. Şekilden görüleceği gibi, soğurma katsayısının pik değeri artan şiddet değerleriyle beklenildiği gibi azalmaktadır. Bu durum özellikle yüksek şiddette çalışan cihaz uygulamaları açısından son derece önemlidir. Sadece lineer soğurma katsayısını göz önüne alınarak yapılan hesaplar özellikle yüksek şiddet bölgelerinde önemli hatalara yol açacaktır ve bundan dolayı da tam sonuç için çizgisel olmayan soğurma katsayısının hesaba katılması gerekir.

Şekil 5.20'de dört farklı kuyu değeri için safsızlığın olduğu ve olmadığı durumdaki soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi gösterilmektedir. Kuyu yarıçapının artan değerleriyle foton enerjileri kırmızı bölgeye doğru kaymaktadır. Bu durum, artan yarıçaplarla 1s ve 1p seviyelerinin birbirine yaklaşmasından kaynaklanır. Kuyu yarıçap değerlerinin soğurma pikleri üzerine etkisi şekilden de kolaylıkla görülebilir. Kuyu yarıçap değerlerindeki artış soğurma piklerinin önemli ölçüde azalmasına neden olur. Bu durum, ilgili dipol matris elemanın artan kuyu yarıçaplarıyla azalmasından kaynaklanır. Ayrıca kuyu yarıçap değerleri arttıkça safsızlığın soğurma spektrumu üzerindeki etkisi de azalmaktadır. Bu beklenilen bir durum olup nedeni, artan kuyu genişliklerinde 1s ve 1p seviyeleri için elektronların tümüyle kuyu bölgesine sınırlandırılmış olması (Şekil 5.15) ve bunun sonucunda da safsızlığın etkisinin azalmasıdır.



Şekil 5.21. Dört farklı çekirdek yarıçap değeri için soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi.

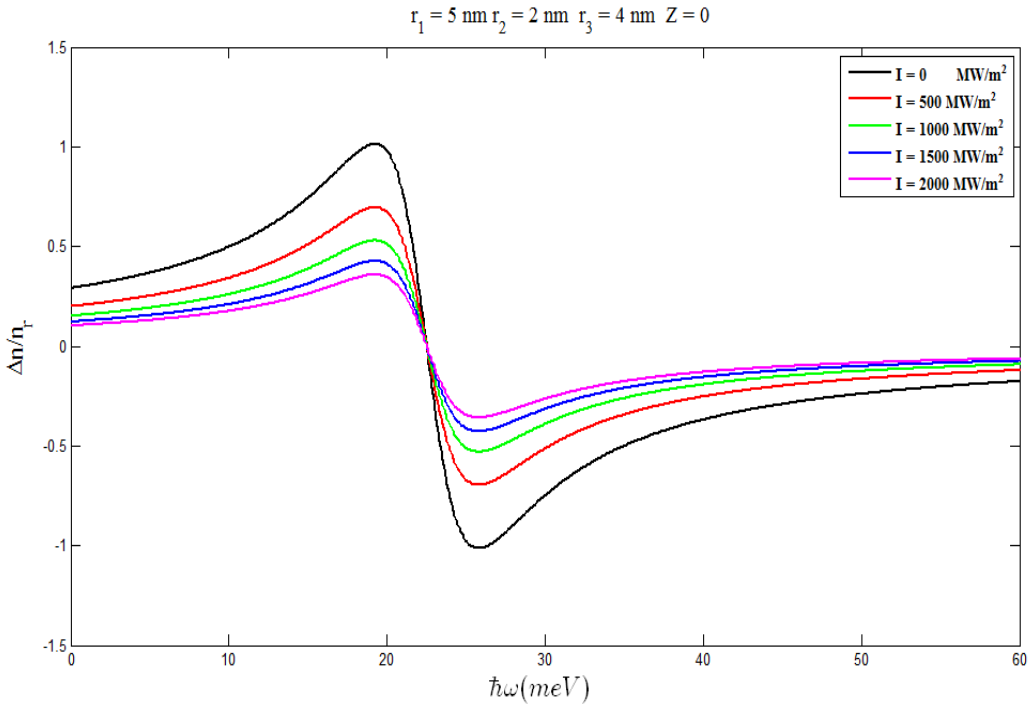
Şekil 5.21’ de dört farklı çekirdek yarıçap değeri için safsızlığın olduğu ve olmadığı durumdaki soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi verilmiştir. Çekirdek yarıçapının artan değerleriyle foton enerjisi başlangıçta mavi bölgeye doğru kaymaktadır. Belirli bir çekirdek yarıçap değerinden sonra ise spektrum kırmızıya doğru kayar. Bu durum, artan yarıçaplarla başlangıçta 1s ve 1p seviyelerinin birbirinden uzaklaşmasından ve belirli bir yarıçap değerinden sonra seviyelerin birbirine yaklaşmasından kaynaklanır. Safsızlığın olduğu durumda, bu davranış daha açık biçimde görülebilir. Çekirdek yarıçap değerlerinin soğurma pikleri üzerine etkisi şekilden de kolaylıkla görülebilir. Çekirdek yarıçap değerlerindeki artış soğurma piklerinin önemli ölçüde azalmasına neden olur. Bu durum, hem ilgili dipol matris elemanın hem de elektron yoğunluğunun artan çekirdek yarıçaplarıyla azalmasından kaynaklanır. r1 = 10 nm için şekil 5.13’den de kolaylıkla görülebileceği gibi 1s ve 1p seviyeleri için olasılık yoğunlukları çekirdek bölgesinde daha büyük değere sahip olup bu durum ilgili seviyeler arasındaki örtüşmenin ve dolayısıyla da ilgili matris elemanının daha büyük değere sahip olmasına neden olur. Ancak, artan çekirdek yarıçapıyla elektron yoğunluğundaki azalma matris elemanındaki artışı baskılayacak ve sonuç olarak da soğurma piki azalmaya devam edecektir.



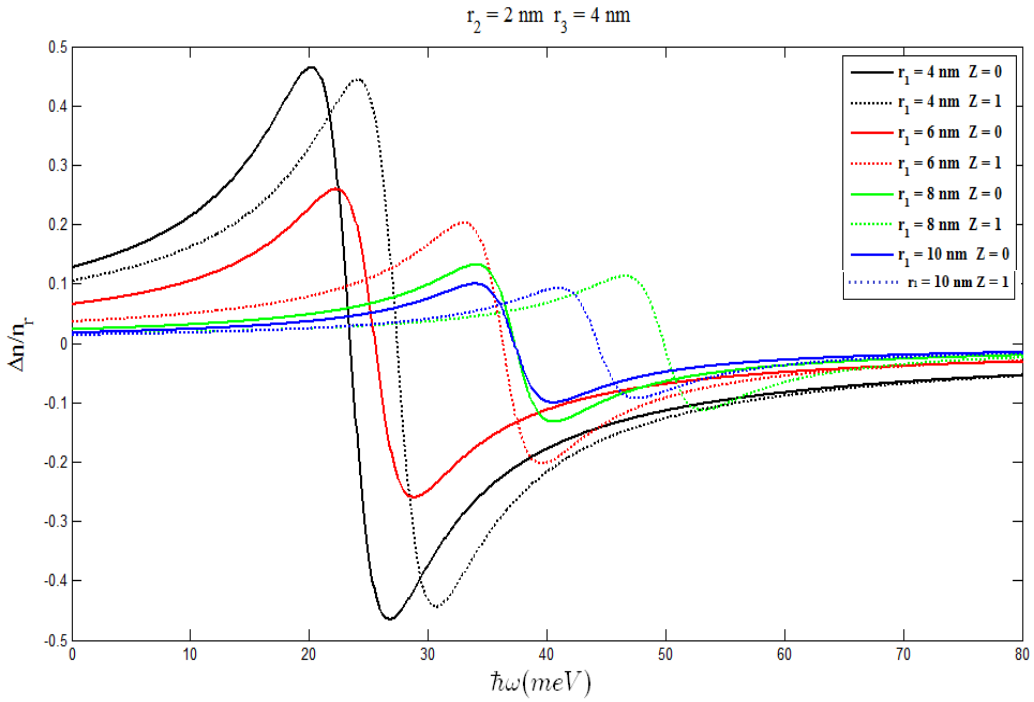
Şekil 5.22. Üç farklı bariyer yarıçap değeri için soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi.

Şekil 5.22’ de üç farklı bariyer yarıçap değeri için safsızlığın olduğu ve olmadığı durumdaki soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi gösterilmektedir. Bariyer yarıçapının artan değerleriyle foton enerjisi kırmızı bölgeye doğru kaymaktadır. Bu durum, şekil 5.14’ den görüleceği gibi artan yarıçaplarla 1s ve 1p seviyelerinin birbirine yaklaşmasından kaynaklanır. Bariyer yarıçap değerlerinin soğurma pikleri üzerine etkisi şekilden de kolaylıkla görülebilir. Bariyer yarıçap değerlerindeki artış aynı zamanda soğurma piklerinin önemli ölçüde azalmasına neden olur. Bu durum, hem taban ve uyarılmış durum dalga fonksiyonlarının artan bariyer genişlikleriyle farklı bölgelerde lokalize olmasından ve bunun sonucunda da ilgili dipol matris elemanın azalmasından hem de elektron yoğunluğunun azalmasından kaynaklanır.

5.2.4. Kırılma İndis Değişimleri



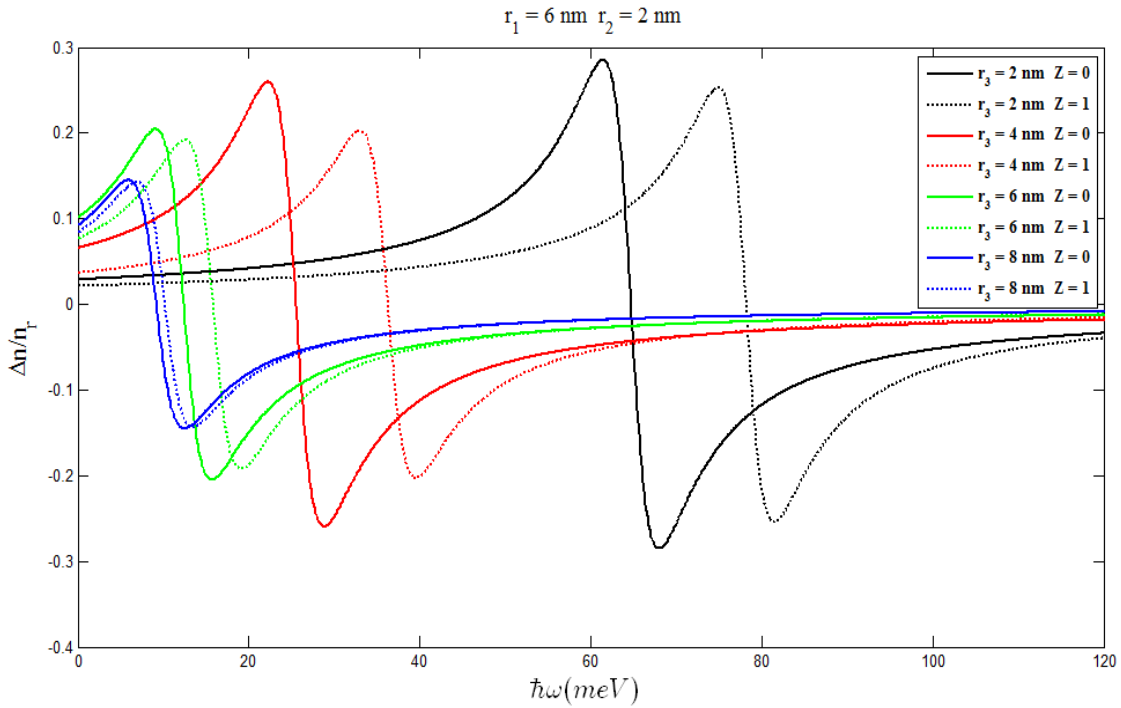
Şekil 5.23. Beş farklı optiksel şiddet değeri için kırılma indis değişiminin foton enerjisi ile değişimi.



Şekil 5.24. Dört farklı çekirdek yarıçap değeri için kırılma indis değişiminin foton enerjisi ile değişimi.

Şekil 5.23'de beş farklı optiksel şiddet değeri için kırılma indis değişiminin foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. Şekilden görüleceği gibi, kırılma indis değişiminin pik değeri artan şiddet değerleriyle beklenildiği gibi azalmaktadır. Bu durum özellikle yüksek şiddette çalışan cihaz uygulamaları açısından son derece önemlidir. Sadece lineer kırılma indis değişimini göz önüne alınarak yapılan hesaplar özellikle yüksek şiddet bölgelerinde önemli hatalara yol açacaktır ve bundan dolayı da tam sonuç için çizgisel olmayan kırılma indis değişiminin de hesaba katılması gerekir.

Şekil 5.24'de dört farklı çekirdek yarıçap değeri için safsızlığın olduğu ve olmadığı durumdaki kırılma indis değişiminin foton enerjisi ile değişimi verilmiştir. Çekirdek yarıçap değerlerinin kırılma indis değişimlerini önemli ölçüde değiştirdiği şekilden de kolaylıkla görülebilir. Çekirdek yarıçap değerlerindeki artış kırılma indis değişimlerinin pik değerlerinin önemli ölçüde azalmasına neden olur. Bu durum, hem ilgili dipol matris elemanın hem de elektron yoğunluğunun artan çekirdek yarıçaplarıyla azalmasından kaynaklanır. Ayrıca, safsızlığın olduğu durumdaki kırılma indis değişiminin safsızlığın olmadığı durumdakine kıyasla daha küçük olduğu görülür. Hem safsızlığın hem de çekirdek yarıçapının kırılma indis değişimleri üzerine böylesi etkisi cihaz uygulamaları açısından son derece önemli olacaktır.



Şekil 5.25. Üç farklı bariyer yarıçap değeri için kırılma indis değişiminin foton enerjisi ile değişimi.

Şekil 5.25'de üç farklı kuyu yarıçap değeri için safsızlığın olduğu ve olmadığı durumdaki kırılma indis değişiminin foton enerjisi ile değişimi gösterilmektedir. Kuyu yarıçap değerlerinin kırılma indis değişimleri üzerine etkisi şekilden de kolaylıkla görülebilir. Kuyu yarıçap değerlerindeki artış aynı zamanda kırılma indis değişim piklerinin önemli ölçüde azalmasına neden olur. Bu durum, artan kuyu genişlikleriyle hem ilgili dipol matris elemanın azalmasından hem de elektron yoğunluğunun azalmasından kaynaklanır.

6. YORUM ve ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, sonlu yarıiletken küresel kuantum noktası ile çok tabakalı yarıiletken küresel kuantum noktasının elektronik ve optik özellikleri teorik olarak ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir. Hesaplamalar birçok fiziksel özelliği oldukça iyi bilinen GaAs/AlGaAs malzemeleri için yapılmıştır. Literatürde kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini modellemede kullanılan pek çok yöntem olmasına rağmen gerek hızı gerekse de kararlılığından dolayı bu tez çalışmasının sayısal hesaplamalarında sonlu farklar metoduna dayalı matris köşegenleştirme tekniği kullanılmıştır. İlk olarak, hidrojenik safsızlık içeren tek elektronlu sonlu küresel bir kuantum noktası için elektronik yapı çalışılmıştır. Elde edilen sonuçlardan hem nokta yarıçapının hem de safsızlığın elektronik özellikleri önemli ölçüde değiştirdiği bulunmuştur. Daha sonra, literatürden de iyi bilinen iki seviyeli sistem için geçerli soğurma ve kırılma indis değişim ifadeleri kullanılarak yapının lineer ve lineer olmayan optiksel özellikleri incelenmiştir.

Tezin ikinci aşamasında, çok tabakalı yarıiletken kuantum noktası göz önüne alınmıştır. Elektronlar arasındaki etkileşmeler Hartree ve yerel yoğunluk yaklaşımı çerçevesi içerisinde incelenmiştir. Bu amaç doğrultusunda Schrödinger-Poisson denklemlerinin öz-uyumlu çözümleri gerçekleştirilmiştir. Elde edilen sonuçlar hem elektron sayısının hem de çok tabakalı küresel kuantum noktasının yapısal parametrelerinin elektronik yapıyı önemli ölçüde etkilediği bulunmuştur. Ayrıca, hidrojenik safsızlığın da etkileri detaylıca çalışılmış ve elektronik özellikleri değiştirdiği görülmüştür. Elde edilen bu sonuçlar bu tip etkilerin optik özellikleri de önemli ölçüde değiştireceğine işaret etmektedir. Bu amaçla, tezin son bölümünde bu konu üzerine odaklanılmıştır. İki seviyeli yoğunluk matris denklemleri kullanılarak şiddete bağlı soğurma katsayısı ve kırılma indisi için açık ifadeler elde edilmiş ve bu ifadeler kullanılarak çeşitli sayısal hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. İki seviye yaklaşımı pek çok durumda yetersiz kalmakla birlikte özellikle şiddete bağlı optiksel süreçlerin tanımlanmasında deneysel sonuçlarla uyumludur (Boyd, 2003). Çekirdek, bariyer ve kuyu yarıçapı gibi yapısal parametrelerin etkileri detaylıca çalışılmıştır. Çok tabakalı küresel kuantum noktasındaki yapısal parametrelerinin çeşitliliğinin optiksel uygulamalar açısından oldukça önemli olduğu ve bu konuda çalışan deneycilere de büyük esneklik sağlayacağı düşünülmektedir. Her ne kadar elektron-elektron etkileşmeleri elektronik yapı hesaplamalarında göz önüne alınsa da optik ifadelerde bu

etkileşmeleri içeren terimlerin olmaması bir eksikliktir. Gelecek çalışmalar açısından böylesi etkileri içeren yoğunluk matris denklemlerinden elde edilen ifadeler kullanarak yapılacak hesaplamalar büyük ölçüde bu alandaki deneyleri açıklayabilecek nitelikte olacaktır. Ayrıca, elektrik ve manyetik alan etkilerin de çok elektronlu kuantum nokta sistemlerine etkisinin çalışılması bu alandaki önemli bir eksikliği de giderecektir.

KAYNAKLAR

Aktaş, Ş., 1998, Düşük Boyutlu $Al_xGa_{1-x}As$ /*GaAs* Sistemlerin Elektronik Özellikleri, Doktora Tezi, T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne.

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

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

Bartıcevıc, Z., Pacheco, M., Latgé, A., 2000, Quantum rings under magnetic fields: electronic and optical properties, *Phys. Rev. B* 62, 6963.

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

Bastard, G., 1988, Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures s.128-142, *Halsted Press*, Fransa.

Baskoutas, S., Karabulut, I., 2008, Linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in spherical quantum dots: effects of impurities, electric field, size, and optical intensity, *J. Appl. Phys.* 103, 073512.

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

Cantele G., Nınno D., Iadonısı G., 2000, Confined states inellipsoidal quantum dots, *Phys.:Condens. Matter*, 12, 9019.

Chuu, DS, Hsiao, CM, Mei, WN - *Physical Review B*, 1992 – APS, Hydrogenic impurity states in quantum dots and quantum wires

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

Ceperley, D.M., Alder, B.J., 1980, Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method, *Phys*. *Rev*. *Lett*. 45, 566

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

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

Galdrikan, B., Birnir, B., 1995, Period doubling and strange attractors in quantum wells, *Physical Reviev Letters*, 76(18), 3308-3311.

Harrison, P., 2005, Quantum Wells, Wires and Dots, *Wiley-İnterscience*, West Sussex-England, 243.

Ilaıwı, K.F., Tomak, M., 1999,'' Polarizabilities of shallow donors in finite-barrier quantum wires''.*Phys. Rev. B,* 42,3132.

Jie, S. J., 2002, Excitions In Quantum Dot Quantum Well Nanoparticles. *Chinese Physics.* 11, 1286-1293.

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

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

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

Kervan, N., 2004., Kuantum Noktalarında Polaron Etkilerinin Sıkıştırılmış Durumlarla Kuramsal Incelenmesı

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

Kittel, C., 1996, Katıhal Fiziğine Giriş, *Bekir Karaoğu*, 6. basım, 224, Bilgitek yayıncılık, İstanbul.

Latgé, A., Montenegro, N.P., Olıveıra, L.E., 1992, Photoluminescence study of shallow acceptors in GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ cylindrical quantum-well wires, *Phys. Rev. B*, 45, 6742.

Latgé A., 1996, Intradonor absorption spectra under external fields in quantum wells, *Phys. Rev. B*, **53**, 10160.

Lee, J., Spector, HN, 1983, Impurity-limited mobility of semiconducting thin wire, *J. Appl. Phys*. 54(7), 3921.

Levine, B. F., Choi, K. K., Bethea, C. G., Walker, J., Malik, R. J. 1987 New 10 μm infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling GaAlAs superlattices. *Applied Physics Letters* 50:1092.97

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

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

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

Montenegro, N. P., Merchancano, T. P., 1992, Hydrogenic Impurities In GaAs (Ga, Al) As Quantum Dots. *Physical Review.* 46, 9780-9783.

Paspalakis, E., Simserides, C., Baskoutas, S., Terzis, A., F., 2008, Electromagnetically induced population transfer between two quantum well subbands, *Elsevier Physica E*, 40, 1301-1034

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

Rezaei, G., Vahdani, M. R. K., Vaseghi B., 2010, Nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity in an ellipsoidal finite potential quantum dot, *Current Appl. Phys.*, 11, 176, 2011.

Spyridon, G., Kosionis, Andreas F., Terezis, C., Simserides, Emmanuel Paspalakis, 2010, Linear and nonlinear optical properties of two-subband system in a symmetric semiconductor quantum well, *Journal of Applied Physics*, 108, 034316.

Şahin, M., Tomak, M., 2005, Electronic Structure of A Many-Electron Spherical Quantum Dot with an Impurity, *Phys. Rev. B*, **72**, 125323.

Ulaş, M., Akbaş, H., Tomak, M., 1997, Shallow donors in a quantum well wire: Electric field and geometrical effects, *Phys. Stat. Sol.*, **200**, 67.

Wang, C.K, Berggren, K.F., 1998, Spontaneous spin polarization in quantum wires *Physica E*, **2**, 964.

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

Xie, W., 2010, Nonlinear optical properties of a D− system in a spherical quantum dot.

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

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

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

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Hasan Cihat İSLAMOĞLU
Uyruğu : Türkiye Cumhuriyeti
Doğum Yeri ve Tarihi : Doğanhisar/KONYA ve 03.01.1989
Telefon : 05375997438
Faks :
e-mail : islamogluhasan_cihat@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	**Selçuklu Atatürk Lisesi, Selçuklu, KONYA**	**2005**
Üniversite	:	**Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, KONYA**	**2010**
Yüksek Lisans	:	**Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, KONYA**	
Doktora	:		

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**

UZMANLIK ALANI

YABANCI DİLLER: İngilizce

BELİRTMEK İSTEĞİNİZ DİĞER ÖZELLİKLER

YAYINLAR