



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ ELEKTRONLU VE ÇOK TABAKALI KÜRESEL BİR KUANTUM NOKTASININ OPTİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

RAŞİT AYDIN

DOKTORA TEZİ

FİZİK Anabilim Dalı

Ekim-2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

DOKTORA TEZİ

İKİ ELEKTRONLU VE ÇOK TABAKALI KÜRESEL BİR KUANTUM NOKTASININ OPTİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Raşit AYDIN

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
FİZİK Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN

2013, 117 Sayfa

Jüri
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN
Doç. Dr. Ahmet ERDİNÇ
Doç. Dr. Erhan AKIN
Yrd. Doç. Dr. Ömer Faruk YÜKSEL

Bu tez çalışmasında, çekirdek/kabuk/kuyu/kabuk yapısına sahip bir kuantum nokta heteroyapıdaki çift elektronun, elektronik ve optik özellikleri ayrıntılı bir şekilde araştırılmıştır. İlk olarak, merkezdeki donor safsızlığının varlığında ve yokluğunda, bu yapıya ait enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları tabaka kalınlıklarının fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Bu amaçla, Poisson-Schrödinger denklemleri, etkin kütle ve Hartree yaklaşımında öz-uyumlu olarak çözülmüştür. Elde edilen enerji değerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak iki elektronlu kuantum nokta yapının, band içi seviyeler arası lineer ve lineer olmayan optik soğurma katsayıları ve osilatör şiddetleri, tabaka kalınlıklarının ve foton enerjilerinin fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Safsızlığın olmadığı durumda gerçekleştirilen tüm hesaplamalar, kuantum noktasının merkezinde bir donor safsızlığının bulunması durumunda tekrar edilmiştir ve böylece negatif yüklü donor safsızlığının (D^-) bağlanma enerjisi, lineer ve üçüncü dereceden lineer olmayan optik soğurma katsayıları gibi elektronik ve optik özellikleri incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar, çekirdek yarıçapının ve tabaka kalınlıklarının fonksiyonu olarak, safsızlığın olduğu ve olmadığı durumlar için ayrıntılı bir şekilde analiz edilmiş ve fiziksel yorumları yapılmıştır. Elektronik ve optik özelliklerin, tabaka kalınlıklarına sıkı bir şekilde bağlı olduğu ve bu özelliklerin safsızlık atomunun varlığında önemli şekilde değişebildiği gözlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Bağlanma enerjisi, çok tabakalı kuantum nokta, optik soğurma katsayısı, osilatör şiddeti, negatif yüklü donor safsızlığı

ABSTRACT

Ph.D. THESIS

INVESTIGATION OF OPTICAL PROPERTIES OF A MULTI-LAYERED SPHERICAL QUANTUM DOT WITH DOUBLE ELECTRONS

Raşit AYDIN

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF SELÇUK UNIVERSITY
DOCTOR OF PHILOSOPHY
IN PHYSICS

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN

2013, 117 Pages

Jury
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Assoc. Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN
Assoc. Prof. Dr. Ahmet ERDİNÇ
Assoc. Prof. Dr. Erhan AKIN
Asst. Prof. Dr. Ömer Faruk YÜKSEL

In this thesis, the electronic and optical properties of a core/shell/well/shell quantum dot heterostructure with double electron have been investigated in a detail. First, the energy eigenvalues and corresponding wave functions of this structure have been calculated as a function of the layer thicknesses for cases with and without an on-center donor impurity. For this purpose, the Poisson-Schrödinger equations have been solved self-consistently in the frame of effective mass approximation and Hartree treatment. The inter-sublevel linear and third-order nonlinear absorption coefficients and oscillator strengths of the double electron multi-shell quantum dot have been calculated as a function of the layer thicknesses and photon energies. All of these calculations performed for cases without impurity have been also repeated in case of the impurity. Therefore, the electronic and optical properties of negatively charged impurity (D^-), such as binding energies, linear and third-order nonlinear optical properties etc., have been investigated. The results have been analyzed in a detail as a function of the core radius and layer thicknesses for cases with and without the impurity and physical reasons have been discussed. We have observed that the electronic and optical properties are drastically dependent on the layer thicknesses and these properties can change importantly with existing of the impurity atom.

Keywords: Binding energy, multi layered quantum dot, absorption coefficients, oscillator strength, negatively charged donor impurity

ÖNSÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Doktora tezi olarak sunulan bu çalışmada, iki elektronlu ve çok tabakalı küresel bir kuantum noktasının elektronik ve optik özellikleri, teorik olarak incelenmiştir. Hesaplamalarda, safsızlık etkisi de göz önüne alınmış ve sonuçlar karşılaştırmalı bir şekilde tabaka kalınlıklarının bir fonksiyonu olarak verilmiştir.

Teknolojideki hızlı gelişmeler, yük taşıyıcıları üç boyutta sınırlandıran kuantum nokta yapıların üretilmesini mümkün hale getirmiştir. Geçtiğimiz yıllarda, yarıiletken kuantum nanoyapılar arasında en çok ilgiyi, aygıt uygulamaları ve ilginç temel fiziksel özellikleri nedeniyle sıfır boyutlu kuantum nanoyapılar görmüştür. Pek çok araştırmacı tarafından kuantum noktaların çeşitli elektronik ve optik özellikleri, hem teorik hem de deneysel olarak yoğun bir şekilde araştırılmaktadır. Son yıllarda nanoyapı üretim teknolojilerindeki gelişmeler sayesinde, çok tabakalı küresel kuantum nokta yapıların üretilmesi de mümkün hale gelmiştir. Buna bağlı olarak bu tür yapılar üzerinde de deneysel ve teorik çalışmalar yapılmaya başlanmıştır.

Bu tez çalışmasında da iki elektronlu ve çok tabakalı yarıiletken kuantum noktasının elektronik ve optik özelliklerinin daha iyi anlaşılabilmesi adına, bu özelliklerin tabaka kalınlıklarıyla değişimi, merkezde safsızlığın varlığında ve yokluğunda, ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir.

Bu çalışma süresince, bilgi ve deneyimleriyle bana her konuda yardımcı olan ve yön gösteren danışman hocam Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN'e ve ailesine en içten teşekkürlerimi sunarım.

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

Raşit AYDIN
KONYA-2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **ix**

1. GİRİŞ ve KAYNAK ARAŞTIRMASI **1**

2. YARIİLETKEN KUANTUM NANOYAPILAR **6**

2.1. Giriş 6
2.2. Katı Cisimlerin Sınıflandırılması: Metaller, Yalıtkanlar ve Yarıiletkenler 6
2.3. Etkin Kütle Kavramı 9
2.4. Düşük Boyutlu Yarıiletken Yapılar 11
2.4.1.Külçe malzeme 12
2.4.2. Kuantum kuyu yapılar 13
2.4.3. Kuantum tel yapılar 15
2.4.4. Kuantum nokta yapılar 16
2.5. Donor Safsızlığı 17

3. KUANTUM NANOYAPILARDA BANDİÇİ OPTİK SÜREÇLER **19**

3.1. Giriş 19
3.2. Radyasyonla Kuantum Sistemlerin Etkileşmesi 19
3.2.1. Elektromanyetik alanda yüklü parçacıklar 19
3.2.2. Geçiş hızları 20
3.2.3. Fermi'nin Altın kuralı 23
3.2.4. Soğurma 24
3.2.5. Dipol yaklaşıklığı 26
3.2.6. Seçim kuralları 28
3.2.7. Çizgi biçimleri ve genişlikleri 29
3.3. Osilatör Şiddeti 30
3.4. Lineer ve Lineer Olmayan Soğurma Katsayıları 32

4. FİZİKSEL YAKLAŞIMLAR ve HESAPLAMA TEKNİKLERİ **34**

4.1. Giriş 34
4.2. Matris Köşegenleştirme Tekniği 34
4.2.1. Radyal Schrödinger denklemi 35
4.2.2. Poisson denklemi 38
4.3. Etkin Kütle Uyuşmazlığı 40
4.4. Dielektrik Katsayı Uyuşmazlığı 43
4.5. Hartree Yaklaşımı 44
4.6. Elektronik Yapı Hesabı 46

5. HESAPLAMA SONUÇLARI 52

5.1. Giriş 52
5.2. Elektronik Özelliklerin Çekirdek Yarıçapı (R_1) ile Değişimi 53
5.3. Elektronik Özelliklerin Bariyer Kalınlığı (Ts) ile Değişimi 63
5.4. Elektronik Özelliklerin Kuyu Genişliği (T_w) ile Değişimi 73
5.5. Optik Özelliklerin Tabaka Kalınlıklarına Bağlı Olarak İncelenmesi 81

6. YORUM ve ÖNERİLER 97

KAYNAKLAR 99

ÖZGEÇMİŞ 108

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

h	Planck Sabiti
$\hbar$	İndirgenmiş Planck sabiti
m_0	Serbest elektronun kütlesi
m^*	Etkin kütle
ε_0	Boşluğun dielektrik geçirgenliği
ε_r	Malzemenin dielektrik sabiti
k	Dalga vektörü
D^0	Yüksüz donor safsızlığı
D^-	Negatif yüklü donor safsızlığı
f	Osilatör şiddeti
$\alpha^{(1)}$	Lineer soğurma katsayısı
$\alpha^{(3)}$	Üçüncü derece lineer olmayan soğurma katsayısı
w	Açısal frekans
μ	Malzemenin manyetik geçirgenliği
I	Işık şiddeti
n_r	Malzemenin kırılma indisi
N	Kuantum noktasındaki elektron yoğunluğu
V_b	Sınırlandırma potansiyeli
V_H	Hartree potansiyeli
T_s	Bariyer genişliği
T_w	Kuyu genişliği
Z	Safsızlık yükü
$R_{nl}(r)$	Elektronun radyal dalga fonksiyonu
a_0^*	Etkin Bohr yarıçapı
R_y^*	Etkin Rydberg sabiti

1. GİRİŞ ve KAYNAK ARAŞTIRMASI

Nanofabrikasyon teknolojisindeki son gelişmeler, düşük boyutlu yarıiletken yapıların üretilmesini mümkün hale getirmiştir. Kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları gibi bir, iki ve üç boyutta sınırlandırılmış nano boyutlu yapılar, elektronik ve optoelektronik uygulamalar için oldukça dikkat çekmiştir. Geçtiğimiz yıllarda, yarıiletken kuantum nanoyapılar arasında en çok ilgiyi, aygıt uygulamaları ve ilginç temel fiziksel özellikleri nedeniyle sıfır boyutlu kuantum nanoyapılar görmüştür. Pek çok araştırmacı tarafından kuantum noktaların çeşitli elektronik ve optik özellikleri, hem teorik hem de deneysel olarak yoğun bir şekilde araştırılmaktadır (Zhu ve ark., 1990; Niculescu ve Niculescu, 1997; Lien ve Trihn, 2001; Peter, 2005).

Kuantum noktalardaki hidrojenik safsızlık problemi, bu yapıların elektronik ve optik özelliklerinin anlaşılmasında oldukça faydalı bir model olması nedeniyle oldukça ilgi çeken bir konu olmuştur. Bu nedenle kuantum nokta yapılarda hidrojenik safsızlık problemi, çeşitli analitik ve nümerik yöntemler kullanılarak, birçok yazar tarafından incelenmiştir (Xie, 2010a; Zhang ve ark., 2010a; Boichuk ve ark., 2011; Rezaei ve ark., 2011b; Taş ve Şahin, 2012b; Şahin ve Köksal, 2012). Küresel kuantum noktalarda merkezde (Porras-Montenegro ve Perez-Merchancano, 1992; Deng ve ark., 1994; Chuu ve ark., 1992; Bose ve Sarkar, 1998; Bose, 1999; Safarpour ve ark., 2012a) veya merkez dışında (Zhu ve Chen, 1994; Rezaei ve ark., 2012a) konumlanan hidrojenik safsızlık, etkin kütle yaklaşımında, farklı yöntemler kullanılarak pek çok araştırmacı tarafından incelenmiştir (Murillo ve Porras-Montenegro, 2000; Dane ve ark., 2008; Stojanovic ve Kostic, 2012). Benzer şekilde, tek bir kuantum noktasındaki hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisine, sınırlandırma potansiyel şekillerinin ve donor konumunun etkileri çalışılmıştır (Riberio ve Latge, 1994; Bose ve Sarkar, 2000; Sadeghi, 2009; Nasri ve Sekkal; 2010). Yarıiletken kuantum nokta yapılara uygulanan dış elektrik alan, manyetik alan, hidrostatik basınç ve sıcaklık etkileri, kuantum noktaların elektronik özellikleri hakkında çok önemli bilgiler sağlayabilir. Bu nedenle pek çok araştırmacı tarafından elektrik alan (Gerardin Jayam ve Navaneethakrishnan, 2003; He ve Xie, 2010; Vazquez ve ark., 2004), manyetik alan (Wu ve Wan, 2012), hidrostatik basınç (Perez-Merchancano ve ark., 2008; Sivakami ve Mahendran, 2010; Dane ve ark., 2011) ve sıcaklık etkisi (Elabsy, 1999; Liang ve Xie, 2011; Safarpour ve ark., 2012b) altında, hidrojenik bir safsızlığın bağlanma enerjisi çalışılmıştır.

Nano fizikte bir elektronlu kuantum nokta yapılar yaygın olarak kullanılmaktadır. Günümüzde ise iki ve daha fazla elektronlu kuantum noktalara olan ilgi artmaktadır. Kuantum noktalardaki elektronların sayısı bu yapıların birçok fiziksel özelliklerini anlamak için çok önemlidir ve elektron sayısı arttıkça elektronlar arası Coulomb etkileşimi önemli hale gelir. Araştırmacılar tarafından tek elektronlu kuantum nokta yapılarla ilgili pek çok çalışmalar yapıldığı gibi son zamanlarda iki elektronlu küresel kuantum noktalarda negatif yüklü donor merkezi (D^-) ile ilgilide teorik ve deneysel araştırmalar da yapılmaktadır. Zhu ve ark. (1992), varyasyon yöntemi kullanarak, küresel bir kuantum noktasındaki D^- safsızlığının bağlanma enerjisini, kuyu yarıçapı ve bariyer yüksekliğine bağlı olarak incelemiştir. Szafran ve ark. (1998), sonlu küresel simetrik sınırlandırma potansiyeline sahip yarıiletken kuantum noktasında, varyasyon yöntemiyle, taban durum ve hem spin-tekli hem de spin-üçlü uyarılmış durum enerjilerini hesaplamışlar ve enerjileri potansiyel kuyu derinliği ve nokta yarıçapının bir fonksiyonu olarak incelemişlerdir. Xie (1999) yaptığı çalışmada, çok cisim metodunu kullanarak, parabolik potansiyelli disk biçimli bir kuantum noktasındaki D^- merkezinin enerji spektrumunu hesaplamıştır ve taban durum ve uyarılmış birkaç seviyenin bağlanma enerjilerini, kuantum nokta yarıçapının fonksiyonu olarak incelemiştir. Xie aynı hesaplamaları, manyetik alanın varlığında tekrar etmiş ve D^- sisteminin enerji spektrumuna, donorun konumunun etkisini incelemiştir (Xie, 2000a; Xie, 2000b; Xie, 2001). Xie (2002) diğer bir çalışmasında, disk biçimli bir kuantum noktasında, D^- merkezinin ikinci bağlı seviyesinin bağlanma spektrumunu, manyetik alan şiddeti ve nokta yarıçapının fonksiyonu olarak hesaplamıştır. Betanjur ve ark. (2004), son yıllarda geliştirilen oransal kırılma boyutu metodunu (fractal dimension method) kullanarak, küresel bir kuantum noktasındaki yüksüz D^0 ve negatif yüklü D^- donor safsızlığının bağlanma enerjisini, farklı potansiyeller için ayrıntılı bir şekilde incelemişlerdir. Gu ve Liang (2005), etkin kütle yaklaşımında matris köşegenleştirme tekniğini kullanarak, Gausyen sınırlayıcı potansiyelli disk biçimli bir kuantum noktasındaki D^- merkezinin, taban durum ve uyarılmış seviyelerin enerjilerini incelemişler ve aynı hesaplamaları harmonik osilatör potansiyellerinde tekrar etmişlerdir. Garcia ve ark. (2006), adyabatik yaklaşım metodunu kullanarak, disk, lens ve piramit gibi farklı geometrik şekillere sahip kuantum noktalarda, yüksüz donor bağlanma enerjilerini incelemişlerdir. Xie (2008a) yaptığı çalışmada, etkin kütle yaklaşımında matris köşegenleştirme yöntemini kullanarak, Gausyen ve parabolik sınırlandırma potansiyeline sahip kuantum noktalarındaki D^- safsızlığının taban durum

ve uyarılmış durum bağlanma enerjisini hesaplamıştır (Xie, 2009b). Xie aynı hesaplamaları manyetik alanın varlığında tekrar etmiştir ve bağlanma enerjisini nokta yarıçapı, potansiyel büyüklüğü, uygulanan manyetik alan şiddeti ve safsızlık atomunun konumuna bağlı olarak incelemiştir (Xie, 2008b; Xie, 2009a). Gomez ve Romero (2010), konfigürasyon etkileşim metodunu kullanarak, Gausyen sınırlandırma potansiyelli küresel bir kuantum noktasının merkezinde ve merkez dışında bulunan D^- safsızlığının bağlanma enerjisini hesaplamışlar ve bağlanma enerjisini, safsızlığın konumuna göre incelemişlerdir. Boda ve Chatterjee (2012), varyasyonel metodu kullanarak, Gaussian sınırlayıcı potansiyelli bir kuantum noktasında hapsedilmiş, yüksüz D^0 ve negatif yüklü D^- safsızlığının bağlanma enerjisini nokta büyüklüğü ve sınırlandırma şiddetinin bir fonksiyonu olarak incelemişler ve D^- merkezinin dipol momentini nokta yarıçapı ve sınırlandırma kuvvetinin bir fonksiyonu olarak hesaplamışlardır.

Son yıllarda nanoyapı üretim teknolojilerindeki gelişmeler sayesinde, çok tabakalı küresel kuantum nokta yapıların (ÇTKKN) üretilmesi mümkün hale gelmiştir. Buna bağlı olarak bu tür ÇTKKN yapılar üzerinde de deneysel ve teorik çalışmalar yapılmaya başlanmıştır (Hsieh, 2000). Hsieh ve Chuu (2000), etkin kütle yaklaşımını kullanarak, ÇTKKN'nin merkezinde bulunan hidrojenik safsızlığın taban ve uyarılmış durum enerjilerini hesaplamışlar ve safsızlık bağlanma enerjisini kabuk kalınlığı, çekirdek yarıçapı, toplam nokta yarıçapı ve potansiyel yükseklikleri cinsinden incelemişlerdir. Zheng (2008), varyasyonel metodunu kullanarak, çoklu bir kuantum noktasındaki hidrojenik safsızlığın taban durum bağlanma enerjisini hesaplamış ve bağlanma enerjisini, nokta boyutu, bariyer kalınlığı ve alaşım konsantrasyonu gibi parametrelere bağlı olarak incelemiştir. Aktas ve Boz (2008), varyasyonel yaklaşımla, çok tabakalı bir kuantum noktasının merkezinde yer alan hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisini hesaplamışlar ve bağlanma enerjisini, çeşitli sınırlandırma potansiyelleri için bariyer kalınlığı ve merkezdeki kuantum nokta büyüklüğüne bağlı olarak incelemişlerdir. Boz ve ark. (2009), yaptıkları çalışmada, 4. Derece Runge-Kutta yöntemini kullanarak, merkezde bulunan hidrojenik safsızlığın enerji durumlarını, farklı potansiyel yükseklikleri için bariyer ve merkezdeki kuantum nokta büyüklüğüne bağlı olarak incelemişlerdir ve başka bir çalışmada aynı hesaplamaları varyasyonel metodu kullanarak, manyetik alanın varlığında tekrar etmişler ve safsızlığın bağlanma enerjisini incelemişlerdir (Boz ve ark., 2010). Mikhail ve Sayed (2011), ÇTKKN'nin merkezinde veya merkez dışında bulunan safsızlığın bağlanma enerjisini, yapının farklı bölgelerinde

farklı kütleler ve dielektrik sabitlerini dikkate alarak, varyasyonel yaklaşımla, safsızlığın yokluğunda ve merkezde safsızlığın varlığında hesaplamışlardır. Şahin ve ark. (2012), ÇTKKN'nin merkezindeki hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisini ve fotoiyonizasyon tesir kesitini hesaplamışlar ve tabaka kalınlıkları ve normalize foton enerjilerinin bir fonksiyonu olarak incelemişlerdir. Taş ve Sahin (2012a), ÇTKKN'nin enerji özdeğerleri, dalga fonksiyonları, elektron olasılık yoğunluğu ve bağlanma enerjileri gibi elektronik özelliklerini safsızlığın varlığı ve yokluğu durumları için, farklı çekirdek yarıçapı, bariyer kalınlıkları ve kuyu genişliklerinin bir fonksiyonu olarak incelemişlerdir. Akgül ve ark. (2012), parabolik sınırlandırma potansiyelli ÇTKKN'nin safsızlığın varlığında ve yokluğunda taban ve uyarılmış durumların elektronik özelliklerini, tabaka kalınlığı ve çekirdek yarıçapına bağlı olarak incelemişlerdir.

Yarıiletken nanoyapılar arasında kuantum noktalar ilginç elektronik özellikleri yanısıra optik özellikleri nedeniyle de büyük önem kazanmıştır. Son yıllarda düşük boyutlu yarıiletken kuantum nokta yapıların, dipol geçişleri (Xie, 2008c; Xie, 2008d; Kostic ve Stojanovic, 2012; Keshavarz ve Zamani, 2013), osilatör şiddeti (Stoleru ve Towe, 2003; Yilmaz ve Şafak, 2007; Bochorishvili ve Polatoglu, 2009), lineer (Özmen ve ark., 2009; Geyter ve Hens, 2010; Rezaei ve ark., 2012b) ve lineer olmayan optik soğurma katsayıları (Xie, 2009c; Vahdani ve Rezaei, 2009; Çakır ve ark., 2010; Yakar ve ark., 2010), fotoiyonizasyon tesir kesiti (Şahin ve ark., 2012) ve kırılma indisi değişimleri (Yao ve ark., 2009; Rezaei ve ark., 2010; Rezaei ve ark., 2011a; Safarpour ve Barati, 2013) gibi optik özellikleri, deneysel ve teorik olarak yaygın bir şekilde çalışılmaktadır. Yapılan bu çalışmaların çoğu, bir kuantum noktasında, en düşük enerji seviyeleri arasındaki geçişlerin hesaplanmasıyla ilgilidir.

Kuantum noktalara, elektrik ve manyetik alan, hidrostatik basınç ve sıcaklık gibi dış pertürbasyonun uygulanması, kuantum noktaların optik özelliklerinde önemli değişikliklere neden olur. Bu nedenle kuantum nokta yapılarına, elektrik alan (Xie, 2010b; Zhang ve ark., 2010b; Sadeghi, 2011; Kırak ve ark., 2011) manyetik alan (Xie, 2009d; Xie, 2011a; Xie, 2013a; Wu ve ark., 2013), hidrostatik basınç ve sıcaklık (Farkoush ve ark., 2013; Kirak ve ark., 2013; Rezaei ve Kish, 2013) etkileri pek çok araştırmacı tarafından çalışılmıştır.

Xie yaptığı çalışmalarında, etkin kütle yaklaşımında, matris köşegenleştirme yöntemi ve kompakt yoğunluk matris yaklaşımını (compact-density matrix approach) kullanarak, parabolik, Gausyen ve Wood-Saxon potansiyeli gibi farklı sınırlandırma potansiyellerine sahip, iki elektronlu bir kuantum noktasının optik özelliklerini,

sınırlandırma şiddeti, safsızlık ve manyetik alana bağlı olarak incelemiştir (Xie, 2008e; Xie, 2009e; Xie, 2011b; Xie, 2011c; Xie, 2013b). Şahin (2009), yaptığı çalışmada bir ve iki elektronlu küresel kuantum noktaların optik özelliklerini, hidrojenik safsızlığın varlığında ve yokluğunda incelemiştir. Bu çalışmasında ayrıca, matris köşegenleştirme tekniğini kullanarak Schrödinger denklemini öz uyumlu alan yöntemiyle çözerek enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını belirlemiştir. Sonuçlar kuantum nokta yarıçapı, ışık şiddeti ve foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak verilmiştir. Lu ve ark. (2011), kompakt-yoğunluklu matris yaklaşımını kullanarak, iki elektronlu bir kuantum noktasının optik özelliklerini ve kırılma indisi değişimlerini incelemişlerdir. Lu ve Xie (2011), pertürbasyon yöntemini kullanarak, iki elektronlu bir kuantum noktasının kırılma indisi ve optik soğurma gibi optik özelliklerini dış bir elektrik alanın varlığında incelemiştir. Mengesha ve Mal'nev (2012), varyasyon ve pertürbasyon yöntemlerini kullanarak, iki elektronlu küresel simetrik bir kuantum noktasının, düşük enerji seviyeleri ve optik özelliklerini incelemişlerdir.

Bu tez çalışmasında, iki elektronlu, çekirdek/kabuk/kuyu/kabuk şeklindeki küresel bir kuantum noktasının, elektronik ve optik özellikleri, safsızlığın varlığında ve yokluğunda ayrıntılı bir şekilde, tabaka kalınlıklarına bağlı olarak incelendi. Bunun için ilk olarak, bu yapıya ait enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını belirlemek için, Poisson-Schrödinger denklemleri, etkin kütle ve Hartree yaklaşımında, öz-uyumlu olarak çözüldü. Elde edilen enerji değerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak iki elektronlu kuantum nokta yapının, band içi seviyeler arası lineer ve lineer olmayan optik soğurma katsayıları ve osilatör şiddetleri farklı tabaka kalınlıklarında hesaplandı. Safsızlığın olmadığı durumda gerçekleştirilen optik özelliklerle ilgili hesaplamalar, kuantum noktasının merkezinde bir donor safsızlığının bulunması durumunda tekrar edildi ve böylece negatif yüklü donor safsızlığının (D^-) bağlanma enerjisi, lineer ve üçüncü dereceden lineer olmayan optik soğurma katsayıları gibi elektronik ve optik özellikleri incelendi.

Sonuçlar, tabaka kalınlıklarının ve çekirdek yarıçapının fonksiyonu olarak ayrıntılı bir şekilde analiz edildi ve fiziksel yorumları yapıldı. Elektronik ve optik özelliklerin, tabaka kalınlıklarına sıkı bir şekilde bağlı olduğu gözlendi.

2. YARIİLETKEN KUANTUM NANOYAPILAR

2.1. Giriş

Bu bölümde metaller, yalıtkanlar ve yarıiletkenler gibi katı cisimler hakkında kısaca bilgiler verilecek ve etkin kütle kavramı açıklanacaktır. Ayrıca külçe malzemeler ve kuantum kuyu, kuantum tel ve kuantum nokta gibi nanoyapılar ve bu yapıların temel elektronik özelliklerinden bahsedilecektir. Yine bu bölümde, yarıiletken bir malzeme içerisindeki donor safsızlığının fiziksel özelliklerinden bahsedilecektir.

2.2. Katı Cisimlerin Sınıflandırılması: Metaller, Yalıtkanlar ve Yarıiletkenler

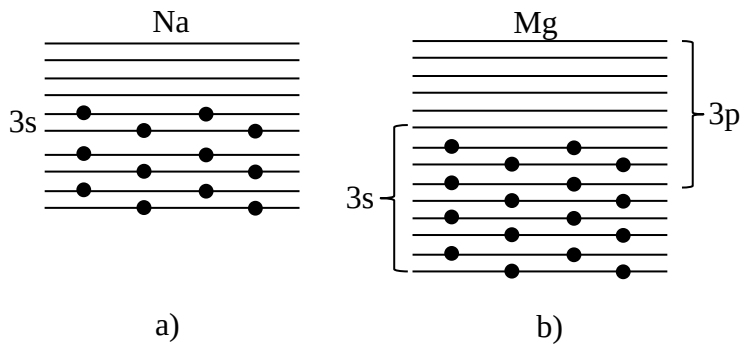
Katı cisimler, elektriksel özelliklerine (özdirencine) göre üç guruba ayrılırlar: Metaller (veya iletkenler), yalıtkanlar ve yarıiletkenler. Katı cisimlerin sınıflandırılması şöyledir:

1. Metaller: $\rho = 10^{-6} - 10^{-4}\ ohm.cm$
2. Yarıiletkenler: $\rho = 10^{-4} - 10^{10}\ ohm.cm$
3. Yalıtkanlar: $\rho \geq 10^{10}\ ohm.cm$

Metallerde özdirenç sıcaklıkla lineer olarak artmakta iken yarıiletkenlerin özdirenci, metallerin aksine sıcaklık arttıkça üstel olarak küçülmektedir (Kittel, 1986).

Metallerin, yarıiletkenlerin ve yalıtkanların özdirenç kriterine göre, ayırt edilmesi her zaman geçerli değildir. Yarıiletkenlerin özdirenci, yüksek sıcaklıklarda metallere benzer ve düşük sıcaklıklarda da (mutlak sıfıra yaklaşıldığında) yalıtkanlara benzer davranış göstermektedirler. Metallerin, yarıiletkenlerin ve yalıtkanların farkı daha genel ve daha tam olarak band teorilerinin açıklanmasıyla belirlenebilir (Durlu, 1992).

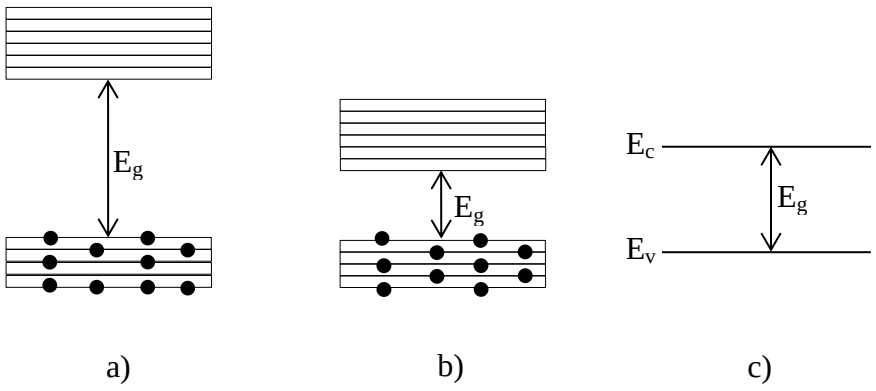
Metallerin valans bandları genelde kısmen doludur. Bunlar iyi iletkendirler. Bunlara Li, Na, K gibi alkali metaller veya Cu, Ag, Au gibi geçiş metalleri örnek olarak verilebilir. Bunların enerji band diyagramları Şekil 2.1a' da görülmektedir. Diğer taraftan, Şekil 2.1b' de görüldüğü gibi, bazı metallerin enerji band yapılarına bakıldığında, tam dolu valans bandı ile boş olan iletkenlik bandının üst üste geldiği görülür. Bunlara Mg, Be gibi elementler örnek olarak verilebilir (Tayyar, 2000).



Şekil 2.1. Metallerin enerji band diyagramı **(a)** Na metalinin kısmen elektronlarla dolmuş valans bandı; **(b)** Mg metalinin elektronlarla tamamen dolmuş valans bandı ve iletim bandının kısmen üstüste gelmesi

Yalıtkanlarda Şekil 2.2a'da görüldüğü gibi valans bandı tamamen dolu ve valans bandının üstündeki iletim bandı tamamen boştur. Valans ve iletim bandları arasında geniş bir yasak band vardır. Yalıtkanlarda yasak bandın genişliği büyüktür (E_g>4 eV) (Karaoğlu, 1996) Yalıtkanlara dış elektrik alan uygulandığında, valans bandında boş yerler olmadığı için elektronlar hareket edemezler (yük taşıyamazlar) ve elektrik akımı oluşturamazlar.

Yarıiletkenler, valans ve iletim bantları arasındaki yasak enerji aralığı yalıtkanlarda olduğu kadar geniş olmayan, iletkenlikleri metallerle yalıtkanlar arasında yer alan, içlerine katkılanan uygun atomlarla elektriksel iletkenliklerinin önemli ölçüde değiştirilebildiği malzemelerdir. Şekil 2.2b'den görüldüğü gibi yarıiletkenlerin enerji band diyagramı T=0K'de, yalıtkanların enerji band diyagramına benzemektedir. Aralarındaki fark, iletim bandı ile valans bandı arasındaki E_g ile gösterilen yasak enerji aralığının yalıtkanlara göre daha küçük olmasıdır (E_g=0.1-4 eV).



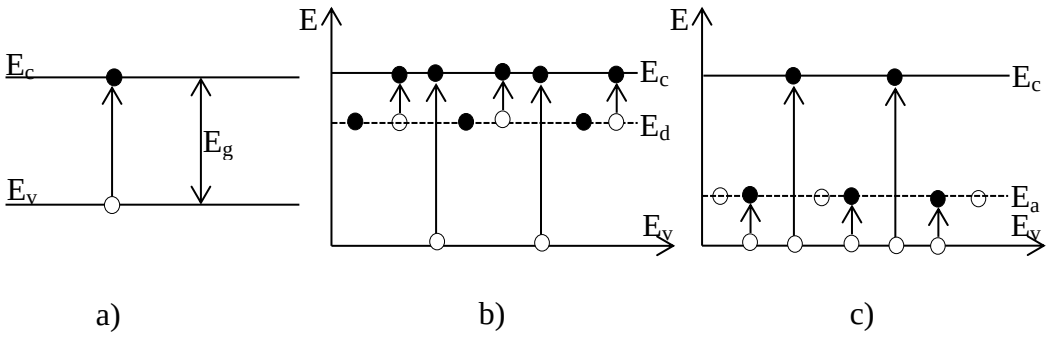
Şekil 2.2. (a) Yalıtkanın, **(b,c)** yarıiletkenin enerji band diyagramı. E_g yasak band genişliğidir.

Örnek olarak, Ge, Si ve GaAs yarıiletkenlerinin yasak band genişliği, sırayla 0.66 eV, 1.2 eV ve 1.43 eV' tur (Omar, 1975). Yarıiletkenin basitleştirilmiş enerji band şeması Şekil 2.2c'de gösterilmektedir. Bu şemada, E_c, iletim bandının en düşük enerjisi ve E_v, valans bandının en yüksek enerjisidir. E_g ise iki bant arasındaki yasak enerji aralığıdır.

Yarıiletkenleri, doğal ve katkılı yarıiletkenler olarak iki kategoride incelemek mümkündür:

Doğal yarıiletkenler, yasak enerji aralığı iletkenlerle yalıtkanlar arasında yer alan, dışarıdan başka bir madde ile katkılanmamış malzemelerdir. Mutlak sıfırda doğal yarıiletkende serbest yük taşıyıcıları bulunmamaktadır yani valans bandı elektronlarla tam olarak doldurulmuştur. Sıcaklık (veya ışık) arttıkça iletim bandına uyarılan elektronlar valans bandda bir elektron boşluğu (deşik) oluşturur. Dolayısıyla yarıiletken malzemede her uyarılma sonucu elektron-deşik çiftleri üretilir. Şekil 2.3a'da doğal yariletkenin enerji band diyagramında ısısal veya optiksel yolla elektron deşik çifti oluşturulması gösterilmektedir (Tayyar, 2000).

Yarıiletken malzemeler, başka maddeler ile katkılandığında, elektriksel özellikleri farklı olan yapıların elde edilebilmesine imkân sağlar. İletkenliği katkı maddeleri ile belirlenen yarıiletkenlere *katkılı yarıiletkenler* denir. Katkılı yarıiletkenler n-tipi yarıiletken ve p-tipi yarıiletken olmak üzere ikiye ayrılırlar. Yarıiletkende elektron veren katkı atomuna verici (donor) denir. İletkenliği donor katkısıyla karakterize olunan yarıiletkene *n-tipi yarıiletken* denir (Durlu, 1992). Donor tipli katkı, yarıiletkenin yasak bandının içinde izin verilmiş enerji düzeylerinin (E_d) oluşmasına yol açar (Şekil 2.3b). Bu enerji düzeyi iletim bandından biraz aşağıda yerleşmektedir.



Şekil 2.3. (a) Doğal **(b)** n-tipi **(c)** p-tipi yarıiletkenlerin band diyagramları

Yarıiletkenlerde elektronları alan katkı atomlarına alıcı (akseptör) denir ve iletkenliği akseptör tipli katkıyla belirlenen yarıiletken *p-tipi yarıiletken* olarak tanımlanır. Akseptör tipli katkı, yarıiletkenin yasak bandının içinde (valans bandının biraz üstünde) E_a enerji düzeyi oluşturur (Şekil 2.3c).

2.3. Etkin Kütle Kavramı

Bir kristal içindeki elektronlar tümüyle serbest değildir. Elektronlar kristal içinde zayıf da olsa peryodik olan örgü potansiyeli ile etkileşmektedirler. Bu nedenle elektronların hareketinin boş uzaydakinden farklı olması beklenir. Peryodik örgü potansiyelini dikkate alarak elektronun hareketini tanımlamak istersek, elektronun boş uzaydaki kütlesi (m_0) yerine kristal potansiyelinin de etkisini içeren etkin kütlesinden m^* bahsetmemiz gerekir (Omar, 1975).

Tek boyutlu periyodik kristal bir örgüyü göz önüne alacak olursak, bu yapıya dış bir elektrik alan uygulandığında bu yapı içerisindeki elektronun sahip olacağı ivme

$$\boldsymbol{a} = \frac{d\boldsymbol{v}_g}{dt} \tag{2.1}$$

şeklindedir. Burada $\boldsymbol{v}_g$ grup hızı, $\boldsymbol{k}$ dalga vektörünün fonksiyonu olduğundan

$$\boldsymbol{v}_g = \frac{1}{\hbar}\ \frac{d}{d\boldsymbol{k}}E(\boldsymbol{k}) \qquad \left[\boldsymbol{v}_g = \frac{dw}{d\boldsymbol{k}}\,, \qquad E = \hbar w\right] \tag{2.2}$$

ile verilir. Denk. (2.1)'deki ivme

$$\boldsymbol{a} = \frac{d\boldsymbol{v}_g}{dt} = \frac{d\boldsymbol{v}_g}{dt}\frac{d\boldsymbol{k}}{d\boldsymbol{k}} = \frac{d\boldsymbol{v}_g}{d\boldsymbol{k}}\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} \tag{2.3}$$

şeklinde yazılabilir. $d\boldsymbol{k}/dt$ türevi

$$\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = \frac{\boldsymbol{F}}{\hbar} \qquad \left[\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}\,, \qquad \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \hbar\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = \boldsymbol{F}\right] \tag{2.4}$$

ile $d\boldsymbol{v}_g/dk$ türevi de Denk. (2.2)'den

$$\frac{d\boldsymbol{v}_g}{d\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\hbar}\ \frac{d^2}{d\boldsymbol{k}^2}E(\boldsymbol{k}) \tag{2.5}$$

ile verilir. Denk. (2.4) ve Denk. (2.5), Denk. (2.3)'te yerlerine yazıldığında

$$\boldsymbol{a} = \frac{1}{\hbar}\ \frac{d^2}{d\boldsymbol{k}^2}E(\boldsymbol{k})\frac{\boldsymbol{F}}{\hbar} = \frac{1}{\hbar^2}\ \frac{d^2}{d\boldsymbol{k}^2}E(\boldsymbol{k})\boldsymbol{F} \tag{2.6}$$

elde edilir. Bu ifade yapı olarak, Newton'un ikinci hareket yasasına ($\boldsymbol{F} = m^*\boldsymbol{a}$) benzemektedir. Bu benzerlikten faydalanarak

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2}{d\boldsymbol{k}^2}E(\boldsymbol{k})} \tag{2.7}$$

olacak şekilde, m^* etkin kütlesi tanımlanır. Bu kavram kütle boyutunda olmakla beraber, sabit olmayıp ***E(k)*** fonksiyonunun ikinci türevine bağlıdır. (Dikici, 2012).

Bir kristal içindeki elektronların hareketi, kristal içinde elektronlar periyodik potansiyel ile etkileştiklerinden dolayı, serbest uzaydaki hareketinden farklı olduğu için serbest olarak hareket eden elektronun momentumu ve enerjisi

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}, \qquad E = \frac{(\hbar\boldsymbol{k})^2}{2m} \tag{2.8}$$

ile verilir. Denklemde görüleceği gibi elektronun momentumu ve enerjisi $\boldsymbol{k}$ dalga vektörüne bağlıdır. Elektronun içerisinde hareket ettiği kristale bir dış kuvvet uygulanırsa elektrona etkiyen toplam kuvvet

$$\boldsymbol{F}_{toplam} = \boldsymbol{F}_{dış} + \boldsymbol{F}_{iç} = m\boldsymbol{a} \tag{2.9}$$

ile tanımlanır. Burada $\boldsymbol{a}$ ivme, m ise elektronun durgun kütlesidir. $\boldsymbol{F}_{iç}$ örgü atomlarının oluşturduğu kristal potansiyelinin elektrona uyguladığı kuvvettir. Kristal içerisindeki tüm iç kuvvetleri hesaplamak oldukça zor olduğundan sanki m^* kütleli bir parçacığa $\boldsymbol{F}_{dış}$ kuvveti etki ediyormuş gibi düşünülür ve

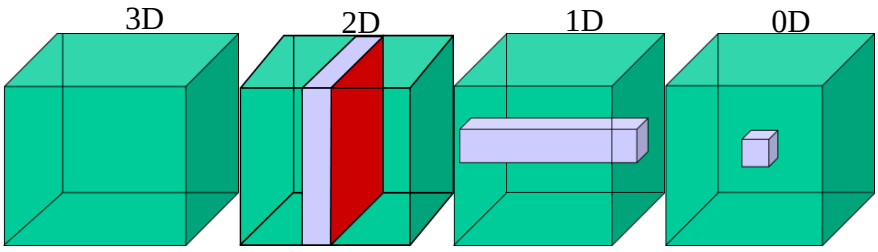
$$\boldsymbol{F}_{dış} = m^*.\boldsymbol{a} \tag{2.10}$$

yazılabilir (Tang Sah, 1994).

2.4. Düşük Boyutlu Yarıiletken Yapılar

Bir yarıiletken malzemenin herhangi bir doğrultudaki tabaka kalınlığı, yarıiletkenin sahip olduğu taşıyıcıların de Broglie dalgaboyu ile kıyaslanabilir boyutlarda ise kuantum boyut etkisi gözlenmeğe başlar. Kuantum boyut etkisinin ortaya çıktığı doğrultularda taşıyıcıların hareketi sınırlandırılmış ve enerji seviyeleri kuantize olmuştur. Bunun nedeni, boyutların düşürülmesiyle değişen durum yoğunluklarıdır. Durum yoğunluğu, bir sistemdeki uygun enerji seviyelerinin sayısını tanımlar ve yarıiletkenlerdeki taşıyıcı konsantrasyonunun ve taşıyıcıların enerji dağılımının belirlenmesinde oldukça önemlidir.

Düşük boyutlu yarıiletken yapılar, taşıyıcı hareketlerinin belli doğrultularda sınırlandırılmasıyla meydana gelen yapılardır. Boyutların sınırlandırılması, malzemelerin özelliklerinin belirlenmesinde kritik bir rol oynar. Sınırlama tek doğrultuda ise iki boyutlu kuantum kuyusu, iki doğrultuda ise tek boyutlu kuantum teli, üç doğrultuda ise sıfır boyutlu kuantum noktası sistemleri olarak adlandırılır. Yarıiletken külçe (bulk) yapılarda uzaysal hiçbir sınırlandırma olmadığından taşıyıcılar iletim ve değerlik bandında sürekli enerji seviyelerinde bulunurlar ve boyutların sınırlandırılması ile taşıyıcılar sürekli enerji seviyeleri yerine, kuantumlu enerji seviyelerinde yer almaya başlarlar (Bimberg ve ark., 1998). Şekil 2.4'te üç boyutlu külçe malzeme, iki bayutlu kuantum kuyusu, bir boyutlu kuantum teli ve sıfır boyutlu kuantum noktası şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 2.4. Külçe malzemeler (3D), kuantum kuyuları (2D), kuantum telleri (1D) ve kuantum noktalarının (0D) şematik gösterimi

Düşük boyutlu yarıiletken yapılar bant aralıkları farklı iki yarıiletken malzemenin peş peşe büyütülmesiyle oluşturulabilir. Bunun için bant aralığı büyük olan yarıiletken üzerine, bant aralığı küçük olan yarı iletken büyütülür ve ardından tekrar bant aralığı büyük olan yarıiletken büyütülerek iletkenlik ve valans bantlarında taşıyıcılar için bir potansiyel kuyusu oluşturulur. Kuantum boyut etkilerinin gözlemlenmesi için bant aralığı küçük olan yarıiletkenin tabaka kalınlığının ya da kalınlıklarının yeterince ince olması gerekir.

İki yarıiletkenin birbiri üzerine büyütülmesiyle oluşan yapılara heteroyapılar ve bu yapıların birbirleriyle birleşim arayüzeylerine de heteroeklemler denilmektedir. Heteroeklemler, heteroyapıların elektronik özelliklerini belirlediğinden istenilen elektriksel ya da optik özelliklere sahip aygıt tasarımı için oldukça önemlidir (Akçay, 2008).

2.4.1.Külçe malzeme

Bir malzemenin elektronik özelliklerini anlamak için, elektronların dalga fonksiyonlarının ve bunlara karşılık gelen enerji durumlarının bilinmesi gerekir. Bir kristal yapıda üç boyutlu Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi = E\varphi \qquad (2.11)$$

ile verilir. Dalga vektörüne bağlı olarak enerji ifadesi

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) \tag{2.12}$$

denklemi ile verilir. Elektronik bantların durum yoğunluğu (DOS), sistemin hem elektronik hem de optik özellikleri için önemli bir parametredir. Durum yoğunluğu gerçek uzayın birim enerji başına durumların sayısı olarak tanımlanır ve

$$\rho(N) = \frac{dN}{dE} \tag{2.13}$$

ile verilir. **k**-uzayında durumların toplam sayısı N ise

$$N = 2\frac{4\pi k^3}{3}\frac{1}{(2\pi)^3} \tag{2.14}$$

denklemi ile tanımlanır. Buradaki 2 sabiti, Pauli Dışarlama İlkesinden gelmektedir. Son olarak bulk malzeme için durum yoğunluğu

$$\rho(N) = \frac{1}{\pi^2\hbar^3}(2m^3E)^{1/2} \tag{2.15}$$

ile verilir (Ferry ve Goodnick, 1997).

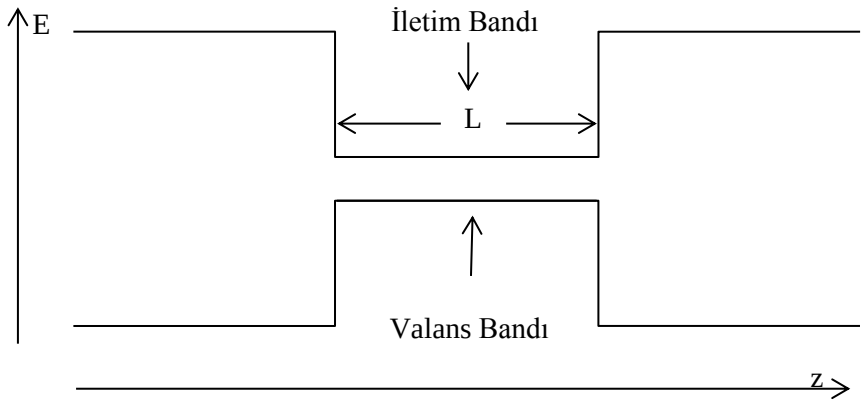
2.4.2. Kuantum kuyu yapılar

Bir kuantum kuyu yapısı, düşük bant aralıklı bir malzeme daha yüksek bant aralıklı malzemenin iki tabakası arasında sandviç edilirse (büyütülürse) oluşturulur. Bant süreksizliği kuyu içinde taşıyıcı sınırlandırılmasını sağlar. Tipik bir kuantum kuyusu Şekil. 2.5'te gösterilmiştir.

Kesikli enerji seviyeleri ve elektronik dalga fonksiyonları Schrödinger denklemi ile hesaplanır. Dalga fonksiyonu z yönünde ayrılabilir ve x-y bağımlılığı

$$\varphi(x, y, z) = e^{(ik_x x + ik_y y)} f(z) \tag{2.16}$$

denklemi ile verilir. Burada $f(z)$ Schrödinger denklemini sağlar. Schrödinger denklemi



Şekil 2.5. Bir heteroyapıda elektron ve deşikler için şekillendirilmiş bir kuantum kuyunun şekli

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z)\right] f_n(z) = \varepsilon_n f_n(z) \tag{2.17}$$

ile verilir ve m^* elektronun etkin kütlesidir. Sonsuz yükseklikteki bariyer için enerji seviyeleri ε_n

$$\varepsilon_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m^*L^2} \tag{2.18}$$

ile verilir. Burada L, potansiyel kuyunun genişliğidir. Parabolik bant varsayımıyla toplam enerji aşağıdaki gibi verilir.

$$E = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m^*} \tag{2.19}$$

ile verilir. Burada $k_\parallel^2 = k_x^2 + k_y^2$ dir.

Bu tip yapı bazen elektronların sadece iki boyutta hareketine izin verildiği için bir quasi (sanki) iki boyutlu elektron gazı (2DEG) olarak da adlandırılır.

Kuantum kuyusunun durum yoğunluğu, külçe malzemedekine benzer şekilde elde edilir. Spin dejenereliği göz önüne alınırsa birim alan başına toplam durum sayısı

$$N^{2D} = 2\pi k^2 \frac{1}{(2\pi/L)^2}\frac{1}{L^2} = \frac{k^2}{2\pi} \tag{2.20}$$

ile verilir. Bu nedenle bir kuantum kuyusundaki tek alt bant için durum yoğunluğu

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \tag{2.21}$$

ile verilir. Kuantum kuyusunun iletim bandında alt bantların bir dizisi olduğu için durum yoğunluğu

$$\rho^{2D}(E) = \sum_i \frac{m^*}{\pi\hbar^2}\Theta(E - E_i) \tag{2.22}$$

ile verilir. Burada Θ birim basamak fonksiyonudur ve E_i alt bant enerji seviyeleridir.

Elektron durum yoğunluğundaki değişiklikler düşük boyutlu sistemlerde potansiyel sınırlandırmaya neden olur ve bu değişiklikler, iletkenlik, optik özellikler vb. değiştirebilir (Singh, 2003).

2.4.3. Kuantum tel yapılar

Tek boyutlu bir elektron gazı oluşturmak için elektronlar iki boyutta sınırlı olmalıdır ve serbestlik derecesi sadece bir boyutta kalmalıdır. Değişkenlerin ayrılması yöntemine göre Schrödinger denkleminin çözümleri

$$\varphi(x, y, z) = e^{(ik_x x)} f(y, z) \tag{2.23}$$

şeklinde ifade edilir. Böylece $f(y, z)$, aşağıda verilen Schrödinger denklemini sağlamaktadır.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(y, z)\right] f(y, z) = \varepsilon f(y, z) \tag{2.24}$$

Burada ε, x-y yönündeki elektron enerjisidir. Bu nedenle elektronların toplam enerjisi

$$E = \varepsilon_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \tag{2.25}$$

dir. Burada ε_i kesikli enerjidir. Elektronların enine hareketinin kuantumlanmış enerjisi

$$\varepsilon_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{n_1^2}{L_y^2} + \frac{n_2^2}{L_z^2}\right) \tag{2.26}$$

ile verilir. Burada L_y, L_z tellerin enine boyutlarıdır. Birim uzunluktaki durumların sayısı

$$N^{1D} = \frac{2\pi}{k} \tag{2.27}$$

ile verilir. Bu nedenle tek bir altbant durum yoğunluğu

$$\rho^{1D}(E) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \frac{1}{\pi\sqrt{E}} \tag{2.28}$$

dir. Durum yoğunluğu tüm alt bantların toplamıdır ve

$$\rho^{1D}(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \sum_{n_1 n_2} \frac{1}{\sqrt{E - \varepsilon_{n_1,n_2}}} \Theta\left(E - \varepsilon_{n_1,n_2}\right) \tag{2.29}$$

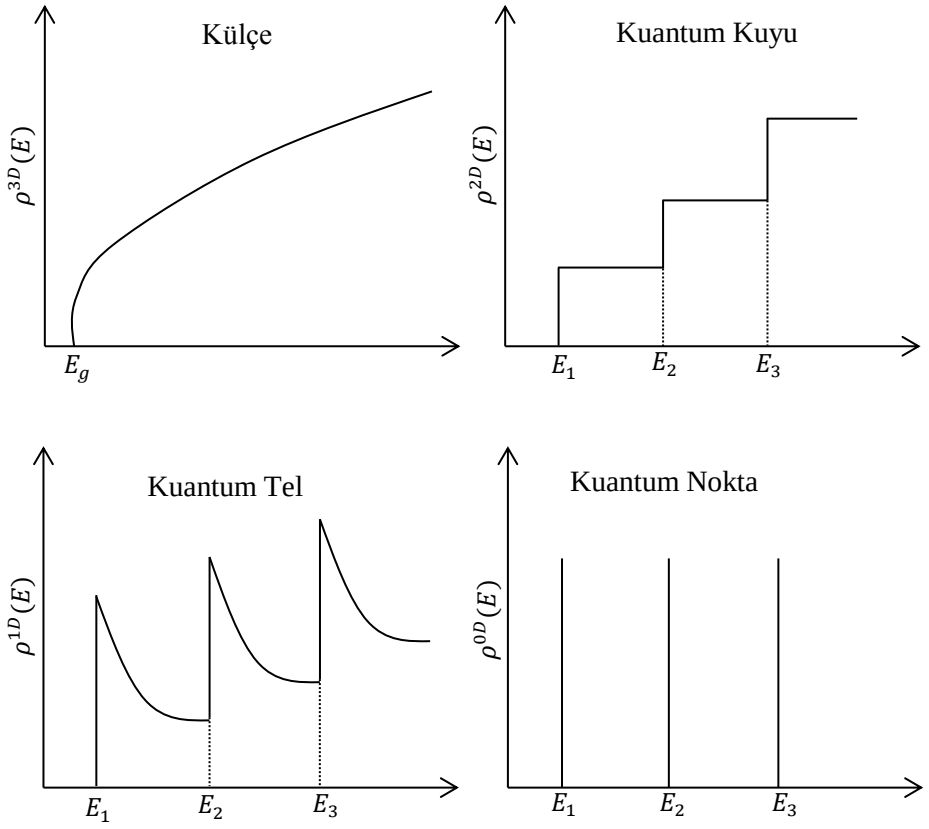
ile verilir. Kuantum kuyuların durum yoğunluğu ile kuantum tellerin durum yoğunluğunu karşılaştırırsak bu iki sistemin karakteristikleri çok farklıdır. Kuantum kuyuda durum yoğunluğu için basamak fonksiyonu davranışı vardır. Kuantum telde ise her bir altbant altında durum yoğunluğu ıraksar ve daha sonra kinetik enerji arttıkça azalır (Mitin ve ark., 1999).

2.4.4. Kuantum nokta yapılar

Kuantum nokta yapılarda elektronlar her üç boyutta sınırlandırılmıştır ki bu da kesikli enerji spektrumuna neden olur. Basit bir kuantum nokta, Şekil 2.4'te gösterilmiştir. Burada kuantum nokta $0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y, 0 \leq z \leq L_z$ şartları ile sınırlı bir kutu gibi düşünülmüştür. Her üç yönde sonsuz sınırlayıcı potansiyel engellerin varsayımıyla bir elektronun enerjisi, Schrödinger denklemi çözülerek bulunur ve

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{n_1^2}{L_x^2} + \frac{n_2^2}{L_y^2} + \frac{n_3^2}{L_z^2}\right) \tag{2.30}$$

ile verilir. Burada n_1, n_2, n_3 durumları tanımlamak için kullanılır. Üç boyuttaki sınırlandırma nedeniyle kuantum nokta durum yoğunluğu δ-fonksiyonu cinsinden yazılabilir ve



Şekil 2.6. 3D, 2D, 1D ve 0D sistemlerin durum yoğunluğunun şematik gösterimi

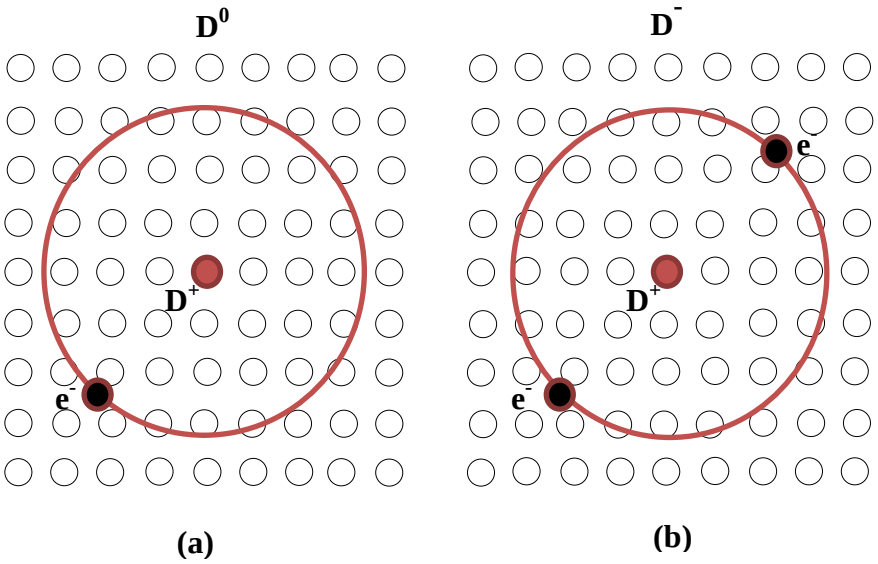
$$\rho^{0D}(E) = \sum_{n_1 n_2 n_3} \delta\left(E - E_{n_1,n_2,n_3}\right) \tag{2.31}$$

ile verilir (Barve ve ark., 2009). Şekil 2.6, 3D, 2D, 1D ve 0D sistemlerinin durum yoğunluğunun enerjiyle değişimini göstermektedir.

2.5. Donor Safsızlığı

Yarıiletken bir malzemeye, safsızlık atomu yerleştirilecek olursa birçok fiziksel özelliği önemli ölçüde değişim gösterir. Özellikle malzemenin içerisine safsızlıkların katılması, elektriksel özellikleri farklı olan ve bu özelliklerinin, katkılanan maddenin cinsi ve miktarı ile önemli ölçüde kontrol edilebildiği yapıların elde edilebilmesini mümkün hale getirir. Şekil 2.7'de külçe bir yarıiletken malzeme içindeki yüksüz (D^0) ve negatif yüklü (D^-) bir donor safsızlığı görülmektedir.

Periyodik tablonun IV. grup elementi Silisyuma (Si), V. gruptan Fosfor (P), Azot (N) gibi atomlar katkılanırsa, oluşan safsızlık donor safsızlığıdır. Silisyum



Şekil 2.7. Külçe bir yarıiletken içerisindeki **(a)** yüksüz (D^0) ve **(b)** negatif yüklü (D^-) hidrojenik safsızlıkların şematik gösterimi

atomuna, periyodik tablonun III. grubundan Aliminyum (Al), Galyum (Ga) gibi atomlar katkılanacak olursa, oluşan safsızlık ise akseptör safsızlığıdır (Harrison, 2005). Yüksüz (D^0) donorun, hidrojen (H) atomunu oluşturan elektron- proton çiftine benzediği Şekil 2.7a'da görülmektedir.

Bir yarıiletken malzemede negatif yüklü donor merkezi (D^-), ikinci bir elektronun bağlandığı, yüksüz bir D^0 merkezi tarafından oluşturulmaktadır. Yani, D^- merkezi, tek bir pozitif iyon ve bu iyona bağlı iki elektrondan oluşmaktadır (Şekil 2.7b). D^- merkezi, tam olarak çözülemeyen, en basit çok elektronlu sistemlerden birisidir. Dolayısıyla bu sistem, malzemede elektron-elektron etkileşmesini incelemek için ilginç bir fırsat sunmaktadır. Yarıiletken bir malzemede yüksüz bir D^0 donor safsızlığının, H atomuna benzediği gibi, negatif yüklü bir D^- donor safsızlığı da, atom fiziğindeki H^- iyonuna benzemektedir (Xie, 2013b).

3. KUANTUM NANOYAPILARDA BANDİÇİ OPTİK SÜREÇLER

3.1. Giriş

Bu bölümde ışıkla malzeme etkileştiği zaman meydana gelen optik süreçlerden biri olan soğurma süreci üzerinde durulacaktır. Bu bağlamda ilk olarak elektromanyatik alanda yüklü parçacıklardan bahsedilecektir. Sonra elektronun ilk durumdan son duruma geçiş hızı ve buradan hareketle Ferminin altın kuralından bahsedilecektir. Elektrik dipol yaklaşımında, iki seviye arasındaki geçiş olasılığı bulunulacak ve kuantum seviyeleri arasında bir elektrik dipol geçişleri olabilmesi için seçim kurallarından bahsedilecektir. Soğurma spektrum çizgilerinin biçimleri açıklanacaktır. Soğurmanın büyüklüğü hakkında bilgi veren, osilatör şiddetinden bahsedilecek ve lineer ve lineer olmayan üçüncü derece soğurma katsayısı ifadeleri anlatılacaktır.

3.2. Radyasyonla Kuantum Sistemlerin Etkileşmesi

Işınımla atomun etkileşmesini göz önüne alırken analiz edilecek üç süreç vardır: Birincisi, klasik olarak titreşen bir yükün kendiliğinden ışıma yapması gibi bir atomda elektromanyetik alan kuantumu olan foton yayınlayarak uyarılmış durumdan daha küçük enerji durumuna kendiliğinden geçiş yapabilmesidir. Bu sürece kendiliğinden yayma denir. İkincisi, atomun düşük düzeyden daha üst düzeye geçiş yaparak ışınım demetinden foton soğurabilmesidir. Bu olaya soğurma denir ve soğurma hızı uygulanan alanın şiddeti ile orantılıdır. Sonuncusu, atomların uygulanan ışınım alanının etkisi altında fotonlar yayabilmesidir. Buna uyartılma yayılması denir ve kendiliğinden yayılmadan ayrılır. Çünkü geçiş oranı uygulanan alanın şiddetiyle orantılı olan soğurmanınkine benzemektedir (Haken ve Wolf, 2004).

3.2.1. Elektromanyetik alanda yüklü parçacıklar

Bir elektromanyetik alan içerisinde bulunan q yüklü ve kütlesi m olan spinsiz bir parçacığın Hamiltoniyeni

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 + q\varphi \tag{3.1}$$

ile verilir. Burada $\boldsymbol{p}$ parçacığın genelleştirilmiş momentumudur. Spine bağlı küçük terimler ihmal edilerek elektromanyetik alanda *m* kütleli bir elektronun Hamiltoniyeni *q*=-*e* alınarak Denk.(3.1) ile verilir (Köksal ve Gümüş, 1999) .

Elektromanyetik alandaki hidrojen tipi bir atomu tanımlamak için *Ze* yüklü *M* kütleli çekirdeğin varlığını hesaba katmamız gerekir. *M* kütlesi, elektronun *m* kütlesi yanında çok büyük olduğu için ışınım alanı ile çekirdek alanı arasındaki etkileşme ihmal edilir. Bununla birlikte Hamiltoniyene elektron ile çekirdek arasındaki elektrostatik Coulomb potansiyeli dahil edilirse elektromanyetik alanda hidrojen tipi bir atom için zamana bağlı Schörödinger denklemi

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla+e\boldsymbol{A})-\frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r}\right]\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.2}$$

dir. Burada $\boldsymbol{p}=-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ ve $\mathbf{A}$ vektör potansiyelidir. $\nabla.\mathbf{A}=0$ ayar koşulundan ötürü

$$\begin{aligned}\nabla.(\boldsymbol{A}\Psi)&=\boldsymbol{A}.(\nabla\Psi)+(\nabla.\boldsymbol{A})\Psi\\&=\boldsymbol{A}.(\nabla\Psi)\end{aligned} \tag{3.3}$$

dir. Bu ifadeyi kullanarak Denk.(3.2)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r}-\frac{i\hbar e}{m}\boldsymbol{A}.\nabla+\frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2\right]\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.4}$$

olarak yazılabilir. $\mathbf{A}$ ya göre lineer olan terimle karşılaştırıldığında $\mathbf{A}^2$ li terim küçük olduğu için ihmal edilir ve lineer terime küçük bir pertürbasyon terimi olarak bakılır (Bransden ve Joachain, 2000).

3.2.2. Geçiş hızları

$\mathbf{A}^2$ li terimi ihmal ederek zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=[H_0+H'(t)]\Psi \tag{3.5}$$

olarak yazılabilir. Buradaki

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r} \tag{3.6}$$

dış alan yokken bir elektronlu alanı tanımlayan zamana bağlı olmayan hidrojen tipi Hamiltoniyendir. $H'(t)$ ise

$$H'(t) = -\frac{i\hbar e}{m}\boldsymbol{A}.\boldsymbol{\nabla} \tag{3.7}$$

zamana bağlı Hamiltoniyendir. Zamana bağlı pertürbasyon kuramını kullanarak bu problemi inceleyebiliriz. Pertürbe olmamış ψ_k durumunda

$$H_0\psi_k = E_k\psi_k \tag{3.8}$$

Schrödinger denkleminin çözümü hidrojen tipi dalga fonksiyonlarıdır. Ψ_k özfonksiyonları tam takım olduğu için, zamana bağlı Schrödinger denklemi Denk.(3.5)' in normalize olduğu varsayılan en genel çözümü

$$\Psi = \sum_k c_k(t)\psi_k(\boldsymbol{r})e^{-iE_kt/\hbar} \tag{3.9}$$

biçimindedir. Burada bilinmeyen $c_k(t)$ katsayıları zamana bağlıdır ve $\lambda = 1$ için

$$\dot{c}_b(t) = (i\hbar)^{-1}\sum_k H'_{bk}(t)c_k(t)e^{iw_{bk}t} \tag{3.10}$$

olarak verilir (Griffiths, 1995). Burada $H'_{bk}(t)$

$$H'_{bk}(t) = \langle\psi_b|H'(t)|\psi_k\rangle = \int \psi_b^*(\boldsymbol{r})H'\psi_k^*(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} \tag{3.11}$$

dir. w_{bk} Bohr açısal frekansı ise

$$w_{bk} = \frac{E_b - E_k}{\hbar} \tag{3.12}$$

ile tanımlanır.

Başlangıçta sistemin E_a enerjili iyi tanımlı bir ψ_a kararlı durumunda olduğunu varsayılırsa başlangıç koşulları

$$c_k(t \leq 0) = \delta_{ka} \tag{3.13}$$

ile verilir ve H' pertürbasyonuyla birinci mertebeden

$$c_b^{(1)}(t) = (i\hbar)^{-1} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{iw_{ba}t'} dt' = \frac{e}{m} \int_0^t \langle \psi_b | \boldsymbol{A}.\boldsymbol{\nabla} | \psi_a \rangle \, e^{iw_{ba}t'} dt' \tag{3.14}$$

elde edilir. Burada

$$w_{ba} = \frac{E_b - E_a}{\hbar}$$

$$\langle \psi_b | \boldsymbol{A}.\boldsymbol{\nabla} | \psi_a \rangle = \int \psi_b^*(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{A}.\boldsymbol{\nabla} \psi_a(\boldsymbol{r}) \, d\boldsymbol{r}$$

dir. Bundan sonra **A**(**r**,t) vektör potansiyelini kullanarak

$$c_b^{(1)} = -\frac{e}{m} \int dw \, A_0(w) \left[e^{i\delta_w} \langle \psi_b | e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} \hat{\varepsilon}.\boldsymbol{\nabla} | \psi_a \rangle \right] \int_0^t dt' e^{i(w_{ba}-w)t'} + \left[e^{-i\delta_w} \langle \psi_b | e^{-i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} \hat{\varepsilon}.\boldsymbol{\nabla} | \psi_a \rangle \right] \int_0^t dt' e^{i(w_{ba}+w)t'} \tag{3.15}$$

bağıntısı elde edilir. Denk. (3.15)'te *t'* üzerindeki ilk integral $w_{ba} \cong w$ yani $E_b \cong E_a + \hbar w$ olmadıkça ihmal edilebilir. Böylece atomun son durumunun ilk durumundakinden daha büyük enerjiye sahip olduğunu ve ışınımdan $\hbar w$ enerjili bir fotonun soğurulduğunu görebiliriz (Bransden ve Joachain, 2000).

3.2.3. Fermi'nin Altın kuralı

Birinci mertebe pertürbasyona göre $a \rightarrow b$ geçişi için geçiş olasılığı Denk. (3.14) göz önüne alınarak

$$P_{ba}(t) = \left|c_b^{(1)}(t)\right|^2 \tag{3.16}$$

ile verilir. Eğer, *H' t_0 =0* anında açıldığı ve *t* anında kapandığı durum dışında zamandan bağımsızsa

$$c_b^{(1)}(t) = \frac{H'_{ba}}{\hbar w_{ba}}\left(e^{iw_{ba}t} - 1\right) \tag{3.17}$$

ifadesi elde edilir ve *a* durumundan *b* durumuna birinci mertebeden geçiş olasılığı

$$P_{ba}(t) = \left|c_b^{(1)}(t)\right|^2 = \frac{2}{\hbar^2}|H'_{ba}|^2 F(t, w_{ba}) \tag{3.18}$$

ile verilir. Burada

$$F(t,w) = \frac{1 - coswt}{w^2} \tag{3.19}$$

dir. *x=wt/2* alarak

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(t,w)dw = t\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{sin^2 x}{x^2}dx = \pi t \tag{3.20}$$

elde edilir. Belirli bir *b* durumuna geçişleri göz önüne almak yerine E_b değeri civarında merkezlenen ve verilen (E_b-η, $E_{b+}\eta$) aralığı içinde yer alan E_b enerjili b' durumlar grubunu içeren geçişlerle ilgilenirsek, $E_{b'}$ düzeylerinin durum yoğunluğunu yani birim enerji başına b' durumlarının sayısını, $\rho_{b'}(E_{b'})$ ile gösterirsek o zaman başlangıçtaki bir *a* durumundan b'son durumlar grubuna birinci mertebeden P_{ba} geçiş olasılığı

$$P_{ba}(t) = \frac{2}{\hbar^2}|H'_{ba}|^2 \rho_b(E_b) \int_{E_b-\eta}^{E_b+\eta} F(t, w_{b'a}) dE_{b'} \tag{3.21}$$

ile verilir. *t* nin η ya $\eta \gg 2\pi\hbar/t$ sartını sağlatacak kadar büyük olduğu varsayılırsa ve Denk. (3.20) kullanılırsa, Denk. (3.21), $E=E_a=E_b$ olmak üzere, geçiş olasılığı

$$P_{ba}(t) = \frac{2\pi}{\hbar}|H'_{ba}|^2 \rho_b(E) t \tag{3.22}$$

bağıntısına indirgenir. Birim zamandaki geçiş hızı

$$W_{ba} = \frac{dP_{ba}}{dt} \tag{3.23}$$

ile verilir. Buna göre Denk. (3.22)' den birinci mertebe pertürbasyon kuramıyla geçiş hızı W_{ba}

$$W_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar}|H'_{ba}|^2 \rho_b(E) \tag{3.24}$$

elde edilir. İlk önce Dirac tarafından elde edilen bu bağıntı *Fermi'nin Altın Kuralı* olarakta bilinir (Köksal ve Gümüş, 1999).

3.2.4. Soğurma

Denk. (3.15)'in ilk terimi soğurmayı tanımlamaktadır. Buna göre sistemin *t* anında *b* durumunda bulunma olasılığı

$$\left|c_b^{(1)}(t)\right|^2 = 2\int dw \left[\frac{eA_0(w)}{m}\right]^2 |M_{ba}(w)|^2 F(t, w - w_{ba}) \tag{3.25}$$

ile verilir. Burada M_{ba} matris elemanları

$$M_{ba} = \langle \psi_b | e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} \hat{\varepsilon}.\boldsymbol{\nabla} | \psi_a \rangle = \int \psi_b^*(\boldsymbol{r}) e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} \hat{\varepsilon}.\boldsymbol{\nabla} \psi_a(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r} \tag{3.26}$$

olarak tanımlanır ve *w=kc* olarak alınır. $\tilde{w} = w - w_{ba}$ olarak yazılırsa Denk. (3.25)'teki $F(t, \tilde{w})$ fonksiyonunun Denk. (3.19)' daki $F(t, w)$ fonksiyonu ile aynı olduğu görülür ve

$$\tilde{w} = \frac{1 - cos\tilde{w}t}{\tilde{w}^2}, \tag{3.27}$$

ile verilir. Özellikle büyük *t* ler için $F(t, \tilde{w})$ fonksiyonu $\tilde{w} = 0$ da yani $w = w_{ba}$ da keskin bir maksimuma sahiptir. Öyleyse $A_0^2(w)$ ve $|M_{ba}(w)|^2$ gibi yavaş değişen büyüklükler Denk. (3.25)' te integral dışına alınır ve *w* üzerinden integral sınırları $\mp\infty$ a genişletilirse Denk. (3.25)

$$\left| c_b^{(1)}(t) \right|^2 = 2 \left[\frac{eA_0(w_{ba})}{m} \right]^2 |M_{ba}(w_{ba})|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} F(t, \tilde{w}) dw \tag{3.28}$$

olur. Denk. (3.20), Denk. (3.28)'de kullanılırsa, Denk.(3.28)

$$\left| c_b^{(1)}(t) \right|^2 = 2\pi \left[\frac{eA_0(w_{ba})}{m} \right]^2 |M_{ba}(w_{ba})|^2 t \tag{3.29}$$

haline gelir. Soğurma için W_{ba} geçiş hızı

$$W_{ba} = \frac{d}{dt} \left| c_b^{(1)}(t) \right|^2 = 2\pi \left[\frac{eA_0(w_{ba})}{m} \right]^2 |M_{ba}(w_{ba})|^2 \tag{3.30}$$

olarak tanımlanır. Işınım yoğunluğu $I(w) = 2\varepsilon_0 w^2 c A_0^2(w)$ alınır ve Denk. (3.30)'da yerine yazılırsa son ifade

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{m^2 c} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) \frac{I(w_{ba})}{w_{ba}^2} |M_{ba}(w_{ba})|^2 \tag{3.31}$$

haline gelir. Atom başına enerji soğurma hızı olan bir *soğurma tesir kesiti* σ_{ab} tanımlanırsa

$$\sigma_{ab} = \frac{4\pi^2 \alpha \hbar^2}{m^2 w_{ba}} |M_{ba}(w_{ba})|^2 \tag{3.32}$$

elde edilir. Burada $\alpha = (e^2/4\pi\varepsilon_0)/\hbar c = 1/137$ ince yapı sabitidir. Frekansları w_{ba} olan gelen fotonların akısı $I(w_{ba})$ nın $\hbar w_{ba}$ ya bölünmesiyle elde edildiğinden σ_{ab} tesir kesiti, birim atom başına birim zamandaki geçiş olasılığı W_{ba}' nın gelen foton akısına oranı olarak ta tanımlanabilir (Bransden ve Joachain, 2000).

3.2.5. Dipol yaklaşıklığı

Kuantum nokta yapısının üzerine gelen, elektromanyetik dalganın dalga boyu, kuantum noktasının boyutundan büyük olursa, dipol yaklaşıklığı yapılır. Bu nedenle, Denk. (3.26) ile tanımlanan M_{ba} matris elemanları için birçok uygulamada $e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$,

$$e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} = 1 + (i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}(i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r})^2 + \cdots \tag{3.33}$$

biçiminde seri açılarak basitleştirilebilir. Örneğin optiksel geçişler incelenecek olursa, atomik dalga fonksiyonları, atomun Bohr yarıçapı yani 1Å (10^{-8}cm) mertebesindeki uzaklıklara uzanırken optik geçişlere eşlik eden dalga boyları, birkaç bin Angström mertebesindedir. Bu nedenle ($\boldsymbol{kr}$) niceliği, r<1Å olduğundan dolayı küçüktür ve Denk. (3.26)'daki $e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$ yerine bir alınabilir. Buna *elektrik dipol yaklaşıklığı* denir. Bu yaklaşıklıkla Denk. (3.26)

$$M_{ba} = \hat{\varepsilon}.\langle\psi_b|\boldsymbol{\nabla}|\psi_a\rangle = \hat{\varepsilon}.\frac{i}{\hbar}\langle\psi_b|\boldsymbol{p}|\psi_a\rangle = \hat{\varepsilon}.\frac{im}{\hbar}\langle\psi_b|\dot{\boldsymbol{r}}|\psi_a\rangle \tag{3.34}$$

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

$$\dot{\boldsymbol{r}} = (i\hbar)^{-1}[\boldsymbol{r}, H_0] \tag{3.35}$$

elde edilir. Bu nedenle

$$\langle\psi_b|\dot{\boldsymbol{r}}|\psi_a\rangle = (i\hbar)^{-1}\langle\psi_b|\boldsymbol{r}H_0 - H_0\boldsymbol{r}|\psi_a\rangle$$
$$\langle\psi_b|\dot{\boldsymbol{r}}|\psi_a\rangle = (i\hbar)^{-1}(E_a - E_b)\langle\psi_b|\boldsymbol{r}|\psi_a\rangle \quad (3.36)$$

yazılır ve başka bir gösterimle

$$\boldsymbol{p}_{ba} = imw_{ba}\boldsymbol{r}_{ba} \quad (3.37)$$

ile ifade edilir. Burada

$$\boldsymbol{p}_{ba} = \langle\psi_b|\boldsymbol{p}|\psi_a\rangle = m\langle\psi_b|\dot{\boldsymbol{r}}|\psi_a\rangle \quad (3.38)$$

$$\boldsymbol{r}_{ba} = \langle\psi_b|\boldsymbol{r}|\psi_a\rangle \quad (3.39)$$

dir. Bu ifadelerden yararlanarak Denk. (3.34) düzenlenirse

$$M_{ba} = -\frac{mw_{ba}}{\hbar}\hat{\varepsilon}.\boldsymbol{r}_{ba} \quad (3.40)$$

elde edilir.

İki elektronlu bir kuantum sisteminde, her bir elektronun foton soğurarak üst enerji seviyesine geçme olasılıkları eşit olduğu için geçiş dipol matris elemanı

$$M_{ba} = e\langle\psi_b|\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2|\psi_a\rangle \quad (3.41)$$

şeklinde olur (Xie, 2011b). Burada enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları dejenere olursa Denk.(3.41)

$$M_{ba} = 2\langle\psi_b|\boldsymbol{R}|\psi_a\rangle \quad (3.42)$$

şeklinde de yazılabilir (Lu ve ark., 2011).

Elektrik dipol yaklaşıklığındaki soğurma için geçiş hızı, Denk. (3.31)'e $\boldsymbol{k}.\boldsymbol{A_0}(w) = 0$ ifadesi yerleştirilerek elde edilir ve

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{c\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right) I(w_{ba})|\hat{\varepsilon}.\boldsymbol{r}_{ba}|^2 \tag{3.43}$$

olarak bulunur. Bu aşamada

$$\boldsymbol{D} = -e\boldsymbol{r} \tag{3.44}$$

elektrik dipol momentini ve onun

$$\boldsymbol{D}_{ba} = -e\boldsymbol{r}_{ba} \tag{3.45}$$

matris elemanını yazarak Denk. (3.43)

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{c\hbar^2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right) I(w_{ba})|\hat{\varepsilon}.\boldsymbol{D}_{ba}|^2 \tag{3.46}$$

halini alır. $\hat{\varepsilon}.\boldsymbol{D}_{ba}$ niceliği *b* ile *a* arasında $\hat{\varepsilon}$ doğrultusundaki elektrik dipol momenti bileşenidir (Köksal ve Gümüş, 1999).

3.2.6. Seçim kuralları

Bir önceki kesimde, elektrik dipol yaklaşımında *a* ve *b* düzeyi arasındaki geçiş olasılığı belirlendi. Belli bir $\hat{\varepsilon}$ kutuplanma vektörüne sahip ışınımın soğurma için temel ifadesi, Denk. (3.43) ile verilir. Bu durumda geçiş hızı için önemli olan $|\hat{\varepsilon}.\boldsymbol{r}_{ba}|^2$ niceliğidir. Eğer $\boldsymbol{r}_{ba}$ sıfır olmuyorsa, geçişin izinli olduğu söylenir. $\boldsymbol{r}_{ba}$ sıfır oluyorsa, geçiş yasaklanmıştır. Geçiş yasak olduğu zaman *manyetik dipol, elektrik kuadrapol* ve diğer geçişlere karşılık gelen Denk.(3.33)'teki seride daha yüksek terimler sıfır olmayabilir fakat geçiş oranı izinli geçişlerden çok daha küçük olacaktır.

O halde atomun dalga fonksiyonlarını kullanarak ve dalga fonksiyonların paritelerini göz önüne alarak hangi seviyeler arasında elektrik dipol ğeçişlerinin olabileceği belirlenebilir. Bir kuantum sisteminde elektrik dipol geçişler, ancak farklı pariteli seviyeler arasında olmaktadır. Yani dalga fonksiyonları farklı pariteli fonksiyonlar olmak durumundadır.

Göz önüne alınan kuantum sisteminin seviyeleri arasında bir elektrik dipol geçişleri olabilmesi için bir takım seçim kuralları vardır. Bunlar

$$\Delta l = \mp 1;$$
$$\Delta m = 0, \mp 1 \tag{3.47}$$

ile verilir. Denk. (3.47) ile verilen kurallara *elektrik dipol seçim kuralları* denir (Bransden ve Joachain, 2000; Okur, 2008).

3.2.7. Çizgi biçimleri ve genişlikleri

Geçiş hızlarını hesap etmek için kesim 3.2.2'de kullanılan yaklaşıklıkta ($E_b > E_a$ olmak üzere) E_a ve E_b enerjili iki atomik düzey arasında yayınlanan veya soğrulan ışınımın açısal frekansının tam olarak $w_{ba} = (E_b - E_a)/\hbar$ olduğu bulundu ve buna göre spektrum çizgisi son ölçüde keskindi. Ancak bu, aşağıda açıklayacağımız nedenle tam olarak doğru olamaz. Taban durumdan başka bütün atomik düzeyler sonlu bir τ yarı ömrü ile bozunur. Belirsizlik ilkesine göre böyle bir düzeyin enerjisi tam duyarlılıkla bulunamaz. $\hbar/\tau$ mertebesinde bir belirsizlik olmalıdır. Bu yüzden fotonların $(E_b - E_a)$ civarında bir aralıkta $(\hbar/\tau_a + \hbar/\tau_b)$ genişliğinde enerjilerle yayınlanacağı sonlu bir olasılık vardır ve burada τ_a ve τ_b sırasıyla *a* ve *b* durumlarının yarı ömürleridir.

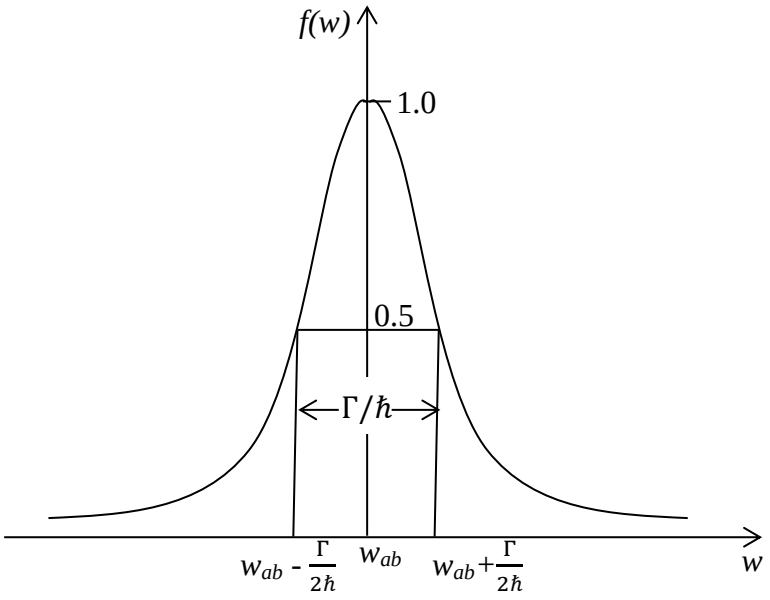
Taban durum *a* durumundan uyarılmış durum *b* durumuna karşılık gelen soğurmanın spektrum çizgilerinin şiddet dağılımı

$$f(w) = \frac{\Gamma^2/(4\hbar^2)}{(w - w_{ab})^2 + \Gamma^2/(4\hbar^2)} \tag{3.48}$$

fonksiyonu ile verilen Lorentizian biçimindedir (Bransden ve Joachain, 2000). Burada $w_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar$ dır. Denk. (3.48)'deki

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} \tag{3.49}$$

niceliğine *çizgi genişliği* ya da *yarı yükseklikteki tam genişlik* te denir.



Şekil 3.1. Lorentizien şiddet dağılımı

$f(w)$ fonksiyonunun biçimi Şekil (3.1)'de gösterilmektedir. Soğrulan ışınımın şiddeti $w = w_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar$ olduğu zaman bir maksimuma ulaşır ve $w = w_{ab} \pm \Gamma/(2\hbar)$ olduğu zaman maksimum değerin yarısına düşer (Bransden ve Joachain, 2000).

3.3. Osilatör Şiddeti

Kesim 3.2.5.' te gösterildiği gibi *a* ve *b* durumları arasındaki geçişlerin şiddeti dipol yaklaşıklığında, $|\boldsymbol{r}_{ba}|^2$ orantılıdır. Buna göre verilen bir *a* ilk durumundan çeşitli son *b* durumuna geçişler serisinin bağıl şiddetleri, $|\boldsymbol{r}_{ba}|^2$ büyüklükleri ile bulunur. Şiddet incelemelerinde *osilatör şiddeti* denilen bağıl bir f_{ba} niceliğinin ortaya konması alışılagelmiştir. Osilatör şiddeti soğurmanın büyüklüğü hakkında bilgi veren yani iki enerji seviyesi arasındaki geçişin büyüklüğünü temsil eden boyutsuz bir niceliktir. Bu nicelik $w_{ba} = (E_a - E_b)/\hbar$ olmak üzere

$$f_{ba} = \frac{2mw_{ba}}{\hbar}|\boldsymbol{r}_{ba}|^2 \tag{3.50}$$

ile tanımlanır. $\boldsymbol{r}_{ba} = \langle\psi_b|\boldsymbol{r}|\psi_a\rangle$ alınarak Denk.(3.50)

$$f_{ba} = \frac{2mw_{ba}}{\hbar} |\langle \psi_b | \boldsymbol{r} | \psi_a \rangle|^2 \tag{3.51}$$

ile gösterilir. Denk. (3.51), $E_a > E_b$ olan soğurma için $f_{ba} > 0$ olduğunu belirtir. Osilatör şiddetleri Thomas-Reiche-Kuhn'un

$$\sum_{b,b\neq a} f_{ba} = 1 \tag{3.52}$$

ile gösterilen toplama kuralına uyar (Köksal ve Gümüş, 1999).

Elektromanyetik radyasyonun kutuplanması z-yönünde seçilirse Denk. (3.51)' deki $|\boldsymbol{r}_{ba}|^2 = |\langle \psi_b | \boldsymbol{r} | \psi_a \rangle|^2$ matris elemanı

$$|z_{ba}|^2 = |\langle \psi_b | z | \psi_a \rangle|^2 \tag{3.53}$$

haline gelir. Burada ψ_b ve ψ_a sırasıyla ilk ve son durum dalga fonksiyonlarıdır. Denk. (3.53)'deki geçiş matris elemanı (Şahin ve Köksal, 2012)

$$|z_{ba}|^2 = \left| \int R_{n',l'}(r) r R_{n,l}(r)\, Y_{l',m'}(\theta,\phi) \cos\theta Y_{l,m}(\theta,\phi) r^2 dr \sin\theta d\,\theta d\phi \right|^2 \tag{3.54}$$

olarak yazılabilir. $n' = 1, n = 1, l' = 1, l = 0$ ve $m' = m = 0$ durumunda $Y_{0,0}(\theta,\phi)$ $Y_{1,0}(\theta,\phi)$ küresel harmonikleri sırasıyla

$$Y_{0,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}$$
$$Y_{1,0}(\theta,\phi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} cos\theta \tag{3.55}$$

ifadeleri ile verilir. Bu ifadeler Denk.(3.54)' de yerine yazılırsa

$$|z_{ba}|^2 = \left| \int_0^\infty R_{1,1}(r) r^3 R_{1,0}(r) dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} cos^2\theta \frac{1}{(4\pi)^{1/2}} \sin\theta d\,\theta d\phi \right|^2 \tag{3.56}$$

haline gelir. Denk.(3.56)'da $\theta = 0 \rightarrow \pi$ ve $\phi = 0 \rightarrow 2\pi$ integralleri hesaplanır ve denklem düzenlenirse $1s$ ve $1p$ seviyeleri arasındaki geçişler için dipol matris elemanı

$$|z_{ba}|^2 = \frac{1}{3}\left|\int_0^\infty R_{1,1}(r) r^3 R_{1,0}(r) dr\right|^2 \tag{3.57}$$

olarak yazılır. Burada $R_{1,1}(r)$ ve $R_{1,0}(r)$, sırasıyla ilk ve son durumlara ait radyal dalga fonksiyonlarıdır. 1/3 çarpanı ise küresel harmoniklerin integrasyonunun karesinden gelmektedir. Denk . (3.57)'den yararlanarak, Denk.(3.51)'deki osilatör şiddet ifadesi

$$f_{ba} = \frac{2m}{3\hbar^2}(E_a - E_b)\left|\int_0^\infty R_{1,1}(r) r^3 R_{1,0}(r) dr\right|^2 \tag{3.58}$$

ile verilir.

3.4. Lineer ve Lineer Olmayan Soğurma Katsayıları

Düşük boyutlu kuantum nokta sistemlerde foton soğurma işlemi, bir ilk durumdan bir son duruma foton yardımı ile meydana gelen optik geçiş olarak tanımlanabilir. Eğer malzemeye gelen foton yeterli bir enerjiye sahipse geçiş, bir ilk ve son seviye arasında meydana gelir. Dolayısıyla seviyeler arasındaki soğurma, sınırlandırma potansiyeli ve foton enerjisine sıkı bir şekilde bağlıdır. Alt seviyeler arası geçişler için optik soğurma katsayısının hesaplamaları, zamana bağlı pertürbasyon teorisinden elde edilen Fermi'nin altın kuralina dayanmaktadır. Altbantlar arası lineer optik soğurma katsayısı

$$\alpha^{(1)}(w) = w\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_r}}\frac{N\hbar\Gamma_{ab}|z_{ba}|^2}{(E_b - E_a - \hbar w)^2(\hbar\Gamma_{ab})^2} \tag{3.59}$$

ile ve üçüncü derece lineer olmayan soğurma katsayısı

$$\alpha^{(3)}(w,I) = -w\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_r}}\left(\frac{I}{2\varepsilon_0 n_r c}\right)\frac{4N\hbar\Gamma_{ab}|z_{ba}|^4}{[(E_b - E_a - \hbar w)^2(\hbar\Gamma_{ab})^2]^2} \tag{3.60}$$

ile verilir. Burada c ışığın boşluktaki hızı, w gelen ışığın açısal frekansı, μ malzemenin manyetik geçirgenliği, I gelen ışık şiddeti, ε_r kuantum noktasının dielektrik sabiti, ε_0 boşluğun dielektrik geçirgenliği, n_r malzemenin kırılma indisi, N ise kuantum noktasındaki elektron yoğunluğu olup $N=n/V_{KN}$ dir (Şahin, 2009). Burada n yapı içerisindeki elektron sayısı ve V_{KN} ise sınırlandırma bölgesinin hacmidir. Toplam optik soğurma katsayısı ise Denk.(3.59) ile Denk.(3.60)'ın toplamından

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

$$\alpha(w,I) = w\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_r}}\left(\frac{N\hbar\Gamma_{ab}|z_{ba}|^2}{(E_b - E_a - \hbar w)^2(\hbar\Gamma_{ab})^2} - \left(\frac{I}{2\varepsilon_0 n_r c}\right)\frac{4N\hbar\Gamma_{ab}|z_{ba}|^4}{[(E_b - E_a - \hbar w)^2(\hbar\Gamma_{ab})^2]^2}\right) \tag{3.61}$$

olarak elde edilir. Burada I gelen ışığın şiddetidir ve

$$I = 2\sqrt{\frac{\varepsilon_r}{\mu}}|E(w)|^2 = \frac{2n_r}{\mu c}|E(w)|^2 \tag{3.62}$$

olarak yazılır (Şahin, 2009).

4. FİZİKSEL YAKLAŞIMLAR ve HESAPLAMA TEKNİKLERİ

4.1. Giriş

Kuantum mekaniksel bir sistemin fiziksel özelliklerini anlamak için Schrödinger denkleminin çözülmesi ve sisteme ait enerji seviyeleri ile bu seviyelere karşılık gelen dalga fonksiyonlarının belirlenmesi gerekmektedir. Bununla birlikte, hidrojen atomu, küresel kare kuyu, parabolik potansiyel gibi az sayıda problem için Schrödinger denklemi analitik olarak çözülebilmektedir. Kuantum mekaniğinde karşılaşılan problemlerin çoğunda, sistemin Schrödinger denklemini analitik olarak çözmek ve enerji düzeyleri ile dalga fonksiyonlarını belirlemek çok zor veya olanaksızdır. Bu nedenle Schrödinger denkleminin tam çözümünün yapılamadığı durumlarda, bazı fiziksel yaklaşım yöntemleri ve yaklaşık hesaplama teknikleri kullanmak kaçınılmaz hale gelmektedir.

Bu bölümde ilk önce bu yöntemlerden biri olan, matris köşegenleştirme tekniği anlatılacaktır. Etkin kütle farkları göz önüne alınmadan, radyal Schrödinger denklemine, matris köşegenleştirme tekniğinin uygulanması yapılacaktır. Sonra etkin kütle farkları gözönüne alınarak, etkin kütle uyuşmazlığı ve dielektrik katsayı uyuşmazlığı açıklanacaktır. Daha sonra çok elektronlu sistemlerde, Schrödinger denklemini, tek elektron Schrödinger denklemine indirgeyen Hartree yaklaşımı anlatılacaktır. Son olarak bu tez çalışması ile ilgili elektronik yapı hesabı verilecektir.

4.2. Matris Köşegenleştirme Tekniği

Matris köşegenleştirme tekniği, Schrödinger denkleminin analitik olarak çözülemediği durumlarda denklemi sayısal olarak çözmek için kuantum mekaniğinde yaygın bir şekilde kullanılan metotlardan biridir. Bu yöntemde Schrödinger denklemi matris biçiminde yazılarak özdeğer ve özfonksiyonları belirlenir. Bunun için Hamiltoniyen matrisi oluşturulur. Hamiltoniyen operatörünün matris elemanı

$$\langle \psi_m | H | \psi_n \rangle = H_{mn} = \int \psi_m^* \, H \psi_n \, dV \tag{4.1}$$

ile tanımlanır. *m,n*= 1,2,3,…..N değerlerini alır. Hamiltoniyen operatörünün her matris elemanı, özfonksiyon uzayını geren iki baz vektörü arasındaki o operatörün beklenen değerini vermektedir. ψ_m ve ψ_n fonksiyonları ortanormal yani hem normalize hem de birbirine dik olmalıdır. Denk. (4.1) matris biçiminde yazılırsa;

$$H_{mn} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \dots & H_{2n} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & \dots & H_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{m1} & H_{m2} & H_{m3} & \dots & H_{mn} \end{pmatrix} \tag{4.2}$$

elde edilir (Aygün ve Zengin, 1998). Artık Schrödinger denklemi alternatif bir yöntem olan matris mekaniği ile çözülebilir.

4.2.1. Radyal Schrödinger denklemi

Radyal Schrödinger denklemi

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}[V-E]R = l(l+1)R \tag{4.3}$$

şeklindedir.

$$U(r) = r.R(r) \Rightarrow R(r) = \frac{U(r)}{r} \tag{4.4}$$

bağıntısıyla yeni bir $U(r)$ fonksiyonu tanımlarsak

$$r^2\frac{dR}{dr} = \frac{dU}{dr}r - U$$
$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) = r\frac{d^2U}{dr^2} \tag{4.5}$$

olur. Böylece $U(r)$ nin sağladığı denklem

$$\frac{d^2U}{dr^2} - \left\{\frac{2mV}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}U = -\frac{2mE}{\hbar^2}U \tag{4.6}$$

şeklini alır. Denk. (4.6)'nın her iki tarafını $-\hbar^2/2m$ ile çarpılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa

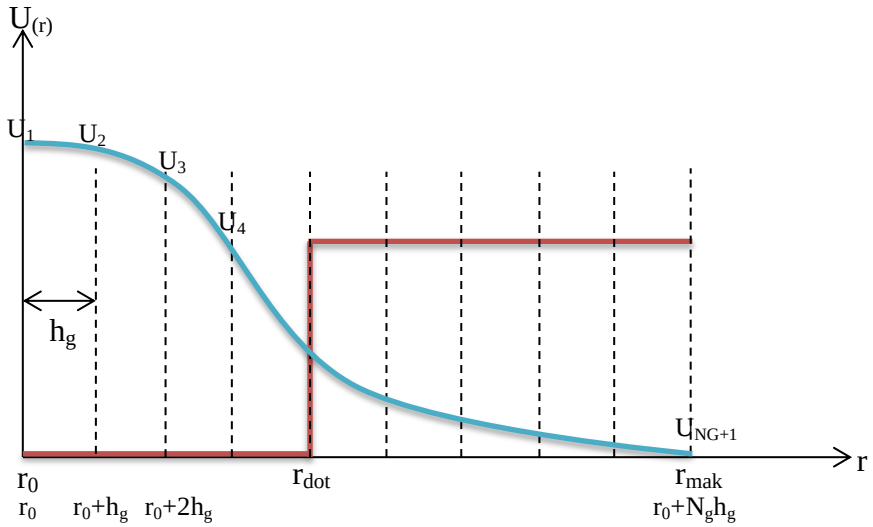
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2U}{dr^2} + \left\{V + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}U = EU \tag{4.7}$$

denklemi elde edilir (Özbek ve Feyiz, 2010). Hamiltoniyen matrisi oluştururken yararlandığımız yöntemlerden biride sonlu fark denklemleridir. Bu yöntemde Şekil 4.1.'de gösterildiği gibi uzayı h_g aralıklarla N_g parçaya bölünür ve özdeğer denklemi bu noktalar üzerinden sonlu fark denklemleriyle ifade edilir.

Sonlu fark denklemlerinde ikinci türev ifadesi

$$\frac{d^2U}{dr^2} = \frac{U_{i+1} - 2U + U_{i-1}}{h_g^2} \qquad (i = 2,3 \ldots ., n) \tag{4.8}$$

denklemi ile verilir. Bu denklemi Denk.(4.7)' de yerine yazarsak



Şekil 4.1. Dalga fonksiyonu uzayının h_g aralıklarla bölünmesi

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{U_{i-1}-2U_i+U_{i+1}}{h_g^2}\right)+\left\{V_i+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}U_i=EU_i \tag{4.9}$$

denklemi ifade edilir. Denklem düzenlenecek olursa

$$\frac{-\hbar^2}{2mh_g^2}\left\{U_{i-1}-\left[2+\frac{2mh_g^2}{\hbar^2}V_i+\frac{h_g^2 l(l+1)}{r^2}\right]U_i+U_{i+1}\right\}=EU_i \tag{4.10}$$

haline gelir.

$$sbt=2+\frac{2mh_g^2}{\hbar^2}V_i+\frac{h_g^2 l(l+1)}{r^2}$$

değişimi yapılırsa

$$\frac{-\hbar^2}{2mh_g^2}\{U_{i-1}-sbtU_i+U_{i+1}\}=EU_i \qquad (i=2,3,4\ldots n) \tag{4.11}$$

denklemi elde edilir. Denk. (4.11) her bir i değeri için yazılırsa

$$i=2\ \rightarrow \qquad \frac{-\hbar^2}{2mh_g^2}\{U_1-sbtU_2+U_3\}=EU_2$$

$$i=3\ \rightarrow \qquad \frac{-\hbar^2}{2mh_g^2}\{U_2-sbtU_3+U_4\}=EU_3$$

$$i=4\ \rightarrow \qquad \frac{-\hbar^2}{2mh_g^2}\{U_3-sbtU_4+U_5\}=EU_4$$

……

$$i=N-1\ \rightarrow \qquad \frac{-\hbar^2}{2mh_g^2}\{U_{N-2}-sbtU_{N-1}+U_N\}=EU_{N-1}$$

$$i=N\ \rightarrow \qquad \frac{-\hbar^2}{2mh_g^2}\{U_{N-1}-sbtU_N+U_{N+1}\}=EU_N \tag{4.12}$$

denklem sistemi elde edilir. Denk. (4.12)' nin sol tarafındaki katsayılar Hamiltoniyen matrisini oluşturan katsayılardır. Bu katsayıların oluşturduğu Hamiltoniyen matrisi ise

$$H = \frac{-\hbar^2}{2mh^2}\begin{bmatrix} -sbt & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -sbt & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -sbt & 1 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -sbt & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -sbt \end{bmatrix} \tag{4.13}$$

şeklinde verilir. Tümüyle sayısal olan bu matrisin özdeğerleri, enerji özdeğerlerine, özvektörleri ise dalgafonksiyonlarına karşılık gelir. Böylece, Schrödinger denklemi tamamen sayısal olarak çözülmüş olur.

4.2.2. Poisson denklemi

Küresel koordinatlarda Poisson denklemi

$$\nabla^2 V = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial V}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(sin\theta\frac{\partial V}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2 V}{\partial \varphi^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{4.14}$$

ile verilir. Poisson denklemi, verilen bir noktada uzaysal yük yoğunluğunu o nokta bölgesindeki potansiyelin ikinci derece türevi ile alakalandırır. Yük dağılımımız küresel simetriden dolayı sadece radyal değişkenin fonksiyonudur. Bu durumda Poisson denklemi

$$\frac{\partial^2 V(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial V(r)}{\partial r} = -\frac{\rho(r)}{\varepsilon_0} \tag{4.15}$$

haline gelir. Burada Poisson denklemi tamamen sayısal olarak çözülecektir. Bunun için, problem, sınır değer problemi olarak göz önüne alınacak ve Denk. (4.15)'te verilen ifade sonlu fark denklemleriyle yazılacaktır. Sonlu fark denklemleri ile birinci ve ikinci türev ifadeleri

$$\frac{d^2V(r)}{dr^2} = \frac{V(r+h_g) - 2V(r) + V(r-h_g)}{h_g^2} \qquad \frac{dV(r)}{dr} = \frac{V(r+h_g) - V(r-h_g)}{2h_g}$$

ile verilir. Buradan indisli forma geçilecek olursa, fark denklemleri

$$\frac{d^2V(i)}{dr^2} = \frac{V(i+1) - 2V(i) + V(i-1)}{h_g^2} \qquad \frac{dV}{dr} = \frac{V(i+1) - V(i-1)}{2h_g}$$

haline gelir. Bu son ifadeler Denk.(4.15)' te yerine yazılırsa

$$\frac{V(i+1) - 2V(i) + V(i-1)}{h_g^2} + \frac{2}{r}\left(\frac{V(i+1) - V(i-1)}{2h_g}\right) = -\frac{\rho(i)}{\varepsilon_0}$$

$$\left(r + h_g\right)V(i+1) - 2rV(i) + \left(r - h_g\right)V(i+1) = -rh_g^2\frac{\rho(i)}{\varepsilon_0} \quad (i = 2,3,4 \dots, n) \quad (4.16)$$

denklemi elde edilir. Denk. (4.16) her bir *i* değeri için yazılırsa

$$i = 2 \rightarrow \qquad \left(r + h_g\right)V_3 - 2rV_2 = -rh_g^2\frac{\rho_2}{\varepsilon_0} - \left(r - h_g\right)V_1$$

$$i = 3 \rightarrow \qquad \left(r + h_g\right)V_4 - 2rV_3 + \left(r - h_g\right)V_2 = -rh_g^2\frac{\rho_3}{\varepsilon_0}$$

$$i = 4 \rightarrow \qquad \left(r + h_g\right)V_5 - 2rV_4 + \left(r - h_g\right)V_3 = -rh_g^2\frac{\rho_4}{\varepsilon_0}$$

……

$$i = N \rightarrow \qquad 2rV_N + \left(r - h_g\right)V_{N-1} = -rh_g^2\frac{\rho_N}{\varepsilon_0} - \left(r + h_g\right)V_{N+1} \qquad (4.17)$$

denklem sistemi elde edilir. Burada her iki uçtaki potansiyel olan V_1 ve V_{N+1} değerleri, sınır şartlarından bilinmektedir. Denklemin sol tarafındaki katsayıların oluşturduğu matrisle beraber Denk.(4.16)

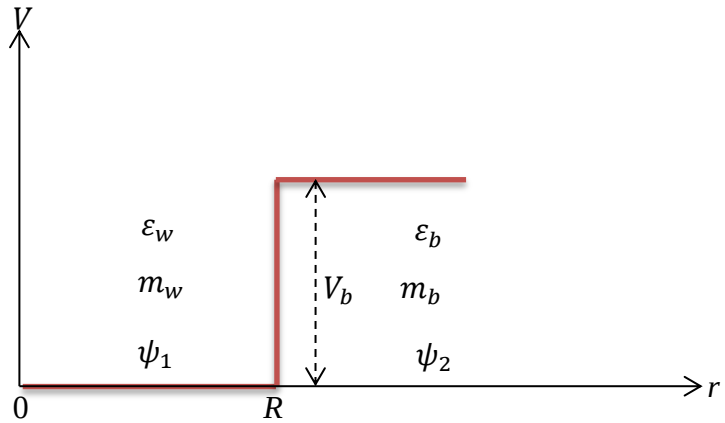
$$\begin{bmatrix} -2r & (r+h) & 0 & 0 \\ (r-h) & -2r & (r+h) & 0 \\ 0 & (r-h) & -2r & (r+h) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & (r-h) & -2r & (r+h) \\ 0 & 0 & (r-h) & -2r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_2 \\ V_3 \\ \cdots \\ \cdots \\ V_N \end{bmatrix} = \frac{-rh_g^2}{\varepsilon_0} \begin{bmatrix} \rho_2 + \dfrac{\varepsilon_0(r-h_g)V_1}{rh_g^2} \\ \rho_3 \\ \cdots \\ \cdots \\ \rho_{N-1} \\ \rho_N + \dfrac{\varepsilon_0(r+h_g)V_{N+1}}{rh_g^2} \end{bmatrix} \tag{4.18}$$

ile verilir.

4.3. Etkin Kütle Uyuşmazlığı

Kuantum heteroyapılar, en az iki farklı yarıiletken malzemeler kullanılarak üretilmektedir. Dolayısıyla bu yarıiletken malzemeler, farklı band yapılarına, örgü sabitlerine, dielektrik katsayılarına ve farklı etkin kütle değerlerine sahiptir. Dolayısıyla kuantum kuyu içerisindeki enerji seviyelerinin hesabında etkin kütle değişiminin göz önüne alınması, bulunan değerlerin gerçekçi olması açısından oldukça önemlidir.

Şekil 4.2'de görüldüğü gibi kuyu içerisinde kütlesi m_w , bariye içerisinde kütlesi m_b olan V_b sınırlandırma potansiyeline sahip bir kuantum nokta yapıyı göz önüne alalım. Kuyu ve bariyer bölgesi için Schrödinger denklemi yazılacak olursa



Şekil 4.2. Sonlu bir V_b sınırlandırma potansiyeline sahip bir kuantum yapısı

$$-\frac{\hbar^2}{2m_w}\nabla^2\psi_1(r) = E\psi_1(r) \qquad 0 \le r \le R$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_b}\nabla^2\psi_2(r) + V_b\psi_2(r) = E\psi_2(r) \qquad r > R \qquad (4.19)$$

denklemleri elde edilir. Burada $\psi_1(r)$ kuyu içerisindeki dalga fonksiyonu, $\psi_2(r)$ ise bariyer bölgelerindeki dalga fonksiyonudur. Kuantum mekaniğinde etkin kütle farklılığının göz önüne alınmadığı durumlar için $\psi(r)$ dalga fonksiyonu ve türevinin sürekli olmaları şartlarının sağlanması gerekir. Bu iki şart

$$\psi_1 \Big|_{r=R} = \psi_2 \Big|_{r=R}$$

$$\frac{d}{dr}\psi_1\Big|_{r=R} = \frac{d}{dr}\psi_2\Big|_{r=R} \qquad (4.20)$$

ile verilir. Etkin kütle farklılığının göz önüne alındığı durumdaki sistemler için bu iki şart

$$\psi_1 \Big|_{r=R} = \psi_2 \Big|_{r=R}$$

$$\frac{1}{m_w}\frac{d}{dr}\psi_1\Big|_{r=R} = \frac{1}{m_b}\frac{d}{dr}\psi_2\Big|_{r=R} \qquad (4.21)$$

denklemleri ile tanımlanır. Bu sınır şartlarına *Ben Daniel ve Duke* (1966) *sınır şartları* denir. Dolayısıyla kuyu-bariyer sınırında sınır şartı yazılırken her iki bölgedeki farklı etkin kütleler doğrudan işin içine girmiştir.

Denk. (4.7)'deki radyal Schrödinger denklemi etkin kütle yaklaşımı yardımıyla BenDaniel-Duke şartını kullanarak yazılırsa

$$\frac{-\hbar^2}{2}\frac{d}{dr}\frac{1}{m(r)}\frac{du}{dr} + \left\{V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}U = EU \qquad (4.22)$$

elde edilir. Denklemde sonlu fark denklemlerinden birinci türev ifadesi olan denklem $dU(r)/dr = [U(r+\delta_r) - U(r-\delta_r)]/2\delta_r$ yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\frac{1}{m(r+\delta_r)}\frac{du}{dr}\Big|_{r+\delta_r} - \frac{1}{m(r-\delta_r)}\frac{du}{dr}\Big|_{r-\delta_r}}{2\delta_r}\right] + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]U = EU \tag{4.23}$$

denklemi elde edilir. Denk. (4.23) düzenlenirse

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{(2\delta_r)^2}\left[\frac{1}{m(r+\delta_r)}U(r+2\delta_r)\right] - \left[\frac{1}{m(r+\delta_r)} + \frac{1}{m(r-\delta_r)}\right]U(r) +$$

$$\left[\frac{1}{m(r-\delta_r)}U(r-2\delta_r)\right] + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]U = EU \tag{4.24}$$

elde edilir. Bu denklemde $2\delta_r \rightarrow \delta_r$ dönüşümü yapılırsa

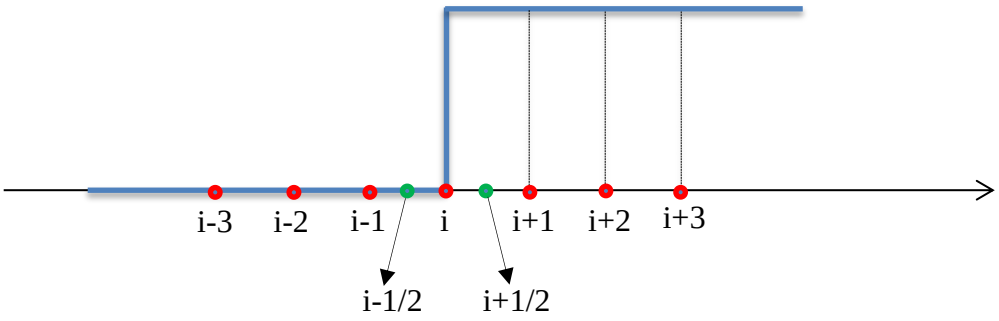
$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{{\delta_r}^2}\left[\frac{1}{m\left(r+\frac{\delta_r}{2}\right)}U(r+\delta_r)\right] - \left[\frac{1}{m\left(r+\frac{\delta_r}{2}\right)} + \frac{1}{m\left(r-\frac{\delta_r}{2}\right)}\right]U(r) +$$

$$\left[\frac{1}{m\left(r-\frac{\delta_r}{2}\right)}U(r-\delta_r)\right] + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]U = EU \tag{4.25}$$

denklemi bulunur. Bu denklem (i)'ye bağlı indisli bir biçimde yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2h^2}\left[\frac{1}{m\left(i+\frac{1}{2}\right)}U(i+1)\right] - \left[\frac{1}{m\left(i+\frac{1}{2}\right)} + \frac{1}{m\left(i-\frac{1}{2}\right)}\right]U(i) +$$

$$\left[\frac{1}{m\left(i-\frac{1}{2}\right)}U(i-1)\right] + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]U(i) = EU(i) \tag{4.26}$$



Şekil 4.3. Bölünmüş uzaydaki (i) indislerinin gösterimi

denklemi elde edilir (Harrison, 2005). Bu denklemdeki (*i+1/2*) ve (*i-1/2*) indis değerleri Şekil (4.3)'te gösterilmiştir. Köşegen matris haline getireceğimiz Denk.(4.26) düzenlenirse

$$-\frac{\hbar^2}{2h^2}\frac{1}{m\left(i+\frac{1}{2}\right)}U(i+1)+\left\{\frac{\hbar^2}{2h^2}\left[\frac{1}{m\left(i+\frac{1}{2}\right)}+\frac{1}{m\left(i-\frac{1}{2}\right)}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2}\right]+V(i)\right\}U(i)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2h^2}\frac{1}{m\left(i-\frac{1}{2}\right)}U(i-1)=EU(i) \tag{4.27}$$

denklemi bulunur.

4.4. Dielektrik Katsayı Uyuşmazlığı

Kesim (4.3)' te anlatılan etkin kütle uyuşmazlığına benzer şekilde, Şekil 4.2'den de görülebileceği gibi kuantum heteroyapıların üretildiği malzemelerin dielektrik katsayıları birbirinden farklı olabilir. Kuyu bölgesindeki malzemenin dielektrik katsayısı ε_w, bariyer bölgesindeki malzemenin dielektrik katsayısı ise ε_b dir. Denk.(4.15) ile verilen Poisson denklemi yeniden yazılacak olursa

$$\frac{d}{dr}\varepsilon(r)\frac{dV}{dr}+\frac{2}{r}\varepsilon(r)\frac{dV}{dr}=-\frac{\rho(r)}{\varepsilon_0} \tag{4.28}$$

haline gelir. Sonlu fark denklemlerinde birinci türev ifadesi denklemde yerine yazılırsa denklem

$$\left(\frac{\varepsilon(r+\delta_r)\frac{dV}{dr}\Big|_{r+\delta_r} - \varepsilon(r-\delta_r)\frac{dV}{dr}\Big|_{r-\delta_r}}{2\delta_r}\right) + \frac{2}{r}\varepsilon(r)\frac{dV}{dr} = -\frac{\rho(r)}{\varepsilon_0} \tag{4.29}$$

şeklinde olur. Bu denklem düzenlenir ve $2\delta_r \rightarrow \delta_r$ dönüşümü yapılırsa

$$\frac{1}{(\delta_r)^2}\left[\varepsilon\left(r+\frac{\delta_r}{2}\right)V(r+\delta_r) - \left\{\varepsilon\left(r+\frac{\delta_r}{2}\right)+\varepsilon\left(r-\frac{\delta_r}{2}\right)\right\}V(r) + \varepsilon\left(r-\frac{\delta_r}{2}\right)V(r-\delta_r)\right] +$$

$$\frac{2}{r}\varepsilon(r)\frac{dV}{dr} = -\frac{\rho(r)}{\varepsilon_0} \tag{4.30}$$

elde edilir. Denk.(4.30) indisli biçimde yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\left[r\varepsilon\left(i-\frac{1}{2}\right) - h_g\varepsilon(i)\right]V(i-1) - r\left[\varepsilon\left(i+\frac{1}{2}\right)+\varepsilon\left(i-\frac{1}{2}\right)\right]V(i) + \left[r\varepsilon\left(i+\frac{1}{2}\right) + h_g\varepsilon(i)\right]V(i+1)$$

$$= -\frac{rh_g^2\rho(i)}{\varepsilon_0} \tag{4.31}$$

denklemi elde edilir.

4.5. Hartree Yaklaşımı

Bir V_b sınırlandırma potansiyelinde, elektronların birbiriyle etkileştiği N tane elektrondan oluşan bir sistem için Schrödinger denklemi,

$$H\psi(\boldsymbol{r}_1, \ldots \boldsymbol{r}_N) = E\psi(\boldsymbol{r}_1, \ldots \boldsymbol{r}_N) \tag{4.32}$$

ile, Hamiltoniyen ifadesi ise

$$H = \sum_{i=1}^{N} -\frac{1}{2}\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{m}\boldsymbol{\nabla}\right) + \sum_{i=1}^{N} V_b(\boldsymbol{r}_i) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N}\frac{1}{\varepsilon\|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j\|} \tag{4.33}$$

ile verilir. Burada ε dielektrik geçirgenliktir. Sayısal bile olsa bu denklemin tam bir çözümü imkânsızdır. Bu nedenle denklemi çözmek için bazı yaklaşımlar kullanmak

gerekir. Kuantum noktalar ve atomlar arasındaki olağanüstü benzerlik sayesinde problemi çözmek için atom fiziği yöntemleri kullanılabilir. Bu yöntemlerden biride Hartree yaklaşımıdır.

Hartree yaklaşımı, çok elektronlu sistemlerin öz-uyumlu (self-consistent) hesaplarında yoğun bir şekilde kullanılan en basit yöntemlerden biridir. Hartree yaklaşımında, çok elektronlu bir yapıdaki bir elektronun ortamdaki diğer elektronlar tarafından oluşturulan ortalama bir elektrostatik Coulomb potansiyeli içerisinde hareket ettiği varsayılır. Yöntem basit olmasına rağmen, oldukça iyi doğrulukta sonuçlar vermektedir. Hartree yaklaşımında çok elektron Schrödinger denklemi, tek elektron Schrödinger denklemine dönüştürülerek daha da basitleştirilir. Bu yapılırken Schrödinger denklemine, elektron elektron etkileşmelerinin toplamı direkt olarak eklenmez, bunun yerine bir elektron üzerine, yapı içerisindeki diğer elektronların ortalama etkisi denkleme eklenir.

$V_H(r)$, elektronlar arası etkileşmeden kaynaklanan Coulomb veya Hartree potansiyeli aşağıdaki Poisson denkleminin çözülmesiyle belirlenir.

$$\boldsymbol{\nabla}(\varepsilon\boldsymbol{\nabla}V_H(r)) = 4\pi\rho(r) \tag{4.34}$$

Buradaki toplam yük yoğunluğu $\rho(r)$

$$\rho(r) = -e\sum_{i=1}^{N}|\psi_i(r)|^2 \tag{4.35}$$

ile verilir. Böylece çok elektronlu bir sistemin Schrödinger denklemi, tek elektronlu sistemin Schrödinger denklemine indirgenmiş olur ve

$$\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{\nabla}\left(-\frac{1}{m}\boldsymbol{\nabla}\right) + V_b(r) + V_{\boldsymbol{H}}(\boldsymbol{r})\right]\psi_i(r) = \varepsilon_i\psi_i(r) \tag{4.36}$$

şeklinde yazılır. Burada ε_i , *i.* elektronun enerjisidir. Sistemin toplam enerjisi ise

$$E = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i - \frac{1}{2} \int \psi_i^* (r) V_H(r) \psi_i(r) d^3r \qquad (4.37)$$

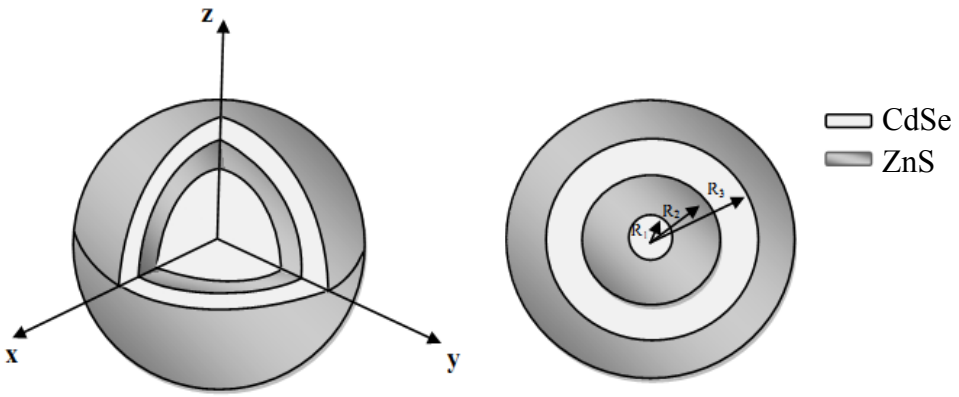
ile verilir (See ve ark., 2002).

4.6. Elektronik Yapı Hesabı

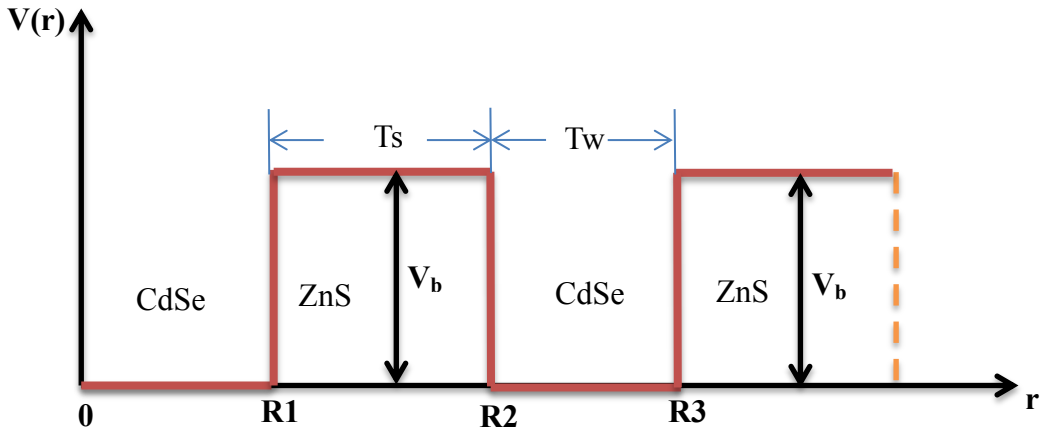
Bu tez çalışmasında iki elektronlu ve çok tabakalı küresel CdSe/ZnS/CdSe/ZnS (yani çekirdek/kabuk/kuyu/kabuk) bir kuantum noktası dikkate alındı. Çok tabakalı bir küresel kuantum nokta yapı genel olarak aralarında belli bir mesafe bulunan iç içe geçmiş iki küresel kabuk gibi göz önüne alınabilir. Böyle bir yapı Şekil 4.4'te gösterilmiştir.

Şekilden de görüldüğü gibi çok tabakalı kuantum nokta yapısı, birisi çekirdek diğeri kuyu olmak üzere iki tane CdSe nanoyapı içerir. Bu yapılar eş merkezli ve iç içedir. R_1 yarıçaplı CdSe çekirdek malzemesi, CdSe'ye göre daha geniş band aralığına sahip ZnS kabuk ile kaplanır. Kabuk kalınlığı $T_s=R_2-R_1$ dir. Bu yapı $T_w=R_3-R_2$ genişlikli kuyu bölgesi oluşturmak için CdSe ile daha kaplanır. Son olarak tüm yapı, kuyu tabakasında bir sınırlandırma bölgesi oluşturmak için ZnS kabuk malzemesi ile kaplanır ve tüm yapı ZnS malzeme içerisine gömülü durumdadır. Elde edilen bu heteroyapının potansiyel profili Şekil 4.5'te görüldüğü gibidir.

Bu yapıda, donor safsızlığı çekirdek bölgesi merkezinde alındı. Burada çekirdek/kabuk/kuyu/kabuk kuantum nokta yapıda bulunan iki elektronun birbiriyle etkileştiği göz önüne alındı.



Şekil 4.4. Çok tabakalı küresel kuantum nokta yapısının şematik gösterimi



Şekil 4.5. Çok tabakalı küresel kuantum nokta yapısının potansiyel profili

Etkin kütle yaklaşımında ve BenDaniel-Duke sınır şartlarında, çok tabakalı bir küresel simetrik kuantum nokta için safsızlık durumuda göz önüne alındığında, tek parçacık Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}_r\left(\frac{1}{m_e^*(r)}\vec{\nabla}_r\right) - e\phi_{sc} - \frac{Ze^2}{\kappa(r)r} + V_b(r)\right]R_{nl}(r) = \varepsilon_{nl}R_{nl}(r) \qquad (4.38)$$

ile verilir. Burada ilk terim elektronun kinetik enerji terimi, $\hbar$ indirgenmiş Planck sabiti, $m_e^*(r)$ elektronun konuma bağlı etkin kütlesi, e elektronik yük, ϕ_{sc} elektronlar arasındaki öz uyumlu Hartree potansiyelidir. Üçüncü terim elektronla hidrojenik donor safsızlık arasındaki Coulomb etkileşimi, Z safsızlık yüküdür. $V_b(r)$ elektronun konuma bağlı sınırlandırıcı potansiyeli, $\kappa(r)$ konuma bağlı dielektrik sabitidir. ε_{nl} tek parçacık enerji özdeğerleri, $R_{nl}(r)$ elektronun radyal dalga fonksiyonunu göstermektedir. Burada $Z = 1$ ise kuantum noktanın merkezinde bir hidrojenik donor safsızlığı vardır ve bu yapı negatif yüklü donor merkezi (D^-) olarak adlandırılır. Ancak $Z = 0$ ise safsızlık atomu yoktur ve yapı iki elektronlu kuantum nokta olarak adlandırılır.

Göz önüne alınan yapı için sınırlandırıcı potansiyelin şematik gösterimi, Şekil 4.5'te gösterilmiş olup matematiksel ifadesi ise

$$V(r) = \begin{cases} 0\,, & 0 \le r \le R_1 \\ V_b\,, & R_1 < r < R_2 \\ 0\,, & R_2 \le r \le R_3 \\ V_b\,, & r > R_3 \end{cases} \tag{4.39}$$

biçimindedir. Burada V_b, CdSe ve ZnS malzemeleri arasındaki iletim bandında oluşan sınırlandırma potansiyelidir. Çok tabakalı küresel simetrik bir kuantum nokta yapı için Denk.(4.38) ile verilen Schrödinger denklemini çözerken kuantum mekaniksel süreklilik şartının sağlanması için BenDaniel-Duke sınır şartları uygulanmıştır. Şekil (4.5)'te göz önüne alınan potansiyel profiline göre Denk.(4.38)'deki Schrödinger denklemi için BenDaniel-Duke sınır şartları

$$R_1(r)\,|_{r=R_1} = R_2(r)\,|_{r=R_1}$$

$$R_2(r)\,|_{r=R_2} = R_3(r)\,|_{r=R_2}$$

$$R_3(r)\,|_{r=R_3} = R_4(r)\,|_{r=R_3}$$

$$\frac{1}{m_{CdSe}}\frac{dR_1(r)}{dr}\bigg|_{r=R_1} = \frac{1}{m_{ZnS}}\frac{dR_2(r)}{dr}\bigg|_{r=R_1}$$

$$\frac{1}{m_{ZnS}}\frac{dR_2(r)}{dr}\bigg|_{r=R_2} = \frac{1}{m_{CdSe}}\frac{dR_3(r)}{dr}\bigg|_{r=R_2}$$

$$\frac{1}{m_{CdSe}}\frac{dR_3(r)}{dr}\bigg|_{r=R_3} = \frac{1}{m_{ZnS}}\frac{dR_4(r)}{dr}\bigg|_{r=R_3} \tag{4.40}$$

ile ifade edilebilir. Burada m_{CdSe} ve m_{ZnS} sırasıyla elektronun, *CdSe* ve *ZnS* malzemeleri içerisindeki etkin kütleleridir.

Yapı içerisinde birden fazla elektron olması durumunda elektronlar arası etkileşmeden kaynaklanan elektrostatik Coulomb potansiyelleri, Poisson denkleminin çözülmesiyle belirlenir. Poisson denklemi ara yüzey kutuplanmalarını da içerecek biçimde

$$\vec{\nabla}\kappa(r)\vec{\nabla}\phi_{sc} = \frac{e}{\varepsilon_0}\rho_e(r) \tag{4.41}$$

olarak yazılabilir. Burada $\rho_e(r)$ elektron yoğunluğu, ε_0 boşluğun dielektrik geçirgenliğidir. $\rho_e(r)$ elektron yoğunluğu

$$\rho_e(r) = \frac{1}{4\pi}\sum_{l=0}^{p} 2(2l+1)\sum_{n=1}^{np}\left|R_{n,l}^{elec}(r)\right|^2 + \frac{1}{4\pi}q\left|R_{nq,lq}^{elec}(r)\right|^2 \tag{4.42}$$

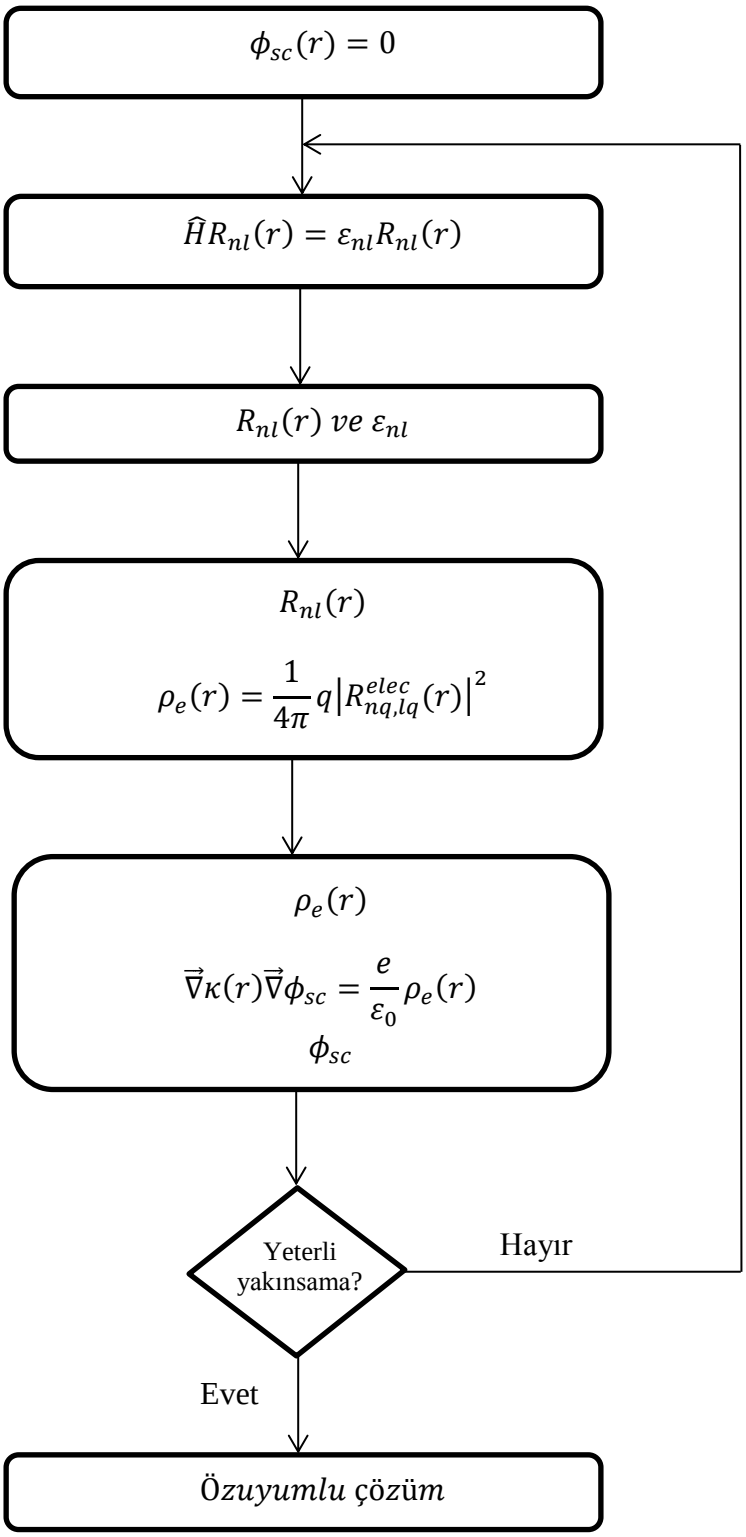
ifadesinden belirlenir. Burada $2(2l+1)$ terimi, spin ve manyetik dejenerelikleri, p ve np sırasıyla tam dolu kabukların açısal momentum kuantum sayısı ve baş kuantum sayısını, q kısmen dolu son kabuktaki elektronların ve deşiklerin sayısını, nq ve lq sırasıyla son kabuğun baş kuantum sayısını ve açısal momentum kuantum sayısını göstermektedir. Hartree yaklaşımında iki elektronun oluşturduğu ortalama bir potansiyelde bir elektronun hareket ettiği göz önüne alınır. Bu uygulamada değiş-tokuş ve korelasyon etkileri dikkate alınmamıştır. Sonuç olarak yük yoğunluğu

$$\rho_e(r) = \frac{1}{4\pi}q\left|R_{nq,lq}^{elec}(r)\right|^2 \tag{4.43}$$

ile verilir.

Sistemin elektronik ve optik özelliklerini belirlemek için çok tabakalı iki elektronlu kuantum nokta yapıyı küresel simetrik kabul edildi. Hesaplamalar Hartree yaklaşımında Denk. (4.38), Denk. (4.41), Denk. (4.43), Poisson-Schrödinger denklemlerinin tam sayısal öz uyumlu (self consistent) çözümlerine bağlı olarak gerçekleştirildi. Poisson-Schrödinger denklemlerinin bu öz uyumlu çözümünde takip ettiğimiz alğoritma aşağıdaki gibi olur:

- Başlangıçta Hartree potansiyeli $\phi_{sc}(r) = 0$ alınarak Denk.(4.38) ile gösterilen tek parçacık Schrödinger denklemi sadece sınırlandırıcı potansiyel $V_b(r)$ etkisi altında çözülür ve tek elektron ε_{nl} enerji seviyeleri ve $R_{nl}(r)$ dalga fonksiyonları belirlenir.
- Bu $R_{nl}(r)$ dalga fonksiyonlarını, Denk.(4.43)'de kullanılarak elektronik yük yoğunluğu $\rho_e(r)$ belirlenir.
- Bu $\rho_e(r)$ elektronik yük yoğunluğunu, Denk.(4.41)'te kullanarak Poisson denklemi çözülür ve $\phi_{sc}(r)$ Hartree potansiyelleri belirlenir.



Şekil 4.6. Schrödinger-Poisson denkleminin öz uyumlu çözümü için kullanılan algoritmanın akış şeması ile gösterimi

- $\phi_{sc}(r)$ Hartree potansiyeli $V_b(r)$ sınırlandırıcı potansiyele eklenerek birinci adıma dönülür ve Denk.(4.38) ile verilen Schrödinger denklemi yeniden çözülür. Yeni enerji değerleri ve dalga fonksiyonları bulunur.
- Son olarak yakınsama kontrolü yapılır. Döngü yeterince iyi bir yakınsama sağlanıncaya kadar devam ettirilir. Yakınsama sağlanınca döngüden çıkılır.

Yukarıda anlatılan döngü için akış şeması, Şekil 4.6'da gösterilmiştir. Tek parçacık enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonunu belirlemek için karşılaşılan denklemlerin çözümünde sayısal analiz tekniklerinden matris köşegenleştirme tekniği kullanıldı. Bunun için Hamiltoniyen operatörü sonlu fark denklemlerinden yararlanılarak yazıldı ve Schrödinger denklemi, Kesim (4.3)'te anlatıldığı gibi bir matris özdeğer denklemine indirgendi. Bu matrisin özdeğer ve özvektörleri EISPACK altprogramı kullanılarak belirlendi. İki elektronlu kuantum nokta için toplam enerji

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^{2} \varepsilon_{nl}(i) - \frac{e}{4\pi\varepsilon_0\kappa(r)} \int R_{nl}\phi_{sc}\, R_{nl} r^2 dr \tag{4.44}$$

ile verilir. Elektronlar arasındaki Coulomb etkileşimi iki kez sayıldığı için bunlardan biri toplam enerji hesaplamalarından çıkartılır.

İki elektronlu çok tabakalı yarıiletken küresel bir kuantum nokta yapısında negatif yüklü donor merkezinin (D^-) bağlanma enerjisi

$$E_b(D^-) = E_0 + E(D^0) - E(D^-) \tag{4.45}$$

olarak tanımlanır. Burada E_0 kuantum noktada safsızlığın olmadığı durumda tek bir elektronun taban durum enerjisidir. $E(D^0)$ ve $E(D^-)$ sırasıyla nötr donorun ve negatif yüklü donor merkezinin en düşük enerji durumudur.

Sistemin elektronik özellikleri bu şekilde belirlendikten sonra, sistemin optik özelliklerinide incelemek için Schrödinger-Poisson denklemlerinin çözümlerinden elde edilen radyal dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri kullanılarak band içi seviyeler arası optik soğurma ve bu seviyeler arasındaki osilatör şiddetleri hesaplandı. İncelenecek sistem için optik geçiş osilatör şiddetleri, Denk.(3.58), lineer optik soğurma katsayısı Denk.(3.59), üçüncü derece lineer olmayan optik soğurma katsayısı ise Denk.(3.60) kullanarak hesaplanmıştır.

5. HESAPLAMA SONUÇLARI

5.1. Giriş

Bu bölümde, bu tez çalışmasında ele alınan iki elektronlu ve çok tabakalı küresel CdSe/ZnS/CdSe/ZnS bir kuantum nokta yapı için bir önceki bölümde anlatılan hesaplama teknikleri ve fiziksel yaklaşım yöntemleri kullanılarak yapılan hesaplama sonuçları verilecek ve elde edilen sonuçlar tartışılacaktır. Bu çalışmada iki elektronlu ve çok tabakalı yarıiletken kuantum noktasının elektronik ve optik özellikleri incelenmiştir.

Bu özellikleri incelemek için gerekli olan enerji özdeğerlerini ve bu enerji özdeğerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarını belirlemek için, Poisson-Schrödinger denklemleri, etkin kütle ve Hartree yaklaşımında öz-uyumlu olarak çözülmüştür. Ayrıca, iki elektronlu ve çok tabakalı yarıiletken küresel kuantum noktasının merkezinde bulunan negatif yüklü hidrojenik donor safsızlığının varlığında, tüm hesaplamalar tekrar edilmiş ve sonuçlar karşılaştırılmalı olarak verilmiştir.

İki elektronlu ve çok tabakalı küresel kuantum nokta yapının, negatif yüklü hidrojenik donor safsızlığının olmadığı (Z=0) durumda ve safsızlığın olduğu (Z=1) durumda, taban durum (1S) ve uyarılmış durum (1P) seviyelerine ait, tek parçacık enerji değerleri, toplam enerji değerleri, safsızlık bağlanma enerjileri ve olasılık yoğunluğu gibi elektronik özellikleri, farklı çekirdek yarıçapları, farklı bariyer kalınlıkları ve farklı kuyu genişlikleri için hesaplanmış ve bu parametrelere bağlı olarak incelenmiştir. Yapının elektronik özelliklerinin incelenmesinin yanında, sistemin taban durumunun bir fotonla uyarılması halinde meydana gelen geçişlere ait osilatör şiddetleri, lineer optik soğurma katsayıları ve üçüncü derece lineer olmayan optik soğurma katsayıları gibi optik özellikleri incelenmiş ve bunlarla ilgili hesaplama sonuçları verilmiştir. Sonuçlar hem safsızlığın olduğu hem de olmadığı durumlar için, çekirdek yarıçapının, bariyer kalınlığının ve kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak verilmiştir.

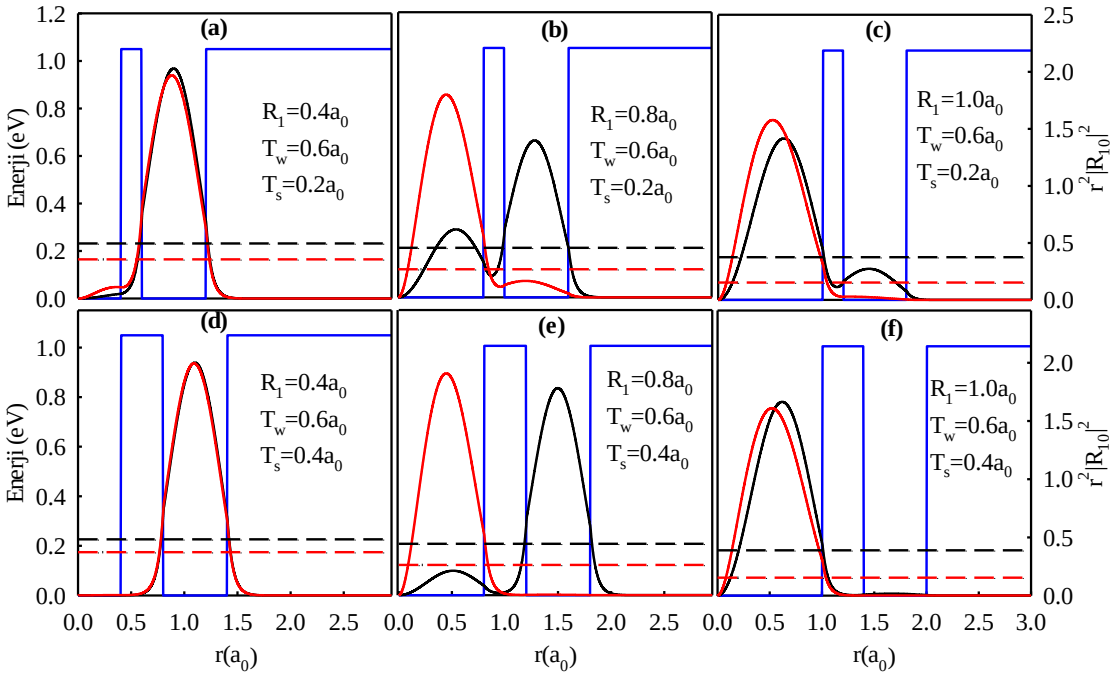
Hesaplamalarda $m = e = \hbar = 1$ olan atomik birim sistemleri kullanılmış ve sonuçlar bu birim sisteminde verilmiştir. Burada göz önüne alınan yapı CdSe/Zns/ CdSe/Zns çok tabakalı bir kuantum noktası olup malzeme parametreleri olarak bu yapıya ait malzeme parametreleri kullanılmıştır. Yani $\varepsilon_{CdSe} = 9.3\varepsilon_0$, $m_{CdSe} = 0.13m_0$, $\varepsilon_{ZnS} = 8.1\varepsilon_0$, $m_{ZnS} = 0.28m_0$, $n_{CdSe} = 2.6$' dır (Şahin ve ark., 2009; Hamizi ve Johan, 2012). Buradaki ε_0, boşluğun dielektrik geçirgenliği, m_0, serbest elektron kütlesi n ise malzemenin kırılma indisidir. Dolayısıyla CdSe için etkin Bohr yarıçapı $a_0^* =$

$\frac{4\pi\varepsilon\hbar^2}{e^2m^*}$ ve etkin Rydber enerjisi ise $R_y^* = \frac{e^4m^*}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon^2}$ 'dir. Bunların sayısal değerleri yaklaşık olarak $a_0^* \cong 37.84$ Å ve $R_y^* = 20.44\, meV$'dir. Yine bu yapı için sınırlandırıcı potansiyelin yüksekliği $V_0 = 1.05\, eV$ olarak alınmıştır.

5.2. Elektronik Özelliklerin Çekirdek Yarıçapı (R_1) ile Değişimi

İki elektronlu ve çok tabakalı yarıiletken küresel bir kuantum noktası için, safsızlığın olmadığı durum (Z=0) ve safsızlığın olduğu durum (Z=1) için, tabaka kalınlıklarına bağlı olarak, elektronların yoğunluk dağılımları Şekil 5.1'de verilmektedir.

Şekil 5.1'de üst panelde (a, b, c) bariyer genişliği $T_s = 0.2a_0$, alt panelde (d, e, f) ise bariyer genişliği $T_s = 0.4a_0$ dır. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla, safsızlığın olmadığı (Z=0) ve safsızlığın olduğu (Z=1) duruma karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.



Şekil 5.1. Çeşitli çekirdek yarıçapları (R_1), farklı bariyer genişlikleri (T_s) ve kuyu genişliği $T_w = 0.6a_0$ için yarıçapın fonksiyonu olarak elektronların olasılık dağılımları. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla, safsızlığın olmadığı (Z=0) ve safsızlığın olduğu (Z=1) duruma karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

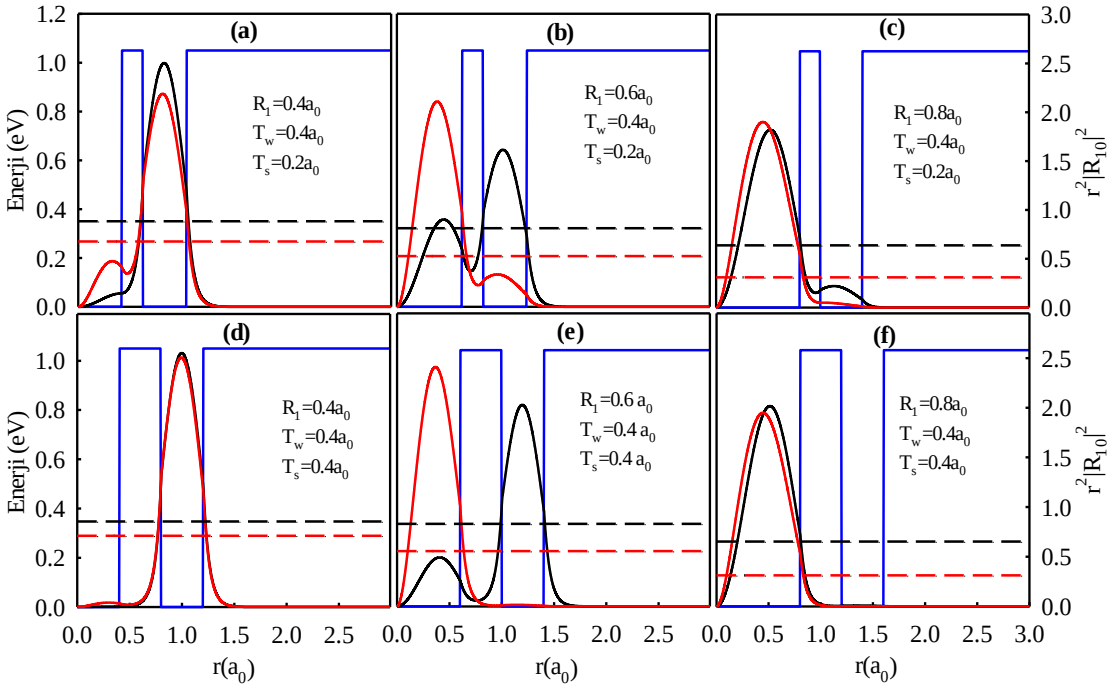
Grafikten de görüldüğü gibi, R_1 çekirdek yarıçapının küçük değerlerinde, gerek safsızlığın olmadığı durum, gerekse safsızlığın olduğu durum için, elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığı, çekirdek bölgesinde bulunma olasılığından daha fazla olmaktadır. Çekirdek yarıçapı arttıkça, enerjinin minimum olma ilkesi gereği, elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı artmaya başlamaktadır. Bununla birlikte elektronlar, kuyu bölgesinin etkisini hala hissetmektedir. Belirli yarıçap değerlerinden sonra, hem Z=0 durumunun hem de Z=1 durumunun olasılık yoğunlukları, çekirdek bölgesinde maksimum olmaktadır. Yani elektronlar, artık kuyu bölgesinin etkisini hissetmemekte ve dolayısıyla kuyu bölgesinin, enerji seviyeleri üzerindeki etkisi kaybolmaktadır.

Şekil 5.1'den de görüldüğü gibi safsızlığın olmadığı Z=0 durumunda elektronlar, birbirlerinden Coulomb itmesi nedeniyle uzaklaşacakları için, olasılık yoğunluğu kuantum noktasının duvarına doğru kaymaktadır. Safsızlığın olduğu Z=1 durumunda ise safsızlık, elektronları birbirine yaklaştırıp daha dar bir alanda yoğunlaştıracağı için olasılık yoğunluğu kuantum noktasının merkezine doğru kaymaktadır.

Kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ için tabaka genişliklerine bağlı olarak elektronların bulunma olasılıkları Şekil 5.2.'de gösterilmektedir. Üst ve alt paneller sırasıyla $T_s=0.2a_0$ ve $T_s=0.4a_0$'a karşılık gelmektedir. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla, Z=0 ve Z=1 durumuna karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

Grafiğe baktığımızda, Şekil 5.1 ile benzer olarak, çekirdek yarıçapı, kuyu genişliğine yaklaşık eşit ($R_1 \cong T_w$) veya küçük ($R_1 < T_w$) olduğunda, minumum enerji ilkesine göre elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığı daha fazla olmakta iken çekirdek yarıçapı, kuyu genişliğinden daha büyük ($R_1 > T_w$) olduğunda, elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı daha fazla olmaktadır.

Şekilden de görüldüğü gibi, safsızlığın olduğu durumda, çekirdek yarıçapı $R_1=0.4a_0$ ve bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ olduğunda elektronların az da olsa çekirdek bölgesinde bulunma olasılığından söz edilebilirken, $T_s=0.4a_0$ olduğunda elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı yaklaşık sıfır olur. Elektronlar artık tamamen kuyu bölgesindedirler. Benzer şekilde, safsızlığın olmadığı durumda $R_1=0.8a_0$ ve $T_s=0.2a_0$ için, elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığından az da olsa bahsedilebilirken, şeklin alt panelinden de görülebileceği gibi, aynı çekirdek yarıçapında, $T_s=0.4a_0$ olduğunda, elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığı yok olur ve artık elektronlar neredeyse çekirdek bölgesinde lokalize olmuşlardır. Yani, çok

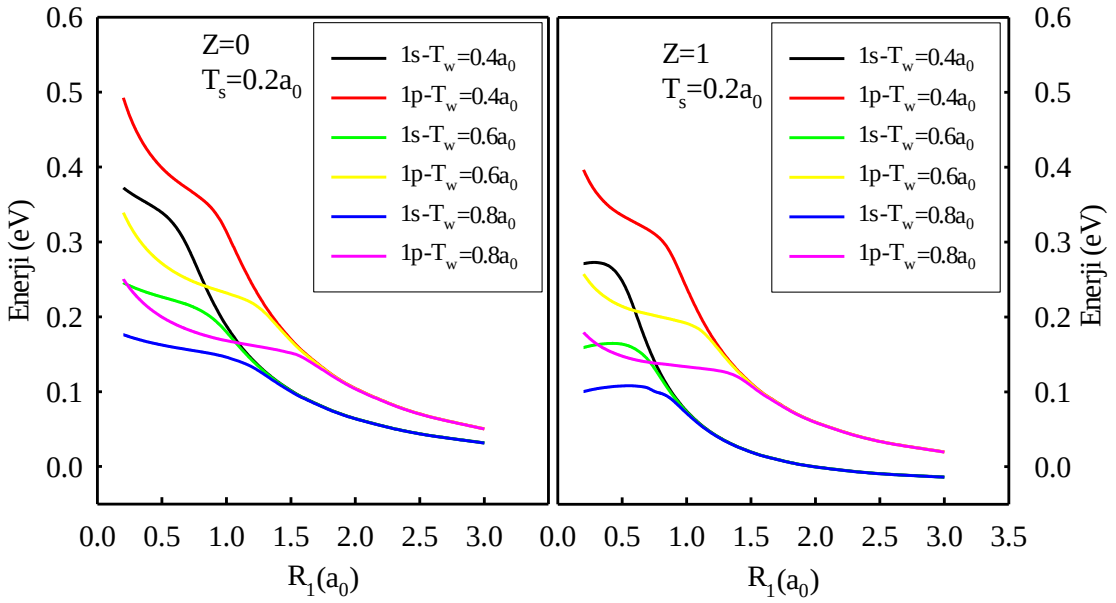


Şekil 5.2. Çeşitli çekirdek yarıçapları (R_1), farklı bariyer genişlikleri (T_s) ve kuyu genişlikleri $T_w = 0.4a_0$ için yarıçapın fonksiyonu olarak elektronların olasılık dağılımları. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla, safsızlığın olmadığı (Z=0) ve safsızlığın olduğu (Z=1) duruma karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

kabuklu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerinin üzerinde, kabuk kalınlığının büyük bir etkisinin olduğu görülmektedir.

İki elektronlu çok tabakalı yarıiletken küresel bir kuantum noktası için, safsızlığın olmadığı durum ve safsızlığın olduğu durum için, ayrı ayrı taban durum (1s) ve uyarılmış durum (1p) tek parçacık enerji seviyelerinin R_1 çekirdek yarıçapına bağlı olarak değişimleri, Şekil 5.3'te verilmiştir. Hesaplamalarda, bariyer genişliği T_s=0.2a_0 olarak alınmış olup sonuçlar üç farklı kuyu genişliği için, T_w=0.4a_0, T_w=0.6a_0 ve T_w=0.8a_0, karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Grafikten de görüldüğü gibi, enerji ile yarıçap arasında $E \propto 1/R^2$ şeklinde bir ilişki olduğu için hem taban durum tek parçacık enerjileri, hem de uyarılmış durum tek parçacık enerjileri artan R_1 değerleri ile birlikte azalma eğilimi sergilemektedir. Yine grafiklere baktığımızda, farklı kuyu genişlikleri için, T_w=0.4a_0, T_w=0.6a_0 ve T_w=0.8a_0, hem Z=0 hem de Z=1durumlarında, taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerjileri belirli bir R_1 değerine kadar, farklı değerlere sahipken, bu yarıçap değerinden sonra taban durum tek parçacık enerjileri kendi aralarında, uyarılmış durum tek parçacık



Şekil 5.3. Sabit bariyer kalınlığı (T_s=0.2a_0) ve farklı kuyu genişlikleri için, T_w=0.4a_0, T_w=0.6a_0 ve T_w=0.8a_0, safsızlığın olmadığı (Z=0) ve olduğu (Z=1) durumları için, taban durum ve uyarılmış durum tek parçacık enerjilerinin çekirdek yarıçapı (R_1) ile değişimi

enerjileri de kendi aralarında birbirlerine yaklaşmakta ve çekirdek yarıçapının daha da artmasıyla birlikte, aynı enerji değerlerine sahip olmaktadırlar. Benzer çalışmalar tek elektronlu yapılar içinde gözlenmiştir (Taş ve Şahin, 2012a). Z=0 durumunda, taban durum tek parçacık enerjileri R_1=1.4a_0 civarında aynı enerji değerine sahip olurken uyarılmış durum tek parçacık enerjileri R_1=1.8a_0 civarında aynı enerji değerlerine sahip olmaktadır. Z=1 durumunda ise taban durum tek parçacık enerjileri R_1=1.0a_0 civarında aynı değere sahip olurken uyarılmış durum tek parçacık enerjileri ise R_1=1.5a_0 civarında aynı değerlere sahip olmaktadır.

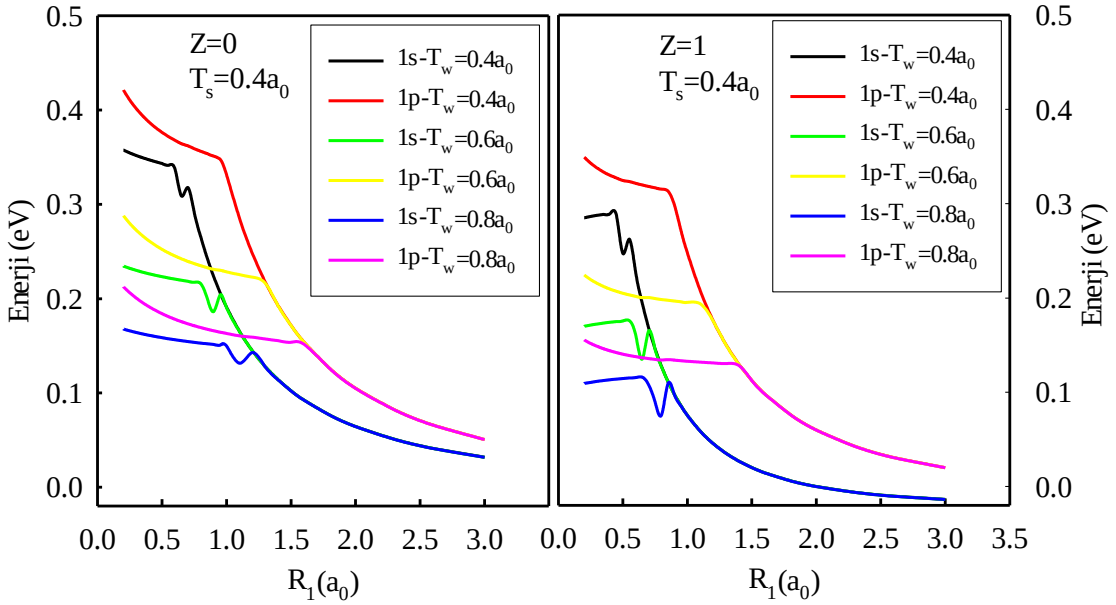
Bu durumun fiziksel nedenini açıklayacak olursak; çekirdek yarıçapının (R_1) küçük değerlerinde, gerek taban durum, gerekse uyarılmış durum için elektronun kuyu bölgesinde bulunma olasılığı, çekirdek bölgesinde bulunma olasılığından daha fazla olmaktadır. Çekirdek yarıçapı arttıkça, enerjinin minimum olma ilkesi gereği, çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı artmaya başlamaktadır. Bununla birlikte elektron, kuyu bölgesinin etkisini hala hissetmektedir. Yukarıda belirtilen yarıçap değerlerinden sonra, hem taban durumun hem de uyarılmış durumun olasılık yoğunlukları, çekirdek bölgesinde maksimum olmaktadır. Yani elektronlar, artık kuyu bölgesinin etkisini hissetmemekte ve dolayısıyla kuyu bölgesinin, enerji seviyeleri üzerindeki etkisi kaybolmaktadır.

Şekilden de anlaşılacağı gibi, safsızlığın varlığında, hem taban hem de uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyesi, safsızlığın olmadığı, durumdaki tek parçacık enerji değerlerinden daha küçüktür. Bu durum, safsızlık atomunun çekici Coulomb potansiyelinden kaynaklanmaktadır. Aynı zamanda bu potansiyelin taban durum tek parçacık enerji seviyesine olan etkisi daha fazla olduğundan dolayı, Z=1 durumunda taban durum tek parçacık enerjisi ile uyarılmış durum tek parçacık enerjisi arasındaki farkın, Z=0 durumundaki farktan, daha büyük olduğu görülmektedir.

Safsızlığın olmadığı durumda tek parçacık enerji seviyelerine, sadece potansiyel duvarlarının etkisi söz konusu iken, safsızlığın olduğu durumda, bu etkiye ilaveten bir de çekici bir Coulomb potansiyelinden kaynaklanan etki gelmektedir. Coulomb potansiyelinin çekici etkisinin taban durum üzerine olan etkisi, uyarılmış durum üzerine olan etkisinden daha fazla olduğundan, taban durumda hissedilir bir düşüş meydana getirmekte ve böylece bu iki seviye arası enerji farkı daha büyük olmaktadır.

Bariyer genişliği $T_s=0.4a_0$ ve üç farklı kuyu genişliği için, $T_w=0.4a_0$, $T_w=0.6a_0$ ve $T_w=0.8a_0$, Z=0 ve Z=1 durumları için, taban durum (1s) ve uyarılmış durum (1p) tek parçacık enerji seviyelerinin R_1 çekirdek yarıçapına bağlı olarak değişimleri, Şekil 5.4'te verilmiştir.

Grafikten de anlaşılacağı gibi, Şekil 5.3'e benzer olarak, hem taban durum tek parçacık enerjileri hem de uyarılmış durum tek parçacık enerjileri artan R_1 değerleri ile birlikte azalma eğilimi göstermektedir. Farklı kuyu genişlikleri için, hem safsızlığın olmadığı hem de safsızlığın olduğu durumlarında, taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerjileri belirli bir R_1 değerine kadar, farklı değerlere sahipken, bu yarıçap değerinden sonra taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerjileri kendi aralarında birbirlerine yaklaşmakta ve çekirdek yarıçapının daha da artmasıyla birlikte, aynı enerji değerlerine sahip olmaktadırlar. Safsızlığın olmadığı durumunda, taban durum tek parçacık enerjileri $R_1=1.2a_0$ civarında aynı enerji değerine sahip olurken, uyarılmış durum enerjileri $R_1=1.6a_0$ civarında aynı enerji değerlerine sahip olmaktadır. Safsızlığın olduğu durumunda ise taban durum tek parçacık enerjileri, $R_1=0.8a_0$ civarında aynı değere sahip olurken, uyarılmış durum tek parçacık enerjileri ise $R_1=1.4a_0$ civarında aynı değerlere sahip olmaktadır. Safsızlığın varlığında, hem taban hem de uyarılmış durum enerji seviyesi, safsızlığın olmadığı andaki enerji değerlerinden daha küçüktür. Bu durum, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinden kaynaklanmaktadır. Yine şekil dikkatli bir biçimde incelenecek olursa, safsızlığın olmadığı durumda taban durum ve uyarılmış durum arası enerji farkı, safsızlığın olduğu duruma göre daha küçüktür.



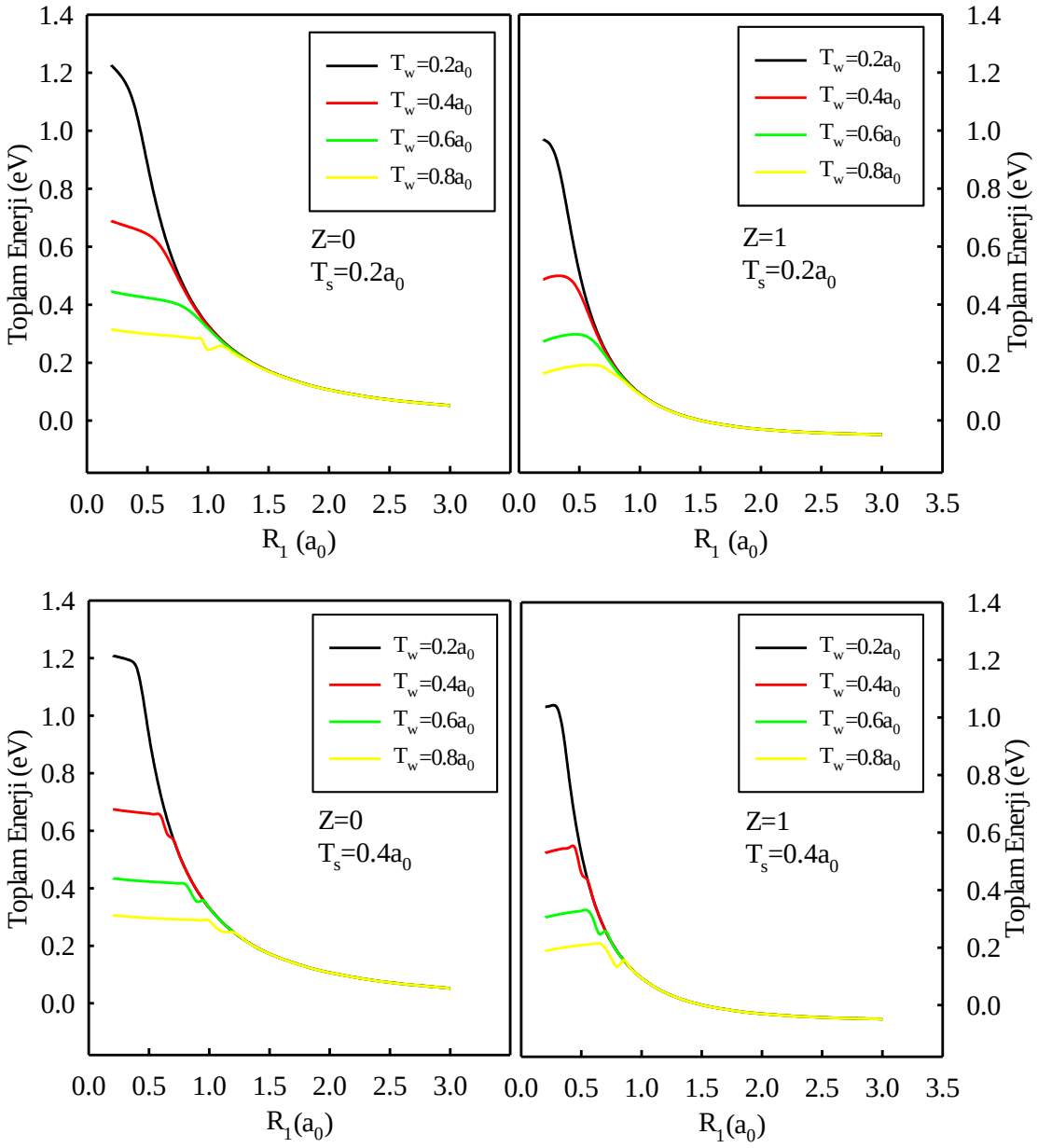
Şekil 5.4. Sabit bariyer kalınlığı (T_s=0.4a_0) ve farklı kuyu genişlikleri için, T_w=0.4a_0, T_w=0.6a_0 ve T_w=0.8a_0, Z=0 ve Z=1 durumları için, taban durum ve uyarılmış durum tek parçacık enerjilerinin çekirdek yarıçapı (R_1) ile değişimi

Şekil 5.4 incelenecek olursa, safsızlığın olmadığı ve safsızlığın olduğu durumlarda, belirli R_1 değerlerinde taban durum tek parçacık enerjilerinde, ani düşüşler görülmektedir. Bu ani düşüşler, Z=0 durumunda, kuyu genişliği T_w=0.4a_0 iken R_1≅0.6a_0, T_w=0.6a_0 için R_1=0.9a_0 ve T_w=0.8a_0 için R_1=1.1a_0 değerlerinde olmaktadır. Benzer şekilde Z=1 durumunda ise, ani düşüşler T_w=0.4a_0 iken R_1=0.5a_0, T_w=0.6a_0 için R_1≅0.6a_0 ve T_w=0.8a_0 için R_1=0.8a_0 değerlerinde olmaktadır. Hem Z=0 durumunda hemde Z=1 durumunda, kuyu genişlikleri arttıkça, ani düşüşler artan R_1 değerlerinde olmaktadır. Z=1 durumundaki düşüşlerin, Z=0 durumundaki düşüşlere göre, daha keskin olduğu Şekil 5.4'te görülmektedir. Şekil 5.3 ve Şekil 5.4 birlikte incelenecek olursa, bariyer genişliği T_s=0.2a_0 olduğunda, hem Z=0 hem de Z=1 durumlarında taban durum tek parçacık enerjilerinde herhangi bir ani düşüş gözlenmezken, T_s=0.4a_0 olduğunda ise, Z=0 ve Z=1 durumlarında taban durum tek parçacık enerjilerinde ani düşüşler görülmektedir. Buradan tek parçacık enerjilerinin, tabaka kalınlıklarında etkilendiği anlaşılmaktadır.

Çok tabakalı bir kuantum nokta heteroyapıda, farklı kuyu genişlikleri, T_w=0.2a_0, T_w=0.4a_0, T_w=0.6a_0, T_w=0.8a_0, ve farklı kabuk kalınlıkları, T_s=0.2a_0, T_s=0.4a_0, için, iki elektron ve negatif yüklü donor merkezinin toplam enerjilerinin, çekirdek yarıçapı R_1'le değişimi Şekil 5.5'te gösterilmektedir. Grafikte safsızlığın olmadığı Z=0 durumu iki

elektron durumuna, safsızlığın olduğu Z=1 durumu ise negatif yüklü donor merkezine karşılık gelmektedir.

Grafiktende görüldüğü gibi, hem üst paneldeki bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ için hem de alt paneldeki bariyer genişliği $T_s=0.4a_0$ için, toplam enerjiler artan R_1 değerleri ile birlikte azalma eğilimi göstermektedir. Bu azalma, kuyu genişliği $T_w=0.2a_0$ için daha belirgindir. Yine grafiklere baktığımızda, farklı kuyu genişlikleri için, hem safsızlığın olmadığı hem de safsızlığın olduğu durumlarda, toplam enerjiler belirli bir R_1 değerine kadar, farklı değerlere sahipken, bu yarıçap değerinden sonra



Şekil 5.5. Farklı kuyu genişlikleri ve kabuk kalınlıkları için, çekirdek yarıçapı R_1'in bir fonksiyonu olarak çok tabakalı bir kuantum noktasının toplam enerjisi

toplam enerjiler kendi aralarında birbirlerine yaklaşmakta ve çekirdek yarıçapının daha da artmasıyla birlikte, aynı enerji değerlerine sahip olmaktadırlar. Grafikte hem alt hem de üst panalde, Z=0 durumunda toplam enerjiler, $R_1=1.2a_0$ için aynı enerji değerine sahip olurken Z=1durumunda toplam enerjiler $R_1=0.8a_0$ için aynı enerji değerlerine sahip olmaktadır ve bu yarıçap değerlerinden sonra toplam enerjiler, kuyu genişliği T_w'dan bağımsız hale gelmektedirler.

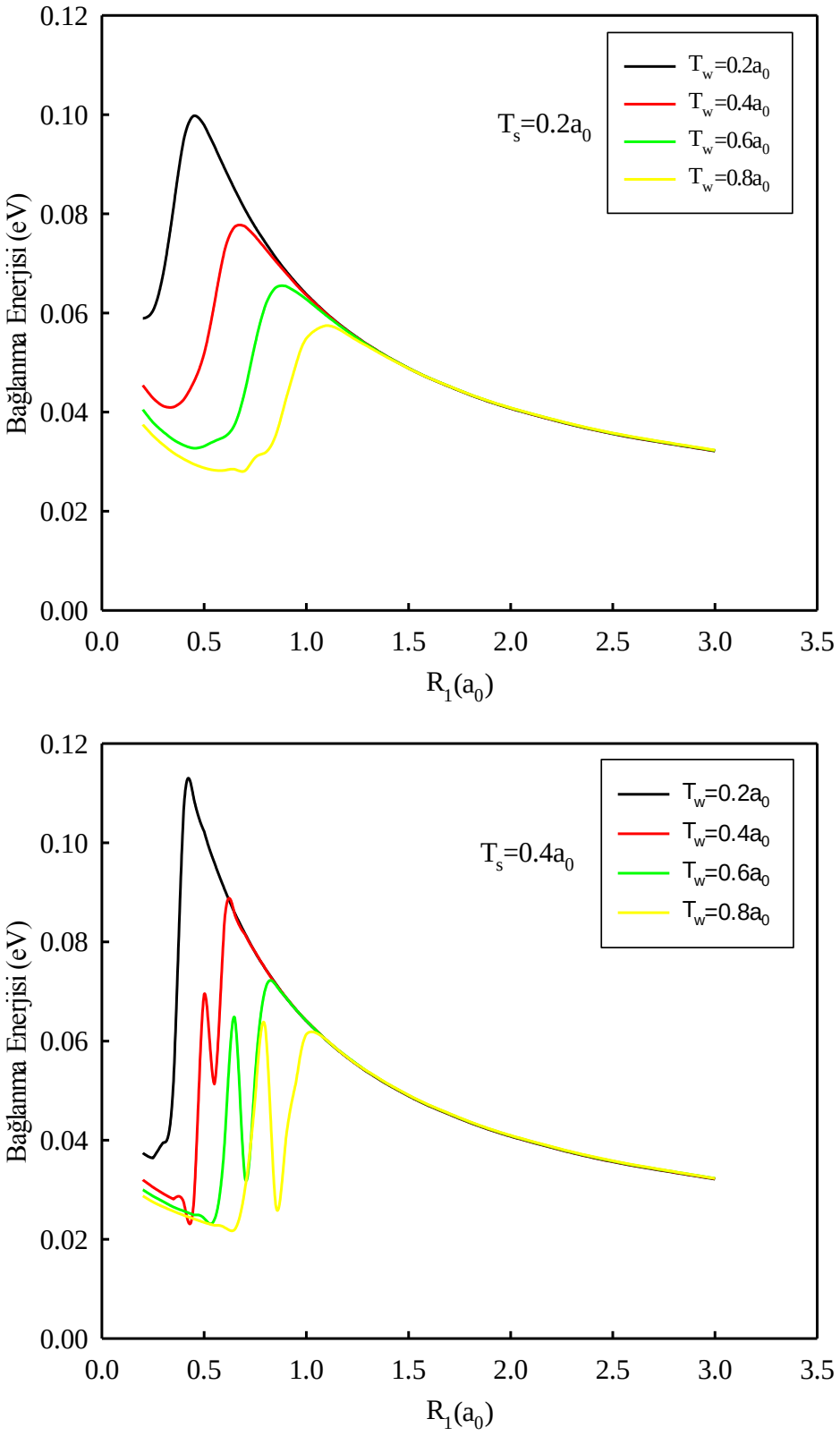
Bu durumun fiziksel sebebi şöyle açıklanabilir: Küçük çekirdek yarıçaplarında elektronlar daha enerjik ve elektronlar arası Coulomb itmesi daha büyük olduğu için toplam enerjiler, kuyu bölgesi boyutundaki değişimlerden büyük ölçüde etkilenmektedirler. Çekirdek yarıçapı R_1 yukarıda belirtilen değerlere ulaştığında, elektronlar neredeyse tamamen çekirdek bölgesinde bulunurlar ve artık elektronlar kuyu bölgesinden etkilenmezler. Kuyu genişliği T_w, çekirdek yarıçapı R_1 ile karşılaştırılabilir olduğunda ($R_1 \cong T_w$) elektronun kuyu bölgesinde bulunma olasılığı daha fazladır. Buna karşın çekirdek yarıçapının kuyu genişliğinden büyük olduğu ($R_1 \geq T_w$) durumlarda ise elektronun çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı çok daha fazla olmaktadır.

Şekil 5.5'te üst panel ve alt paneldeki grafikleri incelediğimizde, bütün durumlarda çift elektronlu kuantum nokta yapının toplam enerjisinin, negatif yüklü donor merkezinin toplam enerjisinden daha büyük olduğu görülmektedir. Yani Z=1 durumdaki toplam enerji, Z=0 durumdaki toplam enerji değerlerinden daha küçüktür. Bu durum, elektronlar arası itici Coulomb etkileşmesi, tek parçacık enerjisini arttırdığından dolayı, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinin bu enerjiyi biraz aşağı çekmesinden kaynaklanmaktadır.

Hem üst panel hem de alt paneldeki grafikleri incelediğimizde belirli çekirdek yarıçapı R_1 civarında toplam enerjilerde ani düşüşlerin olduğu görülmektedir. Üst panelde, Z=0 durumunda, bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ için sadece kuyu genişliği $T_w=0.8a_0$'da ani bir düşüş gözlemlenirken, Z=1 durumunda ise farklı kuyu genişlikleri için herhangi bir ani düşme görülmemektedir. Bu ani düşüşler, şeklin alt panelinde de görülebileceği gibi, hem Z=0 durumunda hem de Z=1 durumunda, bariyer genişliği $T_s=0.4a_0$ için kuyu genişliği $T_w>0.2a_0$ olduğunda çok daha belirgindir. Bu değişiklikler, toplam enerji seviyelerinin, çekirdek ve kuyu bölgeleri arasındaki kabuk kalınlıklarından etkilendiğini göstermektedir.

Şekil 5.6'da negatif yüklü donor merkezi (D^-)' nin bağlanma enerjisinin, iki farklı bariyer kalınlığı, $T_s=0.2a_0$ ve $T_s=0.4a_0$, ve farklı kuyu genişlikleri, $T_w=0.2a_0$, $T_w=0.4a_0$, $T_w=0.6a_0$ ve $T_w=0.8a_0$, için çekirdek yarıçapı R_1 ile değişimi verilmiştir.

Şeklin üst ve alt panelinden de görüldüğü gibi, çekirdek yarıçapının neredeyse $R_1<1.2a_0$ olduğu değerlerde, bağlanma enerjileri oldukça farklı karakterler sergilemektedir.



Şekil 5.6. Farklı kuyu genişlikleri ve kabuk kalınlıkları için, çekirdek yarıçapı R_1'in bir fonksiyonu olarak çok tabakalı bir kuantum noktasının bağlanma enerjisi

Üst panele baktığımızda, ilk önce bağlanma enerjilerinin, artan çekirdek yarıçapı R_1 ile azaldığı görülmektedir. Bu azalmaların, küçük kuyu genişliği T_w değerleri için daha küçük, artan kuyu genişliği T_w değerleri için daha fazla olduğu görülmektedir. Buna ek olarak, bağlanma enerjilerindeki azalmaların, büyük kuyu genişlikleri T_w değerlerine gidildikçe, daha büyük R_1 değerlerinde meydana geldiği, şeklin üst panelinde görülmektedir. Bağlanma enerjisi, minumum değerlere ulaştıktan sonra, her bir kuyu genişliği T_w için, belirli R_1 değerlerine kadar artmakta ve bu belirli R_1 değerlerinden sonra artan R_1 değerleriyle birlikte sürekli olarak azalmaktadır. Çekirdek yarıçapı $R_1 \geq 1.2a_0$ değeri için, bütün bağlanma enerjileri aynı değere sahiptir. Çekirdek yarıçapı R_1'in çok küçük değerlerinde, hem Z=0 hem de Z=1 durumunda, elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığı daha fazla iken, çekirdek yarıçapı $R_1 \geq 1.2a_0$ değeri için, elektronların olasılık yoğunluğunun artık kuyu bölgesinde bulunma ihtimali yok denecek kadar azdır ve elektronlar çekirdek bölgesinde sınırlanmıştır. Bu durumda, artık kuyu genişliklerinin etkisini ihmal edebiliriz. $R_1 \geq 1.2a_0$ değeri için bağlanma enerjileri, tipik bir çekirdek/kuyu kuantum noktasının bağlanma enerjisi davranışını sergilemektedir.

Şeklin alt panelini incelendiğinde, bağlanma enerjilerindeki bu değişikliklerin, bariyer genişliği $T_s=0.4a_0$ için daha karmaşık olduğu görülmektedir. Buna ek olarak üst panel ile karşılaştırıldığında, alt paneldeki bağlanma enerjileri daha büyük değere sahip olduğu görülmektedir. Bu durumun fiziksel nedenleri şöyle açıklanabilir: Bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ olduğunda, elektronlar çekirdek ve kuyu bölgeleri arasında kolaylıkla tünelleme yapabilmektedirler. Bu nedenle çekirdek (kuyu) bölgesinde sınırlandırılan elektronlar, kuyu (çekirdek) bölgesinden daha çok etkilenmektedirler. Buna ek olarak, kabuk kalınlığı ince olduğu için, elektronlar arasındaki itici Coulomb etkileşimleri, büyük ölçüde değişmez. Büyük çekirdek yarıçapı R_1 değerleri için, bağlanma enerjileri üzerine, kuyu etkisi göz ardı edildiği için, yapıya tek bir çekirdek/kabuk kuantum noktası gibi bakılabilir. Sonuç olarak, bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ için, bağlanma enerjileri düzgün bir değişim sergilemektedir.

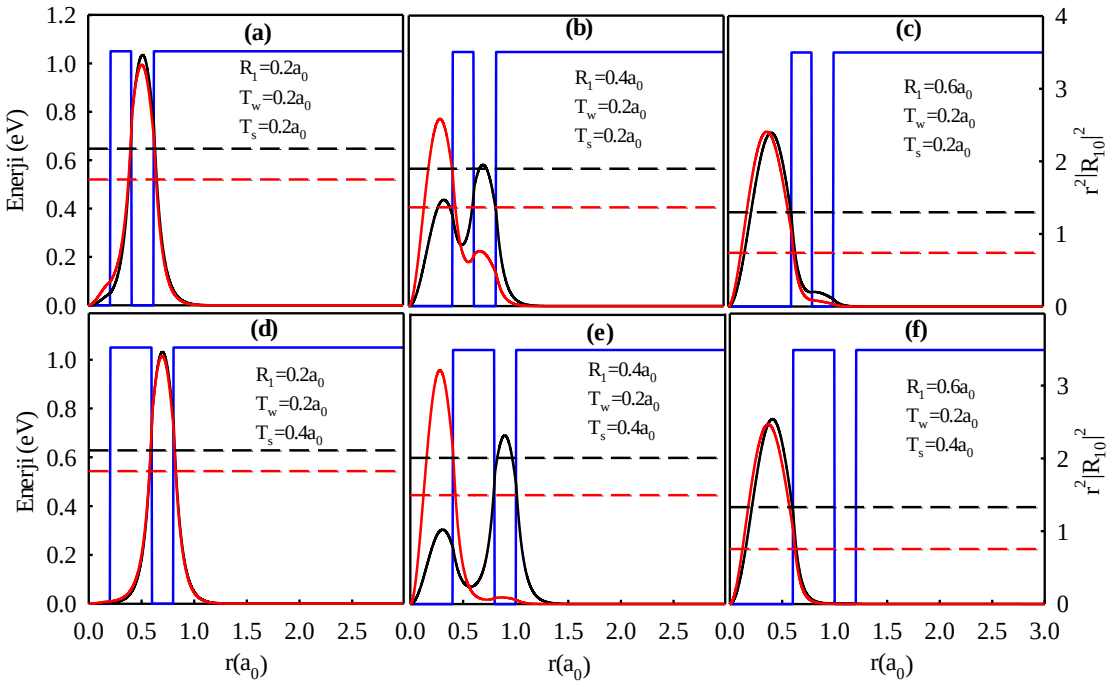
Bariyer genişliği $T_s=0.4a_0$ için, çekirdek ve kuyu bölgeleri arasında, tünelleme olasılığı zordur. Bilindiği gibi, bariyer kalınlığı ne kadar büyük olursa, kuyu bölgesindeki elektronların çekirdek bölgesine, aynı şekilde çekirdek bölgesindeki elektronun da kuyu bölgesine tünelleme olasılığı azalır. Bu nedenle, elektronlar çekirdek ve kuyu bölgelerinin birinde daha fazla sınırlandırılmış olabilir. Ayrıca,

elektronlar arasındaki itici Coulomb etkileşimleri, kabuk kalınlığından önemli ölçüde etkilenmekte ve bağlanma enerjileri çok farklı özellik göstermektedirler.

5.3. Elektronik Özelliklerin Bariyer Kalınlığı (Ts) ile Değişimi

Bu kesimde, iki elektronlu çok tabakalı küresel yarıiletken kuantum noktasının bariyer genişliği T_s'nin değiştirilmesiyle yapının elektronik özelliklerinde ne gibi değişikliklerin meydana geldiği incelenmiştir. İki elektronlu çekirdek / kabuk / kuyu / kabuk bir kuantum noktasında, kuyu genişliklerinin aynı olduğu $T_w=0.2a_0$ ve üç farklı çekirdek yarıçapı $R_1=0.2a_0$, $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ için, safsızlığın olmadığı ($Z=0$) ve olduğu ($Z=1$) durumlarda, iki farklı bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ ve $T_s=0.4a_0$ için elektronların olasılık yoğunlukları Şekil 5.7'de verilmiştir. Grafikte, siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla, Z=0 ve Z=1 durumuna karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

Grafiği incelediğimizde, çekirdek yarıçapı R_1'in, küçük değerleri için elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığı daha fazla olmakta iken, çekirdek yarıçapı R_1'in, büyük değerlerinde, elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı daha fazla olmaktadır. Bu durum Şekil 5.7.a,b,c ve Şekil 5.7.d,e,f'de açıkça görülmektedir.

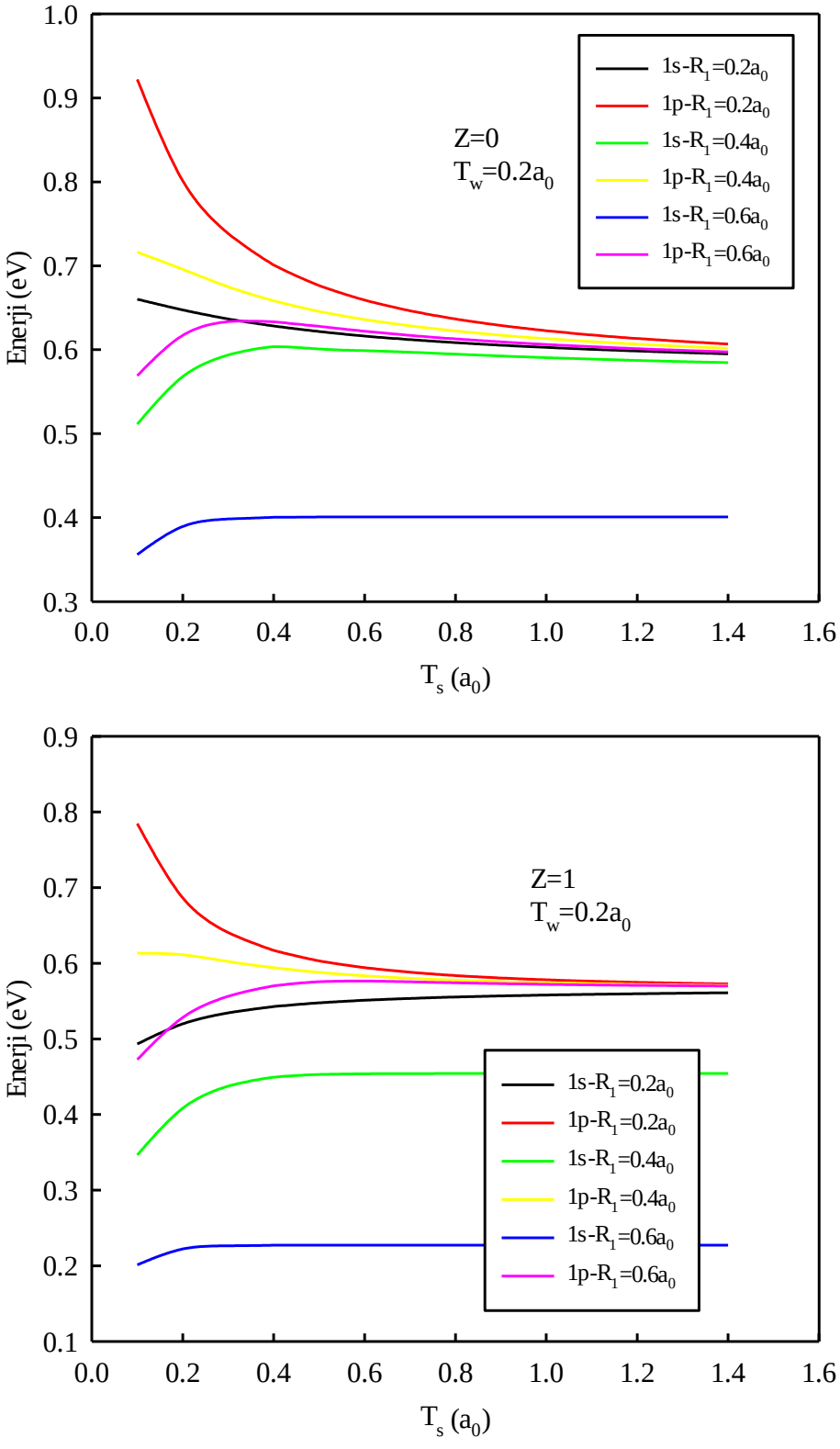


Şekil 5.7. Çeşitli çekirdek yarıçapları (R_1), farklı bariyer genişlikleri (T_s) ve kuyu genişliği ($T_w = 0.2a_0$) için yarıçapın fonksiyonu olarak elektronların olasılık dağılımları.

Şekil 5.7 üst ve alt panellerden bariyer genişliği T_s'nin olasılık yoğunlukları üzerine olan etkisine bakıldığında, safsızlığın olduğu durumda, bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ ve çekirdek yarıçapı $R_1=0.2a_0$ olduğunda (Şekil 5.7a) elektronların az da olsa çekirdek bölgesinde bulunma olasılığından söz edilebilirken, $T_s=0.4a_0$ olduğunda (Şekil 5.7d) elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı yaklaşık sıfır olur. Burada, bariyer kalınlığının $T_s=0.2a_0$ küçük olması nedeniyle, parçacık çekirdek bölgesine bir miktar tünelleme yapabilmektedir. Fakat artan bariyer kalınlığı, artık çekirdek bölgesinin etkisini hissettirmemektedir ve elektronlar artık tamamen kuyu bölgesinde lokalize olmaktadırlar. Safsızlığın olmadığı durumda $T_s=0.2a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ için (Şekil 5.7c), elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığından az da olsa bahsedilebilirken, şeklin alt panelinden de görülebileceği gibi, aynı çekirdek yarıçapında, $T_s=0.4a_0$ olduğunda (Şekil 5.7f), elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığı yok olur. Burada bariyer kalınlığının ($T_s=0.4a_0$) artmasıyla tünelleme olasılığı azalmaktadır ve artan bariyer kalınlığı artık kuyu bölgesinin etkisini hissettirmemektedir. Böylece elektronlar neredeyse tamamen çekirdek bölgesinde lokalize olmuşlardır. Şekil 5.7b'de, bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ için, $Z=1$ durumunda elektronların bulunma olasılık yoğunlukları çekirdek bölgesinde fazla, kuyu bölgesinde az iken $Z=0$ durumunda ise olasılık yoğunlukları kuyu bölgesinde fazla, çekirdek bölgesinde daha azdır. Şekil 5.7e'de, bariyer genişliği $T_s=0.4a_0$ olduğunda, $Z=1$ durumunda, elektronların olasılık yoğunlukları neredeyse tamamen çekirdek bölgesinde yoğun iken, $Z=0$ durumunda ise olasılık yoğunlukları, kuyu bölgesinde daha fazla olmakta ve çekirdek bölgesinde daha az olmaktadır. Buradan, iki elektronlu ve çok tabakalı bir kuantum noktasının elektronik özelliklerinin üzerinde, bariyer kalınlığı T_s'nin büyük bir etkisinin olduğu görülmektedir.

İki elektronlu çok tabakalı yarıiletken küresel bir kuantum noktası için, safsızlığın olmadığı ve safsızlığın olduğu durum için, taban durum (1s) ve uyarılmış durum (1p) tek parçacık enerji seviyelerinin, $R_1=0.2a_0$, $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ gibi üç farklı çekirdek yarıçapında ve $T_w=0.2a_0$ kuyu genişliğinde, bariyer kalınlığı T_s'ye bağlı olarak değişimleri, Şekil 5.8'de verilmiştir.

Şekil 5.8'den de anlaşılabileceği gibi, farklı çekirdek yarıçapları için $Z=1$ ve $Z=0$ durumlarında taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji değerlerinde, küçük bariyer kalınlıklarında değişim gözlenirken, artan bariyer kalınlığı ile birlikte sabit bir değere gitmektedir. Çünkü bariyer kalınlığı küçük iken, hem $Z=0$ hem de $Z=1$ için, taban ve uyarılmış durum dalga fonksiyonları çekirdek ve kuyu bölgeleri arasında



Şekil 5.8. Z=0 ve Z=1 durumu ve kuyu genişliği T_w=0.2a_0 için, bariyer kalınlığı Ts'nin bir fonksiyonu olarak taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyeleri

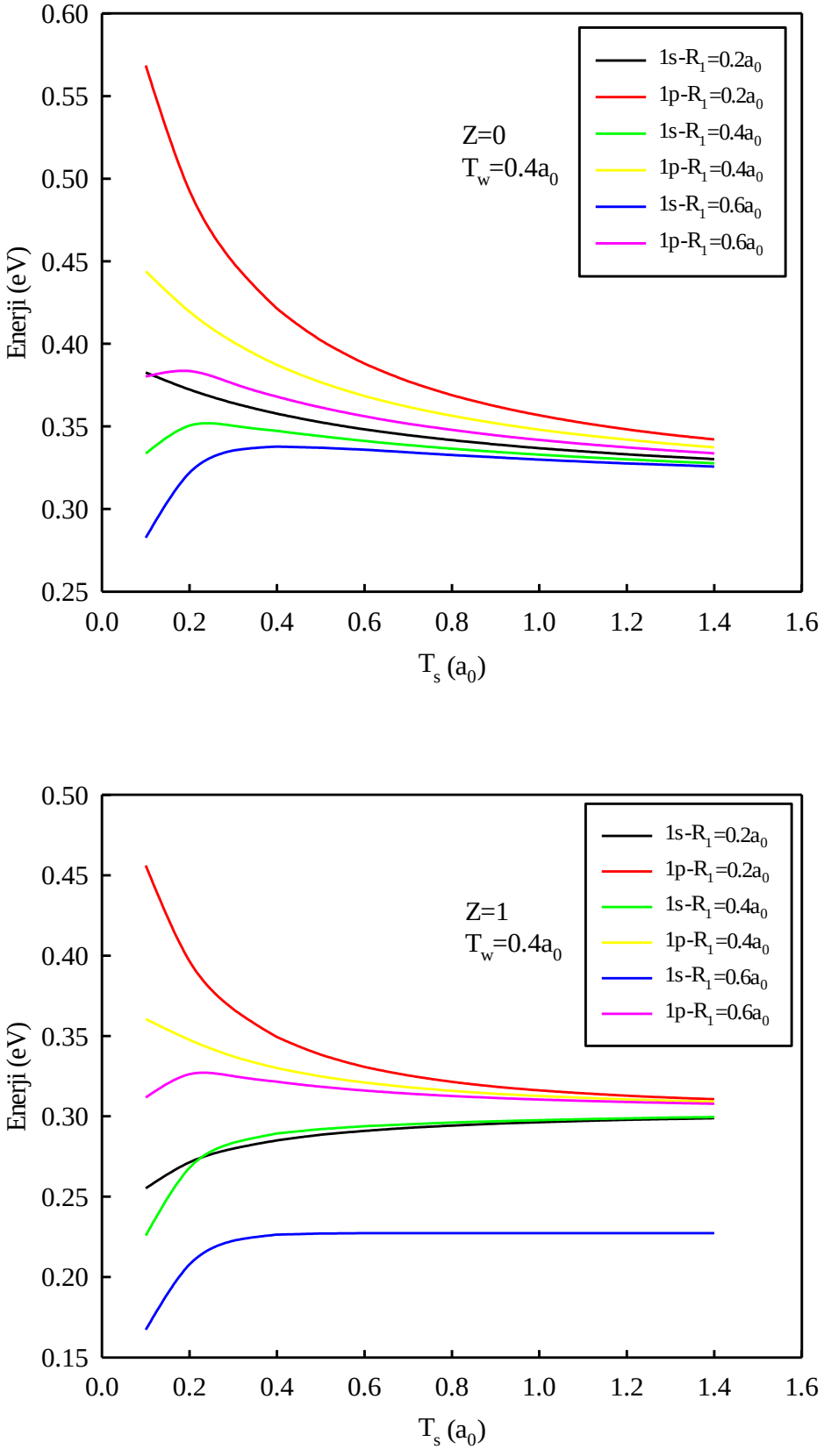
tünelleme yapabilmektedir. Yani, çekirdek bölgesindeki elektronlar, kuyu bölgesinin etkisini hissedebilmektedir. Bu yüzden her iki tek parçacık enerji seviyesi de, küçük bariyer kalınlıklarından etkilenmektedir. Fakat bariyer kalınlığı T_s'nin artmasıyla beraber, çekirdek ve kuyu bölgeleri arasında tünelleme olasılığının azalması ve dolayısıyla çekirdek bölgesindeki elektronların kuyu bölgesinin etkisini hissetmemesi sebebiyle, tek parçacık enerjileri sabit değerlere gitmekte ve artık, bariyer kalınlığının artması tek parçacık enerjilerini etkilememektedir.

İki elektronlu çekirdek/kabuk/kuyu/kabuk/ küresel bir kuantum noktası için, Z=0 ve Z=1durumunda, farklı çekirdek yarıçaplarında ve sabit kuyu genişliğinde $T_w=0.4a_0$, taban durum (1s) ve uyarılmış durum (1p) tek parçacık enerji seviyelerinin, bariyer kalınlığı T_s ile olan değişimleri, Şekil 5.9'da gösterilmiştir.

Şekil 5.9'da, Şekil 5.8'deki duruma benzer olarak, taban durum ve uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyelerin, bariyer kalınlığı T_s'nin küçük değerlerinde değişim gösterirken, bariyer kalınlığının artmasıyla birlikte sabit bir değere gittiği görülmektedir. Bu durumun nedeni, küçük bariyer kalınlıklarında, çekirdek ve kuyu bölgesi arasında elektronların tünelleme yapabilmesi ve bariyer kalınlığının artmasıyla birlikte, çekirdek ve kuyu bölgesi arasında tünelleme olasılığının azalmasıdır.

Şekil 5.8 ve Şekil 5.9 birlikte incelenecek olursa, üst ve alt panellerdeki grafiklerden, safsızlığın varlığında, hem taban hem de uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyesi, safsızlığın olmadığı durumdaki tek parçacık enerji değerlerinden daha küçük olduğu görülmektedir. Bu durum, safsızlık atomunun çekici Coulomb potansiyelinden kaynaklanmaktadır. Aynı zamanda Coulomb potansiyelin etkisi, taban durum tek parçacık enerji seviyesi üzerinde daha fazla olduğu için, Z=1 durumunda taban durum tek parçacık enerjisi ile uyarılmış durum tek parçacık enerjisi arasındaki farkın, Z=0 durumundaki farktan, daha büyük olduğu görülmektedir.

Şekil 5.8'de kuyu genişliği $T_w=0.2a_0$ ve Şekil 5.9'da ise kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ iken, taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji değerlerinin bariyer kalınlığı ile değişimini göstermektedir. Kuyu genişlikleri T_w' lardaki bu değişimin, hem taban hem de uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyelerine olan etkisini inceleyecek olursak, Şekil 5.9'daki taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji değerlerinin Şekil 5.8'deki enerji değerlerine göre daha küçük ve enerji seviyelerinin birbirlerine daha yakın olduğu görülmektedir. Bu durumun nedeni, kuyu genişliği T_w'nın artmasıyla birlikte, kuantum sınırlardırma etkisinin azalması ve elektronların artık kuyunun etkisini daha az hissetmesidir.

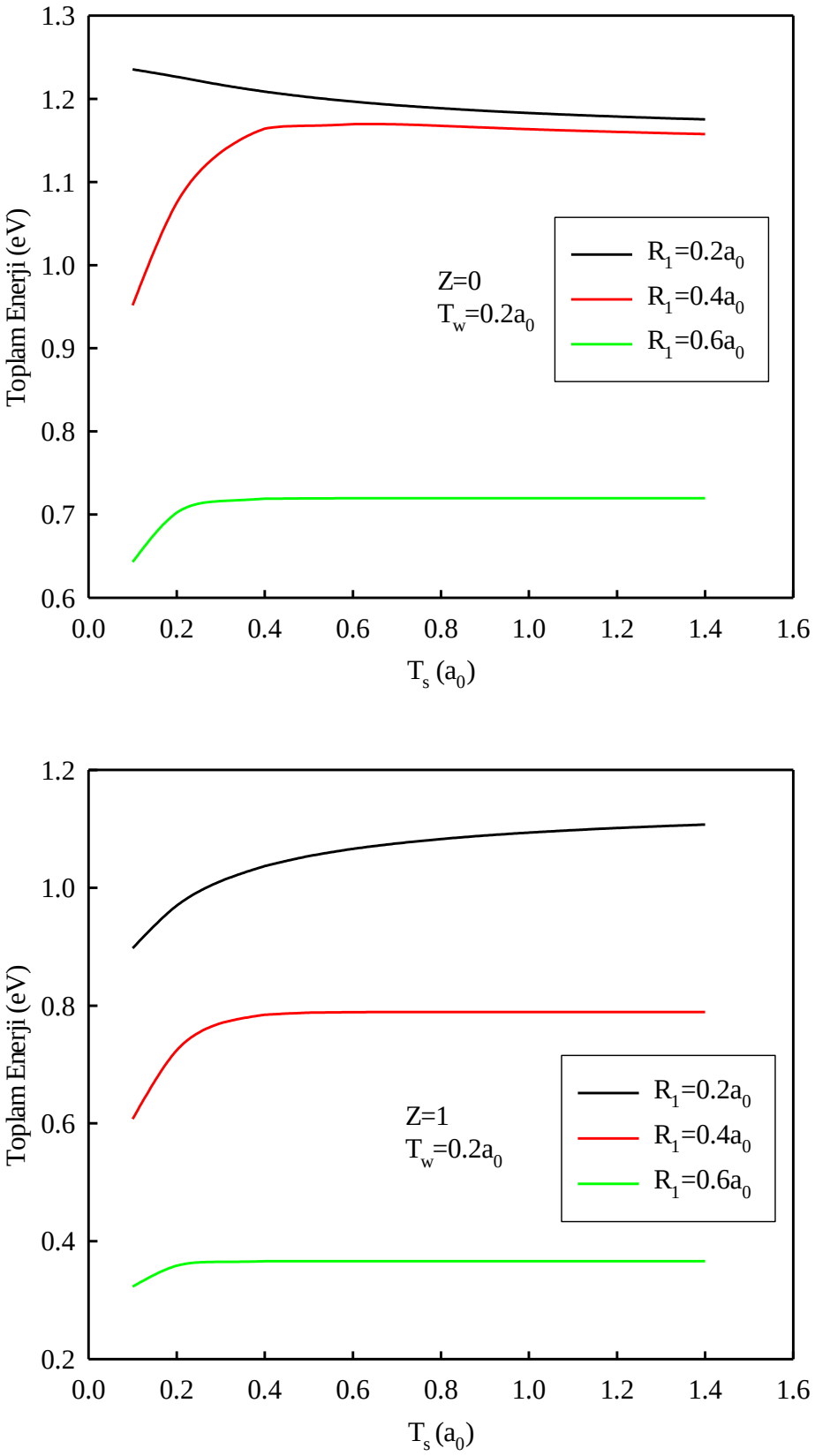


Şekil 5.9. Z=0 ve Z=1 durumu ve kuyu genişliği T_w=0.4a_0 için, bariyer kalınlığı Ts'nin bir fonksiyonu olarak taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyeleri

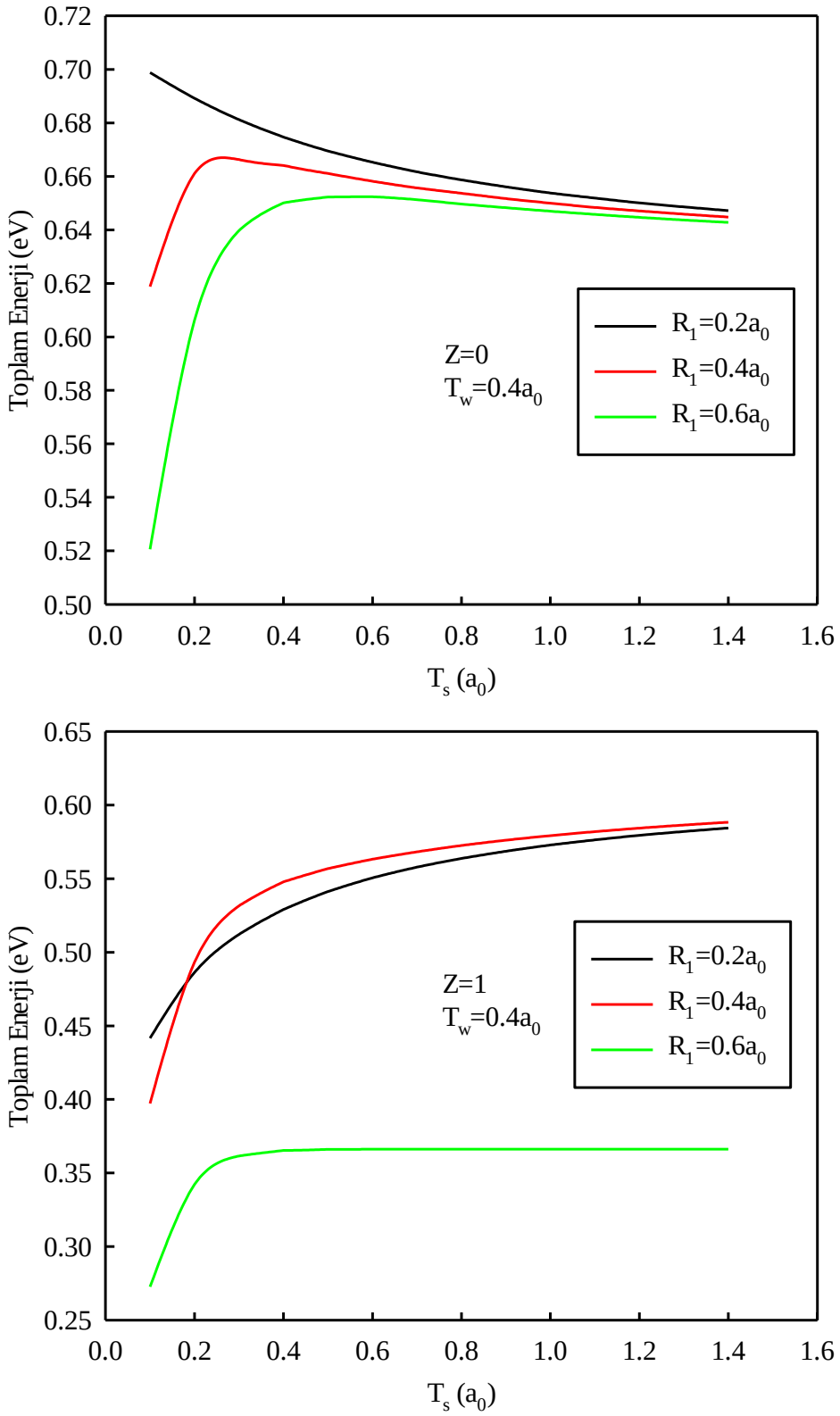
İki elektronlu ve çok kabuklu bir kuantum noktasında, farklı çekirdek yarıçapları, $R_1=0.2a_0$, $R_1=0.4a_0$, $R_1=0.6a_0$, ve sabit kuyu genişliği, $T_w=0.2a_0$ için, iki elektron ve negatif yüklü donor merkezinin toplam enerjilerinin, bariyer kalınlığı T_s ile değişimi Şekil 5.10'da gösterilmektedir. Grafikte Z=0 durumu iki elektron durumuna Z=1 durumu ise negatif yüklü donor merkezine karşılık gelmektedir.

Grafikten de görüldüğü gibi, kuyu genişliği $T_w=0.2a_0$ için, Z=0 durumunda, toplam enerjiler, çekirdek yarıçapı $R_1=0.2a_0$ için, artan bariyer kalınlığı T_s değerleri ile birlikte biraz azalma eğilimi göstermekte ve sabit bir değere gitmekte iken, $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ olduğunda, artan T_s değerleri ile birlikte artmakta ve belirli bir T_s değerinden sonra sabit bir değere gitmektedir. Z=1 durumunda ise toplam enerjiler, farklı çekirdek yarıçap, $R_1=0.2a_0$, $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.2a_0$, değerleri için, artan bariyer kalınlığı T_s değerleri ile birlikte biraz artma eğilimi göstermekte ve sabit bir değere gitmektedir. Bu durumun fiziksel nedeni şöyle açıklanabilir: Küçük çekirdek yarıçaplarında elektronlar arası Coulomb itmesi daha büyük olduğu için elektronun kuyu bölgesinde bulunma olasılığı daha fazladır ve elektronlar çekirdek ve kuyu bölgesi arasında tünelleme yapabilmektedir. Bu nedenle toplam enerjiler, küçük bariyer kalınlıklarından etkilenmektedir. Bariyer kalınlığının artmasıyla beraber, elektronlar çekirdek ve kuyu bölgesi arasında tünelleme yapamayacaklar ve elektronlar neredeyse tamamen çekirdek bölgesinde bulunacaklardır. Artık elektronlar kuyu bölgesinden etkilenmeyecekleri için bariyer kalınlığının artması toplam enerjiyi etkilememektedir.

Şekil 5.10'da üst panel ve alt paneldeki grafikleri incelediğimizde, safsızlığın olmadığı (Z=0) durumdaki çift elektronlu kuantum nokta yapının toplam enerjisinin, safsızlığın olduğu (Z=1) durumdaki negatif yüklü donor merkezi D^-'nin toplam enerjisinden daha büyük olduğu görülmektedir. Yani Z=1 durumdaki toplam enerji değeri, Z=0 durumdaki toplam enerji değerlerinden daha küçüktür. Bu durum, elektronlar arası itici Coulomb etkileşmesi, tek parçacık enerjisini arttırdığından dolayı, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinin bu enerjiyi biraz aşağı çekmesinden kaynaklanmaktadır.



Şekil 5.10. Farklı çekirdek yarıçapları ve sabit kuyu genişliği $T_w=0.2a_0$ için, bariyer kalınlığı T_s'nin bir fonksiyonu olarak çok tabakalı bir kuantum noktasının toplam enerjisi



Şekil 5.11. Farklı çekirdek yarıçapları ve sabit kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ için, bariyer kalınlığı T_s'nin bir fonksiyonu olarak çok tabakalı bir kuantum noktasının toplam enerjisi

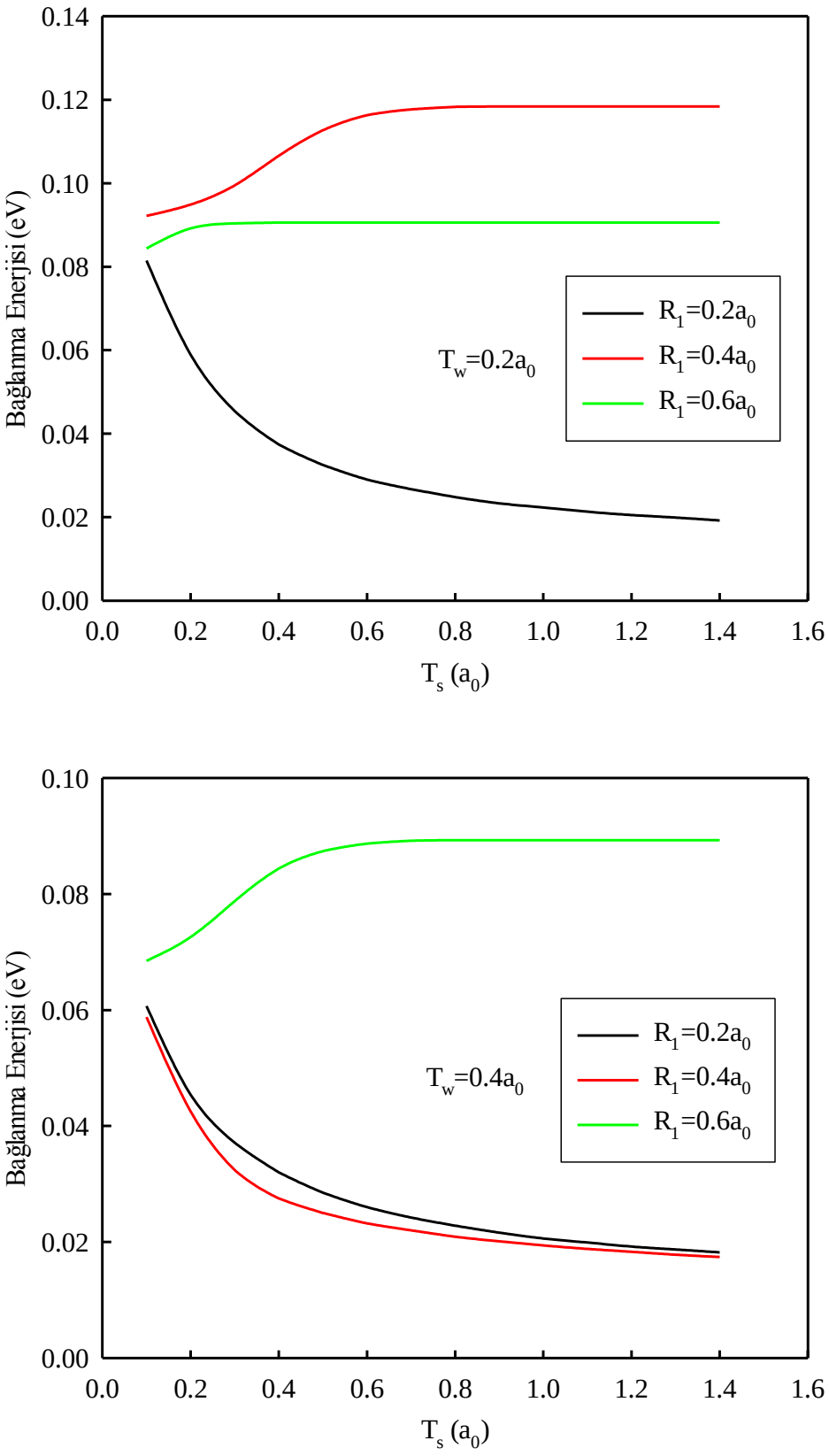
Farklı çekirdek yarıçapları ve sabit kuyu genişliği, $T_w=0.4a_0$ için, bariyer kalınlığı T_s'nin bir fonksiyonu olarak, çok kabuklu bir kuantum noktasında, iki elektron ve negatif yüklü donor merkezinin toplam enerjileri Şekil 5.11'de gösterilmektedir. Grafikten de görüldüğü gibi, kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ için, safsızlığın olmadığı durumda, çekirdek yarıçapı $R_1=0.2a_0$ için toplam enerji, artan bariyer kalınlığı ile birlikte azalma eğilimi göstermekte ve sabit bir değere gitmekte iken, $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ için artan T_s değerleri ile birlikte artmakta ve belirli bir bariyer genişliği değerinden sonra sabit bir değere gitmektedir. Safsızlığın olduğu durumunda ise farklı çekirdek yarıçap değerleri için, toplam enerjiler artan bariyer kalınlığı T_s değerleri ile birlikte artma eğilimi göstermekte ve sonra sabit bir değere gitmektedir.

Şekil 5.10'daki grafiklere benzer şekilde, Şekil 5.11'deki grafikler incelendiğinde, Z=1 durumundaki toplam enerji değerlerinin, Z=0 durumundaki toplam enerji değerlerinden daha küçük olduğu görülmektedir.

Kuyu genişliği $T_w=0.2a_0$ için, toplam enerjilerin T_s ile değişimi, Şekil 5.10'da ve $T_w=0.4a_0$, için toplam enerjilerin T_s ile değişimi Şekil 5.11'de gösterilmektedir. T_w' lardaki bu değişimin, toplam enerji seviyelerine olan etkisini inceleyecek olursak, Şekil 5.11'daki toplam enerji seviyelerinin Şekil 5.10'deki toplam enerji değerlerine göre daha küçük ve birbirlerine daha yakın olduğu görülmektedir. Bu durumun nedeni, kuyu genişliğinin artmasıyla birlikte, kuantum sınırlardırma etkisinin azalması ve elektronların artık kuyunun etkisini daha az hissetmesidir.

İki elektronlu ve çok tabakalı bir küresel kuantum noktasında, negatif yüklü donor merkezi (D^-)' nin bağlanma enerjisinin, iki farklı kuyu genişliği, $T_w=0.2a_0$ ve $T_w=0.4a_0$, ve farklı çekirdek yarıçapları, $R_1=0.2a_0$, $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ için, bariyer kalınlığı T_s ile değişimi Şekil 5.12'de verilmiştir.

Şekilden de görüldüğü gibi, kuyu genişliği $T_w=0.2a_0$ olduğunda, $R_1=0.2a_0$ için, bağlanma enerjisi artan kabuk kalınlığı ile azalırken, $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ değerleri için, bağlanma enerjisi artmaktadır. $T_w=0.4a_0$ olduğunda $R_1=0.2a_0$ ve $R_1=0.4a_0$ değerleri için, bağlanma enerjisi artan kabuk kalınlığı ile azalırken, $R_1=0.6a_0$ için, bağlanma enerjisi artmaktadır. Bu durumu şöyle açıklayabiliriz: $T_w=0.2a_0$ olduğunda, çekirdek yarıçapı $R_1=0.2a_0$ için, elektronların bulunma olasılığı, küçük bariyer kalınlıklarında, çekirdek veya kuyu bölgelerine tünelleme yapabilmektedir ve safsızlık etkisi elektronlar tarafından daha fazla hissedilmektedir. Böylece bağlanma enerjisi daha yüksek olmaktadır. Büyük bariyer kalınlığında ise, çekirdek bölgesine elektronların tünelleme olasılığı azaldığı için, bulunma olasılığı kuyu bölgesinde maksimum olmaktadır.



Şekil 5.12. Farklı kuyu genişlikleri ve çekirdek yarıçapları için, bariyer kalınlığı T_s'in bir fonksiyonu olarak çok tabakalı bir kuantum noktasının bağlanma enerjisi

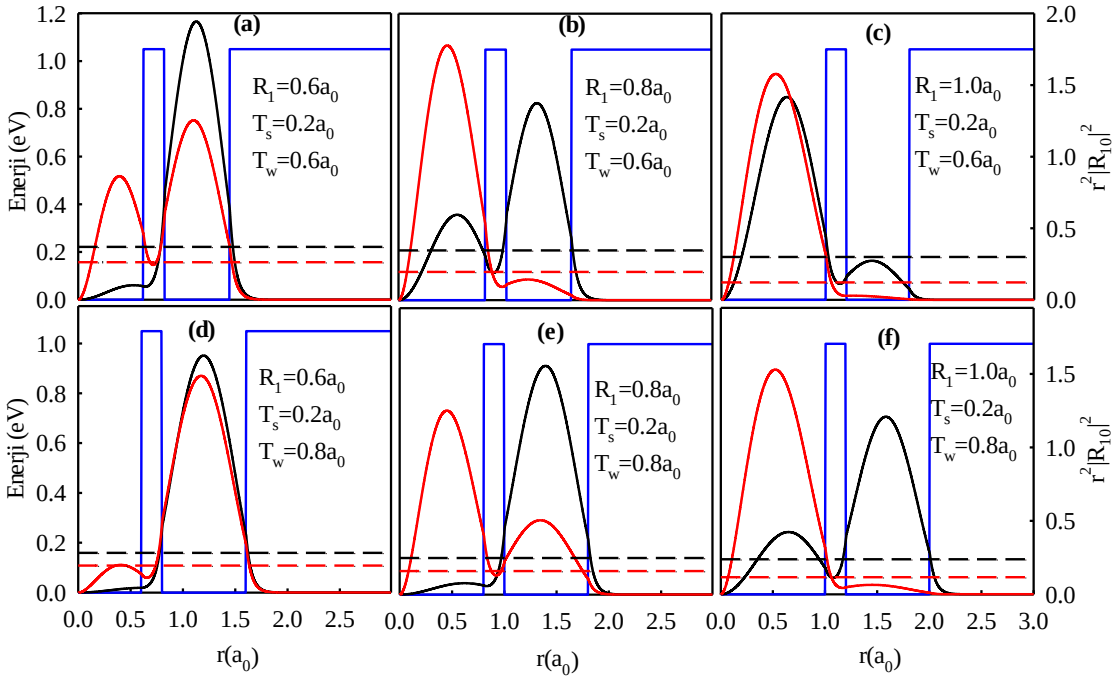
Bu yüzden, elektronlar üzerindeki safsızlığın etkisi azalmakta ve bu durum, bağlanma enerjisinin azalmasına neden olmaktadır. $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ olduğunda, kuyu tabakası, çekirdek yarıçapı ile karşılaştırıldığında, çok küçük olduğu için, elektronların bulunma olasılığı çekirdek bölgesinde maksimumdur. Bu nedenle elektronlar üzerindeki safsızlık etkisi daha büyük olacağı için bağlanma enerjisi daha büyüktür. Kabuk kalınlığı arttığında, elektronların kuyu bölgesine tünelleme olasılığı azalacağı için, elektronlar tamamen çekirdek bölgesinde sınırlandırılmıştır. Bu durumda, bağlanma enerjisi artan kabuk kalınlığı ile daha yukarı biraz büyümektedir. Kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ olduğunda farklı çekirdek yarıçapları içinde benzer durumlar geçerlidir.

5.4. Elektronik Özelliklerin Kuyu Genişliği (T_w) ile Değişimi

Bu kesimde, iki elektronlu çok tabakalı küresel bir yarıiletken kuantum noktasının, kuyu genişliği T_w'nın değiştirilmesiyle, yapının elektronik özelliklerinde ne gibi değişikliklerin meydana geldiği incelenmiştir. İki elektronlu ve çok tabakalı yarıiletken küresel bir kuantum noktası için, Z=0 ve Z=1 için, tabaka kalınlıklarına bağlı olarak, elektronların yoğunluk dağılımları Şekil 5.13'te verilmektedir. Üst ve alt paneller sırasıyla $T_w=0.6a_0$ ve $T_w=0.8a_0$'a karşılık gelmektedir. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla, Z=0 ve Z=1 durumuna karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

Grafikten de görüldüğü gibi, R_1 çekirdek yarıçapının T_w ile aynı değerlere sahip olması halinde, gerek safsızlığın olmadığı, gerekse safsızlığın olduğu durum için, elektronların bulunma olasılığı, kuyu bölgesinde daha fazla olmakta iken, çekirdek yarıçapı arttıkça, enerjinin minimum olma ilkesi gereği elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı artmaya başlamaktadır.

Şekilden de görüldüğü gibi, safsızlığın olduğu durumda, çekirdek yarıçapı $R_1=0.6a_0$ ve kuyu genişliği $T_w=0.6a_0$ olduğunda elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığından az da olsa söz edilebilirken, aynı çekirdek yarıçapı değerinde, $T_w=0.8a_0$ olduğunda elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı neredeyse sıfır olur. Elektronlar artık neredeyse tamamen kuyu bölgesindedirler. Benzer şekilde, Z=0 durumunda $R_1=0.8a_0$ ve $T_w=0.6a_0$ olduğunda, elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığından az da olsa bahsedilebilirken, şeklin alt panelinden de görülebileceği gibi, aynı çekirdek yarıçapında, $T_w=0.8a_0$ olduğunda, elektronların

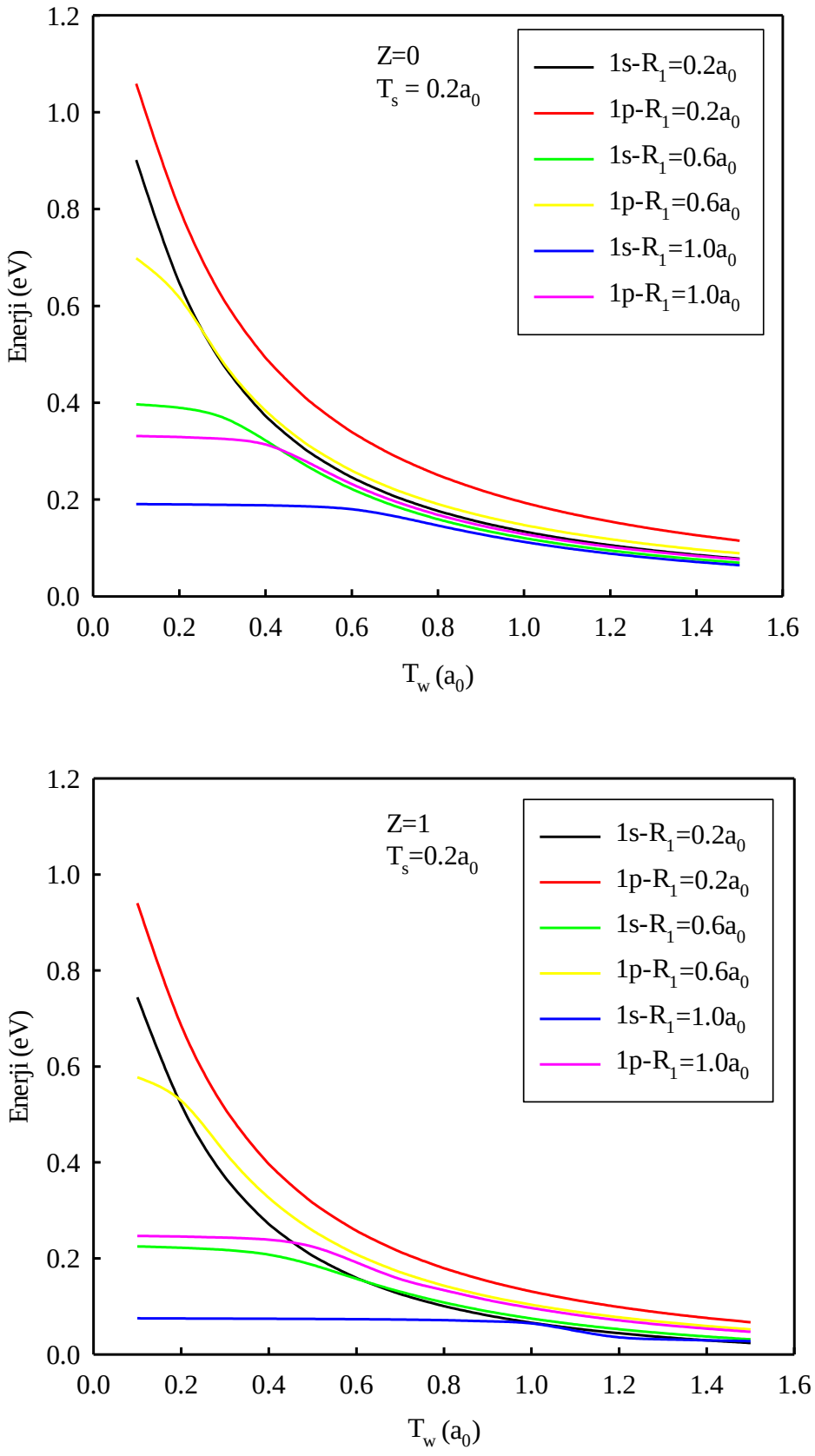


Şekil 5.13. Çeşitli çekirdek yarıçapları (R_1), farklı kuyu genişlikleri (T_w) ve bariyer genişliği $T_s = 0.2a_0$ için yarıçapın fonksiyonu olarak elektronların olasılık dağılımları. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla, safsızlığın olmadığı (Z=0) ve safsızlığın olduğu (Z=1) duruma karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı neredeyse yok olur ve artık elektronlar neredeyse kuyu bölgesinde lokalize olmuşlardır. Z=0 durumunda $R_1=1.0a_0$ ve $T_w=0.6a_0$ olduğunda, elektronların kuyu bölgesinde bulunma olasılığından az da olsa bahsedilebilirken, kuyu genişliği $T_w=0.8a_0$ olduğunda ise elektronların çekirdek bölgesinde bulunma olasılığından az da olsa bahsedilebilir. Elektronlar artık neredeyse çekirdek bölgesinde lokalize olmaktadırlar. Kuyu genişliğinin artmasıyla, kuantum sınırlandırma etkisi azalmakta ve bunun sonucunda enerji değerleri küçülmektedir. Yani, çok kabuklu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerinin üzerinde, kuyu genişliğinin büyük bir etkisinin olduğu görülmektedir.

Çok tabakalı yarıiletken küresel bir kuantum noktası için Z=0 ve Z=1 için, taban durum (1s) ve uyarılmış durum (1p) tek parçacık enerji değerlerinin, $R_1=0.2a_0$, $R_1=0.6a_0$ ve $R_1=1.0a_0$ gibi üç farklı çekirdek yarıçapında ve $T_s=0.2a_0$ bariyer genişliğinde, kuyu genişliği T_w'ya bağlı olarak değişimleri, Şekil 5.14'te verilmiştir.

Şekilden de görüldüğü gibi, çekirdek yarıçapının $R_1=0.2a_0$ olduğu bir yapıda, gerek safsızlığın olmadığı, gerekse safsızlığın olduğu durumda, taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerjilerindeki değişim, artan kuyu genişliği T_w değeriyle azalmaktadır.



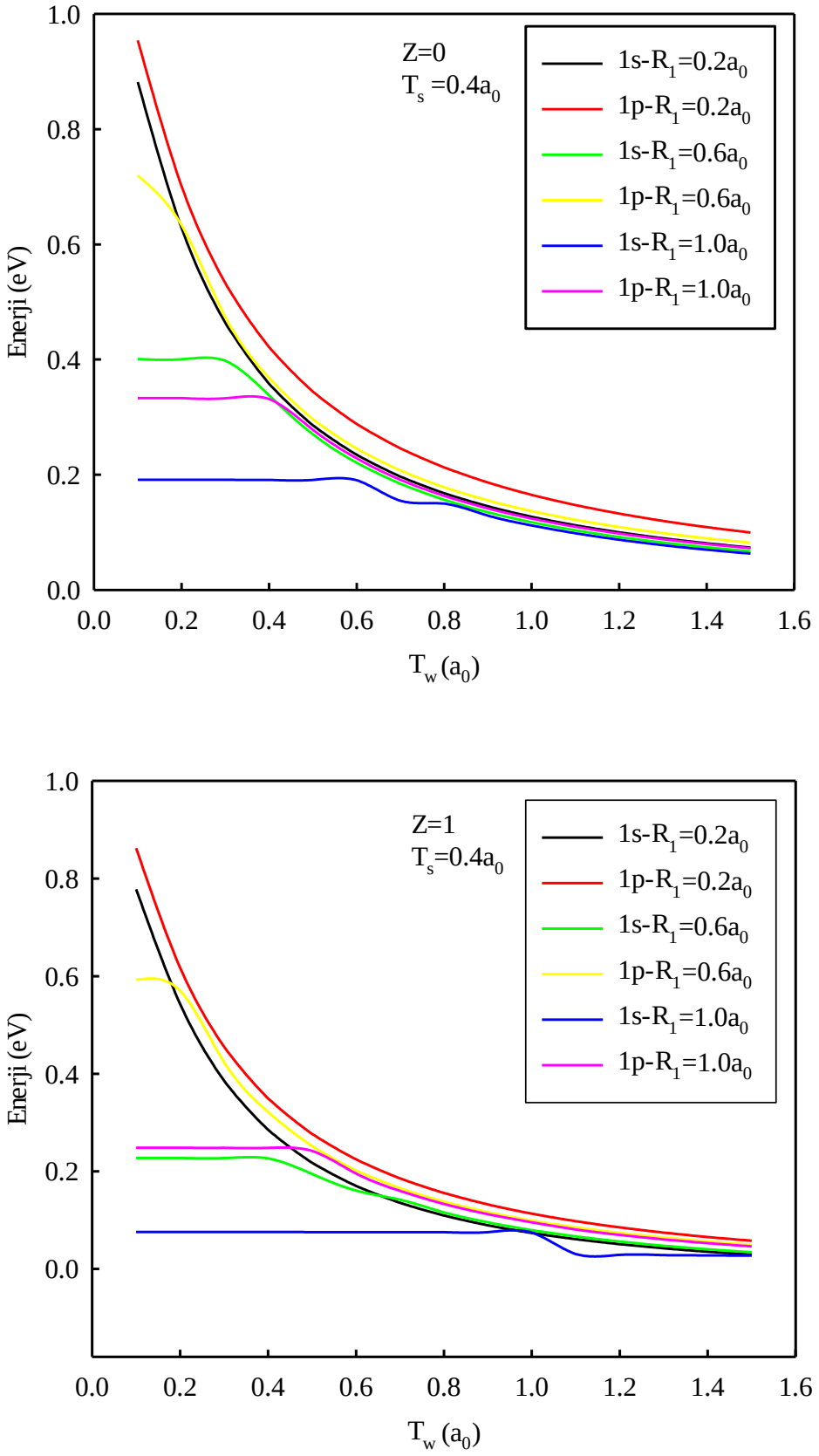
Şekil 5.14. Z=0 ve Z=1 durumu ve bariyer kalınlığı T_s=0.2a_0 için, kuyu genişliği Tw'nın bir fonksiyonu olarak taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyeleri

Aynı zamanda taban ve uyarılmış durum enerji seviyeleri arasındaki fark da, artan T_w değerleriyle oldukça küçülmektedir. Çünkü çekirdek bölgesi dar olduğundan, hem safsızlığın olmadığı durumda hem de safsızlığın olduğu durumda elektronların olasılık yoğunlukları, kuyu bölgesinde lokalize olmaktadır. Bu durum Şekil 5.13'te açık bir şekilde görülmektedir. Çekirdek yarıçapının $R_1=0.6a_0$ olduğunda, Z=0 ve Z=1 durumları için uyarılmış durum tek parçacık enerjileri, artan kuyu genişliği ile azalmakta iken, taban durum tek parçacık enerjileri ise belli bir kuyu genişliğine kadar sabit kalmakta ve bu kuyu genişliğinden sonra azalmaktadır. $R_1=1.0a_0$ olduğunda, taban durum tek parçacık enerjisi ve uyarılmış durum tek parçacık enerjisi gerek safsızlığın olmadığı, gerekse safsızlığın olduğu durumda belli bir kuyu genişliğine kadar sabit kalmakta ve bu değerlerden itibaren ise, artan kuyu genişliğinden etkilenerek azalma eğilimi sergilemektedir. Dolayısıyla taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerjileri arasındaki fark, hızlı bir şekilde azalmaktadır. Yine şekilden de görüldüğü gibi, farklı çekirdek yarıçaplarında Z=0 ve Z=1 durumu için kuyu genişliği T_w'nın artmasıyla beraber, kuantum sınırlandırma etkisini azalacağından, taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerjileri sabit bir değere gitmekte ve artık, kuyu genişliğinin artması tek parçacık enerjilerini etkilememektedir.

İki elektronlu çekirdek/kabuk/kuyu/kabuk/ küresel bir kuantum noktası için, Z=0 ve Z=1durumunda, farklı çekirdek yarıçaplarında ve sabit bariyer genişliğinde $T_s=0.4a_0$, taban durum (1s) ve uyarılmış durum (1p) tek parçacık enerji seviyelerinin, kuyu genişliği T_w ile olan değişimleri, Şekil 5.15'te gösterilmiştir.

Şekil 5.15'te, Şekil 5.14'teki duruma benzer olarak, taban durum ve uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyeleri, $R_1=0.2a_0$ olduğunda, gerek safsızlığın olmadığı, gerekse safsızlığın olduğu durumda, taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerjilerindeki değişim, artan kuyu genişliği T_w değeriyle azalmaktadır. $R_1=0.6a_0$ olduğunda, Z=0 ve Z=1 durumları için, uyarılmış durum tek parçacık enerjileri artan kuyu genişliği ile azalmakta iken, taban durum tek parçacık enerjileri ise belli bir kuyu genişliğine kadar sabit kalmakta ve bu kuyu genişliğinden sonra azalmaktadır. $R_1=1.0a_0$ olduğunda ise, tek parçacık enerjileri, belli bir kuyu genişliğine kadar sabit kalmakta ve bu kuyu genişliğinden sonra, azalma eğilimi sergilemektedir.

Şekil 5.14 ve Şekil 5.15 birlikte incelenecek olursa, safsızlığın varlığında, hem taban hem de uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyesi, safsızlığın olmadığı durumdaki tek parçacık enerji değerlerinden daha küçük olduğu görülmektedir. Bu durum, safsızlık atomunun çekici Coulomb potansiyelinden kaynaklanmaktadır.



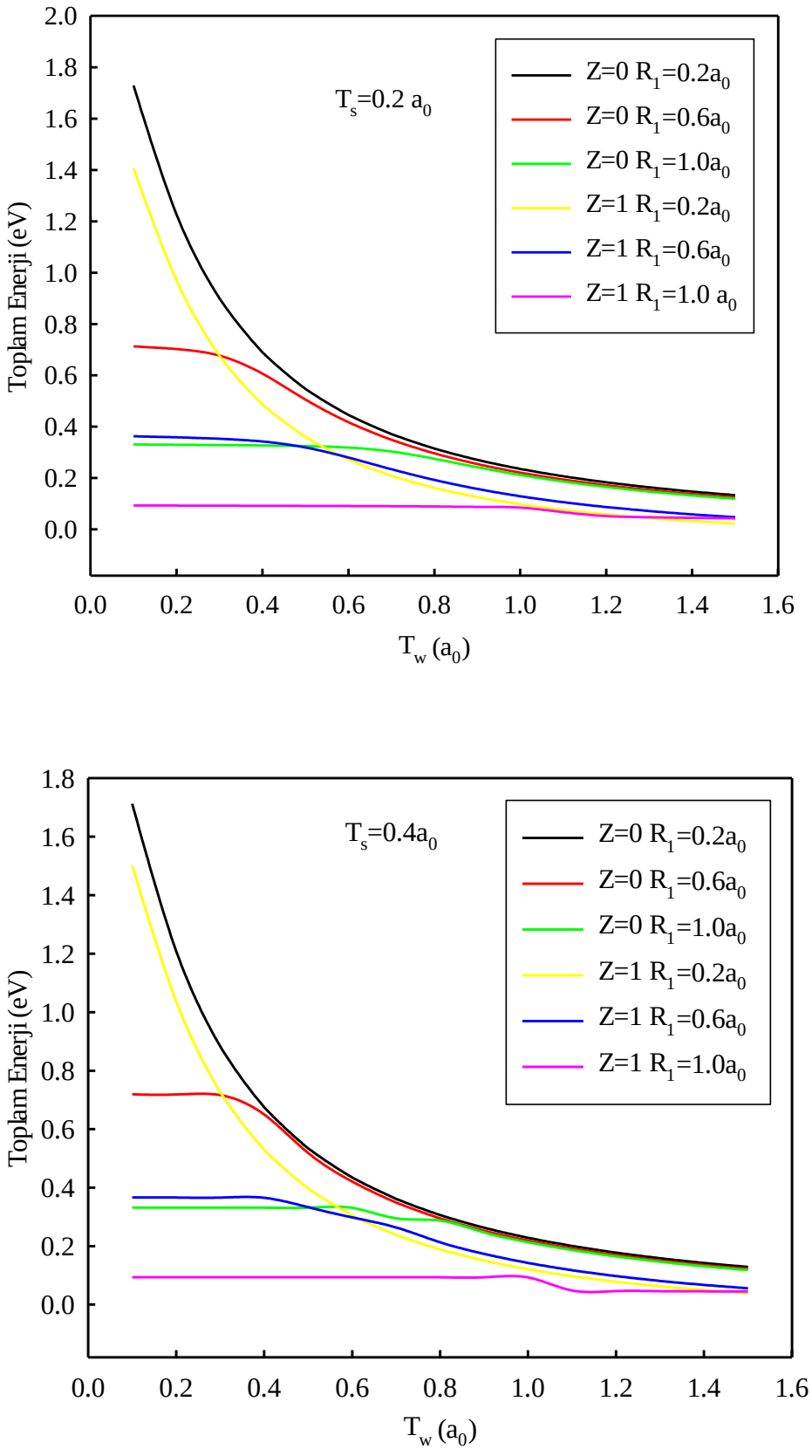
Şekil 5.15. Z=0 ve Z=1 durumu ve bariyer kalınlığı T_s=0.4a_0 için, kuyu genişliği Tw'nın bir fonksiyonu olarak taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyeleri

Şekil 5.14 ve Şekil 5.15'teki, bariyer kalınlıkları T_s' lerdeki değişimin, hem taban hem de uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyelerine olan etkisini inceleyecek olursak, Şekil 5.14'te, $R_1=1.0a_0$ için, taban durum tek parçacık enerji değerlerinde bir çöküş gözlenmezken, Şekil 5.15'te taban durum tek parçacık enerji değerlerinde bir çöküş gözlenmektedir. Bu durum, $R_1=1.0a_0$'da taban durum tek parçacık enerji seviyelerinin, çekirdek ve kuyu bölgeleri arasındaki kabuk kalınlıklarından etkilendiğini göstermektedir.

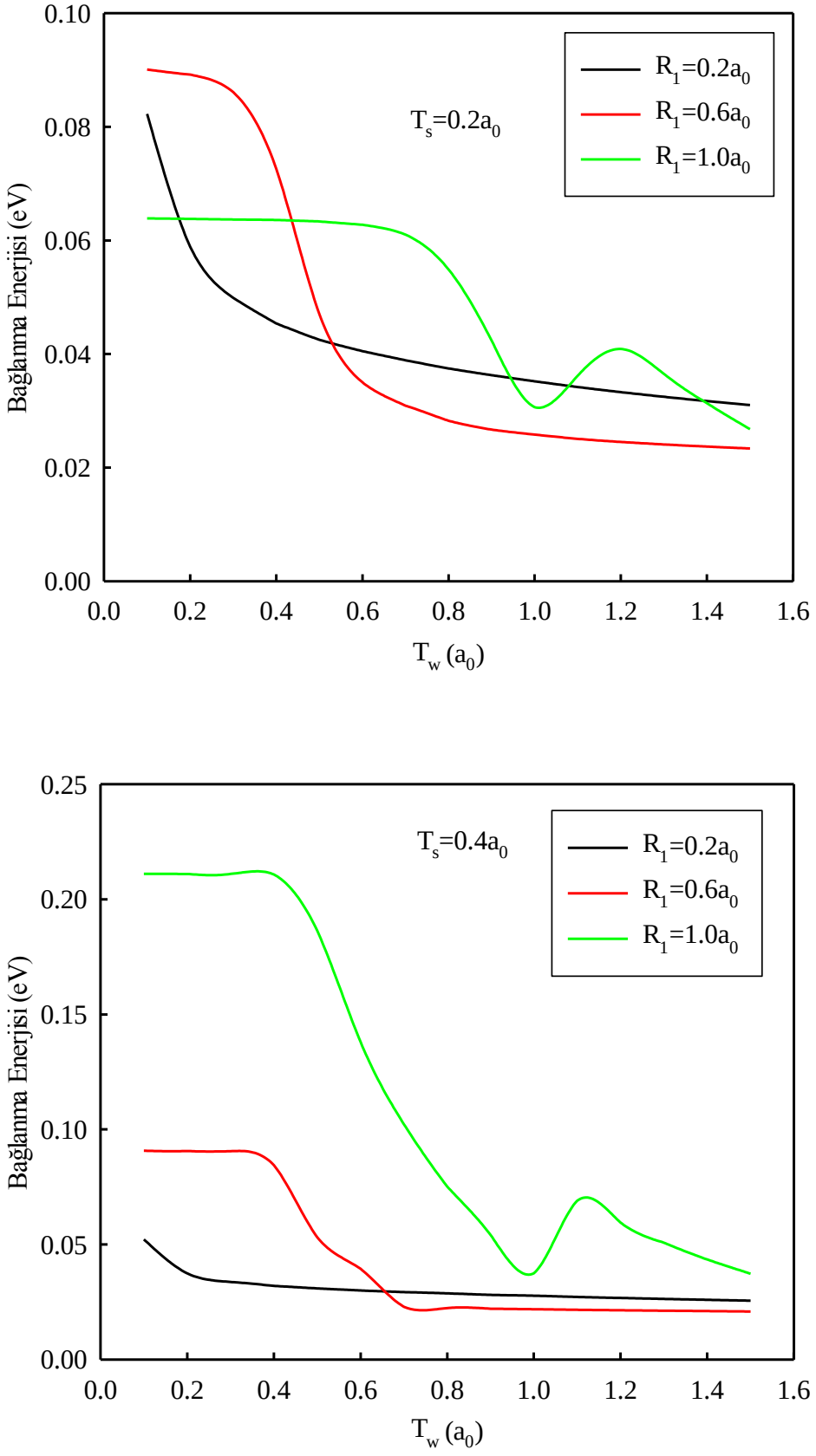
Çok kabuklu bir kuantum nokta heteroyapıda, farklı çekirdek yarıçapları, $R_1=0.2a_0$, $R_1=0.6a_0$, $R_1=1.0a_0$, ve farklı kabuk kalınlıkları, $T_s=0.2a_0$, $T_s=0.4a_0$, için, iki elektron ve negatif yüklü donor merkezinin toplam enerjilerinin, kuyu genişliği T_w'ile değişimi Şekil 5.16'da gösterilmektedir.

Şekil 5.16'dan görüldüğü gibi, hem Z=0 hem de Z=1 durumunda, $R_1=0.2a_0$ için, hem üst paneldeki bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ için hem de alt paneldeki bariyer genişliği $T_s=0.4a_0$ için, toplam enerjiler artan kuyu genişliği T_w değerleri ile birlikte azalma eğilimi göstermektedir. $R_1=0.6a_0$ ve $R_1=1.0a_0$ olduğunda ise, toplam enerjiler, hem $T_s=0.2a_0$ hem de $T_s=0.4a_0$ için, belli bir kuyu genişliğine kadar sabit kalmakta, bu değerlerden itibaren artan kuyu genişliği ile birlikte azalma eğilimi göstermektedir ve büyük kuyu genişliklerinde sabit bir değere gitmektedir. Bu durumun nedeni, kuyu genişliğinin artmasıyla, kuantum sınırlandırma etkisinin azalması ve bunun sonucunda da toplam enerji seviyelerinin birbirine yaklaşmasıdır. Kuyu genişliği daha da arttırılırsa, elektronlar kuyunun etkisini hissetmemekte ve dolayısıyla kuyu bölgesinin, toplam enerjiler üzerine etkisi kaybolmaktadır.

Şekil 5.16'da farklı bariyer Z=1 durumundaki toplam enerji değerlerinin, Z=0 durumundaki enerji değerlerine göre daha küçük olduğu görülmektedir. Z=0 ve Z=1 durumunda, bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$ için, $R_1=1.0a_0$ için, toplam enerji değerlerinde bir çöküş gözlenmezken, $T_s=0.4a_0$ olduğunda toplam enerji değerlerinde bir çöküş gözlenmektedir. Bu durum, $R_1=1.0a_0$'da toplam enerji seviyelerinin, bariyer kalınlıklarından etkilendiğini göstermektedir.



Şekil 5.16. Farklı çekirdek yarıçapları ve kabuk kalınlıkları için, kuyu genişliği T_w'nın bir fonksiyonu olarak çok tabakalı bir kuantum noktasının toplam enerjisi



Şekil 5.17. Farklı bariyer kalınlıkları ve çekirdek yarıçapları için, kuyu genişliği T_w'nın bir fonksiyonu olarak negatif yüklü donor merkezi (D^-) nin bağlanma enerjisi

Şekil 5.17'de farklı kabuk kalınlıkları ve çekirdek yarıçapları için, kuyu genişliği (T_w) nin bir fonksiyonu olarak, negatif yüklü donor merkezi (D^-) nin bağlanma enerjilerini göstermektedir. Şekilde üst panel $T_s=0.2a_0$ için alt panel $T_s=0.4_0$ içindir. Üst ve alt paneller birbirleriyle karşılaştırıldıklarında, bağlanma enerjilerinin genel eğilimleri, aynı parametreler için benzer olmasına rağmen, üst panelde bağlanma enerjilerinin $R_1=0.2a_0$ dışında daha düşük değerlere sahip olduğu görülmektedir. Çünkü elektronlar, çekirdek ve kuyu bölgeleri arasında kolaylıkla tünelleyebilmekte ve aynı zamanda elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesi, bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ olduğunda, daha baskın olmaktadır.

Çekirdek genişliği $R_1=0.2a_0$ olduğunda, elektronlar kuyu bölgesinde lokalize olduğu için ve büyük kuyu genişliklerinde, safsızlığın etkisi azaldığı için, bağlanma enerjileri, artan kuyu genişliği ile azalmaktadır. $R_1=0.6a_0$ olduğunda, belli kuyu genişliklerine kadar sabit kalmakta ve bu belli değerlerden sonra kuyu genişliğinin artması ile azalma eğilimi göstermektedir. Bu durumu şöyle açıklayabiliriz: Küçük kuyu genişliklerinde elektronlar, çekirdek bölgesinde lokalize olmaktadır ve belli bir kuyu genişliğine kadar elektronlar, kuyu bölgesinin etkisini, yeterince hissedememektedir. Bu belli kuyu genişliğinden sonra, kuyu bölgesine tünelleyen elektronlar, daha az etkilenmektedir. $R_1=1.0a_0$ olduğunda ise benzer değişimler gözlenmektedir. Bu çekirdek yarıçapında, önceki çekirdek çekirdek yarıçaplarından farklı olarak, kuyu genişliği $T_w=1.2a_0$ civarında bir çıkıntı vermektedir.

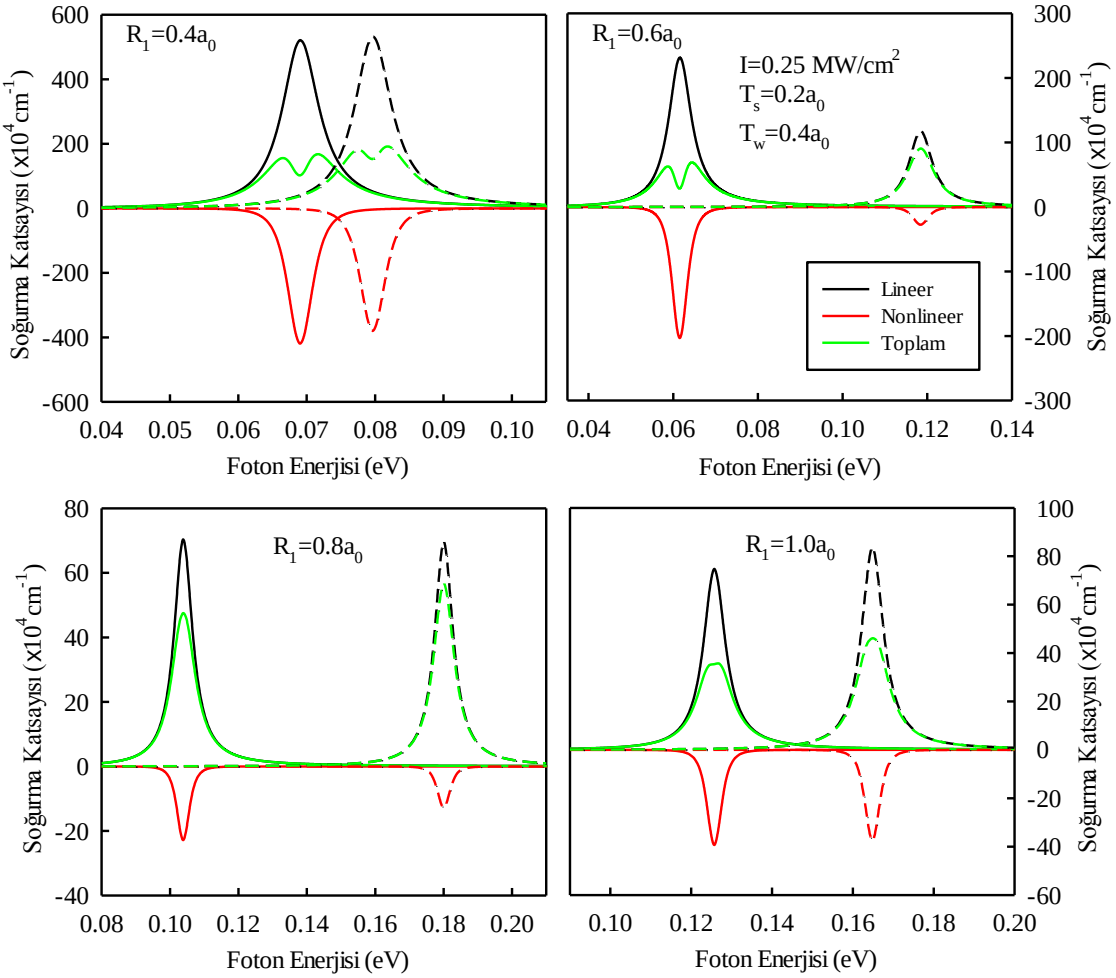
5.5. Optik Özelliklerin Tabaka Kalınlıklarına Bağlı Olarak İncelenmesi

Buraya kadar olan kesimde, iki elektronlu ve çok tabakalı küresel bir yarıiletken kuantum nokta yapısının, enerji seviyeleri, olasılık yoğunlukları ve safsızlık bağlanma enerjileri gibi elektronik özelliklerinin, çekirdek yarıçapı, bariyer kalınlığı ve kuyu genişliği gibi tabaka kalınlıklarına olan bağlılıkları incelendi. Bu kesimde ise ele alınan kuantum nokta yapıya ait osilatör şiddetleri ve lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayıları gibi optik özelliklerin tabaka kalınlıklarına olan bağlılıkları incelenecektir.

Şekil 5.18'de, dört farklı çekirdek yarıçapında, safsızlığın olmadığı ve safsızlığın olduğu durum için lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının, gelen ışığın enerjisi ile değişimi görülmektedir. Şekil 5.18'de bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$, kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ ve gelen ışığın şiddeti I=0.25 MW/cm^2 dir.

Siyah, kırmızı ve yeşil çizgiler sırasıyla, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarına karşılık gelmektedir. Şekil 5.18'deki herbir grafikte, sol grup (düz çizgi), Z=0 ve sağ grup (kesikli çizgi), Z=1 için soğurma katsayılarının, foton enerjisi ile değişimini göstermektedir.

Bilindiği gibi elektronun, ışıkla uyarılması sonucunda elektron, gelen fotonun enerjisini soğurarak daha yüksek enerjili seviyelere geçmektedir. Eğer gelen ışığın enerjisi, optik geçişin gerçekleştiği seviyeler arasındaki enerji farkına eşit olursa (rezonans durumu), bu enerji değeri soğurma eğrisinde maksimum noktaya karşılık gelmektedir.



Şekil 5.18. Dört farklı çekirdek yarıçapında, Z=0 ve Z=1durumu için, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının gelen foton enerjisi ile değişimi. Burada bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$, kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ ve gelen ışığın şiddeti I=0.25 MW/cm^2 dir. Sol grup (düz çizgi), Z=0 ve sağ grup (kesikli çizgi), Z=1 için dir.

Şekil 5.18'den görüldüğü gibi lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayıları, artan yarıçap değerleriyle, genel olarak bir azalma eğilimi sergilemektedir. Üçüncü derece soğurma katsayısı, negatif işaretli olduğu için, Denk. 3.61' e göre toplam soğurma katsayısının azaldığı grafikten görülmektedir. Şekil 5.18'e baktığımızda, Z=0 iken soğurma katsayılarının maksimum değerleri, daha küçük foton enerjilerine karşılık gelmekteyken, Z=1 için bu değerler daha büyük foton enerjilerinde olmaktadır. Bunun sebebi, elektronik özelliklerde de gördüğümüz gibi, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinden kaynaklanmaktadır. Yani safsızlık, 1s seviyesini daha aşağı çekmekte ve böylece 1p seviyesi ile 1s seviyesi arasındaki enerji farkını artırmaktadır. Bu durum, Şekil 5.19'da net bir şekilde görülmektedir.

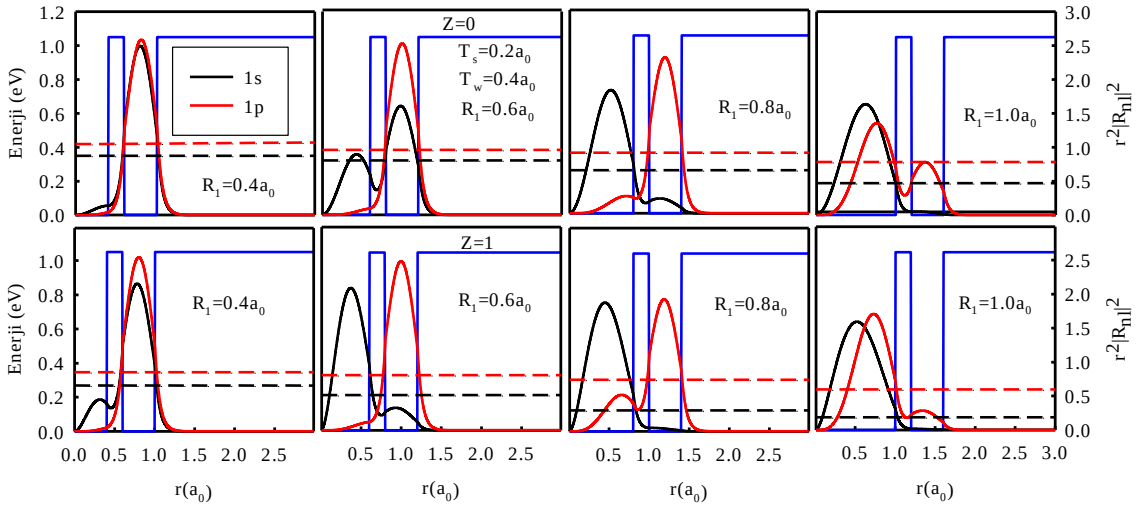
Şekil 5.19'da safsızlığın olmadığı ve olduğu durum için, dört farklı çekirdek yarıçapında, taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarının radyal doğrultuda değişimi gösterilmektedir. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarına karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

Grafikten de görüldüğü gibi, enerji ile yarıçap arasında $E\propto 1/R^2$ şeklinde bir ilişki olduğu için hem taban durum tek parçacık enerjileri hem de uyarılmış durum tek parçacık enerjileri artan R_1 değerleri ile birlikte azalma eğilimi sergilemektedir. Şekil 5.19'dan da anlaşılacağı gibi, Z=1 durumu için hem taban, hem de uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyesi, Z=0 durumdaki tek parçacık enerji değerlerinden daha küçüktür. Bu durum, safsızlık atomunun çekici Coulomb potansiyelinden kaynaklanmaktadır. Aynı zamanda bu potansiyelin taban durum tek parçacık enerji seviyesine olan etkisi daha fazla olduğundan dolayı, Z=1 durumunda taban durum tek parçacık enerjisi ile uyarılmış durum tek parçacık enerjisi arasındaki farkın, Z=0 durumundaki farktan, daha büyük olduğu görülmektedir.

$R_1=0.4a_0$ durumunda, lineer soğurma katsayısı, Z=0 ve Z=1 durumu için hemen hemen aynı değerde iken, lineer olmayan soğurma katsayısının, Z=0 durumundaki değeri, Z=1 durumundaki değerinden büyük olduğu, Şekil 5.18'de görülmektedir. Bunun nedeni, Şekil 5.19'da üst panelden de görebileceğimiz gibi Z=0 durumunda hem taban hem de uyarılmış durum olasılık dağılımlarının kuyu bölgesinde lokalize olmasıyla açıklayabiliriz. Bunun sonucunda, dalga fonksiyonunun örtüşmesi, yani sırasıyla Denk.(3.59) ve Denk.(3.60) ile verilen, lineer ve lineer olmayan soğurma katsayılarındaki dipol matris elemanı, büyük değer almaktadır. Buna bağlı olarak soğurma katsayısı büyük olmaktadır. Bu durumda optik geçiş, çekirdek bölgesinde

değil, kuyu bölgesinde gerçekleşmektedir. Diğer taraftan, Şekil 5.19'da alt panelden de görebileceğimiz gibi, safsızlığın olduğu durumda, uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu hala kuyu bölgesinde lokalize iken, taban durum dalga fonksiyonu, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinden dolayı, az da olsa çekirdek bölgesinde lokalize olmaktadır. Böylece, örtüşme ve dolayısıyla dipol matris elemanı, Z=0 durumuna göre az da olsa küçük olmaktadır. Bu da, lineer olmayan soğurma katsayısının, safsızlığın varlığında daha küçük değere sahip olmasına neden olmaktadır.

$R_1=0.6a_0$ durumunda, hem lineer soğurma katsayısının hem de lineer olmayan soğurma katsayısının pik değeri, safsızlığın olmadığı durumda, safsızlığın olduğu durumundaki değerinden büyük olduğu, Şekil 5.18'de görülmektedir. Bu durumun nedeni, Şekil 5.19'dan net bir şekilde görülmektedir. $R_1=0.6a_0$ için, Şekil 5.19'da Z=0'da üst panelden de görüldüğü gibi, taban durum olasılık yoğunluğu küçük bir oranda çekirdek bölgesinde ve büyük bir oranda kuyu bölgesinde lokalize iken, uyarılmış durum olasılık yoğunluğu tamamen kuyu bölgesinde lokalize olmaktadır. Bu sebeple, dalga fonksiyonlarının örtüşmesi dolayısıyla dipol matris elemanı büyük olmaktadır. Denk. (3.59) ile verilen, lineer soğurma katsayısı dipol matris elemanının mutlak karesi ile, Denk.(3.60) ile verilen, lineer olmayan soğurma katsayısı ise dipol matris elemanının mutlak dördüncü kuvveti ile orantılı olduğu için, soğurma katsayısının pik değeri büyük olmaktadır.



Şekil 5.19. Dört farklı çekirdek yarıçapında, Z=0 (üst panel) ve Z=1 (alt panel) durumu için taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarının çekirdek yarıçapı R_1 ile değişimi. Bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$, kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ dır.

Z=1'de, Şekil 5.19'un alt panelinden görüldüğü gibi, taban durum olasılık yoğunluğu büyük bir oranda çekirdek bölgesinde lokalize iken, uyarılmış durum olasılık yoğunluğu kuyu bölgesinde lokalize olmaktadır. Bu sebeple, dalga fonksiyonunun örtüşmesi, yani dipol matris elemanı küçülmekte ve böylece soğurma katsayısı azalmaktadır.

$R_1=0.8a_0$ durumunda, lineer soğurma katsayısı, safsızlığın olmadığı ve olduğu durum için hemen hemen aynı değerde iken, lineer olmayan soğurma katsayısının, safsızlığın olduğu durumundaki değerinin, safsızlığın olmadığı durumundaki değerinden küçük olduğu, Şekil 5.18'de görülmektedir. $R_1=0.8a_0$ durumunda, safsızlığın olmadığı durumda, Şekil 5.19'da görüldüğü gibi, taban durum olasılık dağılımı büyük bir oranda çekirdek bölgesinde, uyarılmış durum olasılık dağılımı ise büyük bir çoğunlukla kuyu bölgesinde lokalize olmaktadır. Safsızlığın olduğu durumda ise taban durum olasılık dağılımı tamamen çekirdek bölgesinde, uyarılmış durum olasılık dağılımı ise hala büyük bir çoğunlukla kuyu bölgesinde lokalize olmaktadır. Bu nedenle, Z=0'da dalga fonksiyonunun örtüşmesi, yani dipol matris elemanı büyümekte ve böylece soğurma katsayısı artmaktadır.

$R_1=1.0a_0$ durumunda, lineer olmayan soğurma katsayısı, Z=0 ve Z=1 durumu için hemen hemen aynı değerde iken, lineer soğurma katsayısının, Z=0 durumundaki değeri, Z=1 durumundaki değerinden küçük olmaktadır. Bu durum Şekil 5.18'de görülmektedir. Şekil 5.19'da, hem üst panelde Z=0 durumunda hem de alt panelde Z=1 durumunda, taban durum olasılık yoğunluklukları çekirdek bölgesinde lokalize iken, uyarılmış durum olasılık yoğunluklarının, Z=1'deki çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı Z=0'daki çekirdek bölgesinde bulunma olasılığından daha fazladır. Bu nedenle, Z=1'de, dalga fonksiyonunun örtüşmesi yani dipol matris elemanı büyük değer almakta ve soğurma katsayısı büyük değer almaktadır. Bu durumda optik geçiş, kuyu bölgesinde değil, çekirdek bölgesinde gerçekleşmektedir.

$R_1=1.0a_0$ durumundaki lineer ve lineer olmayan soğurma katsayılarının pik değerleri, $R_1=0.8a_0$ durumundaki pik değerlerinden daha büyüktür. Bunun sebebini, Şekil 5.19'u inceleyerek açıklayabiliriz. Şekil 5.19'da, $R_1=0.8a_0$ durumunda, safsızlığın olduğu ve olmadığı durum için, taban durum olasılık dağılımları kuyu bölgesinde lokalize iken uyarılmış durum olasılık dağılımları, çekirdek bölgesinde lokalize olmaktadır. $R_1=1.0a_0$ durumunda ise, safsızlığın olduğu ve olmadığı durum için, taban ve uyarılmış durum olasılık dağılımları, büyük oranda çekirdek bölgesinde lokalize olmaktadır. Dolayısıyla, $R_1=1.0a_0$ için, dalga fonksiyonlarının örtüşmesi büyük olmakta

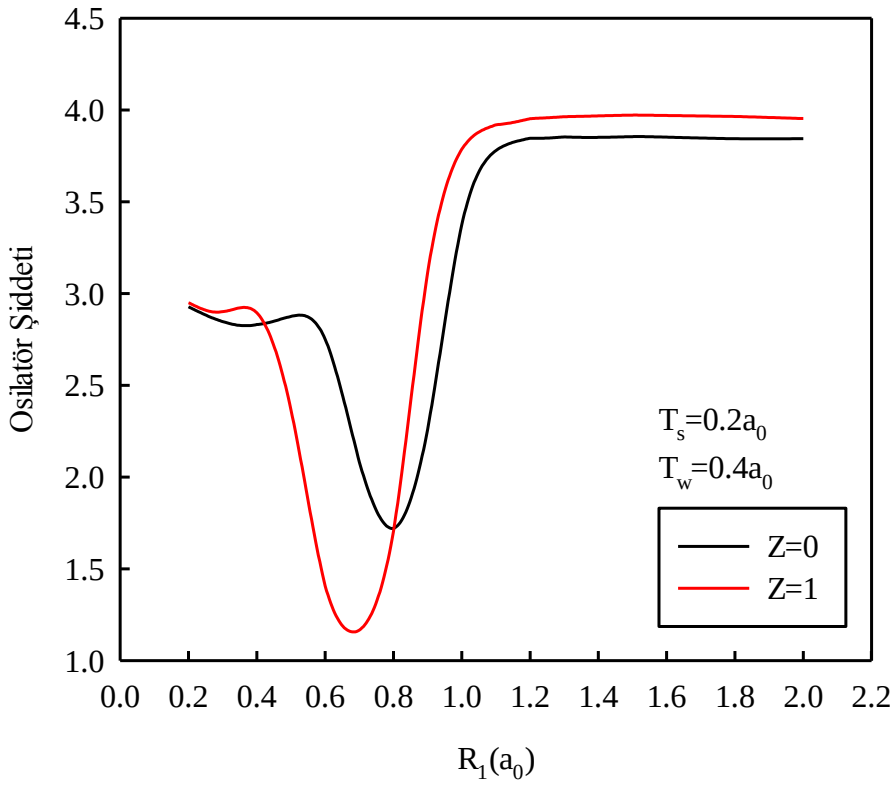
ve buna bağlı olarak soğurma pik değeride büyük olmaktadır. $R_1=0.8a_0$ için, dalga fonksiyonlarının örtüşmesi küçük olmakta ve soğurma pik değeride küçük olmaktadır.

Küçük yarıçap değerlerinde, 1s ve 1p seviyelerinin olasılık dağılımları, kuyu bölgesinde lokalize olmaktadır. Bu sebeple, dalga fonksiyonlarının örtüşmesi büyük olmakta ve soğurma katsayısı büyük olmaktadır. Dolayısıyla soğurma, kuyu bölgesinde gerçekleşmektedir. Çekirdek yarıçapının daha da artırılmasıyla, artık 1s olasılık dağılımı çekirdek bölgesinde lokalize olurken, 1p olasılık dağılımı halen büyük oranda kuyu bölgesinde bulunmaktadır. 1s ve 1p seviyelerinin olasılık dağılımlarının farklı bölgelerde lokalize olmasıyla örtüşmede meydana gelen azalma, soğurma katsayısını azaltmaktadır. Çekirdek yarıçapının daha da artırılmasıyla artık hem 1s hem de 1p seviyelerinin olasılık dağılımları, çekirdek bölgesinde lokalize olmaktadır. Bu da tekrar dalga fonksiyonlarının örtüşmesini artırmakta ve soğurma katsayısı da tekrar artmaktadır. Bu durumda soğurma da çekirdek bölgesinde gerçekleşmektedir.

İki enerji seviyesi arasındaki geçişin büyüklüğünü temsil eden ve birimsiz bir nicelik olan osilatör şiddetinin, $Z=0$ ve $Z=1$ durumu için, çekirdek yarıçapı R_1 ile değişimi Şekil 5.20'de verilmiştir. Burada bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$ ve kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$'dır. Denk. (3.58)'den görüldüğü gibi osilatör şiddeti, geçişin olduğu ilk ve son seviye arasındaki enerji farkıyla ve dipol matris elemanının karesiyle doğru orantılıdır. Bu sebeple, osilatör şiddetinin değeri, dalga fonksiyonlarının örtüşmesi hakkında fikir vermektedir.

Şekle baktığımızda, $R_1=0.4a_0$ ve $R_1=0.6a_0$ değerine kadar osilatör şiddetinde ciddi bir değişiklik olmazken, bu değerlerden sonra ani bir azalma olmakta ve osilatör şiddeti minimum bir değer aldıktan sonra artmaya başlayarak, $R_1=1.0a_0$ ve $R_1=1.2a_0$'dan itibaren sabit bir değere ulaşmaktadır. Bu ani düşme ve artmayı da yine Şekil 5.19'da verilen kritik çekirdek yarıçaplarında, taban durum ve uyarılmış durum olasılık yoğunluklarının dağılımları ile açıklayabiliriz.

$Z=0$ durumunda Şekil 5.19'dan görülebileceği gibi, $R_1=0.2\text{-}0.5a_0$ değerine kadar, hem taban hem de uyarılmış durum dalga fonksiyonları, kuyu bölgesinde lokalize oldukları için, dipol matris eleman değeri yani örtüşme artacaktır. Dolayısıyla osilatör şiddeti değeri büyük olacaktır. $R_1=0.8a_0$ durumunda, taban ve uyarılmış durum dalga fonksiyonlarının örtüşmesi küçük dolayısıyla dipol matris eleman değeri küçük olacaktır. Osilatör şiddeti değeri en küçük değerini alacaktır.



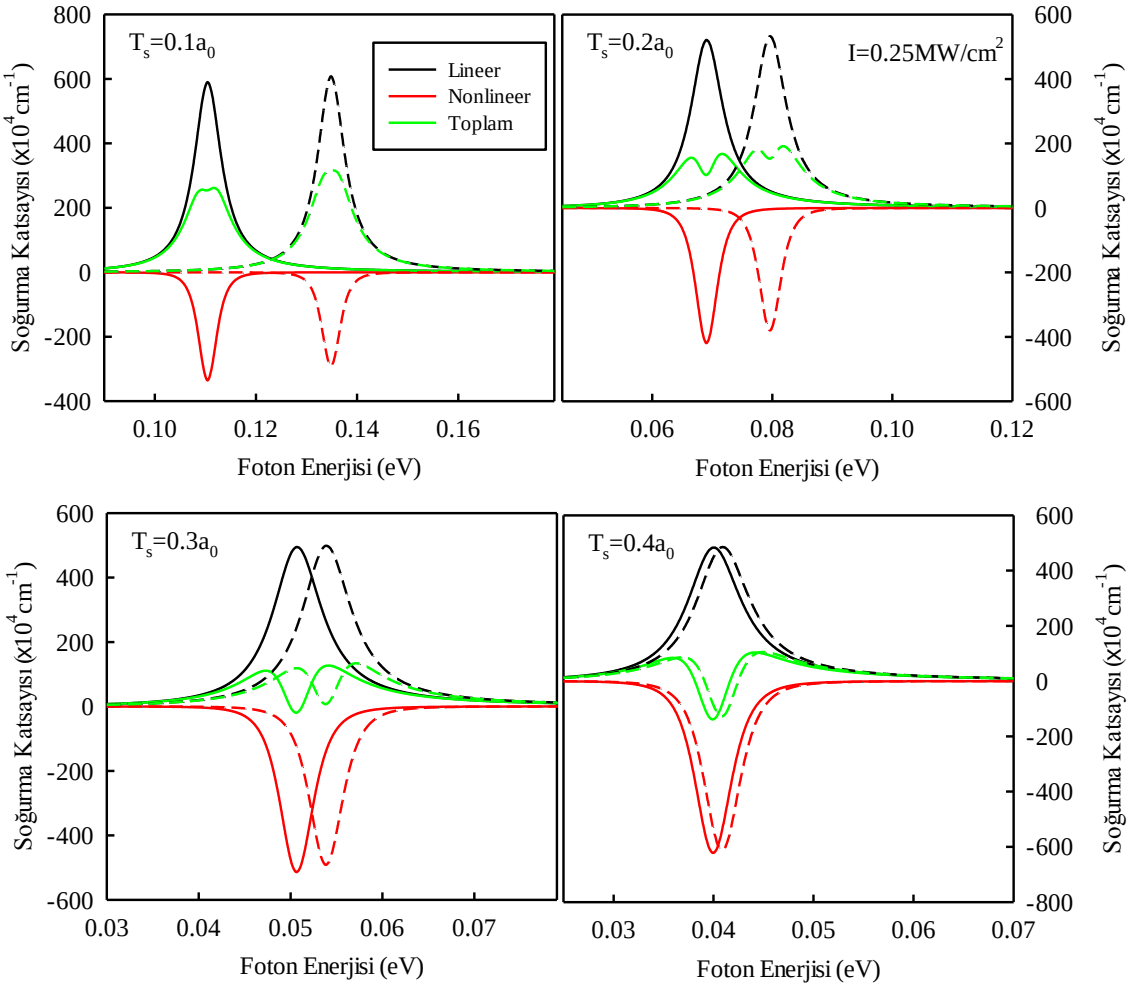
Şekil 5.20. Z=0 ve Z=1 durumunda, osilatör şiddetinin, çekirdek yarıçapı R_1 ile değişimi. Kuantum nokta yapısı için bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$ ve kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$'dır.

$R_1=0.8\text{-}1.1a_0$ değerine kadar, artık kuyunun etkisi kaybolmakta ve hem taban hem de uyarılmış durum çekirdek bölgesinde lokalize olarak dalga fonksiyonlarının örtüşmesinin artmasına neden olmakta ve böylece osilatör şiddetinin tekrar artmasına yol açmaktadır. Yarıçapın daha da artırılması, artık örtüşme ve enerji farkına etki etmediğinden, $R_1=1.2a_0$ değerinden sonra, osilatör şiddeti sabit bir değere gitmektedir.

Z=1 durumunda ise genel davranışın, Z=0 durumundaki ile aynı olduğu görülmektedir. Burada, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinin etkisi de ortaya çıkmaktadır. $R_1=0.7a_0$ durumunda, taban ve uyarılmış durum dalga fonksiyonlarının örtüşmesi küçük dolayısıyla dipol matris eleman değeri küçük olacağı için osilatör şiddeti değeri en küçük değerini alacaktır. Z=1durumunda, hem taban hem de uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyesi, Z=0, durumdaki tek parçacık enerji değerlerinden daha küçüktür. Aynı zamanda Coulomb potansiyelin taban durum tek parçacık enerji seviyesine olan etkisi daha fazla olduğundan dolayı, Z=1 durumunda taban durum tek parçacık enerjisi ile uyarılmış durum tek parçacık enerjisi arasındaki fark, Z=0 durumundaki farktan, daha büyüktür. Bu durumda, Z=1 durumunda, osilatör şiddetinin minimum değerini daha da aşağı çekmektedir.

Şekil 5.21'de, dört farklı bariyer genişliğinde, Z=0 ve Z=1 durum için, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının, gelen foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. Şekil 5.21'de çekirdek yarıçapı $R_1=0.4a_0$, kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ ve gelen ışığın şiddeti I=0.25 MW/cm^2 dir. Siyah, kırmızı ve yeşil çizgiler sırasıyla, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarına karşılık gelmektedir. Şekil 5.21'deki her bir grafikte, sol grup (düz çizgi), Z=0 ve sağ grup (kesikli çizgi), Z=1 için soğurma katsayılarının, foton enerjisi ile değişimini göstermektedir.

Şekil 5.21'den görüldüğü gibi küçük T_s değerlerinde, soğurma pik değerleri büyük foton enerjilerine karşılık gelirken, artan T_s değerleriyle, pik değerleri küçük



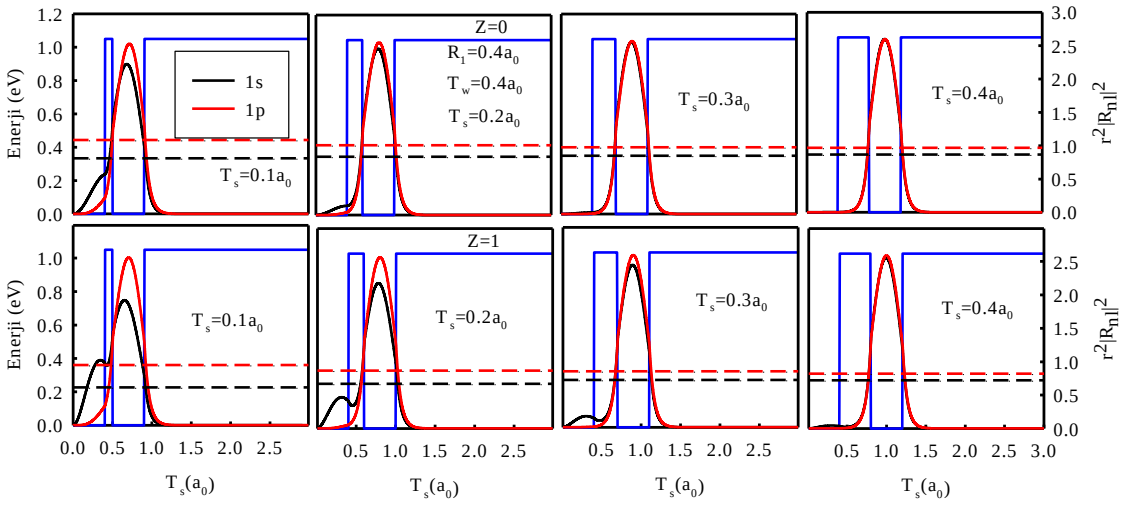
Şekil 5.21. Dört farklı bariyer kalınlığında, Z=0 ve Z=1durumu için, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının gelen foton enerjisi ile değişimi. Burada çekirdek yarıçapı $R_1=0.4a_0$, kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ ve gelen ışığın şiddeti I=0.25 MW/cm^2 dir. Sol grup (düz çizgi), Z=0 ve sağ grup (kesikli çizgi), Z=1 durumuna karşılık gelmektedir.

foton enerjilerine doğru kaymakta (kırmızıya kayma) ve Z=0 ve Z=1 durumunda soğurma pik değerleri örtüşmektedir. Büyük T_s değerlerinde, safsızlığı olmadığı ve olduğu durumda, soğurma pik değerleri yaklaşık eşit olmaktadır.

Şekil 5.21'den lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının, artan bariyer kalınlığı değerleriyle, genel olarak bir azalma eğilimi sergilediğini görmekteyiz. Ayrıca, yine şekilden, artan bariyer kalınlığıyla birlikte, soğurma katsayısının değerlerinin de birbirine yaklaştığını görmekteyiz. Bu durumun nedeni, Şekil 5.22'de görüldüğü gibi, taban durum ve uyarılmış durum tek parçacık enerjilerinin farkının, artan bariyer genişliği ile azalmasıdır.

Şekil 5.22'de safsızlığın olmadığı ve olduğu durum için, dört bariyer kalınlığında, taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarının bariyer kalınlığı T_s ile değişimi gösterilmektedir. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarına karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

Şekil 5.21'e baktığımızda, safsızlığın olmadığı durumdaki soğurma katsayılarının maksimum değerleri, daha küçük foton enerjilerine karşılık gelmekteyken, safsızlığın olduğu durum için bu değerler daha büyük foton enerjilerinde olmaktadır. Şekil 5.21'de, $T_s=0.1a_0$ durumunda, lineer soğurma katsayısı, safsızlığın olduğu ve olmadığı durum için hemen hemen aynı değerde iken, lineer olmayan soğurma katsayısının, Z=0 durumundaki değeri, Z=1 durumundaki değerinden büyük olduğu görülmektedir.



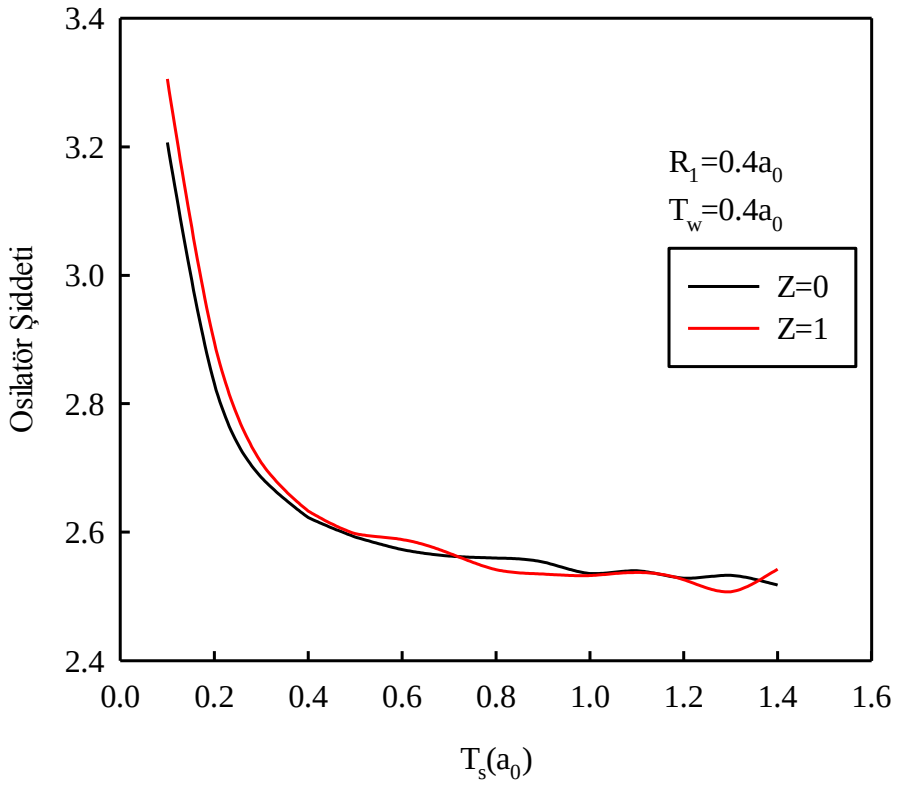
Şekil 5.22. Dört farklı bariyer kalınlığında, Z=0 (üst panel) ve Z=1 (alt panel) durumu için taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarının bariyer kalınlığı T_s ile değişimi. Çekirdek genişliği $R_1=0.4a_0$, kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$ dır.

Bunun nedeni, Şekil 5.22'de üst panelden görebileceğimiz gibi Z=0 durumunda taban ve uyarılmış durum olasılık dağılımlarının kuyu bölgesinde lokalize olmasıyla açıklayabiliriz. Bunun sonucunda dalga fonksiyonunun örtüşmesi, yani dipol matris elemanı, büyük değer almakta ve buna bağlı olarakta soğurma katsayısı büyük olmaktadır. Bu durumda optik geçiş, kuyu bölgesinde gerçekleşmektedir. Diğer taraftan, Şekil 5.22'de alt panelden de görebileceğimiz gibi, safsızlığın olduğu durumda, uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu hala kuyu bölgesinde lokalize iken, taban durum dalga fonksiyonu, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinden dolayı, az da olsa çekirdek bölgesinde lokalize olmaktadır. Böylece, örtüşme ve dolayısıyla dipol matris elemanı, safsızlığın olmadığı durumuna göre az da olsa küçük olmaktadır. Bu da, lineer olmayan soğurma katsayısının, safsızlığın varlığında daha küçük değere sahip olmasına neden olmaktadır.

$T_s=0.2a_0$ ve $T_s=0.3a_0$ durumunda, Şekil 5.22'de de görüldüğü gibi, hem Z=0 hem de Z=1 durumunda, uyarılmış durum olasılık yoğunlukları tamamen kuyu bölgesinde lokalize iken, Z=1 durumunda taban durum olasılık yoğunluğunun çekirdek bölgesinde bulunma olasılığı, Z=0 durumuna göre daha fazladır. Bu nedenle, $T_s=0.2a_0$ ve $T_s=0.3a_0$ durumunda, lineer olmayan soğurma katsayısının, Z=1 durumundaki değeri, Z=0 durumundaki değerinden küçük olduğu, görülmektedir.

$T_s=0.4a_0$ durumunda ise, hem Z=0 hem de Z=1 durumunda, taban ve uyarılmış durum olasılık yoğunlukları tamamen kuyu bölgesinde lokalizedir. Şekil 5.22'de görüldüğü gibi, bariyer kalınlığının artmasıyla kuyu ve çekirdek bölgesi arasındaki tünelleme olasılığı azalmakta ve böylece, hem taban hem de uyarılmış durum dalga fonksiyonları kuyu bölgesinde lokalize olarak, örtüşmeyi artırmakta ve soğurma katsayısındaki azalma meyline ters etki yapmaktadır.

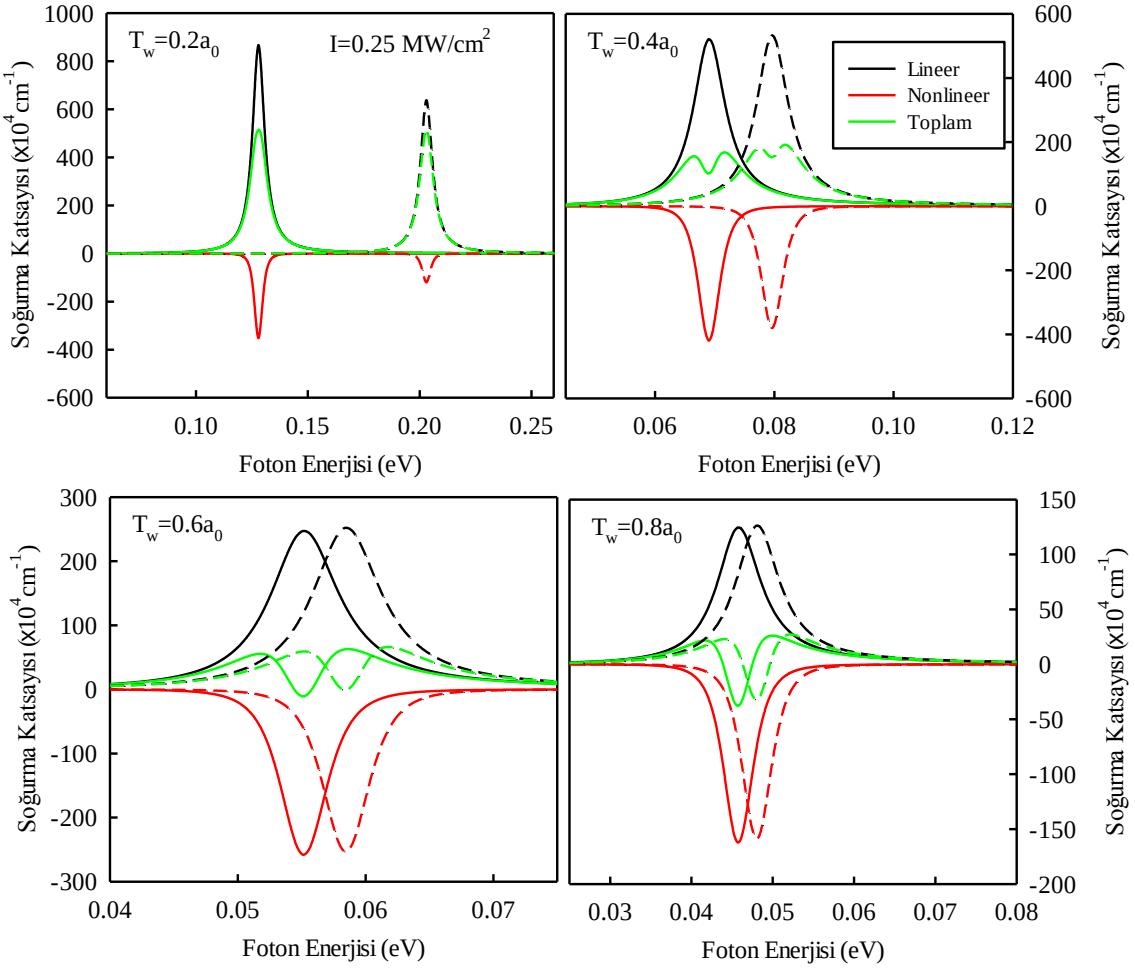
Safsızlığın olmadığı durum ve olduğu durum için, osilatör şiddetinin bariyer kalınlığı T_s ile değişimi Şekil 5.23'te verilmiştir. Burada çekirdek genişliği $R_1=0.4a_0$ ve kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$'dır. Şekil 5.23'ten de görüldüğü gibi, osilatör şiddeti, maksimum bir değerden başlayarak azalmakta ve belirli bir bariyer kalınlığından sonra sabit değerlere ulaşmaktadır. Şekil 5.22'den de görüldüğü gibi, $T_s=0.1a_0$ durumunda, hem Z=0 hem de Z=1 durumunda, uyarılmış durum dalga fonksiyonları kuyu bölgelerinde, taban durum dalga fonksiyonları büyük bir olasılıkla kuyu bölgesinde, az bir olasılıkla çekirdek bölgesinde bulunduğu için, örtüşmenin maksimum olması şeklinde açıklanabilir. Ayrıca, bariyer kalınlığının küçük olması nedeniyle taban ve uyarılmış durum enerjileri arasındaki fark büyüktür. Dolayısıyla hem enerji farkının



Şekil 5.23. Z=0 ve Z=1 durumunda, osilatör şiddetinin, bariyer genişliği T_s ile değişimi. Kuantum nokta yapısı için, çekirdek genişliği $R_1=0.4a_0$ ve kuyu genişliği $T_w=0.4a_0$'dır.

büyük olması, hem de örtüşmenin büyük olması, osilatör şiddetinin maksimum olmasını sağlamaktadır. Bariyer kalınlığının artırılmasıyla birlikte, taban ve uyarılmış durum enerjileri arasındaki fark küçüldüğü için, osilatör şiddeti azalmaktadır. Belirli bir bariyer kalınlığı T_s değerinden sonra, taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji değerlerinin sabit bir değere gitmesi ve hem Z=0 hem de Z=1 durumunda, hem taban durum hem de uyarılmış durum olasılık yoğunluklarının, kuyu bölgesinde lokalize olması nedeniyle osilatör şiddeti sabit bir değere gitmektedir.

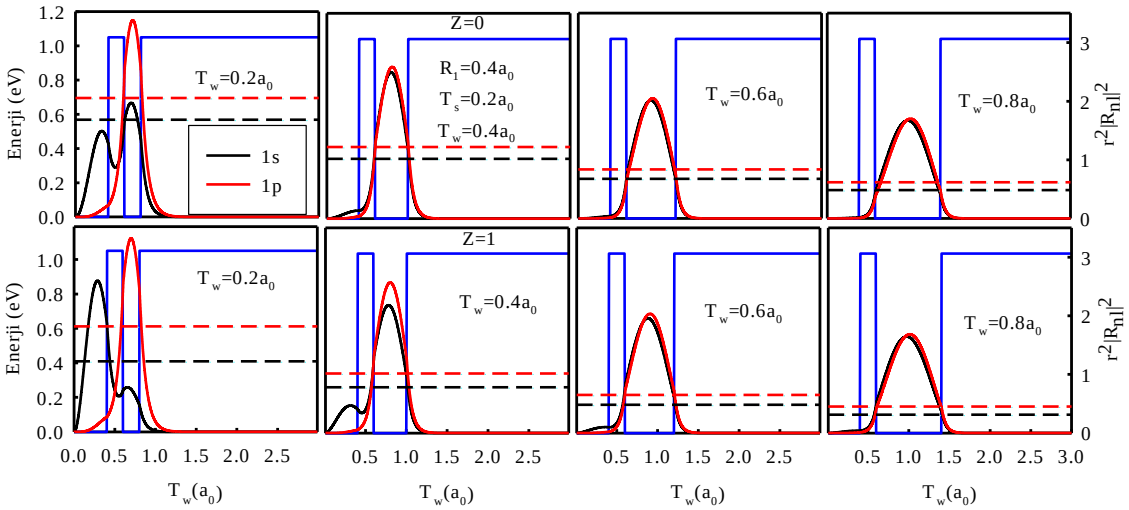
Şekil 5.24'te, dört farklı kuyu genişliğinde, Z=0 ve Z=1 durum için, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının, gelen foton enerjisi ile değişimi görülmektedir. Şekil 5.24'te çekirdek yarıçapı $R_1=0.4a_0$, bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$ ve gelen ışığın şiddeti I=0.25 MW/cm^2 dir. Siyah, kırmızı ve yeşil çizgiler sırasıyla, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarına karşılık gelmektedir. Şekil 5.24'teki her bir grafikte, sol grup (düz çizgi), Z=0 ve sağ grup (kesikli çizgi), Z=1 için soğurma katsayılarının, foton enerjisi ile değişimini göstermektedir.



Şekil 5.24. Dört farklı kuyu genişliğinde, Z=0 ve Z=1durumu için, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının gelen foton enerjisi ile değişimi. Burada çekirdek yarıçapı $R_1=0.4a_0$, bariyer genişliği $T_s=0.2a_0$ ve gelen ışığın şiddeti I=0.25 MW/cm^2 dir. Sol grup (düz çizgi), Z=0 ve sağ grup (kesikli çizgi), Z=1 durumuna karşılık gelmektedir.

Şekil 5.24'den görüldüğü gibi küçük T_w değerlerinde, soğurma pik değerleri büyük foton enerjilerine karşılık gelirken, artan T_w değerleriyle, pik değerleri küçük foton enerjilerine doğru kaymakta (kırmızıya kayma) ve safsızlığın olmadığı ve olduğu durumlarda, soğurma pik değerleri örtüşmektedir. Büyük T_w değerlerinde, Z=0 ve Z=1 durumunda, soğurma pik değerleri yaklaşık eşit olmaktadır.

Şekilden 5.24'den lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının, artan kuyu genişliği değerleriyle, genel olarak bir azalma eğilimi sergilediğini görmekteyiz. Ayrıca, yine şekilden, artan kuyu genişliği ile birlikte, soğurma katsayısının değerlerinin de birbirine yaklaştığını görmekteyiz. Bu durumun nedeni, Şekil 5.25'te görüldüğü gibi, taban durum ve uyarılmış durum tek parçacık enerjilerinin farkının, artan bariyer genişliği ile azalmasıdır.



Şekil 5.25. Dört farklı kuyu genişliğinde, Z=0 (üst panel) ve Z=1 (alt panel) durumu için taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarının kuyu genişliği T_w ile değişimi. Çekirdek genişliği $R_1=0.4a_0$, bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$ dır.

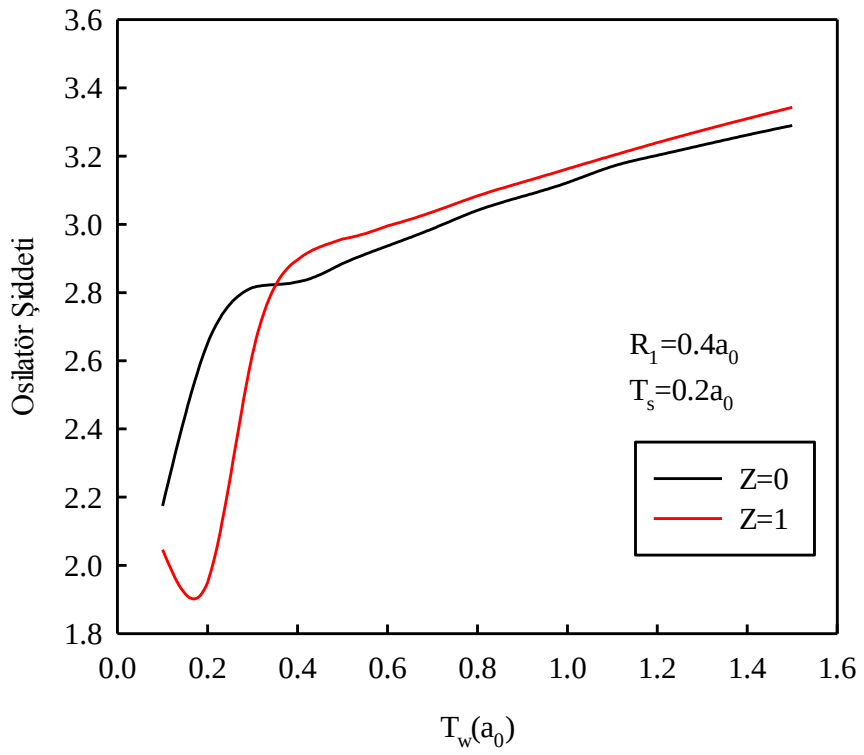
Şekil 5.25'te safsızlığın olmadığı ve olduğu durum için, dört kuyu genişliğinde, taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarının kuyu genişliği T_w ile değişimi gösterilmektedir. Siyah ve kırmızı çizgiler sırasıyla taban (1s) ve uyarılmış seviyenin (1p) olasılık dağılımlarına karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler ise taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerji seviyelerini göstermektedir.

Şekil 5.24'ü incelediğimizde, Şekil 5.21'deki duruma benzer olarak Z=0 durumdaki soğurma katsayılarının maksimum değerleri, daha küçük foton enerjilerine karşılık gelmekteyken, Z=1 için bu değerler daha büyük foton enerjilerinde olmaktadır. Şekil 5.24'te, $T_w=0.2a_0$ durumunda, hem lineer soğurma katsayısı hem de lineer olmayan soğurma katsayısının, safsızlığın olmadığı durumundaki değeri, safsızlığın olduğu durumundaki değerinden büyük olduğu, görülmektedir. Bu durumu, Şekil 5.25'i inceleyerek açıklayabiliriz: Şekil 5.25'te üst panelden de görülebileceği gibi, Z=0 durumunda, taban durum olasılık yoğunluğu daha çok kuyu bölgesinde lokalize iken uyarılmış durum olasılık dağılımı, tamamen kuyu bölgesinde lokalizedir. Bunun sonucunda, dalga fonksiyonunun örtüşmesi, yani dipol matris elemanı, büyük değer almakta ve buna bağlı olarak ta soğurma katsayısı büyük olmaktadır. Bu durumda optik geçiş, hemen hemen kuyu bölgesinde gerçekleşmektedir. Diğer taraftan, Şekil 5.25'te alt panelden de görebileceğimiz gibi, safsızlığın olduğu durumda, uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu hala kuyu bölgesinde lokalize iken, taban durum dalga fonksiyonu, safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinden dolayı, hemen hemen tümüyle çekirdek bölgesinde lokalize olmaktadır. Böylece, örtüşme ve dolayısıyla dipol matris elemanı,

safsızlığın olmadığı durumuna göre küçük olmaktadır. Bu durum, hem lineer hem de lineer olmayan soğurma katsayısının, safsızlığın varlığında daha küçük değere sahip olmasına neden olmaktadır.

Kuyu genişlikleri arttıkça, Z=0 ve Z=1 durumlarında, hem taban durum hem de uyarılmış durum olasılık yoğunlukları kuyu bölgesinde lokalize olduğu ve taban ve uyarılmış durum tek parçacık enerjileri artan kuyu genişliği ile azaldığı için, soğurma katsayısı pik değerleri azalmaktadır.

Şekil 5.26'da Z=0 ve Z=1 durumu için, osilatör şiddetinin kuyu genişliği T_w ile değişimi verilmiştir. Burada bariyer kalınlığı $T_s=0.2a_0$ ve çekirdek yarıçapı $R_1=0.4a_0$'dır. Şekilden görüldüğü gibi, Z=0 durumunda, osilatör şiddeti artan kuyu genişliği ile birlikte önce artmakta, daha sonra belli belirsiz bir azalma davranışı sergilemekte ve T_w'nın daha da artmasıyla tekrar artma eğilimi sergilemektedir. Bunun sebebini, Şekil 5.25'in yardımıyla açıklayabiliriz. Şekil 5.25'ten görüldüğü gibi $T_w=0.2a_0$ değerinde iken, taban durum yoğunluk dağılımı daha az yoğunlukta çekirdek bölgesinde daha çok biçimde kuyu bölgesinde lokalize olurken, uyarılmış durum yoğunluk dağılımı kuyu bölgesinde lokalize olmaktadır. Bu da dalga fonksiyonlarının örtüşmesini azaltmakta ve böylece osilatör şiddeti $T_w=0.2a_0$ değerinde



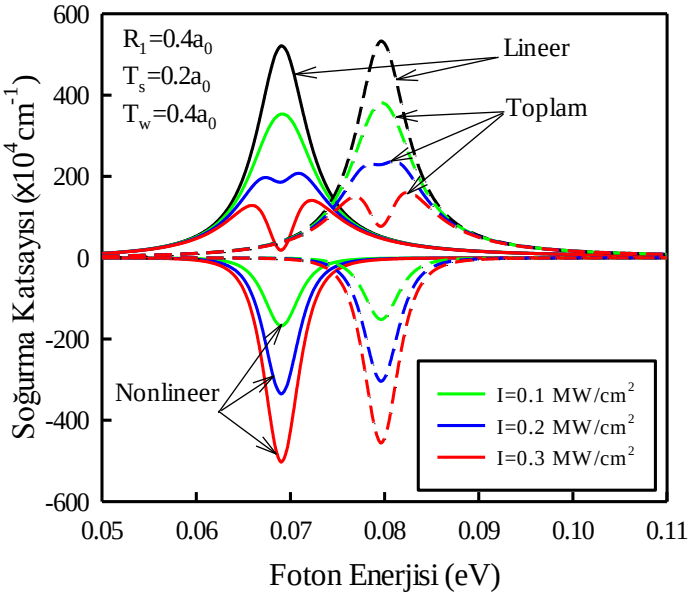
Şekil 5.26. Z=0 ve Z=1 durumunda, osilatör şiddetinin, kuyu genişliği T_w ile değişimi. Kuantum nokta yapısı için, çekirdek genişliği $R_1=0.4a_0$ ve bariyer kalınlığı $Ts=0.2a_0$'dır.

küçük olmaktadır. Daha sonra kuyu genişliğinin artırılmasıyla birlikte (T_w=0.4a_0, 0.6a_0) taban ve uyarılmış durum olasılık yoğunluk dağılımları, kuyu bölgesinde lokalize olmaya başlamaktadırlar. Bu da, dipol matris elemanını yani, örtüşmeyi artırmaktadır. Bunun sonucunda da osilatör şiddeti artmaya başlamaktadır. Şekil 5.25'deki gibi, kuyu genişliğinin daha da artırılmasıyla (T_w=0.8a_0) artık hem taban hem de uyarılmış durum olasılık yoğunluklarının dağılımları tamamen kuyu bölgesinde lokalize olmaktadır. Bu, osilatör şiddetinin artmasına neden olurken, enerji farkının azalması da osilatör şiddetini azaltıcı etki göstermekte ve osilatör şiddetinin artan kuyu genişliğiyle birlikte yumuşak bir şekilde artmasına sebep olmaktadır.

Şekil 5.26'dan görüldüğü gibi, Z=1 durumunda, osilatör şiddeti artan kuyu genişliği ile birlikte önce azalmakta, daha sonra yavaş bir artma davranışı sergilemekte ve daha büyük T_w değerlerinde yavaş bir artma eğilimi sergilemektedir. Bu durumda yine safsızlığın çekici Coulomb potansiyelinin etkisi, gözle görülür derecede osilatör şiddetinin değişimine etki etmiştir. Şekil 5.25'ten görüldüğü gibi Z=1 için, T_w=0.2a_0 değerinde iken safsızlık, özellikle taban durum dalga fonksiyonunu hemen hemen çekirdek bölgesinde sınırlandırarak, dipol matris elemanını küçültmekte ve bunun sonucu olarak da osilatör şiddetinin minimum değeri Z=0 durumuna göre daha da azalmaktadır. Kuyu genişliği, T_w değerleri arttıkça, hem 1s hem de 1p olasılık dağılımları kuyu bölgesinde lokalize olacağı için dalga fonksiyonların örtüşmesi, dolayısıyla dipol matris elemanı artacaktır. Osilatör şiddeti de matris elemanının karesiyle orantılı olduğu için, osilatör şiddeti artacaktır. Osilatör şiddeti tek parçacık enerji farklarıyla orantılı olduğu için, taban durum ve uyarılmış durum tek parçacık enerji farkının azalması da, osilatör şiddetini azaltıcı etki göstermekte ve osilatör şiddetinin artan kuyu genişliğiyle birlikte yumuşak bir şekilde artmasına sebep olmaktadır.

Şekil 5.27'de, üç farklı gelen ışık şiddeti için, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının gelen foton enerjisi ile değişimi gösterilmektedir. Çekirdek yarıçapı R_1=0.4a_0, bariyer genişliği T_s=0.2a_0 ve kuyu genişliği T_w=0.4a_0'dır.

Denk. (3.59)'dan görülebileceği gibi lineer soğurma katsayısı ışık şiddetine bağlı olmamasına rağmen, Denk. (3.60)'dan da görüldüğü gibi, üçüncü derece lineer olmayan soğurma katsayısı ve buna bağlı olarak da toplam soğurma katsayısı, ışık şiddeti ile doğru orantılıdır.



Şekil 5.27. Üç farklı gelen ışık şiddeti için, lineer, üçüncü derece lineer olmayan ve toplam soğurma katsayılarının gelen foton enerjisi ile değişimi. Burada çekirdek yarıçapı R_1=0.4a_0, bariyer genişliği T_s=0.2a_0 ve kuyu genişliği T_w=0.2a_0 dir. Sol grup (düz çizgi), Z=0 ve sağ grup (kesikli çizgi), Z=1 durumlarına karşılık gelmektedir.

Şekil 5.27'de, bu bağlılık, iki elektronlu ve çok tabakalı küresel bir kuantum nokta yapısı için, safsızlığın varlığında ve yokluğunda, gösterilmiştir.

Lineer soğurma katsayıları, safsızlığın varlığında ve yokluğunda, yaklaşık aynı olmasına rağmen, üçüncü derece lineer olmayan soğurma katsayıları safsızlığın olduğu durumda, safsızlığın olmadığı duruma göre, daha küçük olmaktadır. Buna bağlı olarak, safsızlığın olduğu durumdaki toplam soğurma katsayıları, safsızlığın olmadığı duruma göre daha büyük olmaktadır. Benzer sonuç literatürde de rapor edilmiştir (Şahin, 2009). I=0.1 MW/cm^2'de, Z=0 ve Z=1 durumunda, toplam soğurma katsayısında, çökme görülmemesine rağmen, I=0.2 ve 0.3 MW/cm^2 değerlerinde toplam soğurma katsayılarında çökmeler görülmektedir. Z=0 durumundaki çökmeler, lineer olmayan soğurma katsayısının biraz daha büyük olmasından dolayı, Z=1 durumundaki çökmeye göre daha fazladır.

6. YORUM ve ÖNERİLER

Bu çalışmada, iki elektronlu ve çok tabakalı küresel bir kuantum noktasının elektronik ve optik özellikleri hidrojenik donor safsızlığının varlığında ve yokluğunda ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir. Burada göz önüne alınan yapı, çekirdek ve kuyu tabakalarında CdSe ve bariyer (kabuk) tabakalarında ZnS malzemesinin kullanıldığı, CdSe/Zns/ CdSe/Zns çok tabakalı kuantum noktası olup, malzeme parametreleri olarak bu yapıya ait malzeme parametreleri kullanılmıştır. Çalışmamız boyunca hesaplamalarda $m = e = \hbar = 1$ olan atomik birim sistemleri kullanılmış ve sonuçlar bu birim sisteminde verilmiştir.

Göz önüne aldığımız kuantum sistemine ait enerji özdeğerleri ve bu enerji özdeğerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonları tamamen sayısal olarak belirlenmiştir. Bunun için ilk olarak, merkezdeki donor safsızlığın varlığında ve yokluğunda, bu yapıya ait enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları, Poisson-Schrödinger denklemleri, etkin kütle ve Hartree yaklaşımında, öz-uyumlu olarak çözülerek hesaplanmıştır. Elde edilen enerji değerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak iki elektronlu kuantum nokta yapısının, tek parçacık enerji seviyeleri, toplam enerjisi, negatif yüklü donor safsızlığının (D^-) bağlanma enerjileri, band içi seviyeler arası lineer ve lineer olmayan optik soğurma katsayıları ve osilatör şiddetleri farklı tabaka kalınlıklarında hesaplanmıştır. Safsızlığın olmadığı durumda gerçekleştirilen elektronik ve optik özelliklerle ilgili hesaplamalar, kuantum noktasının merkezinde bir donor safsızlığının bulunması durumunda tekrar edilmiştir ve böylece tek parçacık enerji seviyeleri, toplam enerjisi, negatif yüklü donor safsızlığının (D^-) bağlanma enerjisi, lineer ve üçüncü dereceden lineer olmayan optik soğurma katsayıları gibi elektronik ve optik özellikleri incelenmiştir.

Hesaplamalarımızın ilk aşamasında, iki elektronlu ve çok tabakalı yarıiletken bir küresel kuantum noktasının çekirdek yarıçapı R_1, bariyer kalınlığı T_s ve kuyu genişliği T_w gibi yapı parametrelerinin değişmesiyle, tek parçacık enerji seviyeleri, toplam enerjisi ve negatif yüklü donor safsızlığının (D^-) bağlanma enerjileri gibi elektronik özelliklerin değişimi incelenmiştir. Yapıya ait elektronik özellikler, hem safsızlık varken hem de safsızlık yokken tabaka kalınlıklarının fonksiyonu olarak karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Bu aşamada, çekirdek yarıçapının ve kuyu genişliğinin artmasının, tek parçacık enerjilerinde ve toplam enerjilerde genel olarak bir azalma eğilimine sebep olduğu gözlenirken, bariyer kalınlığının belli bir değerden sonra artışı,

çekirdek ve kuyu bölgesi arasında tünelleme olasılığını azalttığı için artık enerji değerlerini değiştirmediği gözlenmiştir. Bariyer kalınlığının artışının negatif yüklü donor safsızlık bağlanma enerjileri üzerinde gözle görülür bir etkisinin olmadığı, fakat çekirdek yarıçapının ve kuyu genişliğinin artmasının negatif yüklü donor safsızlık bağlanma enerjileri üzerinde de büyük etkisi olduğu görülmüştür.

Sonraki aşamada ise, göz önüne aldığımız malzemenin ışıkla etkileşmesi sonucu ortaya çıkan, taban durum ve uyarılmış durum arasındaki optik geçişlere ait osilatör şiddetleri ve lineer, nonlineer ve toplam soğurma katsayıları hesaplanmıştır. Gelen foton enerjisinin, taban ve uyarılmış durum arası enerji farkına eşit olduğu andaki (rezonans durumu) soğurma katsayısının pik değerlerinin ve osilatör şiddetlerinin, safsızlık varken ve yokken tabaka kalınlıklarına olan bağlılığı incelenmiş ve ayrıntılı bir şekilde tartışılmıştır. Bu bağlamda, çekirdek yarıçapının, bariyer kalınlığının ve kuyu genişliğinin artmasıyla, soğurma katsayılarındaki azalmalar ve bunların nedenleri, ayrıca osilatör şiddetindeki ani düşme ve artmaların sebepleri üzerinde durulmuştur.

Hesaplamalarımızdan elde ettiğimiz sonuçların, literatürdeki kuantum nokta yapıların elektronik ve optik özellikleri üzerine yapılan diğer çalışmaların sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür.

Literatürde, iki elektronlu ve çok tabakalı küresel bir kuantum noktası ile ilgili çalışmalar bulunmadığı için bu çalışma literatürdeki önemli bir eksikliği kapatacaktır. Ayrıca bu çalışmanın safsızlığın varlığında ve yokluğunda iki elektronlu ve çok tabakalı küresel bir kuantum noktasının, elektronik ve optik özelliklerini anlamak için çok yararlı olacağını ve katkı sağlayacağını umuyoruz.

Bundan sonraki çalışmalarda, bu tür iki elektronlu ve çok tabakalı kuantum nokta yapıların, elektronik ve optik özellikleri incelenirken, dış manyetik alanın varlığı ve elektrik alanın varlığı gibi parametrelerin etkiside araştırılabilir.

Bu çalışmadaki bütün hesaplamalarda küresel kare kuyu potansiyeli kullanılmış olup, bundan sonraki yapılacak olan çalışmalardai farklı geometrilere ve potansiyellere sahip kuantum nokta yapıların elektronik enerji seviyesi hesaplamaları yapılabilir ve elektronik ve optik özellikleri incelenebilir.

KAYNAKLAR

Akçay N., 2008, Kuantum Noktaları Temelli Bellek Aygıtlar, Doktora Tezi, *İ.Ü.F.B.E.*

Akgül S., Şahin M., Köksal K., 2012, A detailed investigation of the electronic properties of a multi-layer spherical quantum dot with a parabolic confinement, *Journal of Luminescence* 132 1705-1713

Aktas S., Boz F.K., 2008, The binding energy of hydrogenic impurity in multilayered spherical quantum dot, *Physica E* 40 753-758

Aygün E., Zengin M., 1998, Kuantum Fiziği, *Bilim Yayınları*, Ankara

Barve A.V., Lee S.J., Noh S.K., Krishna S., 2009, Review of current progress quantum dot infrared photodetectors, Laser & Photonics Review, 4(6), 738-750

BenDaniel D.J., Duke C.B., 1966, Space charge effects on electron tunneling, *Physical Review* 152:683-692

Betanjur F.J., Ortega J.S., Escorcia R.A., Gonzalez J.D., Mikhailov I.D., 2004, Density of impurity states in doped spherical quantum dots, *Physica E* 23 102-107

Bimberg, D., Grundmann M., Letentsov N.N., 1998, Quantum Dot Heterostructures, *John Wiley&Sons Inc*, Chichester

Bochorishvili B., Polatoglu H.M., 2009, Energy spectrum and oscillator strengths for spherical, conical and cylindrical CdSe quantum dots, *Iop Conf. Series: Material Science and Engineering* 6 012026 (1-5)

Boda A., Chatterjee A., 2012, Ground state and binding energies of (D^0), (D^-) centres and resultant dipole moment of a (D^-) centre in a GaAs quantum dot with Gaussian confinement, *Physica E* 45 36-40

Boichuk V.I., Bilynskyi I.V., Leshko R.Y., Turyanska L.M., 2011, The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum dot with an off-central hydrogenic impurity, *Physica E* 44 476-482

Bose C., 1999, Perturbation calculation of impruty states in spherical quantum dots with parabolic confinement, *Physica E* 4 180-184

Bose C., Sarkar C. K., 1998, Effect of parabolic potential on the impruty binding energy in spherical quantum dots, *Physica B* 253 238-241

Bose C., Sarkar C. K., 2000, Binding energy of impurity states in spherical GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum dots, *Phys. Stat. Sol. B* 218 461-469

Boz F.K., Aktas S., Bilekkaya A., Okan S.E., 2009, Geometric effects on energy states of a hydrogenic impurity in multilayered spherical quantum dot, *Applied Surface Science* 255 6561-6564

Boz F.K., Aktas S., Bilekkaya A., Okan S.E., 2010, The multilayered spherical quantum dot under magnetic field, *Applied Surface Science* 256 3832-3836
Bransden B.H., Joachain C.J., 2000, Quantum Mechanics, *Pearson Education Limited*, England

Chuu D. S., Hsiaho C. M., Mei W. N., 1992, Hydrogenic impurity states in quantum dots and quantum wires, *Phys Rev. B* 46 3898-3905

Çakır B., Yakar Y., Özmen A., Sezer M.Ö., Şahin M., 2010, Linear and nonlinear optical absorption and binding energy of a spherical quantum dot, *Superlattices and Microstructures* 47 556-566

Dane C., Akbas H., Guleroglu A., Minez S., Kasapoğlu K., 2011, The hydrostatic pressure and electric field effects on the normalized binding energy of hydrogenic impurity in a GaAs/AlAs spherical quantum dot, *Physica E* 44 186-189

Dane C., Akbas H., Minez S., Guleroglu A., 2008, Electric field effect in a GaAs/AlAs spherical quantum dot, *Physica E* 41 278-281

Deng Z. Y., Guo J. K., Lai T. R., 1994, Impurity states in a spherical GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum dot:Effects of a spatial variation of dielectric screening, *Phys Rev. B* 50 5736-5739

Dikici M., 2012, Katıhal Fiziği, *Seçkin Yayıncılık*, Ankara

Durlu, T.N., 1992, Katıhal Fiziğine Giriş, *Bilim Yayınları*, Ankara

Elabsy A. M., 1999, Effect of temperature on the binding energy of a confined impurity to a spherical semiconductor quantum dot, *Physica Scripta* 59 328-330

Farkoush B.A., Safarpour Gh., Zamani A., 2013, Linear and the nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes of a spherical quantum dot places at the center of a cylindirical nano-wire: Effects of hydrostatic pressure and temperature, *Superlattices and Microstructures* 59 66-76

Ferry D.K., Goodnick S.M., 1997, Transport in nanostructures, *Cambridge University Press*, Cambridge

Garcia L.F., Marin J.H., Mikhailov I.D., 2006, Negatively charged donors in flat quantum dots, *Brazilian Journal of Physics* 36 878-881

Gerardin Jayam Sr., Navaneethakrishnan K., 2003, Effects of electric field and hydrostatic pressure on donor binding energies in a spherical quantum dot, *Solid States Communications* 126 681-685

Geyter B.D., Hens Z., 2010, The absorption coefficient of PbSe/CdSe core/Shell colloidal quantum dots, *Appl. Phys. Lett.*, 97 161908(1-3)

Gomez S.S., Romero R.H., 2010, Binding energy of an off-center shallow donor D^- in a spherical quantum dot, *Physica E* 42 1563-1566

Griffiths D.J., 1995, Introduction to Quantum Mechanics, *Prentice Hall Inc*, United States of America

Gu J., Liang J.Q., 2005, Energy spectra of D^- centres quantum dots in a Gaussian potential, *Physics Letters A* 335 451-456

Haken H., Wolf H.C., 2004, Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, *Springer*, Heidelberg

Hamizi N.A., Johan M.R., 2012, Optical Properties of CdSe Quantum Dots via Non-TOP based Route, *Int. J. Electrochem. Sci.*, 7 (8458 - 8467)

Harrison P., 2005, Quantum Wells Wires and Dots: Theoretical and computational physics, *John Wiley & Sons Ltd*., England

He L., Xie W., 2010, Effects of an electric field on the confined hydrogen impruty states in a spherical parabolic quantum dot, *Superlattices and Microstructures* 47 266-273

Hsieh C.Y., Chuu D.S., 2000, Donor states in a multi-layered quantum dot, *J. Phys. Condens. Matter* 12 8641-8653

Hsieh, C.Y., 2000, Lower lying states of hydrogenic impurity in a multi-layer quantum *John Wiley & Sons Inc*, Chichester

Karaoğlu B., 1996, Katıhal Fiziğine Giriş, *Güven Kitap Yayın Dağıtım*, İstanbul

Keshavarz A., Zamani N., 2013, Optical properties of spherical quantum dot with position- dependent effective mass, *Superlattices and Microstructures* 58 191-197

Kırak M., Yılmaz S., Şahin M. Gençaslan M., 2011, The electric field effects on the binding energies and the nonlinear optical properties of a donor impurity in a spherical quantum dot, *J. Appl. Phys.* 109 094309 (1-6)

Kirak M., Altinok Y., Yilmaz S., 2013, The effects of the hydrostatic pressure and temperature on the binding energy and optical properties of a donor impurity in a spherical quantum dot under external electric field, *Journal of Luminescence* 136 415-421

Kittel C., 1986, Introduction to Solid States Physics, *John Wiley & Sons Inc*

Kostic R., Stojanovic D., 2012, Influence of the internal heterostructure on nonlinear absorption spectra for intersubband transitions in spherical quantum dot- quantum well nanoparticles, *Phys. Scr.* T149 014055 (1-5)

Köksal F., Gümüş H., 1999, Atom ve Molekül Fiziği, *Bilim Yayıncılık*, Samsun

Liang S.J., Xie W.F., 2011, The hydrostatic pressure and temperature effects on a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot, *Eur. Phys. J. B* 81 79-84

Lien N. V., Trinh N. M., 2001, Electric field effects on the binding energy of hydrogen impruties in quantum dots with parabolic confinements, *J. Phys. Condens. Matter* 13 2563-2571

Lu L., Xie W., 2011, Electric field effects on the intersubband optical absorptions and refractive index in double-electron quantum dots, *Phys. Scr.* 84 025703 1-7

Lu L., Xie W., Hassanabadi H., 2011, Linear and the nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in a two-electron quantum dot, *J. Appl. Phys.* 109 063108 1-5

Mengesha M., Mal'nev V., 2012, Optical properties of two electron quantum dots in low lying para- and ortho- states, *Superlattices ve Microstructures* 52 1-10

Mikhael I.F.I., El Sayed S.B.A., 2011, Exact and variational calculations of a hydrogenic impurity binding energy in a multilayered spherical quantum dot, *Physica E* 43 1371-1378

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

Murillo G., Porras-Montenegro N., 2000, Effect of Electric Field on the Binding Energy of a Donor Impurity in a Spherical GaAs-(Ga,Al)As Quantum Dot with Parabolic Confinement, *Phys. Stat. Sol. B* 220 187-190

Nasri D., Sekkal N., 2010, General properties of confined hydrogenic impruties in spherical quantum dots, *Physica E* 42 2257-2263

Niculescu E. C., Niculescu A., 1997, Donor states in spherical GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum dot, *Modern Physics Letters* 11 673-679

Okur İ., 2008, Molekül Fiziği ve Kuantum Kimyası, *Değişim Yayınları*, İstanbul

Omar M.A., 1975, Elementary Solid State Physics, *Addison-Wesley Publishing Company Inc,*

Özbek H., Feyiz S.D., 2010, Kuantum Mekaniğine Giriş, *Nobel Yayın Dağıtım*, Ankara

Özmen A., Yakar Y., Çakır B. Atav Ü., 2009, Computation of the oscillator strength and absorption coefficients fort he intersubband transitions of the spherical quantum dot, *Optics Communications* 282 3999-4004

Perez-Merchancano S.T., Franco R., Valencia J.S., 2008, Impurity states in a spherical GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum dots: Effects of hydrostatic pressure, *Microelectronics Journal* 39 383-386

Peter A.J., 2005, The effect of hydrostatic pressure on binding energy of impurity states in spherical quantum dots, *Physica E* 28 225-229

Porras-Montenegro N., Perez-Merchancano S.T., 1992, Hydrogenic impurities in GaAs-(Ga,Al)As, *Phys Rev. B* 46 9780-9783

Rezaei G., Kish S.S., 2013, Linear and the nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity confined in a two-dimensional quantum dot: Effects of hydrostatic pressure, external electric and magnetic fields, *Superlattices ve Microstructures* 53 99-112

Rezaei G., Mousazadeh Z., Vaseghi B., 2010, Nonlinear optical properties of a two dimensional elliptic quantum dot, *Physica E* 42 1477-1481

Rezaei G., Taghizadeh S.F., Enshaeian A.A., 2012a, External electric field hydrostatic pressure and temperature effects on the binding energy of an off-center hydrogenic impurity confined in a spherical Gaussian quantum dot, *Physica E* 44 1562-1566

Rezaei G., Vahdani M.R.K., Vaseghi B., 2011b, Nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity in an ellipsoidal finite potential quantum dot, *Current Applied Physics* 11 176-181

Rezaei G., Vaseghi B., Doostimotlagh N.A., 2012b, Linear and nonlinear optical properties of spherical quantum dots: Effects of hydrogenic impurity and conduction band non-parabolicity, *Commun. Theor. Phys.*, 57 485-489

Rezaei G.,Vahdani M.R.K., Vaseghi B., 2011a, Conduction band non-parabolicity effect on the optical absorption coefficient and refractive index changes of spherical quantum dots, *Physica B* 406 1488-1491

Riberio F. J., Latge A., 1994, Impurities in a quantum dot: A comperative study, *Phys Rev. B* 50 4913-4916

Sadeghi E., 2009, Impurity binding energy of excited states in spherical quantum dot, *Physica E* 41 1319-1322

Sadeghi E., 2011, Electric field and impurity effects on optical property of a three-dimensional quantum dot: A combinational potential scheme, *Superlattices and Microstructures* 50 331-339 (2011)

Safarpour Gh., Barati M., 2013, The optical absorption coefficient and refractive index changes of a spherical quantum dot placed of a cylindrical nano-wire, *Journal of Luminescence* 137 98-104

Safarpour Gh., Barati M., Moradi M., Davatolhagh S., Zamani A., 2012a, Binding energy and diamagnetic susceptibility of an on-center hydrogenic donor impurity in a spherical quantum dot placed at the center of a cylindrical nano-wire, *Superlattices and Microstructures* 52 387-397

Safarpour Gh., Moradi M., Barati M., 2012b, Hydrostatic pressure and temperature effects on the electronic energy levels of a spherical quantum dot placed at the center of a nano-wire, *Superlattices and Microstructures* 52 687-696

See J., Dollfus, P., Galdin S., 2002, Comparison of a density functional theory and a Hartree treatment of a silicon quantum dot, J.Appl.Phys. 92(6),3141-3146

Singh J., 2003, Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures, *Cambridge University Press*, Cambridge

Sivakami A., Mahendran M., 2010, Hydrostatic pressure and temperature dependence of correlation energy in a spherical quantum dot, *Superlattices and Microstructures* 47 530-537

Stojanovic D., Kostic R., 2012, Electric field effect on D^0 binding energies in a CdTe/ZnTe spherical quantum dot, *Phys.Scr.* T149 1-4

Stoleru V. G., Towe E., 2003, Oscillator strength for intraband transitions in (In,Ga)As/GaAs quantum dots, *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 83,No. 24 5026-5028

Szafran B., Adamowski J., Stebe B., 1998, Energy spectrum of D^- centers in a spherical quantum dots, *J. Phys. Condens. Matter* 10 7575-7586

Şahin M., 2009, Third- order nonlinear optical properties of a one- and two- electron spherical quantum dot with and without a hydrogenic impurity, *J. Appl. Phys.* 106 063710 1-8

Şahin M., Köksal K., 2012, The linear optical properties of a multi-shell spherical quantum dot of a parabolic confinement for cases with and without a hydrogenic impurity, *Semicond. Sci. Technol.* 27 125011 (1-9)

Şahin M., Nizamoğlu S., Kavruk A.E., Demir H.V., 2009, Self-consistent computation of electronic and optical properties of a single exciton in a spherical quantum dot via matrix diagonalization method, *J. Appl. Phys.*, 106 043704 (1-5)

Şahin M., Tek F., Erdinç A., 2012, The photoionization cross section of a hydrogenic impurity in a multi-layered spherical quantum dot, *J. Appl. Phys.* 111 084317(1-8)

Tang Sah C., 1994, Fundamentals of Solid State Electronics, *World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore*

Taş H., Şahin M., 2012a, The electronic properties of a core/Shell/well/Shell spherical quantum dot with and without a hydrogenic impurity, *J. Appl. Phys.* 111 083702 (1-8)

Taş H., Şahin M., 2012b, The inter-sublevel optical properties of a spherical quantum dot-quantum well with and without a donor impurity, *J. Appl. Phys.* 112 053717 (1-9)

Tayyar C., 2000, Katıhal Elektroniği, *Yıldız Teknik Üniversitesi Basım Yayın Merkezi Matbaası,* İstanbul

Vahdani M.R.K., Rezaei G., 2009, Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic donor in lens-shaped quantum dots, *Physics Letters A* 373 3079-3084

Vazquez G. J., Castillo Mussot M., Mendoza C. I., Spector H. N., 2004, Spherical quantum dot under an electric field, *Phys. Stat. Sol. C* 1 54-57

Wu Q., Guo K., Liu G., Wu J.H., 2013, Polaron effects on the linear and the nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in cylindrical quantum dots with applied magnetic fields, *Physica B* 410 206-211

Wu S., Wan L., 2012, Electronic structures in a CdSe spherical quantum dot in a magnetic field: Diagonalization method and variational method, *J. Appl. Phys.* 111 063711 1-10

Xie W., 1999, Negative donor centers in a GaAs parabolic quantum dot, *Physics Letters A* 263 127-130

Xie W., 2000b, D^- center quantum dots in magnetic fields, *Solid States Communications* 115 417-421

Xie W., 2002, Second bound state of D^- center in a quantum dot, *Physica B* 117-122

Xie W., 2008a, Investigation of D^- centers confined by spherical quantum dots, *Phys. Stat. Sol. B* 245 101-105

Xie W., 2008c, Nonlinear optical properties of a hydrogenic donor quantum dot, *Physics Letters A* 372 5498-5500

Xie W., 2008d, Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic donor in spherical quantum dot, *Physica B* 403 4319-4322

Xie W., 2008e, Negative donor centers and absorption spectra of quantum dots, *J. Phys: Condens. Matter* 20 365213 1-5

Xie W., 2009e, A study of two confined electrons using the Woods- Saxon potential, *J. Phys: Condens. Matter* 21 115802 1-6

Xie W., 2010a, Optical properties of an off-center hydrogenic impurity in a spherical quantum dot with Gaussian potential, *Superlattices and Microstructures* 48 239-247

Xie W., 2010b, Impurity effects on optical property of a spherical quantum dot in the presence of an electric field, *Physica B* 405 3436-3440

Xie W., 2011a, Nonlinear optical properties of an off-center donor in a quantum dot under applied magnetic field, *Solis State Communications* 151 545-549

Xie W., 2011b, Nonlinear optical properties of D^- system in a spherical quantum dot, *Optics Communications* 284 1872-1875

Xie W., 2011c, A study of nonlinear optical properties of a negative donor quantum dot, *Optics Communications* 284 4756-4760

Xie W., 2013a, Linear and nonlinear optical properties of anisotropic quantum dots in a magnetic field, *Phys. Scr*. 87 055704 (1-5)

Xie W., 2013b, Optical absorptions of the low- lying states with higher angular momenta of a D^- system in a spherical quantum dot, *Quantum Electronics* 43(1) 71-75

Xie W.F., 2000a, Negative donor center quantum dots in magnetic fields, *Chin. Phys. Soc.* Vol.9 Num.8 619-623

Xie W.F., 2001, Off-center D^- centers in a quantum dot in the presence of a perpendicular magnetic fields, *Commun. Theor. Phys.*, 35 497-500

Xie W.F., 2008b, A negative donor center trapped by a spherical quantum dot, *Commun. Theor. Phys.*, 49 507-510

Xie W.F., 2009a, Binding energies of D^- centers trapped by quantum dot in a magnetic field, *Commun. Theor. Phys.*, 51 748-750

Xie W.F., 2009b, Binding energy of an off-center D^- in a spherical quantum dot, *Commun. Theor. Phys.*, 51 919-922

Xie WF., 2009c, Linear and nonlinear optical absorptions of a donor impurity in spherical quantum dots, *Commun. Theor. Phys.*, 52 155-158

Xie WF., 2009d, Linear and nonlinear optical absorptions of a Hydrogenic donor in a quantum dot under a magnetic field, *Commun. Theor. Phys.*, 51 923-926

Yakar Y., Çakır B., Özmen A., 2010, Linear and nonlinear optical properties in spherical quantum dots, *Commun. Theor. Phys.*, 53 1185-1189

Yao W., Yu Z., Liu Y., Jia B., 2009, Linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in strained GaN/AlN quantum dots, *Physica E* 41 1382-1385

Yilmaz S., Şafak H., 2007, Oscillator strengths for the intersubband transitions in a CdS- SiO_2 quantum dot with hydrogenic impurityi, *Physica E* 36 40-44

Zhang L., Yu Z., Yao W., Liu Y., Ye H., 2010a, Linear and nonlinear optical properties of strained GaN/AlN quantum dots: Effects of impurities, radii of QDs, and the incident optical intensity, *Superlattices and Microstructures* 48 434-441

Zhang Z.H., Guo K.X., Chen B., Wang R.Z., Kang M.W., Shao S., 2010b, Theoretical studies on the optical absorption coefficients and refractive index changes in a parabolic quantum dots in the presence of electric and magnetic fields, *Superlattices and Microstructures* 47 325-334

Zheng J.L., 2008, Binding energy of hydrogenic impurity in GaAs/$Ga_{1-x}Al_xAs$ multi-quantum dot structure, *Physica E* 40 2879-2883

Zhu J. L., Chen X., 1994, Spectrum and binding of an off-center donor in a spherical quantum dot, *Phys Rev. B* 50 4497-4502

Zhu J.L., Zhao J.H., Duan W.H., Gu B.L., 1992, D^- centers in a spherical quantum dots, *Phys Rev. B* 46 7546-7550

Zhu J-L., Xiong J-J., Gu B-L., 1990, Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$, *Phys Rev. B* 41 6001-6007

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı	**:**	Raşit AYDIN
Uyruğu	**:**	T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi	**:**	KONYA-14.11.1978
Telefon	**:**	0-332-2232788
Faks	**:**	
e-mail	**:**	raydin@selcuk.edu.tr

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	Selçuklu Lisesi, Selçuklu, KONYA	1995
Üniversite	:	Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, KONYA	2001
Yüksek Lisans	:	Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, KONYA	2005
Doktora	:	Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, KONYA	-

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2002	Selçuk Üniversitesi	Araştırma Görevlisi

YABANCI DİLLER: İngilizce

YAYINLAR

R. Aydin, M. Sahin, "The electronic properties of a two-electron multi-shell quantum dot- quantum well heterostructure", *Journal of Applied Physics* **114**, 043706 (2013).

R. Aydin, M. Sahin, "The linear and third-order nonlinear optical properties of a two-electron quantum dot- quantum well heterostructure", (Hazırlanıyor)