



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YARIİLETKEN KUANTUM KUYULARININ PUMP-PROBE OPTİKSEL TEPKİSİ

Rumeysa GÜLESİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalını

Aralık-2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

YARIİLETKEN KUANTUM KUYULARININ PUMP-PROBE OPTİKSEL TEPKİSİ

Rumeysa GÜLESİN

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. İbrahim KARABULUT

2013, 55 Sayfa

Jüri
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Doç. Dr. İbrahim KARABULUT
Doç. Dr. Yıldıray KESKİN

Bu çalışmada, çoklu kuantum kuyu yapılarının elektronik ve pump-probe optiksel özellikleri teorik olarak incelenmiştir. İlk olarak, çoklu kuantum kuyularının elektronik özellikleri sonlu farklar yöntemi kullanılarak nümerik olarak çalışılmıştır. Bariyer genişliğinin enerji seviyeleri ile taban ve uyarılmış durum olasılık yoğunluklarına etkisi detaylı olarak incelenmiştir. Daha sonra, probe demet iletkenliği ve alınganlıkları için açık ifadeler verilmiştir. Ayrıca, rezonans ve rezonans dışı durumlarda farklı pump şiddetleri için nümerik hesaplamalar yapılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Altbantlar arası geçişler, Çoklu kuantum kuyuları, Lineer ve nonlineer optiksel alınganlıklar, Pump-probe optiksel tepki, Sonlu farklar metodu.

ABSTRACT

MS THESIS

THE PUMP-PROBE OPTICAL RESPONSE OF SEMICONDUCTOR QUANTUM WELLS

Rumeysa GÜLESİN

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

Advisor: Assoc. Prof. Dr. İbrahim KARABULUT
2013, 55 Pages

Jury
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Assoc. Prof. Dr. İbrahim KARABULUT
Assoc. Prof. Dr. Yıldıray KESKİN

In this study, the electronic and the pump-probe optical properties of the multiple quantum wells are investigated theoretically. Firstly, the electronic properties of the multiple quantum wells are studied numerically using the finite differences method. The effect of the barrier width on the energy levels and on the probability densities of the ground and excited states is investigated in detail. Then, the explicit expressions for the probe beam conductivity and susceptibilities are given. Moreover, the numerical calculations are done for different pump intensities in the resonant and off-resonant cases.

Keywords: Intersubband transitions, Multiple quantum wells, Linear and nonlinear optical susceptibilities, Pump-probe optical response, Finite difference method.

ÖNSÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans tezi olarak sunulan bu çalışmada, çoklu kuantum kuyu yapılarının elektronik özellikleri ve pump-probe spektroskopisi teorik olarak çalışılmıştır.

Bu çalışma esnasında desteklerini ve bilgilerini esirgemeyen değerli danışmanım Doç. Dr. İbrahim KARABULUT' a Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü öğretim üyeleri ve elemanlarına teşekkür ederim. Çalışmalarım sırasında yardımlarını esirgemeyen kıymetli arkadaşlarım Mustafa Sena ÇAKICI ve Cihat İSLAMOĞLU' na da ayrıca teşekkür ederim. Son olarak, destekleri ile beni yalnız bırakmayan, aileme teşekkür eder ve şükranlarımı sunarım.

Rumeysa GÜLESİN
KONYA-2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **viii**

1. GİRİŞ **1**

2. DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN HETEROYAPILAR **4**

2.1. İletken, Yalıtkan ve Yarıiletken Malzemeler 4
2.2. Yarıiletken Heteroyapılar 5

3. SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMLERİ **9**

3.1. Sonsuz Kuyu 9
3.2. Durum Yoğunluğu 11
3.3. Bir Boyutlu Kuantum Kuyular için Sonlu Farklar Yöntemiyle Schrödinger Denkleminin Sayısal Çözümleri 14

4. NONLİNEER OPTİK **17**

4.1. Nonlineer Optiksel Süreçlerin Tanımları 17
4.2. Kuantum Mekaniğinin Yoğunluk Matris Formalizmi 18

5. PUMP-PROBE (PP) SPEKTROSKOPİSİ **22**

5.1. Pump Demet İletkenliği 23
5.2. Probe Demet İletkenliği 23
5.3. İki Seviyeli Sistemlerde Optiksel Dalga Karışımı 23
5.3.1. Pump ve Probe Alanlarının Varlığında İki Seviyeli Bir Atom için Yoğunluk Matris Denklemlerinin Çözümü 25
5.3.2. Nonlineer Alınganlık İfadeleri 32

6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA **33**

6.1. Çoklu Kuantum Kuyusunun Elektronik Özellikleri 33
6.2. Çoklu Kuantum Kuyularının Pump-Probe Optiksel Tepkisi 35
6.2.1. Probe İletkenliğinin Spektral Biçimi 35
6.2.2. Probe Demetinin Soğurma ve Dispersiyon Spektrumları 36

7. YORUM VE ÖNERİLER **43**

KAYNAKLAR **44**

ÖZGEÇMİŞ **46**

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Δx : Adım Uzunluğu

Γ_n : Durulma Zamanı (ps^{-1})

T_n : Durulma Süresi (ps)

N: Elektron Tabaka Yoğunluğu (cm^{-2})

e : Elektron Yükü ($1{,}6 \times 10^{-19}$ C)

μ_{ba} : Geçiş Matris Elemanı

$\hbar$: İndirgenmiş Plank Sabiti

h: Plank Sabiti ($6{,}62 \times 10^{-34}$ J.s)

σ_{zz}^{pm} : Pump Demet İletkenliği

σ_{zz}^{pr} : Probe Demet İletkenliği

E_g: Yasak Band Aralığı

ρ_{nm} : Yoğunluk Matris Elemanı

$\chi^{(1)}$: Lineer Alınganlık

$\chi^{(3)}$: Üçüncü Mertebe Nonlineer Alınganlık

Kısaltmalar

IB: Altband (Interband)

ISB: Altbandlar arası (Intersubband)

OR: Optiksel Doğrultma (Optical Rectification)

QW: Kuantum Kuyusu (Quantum Well)

RWA: Dönen Dalga Yaklaşımı (Rotating Wave Approximoation)

SHG: İkinci Harmonik Üretimi (Second Harmonic Generation)

THG: Üçüncü Harmonik Üretimi (Third Harmonic Generation)

PP: Pump-Probe

1. GİRİŞ

Son yıllarda band aralık mühendisliği ve moleküler ışın epitaksi (MBE) yöntemlerindeki önemli gelişmeler farklı sınırlandırıcı potansiyele sahip yarıiletken kuantum yapıların üretilmesinde önemli rol oynamaktadır (Liu ve Cappaso, 2000). Yarıiletken kuantum yapılarda, yapıyı oluşturan malzemelerin band aralıklarındaki farklılıklardan kaynaklanan potansiyel tarafından taşıyıcıların hareketi belirli boyutlarda sınırlandırılır. Taşıyıcıların hareketinin tek boyutta sınırlandırıldığı yapılar kuantum kuyuları, iki ve üç boyutta sınırlandırıldığı yapılar ise sırasıyla, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak adlandırılır.

Kuantum kuyu yapılar daha büyük band aralığına sahip iki yarıiletken malzeme arasına yerleştirilmiş olan daha küçük band aralıklı ince bir yarıiletken tabakadan oluşur. Bu tabakanın genişliği nm ölçeklerinde olduğundan kuantum etkileri gözlenir ve sonuçta kuantum kuyusunun büyütme doğrultusundaki enerjiler kesikli hale gelir. Bu kesikli seviyeler arasında optiksel geçişler mümkündür. Eğer valans bandı içerisindeki enerji seviyelerinden iletim bandı içerisindeki seviyelere bir geçiş olursa bu, *bandlar arası* (Interband, IB) geçiş olarak adlandırılır. Eğer geçişler, iletim bandının veya valans bandının kendi içerisindeki altbandlar arasında olursa, bu geçişlere de *altbandlar arası* (Intersubband, ISB) geçişler denir. Son yıllarda, kuantum kuyularındaki ISB geçişler hem fiziksel hem de teknolojik açıdan önemli bir çalışma konusu haline gelmiştir. Bu durum, bu tür geçişlerin büyük dipol matris elemanlarına (1-3 nm) ve osilatör şiddetlerine (f ~ 15-20) sahip olmasından kaynaklanır (West ve Eglash, 1985). Kuantum kuyularındaki ISB geçişlerle ilgili araştırmalar kuantum kuyu kızılötesi fotodetektörü ve kuantum cascade lazeri gibi çeşitli cihazların gelişimine de neden olmuştur. Bu tür cihazlar, yüksek hız ve verimliliğin yanı sıra boyutsal olarak da küçük olduğundan bulk yarıiletken aygıtlara kıyasla oldukça önemli avantajlara sahiptir.

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

MBE yöntemindeki gelişmelerin sonucunda kuantum heteroyapılarla ilgili araştırmalar yaklaşık 30 yıl önce başladı. Bu teknik kullanılarak GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ heteroyapılarının çok ince tabakalarını (100 Å dan daha küçük) hazırlamak mümkün

hale gelmiştir. Bir yarıiletken kuntum kuyusundaki kesikli enerji seviyelerinin varlığı deneysel olarak 1974 yılında gösterildi (Dingle *v*e ark., 1974). Bu çalışmadan sonra, kuantum kuyularındaki aynı band içerisindeki kuantize seviyeler arasındaki geçişlere dayalı optiksel özellikler uzun soluklu bir araştırma konusu haline gelmiştir. İncelenen önemli optiksel özellikler arasında, harmonik üretimi (Zaluzny, 1995; Zaluzny ve Bondarenko, 1996; Yıldırım ve Tomak, 2006; Karabulut ve ark., 2008), elektromanyetik etkili saydamlık (Electromagnetically Induced Transparency, EIT) (Serapiglia ve ark., 2000), tünelleme etkili saydamlık (Tunneling Induced Transparency, TIT) (Faist ve ark., 1997; Schmidt ve ark., 1997), terslenimsiz lazer elde edilmesi (Frogley ve ark., 2006; Zhu ve ark., 1996) ve kontrollü popülasyon transferi (Controlled Population Transfer, CPT) (Paspalakis ve ark., 2006; Paspalakis ve ark., 2006; Adriano ve Batista, 2006; Adriano ve ark., 2006) yer almaktadır.

Bu alandaki önemli problemlerden biri de ISB geçişlere dayalı pump-probe tepkisidir. Bu konuda son yıllarda yoğun bir araştırma konusu haline gelmiştir (Harter ve ark., 1980; Boyd ve ark., 1981; Evangelou ve ark., 2011; Kosionis ve ark. 2011; Zaluzny, 2012). Kuvvetlice sürülen iki seviyeli atomun yarı klasik teorisi Mollow tipi soğurma spektrumu olarak adlandırılan oluşumu öngörür. Radyasyon alanını kuvvetlice sınırlayan mikrokavite doğasının Mollow tipi soğurma spektrumu oluşumunu büyük ölçüde artırdığı bilinmektedir (Liu, 1997). Bu tahmin, eksitonik geçişlere karşılık gelen frekans aralığında elde edilen deneysel sonuçlarla da desteklenmektedir. Bir mikrokavite merkezine yerleştirilen tekli kuantum kuyusunun PP soğurma spekturumu Liu tarafından teorik olarak incelenmiştir (Liu, 1997). Son yıllarda, tekli kuantum kuyusunun PP spektrumuna depolarizasyon etkisi de detaylı olarak çalışılmıştır (Kosionis ve ark. 2011). 2012 yılında, Zaluzny çoklu kuantum kuyularının PP ISB tepkisine mikrokavite etkisini incelemiştir (Zaluzny, 2012).

Bu tez çalışmasında ilk olarak, matris köşegenleştirme tekniği kullanılarak çoklu kuantum kuyularının elektronik özellikleri ile ilgili bazı hesaplamalar yapılmıştır. Daha sonra, Zaluzny tarafından göz önüne alınan çoklu kuantum kuyu modeli için probe iletkenliği hesapları yapılarak sonuçlar yeniden elde edilmiştir. Özellikle rezonans ve rezonans dışı durumlarda farklı pump şiddet değerlerindeki Mollow tipi spektrum incelenmiş ve elde edilen sonuçlar detaylıca yorumlanmıştır.

Tez çalışmasının ikinci aşamasında, ilk olarak, Boyd tarafından elde edilen lineer ve üçüncü mertebe probe alınganlıkları için analitik ifadelere yer verilmiştir. Bu

analitik ifadeler kullanılarak bazı hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Farklı parametreler için soğurma ve dispersiyon spektrumları detaylıca incelenmiştir.

Tez çalışması aşağıdaki gibi düzenlenmiştir: İkinci bölümde, düşük boyutlu yarıiletken yapılarla ilgili genel bir giriş yapılmıştır. Üçüncü bölümde, Schrödinger denkleminin çözümlerinden bahsedilmiştir. Dördüncü bölüm, nonlineer optik ve yoğunluk matris formalizmi ile ilgidir. Beşinci bölümde, PP spektroskopisi ile lineer ve üçüncü mertebe alınganlıklarla ilgi analitik ifadelere yer verilmiştir. Son bölümde, elde edilen nümerik sonuç ve tartışmalara yer verilmiştir.

2. DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN HETEROYAPILAR

2.1. İletken, Yalıtkan ve Yarıiletken Malzemeler

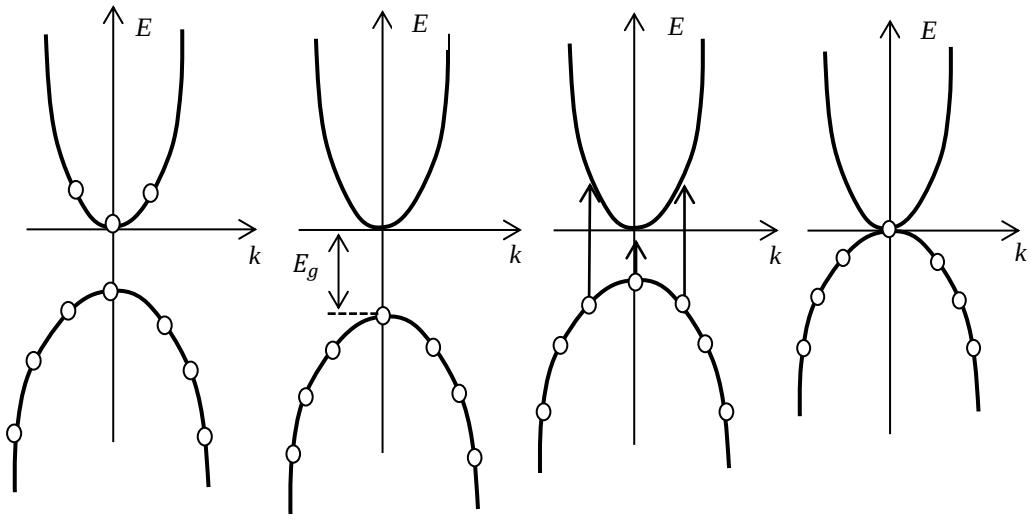
Uygulanan bir elektrik alanın etkisi altında; elektriği iyi ileten katıya *metal* (veya iletken), iletmeyene de *yalıtkan* denir. Bu iki grup katı arasında ayırım yapabilmek için enerji band teorisine dayalı basit bir ölçü vardır.

Tamamen dolu bir enerji bandı, elektrik alan uygulansa bile elektrik yükü taşınmasına izin vermez. Bu ifadeye göre, bir katı onun enerji bandlarının bazıları kısmen işgal edilmişse ancak o zaman iletken olarak davranır.

Yasak enerji aralığı ile birbirinden ayrılmış en yüksek iki bandın elektronlar tarafından işgalinde ortaya çıkabilecek değişik durumlar Şekil 2.1' de gösterilmektedir.

Şekil 2.1a' da bir metal için enerji bandları verilmiştir. İşgal edilmiş durumdaki en yüksek enerji bandı valans bandıdır. Bunun altındaki bütün bandlar tamamen doludur ve elektrik yükü taşınmasına katkıda bulunmaz. Valans bandı üstündeki band iletim bandı olarak adlandırılır ve bu durum için band kısmen doludur.

Şekil 2.1b' de bir yalıtkanın en üst enerji bandları gösterilmektedir. İyi yalıtkana örnek olarak elmas gösterilebilir. Burada en üst band 2s ve 2p atomik seviyelerinin hibridizasyonu sonucu ortaya çıkar ve yasak enerji aralığı ile ayrılır.



Şekil 2.1. (a) Metal (b) Yalıtkan (c) Yarıiletken (d) Yarımetal.

Bu bandlar s ve p durumlarından kaynaklandığından ve ilkel birim hücrede iki atom bulunduğundan bu bandların her biri $8N$ tane elektron tarafından işgal edilebilir. Elmastaki her atom enerji bandına 4 elektron katkıda bulunduğundan, ilkel birim hücre başına 8 değerlik elektronu elde edilir. Yani, band tamamen doludur ve malzeme yalıtkandır. Yasak enerji aralığı elmasta 7eV civarında bir genişliğe sahiptir.

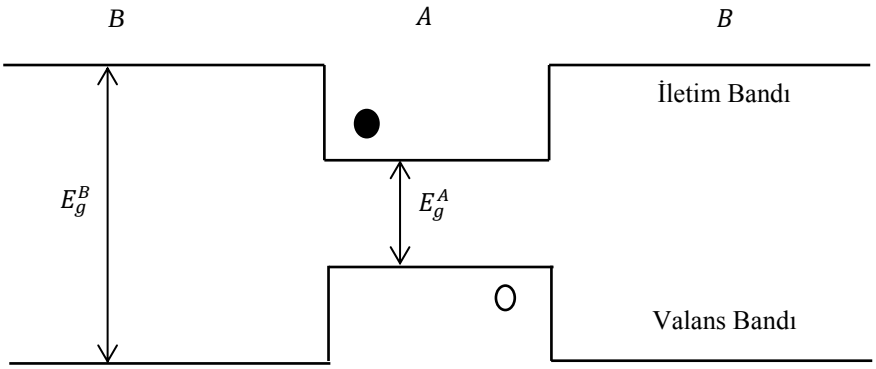
Şekil 2.1c' de bir yarıiletken malzeme için enerji bandları gösterilmektedir. Bazı malzemeler metallerle yalıtkanlar arasındaki bölgenin özelliklerini gösterirler. Eğer valans bandı ile onun üstündeki bandın arasında bulunan yasak enerji aralığı yeteri kadar dar ise, elektronlar termal uyarılma yoluyla valans bandından onun üstündeki banda geçebilir. Böylece, her iki band da kısmen dolu hale gelir ve elektrik iletimine katkıda bulunur. Böyle malzemelere *yarıiletken* malzemeler denir. Yasak enerji aralıkları sırasıyla 1eV ve 0.7eV genişliğinde olan *Si* ve *Ge* bu özelliği gösterir. Oda sıcaklığındaki yasak enerji aralığı kabaca 2eV' dan daha küçük olan malzemeler yarıiletken olarak davranırlar.

Şekil 2.1d' de bir yarımetal için enerji bandları gösterilmektedir. Yarımetallerin yasak enerji aralıkları sıfırdır. *Bi, As, Sb* ve beyaz *Sn* gibi elementler yarımetallere örnek olarak verilebilir.

Sonuç olarak, ilkel birim hücre başına düşen değerlik elektronlarının sayısı tek olan malzemeler metalik özellik gösterir. Bunun sebebi ise bir bandı tamamen doldurmak için çift sayıda elektron gerekmesidir. Sayı çift ise, bandların aralıklı veya çakışık olması malzemenin yalıtkan veya metal oluşunu belirler (Dikici, 2012).

2.2. Yarıiletken Heteroyapılar

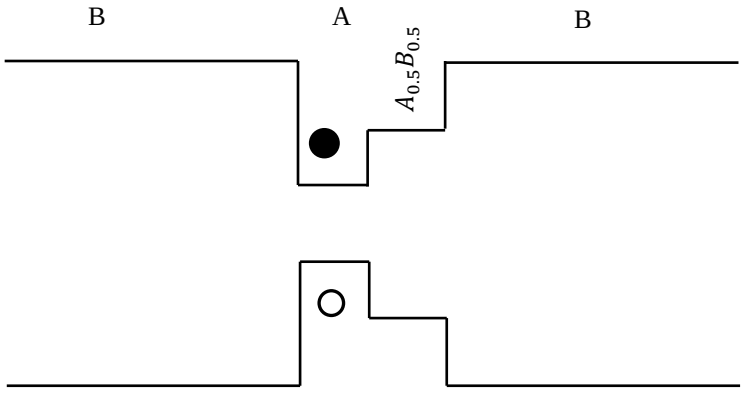
Taşıyıcıların hareketinin bir boyutta sınırlandırıldığı diğer iki boyutta serbest olduğu yapılara *kuantum kuyuları* denir. Kuantum kuyularında elektronların hareketi iki boyutta serbest olduğundan bu yapılar aynı zamanda *iki boyutlu elektron gazı* olarak da adlandırılır. Bir A malzemesi, şekilde görüldüğü gibi band aralığı kendisinden daha geniş B malzemesinden oluşan iki tabaka arasına yerleştirilirse ($E_g^B > E_g^A$), bir çift heteroeklem elde edilmiş olur. Eğer A tabakası, kuantum özelliklerinin gözlenebilmesine yetecek kadar ince olursa bu tip bir yapı *tekli kuantum kuyusu* olarak da adlandırılır.



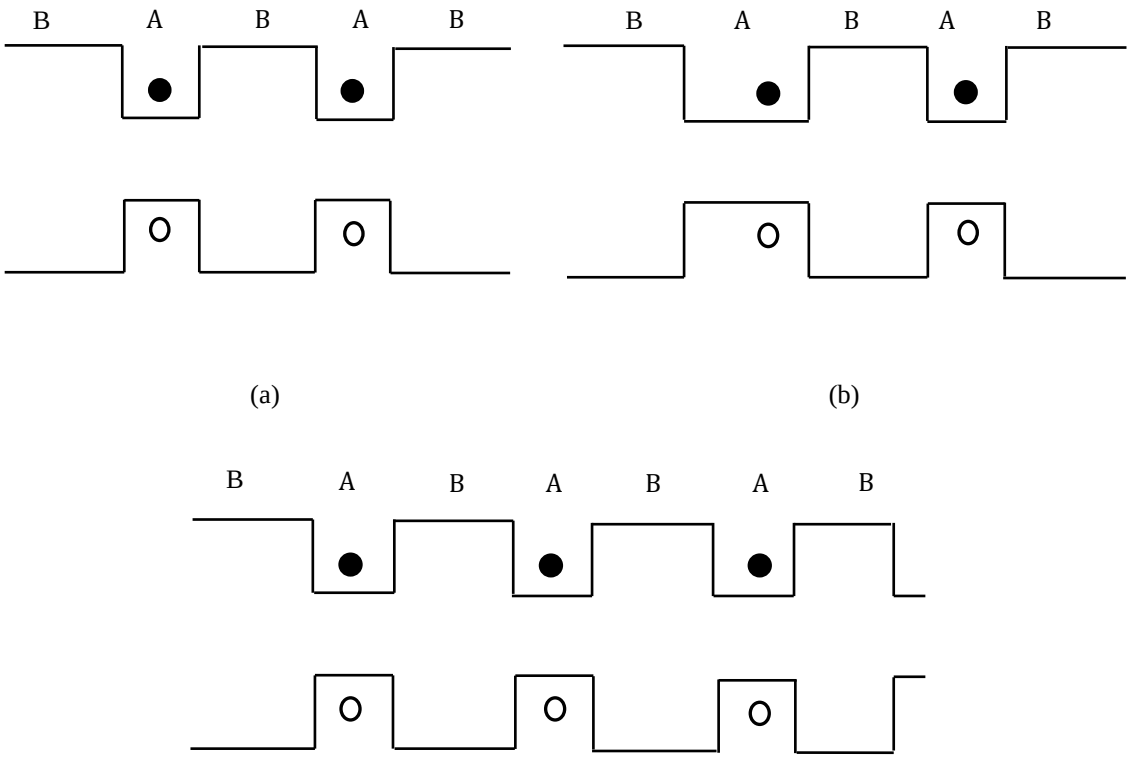
Şekil 2.2. Tekli kuantum kuyusunun iletim ve valans bandındaki bir boyutlu potansiyeller

Eğer sistemde herhangi bir yük taşıyıcısı varsa, bu taşıyıcılar enerjilerini minimum yapmaya çalışacaktır. Dolayısıyla bu tip bir yapıda elektronlar (koyu daire ile gösterilen) ve deşikler (açık daire ile gösterilen) kuantum kuyusu içerisinde toplanacaktır.

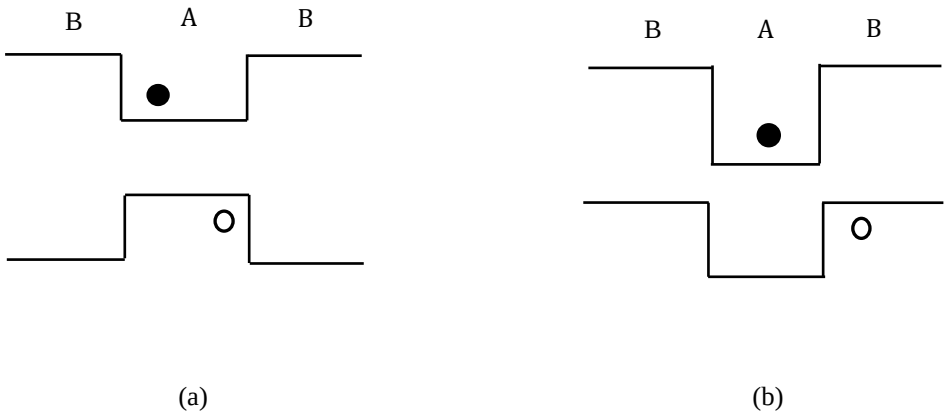
Bu tip bir heteroyapı içerisine ilave yarıiletken tabakalar yerleştirilebilir. Örneğin, A ve B malzemeleri arasına bir alaşım tabakanın yerleştirilmesiyle basamaklı kuantum kuyu yapılar üretilebilir. Şekil 2.3' de bu yolla üretilmiş bir asimetrik basamaklı kuantum kuyusu görülmektedir.



Şekil 2.3. Asimetrik basamaklı kuantum kuyusu.



Şekil 2.4. (a) Simetrik çift kuantum kuyusu (b) Asimetrik çift kuantum kuyusu (c) Çoklu kuantum kuyusu.



Şekil 2.5. (a) 1. Tip kuantum kuyu yapı (b) 2. Tip kuantum kuyu yapı

Ardışık iki kuantum kuyunun üst üste büyütülmesi ile *çift kuantum kuyu* çok sayıda kuantum kuyunun büyütülmesi ile de *çoklu kuantum kuyuları* elde edilir.

Süperörgü adı verilen yapılar da çok sayıda kuantum kuyu yapının ardışık olarak büyütülmesiyle elde edilir. Süperörgü ile çoklu kuantum kuyu yapıları arasında belirgin bir fark vardır. Çoklu kuantum kuyusu yalıtılmış tek kuantum kuyu yapıların bir topluluğu şeklinde davranırken, süperörgü yapıda ise kuantum kuyuları birbirleriyle etkileşir.

Kuantum kuyu yapılar band süreksizliklerine göre 2 sınıfa ayrılırlar. 1. tip yapılarda bir malzemenin (örneğin burada A) band aralığı, daha geniş band aralığına sahip bir diğer malzemenin (B) tamamen içerisinde yer alır. Bunun sonucu, elektron ve deşikler aynı malzemeden oluşan kuantum kuyu yapı içerisinde toplanırlar. Dolayısıyla her iki tip yük taşıyıcının aynı uzaysal bölgede lokalize olması etkin (hızlı) bir yeniden birleşme sürecine neden olur.

2. tip yapılarda A ve B malzemelerinin band aralıkları öyle düzenlenmiştir ki, iletim ve valans bandlarında oluşan kuantum kuyu yapılar farklı malzemeler içerisinde yer alır. Bu ise elektron ve deşiklerin, yarıiletkenin farklı tabakalarında (örneğin elektronlar A' da, deşikler B' de) sınırlandırılmasına yol açar. Bunun sonucu elektron ve deşiklerin yeniden birleşme süreleri oldukça uzar (Harrison, 2005).

3. SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMLERİ

3.1. Sonsuz Kuyu

Sonsuz derinlikteki bir boyutlu potansiyel kuyusu kuantum mekaniğinde tanımlanmış en basit sınırlandırılmış potansiyeldir. Dalga mekaniğini ifade etmekte kullanılan zamandan bağımsız Schrödinger denklemi, klasik mekaniğin Hamiltonyen formülasyonuna benzer biçimde zamandan bağımsız potansiyeller için geçerlidir.

Bir sistemin kinetik ve potansiyel enerjilerinin toplamının sistemin toplam enerjisine eşit olduğundan yola çıkılarak

$$T\psi + V\psi = E\psi \tag{3.1}$$

eşitliğini yazmak mümkündür. Bu ifadedeki ψ özfonksiyonu sistemin durumunu tanımlar. Klasik mekanikle benzerlikten sabit kütleli bir parçacık için kinetik enerji operatörü,

$$T = \frac{P^2}{2m} \tag{3.2}$$

şeklinde verilir. Bu ifadedeki P, bilinen kuantum mekaniksel lineer momentum operatörü olup,

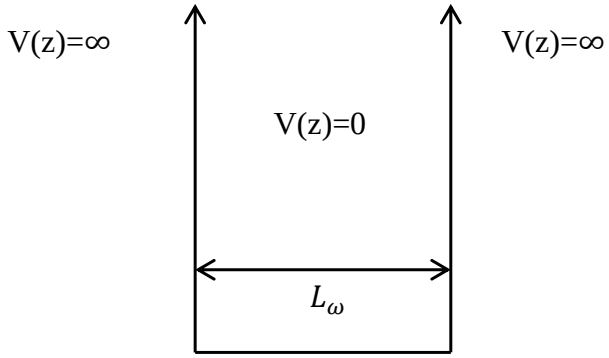
$$P = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}i + \frac{\partial}{\partial y}j + \frac{\partial}{\partial z}k\right) \tag{3.3}$$

ile verilir. T kinetik enerji operatörü için de aynı form kullanarak Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi + V(x,y,z)\psi = E\psi \tag{3.4}$$

biçiminde yazılabilir. Bu ifadedeki $V(x,y,z)$ fonksiyonu sistemin potansiyel enerjisini göstermektedir. Burada tek boyutlu potansiyel durumunu göz önüne alınırsa z ekseni boyunca uzanan bir potansiyel kuyusundaki bir parçacık için Schrödinger denklemi (Şekil (3.1));

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \tag{3.5}$$



Şekil 3.1. Tek boyutlu sonsuz kuyu.

ifadesiyle verilir.

Kuyunun dışında, $V(z) = \infty$ olduğundan bu bölgelerde $\psi(z) = 0$' dır. Potansiyel kuyusu içerisinde Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \tag{3.6}$$

ile verilir. Denk. (3.6)' nın çözümü

$$\psi(z) = Asinkz + Bcoskz \tag{3.7}$$

formunda olup bu çözüm yukarıdaki denklemde yerine yazıldığında

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}(Asinkz + Bcoskz) = E(Asinkz + Bcoskz) \tag{3.8}$$

ve

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \tag{3.9}$$

eşitlikleri elde edilir. Sınır koşullarından dolayı dalga fonksiyonu kosinüslü terim içermeyecektir (yani B=0). Bu nedenle $\psi(z) = Asinkz$ dir. Ayrıca $\psi(0) = \psi(L_\omega) = 0$ için

$$k = \frac{\pi n}{L_\omega} \tag{3.10}$$

elde edilir. Bu ifadedeki *n*, seri çözümleri gösteren bir tamsayıdır. Bu ifade (3.9) denkleminde kullanılırsa sınırlandırılmış seviyelerin enerjisi için,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL_\omega^2} \tag{3.11}$$

elde edilir. A sabit çarpanı da dalga fonksiyonun normalizasyonundan bulunur. Yani,

$$\int_0^{L_\omega} \psi^*(z)\,\psi(z)dz = 1 \tag{3.12}$$

dir. Bu ifadeden, $A = \sqrt{(2/L_\omega)}$ olarak bulunur. Böylece normalize dalga fonksiyonu,

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L_\omega}} \sin\left(\frac{\pi n z}{L_\omega}\right) \tag{3.13}$$

olarak bulunur (Harrison, 2005).

3.2. Durum Yoğunluğu

Altband içerisinde elektron ya da deşiklerin sayısı verilsin, onların enerji ve momentum dağılımı nedir? Bu soruyu cevaplamak için gereken ilk bilgi durum yoğunluğudur. Yani kaç tane elektron enerji aralığı içerisinde var olabilir?

Kuantum kuyusu içerisindeki altband durumunda bu soruyu cevaplamak için ilk önce bulk kristallerde bu özelliği anlamak gerekir. Bloch teoreminin altında yatan düşünce; bir bulk yarıiletkende $\psi = (1/\Omega)\exp(ikr)$ olarak yazılabilen bir özfonksiyonun örgü içerisinde periyodik olma zorunluluğudur. Bu durumda birim hücre L kenarına sahipse;

$$\psi(x,y,z) = \psi(x+L,+L,+L) \tag{3.14}$$

yazılabilir. Bloch teoreminden

$$\psi(x,y,z) = \tfrac{1}{\Omega} exp\{i[k_x(x+L) + k_y(y+L) + k_z(z+L)]\} \tag{3.15}$$

elde edilir. Denk. (3.15) düzenlenirse

$$\psi(x,y,z) = \tfrac{1}{\Omega} exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)] exp[i(k_x L + k_y L + k_z L)] \tag{3.16}$$

elde edilir. Böylece, periyodiklik koşulunun sağlanması için ikinci üstel terim 1'e eşit olmalıdır. Yani,

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \qquad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \qquad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \tag{3.17}$$

bulunur. Bu ifadedeki n_x, n_y ve n_z ' ler tamsayılardır. Bu üç tamsayı değerlerinin her bir kümesi farklı seviyeyi tanımlar ve bu nedenle bir seviye tarafından işgal edilen k uzayının hacmi $(2\pi/L)^3$ ' tür. Durum yoğunluğu gerçek uzayın birim hacmi ve birim enerjisi başına düşen durumların sayısı olarak tanımlanır:

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} \tag{3.18}$$

k uzayındaki toplam durum sayısı N, bir seviye tarafından işgal edilen hacim ile gerçek uzayın hacmi başına k yarıçaplı kürenin hacmine eşittir. Yani,

$$N = 2\frac{4\pi k^3}{3}\frac{1}{(2\pi/L)^3}\frac{1}{L^3} \tag{3.19}$$

$$N = 2\frac{4\pi k^3}{3(2\pi)^3} \tag{3.20}$$

bulunur. Bu ifadedeki 2 çarpanı spin dejenereliğinden kaynaklanmaktadır. Durum yoğunluğunu

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk}.\frac{dk}{dE} \tag{3.21}$$

şeklinde ifade etmek mümkündür. (3.20) denkleminden

$$\frac{dN}{dk} = 2\frac{4\pi k^2}{(2\pi)^3} \tag{3.22}$$

elde edilir. Ayrıca, etkin kütlelerin parabolik bandlar teorisi yardımıyla

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \tag{3.23}$$

yazılır. Buradan yola çıkılarak

$$\frac{dk}{dE} = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{E^{-1/2}}{2} \tag{3.24}$$

elde edilir. Sonuç olarak bulk malzemelerde durum yoğunluğu,

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} \tag{3.25}$$

ile verilir. Böylece band içerisindeki durum yoğunluğu enerjinin momentumun parabolik fonksiyonu olarak gösterilebildiği bir minimum civarında süreklidir ve enerjinin kareköküyle orantılıdır. Benzer biçimdeki iki boyutlu durum sayısı;

$$N^{2D} = 2\pi k^2 \frac{1}{(2\pi/L)^2}\frac{1}{L^2} \tag{3.26}$$

ile verilir. Denk. (3.26) yeniden düzenlenirse

$$N^{2D} = 2\frac{\pi k^2}{(2\pi)^2} \tag{3.27}$$

elde edilir. Buradan

$$\frac{dN^{2D}}{dk} = \frac{k}{\pi} \tag{3.28}$$

ile verilir. Üç boyutlu bulk malzemelere benzerlikten kuantum kuyu sistemlerinde durum yoğunluğu için

$$\rho^{2D}(E) = \frac{k}{\pi}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{E^{-1/2}}{2} \tag{3.29}$$

elde edilir. Bu ifade yeniden düzenlenerek kuantum kuyu sistemindeki tekli altband için durum yoğunluğu

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \tag{3.30}$$

bulunur.

Eğer kuantum kuyu sistemi içerisinde çok sayıda (n) sınırlandırılmış seviye varsa bu durumda herhangi bir özel enerjideki $\rho^{2D}(E)$ durum yoğunluğu tüm altbandlar üzerinden toplamla verilir ve

$$\rho^{2D}(E) = \sum_{i=1}^{n} \frac{m^*}{\pi\hbar^2}\Theta(E - E_i), \tag{3.31}$$

dir. Bu ifadedeki Θ birim basamak fonksiyonudur (Harrison, 2005).

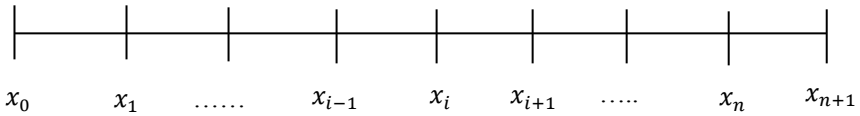
3.3. Bir Boyutlu Kuantum Kuyular için Sonlu Farklar Yöntemiyle Schrödinger Denkleminin Sayısal Çözümleri

Kuantum mekaniğine göre $V(x)$ potansiyeli içinde hareket eden elektronun durumu zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ile tanımlanır:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{3.32}$$

Buradaki x, uzaysal konumdur. $\psi(x)$ fonksiyonu ise elektronun dalga fonksiyonu olarak adlandırılır. E skaler bir büyüklük olup elektronun enerjisini temsil eder. Dalga fonksiyonunun fiziksel anlamı, bir x konumunda $P(x) = |\psi(x)|^2$ ile verilen ve elektronun bulunma olasılık yoğunluk fonksiyonu olan $P(x)$ ile ilgilidir. Tüm uzayda elektronun bulunma olasılığı her zaman 1' e eşit olduğundan tüm uzay boyunca dalga fonksiyonun karesinin integralinin de her zaman 1' e eşit olması gerekir. Kuantum mekaniğine göre elektronun enerji seviyesi kesiklidir. En düşük enerji seviyesi E_0 elektronun taban durumunu temsil ederken E_1, E_2, E_3…, sırasıyla birinci, ikinci, üçüncü uyarılmış enerji seviyelerini temsil etmektedir. Buradaki her bir E_l enerji özdeğerine karşılık gelen bir $\psi_l(x)$ dalga fonksiyonu vardır ve $\psi_l(x)$ aynı zamanda Schrödinger denkleminin özfonksiyonu olarak da adlandırılır. Pek çok durumda özel bir $V(x)$ potansiyeli için E_l enerji özdeğerleri ve bunlara karşılık gelen $\psi_l(x)$ dalga fonksiyonlarının belirlenmesi gerekir. Ancak çoğu durumda enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını analitik olarak belirlemek mümkün değildir. Bundan dolayı sayısal yöntemlere ihtiyaç duyulur.

Schrödinger denklemini çözerek enerji özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını hesaplamak için kullanılan birçok sayısal metod vardır. Bu amaç için sonlu farklar yöntemi kullanılacaktır. İlk adım, x eksenini $x_i = \Delta x * i$ $(i = 0, 1, 2, \ldots . n + 1)$ şeklinde kesikli hale getirmektir:



daha sonra, ikinci türev için merkezi fark tanımından yararlanılarak Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i}{\Delta x^2}+V_i\psi_i=E\psi_i \tag{3.33}$$

şeklinde kesikli hale getirilir. Denklem tekrar düzenlenirse;

$$-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_{i-1}+\left(\frac{2}{\Delta x^2}+V_i\right)\psi_i-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_{i+1}=E\psi_i \tag{3.34}$$

elde edilir. $i=1,\ 2,\ 3,\ldots.n$ değerleri için yukarıdaki denklemi yeniden yazmak mümkündür:

$i=1$ için;

$$-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_0+\left(\frac{2}{\Delta x^2}+V_1\right)\psi_1-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_2=E\psi_1$$

$i=2$ için;

$$-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_1+\left(\frac{2}{\Delta x^2}+V_2\right)\psi_2-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_3=E\psi_2$$

$i=3$ için;

$$-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_2+\left(\frac{2}{\Delta x^2}+V_3\right)\psi_3-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_4=E\psi_3$$

$$\vdots$$

$i=n$ için;

$$-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_{n-1}+\left(\frac{2}{\Delta x^2}+V_n\right)\psi_n-\frac{1}{\Delta x^2}\psi_{n+1}=E\psi_n \tag{3.35}$$

Bu denklem sistemi, $\psi_0=0$ ve $\psi_{n+1}=0$ sınır şartlarını da kullanarak matris formunda yeniden düzenlenirse

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{\Delta x^2}+V_1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & & & & & \\ -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2}+V_2 & -\frac{1}{\Delta x^2} & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2}+V_{n-1} & -\frac{1}{\Delta x^2} & \\ & & & & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2}+V_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

ile verilen üç bant matrisi elde edilir. Bu üç bant matrisinin özdeğer ve özfonksiyonları matlab programı kullanılarak hesaplanacaktır.

4. NONLİNEER OPTİK

4.1. Nonlineer Optiksel Süreçlerin Tanımları

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

Nonlineer optiksel özellikleri tam olarak tanımlayabilmek için bir malzemeye uygulanan optiksel alan kuvveti $E(t)$ ile malzemede oluşan $P(t)$ kutuplanması arasındaki ilişkiden faydalanır. Lineer optikte bu ilişki,

$$P(t) = \chi^{(1)}E(t) \tag{4.1}$$

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

$$P(t) = \chi^{(1)}E(t) + \chi^{(2)}E^2(t) + \chi^{(3)}E^3(t) + \cdots \tag{4.2}$$

$$\cong P^{(1)}(t) + P^{(2)}(t) + P^{(3)}(t) + \cdots \tag{4.3}$$

şeklinde verilir.

Bu ifadedeki $\chi^{(2)}$ ve $\chi^{(3)}$ sırasıyla, ikinci ve üçüncü mertebe nonlineer optiksel alınganlıkları gösterir.

Burada dikkat edilmesi gereken önemli bir nokta denklem (4.1) ve (4.2)' yi yazarken bazı kabullerin yapılmış olmasıdır. (Boyd, 2003). Bu kabuller:

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

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

iii) Anlık tepki yaklaşımı ortamın kayıpsız ve dispersiyonsuz olduğunu gösterir.

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

Uygulanan alanın monokromatik yani,

$$E(t) = E cos\omega t \tag{4.4}$$

ile verildiği durum için kutuplanma ifadesi,

$$P(t) = \frac{1}{2}\chi^{(2)}E^2 + \left(\chi^{(1)}E + \frac{3}{4}\chi^{(3)}E^3(t)\right)cos\omega t + \frac{1}{2}\chi^{(2)}E^2 cos2\omega + \frac{1}{4}\chi^{(3)}E^3 cos3\omega t \tag{4.5}$$

şeklinde yazılır.

Denk. (4.5)' deki ilk terim frekanstan bağımsız olup malzeme içerisinde statik bir alan oluşturur. Bu süreç, optiksel doğrultma (Optical Rectification-OR) olarak adlandırılır. Denk. (4.5)' deki parantez içerisindeki terim, uygulanan alanın frekans değerine eşit frekansta bir katkıyı gösterir ve bu terim, kırılma indisine nonlineer bir katkı verir. Denk. (4.5)' deki üçüncü terim uygulanan alanın frekans değerinin iki katı büyüklüğünde frekansa sahip bir radyasyon üretimine neden olur. Bu süreç ise ikinci harmonik üretimi (Second Harmonic Generation-SHG) olarak adlandırılır. Denk. (4.5)' deki son terim ise uygulanan alan frekensının üç katı büyüklüğünde frekansa sahip bir radyasyon üretimini tanımlanır ve bu süreç, üçüncü harmonik üretimi (Third Harmonic Generation-THG) olarak adlandırılır (Boyd, 2003).

4.2. Kuantum Mekaniğinin Yoğunluk Matris Formalizmi

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

$$i\hbar\frac{\partial\psi_s(r,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi_s(r,t) \tag{4.6}$$

ifadesi ile verilen Schrödinger denklemini sağlar. Denk. (4.6)' daki $\psi_s(r,t)$ dalga fonksiyonu baz fonksiyonları cinsinden,

$$\psi_s(r,t) = \sum_n C_n^s(t) u_n(r) \tag{4.7}$$

şeklinde yazılabilir. Bu denklemdeki $C_n^s(t)$ açılım katsayısı, s seviyesinde olduğu bilinen bir atomun, t zamanında n inci enerji seviyesinde bulunma olasılık genliğini verir. Denk. (4.7), Denk. (4.6)' da yerine yazılırsa,

$$i\hbar \sum_n \frac{dC_n^s(t)}{dt} u_n(r) = \sum_n C_n^s(t) \hat{H} u_n(r) \tag{4.8}$$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_m^s(t) = \sum_n H_{mn} C_n^s(t) \tag{4.9}$$

ifadesi bulunur.

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

$$\langle A \rangle = \int \psi_s^* \hat{A} \psi_s d^3r \tag{4.10}$$

şeklinde tanımlanır.

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

$$\langle A \rangle = \sum_{mn} C_m^{s*} C_n^s A_{mn} \tag{4.11}$$

şeklinde yazılabilir.

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

Sistemin s seviyesinde bulunma olasılığını $p(s)$ ile gösterelim. Bu nicelik kuantum mekaniksel olasılıktan ziyade klasik olasılık olarak kabul edilebilir. Gerçekte $p(s)$, sistemin kuantum mekaniksel durumu ile ilgili bilgi eksikliğini göstermektedir. Bu durumda, sistemin yoğunluk matris elemanları,

$$p_{nm} = \sum_{s} p\,(s) C_m^{s*} C_n^s \tag{4.12}$$

ile tanımlanır. Bu ilişki sembolik olarak,

$$p_{nm} = \overline{C_m^* C_n} \tag{4.13}$$

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

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

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_{s} p(s) \sum_{nm} C_m^{s*} C_n^s A_{mn} \tag{4.14}$$

bu ifade, Denk. (4.12)' de verilen tanım göz önüne alınarak,

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_{nm} \rho_{nm} A_{mn} = tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) \tag{4.15}$$

şeklinde yazılabilir. Denk. (4.12)'in zaman göre türevi alınırsa,

$$\dot{\rho}_{nm} = \sum_{s} \frac{dp(s)}{dt} C_m^{s*} C_n^s + \sum_{s} p(s) \left(C_m^{s*} \frac{dC_n^s}{dt} + \frac{dC_m^{s*}}{dt} C_n^s \right) \tag{4.16}$$

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

$$\dot{\rho}_{nm} = \sum_{s} p(s) \frac{i}{\hbar} \sum_{v} (C_n^s C_v^{s*} H_{vm} - C_m^{s*} C_v^s H_{nv}) \tag{4.17}$$

haline gelir. Denk. (4.12) ile verilen yoğunluk matrisinin tanımı göz önüne alınarak, Denk. (4.17)' den,

$$\dot{\rho}_{nm} = \frac{i}{\hbar} \left(\hat{\rho}\hat{H} - \hat{H}\hat{\rho}\right)_{nm} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]_{nm} \tag{4.18}$$

denklemi elde edilir.

Bu denklemdeki $\hat{H}$ Hamiltonyen operatörü, $\hat{H}_0$ pertürbe olmamış Hamiltonyen ile $\hat{H}_{int}$ etkileşme Hamiltonyenin toplamından oluşur. Bu durumda yoğunluk matris operatörü Lioville denklemi olarak bilinen,

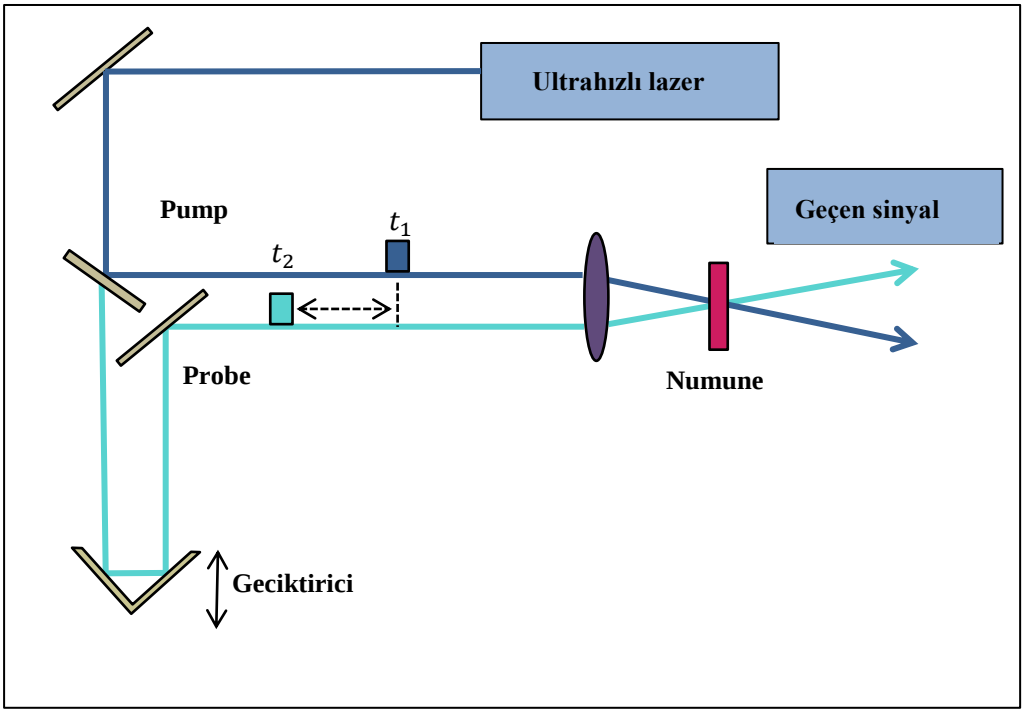
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}_0 + \hat{H}_{int}, \hat{\rho}\right]_{nm} \tag{4.19}$$

hareket denklemini sağlar. Denk. (4.19), etkileşmelerin sonucunda yoğunluk matrisinin zamanla nasıl değiştiğini tanımlar. Bununla birlikte, yukardaki formalizimde hala göz önüne alınmayan bazı etkileşmeler vardır. Buna örnek olarak, atomlar arası çarpışmalardan kaynaklanan etkileşmeler verilebilir. Bu tür etkileşmeler, sistemin durumunda bir değişme ve $dp(s)/dt$ ' nin sıfırdan farklı olmasına neden olur. Yukarıdaki formalizme, böylesi etkiler, Denk. (4.19)' a doğrudan bir sönüm terimi eklenerek dahil edilebilir. Bu durumda hareket denklemi,

$$\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H_0 + H_{int}, \rho]_{nm} - \Gamma_{nm} \left(\rho_{nm} - \rho_{nm}^{(eq)}\right) \tag{4.20}$$

haline gelir. Bu denklemde, Γ_{nm}, $|n\rangle$ ve $|m\rangle$ seviyeleri arasındaki bozulma hızı olup $\Gamma_{nm} = \Gamma_{mn}$ olduğu kabul edilmiştir. $\rho_{nm}^{(eq)}$ ise yoğunluk matrisin termal dengedeki değerini göstermektedir (Boyd 2003, Karabulut, 2008).

5. PUMP-PROBE (PP) SPEKTROSKOPİSİ



Şekil 5.1. PP spektroskopi düzeneği.

Şekil 5.1' de pump-probe (PP) spektroskopisi için deney düzeneği görülmektedir. PP deneyinde, çok hızlı (femtosecond) bir lazerden elde edilen çıkış pulsu iki demete bölünür. Bu demetlerden (pump demeti) biri ile malzeme uyarılırken bu kuvvetli pump demetinin malzemede oluşturduğu değişimler, bu demete göre uygun biçimde geciktirilen daha zayıf probe demetiyle incelenir. PP spektroskopi deneylerinde, malzemeden geçen probe demetiyle ilgili ölçümler yapılır. Genellikle de pump demetinin neden olduğu malzemeden geçen probe demet enerjisindeki değişim ölçülür.

Böylesi bir deneyin sonucunda;

1) Pump demetinin etkisiyle değiştirilen probe demetine malzemenin tepkisi ve

2) Pump demetinin şiddeti ve frekansı ile pump ve probe demetleri arasındaki frekans farkının fonksiyonu olarak probe demetinin iletimi incelenebilir.

Bu deneyden elde edilen sonuçlar, dipol geçiş momentleri ve durulma zamanları hakkında bilgi elde etmek için kullanılabilir.

5.1. Pump Demet İletkenliği

İki parabolik alt bant limitinde ve pump demetinin yokluğunda sadece taban durumun işgal edildiği bir durum için dönen dalga yaklaşımı (RWA-rotating wave approximation) altında kuantum kuyusunun pump demet iletkenliği için (Kosionis ve ark. 2011; Zaluzny, 2012),

$$\sigma_{zz}^{pm}(\omega_{pm}) = \sigma_0 \frac{D(\omega_{pm})}{1 + I_{z,pm}\,\mathrm{Re}\,D(\omega_{pm})}, \tag{5.1}$$

ifadesi elde edilir. Burada, $D(x) = [1 + i(\omega_{IT} - x)/\gamma_{IT}]^{-1}$ ve $\sigma_0 = N_s f_{IT} e^2 / 2m^* \gamma_{IT}$ dır. f_{IT} alt bantlar arası geçişlerle ilişkili osilatör şiddetidir.

5.2. Probe Demet İletkenliği

Pump demetinin tüm mertebeleri için ve probe demetinin birinci mertebesine kadar yoğunluk matris denklemleri çözülerek probe demet iletkenliği (Mollow tipi) için,

$$\sigma_{zz}^{pr}(\omega_{pr}) = \sigma_0 (1 - W) \frac{D(\omega_{pr})}{1 + I_{z,pm}\,\mathrm{Re}\,D(\omega_{pm})}, \tag{5.2}$$

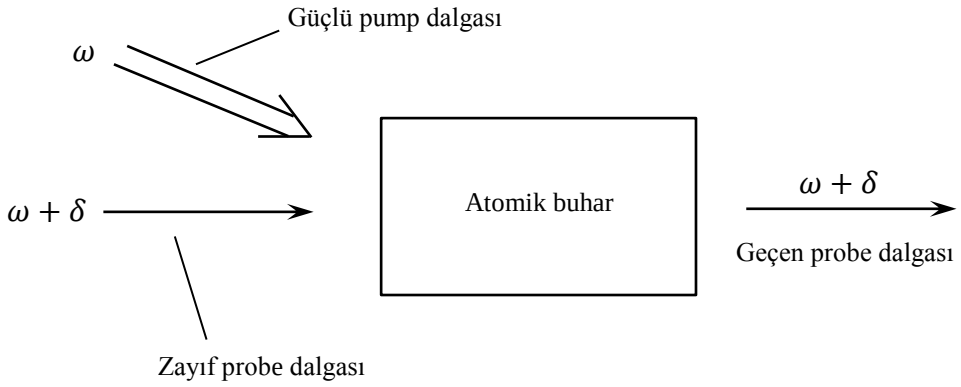
ifadesi elde edilir. Burada,

$$W = \frac{\frac{1}{2} I_{z,pm} F(\omega_{pr}) [D(\omega_{pr}) + D^*(\omega_{pm})]}{1 + \frac{1}{2} I_{z,pm} F(\omega_{pr}) [D(\omega_{pr}) + D^*(2\omega_{pm} - \omega_{pr})]}, \tag{5.3}$$

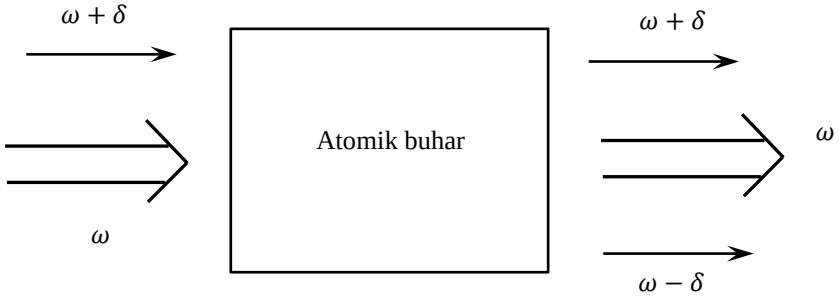
şeklinde tanımlanır.

5.3. İki Seviyeli Sistemlerde Optiksel Dalga Karışımı

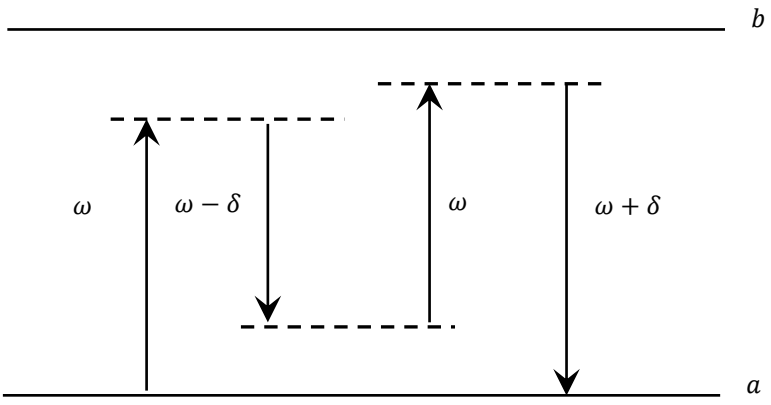
Bu bölümde, pump alanı olarak adlandırılan kuvvetli bir optiksel alan ile probe alanı olarak adlandırılan bir ya da daha fazla zayıf optiksel alanın eşzamanlı varlığında iki seviyeli atomlar topluluğunun tepkisi incelenecektir. Bu tür bir olay örneği doyum spektroskopisi olup Şekil (5.2)' de gösterilmiştir. Böylesi bir deneyde ortamın probe dalgasına olan tepkisinin pump dalgasının varlığında nasıl değiştiği belirlenir. Ayrıca, probe dalgasının iletimi, ω frekansı, pump dalgasının şiddeti ile pump ve probe dalgaları arasındaki frekans kayması δ' nın fonksiyonu olarak ölçülür.



Şekil 5.2. Doyum spektroskobisi düzeneği



(a)



(b)

Şekil 5.3. (a) Dört dalga karışımı b) δ' nın değeri negatif olduğu durum için dört dalga karışım sürecinin enerji seviye tanımı.

Bu tür deneylerin sonuçları, dipol geçiş mometleri ve durulma zamanları (T_1, T_2) hakkında bilgi elde etmek için kullanılabilir. Bu bölümde göz önüne alınan bir diğer etkileşme örneği Şekil (5.3)' de gösterilen çoklu dalga karışım deneyidir. Şekilden de görüleceği gibi ω frekenslı pump dalgasıyla $\omega + \delta$ frekanslı probe dalgası ortam boyunca hemen hemen aynı doğrultuda yayılır. Bu geometri için, Şekil (5.3b)'de gösterilen dört dalga karışım süreci faz uyumlu hale gelir ve bu süreç $\omega - \delta$ frekansında simetrik bir yan bandın üretimine neden olur.

Pump lazerinin düşük şiddetlerinde $\omega + \delta$ ve $\omega - \delta$ frekanslarındaki atomik sistemin tepkisi pertürbasyon teorisi kullanılarak hesaplanabilir (Boyd, 2003).

5.3.1. Pump ve Probe Alanlarının Varlığında İki Seviyeli Bir Atom için Yoğunluk Matris Denklemlerinin Çözümü

$$\tilde{E}(t) = Ee^{-i\omega t} + c.c. \tag{5.4}$$

ile verilen optiksel alanın etkisi altındaki iki seviyeli atomun dinamik davranışı nüfus terslenimi ($\omega = \rho_{bb} - \rho_{aa}$) ve kompleks dipol genliği ($p = \mu_{ab}\sigma_{ba}$) için hareket denklemleri vasıtasıyla tanımlanabilir. Kompleks dipol genliği $\tilde{p}(t)$ atomik dipol momentin beklenen değerine,

$$\tilde{p}(t) = pe^{-i\omega t} + c.c. \tag{5.5}$$

ile bağlıdır. p ve ω için hareket denklemleri,

$$\frac{dp}{dt} = \left(i\Delta - \frac{1}{T_2}\right)p - \frac{i}{\hbar}|\mu_{ba}|^2 E\omega \tag{5.6}$$

$$\frac{d\omega}{dt} = -\frac{\omega - \omega^{(eq)}}{T_1} + \frac{4}{\hbar}\mathrm{Im}(pE^*) \tag{5.7}$$

ile verilir. Burada, $\Delta = \omega - \omega_{ba}$. Uygulanan optiksel alanın genliği,

$$E = E_0 + E_1 e^{-i\delta t} \tag{5.8}$$

şeklinde tanımlanır ve $|E_1| \ll |E_0|$ olarak kabul edilir. (5.8) denklemi (5.4) denkleminde yerine yazılırsa elektrik alan için,

$$\tilde{E}(t) = E_0 e^{-i\omega t} + E_1 e^{-i(\omega+\delta)t} + c.c. \quad (5.9)$$

alternatif ifadesi elde edilir. Burada E_0 ve E_1, sırasıyla, pump ve probe dalgalarının kompleks genlikleridir. (5.6) ve (5.7) denklemleri (5.8)' de verilen alan için tam olarak çözülemez. Bunun yerine çözüm kuvvetli alanın E_0 genliğince tam ve zayıf alanın E_1 genliğince de en düşük mertebede doğrudur. Bundan dolayı (5.6) ve (5.7) denklemlerinin kararlı durum çözümü,

$$p = p_0 + p_1 e^{-i\delta t} + p_{-1} e^{i\delta t} \quad (5.10)$$

$$\omega = \omega_0 + \omega_1 e^{-i\delta t} + \omega_{-1} e^{i\delta t} \quad (5.11)$$

formunda olmalıdır. Burada p_0 ve ω_0, sadece pump alanın var olduğu durumdaki çözümleri göstermektedir ve diğer terimlerin bu çözümlerle karşılaştırdıklarında küçük oldukları kabul edilir:

$$|p_1|, |p_{-1}| \ll |p_0|, \qquad |\omega_1|, |\omega_{-1}| \ll |\omega_0| \quad (5.12)$$

Probe alanın E_1 genliğindeki en düşük mertebeye göre (5.6) ve (5.7) denkleminin çözümünde 0 ve $\pm\delta$ frekensları sadece var olabilir. Aynı zamanda $\omega(t)$' nin reel bir nicelik olabilmesi için ω_{-1}' in ω_1^*' a eşit olması gerekir. Bundan dolayı, $\omega(t) = \omega_0 + 2|\omega_1|\cos(\delta t + \phi)$ formundadır. Burada ϕ , ω' nın fazıdır. Sonuç olarak, pump ve probe alanlarının eş zamanlı etkisinde popülasyon farkı pump-probe frekans farkında harmonik olarak salınır ve ω_1, popülasyon salınımın kompleks genliğini gösterir. (5.10) ve (5.11) deneme çözümleri (5.6) ve (5.7) yoğunluk matris denklemlerinde yerine yazılıp aynı zamana bağlı terimler eşitlenerek ve birden çok küçük niceliğin çarpımını içeren terimler düşürülerek, hareket denklemlerin çözümleri elde edilir. Dipol genliği için hareket denkleminin (5.6)' nın sıfır frekanslı kısmı

$$0 = \left(i\Delta - \frac{1}{T_2}\right) p_0 - \frac{i}{\hbar} |\mu_{ba}|^2 E_0 \omega_0, \quad (5.13)$$

ile verilir ve bu kısmın çözümü ise,

$$p_0 = \frac{\hbar^{-1} |\mu_{ba}|^2 E_0 \omega_0}{\left(\Delta + \frac{i}{T_2}\right)} \quad (5.14)$$

şeklindedir.

Benzer şekilde, denklem (5.6)' nın $e^{-i\delta t}$ ile salınan kısmı

$$-i\delta p_1 = \left(i\Delta - \frac{1}{T_2}\right) p_1 - \frac{i}{\hbar}|\mu_{ba}|^2(E_0\omega_1 + E_1\omega_0) \tag{5.15}$$

olup çözümü

$$p_1 = \frac{\hbar^{-1}|\mu_{ba}|^2(E_0\omega_1 + E_1\omega_0)}{(\delta + \Delta) + \frac{i}{T_2}} \tag{5.16}$$

ile verilir. Son olarak denklem (5.6)' nın $e^{+i\delta t}$ ile salınan kısmı

$$-i\delta p_{-1} = \left(i\Delta - \frac{1}{T_2}\right) p_{-1} - \frac{i}{\hbar}|\mu_{ba}|^2 E_0\omega_{-1} \tag{5.17}$$

olup çözüm için

$$p_{-1} = \frac{\hbar^{-1}|\mu_{ba}|^2 E_0\omega_{-1}}{(\Delta - \delta) + \frac{i}{T_2}} \tag{5.18}$$

elde edilir.

Benzer şekilde (5.10) ve (5.11) deneme çözümleri (5.7) terslenim denkleminde yerine yazılarak sıfır frekanslı kısmı için

$$0 = -\frac{\left(\omega_0 - \omega^{(eq)}\right)}{T_1} + \frac{4}{\hbar} Im(p_0 E_0^*), \tag{5.19}$$

elde edilir. Bu ifadede p_0 için elde edilen (5.14) denklemi kullanılarak

$$\frac{\omega - \omega^{(eq)}}{T_1} = \Omega^2\omega_0 Im\left(\frac{\Delta - \frac{i}{T_2}}{\Delta^2 + \frac{1}{{T_2}^2}}\right) = -\frac{\Omega^2\omega_0/T_2}{\Delta^2 + 1/{T_2}^2} \tag{5.20}$$

elde edilir. Burada $\Omega = 2|\mu_{ba}E|/\hbar$ rezonanstaki Rabi frekansıdır. (5.18) denkleminin çözümünden ω_0 için,

$$\omega_0 = \frac{\omega^{(eq)}(1 + \Delta^2 T_2^2)}{1 + \Delta^2 T_2^2 + \Omega^2 T_2 T_1} \tag{5.21}$$

elde edilir.

$\pm\delta$ frekansında salınan $Im(pE^*)$ kısmı

$$Im(pE^*) = Im\left(p_0E_1^*e^{i\delta t} + p_1E_0^*e^{-i\delta t} + p_{-1}E_0^*e^{i\delta t}\right)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2i}\left(p_0E_1^*e^{i\delta t} + p_1E_0^*e^{-i\delta t} + p_{-1}E_0^*e^{i\delta t}\right. \\ &\qquad - p_0^*E_1e^{-i\delta t} - p_1^*E_0e^{i\delta t} \\ &\qquad \left. - p_{-1}^*E_0e^{-i\delta t}\right) \end{aligned} \tag{5.22}$$

ile verilir. Bu sonuç, (5.7) denkleminde yerine yazılırsa sonuç ifadeni $e^{-i\delta t}$ ile değişen kısmı

$$-i\delta\omega_1 = -\frac{\omega_1}{T_1} - \frac{2i}{\hbar}(p_1E_0^* - p_0^*E_1 - p_{-1}^*E_0) \tag{5.23}$$

ile verilir. Bu ifade ω_1 için çözülürse

$$\omega_1 = \frac{2\hbar^{-1}(p_1E_0^* - p_0^*E_1 - p_{-1}^*E_0)}{\left(\delta + \frac{i}{T_1}\right)} \tag{5.24}$$

elde edilir. Benzer biçimde denklem (5.7)' nin $e^{-i\delta t}$ ile salınan kısmından

$$\omega_{-1} = 2\hbar^{-1}\frac{(p_1^*E_0 - p_0E_1^* - p_{-1}E_0^*)}{\left(\delta - \frac{i}{T_1}\right)} \tag{5.25}$$

elde edilir. Bu noktada, p_0, p_1, p_{-1}, ω_0, ω_1, ω_{-1} nicelikleri için altı çiftlenimli denklem takımı [(5.14), (5.16), (5.18), (5.21), (5.24), (5.25)] vardır. p_0, p_1, p_{-1} için elde edilen ifadeler denklem (5.25)' de yerine yazılırsa

$$\left(\delta + \frac{i}{T_1}\right)\omega_1 = \frac{2|\mu_{ba}|^2}{\hbar^2}\left(\frac{|E_0|^2\omega_1}{\delta + \Delta + \frac{i}{T_2}} + \frac{E_1E_0^*\omega_0}{\delta + \Delta + \frac{i}{T_2}} - \frac{E_1E_0^*\omega_0}{\Delta - \frac{i}{T_2}} - \frac{|E_0|^2\omega_1}{\Delta - \delta - \frac{i}{T_2}}\right) \tag{5.26}$$

elde edilir. Bu denklemin ω_1 için çözümü

$$\omega_1 = -\frac{\omega_0^2|\mu_{ba}|^2E_1E_0^*\hbar^{-2}\left(\delta - \Delta + \frac{i}{T_2}\right)\left(\delta + \frac{2i}{T_2}\right)\left(\Delta - \frac{i}{T_2}\right)^{-1}}{\left\{\left(\delta + \frac{i}{T_1}\right)\left(\delta - \Delta + \frac{i}{T_2}\right)\left(\Delta + \delta + \frac{i}{T_2}\right) - \Omega^2\left(\delta + \frac{i}{T_2}\right)\right\}} \tag{5.27}$$

elde edilir.

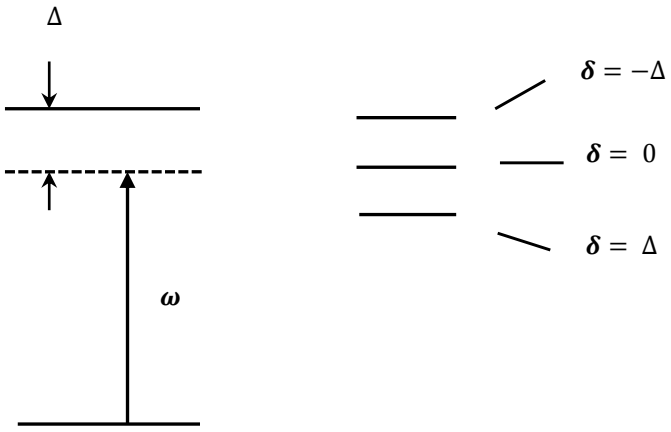
Bu ifadenin paydasında gözüken terim

$$D(\delta) = \left(\delta + \frac{i}{T_1}\right)\left(\delta - \Delta + \frac{i}{T_2}\right)\left(\Delta + \delta + \frac{i}{T_2}\right) - \Omega^2\left(\delta + \frac{i}{T_2}\right) \tag{5.28}$$

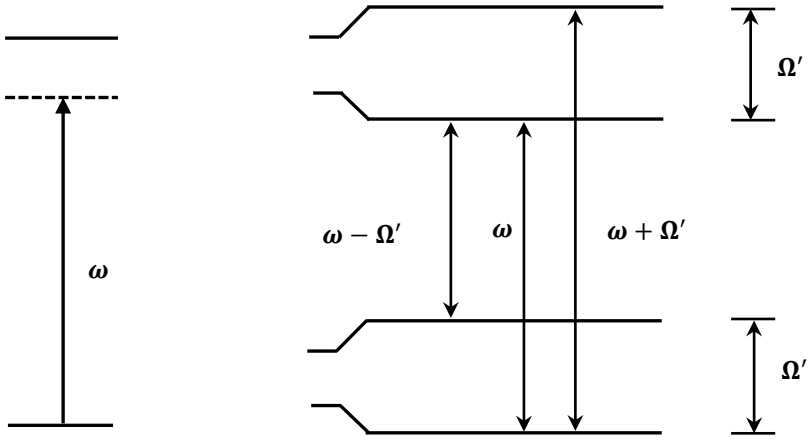
şeklinde tanımlanırsa

$$\omega_1 = -2\omega_0|\mu_{ba}|^2 E_1 E_0^* \hbar^{-2} \frac{\left(\delta - \Delta + \frac{i}{T_2}\right)\left(\delta + \frac{2i}{T_2}\right)}{\left(\Delta - \frac{i}{T_2}\right) D(\delta)} \tag{5.29}$$

denklemine ulaşılır.



(a)



(b)

Şekil 5.4 (a) $\Omega^2 \to 0$, limitinde iki seviyeli sistemde optiksel dalga karışımı. **(**b) Genel durum da $D(\delta)$ fonksiyonuyla verilen pump ve probe alanları için iki seviyeli atomun tepkisindeki rezonans durumu.

Dikkat edilecek olursa, pump dalgası çizgi merkezine ayarlandığında (yani, $\Delta = 0$) ya da $D(\delta)$ fonksiyonu sıfır olduğunda ω_1 (sonuç olarak, p_1 ve p_{-1}) bir rezonans gösterir. $D(\delta)$ fonksiyonun rezonans doğası incelendiğinde ($\Omega^2 \to 0$ limitinde) bu fonksiyon üç terimin çarpımı şeklinde yazılabilir:

$$D(\delta) = \left(\delta + \frac{i}{T_1}\right)\left(\Delta + \delta + \frac{i}{T_2}\right)\left(\delta - \Delta + \frac{i}{T_2}\right) \tag{5.30}$$

Bu denklemde, $D(\delta)$' nın kökleri

$$\delta = 0, \pm\Delta \tag{5.31}$$

ile verilir. Bu frekansların pozisyonları Şekil 5.4a' da gösterilmiştir. Ω^2' nin küçük olmadığı genel durumda Denklem (5.28)'in tam formu kullanılmak zorundadır. Onun rezonans yapısını belirlemek için $D(\delta)$, reel ve imajiner kısımlarına ayrılarak yazılmalıdır:

$$D(\delta) = \delta\left(\delta^2 - \Omega'^2 - \frac{1}{T_2^2} - \frac{2}{T_1 T_2}\right) + i\left(\frac{\delta^2 - \Delta^2}{T_1} + \frac{2\delta^2}{T_2} - \frac{\Omega^2}{T_2} - \frac{1}{T_1 T_2^2}\right) \tag{5.32}$$

Burada, $\Omega' = (\Omega^2 + \Delta^2)^{1/2}$, kaydırılmış Rabi frekansıdır. D' nin reel kısmı

$$\delta = 0, \quad \delta = \pm\left(\Omega'^2 + \frac{1}{T_2^2} + \frac{2}{T_1 T_2}\right)^{1/2} \tag{5.33}$$

değerlerinde sıfır olur. Eğer $\Omega' T_2$ birden daha büyükse, bu üç rezonans belirgin biçimde ayrışacak ve onların özellikleri ayrıca tanımlanabilecektir. Bu limitte, $D(\delta)$ fonksiyonu

$$D(\delta) = \delta(\delta^2 - \Omega'^2) + \mathrm{i}\left(\frac{\delta^2 - \Delta^2}{\mathrm{T_1}} + \frac{2\delta^2 - \Omega^2}{\mathrm{T_2}}\right) \tag{5.34}$$

haline gelir ve üç rezonans

$$\delta = 0, \pm\Omega' \tag{5.35}$$

değerlerinde olur. $\delta = 0$' daki rezonans civarında, $D(\delta)$

$$D(\delta) = -\Omega'^2(\delta + i\Gamma_0), \tag{5.36a}$$

şeklindedir. Burada,

$$\Gamma_0 = \frac{\Delta^2/T_1 + \Omega^2/T_2}{\Delta^2 + \Omega^2} \tag{5.36b}$$

şeklinde tanımlanır. Benzer şekilde, $\delta = \pm\Omega'$' daki rezonanslarda $D(\delta)$ fonksiyonu,

$$D(\delta) = 2\Omega'^2[(\delta \pm \Omega') + i\Gamma_{\pm}] \tag{5.37a}$$

ile verilir. Burada,

$$\Gamma_{\pm} = \frac{\dfrac{\Omega^2}{T_1} + (2\Delta^2 + \Omega^2)/T_2}{2(\Delta^2 + \Omega^2)} \tag{5.37b}$$

şeklinde tanımlanır. Bu rezonanların konumları da Şekil 5.4b' de gösterilmiştir.

$\pm\delta$ yan band frekanslarındaki atomik dipolün tepkisini hesaplamak için (5.28) denklemi (5.16)' da yerine yazılırsa

$$p_1 = \frac{\hbar^{-1}|\mu_{ba}|^2\omega_0 E_1}{\Delta + \delta + i/T_2} \times \left[1 - \frac{(1/2)\Omega^2(\delta - \Delta + i/T_2)(\delta + 2i/T_2)/(\Delta - i/T_2)}{(\delta + i/T_1)(\delta - \Delta + i/T_2)(\Delta + \delta + i/T_2) - \Omega^2(\delta + i/T_2)}\right] \tag{5.38}$$

elde edilir. Bu ifadenin ikinci terimi,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{-\frac{1}{2}\Omega^2(\delta - \Delta + i/T_2)(\delta + 2i/T_2)(\Delta - i/T_2)^{-1}}{(\delta + i/T_1)(\delta - \Delta + i/T_2)(\delta + \Delta + i/T_2) - \Omega^2(\delta + i/T_2)}\, d\delta = 0 \tag{5.39}$$

ile verilen ilişkiyi sağlar (Sargent 1978). (5.39) denklemi basitleştirilecek olursa

$$p_1 = \frac{\hbar^{-1}|\mu_{ba}|^2\omega_0 E_1}{D(\delta)}\left[\left(\left(\delta + \frac{i}{T_1}\right)\left(\delta - \Delta + \frac{i}{T_2}\right) - \frac{1}{2}\Omega^2\frac{\delta}{\Delta - i/T_2}\right)\right] \tag{5.40}$$

elde edilir. Uygulanan probe dalgasına aksi yan bandındaki tepki için

$$p_{-1} = \frac{2\omega_0|\mu_{ba}|^4 E_0^2 E_1^*(\delta - \Delta - i/T_2)(-\delta + 2i/T_2)(\Delta + i/T_2)^{-1}}{\hbar^3(\Delta - \delta + i/T_2)D^*(\delta)} \tag{5.41}$$

elde edilir.

5.3.2. Nonlineer Alınganlık İfadeleri

p_1 probe dalgası tarafından oluşturulan $\omega + \delta$ frekansındaki dipol momentin kompleks genliği olup bu frekanstaki kutuplanma ile arasındaki ilişki $P(\omega + \delta) = Np_1$ dir. $P(\omega + \delta)$, $\epsilon_0\chi^{(1)}(\omega + \delta)E_1$'e eşitlenirse $\chi^{(1)}(\omega + \delta) = Np_1/\epsilon_0 E_1$ elde edilir. Denk. (5.40) kullanılarak da lineer alınganlık için

$$\chi^{(1)}(\omega + \delta) = \frac{N|\mu_{ba}|^2\omega_0}{\epsilon_0\hbar D(\delta)}\left[\left(\delta + \frac{i}{T_1}\right)\left(\delta - \Delta + \frac{i}{T_2}\right) - \frac{1}{2}\Omega^2\frac{\delta}{\Delta - i/T_2}\right] \tag{5.42}$$

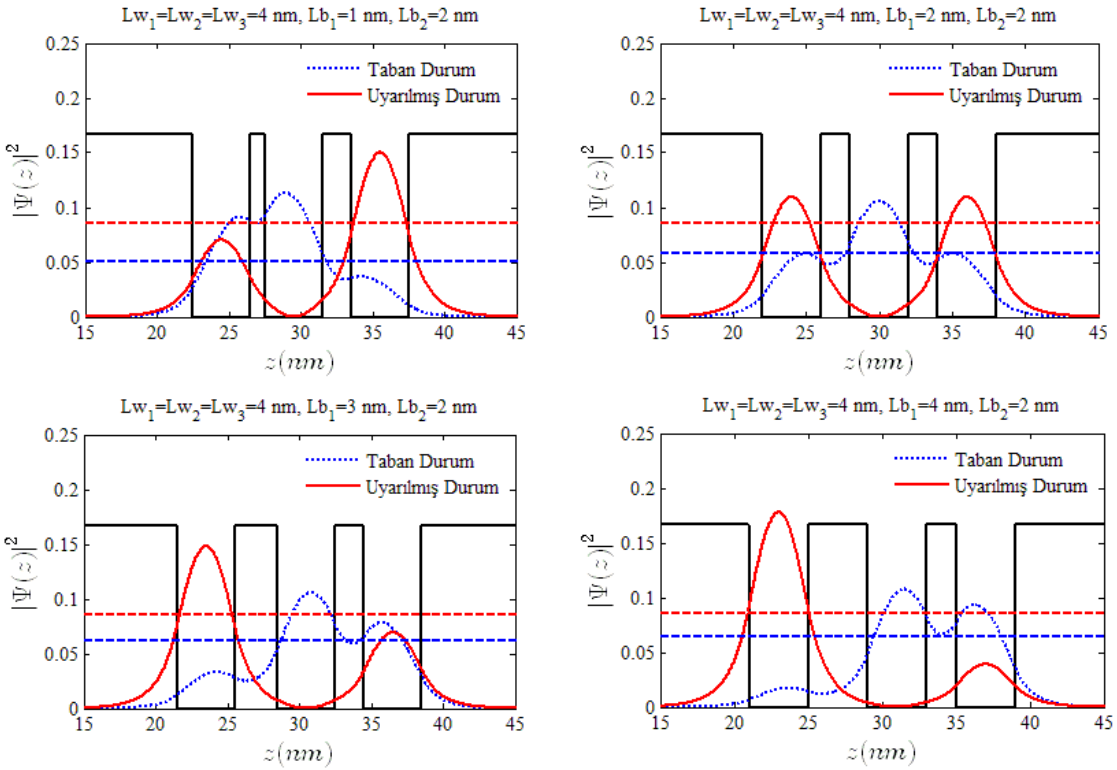
elde edilir. Dikkat edilecek olursa bu ifade pump dalgasının şiddetine bağlıdır. Benzer şekilde $\omega - \delta$ frekansında salınan nonlineer kutuplanma kısmı, $P(\omega - \delta) = Np_{-1}$ ile verilir. Eğer bu nicelik, $3\epsilon_0\chi^{(3)}[\omega - \delta = \omega + \omega - (\omega + \delta)]E_0^2E_1^*$' e eşitlenip (5.41) denkleminin kullanılmasıyla

$$\chi^{(3)}[\omega - \delta = \omega + \omega - (\omega + \delta)] = \frac{2N\omega_0|\mu_{ba}|^4(\delta - \Delta - i/T_2)(-\delta + 2i/T_2)(\Delta + i/T_2)^{-1}}{3\epsilon_0\hbar^3(\Delta - \delta + i/T_2)D^*(\delta)} \tag{5.43}$$

elde edilir. Bu nicelik, üçüncü mertebe alınganlık olarak adlandırılır ve lazer şiddetine kuvvetlice bağlıdır (Boyd, 2003).

6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

6.1. Çoklu Kuantum Kuyusunun Elektronik Özellikleri

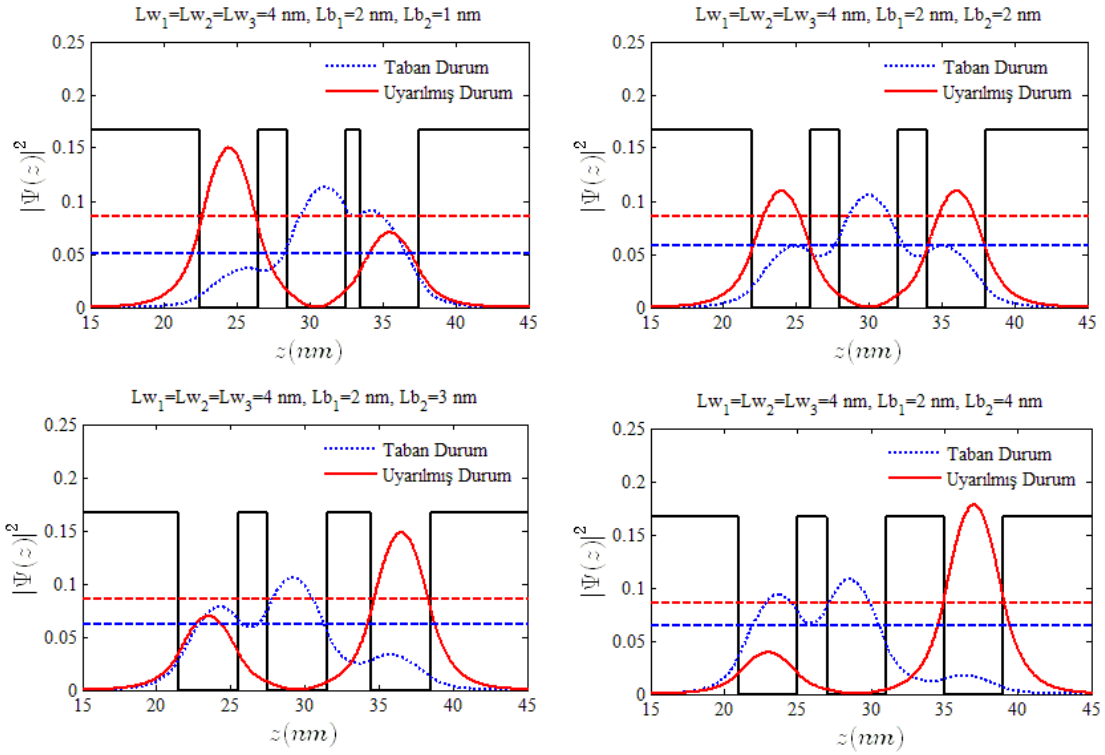


Şekil 6.1. İlk bariyer genişliğine bağlı olarak taban ve uyarılmış durum için olasılık yoğunlukları ve enerji seviyeleri.

Şekil 6.1' de, farklı Lb_1 değerleri için üçlü kuantum kuyusundaki taban ve uyarılmış durum olasılık yoğunlukları verilmiştir.

Lb_1 = 1 nm değeri için, yapı asimetriktir. Bu durumda, taban durum olasılık yoğunluğu birinci ve ikinci kuyu bölgelerinde daha büyük değere sahip iken uyarılmış durum için olasılık yoğunluğu üçüncü kuyu bölgesinde daha büyük bir değere sahip olur.

Lb_1 = 2 nm değeri için, yapı simetrik hale gelir. Beklenildiği gibi taban durum için olasılık yoğunluğu merkezde en büyük değerine sahip iken birinci ve üçüncü kuyularda olasılık yoğunluğu birbirine eşit ve daha küçük değerlere sahiptir. Uyarılmış durum için ise elektron yoğunluğu merkezde (ikinci kuyu içerisinde) sıfır iken birinci ve üçüncü kuyularda maksimum değere sahip olur.



Şekil 6.2. İkinci bariyer genişliğine bağlı olarak taban ve uyarılmış durum için olasılık yoğunlukları ve enerji seviyeleri.

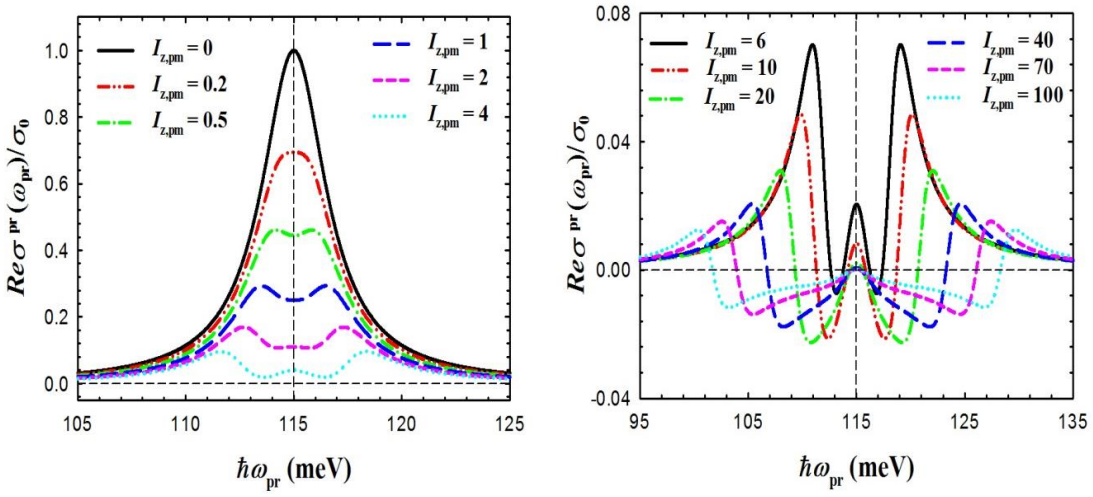
Lb_1 = 3 ve 4 nm değerleri için yapı tekrar asimetrik hale gelir ve Lb_1' in artan değerleriyle taban ve uyarılmış durum olasılık yoğunluklarının yapı merkezine göre simetrisi kırılır. Ayrıca, Lb_1 artırıldığında taban durum olasılık yoğunluğunun birinci kuyu bölgesindeki değeri azalırken ikinci ve üçüncü kuyu bölgelerindeki değerleri ise artmaktadır. Uyarılmış durum olasılık yoğunluk için ise tam tersi bir davranış söz konusudur. Yani, bu değerin birinci kuyu bölgesinde arttığı ve aynı oranda da üçüncü kuyu bölgesinde azaldığı görülmüştür.

Şekil 6.2 de, farklı Lb_2 değerleri için üçlü kuantum kuyusundaki taban ve uyarılmış durum olasılık yoğunlukları verilmiştir. Bu durumda yukarıda anlatılan senaryo beklenildiği gibi tam ters biçimde gerçekleşmektedir. Yani artan Lb_2 değerleriyle taban durum olasılık yoğunluk pikleri birinci ve ikinci kuyu bölgesine kayarken uyarılmış durum olasılık yoğunluğu piki ise üçüncü kuyu bölgesine kaymaktadır.

Ayrıca, yukarıdaki her iki şekilden hem birinci hem de ikinci bariyer genişliğindeki artma ile taban ve uyarılmış durum arasındaki enerji farkının azaldığı görülmüştür.

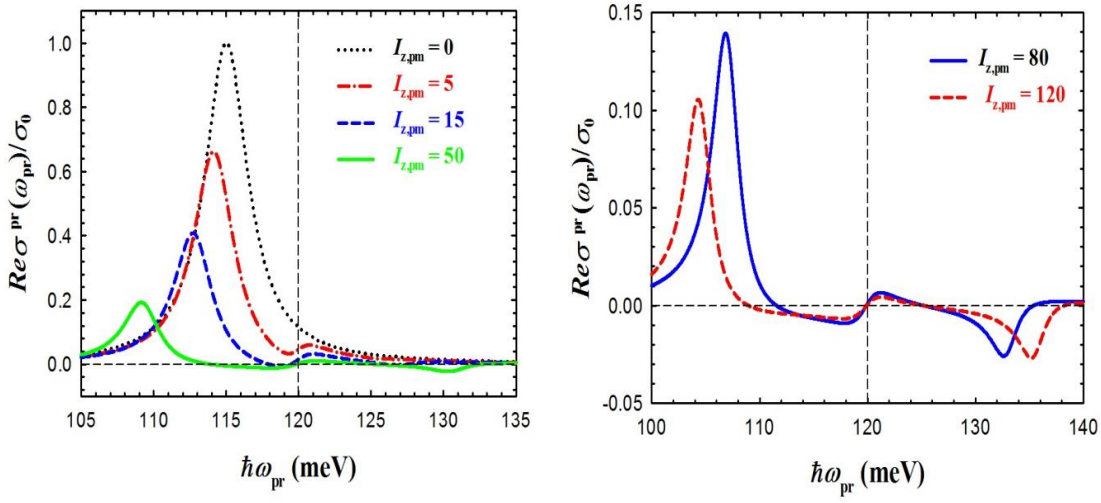
6.2. Çoklu Kuantum Kuyularının Pump-Probe Optiksel Tepkisi

6.2.1. Probe İletkenliğinin Spektral Biçimi



(a) (b)

Şekil 6.3. $\mathrm{Re}\sigma_{zz}^{pr}/\sigma_0$ nin farklı $I_{z,pm}$ değerleri için spektral biçimi. $\gamma_{IT}=1.8\ meV$, $\Gamma_{IT}=1\,meV$ ve $\hbar\omega_{pm}=\hbar\omega_{IT}=115\ meV$. (a) Zayıf pump durumu. (b) Kuvvetli pump durumu.



(a) (b)

Şekil 6.4. $\mathrm{Re}\sigma_{zz}^{pr}/\sigma_0$ nin farklı $I_{z,pm}$ değerleri için spektral biçimi. $\gamma_{IT}=1.8\ meV$, $\Gamma_{IT}=1\,meV$, $\hbar\omega_{IT}=115\ meV$ ve $\hbar\omega_{pm}=120\ meV$. (a) Zayıf pump durumu. (b) Kuvvetli pump durumu.

$\Delta_{pm} = \omega_{pm} - \omega_{IT}$, $\delta = \omega_{pr} - \omega_{pm}$, $\Omega_{Rpm} = \left(I_{z,pm}\gamma_{IT}\Gamma_{IT}\right)^{1/2}$ Rabi flopping frekansı ve $\breve{\Omega}_{Rpm} = \left[\Omega_{Rpm}^2 + \Delta_{pm}^2\right]^{1/2}$ genelleştirilmiş Rabi flopping frekansını göstermektedir.

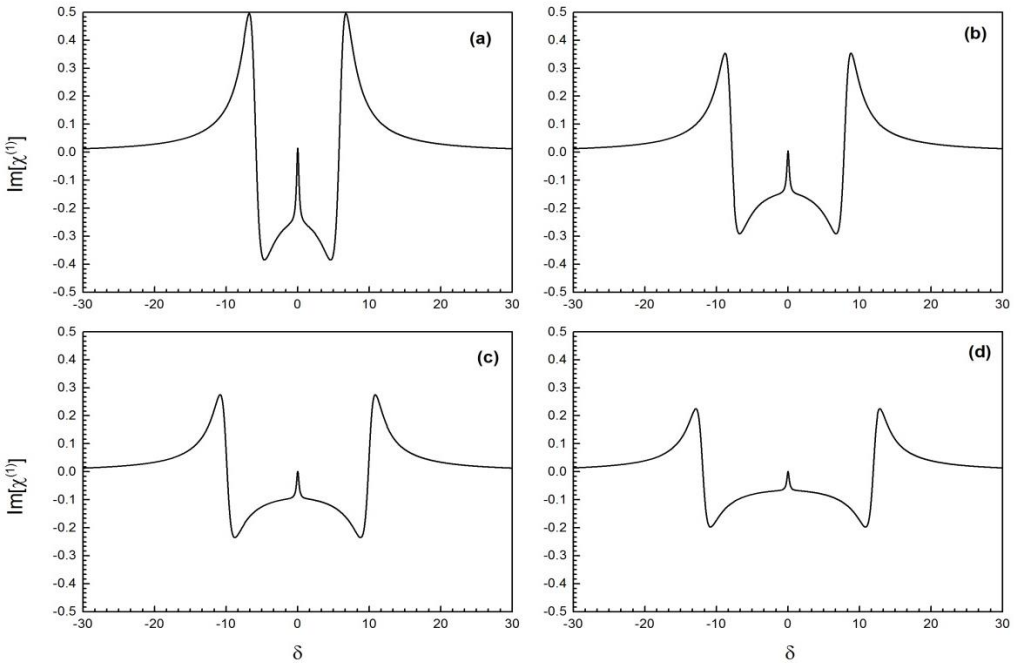
Şekil 6.3' de rezonans durumunda ($\Delta_{pm} = 0$), farklı pump şiddetleri için probe iletkenliğinin spektral biçimi verilmiştir. Pump şiddetinin sıfır olduğu durumda spektrum lorenziyen iken artan pump şiddetleriyle birlikte Mollow tipi biçime dönmüştür. Bu durum, kuvvetli pump durumunda daha belirgindir. Ayrıca, rezonans durumunda, hem zayıf hem de kuvvetli pump şiddetleri için spektrumun simetrik olduğu görülmüştür. Şekil 6.3b' den spektrumun merkezinin soğurma benzeri yanbandlarının ise dispersiyon benzeri davranış gösterdiği görülmektedir.

Rezonans dışı durumda ($\Delta_{pm} \neq 0$) ise spektrum asimetrik hale gelmiştir. Bu durumda, merkez yapı $\delta \cong 0$ civarında yerleşmiş iken ve kuvvetli pump durumu dispersiyon benzeri davranış gösterirken yan bantlar $\delta \cong \pm\breve{\Omega}_{Rpm}$ da yerleşir. Bu durum bir önceki durumun tam tersidir. Sonuçlar yukarıdaki şekillerden de kolaylıkla görülmektedir (Şekil 6.4).

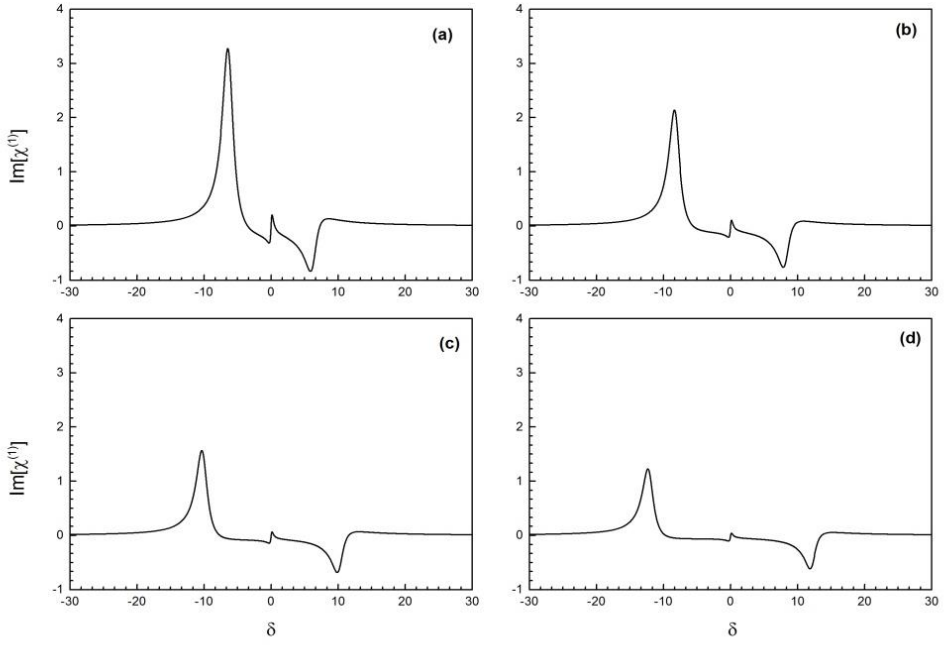
6.2.2. Probe Demetinin Soğurma ve Dispersiyon Spektrumları

Tez çalışmasının bu aşamasında, soğurma ve dispersiyon spektrumlarının pump alan frekansı (Δ) ve şiddetine (Ω) bağlılıkları incelenecektir. İki seviyeli sistemdeki birinci mertebe probe soğurma spektrumu çoğunlukla Mollow soğurma spektrumu olarak da bilinir.

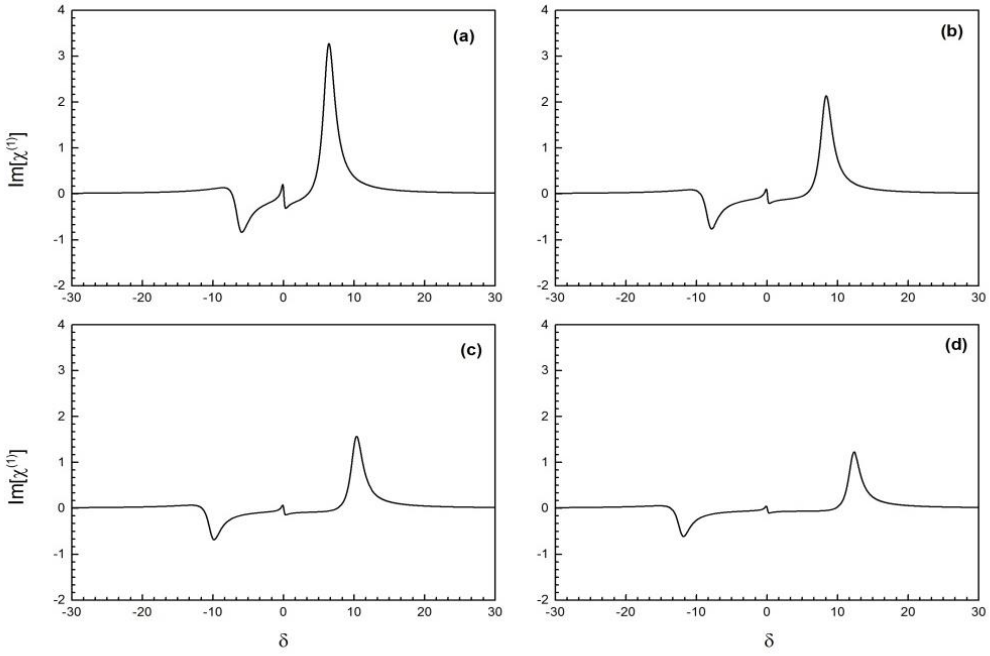
Şekil 6.5-6.7' de Ω' nın artan değerleriyle $\mathrm{Im}\left[\chi^{(1)}\right]$' in pik değerlerinin azaldığı görülmektedir. Şekil 6.5' de, rezonans durumunda (Δ = 0 ps^{-1}), $\mathrm{Im}\left[\chi^{(1)}\right]$' in merkezi soğurma benzeri davranış gösterirken yan bantları dispersiyon benzeri davranış göstermektedir. Şekil 6.5'den soğurmanın yaklaşık $\delta = \pm\Omega$ değerlerinde de sıfıra eşit olduğu görülür.



Şekil 6.5. Rezonans durumunda (Δ = 0), dört farklı Ω değeri için δ parametresinin fonksiyonu olarak keyfi birimlerdeki soğurma spektrumları: (a) Ω = -6 ps^{-1}, (b) Ω = -8 ps^{-1}, (c) Ω = -10 ps^{-1}, (d) Ω = -12 ps^{-1}.

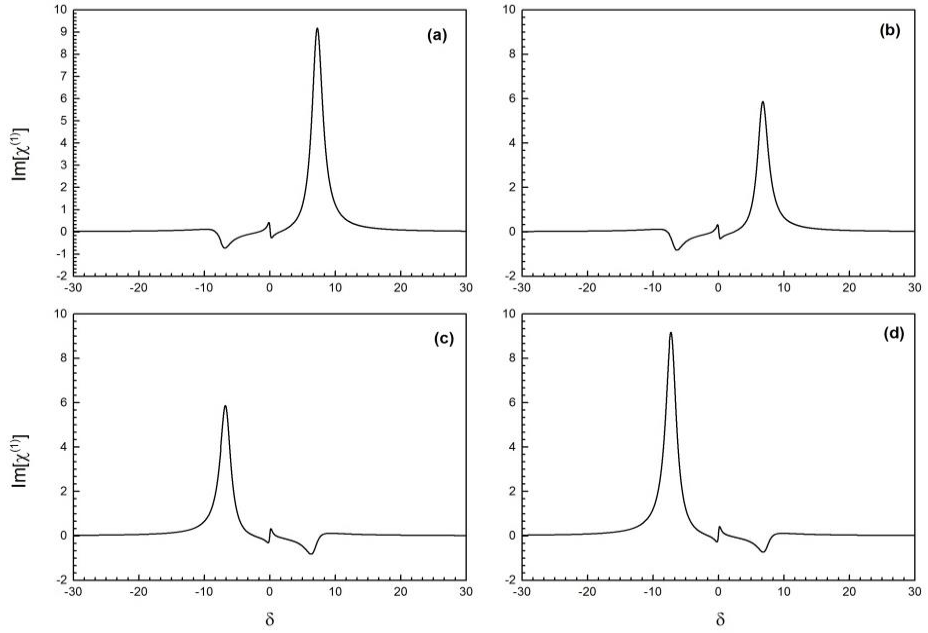


Şekil 6.6. Rezonans dışı durumunda (Δ = 2 ps^{-1}), dört farklı Ω değeri için δ parametresinin fonksiyonu olarak keyfi birimlerdeki soğurma spektrumları: (a) Ω = -6 ps^{-1}, (b) Ω = -8 ps^{-1}, (c) Ω = -10 ps^{-1}, (d) Ω = -12 ps^{-1}.

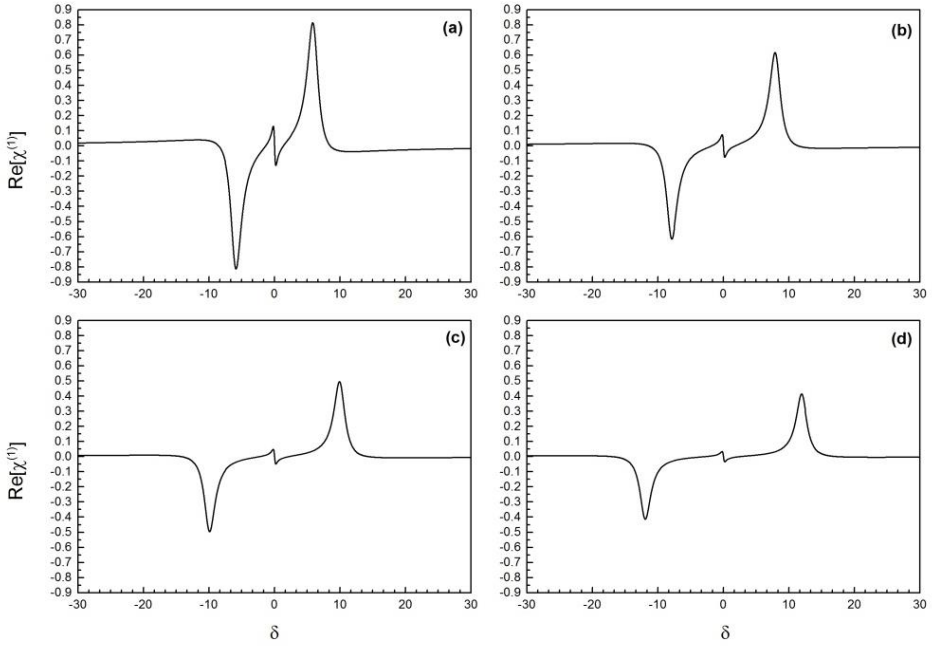


Şekil 6.7. Rezonans dışı durumunda (Δ = -2 ps^{-1}), dört farklı Ω değeri için δ parametresinin fonksiyonu olarak keyfi birimlerdeki soğurma spektrumları: (a) Ω = -6 ps^{-1}, (b) Ω = -8 ps^{-1}, (c) Ω = -10 ps^{-1}, (d) Ω = -12 ps^{-1}.

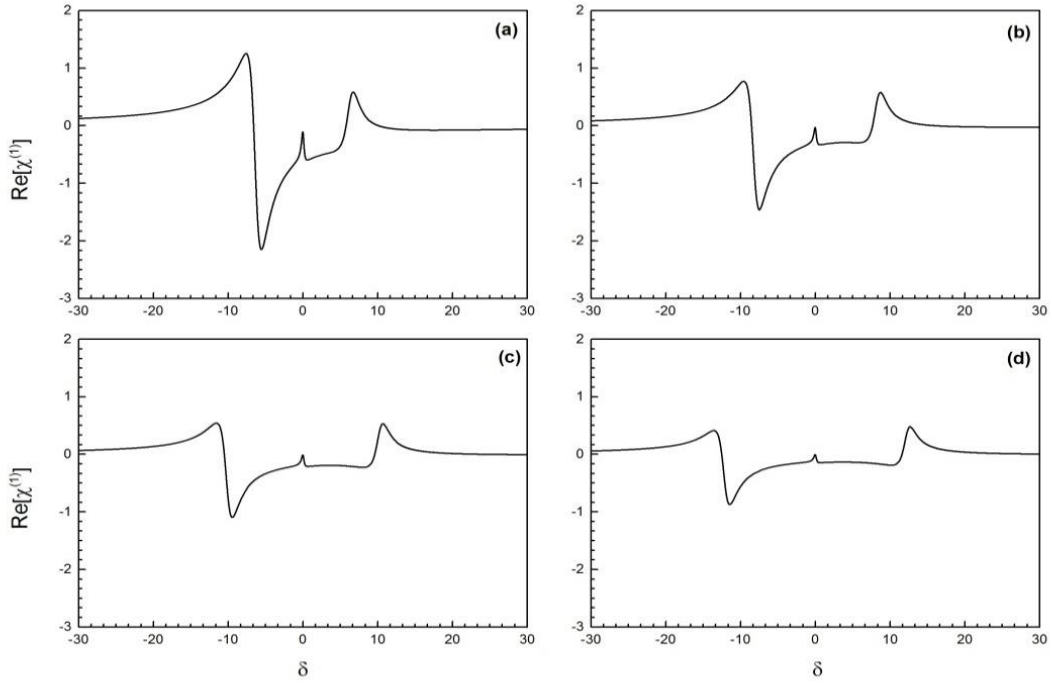
Rezonans dışı durumlarda (Δ = 2 ps^{-1} ve Δ = -2 ps^{-1}) ise $\mathrm{Im}\left[\chi^{(1)}\right]$' in davranışı tam tersine dönmektedir (Şekil 6.6 ve Şekil 6.7). Yani, bu durumlarda merkez dispersif yapı gösterirken yan bantlar ise sırasıyla soğurma/kazanç (Δ = 2 ps^{-1}) ve kazanç/soğurma (Δ = -2 ps^{-1}) benzeri davranışlar göstermektedir. Kuvvetli pump alanı her iki seviyeyi çift seviyeye ayırır ve Δ negatif iken zayıf bir prob alanı ortam boyunca yayıldığında rezonans noktasının mavi tarafında (daha yüksek frekanslarda) kuvvetli bir soğurma piki kırmızı tarafında (daha düşük frekanslarda) ise daha zayıf bir kazanç piki elde edilir. Δ pozitif işarete sahip olduğunda ise tam tersi bir durum gerçekleşir. Yani, bu durumda, rezonans noktasının mavi tarafında zayıf bir kazanç piki görülürken kırmızı tarafında ise daha kuvvetli bir soğurma piki gözlenmiştir. Ayrıca, rezonans dışı durumlarda, yan bandların $\delta = \pm\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$ değerlerinde gözüktüğü belirlenmiştir. Yapılan hesaplamalardan görüldüğü kadarıyla rezonans ve rezonans dışı durumlar arasındaki diğer önemli bir farklılıkta rezonans durumunda soğurma spektrumu simetrik iken rezonans dışı durumda ise bu spektrum asimetrik hale gelir.



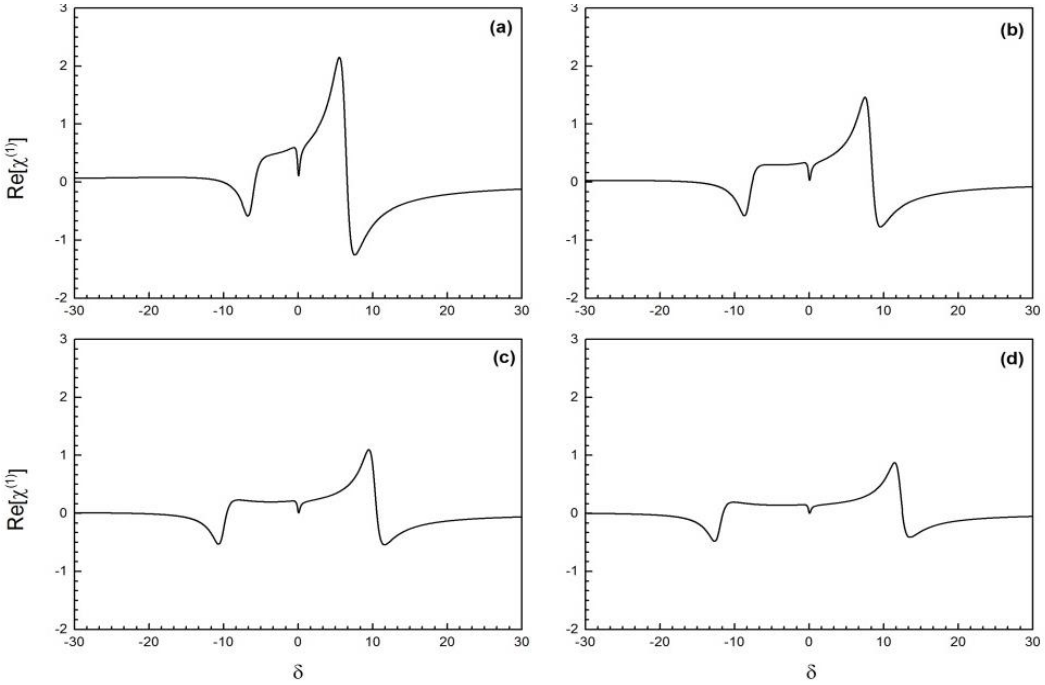
Şekil 6.8. Ω = -6 ps^{-1} ve dört farklı Δ değeri için δ parametresinin fonksiyonu olarak keyfi birimlerdeki soğurma spektrumları: (a) Δ = -4 ps^{-1}, (b) Δ = -3 ps^{-1}, (c) Δ = 3 ps^{-1}, (d) Δ = 4 ps^{-1}.



Şekil 6.9. Rezonans durumunda (Δ = 0), dört farklı Ω değeri için δ parametresinin fonksiyonu olarak keyfi birimlerdeki dispersiyon spektrumları: (a) Ω = -6 ps^{-1}, (b) Ω = -8 ps^{-1}, (c) Ω = -10 ps^{-1}, (d) Ω = -12 ps^{-1}.



Şekil 6.10. Rezonans dışı durumunda (Δ = 2 ps^{-1}), dört farklı Ω değeri için δ parametresinin fonksiyonu olarak keyfi birimlerdeki dispersiyon spektrumları: (a) Ω = -6 ps^{-1}, (b) Ω = -8 ps^{-1}, (c) Ω = -10 ps^{-1}, (d) Ω = -12 ps^{-1}.

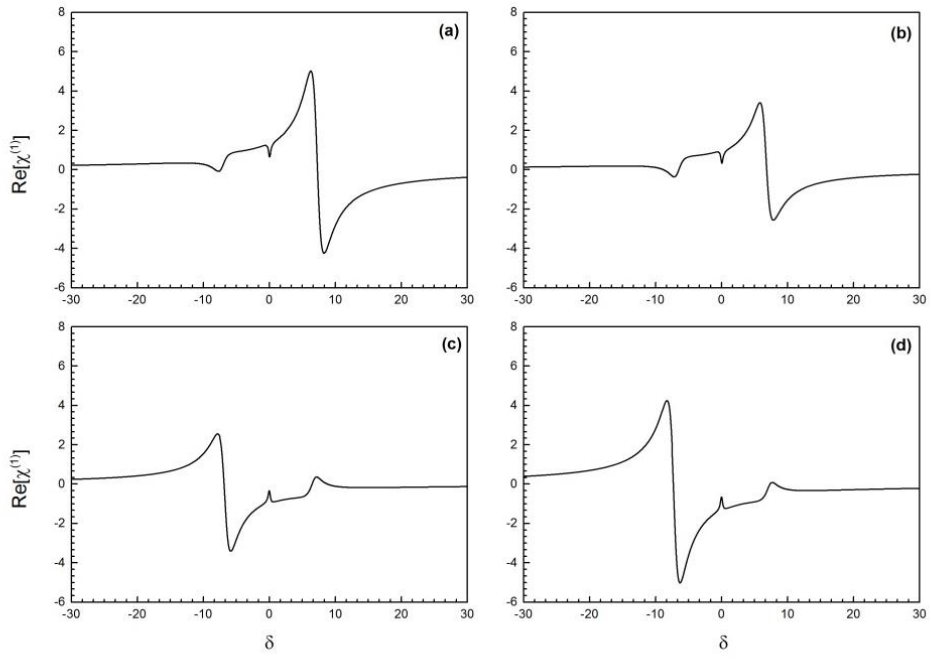


Şekil 6.11. Rezonans dışı durumunda (Δ = -2 ps^{-1}), dört farklı Ω değeri için δ parametresinin fonksiyonu olarak keyfi birimlerdeki dispersiyon spektrumları: (a) Ω = -6 ps^{-1}, (b) Ω = -8 ps^{-1}, (c) Ω = -10 ps^{-1}, (d) Ω = -12 ps^{-1}.

Şekil 6.8' den görüleceği gibi Δ' nın artan değerleriyle hem soğurma hemde kazanç piklerinin arttığı görülmektedir. Yine Şekil 6.8' den Δ' daki işaret değişmesinin soğurma spektrumunu bir önceki duruma göre antisimetrik hale getirdiği görülmüştür.

Şekil 6.9-6.11' den, Ω' nın artan değerleriyle $\mathrm{Re}\left[\chi^{(1)}\right]$' in pik değerlerinin azaldığı görülmektedir. Rezonans durumunda (Δ = 0), dispersiyon spektrumlarının antisimetrik olduğu görülmüştür. Ayrıca, yaklaşık $\delta = \pm\Omega$ değerlerinde dispersiyon spektrumları rabi yanbandları olarak adlandırılan pikler gösterir. Şekil 6.5' den elde ettiğimiz sonuçlar ise aynı δ değerlerinde soğurmanın sıfır olduğunu göstermektedir. Bu durum soğurma olmaksızın kırılma indisinin artması etkisine yol açar. $\delta = 0$ durumunda ise dispersiyon tam olarak sıfıra eşittir.

Şekil 6.10 ve 6.11 de, rezonans dışı durum çalışılmıştır. Her iki şekilden dispersiyon spektrumlarının artık simetrik olmadığı görülmektedir. Bu durumda rabi yanbandları artık $\delta = \pm\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$ değerlerinde gözükür. Ayrıca her iki şekilden, $\delta = 0$ civarındaki dispersiyon spektrumunun sırasıyla soğurma ve kazanç benzeri davranış gösterdiği görülmektedir. Δ = 2 ps^{-1} için dispersiyon spektrumlarının sol yanbadları sağ yanbandlarından daha büyük iken Δ = -2 ps^{-1} için bu durum tam tersine dönmektedir.



Şekil 6.12. Ω = -6 ps^{-1} ve dört farklı Δ değeri için δ parametresinin fonksiyonu olarak keyfi birimlerdeki dispersiyon spektrumları: (a) Δ = -4 ps^{-1}, (b) Δ = -3 ps^{-1}, (c) Δ = 3 ps^{-1}, (d) Δ = 4 ps^{-1}.

Şekil 6.12’ den görüleceği gibi Δ’ nın artan değerleriyle dispersiyon piklerinin arttığı görülmektedir. Yine, Şekil 6.12’ den Δ’ daki işaret değişmesinin dispersiyon spektrumunu bir önceki duruma göre antisimetrik hale getirdiği görülmüştür.

7. YORUM VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, yarıiletken çoklu kuantum kuyularının elektronik yapısı ve ISB geçişlere dayalı PP optiksel tepkisi teorik olarak incelenmiştir. Elektronik yapı hesaplamalarında sonlu farklar metoduna dayalı matris köşegenleştirme tekniği kullanılmıştır. Oldukça hızlı ve kararlı olması bu tekniğin önemli avantajlarından biri olarak görülmüştür. Hesaplamalarda üçlü kuantum kuyu modelleri göz önüne alınmış ve birinci ve ikinci bariyer genişliğinin elektronik yapıyı önemli ölçüde değiştirdiği görülmüştür. Bu değişimin, optiksel uygulamalar açısından oldukça önemli olacağı düşünülmektedir.

Bu düşünceden yola çıkarak tezin ikinci aşamasında ISB geçişlere dayalı PP optiksel tepki detaylıca çalışılmıştır. Bu amaçla, ilk olarak, Zaluzny tarafından geliştirilen prosedür takip edilerek rezonans ve rezonans dışı durumlar için farklı pump şiddetlerinde probe iletkenliğinin spektral biçimi incelenmiştir ve Zaluzny' nin sonuçları yeniden elde edilmiştir. Probe spektrumunun düşük pump şiddetlerinde lorentziyen yüksek pump şiddetlerinde ise Mollow tipi davranış gösterdiği görülmüştür.

Daha sonra, Boyd tarafından geliştirilen metod takip edilerek probe demetinin soğurma ve dispersiyon spektrumları incelenmiştir. Öncelikle, pertürbasyon tekniği yardımıyla iki seviyeli bir sistemde yoğunluk matris denklemlerinin çözümü gerçekleştirilmiştir. Buradan yola çıkılarak lineer ve üçüncü mertebe alınganlıklar için açık analitik ifadelere ulaşılmıştır. Bu ifadelerin reel ve imajiner kısımlarının pump alan şiddetine ve frekansına bağlılıkları incelenmiştir. Elde edilen sonuçlardan hem pump alan şiddetinin hem de frekansının soğurma ve dispersiyon spektrumlarını önemli ölçüde etkilediği görülmüştür. Bu sonucun özellikle, yüksek optiksel şiddete dayalı cihaz uygulamaları açısından önemli olacağı düşünülmektedir.

Gerek elektronik gerekse de optik hesaplamalarında etkin kütle farklılıkları ve elektronlar arası etkileşmelerin rolü göz önüne alınmamıştır. Gelecek çalışmalar açısından bu tür etkilerinde göz önüne alınması daha gerçekçi sonuçlar elde edilmesine imkan sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

Adriano, B., Batista, 2006, Pulse-driven interwell carrier transfer in *n*-type doped asymmetric double quantum wells, *Physical Review B*, 73, 075305.

Adriano, B., Batista, Citrin, D., S., 2006, Quantum control with linear chirp in two-subband *n*-type doped quantum wells, *Physical Review B*, 74, 195318.

Boyd, R. W., Raymer, M. G., Narum, P., Harter, D. J., 1981, Four-wave parametric interactions in a strongly driven two-level system, *Physical Review A*, 24, 411-423.

Boyd, R., W., 2003, Nonlinear Optics, *Academic Press*, San Diego, 0-578.

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

Dikici, M., 2012, Katıhal Fiziği, Seçkin Yayıncılık, Kırıkkale, 424.

Evangelou, S., Paspalakis, E., 2011, Pulsed four-wave mixing in intersubband transitions of a symmetric semiconductor quantum well, *Photonics and Nanostructures*, 9, 168-173.

Faist, J., Capasso, F., Sirtori, C., West, K., W., Pfeiffer, L., N., 1997, Controlling the sign of quantum interference by tunnelling from quantum wells, *Nature*, 390, 589.

Frogley, M., D., Dynes, J., F., Beck, M., Faist, J., Phillips, C., C., 2006, Gain without inversion in semiconductor nanostructures, *Nature Materials*, 5, 175.

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

Harter, D. H., Boyd, R. W., 1980, Nearly degenerate four-wave mixing enhanced by the ac Stark effect, *IEEE J. Quantum Electronics*, 16, 1126-1130.

Karabulut, İ., 2008, Asimetrik kuantum kuyu yapılarının lineer olmayan optik özelliklerinin incelenmesi, Doktor Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.

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

Kosionis, S. G., Terzis, A.F., Paspalakis, E., 2011, Pump-probe optical response and four-wave mixing in intersubband transitions of a semiconductor quantum well, Applied Physics B, 104, 33-43.

Liu, A., 1997, Light control of optical intersubband absorption and amplification in a

quantum well inside a cavity *Physical Review A*, 56, 3206.

Lıu, H., C., Capasso, F., 2000, Intersubband Transitions in Quantum Wells, *Academic Press,* USA, 32-33.

Paspalakis. E., Tsaousidou, M., Terzis, A., F., 2006, Coherent manipulation of a strongly driven semiconductor quantum well, *Physical Review B,* 73(125344).

Paspalakis. E., Tsaousidou, M., Terzis, A., F., 2006, Rabi oscillations in a strongly driven semiconductor quantum well, *Journal of Applied Physics*, 100, 044312.

Serapiglia, G., B., Paspalakis, E., Sirtori, C., Vodopyanov, K., L., Philips, C., C., 2000 Laser-Induced Quantum Coherence in a Semiconductor Quantum Well, *Physical Review Letters*, 84, 1019.

Schmidt, H., Campman, K., L., Gossard, A., C., Imamoglu, A., 1997, Tunneling induced transparency: Fano interference in intersubband transitions, *Applied Physics Letters,* 70, 3455.

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

Yıldırım, H., Tomak, M., 2006, Nonlinear intersubband optical absorption of Si δ-doped GaAs under an electric field, *Physica Status Solidi B,* 243, 2874.

Zaluzny, M., 1993, Saturation of intersubband absorption and optical reftication in asymmetric quantum wells, *J. Appl. Phys.* 74, 4716.

Zaluzny, M., 1995, Influence of the depolarization effect on second-harmonic generation in asymmetric quantum wells, *Physical Review B,* 51, 9757.

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

Zaluzny, M., 2012, Microcavity effect on the pump-probe intersubband response of multiple-quantum-well structures, *Journal of Physics Condensed Matter* 24 (205301).

Zhu, Y., F., Rubiera, A., I., Xiao, M., 1996, Inversionless lasing and photon statistics in a V-type atomic system, *Physical Review A*, 53,1065.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı	**:**	Rumeysa GÜLESİN
Uyruğu	**:**	T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi	**:**	Ankara/09/07/1986
Telefon	**:**	0312 4317554 , 0542-5212104
Faks	**:**	---
e-mail	**:**	Rumeysa_gulesin_@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	**Prof. Dr. Şevket Raşit Hatipoğlu Lisesi**	**2004**
Üniversite	:	**Recep Tayip Erdoğan Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik bölümü, Rize**	**2010**
Yüksek Lisans	:	**Selçuk Üniversitesi, Konya**	**Devam ediyor**
Doktora	:	**---**	**---**

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**

YABANCI DİLLER

İngilizce

YAYINLAR