T.C. BOZOK ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ FİZİK ANABİLİM DALI

Yüksek Lisans Tezi

ASİMETRİK YARI PARABOLİK KUANTUM KUYULARIN ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİ

Ahmet SIRLI

Tez Danışmanı Yrd. Doç. Dr. Muharrem KIRAK

YOZGAT 2015

T.C.

BOZOK ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ FİZİK ANABİLİM DALI

Yüksek Lisans Tezi

ASİMETRİK YARI PARABOLİK KUANTUM KUYULARIN ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİ

Ahmet SIRLI

Tez Danışmanı Yrd. Doç. Dr. Muharrem KIRAK

YOZGAT 2015

T.C. **BOZOK ÜNİVERSİTESİ** FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEZ ONAYI

Enstitümüzün Fizik Anabilim Dalı 7011050001 numaralı öğrencisi Ahmet SIRLI' nın hazırladığı "Asimetrik Yarı Parabolik Kuantum Kuyuların Elektronik ve Optik Özellikleri" başlıklı YÜKSEK LİSANS tezi ile ilgili TEZ SAVUNMA SINAVI, Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliği uyarınca 10/02/2015 Salı günü saat 13:00'da yapılmış, tezin onayına OY BİRLİĞİYLE karar verilmiştir.

Başkan : Doç. Dr. Sait YILMAZ

: Yrd. Doç. Dr. Ümüt TEMİZER Üye

: Yrd. Doc. Dr. Muharrem KIRAK (Danışman) Üye

ONAY:

sayılı kararı ile onaylanmıştır.



Malfung Uterny m) le. Kirch

İÇİNDEKİLER

<u>Sayfa</u>

ÖZETiii
ABSTRACT iv
TEŞEKKÜRv
ŞEKİLLER LİSTESİ vi
KISALTMALAR LİSTESİix
1. GİRİŞ 1
2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR, ÜRETİM TEKNİKLERİ ve KULLANIM ALANLARI
2.1. Kuantum Kuyuları
2.2. Düşük Boyutlu Sistemlerin Enerji Seviyeleri ve Durum Yoğunluğu
2.3. Kuantum Kuyusu Üretim Teknikleri12
2.3.1. Moleküler Işın Epitaksi (MBE)12
2.3.2. Metal Organik Kimyasal Buhar Depozisyonu
2.3.3. Moleküler Demet Epitaksi (MDE)13
2.4. Nanoteknolojinin Genel Kullanım Alanları14
2.4.1. Malzeme Bilimi
2.4.2. Tekstil
2.4.3. Gıda15
2.4.4. Çevre ve Enerji16
2.4.5. Elektronik ve Bilgisayar Teknolojileri16
2.4.6. Savunma17
2.4.7. Optoelektronik17

3. HESAPLAMA TEKNİKLERİ ve YAKLAŞIM METOTLARI19		
3.1. Varyasyon Metodu	19	
3.2. Etkin Kütle Yaklaşımı	21	
4. LİNEER OLMAYAN OPTİK		
5. ASİMETRİK YARI PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNDA ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİ	SAFSIZLIĞIN 28	
5.1. Giriş		
5.2. Elektrik Alanın Elektronik Özellikler Üzerine Etkisi		
5.3. Elektrik Alanın Optik Özellikler Üzerine Etkisi	40	
SONUÇ ve TARTIŞMA		
KAYNAKLAR	50	
ÖZGEÇMİŞ		

ASİMETRİK YARI PARABOLİK KUANTUM KUYULARIN ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİ

Ahmet SIRLI

Bozok Üniversitesi Fen bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Tezi

2015; Sayfa: 56

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Muharrem KIRAK

ÖZET

Bu çalışmada, elektrik alan altında asimetrik yarı parabolik kuantum kuyularının, elektronik ve optik özellikleri etkin kütle yaklaşımı altında varyasyon metodu kullanılarak incelenmiştir. Safsızlığın varlığında ve yokluğunda sistemin enerjisi hesaplanmıştır. Ayrıca sistemin optik özellikleri (lineer ve lineer olmayan soğurma katsayıları ve kırılma indisi değişimleri) incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar elektrik alanın hem bağlanma enerjisi hem de optik özellikler üzerine önemli bir etkiye sahip olduğunu göstermiştir. Asimetrik yarı parabolik kuantum kuyularının elektronik ve optik özelliklerinin, elektrik alan gibi dış etkilerle kontrol edilebileceği gözlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Kuantum Kuyu, Hidrojenik Safsızlık, Elektrik Alan, Elektronik ve Optik Özellikler.

THE ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF THE ASYMMETRICAL SEMI PARABOLIC QUANTUM WELLS

Ahmet SIRLI

Bozok University Graduate School of Natural and Applied Sciences Department of Physics Master of Science Thesis

2015; Page: 56

Thesis Supervisor: Ast. Asc. Prof. Dr. Muharrem KIRAK

ABSTRACT

In this study, the electronic and optical properties of asymmetrical semi parabolic quantum wells under electric field framework effective mass approximation have been investigated by using variational method. The energy of system is calculated with and without impurity. Moreover, the optical properties of the system (the linear and nonlinear absorption coefficients and the refractive index changes) are investigated. The obtained results show that the electric field has a significant both on the binding energy and optical properties. It is found that the electronic and optical properties of asymmetrical semi parabolic quantum well can be controlled by external factors such as electric field.

Keywords: Quantum Well, Hydrogenic Impurity, Electric Field, Electronic and Optical Properties

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasının planlanması, araştırılması, çalışılması ve oluşumundaki her aşamasında çok yakın ilgi, destek ve kıymetli emeğini ve zamanını esirgemeyen, tecrübelerinden yararlandığım, yönlendirme ve bilgilendirmeleriyle çalışmalarımı bilimsel olacak şekilde biçimlendiren, mütevazi kişiliği, özverisi ve sabrıyla bendenize bilimsel çalışma şevki veren kıymetli hocam Yrd. Doç. Dr. Muharrem KIRAK'a teşekkür eder, sonsuz minnet ve şükranlarımı sunarım.

Çalışmalarım süresince her zaman yanımda olan, maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen anneme, eşime en kalbi sonsuz minnet ve şükranlarımı sunar ve bu çalışmam nedeniyle zaman zaman kendilerine ilgimi azalttığım kızlarım Emine ve Merve'ye sonsuz sevgilerimi sunarım.

ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1: Sekil 2.1:	Kuantum Nanoyapılar (a) Üç Boyutlu Hacimsel Yapı (b) Tek Boyutta Sınırlandırılmış Kuantum Kuyusu (c) İki Boyutta Sınırlandırılmış Kuantum Teli (d) Üç Boyutta Sınırlandırılmış Kuantum Nokta Kuantum Kuyusunun Sematik Gösterimi	3 7
Şekil 2.11 Sabil 2.21	Rulk (Hacimsel Vanı) İçin Durum Voğunluğu–Enerii Değişimi	, 8
Şekil 2.2: Şekil 2.3:	Kuantum Kuyu İçin Durum Yoğunluğu–Enerji Değişimi	10
Şekil 2.4:	Kuantum Tel İçin Durum Yoğunluğu–Enerji Değişimi	11
Şekil 2.5:	Kuantum Nokta İçin Durum Yoğunluğu–Enerji Değişimi	11
Şekil 2.6:	MBE Cihazı	12
Şekil 2.7:	Nanoteknolojinin Kullanım Alanları	14
Şekil 5.1:	Yarı Parabolik Potansiyelin Kuantum Kuyu Genişliğiyle Değişimi	31
Şekil 5.2:	Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun Genişliğine (z) Bağlı Olarak Taban Durumu ($n = 0$), Birinci Uyarılmış Durum ($n = 1$), İkinci Uyarılmış Durum ($n = 2$), Üçüncü Uyarılmış Durum ($n = 3$) İçin Dalga Fonksiyonlarının Değişimi.	32
Şekil 5.3:	Farklı Elektrik Alan Büyüklükleri İçin (F = 0.0, 10.0, 40.0 kV/cm) İçin Safsızlığın Olmadığı Durumda, Kuyu Genişliğine $z(a^*)$ Ve Taban Durumu (n = 0), Birinci Uyarılmış Durum (n = 1), İkinci Uyarılmış Durum (n = 2),Üçüncü Uyarılmış Durum (n = 3) İçin Kinetik Enerji Fonksiyonlarının Değişimi. a) F = 0.0 kV/cm b) F = 10.0 kV/cm c) F = 40.0 kV/ cm İçin	34
Şekil 5.4:	Safsızlığın Olduğu Durumda Farklı Elektrik Alan Büyüklükleri İçin Kuyu Genişliğine Bağlı Olarak Minimum Enerji Değerlerinin Değişimi. a) $F = 0.0 \text{ kV/cm}$ b) $F = 10.0 \text{ kV/cm}$ c) 40.0 kV/cm için.	35
Şekil 5.5:	Farklı Elektrik Alan Büyüklükleri İçin ($F = 0.0, 10.0, 40.0 kV/cm$) Bağlanma Enerjisinin Yarı Parabolik Kuantum Kuyu Genişliğine Bağlı Değişimi, a) Taban Durumu($n = 0$), b)Birinci Uyarılmış Durum ($n = 1$), c) İkinci Uyarılmış Durum ($n = 2$) ve d) Üçüncü Uyarılmış Durum ($n=3$) İçin.	36
Şekil 5.6:	Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun Farklı Kuyu Genişliklerinde $(z = 0.75a^* \text{ ve } z = 1.00a^*)$, Bağlanma Enerjisinin Elektrik Alana Bağlı Değişimi a) Taban Durumu $(n = 0)$, b) Birinci Uyarılmış Durum $(n = 1)$, c) İkinci Uyarılmış Durum $(n = 2)$ ve d) Üçüncü Uyarılmış Durum $(n = 3)$ İçin.	37

- Şekil 5.7: Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun Belli Bir Elektrik Alan Altında (F=40 kV/cm), Farklı Kuyu Genişliklerine Bağlı Olarak Enerji Seviyeleri Arasındaki Enerji Farkı Değişimi, a)Taban Durumu (n=0), Birinci Uyarılmış Durum (n = 1); $E_{10} = E_1 - E_0$ b) Birinci Uyarılmış Durum (n = 1) İkinci Uyarılmış Durum (n = 2) $E_{21} = E_2 - E_1$ 38

- Şekil 5.10: Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Kuyu Genişliklerinde (z= $0.5a^*$, z = $0.6a^*$, z = $0.7a^*$), Belli Bir Dış Elektrik Alan Altında (F = 40kV/cm) Ve Belli Bir Işık Şiddetinde (I = $0.3 \text{ MW}/cm^2$) Belirli Enerji Seviyeleri Arasındaki s – p ve p – d Foton Enerjisinin Soğurma Katsayılarına Bağlı Değişimi a) s – p, b) p – d İçin 42
- Şekil 5.12: Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Işık Şiddetlerinde $(l = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 MW/cm^2)$, Belirli Bir Dış Elektrik Alan Altında (F = 40kV/cm), Belirli Bir Kuyu Genişliğinde (z = 0.75 a*) ve 0s – 1p Ve 1p – 2d Geçişleri İçin Foton Enerjisinin Toplam Soğurma Katsayılarına Bağlı Değişimi. a) s – p b) p – d İçin...... 45
- Şekil 5.14: Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Kuyu Genişliği Büyüklüklerinde ($z = 0.5a^*, z = 0.6a^*, z = 0.7a^*$), Belirli Bir Işık Şiddetinde ($I = 0.03 \text{ MW/}cm^2$) ve Belirli Bir Elektrik Alan Altında (F = 40 kV/cm) Foton Enerjisinin Toplam Kırılma İndisi Değişimine Bağlı Değişim Fonksiyonu a) s - p Geçişi İçin b) p - d Geçişi İçin.... 47

KISALTMALAR LİSTESİ

KK	: Kuantum Kuyu
KKT	: Kuantum Kuyu Tel
KN	: Kuantum Nokta
ÇKK	: Çift Kuantum Kuyu
DKK	: Derecelendirilmiş Kuantum Kuyu
KKK	: Kare Kuantum Kuyu
IB	: Bantlar Arası
ISB	: Alt-Bantlar Arası
E_{g1}	: Büyük Yasak Enerji Aralığı
Eg2	: Küçük Yasak Enerji Aralığı
MBE	: Moleküler Işın Epitaksi
MOCVD	: Metal Organik Kimyasal Buhar Depozisyonu
MDE	: Moleküler Demet Epitaksi
LPE	: Sıvı Faz Epitaksi
UHV	: Çok Yüksek Vakum
LED	: Işık Yayan Diyot
Н	: Hamiltonyen
m_0	: Boş Uzaydaki Kütle
m^*	: Etkin Kütle

W	: Açısal Frekans
ν	: Frekans
Ε	: Enerji
k	: Dalga Vektörü
р	: Momentum
F _{dış}	: Dış Kuvvet
n(I)	: Işığın Şiddetine Bağlı Kırılma İndisi
n _r	: Kırılma İndisi,
σ_s	: Elektron yoğunluğu
\mathcal{E}_0	: Boşluğun Dielektrik Sabiti
c	: Işık Hızı
μ_{ij}	: Matris Elemanı
Γ_{ij}	: i ve j Durumları Arasındaki Durulma Oranı
Z	: Büyüme Doğrultusu
ħ	: Planck Sabiti
F	: z- Doğrultusunda Uygulanan Elektrik Alan
e	: Elektron Yükü
ε	: Kuantum Kuyu Malzemenin Dielektrik Sabiti
\vec{r}	: Elektron ve Safsızlık Arasındaki Konum Vektörü
V(z)	: Sınırlandırıcı Potansiyel
$\psi_{n,k}$: Özdeğer fonksiyonları
$\varepsilon_{n,k}$: Öz Enerjiler

\vec{k}_{II}	: xy Düzleminde Dalga Vektörü
\vec{r}_{II}	: xy Düzleminde Konum Vektörü
$U_c(r)$: Bloch Fonksiyonu
$\phi_n(z)$: Zarf Dalga Fonksiyonu
H_Z	: Hamiltonyen İfadesinin z Eksenine Bağlı Kısmı
N_n	: Normalizasyon Sabiti
GaAs	: Galyum Arsenit

1. GİRİŞ

İnsanlık tarihi boyunca bilimde en büyük gelişmeler 20. yüzyılda, fen bilimleri alanında olmuştur. Klasik Mekanik büyük kütleli ve düşük hızlı parçacıklara uygulanmıştır. [1]. Bununla birlikte, 1800'lü yılların sonlarına doğru siyah cisim ışıması, tayf çizgileri, fotoelektrik etki gibi olayları açıklamada yetersiz kalmıştır [2]. Kuantum fiziği, mekanik ve elektromanyetizmanın klasik kuramlarının atomik yapı ve elektromanyetik ışınımın bazı özelliklerini doyurucu ve tam bir biçimde açıklamasındaki yetersizliğe cevap olarak geliştirilmiştir [1].

Kuantum mekaniğinin temelleri 20. yüzyılın ilk yarısında Planck, Einstein, Bohr, Heisenberg, Schrödinger, Dirac ve Pauli gibi bilim adamlarınca atılmıştır. Belirsizlik ilkesi, anti madde, Planck sabiti, siyah cisim ışınımı, dalga kuramı, alan teorileri gibi kavram ve kuramlar bu alanda geliştirilmiştir [2]. Dar çerçevede bu teoride sunulan temel özellikleri şöyle sıralayabiliriz:

1. Enerjinin sürekli değil, kesikli değerler alması.

2. Temel parçacıkların hem parçacık hem de dalga gibi davranışlar göstermesi.

3. Mikroskobik parçacıkların hareketleri tamamen rastgele olduğundan istatistik olarak belirlenmesinin gerekliliğini ortaya koymuştur.

4. Fiziksel olarak bir parçacığının hem konumunun hem de momentumunun aynı anda belirlenmesinin mümkün olmaması. Yani fiziğe kuşku götürmez biçimde belirsizlik fikrinin katılması [1].

Kuantum mekaniği kuantum nano yapılar denilen $(1 \text{ nm}= 10^{-9} \text{ m})$ seviyelerdeki atom altı parçacıkları inceleyen bilim dalı olmakla birlikte biyoloji, malzeme bilimi, elektronik ve uzay çalışmaları gibi birçok uygulama inceleme alanına sahiptir.

Tabiattaki tüm yapıları boyutlarını esas alarak, üç sınıfta toplamak mümkündür. Bunlar:

- **1. Makroskobik Yapılar:** Bu yapıdaki parçacıkların hareketleri istatistiksel olarak tanımlanmasına yetecek mertebededir.
- **2. Mikroskobik Yapılar:** Bu yapının boyutları atom ve molekül mertebesindedir (1Å).
- 3. Mezoskobik Yapılar: Makroskobik ve mikroskobik yapı arasında yer alan ve boyutları yaklaşık olarak 1 Å 1000 Å arasında değişen yapılardır. Mezoskobik yapılarda taşıyıcılar, üç boyutlu serbest hareket etme özelliklerini kaybederler. Belirli bir uzaysal bölge içerisinde sınırlandırılırlar [3].

Malzemenin boyutu, nanometre mertebesine kadar küçüldükçe, bu malzemeye ait mekanik, elektriksel, ısıl, optik ve kimyasal özellikleri ve çevresiyle ilişkileri büyük ölçüde değişmektedir. Aynı malzemenin daha büyük boyutlarda göstermediği özellikler ve davranışlar gözlenmektedir [4]. Örneğin altın makroskobik yapıda sarı renk vermekte iken nano boyutlarda yeşil renk vermektedir. Nano teknoloji bu davranış farklılıklarından yola çıkarak yeni, daha küçük boyutlu ve daha fonksiyonel malzemelerin geliştirilmesine imkân sağlamıştır. Böylece boyutların küçülmesi ve fonksiyonellik gibi özellikler sayesinde insanlığa enerji, ekonomi, çevre gibi endüstriyel konulardan; sağlık, biyoloji, medikal gibi tıbbi ve haberleşme; eğitim gibi sosyal konularda da yenilikler sağlamaktadır. Yeni bir teknoloji alanı olan nanoteknolojide kullanılan malzemeler üç grupta incelenmektedir.

i. İnce filmler, kuantum kuyuları ve süper örgüleri içeren 2 boyutlu yapılar.

ii. Nano teller, kuantum telleri, nanoçubuklar, nanotüpler şeklindeki 1 boyutlu yapılar.

iii. Nanotanecikler ve kuantum nokta oluşturan 0 boyutlu yapılardır [4].

Taşıyıcı hareketinin sınırlandırıldığı boyut sayısına bağlı olarak hacimsel yapı, kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktasının şematik gösterimi Şekil 1.1.'de verilmiştir. İlk şekil sınırlamanın olmadığı hacimsel yapıyı göstermektedir. İkinci şekil taşıyıcıların tek boyutta sınırlandırıldığı kuantum kuyusunu, üçüncü şekil ise taşıyıcıların iki boyutta sınırlandırıldığı kuantum telini göstermektedir. Son şekil ise tüm boyutlarda sınırlamanın olduğu kuantum noktasını göstermektedir.



Şekil 1.1. Kuantum nanoyapılar (a) Üç boyutlu hacimsel yapı (b) Tek boyutta sınırlandırılmış kuantum kuyusu (c) İki boyutta sınırlandırılmış kuantum teli (d) Üç boyutta sınırlandırılmış kuantum nokta.

1960'larda Hayashi ve Panish, büyük bant aralıklı yarıiletken malzemeler arasına daha küçük bant aralıklı ince bir yarıiletken malzeme yerleştirmişler ve taşıyıcıların hareketlerini sınırlayarak nanocihazlar üretmeye başlamışlardır. Böylece taşıyıcıların (elektron ve deşikler) hareketleri bir boyutta genellikle büyüme yönünde sınırlandırılmıştır. Bu tür bir sınırlandırma kuantum kuyusu olarak adlandırılır. Benzer olarak taşıyıcı hareketlerin iki boyutta sınırlandırılması ile kuantum teller ve üç boyutta sınırlandırılması ile kuantum noktalar oluşturulur [3].

Bu gelişmeler ışığı altında düşük boyutlu yapı olarak tanımlanan kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktaları üzerine birçok araştırma yapılmıştır. Elektrik alana bağlı kuantum kuyuları problemi ilginç sorunlar ortaya çıkardı. Elektrik alan bir eksen (büyüyen eksen) boyunca uygulandığı zaman kuantum kuyusunun enerjisinde değişiklikler gözlenmiştir. İzole edilmiş elektrik alanlı kuantum kuyusundaki özdurumların varyasyonel çözümleri önerilmiş ve sonuçlar bu modelle açıklanmıştır [5]. GaAs-Ga(Al)As kuantum kuyusunun safsızlık ve eksitonun enerji durumları incelenmiştir [6]. Kuantum kuyu genişliğinin değiştirilmesi kuantum kuyusunun bant aralıklarının değişmesine neden olmakta bu da kuantum kuyu parametrelerinin değişmesiyle sistemin elektronik ve optik özellikler gibi birçok özelliğinin ayarlanabilir olduğunu göstermektedir [7].

Düşük boyutlu yarıiletken yapılarda, kuantum sınırlamaların varlığının bir sonucu olarak enerji seviyelerinin kesikliliği doğrusal olmama (nonlinearity) durumunun

çarpıcı bir şekilde artmasına neden olur. Bu yapılar özellikle elektronik ve optoelektronik cihazlar gibi birçok uygulama alanlarına sahiptir. Bununla birlikte, son yıllarda nano ölçekli heteroyapıların doğrusal olmayan optik özellikleri gerek teorik gerekse deneysel olarak kapsamlı bir şekilde araştırılmıştır ve araştırmalar halen devam etmektedir [8-14].

Elektrik alan, manyetik alan ve basınç gibi dış faktörlerin etkisi altında düşük boyutlu yarıiletken yapılar üzerine incelemeler son yıllarda oldukça dikkat çekmektedir. Bu ilginin temel nedeni, dış uyarılmalarla kuantum nanoyapıların elektronik ve optik özelliklerinin ayarlanabilmesi ve kontrol edilebilmesi ile yeni nesil opto-elektronik cihazların tasarımında önemli bir rol oynamasıdır [15-19]. Nano ölçek temelinde yapılan araştırmalar arasında hidrojenik safsızlık problemi önemli bir yer teşkil etmektedir. Safsızlık ile kuantum cihazının özellikleri ve performansı önemli ölçüde değiştirilebilmektedir. Yarıiletken nano yapılardaki hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisi üzerine Bastard'ın öncü çalışmasından sonra [20] kuantum kuyularda (KK) [21-23], kuantum kuyu tellerde (KKT) [24-26] kuantum noktalarda (KN) [27-28] birçok sayıda çalışma yapılmıştır.

Düşük boyutlu kuantum yarıiletken yapılar, hacimsel malzemelere göre daha güçlü sınırlandırıcı kuantum etkilere neden olduklarından bu yapıların optik özeliklerinin araştırılması yoğun bir şekilde devam etmektedir [29-43]. Bu yapıların optik özellikleri, yarıiletken lazerler, optik anahtarlama, kızılötesi foto-dedektörler vb. gibi foto-elektronik cihazlarda aynı zamanda ilginç uygulamalar sergilerler [44-47]. Ayrıca bir dış elektrik alanın varlığı, taşıyıcı yük dağılımlarının kutuplanmasına ve böylece taşıyıcı enerjilerinin kaymasına neden olur [48-51]. Yapılan çalışmalar, bu enerji değişiminin kuantum sisteminin yapısına ve uygulanan elektrik alana hassas bir şekilde bağlı olduğunu göstermiştir. Buna ek olarak, çift kuantum kuyuların (ÇKK) optik özelliklerinin incelenmesi KK lazerde çok ilginç uygulamalara sahiptir [52].

KK'ların optik özeliklerinin, potansiyelin sınırlandırılmasının simetrik olmamasına bağlılığı teorik olarak gösterilmiştir. Potansiyel profilinde asimetri, simetrik bir KK'ya elektrik alan uygulanarak ya da KK bileşimsel derecelendirilmesiyle elde edilebilir [53-55]. Asimetrik KK yapılarında soğurma katsayısındaki değişimlerin, kare KK'na nazaran daha büyük olduğu teorik olarak öngörülmüş ve bu sonuç deneysel olarak da ispatlanmıştır [56-58].

Literatürde, bantlararası optik geçişlerde foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak kırılma indisi değişimi ve soğurma katsayıları çoklu ve tekli KK yapılarında incelenmiştir [59-63]. Dış elektrik alan varlığında ve yokluğunda, derecelendirilmiş kuantum kuyularda (DKK) ve KKK'larda lazer alanın bantlararası optik geçiş üzerine etkisi incelenmiştir [64-65].

Son yıllarda, hem lazer teknolojisinde hem de epitaksiyel KK büyütme yöntemlerinde önemli gelişmeler olmuştur. Bantlararası geçişlere göre kuantum kuyuların doğrusal ve doğrusal olmayan optik özellikleri derin bir ilgi uyandırmıştır [66-70]. İletişim teknolojisinde, daha hızlı iletişim hatları ve optik anahtarlama için kuantum kuyuların doğrusal ve doğrusal olmayan optik özelliklerine ihtiyaç duyulur. Doğrusal olmama durumu asimetrik kuantum kuyularında bantlar arası optik geçişler ile ilişkili olup güçlü lazerler ile mümkün hale gelmektedir.

Kuantum kuyuları, büyük band aralıklı iki yarıiletken malzeme arasına yerleştirilmiş daha küçük band aralıklı ince bir yarıiletken tabakadan oluşur. Elektron ve deşikler sırasıyla, iletim ve valans bandı içerisinde sınırlandırılmıştır Kuantum kuyuları büyütme doğrultusunda kesikli enerji seviyelerine sahip olup bu 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 aynı band içerisindeki enerji seviyeleri arasında olursa, bu geçişlere de alt-bandlar 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. Kuantum kuyularındaki ISB geçişlerle ilgili araştırmalar kuantum kuyu kızılötesi fotodetektörü ve kuantum cascade lazeri gibi çeşitli cihazların gelişimine neden olmuştur. Bu tür cihazlar, yüksek hız ve verimliliğin yanı sıra boyutsal olarak da küçük olduğundan yarıiletken aygıtlara göre oldukça avantajlıdırlar [1].

Bu çalışmada, etkin kütle yaklaşımı altında varyasyon metodu kullanılarak asimetrik yarı parabolik kuantum kuyusunda safsızlığın elektronik (kinetik enerji, safsızlık enerjisi ve bağlanma enerjisi gibi) ve optik özellikleri (lineer, lineer olmayan ve toplam soğurma katsayıları ve kırılma indis değişimleri) incelenmiştir.

2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR, ÜRETİM TEKNİKLERİ ve KULLANIM ALANLARI

2.1. Kuantum Kuyular:

Kuantum kuyular üç boyutlu bir yapıda elektronların tek boyutta sınırlandırılması ile oluşturulan düşük boyutlu heteroyapılardır. Kuantum kuyularında taşıyıcıların hareketleri, yapıyı oluşturan malzemelerin bant aralıklarındaki farklılıklardan kaynaklanan potansiyel tarafından istenilen yönde (genellikle z-yönünde) tek boyutta sınırlandırılabilir.

Yasak enerji aralığı büyük (E_{g1}) olan yarıiletken bir malzeme içerisine, daha düşük yasak enerji aralığına (E_{g2}) sahip başka bir yarıiletken malzemenin atom katmanları büyütülür ve bu yasak enerji farkından dolayı potansiyel engel oluşur. Böylece, elektronların hareketleri bu potansiyelde, genellikle büyüme yönünde, sınırlandırılmıştır. Bu tür bir sınırlandırma kuantum kuyusu olarak adlandırılır. Şekil 2.1.'de AlGaAs yarıiletkenler arasına GaAs yarıiletkeni yerleştirilerek oluşturulan kuantum kuyusunun şematik gösterimi verilmiştir.



Şekil 2.1. Kuantum Kuyusunun Şematik Gösterimi [3].

2.2. Düşük Boyutlu Sistemlerin Enerji Seviyeleri ve Durum Yoğunluğu

Düşük boyutlu sistemlerin enerjileri, durum yoğunlukları ve diğer fiziksel özellikleri üç boyutlu (bulk) kristallerden oldukça ıdır. Düşük boyutlu yapıların serbestlik derecelerine göre enerji değerleri ve birim enerji aralığındaki izinli durumların sayısını veren durum yoğunlukları sırasıyla;

Üç boyutta serbest hacimsel yapı için;

$$E^{(3B)} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \right)$$
(2.1)

$$D^{(3B)}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}$$
(2.2)

şeklindedir. Burada \hbar Planck sabiti, m^* etkin kütle, k dalga vektörüdür. Hacimsel yapıda, elektron hareketi genellikle serbesttir ve enerji spektrumu süreklidir. Bunun sonucu olarak, Şekil 2.2.'de görüldüğü gibi birim enerji aralığındaki izinli durumların sayısını veren durum yoğunluğu sürekli olur.



Şekil 2.2. Bulk (Hacimsel Yapı) İçin Durum Yoğunluğu–Enerji Değişimi [71].

İki boyutta serbest kuantum kuyu için;

Kuantum kuyularındaki enerji seviyelerini bulmak için zamandan bağımsız Schrödinger dalga denkleminin çözümü yapılmalıdır. Kuantum kuyularda sınırlama tek boyutta olduğundan dolayı Schrödinger denklemini bir boyutta incelememiz gerekmektedir. Parçacıcığı sadece z doğrultusunda sınırlandırılan ve x ve y doğrultusunda sınırlamanın olmadığı sonsuz potansiyel içerisinde ele alırsak, kuyu içerisinde potansiyel, V_z , sıfır olacaktır. Böylece Schrödinger denklemini

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2\psi_{n_z}}{\partial z^2} = E_{n_z}\psi_{n_z}$$
(2.3)

şeklinde yazabiliriz. Burada \hbar Planck sabiti ve m^* elektronun etkin kütlesidir. $k_{n_z}^2 = \frac{2 m^*}{E_{n_z}}$ tanımının yapılması ile denklemin çözümü

$$\psi_{n_z} = Asin(k_{n_z}) + Bcos(k_{n_z}) \tag{2.4}$$

olarak bulunur. *A* ve *B* normalizasyon sabitleridir ve normalizasyon şartından bulunabilir. Kuyu sınırlarında sınır şartları uygulandığında dalga vektörünün z bileşeni n_z bir tam sayı olmak üzere $k_{n_z} = \frac{n_z}{\pi L_z}$ olarak bulunur. Böylece z yönünde kuantum kuyudaki enerji özdeğerleri,

$$E_{n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L_z^2} n_z^2 \tag{2.5}$$

olarak bulunur. Parçacığın toplam enerjisi ise,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k_x^2 + k_y^2 + \frac{\pi^2}{L_z^2} n_z^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2m_\perp^*} \left(k_\perp^2 + \frac{\pi^2}{L_z^2} n_z^2 \right)$$
(2.6)

şeklinde elde edilir. Bu bize kuantum kuyu içirişindeki parçacığın enerjisinin *n* tamsayısına bağlı olarak kesikli değerler alabileceğini göstermektedir. Kuantum kuyusunda birçok sınırlandırılmış durum olduğundan durum yoğunluğu kuantum kuyusu enerjisinden daha düşük enerjili tüm alt bantlar üzerinden alınmalıdır. Böylece, kuantum kuyusu için durum yoğunluğu

$$D^{(2D)}(E) = D_{\perp}^{(2D)}(E) + D_{z}^{(2D)}(E)$$
(2.7)

$$D^{(2D)}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{\perp}^*}{\hbar^2}\right)^2 E_{\perp}^{3/2} + \frac{m_z^*}{\pi\hbar^2} \sum_{n_{z=1}} \Theta(E - E_{n_z})$$
(2.8)

şeklindedir [3].

İki boyutlu kuantum kuyularında, toplam enerji, sınırlandırılmış doğrultudaki kuantumlanmış seviyeler ile sınırlandırılmış doğrultuya dik olan düzlemdeki kinetik enerjinin toplamına eşittir. Durum yoğunluğu, Şekil 2.3'te görüldüğü gibi her bir basamağı n. alt banda karşılık gelen bir merdiven gibidir. Kuantum kuyularında durum yoğunluğu üç boyutlu hacimsel yapıda olduğu gibi artan $E^{1/2}$ fonksiyonu değil adım fonksiyonu şeklindedir.



Şekil 2.3. Kuantum Kuyu İçin Durum Yoğunluğu–Enerji Değişimi. [71].

Bir boyutta serbest kuantum tel için;

$$E^{(1B)} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k_x^2 + \frac{\pi^2}{L_y^2} n_y^2 + \frac{\pi^2}{L_z^2} n_z^2 \right)$$
(2.9)

$$D^{(1B)}(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{(E-E_i)^{1/2}} \Theta(E-E_i)$$
(2.10)

şeklindedir. Bir boyutlu kuantum telinde enerji, iki boyutta sınırlandırılmış seviyeler ile tel uzunluğu boyunca sürekli olan enerjinin toplamına eşittir. Durum yoğunluğunun farklı olmasının sebebi, durum yoğunluğu her bir alt bandın tabanında birbirinden ayrılır daha sonra enerjinin artmasıyla azalır. Bu Şekil 2.4'te açıkça görülmektedir.



Şekil 2.4. Kuantum Tel İçin Durum Yoğunluğu–Enerji Değişimi. [71].

Üç boyutta sınırlı kuantum nokta için;

$$E^{(0B)} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi^2}{L_x^2} n_x^2 + \frac{\pi^2}{L_y^2} n_y^2 + \frac{\pi^2}{L_z^2} n_z^2 \right)$$
(2.11)

$$D^{(0B)} = 2\sum_{i=1}^{n} \delta(E - E_i)$$
(2.12)

şeklindedir. Burada δ ; x 'in 0 hariç tüm değerleri için 0, x=0 için ise sonsuz olarak tanımlanmış, tüm uzay üzerinden integrali 1 olan Dirac delta fonksiyonudur. Sınırlandırılmış enerji seviyesinde iki durum olacağından durum yoğunluğunun enerji ile değişimi delta fonksiyonun serisi şeklinde olur ve enerji spektrumunun kesikliliği Şekil 2.5.'te görüldüğü gibi durum yoğunluğunun keskinliğini arttırır.



Şekil 2.5. Kuantum Nokta İçin Durum Yoğunluğu–Enerji Değişimi [71].

2.3. Kuantum Kuyusu Üretim Teknikleri

Düşük boyutlu yapıları (heteroyapıları) büyütmek için yaygın şekilde kullanılan birçok yöntem vardır. Bununla birlikte, burada üç yöntemden kısaca bahsedilecektir. İlki moleküler ışın epitaksi (Molecular Beam Epitaxy, MBE) yöntemi, diğerleri metal organik kimyasal buhar depozisyonu (Metal-Organic Chemical Vapour Deposition, MOCVD) ve moleküler demet epitaksi (MDE)'dir.

2.3.1. Moleküler Işın Epitaksi (MBE)

Moleküler Işın Epitaksi (MBE) yöntemi temelde oldukça basit bir metod olup bu cihazın basitleştirilmiş şeması Şekil 2.6'da görülmektedir. Heteroyapının büyütüleceği tabaka, yaklaşık olarak, 5×10⁻¹¹ mbar basınç altında bir buharlaştırıcı içerisindeki ısıtılmış tutaç üzerine yerleştirilir. Heteroyapıyı oluşturan elementler (ki burada Ga, As ve Al olmak üzere), delikleri tabakaya bakan ocaklarda buharlaştırılır ve oluşan buhar kapaklar tarafından engellenir. Knudsen olarak adlandırılan ocaklardan çıkan moleküller, çarpışma yapmaksızın bir doğru boyunca ilerleyen moleküler bir demet oluşturur. Kapakların açılmasıyla birlikte büyütme süreci başlar ve her bir element akışı ocakların sıcaklığıyla kontrol edilir.



Şekil 2.6. MBE Cihazı [72].

MBE yönteminin en önemli avantajı, bu yöntemi kullanarak farklı malzemeler arasında oldukça dik eklemlerin oluşturulabilmesidir. Ancak maliyeti, üretim için yeterince uygun olmaması ve yavaş bir süreç olması bu yöntemin en önemli dezavantajlarıdır.

2.3.2. Metal Organik Kimyasal Buhar Depozisyonu (MOCVD)

Heteroyapıları büyütmek için kullanılan bir diğer metot da metal organik kimyasal buhar depozisyonu (MOCVD)'dur. MOCVD yöntemi, büyütülecek olan tabaka ısıtılmış blok üzerine yerleştirilir ve gazların bileşimi büyütülen malzeme bileşimini kontrol edebilmek için hızlıca değiştirilebilir.

2.3.3. Moleküler Demet Epitaksi (MDE)

Moleküler demet epitaksi (MDE), yüksek kaliteli tek kat tabakalar üretebilen ve çok yüksek vakum (UHV) tabanlı bir tekniktir. Bu tekniğin temelinde ısıtılan katı yüzeyinden elde edilen atom ve atom kümeleri vardır. Isıtılan katı yüzeyinden elde edilen atom ve atom kümeleri UHV ortamına gönderilir. UHV ortamı içindeki artık ve yabancı gazlardan temizlenmiş ortamdır ve buradaki basınç 10⁻¹¹Torr (1Torr=1.33x10⁻³ bar) civarındadır. Bu sayede UHV ortamına gönderilen atom ve atom gurupları artık ve yabancı gazlarla etkileşmeden kolay bir biçimde alt taş üzerindeki sıcak yüzeye ulaşırlar. Buraya ulaşan atom ve atom kümeleri yayılır ve sonuçta büyüyen filmle birleşirler. Bu basit bir kavram olmasına rağmen ara yüzey kontrolü gerektiren materyal saflığına sahip kaliteli sistemler üretmeyi gerektirir.

MDE ve diğer büyütme tekniklerinin seçimi istenen yapıya ve ihtiyaçlara göre belirlenir. Örneğin MDE daha düşük büyütme hızından dolayı seri üretimlerde tercih edilmez. Bu durumda MDE yerine daha yüksek hıza sahip Liquid Phase Epitaxy (LPE) veya Metalorganic Vapour Phase Deposition (MOCVD) gibi diğer teknikler tercih edilir. MDE, arayüzey hızlılığı, arayüzeyin kontrolü ve etkili katkılama gibi bazı özel gereksinimlere ihtiyaç duyulduğunda tercih edilir. Bunun yanında, vakum ortamındaki kontrol ve kaynak materyallerin kalitesindeki kontrol UHV tabanlı olmayan sistemlerle karşılaştırıdığında daha iyidir. Bu sayede MDE tekniğiyle çok daha kaliteli materyal saflığına ulaşmamız mümkündür. Bu özellikle yüksek mobilitedeki uygulamalar için üretilen Al içeren yarıiletkenlerde önemlidir [73].

2.4. Nanoteknolojinin Genel Kullanım Alanları

Nanoteknoloji savunmadan gıda teknolojisine, tekstilden elektroniğe, bilişim ve haberleşmeden uzay çalışmalarına kadar daha birçok alanda uygulama alanına sahiptir. Nanoteknolojinin kullanım alanları Şekil 2.7'de gösterilmiştir.



Şekil 2.7. Nanoteknolojinin Kullanım Alanları

Nanoteknolojinin kullanım alanlarından bazıları aşağıda verilmiştir.

2.4.1. Malzeme Bilimi

Nanoparçacıklar ve nanoyapılar çeşitli malzemelerde daha güçlü, daha hafif ve daha kullanışlı ürünler yapmak veya yeni işlevsel etkiler kazandırmak için kullanılmaktadır. Eğer malzemeler, yapılar ve cihazlar sistematik olarak, ölçekli anlamda molekül olarak inşa edilebilirse, başka yaklaşımlarla mümkün olmayan işlevler oluşturabilir. Malzeme üretim alanında ileri seramikler, boyalar ve renk maddeleri, ultra ince kaplamalar, astar boya ve katkıları, korozyon koruyucuları, katalizörler ve yapışkanlar gibi nano malzemelerin pek çok uygulamaları yoğun bir şekilde kullanılmaktadır.

Birçok önemli uygulamada malzemeye önemli avantajlar sağlayan suyu seven (süperhidrofilik) ve suyu iten (süperhidrofobik) yüzeyler kullanılmaktadır. Yakın bir zamanda elektronik aletler, betonlar, boyalar, camlar, giysiler vb. malzemelerin dış etkenlere maruz kaldıklarında temiz kalmaları için süperhidrofobik ve süperhidrofilik parçacıklar içerecek ya da tamamen bunlarla kaplanmış olacaklardır. Bu yüzeylerde gerçekleştirilen reaksiyonlarla daha yüksek verim elde edilebileceği gibi sürtünmenin neden olduğu enerji kaybı minimuma indirilerek tasarruf sağlanabilecektir.

2.4.2. Tekstil

19. yüzyıl başlarında gelişmeye başlayan tekstil endüstrisi nanoteknoloji sayesinde yeni bir döneme girmeye hazırlanmaktadır. Tekstilde kullanılan malzemelere nanometre boyutlarında farklı özellikler kazandırılmasının çok önemli gelişmelere yol açacağı düşünülmektedir. Örneğin çorap ipliğinin gümüş nanoparçacıklarla katkılandırılması, çorap içerisinde bakteri ve mikrop barınmasını engelleyeceğinden, koku oluşumu önlenmiş olacaktır. Süperhidrofobik kumaşlardan üretilmiş tekstil ürünlerinde kirlenme engellenmiş, dolayısıyla yıkama ve tekrar ütüleme ihtiyacı en aza indirilmiş olacaktır. Böylece su sarfiyatı azalacak, hatta belirli bir süre sonra çamaşır makinalarına gereksinim kalmayacaktır.

Nanoteknoloji yardımıyla çok çeşitli kumaşlar günümüzde üretilebilmekte olup yakın bir gelecekte giyilen tişörtler, gömlekler vs. üzerindeki sensörler sayesinde kişinin kalp atışları, vücut ısısı ve kan şekeri düzenli olarak kontrol edilebilecektir.

2.4.3. Gida

Nanoteknoloji gıda ve ambalaj sektöründe de birçok gelişmenin ortaya çıkmasına olanak sağlamıştır. Gıda maddelerinin, nanoteknoloji ile sağlığa uygun ve taze tutulmasının yanı sıra, gömülü nanoalgılayıcılar sayesinde gıda içindeki tüm değişimler izlenebilmektedir. Ambalaj sanayinde özelikle gelişmiş sanayi ülkeleri büyük araştırma-geliştirme yatırımları yapmakta ve nanoteknolojide ortaya çıkan gelişmelerle gıda ve içecek maddelerinin kalitesi arttırılmaktdır. Böylece gıda sanayindeki üretim ve pazar payları artmaktadır. Örneğin, plastiğe nanokristaller gömerek moleküler gaz içermez ambalaj geliştirilmesi; gıda ambalajında gömülü algılayıcılar ve aktif dil teknolojisi kullanılması; nanoteknolojik yöntemlerin antimikrobiyal akıllı ambalaj geliştirmede kullanımı ambalaj sektöründe nanoteknolojinin kullanımına verilebilecek örnekler olarak gösterilebilir. Birçok gıda malzemesi, plastiklerin nanoyapıyla sağlanan gaz/su buharı geçirgenliğiyle korumaya alınarak tüketicinin aradığı özelliklere kavuşmaktadır. Nanotaneciklerin eklenmesiyle insanlar daha fazla ısı ve ışık dirençli, daha kuvvetli mekanik ve ısıl performans gösteren ve daha az gaz emilimi olan şişe ve ambalaj malzemesi üretebilmektedir.

2.4.4. Çevre ve Enerji

Enerjinin kullanılmasında, depolanmasında ve üretilmesinde nanoteknoloji çok büyük fırsatlar sağlamaktadır. Nanoteknolojinin verdiği imkânlarla daha az atık üreten sistemler geliştirilerek çevre sorunlarının çözümüne yeni ve özgün çözümler oluşturulmaktadır.

Bununla birlikte, nanoteknoloji ile nanofilitrelerin kullanılmasıyla gelecekte temiz suyun elde edilmesi düşünülmektedir. Ayrıca, temiz enerji kaynağı olarak kabul edilen hidrojen enerjisinin üretilmesi ve depolanması nanoteknolojinin uygulama alanına giren önemli bir konudur. Otomobil, uçak ve gemi endüstrilerinde kullanılan nanoteknoloji ürünü malzemeler sayesinde daha az enerji harcanarak çevrenin daha az kirlenmesine ve ulaşımın daha ekonomik olması planlanmaktadır. Taşıt tekerleklerindeki lastiklerde siyah karbon yerine nanoteknoloji ürünü inorganik kil ve polimer kullanılarak çevre dostu lastiklerin yapılabilme imkanı vardır. Nanorobotlar ve akıllı sistemlerin nükleer atıkların kontrolünde, filtrelenmesinde kullanılabilme ihtimali vardır [74].

2.4.5. Elektronik ve Bilgisayar Teknolojileri

Nanoteknoloji araştırmalarının başlangıcında en çok araştırma elektronik sanayisinde yapılmıştır. Burada hedeflenen amaç elektronik araçların nanometre boyutlarında elde edilmeleri ile şu anda kullanılan sistemlerin kapasiteleri ve işlem güçlerini birkaç kat artırmaktır. Nanoteknolojinin elektronik sektöründeki oldukça başarılı uygulamaları ve sahip olunan bilgiler birçok farklı disiplin ve sektörün konu ile ilgili çalışmalarına öncülük etmiştir. Bilim insanları nanoölçekteki malzemelerle, çok küçük hacimlere bilgi işleme ve depolama konularındaki araştırmalarını artırmışlardır.

Nanoboyutta elektronik devre elemanlarının üretilmesi ile bilgisayar mimari tasarımında yeni gelişmeler yaşanmakta daha küçük boyutlu az yer kaplayan çok fonksiyonel bilgisayarlar üretilmektedir. Nanoteknolojinin kullanım alanlarından biri olarak önerilen kuantum bilgisayarların geliştirilmesi ile günümüz bilgisayarları ile kıyaslanamayacak seviyelerde işlem gücü elde etmek mümkün olacaktır [75]. Nanoölçekteki devre elemanları günümüze göre daha az enerji ile fonksiyonlarını yerine getirebildiğinden bu tür bilgisayarların ebat olarak daha küçük, hız ve kapasite olarak çok daha büyük, harcadığı enerji bakımından oldukça ekonomik olacağı çok net bir şekilde görülmektedir.

2.4.6. Savunma

Nanoteknoloji uygulamaları çok iyi geliştirilmiş silah sitemleri, kamuflaj ve akıllı sistemler ile savunma sahasında vazgeçilmez imkanlar sunmaktadır. Nanoteknolojinin en önemli askeri uygulamalardan birisi asker kayıplarının minimuma indirilmesi için akıllı üniformaların tasarlanıp üretilmesidir. Yapılan çalışmalarla akıllı üniforma üretilmesinde ümit verici neticeler elde edilmiştir. Nanoteknoloji tabanlı nanosensörler diğer sensörlere göre aşırı duyarlılığa sahiptir ve bu aşırı duyarlılık sayesinde tek bir tane molekülü bile algılayabilmektedir. Nanosensörlerin bu özelliği, ortamda çok az sayıda bulunan ölümcül mikropların tespitinde önemli hale gelmektedir.

2.4.7. Optoelektronik

Optoelektronik, ışıkla etkileşen elektronik aygıtları inceleyen ve bu aygıtların pratik hayatta uygulanmasını konu alan bilim dalıdır. Nanoelektronik devreler, sayısal devrelerin gelişimine yapması beklenen katkının bir benzerini, nanofotonik aygıtların da günümüzdeki optik iletişim ve internet teknolojilerine yapması beklenmektedir. 1990'larda başlayan ve baş döndürücü bir hızla ilerleyen internet ve bilgi iletişim teknolojisi sürekli olarak artan bir bilgi aktarma hızına ihtiyaç duymaktadır. Günümüzde optik fiber teknolojisinin sunduğu kapasitenin yalnızca binde biri kullanılmaktadır. Bu kapasitenin kullanımı lazer, dedektör ve modülatör gibi fotonik aygıtların kapasitesi ile sınırlı kalmaktadır. Nanofabrikasyon teknolojileri kullanılarak oluşturulacak nanodedektör, nanolazer ve nanomodülatör aygıtlarının kullanıma girmesi ile daha yüksek hızlarda çalışan optik iletişim sistemleri, 2020 yılı ve sonrasında ihtiyaç duyulacak iletişim kapasitesini karşılayacaktır.

Nanokristaller görünür bölgede, rengi boyutlarına bağlı olarak değişen ışık yayabilen etkili merkezler oluşturmaktadır. Nanokristallerin bu özelliği canlı hücrelerin işaretlenmesinde tanı amaçlı olarak kullanılmaktadır [76].

Kansız ameliyatlarda, lazerle yara iyileştirmede, böbrek taşı tedavisinde, göz tedavilerinde, dişçilikte ve benzeri sağlık alanlarında, yüksek çözünürlüklü projeksiyon ekranlarında, DVD'lerde, lazer tabanlı reklam panolarında, LCD ekranlarda, cep telefonu ekranlarında, dijital fotoğraf makinelerinde, MP3 oynatıcılarda, hologramlarda ve diğer pek çok uygulamalarda farklı renklere sahip çok daha ekonomik lazerlere ihtiyaç duyulmaktadır. Nanoteknoloji kullanılarak hem düşük maliyetli hem de istenilen renklerde çalışan nanoışık kaynakları yapma başarısı gösterilmiştir [77].

Kuantum noktaların kullanılması üçüncü–nesil güneş hücrelerinin elektrik üretiminin yaklaşık %60 verimde gerçekleşmesini sağlar ve daha uygun maliyet gerektirmektedir. Kuantum noktalar tercih edilen soğurma ve radyasyon yayma yeteneklerinden dolayı uygun elektrik akımı ve voltajın üretiminde daha etkilidir [3].

3. HESAPLAMA TEKNİKLERİ ve YAKLAŞIM METOTLARI

3.1. Varyasyon Metodu

Varyasyon metodu, kuantum mekaniğinde taban durumu ve bazı uyarılmış durumlar için enerji özdeğerlerinin yaklaşık olarak hesaplama yöntemlerinden biridir [3]. Pertürbasyon yönteminin uygulanamadığı, yani Hamiltonyenin $H = H_0 + V$ gibi iki terime ayrılamadığı durumlarda bu metot uygulanabilir. Taban durum enerjisini minimize ederek bulmayı hedefleyen bir metottur [78]. Bunun için karmaşık sistemlerin dalga fonksiyonlarını tahmin etmek ve bu fonksiyonları geliştirmek için bir yol oluşturulur [1].

Varyasyon metodu, kesin çözümün elde edilemediği durumlarda deneme dalga fonksiyonu ele alarak sistemin enerji özdeğerlerini yaklaşık olarak hesaplar. Hesaplanan enerji değeri daima taban durum enerjisinden daha büyük ya da eşittir. Varyasyon metodu hesaplamaları için süreci kısaca şu şekilde özetleyebiliriz. Sistemi en iyi karakterize edecek şekilde deneme dalga fonksiyonu tayin edilir. Deneme dalga fonksiyonu sistemin yapısına göre bir ya da birden fazla varyasyon parametresi içerebilir. Ancak varyasyon parametresinin çokluğu yapılan hesaplamaları güçleştirecektir. Bu parametreler deneme dalga fonksiyonu enerji değeri minimum olana kadar ayarlanır. Böylece deneme dalga fonksiyonu ve enerji özdeğeri, gerçek dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerine yaklaşılır.

Bir H hamiltonyeninin özdeğerleri E_n ve özvektörleri $\{u_n\}$ olsun. Taban durumu için

$$Hu_0 = E_0 u_0 \ E_0 = \frac{\int u^* H u}{\int u^* u}$$
(3.1)

şeklinde olur. Bu sistemin herhangi bir ψ durumunda hamiltonyeninin beklenen değeri için daima şu eşitsizlik yazılabilir:

$$E = \langle H \rangle = \frac{\int \psi H \psi}{\int \psi \psi^*} \ge E_0 \tag{3.2}$$

(ψ fonksiyonu normlanmışsa payda 1'e eşit olur.) Eşitlik ancak $\psi = u_0$ olduğunda mümkündür. Bu eşitsizliğin ispatı kolaydır. Her ψ durumu için { u_i } özvektörlerinin süperpozisyonu olacağı için

$$\psi = \sum_{i} c_{i} u_{i} \tag{3.3}$$

olarak yazılabilir. Burada c_i katsayıları, varyasyon integralinin minimize edilmesiyle elde edilen $\sum_i |c_i|^2 = 1$ şartını sağlayan katsayılardır. Eşitlik (3.3) ifadesini kesin dalga fonksiyonu üzerinden eşitlik (3.2)'de yerine yazarsak

$$E = \frac{\int \psi H \psi}{\int \psi \psi^*} = \sum_i \sum_j c_i^* c_j \quad \frac{\int u_i^* H u_j}{\int u_i^* u_j}$$
(3.4)

ve gerekli işlemler yapılırsa

$$E = \sum_{i} \sum_{j} c_{i}^{*} c_{j} \frac{\int u_{i}^{*} H u_{j}}{\int u_{i}^{*} u_{j}} E_{j} \delta_{ij} = \sum_{i} c_{i}^{*} c_{i} E_{i} = \sum_{i} |c_{i}|^{2} E_{i}$$
(3.5)

olur. Burada c_i^* ise c_i katsayısının kompleks eşleniğidir. Taban durumu her zaman diğer durumlardan daha küçük enerjili olduğu $(E_i \ge E_0)$ için, serinin her teriminde E_i yerine E_0 alırsak eşitliğin sağ tarafı küçülür:

$$E \ge \sum_{i} |c_{i}|^{2} E_{0} = E_{0} \sum_{i} |c_{i}|^{2}$$
(3.6)

Son olarak $\sum_i |c_i|^2 = 1$ ifadesi kullanılırsa

$$E \ge E_0 \tag{3.7}$$

ifadesi elde edilir. Bu eşitsizliğe göre E değeri ne kadar aşağıya çekebilirse, taban durumuna o kadar yaklaşılmış olur. Seçilen ψ dalga fonksiyonu bir λ parametresi içeriyorsa, bulunan E değeri de bu λ parametresine bağlı olur. O halde, E değeri bu λ parametresine göre minimize edilerek taban durumuna iyice yaklaşılır. Bu yöntem daha genel olarak, $(\lambda_1, \lambda_2 ... \lambda_n)$ gibi birden çok parametreye uygulanabilir [78]. Deneme dalga fonksiyonun enerjisi, gerçek taban durum enerjisinden daima büyüktür ya da eşittir. Deneme fonksiyonundaki her değişim enerji değerini düşürerek gerçek çözüme daha çok yaklaştırmaktadır. Dış kuvvetler ve potansiyeller içeren her boyutta denklemler için elverişli olması ve çoğu zaman nümerik simülasyonlara oldukça benzer sonuçlar vermesi bu metodun avantajları arasında yer almaktadır. Ancak bu avantajlar ele alınan sistemi en iyi derecede tanımlayabilecek bir deneme dalga fonksiyonunun seçilmesi ile mümkün olmaktadır. Eğer sistem iyi bilinmezse sisteme uygun deneme dalga fonksiyonunu belirlemekte oldukça zor olacaktır. İstenilen sonuç elde edilemeyecektir. Öyleyse varyasyon metodu uygulanırken sistemin tam olarak tanımlanması ya da belirlenmesi gerekmektedir [3].

3.2. Etkin Kütle Yaklaşımı

Katıların elektronik, optik, termal gibi temel özelliklerinin elektronun kütlesine göre değişiklik gösterdiği deneysel olarak kanıtlanmıştır. Elektronun kristal içerisindeki potansiyelle az da olsa etkileşmesinden dolayı kütlesi genellikle etkin kütle olarak adlandırılır ve hesaplamalarda boş uzaydaki kütle (m_0) yerine etkin kütle (m^*) dikkate alınır.

Etkin kütlenin serbest elektronun kütlesinden farklılığının sebebi incelenmek istenirse, sürüklenen elektronlar ile kristal atomları arasındaki etkileşimin incelenmesi gerekir. Örneğin, elektrik alan içinde ivmelendirilen bir elektron yavaşlar. Bu yavaşlamanın sebebi, elektronun bazı atomlar ile çarpışması sonucunda olur. Öncelikle iletkenlik bandındaki elektronun hızı göz önüne alınır. Elektronun hareketi dalga paketleri halindedir. O halde etkin kütleyi tanımlamak için elektronun enerjisini, elektronun açısal frekansı cinsinden ifade edersek

$$E = \hbar\omega \tag{3.8}$$

şeklinde olur ve dalganın grup hızı

$$\boldsymbol{\nu}_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi\nu)}{dk} = \frac{d(2\pi E/h)}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$
(3.9)

şeklindedir. Parçacığın ivmesi grup hızı cinsinden

$$\boldsymbol{a} = \frac{d\boldsymbol{v}_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{d\boldsymbol{k}}{dt}$$
(3.10)

olarak bulunur. Burada w, v, E ve k sırası ile açısal frekans, frekans, enerji ve dalga vektörüdür. Denklem (3.10) düzenlenirse

$$\boldsymbol{a} = \left(\frac{1}{\hbar}\right) \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right) \left(\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\right) \tag{3.11}$$

şeklinde yazılabilir [71].

Etkin kütleye ulaşmak için k vektörünün zamana göre değişiminin incelenmesi gerekir. Çünkü momentum $p = \hbar k$ 'dır. Burada momentumun zamana göre değişimi elektronun üzerindeki kuvveti verecektir.

$$\frac{dp}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt} \tag{3.12}$$

Eşitlik (3.12), (3.11) denkleminde yerine yazılır ve düzenlenirse

$$\boldsymbol{a} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \boldsymbol{F}$$
(3.13)

elde edilir. Burada *F* elektronun üzerindeki kuvvettir.

Periyodik örgüde elektrona bir F_{dis} kuvvet uygulanırsa elektronun hareket denklemi Newtonun II. hareket yasasına göre,

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_{i\varsigma} + \boldsymbol{F}_{di\varsigma} = \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{m}^* \boldsymbol{a} = \hbar \frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = \boldsymbol{m}^* \left(\frac{1}{\hbar}\right) \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right) \left(\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\right)$$
(3.14)

olur. Burada p kristal momentumu ve k dalga vektörüdür. Bu denklemden kütle çekilirse

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{dk^2}{d^2E}\right)^{-1}$$
(3.15)

elde edilir. Bu sonuca göre etkin kütle, enerjinin dalga vektörüne göre ikinci türevinin tersi ile orantılıdır.

4. LİNEER OLMAYAN OPTİK

Lineer olmayan (doğrusal olmayan) optik, ışığın varlığı ile bir malzeme sisteminin optiksel özelliklerinin değişikliğinin bir sonucu olarak meydana gelen olayların incelenmesidir. Lineer olmayan optik, lazerin icadında etkili olup ışığın doğasını anlamamızı sağlar. Günümüz optik biliminde lazerler ve dolayısıyla optik aygıtlar, oldukça önemli bir yer tutmaktadırlar. Yeterli yoğunluğa sahip monokromatik (tek renkli) bir ışık malzeme üzerine geldiğinde, çıkan demet, gelen demetin frekansından oldukça farklı frekanslara sahip olacaktır. Bu, lineer olmayan optik etkinin bir örneğidir. Lazerlerle, böyle etkileri incelemek için gerekli yoğunluk seviyelerine ulaşmak kolaydır.

Zayıf ışık alanları ile oluşturulan optiksel olayların karakterleri ışığın şiddetine bağlı değildir. Yani ışığın ortamda yayılması ortamın optik özelliklerini değiştirmez. Böyle olaylara lineer optik olaylar, bu olayları inceleyen optiğe de lineer optik denir. Çok sayıda deneylerden çıkan sonuçlar göstermiştir ki, akım şiddeti $10^8 \text{ W/}cm^2$ ve bundan büyük olan ışık demetleri, ortamın optik karakterini değiştirir. Bu nedenle karakteri ışıma şiddetiyle ilgili olan optik olaylarını inceleyen fizik dalına lineer olmayan optik denir. Lineer olmayan optik özellikler üzerine ilk gözlem Franken tarafından kuartzlarda (saf SiO₂ kristalleri) ikinci harmonik üretimi için 1961'de yapılmıştır [79].

Lineer ve lineer olmayan ortamın bazı temel özellikleri aşağıda verilmiştir.

Lineer Ortamda:

- Kırılma indisi ve soğurma katsayısı ışığın şiddetinden bağımsızdır,
- Işığın frekansı ortamda değişmez, frekans sadece kaynağa bağlıdır,
- Üst üste binme ilkesi geçerlidir,
- Işık ile ışık kontrol edilemez (foton-foton etkileşmesi olmaz).

Lineer Olmayan Ortamda:

- Kırılma indisi ışığın şiddetine bağlı n(I)

- Frekans değişir ($\omega \rightarrow 2\omega; \omega \rightarrow 3\omega$),
- Üst üste binme ilkesi geçerli değildir.
- Işık ile ışık kontrol edilebilir [80].

Lineer optikte, kutuplanma yalnızca lineer alınganlık ve optiksel elektrik alanla tanımlanır ve bu ilişki

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

şeklindedir. Burada $x^{(1)}$ lineer alınganlıktır. Bu bağıntı bize kutuplanmanın, P(t), (birim hacim başına dipol) uygulanan optiksel elektrik alan, E(t)'ye bağlı olduğunu gösterir. Ortamın lineer olmayan özellikleri ise belirli sayıdaki optik alınganlıklar ve kutuplanmanın optiksel alanın kuvvet serisi olarak tanımlanması ile karakterize edilir ve bu ilişki

$$P(t) = P^{(1)}(t) + P^{(2)}(t) + P^{(3)}(t) + \dots + P^{(n)}(t)$$
(4.2)
ya da
$$P(t) = \chi^{(1)}E(t) + \chi^{(2)}E^{(2)}(t) + \chi^{(3)}E^{(3)}(t) + \dots + \chi^{(n)}E^{(n)}(t)$$
(4.3)

ile verilir. $\chi^{(2)}$ ve $\chi^{(3)}$ sırasıyla ikinci ve üçüncü dereceden lineer olmayan optik alınganlıklardır. Lineer olmayan alınganlıkların optik ifadesi kuantum mekaniğinin

alınganlıklardır. Lineer olmayan alınganlıkların optik ifadesi kuantum mekaniğinin yasalarını kullanarak elde edilebilir. Aşağıda sırasıyla lineer ve üçüncü mertebeden lineer alınganlıklar sırasıyla verilmiştir:

$$\chi^{(1)}(w) = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\sigma_s |\mu_{10}|^2}{(E_{10} - \hbar w - i\hbar\Gamma_{10})} = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\sigma_s |\mu_{10}|^2 (E_{10} - \hbar w)}{(E_{10} - \hbar w)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} + i \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\sigma_s |\mu_{10}|^2 \hbar\Gamma_{10}}{(E_{10} - \hbar w)^{2+} (\hbar\Gamma_{10})^2}$$
(4.4)

ve

$$\chi^{(3)}(w) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\sigma_s |\mu_{10}|^2 |E|^2}{(E_{10} - \hbar w - i\hbar\Gamma_{10})} \times \left[\frac{4|\mu_{10}|^2}{(E_{10} - \hbar w)^{2+} (\hbar\Gamma_{10})^2} - \frac{(\mu_{11} - \mu_{00})^2}{(E_{10} - i\hbar\Gamma_{10})(E_{10} - \hbar w - i\hbar\Gamma_{10})} \right]$$
(4.5)

olacaktır. Burada $\mu_{10} = -\langle \psi_1 | r | \psi_0 \rangle$ dipol momentinin matris elemanlarıdır. μ_{10} , Γ_{10} , sırasıyla 1 ve 0 seviyeleri arasındaki matris elemanı ve bozulma hızı (durulma oranı) olup $\Gamma_{10} = \Gamma_{01}$ alınmıştır. *w* açısal frekansı, $\chi^{(1)}$ ortamın lineer alınganlığı, $\chi^{(3)}$ lineer olmayan alınganlık, σ_s elektron yoğunluğu, ε_0 dielektrik sabitini, \hbar Planck sabitini göstermektedir.

Elektronun başlangıç durumundan son duruma birim zamanda geçiş olasılığı Fermi'nin Altın Kuralı

$$\Gamma_{i \to f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i} |\langle f | V | i \rangle|^2 \delta(E)$$
(4.6)

ile hesaplanır. Burada, $E = E_f - E_i \pm \hbar w$ 'dir. E_f ve E_i sırasıyla son ve başlangıç durumunda parçacığın enerjisidir. $\langle f | V | i \rangle$ ise başlangıç ve son durum arasında geçiş matris elemanıdır. V parçacıklar arasındaki saçılma potansiyelidir. $\langle f | ve | i \rangle$ ise sırasıyla son durum ve başlangıç durum dalga fonksiyonlarıdır. (+) işareti yaymaya (emisyon) ve (-) işareti soğurmaya karşılık gelmektedir. Eğer, başlangıç durumu taban durumu ise yalnızca soğurma süreci gerçekleşir, yayma süreci elektronların başlangıç olarak uyarılmış olduğu durumlar iken söz konusudur.

Soğurma katsayısı, gerek hacimsel yarıiletken malzemelerde gerekse heteroyapılar için optik özellikleri anlaşılmasında önemli bir yer teşkil eder ve alınganlıklardan yola çıkılarak hesaplanabilir. Soğurma katsayısı ile optik alınganlık arasındaki ilişki,

$$\alpha(w) = w \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} Im(\varepsilon_0 \chi(w))$$
(4.7)

ile verilir. *Im*, alınganlık kısmının sanal kısmını ifade etmektedir. Lineer ve üçüncü derece lineer olmayan soğurma katsayısı sırası ile

$$\alpha^{(1)}(w) = w \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \frac{\sigma_s |\mu_{10}|^2 \hbar \Gamma_{10}}{(E_{10} - \hbar w)^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2}$$
(4.8)

ve

$$\alpha^{(3)}(w,I) = -2w \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \left(\frac{I}{n_r \varepsilon_0 c}\right) \frac{\sigma_s |\mu_{10}|^4 \hbar \Gamma_{10}}{[(E_{10} - \hbar w)^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2]^2} \times \left[1 - \frac{|\mu_{11} - \mu_{00}|^2}{4|\mu_{10}|^2} \times \frac{\{(E_{10} - \hbar w)^2 - (\hbar \Gamma_{10})^2 + 2E_{10}(E_{10} - \hbar w)\}}{E_{10}^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2}\right]$$
(4.9)

olarak hesaplanır. Burada, n_r kırılma indisi, σ_s elektron yoğunluğu, ε_0 dielektrik sabiti, c ışık hızı, $E_{ij} = E_i - E_j$ iki farklı elektronik durum arasındaki enerji farkıdır. Kutuplanmış elektromanyetik radyasyon *z* yönünde seçilmiştir. Γ_{ij} ve μ_{ij} sırasıyla i ve j durumları arasındaki durulma oranı ve matris elemanıdır. $\Gamma_{ij} = \frac{1}{T_{ij}}$ ve $\mu_{ij} = |\langle \psi_i | ez | \psi_j \rangle|$ şeklinde tanımlanır. T durulma zamanı ve ψ_i ve ψ_j sırasıyla başlangıç ve son durumların dalga fonksiyonudur.

Toplam soğurma katsayısı, lineer ve lineer olmayan soğurma katsayılarının toplamı olarak

$$\alpha(w, I) = \alpha^{(1)}(w) + \alpha^{(3)}(w, I)$$
(4.10)

yazılabilir.

Diğer önemli bir optik özellik ise kırılma indisidir. Kırılma indisi, optik geçişler içeren durumların çalışılması için uygun bir optik özellik olup yarıiletken kuantum nokta optik yükselticilerde kazanç hakkında tamamlayıcı bilgi verir. Literatürde, kırılma indisi değişimi ile optik alınganlık arasındaki bağıntı

$$\frac{\Delta n(w)}{n_r} = Re\left(\frac{x(w)}{2n_r^2}\right) \tag{4.11}$$

ile verilir. *Re*, alınganlık kısmının gerçel kısmını ifade etmektedir. Denklem (4.4)'ten lineer kırılma indisi değişimi

$$\frac{\Delta n^{(1)}(w)}{n_r} = \frac{1}{2n_r \varepsilon_0} \frac{\sigma_s |\mu_{10}|^2 (E_{10} - \hbar w)}{(E_{10} - \hbar w)^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2}$$
(4.12)

ve Denklem (4.5)'ten üçüncü derece lineer olmayan kırılma indisi değişimi

$$\frac{\Delta n^{(3)}(w)}{n_r} = -\left(\frac{\mu c}{4n_r^3\varepsilon_0}\right) \frac{\sigma_s I}{[(E_{10} - \hbar w)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2]^2} \times \left[4(E_{10} - \hbar w)|\mu_{10}|^2 - \frac{|\mu_{11} - \mu_{00}|^2}{E_{10}^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} \times \left\{(E_{10} - \hbar w)[E_{10}(E_{10} - \hbar w) - (\hbar\Gamma_{10})^2] - (\hbar\Gamma_{10})^2(2E_{10} - \hbar w)\}\right]$$
(4.13)

olarak hesaplanabilir. Toplam kırılma indisi değişimi, lineer ve lineer olmayan kırılma indisi değişiminin toplamı olarak

$$\frac{\Delta n(w)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(w)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(w,l)}{n_r}$$
(4.14)

şeklinde ifade edilebilir [3].

5. ASİMETRİK YARI PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNDA SAFSIZLIĞIN ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİ

5.1. Giriş

Kuantum kuyularının elektronik ve optik özellikleri, dış faktörlerle (elektrik alan, manyetik alan ve basınç vb.) kontrol edilebilmektedir. Bu çalışmada, birçok teknolojik uygulamaya sahip olan kuantum kuyularının elektronik ve optik özellikleri teorik olarak incelenecektir. Kuantum kuyu profili olarak asimetrik yarı parabolik kuantum kuyusu ele alınacaktır. Nümerik hesaplamalar etkin kütle yaklaşımı altında varyasyon metodu kullanılarak yapılacaktır. Safsızlığın varlığında ve yokluğunda sistemin enerjisi hesaplanarak elektrik alanın bağlanma enerjisi üzerine etkisi incelenecektir. Ayrıca soğurma katsayısı ve kırılma indisi gibi optik özellikler araştırılacaktır.

5.2. Elektrik Alanın Elektronik Özellikler Üzerine Etkisi

Yarı parabolik kuantum kuyu (KK) sisteminde etkin kütle yaklaşımında uygulanan dış elektrik alan altında asimetrik yarı parabolik sınırlandırılmış donör safsızlık merkezinde bir elektron için Hamiltonyen ifadesi,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(z) + |e| Fz - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 \varepsilon \vec{r}}$$
(5.1)

ile verilir. Burada z büyüme doğrultusunu, m^* iletim bandının etkin kütlesini, \hbar Planck sabiti, **F**, z doğrultusunda uygulanan elektrik alanı, e elektronun yükünü, ε kuantum kuyu malzemenin dielektrik sabini, ε_0 boşluğun dielektrik sabitini, Z=0 durumu safsızlığın yokluğunu, Z=1 durumu safsızlığın varlığını, \vec{r} elektron ve safsızlık arasındaki konum vektörünü ifade etmektedir. V(z) ise sınırlandırıcı potansiyeldir ve,

$$V(z) = \begin{cases} \frac{1}{2}m^* w_0^2 z^2 & z \ge 0\\ \infty & z < 0 \end{cases}$$
(5.2)

şeklindedir. $\psi_{n,k}$ özdeğer fonksiyonları ve $\varepsilon_{n,k}$ öz enerjiler olmak üzere sırasıyla

$$\psi_{n,k}(r) = \phi_n(z)U_c(r)\exp(i\boldsymbol{k}_{\parallel}\boldsymbol{r}_{\parallel})$$
(5.3)

$$\varepsilon_{n,k} = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left| \boldsymbol{k}_{\parallel} \right|^2 \tag{5.4}$$

olarak verilir. Burada sırasıyla , \mathbf{k}_{\parallel} ve \mathbf{r}_{\parallel} sırasıyla xy düzleminde dalga ve konum vektörlerini göstermektedir. $U_c(r)$ $\mathbf{k} = 0$ iletim bandında Bloch fonksiyonunun periyodik kısmı, $\phi_n(z)$ ve E_n sırası ile n. seviyenin zarf dalga fonksiyonu ve alt bant enerjisidir. H_z , safsızlığın yokluğunda (5.1) denkleminde Hamiltonyen ifadesinin z eksenine bağlı kısmı

$$H_{z} = -\left(\frac{\hbar^{2}}{2m^{*}}\right)\left(\frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) + \frac{1}{2}m^{*}w_{0}^{2}z^{2} + |e|Fz$$
(5.5)

şeklindedir. Safsızlığın yokluğunda z'ye bağlı Schrödinger dalga denklemine karşılık gelen dalga fonksiyonu

$$\phi_n(z) = N_n exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2(z+\beta)^2\right) H_{2n+1}(\alpha(z+\beta)^2)$$
(5.6)

olarak bulunur. Burada

$$\alpha = \sqrt{\frac{m^* w_0}{\hbar}} , \ \beta = \frac{ea^* F}{R^*}$$
(5.7)

ve $H_{2n+1}(\alpha z)$ Hermite polinomları ve N_n normalizasyon sabiti olup aşağıdaki gibi verilir.

$$N_n = \left\{ \alpha^{-1} \sqrt{\pi} \, 2^{2n} (2n+1)! \right\}^{-1/2} \tag{5.8}$$

Hermite polinomlarının ilk birkaç değeri aşağıda verilmiştir.

 $H_0(x) = 1 \tag{5.9}$

$$H_1(x) = 2x \tag{5.10}$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2 \tag{5.11}$$

ve

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \tag{5.12}$$

$$H_4(x) = 16x^4 - x^2 + 12 \tag{5.13}$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x \tag{5.14}$$

Denklem (5.6), (5.8) ve Hermite polinom ifadeleri kullanılarak asimetrik yarı parabolik kuantum kuyusunun taban durumu (n = 0), birinci uyarılmış durumu (n = 1) ve ikinci uyarılmış durumu (n = 2) için dalga fonksiyonlarını elde edilir.

Taban durumu için,

$$\phi_0(z) = \left(\alpha^{-1}\sqrt{\pi}\right)^{-1/2} exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2(z+\beta)^2\right) 2\alpha(z+\beta)$$
(5.15)

şeklindedir. Benzer olarak birinci uyarılmış duruma ve ikinci uyarılmış duruma ait dalga fonksiyonu sırası ile

$$\phi_1(z) = \frac{1}{2\sqrt{\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}^3}} exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2(z+\beta)^2\right) (8[\alpha(z+\beta)]^3 - 12[\alpha(z+\beta)])$$
(5.16)

ve

$$\phi_{2}(z) = \frac{1}{568\sqrt{\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}}} exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^{2}(z+\beta)^{2}\right) (128[\alpha(z+\beta)]^{7} - 1344[\alpha(z+\beta)]^{5} + 3360[\alpha(z+\beta)]^{3} - 1680[\alpha(z+\beta)]\right)$$
(5.17)

olarak elde edilir. Safsızlığın olduğu durum için Schrödinger denkleminin analitik çözümü mümkün olmadığından dolayı, hesaplamalar varyasyon metodu kullanılarak yapılacaktır. Varyasyon parametresine bağlı olarak deneme dalga fonksiyonunu,

$$\psi_{\lambda} = \psi_n exp(-\lambda r) \tag{5.18}$$

şeklinde seçebiliriz. Hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisi, safsızlığın olmadığı durumdaki enerji E_0 ile safsızlığın varlığındaki enerji $E(D^0)$ arasındaki fark olarak

$$E_{b}=E_{0}-E(D^{0}) \tag{5.19}$$

verilir.

Safsızlığın olduğu durumdaki enerji,

$$E(D)^{0} = min_{\lambda} \frac{\langle \psi_{\lambda} | H | \psi_{\lambda} \rangle}{\langle \psi_{\lambda} | \psi_{\lambda} \rangle}$$
(5.20)

denkleminin varyasyon parametresine göre minimize edilmesiyle bulunabilir. min_{λ} terimi λ varyasyon parametresine karşılık gelen safsızlık enerjisinin minimum değeri anlamına gelmektedir. Bu terim, (5.1) denkleminde verilen Hamiltonyenin beklenen değerinin minimumudur. Yapılan hesaplamalar indirgenmiş atomik birimlerde yapılmış ve $m_e = \hbar = e = 1$ olarak alınmıştır. Bu çalışmada kullanılan malzeme Galyum Arsenit (GaAs)'dir.

Şekil 5.1.'de asimetrik yarı parabolik potansiyelin kuantum kuyu profili ve Şekil 5.2.'de taban durum ve uyarılmış durumların dalga fonksiyonu verilmiştir.



Şekil 5.1. Yarı Parabolik Potansiyelin Kuantum Kuyu Genişliğiyle Değişimi.



Şekil 5.2. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun Genişliğine (*z*) Bağlı Olarak Taban Durumu (n = 0), Birinci Uyarılmış Durum (n = 1), İkinci Uyarılmış Durum (n = 2), Üçüncü Uyarılmış Durum (n = 3) İçin Dalga Fonksiyonlarının Değişimi.

Safsızlığın olmadığı durum için taban durumu ve uyarılmış durumların farklı dış elektrik alan değerlerine karşılık kuantum kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak kinetik enerji değişimleri Şekil 5.3.'te verilmiştir. Şekil 5.3. (a) elektrik alan yokluğunda ve Sekil 5.3. (b) ve Sekil 5.3. (c) sırasıyla $F = 10 \ kV/cm$ ve F =40 kV/cm değerleri için çizilmiştir. Sekilden de görüldüğü gibi kuantum kuyu genişliği arttıkça kinetik enerji sınırlamadan dolayı azalmaktadır. Küçük kuyu genişliği değerlerinde enerji seviyeleri ayrık (kuantize) iken büyük kuyu genişliklerinde enerji seviyeleri birbirine yaklaşmaktadır. Elektrik alan uygulandığında enerji değerleri azalmaktadır.

Şekil 5.4.'te safsızlığın olduğu durumda farklı elektrik alan büyüklükleri için kuyu genişliğine bağlı olarak minimum enerji değerlerinin değişimi çizilmiştir. Şekil 5.4. (a) elektrik alan yokluğunda ve Şekil 5.4. (b) ve Şekil 5.4. (c) sırasıyla $F = 10 \ kV/cm$ ve $F = 40 \ kV/cm$ değerleri için çizilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi kuantum kuyu genişliği arttıkça minimum enerji, sınırlamanın ve Coulomb etkileşmesi nedeniyle azalmaktadır. Küçük kuyu genişliği değerlerinde enerji seviyeleri ayrık (kuantize) iken büyük kuyu genişliklerinde enerji seviyeleri birbirine yaklaşmaktadır. Elektrik alan uygulandığında minimum enerji değerleri azalmaktadır.

Şekil 5.5. elektrik alanın kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak bağlanma enerjisi üzerine etkisini göstermektedir. Küçük kuantum kuyu genişliği değerlerinde (kuantum sınırlama fazla) elektrik alan etkisi ihmal edilebilecek kadar azdır. Bu bölgede kuantum sınırlama elektrik alana göre daha baskındır. Bununla birlikte, kuantum kuyu genişliği arttıkça elektrik alan etkisi kendini göstermektedir. Burada elektrik alan enerjisi, kuantum sınırlama enerjisi ile mukayese edilebilir derecededir. Elektrik alan arttıkça bağlanma enerjisi azalmaktadır. Bu şekilden, kuantum kuyusunun bağlanma enerjisinin elektrik alana sıkı bir şekilde bağlı olduğu görülmektedir.

Şekil 5.6. yarı parabolik kuantum kuyunun farklı kuyu genişliklerinde ($z=0.75a^*$ $z=1.00 a^*$) bağlanma enerjisinin elektrik alana bağlı değişimi farklı enerji seviyeleri için çizilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi bağlanma enerjisi değerleri elektrik alana bağlı olarak azalmaktadır.



Şekil 5.3. Farklı Elektrik Alan Büyüklükleri İçin (F = 0.0, 10.0, 40.0 kV/cm Safsızlığın Olmadığı Durumda, Kuyu Genişliğine $z(a^*)$ ve Taban Durumu(n = 0, Birinci Uyarılmış Durum (n = 1), İkinci Uyarılmış Durum (n = 2), Üçüncü Uyarılmış Durum (n = 3) İçin Kinetik Enerji Fonksiyonlarının Değişimi. **a**) F = 0.0 kV/cm **b**) F = 10.0 kV/cm **c**) F = 40.0 kV/cm için.



Şekil 5.4. Safsızlığın Olduğu Durumda Farklı Elektrik Alan Büyüklükleri İçin Kuyu Genişliğine Bağlı Olarak Minimum Enerji Değerlerinin Değişimi. **a**) F = 0.0 kV/cm F = 10.0 kV/cm c) 40.0 kV/cm İçin.



Şekil 5.5. Farklı Elektrik Alan Büyüklükleri İçin ($F = 0.0, 10.0, 40.0 \, kV/cm$) Bağlanma Enerjisinin Yarı Parabolik Kuantum Kuyu Genişliğine Bağlı Değişimi a) Taban Durumu (n = 0) b) Birinci Uyarılmış Durum (n = 1) c) İkinci Uyarılmış Durum (n = 2) ve d) Üçüncü Uyarılmış Durum (n = 3) İçin.



Şekil 5.6. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun Farklı Kuyu Genişliklerinde ($z = 0.75a^*$ ve $z = 1.00a^*$), Bağlanma Enerjisinin Elektrik Alana Bağlı Değişimi **a**) Taban Durumu (n = 0) **b**) Birinci Uyarılmış Durum (n = 1), **c**) İkinci Uyarılmış Durum (n = 2) ve **d**) Üçüncü Uyarılmış Durum (n = 3) için.

Şekil 5.7.'de yarı parabolik kuantum kuyunun belli bir elektrik alan altında (F = 40 kV/cm), farklı kuyu genişliklerine bağlı olarak enerji seviyeleri arasındaki enerji farkı değişimi gösterilmiştir. Şekil 5.7. (a)-(b)'den açıkça görüldüğü gibi sabit elektrik alan altında, enerji seviyeleri arasındaki enerji farkı değişimi ($E_{10} = E_1 - E_0$ ve $E_{21} = E_2 - E_1$) kuyu genişliği arttıkça sınırlamadan dolayı azalmaktadır.



Şekil 5.7. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun Belli Bir Elektrik Alan Altında (F=40 kV/cm), Farklı Kuyu Genişliklerine Bağlı Olarak Enerji Seviyeleri Arasındaki Enerji Farkı Değişimi **a**)Taban Durumu (n=0), Birinci Uyarılmış Durum (n = 1) $E_{10} = E_1 - E_0$ **b**) Birinci Uyarılmış Durum(n = 1), İkinci Uyarılmış Durum (n = 2); $E_{21} = E_2 - E_1$

Şekil 5.8. yarı parabolik kuantum kuyunun belli bir kuyu genişliğinde (z=0.75a^{*}), farklı elektrik alan büyüklüklerine bağlı olarak enerji seviyeleri arasındaki enerji farkı değişimini göstermektedir. Şekil 5.8. (a)'da açıkça görülmektedir ki taban durumu (n=0) ile birinci uyarılmış durum arasındaki enerji farkı $E_{10} = E_1 - E_0$ elektrik alan büyüklüğüne bağlı olarak monoton bir şekilde artmaktadır. Benzer olarak artan elektrik alan değerleri için birinci uyarılmış durum ile ikinci uyarılmış durum arasındaki enerji farkı $E_{21} = E_2 - E_1$ artmaktadır.



Şekil 5.8. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun Belli Bir Kuyu Genişliğinde (z = $0.75a^*$), Farklı Elektrik Alana Bağlı Olarak Enerji Seviyeleri Arasındaki Enerji Farkı Değişimi **a**) $E_{10} = E_1 - E_0$ ve **b**) $E_{21} = E_2 - E_1$ için.

Şekil 5.9.'da farklı elektrik alan büyüklüklerinde (F = 30 kV/cm ve F = 50 kV/cm) yarı parabolik kuantum kuyunun kuyu genişliğine $z(a^*)$ bağlı olarak Stark Etkisi, $\Delta E_B(R)$, değişimi taban durumu ve farklı uyarılmış durumlar için çizilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi kuyu genişliği arttıkça Stark Etkisi azalmaktadır. Bu azalma; Şekil 5.9. (a)'da monoton bir şekilde olurken, Şekil 5.9. (b) ve (d)'de ise 0.7a * ve 0.9a * kuyu genişliklerinden sonra hızlı bir şekilde azalmaktadır. Şekil 5.9. (c)'de ise önce azalma önce hızlı iken belirli bir kuantum kuyusu değereinden sonra yavaş bir şekilde azalmaktadır. Elektrik alan artışı, Stark Etkisindeki azalmayı artırmaktadır.



Şekil 5.9. Farklı Elektrik Alan Büyüklüklerinde (F = 30 kV/cm, F = 50 kV/cm) Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun Kuyu Genişliğine $z(a^*)$ Bağlı Olarak Stark Etkisi { $\Delta E_B(R)$ } Değişimi (Taban Durumu ve Farklı Uyarılmış Durumlardaki). a)Taban Durumu (n = 0) b) Birinci Uyarılmış Durum (n = 1) c) İkinci Uyarılmış Durum (n = 2) d) Üçüncü Uyarılmış Durum (n = 3).

5.3. Elektrik Alanın Optik Özellikler Üzerine Etkisi

Bu kısımda elektrik alan, kuantum kuyu genişliği gibi parametrelerin 0s - 1p ve 1p - 2d geçişleri için asimetrik yarı parabolik kuantum kuyunun lineer ve lineer olmayan optik özellikler üzerine etkisi incelenecektir.

Şekil 5.10. yarı parabolik kuantum kuyunun, farklı kuyu genişliklerinde (z= $0.5a^*$, z = $0.6a^*$, z = $0.7a^*$), belli bir dış elektrik alan altında (F=40kV/cm) ve belli bir ışık şiddetinde $I = 0.3 MW/cm^2$) belirli enerji seviyeleri arasındaki (s – p ve p - d) foton enerjisinin soğurma katsayılarına bağlı değişimi çizilmiştir. Lineer

durumda soğurma katsayıları pozitif değerler almakta, lineer olmayan durumda ise soğurma katsayıları negatif değerler aldığı için, toplam soğurma katsayısı, lineer olmayan soğurma katsayısının zıt işaretinden dolayı indirgenir. Sonuçta kuyu genişliğine bağlı olarak toplam soğurma katsayısı hafifçe değişmektedir. Şekil 5.10.'da açık bir şekilde görüldüğü gibi kuantum kuyu genişliğinin artmasına bağlı olarak soğurma katsayıları sola doğru azalmakta yani daha küçük foton enerjilerine doğru kaymaktadır. Bu olay kırmızıya kayma (red shift) olarak adlandırılır. Kırmızıya kayma, fizikte bir nesneden yayılan görülebilen ışığın elektromanyetik tayfın kırmızı yönüne yaklaşmasıdır. Tam tersine kuyu genişliğinin azalması ise maviye kayma (blue shift) olarak bilinmektedir.

Şekil 5.11. farklı elektrik alan değerleri için foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak lineer ve lineer olmayan soğurma katsayılarının göstermektedir. Şekil 5.11. (a) ve Şekil 5.11. (b) sırası ile 0s - 1p ve 1p - 2d geçişleri için I = 0.3 MW/cm^2 ve $z = 0.75a^*$ değerlerinde çizilmiştir. Artan elektrik alan değeri ile maviye kayma gözlenmektedir. Bunun nedeni ise seviyeler arasındaki enerji farkının elektrik alanla artmasıdır. Bu durum Şekil 5.8. ile uyumludur. Ayrıca, elektrik alan değeri arttıkça soğurma katsayılarının büyüklükleri artmaktadır. Bunun fiziksel olarak yorumu ise elektrik alanın artması ile dipol matris elemanın artmasıdır. Buradan anlaşılmaktadır ki uygun elektrik alan ve kuantum kuyu genişliği değerleri için optik özellikler istenilen sekilde kontrol edilebilir.



Şekil 5.10. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Kuyu Genişliklerinde ($z= 0.5a^*, z = 0.6a^*, z = 0.7a^*$), Belli Bir Dış Elektrik Alan Altında (F = 40 kV/cm) ve Belli Bir Işık Şiddetinde (I = 0.3 MW/cm²) Belirli Enerji Seviyeleri Arasındaki (s - p ve p - d) Foton Enerjisinin Soğurma Katsayılarına Bağlı Değişimi **a**) s - p, **b**) p - d için.



Şekil 5.11. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Elektrik Alan Büyüklüklerinde $(F = 0 \ kV/cm, F = 30 \ kV/cm, F = 50 \ kV/cm)$, Belli Bir Işık Şiddetinde $(I = 0.3 \ MW/cm^2)$ Belirli Enerji Seviyeleri Arasındaki $(s - p \ ve \ p - d)$ Foton Enerjisinin Soğurma Katsayılarına Bağlı Değişimi **a**) s - p, **b**) p - d için.

Şekil 5.12. yarı parabolik kuantum kuyunun, farklı ışık şiddetlerinde (I=0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 MW/cm²) belirli bir dış elektrik alan altında (F = 40kV/cm), belirli bir kuyu genişliğinde ($z = 0.75a^*$) ve 0s - 1p ve 1p - 2d geçişleri için foton enerjisinin toplam soğurma katsayılarına bağlı değişimi çizilmiştir. Toplam soğurma katsayılarının pik değerleri başlangıç ve son durumları arasındaki enerji farkına karşılık gelmektedir. 0s - 1p ve 1p - 2d geçişleri için toplam soğurma piki artan ışık şiddeti ile kayma yapmamakta ancak pik değerinde azalma görülmektedir. Toplam soğurma katsayısı yeterince büyük ışık şiddetlerinde ikiye yarılmaktadır.

Şekil 5.13.'te yarı parabolik kuantum kuyunun, farklı elektrik alan büyüklüklerinde (F = 0; 30; 50 kV/cm), belirli bir ışık şiddetinde (I = $0.03 \text{ MW/}cm^2$) ve belirli bir kuyu genişliğinde (z = $0.75a^*$), foton enerjisinin kırılma indisi değişimine bağlı değişim fonksiyonu çizilmiştir. Şekil 5.13. (a), s-p enerji seviyeleri arasındaki, Şekil 5.13. (b)'de p - d enerji seviyeleri için kırılma indisi değişimlerinin foton enerjisine bağlı davranışlarını göstermektedir. Şekillerden de açıkça görüldüğü gibi toplam kırılma indisi değişimine en büyük katkı lineer terimden gelmektedir. Lineer terimden kaynaklanan bu büyük katkıya rağmen optik yoğunluğa bağlı olan lineer olmayan kırılma indisinin zıt işaretli (eksi) olmasından dolayı toplam kırılma indisi değişimi indirgenmektedir. Toplam kırılma indisi elektrik alanla maviye doğru kaymaktadır. Bununla birlikte, kırılma indisi elektrik alanla artmasıdır. (Bkz. Şekil 5.8.).

Şekil 5.14.'te yarı parabolik kuantum kuyunun, farklı kuyu büyüklüklerinde ($z = 0.5a^*, z = 0.6a^*, z = 0.7a^*$), belirli bir ışık şiddetinde ($I = 0.03 \text{ MW}/cm^2$) ve belirli bir elektrik alan altında (F = 40 kV/cm) toplam kırılma indisinin foton enerjisine bağlı değişimi enerji seviyeleri arası için çizilmiştir. Bu değişim, Şekil 5.14. (a)'da s - p geçişi için, Şekil 5.14. (b)'de p - d geçişi için çizilmiştir. Kuyu genişliğinin artmasıyla toplam kırılma indisi büyüklüğünde çok hafif bir değişme olduğu görülmektedir. Ayrıca, kırılma indisi kuantum kuyu genişliğinin artması ile kırmızıya doğru kaymaktadır. Bunun nedeni ise enerji farkının kuantum kuyu genişliği ile azalmasıdır.



Şekil 5.12. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Işık Şiddetlerinde (I=0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 MW/ cm^2), Belirli Bir Dış Elektrik Alan Altında (F = 40 kV/cm), Belirli Bir Kuyu Genişliğinde (z = 0.75 a^{*}) ve 0s – 1p ve 1p – 2d Geçişleri İçin Foton Enerjisinin Toplam Soğurma Katsayılarına Bağlı Değişimi. **a**) *s* – *p* **b**) *p* – *d* İçin.



Şekil 5.13. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Elektrik Alan Büyüklüklerinde (F = 0; 30; 50 kV/cm), Belirli Bir Işık Şiddetinde (I = 0.03 MW/cm^2) Belirli Bir Kuyu Genişliğinde (z = 0.75 a^*), Foton Enerjisinin Kırılma İndisi Değişimine Bağlı Değişim Fonksiyonu **a**) *s* – *p* Geçişi **b**) *p* – *d* Geçişi İçin.



Şekil 5.14. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Kuyu Genişliği Büyüklüklerinde ($z = 0.5a^*, z = 0.6a^*, z = 0.7a^*$), Belirli Bir Işık Şiddetinde ($I = 0.03 \text{ MW}/cm^2$) ve Belirli Bir Elektrik Alan Altında (F = 40 kV/cm) Foton Enerjisinin Toplam Kırılma İndisi Değişimine Bağlı Değişim Fonksiyonu **a**) s - pGeçişi **b**) p - d Geçişi İçin.

Şekil 5.15. yarı parabolik kuantum kuyunun, farklı ışık şiddetlerinde (I=0.1, 0.2, 0.3, 0.4 ve 0.5 MW/ cm^2), belirli bir dış elektrik alan altında (F = 40kV/cm), belirli bir kuyu genişliğinde (z = 0.75a^{*}) ve belirli enerji seviyeleri arasındaki (s – p ve p – d) foton enerjisinin toplam kırılma indisi değişimine bağlı değişimi çizilmiştir. Optik şiddetin artması lineer kırılma indisi değişiminin artmasına neden olur. İki terimin zıt işaretli olmasından dolayı, lineer olmayan terimin artması toplam kırılma indisi değişiminin artması toplam kırılma indisi değişiminin artması toplam kırılma indisi değişiminin artması toplam kırılma indisi değişiminin artması toplam kırılma indisi değişiminin azalmasına neden olacaktır. Buradan çıkan sonuç eğer yarı parabolik kuantum kuyu sisteminin kırılma indisindeki değişiminin büyük olması istenilirse sisteme düşük ışık şiddetlerinde ışık etki ettirilmelidir.



Şekil 5.15. Yarı Parabolik Kuantum Kuyunun, Farklı Işık Şiddetlerinde ($I = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 MW/cm^2$), Belirli Bir Dış Elektrik Alan Altında (F=40kV/cm), Belirli Bir Kuyu Genişliğinde ($z = 0.75 a^*$) ve Belirli Enerji Seviyeleri Arasındaki (s-p ve p-d) Foton Enerjisinin Toplam Kırılma İndisi Değişimine ($\Delta n/\Delta n_r$) Bağlı Değişimi **a**) s-p ve **b**) p-d İçin.

SONUÇ ve TARTIŞMA

Kuantum kuyuların elektronik ve optik özellikleri dış faktörlerle (elektrik alan, manyetik alan ve basınç vb.) kontrol edilebilmektedir. Bu çalışmada, birçok teknolojik uygulamaya sahip olan kuantum kuyularının elektronik ve optik özellikleri teorik olarak incelenmiştir. Kuantum kuyular ve nanoteknoloji hakkında genel bilgi verildi. Kuantum kuyusu profil olarak GaAs asimetrik yarı parabolik kuantum kuyusu olarak ele alınmıştır. Nümerik hesaplamalar etkin kütle yaklaşımı altında varyasyon metodu kullanılarak asimetrik yarı parabolik sınırlandırma potansiyelinde yapılmıştır. Safsızlığın varlığında ve yokluğunda sistemin enerjisi hesaplanarak elektrik alanın bağlanma enerjisi üzerine etkisi ele alınmıştır. Ayrıca soğurma katsayısı ve kırılma indisi gibi optik özellikler incelenmiştir.

İki ana kısımdan oluşan bu çalışmanın ilk kısmında, yarı parabolik kuantum kuyu sisteminin elektronik özellikleri incelenmiştir. Yarı parabolik kuantum kuyu sisteminde elektrik alan artışı ile birlikte enerji seviyelerinin ve bağlanma enerjisinin azaldığı görülmüştür. Ayrıca kuantum kuyu genişliğinin artışı ile enerji seviyeleri arasındaki enerji farkının ve bağlanma enerjisinin azaldığı görülmüştür. İkinci kısımda ise yarı parabolik kuantum kuyu sisteminin optik özellikleri incelenmiştir. Kuantum kuyu genişliğinin artması ile birlikte soğurma katsayısı ve kırılma indisi değişimi kırmızıya doğru kaymakta ve büyüklüğü azalmaktadır. Ancak elektrik alan artışı ile soğurma katsayısı ve kırılma indisi değişimi artmakta ve sağa (maviye) kaymaktadır. Işık şiddeti arttıkça toplam soğurma katsayısı ve toplam kırılma indisi değişimi azalmaktadır.

Yapılan bu incelemeler neticesinde asimetrik yarı parabolik kuantum kuyu sisteminin elektronik ve optik özellikleri uygulanan dış elektrik alana ve ışık şiddetine sıkı bir şekilde bağlıdır. Düşük boyutlu sistemlere elektrik alan, ışık şiddeti gibi dış faktörler uygulanarak fiziksel özelliklerinin ihtiyaca göre değiştirilebileceği açık bir şekilde görülmektedir.

KAYNAKLAR

- 1. Budak, G., Karabulut, A., Kuantum Fiziği I, Nobel Yayın Dağıtım, Yayın No:1242 ,1.Basım, Kasım 2007.
- 2. tr. wikipedia.org/wiki/Kuantum_mekaniği
- **3.** Kırak, M., Küresel Kuantum Noktalarında Dış Elektrik ve Manyetik Alanda Hidrojenik Safsızlık Problemi, Doktora Tezi, Erciyes Üniversitesi, Kayseri 2011.
- 4. www.makineihtisas.com/cagimiz-bilimi-nanoteknoloji-.aspx
- **5.** Mendez E. E., Bastard G., Chang L. L., and Esaki L., Morkoc H. and Fischer R. Effect of an Electric Field on the Luminescence of GaAs Quantum Wells, Phys. Rev. B 26, 7101-.1982.
- **6.** Miller R. C., Kleinman D. A., Gassard A. C., Energy Gap Discontinuties Masses for GaAs-Al_xGa_{1-x} As Quantum Wells, Phys. Rev. B., 29, 7085-, 1984.
- 7. Babaloğlu M., Az Miktarda Azot Eklenmiş Uzun Dalgaboylu Yüzey Işıması Yapan Lazer Yapılar, Yüksek Lisans Tezi, Kilis 7 Aralık Üniversitesi, Kilis 2011.
- **8.** Lee, S. W., Hirakawa, K., Shimada, Y., Bound-to-continuum intersubband photoconductivity of self-assembled InAs quantum dots in modulation-doped heterostructures, Appl. Phys. Lett. 75, 1428-1430, 1999.
- **9.** S. S. Li, J. B. Xia, Temperature Effect of Polaron in Quantum Disk, Phys. Rev. B 55, 15434-15437, 1997.
- **10.** Buczko, R., Bassani, F., Bound and Resonant Electron States in Quantum Dots: The Optical Spectrum, Phys. Rev. B 54, 2667, 1996.
- Bondarenko, V., Zhao, Y., Resonant Photoionization Absorption Spectra of Spherical Quantum Dots, Bondarenko, V., Zhao, Y., J. Phys.: Condens. Matter 15,1377-1386, 2003.
- **12.** Yilmaz, S., Safak, H., Oscilator Strengths for the Intersubband Transitions in a CdS-SiO₂ Quantum Dot with Hydrogenic Impurity, Physica E 36, 40-44, 2007.
- **13.** Milanovic, V., Ikonic, Z., Intraband Absorption of Infrared Radiation in a Semiconductor Quantum Dot, Phys. Rev. B 39, 7982-7984, 1989.
- 14. Kirak, M., Yilmaz, S., Sahin, M., Gencaslan, M., 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, 2011.
- 15. Noda, S., Uemura, T., Yamashita, T., Sasaki, A., All-Optical Modulation Using

an N-Doped Quantum-Well Structure, J.Appl.Phys.68,6529-6531, 1990.

- **16.** Miller, D. A. B., Quantum-Well Optoelectronic Switching Devices, Int. J. High Speed Electron.Syst.1, 19-46, 1991.
- 17. Liu, H.C., Quantum Dot Infrered Photodetector, Opto-Electron. Rev. 11, 1-5, 2003.
- **18.** Nizamoglu, S., Ozel, T., Sari, E., Demir, H. V., White Light Generation Using CdSe/ZnS Core-Shell Nanocrystals Hybridized with Ingan/Gan Light Emitting Diodes, Nanotechnology 18, 065709,2007.
- **19.** Nizamoglu, S., Demir, H. V., Hybrid White Light Sources Based on Layer-By-Layer Assembly of Nanocrystals on Near-UV Emitting Diodes, Nanotechnology 18 (40), 405702, 2007.
- **20.** Bastard, G., Hydrogenic Impurity States in a Quantum Well: A Simple Model Bastard, G., Phys.Rev.B59, 4714, 1981.
- **21.** Qi, X. H., Kong, X. J., Liu, J. J., Hydrogenic Donor Impurity in a Cubic Quantum Dot: Effect of Position-Dependent Effective Mass, Phys. Rev.B 58,10578, 1998.
- 22. Kasapoglu, E., Sari, H., Sokmen, I., Density of Impurity States of Hydrogenic Impurities in an Inverse Parabolic Quantum Well Under the Magnetic Field, Physica B 392, 1-2, 213-216, 2007.
- 23. Baskoutas, S., Terzis, A.F., Binding Energy of Hydrogenic Impurity States in an Inverse Parabolic Quantum Well Under Electric Field, Physica E 40, 1367-1370 , 2008.
- Akbas, H., Aktas, S., Okan, S.E., Ulas, M., Tomak M., Acceptor 1s-2p Transitions InGaAs/Ga_{0,7}Al_{0,3}As Quantum Wells Effects of Spatially Dependent Screening Under Electric and Magnetic Fields, Phys. Status Solidi (B) 205, 537-547, 1998.
- 25. Bouhassoune, M., Charrour, R., Fliyou, M., Bria, D., Nougaoui, A., Binding Energy of Shallow Impurities in a Polar Quantum Well Wire, Physica B 304 (1-4), 389-397, 2001.
- **26.** Poghosyan, B.Zh. Demirjian, G.H., Binding Energy of Hydrogenic Impurities in Quantum Well Wires of InSb/GaAs, Physica B 338, 357-360, 2003.
- 27. Li,S.S., Xia, J.B., Electronic States of a Hydrogenic Donor Impurity in Semiconductor Nano-Structures, Phys. Lett. A 366, 120, 2007.
- **28.** Vartanian, A.L., Vardanyan, L.A., Kazaryan, E.M., Hydrogenic Impurity Bound Polaron in a Cylindrical Quantum Dot in an Electric Field, Phys.Lett. A 360, 649- 654, 2007.

- **29.** Li, S.S., Xia, J.B., Binding Energy of a Hydrogenic Donor Impurity in a Rectangular Parallelepiped-Shaped Quantum Dot: Quantum Confinement and Stark Effects, J.Appl.Phys.101, 093716, 2007.
- **30.** Akgul, S., Sahin, M., Koksal, A Detailed Investigation of the Electronic Properties of a Multi-Layer Spherical Quantum Dot with a Parabolic Confinement, Lumin, J., 132,1705-1713, 2012.
- **31.** Ahn, D., Chuang, S.L., Calculation of Linear and Nonlinear Intersubband Optical Absorption in a Quantum Well Mode with an Applied Electric Field, IEEE J. Quantum Electron 23, 2196-2204, 1987.
- 32. Fejer, M. M., Yoo, S. J. B., Byer, R. L., Harwit, A., Harris, J. S., Mid-Infrared Optical Parametric Generator with Extra-Wide (3–19-μm) Tunability: Applications for Spectroscopy of Two-Dimensional Electrons in Quantum Wells, Phys. Rev. Lett. 62, 1041-1044, 1989.
- **33.** Rosencher, E., Bois, in Intersubband Transitions in Quantum Wells, P., Phys. Rev. B 44, 11315, 1991.
- 34. Kuhn, K.J., Lyengar, G.U., Yee, S., Free Carrier Induced Changes in the Absorption and Refractive Index for Intersubband Optical Transitions in Al_x Ga_{1-x}As/GaAs/Al_x Ga_{1-x}As Quantum Wells, J. Appl. Phys. 70, 5010-5017, 1991.
- **35.** Wang, G. H., Guo, K.X., Excitonic Effects on the Third-Order Nonlinear Optical Susceptibility in Parabolic Quantum Dots, Physica B 315, 234-239, 2002.
- **36.** Zhang, L., Xie, H.J., Bound States and Third-Harmonic Generation in a Semi-Parabolic Quantum Well With an Applied Electric Field, Physica E 22, 791,2004.
- **37.** Sedrakian, D. M., Khachatrian, A. Z., Andresyan, G. M, Badalyan, V. D., Opt. Quantum Electron. 36, 893, 2004.
- **38.** Y.B., Yu, K.X., Guo, S.N., Zhu, Polaron Influence on the Third-Order Nonlinear Optical Susceptibility in Cylindrical Quantum Wires Physica E 27, 62-66, 2005.
- **39.** Wang, G.H., Guo, K. X., Linear and Nonlinear Optical Properties in Spherical Quantum Dots, Physica E 28, 14, 2005.
- **40.** Yu, Y.B., Zhu, S.N., Guo, K.X., Exciton Effects on the Nonlinear Optical Rectification in One-Dimesional Quantum Dots Phys. Lett. A 335, 175, 2005.
- **41.** Yu,Y.B., Zhu, S.N., Guo, K.X., Electron–Phonon Interaction Effect on Optical Absorption in Cylindrical Quantum Wires, Solid State Commun.139,76-79,2006.
- **42.** Zhang, L., Chi, Y.M., Shi, J.J., Second-Order Nonlinear Optical Susceptibilities Induced By Built-in Electric Field in Wurtzite Nitride Double Quantum Wells, Phys. Lett. A 366, 256-261, 2007.

- **43.** Chen, B., Guo,K.X., Wang, R.Z., Zheng, Y.B., Li, B., Nonlinear Optical Rectification in Asymmetric Double Triangular Quantum Wells, Eur. Phys. J. B 66,227-233, 2008.
- 44. Karabulut, İ., Baskoutas, S., Linear and Nonlinear Optical Absorption Coefficients and Refractive Index Changes in Spherical Quantum Dots: Effects of Impurities , Electric Field, Size, and Optical Intensity J. Appl. Phys. 103, 073512, 2008.
- **45.** Liu, C.H., Xu, B.R., Theoretical Study of the Optical Absorption and Refraction Index Change in a Cylindrical Quantum Dot, Phys. Lett. A 372, 888, 2008.
- 46. Chen, B., Guo, K.X., Liu, Z.L., Wang, R.Z., Zheng, Y.B., Li, B., Second-Order Nonlinear Optical Susceptibilities in Asymmetric Coupled Quantum Wells, J. Phys.: Condens. Matter 20, 255214, 2008.
- **47.** Jiang, X., Li, S.S., Tidrow, M.Z., Study of Intersubband Transition in Quantum Dots and Quantum Dot Infrared Photodetectors, Physica E 5, 27, 1999.
- **48.** Brunhes, T., Boucaud, P., Sauvage, S. and Others, Infrared Second-Order Optical Susceptibility in InAs/GaAs Self-Assembled Quantum Dots, Phys. Rev. B 61,5562, 2000.
- **49.** Zhao, X.F., Liu, C.H., Electron Raman Scattering in Cylindrical Quantum Wires, Eur. Phys. J. B 53, 209-212, 2006.
- **50.** Sauvage, S.,Boucaud,P.,and the others,Third-Harmonic Generation in InAs/GaAs Self-Assembled Quantum Dots, Phys. Rev. B 59, 9830, 1999.
- **51.** Wang, G., Third-Harmonic Generation in Cylindrical Parabolic Quantum Wires with an Applied Electric Field, Phys. Rev. B 72, 155329-155334, 2005.
- 52. Verdeyen, J.T., Laser Electronic, Prentice-Hall, Inc., New Jersey, 361–412, 1989.
- **53.** Özturk, E., Sökmen, İ.,Intersubband Transitions in an Asymmetric Double Quantum Well, Superlattices Microstruct. 41, 36-43, 2007.
- 54. Karabulut, İ., Atav, U.,Şafak, H., Tomak, M., Linear and Nonlinear Intersubband Optical Absorptions in an Asymmetric Rectangular Quantum Well, Eur. Phys J. B 55, 283-288, 2007.
- **55.** Chen,B., Guo,K.X., Wang,R.Z., Zhang, Z.H., Liu, Z.L., Linear and Nonlinear Intersubband Optical Absorption in Double Triangular Quantum Wells, Solid State Commun. 149, 310, 2009.
- **56.** Miller, D.A.B., Chemla, D.S., <u>Sch</u>mitt-Rink, S., Relation Between Electroabsorption in Bulk Semiconductors and in Quantum Wells: The Quantum-Confined Franz-Keldysh Effect, Phys. Rev. B 33, 6976, 1986.
- 57. İslam, M.N., Hillman, R.L., Miller, D.A.B., Chemla, D.S., Gossard, A.C., English

, J.H., Electroabsorption in GaAs/AlGaAs Coupled Quantum Well Waveguides, Appl. Phys. Lett. 50, 1098-1100, 1987.

- **58.** Yuh, P. F., Wang, K.L., Large Stark Effects for Transitions From Local States to Global States in Quantum Well Structures, IEEE J. Quantum Electron. QE-25, 1671-1676, 1989.
- **59.** Kan, Y., et al., Field Effects On The Refractive Index and Absorption Coefficient in Algaas Quantum Well Structures and Their Feasibility for Electrooptic Device, Applications IEEE J. Quantum Electron. 23, 2167-2180, 1987.
- **60.** Chuang, S.L., Ahn, D., Optical Transitons in a Parabolic Quantum Well with an Applied Electric Field-Analytical Solutions J. Appl. Phys. 65, 2822-2826, 1989.
- **61.** Shi, J. J., Pan, S. H., Calculation of Linear and Nonlinear Intersubband Optical Absorptions in a Superlattice with a Step-Well Basis, Superlattices Microstruct. 17, 91, 1995.
- **62.** Burileanu, L. M., Niculescu, E. C., Eseanu, N., Radu, A., Polarizabilities of Shallow Donors in Inverse V-Shaped Quantum Wells Under Laser Field, Physica E41,856-860, 2009.
- 63. Kasapoğlu, E., Sökmen,İ., The Effects of Intense Laser Field and Electric Field on Intersubband Absorption in Double Graded QuantumWell, Physica B 403, 3746-3750, 2008; Kasapoğlu, E., Sökmen, İ., Interband Absorption and Exciton Binding Energy in an Inverse Parabolic Quantum Well Under the Magnetic Field, Phys. Lett. A 372, (2007) 56-59, 2007; Kasapoğlu, E., Sarı, H., Sökmen, İ., Intersubband Transitions in Coupled Triple Graded Quantum Wells Under An Electric Field, Phys. Stat. Sol. (B) 242, 2468-2473, 2005.
- 64. Öztürk, E., Sarı, H., Sökmen, İ., Intersubband Optical Absorption in Double Quantum Well Under Intense Laser Field Eur. Phys. J. Appl. Phys. 35, 1, 2006; Öztürk, E., Sarı,H.,Sökmen, İ.,Intersubband Transitions in Quantum Wells Under Intense Laser Field Appl. Phys. A 80, 541, 2005; Öztürk, E., Sarı, H., Sökmen, İ., The Dependence of the Intersubband Transition in Square and Graded Qws on Intense Laser Fields Solid State Commun.132,497, 2004.
- **65.** Öztürk, E., Sarı, H., Sökmen, İ., Electric Field and Intense Laser Field Effects on the Intersubband Optical Absorption in a Graded Quantum Well J. Phys. D:Appl . Phys. 38, 935, 2005.
- **66.** Rosencher, E., Winter, B., Levine(Eds.), B., Intersubband Transitionsin Quantum Wells, Plenum Press, NewYork, 1992.
- **67.** Liu, H.C., Levine, B.F., Andersson(Eds.), J.Y., QuantumWell Intersubband Transition Physicsand Devices, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, 1994.
- 68. Levine, B.F., Quantum-Well Infrared Photodetectors Journal of Applied Physics

74, 8, R1, 1993.

- **69.** Faist, J., Capasso, F., Sivca, D. L., Sirtori, C., Hutchinson, A. L., Cho, A.Y., Quantum Cascade Laser, Science264, 553-556, 1994.
- **70.** Karunasiri, R.P.G., Mii, Y.J., Wang, K.L., Tunable Infrared Modulator and Switch Using Stark Shift in Step Quantum Wells, Electron Deviceletters 11, 227, 1990.
- **71.** Altınok, Y., Elektrik Alan, Sıcaklık ve Basıncın Küresel Kuantum Noktanın Elektronik ve Optik Özellikleri Üzerine Etkisi, Yüksek Lisans Tezi, Bozok Üniversitesi, Yozgat 2013)
- 72. Karabulut, İ., Asimetrik Kuantum Kuyu Yapılarının Lineer Olmayan Optik Özelliklerinin İncelenmesi, Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi, Konya 2008.
- **73.** Çelik, V., Moleküler Demet Epitaksi Tekniğiyle Üretilen $Al_{0,6}Ga_{0,4}As$ Tekli Kuantum Kuyulu Yapının Optiksel ve Yapısal Özellikleri, Yüksek Lisans Tezi, Ba lıkesir Üniversitesi, Balıkesir 2005.
- 74. http://www.hemsireyiz.biz/forums/thread/145414.aspx
- **75.** Celep, Ş., Nanoteknoloji ve Tekstilde Uygulama Alanları, Yüksek Lisans Tezi, Çukurova Üniversitesi, Adana 2007.
- 76. <u>http://www.vizyon21yy.com/documan/Genel_Konular/Nanoteknoloji/Nanofotoni</u> <u>k/Nanofotonik.html</u>
- 77.<u>http://www.haberler.com/bir-bulus-yapti-goruntulemede-milyonlarca-renk-haberi/</u>
- **78.** Karaoğlu B., Kuantum Mekaniğine Giriş, Bilgi Tek Yayıncılık, 2. Basım, Ağustos 1994, İstanbul.
- **79.** Franken, P., Hill, A., Peters, C., Weinreich, G., Generation of Optical Harmonics. Physical Review Letters, 7 (4): 118-119, 1961.
- 80. <u>http://www.acikders.org.tr/pluginfile.php/1070/mod_resource/content/1/Bolum-11.pdf</u>

ÖZGEÇMİŞ

Ahmet SIRLI 05.05.1973 tarihinde Kahramanmaraş'ta doğdu. İlköğrenimini Mıllış Nuri İlkokulu ve Sütçü İmam Lisesi (ortaokul kısmında) tamamladı. Orta öğrenimini ise Sütçü İmam Lisesi'nde bitirdi. Yüksek öğrenimini Süleyman Demirel Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde 2001 yılında tamamladı. 2008 yılında Bozok Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans eğitimini kazandı. Halen aynı bölümde yüksek lisans eğitimine devam etmektedir.

İletişim Bilgileri :

Adres : Çapanoğlu Mahallesi Eski Toki Evleri D/19 Blok Kat:1 No:1

66100 YOZGAT

Tel: 05465226714

E-posta : ahmet.sirli@bozok.edu.tr