

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**YABANCI ATOMLU VE YABANCI ATOMSUZ ÇOK KATMANLI KÜRESEL
KUANTUM NOKTALARINDA ENERJİ DURUMLARININ VE RADYAL OLASILIK
YOĞUNLUĞUNUN İNCELENMESİ**

Beyza DEMİRTAŞ

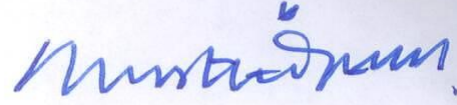
YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Figen BOZ

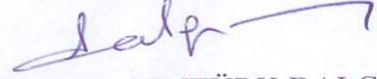
EDİRNE-2015

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü onayı



Prof. Dr. Mustafa Özcan
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Bu tezin Yüksek Lisans olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.



Prof. Dr. Serap ŞENTÜRK DALGIÇ
Anabilim Dalı Başkanı

Bu tez tarafımızca okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.



Doç. Dr. Figen BOZ
Tez Danışmanı

Bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından FİZİK Anabilim Dalında bir Yüksek lisans tezi olarak oy birliği ile kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri:

İmza

Prof. Dr.Ş. Erol OKAN



Prof. Dr. Metin AYDOĞDU



Doç. Dr. Figen BOZ



Tarih: 19/ 02/ 2015

Tarih: 19/02/2015

T.Ü. FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK YÜKSEK LİSANS PROGRAMI
DOĞRULUK BEYANI

İlgili tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını beyan ederim.

19/02/2015

Beyza DEMİRTAŞ

Yüksek Lisans Tezi

Yabancı Atomlu ve Yabancı Atomsuz Çok Katmanlı Küresel Kuantum Noktalarında Enerji Durumlarının ve Radyal Olasılık Yoğunluğunun İncelenmesi

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu çalışmada çok katmanlı küresel kuantum noktasında yabancı atom yokken ve varken enerji seviyeleri ve radyal olasılık yoğunlukları hesaplanmıştır. Etkin kütle yaklaşımıyla hesaplamalarda kullanılan teknik dördüncü derece Runge-Kutta nümerik yöntemidir. Çok katmanlı küresel kuantum noktaları sonsuz ve sonlu potansiyellere sahip olarak düşünülmüştür.

Çok katmanlı sonsuz küresel kuantum noktalarında basamak sayısının ve kalınlıklarının enerji durumlarının hesaplanmasında önemli rol oynadığı bulunmuştur. Çok katmanlı sonsuz küresel kuantum noktalarında basamak kalınlığı arttırılırsa sonsuz küresel kuantum nokta davranışı gösterir.

Çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktalarında enerji durumları ve radyal olasılık dağılımlarının nokta yarıçapına ve bariyer kalınlığına bağlı olduğu görüldü. Çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktalarında tabaka sayısının artmasıyla enerji değerleri azalır.

Yıl : 2015

Sayfa Sayısı : 57

Anahtar Kelimeler : Kuantum Nokta, Enerji Durumu, Dalga Fonksiyonu, Runge Kutta Yöntemi

Master Thesis

Investigation of the Energy States and the Radial Probability Distributions in
Multilayered Spherical Quantum Dot with and without an Impurity

Trakya University Institute of Natural Sciences

Physics of Department

ABSTRACT

In this thesis, the energy levels and the radial probability distribution of an electron in the absence and presence of an impurity have been calculated in multilayered spherical quantum dots. Via effective mass approach, the technique used in calculations is the fourth degree Runge-Kutta numerical method. The multilayered spherical quantum dots are considered having both infinite and finite potentials.

It has been found that the number of steps and their thicknesses play an important role on the energy states in the multilayered infinite spherical quantum dots. If the thickness of the layer is increased the dot displays the behavior of the infinite spherical quantum dot.

The energy levels and the radial probability distribution in multilayer finite quantum dot have been found to be dependent on the radius of inner dot together with barrier thicknesses. In multilayered finite spherical quantum dot, the energy values decrease with the increase of the number of layers.

Year : 2015

Number of Pages : 57

Keywords : Quantum Dot, Energy State, Wave Function, Runge-Kutta
Method

TEŐEKKÜR

Bu yüksek lisans tezinde öncelikle benden yardımını esirgemeyen çalışmamın her aşamasında tek tek ilgilenen danışman hocam Doç. Dr. Figen Boz'a (Trakya Üniversitesi) sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Maddi ve manevi her türlü desteğini esirgemeyen, hayatım boyunca yanımda olan aileme teşekkürlerimi sunmayı kendime görev sayarım.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
İÇİNDEKİLER.....	iv
SİMGELER DİZİNİ.....	vi
ŞEKİLLER.....	vii
1 GİRİŞ.....	1
2 KUANTUM NOKTALARININ ÖZELLİKLERİ.....	4
2.1.Kuantum Noktalarının Özellikleri.....	4
2.2.Çok Katmanlı Küresel Kuantum Noktaları.....	7
3 DÖRDÜNCÜ DERECE RUNGE-KUTTA YÖNTEMİ ve ÇOK KATMANLI KÜRESEL KUANTUM NOKTALARINDA ENERJİ HESAPLARI.....	10
3.1. Dördüncü Derece Runge Kutta Yöntemi.....	10
3.2. Küresel Kuantum Noktasındaki Elektronun Radyal Dalga Fonksiyonunun ve Enerji Değerlerinin Hesaplanması.....	12
3.3. Küresel Kuantum Noktasındaki Yabancı Atomlu Radyal Dalga Fonksiyonunun	

ve Enerji Değerlerinin Hesaplanması.....	21
3.4. Küresel Kuantum Noktasının Merkezinde Yer Alan Yabancı Atomun Bağlanma Enerjisi.....	23
4 SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR.....	24
4.1. Çok Katmanlı Sonsuz Küresel Kuantum Noktaları.....	24
4.1.1. Sonsuz Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri ve Radyal Olasılık Dağılımları.....	25
4.1.2. Tek Basamaklı Sonsuz Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri ve Radyal Olasılık Dağılımları.....	28
4.1.3. Çift Basamaklı Sonsuz Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri ve Radyal Olasılık Dağılımları.....	33
4.2. Çok Katmanlı Sonlu Küresel Kuantum Noktaları.....	37
4.2.1. Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri ve Radyal Olasılık Dağılımları.....	37
4.2.2. Tek Tabakalı Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri.....	40
4.2.3. Çift Tabakalı Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri.....	44
4.2.4. Tek Tabakalı Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Bariyer Kalınlıklarına Bağlı Enerji Değişimleri.....	47
4.2.5. Çift Tabakalı Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Bariyer Kalınlıklarına Bağlı Enerji Değişimleri.....	49
KAYNAKLAR.....	53
ÖZGEÇMİŞ.....	57

SİMGELER DİZİNİ

φ	Eğim
h	Aralık değeri
Ψ	Dalga Fonksiyonu
R_l	Elektronun Radyal Dalga Fonksiyonu
R_{l_i}	Yabancı Atomlu Radyal Dalga Fonksiyonu
E	Enerji
E_B	Bağlanma Enerjisi
H	Hamiltonyen
R_1	Kuyu(tabaka) Kalınlığı
R_2	Kuyu(tabaka) Kalınlığı
R_B	Bariyer Kalınlığı
\hbar	Planck Sabiti
m^*	Elektronun Etkin Kütlesi
L	Açısal Momentum
$V(r)$	Potansiyel Enerji
a^*	Etkin Bohr yarıçapı
R^*	Etkin Rydberg Enerji

ŞEKİLLER

Şekil 2.1.	Metal, yalıtkan ve yarıiletkenlerin bant yapıları.....	4
Şekil 2.2	Kuantum noktaların boyutlarının değişmesiyle renklerinin değişimi.....	6
Şekil 2.3.	Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktalarının şematik gösterimi...	7
Şekil 2.4.	Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktalarının şematik gösterimi...	8
Şekil 2.5.	Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktalarının şematik gösterimi	8
Şekil 2.6.	Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktalarının şematik gösterimi.....	9
Şekil 4.1.	Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun radyal olasılık dağılımları.....	25
Şekil 4.2.	Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimleri	26
Şekil 4.3.	Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlu radyal olasılık dağılımları	26
Şekil 4.4.	Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomun yarıçapa göre enerji değişimi	27
Şekil 4.5.	Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimleri.....	28
Şekil 4.6.	Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının potansiyel gösterimi.....	29
Şekil 4.7.	Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasında elektronun 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için radyal olasılık dağılımları.....	29
Şekil 4.8.	Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri.....	30

Şekil 4.9. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlu radyal olasılık dağılımları.....	30
Şekil 4.10. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atom enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri.....	31
Şekil 4.11. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri..	31
Şekil 4.12. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının potansiyel gösterimi..	33
Şekil 4.13. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun radyal olasılık dağılımları.....	34
Şekil 4.14. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri.....	34
Şekil 4.15. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlu radyal olasılık dağılımları.....	35
Şekil 4.16. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomun enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri.....	35
Şekil 4.17. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d, 2f durumları için bağlanma enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri.....	36
Şekil 4.18. Sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun radyal olasılık dağılımları.....	37
Şekil 4.19. Sonlu küresel kuantum noktasının yarıçapına bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin değişimleri.....	38
Şekil 4.20. Sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlu radyal olasılık dağılımları.....	39
Şekil 4.21. Sonlu küresel kuantum noktasının yarıçapına bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlarının enerjilerinin değişimleri.....	39
Şekil 4.22. Sonlu küresel kuantum noktasının yarıçapına bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin değişimleri.....	40

Şekil 4.23. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin değişimleri.....	41
Şekil 4.24. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atom enerjilerinin değişimleri.....	42
Şekil 4.25. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin değişimleri.....	43
Şekil 4.26. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin değişimleri.....	45
Şekil 4.27. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atom enerjilerinin değişimleri.....	45
Şekil 4.28. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin değişimleri.....	46
Şekil 4.29. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f ve 2s durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı elektron enerjilerinin değişimleri.....	47
Şekil 4.30. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f ve 2s durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı yabancı atom enerjilerinin değişimleri.....	48
Şekil 4.31. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f ve 2s durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı bağlanma enerjilerinin değişimleri.....	49
Şekil 4.32. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı elektron enerjilerinin değişimleri.....	50
Şekil 4.33. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı yabancı atom enerjilerinin değişimleri....	51
Şekil 4.34. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı bağlanma enerjilerinin değişimleri.....	51

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Günümüz teknolojisinin ilerlemesiyle çok katmanlı küresel kuantum nano kristallerinin bazı kimyasal tekniklerle üretilmesi mümkün hale gelmiştir[1]. Kuantum noktalarının teknolojiye fotodetektör[2], transistör[3], kuantum nokta lazerlerinde[4], kuantum bilgisayarlarında[5], optik hafızalarda[6], kuantum nokta güneş pilleri[7] gibi elektronik araçlarda kullanılması, kuantum noktaları üzerine fiziksel incelemelerin artmasına sebep olmuştur.

Sonlu ve sonsuz kuantum noktalarında taban durum için bağlanma enerjileri nokta yarıçapına, potansiyel şekline, yabancı atomun konumuna, uygulanan elektrik alan ve lazer alan şiddetlerine göre çalışılmıştır[8-11]. Bu çalışmalarda efektif kütle yaklaşımı kullanılarak kuantum noktasının merkezinde bulunan yabancı atomun bağlanma enerjisi varyasyon ve pertürbasyon metotları kullanılarak hesaplanmıştır. Bağlanma enerjisinin nokta yarıçapının küçülmesiyle arttığı görülmüştür.

Kuantum noktasında elektronun hareketi üç boyutta sınırlandırıldığından dolayı atomdaki gibi kesikli enerji seviyeleri oluşmaktadır. Birçok çalışmada kuantum noktasındaki bir elektronun ve yabancı atomun enerji düzeyleri çalışılmıştır[12-21]. Chuu ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada Whittaker ve Coulomb saçılma fonksiyonlarının terimleri kullanılarak sonsuz kuantum noktasının merkezinde yer alan yabancı atom için 1s, 2s ve 2p enerjileri hesaplanmıştır[13]. Sonsuz ve sonlu kuantum noktalarında seri açılım metodu kullanılarak 1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p enerjileri

çalışılmıştır[12]. Bu çalışmada kuantum noktasının boyutlarının önemli olduğu bulunmuştur. Varyasyon metodu kullanılarak sonlu küresel kuantum noktalarında hidrostatik basıncın, sıcaklığın ve dielektrik sabitinin bağlanma enerjisini değiştirdiği görülmüştür[17]. Özmen'in çalışmalarında kuantum genetik Algoritma ve Hartree-Fock Roothan metodu kullanılarak sonlu kuantum noktasında 1s, 1p, 1d, 1f durumları için bağlanma enerjileri, osilatör şiddetleri, optik absorpsiyon katsayıları hesaplanmıştır[19, 20].

Çok katmanlı küresel kuantum noktalarının üretilmesi ve küresel kuantum noktalarının elektronik aletlerde kullanılmaya başlamasından dolayı, küresel kuantum noktasının fiziksel özelliklerini açıklanması önemli olmaktadır. Çok katmanlı küresel kuantum noktalar genelde yapı kor/kabuk/kuyu/kabuk tabakaları olarak çalışılmıştır[22-31]. Boz ve arkadaşları GaAs/Al(Ga,As)/GaAs/ Al(Ga,As) yapısı çalışmıştır[22-24]. Bu çalışmalarında yapının geometrisinin ve yapıya uygulanan dışarıdan manyetik alanın enerji durumlarında etkili olduğunu göstermişlerdir. Boz ve arkadaşları tarafından tanımlanan çok katmanlı küresel kuantum noktasına basıncın ve sıcaklığın etkisini Karimi ve arkadaşları Runge-Kutta metodu kullanarak incelemişlerdir[25]. Şahin ve arkadaşları çok katmanlı küresel kuantum noktalarında efektif kütle yaklaşımında çevrim(shooting) metodu kullanarak 1s ve 1p durumları için radyal olasılık dağılımları ve enerjileri hesapları yapmışlardır[26-29]. Bu çalışmalarında çok katmanlı küresel kuantum noktaların optik özelliklerini de incelemişlerdir.

Çok katmanlı küresel kuantum noktası olarak CdSe/ZnS/CdSe/ZnS yapılarında 1s, 1p, 2s, 2p, 1d ve 1f için elektron ve boşlukların kabuk kalınlıklarında bağlı olarak enerjiler hesaplanmıştır[30, 31]. Çok katmanlı küresel InGaAs/AlGaAs kuantum noktasında elektronun özellikleri zamana bağlı nümerik simülasyonla gösterilmiştir[32]. CdS/HgS/CdS/ HgS/CdS ile HgS/CdS/ HgS/CdS çok katmanlı küresel kuantum noktalarının karşılaştırmalı olarak elektron yoğunlukları Runge-Kutta nümerik metoduyla hesaplanmıştır[33].

Hsieh 2000 yılında çok katmanlı küresel kuantum noktasını $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs-Ga_{1-y}Al_yAs$ olarak tanımlanmış ve $x=y$ alarak $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ yapısında elektronun ve hidrojenik yabancı atomun enerji seviyelerini hesaplamıştır[34].

Hesaplamalarını efektif kütle yaklaşımıyla Whittaker ve Coulomb dalga fonksiyonlarını kullanarak yapmıştır. Manaselyan ve arkadaşı tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktası tanımlamış ve küresel bessel fonksiyonlarını kullanarak bağlanma enerjisinin nokta yarıçapına, dielektrik sabitine, aliminyum konsantrasyonuna, manyetik alanın etkilerine bağlı olarak incelemiştir[35].

Biz bu tezde çok katmanlı küresel kuantum noktalarında 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için enerjileri ve radyal olasılık dağılımlarını dördüncü derece Runge-Kutta nümerik yöntemi kullanarak hesapladık.

Tezin 2. Bölümünde kuantum noktalarının özelliklerinden ve bu tezde incelediğimiz çok katmanlı sonsuz ve sonlu küresel kuantum noktalarının nasıl oluştuğundan bahsedilmiştir.

Tezin 3. Bölümünde dördüncü derece Runge-Kutta yöntemi anlatılarak, küresel kuantum noktasındaki elektronun ve yabancı atomlu radyal dalga fonksiyonunu ve enerji değerlerinin nasıl hesaplanacağından bahsedilmiştir. Küresel kuantum noktasının merkezinde yer alan yabancı atomun bağlanma enerjisinin nasıl hesaplandığına yer verilmiştir.

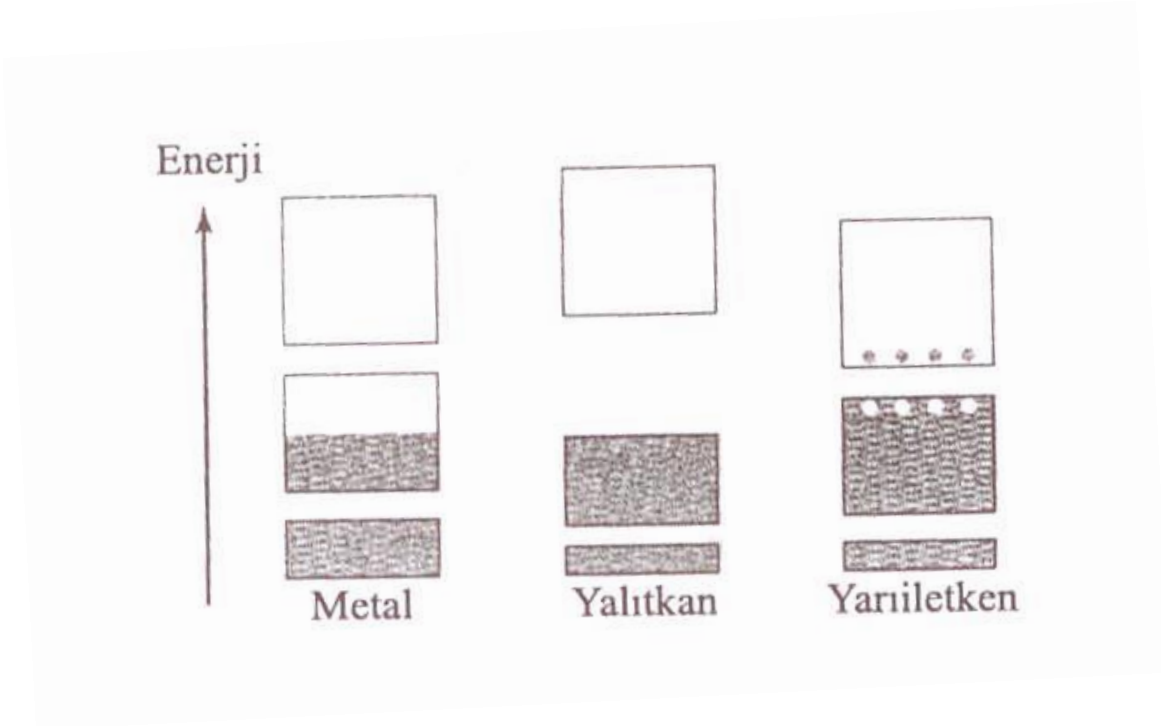
Tezin son bölümü sonuçlar ve tartışmalar kısmıdır. Bu bölümde çok katmanlı sonsuz küresel kuantum noktaları ve çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktaları tanımlanıp enerji durumları ve radyal olasılık dağılımları incelenmiştir. Çok katmanlı sonsuz küresel kuantum noktası tek basamaklı ve çift basamaklı olarak incelenmiştir. Çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktaları ise öncelikle tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktası ve çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktası olarak incelenmiştir. Çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktasında bariyer kalınlıklarına ve iç nokta yarıçapına bağlı enerji değişimleri gösterilmiştir. Literatürdeki benzer çalışmalarla sonuçlarımızın karşılaştırmaları verilmiştir.

BÖLÜM 2

KUANTUM NOKTALARININ ÖZELLİKLERİ

2.1. Kuantum Noktalarının Özellikleri

Malzemeler elektrik yükü taşımalarına göre iletken, yalıtkan ve yarı iletken olarak sınıflandırılır[36]. Şekil 2.1' de metal, yalıtkan, yarıiletken bant yapıları



Şekil 2.1. Metal, yalıtkan ve yarıiletkenlerin bant yapıları[37]

verilmiştir. Taralı bölgeler dolu elektron durumlarını gösterir. Metallerin kısmen iletkenlik bandı, yalıtkanlarda ise tam dolu valans bandı tam boş iletkenlik bandını ayıran çok geniş ($\approx 5 eV$) bir bant aralığına sahip olduğu görülür. Şekilde olduğu gibi bir yarı iletken bant aralığı nispeten dar olan bir yalıtkanlıdır. Yarıiletkenler bant aralığı ($\approx 1 eV$) çok ince olduğundan ısısal çalkantı enerjisiyle dahi uyarılıp iletkenlik bandına geçebilirler[37].

Düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin araştırılması kuantum fiziği ile açıklanabilen davranışlara sahip yeni elektronik devre elemanlarının üretilmesini mümkün kıldığından ilgi çekmektedir. Düşük boyutlu yarıiletken sistemler kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum kutuları (noktaları) olarak sınıflandırılırlar. Taşıyıcı yükün hareketinin kaç boyutta sınırlı ve kaç boyutta serbest tutulduğu göz önüne alınarak bu sınıflandırılma yapılır. Kuantum kuyularında taşıyıcı yükün hareketi bir boyutta, kuantum tellerinde iki boyutta ve kuantum noktalarında ise her üç boyutta sınırlanmıştır. Kuantum kuyuları iki boyutlu, kuantum telleri bir boyutlu ve kuantum noktaları sıfır boyutlu yarıiletken sistemler olarak ifade edilir. Taşıyıcı yükün serbest olarak hareket edebileceği boyut sayısı göz önüne alınarak böyle adlandırılırlar. Bu sistemlerde taşıyıcı yük elektron, boşluk ya da eksiton olabilir[38].

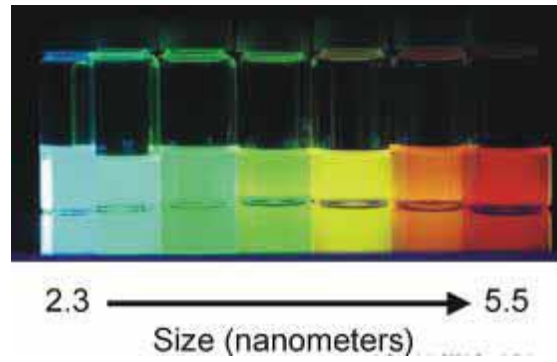
Taşıyıcı yükü elektron olarak kabul ettiğimizde, elektronların serbest hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırılmasıyla sıfır boyutlu nano yapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır. Üç boyuttaki güçlü sınırlandırma sonucunda oluştukları için atomlara benzerliğinden dolayı, yapay atomlar, süper atomlar veya kuantum nokta atomları olarak da adlandırılırlar[39].

İlk kuantum nokta yapı, 250 nm kenar uzunluğu olan kare biçiminde bir geometrik yapıdır. Bu yapı Texas Instrument Incorporated şirketindeki bilim adamları tarafından gerçekleştirilmiştir[40]. Zamanla kuantum noktalarının boyutları 30-45 nm'ye kadar düşürülebilmektedir[41,42]. Kuantum noktalarına birkaç atomdan, binlerce atoma kadar atom barındırabilen yapay bir atom diyebiliriz. Periyodik cetvelin II-VI, III-V grubu bileşiklerinden yani neredeyse yarıiletken-metal tüm bileşiklerden kuantum noktaları elde edilebilmektedir. Optik ve elektriksel özelliklerinden dolayı en çok

üretilen kuantum noktalar, CdSe, InAs, CdS, GaN, InGeAs, CdTe, PbS, PbSe, ZnS'dir[43].

Küresel, piramit, kübik, elipsoid gibi farklı geometrik yapıya sahip kuantum nokta yapıların üretimi de sağlanmıştır. Kuantum noktalarının geometrilerinin, boyutlarının, enerji seviyelerinin ve sınırlandırıldıkları elektron sayılarının kontrol edilebilmesi, onları fiziksel ve teknolojik olarak daha da ilgi çekici hale getirmiştir. Özellikle üretilen teknolojik cihazların boyutlarının küçültülmesinin ancak onu oluşturan elektronik devre elemanlarının küçültülmesiyle mümkün olabilmektedir. Kuantum noktaları sonlu sayıda elektron içermeleri elektronik devre elemanlarının küçülmesine olanak sağladığından dolayı hem teorik hem de deneysel olarak çalışmaktadır[39].

Kuantum noktalarında üç boyutta sıkışan elektron enerjisini üst seviyelere çıkaramadığı için kinetik enerjisi artar dolayısıyla dalga boyu küçülür. Kuantum noktaların boyutlarının değişmesiyle birlikte elektronun yaptığı ışımının rengi de değişmektedir. Kuantum noktalarına kızılötesi ışımaya ve görülebilir bütün frekanslarda ışımaya yaptırılabilir[43].



Şekil 2.2 Kuantum noktaların boyutlarının değişmesiyle renklerinin değişimi[43]

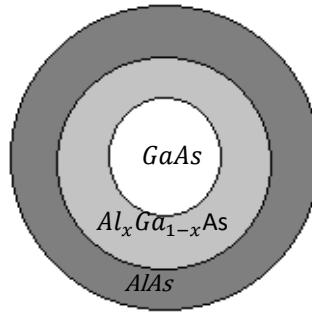
Boyutu değiştirilerek rengi değiştirilebilen kuantum noktaları bu özelliğiyle mühendislik uygulamaları için çok geniş bir alan doğuruyor. Bu alanlar daha verimli çalışan güneş panelleri, tıp teşhisinde kullanılan biyo-ajanlar, çok daha az enerjiyle çalışan lazerler, istenilen renkte LED aydınlatmalar, az enerjiyle çalışan ve daha fazla aydınlatan ampuller, çok daha az enerjiyle çalışan plazma televizyon ve ekranlar olarak ifade edilebilir[43].

Kuantum noktalar bir sürü atomdan oluşan yapay devasa atomlar olduğundan dolayı atom ekleyip çıkartabiliriz. Kuantum noktaların boyutlarını değiştirebildiğimizi de bildiğimize göre bu bize enerji seviyeleriyle oynayabildiğimiz bir malzeme verir. Bu kuantum noktanın en önemli özelliklerinden biridir. Bunun anlamı, kimyada bildiğimiz periyodik cetvelin yanına onun gibi onlarca periyodik cetvel eklemek gibidir. Yani istediğimiz özelliklere sahip yapay atomlar demektir. Bu da ihtiyacınıza göre özelliklerde malzemeler üretmek şansına sahip olduğunuzdan dolayı mühendislik dünyası için bir devrimdir[43].

2.2. Çok Katmanlı Küresel Kuantum Noktaları

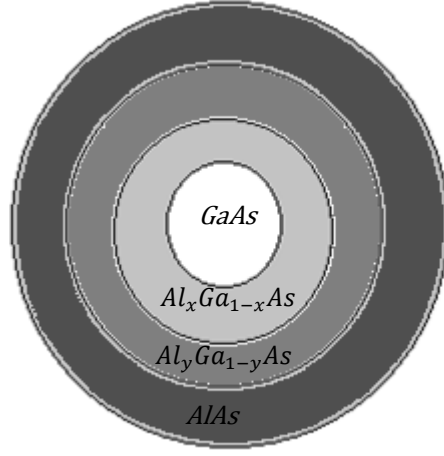
Bu tezde çok katmanlı küresel kuantum noktası olarak iki yapı tanımlanır. Birinci yapı çok katmanlı sonsuz küresel kuantum noktaları ve ikinci yapı olarak çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktalarıdır.

Çok katmanlı sonsuz küresel kuantum noktalarını Şekil 2.3' de gösterdiğimiz gibi tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktası ve Şekil 2.4' de gösterdiğimiz gibi çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktası olarak ifade ediyoruz.



Şekil 2.3. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktalarının şematik gösterimi

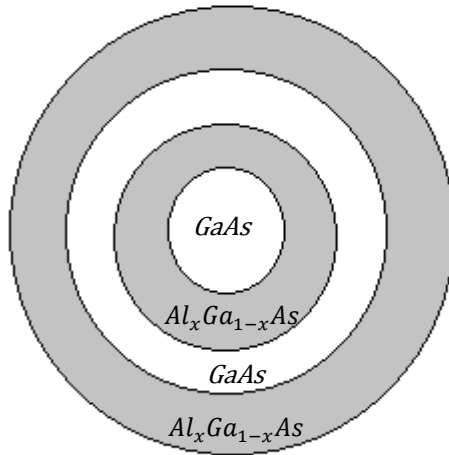
Şekil 2.3' deki yapıda GaAs küresini $Al_xGa_{1-x}As$ tabakasıyla sarıyor ve bu tabakayı da AlAs tabakasıyla sararak tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasını oluşturuyoruz. Bu yapının benzeri Manaselyan ve arkadaşları tarafından tanımlanmıştır[35].



Şekil 2.4. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktalarının şematik gösterimi

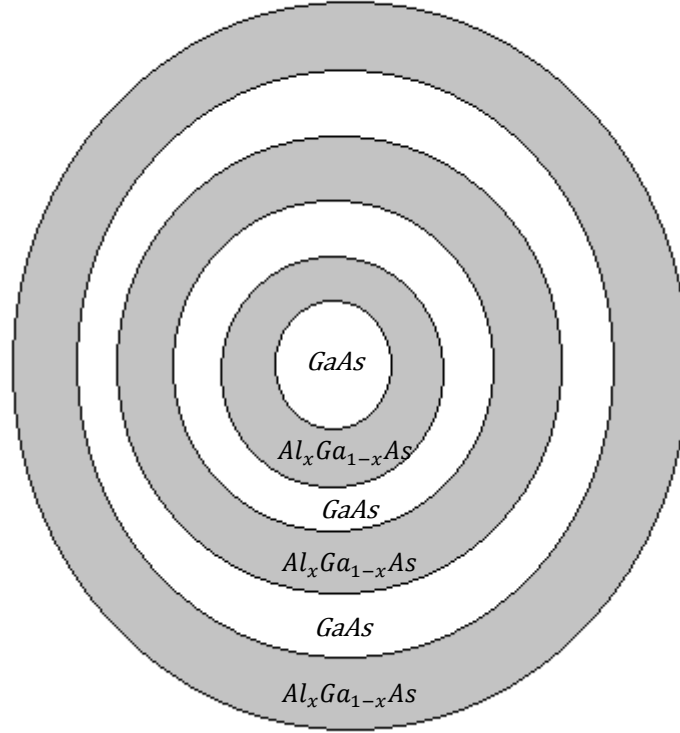
Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasını; GaAs küresinin dışını $Al_xGa_{1-x}As$ tabakasıyla bu tabakanın dışını $Al_yGa_{1-y}As$ tabakasıyla bu tabakayıda AlAs tabakasıyla sararak oluşturuyoruz.

Tezin diğer kısmında ikinci yapı olarak tanımladığımız çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktalarını ele alıyoruz. Çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktalarını Şekil 2.5' de gösterdiğimiz gibi tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktası ve Şekil 2.6' de gösterdiğimiz gibi çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktası olarak ifade ediyoruz.



Şekil 2.5. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktalarının şematik gösterimi

GaAs yarıiletkeni $Al_xGa_{1-x}As$ ve GaAs yarıiletken malzemelerle sırayla sarılarak Şekil 2.5' teki yapı oluşturulmuştur.



Şekil 2.6. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktalarının şematik gösterimi

Şekil 2.6' deki yapıda Şekil 2.5' deki yapının üzerine sırasıyla tekrar bir GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ yarıiletken tabakaları sarılarak çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktaları elde edilmiştir.

BÖLÜM 3

DÖRDÜNCÜ DERECE RUNGE-KUTTA YÖNTEMİ ve ÇOK KATMANLI KÜRESEL KUANTUM NOKTALARINDA ENERJİ HESAPLARI

3.1. Dördüncü Derece Runge-Kutta Yöntemi

Runge-Kutta yöntemi aslında tek adımlı diferansiyel eşitlik çözüm yöntemlerinin temelini oluşturmaktadır. Bu yöntemlerin temelinde aşağıdaki eşitlik ile verilen diferansiyel denklemin istenen bir noktadaki bağımlı değişken değerini bulmaktır. Bu değeri bulurken başlangıç değerinin üzerine tahmini yapılan eğimle aralık büyüklüğünün çarpımını eklemektir. Bu ifadenin matematiksel gösterimi aşağıdaki gibi verilebilir:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (3.1)$$

$$y_{n+1} = y_n + \varphi \cdot h \quad (3.2)$$

Buradaki h çözümü istenen nokta ile bilinen nokta arasındaki aralık değeri, φ ise bu iki aralıktaki tahmin edilen eğim değeridir. Runge-Kutta yöntemleri yüksek mertebeden türevleri hesaplamaya katmadan, Taylor serisi temelinde geliştirilen yöntemlerin, istenen eğim değerinin doğruluğunun belirlenmesi esasına dayanmaktadır. Runge-Kutta yöntemlerine temel teşkil etmek üzere eşitlik 3.1 içerisindeki fonksiyonun eğimi aşağıdaki eşitlik şeklinde düzenlenebilir:

$$\varphi(x_n, y_n, h) = a_1 k_1 + a_2 k_2 + \dots + a_n k_n \quad (3.3)$$

$$k_1 = f(x_n, y_n) \quad (3.4)$$

$$k_2 = f(x_n + \alpha_1 h, y_n + \beta_{1,1} k_1 h) \quad (3.5)$$

...

$$k_n = f(x_n + \alpha_{n-1} h, y_n + \beta_{n-1,1} k_1 h + \beta_{n-1,2} k_2 h + \dots + \beta_{n-1,n-1} k_{n-1} h) \quad (3.6)$$

Burada α ve β sabit değerler ve $\alpha, \beta \leq 1$ alınarak yeni bir seri ile ifade edilir[45]. k değerleri ise ardışık olarak hesaplanan yukarıda gösterilen bu sabit değerlere, bağımlı ve bağımsız değişkene bağlı eşitliklerdir. Bu eşitliklerde önceki eşitliklerde hesaplanan k değerlerinin bir sistemlikle kullanılması söz konusudur[45].

Runge-Kutta yönteminin genel ifadelerinden bağımlı değişken değerini bulurken dört k bağıntısı kullanan ifade dördüncü derece Runge-Kutta yöntemi olarak bilinir. Aşağıdaki ifadelerde dördüncü derece Runge-Kutta yöntemi için bu bağıntılar gösterilir. Dört adımlı yöntemin adından da anlaşılacağı üzere başlangıç değerine dört terim eklenerek yeni değer bulunmaktadır:

$$y_{n+1} = y_n + (a_1 k_1 + a_2 k_2 + a_3 k_3 + a_4 k_4) h \quad (3.7)$$

$$k_1 = f(x_n, y_n) \quad (3.8)$$

$$k_2 = f(x_n + \alpha_1 h, y_n + \beta_{1,1} k_1 h) \quad (3.9)$$

$$k_3 = f(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{2,2} k_2 h) \quad (3.10)$$

$$k_4 = f(x_n + \alpha_3 h, y_n + \beta_{3,3} k_3 h) \quad (3.11)$$

Burada k_1, k_2, k_3, k_4 değerlerini, x' in h kadar ilerletilmesi durumunda y' deki değişimin tahmini olarak düşünebiliriz Bu bağıntılardaki belirsizler direkt verilecektir. Bu değerler yerlerine yazılırsa katsayılar ve çözüm;

$$k_1 = f(x_n, y_n) \quad (3.12)$$

$$k_2 = f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1\right) \quad (3.13)$$

$$k_3 = f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2\right) \quad (3.14)$$

$$k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3) \quad (3.15)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + \theta(h^5) \quad (3.16)$$

olur. Bu eşitlikler orta nokta yöntemi veya genel adıyla bilinen dördüncü derece Runge-Kutta yöntemi olarak adlandırılır[44,45].

Dördüncü derece Runge-Kutta yönteminde bir adımdaki hata payı $\theta(h^5)$ olarak verdiği için, çok duyarlı sonuç verir. Fakat her adımda fonksiyon değeri 4 kez hesaplanır[44-46].

3.2. Küresel Kuantum Noktasındaki Elektronun Radyal Dalga Fonksiyonunun ve Enerji Değerlerinin Hesaplanması

Bu tezde çok katmanlı küresel kuantum noktaları incelenmektedir. Bu incelemeyi yaparken farklı küresel potansiyeller tanımlanmıştır.

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R_1 \\ V_0, & R_1 < r \leq 2R_1 \\ 2V_0, & 2R_1 < r \leq 3R_1 \\ \infty, & r > 3R_1 \end{cases} \quad (3.17)$$

Denklem 3.17' deki küresel potansiyelle tanımlanan kuantum noktasına basamaklı sonsuz kuantum noktası olarak ifade ediyoruz.

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R_1 \\ V_0, & R_1 < r \leq R_1 + R_B \\ 0, & R_1 + R_B < r \leq R_1 + R_B + R_2 \\ V_0, & r > R_1 + R_B + R_2 \end{cases} \quad (3.18)$$

yukarıdaki potansiyelle tanımlanan kuantum noktasını tabakalı sonlu kuantum noktası olarak tanımlanıyor. Bu potansiyellerle tanımlanan bir küresel kuantum noktasındaki bir elektronun Hamiltonyeni;

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) \right] \quad (3.19)$$

olarak verilir. Bu Hamiltonyende

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (3.20)$$

olarak ifade edilir. Bu ifadeyi denklem 3.19'da yerine yazdığımızda zamandan bağımsız Schrödinger denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) \Psi(r, \theta, \varphi) + V(r) \Psi(r, \theta, \varphi) = E_0 \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.21)$$

olur. Bu denklemin çözümü olan dalga fonksiyonu

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_l(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.22)$$

değişkenlerine ayrılarak yukarıdaki formda yazılır. [46, 47]

Bu çözümü denklem 3.21'e uyguladığımızda Hamiltonyen;

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] R_l(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) + V(r)R_l(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) = E_0 R_l(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.23)$$

olur. Bu denklemi düzenleyip kısmi türevlerini aldığımızda;

$$\left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_l(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m^* r^2}{\hbar^2} [E_0 - V(r)] R_l(r) \right] Y_{l,m}(\theta, \varphi) + \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_{l,m}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right] R_l(r) = 0 \quad (3.24)$$

olur. Bu eşitliği $R_l(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ ifadesine bölündüğünde;

$$\frac{1}{R_l(r)} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_l(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m^* r^2}{\hbar^2} [E_0 - V(r)] R_l(r) \right] = - \frac{1}{Y_{l,m}(\theta, \varphi)} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_{l,m}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right] \quad (3.25)$$

olur. Denklem 3.25'in sol tarafı sadece r'ye, sağ tarafı ise (θ, φ) değişkenlerine bağlı olarak değişmektedir. (r, θ, φ) bağımsız değişken olduklarından böyle bir ifade sadece

bir sabite eşit olduğu takdirde doğru olabilir. Solda θ ve φ ' nin fonksiyonu bulunmadığından θ ve φ değiştiğinde sol taraf değişmez, yani bir λ sabitine eşit olur. Eşitlikten dolayı sağ tarafta aynı sabite eşit olmalıdır. Denklem 3.25' in her iki tarafı λ sabitine eşitlenirse

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l(r)}{dr} \right) + \frac{2m^* r^2}{\hbar^2} [E_0 - V(r)] R_l(r) = \lambda R_l(r) \quad (3.26)$$

ve

$$\left[-\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \lambda Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.27)$$

olur. Denklem 3.23' de verilen kısmi diferansiyel denklemi, iki diferansiyel denkleme ayrılmış olur. Schrödinger denkleminin radyal kısmı denklem 3.26'da ve açığa bağlı kısmı denklem 3.27' de tanımlanır. Burada λ sabitini bulabilmek için denklem 3.27' yi köşeli parantez içindeki ifadesi operatör özdeğer denklemi görüntüsündedir. Bu L^2 açısal momentum operatörünün özdeğer denklemi şeklinde yazılabilir. Bunun için

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (3.28)$$

tanımını kullanarak, kartezyen koordinatlarda \vec{L} operatörünün bileşenleri

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x \quad (3.29)$$

olarak tanımlanır. Bu bileşenler küresel koordinatlarda

$$\begin{aligned}
L_x &= i\hbar(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}) \\
L_y &= i\hbar(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}) \\
L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned} \tag{3.30}$$

olarak tanımlanır[48]. Bu tanımlar kullanılarak L_x^2 ,

$$\begin{aligned}
L_x^2 &= -\hbar^2 \left[\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] \left[\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] \\
L_x^2 &= \\
&-\hbar^2 \left[\sin^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta} \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \cos^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \\
L_x^2 &= -\hbar^2 \left[\sin^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \sin\varphi \left(\frac{-\sin^2\theta - \cos^2\theta}{\sin^2\theta} \right) \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \cos^2\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \cos^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \\
L_y^2, & \tag{3.31}
\end{aligned}$$

$$L_y^2 = -\hbar^2 \left[\cos^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \left(\cos\varphi \right) + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \sin^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

$$L_y^2 = -\hbar^2 \left[\cos^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cos\varphi \left[\frac{-\sin^2\theta - \cos^2\theta}{\sin^2\theta} \right] \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \sin^2\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \sin^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

ve L_z^2

$$L_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

açık şekilde ifade edilir. L^2 operatörü

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \tag{3.32}$$

olarak tanımlanır. Denklem 3.31' deki bulunan ifadeleri L^2 operatöründe yerine yazıldığında

$$L^2 = \hbar^2 \left[-\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \quad (3.33)$$

olur. Denklem 3.33' de köşeli parantez içinde bulduğumuz ifade, denklem 3.27' deki köşeli parantez içindeki ifade ile aynıdır. L^2 ' nin özdeğer denklemi

$$L^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.34)$$

dir. Bu eşitlikten λ

$$\lambda = l(l+1) \quad (3.35)$$

olduğu görülür.

Denklem (3.27)'de $\lambda = l(l+1)$ yazılırsa

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y_{l,m}(\theta, \varphi)}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi)}{\partial\varphi^2} \right] = l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.36)$$

Bu denklemin çözümünden $Y_{l,m}$ açısız kısmın çözümlerine ulaşılır. [46-48]

Denklem 3.26' daki radyal kısımda λ' yı yerine yazdığımızda

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l(r)}{dr} \right) + \frac{2m^*r^2}{\hbar^2} [E_0 - V(r)] R_l(r) = l(l+1) R_l(r) \quad (3.37)$$

olur. Bu denklem düzenlendiğinde radyal diferansiyel denklemimizi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^*r^2} + V(r) \right] R_l(r) = E_0 R_l(r) \quad (3.38)$$

elde etmiş oluruz. Tezimizde biz farklı potansiyellere sahip küresel kuantum noktasının radyal diferansiyel denklemini çözüp enerji ve radyal dalga fonksiyonlarını hesaplıyoruz. Denklem 3.38' i $\alpha^* = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* \epsilon^2}$ ve $R^* = \frac{m^* \epsilon^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}$ olarak Rydberg sisteminde uzunluk ve enerji birimleriyle yazdığımızda;

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l(r)}{dr} \right) \right] + \left[E_0 - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = 0 \quad (3.39)$$

olur. Tezimizde GaAs ve $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ yarı iletken malzemelerini kullanıyoruz. Çalıştığımız kuantum nokta yapılarının her bölgesinde etkin kütle ve dielektrik değerlerini eşit olarak seçilmiştir ve $a^* \cong 105 \text{ \AA}^0$ ve $R^* \cong 5,25 \text{ meV}$ değerlerindedir. Denklem 3.39;

$$\frac{1}{r^2} \left[2r \frac{dR_l(r)}{dr} + r^2 \frac{d^2 R_l(r)}{dr^2} \right] + \left[E_0 - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = 0 \quad (3.40)$$

$$\frac{2}{r} \frac{dR_l(r)}{dr} + \frac{d^2 R_l(r)}{dr^2} + \left[E_0 - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = 0$$

$$\frac{d^2 R_l(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_l(r)}{dr} + \left[E_0 - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = 0$$

olarak elde edilir. Bu denklemi çözmek için Bölüm 3.1' de anlattığımız dördüncü derece Runge-Kutta nümerik yöntemini kullanıyoruz. Bu yöntemi küresel kuantum noktalarına uygulayabilmek için

$$Y_1 = R_l(r)$$

(3.41)

$$Y_2 = \frac{dR_l(r)}{dr}$$

dönüşümünü yapıyoruz. Bu ifadeleri kullanarak denklem 3.40

$$\frac{dY_1}{dr} = Y_2$$

(3.42)

$$\frac{dY_2}{dr} + \frac{2}{r} Y_2 + \left[E_0 - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] Y_1 = 0$$

iki tane birbirine bağlı birinci merteye diferansiyel denkleme çevrilir. Bu iki diferansiyel denkleme dördüncü derece Runge-Kutta yöntemi uygulandığında çözümler

$$Y_{1_{i+1}} = Y_{1_i} + h \left[\frac{1}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \right]$$

(3.43)

$$Y_{2_{i+1}} = Y_{2_i} + h \left[\frac{1}{6} (L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4) \right]$$

olur. Denklem 3.43' deki katsayılar

$$K_1 = F1(r, Y1, Y2, E_o, R, V)$$

$$L_1 = F2(r, Y1, Y2, E_o, R, V)$$

$$K_2 = F1(r + h/2, Y1 + K_1/2, Y2 + L_1/2, E_o, R, V)$$

$$L_2 = F2(r + h/2, Y1 + K_1/2, Y2 + L_1/2, E_o, R, V) \quad (3.44)$$

$$K_3 = F1(r + h/2, Y1 + K_2/2, Y2 + L_2/2, E_o, R, V)$$

$$L_3 = F2(r + h/2, Y1 + K_2/2, Y2 + L_2/2, E_o, R, V)$$

$$K_4 = F1(r + h, Y1 + K_3, Y2 + L_3, E_o, R, V)$$

$$L_4 = F2(r + h, Y1 + K_3, Y2 + L_3, E_o, R, V)$$

ifade edilir. Bu denklemlerdeki F1 ve F2 fonksiyonları

$$F1=Y2$$

(3.45)

$$F2 = [-(2Y2)/r] + [V(r) - E_o + (l(l+1)/r^2)]Y1$$

olarak tanımlıyoruz. Bu yöntem kullanılarak $l=0,1,2,3$ değerleri için elektronun 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d, 2f durumlarında radyal dalga fonksiyonu ve enerjiler hesaplanır. Seviyelerin gösteriminde rakam enerji seviyesini, harf ise l değerlerini gösterir. 1s elektronun $l=0$ durumundaki ilk enerjisini, 2s ise elektronun $l=0$ 'daki ikinci enerji değerini gösterir.

3.3. Küresel Kuantum Noktasındaki Yabancı Atomlu Radyal Dalga Fonksiyonunun ve Enerji Değerlerinin Hesaplanması

Sisteme yabancı atom kattığımızda Rydberg birim sisteminde Hamiltonyen

$$H_i = -\nabla^2 - \frac{2}{\vec{r}-\vec{r}_i} + V(r) \quad (3.46)$$

olur[12, 22-24]. Bu denklemin yabancı atom yokken ki sistemden tek farkı Coulomb etkileşim teriminin eklenmesidir. Yabancı atom $r_i=0$ konumunda Hamiltonyen

$$H_i = -\nabla^2 - \frac{2}{r} + V(r) \quad (3.47)$$

olur. $r_i=0$ konumunda yabancı atomun yapıya katılmasıyla eklenen Coulomb terimi sadece r 'ye bağlı değişmektedir. Bundan dolayı yabancı atomlu radyal denklemimiz;

$$\frac{d^2 R_{li}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{li}(r)}{dr} + \left[E_i - V(r) + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{li}(r) = 0 \quad (3.48)$$

olur. Küresel $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ çözümlerimiz aynı olur. Denklem 3.48' in çözümünde dördüncü derece Runge-Kutta nümerik metodunu kullanıyoruz. Bu metodu uygulamak için

$$Y1 = R_{li}(r) \quad (3.49)$$

$$Y2 = \frac{dR_{li}(r)}{dr}$$

dönüşümünü yapıyoruz. Denklem 3.48' den

$$\frac{dY_1}{dr} = Y_2$$

(3.50)

$$\frac{dY_2}{dr} + \frac{2}{r}Y_2 + \left[E_i - V(r) + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] Y_1 = 0$$

iki diferansiyel denklem elde ediyoruz. Bu diferansiyel denklemleri bölüm 3.2 kısmında elektronun enerjisi ve radyal dalga fonksiyonu hesaplamak için kullandığımız dördüncü derece Runge-Kutta denklemlerini kullanarak çözüyoruz. Bölüm 3.2' de tanımladığımız denklemlerde E_0 yerine E_i alıyoruz, F_1 ve F_2 fonksiyonları

$$F_1 = Y_2$$

(3.51)

$$F_2 = [-(2Y_2)/r] + \left[V(r) - E_i - \frac{2}{r} + (l(l+1)/r^2) \right] Y_1$$

olarak tanımlanıyor. Yabancı atoma ait elektronun $l=0,1,2,3$ değerleri için 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d, 2f durumlarında radyal dalga fonksiyonu ve enerjiler dördüncü derece Runge-Kutta metoduyla hesaplanır.

Literatürde çok katmanlı küresel kuantum noktasının merkezinde yer alan yabancı atomun düşük enerji değerleri denklem 3.48' in radyal dalga fonksiyonları Whittaker fonksiyonları ve Coulomb dalga fonksiyonları cinsinden ifade edilerek Schrödinger denklemi çözülmüştür[34]. Yabancı atomlu radyal denklemi literatürde varyasyon[9,35], pertürbasyon[35], kuantum genetik algoritma ve Hartree-Fock Roothan[19, 20], çevrim metodu(shooting method)[27,30], matris köşegenleştirme[18]

yöntemleri ve küresel Bessel ve Hankel fonsiyonları[12], Kummar fonsiyonları ve Runge-Kutta yöntemi kullanılarak çözülmüştür[22-25, 33].

3.4. Küresel Kuantum Noktasının Merkezinde Yer Alan Yabancı Atomun Bağlanma Enerjisi

Küresel kuantum noktasının merkezinde yer alan yabancı atomun bağlanma enerjisi, yapıda yabancı atom yokken ki enerjiden yabancı atom varken ki enerjinin çıkarılmasıyla

$$E_B = E_0 - E_i \quad (3.52)$$

tanımlanır[11, 18, 22-24]. Tezimizde 1s için bağlanma enerjisi

$$E_B = E_{1s0} - E_{1si} \quad (3.53)$$

olarak hesapladık. 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları içinde denklem 3.53' deki tanımı kullanılarak bağlanma enerjilerini hesaplıyoruz[19, 20] .

BÖLÜM 4

SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

Çok katmanlı küresel kuantum noktalarının elektronik özellikleri bu bölümde verilmiştir. Çok katmanlı küresel kuantum noktalarını iki bölümde veriyoruz. Birinci olarak çok katmanlı sonsuz küresel kuantum noktalarını tanımlayıp enerji durumları ve radyal olasılık dağılımları inceleniyor. İkinci olarak çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktaları tanımlanıp enerji durumları ve radyal olasılık dağılımları incelenir. Hesaplamalarda Rydberg enerji birimi ve Bohr yarıçapı sırasıyla $R^* \cong 5,25 \text{ meV}$, $a^* \cong 105A^0$ değerinde alınmıştır.

4.1. Çok Katmanlı Sonsuz Küresel Kuantum Noktaları

Bu bölümde farklı sonsuz küresel kuantum noktaları tanımlanarak enerji durumları ve radyal olasılık dağılımları incelenir. İlk önce sonsuz potansiyele sahip küresel kuantum noktası incelenir. Sonraki kısımlarda tek basamaklı ve çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktaları incelenir.

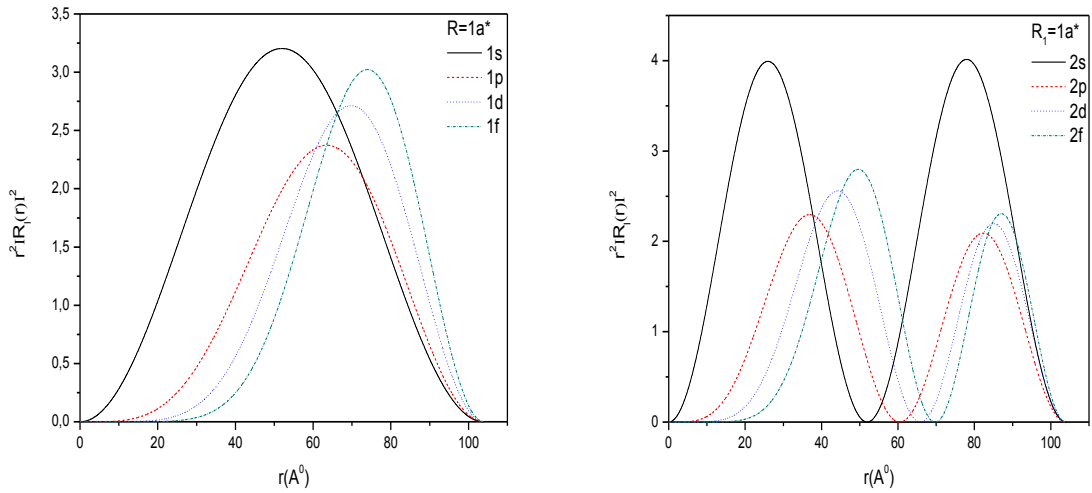
4.1.1. Sonsuz Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri ve Radyal Olasılık Dağılımları

GaAs küresini AlAs tabakasıyla sarılarak oluşturulan sonsuz küresel kuantum noktasının potansiyel enerjisi;

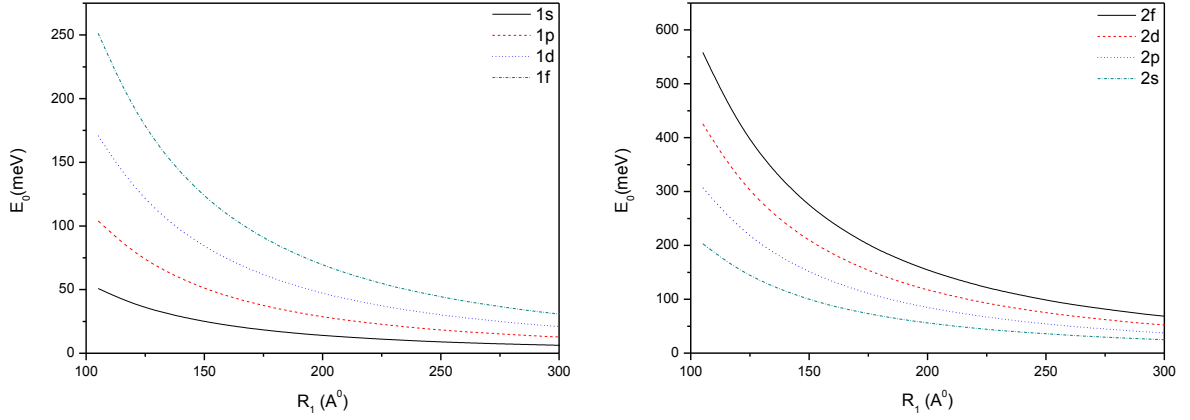
$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq R_1 \\ \infty, & r > R_1 \end{cases} \quad (4.1)$$

olarak tanımlanır.

Sonsuz bir küresel kuantum noktasında $R_1 = 1a^*$ değeri için r 'ye bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için radyal olasılık dağılımları Şekil 4.1' de gösterilmiştir. Bütün durumlar için elektron R_1 yarıçaplı GaAs bölgesinde yer aldığı görülür. Şekil 4.2' de sonsuz küresel kuantum noktasının bir elektronunun yarıçapa bağlı olarak 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f enerji değişimleri verilmiştir. Bu grafikte küçük yarıçap değerinde enerji değerleri büyük olmakta ve bütün enerji durumları için yarıçapı artımıyla eksponansiyel bir azalma görülüyor.

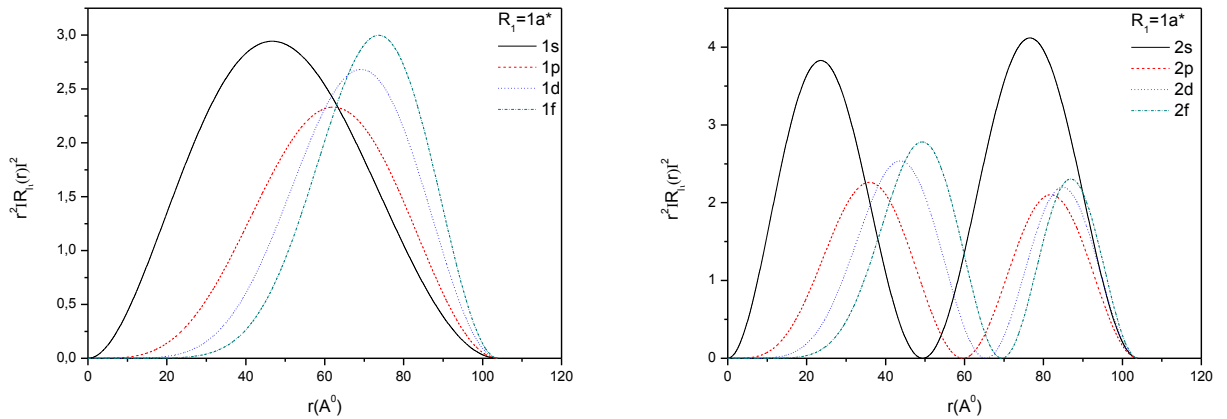


Şekil 4.1. Sonsuz küresel kuantum noktasında 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun radyal olasılık dağılımları



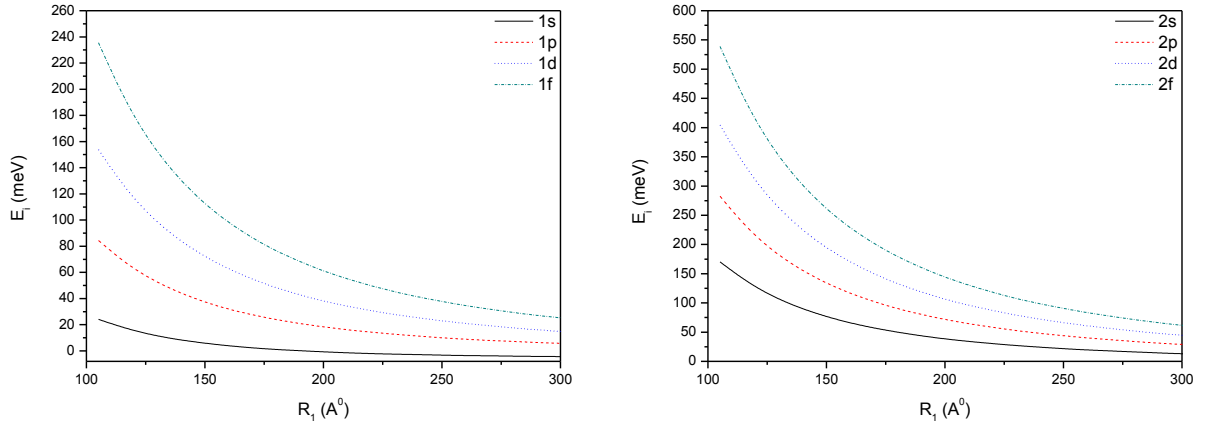
Şekil 4.2. Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimleri

Enerji durumlarının sıralanmasına dikkat edildiğinde 1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 2d ve 2f olarak değiştiği görülür. 1s, 1p, 1d, 2s için bulduğumuz sonuçlar 2009 yılında çalışılan küresel kuantum noktasında bir elektronun enerji değerleriyle uyumludur[49]. Zhu ve arkadaşları tarafından yapılan 1s, 1p, 1d, 1f, 2s ve 2p durumları için bulunan sonuçlar bizim sonuçlarımızla benzerdir[12].



Şekil 4.3. Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlu radyal olasılık dağılımları

Sisteme yabancı atom katıldığında $r_i = 0$ konumunda 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için radyal olasılık dağılımları Şekil 4.3’ te verilmiştir.



Şekil 4.4. Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomun yarıçapa göre enerji değişimi

Şekil 4.4’ te bu durumlar için yabancı atomun enerji değerlerinin yarıçapla dağılımı incelenmiştir. Yarıçapın artmasıyla yabancı atom enerjisi azalma göstermiştir. 1s, 2s ve 2p için olan değerlerimiz Chuu ve arkadaşlarının çalışmasıyla karşılaştırdığımızda uyumlu olduğunu görmekteyiz[13]. Varshni 1999 yılındaki çalışmasında sonsuz bariyer yüksekli R yarıçaplı kuantum noktasının merkezinde yer alan yabancı atom için 1s, 2p, 2d enerji durumlarını tam çözümlerle karşılaştırarak vermiştir[14]. Bizde 1s ve 2p durumları için olan sonuçlarımızla bu çalışmadaki sonuçları karşılaştırdığımızda uyumlu olduğunu gördük. 2014 yılında Baimuratov ve arkadaşlarının yapmış olduğu çalışmada sonsuz kuantum noktasını merkezdeki yabancı atomun en alçak enerji durumları verilmiştir. Bu en alçak enerji durumlarını sonuçlarımızla karşılaştırdığımızda aynı çıkmaktadır[16].

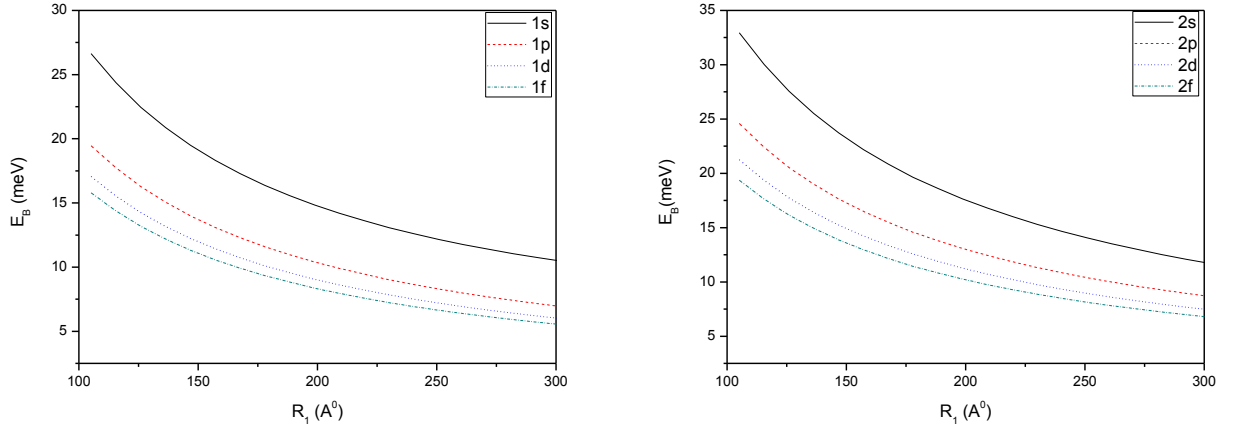
Şekil 4.5’ te sonsuz küresel kuantum noktasının enerji seviyelerinde yarıçapa bağlı bağlanma enerjisi değişimi gösterilmiştir. Buradaki bağlanma enerjisi elektronun enerji durumundan, yabancı atomun enerjisinin çıkarılması;

$$E_B = E_0 - E_i \quad (4.2)$$

bağıntısından hesaplanmıştır. 1s için aldığımızda

$$E_B = (E_{1s})_0 - (E_{1s})_i \quad (4.3)$$

olarak hesaplanmıştır.

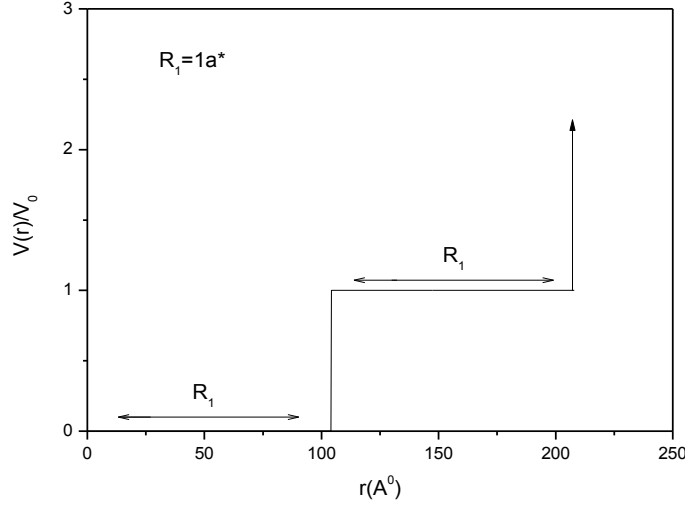


Şekil 4.5. Sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimleri

1s için yapmış olduğumuz bu hesaplamayı diğer durumları içinde bu formülü kullanarak buluyoruz. 1s ve 2s durumları daha büyük enerjilerde yarıçapla değişim vermektedir. Yarıçapın artmasıyla bütün enerji durumları için bağlanma enerjisinin azaldığı gözlenmektedir. Bu davranış literatürdeki çalışmalarda gösterilmiştir[8-10, 14, 34].

4.1.2. Tek Basamaklı Sonsuz Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri ve Radyal Olasılık Dağılımları

Bu bölümde GaAs küresini $Al_xGa_{1-x}As$ tabakasıyla sarıyoruz ve bu tabakayı da AlAs tabakası ile sararak Şekil 4.6' da potansiyel gösterimi verilen tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasını oluşturuyoruz.

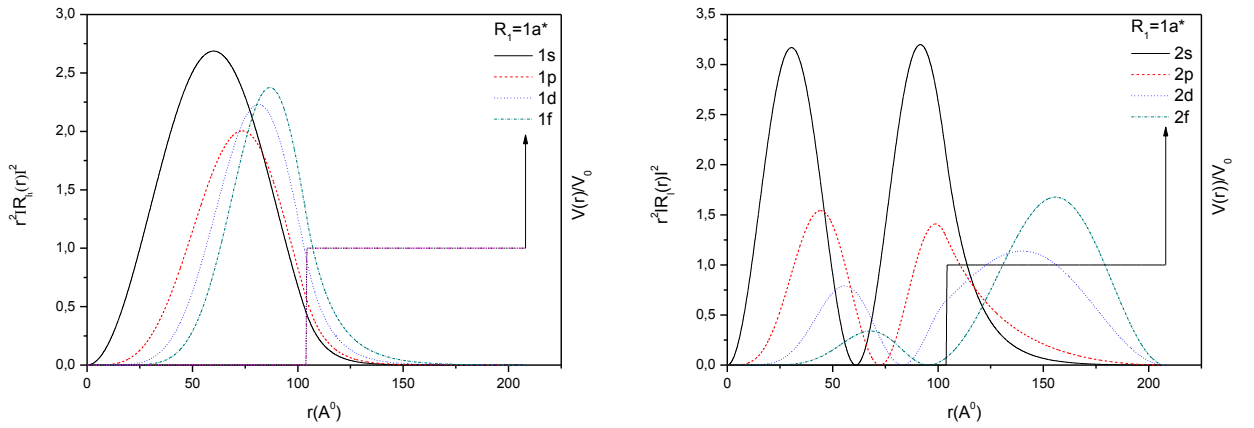


Şekil 4.6. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının potansiyel gösterimi

Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının potansiyel enerjisi;

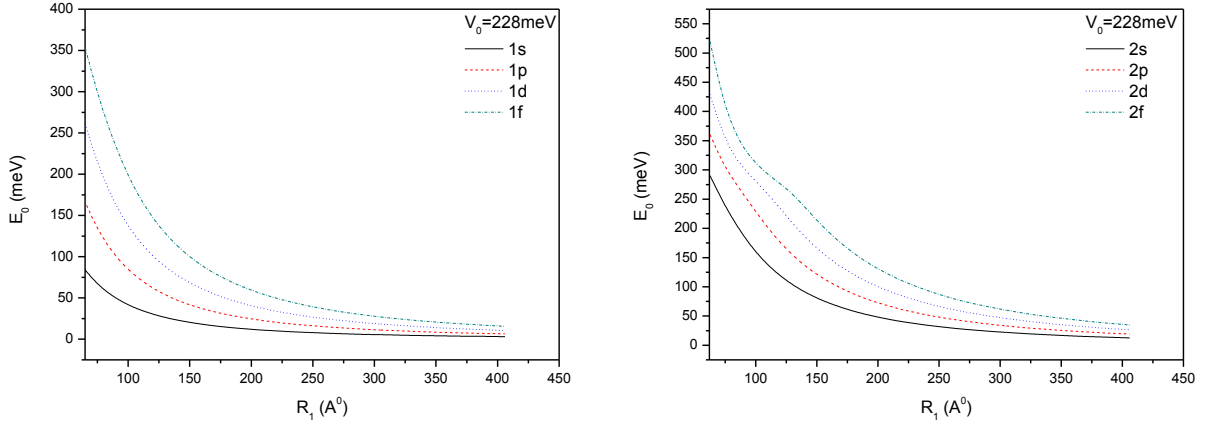
$$V(r)= \begin{cases} 0, & 0 < r \leq R_1 \\ V_0, & R_1 < r \leq 2R_1, \\ \infty, & r > 2R_1 \end{cases} \quad (4.4)$$

olarak tanımlıyoruz. $V_0 = 228meV$ değerindedir. Bu yapıda $R^* \cong 5,25meV$, $R_1 = 1a^* \cong 105A^0$ değeri için 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f ' nin radyal olasılık dağılımları Şekil 4.7' de gösterilmiştir. Bu şekillerde 1s, 1p, 1d, 1f, 2s ve 2p radyal olasılık

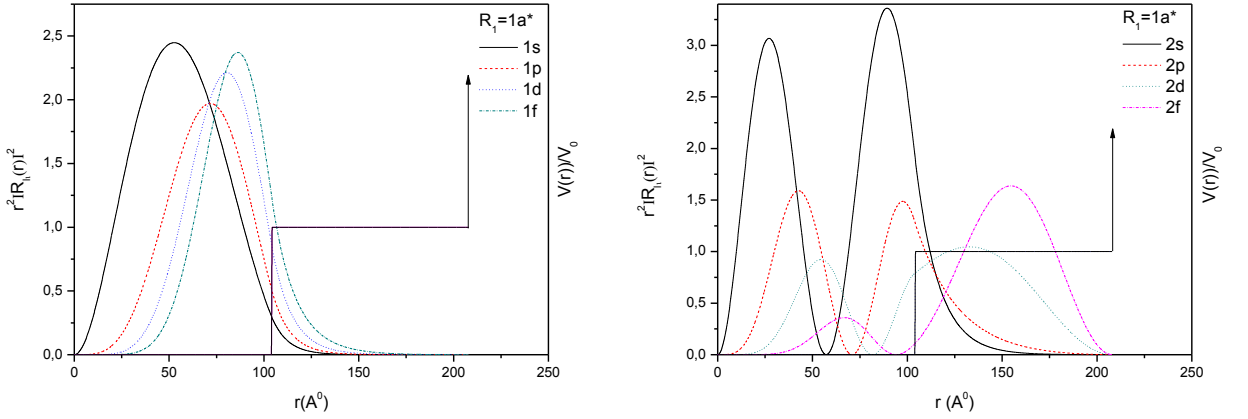


Şekil 4.7. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasında elektronun 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için radyal olasılık dağılımları

dağılımlarının çoğunluğunun $R_1 = 1a^*$ yarıçaplı GaAs kürenin içinde olduğu görülür. 2d ve 2f durumlarında basamak içinde elektronun daha çok yer aldığı görülür. Bu yarıçap değerini arttırdığımızda bütün durumların radyal olasılık dağılımları $R_1 = 1a^*$ yarıçaplı GaAs kürenin içinde olur.



Şekil 4.8. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri

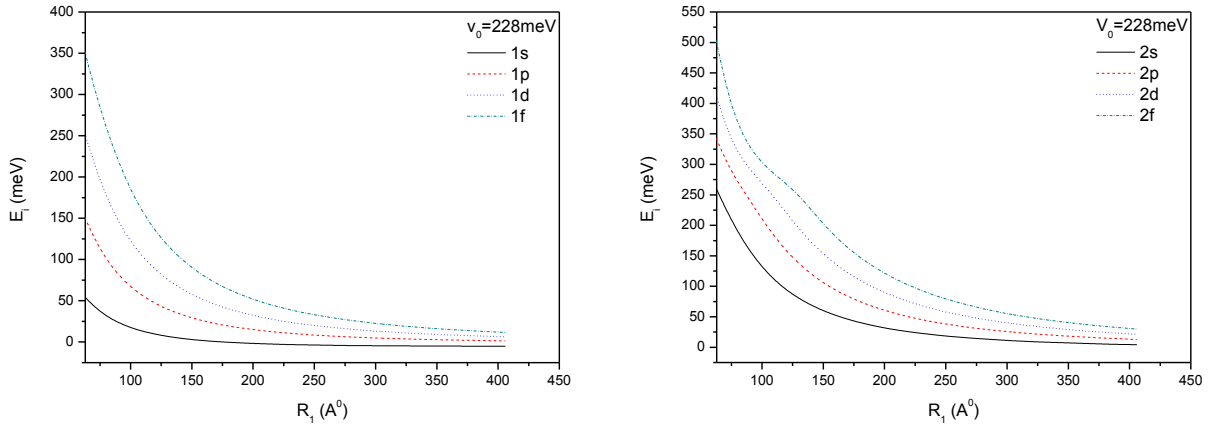


Şekil 4.9. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlu radyal olasılık dağılımları

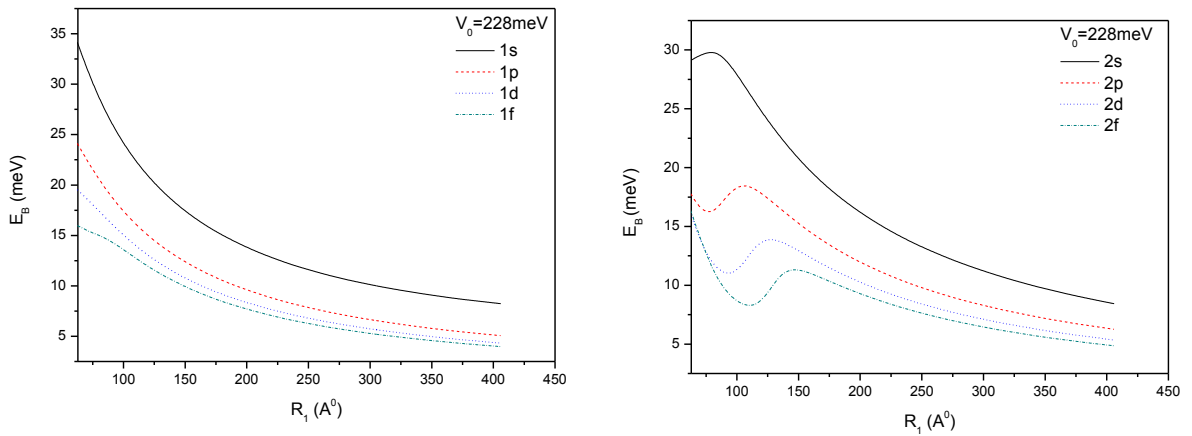
Bu yapıda iç kürenin yarıçapı ve basamak kalınlıkları eşit olarak artırılmıştır. Şekil 4.8' de tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasında 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı olarak değişimi

verilmiştir. Yapı büyüdükçe enerjiler azalma göstermiştir. Büyük tabaka kalınlıklarında enerji değerleri birbirine yaklaşmaktadır.

Şekil 4.9’ da tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasındaki yabancı atomlu 1s, 1p, 1d, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f enerji durumları için radyal olasılık dağılımları verilmiştir. 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p durumları için olasılık dağılımları R_1 yarıçaplı kürede olurken; 2d, 2f durumlarında olasılık dağılımları birinci basamak içinde yer alır.



Şekil 4.10. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atom enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri



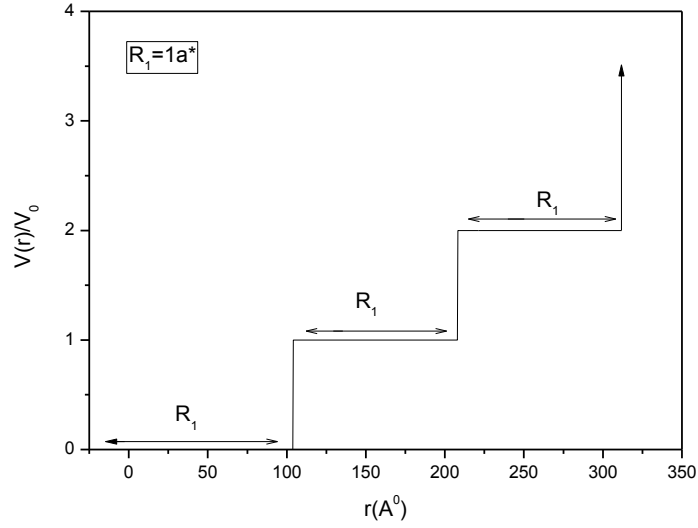
Şekil 4.11. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri

Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasında yabancı atomun 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için katman kalınlığına bağlı enerji değişimleri Şekil 4.10’da verilmiştir. Yabancı atomun enerji değerleri de kalınlığın artmasıyla azalma göstermektedir. Bu şekilden katman kalınlığının 75 \AA^0 ile 200 \AA^0 arasında çalışmanın ilginç sonuçlar vereceğini görüyoruz. Yapı genişledikçe enerji değişimleri azalmaktadır.

1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için katman kalınlığına bağlı olarak Şekil 4.11’de bağlanma enerjisi verilmiştir. Şekil 4.11’de katman kalınlığının artmasıyla 1s, 1p, 1d ve 1f durumları için bağlanma enerjisinin azaldığı gözlenir. Aynı katman kalınlıkları için 2s durumunda bağlanma enerjisi bir maksimum yapıp azalma gösterirken, 2p, 2d, 2f durumları ise küçük katman kalınlıklarında birer minimum yapıp daha sonrada maksimuma ulaşip azalma göstermiştir. Bu davranış küçük katman kalınlıklarında 2p, 2d ve 2f durumlarının radyal olasılık dağılımının tüm yapıya dağılmasından kaynaklanır. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasını sonsuz küresel kuantum noktasıyla karşılaştırdığımızda küçük tabaka kalınlıklarında farklılık olduğunu gördük. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasındaki V_0 bariyer engelinin etkisi küçük tabaka kalınlıklarında ortaya çıkar. Büyük katman kalınlıklarında bağlanma enerjisi tüm durumlar için azalma gösterir. Katman kalınlığı büyük olduğunda tüm durumlarda radyal olasılık dağılımları küresel kuantum noktada yer alır. Bu yapıya benzer bir çalışma 2004 yılında Manaselyan ve arkadaşları çalışmışlardır. Onlar bu çalışmalarında küre yarıçapını sabit tutup, küresel tabakanın kalınlığına bağlı olarak bağlanma enerjisini incelemişlerdir[35]. 1s için bizim sonuçlarımız bu çalışmadaki sonuçlara benzerdir. Araştırmalarımıza göre literatürde bizim çalıştığımız yapıyla ilgili başka kaynak bulamadık. Tek basamaklı sonsuz küresel kuantum noktası olarak tanımladığımız bu yapıda ilk kez bizim tarafımızda 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları araştırılmıştır.

4.1.3. Çift Basamaklı Sonsuz Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri ve Radyal Olasılık Dağılımları

Bu kısımda yapımızı GaAs küresini V_0 potansiyeline sahip $Al_xGa_{1-x}As$ küresel kabuk ile sarıyoruz. Bu kabuğu da $2V_0$ potansiyeline sahip $Al_yGa_{1-y}As$ küresel kabuk ile sarıp yapının da son tabakasının dış potansiyel yüksekliğinin sonsuz olması için AlAs ile sararak Şekil 4.12' deki çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasını tasarlıyoruz.

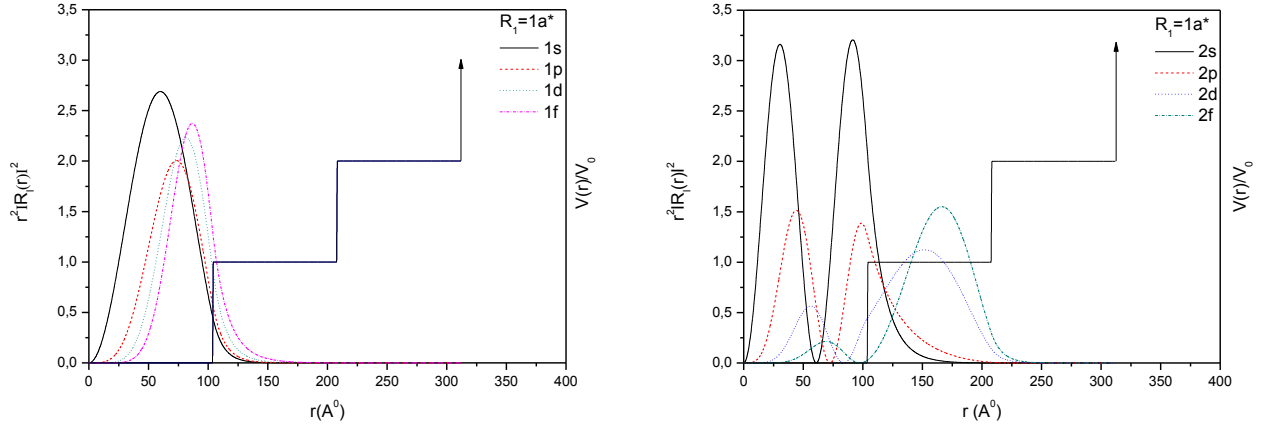


Şekil 4.12. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının potansiyel gösterimi

Bizim tarafımızdan ilk kez çalışıldığını düşündüğümüz çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının potansiyel enerjisi;

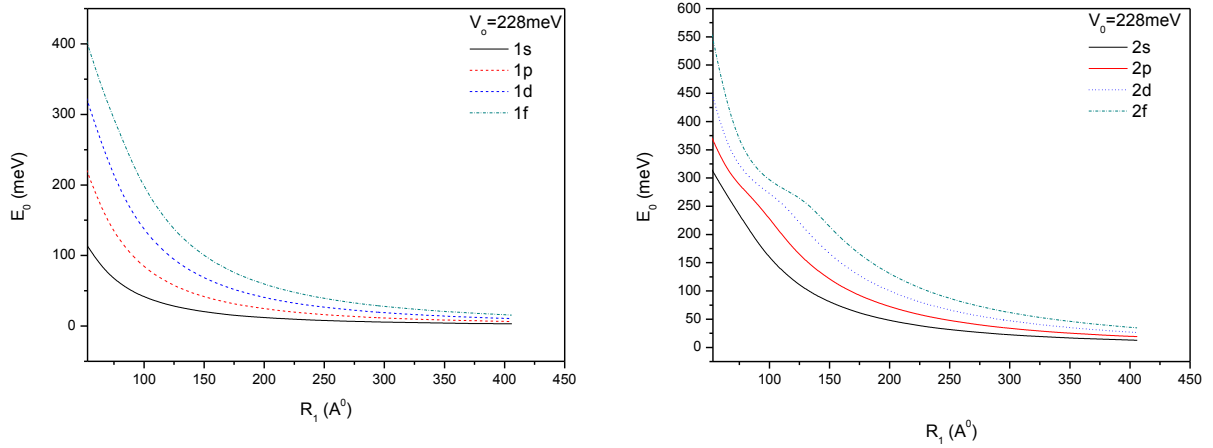
$$V(r)= \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R_1 \\ V_0, & R_1 \leq r \leq 2R_1 \\ 2V_0, & 2R_1 < r < 3R_1 \\ \infty, & r > 3R_1 \end{cases} \quad (4.5)$$

olarak tanımlıyoruz. Bu çalışmada $V_0 = 228meV$ olarak alınmaktadır.



Şekil 4.13. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun radyal olasılık dağılımları

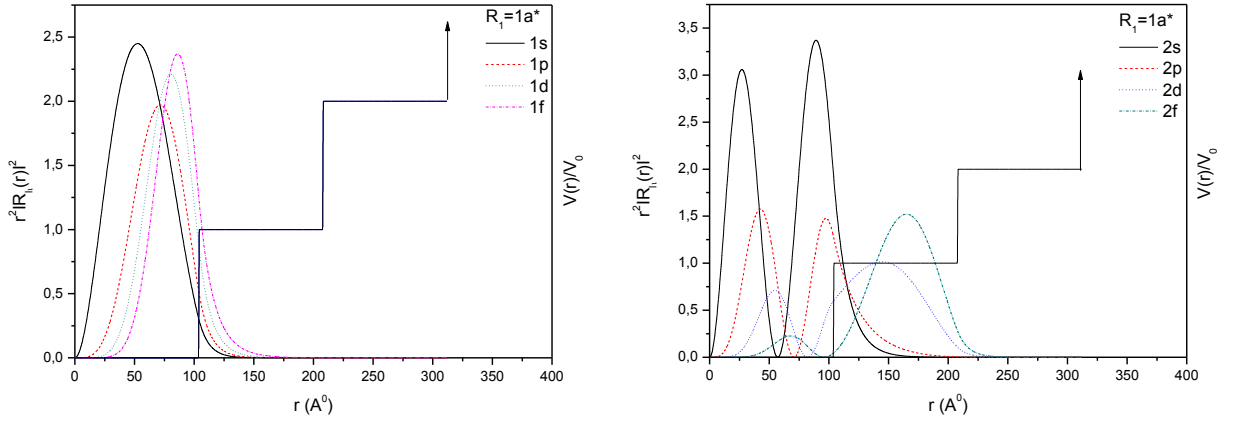
Şekil 4.13'te $R_I = 1a^*$ değeri için 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için radyal olasılık dağılımları verilmiştir. 1s, 1p, 1d, 1f, 2s ve 2p olasılık dağılımları R_I yarıçaplı kürede lokalize olduğu görülür. 2d ve 2f olasılık dağılımları çoğunlukla birinci basamakta yer aldığı görülür. İkinci basamakta ise çok az olasılık dağılımı olduğu gözlenmiştir.



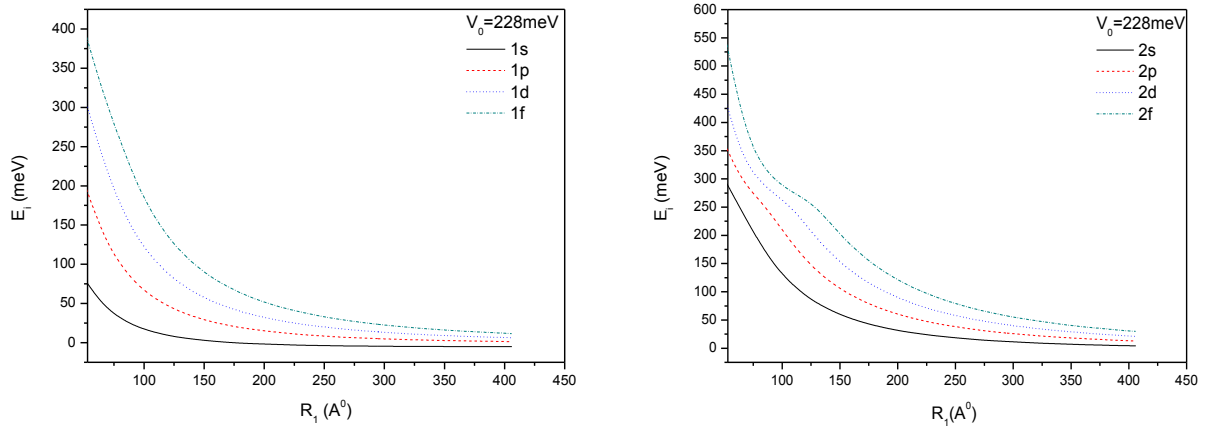
Şekil 4.14. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri

Bu çalışmada iç kürenin yarıçap ve katman kalınlıkları R_1 eşit olarak artırılmıştır. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasındaki bir elektronun 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için katman kalınlığına bağlı enerji değişimi Şekil

4.14' te verilmiştir. Bu şekillerde 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p durumları için enerji katman kalınlığıyla eksponansiyel bir azalma gösterirken; 2d ve 2f durumları için $R_1 \cong 100 \text{ \AA}^0 - 150 \text{ \AA}^0$ arasındaki değerlerde enerjide bir düzleşme görülür. Bu düzleşmenin sebebi elektron bu aralıkta $Al_xGa_{1-x}As$ küresel kabuğundan daha az yer almaya başlıyor ve iç küresel GaAs bölgesinde daha çok yer almasıdır. $R_1 \cong 150 \text{ \AA}^0$ civarından sonra bütün durumlar için elektron GaAs küresi içinde lokalize oluyor.

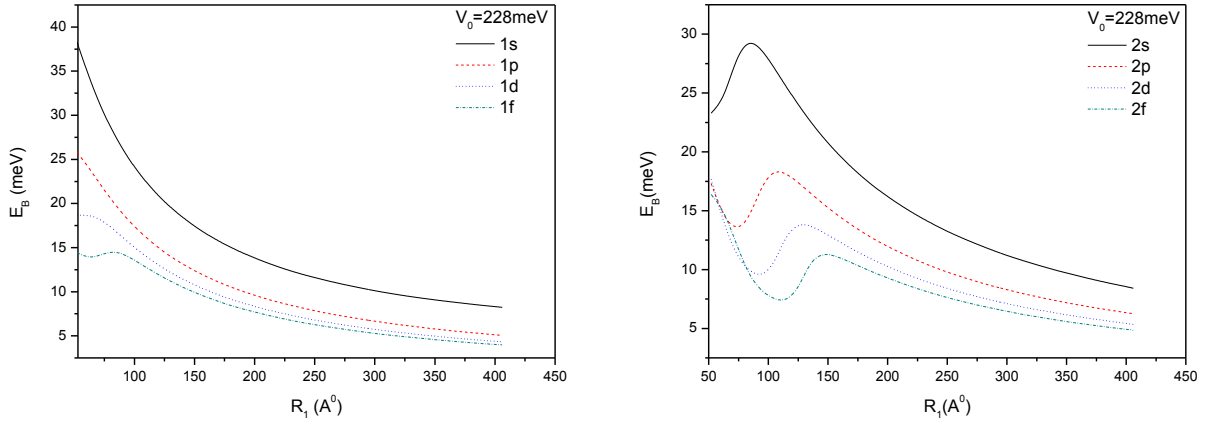


Şekil 4.15. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlu radyal olasılık dağılımları



Şekil 4.16. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomun enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri

Bu sisteme yabancı atom katıldığında 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için radyal olasılık dağılımları Şekil 4.15' te verilir. Şekil 4.16' da yabancı atomun tabaka kalınlığına bağlı enerjileri gösterilir. Elektron enerjileri için görülen karakteristik burada da gözlenir. Yapının boyutu büyüdükçe enerjiler arasındaki farklarda azaldığı gözlenmiştir.



4.17. Çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin basamak kalınlığına bağlı değişimleri

Şekil 4.17' de çift basamaklı sonsuz küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjisi değişimi verilmiştir. Öncelikle 1s ve 1p değerleri basamak kalınlığının artmasıyla eksponansiyel azalırken 1d verilen kalınlık değerine göre sabit bir değerden sonra düşmeye başlamıştır. 1f durumunda ise bir minimum ve sonra da bir maksimum yaparak azalma gözlenmiştir. 2s durumunda bir maksimum yapıp azalma gösterirken, 2p, 2d ve 2f durumlarında minimum yapıp daha sonra maksimum yaptıktan sonra azalma gösterir. Bu durumlar için minimumdan sonraki davranış sonlu kuantum noktası davranışına benzemektedir. 200 A^0 değerinden sonra ki değerler için yapının boyutu büyüdüğünden dolayı sonsuz kuantum noktası davranışı gözlenir. Bağlanma enerjisindeki bu değişimler yapının boyutuna göre yabancı atomlu ve atomsuz olasılık dağılımından kaynaklanmaktadır. Küçük R_1

değerlerinde 2p, 2d ve 2f nin radyal olasılık yoğunlukları tüm yapıya yayılmaktadır. Bizim tarafımızdan ilk defa tanımlandığını düşündüğümüz bu yapıda yapının 100 Å civarında seçilmesinin ilginç sonuçları vereceğini düşünmekteyiz. Özellikle teknolojik uygulamalarda yapı bu boyutlarda seçilirse daha faydalı teknolojik aletler üretileceğini düşünüyoruz.

4.2. Çok Katmanlı Sonlu Küresel Kuantum Noktaları

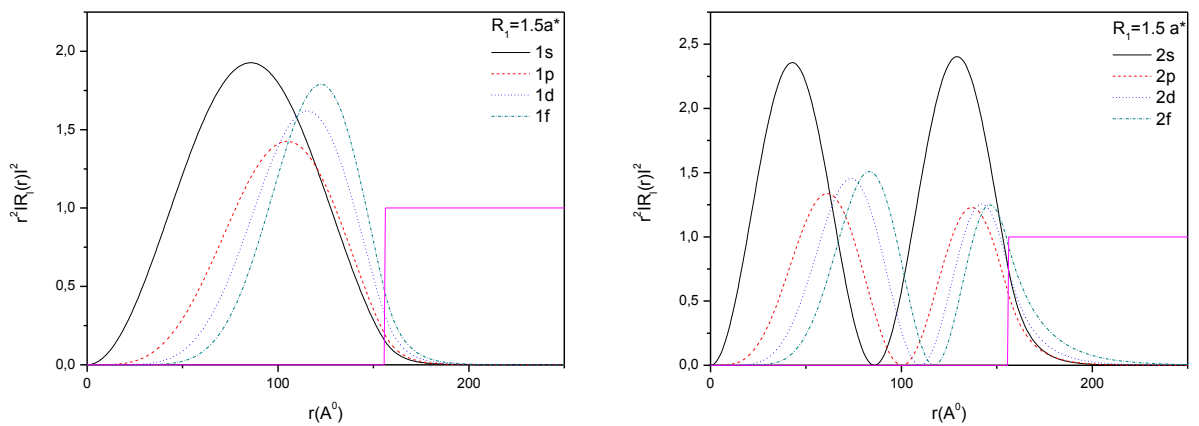
Bu bölümde sonlu potansiyele sahip kuantum noktaları tanımladık. GaAs küresini saran $Al_xGa_{1-x}As$ ve GaAs küre kabuklarıyla sararak oluşan tek ve çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasında yarıçapın ve bariyer kalınlığının enerji değişimindeki etkisini inceledik.

4.2.1. Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri ve Radyal Olasılık Dağılımları

Sonlu küresel kuantum noktasının potansiyel enerjisi;

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 < r \leq R_1 \\ V_0, & r > R_1 \end{cases}, \quad (4.6)$$

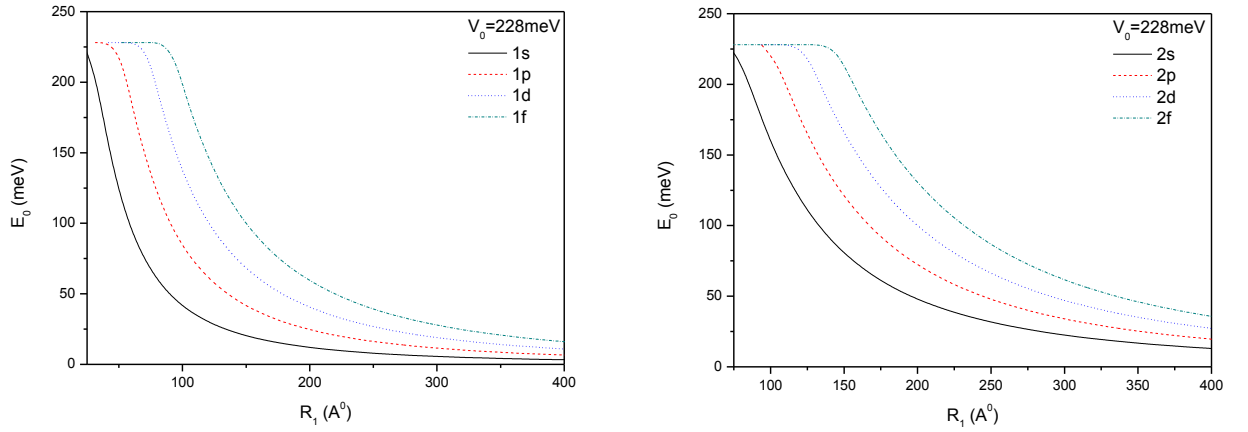
olacak şekilde tanımlanır. Bu yapıda V_0 potansiyel enerjisi 228meV olarak alınıyor.



Şekil 4.18. Sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun radyal olasılık dağılımları

Şekil 4.18’te yarıçapı $1.5a^*$ olan sonlu kuantum noktasının enerji seviyeleri için radyal olasılık dağılımı verilmiştir. Bütün durumlarda elektron çoğunlukla GaAs küresel kuantum noktası içinde yer alır.

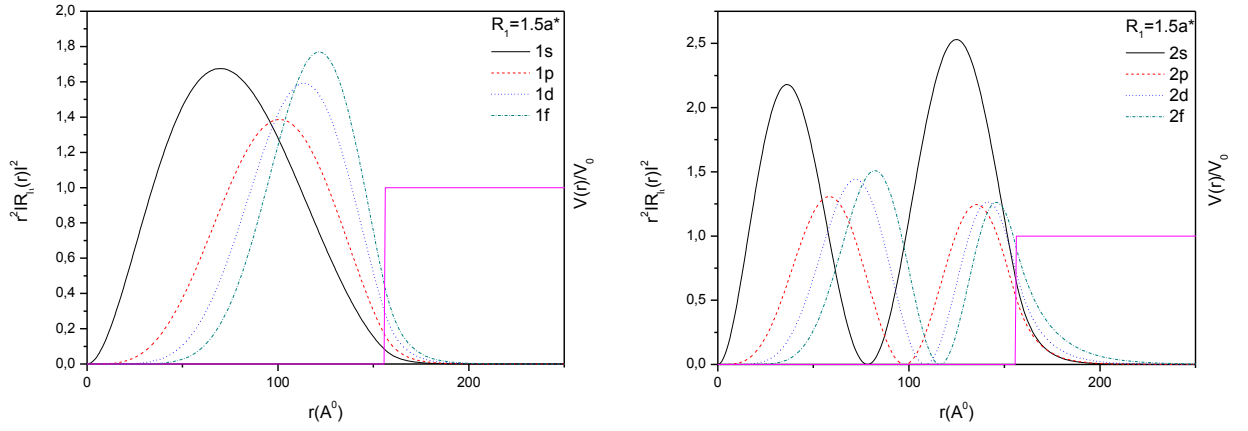
Şekil 4.19’ da sonlu küresel kuantum noktasının yarıçapına bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjileri verilmiştir. Nokta yarıçapının azalmasıyla enerjinin arttığı gözlenmiştir. Bu sonuçlar literatürdeki çalışmalarla benzerlik göstermiştir[19, 20, 34]. 1f, 2s, 2p, 2d, 2f durumları daha büyük yarıçap değerlerinde gözlenmektedir. Özmen ve arkadaşlarının çalışmasında potansiyel yükseklik bizimkiyle aynı alınmıştır[19]. Fakat o çalışmada nokta içinde ve dışında etkin kütle farklı alınmıştır. Bu çalışmadaki sonuçlarla bizim sonuçlarımızı karşılaştırdığımızda çok az farklılık gördük. Bu da yapının tamamında etkin kütleyi ve dielektrik sabitlerini aynı almamızdan kaynaklanmaktadır.



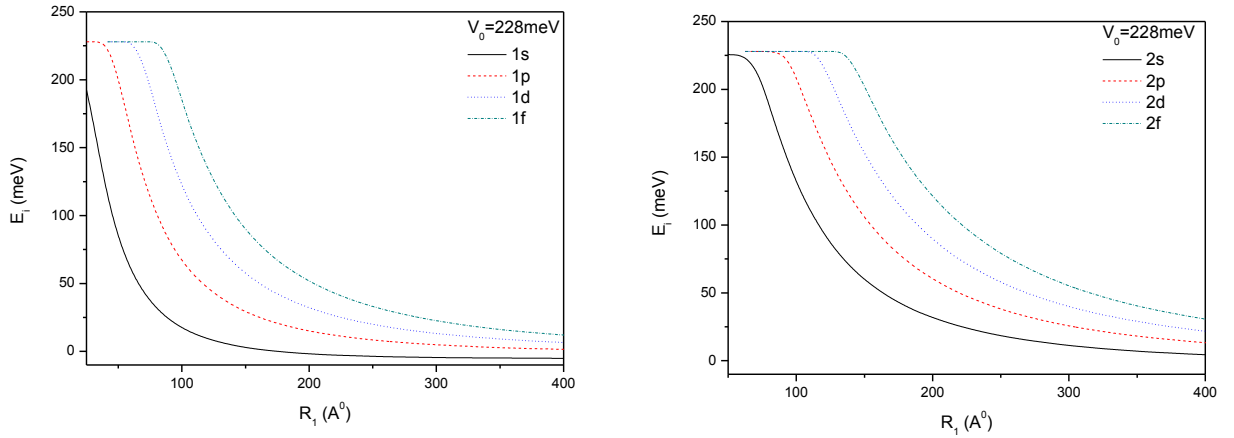
Şekil 4.19. Sonlu küresel kuantum noktasının yarıçapına bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin değişimleri

Yabancı atomlu 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için Şekil 4.20’ de radyal olasılık dağılımları verilmiştir.

Sonlu küresel kuantum noktasında yabancı atomlu 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için enerji değişimleri Şekil 4.21’ de verilmiştir. Nokta yarıçapının azalmasıyla yabancı atom enerji değerleri artma gösterir. Bu sonuçlarla literatürdeki sonuçların uyumlu olduğu görülür[19, 34].

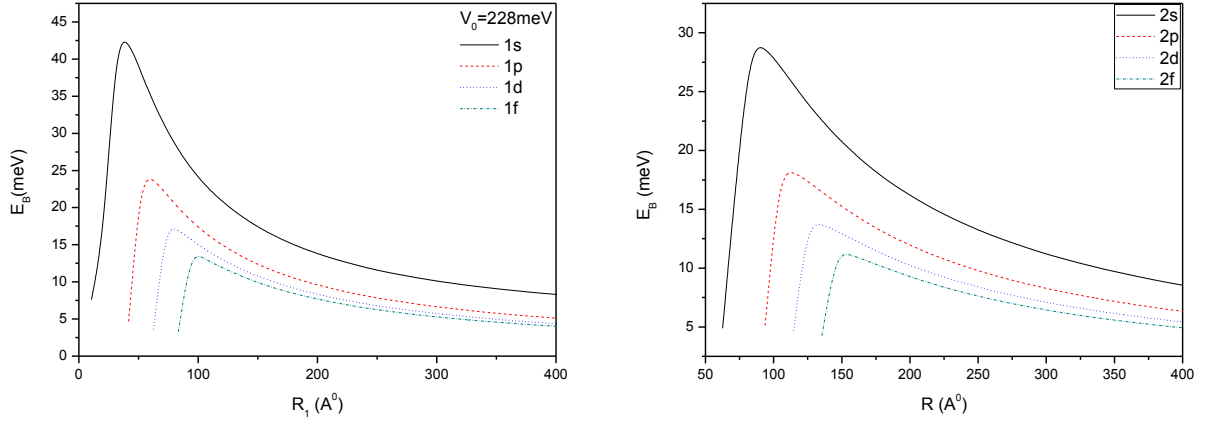


Şekil 4.20. Sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomlu radyal olasılık dağılımları



Şekil 4.21. Sonlu küresel kuantum noktasının yarıçapına bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atom enerjilerinin değişimleri

Sonlu küresel kuantum noktasının yarıçapa bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerji değişimleri Şekil 4.22' de verilmiştir. 1s, 1p, 1d, 1f durumları için nokta yarıçapının azalmasıyla bağlanma enerjisinin arttığı gözlenirken belirli bir yarıçap değerine kadar gelip maksimum yapıp bu değerden sonraki küçük yarıçap değerleri keskin bir azalma gösterir. 2s, 2p, 2d, 2f durumları için bağlanma enerjisinin maksimum değerinin daha büyük yarıçaplara kaydığını ve 1s, 1p, 1d, 1f durumlarındaki bağlanma enerjisiyle aynı karakteristiğini gösterdiğini gördük.



Şekil 4.22. Sonlu küresel kuantum noktasının yarıçapına bağlı 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin değişimleri

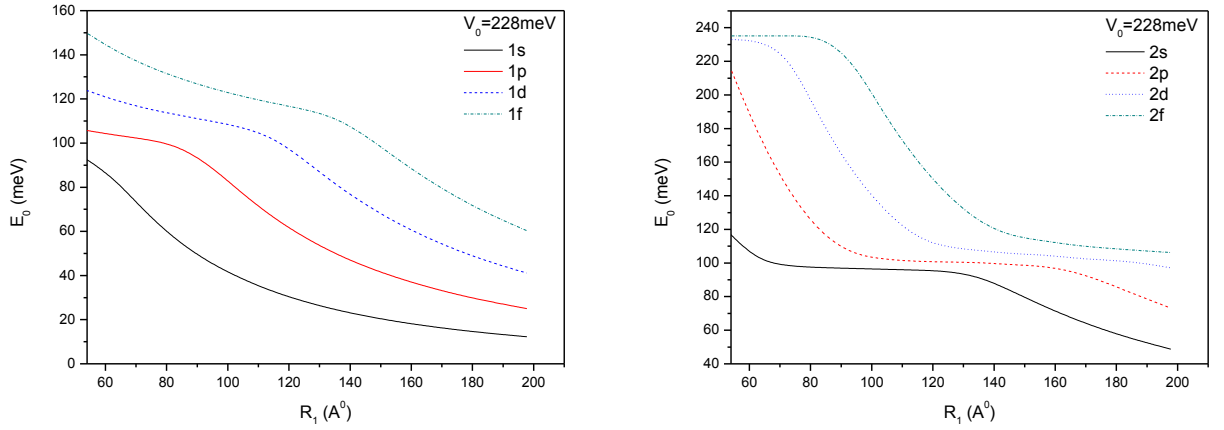
Literatürde sonlu küresel kuantum noktasının taban durum olan 1s durumu için birçok çalışma vardır[9, 10, 12, 17-20, 34, 46]. Bu çalışmalarla çalışmalarımızı karşılaştırdığımızda davranışların aynı olduğunu görüyoruz.

2008 yılında M. Şahin tarafından yapılan çalışmada bizim yapı parametrelerimiz kullanılmıştır. Şahin çalışmasında matris köşegenleştirme tekniğini kullanarak yapmış olduğu hesaplamada 1s durumunda maksimum değerini 46 meV bulmuştur[18]. Bizim çalışmamızda 42.5 meV' tur. Bizim çalışmamızın Şahin'in çalışmasından farkı biz Runge-Kutta nümerik yöntemini kullanarak hesaplamalarımızı yaptık ve etkin kütle, dielektrik sabitini her yerde aynı aldık. Özmen'in 2009 çalışmasıyla karşılaştırdığımızda ise 1s, 1p, 1d, 1f durumları için maksimum bağlanma enerji değerleriyle uyumlu olduğunu gördük[19].

4.2.2. Tek Tabakalı Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri

Bir küresel kuantum noktasını V_0 potansiyeline sahip R_B kalınlıklı bir küresel tabakayla sarıyoruz. Bu tabakayıda R_2 kalınlıklı bir kuantum kuyusu sarılıyor ve tekrarda V_0 potansiyeli sahip bir küresel kabukla yapı sarılıyor. Bu kuantum noktası literatürde çok katmanlı küresel kuantum noktası olarak tanımlanıyor[22-24, 26, 27, 30].

Biz GaAs malzemesinden küresel kuantum noktasını R_B kalınlıklı $Al_xGa_{1-x}As$ malzemeli küresel kabukla sarıyoruz. Bu tabakayıda R_2 kalınlıklı GaAs malzemesiyle sarılıyor ve tekrardan $Al_xGa_{1-x}As$ malzemesiyle sarıyoruz. Bu yapıda R_B kalınlıklı $Al_xGa_{1-x}As$ malzemesini bariyer olarak tanımlıyoruz. Bundan dolayı tek bariyerden oluşturduğumuz için bu çalışmada bu yapıyı biz tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktası olarak tanımladık. Bu yapıda $V_0 = 228meV$ ve R_B bariyer kalınlığı ve R_2 kuyu kalınlığını $0,4a^*$ olarak alıyoruz.



Şekil 4.23. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin değişimleri

Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının potansiyel enerjisi;

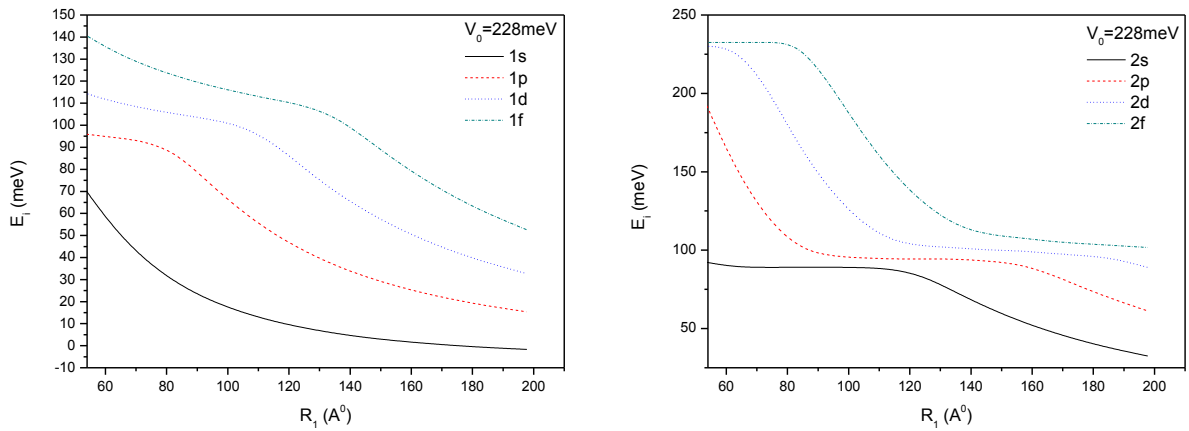
$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 < r < R_1 \\ V_0, & R_1 < r \leq R_1 + R_B \\ 0, & R_1 + R_B < r \leq R_1 + R_B + R_2 \\ V_0, & r > R_1 + R_B + R_2 \end{cases} \quad (4.7)$$

olarak tanımlıyoruz.

Şekil 4.23' te tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumlarında elektronun enerjisinin GaAs küresel kuantum noktasının yarıçapı R_1 ' e bağlı olarak değişimi verilmiştir. Bu şekillerde $R_2 = R_B = 0,4 a^*$ olarak alınmıştır. R_1 kalınlıklarının artmasıyla 1s enerjisinde eksponansiyel bir azalma gözlenirken 1p, 1d, 1f enerjileri kritik R_1 değerlerine kadar yavaş azalma gözlenirken kritik R_1 değerlerini geçtikten sonra ise 1s durumunun davranışı gözlenmiştir. 1p, 1d ve

1f enerjileri için sırasıyla kritik R_1 değeri 90 \AA^0 , 120 \AA^0 ve 140 \AA^0 civarında olduğu görülür. 2s durumunda ise $R_1 = 60 \text{ \AA}^0$ ile 130 \AA^0 arasındaki değerlerde enerjide bir değişiklik görülmemiş ve büyük nokta yarıçapları için enerjide azalma göstermiştir. 2p, 2d, 2f enerjilerinde ise R_1 kalınlıklarının belirli bir durumunda keskin azalma ve daha sonra düzlükler görülmüştür. 2p durumunda bu düzlük 170 \AA^0 değerinde son bulup enerji azalma eğilimi gösterir.

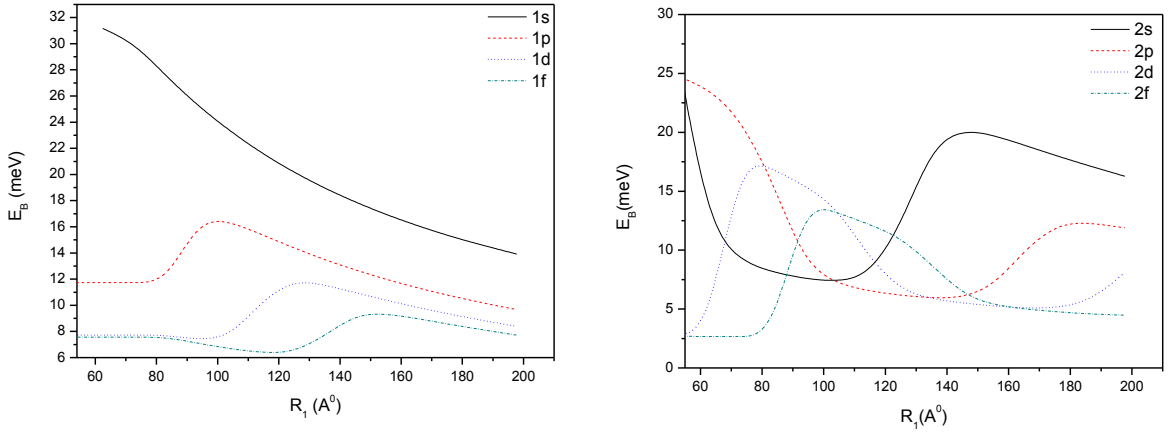
2013' te Aydın ve Şahin'in çalışması bizim geometrik parametrelerimizin aynısıdır[30]. Fakat malzeme CdSe/ZnS çok katmanlı küresel kuantum noktasıdır. Bu çalışmadaki 1s için elektron enerjisinin karakteristiği bizim çalışmamızla uyumludur. CdSe/ZnS/CdSe/SiO₂ kuantum noktasında $l = 0,1,2$ değerleri için elektronun enerjileri verilmiştir. Bizim tanımladığımız yapıya benzer geometriye sahip olan bu kuantum noktası için verilen enerji değerleri bizim sonuçlarımıza benzerdir[50].



Şekil 4.24. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atom enerjilerinin değişimleri

Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atomun enerji değişimleri Şekil 4.24' te gösterilmiştir. 1s durumunda yabancı atom, enerjisi GaAs küresel kuantum noktasının yarıçapının artmasıyla eksponansiyel olarak azalır. Bu davranış Aydın ve Şahin' in çalışmasında da gözlenmiştir[30]. 1p, 1d, 1f durumlarında azalma görülür. Fakat belirli kalınlıklara

kadar küçük, daha sonra eksponansiyel azalmalar gösterir. Örneğin 1p durumu $80 A^0$ kalınlığından sonra eksponansiyel azalma gösterir. Enerji düzeyleri arttıkça R_1 kritik kalınlıkların daha büyük değerler olduğu görülür. 2s durumunda ise $120 A^0$ kalınlığına kadar enerji sabit olmakta daha sonra eksponansiyel değişmektedir. 2p, 2d ve 2f durumları için kalınlığın azalmasıyla enerjilerin arttığı gözlenmiştir.



Şekil 4.25. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin değişimleri

1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasındaki R_1 kalınlıklarına bağlı değişimi Şekil 4.25’ te gösterilmiştir. 1s durumu için R_1 kalınlıklarının artmasıyla bağlanma enerjisi azalmıştır. Bu karakteristik literatürdeki çalışmalarda da görülmüştür[30]. 1p durumunda ise $80 A^0$ kalınlığına kadar sabit kalmış daha sonra bir maksimum yapıp azalma göstermiştir. 1d ve 1f durumları ise $90 A^0$ değerine kadar sabit kalıp çok az bir azalma gösterdikten sonra maksimum yapıp azalma göstermişlerdir.

2s durumunda bağlanma enerjisi tabaka kalınlığının artmasıyla hızla azalmış belirli bir aralıkta $70 A^0 - 110 A^0$ çok yavaş bir azalma göstermiş ve daha sonra $110 A^0$ kalınlığından sonra hızla artmış ve $145 A^0$ civarında bir maksimum yaparak azalma göstermiştir. 2p durumunda aynı karakteristiği göstermiştir. Fakat R_1 ’in $100 A^0$

değerlerine kadar 2s durumu gibi keskin bir azalma göstermemiştir. 2d ve 2f durumları ise daha küçük R_1 kalınlıklarında maksimum yapıp azalma göstermiştir.

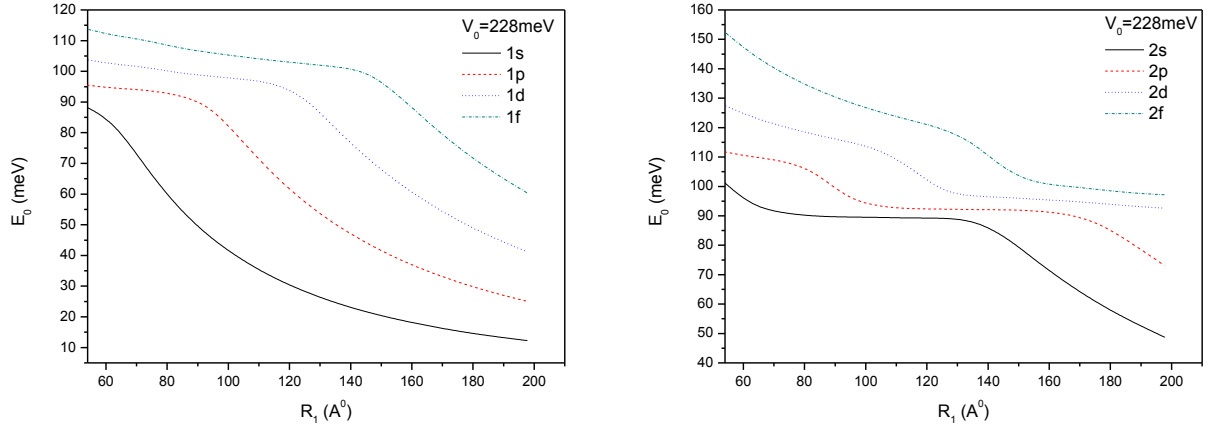
4.2.3. Çift Tabakalı Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Enerji Değişimleri

4.2.2 bölümünde tanımladığımız yapıya bir bariyer ve bir kuyu ekleyerek çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının potansiyel enerjisini;

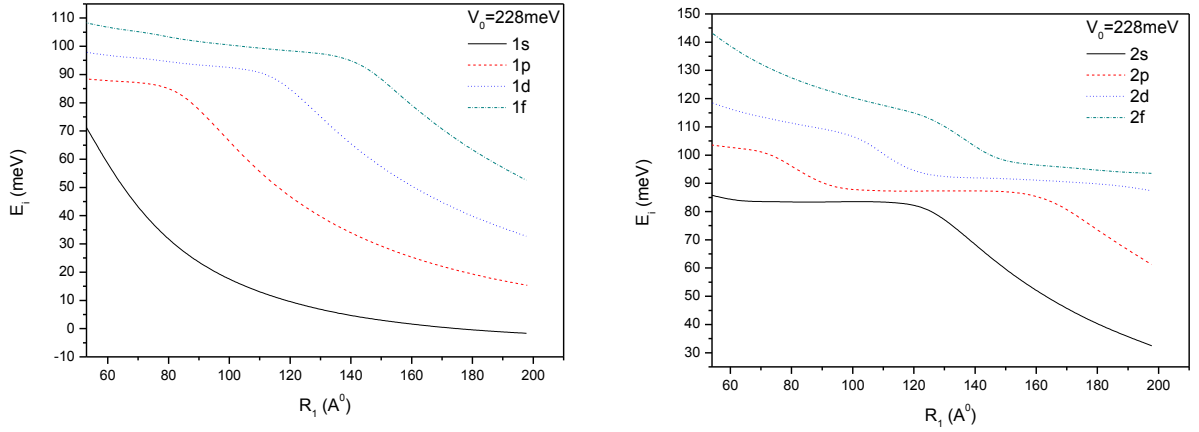
$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 < r \leq R_1 \\ V_0, & R_1 < r \leq R_1 + R_B \\ 0, & R_1 + R_B < r \leq R_1 + R_B + R_2 \\ V_0, & R_1 + R_B + R_2 < r \leq R_1 + R_B + R_2 + R_B \\ 0, & R_1 + R_B + R_2 + R_B < r \leq R_1 + R_B + R_2 + R_B + R_3 \\ V_0, & r > R_1 + R_B + R_2 + R_B + R_3 \end{cases} \quad (4.8)$$

olarak tanımlıyoruz. Bu yapıda $R_2 = R_B = R_3 = 0,4 a^*$ olarak alıyoruz.

Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasında 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjisinin R_1 ' e bağlı değişimi Şekil 4.26' da gösterilmiştir. Tabaka sayısının artması bütün enerjileri düşürmüştür. 1s, 1p, 1d, 1f durumları için tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktası karakteristiği korunmuştur. Ama 2s, 2p, 2d, 2f durumlarında elektron enerjisi tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasındaki gibi keskin değişimler göstermemiştir. 2s durumu küçük R_1 değerlerinde çok az bir değişimden sonra sabit kalmış ve $R_1 \cong 130 A^0$ olan değerinden sonra azalma göstermiştir. 2p durumunda basamaklı bir değişim göstermiştir. 2d durumu büyük R_1 değerlerinde sabit kalır ve R_1 ' in $130 A^0$ ' dan küçük değerlerinde enerji artar, 2f durumunda ise $R_1 \cong 150 A^0$ değerinden sonra sabit kalır. Fakat $150 A^0$ değerlerinden daha küçük R_1 değerleri için enerji artar.

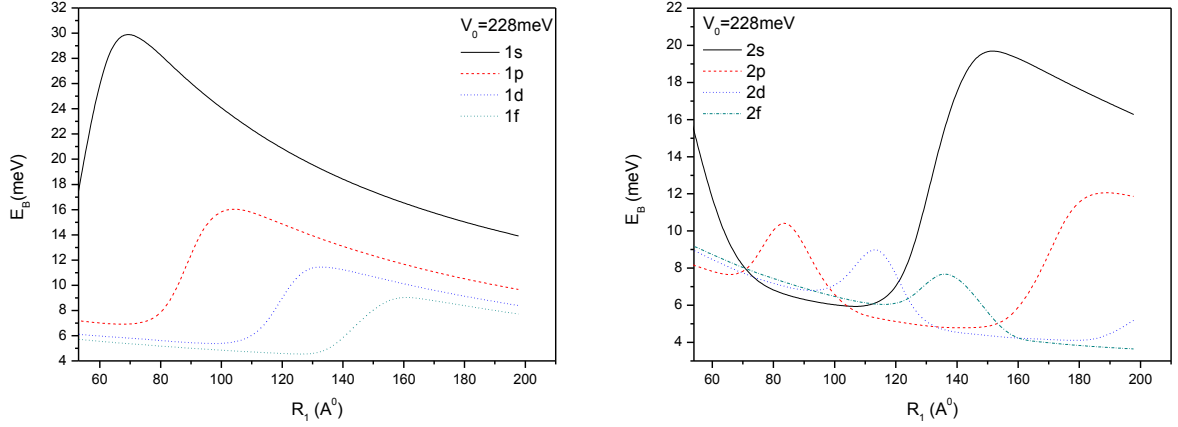


Şekil 4.26. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için elektronun enerjilerinin değişimleri



Şekil 4.27. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için yabancı atom enerjilerinin değişimleri

Sisteme yabancı atom katıldığında yabancı atomun enerjisinin R_1 kalınlığına bağlı değişimi Şekil 4.27’ de verilmiştir. Bütün durumlarda yabancı atomlu sistemde enerjiler elektronun olduğu sistemdeki enerjilerden düşüktür. Fakat karakteristik elektronun enerji değişimlerine benzemektedir. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasıyla bu yapıyı karşılaştırdığımızda yabancı atom enerji değerlerinin daha düşük olduğunu görüyoruz. Sadece 1s ve 2s durumu enerjilerinde ki değişimin az olduğunu görülür. 2p, 2d ve 2f için enerjide tek tabakalı kuantum noktasında keskin azalmalar olurken burada çift tabakalı kuantum noktasında daha yavaş ve enerji değişim aralığı daha azdır.



Şekil 4.28. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bağlanma enerjilerinin değişimleri

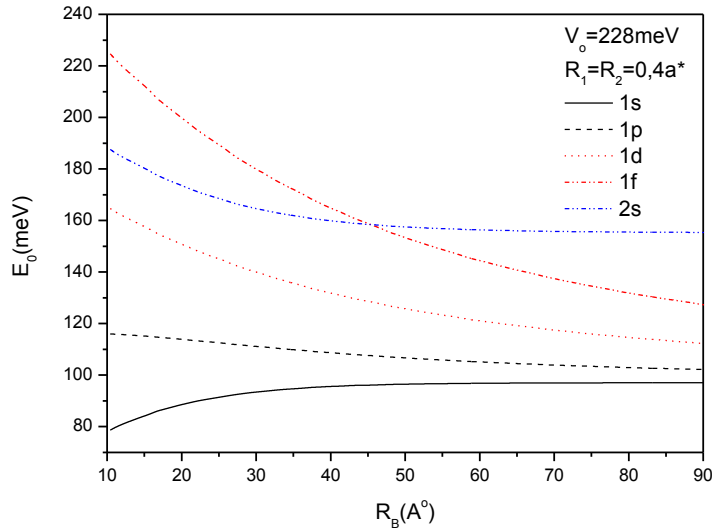
Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasında 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için R_1 kalınlığına bağlı bağlanma enerji değişimleri Şekil 4.28’ de verilmiştir. R_1 kalınlığını arttırdığımızda 1s durumu bir artma maksimumuna vardıktan sonra eksponansiyel azalma gösterir. 1p, 1d, 1f durumları ise R_1 kalınlıklarının artmasıyla bir azalma daha sonrada bir maksimum yapıp azalma göstermektedir. Bu elektronun ve yabancı atomun yapıdaki lokalizasyonlarına bağlıdır. 2s durumunda R_1 kalınlıklarının küçük değerleri için hızla azalma daha sonra yavaş azalma gösterip, 120 A^0 değerlerinden 150 A^0 değerine kadar keskin bir artış göstermektedir. Bu artıştan sonra R_1 kalınlığının artmasıyla azalma gösterir. 2p ve 2d durumları ise küçük R_1 kalınlıkları için azalma gösterirken bir küçük maksimum yaparak bir azalma ve büyük R_1 kalınlığı için keskin artışlar gösterir. 2f durumu ise seçtiğimiz geometriden dolayı R_1 kalınlığının 140 A^0 civarında maksimum yapıp azalma gösterir. 1s, 1p, 1d ve 1f için tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasında bağlanma enerjisi değişimleri çift tabakalı kuantum noktasındaki bağlanma enerjisi değişimlerine göre daha azdır. 2p, 2d ve 2f durumları için ise çift tabakalı kuantum noktasındaki bağlanma enerji değişimleri, tek tabakalı kuantum noktasındaki bağlanma enerji değişimlerine göre daha azdır.

Üç tabakalı sonlu küresel kuantum noktasını da incelediğimizde de çift tabakalıyla karşılaştırdığımız gibi sonuçlar çıktı. Tabaka sayısını arttırdığımızda yapı büyümekte ve enerjilerde bundan dolayı azalma göstermektedir.

4.2.4. Tek Tabakalı Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Bariyer Kalınlıklarına Bağlı Enerji Değişimleri

Bu bölümde 4.2.2 bölümlerinde tanımlanan yapıların daha özel durumlarını inceliyoruz. Bariyer kalınlığını sadece değiştirerek, sabit R_1 ve R_2 değerleri için enerji durumlarının değişimlerini çalışıyoruz.

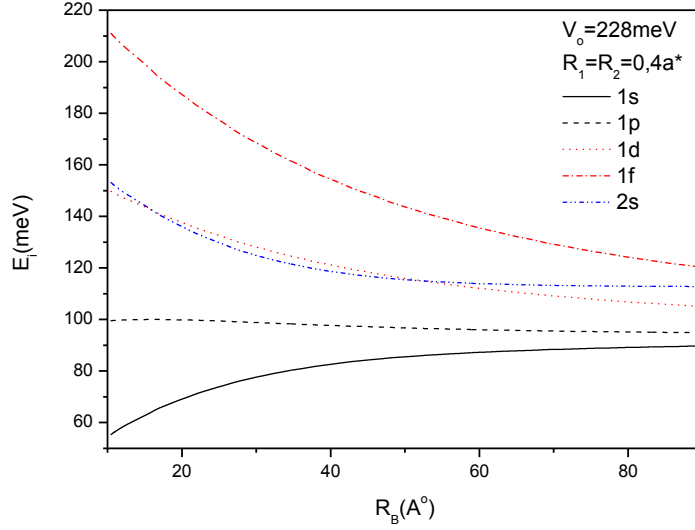
Bölüm 4.2.2' de tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasını tanımlamıştık. O bölümde GaAs küresel kuantum noktasının R_1 yarıçapını değiştirerek yapıyı büyütüyorduk. Bu kısımda ise R_1 ve R_2 kalınlıkları $0,4a^*$ sabit alınarak sadece bariyer olarak tanımladığımız $Al_xGa_{1-x}As$ tabakasının kalınlığı olan R_B değerini arttırarak yapıyı büyütüyoruz. Böyle bir sistemde 1s, 1p, 1d, 1f, 2s durumları için elektronun enerji düzeyleri Şekil 4.29'da verilmiştir. Bu kısımda tanımladığımız geometrik yapıdan dolayı sadece 2p, 2d ve 2f durumları için enerji değerleri 228 meV enerjisinden daha büyük olduğundan bu yapının içinde elektronun bu enerji seviyelerini gösteremiyoruz.



Şekil 4.29. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f ve 2s durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı elektron enerjilerinin değişimleri

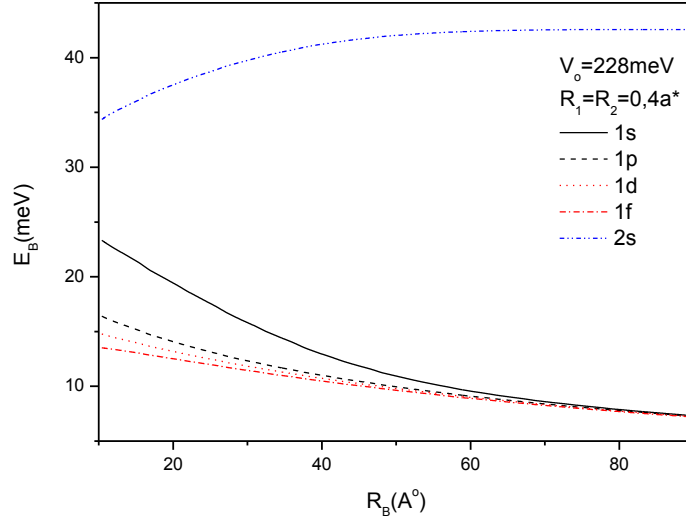
1s durumu bariyer kalınlığını 50 Å değerine kadar eksponansiyel bir artış daha sonra çok az bir değişim göstermiştir. 1p durumunda ise bariyer kalınlığının çok etkili olmadığı görülmüştür. 1d ve 1f durumlarında ise bariyer kalınlığının artmasıyla genelde

eksponansiyel bir azalma gözlenmiştir. 2s durumunda bariyer kalınlığının artmasıyla bir azalma gösterir. $50 A^0$ değerinden sonra sabit bir değerde kalır. Bariyer kalınlığı arttırıldığında bütün enerjiler sabit bir değere yaklaşır.



Şekil 4.30. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f ve 2s durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı yabancı atom enerjilerinin değişimleri

Şekil 4.30' da 1s, 1p, 1d ve 2s durumları için yabancı atomun ve bariyer kalınlığına bağlı enerji değişimi gösterilmiştir. Bu şekilde de elektronun enerji durumlarında görülen karakteristik gözlenmiştir. Fakat enerji değerleri daha küçüktür. Bu da Coulomb etkisinden dolayıdır. 1s durumu $60 A^0$ bariyer kalınlığına kadar eksponansiyel bir artış gösterir. Daha kalın bariyer kalınlıklarında çok az bir değişim gösterir. 1p durumunda bariyer kalınlığının çok etkisi olmadığı burada da görülür. 1d ve 1f durumları bariyer kalınlığıyla eksponansiyel bir azalma davranışı gösterir. 2s durumunda küçük bariyer kalınlıkları için dördüncü sırada enerji olur. Bu bariyer kalınlığının $15 A^0$ ile $50 A^0$ aralığında üçüncü sırada olmaktadır. Bu seçilen yapının geometrisinden dolayı kaynaklanmaktadır.



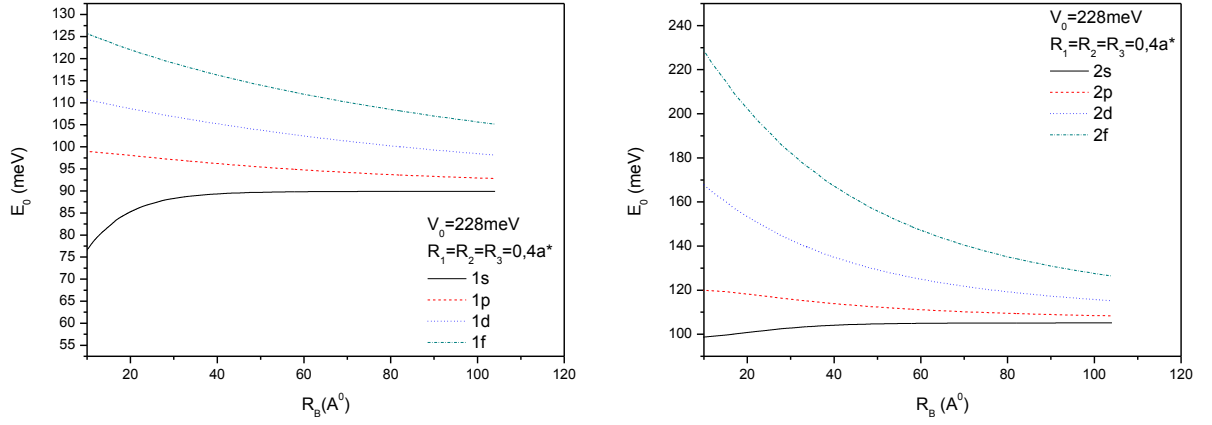
Şekil 4.31. Tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f ve 2s durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı bağlanma enerjilerinin değişimleri

Bariyer kalınlığına bağlı bağlanma enerjisi değişimini Şekil 4.31’ de verilmektedir. 1s, 1p, 1d ve 1f durumları için bağlanma enerjisi bariyer kalınlığıyla eksponansiyel azalır. Literatürde radyal yönde parabolik potansiyele sahip kuantum noktasında taban ve birinci uyarılmış durumun bariyer genişliğine bağlı bağlanma enerjisi verilmiştir. Bu çalışmalar bizim 1s ve 1p durumlarımıza karşılık geliyor. Bizim sonuçlarımızın karakteristiğın aynısı bu çalışmada görülüyor[51].

4.2.5. Çift Tabakalı Sonlu Küresel Kuantum Noktasının Bariyer Kalınlıklarına Bağlı Enerji Değişimleri

Bu bölümde 4.2.3’ de tanımladığımız çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının bariyer kalınlıklarını değiştirerek enerji değişimlerini inceliyoruz. Bu çalışmada GaAs malzemesinin oluşturduğu katmanları $0,4a^*$ değerinde alıyoruz.

$V_0 = 228meV$ ve $R_1 = R_2 = R_3 = 0,4a^*$ olduğunda bariyer kalınlığının değişimine bağlı elektronun enerji durumları Şekil 4.32’ de verilmiştir.



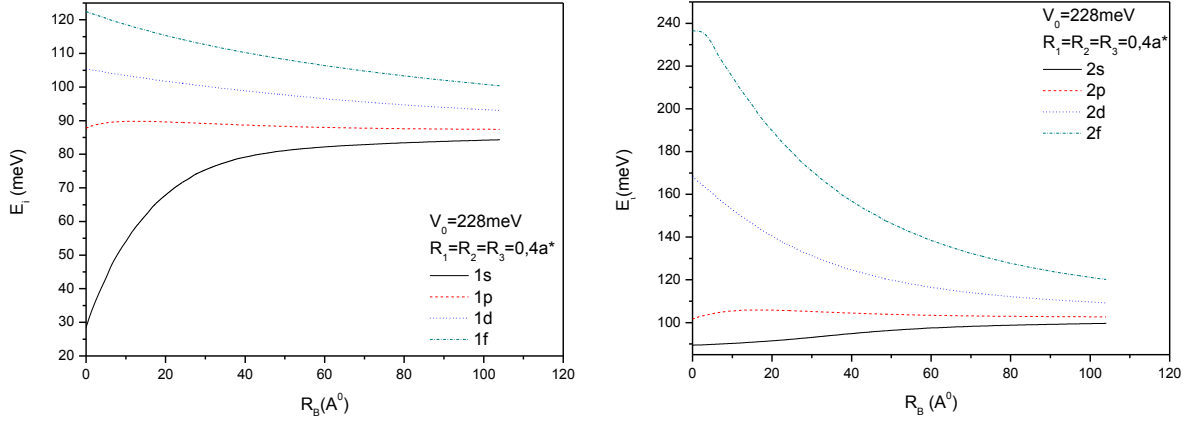
Şekil 4.32. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı elektron enerjilerinin değişimleri

1s durumunda küçük bariyer kalınlıklarında enerji eksponansiyel olarak artmakta ve $R_B = 40 \text{ \AA}$ civarından sonra sabit olmaktadır. 1p durumunda ise bariyer kalınlığının artmasıyla çok az bir değişim gözlenmektedir. 1d ve 1f durumları için bariyer kalınlığıyla enerji azalmaktadır.

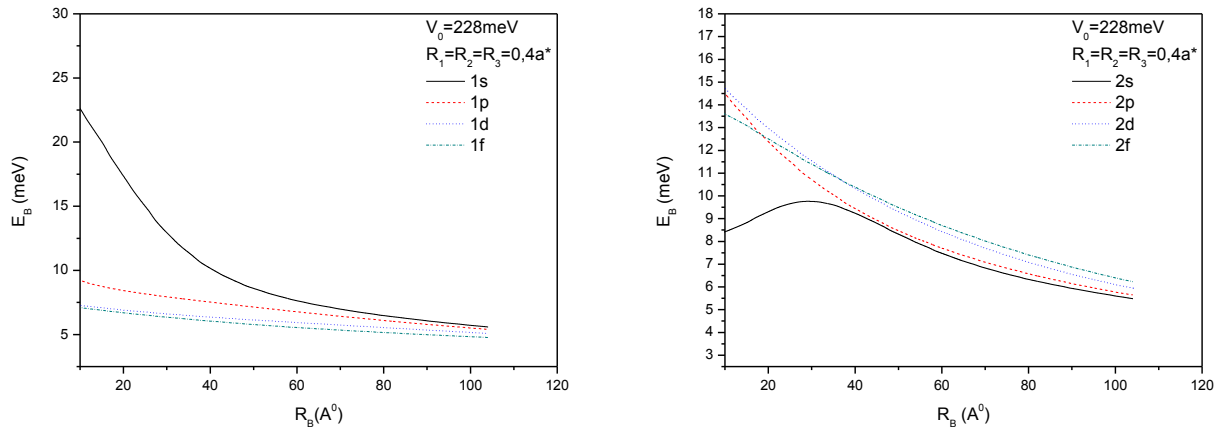
2s durumunda küçük bariyer kalınlıklarında elektron enerjisi az artmakta ve $R_B \approx 50 \text{ \AA}$ civarından sonra sabit olmaktadır. 2p durumunda enerjide az değişimler gözlenmektedir. 2d ve 2f durumlarında enerji bariyer kalınlıklarıyla eksponansiyel azalmaktadır.

Tek tabakalı sonlu kuantum noktasıyla karşılaştırdığımızda enerji değerlerinin düştüğünü görmekteyiz. Yapı büyüdüğü için 2p, 2d ve 2f durumlarının enerjileri de hesaplanıyor.

Şekil 4.33' te yabancı atomun enerji durumları gösterilmiştir. Buradaki karakteristiklerde elektronun enerji değişimlerine benzemektedir. Fakat burada Coulomb etkisinden dolayı enerji değerleri düşüktür. Bu şekilleri tek tabakalı sonlu küresel kuantum noktalarıyla karşılaştırdığımızda tabaka sayısının artmasıyla yapı büyüdüğünden dolayı enerji değerleri daha küçük olduğu görüldü.



Şekil 4.33. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı yabancı atom enerjilerinin değişimleri



Şekil 4.34. Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bariyer kalınlıklarına bağlı bağlanma enerjilerinin değişimleri

Çift tabakalı sonlu küresel kuantum noktasının 1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p, 2d ve 2f durumları için bariyer kalınlığına bağlı bağlanma enerjileri değişimi Şekil 4.34' de verildi. 1s durumu için bağlanma enerjisi bariyer kalınlığının küçülmesiyle hızlı bir artma gözlenirken; 1p, 1d ve 1f durumları için lineer bir artma gösterir. 2s durumunda ise bariyer kalınlığının artmasıyla artma ve $R_B \cong 30 A^0$ civarında maksimum yaptıktan sonra azalma gözlenmiştir. 2p, 2d ve 2f durumlarında ise bariyer kalınlığıyla artmasıyla eksponansiyel bir azalma gözlenmiştir.

Bu grafikleri tek tabakalı sonlu kuantum noktasıyla karşılaştırdığımızda tabaka sayısının artmasıyla enerji değişimleri küçük bariyer kalınlıklarında daha az olduğunu da gördük. Fakat tek tabakalıda bariyer kalınlığı arttığında durumlar arasında enerji farkı yok olurken çift tabakalıda enerji farkının devam ettiğini gözlemledik.

Bu tezde çok katmanlı küresel kuantum noktalarının elektronik özellikleri incelendi. Effektif kütle yaklaşımıyla çok katmanlı küresel kuantum noktalarında enerjiler ve radyal olasılık yoğunlukları dördüncü derece Runge-Kutta nümerik metodu kullanılarak hesaplandı.

Basamaklı sonsuz küresel kuantum noktalarına basamak kalınlıklarının ve potansiyel yüksekliklerinin enerji durumlarının hesaplanmasında önemli olduğu görüldü. Basamaklı sonsuz küresel kuantum noktalarında yapıların büyük seçildiğinde sonsuz küresel kuantum noktası davranışı gösterir. Basamaklı sonsuz küresel kuantum noktalarında tabaka kalınlığının artmasıyla radyal olasılık yoğunluklarının R yarıçaplı GaAs bölgesinde yer aldığı görüldü.

Çok katmanlı sonlu küresel kuantum noktalarında nokta yarıçapının artmasıyla enerjilerde azalmalar olduğu görüldü. Tabaka sayısının artmasıyla enerji değerlerinin düştüğü görüldü. Çok katmanlı küresel kuantum noktalarında enerji ve radyal olasılık dağılımlarında nokta yarıçapının ve bariyer kalınlığının önemli olduğu görüldü.

Radyal olasılık dağılımları ve enerji durumları optik geçiş hesaplamalarında kullanılmaktadır[18, 26, 27, 29, 51, 52]. Bu tezde verilen enerji durumları ve radyal olasılık dağılımları bu hesaplamaları yapacak kişilere yol gösterici olabilir.

Bu çalışmanın devamı olarak burada bulunan sonuçlar kullanılarak çok katmanlı küresel kuantum noktalarında lineer optik özellikleri incelenebilir.

KAYNAKLAR

- [1] H. Weller, A. Eychmüller, *Preparation and characterization of semiconductor nanoparticles*, Semiconductor Nanoclusters: Physical, Chemical, and Catalytic Aspects (Studies in Surface Science and Catalysis), 103, 5, (1997).
- [2] S.Kim, H. Mohseni, M.Erdtmann, E. Michel, C. Jelen, M. Razeghi, *Growth and Characterization of InGaAs/InGaP Quantum Dots for Midinfrared Photoconductive Detector*, Appl. Phys. Lett. , 73, 963, (1998).
- [3] E. Leobandung, L. J. Guo, S.Y. Chou, *Single Hole Quantum Dot Transistors in Silicon*, Appl. Phys. Lett., 67, 2338, (1995).
- [4] N. Kirstaedter , O.G. Schmidt, N.N. Ledentsov, D. Bimberg, V.M. Ustinov, A.Y. Egorov, A.E. Zhukov ; M.V. Maximov, P.S. Kopev, Z.I. Alferov, *Gain and Differential Gain of Single Layer InAs/GaAs Quantum Dot Injection Lasers*, Appl. Phys. Lett., 69, 1226, (1996).
- [5] D. Loss, D.P. Divincenzo, *Quantum Computation with Quantum Dots*, Phys. Rev. A ,57, 120, (1998).
- [6] M. Kroutvar, Y. Ducommun, D. Heiss, M. Bichler, D. Schuh, G. Abstreiter, J.J. Finley, *Optically Programmable Electron Spin Memory Using Semiconductor Quantum Dots*, Nature, 432, 81 (2004).
- [7] J. Wu, S. Lee , V.R. Reddy, M.O. Manasreh, B.D. Weaver, M.K. Yakes, C.S. Furrow, V.P. Kunets, M. Benamara, G.J. Salamo, *Photoluminescence Plasmonic Enhancement in InAs Quantum Dots Coupled to Gold Nanoparticles*, Mater. Lett., 65,3605, (2011).
- [8] C. Bose, C.K. Sarkar, *Effect of a Parabolic Potential on the Impurity Binding Energy in Spherical Quantum Dots*, Physica B, 253, 238, (1998).
- [9] C. Bose, C.K. Sarkar, *Binding Energy of Impurity States in Spherical GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs Quantum Dots*, Phys. Stat.Sol.(b), 218, 461, (2000).
- [10] I.F.I. Mikhail, I.M.M. Ismail, *Binding Energy of on off Centre Hydrogenic Donor Impurity in a Spherical Quantum Dot*, Phy. Stat. Sol. (b), 244, 3647,(2007).
- [11] L.M. Burileanu, *Photoionization Cross-Section of Donor Impurity in Spherical Quantum Dot Under Electric and Intense Laser Fields*, Journal of Luminescence, 145, 684, (2014).
- [12] J.L. Zhu, J.J. Xiong, B.L. Gu, *Confined Electron and Hydrogenic Donor States in a Spherical Quantum Dot of GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs*, Phy. Rev. B. , 41, 6001, (1990).
- [13] D.S. Chuu, C.M. Hsiao, W.N. Mei, *Hydrogenic Impurity States in Quantum Dots and Quantum Wires*, Phys. Rev. B, 46, 3898, (1992).

- [14] Y.P. Varshni, *Accurate Wavefunctions for Hydrogenic Donors in GaAs – (Ga, Al)As Quantum Dots*, Phy. Lett. A, 252, 248, (1999).
- [15] Y.P. Varshini, *Binding Energy of a Hydrogenic Impurity in a 2D Circular Quantum Dot*, Superlattice and Microstructures, 30, 253, (2001).
- [16] A.S. Baimuratov, I.D. Rukhlenko, V. K. Turkov, I.O. Ponomareva, M.Y. Leonov, T.S. Perova, K. Berwick, A.V. Baranov, A.V. Federov, *Level Anticrossing of Impurity States in Semiconductor Nanocrystals*, Scientific Reports, 4, 6917, (2014).
- [17] A. Sivakami, V. Gayathri, *Hydrostatic Pressure and Temperature Dependence of Dielectric Mismatch Effect on the Impurity Binding Energy in a Spherical Quantum Dot*, Superlattices and Microstructures, 58, 218, (2013).
- [18] M. Şahin, *Photoionization Cross Section and Intersublevel Transitions in a One- and Two-Electron Spherical Quantum Dot with a Hydrogenic Impurity*, Phy. Rev. B, 77, 045317, (2008).
- [19] A. Özmen, Y. Yakar, B. Çakır, Ü. Atav, *Computation of the Oscillator Strength and Absorption Coefficients for the Intersubband Transitions of the Spherical Quantum Dot*, Optics Communications, 282, 3999, (2009).
- [20] A. Özmen, B. Çakır, Y. Yakar, *Electronic Structure and Relativistic Terms of One-Electron Spherical Quantum Dot*, Journal of Luminescence, 137, 259, (2013).
- [21] S. Yılmaz, *Küresel Kuantum Noktalarında Safsızlık Problemi*, Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi, (2004).
- [22] S. Aktas, F.K. Boz, *The Binding Energy of Hydrogenic Impurity in Multilayered Spherical Quantum Dot*, Physica E, 40, 753, (2008).
- [23] F.K. Boz, S. Aktas, A. Bilekkaya, S.E. Okan, *Geometric Effects on Energy States of a Hydrogenic Impurity in Multilayered Spherical Quantum Dot*, Appl. Surf. Sci., 255, 6561, (2009).
- [24] F.K. Boz, S. Aktas, A. Bilekkaya, S.E. Okan, *The Multilayered Spherical Quantum Dot Under a Magnetic Field*, Appl. Surf. Sci., 256, 3832, (2010).
- [25] M. J. Karimi, G. Rezaei, M. Nazari, *Linear and Nonlinear Optical Properties of Multilayered Spherical Quantum Dots: Effects of Geometrical Size, Hydrogenic Impurity Hydrostatic Pressure and Temperature*, Journal of Luminescence, 145, 55 (2014).
- [26] M. Şahin, F. Tek, A. Erdiñç, *The Photoionization Cross Section of a Hydrogenic Impurity in a Multi-layered Spherical Quantum Dot*, J. Appl. Phys., 111, 084317, (2012).
- [27] H. Taş, M. Şahin, *The Inter-Sublevel Optical Properties of a Spherical Quantum Dot- Quantum Well with and Without a Donor Impurity*, J. Appl. Phys., 112, 053717, (2012).

- [28] A.E. Kavruk, M. Sahin, F. Koc, *Linear and Nonlinear Optical Properties of GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As Multi-Shell Spherical Quantum Dot*, J. Appl. Phys., 114, 183704, (2013).
- [29] M. Şahin, K. Köksal, *The Linear Optical Properties of a Multi-Shell Spherical Quantum Dot of a Parabolic Confinement for Cases with and without a Hydrogenic Impurity*, Semicond Sci. Technol, 27, 125011, (2012).
- [30] R. Aydın, M. Sahin, *The Electronic Properties of a Two Electron Multi-Shell Quantum Dot-Quantum Well Heterostructure*, J. Appl. Phys., 114, 043706, (2013).
- [31] M. Şahin, S. Nizamoğlu, O. Yerli, H.V. Demir, *Reordering Orbitals of Semiconductor Multi-Shell Quantum Dot-Quantum Well Heteronanocrystals*, J. Appl. Phys., 111, 023713, (2012).
- [32] H.Hoseinkhani, M. Ashouri, *Numerical Simulation and Time- Dependent Quantum Analysis of Electron Properties in Multilayer Spherical InGaAs/AlGaAs Quantum Dot*, Physica E, 56, 238, (2014).
- [33] A. Ferrón, P. Serra, O. Osenda, *Near-Threshold Properties of the Electronic Density of Layered Quantum Dots*, Phys. Rev. B, 85 165322, (2012).
- [34] C.Y. Hsieh, *Lower Lying States of Hydrogenic Impurity in a Multi Layer Quantum Dot*, Chise Journal of Physics, 38, 478, (2000).
- [35] A. Kh. Manaselyan, A.A. Kirakosyan, *Effect of the Dielectric-Constant Mismatch and Magnetic Field on the Binding Energy of Hydrogenic Impurities in a Spherical Quantum Dot*, Physica E, 22, 825, (2004).
- [36] B. Çakır, *Çok Elektronlu Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi*, Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, (Konya, 2007).
- [37] J. R. Taylor, C. D. Zafiratos, M. A. Dubson, *Modern Fizik*, 2. Baskıdan Çeviri, (Okutman Yayıncılık, Ankara, 2008)
- [38] S. Ardalı, *Kuantum Noktalarında Geometrik Etkiler*, Yüksek Lisans Tezi, Trakya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, (Edirne, 2005).
- [39] Ö. Gücüyener, *Bir Kuantum Kutusu İçerisindeki Safsızlık Enerji Seviyelerinin Belirlenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, (Konya, 2006).
- [40] M.A. Reed, *Quantum Dots*, Scientific American, 268, 118, (1993).
- [41] J. Cibert, P.M. Petroff, G.J. Dolan, S.J. Pearton, A.C. Gossard, J.H. English, *Optically Detected Carrier Confinement to One and Zero Dimension in GaAs Quantum Well Wires and Boxes*, Applied Physics Letters, 19, 1275, (1986).

- [42] H.Temkin, G.J. Dolan, M.B. Panish, S.N.G. Chu, *Low-temperature Photoluminescence from InGaAs/InP Quantum Wires and Boxes*, Applied Physics Letters, 7, 413, (1987).
- [43] Emek Göksu Durmuşoğlu, *Kuantum Nokta*, Teknik Yazı Metalurji, TMMOB Metalurji ve Malzeme Mühendisleri Odası, 160, 31, (2011)
- [44] F.K. Boz, *Düşük Boyutlu Yapılarda Yabancı Atom Problemi ve Eksitonlar*, Doktora Tezi, Trakya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, (Edirne, 2005).
- [45] İbrahim Uzun, *Nümerik Analiz* (Beta Basım, İstanbul, 2000).
- [46] Bekir Karaoğlu, *Sayısal Fizik* (Seyir Yayıncılık, İstanbul, 2004).
- [47] Bahattin Başar, *Kuantum Kimyası (Modern Atom Teorisi)* (Birsen Yayınevi, İstanbul, 2010).
- [48] John S.Townsend, *A Modern Approach to Quantum Mechanics*, (Mc Graw-Hill, Inc. Physics Series, Singapore, 1992).
- [49] A.J. Peter K. Navaneethakrishnan, *Hydrogenic Donor in a Spherical Quantum Dot with Different Confinements*, Chin. Phy. Lett. , 26, 087302-1, (2009).
- [50] R. Kostić, D. Stojanović, *Influence of the Internal Heterostructure on Nonlinear Absorption Spectra for Intersubband Transitions in Spherical Quantum Dot-Quantum Well Nanoparticles*, Phys. Scr. , T149, 014055, (2012).
- [51] S. Akgul, M. Şahin, K.Köksal, *A Detailed Investigation of the Electronic Properties of a Multilayer Spherical Quantum Dot with a Parabolic Confinement*, Journal of Luminescence, 132, 1705, (2012).
- [52] Wenfang Xie, *Nonlinear Optical Properties of an off-center Donor in a Quantum Dot Under Applied Magnetic Field*, Solid State Communications, 151, 545, (2011).

ÖZGEÇMİŞ

1990 yılında İstanbul da doğdu. İlköğrenimini Dr. Hasan Akgün İlköğretim Okulu'nda tamamladı. Lise öğrenimini ise Büyükçekmece Lisesinde bitirdi. 2007 yılında Sakarya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nde okumaya başladı ve 2011'de eğitimini tamamladı. 2011'in eylül ayında Trakya Üniversitesi'nde yüksek lisans eğitimine başladı ve hala eğitime devam etmektedir.