



**KUANTUM NOKTALI ARA BANT YAPILI GÜNEŞ PİLLERİNİN
TASARIMI VE VERİM OPTİMİZASYONU**

Volkan KIZILOĞLU

**DOKTORA TEZİ
ELEKTRİK ELEKTRONİK MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

HAZİRAN 2021

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Volkan KIZILOĞLU

22/06/2021

KUANTUM NOKTALI ARA BANT YAPILI GÜNEŞ PİLLERİNİN TASARIMI VE VERİM OPTİMİZASYONU

(Doktora Tezi)

Volkan KIZILOĞLU

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Haziran 2021

ÖZET

Tek ara bantlı yapıli güneş pilleri (ABGP), tek eklemli güneş pillerine göre güneş spektrumunun daha verimli kullanımını sağlamaktadır. Bu çalışmada, Detaylı Denge Modeli kullanılarak yeni Model-B ABGP incelendi ve daha önce kullanılan, burada Model-A ve Model-C olarak adlandırılan, iki model ile karşılaştırıldı. Soğurma katsayıları arasında örtüşme yokken, üç ABGP modelinin verimi, 1,95 eV için %63,20 ve GaAs için %59,90 olarak bulunmuştur. 4 eV örtüşmede, Model-B, Model-C ve Model-A için GaAs pil verimleri, sırasıyla %45,86, %41,32 ve %35,80 olarak bulunmuş ve Model-B'nin diğer iki modele göre daha verimli olduğu görülmüştür. ABGP pil verimi, ışık şiddetinin logaritmasıyla lineer olarak artmaktadır. GaAs ABGP'de maksimum verim için AB durum yoğunluğu en az $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ olması gerekmektedir. Elektron ve boşluk yakalama kesit alan oranlarının 0,01-100 aralığında, optimum AB doluluk oranları 1 ile 0 arasında değişmektedir. Büyük örtüşme durumunda, taşıyıcı yakalama kesit alanları çok farklı iken, Model-B'nin verimi, Model-A'nın veriminden %35 daha büyüktür. 1-3,5 eV bant aralığındaki ABGP'lerde, örtüşmenin olumsuz etkilerini azalttığından Model-B'nin verimi, Model-A'ya göre çok yüksektir. Sonuçlar, Model-B kullanılarak, geniş bant aralığındaki malzemelerin, 10000X'te ve en büyük örtüşmede, %50 üzerinde verime sahip ABGP üretimine uygun olabileceğini göstermektedir. Bu çalışmada, ayrıca InAs/GaAs kutu şekilli kuantum noktalı ara bant yapıli güneş pilinin (KN-ABGP) verimi, detaylı denge modeli kullanılarak araştırıldı. AB enerji seviyeleri ve alt bant soğurma katsayıları, farklı kuantum nokta boyutları için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumları göz önüne alınarak tek bant ve dört bant k.p metodu ile hesaplanmıştır. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, KN boyutlarının artmasıyla alt bant soğurma katsayıları ve AB enerji seviyelerinin sayısı artmıştır. Detaylı denge modelinde, AB enerji seviyelerinin sayısının KN boyutlarıyla artması sonucu ara bant fotoakım yoğunluğunun düştüğü tespit edilmiştir. Kuantum noktaların varlığıyla KN-ABGP kısa devre akım yoğunluklarında önemli bir artış görülmezken açık devre voltajı düşmüştür. Sonuç olarak, InAs/GaAs KN-ABGP verimi %28,40, ideal GaAs ABGP verimi %52,16 ve konvansiyonel GaAs güneş pilinin verimi %34,72 olarak bulunmuştur.

Bilim Kodu : 90543

Anahtar Kelimeler : Ara bant yapıli güneş pilleri (ABGP), Model-B, detaylı denge modeli, örtüşme, doluluk oranı, optik yakalama kesit alanı oranı, GaAs ve geniş bant aralığı, Schrödinger denklemleri, k.p metodu, InAs/GaAs kuantum noktalı ABGP, akım-gerilim karakteristikleri, verim

Sayfa Adedi : 152

Danışman : Prof. Dr. Müzeyyen SARITAŞ

DESIGN AND OPTIMIZATION OF EFFICIENCY IN QUANTUM DOT
INTERMEDIATE BAND SOLAR CELLS

(Ph. D. Thesis)

Volkan KIZILOĞLU

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

June 2021

ABSTRACT

Intermediate band solar cells, IBSCs, with single IB provide better utilization of the solar spectrum than single-junction solar cells. In this study, the new Model-B IBSC was investigated using the Detailed Balance Model and compared with previously used two models and named here as Model-A and Model-C, respectively. For the three IBSC models under non-overlapping absorption coefficients, the maximum efficiencies were found as 63.20% for 1.95 eV and 59.90% for GaAs. With 4 eV overlap, the cell efficiencies for Model-B, Model-C, and Model-A of GaAs IBSCs were calculated as 45.86%, 41.32%, and 35.80% respectively, and Model-B was found to be more efficient than the other two models. The efficiency of IBSC increased linearly with the logarithm of the light concentration. The density of IB states should be at least $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ for maximum efficiency in GaAs IBSC. The optimum IB filling changed between 1 and 0 with 0,01 and 100 ratios of electron/holes capture cross-sections. The peak efficiency of Model-B was 35% over Model-A, at large non-equal capture cross-sections under 4 eV of overlapping. In the 1-3.5 eV range of bandgaps, Model-B reduced the negative influence of large overlapping, and the efficiency of Model-B became much higher than Model-A. Results predicted that the materials in the wide range of bandgaps could be good candidates for fabricating IBSCs using Model-B with an efficiency over 50% at 10000X under large overlapping. In this study, the efficiency of InAs/GaAs box-shaped quantum dot intermediate band solar cell (QD-IBSC) has also been investigated using the detailed balance model. The IB energy levels and sub-band absorption coefficients were determined with the single band k.p and four-band k.p methods, by changing the quantum dot size for equal effective mass and effective mass mismatch cases. The sub-bandgap absorption coefficients and the number of IB energy levels increased with the QD size for both equal effective mass and the effective mass mismatch cases. In the detailed balance model, the intermediate band photocurrent density was decreased as the number of IB energy levels increased with the QD size. With the presence of quantum dots, while there was no significant increase in short circuit current densities of QD-IBSC, the open-circuit voltage decreased. As a result, the efficiencies were found as 28.40% for InAs/GaAs QD-IBSC, 52.16% for ideal GaAs IBSC, and 34.72% for conventional GaAs solar cells.

Science Code : 90543

Key Words : Intermediate band solar cell (IBSC), Model-B, detailed balance model, overlap, filling, optical capture cross-section ratio, GaAs and wide range of band gaps, Schrödinger equations, k.p methods, InAs/GaAs quantum dot IBSC, current-voltage characteristics, efficiency

Page Number : 152

Supervisor : Prof. Dr. Müzeyyen SARITAŞ

TEŞEKKÜR

Doktora çalışmalarım boyunca bana yol gösteren, hatalarımı sabırla düzelten ve akademik hayat ile ilgili tecrübelerini aktaran değerli Danışman hocam Prof. Dr. Müzeyyen SARITAŞ'a, Detaylı Denge Modeli kullanımında desteklerini ve görüşlerini hiçbir zaman esirgemeyen Doç. Dr. Tuğba Selcen NAVRUZ'a, çalışmalarımı yaparken beni maddi manevi yönden destekleyen, her zaman sabır gösteren kıymetli eşim Kübra KIZILOĞLU'na, hayatın bana en büyük hediyesi oğlum Uğur KIZILOĞLU'na, bugünlere gelmemi sağlayan annem Düriye KIZILOĞLU ve babam Turgut KIZILOĞLU'na, her zaman yanımda olduğunu hissettiğim abim Ozan KIZILOĞLU'na, ve maddi desteklerinden dolayı da Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu'na sonsuz teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xvii
1. GİRİŞ.....	1
2. GÜNEŞ ENERJİSİ, GÜNEŞ PİLLERİNİN YAPISI VE TARİHÇESİ ..	5
2.1. Güneş Pili Yapısı ve Çalışma Prensipleri	7
2.1.1. Kuantum verimliliği	13
2.2. Güneş Pili Çalışmasına ve Verimine Etki Eden Malzeme Parametreleri.....	14
2.2.1. Güneş spektrumu/Yarı iletken bant aralığı.....	15
2.2.2. Soğurma katsayısı ve güneş pili kalınlığı.....	16
2.2.3. Sıcaklık.....	16
2.2.4. Yüzey rekombinasyonu.....	17
2.2.5. Taşıyıcı mobiliteleri, ömür süreleri, difüzyon uzunluğu ve katkı konsantrasyonu.....	17
2.3. Güneş Pili Verim Limitleri ve Temel Kayıplar.....	19
2.4. Güneş Pillerinin Sınıflandırılması ve Yüksek Verimli Güneş Pili Modelleri.....	21
2.4.1. Birinci nesil güneş pilleri	22
2.4.2. İkinci nesil güneş pilleri.....	22
2.4.3. Üçüncü nesil güneş pilleri.....	23
2.4.4. Dördüncü nesil güneş pilleri	23

Sayfa

2.5. Ara Bant Yapılı/Kuantum Noktalı Ara Bant Yapılı Güneş Pilleri ve Tarihçesi.	26
2.5.1. Ara bant yapılı materyal üretimi	29
2.6. Kuantum Noktalı Ara Bant Yapılı Güneş Pilleri ve Tarihçesi	32
2.6.1. Nanoyapılar	32
2.6.2. Kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili yapısı	33
3. ARA BANT YAPILI GÜNEŞ PİLLERİ VE MATEMATİK MODELİ	37
3.1. Ara Bant Yapılı Güneş Pili ve Detaylı Denge Modeli	37
3.1.1. Ara bant yapılı güneş pilinin yapısı ve çalışması.....	37
3.1.2. Ara bant yapılı güneş pili matematik modeli	39
3.2. Kuantum Noktalı Ara Bant Yapılı Güneş Pil ve k.p Modeli	44
3.2.1. Kutu şekilli kuantum noktalarda enerji seviyeleri ve soğurma katsayılarının bulunması	46
3.2.2. Eşit etkin kütleli sonlu potansiyel kuyusu için tek boyutlu çözümler.....	47
3.2.3. Kuantum kuyusu ve konak bölgesinde etkin kütle uyumsuzluğu için çözümler	53
3.2.4. Üç boyutlu çözümler	55
3.2.5. Kutu şekilli kuantum noktalarda bant içi (AB-CB arası) soğurma katsayısı.....	55
3.2.6. Empirik dört bant k.p metodu ile bant arası (VB-AB arası) soğurma katsayısının hesaplanması	59
3.3. Kuantum Noktalı Ara Bant Yapılı Güneş Pili için Detaylı Denge Modeli.....	66
3.3.1. Yük yansızlığı şartı	74
3.3.2. Kuasi-Fermi seviyelerinin hesaplanması	75
4. SAYISAL SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR.....	77
4.1. Detaylı Denge Modelinin Optimum Verim için GaAs ve Geniş Bant Aralığındaki ABGP'lere Uygulama Sonuçları	78
4.1.1. GaAs ABGP verim limiti ve optimal pil parametreleri	78

Sayfa

4.1.2. Eşit alt bant soğurma katsayıları için örtüşme ve ara bant doluluk oranının pil verimine, kısa devre akımına ve açık devre voltajına etkileri	80
4.1.3. Model-B için pil veriminin AB durum yoğunluğuyla değişimi.....	86
4.1.4. Eşit olmayan alt bant soğurması için örtüşme, optik yakalama kesit alanı ve doluluk oranının etkileri	86
4.1.5. ABGP bant aralığının, örtüşme miktarının ve ara bant doluluk oranının pil verimine etkileri	87
4.2. InAs/GaAs KN-ABGP’de AB Enerji Seviyeleri, Alt Bant Soğurma Katsayıları ve Alt Bant Fotoakım Yoğunluklarının Hesaplanması.....	90
4.2.1. Tek bant k.p metodu ile AB enerji seviyelerinin ve bant içi (AB-CB arası) soğurma katsayılarının hesaplanması	90
4.2.2. Dört bant k.p metodu ile VB’deki bağlı durum enerji seviyelerinin ve bant arası (VB-AB arası) soğurma katsayılarının hesaplanması.....	107
4.2.3. Kutu şekilli InAs/GaAs KN için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında alt bant fotoakım yoğunlukları	118
4.3. InAs/GaAs KN-ABGP Detaylı Denge Modeli	121
4.3.1. Kuasi-Fermi seviyeleri	123
4.3.2. Akım-gerilim karakteristikleri	125
5. SONUÇLAR VE İLERİYE YÖNELİK ÇALIŞMALAR	129
5.1. GaAs ABGP ve Geniş Bant Aralıklı ABGP’ler için DDM Sonuçları	129
5.2. InAs/GaAs KN-ABGP’de AB Enerji Seviyeleri ve Alt Bant Soğurma Katsayılarının ve Akım Yoğunluklarının k.p Metoduyla Bulunması	131
5.3. InAs/GaAs KN-ABGP’nin I-V karakteristiklerinin ve Veriminin DDM ile Hesaplanması	134
5.4. İleriye Yönelik Çalışmalar	135
KAYNAKLAR	137
ÖZGEÇMİŞ	151

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Güneş ışınlarının güç yoğunluğu	11
Çizelge 2.2. Güneş pilinin kısa devre akımına ve karanlık akımına etki eden faktörler	15
Çizelge 4.1. Farklı üç ABGP modeli için tasarım parametreleri	79
Çizelge 4.2. Farklı ışık konsantrasyonlarında Model-A, Model-B ve Model-C için kısa devre akımlarının ve açık devre voltajlarının örtüşme miktarı ile değişimi.....	85
Çizelge 4.3. Çeşitli bant aralıklarında ve farklı örtüşme değerlerinde Model-A, Model-B ve Model-C için maksimum verimler	89
Çizelge 4.4. Eşit etkin kütle ($m_{cb,InAs}=0,0294m_0$) ile $2a=2b=16nm$, $2c=6nm$ ve $U=0,473$ eV için izin verilen k değerleri ve tek boyutlu enerji seviyeleri	92
Çizelge 4.5. Etkin kütle uyumsuzluğunda ($m_{cb,InAs}=0,0294m_0$ ve $m_{cb,GaAs}=0,0613m_0$) $2a=2b=16nm$, $2c=6nm$ ve $U=0,473$ eV için izin verilen k değerleri ve tek boyutlu enerji seviyeleri	94
Çizelge 4.6. Soğurma katsayılarının hesaplanmasında kullanılan parametreler.....	99
Çizelge 4.7. $2a=2b=16nm$ kuantum nokta genişliği ve $2c=6nm$ kuantum nokta yüksekliği için izin verilen geçişlerin enerji seviyeleri ve matris elemanları ($m_{cb,InAs}=0,0294m_0$ $U=0,473$ eV).....	99
Çizelge 4.8. Dört bant k.p metodunda kullanılan parametreler	108
Çizelge 4.9. cb, lh, hh ve so bantlarının 111,121 ve 221 durumları için zarf fonksiyonlarının toplamaları.....	114
Çizelge 4.10. KN-ABGP Detaylı Denge Modelinde kullanılan parametreler.....	123
Çizelge 4.11. Konvansiyonel GaAs güneş pili, ideal GaAs ABGP ve InAs/GaAs KN-ABGP için hesaplanan açık devre voltajları, kısa devre akımları ve verimler.....	127

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. a) Dünya'ya gelen güneş ışınlarının şematik gösterimi (b) 6000K'de siyah cisim ışıma spektrumu ile AM0, AM1.5G ve AM1.5D spektrumlarının karşılaştırılması.....	6
Şekil 2.2. Dünya üzerinde kurulu fotovoltaik gücün 2009-2019 yılları arasındaki kümülatif değişimi	6
Şekil 2.3. Konvansiyonel bir güneş pilinin basitleştirilmiş pil yapısı.....	7
Şekil 2.4. Güneş pili, modülü ve paneli örnek gösterimi.....	8
Şekil 2.5. a) p-tipi yarı iletken b) n-tipi yarı iletken c) p-n eklemi d) ışık altında güneş pili enerji bant diyagramı.....	8
Şekil 2.6. Örnek bir güneş pilinin ışık altındaki ve karanlıktaki Akım-Gerilim ve güç karakteristiği.....	9
Şekil 2.7. Basitleştirilmiş yoğunlaştırıcı şematigi ve yoğunlaştırılmış ışık altında I-V karakteristiği.....	12
Şekil 2.8. Konvansiyonel güneş pili eşdeğer devresi.....	12
Şekil 2.9. Üretilmiş bir GaAs güneş pilinin dış kuantum verimliliği	14
Şekil 2.10. AM1.5G spektrumu için konvansiyonel güneş pili verim limitinin bant aralığı ile değişimi.....	15
Şekil 2.11. Farklı yarı iletken malzemeler için soğurma katsayılarının dalga boyu ile değişimi.....	16
Şekil 2.12. p-n eklem güneş pili Akım-Gerilim karakteristiğinin sıcaklık ile değişimi.....	17
Şekil 2.13. Si ve GaAs yarı iletken malzemeleri için mobilitenin katkı konsantrasyonu ile değişimi.....	18
Şekil 2.14. Güneş pilinde temel kayıp mekanizmaları	19
Şekil 2.15. Güneş pilinde temel kayıpların ve çıkış gücünün pil malzemesinin bant aralığıyla değişimi.....	21
Şekil 2.16. Yıllara göre güneş pili verim rekorları	22
Şekil 2.17. Ara bant yapıli materyalin enerji bant diyagramı	27

Şekil	Sayfa
Şekil 2.18. ABGP'de pil veriminin ara bant enerji seviyesi ve örtüşme ile değişimi	27
Şekil 2.19. Yığın yarı iletkenin ve nanoyapıların şematik gösterimleri ile durum yoğunlukları	33
Şekil 2.20. Kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili enerji bant diyagramı.....	33
Şekil 2.21. Stranki-Krastanov büyütme modudan büyütülen InAs/GaAs kuantum noktaların taramalı elektron mikroskobu görüntüsü	34
Şekil 2.22. InAs/GaAs kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili ve GaAs konvansiyonel güneş pili için a) akım gerilim karakteristiği b) kuantum verimliliği.....	35
Şekil 3.1. Ara bant yapılı güneş pilinin yapısı ve enerji bant diyagramı	38
Şekil 3.2. Örtüşmeli durumda ana bant ve alt bant soğurma katsayıları.....	38
Şekil 3.3. Ara bant yapılı güneş pilinin basitleştirilmiş enerji bant diyagramı üretim ve rekombinasyon süreçleri	39
Şekil 3.4. Ara bant yapılı güneş pilinin diyot eş değer modeli	41
Şekil 3.5. Tepesi kesilmiş piramit şekilli kuantum noktaların şematik gösterimi	45
Şekil 3.6. KN-ABGP yapısı basitleştirilmiş şematik gösterimi	46
Şekil 3.7. T_w matrisini oluşturan T_{wA} ve T_{wB} matrisleri	64
Şekil 3.8. KN-ABGP'de tek bir kuantum nokta için enerji bant diyagramı.....	67
Şekil 4.1. Optimum ara bant enerji seviyelerinin AB doluluk oranına göre farklı örtüşme miktarlarındaki değişimi	79
Şekil 4.2. Pil veriminin AB doluluk oranı ve farklı örtüşme ile değişimi (a) sabit E_{IB} (0,486 veya 0,934) için (b) örtüşme ile değişen E_{IB} için	80
Şekil 4.3. Model-A ve Model-B için ana bant ve alt bant fotoakımlarının örtüşme miktarı ile değişimi	81
Şekil 4.4. Açık devre voltajının doluluk oranı ve örtüşme miktarı ile değişimi.....	82
Şekil 4.5. Model-A, Model-B ve Model-C için maksimum pil verimlerinin örtüşme miktarı ile değişimi	82
Şekil 4.6. Model-A ve Model-B için pil veriminin AB materyalinin kalınlığı ve örtüşme miktarı ile değişimi.....	83

Şekil	Sayfa
Şekil 4.7. Model-A ve Model-B için pil veriminin ışık konsantrasyonu ve örtüşme miktarı ile değişimi	85
Şekil 4.8. Model-B için pil veriminin AB durum yoğunluğu ve örtüşme miktarı ile değişimi	86
Şekil 4.9. (a) Model-B optimum doluluk oranının ve (b) Model-A ve Model-B için pil veriminin, elektron ve boşluk yakalama kesit alanı oranlarıyla değişimi.....	87
Şekil 4.10. Optimum doluluk oranının ABGP bant aralığı ve örtüşme miktarı ile değişimi.....	88
Şekil 4.11. Model-B için ana bant ve alt bant fotoakımlarının bant aralığı ve örtüşme miktarı ile değişimi.....	88
Şekil 4.12. Model-A, Model-B ve Model-C için pil verimlerinin bant aralığı ve örtüşme ile değişimi	89
Şekil 4.13. x düzleminde $2a=16\text{nm}$ genişliğinde $U=0,473\text{ eV}$ sınırlama potansiyeline sahip sonlu potansiyel kuyusu	91
Şekil 4.14. (a) x düzleminde $2a=16\text{nm}$ ve $U=0,473\text{ eV}$ sahip sonlu potansiyel kuyusu için (b) z düzleminde $2c=6\text{nm}$ ve $U=0,473\text{ eV}$ sahip sonlu potansiyel kuyusu için k değerlerinin grafiksel çözümleri	91
Şekil 4.15. Taban genişliği $2a=2b=16\text{nm}$, $2c=6\text{nm}$ yüksekliğinde ve $U=0,473\text{ eV}$ iletkenlik bandı ofsetine sahip kutu şekilli InAs/GaAs KN sisteminde bağlı durum enerji seviyeleri	92
Şekil 4.16. $U=0,473\text{ eV}$ potansiyel kuyusu için farklı kuantum numaralarında normalize olmuş tek boyutlu dalga fonksiyonlarının yayılımı (a) x düzleminde $2a=16\text{nm}$ (b) z düzleminde $2c=6\text{nm}$ genişlik için.....	93
Şekil 4.17. Etkin kütle uyumsuzluğunda (a) x düzleminde $2a=16\text{nm}$ için ve (b) z düzleminde $2c=6\text{nm}$ için k değerlerinin grafiksel çözümleri ($U=0,473\text{ eV}$, $m_{cb,\text{InAs}}=0,0294m_0$ ve $m_{cb,\text{GaAs}}=0,0613m_0$).....	94
Şekil 4.18. Taban genişliği $2a=2b=16\text{nm}$, $2c=6\text{nm}$ yüksekliğinde ve $U=0,473\text{ eV}$ iletkenlik bandı ofsetine sahip kutu şekilli InAs/GaAs KN sisteminde bağlı durum enerji seviyeleri (a) eşit etkin kütle için (b) etkin kütle uyumsuzluğunda	95
Şekil 4.19. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğunda 6nm kuantum nokta yüksekliği için (a) bağlı durum enerji seviyelerinin kuantum nokta genişliği ile değişimi (b) bağlı durum sayısının (sağ üstte) ve AB durum sayısının (sağ altta) kuantum nokta genişliği ile değişimi.....	95

Şekil	Sayfa
Şekil 4.20. Eşit etkin kütle (mavi renk) ve etkin kütle uyumsuzluğu (kırmızı renk) durumlarında 9nm kuantum nokta yüksekliği için (a) bağlı durum enerji seviyelerinin kuantum nokta genişliği ile değişimi (b) bağlı durum sayısının (sağ üstte) ve AB durum sayısının (sağ altta) kuantum nokta genişliği ile değişimi	96
Şekil 4.21. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında bağlı durumlar arasındaki enerji farkının, kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) 6nm kuantum nokta yüksekliği için (b) 9nm kuantum nokta yüksekliği için	97
Şekil 4.22. AB durum enerji seviyelerinin iletkenlik bandı ofset enerjisi ile değişimi (16nm x 16nm x 6nm KN boyutları).....	97
Şekil 4.23. 16nm x 16nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle durumunda, xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için (a) AB enerji durumları arası (b) AB enerji durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişler için soğurma katsayıları	100
Şekil 4.24. 16nm x 16nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle durumunda ve izotropik fotonlar için (a) AB enerji durumları arası (b) AB enerji durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişler için soğurma katsayıları	101
Şekil 4.25. 16nm x 16nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için etkin kütle uyumsuzluğu durumunda xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için AB durumları arası geçişlerdeki soğurma katsayıları	101
Şekil 4.26. 16nm x 16nm x 6nm boyutlu KN için etkin kütle uyumsuzluğu durumunda, xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için, AB durumlarından sanal bağlı durumlara geçişlerdeki soğurma katsayıları.....	102
Şekil 4.27. 10nm x 10nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için, (a) AB durumları arası ve (b) AB durumları ile sanal bağlı durumlar arası geçişlerdeki soğurma katsayıları.....	103
Şekil 4.28. 20nm x 20nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında AB durumları arası xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için soğurma katsayıları	104
Şekil 4.29. 20nm x 20nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, AB durumları ile sanal bağlı durumlar arası xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için soğurma katsayıları.....	104
Şekil 4.30. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında eşit etkin kütle için tek boyutlu bağlı durumlardan sürekli saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları	105

Şekil	Sayfa
Şekil 4.31. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında eşit etkin kütle için toplam bant içi (AB-CB) soğurma katsayısı (a) xy düzleminde polarize olmuş fotonlar ve (b) izotropik fotonlar için.....	106
Şekil 4.32. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında etkin kütle uyumsuzluğu için tek boyutlu bağlı durumlardan sürekli saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları	106
Şekil 4.33. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında, etkin kütle uyumsuzluğu için, toplam bant içi (AB-CB) soğurma katsayıları (a) xy düzleminde polarize olmuş fotonlar ve (b) izotropik fotonlar için.....	107
Şekil 4.34. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında cb, lh, hh ve so bantları için (farklı renklerde) hesaplanan bağlı durum enerji seviyeleri (a) eşit etkin kütle (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda	109
Şekil 4.35. 10nm x 10nm x 6nm KN boyutlarında cb, lh, hh ve so bantları için (farklı renklerde) hesaplanan bağlı durum enerji seviyeleri (a) eşit etkin kütle (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda	110
Şekil 4.36. 20nm x 20nm x 6nm KN boyutlarında cb, lh, hh ve so bantları için (farklı renklerde) hesaplanan bağlı durum enerji seviyeleri (a) eşit etkin kütle (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda	110
Şekil 4.37. cb, lh, hh, so bantları için 111 ve 121 durumlarının enerji seviyelerinin kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) 6nm kuantum nokta yüksekliği ve (b) 9nm kuantum nokta yüksekliği için	111
Şekil 4.38. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında dört bant için 111 ve 121 durumlarındaki enerji seviye farkının, kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) 6nm kuantum nokta yüksekliği ve (b) 9nm kuantum nokta yüksekliği için	112
Şekil 4.39. cb, lh, hh ve so bantları için hesaplanan üç boyutlu özfonksiyonların $z=0$ 'da ve xy düzleminde yayılımı (a) 111 durumları (b) 121 durumları (c) 221 durumları. Kırmızı kare kuantum noktayı temsil etmektedir	113
Şekil 4.40. 16nm x 16nm x 6nm kuantum nokta boyutları ile oluşan VB durumlarından AB durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında	114
Şekil 4.41. 10nm x 10nm x 6nm kuantum nokta boyutları ile oluşan VB durumlarından AB durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında	116
Şekil 4.42. 20nm x 20nm x 6nm kuantum nokta boyutları ile oluşan VB durumlarından AB durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında	117

Şekil	Sayfa
Şekil 4.43. Bütün VB durumlarından her bir AB durumuna ve bütün VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunluklarının kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda	119
Şekil 4.44. Bant içi (AB-CB) ve bant arası (VB-AB) fotoakım yoğunluklarının kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda.....	120
Şekil 4.45. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğunda, toplam bant arası (VB-AB) fotoakım yoğunluğu ile toplam VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunluklarının toplamının kuantum nokta genişliği ile değişimi	121
Şekil 4.46. InAs/GaAs KN-ABGP enerji bant diyagramı	122
Şekil 4.47. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutları için eşit etkin kütle durumunda toplam alt bant soğurma katsayıları (a) xy düzleminde polarize olmuş fotonlar ve (b) izotropik fotonlar için	123
Şekil 4.48. AB enerji seviyeleri ve bantların Kuasi-Fermi enerji seviyelerinin pilin çıkış gerilimi ile değişimi (a) bu çalışmadaki model için (b) literatürdeki model.....	125
Şekil 4.49. KN-ABGP akım yoğunluğunun çıkış gerilimi ile değişimi (a) alt bant akım yoğunlukları (b) ana bant akım yoğunluğu	126
Şekil 4.50. AB durumları, VB ve CB için elde edilen doluluk oranlarının güneş pilinin çıkış voltajı ile değişimi.....	126
Şekil 4.51. Konvansiyonel GaAs güneş pili, İdeal GaAs ABGP ve InAs/GaAs KN-ABGP Akım-Gerilim karakteristiklerinin karşılaştırılması.....	127

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklamalar
K	Kelvin
λ	Dalga boyu
h	Planck sabiti
c	Işık hızı
J	Akım yoğunluğu
w	Kalınlık
L	Difüzyon uzunluğu
q	Elektron yükü
I	Akım
V	Gerilim
T	Sıcaklık
k_B	Boltzmann sabiti
q	Elektron yükü
n	İdealite faktörü
D	Difüzyon katsayısı
n	Elektron yoğunluğu
p	Boşluk yoğunluğu
n_i	Saf yarıiletkende taşıyıcı yoğunluğu
P_{max}	Maksimum güç noktası
η	Verim
f	Doluluk oranı
X	Işık yoğunlaştırma faktörü
R_s	Seri direnç
R_{SH}	Şönt direnç
E_G	Bant aralığı
τ	Taşıyıcı ömür süresi
α	Soğurma katsayısı

Simgeler**Açıklamalar**

ϵ	Enerji
F	Foton akısı
θ_s	Güneş ile pil arasındaki katı aç
σ_{opt}	Optik yakalama kesit alanı.
C	Yakalama katsayısı
N_{IB}	Ara bant durum yoğunluğu
n_{ref}	Kırılma indisi
J_{sc}	Kısa devre akım yoğunluğu
V_{oc}	Açık devre gerilimi
E_{ov}	Örtüşme miktarı
m^*	Elektron etkin kütlesi
m_0	Boşlukta elektron kütlesi
U	Bant ofset enerjisi
k	Dalga vektörü

Kısaltmalar**Açıklamalar**

AB	Ara bant
ABGP	Ara bant yapılı güneş pili
AFD	Ayrık Fourier Dönüşümü
AM	Hava kütlesi
CB	İletkenlik bandı
DDM	Detaylı denge modeli
EL	Elektroklüminesans
FL	Fotolüminesans
FR	Foto-reflektans
HFD	Hızlı Fourier Dönüşümü
KN	Kuantum Nokta
KN-ABGP	Kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili
VB	Valans bandı

1. GİRİŞ

Güneş pilleri, çevre dostu yenilenebilir enerji kaynakları arasında yer almaktadır. Konvansiyonel güneş pilleri, güneş enerjisini soğurarak elektrik enerjisine dönüştüren elektronik devre elemanlarıdır. Konvansiyonel güneş pilleri, güneş spektrumunu etkin olarak kullanılamadığından verimleri sınırlıdır. Bu sınırlamanın başlıca nedenleri: i) Konvansiyonel güneş pilleri, güneş pili malzemesinin bant aralığından düşük olan güneş enerjisi fotonlarını soğuramazlar. ii) Güneş pili bant aralığından çok büyük enerjili fotonlar soğurulduğunda ise, termalizasyon yoluyla pilin ısınmasına ve verimde kayıplara neden olmaktadır. Bu kayıpları azaltmak için dördüncü nesil güneş pilleri önerilmektedir. Dördüncü nesil güneş pillerinin arasında; ara bant yapılı güneş pilleri, çok eklemli güneş pilleri, aşağı/yukarı dönüşüm pilleri ve termofotovoltaik güneş pilleri yer almaktadır.

Ara bant yapılı güneş pillerinde (ABGP’de), elektronlar, valans banttan iletkenlik bandına doğrudan geçişlerin yanı sıra; bant aralığından düşük enerjili fotonları soğurarak ara bant üzerinden de geçiş yaparak güneş spektrumunu daha etkin bir şekilde kullanırlar. Bu tez çalışması kapsamında, GaAs ve daha geniş bant aralıklı ABGP’lerin verimleri, Detaylı Denge Modeli (DDM) kullanılarak incelenmiş, optimum verime sahip ABGP modeli ortaya atılmış ve literatürdeki diğer iki model ile karşılaştırılmıştır. Optimum tasarım parametreleri, banttan banda soğurma katsayısının, α , 10^4 cm^{-1} olan geniş bant aralıklı malzemelerde; soğurma katsayılarındaki örtüşme miktarı, AB enerjilerinin doluluk, f , elektron/boşluk taşıyıcıların yakalama kesit alanları oranı, $\sigma_{opt-e}/\sigma_{opt-h}$, AB durum yoğunluğu, AB bölgesinin kalınlığı, w , ve 1-46000 güneş konsantrasyonu, X , altında incelenmiştir.

Ayrıca, InAs/GaAs kuantum noktalı ABGP için, tek bant ve dört bant k.p metodu kullanılarak, kuantum noktaların varlığıyla oluşan ara bant enerji seviyeleri ve soğurma katsayıları Schrödinger denklemleri ile elde edilmiştir. AB enerji seviyeleri ve alt bant soğurma katsayıları, farklı kuantum nokta boyutları için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumları göz önüne alınarak hesaplanmıştır. Elde edilen enerji seviyeleri ve soğurma katsayıları kullanılarak InAs/GaAs kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pillerinin bantların ve AB enerji seviyelerinin Kuasi-Fermi seviyeleri nümerik yöntemler ile bulunmuştur. InAs/GaAs KN-ABGP’nin akım-gerilim karakteristikleri ve verimleri DDM

ile edilmiştir. Elde edilen kısa devre akımı, açık devre voltajı ve verim değerleri tartışılmış ve literatür ile karşılaştırılmıştır.

Bölüm 2’de, güneş enerjisi, konvansiyonel güneş pillerinin yapısı ve çalışma prensipleri verilmiştir. Güneş pili çalışmasına etki eden faktörler ve güneş pillerinde verimi limitleyen temel kayıplar sunulmuştur. Daha sonra güneş pilleri sınıflandırılmış ve dördüncü nesil güneş pilleri detaylı olarak incelenmiştir. Ara bant yapılı güneş pillerinin tarihçesi ve üretim yöntemleri verilmiştir. Ayrıca, bu bölümde nanoyapılar ve kuantum noktalar kullanılarak üretilen ara bant yapılı güneş pilleri incelenmiştir.

Bölüm 3.1’de, öncelikle ABGP’nin yapısı, çalışma prensipleri ve ABGP’nin analizinde kullanılacak olan DDM sunulmuştur. DDM kullanılarak, ABGP’nin ana bant ve alt bant akım yoğunlukları ve pil verimi denklemleri türetilmiştir. Bölüm 3.2’de kutu şekilli InAs/GaAs kuantum nokta sistemlerinde enerji seviyelerinin ve alt bant soğurma katsayılarının hesaplanmasında kullanılacak olan tek bant ve dört bant k.p metotları sunulmuştur. Bölüm 3.3’te, Bölüm 3.2’den elde edilen soğurma katsayılarını ve enerji seviyelerini kullanarak, InAs/GaAs KN-ABGP’nin akım-gerilim karakteristikleri ve verimlerinin hesaplanması için yeni DDM denklemleri türetilmiştir.

Bölüm 4’te, elde edilen sayısal sonuçlar verilmiş ve irdelenmiştir. Bölüm 4.1’de DDM kullanılarak, öncelikle üç farklı GaAs ABGP modeli ortaya atılmış; AB enerji seviyeleri, optimum AB doluluk oranları ve örtüşme göz önüne alınarak optimum verime sahip Model-B ABGP önerilmiş ve literatürdeki diğer iki model olan Model-A ve Model-C ile karşılaştırılmıştır. GaAs ABGP’lerin maksimum verimleri, fotoakımları ve açık devre voltajları; pil boyutları, malzemelerin optik ve elektronik özellikleri, katkı konsantrasyonu, taşıyıcı optik yakalama kesit alanları ve güneş ışığı şiddeti göz önüne alınarak incelenmiştir. Ara bandın doluluk oranı ve örtüşmenin verime etkileri geniş yarıiletken materyal aralığına sahip olan ABGP’lere de uygulanmıştır. Kısa devre akımları açık devre voltajları ve verimleri bulunmuştur.

Bölüm 4.2’de, InAs/GaAs kuantum nokta sisteminde, InAs kuantum noktaların varlığıyla GaAs yasak bandında oluşan ara bant enerji seviyeleri önce tek bant k.p metodu ile tespit edilmiştir. Ara bant enerji seviyelerinin, eşit etkin kütle, etkin kütle uyumsuzluğu, kuantum nokta boyutları ve iletkenlik bandı ofset voltajı ile değişimleri bulunmuştur. Ara bant

durumlarından iletkenlik bandı durumlarına geişler için bant içi soğurma katsayıları, farklı etkin kütle koşulları ve kuantum nokta boyutları için hesaplanmıştır. Dört bant k.p metodu kullanılarak, valans bantta oluşan durumların enerji seviyeleri ve valans banttaki enerji durumlarından AB durumlarına geişlerdeki bant arası soğurma katsayıları Bölüm 4.2.2’de bulunmuştur. Tek bant k.p metoduyla bulunan bant içi soğurma katsayıları ve dört bant k.p metoduyla bulunan bant arası soğurma katsayılarından elde edilen fotoakım yoğunluklarının kuantum nokta boyutları ve etkin kütle uyumsuzluğu ile değışimleri Bölüm 4.2.3’te verilmiştir.

Bölüm 4.3’te, Bölüm 4.2’de bulunan ara bant enerji seviyelerini ve alt bant soğurma katsayılarını kullanarak KN-ABGP’nin fotoakım yoğunlukları, akım-gerilim karakteristikleri ve verimleri elde edilmiştir. Bu bölümde, ana bant ve alt bant fotoakım yoğunlukları ayrı ayrı hesaplanarak, alt bant akımlarının düşük olmasının nedenleri araştırılmıştır. KN-ABGP’nin verimi, tek eklemli konvansiyonel GaAs güneş pili ve ideal GaAs ABGP’nin verimleri ile karşılaştırılmıştır.

Bölüm 5’te, Bölüm 4’te elde edilen sonuçlar tartışılmış ve literatür ile karşılaştırılmıştır. Ayrıca ileriye yönelik önerilen çalışmalara yer verilmiştir.

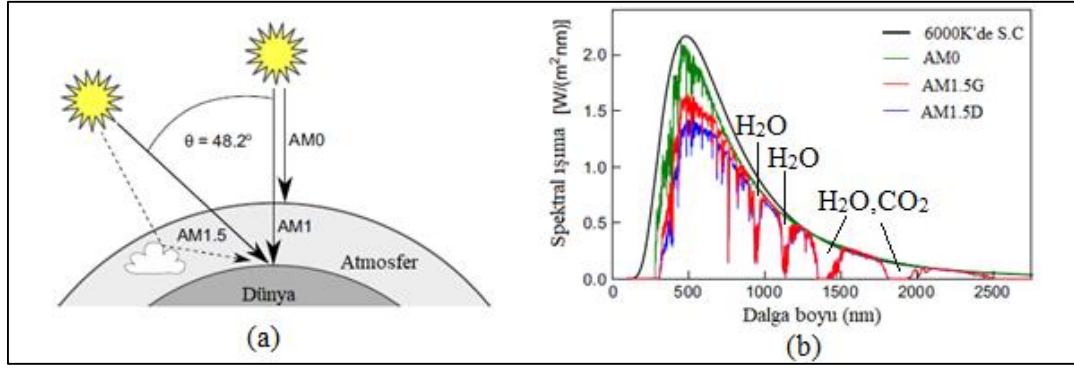
2. GÜNEŞ ENERJİSİ, GÜNEŞ PİLLERİNİN YAPISI VE TARİHÇESİ

Bu bölümde, güneş enerjisi; güneş pillerinin yapısı ve tarihçesi, güneş pillerin çalışma prensipleri; güneş pili çalışmasına ve verimine etki eden parametreler; güneş pili verim limitleri ve temel kayıplar; güneş pillerinin sınıflandırılması ve yüksek verimli güneş pili modelleri; Ara bant yapılı/ kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pilleri ve tarihçesi detaylı olarak işlenecektir.

Güneş pili veya fotovoltaiik pil, fiziksel ve kimyasal bir fenomen olan fotovoltaiik etki ile ışığın enerjisini doğrudan elektrik enerjisine dönüştüren devre elemanıdır. Fotovoltaiik etki ilk defa 1839 yılında A. E. Becquerel tarafından gözlemlenmiştir [1]. Becquerel, sıvı elektrolit içindeki metal elektrotlara ışık uygulandığında elektrotlar arasındaki akımın önemli ölçüde değiştiğini gözlemlemiştir [1].

Yenilenebilir enerji kaynaklarının başında gelen Güneş, Güneş Sisteminin merkezinde yer alır ve neredeyse sınırsız olduğu kabul edilen bir enerji kaynağıdır. Güneş yaklaşık 6000K'lık bir siyah cisim ışımasına karşılık gelen bir elektromanyetik ışıma yapar. Bu ışıma, güneş yüzeyini terk ettikten sonra küresel olarak yayılır. Güneşten ortalama 149600000 km uzaklıktaki dünyanın atmosferinin hemen dışına gelen ortalama ışıma gücü 1353 W/m²'dir. Atmosferin hemen dışına gelen ışınlar herhangi bir atmosfer katmanını geçmediği için bu spektrum dağılımı AM0 olarak adlandırılır.

Yeryüzüne gelen ışıma gücünün yaklaşık %30'u atmosferdeki H₂O ve CO₂ molekülleri tarafından soğurulur. Ekvator ve çevresi gibi güneş ışınlarının dik açıyla geldiği yerlerde AM1 spektrumu geçerlidir. Ülkemiz ise AM1.5 spektrumundadır. AM1.5 spektrumu, aynalar veya lensler yardımıyla yoğunlaştırılmış ışık kullanılan sistemler için doğrudan gelen güneş ışınlarını içeren AM1.5D spektrumu ve doğrudan gelen güneş ışınlarının yanı sıra atmosferden yansıma ve kırılma ile gelen ışınları da içeren AM1.5G spektrumu şeklinde iki farklı kullanımı mevcuttur [2]. AM1.5D için ortalama güç yoğunluğu 900 W/m² iken AM1.5G ortalama için güç yoğunluğu 1000 W/m²'dir [2]. Şekil 2.1'de Dünya'ya gelen güneş ışınlarının şematik gösterimi ve farklı spektrumlar için spektral ışımanın dalga boyuyla değişimi görülmektedir. Atmosferdeki moleküller tarafından soğrulan dalga boyları da Şekil 2.1'de gösterilmiştir.

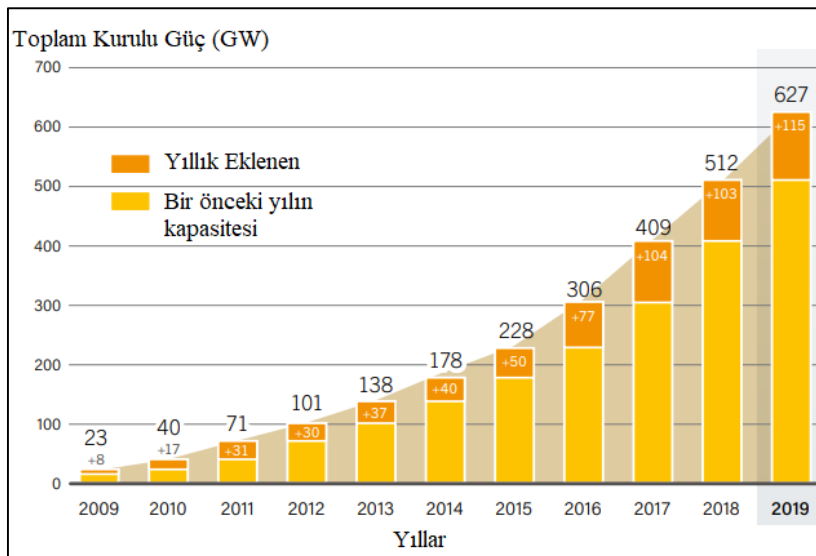


Şekil 2.1. a) Dünya'ya gelen güneş ışınlarının şematik gösterimi (b) 6000K'de siyah cisim ışınım spektrumu ile AM0, AM1.5G ve AM1.5D spektrumlarının karşılaştırılması [2]

Foton enerjisi ile dalga boyu ters orantılıdır;

$$E_{ph} = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.1)$$

Burada h Planck sabitini, c boşluktaki ışık hızını, λ ise dalga boyunu temsil etmektedir. Şekil 2.1'de görüldüğü gibi solar spektrumu kısıtlı dalga boyu (enerji) aralığında etkindir. Dünya üzerindeki kurulu fotovoltaik güç, 2019 sonu itibariyle 627 GW seviyesindedir [3]. Toplam kurulu gücün 2009-2019 yılları arasındaki değişimi ve yıllık eklenen miktarlar Şekil 2.2'de görülmektedir. Toplam kurulu gücün 2030 yılında 2 TW seviyelerine çıkabileceği düşünülmektedir [4].

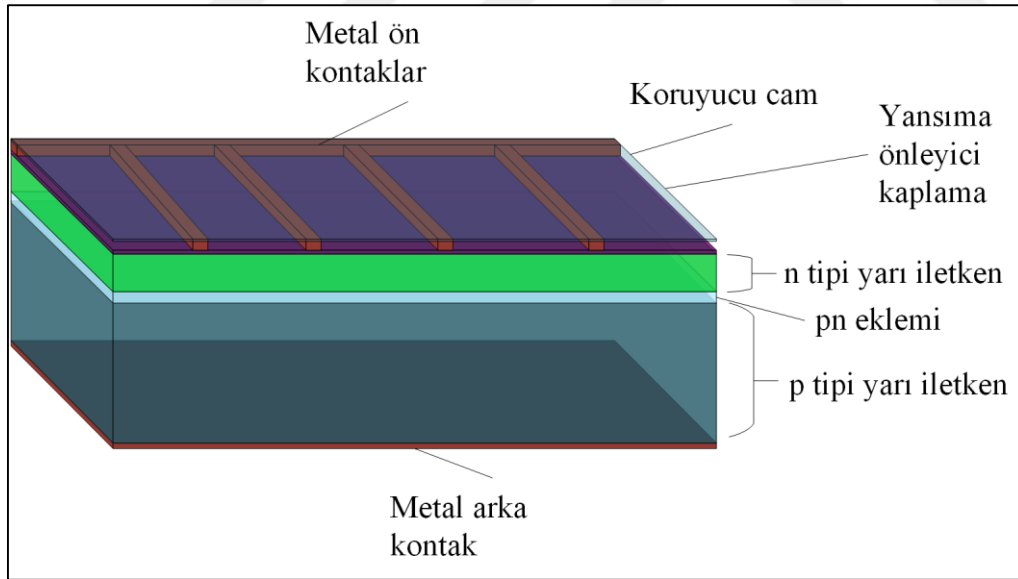


Şekil 2.2. Dünya üzerinde kurulu fotovoltaik gücün 2009-2019 yılları arasındaki kümülatif değişimi [3]

Kurulu güç bakımından en yüksek kapasiteye sahip ülkelerin başında Çin, ABD, Japonya, Almanya ve Hindistan gelmektedir. Küresel elektrik üretiminin yaklaşık %2,8'ini üretebilecek büyüklükte kurulu fotovoltaik güç kapasitesi bulunmaktadır [3]. Türkiye'de ise yüksek güneşlenme potansiyeline rağmen kurulu fotovoltaik gücü 6 GW seviyesindedir. Türkiye Elektrik İletim A. Ş. verilerine göre 2019 yılında toplam kurulu gücün %6,5'ini güneş enerjisi oluşturmaktadır.

2.1. Güneş Pili Yapısı ve Çalışma Prensipleri

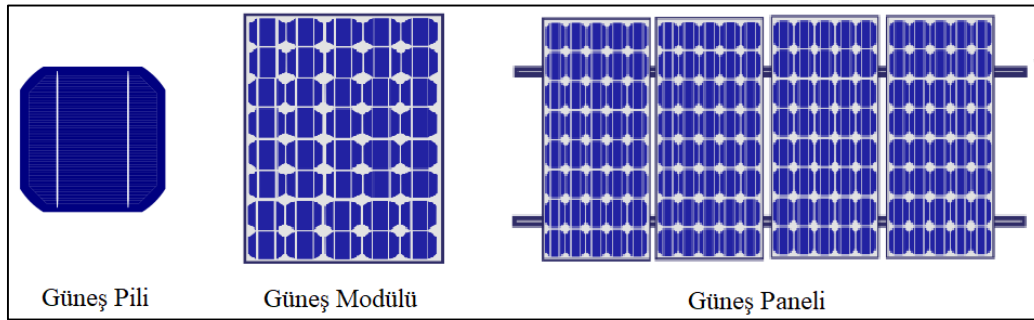
Konvansiyonel güneş pilleri en temel haliyle Silisyum (Si) p-n eklem diyotlardır. Şekil 2.3'te konvansiyonel güneş pilinin basitleştirilmiş pil yapısı görülmektedir. Silisyumun fosfor gibi son yörüngesinde 5 elektron içeren atomlarla katkılanması ile n-tipi Si yarıiletken elde edilir. Benzer şekilde bor gibi son yörüngesinde 3 elektron bulunan atomlarla katkılanırsa p-tipi Si yarıiletken elde edilir. P-tipi yarı iletken, n-tipi ile katkılanarak p-n eklemi elde edilir ve eklemin her iki tarafındaki Fermi seviyeleri eşitlenerek V_g potansiyel engelini oluştururlar.



Şekil 2.3. Konvansiyonel bir güneş pilinin basitleştirilmiş pil yapısı

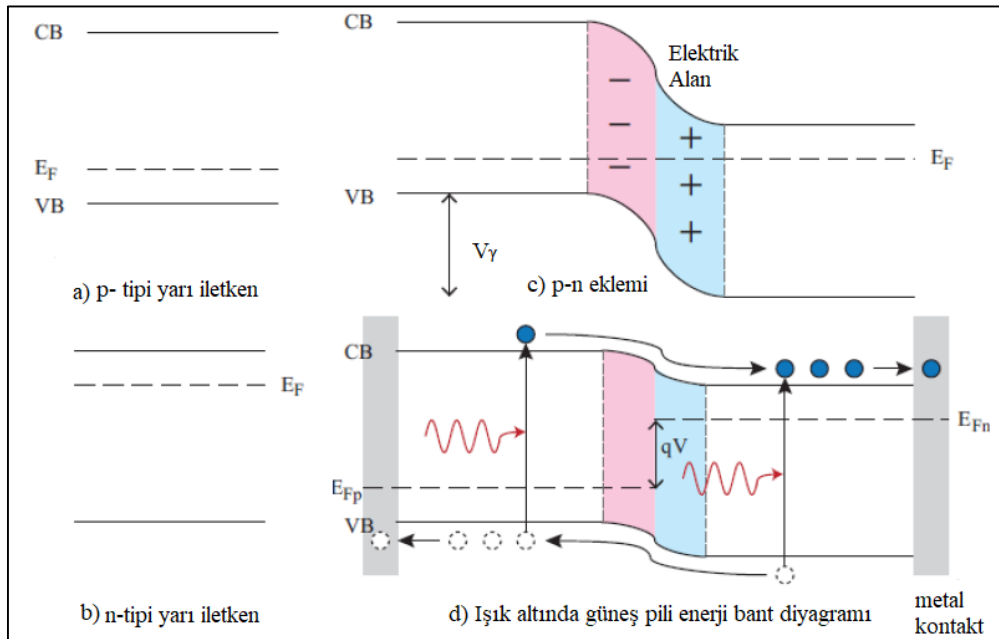
Eklemin ön yüzeyine gelen güneş ışınlarının yansımalarını önlemek için yansımaya önleyici kaplama (Anti Reflection Coating-ARC) ile kaplanır. Silisyum güneş pillerinde en çok kullanılan yansımaya önleyici katmanlar SiO_2 ve TiO_2 'dir. Güneş pilinde üretilen taşıyıcılar ön ve arka metal kontaklar sayesinde toplanır ve devreyi tamamlarlar. Şekil 2.3'te görüldüğü gibi ön kontaklar genellikle bar şeklinde yapılırlar. Ön kontak barları kalın olursa pile güneş

ışınlarının gelmesine engel olurlar. Çok ince olmaları ise dirençlerini artıracaktır. Bu sebeple bar kalınlıkları optimize edilmelidir. Ayrıca akım taşıyıcıların barlara ulaşabilmesi için barlar arası mesafe de çok önemlidir. Dış etmenlerden korumak için güneş pili, diğer koruyucu katmanlarla birlikte, cam muhafazanın altına yerleştirilir. Güneş pillerinin seri/paralel bağlantılar ile bir araya gelmesiyle modüller oluşur. Seri bağlanarak voltaj artışı paralel bağlanarak akım artışı sağlanır. Modüllerin bir araya gelmesiyle de güneş panelleri oluşur. Şekil 2.4'te güneş pili, modülü ve paneli örnekleri görülmektedir.



Şekil 2.4. Güneş pili, modülü ve paneli örnek gösterimi

Şekil 2.5'te p-n ekleminden oluşan güneş pilinin bant yapısı görülmektedir. Güneş pilinin üzerine ışık düşürüldüğünde, malzemenin bant aralığından (E_G 'den) büyük enerjili fotonlar malzeme tarafından soğurulur ve elektron-boşluk çiftleri oluştururlar.



Şekil 2.5. a) p-tipi yarı iletken b) n-tipi yarı iletken c) p-n eklemi d) ışık altında güneş pili enerji bant diyagramı [5]

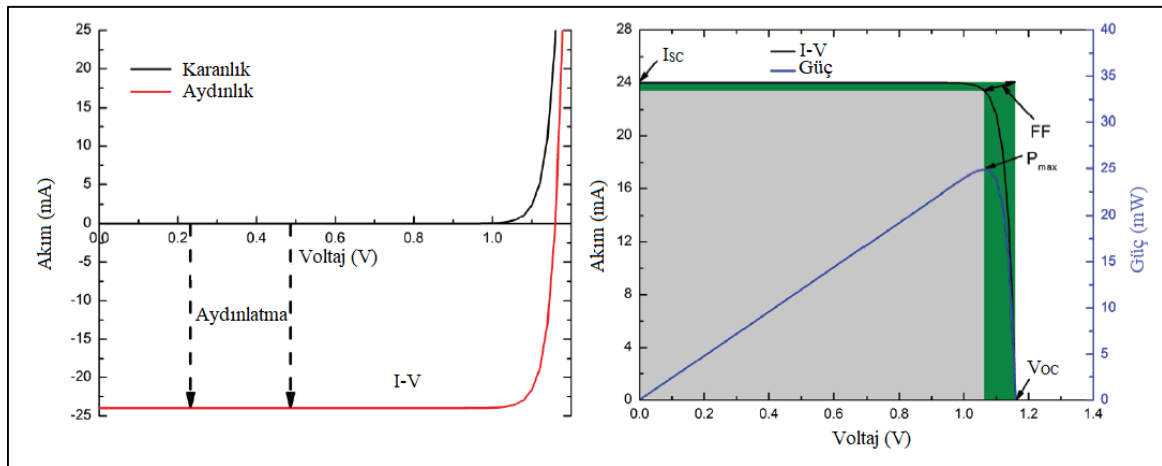
Oluşan azınlık taşıyıcılar diyot eklemine ulaştığında var olan elektrik alanın etkisiyle ayrışırlar. Azınlık taşıyıcıların oluşturduğu akım yoğunluğuna, ışık akım yoğunluğu (J_L) denir. Eğer pil kısa devre durumunda ise toplanan ışık akım yoğunluğuna kısa devre akım yoğunluğu (J_{SC}) denir. J_{SC} , ışık altındaki taşıyıcı üretim hızına (g_{op}), güneş pilinin kalınlığına (w) ve elektron ve boşlukların difüzyon uzunluklarına (L_e ve L_h) bağlı olarak değişmektedir;

$$J_{SC} \propto q g_{op}(w + L_e + L_h) \quad (2.2)$$

Burada q elektron yükünü temsil etmektedir. Akımlar ise akım yoğunlukları ile güneş pilinin yüzey alanı A 'nın çarpımı ile elde edilir;

$$I_{SC} = A J_{SC} \quad (2.3)$$

Şekil 2.5'te görüldüğü gibi p-n eklemine güneş düşürüldüğünde eklem potansiyel engeline azalma meydana gelir ve güneş pili bu azalma miktarı kadar gerilim (V) üretir. Şekil 2.6'te konvansiyonel bir güneş pilinin Akım-Gerilim (I-V) karakteristiği görülmektedir. Diyot Akım-Gerilim karakteristiği aydınlatmanın etkisiyle birinci dördülden I_{SC} kadar aşağı, dördüncü dördüle kayar. Güneş pilleri için bu dördül gücün üretildiği çalışma aralığı olduğu için “güç dördülü” olarak adlandırılır.



Şekil 2.6. Örnek bir güneş pilinin ışık altındaki ve karanlıktaki Akım-Gerilim ve güç karakteristiği [6]

Şekil 2.6'da sağdaki grafikte görüldüğü gibi güneş pili Akım-Gerilim karakteristiği literatürde sıkça güç eğrisiyle beraber birinci dördüle çevrilerek gösterilir.

Güneş pilinden elde edilecek akım yoğunluğu (J) ideal Shockley diyot denklemi kullanılarak ifade edilir;

$$J = J_{SC} - J_0(e^{\frac{qV}{nk_B T_C}} - 1) = J_L - J_D(V) \quad (2.4)$$

Burada J_D karanlık akım yoğunluğunu, k_B Boltzmann sabitini, T_C Kelvin cinsinden güneş pilinin sıcaklığını ve n diyot idealite faktörünü temsil etmektedir. J_0 ise kaçak akım yoğunluğu olup pil kalınlığı etkisi ve yüzey rekombinasyonları ihmal edildiğinde yaklaşık olarak aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$J_0 = q \left[\frac{D_h}{L_h} p_n + \frac{D_e}{L_e} n_p \right] \quad (2.5)$$

Burada, D_e ve D_h , sırasıyla elektron ve boşluklar için difüzyon katsayısını temsil etmektedir. Sırasıyla p ve n tarafındaki azınlık taşıyıcı yoğunluklarını temsil eden p_n ve n_p , aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$p_n = \frac{n_i^2}{N_D} \quad n_p = \frac{n_i^2}{N_A} \quad (2.6)$$

Eş. 2.6'da N_A ve N_D sırasıyla p ve n bölgelerindeki katkı konsantrasyonudur. Katkılanmamış (saf) yarıiletkenlerde taşıyıcı yoğunluğu ise n_i ile gösterilir. Eş. 2.4'te J 'nin sıfırlandığı voltaj değeri açık devre voltajı V_{OC} olarak adlandırılır ve aşağıdaki eşitlik kullanılarak hesaplanır;

$$J_{SC} - J_0(e^{\frac{qV}{nk_B T_C}} - 1) = 0 \quad (2.7)$$

$$V_{OC} = \frac{nk_B T_C}{q} \ln\left(\frac{J_{SC}}{J_0} + 1\right) \quad (2.8)$$

Güneş pilinin maksimum güç noktası P_{max} ile ifade edilir. P_{max} , maksimum güç noktasındaki akım yoğunluğu J_m ve çıkış gerilimi V_m 'nin çarpılmasıyla elde edilir. Güneş pili için önemli diğer bir parametre olan Doluluk Faktörü, FF , maksimum güç noktasının, kısa devre akımı ile açık devre voltajının çarpımına oranlanmasıyla elde edilir;

$$FF = \frac{P_{max}}{J_{sc}V_{oc}} = \frac{J_m V_m}{J_{sc}V_{oc}} \quad (2.9)$$

Güneş pilinin verimi ise maksimum güç noktasındaki gücün pilin ön yüzeyine gelen ışık gücüne bölünmesiyle bulunur;

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} \quad (2.10)$$

P_{in} , güneş pilinin ön yüzüne gelen ortalama ışık güç yoğunluğudur. P_{in} , pilin dünya üzerindeki konumuna, güneş ışınlarının pile geliş açısına, bağlı olarak değişir. Çizelge 2.1’de sıklıkla kullanılan ışıma spektrumları için güç yoğunlukları verilmiştir.

Çizelge 2.1. Güneş ışınlarının güç yoğunluğu [7]

İşıma Spektrumu	P_{in} (mW/cm ²)
Siyah Cisim Işıması	157,9
AM0	155,3
AM1	107,0
AM1.5D	90
AM1.5G	100

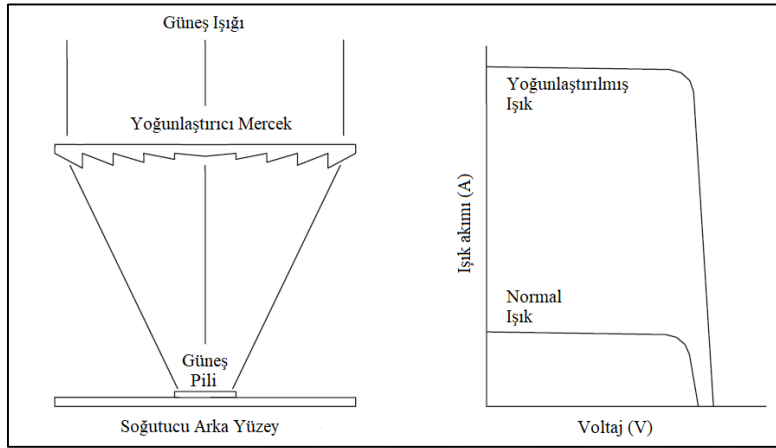
Güneş pillerinde verimi artırmak için güneşten gelen ışınlar mercekler ve aynalar yardımıyla yoğunlaştırılır. Yoğunlaştırma işlemi teoride 46050 kata kadar uygulanabilir. Pratikte ise 1000-1500 kata kadar uygulanabilmektedir. Yoğunlaştırılmış güneş ışığı uygulamalarında güneş pilinin ısınması başlıca sorunlardan biridir. Yoğunlaştırma miktarı, yoğunlaştırma faktörü, X , kullanılarak ifade edilir. Yoğunlaştırılmış güneş altında güneş pilinden elde edilebilecek kısa devre ışık akımı;

$$J_{sc}(X) = XJ_{sc}(1) \quad (2.11)$$

Şeklinde ışık konsantrasyonu ile doğrusal olarak artar. Açık devre voltajı ise ışık konsantrasyonu ile aşağıdaki gibi değişir;

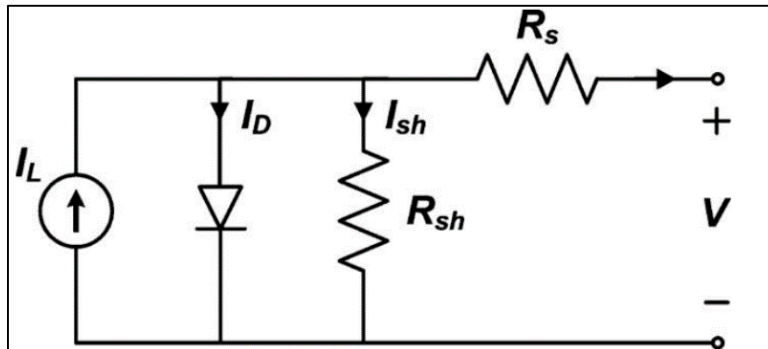
$$V_{oc}(X) = \frac{nk_B T_C}{q} \ln \left(\frac{XJ_{sc}}{J_0} + 1 \right) = V_{oc}(1) + \frac{nk_B T_C}{q} \ln(X) \quad (2.12)$$

Yukarıdaki eşitlikler incelendiğinde kısa devre akımı güneş konsantrasyonu ile doğrusal artarken açık devre gerilimi logaritmik artar. Yoğunlaştırılmış güneş altında pile gelen ışık güç yoğunluğu da ışık konsantrasyonu ile doğrusal olarak artar. Bu sebeple asıl verim artışı artan açık devre voltajındaki artış sayesinde. Şekil 2.7’de örnek bir ışık yoğunlaştırıcı şematığı ve yüksek ışık konsantrasyonunun güneş pili I-V karakteristiği üzerindeki etkisi görülmektedir.



Şekil 2.7. Basitleştirilmiş yoğunlaştırıcı şematığı ve yoğunlaştırılmış ışık altında I-V karakteristiği [8]

Güneş pilinin çalışmasına etki eden iki adet parazitik direnç vardır. Birincisi; eklemdeki taşınmayı, pilin ön ve arka yüzeyindeki metal-yarı iletken temas noktalarındaki direnci, metal bağlantıların direncini içeren seri dirençtir. Genelde R_s ile gösterilir. İdeal bir güneş pilinde R_s sıfır olmalıdır. İkinci parazitik direnç ise şönt direnç (R_{sh}) olarak adlandırılır. Şönt direnç diyottan akan kaçak akımı temsil eder. Şönt direnç çoğunlukla diyot boyunca tünelleme yapan tuzaklardan kaynaklanır. İdeal bir güneş pilinde sonsuz olması gereklidir. Seri ve şönt direnci içeren konvansiyonel güneş pili eş değer devresi Şekil 2.8’te verilmiştir.



Şekil 2.8. Konvansiyonel güneş pili eşdeğer devresi [9]

Parazitik dirençlerin diyot denklemine eklenmesiyle Eş. 2.4;

$$J = J_{SC} - J_0 \left(e^{\frac{q(V-JR_S)}{nk_B T_C}} - 1 \right) - \frac{V+JR_S}{R_{sh}} \quad (2.13)$$

halini alır. Eşitlik 2.13 ve Şekil 2.8'den görülebileceği gibi seri direnç V_{OC} 'yi etkilerken şönt direnç J_{SC} 'yi etkilememektedir.

Güneş pilinde rekombinasyon, üretimin karşıt prosesidir. CB'deki bir elektron VB'deki bir boşluk ile birleşince (rekombine olunca) enerjisini ısı veya ışık olarak yayacaktır. Konvansiyonel güneş pillerinde üç çeşit rekombinasyon mevcuttur; Işımalı, Shockley-Read-Hall (Işımasız) ve Auger rekombinasyonları. Işımalı rekombinasyonda iletkenlik bandındaki bir elektron valans banttaki bir boşluk ile birleşirken malzemenin bant aralığıyla aynı enerjiye sahip bir foton yayımlar. SRH rekombinasyonu ise malzemedeki kusurlar yoluyla gerçekleşir. Güneş pilinin karanlık akımının oluşmasında etkilidir. Kusursuz tamamen saf yarı iletken malzemelerde SRH rekombinasyonu gerçekleşmez.

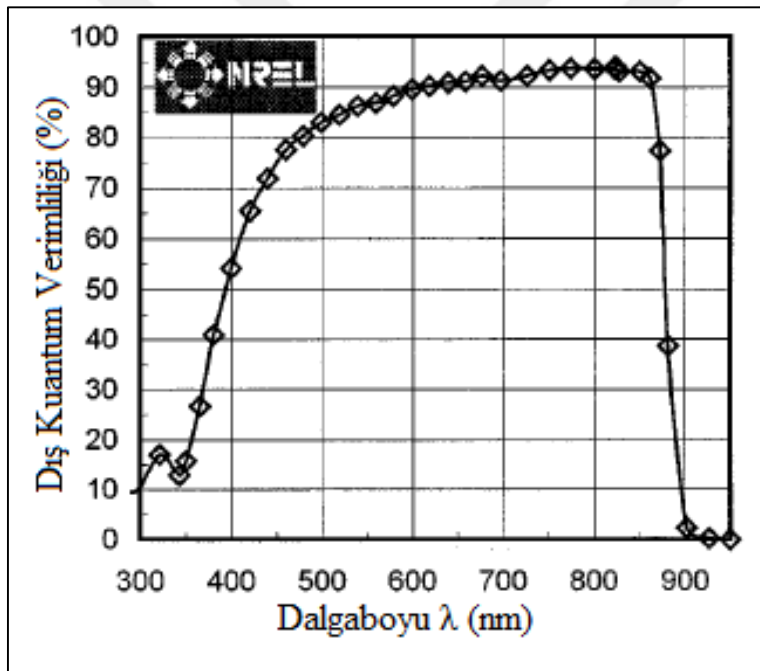
Auger rekombinasyonu üç taşıyıcıyı içerir. Yüksek enerjili bir foton valans bandın en alt enerji seviyesinden bir elektron koparıp iletkenlik bandına gönderirken geride bir boşluk bırakır bu boşluğu valans bandın bir üst enerji seviyesindeki elektron doldurduğunda x ışını çıkarır ve bu ışın valans bandın bir üst enerji seviyesinden bir elektron daha koparıp iletkenlik bandına gönderir. Bu şekilde çok sayıda elektron ve boşluklar üretilerek akım artışı sağlanır. CB'deki bir elektron VB'deki bir boşluk ile birleşirken fazla enerjisini CB'deki üçüncü bir elektrona verir. Bu elektron fazlalık enerjisini ısı olarak pile verir ve CB'ye döner. Auger rekombinasyonu genelde yüksek ışık konsantrasyonlarında ve yüksek katkılama ile ortaya çıkar.

2.1.1. Kuantum verimliliği

Kuantum verimliliği, güneş pilinin belirli bir dalga boyundaki fotonlar ile aydınlatıldığında üreteceği akım miktarını gösterir. Diğer bir deyişle güneş pili tarafından toplanan taşıyıcı sayısının güneş piline gelen belirli bir enerjideki foton sayısına oranıdır. Eğer belirli bir dalga boyundaki bütün fotonlar soğurulur ve ortaya çıkan bütün azınlık

taşıyıcılar toplanırsa o dalga boyu için kuantum verimliliği %100 olur. Konvansiyonel güneş pillerinde malzemenin bant aralığının altında kuantum verimliliği sıfırdır.

Güneş pillerinde iki tip kuantum verimliliği dikkate alınır. Birincisi dış kuantum verimliliği olup pile gelen bütün fotonları dikkate alır. İkincisi, iç kuantum verimliliği, ise pile gelen ve soğurulan bütün fotonları dikkate alır. Pilin yüzeyinden yansıyan ve soğurulmadan pili geçen fotonlar iç kuantum verimliliğinde dikkate alınmaz. Bu sebeple dış kuantum verimliliği her zaman daha düşük olacaktır. Şekil 2.9’da konvansiyonel GaAs güneş pili için dış kuantum verimliliği görülmektedir. Şekilde görüldüğü gibi GaAs güneş pilinde yaklaşık 880nm’den sonra (1,42 eV’tan düşük enerjilerde) soğurma gerçekleşmemektedir.



Şekil 2.9. Üretilmiş bir GaAs güneş pilinin dış kuantum verimliliği [10]

2.2. Güneş Pili Çalışmasına ve Verimine Etki Eden Malzeme Parametreleri

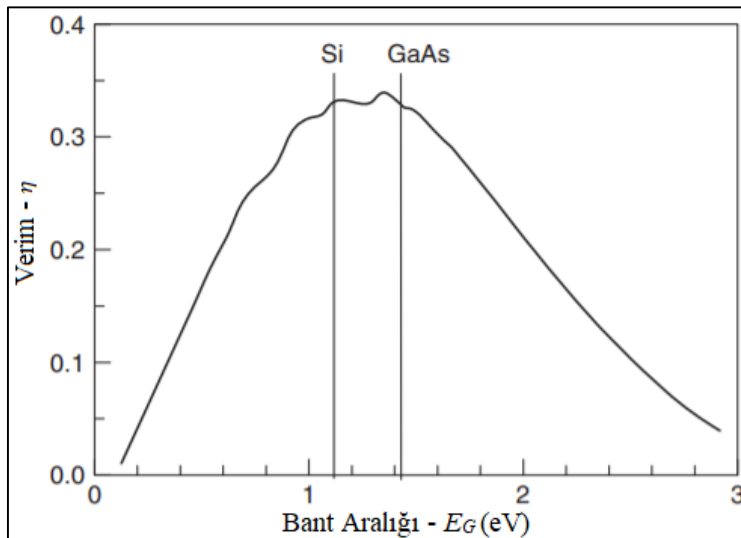
Konvansiyonel güneş pillerinde pilin çalışmasına ve verimine etki eden malzeme parametreleri detaylı olarak incelenmiştir [11]. Güneş pilinde fotoakımın ve açık devre voltajının büyük olması istenir. Karanlık akımın ise olabildiğince küçük olması gereklidir. Çizelge 2.2’de güneş pilinin çalışmasına ve verimine etki eden ve güneş pili tasarımında dikkat edilmesi gereken parametreler görülmektedir. Bu parametrelerden bazıları devam eden bölümlerde incelenmiştir.

Çizelge 2.2. Güneş pilinin kısa devre akımına ve karanlık akımına etki eden faktörler [11, 12]

Parametre	Kısa devre akımı, J_{SC}	Karanlık akım, J_D
Güneş spektrumu	+	
İletim verimliliği	+	
Sıcaklık	+	+
Çıkış gerilimi		+
Etkin ön yüzey alanı	+	
Pil kalınlığı	+	+
Soğurma katsayıları	+	+
Taşıyıcı Ömür süreleri	+	+
Katkılama yoğunluğu ve değişimi	+	+
Mobilite ve difüzyon katsayıları	+	+
Yüzey rekombinasyonu	+	+

2.2.1. Güneş spektrumu/Yarı iletken bant aralığı

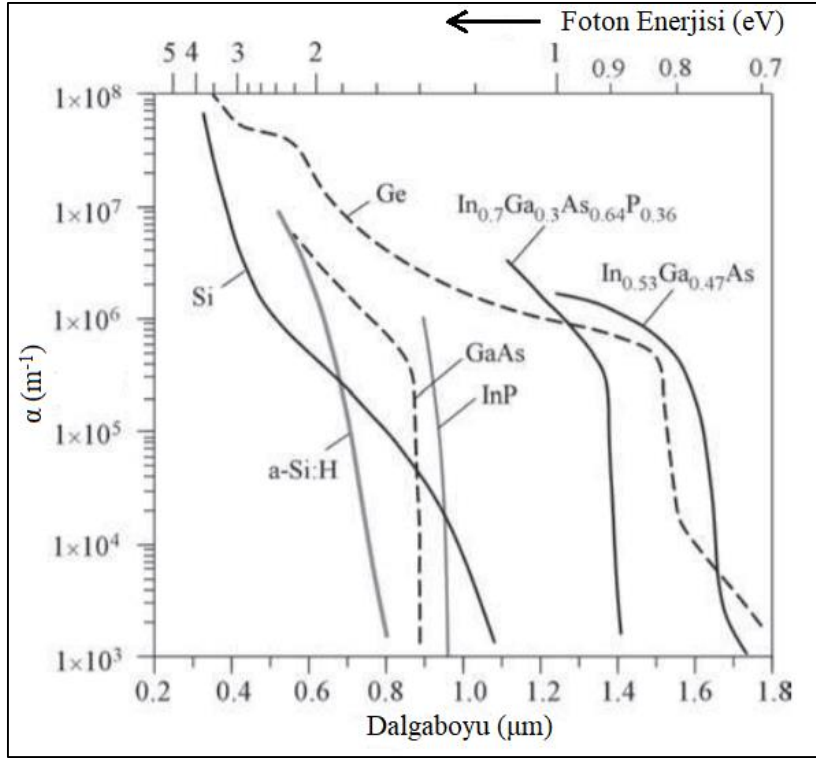
Şekil 2.1’de görüldüğü gibi güneşin spektral ışıma gücü dalga boyu dolayısıyla enerji ile değişmektedir. Konvansiyonel güneş pilleri, bant aralıklarından küçük enerjili fotonları soğuramadığından güneş pili tasarımında en önemli parametre yarı iletken bant aralığıdır. Büyük E_G seçilirse küçük enerjili fotonlar soğurulamaz ve güneş pilinin fotoakımı düşer. E_G küçük olursa fotoakım artar ancak pilin çıkış gerilimi düşer. Şekil 2.10’da AM1.5G spektrumu için konvansiyonel güneş pilinden elde edilebilecek maksimum verimin bant aralığıyla değişimi görülmektedir. Şekil incelenecek olursa konvansiyonel güneş pilleri için bant aralığı için en uygun aralığın 1 – 1,5 eV olduğu görülmektedir.



Şekil 2.10. AM1.5G spektrumu için konvansiyonel güneş pili verim limitinin bant aralığı ile değişimi [13]

2.2.2. Soğurma katsayısı ve güneş pili kalınlığı

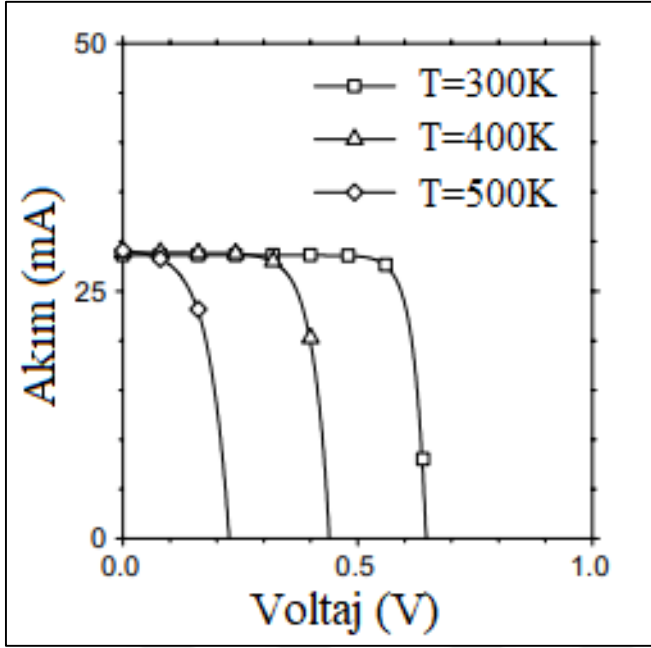
Soğurma derinliği, fotonların yarı iletken malzemede ne kadar mesafe kat edebileceğinin ölçüsüdür. Soğurma katsayısı ve soğurma derinliği ters orantılıdır. Soğurma katsayısı küçük olan malzemelerde güneş pilinin bütün fotonları soğurabilmesi için pil kalınlığı büyük olmalıdır. Ancak pil kalınlığı arttığında SRH rekombinasyonu artacağından karanlık akım artmaktadır. Bu sebeple soğurma katsayısı ve pil kalınlığı optimize edilmesi gereken parametrelerdir. Şekil 2.11’da güneş pili araştırmasında kullanılan çeşitli yarı iletken malzemeler için soğurma katsayılarının dalga boyu ve enerji ile değişimi görülmektedir.



Şekil 2.11. Farklı yarı iletken malzemeler için soğurma katsayılarının dalga boyu ile değişimi [14]

2.2.3. Sıcaklık

Bant genişliği, mobilite gibi birçok parametre güneş pilinin sıcaklığıyla değişmektedir. Bu nedenle pil sıcaklığı dikkat edilmesi gereken parametrelerden biridir. Güneş pillerinde hesaplamalar genelde $T_C=300K$ kabul edilerek yapılır. Şekil 2.12’de sıcaklığın güneş pili I-V karakteristiği üzerindeki etkileri görülmektedir. Sıcaklık artışı pilin kaçak akımını arttırdığından dolayı açık devre voltajını düşürmektedir.



Şekil 2.12. p-n eklem güneş pili Akım-Gerilim karakteristiğinin sıcaklık ile değişimi [15]

2.2.4. Yüzey rekombinasyonu

Pilin emitör yüzeyinde “eksik kalan atomik bağlar” nedeniyle yüzey rekombinasyon hızı artar. Yüzeydeki bu kusurlar (askıda kalan bağlar) latis kristalinin periyodikliğinin kesilmesinden kaynaklanır. Emitör ön yüzeyinde ince bir katman oluşturularak yüzeyde askıda kalan bağların etkisi azaltılır ve yüzey rekombinasyon hızı düşürülür. Bu işleme yüzey pasifleştirme adı verilir [16].

2.2.5. Taşıyıcı mobiliteleri, ömür süreleri, difüzyon uzunluğu ve katkı konsantrasyonu

Güneş pilinde taşıyıcıların difüzyon ile gidebileceği mesafeyi belirten difüzyon uzunluğunun büyük olması istenir. Difüzyon uzunluğunun büyük olabilmesi için taşıyıcı mobilitelerinin de büyük olması gereklidir [12].

$$L_{e,h} = \sqrt{D_{e,h} \tau_{e,h}} \quad (2.14)$$

Burada τ_e ve τ_h sırasıyla elektron ve boşlukların saniye cinsinden taşıyıcı ömür süresini temsil etmektedir. Taşıyıcı mobiliteleri ve difüzyon sabiti arasında Einstein bağıntısı vardır;

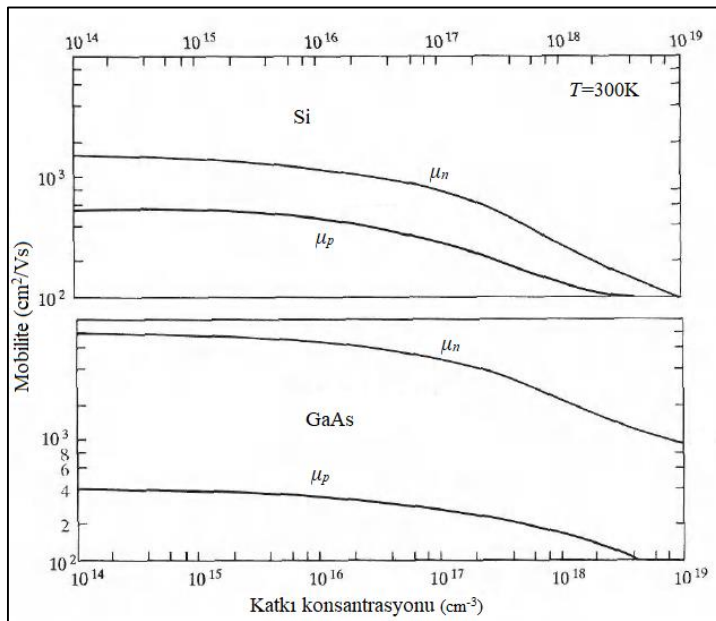
$$\frac{\mu_{e,h}}{D_{e,h}} = \frac{k_B}{q} \quad (2.15)$$

Eşitlik 2.15'te μ_e ve μ_h sırasıyla elektronların ve boşlukların mobilitelerini temsil etmektedir.

Şekil 2.13'te GaAs ve Si için elektron ve boşluk mobilitelerinin taşıyıcı yoğunluğuyla değişimi görülmektedir. Elektron mobiliteleri boşluk mobilitelerinden her zaman yüksektir. Taşıyıcı konsantrasyonları arttıkça mobiliteler düşmektedir. Ayrıca malzemenin katkı konsantrasyonunun fazla olması daha önce de belirtildiği gibi Auger rekombinasyonun artmasına da sebep olacaktır. Difüzyon uzunluğunu artıracak diğer bir parametre taşıyıcı ömür süreleridir. Taşıyıcı ömür süreleri, elektron boşluk çiftlerinin oluşmasından rekombinasyon olmalarına kadar geçen süreyi ifade eder. Ömür sürelerinin büyük olması için malzeme içerisinde rekombinasyon merkezi gibi davranan safsızlıklar olmamalıdır. Malzemenin toplam ömür süresi aşağıdaki bağıntı kullanılarak hesaplanabilir;

$$\frac{1}{\tau_e} = \frac{1}{\tau_{e,Işımali}} + \frac{1}{\tau_{e,SRH}} + \frac{1}{\tau_{e,Auger}} \quad (2.16)$$

$$\frac{1}{\tau_h} = \frac{1}{\tau_{h,Işımali}} + \frac{1}{\tau_{h,SRH}} + \frac{1}{\tau_{h,Auger}} \quad (2.17)$$



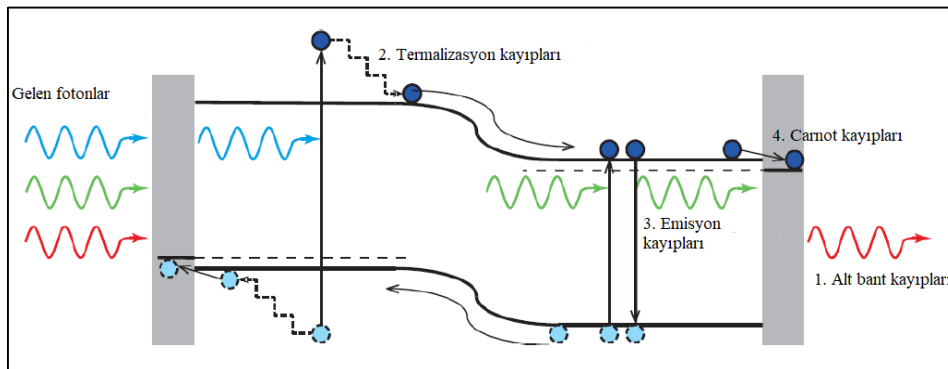
Şekil 2.13. Si ve GaAs yarı iletken malzemeleri için mobilitenin katkı konsantrasyonu ile değişimi [17]

Eşitlik 2.16 ve 2.17’de $\tau_{e,Işılmal}$ ve $\tau_{h,Işılmal}$ terimleri elektron ve boşlukların ışımalı rekombinasyon ömür süresini göstermektedir. Benzer şekilde $\tau_{e,SRH}$ ve $\tau_{h,SRH}$ elektron ve boşlukların ışımasız rekombinasyon ömür süresini ifade ederken $\tau_{e,Auger}$ ve $\tau_{h,Auger}$ Auger rekombinasyon ömür sürelerini göstermektedir.

2.3. Güneş Pili Verim Limitleri ve Temel Kayıplar

Güneş pilinden elde edilebilecek maksimum verim, verim limiti olarak adlandırılır. Tek eklemlili güneş pilinin tek güneş altında (yoğunlaştırılmamış ışık altında) verim limiti Shockley-Queisser tarafından %30 olarak tespit edilmiştir [18]. Maksimum ışık konsantrasyonu (46000 kat yoğunlaştırılmış ışık) altında verim limiti %41 civarına çıkmaktadır. Güneş pili verim limitleri başka araştırmacılar tarafından da araştırılmıştır [19–21]. Tek güneş altında tek bant aralığına sahip güneş pilinde kayıp süreçleri iki ayrı kategoriye ayrılır [19]. Bunlardan ilki; seri direnç, parazitik rekombinasyon ve kontak gölgeleme gibi dış kayıplardır. Dış kayıplar pil verimini önemli ölçüde sınırlayabilir. Ancak teorik olarak önlenabilir ve dolayısıyla verim limitleri hesaplanırken dikkate alınmazlar.

Güneş pili tasarımında iç kayıplar (temel kayıplar) kaçınılmazdır. Temel kayıplar etkilerini ideal güneş pillerinde dahi gösterirler. Güneş pili verim limitini belirleyen 5 temel kayıp mevcuttur [19]. Şekil 2.14’te bu kayıplardan dört tanesi gösterilmiştir. Bu temel kayıpları anlamak güneş pili performansını iyileştirmek ve yüksek verimli güneş pili modelleri üretmek için önemlidir.



Şekil 2.14. Güneş pilinde temel kayıp mekanizmaları [5]

Güneş spektrumu ile tek bant aralığına sahip güneş pilinin soğurması arasındaki uyumsuzluk bant aralığı, E_G ’den küçük fotonların soğurulmamasına yol açar. Böylece birinci temel kayıp

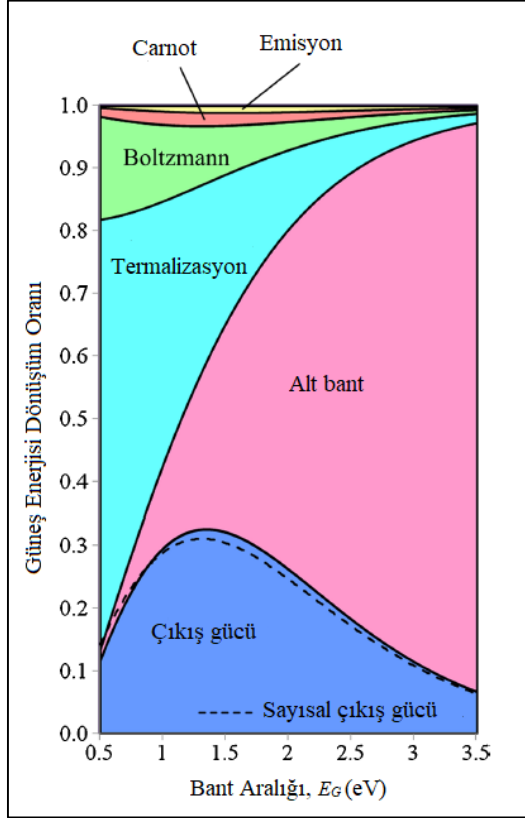
Alt Bant Kayıpları olarak adlandırılır. Bant aralığından düşük enerjili fotonlar soğurulmadan pili geçerler. E_G 'yi küçültmek bu kaybı azaltmak için bir yöntemdir. Ancak E_G küçültüldüğünde çalışma gerilimi de düşeceğinden ve küçük enerji değerlerinde spektral ışıma azalacağından E_G 'nin optimum değeri seçilmelidir. Shockley-Queisser tarafından tek bant aralığına sahip güneş pili için maksimum verim elde edilen optimum bant aralığı, $E_G=1,1$ eV olarak tespit edilmiştir [18]. AM1.5G spektrumu için maksimum verim değeri %33,7 ve optimum $E_G=1,34$ eV olarak hesaplanmıştır [2].

Bant aralığından yüksek enerjili fotonlar soğurulduğunda uyarılan taşıyıcılar ise iletkenlik bandı kenarına dönerken fazlalık enerjisini güneş piline aktarır ve pilin ısınmasına sebep olur. Termalizasyonla pilin ısınması, güneş pilinde verim kayıplarına neden olur. Si güneş pili için derece başına verim değişimi $\% -0.45 \text{ K}^{-1}$ 'dir [22]. İkinci temel kayıp, Krichoff yasasına göre, soğurma olan yerde emisyon da olmalıdır. Üretilen (CB'deki) bir elektronun elektrik kontaklarına ulaşmadan VB'deki bir boşluk ile birleşmesine Emisyon kaybı (Üçüncü temel kayıp) adı verilir. Bu emisyon ışımalı ise malzemenin bant aralığıyla aynı enerjiye sahip bir foton üretilecektir. Eğer ışımasız ise enerji üçüncü bir taşıyıcıya aktarılacaktır veya fonon olarak kaybolacaktır.

Dördüncü temel kayıp Carnot kaybı olarak adlandırılır. Güneş pili sıcak bir kaynaktan (Güneş) soğuk bir kaynağa (atmosfer) ısı akışını sağlayan bir ısı motoru olarak düşünülebilir. Bu çevrim sırasında bir miktar enerjinin feda edilmesi gereklidir [19]. Bir güneş pilinde, bu kayıp kendisini Carnot Faktörü (Kaybı) olarak adlandırılan bir voltaj düşüşü olarak gösterir [23]. Şekil 2.14'te gösterilmeyen son temel kayıp, Boltzmann kaybıdır. Güneşin gökyüzünün sadece bir kısmını kaplaması sebebiyle soğurma ve emisyon açıları arasındaki eşitsizlikten kaynaklanır. Bu uyumsuzluk taşıyıcıların serbest enerjisini azaltan bir entropi oluşumuna sebep olur [19].

Şekil 2.15'te yukarıda açıklanan temel kayıpların güneş pil yapımında kullanılan malzemenin bant aralığıyla değişimi yaklaşık olarak görülmektedir. Şekilde görüldüğü gibi, temel kayıplardan, güneş pili verim limitlerini en çok etkileyenler Alt bant kayıpları ve üst bant termalizasyon kayıplarıdır. Termalizasyon kayıpları bant aralığı arttıkça azalırken Alt bant kayıpları artmaktadır. Örneğin; $E_G=1,31$ eV için güneş piline gelen ışık gücünün %32,5'i elektrik enerjisine çevrilirken %1,1'i Emisyon kaybına %2,2'si Carnot kaybına %9,3'ü Boltzmann kaybına gitmektedir [19]. Termalizasyon ve Alt bant kayıpları ise

$E_G=1,31$ eV için güneş piline gelen ışık gücünün sırasıyla %29,8 ve %25'ini oluşturmaktadır [19].

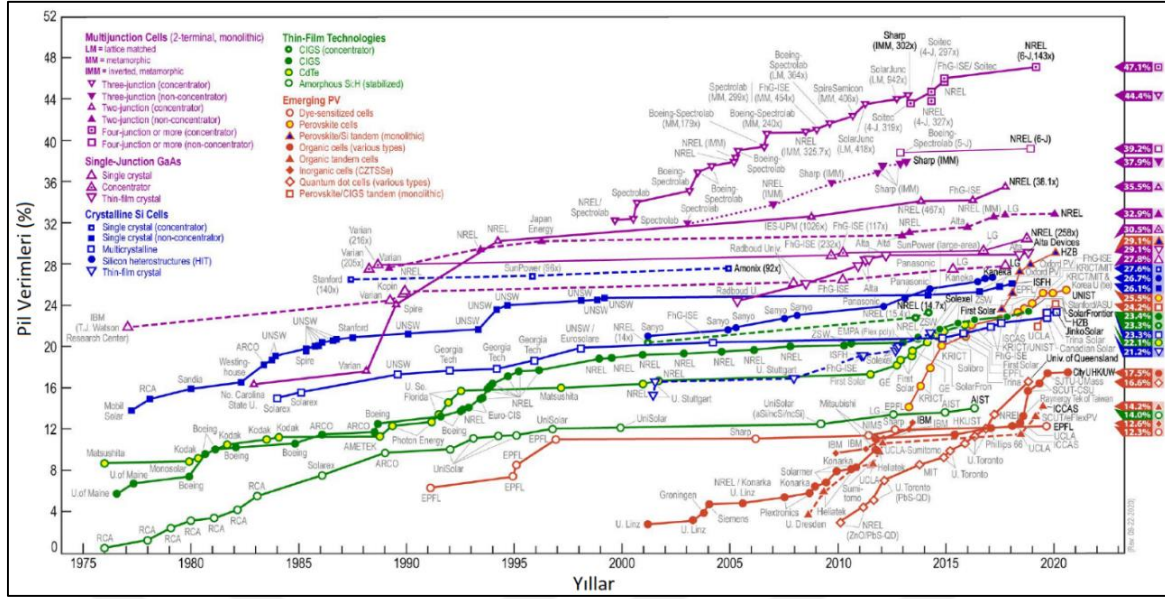


Şekil 2.15. Güneş pilinde temel kayıpların ve çıkış gücünün pil malzemesinin bant aralığıyla değişimi [19]

2.4. Güneş Pillerinin Sınıflandırılması ve Yüksek Verimli Güneş Pili Modelleri

A. E. Becquerel tarafından fotovoltaik etkinin keşfedilmesinin üzerinden 181 yıl geçmiştir. Ancak ilk yarı iletken güneş pillerinin üretilmesi 1950'leri bulmuştur. Silisyum yarı iletken materyali kullanılarak üretilen tek bant aralığına sahip güneş pilleriyle başlayan güneş pili araştırmasında yıllar geçtikçe S-Q verim limitlerini aşabilecek modeller öne çıkmaya başlamıştır.

Güneş pili araştırmasında üretilen güneş pilleri verim rekorları NREL (National Renewable Energy Laboratory-Amerikan Ulusal Yenilenebilir Enerji Laboratuvarı) tarafından 1976'dan günümüze her yıl düzenli olarak açıklanmaktadır. Şekil 2.16'da 1976-2020 yılları arasında NREL tarafından hazırlanan güneş pili verim değerleri görülmektedir [24]. Güneş pilleri üretim teknolojileri ve pil yapıları bakımından dört gruba/nesle ayrılır.



Şekil 2.16. Yıllara göre güneş pili verim rekorları [24]

2.4.1. Birinci nesil güneş pilleri

Birinci nesil güneş pilleri, silisyum (Si) yarı iletken malzeme ile üretilen tek veya çoklu kristal yapıda tek eklemlili güneş pilleridir. Güneş pili piyasasının büyük kısmını Si güneş pilleri oluşturmaktadır. İlk silisyum güneş pili %6 verimlilikte 1954 yılında Bell laboratuvarında üretilmiştir. Yıllar içinde gelişen teknolojiyle birlikte Si güneş pili verimleri yükselmiştir. Tek kristal Si güneş pilinde verim rekoru tek güneş altında %26,1 [25] iken 92 kat yoğunlaştırılmış ışık konsantrasyonu ile %27,6 [26] olarak ölçülmüştür. Çoklu kristal Si güneş pillerinde ise tekli kristal sınırları rekombinasyon merkezi davranarak verimleri düşürmektedir. Çoklu kristal Si güneş pilinde kaydedilen en yüksek verim 22,3'dür [27]. Tek kristal Si güneş pillerinin verimliliği çok kristalli Si güneş pillerine göre daha yüksek olmasına rağmen, çok kristalli Si güneş pillerin üretimi daha kolay ve ucuzdur. Bu sebeple tekli ve çoklu kristal Si güneş pilleri rekabet halindedir.

2.4.2. İkinci nesil güneş pilleri

İkinci nesil güneş pilleri, ince film teknolojisi kullanılarak üretilmektedir. Birinci nesil güneş pillerinin üretim maliyetlerini ve kullanılan malzeme miktarını azaltmak amacıyla önerilmiştir. Ancak verimleri birinci nesil güneş pillerinden daha düşüktür. İnce film güneş pilleri, pilin ön yüzeyinde barlar bulunmadığı için cam, araç, bina vb. uygulamalarda estetik

ve kolaylık bakımından daha uygundur. Ayrıca ince film güneş pilleri esnek tabakalar üzerine büyütülebilirler. Bu sayede ince film güneş pilleri tekstil gibi uygulama alanlarında da kullanılabilir.

İkinci nesil güneş pilleri, amorf Si (a-Si) bazlı ince film güneş pillerini, Kadmiyum Tellür / Kadmiyum Sülfür (CdTe / CdS) güneş pillerini, Bakır İndiyum Galyum Selenid (CIGS) ve GaAs ince film güneş pillerini kapsar. Amorf-Si ince film güneş pili için maksimum verim %14 ile çok eklemli bir güneş piline aittir [27]. Tek eklemli a-Si için verim rekoru %10,2'dir [27]. Bakır İndiyum Selenid (CIS) veya Bakır İndiyum Galyum Selenid (CIGS) güneş pillerinde 1976'da %5 ile başlayan verimler 2019 itibarıyla %23,4 seviyelerine çıkmıştır [28]. CdTe ince film güneş pillerinde ise verim rekoru %22,1'dir. GaAs ince film güneş pilleri diğer malzemelere göre daha pahalı olduğu için genelde uzay uygulamalarında tercih edilmişlerdir. GaAs ince film güneş pilleri diğer ince film güneş pillerine göre daha yüksek verimlere sahiptir. Verim rekoru %29,1 olarak ölçülmüştür [27].

2.4.3. Üçüncü nesil güneş pilleri

Birinci ve ikinci neslin aksine üçüncü nesil güneş pilleri, p-n eklemi içermeyen malzemeler ile üretilirler. Organik güneş pilleri, Boya sentezli güneş pilleri, Perovskite güneş pilleri üçüncü nesil güneş pillerine örnek verilebilir. Daha ucuz malzemeler kullanılıp üretim aşamasını basitleştirerek maliyetin azaltılması ve veriminin artırılması hedeflenmiştir [12]. Boya sentezli güneş pillerinde verim rekoru %11,9, organik güneş pillerde ise %13,45'dir [27]. Perovskite güneş pilleri ise daha güncel bir araştırma konusudur ve çok sayıda çalışmaya konu olmaktadır. Perovskite güneş pili verimleri on yıl gibi kısa sürede %3,8'den [29] %25,5 seviyesine çıkmıştır [24].

2.4.4. Dördüncü nesil güneş pilleri

Bölüm 2.3'te bahsedildiği gibi güneş pillerinde en önemli iki temel kayıp alt bant kayıpları ve üst bant termalizasyon kayıplarıdır. Konvansiyonel güneş pilleri bant aralığından küçük enerjili fotonları soğuramazlar. Yüksek enerjili fotonlar ise soğrulunca fazlalık enerjilerini güneş piline vererek ısınmasına sebep olmaktadır. Dördüncü nesil güneş pillerinde bu spektrum uyuşmazlığını gidererek güneş spektrumunun tamamının kullanılması hedeflenmektedir. Dördüncü nesil güneş pillerine örnek olarak çok eklemli güneş pilleri,

aşağı-yukarı dönüşüm pilleri, termofotovoltaik güneş pilleri ve ara bant yapılı güneş pilleri verilebilir.

Çok eklemli güneş pilleri

Çok eklemli (Tandem) güneş pilleri farklı bant aralıklarına sahip güneş pillerinin bir araya getirilmesiyle (yığın şeklinde üst üste konulmasıyla) elde edilir. Böylece farklı enerji aralıklarındaki fotonlar farklı katmanlarda soğurularak güneş spektrumu daha etkili kullanılacaktır. Çok eklemli güneş pillerinde verim limitleri eklem sayısı ile orantılıdır. İki, üç, dört ve sonsuz sayıda eklem için yoğunlaştırılmamış güneş altında verim limitleri sırasıyla %42,9, %49,3, %53,3 ve %69,9'dur [30]. Maksimum ışık konsantrasyonu altında iki, üç, dört ve sonsuz sayıda eklem için verim limit değerleri %55,9, %63,8, %68,8 ve %86,8 olarak verilmiştir [30].

Çok eklemli güneş pillerinde eklemlerin uyumsuzluğu ve uygun bant aralığına sahip materyallerin seçilememesi yüksek verimlerin önündeki en büyük engellerden biridir. Buna rağmen üretilen güneş pilleri arasında en yüksek verimlere sahip piller çok eklemli güneş pilleridir. Verim rekoruna sahip güneş pili altı eklemli güneş pili olarak verim değeri 143 kat yoğunlaştırılmış güneş altında %47,1 tek güneş ışığı altında %39,2 olarak tescillenmiştir [31]. İki ve üç eklemli güneş pillerinde verim rekorları %35,5 ve %44,4 olarak açıklanmıştır [24]. Dördüncü nesil güneş pilleri arasında S-Q verim limiti henüz sadece çok eklemli güneş pilleri ile aşılabilmektedir.

Aşağı/Yukarı dönüşüm güneş pilleri

Aşağı/Yukarı dönüşüm pilleri konvansiyonel güneş pillerinin soğuramadığı alt bant fotonlarının veya soğursa bile termalizasyon kayıplarına sebep olan yüksek enerjili fotonların bir dönüştürücü sayesinde güneş pilinin bant aralığına uygun enerjiye sahip fotonlara dönüştürülmesini amaçlar. Aşağı dönüşüm güneş pilinde termalizasyona sebep olan enerjisi $2E_G$ ve daha büyük enerjili fotonlar bir dönüştürücü ile E_G enerjili fotonlara çevrilir. Böyle bir dönüştürücü tasarımı ve üretimi aşağı dönüşüm güneş pili üretiminin önündeki en büyük engeldir.

Dönüştürücü üretiminde, lantinitlerin üzerine yoğunlaşan araştırmaların yanı sıra güncel çalışmalarda kuantum noktalar, nanofosforlar, grafen kuantum noktalar, silikon nanopartiküller pil verimini artıran sonuçlar göstermiştir [32]. Teorik olarak $E_G=1,1$ eV için verim limitini %30'dan %40 civarına çıkaran aşağı dönüşüm güneş pillerinde hedeflenen verimlere ulaşamamıştır [33].

Yukarı dönüşüm güneş pillerinde ise, dönüştürücü güneş pili tarafından soğurulamayan düşük enerjili alt bant fotonlarını soğurarak güneş pilinin bant aralığına uygun enerjili foton yayımlar. Yukarı dönüşüm güneş pillerinde verim limiti tek güneş altında %47,6, maksimum ışık konsantrasyonu altında %63,2'dir [34]. Son yıllarda yukarı dönüşüm pilleri araştırmasında teorik çalışmalardan verim artışı sağlanan pratik çalışmalara geçilmiştir [35]. Bununla birlikte henüz konvansiyonel güneş pillerinin S-Q verim limitini aşan bir güneş pili üretilmemiştir.

Termofotovoltaik güneş pilleri

Bir termofotovoltaik sistem, ısıyı elektriğe çeviren ve bu çevrim sırasında ışığı bir aracı olarak kullanan sistemdir. Sistem üç temel parçadan oluşur; Isı kaynağı/Soğurucu, Emiter ve bir güneş pili [36]. Isı kaynağı veya güneşten enerji alan soğurucu ısınır ve emiteri ısıtır. Isınan emiter foton yaymaya başlar. Bu fotonlar güneş pili tarafından soğurulur ve elektrik enerjisine çevrilir. Termofotovoltaik güneş pillerin hesaplanan verim limitleri maksimum ışık konsantrasyonu altında %85,4 normal ışık altında %54'tür [37]. Üretilen termofotovoltaik pil verimleri ise verim limitlerinin çok altında olup %10'un altındadır [38].

Termofotovoltaik pillerde verim limiti E_G 'ye değil sıcaklığa bağlıdır. Maksimum verim limiti emiter sıcaklığı 2544K'de elde edilmektedir [38]. Pratikte bu sıcaklık değerine ulaşmak zordur. Ancak 1000K civarında verim limitinin %70 olması umut vericidir. Soğurucu ve emiterin yüksek ısılarda olması gerekirken güneş pilinin ısınmaması gereklidir. Güneş pili ısındıkça verim düşüşü meydana gelecektir. Güncel çalışmalarda soğurucu üretiminde yüksek erime sıcaklığına sahip seramikler ve metaller kullanılmaktadır. Emiter ve güneş pili seçilirken uyumları dikkate alınır. Termofotovoltaik güneş pili araştırmalarında çok kullanılan güneş pilleri düşük bant aralıklarına sahip III-V bileşikleridir; GaSb ($E_G=0,7$ eV), InGaAs ($E_G=0,6-0,7$ eV) ve InGaAsSb ($E_G=0,5-0,6$ eV) [38].

Sıcak elektron güneş pilleri

Sıcak elektron güneş pilleri veya sıcak taşıyıcı güneş pilleri, yüksek enerjili fotonların soğurulmasıyla oluşan sıcak elektronların çarpışma iyonizasyonu ile yeni elektron-boşluk oluşturmalarıyla pil veriminin artırılmasını hedeflemektedir. Bir foton ile birden fazla elektron-boşluk çifti oluşumuna Auger üretimi adı da verilmektedir. Sıcak elektron güneş pillerinin teorik verimlimitleri termofotovoltaik pillere benzer olarak maksimum ışık yoğunluğunda %85,4 ve normal ışık yoğunluğunda %54 olarak hesaplanmıştır [39]. Auger etkisinin ara bant yapılı güneş pillerinin verimini de artırabileceği düşünülmektedir [40].

Ara bant yapılı güneş pilleri

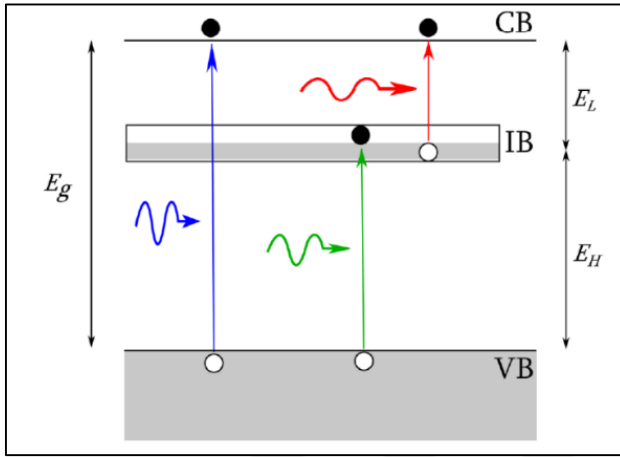
Ara bant yapılı güneş pillerinde, diğer dördüncü nesil güneş pillerinin aksine güneş pilinin yapısında oluşturulan bir değişiklik ile güneş pilinin soğuramadığı alt bant fotonlarının soğurulması ve güneş pili veriminin artırılması hedeflenmiştir. Detaylı açıklamalar Bölüm 2.4'te, matematiksel modeller ise Bölüm. 3'te verilmiştir.

2.5. Ara Bant Yapılı/Kuantum Noktalı Ara Bant Yapılı Güneş Pilleri ve Tarihçesi

Ara bant yapılı güneş pilleri (ABGP), bu tezin konusu olup ABGP yapısı, çalışması ve verim limitinin belirlenmesinde kullanılan matematiksel model Bölüm 3'te detaylı olarak incelenecektir. Bu bölümde, ara bant yapılı materyal üretim yöntemleri ve yüksek verimli ara bant yapılı güneş pili araştırmasında güncel durum incelenecektir. Ayrıca kuantum noktalar ve kuantum noktalar kullanılarak yapılan yeni nesil ara bant yapılı güneş pilleri detaylı olarak incelenecektir. Ara bant yapılı güneş pilleri diğer dördüncü nesil güneş pillerinin aksine güneş pilinin yapısında oluşturulan bir değişiklik ile güneş pilinin soğuramadığı alt bant fotonlarının soğurulması ve güneş pili veriminin artırılması hedeflenmiştir. Ara bant yapılı güneş pilleri konvansiyonel güneş pillerinin verim limitlerini aşmak için, Luque ve Marti tarafından 1997'de önerilmiştir [41]. Ara bant yapılı güneş pilinde, yasak banda bir elektronik durum seti eklenerek bant aralığı ikiye bölünür (Şekil 2.17). Yasak bantta oluşturulan yeni bant Ara Bant (AB) olarak adlandırılır.

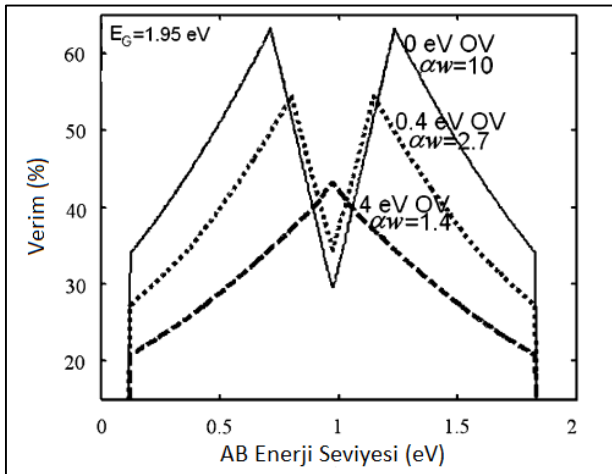
Ara bant yapılı güneş pillerinde elektronlar, valans banttan (VB) iletkenlik bandına (CB), bant aralığından büyük enerjili fotonların soğurulmasıyla, doğrudan çıkabilir. Doğrudan

uyarılmanın yanı sıra, elektronlar, düşük enerjili fotonların soğurulması ile VB'den AB'ye ve AB'den CB'ye iki adımlı foton soğurma mekanizmasıyla çıkabilir. Böylece ABGP'de, bant aralığından düşük enerjili fotonların soğurulması ile fotoakımında ve verimde artış hedeflenir. Ara bant yapılı güneş pili için maksimum verim limiti, tek ara bant ile 1,95 eV bant aralığı için, %63,2 olarak bulunmuştur [43, 44]. İdeal koşullarda birden fazla ara bant oluşturularak ara bant yapılı güneş pili verimi %80 üzerine çıkarılabilir [45].



Şekil 2.17. Ara bant yapılı materyalin enerji bant diyagramı [42].

Navruz ve Saritaş diğer birçok parametreyle beraber ara bant enerji seviyesinin ve soğurma katsayıları arasındaki örtüşmenin pil verimine etkilerini incelemiştir [40, 44, 46]. Şekil 2.18'de ABGP'de pil veriminin ara bant enerji seviyesi ve örtüşme ile değişimi görülmektedir. Optimum ara bant enerji seviyelerinin bant aralığının 1/3'ünde ve 2/3'ünde olduğu ve bu optimum ara bant seviyesinin örtüşme ile değiştiği tespit edilmiştir [44].



Şekil 2.18. ABGP'de pil veriminin ara bant enerji seviyesi ve örtüşme ile değişimi [44]

ABGP'nin, konvansiyonel güneş pili verim limitini aşması için iki temel çalışma prensibini sağlaması gerekir. Bunlar; alt bant soğurması (E_G 'den küçük enerjili fotonları soğurulması) ile ekstra alt bant fotoakımının üretilmesi ve ayrıca çıkış geriliminin de korunmasıdır. Temel çalışma prensipleri, tamamlanmış ara bant yapılı güneş pilinin karakterizasyon ile doğrulanabilir. Bununla birlikte güneş pilinin çalışmasında rol oynayan diğer parametreler sebebiyle tek bir AB seviyesinin oluşturulması zordur [47]. Bu sebeple ara bant yapılı materyal düzeyinde karakterizasyon pil davranışlarını anlamak için kullanışlıdır.

Ara bant yapılı güneş pili üretim tekniklerinin yanı sıra, güneş pili karakterizasyon teknikleri, özellikle ABGP pilinin temel çalışma prensiplerinin anlaşılması önemlidir. Deneysel çalışmalarda kullanılan bazı karakterizasyon teknikleri aşağıdaki gibidir [47];

Alt bant aralığı için spektral yanıt veya kuantum verimliliği

Spektral yanıt veya kuantum verimliliği olarak ifade edilen fotoakım üretimi, ABGP karakterizasyonunda en çok araştırılan konudur. Bu teknik, kısa devre koşulları altında aydınlatılan güneş pilinde üretilen fotoakımın spektral olarak çözülmesini sağlar. Bir ABGP'de alt bant aralığı aydınlatmasına bağlı akım üretimi sayesinde yarı iletken bant aralığı içindeki ara bant durumlarının varlığına da güçlü kanıt sağlanır [48].

İki-foton alt bant fotoakımı

İki-foton alt bant fotoakımının üretimi, AB davranışını tespit edilmesi için güçlü bir yöntemdir. İlk olarak [48]'de önerilmiştir. Spektral yanıt ölçümünde olduğu gibi kısa devre koşullarında ek bir kızılötesi kaynak açıkken ve kapalıyken indüklenen fotoakımın spektral olarak çözülmesinden oluşur. Kızılötesi kaynak, fotonların enerjisi küçük alt banttan yüksek ve büyük alt banttan küçük olacak şekilde filtrelenmiştir.

Beyaz ışık aydınlatmasında kısa devre akımı artışı

ABGP'nin, tek bant aralıklı referans güneş piline göre kısa devre akımındaki artış (genelde pilin Akım-Gerilim karakteristiğinin bir güneş altında ölçülmesiyle elde edilir), alt bant fotoakımının varlığına dolaylı bir kanıt sunmaktadır [49].

Çıkış voltajının korunması

Çıkış voltajının korunması, ABGP'den iki alt bant aralığının herhangi birinden daha yüksek bir açık devre voltajı elde etme ve yeterince yüksek ışık konsantrasyonu altında E_{VC} 'ye yakın bir çıkış voltajına ulaşma kabiliyeti ile ifade edilir [47].

Elektrolüminesans

Elektrolüminesans (EL) deneyi, bir p-n eklemi içeren numuneye akım enjeksiyonuyla yayımlanan fotonlardan oluşan ışıma spektrumunun ölçülmesinden oluşur. Bu spektrumda üç farklı ışıma tepesinin varlığı alt bant soğurmasının varlığını kanıtlar. Bu ışıma zayıf olsa da fotonların soğurulmasına kanıttır. Bu Shockley–Roosbreck ilişkisi olarak bilinir [50].

Fotolüminesans

Fotolüminesans (FL) deneyleri, yarıiletken araştırmalarında, enerji bant aralığının değerini belirlemek için yaygın olarak kullanılmaktadır. AB materyallerinde ise, bu teknik, AB'nin bant aralığı içindeki konumunu belirlemek için kullanılabilir. Teknik, temel olarak yarıiletkenin soğurulabileceği ışıkla aydınlatılıp malzeme tarafından yeniden yayınlanan fotonların tespiti edilmesi spektral olarak çözümlenmesine dayanır.

Foto-reflektans

Foto-reflektans (FR), yarı iletkenlerde banttan banda geçişleri karakterize etmek için yaygın olarak kullanılan bir tekniktir. FR tekniğinde, numuneye etki eden bir elektrik alan modüle edilerek materyalin reflektansındaki değişiklik ölçülür ve incelenir. AB yapılı malzemelerde ana bant ve alt banttaki optik geçişler bu teknikte tanımlanabilir. Bu teknik, kuantum nokta sistemlerine uygulandığında, kuantum noktaların varlığıyla ortaya çıkan ve AB'yi oluşturan sınırlı sayıdaki seviyelerin varlığını kanıtlayabilir.

2.5.1. Ara bant yapılı materyal üretimi

Bilinen geleneksel yarı iletken materyallerin hiçbiri ara bant davranışı sergilememektedir. Bu da ara bant yapılı materyal üretimini teknolojik bir meydan okuma haline getirmektedir.

Ara bant yapılı güneş pili üretiminde çalışmalar üç temel teknolojiye yoğunlaşmıştır. Birinci ve en yaygın kullanılan teknoloji ara bant yapısının kuantum nokta sistemleri kullanılarak elde edilmesidir [51]. Son derece uyumsuz alaşımlar [52] ve derin seviye safsızlıklarının [53] kullanılması yaygın olarak araştırılan diğer iki teknolojidir. Son yıllarda organik moleküller ile oluşturulan ara bant yapılı güneş pilleri araştırmaları mevcuttur [54]. Organik moleküller ile üretilen ara bant yapılı güneş pilleri yapı olarak yukarı dönüşüm pillerine benzer bir yapıya sahiptirler. Henüz çok yeni olmasına rağmen alt bant fotoakımının tespit edilmesi konunun potansiyeli olduğunu göstermektedir [55].

ABGP üretiminde kullanılan yöntemler içinde, AB yapısının varlığı ve davranışı farklı aday materyaller için çeşitli çalışmalarda tespit edilmiştir. Kuantum nokta sistemleri ile üretilen ara bant yapılı güneş pilleri genellikle epitaksiyel yöntemler ile büyütülen kuantum noktaları içermektedir. Epitaksiyel kuantum noktalar bir yarı iletken konak veya matrisin içeresine gömülü olarak üretilirler. Genelde Kuantum Nokta/Konak materyal şeklinde gösterilirler. InAs/GaAs kuantum nokta sisteminin üzerinde yapılan çalışmaların çokluğu, ABGP üretimi için bu materyal sisteminin ilk aday olmasını sağlamıştır.

Ara bant yapılı güneş pili konsepti dışında, InAs/GaAs kuantum nokta sisteminde alt bant geçişlerinin varlığı, fotolüminesans tekniğiyle [56], elektrolüminesans tekniğiyle [57, 58], soğurma ölçümleriyle [59–61] ve foto-reflektans ölçümleriyle [62–64] kanıtlanmıştır. Ara bant yapılı güneş pili konsepti [41]'de önerildikten sonra InAs/GaAs kuantum nokta sistemi için alt bant geçişlerinin fotoakımları spektral yanıt yöntemi ile 2004'te ölçülebilmıştır [65]. Daha sonraki çalışmalarda bu sistemin iyileştirilmesi ve üretiminde karşılaşılan pratik problemler üzerinde çalışılmıştır [66–72].

Bütün iyileştirmelere rağmen, GaAs konak materyalinin bant aralığı ($E_G=1,42$ eV) optimum bant aralığı ($E_G=1,95$ eV) ile karşılaştırıldığında düşük kalmaktadır. [73]'de analitik modeller kullanılarak yeni kuantum nokta sistemlerinin potansiyeli araştırılmıştır. Bu çalışma göstermiştir ki geniş bant aralığına sahip malzemeler ABGP üretimi için iyi adaylardır. Çalışılan malzemelerden bazıları; InAs/AlGaAs, GaAs/AlGaAs ve InAs/InGaP olmak üzere en iyi sonuçlar InAs/AlGaAs kuantum nokta sistemleriyle elde edilmiştir [73].

Son yıllarda GaSb/GaAs ve InP/InGaP gibi tip 2 kuantum noktalar ile AB yapılı malzemeler üretilmesi üzerine çalışmalar mevcuttur [74–77]. CdTe/CdMnTe, InGaN/InN, InGaN/GaN,

AlGaIn/GaN ve PbSe/GaAs kuantum nokta sistemler ara bant yapılı güneş pili araştırmalarında potansiyelleri analitik ve nümerik çalışmalar ile araştırılan sistemlerdir [78–82].

Epitaksiyel kuantum noktalar ile üretilen modellerde en büyük sorunlardan biri düşük konsantrasyonları (10^{15} - 10^{16} cm⁻³ arasında) sebebiyle alt bant soğurmalarının çok düşük seviyelerde kalmasıdır. Diğer bir sorun ise kuantum noktaların varlığı ile oluşan ayırık durumların, boyut ve şeklin optimum olmaması sebebiyle, birbirlerine veya bantlara yakın olmasıdır. Bu da voltaj korunumunu engelleyen yüksek ışımasız rekombinasyona sebep olur. Yakın enerji seviyeleri arasındaki meydana gelen bu hızlı geçişler pilde termalizasyona veya Auger rekombinasyonuna sebep olabilir [55].

ABGP araştırmasında yeni bir yaklaşım olarak koloidal kuantum noktalar kullanılarak bu sorunların önüne geçebileceği düşünülmektedir [55]. Koloidal kuantum noktalar AB materyali olarak ilk defa 2013'te önerilmiştir [83]. Yüksek konsantrasyonları sayesinde koloidal kuantum noktalı AB materyallerinin yüksek alt bant soğurması yapabileceği düşünülmektedir.

ABGP üzerine çalışmalar yüksek oranda kuantum noktalar üzerine ilerlese de son derece uyumsuz alaşımlar ve derin seviye safsızlıkları üzerine paralel ilerleyen çalışmalar mevcuttur. Uyumsuz alaşım prototipleri bazı umut verici sonuçlara sahiptir. Bunlardan en önemli olanı iki adımlı foton soğurmasıyla oluşan alt bant fotoakım yoğunluğunun ZnTe:O⁴ ve GaAs:N ile üretilmiş ABGP'de tespit edilmesidir [84, 85]. Uyumsuz alaşımlarda tespit edilen alt bant akımı genellikle kuantum noktalı prototiplerden yüksektir [86].

Derin seviye safsızlıkları içeren prototipler için sonuçlar uyumsuz alaşımlar kadar umut verici değildir [86]. GaAs:Ti ve GaN:Mn gibi materyaller aday olarak önerilmiş ve üretilmiştir fakat teknolojik zorluklarla karşılaşmıştır [87, 88]. Bu materyallerde alt bant geçişleri tespit edilmiş ama ABGP için önemli olan temel çalışma prensipleri tespit edilememiştir.

Yüksek verimli ABGP için bahsedilen iki temel çalışma prensibi sadece kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pillerinde tespit edilmiştir. İki foton alt bant fotoakımı ilk defa 2006'da InAs/GaAs kuantum nokta sistemi için düşük sıcaklıklarda tespit edilmiştir [71]. Voltaj

korunumu tespiti ise yine düşük sıcaklıklarda InAs/GaAs kuantum nokta sistemi için 2010 yılında gerçekleşmiştir [89].

S-Q verim limitini aşabilecek bir ABGP’de iki temel çalışma prensibi aynı anda tespit edilebilmelidir. Oda sıcaklığında iki temel çalışma prensibinin birlikte tespit edilmesi ve S-Q verim limitini aşan bir ABGP üretilmesi henüz başarılamayan hedefler arasındadır [55]. Üretilen ara bant yapılı güneş pili prototipleri referans konvansiyonel güneş pillerine göre daha düşük verimlere sahiptir.

2.6. Kuantum Noktalı Ara Bant Yapılı Güneş Pilleri ve Tarihçesi

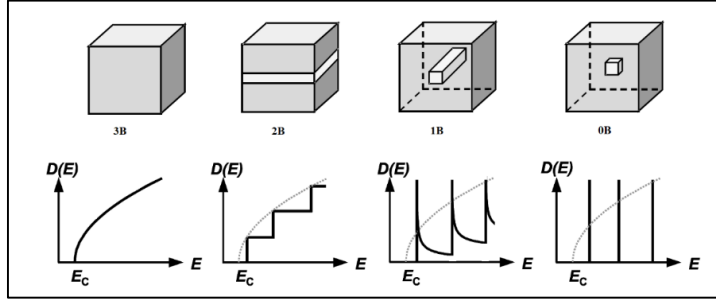
Yarı iletken cihaz üretiminde ve araştırmasında sıklıkla kullanılan küçük boyutlu yarıiletken yapılar olan kuantum noktalar, kuantum kablolar ve kuantum kuyuları genelde nanoyapılar olarak adlandırılırlar. Kuantum noktalar günümüzde, lazerler, LED’ler, tek elektron transistörler, güneş pilleri gibi yarı iletken uygulamalarının yanında biyoloji, tıp gibi birçok alanda kullanılmaktadır.

2.6.1. Nanoyapılar

Yarı iletken malzemelerin boyutları küçüldükçe (100 nm’nin ve altında) Newton mekaniğiyle açıklanamayan davranışlar sergilemeye başlarlar. Bu boyutlarda Kuantum mekaniği geçerli olmaktadır. Boyutlar küçüldükçe malzemenin parametreleri (optik, elektriksel vb. özellikleri) boyutlar ile değişim göstermeye başlar. Bu özellikleriyle nanoyapılar uzun zamandır akademik çalışmalara konu olmuşlardır.

Nanoyapıların şematik gösterimleri ve durum yoğunlukları Şekil 2.19’de görülmektedir. Yığın yarı iletken taşıyıcılar malzeme boyunca üç boyutta serbest hareket edebilmektedir. Yığın yarı iletken tek boyutta sınırlandırılırsa kuantum kuyusu elde edilir. Taşıyıcılar kuantum kuyusu içerisinde iki boyutta serbest hareket edebilir. Kuantum kuyuları yarı iletken lazerler, fotodedektörleri gibi birçok cihazın yapımında kullanılmaktadır. Yığın yarı iletkenin boyutu iki boyutta sınırlandırılırsa kuantum kablolar elde edilir. Kuantum kablolarda taşıyıcılar tek boyutta serbest hareket edebilirler. Kuantum noktalar ise 3 boyutta sınırlandırılmış ve neredeyse “sıfır boyutlu” yarı iletken materyallerdir. Kuantum noktalar yığın yarı iletkenlere göre çok küçük boyutlarda oldukları için sıfır boyutlu sayılmaktadırlar.

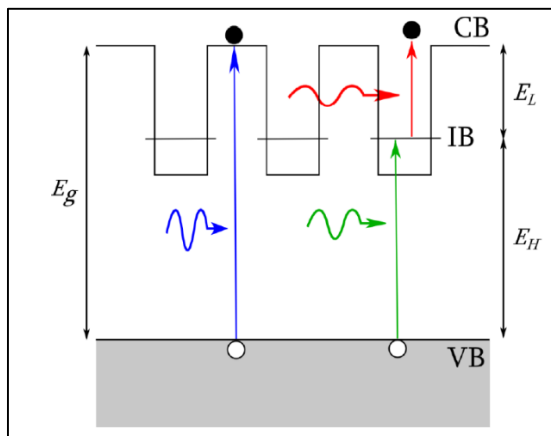
Küçük boyutları yüzünden kuantum noktalarda sınırlı sayıda elektron bulunur. Bu da kuantum noktalarda ayırık enerji seviyelerine sebep olur.



Şekil 2.19. Yığın yarı iletkenin ve nanoyapıların şematik gösterimleri ile durum yoğunlukları [90]

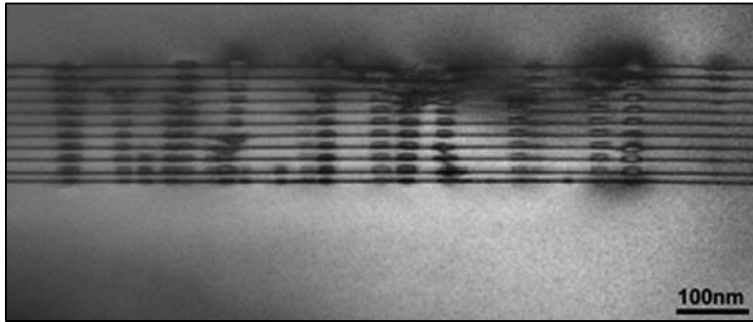
2.6.2. Kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili yapısı

Uzun zamandır akademik çalışmalara konu olan kuantum noktalar, ara bant yapılı güneş pili üretimi için 2000'de önerilmiştir [51]. Küçük bant aralığına sahip kuantum noktaları büyük bant aralığına sahip yığın yarı iletken konak materyaline gömülmesiyle CB'de ve VB'de ofsetler oluşur. Kuantum noktanın varlığıyla konak malzemenin yasak bandında sınırlı enerji durumları ortaya çıkar. Kuantum nokta üç boyutta sınırlandığı için bu durumlar ayırık enerji seviyeleridir. Bu ayırık enerji seviyelerinin ara bant olarak davranması ve alt bant fotonlarının bu seviyeler üzerinden soğurulması hedeflenmiştir. Şekil 2.20'de yarı iletken içerisine gömülen kuantum noktalarla birlikte enerji bant diyagramının değişimi ve oluşan enerji seviyesi görülmektedir. Şekilde tek ayırık enerji seviyesi görülse de gerçekte yasak bantta birden çok ayırık enerji seviyesi oluşur.



Şekil 2.20. Kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili enerji bant diyagramı [42]

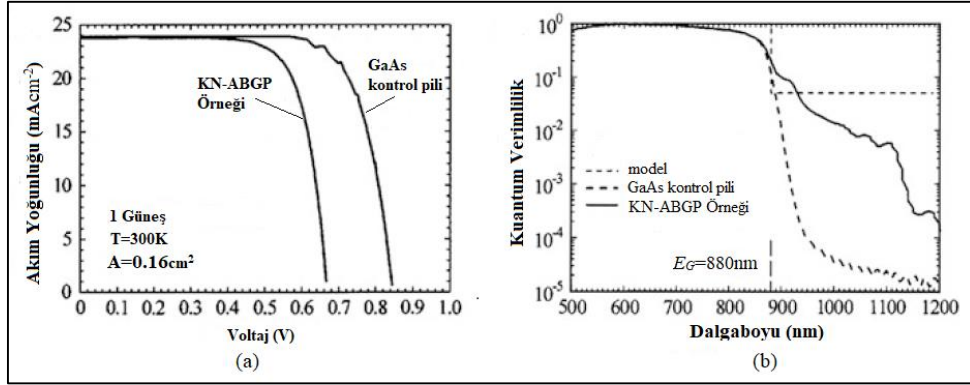
Çoğu kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili (KN-ABGP) prototipi, GaAs matrisi içerisinde büyütülen InAs kuantum noktalardan oluşur. InAs/GaAs kuantum noktalar genellikle Moleküler Demet Epitaksisi kullanılarak Stranski-Krastanov büyütme modunda üretilirler [91]. Kuantum nokta katmanları içeren ara bant yapılı materyal p- ve n-tipi GaAs yarı iletken arasına sandviç şeklinde yerleştirilir. Şekil 2.21’de örnek InAs/GaAs kuantum noktalı ara bant materyalinin Taramalı Elektron Mikroskobu (TEM) görüntüsü görülmektedir.



Şekil 2.21. Stranki-Krastanov büyütme modudan büyütülen InAs/GaAs kuantum noktaların taramalı elektron mikroskobu görüntüsü [91]

2004 yılında üretilen ilk kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili prototipinin kuantum verimliliği ve akım-gerilim karakteristiği Şekil 2.22’de görülmektedir [65]. Alt bant fotonlarının soğurulmasıyla beklenen kısa devre fotoakımı artışı ihmal edilebilecek seviyedeyken açık devre voltajındaki düşüş yüksektir. Bununla birlikte kuantum verimliliği incelenecek olursa konvansiyonel GaAs güneş piline göre kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pilinde alt bant soğurması gözlemlenmiştir.

InAs/GaAs kuantum nokta sistemlerinin elektronik bant yapıları ve optik özellikleri teorik olarak hesaplanabilir. Kuantum nokta ve konak materyallerin latis sabitleri arasındaki farktan kaynaklanan gerinim, kuantum nokta yapısında ve elektro-optik özelliklerinde belirleyici rol oynar. Gerinim etkilerini içeren kuantum nokta elektronik bant yapısı k.p teorisi kullanılarak hesaplanabilir [92–94]. Etkin kütle yaklaşımı ve k.p metoduyla kübik, piramit, yarım piramit, lens, küresel vb. şekillerdeki InAs kuantum noktaların varlığıyla GaAs yasak bandında ortaya çıkan ayırık seviyeler çeşitli çalışmalarda hesaplanmıştır [95–99]. Kuantum noktaların soğurma katsayıları ise literatürde dört bant veya sekiz bant k.p metodu kullanılarak hesaplanmıştır [100–102].



Şekil 2.22. InAs/GaAs kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili ve GaAs konvansiyonel güneş pili için a) akım gerilim karakteristiği b) kuantum verimliliği [91]



3. ARA BANT YAPILI GÜNEŞ PİLLERİ VE MATEMATİK MODELİ

Bu bölümde, ilk olarak ABGP'nin analizinde kullanılacak olan Detaylı Denge Modeli (DDM) Bölüm 3.1'de verilecektir. DDM kullanılarak, tek ara banda sahip ABGP'nin kısa devre akımı, açık devre voltajı ve verim denklemleri elde edilecektir. Bölüm 3.2'de, InAs/GaAs kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pili için kuantum noktaların varlığıyla ortaya çıkan ara bant enerji seviyelerinin elde edilebilmesi için tek bant k.p metodu sunulacaktır. Daha sonra KN-ABGP için alt bant soğurma katsayılarının tek bant ve dört bant k.p metodu ile elde edilişi incelenecektir. Bölüm 3.2'de temel alınan InAs/GaAs KN sistemi için Detaylı Denge Modeli, KN-ABGP için Kuasi-Fermi seviyelerinin elde edilmesi ve akım gerilim denklemleri Bölüm 3.3'te sunulacaktır.

Ara bant yapılı güneş pilleri bugüne kadar deneysel ve teorik çok sayıda çalışmaya konu olmuştur. Soğurma katsayıları arasında örtüşme, yüksek enerjili fotonların soğurulmasıyla oluşabilecek Auger mekanizması, ara bandın doluluk oranın, soğurma katsayıları arasında örtüşmenin ve malzeme parametrelerinin pil performansı üzerine etkileri detaylı denge modeli ve drift-difüzyon modeli kullanılarak incelenmiştir [40, 43, 44, 46, 103–108].

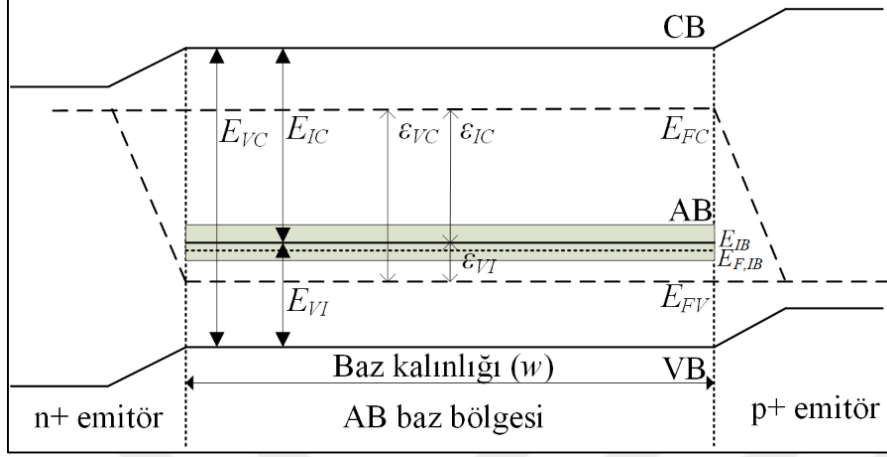
3.1. Ara Bant Yapılı Güneş Pili ve Detaylı Denge Modeli

Bu çalışmada yasak bandında tek ve ideal bir ara banda sahip ABGP için detaylı denge modeli verilmiştir. Ara bant yapısının oluşturulması için literatürde önerilen ve kullanılan yöntemler Bölüm 2.4.1'de incelenmiştir. Ara bant yapılı güneş pili detaylı denge modelinde güneş pilinin tam soğurma yaptığı taşıyıcı mobilitelerinin sonsuz ve seri direncin sıfır olduğu kabul edilir.

3.1.1. Ara bant yapılı güneş pilinin yapısı ve çalışması

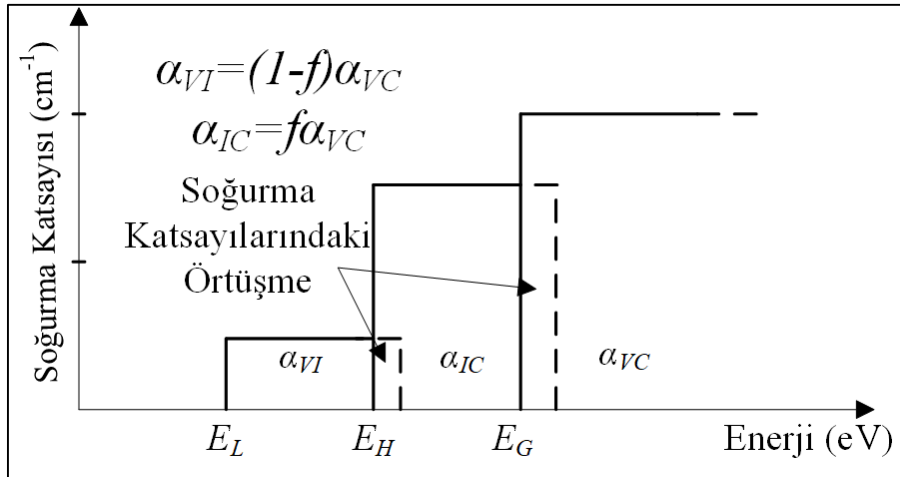
Ara bant yapılı güneş pili için en yaygın kullanılan yapı, p-i-n yapısıdır. Bu yapı, yüksek katkılı p- ve n- emitör katmanları arasında sandviç olmuş düşük katkılı bölgenin eklenmesiyle oluşturulur. Bu düşük katkılı bölgenin bir ara banda sahip olduğu kabul edilir. Ara bant yapılı güneş pilinin yapısı ve enerji bant diyagramı Şekil 3.1'de verilmiştir. Şekil

3.1’de görüldüğü gibi ara bantın varlığıyla birlikte baz bölgesi enerji bant aralığı, E_{VI} ve E_{IC} olmak üzere ikiye bölünür.



Şekil 3.1. Ara bant yapıli güneş pilinin yapısı ve enerji bant diyagramı [108]

Ortaya çıkan iki bant, alt bantlar olarak adlandırılırken, baz bölgesi bant aralığı E_G veya E_{VC} , ana bant olarak adlandırılır. ABGP’de alt bantlar ve ana bant için Şekil 3.2’de gösterilen üç farklı soğurma katsayısı tanımlanmaktadır. Valans banttana ara banda geçişler için α_{VI} , ara banttana iletkenlik bandına geçişler için α_{IC} ve valans banttana iletkenlik bandına doğrudan geçişler için α_{VC} tanımlanmıştır.

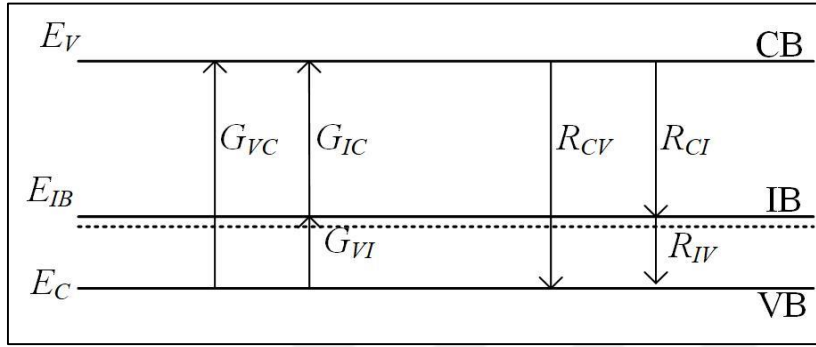


Şekil 3.2. Örtüşmeli durumda ana bant ve alt bant soğurma katsayıları [108]

Ara bant yapıli güneş pilinin basitleştirilmiş enerji bant diyagramı ve üretim ve rekombinasyon süreçleri Şekil 3.3’de gösterilmiştir. Ara bant yapıli güneş piline ışık düşürüldüğünde, E_{ph} gelen fotonun enerjisi olmak üzere üç olasılık söz konusu olur;

$E_{IC} > E_{VI}$ olmak üzere;

- $E_{IC} > E_{ph} > E_{VI}$ ise, foton ara bant tarafından soğurulur ve bir elektron valans banttan ara banda geçer
- $E_G > E_{ph} > E_{IC}$ ise, foton ara bant tarafından soğurulur ve bir elektron ara banttan iletkenlik bandına geçer
- $E_{ph} > E_G$ ise, foton ana bant tarafından soğurulur ve bir elektron valans banttan iletkenlik bandına geçer.



Şekil 3.3. Ara bant yapılu güneş pilinin basitleştirilmiş enerji bant diyagramı üretim ve rekombinasyon süreçleri [108]

İdeal ABGP’de yukarıda bahsedilen üç süreç geçerlidir ve her foton uygun enerjiye sahip bant tarafından soğurulur. Fotonların uygun olmayan bantlar tarafından soğurulmasına soğurma katsayıları arasında örtüşme olarak adlandırılır. Örneğin, $E_G > E_{ph} > E_{IC}$ olan bir foton küçük ara bant tarafından soğurulabilir ve ara banttan iletkenlik bandına bir elektron geçmesi gerekirken valans banttan iletkenlik bandına bir elektron geçer. Ara bant yapılu güneş pilinden alınan çıkış gerilimi ise Şekil 3.1’de de görülen Kuasi-Fermi seviyelerinin ayrılması kadardır.

3.1.2. Ara bant yapılu güneş pili matematik modeli

Ara bant yapılu güneş pillinde VB, CB ve AB arasındaki optik geçişler için tanımlanan üretim (G_{VC} , G_{VI} ve G_{IC}) ve rekombinasyon (R_{CV} , R_{CI} ve R_{IV}) hızları Şekil 3.3’de gösterilmiştir. R_{CI} ve R_{IV} alt bant rekombinasyon hızları, ışımalı rekombinasyon, ışımasız rekombinasyon ve soğurma katsayıları arasında örtüşme olduğunda ortaya çıkan dahili rekombinasyon hızlarının toplamıdır. Ana bandın fotoakım yoğunluğu, VB den CB’ye

doğrudan geçişler sebebiyle oluşan foto üretim hızı, G_{VC} , kullanılarak hesaplanabilir [40, 44, 108];

$$J_{VC} = q \int_0^w G_{VC} dx = q \int_0^w \left[\int_{\varepsilon} \alpha_{VC} F_{inc} \exp(-\alpha_{TOT} x) d\varepsilon \right] dx \quad (3.1)$$

$$\alpha_{TOT} = \alpha_{VC} + \alpha_{VI} + \alpha_{IC} \quad (3.2)$$

Eşitlik 3.1’de, ε enerjiyi, x fotonların kat ettiği mesafeyi, F_{inc} pilin ön yüzeyine gelen foton akısını temsil etmektedir. F_{inc} aşağıdaki eşitlikteki gibi ifade edilir;

$$F_{inc} = X \frac{2\pi}{h^3 c^2} \sin^2 \theta_s \frac{\varepsilon^2}{\exp\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_s}\right) - 1} \quad (3.3)$$

Bu eşitlikte, X güneş konsantrasyonunu, h Planck sabitini, c ışık hızını, θ_s güneş ve pil arasındaki katı açıyı, k_B Boltzman sabitini ve T_s ise Kelvin cinsinden güneş sıcaklığını temsil etmektedir. Ara bant yapılı güneş pillerinde, düşük enerjili fotonların ($E_{ph} < E_G$) soğurulması ara bant üzerinden ekstra akım katkısı sağlamaktadır. Alt bant fotoakım yoğunlukları, J_{VI} ve J_{IC} , ana bant fotoakım yoğunluğuna benzer şekilde alt bant foto üretim hızları, G_{VI} ve G_{IC} , kullanılarak hesaplanabilir;

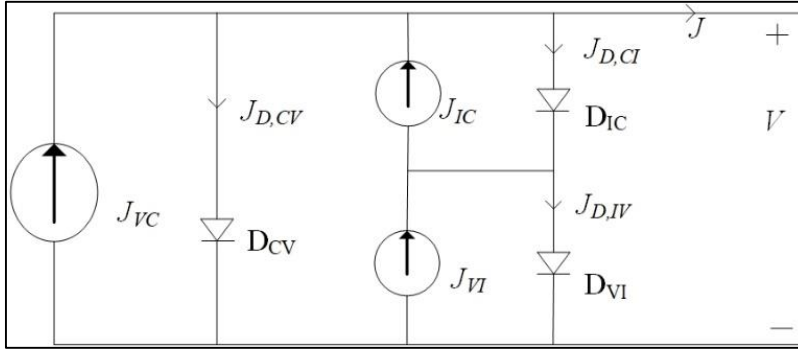
$$J_{VI} = q \int_0^w G_{VI} dx = q \int_0^w \left[\int_{\varepsilon} \alpha_{VI} F_0 \exp(-\alpha_{TOT} x) d\varepsilon \right] dx \quad (3.4)$$

$$J_{IC} = q \int_0^w G_{IC} dx = q \int_0^w \left[\int_{\varepsilon} \alpha_{IC} F_0 \exp(-\alpha_{TOT} x) d\varepsilon \right] dx \quad (3.5)$$

Ara bant yapılı güneş pilinde toplam fotoakım yoğunluğu ana bant fotoakım yoğunluğu ile alt bant fotoakım yoğunluklarının küçüğünün toplanmasıyla elde edilir. Ara bant yapılı güneş pili diyot eşdeğer devresi Şekil 3.4’te verilmiştir. Ara bant yapılı güneş pilinin toplam çıkış akım yoğunluğu, J , ise aşağıdaki eşitlikle hesaplanır;

$$J = J_{VC} + J_{VI/IC} - J_D \quad (3.6)$$

Eşitlik 3.6’da J_D , ara bant yapılı güneş pilinin toplam karanlık akım yoğunluğudur ve ışımalı rekombinasyon, ışımasız rekombinasyon ve soğurma katsayıları arasında örtüşme dolayısıyla ortaya çıkan dahili rekombinasyon akım yoğunluklarının kombinasyonudur.



Şekil 3.4. Ara bant yapıları güneş pilinin diyot eş değer modeli [108]

CB'den VB'ye optik geçişler (elektronların boşluklar ile birleşirken enerjisi kadar foton yayımlandığı geçişler) için tanımlanan ana bant ışımalı (radiative) rekombinasyon akım yoğunluğu ışımalı rekombinasyon hızı kullanılarak aşağıdaki gibi ifade edilir [40, 44, 108];

$$J_{CV}^{rad} = q \int_0^w R_{CV}^{rad} dx$$

$$= q \int_0^w \left[\frac{2\pi}{h^3 c^2} \int_{\varepsilon} \left[\alpha_{CV} \left(\frac{\alpha_{VC} v_{VC} + \alpha_{IC} v_{IC} + \alpha_{VI} v_{VI}}{\alpha_{TOT}} \right) \exp(-\alpha_{TOT} x) \varepsilon^2 \right] d\varepsilon \right] dx \quad (3.7)$$

Bu eşitlikte v_{VC} , v_{VI} ve v_{IC} ise Kuasi-Fermi seviyelerinin ayrılmasıyla ilişkili Bose-Einstein faktörleridir ve aşağıdaki gibi ifade edilir [43];

$$v_{XY} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{XY}}{k_B T_C}\right) - 1} \quad (3.8)$$

Bu eşitlikte, XY bantları (VC, IC veya VI) temsil etmektedir ve ε_{XY} X – Y bantları arasındaki Kuasi-Fermi seviyesindeki ayrılma miktarıdır. AB'den VB'ye ve CB'den AB'ye optik geçişler sebebiyle oluşan AB ışımalı rekombinasyon akımları sırasıyla benzer şekilde ifade edilebilir;

$$J_{IV}^{rad} = q \int_0^w R_{IV}^{rad} dx$$

$$= q \int_0^w \left[\frac{2\pi}{h^3 c^2} \int_{\varepsilon} \left[\alpha_{VI} \left(\frac{\alpha_{VC} v_{VC} + \alpha_{IC} v_{IC} + \alpha_{VI} v_{VI}}{\alpha_{TOT}} \right) \exp(-\alpha_{TOT} x) \varepsilon^2 \right] d\varepsilon \right] dx \quad (3.8)$$

$$J_{CI}^{rad} = q \int_0^w R_{CI}^{rad} dx$$

$$= q \int_0^w \left[\frac{2\pi}{h^3 c^2} \int_{\varepsilon} \left[\alpha_{IC} \left(\frac{\alpha_{VC} v_{VC} + \alpha_{IC} v_{IC} + \alpha_{VI} v_{VI}}{\alpha_{TOT}} \right) \exp(-\alpha_{TOT} x) \varepsilon^2 \right] d\varepsilon \right] dx \quad (3.9)$$

Ara bandın ışımasız (non-radiative) rekombinasyon akım yoğunlukları, ise aşağıdaki eşitlikler ile ifade edilir;

$$J_{IV}^{nr} = e \int_0^w R_{IV}^{nr} dx = e \int_0^w \left[\frac{p_{eq}}{\tau_h} \exp\left(\frac{\varepsilon_{VI}}{k_B T_C}\right) \right] dx \quad (3.10)$$

$$J_{CI}^{nr} = e \int_0^w R_{CI}^{nr} dx = e \int_0^w \left[\frac{n_{eq}}{\tau_e} \exp\left(\frac{\varepsilon_{IC}}{k_B T_C}\right) \right] dx \quad (3.11)$$

τ_e ve τ_h baz gölgesinde elektron ve boşlukların ışımasız rekombinasyon ömür sürelerini, ε_{VI} ve ε_{IC} alt bantlar için Kuasi-Fermi seviyelerindeki ayrılmayı temsil etmektedir. n_{eq} ve p_{eq} ise pil aydınlatılmadan önceki, dengede, serbest taşıyıcı konsantrasyonudur ve geleneksel yarıiletkenler için geçerli eşitlikler ile hesaplanır;

$$n_{eq} = N_C \exp\left(\frac{-(E_C - E_{FI})}{k_B T_C}\right) \quad (3.12)$$

$$p_{eq} = N_V \exp\left(\frac{-(E_{FI} - E_V)}{k_B T_C}\right) \quad (3.13)$$

Bu eşitlikte N_C ve N_V sırasıyla CB ve VB'deki etkin durum yoğunluğudur. E_C , E_{FI} ve E_V ise Şekil 3.1'de gösterilmiştir. Dahili rekombinasyon akım yoğunlukları, α_{VC} , α_{VI} ve α_{IC} soğurma katsayıları arasında örtüşme olduğu durumlarda ortaya çıkan dahili (internal) rekombinasyon hızları kullanılarak aşağıdaki gibi hesaplanır [40, 44];

$$J_{CV/VI}^{int} = e \int_0^w R_{CV/VI}^{int} dx = e \int_0^w \left[\frac{8\pi n_{ref}^2}{h^3 c^2} \int_{\varepsilon} \left(\frac{\alpha_{VC} \alpha_{VI}}{\alpha_{TOT}} (v_{CV} - v_{VI}) \right) \varepsilon^2 d\varepsilon \right] dx \quad (3.14)$$

$$J_{CV/CI}^{int} = e \int_0^w R_{CV/CI}^{int} dx = e \int_0^w \left[\frac{8\pi n_{ref}^2}{h^3 c^2} \int_{\varepsilon} \left(\frac{\alpha_{VC} \alpha_{IC}}{\alpha_{TOT}} (v_{CV} - v_{CI}) \right) \varepsilon^2 d\varepsilon \right] dx \quad (3.15)$$

$$J_{CI/IV}^{int} = e \int_0^w R_{CI/IV}^{int} dx = e \int_0^w \left[\frac{8\pi n_{ref}^2}{h^3 c^2} \int_{\varepsilon} \left(\frac{\alpha_{IC} \alpha_{VI}}{\alpha_{TOT}} (v_{CI} - v_{IV}) \right) \varepsilon^2 d\varepsilon \right] dx \quad (3.16)$$

$$J_{IV/CI}^{int} = e \int_0^w R_{IV/CI}^{int} dx = e \int_0^w \left[\frac{8\pi n_{ref}^2}{h^3 c^2} \int_{\varepsilon} \left(\frac{\alpha_{VI} \alpha_{IC}}{\alpha_{TOT}} (v_{IV} - v_{CI}) \right) \varepsilon^2 d\varepsilon \right] dx \quad (3.17)$$

Bu eşitliklerde n_{ref} kırılma indisini temsil etmektedir. Şekil 3.3’de gösterilen ara bant seviyesiyle ilgili üretim ve rekombinasyon terimlerinin AB denge denklemini sağlaması gereklidir [109];

$$G_{IC} - R_{CI}^{rad} - R_{CI}^{nr} - R_{CV/CI}^{int} - R_{CI/IV}^{int} = G_{VI} - R_{IV}^{rad} - R_{IV}^{nr} - R_{CV/IV}^{int} - R_{IV/CI}^{int} \quad (3.18)$$

Eşitliğin her iki tarafındaki son iki terim dahili rekombinasyon hızlarıdır ve soğurma katsayılarında örtüşme ile ortaya çıkmaktadır. Eğer soğurma katsayıları arasında örtüşme yoksa denklem aşağıdaki eşitliğe indirgenir;

$$G_{IC} - R_{CI}^{rad} - R_{CI}^{nr} = G_{VI} - R_{IV}^{rad} - R_{IV}^{nr} \quad (3.19)$$

Şekil 3.4’te görüldüğü gibi, seri bağlı diyotlar sebebiyle ara banttan çekilebilecek akım alt bant akımlarının küçük olmasıyla sınırlıdır. Bu sebeple VB’den CB’ye ara bant üzerinden en verimli geçişler alt bant üretim hızlarının eşitlendiği durumlarda olmaktadır [109];

$$G_{IC} = G_{VI} \quad (3.20)$$

Bu durumda, rekombinasyon terimleri de Eşitlik 3.18’de verilen AB denge denklemini sağlamak için eşitlenmelidir. Eşitlik 3.6’da verilen ara bant yapılu güneş pilinin toplam karanlık akım yoğunluğu aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$J_D = J_{CV}^{rad} + J_{CI}^{rad} + J_{CI}^{nr} + J_{CV/CI}^{int} + J_{CI/IV}^{int} = J_{CV}^{rad} + J_{IV}^{rad} + J_{IV}^{nr} + J_{CV/VI}^{int} + J_{IV/CI}^{int} \quad (3.21)$$

Ara bant yapılu güneş pilinde alt bant soğurmalarının eşit olduğu durumlarda, $\alpha_{CI} = \alpha_{IV}$, AB üzerinden en verimli geçişler AB’nin elektronlarca yarı dolu olduğu durumdadır [110]. Ara bandın doluluk oranının ve eşit olmayan alt bant soğurmasının pil verimine etkilerini incelemek için alt bant soğurma katsayıları modele aşağıdaki gibi dahil edilmiştir [107, 108, 111, 112];

$$\alpha_{VI} = \alpha_{VI0}(1 - f) = \sigma_{opt,h} N_{IB}(1 - f) \quad (3.22)$$

$$\alpha_{IC} = \alpha_{IC0}f = \sigma_{opt,e} N_{IB}f \quad (3.23)$$

Burada α_{IC0} ve α_{VI0} soğurma katsayısı sabitleridir ve geçişlerin salınım gücünü ve enerji bantlarındaki durumların yoğunluğunu temsil eder [107]. N_{IB} , AB'deki durum yoğunluğunu temsil ederken $\sigma_{opt,e}$ ve $\sigma_{opt,h}$ sırasıyla elektron ve boşluklar için optik yakalama kesit alanıdır. Yukarıdaki denklemlerde, f , AB'nin durumlarının doluluk oranını temsil eder ve 0 (tamamen boş) ile 1 (tamamen dolu) arasında değere sahiptir. AB'deki durum yoğunluğunun pil verimine etkilerini incelemek için, ışımasız rekombinasyon ömür süresi de modele eklenmiştir [107];

$$\tau_{nr} = \frac{1}{CN_{IB}} \quad (3.24)$$

Burada C yakalama katsayısıdır. Şekil 3.1'te görülen ara bant yapılı güneş pilinin çıkış voltajı, V , elektron ve boşlukların kuasi-Fermi seviyesi ayrılması kadardır [44];

$$eV = \varepsilon_{VI} + \varepsilon_{IC} = \varepsilon_{VC} \quad (3.25)$$

Ara bant yapılı güneş pili Detaylı Denge Modelinde I-V karakteristikleri ve pil verimi hesaplanırken; ε_{VI} 'a sıfırdan başlayarak $(E_{IB}-E_V)$ 'ye kadar değerler verilirken ε_{IC} ve ε_{VC} değerleri Eşitlik 3.18'deki AB denge denklemini sağlayacak şekilde hesaplanır. Daha sonra her çıkış voltaj değeri için çıkış akım yoğunluğu hesaplanarak ara bant yapılı güneş pilinin Akım-Gerilim karakteristiği elde edilir. Çıkış voltajının sıfır olduğu akım değeri kısa devre akımı, J_{SC} , olarak tanımlanırken, çıkış akımının sıfır olduğu voltaj değeri açık devre voltajı, V_{OC} , olarak tanımlanır. Ara bant yapılı güneş pilinin verimi, η , konvansiyonel güneş pilleriyle benzer şekilde aşağıdaki eşitlik kullanılarak hesaplanır;

$$\eta = \frac{J_m \times V_m}{P_{in}} = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{J_{SC} \times V_{OC} \times FF}{P_{in}} \quad (3.26)$$

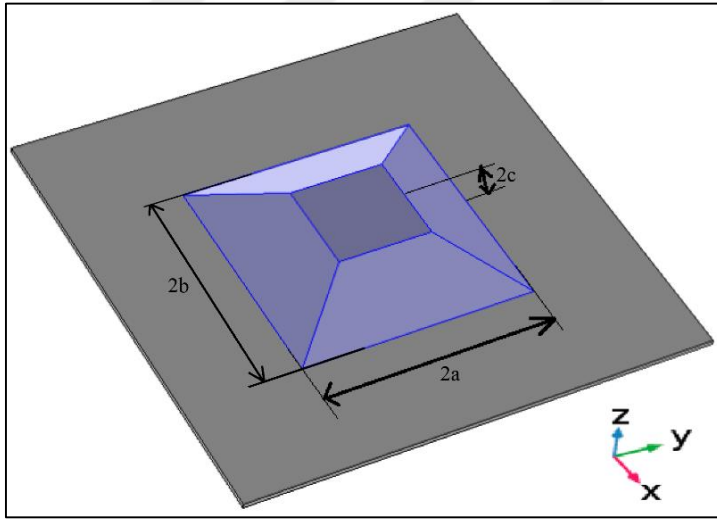
Bu eşitlikte FF doluluk faktörünü temsil etmektedir.

3.2. Kuantum Noktalı Ara Bant Yapılı Güneş Pili ve k.p Modeli

Bu kısımda, InAs/GaAs kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pilinde kuantum noktaların varlığıyla ortaya çıkan enerji seviyelerini ve bu enerji seviyelerinden yapılan geçişler (Şekil 2.20) için tanımlanan alt bant soğurma katsayılarını elde etmek için kullanılan etkin kütle

yaklaşımı ve k.p metodu incelenecektir. Bu çalışmada, InAs/GaAs kuantum noktaları ile oluşturulan ABGP’de bağlı ve saçılma durumlarının enerji seviyeleri eşit etkin kütle için ve etkin kütle uyumsuzluğu için tespit edilebilmesi için tek bant k.p metodu sunulacaktır. Kuantum nokta varlığıyla oluşan ara banttan iletkenlik bandına ve valans banttan ara bana geçişler için soğurma katsayıları için tek bant ve dört bant k.p metodu incelenecektir. Bu yöntemler ile hesaplanan soğurma katsayılarını ve enerji seviyelerini, KN-ABGP için önerilen detaylı denge modelinde kullanarak akım- gerilim karakteristiklerini ve pil verimini bulmak için gerekli denklemler verilecektir.

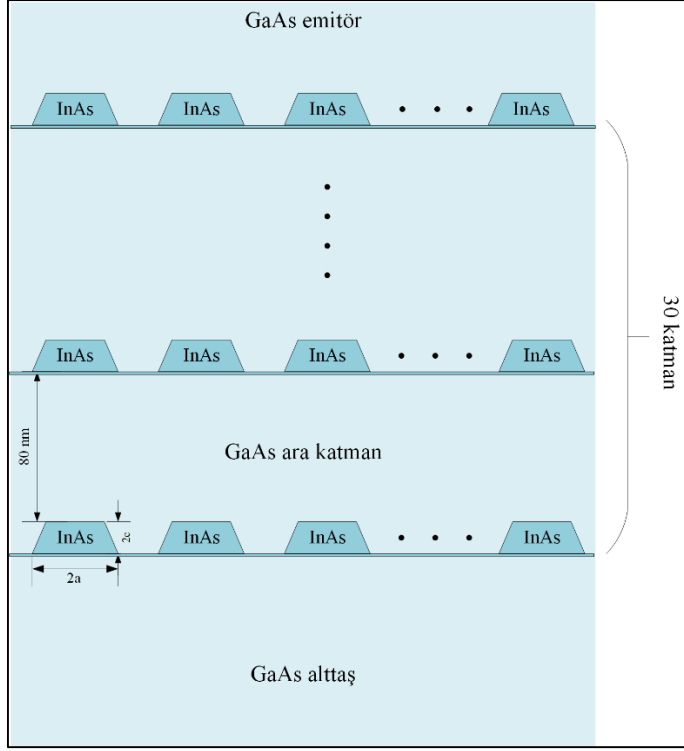
Bu tez çalışması kapsamında temel alınan KN-ABGP yapısı Antolin ve diğerleri tarafından üretilen ve SB olarak adlandırılan InAs/GaAs kuantum nokta sistemidir [91]. KN-ABGP yapısı moleküler demet epitaksisinde Stranski-Krastanov modunda büyütülmüştür. Yapı GaAs yarıiletken içerisinde ince bir “wetting” katmanı üzerinde büyütülen InAs kuantum noktalar gerinim etkisiyle kare tabanlı tepesi kesilmiş piramit şeklini almıştır. Şekil 3.5’te KN-ABGP yapısı ve tek bir tepesi kesilmiş piramit şekilli kuantum noktanın yapısı görülmektedir.



Şekil 3.5. Tepesi kesilmiş piramit şekilli kuantum noktaların şematik gösterimi

Toplam 30 adet katman olarak büyütülen kuantum nokta üzerinde gerinim etkinlerini azaltmak için InAlGaAs gerinim önleyici katman büyütülmüştür. Ayrıca kuantum noktaların varlığıyla ortaya çıkan ara bant durumlarının CB’den yeterince ayrılmaması sebebiyle AB ve CB arasında taşıyıcı kaçışları mevcuttur [91]. Bu kaçışları önlemek için katmanlarının arasında 80nm kalınlığında GaAs katman mevcuttur.

Ara bant yapılı materyalin kalınlığı $2.4\mu\text{m}$ olarak kabul edilmiştir. Ara bant yapılı materyalin z yönünde $2.4\mu\text{m}$ kalınlığa sahip homojen yapıda olduğu ve xy düzleminde sonsuz uzunlukta olduğu kabul edilmektedir. AB katmanı arka yüzeyde büyük bir GaAs alttaş üstte ise ince GaAs emitör katmanları arasında sandviç olmuş haldedir. Şekil 3.6’da KN-ABGP yapısının basitleştirilmiş şematik gösterimi görülmektedir.



Şekil 3.6. KN-ABGP yapısı basitleştirilmiş şematik gösterimi

Kuantum nokta geometrisi nokta davranışı üzerinde etkiye sahiptir ve bu sebeple farklı çalışmalarda çeşitli geometriler benimsenmiştir; küresel, lens, kutu vb. [96, 113–115]. Bu çalışmada, tepesi kesilmiş kare tabanlı piramit şekilli InAs kuantum noktalar kolaylık için $2a=2b$ kenarlı kare tabana ve $2c$ yüksekliğe sahip kutu şekline sahip olduğu kabul edilmiştir. InAs/GaAs kuantum nokta sisteminde kuantum nokta varlığıyla ortaya çıkan enerji seviyelerini ve soğurma katsayılarını hesaplamak için k.p metodu benimsenmiştir.

3.2.1. Kutu şekilli kuantum noktalarda enerji seviyeleri ve soğurma katsayılarının bulunması

K.p metodu yarıiletken bant yapısını bir k_0 noktasında, özellikle bandın minimum ve maksimum noktalarında, analiz etmek için kullanılan çok kullanışlı bir tekniktir [116].

Maksimum/minimum noktaların $k_0=0$ 'da olduğunu düşünmek metodu direkt bant yapılı III-V bileşikleri için uygun bir yaklaşımdır. K.p metodu Bardeen [117] tarafından ortaya atılmış Kane [118], Luttinger-Kohn [119] ve Bir-Pikus [120] tarafından geliştirilmiştir. Son yıllarda nanoyapılar üzerinde sıkça kullanılmaktadır. Bu çalışmada kuantum nokta varlığıyla ortaya çıkan ve ara bandı oluşturduğu düşünülen enerji seviyelerinin hesaplanmasında tek bant k.p metodu benimsenmiştir.

K.p yaklaşımında, kuantum nokta varlığıyla ortaya çıkan elektron dalga fonksiyonları Bloch fonksiyonunun periyodik kısmı, $u_{b,0}(r)$ ile bir zarf fonksiyonunun çarpımı olarak ifade edilir;

$$\Xi(r) = \varphi(r)u_{b,0}(r) \quad (3.27)$$

Bu eşitlikte b bant indisidir ve tek bank k.p metodunda sadece iletkenlik bandı dikkate alınır. Bu zarf fonksiyonu Γ noktası (dalga vektörü, $k=0$) için aşağıdaki Zamandan Bağımsız Schrödinger denkleminin öz fonksiyonudur;

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{cb}^*}\nabla^2\varphi + U(r)\varphi = E\varphi \quad (3.28)$$

Burada m_{cb}^* , cb için elektronların etkin kütlesi, $U(r)$ ise iletkenlik bandı minimumudur. Kuantum noktaların kutu şekilli olması ve değişkenlerin ayrılması yaklaşımı ile üç boyutlu çözümler tek boyutlu çözümler kullanılarak elde edilebilir [98]. Üç boyutlu zarf fonksiyonu, $\varphi(r)$ tek boyutlu fonksiyonlar cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilir [98];

$$\varphi(r) = \gamma(x)\beta(y)\zeta(z) \quad (3.29)$$

Buradaki her çarpan U potansiyeline sahip ve $2a$, $2b$ yada $2c$ genişliğinde kare potansiyel kuyusu için tek boyutlu Schrödinger denkleminin çözümünü içermektedir.

3.2.2. Eşit etkin kütleli sonlu potansiyel kuyusu için tek boyutlu çözümler

$2a$ genişliğinde ve U potansiyeline sahip potansiyel kuyusu için tek boyutlu Schrödinger denklemini aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m_{cb}^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma(x) + U\gamma(x) &= E\gamma(x), & x \leq -a \\
-\frac{\hbar^2}{2m_{cb}^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma(x) &= E\gamma(x), & -a \leq x \leq a \\
-\frac{\hbar^2}{2m_{cb}^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma(x) + U\gamma(x) &= E\gamma(x), & a \leq x
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Potansiyel kuyusunun merkezinin 0'da olduğu kabul edildiğinden U potansiyelinin simetrisinden dolayı, $\gamma(x)$ için bütün çözümler tek ve çift olarak ayrılır. Enerjisi sınırlama potansiyeli U 'dan küçük olan ($E < U$) çift çözümler (bağlı durumlar) için $\gamma(x)$ fonksiyonu kuyunun içinde ve dışında aşağıdaki gibi tanımlanır [121];

$$\gamma_{\text{çift}}(x) = \begin{cases} B_{\text{çift}} \exp(\kappa x), & x \leq -a \\ A_{\text{çift}} \cos(kx), & -a \leq x \leq a \\ B_{\text{çift}} \exp(-\kappa x), & a \leq x \end{cases} \tag{3.31}$$

Benzer olarak $E < U$ için tek çözümler için $\gamma(x)$ Eşitlik 3.31'deki kuyu içerisindeki $\cos(kx)$ ifadesi $\sin(kx)$ ile değiştirilerek aşağıdaki gibi tanımlanır [121];

$$\gamma_{\text{tek}}(x) = \begin{cases} B_{\text{tek}} \exp(\kappa x), & x \leq -a \\ A_{\text{tek}} \sin(kx), & -a \leq x \leq a \\ B_{\text{tek}} \exp(-\kappa x), & a \leq x \end{cases} \tag{3.32}$$

Burada $A_{\text{çift}}$, $B_{\text{çift}}$, A_{tek} ve B_{tek} çift ve tek çözümler için zarf fonksiyonun genliklileri veya normalizasyon katsayıları olarak adlandırılırlar. Eşitlik 3.31 ve 3.32'de k dalga vektörü ve κ sönümlenme katsayısı olup aşağıdaki gibi ifade edilirler;

$$k = \frac{\sqrt{2m_{cb}^* E}}{\hbar} \tag{3.33}$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m_{cb}^* (U - E)}}{\hbar} \tag{3.34}$$

Eşitlik 3.30'daki Schrödinger denklemlerinde sonsuz kinetik enerjileri önlemek için özfonksiyonların ve türevlerinin kuyu içerisinde ve dışarısında sürekli olmalıdır. Bunun için

kuyunun sınırı, $x=a$, düşünülecek olursa sürekliliğin sağlanması için çift zarf fonksiyonun kuyu içerisinde ve bariyer bölgesinde eşitlenmesi gereklidir[121];

$$A_{çift} \cos(ka) = B_{çift} \exp(-\kappa a) \quad (3.35)$$

Benzer şekilde zarf fonksiyonunun türevinin de sürekli olması aşağıdaki eşitliği sağlaması gereklidir;

$$-kA_{çift} \sin(ka) = -\kappa B_{çift} \exp(-\kappa a) \quad (3.36)$$

Eşitlik 3.35 ve 3.36'in birbirine bölünmesinden;

$$k \tan(ka) - \kappa = 0 \quad (3.37)$$

elde edilir. Benzer işlemler tek zarf fonksiyonu için tekrarlanırsa;

$$k \cot(ka) + \kappa = 0 \quad (3.39)$$

Eşitliği elde edilir. Eşitlik 3.33 ve 3.34 incelenecek olursa k ve κ sadece enerjiye bağlı olarak değişmektedir. Eşitlik 3.37 ve 3.38, k ve κ normalize olmuş sabitler u ve v , ($v=ka$, $u=\kappa a$ ve $u_0=v^2+u^2$) cinsinden ifade edilecek şekilde, düzenlenirse durumların enerjilerinin bulunabilmesi için aşağıdaki eşitlik elde edilir [121];

$$\sqrt{u_0^2 - v^2} = v \begin{cases} \tan v, & \text{çift çözümler} \\ -\cot v, & \text{tek çözümler} \end{cases} \quad (3.40)$$

Eşitlik 3.33 ve 3.34 kullanılarak u_0 katsayısı yeniden düzenlenirse;

$$\begin{aligned} u_0^2 &= v^2 + u^2 = a^2(k^2 + \kappa^2) \\ &= \frac{2m_{cb}^* a^2}{\hbar^2} (E + U - E) \\ &= \frac{2m_{cb}^* a^2 U}{2\hbar^2} \end{aligned} \quad (3.41)$$

halini alır ve enerjiden bağımsız değere sahip olmaktadır.

Denklem 3.40'ta eşitliği sağlayan v değerleri dolayısıyla k değerleri grafiksel çözüm ile elde edilebilir. Eşitliğin sağ tarafındaki $\tan$ ve $\cot$ fonksiyonlarının asimptotları k değerlerinin sınırlı değerlere sahip olabileceğini gösterir. Eşitlik 3.40'ı sağlayan k değerleri elde edildikten sonra Eş. 3.33 kullanılarak enerjisi sınırlama potansiyeli U 'dan küçük olan kuyu içerisine sınırlandırılmış bağlı(bound) durumların tek boyutlu ayırık enerji seviyeleri elde edilir. Bağlı durumlar sınırlı sayıda olmaktadır ve genelde n ile gösterilen bir kuantum numarası ile ifade edilirler.

Kuyu içerisinde ve bariyer bölgesinde ayırık enerji seviyeleri bulunan tek boyutlu zarf fonksiyonlarının elde edilebilmesi için $A_{çift}$, $B_{çift}$, A_{tek} ve B_{tek} genliklerinin de elde edilmesi gereklidir. Herhangi bir x noktasındaki zarf fonksiyonun, $\gamma(x)$, ve kompleks eşleniğinin, $\gamma^*(x)$, çarpımı x noktasında parçacık bulunma olasılığının yoğunluğunu ifade eder. Eşitlik 3.42'de gösterildiği gibi olasılık yoğunluk fonksiyonunun tüm uzay üzerinden integrali 1 olması gerekir çünkü parçacığın herhangi bir yerde olabilme olasılığı %100'dür.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \gamma^*(x)\gamma(x)dx = 1 \quad (3.42)$$

Eşitlik 3.42'deki integral normalizasyon integrali veya normalizasyon şartı olarak adlandırılır. Çift fonksiyonların $x=0$ 'da simetrik olması sebebiyle Eşitlik 3.42'deki integral 0'dan ∞ 'a integral alınıp 2 ile çarpılmasıyla elde edilebilir [121];

$$2 \int_0^a A_{çift}^2 \cos^2(kx) dx + 2 \int_a^\infty B_{çift}^2 [\exp(-\kappa x)]^2 dx = 1 \quad (3.43)$$

Bu eşitlikteki integrallerin çözülmesiyle aşağıdaki ifade elde edilir;

$$\frac{A_{çift}^2}{2k} [k2a + \sin(k2a)] + \frac{B_{çift}^2}{\kappa} \exp(\kappa 2a) + 1 \quad (3.44)$$

Eşitlik 3.35'te görülen zarf fonksiyonunun sürekliliği koşulu düzenlendiğinde;

$$B_{çift} = A_{çift} \exp(\kappa a) + \cos(ka) \quad (3.45)$$

Elde edilir. Eşitlik 3.44 Eş. 3.45 kullanılarak düzenlendiğinde $A_{çift}$ ve $B_{çift}$ genlikleri k cinsinden elde edilmiş olur.

$$A_{çift} = \left[a - \frac{1}{2k} \sin(k2a) + \frac{1}{\kappa} \cos^2(ka) \right]^{-1} \quad (3.46)$$

Benzer çıkarımlar tek durumlar için yapılabilir ve A_{tek} ile B_{tek} aşağıdaki gibi elde edilir[121];

$$A_{tek} = \left[a - \frac{1}{2k} \sin(k2a) + \frac{1}{\kappa} \sin^2(ka) \right]^{-1} \quad (3.47)$$

$$B_{tek} = A_{tek} \exp(\kappa a) \sin(ka) \quad (3.48)$$

Enerjisi, sınırlama potansiyeli U 'dan büyük çözümler saçılma (unbound veya extended) durumları olarak adlandırılır. Saçılma durumları sürekli enerji seviyelerine sahiptir. Bağlı durumlarda olduğu gibi potansiyel kuyusunun simetrisinden dolayı tek ve çift olarak ayrılırlar. Çift durumlar için zarf fonksiyonu bağlı durumlardan farklı olarak kuyu içerisinde ve dışarısında sinüzoidal olarak sonsuza kadar yayılır [121];

$$\gamma_{çift}(x) = \begin{cases} B \cos(k_e x - \Phi), & x \leq -a \\ A_{çift} \cos(kx), & -a \leq x \leq a \\ B \cos(k_e x + \Phi), & a \leq x \end{cases} \quad (3.49)$$

Burada, potansiyel kuyunun içinde tanımlanan k dalga vektörü Eş. 3.33'teki gibidir, k_e kuyunun dışı (bariyer bölgesi) için tanımlanmış dalga vektörü ise aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$k_e = \frac{\sqrt{2m_{cb}^*(E-U)}}{\hbar} \quad (3.50)$$

Eşitlik 3.49'da, Φ faz kayması, sinüzoidal fonksiyonların arasında sürekliliğin sağlanması için tanımlanmıştır. Bağlı durumlarda olduğu gibi zarf fonksiyonun ve türevinin sürekli olması için kuyu sınırında aşağıdaki eşitliklerin sağlanması gereklidir [121];

$$A_{çift} \cos(ka) = B \cos(k_e a + \Phi) \quad (3.51)$$

$$-k A_{çift} \sin(ka) = -k_e B \cos(k_e a + \Phi) \quad (3.52)$$

Eşitlik 3.51 ve 3.52'nin oranlanması ile aşağıdaki eşitlik elde edilir;

$$k \tan(ka) = k_e \tan(k_e a + \Phi) \quad (3.53)$$

Çift saçılma durumları için belirli bir enerji seviyesi (belirli k ve k_e değerleri) için Φ , Eş. 3.54 kullanılarak aşağıdaki gibi hesaplanabilir;

$$\Phi_{çift} = \arctan \left[\frac{k}{k_e} \tan(ka) \right] - k_e a \quad (3.54)$$

Enerjisi sınırlama potansiyeli U 'dan büyük tek durumlar için zarf fonksiyonu ise aşağıdaki gibidir [121];

$$\gamma_{tek}(x) = \begin{cases} B \sin(k_e x - \Phi), & x \leq -a \\ A_{tek} \sin(kx), & -a \leq x \leq a \\ B \sin(k_e x + \Phi) & a \leq x \end{cases} \quad (3.55)$$

Eşitlikler 3.51, 3.52 ve 3.53'teki çıkarımların benzerleri tek durumlar için yapılırsa Φ aşağıdaki gibi hesaplanabilir;

$$\Phi_{tek} = \arctan \left[\frac{k_e}{k} \tan(ka) \right] - k_e a \quad (3.56)$$

Saçılma durumlarının zarf fonksiyonlarında (Eş. 3.49 ve 3.55'te) tanımlanan normalizasyon katsayıları, $A_{çift}$, A_{tek} ve B , zarf fonksiyonları sonsuz olarak genişlediği için bağlı durumlar olduğu gibi belirlenemez. Ayrıca durumların enerjilerinin sürekli olmasının getirdiği zorlukları aşabilmek için bütün sistemin kuyu boyutlarından çok büyük, $2L$ boyutlarında, bir sonsuz potansiyel kuyunun içerisinde olduğu ve periyodik koşulların geçerli olduğu düşünülür böylece k_e sınırlı değerlere sahip olacaktır [122];

$$k_e = \frac{n_e \pi}{2L} \quad (3.57)$$

Bu eşitlikte n_e saçılma durumları için tanımlanan kuantum numarasıdır tam sayı değerler alır. L büyüklüğü rastgele seçilir ancak kuantum nokta boyutlarından yeterince büyük seçilen L değerleri için hesaplamalar L 'den bağımsız olacaktır [122]. Saçılma durumlarının enerji değerleri k_e değerleri kullanılarak denklemdeki gibi hesaplanırlar. Normalizasyon katsayıları ise aşağıdaki eşitliklerdeki gibidir [121];

$$B = 1/\sqrt{L} \quad (3.58)$$

$$A_{\text{çift}} = B \frac{\cos(k_e a + \Phi)}{\cos(ka)} \quad (3.59)$$

$$A_{\text{tek}} = B \frac{\sin(k_e a + \Phi)}{\sin(ka)} \quad (3.60)$$

3.2.3. Kuantum kuyusu ve konak bölgesinde etkin kütle uyumsuzluğu için çözümler

Önceki bölümde sunulan eşitlikler kuantum nokta içerisinde ve dışarısında aynı etkin kütle olduğu kabul edildiği durumlar için geçerlidir. İki farklı yarıiletken malzemeden oluşan kuantum noktalarda durumların enerji seviyeleri hesaplanırken nokta ve bariyer malzemelerinin etkin kütlelerinin hesaba katılması daha gerçekçi bir yaklaşım olacaktır. Potansiyel kuyusu içerisinde ve dışarısında farklı etkin kütleler olduğu düşünüldüğünde sınır koşulları BenDaniel ve Duke sınır koşulları olarak adlandırılırlar [121, 123]. Sınır koşulları, $\gamma(x)$ ve $(1/m^*)(\delta\gamma(x)/\delta x)$ fonksiyonlarının sürekli olması gerektiğini ifade eder. Etkin kütle uyumsuzluğu durumunda Schrödinger denklemi aşağıdaki gibidir;

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_{b,cb}^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma(x) + U\gamma(x) &= E\gamma(x), & x \leq -a \\ -\frac{\hbar^2}{2m_{w,cb}^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma(x) &= E\gamma(x), & -a \leq x \leq a \\ -\frac{\hbar^2}{2m_{b,cb}^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma(x) + U\gamma(x) &= E\gamma(x), & a \leq x \end{aligned} \quad (3.61)$$

Burada $m_{w,cb}^*$ ve $m_{b,cb}^*$ sırasıyla potansiyel kuyusunun içerisi ve bariyer bölgesi için elektron etkin kütleleridir. Çözümler eşit etkin kütle durumunda olduğu gibi tek ve çift olarak ayrılırlar ve zarf fonksiyonları Eş. 3.31 ve 3.32 ile aynıdır. Dalga vektörü, k ve sönümleme katsayısı, κ ise eşit etkin kütle durumundan farklı olarak aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$k = \frac{\sqrt{2m_{w,cb}^* E}}{\hbar} \quad (3.62)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m_{b,cb}^* (U-E)}}{\hbar} \quad (3.63)$$

Çift durumlar düşünüldüğünde, sınır koşullarının sağlanması için $x=a$ 'da çift zarf fonksiyonun kuyu içerisinde ve bariyer bölgesinde eşitlenmesi gereklidir;

$$A_{çift} \cos(ka) = B_{çift} \exp(-\kappa a) \quad (3.64)$$

Benzer şekilde zarf fonksiyonunun türevinin $(1/m^*)$ ile çarpımının sürekli olması için aşağıdaki eşitlik sağlanmalıdır.

$$-\frac{kA}{m_{w,cb}^*} \sin(ka) = -\frac{\kappa B}{m_{b,cb}^*} \exp(-\kappa a) \quad (3.65)$$

Eşitlik 3.64 ve 3.65 ün oranlanmasıyla;

$$\frac{k}{m_{w,cb}^*} \tan(ka) - \frac{\kappa}{m_{b,cb}^*} = 0 \quad (3.66)$$

Elde edilir. Benzer işlemler tek zarf fonksiyonları için tekrarlandığında aşağıdaki eşitlik elde edilir;

$$\frac{k}{m_{w,cb}^*} \cot(ka) + \frac{\kappa}{m_{b,cb}^*} = 0 \quad (3.67)$$

Eşit etkin kütle durumunda olduğu gibi k ve κ yerine normalize olmuş sabitler u ve v etkin kütle uyumsuzluğu da dikkate alınarak aşağıdaki gibi kullanılır;

$$v = ka \quad (3.68)$$

$$u = \kappa a \frac{m_{w,cb}^*}{m_{b,cb}^*} \quad (3.69)$$

u_0 ise etkin kütle uyumsuzluğu durumunda aşağıdaki gibidir;

$$u_0^2 = v^2 + u^2 = \frac{2m_{w,cb}^* a^2}{\hbar^2} \left[\left(\frac{m_{w,cb}^*}{m_{b,cb}^*} \right) U + E \left(1 - \frac{m_{w,cb}^*}{m_{b,cb}^*} \right) \right] \quad (3.70)$$

Eşitlik 3.66 ve 3.67 kullanılarak grafiksel çözüm sayesinde etkin kütle uyumsuzluğu durumunda izin verilen k değerleri ve bağlı durumların enerji seviyeleri elde edilebilir.

Bağısız durumlarda ise eşit etkin kütle ile benzer şekilde hesaplanabilir sadece çift ve tek durumlar için faz kayması aşağıdaki gibi değişir [121];

$$\Phi = \begin{cases} \arctan \left[\frac{km_{b,cb}^*}{k_e m_{w,cb}^*} \tan(ka) \right] - k_e a, & \text{çift} \\ \arctan \left[\frac{k_e m_{w,cb}^*}{km_{b,cb}^*} \tan(ka) \right] - k_e x, & \text{tek} \end{cases} \quad (3.71)$$

3.2.4. Üç boyutlu çözümler

Önceki bölümlerde sabit ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında x koordinatları için verilen Eşitlikler y ve z koordinatları için de geçerlidir. Tek boyutlu bağlı durumlar daha önce de bahsedildiği gibi sınırlı sayıda olduğu için bir kuantum numarasıyla ifade edilir. n_x , n_y ve n_z sırasıyla x , y ve z koordinatları için kuantum numaraları olmak üzere kuantum nokta varlığıyla ortaya çıkan üç boyutlu enerji seviyeleri aşağıdaki eşitlik ile ifade edilebilir [98, 124];

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 (k_{n_x}^2 + k_{n_y}^2 + k_{n_z}^2)}{2m_{cb}^*} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} \quad (3.72)$$

Üç boyutlu bağlı durumlar tek boyutlu durumların enerji seviyelerinin toplamı olarak elde edildiği için bazı durumların enerjileri U 'dan büyük olabilir ve konak materyalin iletkenlik bandı içerisinde yer alırlar. Bu durumlar sanal bağlı durumlar olarak adlandırılır. Üç boyutlu saçılma durumları Eş. 3.72'dekine benzer şekilde hesaplanır. Üç boyutlu saçılma durumları iki boyutta bağlı tek boyutta saçılmış, tek boyutta bağlı iki boyutta saçılmış veya üç boyutta da saçılmış olabilirler. Herhangi bir üç boyutlu durum için üç boyutlu zarf fonksiyonları ise o durum için hesaplanan tek boyutlu zarf fonksiyonlarının çarpımıyla hesaplanır [98, 124];

$$\varphi_{n_x n_y n_z}(r) = \gamma_{n_x}(x) \beta_{n_y}(y) \zeta_{n_z}(z) \quad (3.73)$$

3.2.5. Kutu şekilli kuantum noktalarda bant içi (AB-CB arası) soğurma katsayısı

Yarı iletken fiziğinde, birim hacim ve zaman başına taşıyıcı üretim hızı aşağıdaki gibi ifade edilir [124];

$$g = \int \alpha dF_{ph} = \int \frac{dF_{ph}}{dE} \alpha dE \quad (3.74)$$

Burada F_{ph} küçük bir enerji aralığında birim alan ve zaman başına düşen temel foton akısıdır. α ise soğurma katsayısını temsil etmektedir. Kutu şekilli kuantum nokta için φ_i ve φ_f zarf fonksiyonlarına sahip iki durum arasındaki birim hacim ve zaman başına üretim hızı ifadesi Fermi'nin Altın kuralı kullanılarak aşağıdaki gibi ifade edilebilir [124];

$$g = \int \frac{dF_{ph}}{dE} \frac{2\pi^2 q^2 E}{n_{ref} ch \epsilon_0} \frac{|\langle \Xi_i | r \cdot \epsilon | \Xi_f \rangle|^2}{4ab} F_S N_l \delta(E_{line} - E) dE \quad (3.75)$$

Eşitlik 3.74 ve 3.75 kıyaslanırsa kutu şekilli kuantum noktalar için soğurma katsayıları aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$\alpha_{\varphi_i \rightarrow \varphi_f}^{max} = 2 \frac{2\pi^2 q^2 E}{n_{ref} ch \epsilon_0} \frac{|\langle \Xi_i | r \cdot \epsilon | \Xi_f \rangle|^2}{4ab} F_S N_l \delta(E_{line} - E) \quad (3.76)$$

Eşitliğin başındaki 2 çarpanı her bir durumun spin dejenerasyonunu dikkate almak içindir. Eş. 3.76'daki n_{ref} ortamın yansıma indisi, ϵ_0 dielektrik sabiti, F_S xy düzlemiyle kuantum noktaların kısmi kaplama katsayısı, N_l ise z yönünde birim uzunluk başına kuantum nokta katman sayısıdır. E_{line} , φ_i ve φ_f zarf fonksiyonlarına sahip durumlar arasındaki enerji farklıdır. $\langle \Xi_i | r \cdot \epsilon | \Xi_f \rangle$ ifadesi matris elemanı olarak tanımlanır ve aşağıdaki gibi ifade edilir [124];

$$\langle \Xi_i | r \cdot \epsilon | \Xi_f \rangle = \cos \phi \sin \theta \langle \Xi_i | x | \Xi_f \rangle + \sin \phi \sin \theta \langle \Xi_i | y | \Xi_f \rangle + \cos \theta \langle \Xi_i | z | \Xi_f \rangle \quad (3.77)$$

Eşitlik 3.77'de görüldüğü gibi matris elemanı foton polarizasyona, eksenlerle yaptığı Euler açılarıyla (ϕ, θ) tanımlanan şekilde bağlıdır. Eşitlik 3.27'de verilen dalga fonksiyonu ve zarf fonksiyonu arasındaki bağıntı incelendiğinde $u_{b,o}(r)$ $\varphi(r)$ 'ye göre çok hızlı değiştiği için $\langle \Xi_i | r \cdot \epsilon | \Xi_f \rangle = \langle \varphi_i | r \cdot \epsilon | \varphi_f \rangle$ olmaktadır [125].

Değişkenlerin ayrılması kuralı ile $\langle \varphi_i | r \cdot \epsilon | \varphi_f \rangle$ matris elemanı x 'e, y 'ye ve z 'ye ayrı ayrı bağlı üç fonksiyonun çarpımı şeklinde ifade edilebilir. $\langle \varphi_i | r \cdot \epsilon | \varphi_f \rangle \neq 0$ olması için n_y ve n_z kuantum noktalarının aynı kalıp n_x kuantum numarasının farklı olması gereklidir. Dahası elektrik

dipol yaklaşımındaki seçin kurallarındaki gibi matris elemanın sıfırdan farklı olması için kuantum numaraları iki durum için farklı paritede (tek ise çift, çift ise tek) olmalıdır [125]. Aynı durum diğer koordinatlar için de geçerlidir. Böylece matris elemanı sıfırdan farklı olan geçişler, sadece iki durum arasında tek kuantum numarasının ve paritesinin değiştiği geçişlerdir.

Eşitlik 3.76'da görüldüğü gibi soğurma katsayısı ifadesinde matris elemanın mutlak karesi bulunmaktadır Eş 3.77'deki ifadenin mutlak karesi alınır aşağıdaki gibi olmaktadır;

$$\begin{aligned} |\langle \Xi_i | r \cdot \varepsilon | \Xi_f \rangle|^2 &= \cos^2 \phi \sin^2 \theta |\langle \varphi_i | x | \varphi_f \rangle|^2 + \sin^2 \phi \sin^2 \theta |\langle \varphi_i | y | \varphi_f \rangle|^2 \\ &\quad + \cos^2 \theta |\langle \varphi_i | z | \varphi_f \rangle|^2 + 2 \cos \phi \sin \phi \sin^2 \theta \operatorname{Re}[\langle \varphi_i | x | \varphi_f \rangle \langle \varphi_i | y | \varphi_f \rangle] \\ &\quad + 2 \cos \phi \sin \theta \cos \theta \operatorname{Re}[\langle \varphi_i | x | \varphi_f \rangle \langle \varphi_i | z | \varphi_f \rangle] \\ &\quad + 2 \sin \phi \sin \theta \cos \theta \operatorname{Re}[\langle \varphi_i | y | \varphi_f \rangle \langle \varphi_i | z | \varphi_f \rangle] \end{aligned} \quad (3.78)$$

Geçişlerde sadece tek kuantum numarası değişebildiğinden Eş. 3.78'deki iki farklı değişken içeren çarpımlar her zaman sıfırdır. Böylece Eşitlik 3.78 aşağıdaki eşitliğe dönüşür;

$$\begin{aligned} |\langle \Xi_i | r \cdot \varepsilon | \Xi_f \rangle|^2 &= \cos^2 \phi \sin^2 \theta |\langle \varphi_i | x | \varphi_f \rangle|^2 + \sin^2 \phi \sin^2 \theta |\langle \varphi_i | y | \varphi_f \rangle|^2 \\ &\quad + \cos^2 \theta |\langle \varphi_i | z | \varphi_f \rangle|^2 \end{aligned} \quad (3.79)$$

Sadece tek bir kuantum numarası değişebildiği için bu ifadelerden sadece bir tanesi sıfırdan farklı olabilmektedir. Güneş pili araştırmasında sıklıkla kullanılan -z yönlü polarize olmamış ışık için, fotonların elektrik alanı enine olduğu için $\theta = \pi/2$ olur ve ϕ 'nin $0-2\pi$ aralığında bütün değerleri için ortalama alınır;

$$\langle |\langle \Xi_i | r \cdot \varepsilon | \Xi_f \rangle|^2 \rangle_z = \frac{|\langle \varphi_i | x | \varphi_f \rangle|^2}{2} + \frac{|\langle \varphi_i | y | \varphi_f \rangle|^2}{2} \quad (3.80)$$

Yarı iletken tarafından kendiliğinden yayımlanan dahili termal fotonlara karşılık gelen izotropik aydınlatmada ise matris elemanın mutlak karesi aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$\langle |\langle \Xi_i | r \cdot \varepsilon | \Xi_f \rangle|^2 \rangle_{izo} = \frac{|\langle \varphi_i | x | \varphi_f \rangle|^2}{3} + \frac{|\langle \varphi_i | y | \varphi_f \rangle|^2}{3} + \frac{|\langle \varphi_i | z | \varphi_f \rangle|^2}{3} \quad (3.81)$$

Eş. 3.76'daki "max" ifadesi iki durum arasındaki olabilecek en yüksek soğurma katsayısını (başlangıç durumunun tamamen dolu bitiş durumunun ise tamamen boş olduğu geçişler) ifade etmektedir. İki bağlı durum arasındaki soğurma katsayısı i ile gösterilen başlangıç ve f ile gösterilen bitiş durumlarının doluluk oranları dahil edilerek aşağıdaki gibi bulunur;

$$\alpha_{i \rightarrow f} = f_i(1 - f_f)\alpha_{i \rightarrow f}^{max} \quad (3.82)$$

Kuantum nokta için bağlı durumlara arası toplam soğurma katsayısı ise izin verilen bütün geçişler (sadece bir kuantum numarasının ve paritesinin değiştiği geçişler) için hesaplanan soğurma katsayıların toplamı olarak elde edilir;

$$\alpha_{tot} = \sum_{\substack{\text{izin verilen} \\ \text{geçişler}}} f_i(1 - f_f)\alpha_{i \rightarrow f}^{max} \quad (3.83)$$

Eşitlik 3.76'da görüldüğü gibi kuantum noktalarda soğurma katsayısı dirac delta treni şeklindedir. Nokta boyutlarındaki, bant ofsetindeki ve etkin kütledeki küçük değişikliklerin istatistiksel olarak hesaba katılması için dirac fonksiyonu yerine Eş 3.84'te verilen Gauss dağılımı kullanılır [124, 125];

$$\delta(E - E_{line}) \cong \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(E-E_{line})^2}{\sigma^2}\right) \quad (3.84)$$

Burada σ enerji dağılımını temsil eder. Bu dağılım, numunenin düzenliliğine bağlıdır, ancak toplam soğurma katsayıları σ 'dan bağımsızdır. Bağlı durumlardan sürekli saçılma durumlarına geçişler de ise sadece bir kuantum numarasının ve paritesinin değiştiği geçişlere izin verildiği için sadece tek boyutta sürekli saçılma (diğer 2 boyutta bağlı) durumlarına geçişler mümkün olmaktadır. Bu geçişler için soğurma katsayısı aşağıdaki gibi tanımlanır [125];

$$\alpha_{i \rightarrow f_e} = f_i N(E_{line} + E_{n;\rho}) \alpha_{i \rightarrow f_e}^{max} \quad (3.85)$$

Burada N birim enerji başına sürekli saçılma durumlarının yoğunluğunu gösterir ve aşağıdaki eşitlikteki gibi hesaplanır;

$$N(E_{k_e}) = \frac{L\sqrt{m_{cb}^*}}{\sqrt{2}\hbar\pi} \frac{1}{\sqrt{E_{k_e}}} \quad (3.86)$$

Toplam soğurma katsayısı bağlı durumlarda olduğu gibi üç kuantum numarası için izin verilen bütün geçişlerin soğurma katsayılarının toplanmasıyla elde edilir.

3.2.6. Empirik dört bant k.p metodu ile bant arası (VB-AB arası) soğurma katsayısının hesaplanması

Valans bant ile kuantum nokta varlığıyla oluşan ara bant seviyeleri arasındaki geçişler için soğurma katsayısının hesaplanabilmesi için iletkenlik bandı(cb) yanında valans bant ile ilişkili bantlar da dikkate alınmalıdır. Bu bantlar ağır boşluk (heavy hole, hh) bandı, hafif boşluk (light hole, lh) bandı ve spin yörünge etkileşiminden ortaya çıkan ayrılma (split-off, so) bandı olarak adlandırılırlar. Her bant için dalga fonksiyonları b bant indisi olmak üzere aşağıdaki gibi ifade edilir [126];

$$\Xi(r) = \sum_v u_{v,0}(r) \Psi_v(r) \quad (3.87)$$

$$\Psi_v(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum \psi_v(k) e^{ik \cdot r} \quad (3.88)$$

Eş. 3.88’de Ω dalga fonksiyonlarının işgal ettiği normalizasyon hacmini göstermektedir. Bu hacim genelde bir kenarı L olan küp olarak kabul edilir böylece $\Omega=L^3$. Küpün kenarlarındaki periyodik sınır koşulları dikkate alındığında dalga vektörü, ayrık değerlere sahip olacaktır.

$$k_x = \frac{2\pi\kappa_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi\kappa_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi\kappa_z}{L} \quad (3.89)$$

Burada κ_x , κ_y , ve κ_z tam sayılardır. Eşitlik 3.88’de $\psi_v(k)$ ifadeleri $\Xi(r)$ dalga fonksiyonu tanımlayan katsayılardır. $u_{v,0}(r)$ ise $k=0$ ’da (Γ Noktasında) Bloch fonksiyonunu temsil eder ve Genelleştirilmiş Bloch Fonksiyonu (GBF) olarak da adlandırılır. Çinko sülfür yapıya sahip kristallerde $u_{v,0}(r)$ ’ın orbital kısımları $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ ve $|S\rangle$ veya X-, Y-, Z- ve S-GBF olarak tanımlanırlar[102]. Dört bant k.p modelinde spin koordinatları ihmal edilmiştir, diğer bir deyişle her bir orbital dalga fonksiyonu $-\frac{1}{2}$ veya $\frac{1}{2}$ ile çifte dejenere durumdadır. Bu basitleştirme en basit Hamiltonian Matrisinin elde edilmesi için yapılmaktadır [126]. Zarf

fonksiyonları ile çarpılan X-, Y-, Z- ve S-GBF'leri X-, Y-, Z- ve S- zarf fonksiyonları olarak adlandırılırlar.

$\Psi_v(r)$ nanoyapının simetrisinden ve boyutlarından etkilenen zarf fonksiyonlarıdır ve aşağıdaki çoklu bant etkin kütle denklemiyle bulunabilirler;

$$\sum_v H_{vv'}(-i\nabla) \Psi_v(r) + U(r)\Psi_v(r) = E\Psi_v(r) \quad (3.90)$$

burada E , enerji özdeğeridir ve $U(r)$, kuantum noktanın varlığıyla ortaya çıkan orta ölçekte değişen potansiyeldir. Potansiyelin periyodik olarak değişen kısmı Hamiltonian matrisi ile açıklanmaktadır. Bu çalışma [126]'de önerilen Empirik Hamiltonian matrisini temel alır. Bant yapısında önemli etkilere sahip olmasına karşın spin orbit etkileşimleri ve gerinim etkileri bu Hamiltonian matrisine dâhil edilmemiştir. Hesaplamalarda kullanılan bant ofsetleri ve etkin kütleler bu etkileri içeren çalışmalardan alınarak dolaylı olarak dâhil edilmiştir. Dört bant Hamiltonian matrisi aşağıdaki gibidir;

	$ X\rangle$	$ Y\rangle$	$ Z\rangle$	$ S\rangle$	
$\langle X $	$E_v + AK$	0	0	BK_x	
$\langle Y $	0	$E_v + AK$	0	BK_y	(3.91)
$\langle Z $	0	0	$E_v + AK$	BK_z	
$\langle S $	BK_x	BK_y	BK_z	$E_c + AK$	

Eşitlik 3.91'de E_v ve E_c sırasıyla valans bant ve iletkenlik bandı sınırlarıdır. d rastgele seçilen normalize uzunluğudur ve $K=kd$ 'dir. Matriste kullanılan değişkenler aşağıdaki eşitliklerde ifade edildiği gibidir;

$$A = \frac{\hbar^2}{2m_0 d^2} \quad (3.92)$$

$$B = \frac{\hbar P_0}{m_0 d} \quad (3.93)$$

$$P_0 = \sqrt{\frac{E_g}{2} m_0 \left(\frac{m_0}{m_{cb}^*} - 1 \right)} \quad (3.94)$$

Bu Hamiltonian matrisi için önerilen özdeğerler VB ile ilgili bantlarda imkânsız olan pozitif etkin kütleye neden olmaktadır [126]. Bu sebeple 4 bant modelinde spin-orbit etkileşiminin

ve gerinim etkilerinin ihmal edilmesi mümkün değildir. Böylece Hamiltonian Matrisi için aşağıdaki eşitliklerde verilen önerilen özdeğerler tanımlanmıştır [125, 126]. Önerilen özdeğerler deneysel olarak elde edilen etkin kütle dağılımlarını içerdği için model empirik 4 bant k.p model olarak da adlandırılır.

$$E_{cb}(K) \cong E_C + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_{cb}^* d^2} \quad (3.95)$$

$$E_{lh}(K) \cong E_V - \frac{\hbar^2 K^2}{4m_{lh}^* d^2} \quad (3.96)$$

$$E_{hh}(K) \cong E_V - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_{hh}^* d^2} \quad (3.97)$$

$$E_{so}(K) \cong E_{SO} - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_{so}^* d^2} \quad (3.98)$$

Bu eşitliklerde m_{lh}^* , m_{hh}^* ve m_{so}^* sırasıyla hafif boşluk bandı, ağır boşluk bandı ve ayrılma bandı için elektronların etkin kütesini temsil etmektedir. E_{SO} ise ayrılma bandının enerji farkını temsil etmektedir. Önerilen özdeğerler kullanılan Hamiltonian matrisi köşegenleştirildiğinde iletkenlik karşılık gelen için özfonksiyonlar aşağıdaki eşitlikte gösterilen Schrödinger denklemi ile tanımlanabilirler [125, 126];

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{cb}^*} \nabla^2 \Phi + E_C(r) \Phi = E \Phi \quad (3.99)$$

Tek bant k.p metodu ve değişkenlerin ayrılması yaklaşımıyla Eş. 3.99 için çözüm elde edilebilir. Sınırlama potansiyeli olarak InAs kuantum noktaların varlığıyla GaAs bant aralığında oluşan bant ofsetleri kullanılabilir. Böylece cb ile ilgili bağlı durumların enerji seviyeleri ve köşegenleştirilmiş özfonksiyonlar (Φ) elde edilebilir

Eşitlik 3.99'da verilen Schrödinger denklemi valans bant ile ilişkili bantlar için de tanımlanabilir [125, 126];

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{lh}^*} \nabla^2 \Phi - E_V(r) \Phi = -E \Phi \quad (3.100)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{hh}^*}\nabla^2\Phi - E_V(r)\Phi = -E\Phi \quad (3.101)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{so}^*}\nabla^2\Phi - E_{SO}(r)\Phi = -E\Phi \quad (3.102)$$

Tip I kuantum noktalarda görülen VB kaidesi, CB'deki potansiyel kuyusuna eş değer kabul edilir. Bu durumda sınırlama potansiyeli VB kaidesinin tepe noktası olarak kabul edilerek valans banttaki bağlı durumların enerji seviyeleri de tek bant k.p metodu ve değişkenlerin ayrılması metoduyla elde edilebilir.

Valans bant ile ara bant arası soğurma katsayısını hesaplayabilmek için öncelikle matris elemanlarının hesaplanması gereklidir. Matris elemanları için de enerji seviyeleri tespit edilen cb, lh, hh ve so durumlarının zarf fonksiyonlarının hesaplanması gereklidir. Zarf fonksiyonları hesaplanırken aşağıdaki adımlar kullanılır[125, 126];

- Dört bant için bütün üç boyutlu durumların köşegenleştirilmiş özfonksiyonları elde edilir.
- Köşegenleştirilmiş özfonksiyonların Ayırık Fourier Dönüşümleri hesaplanır.
- Ayırık Fourier Dönüşümleri T matrisinin uygun elemanı ile bütün K değerleri için çarpılır.
- Çarpımların Ters Ayırık Fourier Dönüşümleri hesaplanarak X-, Y-, Z- ve S- zarf fonksiyonları elde edilir.

Bu hesaplama adımlarını tek tek inceleyecek olursak; Bütün sistemin bir kenarı L olan kübik yapı içerisinde olduğu düşünüldüğünde Eş. 3.89'da görüldüğü gibi dalga fonksiyonları sınırlı sayıda nokta kullanılarak ayırık olarak ifade edilebilir. Köşegenleştirilmiş özfonksiyonlar da aynı şekilde ayırık noktalarda hesaplanabilir. Tek boyutta, iki ayırık nokta arasındaki uzunluk l ($\Delta\Omega=l^3$) ve toplam nokta sayısı M ($L/M=l$) ile ifade edilir. Böylece $\Omega=L^3=\Delta\Omega M^3$ olur. Köşegenleştirilmiş üç boyutlu özfonksiyonlar ayırık noktalarda Eş. 3.31 ve 3.32 kullanılarak elde edilen tek boyutlu fonksiyonların çarpımıyla elde edilir;

$$\varphi(\mathbf{m}L/N) = \gamma_{m_x}\beta_{m_y}\zeta_{m_z} \quad (3.103)$$

Bu eşitlikte $\mathbf{m}$ m_x , m_y ve m_z 'den oluşan üçlü tamsayıyı göstermektedir. Eşitlik 3.103'te γ_{m_x} , β_{m_y} ve ζ_{m_z} sırasıyla M adet ayırık noktalarda hesaplanmış $\gamma(x)$, $\beta(y)$ ve $\zeta(z)$ fonksiyonlarını

ifade etmektedir. Bir tür Fourier Dönüşümü düzlem dalga gelişimini elde etmenin pratik bir yoludur [125]. $\gamma(x)$ tek boyutlu fonksiyonu için düzlem dalga gelişimi aşağıdaki gibidir;

$$\gamma(x) = \sum_{k_x} \xi(k_x) \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L}} \quad (3.104)$$

Bu tanımlamayla tek boyutlu Ayırık Fourier Dönüşümü ve Ters Ayırık Fourier Dönüşümü aşağıdaki gibi tanımlanır [125];

$$\sqrt{\frac{M}{L}} \xi_{k_x} = \mathcal{F}[\{\gamma_{m_x}\}]_{k_x} \equiv \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m_x=-\frac{M-1}{2}}^{\frac{M-1}{2}} \gamma_{m_x} e^{-\frac{2\pi i k_x m_x}{M}} \quad (3.105)$$

$$\sqrt{\frac{L}{M}} \gamma_{m_x} = \mathcal{F}^{-1}[\{\xi_{k_x}\}]_{m_x} \equiv \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{k_x=-\frac{M-1}{2}}^{\frac{M-1}{2}} \xi_{k_x} e^{\frac{2\pi i k_x m_x}{M}} \quad (3.106)$$

ξ_{k_x} M adet k_x noktasında hesaplanmış Ayırık Fourier Dönüşümünü göstermektedir. Üç boyutlu Ayırık Fourier Dönüşümü tek boyutlu dönüşümlerin çarpımı olarak ifade edileceği gibi aşağıdaki eşitlik kullanılarak da hesaplanabilir [125];

$$\phi_{u,\kappa} = \frac{1}{M^{3/2}} \sum_{\mathbf{m}} \varphi_{u,m} e^{-2\pi i \kappa \cdot \mathbf{m} / M} \quad (3.107)$$

Burada $\kappa \mathbf{m}$ gibi tamsayı üçlüsüdür ve $\varphi_{u,m} \equiv \Delta\Omega^{1/2} \varphi(\mathbf{m}L/M)$ olarak tanımlanmıştır. Eşitlik 3.107’de u indisi bantları (cb, lh, hh veya so) temsil etmektedir. Ayırık Fourier Dönüşümleri hesaplandıktan sonra üçüncü adım olarak; aşağıdaki eşitlik ile zarf fonksiyonlarının Ayırık Fourier Dönüşümleri elde edilir;

$$(\psi_{v,\kappa}) = (T_w^+(2\pi\kappa_x d/L, 2\pi\kappa_y d/L, 2\pi\kappa_z d/L))(\phi_{u,\kappa}) \quad (3.108)$$

Bu eşitlikte v ilgili GBF’unu temsil etmektedir. T ile gösterilen matris Hamiltonian Matrisini köşegenleştiren matristir. T_w matrisi ise T matrisine Givens rotasyon matrisi ile dönüşüm uygulanmış ve gösterim için iki parçaya ayrılmış şekilde $T_w = T_{wA} + T_{wB}$ aşağıdaki gibidir [125]. T_w matrisinde bulunan “+” ifadesi Hermetik eşleniği göstermektedir. Bütün elemanlar reel olduğu için Hermetik eşlenik alma işlemi satırlar ve sütunlar yer değiştirilerek yapılabilir. T_w matrisinin satırları (Hermetik eşleniğin sütunları) sırasıyla cb, lh, hh ve so

bantlarını temsil ederler. T_w 'nin Sütunları (Hermetik eşleniğin satırları) ise X-, Y- Z- ve S- Bloch fonksiyonlarına izdüşümleri göstermektedir. T_w matrisi hesaplanırken $E_G=1,07$ eV olarak InAs ve GaAs bant aralıklarının ortalaması, $B=1,06$ eV olarak alınır. T_w matrisini oluşturan T_{wA} ve T_{wB} matrisleri Şekil 3.7'deki görüldüğü gibidir.

$$\begin{aligned}
 T_{wA} &= \begin{pmatrix} \frac{K_x}{N_1} & \frac{K_y}{N_1} & \frac{K_z\sqrt{1-w^2}}{N_1} & \frac{\left(E_G + \sqrt{E_G^2 + 4B^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)}\right)\sqrt{1-w^2}}{2BN_1} \\ \frac{K_x}{N_2} & \frac{K_y}{N_2} & \frac{K_z\sqrt{1-w^2}}{N_2} & \frac{\left(E_G - \sqrt{E_G^2 + 4B^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)}\right)\sqrt{1-w^2}}{2BN_2} \\ \frac{-K_y\sqrt{1-w^2}}{N_3} & \frac{K_x\sqrt{1-w^2}}{N_3} & 0 & 0 \\ \frac{K_xK_z\sqrt{1-w^2}}{N_4} & \frac{K_yK_z\sqrt{1-w^2}}{N_4} & \frac{-(K_x^2 + K_y^2)\sqrt{1-w^2}}{N_4} & 0 \end{pmatrix} \\
 T_{wB} &= w \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\left(E_G + \sqrt{E_G^2 + 4B^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)}\right)}{2BN_1} & -\frac{K_z}{N_1} \\ 0 & 0 & \frac{\left(E_G - \sqrt{E_G^2 + 4B^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)}\right)}{2BN_2} & -\frac{K_z}{N_2} \\ \frac{K_xK_z}{N_4} & \frac{K_yK_z}{N_4} & \frac{-(K_x^2 + K_y^2)(1-w^2)}{N_4} & \frac{(K_x^2 + K_y^2)w}{N_4} \\ \frac{K_y}{N_3} & -\frac{K_x}{N_3} & 0 & \frac{-(K_x^2 + K_y^2)\sqrt{1-w^2}}{N_3} \end{pmatrix} \\
 N_1 &= \sqrt{8B^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) + 2E_G\left(E_G + \sqrt{E_G^2 + 4B^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)}\right)} / 2B \\
 N_2 &= \sqrt{8B^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) + 2E_G\left(E_G - \sqrt{E_G^2 + 4B^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)}\right)} / 2B \\
 N_3 &= \sqrt{(K_x^2 + K_y^2)} \quad N_4 = \sqrt{(K_x^2 + K_y^2)(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)}
 \end{aligned}$$

Şekil 3.7. T_w matrisini oluşturan T_{wA} ve T_{wB} matrisleri

Son adımda elde edilen $\psi_{v,k}$ fonksiyonlarının Ters Ayırık Fourier Dönüşümler alınarak $\Psi_{v,m} \equiv \Delta\Omega^{1/2} \Psi_v(\mathbf{m}L/M)$ zarf fonksiyonları elde edilir. Tek bant k.p modelinde de belirtildiği gibi dalga fonksiyonlarının integralleri $u_{0,v}$ 'nin zarf fonksiyonlarına göre çok hızlı değişmesi sebebiyle sadece zarf fonksiyonları kullanılarak aşağıdaki gibi hesaplanabilir ;

$$\langle \Xi(r) | \Xi(r) \rangle \cong \sum_v \langle u_{0,v}(r) | u_{0,v}(r) \rangle \langle \Psi_v(r) | \Psi_v(r) \rangle = \sum_v \langle \Psi_v(r) | \Psi_v(r) \rangle \quad (3.109)$$

Eşitlik 3.109'deki toplamalar bütün GBF'ları üzerinden yapıldığında Eş. 3.42'de olduğu gibi 1 sonucunu vermelidir;

$$\sum_v \langle \Psi_v(r) | \Psi_v(r) \rangle = \sum_{v,n} \Psi_{v,n}^* \Psi_{v,n} = \sum_{v,\kappa} \psi_{v,\kappa}^* \psi_{v,\kappa} = \sum_{\kappa} \phi_{u,\kappa}^* \phi_{u,\kappa} = 1 \quad (3.110)$$

Foton-Elektron etkileşimini yöneten VB'deki başlangıç durumundan ara bant bitiş durumuna geçişler için tanımlanan dipol matris elemanları aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$\begin{aligned}\langle \Xi^i | \epsilon \cdot r | \Xi^f \rangle &\cong \sum_v \langle u_{0,v}^i | u_{0,v}^f \rangle \langle \Psi_v^i | \epsilon \cdot r | \Psi_v^f \rangle = \sum_v \langle \Psi_v^i | \epsilon \cdot r | \Psi_v^f \rangle \\ &= \langle \Psi_S^i | \epsilon \cdot r | \Psi_S^f \rangle + \langle \Psi_X^i | \epsilon \cdot r | \Psi_X^f \rangle + \langle \Psi_Y^i | \epsilon \cdot r | \Psi_Y^f \rangle + \langle \Psi_Z^i | \epsilon \cdot r | \Psi_Z^f \rangle\end{aligned}\quad (3.111)$$

Bölüm 4.1.4'te belirtildiği gibi matris elemanları ışık polarizasyonundan etkilenir ve güneş pili araştırmasında sıklıkla kullanılan -z yönlü polarize olmamış ışık için matris elemanının mutlak karesi aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$\langle |\langle \Xi^i | r \cdot \epsilon | \Xi^f \rangle|^2 \rangle_z = \frac{|\langle \Xi^i | x | \Xi^f \rangle|^2}{2} + \frac{|\langle \Xi^i | y | \Xi^f \rangle|^2}{2}\quad (3.112)$$

$$\langle \Xi^i | x | \Xi^f \rangle = \langle \Psi_S^i | x | \Psi_S^f \rangle + \langle \Psi_X^i | x | \Psi_X^f \rangle + \langle \Psi_Y^i | x | \Psi_Y^f \rangle + \langle \Psi_Z^i | x | \Psi_Z^f \rangle\quad (3.113)$$

Benze eşitlik y ve z boyutları için yazılabilir. İzotropik aydınlatmada ise matris elemanının mutlak karesi aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$\langle |\langle \Xi^i | r \cdot \epsilon | \Xi^f \rangle|^2 \rangle_{izo} = \frac{|\langle \Xi^i | x | \Xi^f \rangle|^2}{3} + \frac{|\langle \Xi^i | y | \Xi^f \rangle|^2}{3} + \frac{|\langle \Xi^i | z | \Xi^f \rangle|^2}{3}\quad (3.114)$$

Kutu şekilli kuantum noktalardaki simetri sebebiyle VB'deki durumlardan CB'deki durumlara geçişlerin bazıları yasaklanmıştır [126]. Eşitlik 3.x ve 3.y'de görülen x ve y (yatay) polarizasyonları için izin verilen hh→cb ve so→cb geçişleri bütün zarf fonksiyonları (Ψ_S , Ψ_X , Ψ_Y ve Ψ_Z) için x veya y kuantum noktalarının sadece birinin ve paritesinin değiştiği geçişlerdir. Bu geçişler için z kuantum numarası önemsizdir. X ve y polarizasyonları için izin verilen lh→cb geçişleri ise Ψ_X ve Ψ_Y için, x veya y kuantum noktalarının sadece birinin paritesi değişirken z kuantum numarasının paritesinin aynı kaldığı geçişlerdir. Ψ_S ve Ψ_Z için x veya y kuantum noktalarının sadece birinin ve paritesinin değiştiği lh→cb geçişleri izin verilen geçişlerdir. Bu geçişler için de z kuantum numarası önemsizdir.

Dikey (z) polarizasyonu için izin verilen lh→cb, hh→cb ve so→cb geçişleri, Ψ_X ve Ψ_Y için, x ve y kuantum noktaların aynı anda aynı veya farklı olduğu geçişlerdir. Bu geçişler için z

kuantum numarası önemsizdir. Ψ_S ve Ψ_Z için x veya y kuantum noktalarının paritelerin aynı kaldığı veya x kuantum numarasının başlangıç paritesinin, y kuantum numarasının bitiş paritesi ile aynı olmalıdır ve bunun tersi de geçerlidir. Bu geçişler için de z kuantum numarası önemsizdir.

Matris elemanları hesaplandıktan sonra soğurma katsayıları AB-CB arası soğurma katsayısı ile aynı şekilde hesaplanır. Eş. 3.76'daki soğurma katsayısı eşitliği ve Eş. 3.81'de verilen Gauss dağılımı kullanılarak VB ile ilişkili bütün durumlardan ara bant durumlarına geçişler için soğurma katsayısı hesaplanır. Toplam soğurma katsayısı bütün VB durumları üzerinden toplanarak aşağıdaki gibi elde edilir;

$$\alpha_{VB \rightarrow f}^{max} = \sum_{i \in \text{bütün VB durumları}} \alpha_{i \rightarrow f}^{max} \quad (3.115)$$

VB durumlarından AB durumlarına veya AB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişler için soğurma katsayıları için fotoakım yoğunluğu aşağıda herhangi iki bağlı durum (B.D.) arası verilen eşitlikteki gibi hesaplanabilir;

$$J_{B.D. \rightarrow B.D.}^{abs} = \int_0^{E_G} q F_{inc, T_S}(E) (1 - \exp(-\alpha_{B.D. \rightarrow B.D.}^{max} W)) dE \quad (3.116)$$

Bu eşitlikte F_{inc, T_S} pilin ön yüzeyine gelen T_S güneş sıcaklığı için siyah cisim ışıması karşılık gelen foton akısıdır. F_{inc, T_S} aşağıdaki eşitlik kullanılarak elde edilebilir;

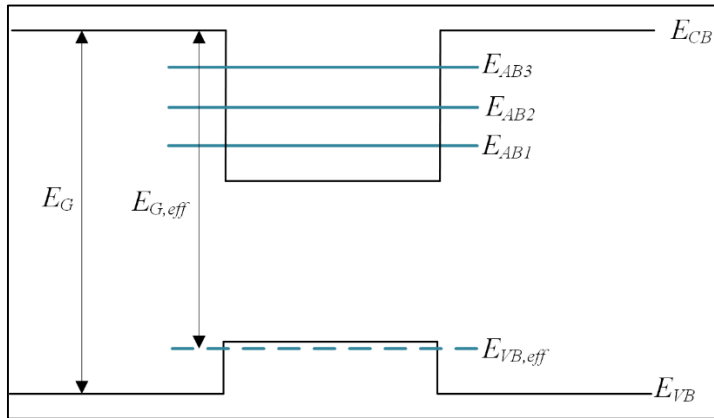
$$F_{inc, T_S}(E) = X \sin(\theta_s) \frac{2\pi}{h^3 c^2} \frac{E^2}{\exp(\frac{E}{k_b T_S})} \quad (3.117)$$

Burada $\sin(\theta_s)$ güneş ile pil arasındaki katı açığı temsil etmektedir.

3.3. Kuantum Noktalı Ara Bant Yapılı Güneş Pili için Detaylı Denge Modeli

Detaylı denge yaklaşımı (modeli) Bölüm 2.2.6'de bahsedilen güneş pillerinin verim limitlerinin hesaplanması için kullanılır. Bölüm 3.1.1'de ara bant yapıları güneş pillerinin verim limitini hesaplamak için detaylı denge modeli sunulmuştur. Bölüm 3.1.1'de sunulan detaylı denge modelinde bütün bantların tam soğurma yaptığı kabul edilir. Kuantum noktalı

ara bant yapılı güneş pillerinde düşük alt bant soğurmasını ve düşük verimlerin nedenlerinin araştırılması için Bölüm 3.2’de hesaplanan enerji seviyeleri ve soğurma katsayılarını içeren model önerilmiştir [125, 127]. KN-ABGP detaylı denge modelinde Bölüm 3.2.1’de hesaplanan CB ve VB durumları ile bant içi ve bant arası soğurma katsayıları giriş parametreleri olarak kullanılmaktadır. Kuantum noktaların varlığıyla yasak bantta üç adet bağlı CB durumu olduğu ve bu durumların ara bandı oluşturduğu kabul edilir. KN-ABGP için enerji bant diyagramı Şekil 3.8’de görülmektedir.



Şekil 3.8. KN-ABGP’de tek bir kuantum nokta için enerji bant diyagramı

Üç AB seviyesinin elektron popülasyonu Fermi-Dirac fonksiyonları ile tanımlanan üç ayrı Kuasi-Fermi seviyesine ($E_{F,AB1}$, $E_{F,AB2}$ ve $E_{F,AB3}$) sahip olduğu düşünülür. İletkenlik bandı sınırı üzerinde bulunan sanal bağlı durumlar ve sürekli bağısız durumlar tek bir Kuasi-Fermi seviyesi ($E_{F,CB}$) ile ifade edilir. VB kaidesi sınırlama potansiyeli kabul edildiğinde ortaya çıkan çok sayıda lh, hh ve so durumları neredeyse sürekli. Bu sebeple bu durumların enerji başlangıç değeri ($E_{VB,eff}$) VB kaidesindeki temel hh durumu olarak alınır. Valans bandın Fermi-Dirac dağılımı tek bir Kuasi-Fermi seviyesi ile ifade edilir; $E_{F,VB}$.

Bu şekilde KN-ABGP’de CB, VB ve üç ayrık AB seviyesi olmak üzere beş ayrı elektron popülasyonu vardır. Foton soğurulma ve yayılım olaylarına bağlı üretim ve rekombinasyon akımları bu beş popülasyon arasında meydana gelir. İki bant veya seviye arasındaki net üretim akım yoğunluğu (elektron üretiminden rekombinasyonun çıkarılmış hali) $J_{l \rightarrow u}$ ile gösterilir. Burada l ve u sırasıyla alt ve üst bandı veya seviyeyi gösterir. Kuantum noktalı ara bant materyali arka yüzeydeki kalın GaAs alttaş ve ön yüzeyde ince GaAs emitör arasında olduğu için akımın VB’den ve CB’den çekildiği doğrudan AB’den çekilmediği kabul edilir. k indisli AB seviyesi için akım süreklilik denklemi aşağıdaki eşitlikteki gibidir;

$$\sum_l J_{l \rightarrow k} - \sum_u J_{k \rightarrow u} = 0 \quad (3.116)$$

Bu toplamalar k seviyesinden alt ve üst bantlar ve seviyeler üzerinden yapılır. Eşitlik 3.116 bütün AB seviyelerin sayısı kadar denklemi temsil eder. $E_{ph} > E_G$ olan bütün fotonların GaAs emitör tarafından soğurulduğu kabul edilir. Bütün materyalin aynı yansıma katsayısına sahip olduğu ve yarı iletkenin içerisinde bütün geçişlerin mükemmel olduğu kabul edilir. Dalga vektörü $\mathbf{q}$ ve polarizasyon vektörü $\boldsymbol{\varepsilon}$ ile tanımlanmış bir $\mathbf{q}, \boldsymbol{\varepsilon}$ foton modu için süreklilik denklemi;

$$\frac{dN_{ph,q\varepsilon}}{dz} = -\frac{n_{ref}}{c} \frac{1}{\cos \theta_q} \dot{N}_{ph,q\varepsilon} \quad (3.117)$$

Burada $N_{ph,q\varepsilon}$ moddaki foton sayısını, θ_q $\mathbf{q}$ ile z arasındaki kutupsal açıyı ne $\dot{N}_{ph,q\varepsilon}$ ise birim zamandaki soğurma ve emisyon olaylarından kaynaklanan net foton yok olmasıdır. Enerji seviyeleri ve bantlar için doluluk oranları Kuasi-Fermi seviyeleri kullanılarak Fermi-Dirac fonksiyonları ile tanımlanır;

$$f_x = \left[\exp \left(\frac{E_x - E_{F,x}}{k_B T_C} \right) + 1 \right]^{-1} \quad (3.118)$$

Tek bir kuantum nokta düşünüldüğünde $|\Xi_l\rangle$ ile ifade edilen bir kuantum durumundan $|\Xi_u\rangle$ ile tanımlanan bir kuantum durumuna $\mathbf{q}, \boldsymbol{\varepsilon}$ modundaki bir fotonun soğurulması veya emisyonu ile bir elektronun geçiş yapma olasılığı Fermi'nin Altın Kuralı ile aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$w_{q,\varepsilon}^a = N_{ph,q\varepsilon} \frac{2\pi^2 q^2 E_{ph}}{\Omega n_{ref}^2 \varepsilon_0} |\langle \Xi_l | \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} | \Xi_u \rangle|^2 \delta(E_u - E_l - E_{ph}) \quad (3.119)$$

$$w_{q,\varepsilon}^e = (N_{ph,q\varepsilon} + 1) \frac{2\pi^2 q^2 E_{ph}}{\Omega n_{ref}^2 \varepsilon_0} |\langle \Xi_l | \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} | \Xi_u \rangle|^2 \delta(E_u - E_l - E_{ph}) \quad (3.120)$$

Bu eşitlikte E_u ve E_l sırasıyla u ve l durumlarının enerji seviyeleridir. Ayrıca $\langle \Xi_l | \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} | \Xi_u \rangle$ ile ifade edilen durumlar arası geçişler için tanımlanan optik matris elemanlarıdır. Soğurma olayı alt durumda en az bir elektron olduğu üst durumda olmadığı durumlarda gerçekleşebilir. Emisyon olayında ise tam zıt koşul gereklidir. Birim hacim

ve zaman başına gerçekleşen soğurma ve emisyon olaylarının sayısı durumların doluluk oranlarının dahil olmasıyla aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$a_{q,\varepsilon} = \rho_{QD} w_{q,\varepsilon}^a f_l (1 - f_u) \equiv \frac{c}{n_{ref}} \frac{N_{ph,q\varepsilon}}{\Omega} \alpha_{q,\varepsilon}^{max} f_l (1 - f_u) \quad (3.121)$$

$$e_{q,\varepsilon} = \rho_{QD} w_{q,\varepsilon}^e f_l (1 - f_u) \equiv \frac{c}{n_{ref}} \frac{(N_{ph,q\varepsilon} + 1)}{\Omega} \alpha_{q,\varepsilon}^{max} f_u (1 - f_l) \quad (3.122)$$

Burada ρ_{QD} birim hacim başına kuantum nokta sayısını temsil eder. Zayıf soğurma yaklaşımı ise AB katmanında foton popülasyonunun çok az değiştiği düşünüldüğünde her bir durum çiftinin yalnızca kendi foton modlarıyla eşleştiği düşünülerek matematiksel kolaylık sağlanabilir. Bu yaklaşımla birlikte, q,ε foton modundaki $|\Xi_u\rangle$ durumundan $|\Xi_l\rangle$ durumuna geçişlerden kaynaklanan net foton kaybolması;

$$\dot{N}_{ph,q\varepsilon} = \Omega (a_{q,\varepsilon} - e_{q,\varepsilon}) \quad (3.123)$$

halini alır ve Eş. 3.117 aşağıdaki gibi düzenlenebilir;

$$\frac{dN_{ph,q\varepsilon}}{dz} = \frac{1}{\cos \theta_q} \alpha_{q,\varepsilon}^{max} (f_l - f_u) \left[N_{ph,q\varepsilon} + \frac{f_u(1-f_u)}{(f_u-f_l)} \right] \quad (3.124)$$

Burada;

$$\begin{aligned} \frac{f_u(1-f_u)}{(f_u-f_l)} &= - \left[\exp \left(\frac{E - (E_{F,u} - E_{F,l})}{k_B T_C} \right) - 1 \right]^{-1} = - \left[\exp \left(\frac{E - \mu}{k_B T_C} \right) - 1 \right]^{-1} \\ &\equiv -f_{B,\mu T_C} \end{aligned} \quad (3.125)$$

Olarak tanımlanır. $f_{B,\mu T_C}$ T_C sıcaklığı ve $\mu = E_{F,u} - E_{F,l}$ kimyasal potansiyeli için fotonların Bose-Einstein enerji dağılımıdır. Eşitlik 3.124'ün genel çözümü;

$$\begin{aligned} N_{ph,q\varepsilon}(z) &= A \exp \left\{ -\alpha_{q,\varepsilon}^{max} (f_l - f_u) \frac{z}{\cos \theta_q} \right\} + f_{B,\mu T_C} \\ &\cong A \left(1 - \alpha_{q,\varepsilon}^{max} (f_l - f_u) \frac{z}{\cos \theta_q} \right) + f_{B,\mu T_C} \end{aligned} \quad (3.126)$$

Şeklinde ifade edilir. Eşitlik 3.126’da ilk satırdaki üstel ifade birinci dereceden Taylor açılımı ile yaklaşık olarak alınmıştır. Bu yaklaşım sadece düşük soğurma durumunda geçerlidir. Burada A integral sabitidir. İntegral sabitinin bulunması için güneş pilinin geometrisi ve çalışma koşulları tarafından belirlenen sınır koşulları kullanılır. Güneş pilinin ön yüzeyden, $+z$ yönünde ilerleyen fotonlar tarafından aydınlatıldığı düşünülmektedir. Ön yüzeyde fotonlar AB katmanına yansıma indisi, n_{ref} , tarafından tanımlanan kaçış konisi ile giriş çıkış yaparlar. Arka tarafta ise fotonlar güneş pile bütünü yarım küre boyunca giriş çıkış yaparlar. Böylece “kçş” üst indisi ile ön yüzeydeki kaçış konisinin içerisindeki modları, “snr” üst indisi ile kaçış konisinin dışında toplam iç yansıma ile sınırlandırılmış modları gösterir. $+z$ yönünde ilerleyen fotonlar “+” ile belirtilirken $-z$ yönünde yol alan fotonlar “-” üst indisiyle gösterilmektedir.

Kaçış konisindeki $+z$ yönünde hareket eden fotonlar AB materyaline $z=0$ ’da girer ve popülasyonları aydınlatma kaynağından gelen popülasyona, $N_{inc}(\theta_q, \varphi_q)$, ($E_G > E_{ph}$ olan fotonlar GaAs emitör tarafından filtreledikten sonra) çevreden gelen emisyon ile gelen fotonlar dahil edilerek elde edilir. $-z$ yönünde ilerleyen modlar AB materyaline GaAs alttaştan $z=W$ ’da girer. GaAs katkılı alttaştan gelen alt bant fotonlarının herhangi bir voltaj koşulunda sıfır kimyasal potansiyele sahip olduğu düşünülebilir. Son olarak kaçış konisi dışarısındaki $+z$ yönünde ilerleyen modlar arka yüzeyden giren ve $z=0$ ’da yansıyan modlardır. Böylece her mod sınıfının sınır koşulları aşağıdaki gibidir;

$$N_{ph,q\varepsilon}^{+kçş}(0) = N_{inc,q\varepsilon}(\theta_q, \varphi_q) + f_{B,0T_C} \quad (3.127)$$

$$N_{ph,q\varepsilon}^{-kçş}(W) = N_{ph,q\varepsilon}^{-snr}(W) = f_{B,0T_C} \quad (3.128)$$

$$N_{ph,q\varepsilon}^{+snr}(0) = N_{ph,q\varepsilon}^{-snr}(0) \quad (3.129)$$

$f_{B,0T_C}$ sıfır kimyasal potansiyelinde ve T_C sıcaklığında Bose-Einstein dağılımını gösterir. Sınır koşulları ile Eş. 3.127-129 için çözümler aşağıdaki gibidir.

$$N_{ph,q\varepsilon}^{+kçş}(z) = (N_{inc,q\varepsilon}(\theta_q, \varphi_q) + f_{B,0T_C}) \left(1 - \alpha_{q,\varepsilon}^{max}(f_l - f_u) \frac{z}{|\cos \theta_q|} \right) + f_{B,\mu T_C} \alpha_{q,\varepsilon}^{max}(f_l - f_u) \frac{z}{|\cos \theta_q|} \quad (3.130)$$

$$N_{ph,q\varepsilon}^{-k\zeta\zeta}(z) = f_{B,0T_c} \left(1 - \alpha_{q,\varepsilon}^{max}(f_l - f_u) \frac{W-z}{|\cos \theta_q|} \right) + f_{B,\mu T_c} \alpha_{q,\varepsilon}^{max}(f_l - f_u) \frac{W-z}{|\cos \theta_q|} \quad (3.131)$$

$$N_{ph,q\varepsilon}^{-snr}(z) = f_{B,0T_c} \left(1 - \alpha_{q,\varepsilon}^{max}(f_l - f_u) \frac{W-z}{|\cos \theta_q|} \right) + f_{B,\mu T_c} \alpha_{q,\varepsilon}^{max}(f_l - f_u) \frac{W-z}{|\cos \theta_q|} \quad (3.132)$$

$$N_{ph,q\varepsilon}^{+snr}(z) = f_{B,0T_c} \left(1 - \alpha_{q,\varepsilon}^{max}(f_l - f_u) \frac{W+z}{|\cos \theta_q|} \right) + f_{B,\mu T_c} \alpha_{q,\varepsilon}^{max}(f_l - f_u) \frac{W+z}{|\cos \theta_q|} \quad (3.133)$$

$l \rightarrow u$ geçişleri için toplam net akım yoğunluğu xy düzleminde birim alan başına toplamda pile giren ve çıkan fotonların sayıları arasındaki farktır. İki ara yüzdeki foton akıları dikkate alındığında birim enerji aralığı başına net üretim akım yoğunluğu aşağıdaki eşitlikteki gibi ifade edilir.

$$J_{l \rightarrow u} = q \int_0^{E_G} \frac{c}{n_{ref}} \rho_{ph} \left[\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_c} d\varphi d\theta |\cos \theta| \sin \theta \langle N_{ph,q\varepsilon}^{+k\zeta\zeta}(0) - N_{ph,q\varepsilon}^{+k\zeta\zeta}(W) \rangle_\varepsilon \\ & - \int_0^{2\pi} \int_{\theta_c}^{\pi/2} d\varphi d\theta |\cos \theta| \sin \theta \langle N_{ph,q\varepsilon}^{+snr}(W) \rangle_\varepsilon \\ & + \int_0^{2\pi} \int_{\pi/2}^{\pi-\theta_c} d\varphi d\theta |\cos \theta| \sin \theta \langle N_{ph,q\varepsilon}^{-snr}(W) \rangle_\varepsilon \\ & + \int_0^{2\pi} \int_{\pi-\theta_c}^{\pi} d\varphi d\theta |\cos \theta| \sin \theta \langle N_{ph,q\varepsilon}^{-k\zeta\zeta}(W) - N_{ph,q\varepsilon}^{-k\zeta\zeta}(+) \rangle_\varepsilon \end{aligned} \right] dE_{ph} \quad (3.134)$$

Burada $\langle \rangle_\varepsilon$ ile belirtilen işlem polarizasyon durumları üzerinden ortalamadır. Eşitlik 3.134'te soğurucu içindeki birim enerji aralığı, birim katı açısı ve birim hacim başına polarize foton modlarının yoğunluğu ρ_{ph} ile gösterilmiştir ve aşağıdaki eşitlikteki gibidir;

$$\rho_{ph} = \frac{2n_{ref}^3(E_{ph})^2}{h^3 c^2} \quad (3.135)$$

Eşitlik 3.134 matematiksel olarak düzenlendiğinde aşağıdaki eşitlik elde edilir;

$$J_{l \rightarrow u} = q \int_0^{E_G} \frac{c}{n_{ref}} \rho_{ph} W(f_l - f_u) \left[\int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_c} d\varphi d\theta \sin \theta \langle \alpha_{q,\varepsilon}^{max} \rangle_\varepsilon N_{inc} + (f_{B,0T_c} - f_{B,\mu T_c}) \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} d\varphi d\theta \sin \theta \langle \alpha_{q,\varepsilon}^{max} \rangle_\varepsilon \right] dE_{ph} \quad (3.136)$$

Bu eşitlikte pili ön yüzüne gelen foton akısı polarize olmamıştır. Eşitlik 3.136'nın hesaplanabilmesi için Eş. 3.78'de verilen optik matris elemanlarının polarizasyon

bağımlılığı dikkate alınmalıdır. Polarizasyon üzerinden ortalaması alınan soğurma katsayısı ifadesi aşağıdaki eşitlikteki gibidir.

$$\begin{aligned} \langle \alpha_{q,\varepsilon}^{max} \rangle_\varepsilon = & \frac{1-\cos^2 \varphi \sin^2 \theta}{2} \alpha_x^{max} + \frac{1-\sin^2 \varphi \sin^2 \theta}{2} \alpha_y^{max} + \frac{\sin^2 \theta}{2} \alpha_z^{max} - \\ & \cos \varphi \sin \varphi \sin^2 \theta \sqrt{\alpha_x^{max} \alpha_y^{max}} - \cos \varphi \cos \theta \sin \theta \sqrt{\alpha_y^{max} \alpha_z^{max}} - \\ & \sin \varphi \cos \theta \sin \theta \sqrt{\alpha_z^{max} \alpha_x^{max}} \end{aligned} \quad (3.137)$$

Eşitlik 3.137’de ayrıntı şeklinde ifade edilen soğurma katsayıları aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$\alpha_x^{max} = \frac{2\pi^2 q^2 E}{n_{ref} ch \varepsilon_0} \rho_{QD} |\langle \Xi_l | x | \Xi_u \rangle|^2 \delta(E_u - E_l - E_{ph}) \quad (3.138)$$

$$\alpha_y^{max} = \frac{2\pi^2 q^2 E}{n_{ref} ch \varepsilon_0} \rho_{QD} |\langle \Xi_l | y | \Xi_u \rangle|^2 \delta(E_u - E_l - E_{ph}) \quad (3.139)$$

$$\alpha_z^{max} = \frac{2\pi^2 q^2 E}{n_{ref} ch \varepsilon_0} \rho_{QD} |\langle \Xi_l | z | \Xi_u \rangle|^2 \delta(E_u - E_l - E_{ph}) \quad (3.140)$$

$l \rightarrow u$ geçişleri için toplam net akım yoğunluğu integraller hesaplandıktan sonra aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$J_{l \rightarrow u} = qW \int_0^{E_G} (f_l - f_u) \left(\frac{F_{ph,inc}}{2} (\alpha_x^{max} + \alpha_y^{max}) + \frac{8\pi n_{ref}^2 E_{ph}^2}{3h^3 c^2} (f_{B,0T_C} - f_{B,\mu T_C}) (\alpha_x^{max} + \alpha_y^{max} + \alpha_z^{max}) \right) dE_{ph} \quad (3.141)$$

Eşitlik 3.141’de gelen foton akısına bağımlı olan ve olmayan ifadeler içermektedir. Bu sayede $l \rightarrow u$ akım yoğunluğu ışık akımı J^L ve karanlık akım J^D kullanılarak aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$J_{l \rightarrow u} = J_{l \rightarrow u}^L + J_{l \rightarrow u}^D \quad (3.142)$$

$$J_{l \rightarrow u}^L = qW \int_0^{E_G} (f_l - f_u) F_{ph,inc} \alpha_{x,y}^{max} dE_{ph} \quad (3.143)$$

$$J_{l \rightarrow u}^D = qW \int_0^{E_G} (f_l - f_u) \frac{8\pi n_{ref}^2 E_{ph}^2}{h^3 c^2} (f_{B,0T_C} - f_{B,\mu T_C}) \alpha_{izo}^{max} dE_{ph} \quad (3.144)$$

Karanlık akım ifadesinde $f_{B,0T_c}$ ile orantılı terim çevreden AB katmanına gelen termal fotonların soğurulmasından kaynaklanan yukarı doğru geçişleri temsil eder. $-f_{B,\mu T_c}$ ile orantılı terim AB materyalinden etrafa yayılan fotonların neden olduğu aşağı yönlü geçişleri temsil eder. Eşitliklerde $\alpha_{xy}^{max}=(\alpha_x^{max}+\alpha_y^{max})/2$ xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için ortalama soğurma katsayısını $\alpha_{izo}^{max}=(\alpha_x^{max}+\alpha_y^{max}+\alpha_z^{max})/3$ izotropik fotonlar için ortalama soğurma katsayısını temsil eder. Eşitlik 3.143'de $F_{ph,inc}$ pilin ön yüzeyine gelen foton akısını temsil eder ve aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$F_{ph,inc}(E) = X \frac{1}{46000} \frac{2\pi E^2}{h^3 c^2} f_{B,0T_s}(E) \frac{1,000}{1,300} \quad (3.145)$$

Burada $f_{B,0T_s}(E)$ güneş sıcaklığındaki bir cisimden yayınlanan fotonlar için Bose-Einstein dağılımıdır. 1,000/1,300 çarpanı ise atmosfer tarafından soğurulan ışık gücünü dahil etmek için kullanılmıştır. Böylece pilin ön yüzeyine gelen ortalama giriş gücü 1000W/m² olarak alınır. Eşitlikte, X Eş. 2.11'de olduğu gibi ışık konsantrasyonunu göstermektedir.

KN-ABGP'den çekebilecek toplam akımı hesaplayabilmek için konak GaAs VB'den başlayıp konak GaAs CB'de bütün geçişlerin ve geçiş zincirlerinin katkılarının hesaplanması gereklidir. Toplam akım yoğunluğu üç ana bileşenden oluşur ve aşağıdaki gibi ifade edilebilir;

$$J_{toplaml} = J_{AB} + J_{VBkaidesi-CB} + J_{E_G-üstü} \quad (3.146)$$

İlk bileşen J_{AB} , VB'den CB'ye AB seviyeleri üzerinden geçişlerin net akım yoğunluğunu ifade eder. Bu da VB'den üç AB durumuna geçişlerin toplamı veya eşit şekilde AB durumlarında CB'ye geçişlerin toplamıdır.

$$J_{AB} = J_{VB-AB1} + J_{VB-AB2} + J_{VB-AB3} = J_{AB1-CB} + J_{AB2-CB} + J_{AB3-CB} \quad (3.147)$$

VB'den AB durumlarına veya AB durumlarında CB'ye geçişler için her bir akım yoğunluğu Eş. 3.142, 3.143 ve 3.144 kullanılarak hesaplanır. $J_{VBkaidesi-CB}$ olarak adlandırılan akım VB kaidesindeki bağlı durumlardan CB'ye doğrudan geçişleri ifade eder. Bu doğrudan geçişlerin enerjileri E_G 'den küçük olduğu için bu akım alt bant akımı olarak değerlendirilir. $J_{VBkaidesi-CB}$ bu koşulları sağlayan bütün geçişler için toplam olarak Eş. 3.142, 3.143 ve 3.144

kullanılarak hesaplanır. Son olarak $J_{EG-üstü}$ akım yoğunluğu konak VB'den konak CB'ye doğrudan geçişleri ifade eder. $E_{ph} > E_G$ olan bütün fotonların konak GaAs tarafından soğurulduğu kabul edilir. $J_{EG-üstü}$ akımı aslında konvansiyonel GaAs güneş pilinin akımına eşit olacaktır. Tek banda sahip kuantum nokta (ara bant) içermeyen güneş pili için akım yoğunluğu detaylı denge yaklaşımı ile aşağıdaki gibi hesaplanabilir;

$$J_{EG-üstü} = J_{EG-üstü}^L - J_{EG-üstü}^D \quad (3.148)$$

$$J_{EG-üstü}^L = q \int_{E_G}^{\infty} (1 - e^{-\alpha_{GaAs}(E_{ph})W_{GaAs}}) F_{ph,inc}(E_{ph}) dE_{ph} \quad (3.149)$$

$$J_{EG-üstü}^D = q \int_{E_G}^{\infty} \frac{2\pi E_{ph}^2}{h^3 c^2} e^{\frac{-(E_{ph}-V)}{k_B T_c}} dE_{ph} \quad (3.150)$$

$J_{EG-üstü}$ akım yoğunluğu hesaplanırken tam soğurma yaptığı (α_{GaAs} GaAs yarıiletken için soğurma katsayısı ve W_{GaAs} toplam pil kalınlığı olmak üzere, $\alpha_{GaAs}W_{GaAs} > 5$ olduğu) kabul edilir. Eşitlik 3.150'de V KN-ABGP çıkış gerilimini temsil etmektedir.

3.3.1. Yük yansızlığı şartı

Kuantum nokta yığınının yük yansızlığı olduğu kabul edilir. Bu şart kenarlardan uzakta kalın kuantum nokta yığınının içerisinde deneysel olarak da tespit edilmiştir [110]. Yük yansızlığı şartı aşağıdaki eşitlik ile ifade edilebilir;

$$n_{CB} + p_{VB} + n_{AB} - N_d^+ = 0 \quad (3.151)$$

Burada n_{CB} CB'deki elektron konsantrasyonudur. p_{VB} ise VB'deki boşluk konsantrasyonunu bağlı durumları da dikkate alarak ifade etmektedir. n_{CB} ve p_{CB} aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$n_{CB} = N_{CB} e^{-(E_{CB}-E_{F,CB})/k_B T_c} \quad (3.152)$$

$$p_{VB} = N_{VB} e^{-(E_{F,VB}-E_{VB})/k_B T_c} + \sum_{bağlı\ boşluk\ durumları} \frac{2\rho_{QD}}{e^{(E_{F,VB}-E_{bd})/k_B T_c} + 1} \quad (3.153)$$

Burada E_{bd} bağlı boşluk (hh, lh veya so) durumlarının enerji seviyelerini göstermektedir. İkinci denklemdeki toplamlar bütün VB bağlı durumların üzerinden yapılır. 2 çarpanı spin

dejenerasyonunu dikkate almak için kullanılır. N_{CB} ve N_{VB} sırasıyla CB ve VB'deki etkin durum yoğunluğunu ifade etmektedir ve aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$N_{CB} = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T_c}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.154)$$

$$N_{VB} = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T_c}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.155)$$

Burada m_e^* ve m_h^* elektron ve boşlukların etkin kütleleri ifade etmektedir. n_{AB} AB durumlarındaki elektron konsantrasyonlarının toplamıdır;

$$n_{AB} = \sum_{i=1,2,3} \frac{2\rho_{QD}}{e^{(E_{ABi}-E_{F,ABi})/k_B T_c} + 1} \quad (3.156)$$

Eşitlik 3.151'de son terim N_d^+ ise ara bandı ön doldurma yapmak için kullanılan iyonize olmuş donör atomların yoğunluğudur.

$$N_d^+ = \frac{N_d}{e^{(E_{F,CB}-E_d)/k_B T_c} + 1} \quad (3.157)$$

Burada E_d donör enerji seviyesidir. Referans KN-ABGP'de kuantum nokta katmanı Si ile δ -katkılanmıştır. Böylece AB'yi ön doldurma için kullanılan donör atomlarının konsantrasyonu, N_d kuantum nokta yoğunluğuna eşit olacaktır.

3.3.2. Kuasi-Fermi seviyelerinin hesaplanması

J-V karakteristiklerinin ve pil veriminin elde edilebilmesi için öncelikle bantların ve seviyelerin Kuasi-Fermi seviyelerinin hesaplanması gereklidir. VB, CB ve üç adet AB seviyesi için tanımlanan beş adet Kuasi-Fermi seviyeleri için beş adet eşitlik tanımlanır. Bu eşitliklerden ilk üçü Eş. 3.116'da üç AB seviyesi için tanımlanan süreklilik denklemleridir;

$$J_{VB \rightarrow AB1} - J_{AB1 \rightarrow AB2} - J_{AB1 \rightarrow CB} = 0 \quad (3.158)$$

$$J_{VB \rightarrow AB2} + J_{AB1 \rightarrow AB2} - J_{AB2 \rightarrow AB3} - J_{AB2 \rightarrow CB} = 0 \quad (3.159)$$

$$J_{VB \rightarrow AB3} + J_{AB2 \rightarrow AB3} - J_{AB3 \rightarrow CB} = 0 \quad (3.160)$$

Dördüncü eşitlik, Eş. 3.151’de verilen ve aşağıda yeniden ifade edilen yük yansızlığı şartı eşitliğidir.

$$n_{CB} - p_{VB} + n_{IB} - N_d = 0 \quad (3.161)$$

Son eşitlik, KN-ABGP’inin çıkış voltajının VB ve CB Kuasi-Fermi seviyeleri arasındaki ayrılma kadar olacağı kabulü yapılarak elde edilir. Bu kabul taşıyıcı mobilitelerinin sonsuz olduğu ve seri direncin sıfır olduğu kabullerine eşdeğerdir.

$$E_{F,CB} - E_{F,VB} = qV \quad (3.162)$$

Bu beş eşitlik gelen foton akısı, ara bant enerji seviyeleri, soğurma katsayıları gibi bilinen parametreler ve bilinmeyen Kuasi-Fermi seviyeleri cinsinden ifade edilir. Verilen çıkış voltajı değerleri için Kuasi-Fermi seviyeleri bu beş eşitlik ile nümerik yöntemler kullanılarak elde edilebilir.

4. SAYISAL SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

Bu bölümde Bölüm 3'te sunulan matematiksel modeller kullanılarak elde edilen sayısal sonuçlar incelenip karşılaştırılacaktır. Bölüm 4.1'de, Bölüm 3.1'de verilen ideal ABGP detaylı denge modeli kullanılarak GaAs ($E_G=1,42$ eV) ABGP için verim limiti ve optimum pil parametreleri belirlenmiştir. Eşit alt bant soğurması için örtüşmenin ve ara bant doluluk oranlarının fotoakımlar, açık devre voltajı ve pil verimi üzerindeki etkileri incelenmiştir. Eşit olmayan alt bant soğurması durumunda verim değişimi ve optimum ara bant durum yoğunluğu tespit edilmeye çalışılmıştır. Doluluk oranının, akımlar ve verim üzerinde etkisi geniş yarı iletken bant aralığındaki ABGP'ler için de incelenmiştir.

Bölüm 4.2'de, InAs/GaAs kuantum noktalar kullanılarak üretilmiş ABGP için kuantum noktaların varlığıyla ortaya çıkan ara bant enerji seviyeleri, Bölüm 3.2'de sunulan k.p metodu kullanılarak tespit edilmiştir. Etkin kütle uyumsuzluğunun ve kuantum nokta boyutlarının AB enerji seviyeleri üzerindeki etkileri incelenmiştir. Ara bant seviyeleri ile iletkenlik bandındaki diğer bağlı ve saçılma durumlarına geçişler için soğurma katsayıları elde edilmiştir. Nokta boyutlarının ve sınırlama potansiyelinin, durum enerjileri ve soğurma katsayıları üzerinde etkileri detaylı olarak incelenmiştir.

Dört bant k.p metodu ile CB'deki bağlı durumların yanı sıra VB'deki ağır boşluk, hafif boşluk ve ayrılma bandı ile ilişkili bağlı durumların enerji seviyeleri tespit edilmiştir. VB ile ilişkili bağlı durumlardan AB durumlarına geçişler için soğurma katsayıları elde edilmiştir. Soğurma katsayılarının nokta boyutları, etkin kütle uyumsuzluğu vb. parametreler ile değişimi incelenmiştir. Ayrıca, akım yoğunluğunun değişimi, nokta boyutlarına, etkin kütle uyumsuzluğuna vb. parametrelere göre de incelenmiştir.

Bölüm 4.3'te, Bölüm 4.2'de enerji seviyeleri ve alt bant soğurma katsayıları hesaplanan InAs/GaAs KN sistemi için Bölüm 3.3'de sunulan Detaylı Denge Modeli kullanılarak Kuasi-Fermi seviyeleri ve akım gerilim karakteristikleri elde edilmiştir. Ana bant ve alt bant akım yoğunlukları elde edilerek, alt bant akımlarının düşük olmasının sebepleri araştırılmıştır. InAs/GaAs KN-ABGP ve ideal GaAs ABGP, tek eklemli konvansiyonel GaAs güneş pili ile karşılaştırılmıştır.

4.1. Detaylı Denge Modelinin Optimum Verim için GaAs ve Geniş Bant Aralığındaki ABGP'lere Uygulama Sonuçları

Güneş pili verim limitlerini hesaplamak için detaylı denge yaklaşımında kullanılan kabuller;

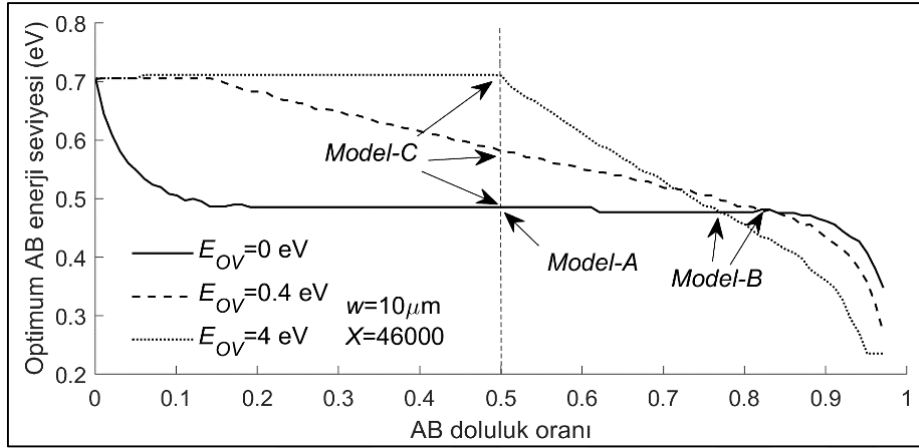
- Güneş piline gelen her foton uygun enerjiye sahip bant tarafından soğurulur ve hiçbir fotonun kaybolmadığı varsayılır.
- Soğurulan her fotonun kesinlikle bir elektron-boşluk çifti ürettiği varsayılır.
- Işımalı rekombinasyonun, diğer rekombinasyon çeşitlerinden hızlı ve baskın olduğu varsayılır.
- Elektron ve boşlukların mobilitelerinin sonsuz olduğu kabul edilir. Seri direncin sıfır ve şönt direncin ise sonsuz olduğu varsayılır.
- Son olarak AM0 spektrumu için güneşin 6000K sıcaklıkta siyah cisim ışıması yapan bir kaynak olduğu kabul edilir. Pilin ön yüzeyine düşen ortalama güç yoğunluğu AM0 için $157,9 \text{ mW/cm}^2$ 'dir. Bu çalışmada ayrıca AM1.5G spektrumu baz alınmıştır. Güneş sıcaklığı 5762K de pilin ön yüzeyine gelen ortalama güç yoğunluğu 100 mW/cm^2 olarak kabul edilmiştir.

4.1.1. GaAs ABGP verim limiti ve optimal pil parametreleri

Bu çalışmada, GaAs yarıiletken materyali ($E_G=1,42 \text{ eV}$) ile üretilmiş tek bir ara banda sahip ABGP için verim limiti AM0 spektrumunda %59,92 olarak hesaplanmıştır. Optimum ara bant seviyeleri VB'ye yakın $E_G/3$ 'te ($0,4856 \text{ eV}$) ve CB'ye yakın $2E_G/3$ 'te ($0,934 \text{ eV}$) belirlenmiştir. Malzeme kalınlığı ve soğurma katsayıları güneş pili tam soğurma yapacak şekilde seçilmiştir. Ara bant yapılı materyalin kalınlığı $w=10\mu\text{m}$ ve ana bant ve ara bant soğurma katsayıları eşit ve $\alpha_{CV}=\alpha_{VI}=\alpha_{IC}=10^4 \text{ cm}^{-1}$ kabul edilmiştir. Pil verimi, ışık konsantrasyonunun daha düşük değerlerinde, $X=1$ için %37,1 ve $X=1000$ için %52,6 olarak hesaplanmıştır. Konvansiyonel GaAs güneş pili için verim limiti değerleri $X=1$, $X=1000$ ve $X=46000$ için sırasıyla %31,7, %36,1, ve %39,1 olarak bulunmuştur.

Navruz ve Sarıtaş, soğurma katsayılarındaki örtüşmenin ABGP'leri üzerinde etkilerini detaylı olarak incelemiştir [44]. Örtüşmenin etkisiyle düşen verimlerin ara bant enerji seviyesinin değiştirilmesiyle veya soğurma katsayıları arasındaki oran ($\alpha_{CV}/\alpha_{VI}=\alpha_{VI}/\alpha_{IC}=10$) ile artırabileceğini belirtmişlerdir [44]. Bu çalışmada, Detaylı Denge Modeli kullanılarak optimum AB enerji seviyesinin ara bandın doluluk oranı ve örtüşmeyle değişimi elde edilmiş olup Şekil 4.1'de görülmektedir.

Şekil 4.1’de görüldüğü gibi inceleme ve karşılaştırma için üç farklı ABGP modeli tanımlanmıştır. Model-A, örtüşmesiz durum için tanımlanan yarı dolu ve optimum ara bant enerji seviyesine, E_{IB} , sahiptir. Model-B, farklı optimum doluluk oranına sahip ve örtüşmesiz durum için tanımlanan (Model-A ile aynı) AB enerji seviyesine sahiptir. Model-C ise yarı dolu ve örtüşme ile değişen optimum AB enerji değerlerine sahiptir.



Şekil 4.1. Optimum ara bant enerji seviyelerinin AB doluluk oranına göre farklı örtüşme miktarlarındaki değişimi [108]

Yukarıdaki üç modelin özellikleri Çizelge 4.1’de özetlenmiştir. Model-A ve Model-B’de AB enerji seviyesi örtüşmeli ve örtüşmesiz durumlarda eşit ve sabittir. Model-C’de ise AB enerji seviyesi örtüşme miktarının artmasıyla yasak bandın ortasına doğru kaymaktadır. Önce üç model için ana bant soğurma katsayısının eşit olduğu kabul edilmiştir. Alt bant soğurma katsayıları yarı dolu durumlar (Model-A ve Model -C) için ana bant soğurma katsayısının yarısına eşittir. Model-B için alt bant soğurma katsayıları çizelgede görüldüğü gibi optimum doluluk oranının değişmesiyle değişmektedir.

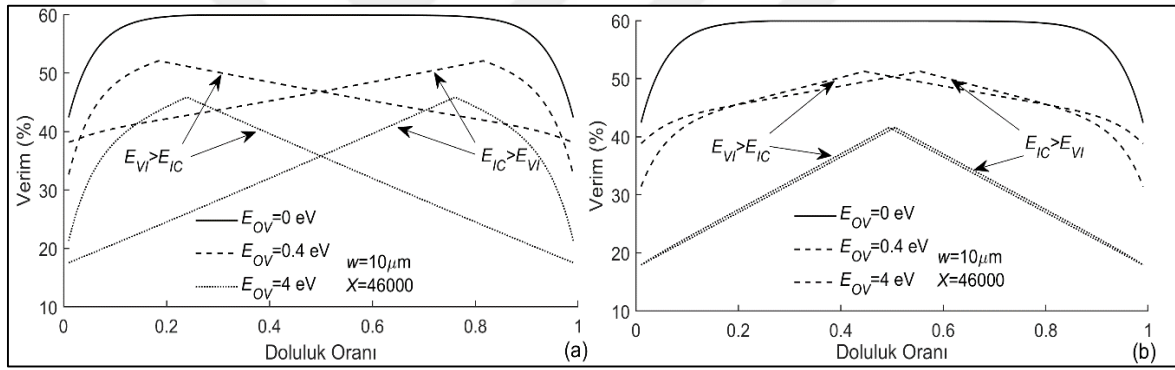
Çizelge 4.1. Farklı üç ABGP modeli için tasarım parametreleri

Model	AB enerji seviyesi (eV)	Doluluk oranı	Soğurma katsayıları (cm ⁻¹)
Model-A	$E_G/3$ veya $2E_G/3$ (0,486 veya 0,934)	0,5	$\alpha_{CV}=10^4$
Model-B	$E_G/3$ veya $2E_G/3$ (0,486 veya 0,934)	Optimum f	$\alpha_{VI}=\alpha_{IC}=\alpha_{CV}/2$ $\alpha_{CV}=10^4$ $\alpha_{VI}=f\alpha_{VI0}$ $\alpha_{IC}=(1-f)\alpha_{IC0}$
Model-C	$E_G/3$ ile $E_G/2$ arası (0,486, 0,568, 0,71 veya 0,934, 0,839, 0,71)	0,5	$\alpha_{CV}=10^4$ $\alpha_{VI}=\alpha_{IC}=\alpha_{CV}/2$

4.1.2. Eşit alt bant soğurma katsayıları için örtüşme ve ara bant doluluk oranının pil verimine, kısa devre akımına ve açık devre voltajına etkileri

Pil veriminin doluluk oranı ve örtüşme ile değişimi

Üç ABGP modelinin maksimum verimlerinin ara bandın doluluk oranları ve örtüşme ile değişimi Şekil 4.2’de görülmektedir. Model-B için (sabit ve optimum enerji seviyesine sahip AB için) ara bandın doluluk oranı VB’a yakın olan optimum ara bant seviyesi için yaklaşık $f=0,8$, CB’ye yakın optimum ara bant seviyesi için yaklaşık $f=0,2$ olarak tespit edilmiştir. Model-C için örtüşme ile değişen AB enerji seviyeleri için optimum doluluk oranı yaklaşık $f=0,5$ olarak elde edilmiştir. Örtüşmesiz durumda her üç model için geniş bir aralıkta maksimum verim elde edilmiştir.



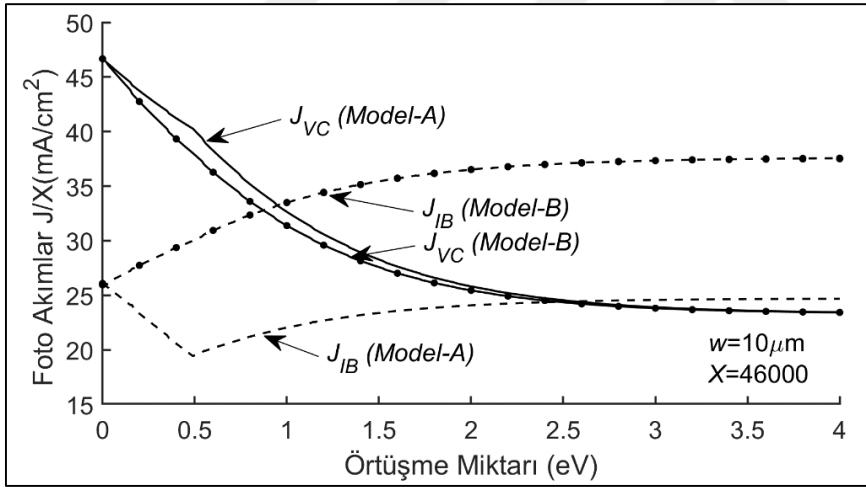
Şekil 4.2. Pil veriminin AB doluluk oranı ve farklı örtüşme ile değişimi (a) sabit E_{IB} (0,486 veya 0,934) için (b) örtüşme ile değişen E_{IB} için [108]

Doluluk oranının çok büyük veya küçük olduğu durumlarda yeterli miktarda soğurma sağlanamadığından ($faw < 5$) pil verimi düşmektedir. Model-A’ya (yarı dolu AB’ye) göre, optimum doluluk oranıyla Model-B için bulunan verim, 0,4 eV örtüşmede, %46,7’den %52,1’e; 4 eV örtüşmede, %35,7’den %45,6’ya çıkmaktadır. Model-C için maksimum verimler, 0,4 eV örtüşmede, %51,4; 4 eV örtüşmede %41,37 olarak tespit edilmiştir.

Model-B ile benzer verim değerleri, soğurma katsayıları arasındaki $\alpha_{CV}/\alpha_{VI} = \alpha_{VI}/\alpha_{IC} = 10$ kat oran için Navruz ve Sarıtaş tarafından bulunmuştur [44]. Ancak, düşük alt bant soğurma katsayıları ile tam soğurmanın elde edilebilmesi için yüksek pil kalınlıkları gerekmektedir ($w=200\mu m$). Model-B’de ise gerekli pil kalınlığı $w=5\mu m$ ’dir.

Model-A ve Model-B için ana bant ve alt bant fotoakımlarının örtüşme miktarı ile değişimi

Model-A ve Model-B için örtüşme miktarının ana bant ve alt bant fotoakım yoğunlukları üzerinde etkileri Şekil 4.3’de gibi elde edilmiştir. Model-A için alt bant fotoakım yoğunluğu $E_{OV}=0,5$ eV’a kadar azalmakta daha sonra 2,5 eV’a kadar artmaktadır. Şekil 3.4’de görülen seri bağlı ara bant diyotları ara bant üzerinden küçük olan akımın akmasını sağlamaktadır. Model-B için optimum doluluk oranı sayesinde alt bant fotoakım yoğunlukları J_{VI} ve J_{IC} eşitlenir ve bu sayede AB üzerinden daha yüksek toplam akım elde edilir. Model-A’da ise J_{VI} ile J_{IC} arasındaki fark D_{VI} ’ı (Şekil 3.4) ileri yönde besleğinden pilin açık devre voltajında düşüslere yol açar. Küçük örtüşme değerlerinde, Model-A’nın ana bant akımı, optimum olmayan doluluk oranı nedeniyle ara banttan elektron çaldığı için, Model-B’nin ana bant akımından bir miktar yüksektir. Ancak, yüksek alt bant fotoakım yoğunluğu sayesinde Model-B’nin toplam fotoakım yoğunluğu Model-A’nın toplam fotoakım yoğunluğundan yüksek olmaktadır.

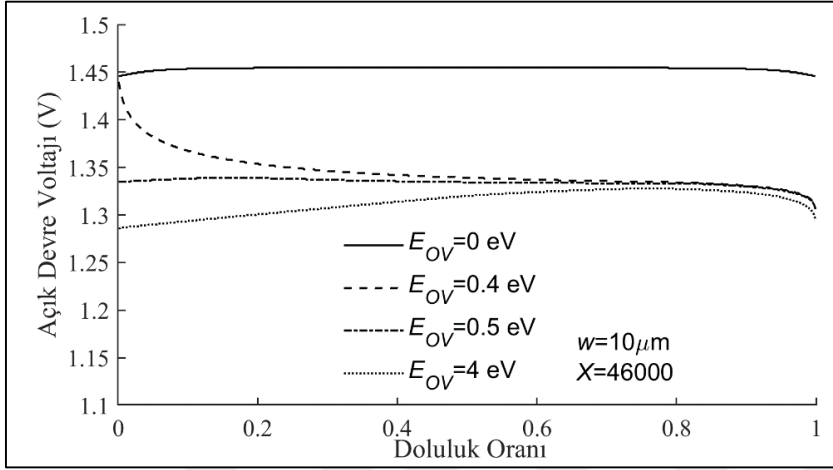


Şekil 4.3. Model-A ve Model-B için ana bant ve alt bant fotoakım yoğunluklarının örtüşme miktarı ile değişimi [108]

Açık devre voltajının doluluk oranı ve örtüşme miktarı ile değişimi

Şekil 4.4, GaAs ABGP’nin açık devre voltajının doluluk oranı ve örtüşme miktarı ile değişimini göstermektedir. Örtüşmesiz durumda 46000 kat yoğunlaştırılmış güneş için açık devre voltajı, Model-A ve Model-B için, 1,456V olarak tespit edilmiştir. Örtüşmenin artmasıyla birlikte açık devre voltajı, fotoakım yoğunluğunun azalmasıyla ve dahili rekombinasyonun artmasıyla düşmektedir. Doluluk oranı $f=0,5$ olan Model-A için, örtüşme

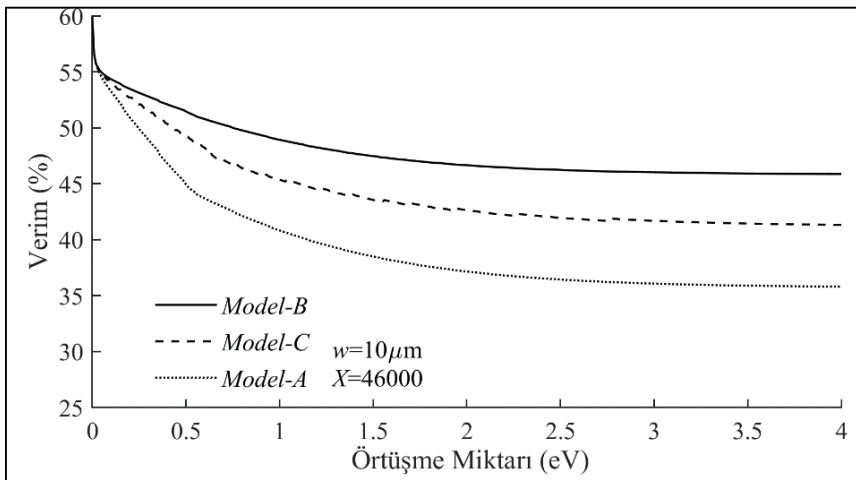
miktarının küçük değerlerinde 1,35V civarında olan açık devre voltajı, örtüşme miktarı 0,5 eV’u geçtikten sonra 1,32V değerine sabitlenmektedir. Doluluk oranı $f=0,8$ olan Model-B için, açık devre voltajı yaklaşık olarak sabit ve 1,34V civarındadır.



Şekil 4.4. Açık devre voltajının doluluk oranı ve örtüşme miktarı ile değişimi [108]

Model-A, Model-B ve Model-C için maksimum verimlerin örtüşme miktarı ile değişimi

Model-A, Model-B ve Model-C için maksimum verimlerin örtüşme miktarı ile değişimi Şekil 4.5’de görüldüğü gibidir. Model-B yüksek alt bant akımları sayesinde Model-A ve Model-C’den daha yüksek verimlere sahiptir. Model-B için verim değerleri $E_{OV}=2,5$ eV değerinden sonra sabitlenmektedir. Model-B ve Model-A maksimum verimleri arasındaki oran, η_B/η_A , iki modelin doluluk oranlarının kare kökleriyle orantılı olup aşağıdaki gibidir;



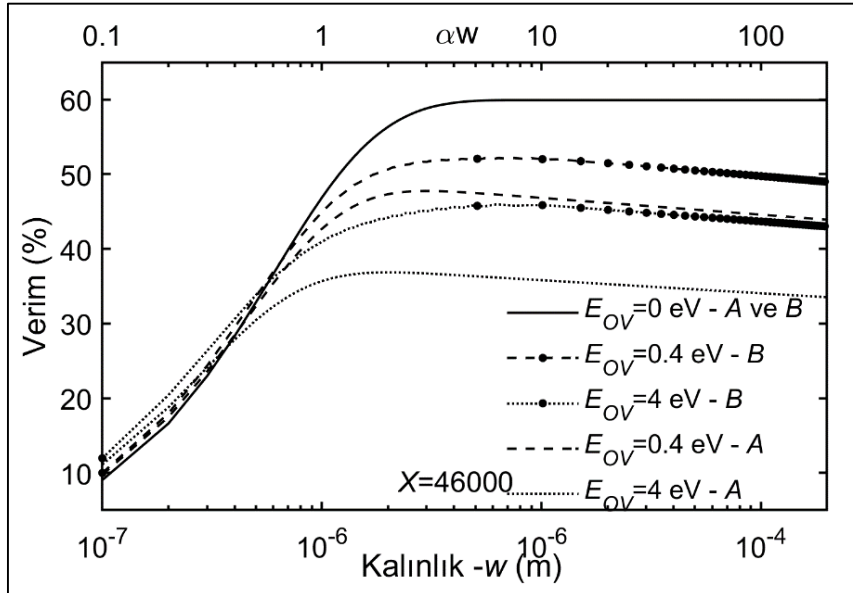
Şekil 4.5. Model-A, Model-B ve Model-C için maksimum pil verimlerinin örtüşme miktarı ile değişimi [108]

$$\frac{\eta_B}{\eta_A} \approx \sqrt{f_{of}/f_{hf}}, \quad E_{OV} \geq E_{OV,P} \approx 2,5 \text{ eV} \quad (4.1)$$

Burada f_{of} ile f_{hf} sırasıyla optimum ve yarı doluluk oranını temsil etmektedir. $E_{OV,P}$ ise verimin sabitlenmeye başladığı örtüşme miktarıdır.

Model-A ve Model-B için pil veriminin, AB materyalinin kalınlığı ve örtüşme miktarı ile değişimi

Model-A ve Model-B için pil veriminin ABGP'nin baz bölgesi kalınlığı ve örtüşme miktarı ile değişimi Şekil 4.6'da görülmektedir. Maksimum verimlerin, tam soğurmanın sağlandığı $\alpha w > 5$ için elde edildiği görülmektedir. Tam soğurmaya ulaşılan pil kalınlıkları örtüşme miktarı ile düşmektedir. Eşitlik 3.14-3.17'den de görüldüğü gibi örtüşmeli durumlarda kalınlığın artması ile dahili rekombinasyon arttığı için verimler de bir miktar düşmektedir. Şekilde görüldüğü gibi, Model-B ile benzer verimlere sahip soğurma katsayıları arasında $\alpha_{CV}/\alpha_{VI} = \alpha_{VI}/\alpha_{IC} = 10$ oran olan modelde gereken pil kalınlığı $200 \mu\text{m}$ [44] iken Model-B için gereken pil kalınlığı $5 \mu\text{m}$ 'dir.



Şekil 4.6. Model-A ve Model-B için pil veriminin AB materyalinin kalınlığı ve örtüşme miktarı ile değişimi [108]

Örtüşmesiz durumda, pil verimi, η , aşağıdaki eşitliği takip etmektedir ve $\alpha w \geq 5$ için maksimum verim, $\eta = \%59,9$ olmaktadır;

$$\eta = \%59,9(1 - e^{-f\alpha w}) \quad (4.2)$$

Model-B'nin pil veriminin doluluk oranı ve örtüşme miktarına bağlı olarak değişimi aşağıdaki gibidir;

$$\eta = \frac{24}{f_{of}/f_{hf}} \left(1 - \frac{f_{of} \cdot E_{OV}}{f_{hf} E_{OV,P}} \right)^2 + \sqrt{\frac{f_{of}}{f_{hf}}} 35,8, \quad f\alpha w=5 \quad (4.3)$$

Yukarıdaki eşitlik $f_{of}E_{OV}/f_{hf}E_{OV,P} \leq 1$ için geçerlidir. Bu eşitlikten ve simülasyon sonuçlarından Model-A için minimum verim $E_{OV} \geq E_{OV,P}=3,8$ eV için %35,8 olarak tespit edilmiştir. Model-B için minimum verim ise $E_{OV} \geq E_{OV,P}=2,5$ eV için %45,86 olarak hesaplanmıştır. Model-B'nin verimi, en büyük örtüşme miktarı olan 4 eV için Model-A'nın veriminden %10 daha fazladır. Şekil 4.5'de Model-A ve Model-B için sunulan verim eğrileri kullanılarak yapılan eğri uydurma (curve fitting) sonucu her iki modelin verimlerinin aşağıdaki eşitliği sağladığı görülmektedir;

$$\eta = ae^{-bE_{OV}} + c \quad (4.4)$$

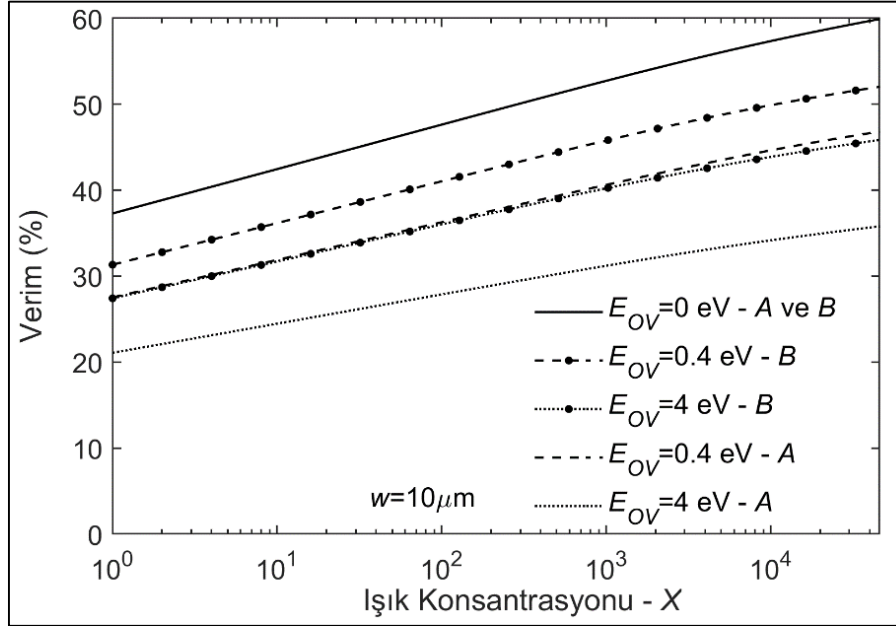
Burada katsayılar, Model-B için $a=10,15$, $b=1,172$, $c=45,72$ olarak; Model-A için $a=20,07$, $b=1,445$, $c=35,90$ olarak elde edilmiştir.

Model-A ve Model-B için verimin ışık konsantrasyonu ve örtüşme miktarı ile değişimi

Şekil 4.7'de Model-A ve Model-B için pil verimlerinin ışık konsantrasyonu, X , ve örtüşme miktarı ile değişimi görülmektedir. Pil verimleri ışık konsantrasyonu ile neredeyse lineer olarak artmaktadır. Model-B'nin 4 eV örtüşmedeki verimi Model-A'nın 0,4 eV örtüşmedeki verimi ile aynı değerdedir. Şekilde görüldüğü gibi, GaAs ABGP ile 300 kat yoğunlaştırılmış ışık altında ve örtüşmesiz durumda %50 üzerinde verim elde edilebilmektedir. Örtüşme miktarı ile, Model-A'da düşen verimler Model-B'deki optimum doluluk oranı ile telafi edilmektedir.

Çizelge 4.2'de, Model-A, Model-B ve Model-C için hesaplanan kısa devre akımlarının ve açık devre voltajlarının farklı ışık konsantrasyonu altında örtüşmeli ve örtüşmesiz durumlarda değişimi görülmektedir. Kısa devre akımları ışık konsantrasyonu X 'e bölünerek

gösterildiği için ışık konsantrasyonundan bağımsız olarak ifade edilmiştir. Beklendiği gibi örtüşmesiz durumda, bütün modellerin kısa devre akımları ışık konsantrasyonundan bağımsız olarak eşittir.



Şekil 4.7. Model-A ve Model-B için pil veriminin ışık konsantrasyonu ve örtüşme miktarı ile değişimi [108]

Çizelge 4.2. Farklı ışık konsantrasyonlarında Model-A, Model-B ve Model-C için kısa devre akımlarının ve açık devre voltajlarının örtüşme miktarı ile değişimi

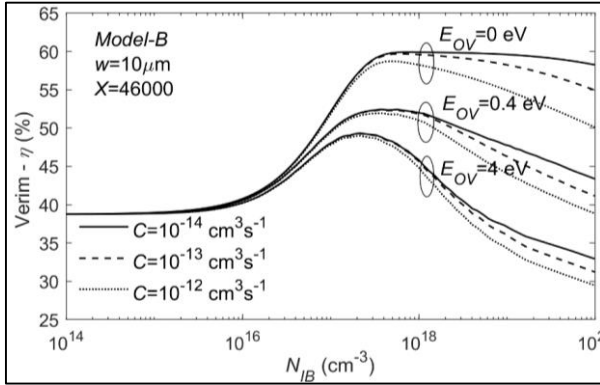
$E_{OV}=0 \text{ eV}$						
	$X=1$		$X=1000$		$X=46000$	
Model	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$
Model-A	72,62	1,01	72,62	1,34	72,62	1,456
Model-B	72,62	1,01	72,62	1,34	72,62	1,456
Model-C	72,62	1,01	72,62	1,34	72,62	1,456
$E_{OV}=0,4 \text{ eV}$						
	$X=1$		$X=1000$		$X=46000$	
Model	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$
Model-A	61,79	0,9	61,79	1,23	61,79	1,34
Model-B	68,7	0,92	68,7	1,23	68,7	1,34
Model-C	66,36	0,9	66,36	1,23	66,38	1,34
$E_{OV}=4 \text{ eV}$						
	$X=1$		$X=1000$		$X=46000$	
Model	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$	$J_{SC}/X(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{OC}(\text{V})$
Model-A	48,14	0,89	48,14	1,21	48,14	1,32
Model-B	60,94	0,91	60,94	1,22	60,94	1,33
Model-C	54,69	1	54,69	1,23	54,69	1,33

Açık devre voltajı ise tek güneş altında 1,01 V iken ışık konsantrasyonun artmasıyla birlikte, Kuasi-Fermi seviyelerinin daha fazla ayrılması nedeniyle, 1000 kat güneş altında 1,34 V ve

46000 kat güneş altında 1,456 V'a çıkmıştır. Örtüşme miktarı arttıkça kısa devre akımları ve açık devre voltajları düşmektedir. Örtüşmeli durumlarda modellerin açık devre voltajları aşağı yukarı aynı seviyelerdedir. En yüksek kısa devre akımları Model-B'de tespit edilmiştir. Örtüşme miktarının artması ile Model-B'nin kısa devre akımı 72,62 mA/cm²'den 60,94 mA/cm²'ye; Model-A'nın kısa devre akımı ise 72,62 mA/cm²'den 48,14 mA/cm²'ye düşmüştür.

4.1.3. Model-B için pil veriminin AB durum yoğunluğuyla değişimi

GaAs ABGP'de optimum AB durum yoğunluğunun belirlenebilmesi için detaylı denge modeline Eşitlikler 3.22, 3.23 ve 3.24 dahil edilmiştir. Böylece, pil veriminin ara bant durum yoğunluğu, N_{IB} , ve örtüşme miktarı ile değişimi Şekil 4.8'deki gibi elde edilmiştir. Örtüşmesiz durumda maksimum verim, $N_{IB}=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ve üzerinde elde edilmiştir. Örtüşme miktarı arttıkça maksimum verimlerin elde edildiği N_{IB} değerleri düşmektedir. $N_{IB}=4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ altında ise verim %38 olmaktadır. Ayrıca, N_{IB} 'nin yüksek değerlerinde taşıyıcıların ömür süreleri azalacağı için verimlerin düşmesi beklenmektedir. Benzer durum C'nin yüksek değerleri için de geçerlidir.



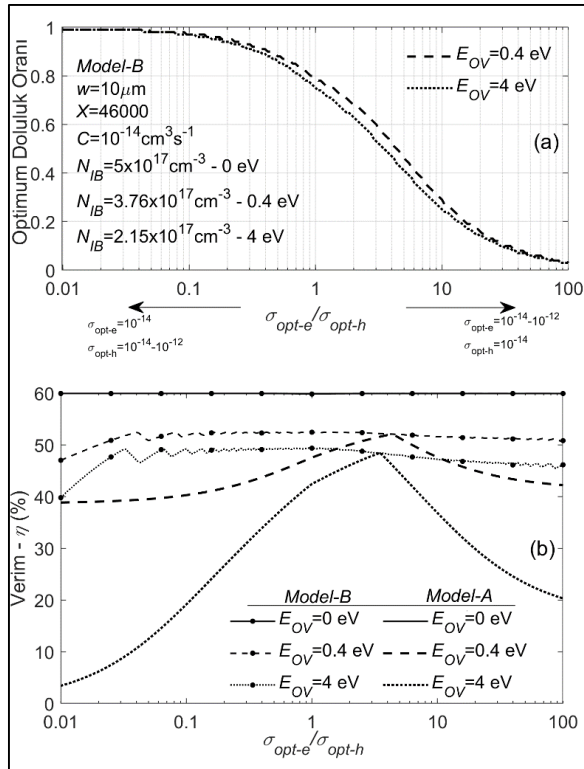
Şekil 4.8. Model-B için pil veriminin AB durum yoğunluğu ve örtüşme miktarı ile değişimi [108]

4.1.4. Eşit olmayan alt bant soğurması için örtüşme, optik yakalama kesit alanı ve doluluk oranının etkileri

İdeal ABGP detaylı denge modelinde alt bant soğurma katsayıları sıklıkla eşit olarak alınır. Bu bölümde eşit olmayan alt bant soğurmalarının etkilerini incelemek için Eşitlik 3.22 ve 3.23'teki elektron ve boşlukların optik yakalama kesit alanları kullanılmıştır. Model-B için

optimum doluluk oranının elektron ve boşlukların yakalama kesit alanı oranı ile değişimi Şekil 4.9(a)'da verilmiştir. Model-A ve Model-B pil verimlerinin elektron ve boşlukların yakalama kesit alanı oranı ile değişimi ise Şekil 4.9(b)'de gösterildiği gibidir.

Model-A örtüşmeli durumda $\sigma_{opt-e}/\sigma_{opt-h}=3,3$ civarında maksimum verime sahiptir bu da Model-B'nin, $f=0,8$ olan optimum doluluk oranına karşılık gelmektedir. Alt bant soğurma katsayılarının (elektron ve boşluk yakalama kesit alanlarının) eşit olmadığı durumlarda optimum doluluk oranı sayesinde Model-B'deki verimin Model-A'daki verimden çok yüksek olduğu görülmektedir.

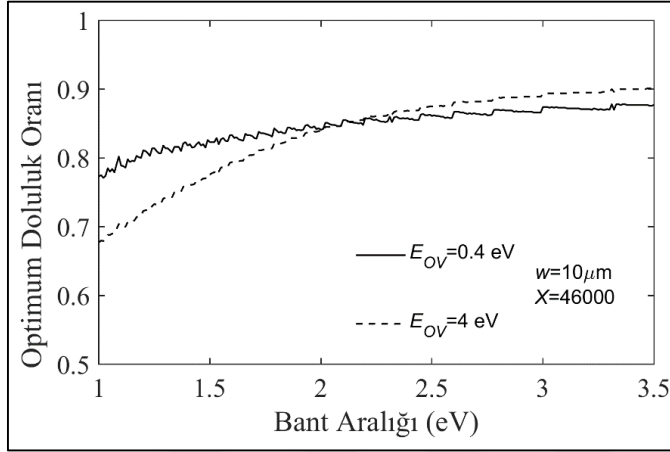


Şekil 4.9. (a) Model-B optimum doluluk oranının ve (b) Model-A ve Model-B için pil veriminin, elektron ve boşluk yakalama kesit alanı oranlarıyla değişimi [108]

4.1.5. ABGP bant aralığının, örtüşme miktarının ve ara bant doluluk oranının pil verimine etkileri

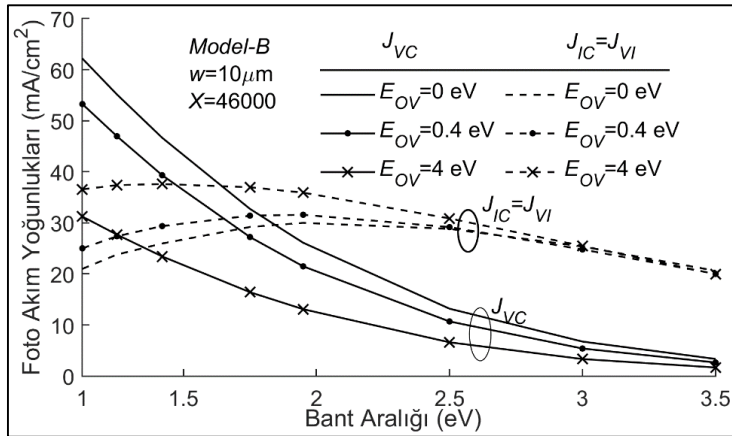
Bu kısımda ideal ABGP veriminin ve fotoakım yoğunluklarının bant aralığıyla ve örtüşme miktarı ile değişimi incelenmiştir. Şekil 4.10'da optimum AB doluluk oranının bant aralığı ve örtüşme miktarı ile değişimi görülmektedir. Şekilde görüldüğü gibi örtüşmeli durumlarda optimum AB doluluk oranı bant aralığı miktarı ile artmaktadır. Doluluk oranındaki

değişimin sebebi, bant aralığına denk gelen güneş spektrumunun değişmesidir. Küçük bant aralıklarında, optimum AB doluluk oranındaki değişim, büyük bant aralıklarına göre örtüşme miktarından daha fazla etkilenir.



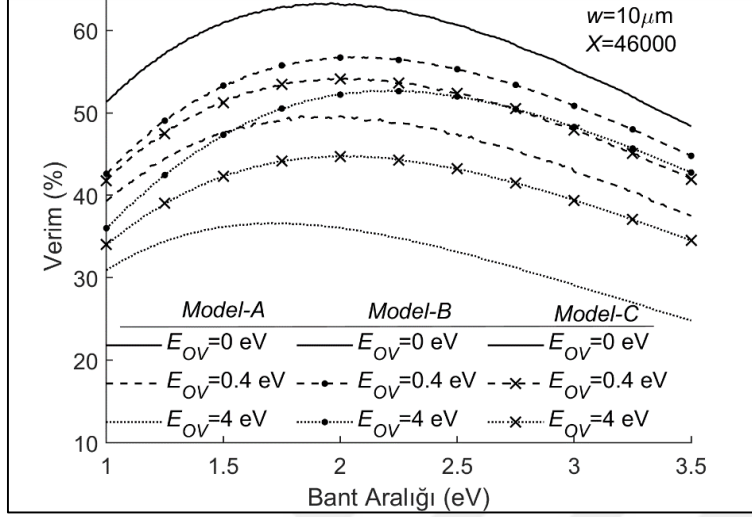
Şekil 4.10. Optimum doluluk oranının ABGP bant aralığı ve örtüşme miktarı ile değişimi [108]

Model-B için ana bant ve alt bant akımlarının bant aralığı ve örtüşme miktarı ile değişimi Şekil 4.11'deki gibidir. Ana bant fotoakımı yoğunluğu, bant aralığının ve örtüşmenin artmasıyla düşmektedir. Alt bant fotoakım yoğunluğu ise küçük E_G 'lerde örtüşme ve bant aralığı ile artmaktadır. Büyük E_G 'ler için, alt bant fotoakım yoğunluğu E_G ile azalmakta ve örtüşmeden bağımsız hale gelmektedir. Küçük E_G değerlerinde ana bandın toplam fotoakım yoğunluğuna katkısı yüksek iken bant aralığı arttıkça azalmakta ve ara bandın toplam fotoakım yoğunluğuna katkısı daha fazla olmaktadır.



Şekil 4.11. Model-B için ana bant ve alt bant fotoakım yoğunluklarının bant aralığı ve örtüşme miktarı ile değişimi [108]

Model-A, Model-B ve Model-C için maksimum verimlerin bant aralığı ve örtüşme miktarı ile değişimi Şekil 4.12'deki gibi elde edilmiştir. Model-B, büyük E_G 'lerde, örtüşmenin etkilerini diğer iki modele göre kompanse edebilmektedir ve pil verimini artırmaktadır. Maksimum verim, 1,95 eV bant aralığında %63,2 olarak elde edilmektedir.



Şekil 4.12. Model-A, Model-B ve Model-C için pil verimlerinin bant aralığı ve örtüşme ile değişimi [108]

Model-C'de, örtüşme miktarı ile AB enerji seviyelerinin bant aralığının ortasına doğru kayması nedeniyle alt bant fotoakım yoğunlukları Model-A'ya göre daha iyi eşitlenmekte ve verim artmaktadır. Düşük bant aralıklarında Model-C'nin verimleri Model-B'nin verimlerine yaklaşmaktadır. Çeşitli bant aralığı değerlerindeki Model-A, Model-B ve Model-C verimleri Çizelge 4.3'te özetlenmiştir.

Çizelge 4.3. Çeşitli bant aralıklarında ve farklı örtüşme değerlerinde Model-A, Model-B ve Model-C için maksimum verimler

		Maksimum verimler (%)			
E_G	E_{OV}	1,12 eV (Si)	1,42 eV (GaAs)	1,95 eV (~AlGaAs, InGaP)	3,5 eV (~GaN)
0 eV		54,35	59,92	63,2	48,39
		42,02	46,83	49,47	37,53
		45,85	52,03	56,52	44,68
0,4 eV		44,91	50,34	54,13	41,94
		32,88	35,8	35,18	24,83
		39,21	45,86	51,78	42,77
4 eV		36,55	41,32	44,7	34,53

4.2. InAs/GaAs KN-ABGP’de AB Enerji Seviyeleri, Alt Bant Soğurma Katsayıları ve Alt Bant Fotoakım Yoğunluklarının Hesaplanması

Bölüm 4.1’de de görüldüğü gibi GaAs yarıiletken materyali ($E_G=1,42$ eV) ile üretilen ABGP için verim limiti maksimum ışık konsantrasyonu altında %59,9 ve 1000X yoğunlaştırılmış güneş ışığı altında %52,6 olarak hesaplanmıştır. Yaygın olarak araştırmalara konu olan InAs/GaAs KN-ABGP için üretilmiş prototiplerin verimleri ise ideal verimlerin çok altında kalmaktadır. Üretilmiş InAs/GaAs KN-ABGP örneklerinden elde edilen maksimum verimler %19 civarındadır [128, 129]. KN-ABGP verimlerindeki düşüklüğün başlıca nedenleri alt bant soğurma katsayılarının düşük olması sebebiyle alt bant fotoakımlarının düşük kalması ve kuantum noktaların varlığıyla düşen çıkış gerilimleridir.

Bu çalışmada InAs/GaAs KN-ABGP’de düşük alt bant akımlarının ve düşük verimlerin sebeplerini incelemek için GaAs konak materyal içerisinde büyütülen InAs kuantum noktaların varlığıyla ortaya çıkan enerji seviyeleri ve soğurma katsayıları hesaplanmıştır. Hesaplamalarda kolaylık olması için tepesi kesilmiş piramit şekilli kuantum noktalar, $2a=2b$ genişliğine ve $2c$ yüksekliğine sahip kutu şeklinde modellenmiştir [98, 102, 124]. Kuantum noktaların varlığıyla InAs/GaAs KN-ABGP’de ortaya çıkan bağlı durumların enerji seviyeleri ve alt bant soğurma katsayıları Bölüm 3.2’de sunulan k.p metodu kullanılarak hesaplanmıştır.

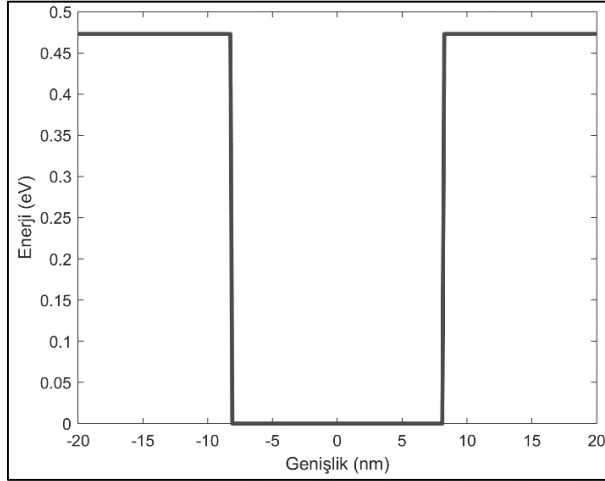
4.2.1. Tek bant k.p metodu ile AB enerji seviyelerinin ve bant içi (AB-CB arası) soğurma katsayılarının hesaplanması

Tek bant k.p metodu ile AB enerji seviyelerinin hesaplanması

InAs/GaAs KN sisteminde kuantum noktaların varlığıyla ortaya çıkan bağlı durumların enerji seviyeleri belirlenirken öncelikle tek boyutlu enerji seviyeleri hesaplanmaktadır. Şekil 4.13’de, x düzleminde $2a$ genişliğinde U sınırlama potansiyeline sahip bir sonlu potansiyel kuyusu görülmektedir. Benzer tanımlama, y düzleminde $2b$ genişliğinde ve z düzleminde $2c$ genişliğinde U sınırlama potansiyeline sahip sonlu potansiyel kuyusu için yapılabilir.

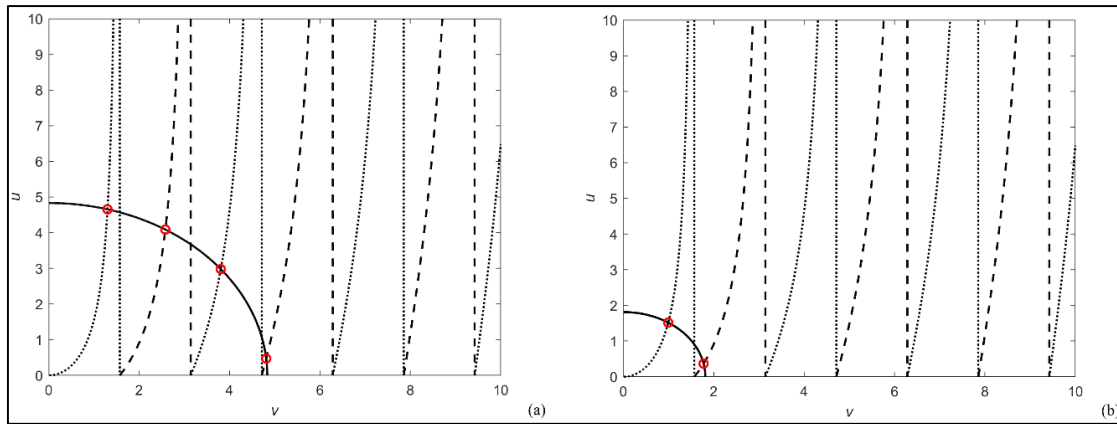
Eşitlik 3.40 kullanılarak x ve z düzleminde $2a=16$ nm ve $2c=6$ nm boyutlarında $U=0,473$ eV sınırlama potansiyeline sahip iki farklı potansiyel kuyusu için elde edilen grafiksel çözümler

Şekil 4.14’de gösterilmiştir. Burada kuantum nokta içerisinde ve bariyer bölgesinde eşit etkin kütle olarak InAs etkin kütlesi, $m_{cb,InAs}=0,0294m_0$, kullanılmıştır. $2a=2b$ olduğu için y düzlemi x düzlemiyle aynı sonuçları verecektir.



Şekil 4.13. x düzleminde $2a=16\text{nm}$ genişliğinde $U=0,473\text{ eV}$ sınırlama potansiyeline sahip sonlu potansiyel kuyusu

Eşitlik 3.40’ta sol taraftaki ifadenin sağ taraftaki tanjant ve kotanjant fonksiyonlarıyla kesişme noktaları kullanılarak izin verilen k değerleri ve dolayısıyla izin verilen tek boyutlu enerji değerleri hesaplanmıştır. Şekil 4.14’de görüldüğü gibi sınırlı sayıda izin verilen tek boyutlu enerji seviyeleri mevcuttur. İzin verilen enerji seviyeleri, kuantum numarası olarak adlandırılan tam sayılarla ifade edilirler. Tek kuantum numaraları, çift durumları temsil ederken çift kuantum numaraları da tek durumları temsil etmektedir.



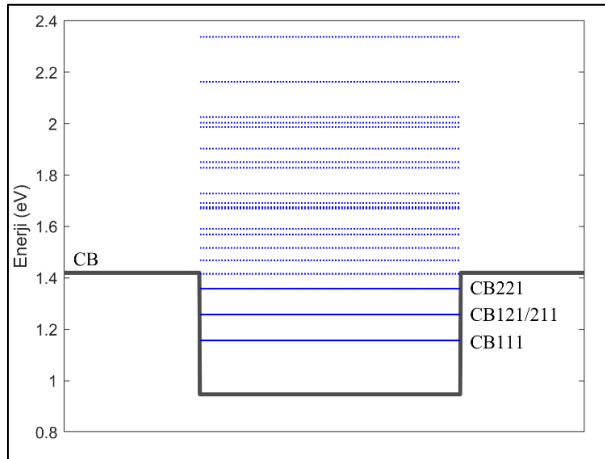
Şekil 4.14. (a) x düzleminde $2a=16\text{nm}$ ve $U=0,473\text{ eV}$ sahip sonlu potansiyel kuyusu için (b) z düzleminde $2c=6\text{nm}$ ve $U=0,473\text{ eV}$ sahip sonlu potansiyel kuyusu için k değerlerinin grafiksel çözümleri

Çizelge 4.4’de, grafiksel çözümden elde edilen, izin verilen k değerleri ve ayırık tek boyutlu enerji seviyeleri görülmektedir. Elde edilen tek boyutlu enerji seviyeleri, literatürde benzer bir çözüm ile elde edilen sonuçlarla uyumludur [124, 125]. Seçilen boyutlar ($2a=16\text{nm}$, $2b=16\text{nm}$ ve $2c=6\text{nm}$) ve $0,473\text{ eV}$ sınırlama potansiyeli ile x ve y düzlemlerinde dörder adet, z düzleminde iki adet izin verilen ayırık enerji seviyesi tespit edilmiştir.

Çizelge 4.4. Eşit etkin kütle ($m_{cb,InAs}=0,0294m_0$) ile $2a=2b=16\text{nm}$, $2c=6\text{nm}$ ve $U=0,473\text{ eV}$ için izin verilen k değerleri ve tek boyutlu enerji seviyeleri

Kuantum Numarası	$n_x=n_y=1$	$n_x=n_y=2$	$n_x=n_y=3$	$n_x=n_y=4$
k	$1,623 \times 10^8$	$3,223 \times 10^8$	$4,757 \times 10^8$	$6,012 \times 10^8$
Enerji (eV)	0,0342	0,1347	0,2933	0,4685
Kuantum Numarası	$n_z=1$	$n_z=2$		
k	$3,305 \times 10^8$	$5,916 \times 10^8$		
Enerji (eV)	0,1416	0,4536		

Bağlı durumların üç boyutlu enerji seviyeleri ise Eşitlik 3.72’de belirtildiği gibi tek boyutlu enerji seviyelerinin toplamı olarak ifade edilir. Taban genişliği $2a=2b=16\text{nm}$ ve $2c=6\text{nm}$ yüksekliğindeki kutu şekilli InAs/GaAs kuantum nokta sistemi için üç boyutlu enerji seviyeleri eşit etkin kütle için Şekil 4.15’de gösterildiği gibidir. Bağlı durumlar, ilgili bant (bu bölümde sadece cb ile ilişkili bağlı durumlar incelenmiştir) ve x,y,z kuantum numaraları kullanılarak ifade edilmişlerdir.

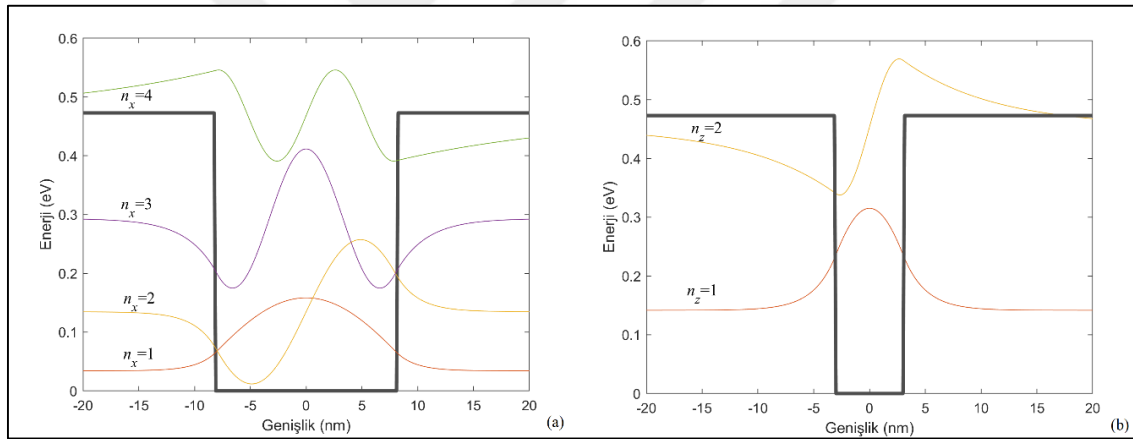


Şekil 4.15. Taban genişliği $2a=2b=16\text{nm}$, $2c=6\text{nm}$ yüksekliğinde ve $U=0,473\text{ eV}$ iletkenlik bandı ofsetine sahip kutu şekilli InAs/GaAs KN sisteminde bağlı durum enerji seviyeleri

Yasak bandın içerisinde tespit edilen bağlı durumların ara bandı oluşturduğu düşünülmektedir. Seçilen boyutlar ve sınırlama potansiyeli için üç adet bağlı durum yasak

bandın içerisinde tespit edilmiştir; CB111, CB121/211 ve CB221. Kuantum nokta tabanının kare olması, $2a=2b$, sebebiyle CB121 ve CB211 gibi durumlar aynı enerji seviyelerine sahiptir. Bağlı enerji durumları olup üç boyutlu enerjisi konak GaAs iletkenlik bandının üzerindeki enerji durumları ise sanal bağlı durumlar olarak adlandırılır. Belirtilen boyutlar ve sınırlama potansiyeli için toplamda $4 \times 4 \times 2 = 32$ adet bağlı ve sanal bağlı enerji durumları tespit edilmiştir.

Tek boyutlu dalga fonksiyonları çift ve tek durumlar için sırasıyla Eşitlik 3.31 ve 3.32 kullanılarak hesaplanmıştır. Şekil 4.16(a) ve (b)'de sırasıyla x düzleminde $2a=16\text{nm}$ ve z düzleminde $2c=6\text{nm}$ boyutları için normalize olmuş tek boyutlu dalga fonksiyonlarının $U=0,473\text{ eV}$ potansiyel kuyusu içerisindeki yayılımları görülmektedir. Tek boyutlu dalga fonksiyonları sınır koşullarını sağlayarak potansiyel kuyusu içinde ve dışında süreklidir.

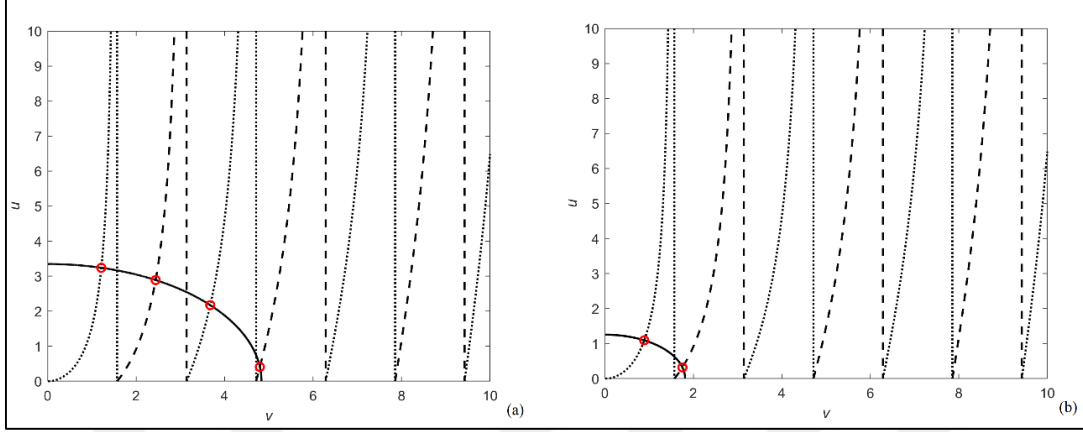


Şekil 4.16. $U=0,473\text{ eV}$ potansiyel kuyusu için farklı kuantum numaralarında normalize olmuş tek boyutlu dalga fonksiyonlarının yayılımı (a) x düzleminde $2a=16\text{nm}$ (b) z düzleminde $2c=6\text{nm}$ genişlik için

Bağlı durum enerji seviyelerinin etkin kütle uyumsuzluğu ile değişimi

Dalga fonksiyonları, çoğunlukla potansiyel kuyusu içerisinde kaldığından daha önceki çalışmalarda elektron etkin kütlesi KN içerisinde ve bariyer bölgesinde, InAs elektron etkin kütlesine eşit olarak alınmıştır [98, 124, 130]. Bu çalışmada, etkin kütle uyumsuzluğunun bağlı durum enerji seviyeleri üzerinde etkileri incelenmiştir. Elektron etkin kütlesi, KN içerisi için InAs elektron etkin kütlesi, $m_{cb,InAs}=0,0294m_0$, bariyer bölgesi için GaAs etkin kütlesi, $m_{cb,GaAs}=0,0613m_0$, olarak kabul edildiğinde, izin verilen k değerleri tek boyutlu

enerji seviyeleri için Eşitlik 3.66 ve 3.67 kullanılarak elde edilen grafiksel çözümler Şekil 4.17'deki gibidir.



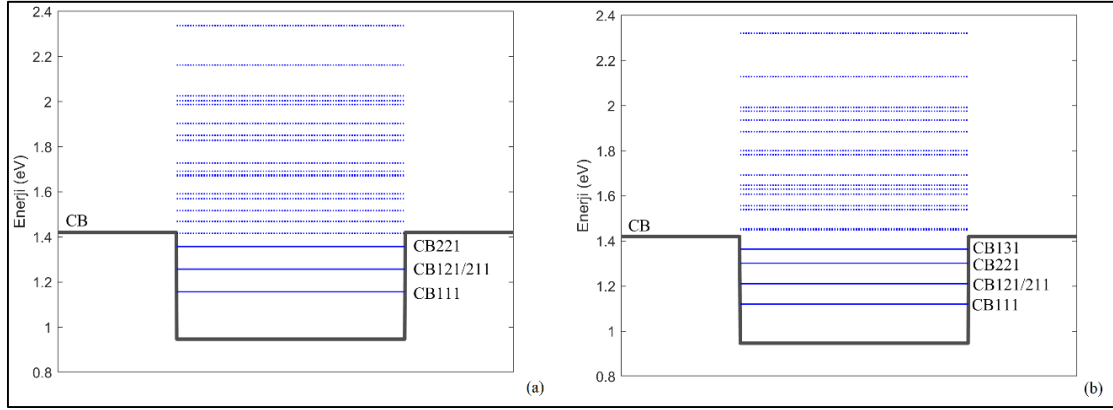
Şekil 4.17. Etkin kütle uyumsuzluğunda (a) x düzleminde $2a=16\text{nm}$ için ve (b) z düzleminde $2c=6\text{nm}$ için k değerlerinin grafiksel çözümleri ($U=0,473\text{ eV}$, $m_{cb,InAs}=0,0294m_0$ ve $m_{cb,GaAs}=0,0613m_0$) [99]

Çizelge 4.5'de etkin kütle uyumsuzluğunda grafiksel çözümden elde edilen k değerleri ve ayırık tek boyutlu enerji seviyeleri görülmektedir. Etkin kütle uyumsuzluğunda izin verilen k değerleri ve ayırık enerji seviyeleri eşit etkin kütleyle göre değişmektedir. Toplam durum sayısı ise etkin kütle uyumsuzluğundan etkilenmemektedir.

Şekil 4.18'de, etkin kütle uyumsuzluğunda elde edilen üç boyutlu enerji seviyeleri, eşit etkin kütle durumunda elde edilen üç boyutlu enerji seviyelerinin karşılaştırılmıştır. Şekil 4.18(b)'de görüldüğü gibi etkin kütle uyumsuzluğunda bağlı durumların enerji seviyeleri düşmektedir. Etkin kütle uyumsuzluğu durumunda, yasak bantta dört adet bağlı durum tespit edilmiştir. CB111, CB121/211 ve CB221 durumlarının yanında CB131/311 durumu da yasak bandın içerisinde yer almaktadır.

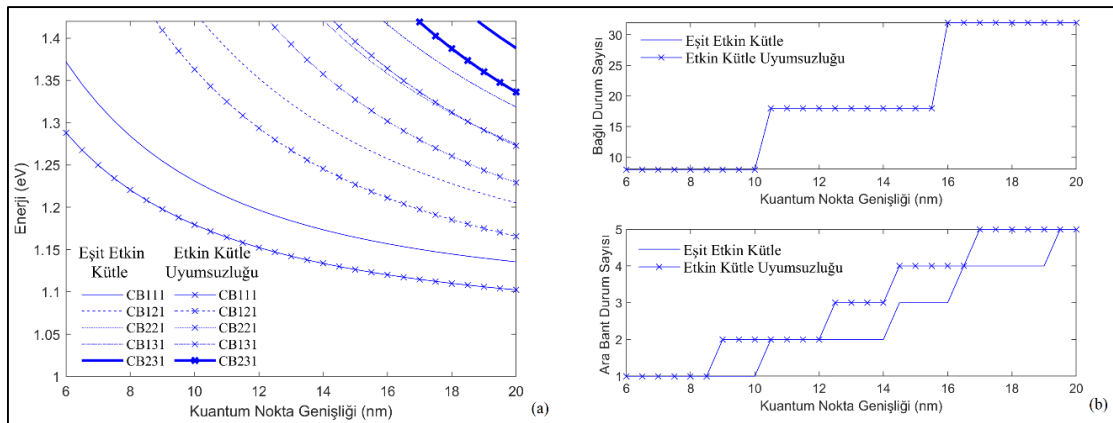
Çizelge 4.5. Etkin kütle uyumsuzluğunda ($m_{cb,InAs}=0,0294m_0$ ve $m_{cb,GaAs}=0,0613m_0$) $2a=2b=16\text{nm}$, $2c=6\text{nm}$ ve $U=0,473\text{ eV}$ için izin verilen k değerleri ve tek boyutlu enerji seviyeleri

Kuantum Numarası	$n_x=n_y=1$	$n_x=n_y=2$	$n_x=n_y=3$	$n_x=n_y=4$
k	$1,516 \times 10^8$	$3,050 \times 10^8$	$4,595 \times 10^8$	$5,996 \times 10^8$
Enerji (eV)	0,0298	0,1206	0,2736	0,4660
Kuantum Numarası	$n_z=1$	$n_z=2$		
k	$2,962 \times 10^8$	$5,840 \times 10^8$		
Enerji (eV)	0,1137	0,442		



Şekil 4.18. Taban genişliği $2a=2b=16\text{nm}$, $2c=6\text{nm}$ yüksekliğinde ve $U=0,473\text{ eV}$ iletkenlik bandı ofsetine sahip kutu şekilli InAs/GaAs KN sisteminde bağlı durum enerji seviyeleri (a) eşit etkin kütle için (b) etkin kütle uyumsuzluğunda

AB durumlarının enerji seviyelerinin, eşit etkin kütleli ve etkin kütle uyumsuzluğunda kuantum nokta genişliği ile değişimi Şekil 4.19(a)'da gösterilmiştir. Nokta yüksekliği 6nm ve sınırlama potansiyeli $0,473\text{ eV}$ olarak kabul edilmiştir. Şekil 4.19(a)'da görüldüğü gibi bağlı durumların enerji seviyeleri nokta boyutları arttıkça azalmaktadır. Benzer sonuçlar farklı şekillerdeki kuantum noktalar için farklı çalışmalarda tespit edilmiştir [131–134]. Şekil 4.19(b)'de bağlı durumların ve AB durumlarının toplam sayılarının, nokta genişliği ve etkin kütle uyumsuzluğu ile değişimi görülmektedir.

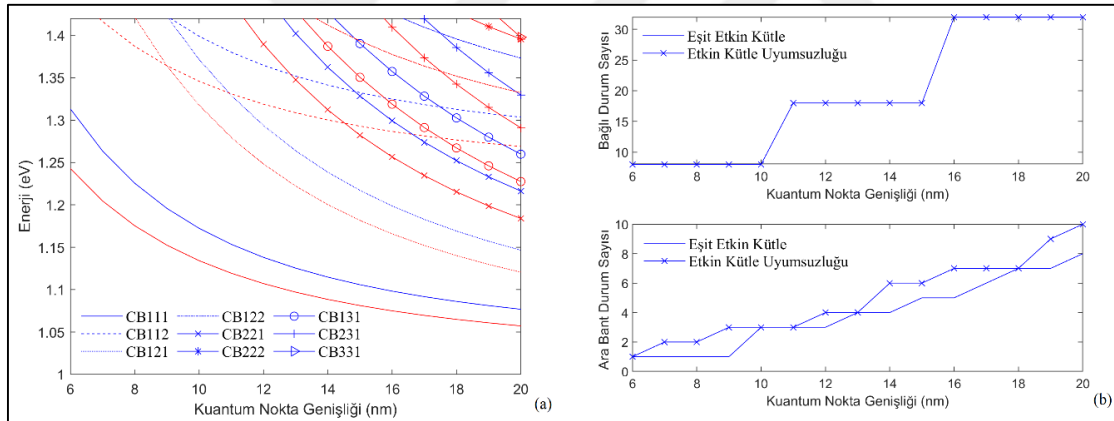


Şekil 4.19. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğunda 6nm kuantum nokta yüksekliği için (a) bağlı durum enerji seviyelerinin kuantum nokta genişliği ile değişimi (b) bağlı durum sayısının (sağ üstte) ve AB durum sayısının (sağ altta) kuantum nokta genişliği ile değişimi

Şekil 4.19(b)'de görüldüğü gibi bağlı durumların sayısı nokta genişliğinin artmasıyla artmaktadır. Kuantum nokta genişliğinin artması ve etkin kütle uyumsuzluğuyla, ara bant enerji seviyeleri daha düşük enerji seviyelerine kaymaktadır. Benzer şekilde, kuantum nokta

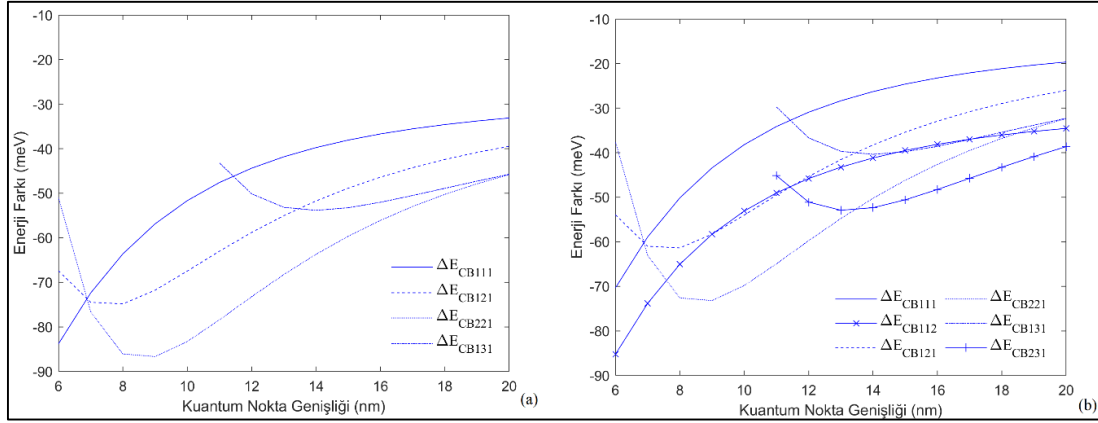
genişliğinin artması ve etkin kütle uyumsuzluğuyla, yasak bantta bulunan AB durumlarının sayısı da artmaktadır. Şekil 4.19(b)'de görüldüğü gibi eşit etkin kütleli durumda 10nm'ye kadar tek AB durumu gözlenirken kuantum nokta boyutları arttıkça AB durum sayıları da artmaktadır. Etkin kütle uyumsuzluğunda ise, AB durum sayısı daha küçük kuantum nokta genişliklerinde (9nm) artmaya başlayıp nokta genişliği arttıkça benzer şekilde artışlar devam etmektedir.

AB durumlarının enerji seviyelerinin, $2c=9\text{nm}$ kuantum nokta yüksekliği kullanılarak eşit etkin kütleli ve etkin kütle uyumsuzluğunda kuantum nokta genişliği ile değişimi Şekil 4.20'de gösterilmiştir. Şekil 4.20(a)'da görüldüğü gibi kuantum nokta yüksekliği arttıkça, kuantum nokta genişliğinde olduğu gibi, bağlı durumların enerji seviyeleri aşağıya kaymaktadır. Böylece, 9nm nokta yüksekliği için yasak bantta bulunan AB durumlarının sayısı 6nm'ye göre artmaktadır.



Şekil 4.20. Eşit etkin kütle (mavi renk) ve etkin kütle uyumsuzluğu (kırmızı renk) durumlarında 9nm kuantum nokta yüksekliği için (a) bağlı durum enerji seviyelerinin kuantum nokta genişliği ile değişimi (b) bağlı durum sayısının (sağ üstte) ve AB durum sayısının (sağ altta) kuantum nokta genişliği ile değişimi

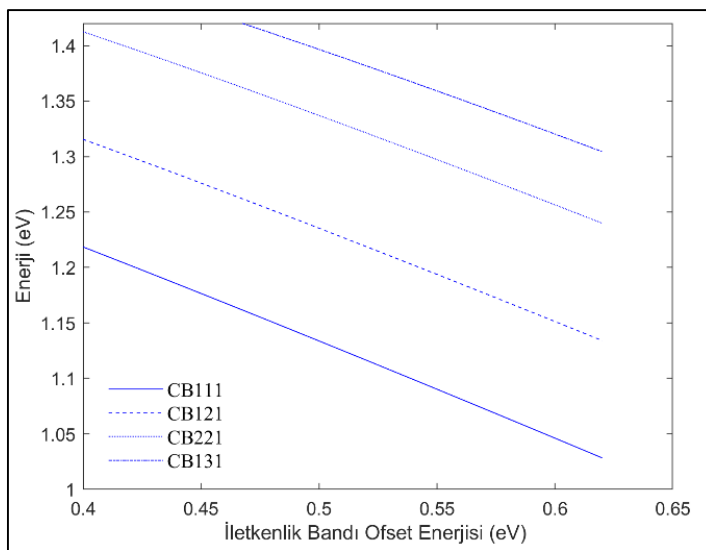
Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu için hesaplanan AB durumlarının arasındaki enerji farkının kuantum nokta boyutu ile değişimi Şekil 4.21(a) ve (b)'deki gibidir. Enerji farkı kuantum nokta genişliği arttıkça azalmaktadır. Şekil 4.21(b)'de görüldüğü gibi, enerji farkı kuantum nokta yüksekliğinin artmasıyla da azalmaktadır. 16 nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında, CB111 durumu için enerji farkı -37 meV; 16 nm x 16nm x 9nm KN boyutlarında ise enerji farkı -23 meV olarak tespit edilmiştir.



Şekil 4.21. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında bağlı durumlar arasındaki enerji farkının, kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) 6nm kuantum nokta yüksekliği için (b) 9nm kuantum nokta yüksekliği için

Enerji seviyelerinin iletkenlik bandı ofset enerjisi ile değişimi

Kuantum nokta üzerinde büyütülen ek kaplama katmanı gibi etkenlerle iletkenlik bandı ofset enerjisi değişebilmektedir [135]. Kuantum nokta varlığı ile ortaya çıkan iletkenlik bandı ofset enerjisi, sınırlama potansiyeli olarak kabul edildiğinden, bağlı durum enerji seviyelerinin iletkenlik bandı ofset enerjisi ile değişimi hesaplanmıştır. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutları ve eşit etkin kütle için AB durumlarının enerji seviyelerinin iletkenlik bandı ofset enerjisi ile değişimi Şekil 4.22’de verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi, AB durumlarının enerji seviyeleri iletkenlik bandı ofset enerjisiyle lineer olarak azalmaktadır.



Şekil 4.22. AB durum enerji seviyelerinin iletkenlik bandı ofset enerjisi ile değişimi (16nm x 16nm x 6nm KN boyutları)

Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında tespit edilen AB durum enerji seviyeleri Bölüm 4.1’de belirtilen ideal AB seviyesinden ($E_{AB}=0,934$ eV) yüksektir. 16nm x 16nm x 6nm boyutlar için, genellikle AB’yi oluşturduğu düşünülen CB111 enerji durumu eşit etkin kütle için 1,15 eV ve etkin kütle uyumsuzluğu için 1,12 eV olarak tespit edilmiştir. İlave olarak bu boyutlar için yasak bantta birden fazla AB durumları oluşmaktadır. Eşit etkin kütleli durumda, tek AB durumu içeren 10 nm KN genişliği için AB enerji seviyesi 1,23 eV olarak bulunmuştur. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğunda kuantum nokta boyutları büyüdükçe bağlı durumların enerji seviyesi azalsa da yasak bantta bulunan AB durum sayısı artmaktadır. AB durum sayısının artmasının ABGP veriminde olumsuz etkilere yol açtığı düşünülmektedir.

Tek bant k.p metodu ile bağlı durumlar arası soğurma katsayılarının hesaplanması

Kuantum noktanın varlığıyla yasak bantta oluşan AB durumlarından diğer AB durumlarına ve CB’nin içerisindeki sanal bağlı durumlara geçişler için soğurma katsayılarının elde edilmesinde kullanılan denklemler Bölüm 3.2.5’de sunulmuştur. Bölüm 4.2.1’de, enerji seviyeleri ve tek boyutlu dalga fonksiyonları hesaplanan bağlı durumlar arasındaki geçişler için soğurma katsayıları, Bölüm 3.2.5’te sunulan ve aşağıda verilen Eşitlik 3.76 kullanılarak hesaplanmıştır.

$$\alpha_{\phi_i \rightarrow \phi_f}^{max} = 2 \frac{2\pi^2 q^2 E}{n_{ref} ch \epsilon_0} \frac{|\langle \Xi_i | r \cdot \epsilon | \Xi_f \rangle|^2}{4ab} F_S N_l \delta(E_{line} - E) \quad (4.5)$$

Bu eşitlikte kullanılan parametreler açıklamalarıyla beraber Çizelge 4.6’da verilmiştir. Bağlı durumlar arasında izin verilen geçişler, x, y ve z kuantum numaralarından yalnızca birinin ve paritesinin değiştiği geçişlerdir; CB111’den CB121’e geçişler, CB121’den CB131’e geçişler izin verilen geçişlere örnektir. Sadece bir kuantum numarasının değişimine izin verildiği için bağlı durumlar arası geçiş enerjileri, değişen kuantum numaralarına ait tek boyutlu enerjilerin arasındaki fark kadardır.

Soğurma katsayılarını hesaplayabilmek için öncelikle Eşitlik 3.80 kullanılarak matris elemanlarının bulunması gerekmektedir. Üç boyutlu dalga fonksiyonları için matris elemanları ise, her seferinde sadece bir kuantum numarasının değişimine izin verildiği tek boyutlu dalga fonksiyonları kullanılarak hesaplanmıştır. Eşitlik 3.80’de görülen her bir

düzlem için matris elemanları, tek boyutlu dalga fonksiyonları kullanılarak, değişen kuantum numarasının n_x olduğu düşünülerek aşağıdaki denklemden hesaplanır [136];

$$\langle \varphi_i | x | \varphi_f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \gamma_i^* x \gamma_f dx \quad (4.6)$$

Çizelge 4.6. Soğurma katsayılarının hesaplanmasında kullanılan parametreler [124].

Parametre	Açıklama	Değer
n_{ref}	GaAs Kırılma indisi	3,5
c	Işık hızı	3×10^8 m
h	Planck sabiti	$6,626 \times 10^{-34}$ Js
ϵ_0	Dielektrik sabiti	$8,854 \times 10^{-12}$ F/m
q	Elektron yükü	$1,602 \times 10^{-19}$ C
F_S	xy düzleminde kuantum noktaların kısmi kapsama katsayı	0,1024
N_l	Birim uzunlukta başına KN katman sayısı	125000 cm^{-1}

Benzer eşitlik n_y ve n_z kuantum numaraları için de geçerlidir. Çizelge 4.7’de $2a=2b=16\text{nm}$ kuantum nokta genişliği ve $2c=6\text{nm}$ kuantum nokta yüksekliği için izin verilen geçişlerin enerjileri ve matris elemanları görülmektedir. Luque ve diğerlerinin aynı boyutlar için bant içi soğurma katsayılarını hesapladıkları çalışmada, analitik olarak elde edilen matris elemanları ile bu çalışmada dalga fonksiyonları kullanılarak elde edilen matris elemanları eşit bulunmuştur [124].

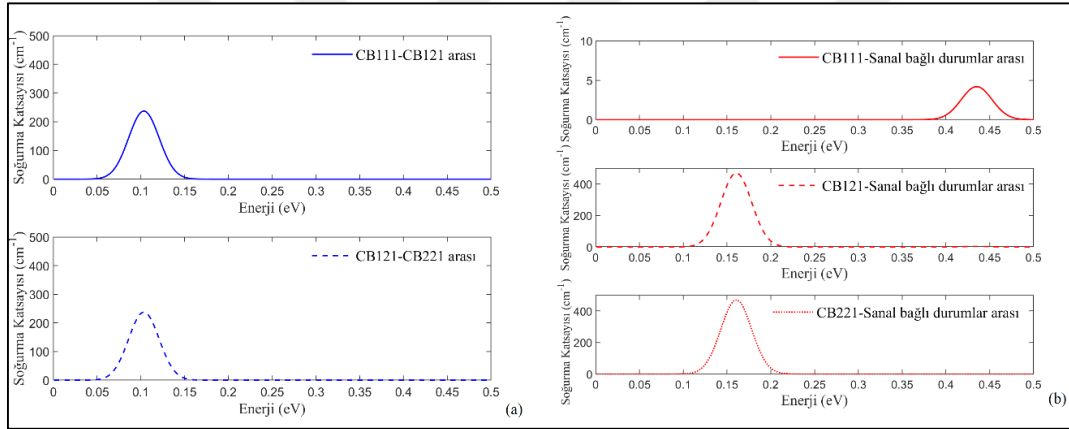
Çizelge 4.7. $2a=2b=16\text{nm}$ KN genişliği ve $2c=6\text{nm}$ KN yüksekliği için izin verilen geçişlerin enerji seviyeleri ve matris elemanları ($m_{cb,InAs}=0,0294m_0$ $U=0,473$ eV).

Kuantum Numarası	n_x veya n_y				n_z
İzin verilen geçişler	1→2	1→4	2→3	3→4	1→2
Enerji (eV)	0,1	0,4343	0,1586	0,1752	0,3119
Matris Elemanı ($ \langle \Xi_i r \cdot \epsilon \Xi_f \rangle ^2 / 4ab$)	0,0489	0,0002	0,0618	0,0578	0,0128

$2a=2b=16\text{nm}$ genişliği ve $2c=6\text{nm}$ yüksekliğine sahip kutu şekilli kuantum noktada, -z yönünde ve xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için bir AB durumundan diğer AB durumlarına veya sanal bağlı durumlara izin verilen geçişler için soğurma katsayılarının foton enerjisi ile değişimi hesaplanmış ve Şekil 4.23’de verilmiştir. Kuantum nokta içerisinde ve bariyer bölgesinde eşit etkin kütle, $m_{cb,InAs}=0,0294m_0$, ve sınırlama potansiyeli $U=0,473$ eV olarak alınmıştır. İki kuantum numarasının aynı anda değişmesi durumunda

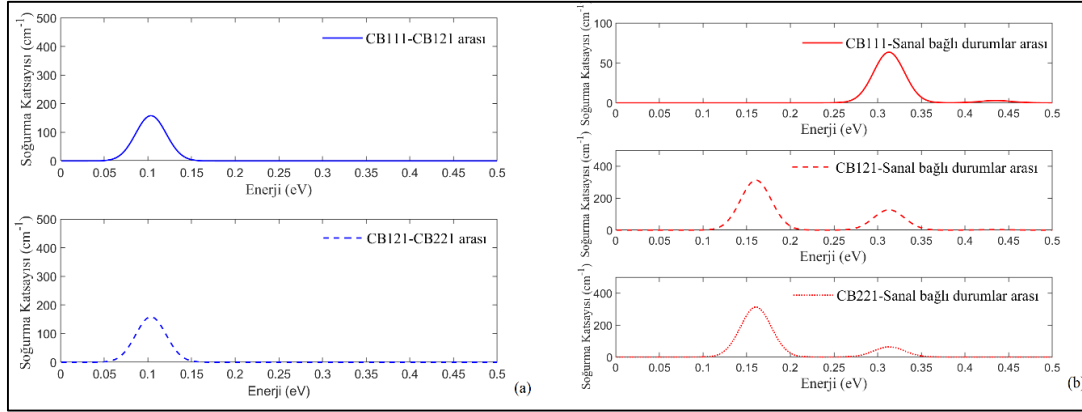
geçişler (CB111 durumundan CB221 durumuna) yasak olduğu için soğurma katsayısı hesaplanmamıştır.

Şekil 4.23(a)'da görüldüğü gibi CB111 durumundan CB121/211 durumuna geçişler ve CB121/CB211 durumundan CB221 durumuna geçişler, n_x veya n_y , kuantum numarası 1'den 2'ye değiştiği için soğurma katsayıları eşittir. Benzer durum, Şekil 4.23(b)'de, CB121/211'den CB131/311'e ve CB221'den CB321/231'e geçişler için geçerlidir. CB111'de sanal bağlı durumlara geçişler için soğurma katsayısının küçük olmasının nedeni, n_x kuantum numarasının 1'den 4'e geçiş yaptığı durumdaki matris elemanın küçük olmasından kaynaklanmaktadır. Bir geçiş için matris elemanın büyüklüğü soğurma katsayısını değiştirmektedir.



Şekil 4.23. 16nm x 16nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle durumunda, xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için (a) AB enerji durumları arası (b) AB enerji durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişler için soğurma katsayıları

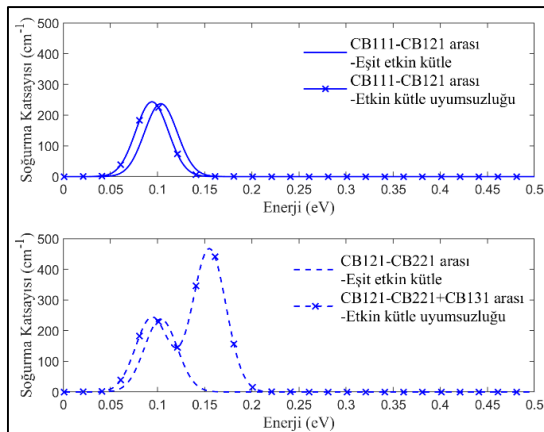
Eşitlik 4.5'te verilen soğurma katsayısı, bağlı durumların doluluk oranlarını içermediği için, izin verilen geçişler için tanımlı maksimum soğurma katsayısını vermektedir. Elde edilen soğurma katsayıları bağlı durumların doluluk oranları dahil edildiğinde literatürdeki sonuçlarla uyumludur [124]. Bölüm 3.3'te tanıtilan detaylı denge modelinde kullanılan izotropik fotonlar için de soğurma katsayıları ayrıca hesaplanmış ve Şekil 4.24'de verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi xy düzleminde polarize olmuş fotonlardan farklı olarak, izotropik fotonlar için z kuantum numarasındaki (CB111→CB112 vb.) geçişler de dikkate alınmaktadır. İzotropik fotonlar için matris elemanları Eşitlik 3.81 kullanılarak hesaplanmıştır.



Şekil 4.24. 16nm x 16nm x 6nm boyutlu kuantum notka için eşit etkin kütle durumunda ve izotropik fotonlar için (a) AB enerji durumları arası (b) AB enerji durumlarından CB'deki sanal bağı durumlarına geçişler için soğurma katsayıları

Tek bant k.p metodu ile bağı durumlar arası soğurma katsayısının etkin kütle uyumsuzluğu ile değişimi

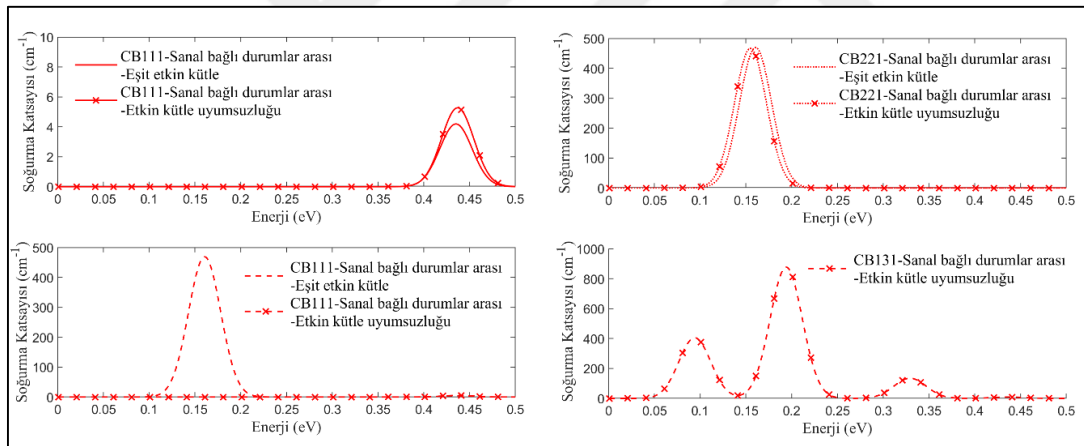
Etkin kütle uyumsuzluğu ile AB durumları arası soğurma katsayısının foton enerjisi ile değişimi Şekil 4.25'de görülmektedir. Şekil 4.18'de etkin kütle uyumsuzluğu ile AB durum sayısının arttığı görülmüştü. CB131 durumu da AB durumu olarak kabul edilerek bu enerji durumuna geçişler de AB durumları arası soğurma katsayısına dahil edilmiş ve Şekil 4.25'de gösterilmiştir. Bu sebeple CB121 durumu için hesaplanan soğurma katsayısı, CB221 durumuna ve CB131 durumuna geçişler için hesaplanan soğurma katsayılarının toplamıdır. Etkin kütle uyumsuzluğu durumunda, soğurma katsayılarının tepe değerlerinde önemli bir artış gözlenmemiştir.



Şekil 4.25. 16nm x 16nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için etkin kütle uyumsuzluğu durumunda xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için AB durumları arası geçişlerdeki soğurma katsayıları

Şekil 4.25’de görüldüğü gibi, etkin kütle uyumsuzluğuyla değişen durum enerji seviyeleri nedeniyle, soğurma katsayıları daha düşük enerji seviyelerine kaymıştır. Konuma bağlı (uzaysal olarak) değişen etkin kütle uyumsuzluğunun GaAs/AlGaAs kübik kuantum noktaların optik özellikleri üzerinde etkileri incelenmiştir [137]. Bu çalışmada konuma bağlı değişen etkin kütle uyumsuzluğuyla eşit etkin kütle durumu ile karşılaştırıldığında bant için soğurma katsayılarının arttığı ve daha düşük enerji seviyelerine kaydığı gösterilmiştir [137].

Etkin kütle uyumsuzluğu durumunda AB durumlarından sanal bağlı durumlara geçişler için soğurma katsayıları hesaplanmış ve Şekil 4.26’da verilmiştir. Etkin kütle uyumsuzluğu ile yasak bantta olan CB131/311 durumu için soğurma katsayısı da ayrıca belirtilmiştir. Şekil 4.18(b)’de görüldüğü gibi, CB131 durumu, etkin kütle uyumsuzluğuyla yasak banda girdiğinden ve CB121/211 durumundan izin verilen başka sanal bağlı durum olmadığı için soğurma katsayısı Şekil 4.26(sol alt grafik)’da sıfır olarak tespit edilmiştir.



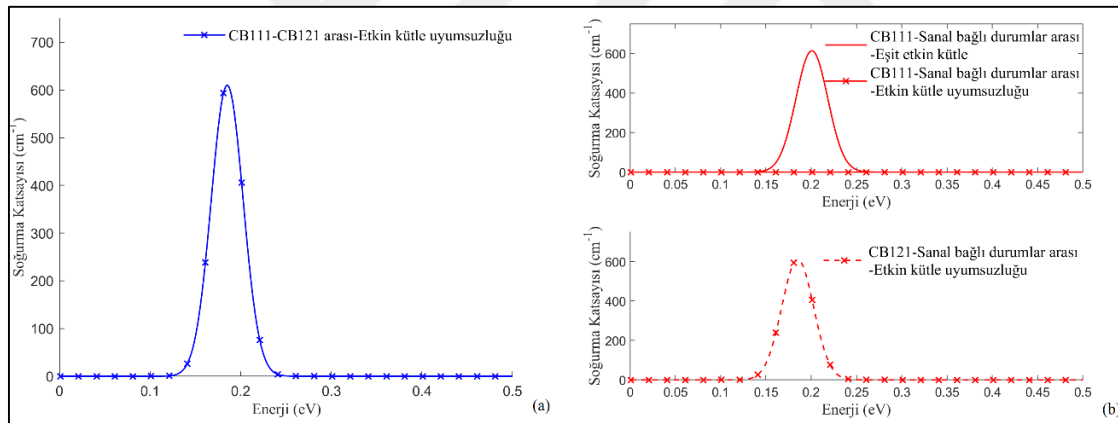
Şekil 4.26. 16nm x 16nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için etkin kütle uyumsuzluğu durumunda, xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için, AB durumlarından sanal bağlı durumlara geçişlerdeki soğurma katsayıları

Tek bant k.p metodu ile bağlı durumlar arası soğurma katsayılarının kuantum nokta boyutları ile değişimi

Bu kısımda kuantum nokta boyutlarının bağlı durumlar arası soğurma katsayılarına etkileri incelenmiştir. 10nm x 10nm x 6nm KN boyutları için AB durumları arası ve AB durumları ile sanal bağlı durumlar arası soğurma katsayılarının foton enerjisine göre değişimi, eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu göz önüne alınarak hesaplanmış olup Şekil 4.27(a) ve (b)’de görülmektedir. 10nm kuantum nokta genişliği için eşit etkin kütleli durumda

sadece CB111 durumu yasak banttadır. Bu nedenle AB durumları arası soğurma katsayı yoktur. Etkin kütle uyumsuzluğu durumunda ise CB121/211 durumu da yasak banttadır ve CB111 ile CB121/221 arası soğurma katsayısı Şekil 4.27(a)'da verilmiştir. Kuantum nokta genişliği azaldıkça, Eşitlik 4.5'te görüldüğü gibi, soğurma katsayısı kuantum nokta genişliği ile ters orantılı olduğundan soğurma katsayısı tepe değerleri artmaktadır. Bu artışlar sabit F değerlerinde hesaplanmıştır, nokta genişliği değişikçe F değerlerinin değişimi dikkate alınmamıştır [101].

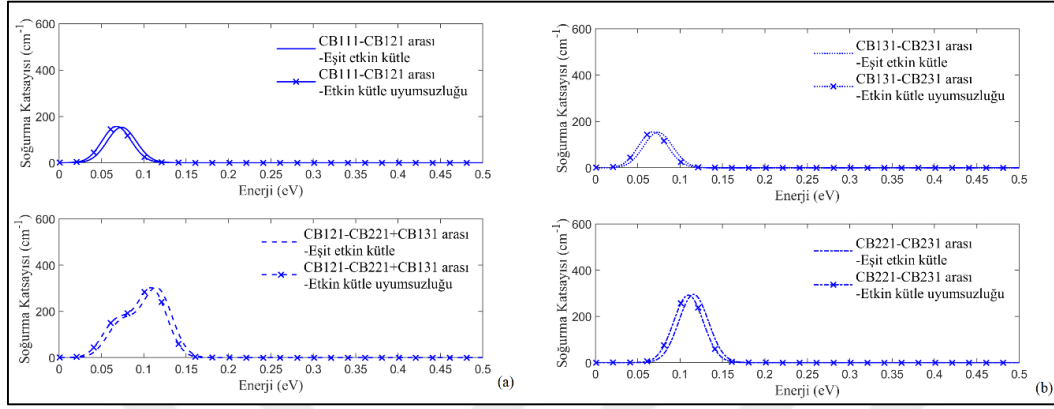
Burada elde ettiğimiz sonuçlara benzer olarak kuantum nokta boyutlarının azalmasıyla artan bant içi soğurma katsayıları başka araştırmacılar tarafından da tespit edilmiştir [134, 138]. Şekil 4.19'da görüldüğü gibi 10 nm kuantum nokta genişliği için toplam sekiz adet bağlı durum ortaya çıkmaktadır. Etkin kütle uyumsuzluğu durumunda, CB111 durumundan izin verilen başka sanal bağlı durum olmadığı için soğurma katsayısı (Şekil 4.27(b) üst) sıfırdır.



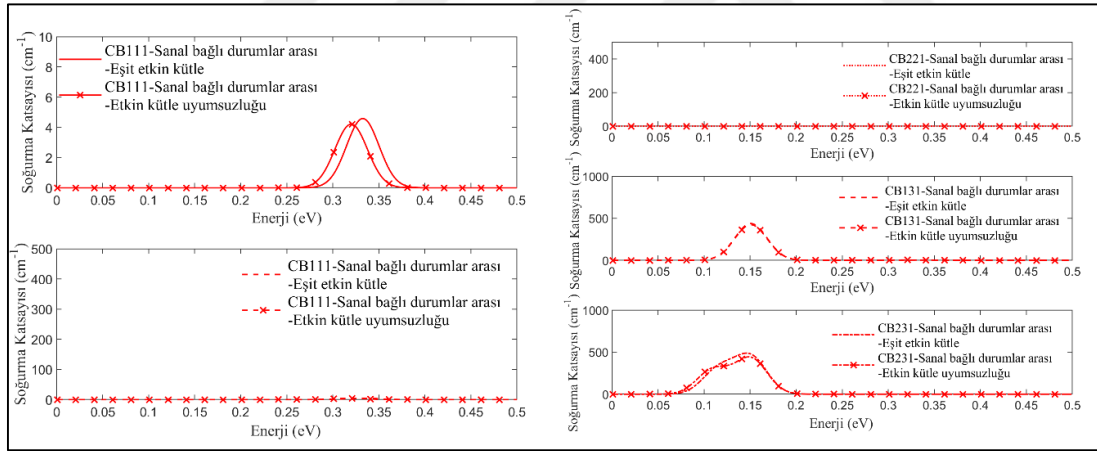
Şekil 4.27. 10nm x 10nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için, (a) AB durumları arası ve (b) AB durumları ile sanal bağlı durumlar arası geçişlerdeki soğurma katsayıları

20nm x 20nm x 6nm KN boyutları için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için, AB durumları arası soğurma katsayısı ayrıca elde edilmiş ve Şekil 4.28'de görülmektedir. Kuantum nokta genişliğinin artmasıyla soğurma katsayılarının tepe değerleri azalmıştır. Ayrıca kuantum nokta genişliğinin artmasıyla bağlı durumlar arası geçişler daha düşük enerji seviyelerinde gerçekleşmiştir. 20nm x 20nm x 6nm KN boyutlarında yasak bantta beş adet AB durumu (CB111, CB121/211, CB221, CB131/311, CB231/321) oluşmuştur. Şekil 4.29'de 20nm x 20nm x 6nm KN boyutları için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, xy

düzleminde polarize olmuş fotonlar için, AB durumlarından sanal bağlı durumlara geçişlerdeki soğurma katsayıları görülmektedir. 20nm KN genişliğinde, eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında soğurma katsayıları benzerdir.



Şekil 4.28. 20nm x 20nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında AB durumları arası xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için soğurma katsayıları



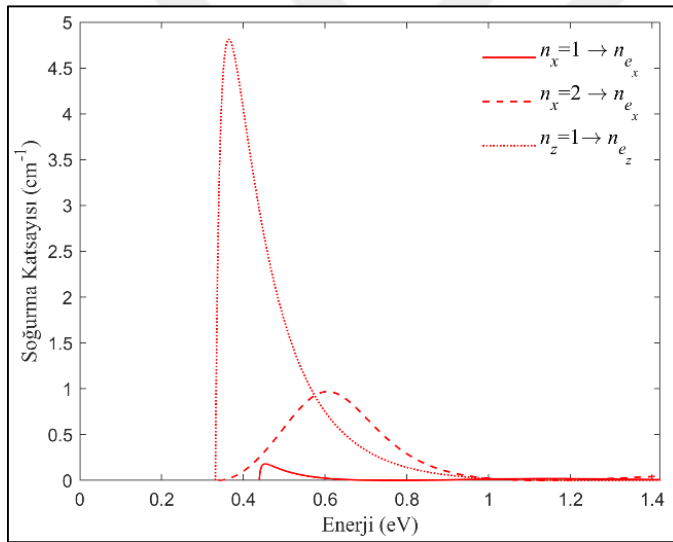
Şekil 4.29. 20nm x 20nm x 6nm boyutlu kuantum nokta için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, AB durumları ile sanal bağlı durumlar arası xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için soğurma katsayıları

Tek bant k.p metodu ile bağlı durumlardan saçılma durumlarına soğurma katsayısı ve toplam bant içi (AB-CB) soğurma katsayısı

Ara bant durumlarından, enerjisi sınırlama potansiyelinden büyük, $E > U$, olan saçılma durumlarına geçişler için soğurma katsayıları Bölüm 3.2.5'te verilmiş olum bu kısımda hesaplanmıştır. Ara bant durumlarından, CB'nin üstündeki iki boyutta bağlı bir diğer boyutta sürekli olan enerji seviyelerine saçılma durumlarındaki geçişler dikkate alınmıştır. Tek

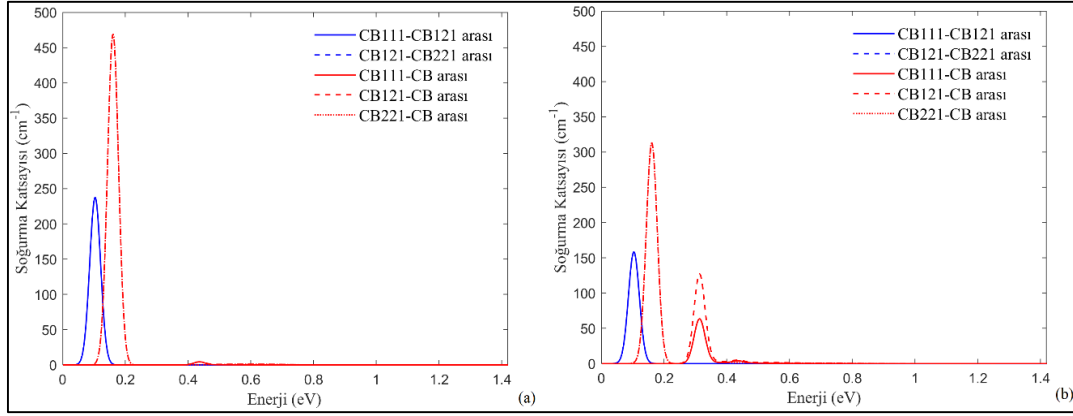
kuantum numarasının değişimine izin verildiği için 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında $n_x=1$, $n_x=2$ ve $n_z=1$, kuantum numaralı AB'deki tek boyutlu bağlı durumlardan sürekli saçılma durumlarına geçişler için soğurma katsayılarının hesaplanması yeterli olmaktadır.

Şekil 4.30'da 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında eşit etkin kütle için tek boyutlu bağlı durumlardan saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları görülmektedir. Saçılma durumları sürekli enerji seviyeleridir bu yüzden soğurma katsayıları da sürekli değildir. Enerjisi 1,42 eV'tan yüksek olan fotonların GaAs konak materyal tarafından soğurulduğu kabul edildiğinden soğurma katsayıları 1,42 eV'a kadar hesaplanmıştır. Ara bant durumlarından saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları, bağlı durumlar arası geçişlere göre düşük seviyelerdedir.



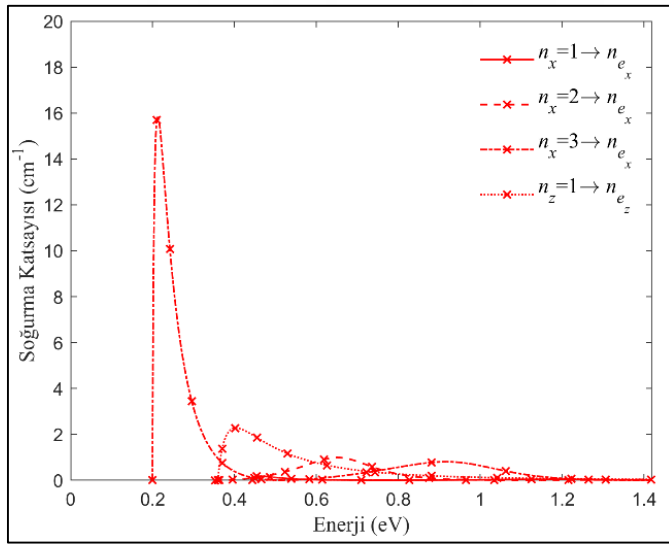
Şekil 4.30. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında eşit etkin kütle için tek boyutlu bağlı durumlardan sürekli saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları

16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında eşit etkin kütle için toplam bant içi (AB-CB) soğurma katsayıları Şekil 4.31'de görülmektedir. Ara bant durumları arası soğurma katsayısı mavi renk ile gösterilirken, ara bant durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara ve sürekli saçılma durumlarına geçişler kırmızı renk ile gösterilmiştir. Daha önce de bahsedildiği gibi CB111 durumundan CB221 durumuna geçişlere izin verilmediğinden bu geçişler için soğurma katsayısı hesaplanmamıştır. Ara bant durumlarından sürekli saçılma durumlarına geçişler için soğurma katsayıları çok düşüktür.



Şekil 4.31. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında eşit etkin kütle için toplam bant içi (AB-CB) soğurma katsayısı (a) xy düzleminde polarize olmuş fotonlar ve (b) izotropik fotonlar için

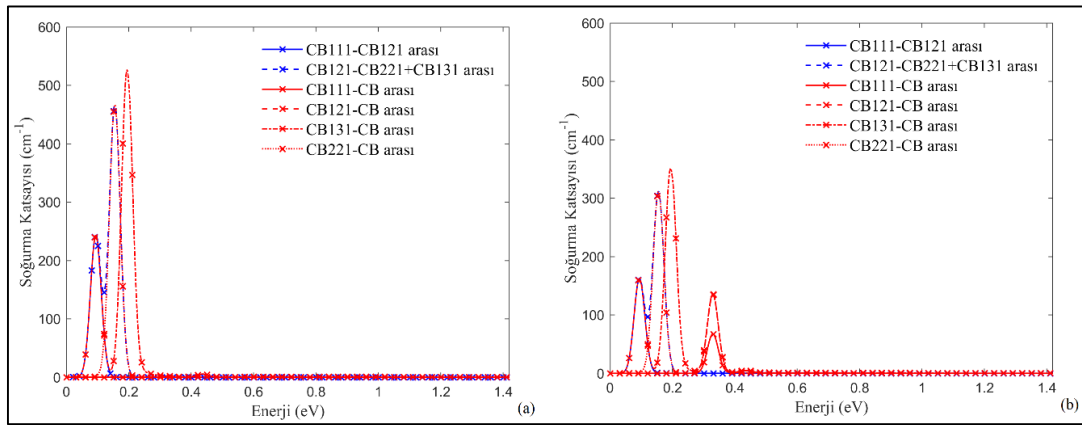
Şekil 4.32’de 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında etkin kütle uyumsuzluğu için tek boyutlu bağlı durumlardan sürekli saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları görülmektedir. Etkin kütle uyumsuzluğunda, CB131 durumu AB durumu olduğundan $n_x=3$ kuantum numaralı tek boyutlu durumdan sürekli saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayısı hesaplanmış ve şekilde gösterilmiştir.



Şekil 4.32. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında etkin kütle uyumsuzluğu için tek boyutlu bağlı durumlardan sürekli saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları

Etkin kütle uyumsuzluğunda, $n_x=1$, $n_x=2$ ve $n_z=1$, kuantum numaralı durumlardan sürekli saçılma durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayılarının, Şekil 4.30’da görülen eşit etkin kütleli durumdaki soğurma katsayılarına göre azaldığı gözlenmiştir.

16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında, etkin kütle uyumsuzluğu için, toplam bant içi (AB-CB) soğurma katsayısı Şekil 4.33’de görülmektedir. CB111 durumundan CB221 durumuna geçişlerin yanı sıra CB221 durumundan CB131 durumuna geçişlere de izin verilmediğinden bu geçişlerdeki soğurma katsayıları hesaplanmamıştır. Bununla birlikte CB131 durumu da AB durumu olduğundan, bu durumdan CB’ye geçişler için soğurma katsayıları toplam soğurma katsayılarına dahil edilmiştir.



Şekil 4.33. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında, etkin kütle uyumsuzluğu için, toplam bant içi (AB-CB) soğurma katsayıları (a) xy düzleminde polarize olmuş fotonlar ve (b) izotropik fotonlar için

4.2.2. Dört bant k.p metodu ile VB’deki bağlı durum enerji seviyelerinin ve bant arası (VB-AB arası) soğurma katsayılarının hesaplanması

Bu kısım kuantum noktanın varlığıyla valans bantta oluşan bağlı enerji durumları ile ara bant durumları arasındaki etkileşim incelenmiştir. VB bağlı durumlarından ara bant durumlarına geçişler için soğurma katsayıları elde edilmeden önce tek bant k.p metodunda olduğu gibi VB durumlarının enerji seviyeleri ve özfonksiyonları elde edilmiştir. Daha önce de bahsedildiği gibi dört bant k.p metodunda iletkenlik bandı(cb), ağır boşluk (heavy hole, hh) bandı, hafif boşluk (light hole, lh) bandı ve spin yörünge etkileşiminden ortaya çıkan ayrılma (split-off, so) bandı dikkate alınmıştır.

Dört bant k.p metodu ile CB ve VB’deki bağlı durumlarının enerji seviyelerinin tespiti

Bölüm 3.2.6’da sunulduğu gibi dört bant k.p metodunda, bantların spin dejenerasyonlarının ihmal edilmesi ve Hamiltonian matrisinin köşegenleştirilmesiyle dört bant (cb, hh, lh ve so

bantları) için dört ayrı eşitlik, Eşitlikler 3.99-102, elde edilir. Bu eşitlikler, tek bant k.p metodunda verilen AB ve CB'deki durumlarının enerji seviyelerini elde etmek için kullanılan ve grafiksel olarak çözülen eşitliklere benzerdir. Böylece, dört bant k.p metodunda, CB'deki cb enerji durumlarının seviyeleri Bölüm 4.2.1'de tek bant k.p metodu ile elde edilen cb durumlarının enerji seviyeleri ile aynıdır.

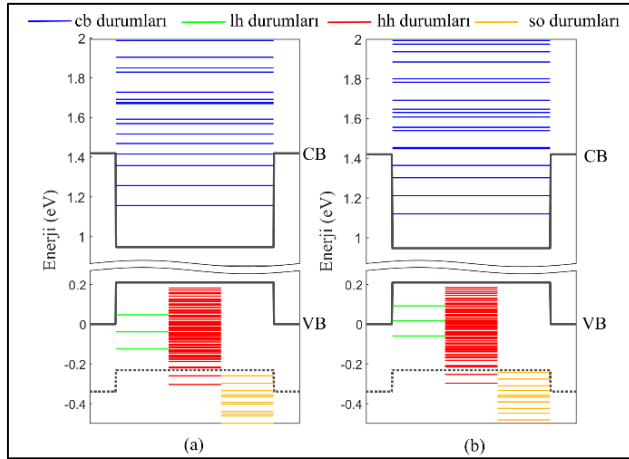
Dört bant k.p metodunda, VB'deki bağlı durumlarının enerji seviyeleri, CB'deki cb durumlarına benzer şekilde grafiksel çözümler kullanılarak hesaplanmıştır. Sınırlama potansiyeli (U_{VB}) için kuantum nokta varlığıyla VB'de oluşan kaidenin en üst enerji seviyesi olarak 0,21 eV alınmış ve etkin kütle için Çizelge 4.8'deki her bandın (hh, lh veya so bandı) kendi etkin kütleleri kullanılmıştır. Hesaplamalarda kullanılan sınırlama potansiyelleri (U_{CB} , U_{VB}), etkin kütleler ve so bandının ayrılma enerji miktarı (E_{SO}) Çizelge 4.8'de verilmiştir.

Çizelge 4.8. Dört bant k.p metodunda kullanılan parametreler [102, 139, 140]

Parametre	InAs	GaAs
m_{cb}^*	0,0294 m_0	0,0613 m_0
m_{hh}^*	0,333 m_0	0,45 m_0
m_{lh}^*	0,027 m_0	0,082 m_0
m_{so}^*	0,076 m_0	0,172 m_0
E_{SO} (eV)	0,390	0,341
U_{CB} (eV)	0,473	
U_{VB} (eV)	0,210	

Şekil 4.34 (a) ve (b)'de sırasıyla eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, 16 nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında, cb, hh ve lh ve so bantları için elde edilen bağlı durum enerji seviyeleri farklı renklerde gösterilmiştir. Seçilen boyutlar ve diğer parametreler ile 32 adet cb durumu 4 adet lh durumu 147 adet hh durumu ve 18 adet so durumu olmak üzere toplam 201 adet durum tespit edilmiştir.

Ağır boşluk bandının büyük etkin kütlesi sayesinde çok sayıda bağlı durum oluşmuştur. İletken bandından farklı olarak VB kaidesindeki durumlarının çok sayıda olması nedeniyle sanal bir süreklilik oluşturdıkları kabul edilir. Etkin kütle uyumsuzluğu, cb durumlarında olduğu gibi toplam lh, hh, ve so durum sayılarını değiştirmemektedir. Şekil 4.34(b)'de görüldüğü gibi etkin kütle uyumsuzluğu durumunda bağlı durumların enerji seviyeleri yasak bandın ortasına doğru yaklaştığından yasak banda giren durum sayısı artmaktadır.

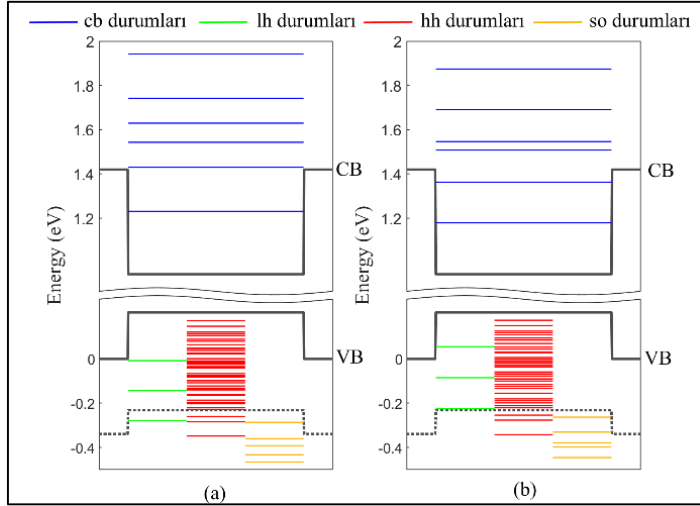


Şekil 4.34. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarında cb, lh, hh ve so bantları için (farklı renklerde) hesaplanan bağlı durum enerji seviyeleri (a) eşit etkin kütle (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda

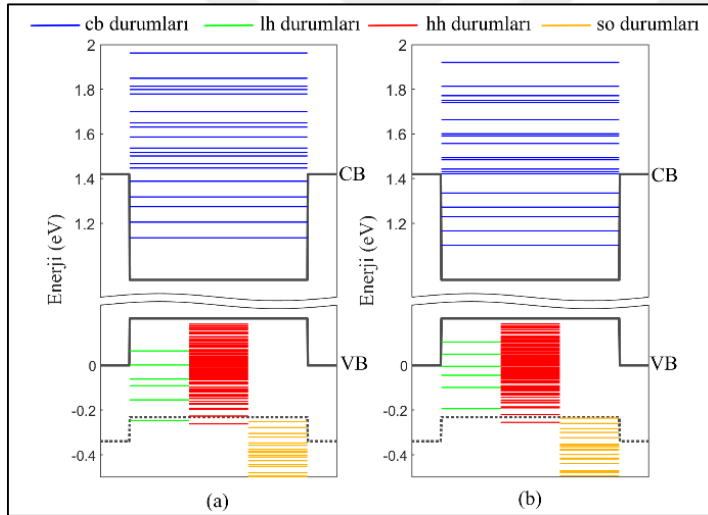
Dört bant k.p metodu ile CB ve VB'deki bağlı durum sayılarının eşit etkin kütle, etkin kütle uyumsuzluğu ve kuantum nokta boyutları ile değişimi

10nm x 10nm x 6nm KN boyutları için eşit etkin kütleli durumda ve etkin kütle uyumsuzluğu durumunda elde edilen bağlı durum enerji seviyeleri Şekil 4.35'de verilmiştir. Şekil 4.35, Şekil 4.34 ile karşılaştırıldığında kuantum nokta boyutları küçüldükçe bağlı durumların sayıları azaldığı ve bağlı durum enerji seviyelerinin yasak bandın ortasından uzaklaştığı görülmüştür. Toplam 8 adet cb durumu 4 adet lh durumu 75 adet hh durumu ve 8 adet so durumu olmak üzere toplam 95 adet bağlı durum tespit edilmiştir. Bölüm 4.2.1'de bahsedildiği gibi boyutlar küçüldükçe ara bant durum sayısı da azalmaktadır. 10 nm kuantum nokta genişliği için eşit etkin kütleli durumda bir adet ara bant durumu tespit edilirken etkin kütle uyumsuzluğu durumunda iki adet ara bant durumu tespit edilmiştir.

20nm x 20nm x 6nm KN boyutları için eşit etkin kütleli durumda ve etkin kütle uyumsuzluğu durumunda elde edilen bağlı durum enerji seviyeleri Şekil 4.36'da görülmektedir. Kuantum nokta genişliği arttıkça bağlı durumların enerji seviyeleri yasak bandın ortasına yaklaşmaktadır. Ayrıca nokta genişliğiyle birlikte bağlı durumların sayısı da artmaktadır. Toplam 32 adet cb durumu, 9 adet lh durumu, 243 adet hh durumu ve 32 adet so durumu olmak üzere toplam 316 adet bağlı durum tespit edilmiştir. 20nm x 20nm x 6nm KN boyutları için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarının her birinde beş adet AB durumu yasak bant içerisinde tespit edilmiştir.

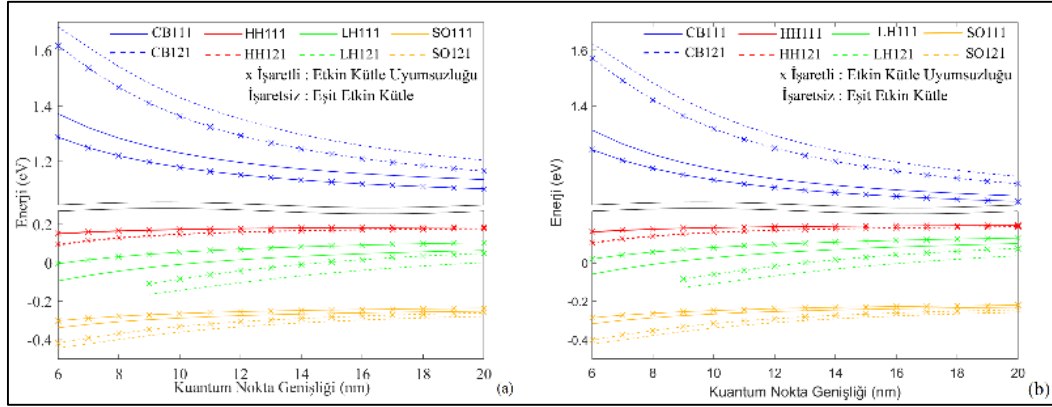


Şekil 4.35. 10nm x 10nm x 6nm KN boyutlarında cb, lh, hh ve so bantları için (farklı renklerde) hesaplanan bağlı durum enerji seviyeleri (a) eşit etkin kütle (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda



Şekil 4.36. 20nm x 20nm x 6nm KN boyutlarında cb, lh, hh ve so bantları için (farklı renklerde) hesaplanan bağlı durum enerji seviyeleri (a) eşit etkin kütle (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda

Dört bant (cb, lh, hh, so bantları) için genel olarak 111 (temel durum) ve 121 (ilk uyarılan durum) durumlarının önemli olduğu kabul edilerek bu durumların enerji seviyelerinin eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında kuantum nokta genişliği ile değişimi hesaplanmış ve farklı kuantum nokta yükseklikleri için Şekil 4.37(a) ve (b)'de verilmiştir. Kuantum nokta genişliği arttıkça bağlı durumların enerji seviyesi yasak bandın ortasına kaymaktadır. Şekil 4.37(b) ile Şekil 4.37(a) karşılaştırıldığında, kuantum nokta yüksekliği arttıkça bağlı durumların enerji seviyeleri de yasak bandın ortasına kaymaktadır.



Şekil 4.37. cb, lh, hh, so bantları için 111 ve 121 durumlarının enerji seviyelerinin kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) 6nm KN yüksekliği ve (b) 9nm KN yüksekliği için

Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumunda, dört bant (cb, lh, hh, so bantları) için 111 (temel durum) ve 121 (ilk uyarılan durum) durumlarındaki enerji seviye farkının kuantum nokta genişliği ile değişimi hesaplanmış ve farklı kuantum nokta yükseklikleri için Şekil 4.38(a) ve (b)'de verilmiştir. Şekil 4.38'de görüldüğü gibi eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu arasındaki enerji farkı, kuantum nokta genişliği ve yüksekliğinin artmasıyla birlikte azalmaktadır. hh durumları için enerji farkı, hh'nin büyük etkin kütleli olması nedeniyle, düşük ve sıfıra yakındır. Düşük etkin kütleleri nedeniyle cb ve lh bantı durumları, etkin kütle uyumsuzluğundan hh durumlarına göre daha fazla etkilenmiştir.

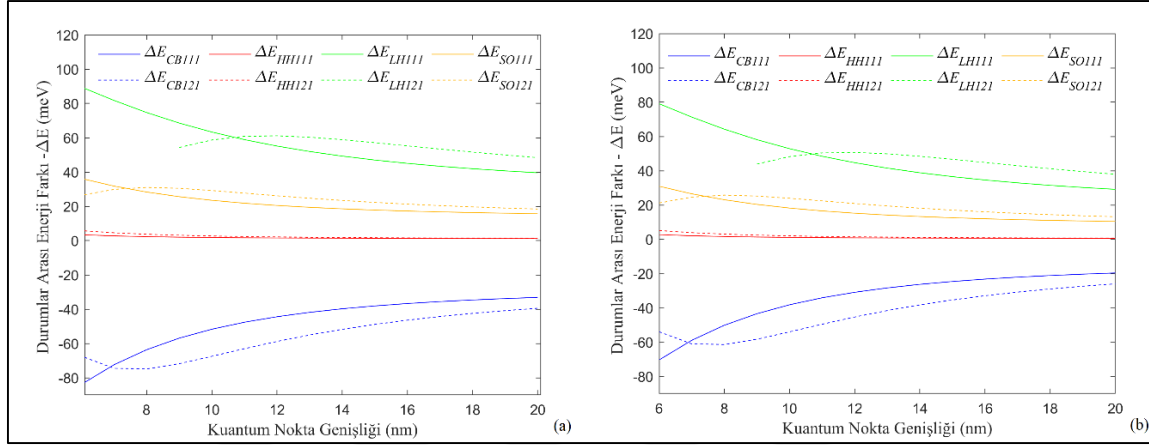
Dört bant k.p metodu ile bant arası (VB-AB) soğurma katsayılarının hesaplanması

Dört bant k.p metoduyla ile VB'deki bağlı durumlardan ara bant durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayılarının hesaplanabilmesi için bütün enerji durumlarının zarf fonksiyonlarının ve Bölüm 3.2.6'da belirtilen izin verilen geçişler için matris elemanlarının hesaplanması gerekmektedir. Matris elemanlarının hesaplamasında kullanılan zarf fonksiyonlarının hesaplama adımları Bölüm 3.2.6'da verilmiştir. Zarf fonksiyonları için ise öncelikle bütün enerji durumlarının üç boyutlu özfonksiyonlarının hesaplanması gerekmektedir.

Üç boyutlu özfonksiyonların ve zarf fonksiyonların hesaplanması

Bölüm 3.2.6'da sunulduğu gibi kuantum nokta sisteminin, bir kenarı L olan Ω hacimli bir küpün içerisinde olduğu düşünüldüğünde dalga fonksiyonları ve özfonksiyonlar sınırlı

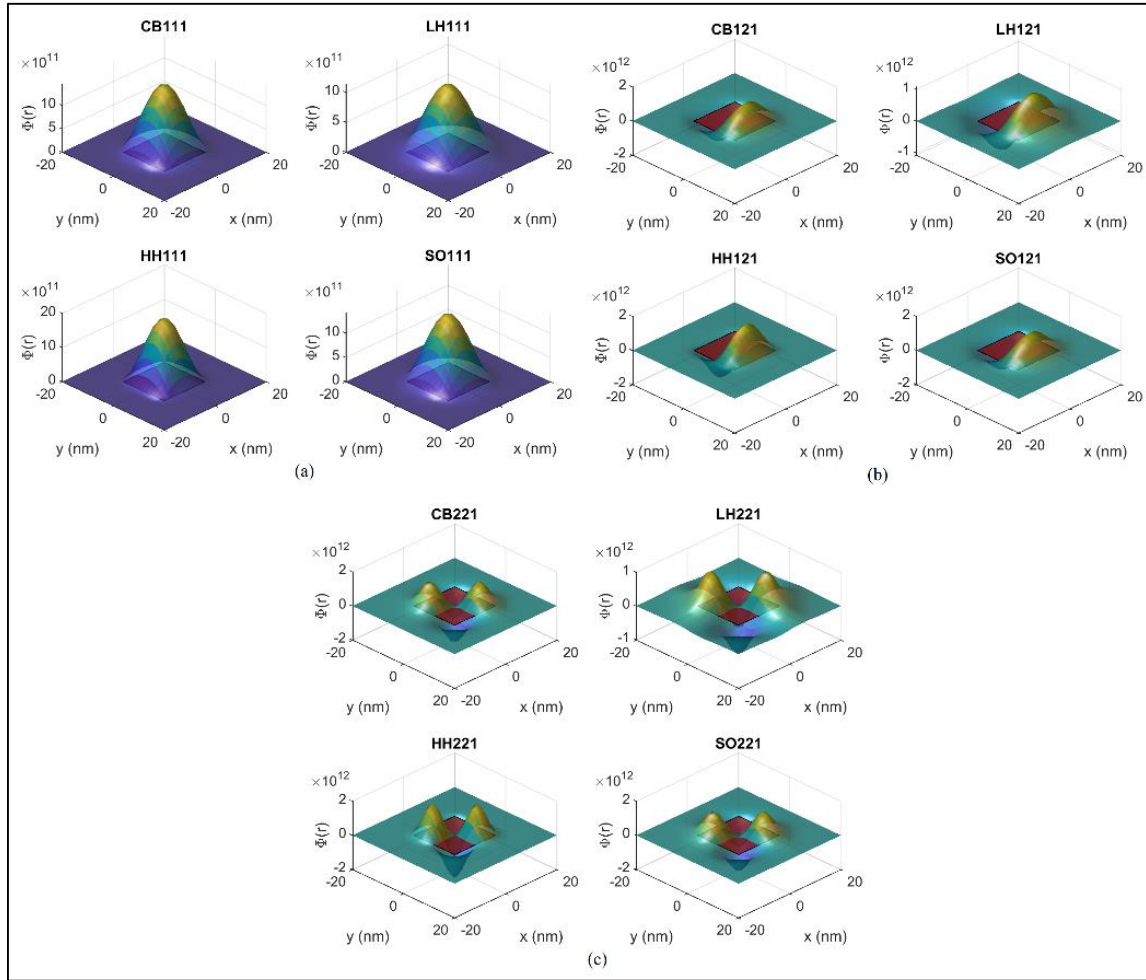
sayıda ayırık nokta kullanılarak ifade edilebilir. İki ayırık nokta arası uzunluk $l=1.5\text{nm}$ ve $L=180\text{nm}$ olarak seçildiğinde tek boyutlu dalga fonksiyonları $M=121$ adet ayırık noktada hesaplanır. Tek boyutlu dalga fonksiyonlarının çarpılmasıyla elde edilen üç boyutlu dalga fonksiyonları ise toplamda $121 \times 121 \times 121 = 1771561$ ayırık noktada hesaplanır.



Şekil 4.38. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında dört bant için 111 ve 121 durumlarındaki enerji seviye farkının, kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) 6nm kuantum nokta yüksekliği ve (b) 9nm kuantum nokta yüksekliği için

Şekil 4.39’da cb, lh, hh ve so bantlarının 111, 121 ve 221 durumları için hesaplanan üç boyutlu özfonksiyonların $z=0$ için xy düzleminde yayılımı görülmektedir. Şekilde görüldüğü gibi hh durumlarının dalga fonksiyonları kuantum nokta içerisinde sınırlanmış olup kuantum nokta dışında yayılmazlar. Bu özellik, hh bandının büyük etkin kütlelerinin bir sonucudur. Diğer bantların, özellikle cb ve lh bantlarının, dalga fonksiyonları kuantum noktanın dışına daha çok yayıldıkları için etkin kütle uyumsuzluğundan daha çok etkilenmektedirler.

Üç boyutlu özfonksiyonlar elde edildikten sonra üç boyutlu özfonksiyonların Fourier Dönüşümleri hesaplanmıştır. Her bir durum için üç boyutlu özfonksiyonların yaklaşık 1,77 milyon hesaplama noktası bulunmaktadır. Ayırık Fourier Dönüşümlerinin Eşitlik 3.107 kullanılarak hesaplanması çok uzun süre aldığından, bu çalışmada Hızlı Fourier Dönüşümü (HFD) algoritması kullanılmıştır. Eşitlik 3.107’de görüldüğü gibi, Ayırık Fourier Dönüşümleri $m=0$ ’dan başlamamaktadır. Bu nedenle, HFD yapılmadan önce özfonksiyonlar her boyutta $-(M-1)/2$ kadar dairesel ötelemeye tabi tutulmuştur.



Şekil 4.39. cb, lh, hh ve so bantları için hesaplanan üç boyutlu özfonksiyonların $z=0$ 'da ve xy düzleminde yayılımı (a) 111 durumları (b) 121 durumları (c) 221 durumları. Kırmızı kare kuantum noktayı temsil etmektedir.

Elde edilen Ayrık Fourier Dönüşümleri, K uzayında T matrisinin uygun elemanlarıyla çarpılmıştır. Elde edilen çarpımların Ters Hızlı Fourier Dönüşümleri hesaplanmış ve $(M-1)/2$ kadar dairesel ötelemeye tutularak X-, Y-, Z- ve S- zarf fonksiyonları elde edilmiştir. Elde edilen zarf fonksiyonları Eşitlik 3.110'u sağlamalıdır [126]. Çizelge 4.9'de, cb, lh, hh ve so bantlarının 111, 121, ve 221 durumları için zarf fonksiyonlarının toplamaları verilmiştir. Çizelgede de görüldüğü gibi eşit etkin kütleli ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında elde edilen zarf fonksiyonları Eşitlik 3.110'u sağlamaktadır.

Dört bant metodu $k.p$ ile VB-AB arası soğurma katsayısı

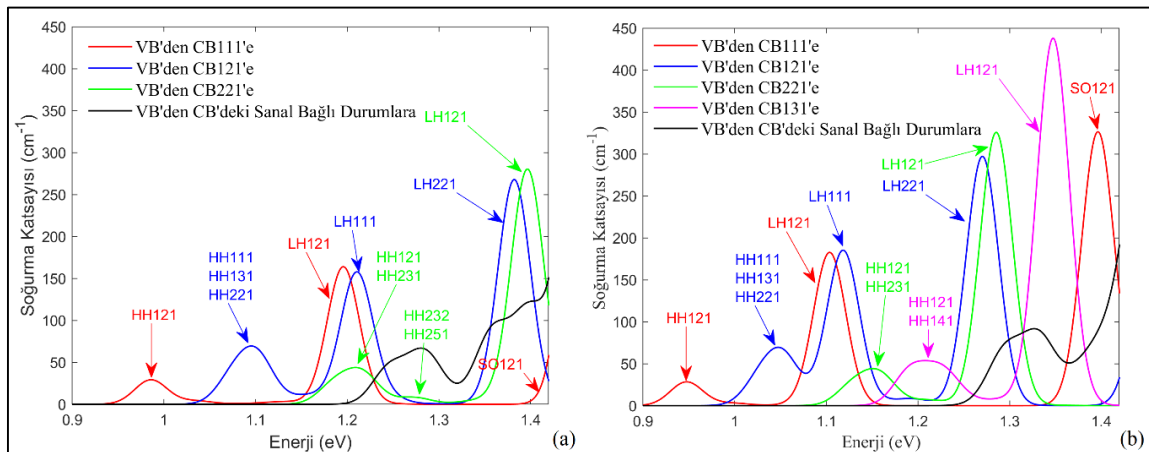
Kuantum noktanın varlığıyla ortaya çıkan bütün durumlar için zarf fonksiyonları elde edildikten sonra Eşitlik 3.111 kullanılarak Bölüm 3.2.6'da belirtilen izin verilen geçişler için

matris elemanları hesaplanmıştır. Valans bant durumlarından ara bant durumlarına geçişler için soğurma katsayıları Eşitlik 4.5 kullanılarak hesaplanmıştır. VB-AB arası soğurma katsayısı hesaplamalarında AB-CB arası soğurma katsayılarında olduğu gibi Çizelge 4.6’da verilen parametreler kullanılmıştır.

Çizelge 4.9. cb, lh, hh ve so bantlarının 111,121 ve 221 durumları için zarf fonksiyonlarının toplamaları

Durum	Eşit etkin kütle				Top.	Etkin kütle uyumsuzluğu				Top.
	$\sum \Psi_x^* \Psi_x$	$\sum \Psi_y^* \Psi_y$	$\sum \Psi_z^* \Psi_z$	$\sum \Psi_s^* \Psi_s$		$\sum \Psi_x^* \Psi_x$	$\sum \Psi_y^* \Psi_y$	$\sum \Psi_z^* \Psi_z$	$\sum \Psi_s^* \Psi_s$	
CB111	0,015	0,015	0,12	0,847	0,999	0,0156	0,0156	0,127	0,86	1,02
CB121	0,014	0,053	0,118	0,8187	0,999	0,014	0,054	0,12	0,83	1,01
CB221	0,048	0,048	0,109	0,795	1	0,049	0,049	0,114	0,80	1,01
HH111	0,474	0,474	0,033	0,003	0,98	0,474	0,474	0,033	0,003	0,98
HH121	0,722	0,218	0,046	0,005	0,991	0,723	0,218	0,046	0,005	0,99
HH221	0,467	0,467	0,052	0,005	0,992	0,467	0,467	0,05	0,005	0,993
LH111	0,284	0,284	0,35	0,078	0,998	0,288	0,288	0,34	0,08	0,997
LH121	0,164	0,525	0,223	0,087	1	0,153	0,551	0,2	0,092	0,996
LH221	0,366	0,366	0,165	0,101	1	0,37	0,37	0,144	0,109	0,995
SO111	0,247	0,247	0,445	0,044	0,983	0,253	0,253	0,443	0,043	0,992
SO121	0,132	0,231	0,579	0,057	1	0,13	0,228	0,488	0,048	0,991
SO221	0,147	0,147	0,642	0,063	1	0,144	0,144	0,645	0,06	0,998

16nm x 16nm x 6nm kuantum nokta boyutları için VB durumlarından AB durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları, eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, hesaplanmış ve Şekil 4.40(a) ve (b)’de verilmiştir. Foton enerjisi 1,42 eV’den büyük olanlar, konak GaAs materyal tarafından soğurularak ana bant fotoakımı yoğunluğunu oluşturacağından, ara bant fotoakım yoğunluğu hesaplamaları 1,42 eV ile sınırlandırılmıştır.



Şekil 4.40. 16nm x 16nm x 6nm kuantum nokta boyutları ile oluşan VB durumlarından AB durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında

Şekil 4.40(a) ve (b)'de, VB durumlarından AB durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları ayrı ayrı hesaplanmış, toplamı alınmış ve şekil üzerinde oklarla belirtilmiştir. VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki soğurma katsayıları da ayrıca elde edilmiş ve şekil üzerinde siyah renk ile belirtilmiştir. $lh \rightarrow cb$ geçişlerinde hesaplanan LH matris elemanları, $hh \rightarrow cb$ geçişlerindeki HH matris elemanlarından büyük olması nedeniyle LH'lerin soğurma tepe değerleri HH'nin soğurma tepe değerlerinden daha yüksektir. Şekil 4.34(a)'daki eşit etkin kütle durumunda görüldüğü gibi, so bandının E_{SO} ayrılma enerjisiyle birlikte $so \rightarrow cb$ geçiş enerjileri SO 1,42 eV'tan yüksek olması nedeniyle, Şekil 4.40(a)'da verilen VB-AB soğurma katsayılarına katkı sağlamamıştır.

16nm x 16nm x 6nm KN boyutları için Şekil 4.40(a) eşit etkin kütle durumu ile Şekil 4.40(b)'deki etkin kütle uyumsuzluğu durumu karşılaştırıldığında, VB-AB arası soğurma katsayılarının tepe değerleri etkin kütle uyumsuzluğu durumunda daha yüksek olduğu görülmektedir. Bunun sebebi, etkin kütle uyumsuzluğundaki matris elemanlarının büyük olmasından kaynaklanmaktadır. Ayrıca, etkin kütle uyumsuzluğunda VB-AB durumları arası geçiş enerjilerinin azalması nedeniyle daha fazla VB-AB geçişleri tespit edilmiş ve toplam soğurma katsayısında artış olmuştur. Şekil 4.40(b)'de görüldüğü gibi etkin kütle uyumsuzluğunda SO121 durumunda VB-AB soğurma katsayısının tepe değeri, Şekil 4.40(a)'daki eşit etkin kütle durumuna göre çok daha yüksektir.

Şekil 4.40(a) ve (b) görüldüğü gibi, 16nm x 16nm x 6nm KN boyutları için ilk soğurma tepe enerjileri, eşit etkin kütle için 0,98 eV'ta, etkin kütle uyumsuzluğu için 0,94 eV'ta gözlenmiştir. İkinci soğurma tepe enerjileri, eşit etkin kütle için 1,09 eV'ta, etkin kütle uyumsuzluğu için 1,03 eV'ta tespit edilmiştir. Literatürde aynı boyutlara sahip olarak üretilmiş InAs/GaAs kuantum noktalı örnek prototip numune için yapılan deneysel çalışmalarda, birinci ve ikinci soğurma tepe enerjileri sırasıyla 0,974 eV ve 1,07 eV olarak tespit edilmiştir [91].

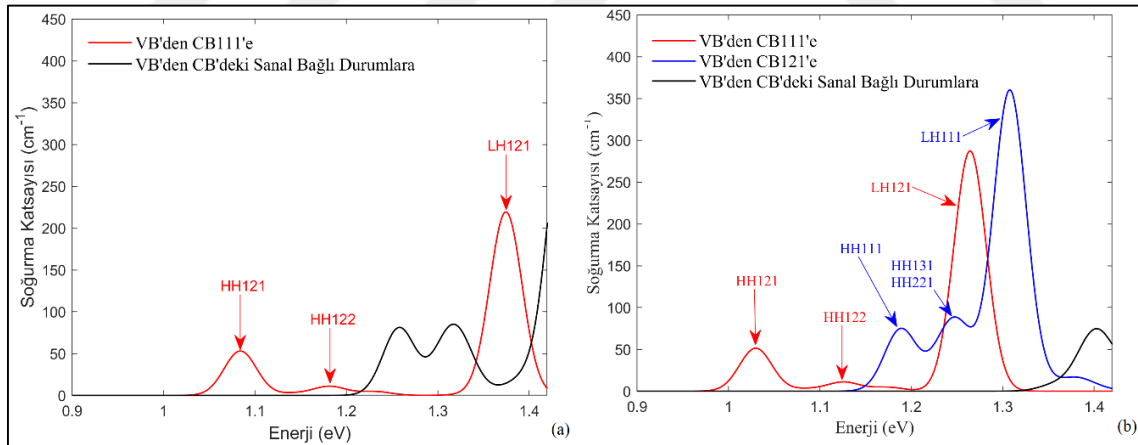
Bu çalışmadaki sayısal sonuçlarımızın, literatürdeki deneysel sonuçlar ile uyum içinde olduğu görülmüştür. Literatürdeki bir başka deneysel çalışmada, 15nm x 15nm x 3nm KN boyutları için birinci ve ikinci soğurma tepe enerjileri sırasıyla 1,08 eV ve 1,12 eV olarak bulunmuştur [141]. Bu çalışmadaki sayısal sonuçlarımızın [141]'deki tespit edilen enerji değerlerden daha düşük olmasının nedeni, deneysel çalışmada kullandıkları KN yüksekliğinin, bu çalışmada kullanılan KN yüksekliğinin yarısına eşit olmasından

kaynaklanmaktadır. Bu çalışmada 9nm ve 6nm KN yüksekliği ile yapılan hesaplamalarda kuantum nokta yüksekliği azalmasıyla arttığı Bölüm 4.2.1’de gözlenmiştir.

Dört bant k.p metodu ile bant arası (VB-AB) soğurma katsayılarının iki farklı kuantum nokta genişliği ile değişimi

10nm x 10nm x 6nm KN boyutları için bant arası (VB-AB) soğurma katsayıları

Kuantum nokta genişliğinin azalmasının VB-AB arası soğurma katsayılarına etkilerini incelemek için 10nm x 10nm x 6nm kuantum nokta boyutları için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında VB-AB arası soğurma katsayıları hesaplanmış ve Şekil 4.41(a) ve (b)’de gösterilmiştir. Tek bant k.p metoduyla tespit edilen AB durumları arası soğurma katsayısında olduğu gibi diğer parametrelerin sabit bırakılıp nokta genişliğinin azalmasıyla soğurma katsayılarının tepe değerlerinin arttığı görülmüştür. Şekil 4.41’deki küçük KN genişliğindeki soğurma katsayılarının tepe değerleri, Şekil 4.40’taki büyük KN genişliğindeki soğurma katsayılarının tepe değerlerine göre artmıştır.



Şekil 4.41. 10nm x 10nm x 6nm kuantum nokta boyutları ile oluşan VB durumlarından AB durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında

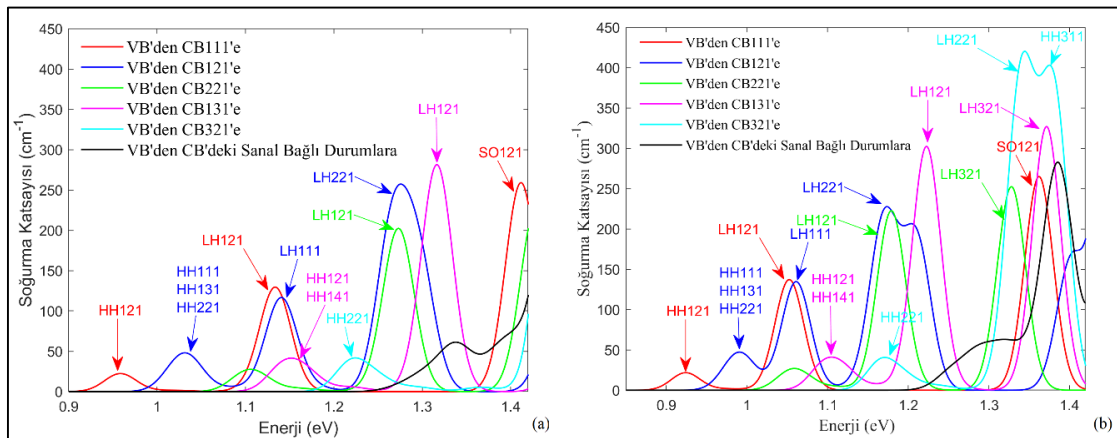
Şekil 4.35’de görüldüğü gibi kuantum nokta genişliğinin azalmasıyla CB ve VB durumlarının enerjileri yasak bant ortasından uzaklaşmış ve geçiş enerjilerinin değerleri artmıştır. VB-AB soğurmasına katkı yapan durumların sayısı azaldığı için toplam VB-AB soğurma katsayısı da azalmıştır. Şekil 4.41(b)’deki etkin kütle uyumsuzluğu durumunda ise soğurma katsayılarının tepe değerleri beklendiği gibi artmıştır. Ayrıca, etkin kütle

uyumsuzluğunda VB-AB durumları arası geçiş enerjilerinin değerlerinin azalması nedeniyle daha fazla VB-AB geçişleri tespit edilmiş ve toplam soğurma katsayısında artış olmuştur. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, 10nm x 10nm 6nm KN boyutlarında, $so \rightarrow cb$ geçiş enerjileri 1,42 eV'tan yüksek olduğu için, VB-AB soğurma katsayısına etkisi görülmemiştir.

20nm x 20 nm x 6nm KN boyutları için bant arası (VB-AB) soğurma katsayıları

20nm x 20nm x 6nm KN boyutları için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, VB-AB arası soğurma katsayıları Şekil 4.42(a) ve (b)'de görüldüğü gibidir. Daha önce görüldüğü gibi kuantum nokta boyutları büyüdükçe soğurma katsayılarının tepe değerleri azalmaktadır. Kuantum nokta genişliği artmasıyla, geçiş enerjilerinin değerleri azalmış; VB-AB soğurma katsayısına katılan durum sayısı arttığından toplam soğurma katsayısı da artmıştır. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, 20nm x 20nm x 6nm KN boyutlarında yasak bantta beş adet AB seviyesi bulunmuştur.

Etkin kütle uyumsuzluğu, Şekil 4.42(b)'de görüldüğü gibi, VB-AB durumları arasındaki geçiş enerjilerinin değerlerini azaltmış, daha fazla VB-AB geçişlerine neden olmuş ve toplam soğurma katsayısını artırmıştır. Etkin kütle uyumsuzluğu durumunda, 20nm x 20nm x 6nm KN boyutlarında, LH221, HH311, LH321 ve SO121 durumları VB-AB soğurma katsayısına dahil olmuş ve bu durumların soğurma katsayılarının tepe değerlerinin diğer durumlara göre yüksek olduğu görülmüştür.



Şekil 4.42. 20nm x 20nm x 6nm kuantum nokta boyutları ile oluşan VB durumlarından AB durumlarına geçişlerdeki soğurma katsayıları (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında

4.2.3. Kutu şekilli InAs/GaAs KN için eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında alt bant fotoakım yoğunlukları

Bu bölümde bant içi ve bant arası soğurma katsayılarından, Eş. 3.116 kullanılarak, elde edilen fotoakım yoğunluklarının, kuantum nokta genişliğine göre değişimi, eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında hesaplanmıştır. Bu kısımda sırasıyla: i) Bütün VB durumlarından her bir AB durumuna ve bütün VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunlukları ayrı ayrı, ii) toplam bant içi (AB-CB), toplam bant arası (VB-AB) ve toplam VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunlukları, iii) toplam bant arası (VB-AB) fotoakım yoğunluğu ile toplam VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunluklarının toplamı hesaplanmıştır. Soğurma katsayılarından elde edilen bu fotoakım yoğunlukları bant içi ve bant arası soğurma katsayılarını karşılaştırmak için hesaplanmıştır. Detaylı denge modelinde, güneş pilinin akım gerilim karakteristiklerinin elde edilebilmesi için AB enerji durumlarının doluluk oranları, karanlık akımları ve terminal voltajı da dahil edilmelidir.

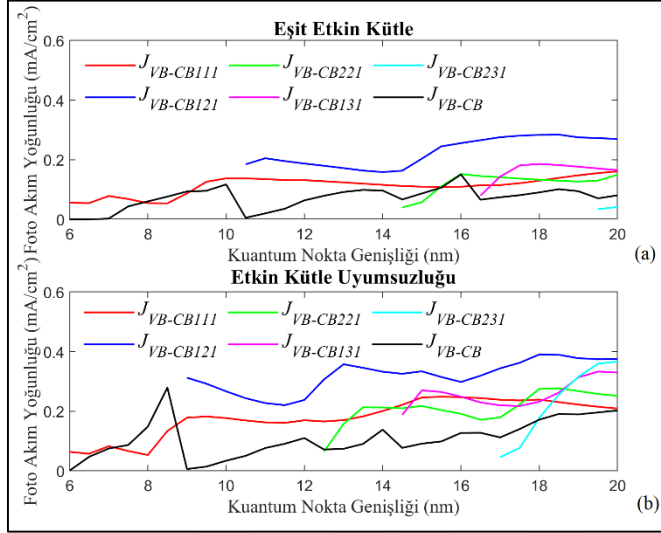
Bütün VB durumlarından her bir AB durumuna ve bütün VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunlukları

Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, bütün VB durumlarından ayrı ayrı AB durumlarına geçişlerdeki fotoakım yoğunluklarının kuantum nokta genişliğine göre değişimi hesaplanmış ve Şekil 4.43'de verilmiştir. Bütün VB durumlarından CB'deki sanal durumlara geçişlerden oluşan sanal fotoakım yoğunluğu, J_{VB-CB} , de hesaplanmış ve şekilde siyah çizgi ile gösterilmiştir. Bütün AB durumları için, KN genişliğinin artmasıyla, akım yoğunlukları azalsa da VB-AB soğurma katsayısına katılan yeni VB durum sayısı arttığından fotoakım yoğunlukları artmaktadır.

Toplam bant içi (AB-CB), toplam bant arası (VB-AB) ve toplam VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunlukları

Bant içi ve bant arası soğurma katsayılarından, Eş. 3.116 kullanılarak, elde edilen fotoakım yoğunluklarının, eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında, kuantum nokta genişliği ile değişimi Şekil 4.44'de verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi bant içi fotoakım

yoğunluğu, J_{AB-CB} , küçük KN boyutlarında (6nm), büyük değerden başlayarak, KN boyutları arttıkça yeni bir AB enerji durumu yasak bantta oluşuncaya kadar azalmaktadır.

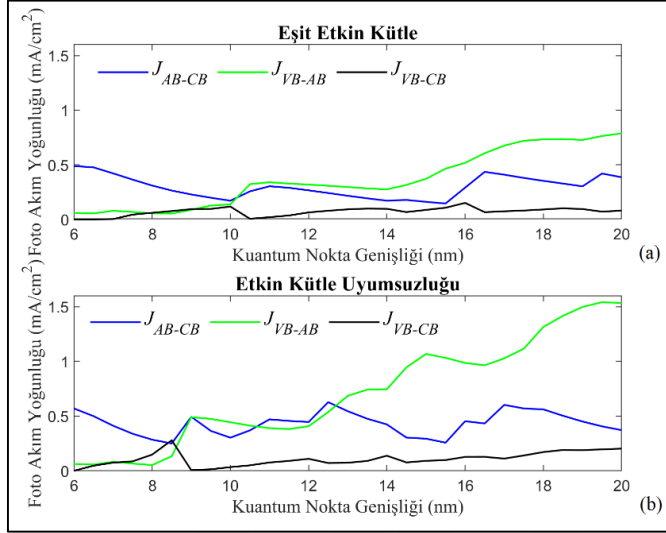


Şekil 4.43. Bütün VB durumlarından her bir AB durumuna ve bütün VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunluklarının kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda

Bant arası fotoakım yoğunluğu, J_{VB-AB} , KN genişliği arttığında, soğurmaya katılan yeni AB ve VB durum sayılarının artmasıyla artmaktadır. VB'den CB'deki sanal durumlara geçişlerden oluşan sanal fotoakım yoğunluğu, J_{VB-CB} , de hesaplanmış ve şekilde siyah çizgi ile gösterilmiştir. Ancak KN genişliğinin artması ve yeni bir sanal durumun yasak banda girmesiyle J_{VB-CB} azalmaktadır. Şekil 4.44'te görüldüğü gibi, etkin kütle uyumsuzluğu durumundaki fotoakım yoğunluğu, eşit etkin kütle durumundaki fotoakım yoğunluğuna göre, soğurmaya katılan AB ve VB durum sayılarının artmasıyla yaklaşık iki katına çıkmaktadır.

Literatürde, 16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarına sahip olarak üretilmiş InAs/GaAs kuantum noktalı örnek prototip numune için yapılan deneysel çalışmalarda, alt bant fotoakım yoğunluğu, 0,266 mA/cm^2 olarak ölçülmüştür [91]. Bu çalışmada, 16nm x 16nm x 6nm KN boyutları için, bant içi fotoakım yoğunluğu, J_{AB-CB} , 0,29 mA/cm^2 ve bant arası fotoakım yoğunluğu, J_{VB-AB} , 0,51 mA/cm^2 olarak hesaplanmıştır. Yukarıda bahsedildiği gibi, fotoakım yoğunluklarının hesaplanmasında enerji durumlarının doluluk oranları dahil edilmemiştir. ABGP'de, AB üzerinden elde edilecek fotoakımın küçük olan fotoakım ($J_{AB-CB}=0,29$

mA/cm²) olacağı da dikkate alındığında, bu çalışmada bulunan akım yoğunluğunun literatürdeki deneysel sonuç ile uyumlu olduğu görülmüştür.



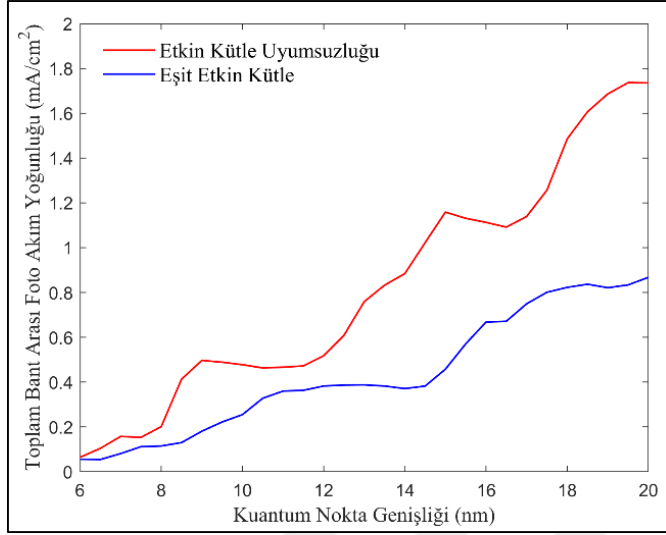
Şekil 4.44. Bant içi (AB-CB) ve bant arası (VB-AB) fotoakım yoğunluklarının kuantum nokta genişliği ile değişimi (a) eşit etkin kütle ve (b) etkin kütle uyumsuzluğu durumunda

Toplam bant arası (VB-AB) fotoakım yoğunluğu ile toplam VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunluklarının toplamı

Şekil 4.45'te eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğunda, toplam bant arası (VB-AB) fotoakım yoğunluğu ile toplam VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunluklarının toplamının kuantum nokta genişliği ile değişimi verilmiştir. KN genişliğinin artmasıyla VB-AB soğurma katsayısına katılan yeni durum sayısı arttığından toplam akım yoğunluğu da artmıştır. Etkin kütle uyumsuzluğunda, VB-AB durumları arasındaki geçiş enerjilerinin değerleri azaldığından VB-AB soğurma katsayısına katılan yeni durum sayısı daha fazla arttığından toplam fotoakım yoğunluğu, eşit etkin kütle durumunun yaklaşık iki katıdır.

Alt bant soğurma katsayıları, i) düzlem içi kuantum nokta yoğunlukları artırarak, ii) kuantum nokta katman sayısını artırarak ve iii) ışık tuzaklama teknikleri kullanılarak artırılabilir [142]. Bu çalışmada, referans alınan InAs/GaAs kuantum noktalı örnek prototip pilde, her KN katmanındaki düzlem içi KN yoğunluğu $4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 'dir ve KN katman sayısı 30'dur [91]. Literatürde görülen yeni çalışmalarda, daha yüksek düzlem içi KN yoğunlukları,

$4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ve $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ olarak bildirilmiştir [143, 144]. Düzlem içi KN yoğunluğunu azaltmadan ($4,4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$) KN katman sayısı 400'e kadar artırılabilmiştir [145]. Yüksek sayıda KN katmanına ve yüksek düzlem içi KN yoğunluğuna birlikte sahip olan KN sistemi, henüz deneysel olarak gerçekleştirilememiştir [142].



Şekil 4.45. Eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğunda, toplam bant arası (VB-AB) fotoakım yoğunluğu ile toplam VB durumlarından CB'deki sanal bağlı durumlara geçişlerdeki fotoakım yoğunluklarının toplamının kuantum nokta genişliği ile değişimi

Literatürde, düzlem içi KN yoğunluğunun $4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 'den $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 'ye çıkmasıyla soğurma katsayısında on kat artış sağlanabileceği belirtilmiştir [125]. $16 \text{ nm} \times 16 \text{ nm} \times 6 \text{ nm}$ KN boyutu için, bant arası toplam fotoakım yoğunluğu eşit etkin kütle için $0,66 \text{ mA/cm}^2$, etkin kütle uyumsuzluğu için $1,11 \text{ mA/cm}^2$ olarak hesaplanmıştır. Eğer düzlem içi KN yoğunluğunu $4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 'den $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 'ye çıkararak soğurmada katsayısında on kat artış sağlanırsa bant arası toplam fotoakım yoğunluğu eşit etkin kütle için $0,66 \text{ mA/cm}^2$ 'den $5,89 \text{ mA/cm}^2$ 'ye, etkin kütle uyumsuzluğu için $1,11 \text{ mA/cm}^2$ 'den $9,31 \text{ mA/cm}^2$ 'ye yükselebilir. Bu çalışmadaki gibi düşük soğurma katsayılarında, pil kalınlığı düşülerek, ışık tuzaklama teknikleri ile soğurma katsayıları $2n_{ref}^2$, GaAs için 25 kat, kadar artırılabilir [142]. Bu iyileştirmelerin etkileri, ileride detaylı denge modeli kullanılarak araştırılabilir.

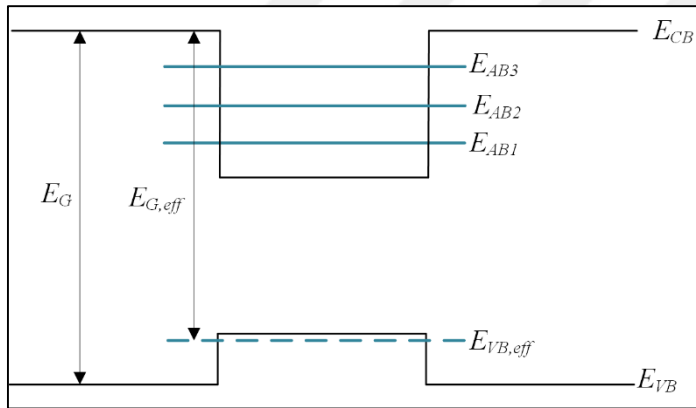
4.3. InAs/GaAs KN-ABGP Detaylı Denge Modeli

Bu bölümde, InAs/GaAs KN-ABGP için Bölüm 3.3'te sunulan detaylı denge modeli kullanılarak Bölüm 4.2'de hesaplanan AB enerji seviyeleri ve alt bant soğurma katsayıları

ile oluşturulan modelde, AB fotoakım yoğunluğunun, KN-ABGP toplam fotoakım yoğunluğuna katkısı hesaplanmıştır. Farklı KN boyutlarında, farklı AB enerji seviyelerine sahip olan KN-ABGP modelinde, eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumları göz önüne alınarak, alt bant fotoakım yoğunlukları hesaplanmıştır. InAs/GaAs KN-ABGP için elde edilen akım gerilim karakteristikleri, Bölüm 4.1’de sunulan ideal GaAs ABGP’nin ve konvansiyonel GaAs güneş pilinin akım gerilim karakteristikleri ile karşılaştırılmıştır.

KN-ABGP Detaylı Denge Modelinde kullanılan parametreler

16nm x 16nm x 6nm KN boyutlarındaki InAs/GaAs KN-ABGP için detaylı denge modelinde kullanılan enerji bant diyagramı Şekil 4.46’da görüldüğü gibidir. GaAs konak materyal bant aralığı $E_G=1,42$ eV olarak alınmıştır. VB’deki lh, hh ve so durumlarının; özellikle hh durumlarının, çok sayıda olduğu göz önüne alınarak, VB kaidesi içerisinde sanal bir süreklilik oluşturduğu kabul edilmiştir.



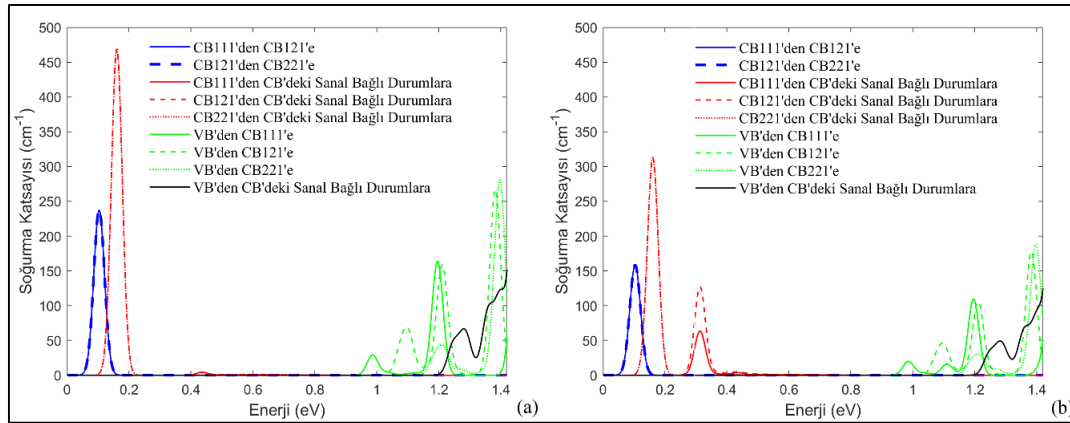
Şekil 4.46. InAs/GaAs KN-ABGP enerji bant diyagramı

Bölüm 4.2’de hesaplanan AB enerji seviyeleri ve diğer bütün VB durumlarının enerji seviyeleri detaylı denge modeli için giriş parametreleridir. Seçilen kuantum nokta boyutları, 16nm x 16nm x 6nm, için Bölüm 4.2’de hesaplanan ara bant durumlarının enerji seviyeleri, $E_{AB1}=1,157$ eV, $E_{AB2}=1,257$ eV ve $E_{AB3}=1,358$ eV olarak detaylı denge modelinde kullanılmıştır. Güneşin 5762K’de siyah cisim ışıması yaptığı kabul edilmiş ve güneş piline gelen foton akısı, Eş. 3.145 ile hesaplanmıştır. Ayrıca güneş ile pil arasındaki katı aç $\sin(\theta_s)=1/46000$ olarak alınmıştır. Aksi belirtilmedikçe güneş pilinin, X=1000 kat yoğunlaştırılmış ışık altında çalıştığı kabul edilmiştir. Detaylı denge modelinde kullanılan giriş parametreleri açıklamalarıyla beraber Çizelge 4.10’da sunulmuştur.

Çizelge 4.10. KN-ABGP Detaylı Denge Modelinde kullanılan parametreler [125, 127]

Parametre	Açıklama	Değer	Birim
E_G	300K'de Bant aralığı	1,42	eV
$E_{G,eff}$	300K'de etkin bant aralığı	1,24	eV
E_{AB1}	CB111 enerji seviyesi	1,157	eV
E_{AB2}	CB121 enerji seviyesi	1,257	eV
E_{AB3}	CB221 enerji seviyesi	1,358	eV
W	Kalınlık	2,4	μm
n_{ref}	GaAs Yansıma indisi	3,5	
ρ_{QD}	Birim hacimdeki KN sayısı	5×10^{15}	cm^{-3}
N_d	Donör atomlarının konsantrasyonu	5×10^{15}	cm^{-3}
E_d	Donör enerji seviyesi	-0,006	eV
N_{CB}	CB'deki etkin durum yoğunluğu	$4,35 \times 10^{23}$	cm^{-3}
N_{VB}	VB'deki etkin durum yoğunluğu	$9,13 \times 10^{24}$	cm^{-3}
T_C	Pil sıcaklığı	300	K
T_S	Güneş Sıcaklığı	5762	K
P_{in}	Pilin ön yüzeyine güç yoğunluğu	1000	Wm^{-2}

Detaylı denge modelinde kullanılan diğer giriş parametreleri ise Bölüm 4.2'de hesaplanan alt bant soğurma katsayılarıdır. Şekil 4.47'de 16nm x 16nm x 6nm kuantum nokta boyutları için tek bant ve dört bant k.p metotlarıyla eşit etkin kütle durumunda elde edilen xy düzleminde polarize olmuş fotonlar için ve izotropik fotonlar için Bölüm 4.2'de hesaplanan bant içi (AB-CB arası), bant arası (VB-AB arası) ve VB'den CB'deki sanal durumlara geçişlerdeki bütün soğurma katsayıları birlikte görülmektedir.



Şekil 4.47. 16nm x 16nm x 6nm KN boyutları için eşit etkin kütle durumunda toplam alt bant soğurma katsayıları (a) xy düzleminde polarize olmuş fotonlar ve (b) izotropik fotonlar için

4.3.1. Kuasi-Fermi seviyeleri

KN-ABGP Akım-Gerilim karakteristiklerinin elde edilebilmesi için öncelikle AB seviyelerinin, CB'nin ve VB'nin Kuasi-Fermi seviyelerinin hesaplanması gerekmektedir.

Bölüm 3.3.2’de, 16nm x 16nm x 6nm kuantum nokta boyutlarında, VB, CB ve üç AB enerji seviyeleri için beş adet Kuasi-Fermi seviyeleri tanımlanmıştır. AB enerji seviyeleri için süreklilik denklemleri, yük yansızlığı şartı denklemi ve çıkış voltajı denklemi olmak üzere aşağıda tanımlanan beş eşitlik Kuasi-Fermi seviyelerinin elde edilmesinde kullanılmıştır. Bölüm 3.3.2’de de sunulan bu beş eşitlik aşağıdaki gibidir;

$$J_{VB \rightarrow AB1} - J_{AB1 \rightarrow AB2} - J_{AB1 \rightarrow CB} = 0 \quad (4.7)$$

$$J_{VB \rightarrow AB2} + J_{AB1 \rightarrow AB2} - J_{AB2 \rightarrow AB3} - J_{AB2 \rightarrow CB} = 0 \quad (4.8)$$

$$J_{VB \rightarrow AB3} + J_{AB2 \rightarrow AB3} - J_{AB3 \rightarrow CB} = 0 \quad (4.9)$$

$$n_{CB} - p_{VB} + n_{IB} - N_d = 0 \quad (4.10)$$

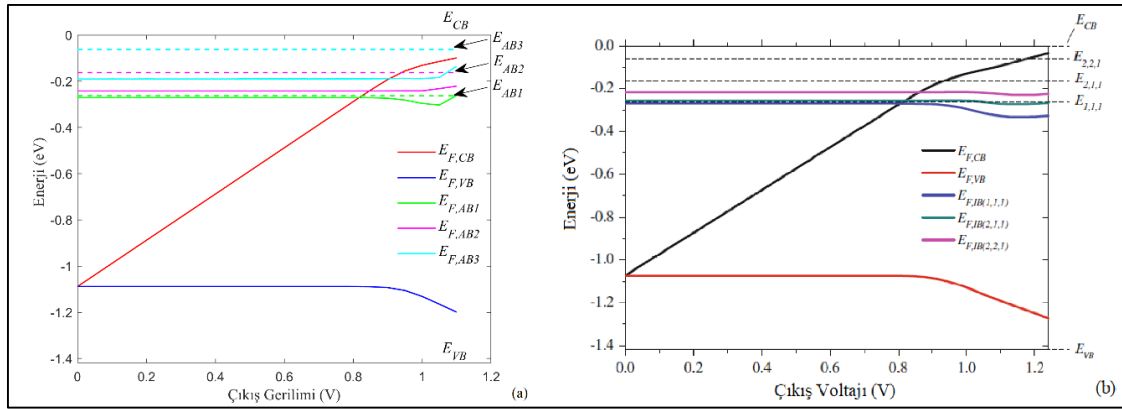
$$E_{F,CB} - E_{F,VB} = qV \quad (4.11)$$

Eşitlik 4.7, 4.8 ve 4.9’da görülen AB enerji seviyeleri ve bantlar arası her bir akım yoğunluğu ifadeleri, Eşitlikler 3.142-145 kullanılarak elde edilmiştir. Eşitlik 4.10’daki yük yansızlığı şartı ise Eşitlikler 3.152-157 kullanılarak hesaplanmıştır. Böylece, bilinmeyen beş Kuasi-Fermi seviyelerini bulmak için, yukarıda verilen giriş parametreleri göz önüne alınarak ve çıkış voltajına sıfırdan başlayıp artan değerler verilerek, Eşitlikler 4.7-11 çözülür. Bu beş eşitliğin nümerik olarak çözümünde, Wolfram Mathematica adlı programı kullanılmıştır.

Bütün giriş parametreleri (durumların enerji seviyeleri, soğurma katsayıları, pilin ön yüzeyine gelen foton akısı vb.) Wolfram Mathematica programına girilmiştir. Kuasi-Fermi seviyeleri, Wolfram Mathematica içindeki Newton-Raphson denklem çözümü algoritması kullanılarak bulunmuştur. Bu çalışmada, AB enerji seviyeleri, VB ve CB için elde edilen Kuasi-Fermi seviyelerinin pilin çıkış voltajı ile değişimi Şekil 4.48(a)’da görüldüğü gibidir. Şekilde GaAs CB sınırı referans noktası (0 eV) olarak seçildiğinden GaAs VB sınırı, -1.42 eV olarak alınmıştır.

Kullanılan Newton-Raphson algoritmasında çözümlerin başlangıç değerlerinin tahmin edilerek seçilmesi gerekmektedir. Seçilen başlangıç değerleri ile çıkış voltajının 1,1 V’a kadar değerleri için, Eşitlikler 4.7-11 sağlanarak, Kuasi-Fermi seviyeleri doğru bir şekilde

elde edilmiştir. Hesaplanan Kuasi-Fermi enerji seviyeleri, literatürde benzer model için Şekil 4.48(b)'de verilen sonuçlarla uyumludur [125]. Çıkış voltajının 1,1 V'tan daha büyük değerleri için program hatalı sonuçlar vermektedir. Hatalı sonuçların elde edilmeye başlandığı 1,1V değeri, Bölüm 4.2'de bulunan ve Çizelge 4.10'da verilen, temel durum enerji seviyesi, E_{AB1} , değeridir. Literatürde sıklıkla temel durum enerji seviyesinin, E_{AB1} , ara bandı oluşturduğu kabul edilmektedir [124, 131, 141]. Diğer AB enerji seviyelerinin, E_{AB2} ve E_{AB3} , doluluk oranları sıfıra yakın olarak bulunsa da toplam akıma katkıları bulunmaktadır. Newton-Raphson algoritması için başlangıç değerinin doğru seçimi çok önemlidir.



Şekil 4.48. VB, CB ve üç AB enerji seviyeleri için Kuasi-Fermi enerji seviyelerinin pilin çıkış gerilimi ile değişimi (a) bu çalışmadaki model (b) literatürdeki model [125]

4.3.2. Akım-gerilim karakteristikleri

KN-ABGP'nin toplam akım yoğunluğunu oluşturan üç ana bileşen aşağıdaki gibidir;

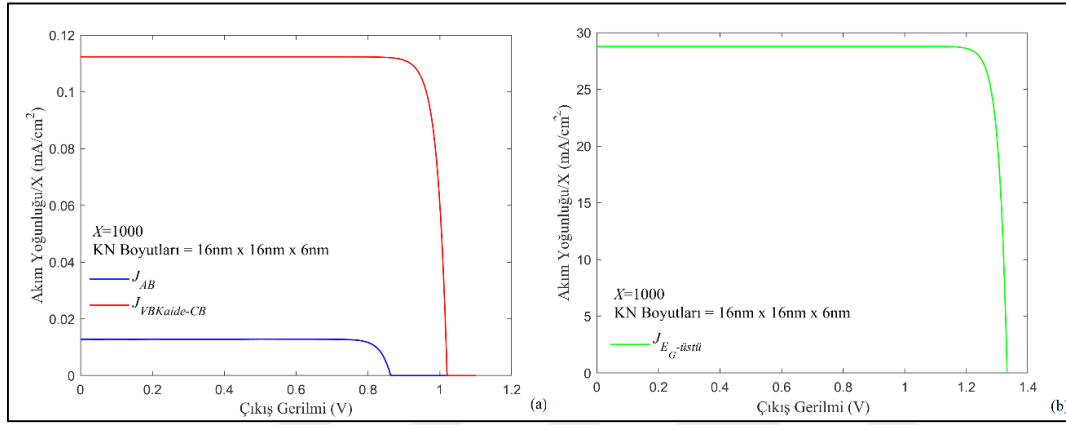
$$J_{toplam} = J_{AB} + J_{VBkaide-CB} + J_{E_G-üstü} \quad (4.12)$$

Ara bant akımı ise VB'den AB enerji seviyelerine veya AB enerji seviyelerinden CB'ye akım yoğunluklarının toplamı şeklinde ifade edilir;

$$J_{AB} = J_{VB-AB1} + J_{VB-AB2} + J_{VB-AB3} = J_{AB1-CB} + J_{AB2-CB} + J_{AB3-CB} \quad (4.13)$$

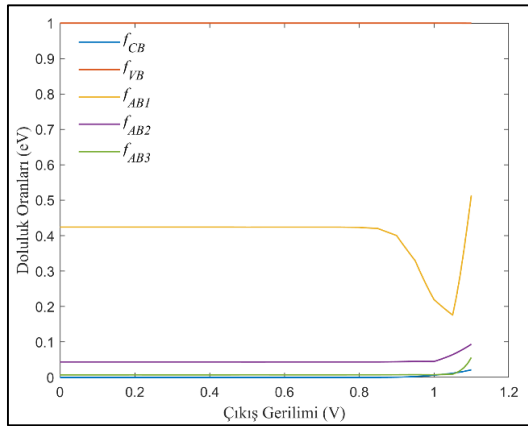
Alt bant ve ana bant akım yoğunluklarının çıkış voltajı ile değişimi (1,1 V' kadar) Şekil 4.49(a) ve (b)'de verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi alt bant soğurmasının toplam akıma

katkısı çok küçüktür. Üç akım bileşeni için kısa devre akım yoğunlukları ara bant için $J_{AB}=0,012 \text{ mA/cm}^2$, VB durumlarından CB'deki sanal durumlara doğrudan geçişler için $J_{VBkaide-CB}=0,12 \text{ mA/cm}^2$ ve ana bant için $J_{E_G\text{-üstü}}=28,78 \text{ mA/cm}^2$ olarak elde edilmiştir. Alt bant soğurma katsayılarını düşük olması alt bant akımlarının düşük olmasının başlıca sebebidir. Ara bant akımının ana bant akımına göre daha düşük değerlerde sıfırlanmasıyla açık devre voltajında düşüşlere yol açmaktadır.



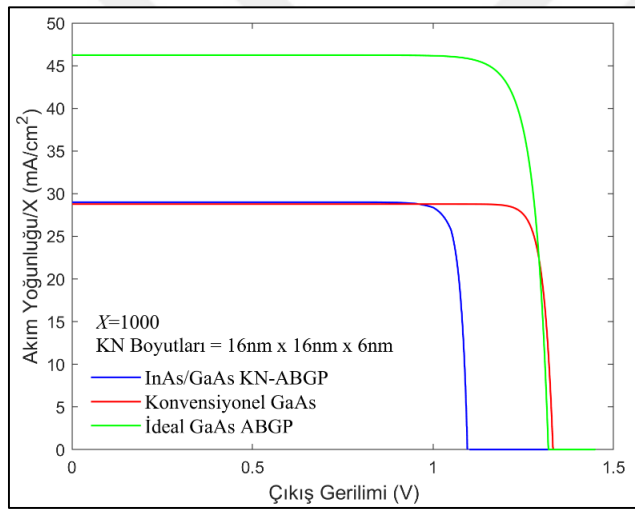
Şekil 4.49. KN-ABGP akım yoğunluğunun çıkış gerilimi ile değişimi (a) alt bant akım yoğunlukları (b) ana bant akım yoğunluğu

AB durumları, VB ve CB için elde edilen doluluk oranlarının güneş pilinin çıkış voltajı ile değişimi Şekil 4.50'de görüldüğü gibidir. Sadece CB111 durumu kayda değer doluluk oranına ($f_{AB1} \approx 0,42$) sahip olduğu tespit edilmiştir. Çıkış voltajının 0,9 V'dan büyük değerleri için AB1 enerji seviyesinin doluluk oranının azaldığı görülmüştür. Diğer AB seviyelerinin neredeyse boş ($f_{AB2} \approx 0,04$ ve $f_{AB3} \approx 0,007$) olduğu görülmektedir.



Şekil 4.50. AB durumları, VB ve CB için elde edilen doluluk oranlarının güneş pilinin çıkış voltajı ile değişimi

Konvansiyonel GaAs güneş pili, İdeal GaAs ABGP ve InAs/GaAs KN-ABGP Akım-Gerilim karakteristiklerinin karşılaştırılması Şekil 4.51’de görülmektedir. KN-ABGP’de kuantum noktanın varlığıyla ortaya çıkan alt bant akımlarının toplam akıma katkısı ihmal edilecek seviyededir. Ayrıca kuantum noktaların varlığıyla güneş pilinin açık devre voltajı düşmektedir. Detaylı denge modelinde yapılan kabuller ile açık devre voltajı genelde yüksek değerlerde elde edilir. Bu çalışmada, KN-ABGP için elde edilen açık devre voltajı da gerçekçilikten uzak şekilde yüksektir. Literatürde deneysel çalışmalarda elde edilen en yüksek voltajları açık devre voltajları 0,9-0,99 V civarındadır [49, 72]. Konvansiyonel GaAs güneş pili, İdeal GaAs ABGP ve InAs/GaAs KN-ABGP için hesaplanan açık devre voltajları, kısa devre akımları ve verimler Çizelge 4.11’de özetlenmiştir.



Şekil 4.51. Konvansiyonel GaAs güneş pili, İdeal GaAs ABGP ve InAs/GaAs KN-ABGP Akım-Gerilim karakteristiklerinin karşılaştırılması

Çizelge 4.11. Konvansiyonel GaAs güneş pili, ideal GaAs ABGP ve InAs/GaAs KN-ABGP için 1000X ışık şiddetinde hesaplanan açık devre voltajları, kısa devre akımları ve verimler

Güneş pili	Açık Devre Voltajı (V)	Kısa Devre Akımı (mA/cm ²)	Verim (%)
Konvansiyonel GaAs	1,33	28,78	34,72
İdeal GaAs ABGP	1,32	46,23	52,16
InAs/GaAs KN-ABGP	1,096	29	28,4



5. SONUÇLAR, TARTIŞMA VE İLERİYE YÖNELİK ÇALIŞMALAR

Bu tez çalışmasında, konvansiyonel güneş pillerinin verim limitlerini aşabilecek dördüncü nesil güneş pillerinden ara bant yapılı güneş pillerinin verimleri detaylı olarak incelenmiştir.

Sonuçlar üç alt bölümde özetlenmiştir:

- i) Detaylı denge modeli kullanılarak GaAs ABGP için verim limiti ve optimum pil parametreleri belirlenmiştir. Tanımlanan üç farklı ABGP modelinde, örtüşmenin, AB enerji seviyelerinin doluluk oranlarının, pil kalınlığının, ışık şiddetinin, AB durum yoğunluğunun ve elektron/boşluk yakalama kesit alanlarının oranlarının, GaAs ve daha geniş bant aralıklı ABGP verimleri üzerinde etkileri incelenmiştir.
- ii) InAs/GaAs kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pil modelinde, kutu şeklindeki kuantum noktaların varlığıyla oluşan AB enerji seviyeleri, alt bant soğurma katsayıları ve fotoakım yoğunlukları k.p metodu kullanılarak hesaplanmıştır. AB enerji seviyeleri, alt bant soğurma katsayıları ve fotoakım yoğunlukları farklı kuantum nokta boyutları, eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumları göz önüne alınarak hesaplanmıştır.
- iii) InAs/GaAs KN-ABGP için hesaplanan AB enerji seviyeleri ve alt bant soğurma katsayıları detaylı denge modelinde kullanılarak InAs/GaAs KN-ABGP'nin akım-gerilim karakteristikleri farklı kuantum nokta boyutları için bulunmuş ve verimleri hesaplanmıştır.

Sonuçlar literatür ile karşılaştırılmıştır. İleriye yönelik yapılacak çalışmalar sunulmuştur.

5.1. GaAs ABGP ve Geniş Bant Aralıklı ABGP'ler için DDM Sonuçları

Ara bant yapılı güneş pillerinde, soğurma katsayılarındaki örtüşme ile verim arasında bir darboğaz mevcuttur. Önceki çalışmalarda, soğurma katsayılarındaki örtüşmenin olumsuz etkilerini engellemek için AB enerji seviyesinin yasak bandın ortasına kayması veya ana bant ve alt bant soğurma katsayıları arasında on kat oran olması önerilmiştir ancak bu oran gerekli pil kalınlığını artırmaktadır [44]. Bu çalışmada, AB enerji seviyelerinin doluluk oranıyla değişimi, 0-4 eV örtüşme aralığında incelenerek, üç farklı GaAs ABGP modeli belirlenmiştir. Literatürde sunulan, Model-A, örtüşmesiz durum için tanımlanan yarı dolu kabul edilen optimum ara bant enerji seviyelerine, ($E_G/3$ veya $2E_G/3$), sahiptir [43, 44]. Bu çalışmada önerilen, Model-B, Model-A ile aynı AB enerji seviyelerinde örtüşme ile değişen

iki farklı optimum doluluk oranına sahiptir. Model-C ise yarı dolu ancak örtüşme ile değişen optimum AB enerji seviyelerine sahiptir. Tanımlanan üç GaAs ABGP modellerin akımları, açık devre voltajları ve verimleri, 0-4 eV örtüşme miktarında, 0-100µm baz kalınlığında, 1-46000 kat yoğunlaştırılmış ışık şiddetinde, 10^{14} - 10^{20} cm⁻³ AB durum yoğunluğunda ve akım taşıyıcılarının optik yakalama kesit alanlarının 0.01-100 oranlarında incelenmiştir. 1-3,5 eV bant aralığına sahip üç farklı ABGP modellerinin fotoakımları ve verimleri hesaplanmış ve karşılaştırılmıştır.

Örtüşmesiz(0 eV) durumda, üç GaAs ABGP modeli için, en yüksek verim %59,9 olarak bulunmuştur. 4 eV örtüşme miktarında, Model-B'nin verimi %45,86'ya, Model-C'nin verimi %41,32'ye ve Model-A'nın verimi %35,80'e düşmüştür. Model-B'deki gibi optimum doluluk oranı seçildiğinde örtüşme ile düşen pil verimlerinin arttığı görülmüştür. Ana bant ve alt bant soğurma katsayıları arasında on kat oran kullanılan modelde en az 200µm baz kalınlığı gerekmektedir [44]. Bu çalışmada sunulan optimum AB doluluk oranına sahip Model-B'de ise gerekli baz kalınlığının çok daha küçük (~5µm) olduğu görülmüştür. Bu çalışmada önerilen Model-B'nin, Model-A'ya göre çok daha verimli olduğu ve Model-C'ye göre de alt bant akımlarının daha iyi eşitlenmesi nedeniyle yüksek fotoakım ve verim sağladığı görülmüştür.

Örtüşmesiz durumda üç ABGP modelinin verimlerinin, tam soğurmanın sağlandığı geniş doluluk oranında, eşit olduğu tespit edilmiştir. Soğurma katsayıları arasında örtüşme durumunda ise, eşit alt bant soğurma katsayılarında Model-B'nin optimum doluluk oranı, AB enerji seviyesi $E_G/3$ 'de iken 0,8 civarında, AB enerji seviyesi $2E_G/3$ 'de iken 0,2 civarında bulunmuştur.

Elektron ve boşluk yakalama kesit alanlarının 0.01-100 oranlarında, optimum doluluk oranlarının 1 ile 0 arasında değiştiği görülmüştür. Elektron ve boşluk yakalama kesit alanlarının oranlarına karşılık gelen optimum doluluk oranı göz önüne alınarak hesaplanan Model-B'nin verimi, Model-A'nın verimden çok daha yüksek olduğu görülmüştür. 4 eV örtüşme miktarında, Model-A'nın verimi, en düşük ve en yüksek yakalama kesit oranlarında, yaklaşık %30 kadar düşmektedir. Örtüşme durumunda Model-A'nın verimi $\sigma_{opt-e}/\sigma_{opt-h}=3,3$ civarında maksimum değere sahiptir. Bu değer, Model-B'nin, $f=0,8$ olan optimum doluluk oranına karşılık gelmektedir. Alt bant soğurma katsayılarının eşit olmadığı, örtüşmeli veya örtüşmesiz, durumlarda AB enerji seviyesinin doluluk oranı mutlaka dikkate alınmalıdır.

GaAs ABGP’de maksimum verim için örtüşmesiz durumda AB durum yoğunluğunun en az $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ olması gerekmektedir. Örtüşme miktarı arttıkça gereken AB durum yoğunluğu bir miktar azalmaktadır. AB durum yoğunluğunun 10^{16} cm^{-3} ’ün altında olduğunda ara bandın etkisi kalmamaktadır.

1-3,5 eV bant aralığındaki ABGP’lerde, Model-B örtüşmenin olumsuz etkilerini giderebildiği için Model-A’ya göre çok verimlidir. 4 eV örtüşme miktarında, 1.12 eV ABGP’de Model-B’nin verimi %39,2 ve Model-C’nin verimi %36,55 olarak hesaplanmıştır. 3,5 eV ABGP’de, Model-B’nin verimi %42,77 ve Model-C’nin verimi %34,53’tür. Model-B ve Model-C, küçük bant aralıklarında birbirlerine yakın verime sahipken büyük bant aralıklarında Model-B Model-C’ye göre daha yüksek verime sahiptir.

Örtüşmesiz durumda, üç model için, en yüksek verim, $E_G=1,95 \text{ eV}$ bant aralığında, %63,2 olarak bulunmuştur. 4 eV örtüşme miktarında, $E_G=1,95 \text{ eV}$ için, Model-B’nin verimi %51,8’e, Model-C’nin verimi %44,7’e ve Model-A’nın verimi %35,18’e düşmüştür. Model-B’ye benzer sonuçlar Lin ve Philips tarafından spektral olarak ayrılmış 0,1 ve 0,9 doluluk oranlarına sahip ABGP için %52,8 olarak tespit edilmiştir [146]. Örtüşmeli durumlarda, Model-C için elde edilen verim artışı, benzer bir model ve düşük örtüşme değerlerinde, başka araştırmacılar tarafından bulunmuştur [147].

5.2. InAs/GaAs KN-ABGP’de AB Enerji Seviyeleri ve Alt Bant Soğurma Katsayılarının ve Akım Yoğunluklarının k.p Metoduyla Bulunması

ABGP için maksimum teorik verimler umut verici olsa da deneysel çalışmalarla üretilen ara bant yapılı güneş pillerinin verimleri maksimum verimlerin çok daha altındadır []. Ara bant yapılı materyal üretiminde en çok başvurulan yöntem, epitaksiyel kuantum noktalar kullanılarak üretilen malzemelerdir. Bu tez çalışmasında, literatürde deneysel olarak üretilmiş kutu şekilli InAs/GaAs kuantum nokta sisteminde, kuantum noktaların varlığıyla yasak bantta oluşan AB enerji seviyeleri k.p metodu kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçların karşılaştırabilmesi için hesaplamalarda bant ofsetleri, elektron etkin kütleleri ve nokta boyutları gibi parametreler literatürden alınmıştır [125–127]. Seçilen 16nm x16nm x6nm kuantum nokta boyutları için bulunan enerji seviyeleri literatürdeki simülasyon sonuçları ile uyumludur [124, 125]. Kuantum nokta boyutları arttıkça AB enerji seviyelerinin düştüğü tespit edilmiştir. Daha çok bağlı durum yasak bantta oluştuğundan AB

durum sayısı KN boyutları ile artmaktadır. Bu çalışmada literatürden farklı olarak KN içerisinde ve bariyer bölgesinde farklı elektron etkin kütleleri kullanılarak AB enerji seviyeleri bulunmuştur. Etkin kütle uyumsuzluğu ile AB enerji seviyelerinin düştüğü ve AB durum sayısının arttığı tespit edilmiştir.

Deneyssel prototipe uygun olarak seçilen 16 nm x 16nm x 6 nm KN boyutları için üç adet ara bant enerji seviyesi bulunmuştur. Kuantum nokta boyutları 10nm'nin altına indiğinde tek ara bant enerji seviyesi elde edilmektedir. Bu çalışmada, bütün KN boyutlarında elde edilen ara bant enerji seviyeleri ideal AB enerji seviyesinden yüksektir. Ayrıca CB'ye yakın çok sayıda AB enerji seviyesinin ortaya çıkması güneş pilinin çalışmasını olumsuz etkilemektedir.

Kuantum noktanın varlığıyla oluşan, VB ile ilişkili bantların bağlı durum enerji seviyeleri de elde edilmiştir. Kuantum nokta boyutları artarken hh, lh, ve so bağlı durumlarının enerji seviyelerinin cb durumlarına benzer şekilde yasak bandın ortasına doğru kaydığı tespit edilmiştir. Etkin kütle uyumsuzluğunda da bağlı durum enerji seviyeleri yasak bandın ortasına kaymaktadır. hh bandının etkin kütlelerinin büyük olması nedeniyle hh durumlarının özfonksiyonları çoğunlukla kuantum nokta içerisinde sınırlanmıştır. Bu sebeple hh durumları, diğer bantlara göre, etkin kütle uyumsuzluğundan az etkilenmektedir. Tam tersine, küçük etkin kütleli lh ve cb durumlarının özfonksiyonları KN dışına daha çok yayılırlar. Bu nedenle, cb ile lh durumları etkin kütle uyumsuzluğundan daha fazla etkilenirler.

Kuantum noktanın varlığıyla oluşan alt bant soğurma katsayıları, bant içi (AB-CB arası) soğurma katsayıları tek bant k.p modeliyle, bant arası (VB-AB arası) soğurma katsayıları dört bant k.p modeli ile, elde edilmiştir. Literatürde kullanılan sekiz bant k.p metodu, bu çalışmada kullanılan dört bant k.p metoduna göre daha doğru sonuçlar vermesine rağmen dört bant k.p metodu ile soğurma katsayıları daha hızlı hesaplanmaktadır [102]. Yüksek kapasiteli bilgisayarların olmadığı ve hızlı hesaplama gerektiren durumlarda dört bant k.p metodu yeterli olmaktadır.

Bu çalışmada eşit etkin kütle ile elde edilen bant içi soğurma katsayıları, literatürde aynı KN boyutlarındaki, matris elemanlarının analitik yöntemler ile çözümünden elde edilen sonuçlarla uyumludur [124]. Literatürdeki benzer çalışmalarda olduğu gibi, kuantum

nokta genişliğinin azalmasıyla bant içi soğurma katsayılarının arttığı gözlenmiştir [134]. Etkin kütle uyumsuzluğunda, bant içi soğurma katsayılarının tepe değerleri yaklaşık aynı kalırken tepe enerjileri daha düşük enerjilere kaymıştır. Literatürde üç boyutta konuma bağlı değişen etkin kütleler kullanılarak yapılan çalışmada, eşit etkin kütleye göre, bant içi soğurma katsayılarının tepe değerlerinin 2 katına çıktığı ve tepe enerjilerinin ise daha düşük enerjilere kaydığı tespit edilmiştir [137].

Bu tez çalışmasında elde edilen bant arası soğurma katsayıları, dört bant k.p metodu kullanılarak yapılan çalışma sonuçları ile uyumludur [126]. Kuantum nokta genişliğinin artması ile bant arası soğurma katsayılarının tepe değerleri azalmıştır. Ancak, bant arası soğurmaya katılan AB enerji seviyelerinin ve VB durumlarının sayısının artması ile toplam bant arası soğurma katsayısının arttığı gözlenmiştir. Etkin kütle uyumsuzluğunda da bant arası soğurmaya katılan yeni AB enerji seviyeleri ve VB durum sayılarının artmasıyla bant arası soğurma katsayılarında artış olmuştur. Deneysel InAs/GaAs KN-ABGP prototipi ile elde edilen sonuçlar ile karşılaştırıldığında, bu çalışmada elde edilen bant arası soğurma katsayılarının tepe enerjilerinin deneysel sonuçlar ile benzer olduğu görülmüştür [91]. Şekil 4.40(a) ve (b) görüldüğü gibi, 16nm x 16nm x 6nm KN boyutları için ilk soğurma tepe enerjileri, eşit etkin kütle için 0,98 eV'ta, etkin kütle uyumsuzluğu için 0,94 eV'ta gözlenmiştir. İkinci soğurma tepe enerjileri, eşit etkin kütle için 1,09 eV'ta, etkin kütle uyumsuzluğu için 1,03 eV'ta tespit edilmiştir. Literatürde aynı boyutlara sahip olarak üretilmiş InAs/GaAs kuantum noktalı örnek prototip numune için yapılan deneysel çalışmalarda, birinci ve ikinci soğurma tepe enerjileri sırasıyla 0,974 eV ve 1,07 eV olarak tespit edilmiştir [91].

Bant içi ve bant arası soğurma katsayıları kullanılarak hesaplanan fotoakım yoğunluklarının, kuantum nokta genişliğine göre değişimi, eşit etkin kütle ve etkin kütle uyumsuzluğu durumlarında hesaplanmıştır. Bant içi fotoakım yoğunluğu, J_{AB-CB} , küçük KN boyutlarında büyük değerden başlayarak, KN boyutları arttıkça yeni bir AB enerji durumu yasak bantta oluşuncaya kadar azalmaktadır. Bant arası fotoakım yoğunluğu, J_{VB-AB} , KN genişliği arttığında, soğurmaya katılan yeni AB ve VB durum sayılarının artmasıyla artmaktadır. Etkin kütle uyumsuzluğu durumunda da soğurmaya katılan yeni AB ve VB durum sayılarının artmasıyla bant arası fotoakım yoğunluğu artmaktadır. Bu çalışmada, 16nm x 16nm x 6nm KN boyutları için, bant içi fotoakım yoğunluğu, J_{AB-CB} , 0,29 mA/cm² ve bant arası fotoakım yoğunluğu, J_{VB-AB} , 0,51 mA/cm² olarak hesaplanmıştır. ABGP detaylı denge

modelinde, AB üzerinden elde edilecek fotoakımın küçük olan fotoakımla sınırlanacağından, bu çalışmada bulunan akım yoğunluğunun ($0,29 \text{ mA/cm}^2$) deneysel InAs/GaAs KN-ABGP prototip için ölçülen alt bant fotoakım yoğunluğu ($0,266 \text{ mA/cm}^2$) ile uyumlu olduğu görülmüştür [91].

Bu tez çalışmasında kutu şekilli InAs/GaAs KN sistemi için hesaplanan alt bant soğurma katsayıları, KN-ABGP'den yüksek verimler elde edilebilmesi için yeterli değildir. Alt bant soğurma katsayıları, kuantum nokta yoğunluğu (düzlem içi KN yoğunluğu veya KN katman sayısı) artırılarak artırılabilir [125]. Bu çalışmada, InAs/GaAs KN sisteminde düzlem içi KN yoğunluğu $4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 'den $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 'ye arttırılırsa soğurma katsayısında on kat artış sağlanacağı düşünülmektedir [125]. Bu durumda bant arası toplam fotoakım yoğunluğu eşit etkin kütle için $0,66 \text{ mA/cm}^2$ 'den $5,89 \text{ mA/cm}^2$ 'ye, etkin kütle uyumsuzluğu için $1,11 \text{ mA/cm}^2$ 'den $9,31 \text{ mA/cm}^2$ 'ye yükselmektedir. Bu çalışmadaki gibi düşük soğurma katsayılarında, pil kalınlığı düşülerek, ışık tuzaklama teknikleri ile soğurma katsayıları $2n_{ref}^2$, GaAs için 25 kat, kadar artırılabilir [142]. Bu iyileştirmelerin etkileri, ileride detaylı denge modeli kullanılarak araştırılabilir. Ancak InAs/GaAs gibi epitaksiyel kuantum noktaların bugünkü teknoloji ile yüksek konsantrasyonlarda üretilmesi mümkün görülmemektedir [55]. Yüksek kuantum nokta yoğunluklarının yanı sıra alt bant soğurma katsayılarının artırılması için ışık tuzaklama tekniklerinin de kullanılması gerekmektedir [125].

5.3. InAs/GaAs KN-ABGP'nin I-V karakteristiklerinin ve Veriminin DDM ile Hesaplanması

InAs/GaAs KN-ABGP için, Bölüm 4.2'de k.p metodu kullanılarak hesaplanan AB enerji seviyeleri ve alt bant soğurma katsayıları detaylı denge modelinde kullanılarak KN-ABGP akım-gerilim karakteristikleri 1000X ışık şiddetinde elde edilmiştir. Elde edilen akım yoğunlukları 1000X ışık şiddetine bölünerek sunulmuştur. $16 \text{ nm} \times 16 \text{ nm} \times 6 \text{ nm}$ KN boyutları için alt bant akım yoğunluklarının güneş pilinin toplam akım yoğunluğuna katkısı $0,13 \text{ mA/cm}^2$ civarında bulunmuş olup ana bant akım yoğunluğuna ($28,78 \text{ mA/cm}^2$) göre ihmal edilebilecek seviyededir. InAs/GaAs KN-ABGP'nin toplam kısa devre akım yoğunluğu (29 mA/cm^2), ideal GaAs ABGP'nin toplam kısa devre akım yoğunluğu ($46,23 \text{ mA/cm}^2$) ve konvansiyonel GaAs güneş pilinin toplam kısa devre akım yoğunluğu ($28,78 \text{ mA/cm}^2$) olarak bulunmuştur. InAs/GaAs KN-ABGP'de ara bandın toplam akım yoğunluğuna katkısının çok az olduğu görülmüştür. Üç güneş pilinin açık devre voltajları

sırasıyla, InAs/GaAs KN-ABGP'nin 1,1 V, ideal GaAs ABGP'nin 1,32 V ve konvansiyonel GaAs güneş pilinin 1,33 V olarak bulunmuştur. Görüldüğü gibi kuantum noktaların varlığıyla KN-ABGP'nin açık devre voltajı düşmüştür. Böylece InAs/GaAs KN-ABGP verimi (%28,4), ideal GaAs ABGP veriminden (%52,16) ve konvansiyonel GaAs güneş pilinin veriminden (%34,72) düşük bulunmuştur. KN boyutları veya etkin kütle uyumsuzluğu ile bant arası soğurma katsayıları bir miktar artsa da AB enerji seviyelerinin artmasıyla ara bant akım yoğunluğunun düştüğü tespit edilmiştir.

Bu tez çalışmasında elde edilen sonuçlar irdelendiğinde, epitaksiyel kuantum noktaların düşük alt bant soğurma katsayılarından dolayı alt bant akımlarının düşük olduğu, çok sayıda ara bandın oluşması nedeniyle de açık devre voltajının da düştüğü tespit edilmiştir. Sonuç olarak KN-ABGP veriminin ideal ABGP'nin veriminden çok düşük olduğu görülmüştür.

5.4. İleriye Yönelik Çalışmalar

InAs/GaAs KN-ABGP verimini artırabilmek için yasak bantta tek AB enerji seviyesi olması gerekmektedir. Bunun için kuantum nokta boyutları azaltılmalıdır. Ancak nokta boyutlarının azaltılması AB enerji seviyeleri iletkenlik bandına yaklaşacaktır ve GaAs ABGP için kabul edilen ideal AB enerji seviyesinden ($2E_G/3$) farklı olacaktır. İleriki çalışmalarda InAs/GaAs KN-ABGP'de AB enerji seviyeleri üzerinde, iletkenlik bandı ofsetini etkileyen kuantum noktaların üzerindeki kaplama katmanı, kuantum nokta materyalindeki (InAlAs, InGaAs vb.) alaşım miktarları gibi parametrelerinin etkileri de incelenebilir.

InAs/GaAs KN-ABGP verimini artırabilmek için alt bant soğurma katsayılarının artırılması gerekmektedir. Alt bant soğurma katsayıları ise daha önce de bahsedildiği gibi KN yoğunluğu artırılarak veya ışık tuzaklama teknikleri ile arttırılabilir. Burada kullanılan KN-ABGP detaylı denge modelinde kullanılan Eş. 3.126'daki Taylor açılımı düşük alt bant soğurma katsayıları için geçerlidir. Alt bant soğurma katsayılarındaki iyileştirmelerle birlikte, KN-ABGP detaylı denge modeli yüksek alt bant soğurma katsayıları için tekrar düzenlenerek akım-gerilim karakteristikleri incelenebilir.

Bu tez çalışmasında tepesi kesilmiş piramit şeklindeki InAs kuantum noktaların kutu şeklinde olduğu kabul edilmiştir. Küresel ve lens gibi farklı şekillerdeki InAs kuantum

noktaları için de enerji seviyeleri ve soğurma katsayıları bulunarak KN-ABGP'nin akım gerilim karakteristikleri ve verimleri bulunabilir.

Epitaksiyel kuantum noktalara göre yüksek konsantrasyonlarda üretilebilen koloidal kuantum noktaların daha yüksek alt bant soğurma katsayılarına sahip olabileceği düşünüldüğünden ileriye yönelik çalışmalarda koloidal kuantum noktalı ara bant yapılı güneş pilleri de incelenebilir [55].



KAYNAKLAR

1. Becquerel, E. (1839). On electric effect under the influence of solar radiation. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences*, 9, 31-33.
2. Rühle, S. (2016). Tabulated values of the Shockley-Queisser limit for single junction solar cells. *Solar Energy*, 130, 139–147.
3. Renewable Energy Policy Network for The 21st Century (2020). *Renewables 2020 Global Status Report*, REN21, Paris, 107.
4. Wilson, G. M., Al-Jassim, M. ve Metzger, W. K. (2020). The 2020 photovoltaic technologies roadmap. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 53, 493001.
5. Megumi, I. (2014). *Theoretical and Experimental Investigation of Quantum Well Intermediate Band Solar Cells*. Doktora Tezi, Imperial College London, London, 18.
6. Bittner, Z. S. (2018). *Development and Characterization of Novel III-V Materials for High Efficiency Photovoltaics*. Doktora Tezi, Rochester Institute of Technology, Rochester, New York, 5.
7. Kızıloğlu, V. (2015). *Ara Bant Yapılı Güneş Pil Veriminin Ara Bandın Doluluk Oranıyla Değişimi*, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 12.
8. Fraas, L. (2010). *Solar Cells and their Applications* (İkinci Baskı). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons Yayınevi, 43–66.
9. Boyd, M. T., Klein, S.A., Reindl, D. T. ve Dougherty, B. P. (2011). Evaluation and Validation of Equivalent Circuit Photovoltaic Solar Cell Performance Models. *Journal of Solar Energy Engineering* 133(2) 021005.
10. Algora, C., Ortiz, E., Rey-Stolle, I., Díaz, V., Peña, R., Andreev, V. M., Khvostikov, V. P. ve Rumyantsev, V. D. (2001). A GaAs solar cell with an efficiency of 26.2% at 1000 suns and 25.0% at 2000 suns. *IEEE Trans Electron Devices* 48(5) 840–844.
11. Saritas, M. (1988). *Review paper on solar cell technology*. In Proceedings of ECO Electronics Technology Workshop, Turkey, 83–128.
12. Navruz, T.S. (2008). *Ara Bant Yapılı Güneş Pillerinde Verim Optimizasyonu*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 18-19.
13. Würfel, P. ve Würfel, U. (2016). *Physics of Solar Cells: From Basic Principles to Advanced Concepts* (Üçüncü Baskı). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 175.
14. Kasap, S. O. (2013). *Optoelectronics & Photonics: Principles & Practices* (İkinci Baskı). İngiltere: Pearson Yayınevi, 389.
15. Meneses-Rodríguez, D., Horley, P. P., González-Hernández J., Vorobiev, Y. V. ve Gorley, P. N. (2005). Photovoltaic solar cells performance at elevated temperatures. *Solar Energy*, 78(2), 243-250.

16. Markvart, T. ve Castañer, L. (2013). *Solar Cells* (İkinci Baskı) Elsevier, 27–54.
17. Streetman B. G. ve Banerjee S. K. (2006). *Solid State Eletronic Devices* (Altıncı Baskı). İngiltere: Pearson Education Inc., 115
18. Shockley, W. ve Queisser, H. J. (1961). Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells. *Journal of Applied Physics*, 32(3), 510-519.
19. Hirst, L. C. ve Ekins-Daukes, N. J. (2011). Fundamental losses in solar cells. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 19(3), 286–293.
20. Würfel, P. (2002). Thermodynamic limitations to solar energy conversion. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 14(1), 18–26.
21. Henry, C. H. (1980). Limiting efficiencies of ideal single and multiple energy gap terrestrial solar cells. *Journal of Applied Physics*, 51, 4494–4500.
22. Dupré, O., Vaillon, R. ve Green, M. A. (2017). *Thermal Behavior of Photovoltaic Devices* (Birinci Baskı). İsviçre: Springer Yayınevi.
23. Landsberg, P. T. ve Markvart T (1998). The carnot factor in solar-cell theory. *Solid-State Electronics*, 42(4), 657–659.
24. İnternet: NREL Research Cell Efficiency Records (Mayıs, 2021). URL: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html> Son Erişim Tarihi: 22.05.2021
25. Hollemann, C., Haase, F., Schäfer, S., Krügener, J., Brendel R. ve Peibst, R. (2019). 26.1%-efficient POLO-IBC cells: Quantification of electrical and optical loss mechanisms. *Progress in Photovoltaics Research and Applications*, 27(11), 950–958.
26. Green, M. A., Dunlop, E. D., Hohl-Ebinger, J., Yoshita, ve M., Ho-Baillie, A. W. Y. (2019). Solar cell efficiency tables (version 54). *Progress in Photovoltaics Research and Applications*, 27(7), 565–575.
27. Green, M. A., Dunlop, E. D., Hohl-Ebinger, J., Yoshita, M., Kopidakis, N. ve Hao, X. (2020). Solar cell efficiency tables (version 56). *Progress in Photovoltaics Research and Applications*, 28(7), 629–638.
28. Nakamura M, Yamaguchi K, Kimoto Y, Yasaki, Y. Kato, T. Ve Sugimoto, H. (2019). Cd-Free Cu(In,Ga)(Se,S)₂ Thin-Film Solar Cell With Record Efficiency of 23.35%. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 9(6), 1863–1867.
29. Kojima, A., Teshima, K., Shirai, Y., ve Miyasaka, T. (2009). Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells. *Journal of the American Chemical Society*, 131(17), 6050–6051.
30. Martí A. ve Araújo G. L. (1996). Limiting efficiencies for photovoltaic energy conversion in multigap systems. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 43(2), 203–222.
31. Geisz, J. F., France, R. M., Schulte, K. L., Steiner, M. A., Norman, A. G., Guthrey, H.

- L., Young, M. R., Song, T. ve Moriarty, T. (2020). Six-junction III–V solar cells with 47.1% conversion efficiency under 143 Suns concentration. *Nature Energy*, 5, 326–335.
32. de la Mora, M. B., Amelines-Sarria, O., Monroy, B. M., Hernández-Pérez, C. D. ve Lugo, J. E. (2017). Materials for downconversion in solar cells: Perspectives and challenges. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 165, 59–71.
 33. Trupke, T., Green, M.A., ve Würfel, P. (2002). Improving solar cell efficiencies by down-conversion of high-energy photons. *Journal of Applied Physics*, 92(3), 1668–1674.
 34. Trupke, T., Green, M.A., ve Würfel, P. (2002). Improving solar cell efficiencies by up-conversion of sub-band-gap light. *Journal of Applied Physics*, 92(3), 4117–4122.
 35. Day, J., Senthilarasu, S. ve Mallick, T. K. (2019). Improving spectral modification for applications in solar cells: A review. *Renewable Energy*, 132, 186–205.
 36. Sakakibara, R., Stelmakh, V., Chan, W. R., Ghebrebrhan, M., Joannopoulos, J. D., Soljacic, M., ve Čelanović, I. (2019). Practical emitters for thermophotovoltaics: a review. *Journal of Photonics for Energy*, 9(3), 032713.
 37. Harder, N-P. ve Würfel, P. (2003). Theoretical limits of thermophotovoltaic solar energy conversion. *Semiconductor Science and Technology*, 18(5), 151-157.
 38. Wang, Y., Liu, H. ve Zhu, J. (2019). Solar thermophotovoltaics: Progress, challenges, and opportunities. *APL Materials*, 7(8), 080906.
 39. Luque, A. ve Hegedus, S. (2003). *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*, John Wiley & Sons.
 40. Navruz, T.S. ve Saritas, M. (2009). The detailed analysis of auger effect on the efficiency of intermediate band solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 93(11), 1913-1922.
 41. Luque, A. ve Martí, A. (1997). Increasing the Efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate Levels. *Physical Review Letters*, 78(26), 5014–5017.
 42. Luque, A. ve Martí, A. (2001). A metallic intermediate band high efficiency solar cell. *Progress in Photovoltaics Research and Applications*, 9(2), 73–86.
 43. Navruz, T. S. ve Saritas, M. (2008). Efficiency variation of the intermediate band solar cell due to the overlap between absorption coefficients. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 92(3), 273-282.

44. Peng, R.W., Mazzer, M., ve Barnham, K.W.J. (2003). Efficiency enhancement of ideal photovoltaic solar cells by photonic excitations in multi-intermediate band structures. *Applied Physics Letters*, 83(4), 770–772
45. Mellor, A. (2013). *Photon Management Structures for Absorption Enhancement in Intermediate Band Solar Cells and Crystalline Silicon Solar Cells*, Doktora Tezi, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, 4,6.
46. Navruz, T.S. ve Saritas, M. (2014). Determination of the optimum material parameters for intermediate band solar cells using diffusion model. *Progress in Photovoltaics Research and Applications*, 22(5), 593-602.
47. Ramiro, I., Marti, A., Antolin, E. ve Luque, A. (2014). Review of experimental results related to the operation of intermediate band solar cells. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 4(2):736–748.
48. Marti, A., Antolin, E., Stanley, C. R., Farmer, C. D., Lopez, N., Diaz, P., Canovas, E., Linares, P. G. ve Luque, A. (2006). Production of photocurrent due to intermediate-to-conduction-band transitions: A demonstration of a key operating principle of the intermediate-band solar cell. *Physical Review Letters*, 97(24), 247701.
49. Bailey, C. G., Forbes, D. V., Polly, S. J., Bittner, Z. S., Dai, Y., Mackos, C., Raffaele, R. P. ve Hubbard, S. M. (2012). Open-circuit voltage improvement of InAs/GaAs quantum-dot solar cells using reduced InAs coverage. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 2(3), 269–275.
50. Van Roosbroeck, W. ve Shockley, W. (1954). Photon-radiative recombination of electrons and holes in germanium. *Physical Review*, 94(6), 1558–1560.
51. Marti, A., Cuadra, L. ve Luque, A. (2000, 15-22 Eylül). *Quantum dot intermediate band solar cell*. Conference Record of the Twenty-Eighth IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Anchorage, AK, USA, 940–943.
52. Shan, W., Walukiewicz, W., Ager, J. W., Haller, E. E., Geisz, J. F., Friedman, D. J., Olson, J. M. ve Kurtz, S. R. (1999). Band anticrossing in GaInNAs alloys. *Physical Review Letters*, 82(6), 1221–1224.
53. Luque, A., Martí, A., Antolín, E. ve Tablero, C. (2006). Intermediate bands versus levels in non-radiative recombination. *Physica B: Condensed Matter*, 382(1-2), 320–327.
54. Ekins-Daukes, N. J. ve Schmidt, T. W. (2008). A molecular approach to the intermediate band solar cell: The symmetric case, *Applied Physics Letters*, 93(6), 063507.

55. Ramiro, I., ve Martí, A. (2020). Intermediate band solar cells: Present and future. *Progress in Photovoltaics Research and Applications*, 29(7), 1–9.
56. Phillips, J., Kamath, K., Zhou, X., Chervela, N. ve Bhattacharya, P. (1997). Photoluminescence and far-infrared absorption in Si-doped self-organized InAs quantum dots. *Applied Physics Letters*, 71(15), 2079–2081.
57. Luque, A., Martí, A., López, N., Antolín, E., Cánovas, E., Stanley, C., Farmer, C., Caballero, L. J., Cuadra, L., ve Balenzategui, J. L. (2005). Experimental analysis of the quasi-Fermi level split in quantum dot intermediate-band solar cells. *Applied Physics Letters*, 87(8), 083505.
58. Ramiro, I., Antolín, E., Linares P. G., Hernández, E., Martí, A., Luque, A., Farmer, C. D., ve Stanley, C. R. (2011). Application of photoluminescence and electroluminescence techniques to the characterization of intermediate band solar cells. *Energy Procedia*, 10, 117–121.
59. Dürr, C. S., Warburton, R. J., Karrai, K., Kotthaus, J. P., Medeiros-Ribeiro, G. ve Petroff, P. M. (1998). Interband absorption on self-assembled InAs quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2(1-4), 23–27.
60. Sauvage, S., Boucaud, P., Julien, F. H., Gérard, J.-M. ve Thierry-Mieg, V. (1997). Intraband absorption in n-doped InAs/GaAs quantum dots. *Applied Physics Letters*, 71(19), 2785–2787.
61. Xu, S. J., Chua, S. J., Mei, T., Wang, X. C., Zhang, X. H., Karunasiri, G., Fan, W. J., Wang, C. H., Jiang, J., Wang, S., ve Xie, X. G. (1998). Characteristics of InGaAs quantum dot infrared photodetectors. *Applied Physics Letters*, 73(21), 3153–3155.
62. Cánovas, E., Martí, A., López, N., Antolín, E., Linares P.G., Farmer, C. D., Stanley, C. R., ve Luque A. (2008). Application of the photoreflectance technique to the characterization of quantum dot intermediate band materials for solar cells. *Thin Solid Films*, 516(20), 6943–6947.
63. Fuertes Marrón, D., Cánovas, E., Artacho, I., Stanley, C. R., Steer, M., Kaizu, T., Shoji, Y., Ahsan, N., Okada, Y., Barrigón, E., Rey-Stolle, I., Algora, C., Martí, A. ve Luque, A. (2013). Application of photoreflectance to advanced multilayer structures for photovoltaics. *Materials Science and Engineering: B*, 178(9), 599–608.
64. Sun, B. Q., Lu, Z. D., Jiang, D. S., Wu, J. Q., Xu, Z. Y., Wang, Y. Q., Wang, J. N., ve Ge, W. K. (1998) Photovoltage and photoreflectance spectroscopy of InAs/GaAs self-organized quantum dots. *Applied Physics Letters*, 73(18), 2657–2659.

65. Luque, A., Martí, A., Stanley, C., López, N., Cuadra, L., Zhou, D., Pearson, J. L. Ve McKee, A. L. (2004). General equivalent circuit for intermediate band devices: Potentials, currents and electroluminescence. *Journal of Applied Physics*, 96, 903–909.
66. Martí, A., Cuadra, L. ve Luque, A. (2002). Design constraints of the quantum-dot intermediate band solar cell. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 14(1-2), 150–157
67. Laghumavarapu, R. B., El-Emawy, M., Nuntawong, N., Moscho, A., Lester, L. F. ve Huffaker, D. L. (2007). Improved device performance of InAsGaAs quantum dot solar cells with GaP strain compensation layers. *Applied Physics Letters*, 91(24), 243115.
68. Martí, A., López, N., Antolín, E., Cánovas, E., Stanley, C. R., Farmer, C. D., Cuadra, L. ve Luque, A. (2006). Novel semiconductor solar cell structures: The quantum dot intermediate band solar cell. *Thin Solid Films*, 511–512, 638–644.
69. Hubbard, S. M., Cress, C. D., Bailey, C. G., Raffaele, R. P., Bailey, S. G. ve Wilt, D. M. (2008). Effect of strain compensation on quantum dot enhanced GaAs solar cells. *Applied Physics Letters*, 92(12), 123512.
70. Martí, A., Antolín, E., Cánovas, E., López, N., Linares P.G., Luque, A., Stanley, C. R. ve Farmer, C. D., (2008). Elements of the design and analysis of quantum-dot intermediate band solar cells. *Thin Solid Films*, 516(20), 6716–6722.
71. Luque, A., Martí, A., López, N., Antolín, E., Cánovas, E., Stanley, C. R., Farmer, C. D. ve Díaz, P. (2006). Operation of the intermediate band solar cell under nonideal space charge region conditions and half filling of the intermediate band. *Journal of Applied Physics*, 99(9), 094503.
72. Bailey, C. G., Forbes, D. V., Raffaele, R. P. ve Hubbard, S. M. (2011). Near 1 V open circuit voltage InAs/GaAs quantum dot solar cells. *Applied Physics Letters*, 98(16), 96–99.
73. Linares, P.G., Martí, A., Antolín, E. ve Luque, A. (2011). III-V compound semiconductor screening for implementing quantum dot intermediate band solar cells. *Journal of Applied Physics*, 109(1), 014313.
74. Ramiro, I., Villa, J., Tablero, C., Antolin, E., Luque, A., Marti, A., Hwang, J., Phillips, J., Martin, A. J. ve Millunchick, J. (2017). Analysis of the intermediate-band absorption properties of type-II GaSb/GaAs quantum-dot photovoltaics. *Physical Review B*, 96(12), 125422.
75. Ramiro, I., Antolín, E., Hwang, J., Teran, A., Martin, A. J., Millunchick, J., Phillips, J.,

- Martí, A. ve Luque, A. (2017, 25-30 Haziran). *Three-bandgap absolute quantum efficiency in intermediate band solar cells*. 2017 IEEE 44th Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), Washington, DC, USA, 1-3.
76. Tamaki, R., Shoji, Y. ve Okada, Y. A. (2017, 25-30 Haziran). *Type-II Quantum Dots for Application to Photon Ratchet Intermediate Band Solar Cells*. 2017 IEEE 44th Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), Washington, DC, USA, 11–13.
77. Tayagaki, T. ve Sugaya, T. (2016). Type-II InP quantum dots in wide-bandgap InGaP host for intermediate-band solar cells. *Applied Physics Letters*, 108(16), 153901.
78. Prado, S. J., Marques, G. E. ve Alcalde, A. M. (2017). Photovoltaic efficiency of intermediate band solar cells based on CdTe/CdMnTe coupled quantum dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(44), 445301.
79. Robichaud, L. ve Krich J. J. (2019, 16-21 Haziran). *InGaN Quantum Dots for Intermediate Band Solar Cells*. 2019 IEEE 46th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), Chicago, IL, USA, 2138–2142.
80. El Aouami, A., Feddi, K., El Haouari, M., El Yadri, M., Ben Afkir, N., Zazoui, M., Feddi, E., Duque C. A. ve Dujardin, F. (2019). Impact of heavy hole levels on the photovoltaic conversion efficiency of In x Ga 1-x N/InN quantum dot intermediate band solar cells. *Superlattices and Microstructures*, 129, 202–211.
81. Hossain, Md. J., Roy, S., Hossain, Md. S. ve Moznuzzaman, Md. (2018, 27-28 Aralık). *Analytical Modeling of AlInN / GaN Quantum Dot Intermediate Band Solar Cell*. 2018 International Conference on Innovation in Engineering and Technology (ICIET), Dhaka, Bangladesh, 1-5.
82. Islam, A., Das, A., Sarkar, N., Matin, M. A. ve Amin N. (2018, 8-9 Şubat). *Numerical Analysis of PbSe/GaAs Quantum Dot Intermediate Band Solar Cell (QDIBSC)*. Int Conf Comput Commun Chem Mater Electron Eng IC4ME2 2018, Rajshahi, Bangladesh, 1-6.
83. Mendes M. J., Hernandez E., Lopez, E., Linares, P. G., Ramiro, I., Artacho, I., Antolin, E., Tobias, I., Marti, A. ve Luque, A. (2013). Self-organized colloidal quantum dots and metal nanoparticles for plasmon-enhanced intermediate-band solar cells. *Nanotechnology*, 24(34), 345402.
84. Tanaka, T., Kusaba, S., Mochinaga, T., Saito, K., Guo, Q., Nishio, M., Yu, K. M. Ve Walukiewicz, W. (2012). Molecular beam epitaxial growth and optical properties of highly mismatched ZnTe 1-xO x alloys. *Applied Physics Letters*, 100(1), 011905.

85. Ahsan, N., Miyashita, N., Monirul Islam, M., Man Yu, K., Walukiewicz, W., ve Okada, Y. (2012). Two-photon excitation in an intermediate band solar cell structure. *Applied Physics Letters*, 100(17), 172111.
86. Estrada E. L. (2016). *Research On Intermediate Band Solar Cells and Development of Capacitive Techniques for Their Characterization*, Doktora Tezi, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, 13-17.
87. Sonoda, S. (2012). Partially filled intermediate band of Cr-doped GaN films. *Applied Physics Letters*, 100(20), 202102.
88. Sheu, J. K., Huang, F. W., Liu, Y. H., Chen, P. C. Yeh, Y. H., Lee, M. L. ve Lai, W. C. (2013). Photoresponses of manganese-doped gallium nitride grown by metalorganic vapor-phase epitaxy. *Applied Physics Letters*, 102(7), 071107.
89. Antolín, E., Martí, A., Linares P.G., Ramiro, I., Hernández, E., Stanley, C. R., Farmer, C. D. ve Luque, A. (2010, 20-25 Haziran). *Advances in quantum dot intermediate band solar cells*. 2010 35th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Honolulu, HI, USA, 65–70.
90. Bimberg, D. (2008). *Semiconductor nanostructures* (Birinci Baskı). Springer Science & Business Media.
91. Antolín, E., Martí, A., Farmer, C. D., Linares, P. G., Hernández, E., Sánchez, A. M., Ben, T., Molina, S. I., Stanley, C. R. ve Luque, A. (2010). Reducing carrier escape in the InAs / GaAs quantum dot intermediate band solar cell. *Journal of Applied Physics*, 108(06), 064513.
92. Pryor, C. (1998). Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations. *Physical Review B*, 57(12), 7190–7195.
93. Stoleru, V. G., Pal, D. ve Towe, E. (2002). Self-assembled (In,Ga)As/GaAs quantum-dot nanostructures: Strain distribution and electronic structure. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 15(3), 131–152.
94. Dahal S.N., Bremner S.P. ve Honsberg C. B. (2008, 11-16 Mayıs) *Band structure calculation for quantum dot solar cells using k.p method*. 2008 33rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference, San Diego, CA, USA, 1-4.
95. Grundmann, M., Stier, O. ve Bimberg, D. (1995). InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure. *Physical Review B*, 52(16), 11969–11981.

96. Popescu, V., Bester, G. ve Zunger, A. (2009). Coexistence and coupling of zero-dimensional, two-dimensional, and continuum resonances in nanostructures. *Physical Review B*, 80(4), 045357.
97. Li, S. S., Xia, J. B., Liu, J. L., Yang, F. H., Niu, Z. C., Feng, S. L. ve Zheng, H. Z. (2001). InAs/GaAs single-electron quantum dot qubit. *Journal of Applied Physics*, 90(12), 6151-6155.
98. Luque, A., Marti, A., Antolin, E. ve Linares, P. G. (2010). Intraband absorption for normal illumination in quantum dot intermediate band solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(12), 2032–2035.
99. Kızıloğlu, V., Navruz, T. S. ve Saritas, M. (2018, 4-6 Temmuz). *Size dependent intermediate band energy levels and absorption of bound states in box shaped quantum dots*. PVCon2018 International Conference on Photovoltaic Science and Technologies, Ankara, Türkiye.
100. Tomić, S., Jones, T. S. ve Harrison, N. M. (2008). Absorption characteristics of a quantum dot array induced intermediate band: Implications for solar cell design. *Applied Physics Letters*, 93(23), 263105.
101. Mellor, A., Luque, A., Tobías, I. ve Marti, A. (2013). A numerical study into the influence of quantum dot size on the sub-bandgap interband photocurrent in intermediate band solar cells. *AIP Advances*, 3(2), 022116.
102. Luque, A., Martí, A., Antolín, E., Linares, P. G., Tobías, I., Ramiro, I., ve Hernandez, E. (2011). New Hamiltonian for a better understanding of the quantum dot intermediate band solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 95(8), 2095–2101.
103. Ley, M., Boudaden, J., Kuznicki, Z. T. (2005). Thermodynamic efficiency of an intermediate band photovoltaic cell with low threshold Auger generation. *Journal of Applied Physics*, 98(4), 044905.
104. Navruz, T. S. ve Saritas, M. (2007, 03-07 Eylül). *The effect of Auger mechanism on the efficiency of the intermediate band solar cell*. 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference 2007, Milan, İtalya, 641-647.
105. Luque, A., Martí, A. ve Cuadra, L. (2003). Impact-ionization-assisted intermediate band solar cell. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 50(2), 447–454.
106. Lin, A. S., Wang, W. ve Phillips, J. D. (2009). Model for intermediate band solar cells incorporating carrier transport and recombination. *Journal of Applied Physics*, 105(06), 064512.

107. Lin, A. S. ve Phillips, J. D. (2009). Drift-diffusion modeling for impurity photovoltaic devices. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 56(12), 3168–3174.
108. Kızıloğlu, V., Navruz, T. S. ve Saritas, M. (2021). Comparison of three IBSCs in terms of photo-filling, capture cross section of carriers, the concentration of IB states and overlapping of absorption coefficients in the wide range of band gaps including GaAs. *Optik*, 225, 165680.
109. Sikder, U. ve Haque, A. (2013). Optimization of idealized quantum dot intermediate band solar cells considering spatial variation of generation rates. *IEEE Access*, 1, 363–370.
110. Luque, A. ve Martí, A. (2010). On the partial filling of the intermediate band in IB solar cells. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 57(6), 1201–1207.
111. Strandberg, R. ve Reenaas, T. W. (2009). Photofilling of intermediate bands. *Journal of Applied Physics*, 105(12), 124512.
112. Strandberg, R. ve Reenaas, T. W. (2011). Optimal filling of the intermediate band in idealized intermediate-band solar cells. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 58(8), 2559–2565.
113. Dai, Z. H., Zhang, L. D., Sun, J. Z., Sun, J. Z., Li, Z. H. ve Huang S. H. (2002). Few-electron filling effect in laterally coupled spherical InAs/GaAs quantum-dot system. *Applied Physics Letters*, 80(14):2577–2579.
114. Lazarenkova, O. L. ve Balandin, A. A. (2014). Miniband formation in a quantum dot crystal. *Journal of Applied Physics*, 89(10), 5509.
115. Popescu, V., Bester, G., Hanna, M. C., Norman, A. G. ve Zunger, A. (2008). Theoretical and experimental examination of the intermediate-band concept for strain-balanced (In,Ga)As/Ga(As,P) quantum dot solar cells. *Physical Review B*, 78(20), 205321.
116. Chuang S. L. (2012). *Physics of Photonic Devices (İkinci Baskı)*. John Wiley and Sons, Hoboken, New Jersey, 113-118.
117. Bardeen, J. (1938). An improved calculation of the energies of metallic Li and Na. *The Journal of Chemical Physics*, 6(7), 367–371.
118. Kane, E. O. (1957). Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(4), 249–261.

119. Luttinger, J. M. ve Kohn, W. (1955). Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields. *Physical Review*, 97(4), 869–883.
120. Bir, G. L. ve Pikus, G. E. (1974). *Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors*. John Wiley and Sons, Hoboken, New Jersey
121. Harrison, P. ve Valavanis, A. (2016). *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*. John Wiley and Sons, Hoboken, New Jersey, 19-77.
122. Luque, A., Mellor, A., Tobías, I., Antolín, E., Linares, P. G., Ramiro, I. ve Martí A. (2013). Virtual-bound, filamentary and layered states in a box-shaped quantum dot of square potential form the exact numerical solution of the effective mass Schrödinger equation. *Physica B: Condensed Matter*, 413, 73–81.
123. Ben Daniel D. J. ve Duke C. B. (1966). Space-charge effects on electron tunneling. *Physical Review*, 152(2), 683–692.
124. Luque, A., Martí, A., Mellor, A., Fuertes Marrón, D., Tobías, I. ve Antolín, E. (2013). Absorption coefficient for the intraband transitions in quantum dot materials. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 21(4), 658–667.
125. Luque, A. ve Mellor, A. (2015). *Photon Absorption Models in Nanostructured Semiconductor Solar Cells and Devices*, Springer.
126. Luque, A., Mellor, A., Antolín, E., Linares, P. G., Ramiro, I., Tobías, I. ve Martí, A. (2012). Symmetry considerations in the empirical k.p Hamiltonian for the study of intermediate band solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 103, 171–183.
127. Mellor, A., Luque, A., Tobías, I. ve Martí, A. (2014). Realistic detailed balance study of the quantum efficiency of quantum dot solar cells. *Advanced Functional Materials*, 24(3), 339–345.
128. Blokhin, S. A., Sakharov, A. V., Nadtochy, A. M., Pauysov, A. S., Maximov, M. V., Ledentsov, N. N., Kovsh, A. R., Mikhlin, S. S., Lantratov, V. M., Mintairov, S. A., Kaluzhniy, N. A. ve Shvarts, M. Z. (2009). AlGaAs/GaAs photovoltaic cells with an array of InGaAs QDs. *Physics of Semiconductor Devices*, 43, 514–518.
129. Tanabe, K., Guimard, D., Bordel, D. ve Arakawa, Y. (2012). High-efficiency InAs/GaAs quantum dot solar cells by metalorganic chemical vapor deposition. *Applied Physics Letters*, 100(19), 98–101.
130. Mellor, A., Luque, A., Tobías, I. ve Martí, A. (2013). A numerical study into the

- influence of quantum dot size on the sub-bandgap interband photocurrent in intermediate band solar cells. *AIP Advances*, 3(2), 022116.
131. Imran, A., Jiang, J., Eric, D. ve Yousaf, M. (2017, 28-30 Ekim). *Size and shape dependent optical properties of InAs quantum dots*. 2017 International Conference on Optical Instruments and Technology: Micro/Nano Photonics: Materials and Devices, Pekin, Çin, 1062209.
 132. Afkir, N. B., Meziane, J. ve Zazoui, M. (2016, 5-10 Haziran). *Numerical modeling of the intermediate band and transition energy in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum dots solar cell with the finite difference approach*. 2016 IEEE 43rd Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), Portland, OR, USA, 2084–2086
 133. Saïdi, I., Sellami, K., Yahyaoui, M., Testelin, C. ve Boujdaria, K. (2011). Electron and hole energy levels in InAs/GaAs quantum dots: Size and magnetic field effects. *Journal of Applied Physics*, 109(03), 033703.
 134. Mellor, A., Luque, A., Tobías, I. ve Martí, A. (2012). The influence of quantum dot size on the sub-bandgap intraband photocurrent in intermediate band solar cells. *Applied Physics Letters*, 101(13), 133909.
 135. Luque, A., Panchak, A., Ramiro, I., Garcia-Linares, P., Mellor, A., Antolín, E., Vlasov, A., Andreev, V. ve Martí, A. (2015). Quantum Dot Parameters Determination from Quantum-Efficiency Measurements. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 5(4), 1074–1078.
 136. Burt, M. G. (1993). The evaluation of the matrix element for interband optical transitions in quantum wells using envelope functions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 5(24), 4091–4098.
 137. Khordad, R. (2011). Effect of position-dependent effective mass on linear and nonlinear optical properties of a cubic quantum dot. *Physica B: Condensed Matter*, 406(20), 3911–3916.
 138. Kabi, S. ve Perera, A. G. U. (2015). Effect of quantum dot size and size distribution on the intersublevel transitions and absorption coefficients of III-V semiconductor quantum dot. *Journal of Applied Physics*, 117(12), 124303.
 139. Sze S. M. ve Ng K. N. (2006). *Physics of Semiconductor Devices* (Üçüncü Baskı). John Wiley & Sons, Inc. Hoboken, New Jersey, 790.
 140. Vurgaftman, I., Meyer, J. R. ve Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 89(11), 5815–5875.

141. Mal, I., Panda, D. P., Tongbram, B., Samajdar, D. P. ve Chakrabarti, S. (2018). Analytical modeling of temperature and power dependent photoluminescence (PL) spectra of InAs / GaAs quantum dots. *Journal of Applied Physics*, 124(14), 145701.
142. Cappelluti, F., Kim, D., van Eerden, M., Cédola, A. P., Aho, T., Bissels, G., Elsehrawy, F., Wu, J., Liu, H., Mulder, P., Bauhuis, G., Schermer, J., Niemi, T. ve Guina, M. (2018). Light-trapping enhanced thin-film III-V quantum dot solar cells fabricated by epitaxial lift-off. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 181, 83–92.
143. Akahane, K., Yamamoto, N. ve Kawanishi, T. (2011). Fabrication of ultra-high-density InAs quantum dots using the strain-compensation technique. *Physica status solidi a*, 208(2), 425–428.
144. Oikawa, S., Makaino, A., Sogabe, T. ve Yamaguchi, K. (2017). Growth Process and Photoluminescence Properties of In-Plane Ultrahigh-Density InAs Quantum Dots on InAsSb/GaAs(001). *Physica status solidi b*, 255(4):1700307.
145. Sugaya, T., Numakami, O., Oshima, R., Furue, S., Komaki, H., Amano, T., Matsubara, K., Okano, Y. ve Niki, S. (2012). Ultra-high stacks of InGaAs/GaAs quantum dots for high efficiency solar cells. *Energy Environ. Sci.* 5(3), 6233-6237.
146. Lin, A. ve Phillips, J. (2014). Resolving spectral overlap issue of intermediate band solar cells using non-uniform sub-bandgap state filling. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 22(10), 1062–1069.
147. Krishna, A. ve Krich, J. J. (2016). Increasing efficiency in intermediate band solar cells with overlapping absorptions. *Journal of Optics*, 18, 074010.





GAZİ GELECEKTİR..