

**T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**YARI İLETKEN HETERO YAPILARIN OPTİK VE MANYETİK
ÖZELLİKLERİNİN DIŞ ETKİLER ALTINDA İNCELENMESİ**

**Kübra BAYRAK
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FİZİK ANABİLİM DALI
DOKTORA TEZİ**

**ŞUBAT 2025
ANTALYA**

**T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**YARI İLETKEN HETERO YAPILARIN OPTİK VE MANYETİK
ÖZELLİKLERİNİN DIŞ ETKİLER ALTINDA İNCELENMESİ**

Kübra BAYRAK

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

**ŞUBAT 2025
ANTALYA**

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YARI İLETKEN HETERO YAPILARIN OPTİK VE MANYETİK
ÖZELLİKLERİNİN DIŞ ETKİLER ALTINDA İNCELENMESİ

Kübra BAYRAK

FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

Bu tez 15/01/2025 tarihinde jüri tarafından oy birliği ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Orhan BAYRAK (Danışman)

Dr. Öğr. Üyesi Deniz KAYA

Doç. Dr. Yılmaz AKSU

Prof. Dr. Mustafa Kemal BAHAR

Prof. Dr. Muharrem KIRAK

ÖZET

YARI İLETKEN HETERO YAPILARIN OPTİK VE MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN DIŞ ETKİLER ALTINDA İNCELENMESİ

Kübra BAYRAK

Doktora Tezi, Fizik Anabilim Dalı
Danışman: Prof. Dr. Orhan BAYRAK

Şubat 2025, 104 sayfa

Bu tezde, bir elektronun yarı iletken kristal yapıdaki davranışı, örgüdeki atomlar ve elektronlarla olan etkileşimlerini temsil eden bir ortalama alan potansiyeli modeli ile incelenmektedir. Bir elektronun diğer bir elektronla olan etkileşimi klasik olarak Coulomb potansiyeli ile modellenirse de çok parçacık etkileşimlerinde deforme Coulomb kullanılmaktadır. Bu çalışma kapsamında sınırlayıcı potansiyel olarak deforme Coulomb formunda olan ters karekök eksponansiyel potansiyel kullanılmıştır. Bu potansiyel, fiziksel etkileşimlerin doğasına uygun olarak yavaş değişen sürekli bir yapı sunmaktadır. Ayrıca ters karekök eksponansiyel potansiyelin, açısal momentum kuantum sayısının sıfır olduğu durumda analitik çözüm sunması, yapılan nümerik hesaplamaların doğruluğunu değerlendirmek için bir referans sağlamaktadır.

Bu tez çalışmasının ilk kısmında, ters karekök eksponansiyel potansiyel ile sınırlandırılan bir GaAs kuantum noktanın bağlı durum enerji özdeğerleri, Schrödinger dalga denkleminin Runge-Kutta yöntemiyle nümerik olarak çözülmesi yoluyla hesaplanmıştır. Hesaplamalarda elektronun etkin kütlesi sabit alınmayıp, $E-k$ bant diyagramına dayalı olarak fiziksel gerekçeler doğrultusunda, konuma bağlı etkin kütle (PDEM) olarak ele alınmıştır. Etkin kütlenin konuma bağlı kesin formu bilinmediğinden, formları farklı iki sürekli model oluşturulmuş ve bu modellerin optik gözlenirler üzerindeki etkileri incelenmiştir. Kütle modellerinin geometrileri, gözlenirler üzerinde büyük bir öneme sahip olduğu gözlenmiştir. Konuma bağlı etkin kütle modellerindeki parametreler sabit kütleyle yakınsayacak şekilde ayarlandığında, optik gözlenirlerin piklerinin de sabit kütle ile hesaplanan değerlere yaklaştığı tespit edilmiştir.

Sıcaklık ve hidrostatik basınç gibi dış faktörler, yarı iletkenlerin bant yapıları üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Çalışmanın ikinci kısmında; elektronun etkin kütlesi, potansiyel derinliği ve iletkenlik bandındaki etkin elektron yoğunluğu, sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlı olarak modellenmiştir. Elektrik ve manyetik alan etkisindeki GaAs yarı iletkeninde bir elektronun davranışı, Schrödinger dalga denkleminin Numerov yöntemiyle nümerik olarak çözülmesi yoluyla analiz edilmiştir. Sıcaklık, hidrostatik basınç, potansiyel

parametresi, elektrik ve manyetik alan gibi faktörlerin optik gözlenirler üzerindeki etkisi kapsamlı bir şekilde tartışılmıştır. Literatürde, potansiyel derinliği ve iletkenlik bandındaki etkin elektron yoğunluğunun sıcaklık ve hidrostatik basınca bağıllığı dikkate alınarak incelenmemiş olup, bu bağımlılık ilk kez bu çalışmada ele alınmıştır.

Bir kuantum noktasının termodinamik ve manyetik gözlenirleri incelenirken en kritik parametrelerden birisi de sıcaklıktır. Çünkü tüm termodinamik ve manyetik gözlenirler, bağlı durum enerjilerinin sıcaklık bağımlılığı kullanılarak, bölüşüm fonksiyonları üzerinden hesaplanmaktadır. Literatürde, yalnızca analitik çözümü bulunan harmonik osilatör ve dikdörtgen kuyu potansiyeli için enerji özdeğerleri, sıcaklığın fonksiyonu olarak alınarak gözlenirler elde edilmiştir. Çalışmanın üçüncü kısmında ise ters karekök eksponansiyel potansiyel sınırlamasında bulunan bir GaAs kuantum noktasının, manyetik alan etkisinde Schrödinger dalga denklemi, Sonlu Farklar metodu ile çözülmüştür. Bölüşüm fonksiyonları tüm girilebilir durumlar üzerinden hesaplanarak mıknatıslanma ve manyetik duygunluk, etkin potansiyel geometrisi ile de ilişkilendirilerek sıcaklık ve manyetik alan altında incelenmiştir.

ANAHTAR KELİMELEER: Kuantum nokta, Optik gözlenirler, Termodinamik ve Manyetik gözlenirler, Ters karekök eksponansiyel potansiyel

JÜRİ: Prof.Dr. Orhan BAYRAK

Dr. Öğr. Üyesi Deniz KAYA

Doç. Dr. Yılmaz AKSU

Prof. Dr. Mustafa Kemal BAHAR

Prof. Dr. Muharrem KIRAK

ABSTRACT

INVESTIGATION OF THE OPTICAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURES UNDER EXTERNAL FACTORS

Kübra BAYRAK

PhD Thesis in PHYSICS

Supervisor: Prof. Dr. Orhan BAYRAK

February 2025, 104 pages

In this thesis, the behavior of an electron in a semiconductor crystal structure is investigated using a potential model that describes its interactions with the atoms and electrons in the lattice through an average field potential. While the interaction between an electron and another electron is typically modeled using the Coulomb potential, in many-body interactions, the deformed Coulomb potential is employed. In this study, the deformed Coulomb potential in the form of an inverse square-root exponential potential is used as the confining potential. This potential provides a smoothly varying continuous structure that aligns with the nature of physical interactions. Furthermore, the inverse square-root exponential potential offers an analytical solution when the angular momentum quantum number is zero, serving as a reference to evaluate the accuracy of the numerical calculations performed.

In the first part of this thesis, the bound state energy eigenvalues of a GaAs quantum dot with an inverse square-root exponential potential were calculated by numerically solving the Schrödinger wave equation using the Runge-Kutta method. In the calculations, the electron's effective mass was not taken as constant but was treated as a position-dependent effective mass (PDEM) based on the E - k band diagram, justified by physical considerations. Since the exact position-dependent form of the effective mass is unknown, two continuous models with different forms were constructed, and their effects on optical observables were examined. The geometries of the mass models have been observed to play a significant role in the observables. It was found that when the parameters of the position-dependent effective mass models were adjusted to approach the constant mass, the peaks of the optical observables shifted toward the values calculated for the constant mass.

External factors such as temperature and hydrostatic pressure have significant effects on the band structures of semiconductors. In the second part of this study, the electron's effective mass, potential depth, and effective electron density in the conduction band were modeled as functions of temperature and hydrostatic pressure. The behavior of an

electron in a GaAs semiconductor under the influence of electric and magnetic fields was analyzed by numerically solving the Schrödinger wave equation using the Numerov method. The effects of factors such as temperature, hydrostatic pressure, electric and magnetic fields, and potential parameters on optical observables were comprehensively discussed. In the literature, the dependence of potential depth and conduction band effective electron density on temperature and hydrostatic pressure has not been considered, and this dependence has been examined for the first time in this study.

Temperature is one of the most critical parameters when examining the thermodynamic and magnetic observables of a quantum dot. This is because all thermodynamic and magnetic observables are calculated via partition functions, which are derived based on the temperature dependence of bound state energies. In the literature, analytical solutions are available only for the harmonic oscillator and rectangular well potentials, where energy eigenvalues are treated as functions of temperature to determine thermodynamic and magnetic observables. In the third part of this study, the Schrödinger wave equation for a GaAs quantum dot confined by an inverse square root exponential potential under the influence of a magnetic field was solved using the Finite Difference method. Partition functions were calculated over all bound states, and magnetization and magnetic susceptibility were analyzed as functions of temperature and magnetic field, with a focus on their relationship to the effective potential geometry.

KEYWORDS: Inverse square root exponential potential, Optical observables, Quantum dot, Thermodynamic and Magnetic observables

COMMITTEE: Prof. Dr. Orhan BAYRAK

Asst. Prof. Dr. Deniz KAYA

Assoc. Prof. Dr. Yılmaz AKSU

Prof. Dr. Mustafa Kemal BAHAR

Prof. Dr. Muharrem KIRAK

ÖNSÖZ

“Âyinesi iştir kişinin lâfa bakılmaz,
Şahsın görünür rütbe-i aklı eserinde.”

Ziya Paşa’nın yukarıdaki mısralarda ifade ettiği gibi kişinin ortaya koyduğu eser, azmini ve alandaki yetkinliğini yansıtmaktadır. Bu düşünceyle hareket ederek doktora sürecim boyunca ulaştığım sonuçları, akademi ve bilime katkıda bulunması amacıyla bu tezde bir araya getirdim. Çalışma sonuçlarımın, literatürde kıymetli bir yeri olacağına olan inancım tamdır.

Bilginin paylaşıldıkça değer kazandığına olan inancımla, çalışma sürecinde kendi yazmış olduğum kodların bir kısmını paylaşmayı uygun görmekteyim. Hesaplamalarımı Mathematica ve Python programlama dillerini kullanarak gerçekleştirdim. Kodların tümüne ulaşım sağlamak isteyen olursa benimle mail yoluyla iletişime geçebilir. Bu bilgileri sizlerle paylaşmaktan mutluluk duyacağımı belirtmek isterim.

Tez sürecinde benden hiçbir yardımını esirgemeyen, bilgi ve tecrübeleriyle bana destek olan hocalarım Prof. Dr. Orhan BAYRAK ve Dr. Öğr. Üyesi Deniz KAYA’ya teşekkür ederim. Psikolojik desteği ve dostluğu ile her zaman yanımda olan sevgili dostum Öğr. Gör. Dr. Reyhan ÖZAYDIN ÖZKARA ve ailesine minnettarım. Tez savunma sürecimde yanımda olan ve bana büyük destek veren arkadaşım Dr. Gizem Büşra GÖK’e teşekkür ederim. Zorlu doktora sürecim boyunca benden hiçbir desteğini esirgemeyen canım ailem, iyi ki varsınız.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	iii
ÖNSÖZ	v
AKADEMİK BEYAN	viii
SİMGELER VE KISALTMALAR	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	xi
ÇİZELGELER DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK TARAMASI	4
2.1. Yarı İletken Yapılar	4
2.2. E-k Bant Diyagramı	5
2.3. Kuantum Noktaların Enerji Seviyeleri ve Durum Yoğunluğu	6
2.4. Yarı İletken İçinde Elektronun Kütlesi	8
2.5. Elektronların Periyodik Potansiyeldeki Davranışları ve Kronig-Penney Modeli	9
2.6. Kuantum Noktaların Üretim Yöntemleri ve Teknolojik Uygulamalar	14
2.7. Lineer ve Lineer Olmayan Optik	17
2.7.1. İkinci ve üçüncü mertebe optik süreçler	18
2.8. Yoğunluk Matrisi	18
2.8.1. Yoğunluk matrisinin pertürbasyon teorisi ile çözümü	20
2.8.2. Lineer ve lineer olmayan optik alınganlıklar	21
2.9. Lineer ve Lineer Olmayan Soğurma Katsayısı ve Kırılma İndisi	23
2.10. Optik Gözlenirlerin Keşfi, Ölçümü ve İlgili Çalışmalar	25
2.11. Termodinamik Gözlenirler	28
2.11.1. İç enerji	29
2.11.2. Helmholtz serbest enerji	29
2.11.3. Isı kapasitesi	30
2.11.4. Entropi	33
2.12. Kuantum Yapıların Termodinamik Gözlenirleri: Literatür İncelemesi	34
2.13. Manyetik Gözlenirler	35
2.13.1. Mıknatıslanma ve manyetik duygunluk	35
2.14. Kuantum Yapıların Manyetik Gözlenirleri: Literatür İncelemesi	36
3. MATERYAL VE METOT	37
3.1. Runge-Kutta (RK) Metodu	37
3.2. Numerov Metodu	38
3.3. Sonlu Farklar Metodu	38
3.4. Kök Bulma Metodu	39
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	40
4.1. Bir Kuantum Noktanın Konuma Bağlı Etkin Kütle İle İncelenmesi	40

4.1.1.	Konuma bağılı etkin kütle ve potansiyel profili kapsamında Schrödinger dalga denklemi	41
4.1.2.	Schrödinger dalga denkleminin RK metodu ile nümerik çözümü	44
4.1.3.	Konuma bağılı etkin kütlelerin optik gözlenirler üzerine etkisi	47
4.2.	Elektrik ve Manyetik Alan Altında Bir Kuantum Noktanın Sıcaklık ve Hidrostatik Basınç Etkisinde İncelenmesi	56
4.2.1.	Sıcaklık ve hidrostatik basınç bağımlı kütle ve potansiyel profili kapsamında Schrödinger dalga denklemi	56
4.2.2.	Schrödinger dalga denkleminin Numerov metodu ile nümerik çözümü	59
4.2.3.	Sıcaklık, hidrostatik basınç, elektrik, manyetik alan ve potansiyel parametresinin gözlenirler üzerine etkisi	61
4.3.	Manyetik Alan Altında Bir Kuantum Noktanın Termodinamik ve Manyetik Gözlenirlerinin İncelenmesi	71
4.3.1.	Sıcaklık ve hidrostatik basınç bağımlı potansiyel profili kapsamında Schrödinger dalga denklemi	71
4.3.2.	Termodinamik ve manyetik gözlenirler	73
4.3.3.	Sıcaklık ve manyetik alanın termodinamik ve manyetik gözlenirler üzerine etkisi	75
5.	SONUÇLAR	85
6.	KAYNAKLAR	88
7.	EKLER	100
	ÖZGEÇMİŞ	

AKADEMİK BEYAN

Doktora Tezi olarak sunduğum “Yarı İletken Hetero Yapıların Optik Ve Manyetik Özelliklerinin Dış Etkiler Altında İncelenmesi” adlı bu çalışmanın, akademik kurallar ve etik değerlere uygun olarak bulunduğunu belirtir, bu tez çalışmasında bana ait olmayan tüm bilgilerin kaynağını gösterdiğimi beyan ederim.

15/01/2025

Kübra BAYRAK



SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler :

$\mathbf{A}$	: Vektör potansiyeli
$\mathbf{B}$	: Manyetik alan vektörü
$\mathcal{E}$	: Elektrik alanın büyüklüğü
e	: Elektron yükü
k	: Dalga sayısı
g^*	: Landé-g faktörü
k_B	: Boltzmann sabiti
$\mathbf{p}$	: Momentum vektörü
∇	: Nabla operatörü
$\hbar$	: İndirgenmiş Planck sabiti
α	: Soğurma katsayısı
C_v	: Sabit hacimdeki ısı kapasitesi
P	: Basınç
T	: Sıcaklık
Δn	: Kırılma indisindeki değişim
Ψ	: Dalga fonksiyonu
ϵ_0	: Boşluğun dielektrik geçirgenliği
μ	: Boşluğun manyetik geçirgenliği
ρ_c	: İletkenlik bandında elektron yük yoğunluğu
S	: Entropi
M	: Mıknatıslanma
χ	: Manyetik duygunluk
ω_c	: Siklotron frekansı
ω_E	: Einstein frekansı
Θ_E	: Einstein sıcaklığı
ω_D	: Debye frekansı
Θ_D	: Debye sıcaklığı
n_r	: Dalga fonksiyonunun radyal düğüm sayısı
m_l	: Yörünge manyetik kuantum sayısı
m_s	: Spin manyetik kuantum sayısı
Z	: Bölüşüm fonksiyonu
W	: Sistemin yaptığı iş
U	: İç enerji
F	: Helmholtz Serbest Enerji

Kısaltmalar :

FD	: Sonlu Farklar (Finite Difference)
LED	: Işık yayan diyot (Light Emitting Diode)
MBE	: Moleküler ışın epitaksisi (Molecular Beam Epitaxy)
MEM	: Modifiye edilmiş eksponansiyel kütle (Modified Exponential Mass)
MOCVD	: Metalorganik kimyasal buhar depozisyonu (Metalorganic Chemical Vapour Deposition)
OR	: Optiksel Doğrultma (Optical Rectification)
QD	: Kuantum nokta (Quantum Dot)
RK	: Runge-Kutta
SHG	: İkinci Harmonik Üretim (Second Harmonic Generation)
SI	: Uluslararası Birim Sistemi (Système International d'Unités)
THG	: Üçüncü Harmonik Üretim (Third Harmonic Generation)
WSM	: Woods–Saxon kütle (Woods-Saxon Mass)

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1	İletken, yarı iletken ve yalıtkanların enerji bant diyagramları	4
Şekil 2.2	GaAs yarı iletkeni için $E - k$ bant diyagramı (Levinshtein ve Rumyantsev 1996)	6
Şekil 2.3	(Soldan sağa doğru) Bulk yapı, kuantum kuyu, kuantum tel ve kuantum noktalar ve $D(E)$ durum yoğunlukları (Alivisatos 1996) . . .	7
Şekil 2.4	Kronig-Penney potansiyelinin geometrik yapısı (Kronig ve Penney 1931)	10
Şekil 2.5	$P = 3\pi/2$ alındığında, Ka 'nın fonksiyonu olarak $(P/Ka)\sin(Ka) + \cos(Ka)$ değişimi (Dikici 2012)	12
Şekil 2.6	Serbest elektronu temsil etmek üzere kesikli çizgilerle gösterilen düzgün parabol ve Kronig-Penney potansiyeli etkisinde olan bir elektronun enerji bantları ile Brillouin bölgeleri (Aygün ve Zengin 1998)	13
Şekil 2.7	MBE yöntemi şeması (Cho 1983)	15
Şekil 2.8	GaAlAs üretiminde MOCVD yöntemi şeması (Karabulut 2008) . .	16
Şekil 2.9	Elmasın molar ısı kapasitesine ilişkin deneysel verilerin (+ işaretli veri noktaları), Einstein modeli (sürekli çizgi) ile karşılaştırılması ($\Theta_E = 1325\text{ K}$) (Mandl 1991)	31
Şekil 2.10	Debye ısı kapasitesi modeli verilerinin (sürekli çizgi); alüminyum, bakır ve kurşunun deneysel verileriyle karşılaştırılması (Mandl 1991)	33
Şekil 4.1	a) Potansiyel parametreleri değişiminde etkin potansiyel profili ($\sigma = 25\text{ nm}$); b) $\mu_1(r)$ etkin kütleinin λ parametresine göre uzaysal değişimi; c) $\mu_2(r)$ etkin kütleinin a parametresine göre uzaysal değişimi ($R = 6\text{ nm}$)	43
Şekil 4.2	a) V_0 ($\lambda = 1\text{ nm}^{-1}$, $\beta = 1$ ve $\sigma = 25\text{ nm}$); b) σ ($V_0 = 0.05\text{ eV}$, $\lambda = 1\text{ nm}^{-1}$ ve $\beta = 1$); c) β ($V_0 = 0.25\text{ eV}$, $\sigma = 25\text{ nm}$ ve $\lambda = 1\text{ nm}^{-1}$) potansiyel parametreleri altında enerji özdeğerleri değişimi	49
Şekil 4.3	a) $\mu_1(r)$ kütleinde bulunan $1/\lambda$ parametresinin değişiminde $n_r = 0$, $\ell = 0$ ve $n_r = 1$, $\ell = 0$ kuantum durumlarında enerji özdeğerleri; b) $\mu_2(r)$ kütleinde bulunan a 'nın değişiminde $n_r = 0$, $\ell = 0$ taban durumu için enerji özdeğerleri	50
Şekil 4.4	$1s - 2p$ durumları arasındaki geçiş için a) V_0 ($\sigma = 30\text{ nm}$, $\beta = 1$); b) σ ($V_0 = 200\text{ meV}$, $\beta = 1$); c) β ($V_0 = 500\text{ meV}$, $\sigma = 12\text{ nm}$) parametrelerine göre dipol matris elemanındaki değişim ($\lambda = 1\text{ nm}^{-1}$)	51

Şekil 4.5	Potansiyel parametrelerinin, gelen foton enerjisine karşı a) lineer $\alpha^{(1)}(\omega)$; b) 3. mertebe lineer olmayan $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ ve c) toplam soğurma katsayıları $\alpha(\omega, I)$ üzerindeki etkisi (E_{21} , $1s$ ve $2p$ kuantum durumları arasındaki enerji farkıdır)	53
Şekil 4.6	Kütle parametrelerinin a) toplam soğurma katsayısına; b) kırılma indisindeki toplam değişime etkisi ($V_0 = 0.25 \text{ eV}$, $\sigma = 25 \text{ nm}$, $\beta = 1$ ve $R = 6 \text{ nm}$). E_{21} , $1s$ ve $2p$ kuantum durumları arasındaki enerji farkıdır	55
Şekil 4.7	a) Sıcaklık; b) hidrostatik basınç; c) homojen manyetik alan; d) lineer elektrik alan ve e) σ parametresi değişiminde $m = 1$ için etkin potansiyel profili. f) Sıcaklık ve hidrostatik basıncın bir fonksiyonu olarak etkin kütledeki değişim	62
Şekil 4.8	a) Sıcaklık ve b) hidrostatik basınç etkileri altında iletim bandındaki etkin elektron yoğunluğunun değişimi. $\rho_e(T, P)$ 'nin $n_r = 1$, $m = 0$ ve $n_r = 0$, $m = 0$ durumları arasındaki optik geçişler sırasındaki c) toplam soğurma katsayısı ve d) toplam kırılma indisi değişimi üzerine etkisi	64
Şekil 4.9	Sıcaklık değişiminde a) farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; b) $n_r = 0$, $m = 0$ ve $n_r = 1$, $m = 0$ durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; c) foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim; d) foton enerjisine göre kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $\sigma = 10 \text{ nm}$, $P = 1 \text{ bar}$, $B = 2 \text{ T}$ ve $\mathcal{E} = 0 \text{ mV/nm}$	65
Şekil 4.10	Hidrostatik basınç değişiminde a) farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; b) $n_r = 0$, $m = 0$ ve $n_r = 1$, $m = 0$ kuantum durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; c) foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim ve d) foton enerjisine göre kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $\sigma = 10 \text{ nm}$, $T = 298 \text{ K}$, $B = 2 \text{ T}$ ve $\mathcal{E} = 0 \text{ mV/nm}$	67
Şekil 4.11	Homojen bir manyetik alan büyüklüğünün değişiminde a) farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; b) $n_r = 0$, $m = 0$ ve $n_r = 1$, $m = 0$ durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; c) foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim ve d) foton enerjisine göre kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $\sigma = 10 \text{ nm}$, $T = 298 \text{ K}$, $P = 1 \text{ bar}$ ve $\mathcal{E} = 0 \text{ mV/nm}$	68

Şekil 4.12	Lineer bir elektrik alan büyüklüğünün değişiminde a) farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; b) $n_r = 0, m = 0$ ve $n_r = 1, m = 0$ durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; c) foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim ve d) foton enerjisine göre bağlı kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $\sigma = 10 \text{ nm}, T = 298 \text{ K}, P = 1 \text{ bar}$ ve $B = 2 \text{ T}$	69
Şekil 4.13	Sınırlama potansiyelindeki σ parametresinin değişiminde a) farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; b) $n_r = 0, m = 0$ ve $n_r = 1, m = 0$ durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; c) foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim ve d) foton enerjisine göre kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $T = 298 \text{ K}, P = 1 \text{ bar}, B = 2 \text{ T}$ ve $\mathcal{E} = 0 \text{ mV/nm}$	70
Şekil 4.14	a) Sıcaklık; b) manyetik alan; c) σ parametresi; d) m_l manyetik kuantum sayısındaki değişim altında potansiyel profili	76
Şekil 4.15	Oniki farklı kuantum durumu için bağlı durum enerji özdeğerinin a) sıcaklık; b) manyetik alan altında değişimi ($m_s = 1/2$)	77
Şekil 4.16	Sıcaklık değişiminde a) bölüşüm fonksiyonu Z ; b) bölüşüm fonksiyonunun doğal logaritması $\ln Z$ 'nin profili. Dış manyetik alan değişiminde c) Z ; d) bölüşüm fonksiyonunun doğal logaritması $\ln Z$ 'nin profili	79
Şekil 4.17	Sıcaklık etkisinde a) iç enerji; b) Helmholtz serbest enerji; c) ısı kapasitesi; d) entropinin değişimi ($\sigma = 8 \text{ nm}, P = 1 \text{ kbar}$)	82
Şekil 4.18	Manyetik alanın a) mıknatıslanma; b) manyetik duygunluk üzerine etkisi. Sıcaklık etkisinde c) mıknatıslanma; d) manyetik duygunluktaki değişim ($\sigma = 8 \text{ nm}, P = 1 \text{ kbar}$)	84

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1	Analitik (Ishkhanyan 2018) yöntemle $\ell = 0$ için elde edilmiş olan enerji özdeğerlerinin Runge-Kutta (RK) yöntemleriyle elde edilen enerji özdeğerleriyle $\hbar = 1$, $m = 1$, $\sigma = 2$ ve $\beta = 1$ parametreleri kullanılarak, n_r düğüm sayısı cinsinden karşılaştırılması	45
Çizelge 4.2	Kütle parametreleri $\lambda = 1 \text{ nm}^{-1}$ ve $a = 5 \text{ nm}$ alınarak beş farklı enerji seviyesi için RK ve FD metotla hesaplanan enerji özdeğerlerinin karşılaştırılması ($V_0 = 0.5 \text{ eV}$, $\sigma = 10 \text{ nm}$, $\beta = 1 \text{ nm}$ ve $R = 6 \text{ nm}$)	46
Çizelge 4.3	Başlangıç ve son kuantum durumları arasında farklı kütle parametreleri (λ , a ve $R = 6 \text{ nm}$) için enerji özdeğerlerinin, rezonans enerjilerinin ve dipol matris elemanlarının değişimi. Potansiyel parametreleri: $V_0 = 0.25 \text{ eV}$, $\sigma = 25 \text{ nm}$ ve $\beta = 1$	47
Çizelge 4.4	Farklı (n_r, m) kuantum durumlarında hesaplanan enerji özdeğerleri için Numerov ve FD yöntemlerinin karşılaştırılması. Hesaplarda alınan sabit parametreler: $T = 298 \text{ K}$, $P = 1 \text{ bar}$, $B = 2 \text{ T}$, $\mathcal{E} = 0 \text{ mV/nm}$ ve $\sigma = 10 \text{ nm}$	60
Çizelge 4.5	T , P , B , $\mathcal{E}$ ve σ parametrelerinin değişen değerleri için, farklı kuantum durumlarının enerji özdeğerleri	60

1. GİRİŞ

Kuantum noktalar (Quantum Dots, QDs), kesikli enerji seviyelerine sahip nanometre boyutlarında yarı iletken yapılardır. Bu yapılar atom benzeri kesikli enerji seviyelerine sahip olduklarından yapay atomlar olarak da adlandırılır (Kastner 1993). Periyodik tablodaki III-V ve II-VI grubu elementlerden oluşan bileşikler, kuantum nokta üretiminde kullanılmaktadır. Bu bileşiklere örnek olarak GaN, InAs, ZnS, CdSe ve GaAs verilebilir. Kuantum noktalar günümüzde birkaç fiziksel ve kimyasal teknik kullanılarak laboratuvar ortamında çeşitli boyut ve şekillerde üretilebilmektedir. Boyutlarına bağlı olarak, kuantum noktalar farklı dalga boylarında soğurma ve emisyon gösterebilirler. Bu özellikleri, optoelektronik cihazlar, sensörler ve devre elemanlarının tasarımı gibi geniş bir teknolojik uygulama yelpazesi sunmaktadır (Bhattacharya vd. 2004; Ameta vd. 2022).

Kuantum boyut etkileri, 2023 yılında bu alanda yaptığı çalışmalarla Nobel Kimya ödülünü alan Aleksey Ekimov ve ekibi tarafından 1981 yılında renkli cam oluşumunu inceleyen gözlenmiştir (Ekimov vd. 1985). Üretim yöntemlerinin etkin kullanımı sayesinde istenilen optik, termodinamik ve manyetik özelliklere sahip kuantum noktalar kolaylıkla tasarlanabilmektedir (Ameta vd. 2022; Michler 2003). Son yıllarda, yarı iletken nano-yapıların teknolojik uygulamalardaki potansiyeli, hem teorik hem de deneysel çalışmalar sayesinde önemli ölçüde gelişmiştir. Düşük boyutlu yarı iletken malzemelerin bant yapıları hakkında yapılan çalışmalar sayesinde yüksek performanslı cihazların tasarımı mümkün olmaktadır. Katkılama ve dış etkiler (sıcaklık, basınç, manyetik ve elektrik alanlar gibi), düşük boyutlu yarı iletkenlerin optik, elektronik, manyetik ve termodinamik özelliklerini değiştirdiğinden, günümüzde teorik ve deneysel çalışmalar bu etkilerin daha derinlemesine incelenmesine odaklanmaktadır (Chakraborty 1999).

Sıcaklık ve basınç gibi dış etkiler, düşük boyutlu yarı iletken kuantum noktalarının bant aralıklarını doğrudan etkilemektedir. Bu etkiler, elektronik enerji, lineer ve lineer olmayan soğurma katsayısı, ısı kapasitesi ve mıknatıslanma gibi fiziksel gözlenirlerin değişimine yol açar. Bu değişimleri incelemek için yarı iletkenlerdeki elektronun kütlesi, sıcaklık ve basınca bağlı bir fonksiyon olarak ele alınmaktadır (Adachi 1985; Ehrenreich 1961). Sıcaklık artışı, kristal yapıdaki titreşimleri artırarak bant aralığında daralma oluşturur (Varshni 1967). Basınç artışında da bant aralığında değişim olmaktadır. Örneğin, GaAs yarı iletkeninde basınç artışında bant aralığı artmaktadır (Pankove 2012). Yarı iletken kuantum yapıların dış etkilere karşı verdiği tepkiler, teknolojik uygulamalardaki performanslarıyla ilişkilendirilir.

Elektrik ve manyetik alanlar, sıcaklık ve basınç gibi fiziksel parametreler, yarı iletken kuantum noktalarının optik, manyetik ve termodinamik özellikleri üzerinde belirgin etkiler yaratır. Yarı iletken kristalde bir elektron üzerine etki eden kuvvet değiştiğinde, buna bağlı olarak sınırlama potansiyeli de değişir ve bu durum enerji seviyelerinde kayma-

lara neden olur. Kuantum noktalarına manyetik alan uygulandığında, elektronların spinleri üzerinde Zeeman etkisi olarak bilinen bir ayrışma meydana gelir ve bu durum, enerji seviyelerinin yarılmasına yol açar (Zeeman 1897). Spin etkisi; transistörler, lazerler ve optik sensörler gibi uygulamaların tasarımında kritik bir rol oynar. Ayrıca, emisyon dalga boyunun amaca uygun şekilde ayarlanabilmesi, LED’lerde (Light-Emitting Diode) renk kontrolünü mümkün kılarak teknolojik kullanımı genişletir (Awschalom ve Loss 2002).

Yarı iletken kuantum noktalarda, ışık yoğunluğunun etkisiyle polarizasyonun doğrusal olmaktan çıktığı durumlarda, lineer olmayan optik tepkiler ortaya çıkmaktadır. Kuantum noktaların boyutlarının ayarlanabilir olması ve ışık yoğunluğunun değiştirilmesi, bu tepkilerin artırılmasını veya azaltılmasını sağlamaktadır. Lineer olmayan optik etkiler, 1961 yılında ikinci harmonik üretimin (Second-Harmonic Generation, SHG) keşfiyle bilim dünyasında önemli bir yer edinmiştir (Franken vd. 1961). SHG teknolojisi sayesinde, doğrudan üretilmeyen yeşil lazer ışığı verimli bir şekilde elde edilebilmiştir. Lineer olmayan optik etkiler arasında, soğurma katsayısındaki doğrusal olmayan artış ve kırılma indisindeki değişim, ışık ile madde etkileşimlerini şekillendiren önemli parametrelerdir. Lineer olmayan optik gözlenirler, yarı iletken kuantum yapıların enerji seviyeleri ile ilişkilendirilerek incelenir.

Yarı iletken kuantum yapılarda elektronların davranışını doğru bir şekilde modellemek, lineer olmayan optik etkiler üzerine çalışılan senaryoların niteliğini doğrudan etkilemektedir. Bir elektronun boşluktaki kütlesi ile yarı iletken madde içerisindeki kütlesi aynı değildir. Bu farklılık, elektrona etki eden sınırlayıcı potansiyelin etkisiyle elektronun artık serbest bir parçacık gibi davranmıyor olmasından kaynaklanır. Bu durumda elektronun kütlesi, malzemenin bant yapısına bağlı olarak değişir ve serbest haldeki kütlesinden farklı bir değer alır. Etkin kütle olarak adlandırdığımız bu kütle, valans bant ve iletkenlik bandının eğriliği ile doğrudan ilişkilidir (Kittel ve McEuen 2018). Yarı iletken kristaldeki bir elektronun davranışı modellenirken elektron kütlesinin malzeme içerisindeki konuma bağlı olarak değiştiği bilinmektedir. Ancak konuma bağlı kütlenin hangi geometrik uzay formuna sahip olduğu hususu araştırma konusudur. Bu nedenle literatürde yapılan çalışmalar, farklı uzay bağımlı kütle modelleri üzerinden gerçekleştirilmiştir. Kütlenin uzay bağımlı olarak alınması ile yarı iletken malzemelerin optik ve elektronik özelliklerinin daha hassas şekilde ayarlanması sağlanabilmektedir.

Sınırlayıcı potansiyel, yarı iletken kristallerde bulunan elektronların davranışını belirleyen önemli faktörlerden biridir. Bu potansiyelin fiziksel temellere dayanarak doğru bir şekilde modellenmesi büyük önem taşır. En basit modelde, bir elektronun başka bir elektron yada atomla etkileşimi, aralarındaki elektrostatik kuvveti tanımlayan Coulomb potansiyeli ile açıklanır. Ancak çok parçacık etkileşiminde sınırlayıcı potansiyel farklı formlar almaktadır. Çünkü elektron, kristal kafes içerisindeyken bulk yapıda bulunan elekt-

ronlar ve atomlarla etkileşime girer. Bahsedilen etkileşim fiziksel gerekçesi sunularak, bu çalışmada ters karekök eksponansiyel potansiyel modeli ele alınmıştır.

Literatürde, ters karekök eksponansiyel potansiyel kullanılarak Schrödinger dalga denkleminin analitik çözümü incelenmiştir. Ancak, elde edilen dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerlerinin doğru olmadığı görülmüştür. Bu sistematik hatalar devam ettirilerek, yanlış dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri temelinde optik gözlenirler üzerine çalışmalar gerçekleştirilmiştir (Hu vd. 2018; Yu vd. 2019). Bununla birlikte, ters karekök eksponansiyel potansiyelin yalnızca $\ell = 0$ kuantum durumu için Schrödinger dalga denkleminin analitik çözümü, Ishkhanyan tarafından doğru bir şekilde elde edilmiştir (Ishkhanyan 2018).

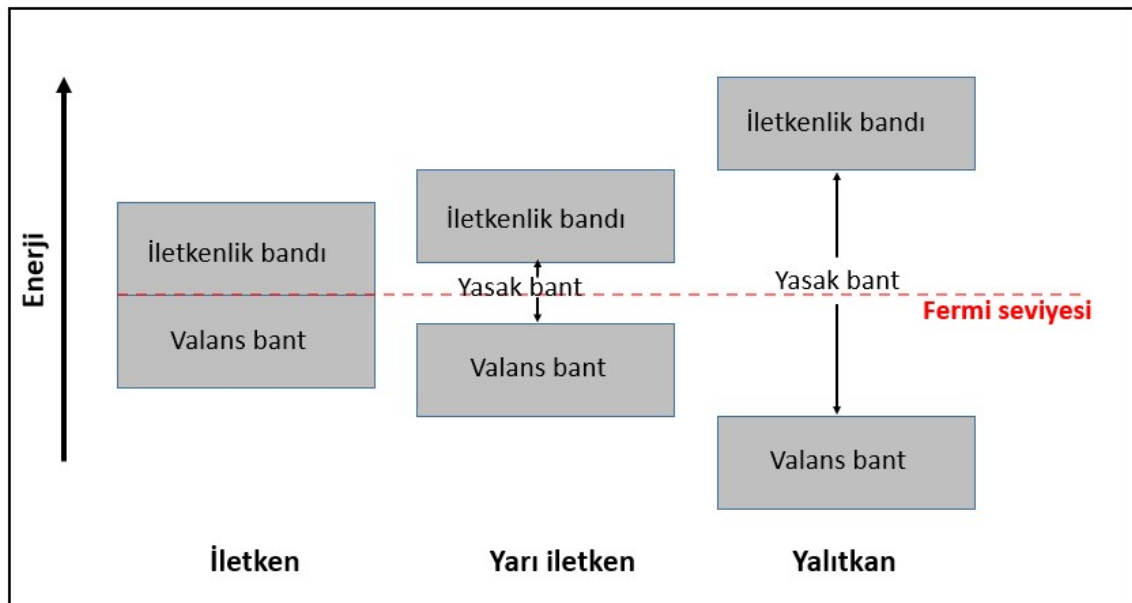
Bu tez çalışmasında ters karekök eksponansiyel potansiyel sınırlamasına sahip bir GaAs kuantum noktanın elektronik, optik, termodinamik ve manyetik özellikleri nümerik olarak incelenecektir. İlk olarak, iki farklı konuma bağlı kütle formu alınarak Schrödinger denklemi Runge-Kutta metodu ile nümerik olarak çözülerek bağlı durum enerji özdeğerleri elde edilecektir. Kütlenin konuma bağlı formlarının fiziksel gerekçesi detaylı bir şekilde açıklanacaktır. Potansiyel parametrelerinin enerji özdeğerleri ve optik gözlenirler üzerine etkisi ortaya konulacaktır. Kütle modellerindeki eğrilik farklılıklarından optik gözlenirlerin nasıl etkilendiği tartışılacaktır. İkinci olarak ortam parametrelerinin etkisini incelemek amacıyla; elektronun etkin kütlesi, potansiyel derinliği ve iletkenlik bandındaki etkin elektron yoğunluğu sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlı olarak alınacaktır. Bu bağılıklar baz alınarak, elektrik ve manyetik alan altında Schrödinger dalga denklemini Numerov metodu ile çözülerek, farklı kuantum durumlarında bağlı durum enerji özdeğerleri elde edilecektir. Sıcaklık, hidrostatik basınç, elektrik ve manyetik alanlar ile potansiyel parametresinin optik gözlenirlere etkisi incelenecektir. Üçüncü olarak yine etkin elektron kütlesi ve potansiyel derinliği sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlı alınarak manyetik alan altında Schrödinger dalga denklemini Sonlu Farklar metodu kullanılarak çözülecektir. Bağlı durum enerji özdeğerleri sıcaklığın bir fonksiyonu olarak alınarak, bölüşüm fonksiyonları üzerinden bir GaAs kuantum noktanın termodinamik ve manyetik gözlenirleri elde edilecektir. Gözlenirlerin sıcaklık ve manyetik alan altındaki davranışları, fiziksel gerekçeler üzerinden desteklenerek açıklanacaktır.

2. KAYNAK TARAMASI

2.1. Yarı İletken Yapılar

Yarı iletkenler; sıcaklık, basınç, elektrik alan ve ışık gibi dış etkiler altında elektriksel iletkenlik özelliklerini değiştirebilen ve bant aralığı bakımından iletkenler ile yalıtkanlar arasında yer alan malzemelerdir. Bu özellikleri, elektronik uygulamalarda vazgeçilmez bir konuma sahip olmalarını sağlar. Yarı iletkenlerin temel fiziksel özelliği, valans ve iletkenlik bantları arasında karakteristik bir yasaklı bant aralığına sahip olmalarıdır. Valans bandında bulunan bir elektron, atom çekirdeğinin çekim kuvveti nedeniyle bir dış etki olmadığı sürece yörüngesinden çıkamaz. Elektron, yasak bant aralığını aşabilecek kadar enerji kazandığında ise iletkenlik bandına geçerek valans bandında pozitif yüklü gibi davranan bir boşluk (deşik) bırakmaktadır. Yarı iletken kristal malzemelerin valans bantta bulunan elektronları, iletkenlik bandına geçtiğinde iletim özelliği kazanmaktadır (Kittel ve McEuen 2018).

İletkenlerde valans bant ve iletkenlik bandı iç içe geçmiş durumdadır. Yalıtkanlarda ise, bunun tersine, bu bantlar arasında geniş bir mesafe bulunur ve elektronlar valans banttan iletkenlik bandına geçemez. Yarı iletken özellik gösteren bir malzeme düşük enerjiler verildiğinde yalıtkan davranış gösterirken, belirli bir eşik enerji değeri (bant aralığı) aşıldığında iletkenlik davranışı sergiler. Yarı iletkenler bu anlamda benzersiz yapılardır. Şekil 2.1’de yalıtkan, yarı iletken ve iletken özellik gösteren malzemelerin bant aralıkları arasındaki farklılıklar görselleştirilmiştir.



Şekil 2.1. İletken, yarı iletken ve yalıtkanların enerji bant diyagramları

Şekil 2.1’de gösterilen kırmızı çizgi, temsili olarak Fermi seviyesini göstermektedir.

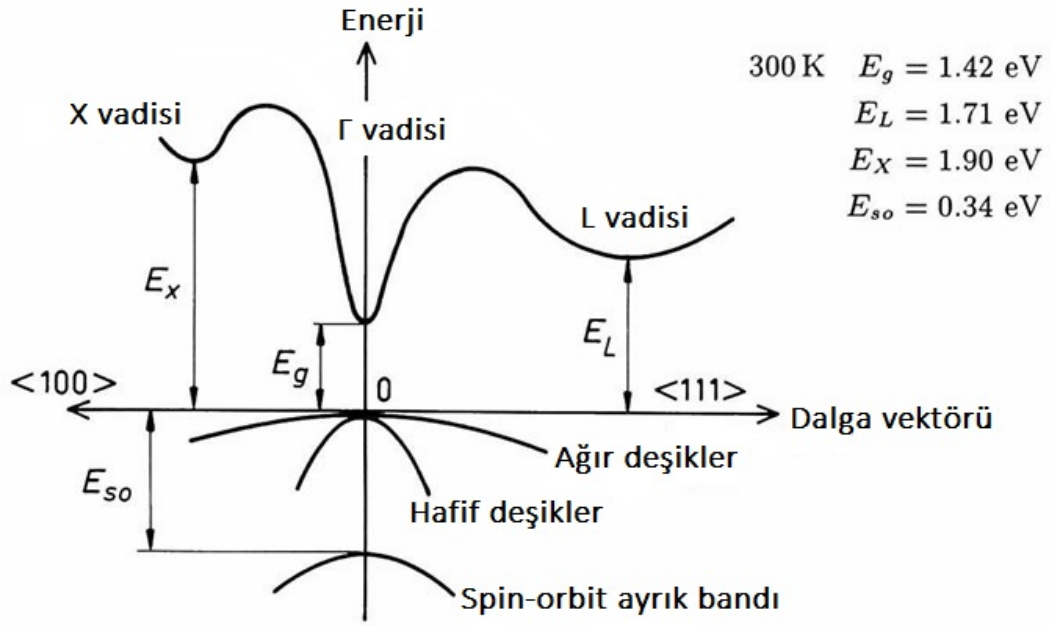
Fermi seviyesi, 0 K sıcaklıkta elektronların doldurabileceği en yüksek enerji seviyesidir. İletkenlerde Fermi seviyesi, çakışmış olan iletkenlik ve valans bantlarının içinde bulunurken, yarı iletkenlerde ve yalıtkanlarda yasak bant bölgesinde yer alır.

Yarı iletkenler, genellikle periyodik tablodaki IV. grup elementlerinden oluşan elmas kafes yapısındaki saf elementlerden, III-V ve II-VI grubu elementlerin oluşturduğu bileşiklerden, bazı oksitlerden veya organik bileşenlerden meydana gelir (Peter ve Cardona 2010). III-V bileşikler arasında yer alan ve bu tez çalışmasında kullanılan GaAs yarı iletkeni, çinkoblend (zinc blende) kafes yapısına sahiptir. Yüzey merkezli kübik (fcc) örgüye sahip olan GaAs kristalinde her As atomu dört Ga atomu ile çevrilidir. Bu düzenli yapı, tetrahedral (düzgün dörtyüzlü) geometri olarak adlandırılır (Dikici 2012). Makro ölçekteki GaAs kristali, boyutları küçültülüp nano ölçeğe inildiğinde kuantum nokta etkileri görülür. Bu yapı, kristal yapının korunduğu kuantum nokta gibi davranır. Elektronlar ise nano boyuttaki kuantum nokta içinde sınırlandırılmaktadırlar. Kuantum etkiler nedeni ile enerji bantları artık sürekli değil ayrıktır. Dolayısıyla elektronlar, yalnızca kesikli enerji seviyelerinde bulunabilmektedir.

2.2. E-k Bant Diyagramı

Katıların elektronik bant yapısı, enerji (E) ile dalga vektörü (k) arasındaki ilişkiyi gösteren $E - k$ bant diyagramı üzerinden incelenir. Kristalin örgü yapısına bağlı olan k dalga vektörü, kristal içindeki elektronun momentumunu belirler. Böylece elektronun kafes içindeki hareket yönü ve büyüklüğü ifade edilmiş olur. Her kristal malzeme, kendine özgü bir $E - k$ bant diyagramına sahiptir. Kristal kafes içinde elektron, periyodik bir potansiyele maruz kaldığı için serbestçe hareket edemez. Elektron, bu potansiyelin etkisiyle belirli enerji seviyelerine yerleşir ve bu şekilde enerji bantları oluşur.

Şekil 2.1’de gösterilen yasak bant aralığı, yarı iletkenlerde elektronların uyarılabilmesi için yeterince dardır. Malzemelerde bant boşlukları doğrudan bant aralığı ve dolaylı bant aralığı olmak üzere iki şekilde olmaktadır. Doğrudan bant aralığı, valans bandının en üst noktası ile iletkenlik bandının en alt noktasının aynı k değerinde olduğu durumdur. Dolaylı bant aralığına sahip yarı iletkenlerde ise bu noktalar farklı k değerlerindedir. Örneğin, GaAs yarı iletkeni doğrudan bant aralığına sahipken, Si dolaylı bant aralığına sahiptir (Sze vd. 2021). GaAs kristalinin $E - k$ bant diyagramı Şekil 2.2’de gösterilmektedir.



Şekil 2.2. GaAs yarı iletkeni için $E - k$ bant diyagramı (Levinshtein ve Rumyantsev 1996)

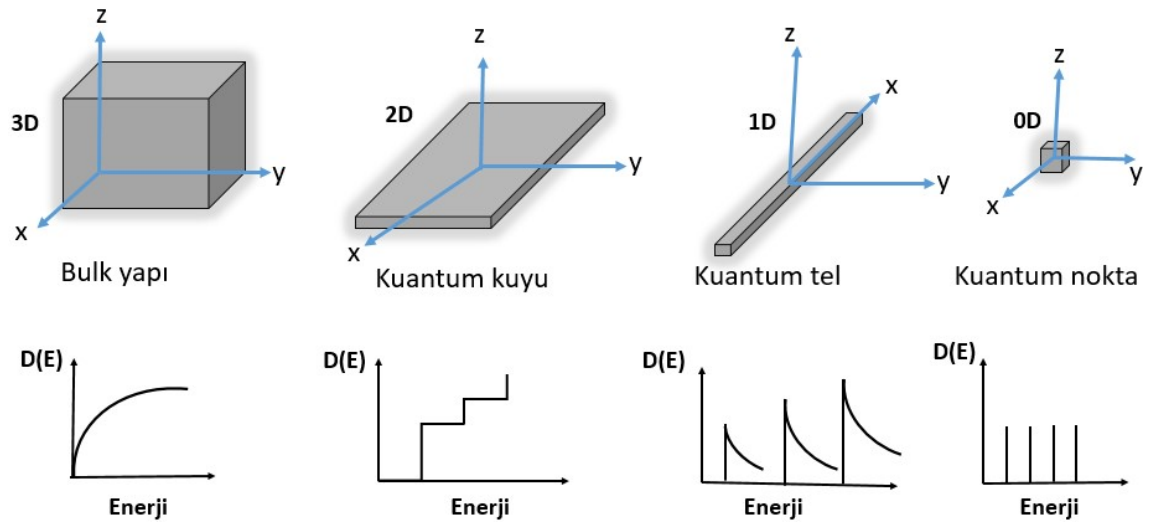
Şekil 2.2’de açıkça görüldüğü gibi E_x , E_Γ ve E_L sırasıyla X vadisi, Γ vadisi ve L vadisindeki enerji seviyelerini ve E_{so} ise spin-orbit ayrışmasında enerji seviyesini ifade etmektedir. Bu enerjilerin 300 K’deki değerleri $E_x = 1.90$ eV, $E_L = 1.71$ eV, $E_{so} = 0.34$ eV’dir. E_g ise GaAs’ın 300 K sıcaklıktaki bant aralığını göstermektedir. Oda sıcaklığında, GaAs yarı iletken kristalinin bant aralığı $E_g = 1.42$ eV’dir (Levinshtein ve Rumyantsev 1996). Valans bandında $k = 0$ noktasında tepe yapan ağır ve hafif deşik eğrileri ise yarı iletkenin valans bandındaki deşiklerin etkin kütlelerini temsil etmektedir. Ayrıca bant diyagramında yer alan $\langle 100 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ ifadeleri, kristalin belirli yönlerini belirtir. $\langle 100 \rangle$ yönü kristalin bir kenarına paralel olan yönü, $\langle 111 \rangle$ yönü ise köşelerden birinden en uzak köşeye uzanan yönü ifade etmektedir. Bu yönler, kristalin simetrik yapısının temel özelliklerini yansıtan kritik faktörlerdir.

$E - k$ bant diyagramının şekli, elektronun kristal kafes içindeki davranışının incelenmesinde büyük öneme sahiptir. Elektronun kristal kafes içindeki davranışı, sıcaklık ve basınç gibi etkenlere bağlı olarak değişir. Sıcaklık arttığında bant aralığı azalmaktadır. Hidrostatik basıncın etkisi ile de değişkenlik göstermektedir. Malzemelerin bunlar gibi dış etkilere karşı gösterdikleri toleransa göre onların elektronik, optik, termodinamik ve manyetik özellikleri incelenebilmektedir.

2.3. Kuantum Noktaların Enerji Seviyeleri ve Durum Yoğunluğu

Yarı iletken kuantum yapılar, elektronlarının kuantum mekaniksel davranışlar sergilediği, nanometre boyutundaki malzemelerdir. Bu yapılarda sınırlayıcı potansiyel elekt-

ronların hareketlerini sınırlandırır. Bu sınırlandırma tek boyutta ise kuantum kuyusu, iki boyutta kuantum tel, üç boyutta ise kuantum nokta olarak adlandırılmaktadır (Şekil 2.3). Kuantum noktalar üç boyutta da sınırlandırılmış olduklarından serbestlik derecesine sahip değildir. Yani elektronların hareket edebilecekleri yönlerin sayısı sıfırdır. Bu durum, kuantum noktaların atomlarda olduğu gibi kuantize (ayrık) enerji seviyelerine sahip olmalarını sağlamaktadır. Kuantum noktalar bu özelliklerinden dolayı "yapay atom" olarak da adlandırılır (Kastner 1993). Şekil 2.3'de kesikli enerji seviyelerine sahip olan bir kuantum noktasının durum yoğunluğunun enerjiye karşı davranışları gösterilmektedir. Ayrıca bulk yapı, kuantum kuyu ve kuantum telin durum yoğunlukları Şekil 2.3'de yer almaktadır (Alivisatos 1996). Durum yoğunluğu, kuantum yapıların boyutlarına göre farklı bir dağılım sergilemektedir. Örneğin, bulk yapıda durum yoğunluğu sürekli bir dağılıma sahipken kuantum kuyu ve tellerde yarı kesikli seviyeler şeklindedir. Boyutlar küçüldükçe, yani bulk yapıdan kuantum noktaya doğru ilerledikçe, kuantum etkiler giderek daha belirgin hale gelir.



Şekil 2.3. (Soldan sağa doğru) Bulk yapı, kuantum kuyu, kuantum tel ve kuantum noktalar ve $D(E)$ durum yoğunlukları (Alivisatos 1996)

Kuantum noktadaki bir elektronun davranışı, Schrödinger dalga denklemi ile modellenir. Dalga denklemi çözülerek elektronun bulunabileceği enerji seviyeleri hesaplanır. Durum yoğunluğu, elektronların belirli bir enerji aralığında bulunabilecekleri kuantum durumlarının sayısal değeridir. Kesikli enerji seviyelerine sahip olmaları nedeni ile kuantum noktalar için durum yoğunluğunda dispersiyon eğrileri bulunmamaktadır. Buna bağlı olarak keskin bir δ fonksiyonu serileri şeklinde ifade edilebilmektedirler. Kuantum noktalar için durum yoğunluğu,

$$D(E) = \sum_n \delta(E - E_n) \quad (2.1)$$

şeklindedir. E_n , elektronun herhangi bir n kuantum durumundaki enerjisini ifade eder (Peter ve Cardona 2010).

2.4. Yarı İletken İçinde Elektronun Kütlesi

Serbest elektron, herhangi bir atom ya da molekül içinde bulunmayan, dolayısıyla bir dış potansiyel etkisinde olmayan elektron olarak tanımlanır ve literatürde kütlesi m_e ile gösterilir. Serbest halde bir elektronun kütlesi, $0.511 \text{ MeV}/c^2$ 'dir. Elektronlar, bir yarı iletken kristal yapı içinde serbest halde olmayıp, periyodik bir potansiyel altında bağlı durumlarda bulunurlar. Bir potansiyel alan etkisindeki elektronların kütlesi, boşluktaki kütlesinden genellikle daha düşük olmaktadır. Bu elektronların kütlesi etkin veya efektif kütle olarak adlandırılır.

Etkin kütlenin fiziksel kaynağı, kristal örgü kuvvetidir. Kristal yapı, $\hbar$ indirgenmiş Planck sabiti olmak üzere $\mathbf{p}_{kristal} = \hbar\mathbf{k}$ olarak ifade edilen bir kristal momentumuna sahiptir. Elektron, kristal örgü tarafından uygulanan $\mathbf{F}_{kristal}$ kuvvetinin etkisi altındadır. Dışarıdan kristale bir $\mathbf{F}_{dış}$ dış kuvvet (örneğin elektrik alan) uygulandığı durumda, elektron üzerine etki eden toplam kuvvet (Dikici 2012),

$$\mathbf{F}_{kristal} + \mathbf{F}_{dış} = m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (2.2)$$

eşitliği ile verilir. Uygulanan kuvvet var olduğu sürece $\mathbf{a} = d\mathbf{v}/dt$ ivmesinden söz edilebilir. Dolayısıyla, $\mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}_{dış}}{m^*}$ ifadesi yazılabilir. Böylece (2.2) denkleminin sağ tarafındaki terim,

$$m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m_e \frac{\mathbf{F}_{dış}}{m^*} \quad (2.3)$$

ifadesine eşit olur. (2.3) eşitliğinin sağ tarafı, Denklem (2.2) ifadesinde yerine yazıldığı durumda m^* ifadesi çekilerek

$$m^* = m_e \frac{\mathbf{F}_{dış}}{\mathbf{F}_{dış} + \mathbf{F}_{kristal}} \quad (2.4)$$

elde edilir. Denklem (2.4)'de açıkça görüldüğü üzere, elektronun serbest haldeki kütlesi m_e , malzeme içerisindeki m^* 'a eşit değildir; ancak, kristal örgü tarafından sağlanan kuvvet sıfır olduğunda eşitlik sağlanır. Yani kütlenin değişme nedeni, kristal örgü kuvveti ve o kuvvete karşılık gelen potansiyeldir (Dikici 2012).

Elektronun enerjisi $E = \hbar\omega$ ve elektrona eşlik eden dalganın grup hızı da $v_g =$

$d\omega/dk$ olduğundan ivme, Denklem (2.5) ile verilir.

$$a = \left(\frac{1}{\hbar}\right) \left(\frac{d^2 E}{dk dt}\right) = \left(\frac{1}{\hbar}\right) \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right) \left(\frac{dk}{dt}\right) \quad (2.5)$$

Newton'un 2. hareket yasası olan $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$ ifadesinden yola çıkarak, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ alındığında,

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} = m^* a \quad (2.6)$$

elde edilir. Denklem (2.5) ile verilen ivme, Denklem (2.6) eşitliğinde yerine yazıldığında etkin kütle ifadesi,

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(k)}{dk^2} \quad (2.7)$$

olarak elde edilir (Kittel ve McEuen 2018). m^* burada etkin elektron kütleini temsil etmektedir. Parçacığın enerjisi, k dalga vektörüne bağlı bir fonksiyondur. k dalga vektörü aslında parçacığın momentumu ile ilişkili olduğundan ($\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$), k değişimi momentum değişimini temsil eder. Denklem (2.7) eşitliğinde yer alan ikinci türev ise $E - k$ bant diyagramının eğriliğini vermektedir.

Kütlenin konuma bağlı olmaması için enerjinin k^2 ile orantılı olduğu varsayımıyla, etkin kütle denen sabit kütle hesaplamalarda kullanılır. Gerçekte $E - k$ bant diyagramı her zaman düzgün bir parabol geometrisinde değildir (Kittel ve McEuen 2018). Bant diyagramının taban ve üst kısmındaki eğriliklerin farklı olması nedeniyle, etkin kütle de bu noktalarda farklıdır. Şekil 2.2'de verilen GaAs'in $E - k$ bant diyagramında, iletkenlik bandının Γ vadisinin alt kısmındaki eğriliğin yüksek olması etkin kütlenin düşük, üst kısmında eğriliğin düşük olması ise alt kısma kıyasla etkin kütlenin yüksek olduğunu göstermektedir.

Etkin kütlenin konuma bağlı formunun gerçek geometrisi bilinmemektedir. Bu nedenle bu tez çalışmasının Bulgular ve Tartışma kısmında PDEM'in gözlenirlere olan etkisi incelenirken, iki farklı kütle formu ele alınmıştır. Her iki modelde sınırlar aynı tutulmuş, ancak uzaya bağlı eğrilikler farklı seçilmiştir. Bu eğrilik farklılıklarının gözlenirler üzerindeki etkileri ayrıntılı bir şekilde tartışılacaktır.

2.5. Elektronların Periyodik Potansiyeldeki Davranışları ve Kronig-Penney Modeli

Kristal yapılarıdaki elektron davranışlarının karakterizasyonu için periyodik bir potansiyelde elektronların incelenmesi büyük önem taşır; çünkü elektron, kristalin düzenli örgüsünden kaynaklanan ve periyodik olarak tekrarlanan bir potansiyele maruz kalır.

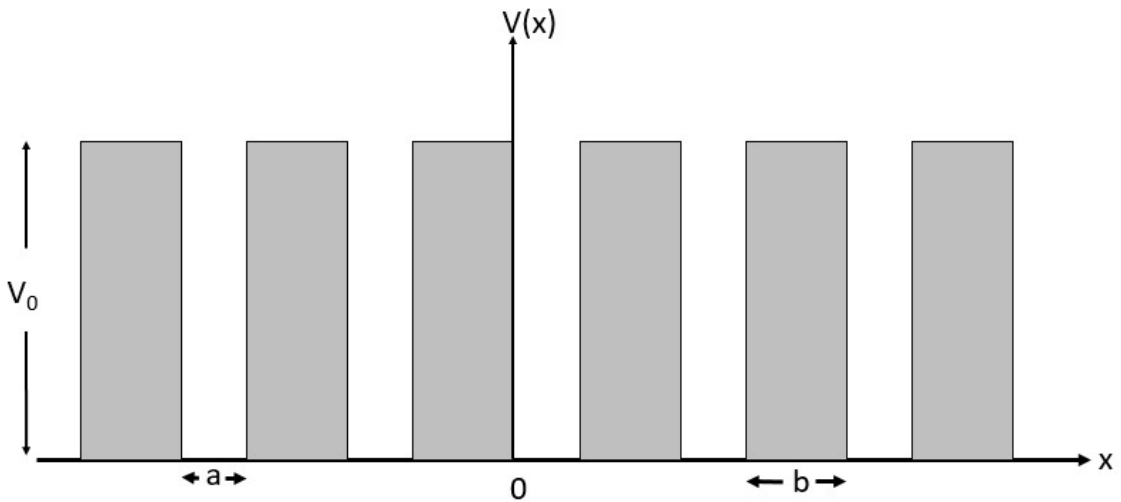
Elektronun kristal kafes içindeki kuantum mekaniksel davranışının modellenmesi için Schrödinger dalga denklemi kullanılır. Schrödinger dalga denklemi ile elektronun dalga fonksiyonu ve bulunabileceği kesikli enerji seviyeleri tespit edilmektedir.

Elektron, periyodik bir potansiyelde bulunduğundan, dalga fonksiyonları da potansiyelin periyoduna uyum sağlar. Bu dalga fonksiyonları, Bloch teoremi olarak adlandırılan bir prensiple incelenir. Bloch teoremine göre elektronun dalga fonksiyonu,

$$\psi_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.8)$$

ile verilmektedir (Bloch 1929). $u_k(r)$ ifadesi burada potansiyelin periyodik özelliklerini ($u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_k(\mathbf{r})$) içerisinde barındıran periyodik bir fonksiyondur. Bu ifadede k indisi, dalga fonksiyonunun k dalga vektörüne bağlı olduğunu ifade eder. $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ifadesinin fiziksel karşılığı, elektronun kristal yapı içindeki davranışını temsil eden ilerleyen bir düzlem dalgadır. Bu dalga de Broglie dalga boyu ile ifade edilir. Yani, $\lambda = 2\pi/k$ şeklindedir. Dolayısıyla elektron, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ kristal momentumuna sahip olur.

Elektronun kristal örgüdeki etkileşimine karşılık gelen potansiyelin gerçek yapısı ve geometrisi tam olarak bilinmemektedir. Bu nedenle, Schrödinger dalga denklemini analitik olarak çözebilmek için, elektronun etkileşimini yaklaşık olarak doğru tanımlayacak bir periyodik potansiyele ihtiyaç duyulmuştur. Bu amaçla, Kronig-Penney olarak adlandırılan bir periyodik potansiyel modeli öne sürülmüştür. Bu model, 1931 yılında R. De L. Kronig ve W. G. Penney tarafından geliştirilmiştir (Kronig ve Penney 1931). Kronig-Penney modeli, yüksekliği ve genişliği aynı olan, periyodik olarak birbirini tekrarlayan keskin köşeli engel ve bariyerlerden oluşmaktadır. Potansiyeldeki periyodiklik, kristallerdeki atomların düzenli mesafelerde birbirini tekrarlıyor olmasını temsil etmektedir. Kronig-Penney potansiyelinin geometrik yapısı Şekil 2.4 ile verilmiştir.



Şekil 2.4. Kronig-Penney potansiyelinin geometrik yapısı (Kronig ve Penney 1931)

Şekil 2.4 ile gösterilen tek boyutlu Kronig-Penney potansiyelinin geometrisi, $0 < x < a$ aralığında $V(x) = 0$ ve $-b < x < 0$ aralığında da $V(x) = V_0$ olacak şekilde verilmektedir. $0 < x < a$ aralığı için Schrödinger dalga denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) \quad (2.9)$$

şeklinde yazılır ve çözüm fonksiyonu, sağa ve sola doğru ilerleyen düzlem dalgaların doğrusal olarak toplamı olmak üzere

$$\Psi(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \quad (2.10)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ olmaktadır. $-b < x < 0$ aralığında ise $V(x) = V_0$ olduğundan $E < V_0$ durumu için Schrödinger dalga denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + (V_0 - E)\Psi(x) = 0 \quad (2.11)$$

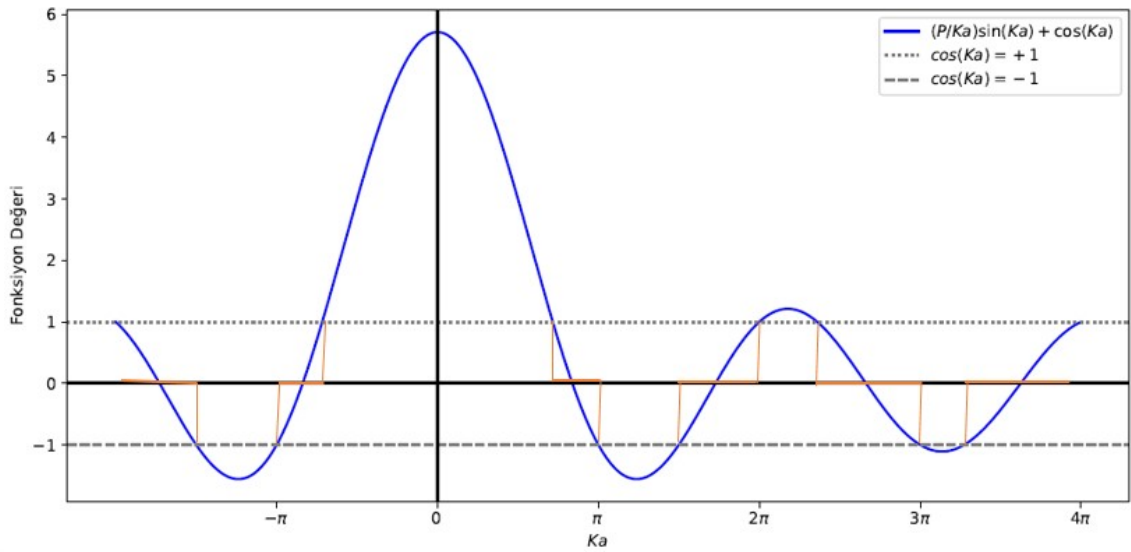
formunda yazılır ve çözüm fonksiyonu ise, eksponansiyel artan veya azalan fonksiyonların doğrusal olarak toplamı olmak üzere

$$\Psi(x) = Ce^{qx} + De^{-qx} \quad (2.12)$$

şeklinde ifade edilir. Bu durumda da $q = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ olarak kabul edilir. Kronig-Penney potansiyelinde ele alınan bu iki bölge için geçerli olacak ve sınır şartlarını da sağlayacak olan çözüm, Denklem (2.8) ile verilen Bloch fonksiyonudur. (2.8) denklemi, (2.9) ve (2.11) dalga denklemlerinde yerine yazılarak süreklilik koşulları ve periyodik olma şartı uygulanır. Elde edilen denklemler Kramer Metoduyla çözüldüğünde; $P = \frac{q^2ba}{2}$ sağlanıp $b \rightarrow 0$ ve $V_0 \rightarrow \infty$ limitleri alınarak denklemler basitleştirildiğinde sonuç

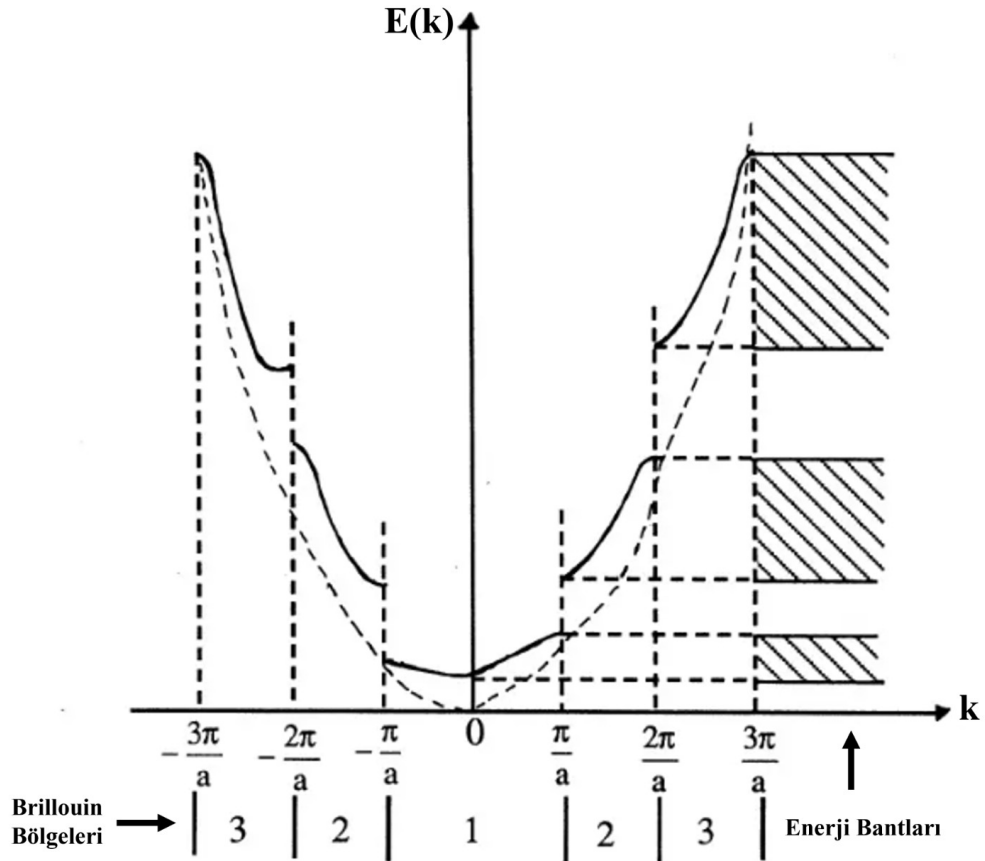
$$\frac{P}{Ka} \sin(Ka) + \cos(Ka) = \cos(ka) \quad (2.13)$$

olmaktadır. (2.13) eşitliğiyle verilen transandantal denklemin çözüm fonksiyonunun, Ka 'ya bağlı değişimi Şekil 2.5'de gösterilmektedir.



Şekil 2.5. $P = 3\pi/2$ alındığında, Ka 'nın fonksiyonu olarak $(P/Ka)\sin(Ka) + \cos(Ka)$ değişimi (Dikici 2012)

Şekil 2.5'de Ka arttıkça fonksiyonun sönüme uğradığı görülmektedir. Bu fonksiyon grafiği, elektronun hareketinde izinli ve yasak olan bölgelerin analizinde kullanılır. $\cos(Ka)$ için -1 ve $+1$ aralığı izinli bölge ve bu aralığın dışı yasak bölge olarak adlandırılmaktadır. Ka 'daki periyodiklik, enerji bantlarının sınırlarını göstermektedir. k 'nın bir fonksiyonu olarak enerji özdeğerlerinin değişimi Şekil 2.6 ile gösterilmiştir. Şekil 2.6'da verilen ayırık eğride yasak bantlar ve Brillouin bölgeleri görülmektedir. $k_n = n\pi/a$ olmak üzere enerji fonksiyonu, $E(k_n) = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$ şeklinde verilmektedir. n kuantum sayısı $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ şeklinde değerler alır. Serbest elektron durumunda ise enerji özdeğerleri, $E(k) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ olmaktadır. Serbest elektron için enerji grafiği, Şekil 2.6'da kesikli çizgilerle gösterilen parabol formundaki eğridir.



Şekil 2.6. Serbest elektronu temsil etmek üzere kesikli çizgilerle gösterilen düzgün parabol ve Kronig-Penney potansiyeli etkisinde olan bir elektronun enerji bantları ile Brillouin bölgeleri (Aygün ve Zengin 1998)

Kronig-Penney potansiyeli, teorik olarak, tek boyutlu uzayda periyodik olarak tekrarlayan, sonsuz yüksekliğe sahip keskin bariyerlerden oluşan bir yapı olarak kabul edilir. Ancak bu potansiyel, gerçek fiziksel sistemleri tam anlamıyla yansıtmaz. Gerçek sistemlerde potansiyel, keskin değişimler yerine daha yavaş ve sürekli geçişler gösterir. Kronig-Penney potansiyelinin süreksiz olduğu noktalar, matematiksel olarak kuvvetin sonsuza ulaşması anlamına gelir. Bu durum fiziksel bir anlam taşımadığından, Kronig-Penney potansiyeli yalnızca idealize bir model olarak değerlendirilir. Ayrıca, matematiksel kolaylık sağlamak için kristallerin kafes yapısı sonsuz kabul edilse de, gerçek kristallerin boyutları sonludur. Kronig-Penney modeli, kristal kafeslerdeki elektronların karmaşık davranışlarını analiz etmek için çözümü basitleştiren ve kolay uygulanabilen bir toy modeldir.

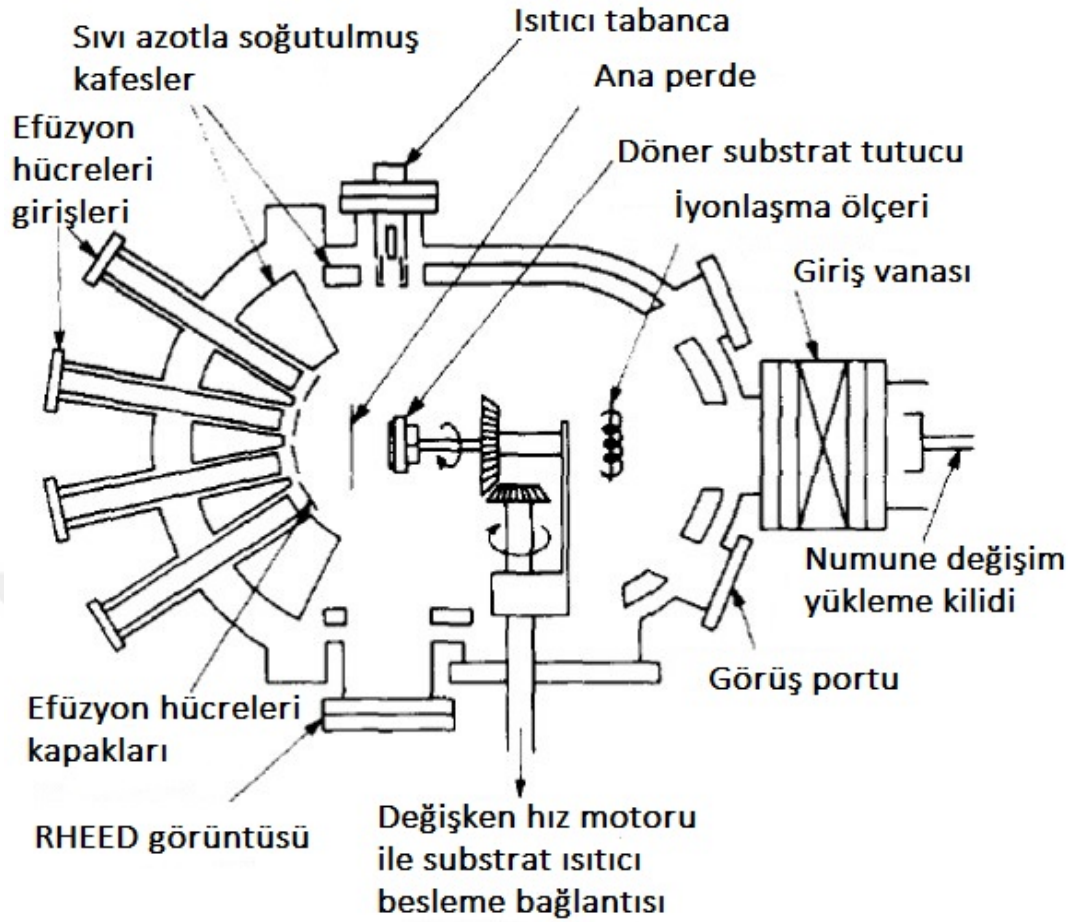
Bir elektronun başka bir elektronla etkileşimi, Coulomb potansiyeliyle tanımlanır. Ancak, elektronun kristal örgüdeki diğer elektronlar ve atomlarla etkileşim kurduğu çok parçacıklı sistemlerde, etkileşimleri daha doğru bir şekilde tanımlamak için deforme edilmiş formda Coulomb potansiyeline ihtiyaç duyulur. Bu tez çalışması kapsamında, fiziksel

gereklilikleri sağlamak amacıyla deforme Coulomb formunda olan ters karekök eksponansiyel potansiyel kullanılmaktadır. Bu potansiyel, ani değişen bariyerler yerine yavaş ve sürekli geçişlere sahip olup, sonlu yarı iletken kafes yapısıyla uyumlu olacak şekilde sonlu bir yapı olarak tanımlanır. Ayrıca, potansiyelin geometrisinin kolayca ayarlanabileceği üç adet parametre vardır. Ters karekök eksponansiyel potansiyelin dış etkiler altındaki davranışları ve parametre değişimlerine verdiği tepkiler, Bulgular ve Tartışma kısmında detaylı olarak incelenmiştir.

2.6. Kuantum Noktaların Üretim Yöntemleri ve Teknolojik Uygulamalar

Kuantum noktalar günümüzde genellikle kimyasal sentezleme yöntemleri, litografik yöntemler ve lazer ablasyonu ile üretilebilmektedir (Ameta vd. 2022). En yaygın kimyasal sentezleme yöntemleri; moleküler ışın epitaksisi (Molecular Beam Epitaxy, MBE), kimyasal buhar depozisyonu (Chemical Vapor Deposition, CVD), metalorganik kimyasal buhar biriktirme (Metalorganic Chemical Vapour Deposition, MOCVD), oksitlenme yöntemi ve koloidal sentezdir. Günümüzde en sık tercih edilen yöntemler arasında yer alan MBE, MOCVD ve koloidal sentez, bu bölümde ayrıntılı olarak ele alınacaktır.

En yaygın yöntemlerden biri olan MBE, ultra yüksek vakum altında malzemelerin büyütülmesini gerçekleştiren oldukça hassas bir tekniktir. Yöntemin genel şeması Şekil 2.7'de verilmiştir. Şekil 2.7'de gösterilen efüzyon hücreleri, malzemelerin yüksek ısıda buharlaştırılarak atomik ışın demetleri elde edildiği ana bileşenlerdir. Atomik ışın demetlerinin hücrelerden çıkışı, hücre kapakları ile kontrol edilir. Efüzyon hücrelerinin çevrili olduğu sıvı azotla soğutulmuş kafesler, hücrelerden yabancı moleküllerin yoğunlaşmasını önler. Isıtılmış tutaç ile hedefe bir taşıyıcıyı yüzey (kristalik substrat) yerleştirilir. Yüksek vakum ortamında, buharlaştırılmış moleküller demetler halinde substrat yüzeyine gönderilerek birbirleriyle etkileşmeden doğrudan hedefe ulaşmaları sağlanır. İşlem sırasında iyonlaşma ölçeri vakum basıncını izlerken, yansımali yüksek enerjili elektron kırınımı (Reflection high-energy electron diffraction, RHEED) sayesinde substrat üzerindeki katmanların büyümesi kontrol edilir. Malzemeler, numune değişim yükleme kilidi sayesinde ise vakum sistemi bozulmadan ilgili yere yerleştirilir yada çıkarılır. MBE yöntemi, değişken hız motoru ve substrat ısıtıcı beslemesi ile birlikte, malzeme büyümesi için sıcaklık ve hareket kontrolü sağlanarak gerçekleştirilmektedir. Tüm bileşenlerin uyumlu bir şekilde çalışması, her bir katmanın atom kalınlığı düzeyinde hassas bir şekilde ayarlanmasına olanak tanır (Cho ve Arthur 1975; Herman ve Sitter 2012).

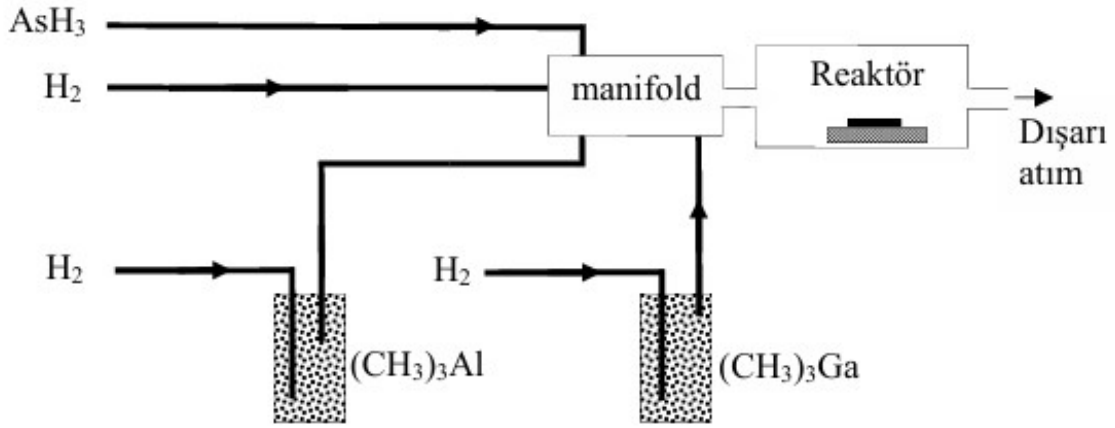


Şekil 2.7. MBE yöntemi şeması (Cho 1983)

1960'lı yılların sonlarında geliştirilen MBE yöntemi ile ilk olarak yarı iletken ince filmler üretilmeye başlanmış, 1970'li yıllarda ise GaAs/AlGaAs gibi hetero yapılar üretilmiştir. Yüksek hassasiyeti sayesinde bu yöntem, 1980'lerden itibaren kuantum kuyular, kuantum teller ve kuantum noktalar gibi düşük boyutlu kuantum yapıların üretiminde de kullanılmaya başlanmıştır (Asahi ve Horikoshi 2019).

MOCVD, kimyasal bir reaksiyon ile kristal katmanı büyütülmesi işlemine dayanan en yaygın yarı iletken üretim yöntemlerinden bir diğeridir. Bu yöntem, bazı metalorganik bileşikler ve reaktif gazların yüksek sıcaklıkta ısıtılarak bir yüzeye tutulumunun sağlanması suretiyle gerçekleştirilir. Şekil 2.8'de görüldüğü gibi AsH₃ (Arsinin) ve H₂ gibi reaktif gazların, manifold sistemi (bağlantı elemanı) aracılığıyla reaktör denilen üniteye belirli oranlarda bir araya getirilerek birleştirilir. Bu gazlar ve metalorganik bileşikler reaktörde etkileşime girerek, üretimi hedeflenen yarı iletken malzemeyi oluşturan moleküllerin birleşmesini sağlar (Coleman 1997). Reaktif gazlar ve metalorganik bileşikler, reaktör içinde yüksek sıcaklıklarda ayrışarak yüzeyde tabaka halinde birikir. Örneğin, GaAs üretimi için trimetilgalyum ((CH₃)₃ Ga) metalorganik bileşiği ve AsH₃ reaktif gazı kullanılırken, Ga-

AlAs üretimi için $(\text{CH}_3)_3\text{Ga}$ ve trimetilalüminyum $(\text{CH}_3)_3\text{Al}$ metalorganik bileşikleri ile AsH_3 kullanılır. GaAlAs yarı iletkeni üretimi için MOCVD yönteminin şeması Şekil 2.8'de gösterilmektedir.



Şekil 2.8. GaAlAs üretiminde MOCVD yöntemi şeması (Karabulut 2008)

Başka bir kuantum nokta üretim tekniği ise koloidal sentez olarak adlandırılan süreçtir. 1993 yılından itibaren bilim dünyasına giren bu yöntem, bir sıvı içerisinde küçük nano parçacıkların üretilmesi esasına dayanır. İlk üretilen nano parçacıklar, boyutları 12-115 Å aralığında değişen CdS, CdSe ve CdTe nano kristalleridir (Murray vd. 1993; Konstantatos 2013). Koloidal sentezleme ile bu nano kristal yapıların elde edilmesi, diğer birçok kuantum noktanın elde edilmesi yolunda kilometre taşı olmuştur.

Yarı iletken kuantum noktalar hayatımızın hemen hemen her alanında karşımıza çıkmaktadır. Özellikle optoelektronik alanında kullanımının başlaması ile nanoteknolojik alandaki ilerlemeler için bir yapıtaşı haline gelmiştir. Bu teknolojik gelişmelerin başında, bir elektronik devre elemanı olan kuantum nokta transistörleri yer almaktadır. Kuantum nokta transistörlerinde elektrik akımı, kuantum noktalar vasıtasıyla kontrol edilmektedir (Kahmann vd. 2020). Bir diğer devre elemanı ise ışık emisyonunun kuantum noktalarla kontrol edilebildiği ışık yayan diyotlar (Light-emitting diodes, LED)'dir. LED'lerde ışığın rengi, kuantum noktalarla sağlanmaktadır (Fan vd. 2021). Veri depolama alanında kullanılan belleklerde de kuantum noktalardan faydalanılmaktadır. Ayrıca, ışığı elektrığe çevirmekte kullanılan güneş hücrelerinde verimliliği artırmak için kuantum noktalar kullanıldığı bilinmektedir (Chernomordik vd. 2017). Son yıllarda sıkça gündeme gelen kuantum bilgisayarlar da ise veriler, "kubit" diye adlandırılan kuantum bitleri ile temsil edilmektedir. Kuantum noktalar, bu bilgisayarlar da spinlerinden dolayı kubit olarak değerlendirilmektedir (Hu ve Sarma 2000). Yarı iletken kuantum noktalar, lazer teknolojisinde de kullanılmaktadır (Chow ve Jahnke 2013). Lazerlerde kullanımının artması ile daha has-

sas emisyon dalga boyu ayarlaması mümkün olmaktadır. Ayrıca kuantum nokta lazerleri, biyomedikal cihazlarda da etkin bir şekilde kullanılmaktadır.

2.7. Lineer ve Lineer Olmayan Optik

Lineer olmayan optik, malzemelerin elektromanyetik alanlara verdiği tepkilerle başlayan süreci ele almaktadır. Bu süreç, ancak dispersiyonsuz ortamda yoğun lazerlerle gerçekleştirilir. Bir malzeme üzerine gönderilen lazer ışığının etkisine karşı malzemede oluşan tepki, kuantum mekaniğinin temel ilkeleri doğrultusunda incelenir. Kuantum mekaniğinin yoğunluk matrisi formalizmi kullanılarak lineer ve lineer olmayan optik alınganlık ifadeleri elde edilir. Bu alınganlık ifadeleriyle lineer ve lineer olmayan soğurma katsayıları ve kırılma indisindeki lineer ve lineer olmayan değişimler türetilir. Söz konusu katsayıların türetilmesinin fiziksel temeli, malzemeye uygulanan lazerin elektrik alanının, malzemede oluşturduğu kutuplanma üzerindeki etkisine dayanır (Boyd 2008).

Lineer optikte, uygulanan ışığın $\mathcal{E}(t)$ elektrik alanı malzemede lineer bir kutuplanma yaratmaktadır. Bu doğrusal ilişki aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$P(t) = \epsilon_0 \chi^{(1)} \mathcal{E}(t). \quad (2.14)$$

Burada ϵ_0 boşluğun bağıl geçirgenliğini, $P(t)$ ve $\chi^{(1)}$ ise sırasıyla malzemede oluşan polarizasyonu ve malzemenin birinci merteye lineer alınganlığını (duygunluk) temsil etmektedir. $P(t)$ ve $\mathcal{E}(t)$, skaler nicelikler olarak kabul edilmektedir. $\chi^{(1)}$ katsayısı ise malzemenin uygulanan elektrik alana verdiği doğrusal tepkinin bir ölçüsüdür. $\mathcal{E}(t)$ 'nin zamana bağlı olması, kaynaktan çıkan ışığın zamana göre salınım yapan bir dalga olarak alınmasından kaynaklanır. Elektrik alanın yoğunluğunun düşük olduğu durumlarda yalnızca lineer optik süreçler gerçekleşirken, şiddet arttıkça lineer olmayan süreçler de ortaya çıkar. Lineer olmayan optikte elektrik alan ile polarizasyon ilişkisi Taylor açılımı yapıldığında,

$$\begin{aligned} P(t) &= \epsilon_0 [\chi^{(1)} \mathcal{E}(t) + \chi^{(2)} \mathcal{E}^2(t) + \chi^{(3)} \mathcal{E}^3(t) + \dots] \\ &\approx P^{(1)}(t) + P^{(2)}(t) + P^{(3)}(t) + \dots \end{aligned} \quad (2.15)$$

şeklinde olmaktadır. $\chi^{(2)}$ ve $\chi^{(3)}$ ise sırasıyla ikinci ve üçüncü merteye lineer olmayan alınganlıklardır. $P^{(2)}(t) = \epsilon_0 \chi^{(2)} \mathcal{E}^2(t)$ ve $P^{(3)}(t) = \epsilon_0 \chi^{(3)} \mathcal{E}^3(t)$ ise sırasıyla ikinci ve üçüncü merteye lineer olmayan polarizasyonu ifade etmektedir. Taylor açılımı, burada malzemenin elektrik alana verdiği lineer olmayan tepkiyi tespit etmek için kullanılmaktadır.

Lazerin elektrik ve manyetik alanları vektörel büyüklüklerdir. Ancak basitlik olması açısından, $\mathcal{E}(t)$ elektrik alanı skaler bir büyüklük olarak alınmaktadır. Lineer olmayan alınganlıkları ifade ederken, elektrik alanın farklı yönlerdeki bileşenleri üzerindeki etkile-

rini doğru şekilde modellemek için tensörler kullanılmaktadır. Ayrıca denklemlerde anlık tepki yaklaşımı geçerlidir. Bu durum, malzemede oluşan polarizasyonun, elektrik alanın herhangi bir t anında bir gecikme olmadan tepki olarak oluştuğu anlamına gelir. Anlık tepki yaklaşımı, ortamın dispersiyonsuz olması ve enerji kaybı olmaması anlamına da gelmektedir. Anlık tepki yaklaşımı uygulandığında; uygulanan elektrik alanın frekansına normalde bağlı olan lineer olmayan alınganlıklar, frekanstan bağımsız hale gelmektedir (Shen 1984; Boyd 2008).

2.7.1. İkinci ve üçüncü merteye optik süreçler

Lineer olmayan optik etkileşimleri incelemek için $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}e^{-i\omega t} + \mathcal{E}^*e^{i\omega t}$ elektrik alanına sahip bir lazer ele alınmaktadır. Bu lazer, bir kristal malzeme ile etkileşime girdiğinde, malzemede tepki olarak oluşan polarizasyon hesaplanabilir. Elektrik alan ifadesi, $P^{(2)}(t) = \epsilon_0\chi^{(2)}\mathcal{E}^2(t)$ denkleminde yerine yazıldığında (Boyd 2008),

$$P^{(2)}(t) = 2\epsilon_0\chi^{(2)}\mathcal{E}\mathcal{E}^* + \epsilon_0\chi^{(2)}\mathcal{E}^2e^{-i2\omega t} + \epsilon_0\chi^{(2)}(\mathcal{E}^*)^2e^{i2\omega t} \quad (2.16)$$

şeklinde ikinci merteye lineer olmayan polarizasyon elde edilir. Burada ilk terim, elektromanyetik radyasyon oluşumuna katkı sağlamaz ve statik bir elektrik alan oluşturur. Bu süreç, Optiksel Doğrultma (Optical Rectification, OR) olarak bilinmektedir. İkinci ve üçüncü terimler ise, uygulanan alanın frekansının iki katı kadar bir tepki ile elektromanyetik radyasyon üretildiğini göstermektedir. Bu optiksel süreç, İkinci Harmonik Üretim (Second Harmonic Generation, SHG) olarak adlandırılmaktadır.

Kristale monokromatik $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E} \cos(\omega t)$ elektrik alanı uygulanırsa, üçüncü merteye lineer olmayan polarizasyon ise

$$P^{(3)}(t) = \frac{1}{4}\epsilon_0\chi^{(3)}\mathcal{E}^3 \cos(3\omega t) + \frac{3}{4}\epsilon_0\chi^{(3)}\mathcal{E}^3 \cos(\omega t) \quad (2.17)$$

formunda elde edilir (Boyd 2008). Birinci terim, ω frekansı ile uygulanan elektrik alanının oluşturduğu 3ω 'lık tepkinin ifadesidir. Bu süreç Üçüncü Harmonik Üretim (Third Harmonic Generation, THG) olarak adlandırılır.

2.8. Yoğunluk Matrisi

Kuantum mekaniksel bir sistem tanımlanırken, parçacığın durumu Ψ dalga fonksiyonları ile ifade edilir. Aslında dalga fonksiyonu tek başına ölçülebilir bir fiziksel büyüklüğü ifade etmemekte, ancak karesi alındığında parçacığın durumu hakkında bilgi edinilebilmektedir. Dalga fonksiyonunun karesi, olasılık yoğunluğunu vermektedir. Örneğin, parçacığın belirli bir konumda bulunma olasılığı kuantum mekaniksel olarak kolaylıkla

incelenebilir. Ancak incelenen sistem karmaşık bir yapıda ise, olasılık dağılımını doğru tanımlamak için yoğunluk matris formalizmine ihtiyaç duyulur. Yoğunluk matrisi, hem saf durumların (pure states) hem de karmaşık durumların (mixed states) istatistiği için kullanılmaktadır. Karmaşık durum, sistemin tek bir kuantum durumunda olmayıp olasılıklar dahilinde birden fazla durumda bulunmasını ifade etmektedir. Yoğunluk matris formalizmi ile lineer olmayan optik alınganlık denklemleri türetilmektedir.

Kuantum mekaniksel bir sistem, birden fazla durum vektörü ile temsil edilebilir. Bu durumlardan her birinde, parçacığın belirli ihtimallerle bulunma olasılığı vardır. Bu ihtimaller istatistiksel olarak düşünüldüğünde yoğunluk matrisi (veya yoğunluk operatörü),

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| \quad (2.18)$$

şeklinde yazılır. p_i , kuantum mekaniksel sistemin $|\Psi_i\rangle$ durumunda bulunma olasılığıdır. Bu olasılıkların toplamı, yoğunluk matrisinin normunun 1 olması gerektiğini ifade eder. Yoğunluk matrisi, özdeğerleri reel olan hermityen bir operatördür. Ayrıca, saf durumlarda beklenen değere karşılık gelmektedir. Bir A gözlenirinin beklenen değeri, saf durum için

$$\langle A \rangle_\rho = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \quad (2.19)$$

ile verilir. Karmaşık bir sistem için ise

$$\langle A \rangle_{\rho_{\text{mix}}} = \text{Tr}(\hat{\rho}_{\text{mix}}\hat{A}) \quad (2.20)$$

şeklinde dir. Tr ifadesi matrisin izini yani diagonal elemanlarının toplamını ifade etmektedir. Yoğunluk matrisinin zamanla evrimi, zamana bağlı Schrödinger dalga denklemi üzerinden hesaplanır. Zamana bağlı Schrödinger dalga denklemi, $\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$ ve hermitik eşleniği de $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = \langle\psi|\hat{H}$ olmak üzere yoğunluk matrisinin zamanla evrimi,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (2.21)$$

denklemi ile verilir. Bu denklem, Liouville veya von Neumann denklemi olarak bilinir. Liouville denklemi ile bir kuantum sisteminin zaman içindeki durumu analiz edilebilmektedir. Denklem (2.21)'de köşeli parantez içindeki kısım, Hamiltonyen ile yoğunluk matrisinin komütasyon ilişkisini ifade eder. Bu denklem,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_0 + \hat{H}_1, \hat{\rho}] \quad (2.22)$$

şeklinde yazılarak Pertürbasyon teorisi ile çözülmek için uygun bir forma getirilmiş olur. H_0 terimi, Hamiltonyen operatörünün pertürbe olmamış kısmıdır. H_1 ise malzemeye uygulanan alan ile malzeme etkileşmesini tanımlayan Hamiltonyen operatörüdür. Bu denkleme, atomlar arası etkileşimler veya spin-orbit etkileşimleri gibi bazı ek etkileşmeler dahil edilmemiştir. Bu etkileşimler, denkleme sönüm terimi eklenmesi ile dahil edilmektedir. $|n\rangle$ ve $|m\rangle$ seviyeleri dikkate alındığında sönüm terimi eklenmiş Liouville denklemi,

$$\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_0 + \hat{H}_1, \hat{\rho}]_{nm} + \Gamma_{nm}(\rho_{nm} + \rho_{nm}^{(eq)}) \quad (2.23)$$

şeklinde ifade edilir. Γ_{nm} , $|n\rangle$ ve $|m\rangle$ durumları arasındaki bozulma hızı veya relaksasyon hızı olarak adlandırılır. Fiziksel süreçlerin zaman tersinirliği ilkesinden yararlanılarak, $\Gamma_{nm} = \Gamma_{mn}$ eşitliği kabul edilir. Ayrıca, $\rho^{(eq)}$ ifadesi yoğunluk matrisinin termal dengedeki (thermal equilibrium) değerini ifade etmektedir.

2.8.1. Yoğunluk matrisinin pertürbasyon teorisi ile çözümü

Pertürbasyon (Tedirgeme) yöntemi, analitik olarak çözülmesi zor olan karmaşık sistemlerin yaklaşık çözümlerini elde etmek için sıkça kullanılan bir tekniktir. (2.23) denkleminin analitik çözümü yoktur. Pertürbe olmamış Hamiltonyen $\hat{H}_0$, pertürbasyon etkisi yokken sistemin çözümünün ve enerji özdeğerlerinin hesaplanmasının daha basit olduğu kısımdır. $\hat{H}_1$ ise pertürbasyon terimidir ve bu terimin, $\hat{H}_0$ 'a kıyasla çok daha küçük olması, yani pertürbasyonun küçük olması gerekir.

Bir sistemin dış alanlarla etkileşimi, dipol momentleri aracılığıyla gerçekleşir. Sistemin dış elektrik alan $\mathcal{E}(t)$ ile etkileşimini, $\hat{H}_1$ ile ifade edilir. Elektrik dipol yaklaşımı dikkate alınarak $\hat{H}_1$,

$$\hat{H}_1 = -\hat{\mu}\mathcal{E}(t) \quad (2.24)$$

şeklinde tanımlanır. Burada, $\hat{\mu}$ elektrik dipol moment operatörünü göstermektedir. Elektrik yükü e ve konum vektörü $\hat{r}$ olmak üzere, elektrik dipol moment $\hat{\mu} = -e\hat{r}$ olarak tanımlanır. $[\hat{H}_0, \rho]_{nm} = \langle n | \hat{H}_0 \rho - \rho \hat{H}_0 | m \rangle$ komütasyon ilişkisi kullanılarak, $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ frekansı ve $\rho_{nm} = \langle n | \rho | m \rangle$ eşitliklerinden faydalanılarak Denklem (2.23) düzenlenirse,

$$\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = -i\omega_{nm}\rho_{nm} + \frac{1}{i\hbar} \sum_k \left(\langle n | \hat{H}_1 | k \rangle \rho_{km} - \rho_{nk} \langle k | \hat{H}_1 | m \rangle \right) - \Gamma_{nm}(\rho_{nm} - \rho_{nm}^{(eq)}) \quad (2.25)$$

ifadesi elde edilir. İlk terim, H_0 'ın ρ_{nm} ile komütasyonunu temsil eder. Pertürbasyon yönteminde pertürbasyon terimi, değeri 0 ile 1 arasında değişen λ parametresi ile çarpılarak

λH_1 şeklinde ifade edilir. Yani H_1 , λH_1 olarak alınır. $\lambda = 0$ olduğunda sistem pertürbe olmamıştır. λ 'nın artan değerleri, pertürbasyonun etkisinin arttığını göstermektedir. Eğer Denklem (2.25) bir kuvvet serisi olarak çözülebiliyorsa, ρ_{nm} ifadesi de Denklem (2.26)'da verildiği gibi bir kuvvet serisi şeklinde yazılır.

$$\rho_{nm} = \rho_{nm}^{(0)} + \lambda \rho_{nm}^{(1)} + \lambda^2 \rho_{nm}^{(2)} + \dots \quad (2.26)$$

Denklem (2.26)'deki λ katsayılarının her birinin yanındaki çarpanlar Denklem (2.25)'deki ile eşitlenirse,

$$\frac{\partial \rho_{nm}^{(0)}}{\partial t} = -i\omega_{nm}\rho_{nm}^{(0)} - \Gamma_{nm}(\rho_{nm}^{(0)} - \rho_{nm}^{(eq)}), \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial \rho_{nm}^{(1)}}{\partial t} = -i\omega_{nm}\rho_{nm}^{(1)} + \frac{1}{i\hbar} [H_1, \rho^{(0)}]_{nm} - \Gamma_{nm}\rho_{nm}^{(1)}, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \rho_{nm}^{(2)}}{\partial t} = -i\omega_{nm}\rho_{nm}^{(2)} + \frac{1}{i\hbar} [H_1, \rho^{(1)}]_{nm} - \Gamma_{nm}\rho_{nm}^{(2)}, \quad (2.29)$$

denklem serileri elde edilir. Örneğin, λ 'nın sıfırcı kuvveti, sistemin pertürbe edilmemiş kısmını temsil etmektedir. Bu durumda, sıfırcı kuvvet ile ilişkili denklem serilerinin ilki, yukarıdaki seride en baştaki ifadeye karşılık gelir. Sıfırcı mertebe çözüm, kararlı (durağan) durumlara karşılık gelir. Kararlı durumda ρ_{nm} elemanları artık zamanla değişmeyeceği için Denklem (2.27)'nin kararlı çözümü $\rho_{nm}^{(0)} = \rho_{nm}^{(eq)}$ durumuna karşılık gelmektedir. Denklemler dt 'ye göre integre edilerek çözümler elde edilir.

2.8.2. Lineer ve lineer olmayan optik alınganlıklar

Yoğunluk matris yöntemi kullanılarak lineer ve lineer olmayan optik alınganlık ifadeleri elde edilebilir. Bu amaçla ω_p , p . frekans bileşenine karşılık gelen açısal frekans olmak üzere uygulanan elektrik alanın zamana bağlı ifadesi,

$$\mathcal{E}(t) = \sum_p \mathcal{E}_p e^{i\omega_p t} \quad (2.30)$$

olarak alınır. Bu durumda 1. mertebe yoğunluk matrisi ifadesi,

$$\rho_{nm}^{(1)} = (\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)}) \sum_p \frac{\mathcal{E}_p \mu_{nm}}{\hbar(\omega_{nm} - \omega_p - i\Gamma_{nm})} e^{-i\omega_p t} \quad (2.31)$$

şeklinde elde edilmektedir. (2.20) denklemi kullanılarak N , ortam yoğunluğu ve μ 'de dipol matris elemanı olmak üzere lineer kutuplanma, $P^{(1)} = N \text{tr}(\mu \rho^{(1)})$ olarak ifade

edilir. Denklem (2.14) ile verilen lineer kutuplanma eşitliğindeki $\chi^{(1)}(\omega)$ çekilirse,

$$\chi^{(1)}(\omega) = N \sum_{nm} (\rho_{mm}^{(0)}(\omega) - \rho_{nn}^{(0)}(\omega)) \left[\frac{\mu_{mn}^i \mu_{nm}^j}{\hbar(\omega_{nm} - \omega_p - i\Gamma_{nm})} \right] \quad (2.32)$$

ifadesi elde edilir. Burada lineer optik alınganlığın, dipol matris elemanının karesi ile doğru orantılı olduğu sonucuna varılabilir. P_I , permütasyon operatörü olmak üzere ikinci ve üçüncü mertebe optik alınganlık ifadeleri de

$$\begin{aligned} \chi_{ijk}^{(2)}(\omega_p + \omega_q, \omega_p, \omega_q) = & \frac{N}{2\hbar^2} \sum_{mnv} (\rho_{mm}^{(0)}(\omega) - \rho_{vv}^{(0)}(\omega)) \times \\ & \left\{ \frac{\mu_{mn}^i \mu_{nv}^j \mu_{vm}^k}{[(\omega_{nm} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{nm}][(\omega_{vm} - \omega_p) - i\Gamma_{vm}]} \right. \\ & + \frac{\mu_{mn}^i \mu_{nv}^k \mu_{vm}^j}{[(\omega_{nm} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{nm}][(\omega_{vm} - \omega_q) - i\Gamma_{vm}]} \\ & - \frac{\mu_{nv}^i \mu_{mn}^j \mu_{vm}^k}{[(\omega_{vn} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{vn}][(\omega_{vm} - \omega_p) - i\Gamma_{vm}]} \\ & \left. - \frac{\mu_{nv}^i \mu_{mn}^k \mu_{vm}^j}{[(\omega_{vn} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{vn}][(\omega_{vm} - \omega_q) - i\Gamma_{vm}]} \right\} \end{aligned} \quad (2.33)$$

ve

$$\begin{aligned} \chi_{kjih}^{(3)}(\omega_p + \omega_q + \omega_r, \omega_r, \omega_q, \omega_p) = & \frac{N}{\hbar^3} P_I \sum_{nmvl} \left\{ \right. \\ & \frac{\mu_{mn}^k \mu_{nv}^j \mu_{vl}^i \mu_{lm}^h (\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{ll}^{(0)})}{[(\omega_{nm} - \omega_p - \omega_q - \omega_r) - i\Gamma_{nm}][(\omega_{vm} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{vm}][(\omega_{lm} - \omega_p) - i\Gamma_{lm}]} \\ & - \frac{\mu_{mn}^k \mu_{nv}^j \mu_{lm}^i \mu_{vl}^h (\rho_{ll}^{(0)} - \rho_{vv}^{(0)})}{[(\omega_{nm} - \omega_p - \omega_q - \omega_r) - i\Gamma_{nm}][(\omega_{vm} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{vm}][(\omega_{vl} - \omega_p) - i\Gamma_{vl}]} \\ & + \frac{\mu_{mn}^k \mu_{vm}^j \mu_{nl}^i \mu_{lv}^h (\rho_{vv}^{(0)} - \rho_{ll}^{(0)})}{[(\omega_{nm} - \omega_p - \omega_q - \omega_r) - i\Gamma_{nm}][(\omega_{nv} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{nv}][(\omega_{lv} - \omega_p) - i\Gamma_{lv}]} \\ & \left. + \frac{\mu_{mn}^k \mu_{vm}^j \mu_{lv}^i \mu_{nl}^h (\rho_{ll}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)})}{[(\omega_{nm} - \omega_p - \omega_q - \omega_r) - i\Gamma_{nm}][(\omega_{nv} - \omega_p - \omega_q) - i\Gamma_{nv}][(\omega_{nl} - \omega_p) - i\Gamma_{nl}]} \right\} \end{aligned} \quad (2.34)$$

olarak elde edilir. P_I operatörü, ω_p , ω_q ve ω_r frekansları ve bu frekanslar ile ilişkili indisleri permütasyon işlemine tabi tutmaktadır. Pertürbasyon teorisi ile elde edilmiş olan optik alınganlık denklemleri kullanılarak, lineer ve lineer olmayan soğurma katsayıları ile kırılma indisindeki toplam değişim denklemleri elde edilecektir.

2.9. Lineer ve Lineer Olmayan Soğurma Katsayısı ve Kırılma İndisi

Optik gözlenirler, bir malzemeye uygulanan elektromanyetik alanın malzemede ortaya çıkardığı özellikleri ifade eder. Bu gözlenirler arasında optik alınganlık, soğurma katsayısı, kırılma indisi gibi malzemeyi karakterize eden özellikler yer almaktadır. Denklem (2.32) ve (2.34), sırasıyla lineer ve lineer olmayan optik alınganlığın permütasyon sonucu elde edilmiş ifadeleridir. Son durum (f) ile ilk durum (i) arasındaki geçişi tanımlayan dipol matris elemanı, $M_{fi} = \langle \psi_f | \mathbf{d} | \psi_i \rangle$ ifadesiyle gösterilir ve elektrik dipol momenti $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$ olarak tanımlanır.

(2.32) ve (2.34) denklemleri baz alınarak lineer ve lineer olmayan optik alınganlıklar aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\chi^{(1)}(\omega) = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\sigma_s |M_{fi}|^2}{[E_{fi} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{fi}]}, \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} \chi^{(3)}(\omega) = & -\frac{1}{\epsilon_0} \frac{\sigma_s |M_{fi}|^2 |E|^2}{(E_{fi} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{fi})} \\ & \times \left[\frac{4|M_{fi}|^2}{(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2} - \frac{(\mu_{ff} - \mu_{ii})^2}{(E_{fi} - i\hbar\Gamma_{fi})(E_{fi} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{fi})} \right]. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Lineer ve lineer olmayan optik alınganlık ifadeleri kullanılarak soğurma katsayıları ve kırılma indisi denklemleri türetilabilmektedir. Lineer dielektrik sabiti $\epsilon^{(1)} = 1 + \chi^{(1)}$ alınarak kırılma indisi,

$$n(\omega) = \sqrt{\epsilon^{(1)}(\omega)} = \sqrt{1 + \chi^{(1)}(\omega)} \approx 1 + \frac{1}{2}\chi^{(1)}(\omega) \quad (2.37)$$

ile verilir. Atomik yoğunluk çok küçük olduğunda $\chi^{(1)} \ll 1$ olmaktadır. Kırılma indisi, bir malzeme içinde düzlem dalganın yayılma biçimi ile ilişkilidir. Bu dalga, $\tilde{\mathcal{E}}(z, t) = \mathcal{E}_0 e^{i(kz - \omega t)} + c.c$ biçiminde yazılır ve burada k ,

$$k = \frac{n(\omega)\omega}{c} \quad (2.38)$$

şeklinde verilir. $I = nc\epsilon_0 \langle \tilde{\mathcal{E}}(x, t) \rangle^2$ olarak verilen dalganın yoğunluğu, uzaya bağlı olarak $I(z) = I_0 e^{-\alpha x}$ şeklinde değişmektedir. Kırılma indisi reel ve sanal kısımlarının toplamı olarak $n(\omega) = n + in^*$ şeklinde alınır. Soğurma katsayısı bu durumda aşağıdaki şekilde alınmaktadır:

$$\alpha = \frac{2n^*\omega}{c}. \quad (2.39)$$

Lineer duygunluk katsayısı $\chi^{(1)}(\omega) = \chi^{(1)} + i\chi^{(1)*}$ alınarak soğurma katsayısı,

$$\alpha = \frac{\chi^{(1)*}\omega}{c} \quad (2.40)$$

formunda yazılmaktadır. Soğurma katsayısı ile optik alınganlık arasındaki bağıntı genel olarak aşağıdaki gibi alınır:

$$\alpha(\omega) = \omega \left(\frac{\mu}{\epsilon} \right)^{1/2} \text{Im}(\epsilon_0 \chi(\omega)). \quad (2.41)$$

Bu bağıntıdan faydalanarak lineer ve lineer olmayan soğurma katsayıları sırasıyla sırasıyla

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \frac{|M_{fi}|^2 \rho_c \hbar \Gamma_{fi}}{(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2}, \quad (2.42)$$

ve

$$\begin{aligned} \alpha^{(3)}(\omega, I) = & -\omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \frac{I}{2\epsilon_0 n_{RC}} \frac{|M_{fi}|^2 \rho_c \hbar \Gamma_{fi}}{[(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2]^2} \\ & \times \left[4|M_{fi}|^2 - \frac{|M_{ff} - M_{ii}|^2 (3E_{fi}^2 - 4E_{fi}\hbar\omega + (\hbar\omega)^2 - (\hbar\Gamma_{fi})^2)}{E_{fi}^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2} \right] \end{aligned} \quad (2.43)$$

şeklinde türetilmektedir. Toplam soğurma katsayısı ise lineer ve lineer olmayan terimlerinin toplamı olmak üzere,

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I) \quad (2.44)$$

şeklinde alınır (Ahn ve Chuang 1987; Ünlü vd. 2006). Burada μ ve ϵ_0 , sırasıyla vakum geçirgenliği ve boşluğun elektriksel geçirgenliğidir. Planck sabitinin $\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$ J.s olduğu bilinmektedir. c simgesi ışığın boşluktaki hızını ifade eder ve değeri $c = 3 \times 10^8$ m/s'dir. E_{fi} simgesi ise son kuantum durumu (f) ile ilk durum (i) arasındaki enerji farkını göstermektedir. Elektronun etkin yoğunluğu ise burada ρ_c ile verilmiştir. Bu değer, 100 Å genişliğine ve 340 meV bariyer yüksekliğine sahip bir kuyunun 77 K sıcaklığındaki bir ortamda $E_F = 25.38$ meV Fermi seviyesi alınarak değeri, 3×10^{16} cm⁻³ olarak belirlenmiştir (Ahn ve Chuang 1987; Ünlü vd. 2006). Son olarak Γ_{fi} ise gevşeme hızıdır ve gevşeme süresi olan T_{fi} ile arasındaki ilişki $\Gamma_{fi} = 1/T_{fi}$ ile verilir.

Yarı iletken bir malzemenin ışık ile etkileşiminde kırılma indisi oldukça önemli

bir gözlenirdir. Kırılma indisinin yüksek olduğu ortamda ışığın hızı yavaşlar. Ayrıca, lazer ışığının I yoğunluğu (intensity) arttıkça malzemenin kırılma indisi değişir. Yüksek ışık yoğunluğu uygulandığı durumlarda lineer olmayan kırılma indisi ortaya çıkar. Lineer ve lineer olmayan kırılma indislerindeki değişimler, yoğunluk matrisi yöntemiyle türetilmektedir. Optik alınganlık ile kırılma indisi arasındaki bağıntı,

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_R} = Re \left(\frac{\chi(\omega)}{2n_R^2} \right) \quad (2.45)$$

şeklindedir. Lineer ve lineer olmayan kırılma indislerindeki değişim sırasıyla,

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_R} = \frac{1}{2n_R^2 \epsilon_0} |M_{fi}|^2 \rho_c \left(\frac{E_{fi} - \hbar\omega}{(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2} \right) \quad (2.46)$$

ve

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_R} = & -\frac{\mu c}{4n_R^3 \epsilon_0} \frac{|M_{fi}|^2 \rho_c I}{((E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2)^2} \left[4(E_{fi} - \hbar\omega) |M_{fi}|^2 \right. \\ & \left. - \frac{(M_{ff} - M_{ii})^2}{E_{fi}^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2} ((E_{fi} - \hbar\omega)(E_{fi}(E_{fi} - \hbar\omega) - (\hbar\Gamma_{fi})^2) - (\hbar\Gamma_{fi})^2(2E_{fi} - \hbar\omega)) \right] \quad (2.47) \end{aligned}$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (2.46) ve (2.47) ile verilen eşitliklerin toplamı, kırılma indisindeki toplam değişimi vermektedir. Kırılma indisindeki toplam değişim, Denklem (2.48) ile ifade edilir.

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_R} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_R} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_R}. \quad (2.48)$$

2.10. Optik Gözlenirlerin Keşfi, Ölçümü ve İlgili Çalışmalar

Pierre Bouguer, 1729 yılında yayınlamış olduğu çalışmasında, ışık yoğunluğunun bir ortamdan başka bir ortama girdiğinde azaldığını ortaya koymuştur (Bouguer 1729). Johann Heinrich Lambert ise 1760 yılında yayınlamış olduğu kitabında, ışığın bir ortamdan geçerken, ortam kalınlığına göre üstel olarak azaldığını matematiksel olarak ifade etmiştir (Lambert 1760). Günümüzde Beer-Lambert yasası olarak bilinen yasa, bu temellere dayanır. August Beer ise Lambert'in kurduğu yasaya çözeltilerdeki madde konsantrasyonunu da ekleyerek, ışığın giriş ve çıkış yoğunlukları arasındaki logaritmik ilişki cinsinden soğurma katsayısı ifadesini türetmiştir (Beer 1852).

Günümüzde makro ölçekteki malzemelerin soğurma katsayısı, spektrofotometre ile kolayca ölçülmektedir. Malzeme üzerine gönderilen monokromatör bir ışığın malzemenin geçmeden ve geçtikten sonraki şiddeti belirlenerek malzemenin kalınlığı da dik-

kate alındığında Beer-Lambert yasası ile soğurma katsayısı hesaplanabilmektedir. Nano boyuttaki malzemeler için ise hacim küçüleceğinden dolayı, bu ölçüm sistemi optimize edilir. Lazer ışığı, nanometre boyutta bir noktaya lensler yardımıyla odaklanır. Mikrospektroskopik yöntemlerle yansıyan ve geçen ışık tespit edilerek lineer soğurma katsayıları incelenmektedir.

Kırılma indisi kavramının temelleri, Willebrord Snellius tarafından, günümüzde Snell yasası olarak bilinen, ışığın bir ortamdan diğerine geçerken gelme açısı ile kırılma açısı arasındaki ilişkiyi matematiksel olarak açıklayan prensip üzerinden atılmıştır (Hardy ve Perrin 1932). Kırılma indisinin ölçümünde kullanılan en temel yöntemler; refraktometre, spektrometrik yöntemler, interferometre, kritik açı yöntemi ve ellipsometrik yöntemlerdir. Refraktometre, ışığın bir prizma yada sıvı malzemeden geçerken yön değiştirme açısını ölçerek kırılma indisini belirler (Moreels vd. 1984). Spektrometrik yöntemde de bir prizmadan ışığın geçirilerek, spektral kaymadaki açı ölçümlerinin analizi ile kırılma indisi hesaplanmaktadır (Wiley ve Garrett 1951). Fabry-Perot veya Michelson interferometresinde ise, ışın bölücü yardımıyla iki kola ayrılan lazerin, malzemenin yerleştirildiği kolda oluşturduğu faz kayması kullanılarak kırılma indisi yüksek bir hassasiyetle belirlenmektedir (Fendley 1982). Ayrıca kritik açı metodu ile de kırılma indisi hesaplanmaktadır. Bu yöntem, ışığın bulunduğu ortamın yoğunluğundan daha az yoğun bir ortama geçişinde tam yansımanın gerçekleştiği kritik açının ölçülerek Snell yasası ile kırılma indisinin bulunması esasına dayanır (Onofri 1999). Son olarak, ellipsometri yönteminde polarize ışık bir yüzeye düşürülerek, yansıma sonrası polarizasyon durumundaki değişiklikler ölçülmekte ve bu sayede malzemelerin kırılma indisi ile soğurma katsayısı hassas bir şekilde belirlenebilmektedir (McCrackin vd. 1963).

Işık malzeme etkileşimindeki lineer etkiler, düşük yoğunluklu elektromanyetik dalga altında olmaktadır. Lineer optik gözlenirler, ışık yoğunluğundan bağımsızdır. Öte yandan, lineer olmayan optik gözlenirler ise ışık yoğunluğuna bağlıdır. Lineer olmayan tepkinin keşfi 1961 yılına, Peter Franken ve ekibinin ikinci harmonik üretimle ilgili yaptıkları çalışmalara dayanır (Franken vd. 1961). Lineer olmayan kırılma indisi, başta doğrusal olmayan interferometrik yöntemler (Moran vd. 1975; Weber vd. 1978) olmak üzere çeşitli tekniklerle hesaplanabilmekteydi (Owyong 1973; Friberg ve Smith 1987; Adair vd. 1987). 1990'lerden itibaren lineer olmayan soğurma katsayısı ve kırılma indisi Z tarama yöntemiyle ışık yoğunluğuna bağlı olarak doğrudan ölçülmektedir (Sheik-Bahae vd. 1990; Smith vd. 1999; Wei vd. 1992). Bu teknikte malzeme, bir z eksenı boyunca hareket ettirilmekteyken odaklanmış halde bir Gauss ışını hedefteki malzemeye gönderilir. Malzemenin z eksenı boyunca hareket ettirilmesinde, ışığın nasıl iletildiği tespit edilir. Odak noktası $z = 0$ olarak kabul edilerek; odak noktasından uzak mesafelerde, yani $z < 0$ ve $z > 0$ durumlarında ışık yoğunluğu düşük olduğu analiz edilir. Bu durumda $z \gg 0$ ve $z \ll 0$

durumlarında lineer olmayan etkiler ihmal edilebilir seviyeye düşer. Odak noktasına yaklaşıldığında ise ışık yoğunluğu giderek artar ve lineer olmayan etkiler görülür. Lazer ışığının yoğunluğuna bağlı olarak, odak noktası ($z = 0$) civarında, doğrusal olmayan kırılma indisi ve soğurma etkileri belirgin hale gelmektedir. Bu lineer olmayan etkiler, iletimdeki değişimlerin analizi sayesinde lineer olmayan optik gözlenirlerin hesaplanmasını mümkün kılar (Sheik-Bahae vd. 1990).

Lineer ve lineer olmayan optik gözlenirlerin ölçümü alanında geliştirilen deneysel ve teorik yöntemler, tarihsel süreçte önemli bir ilerleme kaydetmiş ve günümüzde düşük boyutlu kuantum yapıların optik özelliklerinin analizine temel teşkil etmiştir. 1980'li yıllardan itibaren kuantum yapıların lineer ve lineer olmayan optik özellikleri hakkında çalışmalar yapılmıştır (Miller vd. 1981; Chemla ve Miller 1985; Schmitt-Rink vd. 1989). Bu süreçte, kuantum yapıların lineer ve lineer olmayan optik özellikleri üzerine elektrik ve manyetik alan etkisinin incelendiği ilk çalışmalar önemli bir yer tutmuştur (Ahn ve Chuang 1987; Maksym ve Chakraborty 1990). Çünkü elektrik ve manyetik alan etkisi, enerji seviyelerinin modülasyonunu sağladığı için optik gözleniri doğrudan etkilemektedir. Farklı kuantum yapıların çeşitli kuantum sınırlama potansiyelleri altında ikinci ve üçüncü harmonik üretim katsayıları (Duque vd. 2013; Yesilgul vd. 2017; Ugan ve Bahar 2020; Kirak ve Yılmaz 2022) ile OR katsayıları (Guo ve Gu 1993; Li vd. 2008; Karabulut vd. 2011) elektrik ve manyetik alan altında incelenmiştir. Bunun yanı sıra, elektrik ve manyetik alanların lineer ve lineer olmayan soğurma katsayıları ve kırılma indisindeki toplam değişime etkisi, farklı kuantum yapıları ve sınırlama potansiyelleri altında yoğun bir şekilde araştırılmıştır (Karimi ve Rezaei 2011; Al vd. 2015; Ugan vd. 2021). Bu çalışmaların bir kısmı, spin-yörünge etkileşimini de göz önünde bulundurarak gerçekleştirilmiştir (Karaaslan vd. 2018; Al vd. 2021). Spin etkileri hesaplara katıldığında enerji özdeğerlerinin yarıldığı görülmektedir. Ayrıca, safsızlık ve boyut etkileri, 1980'li yıllardan itibaren kuantum yapıların optik ve elektronik özellikleri üzerindeki etkilerini anlamak amacıyla detaylı olarak araştırılmıştır (Bastard 1981; Norris ve Bawendi 1996; Xie 2010; Baghramyan vd. 2014; Kirak 2021a; Fakkahi vd. 2022; Toscano-Negrette ve et al. 2023; Mandal vd. 2024). Örneğin, GaAs/Al_xGa_{1-x}As heteroyapılarında Al konsantrasyonunun artışı, toplam soğurma katsayısında bir artışa neden olurken, kuantum kuyusunun uzunluğunun artması soğurma katsayısını azaltmaktadır (Ünlü vd. 2006).

Sıcaklık ve hidrostatik basınç gibi çevresel etkiler, kuantum yapıların optik ve elektronik gözlenirlerini önemli ölçüde etkiler. Bu dış etmenlerdeki değişiklikler, taşıyıcıların kuantum yapılarındaki hareketini değiştirir ve dolayısıyla sistemin optik tepkilerinde farklılıklara yol açar (Duque vd. 2011; Bouzaïene vd. 2013; Rezaei ve Kish 2013; Vaseghi vd. 2015; Bera ve Ghosh 2017). Sıcaklık ve hidrostatik basınç etkisi, hesaplamalara yalnızca elektron kütesinin sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlı olarak değişmesiyle değil, aynı

zamanda dielektrik sabitinin bu çevresel parametrelere bağlı olarak değişim göstermesiyle de dahil edilir (Ortakaya ve Kirak 2016; Khordad ve Vaseghi 2019). Ayrıca, ampirik olarak türetilmiş sıcaklık ve hidrostatik basınç bağımlı elektron yoğunluğu ile potansiyel derinliği kullanılarak lineer ve lineer olmayan optik gözlenirler detaylı şekilde incelenmiştir (Bayrak vd. 2024). Bu tez çalışmasında, etkin kütle, potansiyel derinliği ve etkin elektron yoğunluğunun sıcaklık ve hidrostatik basınca göre değişimi dikkate alınarak, lineer ve lineer olmayan optik gözlenirler incelenmiştir.

Kuantum yapılarıdaki elektronların davranışını daha hassas bir şekilde inceleyebilmek için, elektron kütlelerinin yalnızca sıcaklık ve hidrostatik basınca değil, aynı zamanda konuma bağlı olarak değişmesi de dikkate alınmaktadır. Konuma bağlı etkin kütlelerin uzaysal geometrik formu tam olarak bilinmediğinden, literatürde farklı kütle formlarına yönelik yaklaşımlar geliştirilmiştir (Rajashabala ve Navaneethakrishnan 2006, 2008; Peter ve Navaneethakrishnan 2008a; Ghosh ve Ghosh 2018). Farklı kütle formlarının lineer ve lineer olmayan optik gözlenirlere olan etkisi çalışılmıştır (Khordad 2011, 2012; Keshavarz ve Zamani 2013; Ghosh vd. 2016). Ayrıca, kütlelerin uzay bağımlı formunun yanı sıra sıcaklık ve basınç etkilerini de içeren çalışmalar mevcuttur (Tuzemen vd. 2024). Bu tez çalışmasında, iki farklı uzay bağımlı kütle modeli ele alınarak, kütle eğriliğinin optik gözlenirler üzerindeki etkisi tartışılmış ve öne sürülen kütle modellerinin fiziksel gerekçeleri ortaya konulmuştur.

2.11. Termodinamik Gözlenirler

Bölüşüm fonksiyonu (Z), bir termodinamik sistemdeki tüm mikrodurumların işgal olasılıklarının toplamını ifade eden boyutsuz bir fonksiyondur. Bu fonksiyonun temeli, istatistik ve olasılık yasalarına dayanmaktadır (Karaoğlu 2012). E_i , termodinamik bir sistemin i . mikrodurumuna karşılık gelen enerji olmak üzere, bir mikrodurumun $P(E_i)$ işgal edilme olasılığı $e^{-\beta E_i}$ ile orantılıdır. Bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (2.49)$$

şeklinde formüle edilmektedir. Denklem (2.49)'deki k_B , Boltzmann sabitini temsil etmektedir. Termodinamik β parametresi, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ile verilmektedir. Her bir olası mikrodurum için işgal edilme olasılıkları toplandığında, toplam 1 olmalıdır. O halde her bir işgal edilme olasılığı Z bölüşüm fonksiyonu ile normalize edilerek $P(E_i) = e^{-\beta E_i} / Z$ sağlanmış olur. Bu teoriye Maxwell-Boltzman istatistiği adı verilmiştir (Huang 2009). Z bölüşüm fonksiyonu, bir sistemin termodinamik ve manyetik özelliklerinin analizinde önemli bir araçtır. Bu çalışmada incelenen termodinamik ve manyetik gözlenirler, bölüşüm fonksiyonu üzerinden hesaplanmaktadır.

2.11.1. İç enerji

Termodinamiğin birinci yasası olan enerji korunumu ilkesinin Rudolf Clausius tarafından açıklanmasından yola çıkılarak iç enerji kavramı tanımlanmıştır. İş ve ısı değişiminde, kapalı bir sistemdeki enerji değişmektedir. U iç enerji, Q sisteme dahil edilen ısı ve W da sistemin yaptığı iş $W = PdV$ olmak üzere, bu ilişki aşağıdaki şekilde formüle edilir:

$$\Delta U = Q - W. \quad (2.50)$$

Eğer sistemin hacmi sabit tutulursa sistem iş yapmaz, $W = 0$ olur. Ve bu durumda iç enerjideki değişim (ΔU), yalnızca sisteme dahil edilen ısı ile ilişkilendirilir. İç enerji denklemi, diferansiyel formda $dU = TdS - PdV$ olarak da yazılabilir (Karaoğlu 2012). İç enerji, istatistiksel termodinamik çerçevesinde Z bölüşüm fonksiyonu üzerinden şu şekilde hesaplanabilir (Landau ve Lifshitz 2013):

$$\langle U \rangle = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T}. \quad (2.51)$$

İç enerji, bir termodinamik sistemdeki tüm enerjilerin toplamını ifade eder. Sıcaklık etkisi, iç enerjide kritik öneme sahiptir. Sistemde sıcaklık arttıkça o sistemi oluşturan atom ve moleküllerin kinetik enerjileri de artmaktadır. Dolayısıyla kinetik enerjinin artması da iç enerjide artışa neden olur. Ayrıca sıcaklık, parçacıkların yüksek enerjilerde bulunma olasılıklarını da artırdığı için iç enerjiyi yükseltir.

Kuantum noktalarda iç enerji, bu sistemlerin elektronik ve termodinamik özelliklerinin analizinde önemli bir gözlenir olarak öne çıkmaktadır. (2.51) ile verilen iç enerji denkleminde, sıcaklığın karesi çarpanına ek olarak bölüşüm fonksiyonu içindeki β çarpanı ve hatta bağlı durum enerji özdeğerleri de sıcaklığa bağlıdır. Bu tez çalışmasında iç enerji hesaplanırken sıcaklığın çok önemli bir rolü olduğu görülmektedir.

2.11.2. Helmholtz serbest enerji

Hermann von Helmholtz tarafından ortaya koyulan Helmholtz serbest enerji (F), kapalı bir termodinamik sistemin sabit sıcaklıkta (izotermal) iş yapabilme kapasitesini ifade etmektedir. Helmholtz serbest enerjinin iç enerji cinsinden ifadesi,

$$F = U - TS. \quad (2.52)$$

şeklindedir. Diferansiyel formda ise $dF = -SdT - PdV$ şeklinde yazılır. İlk terim sıcaklıktaki değişimin Helmholtz serbest enerjisine etkisini, ikinci terim ise hacimdeki

değişimin etkisini temsil eder. Bölüşüm fonksiyonu cinsinden Helmholtz serbest enerji,

$$F = -k_B T \ln Z \quad (2.53)$$

ile verilir (Landau ve Lifshitz 2013). Helmholtz serbest enerjinin bölüşüm fonksiyonunun doğal logaritması ile doğru orantılı olduğu görülmektedir. Sıcaklık, burada oldukça önemli bir parametredir. Helmholtz serbest enerji hesaplanırken sıcaklık hem çarpan olarak hem de Z bölüşüm fonksiyonundaki β parametresinden gelmektedir. Bu tez çalışmasında bölüşüm fonksiyonuna yazılan bağlı durum enerji özdeğerleri de ayrıca sıcaklığa bağlı olarak alınmıştır.

2.11.3. Isı kapasitesi

Dulong ve Petit yasası, kristal yapıların ısı kapasitelerini sabit olacak şekilde $C_v = 3Nk_B$ değerini aldığını ifade etmektedir. Bu yasa yalnızca yüksek sıcaklıklarda geçerli olmakta, düşük sıcaklıklarda ise elmas gibi sıkı bağlı yapılarda deneysel verileri sağlamamaktadır. Bu nedenle katıların düşük ve yüksek sıcaklıkta ısı kapasiteleri, Einstein ve hemen ardında Debye teorileri ile açıklanmıştır. Şekil 2.9'da, elmas için deneysel veriler ile Einstein modeli kullanılarak elde edilen sonuçlar karşılaştırılmaktadır. Einstein'ın teorisinde atomlar, kristal içinde birbirinden bağımsız şekilde, etkileşmeden hareket etmektedir. Her birinin titreşim hareketi, $\nu = \omega_E/2\pi$ frekansa sahip parçacıkların yaptığı basit harmonik hareketle modellenir.

Einstein'ın modelinde hiç bir atom bir diğeriyle etkileşmemekte, osilasyonlar birbirine girmemektedir. Buna rağmen atomlar üzerinde oluşan geri çağırma kuvveti, diğer atomların tetiklemesinden kaynaklandığı için atomlar arasında güçlü bir çiftlenim oluşmaktadır. Bu durum kuantum mekaniksel olarak incelendiğinde harmonik osilatör gibi davranan bir sistemin enerji seviyeleri,

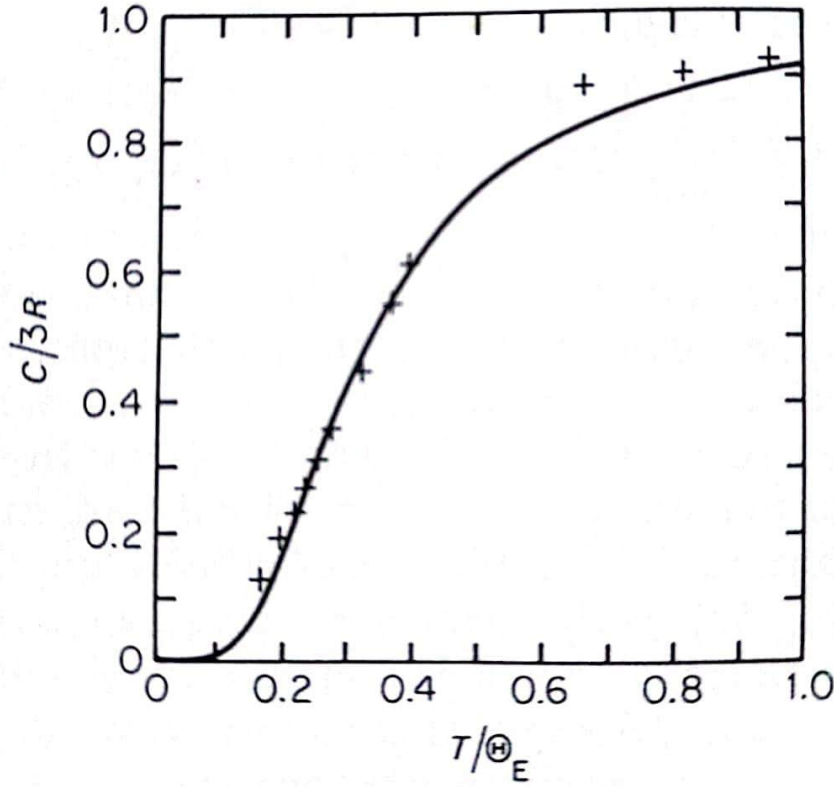
$$\epsilon_n = \hbar\omega_E(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.54)$$

ile verilmektedir. Bu ifade bölüşüm fonksiyonunda yerine yazılır ve $x \equiv \frac{\hbar\omega_E}{k_B T}$ alınırsa bölüşüm fonksiyonu x cinsinden $Z = \frac{e^{-x/2}}{1 - e^{-x}}$ olmaktadır. Eğer katı N atomdan oluşuyor ve 3 boyutluysa enerji seviyeleri $3N\epsilon$ ile hesaplanır ve bu durumda sabit hacimde ısı kapasitesi ifadesi,

$$C_v(T) \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3N \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \beta} \right)_V \frac{\partial \beta}{\partial T} = 3Nk_B \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (2.55)$$

olmaktadır. $x \equiv \frac{\hbar\omega_E}{k_B T}$ ifadesindeki ω_E Einstein frekansı olmak üzere, Einstein sıcaklığı $\Theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B}$ şeklinde tanımlanır. O halde $x \equiv \frac{\Theta_E}{T}$ olur. Isı kapasitesi T 'ye doğrudan bağlıdır.

Bu nedenle Θ_E 'nin T 'den büyük ve küçük olduğu durumlar incelenerek yorum yapılabilir. $T \gg \Theta_E$ ise $x \ll 1$ olur ve $C_v = 3Nk_B$ 'ye eşitliği elde edilir. Yüksek sıcaklıklarda Einstein'ın bu sonucu Dulong ve Petit'in sonucuna indirgenebilmektedir. $T \ll \Theta_E$ durumunda ise $x \gg 1$ olur ve ısı kapasitesi $C_v = 3Nk_B \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 e^{-\Theta_E/T}$ denklemi elde edilir.



Şekil 2.9. Elmasın molar ısı kapasitesine ilişkin deneysel verilerin (+ işaretli veri noktaları), Einstein modeli (sürekli çizgi) ile karşılaştırılması ($\Theta_E = 1325 \text{ K}$) (Mandl 1991)

Einstein'ın elde ettiği bu teorik sonuçlar deneysel verilerle karşılaştırıldığında aralarında denklik olduğu ancak modifiye edilmesi gerektiği görülmüştür. Bunun üzerine Debye teorisi ortaya atılmıştır (Debye 1912). Debye teorisinde atomlar arası çiftlenimler de hesaba katılmaktadır. Teoriye göre, $3N$ normal modla tasvir edilen bir sistem vardır ve her bir mod frekansı $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{3N}$ olacak şekilde osilasyonlar gerçekleşir. Kristalin kafes titreşimleri de bu açısal frekanslara sahip $3N$ tane birbirinden bağımsız osilatöre karşılık gelmektedir. ω_E frekansına sahip bir osilatörün enerjisi $\bar{\epsilon}_\alpha$ olduğundan kristalin ortalama enerjisi,

$$U = \sum_{\alpha=1}^{3N} \bar{\epsilon}_\alpha \quad (2.56)$$

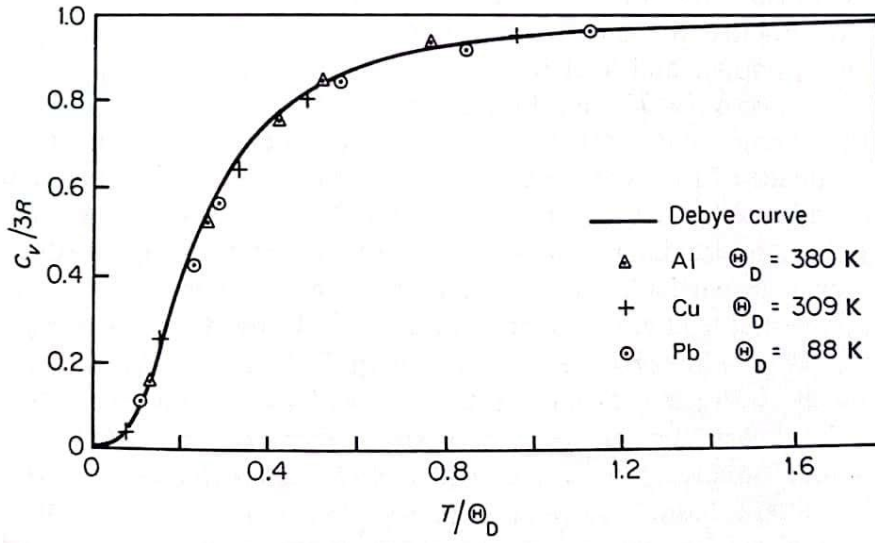
şeklinde ifade edilir. Bir kristal için bu hesabın oldukça komplike olduğu görülmektedir. Bunun üzerine 1912 yılında Peter Debye tarafından bu durumu basitleştirmek için bir model öne sürülmüştür. Bu modele göre Debye, kristaldeki düşük frekanslı titreşimleri elastik dalga olarak nitelendirmektedir. Çünkü düşük frekanslarda λ dalga boyu atomlar arası mesafe a 'dan çok büyük olmaktadır ($\lambda \gg a$). Bu sayede atomik yapı ve dizilim göz ardı edilerek, kristalin homojen ve sürekli bir elastik ortam olarak modellenmesi sağlanmış olmaktadır. Dolayısıyla bu elastik ortamda titreşim modlarını $3N$ olacak şekilde sınırlayan maksimum frekans Debye frekansı ω_D olarak adlandırılmaktadır. O halde $0 - \omega_D$ aralığındaki modların yoğunluğu $\int_0^{\omega_D} f(\omega) d\omega = 3N$ ile verilir. Bu model göz önüne alınarak Debye frekansı analitik olarak türetilmiştir (Mandl 1991).

Isı kapasitesi, sabit hacimde iç enerjinin T 'ye göre türevi alınarak hesaplanır. Kristalin toplam enerjisi, yoğunluk fonksiyonu üzerinden analitik olarak türetilmiş ve ısı kapasitesi, değişken dönüşümü yapılarak ($x \equiv \beta\hbar\omega$, $x_D \equiv \beta\hbar\omega_D \equiv \Theta_D/T$) aşağıdaki formda elde edilmiştir:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk_B \left(\frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{e^x x^4}{(e^x - 1)^2} dx \right). \quad (2.57)$$

Debye sıcaklığı Θ_D , Einstein sıcaklığı ile analogik olarak denktir. Deklem (2.57) ile verilen ifade, Debye modeline göre sabit hacimde ısı sığasıdır. İntegralin içinin yüksek ve düşük sıcaklık limitlerinde hangi formu aldıkları (Mandl 1991)'de detaylandırılmaktadır. $T \gg \Theta_D$ olduğu durumda integral x^2 ye indirgenir ve ısı kapasitesi $C_v = 3Nk_B$ olur. Bu sonuç yüksek sıcaklıklarda Dulong ve Petit yasasına uymaktadır. $T \ll \Theta_D$ limitinde ise ısı kapasitesi $C_v = \frac{12}{5}\pi^4 Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$ ifadesi elde edilmektedir. Düşük sıcaklıklarda Debye modeli üzerinden hesaplanan ısı kapasitesi, T^3 ile doğru orantılıdır.

Einstein ve Debye modelleri yüksek sıcaklıkta Dulong ve Petit yasasıyla oldukça uyumlu olmakta fakat düşük sıcaklıklarda bir farklılık oluşmaktadır. Einstein modeli düşük sıcaklıklarda deneysel verilerle uyumlu olmazken, Debye modeli düşük sıcaklıklarda deneysel verilere uyum sağlamaktadır.



Şekil 2.10. Debye ısı kapasitesi modeli verilerinin (sürekli çizgi); alüminyum, bakır ve kurşunun deneysel verileriyle karşılaştırılması (Mandl 1991)

Isı kapasitesinin sıcaklıkla değişimi, özellikle yüksek sıcaklıklarda alışlageldik davranışlar sergileyebilir. Bazı fiziksel sistemlerde düşük sıcaklıklarda ısı kapasitesindeki artış, keskin bir şekilde artıp azalan bir anomaliye dönüşmektedir (Tari 2003; Gopal 2012). Fiziksel sistemlerde ısı kapasitesinin sıcaklıkla düzenli bir şekilde artması beklenirken, düşük sıcaklıklarda gözlenen bu düşüş ve ardından gelen belirgin artış, alışılmadık bir davranış olarak değerlendirilir. Bu nedenle, bu alışılmadık davranış Schottky anomalisi olarak adlandırılır. Bu tez çalışmasında da benzer bir şekilde Schottky anomalisi gözlemlenmiştir.

2.11.4. Entropi

19. Yüzyılda Rudolf Clausius tarafından termodinamiğin ikinci yasası çerçevesinde geliştirilen entropi, termodinamik bir sistemin düzensizliğini ifade eden bir gözle-nirdir (Clausius 1879). Bir sistemin entropisi, tersinmez süreçler yani geri dönülemeyen süreçlerde sürekli artmaktadır. Çünkü sistem ve çevre arasında ısı alışverişi olur. Yalıtılmış (izole) sistemlerde ise entropi değişimi sıfırdır ve entropinin azalması beklenmemektedir. Termodinamiğin ikinci yasası entropi ile doğrudan ilişkilendirilir. Tersinir bir sistemde entropinin diferansiyel formda matematiksel ifadesi,

$$dS = \frac{dQ}{T} \quad (2.58)$$

şeklinindedir. Denklemden anlaşılacağı üzere sistemdeki ısı değişimi, entropideki değişimle sonuçlanmaktadır. $dQ > 0$ olduğunda sisteme ısı verilmiştir ve entropi artar. $dQ < 0$ olduğunda ise sistem dışarıya ısı vermiştir ve entropi azalır. Dışarıdan ısı alan sistemin

entropi artışı, düşük sıcaklıkta daha belirgin olmaktadır. Sabit hacimde Helmholtz serbest enerjinin sıcaklığa göre türevinin negatifi entropiyi vermektedir. Bu tez çalışmasında entropi gözleniri, sıcaklık ve manyetik alana bağlı olarak değişmektedir. Helmholtz serbest enerji cinsinden entropi ifadesi,

$$\langle S(T, B) \rangle = - \frac{\partial \langle F(T, B) \rangle}{\partial T} \quad (2.59)$$

şeklinde ifade edilir (Landau ve Lifshitz 2013). Bu tez çalışması kapsamında yapılan hesaplarda entropi gözleniri, (2.59) nolu denklem kullanılarak hesaplanmıştır.

2.12. Kuantum Yapıların Termodinamik Gözlenirleri: Literatür İncelemesi

Düşük boyutlu kuantum sistemlerinde, sıcaklık ve hidrostatik basınç gibi çevresel parametrelerin termodinamik gözlenirler üzerindeki etkisi, önemli bir araştırma alanı oluşturmaktadır. Kuantum yapıların termodinamik gözlenirleri üzerine gerçekleştirilen ilk çalışmalar, bu alanın gelişmesine önemli bir katkı sağlamıştır (De Groote vd. 1992). Bir GaAs kuantum noktasında iç enerji, Helmholtz serbest enerji, ısı kapasitesi ve entropi gözlenirleri, sıcaklık ve basınç gibi dış etkiler altında detaylı şekilde incelenmiştir (Khordad 2015; Khordad ve Sedehi 2018; Kirak 2021b). Sıcaklık artışında iç enerjinin artışı, sistemdeki atom ve moleküllerin kinetik enerjilerindeki artışla ilişkilendirildiği için beklenen bir durumdur. Ancak bu artışa karşın, Helmholtz serbest enerji sıcaklık artışında azalır. Bu durum, entropinin sıcaklık artışında artmasıyla ilişkilidir. Çünkü entropi, sistemlerin düzensizliği arttıkça artmakta, bu da serbest enerjinin azalmasına yol açmaktadır. Sabit hacimde ısı kapasitesinin ise hem deneysel hem de teorik olarak sıcaklıkla artması beklenir. Schottky anomalisi olarak nitelenen durumda, düşük sıcaklıklarda ısı kapasitesinde ani bir yükseliş ve düşüş olmaktadır. Özellikle düşük sıcaklıklarda kuantum sistemlerinde Schottky anomalisi gözlenebilmektedir (Boyacioglu ve Chatterjee 2012; Yahyah vd. 2019; Dikko vd. 2021). Ayrıca, donör atomların varlığının kuantum yapıların termodinamik gözlenirleri üzerindeki etkileri de araştırmalarda önemli bir yer tutmaktadır (Yahyah vd. 2019).

Bu tez çalışmasında bir GaAs kuantum noktanın iç enerji, Helmholtz serbest enerji, sabit hacimde ısı kapasitesi ve entropi gözlenirleri, sıcaklık ve manyetik alan değişiminde incelenmiştir. Bahsi edilen Schottky anomalisi, düşük sıcaklık değerlerinde gözlemlenmiş olup, fiziksel temeli Bulgular kısmında ayrıntılı bir şekilde açıklanmıştır.

2.13. Manyetik Gözlenirler

2.13.1. Mıknatıslanma ve manyetik duygululuk

William Gilbert'in manyetik kutuplar ve Dünya'nın manyetikliği hakkındaki incelemeleri sonucu bilimsel anlamda manyetizma kavramı ilk kez ortaya koyulmuştur (Gilbert 1893). Sonrasında bilim dünyasında günümüze dek süregelen çalışmalarla elektromanyetizma ve manyetik malzemelerin fiziksel doğası açıklanmıştır. Mıknatıslanma, bir malzemeye dış manyetik alan uygulandığında yörüngesel ve spin manyetik momentlerde meydana gelen değişiklikleri ifade eder. Matematiksel olarak (Cullity ve Graham 2011),

$$M = \chi B \quad (2.60)$$

denklemleri ile ifade edilir. Burada B manyetik alan ve χ manyetik duygululuktur. Malzemelerin manyetik özelliklerinin tespitinde manyetik alan ile mıknatıslanma ilişkisi önemlidir. Her malzemenin dış manyetik alandan etkilenme şiddeti aynı olmamaktadır. Malzemelerin manyetik alandan etkilenme davranışı; diamanyetizma, paramanyetizma, ferromanyetizma, ferrimanyetizma ve antiferromanyetizma olmak üzere beş ana gruba ayrılmaktadır (Spaldin 2010). Bu tez çalışmasında kullanılan yarı iletken malzeme belirli şartlar altında diamanyetik veya paramanyetik özellik sergilemektedir. Dış manyetik alan uygulandığında, diamanyetik malzemelerde elektronların yörünge hareketlerinde değişim meydana gelir ve manyetik alana ters yönde bir manyetik moment oluşur. Manyetik alanla ters yönde mıknatıslanma oluşturduğundan manyetik duygululuk katsayısı negatif işaretlidir. Dış manyetik alan etkisi ortadan kalktığında eski haline geri döner, net bir manyetik moment oluşmaz ve kalıcı mıknatıslanma gerçekleşmez. Bu nedenle diamanyetik malzemelerin düşük manyetik duyarlılık sergilediği söylenebilir. GaAs yarı iletkeni, manyetik alan uygulanmadığında diamanyetik özellik göstermektedir. Bir dış manyetik alan etkisinde paramanyetik malzemelerde ise uygulanan manyetik alan yönünde kalıcı olmayan bir mıknatıslanma meydana gelir. Paramanyetik malzemelerde diamanyetik malzemelerden farklı olarak ayrıca net bir manyetik moment oluşur. Manyetik duygululuk ise paramanyetik malzemelerde pozitif işaretlidir. Safsızlık ve sıcaklık gibi etkenler yarı iletken malzemelerin manyetiklik özellikleri üzerinde oldukça etkili olmaktadır.

Mıknatıslanma, bir sistemin manyetik alana karşı verdiği tepki ile ilişkili bir büyüklüktür. Bir sistemin dış etkiye karşı duyarlılığı ölçülmek istendiğinde, ilgili değişkene göre türev alınarak hesap yapılmaktadır. Helmholtz serbest enerjisinin manyetik alana göre türevinin negatif işaretlisi, mıknatıslanmayı vermektedir. Tez çalışmasının bu kısmında, ilgili enerji özdeşlikleri manyetik alan ve sıcaklığa bağlı alındığından, mıknatıslanma da sıcaklık ve manyetik alanın bir fonksiyonu olarak alınmaktadır. Bölüşüm fonksiyonu cinsinden

mıknatıslanma, Denklem (2.61)'de gösterildiği gibi ifade edilir:

$$\langle M(T, B) \rangle = \frac{1}{\beta Z(T, B)} \frac{\partial Z(T, B)}{\partial B}. \quad (2.61)$$

Manyetik duygunluk ise mıknatıslanmanın manyetik alana göre türevi olmak üzere,

$$\langle \chi(T, B) \rangle = \frac{\partial M(T, B)}{\partial B} \quad (2.62)$$

olarak verilmektedir. Bu tez çalışmasında elde edilen mıknatıslanma ve manyetik duygunluk verileri (2.61) ve (2.62) denklemleri üzerinden hesaplanmıştır.

2.14. Kuantum Yapıların Manyetik Gözlenirleri: Literatür İncelemesi

Son yıllarda kuantum yapıların manyetik özellikleri, yoğun ilgi gören araştırma konularından biri haline gelmiştir. 1990'lı yıllarda kuantum yapıların mıknatıslanma ve manyetik duygunluk özellikleri üzerine yapılan ilk araştırmalar, günümüzdeki gelişmelerin temelini oluşturmuştur (De Groote vd. 1992; Burkard vd. 1999). Kuantum noktaların mıknatıslanma ve manyetik duygunluk özellikleri sıcaklık, basınç ve manyetik alan etkisinde incelenmiştir (Voskoboynikov vd. 2003; Saha vd. 2016; Castano-Yepes vd. 2018; Bera vd. 2019; Khosravi vd. 2020; Maouhoubi vd. 2022). Bu incelemeler, konuma bağlı etkin kütle yaklaşımı kapsamında da gerçekleştirilmiştir (Bera vd. 2016). Manyetik gözlenirlerde dış etkiler kadar safsızlık atomlarının da etkisi bulunmaktadır. Bu nedenle donör atom etkisinin kuantum noktaların manyetik gözlenirleri üzerindeki rolü de kapsamlı bir şekilde araştırılmıştır (Rahmani vd. 2011; Elsaid vd. 2019). Ayrıca, spin-yörünge etkileşiminin de termodinamik ve manyetik gözlenirler üzerine etkilerinin literatürde önemli bir yeri bulunmaktadır (Khordad 2018; Elsaid vd. 2020).

Bu tez kapsamında, bir GaAs kuantum noktasının termodinamik ve manyetik gözlenirleri ayrıntılı olarak incelenmektedir. Spin etkilerini de dikkate alarak, bir dış manyetik alan ve sıcaklık değişiminde bir GaAs kuantum noktanın davranışını değerlendirmek amacıyla manyetik gözlenirler olan mıknatıslanma ve manyetik duygunluk kapsamlı bir şekilde araştırılmıştır. Literatürde yalnızca harmonik osilatör ve dikkörtgen kuyu potansiyeli için enerji özdeğerleri sıcaklığın fonksiyonu olarak alınarak termodinamik ve manyetik gözlenirler analitik olarak elde edilmiştir. Bu çalışmada ise enerji özdeğerleri, sıcaklık veya manyetik alana bağlı olarak alınarak nümerik yöntemlerle termodinamik ve manyetik gözlenirler elde edilmektedir. Literatürde, enerji özdeğerlerinin sıcaklık veya manyetik alan bağımlılığını dikkate alarak, termodinamik ve manyetik gözlenirlerin nümerik olarak hesaplandığı bir çalışmaya rastlanmamıştır.

3. MATERYAL VE METOT

Nümerik analiz yöntemleri, analitik çözümü olmayan denklemlerin ve denklem sistemlerinin çözümünde kullanılır. Bu yöntemler, diferansiyel denklem çözümleri ve kök bulma yöntemlerine yönelik algoritmaların oluşturulmasını kapsamaktadır. Bu tez çalışmasındaki diferansiyel denklemleri çözmek için kullanılan nümerik yöntemler, Runge-Kutta (RK), Numerov ve Sonlu Farklar (Finite Difference, FD) yöntemleridir. Enerji özdeğerlerinin belirlenmesinde, İkiye Yarılama (Bisection) kök bulma yöntemi uygulanmıştır. İkiye Yarılama yöntemi, verilen bir aralığı sürekli ikiye bölerek köke yaklaşma metoduna dayanır.

3.1. Runge-Kutta (RK) Metodu

Runge-Kutta (RK veya RK4) metodu, adi diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan değişken adım büyüklüğü uygulanabilen tekrarlı bir yöntemdir. Çözüm fonksiyonunun eğimi dört farklı noktadan hesaplanabildiği için hassas bir nümerik analiz metodu olarak değerlendirilmektedir. RK yönteminin geliştirilmesiyle birinci, ikinci, üçüncü ve yüksek mertebelerden adi diferansiyel denklemler etkin bir şekilde çözülebilmektedir. RK metodunun hata terimi $O(h^4)$ 'tür. Bu tez kapsamında $y(0)=0$ ve $y'(0)=1$ başlangıç koşulları baz alınarak, h adım büyüklüğü olmak üzere RK yöntemi,

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}h(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\ x_{n+1} &= x_n + h, n = 0, 1, 2... \end{aligned} \quad (3.1)$$

ile verilmektedir. Söz konusu tekrarlama bağıntısında, eğimleri ifade eden katsayılar,

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n), \\ k_2 &= f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1), \\ k_3 &= f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2), \\ k_4 &= f(x_n + h, y_n + hk_3) \end{aligned} \quad (3.2)$$

şeklinde ifade edilmektedir. RK metodunun matematiksel temeli (Press 2007)'de ayrıntılı olarak incelenmiştir.

Bu tez çalışmasında RK metodu, elektron kütlesi konuma bağlı alınarak oluşturulan Schrödinger dalga denkleminin çözümünde uygulanmıştır. Elde edilen Schrödinger dalga denklemi, ikinci mertebe diferansiyel denklem formunda olduğu için yeni bir değişken tanımlanarak birinci mertebeden iki farklı diferansiyel denklem formuna getirilmiştir.

Değişken dönüşümleri, $f(r) = \frac{dR(r)}{dr}$ ve $\frac{d^2 R(r)}{dr^2} = \frac{df(r)}{dr}$ şeklinde alınmak suretiyle ikinci mertebeden olan Schrödinger dalga denklemi

$$\frac{dR(r)}{dr} = f(r), \quad R(0) = 0 \quad (3.3)$$

ve

$$\frac{df(r)}{dr} + \frac{2m^*}{\hbar^2} [E_n - V_{\text{eff}}(r)] R(r) = 0, \quad f(0) = 1 \quad (3.4)$$

formunda olan iki farklı birinci mertebe diferansiyel denkleme dönüştürülmektedir. RK metodu, kuantum mekaniksel sınır koşulları $R(0) = 0$ ve $R(r_{\text{maks}}) = 0$ gözetilerek uygulanmaktadır.

3.2. Numerov Metodu

İkinci mertebe lineer diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan, altıncı derece hata terimine sahip bir nümerik yöntemdir. Hata terimi h adım büyüklüğünün 6. kuvveti olmak üzere $O(h^6)$ şeklinde ifade edilir. Taylor açılımı baz alınarak türetilmiş olan bu yöntemin yakınsama derecesi, diğer nümerik yöntemlere göre oldukça yüksektir. $\frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} + k^2 \psi(r) = 0$ formundaki bir diferansiyel denklemde, E_n enerjisine karşılık gelen dalga sayısı k olmak üzere $k^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} [E_n - V_{\text{eff}}(r)]$ şeklinde alınmaktadır. h adım büyüklüğü olmak üzere Numerov metodu iterasyonu aşağıdaki şekilde verilmektedir:

$$\psi_{n+1} = \frac{2 \left(1 - \frac{5}{12} h^2 k(n, E_n)\right) \psi_n - \left(1 + \frac{1}{12} h^2 k(n-1, E_n)\right) \psi_{n-1}}{1 + \frac{1}{12} h^2 k(n+1, E_n)} + O(h^6). \quad (3.5)$$

h adım büyüklüğü azaltılarak Numerov metodu ile yapılan hesapların daha hassas olması sağlanmaktadır. Numerov algoritması, ikinci mertebe diferansiyel formda ifade edilen problemlere uygulanabilmektedir. Yöntemin uygulanması ile ilgili ayrıntılı bilgiye (Pang 2006)'dan ulaşılabilir. Bu tez çalışmasında, Numerov metodu ile Schrödinger dalga denklemi çözülerek bağlı durum enerji özdeğerleri elde edilmiştir.

3.3. Sonlu Farklar Metodu

Sonlu farklar metodu (Finite Difference, FD), ikinci mertebe diferansiyel denklemlerin nümerik çözümlerini elde etmek için kullanılan en klasik yöntemlerden biridir. Çözülecek olan problem alanında, eşit aralıklı ızgaralar oluşturularak düğüm noktaları oluşturulması ile işe başlanır. Taylor serisindeki türevlerin yerine fark ifadelerinin yazılması ile türetilen Sonlu Farklar metodu, ikinci derece hassasiyet sağlamaktadır ($O(h^2)$).

İkinci mertebeden olan bir diferansiyel denklem için Sonlu Farklar yaklaşımı,

$$R''(x) \approx \frac{R(x+h) - 2R(x) + R(x-h)}{h^2} + O(h^2) \quad (3.6)$$

şeklinde verilmektedir. Aynı adım sayısı ile yapılan hesaplamalarda, FD yöntemi, Nüme-rov ve RK yöntemlerine kıyasla daha düşük hassasiyete sahip olabilir, ancak hesaplama süresi çok daha kısadır. Yöntemin detaylarına (Thomas 2013)'den kolayca ulaşılabilir.

Bu tez çalışmasında FD metodu, ikinci mertebe lineer diferansiyel denklemlerin çözümü ve enerji özdeğerlerinin nümerik olarak elde edilmesinde kullanılmıştır. $\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} [E_n - V_{eff}(r)] R(r) = 0$ formundaki Schrödinger dalga denkleminin ikinci mertebe türev katsayısı, Denklem (3.6) ile verilen eşitlik kullanılarak düzenlenmiş ve kurulan algoritmalarla hesaplamalar gerçekleştirilmiştir.

3.4. Kök Bulma Metodu

Kök bulma yöntemleri, herhangi bir fonksiyonun sıfır yapan değerlerini, yani denklemin köklerini bulmak için kullanılır. Bir fonksiyonun köklerini bulmakta kullanılan bazı yöntemler; İkiye Yarılama (Bisection), Kiriş yöntemi (Secant), İterasyon yöntemi ve Newton-Raphson yöntemi olarak sıralanabilir. Bu tez çalışmasında, İkiye Yarılama olarak adlandırılan basit ve kolay uygulanabilir bir yöntem kullanılmıştır. Bu yöntem kısaca, verilmiş olan belirli bir aralığı sürekli yarılayarak fonksiyonun y ekseninde işaret değiştirdiği yeri bulma yöntemine dayanmaktadır. İkiye Yarılama yönteminde, istenilen hassasiyete ulaşınca dek sürekli olarak aralık yarılanarak köke yakınsama sağlanır. Yöntemin uygulanması hakkındaki ayrıntılara (Uzun 2004)'ten ulaşılabilir.

Bu tez çalışmasında İkiye Yarılama metodu, verilen enerji aralığını adım adım daraltarak, $R(0) = 0$ ve $R(r_{maks}) = 0$ sınır koşullarını sağlayan ve olması gereken sayıda radyal düğüm içeren çözümler elde edilene dek yarılamanın devam ettirilmesi suretiyle uygulanmaktadır. Dalga fonksiyonundaki radyal düğüm sayısı, $R(r) \times R(r+h) < 0$ koşulu aranarak bulunuyor. Yani, fonksiyonun y ekseninde işaret değiştirdiği noktalar tespit edilmektedir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. Bir Kuantum Noktanın Konuma Bağlı Etkin Kütle İle İncelenmesi

Yarı iletken malzemelerde elektronlar, kristal örgüdeki atomlar ile etkileşime girerler. Bu etkileşimin doğru şekilde modellenenbilmesinde konuma bağlı etkin (efektif) elektron kütlesi kritik öneme sahiptir. Çünkü iletkenlik bandındaki elektronun kütlesi sabit kalmayıp konuma bağlı olarak değişmektedir. Bu tez çalışmasında GaAs yarı iletkeninin iletkenlik bandındaki elektronun kütlesinin konuma bağlılığı, $E - k$ bant diyagramında bulunan Gama vadisindeki eğrilikle ilişkilendirilmektedir.

GaAs yarı iletkeninin $E - k$ bant diyagramı incelendiğinde Gama vadisinin formu $k = 0$ noktası civarında parabolik olarak $E(k) = C(k - n\pi)^2$ şeklinde alınır. Bu durumda, Denklem (2.7) ile tanımlanan etkin kütle, $m^* = \frac{\hbar^2}{2C}$ şeklinde ifade edilmektedir. O halde, Gama vadisinin tabanından tepe noktasına kadar $m^* = \frac{\hbar^2}{2C}$ ile ifade edilen bir kütle söz konusudur. Ancak gerçekte $E - k$ bant diyagramı düzgün bir parabol şeklinde değildir. Bandın eğriliği (enerjinin k 'ye göre 2. türevi) kütle ile ilişkili olduğundan, bant diyagramının incelenmesiyle kütlenin değişimi hakkında önemli bilgiler elde edilebilir. $E - k$ bant diyagramının eğriliği arttıkça, etkin elektron kütlesi serbest elektronun kütlesinden daha küçük olur. Bunun tersine, eğrilik azaldığında etkin elektron kütlesi serbest elektronun kütlesinden daha büyük olur. Bandın tabanında eğrilik yüksek olduğu için kütlenin düşük, tepesinde ise eğrilik düşük olduğu için kütlenin yüksek olduğu sonucuna varılmıştır. Dolayısıyla kütlenin, $E - k$ bant diyagramının Gama vadisinin tabanından tepesine doğru artması gerekmektedir. Buna rağmen konuma bağımlı kütlenin formu tam olarak bilinmemektedir. İncelenen sistemin fiziksel bir sistem olması nedeniyle, kütle fonksiyonunun keskin değişimler göstermesi gerçekçi bir senaryo oluşturmaz. Bu nedenle, kütlenin yavaş ve sürekli bir değişim sergilemesi beklenmektedir. Ayrıca kristal örgülerde elektronun örgü elektronları ve atomları ile etkileşim mesafesi, etkileşimin sonlu doğası nedeniyle sınırlı olmaktadır. Bu durum, etkin elektron kütlesinin faz uzayına bağlı olarak sonsuza gitmeyecek şekilde yavaş bir artış gösteren bir eğri izlemesini gerektirir.

Tezde PDEM'in etkisinin ele alındığı Bulgular kısmında, konuma bağlı etkin kütle iki farklı formda incelenmiş ve bu kütlelerin eğriliğinin, bağlı durum enerji özdeğerleri ile optik gözlenirler üzerindeki etkisi tartışılmıştır. Her iki kütle formu da konuma bağlı olarak artan ve belirli bir noktadan sonra sabitlenen formlar şeklinde seçilmiştir. İki farklı kütle modelinin ele alınma nedeni, PDEM'in gerçek formunun bilinmemesi ve eğrilik farkının gözlenirler üzerindeki etkisinin incelenmek istenmesidir. Potansiyel parametreleri ile konuma bağlı etkin kütle modellerinin optik gözlenirler üzerindeki etkileri sistematik bir şekilde araştırılmıştır.

4.1.1. Konuma bağlı etkin kütle ve potansiyel profili kapsamında Schrödinger dalga denklemi

Yarı iletken bir malzemenin kristal örgüsündeki bir elektronun konuma bağlı etkin kütlesi kullanıldığında Hamiltonyen operatörü, $\delta + \eta + \gamma = -1$ kısıtlaması altında Denklem (4.1)'deki gibi verilmektedir (von Roos 1983; de Souza Dutra ve Almeida 2000; Gönül vd. 2002; Tanaka 2005).

$$H = -\frac{\hbar^2}{4}(\mu^\delta \vec{\nabla} \mu^\eta \vec{\nabla} \mu^\gamma + \mu^\gamma \vec{\nabla} \mu^\eta \vec{\nabla} \mu^\delta) + V + V_{\delta\eta\gamma}. \quad (4.1)$$

Elektronun etkin kütlesi r uzayına bağlı olup, $\mu = \mu(r)$ olarak verilmiştir. V ve $V_{\delta\eta\gamma}$ ifadeleri sırasıyla gerçek sınırlayıcı potansiyel profili ve etkin kütlenin konuma bağlılığından kaynaklanan toplam potansiyeldeki değişikliği ifade etmektedir. Konuma bağlı kütle kapsamında Schrödinger dalga denklemi baz alındığında, konuma bağlı kütle ve momentuma karşılık gelen operatörler komüt etmemektedir. Heisenberg belirsizlik ilkesi gereği, konum ve momentum aynı anda kesin olarak ölçülemeyeceğinden kinetik enerjide bir sıralama belirsizliği oluşmaktadır. von Roos'un ortaya koyduğu δ , η ve γ parametrelerinin sayısal değerleri, kinetik enerjideki sınırlamaya göre değişmektedir (von Roos 1983; Gönül vd. 2002). $\delta = \gamma = 0$ ve $\eta = -1$ olarak alındığı durumda $V_{\delta\eta\gamma}$ potansiyelindeki belirsizlik ortadan kalkmaktadır (Tanaka 2005; Mustafa ve Mazharimousavi 2006). (4.1) denklemi ile verilen Hamiltonyen kullanılarak zamandan bağımsız Schrödinger dalga denklemi küresel koordinatlarda çözülmektedir.

Denklem (4.1) ile verilen Hamiltonyen, zamandan bağımsız Schrödinger denklemi olan $\hat{H}\Psi = E\Psi$ denkleminde yerine yazıldığında ve küresel koordinatlarda çözüldüğünde, dalga fonksiyonunun radyal ve açısalları birbirinden ayrılabilir formlara getirilmektedir. Dalga fonksiyonu $\Psi_{n\ell m}(r) = \frac{R_{n\ell}(r)}{r} Y_\ell^m(\theta, \phi)$, r 'ye bağlı radyal kısmı ve θ ve ϕ 'ye bağlı küresel harmonikler olarak bilinen açısallardan oluşmaktadır. Bu iki kısım birbirinden ayrılabilir formlarda elde edilebilmektedir (Dong ve Lozada-Cassou 2005; Mustafa ve Mazharimousavi 2006; Ikhdair 2009). Konuma bağlı etkin elektron kütlesi dikkate alınarak elde edilen radyal denklem,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R_{n\ell}(r)}{dr^2} + \frac{1}{\mu(r)} \frac{d\mu(r)}{dr} \left(\frac{1}{r} - \frac{d}{dr} \right) R_{n\ell}(r) + \frac{2\mu(r)}{\hbar^2} \\ \times \left(E_{n\ell} - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu(r)r^2} \right) R_{n\ell}(r) = 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

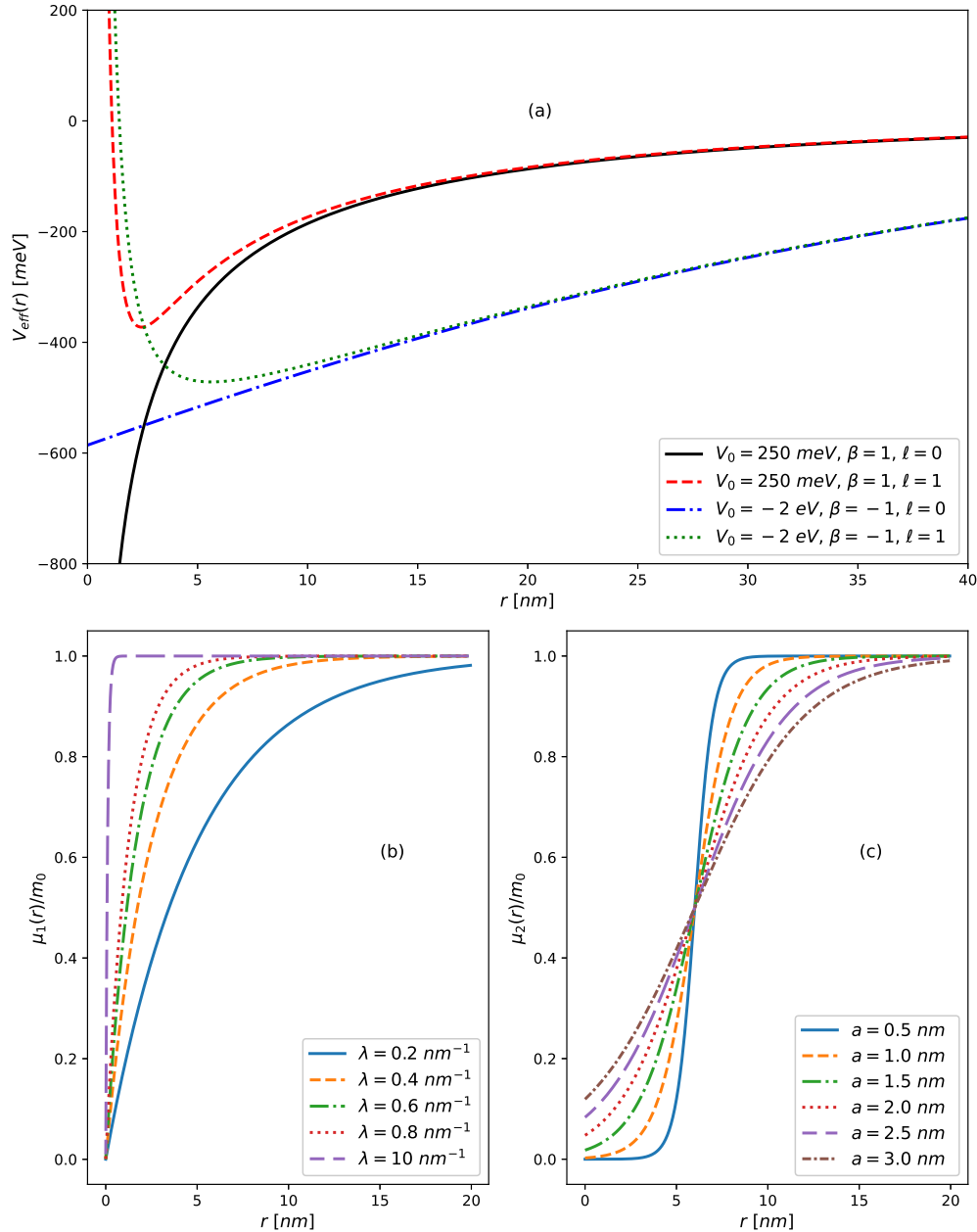
şeklinde. Burada ℓ , açısall momentum kuantum sayısını ifade eder ve $\ell = 0, 1, 2, \dots$ değerlerini alır. $V(r)$, GaAs yarı iletkeninde bir elektronun, yarı iletken kafes yapısı içerisindeki birinci Brillouin bölgesinde ortam atomları ve elektronlarla etkileşimini tanımlayan

sınırlayıcı potansiyeldir. Temelde bir elektronun başka bir parçacıkla olan etkileşimi, Coulomb potansiyeli ile açıklanır. Ancak çok parçacıklı etkileşimler söz konusu olduğunda, bu etkileşimin doğasını açıklamak için yalnızca Coulomb potansiyeli yeterli olmamakta, deforme formlar bu etkileşimleri daha doğru bir şekilde modellemektedir. Ayrıca, elektron-kafes etkileşimini anlamaya yardımcı olan iyi bilinen teorik modellerden biri, bir boyutlu periyodik potansiyel içinde kare kuyular ve bariyerler içeren Kronig-Penney modelidir. Kronig-Penney potansiyelindeki süreksizlikler, kafes noktalarındaki bariyerlerin sonsuz derecede keskin olduğu varsayımından kaynaklanır. Ancak, deneysel sistemler genellikle etkileşimlerin sonlu boyutu ve menzili nedeniyle daha yavaş ve sürekli olarak değişen potansiyeller sergiler. Çünkü potansiyelin keskin şekilde değişmesi, kuvveti matematiksel olarak sonsuza götürse de etkileşimin sonlu doğası nedeniyle fiziksel olarak gerçekçi değildir. Bunun yanında, potansiyelin derinliği ve genişliği belirlenebilse de, potansiyel profilinin eğriliği tam olarak bilinmemektedir. Bu tez kapsamında kullanılan ters karekök eksponansiyel potansiyel, deforme Coulomb potansiyeline indirgenebilen, yavaş değişen ve daha gerçekçi etkileşimleri modelleyebilecek bir potansiyel formudur. $V(r)$, ters karekök eksponansiyel potansiyelin kesilime sahip ve deforme edilmiş hali olarak

$$V(r) = V_0 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \beta e^{-r/\sigma}}} \right) \quad (4.3)$$

şeklinde alınmıştır. Potansiyelin geometrisini etkin bir şekilde belirleyen V_0 , β ve σ olmak üzere üç adet parametre vardır. Bu tez çalışmasında söz konusu parametreler reel sayılar olarak alınmıştır. V_0 potansiyelin derinliğini değiştirirken σ ise derinlik ve genişliği değiştirmektedir. Deformasyon parametresi $\beta = 1$ alındığında, potansiyel kuyusu $r = 0$ 'da sonsuza, r 'nin büyük değerlerinde de sıfıra doğru gider. Bu üç parametre reel değerler aldığı anda, enerji özdeğerlerinin de reel olması için $\beta e^{-r/\sigma} < 1$ koşulunu sağlaması gerekmektedir. Dolayısıyla $r > \ln(\beta^\sigma)$ olur ve bu da potansiyelin kesilime uğradığı noktadır. Ayrıca V_0 derinliğinin ve β deformasyon parametresinin sadece pozitif değerleri için değil negatif değerleri için de sonlu sınıra sahip bir potansiyel kuyusu oluşmaktadır. Yani $V_0 < 0$, $\beta < 0$ ve aynı zamanda $\sigma > 0$ alındığı durumda da potansiyel kuyusu oluşmaktadır. Şekil 4.1a'da kesik ve deforme edilmiş ters karekök eksponansiyel potansiyel ve merkezci potansiyel toplamı olan $V_{eff}(r)$ etkin potansiyelinin r uzayına karşı profili, V_0 ve β 'nin pozitif ve negatif değerleri için $\ell = 0$ ve $\ell = 1$ kuantum durumlarında gösterilmektedir. Şekil 4.1a incelendiğinde, potansiyel kuyusuna yerleşecek olan bağlı durum enerji özdeğerlerinin negatif işaretli olduğu görülmektedir. ℓ kuantum sayısı artırıldığında, potansiyel derinliğinin ve genişliğinin küçüldüğü açıkça görülmektedir. Bu durumda en düşük bağlı durum enerji seviyesinin sıfıra doğru yaklaştığı (arttığı), diğer enerji seviyelerinin buna bağlı olarak artacağı yorumu yapılabilir. ℓ kuantum sayısı ile ilgili bu durum, V_0 ve β 'nin

negatif değerleri alındığında elde edilen kuyu için de geçerlidir. Denklem (4.3) ile verilen potansiyel alınarak, elektron kütesinin sabit ve $\ell = 0$ olduğu durum için Schrödinger dalga denkleminin analitik sonucu literatürde bulunmaktadır (Ishkhanyan 2018). Ancak hem uzay bağımlı kütle hem de $\ell \neq 0$ olduğu durumda kesik ve deforme edilmiş ters kare-kök eksponansiyel potansiyel için Schrödinger dalga denkleminin analitik çözümü yoktur. Sadece nümerik metotlarla çözülebilmektedir. Şekil 4.1b ve c’de ise bu tez çalışmasında kullanılan etkin kütle profilleri verilmektedir.



Şekil 4.1. a) Potansiyel parametreleri değişiminde etkin potansiyel profili ($\sigma = 25 \text{ nm}$); **b)** $\mu_1(r)$ etkin kütesinin λ parametresine göre uzaysal değişimi; **c)** $\mu_2(r)$ etkin kütesinin a parametresine göre uzaysal değişimi ($R = 6 \text{ nm}$)

Konuma bağlı kütlenin eğriliğinin formu belirsiz olduğundan, kısım 4.1.'de verilen gerekçeler dahilinde, eğrilik farkının gözlenirlere etkisini incelemek üzere Şekil 4.1b ve c'deki gibi sınırları aynı olup eğriliği farklı olan iki farklı kütle modeli ele alınmıştır. Bu iki kütle modeli sırasıyla modifiye edilmiş eksponansiyel kütle (Modified Exponential Mass, MEM) ve Woods–Saxon kütle (Woods-Saxon Mass, WSM) modeli olmak üzere sırasıyla (4.4) ve (4.5) denklemleriyle tanımlanmaktadır.

$$\mu_1(r) = m_0(1 - e^{-\lambda r}), \quad (4.4)$$

$$\mu_2(r) = m_0 \left(1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}}\right). \quad (4.5)$$

Elektronun boşluktaki kütlesi m_e olmak üzere bir GaAs yarı iletken kristali içerisindeki elektronun etkin kütlesinin $m_0 = 0.065 m_e$ olduğu bilinmektedir (Levinshtein ve Rumyantsev 1996). Eksponansiyel formdaki kütle fonksiyonunda bulunan λ parametresi ve Woods-Saxon formundaki kütlede bulunan R ve a reel parametrelerinin değişiminde kütlelerin uzaysal değişimi Şekil 4.1b ve c'de açıkça görülmektedir. Denklem (4.4)'de verilen eksponansiyel kütle modelinde λ parametresini sonsuza götürdüğümüzde kütle $\mu_1(r) = m_0$ 'a yakınsamaktadır. λ parametresindeki artışın, kütle modelinin eğriliğini keskinleştirdiği söylenebilir. Denklem (4.5) ile verilen Woods-Saxon kütle modelinde ise kütlenin konumunu belirleyen R uzunluk parametresi ile genişliği etkileyen a difüzyon parametresi bulunmaktadır. Şekil 4.1c'de görüldüğü gibi a parametresi sıfıra doğru yaklaştıkça $\mu_2(r)$ kütlesi keskin sınırları olan bir kütle haline gelmektedir. a parametresi sonsuza götürüldüğünde ise $\mu_2(r)$ kütlesi m_0 sabit kütlesine doğru gitmektedir.

4.1.2. Schrödinger dalga denkleminin RK metodu ile nümerik çözümü

Ters karekök eksponansiyel potansiyel için Schrödinger dalga denkleminin analitik çözümü, yalnızca sabit kütle ve $\ell = 0$ durumu için mümkündür. Tez çalışmasının bu kısmında, elektron kütlesi konuma bağlı alınarak bağlı durum enerji özdeğerleri nümerik yöntemlerle elde edilmiştir. Ayrıca ℓ kuantum sayısının üst seviyeleri (sıfırdan farklı durumlar) için de nümerik hesaplar yapılmıştır. Bu bölümde Schrödinger dalga denklemini çözmek için kullanılan yöntem, Runge-Kutta (RK) metodudur. (4.2) numaralı radyal denklem, $R(r) \equiv y(r)$ alınarak RK motodu uygulandığı durumda, birinci mertbe lineer iki farklı diferansiyel denklem halini almaktadır. $y(0)=0$ ve $y'(0)=1$ başlangıç koşulları

altında bu iki denklem

$$\begin{aligned}\frac{dy(r)}{dr} &= f(r, y(r)), \\ \frac{df(r, y(r))}{dr} &= -\frac{1}{\mu(r)} \frac{d\mu(r)}{dr} \left(\frac{y(r)}{r} - f(r, y(r)) \right) - \frac{2\mu(r)}{\hbar^2} \left(E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu(r)r^2} \right) y(r)\end{aligned}\quad (4.6)$$

şeklinde yazılmaktadır (Aciksoz vd. 2016; Landau vd. 2024). Elde edilen dalga fonksiyonları, $R_{n\ell}(r=0) = 0$ ve $R_{n\ell}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ sınır koşullarını sağlamaktadır. Sınır koşullarını sağlayan dalga fonksiyonları elde edilerek, tüm bağlı durumlar için enerji özdeğerleri hesaplanmıştır. Nümerik hesabımızın doğruluğunu değerlendirmek amacıyla, Ishkhanyan (Ishkhanyan 2018) tarafından sağlanan sabit kütle ve $\ell = 0$ kuantum durumu için analitik olarak hesaplanan enerji özdeğerleri kullanılmıştır. Analitik yöntem ve RK yöntemi ile elde edilen sonuçların karşılaştırması Çizelge 4.1’de sunulmuştur. Çizelgede yer alan analitik ve nümerik sonuçların birbirine oldukça yakın olması, yapılan hesapların güvenilirliğini teyit etmektedir. Analitik yöntemle elde edilen enerji özdeğerleri teorik doğruluğu nedeniyle daha güvenilir bir referans olarak kabul edilse de, yalnızca $\ell = 0$ kuantum durumu için analitik çözüm yapılabilmesi nümerik yöntemlere olan ihtiyacı ortaya koymaktadır. Ayrıca, Çizelge 4.1’de iki farklı potansiyel derinliği için elde edilen enerji özdeğerlerinin sayısının farklı olduğu görülmektedir. Bu durum, potansiyel kuyusunun sığlaşması sonucu bağlı durum sayısının azalmasından kaynaklanmaktadır. Çizelge 4.1’de $V_0 = 4$ potansiyel derinliği için yalnızca üç adet bağlı durum enerji özdeğeri hesaplanabilmektedir. Sınır koşulları değiştirildiği durumda elektron, yarı bağlı veya serbest duruma geçmekte ve ilgili gözlenirler hesaplanabilmektedir.

Çizelge 4.1. Analitik (Ishkhanyan 2018) yöntemle $\ell = 0$ için elde edilmiş olan enerji özdeğerlerinin Runge-Kutta (RK) yöntemleriyle elde edilen enerji özdeğerleriyle $\hbar = 1$, $m = 1$, $\sigma = 2$ ve $\beta = 1$ parametreleri kullanılarak, n_r düğüm sayısı cinsinden karşılaştırılması

n_r	$V_0=4$ (Ishkhanyan 2018)	$V_0=4$ (RK)	$V_0=15$ (Ishkhanyan 2018)	$V_0=15$ (RK)
0	-2.168051	-2.168066	-18.843419	-18.84414
1	-0.416633	-0.416636	-6.947786	-6.947929
2	-0.0294695	-0.029470	-3.007063	-3.007113
3			-1.227239	-1.227261
4			-0.381969	-0.381979
5			-0.043515	-0.043518

RK yöntemi ile hesaplanan enerji özdeğerlerinin doğruluğunu tespit etmek için

hem $\ell = 0$ ile hesaplanan (Çizelge 4.1’de verdiğimiz) analitik sonuçlar hem de Çizelge 4.2’de göstermiş olduğumuz farklı bir nümerik metot olan Sonlu Farklar (FD) metodu ile hesaplanan enerji özdeğerleri referans olarak alınmıştır. Her iki yöntemde adım mesafesi $h = 0.005$ olarak belirlenmiştir. Adım mesafesi küçüldükçe hesaplamalar daha hassas hale gelmektedir ancak bu durum işlem süresinin önemli ölçüde uzamasına neden olmaktadır. Farklı kütle parametreleri için beş farklı kuantum durumu alınarak yapılan hesaplarda, elde edilen enerji özdeğerlerinin birbiriyle büyük oranda örtüştüğü görülmektedir. Uygulanan nümerik yöntemle, bağlı durum enerji özdeğerlerinin iyi bir yaklaşıklık hesabıyla elde edildiği anlaşılmaktadır.

Çizelge 4.2. Kütle parametreleri $\lambda = 1 \text{ nm}^{-1}$ ve $a = 5 \text{ nm}$ alınarak beş farklı enerji seviyesi için RK ve FD metotla hesaplanan enerji özdeğerlerinin karşılaştırılması ($V_0 = 0.5 \text{ eV}$, $\sigma = 10 \text{ nm}$, $\beta = 1 \text{ nm}$ ve $R = 6 \text{ nm}$)

Parametreler	Enerji seviyeleri	$E_{n_r\ell}$ (RK) [meV]	$E_{n_r\ell}$ (FD) [meV]
$\lambda=1 \text{ nm}^{-1}$	1s	-473.032	-472.385
	2s	-153.355	-153.184
	2p	-70.971	-70.974
	3s	-54.969	-54.900
	3p	-21.278	-21.279
$a = 5 \text{ nm}$	1s	-288.960	-288.886
	2s	-71.643	-71.620
	2p	-28.016	-28.011
	3s	-18.244	-18.236
	3p	-3.973	-3.971

Çizelge 4.3’de kütle parametreleri λ ve a ’nın iki farklı değeri için 1s–2p, 2s–2p, 2s–3p, 3s–3p ve 3p–3d optik geçişleri için enerji özdeğerleri, rezonans enerjileri ve M_{fi} dipol matris elemanları hesaplanmıştır. İlk sütun, kütle parametrelerinin (λ ve a) iki farklı değerini, ikinci sütun enerji seviyeleri arasındaki geçişleri göstermektedir. Üçüncü ve dördüncü sütunlar, bu geçişlerdeki $E_{n_r\ell}^i$ ilk ve $E_{n_r\ell}^f$ son bağlı durum enerji özdeğerlerini ifade etmektedir. Beşinci ve altıncı sütunlarda ise enerji seviyeleri arasındaki farkı veren E_{fi} rezonans enerjisi ve bu geçişlerde hesaplanan M_{fi} dipol matris elemanları yer almaktadır. Çizelge incelendiğinde, n_r ve ℓ kuantum sayılarındaki artışın enerji özdeğerlerini artırdığı, seviyeler arası enerji farkını ise azalttığı görülmektedir. Yüksek kuantum sayılarına doğru, $2s - 2p$ durumları hariç, dipol matris elemanının genellikle arttığı tespit edilmiştir. Ayrıca, a parametresinin 5 nm ’den 10 nm ’ye yükseltilmesi, $1s$ ve $2s$ durumları hariç, enerji özdeğerlerinin artmasına neden olmaktadır. λ parametresindeki artış, tüm kuantum durumları için hesaplanan enerji özdeğerlerinde de artışla sonuçlanmıştır.

Çizelge 4.3. Başlangıç ve son kuantum durumları arasında farklı kütle parametreleri (λ , a ve $R = 6 \text{ nm}$) için enerji özdeğerlerinin, rezonans enerjilerinin ve dipol matris elemanlarının değişimi. Potansiyel parametreleri: $V_0 = 0.25 \text{ eV}$, $\sigma = 25 \text{ nm}$ ve $\beta = 1$

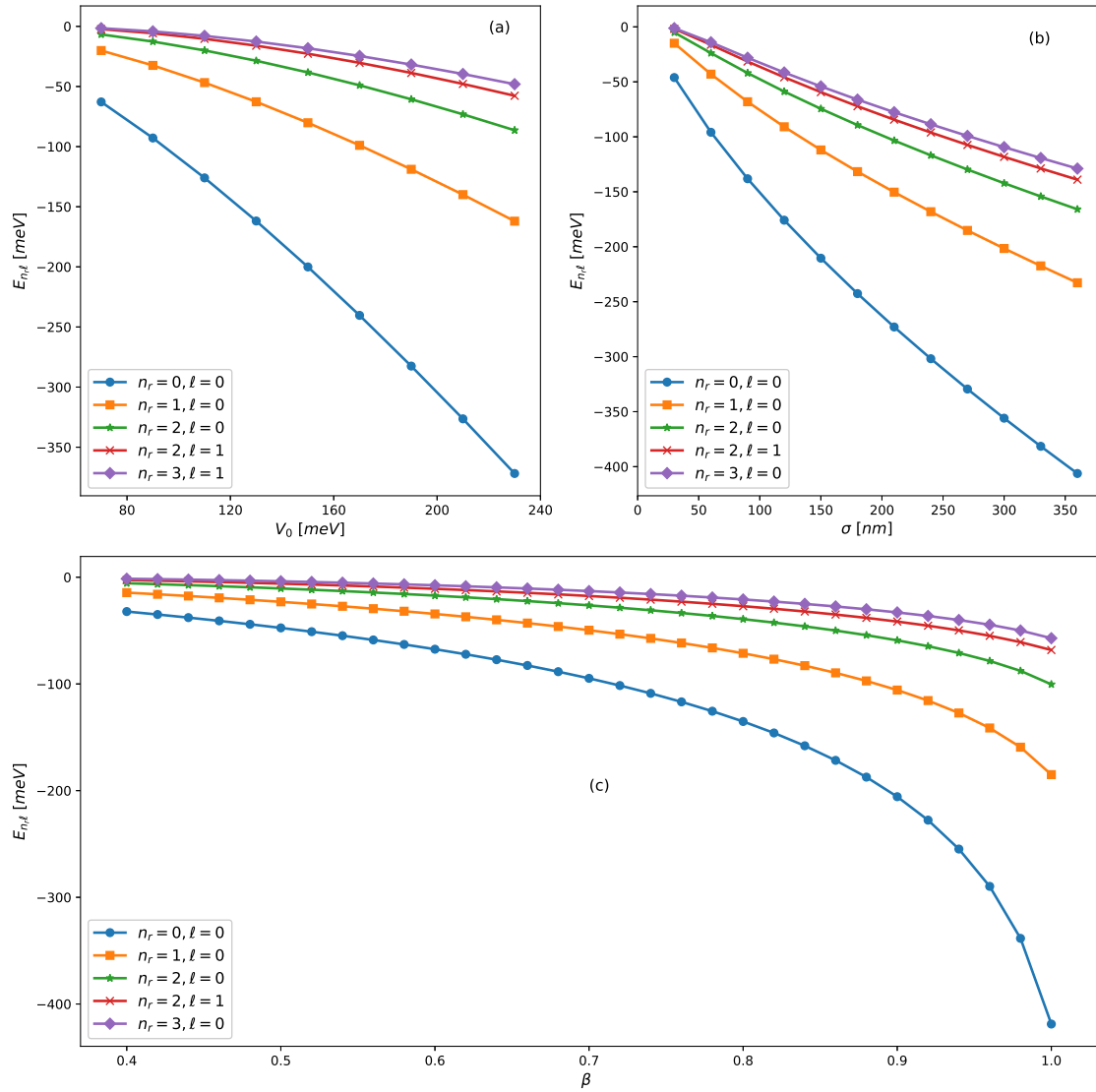
	Geçiş seviyeleri	$E_{n_r\ell}^i [\text{meV}]$	$E_{n_r\ell}^f [\text{meV}]$	$E_{fi} [\text{meV}]$	$M_{fi}/e [\text{nm}]$
$\lambda=0.5 \text{ nm}^{-1}$	1s - 2p	-408.038	-110.837	297.200	0.0837
	2s - 2p	-173.763	-110.837	62.926	0.5565
	2s - 3p	-173.763	-62.820	110.944	0.1455
	3s - 3p	-94.129	-62.820	31.310	0.8903
	3p - 3d	-62.820	-42.755	20.065	1.1968
$\lambda=1 \text{ nm}^{-1}$	1s - 2p	-445.443	-120.091	325.352	0.0715
	2s - 2p	-191.708	-120.091	71.617	0.4945
	2s - 3p	-191.708	-68.221	123.487	0.1327
	3s - 3p	-103.466	-68.221	35.246	0.8022
	3p - 3d	-68.221	-45.230	22.990	1.0616
$a=5 \text{ nm}$	1s - 2p	-305.828	-77.856	227.972	0.1234
	2s - 2p	-121.569	-77.856	43.713	0.8034
	2s - 3p	-121.569	-42.714	78.855	0.2159
	3s - 3p	-63.945	-42.714	21.231	1.2339
	3p - 3d	-42.714	-28.893	13.822	1.5831
$a=10 \text{ nm}$	1s - 2p	-317.087	-75.254	241.833	0.1132
	2s - 2p	-124.438	-75.254	49.184	0.7626
	2s - 3p	-124.438	-39.891	84.547	0.2171
	3s - 3p	-62.635	-39.892	22.743	1.1916
	3p - 3d	-39.892	-25.365	14.527	1.5217

4.1.3. Konuma bağlı etkin kütlelerin optik gözlenirler üzerine etkisi

Bu tez çalışmasında, sınırlama potansiyeli olarak kullanılan ters kare kök kesik ve deforme edilmiş eksponansiyel potansiyelde geometriyi belirleyen V_0 , σ ve β olmak üzere üç adet parametre bulunmaktadır. Şekil 4.2’de bu üç parametrenin bağlı durum enerji özdeğerlerini nasıl etkilediği, beş farklı kuantum durumu için gösterilmiştir. Şekilden açıkça görüldüğü üzere, üst enerji seviyelerine çıkıldıkça enerji özdeğerleri sıfıra doğru yaklaşmakta ve enerji seviyeleri arasındaki enerji farkı azalmaktadır. Yani kuyunun sığ bölgelerine doğru gidildikçe enerji seviyeleri sıklaşmaktadır. V_0 , σ ve β parametrelerinin artışı, enerji seviyeleri arasındaki farkı artırmaktadır. Şekil 4.2’de verilen üç şekilde de görüldüğü üzere, açısal momentum kuantum sayısı ℓ ’nin artışı potansiyel kuyusunu yukarı doğru kaydırarak kuyuyu giderek sıklaştırır ve bu da enerji seviyelerinin artmasına yol açar. Benzer şekilde, n_r kuantum sayısındaki artış da enerji özdeğerlerinin yükselmesine

neden olur. Hesaplamaların $n_r = 3, \ell = 1$ 'e kadar alınmasının nedeni, daha yüksek seviyelerine çıkıldıkça enerji özdeğerlerinin pozitif olarak hesaplanmasıdır. Elektron bu gibi durumlarda bağlı durumdan çıkmaktadır. Bu çalışmada yalnızca bağlı durumlar incelendiği için pozitif enerji özdeğerlerine sahip seviyelere yer verilmemiştir.

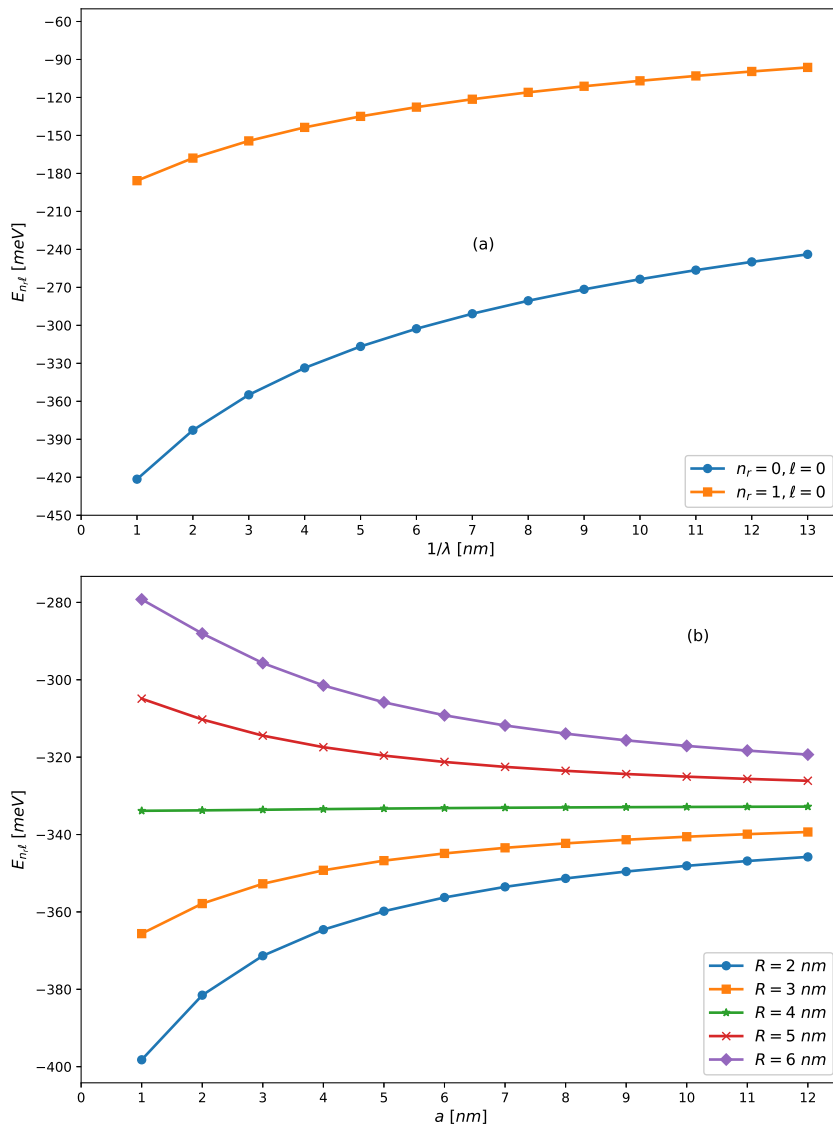
Sınırlayıcı potansiyel parametreleri, enerji özdeğerleri üzerinde büyük bir etkiye sahiptir. Potansiyelin derinliğini değiştiren V_0 parametresi arttıkça, potansiyel kuyusu negatif yönde derinleşir ve enerji özdeğerleri buna bağlı olarak Şekil 4.2a'da görüldüğü gibi azalmaktadır. Potansiyelin hem derinliği hem de genişliğini değiştiren σ parametresinin değişiminde ise enerji özdeğerlerindeki değişim, Şekil 4.2b'de verilmiştir. Açıkça görülmektedir ki σ parametresindeki artış, potansiyel kuyusunu aşağı doğru çekerek enerji özdeğerlerini azaltıcı bir etki yapmaktadır. Şekil 4.2c'de ise β parametresinin enerji özdeğerlerine etkisi analiz edilmektedir. β parametresindeki artış, enerji özdeğerlerini azaltırken, β değeri 1'e yaklaştıkça enerji özdeğerlerindeki azalma eğilimi artar. Daha önce belirttiğimiz gibi enerji özdeğerlerinin reel sayı olarak elde edilebilmesi için $\beta e^{-r/\sigma} < 1$ şartını sağlaması, buna bağlı olarak da $r > \ln(\beta^\sigma)$ olması gerekmektedir. σ ve V_0 'ın sayısal değerlerine bağlı olarak β 'nın 1'den büyük değerleri alındığında, enerji özdeğerleri kompleks olarak hesaplanmaktadır. Bu nedenle, β 'nın 1'den büyük olduğu durumlar bu tez kapsamında değerlendirme dışında bırakılmıştır.



Şekil 4.2. a) V_0 ($\lambda = 1 \text{ nm}^{-1}$, $\beta = 1$ ve $\sigma = 25 \text{ nm}$); b) σ ($V_0 = 0.05 \text{ eV}$, $\lambda = 1 \text{ nm}^{-1}$ ve $\beta = 1$); c) β ($V_0 = 0.25 \text{ eV}$, $\sigma = 25 \text{ nm}$ ve $\lambda = 1 \text{ nm}^{-1}$) potansiyel parametreleri altında enerji özdeğerleri değişimi

Şekil 4.3, enerji özdeğerlerinin, Denklem (4.4) ile tanımlanan $\mu_1(r)$ modifiye edilmiş eksponansiyel kütle modelindeki λ parametresi ile Denklem (4.5) ile verilen $\mu_2(r)$ Woods-Saxon kütle modelindeki a parametresindeki değişimlerden nasıl etkilendiğini göstermektedir. Nümerik hesaplarda potansiyel parametreleri $V_0 = 0.25 \text{ eV}$, $\sigma = 25 \text{ nm}$ ve $\beta = 1$ olarak alınmıştır. Şekil 4.3a'da; $n_r = 0, \ell = 0$ ve $n_r = 1, \ell = 0$ kuantum durumları için $1/\lambda$ 'ya karşı bağlı durum enerji özdeğerlerindeki artış açıkça görülüyor. Denklem (4.4) ile verilen MEM kütle modelindeki λ parametresi sonsuza götürüldüğünde, $\mu_1(r)$ kütlesi m_0 'a gider ve enerji özdeğerleri de m_0 ile ilişkili bir sabit enerji özdeğerine doğru yakınsar. Bu yakınsama Şekil 4.3a'da görülmektedir. Şekil 4.3b, $\mu_2(r)$ kütlesine ait R parametresinin beş farklı değeri için, a parametresindeki artışın taban durum bağlı

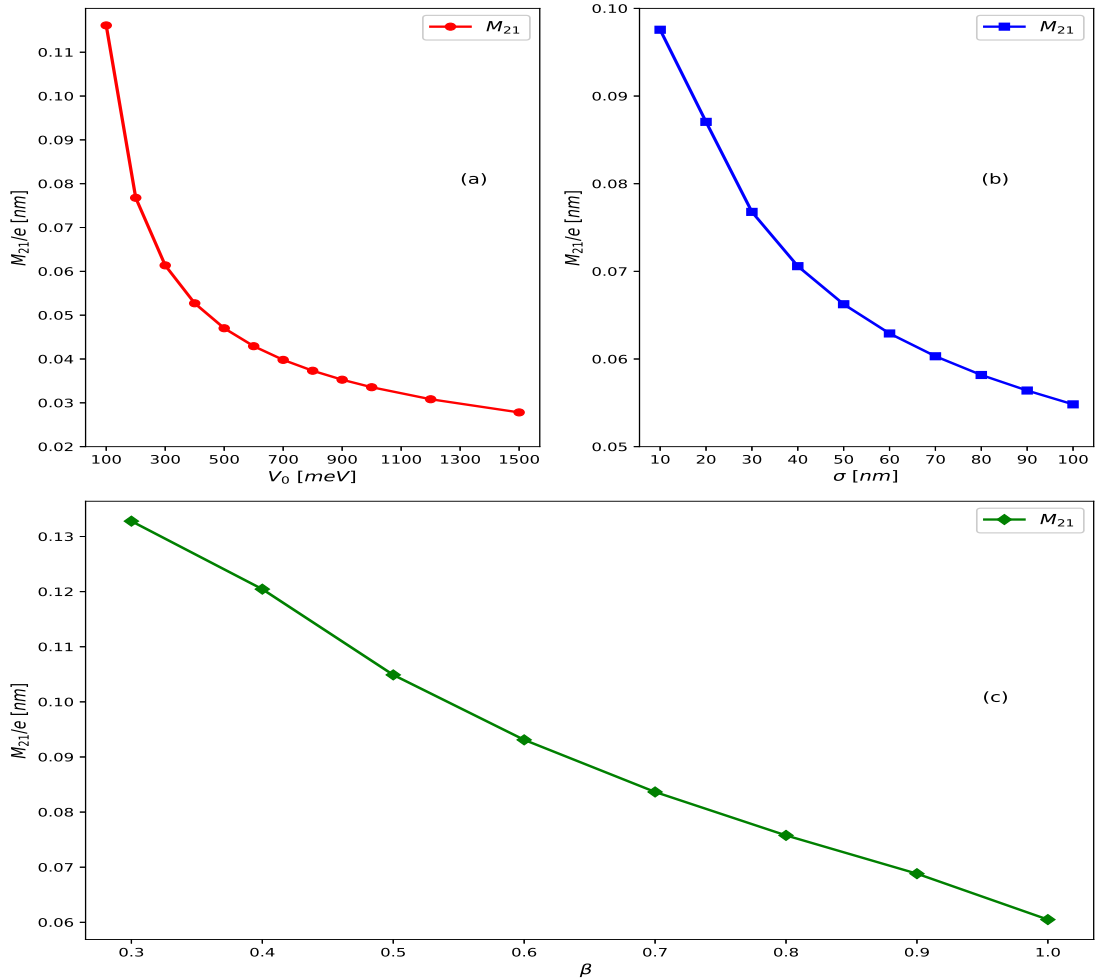
enerji özdeğerlerini nasıl etkilediğini göstermektedir. Bu enerji özdeğerleri, artış veya azalış eğilimi sergileyerek sabit bir değere yakınsamaktadır. R 'nin düşük değerlerinde a parametresine göre enerji özdeğerindeki değişim, $\mu_1(r)$ 'deki kütle parametresi λ 'nın değişimine benzemektedir. R 'nin yüksek değerlerinde ise a parametresi artışında enerji özdeğerleri azalmaktadır. Bu durumu $\mu_2(r)$ kütle fonksiyonunu matematiksel olarak analiz ederek doğrulayabiliriz. Denklem (4.5) ile verilen WSM modeli incelendiğinde, $R \ll a$ durumunda eksponansiyel terim $e^{-R/a}$ 'nın 1'e yakınsadığı açıktır. Bu durumda, WSM modeli MEM modeline benzer ve enerji özdeğerlerindeki artış trendi de benzerlik göstermektedir. $R \gg a$ durumunda ise $e^{-R/a}$ ifadesi azaldığından, kütle m_0 'a yaklaşır. Şekil 4.3b'de görüldüğü üzere, enerji özdeğerleri de buna bağlı olarak sabit bir değere yakınsar.



Şekil 4.3. a) $\mu_1(r)$ kütleğinde bulunan $1/\lambda$ parametresinin değişiminde $n_r = 0, \ell = 0$ ve $n_r = 1, \ell = 0$ kuantum durumlarında enerji özdeğerleri; **b)** $\mu_2(r)$ kütleğinde bulunan a 'nın değişiminde $n_r = 0, \ell = 0$ taban durumu için enerji özdeğerleri

Elektronun $1s - 2p$ geçişindeki dipol matris elemanından yararlanarak, lineer $\alpha^{(1)}(\omega)$, 3. mertebe lineer olmayan $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ ve toplam soğurma katsayıları $\alpha(\omega, I)$ hesaplanmıştır. Hesaplamalarda kullanılan sabitler; $\mu = 4\pi \times 10^{-7} N/A^2$, $\epsilon_R = n_R^2 \epsilon_0$, $n_R=3.2$, $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} F/m$, $\sigma_v = 3 \times 10^{22} m^{-3}$, $I=100 MW/cm^2$ ve $T_{fi} = 0.2 ps$ şeklindedir.

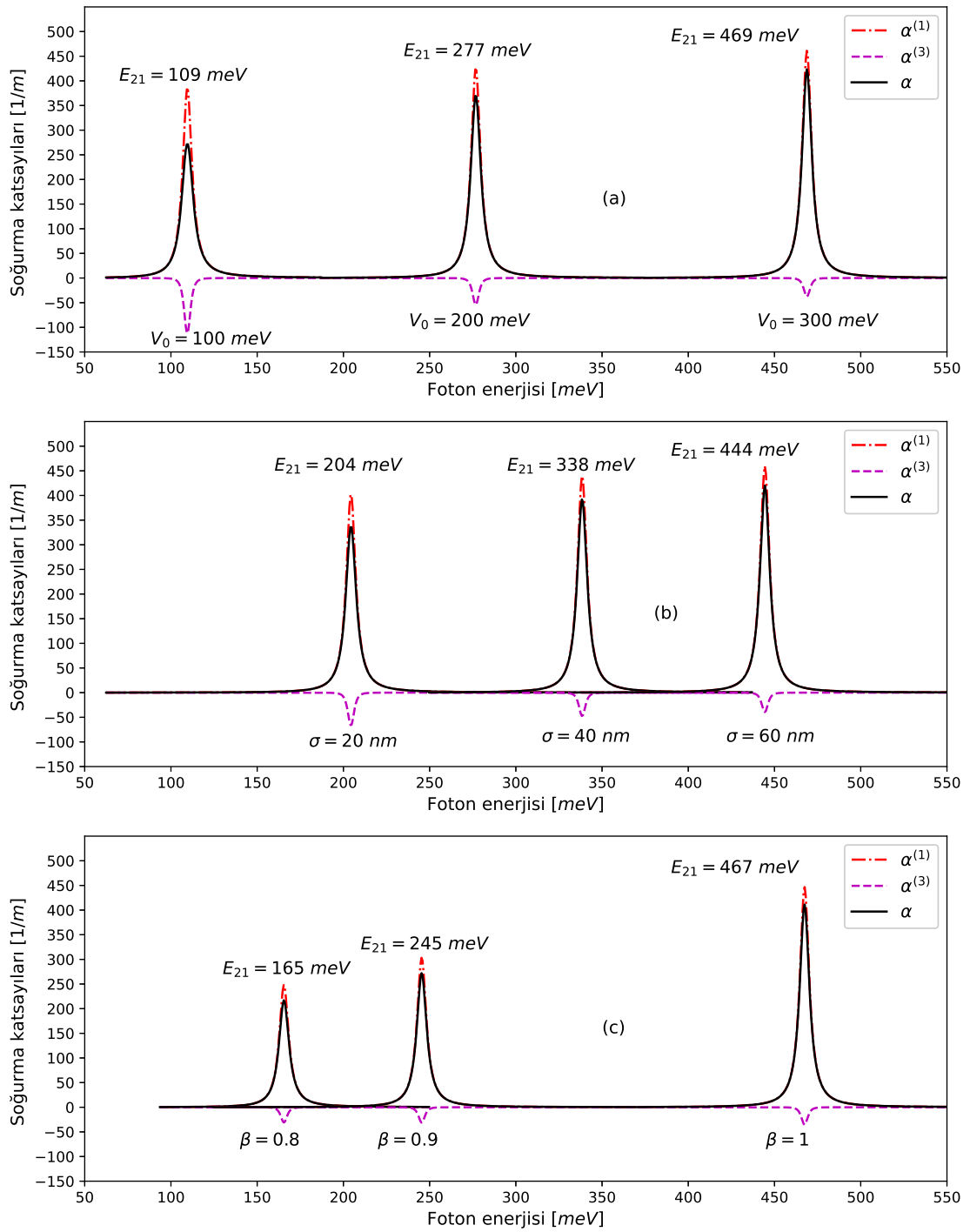
Potansiyel geometrisindeki değişimin, enerji özdeğerleri üzerinde büyük bir etkisi bulunmaktadır. Potansiyel parametreleri olan V_0 , σ ve β 'nin enerji özdeğerlerini değiştirmesinden dipol matris elemanları da etkilenmektedir. Optik gözlenirler, dipol matris elemanları üzerinden hesaplandığından, potansiyel parametrelerinin dipol matris elemanları üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Şekil 4.4'de bu üç parametrenin M_{fi} dipol matris elemanına etkisi görülmektedir. Potansiyel parametrelerinin artışında M_{21} 'in lineer olmayacak şekilde azaldığı açıktır. Ayrıca düşük V_0 ve σ değerlerinde dipol matris elemanları hızla azalırken, yüksek V_0 ve σ değerlerinde azalma hızı giderek yavaşlamaktadır. M_{21} , $1s$ ve $2p$ kuantum durumları arasındaki dipol matris elemanını ifade etmektedir.



Şekil 4.4. $1s - 2p$ durumları arasındaki geçiş için **a)** V_0 ($\sigma = 30 nm$, $\beta = 1$); **b)** σ ($V_0 = 200 meV$, $\beta = 1$); **c)** β ($V_0 = 500 meV$, $\sigma = 12 nm$) parametrelerine göre dipol matris elemanındaki değişim ($\lambda = 1 nm^{-1}$)

Şekil 4.5’de foton enerjilerine karşılık gelen soğurma katsayıları yer almaktadır. Bir GaAs yarı iletken kuantum noktanın $1s - 2p$ elektron geçişine ait optik soğurma katsayılarının, potansiyel parametreleriyle nasıl değiştiği incelenmiştir. Şekil 4.5a’da $\beta = 1$, $\sigma = 30 \text{ nm}$ ve $\lambda = 1 \text{ nm}^{-1}$ alınarak, potansiyel derinliğini değiştiren V_0 parametresinin artışı ile soğurma katsayılarındaki değişim gösterilmektedir. V_0 ’ın 100 meV ile 300 meV arası değişiminde toplam soğurma katsayısının büyüklüğü artmaktadır. Ayrıca potansiyel derinliğinin artışı, $1s - 2p$ kuantum seviyeleri arasındaki enerji farkını, yani foton enerjisini de artırmaktadır. Şekil 4.5b’de ise potansiyeldeki σ uzunluk parametresinin değişimiyle soğurma katsayılarının foton enerjisine göre nasıl değiştiği gösterilmektedir. $V_0 = 500 \text{ meV}$, $\beta = 1$ ve $\lambda = 1 \text{ nm}^{-1}$ parametreleri sabit tutularak, σ ’nın 20 nm ile 60 nm aralığındaki artışında soğurma katsayısındaki değişim incelenmiştir. Toplam soğurma katsayısı $\alpha(\omega, I)$ ’nin σ ile arttığı açıktır. Bunun yanı sıra, σ ’nın artışı rezonans enerjisinin de artışına yol açmıştır. Son olarak, Şekil 4.5c’de β parametresinin değişimiyle soğurma katsayılarının foton enerjisine göre nasıl değiştiği gösterilmektedir. Hesaplamalarda potansiyel parametreleri $V_0 = 500 \text{ meV}$ ve $\sigma = 12 \text{ nm}$, kütle parametresi ise $\lambda = 1 \text{ nm}^{-1}$ olarak alınmıştır. β değeri 0.8’den 1’e doğru artarken, toplam soğurma katsayısının da arttığı görülmektedir. Ayrıca, β ’daki artış foton enerjisinde de artışa neden olmaktadır. Şekil 4.5’te, tüm potansiyel parametreleri artarken lineer soğurma katsayısı $\alpha^{(1)}(\omega)$ ve toplam soğurma katsayısı $\alpha(\omega, I)$ ’nin arttığı açıkça görülmektedir. Öte yandan, lineer olmayan soğurma katsayısı $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ ’ün, V_0 ve σ değerlerindeki artışla azaldığı, β parametresindeki artışla ise artış gösterdiği gözlemlenmektedir.

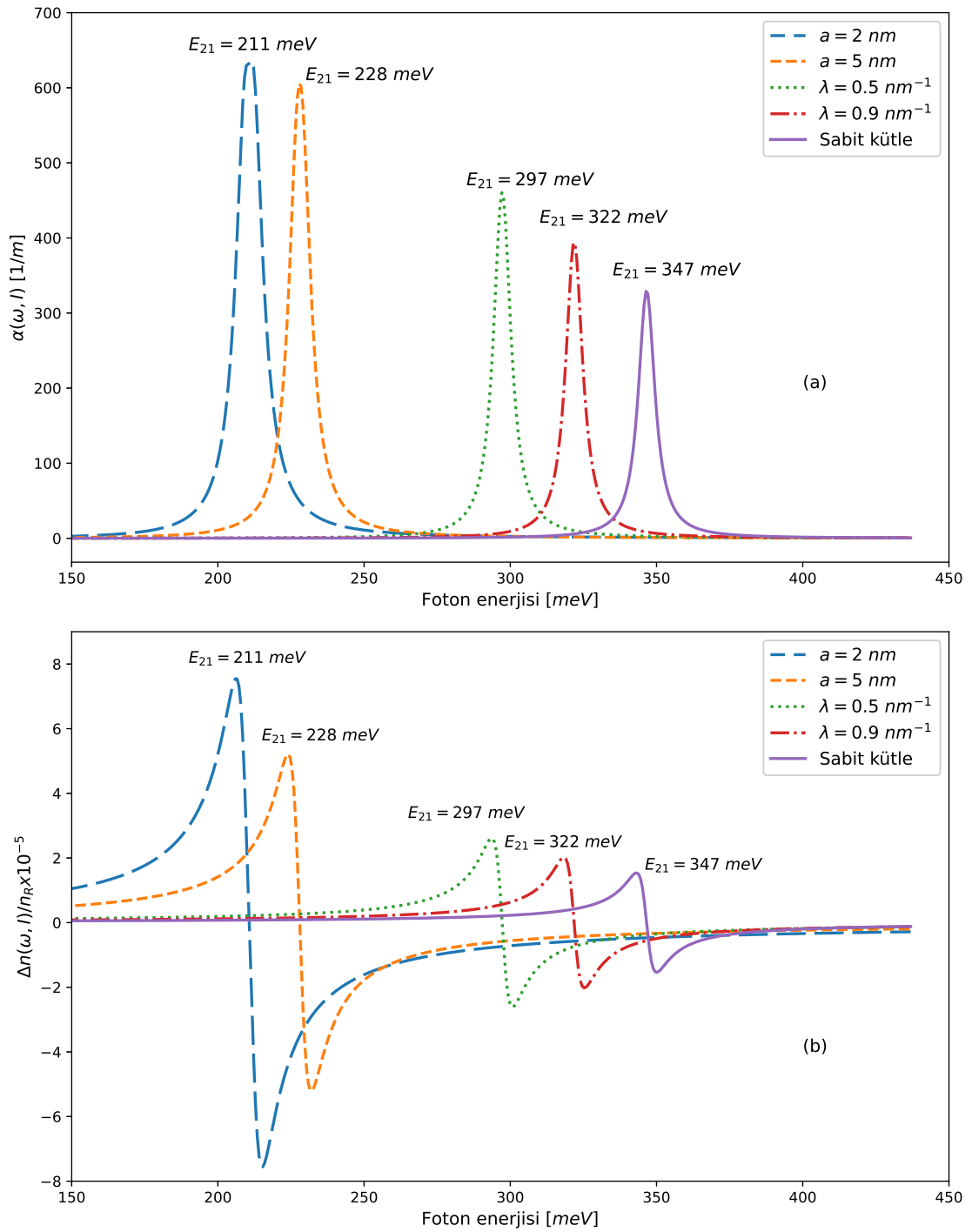
$1s - 2p$ optik geçişi için $\alpha^{(1)}(\omega)$ doğrusal, $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ üçüncü dereceden doğrusal olmayan ve $\alpha(\omega, I)$ toplam soğurma katsayılarının gelen foton enerjisine göre değişiminin V_0 , σ ve β parametrelerine bağlılığı; (2.42), (2.43) ve (2.44) numaralı denklemler incelenerek anlaşılabilir. Denklem (2.42) ve (2.43)’de, potansiyel parametreleri V_0 , σ ve β değiştikçe rezonans enerjisi E_{21} ile ilişkilendirilen ω ve dipol matris elemanı M_{21} dışında tüm parametreler sabit kalır. Şekil 4.4’de gösterildiği gibi dipol matris elemanı artan potansiyel parametreleriyle birlikte azalır. Soğurma katsayıları, (2.42) ve (2.43) denklemlerinde görüldüğü gibi ω ve M_{21} ile orantılıdır. Potansiyel parametrelerinin artışında dipol matris elemanının azalmasına rağmen lineer ve toplam soğurma katsayısının artması, denklemlerdeki ω ’lı kısmın M_{21} ’e baskın gelmesine bağlanmaktadır.



Şekil 4.5. Potansiyel parametrelerinin, gelen foton enerjisine karşı **a)** lineer $\alpha^{(1)}(\omega)$; **b)** 3. mertebe lineer olmayan $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ ve **c)** toplam soğurma katsayıları $\alpha(\omega, I)$ üzerindeki etkisi (E_{21} , $1s$ ve $2p$ kuantum durumları arasındaki enerji farkıdır)

Şekil 4.6’da, $1s - 2p$ geçişi için kütle parametrelerinin toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişime etkisi sunulmuştur. Şekil 4.6a’da, Denklem (4.4) ve (4.5) ile tanımlanan MEM ve WSM kütle modellerinin a ve λ parametrelerinin farklı

değerleri ve kütlenin uzay bağımlı olmadığı durum için toplam soğurma katsayısındaki değişim, foton enerjisine karşı gösterilmektedir. MEM'deki λ değeri 0.5 nm^{-1} 'den 0.9 nm^{-1} 'e çıktığında, toplam soğurma katsayısı azalarak sabit kütle pikine doğru kaymaktadır. Bunun durum Şekil 4.3a'da detaylandırıldığı üzere, λ parametresi arttıkça uzay bağımlı kütle geometrisinin sabit kütle durumuna yaklaşmasından kaynaklanmaktadır. Bir diğer kütle modeli olan WSM'de bulunan a parametresinin değişimi de Şekil 4.6a'da incelenmiştir. a parametresinin 2 nm 'den 5 nm 'ye artışıyla, dipol matris elemanında bir azalma meydana geldiği (Çizelge 4.3) ve buna bağlı olarak toplam soğurma katsayısının da azaldığı görülmektedir. Denklem (4.5) ile tanımlanan kütle fonksiyonunda, a parametresi büyük değerlere götürüldüğünde kütle, sabit kütleyle doğru yaklaşmaktadır. Bu durum, Şekil 4.6a'da a parametresinin artışıyla toplam soğurma katsayısı pik büyüklüğünün azalarak sabit kütle durumuna yaklaşmasıyla da açıkça görülmektedir. Ayrıca kütle parametrelerindeki artış, rezonans enerjisi piklerinin daha yüksek enerji değerlerine doğru kaymasını sağlamaktadır. Şekil 4.6b'de ise kırılma indisindeki toplam değişimin kütle parametrelerine göre değişimi foton enerjisine karşı gösterilmektedir. a ve λ parametreleri arttıkça kırılma indisindeki toplam değişim azalmaktadır. a ve λ değerleri büyük değerlere götürüldüğünde kırılma indisindeki toplam değişim piki, sabit kütle için hesaplanan pike yaklaşmaktadır. Dolayısıyla rezonans enerjileri a ve λ arttıkça artmaktadır.



Şekil 4.6. Kütle parametrelerinin **a)** toplam soğurma katsayısına; **b)** kırılma indisindeki toplam değişime etkisi ($V_0 = 0.25 \text{ eV}$, $\sigma = 25 \text{ nm}$, $\beta = 1$ ve $R = 6 \text{ nm}$). E_{21} , $1s$ ve $2p$ kuantum durumları arasındaki enerji farkıdır

4.2. Elektrik ve Manyetik Alan Altında Bir Kuantum Noktanın Sıcaklık ve Hidrostatik Basınç Etkisinde İncelenmesi

4.2.1. Sıcaklık ve hidrostatik basınç bağımlı kütle ve potansiyel profili kapsamında Schrödinger dalga denklemi

Bir kuantum noktasına hapsolmuş ve homojen bir manyetik alan ve doğrusal elektrik alanına tabi tutulan bir yüklü parçacık ele alındığında, ilgili Hamiltonyen operatörü SI (Système International d'Unités) birim sisteminde,

$$H = \frac{1}{2m^*(T, P)}[\mathbf{p} - q\mathbf{A}]^2 + q\mathcal{E}r + V(r, T, P) \quad (4.7)$$

şekilde ifade edilir (Griffiths ve Schroeter 2018). Burada $m^*(T, P)$ ifadesi parçacığın sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlı olan etkin kütleini temsil etmektedir. Momentum vektörü $\mathbf{p}$ ve parçacığın yükü ise q sembolü ile gösterilmektedir. $\mathbf{A}$ vektör potansiyeli, $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{r} \times \mathbf{B})$ olarak verilmiştir. Bu çerçevede kullanılan vektör potansiyeli seçimiyle manyetik alan $\mathbf{B} = B\hat{k}$ şeklinde olur. $\mathcal{E}$, lineer elektrik alanın büyüklüğünü ifade eder. $V(r, T, P)$ ise Denklem (4.3) ile verilmiş olan ters karekök eksponansiyel potansiyelin sıcaklık ve hidrostatik basınç bağımlı formu olmak üzere (Ishkhanyan 2018; Bayrak vd. 2024),

$$V(r, T, P) = \frac{V_0(T, P)\sqrt{2}}{\sqrt{1 + e^{-r/\sigma}}} \quad (4.8)$$

şeklinde alınmıştır. Sınırlama potansiyeli $V(r, T, P)$ 'nin geometrisinin kontrolünde σ parametresi baskın bir rol oynar. V_0 ise potansiyelin derinliğini değiştirmektedir. Denklemde yer alan $\sqrt{2}$ çarpanının eklenme nedeni, potansiyelin $r = 0$ 'da V_0 olmasını sağlamaktır. Potansiyel kuyusu r 'nin büyük değerlerinde ise $\sqrt{2} V_0(T, P)$ değerine yaklaşmaktadır. Burada sınırlama potansiyelinin derinliği $V_0(T, P)$, sıcaklık ve hidrostatik basıncın bir fonksiyonu olarak

$$V_0(T, P) = E_X(T, P) - E_g^\Gamma(T, P) \quad (4.9)$$

şekilde alınmıştır (Bayrak vd. 2024). GaAs yarı iletkeninin kuantum yapısının $E - k$ bant diyagramı incelendiğinde (Şekil 2.2) potansiyel derinliğinin yaklaşık olarak X vadisi $E_X(T, P)$ ile enerji bant aralığı $E_g^\Gamma(T, P)$ 'nin arasındaki fark kadar olduğu görülebilir (Casey ve Panish 1978; Bayrak vd. 2023). Bu durum, $E_X(T, P)$ ve $E_g^\Gamma(T, P)$ 'nin sıcaklık ve hidrostatik basınç bağımlılığını kullanarak potansiyel derinliğini sıcaklık ve hidrostatik basıncın fonksiyonları olarak yazmamızı sağlar. $E_X(T, P)$ ve $E_g^\Gamma(T, P)$ 'nin matematiksel ifadeleri sırasıyla (4.10) ve (4.11) denklemlerinde verilmektedir (Levinshstein ve Rumyant-

sev 1996; Baser vd. 2013).

$$E_X(T, P) = a_0 - a_1 \frac{T^2}{T + 204} - a_2 P, \quad (4.10)$$

$$E_g^\Gamma(T, P) = b_0 - b_1 \frac{T^2}{T + 204} + b_2 P - b_3 P^2. \quad (4.11)$$

Denklem (4.10)'daki katsayılar sırasıyla $a_0 = 1.981 \text{ eV}$, $a_1 = 4.60 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$ ve $a_2 = 1.5 \times 10^{-3} \text{ eV/kbar}$ olarak verilmiştir. Denklem (4.11)'daki katsayılar ise sırasıyla şu şekildedir: $b_0 = 1.519 \text{ eV}$, $b_1 = 5.405 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$, $b_2 = 0.0126 \text{ eV/kbar}$ ve $b_3 = 3.77 \times 10^{-5} \text{ eV/kbar}^2$ (Levinshtein ve Rumyantsev 1996).

Sıcaklık ve hidrostatik basınç, ortamın fiziksel özelliklerini değiştirdiği için elektronun kristal içerisindeki etkin kütlelerinde de değişikliğe neden olmaktadır. Bir GaAs kuantum noktasının optik özelliklerini gerçekçi parametrelerle doğru bir şekilde hesaplamak için, etkin kütle de potansiyel derinliği gibi sıcaklık ve hidrostatik basıncın bir fonksiyonu olarak (4.12) numaralı denklemdeki gibi tanımlanmıştır (Ehrenreich 1961; Aspnes 1976; Adachi 1985; Raigoza vd. 2004; Peter ve Navaneethakrishnan 2008b).

$$m^*(T, P) = m_e \left[E_p^\Gamma \left(\frac{2}{E_g^\Gamma(T, P)} + \frac{1}{E_g^\Gamma(T, P) + \Delta_0} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (4.12)$$

Burada m_e serbest elektron kütlesi, $\Delta_0 = 0.341 \text{ eV}$ spin-yörünge bölünmesi ve momentum matris elemanı ile ilişkili enerji $E_p^\Gamma = 7.51 \text{ eV}$ olarak verilmiştir.

Denklem (4.7) ile verilmiş olan Hamiltonyen, $\mathbf{p}$ momentum vektörü ve $\mathbf{A}$ vektör potansiyeli yerine konularak,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*(T, P)} \nabla^2 + \frac{1}{2} \omega_c L_z + \frac{1}{8} m^*(T, P) \omega_c^2 r^2 + q\mathcal{E}r + V(r, T, P) \quad (4.13)$$

şeklinde yazılabilir. $\omega_c = \frac{qB}{m^*(T, P)}$ siklotron frekansını belirtir. İkinci terimde yer alan L_z operatörü, açısal momentumun z bileşenini temsil eder. $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\phi}$ denklemi ile verilir. m manyetik kuantum sayısı olmak üzere hermitik L_z operatörü, gerçel $m\hbar$ özdeğerine sahiptir. Denklem (4.13) ile ifade edilen Hamiltonyen, Schödinger dalga denkleminde yerine yazıldığında

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*(T, P)} \nabla^2 + \frac{1}{2} \omega_c m\hbar + \frac{1}{8} m^*(T, P) \omega_c^2 r^2 + q\mathcal{E}r + V(r, T, P) \right] \psi(r) = E_{n,m} \psi(r) \quad (4.14)$$

ifadesi elde edilmektedir. Denklem (4.14) ile verilmiş olan Schrödinger dalga denkleminin öz fonksiyonu kutupsal koordinatlarda,

$$\psi(r) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{R(r)}{\sqrt{r}} \quad (4.15)$$

şeklinde dir. Denklem (4.15), Denklem (4.14)'de yerine konulup açışal ve radyal kısımlar ayrılıp düzenlendiğinde radyal denklem,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m^*(T, P)}{\hbar^2} \left[E_{n_r m} - \frac{1}{2} \omega_c m \hbar - \frac{1}{8} m^*(T, P) \omega_c^2 r^2 \right. \\ \left. - \frac{(m^2 - \frac{1}{4}) \hbar^2}{2m^*(T, P) r^2} - q\mathcal{E}r - V(r, T, P) \right] R(r) = 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

şeklinde elde edilmektedir. Denklem (4.16) ile verilmiş olan radyal denklemin bu durumda etkin potansiyel kısmı,

$$V_{eff}(r, T, P) = \frac{1}{8} m^*(T, P) \omega_c^2 r^2 + \frac{(m^2 - \frac{1}{4}) \hbar^2}{2m^*(T, P) r^2} + q\mathcal{E}r + V(r, T, P) \quad (4.17)$$

olmaktadır. Burada ilk terim olan $\frac{1}{8} m^*(T, P) \omega_c^2 r^2$, manyetik alanın etkisinin potansiyel enerjiye katkısını ifade ederken, ikinci terim $\frac{(m^2 - \frac{1}{4}) \hbar^2}{2m^*(T, P) r^2}$, açışal momentumun değışimiyle ilgili etkileri temsil eder. $q\mathcal{E}r$ terimi, lineer elektrik alanın potansiyel enerjiye katkısını tanımlar ve son terim olan $V(r, T, P)$, Denklem (4.8) ile verilmiş olan sıcaklık ve hidrostatik basınca bağılı sınırlama potansiyelinin potansiyel enerjiye etkisini ifade eder.

Etkin potansiyel, Denklem (4.17) ile verildiğı şekilde alındığı taktirde Denklem (4.16),

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m^*(T, P)}{\hbar^2} \left[E_{n_r m} - \frac{1}{2} \omega_c m \hbar - V_{eff}(r, T, P) \right] R(r) = 0 \quad (4.18)$$

olmaktadır. Denklem (4.18)'de verilen 2. mertebe lineer homojen diferansiyel denklemin analitik bir sonucu olmadığı için nümerik yöntemlerle enerji özdeğerleri hesaplanabilmektedir. Tezin bu kısmında bağılı durum enerji özdeğerlerini elde etmek için Numerov metodu kullanılmıştır.

Malzemelerin ışığı soğurma yeteneğıyle ilişkilendirilen lineer ve lineer olmayan soğurma katsayıları ve malzemelerin optik karakteristiklerinin belirlenmesinde önemli bir rolü olan lineer ve lineer olmayan kırılma indisleri, Numerov metodu ile elde edilen dalga fonksiyonları ve bağılı durum enerji özdeğerleri kullanılarak hesaplanmaktadır. Bu tez kapsamında, Denklem (2.42), (2.43) ve (2.44) ile verilen soğurma katsayıları ve (2.46), (2.47) ve (2.48) numaralı denklemler ile verilen kırılma indisindeki değışimler analiz

edilmiştir. Denklemlerde tanımlanan dipol matris elemanı M_{fi} , kutupsal koordinatlarda aşağıdaki formda alınmıştır:

$$M_{n_r^f m^f n_r^i m^i} = q \int_0^r R_{n_r^f m^f}(r) R_{n_r^i m^i}(r) dr \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m^f - m^i)\phi} d\phi. \quad (4.19)$$

Sıcaklık ve hidrostatik basınç, iletim bandındaki etkin elektron yoğunluğunu $\rho_c(T, P)$ etkileyen en önemli faktörlerdir. Bu bağlamda, etkin elektron yoğunluğunun sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlılığını tanımlamak için aşağıda verilen ampirik formül kullanılmıştır (Levinshtein ve Rumyantsev 1996):

$$\rho_c(T, P) = c_0 T^{3/2} \left[1 - c_1 T - c_2 T^2 + 21e^{-\frac{E_L(T, P)}{k_B T}} + 44e^{-\frac{E_X(T, P)}{k_B T}} \right]. \quad (4.20)$$

(4.20) eşitliğinde verilen sabitler şu şekildedir: $c_0 = 8,63 \times 10^{13} K^{-3/2} cm^{-3}$, $c_1 = 1,93 \times 10^{-4} K^{-1}$ ve $c_2 = 4,19 \times 10^{-8} K^{-2}$. Boltzman sabitinin değeri, $k_B = 8,617343 \times 10^{-5} eV K^{-1}$ 'dir. $E_L(T, P)$ terimi de GaAs'in $E - k$ bant diyagramı incelendiğinde, L vadisinin sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlı enerji farkını temsil eder (Levinshtein ve Rumyantsev 1996). $E_L(T, P)$ ifadesinin matematiksel ifadesi,

$$E_L(T, P) = d_0 - d_1 \frac{T^2}{T + 204} + d_2 P \quad (4.21)$$

şekilde verilmiştir. Denklem (4.21) eşitliğinde ifade edilen sabitler: $d_0 = 1.815 eV$, $d_1 = 6.05 \times 10^{-4} eV/K$ ve $d_2 = 5.5 \times 10^{-3} eV/kbar$ 'dır (Levinshtein ve Rumyantsev 1996).

4.2.2. Schrödinger dalga denkleminin Numerov metodu ile nümerik çözümü

Denklem (4.13) ile verilen Hamiltonyen için Schrödinger dalga denkleminin analitik bir sonucu yoktur. n_r ve m kuantum sayılarının bazı değerleri için ters karekök kesik ve deforme edilmiş eksponansiyel potansiyelin varlığında, radyal Schrödinger dalga denkleminin enerji özdeğerlerinin ve bunlara karşılık gelen dalga fonksiyonlarının sayısal hesaplamalarını gerçekleştirmek için Numerov yöntemi (Landau vd. 2024) kullanılmıştır. Yapılan hesaplamaların doğruluğu ve güvenilirliğini ortaya koymak için de farklı bir nümerik yöntem olan Sonlu Farklar (FD) metodu uygulanmıştır. Numerov yöntemi ile hesaplanan enerji özdeğerlerinin FD metodu ile karşılaştırılması Çizelge 4.4'de verilmiştir.

Çizelge 4.4. Farklı (n_r, m) kuantum durumlarında hesaplanan enerji özdeğerleri için Numerov ve FD yöntemlerinin karşılaştırılması. Hesaplarda alınan sabit parametreler: $T = 298\text{ K}$, $P = 1\text{ bar}$, $B = 2\text{ T}$, $\mathcal{E} = 0\text{ mV/nm}$ ve $\sigma = 10\text{ nm}$

(n_r, m)	$E_{n_r, m}(\text{FD})\text{ [eV]}$	$E_{n_r, m}(\text{Numerov})\text{ [eV]}$
(0,0)	0.55394	0.55397
(1,0)	0.61757	0.61759
(1,1)	0.63914	0.63914
(1,-1)	0.63548	0.63548

Çizelge 4.4, iki farklı nümerik metotla hesaplanan enerji özdeğerlerinin birbirine oldukça yakın olduğunu göstermektedir. Bu durum, yapılan hesaplamaların yüksek bir güvenilirlik taşıdığını ortaya koymaktadır. Çizelge 4.5’de ise dört farklı kuantum durumunda enerji özdeğerleri, değişen T sıcaklık, P hidrostatik basınç, B manyetik alan, $\mathcal{E}$ elektrik alan ve σ potansiyel parametresi değerleri için hesaplanmıştır.

Çizelge 4.5. T , P , B , $\mathcal{E}$ ve σ parametrelerinin değişen değerleri için, farklı kuantum durumlarının enerji özdeğerleri

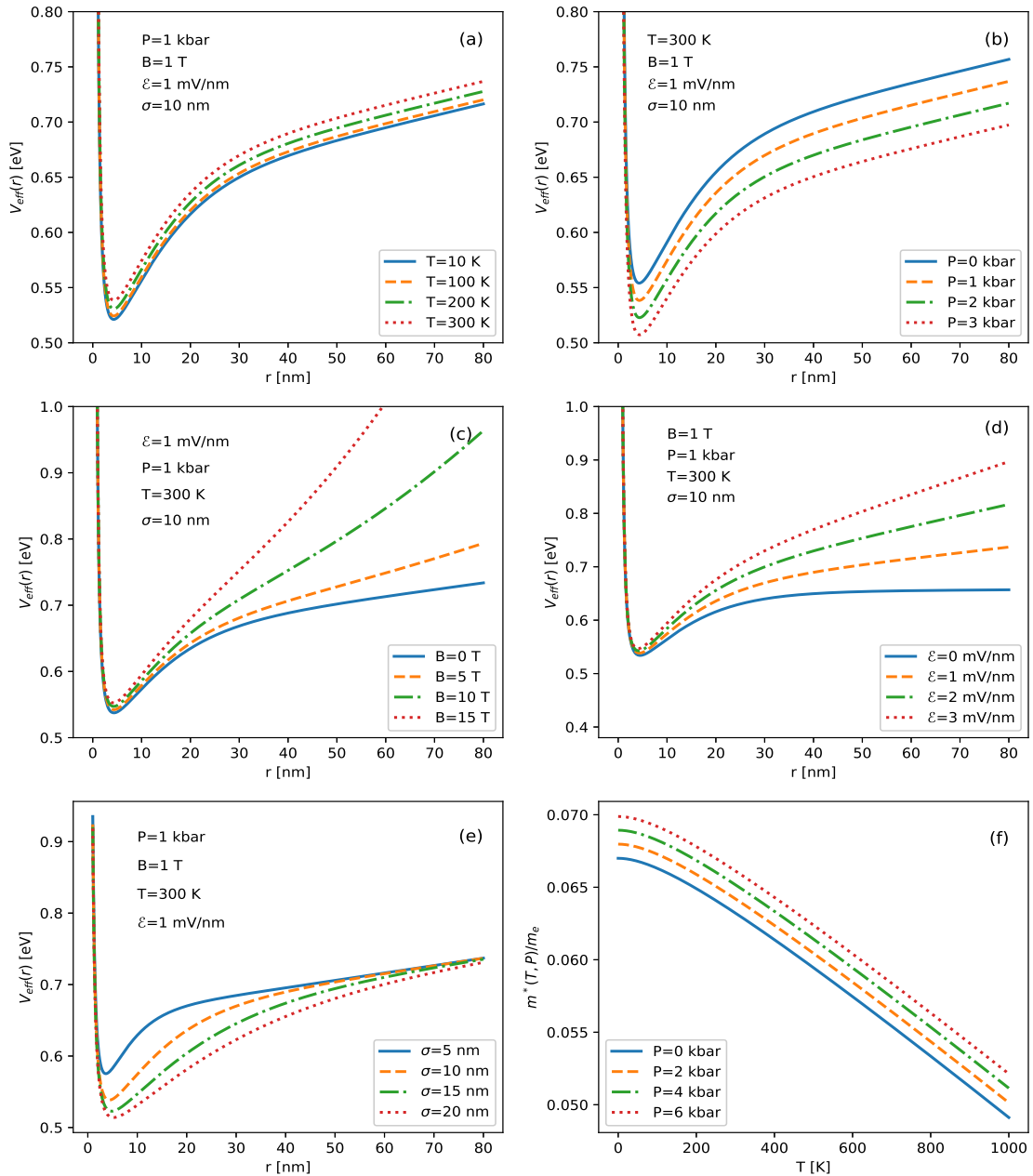
					Enerji özdeğerleri [eV] (n_r, m)			
$B[\text{T}]$	$\mathcal{E}[\text{mV/nm}]$	$T[\text{K}]$	$P[\text{bar}]$	$\sigma[\text{nm}]$	(0,0)	(1,0)	(1,1)	(1,-1)
2	0	100	1	10	0.53998	0.60177	0.62274	0.61925
2	0	200	1	10	0.54639	0.60901	0.63025	0.62668
2	0	300	1	10	0.55413	0.61777	0.63933	0.63567
2	0	298	1	10	0.55397	0.61759	0.63914	0.63548
2	0	298	1000	10	0.53814	0.60014	0.62112	0.61749
0	0	298	1	10	0.55393	0.61737	0.63695	0.63695
10	0	298	1	10	0.55505	0.62263	0.65430	0.63599
20	0	298	1	10	0.55821	0.63596	0.68275	0.64615
2	1	298	1	10	0.55895	0.62879	0.65333	0.64967
2	3	298	1	10	0.56842	0.64945	0.67897	0.67531
2	5	298	1	10	0.57737	0.66853	0.70230	0.69864
2	0	298	1	8	0.56516	0.63356	0.65469	0.65103
2	0	298	1	10	0.55397	0.61759	0.63914	0.63548
2	0	298	1	12	0.54573	0.60482	0.62591	0.62225

4.2.3. Sıcaklık, hidrostatik basınç, elektrik, manyetik alan ve potansiyel parametresinin gözlenirler üzerine etkisi

Ortalama alan potansiyeli, bir elektronun herhangi bir yarı iletken kristalinin örgüsündeki elektron ve atomlarla etkileşimini tanımlamada büyük öneme sahiptir. Enerji özdeğerleri, dipol matris elemanı, lineer ve lineer olmayan soğurma katsayıları, kırılma indisindeki lineer ve lineer olmayan değişim gibi tüm gözlenirler potansiyel geometrisi ile ilişkilidir. Potansiyel derinliği ve etkin elektron kütlesi sırasıyla Denklem (4.9) ve (4.12)'de verildiği gibi sıcaklık ve hidrostatik basıncın fonksiyonları olarak alınarak; sıcaklık, hidrostatik basınç, dış manyetik ve elektrik alan ve ayrıca potansiyel parametresi olan σ 'nın etkisinde bir kuantum noktanın optik gözlenirleri incelenmiştir. Potansiyel derinliği ve etkin kütlelerin sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlı olarak alınması, incelediğimiz fiziksel sistemin daha gerçekçi bir model olmasını sağlamaktadır.

Şekil 4.7'de sıcaklık, hidrostatik basınç, homojen manyetik alan, lineer elektrik alan ve σ potansiyel parametresinin etkin potansiyel geometrisini nasıl değiştirdiği sunulmakta, ayrıca kütlelerin T ve P ile değişimi incelenmektedir. Şekil 4.7a'da sıcaklığın etkin potansiyelin geometrisi üzerindeki etkisi gösterilmiştir. P , B , $\mathcal{E}$ ve σ parametreleri sabit alındığı durumda sıcaklık 10-300 K aralığında değiştikçe, etkin potansiyelin genişliği azalırken derinliği artmaktadır. Sıcaklık artışının, etkin potansiyel geometrisini yukarı doğru kaydıracağı açıkça görülüyor. Bu durumda, en düşük enerji seviyesinin (taban durum) de artması beklenmektedir. Şekil 4.7b'de ise T , B , $\mathcal{E}$ ve σ parametreleri sabit tutularak hidrostatik basıncın etkin potansiyel geometrisine etkisi incelenmiştir. 0–3 $kbar$ 'lık aralıktaki artışı incelenen hidrostatik basınç, sıcaklığın tersine potansiyel geometrisini aşağı doğru kaydırmaktadır. Hidrostatik basınç artırıldığında, potansiyel geometrisinin genişliği artmakta ve derinliği azalmaktadır. Dolayısıyla en düşük enerji seviyesi de buna bağlı olarak azalmaktadır. Şekil 4.7c'de $\mathcal{E}$, P , T ve σ 'nın sabit tutulan değerleriyle, manyetik alanın 0–15 T aralığındaki artışında potansiyel geometrisi incelenmektedir. Manyetik alan artırıldığında potansiyel derinliği neredeyse aynı kalırken potansiyel genişliği daralmaktadır. Bu durumda, en düşük enerji seviyesinin artacağı yorumu yapılır. Denklem (4.17)'deki manyetik alan terimi (ilk terim), diğer terimlere baskın geldiğinde, etkin potansiyel matematiksel olarak harmonik osilatör gibi davranmaktadır. Şekil 4.7c'de de görüldüğü gibi manyetik alanın etkisi arttıkça, etkin potansiyelin şekli osilatör geometrisine yaklaşmaktadır. Şekil 4.7d'de lineer elektrik alandaki değişimin etkin potansiyele etkisi B , P , T ve σ parametreleri sabit alınarak analiz edilmiştir. 0–3 mV/nm aralığındaki elektrik alan artışında potansiyel derinliği neredeyse aynı kalırken potansiyel genişliği daralmaktadır. Bu da manyetik alan etkisinde olduğu gibi taban durum enerji seviyesini artırmaktadır. Denklem (4.17)'deki elektrik alan terimi diğer terimlere baskın geldiği durumda etkin potansiyel, lineer bir terim gibi davranmaya doğru yönelir. Şekil 4.7e'de ise Denklem (4.8)

ile verilen sınırlama potansiyelinde bulunan σ parametresinin, potansiyel geometrisini nasıl etkilediği incelenebilmektedir. σ 'nın artışında, potansiyel geometrisi aşağı doğru kayar. 5 nm 'den 20 nm 'ye kadar olan σ artışında, etkin potansiyelin derinliği azalırken genişlik artmaktadır. Son olarak Şekil 4.7f'de, Denklem (4.12) ile verilen etkin kütle'nin sıcaklığa göre değişimi dört farklı hidrostatik basınç değerlerinde analiz edilmektedir. Basınç sabit tutulup sıcaklık artırıldığında kütle azalmakta, sıcaklık sabit tutulup hidrostatik basınç artırıldığında ise kütle'nin değeri artmaktadır.

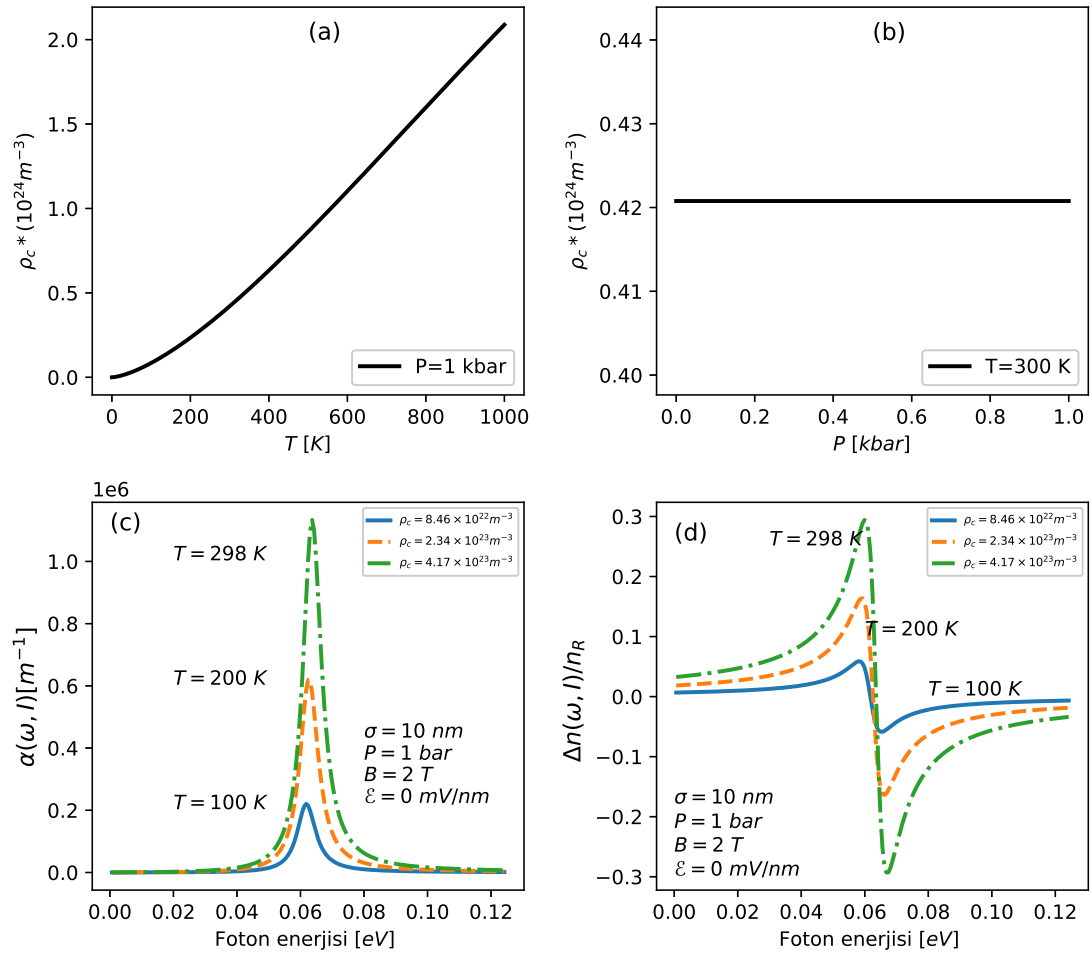


Şekil 4.7. a) Sıcaklık; b) hidrostatik basınç; c) homojen manyetik alan; d) lineer elektrik alan ve e) σ parametresi değişiminde $m = 1$ için etkin potansiyel profili. f) Sıcaklık ve hidrostatik basıncın bir fonksiyonu olarak etkin kütledeki değişim

Lineer ve lineer olmayan soğurma katsayıları ve bağıl kırılma indisindeki toplam değişim gibi optik gözlenirlerin hesaplanmasında iletkenlik bandındaki elektronun taban durum ($n_r = 0, m = 0$) ile ilk uyarılmış durum ($n_r = 1, m = 0$) arasındaki optik geçişi baz alınmıştır. Gözlenirler hakkında yapılan nümerik hesaplarda alınan sabitler; $n_R = 3.2$, $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} F/m$, $\epsilon_R = n_R^2 \epsilon_0$, $\mu = 4\pi \times 10^{-7} N/A^2$, $I = 0.1 MW/cm^2$ ve $T_f = 0.2 ps$ şeklindedir.

Bu tez çalışması kapsamında, Denklem (4.20)'de görüldüğü gibi sıcaklık ve hidrostatik basınç değişiminde $\rho_c(T, P)$ 'nin değişimi ve optik gözlenirlere etkisi incelenmiştir. $\rho_c(T, P)$ ifadesinin değeri, Şekil 4.8a'da gösterildiği gibi $0 K - 1000 K$ arasındaki sıcaklıklarda önemli ölçüde artmaktadır. Ancak, $0 kbar$ ile $1 kbar$ arasındaki hidrostatik basınç artışında ise Şekil 4.8b'de açıkça görüldüğü gibi neredeyse sabit kalmıştır. Denklem (4.20) ile verilen $\rho_c(T, P)$ ifadesine hidrostatik basınç katkısı, eksponansiyel terimlerden gelmektedir. Diğer terimler yanında eksponansiyel terimin etkisi oldukça küçük olduğu için elektron yoğunluğunda sıcaklığın etkisinin hidrostatik basınca kıyasla oldukça baskın olduğu görülür. Şekil 4.8c ve d'de ise sıcaklığa bağlı etkin elektron yoğunluğunun sırasıyla toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişim üzerindeki etkisi gösterilmektedir. Verilen sıcaklık ve hidrostatik basınç değerleri için hesaplanan $\rho_c(T, P)$ değerleri, her iki şeklin sağ üst kısımlarında yer almaktadır. Sabit σ , P , B ve $\mathcal{E}$ altında sıcaklık arttığında, toplam soğurma katsayısının büyüklükleri ve kırılma indisindeki toplam değişim de sırasıyla Şekil 4.8c ve d'de gösterildiği gibi artmaktadır.

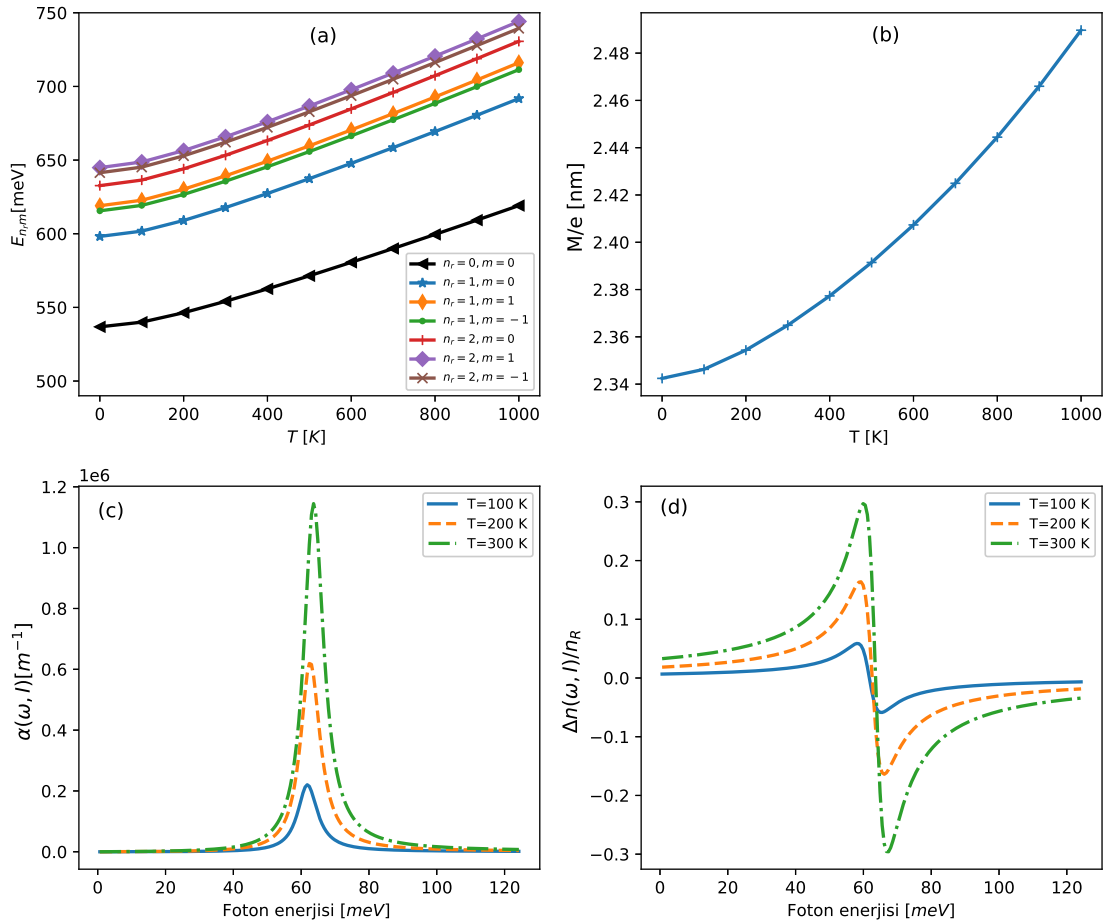
Şekil 4.8c ve d'nin sağ üst kısımlarında yer alan $\rho_c(T, P)$ değerleri ile ilişkilendirildiğinde; sabit basınçta sıcaklık, $\rho_c(T, P)$ değerini ve dolayısıyla söz konusu optik gözlenirlerin büyüklüklerini değiştirmektedir. Bu sonuç, soğurma katsayıları için Denklem (2.42) ve Denklem (2.43), kırılma indisindeki toplam değişim için de Denklem (2.46) ve Denklem (2.47) göz önüne alındığında beklenen bir durumdur. Şekil 4.8c ve d'deki değişim dikkate alındığı durumda, incelenen sistemin fiziksel temellerini güçlendirmesi açısından hesaplamalarda ρ_c sabit olarak alınmayıp sıcaklık ve hidrostatik basınca bağlı olarak ele alınmaktadır.



Şekil 4.8. **a)** Sıcaklık ve **b)** hidrostatik basınç etkileri altında iletim bandındaki etkin elektron yoğunluğunun değişimi. $\rho_c(T, P)$ 'nin $n_r = 1$, $m = 0$ ve $n_r = 0$, $m = 0$ durumları arasındaki optik geçişler sırasındaki **c)** toplam soğurma katsayısı ve **d)** toplam kırılma indisi değişimi üzerine etkisi

Şekil 4.9'da sıcaklığın bağlı durum enerji özdeğerleri, dipol matris elemanı, toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişim üzerindeki etkileri incelenmektedir. Şekil 4.9a'da, yarı iletken kafesin iletkenlik bandındaki elektronların enerji özdeğerlerindeki değişim, yedi farklı kuantum durumu için sıcaklığa bağlı olarak sunulmaktadır. Sıcaklık artışı, etkin potansiyelin derinliğini Şekil 4.7a'da gösterildiği gibi artırmakta ve bu durum Şekil 4.9a'da gösterildiği gibi enerji seviyelerinde artışa yol açmaktadır. Etkin potansiyeldeki sıcaklığa bağlı artış, (4.17) denklemindeki terimlerin incelenmesiyle açıklanabilir. Sıcaklık arttıkça, Denklem (4.11)'deki $E_g^T(T, P)$ değeri azalır. Buna bağlı olarak Denklem (4.12)'de verilen etkin kütle de azalır. Etkin kütledeki bu azalma, hem Denklem (4.17)'deki ilk terim olan manyetik alan teriminde hem de ikinci terim olan merkezci terimde artışa yol açar. Elektrik alan katkısı olan üçüncü terim sıcaklıktan etkilenmezken, sınırlama potansiyelini temsil eden son terim sıcaklıktaki değişikliklerle çok

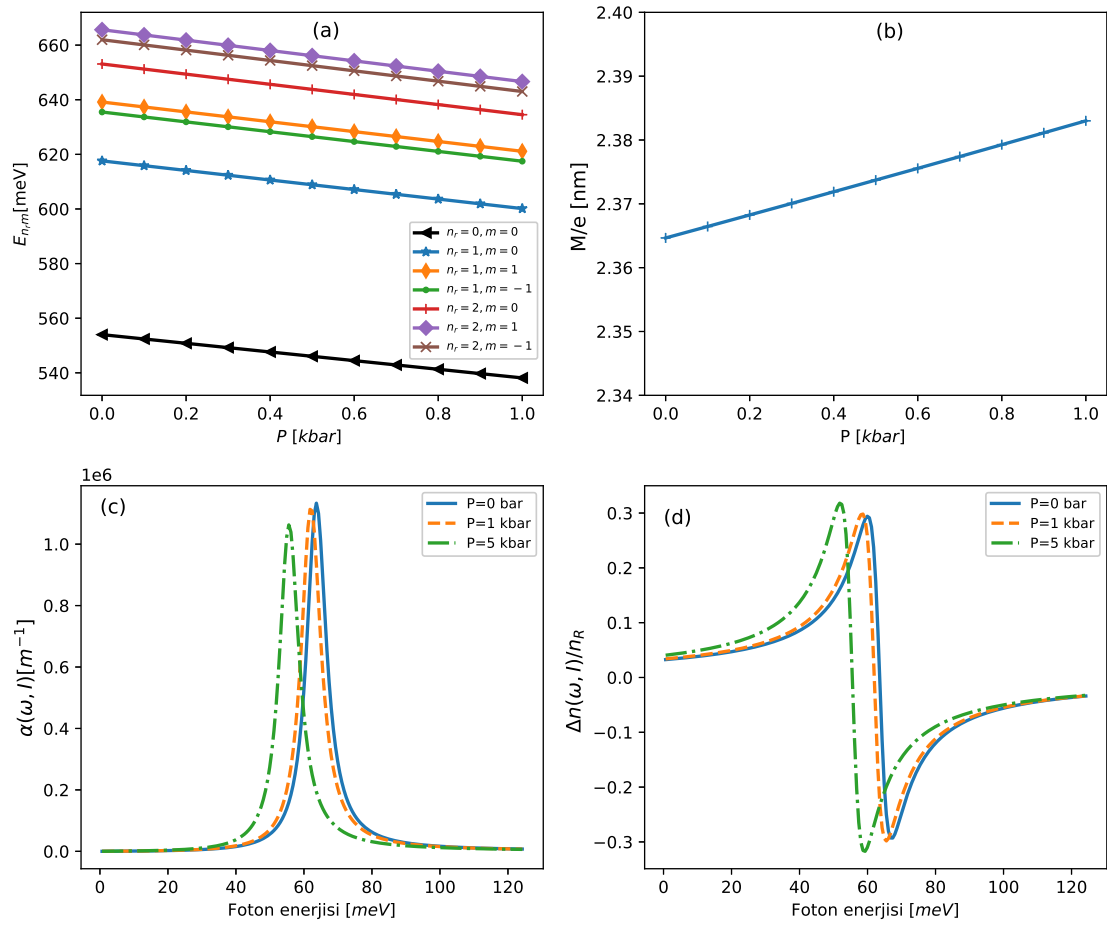
küçük bir değişim gösterir. Ayrıca, Şekil 4.9a'da görüldüğü gibi yüksek enerji seviyelerine çıkıldıkça, bağlı durum enerji seviyeleri arasındaki enerji farkı azalmaktadır. Sıcaklık 0–1000 K bandında arttıkça, taban durum $n_r = 0, m = 0$ ve ilk uyarılmış durum $n_r = 1, m = 0$ arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanı, Şekil 4.9b'de gösterildiği gibi artmaktadır. Dipol matris elemanındaki bu artış, Şekil 4.9c ve d'de gösterildiği gibi hem toplam soğurma katsayısının hem de kırılma indisindeki toplam değişimin büyüklüklerinde artışa yol açar. Foton enerjisinin ise sıcaklık artışında neredeyse aynı kaldığı açıkça görülmektedir.



Şekil 4.9. Sıcaklık değişiminde **a)** farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeşlerindeki değişim; **b)** $n_r = 0, m = 0$ ve $n_r = 1, m = 0$ durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; **c)** foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim; **d)** foton enerjisine göre kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $\sigma = 10$ nm, $P = 1$ bar, $B = 2$ T ve $\mathcal{E} = 0$ mV/nm

Şekil 4.10'da hidrostatik basıncın bağlı durum enerji özdeşleri, dipol matris elemanı, toplam soğurma katsayısı ve bağlı kırılma indisindeki toplam değişim üzerindeki etkileri sistematik şekilde incelenmiştir. Hidrostatik basınç arttıkça, etkin potansiyelin

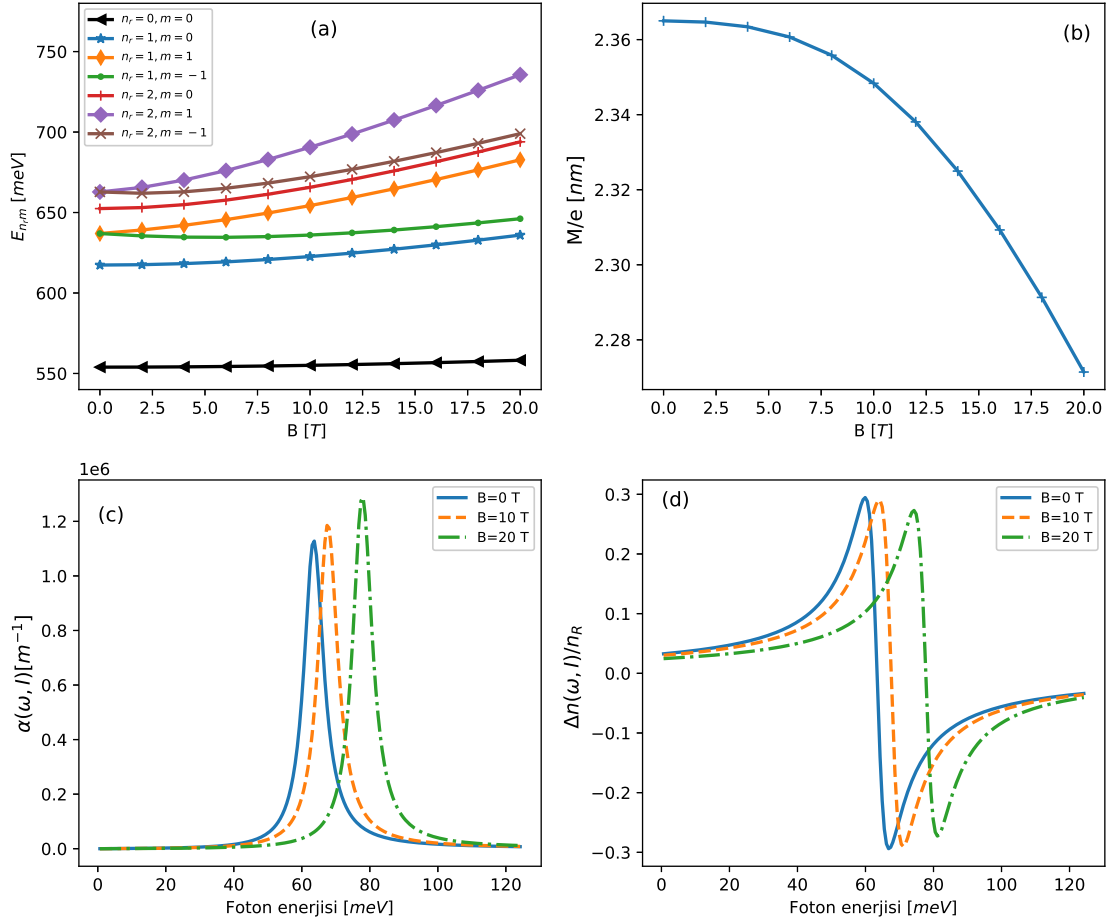
geometrisi Şekil 4.7b’de gösterildiği gibi aşağı doğru kaymaktadır. Etkin potansiyeldeki bu azalma, Denklem (4.17)’deki terimler incelenerek yorumlanabilmektedir. Hidrostatik basıncın artışı, Denklem (4.11)’de verilmiş olan $E_g^T(T, P)$ değerini de artırır. Ayrıca Denklem (4.12) ile verilen etkin kütle Şekil 4.7f’de gösterildiği gibi hidrostatik basınçla artar. Etkin kütledeki artış, manyetik alan terimi ve merkezci terimin katkısını azaltmaktadır. Denklem (4.17)’deki üçüncü terim basınca bağlı olmadığı için hidrostatik basınç değişiminden etkilenmezken, dördüncü terim diğer terimlere kıyasla az da olsa bir değişim gösterir. Kısaca hidrostatik basınç artışında etkin potansiyelin geometrisi aşağı doğru kaydığı için taban durum enerji seviyesi azalmakta ve diğer üst enerji seviyelerinde de azalma olmaktadır. Bu durum Şekil 4.10a’da açıkça görülmektedir. Ayrıca üst enerji seviyelerine doğru çıkıldığında seviyeler arasındaki enerji farkının azaldığı da gözlenmektedir. Şekil 4.10b’de ise hidrostatik basıncın 0–1 *kbar* aralığındaki değişiminde, taban durum ($n_r = 0, m = 0$) ile ilk uyarılmış durum ($n_r = 1, m = 0$) arasındaki optik geçiş için hesaplanan dipol matris elemanında meydana gelen artış görülmektedir. Hidrostatik basıncın bir fonksiyonu olarak dipol matris elemanının artmasına rağmen, Şekil 4.10c ve d’de görüldüğü üzere toplam soğurma katsayısının büyüklüğü azalırken, kırılma indisindeki toplam değişimin büyüklüğü artar. Denklem (2.42) ve (2.43)’e göre $|M_{fi}|^2$ ’deki artışla birlikte toplam soğurma katsayısının da artması beklenmekteydi. Ancak durum beklendiği gibi olmadı. Bu tutarsızlık, diğer terimlerinin sabit kaldığı soğurma denklemlerindeki $\omega |M_{fi}|^2$ ifadesi analiz edilerek anlaşılabilir. Hidrostatik basınç arttıkça, E_{fi} ’deki rezonans frekansı ω , $|M_{fi}|^2$ ’deki artışa kıyasla daha önemli ölçüde azalır ve böylece soğurma katsayılarının genel davranışında baskın olur. Denklem (2.46) ve (2.47) ile verilen lineer ve lineer olmayan kırılma indislerindeki değişimin büyüklüğü ise ω ile doğrusal olarak artmamaktadır ve $|M_{fi}|^2$ terimi denklemlerde baskın gelmektedir. Son olarak, hidrostatik basınç artışında foton enerjisinin azaldığı Şekil 4.10c ve d’de açıkça görülmektedir.



Şekil 4.10. Hidrostatik basınç değişiminde **a)** farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; **b)** $n_r = 0, m = 0$ ve $n_r = 1, m = 0$ kuantum durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; **c)** foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim ve **d)** foton enerjisine göre kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $\sigma = 10 \text{ nm}$, $T = 298 \text{ K}$, $B = 2 \text{ T}$ ve $\mathcal{E} = 0 \text{ mV/nm}$

Şekil 4.11’de, homojen bir manyetik alanın; enerji özdeğerleri, dipol matris elemanı, toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişim üzerindeki etkisi incelenmektedir. Dış manyetik alan şiddeti 0 T alındığında; $n_r = 1$ ve $m = 1, -1$ için enerji özdeğerleri ve $n_r = 2$ ve $m = 1, -1$ kuantum durumları, Şekil 4.11a’da gösterildiği gibi dejeneredir. Manyetik alanın büyüklüğü arttıkça, enerji özdeğerlerinde artış olmaktadır. Ayrıca, $m = 1$ durumlarının $m = -1$ durumlarına kıyasla enerji özdeğerleri daha büyük bir artış sergilemektedir. Şekil 4.11b, manyetik alan artışında dipol matris elemanındaki azalmayı gösterir. Dipol matris elemanının azalması Şekil 4.11c ve d ile verilen, sırasıyla toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişim grafikleri ile ilişkilendirilmektedir. Dipol matris elemanı azaldıkça toplam soğurma katsayısı artarken, kırılma indisindeki toplam değişim azalmaktadır. Bu durum, toplam soğurma katsayısındaki rezonans enerjisi E_{fi} ’deki açısal frekans ω ’nın, $|M_{fi}|^2$ çarpanından gelen

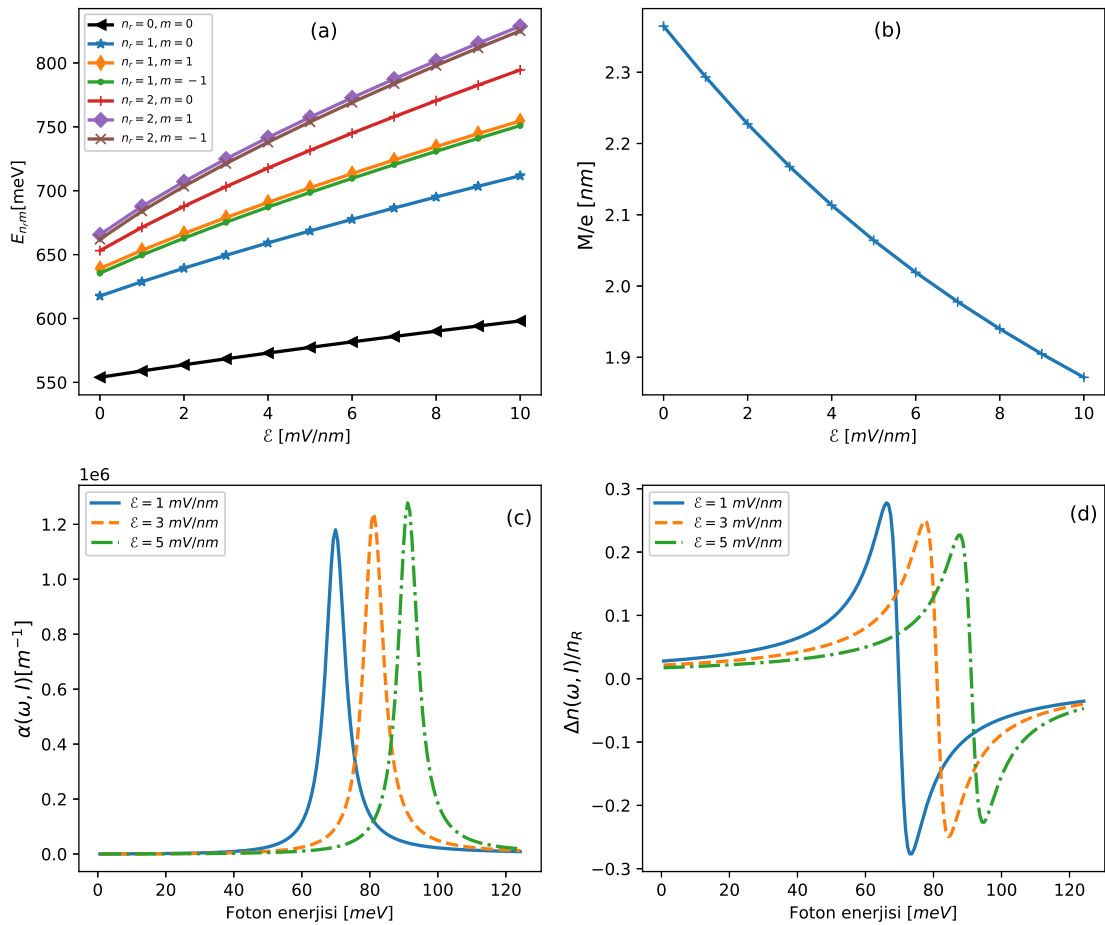
katkıya baskın gelmesinden kaynaklanır. Kırılma indisindeki toplam değişimin azalması da $|M_{fi}|^2$ teriminin Denklem (2.46) ve (2.47)'de baskın olmasından ileri gelmektedir. Manyetik alan büyüklüğündeki artış, Şekil 4.11c ve d'de gösterildiği gibi, taban durum ($n_r = 0, m = 0$) ile ilk uyarılmış durum ($n_r = 1, m = 0$) arasındaki rezonans enerjisi E_{fi} 'de artışa yol açmaktadır.



Şekil 4.11. Homojen bir manyetik alan büyüklüğünün değişiminde **a)** farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; **b)** $n_r = 0, m = 0$ ve $n_r = 1, m = 0$ durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; **c)** foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim ve **d)** foton enerjisine göre kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $\sigma = 10 \text{ nm}$, $T = 298 \text{ K}$, $P = 1 \text{ bar}$ ve $\mathcal{E} = 0 \text{ mV/nm}$

Şekil 4.12'de, bir GaAs yarı iletken kuantum noktasına uygulanan lineer elektrik alanın; enerji özdeğerleri, dipol matris elemanı, toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişim üzerine etkisi incelenmiştir. Elektrik alanının bir fonksiyonu olarak yedi farklı kuantum durumu için enerji özdeğerlerindeki değişim, Şekil 4.12a'da sunulmuştur. Elektrik alan büyüklüğündeki artış, enerji özdeğerlerinin artmasına neden olmuştur. Bu durum öngörülen bir sonuçtur, çünkü elektrik alan etkin potansiyel geometrisini da-

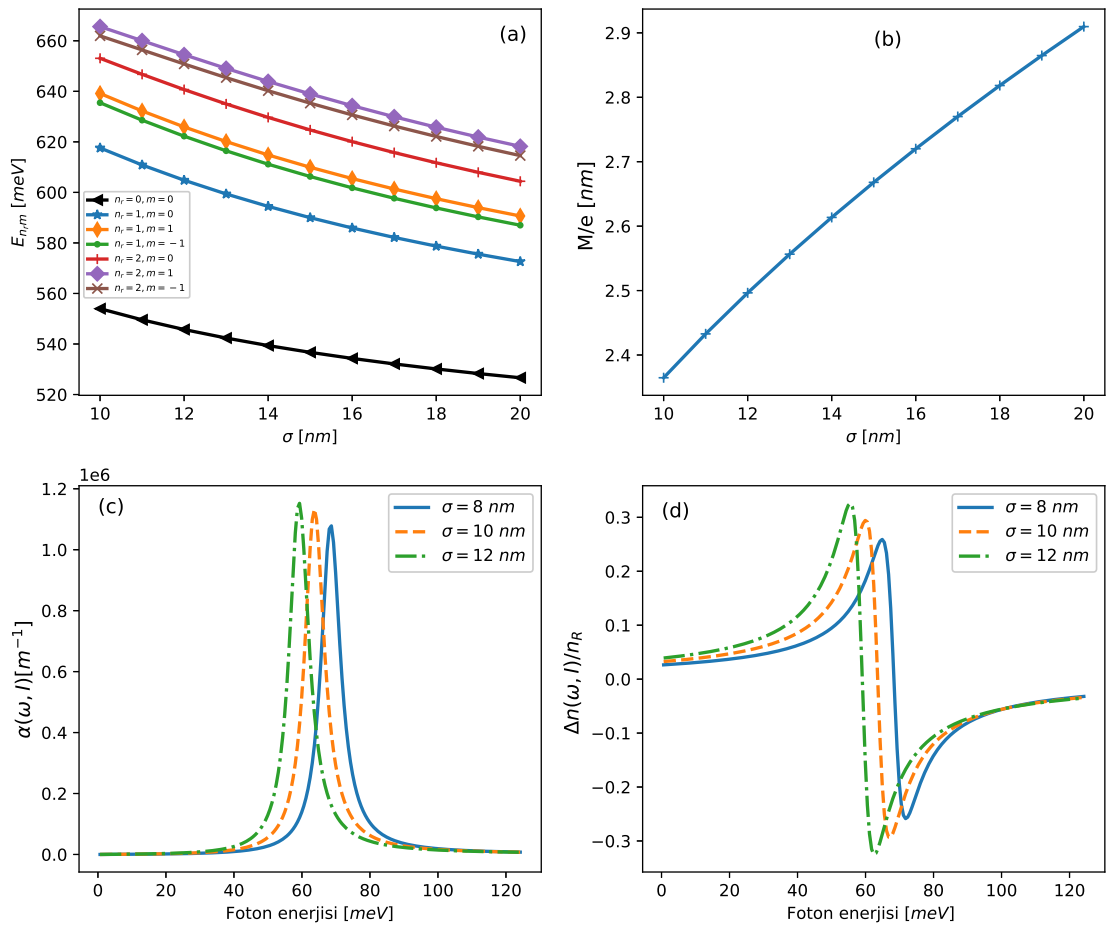
raltmaktadır (Şekil 4.7d). Ayrıca enerji seviyeleri kuantum sayıları arttıkça artmaktadır. Şekil 4.12b’de açıkça görüldüğü gibi, dipol matris elemanında monotonik bir azalma mevcuttur. Dipol matris elemanındaki azalmaya rağmen, elektrik alan arttıkça Şekil 4.12c’de görüldüğü gibi toplam soğurma katsayısında artış olmaktadır. Bu durum, açılmalık frekans ω ’nın $|M_{fi}|^2$ üzerindeki baskın etkisinden kaynaklanır (Denklem (2.42) ve (2.43)). Dipol matris elemanı, Denklem (2.46) ve (2.47) ile verilen ifadelerde ω açılmalık frekansı çarpanına baskın geldiği için Şekil 4.12d’deki kırılma indisindeki toplam değişim, dipol matris elemanının elektrik alandaki azalışı ile uyumlu bir azalma göstermektedir. Ayrıca Şekil 4.12c ve d’de rezonans enerjisinin artan elektrik alanla birlikte arttığı görülmüyor.



Şekil 4.12. Lineer bir elektrik alan büyüklüğünün değişiminde **a)** farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; **b)** $n_r = 0, m = 0$ ve $n_r = 1, m = 0$ durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; **c)** foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim ve **d)** foton enerjisine göre bağlı kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $\sigma = 10$ nm, $T = 298$ K, $P = 1$ bar ve $B = 2$ T

Ters kare kök kesik ve deforme olmuş eksponansiyel potansiyeldeki σ parametresinin; enerji özdeğerleri, dipol matris elemanı, toplam soğurma katsayısı ve kırılma

indisindeki toplam değişim üzerindeki etkileri Şekil 4.13'de incelenmiştir. σ 'daki artışla, etkin potansiyelin derinliği Şekil 4.7d'de gösterildiği gibi azalır, böylece enerji özdeğerleri de Şekil 4.13a'da gösterildiği gibi azalmaktadır. Etkin potansiyel geometrisinin aşağı doğru inmesi, yani enerji özdeğerlerinin azalması durumunda, elektronların kristal kafese daha sıkı bağlandığı söylenebilir. σ 'nın artışı, Şekil 4.13b'ye göre dipol matris elemanının artışıyla sonuçlanmaktadır. Şekil 4.13c ve d'de gösterildiği gibi σ 'daki artış, taban durum ($n_r = 0, m = 0$) ile ilk uyarılmış durum ($n_r = 1, m = 0$) arasındaki rezonans enerjisinde (E_{fi}) azalmaya neden olur. Şekil 4.13c ve d'de görüldüğü gibi σ parametresindeki artış, toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişimi artırmaktadır.



Şekil 4.13. Sınırlama potansiyelindeki σ parametresinin değişiminde **a)** farklı kuantum durumları için bağlı durum enerji özdeğerlerindeki değişim; **b)** $n_r = 0, m = 0$ ve $n_r = 1, m = 0$ durumları arasındaki optik geçiş için dipol matris elemanındaki değişim; **c)** foton enerjisine göre toplam soğurma katsayısındaki değişim ve **d)** foton enerjisine göre kırılma indisindeki toplam değişim. Sabit alınan parametreler: $T = 298\text{ K}$, $P = 1\text{ bar}$, $B = 2\text{ T}$ ve $\mathcal{E} = 0\text{ mV/nm}$

4.3. Manyetik Alan Altında Bir Kuantum Noktanın Termodinamik ve Manyetik Gözlenirlerinin İncelenmesi

Tez çalışmasının bu kısmında, sıcaklık ve manyetik alan altında ters karekök eksponansiyel potansiyele sahip bir kuantum noktanın termodinamik ve manyetik gözlenirleri olan iç enerji, Helmholtz serbest enerji, ısı kapasitesi, entropi, mıknatıslanma ve manyetik duygunluk incelenmiştir. Gözlenirleri hesaplamak için kullanılan Z bölüşüm fonksiyonu, sıcaklık veya manyetik alanın bir fonksiyonu olarak alınmıştır. Yalnızca bölüşüm fonksiyonunda bulunan termodinamik β parametresi değil, bağlı durum enerji özdeğerleri de sıcaklığa bağlıdır. Gözlenirler hesaplanırken alınacak türevde hem enerji özdeğerlerinin sıcaklık bağımlılığı hem de β parametresi dikkate alınmak zorundadır. Literatürde incelenen gözlenirlerde, enerji özdeğerleri sıcaklığın fonksiyonu değildir. Yalnızca analitik çözümü olan harmonik osilatör ve dikdörtgen kuyu potansiyeli için sıcaklığın fonksiyonu olarak alınmış ve gözlenirler analiz edilmiştir (Kirak 2021b; Davlatov vd. 2024). Nümerik bir hesap yapılarak sıcaklığa bağlı enerji özdeğerleriyle gözlenirlerin incelendiği çalışmalar bulunmamaktadır. Ayrıca literatürde, bölüşüm fonksiyonunun yalnızca baş kuantum sayılarıyla hesaplandığı çalışmalar bulunmakta olmasına rağmen tüm girilebilir durumları içermesi gerekmektedir (Fernández 2022). Bölüşüm fonksiyonları hesaplanırken hesaplamalar tüm girilebilir durumlar üzerinden hesaplanmıştır.

Sıcaklık, enerji özdeğerlerini etkin şekilde değiştiren, ihmal edilemez bir etkenidir. Çünkü bölüşüm fonksiyonu kullanılarak hesaplanan tüm gözlenirler sıcaklıkla ilişkilidir. Tezin bu kısmında hem elektron kütlesi, hem de potansiyel derinliği sıcaklık ve hidrostatik basıncın fonksiyonları olarak alınarak enerji özdeğerleri, sıcaklığın fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Ayrıca bölüşüm fonksiyonu manyetik alanında da fonksiyonudur. Enerji özdeğerleri manyetik alana bağlı olarak alınarak, manyetik alan değişiminde termodinamik ve manyetik gözlenirler incelenmiştir. Enerji özdeğerlerini hesaplarken kullandığımız nümerik hesaplar Sonlu Farklar metodu ile gerçekleştirilmiştir.

4.3.1. Sıcaklık ve hidrostatik basınç bağımlı potansiyel profili kapsamında Schrödinger dalga denklemi

Bir kuantum noktasına hapsolmuş, homojen bir manyetik alana tabi tutulan yüklü bir parçacığın Hamiltonyen operatörü SI birim sisteminde (Griffiths ve Schroeter 2018),

$$H = \frac{1}{2m^*(T, P)}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V(r, T, P) \quad (4.22)$$

şeklinde. Bu denklemde kullanılan T ve P bağımlı etkin kütle ile diğer terimler ayrıntılı olarak kısım 4.2.1.'de verilmiştir. Denklem (4.3) ile verilen sınırlama potansiyeli

$V(r, T, P)$, hesaplamalarda

$$V(r, T, P) = \frac{\delta V_0(T, P)}{\sqrt{1 + \beta e^{-r/\sigma}}} \quad (4.23)$$

formunda alınmıştır (Ishkhanyan 2018; Bayrak vd. 2023). (4.23) denkleminde yer alan σ ve V_0 parametreleri, önceki bölümlerde bahsedildiği üzere potansiyelin geometrisinde büyük öneme sahiptir. V_0 potansiyel derinliği, $E_x^\Gamma(T, P)$ ve $E_g^\Gamma(T, P)$ 'nin sıcaklık ve hidrostatik basınç bağımlılığı kullanılarak, sıcaklık ve hidrostatik basınçla ilişkilendirilmiştir (Bayrak vd. 2024). Potansiyel derinliğinin bu durumda alınmasının fiziksel gerekçesi, kısım 4.2.1.'de detaylandırılmaktadır. Hesaplamalarda δ çarpanı 0.4 ve β ise 100 olarak alınmıştır. Gerekli düzenlemeler yapıldığında, Denklem (4.22) ile verilen Hamiltonyen ifadesi,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*(T, P)} \nabla^2 + \frac{1}{2} \omega_c L_z + \frac{1}{8} m^*(T, P) \omega_c^2 r^2 + V(r, T, P) \quad (4.24)$$

şeklinde yazılır. Denklem (4.24)'de $\omega_c = \frac{qB}{m^*(T, P)}$ siklotron frekansını ve L_z 'de açısal momentumun z bileşenini ifade eder. Açısal momentumun z -bileşeni, $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\phi}$ ile verilir. Açısal momentum operatörü, m_l manyetik kuantum sayısı olmak üzere $\hat{L}_z \psi = m_l \hbar \psi$ özdeğer denklemi ile ifade edilmektedir.

Spin etkilerini de hesaba katarak, GaAs kuantum noktasındaki bir elektronunun davranışını karakterize eden Hamiltoniyen aşağıdaki gibi formüle edilir (Kirak 2021b):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*(T, P)} \nabla^2 + \frac{1}{2} \omega_c [L_z + g^* S_z] + \frac{1}{8} m^*(T, P) \omega_c^2 r^2 + V(r, T, P). \quad (4.25)$$

Denklemdeki $g^* = -0.44$ ifadesi GaAs malzemesindeki elektron için Landé-g faktörünü ve S_z ifadesi de spin açısal momentumunun z bileşenini temsil eder. S_z operatörünün enerji özdeğeri ise spin manyetik kuantum sayısı olarak adlandırılan m_s ile ilişkilendirilir. $\hat{S}_z \psi = m_s \hbar \psi$ özdeğer denklemi ile ifade edildiği üzere spin operatörünün özdeğeri $m_s \hbar$ 'dir. Bir dış manyetik alanın varlığında, yüklü bir parçacığın enerji seviyeleri kaymaya uğramaktadır. Bu durum Denklem (4.25)'deki ikinci terimde açıkça görülüyor. Kuantum mekaniğinde bu etki Zeeman etkisi olarak bilinmektedir. Denklem (4.25) ile verilen Hamiltonyende, enerji özdeğerleri yerine konulduğunda aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*(T, P)} \nabla^2 + \frac{1}{2} \omega_c \hbar [m_l + g^* m_s] + \frac{1}{8} m^*(T, P) \omega_c^2 r^2 + V(r, T, P). \quad (4.26)$$

Yukarıda verilen Hamiltonyen'in Schrödinger dalga denkleminde yerine konulması

ile

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(T, P)}\nabla^2 + \frac{1}{2}\omega_c\hbar(m_l + g^*m_s) + \frac{1}{8}m^*(T, P)\omega_c^2r^2 + V(r, T, P)\right]\psi(r) = E_{n_r m_l m_s}(T, P)\psi(r) \quad (4.27)$$

denklemini elde edilir. Denklem (4.15) ile verilen çözüm fonksiyonu Denklem (4.27)'de yerine konulursa radyal kısım aşağıdaki şekli alır:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m^*(T, P)}{\hbar^2} \left[E_{n_r m_l m_s} - \frac{1}{2}\omega_c\hbar(m_l + g^*m_s) - \frac{1}{8}m^*(T, P)\omega_c^2r^2 - \frac{[m_l^2 - \frac{1}{4}]\hbar^2}{2m^*(T, P)r^2} - V(r, T, P) \right] R(r) = 0. \quad (4.28)$$

$R(r)$, Schrödinger dalga denkleminin radyal kısmını temsil etmektedir. Radyal denklemin etkin potansiyel kısmı,

$$V_{eff}(r, T, P) = \frac{1}{8}m^*(T, P)\omega_c^2r^2 + \frac{[m_l^2 - \frac{1}{4}]\hbar^2}{2m^*(T, P)r^2} + V(r, T, P) \quad (4.29)$$

şeklinde alınabilir. Etkin potansiyel yukarıdaki formda alındığı takdirde radyal denklem,

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m^*(T, P)}{\hbar^2} [E_{n_r m_l m_s} - \frac{1}{2}\omega_c\hbar[m_l + g^*m_s] - V_{eff}(r, T, P)] R(r) = 0 \quad (4.30)$$

olarak yazılmaktadır. (4.30) denkleminde verilen ikinci mertebe lineer diferansiyel denklem için analitik bir sonuç bulunmamaktadır. Dolayısıyla tez çalışmasının bu kısmında, sıklıkla kullanılan nümerik yöntemlerden biri olan Sonlu Farklar metodu kullanılarak nümerik çözümler elde edilmiştir. Yöntemin ayrıntılarına kısım 3.3.'de yer verilmiştir.

4.3.2. Termodinamik ve manyetik gözlenirler

Manyetik ve termodinamik gözlenirler, manyetik alan ve sıcaklıktan önemli ölçüde etkilenen fiziksel büyüklüklerdir. Bu gözlenirlerin analizinde, bölüşüm fonksiyonu önemli bir rol oynar. Elektronun GaAs ısı haznesinde hareket ettiğini düşünürsek bölüşüm fonksiyonu, tüm girilebilir kuantum sayıları üzerinden yazılmalıdır. (2.49) denklemini ile verilen bölüşüm fonksiyonu Z 'nin matematiksel ifadesi aşağıdaki şekilde tanımlanır (Mandl 1991):

$$Z(T, B) = \sum_{n_r=0}^{n_{r,maks}} \sum_{m_l=-m_{l,maks}}^{m_{l,maks}} \sum_{m_s}^{m_{s,maks}} e^{-\beta E_{n_r m_l m_s}(T, B)}. \quad (4.31)$$

Bölüşüm fonksiyonundaki $E_{n_r m_l m_s}(T, B)$ ifadesi, bağlı durumlar için hesaplanan sıcaklığa ve manyetik alana bağlı enerji özdeğerlerini ifade eder. Termodinamik β parametresi, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ile verilmektedir. k_B , Boltzmann sabitidir. n_r , m_l ve m_s sırasıyla radyal düğüm sayısını ifade eden kuantum sayısı, manyetik kuantum sayısı ve spin manyetik kuantum sayısıdır. m_s , $+1/2$ ve $-1/2$ değerlerini alır. m_l kuantum sayısının herhangi bir değeri için n_r sıfırdan $n_{r, maks}$ 'a kadar gitmektedir (Taylor vd. 2008). Her bir kuantum durumunun $+1/2$ ve $-1/2$ olmak üzere iki m_s durumu vardır. Örneğin, 10 enerji seviyesi için hesaplama yapıldığında; m_l manyetik kuantum sayısı -9 ve $+9$ arasında değerler alır. Her bir m_l için n_r de $0-9$ arası değerler almaktadır. Bunlarla birlikte her bir seviyenin $+1/2$ ve $-1/2$ değerlerini alan m_s kuantum durumları vardır. Dolayısıyla her bir sıcaklık değeri için 380 adet bağlı durum enerji seviyesi bölüşüm fonksiyonuna yazılmaktadır. Bölüşüm fonksiyonu–sıcaklık hesabı, $0.1\ K$ adımlarla gidilerek $4-70\ K$ aralığında hesaplanmıştır. Dolayısıyla alınan sıcaklık veri noktaları 660 tane olmaktadır. Bu da yapılan hesaplamada $660 \times 380 = 250800$ tane enerji özdeğeri hesaplanması gerektiğini göstermektedir. Yani 660 adet sıcaklık değerinin her biri için 380 adet enerji özdeğeri hesaplanarak, her bir sıcaklığa karşılık gelen bölüşüm fonksiyonları hesaplanmıştır. Hesaplama, iki farklı sabit manyetik alan değeri ($30\ T$ ve $50\ T$) için gerçekleştirildiğinden, toplam bölüşüm fonksiyonu–sıcaklık hesabı $250800 \times 2 = 501600$ adettir. Hesaplamalarda, sıcaklığın $0.1\ K$ gibi çok küçük adımlarla alınmasının nedeni, düşük sıcaklıklarda Z 'nin çok hızlı değişim göstermesidir. Örneğin, yüksek sıcaklıklarda $1\ K$ 'lik adımlar yeterli olurken, düşük sıcaklıklarda bu adımlar ısı kapasitesinin negatif değeri hesaplanmasına yol açabilmektedir. Bu durum fiziksel gerçeklerle uyuşmadığı için sıcaklık adımları küçük seçilmiştir. n_r 'nin 9'a kadar alınmasının nedeni, kuantum sayıları arttıkça Z bölüşüm fonksiyonuna eklenen terimlerin katkısının giderek küçülmesidir. Yani, kuantum sayıları arttıkça enerji özdeğerleri yükselirken, bölüşüm fonksiyonundaki etkisi azalır.

Yapmış olduğumuz bir diğer hesaplamada, $-50\ T$ ve $50\ T$ aralığındaki manyetik alanlar için $1\ T$ adımlarla ilerleyerek her bir manyetik alana karşılık gelen enerji özdeğerleri ve bölüşüm fonksiyonları hesaplanmıştır. $1\ T$ aralıklarla gidilerek yaklaşık 100 adet manyetik alan değerinin her biri için enerji özdeğerleri hesaplanarak bölüşüm fonksiyonuna eklenmiştir. Burada hesaplanan enerji özdeğerleri sayısı tek bir sıcaklık için yaklaşık $100 \times 380 = 38000$ tanedir. İki farklı sıcaklık ($25\ K$ ve $50\ K$) değeri için manyetik alana karşı enerji özdeğerleri hesaplandığı durumda ise bu hesap toplam $38000 \times 2 = 76000$ olmaktadır. Tüm bu hesaplamalar, Python programlama dilinde geliştirilmiş kodlarla yapılmıştır. Hesaplamaların daha hızlı bir şekilde tamamlanmasını sağlamak amacıyla Numba kütüphanesi ve @njit derleyicisi kullanılmıştır. Bu yöntem sayesinde, normal koşullarda aylar sürecektir olan işlemler, birkaç gün içerisinde sonuçlandırılmıştır.

Gözlenirlerin sıcaklık ve manyetik alan değişimindeki davranışını incelemek ama-

cıyla, Z bölüşüm fonksiyonunun sıcaklık ve manyetik alana karşı grafiklerini çizmek üzere veri dosyaları oluşturulmuştur. Bölüşüm fonksiyonu verileri oluşturulurken, düşük sıcaklıklarda daha az enerji seviyesi yeterli iken, yüksek sıcaklıklarda bu seviyelerin sayısı yetersiz kalmıştır. Yüksek sıcaklıklarda, daha fazla bağlı durum enerji seviyesi bulunduğu ve bölüşüm fonksiyonuna alınan seviyelerin sayısı yetersiz olduğunda, ısı kapasitesi artarken bir noktadan sonra azalan bir eğri izlemekteydi. Bu azalma fiziksel değildir ve bu durum, gözlenirlerde yanlış yorumlara neden olabileceği için sıcaklık aralığı $4-70$ K aralığına daraltılmıştır. Isı kapasitesinin $100-400$ K arasında azalan eğri olmaması için alınacak enerji seviyeleri sayısı $4-70$ K arası için aldığımız seviyenin kat kat üzerinde olmalıdır. Elimizdeki bilgisayarlar bunu yapmak için yeterli değildir. Literatürde ısı kapasitesinin belirli bir sıcaklık değerinde sonra azaldığı çok sayıda çalışma (fiziğin gereklerini karşılamayan) vardır. Ayrıca ısı kapasitesi, potansiyel geometrisi düzgün ayarlanmadığında, düşük sıcaklıklarda negatif ifadeler üretmektedir. Z bölüşüm fonksiyonu hesaplanırken alınan sıcaklık adımları küçültüldüğünde bu fiziksel olmayan durum düzeltilmekte, ancak bu durumda da yapılacak hesaplar çok fazla artmaktadır. Bu durumu önlemek için uygun bir potansiyel derinliği ve o derinliğe uygun olan (ısı kapasitesini pozitif yapacak en düşük σ) σ potansiyel parametresi seçilmiştir. Denklem (4.23) ile yapılan hesaplarda $\delta = 0.4$, $\beta = 100$, $\sigma = 8$ nm ve P hidrostatik basıncı da 1 $kbar$ olarak alınmıştır.

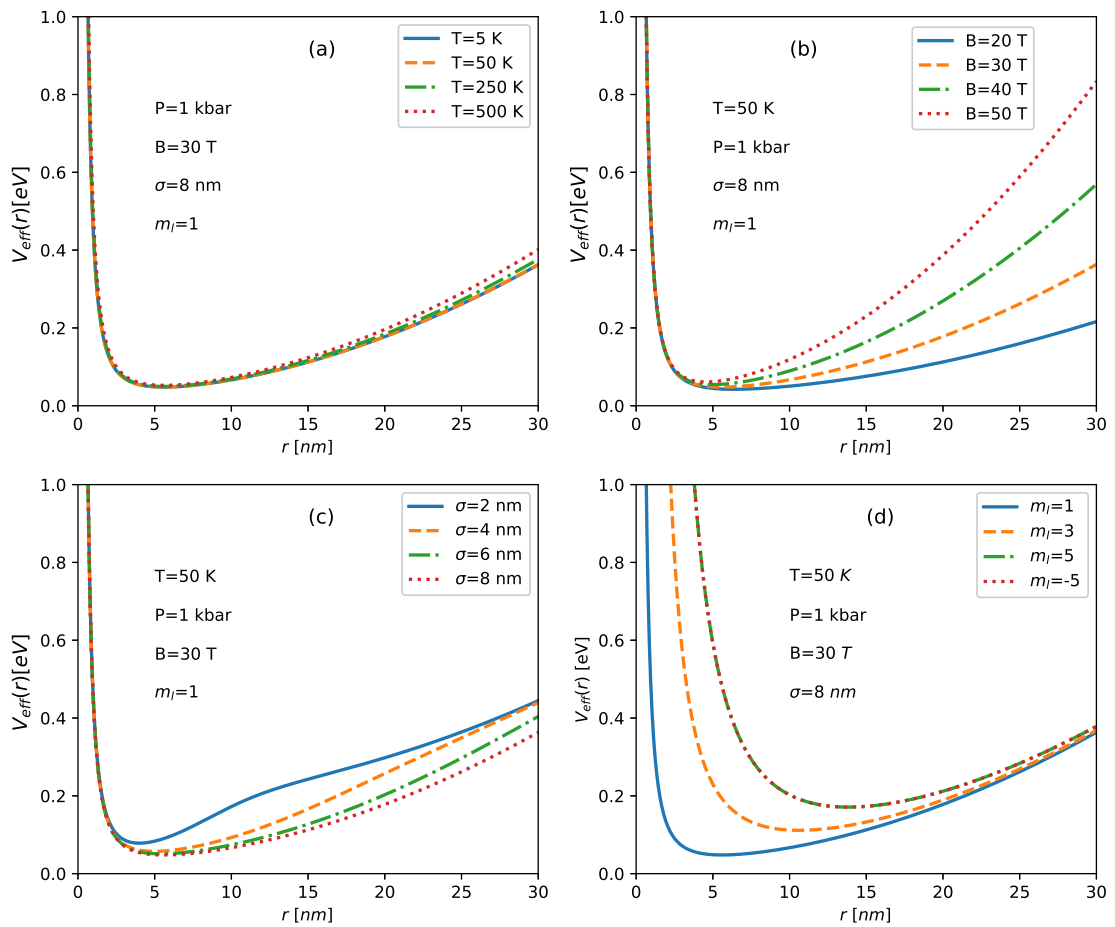
Bu çalışmada incelenen termodinamik gözlenirler; iç enerji $U(T, B)$, Helmholtz serbest enerji $F(T, B)$, ısı kapasitesi $C_v(T, B)$ ve entropi $S(T, B)$ 'dir. Manyetik gözlenirler ise mıknatıslanma M ve manyetik duygunluk χ 'dir. Bu gözlenirlerin T ve P altındaki davranışları ayrıntılı olarak incelenmiştir.

4.3.3. Sıcaklık ve manyetik alanın termodinamik ve manyetik gözlenirler üzerine etkisi

Bu kısımda, termodinamik ve manyetik gözlenirlerin sıcaklıkla değişimi ile manyetik gözlenirlerin manyetik alan altındaki değişimi grafiklerle sunulmaktadır. Kütle fonksiyonu ve sınırlama potansiyeli olarak seçilen ters karekök eksponansiyel potansiyelin derinliği, sıcaklık ve hidrostatik basıncın fonksiyonları olarak ele alınmıştır. Gözlenirlerin sıcaklık ve manyetik alan altındaki davranışları, etkin potansiyelin geometrisi ile ilişkili olduğu için kapsamlı biçimde incelenmesi gerekli görülmektedir.

Şekil 4.14'de etkin potansiyel geometrisi; sıcaklık, manyetik alan ve σ parametreleri altında incelenmiştir. Etkin potansiyelin $5-500$ K sıcaklık aralığındaki değişimi Şekil 4.14a'da verilmiştir. Sıcaklık artışında potansiyel kuyusunun daraldığı ancak potansiyel derinliğinin neredeyse aynı kaldığı açıkça görülmektedir. Şekil 4.14b'de ise manyetik alanın $20-50$ T aralığındaki değişiminde potansiyel geometrisinin daraldığı ve derinliğinin de

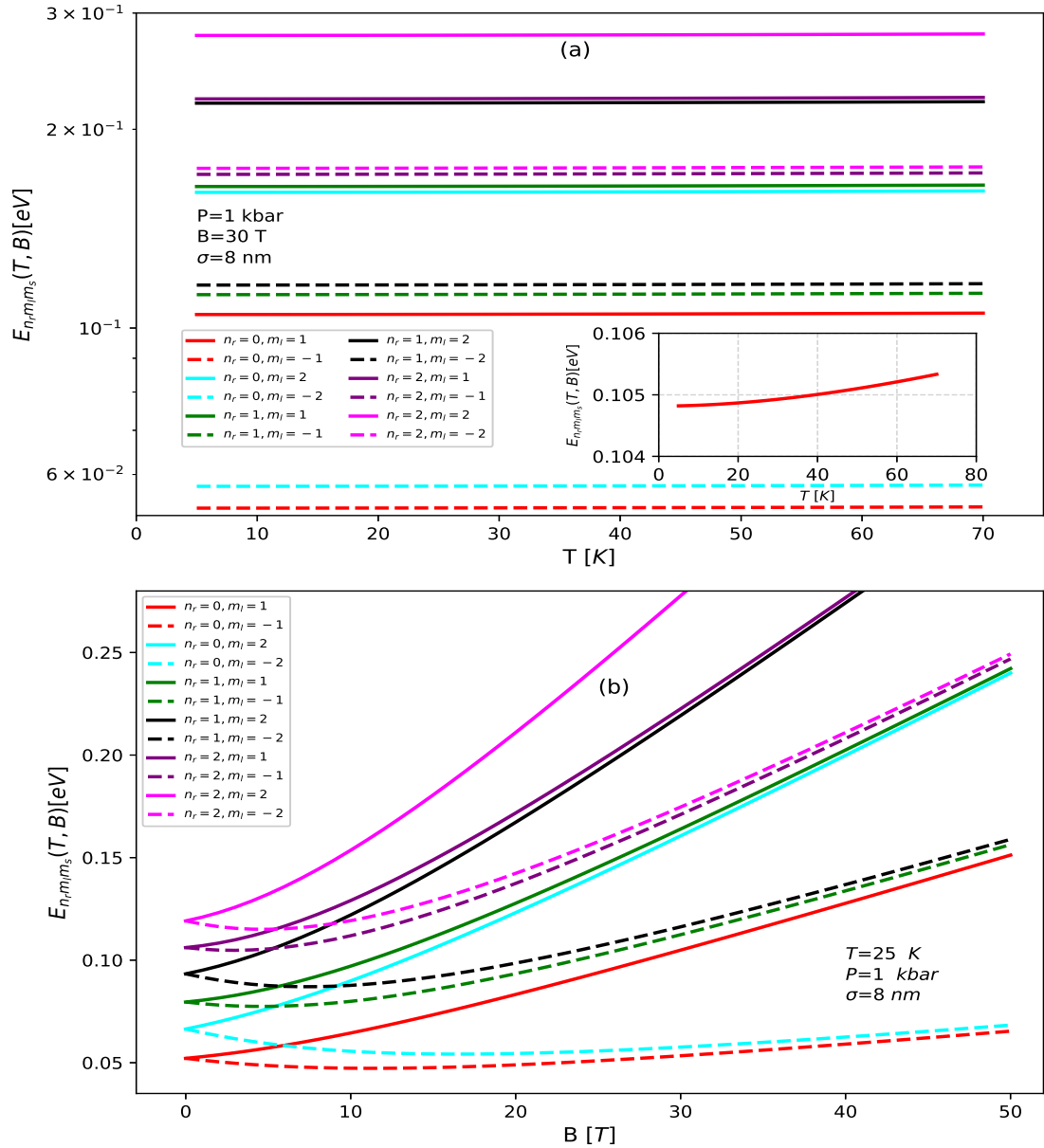
neredeyse aynı kaldığı analiz edilmektedir. Potansiyel geometrisinin daralması, en düşük enerji özdeğerini artırmaktadır. Diğer enerji seviyeleri de buna bağlı olarak artmaktadır. Şekil 4.14c göz önüne alınarak Denklem (4.23) ile verilen sınırlama potansiyelinde bulunan σ parametresindeki artışın etkin potansiyeli nasıl etkilediği incelenmiştir. σ 'nın artışında potansiyel derinliği azalmakta ve genişliği artmaktadır. Şekil 4.14d'de ise m_l manyetik kuantum sayısındaki değişim altında potansiyel geometrisi incelenmektedir. m_l kuantum sayısının artışında, potansiyel kuyusu ve enerji seviyeleri yukarı doğru kaymakta, yani artmaktadır.



Şekil 4.14. a) Sıcaklık; b) manyetik alan; c) σ parametresi; d) m_l manyetik kuantum sayısındaki değişim altında potansiyel profili

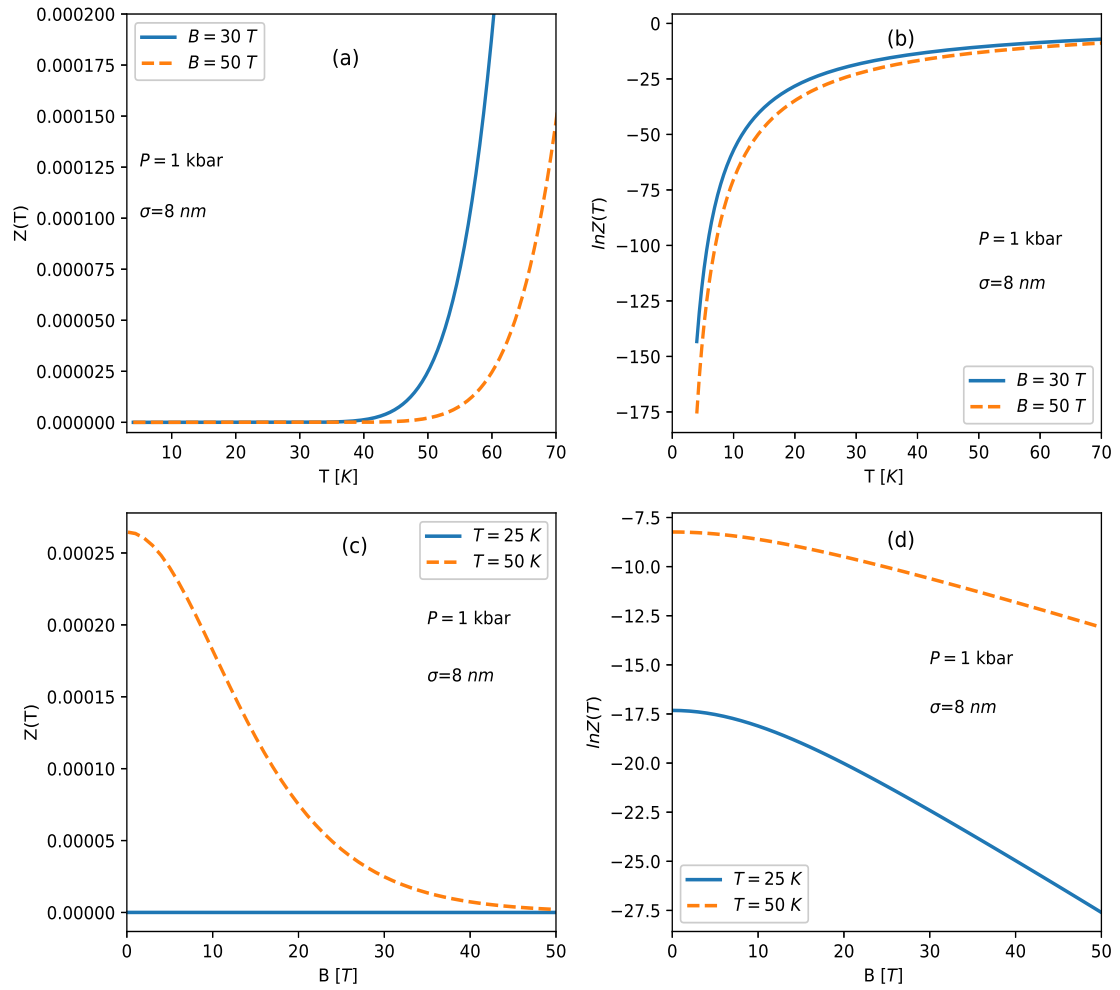
Şekil 4.15, on iki farklı kuantum durumu için sıcaklık ve manyetik alan değişiminde enerji özdeğerlerindeki kaymayı gösterir. Hem Şekil 4.15a hem de Şekil 4.15b'de, m_l manyetik kuantum sayılarının negatif değerleri için eğriler kesikli çizgilerle gösterilirken pozitif değerler düz çizgilerle gösterilmektedir. Şekil 4.15a'da incelenen n_r ve m_l kuantum sayıları arttıkça enerji özdeğerlerinin artış gösterdiği açıktır. Sıcaklık artışında, enerji özdeğerlerindeki değişimi gösteren Şekil 4.15a'da y ekseninin dar ölçeği nedeniyle,

çizgilerin yataya yakın olduğu ve kolay incelenemeyeceği için sağ alt köşesine grafik eklenmiştir. Tek bir kuantum durumunu gösteren küçük grafiğe göre sıcaklık arttıkça enerji özdeğerleri artmaktadır. Sıcaklık artışında enerji özdeğerlerinin dar bir aralıkta artmasının nedeni, Şekil 4.14a’da gösterildiği gibi sıcaklığın potansiyel geometrisi üzerindeki sınırlı etkisidir. Şekil 4.15b’de ise dış manyetik alan artırıldığında, enerji özdeğerlerinde belirgin bir artış eğilimi görülmektedir. Ayrıca $B = 0$ T olduğunda enerji özdeğerleri, herhangi bir n_r kuantum durumunun hem negatif hem de pozitif m_l sayısı için aynıdır. Fakat dış manyetik alan arttıkça, aralarındaki enerji farkı da grafikte görüldüğü gibi büyümektedir.



Şekil 4.15. Oniki farklı kuantum durumu için bağlı durum enerji özdeğerlerinin **a)** sıcaklık; **b)** manyetik alan altında değişimi ($m_s = 1/2$)

Z bölüşüm fonksiyonu, bir sistemin enerji durumlarının olasılıksal dağılımını niteler ve termodinamik ve manyetik gözlenirlerin analizinde önemli bir rol oynar. Şekil 4.16'da, Z ve $\ln Z$ 'nin değişen sıcaklık ve manyetik alan altındaki davranışı, sabit tutulan $\sigma = 8 \text{ nm}$ ve $P = 1 \text{ kbar}$ durumlarında incelenmektedir. Sıcaklık adımları 0.1 K olarak belirlenmiştir. Bu kadar küçük adımlar seçilmesinin nedeni, $Z - T$ grafiğinin düşük sıcaklıklarda hızlı değişim göstermesi ve adımların yeterince küçük alınmaması durumunda türev hesaplamalarının fiziksel olarak hatalı sonuçlar vermesidir. Özellikle sıcaklık adımları yeterince küçük olmadığında ısı kapasitesi negatif hesaplanırken, uygun adımlar seçildiğinde bu hata ortadan kalkmaktadır. Şekil 4.16a'da sabit manyetik alan değerlerinde sıcaklık 4 K 'den 70 K 'ye çıktıkça, hesaplanan bağlı durum enerji özdeğerleri yükselirken, bölüşüm fonksiyonu da artar. Bu artışın nedeni, bağlı durum enerji özdeğerleri ve β 'nin bölüşüm fonksiyonu Z 'ye katkısı karşılaştırıldığında β 'nin baskın olmasıdır. Ayrıca sıcaklık sabit tutularak manyetik alan artırıldığında Z bölüşüm fonksiyonu azalmaktadır. Bu beklenen durum, Şekil 4.16c'de daha net görülmektedir. Manyetik alandaki artışın potansiyel geometrisini daralttığı (Şekil 4.14b), bunun da enerji seviyelerini yükselttiği (Şekil 4.15b) bilinmektedir. Z bölüşüm fonksiyonuna manyetik alan katkısı sadece enerji özdeğerlerinden gelmektedir. Bu nedenle enerji seviyelerinin artışı, bölüşüm fonksiyonunu azaltmaktadır. Sıcaklığın $4 - 70 \text{ K}$ ve manyetik alanın $0 - 50 \text{ T}$ arasındaki artışında $\ln Z$ 'nin değişimi sırasıyla Şekil 4.16b ve d'de gösterilmiştir. Beklenildiği üzere düşey eksen sıfırın altındadır. Şekil 4.16b ve d'ye göre $\ln Z$, sıcaklık artarken artmakta ancak manyetik alan artışında azalmaktadır. Şekil 4.16'da verilen grafikler, termodinamik ve manyetik gözlenirlerin sıcaklık ve manyetik alan altındaki davranışlarının yorumlanmasında faydalı olacaktır.



Şekil 4.16. Sıcaklık değişiminde **a)** bölüşüm fonksiyonu Z ; **b)** bölüşüm fonksiyonunun doğal logaritması $\ln Z$ 'nin profili. Dış manyetik alan değişiminde **c)** Z ; **d)** bölüşüm fonksiyonunun doğal logaritması $\ln Z$ 'nin profili

Şekil 4.17'de, 1 *kbar*'lık sabit hidrostatik basınç ve $\sigma = 8$ nm değerinde 4 – 70 *K*'lık aralıkdaki sıcaklık artışının termodinamik gözlenirleri nasıl etkilediği incelenmiştir. Bu amaçla öncelikle Şekil 4.17a'da 30 ve 50 *T*'lık iki farklı manyetik alan değeri için iç enerjiye karşı sıcaklık grafiği gösterilmiştir. Manyetik alan sabit tutularak sıcaklık artırıldığında iç enerjinin de arttığı açıkça görülebilir. Bu durum termodinamik bir sistemin tipik davranışını yansıtır ve beklenen bir durumdur. Grafikler incelendiğinde, Şekil 4.14a ve Şekil 4.15a 'da görüldüğü gibi, sıcaklık artışı potansiyelin geometrisini daraltmakta ve bunun sonucunda enerji özdeğerlerinde artış olmaktadır. Bu durumda hem bölüşüm fonksiyonu Z hem de $\ln Z$ 'nin değeri Şekil 4.16a ve b'de görüldüğü gibi artar. Fakat $\frac{d \ln Z}{dT}$ azalır ve sıfırdan büyük durumdadır, yani $\frac{d \ln Z}{dT} > 0$ olur. Sıcaklık arttıkça iç enerjideki artışın nedeni, Denklem (2.51)'deki T^2 ifadesinin $\frac{d \ln Z}{dT}$ çarpanına baskın olmasıdır. Ayrıca Şekil 4.17a'da sabit sıcaklıkta manyetik alan artırıldığı durumda iç enerji de artmakta-

dır. Bu durumu da denklemler üzerinden açıklayabiliriz. Şekil 4.14b ve Şekil 4.15b 'de yorumladığımız gibi manyetik alandaki artış potansiyelin geometrisini daralttıkça bağlı durum enerji özdeğerleri artar. Enerji özdeğerlerindeki artışın sonucunda Şekil 4.16c ve d'de görüldüğü gibi hem bölüşüm fonksiyonu Z hem de $\ln Z$ azalmakta ve $\ln Z < 0$ olmaktadır. $\ln Z$ 'nin T ye göre türevi alındığında ise $\frac{d \ln Z}{dT} > 0$ haline gelir. Dolayısıyla Denklem (2.51)'deki $\frac{d \ln Z}{dT}$ çarpanı arttığında iç enerji de artmaktadır.

Şekil 4.17b'de ısı kapasitesinin sıcaklığa bağlı değişimi, $30 T$ ve $50 T$ 'lık sabit manyetik alanlarda incelenmektedir. Isı kapasitesi, düşük sıcaklıklarda keskin bir şekilde artarken yüksek sıcaklıklara çıkıldıkça artış hızı yavaşlar. Şekil 4.17b'de açıkça görüldüğü gibi düşük sıcaklıklarda bu artış hızını kesintiye uğratan bir tepe ve çukur geometrisi oluşmaktadır. Manyetik alan arttıkça bu tepe ve çukur daha yüksek sıcaklıklarda ortaya çıkmakta ve genişlemektedir. Düşük sıcaklıklarda görülen bu düşüş, enerji seviyeleri arasındaki geçişlerden kaynaklanan Schottky anomalisini ile açıklanır. Bu anomalinin nedeni, fiziksel sistemin sonlu sayıda ayrık enerji seviyesine sahip olmasına bağlanmaktadır. Düşük sıcaklıklarda sistem, taban durum enerji seviyesinde bulunurken, sıcaklık artışında üst enerji seviyelerine geçiş ihtimali artmaktadır. Bu durum entropide ani değişimlere neden olmak suretiyle ısı kapasitesinde belirgin bir maksimum oluşturmaktadır (Tari 2003; Gopal 2012; Kittel ve McEuen 2018).

Sabit hacimde ısı kapasitesi, matematiksel olarak Denklem (2.57) ile verildiği üzere, iç enerjinin sıcaklığa göre türevini alarak hesaplanmaktadır. Bu tez çalışmasında, ısı kapasitesinin sıcaklıkla değişimini ifade eden analitik bir denklem olmadığından, Schottky anomalisi denklemler aracılığıyla açıklanamamaktadır. İç enerji için analitik bir form elde edilemez ama literatürdeki ampirik formlarla olan uyumu tartışılabilir. Fermi-Dirac dağılımı üzerinden ısı kapasitesi için analitik bir ifade türetilmiştir (Tari 2003). Fermi-Dirac dağılımına dayanarak kanonik toplulukta $E_{n_r m_l m_s}$ enerji durumundaki bir parçacığın enerjisinin beklenen değeri aşağıdaki gibidir (Tari 2003):

$$\langle U \rangle = E_{n_r m_l m_s} \frac{1}{e^{\beta E_{n_r m_l m_s}} + 1}. \quad (4.32)$$

Sabit hacimde ısı kapasitesi, N bağımsız parçacık için ortalama enerjinin sıcaklığa göre türevi alınarak,

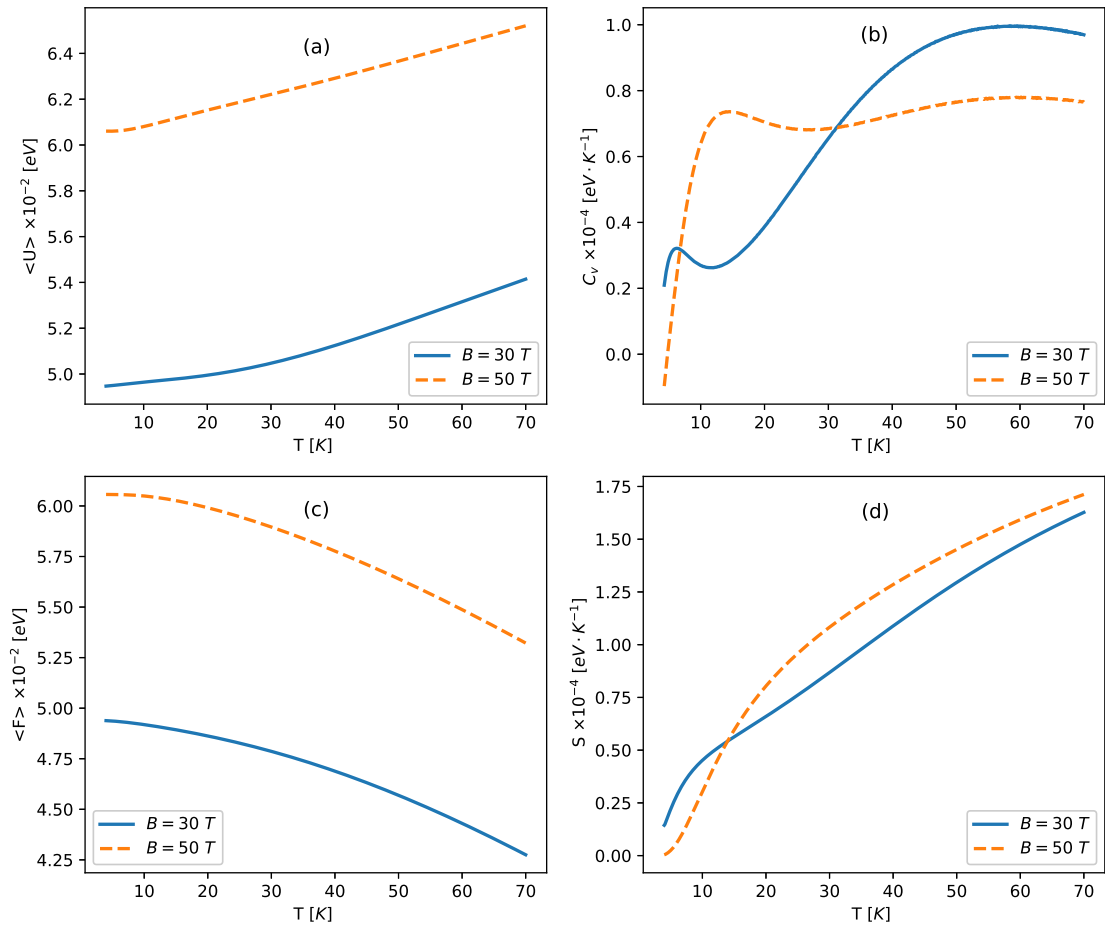
$$\langle C_v \rangle = N k_B \left(\frac{E_{n_r m_l m_s}}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\frac{E_{n_r m_l m_s}}{k_B T}}}{(e^{\frac{E_{n_r m_l m_s}}{k_B T}} + 1)^2} \quad (4.33)$$

formunda elde edilir. Denklem (4.33) ile verilen bağıntı, düşük sıcaklık limitlerinde Schottky anomalisini göstermektedir. Çalışmanın bu kısmında düşük sıcaklıklarda iç enerji, (4.32) denklemi gibi davranır. Bunun sonucunda C_v 'de Schottky anomalisi görülür. Li-

teratürde düşük sıcaklık limitleri için verilen Schottky anomalisine ait ampirik ifadeler ile bu tezde hesaplanan ısı kapasitesinin düşük sıcaklıktaki sonuçlarının uyumlu olduğu görülmektedir.

Şekil 4.17c, termodinamik gözlenirlerden biri olan Helmholtz serbest enerjinin sıcaklık ile değişimine ilişkin hesaplamalar sunmaktadır. Denklem (2.53)'a denklemine sıcaklık katkısı hem $\ln Z$ 'den hem de T çarpanından gelmektedir. Daha önce, manyetik alan sabit sıcaklıkta değiştiğinde potansiyel geometrisinin, enerji özdeğerlerinin, bölüşüm fonksiyonu Z ve $\ln(Z(T))$ 'nin nasıl etkilendiğini Şekil 4.14b, Şekil 4.15b ve Şekil 4.16c-d'de tartışmıştık. Sıcaklık artışında Z ve $\ln(Z(T))$ artmaktadır. Buna rağmen Denklem (2.53) ile verilen Helmholtz serbest enerjisi, $-\ln(Z(T))$ 'nin T çarpanı üzerindeki baskın katkısı nedeniyle artan sıcaklıkla birlikte azalmaktadır. Şekil 4.17c'de ayrıca 30 T ve 50 T manyetik alan büyüklükleri için Helmholtz serbest enerjisi sıcaklığa karşı çizilmiştir. Manyetik alan arttığında potansiyel geometrisi daralarak enerji özdeğerlerini artırmakta ve buna bağlı olarak da Z bölüşüm fonksiyonu ve $\ln Z(T)$ azalmaktadır. Denklemdaki negatif işaret nedeniyle Helmholtz serbest enerjisi artan manyetik alanla birlikte artar.

Son olarak, sistemdeki düzensizliğin ölçüsünü ifade eden entropinin sıcaklığa göre değişimi Şekil 4.17d'deki grafikten analiz edilebilmektedir. Manyetik alan sabit tutulup sıcaklık artırıldığında entropi de artmaktadır. Entropi, matematiksel olarak Helmholtz serbest enerjinin T 'ye göre türevinin negatif işaretlisi alınarak hesaplanmaktadır (Denklem (2.59)). Şekil 4.17c'deki eğrilerin eğimleri alınırsa negatif ifadeler gelir ve Denklem 2.59'deki negatif işaret hesaba katıldığında, Şekil 4.17d'deki pozitif yöndeki artış açıklanmaktadır. Ayrıca dış manyetik alanın 30 T ve 50 T alınarak yapılan hesaplarda Şekil 4.17d'de görüldüğü gibi düşük sıcaklık ve yüksek sıcaklıklarda bir farklılık oluşmaktadır. Yaklaşık 15 K 'in altında yüksek manyetik alanlarda entropi daha düşükken, yüksek sıcaklıklara çıkıldığında yüksek manyetik alanlarda entropi daha fazla hesaplanmaktadır.



Şekil 4.17. Sıcaklık etkisinde **a)** iç enerji; **b)** Helmholtz serbest enerji; **c)** ısı kapasitesi; **d)** entropinin değişimi ($\sigma = 8 \text{ nm}$, $P = 1 \text{ kbar}$)

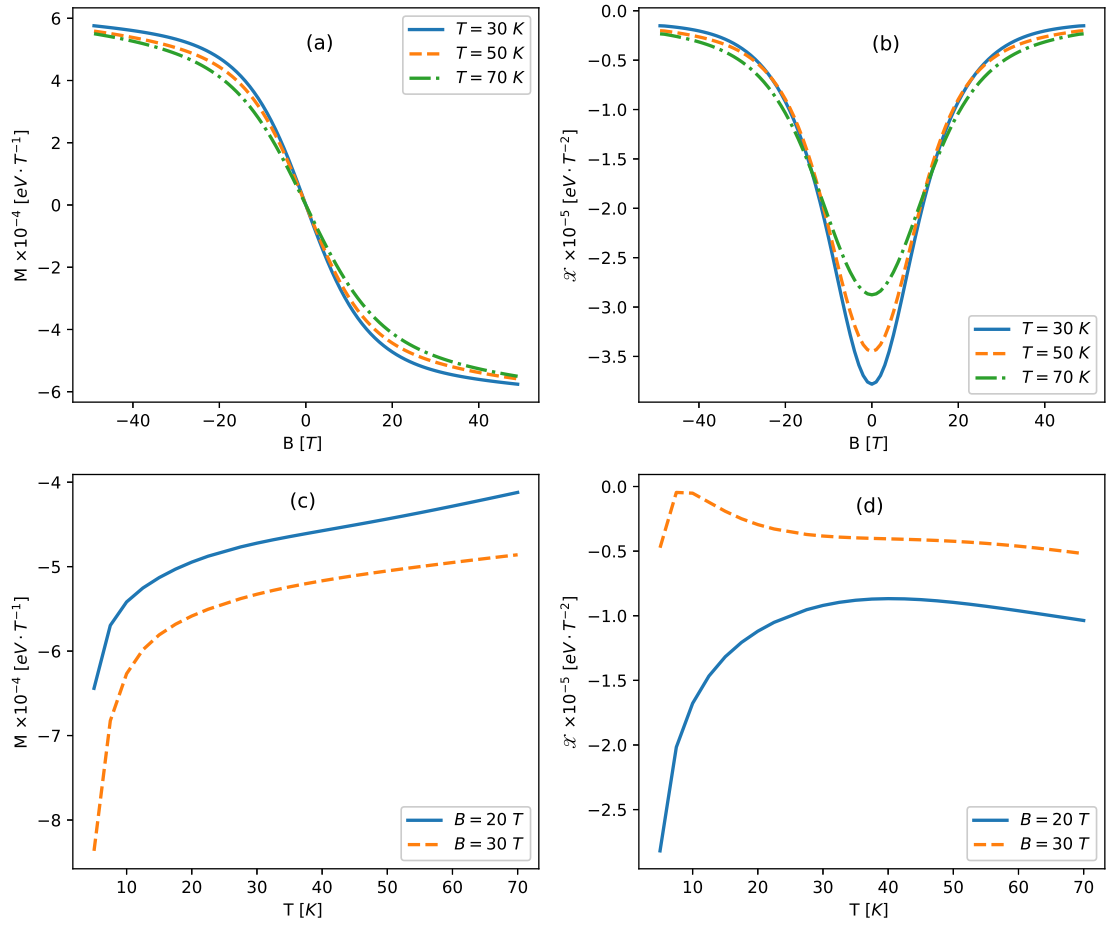
Şekil 4.18’de, manyetik alan ve sıcaklık değişiminin manyetik gözlenirler olan mıknatıslanma ve manyetik duygunluğa olan etkisi incelenmektedir. 30 K, 50 K ve 70 K olmak üzere üç farklı sabit sıcaklık için, artan manyetik alan (-50 T ve $+50 \text{ T}$ arası) altında mıknatıslanmanın davranışı Şekil 4.18a’da analiz edilmektedir. Yüksek sıcaklıklara çıkıldıkça mıknatıslanmanın azaldığı açıkça görülmektedir. Negatif manyetik alan değerleri için manyetizasyon eğrisi, pozitif duruma kıyasla orijine göre simetriktir. Mıknatıslanma, düşük manyetik alanlarda belirgin bir değişim gösterirken manyetik alan şiddeti arttırıldıkça mıknatıslanmanın artış hızı azalır. Dolayısıyla yüksek manyetik alan şiddetlerine çıkıldığında, mıknatıslanma doyuma ulaşır. Şekil 4.18a’daki negatif mıknatıslanma davranışı, uygulanan pozitif manyetik alan arttıkça artmaktadır. Negatif yönde manyetik alan uygulandığı durumda ise mıknatıslanma pozitif yönde artmaktadır. Bu durumu denklemler üzerinden açıklayabiliriz. Mıknatıslanmaya manyetik alanın etkisi, Denklem (2.61)’daki bölüşüm fonksiyonundan, dolayısıyla bölüşüm fonksiyonundaki bağlı durum enerji özdeğerlerinden ileri gelmektedir. Manyetik alan artışının potansiyel geometrisini

daralttığından ve enerji özdeğerlerini artırdığından bahsetmiştik. Böylece hem Z hem de $\ln Z$ ($\ln Z < 0$) Şekil 4.16c ve d’de görüldüğü gibi azalmaktaydı. Dolayısıyla mıknatıslanmayı ifade eden Denklem (2.61)’daki türev çarpanı negatiftir. Sonuçta, pozitif bir dış manyetik alan uygulanması, negatif yönde oluşan mıknatıslanmada artışa yol açarken, manyetik alan ters yönde uygulandığında (negatif olduğunda), mıknatıslanma pozitif yönde bir artış göstermektedir.

Şekil 4.18b; 30 K , 50 K ve 70 K ’lik üç farklı sabit sıcaklıkta, değişen manyetik alan büyüklüğünün manyetik duygunluğu nasıl etkilediğini gösterir. Manyetik duygunluk, Denklem (2.62) ile verildiği gibi mıknatıslanmanın B ’ye göre türevi alınarak hesaplanır. Şekil 4.18a’nın türevi alındığında, beklendiği gibi Şekil 4.18b’yi vermektedir. Sıcaklık artışında manyetik duygunluk 0 T civarında keskin şekilde değişmekte ve bu noktaya yakın yerlerde artan sıcaklıkla birlikte azalmaktadır. Ayrıca manyetik duygunluk, sıcaklık değişiminden düşük manyetik alanlarda (0 T ve civarında) daha fazla etkilenmektedir. Şekil 4.18b’de açıkça görüldüğü gibi, manyetik alanın pozitif veya negatif olduğu durumların her ikisinde de $\chi < 0$ ’dır. Manyetik alan (pozitif ve negatif yönde uygulanan) artışında χ azalarak sıfıra yaklaşmaktadır.

Şekil 4.18c’de, mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlı değişimi incelenmektedir. Denklem (2.61)’e sıcaklık katkısı Z bölüşüm fonksiyonundaki enerji özdeğerlerinden ve termodinamik β parametresinden gelir. Mıknatıslanma, 4–70 K ’lik sıcaklık aralığında artan sıcaklıkla birlikte doğrusal olmayacak şekilde azalış gösterir. Düşük sıcaklıklarda mıknatıslanmada hızlı bir değişim vardır, ancak sıcaklık arttıkça bu değişim hızı azalır. Ayrıca sabit sıcaklıkta dış manyetik alanın büyüklüğü 20 T ’den 30 T ’ye çıkarıldığında negatif mıknatıslanmanın da arttığı görülmektedir.

Şekil 4.18d’de manyetik duygunluk, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak iki farklı manyetik alan büyüklüğü (20 T ve 30 T) için gösterilmiştir. Düşük sıcaklıklarda manyetik duygunluğun azalış hızı, yüksek sıcaklıklara göre daha fazladır. Sıcaklık arttıkça, manyetik duygunluktaki azalmanın hızı yavaşlayarak stabil hale gelir ve yüksek sıcaklıklara gidildikçe duygunluk negatif yönde artmaya başlamaktadır. Sıcaklık sabit alındığında yüksek manyetik alanlarda daha düşük manyetik duygunluk sağlanmaktadır. Bu tez kapsamında kullanılan parametreler ışığında manyetik duygunluğun genel profili, Şekil 4.18d’de görüldüğü gibi diamagnetik özellikler sergilemektedir. Düşük sıcaklıklarda 30 T ’nin üzerinde manyetik alan uygulandığı durumlarda malzemenin karakteri paramanyetik bölgeye doğru kaymaktadır. Yani diamanyetik özellik gösteren malzemeye, düşük sıcaklıklarda yüksek manyetik alanlar uygulandığında paramanyetik özellik sergilemektedir.



Şekil 4.18. Manyetik alanın **a)** mıknatıslanma; **b)** manyetik duygunluk üzerine etkisi. Sıcaklık etkisinde **c)** mıknatıslanma; **d)** manyetik duygunluktaki değişim ($\sigma = 8 \text{ nm}$, $P = 1 \text{ kbar}$)

5. SONUÇLAR

Bir elektronun GaAs yarı iletken kristali içindeki başka bir elektronla etkileşimi temel olarak Coulomb potansiyeli ile tanımlanırken, kristal örgüdeki diğer atom ve elektronlarla olan davranışını tanımlamak için bir ortalama alan potansiyeline ihtiyaç duyulmaktadır. Bu çok parçacık etkileşimi, potansiyelin deforme Coulomb formunda, deneysel sistemlere uygun olacak şekilde sürekli ve sonlu sınırlara sahip bir profil olmasını gerektirmektedir. Bu tez çalışması kapsamında tüm bu gereklilikleri karşılamak üzere ters karekök eksponansiyel potansiyel tercih edilmiştir. Bir ters karekök eksponansiyel potansiyele sahip GaAs kuantum noktanın $\ell = 0$ ve $\ell \neq 0$ durumlarında bağlı durum enerji özdeğerleri ve bunlara karşılık gelen dalga fonksiyonları RK metodu ile nümerik olarak analiz edilmiştir. $\ell = 0$ durumu için Schrödinger dalga denkleminin analitik sonucu bulunmakta (Ishkhanyan 2018) fakat $\ell \neq 0$ durumu için analitik bir sonuç bulunmamaktadır. RK metodu ile $\ell = 0$ için nümerik olarak elde ettiğimiz enerji özdeğerlerini analitik olarak elde edilen enerji özdeğerleriyle karşılaştırılmıştır. Sonuçların birbiriyle oldukça yakın olması, hesaplarımızın güvenilirliğini ortaya koymaktadır.

RK yöntemi ile enerji özdeğerleri hesaplanırken, elektron kütlesi konuma bağlı olarak ele alınmıştır. Bir elektronun boşluktaki kütlesi ile GaAs yarı iletken kristali içindeki kütlesi farklıdır ve konuma bağlı olarak da değişir. Yarı iletkenlerin $E - k$ bant diyagramları incelenerek, elektronun kütlesinin uzaya bağlı değişimi hakkında bilgi edilebilir. GaAs yarı iletkeninin $E - k$ bant diyagramının iletkenlik bandının tabanındaki eğrilik üst noktalara doğru azaldığından, etkin elektron kütlesinin konuma bağlı geometrisinin artan bir kütle formunda olması, eğrilik sürekli olduğundan potansiyelde olduğu gibi sonlu ve sürekli olması gerektiği sonucuna varılmıştır. Bu tez çalışmasında, iki farklı konuma bağlı etkin kütle (PDEM) formu ele alınarak, eğrilik farklılığının elektronik ve optik gözlenirlere etkisi üzerine çalışılmıştır. MEM ve WSM olarak adlandırılan kütle formlarındaki konum bağımlı eğriliklerin bağlı durum enerji özdeğerlerini etkin şekilde değiştirdiği ortaya koyulmuştur. MEM ve WSM kütle modellerindeki parametreler üzerinden PDEM'in soğurma katsayıları ve kırılma indisindeki toplam değişim üzerindeki etkileri incelenmiştir. Kütle modellerindeki parametreler, etkin kütleyle sabit kütle değerine yakınsattığında, soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişimin, sabit kütle için yapılan hesaplamaların sonuçlarına doğru yakınsadığı gözlemlenmiştir.

GaAs kuantum noktasının optik gözlenirleri, sıcaklık ve hidrostatik basıncın etkileri temel alınarak elektrik ve manyetik alan altında incelenmiştir. Etkin elektron kütlesi, potansiyel derinliği ve iletkenlik bandındaki etkin elektron yoğunluğu, sıcaklık ve hidrostatik basıncın fonksiyonları olarak alınarak bağlı durum enerji özdeğerleri Numerov metodu ile nümerik olarak hesaplanmıştır. Sıcaklığın bağlı durum enerji özdeğerlerini nonlineer artırdığı, $0 - 1 \text{ kbar}$ aralığında artırılan basıncın ise aksine azalttığı ortaya koyulmuştur.

Toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişimin artan sıcaklıkla arttığı, hidrostatik basınç artışında ise toplam soğurma katsayısının azaldığı ve kırılma indisinin de aksine arttığı incelenmiştir. Elektrik ve manyetik alan artışında toplam soğurma katsayısı artmakta, kırılma indisindeki toplam değişim ise azalmaktadır. Optik gözlenirlerin dış etkiler altında değişim eğilimleri, dipol matris elemanları ile matematiksel olarak ilişkilendirilmiştir. Soğurma katsayıları ve kırılma indisindeki değişim grafikleri incelendiğinde, foton enerjisinin sıcaklık artışıyla belirgin bir değişim göstermediği (küçük bir artış), hidrostatik basınç artışıyla azaldığı, elektrik ve manyetik alan artışıyla ise arttığı gözlemlenmiştir. Bu durumda sıcaklık, elektrik ve manyetik alan artışında maviye kayma yanıtı oluşurken, hidrostatik basınç artışında ise kırmızıya kayma gerçekleşir. Ters karekök kesik ve deforme olmuş eksponansiyel potansiyeldeki σ parametresi ise, toplam soğurma katsayısı ve kırılma indisindeki toplam değişim üzerinde artışa neden olmaktadır. Foton enerjisinin, bu artış sonucunda azaldığı ve optik yanıtların ise kırmızıya kaydığı tespit edilmiştir.

Manyetik alan etkisinde ters karekök kesik ve deforme olmuş eksponansiyel potansiyele sahip bir GaAs kuantum noktası, sıcaklık ve hidrostatik basınç etkileri dikkate alınarak incelenmiştir. Schrödinger dalga denklemi, potansiyel derinliği ve elektron kütesinin sıcaklık ve hidrostatik basıncın bir fonksiyonu olarak ele alındığı durumda, FD yöntemi ile nümerik olarak çözülerek bağlı durum enerji özdeğerleri hesaplanmıştır. Bağlı durumlara karşılık gelen tüm enerji özdeğerleri baz alınarak Z bölüşüm fonksiyonu hesaplanmıştır. Hesaplamalarda $4 - 70$ K sıcaklık aralığında 0.1 K adımlarla ve -50 ile 50 T manyetik alan aralığında 1 T adımlarla gidilerek toplam 577600 adet bağlı durum enerji özdeğeri hesaplanmıştır. Tüm girilebilir durumlar üzerinden alınan Z bölüşüm fonksiyonlarında, enerji özdeğerlerinin sıcaklık bağımlı olarak hesaplanmış olması önemlidir. Literatürde, sadece analitik çözümü mevcut olan harmonik osilatör potansiyeli için enerji özdeğerleri sıcaklıkla ilişkilendirilerek gözlenirler hesaplanmıştır.

Z bölüşüm fonksiyonları kullanılarak incelenen termodinamik gözlenirler; iç enerji, Helmholtz serbest enerji, ısı kapasitesi ve entropidir. İç enerji, tahmin edilebileceği gibi sıcaklık artışında doğrusal olmayacak şekilde bir artış izlerken, Helmholtz serbest enerji azalmaktadır. Isı kapasitesinin düşük sıcaklık ve yüksek sıcaklıklardaki davranışı karakteristiktir. Düşük sıcaklıklarda bir Schottky anomalisi izlerken yüksek sıcaklıklarda düzenli olarak sürekli artmaktadır. Entropinin ise artan sıcaklıkla bir doğrusal olmayan artış izlediği söylenebilir. Termodinamik gözlenirlerin manyetik alan altındaki davranışları da bu tez kapsamında incelenmiştir. İç enerji, artan manyetik alan altında artarken aksine Helmholtz serbest enerji düşmektedir. Isı kapasite düşük sıcaklıklar hariç manyetik alan artışında ısı kapasitesi düşmektedir. Entropide ise yine düşük sıcaklıklar hariç manyetik alan artışı bir artış söz konusudur. Çalışma kapsamında incelenen manyetik gözlenirler

ise mıknatıslanma ve manyetik duygunluktur. Manyetik alan arttıkça mıknatıslanmanın da arttığı, sıcaklık artışında ise düştüğü gözlenmiştir. Duygunluğun manyetik alan artışında sıfıra doğru gittiği belirlenmiştir. Sıcaklık artışında ise $0\ T$ civarında manyetik duygunluğun azaldığı, yüksek manyetik alan değerlerinde ise bunun tersine düşük sıcaklıklarda daha hızlı sıfıra ulaştığı gözlenmiştir. Dolayısıyla kuantum noktaya düşük sıcaklıkta yüksek manyetik alan uygulandığı durumda paramanyetik bölgeden çıkarak diamanyetik özellik sergilemeye başlamaktadır.

Bu tez çalışmasında, elektron kütlelerinin konuma bağılılığı ve sıcaklık ile hidrostatik basınç etkileri ayrıntılı olarak incelendi. Ancak, bu parametrelerin tümünü birleştirerek daha bütünsel bir model oluşturulması düşünülmektedir. Çalışmanın her adımının fiziksel gerekçeler ve teorik çerçeveler temel alınarak yapılmış olması, kristaldeki atomik etkileşimleri tanımlamada sağlam bir ilerleme kaydedilmesini sağlamıştır.

6. KAYNAKLAR

- Aciksoz, E., Bayrak, O., and Soylu, A. 2016. Binding energy of the donor impurities in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum well wires with Morse potential in the presence of electric and magnetic fields. *Chinese Physics B*, 25 (10): 100302.
- Adachi, S. 1985. GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As: Material parameters for use in research and device applications. *Journal of Applied Physics*, 58 (3): R1–R29.
- Adair, R., Chase, L., and Payne, S. A. 1987. Nonlinear refractive-index measurements of glasses using three-wave frequency mixing. *JOSA B*, 4 (6): 875–881.
- Ahn, D. and Chuang, S.-I. 1987. Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 23 (12): 2196–2204.
- Al, E., Kasapoglu, E., Sari, H., and Sökmen, I. 2021. Zeeman splitting, Zeeman transitions and optical absorption of an electron confined in spherical quantum dots under the magnetic field. *Philosophical Magazine*, 101 (1): 117–128.
- Al, E., Urgan, F., Yesilgul, U., Kasapoglu, E., Sari, H., and Sökmen, I. 2015. Effects of applied electric and magnetic fields on the nonlinear optical properties of asymmetric GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs double inverse parabolic quantum well. *Optical Materials*, 47: 1–6.
- Alivisatos, A. P. 1996. Semiconductor clusters, nanocrystals, and quantum dots. *Science*, 271 (5251): 933–937.
- Ameta, R., Bhatt, J. P., and Ameta, S. C. 2022. Quantum Dots: Fundamentals, Synthesis and Applications. Elsevier.
- Asahi, H. and Horikoshi, Y. 2019. Molecular Beam Epitaxy: Materials and applications for electronics and optoelectronics. John Wiley & Sons.
- Aspnes, D. 1976. GaAs lower conduction-band minima: ordering and properties. *Physical Review B*, 14 (12): 5331.
- Awschalom, D. and Loss, D. 2002. Semiconductor spintronics and quantum computation. Springer Science & Business Media.
- Aygün, E. and Zengin, D. M. 1998. Kuantum fiziği. Bilim Yayınevi.
- Baghrmian, H., Barseghyan, M., Kirakosyan, A., Restrepo, R., Mora-Ramos, M., and Duque, C. 2014. Donor impurity-related linear and nonlinear optical absorption coefficients in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs concentric double quantum rings: Effects of geometry, hydrostatic pressure, and aluminum concentration. *Journal of Luminescence*, 145: 676–683.

- Baser, P., Karki, H., Demir, I., and Elagoz, S. 2013. The hydrostatic pressure and temperature effects on the binding energy of magnetoexcitons in cylindrical quantum well wires. *Superlattices and Microstructures*, 63: 100–109.
- Bastard, G. 1981. Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model. *Physical Review B*, 24 (8): 4714.
- Bayrak, K., Kaya, D., and Bayrak, O. 2023. The effect of position-dependent effective mass on the optical properties of a spherical quantum dot confined in inverse square root truncated and deformed exponential potential. *The European Physical Journal Plus*, 138 (6): 1–11.
- Bayrak, K., Kaya, D., and Bayrak, O. 2024. Optical properties of a quantum dot confined in inverse square root truncated exponential potential under varied conditions of temperature, hydrostatic pressure, and electric/magnetic fields. *The European Physical Journal Plus*, 139 (8): 719.
- Beer 1852. Bestimmung der absorption des rothen lichts in farbigen flüssigkeiten. *Annalen der Physik*, 162 (5): 78–88.
- Bera, A., Ghosh, A., and Ghosh, M. 2019. Analyzing magnetic susceptibility of impurity doped quantum dots in presence of noise. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 484: 391–402.
- Bera, A. and Ghosh, M. 2017. Noise-modulated self-polarization effect of impurity doped quantum dots under simultaneous presence of hydrostatic pressure and temperature. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 109: 26–30.
- Bera, A., Saha, S., Ganguly, J., and Ghosh, M. 2016. Noise-driven diamagnetic susceptibility of impurity doped quantum dots: role of anisotropy, position-dependent effective mass and position-dependent dielectric screening function. *Chemical Physics*, 474: 36–43.
- Bhattacharya, P., Ghosh, S., and Stiff-Roberts, A. 2004. Quantum dot opto-electronic devices. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 34 (1): 1–40.
- Bloch, F. 1929. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für physik*, 52 (7): 555–600.
- Bouguer, P. 1729. Essai d’optique sur la gradation de la lumière. Claude Jombert.
- Bouzaïene, L., Mahrsia, R. B., Baira, M., Sfaxi, L., and Maaref, H. 2013. Hydrostatic pressure and temperature effects on nonlinear optical rectification in a lens shape InAs/GaAs quantum dot. *Journal of Luminescence*, 135: 271–275.
- Boyacioglu, B. and Chatterjee, A. 2012. Heat capacity and entropy of a GaAs quantum

- dot with Gaussian confinement. *Journal of Applied Physics*, 112 (8).
- Boyd, R. W. 2008. Nonlinear optics. Academic Press.
- Burkard, G., Loss, D., and DiVincenzo, D. P. 1999. Coupled quantum dots as quantum gates. *Physical Review B*, 59 (3): 2070.
- Casey, H. C. and Panish, M. B. 1978. Heterostructure lasers, volume 1. Academic Press.
- Castano-Yepes, J., Ramirez-Gutierrez, C., Correa-Gallego, H., and Gómez, E. A. 2018. A comparative study on heat capacity, magnetization and magnetic susceptibility for a GaAs quantum dot with asymmetric confinement. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 103: 464–470.
- Chakraborty, T. 1999. Quantum Dots: A survey of the properties of artificial atoms. Elsevier.
- Chemla, D. S. and Miller, D. A. 1985. Room-temperature excitonic nonlinear-optical effects in semiconductor quantum-well structures. *JOSA B*, 2 (7): 1155–1173.
- Chernomordik, B. D., Marshall, A. R., Pach, G. F., Luther, J. M., and Beard, M. C. 2017. Quantum dot solar cell fabrication protocols. *Chemistry of Materials*, 29 (1): 189–198.
- Cho, A. 1983. Growth of III–V semiconductors by molecular beam epitaxy and their properties. *Thin Solid Films*, 100 (4): 291–317.
- Cho, A. Y. and Arthur, J. 1975. Molecular beam epitaxy. *Progress in Solid State Chemistry*, 10: 157–191.
- Chow, W. W. and Jahnke, F. 2013. On the physics of semiconductor quantum dots for applications in lasers and quantum optics. *Progress in Quantum Electronics*, 37 (3): 109–184.
- Clausius, R. 1879. The mechanical theory of heat. Macmillan.
- Coleman, J. J. 1997. Metalorganic chemical vapor deposition for optoelectronic devices. *Proceedings of the IEEE*, 85 (11): 1715–1729.
- Cullity, B. D. and Graham, C. D. 2011. Introduction to magnetic materials. John Wiley & Sons.
- Davlatov, A., Gulyamov, G., Feddi, E., Feddi, K., Khalmirzaev, A., and Inoyatov, S. 2024. Effect of hydrostatic pressure and temperature on thermodynamic properties of electron gas in narrow bandgap semiconductor nanowires. *Journal of Low Temperature Physics*, pages 1–27.
- De Groote, J.-J. S., Hornos, J. E. M., and Chaplik, A. 1992. Thermodynamic properties

- of quantum dots in a magnetic field. *Physical Review B*, 46 (19): 12773.
- de Souza Dutra, A. and Almeida, C. 2000. Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses. *Physics Letters A*, 275 (1-2): 25–30.
- Debye, P. 1912. Zur theorie der spezifischen wärmen. *Annalen der Physik*, 344 (14): 789–839.
- Diffo, T., Fotue, A., Kenfack, S., Tsiaze, R. K., Baloitcha, E., and Hounkonnou, M. 2021. Thermodynamic properties of a monolayer transition metal dichalcogenide (TMD) quantum dot in the presence of magnetic field. *Physics Letters A*, 385: 126958.
- Dikici, M. 2012. Katıhal fiziği. Seçkin Yayıncılık.
- Dong, S.-H. and Lozada-Cassou, M. 2005. Exact solutions of the Schrödinger equation with the position-dependent mass for a hard-core potential. *Physics Letters A*, 337 (4-6): 313–320.
- Duque, C., Mora-Ramos, M., and Duque, C. 2011. Effects of hydrostatic pressure and electric field on the nonlinear optical rectification of strongly confined electron-hole pairs in GaAs quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 43 (4): 1002–1006.
- Duque, C., Mora-Ramos, M., and Duque, C. 2013. Properties of the second and third harmonics generation in a quantum disc with inverse square potential. A modeling for nonlinear optical responses of a quantum ring. *Journal of Luminescence*, 138: 53–60.
- Ehrenreich, H. 1961. Band structure and transport properties of some 3–5 compounds. *Journal of Applied Physics*, 32 (10): 2155–2166.
- Ekimov, A. I., Efros, A. L., and Onushchenko, A. A. 1985. Quantum size effect in semiconductor microcrystals. *Solid State Communications*, 56 (11): 921–924.
- Elsaid, M., Ali, M., and Shaer, A. 2019. The magnetization and magnetic susceptibility of GaAs Gaussian quantum dot with donor impurity in a magnetic field. *Modern Physics Letters B*, 33 (34): 1950422.
- Elsaid, M. K., Alia, A. A., and Shaer, A. 2020. Rashba spin-orbit interaction effects on thermal and magnetic properties of parabolic GaAs quantum dot in the presence of donor impurity under external electric and magnetic fields. *Chinese Journal of Physics*, 66: 335–348.
- Fakkahi, A., Kirak, M., and Sali, A. 2022. Effect of impurity position and electric field on the optical absorption coefficients and oscillator strength in spherical multilayer

- quantum dot. *The European Physical Journal Plus*, 137 (9): 1–19.
- Fan, X., Wu, T., Liu, B., Zhang, R., Kuo, H.-C., and Chen, Z. 2021. Recent developments of quantum dot based micro-LED based on non-radiative energy transfer mechanism. *Opto-Electronic Advances*, 4 (4): 210022–1.
- Fendley, J. 1982. Measurement of refractive index using a Michelson interferometer. *Physics Education*, 17 (5): 209.
- Fernández, F. M. 2022. Comment on: “thermodynamic properties for the lithium dimer”. pages 1–3.
- Franken, P., Hill, A. E., Peters, C. e., and Weinreich, G. 1961. Generation of optical harmonics. *Physical Review Letters*, 7 (4): 118.
- Friberg, S. and Smith, P. 1987. Nonlinear optical glasses for ultrafast optical switches. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 23 (12): 2089–2094.
- Ghosh, A. and Ghosh, M. 2018. Dipole moment and polarizability of impurity doped quantum dots under anisotropy, spatially-varying effective mass and dielectric screening function: Interplay with noise. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 112: 252–257.
- Ghosh, A. P., Mandal, A., Sarkar, S., and Ghosh, M. 2016. Influence of position-dependent effective mass on the nonlinear optical properties of impurity doped quantum dots in presence of gaussian white noise. *Optics Communications*, 367: 325–334.
- Gilbert, W. 1893. On the loadstone and magnetic bodies, and on the great magnet the earth: a new physiology, demonstrated with many arguments and experiments. Wiley.
- Gönül, B., Gönül, B., Tutcu, D., and Özer, O. 2002. Supersymmetric approach to exactly solvable systems with position-dependent effective masses. *Modern Physics Letters A*, 17 (31): 2057–2066.
- Gopal, E. 2012. Specific heats at low temperatures. Springer Science & Business Media.
- Griffiths, D. J. and Schroeter, D. F. 2018. Introduction to quantum mechanics. Cambridge University Press.
- Guo, K.-X. and Gu, S.-W. 1993. Nonlinear optical rectification in parabolic quantum wells with an applied electric field. *Physical Review B*, 47 (24): 16322.
- Hardy, A. C. and Perrin, F. H. 1932. The principles of optics. McGraw-Hill book Company, Incorporated.
- Herman, M. A. and Sitter, H. 2012. Molecular beam epitaxy: fundamentals and current status, volume 7. Springer Science & Business Media.

- Hu, M., Guo, K., Yu, Q., and Zhang, Z. 2018. Third-harmonic generation investigated by a short-range bottomless exponential potential well. *Superlattices and Microstructures*, 122: 538–547.
- Hu, X. and Sarma, S. D. 2000. Hilbert-space structure of a solid-state quantum computer: Two-electron states of a double-quantum-dot artificial molecule. *Physical Review A*, 61 (6): 062301.
- Huang, K. 2009. Introduction to statistical physics. Chapman and Hall/CRC.
- Ikhdaïr, S. M. 2009. Rotation and vibration of diatomic molecule in the spatially-dependent mass Schrödinger equation with generalized q-deformed Morse potential. *Chemical Physics*, 361 (1-2): 9–17.
- Ishkhanyan, A. 2018. Exact solution of the Schrödinger equation for a short-range exponential potential with inverse square root singularity. *The European Physical Journal Plus*, 133 (3): 83.
- Kahmann, S., Shulga, A., and Loi, M. A. 2020. Quantum dot light-emitting transistors—powerful research tools and their future applications. *Advanced Functional Materials*, 30 (20): 1904174.
- Karaaslan, Y., Gisi, B., Sakiroglu, S., Kasapoglu, E., Sari, H., and Sokmen, I. 2018. Electric and magnetic field modulated energy dispersion, conductivity and optical response in double quantum wire with spin-orbit interactions. *Physics Letters A*, 382 (7): 507–515.
- Karabulut, İ. 2008. Asimetrik kuantum kuyu yapılarının lineer olmayan optik özelliklerinin incelenmesi. Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi , Konya, Türkiye.
- Karabulut, I., Mora-Ramos, M., and Duque, C. 2011. Nonlinear optical rectification and optical absorption in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs asymmetric double quantum wells: Combined effects of applied electric and magnetic fields and hydrostatic pressure. *Journal of Luminescence*, 131 (7): 1502–1509.
- Karaoğlu, B. 2012. İstatistik mekaniğe giriş. Seçkin Yayıncılık.
- Karimi, M. and Rezaei, G. 2011. Effects of external electric and magnetic fields on the linear and nonlinear intersubband optical properties of finite semi-parabolic quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*, 406 (23): 4423–4428.
- Kastner, M. A. 1993. Artificial atoms. *Physics Today*, 46 (1): 24–31.
- Keshavarz, A. and Zamani, N. 2013. Optical properties of spherical quantum dot with position-dependent effective mass. *Superlattices and Microstructures*, 58: 191–197.

- 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.
- Khordad, R. 2012. Effect of position-dependent effective mass on linear and nonlinear optical properties in a quantum dot. *Indian Journal of Physics*, 86 (6): 513–519.
- Khordad, R. 2015. Effect of temperature on magnetic susceptibility and thermodynamic properties of an asymmetric quantum dot in tilted magnetic field. *Modern Physics Letters B*, 29 (23): 1550127.
- Khordad, R. 2018. Simultaneous effects of electron-electron interactions, Rashba spin-orbit interaction and magnetic field on susceptibility of quantum dots. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 449: 510–514.
- Khordad, R. and Sedehi, H. R. 2018. Thermodynamic properties of a double ring-shaped quantum dot at low and high temperatures. *Journal of Low Temperature Physics*, 190: 200–212.
- Khordad, R. and Vaseghi, B. 2019. Effects temperature, pressure and spin-orbit interaction simultaneously on third harmonic generation of wedge-shaped quantum dots. *Chinese Journal of Physics*, 59: 473–480.
- Khosravi, M., Vaseghi, B., Abbasi, K., and Rezaei, G. 2020. Magnetic susceptibility of cylindrical quantum dot with Aharonov-Bohm Flux: simultaneous effects of pressure, temperature, and magnetic field. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 33: 761–768.
- Kirak, M. 2021a. Effects of electric and magnetic fields on the binding energy and second harmonic generation for on-and off-center donor impurities in spherical multilayer quantum dot. *The European Physical Journal Plus*, 136 (6): 1–21.
- Kirak, M. 2021b. Magnetic and thermodynamic properties of GaAs quantum dot confined by parabolic-inverse square plus gaussian potential. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 536: 167481.
- Kirak, M. and Yilmaz, S. 2022. Third harmonic generation of spherical multilayered quantum dot: effects of quantum confinement, impurity, electric and magnetic fields. *Applied Physics A*, 128 (5): 459.
- Kittel, C. and McEuen, P. 2018. Introduction to solid state physics. John Wiley & Sons.
- Konstantatos, G. 2013. Colloidal quantum dot optoelectronics and photovoltaics. Cambridge University Press.
- Kronig, R. d. L. and Penney, W. G. 1931. Quantum mechanics of electrons in crystal

- lattices. *Proceedings of The Royal Society of London. Series A*, 130 (814): 499–513.
- Lambert, J. H. 1760. Photometria.
- Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. 2013. Statistical Physics, volume 5. Elsevier.
- Landau, R. H., Páez, M. J., and Bordeianu, C. C. 2024. Computational physics: Problem solving with Python. John Wiley & Sons.
- Levinshtein, M. and Rumyantsev, S. 1996. Gallium Arsenide (GaAs). *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, 1: 77.
- Li, B., Guo, K.-X., Liu, Z.-L., and Zheng, Y.-B. 2008. Nonlinear optical rectification in parabolic quantum dots in the presence of electric and magnetic fields. *Physics Letters A*, 372 (8): 1337–1340.
- Maksym, P. and Chakraborty, T. 1990. Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions. *Physical Review Letters*, 65 (1): 108.
- Mandal, S., Karakoç, M., and Bayrak, O. 2024. Interaction of an electron and a uniformly charged spherical donor impurity. *Physica Scripta*, 99 (5): 055971.
- Mandl, F. 1991. Statistical physics, volume 14. John Wiley & Sons.
- Maouhoubi, I., En-nadir, R., Zorkani, I., Hassani, A. O. T., and Jorio, A. 2022. The effects of the dielectric screening, temperature, magnetic field, and the structure dimension on the diamagnetic susceptibility and the binding energy of a donor-impurity in quantum disk. *Physica B: Condensed Matter*, 646: 414371.
- McCrackin, F. L., Passaglia, E., Stromberg, R. R., and Steinberg, H. L. 1963. Measurement of the thickness and refractive index of very thin films and the optical properties of surfaces by ellipsometry. *Journal of Research of The National Bureau of Standards. Section A, Physics and Chemistry*, 67 (4): 363.
- Michler, P. 2003. Single quantum dots: Fundamentals, applications and new concepts, volume 90. Springer Science & Business Media.
- Miller, A., Miller, D. A., and Smith, S. D. 1981. Dynamic non-linear optical processes in semiconductors. *Advances in Physics*, 30 (6): 697–800.
- Moran, M., She, C.-Y., and Carman, R. 1975. Interferometric measurements of the nonlinear refractive-index coefficient relative to CS₂ in laser-system-related materials. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 11 (6): 259–263.
- Moreels, E., De Greef, C., and Finsy, R. 1984. Laser light refractometer. *Applied Optics*, 23 (17): 3010–3013.

- Murray, C., Norris, D. J., and Bawendi, M. G. 1993. Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E= Sulfur, Selenium, Tellurium) semiconductor nanocrystallites. *Journal of the American Chemical Society*, 115 (19): 8706–8715.
- Mustafa, O. and Mazharimousavi, S. H. 2006. d-dimensional generalization of the point canonical transformation for a quantum particle with position-dependent mass. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39 (33): 10537.
- Norris, D. J. and Bawendi, M. 1996. Measurement and assignment of the size-dependent optical spectrum in CdSe quantum dots. *Physical Review B*, 53 (24): 16338.
- Onofri, F. 1999. Critical angle refractometry for simultaneous measurement of particles in flow: size and relative refractive index. *Particle & Particle Systems Characterization*, 16 (3): 119–127.
- Ortakaya, S. and Kirak, M. 2016. Hydrostatic pressure and temperature effects on the binding energy and optical absorption of a multilayered quantum dot with a parabolic confinement. *Chinese Physics B*, 25 (12): 127302.
- Owyoung, A. 1973. Ellipse rotation studies in laser host materials. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 9 (11): 1064–1069.
- Pang, T. 2006. An introduction to computational physics. Cambridge University Press.
- Pankove, J. I. 2012. Optical processes in semiconductors. Courier Corporation.
- Peter, A. J. and Navaneethakrishnan, K. 2008a. Effects of position-dependent effective mass and dielectric function of a hydrogenic donor in a quantum dot. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 40 (8): 2747–2751.
- Peter, A. J. and Navaneethakrishnan, K. 2008b. Simultaneous effects of pressure and temperature on donors in a GaAlAs/GaAs quantum well. *Superlattices and Microstructures*, 43 (1): 63–71.
- Peter, Y. and Cardona, M. 2010. Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties. Springer Science & Business Media.
- Press, W. H. 2007. Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing. Cambridge university press.
- Rahmani, K., Zorkani, I., and Jorio, A. 2011. Diamagnetic susceptibility of a confined donor in inhomogeneous quantum dots. *Physica Scripta*, 83 (3): 035701.
- Raigoza, N., Morales, A., Montes, A., Porras-Montenegro, N., and Duque, C. 2004. Stress effects on shallow-donor impurity states in symmetrical GaAs/Al_xGa_{1-x}As double quantum wells. *Physical Review B*, 69 (4): 045323.

- Rajashabala, S. and Navaneethakrishnan, K. 2006. Effective masses for donor binding energies in quantum well systems. *Modern Physics Letters B*, 20 (24): 1529–1541.
- Rajashabala, S. and Navaneethakrishnan, K. 2008. Effects of dielectric screening and position dependent effective mass on donor binding energies and on diamagnetic susceptibility in a quantum well. *Superlattices and Microstructures*, 43 (3): 247–261.
- Rezaei, G. and Kish, S. S. 2013. Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity confined in a two-dimensional quantum dot: effects of hydrostatic pressure, external electric and magnetic fields. *Superlattices and Microstructures*, 53: 99–112.
- Saha, S., Ganguly, J., Bera, A., and Ghosh, M. 2016. Simultaneous influence of hydrostatic pressure and temperature on diamagnetic susceptibility of impurity doped quantum dots under the aegis of noise. *Chemical Physics*, 480: 17–22.
- Schmitt-Rink, S., Chemla, D., and Miller, D. A. 1989. Linear and nonlinear optical properties of semiconductor quantum wells. *Advances in Physics*, 38 (2): 89–188.
- Sheik-Bahae, M., Said, A. A., Wei, T.-H., Hagan, D. J., and Van Stryland, E. W. 1990. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 26 (4): 760–769.
- Shen, Y.-R. 1984. Principles of nonlinear optics.
- Smith, D. D., Yoon, Y., Boyd, R. W., Campbell, J. K., Baker, L. A., Crooks, R. M., and George, M. 1999. z-scan measurement of the nonlinear absorption of a thin gold film. *Journal of Applied Physics*, 86 (11): 6200–6205.
- Spaldin, N. A. 2010. Magnetic materials: fundamentals and applications. Cambridge University Press.
- Sze, S. M., Li, Y., and Ng, K. K. 2021. Physics of semiconductor devices. John Wiley & Sons.
- Tanaka, T. 2005. N-fold supersymmetry in quantum systems with position-dependent mass. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39 (1): 219.
- Tari, A. 2003. The specific heat of matter at low temperatures. World Scientific.
- Taylor, J. R., Zafiratos, C. D., Dubson, M. A., and Karaoğlu, B. 2008. Fen ve mühendislikte modern fizik. Okutman Yayıncılık.
- Thomas, J. W. 2013. Numerical partial differential equations: finite difference methods, volume 22. Springer Science & Business Media.

- Toscano-Negrette, R. G. and et al. 2023. Optical properties in a ZnS/CdS/ZnS core/shell/shell spherical quantum dot: Electric and magnetic field and donor impurity effects. *Nanomaterials*, 13 (3): 550.
- Tuzemen, A. T., Al, E., Sayrac, H., Dakhlaoui, H., Mora-Ramos, M., and Urgan, F. 2024. Effects of hydrostatic pressure, temperature, and position-dependent mass on the nonlinear optical properties of triple delta-doped GaAs quantum well. *The European Physical Journal Plus*, 139 (8): 690.
- Urgan, F. and Bahar, M. 2020. The laser field controlling on the nonlinear optical specifications of the electric field-triggered Rosen-Morse quantum well. *Physics Letters A*, 384 (19): 126400.
- Urgan, F., Bahar, M., Barseghyan, M., Pérez, L., and Laroze, D. 2021. Effect of intense laser and electric fields on nonlinear optical properties of cylindrical quantum dot with Morse potential. *Optik*, 236: 166621.
- Ünlü, S., Karabulut, İ., and Şafak, H. 2006. Linear and nonlinear intersubband optical absorption coefficients and refractive index changes in a quantum box with finite confining potential. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 33 (2): 319–324.
- Uzun, İ. 2004. Mühendislikte nümerik çözüm yöntemleri: nümerik analiz. Beta.
- Varshni, Y. P. 1967. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. *Physica*, 34 (1): 149–154.
- Vaseghi, B., Sadri, M., Rezaei, G., and Gharaati, A. 2015. Optical rectification and third harmonic generation of spherical quantum dots: Controlling via external factors. *Physica B: Condensed Matter*, 457: 212–217.
- von Roos, O. 1983. Position-dependent effective masses in semiconductor theory. *Physical Review B*, 27 (12): 7547.
- Voskoboynikov, O., Bauga, O., Lee, C., and Tretyak, O. 2003. Magnetic properties of parabolic quantum dots in the presence of the spin-orbit interaction. *Journal of Applied Physics*, 94 (9): 5891–5895.
- Weber, M., Milam, D., and Smith, W. 1978. Nonlinear refractive index of glasses and crystals. *Optical Engineering*, 17 (5): 463–469.
- Wei, T., Hagan, D., Sence, M., Van Stryland, E., Perry, J., and Coulter, D. 1992. Direct measurements of nonlinear absorption and refraction in solutions of phthalocyanines. *Applied Physics B*, 54: 46–51.
- Wiley, R. H. and Garrett, R. R. 1951. Spectrometric determination of refractive index at

- low temperatures. *Journal of Polymer Science*, 7 (2-3): 121–131.
- Xie, W. 2010. Impurity effects on optical property of a spherical quantum dot in the presence of an electric field. *Physica B: Condensed Matter*, 405 (16): 3436–3440.
- Yahyah, N. S., Elsaid, M. K., and Shaer, A. 2019. Heat capacity and entropy of gaussian spherical quantum dot in the presence of donor impurity. *Journal of Theoretical and Applied Physics*, 13: 277–288.
- Yesilgul, U., Sari, H., Ungan, F., Martínez-Orozco, J. C., Restrepo, R., Mora-Ramos, M. E., Duque, C. A., and Sökmen, I. 2017. Effects of electromagnetic fields on the nonlinear optical properties of asymmetric double quantum well under intense laser field. *Chemical Physics*, 485: 81–87.
- Yu, Q., Guo, K., Hu, M., and Zhang, Z. 2019. Second-harmonic generation investigated by topless potential well with inverse square root. *IEEE Photonics Technology Letters*, 31 (9): 693–696.
- Zeeman, P. 1897. XXXII. On the influence of magnetism on the nature of the light emitted by a substance. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 43 (262): 226–239.

7. EKLER

Bu tez çalışmasının 4.2. bölümünde yapılan nümerik hesaplamalara ait Python kodları aşağıda verilmektedir.

```
import os
setnotebookdirectory=os.startfile(os.getcwd())
import numpy as np
from scipy import integrate
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
hbar = 1.054571817e-34 # j.s
c= 299792458 # ms^-1
c1= 29979245810**9 # nm*s^-1
e = 1.60217662e-19 # C
KB = 8.617343*10**(-5) #(*eV*K^-1*)
hc= hbar*c*1/(1.602176634*10**(-19))*10**9 # eV . nm
def sigma_v(T, P):
    return (8.63e13 * (T**(3/2)) * (1 - 1.93*10**(-4) * T - 4.19*10**(-8) * T**2 +
        21 * np.exp(-EL(T, P)/(KB * T)) + 44 * np.exp(-Ex(T, P)/(KB * T)))) * 1e6 #
1/m^3 Denklem (4.20)
def V(n, sigma, T, P):
    return (V0(T, P) * np.sqrt(2)) / (np.sqrt(1 + np.exp(-x(n)/sigma))) # Denklem (4.8)
def Eg(T, P):
    return 1.519-5.405*10**(-4)*T**2/(T+204)+0.0126*P-3.77*10**(-5)*P**2 #
Denklem (4.11)
def Ex(T, P):
    return 1.981-4.60*10**(-4)*T**2/(T+204)-1.5*10**(-3)*P # Denklem (4.10)
def EL(T, P):
    return 1.815 - 6.05e-4 *T**2/(T + 204) + 5.5e-3 * P # Denklem (4.21)
def V0(T, P):
    return Ex(T, P) - Eg(T, P) # Denklem (4.9)
def Vml(n, ml, T, P):
    return ((ml*ml-1/4)*hc**2)/(2*mw(T,P)*(x(n)+10**(-10))**2) # Denklem (4.17)de
def Vomega2(n, B, T, P):
    return (1/8) * mwSI(T, P) * omega_c(B, T, P)**2 * x(n)**2 * (1e-9)**2 * 1 /
(1.60217662e-19) # Denklem (4.17) de manyetik alan terimi, ilk terim.
def Ve(n, E1):
    return e * E1 * x(n) * 1 / (1.60217662e-19) # Denklem (4.17)deki elektrik alan terimi
def Veff(n, ml, sigma, T, P, B, E1):
    return V(n, sigma, T, P) + Vomega2(n, B, T, P) + Vml(n, ml, T, P) +
Ve(n,E1)+((0.5*omega_c(B, T, P)*ml*hbar)*1/(1.60217662e-19)) # Etkin potansiyel
def omega_c(B, T, P):
    return (e * B) / mwSI(T, P)
def mwSI(T, P):
    return mw(T, P) / m0 * 9.1093e-31 # kg
m0 = 0.511 * 10**6 # eV
```

```

def mw(T, P):
    return m0 / (1 + 7.51 * (2 / Eg(T, P) + 1 / (Eg(T, P) + 0.341))) # Denklemler (4.12)
# h'ı belirleme kısmı
def x(n):
    return x0+n*h
n=6000; a=0; b=80.; x0=0; h=(b-a)/n
print(h)
En = np.zeros((100,100), dtype=object)
wave = np.zeros((100,100), dtype=object)
NNmax = np.zeros((100,100), dtype=object)
def k(n,ml,en,sigma,T,P,B,E1): # k(n,en)**2
    return 2*mw(T,P)/hc**2*(en-Veff(n,ml,sigma,T,P,B,E1))
# Numerov metodu algoritması
def numerov(n,ml,en,sigma,T,P,B,E1):
    psi = np.zeros(n)
    psi[0] = 0.0
    psi[1] = 1
    for n in range(0,n-2):
        psi[n+2]=( 2*( 1 - (5./12)*h**2*k(n+1,ml,en,sigma,T,P,B,E1))*psi[n+1]-(1 +
1/12.*h**2*k(n,ml,en,sigma,T,P,B,E1))*psi[n] ) /(1 +
1/12.*h**2*k(n+2,ml,en,sigma,T,P,B,E1) )
    return psi

def energy(emax,emin,nr,ml,sigma,T,P,B,E1):
    wave1= np.zeros(n)
    # determining En ---> En[nr,ml]
    while abs(emax-emin) > 1e-10:
        en=(emax+emin)/2.
        wave1 = numerov(n,ml,en,sigma,T,P,B,E1)
        k=0
        for i in range(1,n):
            if wave1[i-1]*wave1[i]<0:
                k=k+1
        if k>nr:
            emax=en
        else:
            emin=en
    En[nr,ml]=en

    # determining Derivative of wave --> derivative_wave
    derivative_wave=np.gradient(wave1, h)

    # determining rmax--->Nmax
    for j in range(n,0,-1):
        if derivative_wave[j-1]*wave1[j-1]<0:
            Nmax=j
            break

```

```

NNmax[nr,ml]=Nmax
# determining normalized wave function ---> wave[nr,ml]
integ=0.;
for i in np.arange(0,Nmax-1):
    integ=integ+(wave1[i]**2+wave1[i+1]**2)*h/2.
normal=1/np.sqrt(integ)
wave[nr,ml]=normal*np.array([wave1[i] if i<NNmax[nr,ml] else 0 for i in
np.arange(0,n,1) ])

# print input and output
#print("nr=",nr,"ml=",ml,"V0=",round(V0(T,P),4),"eV","sigma=",sigma,"nm","T=",T,"
K","P=",P,"B=",B,"T",
E"f{nr,ml}""=",f'{En[nr,ml]:.5f}','eV',"NNmax"f{nr,ml}""=",NNmax[nr,ml],
"normal=", f'{normal:.5f}','h=", f'{h:.3f}')

# Plot the wave function
""" r= np.linspace(a,b,n)
plt.grid(color='lightgray', linestyle='dashed') # determine grid of figure
plt.plot(r[:NNmax[nr,ml]], wave[nr,ml][:NNmax[nr,ml]],linestyle='solid',color='red',
label=r'$\psi(r)$', lw=2)
plt.legend(loc='best')
plt.xlabel('$r$ $[nm]$', fontsize=12) # determine label of x-axes
plt.ylabel('$\psi(r)$ ', fontsize=12) # determine label of y-axes
plt.grid()
plt.show()
""";

#energy(emax,emin,nr,ml,sigma,T,P,B,E1)
energy(20,-20,0,0,10,100,0.001,2,0.00)
energy(20,-20,1,0,10,100,0.001,2,0.00)

r= np.linspace(a,b,n)
plt.grid(color='lightgray', linestyle='dashed') # determine grid of figure
plt.plot(r, wave[0,0],linestyle='solid',color='red', label=r'$\psi_0(r)$', lw=2)
plt.plot(r, wave[1,0],linestyle='solid',color='blue', label=r'$\psi_1(r)$', lw=2)
plt.plot(r, np.array(wave[0,0])*r*np.array(wave[1,0]),linestyle='solid',color='black',
label=r'$\psi_0(r)*r*\psi_1(r)$', lw=2)
plt.legend(loc='best')
plt.xlabel('$r$ $[nm]$', fontsize=12) # determine label of x-axes
plt.ylabel('$\psi(r)$ ', fontsize=12) # determine label of y-axes
plt.grid()
plt.show()

from scipy.integrate import quad
def Integral_phi(mf,mi):
    return np.real( 1/(2*np.pi)*quad(lambda phi:np.exp(1j*(mf-
mi)*phi),0*1,2*np.pi*1)[0] )
Integral_phi(0,0)

```

```

def Integral_radial(nrf,mf,nri,mi):
    f = np.array(wave[nrf,mf])*r*np.array(wave[nri,mi])
    I_simp = (h/3.) * (f[0] + 2*sum(f[:n-2:2]) + 4*sum(f[1:n-1:2]) + f[n-1]) # simpson
    integration

    return np.abs(I_simp)
np.trapz(wave[0,0]*np.array(wave[1,0]), dx=h);
Integral_radial(1,0,0,0)

#Dipol matris elemanı
def Mfi(nrf,mf,nri,mi):
    return Integral_radial(nrf,mf,nri,mi)*Integral_phi(mf,mi) # [nm/C]
Mfi(1,0,0,0)
def Mfi_SI(nrf,mf,nri,mi):
    return Integral_radial(nrf,mf,nri,mi)*Integral_phi(mf,mi)*e*10**(-9) # [C.m]
Mfi_SI(1,0,0,0)
def Efi(nrf,mf,nri,mi):
    return En[nrf,mf]-En[nri,mi] # eV
Efi(1,0,0,0)
def Efi_SI(nrf,mf,nri,mi):
    return (En[nrf,mf]-En[nri,mi])*1.602176634*10**(-19) # [j]
Efi_SI(1,0,0,0)

import math
# All parameter converted to SI unit system
nR = 3.2;
T21=0.2*10**(-12) # [s]
Gamma21=1/T21 # [1/s]
mu=4*np.pi*10**(-7) # [N/A^2]
epsilon0=8.854*10**(-12) # [F/m]
epsilon_R=nR**2*epsilon0 # [F/m]
#sigmav=3*10**22 # [1/m^3]
I1 = 0.1*10**10 # [J/s.m^2] =2.4966036515999*10**28 [eV/s . m^2]

def alpha1(Ef,nrf,mf,nri,mi): # [1/m]
    return
Ef/hbar*np.sqrt(mu/epsilon_R)*(Mfi_SI(nrf,mf,nri,mi))**2*sigma_v(100,0.001)*hbar*
Gamma21/((Efi_SI(nrf,mf,nri,mi)-Ef)**2+(hbar*Gamma21)**2)
alpha1(9.90091805831587e-21,1,0,0,0)

def alpha3(Ef,I1,nrf,mf,nri,mi): # [1/m]
    pay=(Mfi_SI(nrf,mf,nrf,mf)-Mfi_SI(nri,mi,nri,mi))**2*(3*Efi_SI(nrf,mf,nri,mi)**2-
4*Efi_SI(nrf,mf,nri,mi)*Ef+Ef**2-(hbar*Gamma21)**2)
    payda=Efi_SI(nrf,mf,nri,mi)**2+(hbar*Gamma21)**2
    last_term=4*(Mfi_SI(nrf,mf,nri,mi))**2-pay/payda
    return -
Ef/hbar*np.sqrt(mu/epsilon_R)*I1/(2*epsilon0*nR*c)*(Mfi_SI(nrf,mf,nri,mi))**2*sig

```

```

ma_v(100,0.001)*hbar*Gamma21/((Efi_SI(nrf,mf,nri,mi)-
Ef)**2+(hbar*Gamma21)**2)**2*last_term
alpha3(9.90091805831587e-21,I1,1,0,0,0)

```

#Soğurma katsayıları için data dosyaları oluşturma.

```
def alpha(Ef,I1,nrf,mf,nri,mi):
```

```
    return alpha1(Ef,nrf,mf,nri,mi) + alpha3(Ef,I1,nrf,mf,nri,mi)
```

```
alpha1_list_T100=[ alpha1(Ef,1,0,0,0) for Ef in np.arange(0.001e-19,0.2e-19,0.001e-19) ]
```

```
alpha3_list_T100=[ alpha3(Ef,I1,1,0,0,0) for Ef in np.arange(0.001e-19,0.2e-19,0.001e-19) ]
```

```
alpha_list_T100 =[ alpha(Ef,I1,1,0,0,0) for Ef in np.arange(0.001e-19,0.2e-19,0.001e-19) ]
```

```
Ef_list =[ Ef*1/e for Ef in np.arange(0.001e-19,0.2e-19,0.001e-19) ] #
```

convert joule to eV

```
with open("absorption_T100_alpha1_new.dat", "w") as f:
```

```
    for alpha1, Ef in zip(alpha1_list_T100, Ef_list):
```

```
        f.write(f"{Ef}\t{alpha1}\n")
```

```
with open("absorption_T100_alpha3_new.dat", "w") as f:
```

```
    for alpha3, Ef in zip(alpha3_list_T100, Ef_list):
```

```
        f.write(f"{Ef}\t{alpha3}\n")
```

```
with open("absorption_T100_alpha_new.dat", "w") as f:
```

```
    for alpha, Ef in zip(alpha_list_T100, Ef_list):
```

```
        f.write(f"{Ef}\t{alpha}\n")
```

ÖZGEÇMİŞ

KÜBRA BAYRAK

ÖĞRENİM BİLGİLERİ

Doktora 2018-2024	Akdeniz Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Antalya
Yüksek Lisans 2016-2018	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, İstanbul
Lisans 2011-2016	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, İstanbul

MESLEKİ VE İDARİ GÖREVLER

Araştırma Görevlisi 2018-	Akdeniz Üniversitesi Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Antalya
------------------------------	--

ESERLER

Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler

- 1- Bayrak, K., Kaya, D. ve Bayrak, K. (2023). The effect of position-dependent effective mass on the optical properties of a spherical quantum dot confined in inverse square root truncated and deformed exponential potential. The European Physical Journal Plus, 138(6), 1-11.
- 2- Bayrak, K., Kaya, D. ve Bayrak, O. (2024). Optical properties of a quantum dot confined in inverse square root truncated exponential potential under varied conditions of tempe-

perature, hydrostatic pressure, and electric/magnetic fields. The European Physical Journal Plus, 139(8), 719.

3- Bayrak, K., Kaya, D., Gök, G.B. ve Bayrak, O. (2025). A new position-dependent effective mass for a hydrogenic donor embedded in a quantum dot. (Yayınlanmamış makale-Dergiye gönderildi)

4- Bayrak, K., Bayrak, O., Kaya D. (2025). Magnetic and thermodynamic behavior of GaAs quantum dots under inverse square root exponential confinement. (Yayınlanmamış makale-Dergiye gönderildi)

Ulusal hakemli dergilerde yayımlanan makaleler

1- Kam, E., Yümün, Z. Ü., Açıkgöz, G. ve Bayrak, K. (2018). Concentrations of environmental radioactivity in sediment cores from Kulakçayırı Lake. Journal of the Turkish Chemical Society Section A: Chemistry, 5(3), 1371-1374.

2- Ateş, N. Z., Bayrak, K., Turgay, M. E., ve Kam, E. (2020). Evaluation of Excess Lifetime Cancer Risk Caused by External Exposure due to Natural Radioactivity in Bolu, Turkey. Sigma Journal of Engineering and Natural Sciences, 38(2), 945-954.

3- Bayrak, K., Kam, E., Yümün, Z., ve Önce, M. (2022). Investigation of Heavy Metal Concentrations in The Gulf of Izmit (Marmara Sea) Altinova Shipyard Region. Journal of the Turkish Chemical Society Section A: Chemistry, 9(4), 1263-1276.