## SAFSIZLIK DÜZEYLERİ ARASINDAKİ KIZILÖTESİ GEÇİŞLER ÜZERİNE ELEKTRİK ALAN ETKİSİ

YUNUS EMRE YILDIZ

YÜKSEK LİSANS TEZİ FİZİK ANA BİLİM DALI 2015

## CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

## SAFSIZLIK DÜZEYLERİ ARASINDAKİ KIZILÖTESİ GEÇİŞLER ÜZERİNE ELEKTRİK ALAN ETKİSİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Yunus Emre YILDIZ (201292031123)

Fizik Ana Bilim Dalı

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Fatih UNGAN

SİVAS EKİM 2015 Yunus Emre YILDIZ' ın hazırladığı ve "Safsızlık Düzeyleri Arasındaki Kızılötesi Geçişler Üzerine Elektrik Alan Etkisi" adlı bu çalışma aşağıdaki jüri tarafından FİZİK ANA BİLİM DALI' nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir

Tez Danışmanı :	<b>Doç. Dr. Fatih UNGAN</b> Cumhuriyet Üniversitesi	
Jüri Üyeleri :	<b>Doç. Dr. Gökhan GÖKOĞLU</b> Karabük Üniversitesi	
	<b>Prof. Dr. Esin KASAPOĞLU</b> Cumhuriyet Üniversitesi	

Bu tez, Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak onaylanmıştır.

> **Prof. Dr. Mustafa DEĞİRMENCİ** FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

Bu tez, Cumhuriyet Üniversitesi Senatosu'nun 20.08.2014 tarihli ve 7 sayılı kararı ile kabul edilen Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Tez Yazım Kılavuzu (Yönerge)'nda belirtilen kurallara uygun olarak hazırlanmıştır.

Bütün hakları saklıdır. Kaynak göstermek koşuluyla alıntı ve gönderme yapılabilir.

Yunus Emre YILDIZ, 2015

### ETİK

Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Tez Yazım Kılavuzu (Yönerge)'nda belirtilen kurallara uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında;

- ✓ Bütün bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- ✓ Görsel, işitsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçları bilimsel ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- ✓ Başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda ilgili eserlere, bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğumu ve atıfta bulunduğum eserlerin tümünü kaynak olarak gösterdiğimi,
- ✓ Bütün bilgilerin doğru ve tam olduğunu, kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- ✓ Tezin herhangi bir bölümünü, Cumhuriyet Üniversitesi veya bir başka üniversitede, bir başka tez çalışması olarak sunmadığımı; beyan ederim.

02.10.2015

Yunus Emre YILDIZ

## KATKI BELİRTME VE TEŞEKKÜR

Tez çalışmalarım süresince değerli yardımlarını eksik etmeyerek, çalışmamın her aşamasında benimle bilgisini paylaşan, engin tecrübesi ve önerileri ile bana yol gösteren ve yönlendiren, her konuda ilgi ve desteğini eksik etmeyen çok değerli tez hocam Doç. Dr. Fatih UNGAN' a teşekkür ederim.

Maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen anneme, babama ve kardeşlerime ayrı ayrı en içten duygularımla teşekkür ederim

### ÖZET

### SAFSIZLIK DÜZEYLERİ ARASINDAKİ KIZILÖTESİ GEÇİŞLER ÜZERİNE ELEKTRİK ALAN ETKİSİ

#### Yunus Emre YILDIZ

# Yüksek Lisans Tezi Fizik Ana Bilim Dalı Danışman: Doç. Dr. Fatih UNGAN 2015, 49+xv sayfa

Bu çalışmanın ilk aşamasında yarı iletkenler, düşük boyutlu sistemler ve seyreltik III-N-V yarıiletkenler hakkında genel bilgi verilmiştir. Daha sonra GaInNAs/GaAs tek kuantum kuyusundaki 1s, 2s and  $2p_{\pm}$  donor safsızlık enerji düzeyleri üzerine elektrik alan, azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenmiştir. Sonuçlar donor safsızlık atomunun konumu ve kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak sunulmuştur.

Anahtar Kelimeler : Tek kuantum kuyusu, Bant Anti-Crossing (BAC) modeli, Safsızlık bağlanma enerjisi, Seyreltik III-N-V yarıiletkenler.

#### ABSTRACT

### EFFECT OF ELECTRIC FIELD ON THE INFRARED TRANSITONS BETWEEN IMPURITY STATES

Yunus Emre YILDIZ

Master of Science Thesis Department of Physics Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Fatih UNGAN 2015, 49+xv pages

In this study firstly, general information about semiconductor, low dimensional systems and dilute III-N-V semiconductors were given. Then, the effect of electric field, nitrogen and indium concentrations on the 1s, 2s and  $2p_{\pm}$  like donor impurity energy states in a single GaInNAs/GaAs quantum well are investigated by variational approach within the effective-mass approximation. The results are presented as a function of the well width and the donor impurity position

**Key Words:** Single quantum well, band anti-crossing (BAC) model, Impurity binding energy, Dilute III-N-V semiconductors

# İÇİNDEKİLER

## <u>Sayfa</u>

TEŞEKKÜR	vi
ÖZET	vii
ABSTRACT	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ	X
TABLOLAR DİZİNİ	xii
SİMGELER DİZİNİ	xiii
KISALTMALAR DİZİNİ	XV
1. GİRİŞ	1
2. YARIILETKENLER	4
2.1 Saf Yariiletkenler	4
2.2 Katkılı Yarıiletkenler	6
3. HETEROYAPILAR	
3.1 Kuantum Kuyu Sistemleri	
4. GaInNAs GENEL YAPISI	14
4.1 Bant Anti Crossing Modeli	16
4.2 GaInNAs/GaAs Tek Kuantum Kuyusunun Fiziksel Parametreleri Üzeri	ne Azot
ve İndiyum Konsantrasyonlarına Etkisi	
5. GaInNAs/GaAs TEK KUANTUM KUYUSUNUN KUŞATMA	
POTANSİYELİ ve ALT – BANT YAPISI ÜZERİNE ELEKTRİK AL	AN
ETKİSİ	
6. ELEKTRİK ALAN ALTINDAKİ GaInNAs/GaAs TEK KUANTUM	
KUYUSUNDAKİ SAFSIZLIK DÜZEYLERİ ARASINDAKİ KIZILÖ	TESİ
GEÇİŞLER	
7. SONUÇ	
8. KAYNAKÇA	

ÖZGEÇMİŞ

# ŞEKİLLER DİZİNİ

## <u>Sayfa</u>

Şekil 2.1 Şekil 2.2	Mutlak sıfırda saf bir yarıiletkenin elektronik yapısı
Şekil 2.3	Antimon (P) ve Bor (B) safsızlıklarını içeren Silikon (Si) atomunun bant
Şekil 3.1 Şekil 3.2	Oda sıcaklığında bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve enerji aralıkları 9 (a) Birbirine eklenmiş farklı iki yarı iletkenin bant diyagramı (b) Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin birbirine eklenmiş durumdaki bant yapışı
Sekil 3.3	Bant süreksizliğine göre heterovanı türleri
Şekil 3.4	(a) Eg1 ve Eg2 bant aralıklarına sahip iki farklı yarıiletkenden oluşmuş tek kuantum kuyusu yapının üç boyutta şematik gösterimi. (b) Kuantum
	değerlilik bandında Ehl kuşatılmış boşluklar için kuantize olmuş enerji seviyelerini, $\psi$ elektronun dalga fonksiyonunu göstermektedir.(c) x-y
~ • • • • •	düzlemindeki dispersiyon eğrisi
Şekil 4.1	Azot konsantrasyonu ( $y = 0,01$ ) ve Indiyum konsantrasyonu ( $x = 0,30$ ) için Ga1-xInxNyAs1-y'in yapısının iletim bant yapısı
Şekil 4.2	Üç farklı indiyum değeri için $Ga1-xInxNyAs1-y/GaAs$ tek kuantum kuyunun (a) elektron etkin kütlesinin (b) dielektrik sabitinin, azot
Sabil 4 3	Konsantrasyonuna gore degişimi
ŞEKII 4.5	kuvunun kusatma notansivelinin azot konsantrasyonuna göre değisimi 19
Sekil 5.1	Büvütme doğrultusunda uvgulanan elektrik alan altındaki
·, · · · · ·	Ga1-xInxNyAs1-y/GaAs tek kuantum kuyusunun sematik gösterimi. 20
Şekil 5.2	Ga1-xInxNyAs1-y/GaAs tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga
	Ionksiyoniarinin karesinin (a) $y = 0.005$ (b) $y = 0.01$ azot konsantrasyonuna göre değişimi
Şekil 5.3	Ga1-xInxNyAs1-y/GaAs tek kuantum kuyusunun kuşatma
	potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin (a) $x = 0.10$ (b) $x = 0.30$
	indiyum konsantrasyonuna gore degişimi
Şekii 5.4	potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin (a) Lw=100Å (b) Lw=200Å
	kuantum kuyu genişliğine göre değişimi
Şekil 5.5	Büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alan altındaki
	Ga1-xInxNyAs1-y/GaAs tek kuantum kuyusunun potansiyel
	profili, alt bant energi duzeyleri ve bu energi duzeylerine alt dalga fonksiyonlarının karosinin (a) Lw $=100$ Å (b) Lw $=200$ Å kusatum
	kuyu genişliğine göre değişimi

Şekil 6.1	İki farklı azot konsantrasyonu için <i>Ga</i> <sub>1-x</sub> <i>In</i> <sub>x</sub> <i>N</i> <sub>y</sub> <i>As</i> <sub>1-y</sub> /GaAs tek kuantum
	kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjilerinin kuyu
	genişligine göre degişimi
Şekil 6.2	lki farklı indiyum konsantrasyonu için <i>Ga1–xInxNyAs1–y</i> /GaAs tek
	kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma
	enerjilerinin kuyu genişliğine göre değişimi
Şekil 6.3	İki farklı elektrik alan değeri için <i>Ga1–xInxNyAs1–y/</i> GaAs tek kuantum
	kuvusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjilerinin kuvu
	genişliğine göre değişimi
Şekil 6.4	$Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık
-	atomunun bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişimi
Şekil 6.5	Sabit indiyum ve azot konsantrasyonları için elektrik alan altındaki
	$Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun bağlanma enerjisinin
	safsızlık atomunun konumuna göre değişimi
Şekil 6.6	İki farklı elektrik alan değeri için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum
-	kuyusunun merkezinde yer alan safsızlık atomu için kuyu genişliğinin bir
	fonksiyonu olarak geçiş enerjilerinin değişimi
Sekil 6.7	İki farklı elektrik alan değeri için $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum
,	kuvusunun merkezinde ver alan safsızlık atomu için kuvu genişliğinin bir
	fonksivonu olarak gecis frekanslarının değisimi

## TABLOLAR DİZİNİ

## <u>Sayfa</u>

Tablo 2.1	Bazı yarıiletkenle	rin enerji bant aral	lığı değerleri	
-----------	--------------------	----------------------	----------------	--

# SİMGELER DİZİNİ

Ge	Germanyum	
Si	Silisyum	
Sb	Antimon	
GaSb	Galyum Antimon	
InSb	Indiyum Antimon	
GaAs	Galyum Arsenit	
AlAs	Alüminyum Arsenit	
GaN	Galyum Nitrat	
InP	İndiyum Fosfat	
В	Bor	
GaInNAs	Galvum İndivum Nitrat Arsenit	
GaInP	Galvum İndivum Fosfat	
ΛEv	Valans Bandındaki süreksizlik	
ΔEc	İletim Bandındaki süreksizlik	
Lw	Kuantum kuvu genisliği	
T	Sicaklık	
Ēc	İletkenlik bant kenarı	
Ev	Valans bant kenari	
EF	Fermi sevivesi	
Ea	Yariiletkenler' de vasak enerii aralığı	
k k	Boltzman Sabiti	
n	Birim hacimdeki elektron savısı	
n	Birim hacimdeki elektron sayısı	
P 9 A	Örgü sahiti	
aA AB	Örgü sabiti	
E <sup>A</sup> a	Alaşımın yaşak enerii aralığı	
$E^{B}_{a}$	Alaşımın yaşak enerji aralığı	
d	Numune kalınlığı	
e	Flektron viikii	
e 11	Mobilite	
μ S	For Forla	
E	Elektrik Alan	
e	Elektron yükü	
$m_e^*$	Elektronların etkin kütlesi	
λ	Dalga boyu	
h	Planck sabiti	
H ¬	Hamiltonian	
<i>p</i>	Elektronun Momentumu	
Se	Selenyum	
AlGaAs	Alüminyum Galyum Arsenit	
$\mathbf{V}(\mathbf{z})$	Kuşatma Potansıyeli	
InP	Indiyum tostat	
Sb	Antimon	
F	Elektrik Alanın Büyüklüğü	
3	Dielektrik sabiti	
En	Lokalize Azot Seviyesinin Enerjisi	

Ем	Yarıiletkenin İletim Bandı Enerjisi
Lw	Kuyu genişliği, m
V	Kuşatma potansiyeli, J
Vo	Kuşatma potansiyelinin büyüklüğü, J
Vc	Coulomb potansiyeli, J
V <sub>MN</sub>	Matris elemanı çiftlenimi, J
$\Delta_{EC}$	İletim bandı süreksizliği, J
$\Delta_{EV}$	Valans bandı süreksizliği, J
$\delta_n$	Sonsuz kuantum kuyusunun özfonksiyonlarındaki faz farkı

## KISALTMALAR DİZİNİ

- MBE
- BAC
- LED
- Moleküler demetle büyütme
  Bant Anti-Crossing
  Light Emittion Diode
  Metal organik kimyasal buhar biriktirme MOCVD

### 1. GİRİŞ

Yariiletken malzemeler uzun yıllardan beri araştırılmakta ve bu araştırmalar sonucu geliştirilen elektronik ve optoelektronik devre elemanları günlük hayatımızın birçok alanında kullanılmaktadır. Yariiletkenlerin devre elemanı olarak kullanılması, elektronik teknolojisinin hızla gelişmesini sağlamış ve katıhal fiziği üzerine yapılan çalışmaların artmasına neden olmuştur. Yariiletkenlerin sıkça tercih edilmesinin temel nedenleri, çeşitli özelliklerdeki yarıiletken devre elemanlarının çok küçük hacimler içerisine yerleştirilebilir olması, elektriksel ve optiksel özelliklerinin dış etkilerle (elektrik ve manyetik alan, hidrostatik basınç, sıcaklık ve yoğun lazer alanı gibi) değiştirilebilir olması ve istenilen özelliklerde bir devre elemanı yapılmasına imkân vermesidir. Tasarlanan yeni elektronik ve optoelektronik devre elemanlarının modellenmesi, sistemlerin ayarlanabilir fiziksel özellikleri temel alınarak yapılmaktadır [1–2].

Moleküler demetle büyütme (MBE) ve metal organik kimyasal buharlaştırma (MOCVD) gibi deneysel tekniklerindeki son gelişmeler modülasyon katkılama tekniği ile birleştirilerek, yük taşıyıcılarının bir, iki ve üç yöndeki hareketleri kısıtlanarak kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları gibi düşük boyutlu yarıiletken heteroyapıların üretilmesini mümkün kılmıştır. Düşük boyutlu sistemlerin külçe yapılara göre üstünlüğü, bu sistemlerdeki boyut farklılığından kaynaklanır. Geliştirilen sistemlerde boyut azaldıkça, yani kuşatma arttıkça fiziksel özellikleri belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelmektedir. Böylece, bu yapılarda son derece dar ve iyi tanımlanmış enerji düzeylerini elde etmek mümkündür. Buna ek olarak bu sistemlerde elektron ve boşluk yoğunluğu istenildiği gibi değiştirilebilir. Bu sayede özel fonksiyonlara sahip elektronik ve optoelektronik aletler tasarlanabilir [5–6].

Bilindiği gibi yarıiletkenlere dayalı geliştirilen elektronik devre elemanlarının temel fiziksel özellikleri safsızlık atomlarına bağlı olarak önemli oranda değişmektedir. Bu nedenle düşük boyutlu yarıiletken sistemlerinde safsızlık atomlarına bağlı fiziksel özelliklerin belirlenmesi birçok araştırmacının yoğun ilgisini çekmektedir. Yoo ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilen uzak kızılötesi ölçümler seçici donor katkılı GaAs/GaAlAs kuantum kuyularında elektrik alanının safsızlık düzeyleri üzerine gözlenmesini olanaklı kılmıştır [14].

Son yıllarda kristal büyütme tekniklerindeki (MBE ve MOCVD gibi) hızlı gelişmeler sonucunda yariiletken heteroyapılara dayanan birçok optoelektronik devre elemanları geliştirilmiştir. Bu yapılar daha çok örgü sabitleri birbirine yakın III-V grubu variiletkenlerin belirli oranlarda katılarak alaşım halinde tabakalar biçiminde büyütülmesi ile elde edilirler. III-V grubu heteroyapıların elektronik ve optik ayarlanabilirliklerinin özelliklerinin amaca uygun olarak sınırlı olması, araştırmacıların yeni arayışlar içinde olmasını zorunlu kılmaktadır. Son zamanlarda yapılan araştırmalarda III-V grubu yarıiletkenlere küçük bir miktar azot (N) katılmasıyla bant aralıklarının büyük bir oranda azaldığı deneysel ve teorik olarak gösterilmiştir [7–8].

III-V yarıiletkenlerin günümüz optik iletişim sistemlerinde kullanılan yarıiletken lazerler için vazgeçilmez olmaları nedeniyle GaAs örgüsü ile uyuşan dörtlü GaInNAs sistemi araştırmacıların ilgi odağı haline gelmiştir [9–10].  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$  alaşım yarıiletkeni içindeki atomların yoğunlukları değiştirilerek bant aralığı ve örgü sabiti belirli sınırlar içerisinde değiştirilebilir. Kuramsal olarak, değişen azot miktarına bağlı olarak  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$  alaşım yarıiletkeninin bant aralığının 0.6–1.42 eV arasında değişebileceği öngörülmektedir [11]. Bu yapılar optik haberleşme sistemlerinde veri kaybının minimum olduğu 1,3–1.55 µm dalga boyunda çalışabilecek lazer sistemlerinin yapılmasına olanak sağlar [12].

 $Ga_{1-x}In_xAs$  yarıiletkenine azot ekleyerek  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$  yarıiletken bileşiği elde edildiğinde, lazerler için ideal yapı olan derin iletim bandı süreksizliği elde edilebilmektedir. Bu nedenden dolayı  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ , aktif tabaka olarak kullanıldığında yük taşıyıcılar daha iyi hapsedilebilmekte ve bunun sonucu olarak da yüksek sıcaklıklarda yük taşıyıcı sızmaları azalmaktadır. Her ne kadar kristalin içinde azotun varlığı, bant aralığını daraltarak optik haberleşmenin ihtiyaç duyduğu bölgelerde çalışabilen optoelektronik aygıtların üretimine olanak sağlasa da, örgüde ekstra kusurlar oluşturmaktadır. Yarıiletken içerisinde iletim bandı civarına yerleşmiş ve özellikle azota bağlı olan bu kusurlar, bantlar arası geçiş prensibine ve bant içi iletime dayalı aygıtların performansını olumsuz etkilemektedir. Ayrıca azotun varlığında iletim bandı parabolikliğinin azalması sonucu elektron etkin kütlesi artmakta ve elektron hareketliliği azalmaktadır. Teorik hesaplarda, azotun sadece iletim bandına etki edip değerlik (valans) bandına etki etmediği, dolayısıyla boşluk hareketliliğinin elektron hareketliliğinden daha yüksek olması öngörülmektedir. Sun ve arkadaşları tarafından tek kuantum kuyulu n-ve p-tipi  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  üzerinde yapılan teorik ve deneysel çalışmalar ile bu öngörü desteklenmeye çalışılmıştır [13].

Bu tez çalışmasında farklı azot (N) ve indiyum (In) konsantrasyonları için  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun elektronik yapısı, hidrojenik donor safsızlık düzeyleri ve bu safsızlık düzeyler arası geçiş enerjileri; yapının simetrisi, uygulanan elektrik alanının büyüklüğü ve safsızlık atomunun konumuna göre etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel hesap tekniği ile belirlenecektir. Terahertz rejiminde düzeyler arası geçişlere dayalı yeni cihazların yapımında oldukça önemli bir yer tutan donor geçiş enerjileri elektrik alanın büyüklüğü ve yapının simetrisine göre hesaplanarak elde edilen sonuçların uygulamaya getireceği katkılar göz önünde bulundurularak yorumlanacaktır.

#### 2. YARIİLETKENLER

#### 2.1 Saf Yarıiletkenler

Her katının karakteristik bir enerji bant yapısı vardır. Katılardaki enerji bant yapılarının çeşitliliği elektrik iletiminde belirleyici özellikler taşır. Mutlak sıfırda, Şekil 2.1' de görüldüğü gibi yarıiletken bir malzemenin tüm elektronları değerlik bandındadır. İletim bandında hiçbir elektron bulunmadığı için bir yalıtkan gibi davranır. Yarıiletkenlerin en belirgin özelliği, iletkenliklerinin metaller ile yalıtkanlar arasında olması ve sıcaklıkla doğru orantılı değişmesidir. Şekil 2.2' de sıcaklığın artmasıyla değerlik bandındaki elektronlar iletim bandına geçerler ve iletime katılırlar. İletim bandına geçen elektronlar, geride pozitif yüklü boşluklar bırakırlar. Bu boşluklar elektrik alan altında elektronlara zıt yönde hareket ederler. Böylelikle yarıiletkenlerde elektronlar ve boşluklar olmak üzere iki tip yük taşıyıcı elde edilir.

Yarıiletkenleri yalıtkanlardan ayıran en önemli özellik, yasak enerji bant aralığının 1– 4 eV mertebesinde olmasıdır. Tablo 1.'de bazı yarıiletkenlerin enerji bant aralığını göstermektedir [15]. Yalıtkanlarda bu bant aralığı çok daha yüksek mertebelerde olduğu için elektronların değerlik bandından iletim bandına geçme olasılıkları hemen hemen hiç yoktur. Yarıiletkenlerde elektriksel iletimin gerçekleşmesi, herhangi bir etkenle (ısı, sıcaklık, basınç, vb.) elektronların değerlik bandından iletim bandına geçmesi ile mümkündür.



Şekil 2.1 Mutlak sıfırda saf bir yarıiletkenin elektronik bant yapısı.



Şekil 2.2 Saf yarıiletkende yüklerin hareketi.

Kristal	0K <u>Eg (eV)</u>	300K <u>Eg (eV)</u>
Si	1,17	1,14
Ge	0,744	0,67
InP	1,42	1,35
GaP	2,32	2,26
GaAs	1,52	1,43
CdS	2,582	2,42
CdTe	1,607	1,45
ZnO	3,436	3,2
ZnS	3,91	3,6

**Tablo 1** Bazı yarıiletkenlerin enerji bant aralığı değerleri [15].

İdeal bir yarıiletkende, örgü kusurları ve yabancı atomların oluşturdukları safsızlıklar yoktur. Bu tip yarıiletkenler katkısız veya saf yarıiletkenler olarak bilinir. Saf yarıiletkenlerde elektron ve boşluk yoğunluğu aynıdır. Saf yarıiletkenlerde elektrik iletimine katkıda bulunan elektron veya boşluk sayısı az olduğundan aygıt yapımında nadir olarak kullanılır.

#### 2.2 Katkılı Yarıiletkenler

Düşük taşıyıcı yoğunluklu saf yarıiletkenlerde serbest taşıyıcıların akım taşıyabileceğini gördük. Serbest taşıyıcı yoğunluğunu arttırmak için, safsızlık olarak bilinen katkı atomları kullanılır. Bir yarıiletkene katkı atomları ekleme işine aşılama adı verilir. Temel olarak katkılamanın amacı serbest taşıyıcı yoğunluğunu kontrol etmektir. Katkılama işlemleri yapılırken, kullanılan katkı maddeleri, verici (donor) veya alıcı (akseptör) olmak üzere iki ana sınıfa ayrılır. Bunlardan ortama bir elektron verebilen safsızlık atomuna verici, ortamdan bir elektron alan safsızlık atomuna da alıcı atomu adı verilir. Örneğin; silikon gibi 4 valans elektronuna sahip bir yarıiletkene antimon gibi 5 valans elektronlu safsızlık atomu katılarak n-tipi yarıiletken elde edilir. p-tipi yarıiletken oluşturmak içinde, silikon yapıya bor gibi 3 valans elektronlu safsızlık atomu katılır. Bu safsızlık atomları, saf yarıiletkenlere yüzde 1 oranında katılırlar. Böylece 10 milyon atomda 1 atom katkı yapılmış olur [20].



Şekil 2.3 Antimon (P) ve Bor (B) safsızlıklarını içeren Silikon (Si) atomunun bant yapısı.

Katkılı yarıiletkenler, diyot, transistor, doğrultucu, kapasitör gibi elektronik aygıtlar ve fotodedektör, lazer ve fotovoltaik güneş pilleri gibi optoelektronik aygıtlar için olmazsa olmazlardır. Bu aygıtlar endüstriyel sistemlerin bel kemiğini oluşturur. Bilgisayarların hard diskleri, usb flash diskler ve grafik işlemciler vs. gibi elektronik aygıtlar da, yarıiletken malzemelerden yapılır. Ayrıca, güç denetimi ve termal denetim teknikleri, radar ve uydu iletişimi de yarıiletken teknolojisi ile sağlanır. Elektronikten iletişime uzanan çok geniş bir alanda kullanılan bu malzemeler olmasaydı şu anki teknolojiye sahip olamazdık.

#### **3. HETEROYAPILAR**

Bir yarıiletkenin elektronik ve optik özellikleri bant yapısına bağlıdır. Yarıiletken malzemelerin bant yapısı amaca uygun değiştirilerek iyi performanslı elektronik ve optoelektronik aygıt tasarlanabilir. Bu yarıiletken fiziğini güncel kılan nedenlerden biridir.

Bir malzemenin elektronik bant yapısı birçok fiziksel olgu ile ayarlanabilir. MBE ve MOCVD büyütme teknikleri ile yarıiletken tabakaları kusursuz bir şeklinde büyütmek mümkündür. Eğer dar bant aralıklı bir malzeme ile geniş bant aralıklı bir malzeme bir araya getirilirse oluşan yapıya heteroyapı adı verilir

A ve B gibi iki yarıiletken büyütme teknikleriyle bir araya getirilirken;

 Kullanılan yarıiletkenlerin örgü sabitleri birbirine çok yakın seçilir.
 Malzemeler benzer örgü yapısında seçildiği için örgü sabiti Vegard yasasına uyar ve A<sub>x</sub>B<sub>1-x</sub> alaşımı için örgü sabiti

$$a_{alaşım} = xa_A + (1 - x)a_B \tag{3.1}$$

ile verilir, burada x A yarıiletkeni için konsantrasyon,  $a_A$  ve  $a_B$  sırası ile A ve B yarıiletkenlerinin örgü sabitleridir

ii) Alaşımın bant yapısını hesaplamak oldukça zordur. Çünkü alaşımı oluşturan malzemeler kusursuz bir örgüye sahip olsalar da alaşım kusursuz bir örgüye sahip değildir. Atomlar gelişi güzel yerleşmişlerdir.  $E^A_g$  ve  $E^B_g$  sırası ile A ve B yarıiletkenlerinin yasak enerji aralığı olmak üzere alaşımın enerji aralığı

$$E_g^{alaşim} = x E_g^A + (1 - x) E_g^B$$
[3.2]

ile verilir.

Çoğu alaşımın özellikleri yaklaşık olarak alaşımın her bir bileşeninin kendi özelliğinin lineer ortalaması olarak verilir.

Eğer alaşımın oluşma süreci iyiyse, örgü sabiti ve enerji aralığı için verilen denklemler geçerlidir. Yani alaşım  $A_xB_{1-x}$  şeklinde büyütülürse ortalama olasılık A-tipi atom B-tipi atom tarafından çevrelenmiş ve B-tipi atom *x* olasılıklı A-tipi üyeye sahiptir. Bu tip malzemeye en iyi örneklerden biri GaAs ve Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As'dir. Çünkü bu yarıiletkenlerin örgü sabitleri birbirine çok yakındır [16–17].

Bir heteoroyapı oluşturulurken yapıyı oluşturan yarıiletkenlerin örgü sabitlerinin birbirine yakın olması tercih edilir. Şekil 3.1' de bazı yarıiletkenlerin oda sıcaklığında örgü sabitleri ve enerji aralıkları verilmiştir. Şekil 3.1' den görüldüğü gibi GaAs ve AlAs'niğin örgü sabitleri birbirine çok yakındır. Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin bant yapılarının birbirine eklenmemiş Şekil 3.2(a) ve eklenmiş durumları Şekil 3.2(b) şematik olarak gösterilmiştir [18–19].



Şekil 3. 1 Oda sıcaklığında bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve enerji aralıkları [9].







Şekil 3. 2 (a) Birbirine eklenmemiş farklı iki yarıiletkenin bant diyagramı.(b) Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin birbirine eklenmiş durumdaki bant yapısı. Burada  $\Delta E_v$  ve  $\Delta E_c$  sırasıyla valans ve iletim bandındaki süreksizlikleri,  $E_{g1}$  ve  $E_{g2}$  ise temel bant aralıklarıdır.

Heteroyapılar, mikro yapıların yapımında temel eleman niteliğindedir. Düşük boyutlu yapılarda oluşan fiziğin dayandığı anahtar parametre heteroyapıdaki bant süreksizliğidir. Yarıiletken heteroyapılar bant süreksizliğine göre üç gruba ayrılırlar [21]. Bunlar I-tip (Normal), II-tip (Katlı) ve III-tip (Kırık Kayma) heteroyapılar olarak adlandırılırlar. GaAs ve Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As yapısı I-tip (Normal) heteroyapıya örnek verilebilir. Bu yapıda elektron ve boşluk GaAs katmanında bulunurlar. II-tip (Katlı) heteroyapılarda, örneğin Si-Ge, elektronlar Si katmanında, boşluklar ise Ge katmanında kuşatılmışlardır. III-tip (Kırık Kayma) heteroyapıya örnek olarak verebileceğimiz InAs-GaSb yapıda ise, II-tip (Katlı)' deki kuşatmaya benzer bir durum ortaya çıkar fakat bu süper örgülerde periyodun artması ile enerji bant aralığı azalır ve yarıiletkenden yarı metale geçiş gözlenir.



Şekil 3.3 Bant süreksizliğine göre heteroyapı türleri.

#### 3.1 Kuantum Kuyu Sistemleri

Bant aralıkları farklı iki yarıiletken üst üste büyütüldüğünde kuantum kuyusu sistemleri oluştururlar. Eğer dar bant aralığına sahip olan yarıiletken tabakası yeterince inceyse, yarıiletken ara yüzeyine dik doğrultuda, yani yarıiletkenin büyütme doğrultusunda taşıyıcıların hareketleri kuantize olur (sınırlanır). İki boyutlu ya da kuantum kuyusu sistemleri olarak adlandırılan bu sistemlerde taşıyıcıların hareketi büyütme doğrultusunda kuantize olurken, büyütme doğrultusuna dik iki doğrultuda hala serbesttir. Kuyu bölgesinde kuantize olmuş alt bant enerjileri, E<sub>n</sub>, sonsuz derin kuyudaki parçacık yaklaşımı yapılarak,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_e L_z^2}$$
[3.3]

ifadesinden elde edilir. Bu ifadede  $E_n$  (n = 1, 2, 3, ...) kuyu bölgesinde iletkenlik bandı kenarından ölçülen enerji ve  $L_z$  kuantum kuyusu genişliğidir. Benzer ifade valans bandındaki boşluk alt bantları enerjilerini bulmak için de kullanılabilir. Tek farklılık elektron etkin kütlesi  $m_e$  yerine ağır boşluk etkin kütlesi  $m_{hh}$  (ağır boşluk alt bantları için) ya da hafif boşluk etkin kütlesi  $m_{lh}$  (hafif boşluk alt bantları için) kullanılmasıdır. Enerji seviyeleri arası geçiş, kuantum kuyusu içerisindeki enerjilerin toplanması ( $E_{geçiş}$ =  $E_g + E_{c1} + E_{v1}$ ) ile bulunur. Bu enerji kuantum kuyusu için soğurma ve yayma eşik değerlerini belirler.



Şekil 3.4 (a) Eg1 ve Eg2 bant aralıklarına sahip iki farklı yarıiletkenden oluşmuş tek kuantum kuyusu yapının üç boyutta şematik gösterimi. Lz ve Lb sırasıyla kuyu ve engel genişliği, ΔE<sub>C,V</sub> ise sırasıyla iletkenlik ve değerlik bandı süreksizliğidir. (b) Kuantum kuyusu içerisinde iletkenlik bandında Ee1 kuşatılmış elektronlar için ve değerlilik bandında Ehl kuşatılmış boşluklar için kuantize olmuş enerji seviyelerini, ψ elektronun dalga fonksiyonunu göstermektedir. (c) x-y düzlemindeki dispersiyon eğrisi.

Kuantum kuyusunun yasak bant aralığı kuşatılma etkilerine, seçilen konsantrasyona, iletim ve valans bantlarının süreksizliklerine bağlıdır. Ayrıca kuyu genişliğinin değiştirilmesi kuantum kuyusunun bant aralıklarının değişmesine neden olur. Böylece kuantum kuyusu parametreleri ile sistemin optik özellikleri ayarlanabilir. Kuantum boyut etkisiyle oluşan enerji seviyelerinin gözlemlenebilmesi için;

• Sıcaklığın, kuyu içerisindeki seviyeler arasındaki enerji farkı

 $E_{n+1}-E_n >> k_bT$  şartını sağlaması.

• Kuantum kuyusu kalınlığı olan Lz' nin yeterince küçük olması gerekir

#### 4. GaInNAs GENEL YAPISI

özelliklerinin Heteroyapıların elektronik ve optik amaca uygun olarak ayarlanabilirliklerinin sınırlı olması, araştırmacıların yeni arayışlar içinde olmasını zorunlu kılmaktadır. Bu arayışlara örnek olarak lazer modellemesi ve yapımı konusunda yapılan çalışmalar verilebilir. GaAs tabanlı geleneksel heteroyapıların yasak bant aralığı 1200 nm den büyük dalga boyunda ışıyan cihazların yapımında kullanılmaları uygun değildir. Yine çok yaygın olarak kullanılan InP tabanlı yapılarda 2100 nm' ye kadar ulaşılabilmektedir. Bu nedenle, direkt bant aralığı 0.7eV tan 3.2 eV a kadar geniş bir bant aralığında değiştirilebilen seyreltik azotlu GaInNAs heteroyapılar son yıllarda araştırmacıların önemle üzerinde durdukları yapılardır. Ayrıca, son yıllarda veri kaybının az ve optik kazancın fazla olduğu lazer sistemlerinin oluşturulması konusunda yoğun çalışmalar yapılmıştır. Yapılan bu çalışmalarda GaInNAs yapıların optik haberleşme sistemlerinde veri kaybının minimum olduğu 1300 nm-1700 nm penceresinde calışabilecek lazer sistemlerinin yapılmasına olanak sağladıkları görülmüştür [22-23]. Bu pencerede ışıyan lazerlerle optik haberleşme alanında mevcut sistemlere göre kapasite ve iletişim hızında önemli artışlar sağlanmaktadır. Ayrıca, GaAs alt taşlar üzerine büyütülen GaInNAs yapılarda iletim bandı süreksizliğine bağlı elektron kuşatma potansiyelinin yeterli yükseklikte olması bu yapıların uzun dalga boyu lazerlerin yapımında önemini arttırmıştır [24]. n- ve ptipi katkılamada geliştirilen kontrol teknikleri sonucunda azot tabanlı p-n eklemleri üretilmiş ve buna paralel olarak heteroyapı LED'ler ve lazerler geliştirilmiştir [25-26]. Özellikle seyreltik azotlu yarıiletkenlerin kullanıldığı yapılarda oldukça önemli gelişmeler sağlanmıştır. III-V grubu yarıiletkenlere azot katılmasıyla fiziksel büyüklülerin (yasak enerji bant aralığı, atomik örgü sabiti, taşıyıcı etkin kütle, kuşatma potansiyelinin biçimi gibi) ayarlanabilirlik sınırının önemli oranda değiştiği gözlenmiştir [25-27]. Kim ve arkadaşları tarafından MOVPE tekniği ile büyütülen çok bariyerli GaInNAs kuantum kuyusunun 1300 nm diliminde oldukça yüksek optik performansı kaydedilmiştir [28].

Bu çalışmada elde edilen yapı analizi sonuçlarına göre, InGaAs tabakası kuyu içinde azot' un yeniden dağılımını sağlar ve böylece keskin yüzeyli yapının oluşumu gerçekleşir. Ayrıca cihaz tasarımı kapsamında yapılan çalışmalarda optik pompalamalı aktif bölgenin iyileştirilmesi konusunda da önemli gelişmeler sağlanmıştır [29-30]. Bu gelişmelere paralel olarak, oldukça geniş operasyon dalga boyu aralığını kapsayan veri depolama, iletişim, güneş pilleri, foto dinamik terapi, gaz sensörleri ve terahertz cihazlar gibi yeni bir çok optoelektronik cihazın geliştirilmesi beklenmektedir. Uygulama alanında çok yaygın kullanılma potansiyeline sahip seyreltik azotlu yarıiletken yapıların daha kolay ve ekonomik büyütülebilmelerinin yanında özellikle lazerlerde elde edilen performansları da göz önüne alındığında, GaInNAs tabanlı yapıların optik haberleşme sistemlerinde kullanılan geleneksel InP tabanlı yapıların yerini almaları kaçınılmazdır.

#### 4.1 Bant Anti-Crossing Modeli

Bant Anti-Crossing (BAC) modeli, ilk olarak Shan tarafından ileri sürülmüştür. Bu model seyreltik azotlu yapılarda azotun, yarıiletkenlerin bant yapılarına etkilerini göstermek için kullanılan en uygun modeldir. [31]. BAC modelinin uygunluğu, O'Reilly ve Lindsay tarafından da desteklenmiştir [32]. BAC modeli, yüksek uyumsuz alaşımların bant yapıları, geçiş enerjileri, taşıyıcı etkin kütleleri ve taşıyıcı konsantrasyonları hakkında bilgi vermektedir.

BAC modeline göre  $Ga_{1-x}In_xAs$  alaşımına katılan azotun lokalize enerji seviyesi,  $Ga_{1-x}In_xAs$ 'ın iletim bandı ile rezonanstadır. Lokalize azot seviyesi ve iletim bandı arasındaki etkileşim Şekil 4.1' de görüldüğü gibi ana yarıiletkenin iletim bandını E<sub>+</sub> ve E<sub>-</sub> şeklinde ikiye ayırır.



**Şekil 4.1** Azot konsantrasyonu (y = 0,01) ve İndiyum konsantrasyonu (x = 0,30) için  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ 'in yapısının iletim bant yapısı.

Azotun enerji seviyesindeki genişlemenin sıfır olduğu varsayılarak birinci dereceden pertürbasyon teoride bu enerji değerleri için özdeğerler;

$$\begin{vmatrix} E - E_M & V_{MN} \\ V_{MN} & E - E_N \end{vmatrix} = 0$$

$$[4.1]$$

şeklinde yazılabilir. Burada  $E_M$  ana yarıiletkenin iletim bandı enerjisini,  $E_N$  lokalize azot seviyesinin enerjisini ve  $V_{MN}$  ise matris elemanı çiftlenimini temsil etmektedir. Denklem (4.1) ifadesindeki determinantın çözümü ile

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left[ (E_N + E_M) \pm \sqrt{(E_N - E_M)^2 + 4V_{MN}^2} \right]$$
[4.2]

enerji ifadesini elde ederiz. Alaşıma katılan azot ve indiyum miktarlarına bağlı olan  $V_{MN}$ ,  $E_N$  ve  $E_M$ 'in değerleri ise [33]:

$$V_{MN} = 2.7\sqrt{y} \tag{4.3}$$

$$E_N = 1.65(1-x) + 1.44x - 0.38x(1-x)$$
[4.4]

$$E_M = E_{M_0} - 1.55y$$
 [4.5]

şekline alınır. Bu model' den yola çıkarak elektronun etkin kütlesi E(k) dispersiyon eğrisinden;

$$m^{*}(Ga_{1-x}In_{x}N_{y}As_{1-y}) = \frac{2m^{*}(Ga_{1-x}In_{x}As)}{1\frac{E_{M}-E_{N}}{\sqrt{(E_{N}-E_{M})^{2}+4V_{MN}^{2}y}}}$$
[4.6]

eşitliği ile hesaplanır. Burada  $m^*(Ga_{1-x}In_xAs)$ ,  $Ga_{1-x}In_xAs$  yarıiletkeninin elektron etkin kütlesidir. Düşük azot konsantrasyonları için denklem (4.6)'da verilen eşitlikten elde edilen sonuçlar deneysel verilere çok yakındır. [34]

# 4.2 $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ /GaAs Tek Kuantum Kuyusunun Fiziksel Parametreleri Üzerine Azot ve İndiyum Konsantrasyonlarının Etkisi

Bu bölümde  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyunun, elektron etkin kütlesi, dielektrik sabiti ve kuşatma potansiyeli gibi fiziksel parametreleri üzerine azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi incelenerek aşağıdaki grafik ve sonuçlara ulaşılmıştır.



Şekil 4.2 Üç farklı indiyum değeri için Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>/GaAs tek kuantum kuyunun (a) elektron etkin kütlesinin (b) dielektrik sabitinin, azot konsantrasyonuna göre değişimi.



Şekil 4.3 Üç farklı indiyum değeri için Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>/GaAs tek kuantum kuyunun kuşatma potansiyelinin azot konsantrasyonuna göre değişimi.

 $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun, elektron etkin kütlesi ve dielektrik sabiti üzerine azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi Şekil 4.2 de gösterilmiştir. Bu şekillerden de görüldüğü gibi; sabit indiyum (azot) konsantrasyonu için yapıdaki azot (indiyum) konsantrasyonunun artırılması ile sistemin elektron etkin kütlesi artarken (azalırken) dielektrik sabitinin azaldığı (arttığı) görülmektedir.

 $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyunun kuşatma potansiyelinin azot konsantrasyonuna göre değişimi üç farklı indiyum değeri için Şekil 4.3 de verilmiştir. Bu şekilden açıkça görüldüğü gibi yapıdaki azot (indiyum) konsantrasyonun artırıldığı zaman  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$  malzemesinin bant aralığının azaldığı ve buna bağlı olarak  $\Delta E_g$ 'nin arttığı belirlenmiştir. Bu sonuçla, azot ve indiyum konsantrasyonunun artırılması ile oluşan iletim bandındaki bant kaymasının büyümesi, kuşatma potansiyelinin derinleşmesine sebep olmuştur.

# 5. $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNUN KUŞATMA Potansiyeli ve alt-bant yapısı üzerine elektrik alan etkisi

Bu bölümde Şekil 5.1' de şematik olarak gösterilen, büyütme doğrultusunda (*z*doğrultusu) uygulanan elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyeli ve alt bant yapısı üzerine azot ve indiyum konsantrasyonları etkisi etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde zamandan bağımsız Schrödinger dalga denkleminin çözümü yapılarak incelenecektir.



**Şekil 5.1** Büyütme doğrultusunda uygulanan  $\vec{F}$  elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun şematik gösterimi.

Büyütme doğrultusunda uygulanmış elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  kuantum kuyu sisteminin Hamiltonian'ı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde,

$$H = \frac{P^2}{2m_e^*} + V(z) + |e|Fz$$
[5.1]

-

şeklinde yazılır. Burada  $\vec{P}$  elektron momentum operatörü,  $m_e^*$  elektron etkin kütlesi,  $\ell$  temel elektrik yükü, F büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanın büyüklüğü ve V(z) kuşatma potansiyelidir. V(z) kuşatma potansiyeli;

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & , & z < -\frac{L_w}{2} \\ 0 & , & -\frac{L_w}{2} < z < \frac{L_w}{2} \\ V_0 & , & z > \frac{L_w}{2} \end{cases}$$
[5.2]

ile verilir. Elektronun momentum operatörü sistemin Hamiltonian'ında yerine yazılıp, Hamiltoniyendeki tüm uzunluklar etkin Bohr yarıçapı  $(a_B = \frac{\varepsilon \hbar^2}{m_e^* e^2})$  ve tüm enerji

terimleri Rydberg ( $R = \frac{m_e^* e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2}$ ) cinsinden yazılarak boyutsuz Hamiltonian;

$$\tilde{H} = -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}(\tilde{z}) + \tilde{F}\tilde{z}$$
[5.3]

biçiminde elde edilir.  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusu için Schrödinger denklemi;

$$\widetilde{H}\psi(\widetilde{z}) = \widetilde{E}\psi(\widetilde{z})$$
[5.4]

biçimindedir. Sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu  $\psi(\tilde{z})$ , genişliği  $L_b = 2L$  olan sonsuz potansiyel kuyusunun öz fonksiyonlarından oluşan çözümleri baz olarak kullanılarak oluşturulmuştur. Sözü edilen bazlar genel formda

$$\varphi_n(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos\left[\frac{n\pi}{L_b}\tilde{z} - \delta_n\right]$$
[5.5]

biçimindedir. Burada  $\delta_n$ ,  $L_b$  genişliğindeki sonsuz kuantum kuyusunun öz fonksiyonlarındaki tek ve çift özdeğerlere karşılık gelen faz farkı olmak üzere,

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n - tek \text{ ise} \\ \frac{\pi}{2} & n - cift \text{ ise} \end{cases}$$

$$[5.6]$$

değerlerini alır.

Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu,

$$\psi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\tilde{z})$$
[5.7]

biçimindedir.

Boyutsuz Hamiltonian 'ın beklenen değeri,

$$\tilde{E} = \left\langle \psi \left| -\frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + \tilde{V}(\tilde{z}) + \tilde{F}\tilde{z} \right| \psi \right\rangle$$
[5.8]

biçiminde elde edilir. Yukarıdaki anlatılan yaklaşımlar sonucunda elde edilen analitik denklemler bilgisayar programları yardımıyla çözülmüştür. İlk olarak  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun, azot ve indiyum konsantrasyonları değiştirilerek kuşatma potansiyeli ve alt bant yapısı incelenmiştir. Daha sonra sistemin kuşatma potansiyeli ve alt bant yapısı üzerine büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanı ve kuantum kuyu genişliğinin etkisi incelenmiştir.



Şekil 5.2  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin (a) y = 0.005 (b) y = 0.01 azot konsantrasyonuna göre değişimi.



Şekil 5.3  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin (a) x = 0.10 (b) x = 0.30 indiyum konsantrasyonuna göre değişimi.

Şekil 5.2 ve 5.3 (a) ve (b)' de Lw = 100 Å' luk  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin azot ve indiyum konsantrasyonlarına göre değişimi verilmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucunda, sabit bir indiyum konsantrasyonu için azot konsantrasyonunun artırılması ile  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ malzemesinin iletim bant süreksizliği ve elektron etkin kütlesi artarken dielektrik sabiti azalmaktadır. Benzer şekilde sabit bir azot konsantrasyonu için indiyum konsantrasyonunun artırılması ile  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$  malzemesinin iletim bant süreksizliği ve dielektrik sabiti artarken, elektron etkin kütlesinin azaldığı görülmüştür. Bu sonuçlar ve şekillerden de görüldüğü gibi yapıdaki azot ve indiyum konsantrasyonu artırıldığı zaman  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$  malzemesinin bant aralığının hızla azaldığı ve buna bağlı olarak  $\Delta Eg$ 'in hızlı bir şekilde arttığı görülmüştür. Bu sonuçla azot ve indiyum konsantrasyonun artırılması ile oluşan iletim bandındaki bant kaymasının büyümesi, kuşatma potansiyelinin derinleşmesine ve taşıyıcıların daha iyi kuşatılmalarına sebep olmuştur. Bu da gösteriyor ki azot ve indiyum konsantrasyonu sistem için birer ayar parametresidir. Bu ayar parametreleri ile oynanarak istenilen özelliklere sahip cihazların tasarlanması mümkündür.



Şekil 5.4  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin (a)  $L_W = 100 \text{ Å}$  (b)  $L_W = 200 \text{ Å}$ kuantum kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 5.4' de sabit azot ve indiyum konsantrasyonu için  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin kuantum kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Bu şekillerden de görüldüğü gibi kuantum kuyusunun genişliğinin artması ile yapıda kuşatılan alt-bant durum sayısı artmıştır. Alt-bant durum sayısı ve enerjilerinin kuyu genişliği ile ayarlanabilir olması amaca uygun yeni optoelektronik devre elemanlarının tasarlanmasın da önemli bir ayar parametresidir. Sonuç olarak, kuyu genişliği, azot ve indiyum konsantrasyonlarını değiştirerek amaca uygun yeni elektro-optik devre elemanları tasarlanabilir.



**Şekil 5.5** Büyütme doğrultusunda uygulanan (F=50kV/cm) elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin (a)  $L_W = 100 \text{ Å}$  (b)  $L_W = 200 \text{ Å}$ kuantum kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 5.5 (a) ve (b)' de büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun potansiyel profili, alt bant enerji düzeyleri ve bu enerji düzeylerine ait dalga fonksiyonlarının karesinin kuantum kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Bu şekillerden de görüldüğü gibi, büyütme doğrultusunda uygulanan elektik alanın etkisi ile kuantum kuyusunda kuşatılmış olan negatif yüklü elektronlar yapının soluna doğru kayarak kuşatma potansiyelinin bükülmesine neden olur. Kuantum kuyu genişliği azaltıldıkça elektrik alan etkisi ile taban durum enerji seviyelerindeki azalmanın daha küçük olduğu görülmektedir. Çünkü dar kuyularda geometrik kuşatma etkilidir ve taban durum enerji seviyeleri geniş kuyulara göre daha büyük değerler almaktadır. Geniş kuyulardaki enerji seviyelerinin kuyu tabanına yakınlığı dikkate alındığında dar kuyulardaki taban durum enerji seviyesinin kuyu tabanından çok yukarıda olduğu söylenebilir. Kuyu tabanına yakın seviyeler elektrik alandan çok fazla etkilendikleri halde dar kuyularda büyük değerli enerji seviyelerindeki kaymanın az olması da yüksek enerjili seviyelerin elektrik alandan daha az etkilenmesi şeklinde açıklanabilir. Ayrıca bu şekillerden elektrik alan etkisi ile elektron dalga fonksiyonlarının engel içine sızma olasılığının arttığı açıkça görülmektedir. Bu davranış aynı zamanda elektro-optik cihazlar için önemli bir faktör olan kuyu içindeki bir bölgede yük birikiminin gerçekleştiğini göstermektedir. Sonuç olarak düşük boyutlu yapılar üzerine elektrik alanın etkilerinin incelenmesi yeni geliştirilecek optoelektronik aygıtlar için önemli bir faktördür.

# 6. ELEKTRİK ALAN ALTINDAKİ *Ga*1-*xİnxNyAs*1-*y*/GaAs TEK KUANTUM KUYUSUNDAKİ SAFSIZLIK DÜZEYLERİ ARASINDAKİ KIZILÖTESİ GEÇİŞLER

Bu bölümde büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusundaki elektron ve safsızlık atomunun oluşturduğu yapının taban (1s) ve uyarılmış düzeylerin (2s, 2p±) bağlanma enerjileri ve enerji düzeyleri arası geçiş enerjileri etkin kütle yaklaşımı altında hesaplanacaktır. Taban ve uyarılmış düzeylere karşılık gelen bağlanma enerjisinin değişimi sistemin geometrisi, uygulanan elektrik alan ve safsızlık atomunun konumuna göre varyasyonel hesap tekniği yöntemi ile incelenecektir.

Büyütme doğrultusunda uygulanmış elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  kuantum kuyu sisteminin Hamiltonian'ı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde,

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m^*} + V(z) + V_c + |e|Fz$$
[6.1]

şeklinde yazılır. V(z) kuşatma potansiyeli,

$$V_{z} = \begin{cases} Q_{c}\Delta E_{g} & , & z < -\frac{L_{w}}{2} \\ 0 & , & -\frac{L_{w}}{2} < z < \frac{L_{w}}{2} \\ Q_{c}\Delta E_{g} & , & z > \frac{L_{w}}{2} \end{cases}$$

$$(6.2)$$

ile verilir. Burada  $Q_c = 0.80$  ve  $\Delta E_g = E_g(GaAs) - E_g(GaInNAs)$  olarak alınmıştır. Elektron ve safsızlık arasındaki Coulombik potansiyel,

$$V_{c} = -\frac{e^{2}}{\varepsilon\sqrt{(x-x_{i})^{2} + (y-y_{i})^{2} + (z-z_{i})^{2}}}$$
[6.3]

şeklinde yazılır. Burada  $(x_i, y_i, z_i)$  safsızlık atomunun konumunu, (x, y, z) ise elektronun konumunu göstermektedir.

Elektronun momentum  $\vec{p}$  operatörü ve Coulombik potansiyel terimi yerine yazılırsa sistemin Hamiltonian'ı,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2}} + V(z) + |e|Fz \quad [6.4]$$

şeklinde elde edilir.

$$x = \rho \cos \phi$$
  

$$y = \rho \sin \phi$$
  

$$z = z$$
  
[6.5]

dönüşümü yapılarak kutupsal koordinatlardaki Hamiltonian ifadesi

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} + V(z) + |e|Fz$$

$$(6.6)$$

olarak elde edilir. Burada  $\rho = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$ , (x-y) düzlemindeki elektrondonor safsızlık atomu arasındaki bağıl uzaklıktır. Hamiltoniyendeki tüm uzunluklar etkin Bohr yarıçapı ( $a_B = \frac{\varepsilon \hbar^2}{m_e^* e^2}$ ) ve tüm enerji terimleri Rydberg ( $R = \frac{m_e^* e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2}$ ) cinsinden yazılarak boyutsuz Hamiltonian;

$$\widetilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial\widetilde{\rho}^2} + \frac{1}{\widetilde{\rho}}\frac{\partial}{\partial\widetilde{\rho}} + \frac{1}{\widetilde{\rho}^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) - \frac{\partial^2}{\partial\widetilde{z}^2} - \frac{2}{\sqrt{\widetilde{\rho}^2 + (\widetilde{z} - \widetilde{z}_i)^2}} + \widetilde{V}(\widetilde{z}) + |e|\widetilde{F}\widetilde{z}$$

$$[6.7]$$

 $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusundaki elektron-safsızlık atomu sistemi için Schrödinger denklemi,

$$\widetilde{H}\Phi(\widetilde{z},\widetilde{\rho},\lambda) = \widetilde{E}\Phi(\widetilde{z},\widetilde{\rho},\lambda)$$
[6.8]

biçiminde elde edilir. Burada;

$$\psi(\tilde{z},\tilde{\rho},\lambda) = \varphi(\tilde{z})\phi(\tilde{z},\tilde{\rho},\lambda)$$
[6.9]

ve  $\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda)$  üç boyutta Coulomb etkileşimini içeren deneme dalga fonksiyonudur. 1s, 2s,  $2p_0$ ,  $2p_{\pm}$  düzeylerini temsil eden deneme dalga fonksiyonudur.

$$\Phi_{1s}(\tilde{z},\tilde{\rho},\lambda_1) = N_1 e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_1}}$$
[6.10]

$$\Phi_{2s}(\tilde{z},\tilde{\rho},\beta,\lambda_2) = N_2 \left(1 - \beta \sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}\right) e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_2}}$$
[6.11]

$$\Phi_{2p_0}(\tilde{z},\tilde{\rho},\lambda_3) = N_3 \tilde{z} e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_3}}$$
[6.12]

$$\Phi_{2p_{\pm}}(\tilde{z},\tilde{\rho},\Phi,\lambda_4) = N_4\tilde{\rho}e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z}-\tilde{z}_i)^2}}{\lambda_4}}e^{\pm i\Phi}$$
[6.13]

şeklindedir. Burada  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $N_3$  ve  $N_4$  normalizasyon katsayıları,  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_3$  ve  $\lambda_4$  varyasyon parametreleri ve  $\beta$ , 1s ve 2s deneme dalga fonksiyonlarının ortogonallik koşulundan belirlenebilen bir sabittir.

Büyütme doğrultusundaki dalga fonksiyonu, genişliği  $L_b = 2L$  olan sonsuz potansiyel kuyusunun özfonksiyonlarından oluşan çözümleri baz alınarak oluşturulmuştur.

$$\varphi_n(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos\left[\frac{n\pi}{L_b}\tilde{z} - \delta_n\right]$$
[6.14]

biçimindedir. Burada  $\delta_n$ ,  $L_b$  genişliğindeki sonsuz kuantum kuyusunun özfonksiyonlarındaki tek ve çift çözümlere karşılık gelen faz farkı olmak üzere;

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n - tek \text{ ise} \\ \frac{\pi}{2} & n - \zeta ift \text{ ise} \end{cases}$$

$$[6.15]$$

değerlerini alır. Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu;

$$\psi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\tilde{z})$$
[6.16]

biçiminde bir tam setten oluşur. Sistemin toplam enerjisi;

$$\tilde{E} = \min_{\lambda} \langle \psi | \tilde{H} | \psi \rangle$$
[6.17]

varyasyon teoreminden elde edilir. Bu eşitlik sayesinde  $\tilde{E}$ özdeğerini minimum yapan  $\lambda$  varyasyon parametreleri belirlenir.

Boyutsuz Hamiltoniyenin beklenen değeri;

$$\widetilde{H} = \left\langle \psi | \widetilde{H} | \psi \right\rangle = -\left\langle \psi | \frac{\partial^2}{\partial \widetilde{\rho}^2} | \psi \right\rangle - \left\langle \psi | \frac{1}{\widetilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \widetilde{\rho}} | \psi \right\rangle - \left\langle \psi | \frac{1}{\widetilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} | \psi \right\rangle - \left\langle \psi | \frac{\partial^2}{\partial \widetilde{z}^2} | \psi \right\rangle - \left\langle \psi | \frac{\partial^2}{\partial \widetilde{z}^2} | \psi \right\rangle + \left\langle \psi | \widetilde{V}(\widetilde{z}) | \psi \right\rangle + \left\langle \psi | | e | \widetilde{F} \widetilde{z} | \psi \right\rangle$$

$$(6.18)$$

olmak üzere, taban durumda bulunan donor atomunun bağlanma enerjisi ise boyutsuz olarak;

$$\tilde{E} = \tilde{E}_z - \langle \tilde{H} \rangle \tag{6.19}$$

eşitliği ile elde edilir. Burada  $\tilde{E}_z$ elektronun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen taban durum enerjisidir.

Tez çalışmamızda, incelediğimiz  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  kuantum kuyu sisteminin fiziksel parametreleri değiştirilerek 1s, 2s ve  $2p_{\pm}$  düzeylerindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjisi hesaplanmıştır.





**Şekil 6.1** İki farklı azot konsantrasyonu için  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 6.1' de görüldüğü gibi azot konsantrasyonunun artması safsızlık atomunun bağlanma enerjisini artırmaktadır. Azot konsantrasyonunun artması, sistemin kuşatma potansiyelini büyüteceği için elektron ile donor safsızlık atomu arasındaki Coulomb etkileşimini, dolayısıyla safsızlık atomunun bağlanma enerjisini artırır ve elektronsafsızlık atomu arasındaki hidrojen benzeri yapı daha kararlı hale gelir. Aynı zamanda azot konsantrasyonunun artması etkin kütleyi de artırarak elektronun ağırlaşmasına ve kuyu içinde daha iyi lokalize olarak bağlanma enerjisinin artmasına neden olur.





**Şekil 6.2** İki farklı indiyum konsantrasyonu için  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 6.2' de, kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomu için bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimleri sabit azot konsantrasyonu ve farklı indiyum konsantrasyonları için verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi tüm bağlanma enerjisindeki değişim Şekil 6.1 ile benzerdir. Fakat burada, indiyum konsantrasyonundaki artış, bağlanma enerjisini azaltmaktadır. Bunun nedeni indiyum konsantrasyonu arttıkça elektron etkin kütlenin azalmasıdır (Şekil 4.3). İndiyum konsantrasyonunun artması kuşatma potansiyelini artırmasına rağmen elektron etkin kütlesi azaldığı için elektron daha enerjik olacağından engel bölgesine sızma olasılığı artar ve buna bağlı olarak bağlanma enerjisi de azalır.





Şekil 6.3 İki farklı elektrik alan değeri için Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>/GaAs tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 6.3' de iki farklı elektrik alan değeri için  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjilerinin kuyu genişliğine göre değişimi gösterilmiştir. Bu şekillerden de görüldüğü gibi küçük kuantum kuyu değerlerinde elektrik alanın bağlanma enerjisi üzerinde önemli bir etkisi gözükmezken, kuantum kuyu genişliği arttıkça elektrik alanla bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir. Safsızlık atomunun bağlanma enerjisindeki bu azalmanın sebebi elektrik alanın kuşatma potansiyeli üzerindeki etkisidir. Elektrik alanının artması kuşatma potansiyelindeki bant bükülmesinin daha fazla artmasına neden olmaktadır. Bu bant bükülmesi nedeni ile elektronlar yapının sol tarafında oluşan derin üçgen kuantum kuyusunda kuşatılırlar. Böylece elektron ve safsızlık atomunun birbirlerini aynı düzlemde görme olasılığı azaldığından bağlanma enerjisinde bir azalmaya neden olur.





Şekil 6.4  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişimi.

Şekil 6.4 ' de  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun taban (1s) ve uyarılmış düzeylerde (2s, 2p<sub>±</sub>) bağlanma enerjilerinin elektrik alanı ile değişimi verilmiştir. Bu şekillerden de görüldüğü gibi elektrik alan değeri büyüdükçe sistemin bağlanma enerjisi azalmaktadır. Bağlanma enerjisindeki bu azalmanın nedeni; elektrik alanın etkisi ile kuantum kuyusunda kuşatılmış olan elektronlar kuyunun soluna doğru kayarak kuşatma potansiyelinin bükülmesine neden olur. Böylece safsızlık atomu ile elektronun birbirlerini görme olasılığı azalır ve bağlanma enerjileri küçülür.







Şekil 6.5 Sabit indiyum ve azot konsantrasyonları için elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.

Şekil 6.5' de Sabit indiyum ve azot konsantrasyonları için genişliği  $L_w=150$ Å olan  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun F=0 ve F=50kV/cm iki farklı elektrik alan altında bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre nasıl değiştiği görülmektedir. Elektrik alanın yokluğunda elektronun kuyu merkezinde bulunma olasılığı, diğer yerlerde bulunma olasılığından daha fazladır. Bu nedenle maksimum bağlanma enerjisi, kuyu merkezine yerleşen safsızlık atomu için elde edilir. Elektrik alan uygulandığında ise kuantum kuyusunda kuşatılmış olan elektronlar kuyu kenarlarına doğru yönelirler. Burada da elektrik alanın etkisiyle elektronlar kuyunun soluna doğru kayacağından elektronların kuyunun merkezinde değil sol tarafında bulunma olasılıkları artar ve bağlanma enerjisinin maksimum olduğu konum değişmiş olur. Yaklaşık olarak bağlanma enerjisinin maksimum olduğu konum  $z_i=-25$ 'e yakın değerlerde oluşur.



Şekil 6.6 İki farklı elektrik alan değeri için  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun merkezinde yer alan safsızlık atomu için kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak geçiş enerjilerinin değişimi.

Şekil 6.6' da, F=0 ve F=50kV/cm iki farklı elektrik alan değeri için 1s-2p± geçiş enerjileri, sistemin merkezinde bulunan bir safsızlık atomu için sabit indiyum ve sabit azot konsantrasyonlarında  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  kuantum kuyusunun genişliğinin bir fonksiyonu olarak gösterilmiştir. Buradan da görüldüğü üzere kuyu genişliği arttıkça ve elektrik alanın uygulanmasıyla geçiş enerjilerinin azaldığı görülmektedir. Bunun sebebi olarak elektrik alanın artmasıyla taban ve uyarılmış durumlarda bağlanma enerjilerinin azalmasından kaynaklanmaktadır.



Şekil 6.7 İki farklı elektrik alan değeri için  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun merkezinde yer alan safsızlık atomu için kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak geçiş frekanslarının değişimi.

Şekil 6.7' de sabit azot ve indiyum konsantrasyonlarında farklı elektrik alan değerlerinde 1s-2p± geçişlerinin frekans aralığı görülmektedir. Buradan görüldüğü üzere frekans aralığı THz mertebesindedir ve şekil olarak geçiş enerjileri ile birebir benzerlik göstermektedir. Sonuç olarak,  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  kuantum kuyu sisteminin farklı elektrik alan değerleri uygulanarak ve kuyu genişliği değiştirilerek THz bilimine katkıda bulunacak cihazlar üretilebilir.

#### 7. SONUÇLAR

Bu tez çalışmasında,  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyu sisteminin elektriksel özellikleri üzerine azot ve indiyum konsantrasyonu, kuantum kuyu genişliği, safsızlık atomunun konumu ve büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanın etkisi, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel hesap tekniği ile incelenmiştir.

Çalışmamızın ilk aşamasında,  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun elektron etkin kütlesi, dielektrik sabiti ve kuşatma potansiyeli gibi fiziksel büyüklükleri üzerine azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi BAC modeli kullanılarak incelenmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucunda azot konsantrasyonu arttıkça, elektron etkin kütlesi ve kuşatma potansiyel derinliğinin arttığı, dielektrik sabitinin ise azaldığı; indiyum konsantrasyonu arttıkça da kuşatma potansiyel derinliği ve dielektrik sabitinin arttığı, elektron etkin kütlesinin ise azaldığı gözlemlenmiştir.

Çalışmamızın ikinci aşamasında  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyeli ve altbant yapısı üzerine azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi incelenmiştir. Daha sonra sistemin kuşatma potansiyeli ve alt bant yapısı üzerine büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanı ve kuantum kuyu genişliğinin etkisi incelenmiştir. Yapılana hesaplamalar sonucunda, azot ve indiyum konsantrasyonun artırılması ile oluşan iletim bandındaki bant kaymasının büyüdüğünü, kuşatma potansiyelinin derinleştiğini ve taşıyıcıların daha iyi kuşatıldıkları görülmüştür. Bu da gösteriyor ki azot ve indiyum konsantrasyonu sistem için birer ayar parametresidir. Büyütme doğrultusunda uygulanan elektik alanın etkisi ile kuantum kuyusunda kuşatılmış olan negatif yüklü elektronlar yapının soluna doğru kayarak kuşatma potansiyelinin bükülmesine ve elektron dalga fonksiyonlarının engel içine sızma olasılığının artmasına neden olduğu görülmüştür. Bu davranış aynı zamanda elektrooptik cihazlar için önemli bir faktör olan kuyu içindeki bir bölgede yük birikiminin gerçekleştiğini göstermektedir. Ayrıca, kuantum kuyu genişliği azaltıldıkça elektrik alan etkisi ile taban durum enerji seviyelerindeki azalmanın daha küçük olduğu elde edilmiştir. Sonuç olarak düşük boyutlu yapılar üzerine elektrik alanın etkilerinin incelenmesi yeni geliştirilecek optoelektronik aygıtlar için önemli bir faktör olduğu açıkça görülmüştür.

Daha sonra büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusundaki elektron ve safsızlık atomunun

oluşturduğu yapının taban (1s) ve uyarılmış düzeylerin (2s,  $2p_{\pm}$ ) bağlanma enerjileri ve enerji düzeyleri arası geçiş enerjileri üzerine azot ve indiyum konsantrasyonu, kuantum kuyu genişliği ve büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alanın etkisi, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde incelenmiştir. Yapılana hesaplamalar sonucunda; küçük kuantum kuyu değerlerinde elektrik alanın bağlanma enerjisi üzerinde önemli bir etkisi gözlenmezken, kuantum kuyu genişliği arttıkça elektrik alanla bağlanma enerjisinin azaldığı görülmüştür.  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun merkezindeki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişiminde elektrik alanın artmasıyla bağlanma enerjilerinin azalmasını ve bu azalmanın sebebi olarak elektrik alanın kuşatma potansiyeline olan etkisinden kaynaklı olduğu görülmüştür. Çalışmamızın devamında sabit indiyum ve azot konsantrasyonları için elektrik alan altındaki  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre değişimi incelenmiştir. Elektrik alanın yokluğunda, elektronun kuyu merkezinde bulunma olasılığı, diğer yerlerde bulunma olasılığından daha fazla olduğunu, elektrik alan uygulandığında ise elektronların bulunma olasılıklarının kuyunun sol kenarına doğru kaydığını ve bağlanma enerjilerinin en yüksek olduğu merkez konumun değiştiği görülmüştür.

Çalışmamızın iki farklı elektrik son aşamasında alan değeri icin  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyusunun merkezinde yer alan safsızlık atomu için kuyu genişliğinin bir fonksiyonu olarak geçiş enerjilerinin (1s-2p±) değişimi incelenmiştir. Yapılan hesaplamalarda kuantum kuyu genişliği arttıkça geçiş enerjilerinin azaldığını gözlemlenmiştir. Bu geçiş enerjilerinden yola çıkarak  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  kuantum kuyu sisteminin çalışma frekansı belirlenerek bu frekans bölgesinin THz mertebesinde olduğu görülmüştür. Böylece bu tez çalışmamızın,  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$  tek kuantum kuyu sistemini temel alarak elektronik ve optoelektronik cihazların tasarlanmasında katkı sağlayacağı beklenmektedir.

#### 8. KAYNAKÇA

- [1] Erol, A. (2008). "Dilute III-V nitride semiconductor and material systems", Springer, Berlin, 978-3-540-74528-0.
- [2] Henini, M. (2005). "Dilute nitride semiconductor", Elsevier, Amsterdam, Netherlands, 0-08-044502-0.
- [3] R. Dingle, W. Wigman, and C. H. Henry, (1974). Phys. Rev. Lett. 33, 827.
- [4] G. D. Sandersand Y. C. Chang, (1985). Phys. Rev. B 32, 4282.
- [5] R.Greene, K.Bajaj, (1984). Phys. Rev. B 29, 1803
- [6] S.Chaudhury, K.Bajaj, (1984). Phys. Rev. B 29, 1803
- [7] M. Weyers, M. Sato, and H. Ando, Jpn. J. Appl. (1992). Phys. 31, L853.
- [8] S. Nakamura, Jpn. J. (1991). Appl. Phys. 30, L1705.
- [9] M. Kondow, K. Uomi, A. Niwa, T. Kitatani, S. Watahiki and Y. Yazawa, Jpn. J. (1996). Appl. Phys. 35, 1273.
- [10] M. Kondow, T. Kitatani, S. Nakatsuka, M. Larson, K. Nakahara, Y. Yazawaand M. Okai, (1997).IEEE J. Select.Topics Quantum Electron.3,719.
- [11] Plimeni, A. (2000). "Effect of temperature on the optical properties on. (InGa)(AsN)/GaAs Single quantum wells", Appl. Phys. Lett. 77, 2870.
- [12] M.A. Haase, J. Qui, J.M. De Puydtand H. Cheng, (1991). Blue-green laserdiodes, Appl. Phys. Lett.59,1272.
- [13] Sun, Y. Balkan, N., Aslan, M., Lisesiydin, S. B., Carrere, H., Arikan, M. C., ve Marie, (2009). X., "Electronic transport in n- and p-type modulation doped Ga<sub>(x)</sub>In<sub>(1-x)</sub>N<sub>(y)</sub>As<sub>(1-y)</sub>/GaAs quantum wells", J. Phys., Condens. Matter, 21, 174210.
- [14] B.Yoo, B.D. Mc Combe, W.Schaff, (1976). Phys. Rev. B 44, 131152.
- [15] John, W.(1991)"Introduction tosolid state physics", 5th ed., New York.
- [16] Jasprit Singh, (1993). 'Semiconductor Optoelectronics Physics and Technology' *The University of Michigan*, USA
- [17] Jasprit Singh, (2003). 'Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures' *The University of Michigan*, USA
- [18] H.J.Quesser ,R.Dingle (1975). in Fest köper probleme XV(Advances in Solid State Physics), edited by H.J.Quesser (Permagon), P 21.
- [19] Y.Ergün, I.Sökmen, H.Sarı, S.Elagöz ve M.Ç.Arıkan, (1997). Semicond. Sci. Techonol. 12,802
- [20] Ungan, F. Yesilgul, U. Sakiroglu, S. Kasapoglu, E. Sari, H. Sökmen, (2013).I. "Nonlinear optical absorption and refractive index in GaInNAs/GaAs doble quantum wells under intense laser field and applied electric field", J. Lum., 143, 75-80.
- [21] P. Harrison,(1999). 'Quantum Wells,Wiresand Dots' *The University of Leeds*, UK
- [22] M. Kondow, K. Uomi, (1995). In Proc.Solid State Device and Mater. Osaka, Japan, pp.1016-1018.
- [23] M. Kondow, T. Kitatani, S. Nakatsuka, M. C. Larson, K. Nakahara, Y. Yazawa. M. Okai, (1997). IEEE. J. Selected Topics in Quantum Electronics 3, 719
- [24] J. Kasai, T. Kitatani, K.Adachi, K.Nakahara, M.Aoki, (2007). J. Crystal Growth 301, 545..

- [25] I. Akasaki,H. Amano,Y. Koide, K. Hiramatsuand N.Sawaki,(1989).Effects of a inbuffer layer on crystallographic Structures and on electrical andoptical properties of GaN and Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N (0-less-than-x-less-than-orequal-to- 0,4) films grown on sapphire substrate by MOVPE, J. Cryst. Growth, 98, 209.
- [26] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita H.Kiyakuand Y. Sugimoto, (1996). InGaN-basedmulti-quantum-wellstructure laser diodes Jpn.J. Appl. Phys.35, L74.
- [27] Richard Potter, (2002)."Optical Properties in Dilute Nitrides", Ph Dthesis, University of Essex, November
- [28] K. S. Kim, (2006). et al. J. Crystal Growth 287, 620.
- [29] J. Geske , K. G. Gan, Yae L. Piprekand J. E. Bowers, (2004). IEEE J. Quantum Electronics 40.1155
- [30] J. Geske, D. Leonard, M.H. Mac Dougal, B.Barnesand J.E. Bowers, (2004). IEEE Photon. Technol Lett. 16, 1227
- [31] Shan, W., Walukiewicz, W., Ager, J. W., Haller, E. E., Geisz, J. F., Friedman, D. J., Olson, J. M., ve Kurtz, (1999).S. R. "Effect of nitrogen on the band structure of GaInNAs alloys", J. Appl. Phys., 86, 2349.
- [32] O'Reilly, E. P., Lindsay, A. ve Fahy, (2004). S., "Theory of the electronic structure of dilute nitride alloys: beyond the band-anti-crossing model", J. Phys., Condens. Matter, 16, 3276.
- [33] Wu, J., Walukiewicz, W., and Haller, (2002). E.," Band structure of highly mismatched semiconductor alloys: Coherent potential approximation", Phys. Rev. B, 65, 1.
- [34] Tiras, E., Balkan, N., Ardali, S., Gunes, M., Fontaine, C., Arnoult, A., (2011) "Quantum lifetimes and momentum relaxation of electrons and holes in GÅ.7In0.3N0.015As0.985/GaAs quantum wells", Philos. Mag., 91, 628.

# ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel Bilgiler

Adı ve Soyadı	:	Yunus emre YILDIZ
T.C No	:	50296696418
Doğum Yeri ve Tarihi	:	İSTANBUL-1988
Yabancı Dil	:	İngilizce
İletişim Adresi	:	Güvercintepe Mah.
Orhan Gazi Cad.No:40	) I	BAŞAKŞEHİR/İSTANBUL
E-Posta Adresi	:	emreyildiz_60@hotmail.com



Telefon : 0506 644 8761

### Eğitim ve Akademik Durumu

Lise	Halkalı Mehmet Akif Ersoy 2006
Lisans	Cumhuriyet Üniversitesi 2012
Yüksek Lisans	Cumhuriyet Üniversitesi 2015

### <u>Sertifikalar</u>

C sınıfı İş Güvenliği Uzmanlığı Belgesi

Pedagojik Formasyon

## **Proje**

Optik Pompalamalı Seyreltik Azotlu Yarıiletken Lazer