

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

**HİDROSTATİK BASINÇ ALTINDA
KUANTUM KUYUSUNDA SAFSIZLIK DÜZEYLERİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**Elif ŞAHİN
(201292031075)**

**Fizik Anabilim Dalı
Tez Danışmanı: Prof. Dr. Hüseyin SARI**

**SİVAS
2015**

ELİF ŞAHİN 'in hazırladığı ve “**Hidrostatik Basınç Altında Kuantum Kuyusunda Safsızlık Düzeyleri**” adlı bu çalışma aşağıdaki jüri tarafından **FİZİK ANA BİLİM DALI** 'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı : **Prof. Dr. Hüseyin SARI**

Cumhuriyet Üniversitesi

Jüri Üyeleri : **Prof. Dr. İsmail SÖKMEN**

Dokuz Eylül Üniversitesi

Doç. Dr. Fatih UNGAN

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.

Elif ŞAHİN, 2015

Çalışma sırasında bana destek olan biricik aileme ...

ETİK

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

- ✓ 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.

31.08.2015

Elif ŞAHİN

KATKI BELİRTME VE TEŞEKKÜR

Bilgi ve deneyimlerinden sürekli yararlandığım, tezin her aşamasında yardımlarını esirgemeyen danışman hocam Prof. Dr. Hüseyin SARI'ya çok teşekkür ederim.

Bu tez çalışması süresince bilgi ve deneyimleri ile yol gösteren Doç. Dr. Fatih UNGAN ve Doç. Dr. Ünal YEŞİLGÜL'e teşekkürlerimi sunarım.

ÖZET

HİDROSTATİK BASINÇ ALTINDA BİR KUANTUM KUYUSUNDA SAFSIZLIK DÜZEYLERİ

Elif ŞAHİN

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Hüseyin SARI

2015, 45 + xiv sayfa

Bu çalışmada, düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin temel özellikleri hakkında genel bilgiler verilerek kuantum kuyusunda bağlı enerji düzeyleri basınç altında hesaplanmıştır. $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ kuantum kuyusunda 1s, 2s, $2p_0$ ve $2p_{\pm}$ donör düzeyleri için bağlanma enerjisi kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak etkin kütle çerçevesinde hesaplanmıştır.

Anahtar kelimeler: Hidrostatik Basınç, Safsızlık Atomu, Kızılötesi Geçişler

ABSTRACT

IMPURITY LEVELS IN THE QUANTUM WELL UNDER THE HYDROSTATIC PRESSURE

Elif ŞAHİN

Master of Science Thesis

Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Hüseyin SARI

2015, 45 + xiv pages

In this study, the main properties of the low dimensional semiconductors systems are given and then the bound states in the quantum well are calculated under the hydrostatic pressure. Furthermore, the binding energy of the hydrogenic donor states, 1s, 2s, 2p₀ and 2p_±, of the $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ quantum well under the applied hydrostatic pressure is calculated as a function of the well width, in the framework of the effective mass approximation.

Key words: Hydrostatic Pressure, Impurity Atoms, Binding Energy

İÇİNDEKİLER

Sayfa

TEŞEKKÜR	vii
ÖZET	viii
ABSTRACT	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	xi
ÇİZELGELER DİZİNİ	xii
SİMGELER DİZİNİ	xiii
1. GİRİŞ	1
2. YARIİLETKENLER	3
2.1 Saf Yarıiletkenler	3
2.2 Katkılı Yarıiletkenler	6
2.2.1 n-tipi Yarıiletkenler	7
2.2.2 p-tipi Yarıiletkenler	9
3. HETEROYAPILAR	11
3.1 Düşük Boyutlu Yapılar	15
3.2 III-V Yarıiletkenleri	20
4. Ga_{1-x}Al_xAs/ GaAs KUANTUM KUYUSUNDA BAĞLI ENERJİ DÜZEYLERİ	21
4.1. Ga _{1-x} Al _x As/ GaAs Kuantum Kuyusuna Basınç Etkisi	24
5. Ga_{1-x}Al_xAs/ GaAs TEK KUANTUM KUYUSUNDAKİ DONOR SAFSIZLIKLARIN BAĞLANMA ENERJİLERİ	32
6. SONUÇ	43
KAYNAKÇA	44
ÖZGEÇMİŞ	

ŞEKİLLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 2.1	Yarıiletkenlerin elektronik bant diyagramı3
Şekil 2.2	Yarıiletkende yüklerin hareketi4
Şekil 2.3	Silisyum kristaline arsenik atomunun katkılanması8
Şekil 2.4	Bir yarıiletkende donör enerji seviyesi8
Şekil 2.5	Silisyum kristaline galyum atomunun katkılanması10
Şekil 2.6	Bir yarıiletkende akseptör enerji seviyesi10
Şekil 3.1	İki yarıiletkenin bant yapılarının eklenmemiş hali12
Şekil 3.2	İki yarıiletkenin bant yapılarının eklenmiş hali12
Şekil 3.3	Bant süreksizliğine göre heteroyapılar16
Şekil 3.4	Bir kuantum kuyusunun bant yapısı17
Şekil 3.5.a	Kauntum teli19
Şekil 3.5.b	Kuantum kutusu19
Şekil 4.1	$Ga_{1-x}Al_xAs$ / GaAs tek kuantum kuyusunun gösterimi22
Şekil 4.1.1	m^*/m_0 oranının basınca göre değişimi27
Şekil 4.1.2	V_0 Potansiyel yüksekliğinin basınca göre değişimi28
Şekil 4.1.3.a	Kuyu genişliğinin basınca göre değişimi29
Şekil 4.1.3.b	Ortamın dielektrik sabitinin basınca göre değişimi29
Şekil 4.1.4	Bağlı enerji düzeylerinin basınca göre değişimi31
Şekil 5.1	1s düzeyinde bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı basınç değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi37
Şekil 5.2	2s düzeyinde bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı basınç değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi39
Şekil 5.3	$2p_0$ düzeyinde bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı basınç değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi40
Şekil 5.4	$2p_{\pm}$ düzeyinde bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı basınç değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi41

ÇİZELGELER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Çizelge 2.1 Teknolojide yararlanılan yarıiletkenler ve kullanılma yeri.....	5
Çizelge 3.1 Bazı heteroyapılar için değerlik bandı süreksizliğinin deneysel ve kuramsal sonuçları.....	13
Çizelge 4.1 Farklı basınç değerleri altında sistemin bazı fiziksel büyüklükleri	26

SİMGELER DİZİNİ

a_B	Bohr yarıçapı, m
e	Elektronun yükü, C
E	Enerji, J
ϵ	dielektrik sabiti, F m ⁻¹
E_g	Yasak enerji bant aralığı, J
E_F	Fermi enerji seviyesi, J
E_{F_1}	Birinci malzemenin Fermi enerji seviyesi, J
E_{F_2}	İkinci malzemenin Fermi enerji seviyesi, J
E_d	Donor enerji seviyesi, J
E_a	Akseptör enerji seviyesi, J
E_c	İletim bandı sınırındaki enerji değeri, J
E_{c_1}	Birinci malzemenin iletim bandı sınırındaki enerji değeri, J
E_{c_2}	İkinci malzemenin iletim bandı sınırındaki enerji değeri, J
E_{V_1}	Birinci malzemenin değerlik bandı sınırındaki enerji değeri, J
E_{V_2}	İkinci malzemenin değerlik bandı sınırındaki enerji değeri, J
E_{g_1}	Birinci malzemenin yasak enerji aralığı, J
E_{g_2}	İkinci malzemenin yasak enerji aralığı, J
$E_{g_1}^f$	Birinci malzemenin deneysel yasak enerji aralığı, J
$E_{g_2}^f$	İkinci malzemenin deneysel yasak enerji aralığı, J
\vec{k}	Dalga vektörü, m ⁻¹
ΔE_c	İletim bandı süreksizliği, J
ΔE_v	Değerlik bandı süreksizliği, J
m^*	Külçe etkin kütlesi, kg
\hbar	Planck sabiti, J s
V	Kuşatma potansiyeli, J
H	Hamiltonian operatörü, J
V_0	Kuşatma potansiyelinin büyüklüğü, J
V_C	Coulomb potansiyeli, J
Q_C	Bant çarpanı
\vec{p}	Momentum operatörü, kg m s ⁻¹
$\varphi(\vec{z})$	Elektronun z yönündeki hareketi tanımlayan dalga fonksiyonu
E_g^f	Γ –noktasındaki yapı için enerji aralığı, J
E_z	Elektronun z doğrultusundaki hareketini veren taban durum enerjisi, J
E_B	Bağlanma enerjisi, J
N	Normalizasyon sabiti
H	Hamiltonian operatörü, J
L_b	Sonsuz potansiyel kuyunun genişliği, m
L_w	Kuyu genişliği, m

R	Rydberg sabiti, J
λ	Varyasyon parametresi, m
ρ	x-y düzleminde elektron ile donör arasındaki bağıl uzaklık, m
δ_n	Sonsuz kuantum kuyusunun özfonksiyonlarındaki çift ve tek çözümlere karşılık gelen faz farkı
L	Uzunluk, m
r	Elektron ile donör arasındaki bağıl uzaklık, m
n	Baş kuantum sayısı

1. GİRİŞ

1940'lar itibari ile yarıiletken malzemeler yoğun bir şekilde araştırılmaktadır. Bu arařtırmalar ışığında elektronik ve optoelektronik devre elemanları günlük yařantımıza girmiřtir. Yarıiletken malzemelerin devre elemanı olarak kullanılması, elektronik teknolojisinin hızlı bir şekilde gelişmesini saęlamıř ve katıhal fizięi üzerine yapılan çalıřmaların artmasına sebep olmuřtur. Yarıiletken malzemelerin sıkça kullanılmasının temel nedenleri, çeřitli özelliklerdeki yarıiletken devre elemanlarının çok küçük hacimler içerisine yerleřtirilebilir olması, istenilen özelliklerde bir devre elemanı yapılmasına olanak saęlaması, elektriksel ve optik özelliklerinin dıř etkilerle deęiřtirilebilir olmasıdır. Yapılan yeni elektronik devre elemanlarının modellemesi, sistemlerin ayarlanabilir fiziksel özellikleri temel alınarak yapılmaktadır. Önceki çalıřmalarda önce yük taşıyıcılarının bir yöndeki hareketleri engellenerek iki-boyutlu kuantum kuyusu yapıları, kuřatılma boyutları artırılarak tek boyutlu kuantum telleri ve sıfır boyutlu kuantum kutuları yapılmıřtır. Bu sistemlerde boyut azaldıkça, yani kuřatma arttıkça fiziksel özelliklerini belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelmektedir.

Düşük boyutlu yarıiletken yapılar, taşıyıcı hareketlerinin belli doęrultularda sınırlandırılmasıyla meydana gelen yapılardır. Yukarıda adı geçen düşük boyutlu sistemler üzerinde ilk çalıřma Esaki ve Tsu tarafından yapıldı [1]. Daha sonra, Dingle ve arkadaşları [2], Ando, Fowler ve Stern (AFS) çalıřmalar yapmıřtır [3]. Düşük boyutlu sistemlerin külçe yapılara göre üstünlüęü, sistemlerdeki boyut farklılıęından kaynaklanır. Düşük boyutlu sistemlerde son derece dar ve iyi tanımlanmıř enerji düzeylerini elde etmek mümkündür. Buna ek olarak bu sistemlerde elektron ve boşluk (hole) yoğunluęu istenildięi gibi deęiřtirilebilir.

III-V bileşikleri yarıiletkenlerin önemli bir sınıfını oluştururlar. Bu bileşikler periyodik tablonun üçüncü ve beşinci grup elementlerinin bileşik oluşturacak şekilde bir araya gelmesiyle elde edilirler. Bu gruba InSb, GaAs, GaP ve InAs örnek verilebilir. III-V bileşikleri kübik (sphalerite) yapıda kristallenirler, bağlanma tipi de ağırlıklı olarak kovalenttir. Safsızlık atomları olarak periyodik sistemin üçüncü grubuna (B, Al) ait elementlerinin atomları ilave edilirse, bunlar örgünün düzenli atomlarının bazılarının yerlerine geçeceklerdir. Bu tezde de safsızlık atomu olarak Al kullanılmıştır. Yani GaAs yapısına Al eklenerek $Ga_{1-x}Al_xAs$ halini almıştır. $Ga_{1-x}Al_xAs$ / GaAs küresel kuantum noktasının merkezindeki yabancı atomun bağlanma enerjisine hidrostatik basınç etkisi, elektrik alan ve manyetik alan etkisi etkin kütle yaklaşımıyla varyasyonel yöntemle Peter, Jayam ve Navaneethakrishnan tarafından hesaplanmıştır [4,5].

Bu tez çalışmasında $Ga_{1-x}Al_xAs$ / GaAs tek kuantum kuyu yapısının hidrostatik basınç etkisi etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntem kullanılarak incelenmiştir.

2. ve 3. bölümde, yarıiletkenler ve heteroyapılar hakkında genel bilgiler verilmiştir.

4. bölümde, $Ga_{1-x}Al_xAs$ / GaAs tek kuantum kuyusunda bağlı enerji düzeyleri, dielektrik sabiti, etkin kütle, kuyu genişliği ve kuşatma potansiyelinin derinliği gibi fiziksel özellikler basınç altında incelenmiştir.

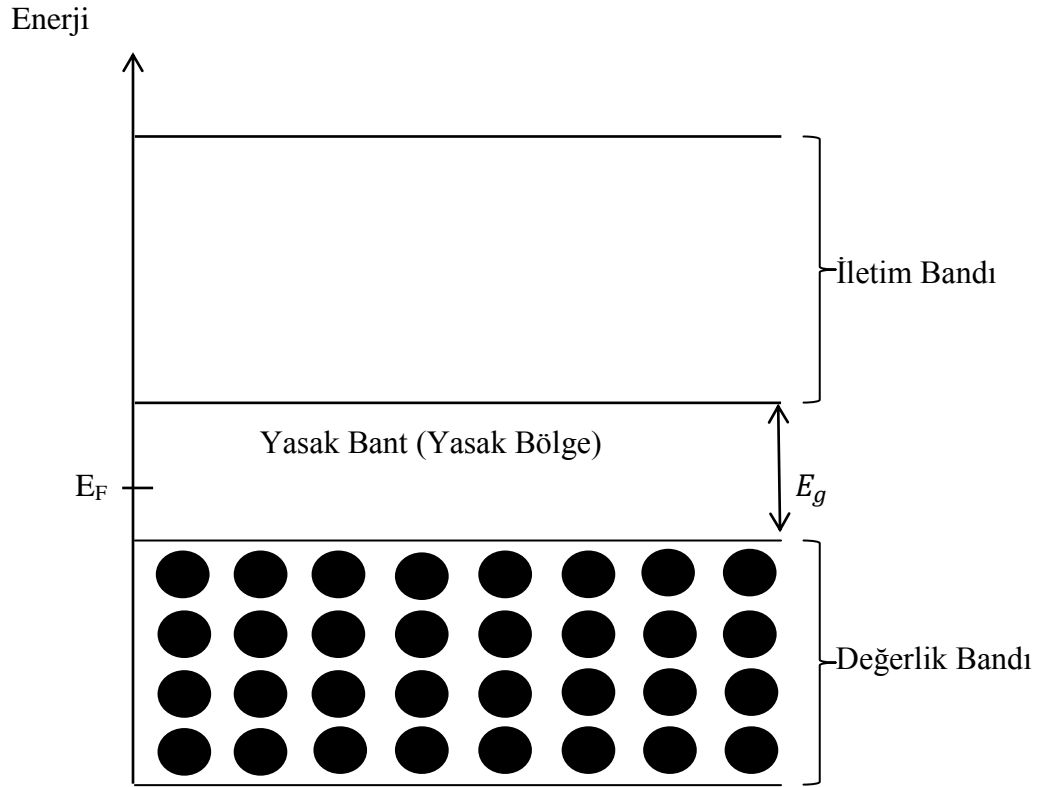
5. bölümde, etkin kütle yaklaşımı ve varyasyonel yöntem kullanılarak

$Ga_{1-x}Al_xAs$ /GaAs tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin analitik denklemleri elde edilerek, safsızlık atomunun bağlanma enerjisi üzerine alüminyum konsantrasyonunun etkisi, kuantum kuyu genişliği ve safsızlık atomu konumunun bir fonksiyonu olarak incelenmiştir.

2. YARIİLETKENLER

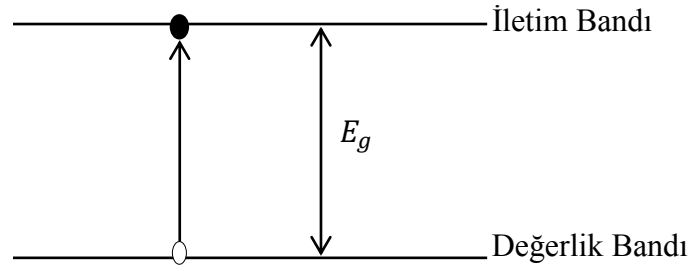
2.1 Saf Yarıiletkenler

Her katının kendine özgü durumları vardır. Bunlardan en başta geleni enerji bant yapısıdır. Enerji bant yapılarının çeşitliliği elektriğin iletiminde belirleyicidir. $T=0$ K (mutlak sıfır) sıcaklığında bir yarıiletkenin bant yapısı Şekil 2.1 'de gösterilmiştir.



Şekil 2.1 Yarıiletkenlerin elektronik bant diyagramı ($T=0$ K).

Mutlak sıfırda bir yarıiletkenin tüm elektronları değerlik (valans) bandındadır. İletim bandında elektron bulunmadığı için bir yalıtkan gibi davranır. Bir yarıiletkenin ayırt edici en önemli özelliği, iletkenliklerinin metallerle yalıtkanlar arasında oluşu ve sıcaklıkla doğru orantılı değişmesidir. Yarıiletkenin elektriksel bir ilettime geçmesi için elektronların herhangi bir etki ile (ışık, ısı, basınç vb.) iletim bandına geçmesi gerekir. Şekil 2.2 'de sıcaklık etkisi ile hareket eden (iletim bandına geçen) elektron gösterilmiştir. Hareket eden bu elektronlar geride pozitif yüklü boşluklar bırakırlar. Böylece yarıiletkenlerde elektronlar ve boşluklar olmak üzere iki tip taşıyıcı elde edilir. Yarıiletkenlerin yasak enerji bant aralığı 1-4 eV mertebesindedir.



Şekil 2.2 Yarıiletkente yüklerin hareketi.

İdeal bir yarıiletken kristalinde yabancı atomların oluşturduğu safsızlıklar ve örgü kusurları yoktur. Bu tip yarıiletkenlere katkısız veya saf yarıiletkenler denir. Katkısız yarıiletkenlerde elektron ve boşluk yoğunluğu birbirine eşittir.

Çizelge 2.1 Teknolojide yararlanılan yarıiletkenler ve kullanılma yerleri

ADI	KULLANILMA YERİ
Germanyum (Ge)	Diyot, transistör
Silikon (Si)	Diyot, transistör
Selenyum (Se)	Diyot
Galyum Arsenik (GaAs)	Tünel diyot, lazer, fotodiyot, led
İndiyum Fosfor (InP)	Diyot, transistör
Kurşun Sülfür (PbS)	Güneş pili (Fotosel)

2.2 Katkılı Yarıiletkenler

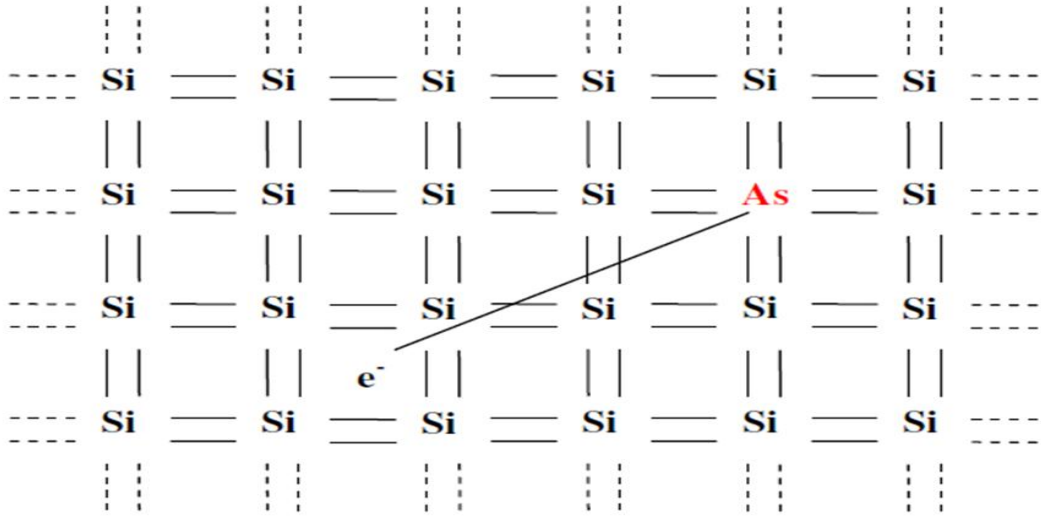
Saf bir yarıiletken içerisine kasıtlı olarak safsızlık atomu (impurity) katılmasına katkılama, oluşan yarıiletkene de katkılı yarıiletken denir. Elektron ve boşluk yoğunluğunu artırmak için kullanılan en yaygın yöntemlerden biri katkılama dır. Katkı atomuna baęlı olarak n-tipi ya da p-tipi yarıiletken elde etmek mümkündür. Katkılı yarıiletkenler ayarlanabilen devre elemanlarının yapılmasına imkân sağladığı için teknolojide yaygın olarak kullanılır.

Yarıiletken içerisine safsızlık atomu katkılama sonucunda elektron ve boşluk sayısı artırılarak elektriksel iletkenlik artırılır. Elektriksel iletkenlik katkı atomunun cinsine ve konsantrasyonuna göre deęişir.

Yarıiletkende bulunan yabancı atomlar veya oluşmuş bir yapı bozukluğu yasak enerji bölgesinde sınırlandırılmış ara enerji seviyelerinin oluşmasına neden olur.

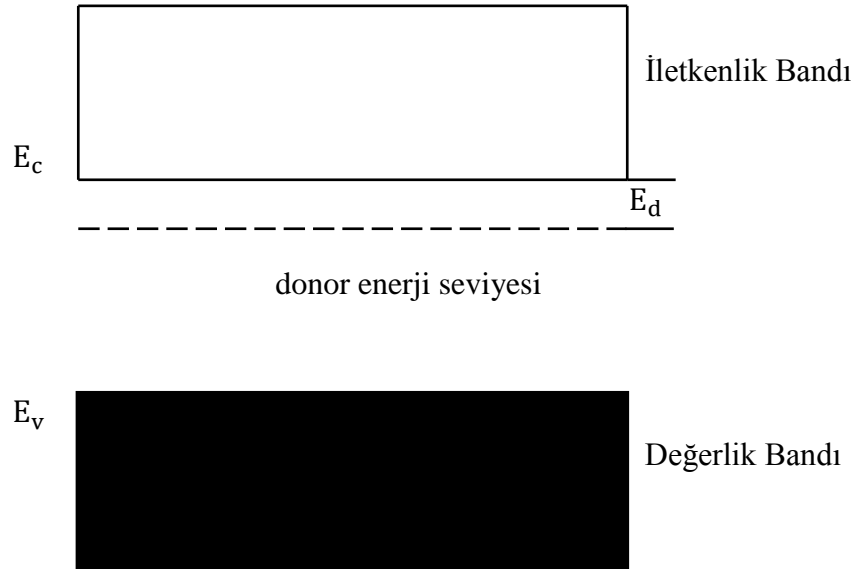
2.2.1 n-tipi Yarıiletkenler

Periyodik tablonun V. grup elementlerinden arsenik (As) kristali periyodik tablonun IV. grup elementlerinden olan silisyum (Si) kristaline ilave edildiğinde, arsenik atomunun dört elektronu silisyum atomunun dört elektronu ile kovalent bağ yapar. Geriye bir valans elektronu kalır (Şekil 2.3). Bu elektron Coulomb potansiyelinde ($e^2/\epsilon r$) hareket eder. Her katkı atomu başına serbest kalan bu tek elektronun bağlanma enerjisi çok küçük olup yapı içerisinde serbest elektron gibi davranır. Elektron yoğunluğu boşluk yoğunluğundan fazla olduğu için bu tip kristallere n-tipi yarıiletken, kristale katkılanan atomlara elektron verici (donor) ve katkılanan atomların bulunduğu enerji seviyelerine de donor enerji seviyesi denir.



Şekil 2.3 Silisyum kristaline arsenik atomunun katkılanması.

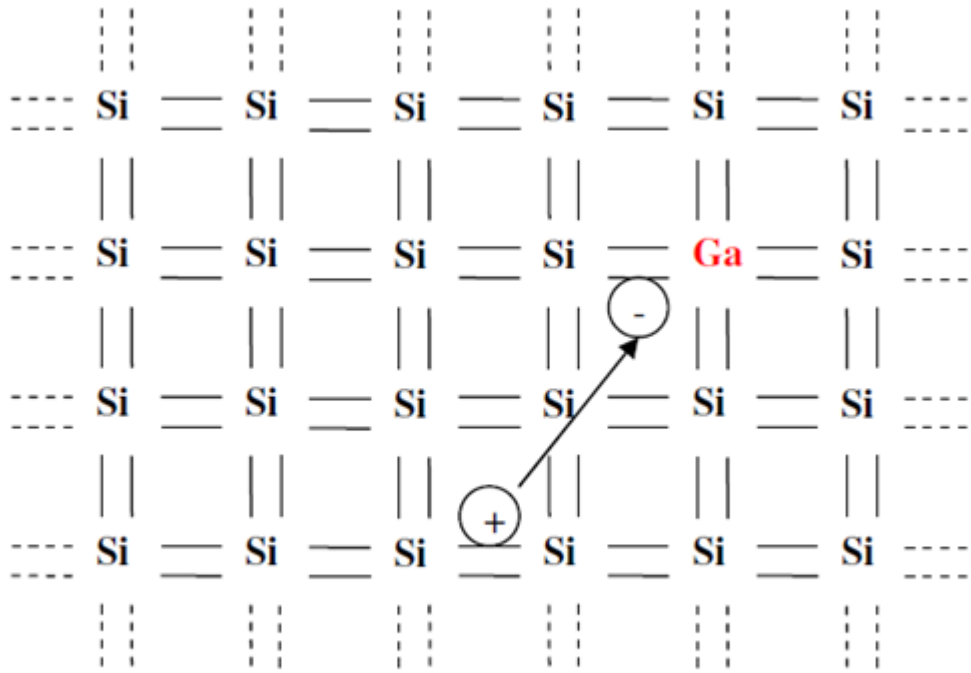
Donor enerji seviyesi, enerji aralığında iletim bandının biraz aşağısında bulunur (Şekil 2.4). n-tipi yarıiletkenlerde Fermi enerji seviyesi, katkı yoğunluğuna bağlı olarak yasak enerji aralığının orta kısmından iletim bandına doğru kayma yapar. Küçük bir enerjiyle donor atomlarının iyonlaşmasıyla birlikte donor elektronları iletim bandına geçerler. Bu enerjiye katkı atomunun iyonlaşma enerjisi denir.



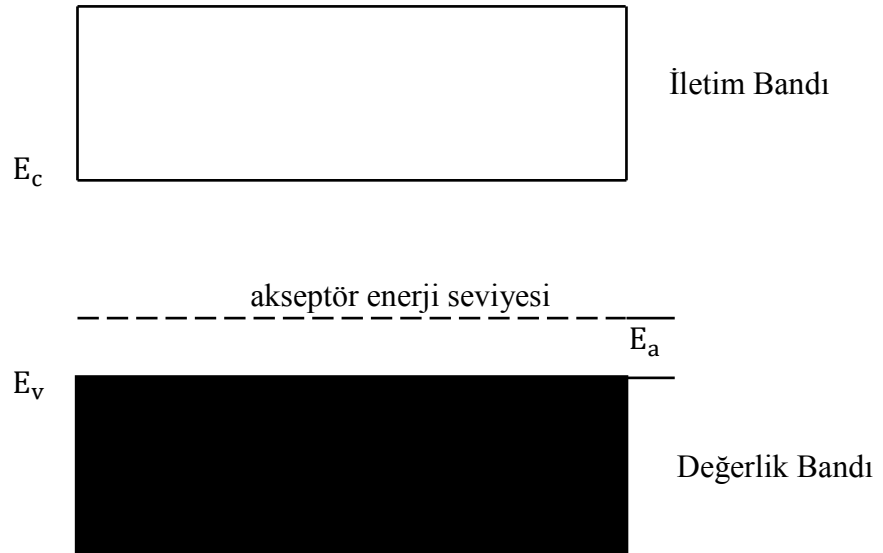
Şekil 2.4 Bir yarıiletkende donor enerji seviyesi.

2.2.2 p-tipi Yarıiletken

IV. grup elementlerinden silisyum atomuna III. grup elementlerinden galyum atomuyla katkılandığında p-tipi yarıiletken elde edilir. Galyum atomu 3 valans elektronuna sahiptir ve silisyuma katkılanması durumunda elektron bağlarından biri boş kalır (Şekil2.5). Bu boşluk diğer bağlanmadan kapılan bir elektronla doldurulabilir ve boşluk elektronun yerine geçer. Böylece valans bandında bir boşluk oluşmuş olur. Buna karşılık iletim bandına elektron çıkmaz. Oluşan bu boşluğu akseptör denir. Akseptör atomlarının yarıiletken içerisinde buldukları enerji seviyesine akseptör enerji seviyesi denir. Bir akseptörün iyonlaşmasıyla bir boşluğun serbest kalabilmesi için enerji verilmesi gerekir. Akseptör seviyeleri enerji aralığında valans bandına daha yakındır (Şekil 2.6).



Şekil 2.5 Silisyum kristaline galyum katkılanması.



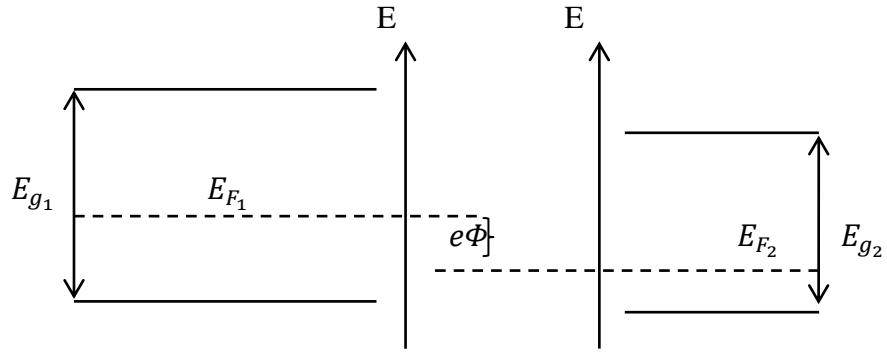
Şekil 2.6 Bir yarıiletkeninde akseptör enerji seviyesi.

3. HETEROYAPILAR

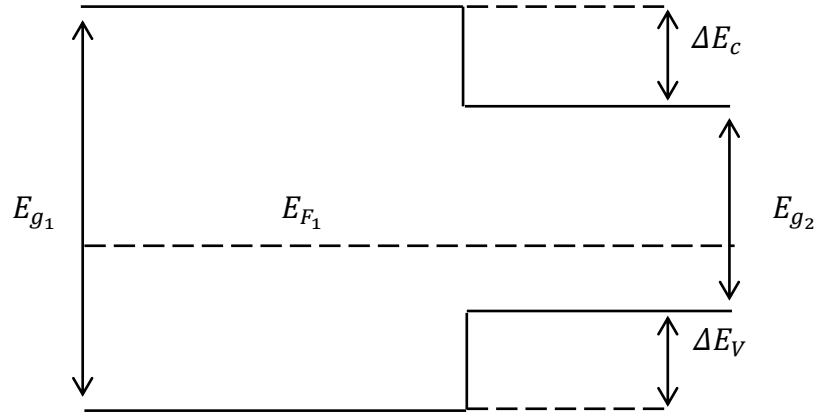
Birbirinden farklı iki ya da daha fazla yarıiletken yapının ortak bir kristalde üretilmesiyle elde edilir. Heteroyapıyı oluşturan malzemeler birbirine benzer yapıdadır ve örgü sabitleri arasında çok az bir farklılık vardır. Bir yarıiletkenin heteroyapı oluşturabilme uygunluğu örgü sabiti ile belirlenir. Heteroyapılarda, ara yüzeyde bant yapısının birden değiştiği kabul edildiğinden bir heteroyapının elektronik yapısını belirlemek üzere külçe yapıların enerji bantları bir araya getirilir. Bir araya getirilen yarıiletkenlerde en önemli nokta bant yapılarının konumlarıdır. Çünkü iletim ve değerlik bantlarındaki süreksizlik bu konumlara bağlı olacaktır.

Heteroyapının ara yüzeyinin her iki yanındaki ortalama elektron yoğunluğu aynı kabul edilirse, serbest elektron modeline göre Fermi enerji düzeyi aynı anda her iki külçenin yasak bant aralığının ortasını temsil eder. Örgü sabitlerinin farklılığından kaynaklanan elektron yoğunluğundaki küçük fark, ara yüzeyden yük transferine sebep olur. Bahsedilen yük transferi önemsiz bir büyüklükte olduğu için ihmal edilir. Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin bant yapılarının eklenmemiş hali Şekil 3.1 'de gösterilmiştir.

Bir heteroyapıda oluşturulan kuantum kuyusundaki en önemli sorun iletim ve değerlik bantlarındaki süreksizlikleri hesaplamaktır. Heteroyapı oluşturmak için bir araya getirilen malzemelerde ΔE_c , ΔE_v gibi süreksizlikler oluşur (Şekil 3.2).



Şekil 3.1 İki yarıiletkenin bant yapılarının eklenmemiş hali.



Şekil 3.2 İki yarıiletkenin bant yapılarının eklenmiş hali.

$$\Delta E_c = |E_{g_1}^f - E_{g_2}^f| - |\Delta E_v| \quad [3.1]$$

$$\Delta E_v = \frac{E_{g_1} - E_{g_2}}{2} \quad [3.2]$$

ile verilir.

Eğer heteroyapıyı oluşturan iki yarıiletken de direkt bant aralıklı ise, ΔE_c yukarıdaki eşitlik ile kolayca hesaplanır. Fakat her iki yarıiletken direkt bant özelliğine sahip değilse, iletim bandındaki süreksizlik hesaplanırken aynı iletim bandı minimumları farklı alınmalıdır. Yani külçe bant diyagramında aynı \vec{k} dalga vektörü ile tanımlı olmalıdır. Heteroyapılarda kullanılan süreklilik koşulu, elektronun ara yüzeyden geçerken \vec{k} dalga vektörü ile kütesinin değişmemesi olarak ifade edilebilir.

GaAs ve AlAs gibi önemli yarıiletkenlerin bant süreksizlikleri $\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} \cong \frac{60}{40}$ ile $\frac{65}{35}$ arasındadır [6].

Çizelge 3.1 Bazı heteroyapılar için değerlik bandı süreksizliğinin deneysel ve kuramsal sonuçları (δa külçe örgü sabiti farkıdır.)

Heteroyapı	δa (Å)	ΔE_v (eV)	Deneysel ΔE_v (eV)
AlAs-GaAs	0.01	0.43	0.45
AlAs-Ge	0.01	0.89	0.95
GaAs-Ge	0.00	0.47	0.56
GaAs-InAs	0.05	0.20	0.46
GaAs-InAs	0.40	0.37	0.17
ZnSe-GaAs	0.00	1.04	0.96

Aynı momentum dalga vektörüne karşılık gelen enerji düzeyleri arasında oluşan süreksizliğin heteroyapıdaki elektronların davranışı üzerindeki etkisini, elektronların potansiyel engelinden geri yansımaları biçiminde tanımlayabiliriz.

Heteroyapı bileşenlerinde katkı maddelerinin olması durumunda, heteroyapıda bir uzay yükü bölgesi oluşur ve bant bükülmesine neden olur. Heteroyapı en az iki yarıiletkenle oluştuğu için ara yüzeyin her iki yanında da uzay yükü potansiyeli sıfırdan farklı olur. Çift yüklü tabakanın neden olduğu potansiyeldeki uzamsal değişim, iletim bandı süreksizliğinin üzerine eklenir.

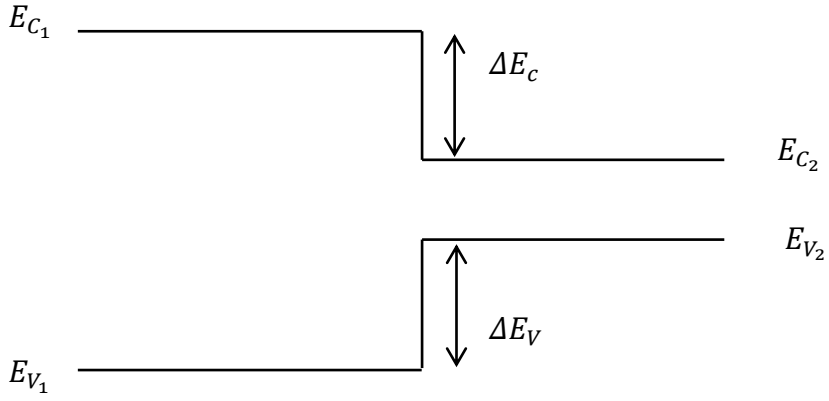
3.1 Düşük Boyutlu Yapılar

Heteroyapılar, mikro yapıların en önemli elemanı niteliğindedir. Düşük boyutlu yarıiletken yapılar, taşıyıcı hareketlerinin belli doğrultularda sınırlandırılmasıyla meydana gelen yapılardır. Düşük boyutlu yapılarda oluşan fiziğin dayandığı temel parametre, heteroyapılardaki bant süreksizliğidir. Heteroyapılar bant süreksizliğine göre normal, katlı ve kırık kayma olmak üzere üçe ayrılır (Şekil 3.3). I. tip yapıya $Ga_{1-x}Al_xAs$ / GaAs, II. tip yapıya Si-Ge ve III. tip yapıya ise InAs - GaSb örnek verilebilir.

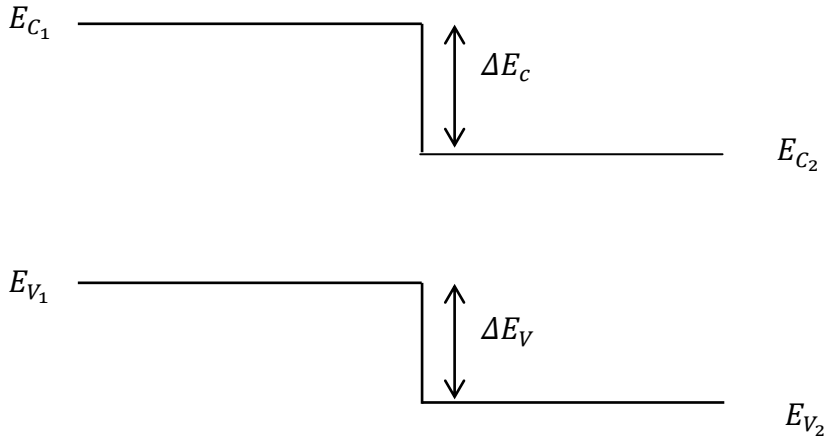
Normal heteroyapılarda, elektron ve boşluk ikinci katmanda bulunur. Katlı heteroyapılarda elektronlar ikinci katmanda, boşluklar ise birinci katmanda kuşatılır. Kırık kayma da ise katlı yapıdaki kuşatmaya benzer bir durum oluşur. Bu tür süper örgülerde periyodun artması ile enerji bant aralığı azalır ve yarıiletkenden yarı-metale geçiş gözlemlenir.

Düşük boyutlu yarıiletken yapılar bant yapıları farklı iki yarıiletken malzemenin peş peşe büyütülmesiyle oluşturulabilir. Bunun için bant aralığı büyük olan yarıiletken üzerine, bant aralığı küçük olan yarıiletken büyütülür ve ardından tekrar bant aralığı büyük olan yarıiletken büyütülerek iletkenlik ve değerlik bantlarında taşıyıcılar için bir potansiyel kuyusu oluşturulur (Şekil 3.4).

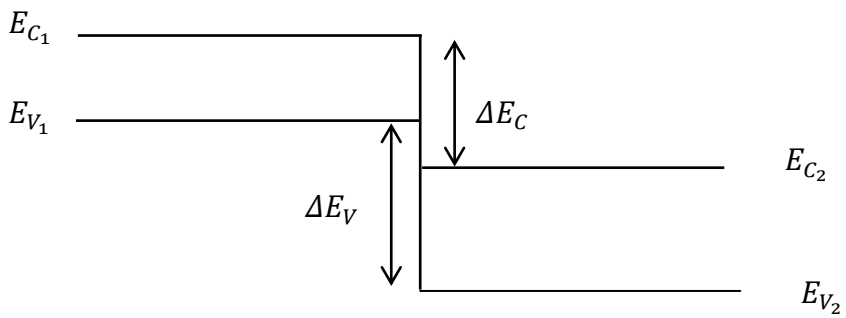
Normal (I. tip heteroyapı)



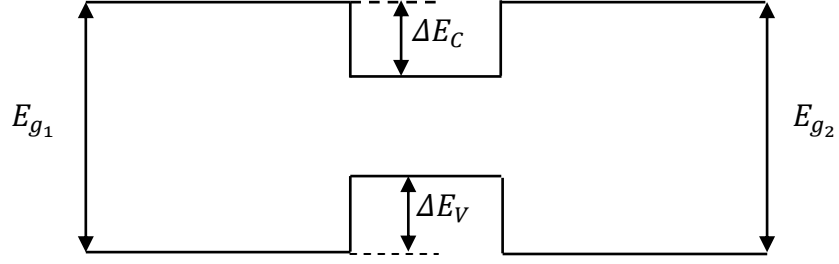
Katlı (II. tip heteroyapı)



Kırık Kayma (III. tip heteroyapı)



Şekil 3.3 Bant süreksizliğine göre heteroyapılar.



Şekil 3.4 Bir kuantum kuyusunun bant yapısı.

Heteroyapılar kuşatma boyutuna göre; kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum kutusu olarak incelenir. Bu sistemlerin en basiti örgü sabitleri birbirine çok yakın değerlerde olan GaAs tabakasının iki tarafına $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ eklenerek oluşturulan heteroyapılardır.

Bir kuantum kuyu yapısı, düşük bant aralıklı bir yapının daha yüksek bant aralıklı bir yapı üzerine büyütülmesiyle elde edilir. Kuantum kuyularında yük taşıyıcıları iki boyutta serbest parçacık gibi hareket edebilirken, farklı tabakaya doğru (kristalin büyütme yönünde) hareketleri bir boyutta sınırlanır ve enerjileri kuantize olur. Şekil 3.4 'teki kuantum kuyusundaki elektronun davranışı incelendiğinde elektronun orta tabakayı (en düşük enerji) tercih ettiği görülür. Kuantum kuyusunun enerjisi;

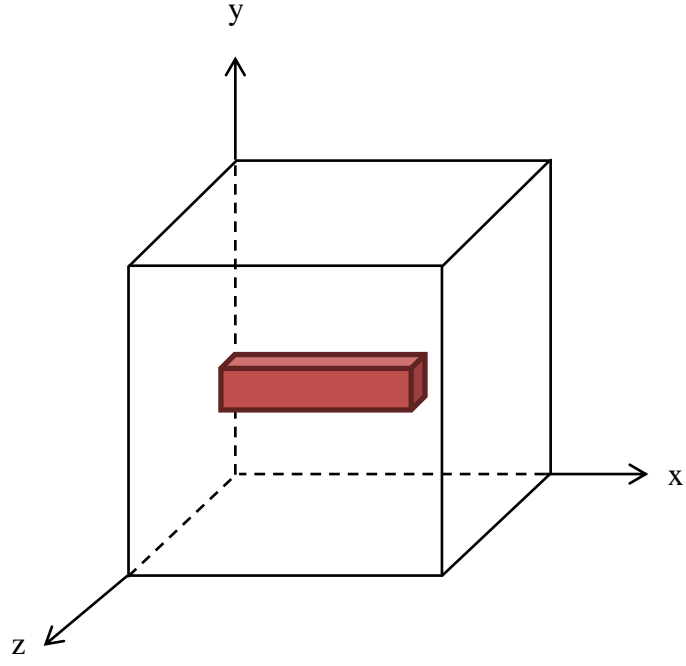
$$E = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad [3.3]$$

ile verilir.

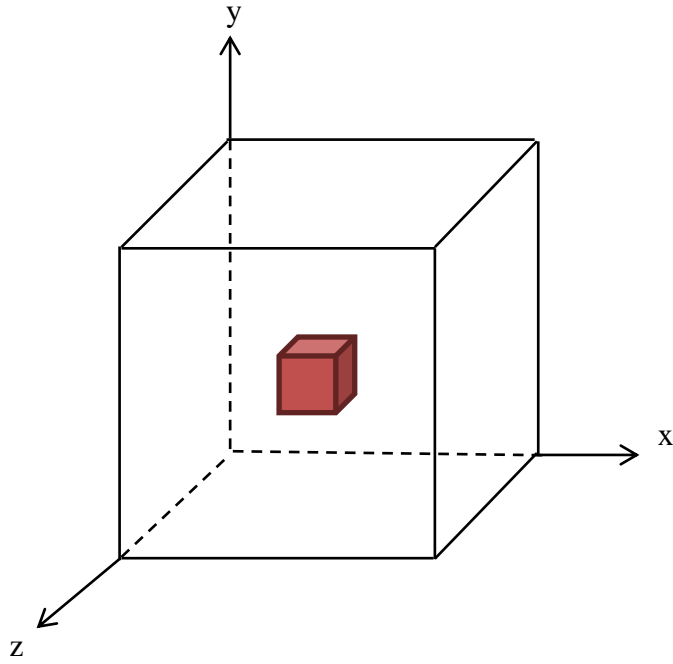
Bu durumda, bir kuyudaki parçacık problemine ulaşılmış olur. Buradaki tek fark elektronun etkin kütesidir. Bu da elektronun serbest uzayda değil de kuşatılmış bölge içinde hareket ediyor olmasından kaynaklanır. Etkin kütle büyüklüğü kristal potansiyelinin şiddetini yansıtır. Bu değer maddelerin karakteristik bir özelliğidir. Kuantum kuyusunun oluşmasını sağlayan yarıiletkenlerin bant yapıları birbirine benzer olduğu için aralarındaki etkin kütle farkı ihmal edilir. Sonuç olarak kuantum kuyusu içerisinde kuşatılmış bir parçacık elde edilmiş olur. Kuşatmanın elektron üzerindeki etkisi sonucu, ara yüzeye dik doğrultuda enerji spektrumu süreksizlik göstererek enerji seviyelerine ayrılır [7, 8]. Taban durum enerjisi seviyesinin etkin kütle değerinin azalması ile kuyunun üst kısmına çıkması beklenir. Burada engel yüksekliği, kuyu genişliği ve etkin kütle küçük olsa dahi en az bir kuşatılmış durum elde edilir. Kuyu genişliği değiştirilmesi kuyunun bant aralığının değişmesine neden olur.

Taşıyıcıların hareketinin iki boyutta kuantize olduğu yapılar kuantum telleri olarak adlandırılır. Eğer tel z eksenine yerleştirilirse elektronun enerjisi x ve y doğrultularında kuantalanmıştır. Kuşatılmış seviyeleri hesaplamak için iletim bant diyagramından yararlanılır.

Elektron hareketinin üç boyutta sınırlandırıldığı yapılara kuantum kutuları denir. Hareketin üç boyutta sınırlandırılması kesikli enerji spektrumuna neden olur. Şekil 3.5.a'da kuantum teli ve Şekil 3.5.b'de de kuantum kutusunun gösterimi verilmiştir.



Şekil 3.5.a Kuantum teli.



Şekil 3.5.b Kuantum kutusu.

3.2 III-V Yarıiletkenleri

Bu tip yarıiletkenler doğrudan bant geçiş özelliğine ve geniş yasak enerji aralığına sahiptirler. III-V yarıiletkenlerinin oluşturduğu yapı kovalent ve iyonik bağ karışımı bir özellik gösterirler. Elementler ve bileşik yarıiletkenler kıyaslandığında, bileşiklerin yüksek ergime sıcaklığına, geniş yasak enerji aralığına sahip oldukları görülmektedir. Bu olgu bileşik yarıiletkenlerin karışık bağlı (kovalent/iyonik) olduğunun göstergelerindedir.

III-V yarıiletkenler geniş bant aralıkları, sıcaklığa dayanıklı olmaları nedeniyle teknolojide oldukça sık kullanılır. Geniş bant aralığı nedeni ile optoelektronik aygıtların yapımında kullanılmaya başlanmıştır.

4. $Ga_{1-x}Al_xAs$ / $GaAs$ KUANTUM KUYUSUNDA BAĞLI ENERJİ DÜZEYLERİ

Bu bölümde $Ga_{1-x}Al_xAs$ / $GaAs$ tek kuantum kuyusunun dielektrik sabiti, etkin kütlesi, kuşatma potansiyeli ve kuyu genişliği incelenecektir.

z -doğrultusunda kuşatılmış bir sistemin Hamiltoniyen'i;

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(z) \quad [4.1]$$

ile verilir. $V(z)$ kuşatma potansiyeli;

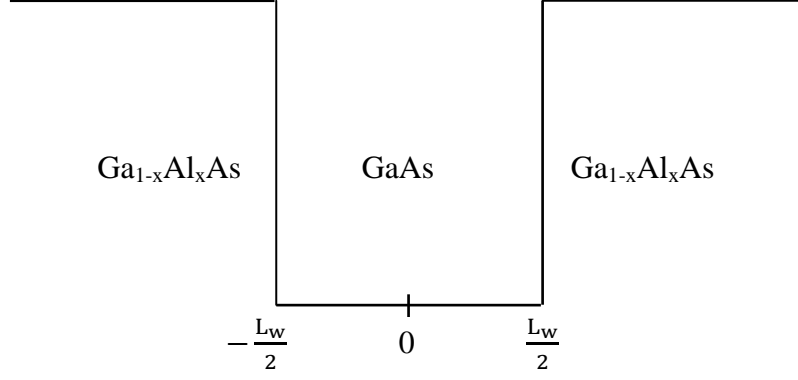
$$V(z) = \begin{cases} V_0 & , & z < -\frac{L_w}{2} \\ 0 & , & -\frac{L_w}{2} < z < \frac{L_w}{2} \\ V_0 & , & z > \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad [4.2]$$

şeklinde. Burada E_g yasak enerji aralığı olmak üzere;

$$V_0 = Q_c \Delta E_g \quad [4.3]$$

$$\Delta E_g = E_g(GaAs) - E_g(GaAlAs) \quad [4.4]$$

ve $Q_c = 0.6$ olarak alınmıştır.



Şekil 4.1 L_w genişlikli $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ tek kuantum kuyusunun gösterimi.

Elektronun momentum operatörü \vec{p} ;

$$\vec{p} = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{z} \right) \quad [4.5]$$

ve kuşatma potansiyeli Denklem (4.1)'de yerine yazılırsa, kartezyen koordinatlarda sistemin Hamiltoniyen'i;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) \quad [4.6]$$

şeklinde bulunur.

Hamiltoniyen'i boyutsuz hale getirmek için tüm uzunlukları etkin Bohr yarıçapı ($a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2}$) ve bütün enerji ifadelerini Rydberg ($R = \frac{e^2}{2\epsilon a_B}$) cinsinden yazılabilir.

Ve boyutsuz Hamiltoniyen ifadesi;

$$\tilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right) + \tilde{V}(\tilde{z}) \quad [4.7]$$

biçiminde ele edilir.

$Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ tek kuantum kuyusu için Schrödinger denklemi;

$$\tilde{H}\varphi(\tilde{z}) = \tilde{E}\varphi(\tilde{z}) \quad [4.8]$$

şeklindedir. Burada $\varphi(\tilde{z})$, elektronun z yönündeki hareketini tanımlayan dalga fonksiyonudur. Boyutsuz Hamiltonian'ın beklenen değeri;

$$\langle \tilde{H} \rangle = \left\langle \varphi(\tilde{z}) \left| -\frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + V(\tilde{z}) \right| \varphi(\tilde{z}) \right\rangle = \tilde{E} \quad [4.9]$$

ile bulunur.

4.1 Ga_{1-x}Al_xAs/ GaAs Kuantum Kuyusuna Basınç Etkisi

Bir önceki bölümde Ga_{1-x}Al_xAs/ GaAs kuyusu ile ilgili genel bilgiler verilmiştir. Bu bölümde ise kuyu üzerine basınç etkisi incelenecektir.

Kuyu üzerine etkileyen basınç kuyunun genişliğini, dielektrik sabitini, kuşatma potansiyelini ve etkin kütleyi değiştirmektedir. Basınç altında sistemin boyutsuz Hamiltoniyen'i;

$$\tilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (\bar{z}_e - \bar{z}_i)^2}} + \tilde{V}(z, P) \quad [4.1.1]$$

biçiminde verilir. Basınç ile değişen etkin kütle ifadesi;

$$m_e^*(P) = \frac{m_0}{1 + E_p^\Gamma \left[\frac{2}{E_g^\Gamma(P)} + \frac{1}{E_g^\Gamma(P) + \Delta_0} \right]} \quad [4.1.2]$$

ile verilir. Buradaki m₀ serbest elektronun kütlesi, E_p^Γ = 7.51 eV, Δ₀ = 0.341 eV, E_g^Γ hidrostatik basınç etkisi ile Γ -noktasındaki GaAs yapısı için bir enerji aralığı olup birimi eV dir. Bu ifadenin açılımı ise;

$$E_g^\Gamma(P) = a + bP + cP^2 \quad [4.1.3]$$

olup, a = 1.425 eV, b = 1.26 × 10⁻² eV/kbar ve c = -3.77 × 10⁻⁵ eV/kbar² dir [9-12].

Dielektrik sabitinin basınç ile değişim ifadesi de;

$$\varepsilon(P) = \varepsilon(0)e^{\delta P} \quad [4.1.4]$$

eşitliği ile verilir. Burada;

$\delta = -1.73 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$, $\varepsilon(0)$ atmosferin dielektrik sabiti ve değeri 13.8 dir. z-doğrultusundaki kuşatma potansiyeli;

$$V(z, P) = \begin{cases} V_0(P) & , & z < -\frac{L(P)}{2} \\ 0 & , & -\frac{L(P)}{2} < z < \frac{L(P)}{2} \\ V_0(P) & , & z > \frac{L(P)}{2} \end{cases} \quad [4.1.5]$$

ile verilir [12]. Engel yüksekliği;

$$V_0 = Q_c \Delta E_g^\Gamma(x, P) \quad [4.1.6]$$

eşitliği ile verilir. Burada, Q_c iletim bandı parametresi ve değeri 0.6 olarak alınmıştır [13]. x , $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ kuyusundaki Al mol kesri ve değeri 0.3, ΔE_g^Γ ise Γ -noktasındaki kuyu ve engel arasındaki enerji farkı olup, değeri aşağıdaki gibidir.

$$\Delta E_g^\Gamma(x, P) = \Delta E_g^\Gamma(x) + PD(x) \quad [4.1.7]$$

burada,

$$\Delta E_g^\Gamma(x) = (1.155x + 0.37x^2) \text{ eV} \quad [4.1.8]$$

$$D(x) = [-(1.3 \times 10^{-3})] \text{ eV/kbar} \quad [4.1.9]$$

olup bant yapısındaki basınç katsayısıdır [14].

Basıncın kuyu genişliğine etkisi de aşağıdaki gibidir.

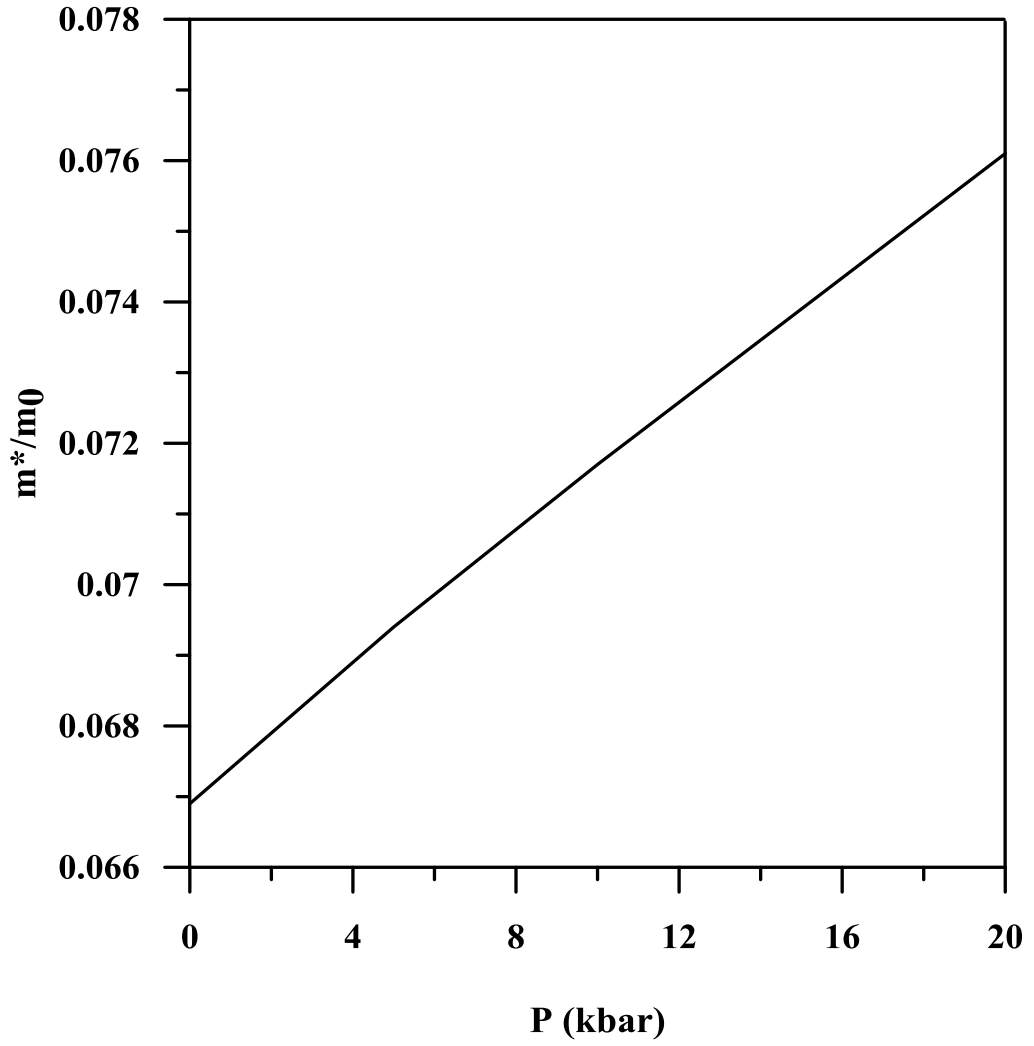
$$L(P) = L(0)[1 - (s_{11} + 2s_{22})P] \quad [4.1.10]$$

Burada,

$S_{11} = 1.16 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$ ve $S_{22} = -3.7 \times 10^{-4} \text{ kbar}^{-1}$ GaAs yapısının esneklik sabitleri [9-11] ve $L(0)$ kuşatma potansiyellerinin orijinal genişliğidir.

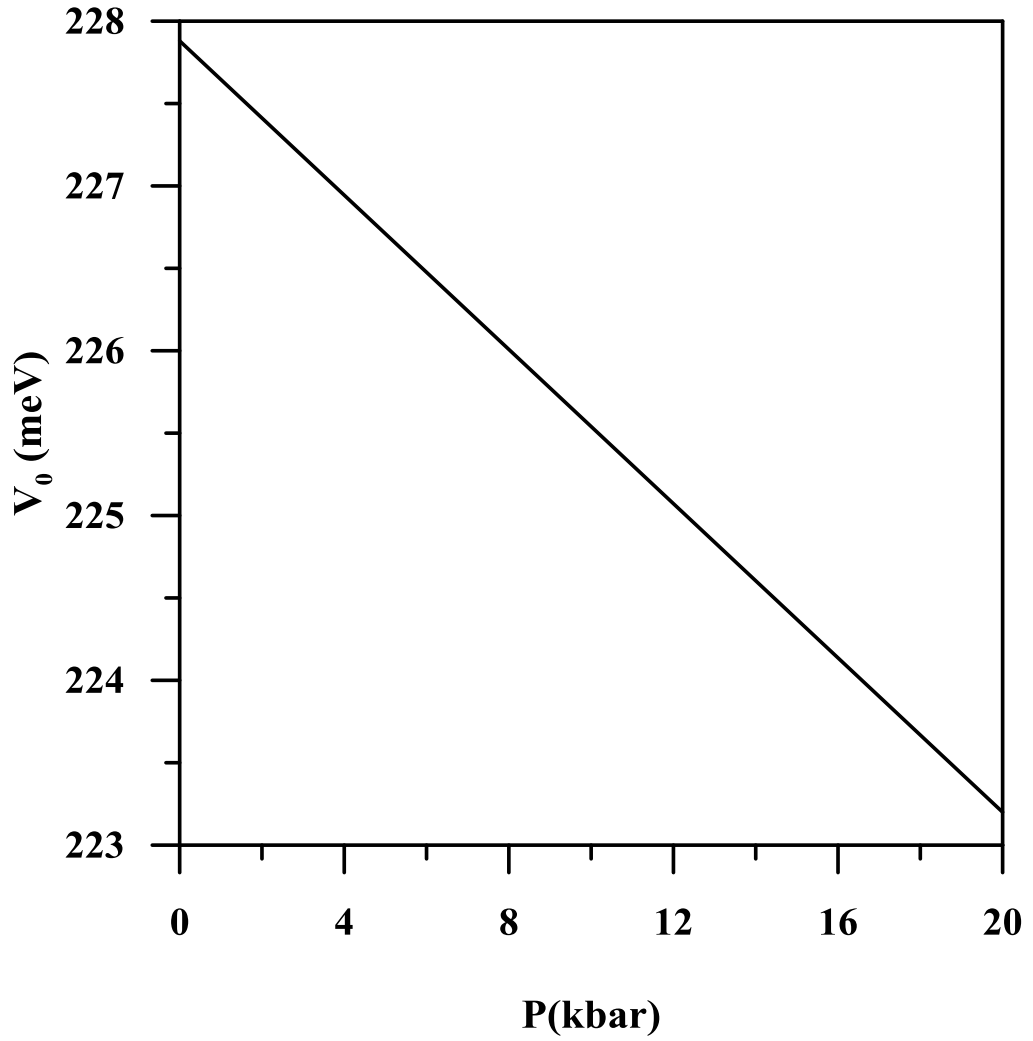
Çizelge 4.1 $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ kuantum kuyusu için $T=0 \text{ K}$ 'de farklı basınç değerleri altında sistemin bazı fiziksel büyüklükleri

P (kbar)	m^*/m_0	V_0 (meV)	ϵ	L (Å)	E (meV)
0	0,0669	227,88	12,6498	100	32,0595
5	0,0694	226,71	12,5408	99,79	31,2502
10	0,0717	225,54	12,4328	99,58	30,5526
15	0,0739	224,37	12,3257	99,37	29,9222
20	0,0761	223,20	12,2196	99,19	29,3232



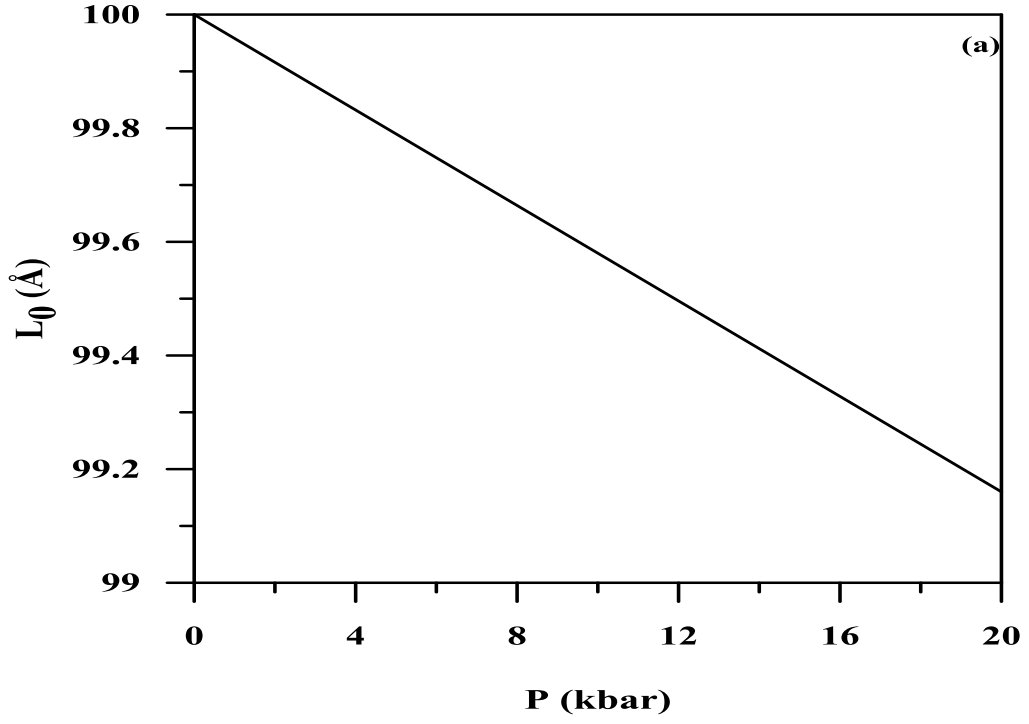
Şekil 4.1.1 m^*/m_0 oranının basınca göre değişimi.

Şekil 4.1.1’de m^*/m_0 oranının basınca bağlı değişimi verilmiştir. Denklem (4.1.2)’de açıkça görüldüğü gibi elektronun etkin kütlesi GaAs için tanımlı olan Γ -noktasındaki enerji aralığı olan E_g^{Γ} ile orantılıdır. Bu niceliğin basınç ile değişimi ise Denklem (4.1.3)’de verilmiştir. (4.1.3) denkleminde tanımlı a, b ve c katsayılarının büyüklükleri karşılaştırıldığında E_g^{Γ} niceliğinin basınca bağlı değişiminin lineer olacağı anlaşılmaktadır. Bu nedenle; Şekil 4.1.1’de görüldüğü gibi m^*/m_0 oranı basınçla lineer olarak artmaktadır.

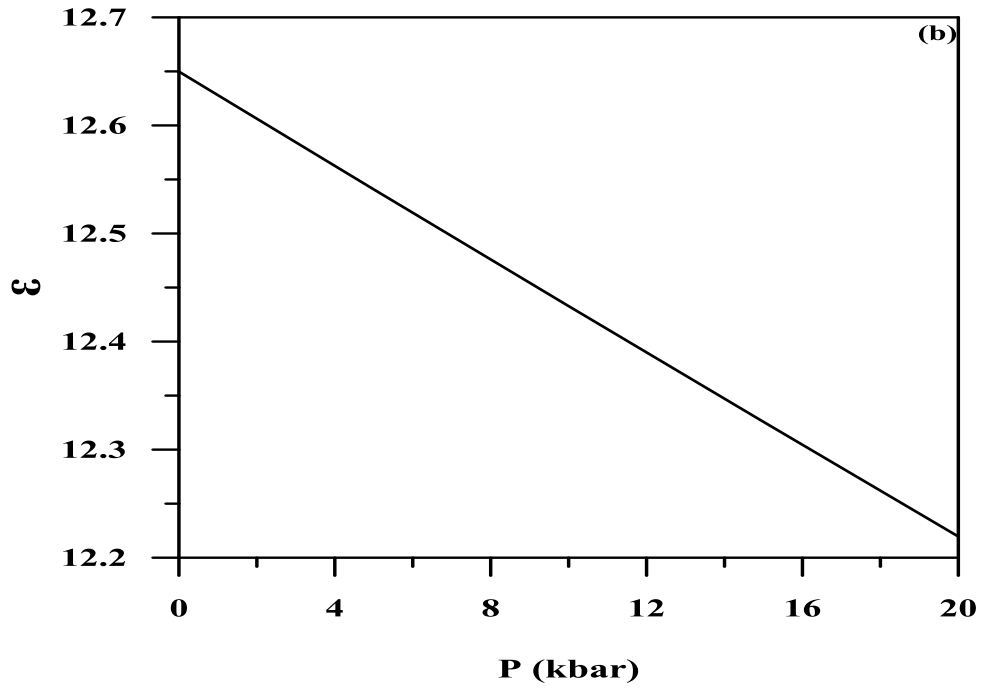


Şekil 4.1.2 V_0 potansiyel yüksekliğinin basınca göre değişimi.

Şekil 4.1.2 de V_0 potansiyel yüksekliğinin basınca göre değişimi verilmiştir. Potansiyel yüksekliğinin basınca bağlı değişimi (4.1.6) – (4.1.8) denklemleri incelenerek değerlendirildiğinde; V_0 yüksekliğinin basınca lineer bağlı olduğu görülecektir. Bu nedenle Şekil 4.1.2’de açıkça görüldüğü gibi V_0 yüksekliği basınçla lineer olarak azalmaktadır.

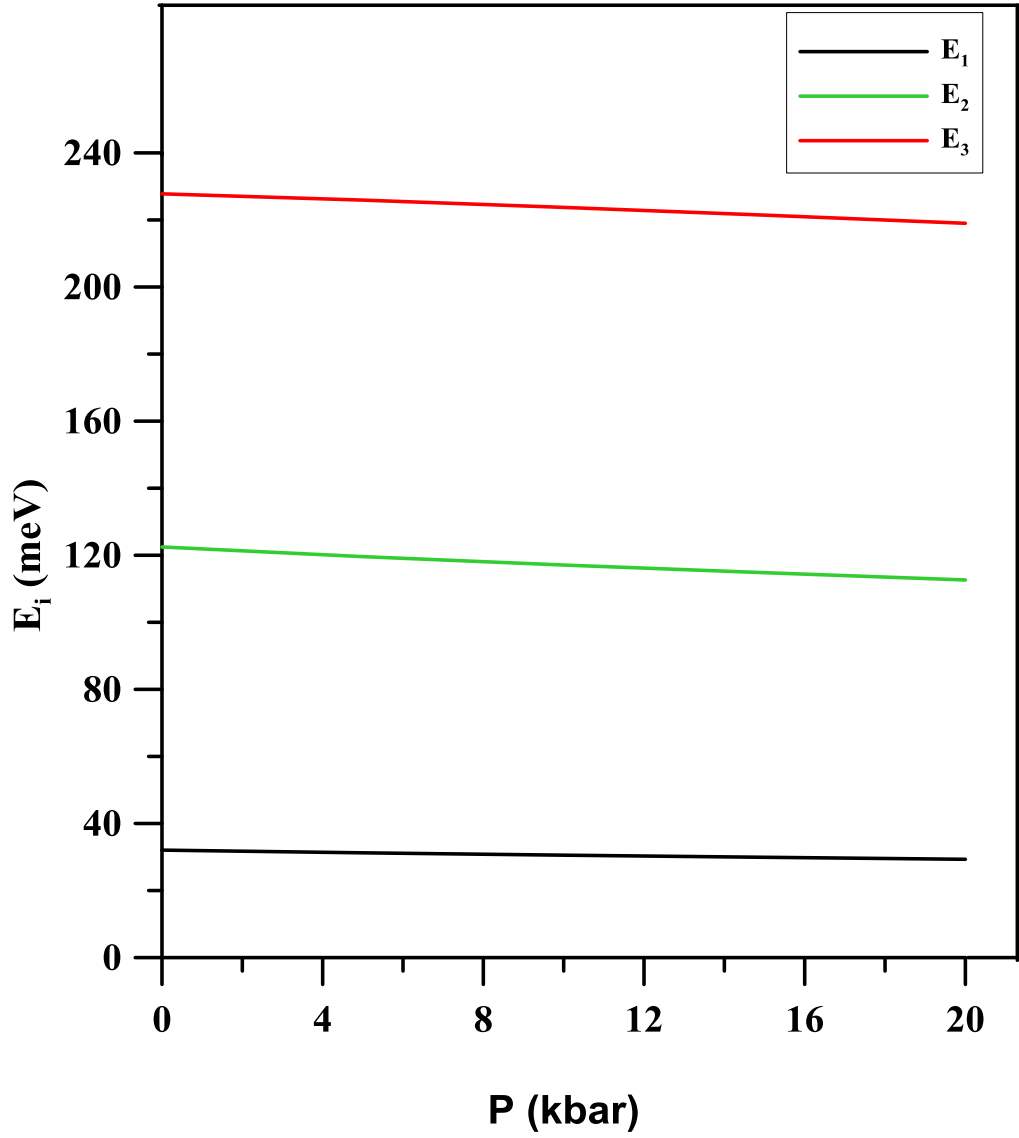


Şekil 4.1.3.a Kuyu genişliğinin basınca göre değişimi.



Şekil 4.1.3.b Ortamın dielektrik sabitinin basınca göre değişimi.

Şekil 4.1.3 (a)'da kuyu genişliği ve (b)'de ise ortamın dielektrik sabitinin uygulanan basınca göre değişimi verilmiştir. Kuyu genişliğinin ve ortamın dielektrik sabitinin basınca bağlı değişiminin tanımlandığı (4.1.10) ve (4.1.4) denklemleri göz önüne alındığında kuyu genişliğinin ve dielektrik sabitinin basınç altında lineer olarak azalacağı anlaşılmaktadır.



Şekil 4.1.4 Bağlı enerji düzeylerinin basınca göre değişimi.

Kuantum kuyusunda bağlı enerji düzeylerinin basınca bağlı değişimi Şekil 4.1.4'te verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi potansiyel yüksekliğinin basınç altında lineer olarak azalmasına bağlı olarak bağlı enerji düzeylerinin yaklaşık olarak aynı oranda basınç ile azaldığı görülmektedir.

5. $Ga_{1-x}Al_xAs/ GaAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNDAKİ DONOR SAFSIZLIKLARIN BAĞLANMA ENERJİLERİ

Bu bölümde $Ga_{1-x}Al_xAs/ GaAs$ kuantum kuyusundaki elektron ve donör atomunun meydana getirdiği yapının bağlanma enerjisinin z doğrultusundaki kuyu genişliğine bağlılığı etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntem ile incelenmiştir.

z doğrultusunda kuşatılmış sistemin etkin kütle yaklaşımına göre Hamiltoniyen'i;

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(z) + V_c \quad [5.1]$$

ile verilir. Burada V_c elektron ve donör arasındaki Coulomb potansiyeli olup;

$$V_c = -\frac{e^2}{\epsilon r} \quad [5.2]$$

ve

$$r = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2} \quad [5.3]$$

şeklinde yazılır. Buradaki x, y ve z elektronun konumunu x_i, y_i ve z_i ise donör atomunun konumunu göstermektedir. Coulomb potansiyeli, kuşatma potansiyeli ve momentum operatörü Denklem (5.1)'de yerine yazılırsa sistemin Hamiltoniyen'i;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} + V(z) \quad [5.4]$$

biçiminde yazılabilir.

$$\begin{aligned}
x &= \rho \cos\phi \\
y &= \rho \sin\phi \\
z &= z
\end{aligned} \tag{5.5}$$

ifadeleri ile kutupsal koordinatlara geçildiğinde Hamiltoniyen;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + V(z) \tag{5.6}$$

biçiminde elde edilir. ρ , x-y düzleminde elektron ile donör arasındaki uzaklık olup;

$$\rho = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2} \tag{5.7}$$

ile verilir. Hamiltoniyen'i boyutsuz hale getirmek için tüm uzunlukları etkin Bohr yarıçapı ($a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2}$) ve bütün enerji ifadelerini Rydberg ($R = \frac{e^2}{2\epsilon a_B}$) cinsinden yazılırsa boyutsuz Hamiltoniyen ifadesi;

$$\tilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\phi}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right) - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} + \tilde{V}(\tilde{z}) \tag{5.8}$$

şeklinde elde edilir. $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki elektron ve donör atomu için Schrödinger denklemi;

$$\tilde{H}\psi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda) = \tilde{E}\psi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda) \tag{5.9}$$

şeklindedir.

$$\psi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda) = \varphi(\tilde{z})\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda) \quad [5.10]$$

$\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda)$ ise Coulomb etkileşimini içeren deneme dalga fonksiyonudur. Safsızlık atomuna bağlı elektron için 1s, 2s, $2p_0$ ve $2p_{\pm}$ seviyelerini ifade eden deneme dalga fonksiyonları;

$$\phi_{1s}(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda_1) = N_1 e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_1}} \quad [5.11]$$

$$\phi_{2s}(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \beta, \lambda_2) = N_2 (1 - \beta \sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}) e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_2}} \quad [5.12]$$

$$\phi_{2p_0}(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda_3) = N_3 \tilde{z} e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_3}} \quad [5.13]$$

$$\phi_{2p_{\pm}}(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \lambda_4) = N_4 \rho e^{-\frac{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}}{\lambda_4}} e^{\pm i\phi} \quad [5.14]$$

biçimindedir. Buradaki N_1, N_2, N_3 ve N_4 normalizasyon katsayıları, β ; 1s ve 2s deneme dalga fonksiyonlarının ortogonalite koşulundan gelen bir sabit ve $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ ve λ_4 varyasyon parametreleridir.

Genişliği $L_b = 2L$ olan sonsuz potansiyel kuyusunun özfonksiyonlarının çözümleri temel alınarak z doğrultusundaki dalga fonksiyonu oluşturulabilir. Bunların genel formu ise;

$$\varphi_n(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos\left(\frac{n\pi\tilde{z}}{L_b} - \delta_n\right) \quad [5.15]$$

şeklindedir.

Buradaki δ_n , L_b genişlikli sonsuz kuyunun özfonksiyonlarındaki çift ve tek çözümlerine karşılık gelen faz farkı olup;

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n \text{ tek ise} \\ \frac{\pi}{2} & n \text{ çift ise} \end{cases} \quad [5.16]$$

değerlerini alır.

Bu durumda sistemin dalga fonksiyonu;

$$\varphi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \varphi_n(\tilde{z}) \quad [5.17]$$

şeklinde verilir. Sistemin toplam enerjisi ise;

$$\tilde{E} = \min_{\lambda} \langle \psi | \tilde{H} | \psi \rangle \quad [5.18]$$

varyasyon teoreminden elde edilir. \tilde{E} özdeğerini minimum yapan λ parametreleri bu eşitlik sayesinde bulunur. Boyutsuz hale getirilen Hamiltoniyen'in beklenen değeri;

$$\begin{aligned} \langle \tilde{H} \rangle = \langle \psi | \tilde{H} | \psi \rangle = & - \left\langle \psi \left| \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} \right| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \left| \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \right| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \left| \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \left| \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right| \psi \right\rangle + \\ & \left\langle \psi \left| \tilde{V}(\tilde{z}) \right| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \left| \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} + \tilde{z}_i)^2}} \right| \psi \right\rangle \end{aligned} \quad [5.19]$$

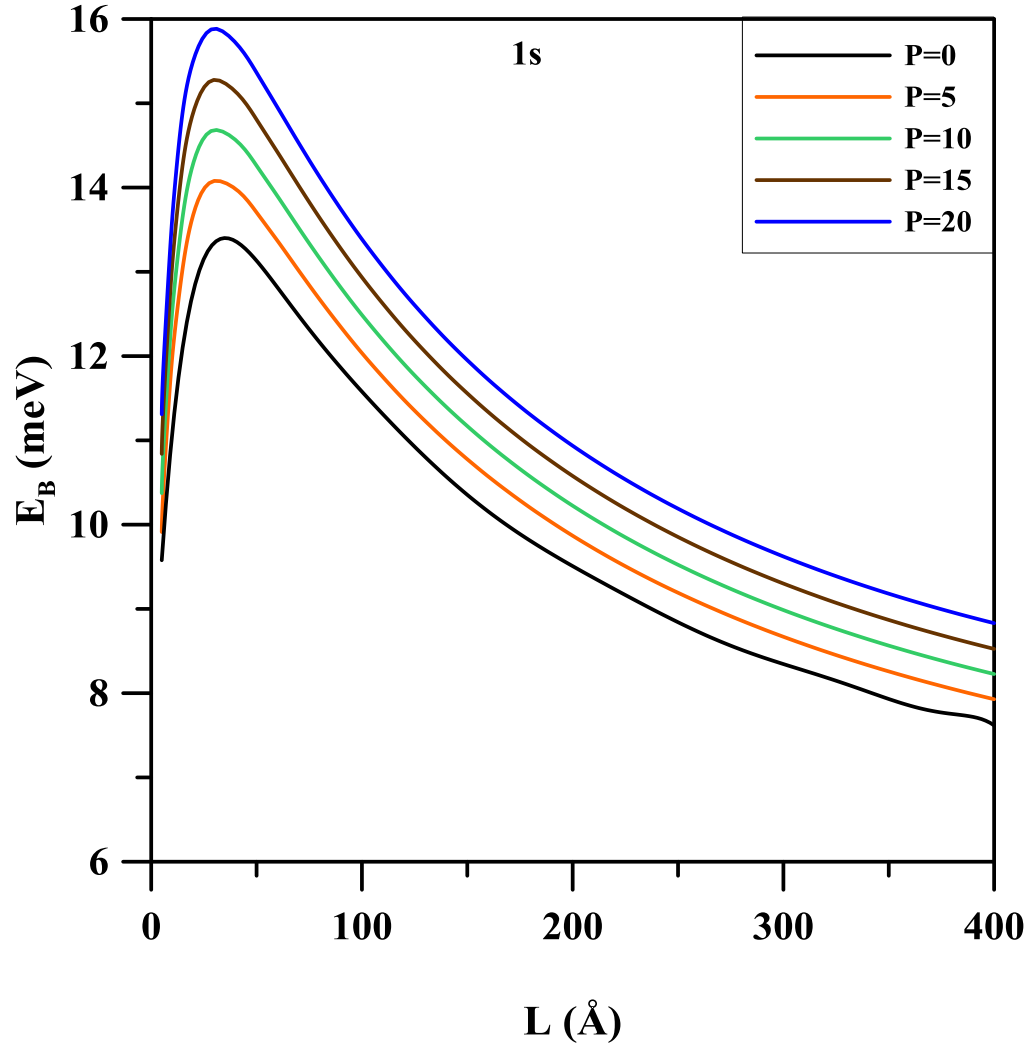
dir.

Taban durumda bulunan donör atomunun boyutsuz bağlanma enerjisi ise;

$$\tilde{E}_B = \tilde{E}_z - \langle \tilde{H} \rangle \quad [5.20]$$

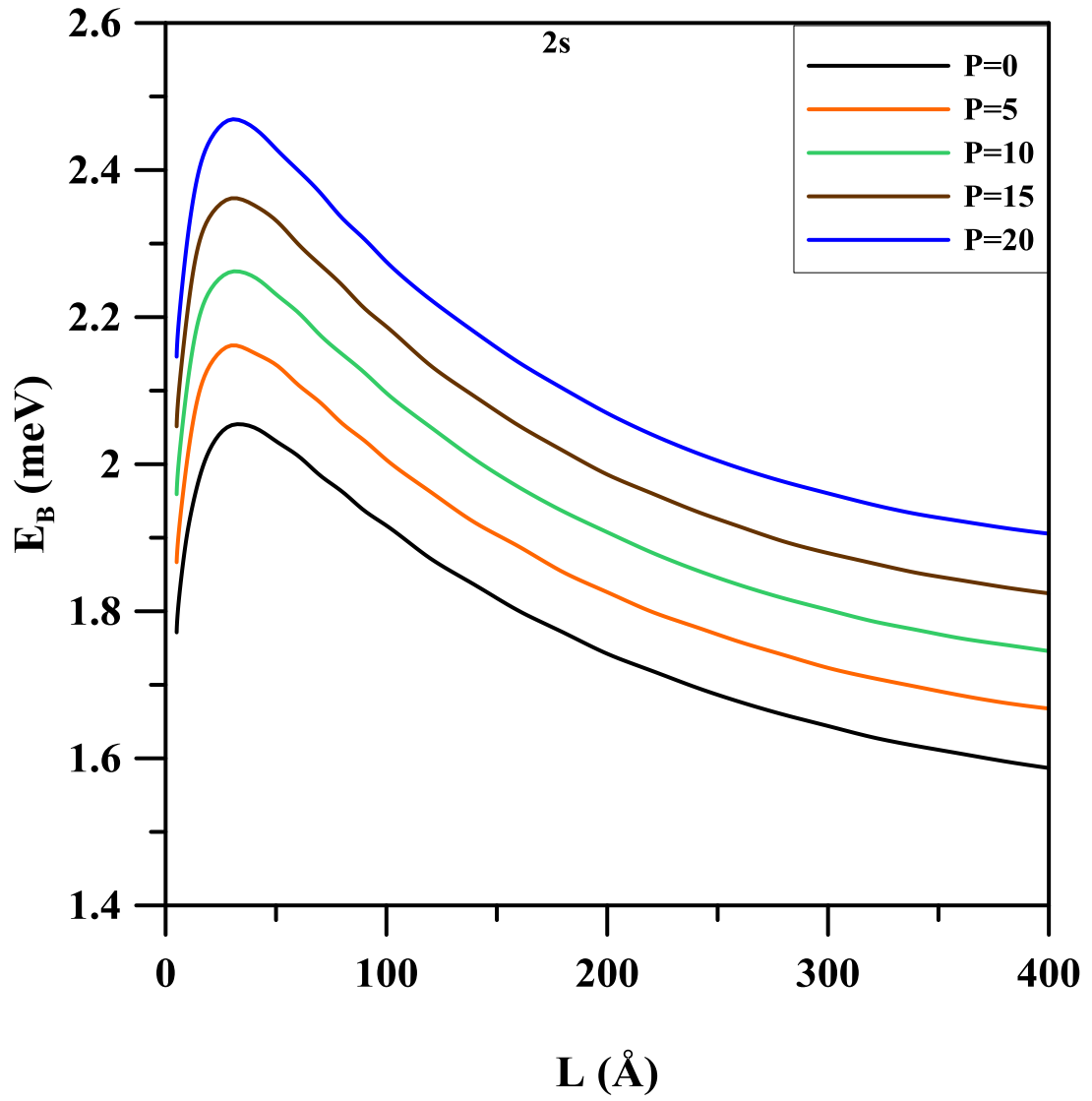
şeklinde elde edilir. \tilde{E}_z , elektronun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen taban durum enerjisidir.

Sistemin fiziksel parametreleri değiştirilerek $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ tek kuantum kuyusunun 1s, 2s, $2p_0$ ve $2p_{\pm}$ düzeylerindeki bağlanma enerjisi hesaplanmıştır.

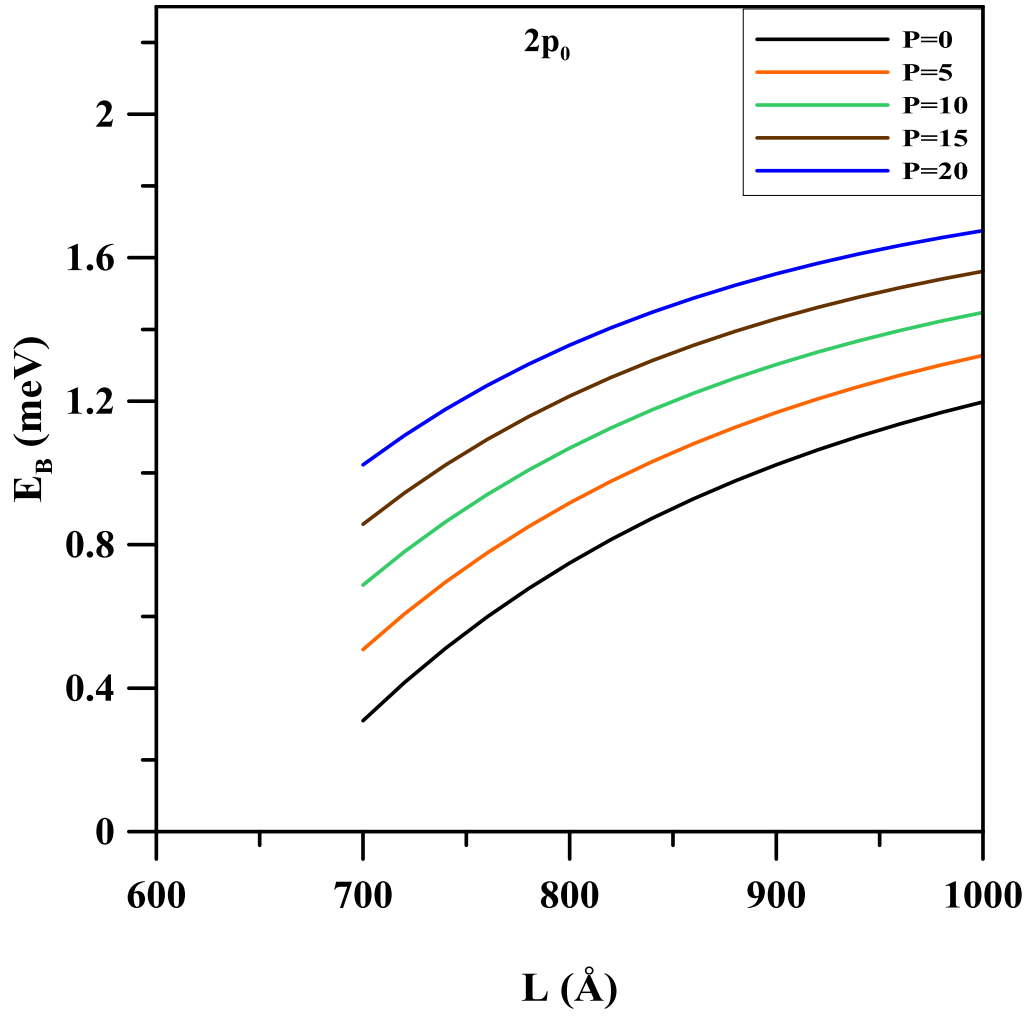


Şekil 5.1 1s düzeyinde bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı basınç değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi.

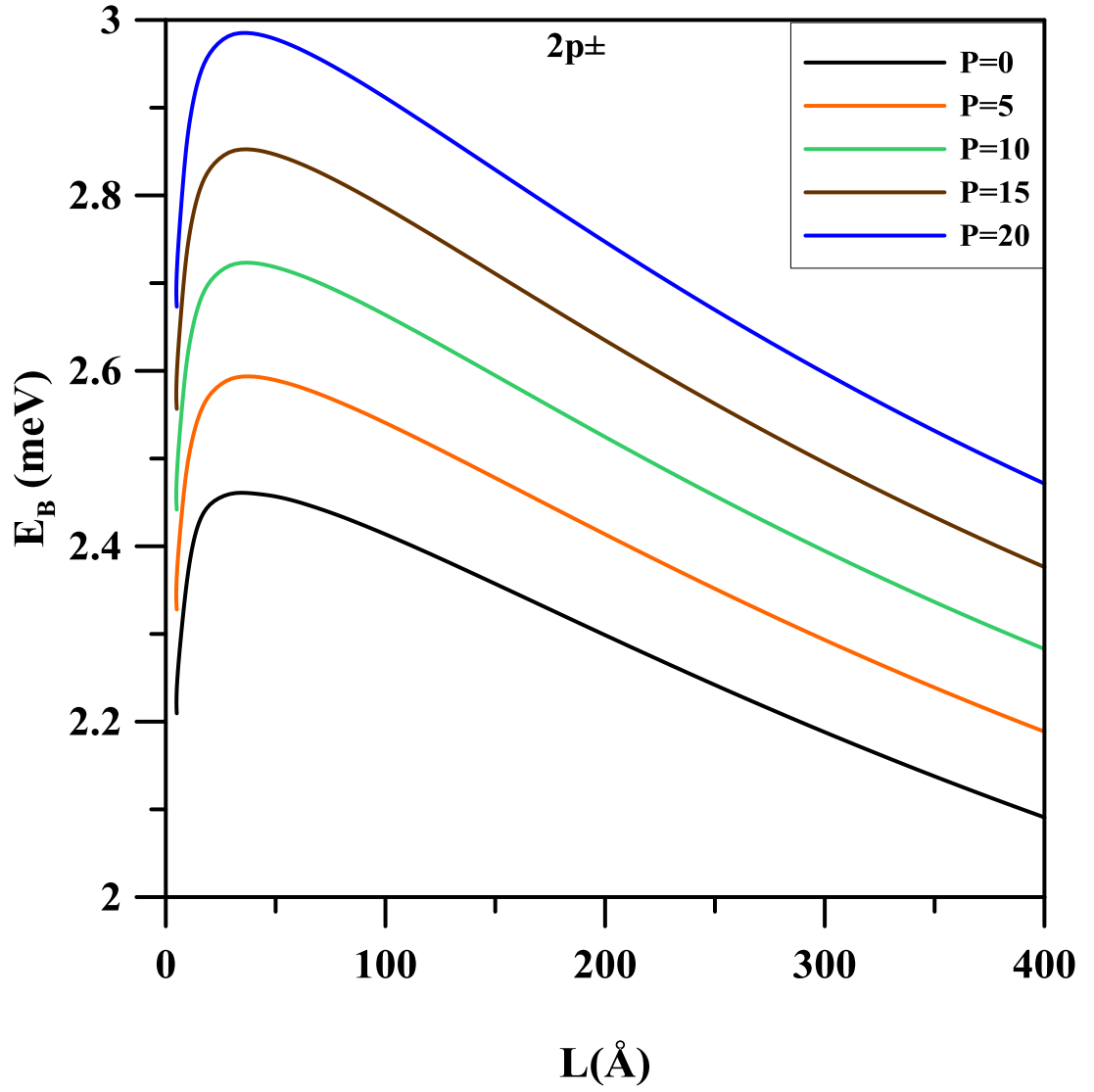
Şekil 5.1’de safsızlık atomunun 1s düzeyi bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi, farklı basınç değerleri için verilmiştir. Yapılan hesaplamalarda safsızlık atomunun konumu kuyu merkezinde alınarak alüminyum konsantrasyonu $x=0.3$ alınmıştır. Şekilde görüldüğü gibi bütün basınç değerleri için büyük kuyu genişliklerinde kuşatmanın etkisi çok zayıf olduğundan bağlanma enerjisi GaAs külçe değerine yakınsamaktadır. Kuyu genişliği (L_0) azatıldığında ise, elektron ile safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı artar ve buna bağlı olarak bağlanma enerjisinin arttığı görülmektedir. Yaklaşık olarak $L_0 \sim 50 \text{ \AA}$ değerinde ise elektron ile safsızlık atomunun aynı konumda bulunma olasılığı en büyük değerine ulaşır ve Coulombic bağlanma en kararlı duruma geçer. Daha küçük L_0 değerlerinde ise elektron çok enerjik olduğundan potansiyel engellerin içerisine sızmaları artar ve sistem çok geniş kuyularda olduğu gibi yeniden üç boyutlu karaktere sahip olur. Bu nedenle çok dar kuyular için bağlanma enerjisi azalarak külçe atomun düzeyine yakınsıyor.



Şekil 5.2 2s düzeyinde bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı basınç değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi.



Şekil 5.3 $2p_0$ düzeyinde bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı basınç değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi.



Şekil 5.4 $2p_{\pm}$ düzeyinde bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı basınç değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 5.2, 5.3, 5.4'te sırasıyla $2s$, $2p_0$ ve $2p_{\pm}$ donör düzeyleri için farklı basınç değerlerinde kuyu genişliğine göre bağlanma enerjisinin değişimi verilmiştir. Bütün donör düzeyleri için kuyu genişliğine göre bağlanma enerjisinin değişimi $1s$ durumuna benzer bir davranış göstermektedir. Uygulanan hidrostatik basıncın elektron ile safsızlık atomu arasındaki bağlanma üzerindeki etkisine bakıldığında beklendiği gibi kuyu genişliğinin basınçla azalmasına bağlı olarak bağlanma enerjisinin arttığı görülmektedir. Bilindiği gibi kuyu genişliğinin azalmasının sonucunda elektron ile safsızlık atomu arasındaki elektrostatik etkileşme artar ve bunun sonucunda yapı daha kararlı hale gelmektedir. $2s$ ve $2p_{\pm}$ durumlarından farklı olarak, $2p_0$ düzeyine karşılık gelen dalga fonksiyonunun özelliğine bağlı olup, $2p_0$ düzeyinde bağlanma enerjisinin hidrostatik basınca duyarlı olmadığı görülmektedir.

6. SONUÇ

Bu tez çalışmasının ilk aşamasında basınç altında kuantum kuyusunda bağlı enerji düzeyleri hesaplanmıştır. Elde edilen özfonksiyonlar kullanılarak, kuyu merkezinde bulunan safsızlık atomuna bağlı elektron için farklı düzeylere karşılık gelen bağlanma enerjisi hidrostatik basıncın ve kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak bulunmuştur. Elde edilen sonuçlara göre; hidrostatik basınç altında hidrojenik yapının daha kararlı duruma geldiği belirlenmiştir. Böylece, dışardan uygulanan basınç değerlerinin donör düzeylerinin uygulama alanına yönelik olarak düzenlenmesi için ayarlanabilir parametre olarak değerlendirilebileceği sonucuna varılmıştır.

KAYNAKÇA

1. **L. Esaki and R. Tsu**, (1969). “Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors” IBM Res. Note, RC-2414.
2. **R. Dingle, W. Wiegmann, and C. H. Henry**, (1974). Phys. Lett. 33, 827.
3. **T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern**, (1982). Rev. Mod. Phys. 54, 437.
4. **Jayam S. G. , Navaneethakrishnan**, (2003). “Effect of electric field and hydrostatic pressure on donor binding energies in a spherical quantum dot”, Solid–State Communications, 126, p 681-685.
5. **Peter A. J. ,** (2005). “The effect of hydrostatic pressure on binding energy of impurity states in spherical quantum dots”, Physica E, 28, p 225–229.
6. **S. Mori, T. Ando**, (1980). Surface Science
7. **R. Dingle**, (1975) in Festkörperprobleme XV (Advances in Solid State Physics), edited by H. J. Quesser, P. 21.
8. **L. Esaki and L. L. Chang**, (1976). Thin Solid Films 36, 285.
9. **H. Ehrenrich, J. Appl.**, (1961). Phys. 32, 2155.
10. **S. Adachi, J. Appl.**, (1985). Phys. 58, R1-R29.
11. **D.E. Aspnes**, (1976). Phys. Rev. B 14, 5331.
12. **B. Welber, M. Cardona, C.K. Kim, S. Rodriquez**, (1975). Phys. Rev. B 12, 5729.
13. **R.F. Kopf, M.H. Herman, M.L. Schnoes, A.P. Perley, G. Livescu, M. Ohring, J. Appl.**, (1992). Phys. 71, 5004.
14. **A. Montes, A.L. Morales, C.A. Duque**, (2002). Surf. Rev. Lett. 9, 1753.
15. **H. Sarı**, (1993). GaAs- $Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum çukurları yük taşıyıcıları ve eksitonların alan altındaki davranışları. *Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü* (Doktora Tezi) 117s, Sivas.
16. **Ü. Yeşilgül**, (2004). Magneto-donor sisteminin nanoyapılardaki elektronik ve optik özelliklerinin alan altındaki davranışı. *Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü* (Yüksek Lisans Tezi) 59s, Sivas.
17. **E. B. Al**, (2014). GaInAs /GaAs kuantum kuyularında hidrojenik düzeyler arasında kızılötesi geçişler. *Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü* (Yüksek Lisans Tezi) 54s, Sivas.
18. **Akbas H. , Erdoğan İ., Akankan O.**, (2011). “Hydrostatic pressure effects on impurity states in GaAs / AlAs quantum wells”, Süperlattices and Microstructures, 50, p 80-89.
19. **Bastard G.**, (1980). “Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model”, Physical Review B, 24, 8, p 4714-4722.
20. **H. Panahi and M. Maleki**, (2008). “Binding energies of donor states in GaAs-GaAlAs quantum wells under hydrostatic pressure”, Journal of Applied Sciences 8 (4): 636-641.
21. **G. J. Zhao, X. X. Liang and S. L. Ban**, (2003). “Binding energies of donors in quantum wells under hydrostatic pressure”, Physics Letter A 319,191-197.



ÖZGEÇMİŞ

Kişisel bilgiler

Adı Soyadı	Elif Şahin
Doğum Yeri ve Tarihi	Sivas, 10.09.1990
Medeni Hali	Bekar
Yabancı Dil	İngilizce
E-posta Adresi	elif_sahin_fzkci@hotmail.com

Eğitim ve Akademik Durumu

Lise	Orhangazi YDA Lisesi, 2008
Lisans	Cumhuriyet Üniversitesi, 2012