

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

**FARKLI KUANTUM KUYULARININ
ELEKTRİK ALAN ALTINDA DAVRANIŞLARI**

**Erman KÖSE
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

2009

Danışman: Doç. Dr. Emine ÖZTÜRK

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ' NE

Bu çalışma jürimiz tarafından, Fizik Anabilimdalı' nda Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan:

Üye:

Üye:

ONAY

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

.../.../2009

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ

Bu tez, Cumhuriyet Üniversitesi Senatosunun 05.01.1984 tarihli toplantısında kabul edilen ve daha sonra 30.12.1993 tarihinde C.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğünce hazırlanan ve yayınlanan “Yüksek Lisans ve Doktora tez yazım kılavuzu” adlı yönergeye göre hazırlanmıştır.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
SUMMARY.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	iv
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	viii
1.GİRİŞ.....	1
2. DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLER	3
2.1. Giriş	3
2.2. Heteroyapılar	5
2.3. Yarıiletkenler.....	10
2.4. Kuantum Kuyulu Yapılar.....	13
3. FARKLI ŞEKİLLERDEKİ KUANTUM KUYULARININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ	22
3.1. Giriş	22
3.2. Kuantum Kuyularının Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması.....	24
3.3. Farklı Şekillere Sahip Tekli Kuantum Kuyularının Elektronik Özellikleri.....	27
3.4. Farklı Şekillere Sahip İkili Kuantum Kuyularının Elektronik Özellikleri.....	37
3.5. Farklı Şekillere Sahip Üçlü Kuantum Kuyularının Elektronik Özellikleri.....	43
3.6. Farklı Kuantum Kuyularına Uygulanan Elektrik Alanın Etkisi.....	47
4. SONUÇ.....	65
5. KAYNAKLAR	64
6. ÖZGEÇMİŞ	66
7. EK.....	70

ÖZET**Yüksek Lisans Tezi****FARKLI KUANTUM KUYULARININ
ELEKTRİK ALAN ALTINDA İNCELENMESİ****Erman KÖSE****Cumhuriyet Üniversitesi****Fen Bilimleri Enstitüsü****Danışman: Doç. Dr. Emine ÖZTÜRK**

Bu çalışmada, ilk olarak yalıtılmış kare, eğik ve parabolik kuantum kuyuları için Schrödinger dalga denklemini nümerik olarak çözdük. Daha sonra kare-eğik, kare-parabolik, eğik-parabolik ve kare-eğik-parabolik şeklindeki birleştirilmiş kuantum kuyuları için enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını bulduk. Son olarak, dışarıdan uygulanan elektrik alan altında, farklı potansiyel profillerine sahip sistemlerin elektronik özelliklerinin önemli ölçüde değiştiğini gösterdik.

ANAHTAR KELİMELEER: GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs yapısı, potansiyel profili, dalga fonksiyonu, kare kuantum kuyusu (SQW), eğik kuantum kuyusu (GQW), parabolik kuantum kuyusu (PQW), ikili kuantum kuyusu (DQW), üçlü kuantum kuyusu (TQW), elektrik alan etkisi.

SUMMARY**MSc Thesis****BEHAVIORS OF DIFFERENT QUANTUM WELLS
UNDER APPLIED ELECTRIC FIELD****Erman KÖSE****Cumhuriyet University****Graduate School of Natural and Applied Sciences****Department of Physics****Supervisor: Doç. Dr. Emine ÖZTÜRK**

In this study, firstly we have numerically solved the Schrödinger wave equation for isolated square, graded and parabolic quantum wells. Secondly, we have founded the energy eigenvalues and wave functions for the combined potentials such as, square-graded, square-parabolic, graded-parabolic and square-graded-parabolic quantum wells. Finally, we have shown that the electronic properties of the systems with different potential profiles significant changes under external applied electric field.

KEY WORDS: GaAs- $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ structure, potential profile, wave function, square quantum well (SQW), graded quantum well (GQW), parabolic quantum well (PQW), double quantum well (DQW), triple quantum well (TQW), effect of electric field.

TEŐEKKÜR

Bu tez alıőmasında, tez konusunu öneren, alıőmalarımı yönlendiren, bilgi ve tecrübelerinden yararlandıđım danışman hocam Sayın Do. Dr. Emine ÖZTÜRK' e sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

ŞEKİLLER DİZİNİ

2. DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLER

Şekil 2-1 Bant aralıkları farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapı	5
Şekil 2-2 GaAlAs ve GaAs tabakaları arasında hareket eden bir yük taşıyıcı	7
Şekil 2-3 a) Yasak enerji aralıkları farklı iki yarıiletkenin bant diyagramı, b) Farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapıdaki bant süreksizlikleri. ΔE_c iletkenlik, ΔE_v valans bandında oluşan süreksizliklerdir.....	9
Şekil 2-4 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda $T=0$ ⁰ K için bant yapıları	11
Şekil 2-5 L genişlikli ve sonsuz yüksek duvarlı, bir boyutlu kuyu diyagramı	16
Şekil 2-6 GaAlAs arasına yerleştirilen a genişliğinde GaAs katmanını içeren bir örnek	19
Şekil 2-7 GaAs çukurunun elektronik yapısı	19
Şekil 2-8 Tekli kuantum kuyulu yapının şematik gösterimi	20
Şekil 2-9 İkili kuantum kuyulu yapının şematik gösterimi	20
Şekil 2-10 Çoklu kuantum kuyulu yapının şematik gösterimi	21
Şekil 2-11 Süperörgü yapının şematik gösterimi	21
3. FARKLI KUANTUM KUYULARININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ	
Şekil 3-1 (a) Kare şeklindeki kuantum kuyusunun şematik gösterimi.....	29
Şekil 3-1 (b) Yarı kare şeklindeki kuantum kuyusunun şematik gösterimi	29
Şekil 3-1 (c) Eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi	30
Şekil 3-1 (d) Yarı eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi	30
Şekil 3-1 (e) Parabolik kuantum kuyusunun şematik gösterimi	31
Şekil 3-1 (f) Yarı Parabolik kuantum kuyusunun şematik gösterimi	31

Şekil 3-2 (a) Kare kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	33
Şekil 3-2 (b) Yarı kare kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji öz değerinde elektronun bulunma olasılıkları	33
Şekil 3-2 (c) Eğik kuyunun potansiyel profili ve taban durumu enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	34
Şekil 3-2 (d) Yarı eğik kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji öz değerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	34
Şekil 3-2 (e) Parabolik kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji öz değerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	35
Şekil 3-2 (f) Yarı parabolik kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji öz değerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	35
Şekil 3-3 (a) Kare-eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi	38
Şekil 3-3 (b) Kare-parabol kuantum kuyusunun şematik gösterimi	38
Şekil 3-3 (c) Parabol-eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi	38
Şekil 3-4 (a) Kare-eğik kuyuların potansiyel profili ve ilk üç enerji öz değerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	41
Şekil 3-4 (b) Kare-parabol kuyuların potansiyel profili ve ilk üç enerji öz değerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	41
Şekil 3-4 (c) Parabol-Eğik kuyuların potansiyel profili ve ilk üç enerji öz değerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	42
Şekil 3-5 Kare-parabol-eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi	43
Şekil 3-6 Kare-Parabol-Eğik kuyuların potansiyel profili ve bağlı durumdaki enerji öz değerlerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	44

Şekil 3-7 (a-c) Parabolik-eğik, kare-eğik ve kare-parabolik ikili kuantum kuyuları için bariyer genişliğinin (L_b) bir fonksiyonu olarak elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	46
Şekil 3-8 (a) $F=20$ kV/cm için kare kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	49
Şekil 3-8 (b) $F=20$ kV/cm için yarı kare kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	49
Şekil 3-9 (a-d) $F=20$ kV/cm için kare kuantum kuyusunun $L_o = 400-700$ Å arasındaki kuyu genişliklerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları.....	50
Şekil 3-9 (e-h) $F=20$ kV/cm için kare kuantum kuyusunun $L_o = 800-1200$ Å arasındaki kuyu genişliklerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları.....	51
Şekil 3-10 (a) $F=20$ kV/cm için eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve taban durumu özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	52
Şekil 3-10 (b) $F=-20$ kV/cm için eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve taban durumu enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	52
Şekil 3-10 (c) $F=20$ kV/cm için yarı eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	53
Şekil 3-10 (d) $F=-20$ kV/cm için yarı eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	53
Şekil 3-11 (a) $F=20$ kV/cm için parabolik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	54
Şekil 3-11 (b) $F=20$ kV/cm için yarı parabolik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	54
Şekil 3-12 $F=20$ kV/cm için kare-parabolik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	57

Şekil 3-13 (a) $F=20$ kV/cm için kare-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	58
Şekil 3-13 (b) $F=-20$ kV/cm için kare-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	58
Şekil 3-14 (a) $F=20$ kV/cm için parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	59
Şekil 3-14 (b) $F=-20$ kV/cm için parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	59
Şekil 3-15 (a) $F=25$ kV/cm için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	61
Şekil 3-15 (b) $F=-25$ kV/cm için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	61
Şekil 3-16 (a) $F=60$ kV/cm için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	62
Şekil 3-16 (b) $F=-60$ kV/cm için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları	62
Şekil 3-17 Kare-parabolik-eğik üçlü kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın bir fonksiyonu olarak enerji seviyeleri arasındaki farklar	63
Şekil Ek-1 Eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi	70

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2-1 Bazı önemli heteroyapıların valans bant süreksizliğinin kuramsal ve deneysel sonuçları	7
Çizelge 3-1 Farklı şekillerdeki tekli kuantum kuyularının ilk iki enerji özdeğeri ve ilk iki enerji seviyesinde elektronun bulunma olasılıkları.....	32
Çizelge 3-2 Farklı şekillerdeki ikili kuantum kuyularının ilk üç enerji özdeğeri ve ilk iki enerji seviyesinde elektronun bulunma olasılıkları.....	39
Çizelge 3-3 Farklı şekillerdeki üçlü kuantum kuyularının ilk üç enerji özdeğeri ve ilk üç enerji seviyesinde elektronun bulunma olasılıkları	44

1. GİRİŞ

Yarıiletkenler, iletkenlik bakımından iletkenler ile yalıtkanlar arasında yer alırlar, normal halde yalıtkanlardır. Ancak ısı, ışık, basınç, elektrik ve magnetik alan altında veya gerilim uygulandığında bir miktar valans elektronu serbest hale geçer, yani iletkenlik özelliği kazanır. Bu şekilde iletkenlik özelliği kazanması geçici olup, dış etki kalkınca elektronlar tekrar atomlarına dönerler. Yarıiletkenler tabiatta basit eleman halinde bulunduğu gibi, laboratuvarında bileşik eleman halinde de elde edilirler. Yarıiletkenler kristal yapıya sahiptirler, yani atomları kübik kafes sistemi denilen belirli bir düzende sıralanmıştır. Yarıiletkenler, ısı, ışık, basınç elektrik ve magnetik alan uygulanmasıyla belirli oranda iletken hale geçirilebildikleri gibi, içlerine bazı özel maddelerin katılımıyla da iletkenlikleri arttırılabilmektedir. Katkı maddeleriyle iletkenlikleri arttırılan yarıiletkenlerin elektronikte ayrı bir kullanım yeri vardır.

Günümüz teknolojisinde yarıiletkenler oldukça yaygın bir kullanım alanına sahiptirler ve birçok elektronik devrenin ve düzeneklerin temel yapıtaşını oluştururlar. Bu nedenle de hayatımızda oldukça önemli bir yere sahiptirler. Örneğin; Germanyum (Ge); diyot, transistör ve entegre devrelerinde, Galyum Arsenid (GaAs); tünel diyot, lazer, foto-diyot led yapımında, Kurşun Sülfür (PbS); güneş pili, fotosel yapımında, İndiyum fosfür (InP) ise diyot ve transistör yapımında kullanılan yarıiletkenlerdir. Teknolojinin gelişmesine paralel olarak farklı özellik ve işlevlerdeki devre elemanlarının çok küçük hacim içerisine yerleştirilebilmeleri, yarıiletkenlerin temel tercih nedenlerinden biri olmuştur. Gelişen elektronik ve iletişim teknolojisi, daha hızlı çalışan ve daha küçük hacimli elektronik devre elemanlarına ihtiyaç duymaktadır. Bu yüzden yarıiletken fiziği bilim insanlarının yoğun bir şekilde uğraştıkları alan olmaktadır. Bu yeni tür yarıiletkenler, epitaksiyel olarak (çok ince tabakalar şeklinde atomların düzenli olarak dizilmesiyle) iki boyutlu veya düşük boyutlu olarak adlandırılan yapılardan oluşmaktadır. Bu yapıların oluşturulmasında MBE (Molecular Beam Epitaxy), MOCVD (Metal-Organic-Chemical Vapour Deposition) ve onların çeşitli türleri olan CBE (Chemical Beam Epitaxy) , ALE (Atomic Layer Epitaxy) gibi

epitaksiyel kristal büyütme teknikleri kullanılmıştır. Bu yöntemlerle oldukça değişik yapılar oluşturulabilir. Örneğin, iki GaAlAs yarıiletken tabakası arasına ince bir GaAs tabakası oluşturularak tekli kuantum çukuru, bu tabakaların periyodik olarak tekrarlanması halinde çoklu kuantum çukurları veya tabaka kalınlıkları ayarlanarak oluşturulabilen süperörgüler bu yöntemlerle kolayca büyütülebilir. Geliştirilen bu sistemlerde, boyut azaldıkça fiziksel özellikleri belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelmektedir ve bu sayede özel fonksiyonlara sahip devre elemanları tasarlanabilmektedir. Ayrıca düşük boyutlu sistemlerde taşıyıcıların yaşam süreleri külçe malzemelere göre daha farklıdır. Külçe yarıiletkenlerde madde içinde çeşitli kusurlar nedeniyle oluşan saçılmalar sonucu taşıyıcıların yaşam süreleri kısalmış, bu durumda külçe malzemelerin kullanım alanı daralmıştır. Oysa yapının boyutu azaldıkça saçılma oranları azalır ve taşıyıcıların yaşam süreleri önemli oranlarda artar.

Bu çalışmada; ilk olarak, son araştırma konuları içerisinde yer alan GaAs ve $Ga_{1-x}Al_xAs$ yapıda olan kare, eğik ve parabolik kuantum kuyularının tekli, yan yana çiftli ve üçlü dizilimleriyle oluşan potansiyel profilleri için, Schrödinger dalga denklemi nümerik olarak çözülmüştür. Daha sonra farklı şekilli ve dizimli kuantum kuyularına elektrik alan uygulayarak, bu yapıların elektrik alan altında potansiyel profillerinin, enerji özdeğerlerinin ve dalga fonksiyonlarının önemli oranda değiştiği ortaya konulmuştur. Farklı potansiyel profillerine sahip GaAs- $Ga_{1-x}Al_xAs$ yapılarının elektronik özelliklerinde, uygulanan elektrik alanın büyüklüğüne ve yönüne bağlı olarak ortaya çıkan değişimler, hem kuantum elektronik hem de fotonik aletlerdeki araştırmalarla, yeni yarıiletken aletlerin yapımında önemli rol oynamaktadır.

2. DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLER

2.1. Giriş

Yarıiletkenlerin bir “alttabaka (substrate)” üzerinde atomik tabakalar kalınlığında epitaksiyel olarak büyütülmesiyle oluşturulan düşük boyutlu yapılar, nano-yapılar olarak da adlandırılabilir. Bu düşük boyutlu yapılar, günümüzde çeşitli kristal büyütme yöntemleriyle yapılabilmektedir. Bu yöntemlerden birisi de “Molecular Beam Epitaxy (MBE)” yöntemidir. Yüksek vakum altında kontrollü bir şekilde yarıiletkenlerin buharlaştırılarak epitaksiyel olarak büyütüldüğü bu yöntemde, büyütme esnasında yarıiletken kristal içinde oluşabilecek kusurlar da en aza indirilmektedir. Dolayısıyla çok saf düşük boyutlu yarıiletken yapılar oluşturmak mümkün olmaktadır.

Düşük boyutlu sistemlerin külçe malzemelere göre ilginç olmaları, bu sistemlerdeki boyut farklılığından kaynaklanır. Fiziksel bir olayın anlaşılmasında üzerinde çalışılan sistemin boyutu önemli bir parametredir. Dışarıdan uygulanan bir etki ile bir sistemi daha düşük boyuta indirgeyerek sistemin bazı önemli parametreleri (elektronik yapı, yük yoğunluğu, saçılmaya bağlı hareketlilik) ayarlanabilir duruma getirilebilir. Böylece uygulama alanında amaca yönelik koşullar sağlanabilir. Örneğin; bu sistemlerde elektron veya boşluk yoğunluğu geniş bir dilimde istenildiği biçimde değiştirilebilir. Ayrıca düşük boyutlu sistemlerde dar ve iyi tanımlanmış enerji durumlarını elde etmek mümkündür. Bu da, böyle sistemlerin çok iyi belirlenmiş kesikli enerji düzeylerini test edebilme olanağını sağlar. Örneğin, örgü sabitleri birbirine yakın farklı türde yarıiletkenler bir araya getirilerek yük taşıyıcılarının uzaysal olarak hareketi sınırlandırılır. Bu sınırlamalarla külçe materyallerin sürekli enerji durumları yerine, kuantum etkileri sonucu kesikli enerji değerleri elde edilir.

Düşük boyutlu yapılarda, büyütme doğrultusunda oluşan kuantizasyon, yüklü taşıyıcıların hareketini büyütme doğrultusunda sınırlayacağından, külçe yapılardan farklı olarak üç boyut yerine iki boyutta hareketten bahsedilebilir. Sanki iki boyutta hareketin söz konusu olduğu bu yapılarda, iki boyutta

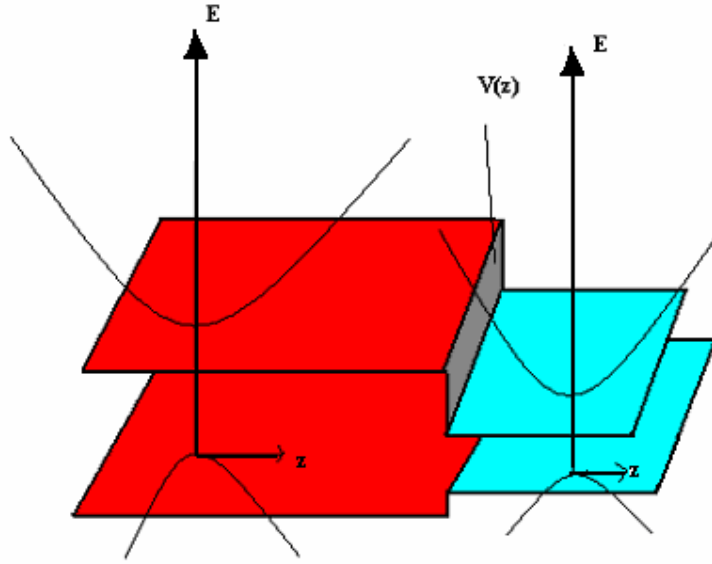
sıkıştırılmış elektron gazı özelliđi gözlenir. Bu durum metallerde olduđu gibi, düşük sıcaklıklarda yapıdaki saçılma olaylarının azalması sonucunda, elektronların mobilitelerinde ortaya çıkan artışa karşılık gelmektedir. Dolayısıyla külçe yapılardan farklı olarak, düşük boyutlu yapılarda gözlenen yüksek mobiliteden yararlanarak daha hızlı çalışabilen elektronik düzenekler oluşturmak mümkündür.

İki boyutlu sistemlerin elektronik açıdan bir başka ilginç özelliđi de, yük taşıyıcılarının yaşam süreleri ile yük taşıyıcılarının yoğunluklarının deđiştirilebilir olmasıdır. Düşük boyutlu sistemler üzerinde ilk çalışma, Esaki ve Tsu tarafından yapılmıştır [1].

Düşük boyutlu yarıiletken yapılarda gözlenen fiziksel olayların açıklanabilmesi için yapılan çalışmalar günümüzde de yoğun olarak devam etmektedir [2,3].

2.2. Heteroyapılar

Birbirinden farklı iki yarıiletkenin bir araya getirilmesiyle oluşturulan yapıya “heteroyapı” denir. Heteroyapıyı oluşturan külçelerin benzer yapıda olmaları, uygulamada önemli sonuçların alınmasını sağlar.



Şekil 2-1 Bant aralıkları farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapı

Heteroyapıyı oluşturan bir yarıiletkenin kristal potansiyeli ile elektronik yapısının, ara yüzey düzlemine kadar değişmediği kabul edilir. Ara yüzeyde elektronik yapı ve kristal potansiyel, aniden diğer külçenin özelliklerini sergileyecek şekilde değişir. Teknolojik uygulamada önemli olan yarıiletkenlerin çoğu, aynı simetri grubuna sahip olduklarından heteroyapı için kabul edilen koşullar sağlanmış olur. Genel olarak külçelerin örgü sabiti, heteroyapı için uygunluk sabiti olarak değerlendirilir. Benzer örgüye sahip materyaller arasında yapılan ekleme ile yapının iletim ve valans bantlarında süreksizlikler meydana gelir. Bu süreksizlikler tekrarlanarak kuantum çukuru/çukurlarını oluştururlar ve böylece yük taşıyıcılarının büyütme doğrultusundaki hareketlerini sınırlayarak kuşatmaya neden olurlar. Bu yapı içinde artık kuantum etkileri söz konusu olur ve enerji durumları kesikli bir spektrum oluştururlar. Yarıiletken mikro yapı

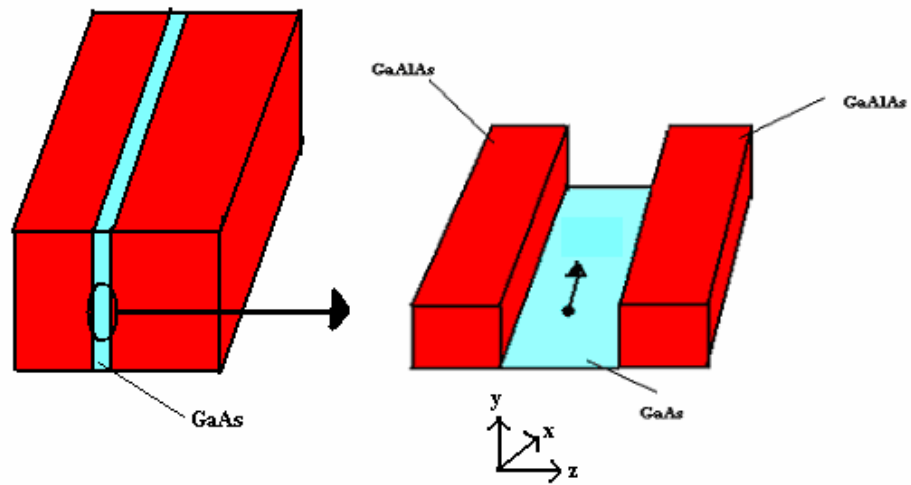
uygulamalarında GaAs ve GaAlAs materyalleri sıkça kullanılır. Şekil 2-1 'de bant aralıkları farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapı görülmektedir.

Çizelge 2-1 bazı önemli heteroyapıların örgü sabitleri arasındaki farkları ve valans bant süreksizliklerini göstermektedir. Örgü sabitleri birbirine yakın yarıiletkenlerin oluşturdukları heteroyapıda, eğer bu yarıiletkenin temel bant aralığı direkt ise, bant süreksizlik profili, kuantum çukuru modelini temsil eder. Kuantum çukurunu oluşturan yarıiletkenlerin bant yapıları, bant sınırlarında benzer olduklarından dolayı engelde ve çukurda etkin kütle farkı önemsenmeyebilir. Bir boyutlu potansiyel içinde kuşatılan elektron ve boşluk, kuşatma doğrultusuna dik (x-y) düzleminde serbest parçacık karakterinde olup sanki iki boyutta hareket ediyormuş gibi davranış gösterirler. Şekil 2-2'de GaAlAs ve GaAs tabakaları arasında hareket eden bir yük taşıyıcı şematik olarak görülmektedir. Malzemeler katkılı olmadıkları için bant bükülmesi görülmez ve potansiyel iki basamak potansiyelinin yan yana gelmesiyle oluşur. Şekil 2-2'de verilen kuantum kuyusundaki elektronun davranışı incelenirse, elektron en düşük enerjiyi, yani GaAs tabakasını tercih edecektir. Heteroyapı bileşenlerinin birinde katkı maddelerinin olması durumunda heteroyapıda bir uzay yükü bölgesi oluşur ve bu durum bant bükülmesine neden olur. Heteroyapılarda mobilite, GaAs ve GaAlAs uygulanan modülasyon katkılama tekniği ile artırılabilir [4].

Elektronun dalga fonksiyonunun kuantum kuyusu içinde duran dalga formunda olması, GaAs kuyusu dışında ise dalga fonksiyonunun üstel olarak azalması beklenir. Elektronun enerjisi GaAs'ın iletim bandından (E_c) itibaren, boşluğun enerjisi ise valans bandından (E_v) itibaren ölçülür. Etkin kütle küçüldükçe en düşük kuşatılmış durum, iletim bant (E_c) sınırından yukarı kaydırılır ve daha da küçültülürse dalga fonksiyonunun kuyunun dışına sızması beklenir.

Çizelge 2-1 Bazı önemli heteroyapıların valans bant süreksizliğinin kuramsal ve deneysel sonuçları

Heteroyapı	(örgü sabitleri arasındaki fark) Å	Kuramsal(ΔE_V) eV	Deneysel(ΔE_V) eV
GaAs-Ge	0.00	0.47	0.56
GaP-Si	0.01	0.41	0.8
AlAs-GaAs	0.01	0.43	0.5
AlAs-Ge	0.01	0.89	0.95
ZnSe-Ge	0.00	1.51	1.52
ZnSe-GaAs	0.00	1.04	0.96
Si-Ge	0.22	0.48	-



Şekil 2-2 GaAlAs ve GaAs tabakaları arasında hareket eden bir yük taşıyıcı

İletim bandı sınırındaki elektronların kuşatılmasının açıklandığı yöntemle valans bandındaki boşlukların kuşatılması da açıklanabilir. ΔE_c potansiyel kuyusuna karşılık ΔE_v değerinde bir potansiyel engeli elde edilir. Bu durumda valans bandında, GaAs külçesinin valans bandının tepesinden daha düşük enerjili durumların elde edilmesi beklenir. Bu durumların külçe bant sınırına göre konumları iletim bandındaki gibi değildir. Çünkü potansiyel yüksekliği ve etkin kütleler farklı değerdedir. Oluşturulan yapıya ışık gönderilirse yasak bandın büyüklüğüne eşit veya daha büyük enerjili fotonlar valans elektronları tarafından soğurulur. Bu incelemelere göre kuşatılmış elektronun en düşük enerjili durumu GaAs külçesinin valans bandının tepesinden daha altıdır. Bunun sonucu olarak kuantum kuyusu yapısında elektronun valans bandından iletim bandına gidebilmesi için GaAs'ın yasak bant aralığından daha büyük bir enerjiye ihtiyacı vardır. Bu enerji;

$$E = E_g + E_{el} + E_{hl} \text{ dir.} \quad (2.1)$$

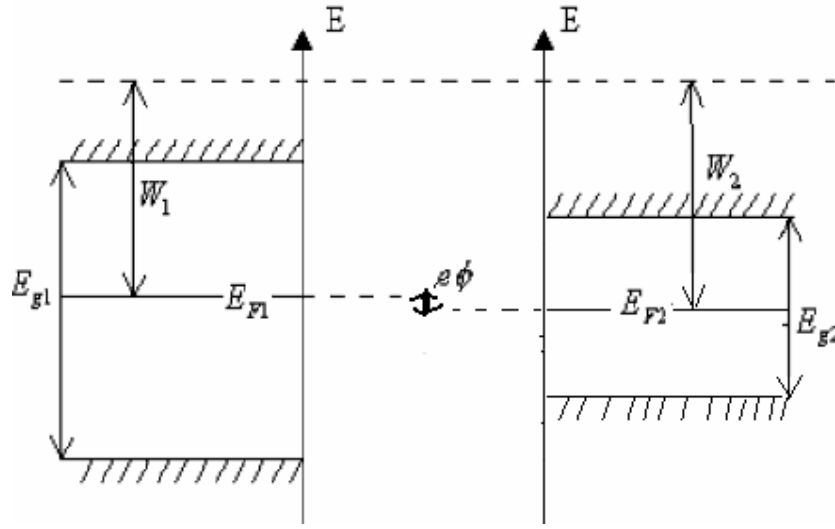
E_{el} :Kuşatılmış elektronun en düşük enerjili durumu

E_{hl} :Kuşatılmış boşluğun en düşük enerjili durumu

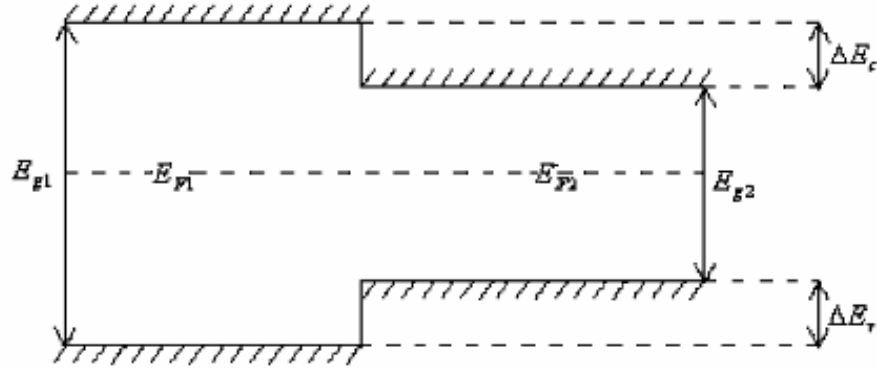
E_g : Yasak bant aralığı

Bu ilk durumlar arası geçiş, kuantum kuyusu için soğurma ve yayma eşik değerlerini belirler. Yani kuantum kuyusunun yasak bant aralığı kuşatılma etkilerine bağlıdır. Kullanılan alaşımda özel bir alüminyum konsantrasyonu seçilirse iletim ve valans bantlarının süreksizlikleri ayarlanabilir. ΔE_c ve ΔE_v ' nin toplamı heteroyapıyı oluşturan yarıiletkenlerin enerji aralıkları arasındaki farka eşit olmak zorundadır. $x = 1$ değeri için yasak enerji aralıkları arasındaki farkın % 70' i iletkenlik, % 30' u ise valans bandından kaynaklanmaktadır. x değerine bağlı olarak bu oranlar da değişir. Örneğin; $x = 0.45$ değeri için farkın % 60' ı iletkenlik, % 40' ı valans bandından kaynaklanır. Yasak enerji aralıkları farklı iki yarıiletkenin bant diyagramı ve bu yarıiletkenlerin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapıdaki bant süreksizlikleri Şekil 2-3'de gösterilmektedir. Burada E_g , yasak enerji aralığını, E_f ise Fermi enerjisini göstermektedir. Sonuçta kuantum

kuyusu yapısının bant aralığı ile kuşatılmış seviyelerin konumu değiştirilebilir. Ayrıca kuyu genişliğinin değiştirilmesi, kuantum kuyusunun bant aralıklarının değişmesine neden olur. Böylece kuantum kuyusunun parametreleri ile sistemin elektriksel ve optiksel özellikleri ayarlanabilir.



(a)



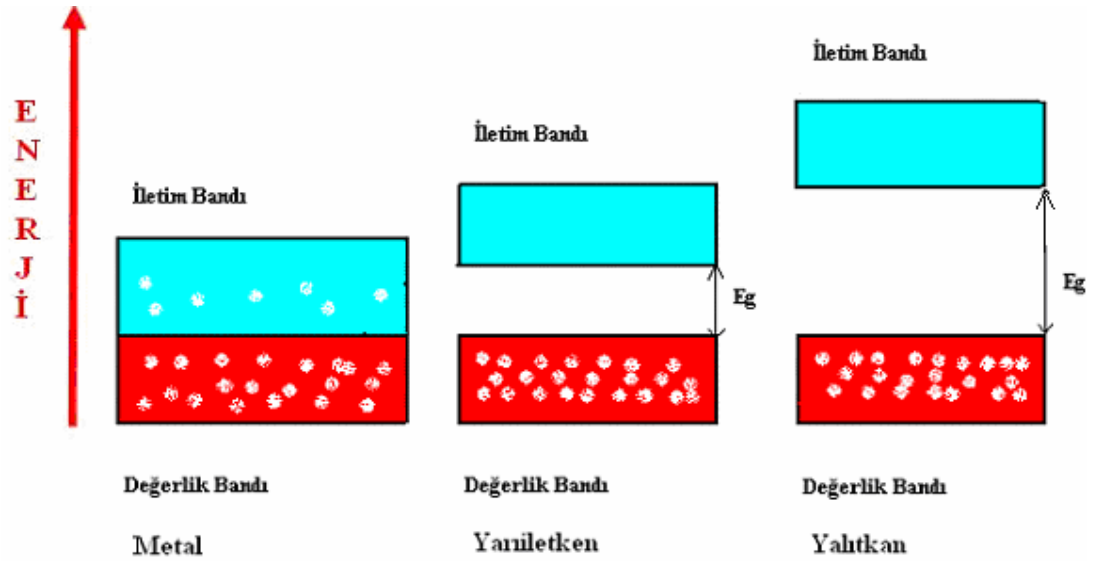
(b)

Şekil 2-3 a) Yasak enerji aralıkları farklı iki yarıiletkenin bant diyagramı, b) Farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapıdaki bant süreksizlikleri. ΔE_c iletkenlik, ΔE_v ise valans bandında oluşan süreksizliklerdir.

2.3. Yarıiletkenler

Her katının karakteristik bir enerji bant yapısı vardır ve katılardaki bant yapılarının çeşitliliği, elektrik iletiminde belirleyici özellikler taşır. Şekil 2-4 metal, yarıiletken ve yalıtkanın bant yapılarını göstermektedir. Katıların en önemli ve ilginç sınıfını oluşturan yarıiletkenler, iletkenlikleri metaller ve yalıtkanlar arasında olan, sıcaklığın artmasıyla iletkenlikleri artan maddelerdir. Diğer bir önemli özellikleri ise, katkılama (doping) yoluyla iletkenliklerinin artmasıdır. Bu özellikleriyle yarıiletkenler, günümüzde birçok elektronik devrenin ve çeşitli düzeneklerin temel yapı taşlarını oluşturarak, hareketli yüklerin kaynağını sağlamak için kullanılır ve yüklerin aktığı, denetlendiği ortamı oluşturur.

1980' li yıllara kadar kristallerin büyütülmesindeki yetersizlikten dolayı teknoloji, Ge (Germanyum) ve Si (Silisyum) gibi temel yarıiletkenler üzerine kuruluydu. Daha sonraları geliştirilen yöntemler ile yüksek mobiliteli transistörler ve devre elemanları yapılmaya başlandı. Sözü edilen MBE ve MOCVD gibi kristal büyütme yöntemleriyle birkaç atomik tabakalı düşük boyutlu sistemlerin çok temiz olarak büyütülmesi, yeni teknolojik sonuçlar doğurmuş ve buna bağlı olarak hemen hemen bütün ülkelerin yarıiletken araştırma laboratuvarlarının ön sırasında yer alan yeni araştırma konuları ortaya çıkmıştır. Bu yöntemler ile elde edilen III-V yarıiletken bileşiklerine örnek olarak GaAs-GaAlAs, InAs-GaSb ve GaSb-AlSb bileşiklerini verebiliriz. Ge ve Si gibi temel yarıiletken malzemeler oksitlenme avantajının yanında indirekt gap ve düşük elektron hareketlilikli olduklarından, yüksek elektronik performanslı (yüksek iletkenlikli, frekans yükselticili) devre elemanlarının yapılmasına olanak tanımamaktadırlar. GaAs, InP ve GaSb gibi direkt gapli materyaller ise yüksek hareketlilikli yarıiletken yapılarıdır.



Şekil 2-4 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda $T=0$ K için bant yapıları

Saf yarıiletkenlerin bant yapısına bakıldığında mutlak sıfır sıcaklığında (0 K) tamamen elektronlarla dolu olan banda valans bandı ve bunu takip eden ilk boş banda ise iletkenlik bandı denir. Bu iki bant arasında kalan enerji aralığı, yasak bant aralığı (E_g) dır. Bu aralık yarıiletkenlerde 3 eV'a eşit veya daha küçüktür. Yalıtkanlarda ise; yaklaşık olarak 10 eV civarındadır. Yarıiletkenlerin en belirgin özelliği, mutlak sıfır sıcaklığında yalıtkan özellik göstermesidir. Bu maddeler düşük sıcaklıkta iletme hiçbir katkıda bulunmazken, sıcaklığın artırılmasıyla özdirençleri azalarak iletme katkıda bulunurlar. Saf bir yarıiletkende elektriksel bir iletimin gerçekleştirilmesi, elektronların valans bandından sıcaklığın etkisiyle iletkenlik bandına geçmesi ile mümkün olur. Bu durum yarıiletkenlerin elektriksel iletkenliğinin sıcaklığa sıkı sıkıya bağlı olduğunu gösterir.

Yarıiletkenlerde elektronların valans bandından yasak bant aralığı miktarında enerji kazanarak iletim bandına geçmesi sonucunda, valans bandında elektronların bıraktıkları yerlere boşluk adı verilir. Boşluklar pozitif yüklü tanecikler gibi davranırlar ve elektrik alanı altında elektronlarla zıt yönde hareket edip, aynı yönde akım yoğunluğu oluştururlar. Böylece yarıiletkenlerde iki tür

taşıyıcı varlığından bahsedilir. İdeal bir yarıiletken kristalde, örgü kusurları ve yabancı atomların oluşturdukları safsızlıklar yoktur ve bu yarıiletkenler katkısız veya saf yarıiletkenler olarak bilinirler. Böylece bir yarıiletkendeki elektron yoğunluğu n , boşluk yoğunluğu p ise, $n = p = n_i$ olacaktır. Burada n_i , yarıiletkendeki saf taşıyıcı yoğunluğudur.

Saf yarıiletkenlerdeki kuvvetli bağlanma yüzünden oldukça fazla ek enerji harcamadıkça oldukça az sayıda taşıyıcı oluşur. Bundan dolayı elektriksel özellikleri yalıtkanlarınkine benzer ve elektronik aletlerde kullanmak için pek uygun değildirler. Ayrıca, yarıiletkenlerde sıcaklığın artırılması yöntemiyle oluşturulan taşıyıcılarla yapılan işlemlerde birçok sorunlarla karşılaşmaktadır. Örneğin; sıcaklık arttıkça istenilmeyen fonon saçılmalarının artması ve elektrik alan etkisi ile tam olarak kontrol edilemeyişlerinden dolayı yüksek sıcaklıklarda işlem yapan yarıiletken cihazlarda performans belli bir limiti aşamaz. Bu sorunları ortadan kaldırmak ve iletimi artırmak için katkılama yöntemi kullanılır. Bu yöntemle katkı atomuna bağlı olarak bir kristalde elektron veya boşlukların üstünlüğü sağlanabilir. Yani; yarıiletkenlerde katkılama sonucunda p-tipi veya n-tipi yarıiletken oluşturmak mümkündür. Kullanılan safsızlık yoğunluğu 10^6 ile 10^8 arasında ana madde atomuna karşılık bir safsızlık atomudur. Bu yüzden fiziksel ve kimyasal özelliklerin çoğu temel olarak ana yarıiletkenin özellikleridir. Yalnız elektriksel özellikler önemli ölçüde değişir ve yapay maddenin daha çok metallere benzemesine neden olur.

2.4. Kuantum Kuyulu Yapılar

Newton mekaniğinin mikroskobik ölçekteki olayları açıklayamaması 20. yüzyılın başlarında kuantum mekaniğinin doğmasına neden olmuştur. Newton mekaniği, uygulanmış kuvvetlerin etkisi altındaki bir parçacığın herhangi bir anda konumu, hızı, ivmesi vb. gibi niceliklerin tam bir doğrulukla ölçülebileceğini garanti sayar. Bu makroskobik ölçekte doğrudur. Kuantum mekaniği ise mikroskobik düzeyde bunun doğru olmadığını, yani bir parçacığın konumunun ve hızının aynı anda tam bir doğrulukla belirlemeyeceğini söyler (Belirsizlik İlkesi). Kuantum mekaniğine göre hareket eden tüm parçacıklara bir De Broglie dalgası eşlik eder ve bu dalganın matematiksel fonksiyonuna parçacığın dalga fonksiyonu denir, $\psi(x, y, z, t)$ ile gösterilir. ψ kendi başına bir fiziksel anlama sahip değildir, fakat $|\psi|^2$ parçacığın o anda orada bulunma olasılığını belirler. Kuantum mekaniğinin sorunu, dış kuvvetlerin etkisi ile hareketi sınırlanan bir cisim için dalga fonksiyonunu tayin etmektir. Dalga fonksiyonunun uyması gereken koşullar sırasıyla; i) $|\psi|^2$ 'nin tüm uzay üzerinden integrali sonlu olmalıdır, ii) ψ 'nin kısmi türevleri sonlu olmalıdır, iii) ψ normalize edildiğinde tüm uzay üzerinden integrali bire eşit olmalıdır. Nasıl ki Newton'un II. hareket kanunu klasik mekaniğin temel denklemidir, Schrödinger denklemi de kuantum mekaniğinin temel denklemidir. Klasik mekanikte gerilmiş bir ipde, ipin x ekseninden ayrılma miktarı y ve yayılan dalgaların hızı v iken genel dalga denklemi;

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \frac{1}{v^2} \frac{d^2y}{dt^2} \quad (2.2)$$

şeklindedir. Bu denklemin bütün çözümleri;

$$y = F(t \pm x/v) \quad (2.3)$$

biçiminde olup, sabit genişlikli ve sabit açısal frekanslı dalgalar için,

$$y = Ae^{-iw(t-x/v)} \quad (2.4)$$

şeklindedir.

Toplam enerjisi E , momentumu P olan ve $+X$ yönünde hareket eden serbest bir parçacığın dalga fonksiyonu;

$$\Psi = Ae^{-(2\pi i/h)(Et-Px)} \quad (2.5)$$

şeklindedir. Bu fonksiyondan toplam enerjisi,

$$E = \frac{P^2}{2m} + V \quad (2.6)$$

olan bir parçacığın tek boyutta zamana bağlı Schrödinger denklemi;

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V\Psi = E\Psi \quad (2.7)$$

şeklindedir.

Bir parçacığın üç boyutta zamana bağlı Schrödinger denklemi ise;

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z, t)\Psi \quad (2.8)$$

şeklinde ifade edilir.

Kuantum mekaniği, V potansiyel fonksiyonunun değişik biçimleri için Schrödinger denklemini çözmekle uğraşır. Serbest bir parçacığın tek boyutlu dalga fonksiyonu,

$$\Psi(x, t) = \Psi(x)\Psi(t) \quad (2.9)$$

şeklinde ifade edilir.

Şans eseri olarak, sabit kuvvetler tarafından etkilenen parçacıkların bütün fonksiyonlarının zamanla değişimleri, serbest bir parçacığıinkiyle aynı biçime sahiptir. Bu durumda tek boyutta zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0 \quad (2.10)$$

şeklindedir.

Bir parçacığın üç boyutta zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ise;

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

şeklinde ifade edilir.

Genellikle Schrödinger kararlı hal denklemi, E enerjisinin yalnızca belirli değerleri için çözülebilir. Yani çözümde elde edilen dalga fonksiyonu için, istenilen nitelikleri sağlamalıdır. Ancak böyle bir durumda sistem kararlı halde olabilir. Bu durum, enerjinin kuantumlu olduğunu belirtir, enerjinin kuantumlu olması bütün kararlı sistemlere özgü evrensel bir olay olarak ortaya çıkar.

Schrödinger denkleminin çözümlerinde, enerji kuantizasyonunun ortaya çıkmasına çok benzeyen alışılmış bir örnek, her iki ucundan gerilmiş L boyunda bir ipte meydana gelen duran dalgalarıdır. Burada, bir tek dalganın bir tek doğrultuda devamlı yayılması yerine, ipin her iki ucundaki y uzanımı sıfır olmak koşuluyla dalgalar aynı anda hem +x hem de -x yönlerinde ilerlemektedir. Uzanım için kabul edilebilir bir $y(x, t)$ fonksiyonu, aynen dalga fonksiyonu gibi, süreklilik, sonluluk ve tek değerlilik koşullarını sağlamalıdır. Bu durumda, bu sınırlandırmalara uygun olan dalga denkleminin yegane çözümleri, dalga boylarının;

$$\lambda_n = \frac{2L}{n+1} \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots) \quad (2.12)$$

olduğu durumlardır.

Schrödinger kararlı durum denkleminde ($H\Psi_n = E_n\Psi_n$), E_n enerji değerlerine özdeğerler ve buna karşılık gelen ψ_n dalga fonksiyonlarına öz fonksiyonlar denir. Buradaki n sayısı kuantum sayısıdır. Boyutları L olan bir kuyu içerisine kapatılmış bir parçacık için Schrödinger denkleminin çözümü kuantum mekaniği açısından önemlidir. Böyle bir parçacık için kuyunun duvarlarının sonsuz sertlikte olduğu, yani çarpışmalar sonucunda enerji kaybının olmadığı varsayılırsa ve bu kutu içerisindeki potansiyel (V) sıfır ise, kutu içindeki bir parçacık için bir boyuttaki Schrödinger denklemi;

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \quad (2.13)$$

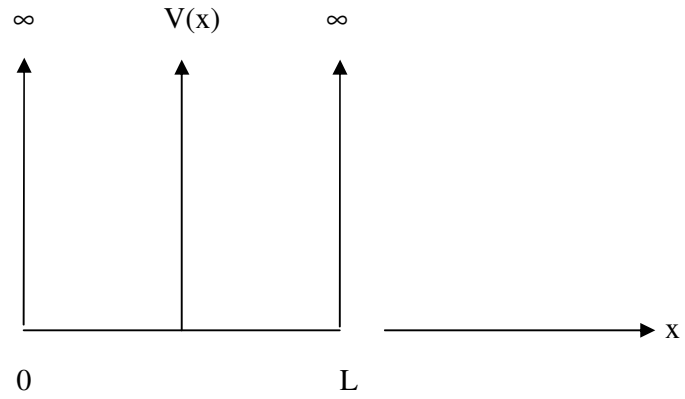
şeklindedir.

Bu parçacık için potansiyel;

$$0 < x < L \text{ için } V(x) = 0 \quad (2.14)$$

$$x < 0 \text{ veya } x > L \text{ için } V(x) = \infty \quad (2.15)$$

şeklindedir. Şekil 2-5 de L genişlikli ve sonsuz yüksek duvarlı, bir boyutlu kuyu diyagramı gösterilmiştir.



Şekil 2-5 L genişlikli ve sonsuz yüksek duvarlı, bir boyutlu kuyu diyagramı

Buradaki Schrödinger denklemi ;

$$\Psi = A \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \quad (2.16)$$

$$\Psi = B \cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \quad (2.17)$$

şeklinde iki çözüme sahiptir.

Sınır koşullarına uygun dalga fonksiyonu Denklem (2.16)'daki fonksiyondur.

$x = 0$ ve $x = L$ için $\psi = 0$ olduğundan;

$$\sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x L = 0 \quad (2.18)$$

olmalıdır. Bunun için de; $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L$ nin ' π ' nin tamsayı katları yani;

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (2.19)$$

olması gerekir. Buradan sistemin enerji düzeylerini oluşturan özdeğerler;

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (2.20)$$

olarak bulunur. Görüldüğü gibi sonsuz derin kuyu içine hapsedilmiş bir parçacığın alabileceği enerji değerleri, klasik mekaniktekinin aksine sürekli değil kesiklidir. Yani parçacık, ancak belli enerji düzeylerinde bulunabilir. Bir boyutlu kutudaki parçacık için E_n değerlerine karşılık gelen öz fonksiyonlar ise;

$$\Psi_n = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (2.21)$$

şeklindedir. Bu fonksiyon;

$$\int_0^L \Psi_n^*(x) \Psi_n(x) dx = 1 \quad (2.22)$$

eşitliği ile normalize edildiğinde, parçacığın normalize edilmiş dalga fonksiyonu;

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (2.23)$$

şeklinde olur. Bu koşullarda parçacığın, üç boyutta normalize edilmiş dalga fonksiyonu ise;

$$\Psi_n = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L} \quad (2.24)$$

şeklindedir.

Kuyu içinde belirli bir noktada parçacığın var olma olasılığı, farklı kuantum sayıları için çok farklı olabilir. Örneğin, $n=1$ de parçacık kuyunun tam ortasında maksimum olasılıkta bulunurken, $n=2$ için bu noktada olasılığı sıfır olur.

Kuyu duvarlarının sonsuz sertlikte olmadığı durumlarda kuyunun dışında potansiyel enerji, sonlu bir nicelik olup uçlarının hafifçe hareket etmesine olanak verecek şekilde titreşen bir ipin durumunu andırır. Bu durumda kuyu dışında ψ dalga fonksiyonları sıfır değildir. Parçacığın enerjisi, kuyu dışındaki potansiyel değerinden küçük olmasına rağmen, yine de parçacığın kuyu dışında belirli bir

bulunma olasılığı vardır. Bu durumu Heisenberg Belirsizlik İlkesi kolaylıkla açıklayabilmektedir. Kuantum mekaniğinde döteron kuramı ve tünel olayı buna iyi bir örnek oluşturur. Schrödinger denklemi değişik potansiyel enerjiler içinde bulunan parçacıklar için çözülmüş ve deneylerle ne kadar tutarlı olduğu kanıtlanmıştır.

Bilindiği gibi, bir elektronun kararlı enerji durumu ve bu durumda bulunan elektronu tanımlayan dalga fonksiyonu, onun potansiyel enerjisini de içeren Schrödinger dalga denkleminin çözümüdür. Örneğin, bir hidrojen atomu için potansiyel enerji değeri;

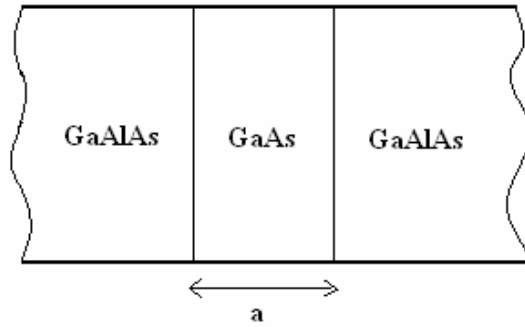
$$V = \frac{Ze^2}{r} \quad (2.25)$$

ifadesi ile belirtilir. Burada Z hidrojenin atom numarası, e elektronun yükü, r ise hidrojen atomunun yarıçapıdır.

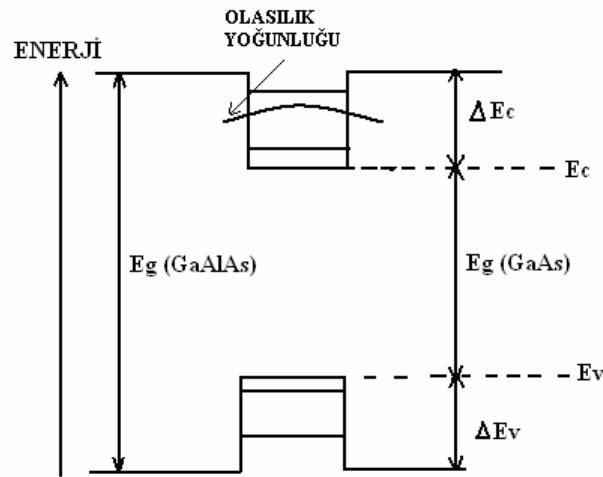
Bilindiği gibi, heteroyapı farklı yarıiletkenlerin birbirine eklenmesi (birbiri üzerine büyütülmesi) ile oluşturulur. Yapı bileşenlerinin elektronik bant yapısına ve diğer fiziksel parametrelere bağlı olarak, ara yüzeyde bant süreksizliği meydana gelir. Bu süreksizlik, iletim ve valans bantları kenarında basamak fonksiyonu ile tanımlanır. Bu basamağın yüksekliğine bant süreksizliği (bant-offset) adı verilir. Örgü sabitleri birbirine yakın yarıiletkenlerin oluşturduğu heteroyapıda eğer bu yarıiletkenlerin temel bant aralığı direkt ise, bant süreksizliğinin profili kuantum çukuru modelini temsil eder. Yarıiletken mikroyapı uygulamalarının çoğunda basit heteroyapılar esas alınır. Uygulamada GaAs ve GaAlAs materyalleri sıkça kullanılır. Alüminyum konsantrasyonunun % 30-35 dolayında alındığı yapılarda iletim bandındaki engel yüksekliğinin büyük olmasına karşın, alaşım direkt bant özelliğini korur. Çalışmamızda üzerinde duracağımız heteroyapı modeli bu özelliكتedir.

Ara yüzeyin “aniden değişme” doğasına bağlı koşullar GaAs-AlAs yapılarda iyi bir biçimde sağlandığı için, kalınlığı kontrol edilebilen bu tür materyalleri kullanarak çok katmanlı (tabakalı) daha karmaşık yapıları oluşturmak olasıdır. Bu sistemlerin en basit olanı Şekil 2-6 da verilmiştir. Burada ince GaAs katmanı iki kalın GaAlAs alaşımı arasına yerleştirilmiştir. Bu çift heteroeklem

sistemine genellikle “kuantum çukuru” adı verilir. Şekil 2-7 deki elektronik yapıya bakıldığında bu isimlendirmenin uygun olduğu görülür. Bu elektronik yapı, önceki bölümde açıklanan tek heteroyapı sonuçlarının kullanılması ile elde edilir. Elektronik yapı aniden değiştiği için ve iki materyalin örgü sabitleri özdeş olduğundan, katkı maddesinin olmaması durumunda, potansiyel ardışık iki basamak potansiyelin toplamı biçiminde oluşur.

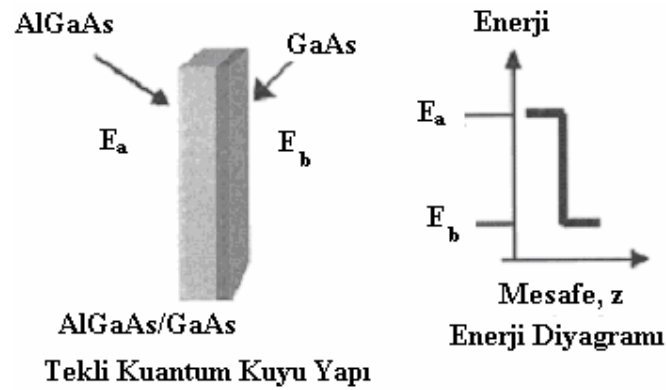


Şekil 2-6 GaAlAs arasına yerleştirilen a genişliğinde GaAs katmanını içeren bir örnek



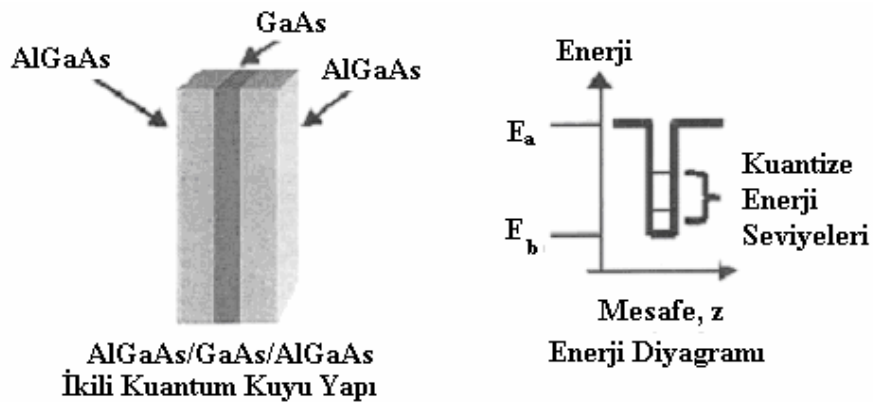
Şekil 2-7 GaAs kuantum çukurunun elektronik yapısı. $E_g(\text{GaAs})$, GaAs külçesinin yasak bant aralığıdır. İletim bandında en düşük kuşatılmış durum, GaAs külçe bant kenarı olan E_c 'nin üzerinde yer alır.

Bir tekli kuantum kuyu yapısı; bir uygun taban numune üzerine ikili, üçlü veya dörtlü yarıiletken alaşımların bir ultra ince tabaka olarak çoklu epitaksiyel büyütülmesiyle elde edilir. Bu yapılara örnek olarak InP/GaAs, AlGaAs/GaAs, Si/Ge yapıları verilebilir. Tekli kuantum kuyu yapının şematik gösterimi Şekil 2-8 de verilmiştir [6].



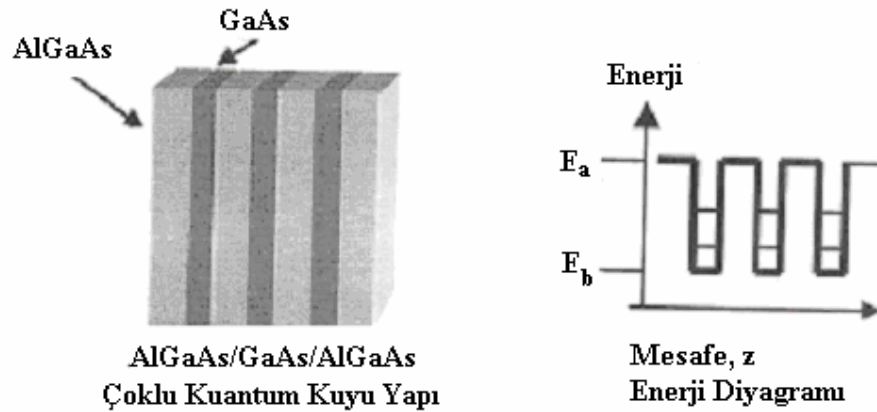
Şekil 2-8 Tekli kuantum kuyulu yapının şematik gösterimi

Bir ikili kuantum-kuyu yapısı; bir dar bant aralıklı ultra ince tabakanın, geniş bant aralıklı tabakalar arasına sandviçlenerek yerleştirildiği yapılardır. Geniş bant aralıklı yapılar genellikle aynı yarıiletkendir. Şekil 2-9 da AlGaAs/GaAs/AlGaAs ikili kuantum kuyusunun şematik diyagramı görülmektedir [6].



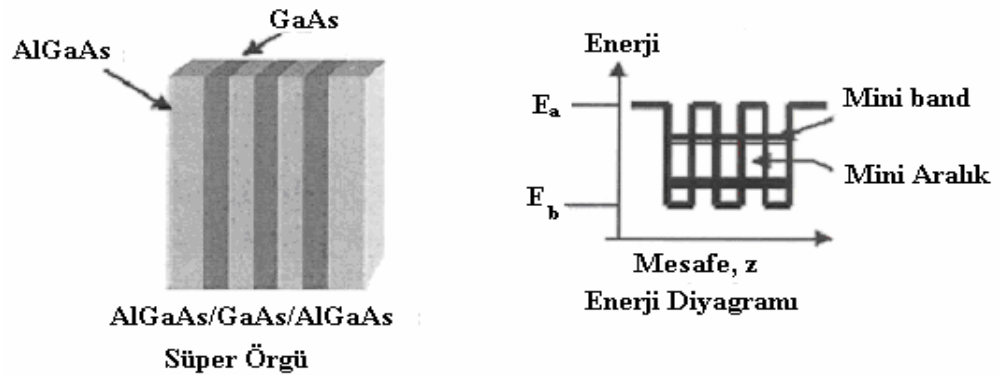
Şekil 2-9 İkili kuantum kuyulu yapının şematik gösterimi

Çoklu kuantum kuyu yapısı; dar ve geniş bant aralıklı tabakaların birinin diğerinin üzerine büyütüldüğü çoklu yapıdır. Genellikle geniş bant aralıklı materyaller, değişik kuantum kuyularındaki elektronlar arasında iletişimi sağlayan bir engel şeklindedir. Çoklu kuantum kuyu yapının şematik gösterimi Şekil 2-10 da verilmiştir [6].



Şekil 2-10 Çoklu kuantum kuyulu yapının şematik gösterimi

Bir süper örgü, değişik engeller arasında elektronların tünellenebildiği, ultra ince olan dar bant aralıklı tabakalardan oluşan birçoklu kuantum-kuyu yapısıdır. Bu yapı minibantlar ve mini aralıkların oluşumunu sağlar. Süperörgü yapının şematik gösterimi Şekil 2-11 de verilmiştir [6].



Şekil 2-11 Süperörgü yapının şematik gösterimi

3. FARKLI KUANTUM KUYULARININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

3.1. Giriş

Yarıiletken yapıları büyütme yöntemlerindeki ilerlemeler, bazı elektronik cihazların özel bir yöntemle imal edilmesine imkan vermiştir. Yarıiletken kuantum kuyusunun profilinde meydana gelen bir değişim, bu kuantum kuyusunun alt-bant enerji durumlarını ve dalga fonksiyonlarını değiştirir. Bu yüzden kuantum kuyusunun profiline bağlı olan çeşitli fiziksel özellikler de değişir. Teknolojik uygulamaların geniş çeşitliliği nedeniyle, tekli ve çoklu yarıiletken kuantum kuyulu yapılar manyetik alan, elektrik alan ve ayrı katkılama işlemleri gibi farklı dış pertürbasyonlarda geniş ölçüde çalışılmıştır. Kare, eğik ve parabolik şeklindeki kuantum kuyularında elektrik alan, manyetik alan ve lazer alanındaki deneysel ve teorik çalışmalar, en çok ilgi çeken araştırma konuları olmuşlardır [7-17].

Günümüzde yarıiletken cihazlar, kuantum kuyu sistemlerinin elektriksel ve optiksel özelliklerine bağlı olarak tasarlanmaktadır. Örneğin; optiksel modüller sınırlı Stark etkisinde bulunan kuantum kuyularına dayalı olarak imal edilmektedirler. İkili ve üçlü kuantum kuyulu yapılar, cihaz endüstrisi ile çok yakından ilgilidir. Özellikle kuyu ve engel değişiklikleri arasındaki ilişki, iyi bir şekilde ortaya konulduktan sonra yarıiletken cihaz teknolojisinde büyük bir ilerleme sağlanmıştır. Dar ve tekli bir kuantum kuyusunda enerji seviyeleri için bir kuantum sınırlama etkisinin varlığı, daha önceden büyük ölçüde çalışılmıştır. İkili ve üçlü kuantum kuyularında bu sınırlama etkilerine ek olarak, izole edilmiş kuyularda hangi enerji seviyelerinin karakterize olacağı ve sistemin taban durumlarının potansiyel engelini ne derecede etkileyebilecekleri açıklanmıştır. Heteroyapıda bulunan yarıiletken ikili kuantum kuyuları teknolojik uygulamalar için önemli adaylardır. Bu yüzden yeni çıkan elektronik cihazların uygulama temellerini açıklayabilmektedirler [18–20]. Benzer olarak; heteroyapıdaki çiftli engel sistemleri, ikili ve üçlü kuantum kuyu sistemleri gibi birçok ilgi çekici fiziksel özelliği açıklayabilmektedirler [21–23].

Tekli kuantum kuyularına göre çoklu yarıiletken yapıdaki ana avantaj; büyütölmüş eksiton elektro-optiksel etkileşimidir. İkili ve üçlü kuantum kuyularında eksitonların elektro-optiksel özellikleri, yüksek hızlı, uzaysal, ışık modölatörlerinin potansiyel uygulamalarına imkan verir. Huang ve Manasreh tarafından açıklanan ilginç bir uygulama, üçlü kuantum kuyularıyla üç renkli kızılötesi fotodetektörlerin birbirine benzetilmesidir [24].

3.2. Kuantum Kuyularının Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması

Farklı kuantum kuyularının dalga fonksiyonlarının ve enerji özdeğerlerinin bulunabilmesi için Schrödinger dalga denkleminin belirlenen sınır koşullarında çözümüne ihtiyaç duyulur. Schrödinger dalga denkleminin en genel hali,

$$H\Psi(x, y, z, t) = E\Psi(x, y, z, t) \quad (3.1)$$

şeklindedir. Bu ifadedeki H, Hamiltonien operatörü olup kuantum mekaniğinde sıkça kullanılan bir işlemcidir.

Sonsuz yükseklikteki duvarlarla sınırlandırılan bir kuyuda duvarlar, yük taşıyıcılarının $\pm\infty$ ' a kaçmasını önler ve lokalizasyonu korur. z- doğrultusundaki bir sistemin Hamiltonien'i, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + V(z) \quad (3.2)$$

eşitliği ile verilir. Burada P ve z, parçacığın momentum ve konumu, m^* etkin kütlesi (elektronun serbest haldeki kütlesi m_0 olmak üzere $m^* = 0.067m_0$ olarak alınmıştır) ve V(z) ise, sistemin potansiyel enerji terimidir. Sistemin Schrödinger dalga denklemini;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) \quad (3.3)$$

şeklindedir. Burada h Planck sabiti olmak üzere, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ dir.

Schrödinger dalga denkleminin en genel çözümü, enerji özdeğerlerini ve Ψ_n dalga fonksiyonunu verir. Sonsuz yükseklikteki duvarlarla sınırlandırılan ve genişliği L_0 (Tüm hesaplamalarda $L_0 = 800 \text{ \AA}$ olarak alınmıştır.) olan potansiyel kuyusuna sahip sistemin dalga fonksiyonu,

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L_0}} \text{Cos} \left[\frac{n\pi z}{L_0} - \delta_n \right] \quad (3.4)$$

eşitliğiyle verilir. Bu eşitlikte δ_n , kuyunun öz fonksiyonlarındaki tek veya çift özdeğerlere karşılık gelen faz farkı olmak üzere;

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n \text{ tek ise} \\ \frac{\pi}{2} & n \text{ çift ise} \end{cases} \quad (3.5)$$

değerlerini alır.

Sistemin dalga fonksiyonları için sonsuz kare kuyunun ortonormal fonksiyonlarını baz alarak,

$$\bar{\Psi}_i(z) = \sum_{i=1}^{N_0} C_{in} \Psi_n(z) \quad (3.6)$$

denklemini kullandık. Eğer sistemin öz fonksiyonları bilinmiyorsa, bu öz fonksiyonlar kendine yakın bir sistemin ortonormal dalga fonksiyonları cinsinden tanımlanabilir. $\{\Psi_n\}$ fonksiyonları, bilinen sistemin baz vektörleri, $\{C_{in}\}$ katsayıları ise, $\bar{\Psi}_i$ vektörünün bu bazdaki bileşenleri ve N_0 sistem boyutudur. Tüm hesaplamalarda $N_0=30$ olarak alınmıştır.

Sistemdeki elektronun özenerji spektrumu;

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^* L_0^2} \quad (3.7)$$

biçimindedir ve $n=1$ için taban durumu enerjisi,

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L_0^2} \quad (3.8)$$

olarak elde edilir.

Bu denklemlerde yer alan L_0 uzunluk boyutunda, E_1 ise enerji boyutundadır. Uzunluk ve enerji mertebesinde olan fiziksel nicelikler sırasıyla; L_0 ve E_1 'a bölünerek boyutsuz hale getirilebilir. Örneğin; z parametresinin boyutsuz hali,

$$\tilde{z} = \frac{z}{L_0} \quad (3.9)$$

şeklindedir. z parametresine göre 1. ve 2. mertebeden türev alınır sırasıyla;

$$\frac{d}{dz} = \frac{1}{L_0} \frac{d}{d\tilde{z}} \quad (3.10)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} = \frac{1}{L_0^2} \frac{d^2}{d\tilde{z}^2} \quad (3.11)$$

denklemleri elde edilir.

(3.11) denklemi (3.3) denkleminde yerine yazılırsa Hamiltonien;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{L_0^2} \frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + V(z) \quad (3.12)$$

şeklinde olur.

Hamiltonien enerji boyutunda olduğundan (3.12) denkleminin her iki tarafı E_1 'a bölünürse Hamiltonien boyutsuz hale getirilir. Son olarak Hamiltonien'in boyutsuz hali,

$$\tilde{H} = -\frac{1}{\pi^2} \frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + \tilde{V}(z) \quad (3.13)$$

olarak elde edilir.

Kuantum kuyularına sahip sistemin elektronik özelliklerini hesaplama işlemlerinde, Hamiltonien operatörü ve beklenen değer ifadesi kullanılabilir. Bu durumda Hamiltonien'nin beklenen değeri

$$\langle \Psi_n | H | \Psi_m \rangle = \int \Psi_m H \Psi_n dz \quad (3.14)$$

eşitliğinden hesaplanır.

3.3. Farklı Şekillere Sahip Tekli Kuantum Kuyularının Elektronik Özellikleri

Kare, eğik ve parabolik kuyular için kuyu genişlikleri sırasıyla, $L_s = L_g = L_p = 100 \text{ \AA}$, yarı kare kuyu için $L_b = 40 \text{ \AA}$ ve kuyu potansiyel yüksekliği $V_0 = 120 \text{ meV}$ olmak üzere; Şekil 3-1 (a-f)' de şematik gösterimleri verilen farklı şekillerdeki tekli kuantum kuyuları için potansiyel ifadeleri;

$$V(z) = \begin{cases} 0 & -\frac{L_s}{2} \leq z \leq \frac{L_s}{2} & \text{kare kuyu için} \\ 0 & -\frac{L_b}{2} \leq z \leq \frac{L_b}{2} & \text{yarı kare kuyu için} \\ \frac{V_0}{2} & \frac{L_b}{2} \leq |z| \leq \frac{L_s}{2} & \\ \frac{V_0}{L_g} z & 0 \leq z \leq L_g & \text{eğik kuyu için} \\ \frac{V_0}{2L_g} z & 0 \leq z \leq L_g & \text{yarı eğik kuyu için} \\ a z^2 & -\frac{L_p}{2} \leq z \leq \frac{L_p}{2} & \text{parabolik kuyu için} \\ V_0 & & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \quad (3.15)$$

şeklindedir.

GaAs - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ yapıda iletim bandına karşılık gelen kuyu potansiyeli x ' in bir fonksiyonu olarak;

$$V(x) = 0.6 (1.155 x + 0.37 x^2) \text{ eV}. \quad (3.16)$$

şeklinde verilir. Bilindiği gibi kare, eğik ve parabolik potansiyel profilleri, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ yapıdaki alüminyum konsantrasyonu değişiminden elde edilir. Tüm hesaplamalarda, $\text{GaAs}-\text{Al}_{0.165}\text{Ga}_{0.835}\text{As}$ yapısı için $x = 0.165$ değerine karşılık gelen potansiyel yüksekliği $V_0 = 120 \text{ meV}$ olarak alınmıştır.

Burada parabolik kuyu için $\hbar w = 120$ meV olmak üzere;

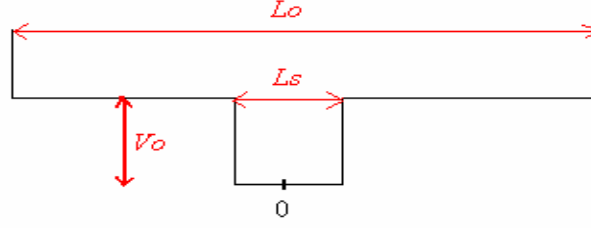
$$a = \frac{1}{2} m^* w^2 = \frac{\hbar^2 w^2 \pi^2}{4} \quad (3.16)$$

olarak alınmıştır [25]. Herhangi bir ayarlama parametresi (β) kullanılarak parabolik kuantum kuyusunun şekli değiştirilebilir. Bu durumlarda β , denklem (3.16)'daki ifadeyle çapılır. Yapılan bütün işlemlerde parabolik kuyu için $\beta = 0.6$, yarı parabolik kuyu için ise $\beta = 0.4$ olarak alınmıştır.

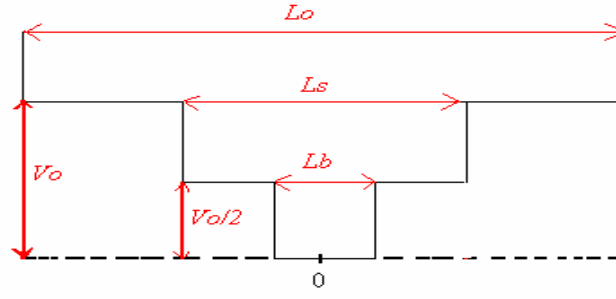
Parabolik kuantum kuyusu için ayarlama parametresi,

$$\Omega = \frac{4V_0}{L_p^2} \quad (3.17)$$

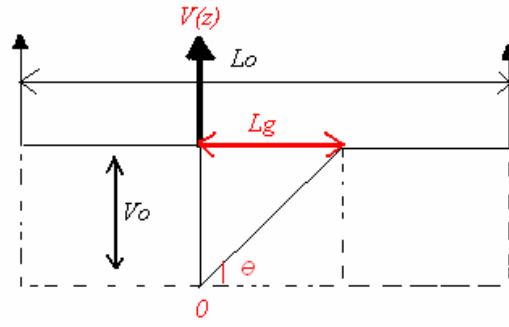
olarak da alınabilir [26]. Bu çalışmada parabolik kuantum kuyusu için yapılan tüm hesaplamalarda (3.16) denklemini kullanılmıştır.



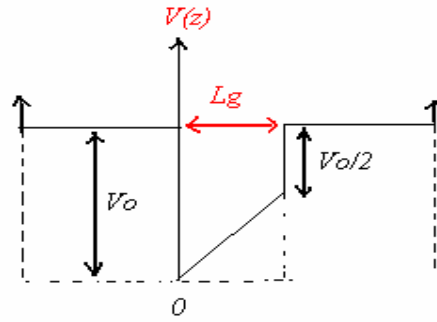
Şekil 3-1 (a) Kare şeklindeki kuantum kuyusunun şematik gösterimi



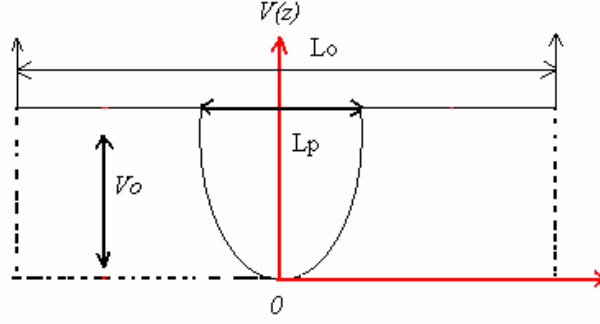
Şekil 3-1 (b) Yarı kare şeklindeki kuantum kuyusunun şematik gösterimi



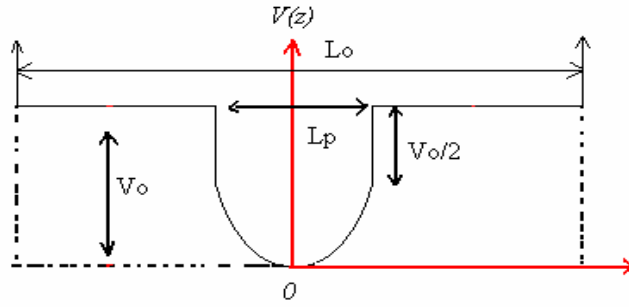
Şekil 3-1 (c) Eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi



Şekil 3-1 (d) Yarı eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi



Şekil 3-1 (e) Parabolik kuantum kuyusunun şematik gösterimi



Şekil 3-1 (f) Yarı parabolik kuantum kuyusunun şematik gösterimi

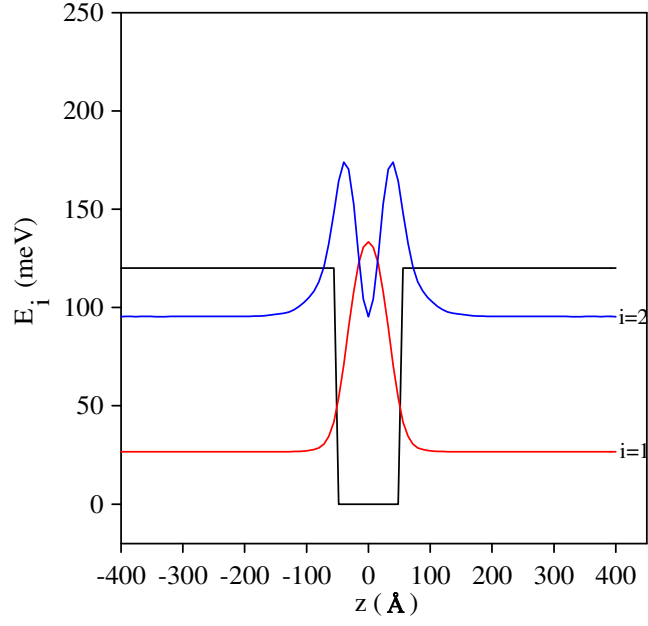
(3.15) denklemiyle verilen potansiyel ifadeleri ve beklenen deęer ifadesi kullanılarak tekli kuantum kuyularının elektronik özellikleri hesaplanmıştır.

Şekil 3-2 (a-f)' de farklı potansiyel profillerine sahip tekli kuantum kuyularının baęlı enerji özdeęerlerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları gösterilmiştir.

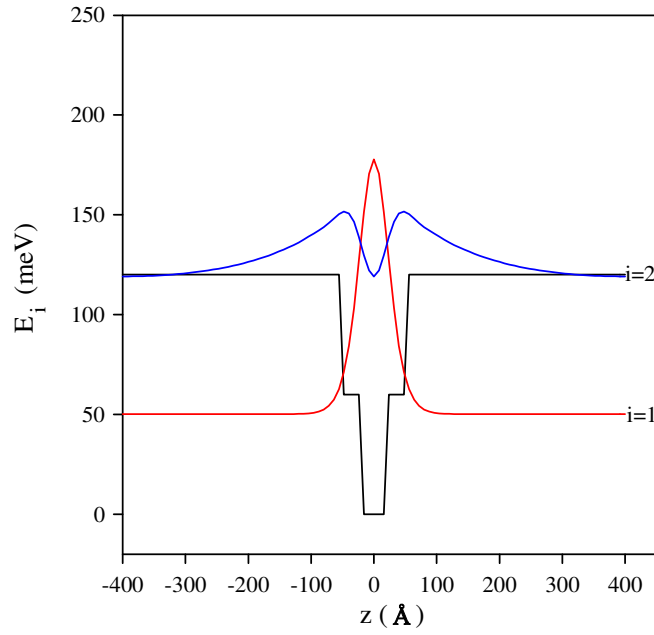
Çizelge 3-1' de ise, farklı şekillerdeki tekli kuantum kuyularının ilk iki enerji özdeęeri ve kuyu içerisinde bu enerji seviyelerinde elektronun bulunma olasılıkları verilmiş, dalga fonksiyonları çizilirken kuyu dışında kalan özdeęerler, yani baęlı olmayan durumlar göz önüne alınmamıştır.

Çizelge 3-1 Farklı şekillerdeki tekli kuantum kuyularının ilk iki enerji özdeęeri ve ilk iki enerji seviyesinde elektronun bulunma olasılıkları

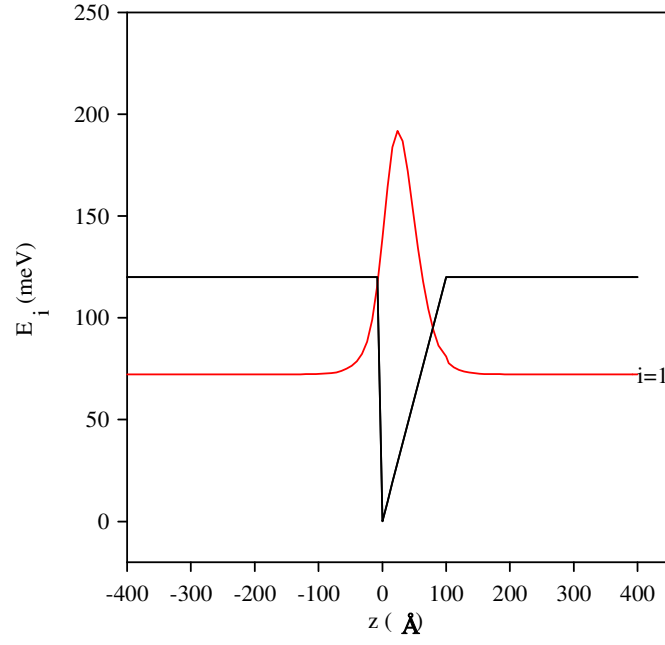
Kuyu Şekli	1. Enerji Özdeęeri(meV)	1. Enerjide Bulunma Olasılıkları	2. Enerji Özdeęeri(meV)	2. Enerjide Bulunma Olasılıkları
Kare	26.648	0.925	95.379	0.606
Yarı kare	50.165	0.932	119.148	0.233
Eęik	72.243	0.838	122.151	0.088
Yarı-eęik	52.004	0.895	112.411	0.432
Parabolik	45.274	0.937	117.744	0.309
Yarı- parabolik	39.333	0.933	111.802	0.455



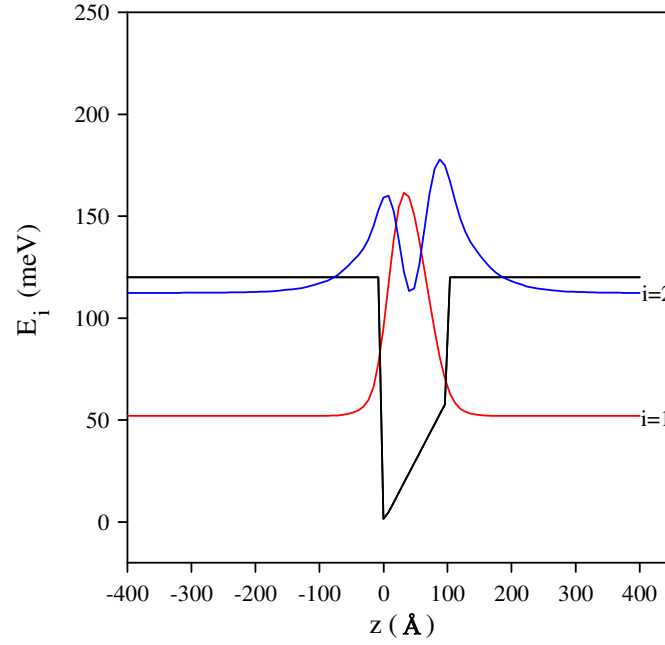
Şekil 3-2 (a) Kare kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



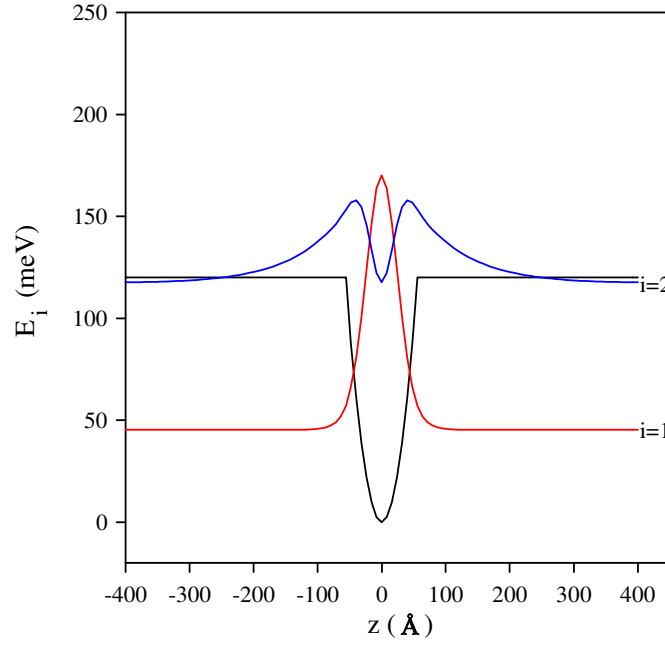
Şekil 3-2 (b) Yarı kare kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



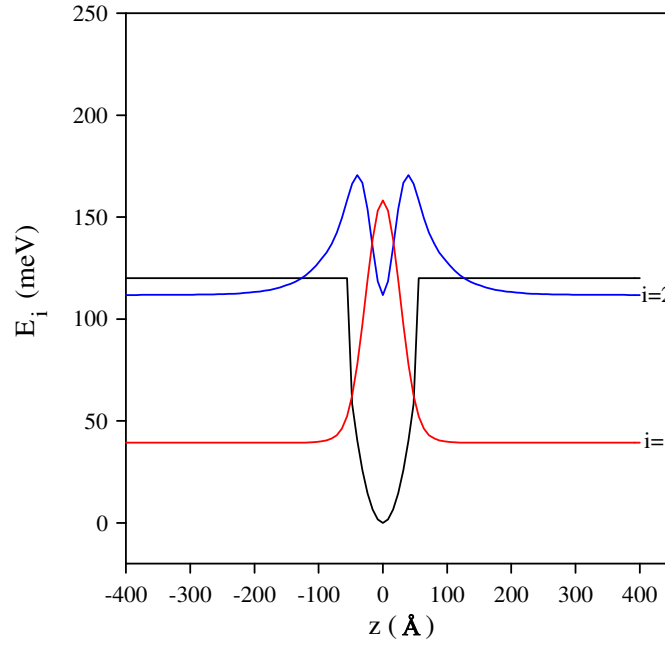
Şekil 3-2 (c) Eğik kuyunun potansiyel profili ve taban durumu enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-2 (d) Yarı eğik kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-2 (e) Parabolik kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-2 (f) Yarı parabolik kuyunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları

Bu şekillerden de görüldüğü gibi; aynı kuyu genişliğine ve potansiyel yüksekliğine sahip farklı kuantum kuyuların enerji özdeğerleri, birbirlerinden oldukça farklıdır. Potansiyel profilinin değişiminden en çok taban durumundaki parçacık etkilendiğinden, en düşük taban durum enerji özdeğeri kare kuyuda, en büyük taban durum enerji özdeğeri ise eğik kuyudadır. Eğik kuyuda sadece taban durum enerji özdeğerinin yer aldığı, diğer kuyularda ise taban ve birinci uyarılmış durum enerji özdeğerlerinin bulunduğu görülmüştür. Beklenildiği gibi, yarı-kare ile yarı-eğik kuyulardaki taban durum enerji özdeğerleri birbirine çok yakındır. Birbirine benzer kuyularda taban durum enerji seviyeleri arasındaki farklar, sırasıyla kare-yarı kare, eğik-yarı eğik ve parabolik-yarı parabolik kuyular için -23.517 meV, 20.239 meV ve 5.941 meV olarak bulunmuştur. Bu sonuçlara göre; taban durum enerji özdeğeri, kuyunun şeklinin parabolik ya da yarı parabolik olması durumunda fazla değişmemesine rağmen, kuyunun kare ya da yarı kare olmasında büyük ölçüde değişmektedir. Elektronun taban durum enerji seviyesinde bulunma olasılığı, en fazla parabolik kuyuda, en az ise eğik kuyudadır. Taban durumundaki elektronun olasılık yoğunluğunun, eğik ve yarı-eğik kuyularda asimetric, diğer kuyularda ise simetric olarak lokalize olduğu görülmüştür.

Birinci uyarılmış en düşük enerji seviyesi ve bu enerji seviyesinde elektronun en fazla bulunma olasılığı kare kuyudadır. Bu enerji seviyesinin artması ve buna bağlı olarak bulunma olasılıklarının azalması sırasıyla; yarı-parabolik, yarı-eğik, parabolik, yarı-kare kuyuda görülmektedir. Eğik kuyuda birinci uyarılmış enerji özdeğeri kuyunun dışında olduğundan, bulunma olasılığı oldukça küçüktür. Sadece yarı-eğik kuyuda birinci uyarılmış durumdaki elektronun olasılık yoğunluğu asimetric ve sağa doğrudur, diğerlerinde ise simetrictir.

3.4. Farklı Şekillere Sahip İkili Kuantum Kuyularının Elektronik Özellikleri

Kare, eğik ve parabolik kuyular için kuyu genişlikleri sırasıyla, $L_s = L_g = L_p = 100 \text{ \AA}$, engel genişlikleri $L_b = 40 \text{ \AA}$ ve kuyu potansiyel yüksekliği $V_0 = 120 \text{ meV}$ olmak üzere; Şekil 3-3 (a-c)' de şematik gösterimleri verilen farklı şekillerdeki ikili kuantum kuyuları için potansiyel ifadeleri aşağıda verilmiştir. Buna göre;

Kare-eğik ikili kuantum kuyusu için potansiyel ifadesi;

$$V(z) = \begin{cases} 0 & -L_s - L_b \leq z \leq -L_b & \text{kare kuyu için} \\ \frac{V_0}{L_g} z & 0 \leq z \leq L_g & \text{eğik kuyu için} \\ V_0 & & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \quad (3.18)$$

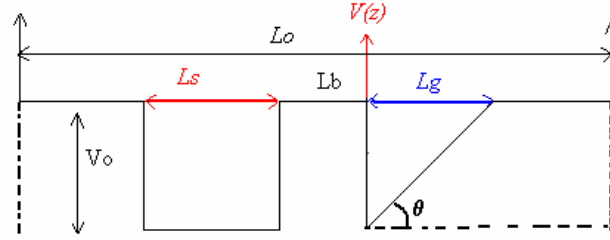
Kare-parabolik ikili kuantum kuyusu için potansiyel ifadesi;

$$V(z) = \begin{cases} 0 & -L_s - L_b - \frac{L_p}{2} \leq z \leq -L_b - \frac{L_p}{2} & \text{kare kuyu için} \\ a z^2 & -\frac{L_p}{2} \leq z \leq \frac{L_p}{2} & \text{parabolik kuyu için} \\ V_0 & & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \quad (3.19)$$

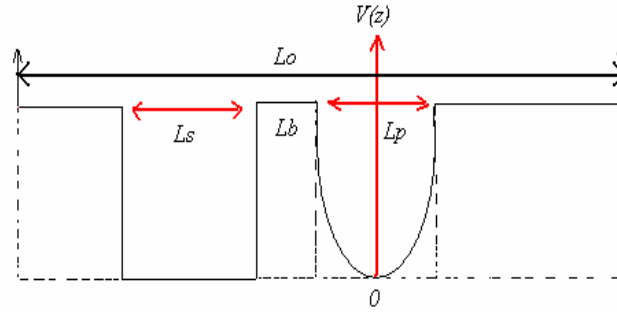
Parabolik - eğik ikili kuantum kuyusu için potansiyel ifadesi;

$$V(z) = \begin{cases} a z^2 & -\frac{L_p}{2} \leq z \leq \frac{L_p}{2} & \text{parabolik kuyu için} \\ \frac{V_0}{L_g} z & \frac{L_p}{2} + L_b \leq z \leq \frac{L_p}{2} + L_b + L_g & \text{eğik kuyu için} \\ V_0 & & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \quad (3.20)$$

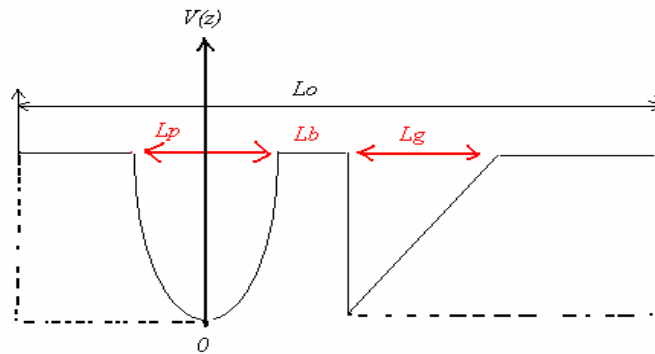
şeklindedir.



Şekil 3-3 (a) Kare-eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi



Şekil 3-3 (b) Kare-parabolik kuantum kuyusunun şematik gösterimi



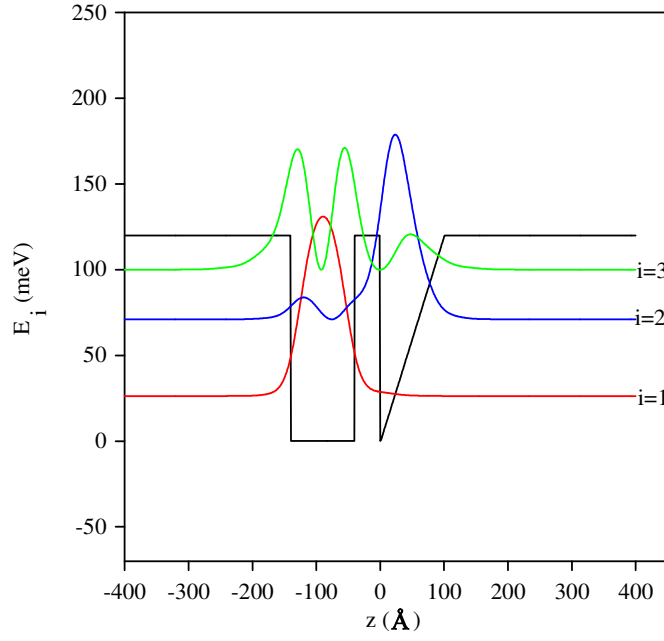
Şekil 3-3 (c) Parabolik-eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi

Çizelge 3-2' de farklı şekillerdeki ikili kuantum kuyularının bağlı enerji özdeğerleri ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılıkları verilmiştir.

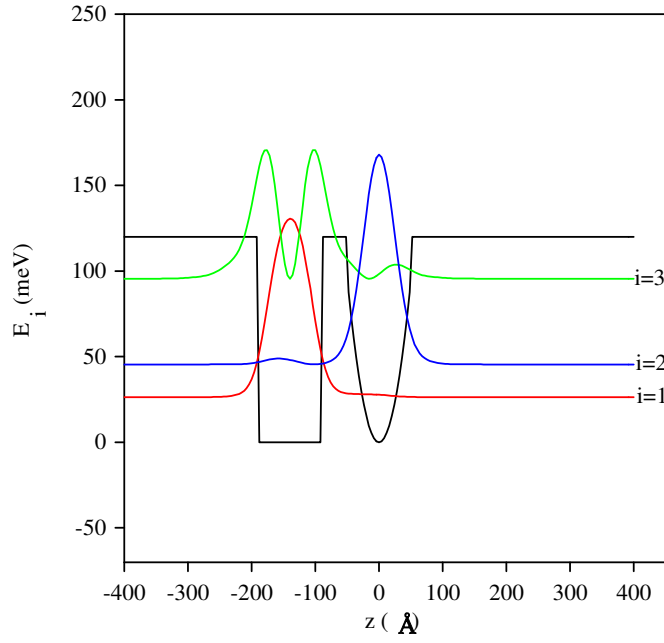
Çizelge 3-2 Farklı şekillerdeki ikili kuantum kuyularının ilk üç enerji özdeğeri ve ilk iki enerji seviyesinde elektronun bulunma olasılıkları

Kuyu Şekli	1. Enerji Özdeğeri (meV)	1. Enerjide Bulunma Olasılıkları	2. Enerji Özdeğeri (meV)	2. Enerjide Bulunma Olasılıkları	3. Enerji Özdeğeri (meV)
Kare-Eğik	26.310	0.915	71.026	0.745	99.929
Kare-Parabolik	26.360	0.908	45.462	0.918	95.453
Parabolik-Eğik	44.427	0.883	63.104	0.820	118.291

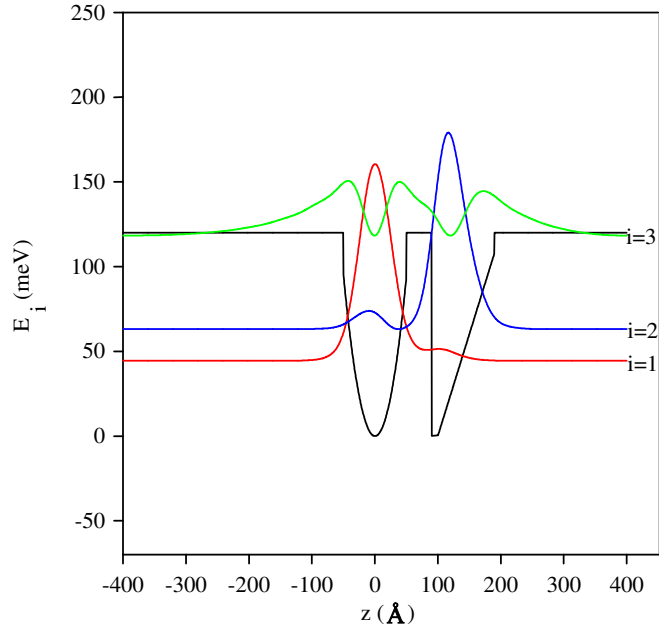
Şekil 3-4 (a-c)' de farklı şekillerdeki ikili kuantum kuyularının potansiyel profilleri ve bağlı durumdaki enerji özdeğerlerinde elektronun olasılık yoğunlukları verilmiştir. Bu şekillerden de görüldüğü gibi; aynı kuyu genişliğine ve potansiyel yüksekliğine sahip farklı şekillerdeki ikili kuyuların enerji özdeğerleri birbirlerinden farklıdır. Potansiyel profilinin değişiminden en çok taban durumundaki enerjiye sahip olan parçacık etkilendiğinden, en düşük enerji özdeğeri sırasıyla; kare, parabolik ve eğik kuyudadır, aynı zamanda bu değerler kare-eğik ve kare-parabolik ikili kuyularda yalıtılmış tekli kuyulardakine oldukça yakındır. Parabolik-eğik kuyuda ise parabolik kuyu için enerji değeri değişmezken, eğik kuyudaki enerji seviyesi azalmaktadır, çünkü parabolik kuyu giderek genişlediğinden, eğik kuyudaki parçacık parabolik kuyuya doğru tünellemektedir. Bu durum, olasılık yoğunluklarından da açıkça görülmektedir. Kare-parabolik kuyularda ilk iki seviyedeki parçacıkların diğer kuyulara tünellemesi görülmezken (Şekil 3-4 (b)), $i=2$ enerji özdeğerindeki eğik kuyudaki elektronun, kare kuyuya (Şekil 3-4 (a)) ve parabolik kuyuya (Şekil 3-4 (c)) tünellediği görülmektedir. Eğik kuyuda lokalize olan parçacığın olasılık yoğunluğu asimetriktir, diğerlerinde ise simetriktir. $i=3$ enerji özdeğerlerinde bulunan elektronun olasılık yoğunlukları, kare kuyunun olduğu şekillerde kare kuyuda, parabolik-eğik kuyuda ise parabolik kuyuda daha fazla lokalizedir.



Şekil 3-4 (a) Kare-eğik kuyuların potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-4 (b) Kare-parabolik kuyuların potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-4 (c) Parabolik-eğik kuyuların potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları

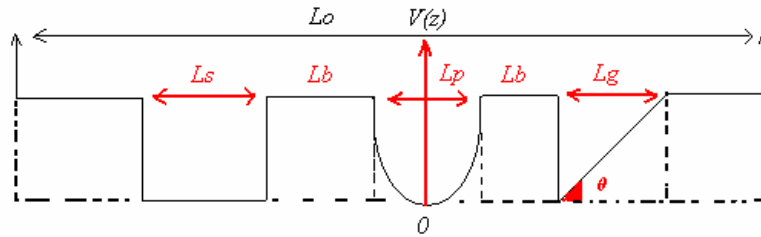
3.5. Farklı Şekillere Sahip Üçlü Kuantum Kuyularının Elektronik Özellikleri

Kare, eğik ve parabolik kuyular için kuyu genişlikleri sırasıyla, $L_s = L_g = L_p = 100 \text{ \AA}$, engel genişlikleri $L_b = 40 \text{ \AA}$ ve kuyu potansiyel yüksekliği $V_0 = 120 \text{ meV}$ olmak üzere; Şekil 3-5 de şematik gösterimi verilen üçlü kuantum kuyusu için potansiyel ifadesi aşağıda verilmiştir. Buna göre;

Kare-parabolik-eğik üçlü kuantum kuyusu için potansiyel ifadesi;

$$V(z) = \begin{cases} 0 & -L_s - L_b - \frac{L_p}{2} \leq z \leq -L_b - \frac{L_p}{2} & \text{kare kuyu için} \\ a z^2 & -\frac{L_p}{2} \leq z \leq \frac{L_p}{2} & \text{parabol kuyu için} \\ \frac{V_0}{L_g} z & \frac{L_p}{2} + L_b \leq z \leq \frac{L_p}{2} + L_b + L_g & \text{graded kuyu için} \\ V_0 & & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \quad (3.21)$$

şeklindedir.



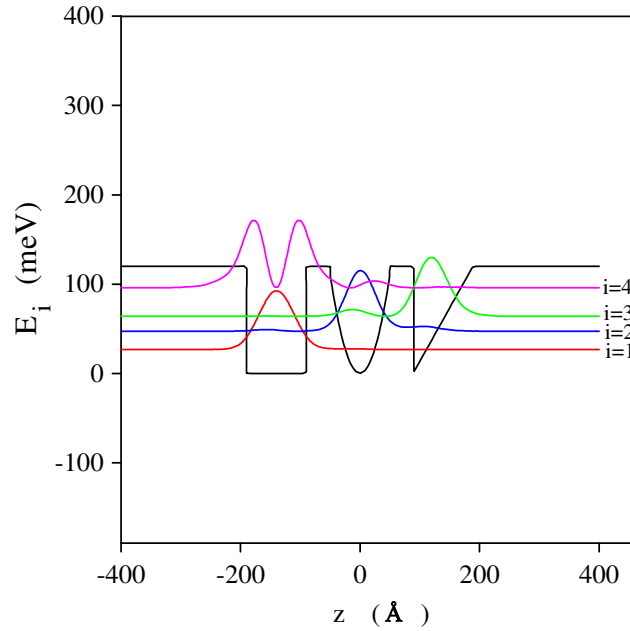
Şekil 3-5 Kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi

Şekil 3-6 da kare-parabolik-eğik şeklindeki üçlü kuantum kuyusunun potansiyel profilleri ve bağlı durumdaki enerji özdeğerlerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları gösterilmiştir.

Çizelge 3-3’ de kare-parabolik-eğik şeklindeki üçlü kuantum kuyusunun ilk üç enerji özdeğeri ve bu değerlere karşılık gelen bulunma olasılıkları gösterilmiştir. Dördüncü enerji özdeğeri, 95.6651 meV olup Çizelge 3-3’ de gösterilmemiştir.

Çizelge 3-3 Kare-parabolik-eğik üçlü kuantum kuyusunun ilk üç enerji özdeğeri ve ilk üç enerji seviyesinde elektronun bulunma olasılıkları

Kuyu Şekli	1.Enerji Özdeğeri (meV)	1. Enerjide Bulunma Olasılıkları	2.Enerji Özdeğeri (meV)	2. Enerjide Bulunma Olasılıkları	3.Enerji Özdeğeri (meV)	3. Enerjide Bulunma Olasılıkları
Kare-Parabolik-Eğik	26.358	0.908	44.617	0.864	63.080	0.818

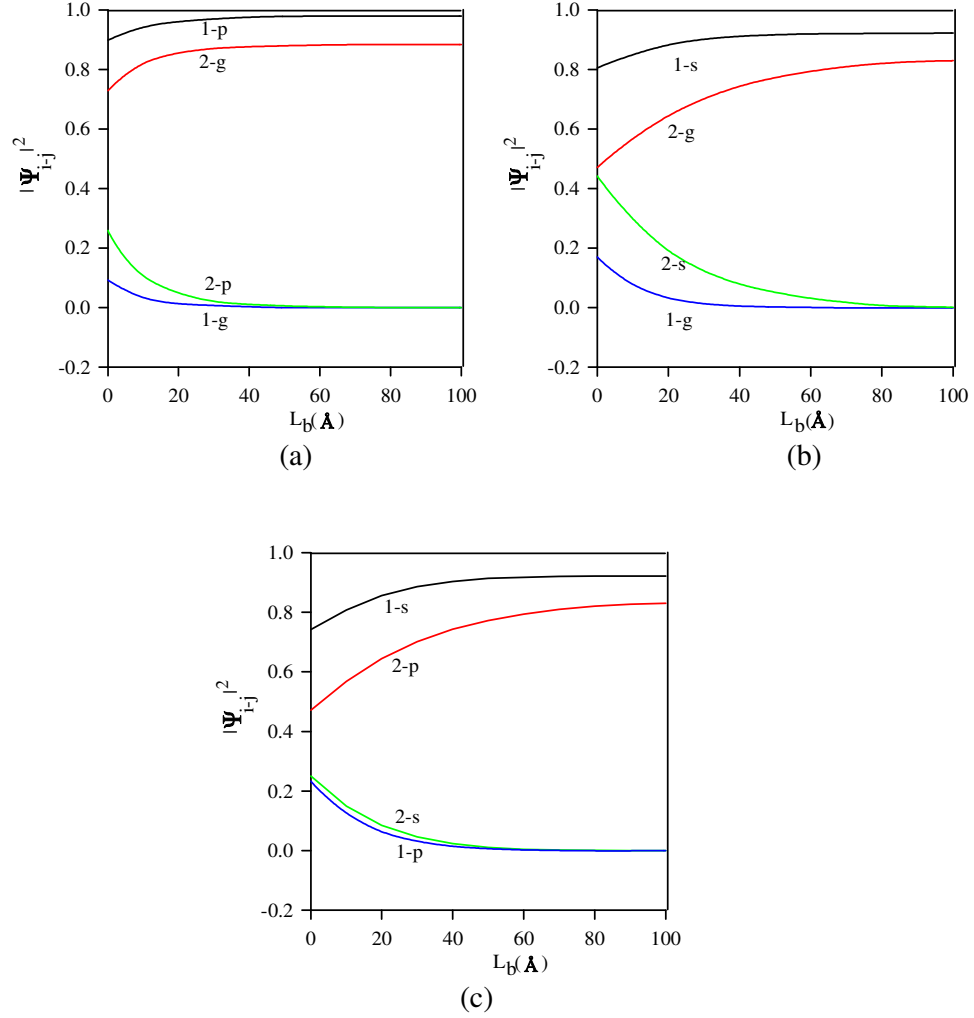


Şekil 3-6 Kare-parabolik-eğik kuyuların potansiyel profili ve ilk dört enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları

Şekil 3-6 dan ve Çizelge 3-3 den de görüldüğü gibi, kare-parabolik-eğik üçlü kuantum kuyusunun ilk iki enerji özdeğeri kare-parabolik ikili kuantum kuyusunun ilk iki enerji özdeğerine oldukça yakındır. Kare kuyu içeren diğer ikili yapılarda olduğu gibi, birinci dalga fonksiyonu yine kare kuyu içerisinde simetrik bir şekilde lokalizasyona uğramıştır. Kare-parabolik ikili kuyuda olduğu gibi, ikinci dalga fonksiyonu parabolik kuyu içerisinde simetrik bir şekilde lokalize olmuştur. Üçüncü dalga fonksiyonu ise, eğik kuyuda lokalize olup simetrik bir yapıya sahip değildir. Potansiyel profilinin değişiminden en çok taban durumundaki enerjiye sahip olan parçacık etkilendiğinden, en düşük enerji özdeğeri sırasıyla; kare, parabolik ve eğik kuyudadır, aynı zamanda bu değerler kare-parabolik-eğik kuyuda yalıtılmış tekli ve ikili kuyulardakine oldukça yakındır. Ayrıca elektronun bulunma olasılık yoğunluğu kare kuyuda en fazla iken, eğik kuyuda en azdır.

Şekil 3-7 (a-c)'de sırasıyla kare-eğik, kare-parabolik ve parabolik-eğik ikili kuantum kuyuları için engel genişliğinin (L_b) bir fonksiyonu olarak elektronun bulunma olasılık yoğunlukları gösterilmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi sırasıyla; parabolik-eğik kuyuda $L_b = 40 \text{ \AA}$ (Şekil 3.7(a)), kare-eğik kuyuda $L_b = 80 \text{ \AA}$ (Şekil 3.7(b)) ve kare-parabolik kuyuda (tünelleme çok az olmasına rağmen) $L_b = 60 \text{ \AA}$ (Şekil3.7(c)) genişliğinden sonra parçacık için tünelleme olayı görülmemektedir. Bu şekillerde parçacığın;

- 1-s: $i=1$ seviyesi için elektronun kare kuyuda,
 - 2-s: $i=2$ seviyesi için elektronun kare kuyuda,
 - 1-g: $i=1$ seviyesi için elektronun eğik kuyuda,
 - 2-g: $i=2$ seviyesi için elektronun eğik kuyuda,
 - 1-p: $i=1$ seviyesi için elektronun parabolik kuyuda,
 - 2-p: $i=2$ seviyesi için elektronun parabolik kuyuda
- bulunma olasılık yoğunluklarını temsil etmektedirler.



Şekil 3-7 (a) Parabolik-eğik, (b) kare-eğik ve (c) kare-parabolik ikili kuantum kuyuları için bariyer genişliğinin (L_b) bir fonksiyonu olarak elektronun bulunma olasılık yoğunlukları.

1-s: $i=1$ seviyesi için elektronun kare kuyuda, 2-s: $i=2$ seviyesi için elektronun kare kuyuda, 1-g: $i=1$ seviyesi için elektronun eğik kuyuda, 2-g: $i=2$ seviyesi için elektronun eğik kuyuda, 1-p: $i=1$ seviyesi için elektronun parabolik kuyuda, 2-p: $i=2$ seviyesi için elektronun parabolik kuyuda bulunma olasılık yoğunluklarını temsil etmektedirler.

3.6. Farklı Kuantum Kuyularına Uygulanan Elektrik Alanın Etkisi

Katıların elektronik durumları üzerinde statik elektrik alanının etkileri, son yıllarda büyük bir ilgi alanı olmuştur. Kuşatılmadan dolayı elektrik alanı altında kuantum çukurlarında meydana gelen etkilerin, külçedeki etkilerden farklı olacağı da açıktır. Statik elektrik alanının katılarda elektronik durumlar üzerindeki etkileri ve yük taşıyıcılarının bir boyutlu potansiyel içine kuşatılmaları (confinement) kesikli enerji durumlarının oluşmasını sağlar. Bu durum elektronik yapıda önemli değişmelere neden olur. GaAs ve $Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyuları üzerinde yapılan yoğun çalışmalarda kuantum çukurlarının soğurma ve lüminesans spektrumlarında eksitonik etkilerin başat olduğu gözlenmiştir.

Kuantum kuyulu yapılarıdaki elektronik durumlar, dışarıdan uygulanan bir elektrik alan yardımıyla değiştirilebilir. Ayrıca bu yöntem yardımıyla çiftlenimli ve çiftlenimli olmayan dalga fonksiyonları elde edilebilir. Bu etkiler optiksel özelliklerde önemli değişikliklere neden oldukları gibi, optiksel lineerliğin bozulmasına yol açarak bazı optiksel cihazların yapımına olanak sağlarlar [27].

Bu çalışmada büyütme yönüne paralel olarak uygulanan elektrik alan altında L_0 genişlikli sonsuz duvarlı kuantum kuyuları içine yerleştirilmiş farklı biçimlerdeki tekli, ikili ve üçlü kuantum kuyularının elektronik özelliklerini belirledik. Etkin kütle yaklaşımında, bir sistemdeki elektronlar için enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları, uygun bir Hamiltonien ile Schrödinger dalga denkleminin çözümlerini sağlamalıdır. Bir boyutlu Schrödinger dalga denklemi;

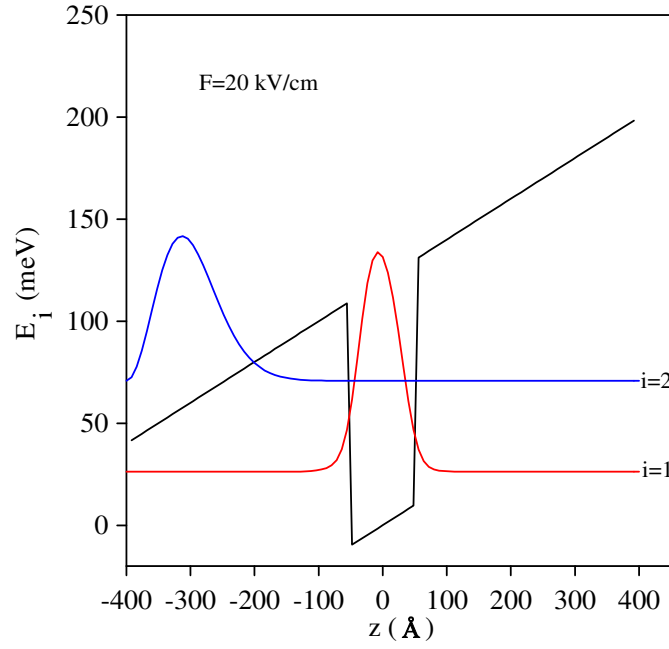
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) + e F z \right) \psi(z) = E \psi(z) \quad (3.22)$$

şeklinde. Burada F elektrik alan şiddeti, $V(z)$ ise elektron için z ekseninde seçilen potansiyel değeridir. Bu potansiyel ifadeleri, kare, yarı kare, eğik, yarı-eğik ve parabolik kuyular için Denklem (3.15)' te; kare-eğik, kare-parabolik ve

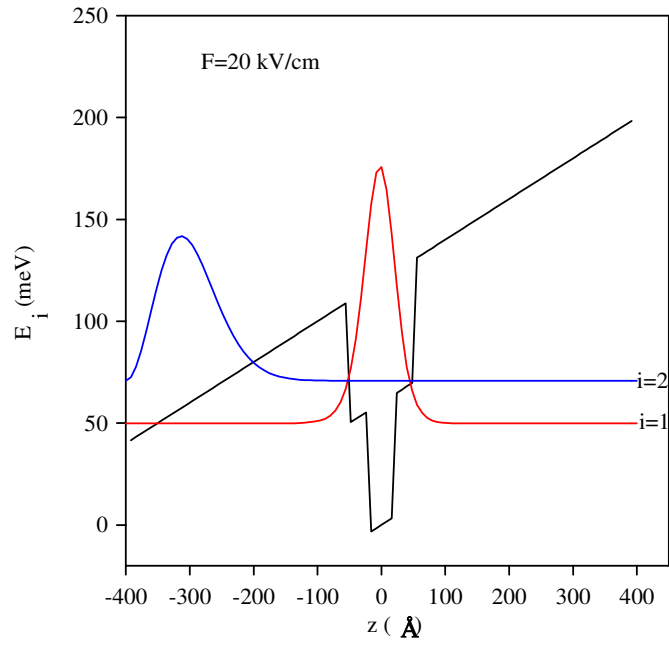
eğik-parabolik kuantum kuyuları için sırasıyla Denklem (3.18), (3.19) ve (3.20) 'de; üçlü kuantum kuyusu için ise Denklem (3.22)' de verilmiştir.

Denklem (3.22)' deki Schrödinger dalga denklemi, Denklem (3.14)' deki beklenen değer ifadesinde kullanılarak, her bir kuantum kuyusu için elektrik alan altındaki enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları bulunur. Bu hesaplamalar yapılırken, eğik kuantum kuyusu içermeyen yapılar için elektrik alan değeri $F = 20$ kV/cm, eğik kuyu içeren yapılarda ise; $F = \pm 20$ kV/cm olarak alınmıştır. Üçlü kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alan değerleri diğer yapılardan farklı olarak sırasıyla, ± 25 kV/cm ve ± 60 kV/cm büyüklüğündedir.

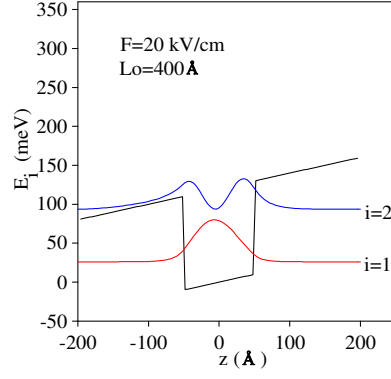
Şekil 3-8 (a-b) de $F = 20$ kV/cm değeri için kare ve yarı kare kuantum kuyularının potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun olasılık yoğunlukları gösterilmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi; z- doğrultusunda uygulanan pozitif değerlikli elektrik alan, kare ve yarı kare kuantum kuyularının şekillerini değiştirerek kuyu potansiyelinin sol tarafa doğru eğilmesine neden olur ve sol taraftaki engelde sözde ikinci bir kuantum kuyusu ortaya çıkar. $F=0$ için olasılık yoğunlukları $z=0$ da merkezlenirken, elektrik alanın uygulanmasıyla bu yoğunluklar sol engel yakınında lokalize olmaya başlar. Parçacıkların ilk olarak yerleştiği taban durumunun aksine, uyarılmış durumdaki taşıyıcılar, daha yüksek enerjiye ve tüm uzay bölgesi içinde çok daha yüksek bulunma olasılığına sahiptir. Bu yüzden, elektrik alan şiddetinden dolayı ortaya çıkan değişimlerden, birinci uyarılmış durumdaki parçacıklar taban durumdaki parçacıklara nazaran daha çok etkilenirler. Birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonları, sol kuyuya doğru kayarken, taban durum dalga fonksiyonları kuyu içerisinde lokalizedirler. Şekil 3-11 (a-b)' de parabolik ve yarı parabolik kuyular içinde aynı davranış söz konusudur, ancak kuantum kuyusunun biçimine bağlı olarak enerji seviyeleri ve bulunma olasılıkları değerlerinde farklılıklar vardır. Şekil 3-9 (a-g)'de ise $F = 20$ kV/cm için kare kuantum kuyusunun $L_0 = 400-1000$ Å arasındaki kuyu genişliklerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları gösterilmiştir.



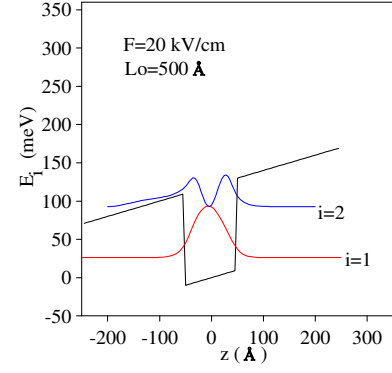
Şekil 3-8 (a) $F = 20$ kV/cm için kare kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



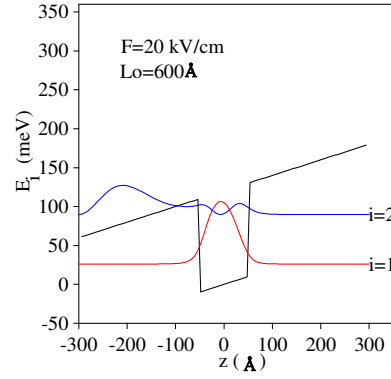
Şekil 3-8 (b) $F = 20$ kV/cm için yarı kare kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



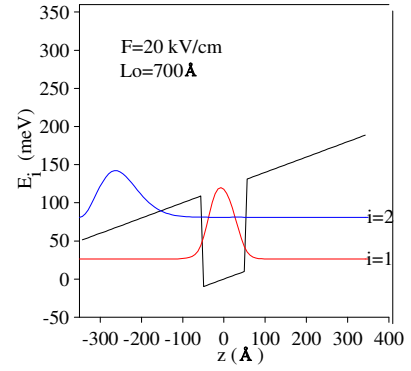
(a)



(b)

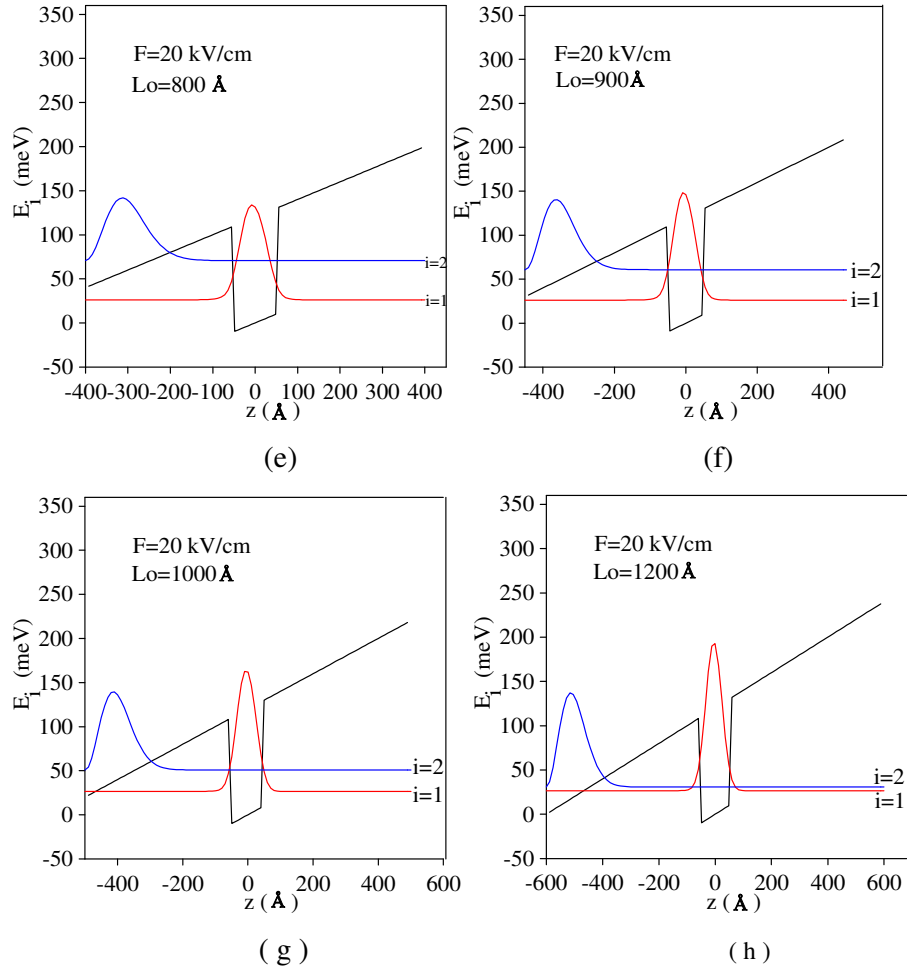


(c)



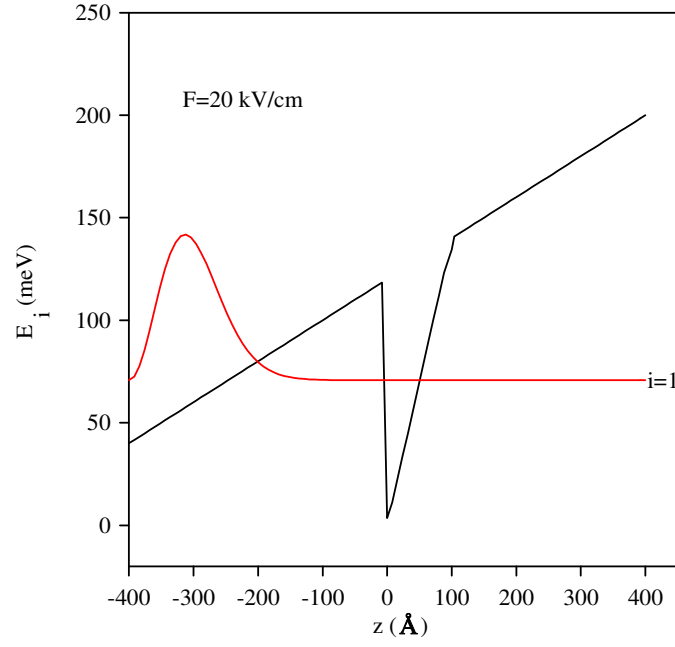
(d)

Şekil 3-9 (a-d) $F = 20 \text{ kV/cm}$ için kare kuantum kuyusunun $L_o = 400 - 700 \text{ \AA}$ arasındaki kuyu genişliklerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları

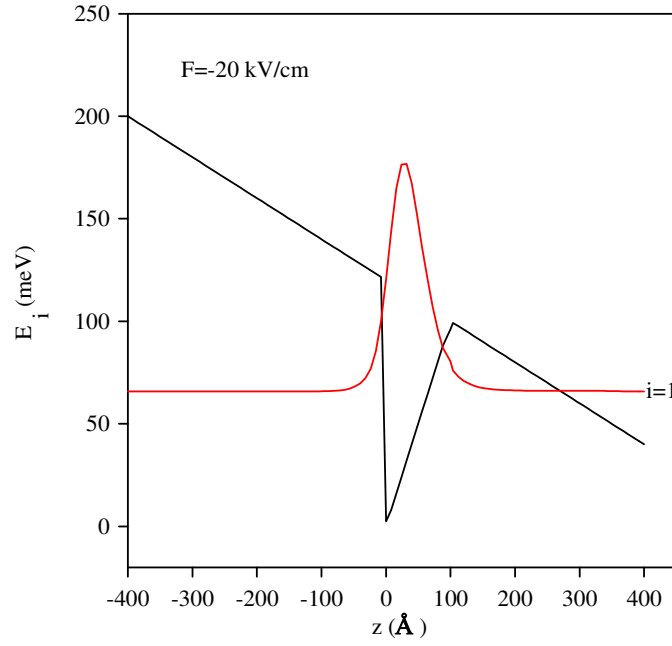


Şekil 3-9 (e-h) $F=20$ kV/cm için kare kuantum kuyusunun $L_0 = 800-1200$ Å arasındaki kuyu genişliklerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları

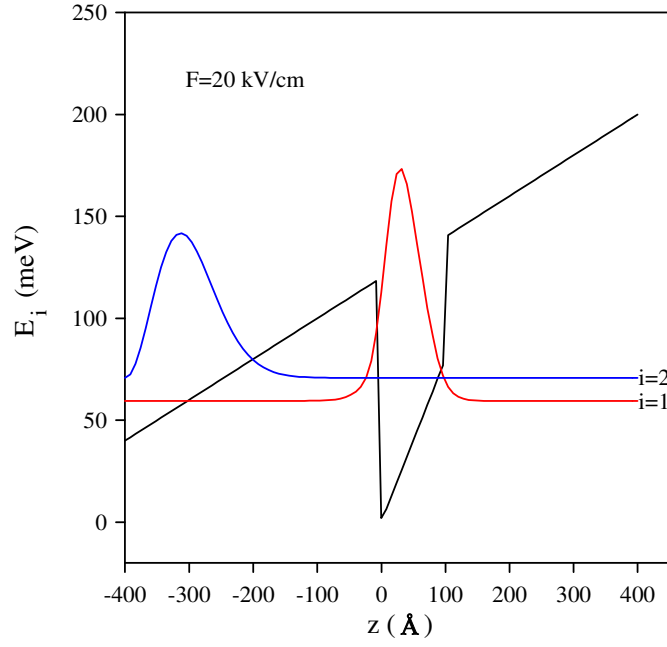
Şekillerden de görüldüğü gibi, sonsuz yükseklikteki kuyunun genişliği arttıkça, taban durum enerji seviyesindeki parçacık kare kuyu içerisinde lokalizedir ve bu enerji seviyesinde belirgin bir değişim olmamasına rağmen, birinci uyarılmış enerji özdeğerinde azalma görülmektedir ve elektron sol taraftaki üçgenimsi kuantum kuyusuna kaymaktadır. $L_0 = 700$ Å değerinden sonra birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonları, yapıların sol taraflarında oluşan sözde üçgenimsi kuantum kuyularının içerisinde benzer şekilde davranış gösterdiklerinden, bu çalışmada $L_0 = 800$ Å olarak alınmıştır.



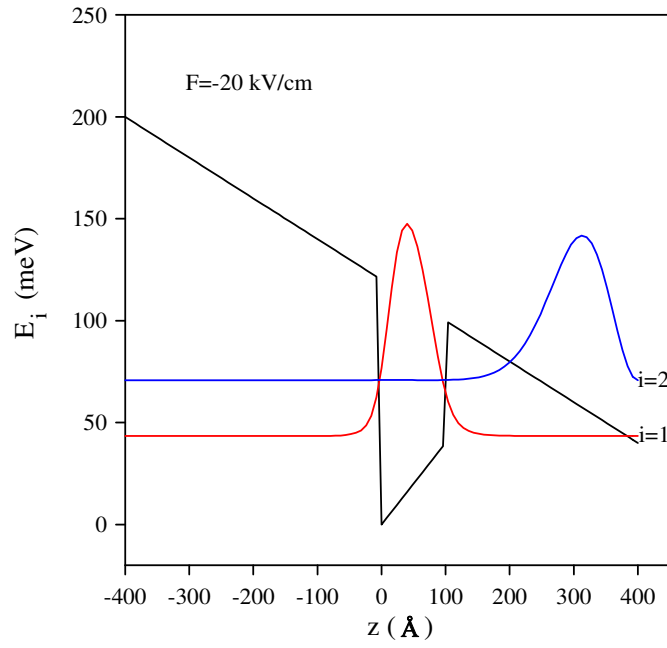
Şekil 3-10 (a) $F = 20$ kV/cm için eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve taban durumu enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



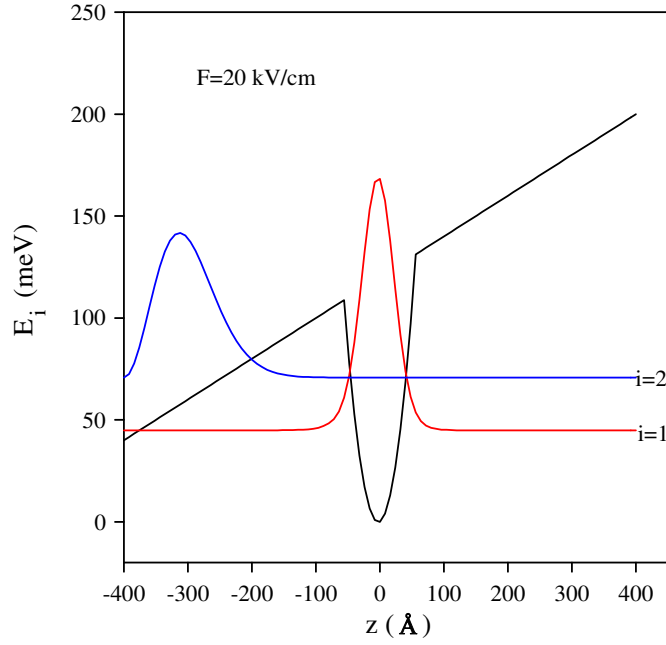
Şekil 3-10 (b) $F = -20$ kV/cm için eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve taban durumu enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



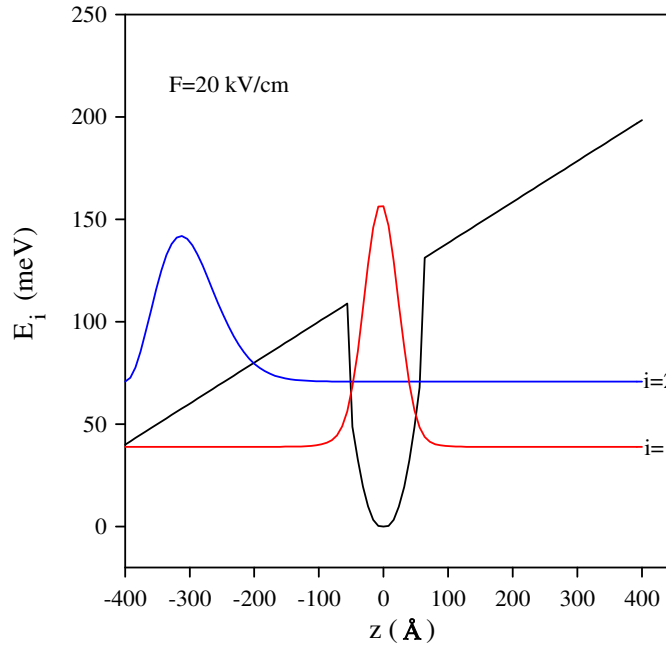
Şekil 3-10 (c) $F = 20$ kV/cm için yarı eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun olasılık yoğunlukları



Şekil 3-10 (d) $F = -20$ kV/cm için yarı eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun olasılık yoğunlukları



Şekil 3-11 (a) $F = 20$ kV/cm için parabolik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-11 (b) $F = 20$ kV/cm için yarı parabolik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları

Şekil 3–10 (a-d) de $F = \pm 20$ kV/cm değeri için eğik ve yarı eğik kuantum kuyularının potansiyel profilleri ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları gösterilmiştir.

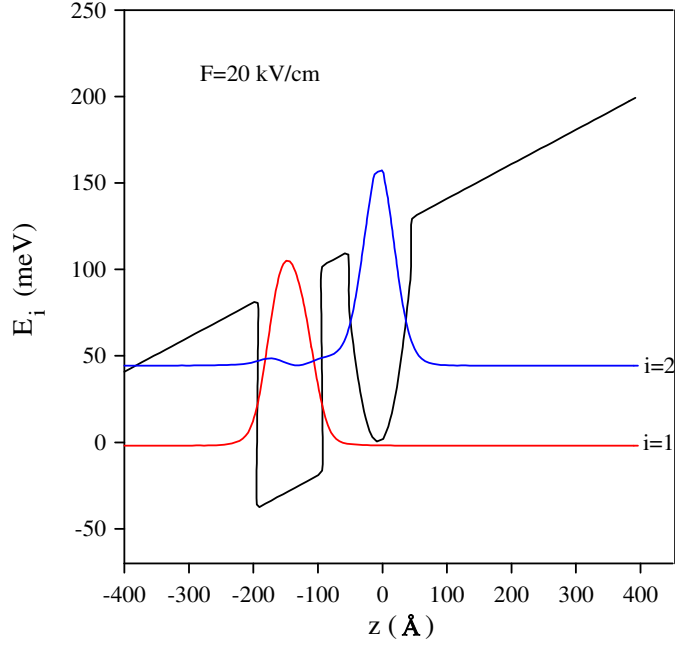
Bu şekillerden de görüldüğü gibi z- doğrultusunda uygulanan pozitif ve negatif işaretli elektrik alan, eğik ve yarı eğik kuantum kuyularının şekillerini değiştirmiştir. $F = 20$ kV/cm olduğunda her iki kuyu potansiyeli de sol tarafa doğru, $F = -20$ kV/cm olduğunda ise sağ tarafa doğru eğilmektedir. Eğik kuyuya dışardan uygulanan elektrik alan değerinin $F = 20$ kV/cm olduğu durumda, taban durum dalga fonksiyonu kuyu içerisinde yer almazken, ikinci dalga fonksiyonu kuyu içerisinde asimetrik bir şekilde lokalizasyona uğramıştır. $F = -20$ kV/cm için bu dalga fonksiyonu kuyu içerisinde asimetrik bir şekilde lokalize olmuştur. İkinci dalga fonksiyonu ise kuyu içerisinden kaçıp sola doğru ilerlemiştir. $F=0$ için, eğik kuyuda birinci uyarılmış enerji seviyesi kuyu dışında olduğundan bu seviyenin elektrik alan altında değişimine bakılmamıştır. $F = 20$ kV/cm için taban durum enerjisindeki elektron olasılık dağılımı, eğik kuyudan sol engele doğru hareket ederken, yarı eğik kuyu içinde halen lokalizedir. Yarı eğik kuyudaki birinci uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu ise sol engel yakınında lokalize olmaktadır. Oysa; $F = -20$ kV/cm için hem eğik hem de yarı eğik kuyu düzleşmeye başladığından, eğik kuyu için taban durum dalga fonksiyonu, kuyu içinde kısmen lokalize, yarı eğik kuyu içinde ise tamamen lokalize olup, birinci uyarılmış enerji dalga fonksiyonu sağ engel yakınında yerleşiktir. Buradan yola çıkarak; eğik ve yarı eğik kuantum kuyularının sivrileşmesinin veya düzleşmesinin uygulanan elektrik alanın $\pm z$ yönüne bağlı olduğunu söyleyebiliriz.

Elde edilen tüm bu sonuçlara göre söyleyebiliriz ki, uygulanan elektrik alan, simetrik kuyuların potansiyel profillerini, enerji seviyelerini, elektronların kuşatılmalarını ve lokalizasyonlarını belirli ölçüde değiştirmektedir. Simetrik olmayan kuyular için ise, uygulanan elektrik alanın $\pm z$ yönünde olması, ya kuyuların simetritlerinin daha fazla bozulmasına ya da kuyuların düzleşmesine neden olduğundan eğik ve yarı eğik kuyuların elektronik özelliklerini büyük ölçüde değiştirmektedir.

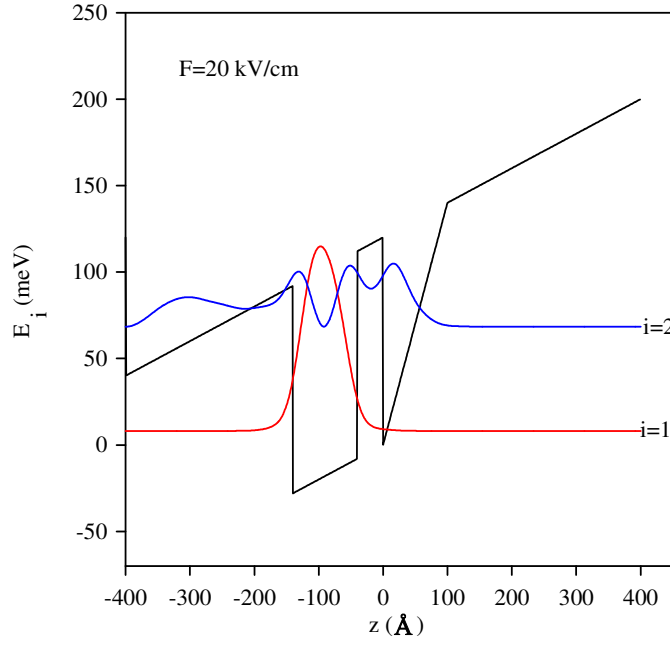
Şekil 3–11 (a-b) de $F = 20$ kV/cm değeri için parabolik ve yarı parabolik kuantum kuyularının potansiyel profilleri ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun olasılık yoğunlukları gösterilmiştir. $F=0$ için, parabolik ve yarı parabolik kuyularda birinci uyarılmış enerji seviyesi kuyuların içerisinde simetrik bir şekilde lokalize olmaktadır. $F = 20$ kV/cm olduğunda ise her iki kuyu potansiyeli de sol tarafa doğru eğilmektedir. Parabolik ve yarı parabolik kuyular için taban durum dalga fonksiyonları kuyuların içinde tamamen lokalize olurken, birinci uyarılmış enerji dalga fonksiyonları sol engel yakınında yerleşiktir.

Şekil 3-12' de kare-parabolik şeklindeki kuantum kuyusuna dışarıdan uygulanan elektrik alanın $F = 20$ kV/cm olduğu durumdaki potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları gösterilmiştir. Uygulanan elektrik alan, kuyuların eğilmelerine ve enerji seviyelerinin değişimine neden olmaktadır. Kare kuyudaki dalga fonksiyonu kuyu içinde tamamen lokalize iken, parabolik kuyudaki $i=2$ seviyesine karşılık gelen dalga fonksiyonu daha enerjik olduğundan, kare kuyuya doğru tünellemeye başlamıştır.

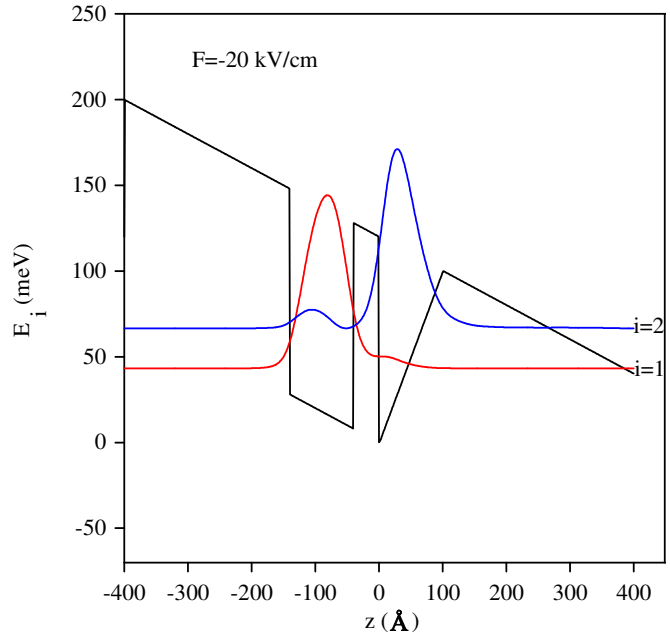
Şekil 3-13 (a-b) ve Şekil 3-14 (a-b), $F = \pm 20$ kV/cm için sırasıyla kare-eğik ve parabolik-eğik kuyularının değişimlerini ve ilk iki enerji seviyesindeki elektronun olasılık dağılımlarını göstermektedir. $F = 20$ kV/cm için, $i=1$ enerji seviyesine karşılık gelen dalga fonksiyonu kare kuyuda (Şekil 3-13 (a)) ve parabolik kuyuda (Şekil 3-14 (a)) tamamen lokalize olmasına rağmen, $i=2$ seviyesi için eğik kuyudaki dalga fonksiyonu kare kuyuya doğru hareket etmeye başlarken, parabolik-eğik kuyu için, eğik kuyudan tamamen kaymış ve soldaki kuyu yakınında yerleşmiştir. $F = -20$ kV/cm için ise; eğik kuyu düzleşmeye başladığından, kare-eğik kuyu için $i=1$ ve $i=2$ seviyelerindeki dalga fonksiyonları, $F=0$ kV/cm durumundaki lokalizasyonlarını büyük ölçüde korumaktadırlar. Parabolik-eğik kuyuda ise değişim oldukça fazladır. $F=0$ durumunda $i=1$ ve $i=2$ seviyelerindeki elektronlar sırasıyla parabolik ve eğik kuyuda yerleşirken, $F= -20$ kV/cm olduğunda bu seviyelerdeki elektronların bulunma olasılık yoğunlukları yer değiştirmiş ve farklı kuyularda lokalize olmuşlardır.



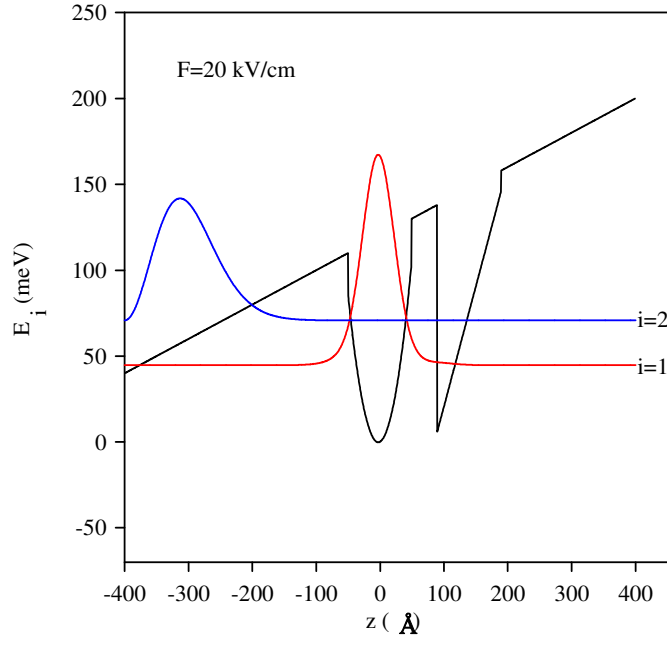
Şekil 3-12 $F=20$ kV/cm için kare-parabolik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



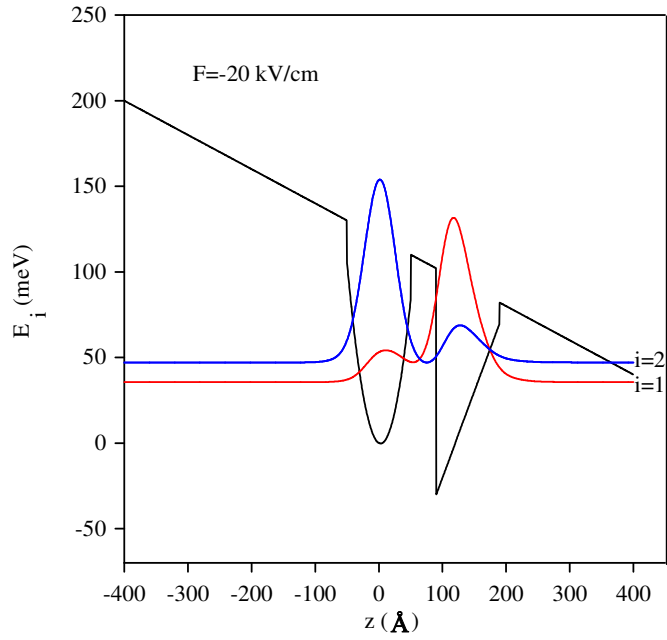
Şekil 3-13 (a) $F = 20$ kV/cm için kare-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-13 (b) $F = -20$ kV/cm için kare-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-14 (a) $F = 20$ kV/cm için parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları

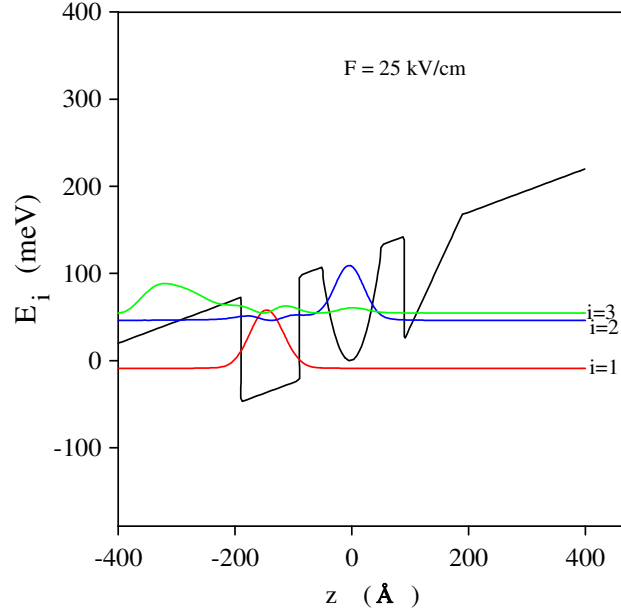


Şekil 3-14 (b) $F = -20$ kV/cm için parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk iki enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları

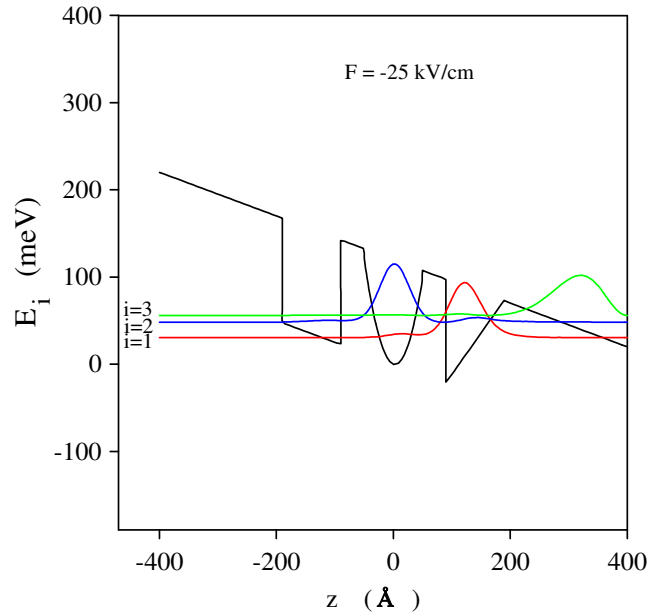
Şekil 3-15 (a-b)' de $F = \pm 20 \text{ kV/cm}$ için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları gösterilmiştir. Şekil 3-15 (a) da görüldüğü gibi, elektrik alan değeri 25 kV/cm olarak uygulandığında, üçlü kuantum kuyusunun elektronik yapısı değişir. Bu durumda, kare şeklindeki kuantum kuyusuyla sonsuz engelli yapının sol tarafı arasındaki bölgede üçgene benzer bir potansiyel meydana gelir. Birinci altband dalga fonksiyonu, kare kuyu içerisinde lokalize olurken ikinci altband dalga fonksiyonu parabolik kuyu içerisinde lokalizedir. Üçüncü dalga fonksiyonu ise, oluşan üçgenimsi kuantum kuyusuna doğru hareket ettiğinden, eğik kuyu içerisinde lokalize olan dalga fonksiyonu bulunmamaktadır. Elektrik alan değeri -25 kV/cm olduğunda, üçlü kuantum kuyusu sağa doğru eğilir ve sağ taraftaki engelde üçgenimsi bir kuantum kuyusu görülür (Şekil 3-15 (b)). Birinci altband dalga fonksiyonu, eğik kuyu içerisinde lokalize olurken, ikinci altband dalga fonksiyonu parabolik kuyu içerisinde lokalizedir. Üçüncü altband dalga fonksiyonu ise, yapının sağ tarafında lokalize olmaya başladığından kare kuyu içerisinde lokalize olan dalga fonksiyonu yoktur. Şekil 3-15 (a)' dan da görüldüğü gibi, elektrik alan değeri 60 kV/cm ' ye çıkartıldığında, üçlü kuantum kuyu yapısı belirgin bir biçimde değişir ve eğik kuyu elektrik alanının 25 kV/cm olduğu duruma göre daha da keskinleşir. İkinci ve üçüncü dalga fonksiyonları sol tarafa doğru kayarken, taban durum dalga fonksiyonu kare kuantum kuyu içerisinde lokalize olmaya devam eder. Elektrik alan değeri -60 kV/cm olarak uygulandığında ise, eğik kuyu daha da düzleşir ve tüm altbandlar yapının sağ tarafına doğru hareket eder (Şekil 3-16 (b)). Kare, parabolik ve eğik kuyular içerisinde lokalize olan dalga fonksiyonu bulunmamaktadır.

Bu çalışmada $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ yapısının L_0 genişlikli sonsuz bir kuantum kuyusu içine yerleştirildiği kabul edildiğinden, böyle yapılara uygulanan yüksek pozitif işaretli elektrik alanı, yapının sol engeli ile sol kuyusu arasında sözde üçgen biçiminde yeni bir kuantum kuyusu ortaya çıkarır. Ve elektron yoğunluğunun sol engel yakınında lokalize olmasını sağlar. Zıt yönde uygulanan elektrik alanı ise, yukarıda belirtilenlerin aksi yönünde bir etki sağlar. Uygulanan elektrik alanının büyüklüğüne ve yönüne bağlı olarak sistemin elektronik yapısının

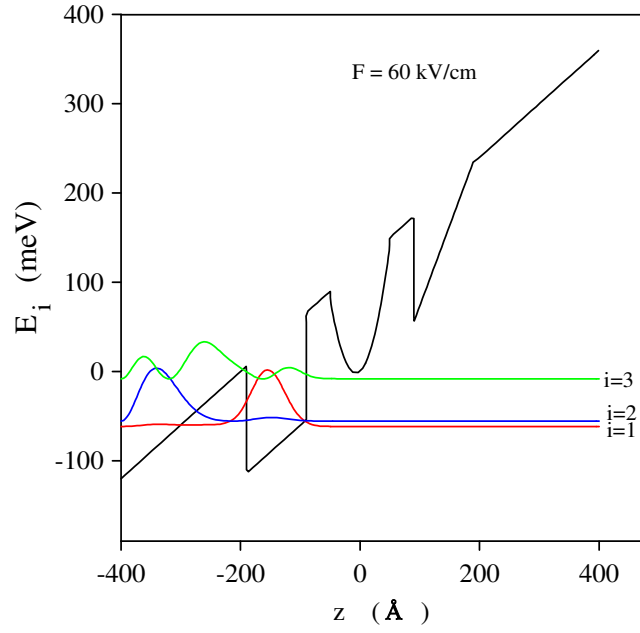
değişmesi, kuyu engel genişlikleri ile yüksekliklerinin ve uygulanan elektrik alanın, amaca yönelik ayarlanabilir parametreler biçiminde değerlendirilmelerine olanak sağlar.



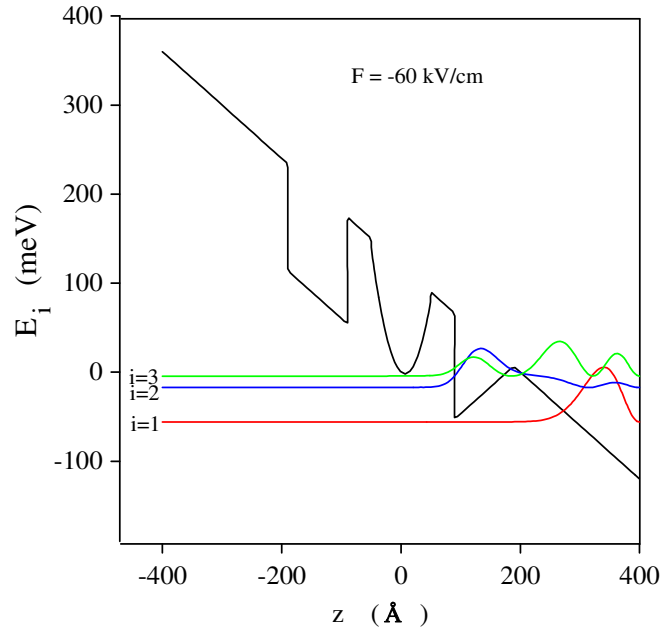
Şekil 3-15 (a) $F = 25 \text{ kV/cm}$ için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



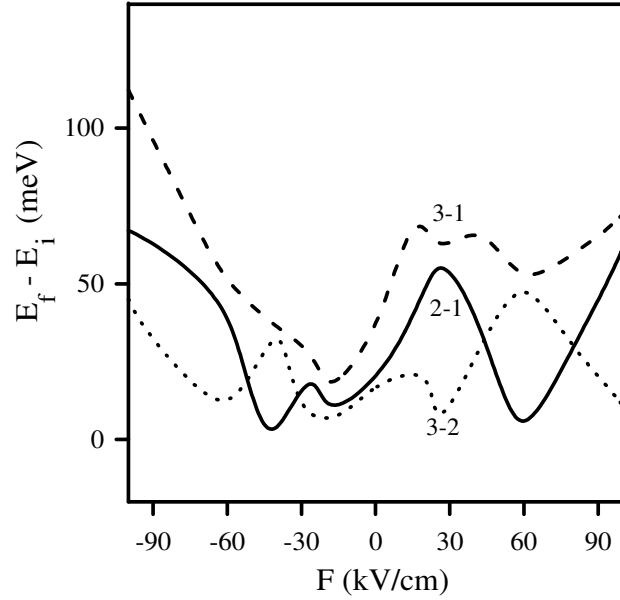
Şekil 3-15 (b) $F = -25 \text{ kV/cm}$ için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-16 (a) $F = 60 \text{ kV/cm}$ için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-16 (b) $F = -60 \text{ kV/cm}$ için kare-parabolik-eğik kuantum kuyusunun potansiyel profili ve ilk üç enerji özdeğerinde elektronun bulunma olasılık yoğunlukları



Şekil 3-17 Kare-parabolik-eğik üçlü kuantum kuyusuna uygulanan elektrik alanın bir fonksiyonu olarak enerji seviyeleri arasındaki farklar

Şekil 3-17’de ise üçlü kuantum kuyusu için, uygulanan elektrik alanın bir fonksiyonu olarak enerji seviyeleri ($E_f - E_i$) arasındaki farklar gösterilmektedir. Burada E_i , ilk enerji değerini, E_f ise son enerji değerini göstermektedir. Şekilden de görüldüğü gibi, enerji fark değerlerindeki artma veya azalma miktarı uygulanan elektrik alanın yönüne ve büyüklüğüne bağlıdır. Bu çalışmada kullanılan parametrelerle elde ettiğimiz sonuçlara göre; elektrik alan değeri 15kV/cm’den küçük olduğunda, enerji farkları artar ve üçüncü altband dalga fonksiyonu, halen eğik kuyu içerisinde yerleşiktir. Elektrik alan değerinin 15 kV/cm’ye eşit veya büyük olduğu durumlarda ise, bu enerji seviyesindeki elektronlar sol tarafa doğru hareket ettiklerinden eğik kuyuda elektron bulunmamaktadır. Elektrik alan değerinin 28 kV/cm’ye eşit veya büyük olduğu durumlarda, ikinci altband dalga fonksiyonu parabolik kuyu içerisinde lokalize olmadığından enerji seviyeleri arasındaki farklar değişir. Elektrik alan değerinin,

64 kV/cm' ye eşit olduğu durumlarda ise, $i=1$ için dalga fonksiyonu artık kare kuyu içerisinde lokalize olmadığından tüm dalga fonksiyonları yeni üçgen kuyuya doğru hareket etmektedirler. Üçlü kuantum kuyusunda elektrik alanın pozitif olarak uygulanmasıyla elde edilen sonuçlar, negatif alınmasıyla elde edilen sonuçlarla oldukça farklıdır. Elektrik alan değerinin, $-F \geq 11$, $11 < -F \leq 13$ ve $-F \geq 14$ kV/cm olduğu durumlarda, birinci dalga fonksiyonu, sırasıyla, kare, parabolik ve eğik kuantum kuyuları içerisinde lokalizedir. $-F \geq 25$ kV/cm olduğu durumlarda, taban durum dalga fonksiyonu eğik kuyuda, birinci uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu tamamen parabolik kuyuda, üçüncü uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu ise kuyuların dışındadır. Elektrik alan değerinin $-F \geq 28$ kV/cm ve $-F \geq 40$ kV/cm olduğu durumlarda, ikinci ve birinci alt-bant dalga fonksiyonları, sırasıyla; parabolik ve eğik kuantum kuyuları içerisinde lokalize değildiler. Bu değişimler, Şekil 3-17 'de $E_f - E_i$ değerinin maksimumu veya minimumu olarak karakterize edilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, farklı potansiyel profillerinden oluşan üçlü kuantum kuyusuna sahip yapı, uygulanan elektrik alanın büyüklüğünün ve yönünün değiştirilmesiyle farklı özellikler göstermektedir.

4. SONUÇ

Elektronik ve optik aletlerin teknolojik uygulamalarında temel araştırma konusu olarak ele alınan yarıiletken yapıların potansiyel profilleri, farklı metotlar kullanan birçok araştırmacı tarafından hem teorik hem de deneysel olarak çalışılmıştır. Uygulamalarda potansiyel profilindeki değişim, yarıiletken yapıların çok duyarlı olarak kontrol edilmesini sağlar ve gelecekte de kuantum elektronik ve fotonik cihaz araştırmalarında önemli bir rol oynayacaktır.

Bu çalışmada, ilk olarak düşük boyutlu sistemler, heteroyapılar ve kuantum kuyulu yapılar hakkında kısa bir bilgi verildikten sonra, farklı biçimlerde ve dizilimlerdeki potansiyel profillerine sahip GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs yapısının elektronik özellikleri, Schrödinger dalga denkleminin nümerik çözümüyle elde edilmiştir. Daha sonra, bu yapılara dışarıdan bir elektrik alan uygulayarak elektronik özelliklerin bu alan altındaki değişimleri incelenmiştir. Bu hesaplamalar yapılırken GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs yapısının, L₀ genişlikli ve sonsuz derinlikli bir kuantum kuyusuna yerleştirildiği kabul edilmiştir.

Bu çalışmada kullanılan parametrelere göre; elde edilen tüm verilerden yola çıkarak; simetrik olmayan bir yapıda dalga fonksiyonlarının simetrik olmadığı, enerji özdeğerlerinin simetrik yapılara göre büyük değişim gösterdiği görülmektedir. Dolayısıyla, aynı kuyu genişliğine ve potansiyel yüksekliğine sahip farklı kuantum kuyuların enerji özdeğerleri, birbirlerinden oldukça farklıdır. Potansiyel profilinin değişiminden en çok taban durumundaki parçacık etkilendiğinden, en düşük taban durum enerji özdeğeri kare kuyuda, en büyük taban durum enerji özdeğeri ise eğik kuyudadır. Eğik kuyuda sadece taban durum enerji özdeğerinin yer aldığı, diğer kuyularda ise taban ve birinci uyarılmış durum enerji özdeğerlerinin bulunduğu görülmüştür. Beklenildiği gibi, yarı-kare ile yarı-eğik kuyulardaki taban durum enerji özdeğerleri birbirine çok yakındır.

z- doğrultusunda uygulanan pozitif değerlikli elektrik alan, kuantum kuyularının şekillerini değiştirerek kuyu potansiyelinin sol tarafa doğru eğilmesine neden olur ve sol taraftaki engelde sözde üçgen şeklinde bir kuantum kuyusu ortaya çıkar. F=0 için olasılık yoğunlukları, simetrik yapılar için z=0 da

merkezlenirken, elektrik alanın uygulanmasıyla bu yoğunluklar sol engel yakınında lokalize olmaya başlar. Elde edilen tüm bu sonuçlara göre söyleyebiliriz ki, uygulanan elektrik alan, simetrik kuyuların potansiyel profillerini, enerji seviyelerini, elektronların kuşatılmaları ile lokalizasyonlarını belirli ölçüde değiştirmektedir. Simetrik olmayan kuyular için ise, uygulanan elektrik alanın $\pm z$ yönünde olması, ya kuyuların simetriterinin daha fazla bozulmasına ya da kuyuların düzleşmesine neden olduğundan eğik ve yarı eğik kuyuların elektronik özelliklerini büyük ölçüde değiştirmektedir.

Parçacıkların ilk olarak yerleştiği taban durumunun aksine, uyarılmış durumdaki taşıyıcılar, daha yüksek enerjiye ve tüm uzay bölgesi içinde çok daha yüksek bulunma olasılığına sahiptir. Bu yüzden, elektrik alan şiddetinden dolayı ortaya çıkan değişimlerden, birinci uyarılmış durumdaki parçacıklar taban durumdaki parçacıklara nazaran daha çok etkilenirler. Elektrik alan şiddetine bağlı olarak birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonları, sol kuyuya doğru kayarken, taban durum dalga fonksiyonları kuyu içerisinde lokalizedirler.

Sonuç olarak; elektronun tünelleme olasılığı, uygulanan elektrik alanın yönüne ve büyüklüğüne bağlı olarak artabilir veya azalabilir. Ayrıca bu tünelleme kontrolü fotodedektör sınıfı yüksek enerji üretebilen cihazlarda oldukça kullanışlıdır. GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs yapının elektronik özelliklerinde meydana gelen değişim, son zamanlarda hem çok yüksek elektron hareketlilik ve yoğunluklarıyla hem de kuantum-elektronik ve fotonik aletlerdeki araştırmalarla, yeni yarı iletken aletlerin yapımında önemli rol oynamaktadır. GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs bileşiminin alaşımları ve heteroyapılar günümüzde fiber optik, telekomünikasyon, optik hafıza ve compact diskler (CD) için gerekli teknolojiyi sağlamaktadır.

5. KAYNAKLAR

- [1] L. Esaki and R. Tsu (1969) "Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors" IBM Res. Note, RC-2414
- [2] E. Ozturk (2000), δ katkılı GaAs yapılarında elektronik yapı (Doktora tezi).
- [3] R. Amca, Y. Ergün, I. Sökmen, H. Sarı (2000) "Electronic energy spectra in a multiple quantum well within external electric and tilted magnetic fields", *Semicond. Sci. Technol.* **15**, 1087-1092.
- [4] H. L. Störmer, R. Dingle, A. C. Gossard, W. W. Wiegman and M. D. Sturge (1979), "Two-dimensional electron gas at differentially doped GaAs–Al_xGa_{1-x}As heterojunction interface" *J. Vac. Sci. Technol.*, **16**, 1517.
- [5] Jasprit Sing, (1994), *Semiconductor Devices*, McGraw-Hill Inc.
- [6] Z. C. Feng, 'Semiconductor Interfaces and Microstructure.'
- [7] H. C. Liu, F. Capasso (2000), 'Intersubband Transitions in Quantum Wells', Academic Pres.
- [8] R. L. Greene and K. K. Bajaj (1985), *Phys. Rev. B* **31**, 913.
- [9] J. A. Brum, G. Priester and G. Allan (1985), *Phys. Rev. B* **32**, 2378
- [10] B. S. Yoo, L. He, B. D. McCombe, W. Schaff, (1991), *Superlatt. Microstruct.* **8**, 297.
- [11] E. Ozturk, H. Sari and I. Sokmen, (2004), *Surface Review and Letters* **11**, 297.
- [12] E. Kasapoglu, H. Sari and I. Sokmen, (2000), *J. Appl. Physics* **88**, 2671.
- [13] N. C. Mamani, C. A. Duarte, G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, (2006), *Braz. J. Phys.* **36**, 336.
- [14] E. C. Niculescu, (1997), *Czechoslovak Journal of Physics* **47**, 835.
- [15] I. Tifrea, M. E. Flatte, (2005), *Journal of Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism* **18**, 207.
- [16] H. Sari, E. Kasapoglu, Y. Ergun and I. Sokmen, (1999), *Tr. J. of Physics* **23**, 775.
- [17] E. Ozturk, H. Sari and I. Sokmen, (2004), *Solid State Communications* **132**, 497.
- [18] Y. Ohno, T. Matsusue and H. Sakaki, (1993), *Appl. Phys. Lett.* **62**, 1952.
- [19] K. Leo, J. Shah, E. O. Göbel, J. P. Gordon, and S. Schmitt-Rink, (1992), *Semicond. Sci. Technol.* **7**, B394.
- [20] L. Liu, L. Swierkowski, D. Neilson, J. Szymanski, (1996), *Phys. Rev. B* **53**, 7923.
- [21] H. Sari, E. Kasapoglu, and I. Sokmen, (2003), *Physica B* **325**, 300 E. Kasapoglu, H. Sari and I. Sokmen, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, 2468 (2005).
- [22] H. S. Ahn, S. Y. Yi, J. Y. Ryu, S. W. Kim, K. Mizutani, M. Yamaguchi, N. Sawaki, (2001), *Journal of the Korean Physical Society* **39**, 451 K. Mizutani, Y. Nishimoto, M. Yamaguchi, N. Sawaki and H. S. Ahn, (2003), *Journal of the Korean Physical Society* **42**, S633.
- [23] E. Ozturk, H. Sari, Y. Ergun and I. Sokmen, (2005), *Appl. Phys. A* **80**, 167.
- [24] D. Huang and M. O. Manasreh (1996), *J. Appl. Phys.* **80**, 6045.

- [25] Paul Harrison (2000), 'Quantum Wells, Wires and Dots' **82**, 480
- [26] R. M. Soraide and G. Q. Hai (2002), *Braz. J. Phys* **32**, 344
- [27] R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard and W. W. Wiegman (1978), "Evolution and recent advances in RF/Microwave transistors", *Appl. Phys. Lett.*, **33**, 665.

6. ÖZGEÇMİŞ

Adı-Soyadı : Erman KÖSE

Doğum Yeri-Yılı : Sivas-1983

Lisans (2001–2005) : Cumhuriyet Üniversitesi

Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Sivas

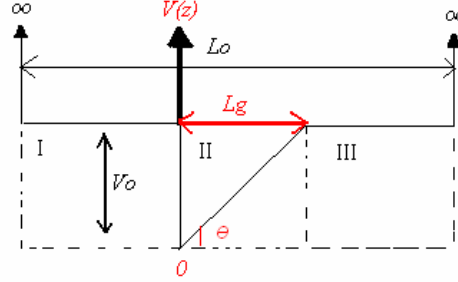
Yüksek Lisans (2005–2008) : Cumhuriyet Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı Sivas

7. EK

Eğik Kuantum Kuyusunun Elektronik Özelliklerinin Farklı Bir Yöntemle Hesaplanması



Şekil Ek-1 Eğik kuantum kuyusunun şematik gösterimi

Şekildeki eğik kuantum kuyusu için Schrödinger denklemi, Denklem (3.3) ile aynı formdadır. Potansiyel enerji fonksiyonu ise; (3.15) denklemine benzer olarak,

$$V(z) = \begin{cases} \infty & |z| > \frac{L_0}{2} \\ \frac{V_0}{L_g}(z - L_g) & 0 \leq z \leq L_g \\ V_0 & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \quad (\text{EK-1})$$

şeklindedir. Her bir bölgedeki dalga fonksiyonlarını ise,

$$V(z) = \begin{cases} A e^{Kz} & \text{I. bölge} \\ C \text{Ai}[\chi(z)] + D \text{Bi}[\chi(z)] & \text{II. bölge} \\ B e^{-Kz} & \text{III. bölge} \end{cases} \quad (\text{EK-2})$$

olarak ifade edebiliriz. Burada $\text{Ai}[\chi(z)]$ ve $\text{Bi}[\chi(z)]$ Airy fonksiyonlarıdır ve

$$K = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(V_0 - E_i)} \quad (\text{EK-3})$$

$$\chi(z) = \left(\frac{m^* (L_g)^2}{2\hbar^2 V_0^2} \right)^{1/3} \left(\frac{V_0}{L_g} (z - L_g) - E_i \right) \quad (\text{EK-4})$$

olmak üzere A, B, C, D normalizasyondan bulunacak olan sabitlerdir. Sınır şartları ve normalizasyon koşulunun kullanılmasıyla, enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları elde edilebilir. Daha sonraki çalışmalarda, eğik kuantum kuyusunun elektronik özelliklerini hesaplamada Airy fonksiyonları da kullanılabilir.