

DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKENLERDE ALAN  
ALTINDA SAFSIZLIKLARIN DİAMANYETİK  
ALINGANLIĞI  
ERCAN KILIÇARSLAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI  
2009

CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKENLERDE ALAN ALTINDA  
SAFSIZLIKLARIN DİAMANYETİK ALINGANLIĞI

ERCAN KILIÇARSLAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI  
Prof.Dr. Hüseyin SARI

SİVAS  
2009

Bu alıřma Cumhuriyet niversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanmıř ve jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiřtir.

Başkan: Prof. Dr. Rauf AMİROV

Üye: Doç. Dr. Esin KASAPOĞLU

Üye: Prof. Dr. Hüseyin SARI

## ONAY

Bu tez alıřması, .../.../..... tarihinde Enstitü Yönetim Kurulu tarafından belirlenen ve yukarıda imzaları bulunan jüri üyeleri tarafından kabul edilmiřtir.

Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
MÜDÜRÜ

Bu tez Cumhuriyet Üniversitesi Senatosu'nun 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 klavuzu' adlı yönergeye göre hazırlanmıştır

## ÖZET

### Yüksek Lisans Tezi

#### DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKENLERDE ALAN ALTINDA SAFSIZLIKLARIN DİAMANYETİK ALINGANLIĞI

Ercan KILIÇARSLAN

Cumhuriyet Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

2009

Danışman: Prof. Dr. Hüseyin SARI

Bu çalışmada, donör katkıli simetrik GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum kuyusu ve kuantum telinde impurity bağlanma enerjisi ve diamanyetik alinganlık etkin kütle yaklaşımında varyasyonel olarak, sistemin ayarlanabilir fiziksel parametreleri (kuyu genişliđi, safsızlık atomunun konumu) ve dışarıdan uygulanan manyetik alanın bir fonksiyonu olarak hesaplandı.

**Anahtar Kelimeler:** Kuantum Kuyusu, Kuantum Teli, Diamanyetik Alinganlık, Manyetik Alan

## **SUMMARY**

### **MSc Thesis**

## **DİAMAGNETİC SUSCEPTİBİLİTY CALCULATIONS UNDER FIELD OF IMPURITY ATOMS IN SEMİCONDUCTORS**

Ercan KILIÇARSLAN

Cumhuriyet University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

2009

Supervisor: Prof. Dr. Hüseyin SARI

In this study, we have calculated the diamagnetic susceptibility and binding energy of the donor in symmetric GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells and quantum wires as a function of the impurity positions, dimensions of the structures and external magnetic field. The calculations were performed within the effective mass approximation, using a variational method.

**Key Words:** Quantum Well, Quantum Wire, Diamagnetic Susceptibility, Magnetic field.

## TEŐEKKÜR

Konu seiminde ve alıŐmalarımın her aŐamasında bilgi ve deneyimlerinden faydalandıĐım danıŐman hocam Sayın Prof. Dr. Hüseyin SARI' ya ve tez alıŐmamın baŐlangıcından bitimine kadar her konuda bana yardım eden deĐerli hocam Do. Dr. Esin KASAPOĐLU'na teŐekkür ederim. Ayrıca alıŐmalarım sırasında bana hep destek olan tüm arkadaşlarıma teŐekkür ederim.

## İÇİNDEKİLER

İÇİNDEKİLER .....	i
ŞEKİLLER TABLOSU .....	iii
TABLOLAR DİZİNİ.....	v
1. GİRİŞ .....	1
2. YARIİLETKENLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ .....	4
2.1. Yarıiletkenlerin Band Yapısı .....	4
2.2. Bazı Yarıiletkenlerin Band Yapısı .....	7
2.2.1. Silisyum.....	7
2.3. Katkılı Yarıiletkenler.....	10
3. HETEROYAPILAR .....	13
3.1. Nanoyapılar: Kuantum Kuyuları, Telleri ve Noktaları .....	17
4. DONOR KATKILI HETEROYAPILAR .....	22
4.1. GİRİŞ .....	22
4.2. Manyetik Alan Altında Donor Katkılı GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As Kuantum Kuyusu	22
4.3. Manyetik Alan Altında Donor Katkılı GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As Kuantum Teli	29
5. DİAMANYETİZMA .....	35
5.1. Giriş.....	35
5.2. Hellmann-Feynman Teoremi.....	36
5.3. Kuantum Kuyusunda Donor Safsızlık Atomlarının Manyetik Alan Altındaki Diamanyetik Alınganlığı .....	38
5.4. Kuantum Tellerinde Donor Safsızlık Atomlarının Manyetik Alan Altındaki Diamanyetik Alınganlığı .....	42



6. TARTIŞMA VE SONUÇ .....	45
KAYNAKLAR .....	46
ÖZGEÇMİŞ .....	49

## ŞEKİLLER TABLOSU

Şekil 2.1: Yarıiletkenlerin band yapısı .....	6
Şekil 2.2: Silisyumun band yapısı .....	8
Şekil 2.3: Galyum arsenidin band yapısı .....	10
Şekil 3.1: Oda sıcaklığında bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve enerji aralıkları [9].....	14
Şekil 3.2: (a) Birbirine eklenmemiş farklı iki yarıiletkenin band diyagramı .....	15
(b) Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin birbirine eklenmiş durumdaki band yapısı. Burada $\Delta E_v$ ve $\Delta E_c$ sırasıyla valans ve iletim bandındaki süreksizlikleri, $E_{g1}$ ve $E_{g2}$ ise temel bant aralıklarıdır. ....	15
Şekil 3.3: Bant süreksizliğine göre heteroyapı türleri .....	17
Şekil 3.4: Bir heteroyapıda elektron ve holler için kuantum kuyu oluşumunun şematik gösterimi. ....	18
Şekil 3.5: Kuantum Kuyu profili.....	19
Şekil 3.6: Kuantum teli. ....	20
Şekil 3.7: Kuantum kutusu.....	20
Şekil 4.1: GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As kuantum kuyusu potansiyel profili. ....	23
Şekil 4.2: GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As tek kuantum kuyusundaki donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için donör atomunun konumuna göre değişimi. ....	27
Şekil 4.3: GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As kuantum kuyusunun merkezinde yerleşen donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı kuyu genişlikleri için manyetik alana göre değişimi.....	28
Şekil 4.4: GaAs/GaAlAs kuantum teli potansiyeli.....	29
Şekil 4.5: Simetrik GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As kuantum telinde manyetik alan altında safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin donör atomunun konumuna göre değişimi.....	33

Şekil 4.6: Farklı genişlikli GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As kuantum telinin merkezinde lokalize olan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi.....	34
Şekil 5.1: L = 100 Å genişlikli GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As kuantum kuyusundaki donör safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığının farklı manyetik alan değerleri için donör atomunun konumuna göre değişimi. ....	40
Şekil 5.2: Farklı genişlikli GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As kuantum kuyusunun merkezindeki donör safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığının manyetik alana göre değişimi.....	41
Şekil 5.3: L = 200 Å genişlikli Simetrik GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As kuantum telinde donör safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığının farklı manyetik alan değerleri için donör atomunun konumuna göre değişimi. ....	43
Şekil 5.4: Farklı genişlikli GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As kuantum telinin merkezinde lokalize olan safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığının manyetik alana göre değişimi.....	44

## **TABLolar DİZİNİ**

Tablo 1: Bazı yarıiletkenlerin verici ve alıcı enerji seviyeleri [8]..... 12

## 1. GİRİŞ

Kuantum mekaniği geliştikçe, atomik yapı konusundaki uygulamalar gazlardaki izole edilmiş atomlara yöneldi. Katıhalde, fizikçiler metallere daha çok yöneldiler. Çünkü metalin davranışı malzemenin saflığına çok bağlı değildir. Yarıiletkenlerde en ufak safsızlık ilavesinin bile iletkenlikte çok büyük etkiler göstermesinden dolayı yarıiletkenlere çok az ilgi vardı. Pauli'nin dediği gibi " Kir Fiziği" problemleri, 1920'li yılların en iyi fizikçilerinin bile ilgisini çekmiyordu. Bu sırada, Robert W. Pohl, Göttingende iyonik kristaller üzerine çalışmalara başladı. Pohl'un okulu tam bir deneysel okuldu. Deney grubu öncelikle metal olmayan malzemelerdeki elektriksel iletkenlik incelemeleri üzerinde durdu. Safsızlıkların malzemelerin özelliklerine etkilerini not ettiler. Böylece yarıiletken fiziğinin ve kısmende olsa katkılama işleminin deneysel buluşlarını yapmış oldular [1].

Pohl Göttingende Max Born ve James Franck ile beraber kuantum mekaniğinin yeni gelişen alanının öncüleri olmuşlardı. Sonuç olarak Pohl'un grubu yarıiletkenlerde kristal büyümesi, katkılama, iletkenlik ve foto-elektrik etki gibi konularda çalıştılar ve yarıiletken fiziğinin gelecekteki teorilerinin temelini atacak veriler elde ettiler. Elektriksel iletkenlik üzerine katkılamanın etkisinin, çoğu sebepten dolayı özellikle üzerinde duruldu.1938'de Pohl ve Hilsch yarıiletken fiziği hakkındaki bilgilerini, üç terminalli akım yükselticisi tasarlamak için kullandılar [1]. Çalışmalarının amacı, lambalarda olduğu gibi katılarda da elektrostatik alan etkisi ile elektron akışını sağlamaktı. Daha sonraları bu çalışmalar bugünkü transistörlerin temelini teşkil etti ve 1947 yılında Bardeen ve Brattain tarafından transistörün keşfedilmesine olanak sağladı. Transistörün keşfedilmesiyle yarıiletken teknolojisi çok hızlı bir şekilde gelişmeye başladı.

Yarıiletkenlerin önemli fiziksel özelliklerinin anlaşılmaya başlanmasıyla birlikte bu malzemelerin büyük teknolojik kullanımları olabileceği belirlendi. Artık, günümüzde yarıiletkenler çok yaygın kullanım alanına sahip olup birçok elektronik devrenin ve çeşitli düzeneklerin temel yapı elemanlarını oluşturarak yaşantımız içinde önemli yer tutmaktadırlar. Yarıiletkenlerin sıkça tercih edilmelerinin temel nedenleri, yarıiletken devre elemanlarının çok küçük hacimler içerisine yerleştirilebilir olmaları, söz konusu yarıiletkenlerin yasak band

aralıklarının küçük olması ve istenilen bir devre elemanı yapılmasına imkân vermesidir.

Birçok elektronik yapı tasarımında yarıiletkenler, hareketli yüklerin kaynağını sağlamak için kullanılırlar. Tasarlanan yeni elektronik devre elemanlarının modellenmesi, sistemlerin ayarlanabilir fiziksel özellikleri temel alınarak yapılmaktadır. Yarıiletkenlerin kristal yapılarının incelenmesi sayesinde yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri belirlenebilmektedir. 1980'li yıllara kadar yapay kristallerin büyütülmesindeki yetersizlikten dolayı yarıiletken malzemelerden elde edilen devre elemanları Ge, Si ve benzeri temel yarıiletken malzemeler üzerine kuruluydu. Daha sonraları yapılan çalışmalarla yeni tür yarıiletkenler ortaya çıkarıldı. Bu yeni tür yarıiletkenler epitaksiyel olarak oluşturulan düşük boyutlu olarak adlandırılan yapılardan oluşmaktadır. Günümüzde bunu mümkün kılan kristal yetiştirme teknikleri geliştirilmiştir. Bunlardan en önemlileri MBE (Molecular Beam Epitaxy) ve MOCVD (Metal-Organic Vapour Deposition) teknikleridir. Bu büyütme teknikleriyle değişik yapılar oluşturulabilmektedir. Örneğin; GaAlAs yarıiletken tabakası arasına GaAs tabakası oluşturularak tekli kuantum çukuru, bu tabakaların periyodik olarak tekrarlanmasıyla çoklu kuantum çukurları veya tabaka kalınlıkları ayarlanarak oluşturulan süperörgüler, bu yöntemlerle kolayca büyütülebilir [2,3].

Yoğun madde fiziğindeki araştırmaların düşük boyutlu sistemler üzerine yoğunlaşması şaşırtıcı değildir. Kristal büyütme tekniklerindeki gelişmeler sonucunda yük taşıyıcıların bir yöndeki hareketi kısıtlanarak iki-boyutlu kuantum kuyusu, kuşatılma boyutları arttırılarak bir-boyutlu kuantum tellerinin ve sıfır boyutlu kutularının oluşturulması mümkün kılınmıştır. Düşük boyutlu sistemlerde çalışılmasının temel sebebi, materyalin boyutlarının De Broglie dalga boyu mertebesinde (100 Å) olduğunda kuantum etkilerinin ortaya çıkmasıdır. Düşük boyutlu sistemlerle, materyalin fiziksel özelliklerini belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelir. Bu sayede özel fonksiyonlara sahip aletler tasarlanabilir. Düşük boyutlu sistemlerin külçe malzemelere göre üstünlüğü bu sistemlerdeki taşıyıcıların yaşam sürelerinden kaynaklanır. Külçe yarıiletkenlerde, madde içinde çeşitli kusurlar nedeniyle oluşan saçılmalar sonucu taşıyıcıların yaşam süreleri kısadır. Oysa düşük boyutlu sistemlerde boyut azaldıkça

taşıyıcıların yaşam süresi artar. Üç boyutlu sistemlerde fonon saçılmaları nedeniyle taşıyıcıların yaşam süreleri 1-2 ps mertebesinde. Boyut azaldıkça taşıyıcıların saçılmaya uğrama olasılıkları azalmakta ve bunun sonucunda taşıyıcıların yaşam süreleri artmaktadır. İki boyutlu yapılardaki taşıyıcıların yaşam süreleri 10 ps ve bir boyutlu yapılardaki taşıyıcıların yaşam süresi ise 100 ps kadardır. Yük taşıyıcı yoğunluğu arttıkça yaşam süresi artar. Çünkü taşıyıcı konsantrasyonu arttıkça saçılma potansiyeline karşı perdeleme etkisi ortaya çıkar. Düşük boyutlu sistemlerde taşıyıcıların yaşam süresinin uzun olması yarıiletken dayalı devre elemanı yapımında büyük avantajlar sağlar.

Günümüzde gelişen teknolojiye uygun özellikli yeni yarıiletken devre elemanları oluşturmak için düşük boyutlu sistemler üzerindeki çalışmalar yoğun bir şekilde devam etmektedir [4-7].

## 2. YARIİLETKENLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Yarıiletkenler çoğu elektronik aletlerin temelini oluştururlar. Örneğin; diyot, bipolar transistör ve alan etkili taransistör gibi modern elektronik teknolojinin yapıtaşları yarıiletken teknolojiyle açığa çıkmışlardır. Ayrıca yarıiletkenler temel fizik sorularının da keşfini sağlamışlardır. Quantum Hall Effect, çok parçacıklı sistemler ve düşük boyutlar yarıiletken fiziği ile açıklanmışlardır. Elektriksel iletkenlikleri metaller ile yalıtkanlar arasında olan malzemelere yarıiletken malzemeler adı verilir. Yarıiletkenlerin tanıtıcı olma özelliği, ısıl uyarma, safsızlık atomlarının varlığı ve kristal örgü kusurlarının yoğunluğu gibi nedenlerle ortaya çıkar. Yarıiletkenlerin en önemli özelliklerinden biri de sıcaklık arttıkça özdirençlerinin küçülmesidir.

Yarıiletkenlerin fiziksel özelliklerini anlamak için elektronların yarıiletken içinde nasıl davrandıklarını ve dış kuvvete nasıl cevap verdiklerini bilmek gerekir. Problemin zorluğu hakkında düşünürsek, iyonlardan oluşan örgüde  $10^{22} \text{ cm}^{-3}$  elektron vardır. Bu açıdan bakarsak problem oldukça zordur. Oysa yarıiletken fiziği problemi basit varsayımlarla kolaylaştırır. Şimdi, yarıiletken fiziğinin problemi basitleştiren varsayımlarından bahsedeceğiz.

### 2.1. Yarıiletkenlerin Band Yapısı

Yarıiletken fiziğinin anahtarı band teorisi ve onun sonuçlarından kaynaklanan etkin kütle teorisidir. İdeal bir yarıiletkeni sunarken kusursuz bir periyodik yapı göz önüne alınır. Varsayımımız; atomların kristal içinde periyodik olarak dizilmesidir. Bu varsayım tam doğru olmamasına rağmen, enerji momentum ilişkisi modifiye edilerek elektronların serbest uzayda hareket ediyormuş gibi alınmasına band teorisi izin verir [8].

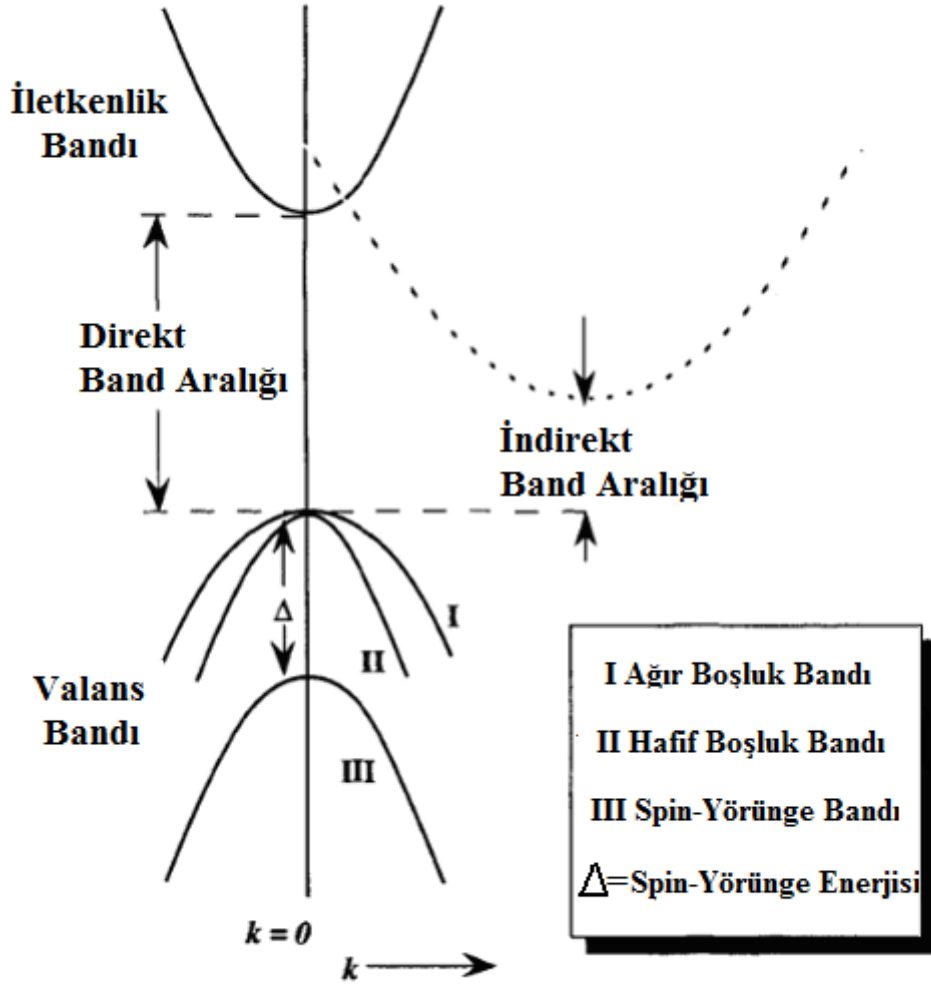
Katıların band teorisi, yarıiletkenlerin elektriksel özelliklerini büyük bir başarı ile açıklar. Mutlak sıfır sıcaklığında ( $T = 0 \text{ K}$ ) tamamen elektronlarla dolu olan banda valans bandı ve bunu takip eden ilk boş banda ise iletkenlik bandı adı verilir. Bu iki band birbirinden bir enerji aralığı ile ayrılır. Bu aralık yasak enerji aralığı olarak tanımlanır. Yarıiletkenlerde iletim olayını düşünürsek, izinli bandlar elektronlarla dolu olduğunda banddaki elektronlar hiç akım taşımazlar. Çünkü elektronlar fermiyondur ve fermiyonlar band dolu olduğunda hiç akım taşımazlar. Elektronlar sadece boş durumlara hareket ederler ve sonuç olarak elektronlar bir



yerden başka bir yere hareket edemezler. Bu etkide sonsuz öz direnç ve bir yarıiletkeni veya bir yalıtkanı çağrıştırır. Fakat bir yarıiletken dışarıdan herhangi bir etki ile uyarılırsa (ışık, sıcaklık, basınç v.b) değerlik bandındaki bazı elektronlar iletim bandına çıkarlar. Böylece, yarıiletkende iletim olayını sağlayacak yük taşıyıcıları oluşur. Valans bandındaki elektronlar iletim bandına çıkınca, değerlik bandında boşluklar bırakırlar. Böylece, yarıiletkenlerde elektron ve boşluk olmak üzere iki tür taşıyıcının varlığından bahsedilir.

Enerji band diyagramları, kristal doğrultusuna göre çizildiğinde, yarıiletkenlerin bazı özelliklerini analiz etmemiz kolaylaşır. Örneğin, Şekil 2.1 'de yarıiletkenlerin band yapısı görülmektedir. Şekilden de görüldüğü gibi valans bandı üç kısımdan oluşur. Bunlar ağır boşluk bandı, hafif boşluk bandı ve spin-yörünge bandıdır. İletkenlik band sınırının basitliğinden dolayı iletkenlik bandı sınırındaki  $E(k)$  ilişkisi paraboliktir. Fakat valans bandı için problem çok karmaşıktır. Çünkü ağır boşluk ve hafif boşluk durumları arasındaki etkileşim çok güçlüdür. Genelde spin-yörünge bandının enerjisi oldukça geniş olduğundan buradaki boşluklar ihmal edilebilir.

Yarıiletkenlerin hazırlanmasında en dıştaki elektronik seviyelerin s-tipi yada p-tipi olması yarıiletkenlerin elektronik ve optoelektronik özelliklerinde önemli rol oynar. Şekil 2.1'de görüldüğü gibi, bir yarıiletkende, valans bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu aynı  $k$  değerlerinde ( $k=0$ ) oluşursa, bu tip yarıiletkene direkt band aralıklı yarıiletken adı verilir. Direkt band aralıklı yarıiletkenlerde iletkenlik bandının dibindeki elektronların birim hücresi s-tipidir. Böyle bir yarıiletkende bir elektron iletkenlik bandından valans bandına geçerse momentum korunur. Böyle bir geçiş enerjisi  $h\nu$  olan bir foton ortaya çıkarır. Bu özelliğinden dolayı direkt band aralıklı yarıiletkenler optik geçişlerde kullanılırlar. Aynı şekilde iletkenlik bandının minimumu ile valans bandının maksimumu farklı  $k$  değerlerinde oluşursa bu tip yarıiletkenlere indirekt band aralıklı yarıiletkenler adı verilir. İndirekt band aralıklı yarıiletkenlerin iletkenlik bandsını durumlarının birim hücresi s-tipi ve p-tipi'nin karışımıdır. Örneğin, Ge ve Si indirekt yarıiletkenlerdir. Bu tip yarıiletkenlerde elektron iletkenlik bandından valans bandına geçerken momentum değişir. Bu nedenle optik aletlerde verimsiz olduklarından kullanılmazlar.



**Şekil 2.1:** Yarıiletkenlerin band yapısı

Bir yarıiletkenin enerji seviyelerini bulmak için periyodik potansiyeli bilmemiz gerekir. Bunun içinde, Bloch tarafından ortaya konulan dalga fonksiyonunu kullanmamız gerekir. Elektronların yarıiletken içindeki davranışı Schrödinger dalga denklemi ile verilir;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\psi\right)\psi(r) = E\psi(r) \quad (2.1)$$

Burada  $U(r)$  elektronların etkileşimde olduğu periyodik potansiyeldir. Kristalin doğasından dolayı potansiyel periyodiktir.

$$U(r) = U(r + R) \quad (2.2)$$

Sonuç olarak, elektronun kristalin her bir hücresinde bulunma olasılığını eşit olarak alacağız. Çünkü her bir hücre özdeştir. Eğer potansiyel değişken olursa bu çözüm geçersiz olur. Bloch teoremi periyodik yapı içinde hareket eden

elektronun dalga fonksiyonu için bir form verir. Bu form, elektronun dalga fonksiyonunun bir düzlem dalga ile ( $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ) örgünün periyoduyla periyodik olarak değişen bir fonksiyonun ( $U_k(r)$ ) çarpımı ile verildiğini söyler. Yani, elektronun dalga fonksiyonu

$$\psi_k(r) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_k(r) \quad (2.3)$$

şeklinde verilir. Bu yolla, yasak enerji aralıkları tarafından ayrılan bandların oluşması açıklanır. Elektronların bandın tabanında veya tepesindeki davranışı serbest elektronun davranışına benzerdir. Fakat elektronlar periyodik potansiyelden etkilenirler. Bu etki teoriye elektronun kütle değerlerinin yeniden tanımlanmasıyla aktarılır. Bu yeni kütleyle etkin kütle adı verilir.

Etkin Kütle, elektronun periyodik potansiyel ve dış kuvvet etkisi altındaki hareketine Newton'un 2.hareket kanununun uygulanmasını sağlayan bir tanımlamadır. Etkin kütle serbest elektronun etkin kütesinden farklıdır ve band eğriliğine göre pozitif veya negatif değerler alabilir. Valans bandındaki elektronların etkin kütleleri iletkenlik bandından daha ağır ve negatiftir. Genel olarak etkin kütle

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (2.4)$$

şeklinde verilir. Özetlersek, band sınırları yanında elektronun kütlesi  $m^*$  gibi davranır.

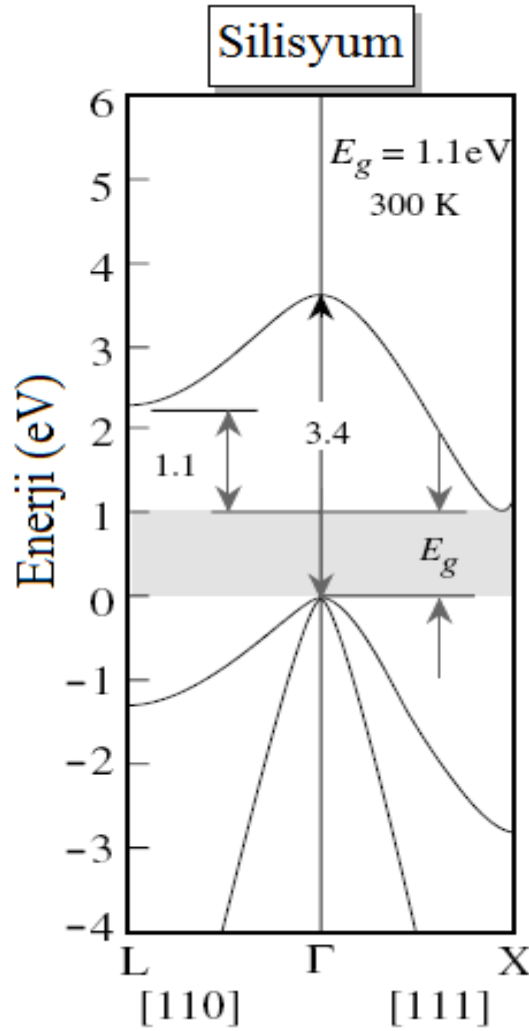
## 2.2. Bazı Yarıiletkenlerin Band Yapısı

### 2.2.1. Silisyum

Silisyum elektronik endüstrisi için vazgeçilmez bir malzemedir. Şekil 2.2'de silisyumun band yapısı görülmektedir. Şekilden de görüldüğü gibi band aralığı 1.1 eV 'dır. İletkenlik bandının dibi  $k=(0.85 \frac{2\pi}{a}, 0, 0)$ 'da oluşur ve 5 farklı denk noktası daha mevcuttur. Örgü sabiti  $a=5.43 \text{ \AA}$  'dur. İletkenlik bandının dibi minimum alınırsa enerji

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k_l^2}{m_l^*} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{m_t^*} \quad (2.5)$$

olur. Burada  $k_l$   $k$ 'nin boylamsal bileşeni  $k_t$  enine bileşeni ve  $m_0$  serbest elektronun kütlesidir. Ayrıca,  $m_l^* = 0.98 m_0$  değerinde ve  $m_t^* = 0.19 m_0$  'dır. Şekilden de görüldüğü gibi silisyum indirekt malzemedir. Bundan dolayı optik geçişlerde tercih edilmezler. Bunun sebebi momentumun korunumundan dolayı optikal geçişlerde " düşey  $k$  " gerekmesidir. Yani iletkenlik bandının en alt noktası ile valans bandının en yüksek noktası aynı  $k$  değerinde olması gerekir. Ayrıca, silisyumda boşluk geçişi özellikleri oldukça zayıftır. Çünkü boşluk kütleleri oldukça büyüktür. Fakat elektronik aletler için yüksek güvenilirlikten dolayı silisyum oldukça yaygın kullanılır [9].



Şekil 2.2: Silisyumun band yapısı

### 2.2.2. GaAs

GaAs'niğin band yapısı Őekil 2.3'de grlmektedir. Band aralıđı direkt olduđu iin optikal geiŐlerde tercih edilir. Band sınırında  $E(k)$  bađıntısı izotropiktir. Ve;

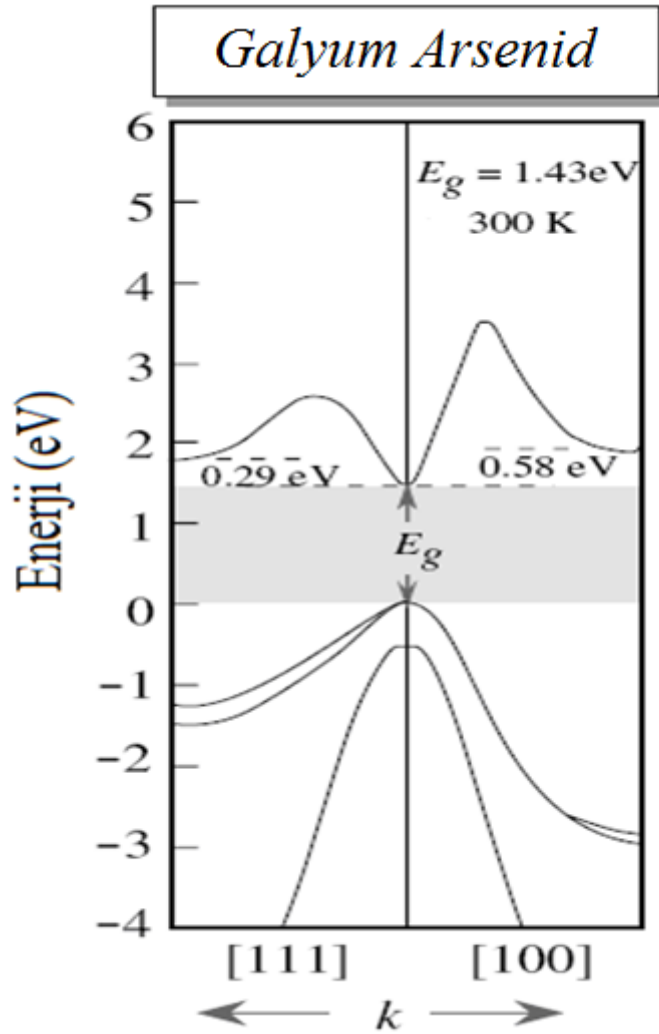
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.6)$$

Őeklinde yazılabilir. Daha duyarlı bir hesap iin  $E(k)$  bađıntısı non-parabolik alınırsa

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

Őeklinde verilir. Burada  $\alpha = 0,67eV^{-1}$  ' dir.

Genel olarak sıcaklık arttıka yarıiletkenlerin band aralıđı azalır. rneđin GaAs 'de 0K'de band aralıđı 1.51 eV ve oda sıcaklıđında 1.43 eV'dur. Bu zellik hem elektronik hemde optoelektronik aletlerde ok nemlidir [9].



Şekil 2.3: Galyum arsenidin band yapısı

### 2.3. Katkılı Yarıiletkenler

Düşük yoğunluklu saf yarıiletkenlerde serbest taşıyıcıların akım taşıyabileceğini gördük. Serbest taşıyıcı yoğunluğunu arttırmak için, safsızlık olarak bilinen katkılamalar kullanılırlar. Bir yarıiletkene katkı atomları ekleme işine aşılama adı verilir. Temel olarak katkılamamanın amacı serbest taşıyıcı yoğunluğunu kontrol etmektir. Katkı atomları periyodik tablodan seçilir. Çünkü, katkı atomlarının dış kabuk elektronu ev sahibi yarıiletkeninden ya bir fazla yada bir eksik seçilir. Sonuç olarak katkılama işlemleri yapılırken, kullanılan katkı maddeleri, verici(donor) veya alıcı(akseptör) olmak üzere iki ana sınıfa ayrılır. Bunlardan ortama bir elektron verebilen safsızlık atomuna verici, ortamdan bir elektron alan safsızlık atomuna da alıcı atomu adı verilir. Donor atomu için düşünürsek, elektron-donor etkileşmesi coulombik potansiyel tarafından ifade

edilir ve problem basitçe hidrojen atomu gibi çözülür. Enerji basitçe kuantum mekaniğindeki hidrojen atomu probleminden yararlanılarak verilir. Buna göre donör enerji seviyesi

$$E_d = E_i - \frac{e^4 m_e^*}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2 n^2} \quad n = 1,2,3 \dots \quad (2.8)$$

olup  $m_e$  elektronun etkin kütlesi,  $E_i$  ise iletkenlik bandı kenarındaki enerjidir. Tablo 1 'de bazı yarıiletkenlerin taban durum enerjisi görülmektedir. Denklem 2.8'e göre donör enerji seviyesi yalnızca ana kristalin özelliklerine bağlıdır. Denklem 2.8'e göre Ge, Si ve GaAs için donör enerji seviyeleri sırasıyla 6, 25 ve 7 meV olmalıdır. Fakat Tablo1'den görüldüğü gibi bu değerlerde bir miktar sapma vardır. Demek ki donör enerji seviyesi katılan atomun cinsinde bağlıdır. Bu sapmaların oluşmasının sebebi gerçek safsızlık pertürbasyon potansiyelinin bizim varsaydığımız coulombik potansiyelden farklı olmasıdır.

Safsızlıklarda bir başka önemli sınıf akseptörlerdir. Akseptörler elektronlar tarafından oluşturulan negatif yüklü iyonlardır. Akseptör seviyeleri ana örgü atomları gibi çekirdek potansiyeline benzer potansiyele sahip olan safsızlıklarla üretilir. Valans bandı problemi çok karmaşıktır. Bu nedenle akseptör enerji seviyesini hesaplamak zordur. Fakat akseptör enerji seviyesi ağır-boşluk kütlesi alınarak doğru bir şekilde tahmin edilebilir.

Oda sıcaklığı ve üzerindeki sıcaklıklarda vericilerin ısısal iyonlaşması iletkenlik bandına elektronlar aktarır. Bu durumda kristalin iletkenliği elektronlar tarafından belirlenir ve bu yarıiletkene n-tipi yarıiletken adı verilir. Eğer kristalde alıcı sayısı daha fazla olursa valans bandına boşluklar aktarılır ve iletkenlik boşluklar tarafından sağlandığı için bu yarıiletkene p-tipi yarıiletken adı verilir.

<b>Yarıiletken</b>	<b>Safsızlık (donor)</b>	<b>Verici enerjisi (meV)</b>	<b>Safsızlık (alıcı)</b>	<b>Alıcı enerjisi (meV)</b>
<b>GaAs</b>	<b>Si</b>	<b>5.8</b>	<b>C</b>	<b>26</b>
	<b>Ge</b>	<b>6.0</b>	<b>Be</b>	<b>28</b>
	<b>S</b>	<b>6.0</b>	<b>Mg</b>	<b>28</b>
	<b>Sn</b>	<b>6.0</b>	<b>Si</b>	<b>35</b>
<b>Si</b>	<b>Li</b>	<b>33</b>	<b>B</b>	<b>45</b>
	<b>Sb</b>	<b>39</b>	<b>Al</b>	<b>67</b>
	<b>P</b>	<b>45</b>	<b>Ga</b>	<b>72</b>
	<b>As</b>	<b>54</b>	<b>In</b>	<b>160</b>
<b>Ge</b>	<b>Li</b>	<b>9.3</b>	<b>B</b>	<b>10</b>
	<b>Sb</b>	<b>9.6</b>	<b>Al</b>	<b>10</b>
	<b>P</b>	<b>12.0</b>	<b>Ga</b>	<b>11</b>
	<b>As</b>	<b>13.0</b>	<b>In</b>	<b>11</b>

**Tablo 1:** Bazı yarıiletkenlerin verici ve alıcı enerji seviyeleri [8]



### 3. HETEROYAPILAR

Yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri band yapısına bağlı olduğu için şu soru akla gelebilir, Malzemelerin band yapısı değiştirilebilir, malzemeler anlaşılabilir ve iyi performansta dizayn edilebilirler mi? Sorunun cevabı evettir. Yarıiletkenlerin band yapıları son 20 yıldır değiştirilebiliyor. Bu yarıiletken fiziğini güncel kılan nedenlerden biridir.

Elektronik band yapısı birçok fiziksel olgu ile ayarlanabilir. MBE ve MOCVD büyütme teknikleri ile yarıiletken tabakaları seri şeklinde büyütme mümkündür. Eğer dar band aralıklı bir malzeme ile geniş band aralıklı bir malzeme bir araya getirilirse oluşan yapıya heteroyapı adı verilir.

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

- i) Kullanılan yarıiletkenlerin örgü sabitleri birbirine çok yakın seçilir. Malzemeler benzer örgü yapısında seçildiği için örgü sabiti Vegard yasasına uyar ve  $A_xB_{1-x}$  alaşımı için örgü sabiti

$$a_{alaşım} = x a_A + (1 - x)a_B \quad (3.1)$$

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

- ii) Alaşımın band yapısını hesaplamak oldukça zordur. Çünkü alaşımı oluşturan malzemeler kusursuz bir örgüye sahip olsalar da alaşım kusursuz bir örgüye sahip değildir. Atomlar gelişigüzel yerleşmişlerdir ve periyodik değildirler.  $E_g^A$  ve  $E_g^B$  sırası ile A ve B yarıiletkenlerinin yasak enerji aralığı olmak üzere alaşımın enerji aralığı

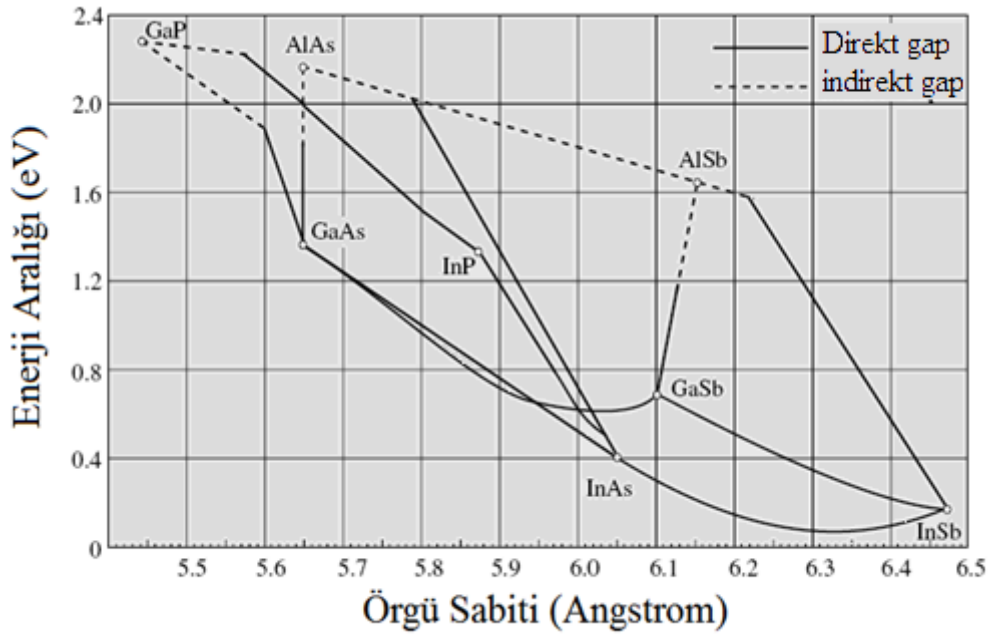
$$E_g^{alaşım} = xE_g^A + (1 - x)E_g^B \quad (3.2)$$

ile verilir.

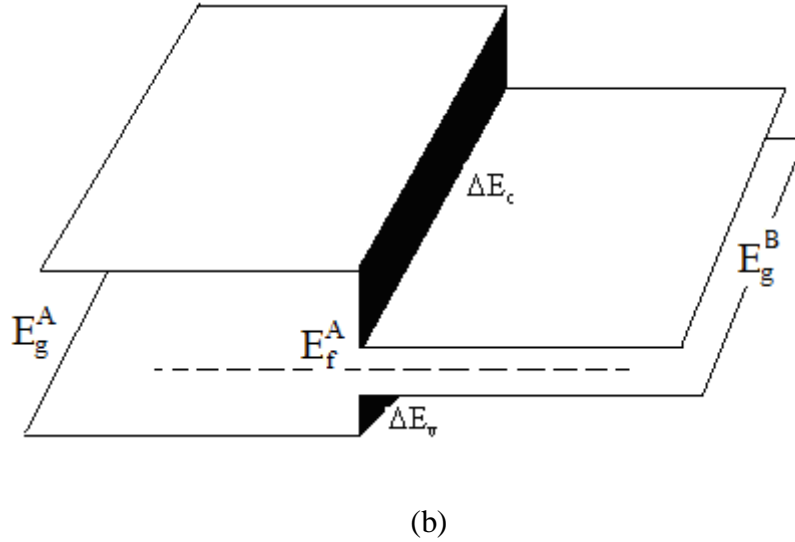
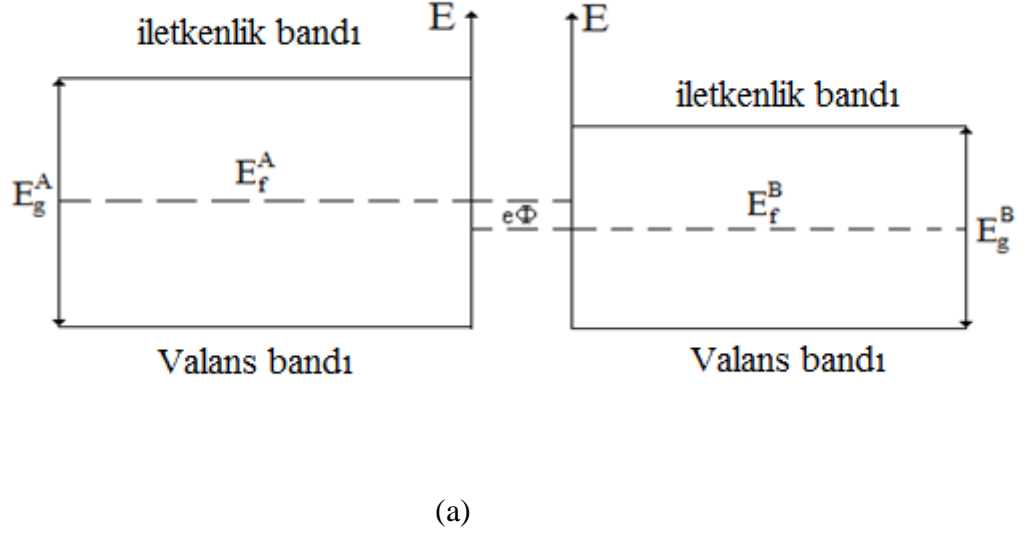
Çoğu alaşımın özellikleri yaklaşık olarak alaşımın her bir bileşeninin kendi özelliğinin lineer ortalaması olarak verilir. Eğer alaşımın oluşma süreci iyiye, örgü sabiti ve enerji aralığı için verilen denklemler geçerlidir. Yani alaşım  $A_xB_{1-x}$  şeklinde büyütülürse ortalama olasılık A-tipi atom B-tipi atom tarafından çevrelenmiş ve B-tipi atom  $x$  olasılıklı A-tipi üyeye sahiptir. Bu tip malzemeye en

iyi örneklerden biri GaAs ve  $Al_xGa_{1-x}As$  'dir. Çünkü bu yarıiletkenlerin örgü sabitleri birbirine çok yakındır [8,9].

Heteroyapıyı oluşturan külçelerin benzer yapıda olmaları, uygulamada önemli sonuçların alınmasını sağlar. Aynı zamanda bu koşul ile elektron dalga vektörünün ara yüzeyde değişmemesi de kabul edilmiş olur. Bu yöntemle 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 biçimde değişir. Zaten teknolojik uygulamada önemli olan yarıiletkenlerin çoğu aynı simetri grubuna sahip olduklarından, heteroyapı için kabul edilen şartlar sağlanmış olur. Örgü sabiti bir yarıiletkenin heteroyapı oluşturabilme uygunluğunu belirler. Bir heteroyapı oluşturulurken yapıyı oluşturan heteroyapıların örgü sabitlerinin birbirine yakın olması tercih edilir. Şekil 3.1'de bazı yarıiletkenlerin oda sıcaklığında örgü sabitleri ve enerji aralıkları verilmiştir. Şekil 3.1' den görüldüğü gibi GaAs ve AlAs'niğin örgü sabitleri birbirine çok yakındır. Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin bant yapılarının birbirine eklenmemiş (Şekil 3.2(a)) ve eklenmiş durumları (Şekil 3.2(b)) şematik olarak gösterilmiştir [10,11].



Şekil 3.1: Oda sıcaklığında bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve enerji aralıkları [9]



**Şekil 3.2:** (a) Birbirine eklenmemiş farklı iki yarıiletkenin band diyagramı

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

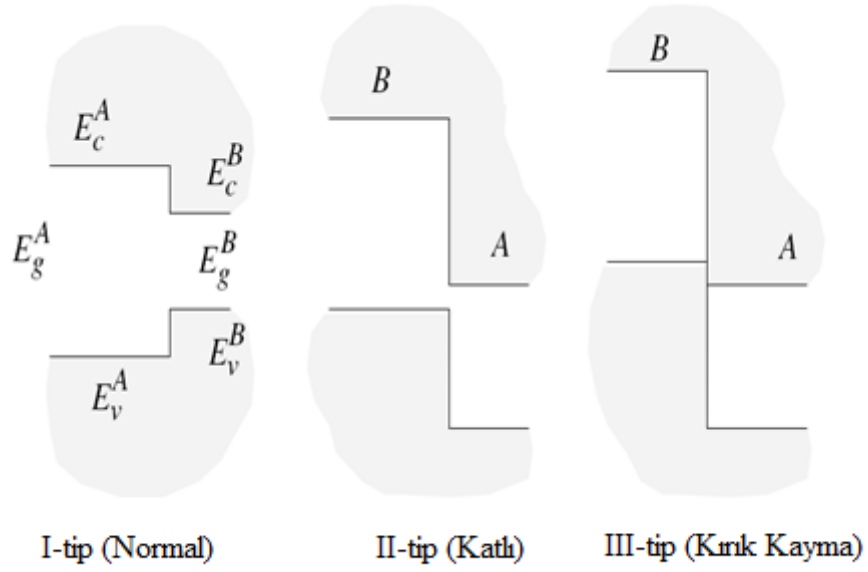
İki yarıiletken bir araya getirildiğinde band sınırlarında görülen süreksizlik kuantum kuyusu problemlerinde çok önemlidir. Şekil 3.2(b) de görüldüğü gibi A ve B gibi iki yarıiletkenin band aralığının bir bölümündeki süreksizlik, iletkenlik ve valans bandının bir bölümünde görülmektedir. Fakat iki yarıiletken bir araya getirildiğinde yük transferi olacağından problem basit değildir. Ara yüzeyde bağlar farklı kimyasal özelliklere sahip elementleri içerir. Sonuçta bu bağlar etrafında yük alışverişi olur. Bir dizi teorik model band sınırlarındaki süreksizliği

hesaplamak için önerildi. Fakat kesin bir deęer elde edilmedi. Süreksizlięi belirlemek için arařtırmalar hala devam etmektedir. Önemli yarıiletkenlerden GaAs ve AlAs için süreksizlik yaklaşık olarak;

$$\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} \cong \frac{60}{40} \quad (3.3)$$

Şeklinde verilebilir [8].

Heteroyapılar mikroyapıların yapımında temel eleman niteliğindedir. Düşük boyutlu yapılarda oluşan fiziğin dayandığı anahtar parametre heteroyapıdaki bant süreksizliğidir. Yarıiletken heteroyapılar bant süreksizliğine göre üç gruba ayrılırlar [12]. Bunlar I-tip (Normal), II-tip (Katlı) ve III-tip (Kırık Kayma) heteroyapılar olarak adlandırılırlar (Şek.3.3 ). I-tip (Normal) heteroyapıya örnek verilebilir. Bu yapıda elektron ve boşluk GaAs katmanında bulunurlar. II-tip (Katlı) heteroyapılarda, örneğin Si-Ge, elektronlar Si katmanında, boşluklar ise Ge katmanında kuşatılmışlardır. III-tip (Kırık Kayma) heteroyapıya örnek olarak verebileceğimiz InAs-GaSb yapıda ise, II-tip (Katlı)'deki kuşatmaya benzer bir durum ortaya çıkar fakat bu süperörgülerde periyodun artması ile enerji bant aralığı azalır ve yarıiletkenden yarımetale geçiş gözlenir



**Şekil 3.3:** Bant süreksizliğine göre heteroyapı türleri

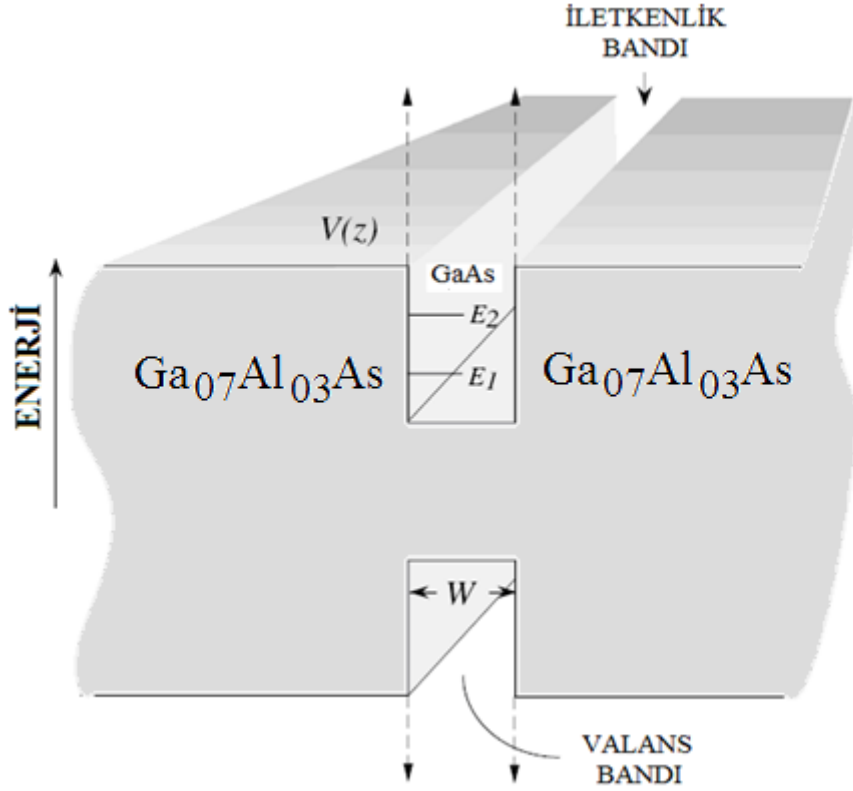
### 3.1. Nanoyapılar: Kuantum Kuyuları, Telleri ve Noktaları

Yarıiletken teknolojisinin gelişimi ile, elektronik ve optoelektronikte çok geniş uygulama alanları bulan, günümüz teknolojisinde kullanılan devre elemanlarının, boyutlarının daha küçük ve ömürlerinin daha uzun olmaları ve çok daha hızlı çalışmaları istenmektedir. Kullanım alanlarının genişlemesi, dolayısı ile, bunların yapısal ve fiziksel özellikleri hakkında kesin bilgilere sahip olma gerekliliğini de beraberinde getirmektedir.

Moleküler Işın Epitaksi (Moleculer-Beam Epitaxy- MBE) ve Metal-Organik Kimyasal Buhar Fazında Çökeltme (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition- MOCVD) gibi kristal büyütme tekniklerinin gelişimi, yarıiletkenler üzerine yapılan çalışmaların artmasına neden olmuştur. Çünkü bu teknikler sayesinde çok küçük boyutlara sahip devre elemanları yapılması daha kolay bir hale gelmiştir. Daha sonra, bu teknikler kullanılarak yapılan devre elemanlarında, boyutlardaki azalmanın, performans üzerindeki etkileri araştırılmaya başlanmıştır.

Malzemenin sahip olduğu üç boyutlu hareket serbestliğinin iki boyuta düşürülmesiyle iki boyutlu yapılar yani kuantum kuyuları elde edilir. Uygulamada GaAs ve GaAlAs malzemeleri sıkça kullanılır (şekil 3.4). Bu yapıda Al konsantrasyonu % 30-35 civarında alındığında alaşım direkt band özelliğini korur.

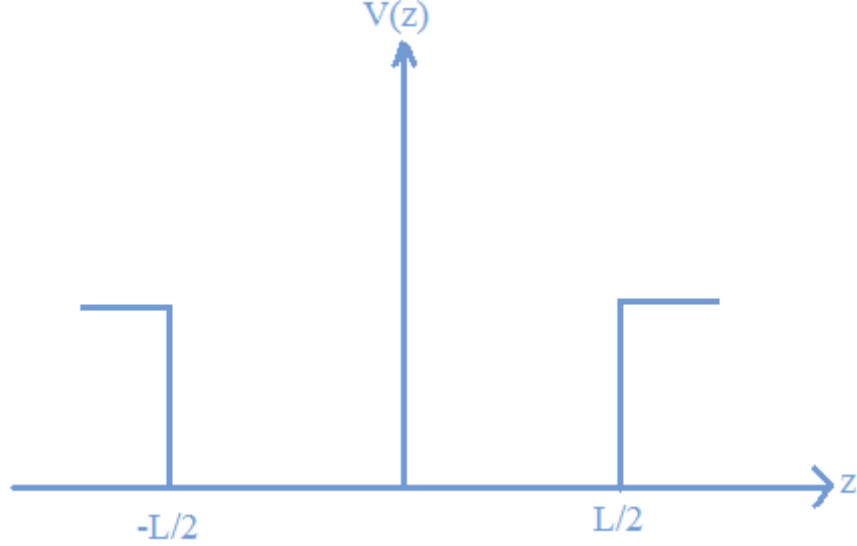
Şekil 3.4’de verilen kuantum kuyusundaki elektronun davranışı incelenirse elektron en düşük enerjiyi yani GaAs tabakasını tercih edecektir. Burada GaAs tabakası aktif bölgedir ve bu aktif bölge kuantum kuyusu olarak adlandırılır. Kuantum kuyusundaki elektron veya boşluğun dalga boyu de-Broglie dalga boyu ile kıyaslanabilir ya da daha küçüktür. Ancak bir kuantum kuyusunun genişliğini ayarlama da bir alt sınır ve bir üst sınır gereklidir. Örneğin GaAs için kuyu genişliğinin alt sınırı yaklaşık 20Å’dur. Aynı şekilde genişliğin, kuantum etkilerini yok etmeyecek bir üst sınırı olmalıdır ve bu değer elektronun o kristal içerisindeki ortalama serbest yolu ile verilir.



**Şekil 3.4:** Bir heteroyapıda elektron ve holler için kuantum kuyu oluşumunun şematik gösterimi.

Kuantum kuyuları için çözüm yapılırken daha önce bahsedildiği gibi bazı basitleştirmeler kullanılır. İlk basitleştirme, elektronun etkin kütlesi alınırken yapılır. Kuantum kuyusunu oluşturan GaAs ve GaAlAs ‘nın örgü sabitleri birbirine çok yakın olduğundan, bu iki yarıiletken arasındaki etkin kütle farkı ihmal edilir. İkinci basitleştirme potansiyel enerji profili olup, ideal bir yaklaşımla

potansiyel profili basamak biçiminde alınır. Şekil 3.5 'de ideal potansiyel kuyu profili görülmektedir.



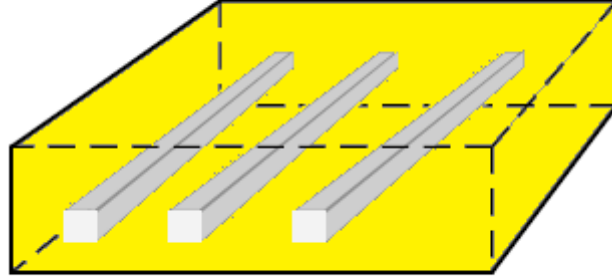
**Şekil 3.5:** Kuantum Kuyu profili

Yapılan yaklaşımlarla kuantum kuyusu içinde kuşatılmış bir parçacık elde edilir. Böyle bir yapı için idealleştirilmiş potansiyel aşağıdaki gibi verilir.

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq L/2 \\ V, & |z| > L/2 \end{cases} \quad (3.4)$$

Kuantum kuyuları mevcut olduğunda, gelişmiş devre elemanlarının performansı ile ilgili önemli faktörler ortaya çıkmaktadır. Dolayısı ile bu mekanizmaların ve bunları etkileyen parametrelerin ne olduğunun bilinmesi, devre elemanlarının performansı açısından son derece önemlidir. İki boyutlu heteroyapılar kullanılarak yapılan cihazlardan elde edilen başarılar nedeniyle son yıllarda yapılan çalışmalar sistemin boyutlarını indirmek üzerine yoğunlaşmıştır.

Kuantum kuyu yapısının var olan iki doğrultudaki hareket edebilme serbestliğinin bir boyut daha düşürülmesiyle kuantum telleri elde edilir. Yani kuantum telindeki bir parçacık iki yönde kuşatılmışken tek yönde serbest olur. Kuantum telini göz önüne getirebilmek için, uzun bir GaAs çubuğu GaAlAs malzemesi içine yerleştirilir. Kuantum telinin şematik gösterimi şekil 3.6'da verilmiştir.



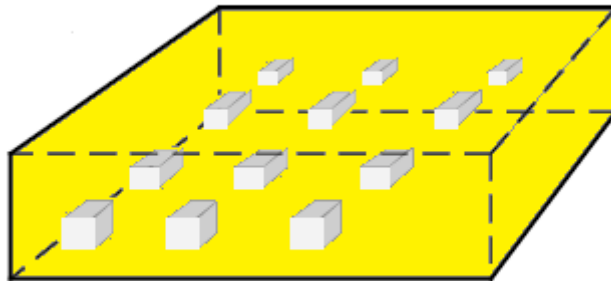
**Şekil 3.6:** Kuantum teli.

Kuantum teli için iki boyutlu kuşatma potansiyeli

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq \frac{L_x}{2}, 0 \leq y \leq \frac{L_y}{2} \\ V, & |x| > \frac{L_x}{2}, |y| > \frac{L_y}{2} \end{cases} \quad (3.5)$$

şeklinde verilir.

Kuantum telinin sahip olduğu bir boyuttaki hareket serbestliği ortadan kaldırırsa taşıyıcılar artık serbestçe hareket edemez ve yapı sıfır boyutlu hale gelir. Bu durum şekil 3.7’de şematik olarak verilmiştir. Bu tür sistemlerde taşıyıcının enerjisi üç yönde kuantize olur. Bu nedenle bu tür sistemlere kuantum kutuları adı verilir.



**Şekil 3.7:** Kuantum kutusu.



Kuantum kutusu için üç boyutlu kuşatma potansiyeli

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \textit{kutu içinde} \\ V, & \textit{diğer yerlerde} \end{cases} \quad (3.6)$$

şeklinde verilir.

## 4. DONOR KATKILI HETEROYAPILAR

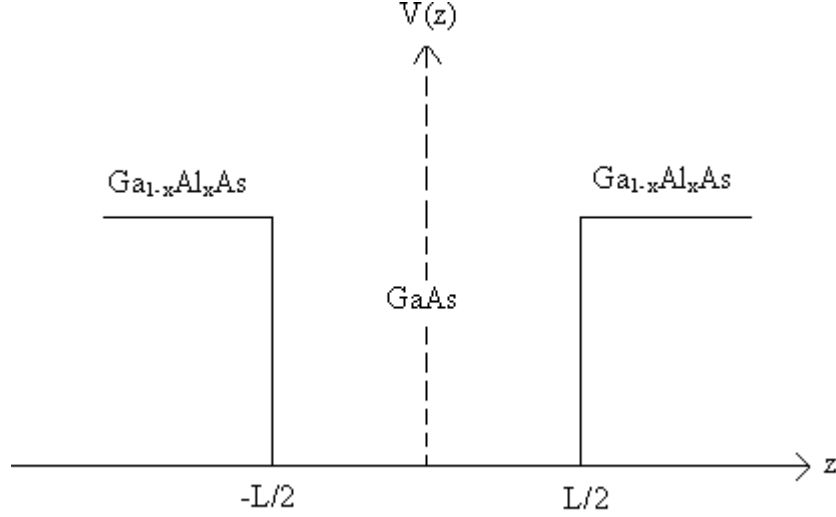
### 4.1. GİRİŞ

Günümüz teknolojisinde düşük boyutlu sistemlerin sık kullanılmasının en önemli nedeni, oluşturulan sistemin ayarlanabilir parametreleri; yani kuyu genişliği, taşıyıcı yoğunluğu, uygulanan dış alanların (elektrik ve manyetik alan) uygulanma doğrultuları ve şiddetleri değiştirilerek sistemin elektronik ve optik özelliklerinin oldukça belirgin biçimde amaca uygun olarak ayarlanabilir olmasıdır. Ayrıca katkılama yapılırken katkı atomlarının konumu da sistemin fiziksel özelliklerini değiştiren bir parametre olarak önem kazanmaktadır.

Bu çalışmada, donör katkılı bir heteroyapı ele alınarak kuyu ve tel şeklinde farklı boyutlardaki sistem içerisinde bulunan elektron ve donör atomu arasındaki bağlanma enerjisinin, kuyu genişliğine, katkı atomunun konumuna ve dışarıdan uygulanan manyetik alan şiddetine bağlılığı araştırılmıştır.

### 4.2. Manyetik Alan Altında Donör Katkılı GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As Kuantum Kuyusu

Tez çalışmasında potansiyel profili Şekil 4.1 ile verilen GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum kuyusundaki, elektron ve safsızlık atomunun oluşturduğu yapının bağlanma enerjisinin +z yönünde uygulanan manyetik alana ve safsızlık atomunun konumuna bağlılığı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenmiştir.



**Şekil 4.1:** GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum kuyusu potansiyel profili.

z doğrultusunda kuşatılmış ve +z yönünde uygulanan manyetik alan altındaki elektron- safsızlık sisteminin Hamiltonian'ı

$$H = \frac{1}{2 m_e^*} (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}))^2 + V(z) + V_C \quad (4.1)$$

biçimindedir.

Burada  $\vec{p}$  elektronun momentumu, e elektronun yükünü ve  $m_e^*$  elektronun etkin külesini göstermektedir.  $\vec{A}$ ,  $\vec{A} = (\frac{-B_0 y}{2}, \frac{B_0 x}{2}, 0)$  şeklinde verilen vektör potansiyeli,  $V_C$

$$V_C = -\frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2}} \quad (4.2)$$

elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulombic potansiyeli ve  $\epsilon_0$  ortamın dielektrik sabitidir (kuyu ve engel içinde aynı alınmıştır) [13]. Burada  $(x_i, y_i, z_i)$  safsızlık atomunun konumunu,  $(x, y, z)$  ise elektronun konumunu göstermektedir. Kuşatma potansiyelinin fonksiyonel formu aşağıdaki gibidir.

$$V(z) = \begin{cases} V, & z \leq -L/2 \\ 0, & -L/2 < z < L/2 \\ V, & z \geq L/2 \end{cases} \quad (4.3)$$

Hesaplamlarda kullanılan fiziksel parametrelerin değerleri  $m_e^* = 0.0665 m_0$  ( $m_0$ , serbest elektronun kütlesi),  $\epsilon_0 = 12.58$ , GaAs-Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As yapısının iletkenlik bandı süreksizliği  $V = 228$  meV olarak alınmıştır [14].

$V_C$ , Coulomb potansiyelinin değeri yerine yazılırsa sistemin Hamiltonian'ı

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \frac{e^2 B_0^2 (x^2 + y^2)}{8m_e^* c^2} + \frac{e\hbar B_0 L_z}{2m_e^* c} + V(z) - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} \quad (4.4)$$

şeklinde elde edilir.

Burada  $L_z$ , açısal momentum operatörünün  $\hbar = 1$  birimindeki  $z$  bileşenidir.

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos\phi \\ y &= \rho \sin\phi \\ z &= z \end{aligned} \quad (4.5)$$

dönüşümü yapılarak silindirik koordinatlardaki Hamiltonian ifadesi

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + \frac{e^2 B_0^2 \rho^2}{8m_e^* c^2} + \frac{e\hbar B_0 L_z}{2m_e^* c} - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} \quad (4.6)$$

şeklinde elde edilir. Hamiltonian'deki tüm uzunluklar Bohr yarıçapı ( $a_B = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m_e^* e^2}$ )

ve tüm enerji terimleri Rydberg ( $Ryd = \frac{m_e^* e^4}{2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$ ) cinsinden yazılarak Hamiltonian

$$\tilde{H} = -\left( \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\phi}^2} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}(\tilde{z}) + \gamma L_z + \frac{1}{4} \gamma^2 \tilde{\rho}^2 - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z}-\tilde{z}_i)^2}} \quad (4.7)$$

biçiminde boyutsuz hale getirilebilir [14]. Burada  $\gamma = \frac{e \hbar B_0}{2 m_e^* c Ryd}$  ile verilir ve

birinci Landau düzeyi olarak adlandırılır. Elektron-safsızlık atomu sistemi için Schrödinger denklemi,

$$\tilde{H} \phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \tilde{E} \phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) \quad (4.8)$$

biçiminde yazılabilir. Sistemi tanımlayan genel dalga fonksiyonu

$$\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \psi(\tilde{z}) g(\tilde{\rho}, \alpha) \quad (4.9)$$

İle verilir. Burada  $\Psi(\tilde{z})$ , elektronun  $z$  doğrultusundaki hareketini tanımlayan dalga fonksiyonudur ve genişliği  $L_b$  olan sonsuz potansiyel kuyunun öz fonksiyonlarından oluşan çözümler baz olarak kullanılmıştır ve  $L_b$  nin değeri ( $L_b > L$ ) enerji özdeğerlerinin yakınsamasına göre belirlenir. Sözü edilen bazlar,

$$\psi_n(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos\left[\frac{n\pi}{L_b}\tilde{z} - \delta_n\right] \quad (4.10)$$

biçimindedir. Burada  $\delta_n$ ,  $L_b$  genişliğindeki sonsuz kuyunun öz fonksiyonlarındaki tek veya çift özdeğerlere karşı gelen faz farkı olmak üzere,

$$\delta_n = \begin{cases} 0; & n - \text{tek ise} \\ \frac{\pi}{2}; & n - \text{çift ise} \end{cases} \quad (4.11)$$

değerlerini alır. Bu durumda  $z$  doğrultusundaki dalga fonksiyonları baz fonksiyonları cinsinden,

$$\psi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(\tilde{z}) \quad (4.12)$$

biçimindedir.

Ayrıca incelediğimiz yapıda  $x$  ve  $y$  doğrultularında kuşatma olmadığı için elektron bu doğrultuda sadece Coulombic etkileşme etkisindedir. Elektron ile safsızlık atomu arasındaki bu etkileşim sonucu hidrojen atomu yapısına benzer bir durum ortaya çıkar. Bu nedenle bu doğrultudaki hareketi tanımlamak için hidrojen tipi atomları tanımlayan Gaussian tip orbital dalga fonksiyonu tanımlanmıştır.

Dalga fonksiyonu

$$g(\tilde{\rho}, \alpha) = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\tilde{\rho}}{\alpha}} \quad (4.13)$$

formundadır [14, 15].

Sistemin toplam enerjisi

$$\min_{\alpha} \langle \phi | \tilde{H} | \phi \rangle = \tilde{E} \quad (4.14)$$

eşitliğinden elde edilir. Burada  $\tilde{E}$  özdeğerini minimum yapan varyasyon parametresi ( $\alpha$ ) ile belirlenir. Boyutsuz Hamiltonianin beklenen değeri ise,

$$\tilde{E} = \tilde{E}_z + \frac{3}{8}\gamma^2\alpha^2 + \frac{1}{\alpha^2} - \left\langle \phi \left| \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} \right| \phi \right\rangle \quad (4.15)$$

biçiminde bulunur. Bu denklemdeki en son terim elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulombic etkileşme terimini ifade eder. Taban durumunda bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisi ise boyutsuz olarak

$$\tilde{E}_B = \tilde{E}_z + \gamma - \langle \tilde{H} \rangle \quad (4.16)$$

ile verilir [14, 16, 17]. Burada  $\tilde{E}_z$  elektronun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen taban durum enerjisidir. Buna göre taban durumundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisi,

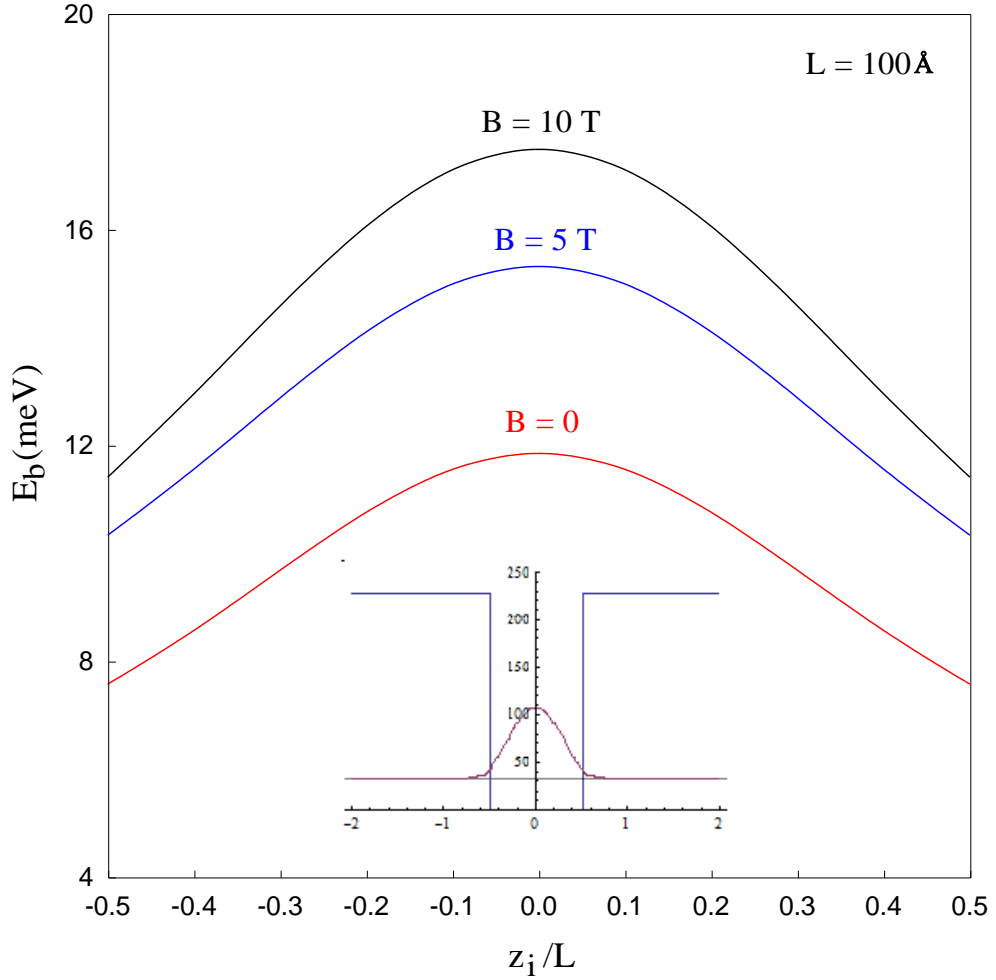
$$E_B = \gamma - \frac{3}{8}\gamma^2\alpha^2 - \frac{1}{\alpha^2} + \left\langle \phi \left| \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} \right| \phi \right\rangle \quad (4.17)$$

olarak verilir [14, 16, 17].

Şekil 4.2’de,  $L = 100 \text{ \AA}$  genişlikli tek kuantum kuyusundaki donör atomunun bağlanma enerjisinin donör atomunun konumuna göre değişimi farklı manyetik alan değerleri için verilmiştir. Ayrıca aynı kuyu parametreleri için elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi ve potansiyel profili de bu şekil içinde verilmiştir. Dalga fonksiyonunun uzaysal dağılımına baktığımızda (küçük şekil), donör atomu merkezde lokalize olduğunda, donör atomuyla elektronun birbirini aynı düzlemde görme olasılığı artacağından, maksimum bağlanma enerjisi kuyunun merkezinde yerleşen donör atomu için elde edilir. Merkezden uzaklaştıkça, donör atomuyla elektronun birbirini aynı düzlemde görme olasılığı azalacağından, bağlanma enerjisi azalır. Kısaca donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin donör atomunun konumuna göre değişimi elektronun taban durum dalga fonksiyonunun uzaysal dağılımının bir haritası gibidir.

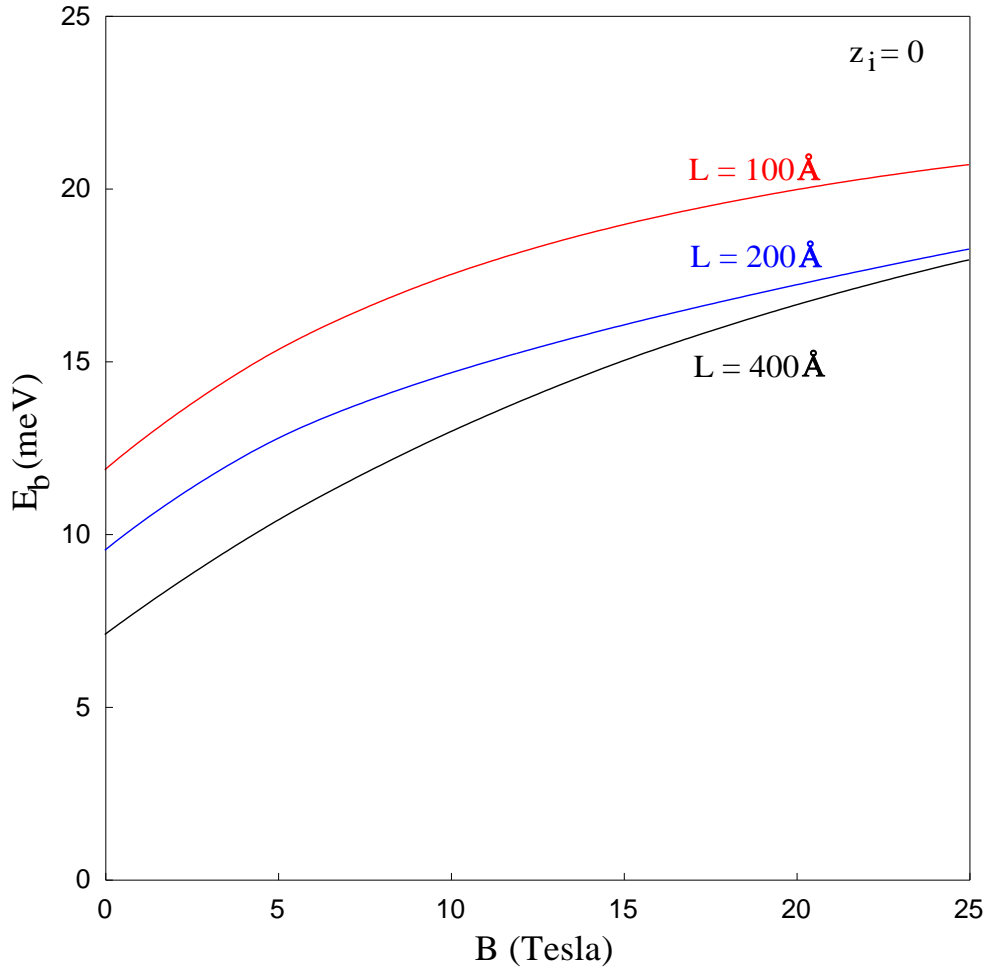
Ayrıca şekilden görüldüğü gibi manyetik alanın artması bağlanma enerjisini artırmaktadır. Kuyuya +z yönünde uygulanan manyetik alan (x-y) düzleminde bir kuşatma meydana getirir. Elektronun (x-y) düzleminde

kuşatılması, elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulombic etkileşimi artıracak ve bu nedenle safsızlık atomunun bağlanma enerjisi artacaktır.



**Şekil 4.2:** GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As tek kuantum kuyusundaki donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için donör atomunun konumuna göre değişimi.

Manyetik alanın, geometrik kuşatmanın zayıf olduğu durumlarda daha etkin olduğunu göstermek için Şekil 4.3’de farklı kuyu genişlikleri için kuyu merkezinde lokalize olan safsızlık atomunun, bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi kuyu boyutu büyüdükçe geometrik kuşatma zayıflar ve manyetik alan kuşatması daha etkin olur. Aynı zamanda kuyu genişliği arttıkça, safsızlık atomu ile elektronun birbirini aynı düzlemde görme olasılığı azaldığı için bağlanma enerjisi azalmaktadır.

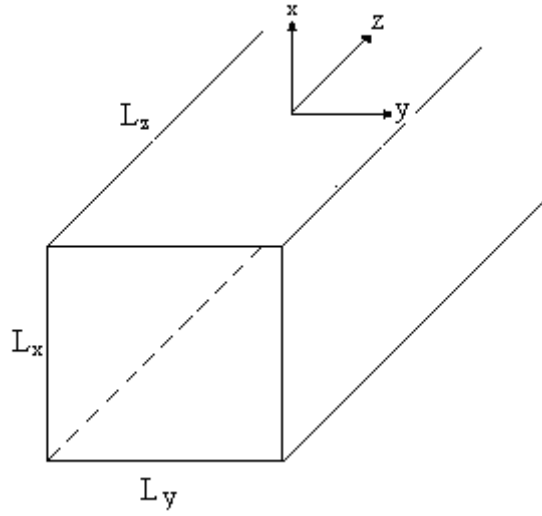


**Şekil 4.3:** GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum kuyusunun merkezinde yerleşen donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı kuyu genişlikleri için manyetik alana göre değişimi.



### 4.3. Manyetik Alan Altında Donor Katkılı GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As Kuantum Teli

Çalışmamızın bu kısmında potansiyel profili Şekil 4.4’de verilen kuantum telindeki, elektron ve donor safsızlık atomunun oluşturduğu yapının bağlanma enerjisinin +z yönünde uygulanan manyetik alana ve kuantum teli konumlarına bağlılığı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenmiştir.



Şekil 4.4: GaAs/GaAlAs kuantum teli potansiyeli.

x ve y doğrultularında kuşatılmış ve +z yönünde uygulanan manyetik alan altındaki elektron-safsızlık sisteminin Hamiltonian’i

$$H = \frac{1}{2 m_e^*} (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}))^2 + V(x, y) + V_c \quad (4.18)$$

biçiminde verilir. Kuşatma potansiyelinin fonksiyonel formu aşağıdaki gibidir.

$$V(x) = \begin{cases} V, & x \leq -L/2 \\ 0, & -L/2 < x < L/2 \\ V, & x \geq L/2 \end{cases} ; V(y) = \begin{cases} V, & y \leq -L/2 \\ 0, & -L/2 < y < L/2 \\ V, & y \geq L/2 \end{cases} \quad (4.19)$$

Burada  $\vec{A}$ ,  $\vec{A} = (\frac{-B_0 y}{2}, \frac{B_0 x}{2}, 0)$  şeklinde tanımlı vektör potansiyelidir.

$\vec{p}$  operatörünün ve  $\vec{A}$  vektör potansiyelinin değerleri yerine yazılırsa ve Hamiltonian'deki tüm uzunluklar Bohr yarıçapı ve tüm enerji terimleri Rydberg cinsinden yazılarak boyutsuz Hamiltonian

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= - \left[ \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right] + \tilde{V}(\tilde{x}) + \tilde{V}(\tilde{y}) + \gamma L_z + \\ &\frac{1}{4} \gamma^2 (\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) - \frac{2}{\sqrt{(\tilde{x}-\tilde{x}_i)^2 + (\tilde{y}-\tilde{y}_i)^2 + (\tilde{z}-\tilde{z}_i)^2}} \end{aligned} \quad (4.20)$$

biçiminde elde edilir. Elektron-safsızlık atomu sistemi için Schrödinger denklemi,

$$\tilde{H}\psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \tilde{E}\psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) \quad (4.21)$$

biçiminde yazılır. Sistemi tanımlayan genel dalga fonksiyonu

$$\psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, \alpha) = \phi_1(\tilde{x})\phi_2(\tilde{y})g(\tilde{z}, \alpha) \quad (4.22)$$

ile verilir. Burada x doğrultusunda dalga fonksiyonunu( $\Phi_1(\tilde{x})$ ) bulmak için; genişliği  $L_b$  olan sonsuz potansiyel kuyusunun öz fonksiyonlarından oluşan çözümler baz olarak kullanılmıştır. Sözü edilen bazlar,

$$\psi_n(\tilde{x}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \text{Cos} \left[ \frac{n\pi}{L_b} \tilde{x} - \delta_n \right] \quad (4.23)$$

biçimindedir. Burada  $\delta_n$ ,  $L_b$  genişliğindeki sonsuz kuyunun öz fonksiyonlarındaki tek veya çift özdeğerlere karşı gelen faz farkı olmak üzere,

$$\delta_n = \begin{cases} 0 ; & n - \text{tek ise} \\ \frac{\pi}{2} ; & n - \text{çift ise} \end{cases} \quad (4.24)$$

değerlerini alır. Bu durumda x doğrultusundaki dalga fonksiyonları baz fonksiyonları cinsinden,

$$\phi_1(\tilde{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(\tilde{x}) \quad (4.25)$$

biçimindedir.

Aynı şekilde y doğrultusundada genişliği  $L_b$  olan sonsuz potansiyel kuyusunun öz fonksiyonlarından oluşan çözümler baz olarak kullanılmıştır. Sözü edilen bazlar,

$$\psi_n(\tilde{y}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \text{Cos} \left[ \frac{n\pi}{L_b} \tilde{y} - \delta_n \right] \quad (4.26)$$

biçimindedir. Burada  $\delta_n$  denklem 4.24 de verildiği gibidir. Bu durumda y doğrultusundaki dalga fonksiyonları baz fonksiyonları cinsinden,

$$\phi_2(\tilde{y}) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(\tilde{y}) \quad (4.27)$$

biçimindedir.

İncelediğimiz yapıda, z eksenini doğrultusunda kuşatma olmadığı için elektron bu doğrultuda sadece Coulombic etkileşme etkisindedir. Elektron ile safsızlık atomu arasındaki bu etkileşim sonucu hidrojen atomu yapısına benzer bir durum ortaya çıkar. Bu nedenle bu doğrultudaki hareketi tanımlamak için hidrojen tipi atomları tanımlayan Gaussian tip orbital dalga fonksiyonu kullanılmıştır. Dalga fonksiyonu

$$g(\tilde{z}, \alpha) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left( \frac{2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\left( \frac{\tilde{z}}{\alpha} \right)^2} \quad (4.28)$$

formundadır [13].

Boyutsuz Hamiltonian'ın beklenen değeri

$$\begin{aligned} \langle \tilde{H} \rangle &= \tilde{E}_x + \tilde{E}_y - \frac{1}{\alpha^2} + \left\langle \psi \left| \frac{2}{\sqrt{(\tilde{x} - \tilde{x}_i)^2 + (\tilde{y} - \tilde{y}_i)^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} \right| \psi \right\rangle \\ \tilde{E}_x &= \left\langle \psi \left| -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{V}(\tilde{x}) + \frac{1}{4} \gamma^2 \tilde{x}^2 \right| \psi \right\rangle \\ \tilde{E}_y &= \left\langle \psi \left| -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} + \tilde{V}(\tilde{y}) + \frac{1}{4} \gamma^2 \tilde{y}^2 \right| \psi \right\rangle \end{aligned} \quad (4.29)$$

biçiminde bulunur.

Taban durumunda bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisi boyutsuz olarak,

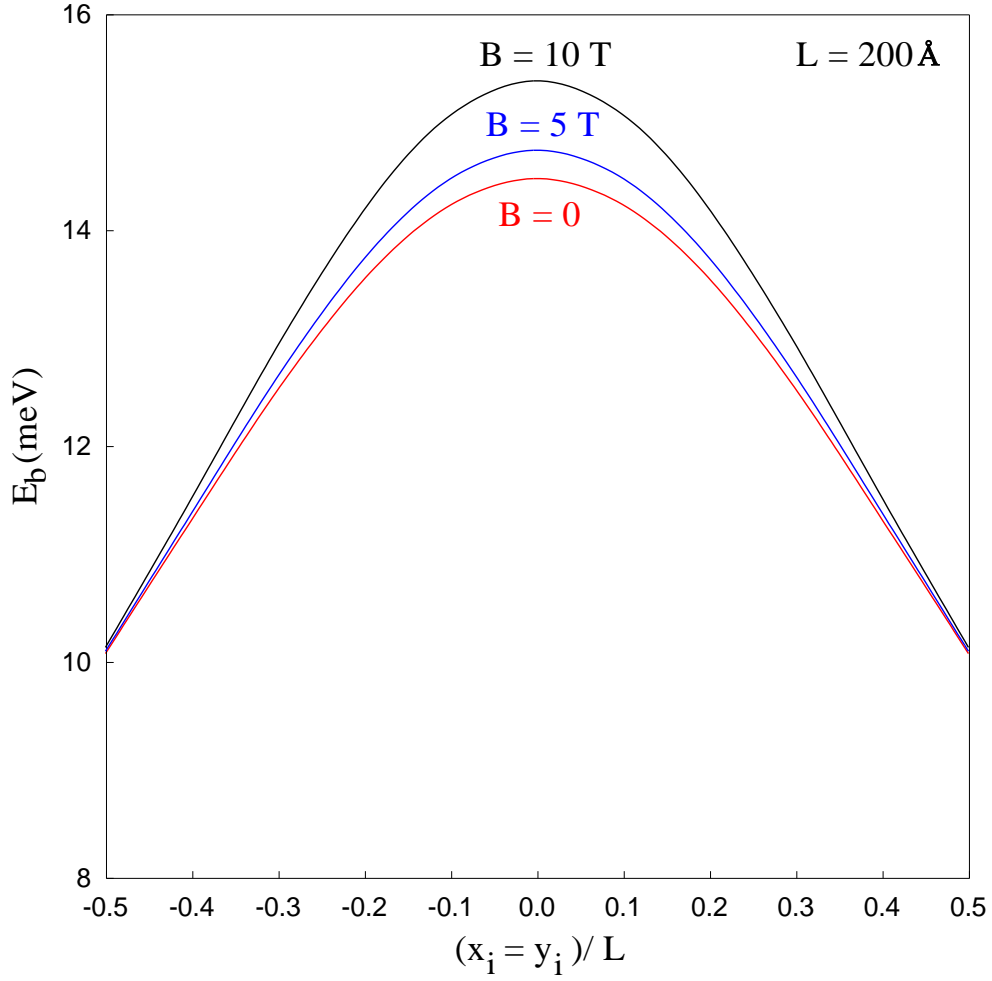
$$\tilde{E}_B = \tilde{E}_x + \tilde{E}_y - \langle \tilde{H} \rangle \quad (4.30)$$

ile verilir [13, 18, 19]. Burada  $\tilde{E}_x$  ve  $\tilde{E}_y$  elektronun x ve y doğrultusundaki hareketine karşılık gelen taban durum enerjileridir. Buna göre taban durumundaki safsızlık atomu bağlanma enerjisi [13, 18, 19]

$$\tilde{E}_B = -\frac{1}{\alpha^2} + 2 \iiint_{-\infty}^{+\infty} |\phi_1(\tilde{x})|^2 |\phi_2(\tilde{y})|^2 \frac{|g(\tilde{z}, \alpha)|^2}{\sqrt{(\tilde{x}-\tilde{x}_i)^2 + (\tilde{y}-\tilde{y}_i)^2 + (\tilde{z}-\tilde{z}_i)^2}} d\tilde{x} d\tilde{y} d\tilde{z} \quad (4.31)$$

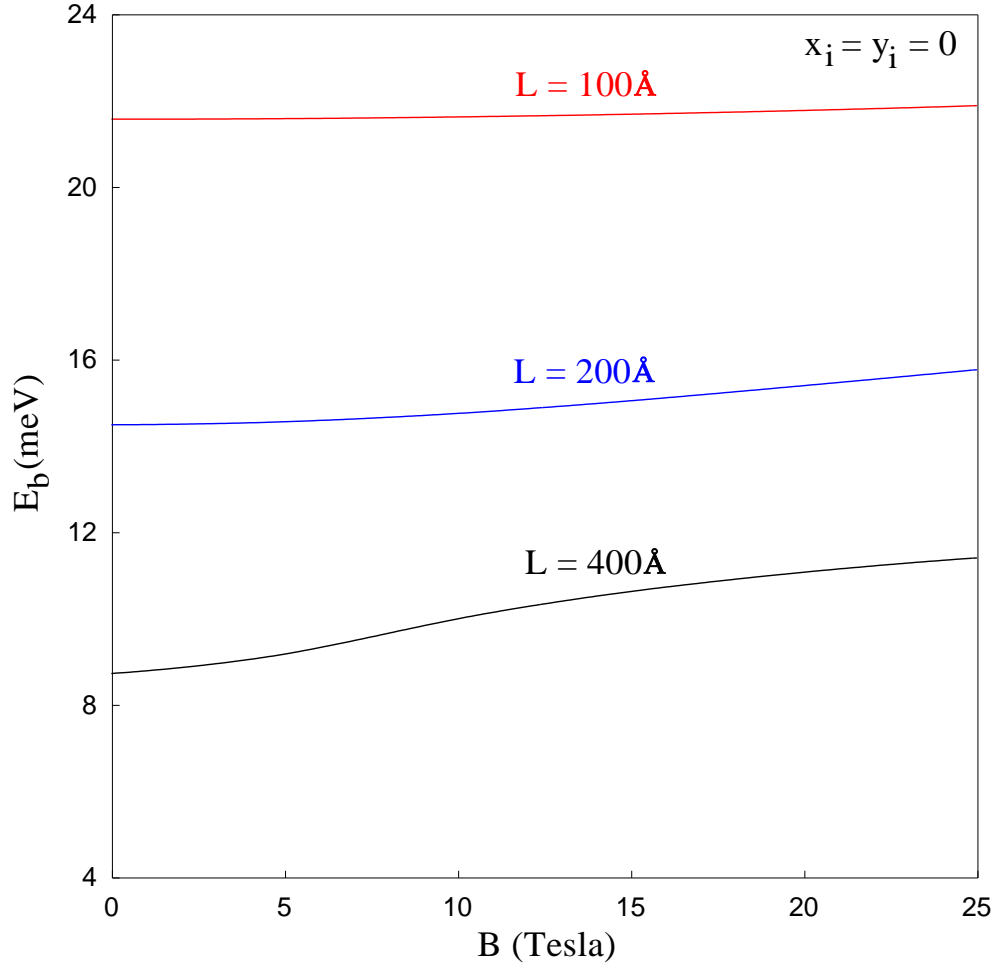
biçimindedir.

Şekil 4.5’de simetrik kuantum telinin farklı manyetik alan değerleri için bağlanma enerjisinin donör atomunun konumuna göre değişimi verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi manyetik alan arttıkça uygulandığı doğrultuda kuşatmayı arttıracığından bağlanmada artmaktadır. Ayrıca, tüm manyetik alan değerlerinde donör atomu merkezde lokalize olduğunda bağlanma enerjisi maksimumdur. Bunun nedeni, donör atomu merkezde lokalize olduğunda, donör atomuyla elektronun birbirini aynı düzlemde görme olasılığının artmasıdır. Aynı şekilde tüm manyetik alan değerlerinde kuyu merkezinden uzaklaştıkça bağlanma enerjisi azalmaktadır. Kuantum telinde iki yönden kuşatma olduğundan bağlanma enerjisi kuantum kuyusuna göre yaklaşık iki kat artmıştır.



**Şekil 4.5:** Simetrik GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum telinde manyetik alan altında safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin donor atomunun konumuna göre değişimi.

Manyetik alanın, geometrik kuşatmanın zayıf olduğu durumlarda daha etkin olduğunu göstermek için Şekil 4.6’da  $L = 100 \text{ \AA}$ ,  $200 \text{ \AA}$  ve  $400 \text{ \AA}$ ’luk tel boyutlarında, merkezde lokalize olan safsızlık atomu bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi verilmiştir. Şekilde de görüldüğü gibi tel boyutu büyüdükçe geometrik kuşatma zayıflar ve manyetik alan kuşatması daha başat olur. Bunun sonucu olarak da,  $L = 400 \text{ \AA}$  tel genişliğinde safsızlık atomu bağlanma enerjisi manyetik alana daha duyarlı olur. Ayrıca şekilden de görüldüğü gibi manyetik alan arttıkça bağlanma enerjisi artmaktadır.



**Şekil 4.6:** Farklı genişlikli GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum telinin merkezinde lokalize olan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi.

## 5. DIAMANYETİZMA

### 5.1. Giriş

Diamanyetizma, bir malzemedeki elektrik yüklerinin uygulanan dış manyetik alana karşı numune içini perdeleme eğilimiyle bağlantılıdır. Diamanyetik malzemelerde atomlar net bir manyetik momente sahip değildir. Fakat malzemeye dışarıdan bir manyetik alan uygulanırsa malzeme içindeki elektronları ivmelendiren etkileşmeli bir akım oluşur. Lenz yasasına göre, ortaya çıkan etkileşmeli akımın manyetik alanı uygulanan manyetik alana zıt yönde olur ve bu akımın yol açtığı manyetik moment diamanyetik karakterde olur. Ayrıca diamanyetik malzemeler negatif mıknatıslanmaya sahip malzemelerdir [20].

Şimdi diamanyetik karakterdeki bir sistem için mıknatıslanma ve alınganlık ifadelerini türetelim. Manyetik alan altında sistemin enerjisi  $E_i$  ise sistemin serbest enerjisi manyetik alana bağlı olur.  $k_B$  Boltzmann sabiti ve  $T$  mutlak sıcaklık olmak üzere eş bölüşüm fonksiyonunu

$$Z = \sum_i e^{-E_i(B)/k_B T} \quad (5.1)$$

İle verilir. Eş bölüşüm fonksiyonundan yararlanarak Helmholtz serbest enerjisi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln \left\{ \sum_i e^{-\frac{E_i(B)}{k_B T}} \right\} \quad (5.2)$$

Mıknatıslanma serbest enerji yoğunluğunun kısmi türevinin negatifine eşittir. Serbest enerji yoğunluğu  $f = NF/V$  olmak üzere mıknatıslanma aşağıdaki gibi verilir [21].

$$M(B, T) = -\frac{\partial f}{\partial B} = -\frac{N}{V} \frac{\partial F}{\partial B} \quad (5.3)$$

Burada  $V$  sistemin hacmi ve  $N/V$  birim hacimdeki atom sayısıdır. Ayrıca mıknatıslanma aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$M(B, T) = \frac{\sum_i M_i(B) e^{-E_i(B)/k_B T}}{\sum_i e^{-E_i(B)/k_B T}} \quad (5.4)$$

Burada  $M_i(B)$  i'inci duruma karşılık gelen mıknatıslanmadır. Ve aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$M_i(B) = -\frac{N}{V} \frac{\partial E_i(B)}{\partial B} \quad (5.5)$$

Herhangi bir sistem için manyetik alınganlık CGS birim sisteminde

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \quad (5.6)$$

şeklinde tanımlanır [25]. O halde (5.3) eşitliğinden yararlanarak diamanyetik alınganlık

$$\chi = -\frac{N}{V} \frac{\partial^2 F(B)}{\partial B^2} \quad (5.7)$$

biçiminde yazılabilir.

Son yıllarda düşük boyutlu sistemlerde sınırlanan taşıyıcılar için diyamanyetik alınganlık ölçümleri incelenmiştir. Düşük boyutlu sistemler için herhangi bir deneysel veri olmamasına karşın, teorik olarak diamanyetik alınganlık ölçümleri düşük boyutlu sistemlerdeki taşıyıcıların dinamikleri üzerine daha fazla ışık tutacağı öngörülerek yoğun olarak çalışılmaktadır [22-26].

## 5.2. Hellmann-Feynman Teoremi

Hellmann-Feynman teoremi, Hans Helmann (1937) ve Richard Feynman (1939) tarafından birbirinden bağımsız olarak ispatlanmıştır. Bu teorem  $\lambda$  zamandan bağımsız hamiltonianin bir parametresi olmak üzere;

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle \quad (5.8)$$

olduğunu söyler [27]. Buradaki  $\lambda$  bir operatör,  $H_\lambda$   $\lambda$  operatörüne bağlı hamiltonien ve E enerjidir.

Hellmann-Feynman teoreminin ispatını yapmak için özdeğer denklemini yazalım;

$$H_\lambda |\psi(\lambda)\rangle = E |\psi(\lambda)\rangle \quad (5.9)$$

Dalga fonksiyonunun normalizasyonundan

$$\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = 1 \quad (5.10)$$



Yazılabilir. Buna göre

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = 0 \quad (5.11)$$

Olur. Enerjinin beklenen değerinin  $\lambda$ 'ya göre türevine alınırsa;

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi(\lambda) | H_\lambda | \psi(\lambda) \rangle \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \middle| H_\lambda \middle| \psi(\lambda) \right\rangle + \left\langle \psi(\lambda) \middle| H_\lambda \middle| \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle + \left\langle \psi(\lambda) \middle| \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \middle| \psi(\lambda) \right\rangle \quad (5.13)$$

Eşitliği elde edilir. Bu eşitlikten yararlanarak (5.13) İfadesi aşağıdaki gibi basitleştirilebilir.

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = E \left\langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \middle| \psi(\lambda) \right\rangle + E \left\langle \psi(\lambda) \middle| \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle + \left\langle \psi(\lambda) \middle| \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \middle| \psi(\lambda) \right\rangle \quad (5.14)$$

Yazdığımız son eşitliğin iki terimi birleştirilirse (5.14) eşitliği aşağıdaki gibi olur.

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = E \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle + \left\langle \psi(\lambda) \middle| \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \middle| \psi(\lambda) \right\rangle \quad (5.15)$$

Son denklemdaki  $\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle$  ifadesi, dalga fonksiyonu normalize olduğu için sabit olacaktır. Bu nedenle türevi sıfır olacaktır. Böylece enerjinin birinci türevi hamiltonienin beklenen değerinin birinci türevi olur ve

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = \left\langle \psi(\lambda) \middle| \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \middle| \psi(\lambda) \right\rangle \quad (5.16)$$

eklinde yazılır. Sonuç olarak son denklem aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle \quad (5.17)$$

Bu sonuç Hellmann-Feynman teoremi olarak bilinir.

### 5.3. Kuantum Kuyusunda Donor Safsızlık Atomlarının Manyetik Alan Altındaki Diamanyetik Alınganlığı

Bu kısımda GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum kuyusunda,  $\vec{r} = (0, 0, z_i)$  konumundaki safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığı, +z yönünde uygulanan manyetik alana ve safsızlık atomunun konumuna bağlılığı incelenmiştir.

Bu sistemin Hamiltonian'ı Bölüm 4.2'deki denklem (4.6)'da verildiği gibi

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + \frac{e^2 B_0^2 \rho^2}{8m_e^* c^2} + \frac{e \hbar B_0 L_z}{2m_e^* c} - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} \quad (5.18)$$

biçimindedir. Diamanyetik alınganlığı hesaplamak için denklem (5.17)'den yararlanalım. Denklem (5.17)'deki  $\lambda$  parametresi bizim problemimiz için B manyetik alanıdır. O halde hamiltonienin B'ye göre türevi

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial B_0} \right\rangle = \frac{e}{2m_e^* c} \left[ \langle L_z \rangle + \frac{e B_0 \langle \rho^2 \rangle}{2c} \right] \quad (5.19)$$

şeklindedir. Manyetik alan z doğrultusunda olduğu için denklem (5.19)'daki ilk terim tek çekirdekli sistemlerde sadece paramanyetizmaya katkıda bulunurken, ikinci terim diamanyetik karakterdedir. Helmann-Feynman teoreminden ve (5.7) eşitliğinden yararlanarak diamanyetik alınganlık

$$-\chi = \frac{e}{2m_e^* B_0 c} \langle L_z \rangle + \frac{e^2}{4m_e^* c^2} \langle \rho^2 \rangle \quad (5.20)$$

şeklinde verilir [20]. Taban durum için M=0 olacağından  $\langle L_z \rangle = 0$  olur. Bundan dolayı diamanyetik alınganlık

$$\chi = -\frac{e^2 \langle \rho^2 \rangle}{4m_e^* c^2} \quad (5.21)$$

şeklini alır. Burada c ışık hızı ve  $\langle \rho^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle$  elektronun çekirdekten geçen ve manyetik alan doğrultusunda olan bir eksene göre ortalama dik uzaklığıdır. Çalışmamızda diamanyetik alınganlık atomik birimler cinsinden hesaplandı. Buna göre, atomik birimlerde (a.u) c=137, e=1 ve  $m_0 = 1$  olarak alındı. Küresel simetrik yük dağılımı için  $\langle \rho^2 \rangle = \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle$  yazılabilir. Bu durumda denklem (5.21) Langevin formülünü verir[18]. Fakat, bizim

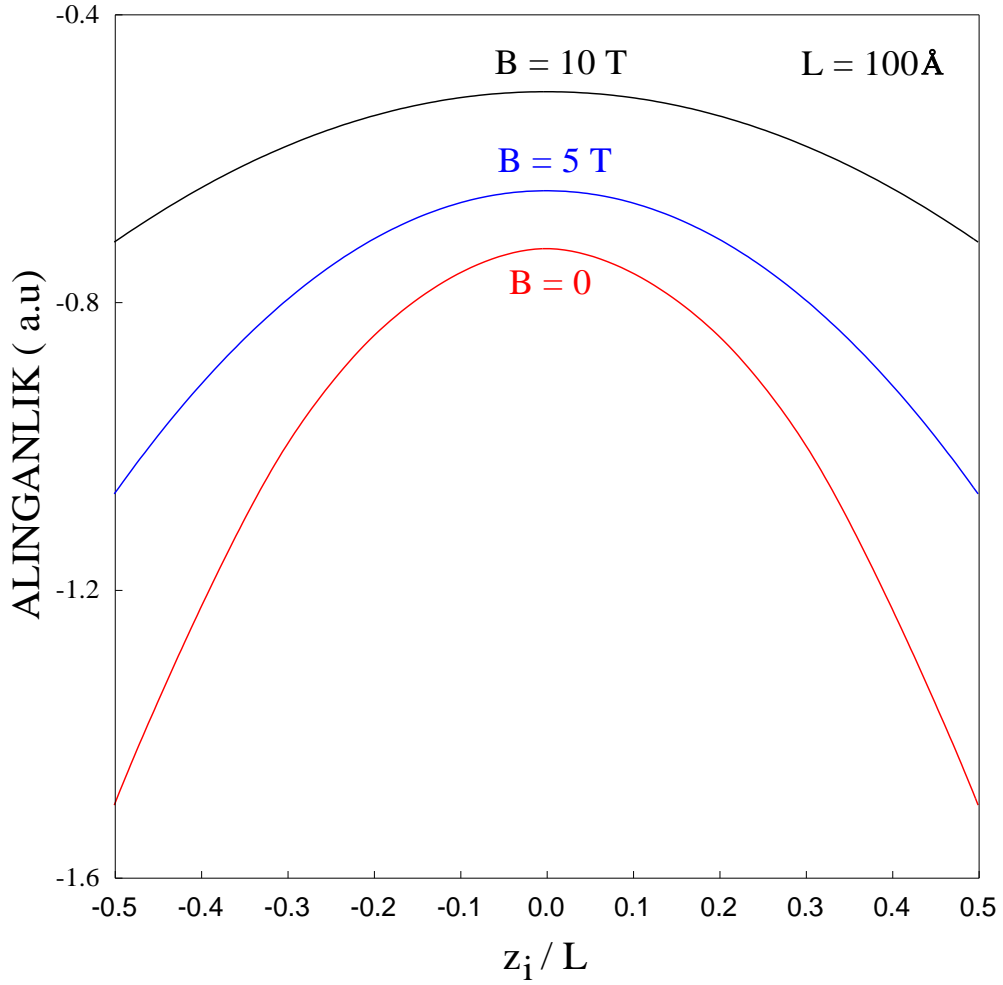
çalışmamızda manyetik alan ve geometrik kuşatma olduğu için yapı küresel simetrik değildir. Bundan dolayı çalışmamızda diamanyetik alınganlık denklem (5.21) yardımıyla hesaplandı.

Kuantum kuyusundaki donör safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığını hesaplamak için denklem (5.21)'deki  $\langle \rho^2 \rangle$  terimini hesaplamalıyız. Bu terimde

$$\langle \rho^2 \rangle = \iiint \phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) \rho^2 \phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) d\tau \quad (5.22)$$

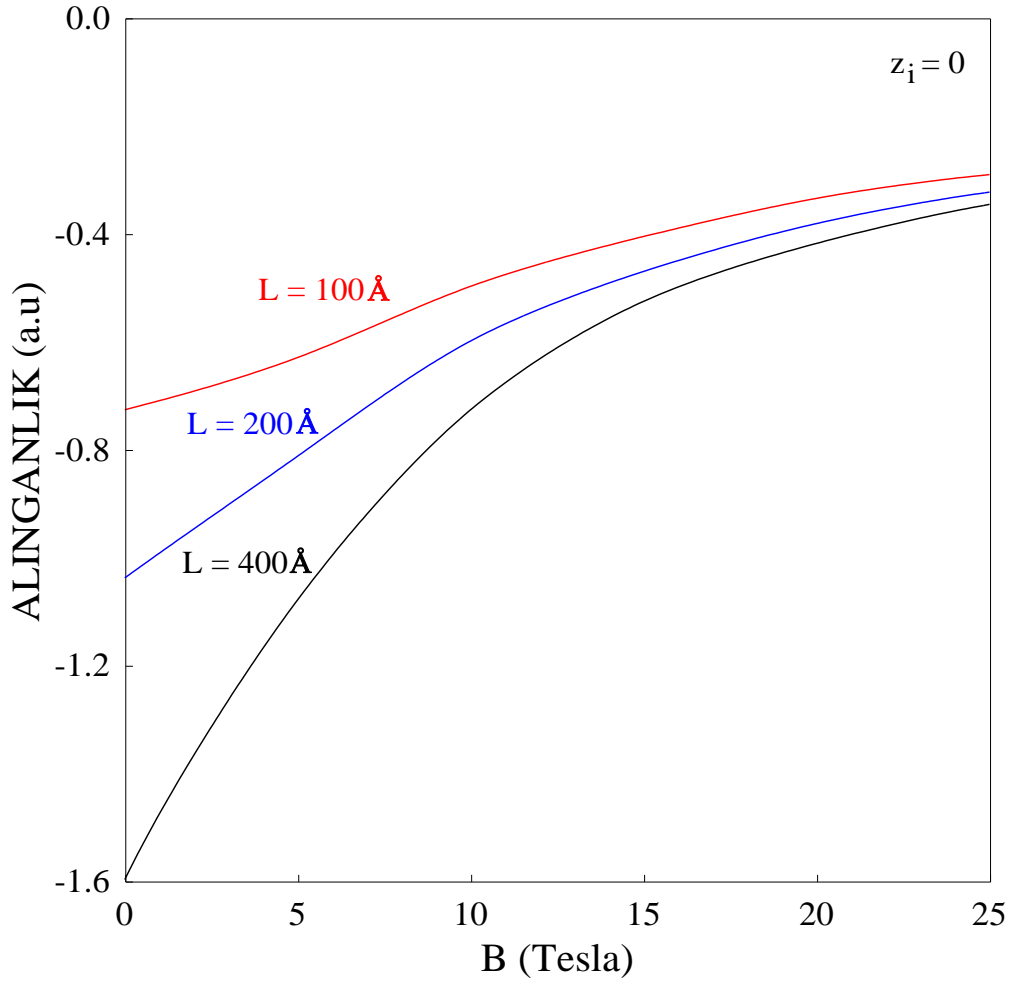
şeklindedir. Buradaki  $d\tau$  silindirik koordinatlarda hacim elemanıdır.

İlk olarak GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum kuyusunda olan donör safsızlık atomu için diamanyetik alınganlığın donör safsızlık atomunun konumuna göre değişimi farklı manyetik alan değerlerine göre şekil 5.1'de verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi manyetik alanın artmasıyla diamanyetik alınganlık artmıştır. Bunun nedeni, +z yönünde uygulanan manyetik alan arttıkça (x-y) düzleminde kuşatma artar ve  $\langle \rho^2 \rangle$  azalır. Bundan dolayı, diamanyetik alınganlık  $\langle \rho^2 \rangle$  ile doğru orantılı ve zıt yönlü olduğundan artar. Şekilden görüldüğü gibi manyetik alanın her değerinde kuyunun merkezinde lokalize olan donör atomu için diamanyetik alınganlık maksimumdur. Aynı şekilde kuyu merkezinden uzaklaştıkça, donör atomu ile elektronun birbirini aynı düzlemde görme olasılığı azalacağından  $\langle \rho^2 \rangle$  artar ve diamanyetik alınganlık azalır. Ayrıca şekil 4.2 ile şekil 5.1 karşılaştırıldığında manyetik alan altında donör bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre değişimi ile diamanyetik alınganlık değişiminin nitel olarak benzerlik gösterdiği görülür.



**Şekil 5.1:**  $L = 100 \text{ \AA}$  genişlikli GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum kuyusundaki donör safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığının farklı manyetik alan değerleri için donör atomunun konumuna göre değişimi.

Manyetik alanın, geometrik kuşatmanın zayıf olduğu durumlarda daha etkin olduğunu göstermek için Şekil 5.2’de farklı genişlikli kuantum kuyularındaki donör safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığının manyetik alana göre değişimi verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi kuyu boyutu büyüdükçe geometrik kuşatma zayıflar ve manyetik alan kuşatmasının alınganlık üzerine etkisi daha başat olur. Aynı zamanda kuyu genişliği arttıkça alınganlık azalmıştır. Çünkü geniş kuyularda safsızlık atomu ile elektronun birbirini görme olasılığı azaldığı için  $\langle \rho^2 \rangle$  artar ve bunun sonucu olarak alınganlık azalır. Ayrıca şekilden görüldüğü gibi manyetik alan arttıkça  $\langle \rho^2 \rangle$  azaldığından alınganlıkta artış gözlenir.



**Şekil 5.2:** Farklı genişlikli GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum kuyusunun merkezindeki donör safsızlık atomunun diamanyetik alinganlığının manyetik alana göre değişimi.

#### 5.4. Kuantum Tellerinde Donor Safsızlık Atomlarının Manyetik Alan Altındaki Diamanyetik Alınganlığı

Çalışmamızın bu bölümünde GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum telinde,  $\vec{r} = (x_i, y_i, 0)$  konumundaki safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığı, +z yönünde uygulanan manyetik alana ve kuantum teli boyutlarına ( $L_x, L_y$ ) bağıllığı incelenmiştir.

Ayar dönüşümü için manyetik vektör potansiyeli  $\vec{A} = (\frac{-B_0 y}{2}, \frac{B_0 x}{2}, 0)$  olarak seçilmiştir. x ve y eksenlerinde oluşturulan kuantum kuyuları nedeniyle elektronun bu doğrultudaki hareketleri sınırlandırılmıştır. Kuantum telinin z eksenini doğrultusunda ise elektron serbest parçacıkmiş gibi davranacaktır.

Bu sistemin Hamiltonian'ı

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(x) + V(y) + \frac{e^2 B_0^2 ((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2)}{8m_e^* c^2} + \frac{e\hbar B_0 L_z}{2m_e^* c} - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} \quad (5.23)$$

şeklinindedir. Hellmann-Feynman teoremi denklem (5.23)'e uygulanırsa diamanyetik alınganlık

$$\chi = -\frac{e^2 \langle ((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2) \rangle}{4m_e^* c^2} \quad (5.24)$$

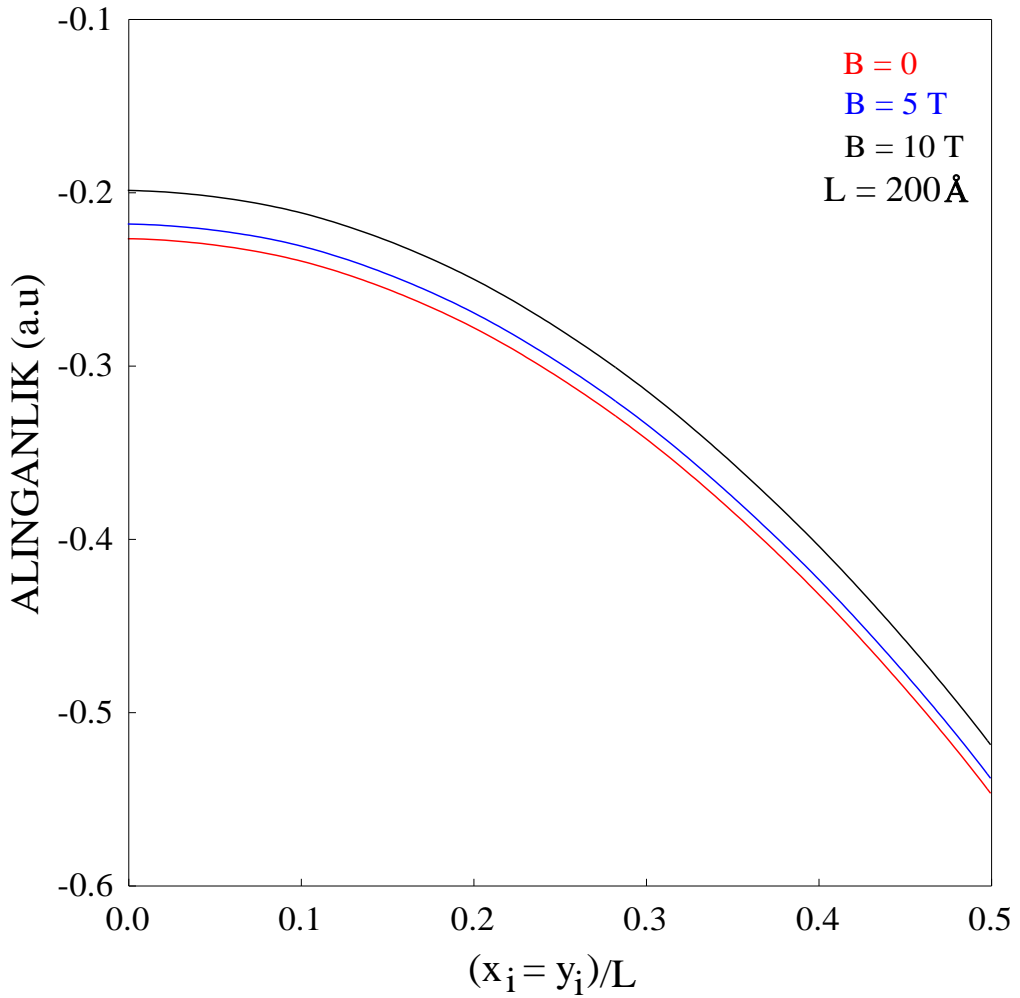
şeklinde verilir. Buradaki e, c ve  $m_e^*$  atomik birimlerde Bölüm 5.3'de verilen değerlerle aynıdır. Kuantum telindeki safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığını hesaplamak için  $\langle ((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2) \rangle$  terimini hesaplamalıyız. Bu terimde

$$\langle ((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2) \rangle = \iiint_{-\infty}^{+\infty} |\phi_1(x)|^2 |\phi_2(y)|^2 (g(z, \alpha))^2 ((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2) dx dy dz \quad (5.25)$$

şeklinindedir. Burada  $\phi_1(x)$ ,  $\phi_2(y)$  ve  $g(z, \alpha)$  Bölüm 4.3 de verilen değerlerin boyutlu değerleridir.

Simetrik kuantum telinin farklı manyetik alan değerleri için diamanyetik alınganlığının donör atomunun konumuna göre değişimi şekil 5.3'de verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi manyetik alan arttıkça, parçacıkların (x-y) düzlemindeki kuşatılması artacağından alınganlıkta artmaktadır. Ayrıca, tüm

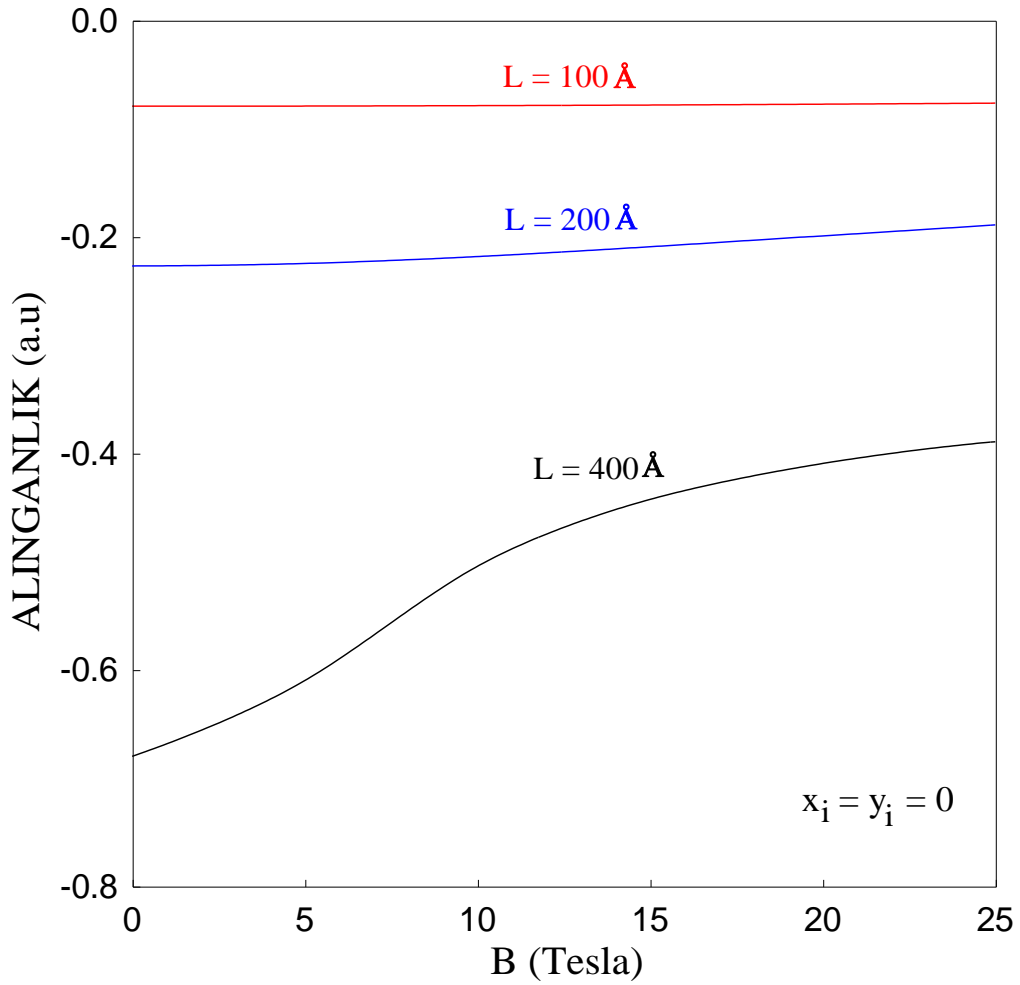
manyetik alan deęerlerinde merkezi donör atomu için baęlanma enerjisi maksimum olduęu için alinganlıkta maksimum olur ve merkezden uzaklařtıkça alinganlık azalmaktadır. Kuantum telinde geometrik kuřatma kuantum kuyusuna gre daha etkili olduęundan, kuantum telinde manyetik alana baęlılık kuyu sistemine gre daha zayıftır ve bunun sonucu olarak farklı alan deęerlerindeki alinganlık eęrileri birbirine çok yaklařır.



**řekil 5.3:**  $L = 200$  Å geniřlikli Simetrik GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum telinde donr safsızlık atomunun diamanyetik alinganlıęının farklı manyetik alan deęerleri için donr atomunun konumuna gre deęiřimi.

Son olarak, řekil 5.4'de farklı tel geniřliklerinde, merkezde lokalize olan safsızlık atomunun diamanyetik alinganlıęının manyetik alana gre deęiřimi verilmiřtir. řekilden de grldęu gibi tel boyutu bydkçe geometrik kuřatma

zayıflar ve manyetik alan kuşatması daha başat olur. Bunun sonucu olarak da,  $L = 400 \text{ \AA}$  tel genişliğinde safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığı manyetik alana daha duyarlı olur. Ayrıca şekilden de görüldüğü gibi tel boyutu küçüldükçe geometrik kuşatma artacağından alınganlıkta artmaktadır.



**Şekil 5.4:** Farklı genişlikli GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As kuantum telinin merkezinde lokalize olan safsızlık atomunun diamanyetik alınganlığının manyetik alana göre değişimi.



## 6. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada, donör katkılı bir heteroyapı ele alınarak kuyu ve tel şeklinde farklı boyutlardaki sistem içerisinde bulunan elektron ve donör atomu arasındaki bağlanma enerjisinin ve diamanyetik alınganlığın, kuyu genişliği, katkı atomunun konumu ve dışarıdan uygulanan manyetik alan ile nasıl değiştiği üzerinde duruldu. Kuantum kuyu ve telinde safsızlık atomu problemi Schrödinger dalga denklemi kullanılarak çözüldü. Bağlanma enerjilerinin hesaplanmasında, etkin kütle yaklaşımı ve varyasyon tekniği kullanıldı. Yapılan tüm hesaplamalarda Alüminyum konsantrasyonu  $x=0.3$  alındı. Ayrıca safsızlık atomunun diamanyetik alınganlık hesabı için Hellmann-Feynman teoreminden yararlanıldı.

Elde edilen sonuçları burada kısaca özetleyecek olursak; düşük boyutlu sistemlerde manyetik alanın artmasıyla diamanyetik alınganlık artmaktadır. Aynı şekilde, hem kuantum kuyusunda hemde kuantum telinde kuyu veya tel boyutları arttıkça diamanyetik alınganlığın azaldığı gözlenmiştir. Ayrıca heteroyapılarda boyut parametresinin ve manyetik alanın sistemin elektronik ve optik özellikleri üzerinde çok etkili olduğu görüldü.

Bu çalışmada elde edilen sonuçların bu konuda daha önce yapılan çalışmalarla uyumlu olduğu görülmüştür. Bilindiği kadarıyla, şu ana kadar düşük boyutlu sistemlerin diamanyetik alınganlıkları için herhangi bir deneysel veri alınmamıştır. Burada elde edilen sonuçlar bu konuda yapılacak deneysel çalışmalara öncü olabilecek niteliktedir.

## KAYNAKLAR

1. Jasprit Singh 'Physics of semiconductors and Their Heterostructures'  
The University of Michigan, USA (1993)
2. M.Jaros 'Physics and Applications of Semiconductor Heterostructures'  
Oxford University Press, New York (1989)
3. B.G.Streetman 'Solid State Electronic Devices' Prentice Hall Inc. NJ  
(1990)
4. G. Bastard Phys. Rev. B. 24 (1981) 4714
5. E. Kasapođlu, H. Sarı, İ. Sökmen 19 Physica E (2003) 332-335
6. C.A.Duque, A.L.Morales, A.Montes and N.Porrás-Montenegro  
Phys.Rev.B 55, 10721 (1997)
7. A.Latge, M.de Dios-Leyva and L.E.Oliveria Phys.Rev.B 49, 10450  
(1994)
8. Jasprit Singh 'Semiconductor Optoelectronics Physics and Technology'  
The University of Michigan, USA (1993)
9. Jasprit Singh 'Electronic and Optoelectronic Properties of  
Semiconductor Structures' The University of Michigan, USA (2003)
10. R.Dingle in Festkörperprobleme XV(Advances in Solid State Physics),  
edited by H.J.Quesser (Permagon,1975) P 21
11. Y.Ergün, I.Sökmen, H.Sarı, S.Elagöz ve M.Ç.Arıkan, Semicond. Sci.  
Techonol. 12,802 (1997)

12. P. Harrison 'Quantum Wells, Wires and Dots' The University of Leeds, UK (1999).
13. E. Kasapoğlu, H. Sarı, İ. Sökmen Solid State Communications 125 (2003)
14. G. Bastard 'Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures' Halsted, New York (1998).
15. A. Balandin and S. Bandyopadhyay 'Superlattices and Microstructures' Vol. 16, No:21 (1996).
16. R. L. Greene, K. K. Bajaj Phys. Rev. B (1985) 913-918.
17. C. Aldrich and R. L. Greene Phys. Status Solidi B 93, 343 (1979).
18. A. Montes, C. A. Duque, N. Porrás-Montenegro J. Appl. Phys. Vol. 81 No: 12
19. G. W. Bryant , Phys. Rev. B 29 ,6632 (1984).
20. C.Kittel, Introduction to Solid State Physics, Seventh ed., Wiley, New York, 2000.
21. Jenő Solyom, Fundamentals of the physics of solids, Budapest, Hungary, 2002.
22. P.Nithiananthi,K.Jayakumar, Solid State Commun.137 (2006) 427
23. N.Muthu Irulayee, K.Navaneethakrishnan, Physica E 41 (2008) 193-195
24. P.Nithiananthi,K.Jayakumar, Physica B 391 (2007) 113

25. M.Latha, S.Rajashabala and K.Navaneethakrishnan, Phys.Stat.Sol.(b) 243 (2006) 1219-1228
26. P.Nithiananthi,K.Jayakumar, Superlattices and microstructures 40 (2006) 174-179
27. E.Merzbacher, Quantum Mechanics, third ed., Wiley, New York, 2000.

## ÖZGEÇMİŞ

Adı-Soyadı : Ercan KILIÇARSLAN  
Doğum Yeri-Yılı : Diyarbakır- 1984  
Medeni Durumu : Bekar  
İş Adresi : Cumhuriyet Üniversitesi  
Fen Edebiyat Fakültesi  
Fizik Bölümü 58140 Sivas  
İş Tel : (346) 219 10 10-2160  
Lisans (2002-2006) : Cumhuriyet Üniversitesi  
Fen Edebiyat Fakültesi  
Fizik Bölümü  
Yüksek Lisans (2006-2009) : Cumhuriyet Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Fizik Anabilim Dalı