

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

**HETEROYAPILARDA
UZAYSAL PERDELEMENİN
SAFSIZLIK DÜZEYLERİNE ETKİSİ**

**Alper ZEYTUN
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANA BİLİM DALI
2009**

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

**HETEROYAPILARDA
UZAYSAL PERDELEMENİN
SAFSIZLIK DÜZEYLERİNE ETKİSİ**

**Alper ZEYTUN
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANA BİLİM DALI**

Danışman : Prof. Dr. Hüseyin SARI

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ'NE

Bu çalışma jürimiz tarafından, Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. İsmail SÖKMEN

Üye : Prof. Dr. Hüseyin SARI

Üye : Doç. Dr. Esin KASAPOĞLU

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.

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

HETEROYAPILARDA UZAYSAL PERDELEMENİN SAFSIZLIK DÜZEYLERİNE ETKİSİ

Alper ZEYTUN

Cumhuriyet Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Bölümü

Danışman : Prof. Dr. Hüseyin SARI

Bu çalışmada, konuma bağlı dielektrik sabitinin hidrojenik bağlanmaya yapacağı etki varyasyonel hesap tekniği ile hesaplandı. Ayrıca elektrik ve manyetik alan altında kuşatma potansiyelinin biçimine bağlı olarak dielektrik duyarlılığın hidrojenik bağlanma üzerindeki etkisi incelendi.

ANAHTAR KELİMELEER : Manyetik alan, Elektrik alan, Konuma bağlı dielektrik sabiti ,Bağlanma enerjisi

SUMMARY

MSc Thesis

**SPATIALLY DEPENDENT SCREENING EFFECT
ON THE IMPURITY LEVELS
IN THE HETEROSTRUCTURES**

Alper ZEYTUN

Cumhuriye University

Graduate School of Natural Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Hüseyin SARI

In this study the effect of the position dependent dielectric constant on the hydrogenic binding energy has been calculated by variational technique. Furthermore the sensitivity of the hydrogenic binding on the dielectric constant is investigated for confinement potential with different shapes under the electric and magnetic field.

KEY WORDS: Magnetic field, Electric field, Position dependent dielectric function, Binding energy

TEŐEKKÖR

Konu seiminde ve alıŐmalarımın her aŐamasında bilgi ve deneyimlerinden faydalandıĐım danıŐman hocam sayın Prof. Dr. Hőseyin SARI' ya, hocam sayın Do. Dr. Esin KASAPOĐLU' na, alıŐmalarım boyunca sabır ve őzveri ile bana destek olan ailem ve ev arkadaŐım Serkan KILIN' a teŐekkőr ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
SUMMARY	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ	v
1-GİRİŞ	1
2-YARIİLETKENLER	3
2-1 Saf Yarıiletkenler	3
2-2 Katkılı Yarıiletkenler	8
3-HETEROYAPILAR	10
3-1 Heteroyapılara Giriş	10
3-2 Kuantum Kuyuları, Telleri ve Kutuları	15
4-1 ELEKTRİK ALAN ALTINDA DONOR KATKILI GaAs/Ga _{1-x} Al _x As KUANTUM KUYUSU	19
4.2 MANYETİK ALAN ALTINDA DONOR KATKILI GaAs/Ga _{1-x} Al _x As KUANTUM KUYUSU	33
5-SONUÇ VE TARTIŞMA	41
6-KAYNAKÇA	42
7-ÖZGEÇMİŞ	44

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2-1 (a) İletkenlerin enerji band diyagramı	3
(b) Yarıiletkenlerin enerji band diyagramı	3
(c) Yalıtkanların enerji band diyagramı	3
Şekil 2-2 (a) $T = 0^{\circ} \text{K}$ sıcaklıkta yarıiletkenlerin bant yapısı	4
(b) $T > 0^{\circ} \text{K}$ de yarıiletkenlerin bant yapısı	4
Şekil 2-3 Yarıiletkenlerde dolaysız bant geçişi	6
Şekil 2-4 Yarıiletkenlerde dolaylı bant geçişi	6
Şekil 2-5 (a) GaAs'da L, Γ , X ile verilen süreksizliklerin gösterimi	7
(b) AlAs'da L, Γ , X ile verilen süreksizliklerin gösterimi	7
Şekil 2-6 (a) As katkılanmış Ge kristali (n-tipi)	8
(b) Donor enerji seviyesi	8
Şekil 2-7 (a) In katkılanmış Ge kristali (p-tipi)	9
(b) Akseptör enerji seviyesi	9
Şekil 3-1 Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin birbirine eklenmemiş band yapısı	10
Şekil 3-2 Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin birbirine eklenmiş band yapısı	11
Şekil 3-3 GaAs–Ga _{0,7} Al _{0,3} As (n–tipi) heteroyapıda iletim bandı eğiminin gösterimi	12
Şekil 3-4 Bant süreksizliğine göre heteroyapı türleri	13
Şekil 3-5 a, Heteroyapı için rezonans tünelleme modeli	14
b, Heteroyapı için rezonans tünelleme modeli	14
c, Heteroyapı için rezonans tünelleme modeli	14
d, Heteroyapı için rezonans tünelleme modeli	14
Şekil 3-6 GaAs kuantum kuyusunun elektronik band yapısı	15
Şekil 3-7 (a) Kuantum teli	17
(b) Kuantum telinin iletkenlik bandında oluşan süreksizlikler	17
Şekil 3-8 Kuantum noktası	18

Şekil 4-1 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusu potansiyel profili	19
Şekil 4-2. Konuma bağlı dielektrik sabitinin değişimi	24
Şekil 4-3 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $z_i=0$ ve $z_i=\pm L/2$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi.	26
Şekil 4-4 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $z_i=-L/2$ ve $z_i=L/2$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliği ve elektrik alana bağlı değişimi.	28
Şekil 4-5 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $z_i=0$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin, kuyu genişliği, elektrik alan ve uzaysal perdelemenin etkisiyle değişimi.	30
Şekil 4-6 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $z_i=L/2$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin alan altında kuyu genişliğine göre değişimi.	32
Şekil 4-7 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $z_i=0$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun manyetik alan altında bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.	38
Şekil 4-8 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $z_i=\pm L/2$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun manyetik alan altındaki ve konuma bağlı dielektrik sabitinin (uzaysal perdeleme) etkisiyle bağlanma enerjisinin, kuyu genişliği ile değişimi.	40

1. GİRİŞ

Son yıllarda hızla gelişen teknolojiye yarıiletkenler çok yaygın bir kullanım alanına sahiptirler. Birçok elektronik devre elemanının ve çeşitli düzeneklerin temel yapı elemanlarını yarıiletkenler oluşturmaktadırlar. Yarıiletkenle elektriksel iletkenlikleri metal ile yalıtkanlar arasında olan malzemelerdir. Yarıiletkenlerin iletkenlikleri; sıcaklık, optik uyarılmalar ve katkılama ile büyük ölçüde değişmektedir. Yarıiletkenlerin elektriksel özelliklerinin dış etkilerle değişebilir olmasından dolayı elektronik devre elemanlarının yapımında kullanımı tercih sebeplerindedir. Yarıiletken devre elemanlarının çok küçük hacimler içerisine yerleştirilebilir olması, yasak bant aralıklarının çeşitli uygulamalar için elverişli bölgede olması ve bunun neticesinde istenilen özelliklere sahip bir devre elemanı yapılmasına imkân vermesi başka bir tercih sebebidir. Yarıiletkenlerle yapılan devre elemanlarının diğer p-n eklemli elektronik devre elemanlarına(kristal diyot ve transistör) göre daha yüksek performansa sahip olmalarının yanı sıra fabrikasyon üretimine uygun olmaları ve maliyetlerinin düşük olması yarıiletken teknolojisine ilgiyi arttırmıştır[1, 2, 3].

Yapılan çalışmalar neticesinde yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri belirlenebilmektedir. Son yıllarda yapay modeller üzerinde çalışmalar yoğunlaşmıştır. Çok ince tabakalar şeklinde atomların düzenli olarak dizilmesiyle oluşan iki boyutlu veya düşük boyutlu olarak adlandırılan yapılar oluşturulmaktadır. MBE(Moleküler Beam Epitaxy)ve MOCVD (Metal Organic Chemical Vapour Deposition) kristal büyütme yöntemleriyle bu yapılar oluşturulmaktadır. İki $Ga_{1-x}Al_xAs$ yarıiletken tabakası arasında GaAs tabakası oluşturularak tekli kuantum çukuru, bu tabakaların periyodik tekrarlanması sonucu çoklu kuantum çukurları veya tabaka kalınlıkları ayarlanarak oluşturulabilen süper örgüler elde edilebilmektedir[4, 5].

Kuantum mekaniksel sistemlerinde kuşatma artırılıp boyut azaltıldıkça, fiziksel özellikleri belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelmektedir. Bu sayede istenilen şekilde cihazlar tasarlanmaktadır. Düşük boyutlu sistemlerde yük taşıyıcılarının yaşam süreleri külçe malzemelere göre farklıdır. Külçe yarıiletken-

lerde madde içerisindeki çeşitli kusurlar nedeniyle oluşan saçılmalar neticesinde yük taşıyıcılarının yaşam süreleri kısadır. Bu durum ise külçe malzemelerin kullanım alanlarını daraltır. Yapının boyutu azaldıkça saçılma oranları azalır ve yük taşıyıcılarının yaşam süreleri önemli bir şekilde atar[6]. Yapılan çalışmalarda önce yük taşıyıcılarının bir yöndeki hareketleri kısıtlanarak iki-boyutlu kuantum kuyusu yapıları geliştirilmiştir. Kuşatma boyutları artırılarak bir-boyutlu kuantum telleri ve sıfır-boyutlu kuantum noktaları yapılmıştır. Elektronun hareketini üç boyuttan sıfır boyutuna doğru indirdiğimizde sistemin elektronik ve optik özelliklerinde teknolojide büyük kullanım alanları açacak kadar önemli değişiklikler olmaktadır. Bunun nedeni çarpışmaların azalması ve potansiyel etkileşmelerin önemsenebilir bağlanmalara yol açmasıdır. Düşük boyutlu sistemlerde son derece dar ve iyi tanımlanmış enerji düzeyleri elde etmek mümkündür. Bu tür sistemlerde elektron veya boşluk yoğunluğu istenildiği gibi değiştirilebilir.

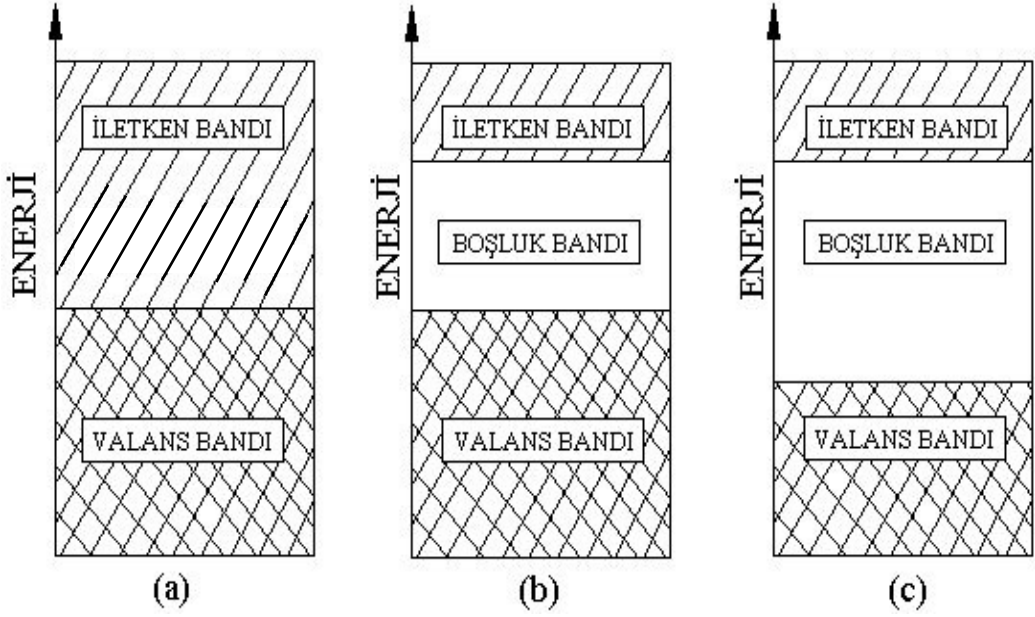
Yarıiletken heteroyapılar üzerinde yapılan kuramsal ve deneysel çalışmalar sonucunda safsızlık düzeylerinin külçe malzemeye göre çok farklı özellikler sergiledikleri ve yapılan hesaplamalarda safsızlık atomu ile yük taşıyıcıları arasındaki Coulombic etkileşme genellikle statik dielektrik sabiti ile tanımlanmıştır.

Bu çalışmada amacımız, konuma bağlı dielektrik sabitinin hidrojenik bağlanmaya yapacağı etkiyi varyasyonel hesap tekniği ile hesaplamaktır. Ayrıca kuşatma potansiyelinin biçimine bağlı olarak dielektrik duyarlılığın hidrojenik bağlanma üzerindeki etkisini araştırmaktır. Çalışmamızın son aşamasında uzaysal ortamında manyetik alan altında safsızlık atom enerji düzeyleri üzerinde durulacaktır.

2-YARIİLETKENLER

2.1 Saf Yarıiletkenler

Yarıiletkenler, iletkenlikleri metaller ile yalıtkanlar arasında olan, sıcaklığın artmasıyla iletkenlikleri artan maddelerdir. Katılarda iletkenlik, her katı madenin kendine özgü olan enerji bant yapısı ile değişir[3]. Şekil 2-1 de $T = 0^{\circ}K$ 'de katılara ait enerji bant diyagramları verilmiştir. Bant diyagramlarında dolu olan banda değerlik (valans) bandı, boş olan banda ise iletim bandı denir. Şekil 2-1(a) da iletken bir katıya ait enerji bant diyagramı verilmiştir. Şekil 2-1(b) de yarıiletken bir katıya ait enerji bant diyagramı verilmiştir. Şekil 2-1(c) de ise yalıtkan bir katıya ait enerji bant diyagramı verilmiştir.

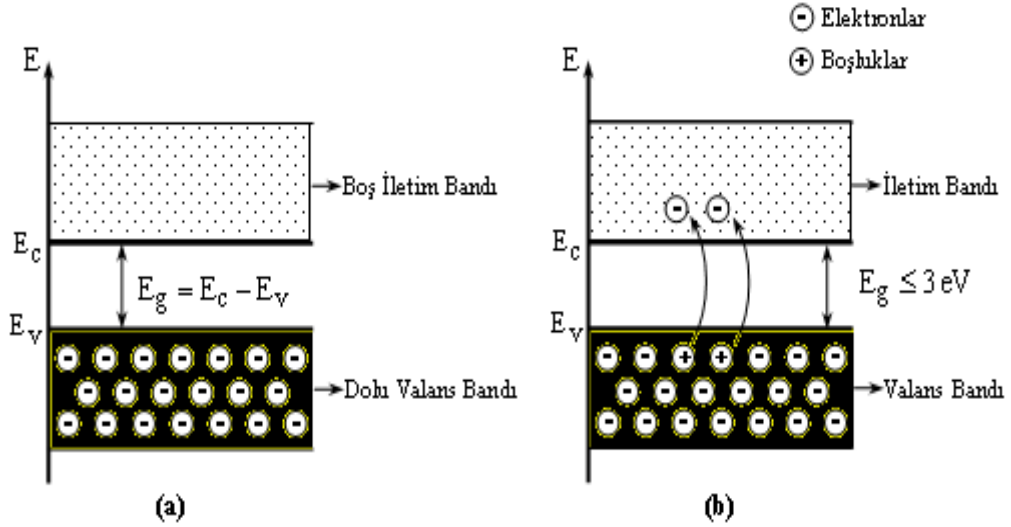


Şekil 2-1 (a) İletkenlerin enerji bant diyagramı

(b) Yarıiletkenlerin enerji bant diyagramı

(c) Yalıtkanların enerji bant diyagramı

Bir yarıiletkenin elektriksel iletkenliği sıcaklıkla orantılıdır. Sıcaklık arttığında yarıiletkenin özdirencinin küçülmesi önemli bir özelliğidir. Katkılama yolu ile iletkenliklerinin artması diğer önemli bir özelliğidir. Yarıiletkenlerde uygun yabancı madde konsantrasyonunun artması özdirenci küçültür[7]. Yarıiletkenlerin bant yapıları elektrik iletiminde belirleyici özellik gösterir. Şekil 2-2 (b) Yarıiletkenlerde $T = 0^\circ \text{K}$ sıcaklıkta iletim bandı tamamen boş iken değerlik (valans) bandı tamamen doludur. Bu yüzden yarıiletkenler düşük sıcaklıklarda yalıtkandırlar. $T = 0^\circ \text{K}$ sıcaklıkta saf bir yarıiletkenin E_f Fermi enerjisi yasak enerji aralığının tam ortasındadır.



Şekil 2-2 (a) $T = 0^\circ \text{K}$ sıcaklıkta yarıiletkenlerin bant yapısı,

(b) $T > 0^\circ \text{K}$ de yarıiletkenlerin bant yapısı

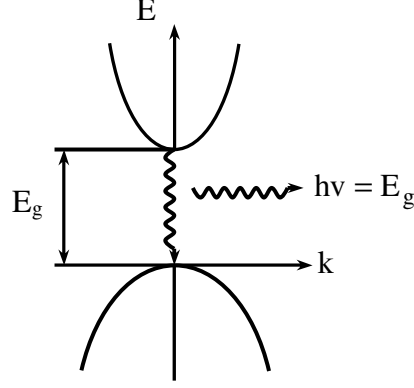
Yarıiletkenlerin yasak enerji aralığı genellikle 3 eV' dan küçüktür. Yarıiletkenlerin yasak enerji aralığı yalıtkanların yasak enerji aralığından (7-10 eV)

daha küçük değere sahip olduğundan sıcaklık artırılırsa ($T > 0^0 \text{ K}$) elektronlar yasak enerji aralığını geçecek kadar uyarılır ve değerlik (valans) bandında bir boşluk bırakarak iletim bandına geçerler. Bu nedenden yüksek sıcaklıklarda yarıiletkenler iletken gibi davranırlar. Boşluklar (holler) ise pozitif yüklü tanecikler gibi davranırlar ve elektronun yükü ile zıt yüke sahiptirler. Boşlukların ve elektronların her ikisi de elektrik alandan etkilendiği için ilettime katkı sağlarlar. Saf yarıiletkenlerde akım iletimine katkıda bulunan elektron veya boşluk sayısı az olduğundan aygıt yapımında pek kullanılmazlar. Örgü kusurları ve yabancı atomların oluşturdukları safsızlıklar yoktur. Saf bir yarıiletkende ilettime katılan elektron ve hollerin sayısı aynıdır[7]. Elektron yoğunluğu n , boşluk yoğunluğu p olmak üzere; $n = p = n_i$ olacaktır.

n_i : yarıiletkendeki saf taşıyıcıların yoğunluğudur.

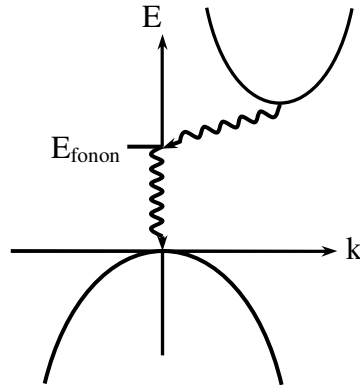
Yarıiletken teknolojisiyle yapılan cihazların uygulanmalarında dolaylı ve dolaysız band geçişleri önemli yer tutarlar.

Şekil 2-3 de gösterildiği gibi, E_g yasak enerji aralıklı yarıiletkene $E = \frac{\hbar c}{\lambda} \geq E_g$ enerjili bir ışık düşürülürse değerlik bandındaki elektronlar foton enerjisini soğurarak iletkenlik bandına geçerler. Burada çok kısa bir süre kalırlar. Elektronlar E_g enerjili bir foton yayarak tekrar değerlik bandına dönerler. Dolaysız (direct) bir optik geçişte iletim bandının minimumu ile değerlik bandının maksimumu aynı k uzay vektörü değerine sahiptir ($\vec{k}=0$). Dolaysız bir optik geçiş, \vec{k} uzay vektörü değerinde önemli bir değişikliğe yol açmaz, çünkü soğrulan fotonun dalga vektörü küçüktür.



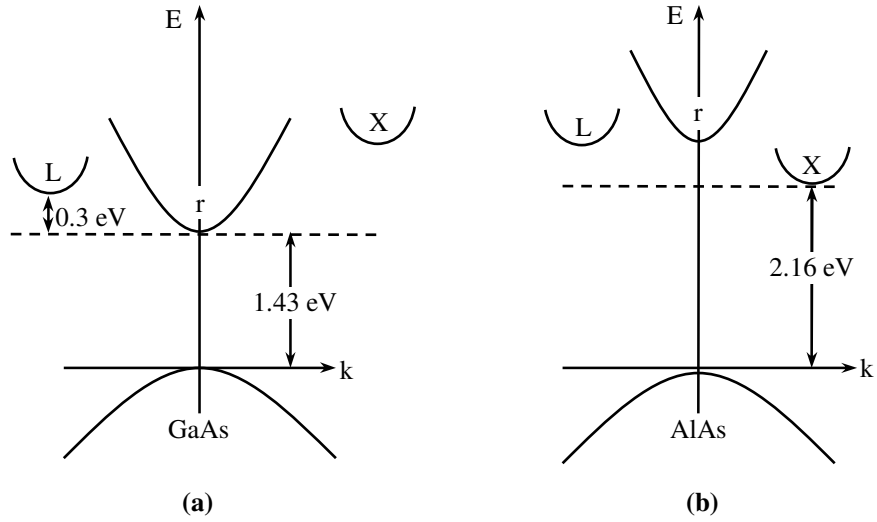
Şekil 2-3 Yarıiletkenlerde dolaysız bant geçişi

Şekil 2-4 de gösterildiği gibi, Silikon gibi bazı yarıiletken maddelerde iletim bandının en alt noktası ile değerlik bandının tepesi aynı \vec{k} uzay vektörü değerine sahip değildir. Bu yüzden bu tür geçişlerde momentumun korunabilmesi için fonon momentumuna ihtiyaç vardır. Bu özelliği taşıyan yarı iletken maddelere dolaylı (indirect) yarıiletkenler denir.



Şekil 2-4 Yarıiletkenlerde dolaylı bant geçişi

Şekil 2-5’de gösterildiği gibi dolaysız ve dolaylı geçişli maddelerde Γ , X ve L gibi yüksek simetri noktaları bulunur. Bu noktalar Brillouin bölgesinin merkezinde ve sınırında yer alır. İletim bandının minimumuna ($\vec{k}=0$ durumunda) Γ denir. Değerlik bandı ile iletim bandı arasındaki geçişler sırasında geçiş iletim bandının Γ vadisi ile değerlik bandı arasında oluyorsa yapı dolaysız yapı dolaysız geçi özelliği gösterir. Geçiş, iletim bandının L ve X vadisi ile değerlik bandı arasında oluyorsa dolaylı geçiş özelliği gösterir.



Şekil 2-5 (a) GaAs’da L, Γ , X ile verilen süreksizliklerin gösterimi

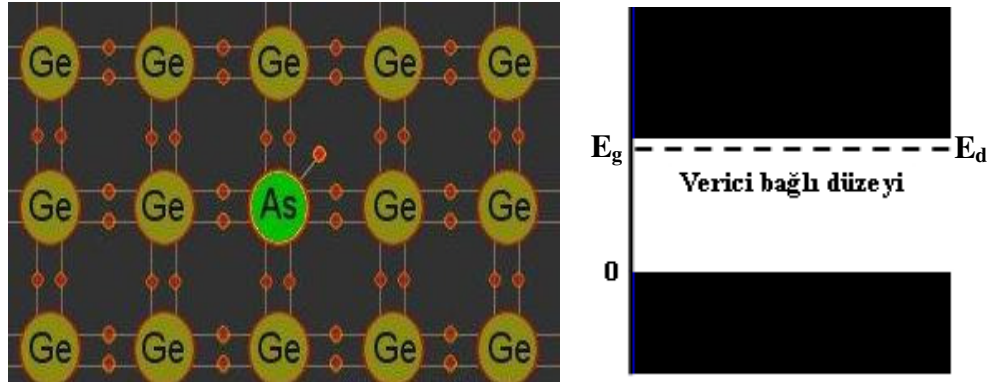
(b) AlAs’da L, Γ , X ile verilen süreksizliklerin gösterimi

GaAs oda sıcaklığında dolaysız (direct) band aralığına sahip bir malzeme özelliği gösterir. İletim bandı minimumuna ($k=0$ durumu) Γ denir. İletim bandının daha yukarısındaki iki vadinin minimumlarına ise, dolaylı vadilerden daha düşük durumlardaki minimuma L, dolaylı vadilerden daha yüksek durumdaki minimuma X denir. AlAs’in dolaysız olan Γ minimumu, dolaylı olan X minimumundan çok daha yukarıdadır. Bu nedenle AlAs oda sıcaklığında dolaylı geçişli bir malzemedir[4].

2-2 Katkılı Yarıiletkenler

Öz taşıyıcı sayısı fazla olmadığından yarıiletkenlerde taşıyıcı sayısını artırmak için yarıiletkene katkı maddesi eklenir. Katkı maddeleri ve örgü bozuklukları bir yarıiletkenin elektrik iletkenliğini etkiler. Bir yarıiletkene katkı atomları ekleme işine aşılama (doping) adı verilir[8].

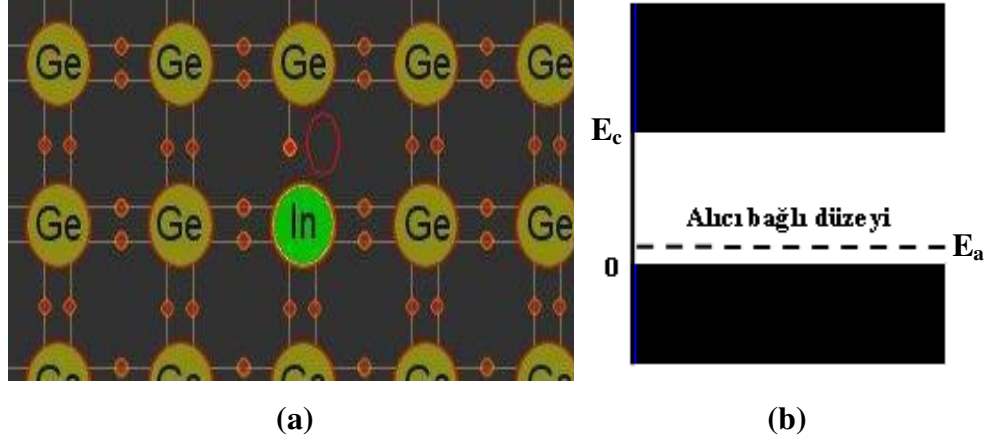
Yarıiletkenlerde elektron ve holler olmak üzere iki tip yük taşıyıcıları bulunur. Saf yarıiletkene katılan safsızlık atomları yarıiletkenin taşıyıcı sayısını artırarak elektriksel özelliğini büyük ölçüde değiştirir[9]. Si ve Ge gibi valansı dört olan yarı iletken maddelerin içerisinde Şekil 2-6 (a)'da gösterildiği gibi valansı beş olan As atomları ile katılanırsa, Ge atomunun dört elektronu ile kovalent bağ oluşturur. Ancak As atomu beş elektronlu olduğu için bağlanmalar sonucunda As atomunun bir elektronu boşta kalır ve bağa katılmaz. Bu elektron katkı iyonu çevresinde Coulomb potansiyeli etkisinde hareket eder. Fakat Coulomb etkileşmesi oldukça zayıftır ve parçacık serbest elektron gibi davranır. Bir elektronu boşta kalan ve elektron verebilen bu tür katkı atomlarına verici (donor) safsızlık atomu denir. Şekil 2-6(b)'de görüldüğü gibi bu safsızlık atomları yasak enerji band aralığında iletim bandına yakın bir yerde bir enerji düzeyi oluşturur.



Şekil 2-6 (a) As katkılanmış Ge kristali (n-tipi) (b) Donor enerji seviyesi

Si ve Ge gibi yarıiletkenler içerisinde Şekil 2-7(a)'daki gibi valansı üç olan In katkılanırsa Ge atomunun üç atomu ile In atomunun üç elektronu yine kovalent

bağ yapar ve atomlar arasında oluşan bağlanmalar sırasında In' un bir atomunda elektron eksik kalır. Eksik kalan bu elektron başka bir atomdan alınan elektron ile tamamlanır. Bu elektronun bıraktığı yerde artı yüklü bir hole oluşur. Bu hole saf-sızlık atomu çevresinde Coulomb potansiyeli etkisinde hareket eder. Bu Coulomb etkileşme terimi zayıf olduğu için serbest parçacık gibi davranır. Bir elektron alan atoma alıcı (acceptor) saf-sızlık atomu denir. Bu saf-sızlık atomları Şekil 2-7 (b)'de gösterildiği gibi yasak enerji band aralığında valans bandına yakın bir yerde bir enerji düzeyi oluşturur.



Şekil 2-7 (a) In katkılanmış Ge kristali (p-tipi) (b) Akseptör enerji seviyesi

Enerji bant diyagramında görüldüğü gibi, bir elektron enerji aldığı anda bandın üst tarafına çıkar, boşluk ise enerji aldığı anda aşağı iner.

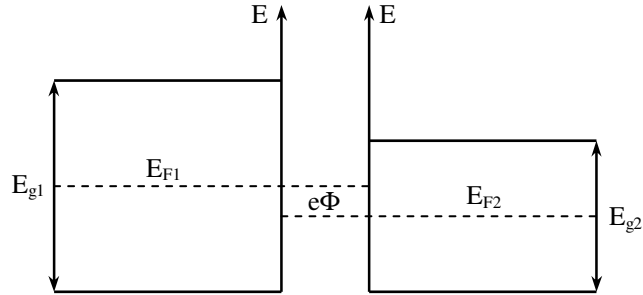
Verici atom sayısı alıcılardan daha fazla ise, vericilerin ısısal iyonlaşması iletkenlik bandına elektronlar aktarır. Bu durumda kristalin iletkenliği elektronlar tarafından belirlenir ve bu maddeye n tipi yarıiletken denir.

Alıcı sayısı daha fazla olduğunda valans bandına boşluklar aktarılır ve iletkenlik boşluklar tarafından belirlendiği için bu maddeye p tipi yarıiletken denir[8].

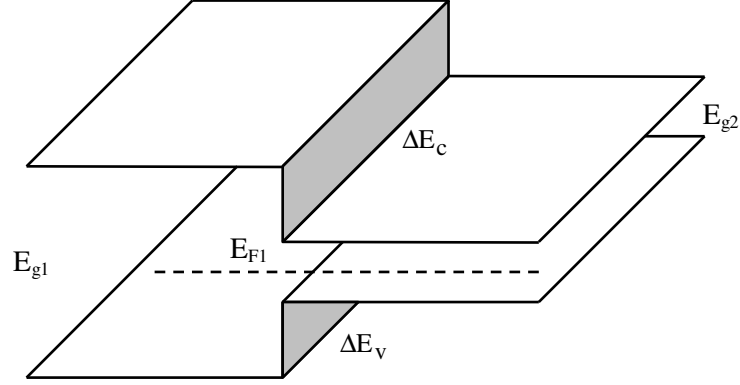
3- HETEROYAPILAR

3-1 Heteroyapılara Giriş

Heteroyapılı yarıiletkenler, iki veya daha çok farklı yarıiletken yapının ortak bir kristal yapıda uyum içerisinde üretilmesiyle elde edilir. Heteroyapıyı oluşturan materyaller birbirine benzer yapıdadır ve örgü sabitleri arasında çok az bir farklılık vardır. Örgü sabiti bir yarıiletkenin heteroyapı oluşturabilme uygunluğunu belirler. Heteroyapıda ara yüzeyde band yapısının aniden değiştiğini kabul ettiğimiz için bir heteroyapı sisteminin elektronik yapısını belirlemek üzere, külçe enerji bandlarını bir araya getirebiliriz. Burada en önemli nokta ise, heteroyapıyı oluşturan külçelerin band yapılarının konumlarıdır. Ara yüzeyin her iki kenarında ortalama elektron yoğunluğunun aynı olduğu kabul edilirse, serbest elektron modeline göre Fermi enerjisi aynı zamanda her iki külçenin yasak band aralığının ortasını temsil edecektir. Örgü sabitlerinin farklılığından kaynaklanan elektron yoğunluğundaki küçük fark, ara yüzeyden yük transferine neden olur. Sözü edilen yük transferi önemsiz büyüklükte olduğu için ihmal edilir. Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletken band yapılarının birbirine eklenmemiş ve eklenmiş durumları sırasıyla Şekil 3.1 ve Şekil 3-2 de gösterilmiştir. Şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 3-1 Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin birbirine eklenmemiş band yapısı



Şekil 3-2 Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin birbirine eklenmiş band yapısı

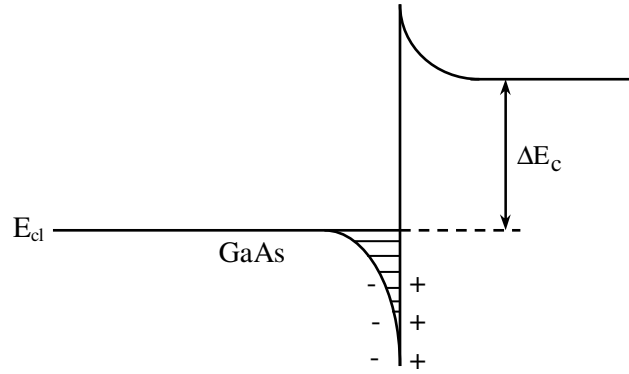
Heteroyapıda oluşturulan kuantum kuyularında en önemli sorun iletkenlik ve valans bandlarındaki süreksizlikleri hesaplamaktır. Heteroyapı oluşturmak iki malzeme bir araya getirildiğinde ΔE_c ve ΔE_v süreksizlikleri oluşur. Valans bandında oluşan süreksizlik $\Delta E_v = \frac{E_{g1} - E_{g2}}{2}$ eşitliği ile verilir. İletim bandının karmaşık yapısından dolayı aynı yöntem ile iletim bandındaki kesiklilik sağlıklı bir biçimde elde edilemez. Fakat iletim bandındaki süreksizliği

$\Delta E_c = |E_{g1}^f - E_{g2}^f| - |\Delta E_v|$ eşitliği ile verme şansımız vardır. Burada E_{g1}^f ve E_{g2}^f külçelerin deneysel band aralıklarıdır.

Eğer heteroyapıyı oluşturan yarıiletkenlerin ikisi de direkt band aralıklı ise, ΔE_c yukarıda verilen bağıntı ile kolayca hesaplanır. Fakat iki yarıiletken direkt band özelliği taşııyorsa, iletim bandındaki kesiklilik hesaplanırken aynı iletim bandı minimumları farklı alınmalıdır yani külçe band diyagramında aynı k dalga vektörü ile tanımlı olmalıdır. Heteroyapılarda kullanılan süreklilik koşulu, elektronun ara yüzeyden geçerken k dalga vektörü ile kütesinin değişmemesi olarak ifade edilebilir. GaAs–AlAs örneğinde olduğu gibi farklı band aralıklarına sahip materyallerin oluşturduğu heteroyapılarda süreklilik koşulu, GaAs katmanının Γ

bandında olan bir elektronun ara yüzeye yaklaşırken X bandı minimumunu (vadi-si) görme olasılığının çok az olması durumunda sağlanmış olur. Aynı momentum dalga vektörüne karşılık gelen enerji düzeyleri arasında oluşan süreksizliğin heteroyapıda elektronların davranışı üzerindeki etkisini elektronların potansiyel engelinden geri yansımaları biçiminde tanımlayabiliriz. Bu basit model ile heteroeklem mikro yapılarında buna benzer etkileşmeler için yarı nicel bir açıklama getirilebilir.

Heteroyapı bileşenlerinde katkı maddelerinin olması durumunda heteroyapıda bir uzay yükü bölgesi oluşur ve band bükülmesine neden olur. Heteroyapı iki yarıiletkenle oluştuğu için, ara yüzeyin her iki yanında da uzay yükü potansiyeli sıfırdan farklıdır. Çift yüklü tabakanın neden olduğu potansiyeldeki uzamsal değişim iletim bandı kesikliliği üzerine eklenir. Şekil 3-3 GaAs–Ga_{0.7}Al_{0.3}As iletim bandlarını ayıran heteroeklem engeli oldukça düşük olduğundan, parçacığın içine sızma olasılığı fazladır. Burada iki boyutlu elektron gazı tabakası MOS yapıdakine göre oldukça büyüktür.

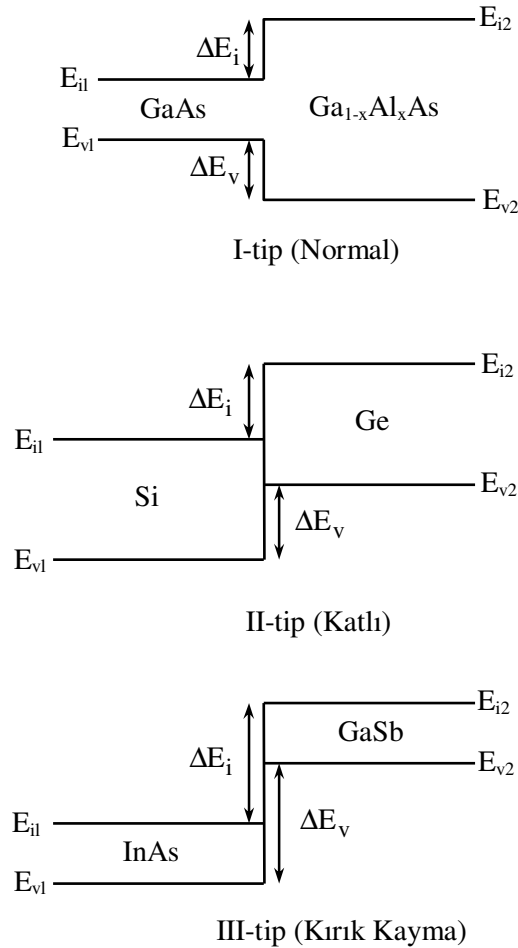


Şekil 3-3 GaAs–Ga_{0.7}Al_{0.3}As (n-tipi) heteroyapıda iletim bandı eğiminin gösterimi

Şekil 3-3 GaAs–Ga_{0.7}Al_{0.3}As (n-tipi) heteroyapıda iletim bandı eğiminin gösterimi ΔE_c saf yapının band süreksizliğidir. Kesikli çizgilerle heteroyapının GaAs bölümünde kuşatılmış durumlar belirtilmiştir.

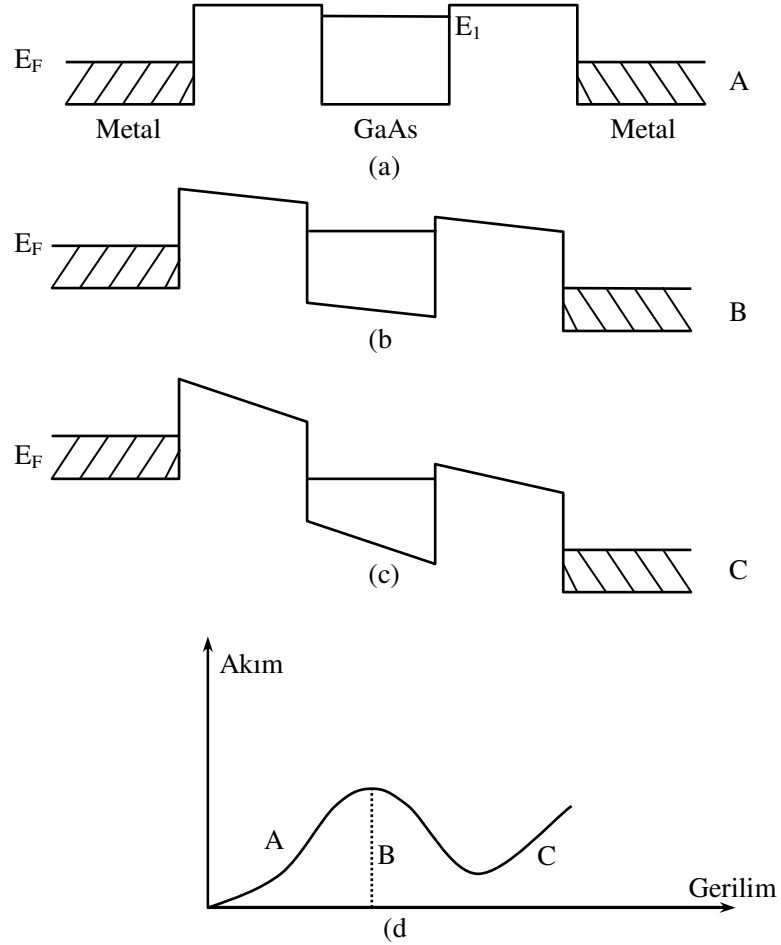
Heteroyapılar mikroyapıların temel eleman niteliğindedir. Düşük boyutlu yapılarda oluşan fiziğin dayandığı anahtar parametre heteroyapılardaki band sü-

reksizliđidir. Heteroyapılar band süreksizliđine göre üçe ayrılır. Bunlar I-tip (Normal), II-tip (Katlı) ve III-tip (Kırık Kayma) heteroyapılar olarak adlandırılır (Şekil 3-4). GaAs–Ga_{1-x}Al_xAs I-tip (Normal) heteroyapıya örnek verilebilir. Bu yapıda elektron ve boşluk GaAs katmanında bulunurlar. II-tip (Katlı) heteroyapılarda, örneđin Si–Ge, elektronlar Si katmanında, boşluklar ise Ge katmanında kuşatılmıştır. III-tip (Kırık Kayma) heteroyapıya örnek olarak verebileceğimiz InAs–GaSb yapıda ise, II-tip (Katlı) yapıdaki kuşatmaya benzer bir durum ortaya çıkar fakat bu süperörgülerde periyodun artması ile enerji band aralıđı azalır ve yarıiletken yarımetale geçiş gözlenir.



Şekil 3-4 Bant süreksizliđine göre heteroyapı türleri

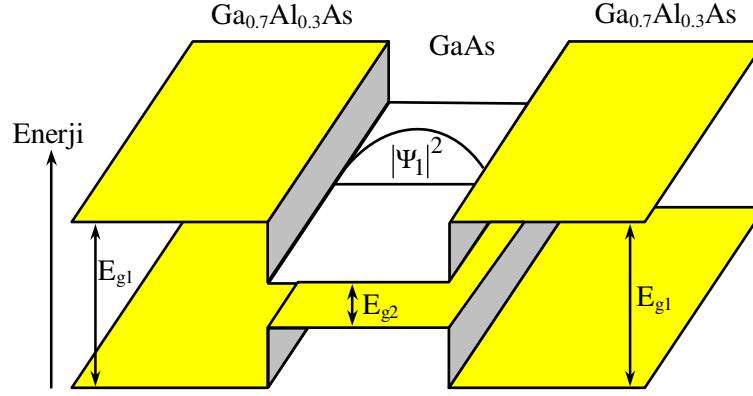
Katkılanan yarıiletken heteroyapılar uygulama alanında yeni olanaklar sağlar. Heteroyapılarda mobilite, modülasyon katkılama ile artırılabilir [1,10]. Bu yöntem ile engel karakterinde olan bölge katkılanır, engeldeki donörler iyonlaşarak bu bölgeden çukura doğru hareket ederler ve orada kuşatılırlar. İki boyutlu sistemlerde ilginç bir uygulama rezonans tünelleme olayıdır [11,12]. Şekil 3-5’de verilen katkısız sisteme küçük bir alan uygulandığında, düşük tünelleme olasılığı ve elektronlar arası zayıf bir akı gözlenir. Elektrik alan şiddeti artırılır, E_n enerji durumu elektronların E_F düzeyi ile çakışırsa tünelleme ve akım miktarı hızla artar. Yüksek elektrik alanlarda ise, bu çakışma bozulur ve tünelleme normal değerine döner. Aşırı elektrik alan altında ise, engel tümüyle ortadan kalkar ve akım tekrar artar (Şekil 3-5 a, b, c, d). Heteroyapıların bu özelliği teknolojik uygulamada önemli bir yer tutar.



Şekil 3-5 a, b, c, d Heteroyapı için rezonans tünelleme modeli

3-2 Kuantum Kuyuları, Telleri ve Kutuları

Yarıiletken mikroyapı uygulamalarının çoğunda basit heteroyapılar esas alınır. Örgü sabitleri birbirine yakın yarıiletkenlerin oluşturduğu heteroyapılarda, yarıiletkenlerin temel band aralığı direkt ise, band süreksizliğinin profili kuantum çukuru modeli ile temsil edilir. Uygulamada GaAs ve GaAlAs materyalleri sıkça kullanılır. İnce bir GaAs tabakasının iki tarafından daha kalın GaAs–Ga_{1-x}Al_xAs eklenerek elektronik yapı oluşturulur (Şekil 3-6).



Şekil 3.6 GaAs kuantum kuyusunun elektronik band yapısı

Bu yapıda Al konsantrasyonu % 30–35 dolayında alındığı yapılarda iletim bandındaki engel yüksekliğinin büyük olmasına karşın, alaşım direkt band özelliğini korur.

Şekil 3-6’da verilen kuantum kuyusundaki elektronun davranışı incelenirse elektron en düşük enerjiyi yani GaAs tabakasını tercih edecektir. Bunun sonucunda elektron GaAs katmanında kuşatılmış olup yapı artık iki boyutlu hale gelmiştir. GaAs tabakasının 200Å–400Å arasında olması sağlanırsa (GaAs içinde elektronun ortalama serbest yolundan küçük, GaAs kristalinin makroskobik özelliklerini gösterecek kadar büyük) GaAs katmanı külçe özelliklerini gösterir ve elektron bir çarpışma yapmadan kuyunun bir ucundan diğer ucuna gidebilir[5].

Kuantum kuyusunda bulunan elektronun enerjisi $E_e = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$ eşitliği

ile verilir. Burada, m_e^* GaAs'ın en düşük iletkenlik bandındaki elektronun külçe etkin kütlesi, iletkenlik bandı sınırındaki enerji değeridir. k ise E_c iletkenlik bandı sınırında sıfır değeri alan dalga vektörüdür.

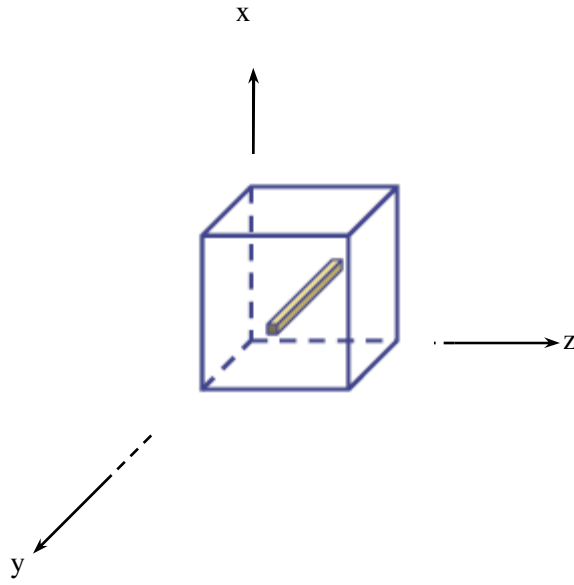
Bu durumda bir kuyudaki parçacık problemine ulaşılmış olur. Aradaki tek fark elektronun etkin kütlesidir. Bu da elektronun serbest uzayda değil de GaAs'ın içinde hareket ediyor olmasından kaynaklanır. Etkin kütle büyüklüğü kristal potansiyelinin şiddetini yansıtır ve bu değer maddeden maddeye değişir. GaAs için elektronun etkin kütle değeri, m_0 serbest elektronun kütlesi olmak üzere, $0.067m_0$ 'dır ve AlAs için ise $0.1m_0$ kadardır [3]. Kuantum kuyusunun oluşmasını sağlayan iki yarıiletkenin band yapıları birbirine çok benzer olduğu için GaAs ve $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ arasındaki etkin kütle farkı ihmal edilir. (Sonuç olarak kuantum kuyusu içinde kuşatılmış bir parçacık elde edilmiş olur.)

Kuşatmanın elektron üzerindeki etkisi sonucu ara yüzeye dik doğrultuda enerji spektrumu süreksizlik göstererek enerji seviyelerine ayrılır [13,14]. Taban durum enerji seviyesinin etkin kütle değerinin azalması ile kuyunun üst kısmına çıkması beklenir. Burada; engel yüksekliği, etkin kütle ve kuyu genişliği küçük de olsa yine de en az bir kuşatılmış durum elde edilir.

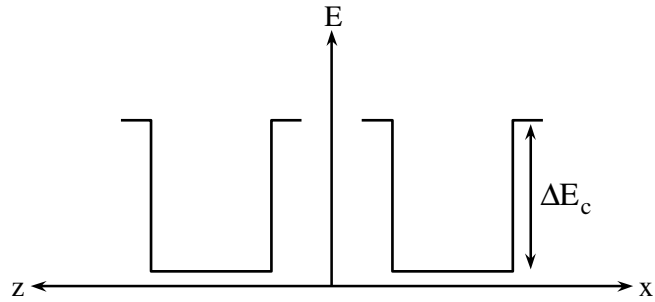
Sonuçta kuantum kuyusu yapısının band aralığı ile kuşatılmış seviyelerin konumu değiştirilebilir. Ayrıca kuyu genişliğinin değiştirilmesi kuantum kuyusunun band aralıklarının değişmesine neden olur. Böylece kuantum kuyusu parametreleri ile sistemin optiksel özellikleri ayarlanabilir.

İki boyutlu heteroyapılar kullanılarak yapılan cihazlardan elde edilen başarılar nedeniyle son yıllarda yapılan çalışmalar sistemlerin boyutlarını indirmek üzere yoğunlaşmıştır. Bu süreçte sistemin kuşatma boyutu artırılarak ayarlanabilir parametrelerin sayısı artırılabilir. Kuantum telleri incelenirken kuşatma yapılan doğrultularda oluşan kuantum kuyuları birbirinden bağımsız olarak ele alınır. Kuantum telini göz önüne getirebilmek için, uzun bir GaAs çubuğu $Ga_{1-x}Al_xAs$ malzemesi içine yerleştirilir (Şekil 3-7(a)). Eğer bu çubuk y eksenini boyunca yerleştirir-

lirise x, z doğrultularında kuantum kuyularındaki engeller nedeniyle kuşatılmalar gerçekleşir. Oluşan kuantum teli yapısının kuşatılmış seviyelerini hesaplamak için Şekil 3-7 (b)'deki iletim band diyagramından faydalanılır. Kuantum tellerinde taşıyıcılar bir boyutta serbestçe hareket edip, iki boyutta kuşatıldıkları için yapımız artık bir boyutlu hale gelmiştir.



Şekil 3-7 (a) Kuantum teli



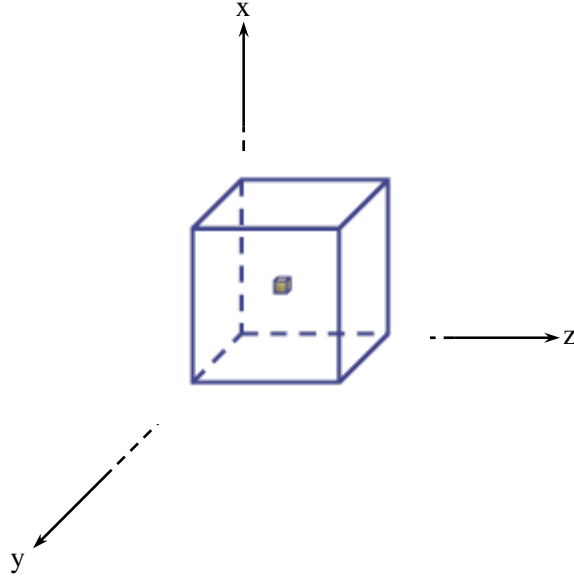
Şekil 3-7 (b) Kuantum telinin iletim bandında oluşan süreksizlikler.

Eğer parçacıklar bir çizgi boyunca sınırlanırsa buradaki kuantizasyon iki boyutlu kuyulardan daha fazla olacaktır. Bu demektir ki kuantum kuyusundaki en düşük kuşatılmış durum bu yapıda daha yukarı kaydırılacaktır. Engel yüksekliği

boyuttan bağımsız olduğu için kuantum telindeki kuşatılmış bir durumun kuyu genişliğine duyarlılığı kuantum kuyusundan iki kat fazla olacaktır.

Sistemimizde üç boyutta kuşatılma olursa, taşıyıcılar artık serbestçe hareket edemez ve yapı artık sıfır boyutlu hale gelir. Bu nedenle kuantum kutusu ile temsil edilebilir (Şekil 3-8)

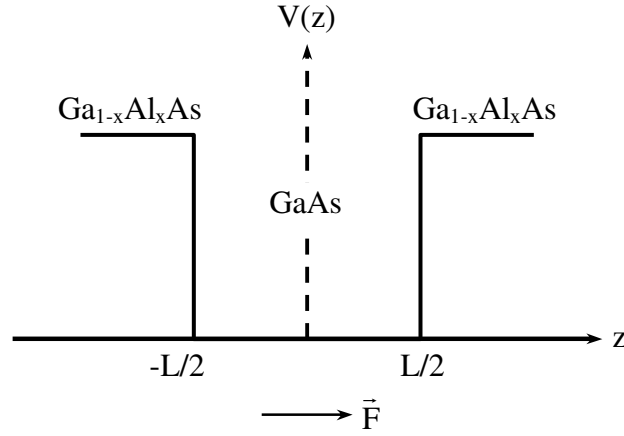
Kuantum telinde olduğu gibi, kuantum kutusunda da kuantum kuyuları birbirinde bağımsız olarak ele alınabilir. Kuşatılma etkisini artırdığımızdan, kuşatılmış bir durumun kuyu genişliğine duyarlılığı kuantum telinden daha fazladır [11].



Şekil 3-8 Kuantum noktası.

4-1 ELEKTRİK ALAN ALTINDA DONOR KATKILI GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs KUANTUM KUYUSU

Çalışmamızda potansiyel profili Şekil 4.1 ile verilen GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusundaki, elektron ve safsızlık atomunun oluşturduğu yapının bağlanma enerjisinin +z yönünde uygulanan elektrik alana ve kuantum kuyu genişliğine (L) bağlılığı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenmiştir.



Şekil 4-1 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusu potansiyel profili

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

$$H = \frac{\vec{p}}{2m_e^*} + V(z) + eFz + V_c \quad (4.1)$$

biçiminde verilir. Kuşatma potansiyelinin fonksiyonel formu aşağıdaki gibidir.

$$V(z) = \begin{cases} V, & z \leq -Lz/2 \\ 0, & -Lz/2 < z < Lz/2 \\ V, & z \geq Lz/2 \end{cases} \quad (4.2)$$

Burada \vec{p} elektronun momentumu, e elektronun yükü, F elektrik alanı, m_e^* elektronun etkin kütlesi ve V_c

$$V_c = \frac{-e^2}{\epsilon(r)\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} \quad (4.3)$$

elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulombic potansiyel ve $\epsilon(r)$ konuma bağlı dielektrik sabitidir [16]. Burada (x_i, y_i, z_i) safsızlık atomunun konumu, (x, y, z) ise elektronun konumunu göstermektedir.

Konuma bağlı dielektrik sabiti,

$$\frac{1}{\epsilon_0} \rightarrow \frac{1}{\epsilon(r)} = \left[\frac{1}{\epsilon_0} + \left(1 - \frac{1}{\epsilon_0}\right) e^{-\frac{r}{a}} \right] \quad (4.4)$$

bağıntısıyla verilir. Burada a sabiti perdeleme uzunluğudur.

Hesaplamalarda kullanılan fiziksel parametrelerin değerleri $m_e^* = 0.0665 m_0$ (m_0 , serbest elektronun kütlesi), $\epsilon_0 = 12.58$, GaAs- $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ yapısının iletkenlik bandı süreksizliği $V=228$ meV olarak alınmıştır [17].

Coulombic potansiyelinde $\epsilon(r)$ değeri yerine yazılırsa

$$V_c = -\frac{e^2}{\epsilon_0 r} - \frac{e^2(\epsilon_0 - 1)}{\epsilon_0 r} e^{-\frac{r}{a}} \quad (4.5)$$

biçiminde elde edilir. Sistemin Hamiltonian'ı

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon(r)\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} \quad (4.6)$$

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 ($R = \frac{m_e^* e^4}{2\epsilon_0^2 \hbar^2}$) cinsinden yazılarak V_C , Coulombic etkileşim terimini boyutsuz hale getirirsek

$$\tilde{V}_c = -\frac{2}{\tilde{r}} \left[1 + (\epsilon_0 - 1) e^{-\frac{\tilde{r}}{\tilde{a}}} \right] \quad (4.7)$$

olur. Sistemin Hamiltonian'ı,

$$\tilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right) + \tilde{V}(\tilde{z}) + \tilde{F}\tilde{z} - \frac{2}{\epsilon_0 \sqrt{(\tilde{x} - \tilde{x}_i)^2 + (\tilde{y} - \tilde{y}_i)^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} \quad (4.8)$$

biçiminde elde edilir[19].

$$x = \rho \sin \phi \quad (4.9)$$

$$y = \rho \cos \phi$$

dönüşümü yapılarak silindirik koordinatlardaki Hamiltonian ifadesi

$$\tilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\phi}^2} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}(\tilde{z}) + \tilde{F}\tilde{z} - \frac{2}{\tilde{r}} \left[1 + (\epsilon_0 - 1) e^{-\frac{\tilde{r}}{\tilde{a}}} \right] \quad (4.10)$$

biçiminde elde edilir.

Elektron safsızlık atomu sistemi için Schrödinger denklemi,

$$\tilde{H}\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \tilde{E}\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) \quad (4.11)$$

biçiminde yazılabilir. Sistemi tanımlayan genel dalga fonksiyonu

$$\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \psi(\tilde{z}) g(\tilde{\rho}, \alpha) \quad (4.12)$$

İle verilir.

$\psi(\tilde{z})$, 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 ($L_b > L_z$) enerji özdeğerlerinin yakınsamasına göre belirlenir. Sözü edilen bazlar,

$$\psi_a(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos \left[\frac{n\pi}{L_b} \tilde{z} - \delta_n \right] \quad (4.13)$$

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

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n - \text{tekise} \\ \frac{\pi}{2} & n - \text{çiftise} \end{cases} \quad (4.14)$$

değerini alır. Bu durumda z doğrultusundaki dalga fonksiyonları baz fonksiyonları cinsinden,

$$\psi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\tilde{z}) \quad (4.15)$$

biçimindedir.

İncelediğimiz 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 tipi orbital dalga fonksiyonları tanımlanmıştır.

Dalga fonksiyonu

$$g(\tilde{\rho}, \alpha) = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\left(\frac{\tilde{\rho}}{\alpha} \right)} \quad (4.16)$$

formundadır[17,18].

Sistemin toplam enerjisi

$$\min_{\alpha} \langle \phi | \tilde{H} | \phi \rangle = \tilde{E} \quad (4.17)$$

Eşitliğinden elde edilir. Burada \tilde{E} özdeğerini minimum yapan varyasyon parametresi α ile belirlenir. Boyutsuz Hamiltonianin beklenen değeri ise,

$$\tilde{E} = \tilde{E}_z - \frac{1}{\alpha^2} + \langle \phi | \frac{2}{\sqrt{(\tilde{\rho}) + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} | \phi \rangle \quad (4.18)$$

biçiminde bulunur.

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

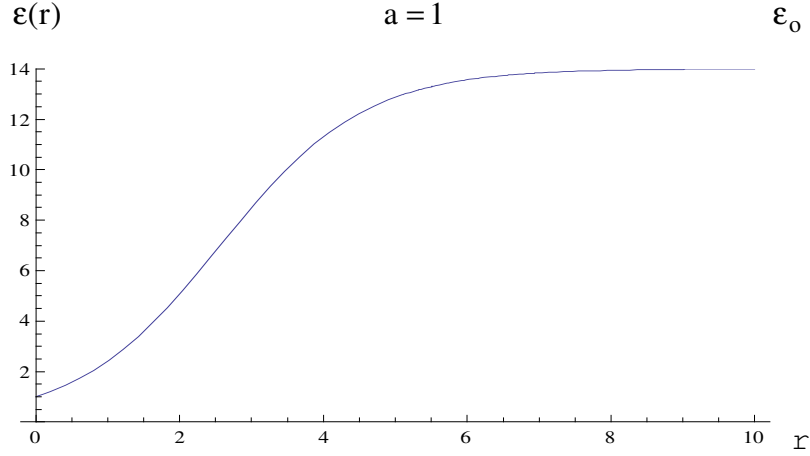
$$\tilde{E}_B = \tilde{E}_z - \langle \tilde{H} \rangle \quad (4.19)$$

ile verilir[19,20]. Burada \tilde{E}_z elektronun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen normalize taban durum enerjisidir. Buna göre taban durumundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisi[21].

$$\tilde{E}_B = -\frac{1}{\alpha^2} + \langle \phi | \frac{2}{\sqrt{(\tilde{\rho})^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} | \phi \rangle \quad (4.20)$$

olarak verilir.

Konuma bağlı dielektrik fonksiyonu $\epsilon(r)$ 'nin değişimi Şekil 4-2'de verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi safsızlık atomu civarında dielektrik sabitinin küçük olması sonucundan elektron ile safsızlık atomu arasındaki etkileşme daha büyük olacaktır.

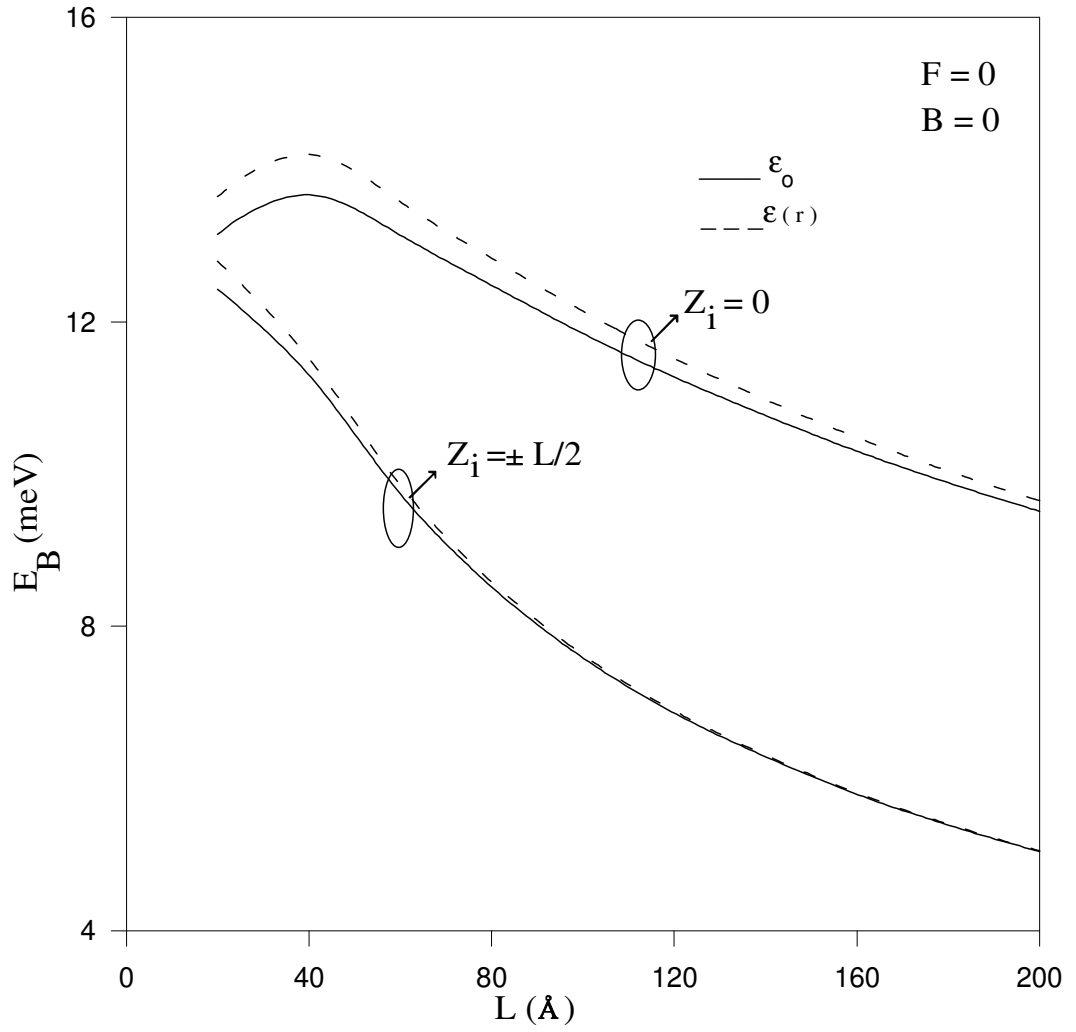


Şekil 4-2. Konuma bağlı dielektrik sabitinin değişimi

Şekil 4-3'de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i=0$ konumunda bulunan donör safsızlık atomu için bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Şekil 4-3'de görüldüğü gibi kuyu genişliği arttıkça bir maksimuma çıkana kadar artar ve sonra azalmaya başlar. Bağlanma enerjisinin maksimum olduğu L değerleri için sistem yarı iki boyutlu karaktere sahiptir ve elektron ile safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı maksimum değerdedir. Kuyu genişliği arttıkça büyütme doğrultusundaki kuşatma azalır ve safsızlık atomu ile elektronun aynı düzlemde bulunma olasılığı hızlıca azalır. Sonuç olarak safsızlık atomunun bağlanma enerjisi üç boyutlu sistemdeki değerine yaklaşır.

Ayrıca çok küçük L değerlerinde elektron çok enerjik olduğundan potansiyel engellerine sızmalar artar ve sistem çok büyük L değerlerinde olduğu gibi yeniden üç boyutlu karaktere sahip olur. Bundan dolayı çok küçük L değerleri için bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir.

GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i = \pm L/2$ konumunda donör safsızlık atomun bağlanma enerjisi, kuyu genişliği arttıkça hızlıca azalmaktadır. Ayrıca konuma bağlı dielektrik sabitinin etkisi, dar kuyularda bağlanma enerjisi üzerinde etkili iken bu etki kuyu genişliği arttıkça azalmaktadır.

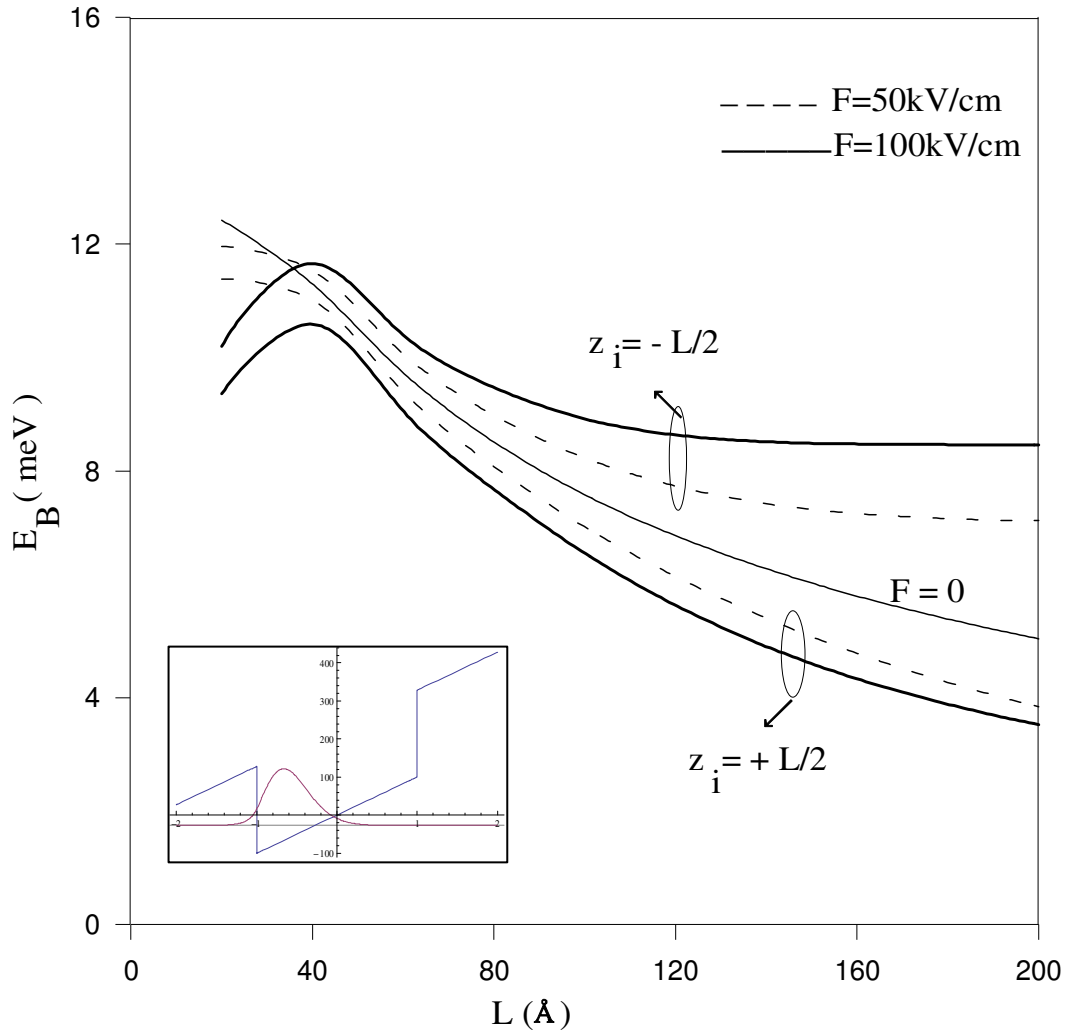


Şekil 4-3 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i=0$ ve $z_i=\pm L/2$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı değişimi.

Şekil 4-4'de farklı konumlar için donör bağlanma enerjisinin elektrik alan altında kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Beklendiği gibi, $z_i = 0$ 'da bulunan safsızlık atomu için yapıya + z yönünde uygulanan elektrik alan elektronları kuyunun sol tarafına iter ve sonucunda elektron ile safsızlık atomu arasında Coulombic etkileşimi azaltır ve safsızlık atomunun bağlanma enerjisi azalır.

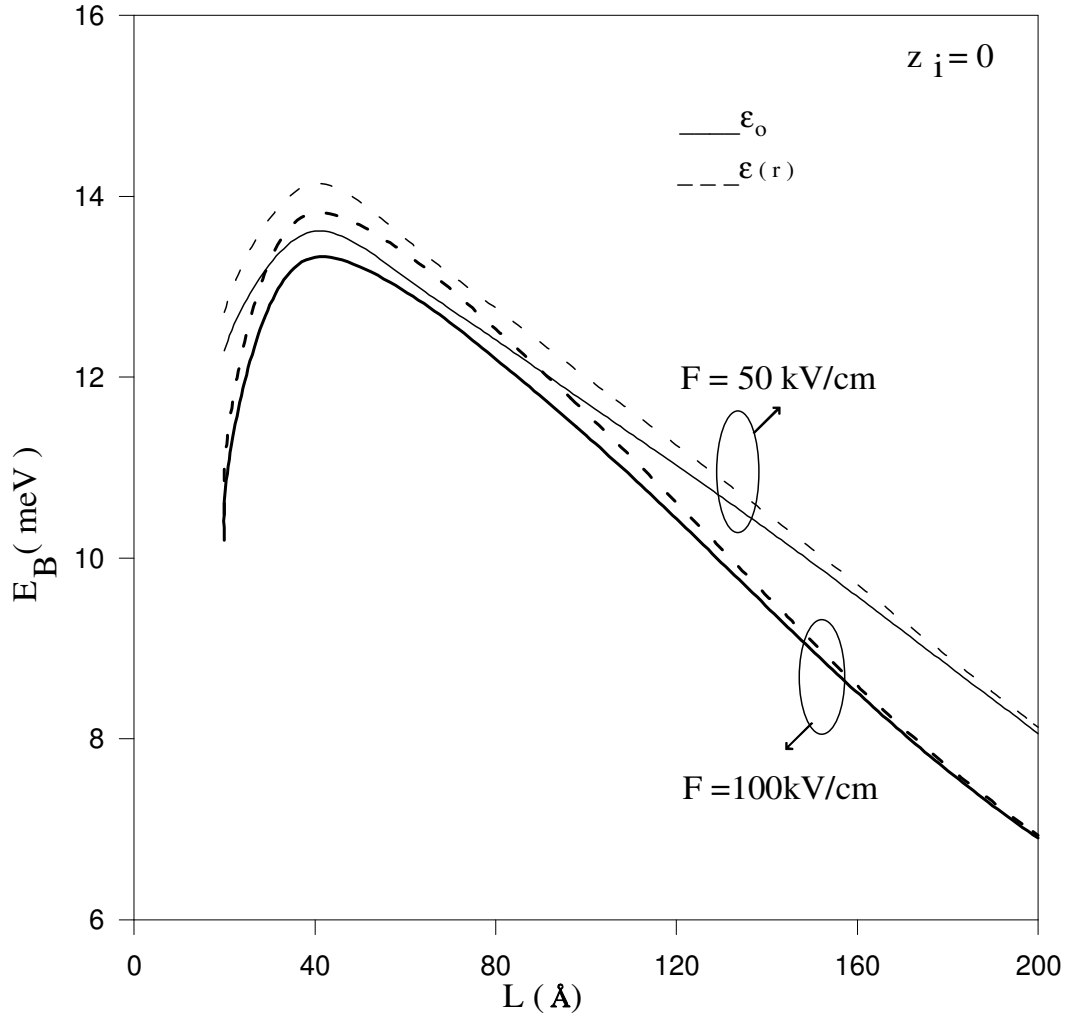
GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i = +L/2$ konumunda bulunan safsızlık elektronlar, uygulanan elektrik alan etkisiyle kuyunun sol tarafına süpürülürler ve bunun sonucunda elektron ile safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı $z_i = 0$ konumuna göre azalacaktır. Bu nedenle artan elektrik alanla, elektron safsızlık atomunun arasındaki bağlanma enerjisi azalma göstermektedir.

Oysa GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i = -L/2$ konumunda bulunan safsızlık atomu ve elektronun aynı düzlemde bulunma olasılığı $z_i = 0$ konumuna göre elektrik alan ile artacaktır. Bu durum elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulombic etkileşmeyi arttıracaktır ve bağlanma enerjisi elektrik alan ile artacaktır. Ayrıca, büyük kuyu genişliklerinde elektrik alanın daha da etkili olduğu Şekil 4-4'de açıkça görülmektedir.



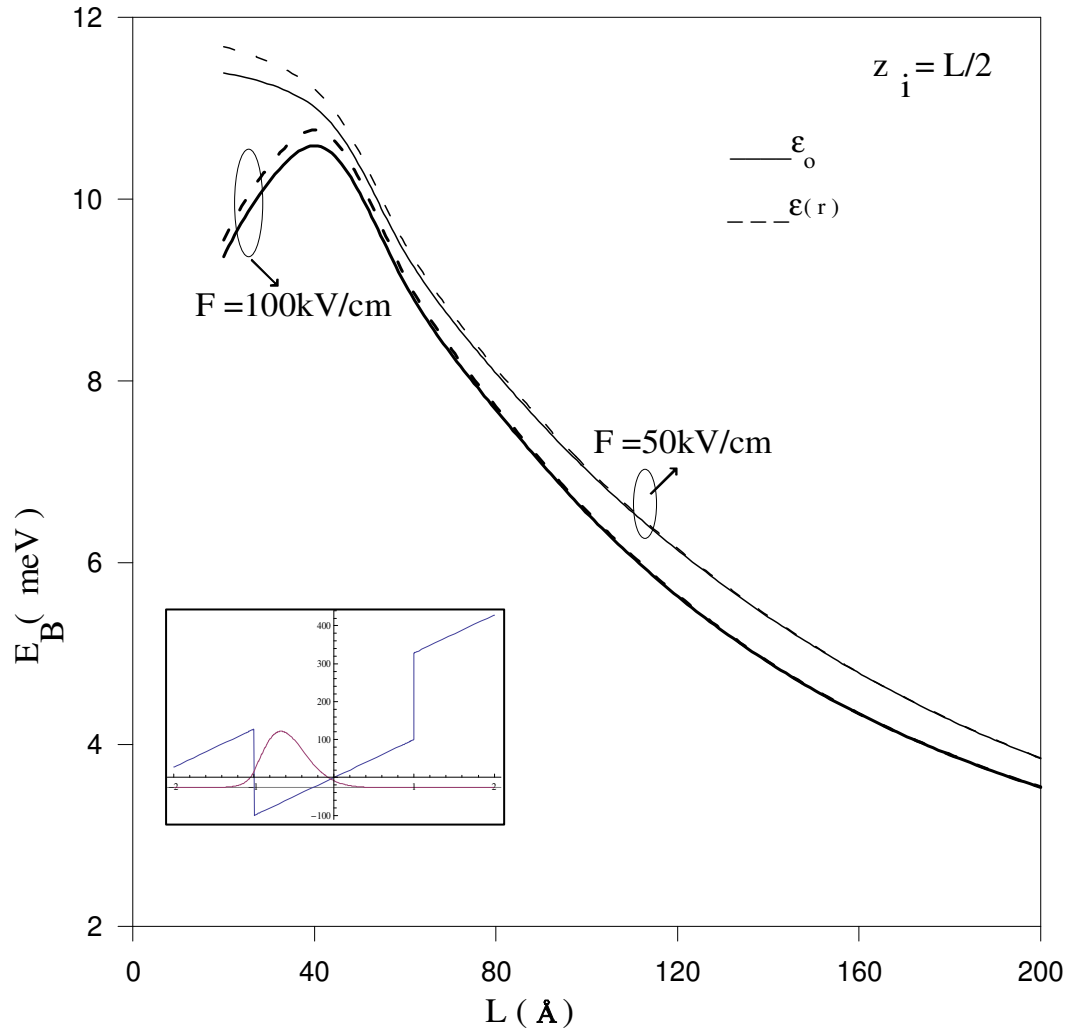
Şekil 4-4 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i = -L/2$ ve $z_i = L/2$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliği ve elektrik alana bağlı değişimi.

Şekil 4-5’de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i=0$ konumunda +z yönünde uygulanan elektrik alan ile konuma bağlı dielektrik sabitinin etkisi altındaki donor safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Beklendiği gibi konuma bağlı dielektrik sabiti küçük kuyu genişliklerinde bağlanma enerjisini arttırmaktadır. Beklendiği gibi, kuyu genişliği arttıkça konuma bağlı dielektrik sabitinin donor bağlanma enerjisi üzerindeki etkisi azalmaktadır.



Şekil 4-5 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i=0$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin, kuyu genişliği, elektrik alan ve uzaysal perdelemenin etkisiyle değişimi.

Şekil 4-6'da GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i = L/2$ konumunda +z yönünde uygulanan elektrik alan ile konuma bağlı dielektrik sabitinin etkisi altındaki donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Daha önce de gösterildiği gibi bağlanma enerjisi kuyu genişliği arttıkça bir maksimuma çıkana kadar artar ve sonra azalmaya başlar. Yapıya uygulanan elektrik alan artırıldıkça donör safsızlık atomlarının bağlanma enerjisi azalmaktadır.



Şekil 4-6 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i = L/2$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin alan altında kuyu genişliğine göre değişimi.

4.2 MANYETİK ALAN ALTINDA DONOR KATKILI GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs KUANTUM KUYUSU

Çalışmamızda ayrıca potansiyel profili Şekil 4-1 ile verilen GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusundaki, elektron ve safsızlık atomunun oluşturduğu yapının bağlanma enerjisinin +z yönünde uygulanan manyetik alana ve z doğrultusundaki kuantum kuyu genişliğine (L) bağlılığı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenmiştir.

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

$$H = \frac{1}{2m_e^*} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + V(z) + V_c \quad (4.21)$$

biçiminde verilir. Kuşatma potansiyelinin fonksiyonel formu aşağıdaki gibidir.

$$V(z) = \begin{cases} V, & z \leq -Lz/2 \\ 0, & -Lz/2 < z < Lz/2 \\ V, & z \geq Lz/2 \end{cases} \quad (4.22)$$

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

V_c , elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulombic potansiyeli ve ϵ_0 ortamın dielektrik sabitidir [16].

Hesaplamalarda kullanılan fiziksel parametreler $m_e^* = 0.0665 m_0$ (m_0 , serbest elektronun kütlesi), $\epsilon_0 = 12.58$, GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As yapısının iletkenlik bandı süreksizliği $V=228$ meV olarak alınmıştır [17].

V_c , Coulombic potansiyelinin değeri yerine yazılırsa sistemin Hamiltonian'ı

$$\begin{aligned} H = & \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] - \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{e\hbar B_0 L_z}{2m_e^* c} + \frac{e^2 B_0^2}{8m_e^* c^2} (x^2 + y^2) + V(z) \\ & - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2}} \end{aligned} \quad (4.23)$$

şeklinde elde edilir.

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

$$x = \rho \sin \phi \quad (4.24)$$

$$y = \rho \cos \phi$$

dönüşümü yapılarak silindirik koordinatlardaki Hamiltonian ifadesi

$$\begin{aligned} H = & -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \\ & + \frac{e^2 B_0^2 \rho^2}{8m_e^* c^2} - \frac{e B_0 L_z}{2m_e^* c} - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \end{aligned} \quad (4.25)$$

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

ve tüm enerji terimleri Rydberg $\left(R = \frac{m_e^* e^4}{2\epsilon_0^2 \hbar^2} \right)$ cinsinden yazılarak boyutsuz

Hamiltonian,

$$\tilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right) + \tilde{V}(\tilde{z}) - \frac{2}{\sqrt{(\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2)}} - \gamma L_z + \frac{1}{4} \gamma^2 \tilde{\rho}^2 \quad (4.26)$$

deki gibi boyutsuz hale getirilebilir[17]. Burada $\gamma = \frac{e\hbar B_0}{2m_e^* c R}$ ile verilir.

Elektron safsızlık atomu için Schrödinger denklemi,

$$\tilde{H}\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \tilde{E}\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) \quad (4.27)$$

biçiminde yazılabilir. Sistemin genel dalga fonksiyonu

$$\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \psi(\tilde{z})g(\tilde{\rho}, \alpha) \quad (4.28)$$

şekindedir. Buradaki $\psi(\tilde{z})$ ve $g(\tilde{\rho}, \alpha)$ Bölüm 4-2 deki $\psi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\tilde{z})$ ve

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

Sistemin toplam enerjisi,

$$\min_{\alpha} \langle \phi | H | \phi \rangle = \tilde{E} \quad (4.29)$$

eşitliğinden elde edilir. \tilde{E} özdeğerini minimum yapan varyasyon parametresi α ile belirlenir. Boyutsuz Hamiltonian'ın beklenen değeri ise,

$$\tilde{E} = \tilde{E}_z + \frac{3}{8}\gamma^2\alpha^2 + \frac{1}{\alpha^2} - \langle \phi | \frac{2}{\sqrt{(\tilde{p})^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} | \phi \rangle \quad (4.30)$$

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

$$\tilde{E}_B = \tilde{E}_z + \gamma - \langle \tilde{H} \rangle \quad (4.31)$$

biçiminde verilir. Buna göre taban durumundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisi [17, 22, 23],

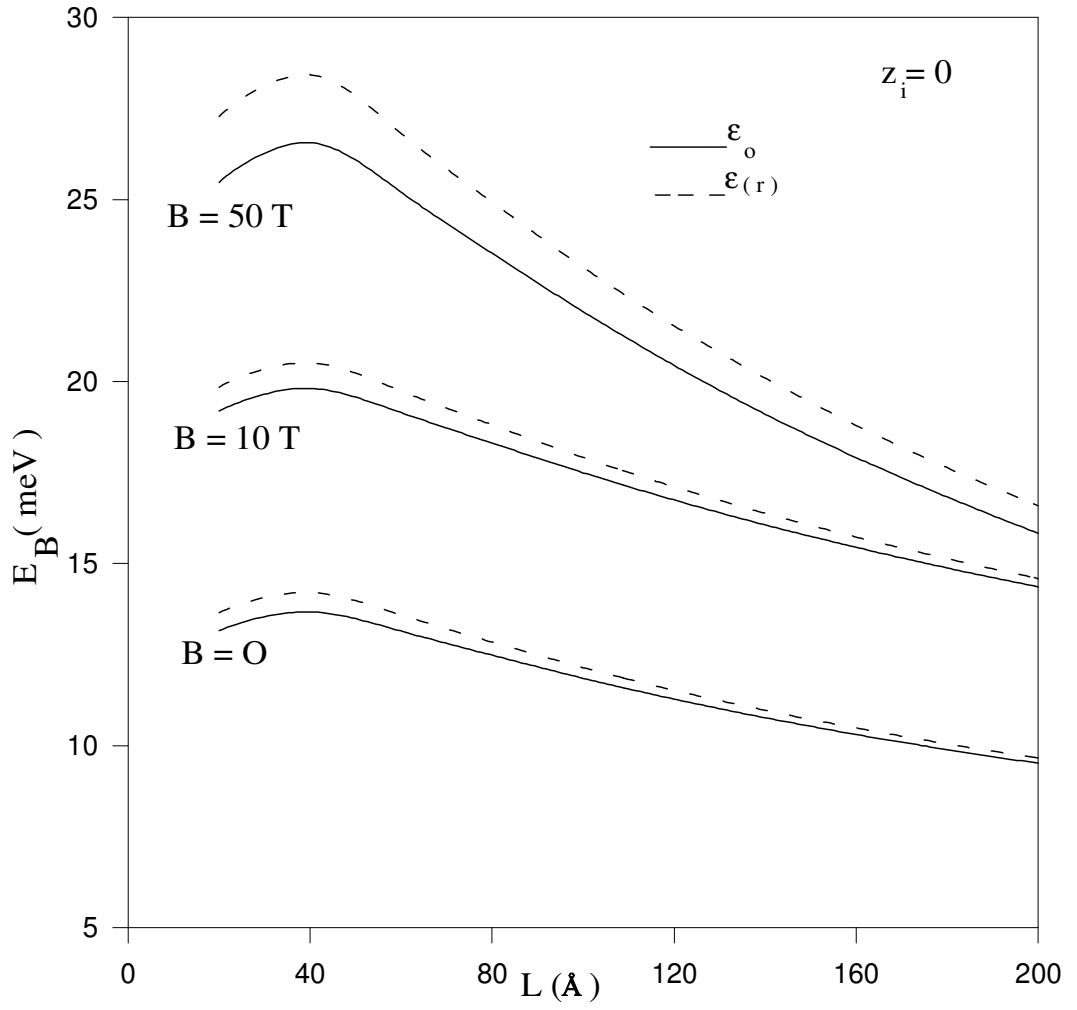
$$\tilde{E}_B = \gamma - \frac{1}{\alpha^2} - \frac{3}{8}\gamma^2\alpha^2 + \langle \phi | \frac{2}{\sqrt{(\tilde{p})^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} | \phi \rangle \quad (4.32)$$

olarak bulunur.

GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i=0$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun farklı manyetik alan değerleri ve konuma bağlı dielektrik sabitinin (uzaysal perdeleme) etkisiyle bağlanma enerjisinin, kuyu genişliği ile değişimi Şekil 4-7'de görüldüğü gibi verilmiştir.

Şekil 4-7'de görüldüğü gibi manyetik alanın artması bağlanma enerjisini artırmaktadır. Kuantum kuyusuna + z yönünde uygulanan manyetik alan (x-y) düzleminde parabolik bir kuşatma meydana getirir. Elektronun (x-y) düzleminde kuşatılması sonucu elektron ile safsızlık atomunun arasındaki Coulombic etkileşimi artıracak ve bu nedenle safsızlık atomunun bağlanma enerjisi artacaktır.

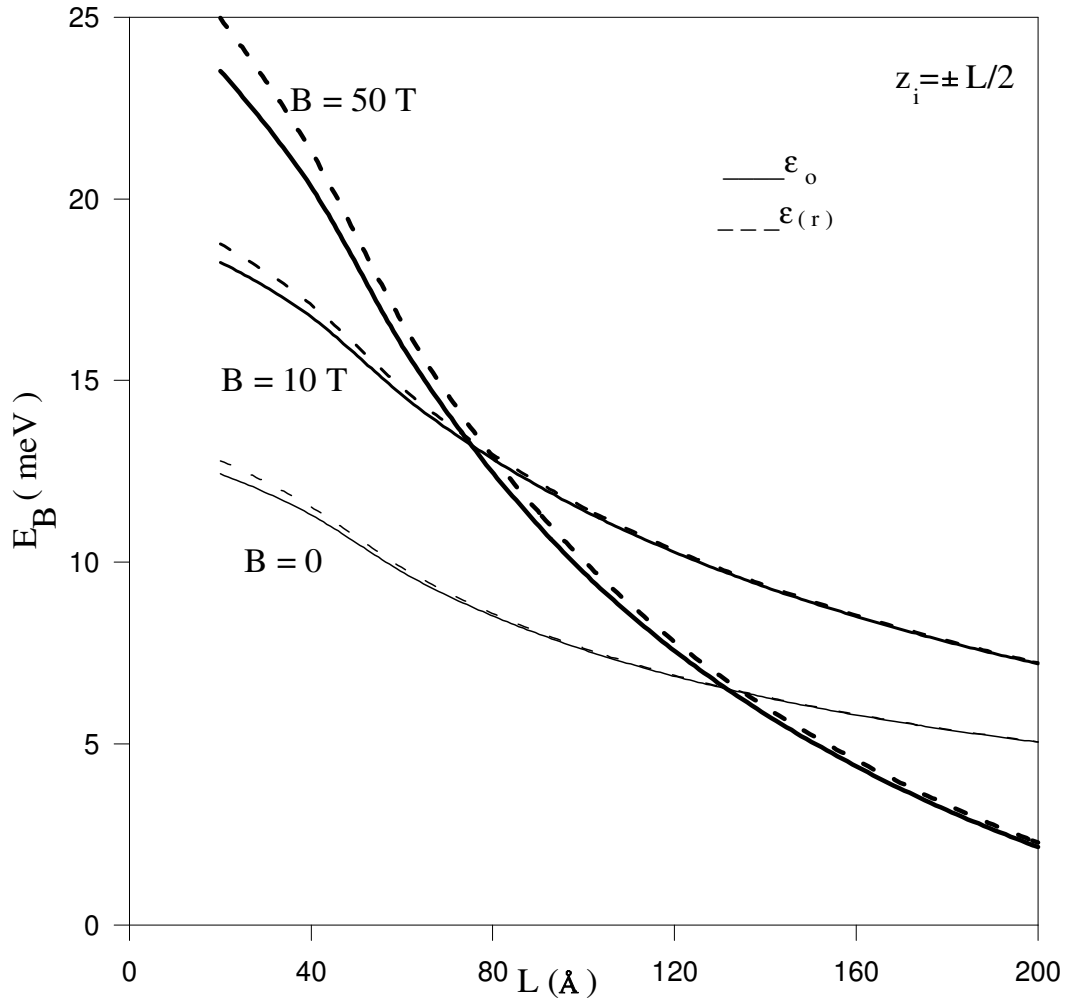
Şekilde görüldüğü gibi manyetik alan altında konuma bağlı dielektrik sabiti için bağlanma enerjisi daha büyük değerlere ulaşmaktadır. Çünkü, manyetik alan altında (x-y) düzleminde oluşan kuşatma sonucunda elektronun safsızlık atomu civarında bulunma olasılığı artar ve bilindiği gibi küçük r değerlerinde $\epsilon(r) \rightarrow 1$ değerine yaklaşır ve sonuçta hidrojenik bağlanma daha kuvvetli hale gelir.



Şekil 4-7 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i=0$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun manyetik alan altında bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i = \pm L/2$ konumunda donor saf-sızlık atomunun farklı manyetik alan değeri ve konuma bağlı dielektrik sabitinin (uzaysal perdeleme) etkisiyle bağlanma enerjisinin, kuyu genişliği ile değişimi Şekil 4-8 ile verilmiştir. Bağlanma enerjisinin değişimi Şekil 4-7 ile verilen değişime benzemektedir. Burada saf-sızlık atomunun konumu $z_i = \pm L/2$ olarak alındığından elektron ile saf-sızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı $z_i = 0$ konumuna göre azalacaktır. Kuyu kenarlarında saf-sızlık atomunun bağlanma enerjisi merkezdeki saf-sızlık atomunun bağlanma enerjisine göre azalmıştır.

Şekil 4-8 ve 4-7 ile verilen bağlanma enerjisi değişimlerini karşılaştırdığımızda; $z_i = \pm L/2$ konumunda bulunan saf-sızlık atomu için bağlanma enerjisinin, alan altındaki değişiminin $z_i = 0$ konumuna göre oldukça fazla olduğu görülür. Manyetik alan altında (x-y) düzleminde oluşan geometrik kuşatma elektronun sistemin merkezine doğru süpürüldüğü ve $z_i = \pm L/2$ için Colombic etkileşme artan L değerleriyle hızla azalır.



Şekil 4-8 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $z_i = \pm L/2$ konumunda bulunan donör safsızlık atomunun manyetik alan altındaki ve konuma bağlı dielektrik sabitinin (uzaysal perdeleme) etkisiyle bağlanma enerjisinin, kuyu genişliği ile değişimi.

5-SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, konuma bağlı dielektrik sabitinin hidrojenik bağlanmaya yapacağı etki varyasyonel hesap tekniği ile hesaplandı. Ayrıca kuşatma potansiyelinin biçimine bağlı olarak dielektrik duyarlılığın hidrojenik bağlanma üzerindeki etkisini araştırıldı. Çalışmanın son aşamasında uzaysal dielektrik ortamında manyetik alan altında safsızlık atom enerji düzeyleri üzerinde duruldu.

Elde edilen sonuçlardan, safsızlık atomu bağlanma enerjisinin dış alana, uzaysal perdelemeye ve kuşatma potansiyelinin biçimine oldukça duyarlı olduğu anlaşılmaktadır.

Ayrıca bu çalışmada elde edilen sonuçların konu ile ilgili daha önce yapılan çalışmalarla uyumlu olduğu görülmüştür[24, 25].

6-KAYNAKLAR

1. L. Esaki and R. Tsu 'Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors' IBM Res. Note, RC-2414(1969).
2. B. Das, S. Bandyopadhyay, M.R. MELLOCH, J. Phys. Condens. Matter 12, 35-L 41 (2000).
3. Esin Kasapoğlu Doktora Tezi (1999).
4. B. G. Streetman 'Solid State Electronic Devices' Prentice Hall Inc. NJ (1990).
5. M. Jaros 'Physics and Applications of Semiconductor Heterostructures' Oxford University Press, New York (1989).
6. Emine Öztürk Doktora Tezi (2000).
7. Jasprit Sing, Semiconductor Devices, Mc Graw-Hill Inc., (1994).
8. Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics John Wiley & Sons, Inc., (1986).
9. Milton Abramowitz, Irene A. Segun, Handbook of Mathematical Functions. (Dover, New York, 1965) p. 504.
10. S. Mori, T. Ando, Surface Science 98, 101 (1980).
11. L. L. Chang, L. Esaki and R. Tsu, Appl. Phys. Lett. 24, 593 (1974).
12. E. E. Mendez, Physics of Resonant Tunneling in Semiconductors (Plenum Press, Erice, Scily, 1987).
13. R. Dingle in Festkörperprobleme XV (Advances in Solid State Physics), edited by H. J. Quesser (Permagon, 1975) P 21.
14. L. Esaki and L. L. Chang 'Thin Solid Films' 36, 285 (1976).
15. P. Harrison 'Quantum Wells, Wires and Dots' The University of Leeds, UK (1999).
16. E. Kasapoğlu, H. Sarı, I. Sökmen, Solid State Communications 125 (2003).
17. G. Bastard 'Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures' Halsted, New York (1998).
18. A. Balandin and S. Bandyopadhyay 'Superlattices and Microstructures' Vol. 16, No:21 (1996).
19. E. Kasapoğlu, H. Sarı, I. Sökmen Physica B 315 (2002) 261-266.

20. A. Montes, C. A. Duque, N. Porrás-Montenegro J. Appl. Phys. Vol. 81 No:12 (1997).
21. E. Kasapoğlu, H. Sarı, I. Sökmen Physica B 339 (2003) 17-22.
22. R. L. Greene, K. K. Bajaj Phys. Rev. B (1985) 913-918.
23. C. Aldrich and R. L. Greene Phys. Status Solidi B 93, 343 (1979).
24. G. Bastard, Phys. Rev. B 24, 4714 (1981.)
25. R. L. Greene, and K.K. Bajaj , Solid State Commun. 45, 825 (1983).

7- ÖZGEÇMİŞ

Adı-Soyadı : Alper ZEYTUN
Doğum Yeri-Yılı : Adana-1980
Medeni Durumu : Bekar
İş Adresi : 100. Yıl İ.Ö.O.
İş Tel :
Lisans : Balıkesir Üniversitesi
Necati Bey Eğitim Fakültesi
Fizik Öğretmenliği Balıkesir
Yüksek Lisans : Cumhuriyet Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Ana Bilim Dalı Sivas