

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

**P-TİPİ δ -KATKILI GaAs YAPILARIN
ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ**

**Mustafa Kemal BAHAR
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

2007

Danışman: Doç. Dr. Emine ÖZTÜRK

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ' NE

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

Başkan:

Üye:

Üye:

ONAY

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

.../.../2007

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

Prof. Dr. Hasan Hüseyin BAŞIBÜYÜK

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

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
SUMMARY.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	iv
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	vi
1. GİRİŞ.....	1
2. DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLER.....	3
2.1.Giriş.....	3
2.2.Heteroyapılar ve Kuantum Çukurları.....	5
2.3.Yarıiletkenler.....	10
2.4.Katkılı Yapılar.....	17
3. ÖZ-UYUMLU HESAP KURALLARI.....	20
3.1.Giriş.....	20
3.2.P-Tipi δ -Katkılı GaAs Yapısı için Öz-Uyumlu Hesabı.....	21
4. P-TİPİ δ -KATKILI GaAs YAPISININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ.....	25
5. SONUÇ.....	45
6. KAYNAKLAR.....	47
7. ÖZGEÇMİŞ.....	49

ÖZET
Yüksek Lisans Tezi

P-TİPİ δ -KATKILI GaAs YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Mustafa Kemal BAHAR
Cumhuriyet Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü

Danışman: Doç. Dr. Emine ÖZTÜRK

Bu çalışmada, katkılama konsantrasyonu ve katkılama kalınlıklarına bağlı olarak p-tipi δ -katkılı GaAs yapısının potansiyel profilini, yük yoğunluğunu, Fermi enerjisini, altband enerji ve altband yerleşimlerini Schrödinger ve Poisson denklemlerinin self-consistent (öz-uyumlu) çözümüyle hesapladık. Elde ettiğimiz sonuçlara göre, ağır hollerin altbandlara yerleşimleri, tüm taşıyıcıların yaklaşık olarak %91'ini içerir ve ağır hollerin dolu durum sayısı, hafif hollere kıyasla daha fazladır. Ağır hol için bulunan altband enerjileri ve yerleşimleri, katkılama konsantrasyonu ve katkılama kalınlığına bağlı olarak belirgin bir şekilde değişmektedir. Oysa; hafif holler için elde edilen altband enerjisi, katkılama konsantrasyonuna göre değişirken, altband yerleşimi katkı konsantrasyonuna ve kalınlığına karşı duyarsızdır.

ANAHTAR KELİMELEER: P-tipi δ -katkılama, GaAs yapısı, self-consistent, potansiyel profili, altband yapısı.

SUMMARY**MSc Thesis****ELECTRONIC PROPERTIES OF P-TYPE δ -DOPED GaAs STRUCTURE****Mustafa Kemal BAHAR****Cumhuriyet University****Graduate School of Natural and Applied Sciences****Department of Physics****Supervisor: Doç. Dr. Emine ÖZTÜRK**

In this study, we have calculated the potential profile, the charge density, the Fermi energy, the subband energies and populations as dependent on the doping concentration and the doping thickness by solving the Schrödinger and the Poisson equations self-consistently. The results we obtained show that the heavy-hole subbands contain many more energy occupied states than the light-hole ones, the population of the heavy-hole levels represent approximately 91% of all the carriers. The subband energies and populations obtained for the heavy-hole change significantly as depend on the doping concentration and thickness. Whereas; while for light-holes the subband energy change with the acceptor concentration, the subband occupation for the light-hole is not sensitive to the doping concentration and thickness.

KEY WORDS: P-type δ -doping, GaAs structure, self-consistent, potential profile, subband structure, light hole.

TEŐEKKÜR

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

ŞEKİLLER DİZİNİ

2. DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLER

Şekil 2-1 Band aralıkları farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapı.....	5
Şekil 2-2 GaAlAs ve GaAs tabakaları arasında hareket eden bir yük taşıyıcı.....	7
Şekil 2-3 a) Yasak enerji aralıkları farklı iki yarıiletkenin band diyagramı, b) Farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapıdaki band süreksizlikleri. ΔE_c iletkenlik, ΔE_v valans bandında oluşan süreksizliklerdir.....	9
Şekil 2-4 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda T=0 K için band yapıları.....	11
Şekil 2-5 Arsenik katkılanmış Si kristali.....	12
Şekil 2-6 Boron katkılanmış Si kristali.....	13
Şekil 2-7 T=0 K'de katkı yarıiletkenlerin enerji band diyagramları.....	15
Şekil 2-8 Sıcaklık artırıldığında verici (alıcı) safsızlık seviyesinden bazı elektronların iletkenlik bandına, valans bandındaki bazı elektronların alıcı safsızlık seviyesine geçişleri.....	15
Şekil 2-9 Sıcaklık daha da artırıldığında verici (alıcı) safsızlık seviyesinden elektronların iletkenlik bandına, valans bandındaki elektronların alıcı safsızlık seviyesine geçişleri.....	16

3. ÖZ-UYUMLU HESAP KURALLARI

Şekil 3-1 (a) Katkılı bölgeyi içine alan gerçek malzemenin arakesiti.....	21
Şekil 3-1 (b) P-tipi katkıdan dolayı oluşan ek potansiyel yapısı.....	21

4. P-TİPİ δ -KATKILI GaAs YAPISININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Şekil 4-1 Homojen katkılama dağılımı için potansiyel profilinin şematik gösterimi.....	29
Şekil 4-2 a) 2. döngüde, b) 3. döngüde ve c) 4. döngüde p-tipi δ -katkılı GaAs yapısı için elde edilen etkin potansiyel profilleri ve altband enerji seviyelerine göre olasılık dağılımları. $P^{2D} = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ve $\Delta z = 30 \text{ \AA}$	35

- Şekil 4-3 P-tipi δ -katkılı GaAs yapısı için elde edilen altband enerji seviyelerine göre olasılık dağılımları (sürekli eğriler) ile etkin potansiyel profilleri (kesikli eğriler) a) $P^{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z = 10 \text{ \AA}$ ve b) $P^{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z = 30 \text{ \AA}$ 36
- Şekil 4-4 $\Delta z = 30 \text{ \AA}$ için p-tipi δ katkı GaAs yapısında farklı katkılama konsantrasyonları (aşağıdan yukarıya $P^{2D} = 2, 4, 6, 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) için elde edilen a) öz-uyumlu potansiyelleri, b) yük yoğunluğu profilleri38
- Şekil 4-5 $\Delta z = 30 \text{ \AA}$ için p-tipi δ katkı GaAs yapısında, katkılama konsantrasyonuna bağlı olarak a) altband enerjileri b) altband yerleşimleri40
- Şekil 4-6 $P^{2D} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ için p-tipi δ katkı GaAs yapısında, farklı katkılama kalınlıkları (yukarıdan aşağıya $\Delta z = 10, 40, 70, 100 \text{ \AA}$) için a) öz-uyumlu potansiyelleri, b) yük yoğunluğu profilleri42
- Şekil 4-7 $P^{2D} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ için p-tipi δ katkı GaAs yapısında, katkılama kalınlığına bağlı olarak a) altband enerjileri, b) altband yerleşimleri.....44

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2-1 Bazı önemli heteroyapıların valans band süreksizliğinin kuramsal ve deneysel sonuçları.....	7
Çizelge 3-1 Öz-uyumlu hesabı için akış şeması.....	22
Çizelge 4-1 $P^{2D} = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ve $\Delta z = 30 \text{ \AA}$ için 1- 4. döngülerde sırasıyla elde edilen enerji özdeğerleri, Fermi enerjileri, potansiyel derinliği, dolu durum sayıları ve yük taşıyıcı konsantrasyonları.....	34

1. GİRİŞ

Günümüz teknolojisinde yarıiletkenler oldukça yaygın bir kullanım alanına sahiptirler ve bir çok elektronik devrenin ve düzeneklerin temel yapıtaşını oluştururlar. Bu nedenle de hayatımızda oldukça önemli bir yere sahiptirler. Teknolojinin gelişmesine paralel olarak farklı özellik ve işlevlerdeki devre elemanlarının çok küçük hacim içerisine yerleştirilebilmeleri yarıiletkenlerin temel tercih nedenlerinden biri olmuştur. Gelişen elektronik ve iletişim teknolojisi, daha hızlı çalışan ve daha küçük hacimli elektronik devre elemanlarına ihtiyaç duymaktadır. Bu yüzden yarıiletken fiziği bilim adamlarının yoğun bir şekilde uğraştıkları alan olmaktadır. Bu yeni tür yarıiletkenler, epitaksiyel olarak (çok ince tabakalar şeklinde atomların düzenli olarak dizilmesiyle) iki boyutlu veya düşük boyutlu olarak adlandırılan yapılardan oluşmaktadır. Bu yapıların oluşturulmasında MBE (Molecular Beam Epitaxy), MOCVD (Metal-Organic-Chemical Vapour Deposition) ve onların çeşitli türleri olan CBE (Chemical Beam Epitaxy) , ALE (Atomic Layer Epitaxy) gibi epitaxial kristal büyütme teknikleri kullanılmıştır. Bu yöntemlerle oldukça değişik yapılar oluşturulabilir. Örneğin, iki GaAlAs yarıiletken tabakası arasına ince bir GaAs tabakası oluşturularak tekli kuantum çukuru, bu tabakaların periyodik olarak tekrarlanması halinde çoklu kuantum çukurları veya tabaka kalınlıkları ayarlanarak oluşturulabilen süper örgüler bu yöntemlerle kolayca büyütülebilir. Geliştirilen bu sistemlerde, boyut azaldıkça fiziksel özellikleri belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelmektedir ve bu sayede özel fonksiyonlara sahip devre elemanları tasarlanabilir. Ayrıca düşük boyutlu sistemlerde taşıyıcıların yaşam süreleri külçe malzemelere göre daha farklıdır. Külçe yarıiletkenlerde madde içinde çeşitli kusurlar nedeniyle oluşan saçılmalar sonucu taşıyıcıların yaşam süreleri kısalmır, bu durumda külçe malzemelerin kullanım alanı daralır. Oysa yapının boyutu azaldıkça saçılma oranları azalır ve taşıyıcıların yaşam süreleri önemli oranlarda artar.

Bu çalışmada, son araştırma konuları içinde yer alan ve düşük boyutlu sistemlere örnek olarak verebileceğimiz, aynı malzemenin çok dar bir bölgesinde

p-tipi katkı tabakası oluşturularak büyütülen δ -katkılı GaAs yapısının potansiyel profilini ve dinamik band yapısını, Schrödinger ve Poisson denklemlerinin öz-uyumlu çözümüyle belirlemeye çalıştık. Çalışmada ilk olarak, düşük boyutlu sistemler ve katkı yapıları hakkında kısa bir bilgiden sonra, öz-uyumlu hesap kuralları verilmiştir. P-tipi katkı GaAs yapısının elektronik özellikleri üzerinde sırasıyla katkı konsantrasyonunun ve katkı kalınlığının etkisi incelenmiştir.

2. DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLER

2.1. Giriş

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

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

Düşük boyutlu yapılarda, büyütme doğrultusunda oluşan kuantizasyon, yüklü taşıyıcıların hareketini büyütme doğrultusunda sınırlayacağından, külçe yapılardan farklı olarak üç boyut yerine iki boyutta hareketten bahsedilebilir. Sanki iki boyutta hareketin söz konusu olduğu bu yapılarda, iki boyutta sıkıştırılmış elektron gazı özelliği gözlenir. Bu durum metallerde olduğu gibi

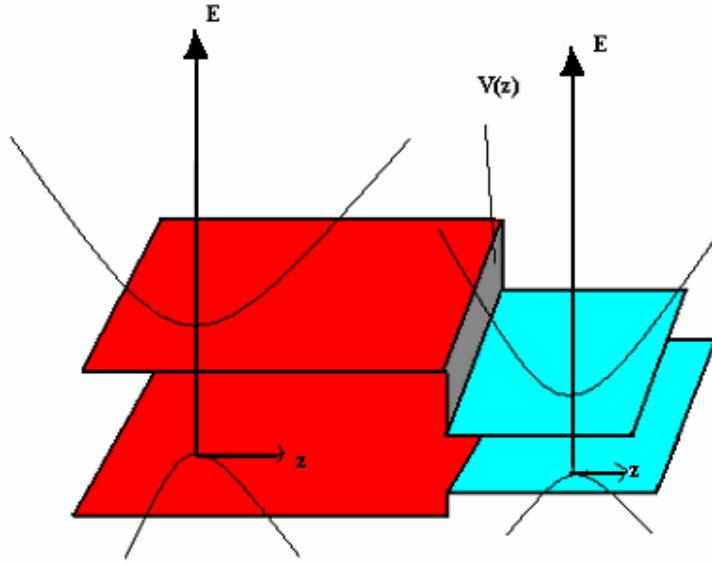
düşük sıcaklıklarda yapıdaki saçılma olaylarının azalması sonucunda, elektronların mobilitelerinde ortaya çıkan artışa karşılık gelmektedir. Dolayısıyla külçe yapılardan farklı olarak, düşük boyutlu yapılarda gözlenen yüksek mobiliteden yararlanarak daha hızlı çalışabilen elektronik düzenekler oluşturmak mümkündür.

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

Düşük boyutlu yarıiletken yapılarda gözlenen fiziksel olayların açıklanabilmesi için yapılan çalışmalar günümüzde de yoğun olarak devam etmektedir.

2.2. Heteroyapılar ve Kuantum Çukurları

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



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

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

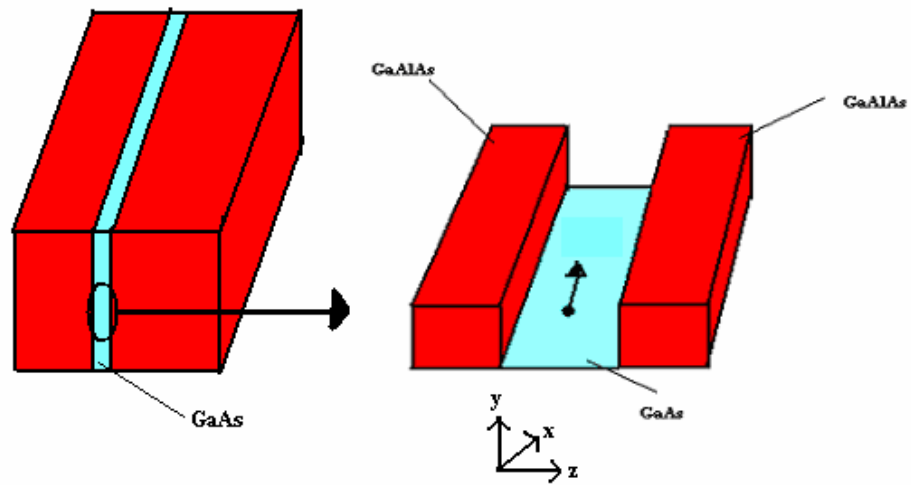
uygulamalarında GaAs ve GaAlAs materyalleri sıkça kullanılır. Şekil 2-1 'de band aralıkları farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapı görülmektedir.

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

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

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

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



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

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

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

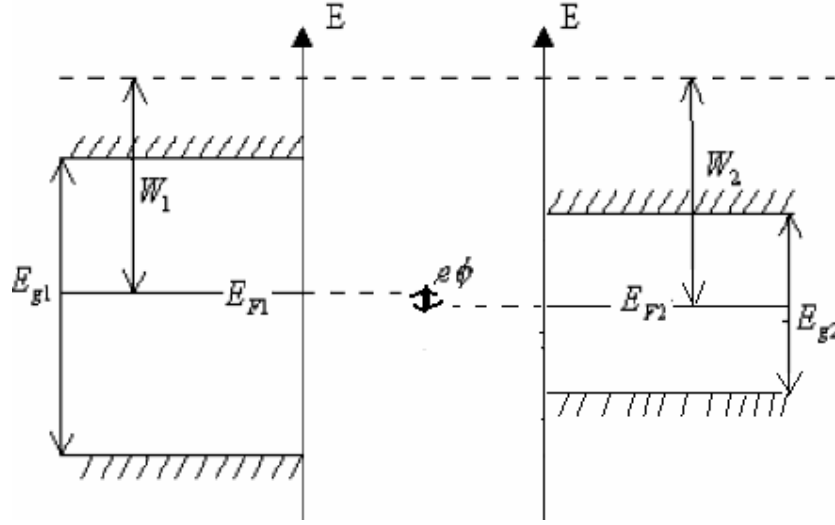
E_{el} :Kuşatılmış elektronun en düşük enerjili durumu

E_{hl} :Kuşatılmış holün en düşük enerjili durumu

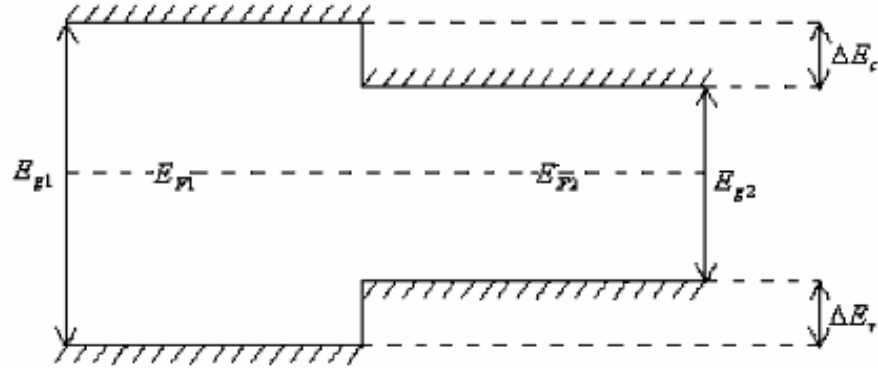
E_g : Yasak band aralığı

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

değiştirilebilir. Ayrıca kuyu genişliğinin değiştirilmesi, kuantum kuyusunun band aralıklarının değişmesine neden olur. Böylece kuantum kuyusunun parametreleri ile sistemin elektriksel ve optiksel özellikleri ayarlanabilir.



(a)



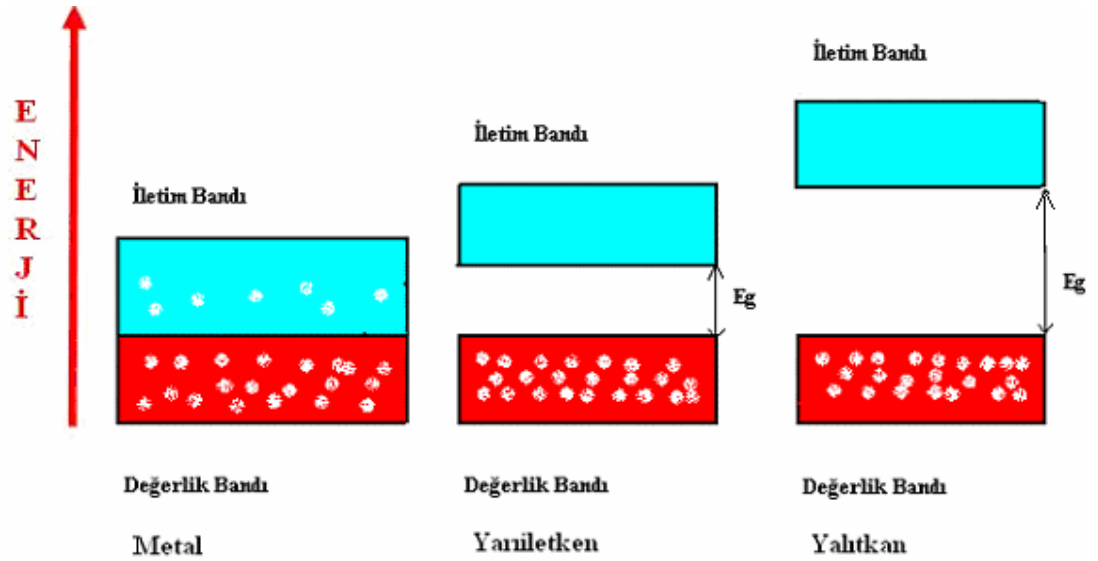
(b)

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

2.3. Yarıiletkenler

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

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



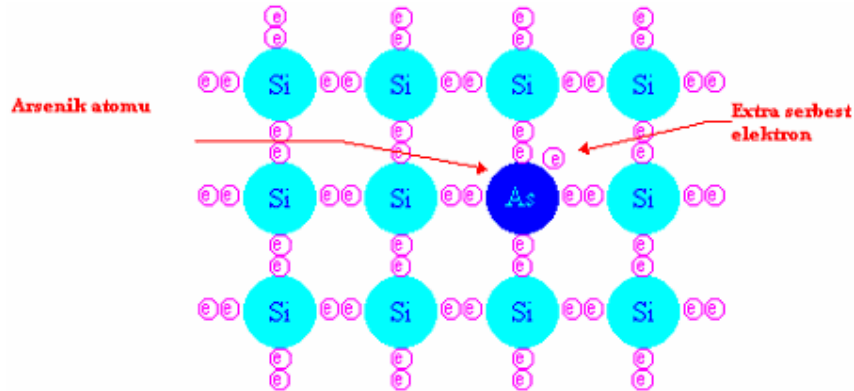
Şekil 2-4 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda T=0 K için band yapıları

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

Yarıiletkenlerde elektronların valans bandından yasak band aralığı miktarında enerji kazanarak iletim bandına geçmesi sonucunda, valans bandında elektronların bıraktıkları yerlere hol adı verilir. Holler pozitif yüklü tanecikler gibi davranırlar ve elektrik alanı altında elektronlarla zıt yönde hareket edip, aynı yönde akım yoğunluğu oluşturlar. Böylece yarıiletkenlerde iki tür taşıyıcı varlığından bahsedilir. İdeal bir yarıiletken kristalde, örgü kusurları ve yabancı atomların oluşturdukları safsızlıklar yoktur ve bu yarıiletkenler katkısız veya saf

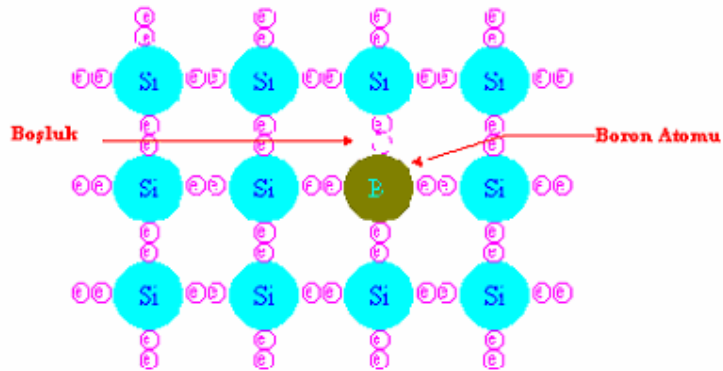
yariletkenler olarak bilinirler. Böylece bir yariletkendeki elektron yoğunluğu n , hol yoğunluğu p ise, $n = p = n_i$ olacaktır. Burada n_i , yariletkendeki saf taşıyıcı yoğunluğudur.

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



Şekil 2-5 Arsenik katkılanmış Si kristali

Yarıiletken kristal yapısında bulunan yabancı atomlar, yasak enerji bölgesine yerleşen ara enerji seviyelerinin oluşmasına neden olurlar. Örneğin; Şekil 2-5’de görüldüğü gibi, 4- bağ elektronlu Si kristaline 5- bağ elektronlu atomlardan oluşan P (Fosfor), As (Arsenik), Sb (Antimon) gibi elementlerin atomları, kristalin örgü yapısını bozmayacak şekilde örgüdeki normal bir atomla yer değiştirirse, 5- bağ elektronlu bu atomların 5 elektronundan 4 tanesi elektron çifti bağı yapar, geride bir valans elektronu kalır. Bu elektron katkı iyonunun $e^2/\epsilon r$ Coulomb potansiyelinde hareket eder. Yarıiletken kristalin perdelemesi nedeniyle, Coulomb potansiyeli oldukça zayıftır. Her atom başına serbest kalan bu tek elektronun bağlanma enerjisi çok küçük olup, serbest elektron gibi davranır. Bu sebeple de oda sıcaklığında iletkenlik bandında bulunur. Kristale katkılanan 5- bağ elektronlu yabancı atomlara elektron verici anlamına gelen “donor” ve donor atomlarının iletkenlik bandına çok yakın olan enerji seviyesine “donor seviyesi”, yeni oluşan katkıli yarıiletkene ise n-tipi yarıiletken denir.



Şekil 2-6 Boron katkılanmış Si kristali

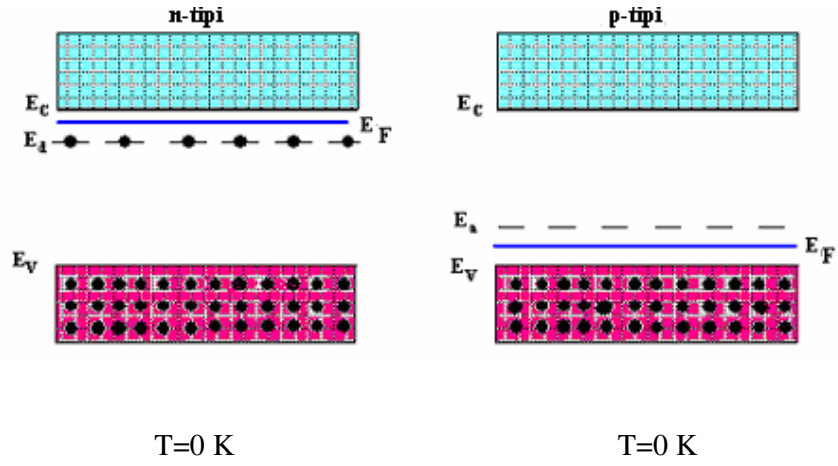
Şekil 2-6’da ise Si kristaline 3- bağ elektronlu atomlardan oluşmuş Ga (Galyum), Al (Alüminyum), B (Boron) gibi elementler katkılı olduğunda, yapılacak her bir “elektron çifti” bağı için bir elektron eksik kalacak veya başka bir deyişle bağ başına bir boşluk meydana gelecektir. Böyle bir kristale elektrik alan

uygulanırsa, komşu atomlardaki elektronlardan biri kolayca bu boşluğu doldurur ve böylece hol yer deęiřtirmiş olur. Holün gittięi yerdeki komşu atomların elektronlarından biri yine elektron boşluęunu doldurabilir. Bu řekilde de elektron boşluęunun hareketi ile elektrik akımın taşınması gerçekteşir. Sonuçta holler valans bandında bulunacak, yabancı atomlar negatif yüklenerek iyonize olacaklardır. Kristale katılanan 3- baę elektronlu yabancı atomlara elektron alıcı ve "akseptör", akseptörlerin valans bandına yakın olan enerji seviyesine "akseptör seviyesi", yeni oluřan katkılı yarıiletken de "p-tipi yarıiletken" adı verilir.

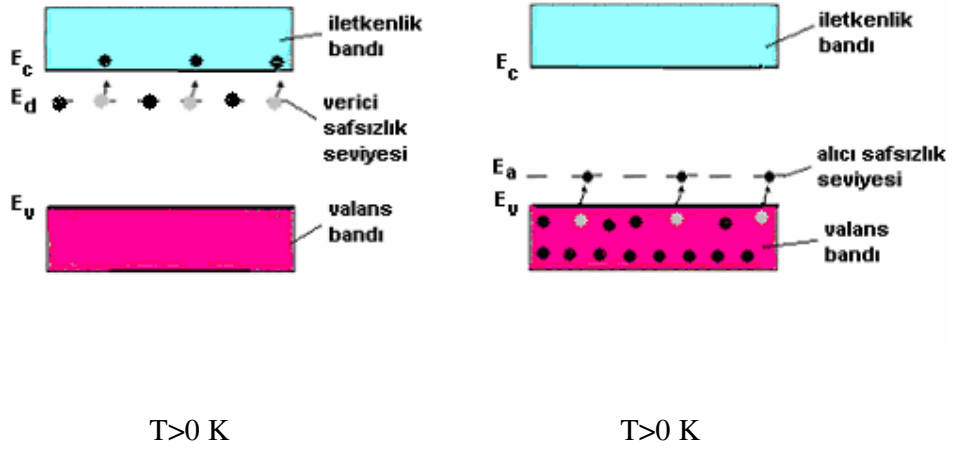
Şekil 2-7'de elektron alıcı (E_a) ve vericinin (E_d) her ikisinin de enerji seviyesinin yasak enerji aralıęına düřtüęü görülmektedir. Band modeline göre bu bölge, elektronun bulunamayacaęı bir yerdir. Bunda bir çelişki yoktur, çünkü burada tartıřılan mükemmel kristalin deęil, alıcı ve vericinin enerji seviyesidir. Bunlar ise, zaten safsızlık durumunu temsil ederler. Bu farkın başka bir sebebi de, safsızlık durumunun yerelleşmiş olmasıdır.

Çok zayıf baęlı elektron çok kolay bir řekilde uyarılacaęı için verici seviyesi iletkenlik bandının hemen altında bulunur. Eksik elektron komşu atomdan saęlanacaęı için alıcı seviyesi valans bandının hemen altında bulunur. n-tipi veya p-tipi yarıiletkenlerde sıcaklıęın artırılması ile elektronların donör seviyesinden iletkenlik bandına veya valans bandından akseptör seviyesine geçiři mümkündür. Valans bandının altında (iletkenlik bandının üstünde) yüksek sıcaklıklarda ne kadar hol (elektron) varsa yarıiletkende de o kadar yabancı atom vardır. Valans bandındaki holler, iletkenlik bandındaki elektronlar gibi iletkenlięe katkıda bulunurlar. Sıcaklık arttıka bunların sayısı da artar. Sıcaklık deęiřimine karřı elektronların enerji band diyagramları Şekil 2-8 ve 2-9'da gösterilmiştir. Şekil 2-7'den de görüldüęü gibi, $T=0$ K'de Fermi seviyesi verici (alıcı) safsızlık seviyesiyle iletkenlik (valans) bandının arasındadır ve valans bandı tamamen doludur. Sıcaklık biraz artırıldıęında verici (alıcı) safsızlık seviyesinden bazı elektronlar iletkenlik bandına, valans bandındaki bazı elektronlar alıcı safsızlık seviyesine geçerler (Şekil 2-8) $T \gg 0$ K için sıcaklık daha da artırıldıęında verici safsızlık seviyesindeki bütün elektronların iletkenlik bandına geçmesiyle birlikte valans bandındaki elektronların bir kısmı da iletkenlik bandına geçer. Artık verici

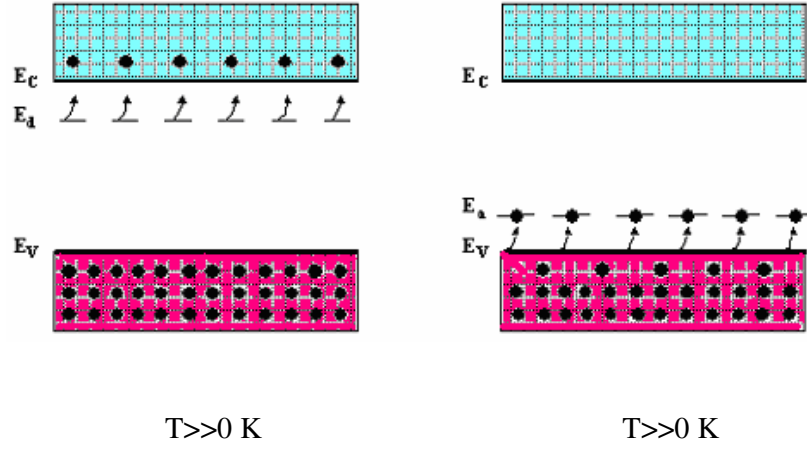
safsızlık seviyesi ortadan kalkar ve Fermi seviyesi katkılama olmadan önceki seviyesine düşer. Aynı yorumlar her şey simetrik ve birbirinin tersi olacak şekilde holler içinde geçerlidir.



Şekil 2-7 $T=0$ K'de katkılı yarıiletkenlerin enerji band diyagramları



Şekil 2-8 Sıcaklık artırıldığında verici (alıcı) safsızlık seviyesinden bazı elektronların iletkenlik bandına, valans bandındaki bazı elektronların alıcı safsızlık seviyesine geçişleri



Şekil 2-9 Sıcaklık daha da artırıldığında verici (alıcı) safsızlık seviyesinden elektronların iletkenlik bandına, valans bandındaki elektronların alıcı safsızlık seviyesine geçişleri

2.4. Katkılı Yapılar

Yarıiletkenlerin katkılanmasındaki amaç, yarıiletkenlerde serbest taşıyıcı yoğunluk değişimini kontrollü bir şekilde yapmaktır. Bu, dopantların iyonize olmasını gerektirir. Donor iyonize olduğunda, kristalin içinde pozitif yüklü bir iyon vardır. Bu sabit yüklü merkez, serbest elektronlar için saçılmaya neden olur ve iyonize safsızlık saçılması, önemli bir saçılma merkezidir. Saçılma, elektronların geçiş özelliklerinde bir bozulma (deterioration)ya neden olur. Saçılma olmaksızın kontrol edilebilir yüksek hareketlilikli sanki iki boyutlu elektron gazının oluşturulması, Dingle ve Ark.[3] ile Stormer ve Ark.[4] tarafından GaAs/Al_xGa_{1-x}As heteroyapılara uygulanan düzenli (modulation) katkılama tekniği ile mümkün olmuştur. Bu yöntemde, heteroyapı büyütülür ve yasak enerji band aralığı büyük olan engel karakterindeki bölge katkılanır. Engeldeki donörlerin iyonlaşmasıyla ortaya çıkan elektronlar, dar yasak enerjili GaAs bölgesindeki düşük enerji durumlarını görür, bu bölgeye geçer ve burada kuşatılırlar. Bu şekilde yük taşıyıcıları ve safsızlık iyonları, uzaysal olarak birbirinden ayrılmış olur. GaAs da yoğunlaşan elektron konsantrasyonu, katkılama miktarına ve böylece Fermi enerjisine bağlı olacaktır. Pozitif yüklü donörler ve negatif yüklü elektronların bu uzaysal ayrımı, bir band bükülmesine sebep olur. İyonize safsızlık saçılması, hareketli elektronlar ve sabit iyonize saçılma merkezleri arasındaki bu fiziksel ayrımın ortadan kaldırılması. Sonuç olarak GaAs, yapıda katkı atomlarından arınmış bölge olduğundan, düşük sıcaklıklarda hareketliliği azaltan safsızlık saçılması ortadan kalkmış olur ve elektronların hareketliliği yüksek oranda bulunur. Yani elektronlar, donör atomlarının lokalize taban durumundan daha düşük enerji konumlarında olduğu için, malzemenin niteliğinin saf olması koşuluyla, en düşük sıcaklıklarda bile hareketli kalırlar. Bu tür yapılar temel alınarak alan etkili transistörler (Modulation Doped Field Effect Transistors- MODFETs) düşük sıcaklıklarda yapılabilir ve genellikle uzaydan çok zayıf sinyalleri ölçmede, az gürültü gerektiren diğer alet uygulamalarında kullanılırlar.

Son zamanlarda hem çok yüksek elektron hareketlilik ve yoğunluklarıyla hem de kuantum-elektronik alet ve fotonik alet arařtırmalarıyla, dzenli-katkılı GaAs/Al_xGa_{1-x}As heteroyapıların yapımında önemli bir rol oynayacak olan δ -katkılama tekniđi geliřtirilmiřtir [5-15].

Eđer katkılı tabakanın kalınlıđı, malzemenin boyutları ile karřılařtırıldıđında çok küçük ise, yarıiletkenlerdeki bir boyutlu katkılama profili, Dirac Delta Fonksiyonu ile matematiksel olarak tanımlanabilir. Katkılı bölgenin kalınlıđı, örgü sabiti ile karřılařtırıldıđında sadece birkaç angstrom kalınlık farkı olur. Bu tip dopant dađılımı olan yarıiletkenler “ δ -katkılı yarıiletkenler” olarak adlandırılmıřlardır. MBE büyütme gibi tekniklerinin geliřmesiyle de katkı atomunun uzaysal kontrolünde önemli geliřmeler elde edilmiřtir. Bu tür çalıřmalar ilk olarak 1960’lı yıllarda bařlamıř ve günümüzde de hala devam etmektedir [16-20].

1997 yılında L.M. Gaggero-Sager, M.E. Mora-Ramos, D.A. Contreras-Solorio Si ve GaAs’ın p-tipi delta katkılı kuantum kuyularında Thomas-Fermi yaklařımını incelemiřlerdir. P-tipi delta katkılı Si ve GaAs kuantum kuyularındaki hol altband yapılarının Thomas-Fermi hesaplamaları, katkılama konsantrasyonunun farklı deđerleri için yapılmıřtır. Sonuçlar bazı deneysel verilerle ve öz uyumlu hesaplarıyla karřılařtırılmıř ve çok iyi bir uyum bulunmuřtur. Özellikle bu modelden holün taban seviyesinin sonucu tam olarak oluşturulabilen en küçük safsızlık ile deneysel sistem için rapor edilen deđer eřit çıkmıřtır.

2000 yılında L. M. Gaggero-Sager ve M. E. Mora-Ramos [21] p-tipi delta katkılı Si kuantum kuyularında hollerin enerji seviyelerini incelemiřlerdir. P-tipi B katkılı Si kuantum kuyusundaki elektronik yapı için hesaplamalar Thomas-Fermi yaklařıklıđı ve öz-uyumlu yöntemiyle yapılmıřtır. Öz-uyumlu hesaplamaları yapılırken iki bađımsız (hh+lh) ve üç bađımsız (hh+lh+so) ‘ın hol band modelleri varsayılmıřtır. Sayısal olarak hesaplanan veriler, onların kendi aralarında ve deneysel sonuçlar ile so (split off) hol bandının da dahil olduđu etkilerde yapılan vurguyla karřılařtırılmıřtır. Thomas-Fermi yaklařımı iki farklı band modeliyle kullanılmıř: hh+lh ve hh+so. Bu teorinin sadeliđine karřın,

deneysel sonuçlar ile elde edilen sonuçların karşılaştırılması neticesinde çok iyi bir uyuma görülmüştür.

2005 yılında I. Rodriguez-Vargas , L. M. Gaggero-Sager [22] silisyumda çiftli p-tipi delta katkıli kuantum kuyularının valans band yapılarının Thomas-Fermi-Dirac hesaplamalarını yapmışlardır. Silisyumda delta katkıli çiftli kuantum kuyularında hollerin altband yapıları gösterilmiştir. Öncelikle, Thomas-Fermi-Dirac yaklaşımının çizgileriyle elde edilen Hartree-Fock potansiyeli için analitik bir ifade kullanılmıştır. Katkılamaların farklı yoğunlukları için oluşturulan tabaka kalınlıkları analiz edilmiştir. Düşük yük yoğunluğunda ($P^{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) karşılıklı etkiler olurken ve olmazken 60 \AA ; sistemin dejenere mesafesinde bir fark bulunmuştur. Yüksek katkı konsantrasyonlarında böyle bir fark 5 \AA dolaylarında ortaya çıkmıştır. Basit delta katkıli (SDD) ile DDD (double delta doped) kuantum kuyuları arasındaki taşıyıcı oranları gösterilmiş ve safsızlıkların bütün sınıfları için maksimum mobilite tabaka kalınlığı bulunmuştur.

2006 yılında I. Rodríguez-Vargas , C. A. Duque , M. E. Mora-Ramos , V. R. Velasco [23] tekli ve çiftli p-tipi delta katkıli elmas kuantum kuyularında hol altband yapılarını incelemişlerdir. P-tipi delta katkıli elmas kuantum kuyularında ağır, hafif ve split off hol durumları için bir $6 \times 6 \vec{k}, \vec{p}$ modelin kullanımıyla çalışılmıştır. Bükülmüş band profillerinin tanımı için bir yerel yük yoğunluğu, Thomas-Fermi-Dirac yaklaşımının kullanılmasıyla etkin kütleli Hamiltonian çözülmüş ve valans band spektrumlarının özellikleri iki durum içinde özetle tartışılmıştır.

3. ÖZ-UYUMLU HESAP KURALLARI

3.1. Giriş

Katkılı yapılarda, biçimi serbest taşıyıcıların varlığına bağlı olarak ortaya çıkan dinamik potansiyel yapısının yükler üzerindeki etkisini araştırmak, sistemi anlamada önemlidir. Sözü edilen potansiyelin biçimi de, bu taşıyıcıların enerji durumlarını belirler. Bir sistemdeki parçacıklar için dalga fonksiyonları ve enerji düzeyleri, Hamiltonian'a özgü Schrödinger denkleminin çözümüyle elde edilebilir. Bir kuantum kuyusu yapısı için, çok parçacıklı yapılarda elektronlar arası etkileşimin ihmal edildiği kabul edilerek, elektronların hareketini anlatmak için, tek elektronlu Hamiltonian kullanılır. Katkılı yapılarda enerji durumlarının hesaplanması için, tek parçacık Hamiltonian'ı ile çok parçacıklı Poisson denkleminin birlikte ele alınıp öz-uyumlu olarak çözülmesi gerekmektedir. Katkılı olmayan heteroyapılarda ise; yerleşik potansiyeller, önceden bilinen ve sabit potansiyeller olduğu için öz-uyumlu zorunluluğu yoktur.

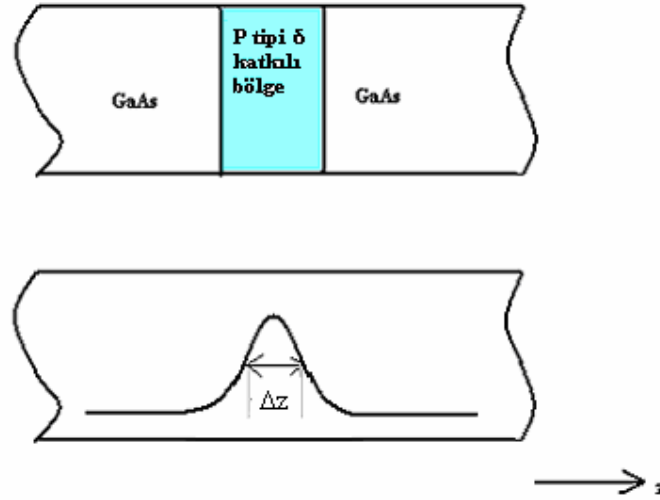
Bilindiği gibi, bir elektronun (holün) kararlı enerji durumu ve bu durumda bulunan elektronu (holü) tanımlayan dalga fonksiyonu, onun potansiyel enerjisini de içeren Schrödinger dalga denkleminin çözümüdür. Poisson denklemi ise verilen (veya hesaplanmış) yük konsantrasyonunu kullanarak doğru potansiyel profilini elde etmek için çözülür. Bu iki farklı denklem, enerji özdeğerlerini, dalga fonksiyonunu, potansiyel profilini ve altband yerleşimlerini elde etmek için öz-uyumlu olarak birlikte çözülürler.

Bu çalışmada, katkıli yarıiletken malzemenin potansiyel profilleri, yük yoğunluğu profilleri, Fermi enerjisi ve altband enerjileri ile altband yerleşimleri öz-uyumlu olarak Poisson ve Schrödinger denklemleri birlikte ele alınarak hesaplanmıştır. Hesaplarımızda **homojen katkılama dağılımı** için

$$N_A(z) = P^{2D}/\Delta z \quad (3.1)$$

eşitliği kullanılmıştır ve safsızlıkların Δz kalınlığındaki bir tabakaya homojen olarak dağıtıldıkları kabul edilmiştir. Burada; Δz ; katkılama kalınlığı, P^{2D} ; katkılama konsantrasyonu ve $N_A(z)$; safsızlık yük yoğunluğudur.

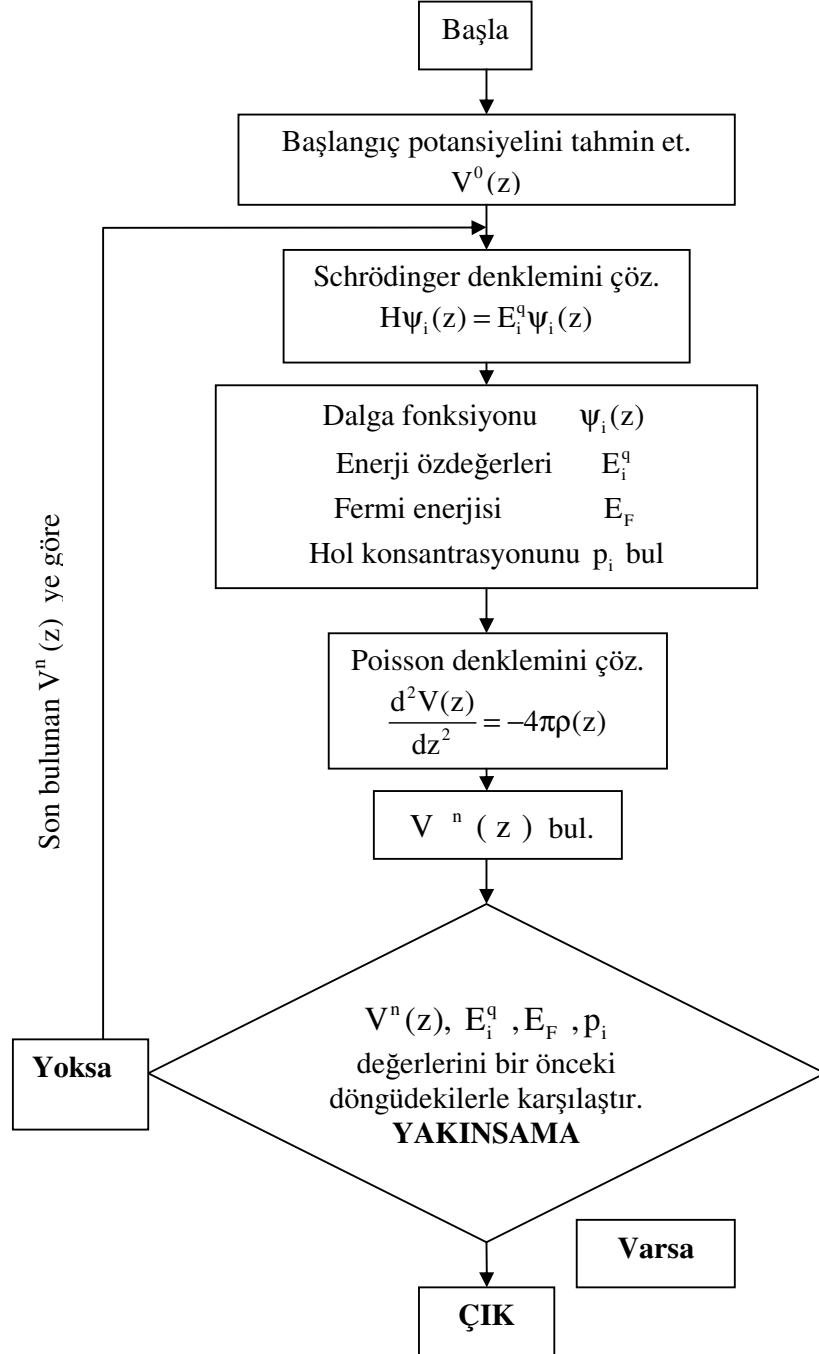
3.2. P-tipi δ -Katlı GaAs Yapısı İçin Öz-Uyumlu Hesabı



Şekil 3-1 (a) Katlı bölgeyi içine alan gerçek malzemenin arakesiti
(b) p-tipi katkıdan dolayı oluşan ek potansiyel yapısı

δ katlı yarıiletken malzemelerden yapılmış temel devre elemanları elektronik ve optoelektronik uygulamalar için geniş araştırma konusudur. Bu katılama metodu, dar ve keskin katılama profilinin çok duyarlı kontrol edilmesini sağlar ve temel araştırmaların önemli bir kaynağını oluşturur. Böyle dar ve keskin profiller, $P(z) = P^{2D}\delta(z)$ şeklinde Dirac Delta fonksiyonuyla matematiksel olarak tanımlanabilir [24]. Burada P^{2D} , iki boyutta akseptör konsantrasyonudur. İyonize olan akseptörler, δ katılama yapılmış GaAs malzemesi içinde V- şeklinde bir potansiyel kuyusu oluştururlar. Dar potansiyel kuyusu içinde büyütme yüzeyine dik hareket için hol enerjileri, 2D altbandlar içinde kuantize edilirler. Altband seviyeleri, lokalize olan iyonize safsızlıklar ve serbest taşıyıcılardan dolayı valans bandının band eğimini hesaba katan öz-uyumlu çözümüyle hesaplanmaktadır. Öz-uyumlu hesabı için akış şeması Çizelge 3-1'de verilmiştir.

Çizelge 3-1 Öz-uyumlu hesabı için akış şeması



P-tipi δ katkılı bir sistemde öz-uyumlu hesabı şu şekilde yapılabilir:

1-) Başlangıç potansiyeli $V^o(z)$ tahmin edilir.

2-) $\psi_i(z)$ dalga fonksiyonunu ve E_i^q enerji özdeğerlerini elde etmek için, başlangıç potansiyeli, $H\psi_i(z) = E_i\psi_i(z)$ şeklindeki Schrödinger denkleminde yerine yazılır ve bu denklem çözülür.

3-) i. valans altbandındaki ağır ve hafif hollerin yüzey konsantrasyonu, T sıcaklığında

$$p_i = -\frac{m_q^* k_B T}{\pi h^2} \ln(1 + e^{(E_F - E_i^q)/k_B T}) \quad (3.2a)$$

ve bir yaklaşımla mutlak sıfırda

$$p_i = -\frac{m_q^*}{\pi h^2} (E_F - E_i^q) \quad (3.2b)$$

ifadeleri ile verilir. Burada q indisi altbandları (ağır hol (hh) için q=1 ve hafif hol (lh) için q=2 biçiminde) etiketlendirmek için kullanılmıştır.

E_i^q : q. altbandın i. enerji seviyesi

E_F : Fermi enerjisi

k_B : Boltzman sabiti

m_q^* : Holün etkin kütesidir.

Verilen bir toplam katkı konsantrasyonu için, bütün hollerin altbandlara

yerleşmesi koşulu yani; $\sum_{q=1}^2 \sum_{i=1}^{n_q} p_i = P^{2D}$ ve 2. adımda elde edilen enerji

özdeğerleri kullanılarak, E_F Fermi enerji seviyesi bulunur.

4-) 2. ve 3. adımda elde edilen akseptör konsantrasyonu ve dalga fonksiyonu

yardımıyla, hollerin toplam yük yoğunluğu $P(z) = \sum_{q=1}^2 \sum_{i=1}^{n_q} p_i |\bar{\psi}_i^q(z)|^2$ denkleminde

elde edilir. Burada n_q , q. altbandın dolu durum sayısı ve $\bar{\psi}_i^q(z)$ ortonormal baz fonksiyonları üzerinden tanımlanmış dalga fonksiyonudur.

5-) Verilen toplam akseptör dağılım yoğunluğu $N_A(z)$ ve 4.adımda bulunan hollerin toplam yük yoğunluğu $P(z)$ yardımıyla n. adıma karşılık gelen $V^n(z)$ potansiyeli

$$\frac{d^2V^n(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} [P(z) - N_A(z)] \quad (3.3)$$

eşitliği ile hesaplanır.

6-) Eğer $V^n(z)$, $V^{n-1}(z)$ ile yakınsamıyorsa, o zaman elde edilen potansiyel, başlangıç potansiyeli olarak alınır, 2. adıma dönülür ve diğer adımlar aynı şekilde tekrarlanır. Yakınsıyorsa son bulunan değerler (enerji özdeğerleri, dalga fonksiyonu, yük yoğunlukları, potansiyel profili ve Fermi enerjisi) gerekli koşulları sağlayan fiziksel değerlerdir.

4. P-Tipi δ -KATKILI GaAs YAPISININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

P-tipi δ -katkılı GaAs yapısının elektronik özellikleri, δ -katkılı tabakanın L_o genişliğinde ve sonsuz derinlikli bir kuantum kuyusuna yerleştirildiği kabul edilerek incelenmiştir.

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

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + V(z) \quad (4.1a)$$

$$V(z) = V_H(z) + V_{xc} \quad (4.1b)$$

eşitliği ile verilir. Burada P ve z, parçacığın momentum ve konumu, m^* etkin kütlesi, $V_H(z)$ etkin Hartree potansiyeli ve V_{xc} ise karşılıklı etkileşim potansiyelidir. Bu potansiyel, yüksek katkı konsantrasyonlarına sahip yapılarda çok az etkili olduğundan dolayı ihmal edilebilir [25]. Yapılan hesaplamalarda bu terim ihmal edilmiştir. O halde sistemin Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{hh}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \Psi_n(z) = E_n^{hh} \Psi_n(z) \quad (4.2a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{lh}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \Psi_n(z) = E_n^{lh} \Psi_n(z) \quad (4.2b)$$

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

$$\Psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L_o}} \text{Cos} \left[\frac{n\pi z}{L_o} - \delta_n \right] \quad (4.3)$$

eşitliği ile verilir. Bu eşitlikte δ_n , L_0 genişliğindeki kuyunun öz fonksiyonlarındaki tek veya çift öz değerlere karşılık gelen faz farkı olmak üzere,

$$\delta_n = \begin{cases} 0, & n \text{ tek ise} \\ \frac{\pi}{2}, & n \text{ çift ise} \end{cases} \quad (4.4)$$

değerlerini alır.

Elektronun özenerji spektrumu (m_e^* , elektronun etkin kütesidir.)

$$E_n^{(0)} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m_e^*L_0^2} \quad (4.5)$$

biçimindedir ve normalize parametrelerini $\tilde{E}^{hh} = \frac{E^{hh}}{E_1^{(0)}}$, $\tilde{E}^{lh} = \frac{E^{lh}}{E_1^{(0)}}$, $\tilde{V} = \frac{V}{E_1^{(0)}}$,

$\tilde{z} = \frac{z}{L_0}$ şeklinde tanımlayarak Denklem 4.2' yi

$$\frac{m_e^*}{m_{hh}^*} \frac{\partial^2 \psi_n(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}^2} + \pi^2 [\tilde{E}_n^{hh} - V(\tilde{z})] \psi_n(\tilde{z}) = 0 \quad (4.6a)$$

$$\frac{m_e^*}{m_{lh}^*} \frac{\partial^2 \psi_n(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}^2} + \pi^2 [\tilde{E}_n^{lh} - V(\tilde{z})] \psi_n(\tilde{z}) = 0 \quad (4.6b)$$

biçiminde yazabiliriz. Hollerin birbirleriyle, safsızlık yükleriyle elektrostatik etkileşmelerinden dolayı $V(z)$ potansiyeli

$$\frac{\partial^2 V(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}^2} = \tilde{\Lambda}_0 \left[\sum_{q=1}^2 \sum_{i=1}^{n_q} \tilde{p}_i |\bar{\psi}_i^q(\tilde{z})|^2 - N_A(\tilde{z}) \right] \quad (4.7)$$

şeklinde olan Poisson denkleminde bulunacaktır. Burada

$$\begin{aligned} R &= \frac{q_h^2}{L_o}, \tilde{\Lambda} = \frac{R}{E_1^{(0)}}, \tilde{\Lambda}_0 = \frac{4\pi}{\epsilon} \tilde{\Lambda}, \\ \tilde{p}_i &= p_i L_o^2, \tilde{P}^{2D} = P^{2D} L_o^2, \\ \Delta \tilde{z} &= \Delta z / L_o, \tilde{E}_F = E_F / E_1^{(0)} \end{aligned}$$

olmak üzere

$$\tilde{p}_i = -\frac{\pi m_q^*}{2 m_e^*} (\tilde{E}_F - \tilde{E}_i^q) \quad (4.8)$$

eşitliği ile verilen q. altbandın i. durumdaki taşıyıcı sayısı,

q_h : Hol yükü

ϵ : GaAs dielektrik sabiti

n_i^q : q. altband için i. dolu durum sayısı

\tilde{P}^{2D} : Yüzey katkı konsantrasyonu

$\Delta \tilde{z}$: Katkı kalınlığı

\tilde{E}_F : Fermi enerjisi

$N_A(\tilde{z})$: Katkılı atomların toplam uzay dağılımıdır.

Poisson denkleminin çözümünde, sistemin dalga fonksiyonları için sonsuz kare kuyunun ortonormal fonksiyonlarını baz olarak

$$\bar{\Psi}_i^{hh}(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_{in}^{hh} \Psi_n(\tilde{z}) \quad (4.9)$$

$$\bar{\Psi}_i^{lh}(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_{in}^{lh} \Psi_n(\tilde{z}) \quad (4.10)$$

denklemini kullandık. Eğer sistemin öz fonksiyonları bilinmiyorsa, bu öz fonksiyonlar kendine yakın bir sistemin ortonormal dalga fonksiyonları cinsinden tanımlanabilir. Bu durum, (4.9) ve (4.10) denklemi şeklindedir. $\{\Psi_n\}$ fonksiyonları bilinen sistemin baz vektörleri, $\{c_{in}^q\}$ katsayıları ise $\bar{\Psi}_i^q$ vektörünün bu bazdaki bileşenleridir. p_i ise q. altbandın i. durumundaki yük miktarı olmak

üzere q . altbanddaki yük dağılımı, $\tilde{p}_i |\bar{\Psi}_i^q(\tilde{z})|^2$ ile verilir. Böylece Poisson denklemi

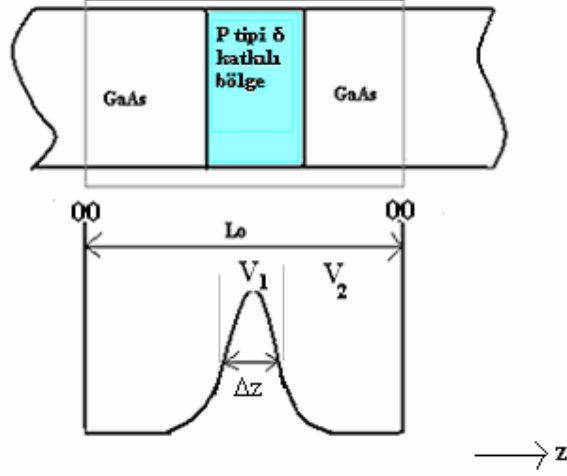
$$\frac{\partial^2 V(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}^2} = \tilde{\Lambda}_o \left\{ \sum_{q=1}^2 \sum_{i=1}^{n_q} \tilde{p}_i \sum_{j,k=1}^{N_o} c_{ij}^{q*} c_{ik}^q \Psi_j^*(\tilde{z}) \Psi_k(\tilde{z}) - N_A(\tilde{z}) \right\} \quad (4.11)$$

şeklini alır. Burada $\Psi_j(\tilde{z}) = \sqrt{2} \text{Cos}[j\pi\tilde{z} - \alpha_j]$ ve α_j (4.4) denkleminin benzeridir.

N_o sistem boyutu ve C_{ij} açılım katsayıları olmak üzere başlangıçta

$$C_{ij}^q = \begin{cases} 1, & i=j \text{ ise} \\ 0, & i \neq j \text{ ise} \end{cases} \quad (4.12)$$

koşulunu kullandık.



Şekil 4-1 Homojen katkılama dağılımı için potansiyel profilinin şematik gösterimi

Şematik gösterimi Şekil 4-1 ile verilen homojen katkılama dağılımı için kullanılan potansiyel enerji ifadesi,

$$V(z) = \begin{cases} V_1, & -\frac{\Delta z}{2} \leq z \leq \frac{\Delta z}{2} \\ V_2, & \frac{\Delta z}{2} \leq z \leq \frac{L_0}{2} \end{cases} \quad (4.13)$$

biçimindedir.

(4.11) denklemini bir kez integre ettiğimizde

$$|\tilde{z}| \leq \frac{\Delta \tilde{z}}{2} \text{ için} \quad \frac{\partial V_1(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}} = g_1(\tilde{z}) + h_1(\tilde{z}) + c_1 \quad (4.14)$$

$$|\tilde{z}| \geq \frac{\Delta \tilde{z}}{2} \text{ için} \quad \frac{\partial V_2(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}} = g_1(\tilde{z}) + c_1 \quad (4.15)$$

eşitliklerini ve

(4.11) denklemini iki kez integre ettiğimizde, potansiyel enerji için

$$|\tilde{z}| \leq \frac{\Delta\tilde{z}}{2} \text{ için} \quad V_1(\tilde{z}) = g_2(\tilde{z}) + h_2(\tilde{z}) + c_1|\tilde{z}| + c_2 \quad (4.16)$$

$$|\tilde{z}| \geq \frac{\Delta\tilde{z}}{2} \text{ için} \quad V_2(\tilde{z}) = g_2(\tilde{z}) + c_1|\tilde{z}| + c_2 \quad (4.17)$$

eşitliklerini elde ederiz. Burada $\text{Cosa.Cosb} = \frac{1}{2}\text{Cos}(a+b) + \frac{1}{2}\text{Cos}(a-b)$ açılımını kullanarak

$$g_1(\tilde{z}) = \tilde{\Lambda}_o \sum_{q=1}^2 \sum_{i=1}^{n_q} \tilde{p}_i \sum_{j,k=1}^{N_o} c_{ij}^{*q} c_{ik}^q I_1(\tilde{z}) \quad (4.18)$$

$$I_1(\tilde{z}) = \frac{1}{(j+k)\pi} \text{Sin}[(j+k)\pi\tilde{z} - (\alpha_j + \alpha_k)] \\ + \begin{cases} \frac{1}{(j-k)\pi} \text{Sin}[(j-k)\pi\tilde{z} - (\alpha_j - \alpha_k)], & j \neq k \text{ ise} \\ \tilde{z}, & j = k \text{ ise} \end{cases} \quad (4.19)$$

$$g_2(\tilde{z}) = \tilde{\Lambda}_o \sum_{q=1}^2 \sum_{i=1}^{n_q} \tilde{p}_i \sum_{j,k=1}^{N_o} c_{ij}^{q*} c_{ik}^q \int I_1(\tilde{z}) d\tilde{z} \quad (4.20)$$

$$\int I_1(\tilde{z})d\tilde{z} = -\left(\frac{1}{\pi(j+k)}\right)^2 \text{Cos}[(j+k)\pi\tilde{z} - (\alpha_j + \alpha_k)]$$

$$+ \begin{cases} -\left(\frac{1}{\pi(j-k)}\right)^2 \text{Cos}[(j-k)\pi\tilde{z} - (\alpha_j - \alpha_k)], & j \neq k \text{ ise} \\ \frac{\tilde{z}^2}{2}, & j = k \text{ ise} \end{cases} \quad (4.21)$$

ifadelerini elde ettik. Sınır ve süreklilik koşullarından,

$$\text{a) } \left. \frac{\partial V_2(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}} \right|_{\tilde{z}=\frac{1}{2}} = 0 \text{ koşulundan} \quad c_1' = -g_1(\tilde{z} = 1/2) \quad (4.22)$$

$$\text{b) } V_2(\tilde{z})\big|_{\tilde{z}=\frac{1}{2}} = 0 \text{ koşulundan} \quad c_2' = -g_2(\tilde{z} = 1/2) - c_1'(1/2) \quad (4.23)$$

$$\text{c) } \left. \frac{\partial V_1(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}} \right|_{\tilde{z}=\frac{\Delta\tilde{z}}{2}} = \left. \frac{\partial V_2(\tilde{z})}{\partial \tilde{z}} \right|_{\tilde{z}=\frac{\Delta\tilde{z}}{2}} \text{ sürekliliğinden}$$

$$h_1(\tilde{z}) = \tilde{\Lambda}_0 \frac{\tilde{N}_d}{\Delta\tilde{z}} \tilde{z} \text{ olmak üzere} \quad (4.24)$$

$$c_1 = -h_1(\tilde{z} = \Delta\tilde{z}/2) + c_1' \quad (4.25)$$

$$\text{d) } V_1(\tilde{z})\big|_{\tilde{z}=\frac{\Delta\tilde{z}}{2}} = V_2(\tilde{z})\big|_{\tilde{z}=\frac{\Delta\tilde{z}}{2}} \text{ koşulundan ise}$$

$$h_2(\tilde{z}) = \tilde{\Lambda}_0 \frac{\tilde{N}_d}{\Delta\tilde{z}} \frac{\tilde{z}^2}{2} \text{ olmak üzere} \quad (4.26)$$

$$c_2 = -h_2(\tilde{z} = \Delta\tilde{z}/2) - c_1(\Delta\tilde{z}/2) + c_1'(\Delta\tilde{z}/2) + c_2' \quad (4.27)$$

denklemlerini elde ettik. Bu durumda, $\tilde{H} = -\frac{m_e^*}{m_q^*} \pi^2 \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + V(\tilde{z})$ olmak üzere

Hamiltonian' ın beklenen değeri

$$\tilde{H}_{nm} = \langle \tilde{\Psi}_n | \tilde{H} | \tilde{\Psi}_m \rangle = n^2 \frac{m_e^*}{m_q^*} \delta_{n,m} + \langle \tilde{\Psi}_n | V(\tilde{z}) | \tilde{\Psi}_m \rangle \quad (4.28)$$

eşitliğinden hesaplanır. Burada

$$\delta_{n,m} = \begin{cases} 1, & n=m \text{ ise} \\ 0, & n \neq m \text{ ise} \end{cases} \quad (4.29)$$

koşulunu sağlar.

$$\langle \tilde{\Psi}_n | V(\tilde{z}) | \tilde{\Psi}_m \rangle = \int_{-1/2}^{1/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) V(\tilde{z}) \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} = 2 \int_0^{1/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) V(\tilde{z}) \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} \quad (4.30)$$

biçiminde yazarak (4.28) denklemi daha açık olarak,

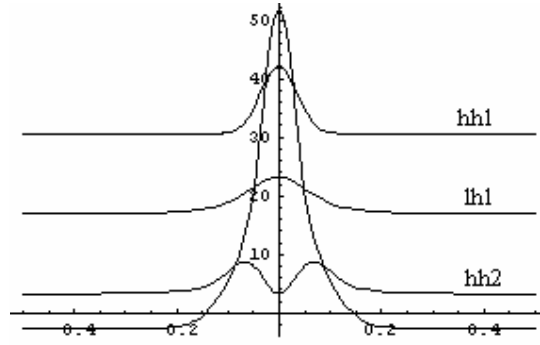
$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Psi}_n | V(\tilde{z}) | \tilde{\Psi}_m \rangle &= 2 \int_0^{\Delta\tilde{z}/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) V_1(\tilde{z}) \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} + 2 \int_{\Delta\tilde{z}/2}^{1/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) V_2(\tilde{z}) \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} \\ &= \int_{-1/2}^{1/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) g_2(\tilde{z}) \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} + 2 \int_0^{\Delta\tilde{z}/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) h_2(\tilde{z}) \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} \\ &\quad + 2c_1 \int_0^{\Delta\tilde{z}/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) |\tilde{z}| \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} + 2c_2 \int_0^{\Delta\tilde{z}/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} \\ &\quad + 2c_1' \int_{\Delta\tilde{z}/2}^{1/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) |\tilde{z}| \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} + 2c_2' \int_{\Delta\tilde{z}/2}^{1/2} \tilde{\Psi}_n(\tilde{z}) \tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) d\tilde{z} \end{aligned} \quad (4.31)$$

yazılabilir.

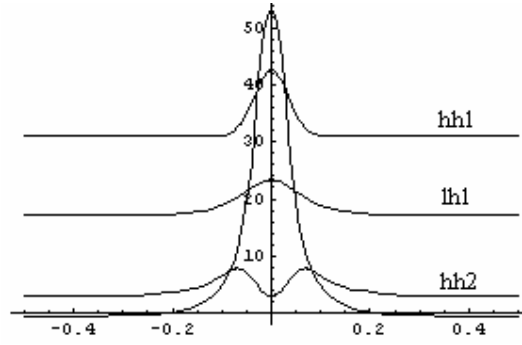
Yapılan hesaplamalarda $L_0 = 500 \text{ \AA}$ olarak alınmıştır ve tüm şekillerde potansiyel derinliği ve altband enerjileri, Fermi enerjisine göre belirlenmiştir. Şekillerde hh sembolü ağır holü ve lh sembolü hafif holü göstermektedir. $m_{hh} = 0.45 m_0$, $m_{lh} = 0.087 m_0$, ve m_0 , serbest elektronun etkin kütlesi olmak üzere GaAs için $\epsilon = 12.4$ olarak alınmıştır. $P^{2D} = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ve $\Delta z = 30 \text{ \AA}$ için 2 - 4. döngüler için elde edilen potansiyel profilleri ve altband enerji seviyelerine göre farklı altbandlardaki hollerin olasılık dağılımları Şekil 4-2'de gösterilmektedir. Ayrıca (15x15) matrisiyle hesaplanan ve 1 - 4. döngülerle elde edilen veriler Çizelge 4-1'de verilmiştir. Çizelgeden de görüldüğü gibi, 3. ve 4. döngülerde yakınsama sağlanmaktadır. Şekil 4-3 (a) ve (b) 'de; sırasıyla $\Delta z = 10 \text{ \AA}$, $P^{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ve $\Delta z = 30 \text{ \AA}$, $P^{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ değerlerinde p-tipi δ -katkılı GaAs tabakası için elde edilen etkin potansiyel profili, altband enerji seviyelerine göre farklı altbandlardaki hollerin olasılık dağılımları homojen dağılım için gösterilmiştir. Şekil 4-3 (a) ve (b) arasındaki başlıca fark, etkin potansiyel profilinin derinliği, genişliği ve dolu durum sayısıdır. Beklenildiği gibi, dolu durumların sayısı potansiyel derinliğine bağlı olarak artmaktadır. Aynı zamanda, ağır holün taban durum dalga fonksiyonu, hafif holün taban durum dalga fonksiyonuna göre daha iyi lokalize olmaktadır.

Çizelge 4-1 $P^{2D} = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ve $\Delta z = 30 \text{ \AA}$ için 1-4. döngülerde sırasıyla elde edilen enerji özdeşleri, Fermi enerjileri, potansiyel derinliği, dolu durum sayıları ve yük taşıyıcı konsantrasyonları

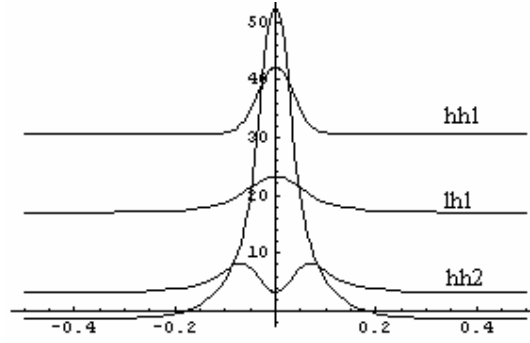
	1. Döngü	2. Döngü	3. Döngü	4. Döngü
$E_1^{hh} \text{ (meV)}$	278.45	33.22	31.52	32.11
$E_1^{lh} \text{ (meV)}$	263.66	19.64	17.66	18.52
$E_2^{hh} \text{ (meV)}$	250.15	5.92	3.52	4.71
$E_3^{hh} \text{ (meV)}$	247.28			
$E_F \text{ (meV)}$	247.27	2.59	0.550	1.44
$V \text{ (meV)}$	304.50	54.15	53.60	53.72
n_d^{hh} Ağır hol dolu durum sayısı	3	2	2	2
n_d^{lh} Hafif hol dolu durum sayısı	1	1	1	1
$n_1^{hh} (\times 10^{12} \text{ cm}^{-2})$	5.861	5.750	5.820	5.765
$n_1^{lh} (\times 10^{12} \text{ cm}^{-2})$	0.595	0.619	0.621	0.620
$n_2^{hh} (\times 10^{12} \text{ cm}^{-2})$	0.540	0.624	0.558	0.614
$n_3^{hh} (\times 10^{12} \text{ cm}^{-2})$	0.002			



(a)

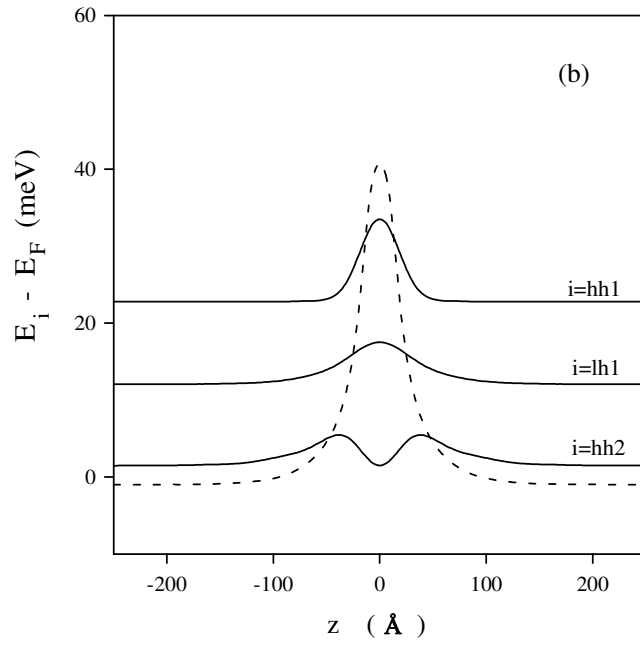
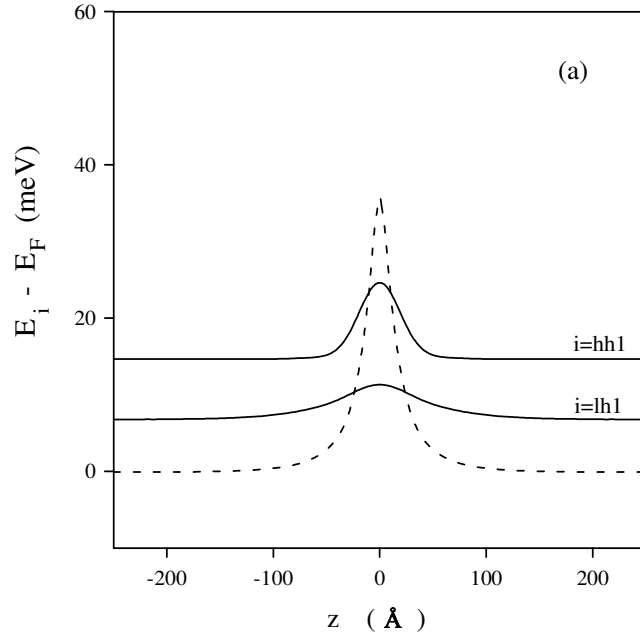


(b)



(c)

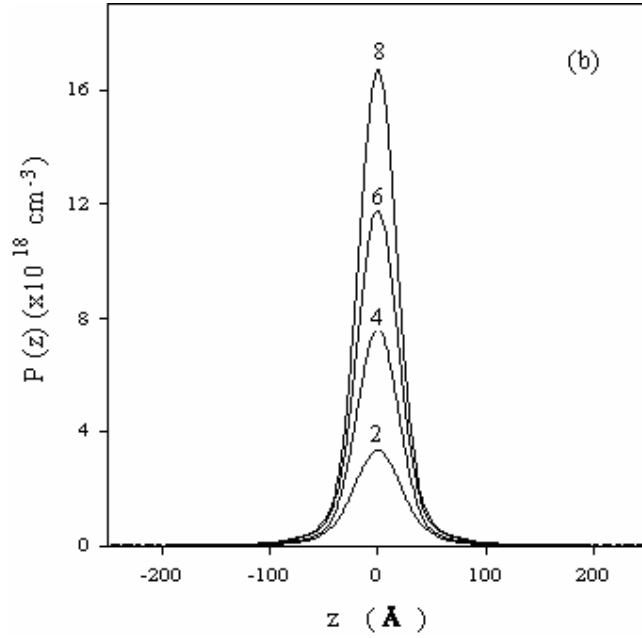
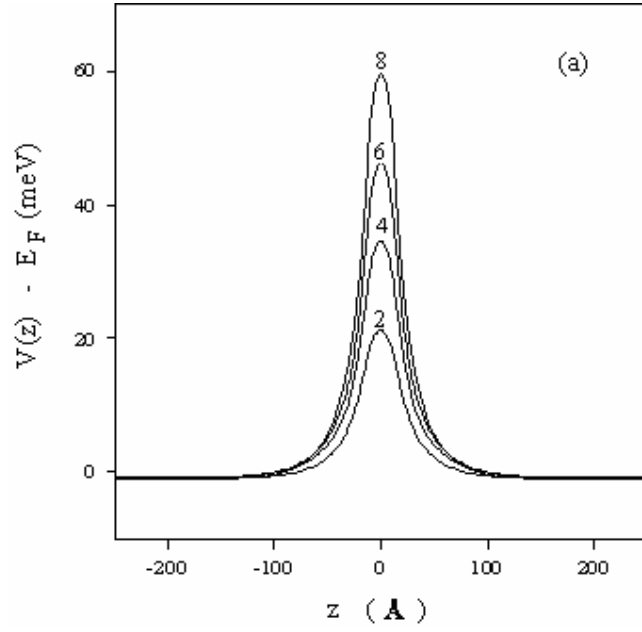
Şekil 4-2 a) 2. döngüde, b) 3. döngüde ve c) 4. döngüde p-tipi δ -katkılı GaAs yapısı için elde edilen etkin potansiyel profilleri ve altband enerji seviyelerine göre olasılık dağılımları. $P^{2D} = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ve $\Delta z = 30 \text{ \AA}$



Şekil 4-3 P-tipi δ -katkılı GaAs yapısı için elde edilen altband enerji seviyelerine göre olasılık dağılımları (sürekli eğriler) ile etkin potansiyel profilleri (kesikli eğriler)

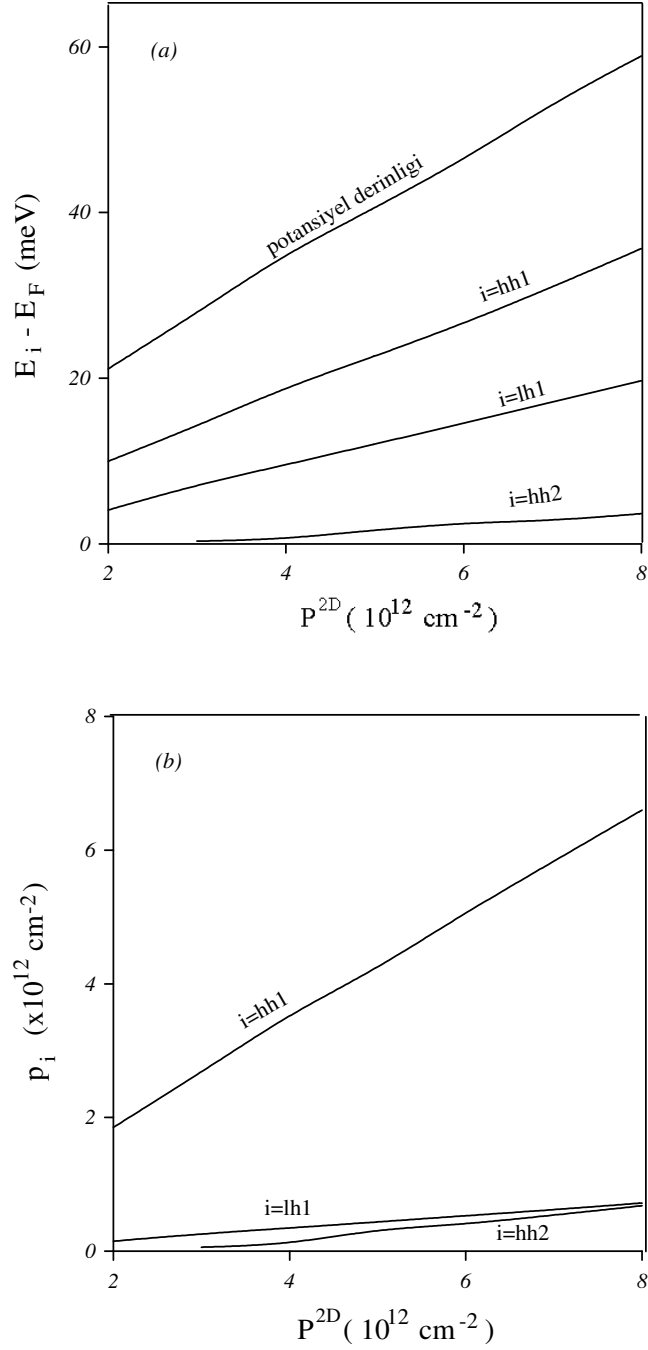
a) $P^{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z = 10 \text{ \AA}$ ve b) $P^{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z = 30 \text{ \AA}$

Farklı katkılama konsantrasyonları için elde edilen etkin potansiyel profilleri ve yük yoğunlukları sırasıyla Şekil 4-4 (a) ve (b)'de gösterilmiştir. Buradan da görüldüğü gibi, GaAs katmanındaki katkı konsantrasyonunun artmasına bağlı olarak, enerji bandında oluşan bükülmeler artmaktadır. Katkı konsantrasyonunun artan değerleri ile meydana gelen daha derin bükülme, yük taşıyıcıların katkılama bölgesindeki kuşatılmalarını artıracaktır. Böylece katkı konsantrasyonunun artmasıyla potansiyel çukurunda kuşatılan parçacıkların lokalizasyonunun katkılama bölgesinde artması, bu sistemlerin kuşatılmaları ayarlanabilir cihazlar olarak kullanılmasına olanak sağlar. Daha büyük katkılama konsantrasyonu için etkin potansiyel profilinin daha derin olmasıyla birlikte, potansiyel profilinin tabanı neredeyse değişmez kalır. Yüksek katkı konsantrasyonlarında delta katkılı tabakada değişen yük yoğunluğunun artışı, bandın daha fazla eğrilmesine ve daha iyi lokalize olan yük yoğunluğu profilinin oluşmasına neden olur. Şekil 4-4b'den de görüldüğü gibi GaAs katmanındaki P^{2D} katkı konsantrasyonunun artmasına bağlı olarak, elektronik yoğunluk artmakta ve delta katkılı GaAs etrafında daha iyi lokalize olmaktadır. Sonuç olarak, P^{2D} 'nin artmasıyla enerji bandındaki derinlik artarken, buna bağlı olarak yük taşıyıcıların katkılama bölgesinde arttığı ve kuşatmanın daha fazla olduğu görülmektedir. Band içi ve bandlar arası tüm fiziksel olayların, P^{2D} ile istenildiği biçimde değiştirilebileceğini söyleyebiliriz.



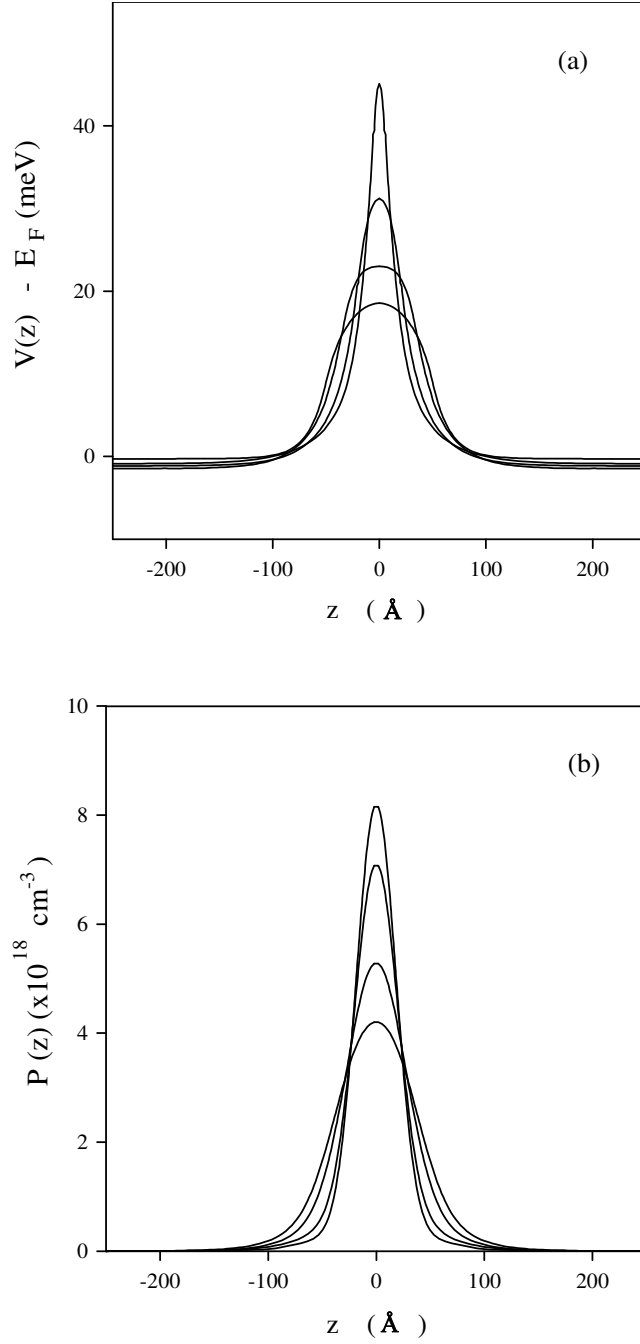
Şekil 4-4 $\Delta z = 30$ Å için p-tipi δ katkılı GaAs yapısında farklı katkılama konsantrasyonları (aşağıdan yukarıya $P^{2D} = 2, 4, 6, 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) için elde edilen a) öz-uyumlu potansiyelleri ve b) yük yoğunluğu profilleri

Katkı konsantrasyonuna karşı altband enerjileri ve yerleşimleri Şekil 4-5 (a) ve (b)' de belirtilmiştir. Yüksek katkılama konsantrasyonlarında δ -tabakasında artan yük yoğunluğu, daha çok band eğimine yol açar ve daha derin bir kuantum kuyusunun oluşumuna neden olur. Bu özellik, böyle bir katkılama biçiminin kullanıldığı yarıiletken aletlerde, taşıyıcı kuşatmasını kontrol etmek için kullanılır. Beklenildiği gibi hafif ve ağır hol için enerji değerleri ve dolu durum sayısı, akseptör konsantrasyonunun artmasıyla birlikte artar. Bu çalışmada, sistemdeki tüm taşıyıcıların değerlerini göz önüne aldığımızda, ağır hollerin altbandlara yerleşimleri, Gaggero-Sager ve Ark. [26]'dan farklı olarak, tüm taşıyıcıların yaklaşık olarak %91'ini içerir ve ağır hollerin dolu durum sayısı, hafif hollere kıyasla daha fazladır. Gaggero-Sager ve Ark. [26], ağır hol seviyelerine yerleşen taşıyıcı yoğunluk oranını, tüm taşıyıcılar üzerinden %95 olarak bulmuşlardır. Bu orana bağlı olarak hafif holler, akseptör yoğunluğuna karşı daha az duyarlı iken, katkılama konsantrasyonunun artması ile ağır holün altband doluluk durumu hızlı bir şekilde değişmektedir. Yani, δ -katkılama konsantrasyonunun artmasıyla etkin potansiyel derinliği, altband enerjileri ve yerleşimleri önemli bir biçimde değişmektedir. Potansiyel değişiminden etkilenme şiddeti, taban durum enerjisinden uyarılmış enerji seviyelerine doğru azalmaktadır. Bu etki, hem altband enerjilerinin hem de altband yerleşimlerinin P^{2D} ye bağlı değişiminden de görülmektedir.



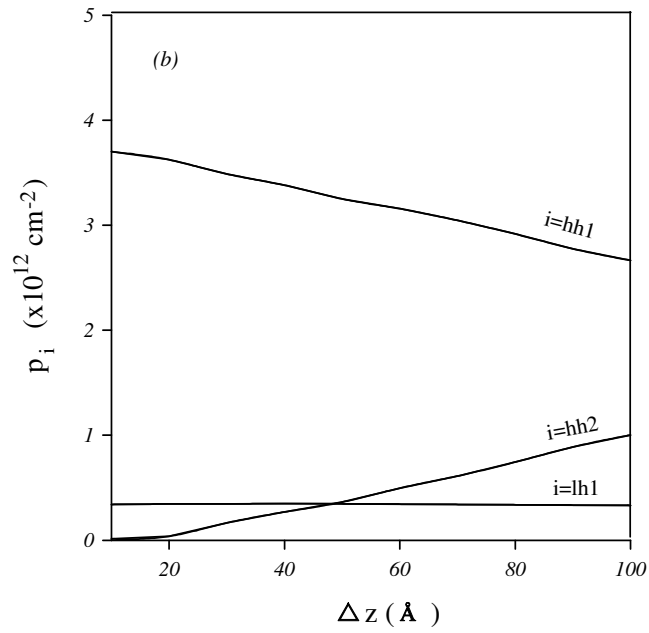
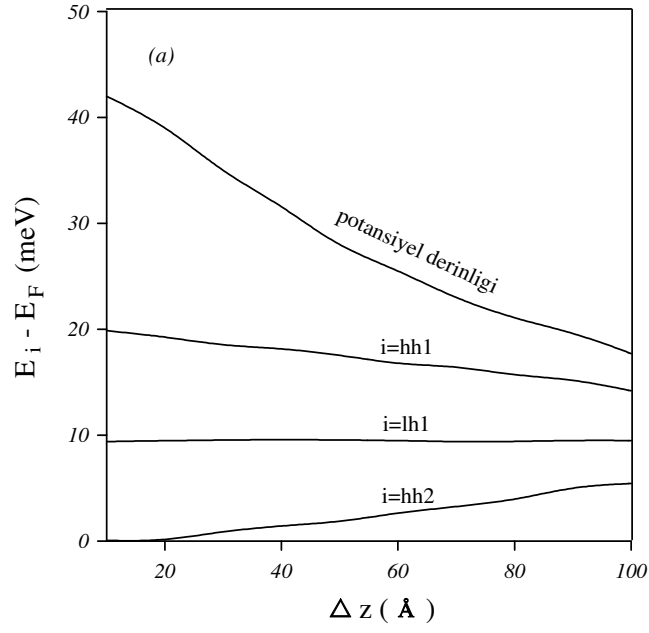
Şekil 4-5 $\Delta z = 30 \text{ \AA}$ için p-tipi δ katkılı GaAs yapısında, katkılama konsantrasyonuna bağlı olarak a) altband enerjileri b) altband yerleşimleri

Farklı katkılama kalınlıklarında ($\Delta z = 10, 40, 70, 100 \text{ \AA}$) etkin potansiyel profili ve yük yoğunluğu profili Şekil 4-6 (a) ve (b)' de verilmiştir. Sabit bir katkılama konsantrasyonunda, potansiyel profilinin katkılama kalınlığı (Δz)'na göre değişimine baktığımızda, dopantların dar bir bölgede ($\Delta z = 10 \text{ \AA}$) olduğu zaman, etkin potansiyel profili daha derin, yük taşıyıcıların kuşatılmaları daha fazladır. Şekil 4-6b'de dar dopant dağılımı için değişen yük yoğunluğu profilinin, geniş dopant dağılımlarından daha iyi lokalize olduğu görülmektedir. Akseptör dağılımı kalınlıkları arasındaki bu fark, bu yarıiletken yapıların geçiş özelliklerinde bazı önemli belirtkenlere sahiptir.



Şekil 4-6 $P^{2D} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ için p-tipi δ katkılı GaAs yapısında, farklı katkılama kalınlıkları (yukarıdan aşağıya $\Delta z = 10, 40, 70, 100 \text{ \AA}$) için a) öz-uyumlu potansiyelleri b) yük yoğunluğu profilleri

Akseptör katkılama kalınlığının fonksiyonu olarak, altband enerji seviyeleri ve altband yerleşimleri sırasıyla Şekil 4-7 (a) ve (b)'de gösterilmiştir. GaAs katmanındaki Δz katkı kalınlığının artmasına bağlı olarak, etkin potansiyel profili sığlaşır ve genişler. Potansiyel derinliği, GaAs katmanındaki katkı kalınlığına çok duyarlıdır ve bu potansiyelin derinliği katkılama kalınlığının artmasıyla azalır. Potansiyel derinliğindeki değişimden ilk olarak taban durum enerjisi etkilenmekte, diğer uyarılmış altband enerjileri potansiyel profilinin değişimine bağlı olarak daha az değişim göstermektedir. Altband seviyeleri üzerine hollerin dağılımı, akseptör katkılama kalınlığına bağlıdır ve taban durumundaki ağır holün enerji seviyesi ve altband yerleşimi akseptör kalınlığı ile değişir. Taban durum enerji seviyesi ve altband yerleşimi hafif holün altbandı için nerdeyse hiç değişmez kalmaktadır. Çünkü, hafif holün altbandı ağır holün altbandlarından daha geniş bir sırada lokalize olmuştur, böylece hafif holün taban durum enerjisi ve altband yerleşimleri delta tabakası kalınlığının artması ile hemen hemen değişmez kalır. Bununla birlikte, katkılama kalınlığının artmasıyla taban durumundaki ağır hol ve ağır holün ilk dolu altband enerjisi ve altband yerleşimlerinin ikisi de önemli bir şekilde değişmektedir. Alandaki lokalize safsızlıkların bu özelliğinden dolayı; delta katkılama, bu katkılamanın kullanıldığı cihazlarda taşıyıcıların kuantum kuşatmasının kontrolü için kullanılır.



Şekil 4-7 $P^{2D} = 4 \times 10^{12}$ cm $^{-2}$ için p-tipi δ katkılı GaAs yapısında, katkılama kalınlığına bağlı olarak a) altband enerjileri b) altband yerleşimleri

5. SONUÇ

Elektronik ve optik aletlerin teknolojik uygulamalarında temel araştırma konusu olarak ele alınan yarıiletken yapılarıdaki δ -katkılama, farklı metodlar kullanan birçok araştırmacı tarafından hem teorik hem de deneysel olarak çalışılmıştır. Uygulamalarda δ -katkılama tekniği, katkılama profilinin çok duyarlı olarak kontrol edilmesini sağlar ve gelecekte kuantum elektronik ve fotonik cihaz araştırmalarında önemli bir rol oynayacaktır.

Bu çalışmada, ilk olarak düşük boyutlu sistemler ve katkılı yapılar hakkında kısa bir bilgi verildikten sonra, p-tipi delta katkılı GaAs yapısının potansiyel profili ve dinamik band yapısı, Schrödinger ve Poisson denklemlerinin öz-uyumlu çözümüyle teorik olarak hesaplanmıştır. P-tipi delta katkılı GaAs yapısının elektronik özellikleri, δ -katkılı tabakanın, L_0 genişliğinde ve sonsuz derinlikli bir kuantum kuyusuna yerleştirildiği kabul edilerek incelenmiştir.

Aynı malzemenin çok dar bir bölgesinde büyütülen p-tipi δ -katkılı GaAs yapısını (sonsuz kuyu metodunu kullanarak), katkılama konsantrasyonu ve katkılama kalınlığına bağlı olarak homojen dağılım için inceledik.

Katkılama konsantrasyonunun artmasına bağlı olarak etkin potansiyel profili derinleşmekte, enerji bandında oluşan bükülmeler artmakta ve yük taşıyıcıları katkılama bölgesinde çok daha iyi kuşatılmaktadır. Böylece katkı konsantrasyonunun artmasıyla potansiyel çukurunda kuşatılan parçacıkların lokalizasyonunun katkılama bölgesinde artması, bu sistemlerin kuşatılmaları ayarlanabilir cihazlar olarak kullanılmasına olanak sağlar. Sabit bir katkılama konsantrasyonunda, GaAs tabakasındaki Δz katkılama kalınlığının artmasıyla birlikte, etkin potansiyel profili sığlaşır, potansiyel derinliği azalır ve böylece yük taşıyıcıları daha geniş bir bölgede kuşatılırlar. Potansiyel derinliğindeki değişimden ilk olarak taban durum enerjisi etkilenirken, diğer uyarılmış altband enerjilerinde daha az değişim görülmektedir. Katkılama kalınlığı büyük olduğunda ($\Delta z = 100 \text{ \AA}$), δ -katkılı GaAs yapısının elektronik özellikleri, akseptör dağılım biçimine oldukça duyarlıdır. Katkılama konsantrasyonu (P^{2D}) ve

katkılama kalınlığına (Δz) baęlı olarak sistemin elektronik yapısının deęiřmesi, hem P^{2D} hem de Δz nin amaca yönelik ayarlanabilir parametre biçiminde deęerlendirilmesine olanak saęlar.

Sonuç olarak, δ -katkılama teknięi, son zamanlarda hem çok yüksek elektron hareketlilik ve yoęunluklarıyla hem de kuantum-elektronik ve fotonik aletlerdeki arařtırmalarıyla, yeni yarıiletken aletlerin yapımında önemli bir rol oynamaktadır.

6. KAYNAKLAR

- [1] L. Esaki and R. Tsu (1969) "Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors" IBM Res. Note, RC-2414
- [2] Jasprit Sing, (1994) Semiconductor Devices, McGraw-Hill Inc.,
- [3] R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard and W. W. Wiegman (1978) "Evolution and recent advances in RF/Microwave transistors", Appl. Phys. Lett., **33**, 665
- [4] H. L. Störmer, R. Dingle, A. C. Gossard, W. W. Wiegman and M. D. Sturge (1979), "Two-dimensional electron gas at differentially doped GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterojunction interface" J. Vac. Sci. Technol., **16**, 1517
- [5] E. F. Schubert, J. Vac. (1990) "n-type delta-doped quantum well lasers with extremely low transparency current density" Sci. Technol. A **8**, 2980
- [6] K. Ploog, M. Hauser and A. Fischer, (1998) "Time-Resolved Interband transitions in periodic multilayer delta-doped systems" Appl. Phys. A **45**, 233
- [7] L. Ioratti, Phys. Rev. (1990) "Formation of subbands in delta doped semiconductors" B **41**, 8340
- [8] M. L. Ke, J. S. Rimmer, B. Hamilton, J. H. Evans, M. Missous, K. E. Singer, P. Zalm, (1992) "Intersubband optical absorption of double Si delta doped GaAs layers" Phys. Rev. B **45**, 14114
- [9] F. Dominguez-Adame, B. Mendez, F. Macina, (1994) "Electronic structure of Si Delta doped in an electrical field" Semicond. Sci. Technol. **9**, 263
- [10] K. Nakazato, R. J. Blaikie, H. Ahmed (1994), J. Appl. Phys. **75**, 5123
- [11] J. Osvald, (2004) "Self consistent analysis of Si delta doped layer placed in a non-central position in GaAs" Physica E **23**, 147
- [12] L. Chico, F. Garcia-Moliner, and V. R. Velasco, (1993) "Electronic structure of periodically delta doped GaAs:Si" Phys. Rev. B **48**, 11 427
- [13] E. Ozturk and I. Sokmen, (2003) "Intersubband transitions for single, double and triple Si delta doped GaAs layers" J. Phys. D: Appl. Phys. **36**, 2457
- [14] E. Ozturk and I. Sokmen, (2003) "The electric field affects on intersubband optical absorption of Si delta doped GaAs layer" Solid State Commun. **126**, 605
- [15] E. Ozturk, Y. Ergun, H. Sari, I. Sokmen, (2000) "Si delta doped GaAs structure with different dopant distribution models" Superlattices and Microstructure **28**, 35
- [16] R. C. Newman, F. Thomson (1972), "Localized vibrational modes in GaAs containing silicon and boron" Journal of Physics C :Solid State Physics, **3**, 1999-2010
- [17] R. Murray, R. C. Newman, J. L. Sanster (1989), J. Appl. Phys., **66**, (6), 2589
- [18] E. F. Schubert, A. Fischer, K. Ploog (1986) "The delta-doped field-effect transistors" IEEE Trans. On Electron Devices, ED **33** (5), 625-632
- [19] A. C. Maciel, M. Tahtam, J. F. Ryan, J. M. Worlock, R. E. Nahory, J. P. Harbison and T. Florez (1990) "Photoluminescence from the quasi-two-dimensional electron gas at a single silicon delta doped layer in GaAs" Surf. Sci., **228**, 251
- [20] L. E. Ramos, G. M. Sipahi, L. M. Scolfaro, R. Enderlein, J. R. Leite (1997), "Minibands of p-type δ -doping superlattices in GaAs" Superlattices and Microstructure, **22**, 4

- [21] L. M. Gaggero-Sager, M. E. Mora-Ramos (2000), "Hole energy levels in p-type δ -doped Si quantum wells" *Solid State Electronics*, **44**, 1
- [22] I. Rodríguez-Vargas, L.M. Gaggero-Sager, (2005) "Thomas–Fermi–Dirac calculations of valence band states of double p-type d-doped quantum wells in Si" *Physica Status Solidi*, **2**, **10**, 3634
- [23] I. Rodríguez-Vargas, C.A. Duque, M.E. Mora-Ramos, V.R. Velasco, (2006) "Hole subband structure in single and double p-type delta doped diamond quantum wells" *Phys. Stat. Sol.* **4**,**2**, 451-417
- [24] J. C. Henning and J.P. Ansems (1987),"A new model deep donor centres in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ " *Semicond. Sci. Tech.*, **2**,1
- [25] P.M. Koenraad, F.A.P. Blom, C.J.G.M. Langerak, M.R. Leys, J.A.A.J Perenboom, J. Singleton, S.J.R.M. Spermon, W.C. Van Der Vleuten, A.P.J. Voncken and J. H. Wolter (1990), "Observation of high mobility and cyclotron resonance in 20 \AA silicon on delta doped GaAs grown by MBE at $480 \text{ }^\circ\text{C}$ " *Semicond. Sci. And Tech.*, **5**, 861
- [26] L. M. Gaggero-Sager, R. Perez Alvarez, (1996), "Self-consistent energy levels in p-type delta-doped quantum wells in GaAs" *J. Appl. Phys.* **79**, (6)

7. ÖZGEÇMİŞ

Adı-Soyadı : Mustafa Kemal BAHAR

Doğum Yeri-Yılı : Sivas-1981

Medeni Durumu : Bekar

Lisans (1999-2004) : Ege Üniversitesi

Fen Fakültesi Fizik Bölümü İzmir

Yüksek Lisans (2004-2007) : Cumhuriyet Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı Sivas