

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ'NE

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

Başkan: Prof. Dr. Hüseyin SARI

Üye : Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ

Üye : Doç. Dr. Esin KASAPOĞLU

Üye : Yrd. Doç. Dr. Mustafa HOŞTUT

Üye : Yrd. Doç. Dr. Nihat YILDIZ

ONAY

Yukarıdaki imzaların adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylıyorum.

.../.../2007

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

Prof. Dr. Halil GÜRSOY

1-GİRİŞ

Yarıiletkenler, elektriksel iletkenlikleri metal ve yalıtkanlar arasında olan malzemelerdir. Bu malzemelerin iletkenlikleri; sıcaklık, optik uyarılmalar ve katılama ile büyük ölçüde değişir. Yarı iletkenlerin bu özelliği yani elektriksel özelliklerinin dış etkilerle belirgin bir şekilde değişebilir olması, elektronik cihaz yapımında tercih nedenidir.

Bir yarıiletkeni metal ve yalıtkanlardan ayıran en temel özelliklerden birisi, enerji bant aralığıdır. Bu aralık, yarıiletken tarafından yayılan veya soğurulan ışığın dalga boyu ile belirlenir. Örneğin, GaAs'ın enerji bant aralığı yaklaşık 1.43 eV dir ve bu değer yakın kırmızı ötesi bölgesindeki ışığın dalga boyuna karşılık gelir. Bunun tersine GaP 'ın bant aralığı yaklaşık 2.3 eV dir. Bu değer spektrumun yeşil bölgesine karşılık gelir. Yarıiletkenlerin bant aralıklarının değişimlerinin bir sonucu olarak spektrumun kırmızı ötesi ve görünür bölgesine düşen dalga boylarında ışık yayan diyotlar (LED ler) ve lazerler yapılabilir. Yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri katkı atomları (impurity-safsızlık atomları) ile de belirgin şekilde değişir.

Günümüzde yarıiletkenler devre elemanları yapımında çok sık kullanılmaktadır. Yarıiletkenlerin devre elemanı olarak kullanılması, elektronik teknolojisinin hızlı gelişmesini sağlamış ve katıhal fiziği üzerine yapılan çalışmaların artmasına neden olmuştur. Yarıiletkenlerin uygulama alanında tercih edilmesinin temel nedeni, yarıiletken devre elemanlarının çok küçük hacimler içerisine yerleştirilebilir olması, söz konusu yarıiletkenlerin yasak bant aralıklarının küçük olması ve istenilen özelliklerde bir devre elemanı yapılmasına imkân vermesidir. Örneğin; nanoteknoloji, atomik veya moleküler boyutta maddenin mühendisliği yapılarak yepyeni özelliklerinin açığa çıkarılmasıdır. Nanometre, metrenin milyarda birini temsil eder. İnsan saç telinin çapı 100.000 nm, bir toplu iğne başı 1 mm dir. 1 nm içerisine ancak 2-3 atom sığdırılabilir. Yaklaşık 100 ya da 1000 atom bir araya gelerek nano ölçeklerde bir devre elemanı oluşturulur. Bir aygıtta kullanılan malzemenin boyutu küçüldükçe çalışma hızı artar ve o malzemenin yeni özellikleri ortaya çıkar. Boyutlar nanometre ölçeklerine yaklaşırken malzemenin fiziksel özellikleri kuantum mekaniğinin kontrolüne girer, elektron durumlarının fazı ve enerji spektrumunun kesikli yapısı daha belirgin hale gelir. Daha da önemlisi, malzemeyi oluşturan atom sayıları 100' ler düzeyine inince, atomsal yapının geometrisi, hatta atom sayısının kendisi bile fiziksel özelliklerin belirlenmesinde etken olur. Nanoölçeklerdeki bir yapıya yeni eklenen her atomun fiziksel özelliklerde neden olduğu değişiklikler, bu atomun cinsine, nanoyapının türüne ve geometrisine bağlı olarak belirginleşir. Örneğin; nano yapının iletkenliği, o yapıya tek bir atom eklense bile değişebilmektedir. Benzer şekilde, nanoölçeklerde atomlar arası bağ yapısı da değişikliğe uğrayabilmekte; mekanik olarak malzeme güçlenirken ya da zayıflarken, elektronik olarak iletkenlik özelliği tümüyle değişebilmektedir. Örneğin, yarıiletken olarak bilinen ve çağımızın en önemli malzemesi olan silisyumdan yapılan bir telin çapı nanometreye yaklaşırken tel iletken bir karakter sergiler.

Tasarlanan yeni elektronik devre elemanlarının modellenmesi, sistemlerin ayarlanabilir fiziksel özellikleri temel alınarak yapılmaktadır. Yarıiletkenlerin kristal yapılarının incelenmesi sayesinde yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri belirlenebilmektedir. Bu nedenle bilim adamları çalışmalarını bu yapay modeller üzerinde yoğunlaştırmışlardır. Bu çalışmalar 1970'lerin ortasından itibaren IBM de çalışan Esaki ve Tsu önderliğinde güç kazanmıştır[1]. MBE (Molecular Beam Epitaxy) ve MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) gibi büyütme teknikleri yarıiletken fiziği ve teknolojisinde önemli etkiler yapmıştır. Epitaksiyel olarak yapılan büyütme yöntemleri ile son derece değişik yapılar oluşturulabilmektedir. Örneğin, iki $Ga_{1-x}Al_xAs$ yarıiletken tabakası arasına GaAs tabakası oluşturularak tekli kuantum kuyuları, bu tabakaların periyodik tekrarlanması halinde çoklu kuantum çukurları veya tabaka kalınlıkları ayarlanarak oluşturulabilen süper örgüler, bu yöntemlerle kolayca elde edilebilmektedir.

Yapılan çalışmalarda, önce yük taşıyıcılarının bir yöndeki hareketleri kısıtlanarak iki boyutlu kuantum kuyuları geliştirilmiştir. Daha sonra ise kuşatılma boyutları artırılarak bir boyutlu kuantum telleri ve sıfır boyutlu kuantum kutuları yapılmıştır. Geliştirilen sistemlerde boyut azaldıkça yani kuşatma arttıkça fiziksel özellikleri belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelmektedir. Bu sayede özel fonksiyonlara sahip aletler tasarlanmaktadır.

Yukarıda adı geçen düşük boyutlu sistemlerin külçe yapılara göre üstünlüğü bu sistemlerdeki boyut farklılığından kaynaklanır. Düşük boyutlu sistemler üzerine ilk çalışmalar Esaki ve Tsu tarafından yapılmıştır. Daha sonra Dingle ve arkadaşları çok dar heteroyapılarda soğurma olayını incelediler[2]. İki boyutlu sistemlerin özellikleri konusunda temel sayılabilecek bir çalışma da Ando, Fowler ve Stern tarafından yapılmıştır[3].

Düşük boyutlu sistemlerde son derece dar ve iyi tanımlanmış enerji düzeylerini elde etmek mümkündür. Buna ek olarak, bu sistemlerde elektron (veya boşluk) yoğunluğu istenildiği gibi değiştirilebilir. Üç boyutlu yarıiletken sistemlerde ise, yüksek taşıyıcı yoğunluğu elde etmek için birçok seçenek vardır. Sıcaklığı yükseltebilir veya taşıyıcıları termal olarak uyarabiliriz. Bunun sonucunda da iki tip taşıyıcı ve çok yüksek sıcaklıklarda fononların varlığına bağlı olarak daha çok saçılma olur. Benzer bir yaklaşım da yarıiletken üzerine ışık düşürülmesidir. Bu durumda yine iki tip taşıyıcı, fakat daha az sayıda fonon oluşur. Ancak ışığın homojen soğurulmamasından kaçınmak zordur. Bir başka yöntem olarak kristal, donör veya akseptörlerle katkılanabilir. Bu durumda tek tip yük taşıyıcıları oluşur, fakat bu taşıyıcıların aynı uzayda Coulomb merkezleri oluşturmaları istenmeyen bir durumdur. Ayrıca eşit yük ve sayı yoğunluğuna sahip dengeleme yükü mobiliteyi önemli miktarda azaltır. Oysa düşük boyutlu sistemlerde yük taşıyıcıları dengeleme yükten ayrı olarak uzayın farklı bölgelerinde lokalize oldukları için yukarıda sözü edilen olumsuzluklar söz konusu olamaz. Düşük boyutlu sistemlerin ilginç olmaları elektronik özelliklerinden kaynaklanır. Ayrıca yarıiletken mikroyapılar, elektronik cihazların hızlarının artırılmasında da çok önemli etkilere sahiptir. Bu devre elemanlarının boyutlarının çok küçük

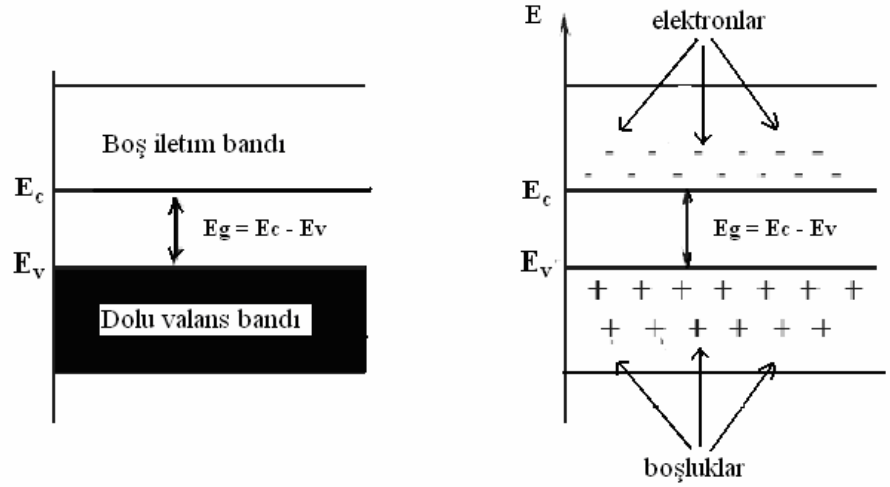
olması, elektron iletimi için gereken net zamanı doğal olarak çok kısaltır. Bu nedenle çok daha küçük elektronik cihazların oluşturulması konusunda yoğun çalışmalar yapılmaktadır.

Katkılı yarıiletken heteroyapılar da uygulama alanında yeni olanaklar sağlarlar. Örneğin, bu yapılarda mobilite ve modülasyon katkılama ile artırılabilir. Bu yöntem ile engel karakterinde olan bölge katkılanır, engeldeki donörler iyonlaşarak bu bölgeden çukura doğru hareket ederler ve orada kuşatılırlar. Bu şekilde yük taşıyıcıları ve safsızlık iyonları ayrılmış olurlar. Böylece düşük sıcaklıklarda mobiliteyi azaltan safsızlık saçılması ortadan kalkmış olur.

2-YARIİLETKENLER

2-1. Saf Yarıiletkenler

Her katının karakteristik bir enerji bant yapısı vardır. Katılardaki bant yapılarının çeşitliliği, elektrik iletiminde belirleyici özellikler taşır.



Şekil 2-1 (a) T = 0 K de yarıiletkenin bant yapısı

(b) T > 0 K de yarıiletkenin bant yapısı

Düşük sıcaklıklarda şekil 2-1 (a) da görüldüğü gibi yarıiletkenin tüm elektronları değerlik bandındadır, iletim bandında hiç elektron bulunmadığı için bir yalıtkan gibi davranır. Yarıiletkenlerin en belirgin özelliği; iletkenliklerinin, iyi iletkenlerle yalıtkanlar arasında oluşu ve sıcaklığın artmasıyla artışıdır. Şekil 2-1 (b) de sıcaklığın artmasıyla valans bandındaki elektronlar iletkenlik bandına geçerler ve iletme katılırlar geride pozitif yüklü boşluklar bırakırlar, bu şekilde yarıiletkenlerde elektronlar ve boşluklar olmak üzere iki tip yük taşıyıcı elde edilir.

Yarıiletkenleri yalıtkanlardan ayıran en önemli özellik, yasak enerji aralığının $E_g < 3$ eV olmasıdır, yalıtkanlarda ise bu aralık çok büyüktür ($E_g \sim 5$ eV) dolayısıyla yalıtkanlarda elektronların değerlik bandından iletim bandına geçme olasılıkları hemen hemen hiç yoktur. Yarıiletkenlerde elektriksel iletimin gerçekleşmesi, elektronların değerlik bandından herhangi bir etkenle (ısı, sıcaklık, basınç v.b) iletkenlik bandına geçmesi ile mümkündür. Elektronların iletim bandına geçmeleri sonunda, valans bandında bıraktıkları yüklü parçacıklara hole-boşluk denir. Boşluklar pozitif yüklü taneciklerdir ve elektrik alanı altında elektronlara zıt yönde hareket ederler.

İdeal bir yarıiletkende, örgü kusurları ve yabancı atomların oluşturdukları safsızlıklar yoktur. Bu tip yarıiletkenler katkısız veya saf yarıiletkenler olarak bilinir. Saf yarıiletkenlerde elektron yoğunluğu n , boşluk yoğunluğu p olmak üzere;

$$n = p = n_i \text{ olacaktır.}$$

n_i : yarıiletkendeki saf taşıyıcıların yoğunluğudur.

Saf yarıiletkenlerde akım iletimine katkıda bulunan elektron veya boşluk sayısı az olduğundan aygıt yapımında nadir olarak kullanılır.

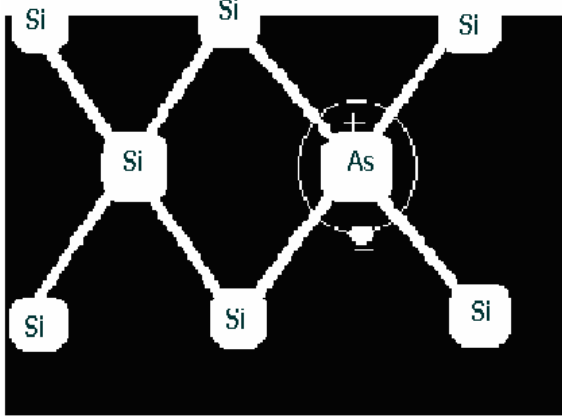
2-2. Katkılı Yarıiletkenler

Saf yarıiletkende akım iletimine katkıda bulunan elektron veya boşluk yoğunluğunu artırmak için kullanılan en yaygın yöntem, yarıiletken içerisine kristalin örgü yapısını bozmayacak bir şekilde safsızlık atomu (impurity) katmaktır. Yarıiletken içine safsızlık atomu katma işlemine 'katılama', bu tip yarıiletkene 'katkılı yarıiletken' denir. (Örneğin Si içine $1/10^5$ oranında Bor katıldığında saf Silisyumun oda sıcaklığındaki elektriksel iletkenliği 10^3 oranında artacaktır). Yarıiletkenlerde katılama sonucu katkı atomunun cinsine bağlı olarak n-tipi ya da p-tipi yarıiletken oluşturmak mümkündür. Katkılı yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri istenilen şekilde ayarlanabilen devre elemanları yapılmasına imkân vermesi nedeniyle, teknolojide geniş kullanım alanlarına sahiptir.

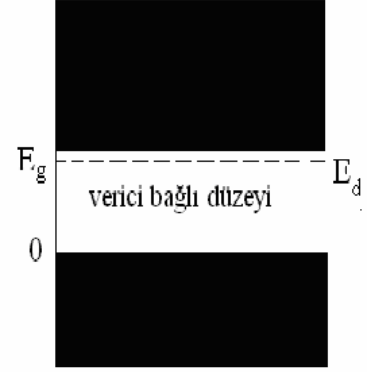
Yarıiletken içerisine safsızlık atomu katkılayarak iletme katılan elektron ya da hole sayısı artırılarak elektriksel iletkenlik artırılır. Saf yarıiletkenlerin elektriksel iletkenlikleri, katkı atomlarının cinsine ve konsantrasyonuna bağlı olarak belirgin ölçüde değişmektedir.

Bir yarıiletken kristal yapısında bulunan yabancı atomlar veya kristal yapı bozukluğu, yasak enerji bölgesinde lokalize ara enerji seviyelerinin oluşmasına neden olur.

2-1. 1 Verici Safsızlık Atomları



Şekil 2-2 As (+5) atomu katkılanmış Si (+4) atomu

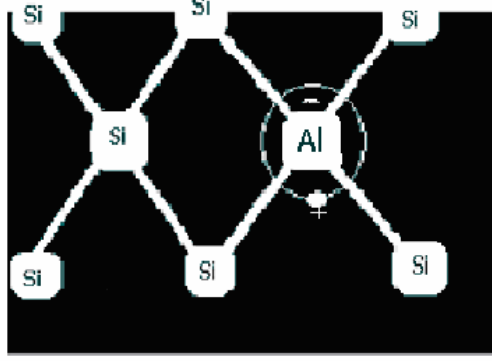


Şekil 2-3 Donor enerji seviyesi

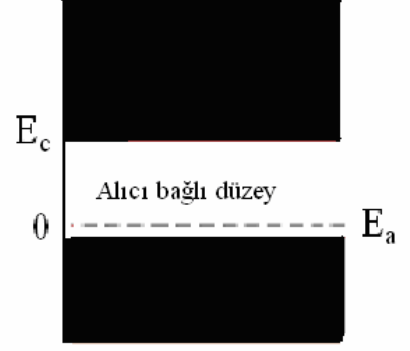
Dört değerlik elektronuna sahip Si kristali içerisine, beş değerlik elektronuna sahip As atomu, kristalin örgü yapısını bozmayacak şekilde katkılanırsa, beş bağ elektronlu bu atomunun dört elektronu Si atomunun dört elektronu ile çiftli kovalent bağını yapacaktır ve bu durumda bir valans elektronu boşa kalır. Boşta kalan bu elektron $e^2 / \epsilon r$ Coulomb potansiyelinde hareket eder (ϵ dielektrik sabitidir). Her katkı atomu başına serbest kalan bu tek elektronun bağlanma enerjisi çok küçük olup, serbest elektron gibi davranır. Bu sebeple oda sıcaklığında iletkenlik bandında bulunur. Kristale karıştırılan beş bağ elektronlu atomlara, elektron verici anlamına gelen 'donor' ve bu donor atomlarının iletkenlik bandına yakın olan enerji seviyesine 'donor seviyesi' yeni oluşan katkılı yarıiletkene ise 'n-tipi yarıiletken' denir.

Şekil 2-2 de görüldüğü gibi As beş değerlik elektronuna, Si ise dört değerlik elektronuna sahiptir. Buna göre As'ın dört elektronu Si atomları ile dörtlü kovalent bağını oluşturduktan sonra kalan beşinci elektron iletkenliğe katılır. As atomu verici olarak adlandırılır, çünkü iyonlaşmış durumda iletkenlik bandına bir elektron vermiştir.

2-2. 2 Alıcı Safsızlık Atomları



Şekil 2-4 Al (+3) katkılanmış Si (+4) atomu



Şekil 2-5 akseptör enerji seviyesi

Ge veya Si kristaline üç bağ elektronlu (B, Ga, Al) atomlar katıldığında, 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 elektron boşluğunu doldurur ve böylece boşluk yer değiştirmiş olur. Boşluğun gittiği yerdeki komşu atomların elektronlarından biri yine elektron boşluğunu doldurabilir. Bu şekilde de elektron boşluğunun hareketi ile elektrik akımının taşınması gerçekleşir. Sonuçta boşluklar valans bandında bulunacak yabancı atomlar negatif yüklenerek iyonize olacaktır. Kristale karıştırılan üç bağ elektronlu yabancı atomlara elektron alıcı veya ‘akseptör’, akseptörlerin valans bandına yakın olan enerji seviyesine ‘akseptör seviyesi’, yeni oluşan katkılı yarıiletken ise ‘p-tipi yarıiletken’ denir. Şekil 2-4 ‘de Al atomu üç valans elektronuna sahiptir. Dörtlü kovalent bağını tamamlayabilmek için Si – Si bağından bir elektron Silisyum valans bandında bir boşluk bırakır. Bu pozitif boşluk iletkenliğe katılır. Al atomuna alıcı denir, çünkü iyonlaşmış durumda bir elektron almıştır. $T = 0$ K de boşluk bağlıdır, ancak sıcaklık arttıkça serbest duruma geçer.

Alıcı ve vericinin her ikisinde de enerji seviyesi yasak enerji aralığına düşmektedir. Bu bölge bant modeline göre, elektronun bulunamayacağı bir yerdedir. Bunda bir çelişki yoktur, çünkü burada ki enerji seviyesi saf kristalin değil, katkılı kristalin alıcı ve vericinin enerji seviyesidir. Bunlar safsızlık durumlarını temsil eder.

3-KUANTUM KUYULARI

3-1. Giriş

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

Kuantum kuyuları, yarıiletken fiziğinin en önemli uygulama alanlarından biridir. İki boyutlu bir geometriye sahiptir. Elektronlar ve holler iki boyutta serbestçe hareket ederler. Üçüncü boyuttaki hareket, deneysel olarak değiştirilebilen kuyuda sınırlıdır.

3-2. Manyetik Alan Altında Üçlü GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs Kuantum Kuyusundaki Donor Safsızlık Atomlarının Bağlanma Enerjisi

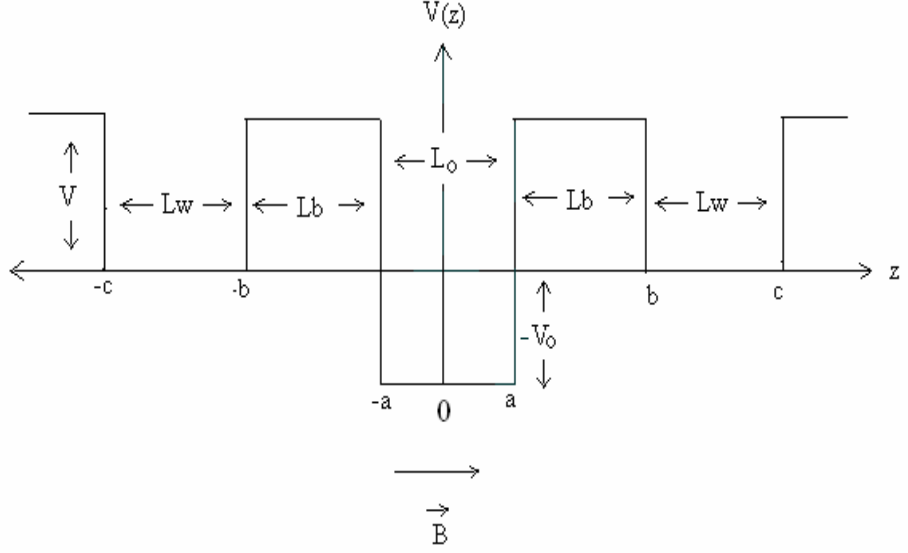
Yarıiletken heteroyapılar, ilginç fiziksel olaylara neden olduğundan fotodedektör ve optoelektronik cihazlar gibi önemli uygulamalara sahiptir. Yarıiletken heteroyapılar da elektronik ve optik özellikleri uygun potansiyel profilleri seçilerek, elektrik ve manyetik alan gibi dış alanlar uygulayarak ve katkılama gibi yöntemlerle amaca uygun olarak değiştirilebilir.

Teknolojik uygulamadaki çeşitliliğe bağlı olarak tek ve çoklu kuantum kuyuları çok yoğun bir şekilde çalışılmaktadır. Çift-engel ve çift-kuyu sistemlerine bağlı olarak üçlü kuantum kuyularının fiziksel özelliklerinde ilginç değişimler gözlenmiştir. Çift kuantum kuyuları ile kıyaslandığı zaman üçlü kuantum kuyularının özellikle rezonans tünelleme de üstünlük sağladığı görülmüştür.

Yarıiletken heteroyapılardaki safsızlık atomları (impuritiler) uygun dış alanlara (elektrik ve manyetik alan gibi) ve seçilen uygun potansiyel biçimine bağlı olarak sistemin elektronik ve optik özelliklerinin nitel olarak değişmesine neden olurlar. Bu nedenle farklı yarıiletken heteroyapılarda safsızlık atomlarının enerji düzeyleri, bağlanma enerjileri ve bunlara ait spektrum yoğun bir şekilde çalışılmıştır [4-13].

Yapılan bu çalışma da üçlü GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusundaki donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisi, büyütme doğrultusuna (z-yönü) paralel olarak uygulanan manyetik alanın, kuyu ve engel genişliklerinin ve merkezi kuyunun potansiyel derinliğinin bir fonksiyonu olarak etkin kütle yaklaşımında varyasyonel olarak hesaplandı.

Şematik gösterimi şekil 3-1 de verilen üçlü kuantum kuyusu, dıştaki L_w genişlikli kuantum kuyularıyla L_b genişlikli potansiyel engelleriyle birleştirilmiş L_o genişlikli merkezi bir GaAs kuantum kuyusundan oluşur.



Şekil 3-1 Üçlü kuantum kuyusunun şematik gösterimi

Etkin kütle yaklaşımında, elektron ve donör safsızlık atomundan oluşan sistemin manyetik alan altındaki Hamiltonian'ı

$$H = \frac{1}{2m_e^*} \left(\vec{p}_e + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_e) \right)^2 + V(z) - \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{r}_e - \vec{r}_i|} \quad (3.1)$$

ile verilir. Burada $V(z)$, z doğrultusunda büyütülen üçlü kuantum kuyusundaki elektron için

kuşatma potansiyeli, m_e^* elektronun etkin kütlesi \vec{r}_e ve \vec{r}_i sırası ile elektron ve donör safsızlık atomunun konumları, \vec{p}_e elektron momentumu, e elektronun yükü, ϵ_0 dielektrik sabitidir (

kuyu ve engel içinde eşit alınmıştır) [14]. $\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r})$ Vektör potansiyelidir. Manyetik alan

büyütme doğrultusuna (z doğrultusuna) paralel olarak uygulanmıştır, yani $\vec{B} = (0,0,B_0)$.

Uygulanan manyetik alanı tanımlamak için vektör potansiyeli $\vec{A} = \left(\frac{-B_0 y}{2}, \frac{B_0 x}{2}, 0 \right)$

biçiminde seçilmiştir.

$$|a| = \frac{L_o}{2} \quad , \quad |b| = \frac{L_o}{2} + L_b \quad , \quad |c| = \frac{L_o}{2} + L_w + L_b$$

L_o merkezi kuyunun genişliği, L_b engel genişliği, L_w dış kuyuların genişliği olmak üzere,

kuşatma potansiyelinin fonksiyonel formu

$$V(z) = \begin{cases} V & , \quad z < -c \\ 0 & , \quad -c < z < -b \\ V & , \quad -b < z < -a \\ -V_o & , \quad -a < z < a \\ V & , \quad a < z < b \\ 0 & , \quad b < z < c \\ V & , \quad z > c \end{cases} \quad (3.2)$$

biçimindedir.

Momentum ve vektör potansiyelinin bileşenleri yerine yazılıp, gerekli düzeltmeler yapıldıktan sonra denklem (3.1)

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e\hbar B_o L_z}{2m_e^* c} + \frac{e^2 B_o^2 (x^2 + y^2)}{8m_e^* c^2} - \frac{e^2}{\epsilon_o \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} + V_z \quad (3.3)$$

biçimine dönüşür.

$$x = \rho \cos \Phi$$

$$y = \rho \sin \Phi$$

dönüşümü ile silindirik koordinatlardaki Hamiltonian,

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{eB_o L_z}{2m_e^* c} + \frac{e^2 B_o^2 \rho^2}{8m_e^* c^2} - \frac{e^2}{\epsilon_o \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} + V(z) \quad (3.4)$$

biçiminde elde edilir.

L_z açılmal momentum operatörünün $\hbar = 1$ birimindeki z bileşeni, $\rho = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$, $(x - y)$ düzlemindeki elektron ve donör safsızlık atomu arasındaki bağıl uzaklıktır.

Hamiltonian'deki bütün uzunluklar Bohr yarıçapı $\left(a_o = \frac{\epsilon_o \hbar^2}{m_e^* e^2} \right)$ ve tüm enerji terimleri

de $\left(R = \frac{m_e^* e^4}{2\epsilon_o^2 \hbar^2} \right)$ Rydberg'e göre normalize edilirse boyutsuz Hamiltonian aşağıdaki

biçiminde elde edilir [15].

$$\tilde{H} = - \left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\Phi}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}^2} \right] - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} - \tilde{\gamma} L_z + \frac{1}{4} \tilde{\gamma}^2 \tilde{\rho}^2 - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} + V(\tilde{z}) \quad (3.5)$$

Burada $\tilde{\gamma} = \frac{e\hbar B_o}{2m_e^* cR}$ ile verilir ve birinci Landau düzeyi olarak adlandırılır.

Varyasyon tekniğini kullanarak, denklem (3.5) de tanımlanan Hamiltonian için yaklaşık bir özfonksiyon olan deneme dalga fonksiyonu oluşturulabilir. Donör safsızlık atomu için taban durum dalga fonksiyonu

$$\Phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \psi(\tilde{z}) \varphi(\tilde{\rho}, \alpha) \quad (3.6)$$

ile verilir.

$\psi(\tilde{z})$, z doğrultusundaki Schrödinger denkleminin tam çözümünden elde edilen dalga fonksiyonu ve $(x-y)$ düzlemindeki dalga fonksiyonu $\varphi(\tilde{\rho}, \alpha)$ iki boyutlu hidrojen tipi atomun taban durumu dalga fonksiyonu olacak şekilde seçilir [4,5].

$$\varphi(\tilde{\rho}, \alpha) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\alpha} \text{Exp}[-\tilde{\rho}/\alpha] \quad (3.7)$$

α varyasyon parametresidir ve hidrojen atomundaki a_0 Bohr yarıçapına karşılık gelir.

Donor safsızlık atomunun bağlanma enerjisi denklem (3. 5) deki Hamiltonian'ın beklenen değerini minimum yapan α varyasyon parametresine göre belirlenir ve taban durumu için donör bağlanma enerjisi [16,17]

$$E_b = E_z + \gamma - \langle \Phi | H | \Phi \rangle \quad (3.8-a)$$

$$\tilde{E}_b = \tilde{\gamma} - \frac{1}{\alpha^2} - \frac{3}{8} \tilde{\gamma}^2 \alpha^2 + \frac{8}{\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} |\psi(\tilde{z})|^2 d\tilde{z} \frac{e^{-\frac{2\tilde{\rho}}{\alpha}}}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} d\tilde{\rho} \quad (3.8-b)$$

ile verilir [15,18,19]. Burada \tilde{E}_z , z-doğrultusundaki Schrödinger denkleminde elde edilen elektronun taban durum enerjisidir.

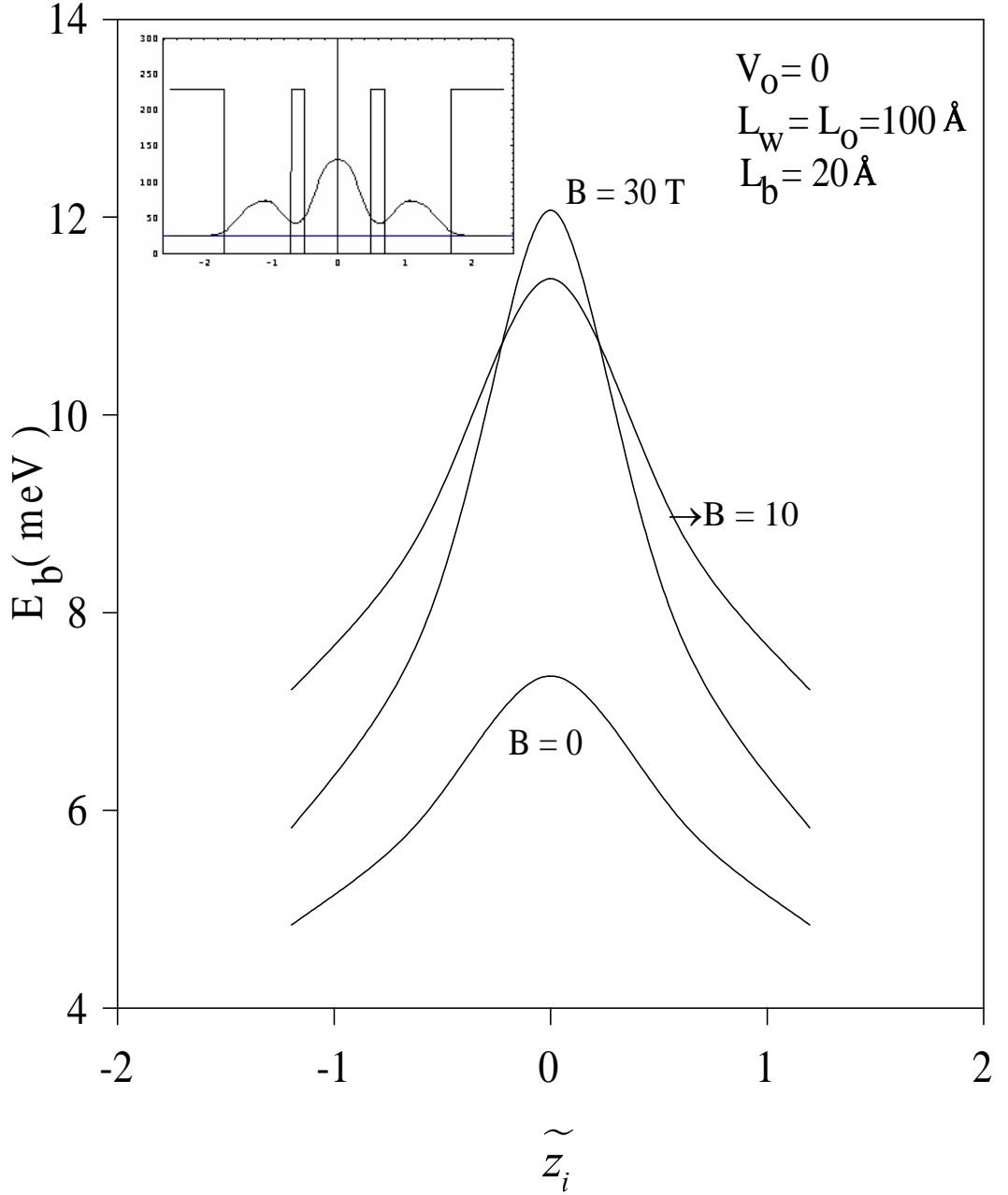
Hesaplamalarımızda kullandığımız fiziksel parametrelerin değerleri $m_e^* = 0.665m_0$ (m_0 serbest elektron kütlesi), $\epsilon_0 = 12.58$ ve GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As yapısının iletkenlik bant süreksizliği $V = 228$ meV olarak alınmıştır[15].

Çalışmamızda ilk olarak üzerinde durduğumuz sistemin ayarlanabilir parametreleri olan V_0 , L_w , L_b , L_0 değiştirilerek donör bağlanma enerjisinin donör konumuna, manyetik alan şiddetine ve merkezi kuyunun potansiyel derinliğine bağlılığı incelendi.

Şekil 3-1 (a) da $V_0 = 0$, $L_w = L_0 = 100$ Å, $L_b = 20$ Å için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin normalize donör konumuna göre değişimi, farklı manyetik alan değerleri için

verilmiştir. Ayrıca aynı kuyu parametreleri için elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi ve potansiyel profili de bu şekil içine yerleştirilmiştir.

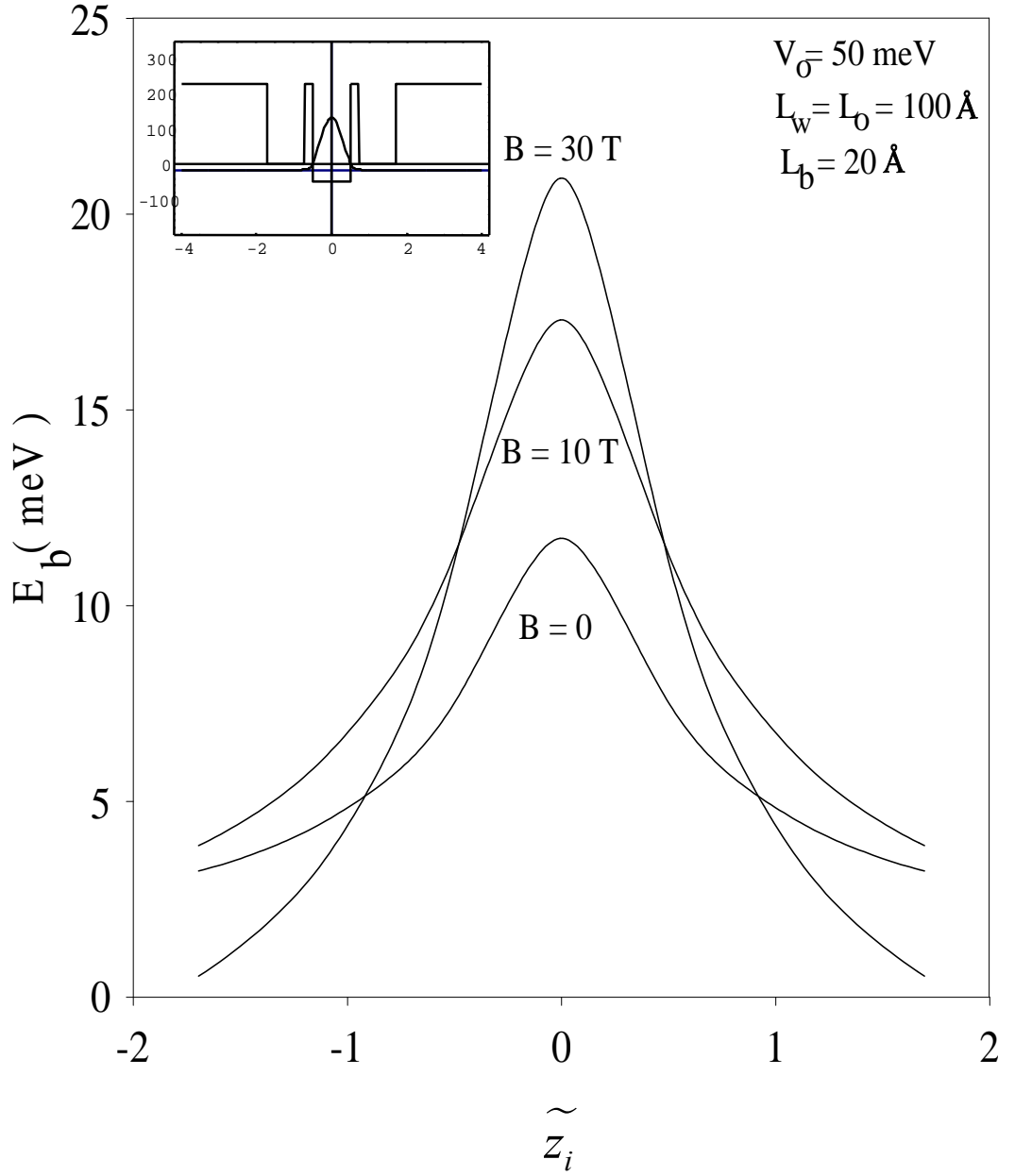
Dalga fonksiyonunun uzaysal dağılımına baktığımızda (küçük şekil), elektronun merkezi kuyuda bulunma olasılığı, dış kuyularda bulunma olasılığından fazladır bu nedenle, maksimum bağlanma enerjisi merkezi kuyunun merkezinde yerleşen donör atomu için elde edilir. Merkezden uzaklaştıkça, elektronun dış kuyularda bulunma olasılığı azaldığından dolayı, dış kuyuların merkezinde yerleşen donör atomları için bağlanma azalır. Kısaca donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin donör konumuna göre değişimi elektronun taban durum dalga fonksiyonunun uzaysal dağılımının bir haritası gibidir. Manyetik alan arttıkça bağlanma enerjisi artar çünkü manyetik alan elektronun (x-y) düzleminde daha fazla kuşatılmasına neden olur, bu nedenle de elektron ile donör atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığını artırdığı için bağlanma enerjisi manyetik alan arttıkça artar.



Şekil 3-1 (a) $V_0 = 0$ için $L_w = L_o = 100 \text{ \AA}$ ve $L_b = 20 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin, farklı manyetik alan değerleri için normalize donör konumuna göre değişimi ve aynı parametreler için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Şekil 3-1 (b) de $V_o = 50$ meV, $L_w = L_o = 100$ Å, $L_b = 20$ Å için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin normalize konuma göre değişimi, farklı manyetik alan değerleri için verilmiştir. Ayrıca aynı kuyu parametreleri için elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi ve potansiyel profili de bu şekil içine yerleştirilmiştir.

Merkezi kuyunun derinliğini artırdığımızda dalga fonksiyonunun uzaysal lokalizasyonundan da görüldüğü gibi elektron tamamen merkezi kuyuda lokalize olur ve merkezde yerleşmiş donör safsızlık atomu ile elektronun birbirlerini aynı düzlemde görme olasılıkları arttığı için bağlanma enerjisi bir önceki duruma göre daha fazla artar (yaklaşık iki kat artar). Elektronun dış kuyularda bulunma olasılığı çok zayıfladığı için dış kuyu merkezlerinde lokalize olan donör atomları için bağlanma çok zayıf olur.

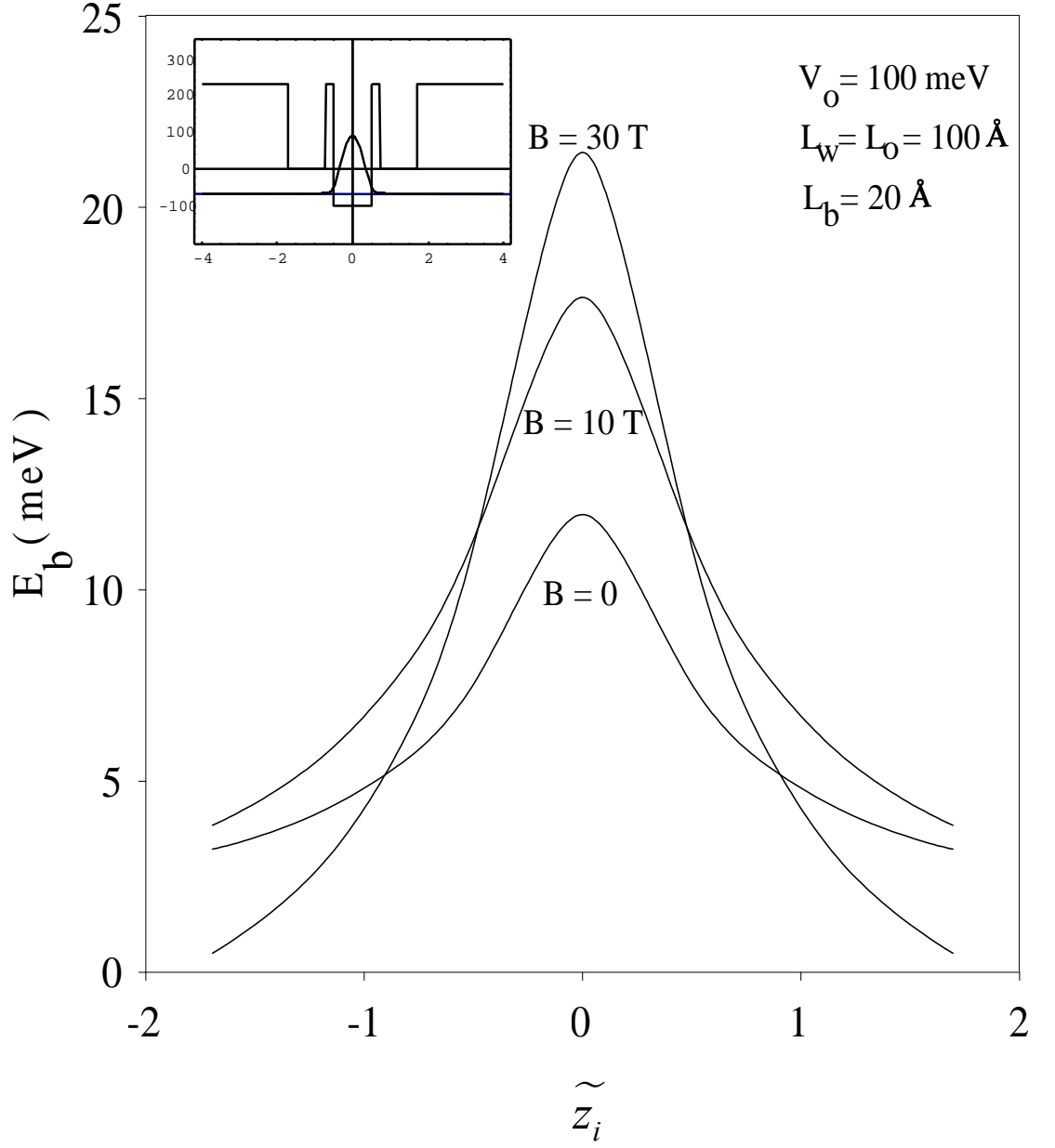


Şekil 3-1 (b) $V_0 = 50$ meV için $L_w = L_o = 100$ Å ve $L_b = 20$ Å için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin, farklı manyetik alan değerleri için normalize donör konumuna göre değişimi ve aynı parametreler için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Şekil 3-1 (c) de $V_o = 100$ meV, $L_w = L_o = 100$ Å, $L_b = 20$ Å için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin normalize konuma göre değişimi farklı manyetik alan değerleri için verilmiştir. Ayrıca aynı kuyu parametreleri için elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi ve potansiyelin profili de bu şekil içine yerleştirilmiştir.

$V_o = 100$ meV için elektron tamamen merkezi kuyu da lokalizedir, bu nedenle merkezi donör atomu için elde edilen bağlanma enerjisi, dış kuyuların merkezinde lokalize olan donör atomları için elde edilen bağlanma enerjisinden oldukça büyüktür ve burada elde edilen sonuçlar Şekil 3-1 (b) deki sonuçlarla hemen hemen aynıdır.

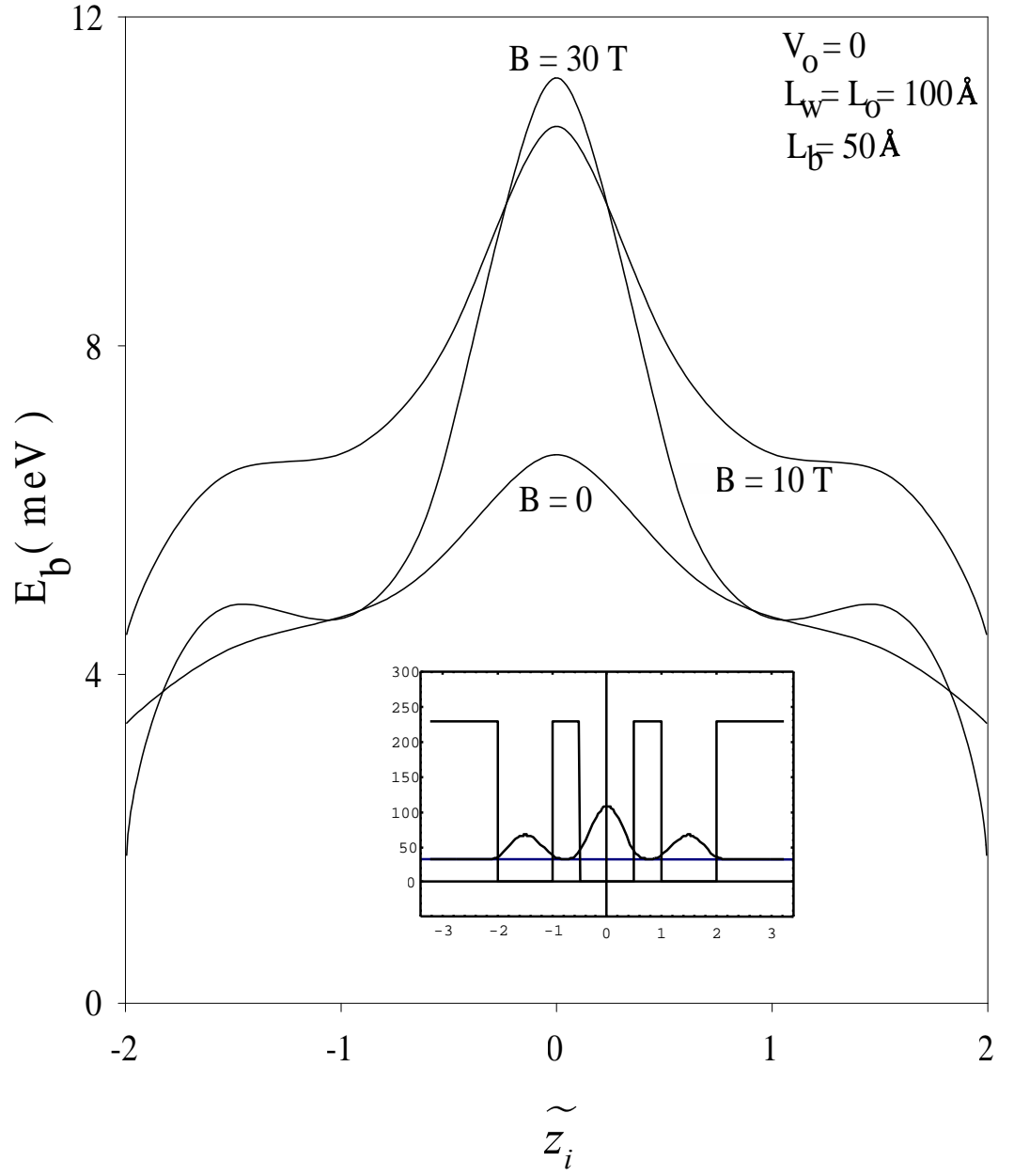
Donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin dış alana ve sistemin geometrisine güçlü bir şekilde bağlı olduğunu kanıtlar.



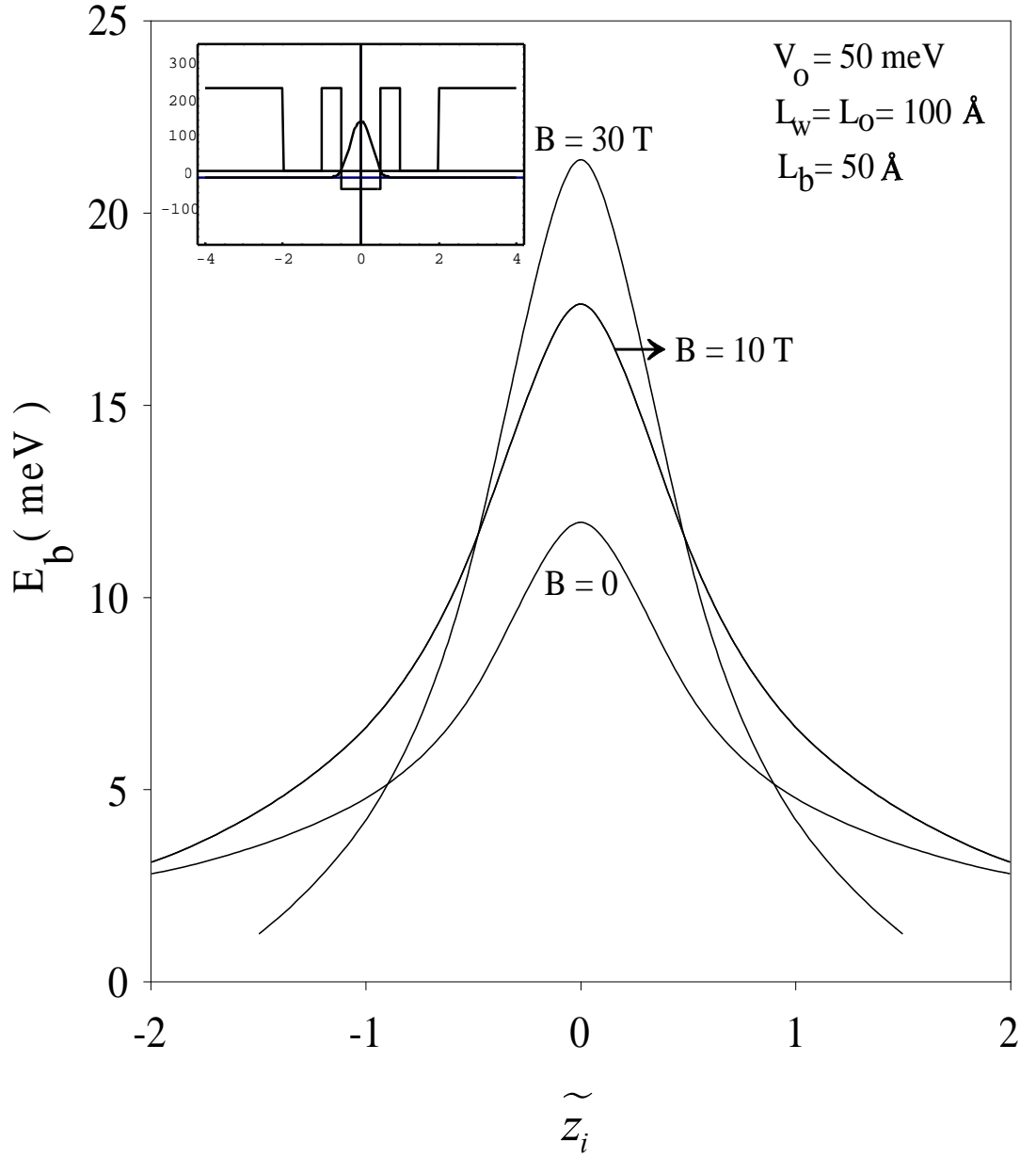
Şekil 3-1 (c) $V_o = 100$ meV için $L_w = L_o = 100$ Å ve $L_b = 20$ Å için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin, farklı manyetik alan değerleri için normalize donör konumuna göre değişimi ve aynı parametreler için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Tezin bu bölümünde bariyer genişliğini artırarak elektron ile donör safsızlık atomu arasındaki bağlanma enerjisinin merkez kuyu potansiyelinin derinliğine ve manyetik alana bağlı değişimi incelenecektir.

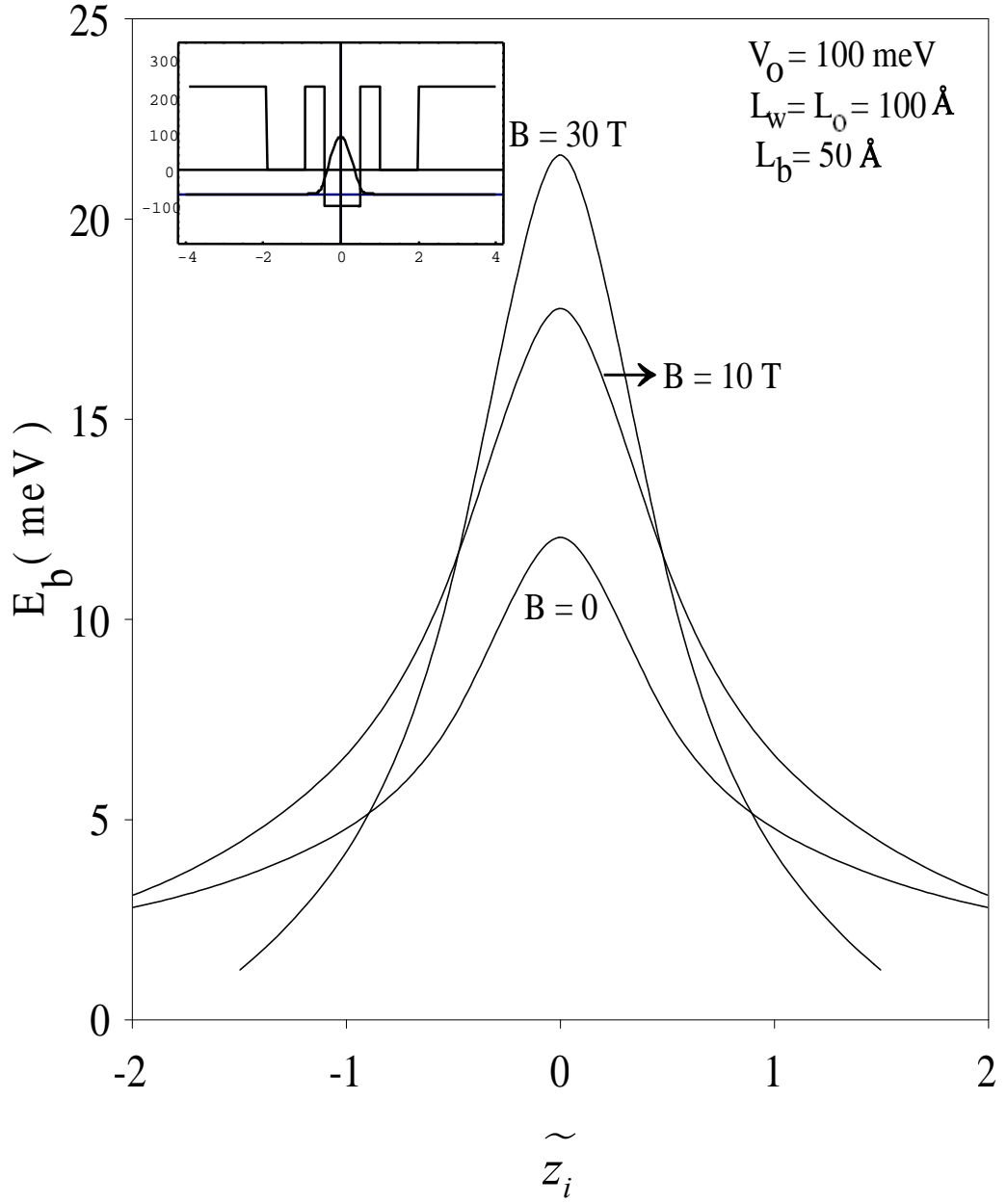
Şekil 3-2 (a), (b), (c) de $L_w = L_o = 100 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör bağlanma enerjisinin normalize donör konumuna göre değişimi farklı manyetik alan değerlerine göre $V_o = 0$, $V_o = 50 \text{ meV}$, $V_o = 100 \text{ meV}$ için sırası ile verilmiştir. Engel genişliğinin artmasıyla efektif uzunluk ($L_{ef} = 2L_w + L_o + 2L_b$) artar ve elektron ile donör atomunun birbirlerini aynı düzlemde görme olasılıkları azalacağı için bağlanma enerjisi tüm donör konumları için Şekil 3-1 (a) dakine oranla azalır. Ancak yine bağlanma enerjisi elektron lokalizasyonuna bağlı olarak merkezdeki donör atomu için dış kuyulardaki donör atomlarınınkinden daha büyüktür. $V_o = 50 \text{ meV}$ ve $V_o = 100 \text{ meV}$ potansiyel derinlikleri için elektron tamamen merkezi kuyuda lokalizedir ve bu nedenle donör bağlanma enerjileri, engel genişliği $L_b = 50 \text{ \AA}$ olmasına rağmen Şekil 3-1 (b) ve Şekil 3-1 (c) deki ($L_b = 20 \text{ \AA}$) sonuçlar ile tamamen aynıdır. Elektron tamamen merkezi kuyuda yerleştiği için engel genişliğinin hiçbir önemi yoktur.



Şekil 3-2 (a) $V_0 = 0$ için $L_w = L_0 = 100 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için normalize donör konumuna göre değişimi ve aynı parametreler için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi



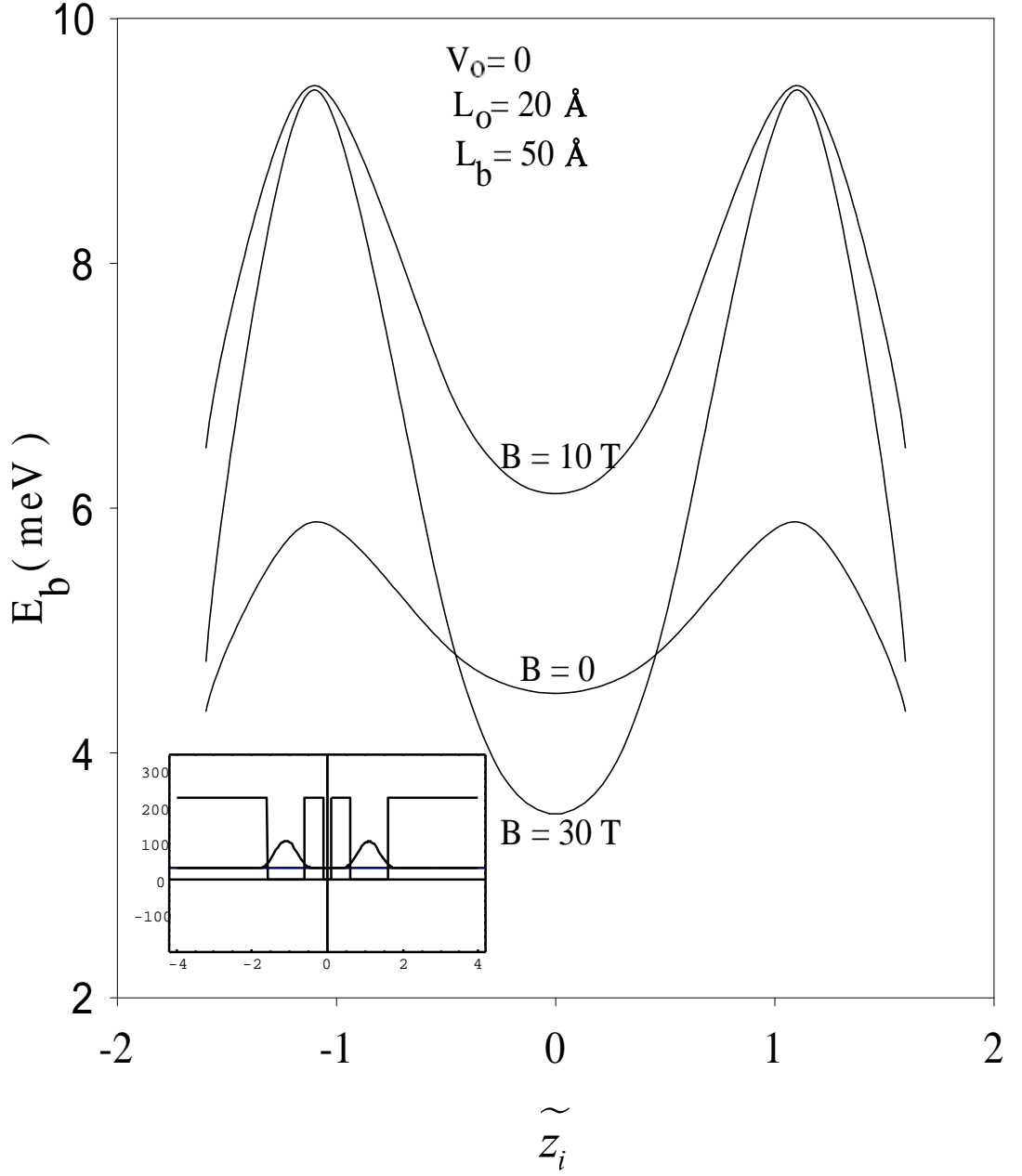
Şekil 3-2 (b) $V_0 = 50$ meV için $L_w = L_o = 100$ Å ve $L_b = 50$ Å için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için normalize donör konumuna göre değişimi ve aynı parametreler için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi



Şekil 3-2 (c) $V_0 = 100$ meV için $L_w = L_o = 100$ Å ve $L_b = 50$ Å için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için normalize donör konumuna göre değişimi ve aynı parametreler için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Şekil 3-3 de, $V_o = 0$, $L_o = 20 \text{ \AA}$, $L_b = 50 \text{ \AA}$ ve $L_w = 100 \text{ \AA}$ için donör bağlanma enerjisinin donör konumuna göre değişimi farklı manyetik alan değerleri için verilmiştir. Bu parametreler için potansiyelin şekli ile dalga fonksiyonunun genliğinin karesi $|\psi(\tilde{z})|^2$ nin normalize donör konumuna göre değişimi de şekil içinde verilmiştir.

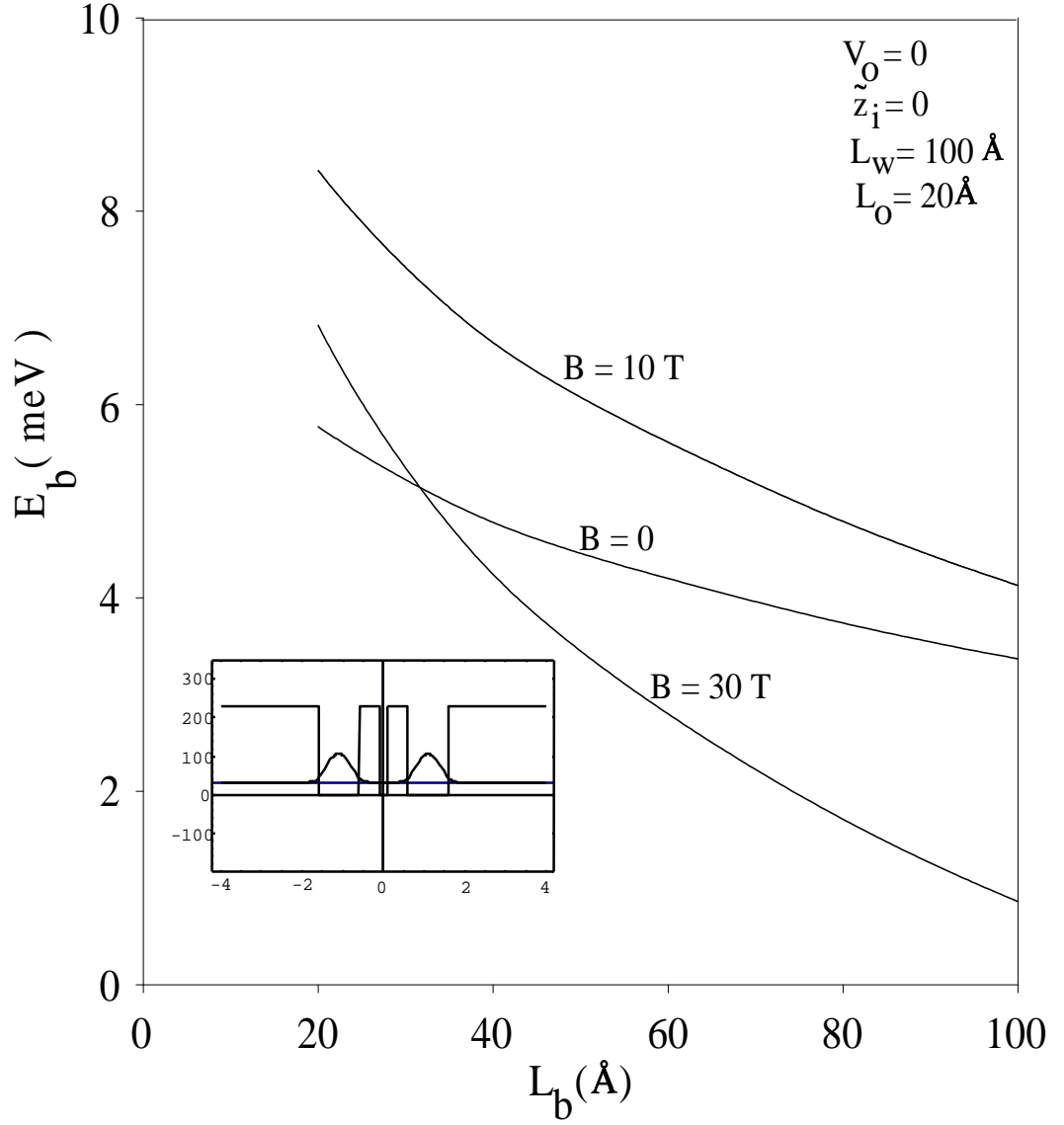
Dalga fonksiyonunun analizinden de görüldüğü gibi, merkezi kuyu genişliğinin çok dar olması nedeniyle elektron tamamen dış kuyularda lokalize olmuştur. Bu durum tamamen bağlanma enerjisinin normalize donör konumuna göre değişiminde kendisini gösterir. Merkezdeki donör atomu için bağlanma enerjisi çok düşük, dış kuyu merkezlerindeki donör atomları için bağlanma enerjisi oldukça büyüktür. Manyetik alanın (x-y) düzlemindeki kuşatmayı ve elektron ile donör arasındaki Coulombik etkileşimi artırdığı ve buna bağlı olarak da bağlanma enerjisini artırdığı bilinir. Bu şekilde merkezi donör için $B = 30 \text{ T}$ değerindeki değişim bir çelişki yaratmaz çünkü elektron merkezi kuyuda ($L_o = 20 \text{ \AA}$) delokalizasyon rejimindedir (z doğrultusu), manyetik alan elektronun (x-y) düzlemindeki yayılımını artırır, bu nedenle büyük alanlarda bağlanma enerjisi azalır. Ayrıca $L_o = 20 \text{ \AA}$ için elektron dış kuyularda lokalize, merkezi kuyuda delokalize olduğu için V_o ' ın artması hiçbir şekilde bu sonucu değiştirmez. Bu nedenle $V_o = 50 \text{ meV}$ ve $V_o = 100 \text{ meV}$ için bağlanma enerjisi eğrilerine yer verilmemiştir.



Şekil 3-3 $V_o = 0$ için $L_w = 100 \text{ \AA}$, $L_o = 20 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ değerleri için donör atomunun bağlanma enerjisinin, farklı manyetik alan değerleri için normalize donör konumuna göre değişimi ve aynı parametreler için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Şekil 3-4 (a) da $V_o = 0$ da $L_o = 20 \text{ \AA}$, $L_w = 100 \text{ \AA}$ için farklı manyetik alan değerleri altında bağlanma enerjisinin L_b bariyer genişliğine göre değişim grafiği ve $V_o = 0$, $L_o = 20 \text{ \AA}$, $L_b = 50 \text{ \AA}$ için normalize dalga fonksiyonu grafiği verilmiştir.

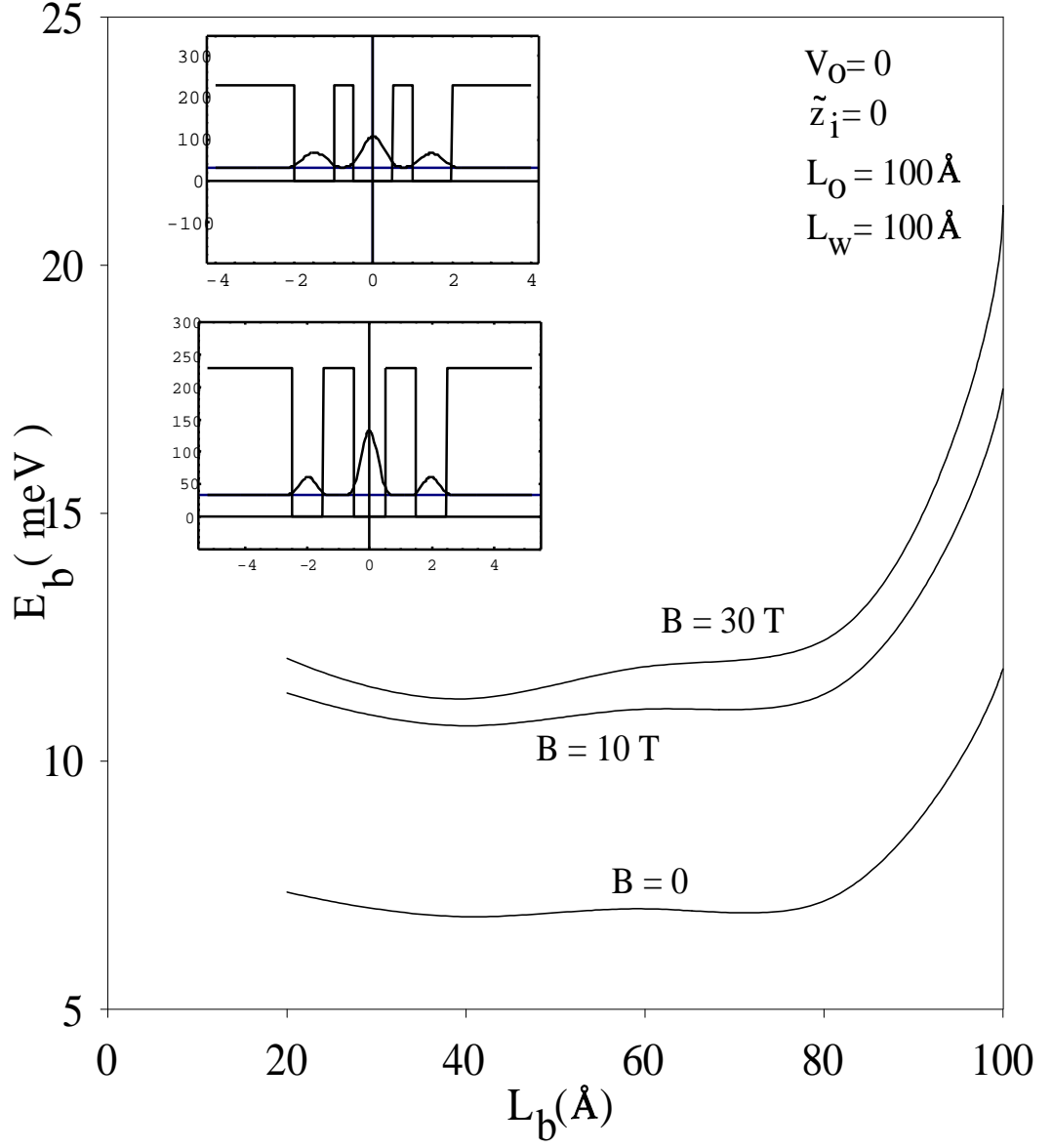
Şekilde görüldüğü gibi L_b bariyer genişliği arttıkça bağlanma enerjisinin tüm manyetik alan değerleri için azaldığı görülmektedir. $L_o = 20 \text{ \AA}$ da merkezi kuyuda elektron bulunma olasılığı çok küçüktür (dalga fonksiyonu grafiğinden de görülmektedir), bu nedenle dış kuyuların merkezinde yerleşen donör atomu ile elektron arasındaki bağlanma enerjisi daha büyük olacaktır. Engel genişliğinin artmasıyla elektron ile merkezde lokalize olan safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı gittikçe daha da azalacaktır yani efektif uzunluk arttığı için bağlanma enerjisi de azalacaktır.



Şekil 3-4 (a) $V_o = 0$, $L_o = 20 \text{ \AA}$, $L_w = 100 \text{ \AA}$ için donör atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için bariyer genişliği (L_b) ye göre değişim grafiği ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ $L_o = 20 \text{ \AA}$ da potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Şekil 3-4 (b) de $V_o = 0$, $L_o = 100 \text{ \AA}$ ve $L_w = 100 \text{ \AA}$ için farklı manyetik alan değerlerine göre bağlanma enerjisinin L_b bariyer genişliğine göre değişim grafiği ve farklı iki L_b değeri için $|\psi(\tilde{z})|^2$ nin normalize donör konumuna göre değişimi Şekil-3.4 (b) de verilmiştir.

Bağlanma enerjisinin engel genişliğine bağlı olarak değişimine baktığımızda önce $L_b \sim 40 \text{ \AA}$ azaldığı ve $L_b > 40 \text{ \AA}$ için arttığını görmekteyiz. $|\psi(\tilde{z})|^2$ nin konuma göre değişimi bu durumu net bir şekilde açıklamaktadır. Merkezi kuyu genişliğinin artmasıyla elektronun merkezi kuyuda bulunma olasılığı bir önceki $L_o = 20 \text{ \AA}$ değerine oranla oldukça fazladır ve engel genişliğinin artmasıyla elektronun dış kuyularda bulunma olasılığı gittikçe azalacağı için $\tilde{z}_i = 0$ donör atomu için bağlanma enerjisi L_b arttıkça tüm alan değerleri için artacaktır.

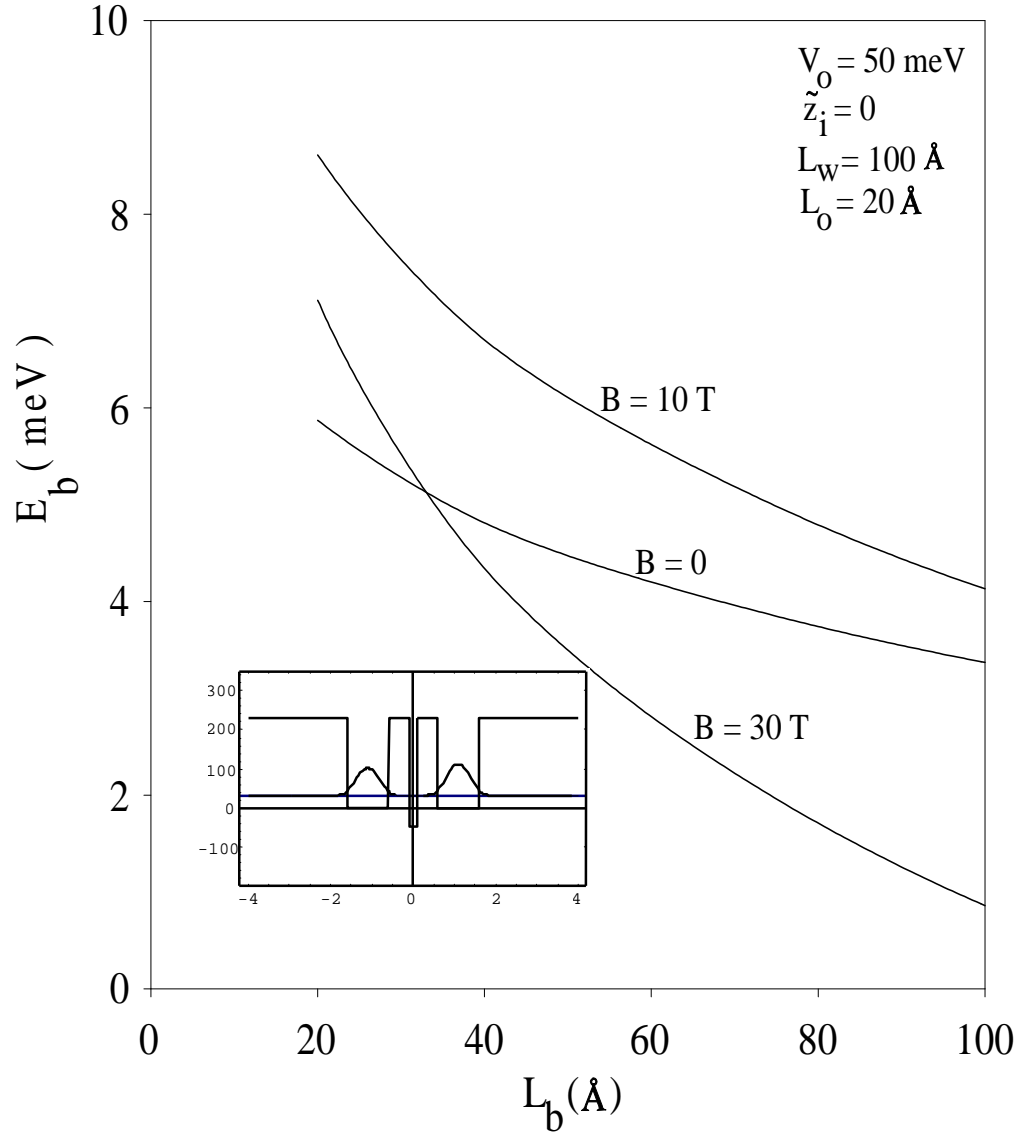


Şekil 3-4 (b) $V_0 = 0$, $L_0 = 100 \text{ \AA}$, $L_w = 100 \text{ \AA}$ için donör atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için bariyer genişliği (L_b) ye göre değişim grafiği ve $L_b = 50 \text{ \AA}$, $L_0 = 100 \text{ \AA}$ ve $L_b = 100 \text{ \AA}$, $L_0 = 100 \text{ \AA}$ için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Şekil 3-5 (a), (b), (c) de $V_o = 50$ meV, $L_w = 100$ Å için donör bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerlerine göre L_b -engel genişliğinin bir fonksiyonu olarak değişim grafiği $L_o = 20$ Å, $L_o = 50$ Å ve $L_o = 100$ Å için sırasıyla verilmiştir.

$V_o = 50$ meV, $L_o = 20$ Å ve $L_w = 100$ Å kuyu parametreleri için bağlanma enerjisinin L_b -engel genişliğine göre değişimi farklı manyetik alan değerleri için Şekil 3-5 (a) da verilmiştir. Burada elde edilen sonuçlar $V_o = 50$ meV olmasına rağmen Şekil 3-4 (a) da $V_o = 0$ için elde edilen sonuçlarla tamamen aynıdır çünkü, merkezi kuyunun genişliği çok dar olduğu için elektron delokalizasyon rejimindedir ve V_o 'ın artması bu durumu değiştirmez.

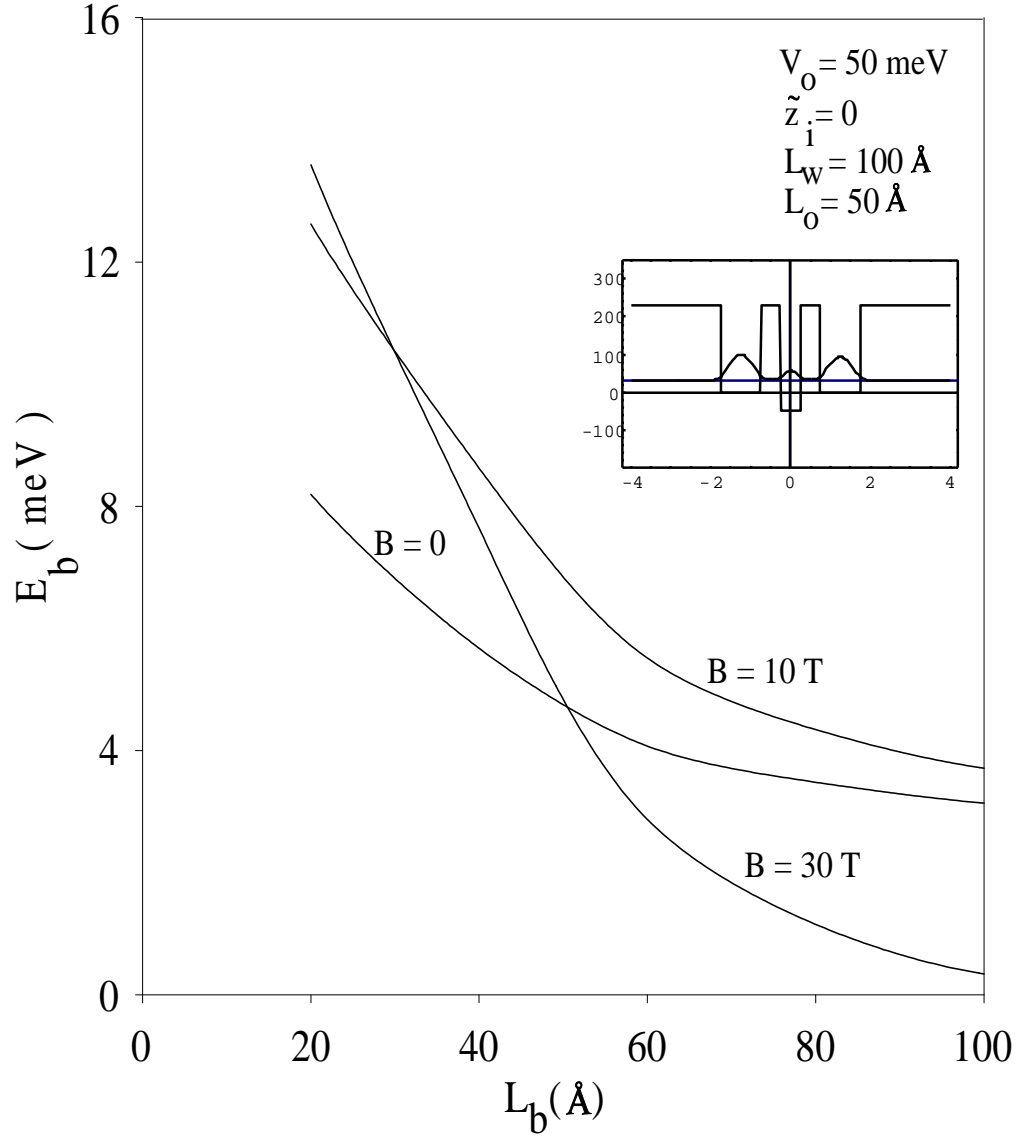
L_b nin artmasıyla elektronun merkezde bulunma olasılığı gittikçe azalır (sızmalar kalkar) ve buna bağlı olarak da bağlanma enerjisi azalır.



Şekil 3-5 (a) $V_o = 50 \text{ meV}$, $L_o = 20 \text{ \AA}$ ve $L_w = 100 \text{ \AA}$ için donör atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için bariyer genişliğine (L_b) göre değişimi ve $L_b = 50 \text{ \AA}$, $L_o = 20 \text{ \AA}$ için potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Şekil 3-5 (b) de $V_o = 50$ meV de $L_o = 50$ Å ve $L_w = 100$ Å için farklı manyetik alan değerlerine göre bağlanma enerjisinin L_b -engel genişliğine göre değişim grafiği ve $L_o = 50$ Å, $L_b = 50$ Å için $|\psi(\tilde{z})|^2$ nin normalize konuma göre değişimi verilmiştir.

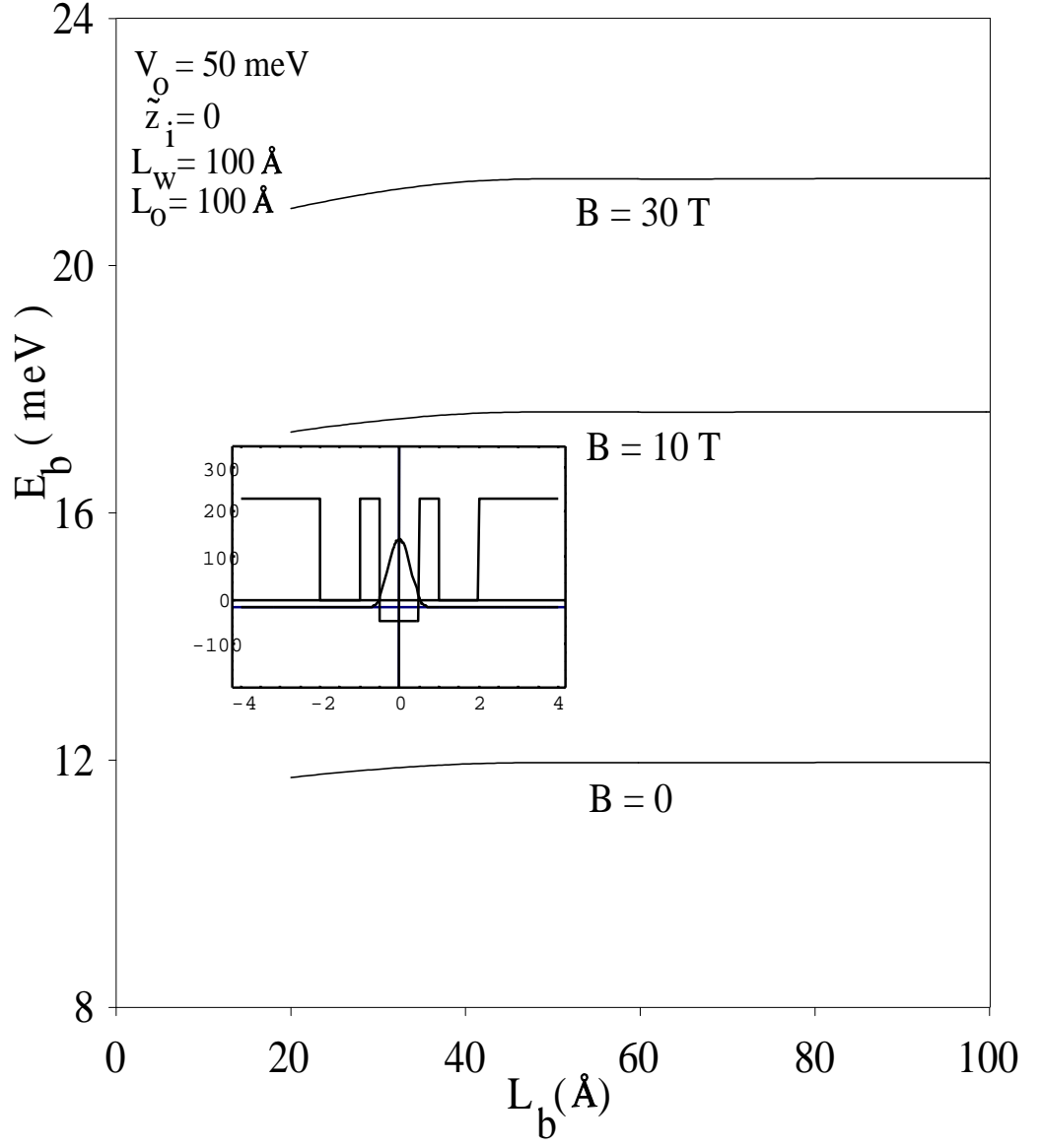
Bir önceki şekille (Şekil 3-5 (a)) kıyasladığımızda L_o merkezi kuyu genişliğinin artmasıyla, elektronun bu kuyuda bulunma olasılığı artar ve $\tilde{z}_i = 0$ da bulunan donör atomu için bağlanma enerjisinin arttığı görülür. L_b nin artmasıyla penetrasyon azalacağı için bağlanma enerjisi azalır.



Şekil 3-5 (b) $V_o = 50$ meV, $L_o = 50$ Å ve $L_w = 100$ Å için donör atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için bariyer genişliğine (L_b) göre değişimi ve $L_b = 50$ Å, $L_o = 50$ Å da potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

Şekil 3-5 (c) de $V_o = 50$ meV de $L_o = 100$ Å ve $L_w = 100$ Å için farklı manyetik alan değerlerine göre bağlanma enerjisinin L_b -engel genişliğine göre değişim grafiği, $L_o = 100$ Å, $L_b = 50$ Å için $|\psi(\tilde{z})|^2$ nin normalize konuma göre değişimi verilmiştir.

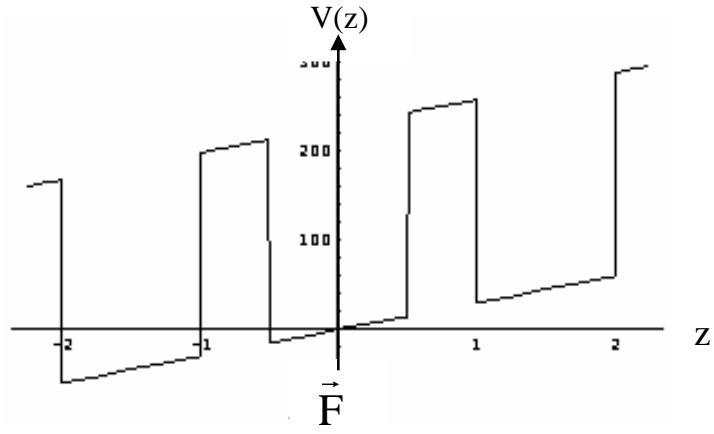
Merkezi kuyu genişliğinin ($L_o = 100$ Å) artmasıyla elektron tamamen merkezi kuyuda lokalize olduğu için $\tilde{z}_i = 0$ konumundaki donör atomunun bağlanma enerjisi bir önceki L_o değerine oranla belirgin bir şekilde artar. L_b -engel genişliğinin artması ile elektronun giderek dış kuyulara sızması engellendiği için bağlanma enerjisi, L_b -engel genişliğinin değişiminden hemen hemen hiç etkilenmez ve sabit kalır. Manyetik alanın artmasıyla da elektron ile safsızlık atomunun birbirini aynı düzlemde görme olasılığı arttığı için aralarındaki Coulombic etkileşim artacaktır buna bağlı olarak da bağlanma enerjisi artacaktır.



Şekil 3-5 (c) $V_o = 50$ meV, $L_o = 100$ Å ve $L_w = 100$ Å için donör atomunun bağlanma enerjisinin farklı manyetik alan değerleri için bariyer genişliğine (L_b) göre değişimi ile $L_b = 50$ Å, $L_o = 100$ Å da potansiyel profili ile elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre değişimi

4- Elektrik Alan Altında Üçlü GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs Kuantum Kuyusundaki Donor Safsızlık Atomlarının Bağlanma Enerjisi

Çalışmamızın bu bölümünde potansiyel profili, Şekil 4-1 de verilen GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs üçlü kuantum kuyusundaki elektron ile donor safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin +z yönünde uygulanan elektrik alana (F), dış-kuyu genişliğine (L_W), engel genişliğine (L_b), merkezi kuyu genişliğine (L_0) ve merkezi kuyunun derinliğine (V_0) bağlılığı, etkin kütle yaklaşımında varyasyonel olarak incelenmiştir.



Şekil 4-1 Elektrik alan altında üçlü kuantum kuyusunun şematik gösterimi

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

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

biçiminde verilir. Kuşatma potansiyelinin fonksiyonel formu, bir önceki bölümde denklem (3.2) de verildiği gibidir.

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

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

elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulomb potansiyeli ve ϵ_o ortamın dielektrik sabitidir (kuyu ve engel içinde aynı alınmıştır)[14]. Burada (x_i, y_i, z_i) safsızlık atomunun konumunu (x, y, z) elektronun konumunu göstermektedir. Hesaplamalarımızda kullandığımız fiziksel parametrelerin değerleri $m_e^* = 0.665m_o$ (m_o serbest elektron kütlesi), $\epsilon_o = 12.58$, GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As yapısının iletkenlik bant süreksizliği $V = 228$ meV olarak alınmıştır [15].

V_c , coulombic potansiyelin değeri yerine yazılırsa Hamiltonian

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - V(z) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon_o \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} \quad (4.3)$$

biçiminde elde edilir.

Daha önce bölüm (3.2) de yapılan silindirik koordinatlardaki boyutsuz dönüşümler sonucunda Hamiltonian

$$H = - \left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\Phi}^2} \right] - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}(\tilde{z}) + \tilde{F}\tilde{z} - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (z-z_i)^2}} \quad (4.4)$$

şeklinde elde edilir.

Elektron-safsızlık atomu sistemi için Schrödinger denklemi,

$$\tilde{H}\Phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \tilde{E} \Phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) \quad (4.5)$$

biçiminde yazılabilir. Sistemi tanımlayan genel dalga fonksiyonu $\Phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha)$ ve $\varphi(\tilde{\rho}, \alpha)$ denklem (3.6) ve (3.7) deki gibidir.

$\psi(z)$, elektronun z doğrultusundaki hareketini tanımlayan dalga fonksiyonudur ve genişliği L olan sonsuz potansiyel kuyunun özfonksiyonlarından oluşan çözümler baz olarak kullanılmıştır ve L nin değeri enerji özdeğerinin yakınsamasına göre belirlenir. Sözü edilen bazlar,

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \left[\frac{n\pi}{L} z - \delta_n \right] \quad (4.6)$$

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

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & \text{n-tek ise} \\ \frac{\pi}{2} & \text{n-çift ise} \end{cases} \quad (4.7)$$

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

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(z) \quad (4.8)$$

biçimindedir.

Donor atomu için taban durum enerjisi

$$\min_{\alpha} \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \langle H \rangle \quad (4.9)$$

Hamiltonian'ın beklenen değerini minimum yapan α parametresine göre belirlenir.

Taban durumunda bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisi ise,

$$\tilde{E}_b = \tilde{E}_z - \langle \tilde{H} \rangle \quad (4.10)$$

İle verilir[20-22]. \tilde{E}_z elektronun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen normalize taban durum enerjisidir. Böylece taban durumdaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisi

$$\tilde{E}_b = -\frac{1}{\alpha^2} + \langle \Phi | \frac{2}{\sqrt{(\tilde{\rho})^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} | \Phi \rangle \quad (4.11)$$

biçiminde elde edilir[23].

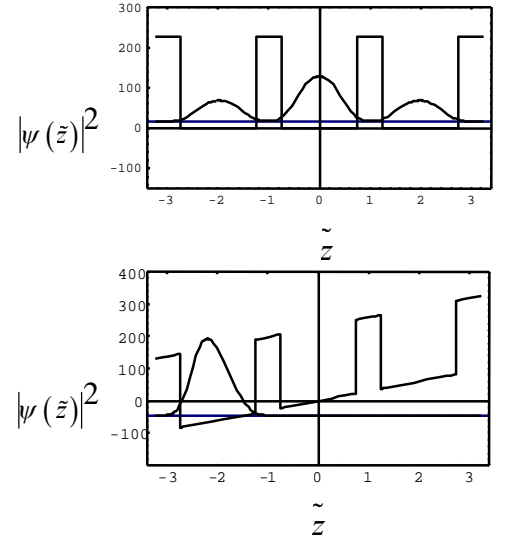
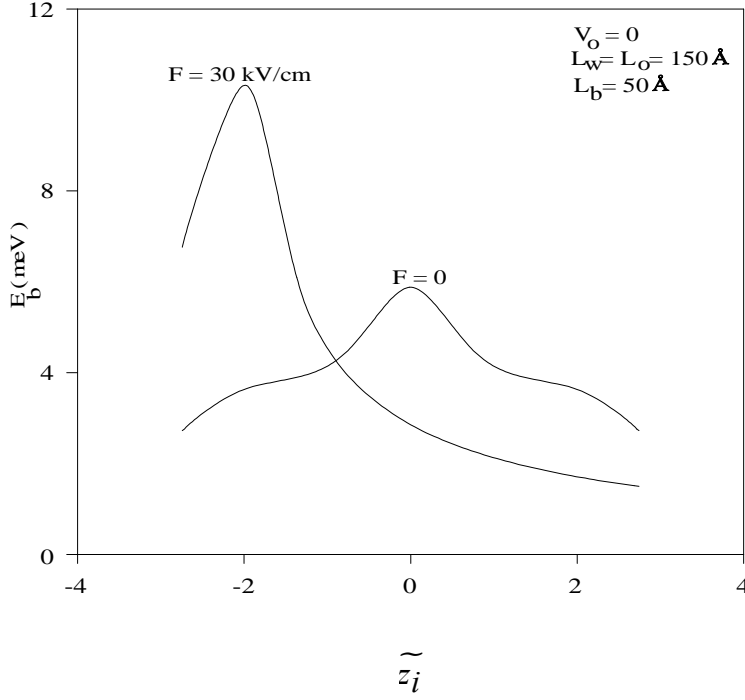
Çalışmamızda üçlü GaAs/GaAlAs kuantum kuyusunda donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisi, dış kuyu ve bariyer genişliklerine, merkezi kuyunun potansiyel derinliğine ve donör atomunun konumuna bağlılığı elektrik alan altında incelenmiştir.

Şekil 4-1 (a), (b), (c) de $L_o = 150 \text{ \AA}$, $L_w = 150 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin normalize donör konumuna göre değişimi ve $|\psi(\tilde{z})|^2$ nin normalize konuma göre değişimi $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ alan değerleri için merkezi potansiyel derinliğinin $V_o = 0$, $V_o = 50 \text{ meV}$, $V_o = 100 \text{ meV}$ değerleri için sırası ile verilmiştir.

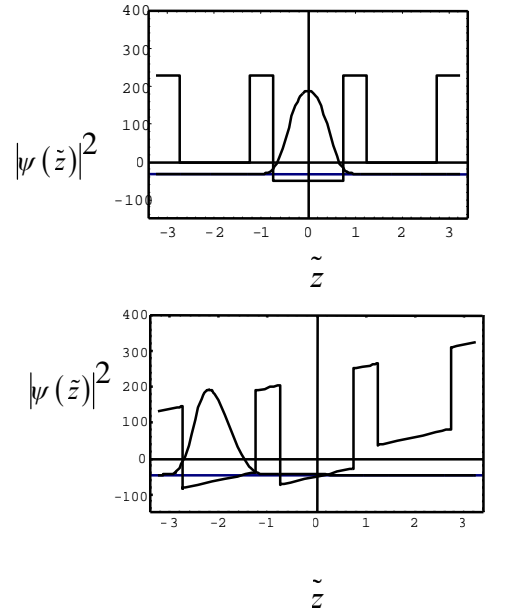
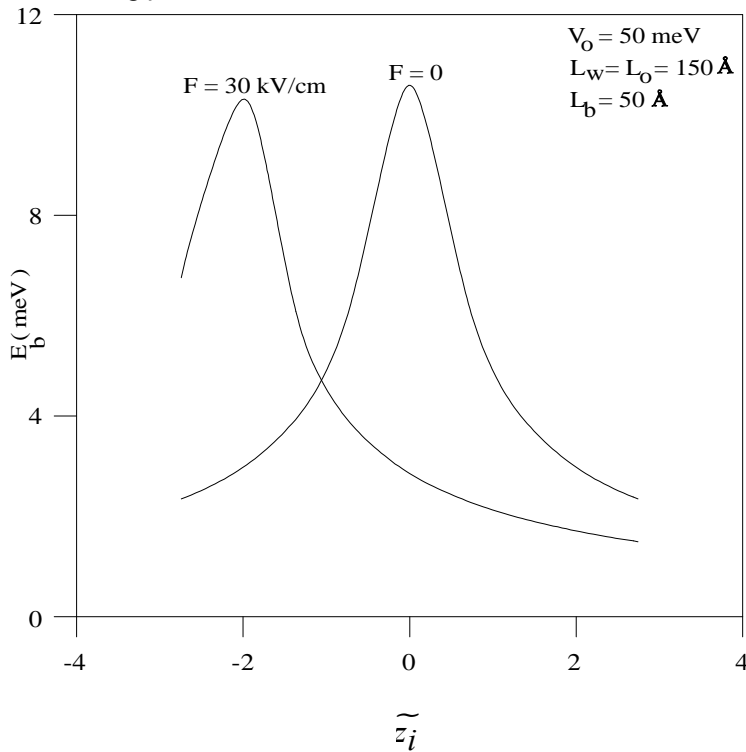
Şekil 4-1 (a) da, $F = 0$ da elektronun merkezi kuyuda bulunma olasılığı dış kuyularda bulunma olasılığından daha fazladır ve merkezi kuyunun merkezinde yerleşen donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisi dış kuyuların merkezinde yerleşen donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinden daha büyük olacaktır, yapıya +z yönünde uygulanan elektrik alan etkisiyle elektronlar kuyunun sol tarafına itilir (dalga fonksiyonu grafiğinden de görüldüğü gibi), ve elektronların sol kuyuda bulunma olasılığı artarken merkezi kuyuda ve sağ taraftaki kuyuda bulunma olasılığı azalır ve buna bağlı olarak sol kuyu merkezindeki donör atomu için bağlanma enerjisi artacaktır.

Şekil 4-1 (b) de, $V_o = 50 \text{ meV}$ için elektron merkezi kuyuda daha iyi lokalizedir ve $\tilde{z}_i = 0$ konumu için bağlanma enerjisinin değeri $V_o = 0$ dakinden daha da büyüktür. +z yönünde uygulanan elektrik alan elektronları kuyunun sol tarafına iter (dalga fonksiyonu grafiğinden de görüldüğü gibi), elektronlar sol tarafa gittiği için merkezi kuyuda ve sağ taraftaki kuyuda elektron bulunma olasılığı gittikçe azalacaktır ve sol kuyu merkezindeki safsızlık atomu ile elektron arasındaki bağlanma enerjisi elektrik alan etkisiyle artacaktır.

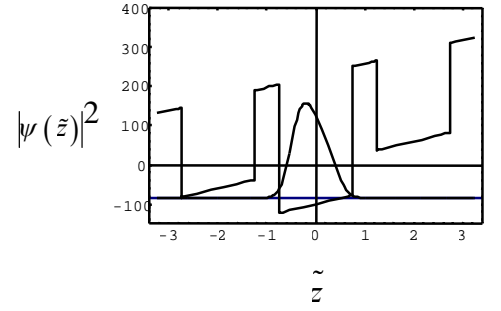
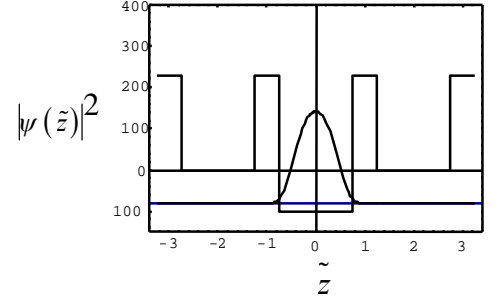
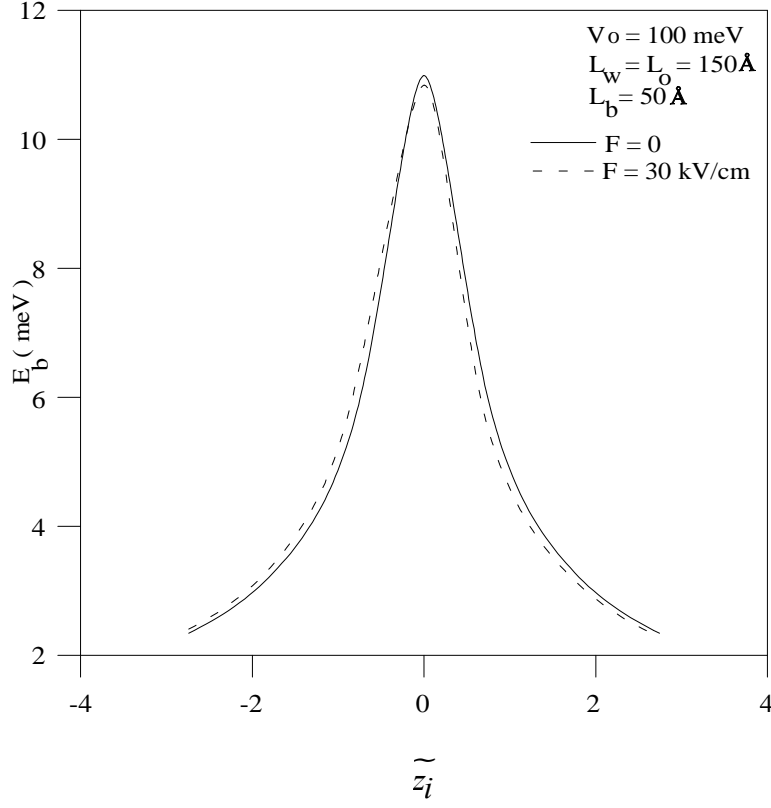
Şekil 4-1 (c) de, $V_o = 100 \text{ meV}$ için elektron tamamen merkezi kuyuda lokalizedir, dış kuyularda bulunma olasılığı hemen hemen hiç yoktur ve uygulanan elektrik alan yapının şeklini değiştirmesine rağmen bağlanma enerjisinde çok küçük bir kayma meydana getirecektir (dalga fonksiyonu grafiğinde görüldüğü gibi).



Şekil 4-1 (a) $V_0 = 0$, $L_o = 150 \text{ \AA}$, $L_w = 150 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ alan değerleri için değişimi



Şekil 4-1 (b) $V_0 = 50 \text{ meV}$, $L_o = 150 \text{ \AA}$, $L_w = 150 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ alan değerleri için değişim



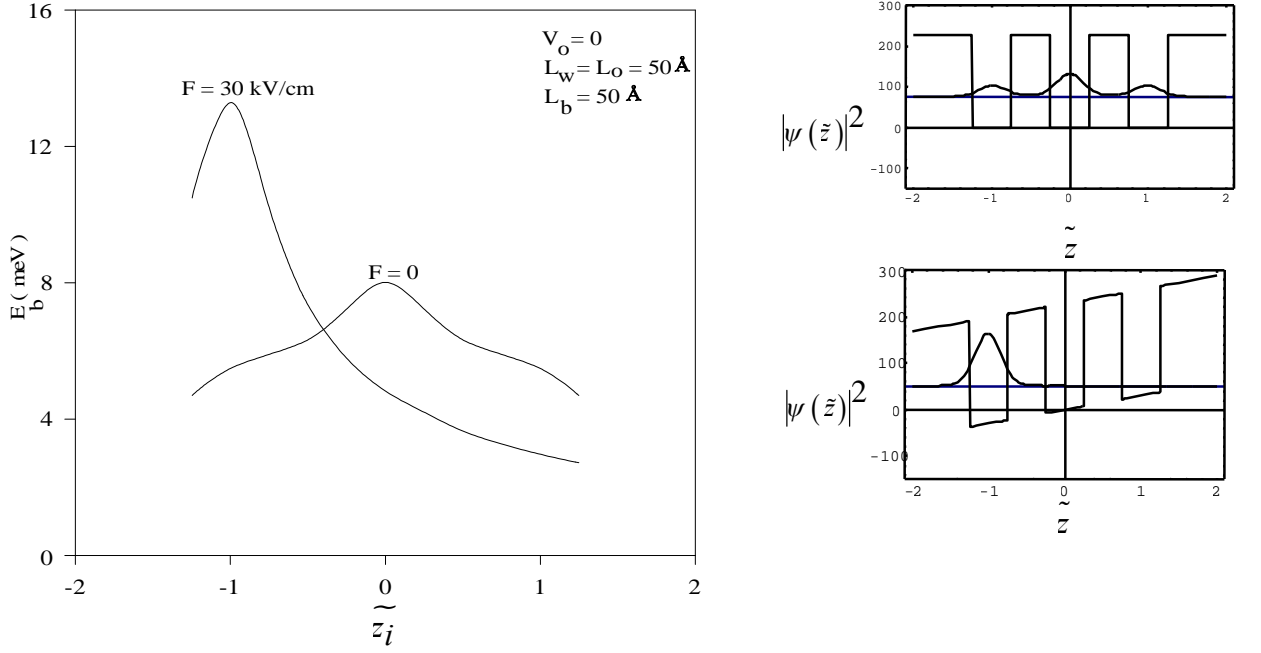
Şekil 4-1 (c) $V_o = 100 \text{ meV}$, $L_o = 150 \text{ \AA}$, $L_w = 150 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ alan değerleri için değişimi

Şekil 4-2 (a), (b), (c) de $L_o = 50 \text{ \AA}$, $L_w = 50 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin normalize donör konumuna göre değişimi ve $|\psi(\tilde{z})|^2$ nin normalize konuma göre değişimi $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ için merkezi potansiyel derinliğinin $V_o = 0$, $V_o = 50 \text{ meV}$, $V_o = 100 \text{ meV}$ değerleri için sırası ile verilmiştir.

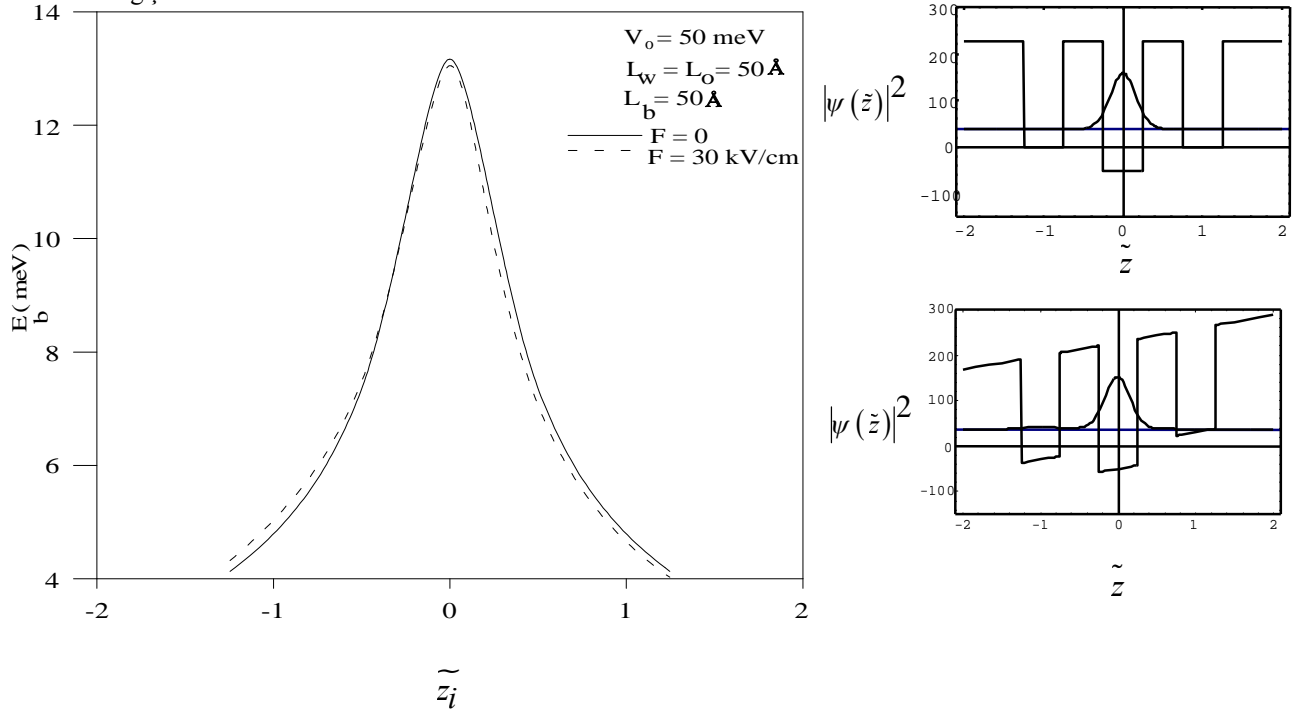
Şekilden de görüldüğü gibi, elektrik alanın $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ değerleri için donör bağlanma enerjisinin normalize donör konumuna göre davranışı Şekil 4-1 (a) dakine benzer bir davranış gösterir. Tek fark burada geometrik kuşatma daha iyi olduğu için her iki alan değeri içinde bağlanma enerjisi daha büyüktür.

Şekil 4-2 (b) de $V_o = 50 \text{ meV}$ için elektron merkezi kuyuda lokalizedir dış kuyularda bulunma olasılığı hemen hemen hiç yoktur bu nedenle merkezi kuyunun merkezinde yerleşen donör atomunun bağlanma enerjisi büyüktür. Uygulanan elektrik alan yapının şeklini değiştirmiş olmasına rağmen bağlanma enerjisinde çok küçük bir değişikliğe neden olmuştur (dalga fonksiyonu grafiğinden görüldüğü gibi) çünkü, merkezi kuyunun genişliği Şekil 4-1 (b) dekine oranla oldukça dardır. Yapı dar kuyudur ve dar kuyularda elektronlar çok enerjik olduğu için elektrik alanın kuyu tabanında yaratmış olduğu değişiklikten hemen hemen etkilenmezler. Geniş kuyularda elektronların enerjileri çok küçüktür ve elektrik alandan çok etkilenirler, bu durum Şekil 4-1(b) de oldukça belirgindir.

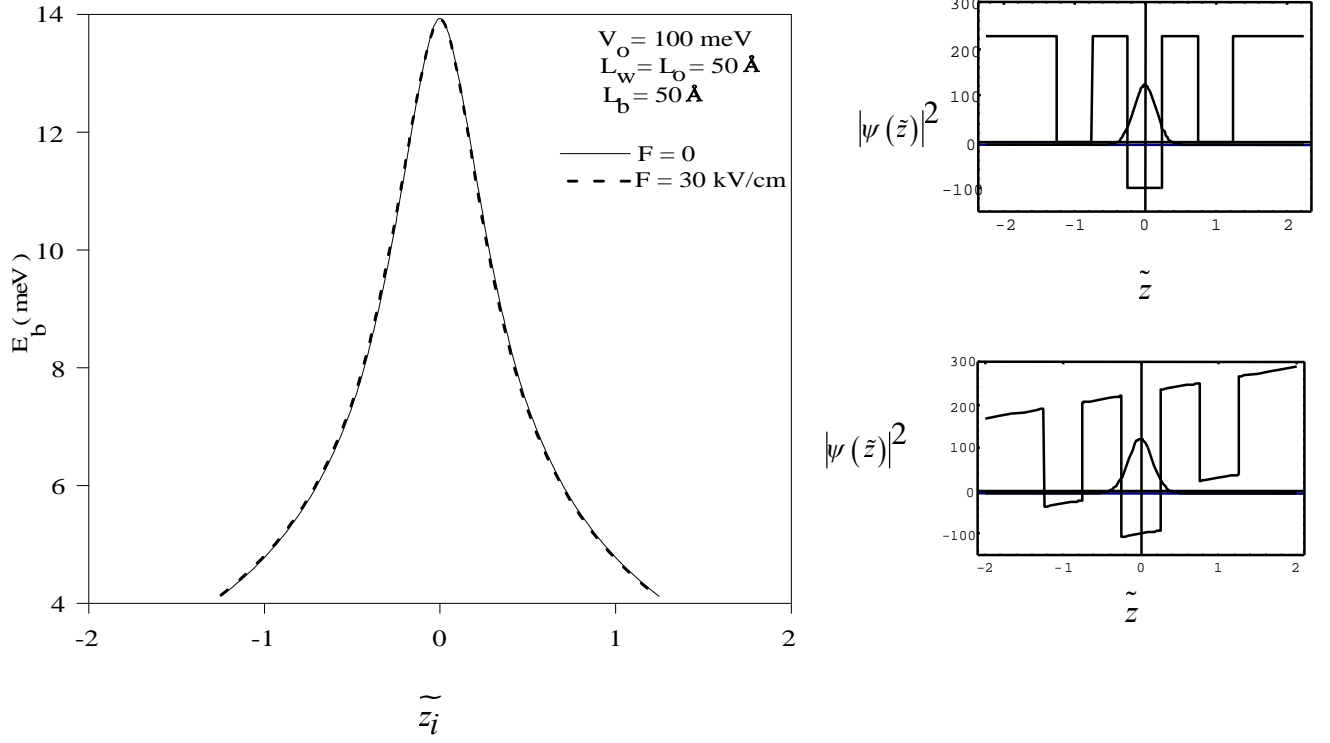
Şekil 4-2 (c) de ise, potansiyel derinliğinin artmasıyla elektron tamamen merkezi kuyuda lokalizedir, fakat merkezi kuyunun genişliği çok dar olduğu için elektrik alandan hemen hemen hiç etkilenmez. Şekil 4-1 (c) de merkezi kuyu geniş olmasına rağmen donör bağlanma enerjisinin elektrik alandan bağımsız olması kuyu derinliğinden kaynaklanmaktadır.



Şekil 4-2 (a) $V_o = 0$, $L_o = 50 \text{ \AA}$, $L_w = 50 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ alan değerleri için değişimi



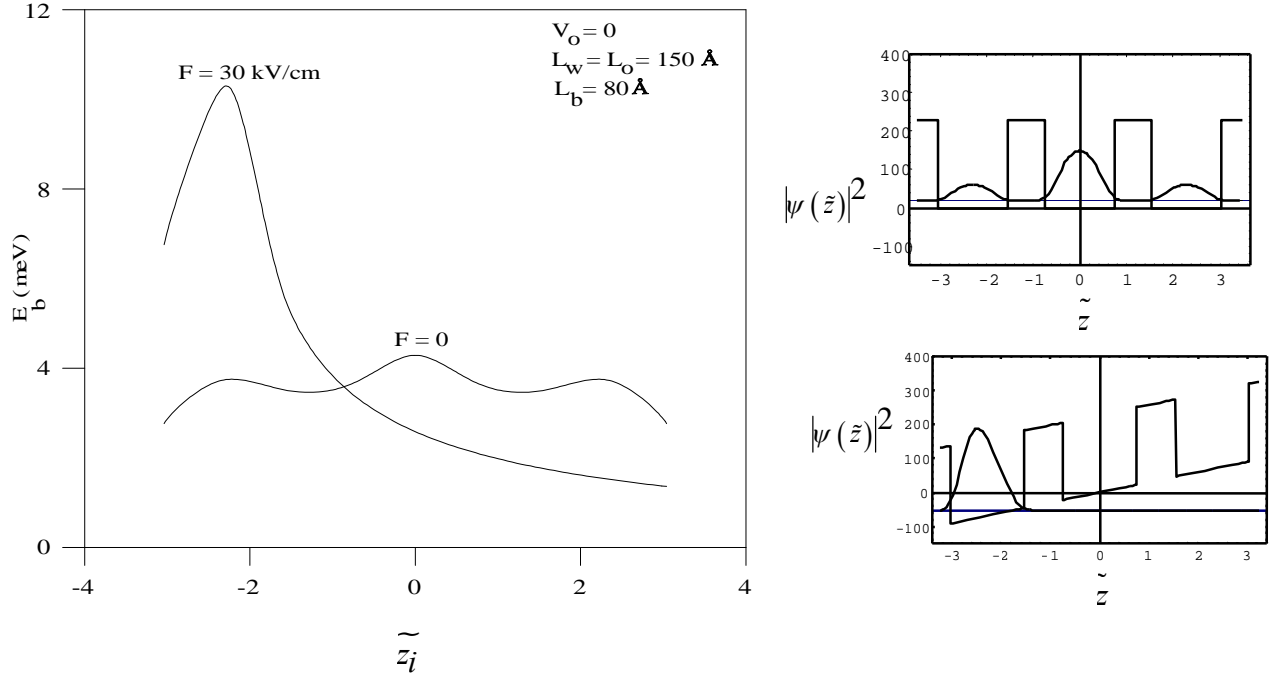
Şekil 4-2 (b) $V_o = 50 \text{ meV}$, $L_o = 50 \text{ \AA}$, $L_w = 50 \text{ \AA}$ ve $L_b = 50 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ alan değerleri için değişimi



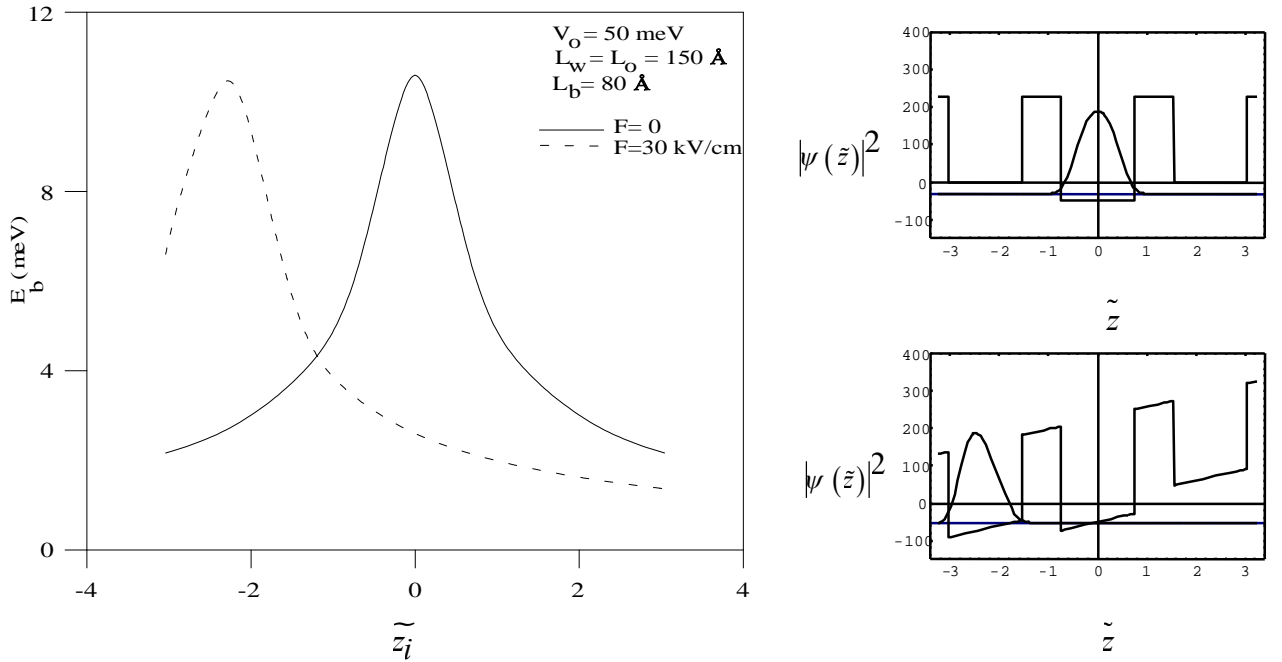
Şekil 4-2 (c) $V_o=100$ meV, $L_o=50$ Å, $L_w = 50$ Å ve $L_b=50$ Å için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F = 0$ ve $F = 30$ kV/cm alan değerleri için değişimi

Şekil 4-3 (a), (b), (c) de $L_o = 150 \text{ \AA}$, $L_w = 150 \text{ \AA}$ ve $L_b = 80 \text{ \AA}$ için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin normalize donör konumuna göre değişimi ve $|\psi(\tilde{z})|^2$ nin normalize konuma göre değişimi $F = 0$ ve $F = 30 \text{ kV/cm}$ için merkezi potansiyel derinliğinin $V_o = 0$, $V_o = 50 \text{ meV}$, $V_o = 100 \text{ meV}$ değerleri için sırası ile verilmiştir.

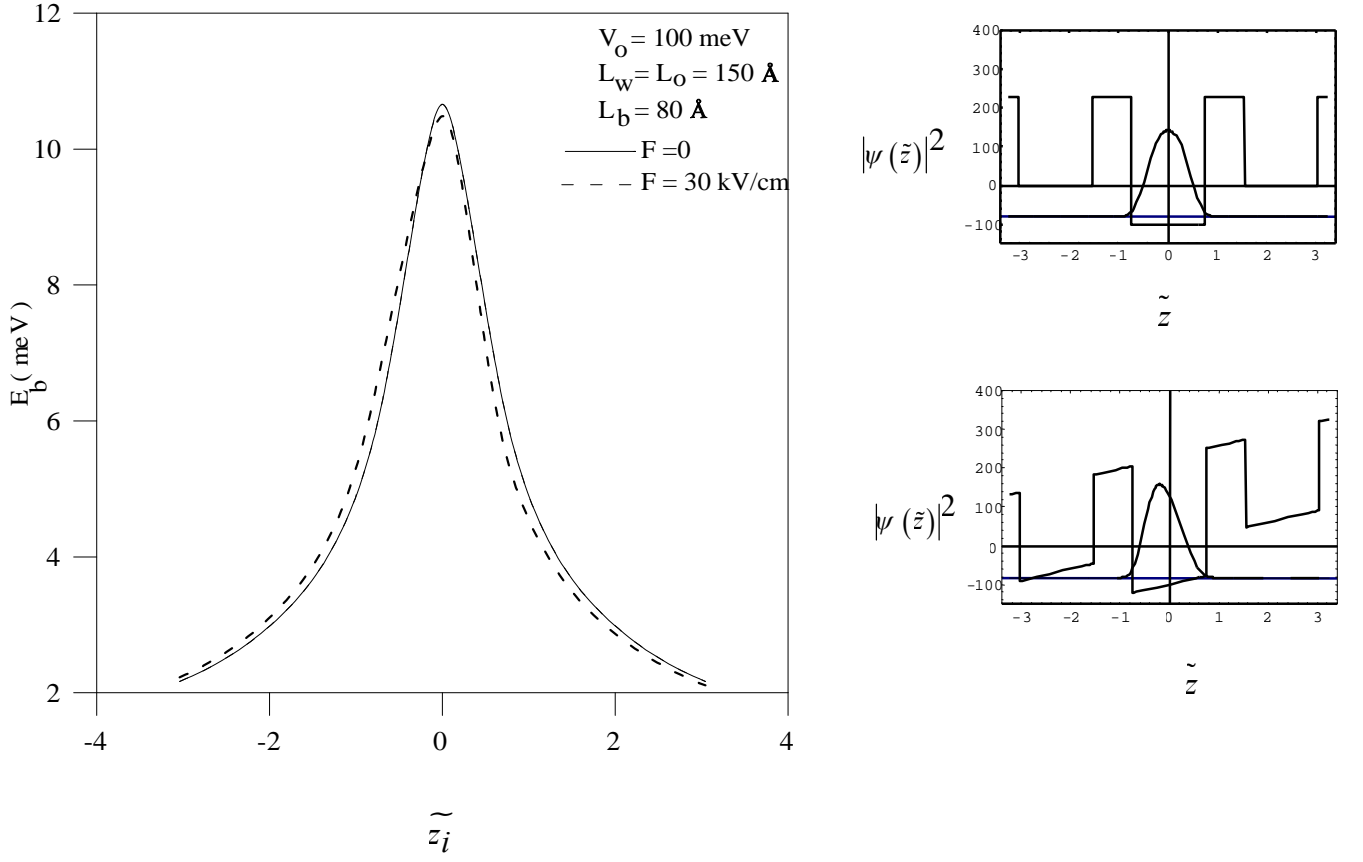
Her üç şekilden de görüldüğü gibi, elektrik alan altında donör bağlanma enerjisinin normalize donör konumuna göre değişimi daha önce elde edilen sonuçlarla büyük bir benzerlik gösterir. Burada engel genişliğinin artmasıyla kuyular arası çiftlenim azalır ve efektif uzunluk ($L = 2L_w + L_o + 2L_b$) arttığı için bağlanma enerjisi önceki sonuçlara göre daha düşüktür.



Şekil 4-3 (a) $V_o=0$, $L_o=150$ Å, $L_w=150$ Å ve $L_b=80$ Å için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F=0$ ve $F=30$ kV/cm alan değerleri için değişimi



Şekil 4-3 (b) $V_o=50$ meV, $L_o=150$ Å, $L_w=150$ Å ve $L_b=80$ Å için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F=0$ ve $F=30$ kV/cm alan değerleri için değişimi



Şekil 4-3 (c) $V_o = 100$ meV, $L_o = 150$ Å, $L_w = 150$ Å ve $L_b = 80$ Å için donör safsızlık atomu bağlanma enerjisinin normalize donör atomunun konumuna göre değişimi ve elektronun taban durum dalga fonksiyonunun karesinin normalize konuma göre $F = 0$ ve $F = 30$ kV/cm alan değerleri için değişimi

5- SONUÇ ve TARTIŞMA

Bu çalışmada, GaAs/GaAlAs üçlü kuantum kuyusundaki donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin yapı parametrelerine, merkezi kuyu derinliğine, dış alanların şiddetine ve donör atomunun konumuna bağlılığı, etkin kütle yaklaşımında varyasyonel olarak incelendi.

Elde edilen sonuçlardan, bağlanma enerjisinin yapı parametrelerine ve dış alanların şiddetine çok duyarlı olduğu ve bu konuda yapılan çalışmalarla oldukça uyumlu olduğu görüldü [23-24].

Donör bağlanma enerjisi, temel olarak üçlü kuantum kuyusundaki elektronik dalga fonksiyonunun uzaysal dağılımının karakteristik özelliğini sergilemesinden dolayı çok önemlidir. Ayrıca uygulanan dış alanlar, donör bağlanma enerjisini donör konumuna ve yapı parametrelerine bağlı olarak artırabilir veya azaltabilir. Bu durum kuantum kuyularının elektronik ve optik özelliklerini de önemli oranda değiştirebilir, bu da uygulama alanında çok önemli sonuçlar oluşturur.

6- KAYNAKLAR

1. Esaki L. and Tsu R. 'Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors' IBM Res. Note, (1969) RC-2414
2. Dingle R. , Wiegman W. and Henry C. H. , Phys. Rev. Lett. (1974) **24**, 593
3. Ando T. , Fowler A. B. and Stern F. , Rev. Mod. Phys. (1982) **54**, 437
4. Bastard G. . Phys. Rev. B (1981) **24**, 4714
5. Greene R. L. and Bajaj K. K. Solid State Commum. (1993) **45**, 825
6. Ribeiro F. J. and Latge A. Phys. Rev. B. (1994) **50**, 4913
7. Latge A. , Porras – Montenegro N. , Dios – Leyva M. de and Oliveira L. E. Phys. Rev. B. (1996) **50**, 10160
8. Ribeiro F. J. , Latge A. , Pacheco M. and Barticevic Z. , J. Appl. Phys. (1997) **82**, 270
9. Oliveira L. E. , Porras- Montenegro N. and Latge A. Phys. Rev. B. (1993) **47**, 13864
10. Ribeiro F. J. , Bruno- Alfonso A. and Latge A. Phys. Rev. B. (1998) **57**, 13010
11. Bruno- Alfonso A. and Latge A. Phys. Rev. B. (2000) **61**, 15887
12. Villamil P. , Porras- Montenegro N. and Granada J. C. Phys. Rev. B. (1999) **59**, 1605
13. Villamil P. and Porras- Montenegro N. J. Phys. Condens. Matter (1999) **11**, 9723
14. Kasapoğlu E. , Sarı H. , Sökmen I. , Solid State Communications (2003) **125**
15. Bostard G. ' Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures' Halsted, New York (1998)
16. Cen J. , Lee S. M. and Bajaj K. K. , J. Appl. Phys. (1993) **73**, 2848
17. Grene R. L. and Bajaj K. K. Phys. Rev. B. (1985) **31**, 913
18. Grene R. L. , Bajaj K. K. Phys. Rev. B (1985) **913**, 918
19. Aldrich C. and Greene R. L. Phys. Status Solidi B (1979) **93**, 343
20. Kasapoğlu E. , Sarı H. , Sökmen I. Physica B (2002) **315**, 261-266
21. Montes A. , Duque C. A. , Porras N. - Montenegro J. Appl. Phys. (1997) **81**, 12
22. Jayam Sr. G. , Navaeethakrishnan K. Solid State Communications (2002) **122**, 433-438
23. Kasapoğlu E. , Sarı H. , Sökmen I. Physica B (2003) **339**, 17-22
24. Kasapoğlu E. , Sarı H. , Sökmen I. Surface Review and letters (2006) **13**,397

7- ÖZGEÇMİŞ

Adı-Soyadı : Yasemin Adıbelli (Güler)
Doğum Yeri- Yılı : Kayseri-1980
Medeni durumu : Evli
İş Adresi :
İş Tel :
Lisans (1999-2003) : Cumhuriyet Üniversitesi
Fen Edebiyat Fakültesi
Fizik Bölümü Sivas
Yüksek Lisans (2004-2007) : Cumhuriyet Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı