

T.C
TUNCELİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN SİSTEMLERİN SONLU ELEMANLAR
YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Mehtap BOZTUĞ

Anabilim Dalı: Elektrik-Elektronik Mühendisliği

DANIŞMAN

Yrd. Doç. Dr. Metin GÜNEŞ

TEMMUZ-2013

T.C
TUNCELİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN SİSTEMLERİN SONLU ELEMANLAR
YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Mehtap BOZTUĞ

Öğrenci No: 102103101

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 17 Haziran 2013

Tezin Savunulduğu Tarih : 08 Temmuz 2013

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Metin GÜNEŞ (T.Ü)

Diğer Jüri Üyeleri : Yrd. Doç. Dr. Hüseyin ERİŞTİ (T.Ü)

Yrd. Doç. Dr. Ömer ÇELİK (T.Ü)

TEMMUZ-2013

Mehtap Boztuğ tarafından hazırlanan DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN SİSTEMLERİN SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Yrd.Doç.Dr. Metin GÜNEŞ
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Elektrik Elektronik Mühendisliği Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir. Bu tez, Tunceli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

Başkan : Yrd.Doç.Dr. Metin GÜNEŞ (T.Ü)

Üye : Yrd. Doç. Dr. Hüseyin ERİŞTİ (T.Ü)

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ömer ÇELİK (T.Ü)

Tarih : 08 Temmuz 2013

ÖNSÖZ

Tez çalışmamda değerli katkılarından dolayı danışman hocam Yrd.Doç.Dr. Metin Güneş'e,

Bana her konuda sabrı ve sevgisi ile destek olan aileme desteklerinden dolayı teşekkürlerimi sunuyorum.

Mehtap BOZTUĞ

Tunceli-2013

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖNSÖZ	i
İÇİNDEKİLER	ii
ÖZET	iii
SUMMARY	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ	v
TABLolar LİSTESİ	viii
1. GİRİŞ	1
2. YARIİLETKENLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ, HETEROYAPILAR ve NANOYAPILAR	3
2.1. YARIİLETKENLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ	5
2.1.1. Yarıiletkenlerin Band Yapısı	5
2.1.1.1. Silisyum'un Band Yapısı	8
2.1.1.2. GaAs'in Band Yapısı	9
2.1.2. Katkılı Yarıiletkenler	10
2.2. HETEROYAPILAR	12
2.3. NANOYAPILAR: KUANTUM KUYULARI, TELLERİ VE NOKTALARI	15
3. SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ	20
3.1. Baz Fonksiyonları Seçimi	24
3.2. Bir Boyutta Parçalı Lineer Baz Fonksiyonları	26
3.3. FEM'in Çiftlenimsiz Bantlara Uygulanması	29
4. ELEKTRİK ALAN VE BASINÇ ALTINDA "CORRUGATED" $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ KUANTUM KUYUSUNUN İLETKENLİK BANDI YAPISI VE BANT İÇİ SOĞURMA	39
5. SONUÇLAR	72
KAYNAKLAR	75
ÖZGEÇMİŞ	80

ÖZET

Bu çalışmada “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyu sisteminin elektronik bant yapısı ve optik özelliklerinin elektrik alana ve uygulanan baskıya bağlı değişimi, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde sonlu elemanlar yöntemi ile incelenmiştir. Sonuç olarak; σ parametresi, elektrik alanı, kuyu genişliği, baskının büyüklüğü değiştirilerek “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ tek kuantum kuyusu sisteminin elektronik ve optik özellikleri amaca uygun biçimde ayarlanabilir.

Anahtar kelimeler:“corrugated” kuantum kuyusu, sonlu elemanlar yöntemi, bant içi soğurma, baskı, elektrik alan.

SUMMARY

Investigation of Low Dimensional Semiconductor Systems with Finite Element Method

In this study, the effects of stress, electric field and well width on the electronic band structure and the optic properties of a single corrugated $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum well is investigated with effective mass approximation by combining the finite element method. According to the findings, the electronic and optic properties of a single corrugated $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum well system can be adjusted for the changes in σ parameter, electric field, well width and stress.

Key words: Corrugated quantum well, finite element method, intersubband absorption, stress, electric field.

ŞEKİLLER LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Şekil 2.1	Yarıiletkenlerinbant yapısı 7
Şekil 2.2	Silisyumun band yapısı 9
Şekil 2.3	GaAs'in band yapısı 10
Şekil 2.4	Oda sıcaklığında bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve enerji aralıkları 13
Şekil 2.5	(a) Birbirine eklenmemiş farklı iki yarı iletkenin band diyagramı, (b) Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarı iletkenin birbirine eklenmiş durumdaki band yapısı 14
Şekil 2.6	Bant süreksizliğine göre hetero yapı türleri 15
Şekil 2.7	Bir hetero yapıda elektron ve holler için kuantum kuyu oluşumunun şematik gösterimi 16
Şekil 2.8	Kuantum kuyu profili 17
Şekil 2.9	Kuantum teli 18
Şekil 2.10	Kuantum kutusu 19
Şekil 3.1	z uzayında farklı düğüm noktası sayıları için baz fonksiyonları 25
Şekil 3.2	Üç elemanlı çalışma uzayı, lineer baz fonksiyonları ve [-1,1] aralığında elde edilen bazların çalışma uzayına yerleştirilmesi sonucu elde edilen global baz fonksiyonları 26
Şekil 3.3	Çiftlenimsiz bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması 33
Şekil 4.1	(a) "Corrugated" kuantum kuyusunun potansiyel profili ($\sigma = 1$ için sürekli çizgi, $\sigma = 2$ için kesikli çizgi, $\sigma = 3$ için kesikli-noktalı çizgi kullanılmıştır.) 40
Şekil 4.1	(b) "Corrugated" kuantum kuyusunun $F = 0$ ve $F \neq 0$ için izinli olası geçişlerin şematik gösterimi ($\sigma = 2$ durumu) 40
Şekil 4.2	Sonsuz kuantum kuyusunun FEM ile hesaplanan enerji özdeğerlerinin Bağlı Hatası 45
Şekil 4.3	$L_w = 100 \text{ \AA}$ luk "corrugated" $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için 47
Şekil 4.4	$L_w = 150 \text{ \AA}$ luk "corrugated" $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için 49
Şekil 4.5	$L_w = 200 \text{ \AA}$ luk "corrugated" $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk üç enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için 50
Şekil 4.6	$F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değeri için $L_w = 100 \text{ \AA}$ genişliğinde "corrugated" $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$, (c) $\sigma = 3$ 51

- Şekil4.7 $F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değeri için $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$, (c) $\sigma = 3$ 53
- Şekil 4.8 $S = 20 \text{ kbar}$ (Baskı gerilme şeklinde) baskı değeri için $L_w = 150 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$, (c) $\sigma = 3$ 54
- Şekil 4.9 $S = -20 \text{ kbar}$ (Baskı sıkıştırma şeklinde) baskı değeri için $L_w = 150 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$, (c) $\sigma = 3$ 55
- Şekil 4.10 “Corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerjinin kuyu genişliğine göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için 57
- Şekil 4.11 “Corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın kuyu genişliğine göre değişimi 58
- Şekil 4.12 $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyinin elektrik alana göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için 59
- Şekil4.13 $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandının ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın elektrik alana göre değişimi 60
- Şekil 4.14 $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyinin uygulanan baskıya göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için 61
- Şekil 4.15 $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandının ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın uygulanan baskıya göre değişimi 62
- Şekil 4.16 Farklı kuyu genişliklerine sahip “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişin eait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $L_w = 100 \text{ \AA}$ için, (b) $L_w = 150 \text{ \AA}$ için, (c) $L_w = 200 \text{ \AA}$ için 63
- Şekil 4.17 Farklı σ değerlerine sahip “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için 65
- Şekil 4.18 Farklı σ ve elektrik alan değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ 66

- Şekil 4.19 Farklı σ ve elektrik alan değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma kat sayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $F = 0$ için, (b) $F = 50 \text{ kV/cm}$ için, (c) $F = 100 \frac{\text{kV}}{\text{cm}}$ için 67
- Şekil 4.20 Farklı σ ve baskı değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $S = -20 \text{ kbar}$, (b) $S = 0$ ve (c) $S = +20 \text{ kbar}$ 69
- Şekil 4.21 Farklı σ ve baskı değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için 70
- Şekil 4.22 Farklı σ değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusundaki 1-2 ve 2-3 geçişlerine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi 71

TABLULAR LİSTESİ

Sayfa No

Tablo1. Bazı yarı iletkenlerin verici ve alıcı enerji seviyeleri

11

1. GİRİŞ

Yarıiletkenler, günümüzde çok yaygın kullanım alanına sahip olup bir çok elektronik devrenin ve çeşitli düzeneklerin temel yapı elemanlarını oluşturarak yaşantımız içinde önemli bir yer tutarlar. Son yıllarda yeni elektronik devre elemanlarının geliştirilmesi çoğunlukla düşük boyutlu yarıiletken heteroyapılara dayanmaktadır (Elabsy,1994; Kolokolov vd., 2001; Gil vd., 1993; Ehrenreich, 1961; Aspens, 1976; Adachi, 1985; Welber vd., 1983). Yeni cihazlar için önerilen modellerin çalışma ilkeleri elektronik ve optik özelliklerin amaca yönelik ayarlanabilir olmalarına bağlıdır. Bu durum kuantum kuyularının araştırılmasını önemli kılmaktadır. Özellikle elektrik alan ve basınç altında bu sistemlerde ölçülen fiziksel büyüklüklerde önemli değişimler elde edilmektedir (Elabsy,1994; Kolokolov vd., 2001; Gil vd., 1993; Ehrenreich, 1961; Aspens, 1976; Adachi, 1985). Bu nedenle, söz konusu olan bu sistemlerin farklı biçimleri için kuramsal ve deneysel çalışmalar yoğun bir şekilde devam etmektedir.

Deneysel kristal büyütme tekniklerindeki yeni gelişmelere bağlı olarak boyutları elektronik de Broglie dalga boyu ile kıyaslanabilir yarıiletken yapılar oluşturulmuştur. Düşük boyutlu heteroyapılarda elektronik ve optik özellikler sistemin boyutuna çok duyarlıdır. Düşük boyutlu sistemlerin külçe malzemelere göre ilginç olmaları bu sistemlerdeki boyutun farklılığından kaynaklanmaktadır. Örneğin, çoklu GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs kuyularından oluşan sistemlerde külçe malzemeye göre çok yüksek elektronik mobiliteler ve eksiton bağlanma enerjisinde önemli bir artış gözlenmiştir (Esaki ve Tsu, 1969). Heteroyapılardaki verici safsızlıkların bağlanma enerjisi üzerine hidrostatik basıncın etkisi ilk olarak Elabsy (Elabsy,1994) tarafından araştırıldı ve hidrostatik basıncın artmasıyla bağlanma enerjisinin arttığını buldu.

Sonuç olarak; sistemin geometrisini, elektrik alanı ve hidrostatik basıncı değiştirerek, sistemimizin elektronik ve optik özelliklerini amacımıza uygun biçimde ayarlayabiliriz. Bunları göz önüne aldığımızda kuantum kuyularının üzerinde durulması gereken önemli bir konu olduğunu söyleyebiliriz.

Bu tez çalışmasında, büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alan ve baskı altında üçgen dalgalı geometriye sahip “corrugated” Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusu sisteminin iletkenlik bandının elektronik yapısı ve bant içi geçişler sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ile incelendi.

Bölüm 2’de yarıiletkenlerin elektronik özellikleri ile heteroyapılar hakkında genel bilgi verilmiştir.

Bölüm 3’te sonlu elemanlar yöntemi (FEM) hakkında genel bilgiler verilerek, çiftlenimsiz bantlara bu yöntemin uygulanabilmesi için gerekli analitik işlemler yapılmıştır.

Bölüm 4’te elektrik alan ve baskı altında “corrugated” $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandı yapısı ve bant içi soğurma katsayısı sonlu elemanlar yöntemi ile hesaplanmıştır.

Çalışmanın son aşamasında ise, elde edilen sonuçların deneysel sonuçlarla uyumu ve bu sonuçların teknolojik uygulamalarda sağlayacağı yeni katkılar göz önüne alınarak yorumlanmıştır.

2. YARIİLETKENLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ VE HETEROYAPILAR

Kuantum mekaniği geliştikçe, ilk uygulamalar gazlardaki izole edilmiş atomlara yöneldi. Atom spektrumu test konularını kuantum mekaniksel formalizimlere uygulanabilir yaptı. Katıhalde, fizikçiler metallere daha çok yöneldiler. Çünkü, metalin davranışı malzemenin saflığına çok bağlı değildir. Yarıiletkenlerde en ufak safsızlık ilavesinin bile iletkenlikte çok büyük etkiler göstermesinden dolayı yarıiletkenlere çok az ilgi vardı. Pauli'nin dediği gibi "Kir Fiziği" problemleri, 1920'li yılların en iyi fizikçilerinin bile ilgisini çekmiyordu. Bu sırada, Robert W. Pohl, Göttingende iyonik kristaller üzerine çalışmalara başladı ve bir süre çalışmada bir ilerleme gösteremedi. Pohl'un okulu tam bir deneysel okuldu. Deneysel grubu öncelikle metal olmayan malzemelerdeki elektriksel iletkenlik incelemeleri üzerinde durdu. Safsızlıkların malzemelerin özelliklerine etkilerini not ettiler. Böylece yarıiletken fiziğinin ve kısmende olsa doplama işleminin deneysel buluşlarını yapmış oldular (Singh, 1993).

Pohl Göttingende Max Born ve James Franck gibi kuantum mekaniğinin yeni gelişen alanının öncüleri olmuşlardı. Sonuç olarak Pohl'un grubu yarıiletkenlerde kristal büyümesi, doplama, iletkenlik ve foto-elektrik etki gibi konularda çalıştılar ve yarıiletken fiziğinin gelecekteki teorilerinin temelini atacak veriler elde ettiler. Elektriksel iletkenlik üzerine doplamanın etkisinin, çoğu sebepten dolayı özellikle üzerinde duruldu. Aslında 1938'de Pohl ve Hilsch yarıiletken fiziği hakkındaki bildiklerini, üç terminalli akım yükselticisi tasarlamak için kullandılar (Singh, 1993). Bir KBr kristalinde akım yükseltici etkiyi gösterdiler ve 100'lük bir yükseltme elde ettiler.

Yarıiletkenlerin özellikleri anlaşılmağa başlandıkça bu malzemelerin büyük teknolojik kullanımları olabileceği belirlendi. Artık, günümüzde yarıiletkenler çok yaygın kullanım alanına sahip olup birçok elektronik devrenin ve çeşitli düzeneklerin temel yapı elemanlarını oluşturarak yaşantımız içinde önemli yer tutarlar. Yarıiletkenlerin sıkça tercih edilmelerinin temel nedenleri, yarıiletken devre elemanlarının çok küçük hacimler içerisine yerleştirilebilir olmaları, söz konusu yarıiletkenlerin yasak band aralıklarının küçük olması ve istenilen bir devre elemanı yapılmasına imkan vermesidir.

Birçok elektronik yapı tasarımında yarıiletkenler, hareketli yüklerin kaynağını sağlamak için kullanılırlar. Tasarlanan yeni elektronik devre elemanlarının modellenmesi, sistemlerin ayarlanabilir fiziksel özellikleri temel alınarak yapılmaktadır. Yarıiletkenlerin kristal yapılarının incelenmesi sayesinde yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri

belirlenebilmektedir. 1980'li yıllara kadar yapay kristallerin büyütülmesindeki yetersizlikten dolayı yarıiletken malzemelerden elde edilen devre elemanları Ge,Si ve benzeri temel yarıiletken malzemeler üzerine kuruluydu. Daha sonraları yapılan çalışmalarla yeni tür yarıiletkenler ortaya çıkarıldı. Bu yeni tür yarıiletkenler epitaksiyel olarak oluşturulan düşük boyutlu olarak adlandırılan yapılardan oluşmaktadır. Günümüzde bunu mümkün kılan kristal yetiştirme teknikleri geliştirilmiştir. Bunlardan en önemlileri MBE (Molecular Beam Epitaxy) ve MOCVD (Metal-Organic Vapour Deposition) teknikleridir. Bu büyütme teknikleriyle değişik yapılar oluşturulabilmektedir. Örneğin; GaAlAs yarıiletken tabakası arasına GaAs tabakası oluşturularak tekli kuantum çukuru, bu tabakaların periyodik olarak tekrarlanmasıyla çoklu kuantum çukurları veya tabaka kalınlıkları ayarlanarak oluşturulan süperörgüler, bu yöntemlerle kolayca büyütülebilir (Jaros, 1983; Streetman, 1990).

Yoğun madde fiziğindeki araştırmaların düşük boyutlu sistemler üzerine yoğunlaşması şaşırtıcı değildir. Kristal büyütme tekniklerindeki gelişmeler neticesinde yük taşıyıcıların bir yöndeki hareketi kısıtlanarak iki-boyutlu kuantum kuyusu, kuşatılma boyutları arttırılarak bir-boyutlu kuantum tellerinin ve sıfır boyutlu kutularının oluşturulması mümkün kılınmıştır. Düşük boyutlu sistemlerde çalışılmasının temel sebebi, materyalin boyutlarının De Broglie dalga boyu mertebesinde (100 Å) olduğunda kuantum etkilerinin ortaya çıkmasıdır. Düşük boyutlu sistemlerle, materyalin fiziksel özelliklerini belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelir. Bu sayede özel fonksiyonlara sahip aletler tasarlanabilir. Düşük boyutlu sistemlerin külçe malzemelere göre üstünlüğü bu sistemlerdeki taşıyıcıların yaşam sürelerinden kaynaklanır. Külçe yarıiletkenlerde, madde içinde çeşitli kusurlar nedeniyle oluşan saçılmalar sonucu taşıyıcıların yaşam süreleri kısadır. Oysa düşük boyutlu sistemlerde boyut azaldıkça taşıyıcıların yaşam süresi artar. Üç boyutlu sistemlerde fonon saçılmaları nedeniyle taşıyıcıların yaşam süreleri 1-2 ps mertebesindedir. Boyut azaldıkça taşıyıcıların saçılmaya uğrama olasılıkları azalmakta ve bunun sonucunda taşıyıcıların yaşam süreleri artmaktadır. İki boyutlu yapılardaki taşıyıcıların yaşam süreleri 10 ps kadardır. Bir boyutlu yapılardaki taşıyıcıların yaşam süresi ise 100 ps kadardır. Yük taşıyıcı yoğunluğu arttıkça yaşam süresi artar. Çünkü taşıyıcı konsantrasyonu arttıkça saçılma potansiyeline karşı perdeleme etkisi ortaya çıkar. Düşük boyutlu sistemlerde taşıyıcıların yaşam süresinin uzun olması yarıiletkene dayalı devre elemanı yapımında büyük avantajlar sağlar.

Günümüzde gelişen teknolojiye uygun özellikli yeni yarıiletken devre elemanları oluşturmak için düşük boyutlu sistemler üzerindeki çalışmalar yoğun bir şekilde devam etmektedir (Bastard, 1981; Kasapoğlu vd., 2003; Duque vd., 1997; Latge vd., 1994).

2.1. YARIİLETKENLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

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

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

2.1.1. YARIİLETKENLERİN BAND YAPISI

Yarıiletken fiziğinin anahtarı band teorisi ve onun sonuçlarından kaynaklanan etkin kütle teorisidir. İdeal bir yarıiletkeni sunarken kusursuz bir periyodik yapı göz önüne alınır. Varsayımımız; atomların kristal içinde periyodik olarak dizilmesidir. Bu varsayım tam doğru olmamasına rağmen, enerji momentum ilişkisi modifiye edilerek elektronların serbest uzayda hareket ediyormuş gibi alınmasına band teorisi izin verir (Singh, 1993).

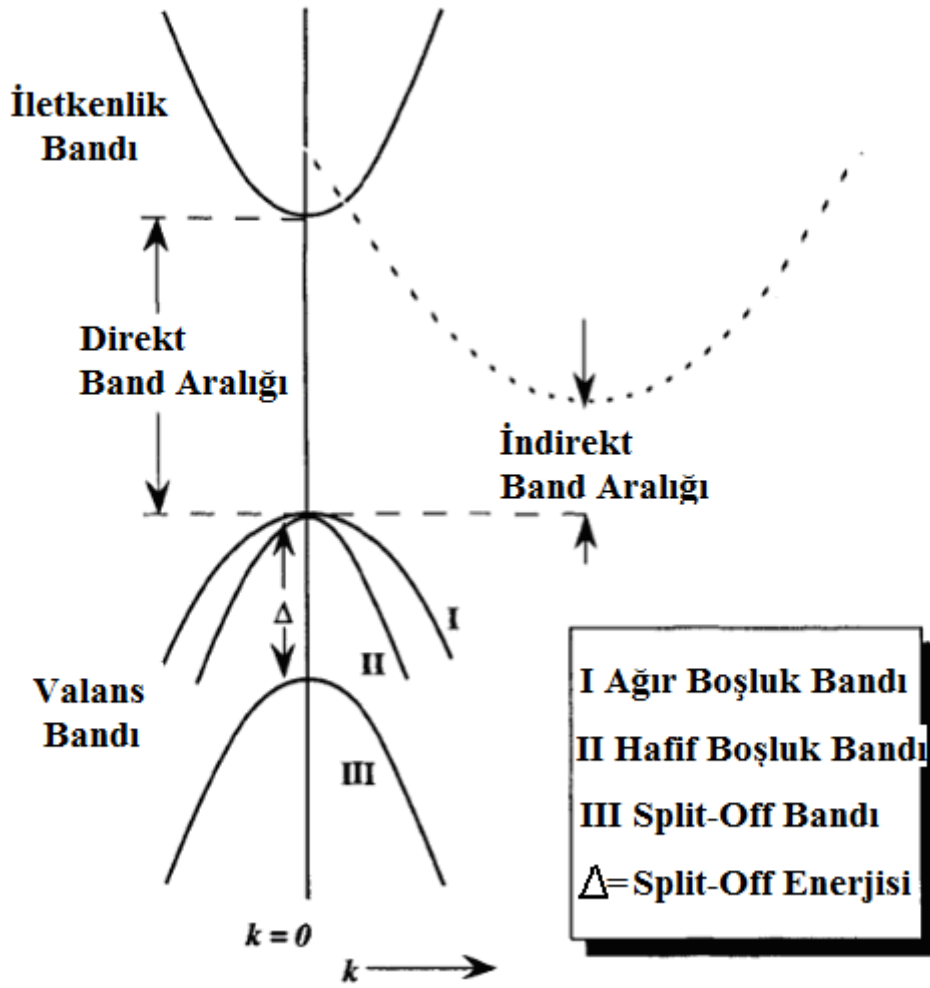
Katıların band teorisi, yarıiletkenlerin elektriksel özelliklerini büyük bir başarı ile açıklar. Mutlak sıfır sıcaklığında ($T=0 \text{ K}$) tamamen elektronlarla dolu olan banda valans bandı ve bunu takip eden ilk boş banda ise iletkenlik bandı adı verilir. Bu iki band

birbirinden bir enerji aralığı ile ayrılır. Bu aralık yasak enerji aralığı olarak tanımlanır. Yarıiletkenlerde iletim olayını düşünürsek, izinli bandlar elektronlarla dolu olduğunda banddaki elektronlar hiç akım taşımazlar. Çünkü elektronlar fermiyondur ve fermiyonlar band dolu olduğunda hiç akım taşımazlar. Elektronlar sadece boş durumlara hareket ederler ve sonuç olarak elektronlar bir yerden başka bir yere hareket edemezler. Bu etkiye sonsuz özdirenç ve bir yarıiletkeni veya bir yalıtkanı çağrıştırır. Fakat bir yarıiletken dışarıdan herhangi bir etki ile uyarılırsa (ışık, sıcaklık, basınç v.b) değerlik bandındaki bazı elektronlar iletim bandına çıkarlar. Böylece, yarıiletkende iletim olayı gerçekleşir. Değerlik bandındaki elektronlar iletim bandına çıkınca, geride değerlik bandında boşluklar bırakırlar. Böylece, yarıiletkenlerde elektronlar ve boşluklar olmak üzere iki tür taşıyıcının varlığından bahsedilir.

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

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

geçerken momentum değişir. Bu nedenle optik aletlerde verimsiz olduklarından kullanılmazlar.



Şekil 2.1. Yarıiletkenlerin bant yapısı

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

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

Burada $U(r)$ elektronlar tarafından yaratılan potansiyeldir. Kristalin doğasından dolayı potansiyel periyodiktir.

$$U(r) = U(r + R)$$

Sonuç olarak, elektronun kristalin her bir hücresinde bulunma olasılığını eşit olarak alacağız. Çünkü her bir hücre özdeştir. Eğer potansiyel değişken olursa bu çözüm geçersiz olur. Bloch teoremi periyodik yapı içinde hareket eden elektronun dalga fonksiyonu için bir form verir. Bu form, elektronun dalga fonksiyonunun bir düzlem dalga ile ($e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$) örgünün periyoduyla periyodik olarak değişen bir fonksiyonun ($U_k(\mathbf{r})$) çarpımı ile verildiğini söyler. Yani, elektronun dalga fonksiyonu

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

şeklinde verilir. Bu yolla, yasak enerji aralıkları tarafından ayrılan bantların oluşması sağlanır. Elektronların bantın tabanında veya tepesindeki davranışı serbest elektronunkine benzerdir. Fakat elektronlar periyodik potansiyelden etkilenirler. Bu etki teoriye elektronun kütle değerlerinin yeniden tanımlanmasıyla aktarılır. Bu yeni kütleyle etkin kütle adı verilir. Etkin Kütle, elektronun periyodik potansiyel ve dış kuvvet etkisi altındaki hareketine Newton'un 2.hareket kanununun uygulanmasını sağlayan bir büyüklüktür. Etkin kütle serbest elektronun etkin külesinden farklıdır. Ve band eğriliğine göre pozitif veya negatif değerler alabilir. Valans bandındaki elektronların etkin kütleleri iletkenlik bandından daha ağır ve negatiftir. Genel olarak etkin kütle

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

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

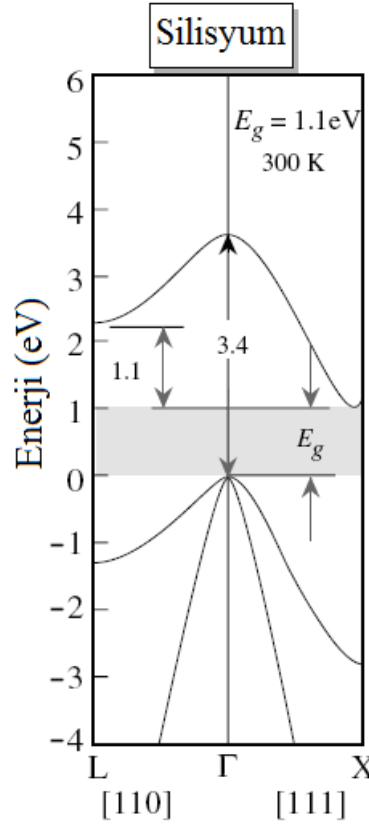
2.1.1.1 Silisyum'un Band Yapısı

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

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

olur. Burada k_l k 'nın boylamsal bölümü k_t ise enine bölümüdür. Ayrıca, $m_l^*=0.98 m_0$ değerinde ve $m_t^*=0.19 m_0$ 'dır. Şekilden de görüldüğü gibi silisyum indirek malzemedir.

Bundan dolayı optik geçişlerde kullanılmazlar. Bunun sebebi momentumun korunumundan dolayı optikal geçişlerde “ düşey k ” gerekir. Ayrıca, silisyumda boşluk geçişi özellikleri oldukça zayıftır. Çünkü boşluk kütleleri oldukça büyüktür. Fakat elektronik aletler için yüksek güvenilirlikten dolayı silisyum oldukça yaygın kullanılır (Singh, 2003).



Şekil 2.2. Silisyumun band yapısı

2.1.1.2. GaAs'ın Band Yapısı

GaAs'ın band yapısı Şekil 2.3'de görülmektedir. Band aralığı direk olduğu için optikal geçişlerde kullanılır. Band sınırında E-k ilişkisi izotropiktir. E-k ilişkisi;

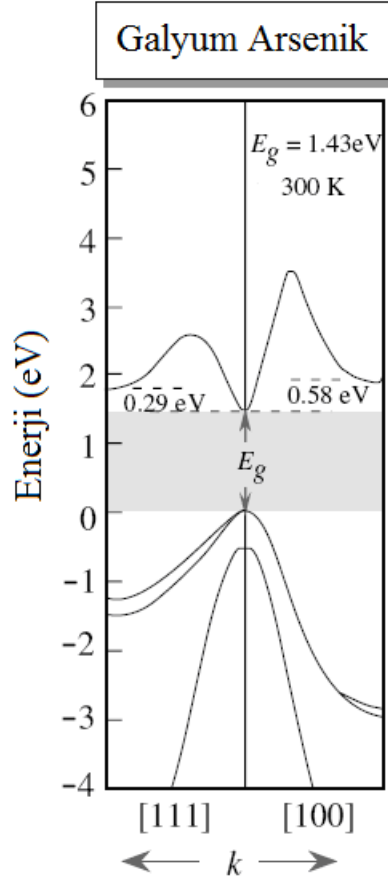
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

şeklinde yazılabilir. Daha duyarlı bir hesap için E-k ilişkisi non-parabolik alınırsa

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

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

Genel olarak sıcaklık arttıkça yarıiletkenlerin band aralığı azalır. Örneğin GaAs'de 0 K'de band aralığı 1.51 eV ve oda sıcaklığında 1.43 eV'dur. Bu özellik hem elektronik hemde optoelektronik aletlerde çok önemlidir (Singh, 2003).



Şekil 2.3. GaAs'in band yapısı

2.1.2. KATKILI YARIİLETKENLER

Düşük yoğunluklu saf yarıiletkenlerde serbest taşıyıcıların akım taşıyabileceğini gördük. Serbest taşıyıcı yoğunluğunu arttırmak için, safsızlık olarak bilinen katkılama kullanılırlar. Bir yarıiletken katkılı atomları eklemeye işine aşılama (doplama) adı verilir. Temel olarak katkılamanın amacı serbest taşıyıcı yoğunluğunu kontrol etmektir. Katkılı atomları periyodik tablodan seçilir. Çünkü, katkı atomlarının dış kabuk elektronu ev sahibi yarıiletken ya bir fazla ya da bir eksik seçilir. Sonuç olarak katkılama işlemleri yapılırken, kullanılan katkı maddeleri, verici (donör) veya alıcı (akseptör) olmak üzere iki ana sınıfa ayrılır. Bunlardan ortama bir elektron verebilen safsızlık atomuna verici, ortamdaki bir elektron alan safsızlık atomuna alıcı atomu adı verilir. Donör atomu için düşünelim, elektron-donor etkileşimi Coulombic potansiyel tarafından ifade edilir ve problem basitçe hidrojen atomu gibi çözülür. Enerji basitçe kuantum mekaniğindeki hidrojen atomu probleminden yararlanılarak verilir. Buna göre donör enerji seviyesi

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

olup m_e elektronun etkin kütlesi, E_i ise iletkenlik bandı kıyısındaki enerjidir. Tablo 1 'de bazı yarıiletkenlerin taban durum enerjisi görülmektedir. Donör enerji seviyesi yalnızca ana kristalin özelliklerine bağlıdır. Denklem göre Ge, Si, GaAs için donör enerji seviyeleri sırasıyla 0,006, 0,025 ve 0,007 eV olmalıdır. Fakat Tablo1'den görüldüğü gibi bu değerlerde bir miktar sapma vardır. Demek ki donör enerji seviyesi katkılanan atomun cinsine de bağlı. Bu sapmaların oluşmasının sebebi gerçek safsızlık pertürbasyon potansiyelinin bizim varsaydığımız Coulombic potansiyelden farklı olmasıdır.

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

Tablo 1. Bazı yarıiletkenlerin verici ve alıcı enerji seviyeleri

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

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

2.2. HETEROYAPILAR

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

Elektronik band yapısı birçok fiziksel olgu ile modifiye edilebilir. MBE ve MOCVD ile yarıiletken tabakaları seri şekilde büyütme mümkün. Eğer dar band aralıklı bir malzeme ile geniş band aralıklı bir malzeme bir araya getirilirse oluşan yapıya heteroyapı adı verilir.

A ve B gibi iki yarıiletken büyütme teknikleriyle bir araya getirilirse, alaşımın özellikleri;

- i) Örgünün kristal yapısı: İki veya daha çok bileşenli alaşıma sahip çoğu yarıiletken alaşım benzer kristal yapısına sahip olduğu için benzer kristal yapısına sahiptir. Malzemeler benzer örgü yapısında seçildiği için örgü sabiti Vegard yasasına uyar. A_xB_{1-x} alaşımı için;

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

dir.

- ii) Alaşımın band yapısı: Alaşımın band yapısını hesaplamak oldukça zordur. Çünkü alaşımı oluşturan malzemeler kusursuz bir örgüye sahip olsalar da alaşım kusursuz bir örgüye sahip değildir. Atomlar gelişigüzel yerleşmişlerdir ve periyodik değildirler. Buna rağmen alaşımın band yapısı iyi bir yaklaşımla;

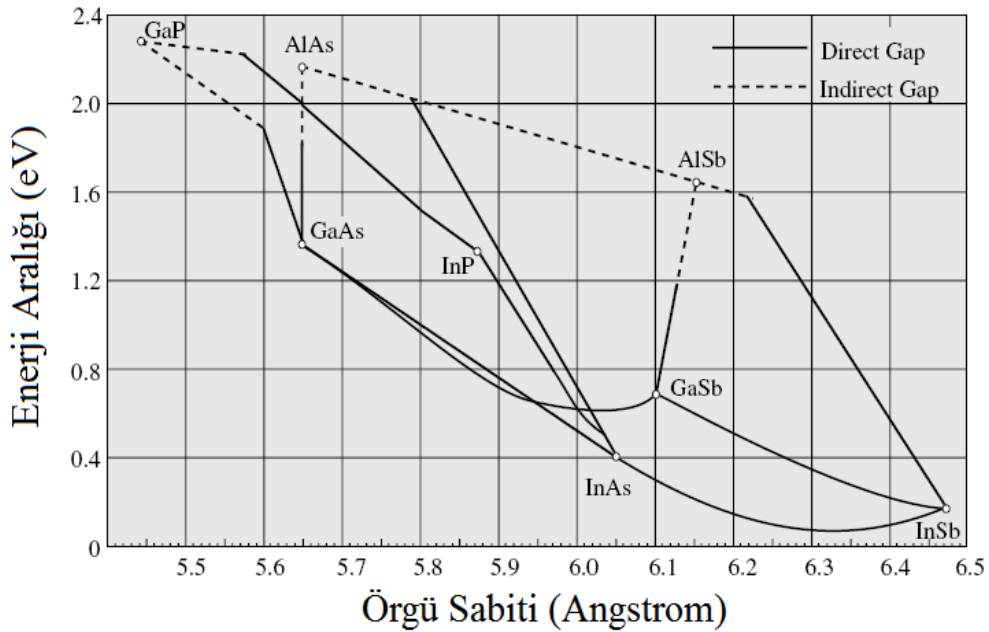
$$E_g^{\text{alaşım}} = x E_g^A + (1 - x) E_g^B$$

şeklinde verilebilir.

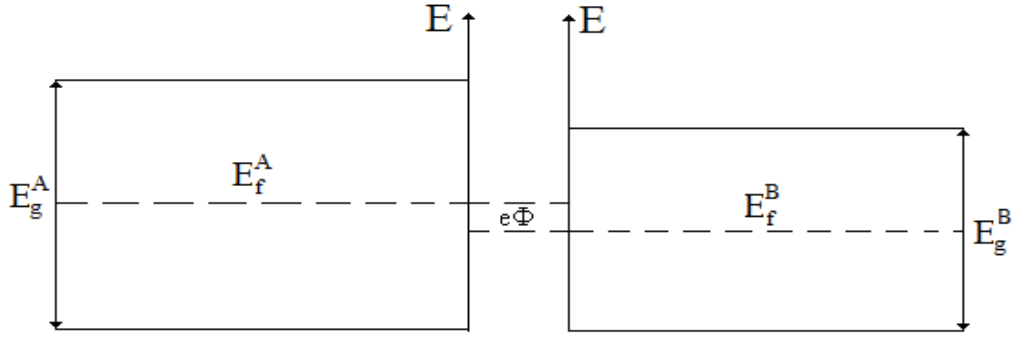
Çoğu alaşımın özellikleri yaklaşık olarak alaşımın her bir bileşeninin kendi özelliğinin lineer ortalaması olarak verilir. Eğer alaşımın oluşma süreci iyiye, örgü sabiti ve enerji aralığı için verilen denklemler geçerlidir. Yani alaşım A_xB_{1-x} şeklinde büyütülürse ortalama olasılık A-tipi atom B-tipi atom tarafından çevrelenmiş ve B-tipi atom x olasılıklı A-tipi üyeye sahiptir. Bu tip malzemeye en iyi örneklerden biri GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ 'dir. Çünkü bu yarıiletkenlerin örgü sabitleri birbirine çok yakındır (Singh, 1993; Singh, 2003).

Heteroyapıyı oluşturan külcelerin benzer yapıda olmaları, uygulamada önemli sonuçların alınmasını sağlar. Aynı zamanda bu koşul ile elektron dalga vektörünün ara

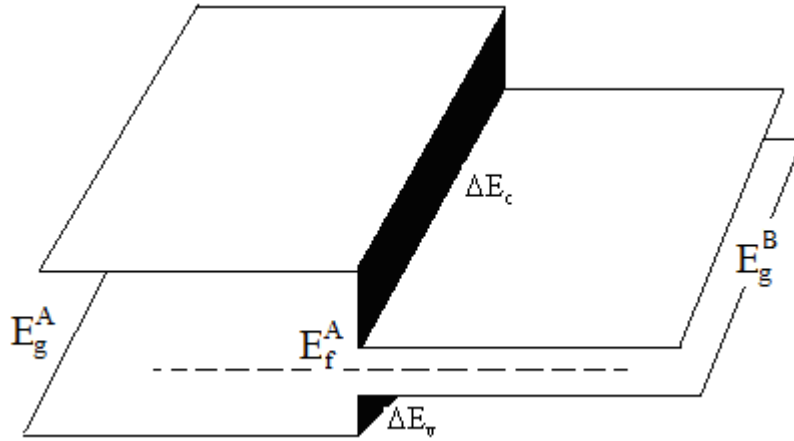
yüzeyde değişmemesi de kabul edilmiş olur. Kabul edilmekten kastımız, heteroyapıyı oluşturan bir yarıiletkenin kristal potansiyeli ile elektronik yapısının ara yüzey düzlemine kadar değişmediğidir. Ara yüzeyde elektronik yapı ve kristal potansiyel aniden diğer külçenin özelliklerini sergileyecek biçimde değişir. Zaten teknolojik uygulamada önemli olan yarıiletkenlerin çoğu aynı simetri grubuna sahip olduklarından, heteroyapı için kabul edilen şartlar sağlanmış olur. Örgü sabiti bir yarıiletkenin heteroyapı oluşturabilme uygunluğunu belirler. Bir heteroyapı oluşturulurken yapıyı oluşturan heteroyapıların örgü sabitlerinin birbirine yakın olaması tercih edilir. Şekil 2.4 de bazı yarıiletkenlerin oda sıcaklığında örgü sabitleri ve enerji aralıkları verilmiştir. Şekil 2.4'den görüldüğü gibi GaAs ve AlAs'nin örgü sabitleri birbirine çok yakındır. Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin bant yapılarının birbirine eklenmemiş (Şekil 2.5(a)) ve eklenmiş durumları (Şekil 2.5(b)) şematik olarak gösterilmiştir (Dingle, 1975; Ergün vd., 1997).



Şekil 2.4 Oda sıcaklığında bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve enerji aralıkları (Singh, 2003).



(a)



(b)

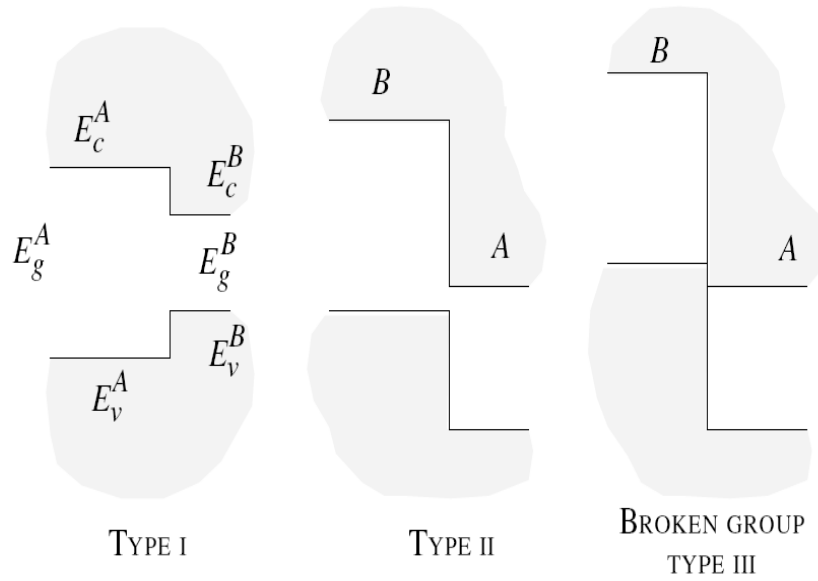
Şekil 2.5. (a) Birbirine eklenmemiş farklı iki yarıiletkenin band diyagramı, **(b)** Örgü sabitleri birbirine yakın olan iki yarıiletkenin birbirine eklenmiş durumdaki band yapısı. Burada ΔE_v ve ΔE_c sırasıyla valans ve iletim bandındaki süreksizlikleri, E_{g1} ve E_{g2} ise temel bant aralıklarıdır.

İki yarıiletken bir araya getirildiğinde band sınırlarında üretilen süreksizlik kuantum kuyusu problemlerinde aşırı önemlidir. Şekil 2.5 (b) de görüldüğü gibi A ve B gibi iki yarıiletkenin band aralığının bir bölümündeki süreksizlik, iletkenlik ve valans bandının bir bölümünde görülmektedir. Ne yazık ki, iki yarıiletken bir araya getirildiğinde yük transferi olacağından problem basit değildir. Ara yüzeyde bağlar farklı kimyasal özelliklere sahip elementleri içerir. Sonuçta bu bağlar etrafında yük alışverişi olur. Bir dizi teorik model band sınırlarındaki süreksizliği hesaplamak için önerildi. Fakat kesin bir değer elde edilmedi. Süreksizliği belirlemek için araştırmalar hala devam etmektedir. Önemli yarıiletkenlerden GaAs ve AlAs için süreksizlik yaklaşık olarak;

$$\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} \cong \frac{60}{40}$$

şeklinde verilebilir (Aspens, 1976).

Heteroyapılar mikroyapıların yapımında temel eleman niteliğindedir. Düşük boyutlu yapılarda oluşan fiziğin dayandığı anahtar parametre heteroyapıdaki bant süreksizliğidir. Yarıiletkenler heteroyapılar bant süreksizliğine göre üç gruba ayrılırlar (Harrison, 1999). Bunlar I-tip (Normal), II-tip (Katlı) ve III-tip (Kırık Kayma) heteroyapılar olarak adlandırılırlar (Şekil 2.6) I-tip (Normal) heteroyapıya örnek verilebilir. Bu yapıda elektron ve boşluk GaAs katmanında bulunurlar. II-tip (Katlı) heteroyapılarda, örneğin Si-Ge, elektronlar Si katmanında, boşluklar ise Ge katmanında kuşatılmışlardır. III-tip (Kırık Kayma) heteroyapıya örnek olarak verebileceğimiz InAs-GaSb yapıda ise, II-tip (Katlı)'deki kuşatmaya benzer bir durum ortaya çıkar fakat bu süperörgülerde periyodun artması ile enerji bant aralığı azalır ve yarıiletkenden yarımetale geçiş gözlenir.



Şekil 2.6. Bant süreksizliğine göre heteroyapı türleri

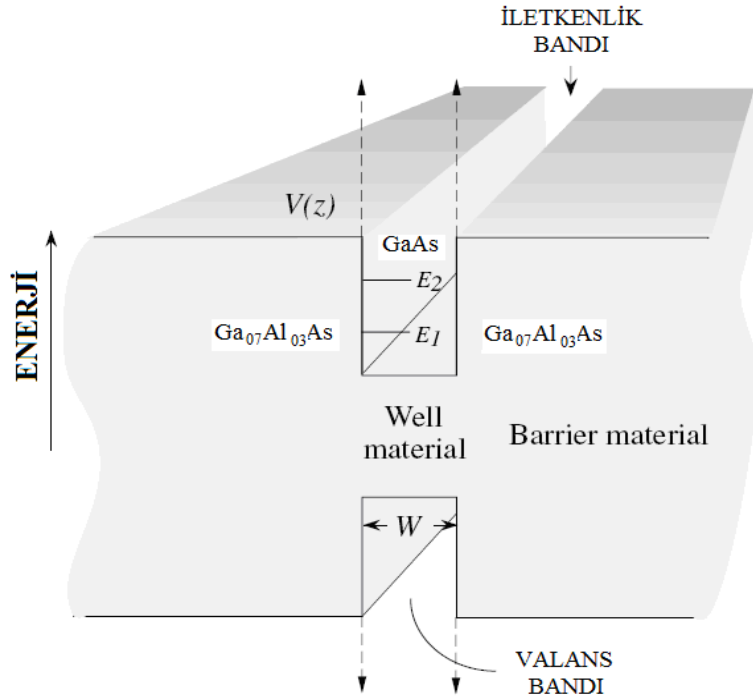
2.3. NANOYAPILAR: KUANTUM KUYULARI, TELLERİ VE NOKTALARI

Yarıiletken teknolojisinin gelişimi ile, elektronik ve optoelektronikte çok geniş uygulama alanları bulan, günümüz teknolojisinde kullanılan devre elemanlarının, boyutlarının daha küçük ve ömürlerinin daha uzun olmaları ve çok daha hızlı çalışmaları

istenmektedir. Kullanım alanlarının genişlemesi, dolayısı ile, bunların yapısal ve fiziksel özellikleri hakkında kesin bilgilere sahip olma gerekliliğini de beraberinde getirmektedir.

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

Malzemenin sahip olduğu üç boyutlu hareket serbestliğinin iki boyuta düşürülmesiyle iki boyutlu yapılar yani kuantum kuyuları elde edilir Uygulamada GaAs ve GaAlAs malzemeleri sıkça kullanılır.(Şekil 2.7.) Bu yapıda Al konsantrasyonu % 30-35 civarında alındığında alaşım direkt band özelliğini korur.

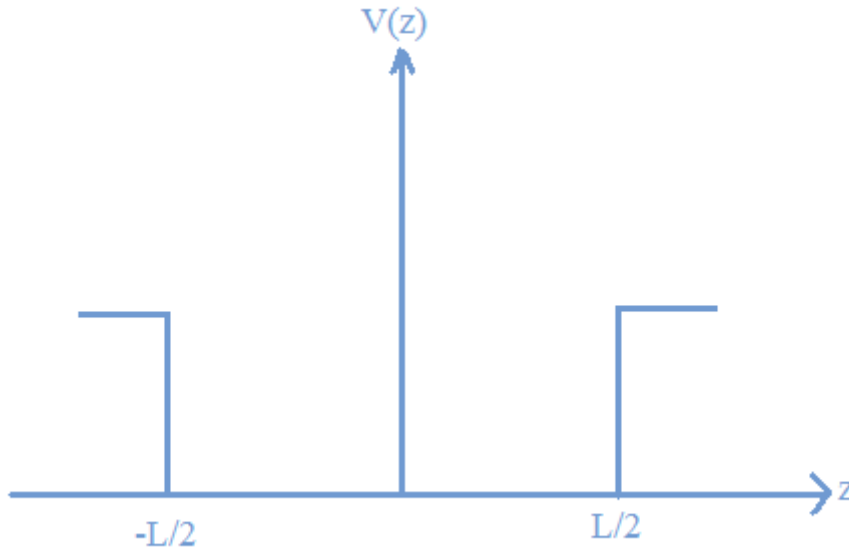


Şekil 2.7. Bir heteroyapıda elektron ve holler için kuantum kuyusu oluşumunun şematik gösterimi.

Şekil 2.7’te verilen kuantum kuyusundaki elektronun davranışı incelenirse elektron en düşük enerjiyi yani GaAs tabakasını tercih edecektir. Burada GaAs tabakası aktif bölgedir ve bu aktif bölge kuantum kuyusu olarak adlandırılır. Kuantum kuyusundaki

elektron veya boşluğun dalga boyu de-Broglie dalga boyu ile kıyaslanabilir ya da daha küçüktür. Ancak bir kuantum kuyusunun genişliğini ayarlama da bir alt sınır ve bir üst sınır gereklidir. Örneğin GaAs için kuyu genişliğinin alt sınırı yaklaşık 20\AA 'dır. Aynı şekilde genişliğin, kuantum etkilerini yok etmeyecek bir üst sınırı olmalıdır ve bu değer elektronun o kristal içerisindeki ortalama serbest yolu ile verilir.

Kuantum kuyuları için çözüm yapılırken daha önce bahsedildiği gibi bazı basitleştirmeler kullanılır. İlk basitleştirme, elektronun etkin kütlesi alınırken yapılır. Kuantum kuyusunu oluşturan GaAs ve GaAlAs'ın örgü sabitleri birbirine çok yakın olduğundan, bu iki yarıiletken arasındaki etkin kütle farkı ihmal edilir. İkinci basitleştirme potansiyel enerji profili olup, ideal bir yaklaşımla potansiyel profili basamak biçiminde alınır. Şekil 2.8'te ideal potansiyel kuyu profili görülmektedir.



Şekil 2.8. Kuantum kuyu profili

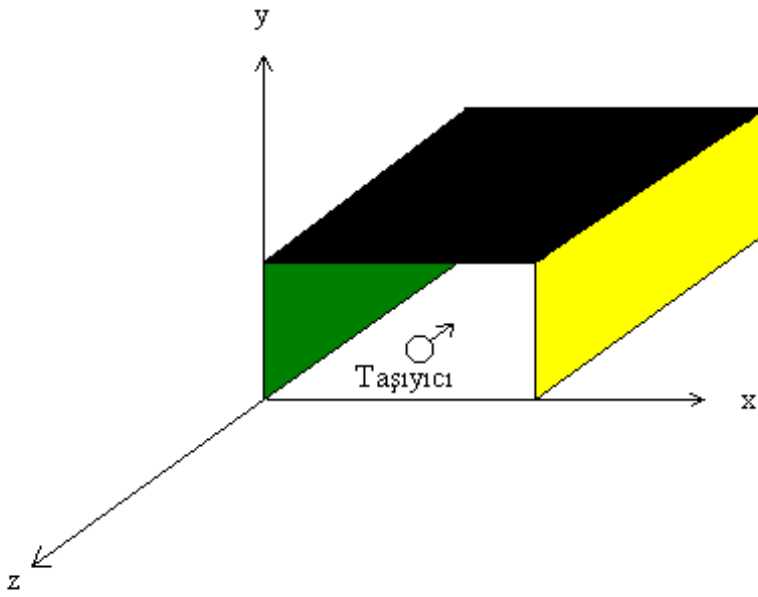
Yapılan yaklaşımlarla kuantum kuyusu içinde kuşatılmış bir parçacık elde edilir. Böyle bir yapı için idealleştirilmiş potansiyel aşağıdaki gibi verilir.

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

Kuantum kuyuları mevcut olduğunda, gelişmiş devre elemanlarının performansı ile ilgili önemli faktörler ortaya çıkmaktadırlar. Dolayısı ile bu mekanizmaların ve bunları etkileyen parametrelerin ne olduğunun bilinmesi, devre elemanlarının performansı

açısından son derece önemlidir. İki boyutlu heteroyapılar kullanılarak yapılan cihazlardan elde edilen başarılar nedeniyle son yıllarda yapılan çalışmalar sistemin boyutlarını indirmek üzerine yoğunlaşmıştır.

Kuantum kuyu yapısının var olan iki doğrultudaki hareket edebilme serbestliğinin bir boyut daha düşürülmesiyle kuantum telleri elde edilir. Yani kuantum telindeki bir parçacık iki yönde kuşatılmışken tek yönde serbest olur. Kuantum telini göz önüne getirebilmek için, uzun bir GaAs çubuğu GaAlAs malzemesi içine yerleştirilir.(Şekil 2.9)



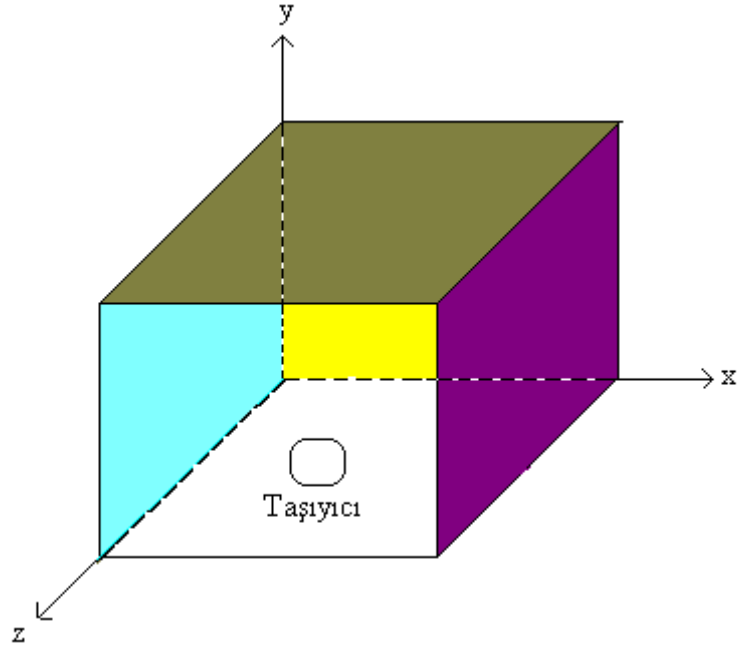
Şekil 2.9. Kuantum teli.

Kuantum teli için iki boyutlu kuşatma potansiyeli

$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L \\ V, & x \leq 0, y \leq 0 \geq L, y \geq L \end{cases}$$

şeklinde verilir.

Kuantum telinin sahip olduğu bir boyuttaki hareket serbestliği ortadan kaldırılırsa taşıyıcılar artık serbestçe hareket edemez ve yapı sıfır boyutlu hale gelir.(Şekil 2.10) Bu tür sistemlerde taşıyıcının enerjisi üç yönde kuantize olur. Bu nedenle bu tür sistemlere kuantum kutuları adı verilir.



Şekil 2.10. Kuantum kutusu.

Kuantum kutusu için üç boyutlu kuşatma potansiyeli

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

şeklinde verilir.

3. SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ (FINITE ELEMENT METHOD)

Sonlu Elemanlar Yöntemi (*Finite Element Method, FEM*) çok çeşitli fiziksel sistemlere ilişkin sayısal hesaplamalarda kullanılan bir yöntemdir (Pask, 2001). Bir parçacıklı sistemin Hamiltonian'ı, $V(\vec{r})$ kuşatma potansiyeli olmak üzere,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \quad (3.1)$$

biçiminde yazılabilir. Bu Hamiltonian ile yazılan Schrödinger denkleminde, uzunluklar Bohr yarıçapı, enerji de Rydberg enerjisi ile ölçülerek “boyutsuz” Hamiltonian

$$H = -\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \quad (3.2)$$

biçiminde elde edilebilir. Bu durumda boyutsuz Hamiltonian ile Schrödinger denklemi

$$H\psi = \varepsilon\psi \quad (3.3)$$

dir. Burada ilgilenilen fiziksel sistemi betimleyen dalga fonksiyonu, gerçek dalga fonksiyonu ise bu ifade geçerlidir. Yani, sayısal hesapta elde edilmek istenen dalga fonksiyonu gerçek değerine ne kadar yakınsa bu ifade de o kadar geçerli olur. Varyasyon ilkesindeki temel düşünceden hareketle elde edilmek istenen ve sistemi betimleyen dalga fonksiyonuna başlangıçta bir öneri yapılabilir.

$$\psi \rightarrow u(\vec{r}) \quad (\text{Elde edilecek dalga fonksiyonu})$$

Yapılmak istenen, önerilen bu dalga fonksiyonları ile sistem için Schrödinger denklemini yazarak “*minimizasyon ilkesi*” gereği ilgili sistemin enerjisini minimum yapan dalga fonksiyonları ailesini elde etmektir. Önerilen yaklaşık dalga fonksiyonu ile Schrödinger denklemi

$$Hu = \varepsilon u \quad (3.4)$$

biçimindedir. Sayısal hesaplamalar için ilgili çalışma uzayı bölmelendirilmelidir. Bu anlamda bölmelendirilmiş uzaydaki toplam düğüm noktası (nod) sayısı N , yine ilgili uzayı geren baz fonksiyonları $\Phi_n(\vec{r})$ olmak üzere, elde edilmek istenen dalga fonksiyonu;

$$u(\vec{r}) = \sum_{n=1}^N u_n \Phi_n(\vec{r}) \quad (3.5)$$

biçiminde seriye açılarak yazılabilir. Yine elde edilmek istenen dalga fonksiyonunu ilgili uzaydaki nodlar üzerinden matris gösterimi

$$\bar{\Phi}^T = \{ \Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \dots, \Phi_N \} \quad (3.6)$$

$$\bar{u}^T = \{ u_1, u_2, u_3, \dots, u_N \} \quad (3.7)$$

olmak üzere

$$u(\vec{r}) = \bar{\Phi}^T(\vec{r}) \cdot \bar{u} \quad (3.8)$$

biçimindedir. Böylelikle sistemde bulunması gereken N adet değişim parametresi u_n “Galerkin Yöntemi” ile elde edilebilir. Burada temel ilke, Schrödinger denklemini aranan $u(\vec{r})$ fonksiyonu ile yazmak, denklemi soldan fonksiyonun hermitik eşleniği ile çarpmak ve ilgili uzayda integral alarak sistemin değişim parametrelerinin minimum kılacağı ifadeyi oluşturmaktır. Yani, $u^+ = \bar{u}^+ \cdot \bar{\Phi}(\vec{r})$ olmak üzere,

$$G = \int_{\Omega} u^+ (H - \epsilon I) u \, d\tau \quad (3.9)$$

Burada I, $N \times N$ boyutlu birim matristir. Ayrıca $u(\vec{r})$, sisteme ilişkin tam çözüm ise $G = 0$, değil ise $G \neq 0$ olacaktır. G’yi minimum yapan $\{u, u^+\}$ ailesi enerjiyi de minimum kılacaktır. Aranan dalga fonksiyonu ve hermitik eşleniği yerine yazılırsa,

$$G = \bar{u}^+ \cdot \left[\int_{\Omega} \bar{\Phi}(\vec{r}) (H - \epsilon I) \bar{\Phi}^T(\vec{r}) \, d\tau \right] \cdot \bar{u} \quad (3.10)$$

ve sembolik değişim yazılırsa,

$$\frac{\partial G}{\partial u^+} = 0 \quad (3.11)$$

$$\left[\int_{\Omega} \bar{\Phi} (H - \varepsilon I) \bar{\Phi}^T d\tau \right] \cdot \bar{u} = 0 \quad (3.12)$$

elde edilir. Burada Hamiltonian'ı açık olarak yazmadan önce kinetik terimin katkısına bakılmak istenirse, bu integralin

$$- \int_{\Omega} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla}^2 \cdot \bar{\Phi}^T \cdot d\tau = \int_{\Omega} \bar{\nabla} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\Phi}^T \cdot d\tau - \int_{\Omega} \bar{\nabla} (\bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\Phi}^T) \cdot d\tau$$

biçiminde yazılabileceği görülebilir. Bu ifadedeki ikinci terim ise, Stokes Teoremi ile bir yüzey integraline dönüştürülebilir.

$$= \int_{\Omega} \bar{\nabla} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\Phi}^T \cdot d\tau - \int_{\partial\Omega} \bar{\Phi} (\bar{\nabla} \bar{\Phi}^T) \cdot d\bar{a}$$

İlgilenilen fiziksel sistemin çözüm uzayının yüzeylerinde aranan dalga fonksiyonu ve eşleniklerinin sıfır olması gerekliliği, yani fiziksel sınır koşulları düşünüldüğünde, buradaki ikinci terimin kinetik terime katkısının olmayacağı görülebilir.

$$\bar{\Phi}_{yüzey} = 0 \quad (3.13)$$

Hamiltonian'ın açık biçimi, G nin değişimi ifadesinde yazılırsa,

$$\left[\int_{\Omega} d\tau \left[\bar{\nabla} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\Phi}^T + \bar{\Phi} V(\vec{r}) \bar{\Phi}^T \right] \right] \cdot \bar{u} = \varepsilon \left[\int_{\Omega} d\tau \bar{\Phi} \bar{\Phi}^T \right] \cdot \bar{u} \quad (3.14)$$

Bu ifade yeni bir gösterimle

$$\bar{\bar{K}} \cdot \bar{u} = \varepsilon \bar{\bar{M}} \cdot \bar{u} \quad (3.15)$$

biçiminde yazılabilir. Literatürde,

$\bar{\bar{K}}$: Esneklik Matrisi (Stifness Matrix)

$\bar{\bar{M}}$: Kütle Matrisi (Mass Matrix)

olarak isimlendirilir ve

$$\bar{\bar{K}} = \int_{\Omega} d\tau \left[\bar{\nabla} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\Phi}^T + \bar{\Phi} V(\bar{r}) \bar{\Phi}^T \right] \quad (3.16)$$

dir. Çalışma uzayının tümü üzerinden olan integraller ise bölmelendirilmiş uzay elemanları üzerinden olan integrallerin toplamı biçiminde yazılabilir.

$$\int_{\Omega} d\tau = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} d\tau \quad (3.17)$$

O halde,

$$\bar{\bar{K}} = \sum_{e=1}^{N_e} \bar{\bar{k}}_e \quad \Leftrightarrow \quad \bar{\bar{k}}_e = \int_{\Omega_e} d\tau \left[\bar{\nabla} \bar{\phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\phi}^T + \bar{\phi} V \bar{\phi}^T \right] \quad (3.18)$$

$$\bar{\bar{M}} = \sum_{e=1}^{N_e} \bar{\bar{m}}_e \quad \Leftrightarrow \quad \bar{\bar{m}}_e = \int_{\Omega_e} d\tau \bar{\phi} \bar{\phi}^T \quad (3.19)$$

Burada,

$\bar{\phi}$: Global eleman baz fonksiyonu

$\bar{\Phi}$: Tüm uzayı geren baz fonksiyonu

dur. Uzay boyutuna göre, tüm uzay baz fonksiyonları global eleman baz fonksiyonları cinsinden yazılabilir.

6.1. Baz Fonksiyonları Seçimi

Fiziksel sistemlerin çözümüne ilişkin güçlü bir yöntem olan FEM’de yaklaşık çözüm sonlu boyuttaki fonksiyon uzayında aranır ve bu uzay bir baz fonksiyon seti ile tanımlanabilir. N uzay boyutu olmak üzere

$$\{\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_N\} \quad (3.20)$$

dir. Baz fonksiyonları ile uzayın herhangi bir fonksiyon üyesi, bazların lineer bileşimi olarak gösterilebilir. Örneğin z_N elemanlarına sahip kesikli uzayda aranan kesin çözüm $u(z)$ ’ye yaklaşık çözüm

$$U(z) = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(z) \quad (3.21)$$

dir. Burada, c_j , skaler bir sabittir. Sıklıkla çözüm uzayını geren baz fonksiyonları, polinomların kolay tanımlanması ve iyi bilinen özelliklere sahip olması nedeniyle, sonlu boyuttaki polinom uzayı olarak seçilir. Bu durumda baz fonksiyonları polinomlardır ve n . derece bir polinom uzayı için baz fonksiyonu olarak seçilecek polinomun mertebesi $N = n + 1$ dir. Örnek olarak $\{1, z, z^2, \dots, z^N\}$ seçilebilir. Ancak herhangi bir lineer vektör uzayı için tek bir temel set olmadığından baz fonksiyonlarının seçimi esnektir. Polinom uzayı baz fonksiyonları için de “*Lagrange Polinomları*” baz fonksiyonları olarak seçilebilir. Lagrange polinomları çazılma uzayı Ω içindeki N tane düğüm noktasına (nod) göre $\{z_1, z_2, \dots, z_N\}$ tanımlanır. j nod indisini göstermek üzere $(N - 1)$. derece polinom her z_j ile ilişkilidir. Polinomlar şu özelliğe sahiptir;

$$\phi_i(z_j) = \delta_{ij} \quad (3.22)$$

Bir boyutta baz fonksiyonlarını yazmak için çalışma uzayı $[0,1]$ aralığına set edilebilir.

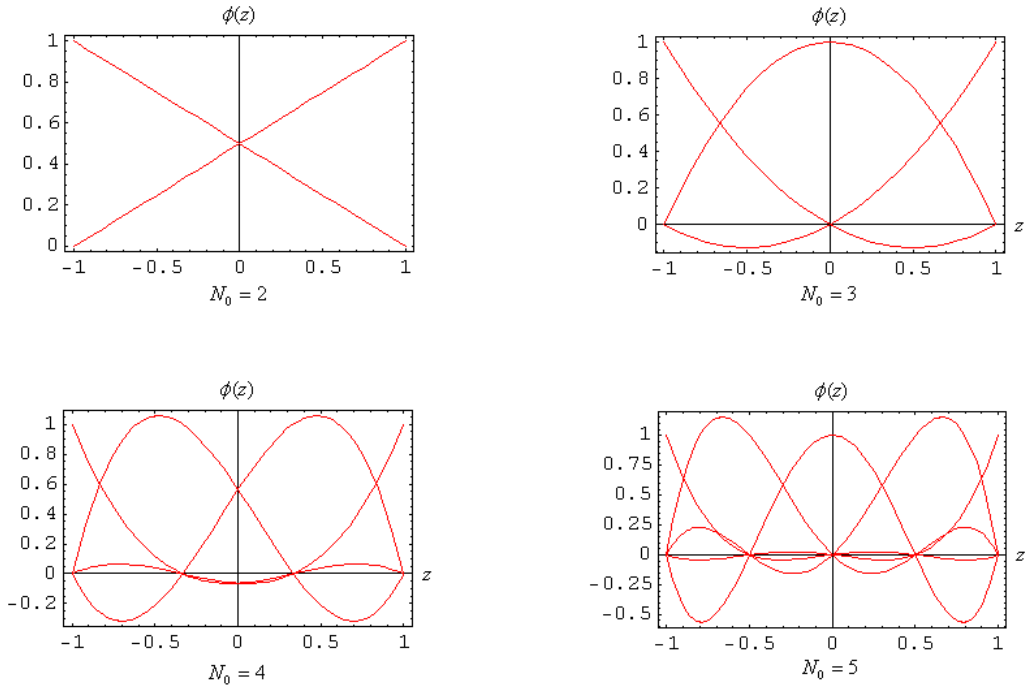
$$[z_a, z_b] \rightarrow [0,1]$$

Çözüm uzayında N tane nod olduğu düşünülürse, sistemde $(N - 1)$ tane parça yer alacak (Ω_j) ve bu parçaların her biri $\left(\frac{j-1}{N}, \frac{j}{N}\right)$ aralığında olur. Baz fonksiyonları z uzayında ve $\hat{\Omega} = [-1,1]$ aralığında aranır. Uzaydaki nod sayısı N_0 olsun ($N_0 \geq 2$). Burada oluşturulacak baz fonksiyonları N_0 tane olur ve z^{N_0-1} . dereceden polinomlardır. $\phi_i(z_j) = \delta_{ij}$ koşulunu sağlayan polinomların seçimi şöyle olabilir;

$$\phi_i(z) = \Lambda_i \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z - z_j) \quad \phi_i(z_k) = \Lambda_i \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z_k - z_j) \quad (3.23)$$

Burada Λ_i ler normalizasyon sabitidir.

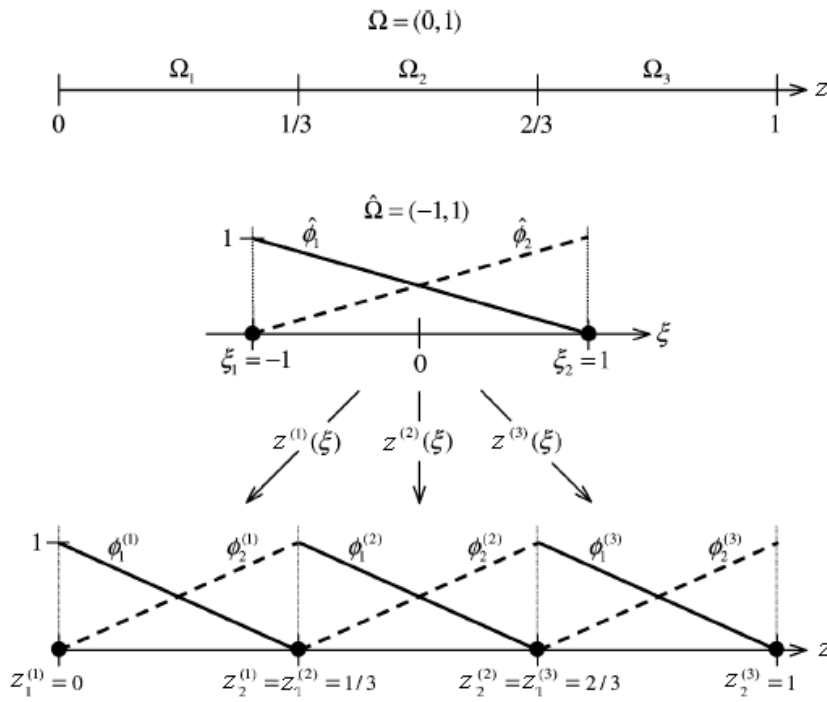
$$\Lambda_i = \frac{1}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z_i - z_j)} \quad \phi_i(z_k) = \frac{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z_k - z_j)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z_i - z_j)} \quad (3.24)$$



Şekil 3.1. z uzayında farklı düğüm noktası sayıları için baz fonksiyonları.

3.2. Bir Boyutta Parçalı Lineer Baz Fonksiyonları

Şekil 3.2.'deki gibi $\Omega = (0,1)$ çalışma uzayı için baz fonksiyonları arayalım. Çalışma uzayı 3 parçaya bölünebilir ($\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$). Her bir elemanla birleştirilen yerel baz fonksiyonlarını oluşturmak için kullanılan ana baz (parent basis) $\{\hat{\phi}_i\}$, ana eleman (parent element) $\hat{\Omega} = (-1,1)$ üzerinde tanımlansın.



Şekil 3.2. Üç elemanlı çalışma uzayı, lineer baz fonksiyonları ve $[-1,1]$ aralığında elde edilen bazların çalışma uzayına yerleştirilmesi sonucu elde edilen global baz fonksiyonları

Böylelikle ana bazlar

$$\hat{\phi}_1(\xi) = \frac{\xi - \xi_2}{\xi_1 - \xi_2} = \frac{\xi - 1}{-1 - 1} = -\frac{1}{2}(\xi - 1) \quad \rightarrow \quad \hat{\phi}_1(\xi) = -\frac{1}{2}(\xi - 1) \quad (3.25)$$

$$\hat{\phi}_2(\xi) = \frac{\xi - \xi_1}{\xi_2 - \xi_1} = \frac{\xi - (-1)}{1 - (-1)} = \frac{1}{2}(\xi + 1) \quad \rightarrow \quad \hat{\phi}_2(\xi) = \frac{1}{2}(\xi + 1) \quad (3.26)$$

Herbir Ω_j elemanı ile ilişkili olan yerel baz fonksiyonları, ana eleman $\hat{\Omega}$ 'dan her bir Ω_j elemanına tanımlı $z^{(j)}(\xi)$ dönüşümü ile tanımlanır. Dönüşüm için z 'nin ξ ile ilişkisi elde edilmelidir.

$$z^{(j)}(\xi) = a^{(j)}\xi + b^{(j)} \quad (3.27)$$

$\xi = -1$ ve $\xi = 1$ için $z^{(j)}(\xi)$ değerleri nod indisleri cinsinden bilindiğinden,

$$z^{(j)}(\xi = -1) = -a^{(j)} + b^{(j)} = \frac{j-1}{N}, \quad z^{(j)}(\xi = 1) = a^{(j)} + b^{(j)} = \frac{j}{N} \quad (3.28)$$

bulunur. Dolayısıyla,

$$b^{(j)} = \frac{2j-1}{2N}, \quad a^{(j)} = \frac{1}{2N} \quad (3.29)$$

$$z^{(j)}(\xi) = \frac{1}{2N}\xi + \frac{2j-1}{2N} \quad (3.30)$$

ve ters dönüşüm ile

$$\xi^{(j)}(z) = 2Nz + (1-2j) \quad (3.31)$$

olur. O halde $N = 3$ ve $j = 1, 2, 3$ kullanılarak her bir eleman için

$$\begin{aligned} z^{(1)}(\xi) &= \frac{1}{6}\xi + \frac{1}{6} & \rightarrow & \quad \xi^{(1)}(z) = 6z - 1 \\ z^{(2)}(\xi) &= \frac{1}{6}\xi + \frac{3}{6} & \rightarrow & \quad \xi^{(2)}(z) = 6z - 3 \\ z^{(3)}(\xi) &= \frac{1}{6}\xi + \frac{5}{6} & \rightarrow & \quad \xi^{(3)}(z) = 6z - 5 \end{aligned} \quad (3.32)$$

bulunur. Herbir elemana ait yerel baz fonksiyonları

$$\phi^{(j)}_i(z) \equiv \hat{\phi}_i[\xi^{(j)}(z)] \quad (3.33)$$

ifadesinden,

$$\begin{aligned} \phi^{(1)}_1(z) &= 1-3z, & \phi^{(1)}_2(z) &= 3z, & \phi^{(2)}_1(z) &= 2-3z \\ \phi^{(2)}_2(z) &= 3z-1, & \phi^{(3)}_1(z) &= 3-3z, & \phi^{(3)}_2(z) &= 3z-2 \end{aligned} \quad (3.34)$$

biçimindedir. Buradan hareketle z uzayında, çakışan nodlarda yerel baz fonksiyonları birleştirilerek parçalı global baz fonksiyonları elde edilir.

$$\phi_1(z) = \begin{cases} \phi^{(1)}_1(z), & z \in \Omega_1 \\ 0, & z \notin \Omega_1 \end{cases} \quad (3.35)$$

$$\phi_2(z) = \begin{cases} \phi^{(1)}_2(z), & z \in \Omega_1 \\ \phi^{(2)}_1(z), & z \in \Omega_2 \\ 0, & z \notin \Omega_1 \text{ ve } z \notin \Omega_2 \end{cases} \quad (3.36)$$

$$\phi_3(z) = \begin{cases} \phi^{(2)}_2(z), & z \in \Omega_2 \\ \phi^{(3)}_1(z), & z \in \Omega_3 \\ 0, & z \notin \Omega_2 \text{ ve } z \notin \Omega_3 \end{cases} \quad (3.37)$$

$$\phi_4(z) = \begin{cases} \phi^{(3)}_2(z), & z \in \Omega_3 \\ 0, & z \notin \Omega_3 \end{cases} \quad (3.38)$$

3.3. FEM (Finite Element Method)'in Çiftlenimsiz Bantlara Uygulanması

Basit olsun diye öncelikle çiftlenimsiz alt bantlarla işe başlanır. Örneğin, iletkenlik bantları için Hamiltonian

$$H^0 = \sum_{\alpha=x}^z \sum_{\beta=x}^z H_{\alpha\beta} k_{\alpha} k_{\beta} = \underbrace{(H_{xx}k_x^2 + H_{yy}k_y^2 + H_{xy}k_x k_y)}_{H_C(k_x, k_y)} + \underbrace{(H_{xz}k_x + H_{yz}k_y)}_{H_B(k_x, k_y)} k_z + \underbrace{H_{zz}k_z^2}_{H_A} \quad (3.39)$$

Kuantum kuyusunun

Matris değil,

Kuşatma potansiyelini içermiyor.

Çiftlenimsiz bantlar için skaler.

şeklinde yazılabilir.

z koordinatı için özel hareket, kuşatma doğrultusu bu doğrultu seçildiği için olur. Bu yüzden gerçekte H_A , H_B , H_C bariyer ve kuyu materyallerinin etkin kütlelerine (Luttinger parametrelerinin değişimine) bağlı olduğu kadar z 'ye de bağlı olur. Böylece $k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z}$ ve simetrik olarak

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial z^2} H_A(z) &\rightarrow \frac{\partial}{\partial z} H_A(z) \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial z} H_B(k_x, k_y, z) &\rightarrow \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z} H_B(k_x, k_y, z) + H_B(k_x, k_y, z) \frac{\partial}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

gibi yazılır. O zaman kuantum kuyusu (çiftlenimsiz) alt bantları için etkin kütle eşitliği

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} H_A \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(H_B \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} H_B \right) + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) = 0 \quad (3.41)$$

şeklinde verilir. Yukarıdaki denklemi soldan $g^\dagger(z)$ ile çarpıp $z \in [z_a, z_b]$ (çalışma uzayı) üzerinden integral alınırsa,

$$\int_{z_a}^{z_b} g^\dagger(z) \left[\underbrace{-\frac{\partial}{\partial z} H_A \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(H_B \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} H_B \right)}_{\text{yüzey terimi}} + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) dz = 0 \quad (3.42)$$

Kısmi integrasyon uygulanırsa,

$$\int_{z_a}^{z_b} g^\dagger(z) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{\partial}{\partial z} + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) dz + \int_{z_a}^{z_b} g^\dagger(z) \left[-\frac{\partial}{\partial z} H_A \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial z} H_B \right] g(z) dz = 0$$

$$u = g^\dagger(z) \text{ ve } dv = \frac{\partial}{\partial z} \left[-H_A \frac{\partial g(z)}{\partial z} - \frac{i}{2} H_B g(z) \right] dz$$

$$\text{olmak üzere } \int_{z_a}^{z_b} u dv = uv \Big|_{z_a}^{z_b} - \int_{z_a}^{z_b} v du \text{ dir.}$$

$$\int_{z_a}^{z_b} g^\dagger(z) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{\partial}{\partial z} + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) dz + \int_{z_a}^{z_b} \frac{\partial}{\partial z} g^\dagger(z) \left[H_A \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} H_B \right] g(z) dz - \underbrace{g^\dagger(z) H_A \frac{\partial g(z)}{\partial z} - \frac{i}{2} g^\dagger(z) H_B g(z)}_{\text{yüzey terimi}} \Big|_{z_a}^{z_b} = 0 \quad (3.43)$$

Yüzey terimi önemlidir ve bu terimle ilgilenirken dikkatli olunmalıdır. Bununla birlikte bu terim sıfır alınabilir. Çünkü, çözülecek olan sistem uzayın belli bir bölgesine hapsolmuşsa sisteme ait dalga fonksiyonu uzayın hapsoldüğü kısmın sınırlarında sıfır olmalıdır. Bu koşul sistemin kesin çözümü olan ψ için geçerli olduğu gibi deneme fonksiyonu $g(z)$ için de geçerlidir.

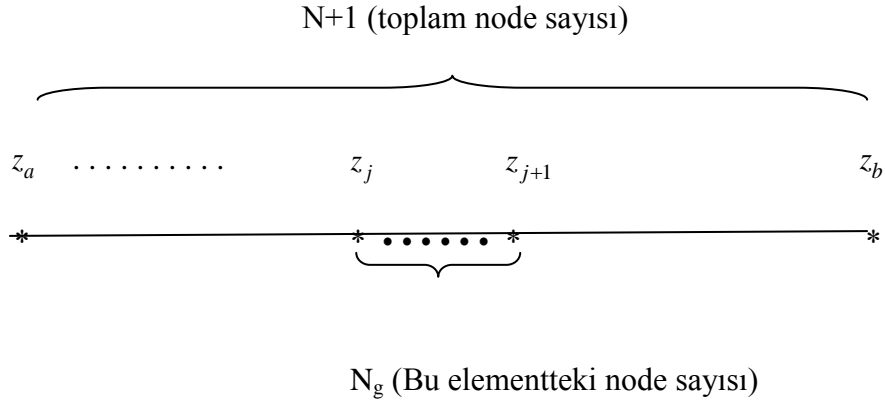
$$g(z_a) = g(z_b) = g^\dagger(z_a) = g^\dagger(z_b) = 0$$

$[z_a, z_b]$ aralığı,

$$[z_a, z_b] \rightarrow [z_0, z_1] + [z_1, z_2] + \dots + [z_j, z_{j+1}] + \dots + [z_N, z_{N+1}] = \sum_{j=0}^N [z_j, z_{j+1}] \quad (3.44)$$

şeklinde N tane global elemente ayrılabilir. Dolayısıyla $\int_{z_a}^{z_b} dz \rightarrow \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} dz$ yazılabilir.

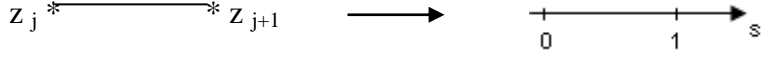
Burada, $N+1$ = Toplam node sayısını ifade eder, N = Global element sayısını ifade eder, N_g (veya n) = Global elementteki node sayısını ifade eder.



Bu bilgilerin ışığında üretici (generating) denklem

$$G = \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} g^\dagger(z) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{\partial}{\partial z} + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) dz + \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial}{\partial z} g^\dagger(z) \left[H_A \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} H_B \right] g(z) dz = 0 \quad (3.45)$$

şeklinde yazılabilir. Global element için aşağıdaki dönüşüm yapılırsa,



$$s = az + b \quad \text{ise} \quad \begin{aligned} 1 &= az_{j+1} + b \\ 0 &= az_j + b \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} a &= \frac{1}{z_{j+1} - z_j} \\ b &= -\frac{z_j}{z_{j+1} - z_j} \end{aligned}$$

elde edilir. Dolayısıyla,

$$s = \frac{z - z_j}{z_{j+1} - z_j} \quad L_j = z_{j+1} - z_j \quad \Rightarrow \quad ds = \frac{dz}{L_j} \quad (3.46)$$

şeklinde tanımlanan dönüşüm ile de,

$$\int_{z_j}^{z_{j+1}} dz = L_j \int_0^1 ds \quad \text{ve} \quad \frac{\partial}{\partial z} \rightarrow \frac{\partial s}{\partial z} \frac{\partial}{\partial s} = \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} \quad (3.47)$$

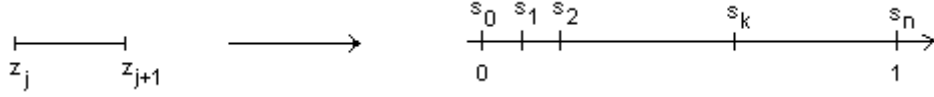
$$g_j(z) \rightarrow g_j(s) \quad (\text{j.nci global element zarf fonksiyonu}) \quad (3.48)$$

olur. Dolayısıyla

$$\begin{aligned} G &= \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 g^\dagger(s) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + H_C + (U_{QW}(s) - E) \right] g(s) ds \\ &+ \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 \frac{1}{L_j} \frac{\partial (g^\dagger(z))}{\partial s} \left[H_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} H_B \right] g(s) ds = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G &= \sum_{j=0}^N \int_0^1 g^\dagger(s) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{\partial}{\partial s} + L_j (H_C + (U_{QW}(s) - E)) \right] g(s) ds \\ &+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{\partial (g^\dagger(z))}{\partial s} \left[H_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} H_B \right] g(s) ds = 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

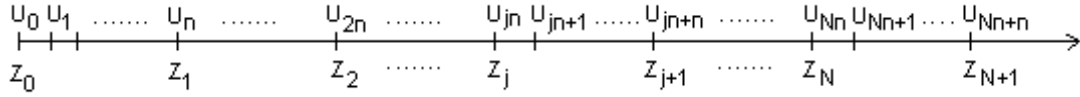
denklemleri elde edilir. Yukarıdaki s dönüşümüyle geçilen $[0,1]$ uzayında FEM bazları (ϕ 'lerin kümesi) oluşturulabilir. Bu uzayın (global elementin) n parçaya bölünmesiyle uzayda n . dereceden polinomla verilebilen $n+1$ tane baz fonksiyonu oluşturulabilir.



Burada $s_0 = 0$ ve $s_n = 1$ dir. Baz fonksiyonları

$$\phi_i(s) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{(s - s_k)}{(s_i - s_k)} \quad (3.50)$$

ile tanımlıdır. Şekilden de görülebilir ki, s uzayının n parçaya bölünmesi ile çözüm uzayının j .nci bölgesi de n parçaya bölünür. Dolayısıyla, çözüm uzayında $([z_a, z_b])$ $n.(N+1)+1$ nokta olduğudur. Enerji özdeğer denkleminin çözümü olan fonksiyonun bu noktalarındaki değerleri



Şekil 3.3. Çiftlenimsiz bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması

şeklinde olsun. Daha önce de belirtildiği gibi $U_0 = U_{Nn+n} = 0$ olmalıdır. $g_j(s)$ fonksiyonları oluşturulan baz fonksiyonlarının lineer bileşimi olarak yazılabilir.

$$g_j(s) = \sum_{k=1}^n U_{jn+k} \cdot \phi_k(s) \quad \Rightarrow \quad g_j^\dagger(s) = \sum_{k=1}^n U_{jn+k}^\dagger \cdot \phi_k(s) \quad (3.51)$$

Burada n global elementteki node sayısını (N_g), U_{jn+k} 'lar katsayıları, $\phi_k(s)$ 'ler de global element baz fonksiyonlarını temsil ediyor. Bu fonksiyonları matris formunda yazmak istersek;

$$g_j(s) = \bar{\phi}^T \bar{U}_{jn} = [\phi_1(s) \quad \phi_2(s) \quad \dots \quad \phi_n(s)]_{1 \times n} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix}_{n \times 1} \quad (3.52)$$

$$g_j^\dagger(s) = \bar{U}_{jn}^\dagger \bar{\phi} = [U_{jn+1}^* \quad U_{jn+2}^* \quad \dots \quad U_{jn+n}^*]_{1 \times n} \begin{bmatrix} \phi_1(s) \\ \phi_2(s) \\ \vdots \\ \phi_n(s) \end{bmatrix}_{n \times 1} \quad (3.53)$$

Not: $A^\dagger = (A^*)^T$ dir.

Bu matris gösterimi “generating” denkleminde kullanılırsa,

$$G = \sum_{j=0}^N \int_0^1 [U_{jn+1}^* \quad U_{jn+2}^* \quad \dots \quad U_{jn+n}^*] \begin{bmatrix} \phi_1(s) \\ \phi_2(s) \\ \vdots \\ \phi_n(s) \end{bmatrix} \underbrace{\left[-\frac{iH_B}{2} \frac{\partial}{\partial s} + L_j (H_C + (U_{QW}(s) - E)) \right]}_{AA} [\phi_1(s) \quad \phi_2(s) \quad \dots \quad \phi_n(s)] \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} ds + \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \left[[U_{jn+1}^* \quad U_{jn+2}^* \quad \dots \quad U_{jn+n}^*] \begin{bmatrix} \phi_1(s) \\ \phi_2(s) \\ \vdots \\ \phi_n(s) \end{bmatrix} \underbrace{\left[H_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} H_B \right]}_{BB} [\phi_1(s) \quad \phi_2(s) \quad \dots \quad \phi_n(s)] \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} \right] ds = 0 \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned}
G = \sum_{j=0}^N \left[U_{jn+1}^* \quad U_{jn+2}^* \quad \dots \quad U_{jn+n}^* \right] & \underbrace{\begin{bmatrix} \int_0^1 \hat{\phi}_1(s) \cdot AA \cdot \hat{\phi}_1(s) ds & \int_0^1 \hat{\phi}_1(s) \cdot AA \cdot \hat{\phi}_2(s) ds & \dots & \int_0^1 \hat{\phi}_1(s) \cdot AA \cdot \hat{\phi}_n(s) ds \\ \int_0^1 \hat{\phi}_2(s) \cdot AA \cdot \hat{\phi}_1(s) ds & \int_0^1 \hat{\phi}_2(s) \cdot AA \cdot \hat{\phi}_2(s) ds & \dots & \int_0^1 \hat{\phi}_2(s) \cdot AA \cdot \hat{\phi}_n(s) ds \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ \int_0^1 \hat{\phi}_n(s) \cdot AA \cdot \hat{\phi}_1(s) ds & \dots & \dots & \int_0^1 \hat{\phi}_n(s) \cdot AA \cdot \hat{\phi}_n(s) ds \end{bmatrix}}_{AA} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} + \\
+ \sum_{j=0}^N \left[U_{jn+1}^* \quad U_{jn+2}^* \quad \dots \quad U_{jn+n}^* \right] & \underbrace{\begin{bmatrix} \int_0^1 \frac{\partial \hat{\phi}_1(s)}{\partial s} \cdot AA \cdot \hat{\phi}_1(s) ds & \int_0^1 \frac{\partial \hat{\phi}_1(s)}{\partial s} \cdot AA \cdot \hat{\phi}_2(s) ds & \dots & \int_0^1 \frac{\partial \hat{\phi}_1(s)}{\partial s} \cdot AA \cdot \hat{\phi}_n(s) ds \\ \int_0^1 \frac{\partial \hat{\phi}_2(s)}{\partial s} \cdot AA \cdot \hat{\phi}_1(s) ds & \int_0^1 \frac{\partial \hat{\phi}_2(s)}{\partial s} \cdot AA \cdot \hat{\phi}_2(s) ds & \dots & \int_0^1 \frac{\partial \hat{\phi}_2(s)}{\partial s} \cdot AA \cdot \hat{\phi}_n(s) ds \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ \int_0^1 \frac{\partial \hat{\phi}_n(s)}{\partial s} \cdot AA \cdot \hat{\phi}_1(s) ds & \dots & \dots & \int_0^1 \frac{\partial \hat{\phi}_n(s)}{\partial s} \cdot AA \cdot \hat{\phi}_n(s) ds \end{bmatrix}}_{BB} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} = 0 \tag{3.55}
\end{aligned}$$

$$G = \sum_{j=0}^N \left[U_{jn+1}^* \quad U_{jn+2}^* \quad \dots \quad U_{jn+n}^* \right] \underbrace{\left[\overline{AA} + \overline{BB} \right]} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} = 0 \tag{3.56}$$

elde edilir. Burada \overline{AA} ve \overline{BB} matrisinin elemanları aşağıdaki biçimde yazılabilir.

$$AA_{11} = \int_0^1 \hat{\phi}_1(s) \left[-\frac{iH_B}{2} \frac{\partial}{\partial s} + L_j \left(H_C + (U_{QW}(s) - E) \right) \right] \hat{\phi}_1(s) ds$$

$$AA_{11} = \int_0^1 \hat{\phi}_1(s) \left(-\frac{iH_B}{2} \right) \frac{\partial \hat{\phi}_1(s)}{\partial s} ds + \int_0^1 \hat{\phi}_1(s) L_j \left(H_C + (U_{QW}(s) - E) \right) \hat{\phi}_1(s) ds$$

dir. Dolayısıyla

$$AA_{kk} = \int_0^1 \hat{\phi}_k(s) \left(-\frac{iH_B}{2} \right) \frac{\partial \hat{\phi}_k(s)}{\partial s} ds + \int_0^1 \hat{\phi}_k(s) L_j \left(H_C + (U_{QW}(s) - E) \right) \hat{\phi}_k(s) ds$$

yazılabilir. Aynı şekilde

$$\begin{aligned}
 BB_{11} &= \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \left[H_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} H_B \right] \phi_1(s) ds \\
 BB_{11} &= \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \frac{H_A}{L_j} \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} ds + \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \frac{iH_B}{2} \phi_1(s) ds \\
 BB_{kk} &= \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{H_A}{L_j} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{iH_B}{2} \phi_k(s) ds
 \end{aligned}$$

yazılabilir. Buradan $\overline{\overline{AA+BB}}$ matrisinin elemanları için ($k=1,2,\dots,n$ (global elementteki node sayısı) olmak üzere)

$$\begin{aligned}
 \left(\overline{\overline{AA+BB}} \right)_{kk} &= \frac{H_A^j}{L_j} \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \frac{iH_B^j}{2} \left[\int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds - \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \right] + \\
 &+ L_j \left(H_C^j + (U_{QW}^j(s) - E) \right) \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds
 \end{aligned} \tag{3.57}$$

yazılabilir. H_A^j , H_B^j , H_C^j ve $U_{QW}^j(s)$ terimlerindeki j indisleri bu terimlerin z bağımlılıklarını ifade eder. Nodları, j .nci materyaldeki özelliklerin (yarıiletkenin özellikleri) ve kuşatma potansiyelinin sabit olduğunu kabul ettiğimizi düşündük.

$\overline{\overline{AA+BB}}$ matrisi,

$$\begin{aligned}
 \left(\overline{\overline{AA+BB}} \right)_{kk} &= \underbrace{\frac{H_A^j}{L_j} \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds}_{\left(\overline{\overline{K_1}} \right)_{kk}} + \frac{iH_B^j}{2} \underbrace{\left[\int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds - \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \right]}_{\left(\overline{\overline{K_2}} \right)_{kk}} + \\
 &+ L_j \underbrace{\left(H_C^j + U_{QW}^j(s) \right) \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds}_{\left(\overline{\overline{M_1}} \right)_{kk}} - L_j E \underbrace{\int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds}_{\left(\overline{\overline{M_1}} \right)_{kk}}
 \end{aligned}$$

$$\overline{AA} + \overline{BB} = \underbrace{\frac{H_A^j}{L_j} \overline{K}_1 + \frac{iH_B^j}{2} \overline{K}_2 + L_j (H_C^j + U_{QW}^j(s)) \overline{M}_1 - E L_j \overline{M}_1}_{\overline{K}} \overline{M} \quad (3.58)$$

$$\overline{AA} + \overline{BB} = \overline{K} - E\overline{M} \quad (3.59)$$

$$G = \sum_{j=0}^N \begin{bmatrix} U_{jn+1}^* & U_{jn+2}^* & \dots & U_{jn+n}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{K} - E\overline{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} = 0 \quad (3.60)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda elde edilen son eşitlikten ve

$$\frac{\partial G}{\partial U_{jn+k}^*} = 0, \quad jn+k = 1, 2, \dots, Nn+n-1 \quad (3.61)$$

denkleminden yararlanılarak $Nn+n-1$ tane FEM eşitliği bulunur.

$$\frac{\partial G}{\partial U_{jn+k}^*} = \begin{bmatrix} \overline{K} - E\overline{M} \\ \overline{K} - E\overline{M} \\ \overline{K} - E\overline{M} \\ \overline{K} - E\overline{M} \\ \overline{K} - E\overline{M} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_n \\ U_{n+1} \\ \vdots \\ U_{2n} \\ \vdots \\ U_{jn} \\ U_{jn+1} \\ \vdots \\ U_{jn+k} \\ U_{Nn+1} \\ \vdots \\ U_{Nn+n-1} \end{bmatrix} = 0 \quad (3.62)$$

(Nn+n-1) × (Nn+n-1) (Nn+n-1) × 1

Sonuçta FEM denklemlerinin yapısı aşağıdaki gibi olur ve bu matris eşitliğinin çözülmesiyle sistemimizin özdeğer ve özfonksiyonları bulunur.

$$\begin{bmatrix} \overline{\overline{K}} & 0 & 0 \\ 0 & & 0 \\ 0 & 0 & \overline{\overline{K}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{\overline{U}} \\ \overline{\overline{U}} \\ \overline{\overline{U}} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \overline{\overline{M}} & 0 & 0 \\ 0 & & 0 \\ 0 & 0 & \overline{\overline{M}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{\overline{U}} \\ \overline{\overline{U}} \\ \overline{\overline{U}} \end{bmatrix} \quad (3.63)$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{\substack{\overline{\overline{KK}} \\ (N_1+n-1) \times (N_1+n-1) \text{ lik} \\ \text{matris}}} \quad \underbrace{\hspace{5em}}_{\substack{\overline{\overline{U}} \\ (N_1+n-1) \times 1 \text{ lik} \\ \text{matris}}} \quad = E \quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\substack{\overline{\overline{MM}} \\ (N_1+n-1) \times (N_1+n-1) \text{ lik} \\ \text{matris}}} \quad \underbrace{\hspace{5em}}_{\substack{\overline{\overline{U}} \\ (N_1+n-1) \times 1 \text{ lik} \\ \text{matris}}}$

$$\boxed{\overline{\overline{KK}} \cdot \overline{\overline{U}} = E \cdot \overline{\overline{MM}} \cdot \overline{\overline{U}}} \quad (3.64)$$

Burada $\overline{\overline{KK}}$, $\overline{\overline{K}}$ matrislerinin iç içe geçmesinden (kronlanması) oluşan matristir, $\overline{\overline{MM}}$ ise $\overline{\overline{M}}$ matrislerinin iç içe geçmesinden oluşan matristir.

4. ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA “CORRUGATED” Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs/Ga_{1-x}Al_xAs KUANTUM KUYUSUNUN İLETKENLİK BANDI YAPISI VE BANT İÇİ SOĞURMA

Bugünkü ileri tekniklerle kuantum kuyuları kare, üçgen, parabolik ve çiftlenimli kuantum kuyuları gibi farklı formlarda yapılabilmektedir. Deneysel teknikler diğer olaylar ve uygulamaları anlamayı, keşfetmeyi ve geliştirmeyi teşvik etmektedir, özellikle de sığ safsızlıkların varlığından güçlü bir şekilde etkilenen malzemelerden yapılmış aletlerin optik ve iletim özelliklerini anlamamıza yardımcı olmaktadır. Bir “corrugated” kuantum kuyusunun potansiyeli Şekil 4.1 'de gösterildiği gibi büyütülebilmektedir. Burada I. bölge ($|z| > L/2$) Ga_{1-x}Al_xAs ve II. bölge ($L/2 < z < L/2$) Ga_{1-y}Al_yAs den oluşmaktadır. II. bölgede y Al-konsantrasyonu z'ye bağlı olarak değişmektedir ve bant kenarını ters V biçimli kuantum kuyusu yapabilmek için y kuyu merkezinde maksimum değerini almaktadır.

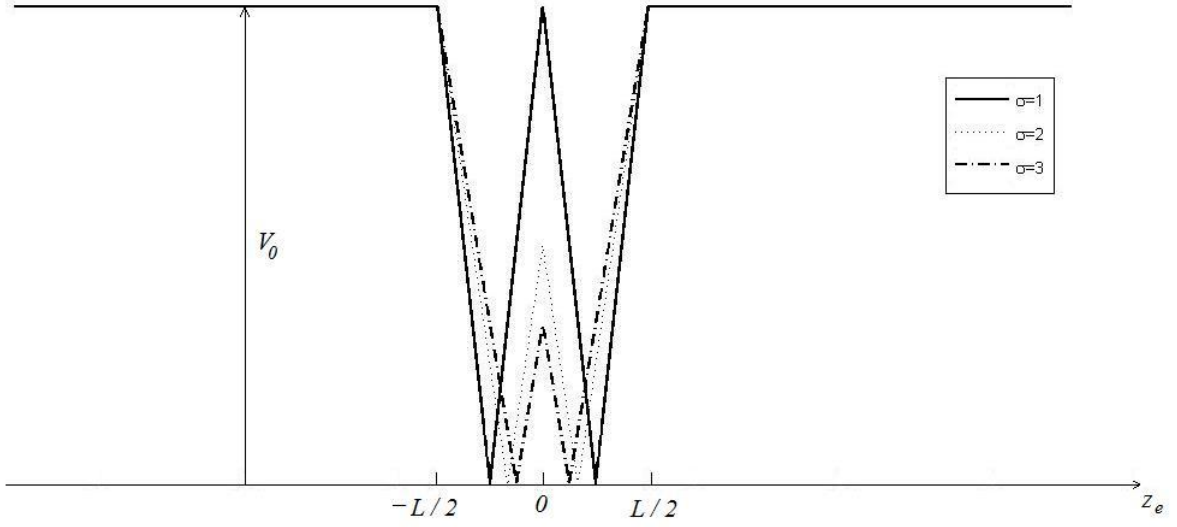
+z_e doğrultusunda uygulanan elektrik alan ve baskı altındaki bir “corrugated” yarıiletken kuantum kuyusunun iletkenlik bandı için Hamiltonian

$$H = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e(z_e)} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_e(z_e)} + eFz_e + V_c(z_e) + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (4.1)$$

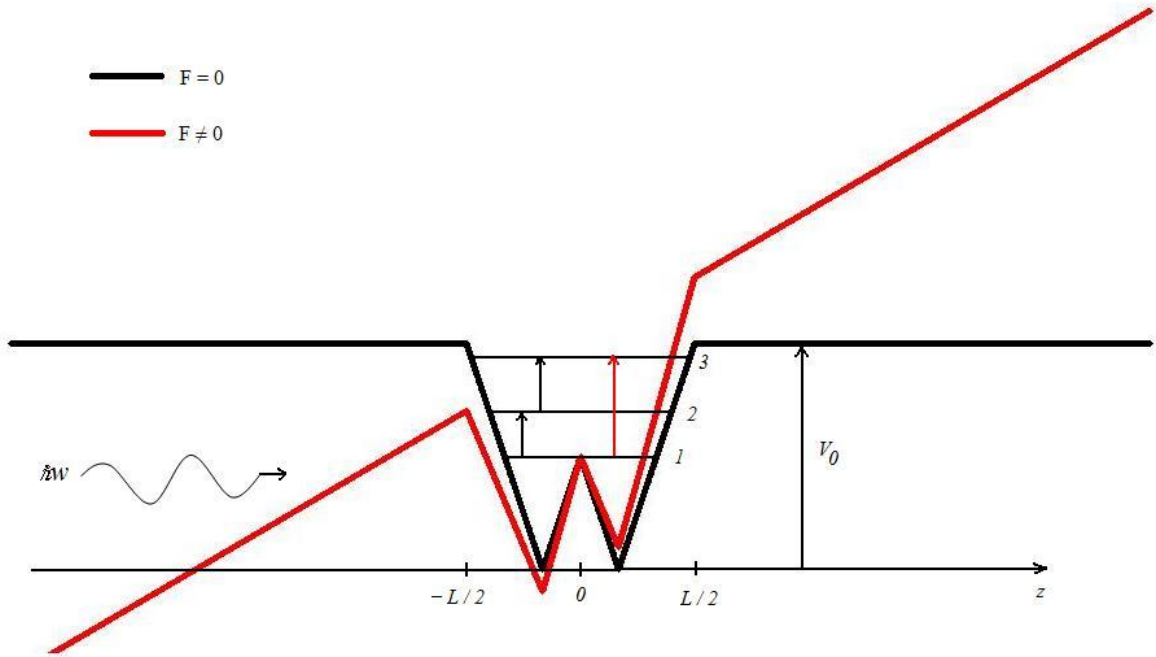
şeklinde yazılır. Burada, V_c(z_e)

$$V_c(z_e) = \begin{cases} V_0 & , \quad z_e < -\frac{L}{2} \\ \left| \frac{V_0}{\sigma} \left(1 - \frac{|z|}{L/2} \right) - \frac{2V_0}{L} |z| \right| & , \quad -\frac{L}{2} \leq z_e \leq \frac{L}{2} \\ V_0 & , \quad z_e > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.2)$$

ile verilir ve bu potansiyel Şekil 4.1 (a) 'daki gibidir. Burada, $\sigma = x_B/x_A$ (x_B bariyerlerdeki Al konsantrasyonu, x_A ise kuantum kuyu merkezindeki Al konsantrasyonudur.) Ayrıca $V_0 = Q_C \Delta E_g$ dir ve $Q_C = 0.60$ olarak alınmıştır. Yukarıdaki Hamiltonian kullanılarak özdeğer denkleminin çözümü, Bölüm 3'te anlatılan çiftlenimsiz bantlar için sonlu elemanlar yöntemi ile yapıldı. İletkenlik bandındaki bir elektron için dalga fonksiyonları ile alt bant enerji değerlerinin elektrik alan ve baskı altındaki değişimi elde edildi. Hesaplamalarda kullanılan fiziksel parametreler Chuang (1995) ve Li (2000)'den alındı.



Şekil 4.1.(a) Corrugated kuantum kuyusunun potansiyel profili ($\sigma = 1$ için sürekli çizgi, $\sigma = 2$ için kesikli çizgi, $\sigma = 3$ için kesikli-noktalı çizgi kullanılmıştır.)



Şekil 4.1. (b) Corrugated kuantum kuyusunun $F = 0$ ve $F \neq 0$ için izinli olası geçişlerin şematik gösterimi ($\sigma = 2$ durumu)

Optik radyasyon altında bir kristaldeki elektronla radyasyon arasındaki etkileşim Hamiltonianı

$$H' = -\frac{e}{m_0} \vec{A} \cdot \vec{p} = -\frac{e}{2m_0} A_0 [e^{-i\vec{q}\vec{r}-i\omega t} + cc] \hat{e}\vec{p} \quad (4.3)$$

şeklinde verilir. Burada, \vec{A} vektör potansiyeli, $\hat{\epsilon}$ polarizasyon vektörü, \vec{q} gelen optik radyasyon için dalga vektörü, e elektronun yükü, m_0 serbest elektron kütlesi ve \vec{p} kristaldeki elektronun momentum vektörüdür. H' etkileşim potansiyeli için geçiş oranı

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | H' | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (4.4)$$

şeklinde verilir (Heitler, 1984). Burada E_i ve E_f sırasıyla başlangıç ve son durumdaki elektronun enerjileri, ω gelen fotonun açısal frekansıdır. Başlangıç durumu dalga fonksiyonu ve soğurma sonucu son durum dalga fonksiyonu sırasıyla

$$\psi_i(\vec{r}) = u_c(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{\rho}}}{\sqrt{A}} g_i(z) \quad (4.5)$$

$$\psi_f(\vec{r}) = u_{c'}(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}'_i \cdot \vec{\rho}}}{\sqrt{A}} g_f(z) \quad (4.6)$$

ile verilir. Burada, A kuantum kuyusunun alanı, \vec{k}_i ve \vec{k}'_i sırasıyla elektronun başlangıç ve son durumunda (x - y) düzlemindeki dalga vektörleri, $\vec{\rho}$ (x - y) düzlemindeki konum vektörü, $u_c(\vec{r})$ ve $u_{c'}(\vec{r})$ iletkenlik bandı minimumu civarındaki periyodik baz fonksiyonlarıdır. $g_i(z)$ ve $g_f(z)$ zarf fonksiyonları aşağıdaki Schrödinger eşitliğine uyarlar.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z_e} \frac{1}{m_e(z_e)} \frac{\partial}{\partial z_e} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_e(z_e)} + eFz_e + V_c(z_e) + a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \right) g(z_e) = E g(z_e) \quad (4.7)$$

Genel olarak, foton soğurmanın matris elemanı yaklaşık olarak

$$\langle \Psi_f | H' | \Psi_i \rangle \cong \int_{\Omega} u_{c'}^* H' u_c d\tau \int_V g_f^* g_i d\tau + \int_{\Omega} u_c^* u_{c'} d\tau \int_V g_f^* H' g_i d\tau \quad (4.8)$$

şeklinde yazılır (Coon, 1984). Yukarıdaki denklemin birinci terimindeki ikinci integral doğrudan bant içi geçiş durumu için sıfırı verir. Bunun için bant içi geçiş durumunda

$$\langle \Psi_f | H' | \Psi_i \rangle \approx \langle g_f | H' | g_i \rangle \quad (4.9)$$

terimi ile ilgilenilir. Kuantum kuyusunda bant içi geçişler için soğurma katsayısı

$$\alpha = \sum_i \sum_f \frac{\mu c m_e k_B T e^2}{\pi \hbar^2 m_0^2 L n_r w} (\cos^2 \theta) \cdot |M_{fi}|^2 \cdot \ln \left[\frac{1 + e^{\left[\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right]}}{1 + e^{\left[\frac{E_F - E_f}{k_B T} \right]}} \right] \frac{\Gamma/2}{(\hbar w + E_f - E_i)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (4.10)$$

ile verilir. Burada matris elementi

$$M_{fi} = \frac{m_0(E_i - E_f)}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} g_f^*(z) z g_i(z) dz \quad (4.11)$$

şeklinde verilir. E_i ve E_f sırası ile i .nci ve f .nci alt bant enerjileri, μ geçirgenlik katsayısı, c ışığın boşluktaki hızı, k_B Boltzmann sabiti, T sıcaklık, θ , polarizasyon vektörü $\hat{\epsilon}$ ile kuyu normalini arasındaki açı, n_r kırılma indisi, E_F kuyudaki elektron yoğunluğuna bağlı olan Fermi enerjisi, Γ çizgi genişliğidir (line broadening). Kırılma indisi (Willardson, 1967)

$$n_r^2 = A + B \left(\frac{\lambda^2}{\lambda^2 - C^2} \right)$$

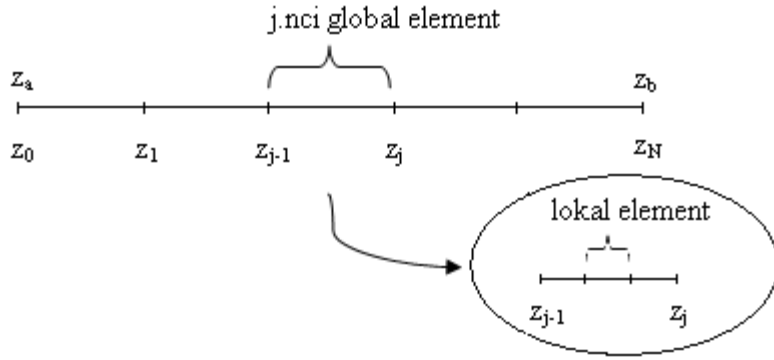
ile verilir ve $T = 298 K$ 'de $A = 8.950$, $B = 2.054$, $C^2 = 0.390$ 'dır. Hesaplamalarda $T = 300 K$, $E_F = 6.49 meV$ ($n_e = 1.6 \times 10^{17} cm^{-3}$), $\Gamma = 10 meV$ (deneysel sonuçlardan alınmıştır (West ve Eglash, 1985). Ayrıca elektrik alan ve baskının değişiminden etkilenmediği düşünülmüştür). Soğurma katsayısı hesaplanırken gelen fotonun kuyuya dik polarize olduğu düşünülerek $\theta = 0$ alınmıştır.

$g(z)$ zarf fonksiyonu olmak üzere optiksel dipol matris elementi M_{fi} sonlu elemanlar yöntemi ile aşağıdaki şekilde hesaplandı.

Çalışma uzayımız $[z_a, z_b]$ aralığında tanımlı olsun. Bu aralıkta aşağıdaki integrali hesaplamak istiyoruz.

$$A_{fi} = \int_{z_a}^{z_b} dz \cdot g_f^*(z) \cdot z \cdot g_i(z) \quad (4.12)$$

Öncelikle çalışma uzayı $(N-1)$ tane global elemente bölünür. Daha sonra her bir global element $(n-1)$ tane lokal elemente bölünür. Yani, j .nci global elementte n tane nod oluşturulur.



Dolayısıyla (4.12) denklemindeki integral, j global element indisi olmak üzere

$$\int_{z_a}^{z_b} dz \rightarrow \sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \quad (4.13)$$

şeklinde yazılır. Daha sonra j .nci global element ele alınır ve zarf fonksiyonları lokal element baz fonksiyonları cinsinden seriye açılır.

$$g(z) = \overline{N(z)^T} \cdot \bar{\phi} \quad g^T(z) = \overline{N(z)} \cdot \bar{\phi}^T \quad (4.14)$$

Burada $N(z)$ biçim fonksiyonlarını, ϕ ise nodal değerleri temsil eder. Buna göre (4.12) denklemi

$$\begin{aligned} A_{fi} &= \sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \cdot \overline{N(z)} \cdot \bar{\phi}_f^T \cdot z \cdot \overline{N(z)^T} \cdot \bar{\phi}_i \\ &= \bar{\phi}_f^T \left[\sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \cdot \overline{N(z)} \cdot z \cdot \overline{N(z)^T} \right] \bar{\phi}_i \end{aligned} \quad (4.15)$$

şekline dönüşür. Buradan $[z_{j-1}, z_j]$ aralığı s dönüşümüyle $[0,1]$ aralığına götürülür ise,

$$\begin{array}{ccc} z_{j-1}^* \text{-----} z_j^* & \longrightarrow & \begin{array}{c} 0 \text{-----} 1 \\ \longleftarrow s \end{array} \\ \\ s = az + b \quad \text{ise} \quad 1 = az_j + b & & a = \frac{1}{z_j - z_{j-1}} \\ & \Longrightarrow & \\ 0 = az_{j-1} + b & & b = -\frac{z_{j-1}}{z_j - z_{j-1}} \end{array}$$

olur. Dolayısıyla,

$$s = \frac{z - z_{j-1}}{z_j - z_{j-1}} \quad L_j = z_j - z_{j-1} \quad \Rightarrow \quad ds = \frac{dz}{L_j}$$

$$\int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \quad \rightarrow \quad L_j \int_0^1 ds$$

$$g_j(z) \quad \rightarrow \quad g_j(s) \quad (\text{j.nci global element zarf fonksiyonu})$$

elde edilir. Buradan,

$$\begin{aligned} A_{fi} &= \bar{\phi}_f^{-T} \left[\sum_{j=1}^N L_j \int_0^1 ds \overline{N(s)} \cdot (L_j s + z_{j-1}) \cdot \overline{N(s)}^T \right] \bar{\phi}_i \\ &= \bar{\phi}_f^{-T} \left[\sum_{j=1}^N L_j \left(\underbrace{L_j \int_0^1 ds \overline{N(s)} s \overline{N(s)}^T}_{\overline{m_{e2}}} + z_{j-1} \underbrace{\int_0^1 ds \overline{N(s)} \overline{N(s)}^T}_{\overline{m_e}} \right) \right] \bar{\phi}_i \\ &= \bar{\phi}_f^{-T} \left[\underbrace{\sum_{j=1}^N L_j (L_j \overline{m_{e2}} + z_{j-1} \overline{m_e})}_{\overline{M}} \right] \bar{\phi}_i \\ A_{fi} &= \bar{\phi}_f^{-T} \overline{M} \bar{\phi}_i \end{aligned} \quad (4.16)$$

elde edilir. Bu denklemdeki \overline{M} matrisi ile başlangıç ve son durumdaki $\bar{\phi}$ 'ler kullanılarak çiftlenimsiz bantlar için optiksel dipol matris elementi

$$M_{fi} = \frac{m_0(E_i - E_f)}{i\hbar} \bar{\phi}_f^{-T} \overline{M} \bar{\phi}_i \quad (4.17)$$

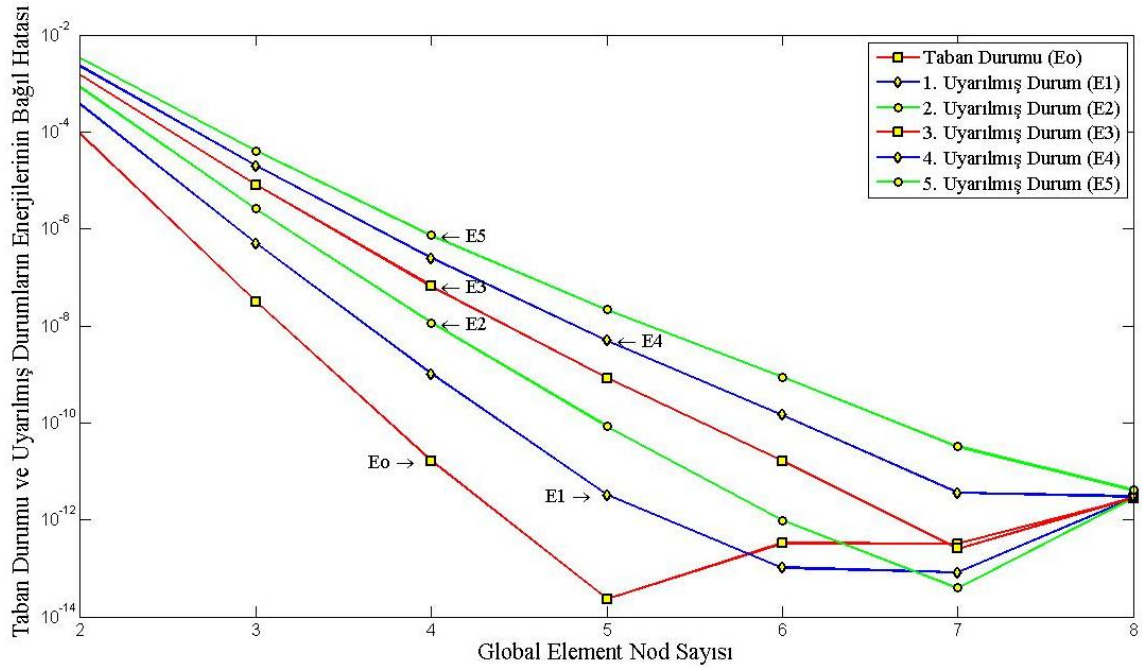
şeklinde bulunur. Buradaki \overline{M} matrisi, $\overline{m} = L_j (L_j \overline{m_{e2}} + z_{j-1} \overline{m_e})$ olmak üzere,

$$\overline{\overline{M}} = \begin{bmatrix} \overline{\overline{m}} & & & & \\ & \overline{\overline{m}} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \overline{\overline{m}} & \\ & & & & \overline{\overline{m}} \end{bmatrix}$$

biçiminde oluşturulur. Yani, $\overline{\overline{m}}$ matrisi elde edildikten sonra $\overline{\overline{M}}$ matrisi içine gömülür (“kron”lanır).

Dolayısıyla optiksel dipol matris elementinin bulunmasıyla Şekil 4.1.’de şematik potansiyel profili verilen “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki bant içi geçişler için soğurma katsayısı denklem (4.10) ile hesaplandı.

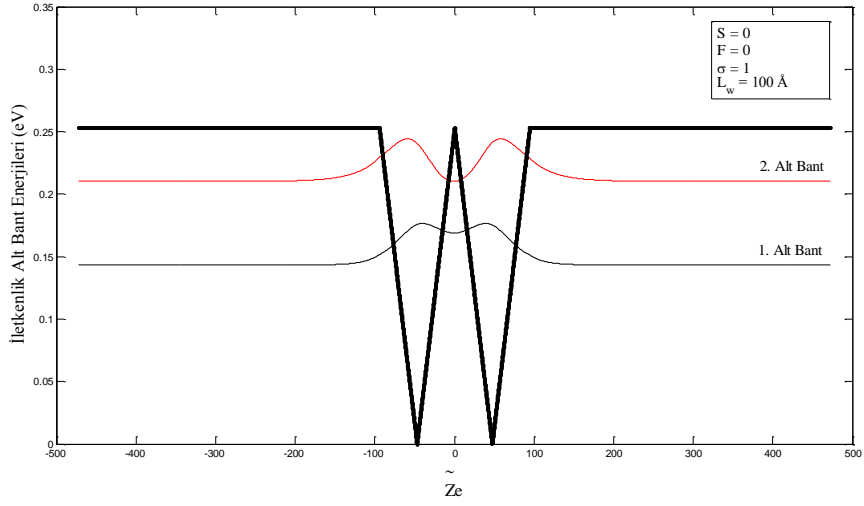
Sonlu elemanlar yöntemi ile yapılan tüm hesaplamalarda global elementteki nod sayısı 4, toplam nod sayısı da 4000 olarak alındı. Ayrıca iletkenlik bandı enerji öz değer ve öz fonksiyonu hesaplamalarında kullanılan tüm fiziksel parametreler Chuang (1995) ve Li (2000)’den, iletkenlik bandında bant içi soğurma katsayısı hesaplamalarında gerekli olan tüm fiziksel parametreler Kasapoğlu (1999)’dan alındı.



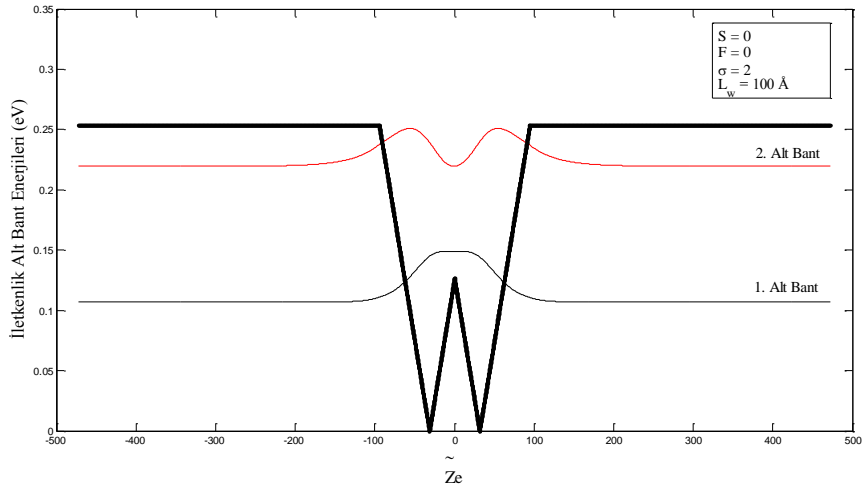
Şekil 4.2. Sonsuz kuantum kuyusunun FEM ile hesaplanan enerji öz değerlerinin Bağıl Hatası

İlk olarak, FEM ile elde edilen sonuçların geçerliliğini test etmek amacıyla sonsuz kuantum kuyusunun enerji öz değerlerini hesapladık. Sonsuz GaAs kuantum kuyusunun FEM ile hesaplanan ilk altı enerji özdeğerinin bağıl hatasının global elementteki nod sayısına göre değişimi Şekil 4.2’de verilmiştir. Burada toplam nod sayısı sabit tutulmuştur. Bu şekle bakıldığında global elementteki nod sayısı arttığında enerji öz değerlerinin bağıl hatasının azaldığı görülmektedir. Global element nod sayısı 8 olduğunda ise tüm enerji öz değerlerinin bağıl hata değeri aynı olmaktadır.

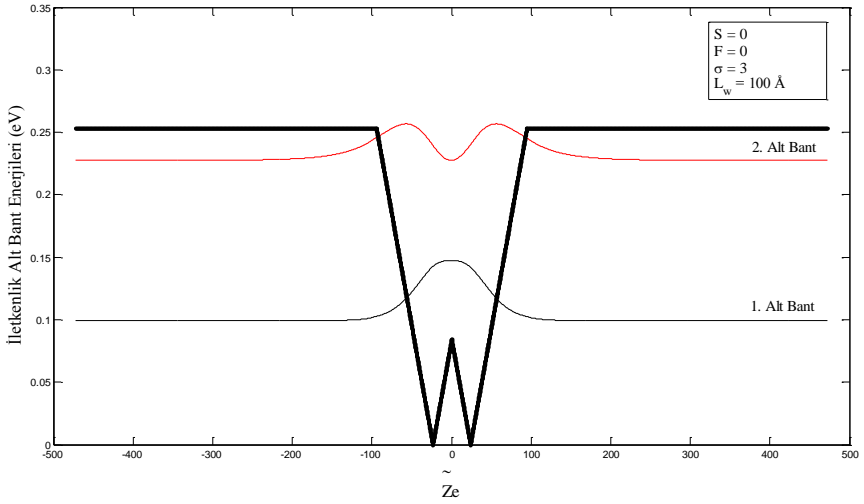
Şekil 4.3 (a), (b), (c) de $F = 0$ ve $S = 0$ durumunda $L_w = 100 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi $\sigma = 1$, $\sigma = 2$ ve $\sigma = 3$ için sırasıyla verilmiştir. Küçük σ değerlerinde bu yapı, çiftlenimli kuantum kuyusunun ters V biçimli potansiyelinin yanlarından birisine lokalize olmuş bir elektronun davranışına benzer bir şekilde davranır. Bu yapı büyük σ değerlerinde ise, V biçimli kuantum kuyusu yapısına benzer davranır ve bir elektron bu kuyu içinde ters V biçimli potansiyelin her iki tarafında serbestçe hareket edebilir. Şekil 4.3 (a), (b) ve (c) incelendiğinde, 1. alt bant enerjisi ve dalga fonksiyonunun σ parametresine bağlılığının daha büyük olduğunu söyleyebiliriz. Bunun nedeni, taban durum en düşük enerji seviyeli durum olduğundan kuyunun tabanındaki potansiyel değişiminden ilk önce onun etkileniyor olmasıdır. Dolayısıyla bu şekillerden, σ değeri arttıkça 1. alt bantın dalga fonksiyonunun kuyu içindeki bulunma olasılığının arttığı görülmektedir. Ayrıca σ ’nın artmasıyla alt bant enerji değerleri azalmaktadır. Çünkü, kuyu içindeki potansiyelin büyüklüğü σ ’nın artmasıyla azalmaktadır.



(a)



(b)



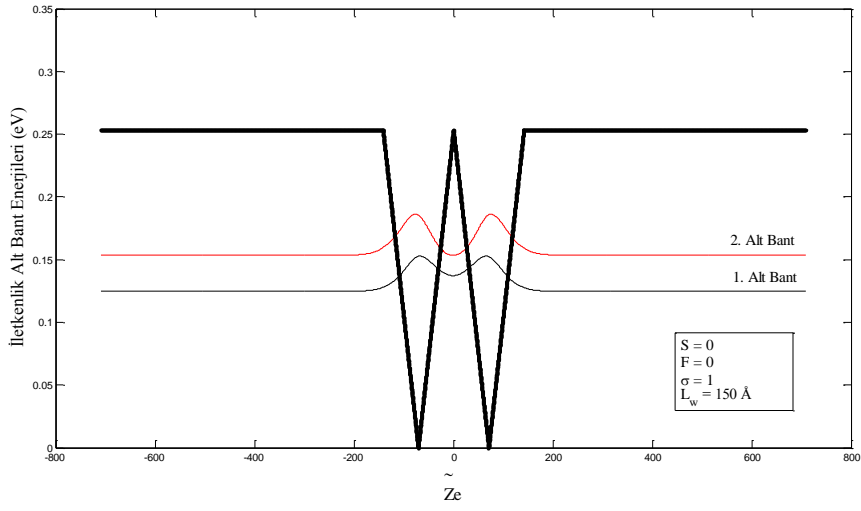
(c)

Şekil 4.3 $L_w = 100 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için.

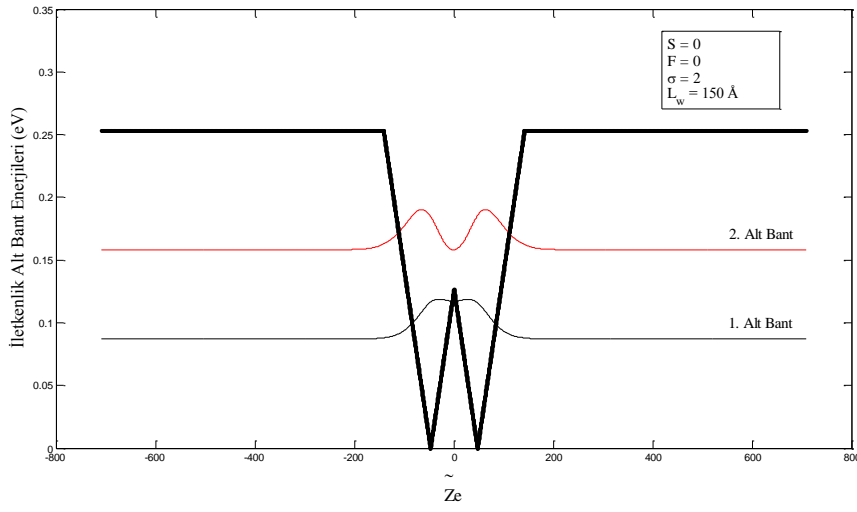
Şekil 4.4 'te $L_w = 150 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesinin; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için normalize konuma göre değişimi verilmiştir. σ 'nın değişimi ile $L_w = 150 \text{ \AA}$ 'luk kuyudaki bağlı durumların dalga fonksiyonları, $L_w = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyudaki bağlı durumların dalga fonksiyonlarına göre daha fazla etkilenmektedir. Ayrıca 1. ve 2. alt bant enerjileri arasındaki fark σ 'nın artmasıyla büyümektedir.

Şekil 4.5 'te $L_w = 200 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesinin; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için normalize konuma göre değişimi verilmiştir. Buradaki dalga fonksiyonlarının davranışı $L_w = 100 \text{ \AA}$ ve $L_w = 150 \text{ \AA}$ luk kuyulardaki davranışa benzerdir. Buradaki temel fark, bağlı durum enerjilerinin $L_w = 100 \text{ \AA}$ ve $L_w = 150 \text{ \AA}$ durumlarındaki enerjilerinden daha küçük oluşudur.

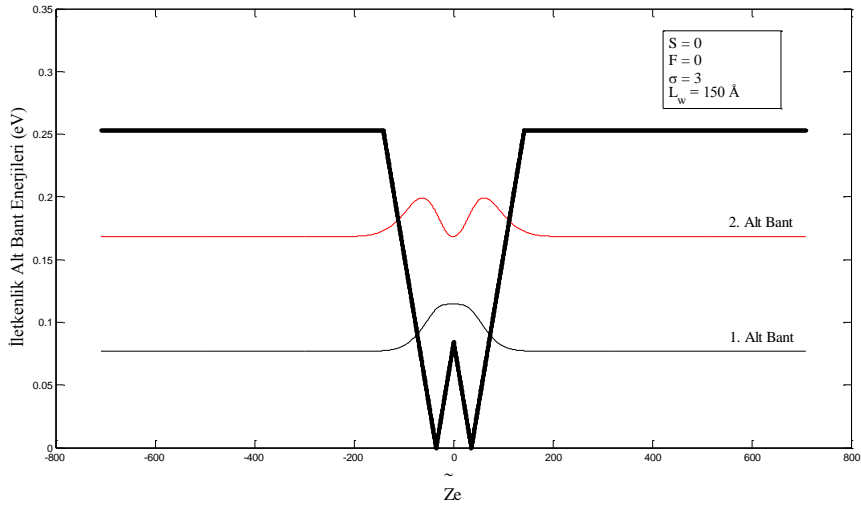
Şekil 4.6 (a), (b) ve (c)'de $F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değeri için $L_w = 100 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi sırasıyla $\sigma = 1$, $\sigma = 2$ ve $\sigma = 3$ için verilmiştir. $+z$ doğrultusunda E alanı uygulandığında 1. alt bant dalga fonksiyonu “corrugated” kuyunun sol kısmındaki kuyuda, 2.alt bant dalda fonksiyonu ise kuyunun sağ tarafındaki kuyuda yerleşir. σ değeri arttıkça 2.alt bant dalga fonksiyonu “corrugated” kuyunun dışına sızar. 1.alt bant dalga fonksiyonu elektrik alan değerinin artması ile birlikte “corrugated” kuantum kuyusunun sol duvarına doğru kayar ve orada yerleşir.



(a)

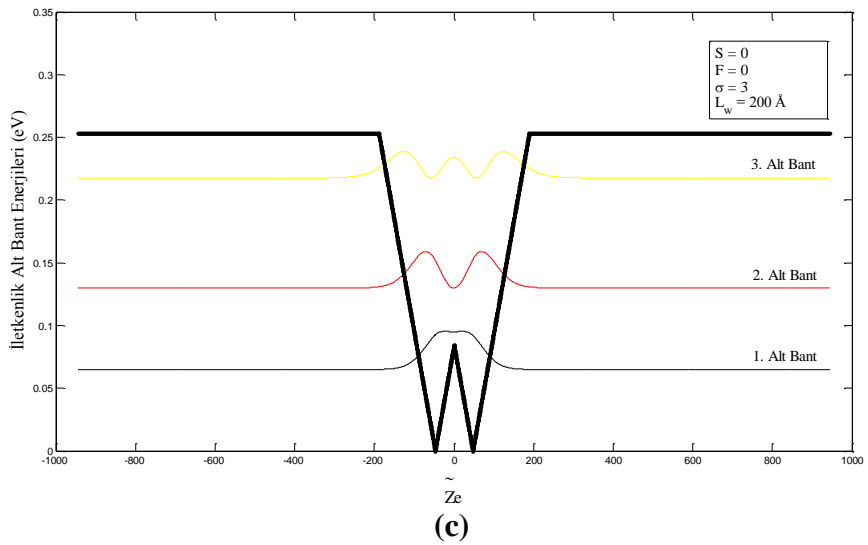
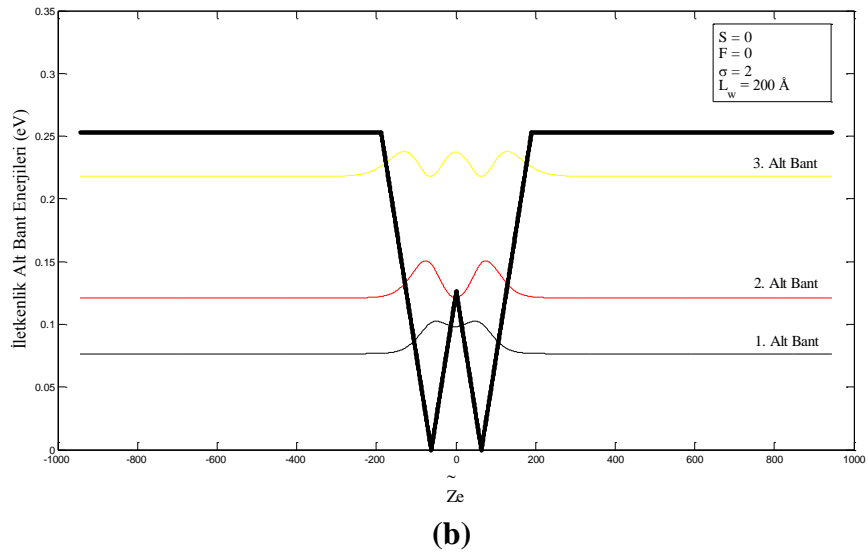
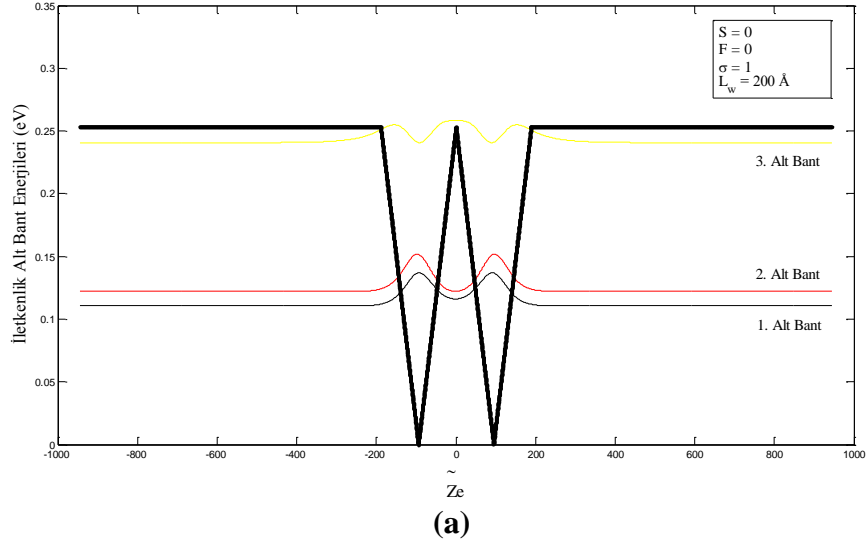


(b)

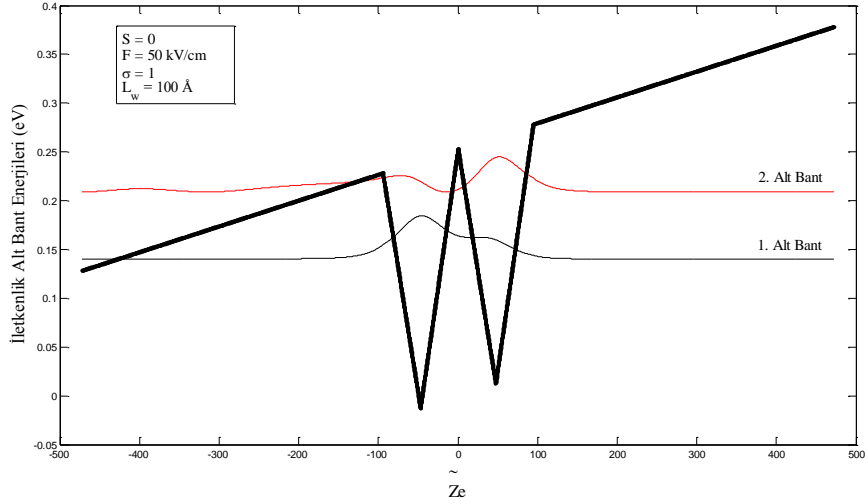


(c)

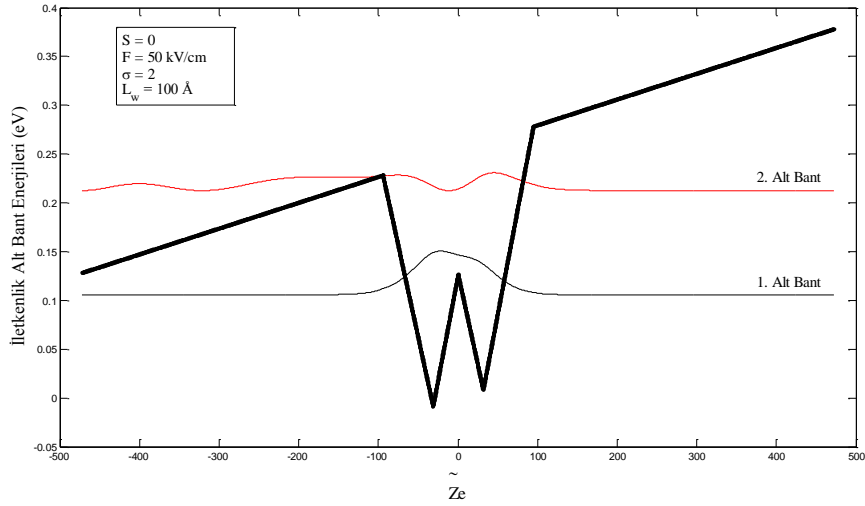
Şekil 4.4 $L_w = 150 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için.



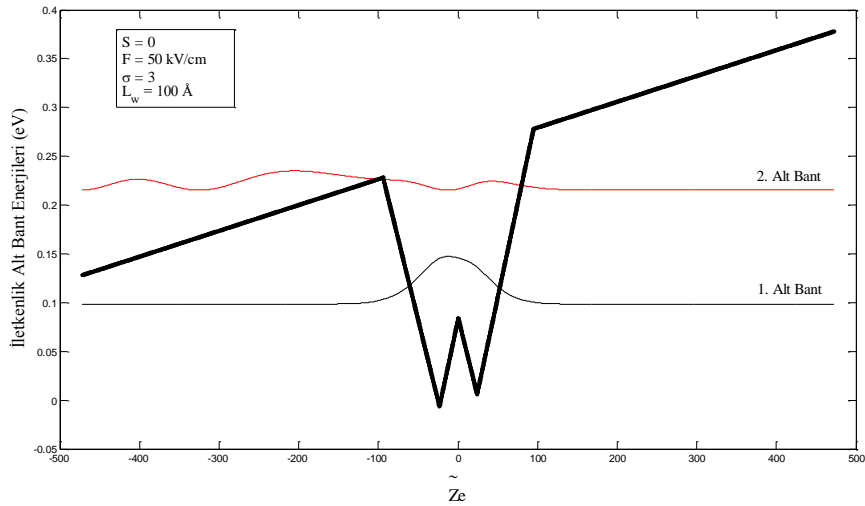
Şekil 4.5 $L_w = 200 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk üç enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için.



(a)



(b)



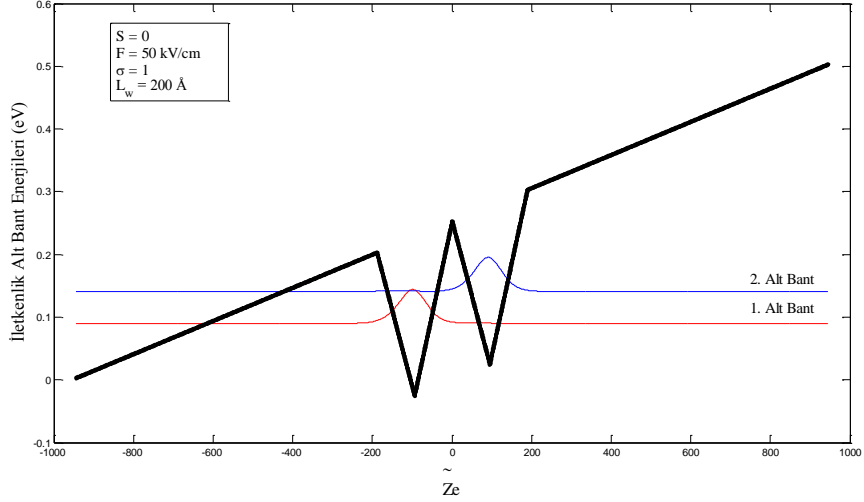
(c)

Şekil 4.6 $F = 50$ kV/cm alan değeri için $L_w = 100$ Å genişliğinde “corrugated” $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$, (c) $\sigma = 3$.

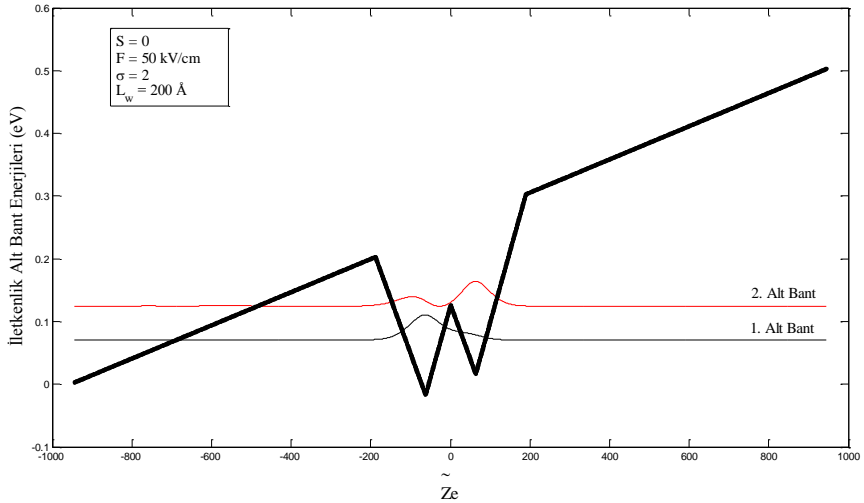
Şekil 4.7 (a), (b) ve (c)'de $F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değeri için $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi sırasıyla $\sigma = 1$, $\sigma = 2$ ve $\sigma = 3$ için verilmiştir. Elektrik alanının uygulanması ile birlikte $L_w = 200 \text{ \AA}$ luk “corrugated” kuyuda 1. ve 2. alt bant dalga fonksiyonlarının sırasıyla kuyunun sol ve sağ tarafına yerleşmeleri $L_w = 100 \text{ \AA}$ luk kuyuya göre daha belirgindir. $\sigma = 2$ de artık 2.alt bant dalga fonksiyonunun yerleşmesi sağ kuyudan sola kaymak üzeredir. $\sigma = 3$ te ise, yani Şekil 4.7 (c) de 2.alt bant dalga fonksiyonu da kuyunun sol tarafında yerleşmeye başladığı görülmektedir.

Şekil 4.8 'de $S = 20 \text{ kbar}$ (Baskı gerilme şeklinde) baskı değeri için $L_w = 150 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için verilmiştir. Uygulanan baskı pozitif olduğunda, yani baskı yapıyı gelecek şekilde uygulandığında yapıdaki tüm alt bant enerji değerleri ve potansiyel değeri enerji ekseninde aşağıya doğru eşit miktarda kaymaktadır. Dolayısıyla baskı uygulanmamış haldeki kuantum kuyusunun enerji öz değerlerinden daha küçük enerji öz değerleri ortaya çıkar. σ 'nın bu durumdaki yapıya etkisi baskı uygulanmamış durumdakinin benzeridir.

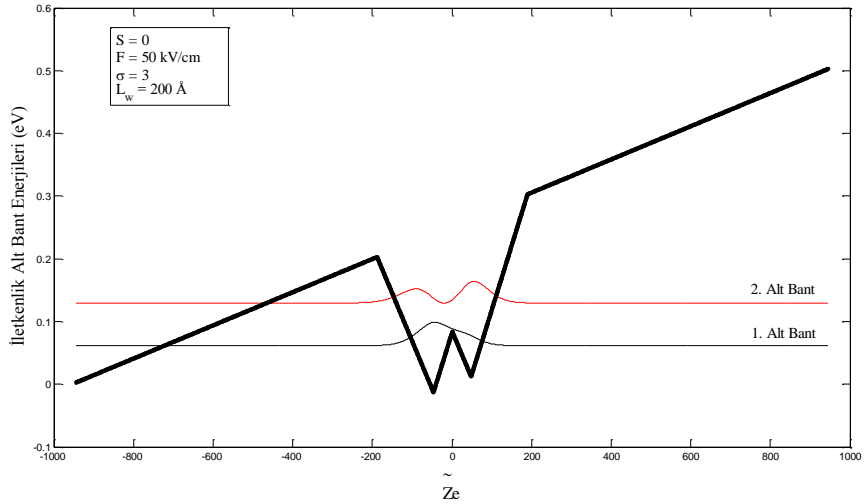
Şekil 4.9 'da ise $S = -20 \text{ kbar}$ (Baskı sıkıştırma şeklinde) baskı değeri için $L_w = 150 \text{ \AA}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için verilmiştir. Uygulanan baskı negatif olduğunda, yani baskı yapıyı sıkıştıracak şekilde uygulandığında yapıdaki tüm alt bant enerji değerleri ve potansiyel değeri enerji ekseninde yukarıya doğru eşit miktarda kaymaktadır. Dolayısıyla baskı uygulanmamış haldeki kuantum kuyusunun enerji öz değerlerinden daha büyük enerji öz değerleri ortaya çıkar. Burada da yine σ 'nın yapıya etkisi baskı uygulanmamış durumdakinin aynıdır.



(a)

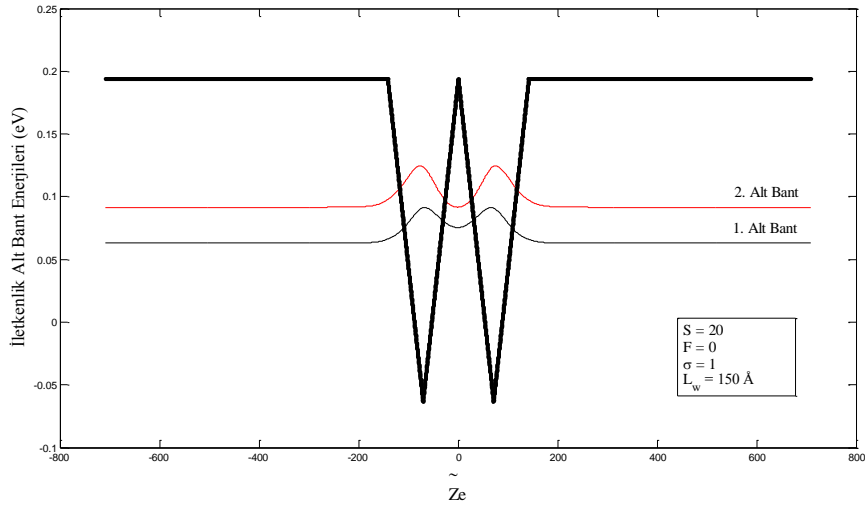


(b)

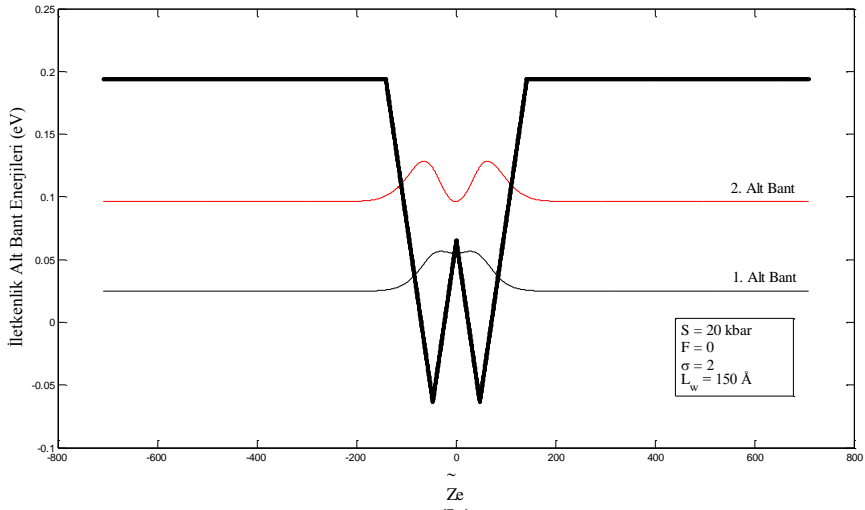


(c)

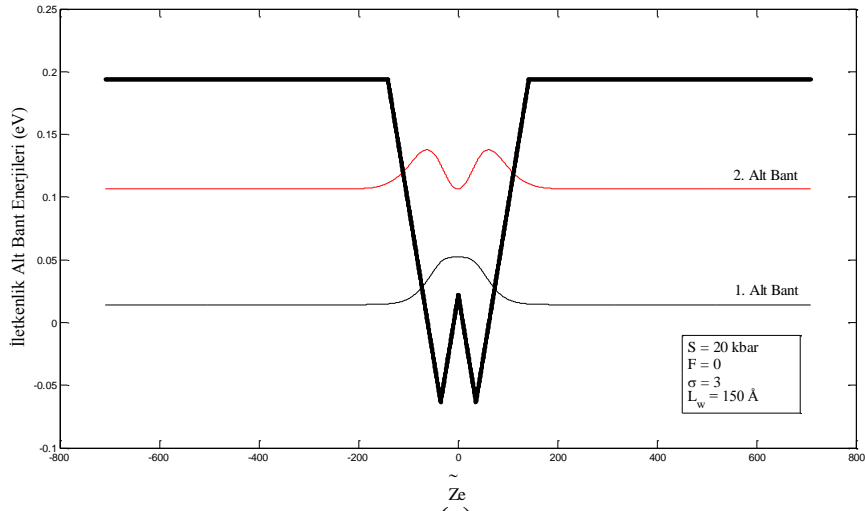
Şekil 4.7 $F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değeri için $L_w = 200 \text{ Å}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$, (c) $\sigma = 3$.



(a)

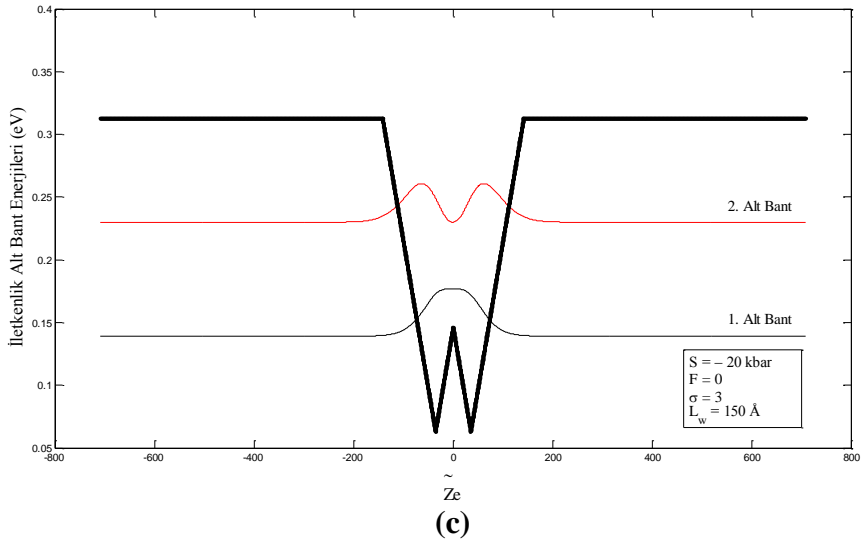
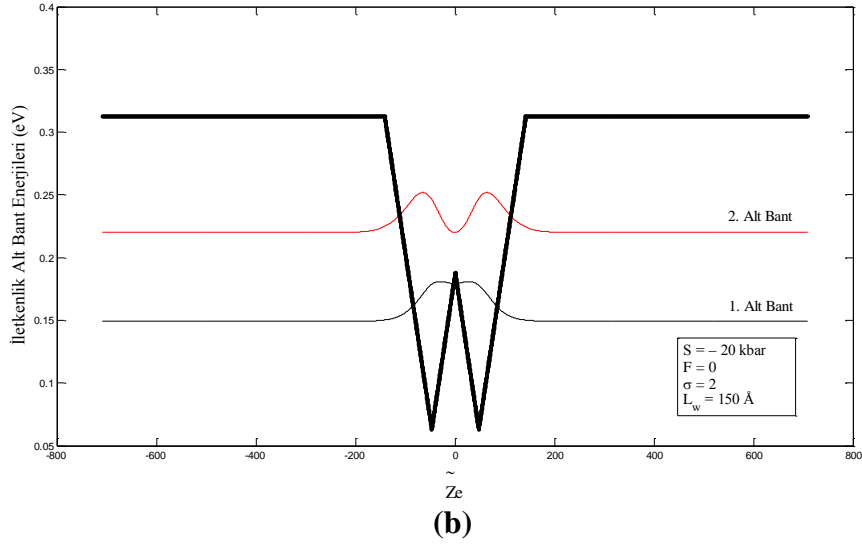
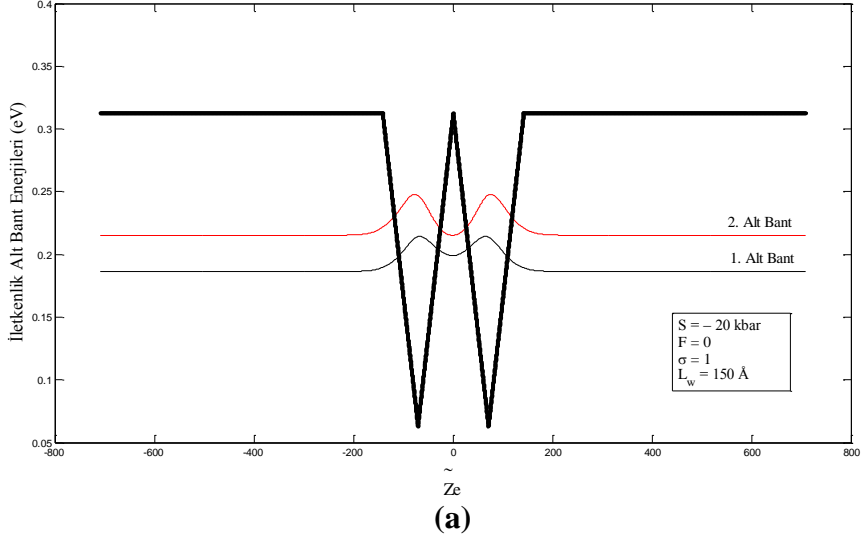


(b)



(c)

Şekil 4.8 $S = 20 \text{ kbar}$ (Baskı gerilme şeklinde) baskı değeri için $L_w = 150 \text{ Å}$ luk “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$, (c) $\sigma = 3$.



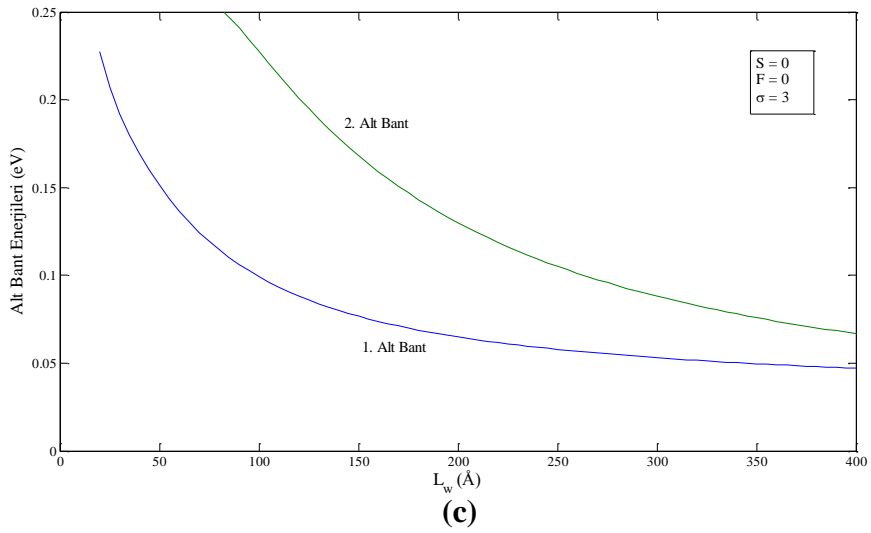
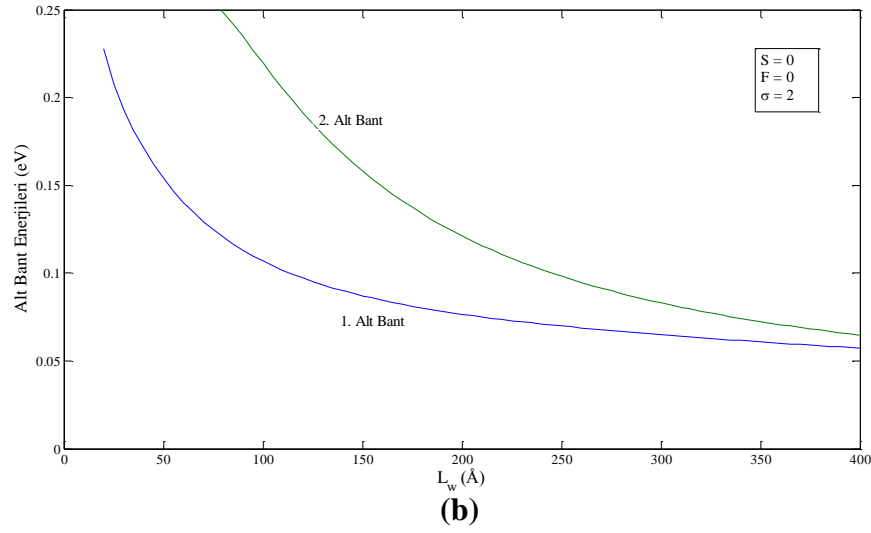
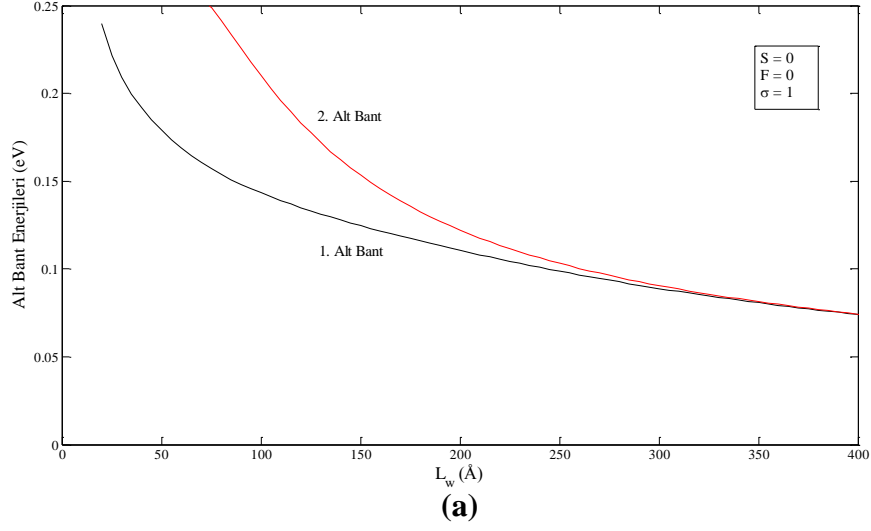
Şekil 4.9 $S = -20$ kbar (Baskı sıkıştırma şeklinde) baskı değeri için $L_w = 150$ Å luk “corrugated” $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$, (c) $\sigma = 3$.

Şekil 4.10'da “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerjinin kuyu genişliğine göre değişimi (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için verilmiştir. Şekle bakıldığında kuyu genişliği L arttıkça alt bant enerji değeri azalmakta ve düzeyler kuyu tabanına yaklaşmaktadır. $\sigma = 1$ durumu için ilk iki enerji düzeyi arasındaki fark, L arttıkça azalarak $L_w = 400 \text{ \AA}$ da aynı değeri alır. σ arttıkça ($\sigma = 2$ ve 3) genel davranış aynı kalmakla birlikte enerji düzeyleri arasındaki fark artmakta ve $L_w = 400 \text{ \AA}$ da bile fark görülmektedir.

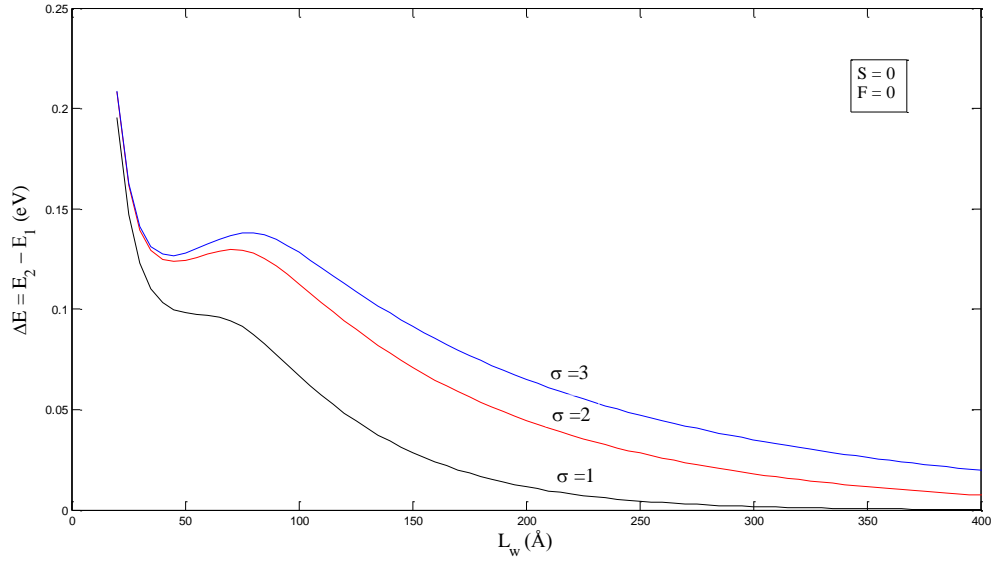
Şekil 4.11'de “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, genel davranış enerji farkının kuyu genişliği arttıkça hızlı bir biçimde azalması şeklindedir. $L_w = 50 - 100 \text{ \AA}$ bölgesi için σ arttıkça ΔE artar. $L_w = 50 - 100 \text{ \AA}$ bölgesi dışında σ arttıkça ΔE azalır.

$L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyinin elektrik alana göre değişiminin grafiği Şekil 4.12'de sırasıyla (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için verilmiştir. $\sigma = 1$ durumunda 1.alt bant enerji düzeyi elektrik alanın artması ile azalırken, 2.alt bant enerji düzeyi artmaktadır. $\sigma = 2$ durumunda 1.alt bant enerji düzeyi elektrik alanın artması ile azalmakta, 2.alt bant enerji düzeyi ise değişmemektedir. $\sigma = 3$ durumunda ise, 1.alt bant ve 2.alt bant enerji düzeyleri elektrik alanının artması ile çok az miktarda azalma göstermektedir. Bu sonuçlara bakarak; σ “corrugation” parametresinin, elektrik alanının alt bant enerjileri üzerindeki etkisini değiştirdiğini söyleyebiliriz.

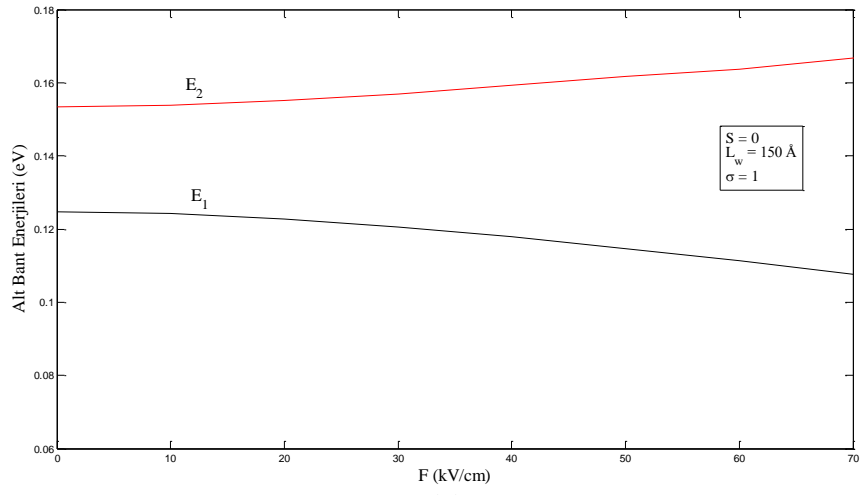
Şekil 4.13'te $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandının ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın elektrik alana göre değişimi verilmiştir. Şekle bakıldığında, elektrik alan değerinin sıfırdan 70 kV/cm 'ye artması ile ilk iki alt bant enerjisi arasındaki farkın (ΔE) artış miktarı $\sigma = 1$ için yaklaşık 30 meV , $\sigma = 2$ için yaklaşık 5 meV ve $\sigma = 3$ için ise sıfırdır. Bu grafikten, σ 'nın “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusu yapısının alt bant enerjileri üzerinde çok önemli bir etkisi olduğu sonucu çıkartılabilir.



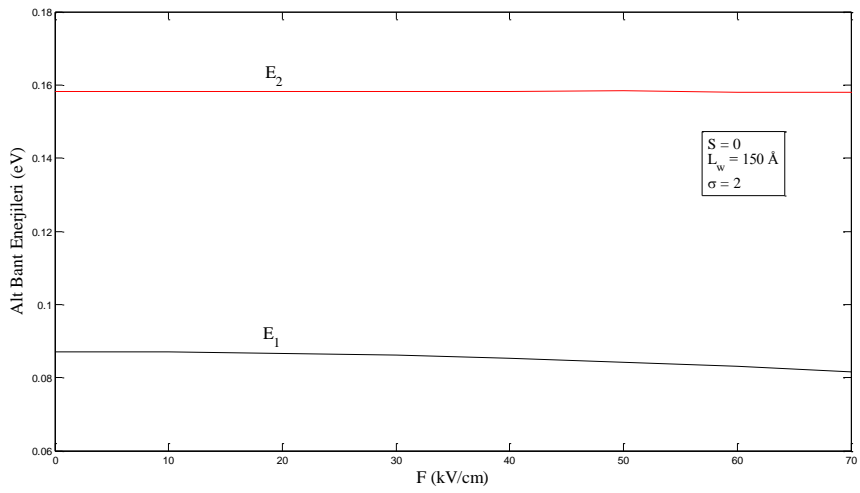
Şekil 4.10 “Corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerjinin kuyu genişliğine göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için.



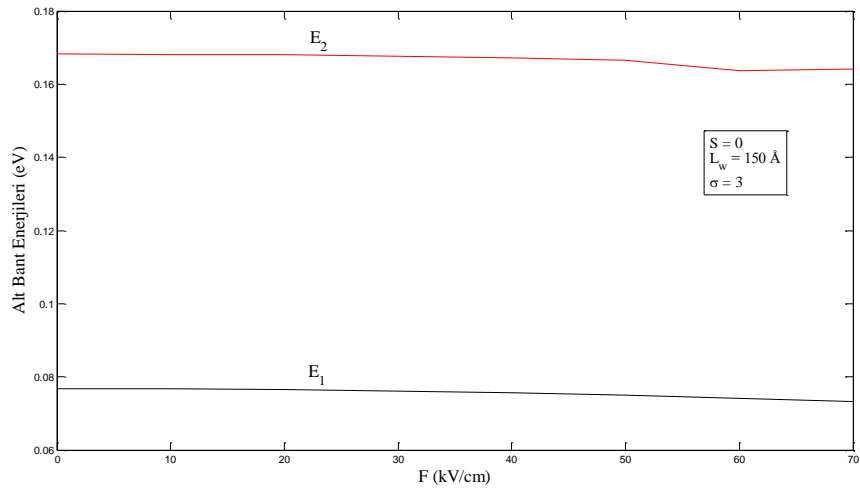
Şekil 4.11 “Corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın kuyu genişliğine göre değişimi.



(a)

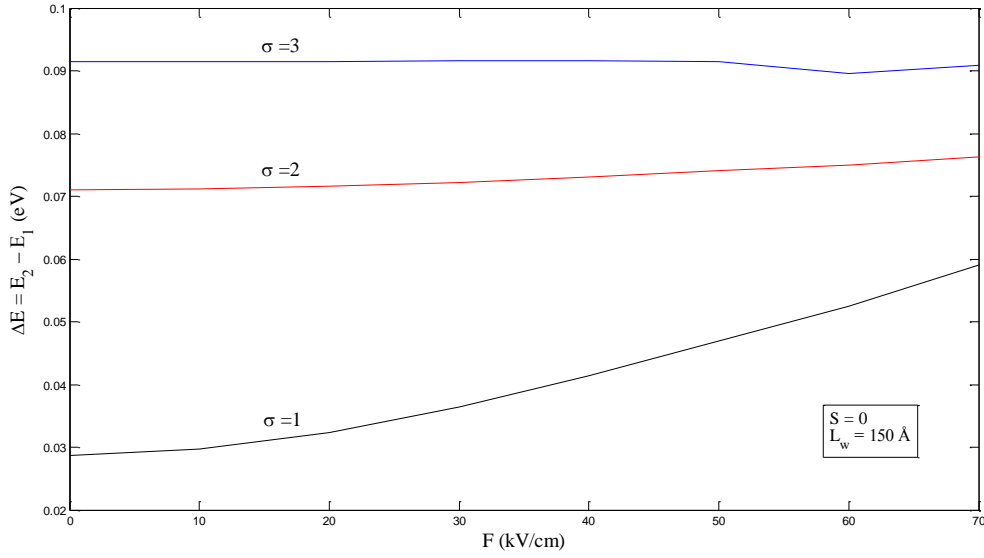


(b)



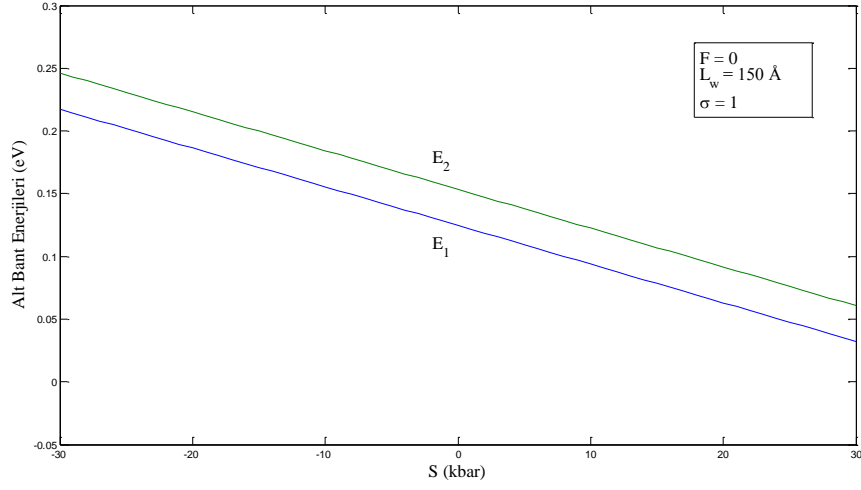
(c)

Şekil 4.12 $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyinin elektrik alana göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için.

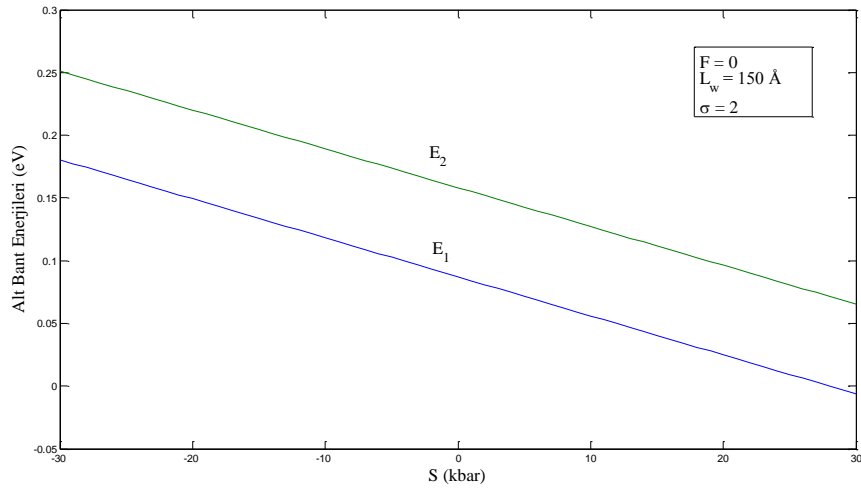


Şekil 4.13 $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandının ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın elektrik alana göre değişimi.

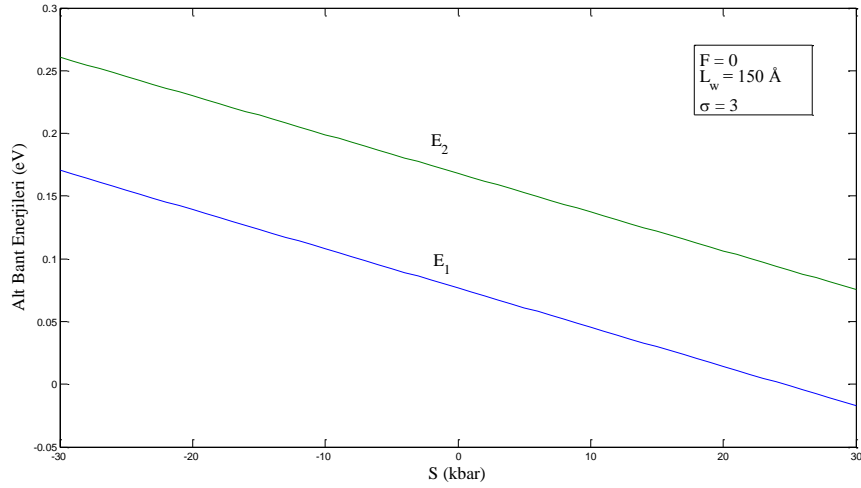
Şekil 4.14’te $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyinin uygulanan baskıya göre değişimi (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için sırasıyla verilmiştir. Baskı pozitif iken sisteme uygulanan baskı gerilme şeklinde, negatif durumda ise sisteme uygulanan baskı sıkıştırma şeklindedir. Şekle bakıldığında ilk göze çarpan davranış, alt bant enerjilerinin baskı ile lineer değişiyor olmasıdır. Yani, pozitif bölgede baskının artması ile alt bant enerji değerleri lineer olarak azalmakta, negatif bölgede ise baskının artması ile alt bant enerji değerleri lineer olarak artmaktadır. Bu davranış her σ değeri için aynıdır.



(a)

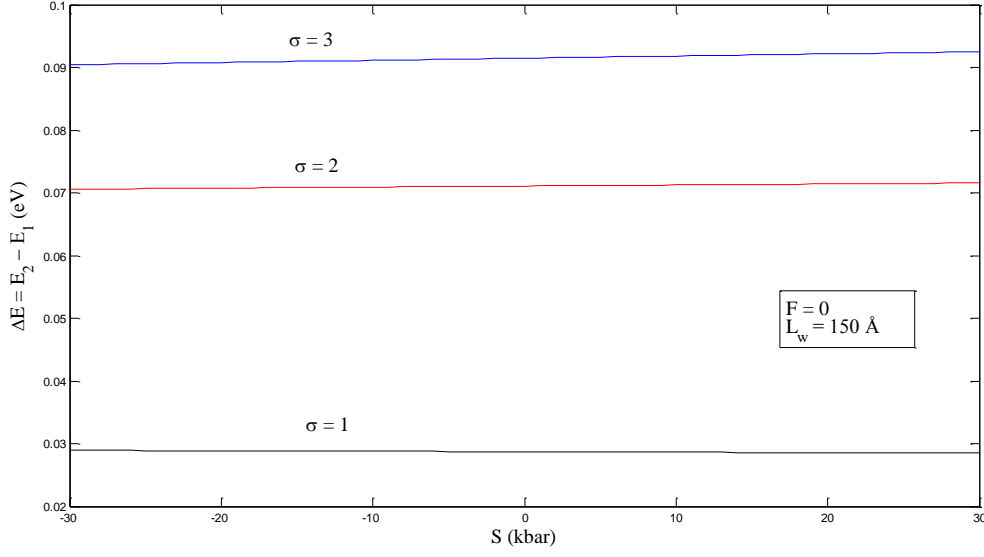


(b)



(c)

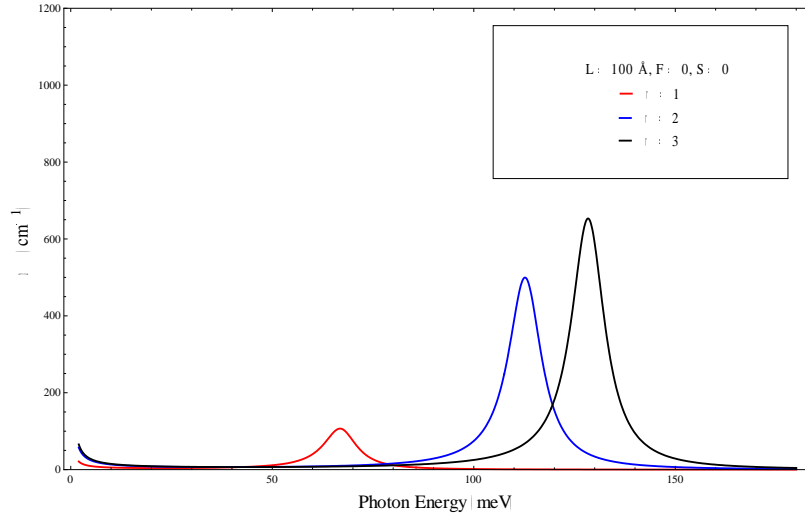
Şekil 4.14 $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk iki enerji düzeyinin uygulanan baskıya göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için.



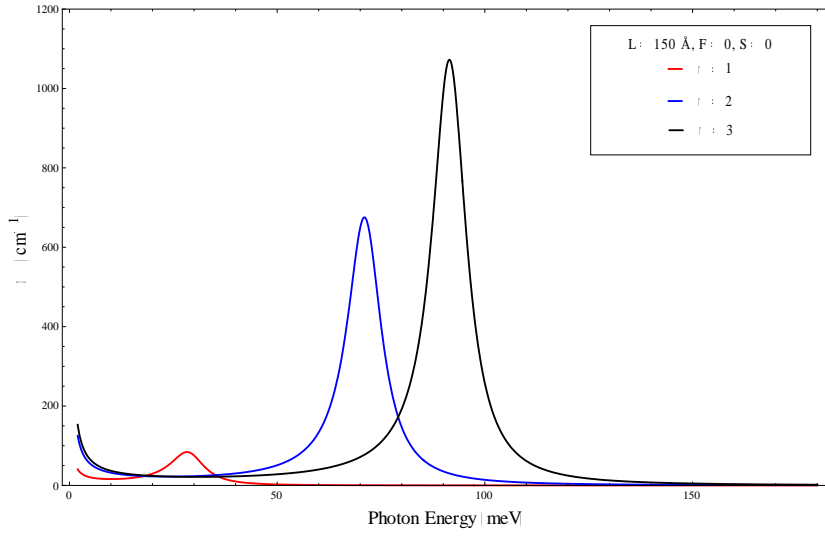
Şekil 4.15 $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandının ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın uygulanan baskıya göre değişimi.

Şekil 4.15’te $L_w = 150 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandının ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın uygulanan baskıya göre değişimi verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın baskı ile değişimi sabit ve her bir σ değeri için bu davranış aynıdır. Tüm baskı değerlerinde $\sigma = 1$ için $\Delta E \cong 29 \text{ meV}$, $\sigma = 2$ için $\Delta E \cong 71 \text{ meV}$ ve $\sigma = 3$ için $\Delta E \cong 91 \text{ meV}$ dir.

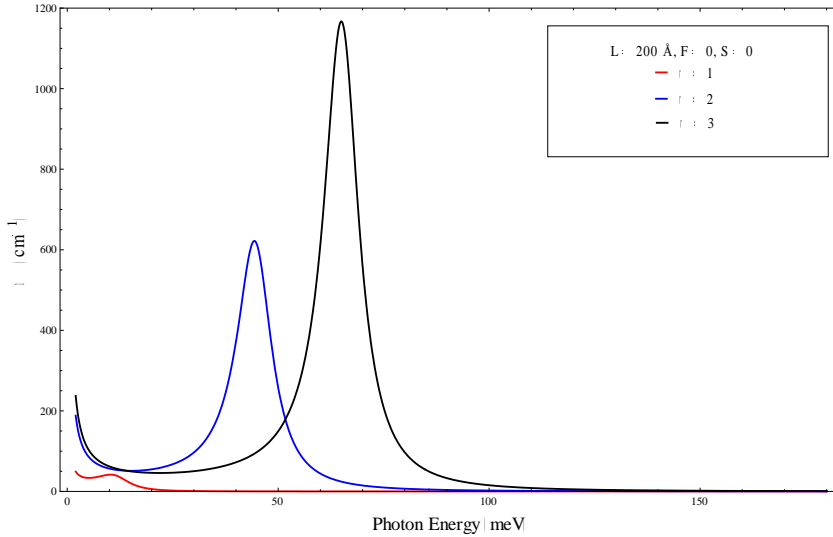
Şekil 4.16’da farklı kuyu genişliklerine sahip “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) $L_w = 100 \text{ \AA}$, (b) $L_w = 150 \text{ \AA}$ ve (c) $L_w = 200 \text{ \AA}$ için sırasıyla verilmiştir. Şekle bakıldığında, tüm L_w değerleri için σ değeri arttıkça soğurma pikinin büyüklüğünün ve soğurma pik pozisyon enerjisinin arttığı görülmektedir. Fakat büyük L değerlerinde soğurma pik enerjileri daha düşük değerlere doğru kaymaktadır.



(a)



(b)



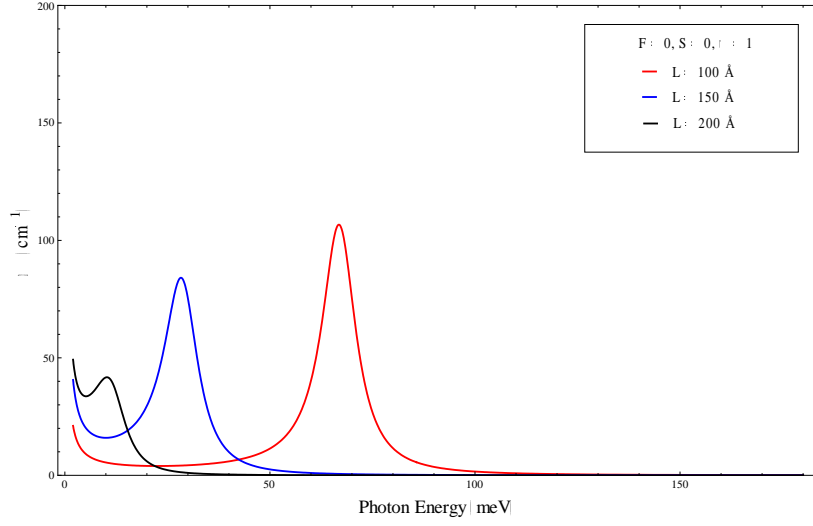
(c)

Şekil 4.16 Farklı kuyu genişliklerine sahip “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $L_w = 100 \text{ \AA}$ için, (b) $L_w = 150 \text{ \AA}$ için, (c) $L_w = 200 \text{ \AA}$ için.

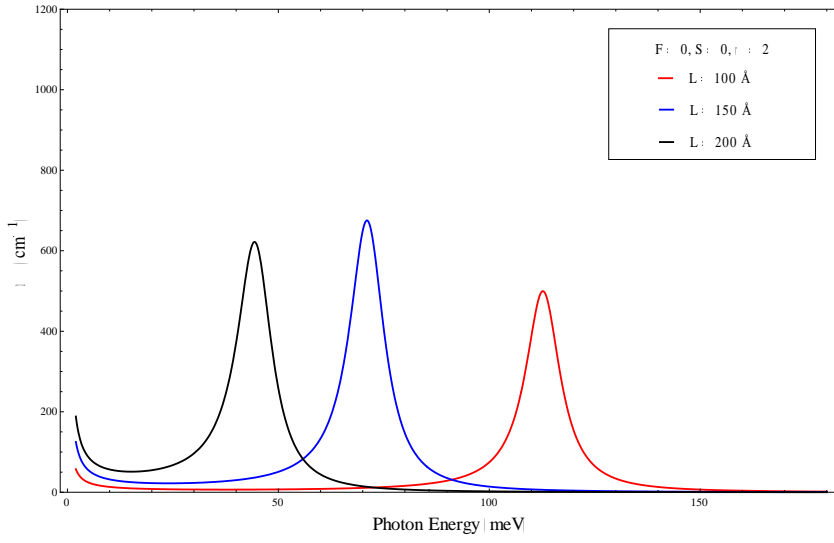
Şekil 4.17’de farklı σ değerlerine sahip “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için sırasıyla verilmiştir. Şekil 4.17 (a)’da L değeri arttıkça soğurma pik genliği azalmakta ve pik pozisyonu enerjisi küçük enerji değerlerine kaymaktadır. Şekil 4.17 (b)’de bu davranış biraz değişmeye başlamaktadır. L değeri arttıkça soğurma pik pozisyonu enerjisi küçük enerji değerlerine doğru kayarken pik genliği önce artmakta sonra azalmaktadır. Şekil 4.17 (c)’de pik pozisyonu enerjisi için davranış yine aynıdır, fakat pik genliği için davranış Şekil 4.17 (a)’da görülenin tam tersidir. Yani, L değeri arttıkça piklerin genliği artmaktadır. Buradan çıkarılabilecek sonuç şudur; biz böyle bir kuantum kuyusunda pik pozisyonu ve enerjisini kuantum kuyusunun genişliği ve σ parametresi ile koordineli bir şekilde değiştirerek ayarlayabiliriz.

Şekil 4.18’de farklı σ ve elektrik alan değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için verilmiştir. Şekle bakıldığında ilk görülen davranış elektrik alanının artması ile birlikte soğurma pik genliğinin ve pozisyon enerjisinin artmasıdır. $\sigma = 1$ için pikler arasındaki enerji farkı büyük iken $\sigma = 3$ durumunda bu fark çok azalmaktadır.

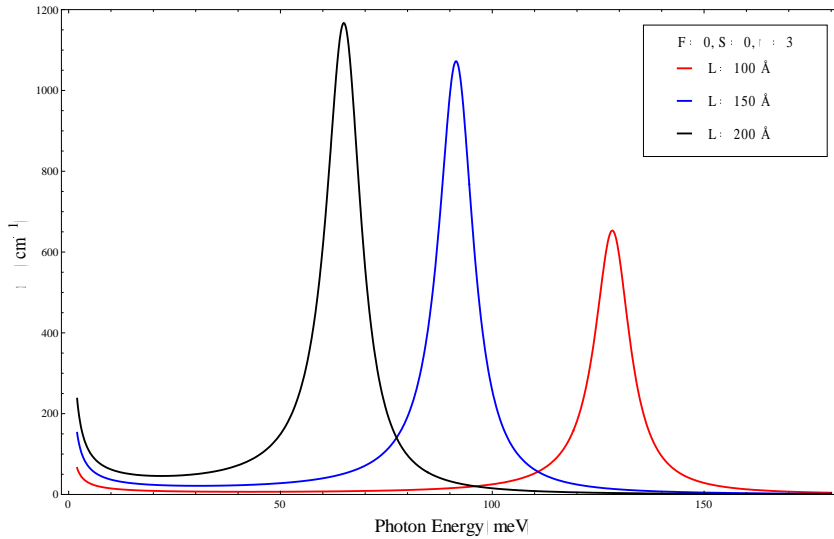
Şekil 4.19’da farklı σ ve elektrik alan değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) $F = 0$, (b) $F = 50 \text{ kV/cm}$ ve (c) $F = 100 \text{ kV/cm}$ için sırasıyla verilmiştir. Bu grafik, σ ’nın soğurma pik genliği ve enerjisi üzerindeki etkisini açıkça göstermektedir. $\sigma = 1$ ile $\sigma = 2$ pik genlikleri arasında yaklaşık 10 kat fark vardır., yani $\sigma = 2$ için pik genliği $\sigma = 1$ için olan genlikten yaklaşık olarak 10 kat daha büyüktür. Benzer şekilde $\sigma = 3$ için olan genlik de $\sigma = 2$ için olan genliğin yaklaşık 2 katıdır. Bu grafikteki diğer önemli nokta da şudur; $F = 0$ durumunda $\sigma = 1$ için olan pik $\sigma = 2$ ve $\sigma = 3$ için olan piklerin pozisyon enerjilerinden küçük iken, önce $F = 50 \text{ kV/cm}$ durumunda $\sigma = 1$ için olan pik neredeyse $\sigma = 2$ ile aynı pozisyona gelmekte, daha sonra $F = 100 \text{ kV/cm}$ durumunda ise $\sigma = 1$ için olan pik $\sigma = 2$ ve $\sigma = 3$ için olan piklerin pozisyon enerjisinden daha büyük değerlere kaymaktadır.



(a)

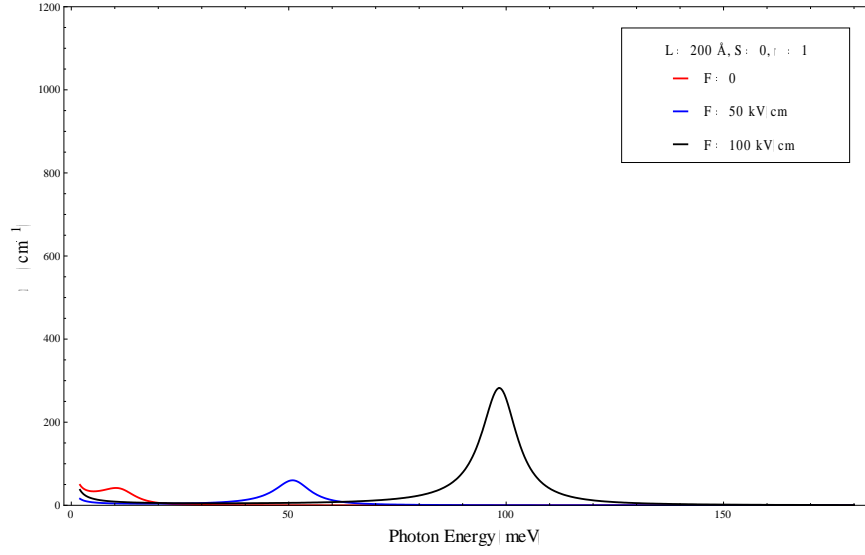


(b)

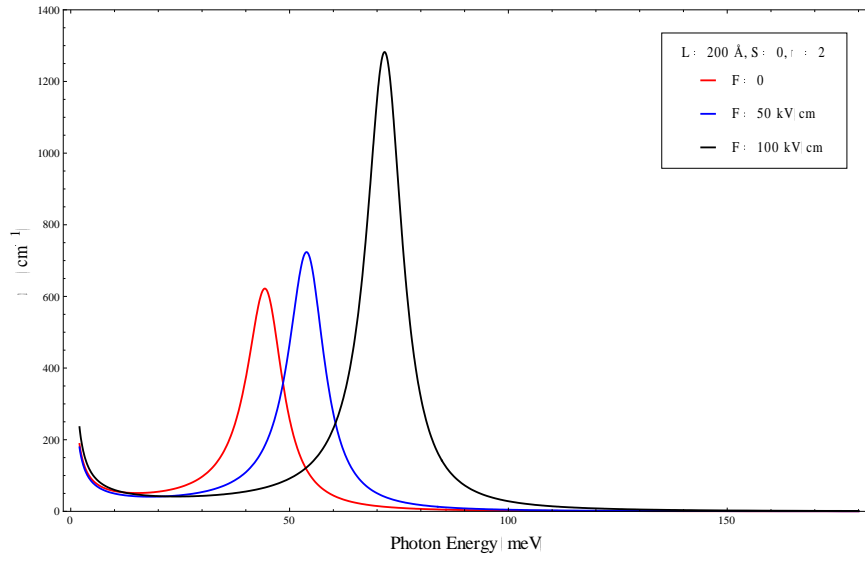


(c)

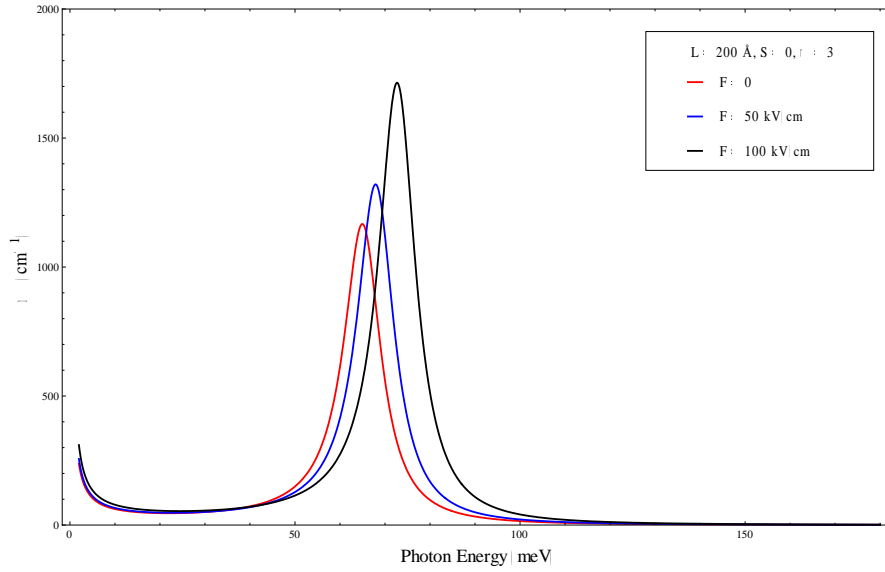
Şekil 4.17 Farklı σ değerlerine sahip “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için.



(a)

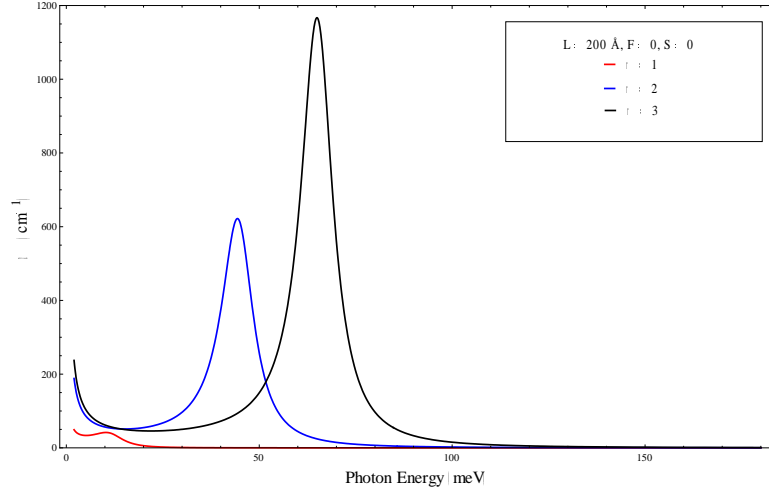


(b)

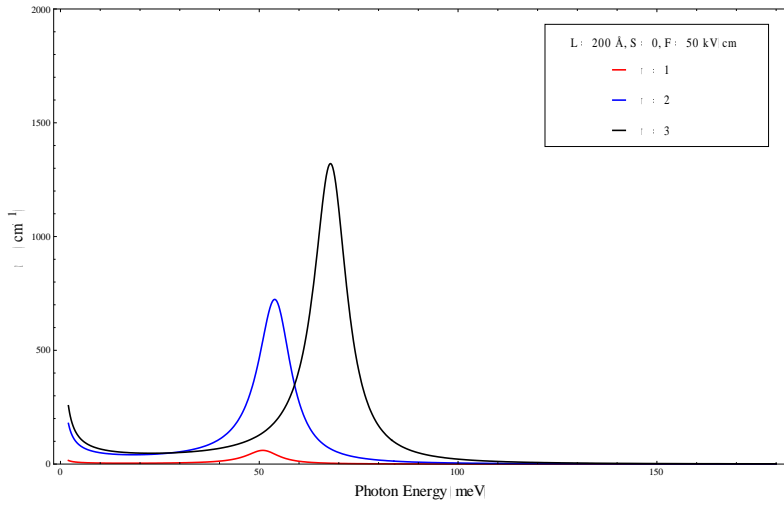


(c)

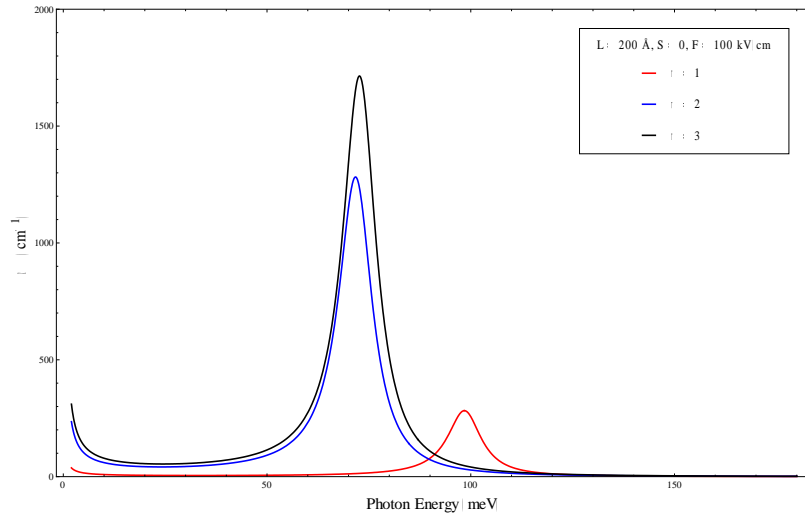
Şekil 4.18 Farklı σ ve elektrik alan değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$.



(a)



(b)

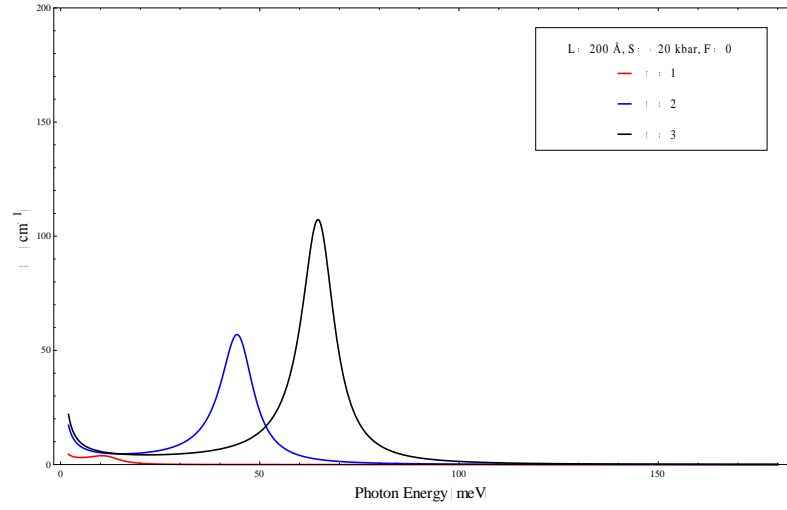


(c)

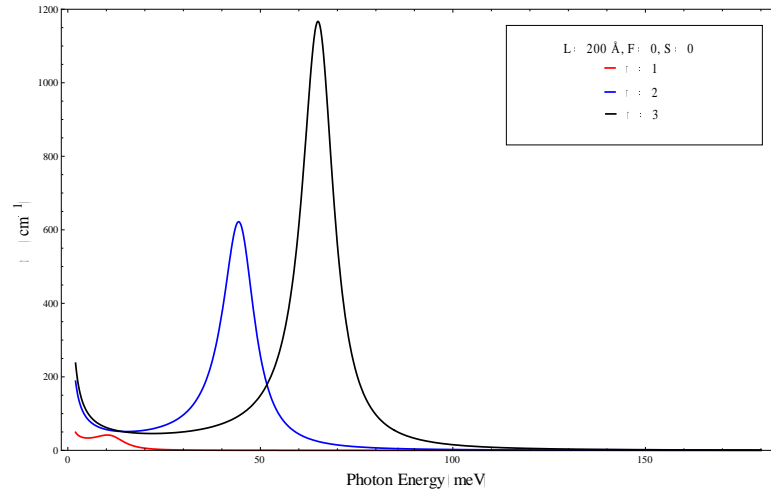
Şekil 4.19 Farklı σ ve elektrik alan değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $F = 0$ için, (b) $F = 50 \text{ kV/cm}$ için, (c) $F = 100 \text{ kV/cm}$ için.

Şekil 4.20’de farklı σ ve baskı değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) $S = -20 \text{ kbar}$, (b) $S = 0$ ve (c) $S = +20 \text{ kbar}$ için sırasıyla verilmiştir. Bu grafiğe bakıldığında pik pozisyon enerjilerinin değişmediği görülmektedir. Fakat, $S = -20 \text{ kbar}$ için pik genliği $S = 0$ için olana göre yaklaşık 10 kat küçüldüğü görülmektedir. Bunun yanında $S = +20 \text{ kbar}$ durumunda pik genliği ise $S = 0$ için olana göre yaklaşık 7 kat artmaktadır.

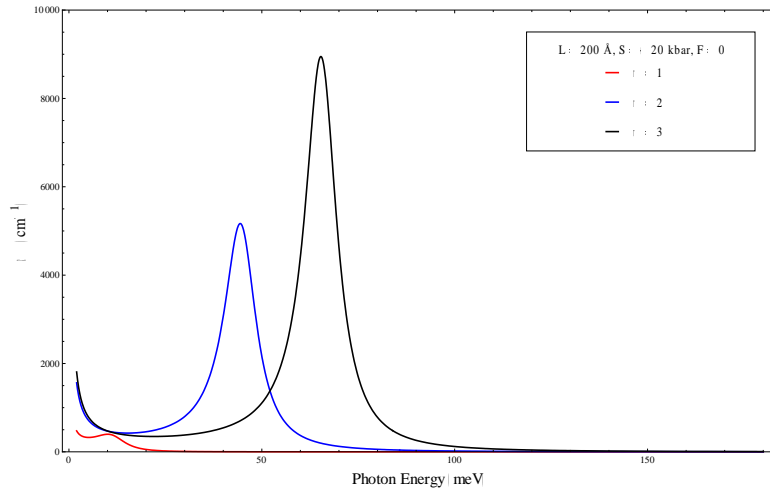
Şekil 4.21’de farklı σ ve baskı değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = 2$ ve (c) $\sigma = 3$ için verilmiştir. Bu şekilden de görüldüğü üzere, $\sigma = 1$ durumunda baskı negatif (sıkıştırma şeklinde) iken soğurma piki belirgin değildir. Fakat baskıyı pozitif (gerilme şeklinde) yaptığımızda soğurma piki ortaya çıkmaktadır. Dolayısıyla biz baskıyı ayarlayarak bu sistemde soğurma pikinin genliğini büyütebiliriz. $\sigma = 2$ ve $\sigma = 3$ durumunda bu davranış açıkça görülmektedir. Buradaki farklılık, σ ’nın artması ile genlik değerinin de katlanarak artmasıdır.



(a)

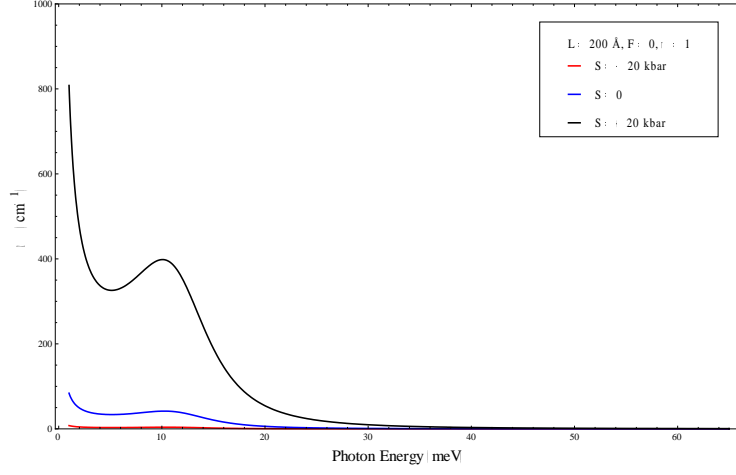


(b)

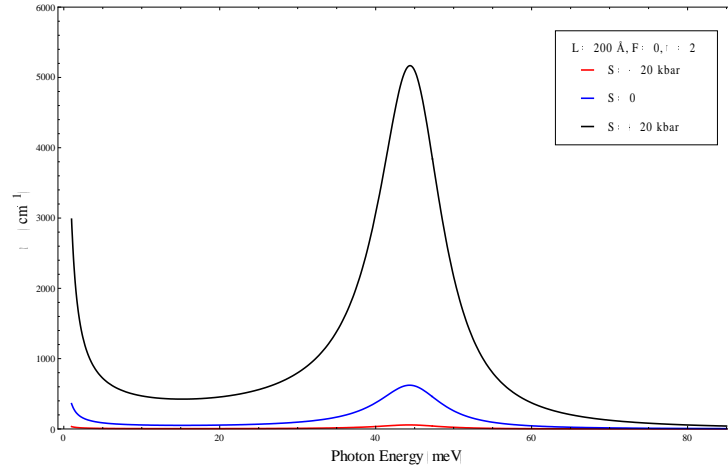


(c)

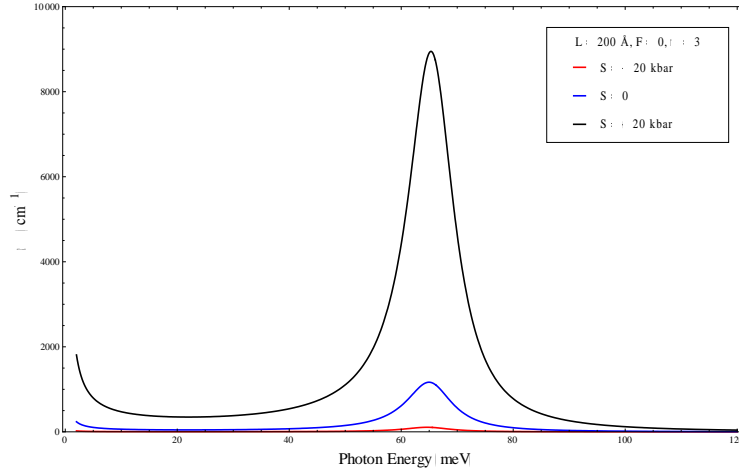
Şekil 4.20 Farklı σ ve baskı değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $S = -20 \text{ kbar}$, (b) $S = 0$ ve (c) $S = +20 \text{ kbar}$.



(a)

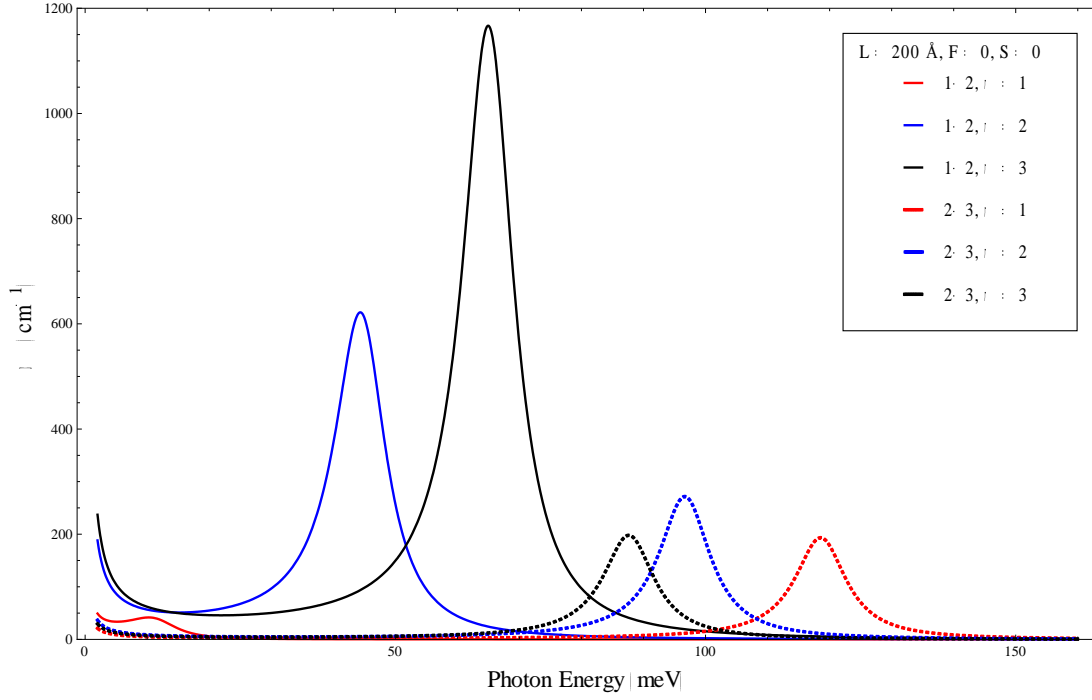


(b)



(c)

Şekil 4.21 Farklı σ ve baskı değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi; (a) $\sigma = 1$ için, (b) $\sigma = 2$ için, (c) $\sigma = 3$ için.



Şekil 4.22 Farklı σ değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusundaki 1-2 ve 2-3 geçişlerine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi.

Şekil 4.22’de farklı σ değerlerine sahip $L_w = 200 \text{ \AA}$ genişliğinde “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum kuyusundaki 1-2 ve 2-3 geçişlerine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi verilmiştir. Şekle bakıldığında 1-2 geçişi için σ ’nın artması ile soğurma pik genişliğinin ve pozisyon enerjisinin azaldığı görülmektedir. 2-3 geçişinde ise σ ’nın artması ile soğurma pik pozisyon enerjilerinin arttığı, pik genişliğinin $\sigma = 2$ ’de arttığı $\sigma = 3$ ’te ise $\sigma = 1$ ’deki değerine düştüğü görülmektedir. Bu davranışlara bakarak, σ ’nın bu yapılarda soğurma pik genişliği ve pozisyon enerjisini açıkça etkileyen bir faktör olduğunu söyleyebiliriz.

5. SONUÇLAR

Son yıllarda bilim ve teknoloji politikaları dünyanın her yerinde nano malzeme keşif ve geliştirme faaliyetlerinin hızla artmasına neden olmuştur. Yarıiletken malzemelerde bunlardan biridir. Öyle ki güncel yüksek teknolojileri üreten kurum ve araştırmacılar için malzeme tasarımını, nano boyutlarda ön plana çıkan kuantum-mekaniksel özelliklere ve kavramlara dayandırmak artık zorunlu hale gelmiştir. Yarı iletkenler, elektronik için vazgeçilmez malzemelerdir. Transistörlerde, fotodiyotlarda, lazer diyotlarda, entegrelerde, fotosellerde, güneş pillerinde ve gördüğümüz çoğu elektronik malzemede yarı iletkenler kullanılır.

Bu çalışmada “corrugated” $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyu sisteminin elektronik bant yapısı ve optik özelliklerinin elektrik alana ve uygulanan baskıya bağlı değişimi, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde sonlu elemanlar yöntemi ile incelenmiştir. Sonlu elemanlar yöntemi ile yapılan elektronik bant yapısı hesaplamalarında global elementteki nod sayısı 4, toplam nod sayısı da 4000 olarak alındı. Bu enerji öz değeri hesaplamalarında çok küçük hata miktarlarına ($\sim 0.001 meV$) karşılık gelmektedir.

Bu tez çalışmasının ilk aşamasında, “corrugated” $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki bir elektronun dalga fonksiyonu, alt bant enerji değerleri ile bant içi soğurma katsayısının elektrik alan ve baskı altındaki değişimleri incelendi. σ (“corrugation”) parametresinin artması ile taban durum enerjisi azalırken, birinci uyarılmış durum enerjisi artmaktadır. Bu durum ilk iki alt bant arasındaki enerji farkının σ 'nın artması ile artmasına neden olmakta ve dolayısıyla da σ 'nın bu sistemin alt bant enerjileri üzerinde önemli bir etkisi olduğunu göstermektedir. Uygulanan baskının pozitif veya negatif olmasına bağlı olarak tüm alt bantların enerjileri ve kuyu potansiyeli değeri enerji ekseninde aşağıya veya yukarıya doğru eşit miktarda kaymaktadır. Bu nedenle ilk iki enerji düzeyi arasındaki farkın baskıyla değişimi sabit kalmaktadır. Her bir σ değeri için bu enerji farkının değeri farklıdır. Ayrıca $\sigma = 1$ durumunda, iletkenlik bandı taban durumu enerjisi elektrik alanın artmasıyla azalırken, birinci uyarılmış durumun enerjisi elektrik alanın artmasıyla artmakta, $\sigma = 2$ ve $\sigma = 3$ durumunda, taban durum enerjisi elektrik alanının artması ile azalmakta, fakat birinci uyarılmış durumun enerjisi neredeyse değişmemektedir.

Elektrik alanının artmasıyla birlikte bant içi soğurma pikinin genliği ve pozisyon enerjisi artmaktadır. $\sigma = 1$ durumunda $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk "corrugated" $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ tek kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma piki $F = 0$ 'da 10 meV pozisyonunda ve 50 cm^{-1} büyüklüğünde bir genliğe sahip iken, $F = 100 \text{ kV/cm}$ 'de ise 100 meV 'de ve 300 cm^{-1} büyüklüğünde bir genliğe sahiptir. $\sigma = 2$ durumunda, 1-2 geçişine ait bant içi soğurma piki $F = 0$ 'da 45 meV pozisyonunda ve 600 cm^{-1} büyüklüğünde bir genliğe sahip iken, $F = 100 \text{ kV/cm}$ 'de ise 70 meV 'de ve 1300 cm^{-1} büyüklüğünde bir genliğe sahiptir. $\sigma = 3$ durumunda ise, 1-2 geçişine ait bant içi soğurma piki $F = 0$ 'da 65 meV pozisyonunda ve 1200 cm^{-1} büyüklüğünde bir genliğe sahip iken, $F = 100 \text{ kV/cm}$ 'de ise 73 meV 'de ve 1700 cm^{-1} büyüklüğünde bir genliğe sahiptir. Dolayısıyla bu değerlere bakıldığında elektrik alanın 100 kV/cm 'ye artırılması ile $\sigma = 1$ durumunda yaklaşık 90 meV 'lik kayma ve soğurma pikinde yaklaşık 6 kat artış, $\sigma = 2$ durumunda yaklaşık 25 meV 'lik kayma ve soğurma pikinde yaklaşık 2 kat artış, $\sigma = 3$ durumunda ise yaklaşık 8 meV 'lik kayma ve soğurma pikinde yaklaşık 1.5 kat artış görülmektedir. Ekziton soğurmayla bant içi soğurma karşılaştırıldığında bu sonuçlar iki farklı özellik olarak ortaya konulabilir (Miller, 1985). Soğurma pikinin enerjisinin artarak enerji ekseninde kayması kuantum kuşatma Stark etkisi diye bilinir. Bunun nedeni elektrik alanının artmasıyla ilk ve ikinci alt bant arasındaki enerji farkının artmasıdır. Ayrıca bant içi geçişlerde elektrik alan arttıkça soğurma pikinin genliğinin artmasının sebebi; elektrik alanın tüm durumlar için elektronları kuyunun aynı tarafına itmesi dolayısıyla alt bantlar arasındaki overlapi arttırmasıdır.

Kuantum kuyusuna uygulanan baskının soğurma pikinin enerjisini değiştirmeden sadece genliğini değiştirdiği görülmüştür. $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk "corrugated" $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ tek kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının $\sigma = 1$ ve $F = 0$ durumunda $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği 400 cm^{-1} iken, $S = -20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği ortaya çıkmamaktadır. $\sigma = 2$ ve $F = 0$ durumunda $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği 5000 cm^{-1} iken, $S = -20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği 60 cm^{-1} dir. $\sigma = 3$ ve $F = 0$ durumunda ise $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği 9000 cm^{-1} iken, $S = -20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği 110 cm^{-1} dir. Baskının uygulanmasıyla alt bantlar arasındaki enerji farkının sabit kalmasından dolayı soğurma pikinin enerjisi değişmemektedir. Baskının yanında elektrik

alanın da uygulanmasıyla soğurma pikinin genliği daha da artmaktadır. Aynı zamanda pikin enerjisi de artar.

Elde edilen diğer bir sonuç ise, 1-2 optik geçişinde σ 'nın artması ile hem soğurma pik genliği hem de soğurma pik pozisyon enerjisi artarken, 2-3 optik geçişinde ise σ 'nın artması ile pik pozisyonu enerjisi azalmakta ve pik genliği de önce artıp sonra azalmaktadır. Bu sonuçlara bakarak bant içi geçişlerde σ parametresi, uygulanan baskı, elektrik alan ve kuyu genişliği birer ayar parametresidir denilebilir.

Sonuç olarak; σ parametresi, elektrik alanı, kuyu genişliğini, baskının büyüklüğünü ve baskının uygulama yönünü değiştirerek “corrugated” $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ tek kuantum kuyusu sisteminin elektronik ve optik özellikleri amaca uygun biçimde ayarlanabilir. Bu tezde kullanılan yöntem, baskı altındaki III-V yarıiletken bileşiklerinden oluşturulmuş kuantum kuyu sisteminin elektronik ve optik özelliklerini iyi bir şekilde tanımlama olanağı sağlamıştır. Buradaki sonuçların, Raman ve fotolüminensans deneylerinin sonuçları ile karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülebilir. Bu çalışmada sözü edilen dış parametrelerin değiştirilmesi ile soğurma piklerinin genliği ve pozisyonunun değiştirilebildiği görülmüştür. Dolayısıyla bu çalışmada kullanılan yöntem, baskı ile ayarlanabilen kızılötesi dedektör tasarımı uygulamalarında kullanılabilir.

KAYNAKLAR

- Adachi S.**, 1985. GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and device applications, *J. Appl. Phys.*, **58** (3), R1-R29.
- Aspens D.E.**, 1976. GaAs lower conduction-band minima: Ordering and properties, *Phys. Rev. B*, **14**(12), 5331-5343.
- Bassani, F. and Pastori Parravicini, G.**, 1975. Electronic States and Optical Transitions in Solids, pp. 152–154, Pergamon, New York,
- Bastard, G.**, 1981. Hydrogenic impurity states in a quantum well - a simple-model, *Phys. Rev. B*, **24**(8), 4714-4722.
- Bastard, G.**, 1988. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures, Halsted Press, New York.
- Boucenna, M., and Bouarissa, N.**, 2004. Predicted electronic properties of GaAs under hydrostatic pressure, *Mater. Chem. Phys.* **84**(2-3), 375379.
- Chico, L., Garcia-Moliner, F., and Velasco, V. R.**, 1993. “Electronic structure of periodically delta doped GaAs-Si, *Phys. Rev. B*, **48**(15), 11427-11430.
- Chuang, S. L.**, 1995. Physics Of Optoelectronic Devices, Wiley, New York.
- Coon, D.D. and Karunasiri, R.P.G.**, 1984. New mode of IR detection using quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* **45**(6), 649651.
- Dingle R.**, (1975) in Festskörperprobleme XV(Advances in Solid State Physics), edited by H.J.Quesser (Permagon,) P 21.
- Dingle, R., Störmer, H. L., Gossard, A. C. and Wiegman, W. W.**, 1978. Evolution and recent advances in RF/Microwave transistors, *Appl. Phys. Lett.*, 33, 665-671.
- Dominguez- Adame, F., Mendez, B. and Macia, E.**, 1994. Electronic structure of Si Delta doped in an electrical field, *Semicond. Sci. Technol.* **9**(3), 263-271.
- Duque, C.A., Morales, A.L., Montes, A. and Porrás-Montenegro, N.**, 1997. Effects of applied electric fields on the infrared transitions between hydrogenic states in GaAs low-dimensional systems, *Phys.Rev.B*, **55**(16), 10721-10728.
- Ehrenreich H.**, 1961. Band Structure and Transport Properties of Some 3–5 Compounds, *J. Appl. Phys.*, **32**(10), 2155-2166.
- Elabsy, A.M.**, 1994. Effect of the gamma-chi crossover on the binding-energies of confined donors in single gaas/alxga1-xas quantum-well microstructures, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**(46), 10025-10030.

- Ergün, Y., Sökmen, I., Sari, H., Elagöz, S. and Arıkan, M.Ç.,** 1997. The orbit centre dependence of the energy levels in a single quantum well under external tilted magnetic and electric fields, *Semicond. Sci. Technol.*, **12(7)**, 802-807.
- Esaki, L. and Tsu, R.,** 1969. Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors, IBM Res.Note, RC-2414.
- Fukui, T. and Saito, H.,** 1987. (Al_{0.5}Ga_{0.5})_{0.5} fractional-layer superlattices grown on (001) vicinal surfaces by metalorganic chemical vapor-deposition, *Appl. Phys. Lett.*, **50(13)**, 824-826.
- Gaggero-Sager, L. M. and Mora-Ramos, M. E.,** 2000. Hole energy levels in p-type delta-doped Si quantum wells, *Solid State Electronics*, **44(1)**, 175-183.
- Gil, B., Lefebvre, P., Bonnel, P., Mathieu, H., Deparis, C., Massies, J., Neu, G. and Chen, Y.,** 1993. Uniaxial-stress investigation of asymmetrical GaAs-(Ga,Al)As double quantum-wells, *Phys. Rev. B*, **47(4)**, 1954-1960.
- Harrison, P.,** 1999. Quantum Wells, Wires and Dots, Press of The University of Leeds, UK.
- Heitler, W.,** 1984. The Quantum Theory of Radiation Dover, Academic Press, New York.
- Holtz, M., Seon, M., Brafman, O., Manor, R. and Fekete, D.,** 1996. Pressure dependence of the optic phonon energies in Al_xGa_{1-x}As, *Phys. Rev. B*, **54(12)**, 8714-8720.
- Ioratti, L.,** 1990. Formation of subbands in delta doped semiconductors, *Phys. Rev. B*, **41(14)**, 8340-8344.
- Jaros, M.,** 1989. Physics and Applications of Semiconductor Heterostructures, Oxford University Press, New York,
- Jayaraman, A.,** 1983. Diamond anvil cell and high-pressure physical investigations, *Rev. Mod. Phys.*, **55(1)**, 65-108.
- John Peter, A. and Navaneethakrishnan, K.,** 2004. The effect of hydrostatic pressure on metal-insulator transition in quantum well semiconductor systems, *Solid State Commun.*, **130(3-4)**, 155-158.
- Kasapoglu, E., Sari, H., Ergun, Y., and Sokmen, İ.,** 1999. Improvement in intersubband optical absorption and the effects of device parameter variations in quantum wells with an applied electric field, *Superlattices and Microstructures*, **26(6)**, 395-404.

- Kasapoğlu, E., Sarı, H. and Sökmen, İ.**, 2003. Geometrical effects on shallow donor impurities in quantum wires, *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures*, **19(4)**, 332-335.
- Ke, M.L., Rimmer, J.S., Hamilton, B., Evans, J.H., Missous, M., Singer, K. E. and Zalm, P.**, 1992. Radiative Transitions Associated With Hole Confinement At Si Delta-Doped Planes In Gaas, *Phys. Rev. B*, **45(24)**, 14114-14121.
- Klepfer, R.O., Madarasz, F.L. and Szmulowichz, F.**, 1995. Excitonic Nonlinear-Optical Processes In Gaas Quantum-Well Wires, *Phys. Rev. B*, **51(7)**, 4633-4636.
- Kolokolov, K.I., Beneslavski, S.D., Ya. Minina, N. and Savin, A.M.**, 2001. Far-infrared intersubband absorption in p-type GaAs/Al_xGa_{1-x}As single heterojunctions under uniaxial compression, *Phys. Rev. B*, **63(19)**, Art.no.195308.
- Kopf, R.F., Herman, M.H., Schnoes, M.L., Perley, A.P., Livescu, G. and Ohring, M.**, 1992. Band Offset Determination In Analog Graded Parabolic And Triangular Quantum-Wells Of Gaas/Algaas And Gamas/Alinas, *J. Appl. Phys.*, **71(10)**, 5004-5011.
- Latge, A., de Dios-Leyva, M. and Oliveria, L.E.**, 1994. Donor-Excited States And Infrared-Transition Strengths In Cylindrical Gaas-(Ga,Al)As Quantum-Well Wires, *Phys.Rev.B* **49(15)**, 10450-10455.
- Li, E.H.**, 2000. Material parameters of InGaAsP and InAlGaAs systems for use in quantum well structures at low and room temperatures, *Physica E*, **5(4)**, 215-273.
- Maciel A. C., Tahtam M., Ryan J. F., Worlock J. M., Nahory R. E., Harbison J. P. and Florez T.**, 1990. Raman scattering from electronic excitations in periodically delta-doped GaAs, *Surf. Sci.*, **228(1-3)**, 251-254.
- Miller, D. A. B., Chemla, D. S., Damen, T. C., Gossard, A. C., Wiegman, W., Wood, T. H., and Burrus, C. A.**, 1985. Electric-field dependence of optical-absorption near the band-gap of quantum well structures, *Phys. Rev. B*, **32(2)**, 1043-1060.
- Montes, A., Morales, A.L. and Duque, C.A.**, 2002. Binding energy for a shallow donor impurity in GaAs-(Ga, Al)As quantum wells under hydrostatic pressure and applied electric field, *Surf. Rev. Lett.*, **9(5-6)**, 1753-1756.
- Morales, A.L., Montes, A., Lopez, S.Y. and Duque, C.A.**, 2002. Simultaneous effect of hydrostatic stress and an electric field on donors in a GaAs-(Ga-Al) As quantum well, *J. Phys.: Condens. Matter*, **14(5)**, 987-995.

- Murray, R., Newman, R.C. and Sanster, M.J.L.,** 1989. The calibration of the strength of the localized vibrational-modes of silicon impurities in epitaxial GaAs revealed by infrared-absorption and raman-scattering, *J. Appl. Phys.*, **66 (6)**, 2589-2596.
- Nakahara, J., Ichimori, T., Minomura, S. and Kuklmoto, H.,** 1987. Raman spectra in Al_xGa_{1-x}As under high-pressure, *J. Phys. Soc. Japan*, **56(3)**, 1010-1016.
- Nakazato, K., Blaikie, R.J. and Ahmed, H.,** 1994. Single-electron memory, *J. Appl. Phys.* **75(10)**, 5123-5134.
- Newman, R.C. and Thomson, F.,** 1972. Localized vibrational modes in GaAs containing silicon and boron, *Journal of Physics C :Solid State Physics*, **3**, 1999-2010.
- Osvald, J.,** 2004. Self consistent analysis of Si delta doped layer placed in a non-central position in GaAs structure, *Physica E Low Dimensional*, **23(1-2)**, 147151.
- Ozturk, E., Ergun, Y., Sari, H. and Sokmen, I.,** 2000. Electronic subband of single Si delta doped GaAs structure, *Superlattices and Microstructure*, **28(1)**, 35-45.
- Ozturk, E. and Sokmen, I.,** 2003. Intersubband transitions for single, double and triple Si delta doped GaAs layers, *J. Phys. D:Appl. Phys.* **36(20)**, 2457-2464.
- Ozturk, E. and Sokmen, I.,** 2003. The electric field affects on intersubband optical absorption of Si delta doped GaAs layer, *Solid State Commun.* **126(11)**, 605-609.
- Pask, J.E., Klein, B.M., Sterne, P.A. and Fong, C.Y.,** 2001. Finite-element methods in electronic-structure theory, *Computer Physics Communications*, **135(1)**, 1-34.
- Ploog, K., Hauser, M. and Fischer, A.,** 1998. Time-Resolved Interband transitions in periodic multilayer delta-doped systems, *Appl. Phys. A*, **45**, 233-238.
- Raigoza, N., Morales, A.L., Montes, A., Porrás-Montenagro, N. and Duque, C.A.,** 2004. Stress effects on shallow-donor impurity states in symmetrical GaAs/Al_xGa_{1-x}As double quantum wells, *Phys. Rev. B*, **69(4)**, article no: 045323.
- Ramos, L. E., Sipahi, G. M., Scolfaro, L. M., Enderlein, R. and Leite, J. R.,** 1997. Minibands of p-type δ -doping superlattices in GaAs, *Superlattices and Microstructure*, **22(4)**, 443-451.
- Rodríguez-Vargas, I., Duque, C.A., Mora-Ramos, M.E. and Velasco, V.R.,** 2006. Hole subband structure in single and double p-type delta doped diamond quantum wells, *Phys. Stat. Sol.*, **4(2)**, 451-417.
- Rodríguez-Vargas, I., and Gaggero-Sager, L.M.,** 2005. Thomas–Fermi–Dirac calculations of valence band states of double p-type d-doped quantum wells in Si, *Physica Status Solidi*, **2(10)**, 3634-3636.

- Samara, G.A.**, 1983. Temperature and pressure dependences of the dielectric-constants of semiconductors, *Phys. Rev. B*, **27(6)**, 3494-3505.
- Schubert, E. F., Fischer, A. and Ploog, K.**, 1986. The delta-doped field-effect transistors, *IEEE Trans. On Electron Devices*, **33 (5)**, 625-632.
- Schubert, E.F.**, 1990. Delta doping of III-V- compound semi conductors – Fundamentals and device applications, *J. Vac. Sci. Technol. A*, **8(3)**, 2980-2996 .
- Singh, J.**, 1993. Physics of semiconductors and Their Heterostructures, Press of The University of Michigan, USA.
- Singh, J.**, 1993. Semiconductor Optoelectronics Physics and Technology, Press of The University of Michigan, USA .
- Singh, J.**, 1994. Semiconductor Devices, McGraw-Hill Inc., New York.
- Singh, J.**, 2003. Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures, Press of The University of Michigan, USA.
- Störmer, H. L., Dingle, R., Gossard, A. C., Wiegman, W. W. and Sturge, M. D.**, 1979. Two-dimensional electron gas at differentially doped GaAs–Al_xGa_{1-x}As heterojunction interface, *J. Vac. Sci. Technol.*, **16**, 1517-1527.
- Streetman, B.G.**, 1990. Solid State Electronic Devices, Prentice Hall Inc., New Jersey .
- Sukumar, A. and Navaneethakrishnan, K.**, 1990. Effect of the dielectric function and pressure on the binding-energies of excitons in GaAs and GaAs Ga_{1-x}Al_xAs superlattices, *Solid State Commun.*, **76(4)**, 561-564.
- Thien, C.H., and Tran Thoai, D.B.**, 1996. Effects of the electric field on energy levels in a surface quantum wire, *Solid State Communications*, **97(7)**, 643-645.
- Welber B., Cardona M., Kim C.K., Rodriguez S.**, 1975. Dependence of the direct energy gap of GaAs on hydrostatic pressure, *Phys.Rev. B*, **12(12)**, 5729-5738.
- West, L.C. and Eglash, S.J.**, 1985. 1st observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction-band of a GAAS quantum well, *Appl.Phys.Lett.* **46**, 1156-1158.
- Willardson, R.K.**, 1967. Semiconductors and Semimetals, Academic Press, New York.
- Zhao, G.J., Liang, X.X. and Ban, S.L.**, 2003. Binding energies of excitons in GaAs/AlAs quantum wells under pressure, *Mod. Phys. Lett. B*, **17**, 863-870.
- Zhao, G.J., Liang, X.X. and Ban, S.L.**, 2003. Binding energies of donors of quantum wells under hydrostatic pressure, *Phys. Lett.A.*, **319**, 191-197.

ÖZGEÇMİŞ

Mehtap Boztuğ, 1972 Yılında Kayseri’de doğdu. İlk ve Orta öğrenimini Kayseri’de tamamladı. 1989 yılında Cumhuriyet Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girerek 1994 yılında buradan mezun oldu. 1995-2010 yılları arasında Sivas’ın değişik okullarında Fen Bilgisi/Fizik öğretmenliği yaptı. Halen Tunceli Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü Enstitü Sekreterliği görevini yürütmektedir. Evli ve iki çocuk annesidir.