

751870

**ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

DOKTORA TEZİ

Zeki YARAR

**Heteroeklem Yapılarda Eklem Düzlemi
Boyunca Yük Taşımının Monte Carlo
Yöntemi İle İncelenmesi**

FİZİK ANABİLİM DALI

ADANA, 2004

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HETEROEKLEM YAPILARDA EKLEM DÜZLEMİ BOYUNCA YÜK
TAŞINIMININ MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

Zeki YARAR

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Bu Tez 22.10/2004 Tarihinde Aşağıdaki Jüri Üyeleri Tarafından
Oybirliği/Oyçokluğu İle Kabul Edilmiştir.

İmza: *Metin Özdemir*

Doç. Dr. Metin ÖZDEMİR
DANIŞMAN

İmza: *Ramazan Esen*

Prof. Dr. Ramazan ESEN
ÜYE

İmza: *Halil Yaraneri*

Prof. Dr. Halil YARANERİ
ÜYE

İmza: *Gülten Günel*

Prof. Dr. Gülten GÜNEL
ÜYE

İmza: *Yusuf Ünlü*

Prof. Dr. Yusuf ÜNLÜ
ÜYE

Bu tez Enstitümüz Fizik Anabilim Dalında hazırlanmıştır.

Kod No: 867



Prof. Dr. Fikri AKDENİZ
Enstitü Müdürü
İmza ve Mühür

Bu Çalışma Ç.Ü. Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi Tarafından Desteklenmiştir.

Proje No: FBE2002D38

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaktan yapılan bildirişlerin, çizelge şekil ve fotoğrafların kaynak gösterilmeden kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanundaki hükümlere tabidir.

ÖZ

DOKTORA TEZİ

**HETEROEKLEM YAPILARDA EKLEM DÜZLEMİ BOYUNCA YÜK
TAŞINIMININ MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

Zeki YARAR

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

Danışman: Doç. Dr. Metin ÖZDEMİR

Yıl: 2004, Sayfa: 165

Jüri: Doç. Dr. Metin ÖZDEMİR

: Prof. Dr. Ramazan ESEN

: Prof. Dr. Halil YARANERİ

: Prof. Dr. Gülten GÜNEL

: Prof. Dr. Yusuf ÜNLÜ

Modülasyon katkılı AlGaAs/GaAs tipi tekli veya çoklu heteroyapıların ara yüzeyinde oluşan iki boyutlu elektron gazının (2BEG) oluşturduğu potansiyel profili, boş veya dolu enerji seviyeleri ve bunlara karşılık gelen dalga fonksiyonları, dolu enerji seviyelerinde bulunan elektron yoğunluğu Schrödinger ve Poisson denklemlerinin sayısal olarak kendi içinde uyumlu çözümü ile elde edilmiştir. Çözümde hiç bir uyum parametresi kullanılmamış, sadece malzeme parametrelerinin verilmesi yeterli olmuştur. Yukarıda belirtilen değerler elde edildikten sonra iki boyutlu elektronların saçılma oranları Born yaklaşımı temel alınarak analitik ve sayısal yöntemlerle hesaplanmıştır. Göz önüne alınan saçılma mekanizmaları buruşuk yüzey, akustik fonon, polar optik fonon ve uzak safsızlık saçılmalarıdır. Düzgün bir manyetik alan altında iki boyutlu elektron gazındaki kimyasal potansiyelin değişimi, elektron konsantrasyonunun değişmediği varsayılarak, düzey genişleme parametresi ve sıcaklığın bir fonksiyonu olarak çalışılmıştır. Düzey genişlemesi için gausiyen, lorentzien ve eksponansiyel biçimler ele alınmış ve sonuçlar karşılaştırılmıştır. Daha sonra Monte Carlo yöntemi kullanılarak elektronların hetero eklem düzlemine paralel olarak sürüklenme hızları uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak değişik sıcaklık ve malzeme parametre değerlerinde bulunmuş, elektronların düşük alan mobilite değerlerinin sıcaklığa ve elektrik alanına göre değişimi, elektronların kesikli alt bant ve üç boyutlu vadi dolulukları elde edilmiş, sistemin hangi sıcaklık ve/veya alan değerlerine kadar iki boyutlu kaldığı incelenmiştir. Benzeri hesaplamalar bir kuantum kuyusu için tekrar edilmiştir. Her iki durumda da buruşuk yüzey ve uzak safsızlık saçılmalarının elektron taşınım ve mobilite değerlerine etkisi özellikle incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Saçılma, kendi içinde uyumlu, Monte-Carlo, mobilite, kimyasal potansiyel.

ABSTRACT

PhD. THESIS

INVESTIGATION OF CHARGE TRANSPORT CONFINED AT A HETEROJUNCTION ALONG THE JUNCTION PLANE BY MONTE CARLO TECHNIQUES

Zeki YARAR

DEPARTMENT OF PHYSICS

INSTITUTE OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

UNIVERSITY OF ÇUKUROVA

Supervisor: Assoc. Prof. Metin ÖZDEMİR

Year: 2004, Pages: 165

Jury: Assoc. Prof. Metin ÖZDEMİR

: Prof. Ramazan ESEN

: Prof. Halil YARANERİ

: Prof. Gülten GÜNEL

: Prof. Yusuf ÜNLÜ

Schrödinger and Poisson equations are solved self consistently to obtain the potential profile formed at a modulation doped AlGaAs/GaAs hetero junction. In addition empty or occupied quantized energy levels, charge carrier concentrations in each occupied level, wave functions corresponding to each level are also calculated. No adjustable parameters are used, it is sufficient to provide only the material parameters. Armed with the information given above, electron scattering rates based on Born approximation are calculated using a combination of analytical and numerical methods. The scattering mechanisms considered are: surface roughness, acoustic phonon, polar optic phonon and remote impurity scattering. Assuming that the two-dimensional electron concentration is not altered, the variation of chemical potential with respect to both temperature and energy level-broadening parameter is studied under a uniform and constant magnetic field. Gaussian, exponential and lorentzian forms of broadening are used and the results are compared. Then using ensemble Monte Carlo method, the drift velocity of electrons along the hetero junction plane, the variation of low field mobility of electrons at the hetero junction, the occupancy of the quantized sub bands and three dimensional valleys are obtained as a function of applied electric field at various temperatures and material parameters. The temperature and/or field beyond which two dimensional nature of the system ceases to exist is also investigated. Similar calculations are repeated for a quantum well. In both cases, emphasis is given to the effect of surface roughness and remote impurity scattering on electron transport properties and electron mobility.

Key Words: Scattering, self-consistent, Monte Carlo, mobility, chemical potential.

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca bana yol gösteren, her türlü yardım ve ilgilerini gördüğüm tez danışmanım Doç.Dr. Metin ÖZDEMİR'e, bu tezin hazırlanması süresince bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım Çukurova Üniversitesi ve Mersin Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü öğretim elemanlarına, bana destek olan arkadaşlarıma ve her zaman yanımda olan aileme teşekkürlerimi sunarım.



İÇİNDEKİLER	SAYFA
ÖZ.....	I
ABSTRACT.....	II
TEŞEKKÜR.....	III
İÇİNDEKİLER.....	IV
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	VI
1. GİRİŞ.....	1
2.ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR.....	5
2.1. Giriş.....	5
2.2. Heteroyapıların Genel Özellikleri.....	6
2.3. Heteroyapıların Büyütülmesi ve Yarıiletken Heteroeklemler.....	8
2.4. Hall Etkisi Ve Uygulamaları.....	12
2.5. Kuantum Kuyu Yapıları Ve Süperörgüler.....	15
3. TEORİK ALT YAPI.....	19
3.1. Taşıyıcı Saçılması ve Fermi'nin Altın Kuralı.....	19
3.2. Örgü Titreşimleri	30
3.3. Akustik Fonon Saçılması.....	34
3.3.1. İki Boyutlu Elektron Gazında Akustik Saçılma.....	40
3.4. Polar Optik Fonon Saçılması.....	44
3.4.1. İki Boyutlu Taşıyıcıların Optik Fonon Saçılması.....	58
3.5. Uzak Safsızlık Saçılması.....	65
3.6. Buruşuk Yüzey Saçılması.....	72
3.6.1. Gaussiyan Oto Korelasyon Fonksiyonu ve Saçılma Oranı.....	74
3.6.2. Exponansiyel Oto Korelasyon Fonksiyonu ve Saçılma Oranı..	77
3.6.3. Lorentsiyan Oto Korelasyon Fonksiyonu ve Saçılma Oranı.....	79
3.7. Tek Parçacık Monte Carlo Simülasyonu.....	82
3.7.1. Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu.....	83
3.7.2. Saçılma Olaylarının Seçimi.....	87
3.7.3. Hareket Denklemleri.....	92
3.8. Ensemble Monte Carlo Simülasyonu.....	93

3.9. Schrödinger-Poisson Denklemlerinin Kendi İçinde	
Uyumlu Çözümü.....	97
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	100
4.1. Schrödinger/Poisson Denklemlerinin Kendi İçinde Uyumlu Sayısal	
Çözümü ve Hetero Eklemlerin Bazı Elektronik Özellikleri.....	100
4.2. Manyetik Alan Altında Kimyasal Potansiyel Salınımları.....	107
4.2.1. Teori ve Formülasyon.....	108
4.2.2. Sonuçlar ve Tartışma.....	113
4.3. Monte Carlo Simülasyonları.....	124
4.3.1. AlGaAs/GaAs Yapısı için İki Boyutlu Elektron	
Gazının Taşınım Özellikleri.....	124
4.3.2. Kuantum Kuyusu için Elektron Taşınım Özellikleri ve	
Mobilite Hesabı.....	132
4.3.2.1. Monte Carlo Simülasyonunun Genel Özellikleri.....	132
4.3.2.2. Mobilite Hesaplamaları.....	135
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	141
KAYNAKLAR.....	145
ÖZGEÇMİŞ.....	150
EK-A. Schrödinger Denkleminin Formülasyonu.....	151
EK-B. Poisson Denkleminin Formülasyonu.....	156
EK-C. Materyal Parametreleri.....	165

Şekil 2.1. Bazı malzemelerin yasak enerji aralığının katkı maddesine göre değişimi.....	7
Şekil 2.2. İki boyutlu elektron gazının oluşumu.....	10
Şekil 2.3. Modülasyon katkılı heteroyapılara bir örnek.....	11
Şekil 3.1. Açıların seçimi.....	29
Şekil 3.2. Kübik yarıiletkenlerde ilerleyen elastik dalgalar için tipik dağılım bağıntısı.....	31
Şekil 3.3. Polar açının tanımlanması.....	37
Şekil 3.4. $T=77\text{ K}$ ve $T=300\text{ K}$ değerleri için üç boyutlu akustik fonon saçılma oranı.....	39
Şekil 3.5. $ G_{mn}(q_z) ^2$ girişim terimleri.....	42
Şekil 3.6. AlGaAs/GaAs heteroyapısında oluşan iki boyutlu elektron gazının akustik saçılma oranı.....	44
Şekil 3.7. AlGaAs/GaAs heteroyapısında oluşan iki boyutlu elektron gazının polar optik saçılma oranı.....	65
Şekil 3.8. Bir safsızlık tarafından saçılan elektronun θ açısı ve $\vec{q}$ vektörü arasındaki ilişkinin k -uzayındaki gösterimi.....	68
Şekil 3.9. İki boyutlu elektron gazında uzak iyonize safsızlıklardan kaynaklanan elektron saçılmasının geometrisi.....	71
Şekil 3.10. Exponansiyel, Gaussiyen ve Lorentsiyen saçılma oranlarının $\Delta=4.3\text{ A}^0$ ve $L=15\text{ A}^0$ değerleri için karşılaştırmalı bir grafiği.....	81
Şekil 3.11. Tek parçacık Monte Carlo hesabının akış diyagramı.....	84
Şekil 3.12 Toplam zaman aralığının küçük k aralıklarına bölünmesi.....	85
Şekil 3.13. Γ tarafından normalize edilmiş saçılma oranlarının toplamının gösterimi.....	87
Şekil 3.14. Laboratuvar çerçevesinde açıların gösterimi.....	88
Şekil 3.15. $\vec{k}$ 'ne göre $\vec{k}'$ 'nün polar ve tepe açılarının gösterimi.....	90

Şekil 3.16. k_z -ekseninin başlangıç dalga vektörüne paralel olduğu yeni çerçeve ile laboratuvar çerçevesi arasındaki ilişki.....	91
Şekil3.17. Ensemble Monte Carlo simülasyonunun akış diyagramı.....	95
Şekil3.18. Ensemble Monte Carlo alt programının akış diyagramı.....	96
Şekil 4.1. Toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı sıcaklık için gösterilmesi.....	102
Şekil 4.2. Birinci enerji düzeyinin aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı sıcaklık için gösterilmesi.....	103
Şekil 4.3. Toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı verici yoğunluğu için gösterilmesi.....	103
Şekil 4.4. Birinci enerji düzeyinin aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı verici konsantrasyonu için gösterilmesi.....	104
Şekil 4.5. Toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi.....	104
Şekil 4.6. Toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi.....	105
Şekil 4.7. Toplam elektron konsantrasyonunun sıcaklığa göre değişiminin iki farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi.....	105
Şekil 4.8. Birinci enerji düzeyinin sıcaklığa göre değişiminin iki farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi.....	106
Şekil 4.9. Birinci enerji düzeyinin aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı Al. konsantrasyonu için gösterilmesi.....	106
Şekil 4.10. Simülasyonlarda kullanılan numunenin geometrik organizasyonu.....	109
Şekil 4.11. İletim bant profili ve şekil 4.10'da gösterilen geometriye bağlı olan kuantum kuyusunda bulunan ilk üç dalga fonksiyonu.....	109
Şekil 4.12. $T=4.2$ K değerinde gaussyen tipi genişlemesinin $\Gamma_G = 0.2, 0.5, 1.0$ ve 2.0 meV düzey genişleme parametreleri için B' 'nin bir fonksiyonu olarak μ' 'deki salınımlar.....	116
Şekil 4.13. Parametreler şekil 4.12'deki ile aynı ancak sıcaklık $T=30$ K.....	119

Şekil 4.14. $T=4.2, 10, 20, 30$ K değerlerinde gaussyen tipi genişlemenin $\Gamma_G=0.2$ meV düzey genişleme parametresi için B' 'nin bir fonksiyonu olarak μ' 'deki salınımlar.....	121
Şekil 4.15. $T=4.2$ K'de gaussyen, lorentziyan ve eksponansiyel düzey genişlemelerinin karşılaştırılması.....	122
Şekil 4.16. Parametreler şekil 4.15 ile aynı sadece gaussyen formdaki düzey genişleme parametresi $\Gamma_{G2}=0.5$ meV alınmıştır.....	123
Şekil 4.17. Modülasyon katkılı GaAs/ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ heteroyapısında bir boyutlu kanalın yapısı.....	125
Şekil 4.18. Potansiyel profili , taban duruma bağlı dalga fonksiyonu ve birinci uyarılmış duruma ait dalga fonksiyonu.....	126
Şekil 4.19. Farklı elektrik alanlarda zamanın bir fonksiyonu olarak elektronların ortalama hızı.....	127
Şekil 4.20. 2, 4 ve 5 kV/cm alanları ve 4.2 K için zamanın bir fonksiyonu olarak vadi ve düzeylerin dolulukları.....	128
Şekil 4.21. Üç farklı sıcaklık için ortalama elektron hızının elektrik alana göre değişim eğrileri.....	129
Şekil 4.22. 0.5 kV/cm elektrik alanı için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak mobilitenin değişimi.....	130
Şekil 4.23. Uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak mobilitenin değişimi.....	131
Şekil 4.24. Kuyu içindeki enerji düzeyleri arasındaki farkın kuyu genişliğine göre değişimi.....	134
Şekil 4.25. Değişik sıcaklıklar için mobilitenin elektrik alana göre değişimi.....	135
Şekil 4.26. Kuyu içinde bulunan enerji düzeyleri ile Γ ve L bandının doluluk oranları.....	136
Şekil 4.27. Buruşuk yüzey saçılması yokken ve Gaussien oto korelasyon fonksiyonu için buruşuk yüzey saçılması varken farklı L değerlerinde sıcaklığın bir fonksiyonu olarak mobilitenin değişimi.....	137

Şekil 4.28. Uzak safsızlık saçılması ve buruşuk yüzey saçılmasının değişik sıcaklıklar için aralık kalınlığına göre mobiliteye etkisi.....	138
Şekil 4.29. Değişik sıcaklıklar için verici konsantrasyonuna göre buruşuk yüzey saçılmasının mobiliteye etkisi.....	140



1. GİRİŞ

Bu çalışmanın temel amacı farklı yarıiletken malzemelerin üretim esnasında uygun şekilde birleştirilmesi ile elde edilen heteroeklem yapılarda, ara yüzeyde oluşan iki ve daha düşük boyutlardaki yapıların elektronik özelliklerini farklı elektrik ve manyetik alanlar altında teorik olarak incelemektir. Enerji bant aralıkları daha büyük iki yarı iletken tabaka arasına daha düşük enerji bant aralığına sahip bir yarı iletkenin yerleştirilmesi ile elde edilen bir yapıda, ara bölge elektron tutacak bir potansiyel oluşturur, bu yapı bir kuantum kuyusu olarak adlandırılır. Böyle bir yapıda eklem düzlemine dik yönde elektron hareketi sınırlı iken, düzlemler boyunca elektron hareketi üzerinde bir sınırlama yoktur. Bu nedenle bu şekilde elde edilen taşıyıcılara iki boyutlu elektron gazı (2BEG) denir. 2BEG'ı bir boyutta daha sınırlandırılırsa tek boyutlu kuantum telleri ve her boyutta sınırlandırılırsa sıfır boyutlu kuantum noktaları elde edilir.

Belirtilen temel amaç için ilk önce iki ve daha fazla farklı yasak enerji aralığına sahip malzemenin birleştirilmesi ile elde edilen çoklu bir heteroeklemin iletim bandının yapısını sayısal olarak çözen çok amaçlı bir program yazılmıştır. Burada hiçbir uyum parametresi kullanılmamış, sadece başlangıçtaki malzeme parametrelerinin ve her katmandaki verici ve alıcı safsızlık yoğunluklarının verilmesi yeterli olmuştur. Göz önüne alınan sistemin çözümü Hartree ve etkin kütle yaklaşımları çerçevesinde Poisson ve Schrödinger denklemlerinin kendi içinde uyumlu hesabı ile yapılmıştır. Çözümün sonucunda çok katmanlı yapı için iletim bandının yapısı, yük dağılımı, düşük boyutlara hapsolmuş taşıyıcılar için enerji seviyeleri ve bunlara karşılık gelen dalga fonksiyonları bulunmuştur. Bu programın bazı ufak değişikliklerle kuantum tellerine uygulanması mümkündür.

Daha sonra malzemeye değişik açılarda uygulanan farklı elektrik ve manyetik alanların etkileri incelendi. Elektrik alan enerji bantlarında eğim oluşturacağından her seviyede tutulan elektron sayısı ve bunların taşınım özellikleri buna bağlı olarak değişecektir. Manyetik alan ise yeni enerji seviyelerinin (Landau seviyeleri) oluşmasına sebep olacaktır. Diğer yanda uygulanan manyetik alan çok yüksek sayıdaki serbest elektronun bir tek banda yığılması ile elektronlar arası etkileşmelerin

çok önemli olduğu sınıra kadar arttırılırsa, elektron-elektron etkileşmelerinin sadece bir ortalama alan ile temsil edildiği Hartree yaklaşımı geçerliliğini yitirecektir. Bu nedenle bu çalışmada çok yüksek manyetik alanlar kullanılmamıştır.

Yukarıda bahsedilen temel veriler elektrik ve manyetik alanlar altında elde edildikten sonra heteroyapıların elektronik, optik ve taşıma özellikleri incelenebilir. Bu çalışmada optik özellikler üzerinde durulmamıştır. Tezde çalışılan konular özetle şunlar olmuştur:

Bölüm 4.1’de modülasyon katkılama tekniğinin kullanıldığı bir yapı için değişik parametreler ışığında Schrödinger ve Poisson denklemlerinin kendi içinde uyumlu çözümünden hetero eklemlerde toplam elektron konsantrasyonunun ve birinci enerji düzeyinin aralık kalınlığı, Al konsantrasyonu ve sıcaklığa göre değişimleri incelenmiştir. Sıcaklık ve verici konsantrasyonu arttıkça toplam elektron konsantrasyonunun arttığı görülmüştür. Bunun yanında aralık kalınlığı büyüdükçe toplam elektron konsantrasyonu ve birinci enerji düzeyinin değerinin azaldığı bulunmuştur.

Bölüm 4.2’de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ kuantum kuyusunda oluşan 2BEG göz önüne alınmış ve düzgün ve sabit bir manyetik alan altında birinci, ikinci ve üçüncü alt bantların bazıları veya tamamı elektronlarla dolu iken sistemin kimyasal potansiyelindeki değişim incelenmiştir. İletim enerji bant profili, enerji alt bantları her bir banttaki elektron konsantrasyonu manyetik alan yokken sayısal olarak Poisson ve Schrödinger denklemlerinin kendi içinde uyumlu çözümü ile bulunmuştur. Bu çözümler her sıcaklık için ayrı ayrı elde edilmiştir. Sonra kuyu içindeki elektron konsantrasyonunun manyetik alanla değişmediği varsayımıyla, farklı sıcaklıklarda ve değişik formlardaki düzey genişlemeleri için uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyelin değişimi bulunmuştur. Kimyasal potansiyel salınımlarına genişlemenin etkisi düzey genişlemesinin eksponansiyel, lorentziyan ve gausiyen olduğu durumlar için bakılmıştır. Temelde birbirinden farklı süreçler olmasına rağmen sabit bir sıcaklıkta düzey genişlemesini artırmanın veya sabit bir düzey genişleme değerinde sıcaklığı artırmanın göz önüne alınan tüm durumlar için niteliksel olarak kimyasal potansiyel üzerinde aynı etkileri yarattığı gözlenmiştir.

Bölüm 4.3.1’de modülasyon katkılı GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As yapısının kendi içinde uyumlu olarak hesaplanmış potansiyel profili ve taban durum ile birinci uyarılmış duruma ait dalga fonksiyonları elde edildi. Bu yapı içinde tutulan iki boyutlu serbest elektronların taşınımı hetero ekleme paralel olarak uygulanan elektrik alanı altında ensemble Monte Carlo yöntemi ile incelendi. Göz önüne alınan saçılma mekanizmaları akustik fonon saçılması, polar optik fonon saçılması ve iyonize olmuş uzak iyonlardan kaynaklanan saçılmadır. İki boyutlu saçılma oranlarının hesaplanmasında kendi içinde uyumlu olarak hesaplanan dalga fonksiyonları kullanılmıştır. Uygulanan alan altında saçılmalarında etkisi ile enerjileri iletim bandı sınırına kadar artan elektronlar iki boyutlu sistemden çıkarılarak üç boyutlu sisteme entegre edilmişlerdir. Bu özellikteki elektronlar GaAs içinde Γ bandının en alt seviyesine yerleştirilerek hareketleri takip edilmiştir. GaAs için sadece Γ ve L vadileri göz önüne alınmış, X vadisi ihmal edilmiştir. Modülasyon katkılı GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As hetero yapısı için farklı elektrik alanlardaki hız-zaman karakteristikleri, iki boyutlu enerji düzeyleri ve üç boyutlu Γ ve L düzeylerinin elektron dolulukları, uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak değişik sıcaklıklar için elektron hızının değişimi, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak elektron mobilitesinin değişimi ve uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak uzak safsızlık saçılması (remote impurity) varken ve yokken mobilitenin değişimi incelenmiştir. Yüksek mobilite değerleri ancak uygulanan düşük alan değerlerinde ve/veya düşük sıcaklıklarda elde edilmiştir. Simülasyon sonuçları uzak safsızlık saçılmasının mobilite üzerine çok büyük etkisinin olabileceğini göstermiştir. Yüksek alan değerlerinde veya yüksek sıcaklıklarda sistem iki boyutlu olma özelliklerini hızla kaybetmekte ve üç boyutlu hale gelmektedir. Hangi sıcaklık ve uygulanan alan değerlerine kadar iki boyutlu elektron gazı özelliklerinin korunduğu ayrıca belirlenmeye çalışılmıştır.

Bölüm 4.3.2’de GaAs/GaAlAs kuantum kuyusunda oluşan iki boyutlu elektron gazının ara yüzey boyunca uygulanan bir elektrik alanı altında taşınım özellikleri incelenmiş, özellikle sıcaklık, verici konsantrasyonu, ara yüzeyin vericilere olan uzaklığı gibi parametrelerin mobiliteye etkisi araştırılmıştır. Göz önüne alınan saçılma mekanizmaları akustik fonon, polar ve polar olmayan optik fonon, uzak safsızlık ve buruşuk yüzey saçılması olmuştur. Kuantum kuyusu için

elektron mobilitesinin uygulanan alana, sıcaklığa, aralık kalınlığına ve verici safsızlık yoğunluğuna göre değişimi incelenmiştir. Ayrıca özellikle iki boyutlu sisteme özgü olarak ortaya çıkan uzak safsızlık saçılması ile buruşuk yüzey saçılmasının mobiliteye etkisi araştırılmıştır. Düşük alan ve düşük sıcaklıklarda mobilite hacimsel mobiliteden yaklaşık iki merteye daha büyük iken, sıcaklık ve/veya alan arttıkça bu değer azalmaktadır. En etkin buruşuk yüzey saçılması ($L=70 \text{ Å}^\circ$) göz önüne alındığında buruşuk yüzey saçılma mekanizmasının olmadığı duruma göre mobilite de yaklaşık iki kat fark olduğu gözlenmiştir. Uzak safsızlık saçılmasının olmadığı düşük sıcaklık değerlerinde mobilitenin aralık kalınlığı (W_s) ile hemen hemen doğrusal olarak arttığı elde edilmiştir. Buruşuk yüzey saçılmasının değişik sıcaklıklar için verici konsantrasyonuna göre mobiliteye etkisi incelenmiş özellikle düşük sıcaklık değerlerinde mobilitenin N_D ile azaldığı bulunmuştur.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

2.1. Giriş

Yarıiletkenlerin teknolojiye yerini almasıyla yaşadığımız dünya büyük oranda değişmiştir ve yarıiletkenlerin geleceğin teknolojisinde de baskın bir rol alacağı kesin görülmektedir. 1948'de Bell laboratuvarlarında ilk nokta-bağlantılı transistörün geliştirilmesinden sonra bu alandaki teknoloji, 1 cm^2 den daha küçük alanlara bir milyon civarında eleman yerleştirebilecek düzeye ulaşmıştır. Gigabit oranlı sinyallerin optik kontrollerinin yanı sıra yarıiletken aygıtların çalışma frekansları da 10^{12} Hz 'in üzerine çıkmıştır. Teknolojideki bu ilerleme, düşük güç ve yüksek işlem hızlarında çalışan, $0.1 \mu\text{m}$ civarında çok küçük ölçeklere sahip aygıtların ve entegre devrelerin oluşumuna doğru bir gelişim göstermektedir. Geleceğin yarıiletken aygıtlarının 1000 Å dan küçük boyutlarda ve daha yüksek frekanslarda olacağı tahmin edilmektedir.

Yeni tip aygıtların geliştirilmesine duyulan ihtiyaç, var olan teknolojinin son sınırlarında çalışan elemanlar, yarıiletken aygıtların karakteristikleri ve fiziğinin anlaşılmasına olan ilgiyi artırmaktadır. Modern yarıiletken elemanların karakterizasyonu ve gelişiminde deneysel çalışmalar kullanışlı bilgiler sunmasına rağmen yalnızca deneysel bir yaklaşımla bu aygıtların karmaşık fiziksel ve elektriksel davranışları yeterince anlaşılamaz. Bundan başka yeni yarıiletken aygıtlar karmaşıktıkça ve entegre devrelerdeki yoğunluk arttıkça tamamen deneysel gelişim çalışmaları ekonomik olmaktan uzaklaşmaktadır ve daha etkin-ekonomik dizaynlara ihtiyaç duyulmaktadır. Bu tür nedenlerden dolayı son yıllarda bilgisayar destekli dizayn teknikleri (CAD computer-aided-design) hem simülasyon hem de aygıt ve devrelerin dizaynında sıklıkla kullanılmaktadır (Snowden,1988).

Son 30 yıl içinde çok sayıda yarıiletken aygıt ve bunların materyalleri geliştirilmiştir. Modern elektronik sistemlerde en çok kullanılan yarıiletken aygıtlar diyotlar, alan etkili transistörler ve çift kutuplu (bipolar) transistörlerdir. Tristor (thyristor) ve triyak (triac) gibi diğer elemanlar devre anahtarı olarak kullanılmaktadır. Silikon en genel yarıiletken malzeme olmasına rağmen galyum

arsenür, indiyum fosfat ve galyum alüminyum arsenür gibi diğer malzemeler özel avantajlarından dolayı çoklukla kullanılmaktadır.

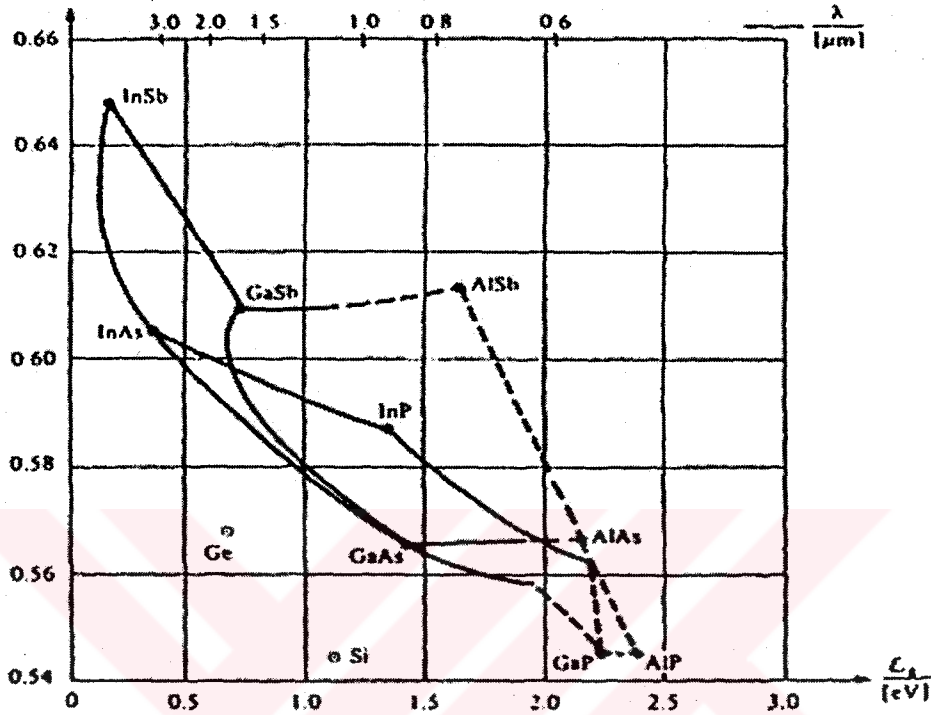
Başka malzemelerde çalışılmış olmasına rağmen iki boyutlu metal-yalıtkan-yarıiletken (MIS, metal-insulator semiconductor) sistemler üzerindeki çalışmaların çoğu teknolojik olarak iyi geliştirilmiş bir örnek olan metal-silikon dioxide-silikon yapısı üzerine olmuştur. Silikon metal-oksit yarıiletken (MOS, metal-oxide semiconductor) alan etkili transistörler entegre devrelerde anahtar ve yükselteç (amplifying) olarak 1960'lı ve 1970'li yıllarda geliştirilmiştir. Silikon MOS alan etkili transistör, kapasitörün düzlemleri üzerindeki yükün voltaj uygulanarak değiştirilmesiyle düzlemlerden birinin iletkenliğinin ayarlanabildiği en başarılı örnektir. MOS yapılar günümüz bilgisayarlarında kullanılan mantıksal devrelerin ve hafıza elemanlarının en önemli elektronik bileşenlerini oluşturur. Bu konudaki ilk çalışmalar 1930'lara dayanır (Lilienfeld ve Heil'in patentleri ile).

Shockley ve Pearson (1948), organik yalıtılmış bir film ve bir metalik sayaç elektrodu ile az miktarda oksitlendirilmiş bir yarıiletken kullanarak bu tip aygıtların ilk örneği olan MIS yapısı üzerinde çalışmışlardır. Bu yapılar 1950 ve 1960'larda yüzey geçişleri ve arayüzey durumlarının nümerik çalışmalarının çoğunda kullanılmışlardır. Bununla ilgili başka bir yapıda CdSe, CdTe, CdS, Se veya Te gibi yüksek dirençli polikristal yarıiletkenlerden yapılmış ince filmlere Ohmik kontakt olarak kullanılan ince-film transistörüdür (Weimer,1962). Ancak bu sistemlerin özellikleri Si-SiO₂ (silikon-silikon dioksit) sistemlerin özellikleri kadar iyi özelliklere sahip olmadığından laboratuvar çalışmalarının dışında aygıt üretimlerinde fazla kullanılmamışlardır.

2.2. Heteroyapıların Genel Özellikleri

III-V materyalleri yarıiletken özellikleri yönünden geniş bir aralıkta incelenmiş olmasına rağmen heteroyapılarda genellikle az sayıda materyal kullanılmıştır. Bu özelliklerin kullanılabilirliğini artırabilmek için değişik bileşikler arasında farklı alaşımlarda kullanılmıştır. Bunların içinde en genel olan ve göze çarpan alaşım tipi Al_xGa_{1-x}As alaşımıdır. Farklı materyallerin en önemli iki özelliği

örgü sabiti ve yasak enerji aralığıdır (şekil 2.1). Heteroyapıların aktif bölgeleri arayüzelere çok yakındır. Bu sadece III-V bileşikleri için değil Si ve SiO₂ arasında



Şekil 2.1. Bazı malzemelerin yasak enerji aralığının hangi malzemelerle katkılандığında nasıl ve ne kadar değıştirilebileceğini örgü sabitlerinin bir fonksiyonu olarak göstermektedir. Kesikli olarak gösterilen çizgiler malzemenin belirli bir katkılama oranından sonra doğrudan bant yapısından dolayı bant yapısına geçtiğini göstermektedir.

bir arayüze sahip en önemli ve ekonomik yarıiletkenlerden biri olan metal oksit yarıiletken alan etkili transistör (MOSFET, metal-oxide semiconductor field effect transistor) yapısı için de geçerlidir. Bu yapıda Si bir kristal iken SiO₂ kristal olmayıp amorfür. Bu iki malzemeyi arayüzelerde bozukluk ve gerilim olmadan birleştirmek imkansızdır. Bu tür yüzey bozuklukları ve gerilimler nedeniyle oksitteki yüklü kusurlardan dolayı bir saçılma oluşur (buruşuk yüzey saçılması) ve bu saçılma MOSFET içindeki elektron mobilitelerini büyük oranda düşürür (düşük sıcaklıklarda 4 m²V⁻¹s⁻¹ değerlerinin altına iner). III-V tipi heteroyapıların daha iyi bir performansla çalışabilmesi için arayüzelerin neredeyse kusursuz olması gerekir. Bu ancak

gelişmiş teknoloji ile sağlanabilir. Moleküler hüzme epitaksiyel (MBE, molecular-beam epitaxy) ve metal organik kimyasal buhar depolama (MOCVD, metal organic chemical vapour deposition) gibi pahalı tekniklerle bu sorun büyük oranda aşılmıştır.

Prensip olarak iki malzemeyi ideal bir heteroyapı biçiminde birleştirmek mümkündür. Bunu sağlamak için öncelikle aynı kristal yapıya veya en azından aynı simetriye sahip malzemeler gerekir. Genel olarak kullanılan III-V bileşiklerinde bu koşul sağlanabilir. İkinci bir gereklilik, elde edilen son yapıda herhangi bir gerilim oluşmamasını sağlamaktır. Bu koşul ise iki ayrı malzemenin örgü sabitleri birbirine çok yakın seçilerek sağlanabilir. Şekil 2.1'e bakılırsa özellikle $Al_xGa_{1-x}As$ yapısı için örgü sabitlerinin x 'in bir fonksiyonu olarak %0.15'ten daha az değiştiği görülebilir. Bundan dolayı GaAs ve AlAs veya $Al_xGa_{1-x}As$ alaşımlarının ara değerleri de fazla bir gerilim oluşturmada birbirini üstüne büyütülebilir.

Ne yazık ki gerilim oluşturmada büyütülebilecek malzemelerin sayısı sınırlıdır. Bir alternatif olarak InP taban kullanılabilir. $Al_{0.48}In_{0.52}As$ ve $Ga_{0.47}In_{0.53}As$ alaşımları InP ile aynı örgü sabitine, doğrudan bant aralığına ve etkin tuzak taşıyıcılarına sahiptir. Bundan dolayı bu malzemeler de yüksek hızlı elektronik aygıtlarda kullanılabilir.

2.3. Heteroyapıların Büyütülmesi ve Yarıiletken Heteroeklemler

Kuyu olarak kullanılmak istenen heteroyapıların yüksek kalitede üretilmesi gerekir. Özellikle heteroyapıda kullanılan her iki materyalin atomik yapıları karşılaştırılabilir olmalı ve ara yüzeyde safsızlıklar ve diğer kusurlardan dolayı oluşan saçılmalar minimum olmalıdır.

Heteroyapıların büyütülmesinde çok kullanılan ve yüksek kalitede üretim yapılabilen iki yöntemden birisi moleküler hüzme epitaksiyel (MBE) diğeri metal organik kimyasal buhar depolama (MOCVD) yöntemidir. MBE yöntemi oldukça basit bir teknikle çalışır: heteroyapının büyütüleceği taban malzemesi ultra yüksek vakum (UHV, ultra high vacuum) ortamında ısıtılmış bir tutucuya yerleştirilir. Heteroyapıyı oluşturacak bileşenler bu tabana doğru buharlaştırılır. Moleküller herhangi bir çarpışmaya uğramadan düz bir doğru halinde moleküler bir hüzme

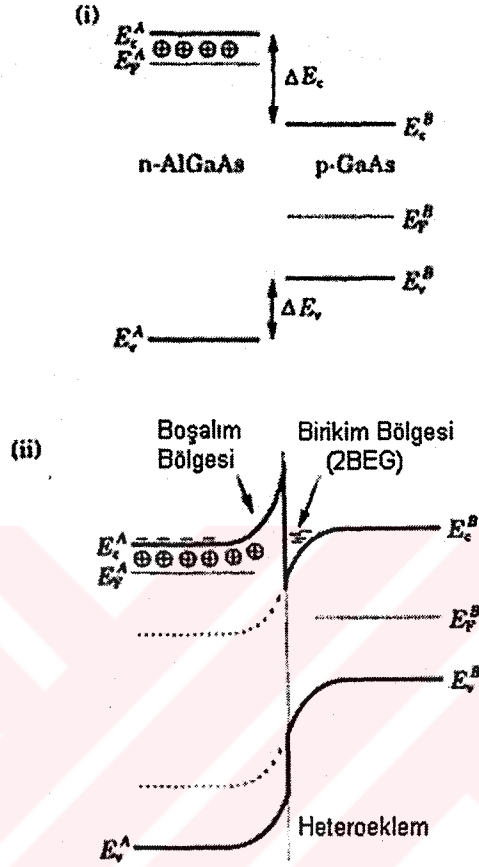
oluşturarak taban üzerine yerleştirilirler. Bu yöntemde her bileşenin akısı ısıtıcılarla kontrol edilir ve katkı malzemeleri de aynı şekilde ek ışın tabancaları kullanılarak yerleştirilir. Prensip basit olmasına rağmen pratikte çeşitli zorluklar ortaya çıkar. İlk olarak materyallerin herhangi bir kirlenmeye uğramadan çok saf olarak yerleştirilmeleri ve kirliliği azaltmak için ortamdaki basıncın çok küçük olması gerekir. Sıcaklık değişimleri istenmeyen difüzyonlara ve ara yüzeye kirlilik bulaşmasına neden olabilir.

MOCVD yöntemi hemen hemen atmosfer basıncı altında çalışmaktadır. Bu yöntemde taban olarak kullanılacak malzeme ısıtılmış bir blok üzerine yerleştirilir ve tabanın bulunduğu odadan (chamber) farklı gazlar hidrojenle taşınarak geçirilir. Büyütülecek malzemenin yapısını kontrol edebilmek için gazların bileşimi hızla değiştirilir. Bu aparat MBE için kullanılan aygıttan çok daha basittir ancak pratikteki en önemli sorun yüksek oranda toksik gazların varlığıdır. Reaktör içindeki aerodinamik yapıdan kaynaklanan problemler oluşabilir. Gazın bileşimini değiştirebilmek ve keskin ara yüzeyler elde edebilmek için karışan gazlarla taban arasındaki sistemin hacmi minimize edilmelidir. Ayrıca reaksiyon odasındaki gazların karışımı akıyı etkilemeden değiştirilebilmelidir. Optoelektronik aygıt üretiminde MOCVD yöntemi MBE yöntemine göre daha çok kullanılan bir yöntem olup ticari üretimde başarılı ve hızlı bir yöntemdir. Ayrıca bu yöntemde bir örnek farklı amaçlar için yeniden büyütülebilir.

MBE ve MOCVD yöntemlerini temel alan başka bir çok yöntem ortaya çıkmıştır. Örneğin MBE yönteminde kullanılan kaynak yerine MOCVD'dekine benzer kaynaklar kullanılarak kimyasal hüzmeye epitaksi (CBE, chemical beam epitaxy) veya metal organik moleküler hüzmeye epitaksi (MOMBE, metal organic molecular beam epitaxy) gibi yöntemler geliştirilmiştir. Bir başka örnek reaksiyon malzemelerinin ayrı ayrı kullanılmasıyla tabakalar halinde büyüme yapılan atomik tabaka epitaksi (ALE, atomic layer epitaxy) yöntemidir. Tüm bu yöntemlerde amaç aygıt kalınlığını kontrol edebilmek ve aygıtın performansının geliştirilmesidir. Aynı yöntemler Si-Ge heteroyapıların üretiminde de kullanılmaktadır.

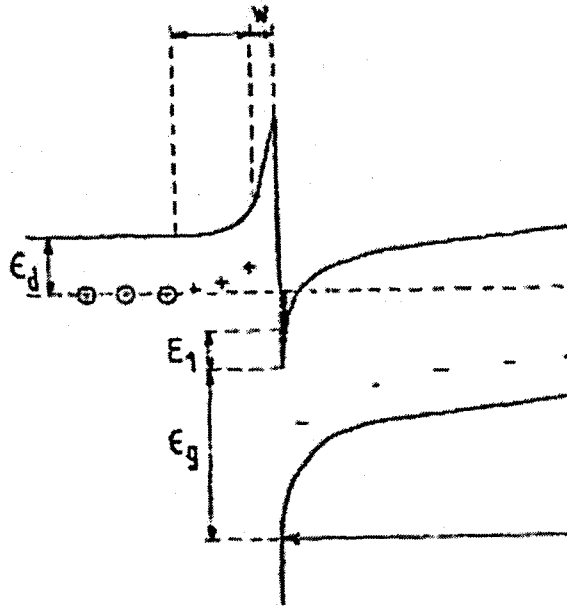
Genel olarak bant aralıkları birbirinden farklı olan iki yarıiletken üst üste büyütülerek oluşturulan yapıya heteroeklem denir. Bir yarıiletkenden diğerine yük

geçişlerinin olmadığı başlangıç durum şekil 2.2(i)'de verilmiştir. Katkılanmış



Şekil 2.2. İki boyutlu elektron gazının (2BEG) oluşumu. İki malzemenin yasak enerji aralıkları eşit olmadığında iletim ve değerlik bantları çeşitli şekillerde dizilebilirler. Burada (i)'de gösterilen başlangıçtaki diziliş biçimi GaAs/GaAlAs yapısına da uyan “staggered” bant yapısına bir örnektir. Elektronlar n-tipi GaAlAs tarafından p-tipi GaAs tarafına iki tarafın Fermi enerji seviyeleri eşit olana kadar geçerler. Bunun sonucunda ara yüzeye yakın bölgelerde enerji bantlarında eğilmeler meydana gelir. Geçen elektronlar ara yüzeyde oluşan üçgenimsi potansiyel kuyusuna hapsolarak 2BEG oluşturur.

yarıiletkenlerde bir bölgeden diğerine yük geçişleri olur ve bu geçişler tüm yapıdaki



Şekil 2.3. Modülasyon katkılı heteroyapılara bir örnek. W ile gösterilen bölge katkılanmamıştır. Böylece elektronların saçılmasına sebep olan iyonize olmuş safsızlıklar sadece W uzunluğunun solunda oluşur. Elektronların saçılması W ile eksponansiyel olarak azalır.

kimyasal potansiyel eşit olana kadar devam eder. Bu yük geçişleri nedeniyle şekil 2.2(ii)'de görüldüğü gibi enerji bantlarında eğilmeler oluşur. İki malzemenin birleşme noktasında oluşan üçgene benzer kuyu şeklindeki potansiyelde elektronlar iki boyutta serbest hareket edebilirken üçüncü boyuttaki hareketleri engellenmiştir. Böyle bir yapı literatürde iki boyutlu elektron gazı (2BEG) olarak bilinir. 2BEG'da bulunan elektronlar katkı atomlarından dolayı saçılmaya uğrayabilir. Bunu engellemek için 2BEG ile katkı maddeleri arasında katkılanmamış ince bir tabaka bırakılarak 2BEG'da bulunan elektronlar iyonik saçılma merkezlerinden ayrılabilir (Şekil 2.3). Bu şekilde katkılanmış yapılara modülasyon katkılı heteroyapılar denir. Katkılanmış bir heteroeklemde tuzaklanmış bulunan 2BEG elektronik geçirgenlik (transport) için kullanılan en önemli düşük-boyutlu sistemdir. Bu yapı alan etkili transistörün çekirdek kısmını oluşturur. Modülasyon katkılı alan etkili transistör (MODFET, modulation-doped field-effect transistor) ve yüksek elektron mobiliteli transistör (HEMT, high electron mobility transistor) gibi değişik isimlendirmeleri vardır. Si ve SiO_2 arasındaki arayüzeyde tuzaklanmış deşik ve elektronlara sahip olan

silikon MOSFET yapısı en genel elektronik yapılardan birisidir. Metalik kapı (gate) ve 2BEG arasına bir kapasitör yerleştirilerek 2BEG'nin yoğunluğu kontrol edilebilir. Bu yapılar uzun yıllar çift-heteroyapı lazerlerinde (double-heterostructure lasers) taşıyıcıları ve ışığı sınırlayabilmek için kullanılmıştır (Kressel ve Butler, 1977; Casey ve Panish, 1978).

2.4. Hall Etkisi Ve Uygulamaları

Kuantize Hall etkisi, Hall etkisi olarak bilinen daha genel bir olgunun özel bir durumudur. Hall etkisini gözlemek için düzlemsel bir iletken malzemeye yüzeye dik bir manyetik alan uygulanır. Böylece bir uçtan diğerine küçük bir elektrik alan yaratılır. Akıma paralel yönde ve dik yönde olmak üzere iki voltaj ölçülür. Hiç manyetik alan yokken akıma dik yöndeki voltaj farkı sıfırdır. İlk olarak 1879'da Edwin Hall numuneye dik bir manyetik alan uygulanırsa bir voltaj farkı oluştuğunu gözledi. Bu voltaj farkı uygulanan manyetik alanla doğru orantılıdır. Akıma paralel yöndeki voltaj farkı ise manyetik alandan bağımsız olup aynı kalır. Her iki voltaj farkı da numuneden geçen akımla doğru orantılıdır ve bu voltaj farkını geçen akıma bölersek bu oran Hall direncini (Hall katsayısı) verir. Katkılama yapılan yarıiletkenlerin taşıyıcı yoğunluğunu bulmak için Hall katsayısı kullanılır. Manyetik alanların ölçümünde kullanılan Hall problemlerinin yapımında daha küçük taşıyıcı yoğunluğu ve böylece daha büyük Hall etkisine sahip olmasından dolayı yarıiletkenleri kullanmak elverişlidir.

Son yıllarda iki ve daha düşük boyutlu elektron sistemleri yoğun olarak çalışılmış daha önce görülemeyen, tamamen kuantum mekaniksel olgulara dayanan tam ve kesirli Kuantum Hall olayları gibi yeni olgular deneysel olarak düşük boyutlu sistemler sayesinde gözlenmiştir. Bu ve benzeri olayların gözlenebilmesi için elektron gazının elektrik ve manyetik alanlar altındaki özellikleri incelenmiştir. 1980'de Klaus Von Klitzing Max Planck enstitüsü yüksek manyetik alan laboratuvarında çalışırken bugün tam sayılı Kuantize Hall etkisi (Integral Quantized Hall Effect, IQHE) olarak bilinen bir olguyu gözlemledi ve bu olgu kendisine 1985 Nobel Fizik Ödülü'nü kazandırdı. İki yıl sonra da başka bir araştırma

laboratuvarında kesirli Kuantize Hall etkisi (Fractional Quantized Hall Effect, FQHE) olarak bilinen bir etki gözlemlendi. Bu etkiler genel olarak aynı olmasına rağmen oldukça farklı açıklamalara sahiptir. Klitzing 1980'de yaptığı deneyde alan etkili transistör (FET) kullanmıştır. Bu aygıtta silikon bir taban ile üstte bulunan metal bir kontakt ince bir yarıiletken malzeme ile birbirinden ayrılmıştır. Metal kontakta uygulanan voltaj elektronları ince tabakaya çeker. Herhangi bir transistör basit olarak bir anahtar gibi görülebilir. Yapıya bir elektrik alan uygulanarak akım yolu açılır ve bir elektrottan diğerine akım geçişi sağlanır. Akım akışını durdurmak için elektrik alan kesilir. İki boyutlu sistemlerin elektronik ve optik özelliklerinin detaylı bir incelemesi için bkz. (Ando, 1982; Bastard, 1988; Shik, 1997).

Kesirli Kuantize Hall etkisinin ilk gözlemlendiği eleman bir heteroeklemdir. Bu etki Störmer, Tsui ve Laughlin tarafından keşfedilmiş ve sahiplerine 1998 yılında Nobel Fizik Ödülü'nü kazandırmıştır. Kesirli Kuantum Hall etkisi elektronların toplu şekilde davranışlarının önceden bilinmeyen yönlerini ortaya koymuş ve bu keşifle teorik katı hal fiziği yeni bir yön kazanmıştır. Störmer, Tsui ve Laughlin'in bu çalışması bizim mikroskobik kuantum etkilerini anlamamızı sağlamıştır. Hall etkisinde Hall direnci manyetik alanla doğrusal olarak artmaz ve bir takım düzlükler (platolar) oluşur. Kesirli Kuantum Hall etkisinde kesirli sayılarla ifade edilen ek düzlükler vardır. Bir başka deyişle manyetik alanın değişimine rağmen Hall direncinin değişmediği aralıklar oluşur. Böyle platolarda Hall direnci oldukça düzdür. Buna ek olarak aynı aralıkta akıma paralel yöndeki voltaj değişimi tamamen ortadan kalkar. Yani numunede hiç elektriksel direnç olmaz ve akım bir uçtan diğerine enerji kaybetmeden akar.

Elektriksel direncin yok olması ve Hall direncindeki platolar dikkate değer olgulardır. Bu platolar $\rho_T = \frac{h}{ie^2} = \frac{25812.8\Omega}{i}$ (i : tamsayı) gibi basit ve temel sabitler cinsinden ifade edilebilir bir denkleme karşılık gelir. Her düzlük farklı bir tamsayı ile karakterize edilir. Hall etkisinin en ilginç yanı kesinlik derecesidir. Farklı tamsayı platolarındaki Hall direncinin ölçülen değerleri temel sabitlerin bilinen hassasiyet sınırı olan 6 milyonda 1 mertebesi civarındadır. Hall direncinin değerleri farklı tamsayılarla çarpılmış olmasına rağmen aynı değere eşittir. Hall direncindeki bu

kesinlik normal koşullarda bilindiği üzere numunenin geometrisine, üretilirken geçirdiği evrelere, içerdiği safsızlık miktarına hassas derecede bağlıdır. Kuantize Hall etkisi numunenin geometrisinden, numuneyi oluşturan malzemedan, üretilirken geçirdiği evrelerden, tüm mikroskobik detaylardan ve hatta malzemenin içerdiği safsızlıklardan bağımsızdır. Silikon alan etkili transistör, GaAs heteroyapısı, InGaAs gibi farklı numunelerde yapılan ölçümler Kuantum Hall etkisi için aynı sonucu

vermektedir. Bu değer $R_0 = \frac{h}{e^2} = 25812.8 \text{ Ohm} \cong 25k\Omega$ mertebesindedir. Aynı

değerlere sahip bir tel direnci bir de Kuantum Hall direnci olsun. Kristalleşmenin değişimi, gerilimin değişmesi gibi nedenlerle tüm tel dirençler zamanla değişmektedir. Bu değişimler negatifte pozitifte olabilir. Oysa Kuantum Hall direncinin kararlılığı (stabilitesi) yatay bir çizgi ile verilir. Tüm bu nedenlerden dolayı Kuantum Hall direncinin kararlı ve yeniden üretilebilir bir direnç olduğu konusunda anlaşma sağlanmış ve 1990'dan bu yana Uluslararası referans direnç olarak kullanılmaya başlanmıştır (hassasiyet mertebesi $\approx 2 \times 10^{-8}$). Bu uygulama süper iletkenlikle yapılan Josephson etkisine çok benzerdir. Bazı mikrodalgalarla süper iletkenler radyasyona maruz bırakılırsa bir voltaj ölçülür. Bu voltaj frekansa (çok iyi bilinir) ve temel sabitlere (e, h) bağlıdır. Bir 'Volt' belirli bir frekansta Josephson Voltajı olarak adlandırılır. Bu 1978'de voltaj için yeni bir referans olarak kabul edilmiştir. Bugün akım Uluslararası referans olarak 1948'de iki tel arasındaki kuvvet olarak tanımlanmıştır. İki telden geçen akım 1 Amper ise aralarında 1 metre uzaklık bulunan bu iki tel için kuvvet belirli bir değer ($2 \times 10^{-7} \text{ N/m}$) olmalıdır. Bu tanımın bir sonucu olarak manyetik kuvvet $\mu = 4\pi 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$ değerine sabitlenmiştir. Fakat bu çok zor bir deneydir ve bu yolla 1 Amper'deki değişimin belirsizliği çok büyük olur. Bu deneyi temel alan bir tanım 10^{-6} dan daha küçük bir belirsizlik ortaya koyamaz. Bu tanımın yerine Klitzing Josephson etkisi ve Kuantum Hall etkisinin birleştirilmesiyle oluşmuş yeni bir tanım önermiştir. Klitzing'in önerdiği tanıma göre Josephson etkisi h/e ile Kuantum Hall etkisi ise h/e^2 ile verilir. Kuantum Hall elemanında I akımı h/e^2 ifadesine bağlı bir voltaj üretirken Josephson aygıtı ν mikrodalgası ile ısıtılarak bir voltaj üretir. Eğer bu voltajlar aynı ise akım için $I = e \cdot \nu$ biçiminde yeni bir tanım kullanılabilir. Kuantum Hall direncinin diğer bir

uygulaması ince yapı sabitidir. α ince yapı sabitinin ölçülmesinde 10^{-8} civarında bir kesinlik verdiği için Kuantum Hall etkisinin e^2/h değeri referans olarak kabul edilmiştir.

2.5. Kuantum Kuyu Yapıları Ve Süperörgüler

Şekil 2.2(i)'de görülen bir potansiyel içinde bulunan bir elektron iki yolla kullanılabilir. Daha küçük bant aralıklı materyalde elektronlar heteroekleme sağdan yanaştıklarında yansıtılarak küçük bant aralıklı materyal bölgesine sınırlandırılır. Daha geniş aralıklı materyaldeki elektronlar daha yüksek bir potansiyel enerjidedir ve soldan heteroekleme yanaştıklarında, arayüzeyde bir elektrik alanla ivmelenirler ve potansiyel enerjideki fark kinetik enerjiye dönüşür. Böylece elektronlar heteroekleme dik yönde ani bir ivme kazanırlar. Bugün heteroeklem aygıtlarının büyük bir performans ortaya koyabilmeleri için bu iki özellikten yararlanılmaktadır (Harris, 1990). Birden fazla heteroeklem kuyu veya engel oluşturmak için üst üste büyütülerek farklı amaçlar için kullanılabilir. Bu amaç için oluşturulmuş bir engel potansiyelinde engeller arasındaki geçiş, engel kalınlıkları ve uygulanan bir elektrik alanla değiştirilebilir. Böylece bir yarıiletken elemanda taşıyıcı geçişinin kontrolü olanaklı hale gelir. Birden fazla heteroeklem kuyu oluşturmak için birleştirildiğinde kuyu içinde sınırlandırılmış bir elektron için enerji durumları kesikli (kuantize) olur ve heteroyapıya dik yöndeki momentumun izin verilmiş değerleri üzerinde sınırlamalar vardır. Bir kuantum kuyusundaki enerji düzeylerinin önemi; transistör benzeri aygıtlardaki hareketli elektronların geçişinin kontrol edilmesinde ve optik elemanların yapımında kullanılabilir olmasından kaynaklanır.

GaAs ve GaAlAs katmanlarının bir çoğunu içeren bir sistemi göz önüne alalım. Alaşım katmanları yeterince kalın ($>100 \text{ Å}$) ise herbir GaAs kuyusunda sınırlandırılmış durumdaki dalga fonksiyonları, diğerleriyle örtüşme (overlap) yapabilecek kadar engeli aşamaz böylece taşıyıcılar kuyudan kuyuya serbest hareket edemezler ve lokalize olarak kalırlar. Kuyular arasındaki uzaklık yeterince büyük olduğundan her kuyu bağımsız olarak düşünülebilir. Böyle yapılar çoklu kuantum kuyu yapıları olarak adlandırılabilir. Bu yapıların elektronik özellikleri, herbir kuyu

için elde edilen sonuçların bir süperpozisyonu olarak elde edilir ve yeni düzey yoktur.

Alaşım katmanları daha dar olursa, komşu kuyulardaki dalga fonksiyonları örtüşmeye başlar. Örtüşmeden dolayı sistemdeki elektron bir kuyudan diğerine serbestçe hareket edebilir. Kuyular arasındaki örtüşme sıkı bağlanma modeli geçerli olacak şekilde yeterince küçük ise ve yapı periyodik olarak kendini tekrar ediyorsa böyle oluşturulmuş kuantum kuyuları süperörgü olarak adlandırılır. Kuyular arasındaki alışım katmanlarının kalınlığı çok azaltılırsa sıkı bağlanma modeli uygulanamaz ve yaklaşık serbest elektron modeli kullanılır.

Kuantum kuyuları ve süperörgüler pratik uygulamalar için ilk iyi tanımlanmış mikroyapılardır ve bant yapı mühendisliğinin anahtar fikirlerinin kurulmasında bir araç görevi görmüşlerdir. Elektronik aygıtlarda yarıiletken mikroyapıların ilk uygulamasını transistörler oluşturur. Elektronik endüstrisinde sık kullanılan transistörlerden biri çift kutuplu (bipolar) transistör diğeri alan etkili transistördür (Sze, 1985). Çift kutuplu transistörler çoğunlukla bilgisayarların merkezi işlem birimlerinin temel elemanları olarak kullanılırlar. Bu eleman, makinenin veri denetimi ve işlemlerini yapan bölümüdür. Alan etkili transistörler ise temel olarak bilgisayarların belleğinin oluşturulmasında kullanılırlar.

Örgü titreşimlerinin (fonon saçılmaları) önlenemediği düşük sıcaklıklarda, elektron saçılmalarının temel kaynağı (bunun sonucu olarak elektron akışının azalmasının temel kaynağı) safsızlıkların varlığıdır. Katkı malzemeli taşıyıcılar olmadan yarıiletken bir malzeme elektronik aygıtlarda kullanılamayacağından, katkı malzemeli taşıyıcıların varlığı yarıiletken için kaçınılmazdır. Bu katkı malzemeleriyle oluşan elektron çarpışmalarından korunmak için “modulation doping” prensibi geliştirilmiştir. Bu prensibin özü elektron akımını şekil 2.3’te görüldüğü gibi katkı safsızlıklarının bulunduğu bölgeden aktif bir kanalla ayırmak şeklinde ifade edilebilir. Bu aygıt daha önce belirtildiği üzere yüksek elektron mobiliteli transistör (HEMT) olarak adlandırılır (Capasso, 1987). Çok küçük bir aygıtta anahtar hızının belirlenmesinde aygıt bileşenlerinin tasarımı, materyal kalitesi ve yerdeğiştirme katmanının yere bağlı yapısıyla elde edilen potansiyel şekli gibi birçok parametre gözönüne alınmalıdır.

Pek çok çalışmada silikon ara yüzey tabakalarında elektron mobilitesi incelenmiştir. Çünkü inversiyon tabakalarda etkin elektron mobilitesi aygıt karakteristiğini belirlemede önemli bir rol oynamaktadır. Yani bir aygıt üretilmeden önce elektron mobilitelerinin tahmin edilmesi aygıtın göstereceği performansı bilmek açısından önemlidir.

GaAs/ Al_xGa_{1-x} As heteroeklemde oluşan iki boyutlu bir elektron gazı için düşük sıcaklık mobilitesi Al_xGa_{1-x} As tabakasında bulunan iyonize olmuş donörlerden kaynaklanan Coulomb saçılması, Al_xGa_{1-x} As tabakasındaki mevcut alaşım düzensizliklerinden kaynaklanan saçılmalar ve yüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılmalar göz önüne alınmıştır. Ara yüzey pürüzlülüğü ve alaşım saçılmalarının yüksek elektron yoğunluklarında ($\sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) etkin bir rol oynayabileceği gösterilmiştir (Ando, 1982). MOSFET'lerde ara yüzey pürüzlülük saçılmasının elektron mobilitesine etkisinin ele alındığı bir çalışmada buruşuk yüzey saçılmasının elektron mobilitelerini indirgediği görülmüştür (Yamakawa, 1996).

Çift kuyulu bir Si-SiGe yapısında ara yüzeyde hareket kabiliyeti olan elektronların ara yüzey boyunca taşınımı ve mobilitesi Monte Carlo yöntemi ile Crow ve Abram (1999) tarafından çalışılmış, düşük sıcaklıklarda (77 K) daha dar kuantum kuyularında meydana gelen mobilite azalmasının yüzey pürüzlülüğünden ve Coulomb saçılmasından kaynaklandığı bulunmuştur.

İlk yarıiletken lazerler yüksek oranda katkılanmış p-n eklemlilerden elde edilmiştir. Ancak bu aygıtlar düşük performansa sahip olduğundan dolayı yarıiletken heteroeklem lazerler kullanılmaktadır. Heteroeklem lazerlerde elektron geçişlerinden dolayı oluşan ışınının dalga boyu, orta tabakanın genişliği (GaAs) ve engel yüksekliğinin uygun seçimiyle ayarlanabilir.

Diğer etkiler göz önüne alınmadan, basit olarak, bant aralığında elektronlardan dolayı rasgele fotonlar oluşuyorsa böyle bir sistem ışık yayıcı diyod (Light Emitting Diode-LED) olarak adlandırılır (Bergh, 1976). Bu kendiliğinden olan yayılım hemen hemen tek renkli fakat uyumcul değildir. LED yapısı diğer yapılara göre daha basit olup maliyeti ucuz olan bir yapıdır.

Burada anlatılan yapıların dışında elektronik olarak üretilen optik sinyallerin dönüştürülmesi ve taşınması amacıyla fotodetektörler ve fiber optik kablolar

kullanılır. Fotodetektörler değişik yollarla üretilen optik sinyalleri elektrik akımına çevirebilmek amacıyla kullanılır. Fotodiyodların performansı; düşük gürültü, hassaslık, yüksek kazanç ve cevap verme hızı gibi parametrelerle ölçülür (Capasso, 1987). Günümüzde modern bilgi teknolojisinin temelini oluşturan fiber optik dalga kılavuzları ışık ışınını kablonun (fiber) merkezinde tuzaklayarak kilometrelerce uzağa taşıyabilir. Fiberdeki ışık ışını ile olan etkileşimin derecesi, fiberin yapımında kullanılan silikonun mikroskobik ve fiziksel özelliklerine bağlıdır (Jaros, 1989).



3. TEORİK ALT YAPI

3.1. Taşıyıcı Saçılması ve Fermi'nin Altın Kuralı

Tam çözümü yapılabilen ve zamandan bağımsız H_0 Hamiltonyeni ile temsil edilen bir sistem göz önüne alalım. E_k enerji öz değerleri olmak üzere zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$H_0 \Psi_k(\vec{r}) = E_k \Psi_k(\vec{r}) \quad (3.1)$$

şeklinde yazılabilir. Ψ_k durumlarının zamana bağıllığı

$$\Psi_k^0(\vec{r}, t) = \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t / \hbar} \quad (3.2)$$

ile verilir ve bu fonksiyon aslında

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k^0(\vec{r}, t)}{\partial t} = H_0 \Psi_k^0(\vec{r}, t) \quad (3.3)$$

ile verilen zamana bağlı Schrödinger dalga denkleminin çözümüdür. Sisteme zamana bağlı bir H' pertürbasyonunun etki ettiğini varsayalım. Bu durumda sistemin toplam Hamiltonyeni ve zamana bağlı Schrödinger denklemi sırası ile

$$H = H_0 + \lambda H' \quad (3.4)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (H_0 + \lambda H') \Psi(\vec{r}, t)$$

olacaktır. Burada λ pertürbasyon yaklaşıklığının derecesini takip etmek için kullanılan bir parametredir ve işlemlerin sonunda bire eşitlenecektir. Pertürbasyon yoksa λ sıfırdır. H' pertürbasyonunun H_0 'a göre küçük olduğu varsayılmıştır.

$\Psi_k^0(\vec{r}, t)$ fonksiyonlar kümesi tam ortonormal bir set oluşturduğundan dolayı pertürbe olmuş sistemin çözümü, $\Psi_k^0(\vec{r}, t)$ 'nin lineer bir kombinasyonu olarak alınabilir. Bu durumda

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k C_k(t) \Psi_k^0(\vec{r}, t) = \sum_k C_k(t) \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (3.5)$$

yazılabilir. Bu çözüm Schrödinger dalga denkleminde yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= (H_0 + \lambda H') \Psi(\vec{r}, t) \\ i\hbar \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial t} \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} + i\hbar \sum_k C_k(t) \Psi_k(\vec{r}) \left(\frac{-iE_k}{\hbar} \right) e^{-iE_k t/\hbar} &= (H_0 + \lambda H') \sum_k C_k(t) \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} \end{aligned} \quad (3.6)$$

olduğu görülür. Bu denklem yeniden düzenlenirse

$$i\hbar \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial t} \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} = \lambda \sum_k H' C_k(t) \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (3.7)$$

elde edilecektir. C_k 'ya göre birinci mertebeden olan bu denklemler Schrödinger dalga denklemini ile aynı biçimdedir. Ayrıca eğer $\Psi(\vec{r}, t)$ normalize ise bu özellik kullanılarak

$$1 = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) dV = \int \left(\sum_{k'} C_{k'}^* \Psi_{k'}^* e^{iE_{k'} t/\hbar} \right) \left(\sum_k C_k \Psi_k e^{-iE_k t/\hbar} \right) dV \quad (3.8)$$

yazılabilir.

$$\int \Psi_{k'}^* \Psi_k(\vec{r}) dV = \delta(k, k') \quad (3.9)$$

ifadesi kullanılarak

$$\sum_k |C_k(t)|^2 = 1 \quad (3.10)$$

elde edilir. Burada $|C_k(t)|^2$ sistemin t zamanında pertürbe olmamış k durumunda bulunma olasılığıdır. Bunun yanında

$$\begin{aligned} \int \Psi_{k'}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) dV &= \int \sum_k C_k \Psi_{k'}^*(r) \Psi_k(r) e^{-iE_k t/\hbar} dV \\ &= C_{k'}(t) e^{-iE_{k'} t/\hbar} \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$C_{k'}(t) = e^{iE_{k'} t/\hbar} \int \Psi_{k'}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) dV$$

ifadesinin karesi alınırsa Dirac bra-ket notasyonuna göre olan aşağıdaki sonuç elde edilir

$$|C_{k'}(t)|^2 = \left| \langle \Psi_{k'}(\vec{r}) | \Psi(\vec{r}, t) \rangle \right|^2 \quad (3.12)$$

Şimdi $C_k(t)$ için bir eşitlik bulmak amacıyla (3.7) numaralı denklem $\Psi_{k'}^* e^{iE_{k'} t/\hbar}$ ile çarpılarak hacim üzerinden integrali alınırsa

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}}{\partial t} = \lambda \sum_k \langle k' | H' | k \rangle C_k(t) e^{i(E_{k'} - E_k) t/\hbar} \quad (3.13)$$

elde edilir. Buradaki Dirac bra-ket notasyonu

$$\langle k' | H' | k \rangle = \int \Psi_{k'}^* H' \Psi_k dV \quad (3.14)$$

olarak yazılabilir. Zayıf bir pertürbasyon için $C_k(t)$ 'deki değişiminde yavaş olması beklenir. $C_k(t)$ λ için kuvvet serisi olarak açılırsa

$$C_k(t) = C_k^{(0)}(t) + \lambda C_k^{(1)}(t) + \lambda^2 C_k^{(2)}(t) + \dots \quad (3.15)$$

olur. Bu açılım 3.13 diferansiyel denkleminde yerine konulursa

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \frac{\partial C_{k'}^{(0)}}{\partial t} + \lambda \frac{\partial C_{k'}^{(1)}}{\partial t} + \lambda^2 \frac{\partial C_{k'}^{(2)}}{\partial t} + \dots \right\} \\ = \lambda \sum_k \langle k' | H' | k \rangle (C_k^{(0)} + \lambda C_k^{(1)} + \lambda^2 C_k^{(2)} + \dots) e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar} \end{aligned} \quad (3.16)$$

elde edilir. λ 'ya göre katsayıları aynı olan terimler eşitlenebilir

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}^{(0)}}{\partial t} = 0 \Rightarrow C_{k'}^{(0)}(t) = \text{sabit} \quad (3.17)$$

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}^{(1)}}{\partial t} = \sum_k \langle k' | H' | k \rangle C_k^{(0)}(t) e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar}$$

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}^{(2)}}{\partial t} = \sum_k \langle k' | H' | k \rangle C_k^{(1)}(t) e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar}$$

$\vdots$

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}^{(n)}}{\partial t} = \sum_k \langle k' | H' | k \rangle C_k^{(n-1)}(t) e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar} \quad (3.18)$$

zayıf bir etkileşim olduğu varsayılırsa sadece birinci mertebeden olan terimi almak yeterlidir. Başlangıç koşulu olarak sistemin k_i durumunda olduğu varsayılırsa $C_{k_i}^{(0)}(0)$ dışında kalan tüm terimler sıfır olur yani

$$\begin{cases} C_{k_i}^{(0)}(0) = 1 \\ C_k^{(0)}(0) = 0, k \neq k_i \text{ ise} \end{cases} \quad (3.19)$$

ve

$$C_k^{(1)}(0) = 0 \quad \text{tüm } k \text{ değerleri için} \quad (3.20)$$

olarak yazılabilir. Sadece birinci mertebeden pertürbasyonu göz önüne alacağımızdan dolayı $C_k^{(1)}(t)$ teriminde üst indis atılarak basitçe $C_k(t)$ yazılabilir. $C_k(t)$ için birinci mertebeden diferansiyel denklem aşağıdaki gibi olur

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}(t)}{\partial t} = \langle k' | H' | k_i \rangle \underbrace{C_{k_i}^{(0)}(t)}_{\text{sabit}=1} e^{i(E_{k'} - E_{k_i})t/\hbar} \quad (3.21)$$

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}(t)}{\partial t} = \langle k' | H' | k_i \rangle e^{i(E_{k'} - E_{k_i})t/\hbar} \quad (3.22)$$

H'_0 zamandan bağımsız olmak üzere aşağıdaki gibi harmonik bir pertürbasyon göz önüne alınabilir

$$H' = H'_0 e^{\pm i\omega t} \quad (3.23)$$

H' gerçek olduğundan artı ve eksi işaretlerden her ikisini de almalıyız. Karmaşık (kompleks) bir $z=x+iy$ sayısı için

$$x = \frac{1}{2}(z + z^*) \quad \text{ve} \quad y = \frac{1}{2i}(z - z^*) \quad (3.24)$$

yazılabilir böylece

$$H' = H'_0 \sin wt = H'_0 [e^{iwt} - e^{-iwt}] / 2i$$

$$H' = H'_0 \cos wt = H'_0 [e^{iwt} + e^{-iwt}] / 2$$
(3.25)

olur. Bu harmonik potansiyel denklem (3.22)'de kullanılır ve $u = \frac{E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega}{2\hbar}$ dönüşümü yapılırsa

$$C_{k'}(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle k' | H'_0 | k_i \rangle e^{iut} \left(\frac{\sin(ut)}{ut} \right) t$$
(3.26)

elde edilir. Bir elektronun t zamanında $\vec{k}'$ durumunda bulunma olasılığı $|C_{k'}(t)|^2$ ile verilir. O zaman birim zamandaki geçiş olasılığını veren geçiş oranı aşağıdaki gibidir

$$S(\vec{k}_i, \vec{k}') = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|C_{k'}(t)|^2}{t}$$
(3.27)

$$S(\vec{k}_i, \vec{k}') = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|\langle k' | H'_0 | k_i \rangle|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin(ut)}{ut} \right)^2 t$$
(3.28)

t sonsuza giderken $\left(\frac{\sin(ut)}{ut} \right)^2$ fonksiyonu $u=0$ civarında Dirac-delta fonksiyonuna benzer bir maksimum verir ve değerinin π/t olduğu burada kullanılabilir. Buna göre zaman sonsuza giderken $\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin(ut)}{ut} \right)^2$ fonksiyonu yerine $\frac{\pi}{t} \delta(u)$ ifadesi kullanılabilir. O zaman

$$S(k_i, k') = \frac{|\langle k' | H'_0 | k_i \rangle|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\pi}{t} \delta(u) \right) t \quad (3.29)$$

$$S(k_i, k') = \frac{\pi}{\hbar^2} |\langle k' | H'_0 | k_i \rangle|^2 \delta \left(\frac{E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar \omega}{2\hbar} \right) \quad (3.30)$$

elde edilir. $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ özelliği kullanılırsa

$$S(k_i, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k' | H'_0 | k_i \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar \omega) \quad (3.31)$$

sonucuna ulaşılır. Bu eşitlik “Fermi’nin Altın Kuralı” olarak bilinir. Bu denklem, yarıiletkenlerde taşıyıcılara uygulanacak olan saçılma teorisinin temel bir sonucudur. Eşitlikte görülen delta fonksiyonu basitçe enerjinin korunumu olarak açıklanabilir ve bu eşitlik saçılma zayıf ise geçerlidir. Delta fonksiyonundaki artı işareti ($E_{k'} = E_{k_i} - \hbar \omega$) yayınımlı, eksi işareti ise ($E_{k'} = E_{k_i} + \hbar \omega$) soğurulmayı gösterir. Bu çıkarımda tüm k' son durumlarının boş olduğu varsayılmıştır. Bazı durumlar dolu olabilir, o zaman bu varsayım geçerli olmaz. Bu etkinin hesaba katılabilmesi için çıkarımda durum yoğunluğunun kullanılması gerekir. Yani son durumlara bağlı enerjiler için durum yoğunluğu $D(\epsilon_{k'})$ değerinin bilinmesine ihtiyaç vardır. O zaman elde edilebilir durumların sayısı $D(\epsilon_k)(1 - f(\epsilon_k))$ olur, parantez içindeki ifade durumların boş olma olasılığını verir. Fermi’nin Altın Kuralı’nın uygulanabilmesi için saçılma potansiyelinin tanımlanması gerekir. Böylece Dirac bra-ket notasyonunda gösterilen terim hesaplanabilir. Mutlak değer içindeki ifade matris elemanı olarak bilinir. Yarıiletkenlerdeki elektronlar için pertürbe olmamış durumun dalga fonksiyonları, Bloch dalgalarıdır. Bu probleme daha yakından bakabilmek için H'_0 pertürbe olmamış potansiyelin yere bağlı kısmı Fourier serisine açılabilir

$$H'_0 = \sum_q U_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad , \quad -\infty \leq q \leq \infty \quad (3.32)$$

Burada U_q açılım katsayısıdır. Gerçek bir potansiyel için $(H'_0)^* = (H'_0)$ olmalıdır bu ancak $U_q^* = U_{-q}$ veya $U_{-q}^* = U_q$ durumlarında gerçekleşir. Şimdi matris elemanlarını hesaplamak için Bloch dalgaları kullanılabilir

$$\Psi_k(r) = U(r) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (3.33)$$

$U(r)$ örgü periyodikliği R 'ye eşit periyodik bir fonksiyondur. Bundan başka $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$ olduğundan $\Psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \Psi_k(\vec{r})$ yazılabilir. Bloch dalgası matris elemanı içinde kullanılırsa

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \int U_{k'}^* e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \sum_q U_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} U_k(r) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dV \quad (3.34)$$

$$= \sum_q U_q \int U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) e^{i(\vec{q} - \vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{r}} dV \quad (3.35)$$

yazılabilir. Yukarıdaki integral kristal hacmi üzerinden alınmalıdır. Ancak $\vec{r}$ 'nin her bir i hücresi için $\vec{R}_i$ ile yer değiştirmesi yapılabilir, $U_k(\vec{r} + \vec{R}) = U_k(\vec{r})$ olduğundan dolayı integrale bu terimlerden herhangi bir katkı gelmez.

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \sum_q U_q \int \sum_{\text{hücre } \vec{R}_i} U_{k'}^*(\vec{r} + \vec{R}_i) U_k(\vec{r} + \vec{R}_i) e^{i(\vec{q} - \vec{k}' + \vec{k}) \cdot (\vec{r} + \vec{R}_i)} dV \quad (3.36)$$

Burada R üzerinden olan toplama $R=0$ dahil tüm olası öteleme vektörlerini içerir.

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \sum_q U_q \int \sum_{\text{hücre } \vec{R}_i} U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) e^{i(\vec{q} - \vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{q} - \vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{R}_i} dV \quad (3.37)$$

Denklemden $\sum_{R_i} e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{R}_i} = N \delta(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})$ ifadesi kullanılabilir (Ashcroft, 1976) ve

R üzerinden olan toplam integral dışına alınabilir

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \sum_q U_q \sum_{R_i} e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{R}_i} \int_{hücre} U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{r}} dV \quad (3.38)$$

burada N ilkel hücre sayısıdır.

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \sum_q U_q N \int_{hücre} U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) \delta(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k}) e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{r}} dV \quad (3.39)$$

$$= U_{\vec{k}-\vec{k}} \int_{hücre} U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) dV \quad (3.40)$$

Bu denklemde N normalizasyon sabitinin içine yerleştirilmiştir yani

$U_k \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} U_k(\vec{r})$ ile yer değiştirilmiştir. Parabolik bantlar için her bir ilkel hücre

üzerinden alınan bu integral yaklaşık olarak bire eşittir. Etkin kütle yaklaşımına göre yaklaşık parabolik olarak kabul edilen bantlar için Bloch dalga fonksiyonları düzlem dalgalarla yer değiştirebilir. Yani matematiksel olarak $U_k(r)$ yerine bir sabit alınabilir ve parabolik bantlar için m yerine m^* kullanılmalıdır. Buna göre parabolik bantlar için

$$I(k', k) \equiv \int U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) dV = 1 \quad (3.41)$$

ifadesi üst üste binme (overlap) integrali olarak bilinir. Denklem (3.32) kullanılarak açılım katsayıları hesaplanabilir, bunun için

$$H'_0 = U(r) = \sum_q U_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (3.42)$$

ifadesinde her iki taraf $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$ ile çarpılarak hacim üzerinden integral alınırsa

$$\int U(r) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r = \sum_q U_q \underbrace{\int_V e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}} dV}_{\delta(q,q')} \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} \int U(r) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r &= V \sum_q U_q \delta(q,q') \\ &= V U_{q'} \end{aligned} \quad (3.44)$$

olur. Hacim $V=\Omega$ olmak üzere

$$U_q = \frac{1}{\Omega} \int U(r) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV \quad (3.45)$$

$$U_{k'-k} = \frac{1}{\Omega} \int U(r) e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} dV \quad (3.46)$$

$$U_{k'-k} = \frac{1}{\Omega} \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} U(r) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \quad (3.47)$$

yazılabilir. Bu sonuç ile parabolik bantlar için bulunan $I(k',k)=1$ sonucu denklem (3.40)'ta kullanılırsa

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \frac{1}{\Omega} \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} U(r) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \quad (3.48)$$

sonucu elde edilir.

Fermi'nin Altın Kuralı olarak bilinen eşitlik (3.31)'deki $S(\vec{k}, \vec{k}')$ tüm $\vec{k}'$ son durumları üzerinden integre edilerek saçılma oranı $W(k)$ elde edilebilir. Ters örgü

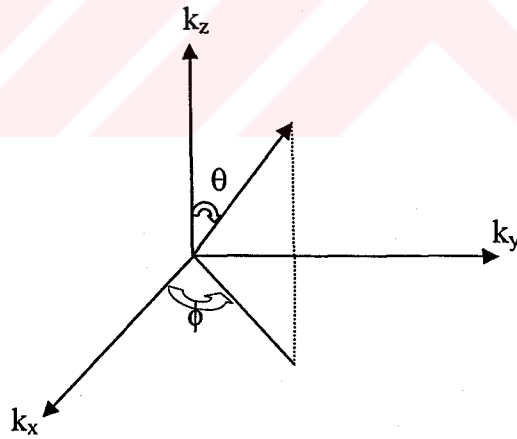
uzayındaki bir $d\vec{k}'$ hacmindeki durumların sayısı $\frac{(2\pi)^3}{\Omega}$ biçimindedir (Kittel, 1996)

buna göre saçılma oranı

$$W(\vec{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' , \quad d\vec{k}' = k'^2 \sin \vartheta d\vartheta d\phi dk' \quad (3.49)$$

$$W(\vec{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} S(\vec{k}, \vec{k}') k'^2 \sin \vartheta dk' d\vartheta d\phi \quad (3.50)$$

olarak elde edilir. Burada yer alan açılar şekil 3.1'de gösterilmiştir.



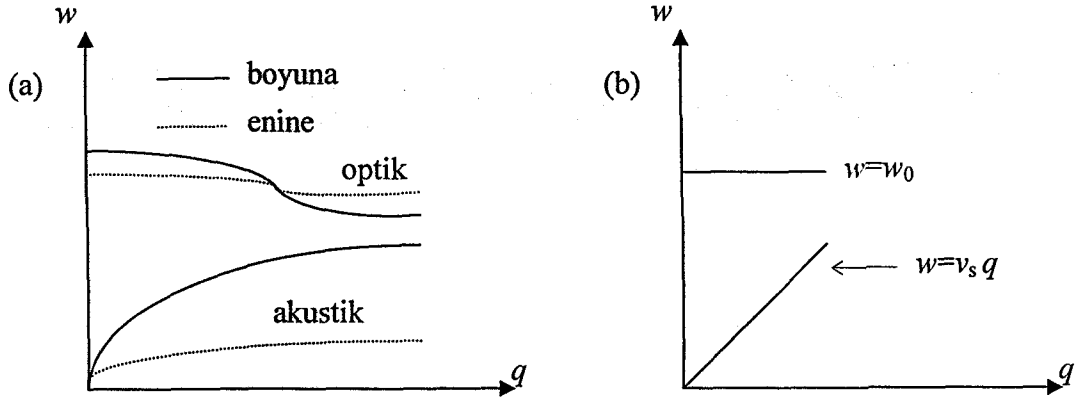
Şekil 3.1. Açılarının seçimi

3.2. Örgü Titreşimleri

Yarıiletkenlerde oluşan saçılmaların çoğu örgü titreşimlerinden kaynaklanır. Bundan dolayı bu tür saçılmaların temel özelliklerinin anlaşılması gerekir. Bir atom denge noktasından uzaklaştırılırsa bağ kuvvetleri onu geri dönmeye zorlar. Böylece denge noktası civarında bir salınım ortaya çıkar. Örgü dalgaları periyodik bir ortamda ilerlediğinden dolayı, Bloch dalgalarının özelliklerine çok benzer özellikler ortaya koyarlar. Bloch elektronları kusursuz bir kristaldeki öz durumları verir, bu elektronlar kristali oluşturan iyonların periyodik dizilimiyle oluşmuş periyodik potansiyel tarafından saçılıma uğratılmazlar. Buna rağmen kristal potansiyelinin periyodikliği çok çeşitli nedenlerle bozulduğundan, kristalde ilerleyen elektronlar örgü titreşimlerinden dolayı saçılıma uğrarlar. Kristaldeki bir iyonun küçük bir yer değiştirmesi kristal potansiyelinde küçük bir değişime neden olur, periyodiklikteki bu değişim yada bozulma teorik olarak örgü titreşimlerinin genliği ile açıklanabilir. Bununla birlikte kristal potansiyelinin kendisini bilmek zor olduğundan dolayı periyodiklikteki bu sapma “deformasyon potansiyel metodu” olarak adlandırılan fenomenolojik (olgusal) bir yolla açıklanır. Örgü titreşimlerinin dalga doğası “fonon” olarak kuantize edildiğinden dolayı örgü titreşimlerinin elektron hareketine etkisi “elektron-fonon etkileşimi” olarak adlandırılan bir kuantum yöntemi yardımıyla açıklanabilir.

Elektron-fonon etkileşimi yarıiletken aygıtlardaki baskın saçılma mekanizmalarından birisidir. Böyle küçük ölçekteki aygıtlardaki taşıyıcılar, yüksek elektrik alan uygulanarak, daha yüksek enerji düzeylerine çıkarılabilirler. Bu nedenle fononların kendiliğinden yayınımini temel alan saçılmalar, düşük sıcaklıklarda bir kaç fonon olsa bile oluşabilirler.

Akustik ve optik olarak adlandırılan iki çeşit fonon modu vardır. Akustik moddaki fononlar ses dalgaları gibidir ve bu modda komşu atomlar aynı yönde hareket ederler. Optik fononlarda (bu titreşimler ışıkla güçlü biçimde etkileşime girdiğinden dolayı bu ismi almıştır) komşu atomlar birbirine zıt yönde hareket



Şekil 3.2. (a) Kübik yarıiletkenlerde ilerleyen elastik dalgalar için tipik dağınım bağıntısı (b) Boyuna örgü titreşimleri Brillouin bölgesi civarında olduğu zaman kullanışlı olan basitleştirilmiş dağınım bağıntısı.

ederler. Akustik ve optik fonon saçılmaları, örgü titreşimlerini bant enerjilerindeki değişimle ilişkilendiren deformasyon potansiyeli yardımıyla açıklanabildiğinden dolayı, deformasyon potansiyel saçılması olarak adlandırılırlar.

Şekil 3.2’de, silikon ve galyum arsenür benzeri kübik yarıiletkenlerdeki elastik dalgalar için tipik bir dağınım bağıntısı (w ’ya göre q ’nun değişimi) grafiği görülmektedir. Üçü akustik modlara ve üçü optik modlara karşılık gelen altı çeşit elastik dalga vardır. Akustik modlardan biri boyuna akustik (longitudinal acoustic-LA) diğer ikisi enine (transverse acoustic-TA) akustiktir. Boyuna dalgalar için atomlar ilerleme yönünde yer değiştirirler. Atomların enine yer değiştirdiği enine modlar kübik silikon ve GaAs için dejeneredir. Şekil 3.2’de abartılı olarak çizilmiş olan optik modlar için dağınım bağıntısı gerçekte dalga vektörüne göre küçük bir değişim gösterir. Elektronlar optik fononlar tarafından saçılarak aynı vadede kalırlarsa dağınım bağıntısı için w_0 bir sabit olmak üzere $w(q) = w_0$ yaklaşıklığı kullanılabilir. Brillouin bölgesi civarındaki küçük q değerleri için dağınım bağıntısı lineer (doğrusal) görünmektedir ve v_s ses hızı olmak üzere aşağıdaki gibi yazılabilir

$$w(q) = v_s q \quad (3.51)$$

Şekil 3.2'deki sağ taraftaki grafik akustik ve optik modlar için basitleştirilmiş dağılım bağıntısını göstermektedir ve çoğunlukla saçılma hesaplarında bu ifadeler kullanılmaktadır.

Örgü titreşimleri harmonik salınıcının titreşimlerine çok benzer olduğundan dolayı her bir normal modun enerjisi de aşağıdaki gibi kuantize edilmelidir

$$E_q = \hbar\omega(q) \left(N_q + \frac{1}{2} \right) \quad (3.52)$$

Enerji kuantumu fonon olarak adlandırılan bir parçacık olarak görüldüğünden, fononların sayısı Bose-Einstein faktörü ile bulunabilir

$$N_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega(q)/k_B T} - 1} \quad (3.53)$$

$k_B T_L \gg \hbar\omega(q)$ için bu faktör aşağıdaki gibi yazılabilir

$$N_q \approx \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega(q)}{k_B T_L} - 1} = \frac{k_B T_L}{\hbar\omega(q)} \quad (3.54)$$

burada T_L örgü sıcaklığıdır. Bu sonuç eş bölüşüm ilkesi olarak bilinir ve akustik fononlar için çok küçük sıcaklıklar dışında genellikle doğrudur. $k_B T_L$ (oda sıcaklığında 26 meV) termal enerjiyi gösterirken $\hbar\omega_q$ (yaklaşık 0.1-0.3 meV) fonon enerjisini gösterir.

Akustik ve optik deformasyon potansiyeli saçılmasına ek olarak bağların polar (kutuplu) doğasından dolayı bileşik yarıiletkenlerde güçlü bir etkileşme daha oluşabilir. Fononlardan dolayı oluşan örgüdeki yer değiştirmeler atomlar arasındaki dipol momentini bozar, bunun sonucunda oluşan elektrik alan taşıyıcıların saçılmasına neden olur. Polar saçılmalar, akustik veya optik fononlardan dolayı oluşabilir bunlarda sırasıyla piezoelektrik ve polar optik saçılma olarak adlandırılır. Polar optik saçılma bileşik yarıiletken yapılarıdaki taşıyıcılar için baskın saçılma mekanizmasıdır.

3.3. Akustik Fonon Saçılması

Akustik fonon saçılmasına ait saçılma oranlarının bulunabilmesi için önce denklem 3.14'deki matris elemanının hesaplanması gerekir. Matris elemanının hesabında ilk adım saçılmadan sorumlu olan pertürbasyon (tedirginme) potansiyelini tanımlamaktır. Bir yarıiletkenin bant yapısı kristal potansiyeli tarafından belirlendiğinden dolayı, potansiyel örgü uzaklıklarındaki değişimlerden etkilenir. Basınç altındaki bir yarıiletkenin iletim bant kıyısında periyodik değişimler oluşur, bu nedenle örgü sabitinde de periyodik değişimler oluşur. Bundan dolayı elektronun potansiyel enerjisi konuma bağlıdır ve $E_c(\vec{r}, t) - E_0^0 = \delta E_c$ elektron-iyon etkileşimine neden olan pertürbasyon potansiyelidir. Burada D değeri deneysel olarak bulunan deformasyon potansiyel sabiti olmak üzere

$$\delta E_c = \frac{\partial E_c}{\partial V} \delta V = V \frac{\partial E_c}{\partial V} \frac{\delta V}{V} = D \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \quad , \quad D \equiv V \frac{\partial E_c}{\partial V} \quad (3.55)$$

yazılabilir.

Bir kristalde titreşen atomlar, normal mod salınımlarının süperpozisyonu (üst üste binmiş hali) olarak tanımlanabilir. Her bir normal mod, bağımsız bir harmonik salınıcı gibi salınım yapar ve kuantize edilebilir. Fonon olarak adlandırılan bu son kuantalar, sırasıyla a_q^+ ve a_q yaratma ve yok etme operatörleri yardımıyla yaratılıp yok edilebilirler. t zamanında $\vec{r}$ noktasındaki örgüdeki yer değiştirme aşağıdaki gibi tanımlanabilir (Tomizawa, 1993; Ashcroft, 1976)

$$u(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(\frac{\hbar}{2m\omega_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (3.56)$$

burada normal mod salınımı, ρ materyalin yoğunluğu, Ω kristalin hacmi olmak üzere süreklilik limiti yardımıyla yazılabilir;

$$\rho = \frac{mN}{\Omega} \quad (3.57)$$

$$u(\vec{r}, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (3.58)$$

burada $\hat{e}_q$ birim polarizasyon vektörü, q dalga vektörü, w_q salınımın açısal frekansı, N kristaldeki atom sayısıdır. Denklem 3.51 akustik fononlar için uzun dalga boyu limitinde ($q \rightarrow 0$) tanımlanmıştı. Denklemdeki $v_s = \sqrt{\frac{C_L}{\rho}}$ ses hızıdır ve C_L boyuna titreşimler için materyalin elastiklik sabitidir. Akustik fononlar için pertürbasyon potansiyeli denklem 3.55'te tanımlanmıştı. Sadece boyuna akustik fononların saçılmaya neden olduğu bir durum aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = i\vec{q} \cdot \vec{u} = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q \cdot \vec{q} (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (3.59)$$

$$\hat{e}_q \cdot \vec{q} = \begin{cases} 0 & \text{enine salınımları için} \\ \neq 0 & \text{boyuna salınımlar için} \end{cases} \quad (3.60)$$

Polarizasyon vektörü dalga vektörüne paralel olarak alınırsa ($\hat{e}_q \cdot \vec{q} = q$) akustik fononlar için pertürbasyon potansiyeli

$$H' = \sum_q i q D \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_q} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (3.61)$$

olur.

Elektronlar için saçılmadan önce ve sonra, serbest elektron (düzlem dalga) çözümleri kullanılabilir. Yaratma ve yok etme operatörlerinin $n_q \pm 1$, n_q durumları arasındaki matris elemanları sıfırdan farklı değerler alır burada n_q fonon sayısıdır.

$$\text{Fonon durumları} \quad |q\rangle = \prod_q |n_q\rangle \quad (3.62)$$

dalga fonksiyonları ve elektron durumları için

$$\text{Elektron durumları} \quad |k\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (3.63)$$

dalga fonksiyonları kullanılır ve fononlar için aşağıdaki matris özellikleri kullanılırsa

$$\begin{aligned} \langle n' | a | n \rangle &= 0 \quad n' \neq n-1 \\ \langle n-1 | a | n \rangle &= \sqrt{n} \\ \langle n+1 | a^+ | n \rangle &= \sqrt{n+1} \end{aligned} \quad (3.64)$$

denklem (3.14)'deki matris elemanları (verilen pertürbasyon potansiyeli kullanılarak) hesaplanabilir (Shankar, 1980). Gerekli işlemlerden sonra

$$\langle k', n_q \mp 1 | H' | k, n_q \rangle = iqD \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_q} \right)^{1/2} \begin{cases} \sqrt{n_q} \delta(\vec{k}' - \vec{k} - q) \\ -\sqrt{n_q + 1} \delta(\vec{k}' - \vec{k} + q) \end{cases} \quad (3.65)$$

elde edilir. Burada her bir denklemdeki delta fonksiyonu, elektron-fonon etkileşimi sırasında kristal momentumunun korunduğunu gösterir. Bu sonuç, soğurulma ve yayılım işlemleri birleştirilerek Fermi'nin altın kuralında yerine konulursa akustik fononlar için aşağıdaki geçiş oranı elde edilir

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{D^2 q^2 \hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_q) \quad (3.66)$$

Denklemdaki iki delta fonksiyonu enerji ve momentumun korunumunu ifade eder, artı işareti fonon soğurulması ve eksi işareti fonon yayılımını göstermek üzere aşağıdaki gibi iki denklem yazılabilir

$$E_{k'} = E_k \pm \hbar\omega_q \quad (3.67)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (3.68)$$

Parabolik ve küresel enerji bantları için enerjinin korunumu,

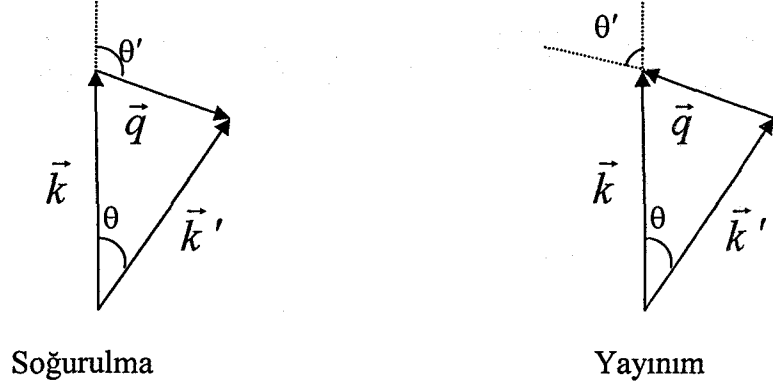
$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar\omega_q \quad (3.69)$$

şeklindedir. Momentumun korunumu kullanılarak $\vec{k}'$ denklemde yerine konulursa, iki ayrı delta fonksiyonu tek bir delta fonksiyonuna dönüştürülebilir:

$$\delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_q) = \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq \cos\theta'}{m^*} \mp \hbar\omega_q\right) \quad (3.70)$$

burada θ' şekil 3.3'te gösterildiği gibi k ve q arasındaki polar açıdır. Son delta fonksiyonu düzenlenirse, açı ile fonon dalga vektörü arasında aşağıdaki gibi bir ilişki elde edilir

$$\cos\theta' = \frac{1}{2} \left(\pm \frac{q}{k} + \frac{\hbar\omega_q}{E_k} \frac{k}{q} \right) \quad (3.71)$$



Şekil 3.3. Polar açının tanımlanması

Bu aynı zamanda fononların açisal frekansı, momentumu ve enerjisini temel alan momentum durumları arasındaki açıdır.

Denklem (3.70)'deki delta fonksiyonu kullanılarak geçiş oranı aşağıdaki gibi yazılabilir

$$S(k, k') = \frac{\pi D^2 q^2}{\rho \Omega w_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar w_q \right) \quad (3.72)$$

Akustik fonon enerjisi $\hbar w_q$ oda sıcaklığındaki $k_B T$ enerjisinden çok küçük olduğundan dolayı, eş bölüşüm ilkesi kullanılabilir. Böylece akustik fonon saçılması elastik (enerjide değişim yok $\hbar w_q = 0$) olarak kabul edilebilir. Bu yaklaşıklıklar altında geçiş oranı aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir

$$S(k, k') = \frac{\pi D^2}{\hbar C_L \Omega} \frac{k_B T_L}{E_k} \left(\frac{k}{2q} \right) \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta' \right) \quad (3.73)$$

Bu sonucun k' üzerinden integrali alınarak saçılma oranı bulunabilir

$$W(k) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(k, k') d^3 \vec{k}' \quad (3.74)$$

Belirli bir $\vec{k}$ değeri için $d\vec{k}' = d\vec{q}$ alınabilir;

$$W(k) = \frac{\Omega}{8\pi^3} \frac{\pi D^2}{\hbar C_L \Omega} \frac{k_B T_L}{E_k} \frac{k}{2} \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d^3 \vec{q} \quad (3.75)$$

q üzerinden olan integral polar koordinatlarda aşağıdaki gibi yazılabilir

$$I_q = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) q^2 \sin\theta' d\theta' d\phi dq \quad (3.76)$$

ϕ üzerinden olan integral son derece açıktır ve $\cos\theta'$ üzerinden olan integral δ -fonksiyonundan dolayı alınabilir. Denklem (3.71)'deki $\cos\theta'$, -1 ile +1 arasında sınırlandırılmış olduğundan dolayı, q üzerinden olan integralde $q_{\min}$ ve $q_{\max}$ arasında sınırlıdır. $\hbar\omega_q = 0$ olarak alınmış olduğundan dolayı q integralinin sınırları aşağıdaki gibi verilir

$$\begin{aligned} q_{\min} &= 0 \\ q_{\max} &= 2k \end{aligned} \quad (3.77)$$

Bu sonuçlar kullanılarak integral aşağıdaki gibi yazılabilir

$$I_q = 2\pi \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} q dq = \pi(q_{\max}^2 - q_{\min}^2) = 4\pi k^2 \quad (3.78)$$

Böylece saçılma oranı

$$W(k) = \frac{\pi D^2 k_B T_L}{\hbar C_L} D(\epsilon_k) \quad (3.79)$$

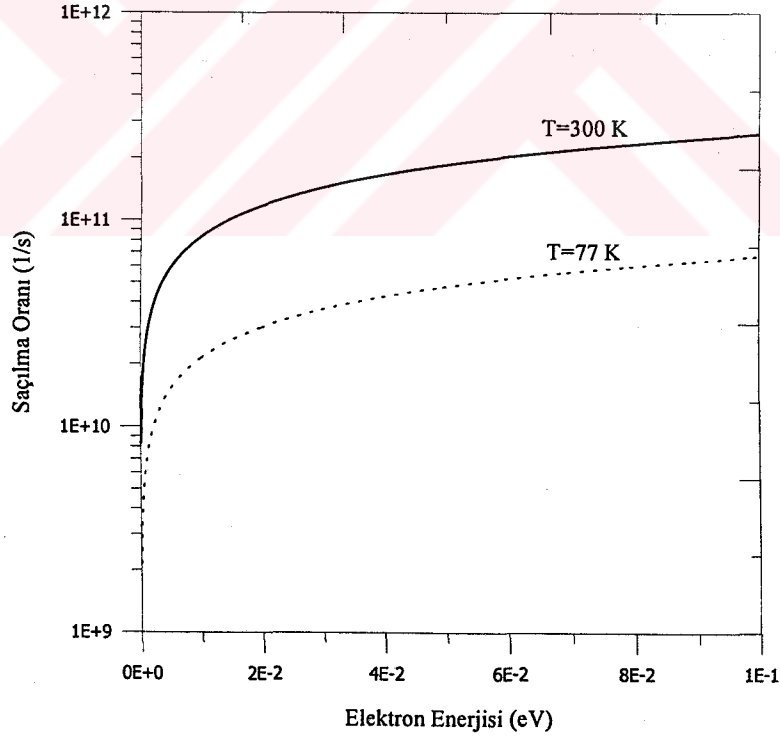
olur. Burada $D(\epsilon_k)$ durum yoğunluğu olup aşağıdaki gibi verilir

$$D(\epsilon_k) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_k} \quad (3.80)$$

Saçılma oranı soğurulma ve yayılım işlemlerinin toplamı olduğundan dolayı toplam saçılma oranının bulunması için sonucun 2 ile çarpılması gerekir

$$W(k) = \frac{2\pi D^2 k_B T_L}{\hbar C_L} D(\epsilon_k) \quad (3.81)$$

Şekil 3.4 elektron enerjisine göre üç boyutlu fonon saçılma oranının $T=77$ K ve $T=300$ K değerleri için denklem 3.81 kullanılarak elde edilmiş bir sonucunu göstermektedir. Saçılma oranı elektron enerjisi ile artmaktadır çünkü saçılma oranı elektron enerjisinin artışı ile birlikte monoton bir artış gösteren durum yoğunluğuna bağlıdır.



Şekil 3.4. $T=77$ K ve $T=300$ K değerleri için üç boyutlu akustik fonon saçılması oranı

3.3.1. İki Boyutlu Elektron Gazında Akustik Saçılma

Denklem 3.14'deki matris elemanları uygun bir şekilde hesaplanabilirse iki boyutlu elektron gazındaki saçılma oranları bulunabilir. İntegral birincisi x - y düzlemi, diğeri z -düzlemi olacak şekilde iki bölüme ayrılarak hesaplamalar kolaylaştırılabilir. Fonon saçılması için elektronlarla etkileşen fonon modları üç boyutlu varsayılmıştır. Bundan dolayı akustik fononlar için denklem (3.61)'de verilen etkileşim Hamiltonyeni kullanılabilir. z -yönünde sınırlandırılmış olan elektronlar için iki boyutlu dalga fonksiyonu

$$\Psi(\vec{r}) = \psi_n(z) e^{i\vec{k}_p \cdot \vec{r}_p} \quad (3.82)$$

ile verilir. r_p^2 ($\vec{r}^2 - z^2$) ve k_p^2 ($\vec{k}^2 - k_z^2$) pozisyon vektörünün karesi alınmış bileşenleridir ve dalga vektörü x - y yönündedir. Saçılma oranının hesaplanması için öncelikle matris elemanı bulunmalıdır,

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle &= \int_{\Omega} \psi_k^*(\vec{r}) H' \psi_k(\vec{r}) d\vec{r}_p dz \\ &= \int_{\Omega} \psi_n(z) e^{i\vec{k}_p' \cdot \vec{r}_p} H' \psi_m(z) e^{i\vec{k}_p \cdot \vec{r}_p} d\vec{r}_p dz \end{aligned} \quad (3.83)$$

burada k ve k' çarpışmadan önceki ve sonraki elektron dalga vektörleridir.

Akustik fonon saçılması için integral sırasıyla r_p' ve z gibi iki fonksiyonun çarpımı olarak yazılabildiğinden r_p' ve z üzerinden olan integralleri almak kolaydır. Denklem (3.61)'de verilen etkileşim Hamiltonyeni yukarıda yerine yazılırsa

$$\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle = i \left(\frac{D^2 k_B T_L}{C_L \Omega} \right)^{1/2} G_{m,n}(q_z) \delta(\vec{k}' - \vec{k}_p \mp \vec{q}_p) \quad (3.84)$$

olur. Burada δ -fonksiyonu x ve y 'ye göre olan integralden gelir ve x - y düzlemindeki momentumun korunumunu gösterir. δ -fonksiyonundaki üst işaret soğurulmayı alttaki işaret ise yayınımlı gösterir. Fonon matris elemanının hesabında ortaya çıkan n_q yerine, eş bölüşüm ilkesinin geçerli olduğu varsayılarak $k_B T_L / \hbar \omega_q$ kullanılmıştır. $G_{m,n}(q_z)$ terimi sınırlandırılmış yöndeki (z -yönü) matris elemanını gösterir ve aşağıdaki gibi yazılabilir

$$G_{m,n}(q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(z) e^{iq_z z} \psi_m(z) dz \quad (3.85)$$

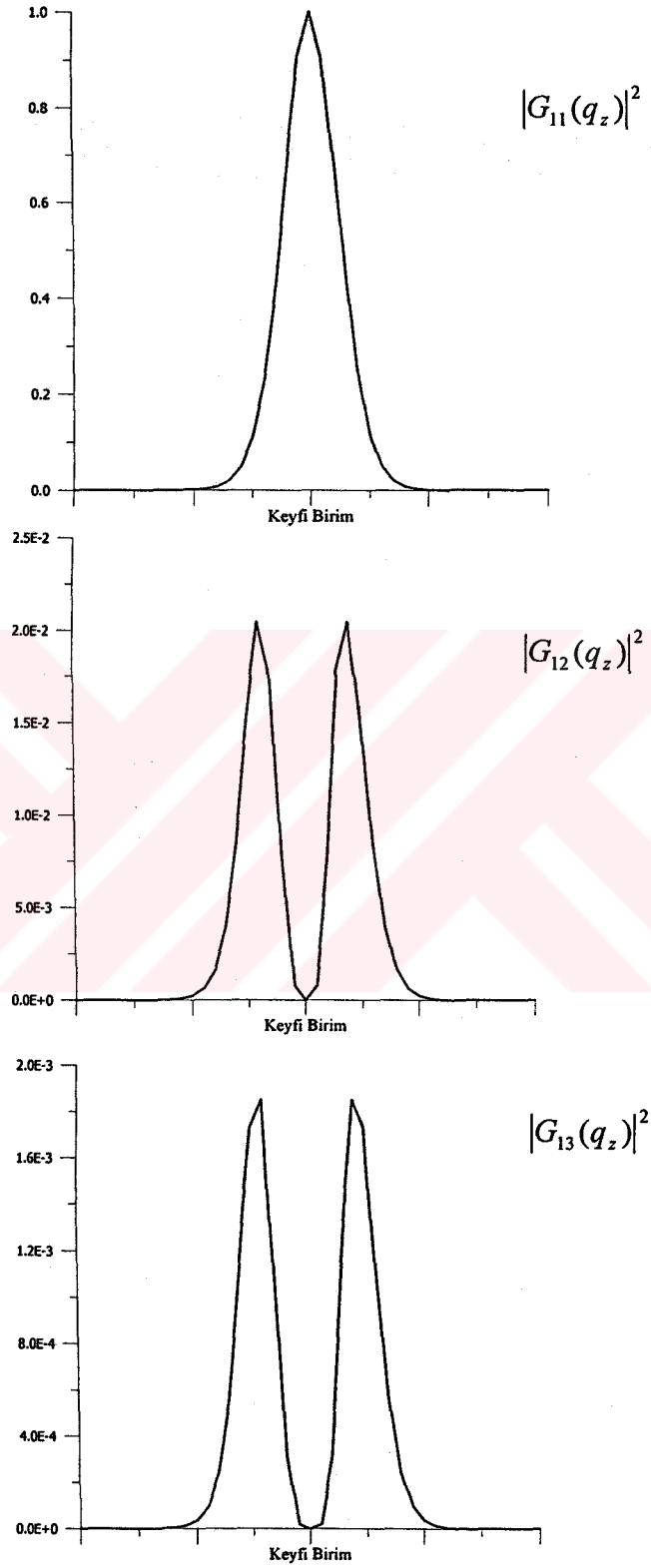
Dalga fonksiyonu belirli bir bölgenin dışında etkin olarak sifıra gidiyorsa z -yönündeki integral sınırının $\pm \infty$ 'a kadar alınmasına gerek yoktur. Şekil 3.5 $|G_{mn}(q_z)|^2$ elemanlarını göstermektedir. Sınırlandırılmış yöndeki (z -yönü) $G_{mn}(q_z)$ teriminin en büyük değerinin $m=1$ ve $n=1$ değerlerinde olduğu açıkça görülmektedir. Matris elemanının karesinin alınabilmesi için kompleks eşleniği ile çarpılması gerekir.

$$\left| \langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle \right|^2 = \frac{D^2 k_B T_L}{C_L \Omega} |G_{m,n}(q_z)|^2 \delta(\vec{k}' - \vec{k}_p \mp \vec{q}_p) \quad (3.86)$$

Hesaplanan matris elemanının karesi kullanılarak aşağıdaki eşitlik yardımıyla saçılma oranı bulunabilir

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \iiint \left| \langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle \right|^2 \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar \omega_0) dq_z q_p d\theta \quad (3.87)$$

burada akustik fononlar için $\hbar \omega_0$ fonon enerjisinin sıfır olduğu varsayılmıştır. Enerji ve momentum korunumu göz önüne alınarak, olası son durumlar üzerinden integral hesaplanırsa, m 'ninci alt banttan n 'inci alt banda olan saçılma oranı aşağıdaki gibi elde edilir



Şekil 3.5. $|G_m(q_z)|^2$ girişim terimleri. Yatay eksen keyfi birim olarak alınmış q_z değerlerini göstermektedir.

$$W_{m \rightarrow n}(k) = \frac{2\pi D^2 k_B T_L}{\hbar C_L} \phi(m, n) D_{2D}(\epsilon) \quad (3.88)$$

burada görülen $\phi(m, n)$ aşağıdaki gibi yazılır,

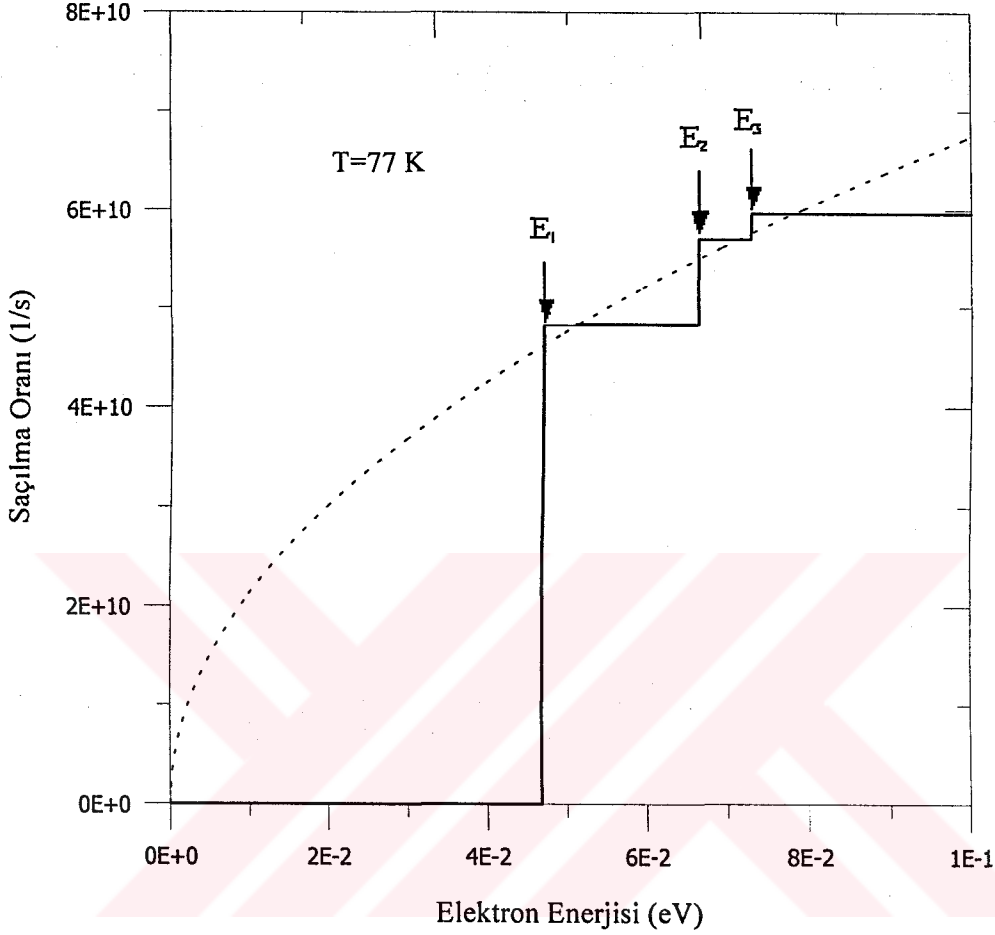
$$\phi(m, n) = \int_{-q_{z \max}}^{q_{z \min}} |G_{m,n}(q_z)|^2 dq_z \quad (3.89)$$

ve n 'inci alt bandın durum yoğunluğu ise

$$D_{2D}(\epsilon) = \frac{m^*}{2\pi \hbar^2} \quad (3.90)$$

ile verilir.

İki boyutlu elektron gazı (2DEG) için elde edilen saçılma oranı üç boyutlu elektron gazındaki (3DEG) saçılma oranına çok benzerdir, en önemli fark iki boyutlu elektron gazındaki $\phi(m, n)$ ifadesidir. Denklem (3.89)'da görüldüğü gibi $\phi(m, n)$ alt bant dalga fonksiyonları ile ilişkilidir. Alt bant dalga fonksiyonları uygun bir şekilde normalize edilmişse $\phi(m, n)$ 'in değeri bir mertebesindedir. Bundan dolayı 2DEG için elde edilen saçılma oranlarının toplamının 3DEG için bulunan saçılma oranından çok farklı olmaması beklenir. AlGaAs/GaAs arayüzeyindeki iki boyutlu elektron gazının akustik fonon saçılma oranı şekil 3.6'da gösterilmiştir. Çözüm yapılırken denklem 3.88'de görülen $G_{mn}(q_z)$ terimindeki dalga fonksiyonları için kendi içinde uyumlu hesaplardan elde edilen sonuçlar kullanılmıştır. Burada hesaplanan E_1 , E_2 ve E_3 enerji özdeğerleri sırasıyla 46, 66.2 ve 72.8 meV olarak bulunmuştur. İki boyutlu elektron gazında durum yoğunluğunun keskin bir şekilde arttığı alt bant enerji düzeylerine karşılık gelen enerjilerde saçılma oranının basamak benzeri bir artış gösterdiği açıkça görülmektedir.



Şekil 3.6. AlGaAs/GaAs heteroyapısında oluşan iki boyutlu elektron gazının akustik saçılma oranı. Sürekli çizgi iki boyutlu saçılma oranını, kesikli çizgi üç boyutlu saçılma oranını gösterir. E_1 , E_2 ve E_3 altbant enerji düzeylerini gösterir.

3.4. Polar Optik Fonon Saçılması

Boyuna örgü titreşimleri GaAs, InP gibi iyonik yarıiletkenlerde polarizasyon dalgalarının oluşmasına neden olurlar. Polarizasyon dalgaları, elektronlarla güçlü biçimde etkileşerek, elektronların polar saçılmaya uğramasına neden olur. Polar saçılmalar, akustik yada optik fononlardan dolayı oluşabilir. Polar akustik fonon saçılması *piezoelektrik saçılma* olarak bilinir. Bu saçılma çok saf yarıiletkenlerde ve oldukça düşük sıcaklıklarda etkin olup, oda sıcaklığında son derece önemsizdir.

Polar optik fonon saçılması çok güçlü olup oda sıcaklığında bileşik yarıiletkenler için baskın saçılma mekanizmasıdır. Bu bölümde polar optik fononlardan kaynaklanan saçılmanın hesabı yapılacaktır.

Polarizasyon pozitif ($\vec{u}_+$) ve negatif ($\vec{u}_-$) iyonların göreceli yer değiştiğiyle ($\vec{u} = \vec{u}_+ - \vec{u}_-$) orantılıdır. Bir dış elektrik alan yokken pozitif ($\vec{u}_+$) ve negatif ($\vec{u}_-$) iyonlar için hareket denklemi aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\begin{aligned} M_+ u_+'' &= -k(u_+ - u_-) \\ M_- u_-'' &= -k(u_- - u_+) \end{aligned} \quad (3.91)$$

$\vec{u} = \vec{u}_+ - \vec{u}_-$ ifadesinde iki tarafın ikinci türevi alınarak yukarıdaki denklemler yerleştirilirse

$$u'' = -\frac{k}{M_R} u, \quad \frac{1}{M_R} = \frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-} \quad (3.92)$$

olur. M_R pozitif ve negatif iyonların indirgenmiş kütlesi, N iyon çiftlerinin sayısı ve

$w_0^2 = \frac{k}{M_R}$ olmak üzere ikinci derece denklemin çözümü aşağıdaki gibi olur

$$\begin{aligned} \vec{u}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(\frac{\hbar}{2M_R w_0} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &= \sum_q \left(\frac{\hbar}{2NM_R w_0} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \end{aligned} \quad (3.93)$$

Atomik polarizasyon ve yer değiştirme polarizasyonu olarak iki tip polarizasyon vardır. Atomik polarizasyon uygulanan tüm dış frekanslar için vardır ve morötesi bölgenin üstündeki frekanslarda, frekanstan bağımsızdır. Elektronik

kabuğun titreşim frekansının bir üst sınırı vardır ve dış alan frekansı bu değer civarında olmadığı sürece, polarizasyon frekanstan bağımsız olacaktır. Yer değiştirme polarizasyonunun w_0 rezonans frekansı Debye frekansı (w_D) civarındadır ($\hbar w_D \approx 0.1-0.01$ eV) ve atomik kabuk frekansından 10^2-10^3 kez daha küçük olabilir. Bundan dolayı yerdeğiştirme polarizasyonu kızıl ötesi ve optik bölgede önemli bir frekans bağıllığına sahiptir. Fakat bu frekansların üstünde yerdeğiştirme polarizasyonu uygulanan alana tepki vermeyecektir. Sonuç olarak κ_s ve κ_∞ şeklinde iki optik sabit tanımlanmıştır. Birincisi statik (veya düşük frekans) dielektrik sabiti olup uygulanan frekansın $w \ll w_0$ aralığında olduğu değerlerde (atomik titreşimler) geçerlidir. Diğer uygulanan frekansın $w \gg w_0$ değerleri için geçerli olup yüksek frekans dielektrik sabiti olarak bilinir.

İyonların görelî hareketiyle ortaya çıkan $\vec{P}$ polarizasyonu dielektrik yer değiştirme $\vec{D}$ 'ye aşağıdaki gibi katkıda bulunur

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_{iyon} + \vec{P} \quad (3.94)$$

burada ϵ_0 boşluğun dielektrik sabiti, $\vec{E}$ elektrik alan, $\vec{P}_{iyon}$ iyonların kendilerinden kaynaklanan (görelî yer değiştirmeden değil) polarizasyonun yarattığı dipol momenti ve $\vec{P}$ ise görelî yer değiştirmeye bağılı olup aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\vec{P} = \frac{e^* N}{\Omega} (\vec{u}_+ - \vec{u}_-) = \frac{e^* N}{\Omega} \vec{u} \quad (3.95)$$

$\vec{P}_{iyon}$ 'un ϵ_∞ ile $\epsilon_\infty \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_{iyon}$ ilişkisi kullanılarak

$$\vec{D} = \epsilon_\infty \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_\infty \vec{E} + \frac{e^* N}{\Omega} \vec{u} \quad (3.96)$$

yazılabilir. Boyuna elastik dalgalara bağılı dielektrik yer değiştirmenin değişimi

$\vec{D} = D \hat{e}_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$ ve polarize yükler için $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0$ ifadeleri kullanılırsa

$$i\vec{q} \cdot \vec{D} = 0 \quad (3.97)$$

olur sıfırdan farklı q 'lar için $\vec{D} = 0$ olması gerektiğinden denklem (3.96)'da $\vec{D} = 0$ kullanılırsa

$$\vec{E} = -\frac{N e^* \vec{u}}{\Omega \epsilon_\infty} \quad (3.98)$$

bulunur, böylece elektrostatik potansiyel

$$U(\vec{r}) = -\int \vec{E} \cdot d\vec{r} = \frac{N e^*}{\Omega \epsilon_\infty} \int u(\vec{r}) \cdot d\vec{r} \quad (3.99)$$

$$U(\vec{r}) = \frac{N e^*}{\Omega \epsilon_\infty} \sum_q \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_0} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^+) \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{e}_q \cdot d\vec{r} \quad (3.100)$$

olur. Burada

$$I_q = \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{e}_q \cdot d\vec{r} \quad (3.101)$$

olarak yazılabilir. $\hat{e}_q$ polarizasyon yönü ile $\vec{q}$ yer değiştirmesi aynı yöndedir buna göre

$$U(r) = -i \frac{e^* N}{\Omega \epsilon_\infty} \frac{1}{q} u(r) \quad (3.102)$$

olur. Burada etkin yük e^* Fröhlich (Tomizawa, 1993) tarafından

$$e^* = \left(\frac{\Omega M}{N} \right)^{1/2} w_0 \epsilon_\infty \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right)^{1/2} \quad (3.103)$$

şeklinde tanımlanmıştır.

Elektronun polar optik fononlarla etkileşim potansiyeli olan H' pertürbasyon Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi olur

$$H' = -eU(\vec{r}) = \frac{ie e^* N}{\Omega \epsilon_\infty q} u(r) \quad (3.104)$$

$$H' = \sum_q i \frac{e}{q} \left(\frac{\hbar w_0}{2 \epsilon_p \Omega} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (3.105)$$

burada $1/\epsilon_p = 1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s$ 'dir. Akustik fonon saçılmasına benzer biçimde bu sonuç kullanılarak polar optik fononlar için kare matris elemanı aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\left| \langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle \right|^2 = \frac{e^2 \hbar w_0}{2 \epsilon_p \Omega} \frac{1}{q^2} \left[n(w_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \quad (3.106)$$

Geçiş oranı Fermi'nin altın kuralı kullanılarak bulunabilir

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi e^2 w_0}{\epsilon_p \Omega} \frac{1}{q^2} \left[n(w_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_k - E_{k'} \mp \hbar w_0) \quad (3.107)$$

iki delta fonksiyonu birleştirilir ve denklemin olası son durumlar üzerinden integrali alınırsa, saçılma oranı elde edilebilir

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi e^2 w_0}{\epsilon_p \Omega \left[n(w_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right]} \times \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{q^2} \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar w_0 \right) d^3 \vec{q} \quad (3.108)$$

Fonon momentumu q ve taşıyıcının başlangıç ve son durumları daha önce şekil 3.3'te gösterilmiştir. Delta fonksiyonunu düzenlemek için fonksiyonun içi $2m^*/\hbar^2$ parantezine alınıp $\delta(ax) = \delta(x)/a$ eşitliği kullanılırsa

$$W(\vec{k}) = \frac{m^* e^2 w_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)^2} \int \frac{1}{q^2} \delta \left(q^2 \pm 2kq \cos \theta' \mp \frac{2m^* w_0}{\hbar} \right) d^3 \vec{q} \quad (3.109)$$

olur. Burada $P' = \frac{1}{\epsilon_p} \left[n(w_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right]$ biçiminde tanımlanmıştır. İntegrali polar koordinatlarda yazarsak birim hacim $q^2 dq \sin \theta' d\theta' d\phi$ şeklinde olur buna göre

$$W(\vec{k}) = \frac{m^* e^2 w_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)^2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{q^2} \delta \left(q^2 \pm 2kq \cos \theta' \mp \frac{2m^* w_0}{\hbar} \right) \times q^2 dq \sin \theta' d\theta' d\phi \quad (3.110)$$

yazılabilir. İntegral ϕ 'den bağımsız olduğundan ϕ üzerinden olan integralden sadece 2π gelir. Buna göre,

$$W(\vec{k}) = \frac{m^* e^2 w_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{1}{q^2} \delta \left(q^2 \pm 2kq \cos \theta' \mp \frac{2m^* w_0}{\hbar} \right) q^2 dq \sin \theta' d\theta' \quad (3.111)$$

olur. İntegralin başındaki sabitlere bir isim verilirse

$$Y' = \frac{m^* e^2 w_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)} \quad (3.112)$$

ve ilk adımda integral sadece soğurulma olayı (δ -fonksiyonunda üstteki işaret) için yazılırsa

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1}{q^2} \delta\left(q^2 + 2kq \cos \theta' - \frac{2m^* w_0}{\hbar}\right) q^2 dq \sin \theta' d\theta' \quad (3.113)$$

olur. Hagston, Piorek ve Harrison'un yaklaşımları takip edilerek (Harrison, 2000) δ -fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir

$$(q - \alpha_1)(q + \alpha_2) = q^2 + (\alpha_2 - \alpha_1)q - \alpha_1 \alpha_2 \quad (3.114)$$

buradaki α_1 ve α_2 sabitleri gerçekte ve pozitifdir, buna göre $\alpha_1 \alpha_2$ çarpımı negatif olmalıdır. Fonon dalga vektörü k sıfırdan büyük olmak zorunda olduğundan δ -fonksiyonuna tek bir katkı gelir

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^\pi \int_0^\infty \delta((q - \alpha_1)(q + \alpha_2)) dq \sin \theta' d\theta' \quad (3.115)$$

$q = \alpha_1$ civarındaki çözüm için $(q + \alpha_2)$ sabit olup $\delta(ax) = \delta(x)/a$ kuralına göre δ -fonksiyonu dışına alınabilir

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1}{q + \alpha_2} \delta(q - \alpha_1) dq \sin \theta' d\theta' \quad (3.116)$$

q üzerinden integral alındığında

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^{\pi} \frac{1}{\alpha_1 + \alpha_2} \sin \theta' d\theta' \quad (3.117)$$

olur. Denklem (3.115)'e göre $0 < \theta' < \pi/2$ için $\alpha_2 > \alpha_1$ ve $\pi/2 < \theta' < \pi$ için $\alpha_1 > \alpha_2$ biçimindedir. q için kuadratik denklem

$$q^2 + 2kq \cos \theta' - \frac{2m^* w_0}{\hbar} = 0 \quad (3.118)$$

biçimindedir ve bu denklemin çözümü

$$q = -k \cos \theta' \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.119)$$

olarak yazılabilir. Böylece denklemin iki ayrı çözümü aşağıdaki gibi olur,

$$q = -k \cos \theta' + \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.120)$$

ve

$$q = -k \cos \theta' - \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.121)$$

α_1 pozitif köke (q) ve α_2 negatif köke ($-q$) karşılık gelir böylece bu ikisinin toplamı,

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 2\sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.122)$$

biçimindedir. Bu sonuç denklem (3.117)'de yerine konulursa

$$W(k) = Y' \int_0^{\pi} \frac{1}{2\sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}}} \sin \theta' d\theta' \quad (3.123)$$

olur. Böylece problem θ' üzerinden tek bir integrale dönüşür, bu integrali alabilmenin bir yolu yeni bir değişkenle uygun bir dönüşüm yapmaktır

$$\varphi = -k \cos \theta' + \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.124)$$

integral sınırları

$$\varphi_{\min} = \varphi(\theta' = 0) = -k + \sqrt{k^2 + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.125)$$

ve

$$\varphi_{\max} = \varphi(\theta' = \pi) = k + \sqrt{k^2 + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.126)$$

şeklindedir. Bu dönüşüme uygun olarak denklem (3.123) yeniden yazılırsa,

$$\varphi + k \cos \theta' = \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.127)$$

olur, karekökten kurtulmak için iki tarafın karesi alınırsa

$$\varphi^2 + 2\varphi k \cos \theta' + k^2 \cos^2 \theta' = k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar} \quad (3.128)$$

$$k \cos \theta' = \frac{m^* w_0}{\hbar \varphi} - \frac{\varphi}{2} \quad (3.129)$$

elde edilir. Bu sonuç denklem (3.127)'de kullanılırsa

$$\varphi + \frac{m^* w_0}{\hbar \varphi} - \frac{\varphi}{2} = \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.130)$$

$$\frac{\varphi}{2} + \frac{m^* w_0}{\hbar \varphi} = \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.131)$$

olur. Denklem (3.129)'un iki tarafının φ 'ye göre türevi alınır

$$\sin \theta' d\theta' = \left(\frac{m^* w_0}{\hbar k \varphi^2} + \frac{1}{2k} \right) d\varphi \quad (3.132)$$

olur, bulunan son iki ifade denklem (3.123)'te kullanılır ve gerekli işlemler yapılırsa

$$W(k) = \frac{Y'}{2} \int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} \frac{1}{\frac{\varphi}{2} + \frac{m^* w_0}{\hbar \varphi}} \left(\frac{m^* w_0}{\hbar k \varphi^2} + \frac{1}{2k} \right) d\varphi \quad (3.133)$$

$$W(k) = \frac{Y'}{2} \int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} \frac{1}{\frac{\varphi}{2} + \frac{m^* w_0}{\hbar \varphi}} \times \frac{1}{k \varphi} \left(\frac{m^* w_0}{\hbar \varphi} + \frac{\varphi}{2} \right) d\varphi \quad (3.134)$$

$$W(k) = \frac{Y'}{2} \int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} \frac{1}{k \varphi} d\varphi \quad (3.135)$$

$$W(k) = \frac{Y'}{2} \frac{1}{k} [\ln \varphi]_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} \quad (3.136)$$

sonucuna ulaşılır.

Şimdi benzer şekilde yayınım hesabı için denklem (3.111) yeniden yazılırsa,

$$W(\vec{k}) = \frac{m^* e^2 w_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\pi \int_0^\infty \delta\left(q^2 - 2kq \cos\theta' + \frac{2m^* w_0}{\hbar}\right) dq \sin\theta' d\theta' \quad (3.137)$$

olur bu denklemin kökleri

$$q = k \cos\theta' \pm \sqrt{k^2 \cos^2\theta' - \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.138)$$

şeklinde yazılabilir. $0 < \theta' < \pi/2$ için $\cos\theta' > 0$ olduğundan olası çarpanlar $(q+\alpha_1)(q+\alpha_2)$ biçimindedir bu aralıkta delta fonksiyonu asla sıfır olamaz, bundan dolayı bu terimden integrale bir katkı gelmez. Fonon momentumu q 'nın gerçel olabilmesi için karekök içindeki ifade pozitif olmalıdır buna göre

$$k^2 \cos^2\theta' - \frac{2m^* w_0}{\hbar} > 0 \quad (3.139)$$

$$k^2 \cos^2\theta' > \frac{2m^* w_0}{\hbar} \quad (3.140)$$

böylece θ' için bir minimum değer vardır

$$\cos\theta'_{\min} = -\sqrt{\frac{2m^* w_0}{\hbar k^2}} \quad (3.141)$$

δ -fonksiyonu içindeki q katsayısı daha önce gerçek ve pozitif olarak göz önüne alınan α_1 ve α_2 cinsinden $(q-\alpha_1)(q-\alpha_2)$ olarak çarpanlarına ayrılabilir, buna göre denklem (3.137)

$$W(\vec{k}) = Y' \int_{\theta'_{\min}}^{\pi} \int_0^{\infty} \delta((q - \alpha_1)(q - \alpha_2)) dq \sin \theta' d\theta' \quad (3.142)$$

olarak yazılabilir, delta fonksiyonundaki her iki terimden de integrale katkı gelmelidir. $\alpha_1 > \alpha_2$ durumu için $\alpha_2 - \alpha_1$ negatif olacağından α_2 civarında çözüm

$$\delta((q - \alpha_1)(q - \alpha_2)) = \frac{\delta(q - \alpha_2)}{|q - \alpha_1|} \quad (3.143)$$

ve

$$W(\vec{k}) = Y' \int_{\theta'_{\min}}^{\pi} \int_0^{\infty} \left[\frac{\delta(q - \alpha_1)}{q - \alpha_2} + \frac{\delta(q - \alpha_2)}{|q - \alpha_1|} \right] dq \sin \theta' d\theta' \quad (3.144)$$

olur. Fonon momentumu olan q üzerinden integral alınır

$$W(\vec{k}) = Y' \int_{\theta'_{\min}}^{\pi} \left(\frac{1}{\alpha_1 - \alpha_2} + \frac{1}{|\alpha_2 - \alpha_1|} \right) \sin \theta' d\theta' \quad (3.145)$$

olur. Burada soğurulmaya benzer biçimde yeni bir değişken tanımlanabilir,

$$\varphi = -k \cos \theta' + \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' - \frac{2m^* w_0}{\hbar}} \quad (3.146)$$

φ 'nin minimum değeri denklem (3.139)'daki karekök içindeki ifade sıfır olduğunda gerçekleşir

$$\varphi_{\min} = \varphi(\theta'_{\min}) = -k \cos \theta'_{\min} \quad (3.147)$$

denklem (3.144) kullanılırsa

$$\varphi_{\min} = \sqrt{\frac{2m^*w_0}{\hbar}} \quad (3.148)$$

φ 'nin maksimum değeri $\cos \theta'_{\min}$ 'nin maksimum olduğu değerdir

$$\varphi_{\max} = \varphi(\theta' = \pi) = k + \sqrt{k^2 - \frac{2m^*w_0}{\hbar}} \quad (3.149)$$

bu verilerle soğurulma için yapılan hesaplar takip edilirse, yayılım için saçılma oranı aşağıdaki gibi elde edilir

$$W(k) = Y' \frac{1}{k} [\ln \varphi]_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} \quad (3.150)$$

3.4.1. İki Boyutlu Taşıyıcıların Optik Fonon Saçılması

İki boyutlu hesaplar için kullanılan Hamiltonyen üç boyut için yazılmış olanla aynıdır. Bununla birlikte simetriyi kullanabilmek için büyüme yönü z-ekseni ve katmanların bulunduğu düzlem x-y düzlemi olarak alınabilir. Buna göre iki boyutlu akustik fononların hesabında yapıldığı gibi dalga fonksiyonu

$$\Psi = \psi(z) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{xy}} \quad (3.151)$$

olarak alınabilir. Akustik fononlarda izlenen yol takip edilerek saçılma oranı en genel haliyle yazılabilir

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi e^2 w_0 P'}{(2\pi)^3} \int \int \frac{|G_{ij}(q_z)|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2} \delta(E'_k - E_k) dq_z d\vec{q}_{xy} \quad (3.152)$$

üç boyutta görülmeyen $G_{if}(q_z)$ form faktörü olarak bilinir ve daha önce denklem 3.85'te tanımlanmıştı. Ayrıca $P' = \frac{1}{\varepsilon_p} \left[n(w_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right]$ biçimindedir ve δ -fonksiyonunda görülen enerji, kuantum kuyu sistemindeki iki boyutlu alt bantlara göre aşağıdaki gibi tanımlanmıştır

$$E'_k = E_k + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar w_0 \quad (3.153)$$

ve

$$E'_{k'} = E_{k'} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} \quad (3.154)$$

enerjide görülen üst indis toplam enerjiyi, E_k ve $E_{k'}$ iki boyutlu sistemde elektronun bulunduğu alt bandın taban enerji değerini, $\pm \hbar w_0$ teriminde üst işaret fonon soğurulmasını ve alt işaret fonon yayınımını gösterir. Bu enerjiler δ -fonksiyonunda yerine yerleştirilirse,

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi e^2 w_0 P'}{(2\pi)^3} \int \int \frac{|G_{if}(q_z)|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2} \times \delta \left(E_{k'} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} \left(E_k + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar w_0 \right) \right) dq_z d\vec{q}_{xy} \quad (3.155)$$

olur. Kolaylık için $\Delta = E_{k'} - E_k \mp \hbar w_0$ olarak alınabilir. Buna göre

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi e^2 w_0 P'}{(2\pi)^3} \int \int \frac{|G_{if}(q_z)|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2} \times \delta \left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \Delta \right) dq_z d\vec{q}_{xy} \quad (3.156)$$

yazılabilir. Momentumun korunumu ile $\vec{q}_{xy}$ için yeni alan $q_{xy}dq_{xy}d\theta'$ kullanılarak daha önceki hesaplara benzer şekilde önce soğurulma olayı için δ -fonksiyonu düzenlenirse

$$W(\vec{k}) = \frac{2m^*e^2w_0P'}{(2\pi)^2\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \frac{|G_y(q_z)|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2} \times \delta\left(q_{xy}^2 + 2kq_{xy}\cos\theta' + \frac{2m^*\Delta}{\hbar^2}\right) q_{xy}d\theta'dq_{xy}dq_z \quad (3.157)$$

elde edilir. Kolaylık açısından integralin başındaki katsayılar bir sabite eşitlenebilir

$$Y'' = \frac{2m^*e^2w_0P'}{(2\pi)^2\hbar^2} \quad (3.158)$$

Δ pozitif ve $0 < \theta' < \pi/2$ durumu için δ -fonksiyonunun içi sürekli pozitif olacağından sıfır olamaz ve integrale bir katkısı yoktur. Bununla beraber $\pi/2 < \theta' < \pi$ durumu için $\cos\theta'$ negatiftir. $\theta = \pi - \theta'$ değişken değiştirmesi ile $\cos\theta'$ trigonometrik özdeşlikler kullanılırsa $-\cos\theta$ ve $d\theta = d\theta'$ olur. İntegral sınırları $\theta' = \pi/2$ iken $\theta = \pi/2$ ve $\theta' = \pi$ iken $\theta = 0$ olur, buna göre

$$W(\vec{k}) = Y'' \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi/2} \frac{|G_y(q_z)|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2} \times \delta\left(q_{xy}^2 - 2kq_{xy}\cos\theta + \frac{2m^*\Delta}{\hbar^2}\right) q_{xy}d\theta dq_{xy}dq_z \quad (3.159)$$

olur. Şimdi δ -fonksiyonunun içindeki ifade $\alpha_1 > \alpha_2$ varsayımıyla $(q_{xy} - \alpha_1)(q_{xy} - \alpha_2)$ şeklinde çarpanlarına ayrılabilir. Böylece görüldüğü üzere fonon dalga vektörü için iki çözüm vardır. Her bir soğurulma ve yayınım işlemi için olası iki saçılma oluşabilir ve bunlardan herbirinde hem momentum hemde enerji korunur. Bu çarpan kullanılırsa denklem

$$W(\vec{k}) = Y'' \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi/2} \frac{|G_{if}(q_z)|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2} \times \delta((q_{xy} - \alpha_1)(q_{xy} - \alpha_2)) q_{xy} d\theta dq_{xy} dq_z \quad (3.160)$$

olur. $q_{xy} = \alpha_1$ civarındaki çözüm için $(q_{xy} - \alpha_2)$ bir sabittir, ve diğer çarpan içinde tersi geçerlidir buna göre

$$W(\vec{k}) = Y'' \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi/2} \frac{|G_{if}(q_z)|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2} \times \left[\frac{\delta(q_{xy} - \alpha_1)}{(q_{xy} - \alpha_2)} + \frac{\delta(q_{xy} - \alpha_2)}{|q_{xy} - \alpha_1|} \right] q_{xy} d\theta dq_{xy} dq_z \quad (3.161)$$

yazılabilir. Böylece q_{xy} üzerinden olan integral

$$W(\vec{k}) = Y'' \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\pi/2} |G_{if}(q_z)|^2 \times \left[\frac{1}{\alpha_1^2 + q_z^2} \frac{\alpha_1}{(\alpha_1 - \alpha_2)} + \frac{1}{\alpha_2^2 + q_z^2} \frac{\alpha_2}{(\alpha_1 - \alpha_2)} \right] d\theta dq_z \quad (3.162)$$

olur. Denklem (3.159)'daki δ -fonksiyonu içinde bulunan q_{xy} için kuadratik ifadenin çözümü aşağıdaki gibidir:

$$q_{xy} = k \cos \theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \theta - \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2}} \quad (3.163)$$

$\alpha_1 > \alpha_2$ varsayımıyla bu sabitler yazılırsa

$$\alpha_1 = k \cos \theta + \sqrt{k^2 \cos^2 \theta - \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2}} \quad (3.164)$$

ve

$$\alpha_2 = k \cos \theta - \sqrt{k^2 \cos^2 \theta - \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2}} \quad (3.165)$$

olur. Denklem (3.162)'de α_1 ve α_2 yerine yazılır ve düzenlenirse

$$W(\vec{k}) = Y'' \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\pi/2} |G_{if}(q_z)|^2 k \left[q_z^2 + \left(\frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \right) \right] \times \frac{\cos \theta}{\sqrt{k^2 \cos^2 \theta - \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \left[\left(q_z^2 - \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \right)^2 + 4k^2 q_z^2 \cos^2 \theta \right]}} d\theta dq_z \quad (3.166)$$

elde edilir. Şimdiye kadar yapılan çıkarım oldukça standart metotlar kullanılarak yapıldı. Burada θ üzerinden olan integralin hesabı için Hagston, Piorek ve Harrison'un çalışmaları kullanılarak çok kullanışlı bir sonuç elde edilebilir (Harrison, 2000). Matematiksel yöntemin ayrıntısı ile incelendiği referans gözönüne alınarak doğrudan sonuç yazılabilir

$$W(k) = \frac{Y''}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\pi |G_{if}(q_z)|^2}{\sqrt{q_z^4 + 2q_z^2 \left(2k^2 - \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \right) + \left(\frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \right)^2}} dq_z \quad (3.167)$$

benzer yöntemle yayınım için denklem (3.157) yeniden yazılırsa

$$W(\vec{k}) = \frac{2m^* e^2 w_0 P'}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \frac{|G_{if}(q_z)|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2} \times \delta \left(q_{xy}^2 - 2kq_{xy} \cos \theta' + \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \right) q_{xy} d\theta' dq_{xy} dq_z \quad (3.168)$$

olur. Δ pozitif ve $\pi/2 < \theta' < \pi$ durumu için δ -fonksiyonunun içi sürekli pozitif olacağından sıfır olamaz ve integrale bir katkısı yoktur. Bununla beraber $0 < \theta' < \pi/2$ durumu için $\cos \theta'$ pozitifdir ve açığa bağlı çözüm denklem (3.167) ile özdeşir.

Δ negatif durumu ve yayılım için benzer işlemler yapılırsa sonuç denklem (3.167) ile aynı çıkar. Bundan dolayı denklem (3.167), boyuna optik bir fononla saçılmadan önce 'i' altbandında bulunan bir taşıyıcının yaşam zamanı için elde edilen genel sonucu gösterir. Bu sonuç dalga fonksiyonunun özel yapısından bağımsız olarak tüm iki boyutlu taşıyıcı dağılımlarına uygulanabildiğinden dolayı son derece kullanışlıdır.

Monte Carlo hesaplamalarında $W(k)$ saçılma oranının yanında elektronların saçılmadan sonraki son durumlarının da bilinmesi gerekir. Bunu ortaya koyacak bir formül kullanılarak $\vec{k}'$ ve $\vec{k}$ arasındaki polar açı bulunabilir. Denklem (3.166) kullanılarak θ ve $\theta + d\theta$ arasındaki açıların saçılma olasılığı yazılabilir

$$P(\theta)d\theta = Y'' \int_0^{\pi/2} |G_y(q_z)|^2 k \left[q_z^2 + \left(\frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \right) \right] \cos \theta \times \frac{1}{\sqrt{k^2 \cos^2 \theta - \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \left[\left(q_z^2 - \frac{2m^* \Delta}{\hbar^2} \right)^2 + 4k^2 q_z^2 \cos^2 \theta \right]}} d\theta \quad (3.169)$$

0 ve θ arasındaki saçılma olasılığı, yukarıdaki denklemin 0 ile θ arasında integrali alınarak ve sonuç denklem (3.167)'ye bölünerek bulunabilir

$$\frac{W(\theta)}{W(k)} = \frac{1}{W(k)} \int_0^\theta P(\beta) d\beta \quad (3.170)$$

$W(\theta)/W(k)$ sıfırdan büyük ve θ ile monoton artan bir fonksiyon olduğundan, bu ifade 0 ile 1 arasında bulunan rasgele bir sayıya eşitlenerek, θ saçılma açısı bulunabilir. Denklem (3.163)'e göre karekökün içi negatif olamayacağından dolayı olası fonon momentumları üzerinde bundan dolayı da olası θ açıları üzerinde bir

sınırlama vardır. Şekil 3.3'ten $\vec{q}_{xy} = \vec{k}' - \vec{k}$ bağıntısı kullanılarak fonon momentumu ve θ açısı arasında bir ilişki yazılabilir

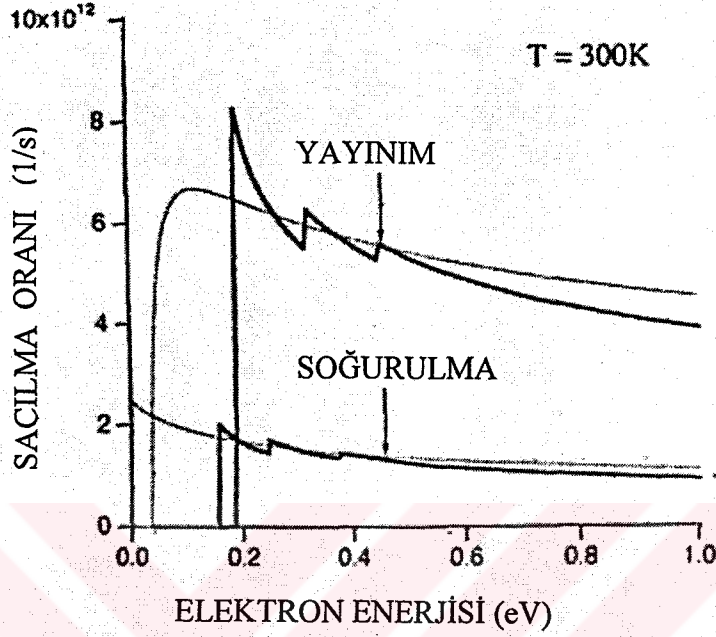
$$q_{xy}^2 = k'^2 + k^2 - 2kk' \cos \theta \quad (3.171)$$

kosinüs ifadesi buradan çekilirse;

$$\cos \theta = \frac{k'^2 + k^2 - q_{xy}^2}{2kk'} \quad (3.172)$$

elde edilir. Buna göre enerjiyi içeren delta ifadesi ve fonon momentumu q_{xy} üzerindeki sınırlamalar göz önüne alınarak denklem (3.172)'den kosinüs açılarının bir tablosu elde edilebilir. Yukarıda anılan tüm işlemler nümerik olarak alındığından dolayı elde edilen bu nümerik sonuçların bir tablosu kullanılarak polar açının olası değerlerinin bir listesi yine nümerik olarak elde edilebilir.

Şekil 3.7 AlGaAs/GaAs arayüzündeki birinci alt bant içindeki iki boyutlu elektron gazının polar optik fonon saçılma oranını göstermektedir (Tomizawa, 1993). Burada üçgen kuyu yapısına ait olan dalga fonksiyonları kullanıldığından iki boyutlu elektron gazının AlGaAs katmanına olan sızmaları göz önüne alınmamıştır. Dalga fonksiyonlarında bulunan katsayılar, üçgen kuyu potansiyeli için varyasyonel metod kullanılarak hesaplanmıştır. İki boyutlu elektron gazı için E_k 'nin bir fonksiyonu olarak çizilmiş olan grafikte altbant saçılmalarından kaynaklanan basamak benzeri artış açıkça görülmektedir. Alt bant enerji düzeyleri arasındaki fark fonon enerjisine yakın enerjilerde olduğu zaman iki boyutlu elektron gazının fonon saçılma oranı, üç boyutlu elektron gazının saçılma oranından çok daha büyük olabilir.



Şekil 3.7. AlGaAs/GaAs heteroyapısında oluşan iki boyutlu elektron gazının polar optik saçılma oranı

3.5. Uzak Safsızlık Saçılması

İki boyutlu elektron gazı, düşük sıcaklıkta elektronların uzun bir serbest yola sahip olmalarından dolayı en önemli düşük boyutlu sistemdir. Bu sistemde elektronlarla vericiler (donörler) birbirlerinden ayrıldığından dolayı iyonize safsızlıklarla saçılmalar azalır. Elektronların belirli bir aralıkla (spacer) iyonize vericilerden ayrıldığı bir çok iki boyutlu elektron gazında (2BEG), düşük sıcaklıkta oluşan en güçlü saçılma mekanizması bu vericilerin neden olduğu saçılmadır.

Serbest elektronların iki boyutta sınırlandırıldığı bir sistem göz önüne alınsın ve bu sistem sonlu bir A alanına sahip bir kutuya konulsun. k 'dan $k' = k + q$ gibi başka

bir duruma tek bir safsızlığın saçılması için q üzerinden geçiş oranı denklem 3.31'de gösterildiği gibi Fermi'nin Altın Kuralı ile verilir. En genel haliyle iki boyutlu sistem için saçılma oranı ise aşağıdaki gibi yazılabilir

$$W_{k+q,k} = \frac{A}{(2\pi)^2} \int S_{k+q,k} d^2 \vec{q} \quad (3.173)$$

Gerçek bir sistemde çok sayıda safsızlık bulunur, birim alan başına ortalama yoğunluk n_{saf}^{2D} ise örneğimizdeki A alanında bulunan safsızlıkların toplam sayısı $N_{saf}^{2D} = An_{saf}^{2D}$ olur. Her bir safsızlıktan kaynaklanan saçılmanın diğerlerinden bağımsız olduğu düşünülürse toplam oran, denklemin N_{saf}^{2D} ile çarpımıyla bulunur

$$W_{k+q,k} = (An_{saf}^{2D}) \frac{A}{2\pi^2} \int \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle k+q | H' | k \rangle \right|^2 \delta(E_{k+q} - E_k) d^2 q \quad (3.174)$$

başlangıç ve son durumlar düzlem dalgalar cinsinden tanımlanırsa

$$\Psi(\vec{r}) = \psi_n(z) e^{i\vec{k}_p \cdot \vec{r}_p} \frac{1}{\sqrt{A}} \quad (3.175)$$

olur. $\vec{k}_p$ ve $\vec{r}_p$ sırasıyla paralel yöndeki dalga vektörü ve konum vektörüdür.

Pertürbasyon potansiyeli $H' = -e\phi^{top}(\vec{r}, z)$ olarak yazılırsa matris elemanı aşağıdaki gibi kurulabilir

$$\langle \vec{k}_p' | H' | \vec{k}_p \rangle = \int \Psi_k^*(\vec{r}) H' \Psi_k(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.176)$$

$$= \frac{1}{A} \int \psi_n(z) e^{-i\vec{k}_p' \cdot \vec{r}_p} H' e^{i\vec{k}_p \cdot \vec{r}_p} d\vec{r}_p dz \quad (3.177)$$

$$= -\frac{e}{A} \int \psi_n(z) e^{-i(\vec{k}_p + \vec{q}_p) \cdot \vec{r}_p} \phi^{top}(\vec{r}, z) \psi_m(z) e^{i\vec{k}_p \cdot \vec{r}_p} d^2 r_p dz \quad (3.178)$$

$$= -\frac{e}{A} \int \int \psi_n(z) \psi_m(z) e^{-i\vec{q}_p \cdot \vec{r}_p} \phi^{top}(\vec{r}, z) d^2 r_p dz \quad (3.179)$$

olur. $\vec{r}_p$ üzerinden olan integral aşağıdaki gibi yazılabilir

$$e^{-i\vec{q}_p \cdot \vec{r}_p} \phi^{top}(\vec{r}, z) d^2 r_p = \phi^{top}(q_p, z) \quad (3.180)$$

$\phi^{top}(q_p, z)$ saçılma potansiyelinin Fourier dönüşümüdür. Buna göre matris elemanı

$$\langle \vec{k}'_p | H' | \vec{k}_p \rangle = -\frac{e}{A} \int \psi_n(z) \phi^{top}(q_p, z) \psi_m(z) dz \quad (3.181)$$

$$= -\frac{e}{A} \phi_{nm}^{top}(q_p) \quad (3.182)$$

biçiminde yazılabilir. Bu sonuç saçılma oranında kullanılırsa,

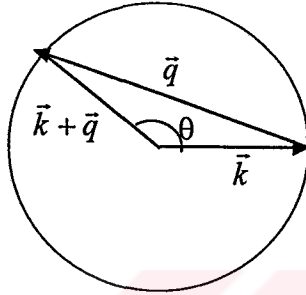
$$W_{k+q,k} = \frac{A^2 n_{saf}^{2D}}{2\pi\hbar} \int \left| -\frac{e}{A} \phi_{nm}^{top}(q_p) \right|^2 \delta(E_{k'} - E_k) d^2 q \quad (3.183)$$

olur. İntegral içindeki δ -fonksiyonunu düzenleyebiliriz

$$\begin{aligned} \delta(E_{k'} - E_k) &= \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) = \frac{2m^*}{\hbar^2} \delta[(k' - k)(k' + k)] \\ &= \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{1}{2k} [\delta(k' - k) + \delta(k' + k)] \end{aligned} \quad (3.184)$$

δ -fonksiyonundaki artılı terim sıfır olamayacağından bir katkı gelmez buna göre sadece eksili terimin alınması yeterlidir.

$$W_{k+q,k} = \frac{A^2 n_{saf}^{2D}}{2\pi\hbar} \frac{e^2}{A^2} \frac{m^*}{\hbar^2 k} \int |\phi_{nm}^{top}(q_p)|^2 \delta(k' - k) d^2 q \quad (3.185)$$



Şekil 3.8. Bir safsızlık tarafından saçılan elektronun θ açısı ve $\vec{q}$ vektörü arasındaki ilişkinin k -uzayındaki gösterimi

$\vec{k}'$ ve $\vec{k}$ 'nın gösterildiği şekil 3.8'de saçılmanın geometrisi ve elektronun saçıldığı açı ile $\vec{q}$ dalga vektörü arasındaki ilişki görülmektedir. Enerji korunduğundan dolayı saçılmadan önceki ve sonraki dalga vektörleri aynı büyüklükte olmalıdır, bundan dolayı bu vektörler k -uzayında bir dairenin üzerinde bulunurlar. $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ ve $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ vektör ilişkisi kullanılarak, trigonometrinin yardımıyla açı ve dalga vektörü arasında bir ilişki bulunabilir

$$|\vec{k}' - \vec{k}|^2 = k'^2 + k^2 - 2k'k \cos \theta \quad (3.186)$$

enerjinin korunumuna göre $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ olduğu kullanılırsa

$$|\vec{k}' - \vec{k}| = (2k^2(1 - \cos \theta))^{1/2} = \left(2k^2 \left(2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \right)^{1/2} \quad (3.187)$$

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (3.188)$$

elde edilir. $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ dalga vektörünün terimleri cinsinden integral yeniden düzenlenirse

$$W_{k+q,k} = \frac{n_{saf}^{2D} m^* e^2}{2\pi \hbar^3 k} \int |\phi_{nm}^{top}(\vec{k}' - k)|^2 \delta(k' - k) d^2 k' \quad (3.189)$$

elde edilir. $d^2 k' = k' dk' d\theta$ açılımı ve integral sınırları yerleştirilirse,

$$W_{k+q,k} = \frac{n_{saf}^{2D} m^* e^2}{2\pi \hbar^3 k} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} k' dk' \left| \phi_{nm}^{top} \left(2k \sin \frac{\theta}{2} \right) \right|^2 \delta(k' - k) \quad (3.190)$$

olur. θ üzerinden olan integral $[0-\theta]$ aralığında alınıp 2 ile çarpılabilir (çift fonksiyon olduğundan) ve delta fonksiyonu kullanılarak k' üzerinden olan integral kolayca alınabilir, buna göre

$$W_{k+q,k} = \frac{n_{saf}^{2D} m^* e^2}{2\pi \hbar^3 k} 2 \int_0^{\pi} d\theta k \left| \phi_{nm}^{top} \left(2k \sin \frac{\theta}{2} \right) \right|^2 \quad (3.191)$$

$$W_{k+q,k} = \frac{n_{saf}^{2D} m^* e^2}{\pi \hbar^3} \int_0^{\pi} d\theta \left| \phi_{nm}^{top} \left(2k \sin \frac{\theta}{2} \right) \right|^2 \quad (3.192)$$

olur. θ üzerinden olan integral için $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ dönüşümü yapılırsa integral sınırları

$\theta = 0 \Rightarrow q = 0$ ve $\theta = \pi \Rightarrow q = 2k$ biçiminde değişir. $d\theta$ yerine ise

$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{q}{2k} \quad , \quad dq = k \cos \frac{\theta}{2} d\theta \Rightarrow d\theta = \frac{dq}{k \cos \frac{\theta}{2}} \quad (3.193)$$

$$d\theta = \frac{dq}{k \sqrt{1 - \sin^2 \frac{\theta}{2}}} = \frac{dq}{k \sqrt{1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2}} \quad (3.194)$$

yazılarak integral düzenlenirse,

$$W_{k+q,k} = \frac{n_{saf}^{2D} m^* e^2}{\pi \hbar^3} \int_0^{2k} |\phi_{nm}^{top}(q)|^2 \frac{dq}{k \sqrt{1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2}} \quad (3.195)$$

olur. Dış potansiyel ile toplam potansiyel arasında aşağıdaki gibi bir ilişki vardır (Bastard, 1988)

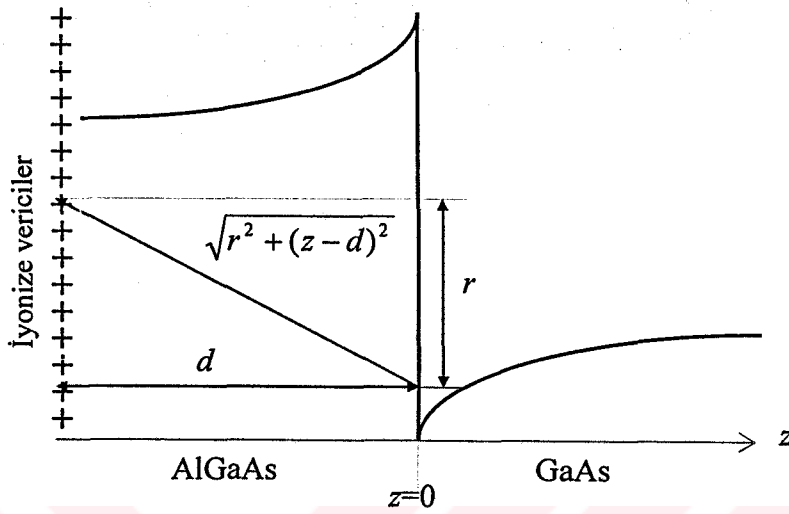
$$\phi_{nj}^{du}(q_p) = \epsilon_{nljm} \phi_{lm}^{top}(q_p) \quad (3.196)$$

Önce dış potansiyel tanımlansın

$$\phi_{nj}^{du}(q_p) = \int \psi_n(z) \phi^{du}(q_p, z) \psi_j(z) dz \quad (3.197)$$

burada $\phi^{du}(q_p, z)$ Fourier dönüşümü olup aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\phi^{du}(q_p, z) = \int \phi^{du}(\vec{r}_p, z) e^{-i\vec{q}_p \cdot \vec{r}_p} d^2 r_p \quad (3.198)$$



Şekil 3.9. İki boyutlu elektron gazında uzak iyonize safsızlıklardan kaynaklanan elektron saçılmasının geometrisi. z-ekseni sağa doğru olduğundan, safsızlıklar için $d < 0$ 'dır.

$\phi^{du}(\vec{r}_p, z)$ Coulomb etkileşiminin yarattığı potansiyel olup genel olarak aşağıdaki gibi verilir (Bastard, 1988)

$$\phi^{du}(\vec{r}_p, z) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\kappa\sqrt{(\vec{r} - \vec{r}')^2 + (z - z')^2}} \quad (3.199)$$

yukarıdaki şekil 3.9'a göre d safsızlıkların bulunduğu mesafe olmak üzere $z' = -d$ ve $\vec{r}' = 0$ alınarak bu potansiyel denklem (3.199)'da kullanılabilir

$$\phi^{du}(q_p, z) = \int \frac{e}{4\pi\epsilon_0\kappa\sqrt{r^2 + (z + |d|)^2}} e^{-i\vec{q}_p \cdot \vec{r}_p} d^2r_p \quad (3.200)$$

$d^2r_p = r_p dr_p d\theta$ dönüşümü ile

$$\phi^{dn}(q_p, z) = \int \int \frac{e}{4\pi\epsilon_0\kappa\sqrt{r^2 + (z+|d|)^2}} e^{-i\vec{q}_p \cdot \vec{r}_p} r_p dr_p d\theta \quad (3.201)$$

olur. İntegral tabloları kullanılarak (Gradshteyn, 1965) bu integralin sonucu doğrudan yazılabilir

$$\phi^{dn}(q_p, z) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\kappa} \frac{2\pi e^{-q_p(z+|d|)}}{q_p} \quad (3.202)$$

denklem (3.198)'e bu sonuç yerleştirilirse

$$\phi_{nj}^{dn}(q_p) = \int \frac{e}{2\epsilon_0\kappa q_p} \psi_n(z) \psi_j(z) e^{-q_p(z+|d|)} dz \quad (3.203)$$

olur. Denklem (3.196)'da bulunan dış potansiyel ile toplam potansiyeli birbirine bağlayan ϵ_{nljm} terimi ise aşağıdaki gibi verilir

$$\epsilon_{nljm} = \delta_{nl}\delta_{jm} - \sum_{l,m} A_{lm}(q_p) T_{lm}^{jn}(q_p) \quad (3.204)$$

toplam içinde görülen $A_{lm}(q_p)$ en genel haliyle aşağıdaki gibi yazılabilir

$$A_{lm}(q) = \frac{2}{\Omega_d} \sum_k \frac{f_l(k) - f_m(k+q)}{E_l(k) - E_m(k+q)} \quad (3.205)$$

d boyutsal dalga vektörünü ($d=1,2,3$) göstermek üzere toplam ifadesi aşağıdaki eşitlik kullanılarak integrale dönüştürülebilir (Bastard, 1988)

$$\frac{1}{\Omega_d} \sum_k \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \quad (3.206)$$

iki boyutlu ($d=2$) bir sistem için $d^2k = k_p dk_p d\theta$ kullanılarak

$$A_{lm}(q_p) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^k \left[\frac{f_l(k_p) - f_m(k_p + q_p)}{E_l(k_p) - E_m(k_p + q_p)} \right] k_p dk_p d\theta \quad (3.207)$$

yazılabilir. Burada görülen f ve E terimleri ise,

$$f_l(k_p) = \frac{1}{e^{(E_l(k_p) - E_F)/k_B T} + 1} \quad (3.208)$$

$$f_m(k_p + q_p) = \frac{1}{e^{(E_m(k_p + q_p) - E_F)/k_B T} + 1} \quad (3.209)$$

$$E_l(k_p) = E_l + \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m^*} \quad (3.210)$$

$$E_m(k_p + q_p) = E_m + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_p + q_p)^2 \quad (3.211)$$

biçiminde verilir. Burada $(k_p + q_p)^2 = k_p^2 + q_p^2 + 2k_p q_p \cos\theta$, E_F Fermi enerjisi ve E elektronun bulunduğu düzeyin tabanına göre ölçülen enerjidir. Dalga fonksiyonlarını içeren $T_{lm}^{jn}(q_p)$ ise aşağıdaki gibi yazılabilir

$$T_{lm}^{jn}(q_p) = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 \kappa q_p} \iint dz dz' \psi_j(z) \psi_n(z) \psi_l(z') \psi_m(z') e^{-q_p |z - z'|} \quad (3.212)$$

Böylece $\phi_{nj}^{du} = A \phi_{lm}^{top}$ gibi bir matris denkleminde dönüştürülen toplam potansiyel, bu denklemin matris formülasyonu kullanılarak çözülebilir.

Monte Carlo yönteminde, bir kez saçılma mekanizması seçilerek hesaplandıktan sonra bir sonraki uçuşun yönünü bulabilmek için saçılma açısının hesaplanması gerekir. θ açısının hesabı analitik sonuçlar olmadığından dolayı genellikle karmaşıktır. Polar optik saçılmada kullanılan genel yöntem çok yavaş ve alınması güç olduğundan dolayı burada saçılma açılarını bulmada Krowne(1987)'nin geliştirdiği basit algoritma kullanılacaktır. Denklem (3.192), θ 'ya bağlı saçılma oranını veren ifadedir. Buna göre denklemde yer alan $\phi_{nm}^{top}(2k \sin \frac{\theta}{2})$ ifadesi $P(\theta)$ saçılma olasılığını verir ve θ 'nın bulunmasında kullanılabilir. $P(\cos \theta)$ $(-1,+1)$ aralığında bulunan ve maksimum değeri $\cos \theta=1$ için $P(1)$ olan monoton artan bir fonksiyon ise r_1 ve r_2 gibi iki rasgele sayı kullanılabilir. Bu sayılardan birincisi $(-1,+1)$ aralığındaki $\cos \theta$ 'yı gösterirken diğeri $P(-1)$ ve $P(1)$ aralığında $P(\theta)$ 'yı gösterir. Eğer $r_2 < P(r_1)$ ise r_1 rasgele sayısı $\cos \theta$ 'nın seçilmiş değeri olarak alınır, değilse bunu sağlayacak yeni çift rasgele sayılar üretilir. Monoton azalan $P(\cos \theta)$ fonksiyonları için $1-P(\theta)$ ifadesi kullanılır. Yöntem son derece basit, hızlı ve genellikle bir kaç adımda aranan çift sayının bulunmasını sağlayacak kadar pratiktir. Bununla birlikte $P(\theta)$, alabileceği olası değerlerin sınırı dışında her yerde küçükse bir sonuç alabilmek için uzun bir zaman geçebilir. Eğer $P(\theta)$ monoton bir fonksiyon değilse, $\cos \theta$ aralığı, monoton olarak alınabilecek küçük aralıklara bölünür. Rasgele sayı ikilisini sağlayan aralıklardan birisi seçildiğinde, yukarıda anlatılan kurala göre θ açısı bulunur (Mogilestue, 1993).

3.6. Buruşuk Yüzey Saçılması

Buruşuk yüzeyden kaynaklanan potansiyel enerji değişimi aşağıdaki gibi yazılabilir

$$H = -e[V(z + \Delta(r_{\parallel}) - V(z)] \cong \Delta(r_{\parallel}) \left(-e \frac{\partial V}{\partial z}\right) = \Delta(r_{\parallel}) E(z) \quad (3.213)$$

burada e elektron yükü ve $E(z) = -e(\partial V/\partial z)$ heteroekleme dik olan elektrik alanıdır. Bu ifade ile denklem 3.175'te görülen dalga fonksiyonu, saçılma oranını veren denklem 3.173'te kullanılırsa

$$W(k_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{A}{(2\pi)^2} \int \frac{|F_{nm}\Delta(q_{\parallel})|^2}{\varepsilon(q_{\parallel})} \delta(E_k - E_k) d^2k' \quad (3.214)$$

elde edilir. Denklemdeki F_{nm} terimi eklemdeki etkin elektrik alan olarak bilinir ve matris elemanları aşağıdaki gibi yazılabilir

$$F_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_n^*(z) E(z) \chi_m(z) dz \quad (3.215)$$

Oto korelasyon fonksiyonu olan $\Delta(r_{\parallel})$ nin iki boyutlu fourier dönüşümü olan $\Delta(q_{\parallel})$ aşağıdaki gibidir

$$\Delta(q_{\parallel}) = \frac{1}{A} \int_{r_{\parallel}=0\theta=0}^{\infty} \int_0^{2\pi} \Delta(r_{\parallel}) e^{-i(k_{\parallel}' - k_{\parallel})r_{\parallel}} r_{\parallel} dr_{\parallel} d\theta = \frac{1}{A} \int_{r_{\parallel}=0\theta=0}^{\infty} \int_0^{2\pi} \Delta(r_{\parallel}) e^{-iq_{\parallel}r_{\parallel}} r_{\parallel} dr_{\parallel} d\theta \quad (3.216)$$

burada $q_{\parallel} = k_{\parallel}' - k_{\parallel}$ saçılmadan önceki ve sonraki dalga vektörleridir ve denklemdeki ε ortamın dielektrik fonksiyonu olup aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\varepsilon(q_{\parallel}) = 1 + \frac{4\pi e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2\kappa} \frac{m^*}{q_{\parallel}} G(q_{\parallel}) \quad (3.217)$$

burada

$$G(q) = \sum_m \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} |\chi_m(z)|^2 |\chi_m(z')|^2 \exp\{-q|z - z'|\} dz dz' \quad (3.218)$$

ϵ_0 serbest uzayın permitivitesi, κ yarıiletkenin dielektrik sabiti, $\hbar$ Planck sabitinin 2π ile bölünmüş hali ve m^* elektronun etkin kütlesidir. Bundan sonra saçılma denklemini çalışabilmek için oto korelasyon fonksiyonunun şeklinin bilinmesi gerekir. Oto korelasyon fonksiyonunun tam biçimi bilinmemekle beraber geleneksel olarak Gaussian veya Ekspansiyel fonksiyonlar kullanılmaktadır. Bunlara ek olarak bu çalışmada lorentzian tipi bir oto korelasyon fonksiyonu kullanılacaktır.

3.6.1. Gaussian Oto Korelasyon Fonksiyonu ve Saçılma Oranı

Gaussiyan oto korelasyon fonksiyonu

$$\Delta(r_{\parallel}) = \Delta_g^2 e^{-r_{\parallel}^2/L_g^2} \quad (3.219)$$

olarak tanımlanır. Burada Δ_g yüzey pürüzlülüğünün kare ortalama köküne eşittir. L_g ise pürüzlülüğün dağılımının x - y düzlemi üzerindeki erişiminin bir ölçüsüdür. L_g ne kadar büyükse, dağılımın erimi de o kadar büyük olur. $r_{\parallel}$, x - y düzlemi üzerinde pürüzlülüğün merkezine göre olan koordinatları belirler. Bu fonksiyonun fourier dönüşümü

$$|\Delta(q_{\parallel})|^2 = \frac{1}{A} \int_{r_{\parallel}=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} \Delta(r_{\parallel}) e^{-i\vec{q}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} r_{\parallel} dr_{\parallel} d\theta = \frac{1}{A} \int_{r_{\parallel}=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} \Delta_g^2 e^{-r_{\parallel}^2/L_g^2} e^{-i\vec{q}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} r_{\parallel} dr_{\parallel} d\theta \quad (3.220)$$

biçimindedir. Gerekli integraller alındıktan sonra

$$|\Delta(q_{\parallel})|^2 = \Delta_g^2 \pi L_g^2 \frac{e^{-q_{\parallel}^2 L_g^2/4}}{A} \quad (3.221)$$

olarak elde edilir. Bu dönüşüm saçılma oranında kullanılırsa

$$W(k_{\parallel}) = \frac{m^* (eF)^2 A}{\pi \hbar^3 A} \int_{q_{\parallel}=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} \Delta_g^2 \pi L_g^2 e^{-\frac{q_{\parallel}^2 L_g^2}{4}} \delta(q_{\parallel}^2 + 2q_{\parallel} k_{\parallel} \cos \theta) q_{\parallel} dq_{\parallel} d\theta \quad (3.222)$$

elde edilir. Bu denklemde delta fonksiyonu yeniden düzenlenirse

$$W(k_{\parallel}) = \frac{m^* \Delta_g^2 L_g^2 (eF)^2}{\hbar^3} \int_{q_{\parallel}=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} e^{-\frac{q_{\parallel}^2 L_g^2}{4}} \delta(q_{\parallel} + 2k_{\parallel} \cos \theta) dq_{\parallel} d\theta \quad (3.223)$$

olur. Bu son denklemde $q_{\parallel} \geq 0, k_{\parallel} \geq 0$ olması gerektiğine dikkat edilmelidir. Bu nedenle sadece $\cos \theta > 0$ olduğu durumlar için delta fonksiyonuna bir katkı gelir. Böylece integralin yeni sınırları

$$W(k_{\parallel}) = \frac{m^* \Delta_g^2 L_g^2 (eF)^2}{\hbar^3} \int_{q_{\parallel}=0}^{\infty} \int_{\pi/2}^{3\pi/2} e^{-\frac{q_{\parallel}^2 L_g^2}{4}} \delta(q_{\parallel} + 2k_{\parallel} \cos \theta) dq_{\parallel} d\theta \quad (3.224)$$

olur ve delta fonksiyonundan gelen katkının eklenmesi ile sonuç

$$A_g = \frac{m^* \Delta_g^2 L_g^2 (eF)^2}{\hbar^3} \quad (3.225)$$

olmak üzere

$$W(k_{\parallel}) = A_g \int_{\pi/2}^{3\pi/2} e^{-k_{\parallel}^2 \cos^2 \theta L_g^2} d\theta \quad (3.226)$$

elde edilir. Bu integral çeşitli yollardan alınabilir. Kısaca belirtmek gerekirse $y = \theta - \frac{\pi}{2}$ değişken değişimi yapılır ve integralin sınırları buna uygun şekilde $[0, \pi]$

aralığı olarak seçilir ve $\cos \theta = \cos(y + \frac{\pi}{2}) = -\sin y$ denkleğinden faydalanılırsa yeni integral

$$W(k_{\parallel}) = A_g \int_0^{\pi} e^{-k_{\parallel}^2 \sin^2 \theta L_g^2} d\theta \quad (3.227)$$

şekline dönüşür. Bu integral aynı zamanda

$$W(k_{\parallel}) = A_g 2 \int_0^{\pi/2} e^{-k_{\parallel}^2 \cos^2 \theta L_g^2} d\theta \quad (3.228)$$

şeklinde de yazılabilir. Burada $u = 2\cos^2 \theta$ değışken değışimi yapılırsa yeni integral

$$W(k_{\parallel}) = A_g \int_0^2 \frac{e^{-k_{\parallel}^2 L_g^2 u/2}}{\sqrt{u(2-u)}} du \quad (3.229)$$

olur. Bu integralin sonucu integral tablosundan (Gradshteyn, 1965) bulunabilir, bu tabloya göre integralin sonucu

$$W(k_{\parallel}) = \frac{\pi m^* \Delta_g^2 L_g^2 (eF)^2}{\hbar^3} e^{-k_{\parallel}^2 L_g^2/2} I_0\left(\frac{k_{\parallel}^2 L_g^2}{2}\right) \quad (3.230)$$

bulunur. I_0 sıfırncı mertebeden sanal argümanlı Bessel Fonksiyonudur.

3.6.2. Ekspansiyel Oto Korelasyon Fonksiyonu ve Saçılma Oranı

Ekspansiyel yaklaşım için oto korelasyon fonksiyonu

$$\Delta(r_{\parallel}) = \Delta_e^2 e^{-\eta/L} \quad (3.231)$$

olarak alınır. Oto korelasyon fonksiyonunun fourier dönüşümü

$$|\Delta(q_{\parallel})|^2 = \frac{1}{A} \int_{\eta=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} \Delta_e^2 e^{-\eta/L} e^{-iq_{\parallel} \cdot r_{\parallel}} r_{\parallel} dr_{\parallel} d\theta = \frac{\Delta_e^2 \pi L_e^2}{A(1 + \frac{L_e^2 q_{\parallel}^2}{2})^{3/2}} \quad (3.232)$$

biçimindedir. Bu sonuç saçılma oranında kullanılırsa ekspansiyel yaklaşım için saçılma oranı

$$W(k_{\parallel}) = \frac{m^* (eF)^2 A}{\pi \hbar^3 A} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{\pi \Delta_e^2 L_e^2}{(1 + \frac{L_e^2 q_{\parallel}^2}{2})^{3/2}} \delta(q_{\parallel}^2 + 2q_{\parallel} k_{\parallel} \cos \theta) q_{\parallel} dq_{\parallel} d\theta \quad (3.233)$$

olarak yazılabilir. Bu denklemde delta fonksiyonu yeniden düzenlenirse

$$W(k_{\parallel}) = \frac{m^* (eF)^2 \Delta_e^2 L_e^2}{\hbar^3} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{\delta(q_{\parallel}^2 + 2q_{\parallel} k_{\parallel} \cos \theta)}{(1 + \frac{L_e^2 q_{\parallel}^2}{2})^{3/2}} q_{\parallel} dq_{\parallel} d\theta \quad (3.234)$$

elde edilir. Bu son denklemde de $q_{\parallel} \geq 0, k_{\parallel} \geq 0$ olması gerektiğinden ve bu nedenle sadece $\cos \theta < 0$ olduğu durumlar için delta fonksiyonundan bir katkı geldiğinden bu integralin yeni sınırları

$$A_e = \frac{m^* (eF)^2 \Delta_e^2 L_e^2}{\hbar^3} \quad (3.235)$$

olmak üzere

$$W(k_{\parallel}) = A_e \int_0^{\infty} \int_{\pi/2}^{3\pi/2} \frac{\delta(q_{\parallel} + 2k_{\parallel} \cos \theta)}{(1 + \frac{L_e^2 q_{\parallel}^2}{2})^{3/2}} dq_{\parallel} d\theta \quad (3.236)$$

halini alır ve $q_{\parallel}$ 'e göre integral alınır

$$W(k_{\parallel}) = A_e \int_{\pi/2}^{3\pi/2} \frac{d\theta}{(1 + 2k_{\parallel}^2 L_e^2 \cos^2 \theta)^{3/2}} \quad (3.237)$$

denklemleri elde edilir. $p^2 = 2k_{\parallel}^2 L_e^2$ seçilir ve $x = \theta - \frac{\pi}{2}$ değişken değişimi yapılırsa integralin değişimden sonraki şekli

$$W(k_{\parallel}) = 2A_e \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{\sqrt{(1 + p^2 \sin^2 x)^3}} \quad (3.238)$$

olur. Bu integralin sonucunun integral tablosundan (Gradshteyn, 1965)

$$W(k_{\parallel}) = 2A_e \frac{1}{\sqrt{1 + p^2}} E(\alpha, \frac{p}{\sqrt{1 + p^2}}), \alpha = \frac{\pi}{2} \quad (3.239)$$

olduğu bulunabilir. Burada $E(k)$ ikinci tip tam eliptik integraldir. Bu fonksiyon aynı zamanda

$$E(k) = E(\frac{\pi}{2}, k) \quad (3.240)$$

şeklinde ifade edilebilir ve değeri aşağıdaki seriye eşittir (Gradshteyn, 1965).

$$E = \frac{\pi}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2^2} k^2 - \frac{1^2 3}{2^2 4^2} k^4 - \dots - \left[\frac{(2n-1)!!}{2^n n!} \right]^2 \frac{k^{2n}}{2n-1} - \dots \right\} \quad (3.241)$$

Elde edilen bu sonucu denklem (3.239)'da yerine koyarsak eksponansiyel yaklaşım için saçılma oranı

$$W(k_{\parallel}) = \frac{2A_e}{\sqrt{1+p^2}} E(k) \quad (3.242)$$

olarak bulunur. Bu denklemdeki k , A_e ve p değerleri aşağıda verilmiştir

$$k = \frac{p}{\sqrt{1+p^2}} \quad (3.243)$$

$$A_e = \frac{m^* (eF)^2 \Delta_e^2 L_e^2}{\hbar^3} \quad (3.244)$$

$$p = \sqrt{2} k_{\parallel} L_e \quad (3.245)$$

3.6.3. Lorentsiyan Oto Korelasyon Fonksiyonu ve Saçılma Oranı

Lorentsiyan oto korelasyon fonksiyonu

$$\Delta(r_{\parallel}) = \frac{\Delta_l^2 L_l^2}{r_{\parallel}^2 + L_l^2} \quad (3.246)$$

şeklinde alınmıştır. Bu denklemde Δ_l yüzey pürüzlülüğünün kare ortalama kök değerini ve L_l pürüzlülüğün ara yüzey düzlemindeki etkin uzunluğunu temsil etmektedir. Bu fonksiyonun fourier dönüşümü

$$|\Delta(q_{\parallel})|^2 = \frac{1}{A} \int_{r_{\parallel}=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} \frac{\Delta_l^2 L_l^2}{r_{\parallel}^2 + L_l^2} e^{-iq_{\parallel} \cdot r_{\parallel}} r_{\parallel} dr_{\parallel} d\theta = \frac{2\pi \Delta_l^2 L_l^2}{A} \kappa_0(q_{\parallel} L_l) \quad (3.247)$$

olur. Burada κ_0 , sıfırcı mertebeden sanal argümanlı Bessel fonksiyonudur ve değeri

$$I_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2k}}{(k!)^2} \quad (3.248)$$

biçiminde sıfırcı mertebeden sanal argümanlı Bessel Fonksiyonu olmak üzere

$$\kappa_0(z) = -\ell n\left(\frac{z}{2}\right) I_0(z) + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2k}}{(k!)^2} \psi(k+1) \quad (3.249)$$

ile verilir. Bu denklemde yer alan $\psi(n+1)$ $\psi(1) = -C = -0.57721566490$ olmak üzere

$$\psi(n+1) = -C + \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} \quad (3.250)$$

şeklinde verilir (Gradshteyn, 1965). Bu oto korelasyon fonksiyonu için saçılma oranı

$$W(k_{\parallel}) = \frac{m^* (eF)^2 A}{\pi \hbar^3} \int_{q_{\parallel}=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} |\Delta(q_{\parallel})|^2 \delta(q_{\parallel}^2 + 2q_{\parallel} k_{\parallel} \cos \theta) q_{\parallel} dq_{\parallel} d\theta \quad (3.251)$$

olarak yazılabilir ve yukarıda hesaplanan fourier dönüşümü bu denklemde yerine yazılıp “Mathematica” isimli program kullanılarak ortaya çıkan integral çözülürse

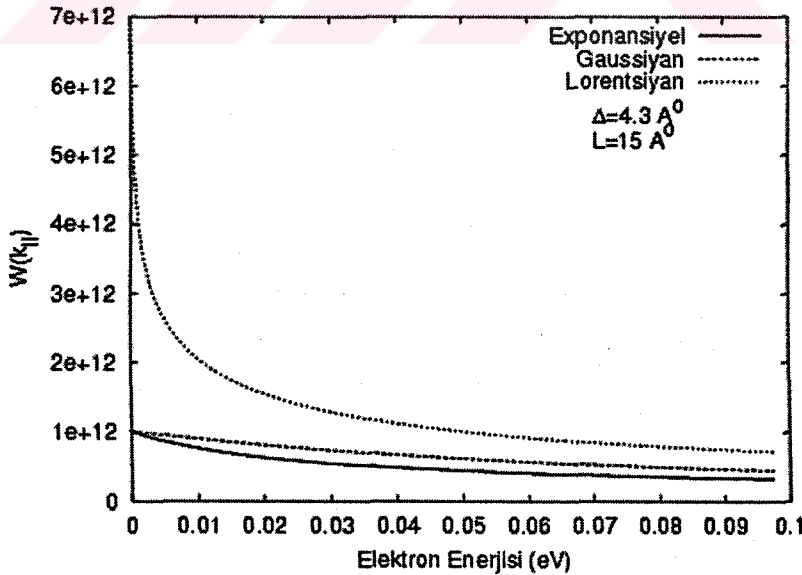
$$W(k_{\parallel}) = \frac{2\pi^2 \Delta_l^2 L_l^2 m^* (eF)^2}{\hbar^3} \kappa_0(k_{\parallel} L_l) I_0(k_{\parallel} L_l) \quad (3.252)$$

elde edilir.

Yukarıdaki üç bölümde de görüldüğü gibi kullanılan oto korelasyon fonksiyonuna bağlı olmaksızın saçılma oranlarının temel bazı özellikleri vardır.

Kullanılan tüm fonksiyonlar için saçılma oranı ara yüzeye dik etkin elektrik alanının (F) karesi ile orantılıdır. Elektrik alan arttıkça üçgene benzer potansiyelin eğimi artarak daha dik bir kuyu haline geldiğinden, ara yüzeye hapsedilmiş elektronları temsil eden dalga fonksiyonları ara yüzeye daha yakın olmaya zorlanır. Böylece elektronlar ortalama olarak pürüzlülüğün kaynaklanan saçılma merkezlerine daha yakın olurlar ve bu nedenle saçılma oranı artar. Diğer yandan saçılma oranları ara yüzey buruşukluğunun kare ortalama kök büyüklüğü (Δ) ile pürüzlülüğün ara yüzey boyunca etkin uzunluğunun (L) çarpımının karesi ile orantılıdır. Yani önemli olan parametre bu iki değerin çarpımıdır. Bu nedenle beklenebileceği gibi buruşukluk arttıkça saçılma da artmaktadır.

Yukarıdaki son üç bölümde elde edilen saçılma oranlarının elektronun enerjisinin bir fonksiyonu olarak $\Delta=4.3 \text{ Å}^0$ ve $L=15 \text{ Å}^0$ değerleri için çizilen grafik şekil 3.10'da gösterilmiştir. Bütün oto korelasyon fonksiyonları için elektron enerjisi arttıkça saçılma oranları azalmaktadır, yani buruşuk yüzey saçılması daha çok düşük enerjili elektronlar için etkindir.



Şekil 3.10. Exponansiyel, Gaussiyen ve Lorentsiyen saçılma oranlarının $\Delta=4.3 \text{ Å}^0$ ve $L=15 \text{ Å}^0$ değerleri için karşılaştırmalı bir grafiği

3.7. Tek Parçacık Monte Carlo Simülasyonu

Monte Carlo metodu, galaksilerin gelişiminden alt atomik (sub-atomik) kuantum fiziğine kadar çok geniş bir alanda kullanılmaktadır. Monte Carlo modellerinin önemli bir özelliği hem malzeme hem de aygıt simülasyonlarına uygulanabilir olmasıdır. Bu metodun ayrıcalıklı bir başka özelliği, deneylerde elde edilemeyen veya gözlenemeyen fiziksel süreçlerin simülasyonlarının yapılabilmesine izin vermesidir. Bu anlamda Monte Carlo simülasyonları deney sonuçlarına çok benzer sonuçlar üretebilir. Yarıiletken simülasyonlarında kullanılan hız-alan karakteristikleri gibi bir çok geçirgenlik özelliği Monte Carlo simülasyonları kullanılarak elde edilebilir. Elektrik alanın bir fonksiyonu olarak elde edilen mobilité, enerji, difüzyon, durulma zamanı ve etkin kütle karakteristikleri Monte Carlo modelleri kullanılarak bulunabilir. Ayrıca küçük ölçekli aygıtların modellemesinde de kullanılan Monte Carlo simülasyonları bu aygıtların fiziğinin anlaşılmasında önemli bir yer tutar.

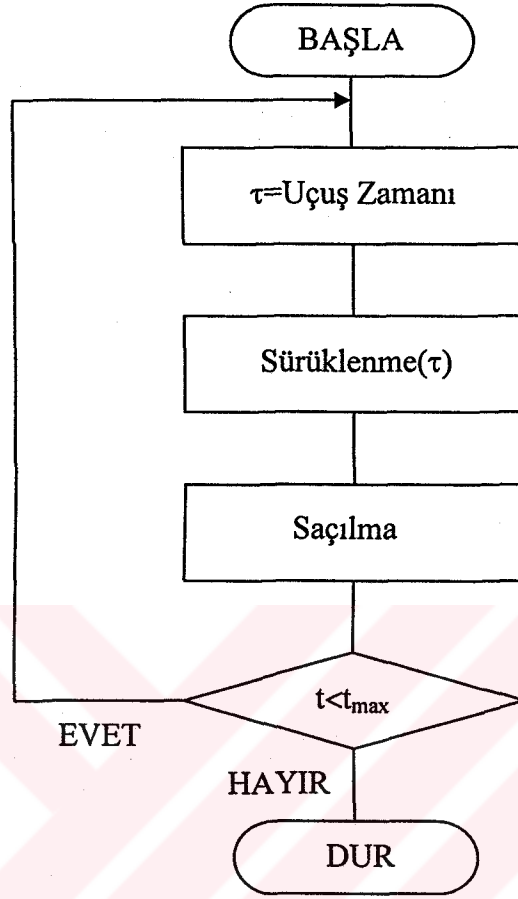
Monte Carlo metodunun temeli, parçacıklar arasındaki çarpışma zamanlarının bulunması gibi saçılma olaylarında artarda rasgele sayılar üreterek, mikroskobik süreçleri tanımlamak için bu sayıları kullanmasıdır. Tek parçacık Monte Carlo simülasyonları, parçacığın hareketini yeterince uzun bir zaman periyodunda takip ederek, homojen numunelerde kararlı durum olgusunu (steady-state phenomena) modellemede kullanılır. Zaman aralığı çok uzun tutularak, edinilen bilgiler elektron gazının davranışını tanımlamada kullanılabilir. Bu yaklaşımın bir avantajı, sistemde sadece bir parçacık kullanıldığından, uzun bir geçmişe ait bilginin sıradan bir bilgisayarla elde edilebilir olmasıdır. Eğer numune homojen değilse çok sayıda parçacığın simüle edilmesi gerekir. Zaman veya konuma bağlı sistemlerde periyodiklik varsa, işlemleri tek parçacık simülasyonuna indirgeyerek basitleştirmek mümkündür. Monte Carlo simülasyonlarında fiziksel sisteme ait malzeme parametrelerinin, enerji bant yapısının, saçılma oranlarının ve örgü sıcaklığının ayrıntılı olarak tanımlanması gerekir. Parçacıklara etki eden kuvvetler, elektrik ve manyetik alanlar ile saçılma mekanizmalarını içerir. Uygulanan dış alan ve başlangıç koşulları özel olarak tanımlanmalıdır. Bu veriler kullanılarak stokastik saçılma

süreçlerini kontrol eden rasgele sayılarla, momentum uzayındaki elektron hareketini gösteren simülasyon elde edilebilir. Her bir elektronun hareketi çarpışmalar arasındaki serbest uçuş zamanlarını içerir. Genellikle çarpışmalar arasında elektronun sabit bir alanda ivmelendirildiği ve malzemenin enerji bant yapısının belirlediği klasik hareket yasalarına uyduğu varsayılır. Çarpışmalar enerjinin bir fonksiyonu olarak belirli olasılıklara sahip rasgele olaylardır. Rasgele sayılar, serbest uçuş zamanını ve saçılma süreçlerini (seçilen saçılma mekanizması ve saçılmadan sonraki dalga vektörünün yönü) kontrol eder. Her bir uçuş zamanı sırasında elde edilen bilgi simülasyon için gerekli olan parametreleri bulmada kullanılır (Snowden, 1988).

Bir yarıiletken taşıyıcı geçirgenliğinin analizi karşılıklı etkileşen çok parçacık problemi olduğundan dolayı yapılması zor bir iştir. Bununla birlikte çok parçacık sistemi bağımsız parçacıkların bir bütünü olarak göz önüne alınırsa, tek bir parçacığın bir çok saçılmaya uğraması izlenerek parçacıkların bütünü simüle edecek bir basitleştirme yapılabilir. Tek parçacık Monte Carlo tekniğinin temel fikri budur.

3.7.1. Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu

Geçirgenlik analizlerine uygulanan tek parçacık Monte Carlo yönteminin prensibi momentum uzayındaki bir parçacığın hareketinin simüle edilmesidir. Bu simülasyon, taşıyıcının serbest uçuş süresi ve saçılma olayı stokastik olarak seçilerek oluşturulabilir. Bundan dolayı simülasyon rasgele sayıların artarda seçilmesiyle yapılabilir. Simülasyon programı sürüklenme ve saçılma süreçlerini kontrol eden alt programlar kullanılarak (subroutine) yapılabilir. Taşıyıcının sürüklenme işlemini, sürüklenme ve saçılma işlemini, saçılma olarak adlandırılan altprogramların yaptığı düşünülerek basit bir akış diyagramı ile programın ana hatları gösterilebilir (Şekil (3.11)). Simülasyon işlemi sırasında saçılmalar ve sabit bir elektrik alan altındaki sürüklenme hareketi sürekli kendini tekrar eden bir iterasyon işlemi olarak hesaplanır. Şekil 3.11’de görüldüğü gibi bu iki alt program sürekli değişimli olarak çalışır ve her iterasyonda uçuş zamanı hesaplanır.

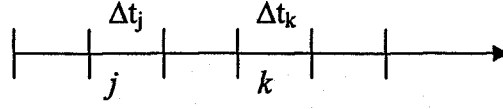


Şekil 3.11. Tek parçacık Monte Carlo hesabının akış diyagramı

Serbest uçuş süresi, değişik saçılma oranlarının toplamı olan toplam saçılma oranına bağlıdır. Her bir saçılma mekanizmasının saçılma oranı enerjiye bağlı olduğundan dolayı toplam saçılma oranı da elektron enerjisinin bir fonksiyonudur. N saçılma mekanizmalarının sayısı olmak üzere, W_T toplam saçılma oranı olsun

$$W_T = \sum_{i=1}^N W_i(E) \quad (3.253)$$

burada N toplam saçılma mekanizması sayısıdır. Toplam zaman aralığı şekil 3.12'deki gibi küçük k aralıklarına bölünebilir.



Şekil 3.12 Toplam zaman aralığının küçük k aralıklarına bölünmesi

Bir saçılma olayının k 'nıncı aralıkta olma olasılığı

$$P_k \Delta t_k = W_T(t_k) \Delta t_k \quad (3.254)$$

ile verilir. Bu saçılma olayının j aralığında olmama olasılığı ise tüm olasılığın olma olasılığından farkına eşittir. Buna göre

$$P_j \Delta t_j = 1 - W_T(t_j) \Delta t_j \quad (3.255)$$

yazılabilir. Farklı aralıklardaki olayların stokastik olarak birbirinden bağımsız olduğunu varsayalım. O zaman k aralığında olan olayları aşağıdaki gibi çarpım şeklinde yazabiliriz

$$P \Delta t_k = \prod_{j=1}^{k-1} P_j \Delta t_j P_k \Delta t_k \quad (3.256)$$

$$= \prod_{j=1}^{k-1} [1 - W_T(t_j) \Delta t_j] W_T(t_k) \Delta t_k \quad (3.257)$$

iki tarafın logaritması alınır ve $\Delta t \rightarrow 0$ limiti ile denklem düzenlenirse

$$P dt = W_T(t) \left[e^{-\int_0^t W_T(t') dt'} \right] dt \quad (3.258)$$

elde edilir. Hesaplarda kolaylık olması açısından elektronun durumunun değişmediği W_0 oranı ile adlandırılan yeni bir 'kendi kendine saçılma (self scattering)' mekanizması tanımlanabilir

$$W_0(E_k) = \Gamma - \sum_{j=1}^N W_j(E_k) \quad (3.259)$$

burada

$$\Gamma = \sum_{j=0}^N W_j(E_k) \quad (3.260)$$

bir sabittir. $W_T \rightarrow \Gamma$ olmak üzere

$$P(t)dt = W_T e^{-\int_0^t W_T dt'} dt \quad (3.261)$$

$$P(t)dt = \Gamma e^{-\int_0^t \Gamma dt'} dt \quad (3.262)$$

$$P(t)dt = \Gamma e^{-\Gamma t} dt \quad (3.263)$$

olur. Serbest uçuş zamanı τ aşağıdaki gibi bulunabilir

$$S(\tau) = \int_0^\tau \Gamma e^{-\Gamma t} dt = r \quad (3.264)$$

burada r sayısı 0-1 aralığında seçilen düzgün rasgele bir sayıdır. Integral çözülürse

$$1 - e^{-\Gamma \tau} = r \Rightarrow \tau = -\ln(1 - r) / \Gamma \quad (3.265)$$

olur. Burada r rasgele bir sayı olduğundan τ aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\tau = -\frac{1}{\Gamma} \ln(r) \quad (3.266)$$

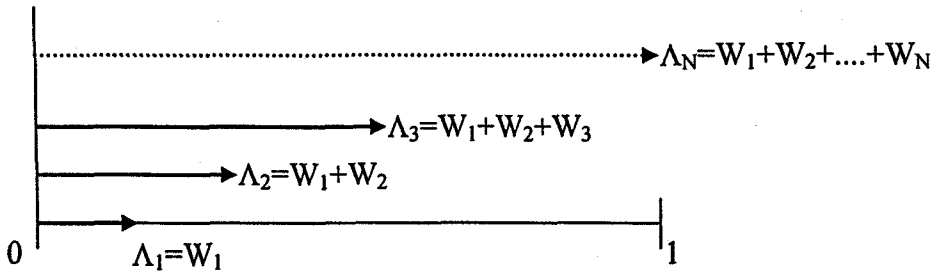
Kendi kendine saçılmanın negatif olmaması için Γ , W_T 'nin en büyük değerinden daha büyük olmalıdır. Bunun yanında kendi kendine saçılma olaylarını minimize etmek için de mümkün olduğunca küçük olmalıdır.

3.7.2. Saçılma Olaylarının Seçimi

Saçılma mekanizmasının seçilebilmesi için aşağıdaki fonksiyon tanımlanabilir

$$\Lambda_n(E_k) = \frac{\sum_{j=1}^n W_j(E_k)}{\Gamma} \quad , \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (3.267)$$

bu Γ tarafından normalize edilmiş saçılma oranlarının toplamıdır. Γ toplam saçılma oranı, N saçılma mekanizmalarının toplam sayısıdır. Gerçekleşen her bir W_j olayının oluşma olasılığı W_j/Γ ile orantılıdır. Bu olasılık ile 0-1 aralığındaki rasgele sayılar arasında bir bağlantı kurulabilir. Bu bağlantı yukarıda tanımlanan fonksiyon kullanılarak yapılabilir.



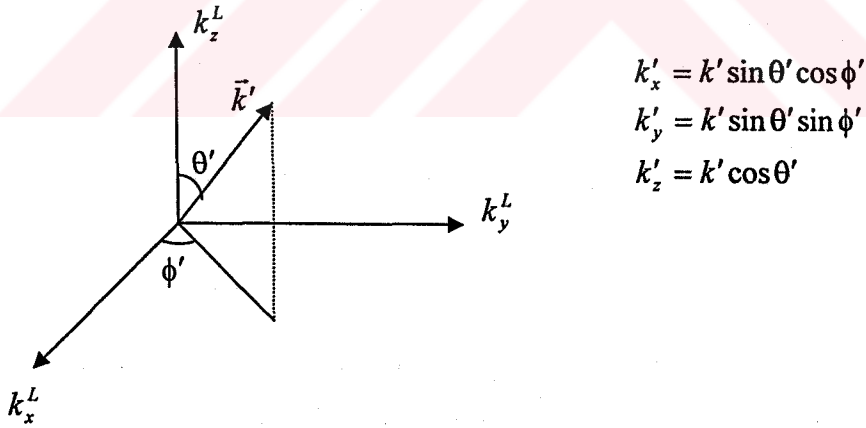
Şekil 3.13. Γ tarafından normalize edilmiş saçılma oranlarının toplamının gösterimi.

Λ_{n-1} ve Λ_n gibi iki fonksiyon arasındaki fark n 'inci saçılma mekanizmasını verir. Bundan dolayı E_k enerjili bir elektron için saçılma mekanizmasının seçimi r_2 sayısı 0-1 aralığında rasgele bir sayı olmak üzere,

$$\Lambda_{n-1}(E_k) < r_2 < \Lambda_n(E_k) \quad , \quad n=1,2,\dots,N \quad (3.268)$$

koşulu ile verilir.

Saçılma mekanizmasının bulunmasından sonra saçılmadan sonraki dalga vektörü $\vec{k}'$ 'nin bilinmesi gerekir. Bu vektörün büyüklüğü enerjinin korunumundan bulunabilir. Saçılma izotropik ise saçılan elektronun yönü saçılmadan sonra her yönde eşit olasılıkla bulunabilir. $P(\theta', \phi') d\theta' d\phi'$ olasılık yoğunluğu, $\vec{k}'$ yarıçaplı küre üzerindeki elde edilebilir durumların sayısı ile orantılıdır. θ' ve ϕ' yarıiletken üzerinde sabitlenmiş (k_x^L, k_y^L, k_z^L) laboratuvar çerçevesine (şekil 3.14) göre ölçülen açılardır.



Şekil 3.14 Laboratuvar çerçevesinde açılarının gösterimi

$$P(\theta, \phi) = \frac{dA}{A} = \frac{k'^2 \sin \theta d\theta d\phi}{4\pi k'^2} = \frac{1}{4\pi} \sin \theta d\theta d\phi \quad (3.269)$$

Buna göre

$$P(\theta', \phi') = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\phi'} \int_0^{\theta'} \sin \theta d\theta d\phi \quad (3.270)$$

$$= \frac{\phi'}{2\pi} \left(\frac{1 - \cos \theta'}{2} \right) \quad (3.271)$$

elde edilir. Burada $\frac{\phi'}{2\pi} \in [0,1]$ ve $\left(\frac{1 - \cos \theta'}{2} \right) \in [0,1]$ olduğundan her ikisi de ayrı ayrı 0 ile 1 aralığındaki rasgele sayılara eşitlenebilir. Birincisi r_3 ikincisi r_4 gibi bir rasgele sayıya eşitlenirse

$$\phi' = 2\pi r_3 \quad (3.272)$$

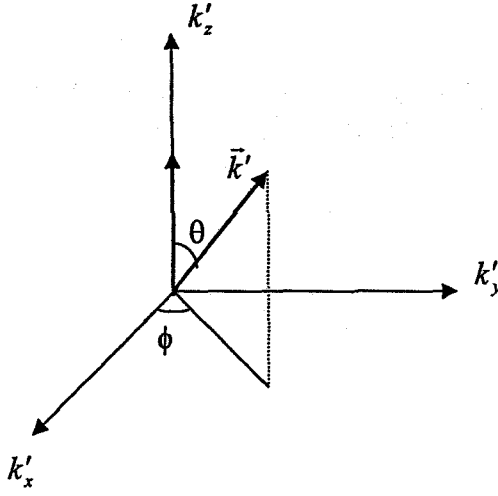
$$\cos \theta' = 1 - 2r_4 \quad (3.273)$$

yazılabilir.

Saçılma izotropik değilse $\vec{k}'$ 'nü seçilen laboratuvar çerçevesine göre k'_x , k'_y , k'_z terimleri cinsinden açıklamamız gerekir. Saçılmadan sonraki elektron dalga vektörünü, k'_z eksenine paralel alınarak oluşturulacak yeni bir koordinat sisteminde çalışmak çok daha kolaydır. Yeni çerçeve (k_x^L, k_y^L, k_z^L) laboratuvar çerçevesinin k_x ekseninde α kadar k_z ekseninde β kadar döndürülmesi ile elde edilebilir. Bu dönüşümün matrisi aşağıdaki gibi yazılabilir

$$A_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.274)$$

θ ve ϕ açıları, $\vec{k}$ 'ne göre $\vec{k}'$ 'nün polar ve tepe açıları olsun. O zaman (k'_x, k'_y, k'_z) çerçevesindeki $\vec{k}$ 'nün bileşenleri şekil (3.15)'deki gibi olur. Saçılmadan sonra



$$\begin{aligned} k'_x &= k' \sin \theta \cos \phi \\ k'_y &= k' \sin \theta \sin \phi \\ k'_z &= k' \cos \theta \end{aligned}$$

Şekil 3.15 $\vec{k}$ 'ne göre $\vec{k}'$ 'nün polar ve tepe açılarının gösterimi

(k'_x, k'_y, k'_z) çerçevesindeki $\vec{k}'$ 'nün bileşenleri aşağıdaki gibi elde edilebilir

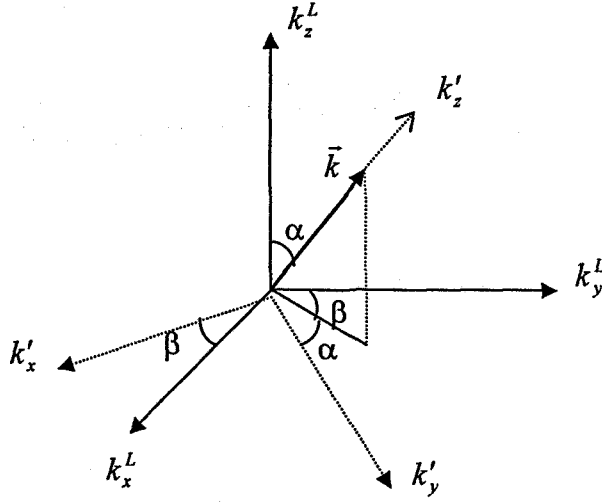
$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = A_{\alpha\beta}^{-1} \begin{pmatrix} k' \sin \theta \cos \phi \\ k' \sin \theta \sin \phi \\ k' \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.275)$$

burada $A_{\alpha\beta}^{-1}$ yukarıda verilmiş olan $A_{\alpha\beta}$ ifadesinin tersidir ve aşağıdaki gibi yazılabilir

$$A_{\alpha\beta}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \beta & \cos \alpha \sin \beta & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \alpha \cos \beta & \sin \alpha \cos \beta \\ 0 & -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (3.276)$$

matris elemanında bulunan sinüs ve kosinüs açıları ise aşağıda verilmiştir

$$\sin \alpha = \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k}, \quad \cos \alpha = \frac{k_z}{k} \quad (3.277)$$



Şekil 3.16 k_z -ekseninin başlangıç dalga vektörüne paralel olduğu yeni çerçeve ile laboratuvar çerçevesi arasındaki ilişki.

$$\sin \beta = \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}, \quad \cos \beta = \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \quad (3.278)$$

bu sonuçlar kullanılarak saçılmadan sonraki dalga vektörünün bileşenleri aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ -k_x & \frac{k_y k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ 0 & \frac{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \sin \theta \cos \phi \\ k' \sin \theta \sin \phi \\ k' \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.279)$$

Yukarıdaki matris denkleminde (k'_x, k'_y, k'_z) saçılmadan önceki dalga vektörünün bileşenleridir. k' saçılmadan sonraki dalga vektörünün büyüklüğü olup enerjinin

korunumundan bulunabilir. θ ve ϕ açıları saçılmadan önceki dalga vektörüne göre saçılmadan sonraki dalga vektörünün polar ve tepe açılarıdır.

3.7.3. Hareket Denklemleri

Monte Carlo metodu düzgün bir elektrik alan altında, yarıiletkendeki taşıyıcı hızının hesabında da kullanılır. Burada taşıyıcı hızı ve enerji hesabı için temel denklemler verilecektir. k -uzayında her bir hacim elemanı içindeki bir elektronun, uçuş zamanına ait bilgiler saklanırsa, ortalama taşıyıcı hızı ve enerjinin hesaplanabileceği dağılım fonksiyonları oluşturulabilir. Bu işlem k -uzayında çok sayıda veri saklanması ile yapılacağından büyük oranda hafıza gerektirir. Çok hafıza gerektiren bu işlemi yapmaya gerek kalmadan, her bir elektronun uçuşu doğrudan izlenerek, hız ve enerjinin ortalama değerleri hesaplanabilir ve sonra tüm uçuşlar üzerinden bir ortalama alınabilir.

Ani taşıyıcı hızı (grup hızı) aşağıdaki gibi yazılabilir

$$v_g = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_v(k) \quad (3.280)$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{-e\vec{F}}{\hbar} \quad (3.281)$$

burada $\vec{F}$ elektrik alanıdır. Serbest uçuş zamanı (τ) boyunca ortalama hız

$$\langle v \rangle_\tau = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E_k}{\Delta k} \quad (3.282)$$

ile verilir $\Delta \vec{k} = \frac{-e\vec{F}}{\hbar} \tau$ ifadesi yerine konulursa

$$\langle v \rangle_\tau = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E_k}{-e\vec{F}\tau} \hbar = \frac{-\Delta E_k}{eF\tau} \quad (3.283)$$

elde edilir. τ süresi için yazılan ortalama taşıyıcı hızı kullanılarak, toplam T simülasyon zamanı boyunca ortalama hız aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\langle v \rangle_T = \frac{1}{T} \sum \langle v \rangle_\tau \quad (3.284)$$

$$= \frac{-1}{eFT} \sum \Delta E_k \quad (3.285)$$

$$= \frac{-1}{eFT} \sum (E_f - E_i) \quad (3.286)$$

E_i elektron uçuşunun başlangıcındaki enerji, E_f ise uçuşun sonundaki enerjidir. Yukarıdaki denkleme göre her bir uçuş süresi boyunca enerjideki artışların (farkların) saklanması gerekir. Aynı mantıkla ortalama enerji de aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\langle E \rangle_T = \frac{1}{T} \sum \langle E \rangle_\tau \quad (3.287)$$

burada $\langle E \rangle_\tau$ iyi bir yaklaşıklıkla

$$\langle E \rangle_\tau \cong \frac{E_i + E_f}{2} \quad (3.288)$$

ile verilir. $\langle E \rangle_\tau$ ve $\langle v \rangle_\tau$ hesabının yapılabilmesi için $\langle E \rangle_\tau$ ve $\langle v \rangle_\tau$ hesaplarının sürüklenme (drift) alt programına (subroutine) eklenmesi gerekir.

3.8. Ensemble Monte Carlo Simülasyonu

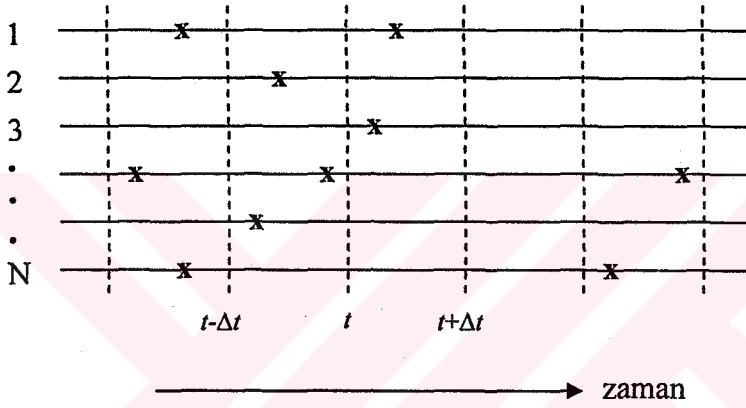
Bir önceki bölümde tartışıldığı gibi tek parçacık Monte Carlo metodu özellikle statik ve düzgün bir elektrik alan altında kararlı durum taşıyıcı geçirgenliği

gibi geçirgenlik hesapları için çok kullanışlı bir yöntemdir. Bununla beraber ensemble Monte Carlo metodu taşıyıcı difüzyonunun analizi, homojen olmayan bir alanda taşıyıcı geçirgenliği, taşıyıcıların kararsız davranışı vb gibi birçok değişik amaç için kullanılabilir. Böyle bir ensemble Monte Carlo metodu külçe (bulk) kristaldeki taşıyıcı geçirgenliğine uygulanabilir.

Ensemble Monte Carlo metodu küçük bir Δt zaman artışı esnasında birçok parçacığın eş zamanlı olarak hesaplanmasını temel alır. Metot dinamik olduğundan geçici parçacık hareketlerinin analizi için uygundur. Bununla birlikte sistem kararlı duruma ulaşıncaya kadar hesaplamalara devam edilirse kararlı durum problemlerine de uygulanabilir. Şekil 3.17 bir ensemble Monte Carlo hesabının sistematik akış diyagramını göstermektedir. Yatay çizgiler zaman eksenini üzerindeki parçacıkların yörüngelerini gösterir. Eksenin sağ tarafına ilerledikçe zaman artmaktadır. Dikine kesikli çizgiler çok parçacık sisteminin gözlemlendiği zamanları gösterir. İki komşu kesikli çizgi arasındaki aralık iki gözlem arasındaki Δt zaman artışına bağlıdır. Yatay çizgiler üzerindeki her bir x saçılmanın oluştuğu zamanı gösterir. Böylece iki komşu x arasındaki mesafe serbest uçuş zamanını gösterir. Tüm parçacık sisteminin gözlenebilmesi için gerçek uzay ve momentum uzayındaki parçacık konumlarının her bir Δt zamanı için hesaplanması gerekir. Uygulanan elektrik alan kararlı olsa bile değişen elektron enerjilerinin zamanla güncellenebilmesi için Δt zaman artışı yeterince küçük seçilmelidir.

Ensemble Monte Carlo metodu sürüklenme ve saçılma işlemlerini içeren iki alt programla yapılabilir. Tek parçacık Monte Carlo metodu için yazılan alt programlar küçük değişikliklerle ensemble Monte Carlo metodu için de kullanılabilir. En önemli fark ensemble Monte Carlo hesabının tüm parçacıklar için Δt zamanında saçılma ve sürüklenme hesaplarının tekrarlanmasını gerektirmesidir. Δt zaman aralığında (t ve $t+\Delta t$ arası olsun) bulunan bir parçacığın hareketine bakılırsa saçılma olaylarının rasgele olduğu görülür. Bundan dolayı Δt zamanında parçacığın kaç kez saçılacağı bilinemez. t 'den $t+\Delta t$ 'ye kadar olan böyle bir hareketi simüle edebilmek için t zamanındaki konum ve momentum vektörlerinin bilindiği ve t 'den sonraki ilk saçılma zamanı t_s 'nin rasgele bir sayıyla bulunabileceği varsayılabilir. Eğer

t_s , $t+\Delta t$ 'den büyükse o zaman parçacık Δt süresi kadar sürüklenir. t_s , $t+\Delta t$ 'den küçükse o zaman parçacık $t+\Delta t$ den önce saçılır. Bu durumda parçacık t_s-t zamanı kadar sürüklenir ve t_s zamanında saçılır. O zaman yeni saçılma zamanı t_s diğer bir rasgele sayıyla bulunmalıdır. Bunun ardından yeni t_s değerinin $t+\Delta t$ değerinden büyük olup olmadığına bakılır ve bu şekilde simülasyon sonuna kadar adımlar tekrarlanır. Ensemble Monte Carlo hesabı için burada anlatılan sırayı takip eden bir alt program şekil 3.18'de gösterilmiştir.

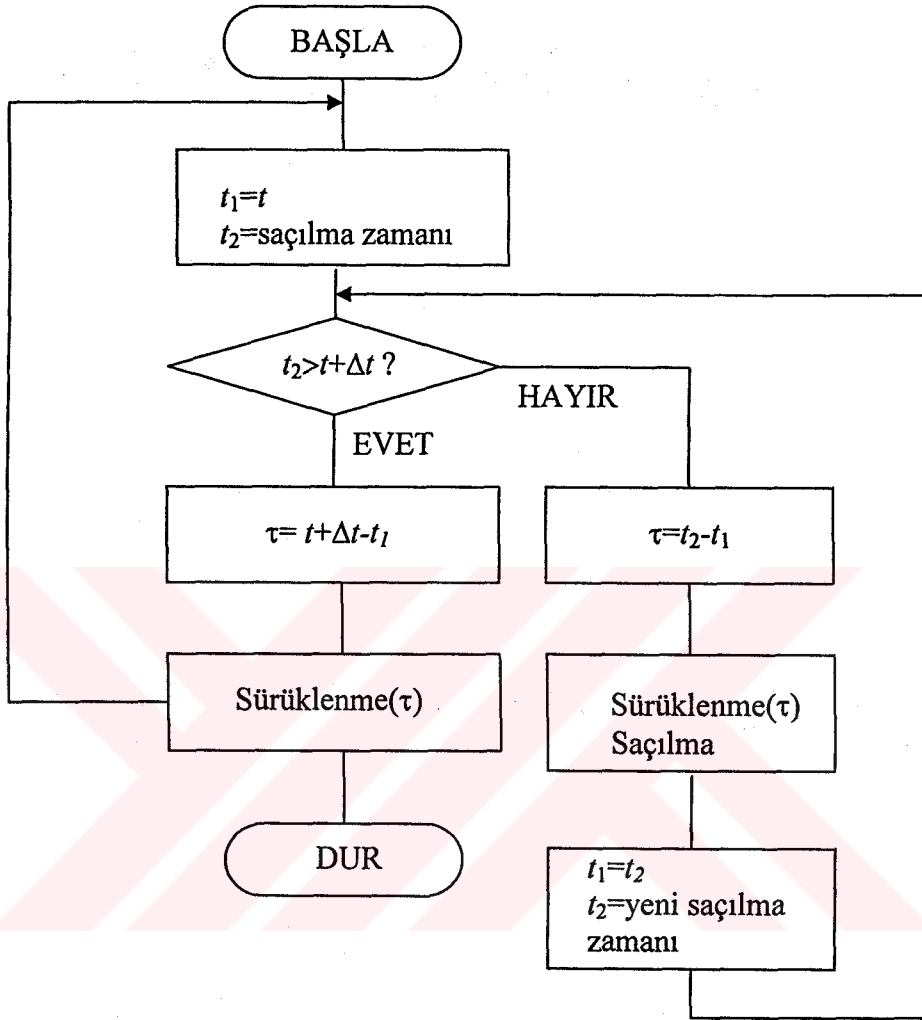


Şekil 3.17. Ensemble Monte Carlo simülasyonunun akış diyagramı. Yatay düz çizgiler her parçacığın yolunu gösterirken dikey kesikli çizgiler modelleme zamanını gösterir. Düz çizgiler üzerindeki x işareti ise saçılma zamanını gösterir.

τ uçuş zamanı esnasında Δr konum vektöründeki artış hareket denklemleri kullanılarak hesaplanabilir. Eğer Δt esnasındaki F elektrik alanı sabit varsayılırsa Δr , uçuş zamanındaki ortalama taşıyıcı hızının uçuş zamanı ile çarpılmasıyla elde edilebilir. Buna göre

$$\Delta r = \langle v \rangle_{\tau} \tau \quad (3.289)$$

yazılabilir. Burada $\langle v \rangle_{\tau}$ denklem 3.283 ile verilir. Eğer parçacığın konumu gerekiyorsa Δr 'nin hesabı sürüklenme alt programına eklenmelidir.



Şekil 3.18. Ensemble Monte Carlo alt programının akış diyagramı

Elektron geçirgenlik aygıtları olası yüksek frekans ve yüksek hız uygulamalarından dolayı ilginç olduğundan çok çalışılmaktadır. Bir aygıt içindeki elektronların geçiş zamanı elektronların durulma zamanı ile kıyaslanabilir yada ondan daha küçük ise aygıta gelen soğuk (cold) elektronlar aygıttan geçişleri sırasında kararlı durum hızına ulaşamayabilirler. Bundan dolayı tek parçacık Monte Carlo yöntemi ile hesaplanan hız-alan eğrileri küçük ölçekteki aygıtlardaki elektronların geçirgenliği için kullanılamaz. Soğuk elektronun aygıta

enjeksiyonundan sonra oluşan geçiş olayları ortalama hızın doyum hızına nazaran ani bir yükseliş (overshoot) göstermesine neden olur. Bu olgu ensemble Monte Carlo metodu ile geniş bir alanda çalışılmıştır. Bulgular kısmında bölüm 4.3'te elde edilen grafiklerde de hızlı artıştan kaynaklanan ani yükseliş (overshoot) olgusu açıkça gözlenmiştir.

3.9. Schrödinger-Poisson Denklemlerinin Kendi İçinde Uyumlu Çözümü

Yüksek kaliteye sahip heteroyapıların oluşturduğu kuantum kuyularının büyütülmesi, düşük boyutlardaki yeni yapıların üretilmesine ve bunların aygıt uygulamalarına olanak tanır. Bu yapıların optik ve geçirgenlik özelliklerinin tam olarak anlaşılabilmesi için Schrödinger ve Poisson denklemlerinin kendi içinde uyumlu olarak (self-consistent) çözülmesi gerekir.

Schrödinger denkleminin çözümünde kullanılan geleneksel yöntem sonlu farklar yöntemidir (Finite Difference Method-FDM). Bu yöntemde gerçek uzay belirli aralıklara bölünür ve Schrödinger denklemi belirli aralıklardan oluşan her bir bölge için ayrı ayrı çözülür. Her bir aralık için çözülen diferansiyel denklem, Ψ dalga fonksiyonu için Schrödinger denkleminin bir vektör çözümünü ve bir matris formülasyonunu verir

$$A\Psi=\lambda\Psi \quad (3.290)$$

A matris operatörü ve λ enerji özdeğerleridir.

AlGaAs/GaAs heteroekleminde z -ekseni büyütme yönünü göstermek üzere bir boyutlu tek elektron Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi verilir (Tan, 1990)

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \Psi(z) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (3.291)$$

AlGaAs/GaAs heteroekleminde z -ekseni büyütme yönünü göstermek üzere bir boyutlu tek elektron Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi verilir (Tan, 1990)

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \Psi(z) + V(z) \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (3.291)$$

burada $\Psi(z)$ kuantize düzeylere ait dalga fonksiyonu, E enerji, $V(z)$ ara yüzeydeki bir boyutlu potansiyel, $\hbar$ Planck sabitinin 2π ile bölünmüş hali ve m^* elektronun etkin kütesidir. Ara yüzeydeki bir boyutlu Poisson denklemi ise şöyle yazılabilir

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s(z) \frac{d}{dz} \right) \phi(z) = \frac{-q(N_D(z) - n(z) - N_A(z))}{\epsilon_0} \quad (3.292)$$

Burada ϵ_s malzemenin dielektrik sabiti, ϵ_0 boş uzayın doygunluğu (permittivitesi), ϕ elektrostatik potansiyel, N_D iyonize olmuş verici (donor) konsantrasyonu, $n(z)$ iki boyutlu elektron yoğunluğu toplamı ve N_A eklemdaki iyonize olmuş alıcıları (acceptor) gösterir. İletim bandındaki elektron dağılımını bulabilmek için V potansiyel enerjisini iletim bant enerjisine eşit olarak alabiliriz. Keyfi bir potansiyel enerji profiline sahip bir kuantum kuyusunda V potansiyel enerjisi elektrostatik potansiyel ϕ ile aşağıdaki gibi ilişkilendirilebilir

$$V(z) = -q \phi(z) \Delta E_c(z) \quad (3.293)$$

Burada ΔE_c heteroeklem ara yüzeyindeki bant süreksizliğine göre ölçülen sanki potansiyel (pseudopotential) enerjisidir. Denklem (3.291)'deki $\Psi(z)$ ve denklem (3.292)'deki $n(z)$ aşağıdaki gibi ilişkilendirilebilir

$$n(z) = \sum_{k=1}^m \Psi_k^*(z) \Psi_k(z) n_k \quad (3.294)$$

Burada m dolu seviyelerin sayısı ve

$$n_k = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{E_k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}} dE \quad (3.295)$$

biçiminde olup E_k özenerjidir.

Denklem (3.291) ve (3.292)'nin kendi içinde uyumlu (self-consistent) bir çözümünü bulabilmek için bir iterasyon işlemi yapmalıyız. Bir $V(z)$ deneme potansiyeli ile başlayarak dalga fonksiyonlarını ve bunlara ait E_k özenerjilerini, denklem (3.294) ve denklem (3.295)'in yardımıyla $n(z)$ elektron yoğunluğunu hesaplayabiliriz. Hesaplanmış olan $n(z)$ ve bilinen $N_D(z)$ verici (donor) konsantrasyonu ile $N_A(z)$ alıcı (acceptor) konsantrasyonu kullanılarak denklem (3.292)'nin çözümü ile ϕ bulunabilir. Bu sonuç denklem (3.293)'te kullanılarak yeni $V(z)$ elde edilebilir. Sonraki iterasyonlarda kendi içinde uyumlu çözüm istenen hata kriterine kadar yapılarak $V(z)$ ve $n(z)$ için son çözümler bulunur. Schrödinger denkleminin formülasyonu Ek A'da, Poisson denkleminin formülasyonu ise ek B'de verilmiştir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. Schrödinger/Poisson Denklemlerinin Kendi İçinde Uyumlu Sayısal Çözümü ve Hetero Eklemlerin Bazı Elektronik Özellikleri

Sanki-iki boyutlu elektron gazının yüksek mobiliteye sahip olduğunun farkedilmesinden sonra modülasyon katkılama tekniği geliştirilmiştir. Yöntem ilk olarak Dingle (1978) ve Störmer (1980) tarafından GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs heteroyapısına uygulanmıştır. Serbest taşıyıcıların ve safsızlık katkılama oranlarının belirlediği ara yüzey potansiyeli içinde oluşan enerji seviyelerinin, her seviyedeki elektron yoğunluğunun ve dalga fonksiyonlarının malzeme parametrelerine nasıl bağlı olduğu değişik veriler ışığında incelenebilir. Potansiyelin biçimi elektron yoğunluğu tarafından belirlenir, fakat enerji seviyeleri diğer tarafta her seviyede tutulabilecek elektron sayısını belirler. Bu nedenle hetero yapılarda oluşan enerji seviyelerini ve her seviyedeki elektron yoğunluğunu bulmak için hesaplamaların kendi içinde uyumlu olması gerekir.

Heteroyapıların seçimli olarak katkılanması fikri basit ve etkili bir şekilde geliştirilmiştir. Katkılanmamış bir heteroekleme göre katkılama yapılmış olan bir heteroeklemede safsızlıkların konumu, son fiziksel durumu keskin bir şekilde etkiler. Elektronların ve vericilerin (donörler) yere bağlı olarak birbirinden ayrılmasının iki önemli sonucu vardır:

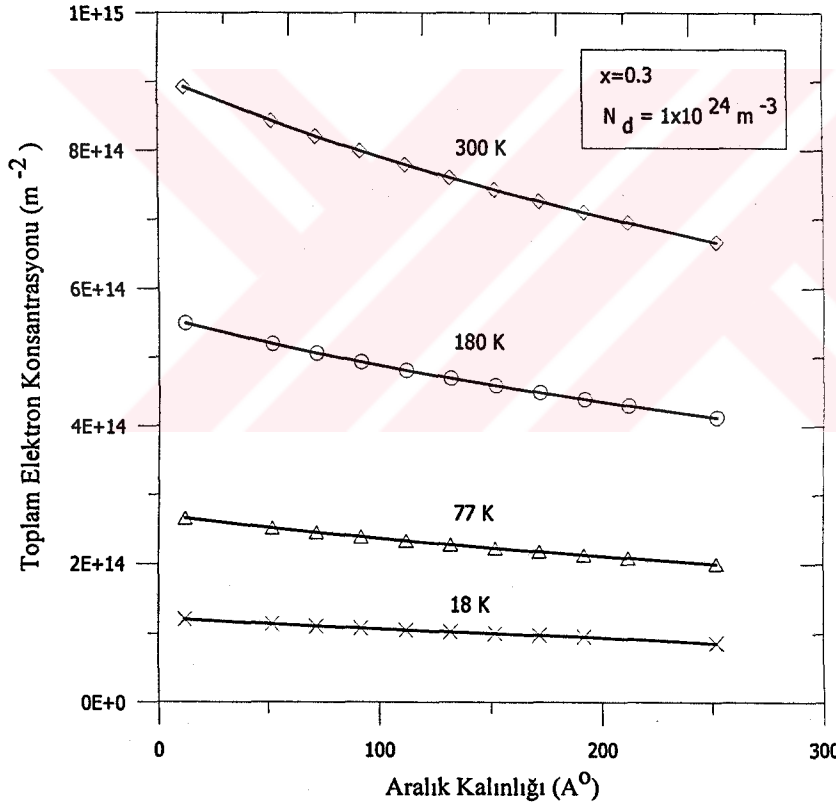
- (i) İyonize donörler ve negatif yüklü elektronlar arasında oluşan dipol yapısından dolayı bant bükülmesi oluşur. Elektronun içine düştüğü son potansiyel şekli arayüzey yakınında üçgene benzeyen bir yapıdır ve $z=0$ 'da engel tarafından sınırlandırılmıştır. Sonuç olarak burada bağlı durumlar oluşur ve enerji düzeyleri arasındaki fark ısısal veya çarpışmalardan kaynaklanan genişlemelerden daha büyükse taşıyıcı hareketi etkin olarak sanki iki boyutludur.
- (ii) Serbest taşıyıcıların varlığından dolayı tabaka düzleminde $T=0$ K°'de bile elektriksel iletim oluşabilir. Diğer yandan z-ekseni yönündeki akım akışı, elektronun bu eksenindeki hareketi sınırlandırılmış olduğundan dolayı çok

zordur. Modülasyon katkılmasının en önemli avantajı taşıyıcılar ve vericiler (donorlar) arasındaki ayrılmadan dolayı safsızlık saçılmasının azalması ve mobilitenin yüksek oranda artmasıdır.

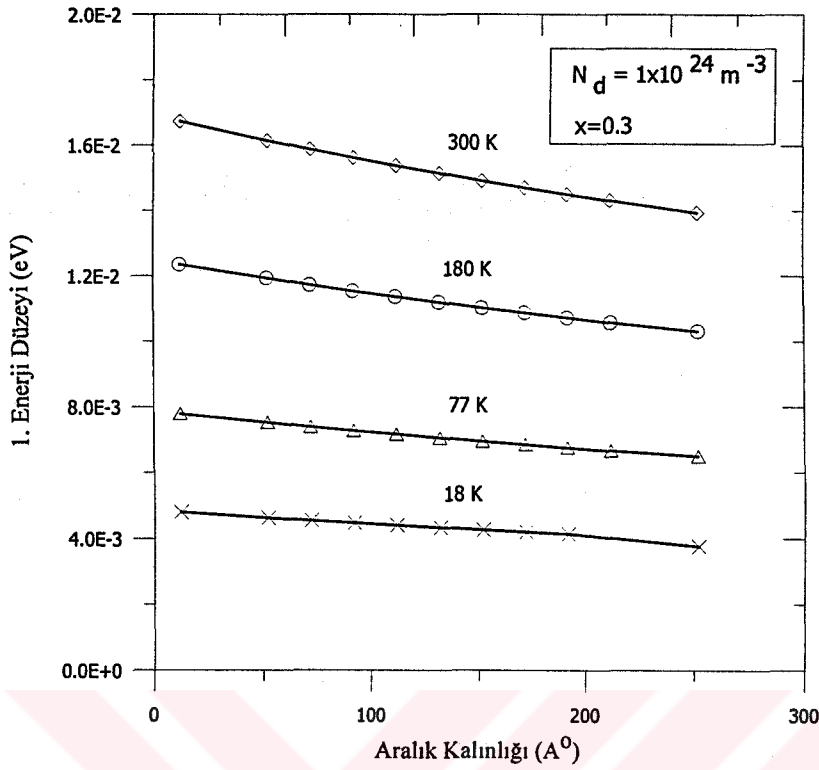
Modülasyon katkılama tekniğinin kullanıldığı bir yapı için değişik parametreler ışığında Schrödinger ve Poisson denklemlerinin kendi içinde uyumlu çözümünden elde edilen bazı sonuçlar incelenebilir.

Şekil 4.1’de toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişimi birkaç farklı sıcaklık için gösterilmiştir. Yüksek sıcaklıklarda daha fazla elektron geçişi olduğundan toplam elektron konsantrasyonu sıcaklıkla artmaktadır. Aralık kalınlığı artırıldıkça elektron geçişi de azalacağından iki boyutlu elektron gazını oluşturan kyunun eğimi de azalacaktır. Kyunun eğimi azalınca potansiyel profili de yayvanlaşacağından dolayı şekil 4.2’de görüldüğü üzere enerji düzeylerinin değeri de düşecektir. Verici yoğunluğu artırılırsa iki boyutlu elektron gazının konsantrasyonunda artış olması beklenir. Şekil 4.3’de gösterildiği üzere yüksek verici konsantrasyonları için yüksek elektron yoğunlukları elde edilmiştir. Düşük sıcaklık ve düşük verici yoğunlukları için sistemdeki toplam elektron konsantrasyonundaki değişimde son derece azdır. Yüksek elektron yoğunluklarında kuyu içindeki elektron konsantrasyonunun artması ile birlikte potansiyelin eğimi de artmaktadır. İki boyutlu elektron gazının olduğu kuyu daralırsa enerji düzeylerinin değeri büyümelidir. Şekil 4.4’de görüldüğü üzere yüksek oranda verici konsantrasyonu değerleri için enerji düzeylerinin değeri büyük olurken aralık kalınlığının artırılmasıyla elektron gazının yoğunluğu azaldığından dolayı enerji düzeylerinin değeri de azalmaktadır. Şekil 4.5-4.7 birkaç farklı alüminyum konsantrasyonu için toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişimini göstermektedir. Alüminyum konsantrasyonu artırıldıkça iki boyutlu elektron gazının konsantrasyonu çok düşük oranlarda azalmaktadır. İki boyutlu elektron gazının konsantrasyonunun azalması ile potansiyelin eğimi de azalır. Buna göre daha önceki grafiklerde görüldüğü gibi enerji düzeyinin az oranda düşmesi beklenir. Ancak alüminyum konsantrasyonu artırıldıkça ara yüzeyin iletim bandındaki süreksizliğin (iki farklı malzemenin yasak enerji değerleri arasındaki

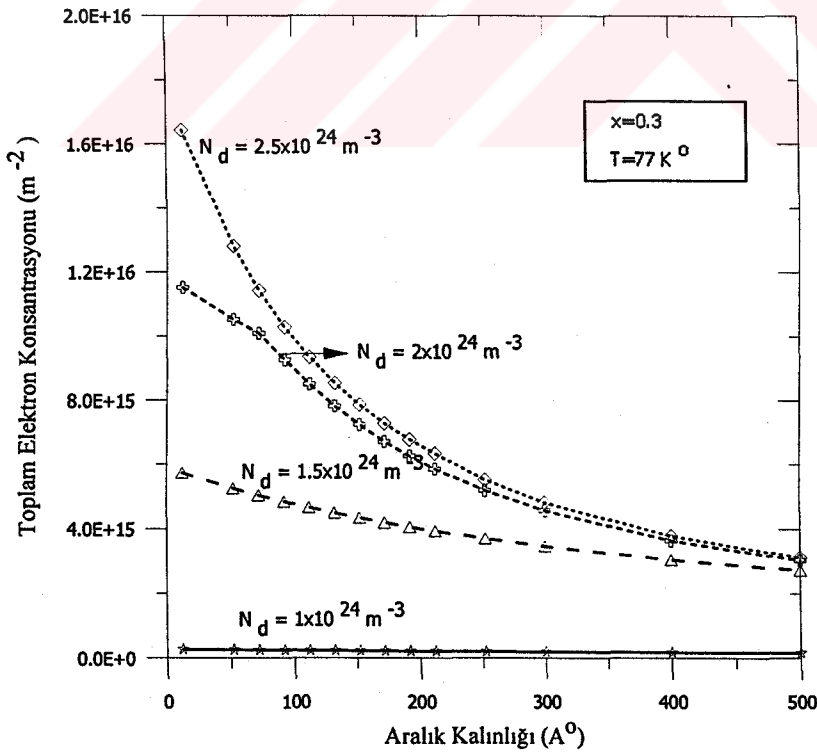
fark, V_b) değeri de artar. Süreksizlik değerinin artmasıyla dalga fonksiyonunun engel içrisine sızma yüzdesi azalır ve iki boyutlu elektron gazının daha iyi tuzaklanması sağlandığından dolayı şekil 4.8 ve 4.9'da görüldüğü üzere enerji düzeyinin değeri de büyür. Alüminyum konsantrasyonunun artırılmasıyla ortaya çıkan bu durum sadece bir enerji düzeyi göz önüne alınarak tekli bir heteroeklemde kendi içinde uyumlu enerji düzeyi ve yük geçişi hesabının yanında süreksizliğin sonsuz kabul edildiği Fang-Howard çözümlerinde de gözlenmiştir (Bastard, 1988).



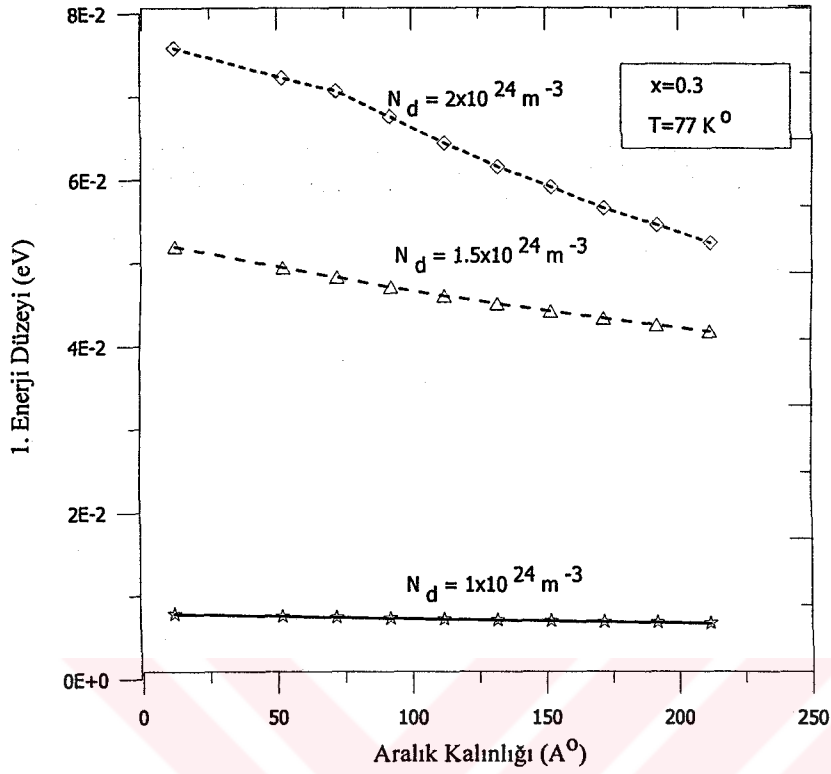
Şekil 4.1. Toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı sıcaklık için gösterilmesi.



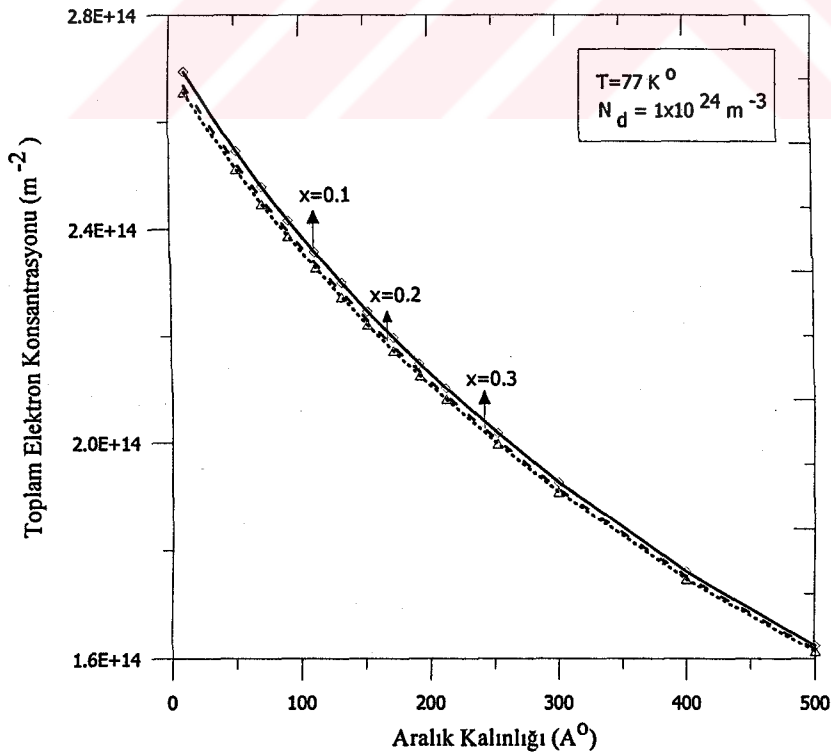
Şekil 4.2. Birinci enerji düzeyinin aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı sıcaklık için gösterilmesi.



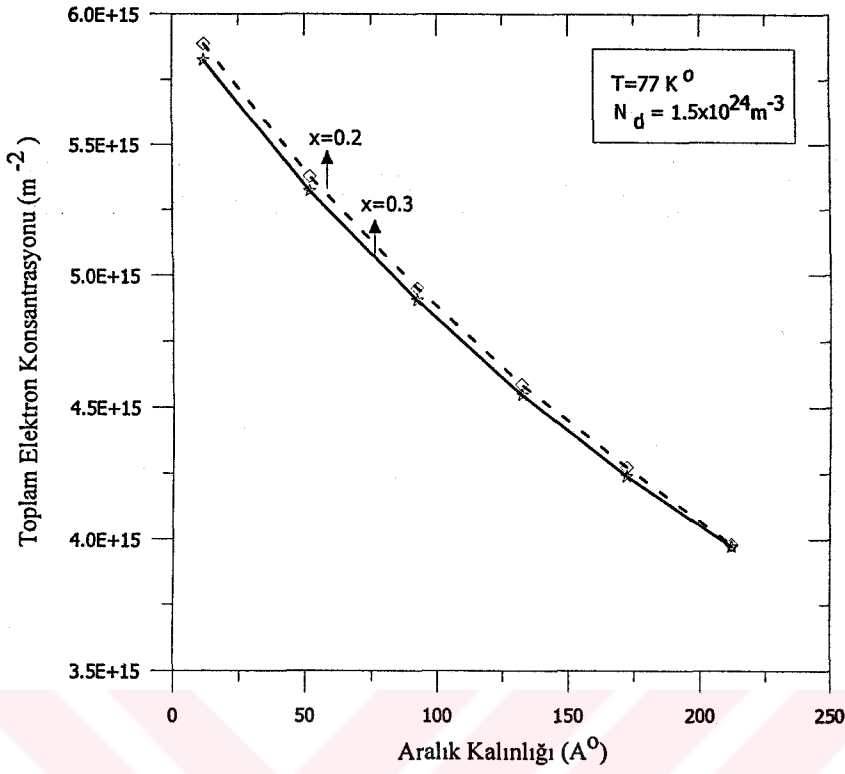
Şekil 4.3. Toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı verici yoğunluğu için gösterilmesi.



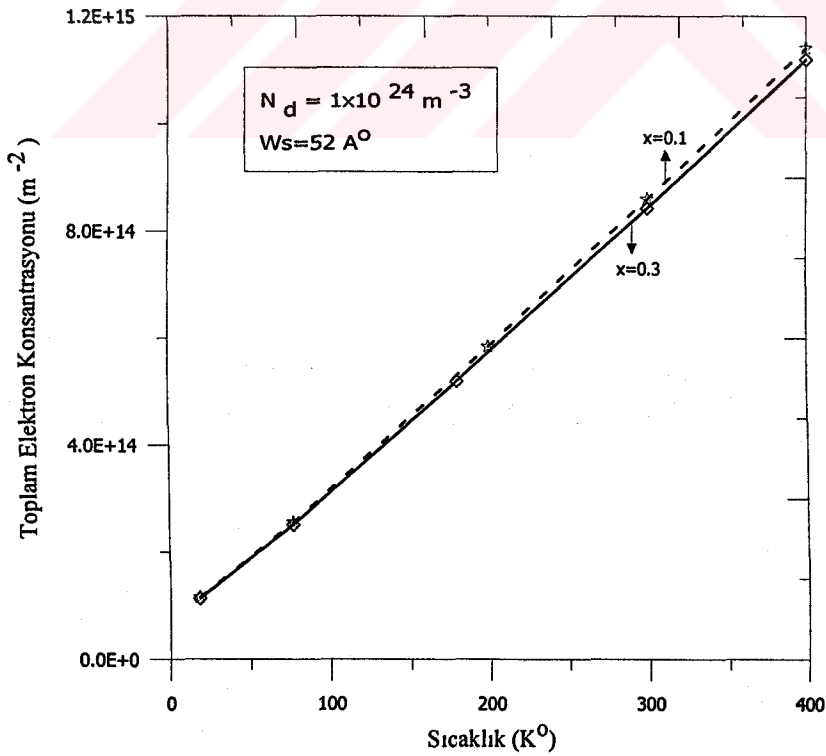
Şekil 4.4. Birinci enerji düzeyinin aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı verici konsantrasyonu için gösterilmesi.



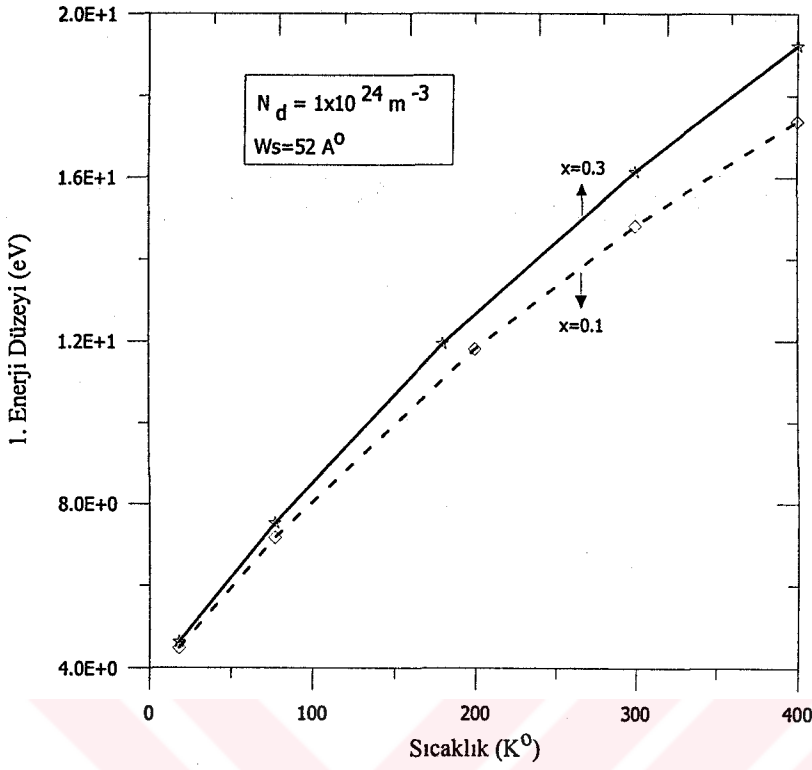
Şekil 4.5. Toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi.



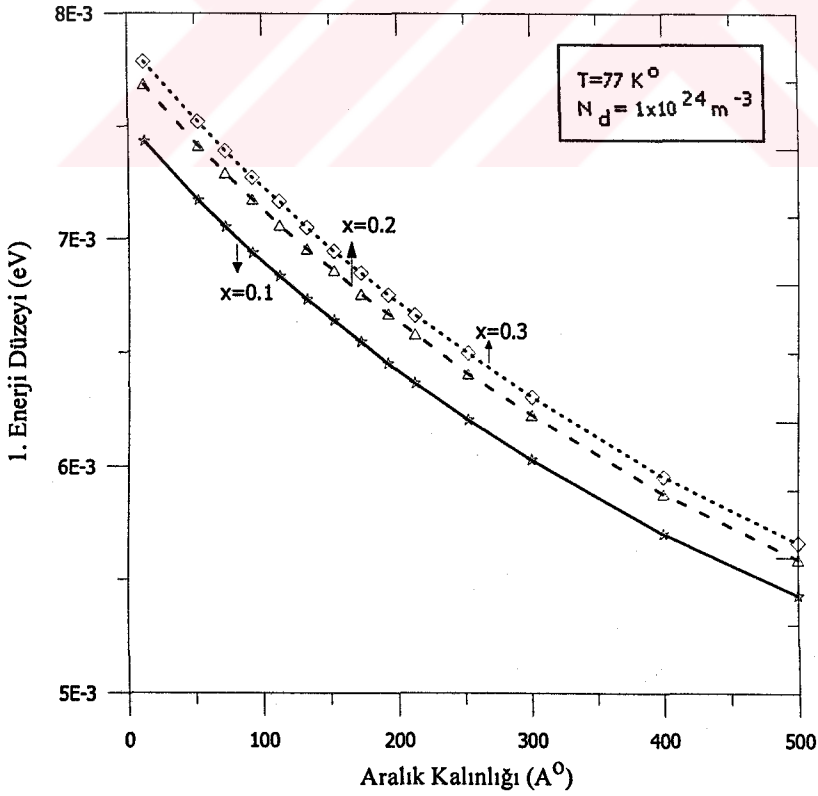
Şekil 4.6. Toplam elektron konsantrasyonunun aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi (verici konsantrasyonu farklı).



Şekil 4.7. Toplam elektron konsantrasyonunun sıcaklığa göre değişiminin iki farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi



Şekil 4.8. Birinci enerji düzeyinin sıcaklığa göre değişiminin iki farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi



Şekil 4.9. Birinci enerji düzeyinin aralık kalınlığına göre değişiminin birkaç farklı Al konsantrasyonu için gösterilmesi.

4.2. Manyetik Alan Altında Kimyasal Potansiyel Salınımları

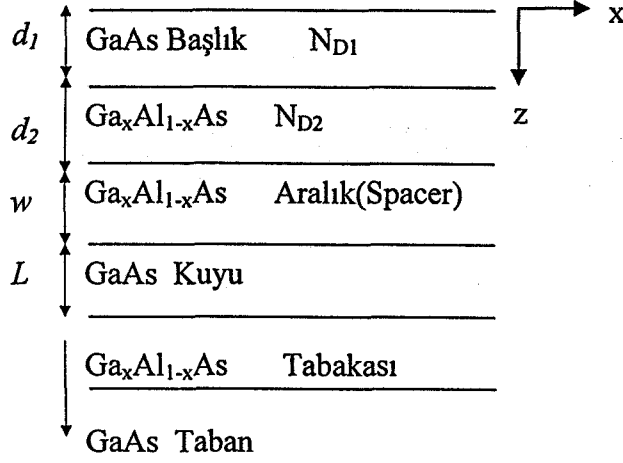
İki boyutlu elektron gazına (2BEG) uygulanan düzgün bir manyetik alanın etkileri uzun zaman önce Landau (Landau, 1930) tarafından yeni enerji düzeylerinin keşfinden bu yana, çok geniş olarak çalışılmıştır. Bu alandaki çalışmaların önemli bir kısmı Shubnikov-de Haas (SdH) salınımları (Ando, 1982) ile tamsayı (Klitzing, 1980) ve kesirli kuantum Hall (Tsui, 1982; Eisenstein, 1990) etkileri üzerinde yoğunlaşmıştır.

Düzgün bir manyetik alan altındaki $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heteroekleminde oluşan iki boyutlu bir elektron gazı (2BEG) için kimyasal potansiyel salınımları yakın zamanda Zawadski ve Lassnig (Zawadski, 1984) tarafından çalışılmıştır. Sayısal çalışmalarında sadece ilk alt bandın dolu olduğunu (elektrik kuantum limit) varsaymışlardır. Bunun yanında kimyasal potansiyel, öz (specific) ısı ve elektron gazının manyeto-termal salınımları Landau düzeylerinin genişlemesinin gaussyen yapıda olduğu bir durum varsayımı ile manyetik alanın bir fonksiyonu olarak elde edilmiştir. Başka bir makalede Sanches-Dehesa ve arkadaşları (Sanchez-Dehesa, 1987) sıfır sıcaklık limitinde ve sabit bir manyetik alan altında bulunan $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ yapısında oluşan 2BEG'daki kimyasal potansiyel ve altbant enerji değişimlerini çalışmışlardır. Çalışmalarında iletim enerji bant profilini, alt bant enerji düzeylerini ve her bir banttaki elektron doluluğunu Hartre yaklaşımıyla kendi içinde uyumlu (self consistent) olarak bulmuşlardır. Çalıştıkları geometrideki katkı konsantrasyonlarını ve parametreleri üç alt banda kadar olan düzeylerin elektronlarla dolu olduğunu sağlayacak biçimde seçmişlerdir. Elektron konsantrasyonlarının yanında alt bant düzeylerinin ve kimyasal potansiyelin manyetik alandan etkilendiğini bulmuşlardır. Alt bantlar arasındaki enerji farkı manyetik alanla değişmektedir ve bu değişim kuantum kuyusundaki elektron yük yoğunluğunun salınımlarına atfedilmektedir. Alt bantların kesişmesi ve elektronların birinci alt bandın ötesinde yer almalarından dolayı kimyasal potansiyelin salınımlı davranışı karmaşık bir hal alır. Diğer bir çok teorik ve deneysel çalışmalarda sabit veya değişen bir manyetik alan altında bulunan 2BEG'nin değişik özellikleri (manyetizasyon, ısı kapasitesi, manyetodirenç, spin etkileri) ele alınmıştır.

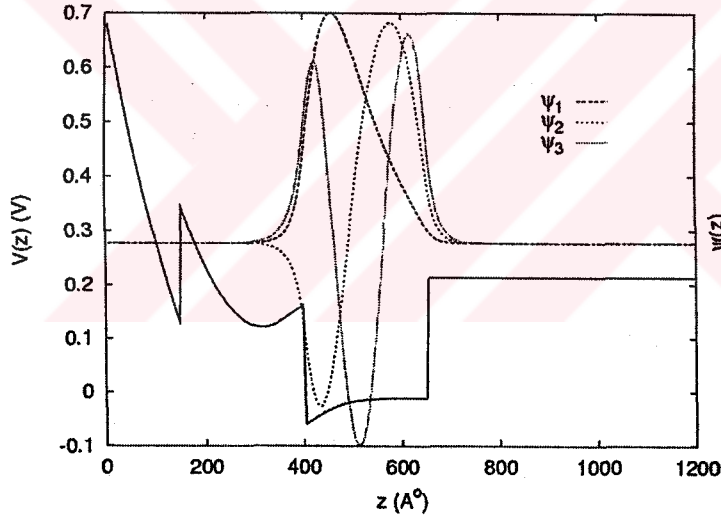
Yukarıda ele alınan özellikler sonlu bir sıcaklık altındaki 2BEG’ında ilk altbandın dışındakiler dolu olduğu durum için nadiren çalışılmıştır. Bundan dolayı bu çalışmada $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda oluşan 2BEG göz önüne alınmış ve düzgün ve sabit bir manyetik alan altında birinci, ikinci ve üçüncü alt bantlar elektronlarla dolu iken sistemin kimyasal potansiyelindeki değişim incelenmiştir. İletim enerji bant profili, enerji alt bantları, her bir banttaki elektron konsantrasyonu manyetik alan yokken sayısal olarak Poisson ve Schrödinger denklemlerinin kendi içinde uyumlu çözümü ile bulunmuştur. Bu çözümler her sıcaklık için ayrı ayrı elde edilmiştir. Sonra kuyu içindeki elektron konsantrasyonunun manyetik alanla değişmediği varsayımıyla, farklı sıcaklıklarda ve değişik formlardaki düzey genişlemeleri için uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyelin değişimi bulunmuştur. Genişlemenin etkisi düzey genişlemesinin eksponansiyel, lorentziyan ve gausyen olduğu durumlar için incelenmiştir.

4.2.1. Teori ve Formülasyon

Burada amaç birden üçe kadar olan dolu alt bantlardaki düzey genişlemesinin, değişik formlar için düzgün bir manyetik alanda bulunan 2BEG’nın kimyasal potansiyel salınımlarının karşılaştırmalı olarak çalışılmasıdır. Şekil 4.10’da gösterilen geometriye bağlı olarak oluşmuş tipik bir iletim bant enerjisi profili şekil 4.11’de gösterilmiştir. Ayrıca şekil 4.11’de 4.2 K sıcaklık için bu yapının oluşturduğu kuantum kuyusunda bulunan ilk üç enerji özdeğeri ve bunlara ait dalga fonksiyonları gösterilmiştir. d_1 uzunluklu GaAs kapağına (cap) o bölgede bulunan yüzey yüklerini hesaba katmak için 0.7 V büyüklüğünde bir potansiyel uygulandığı varsayılmıştır (Davies, 1998). Şekilde gösterilen durum için sadece birinci alt bant doludur. Bu heteroyapıya bir manyetik alan uygulandığı zaman her enerji bandı Landau düzeyleri olarak bilinen yeni enerji düzeylerine ayrılır. Uygulanan manyetik alanın heteroeklem arayüzeyinin normali doğrultusunda $(0,0,B)$ olduğu varsayılmıştır. Sonuçta B manyetik alanı fiziksel öneme sahip olduğundan sonuçlar A vektör potansiyelinden bağımsız



Şekil 4.10. Simülasyonlarda kullanılan numunenin geometrik organizasyonu



Şekil 4.11. İletim bant profili (kalın çizgi) ve şekil 4.10'da gösterilen geometriye bağlı olan kuantum kuyusunda bulunan ilk üç dalga fonksiyonu. Kullanılan parametreler: $d_1=152 \text{ Å}$, $d_2=200 \text{ Å}$, $N_{D1}=1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_{D2}=1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $w=52 \text{ Å}$, ve $L=252 \text{ Å}$, $\epsilon_{\text{GaAs}}=12.9$, $\epsilon_{\text{GaAlAs}}=13.1$, $m^*=0.069 m_0$. Birinci alt banttaki elektronların yoğunluğu $n_s=4.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ve kuyunun tabanına göre ölçülmüş olan ilk üç enerji özdeğeri sırasıyla 44.2, 65.2 ve 97.0 meV. Dalga fonksiyonları için çizilmiş olan sağ taraftaki eksen keyfi birimdedir.

olacaktır. Bundan dolayı $(0, Bx, 0)$ şeklinde bir vektör potansiyeli seçebiliriz. O zaman manyetik alan varken tek bir elektron için Hamiltonyen aşağıdaki gibi olur

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} - eBx \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(z) \quad (4.1)$$

burada $V(z)$ şekil 4.11’de gösterilmiş olan potansiyel profilidir. Etkin potansiyel $V(z)$ kuantum kuyusunda sınırlandırılmış olan elektronları, safsızlıkların yarattığı elektrostatik potansiyeli ve kuyunun engel potansiyellerini içerir. Yukarıda yazılan Hamiltonyenin özfonksiyonları aşağıdaki gibidir

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_y y} u(x, z) \quad (4.2)$$

burada L_y numunenin y -yönündeki boyutu olup $u(x, z)$ sadece x ve z ’nin bir fonksiyonudur. $\psi(r)$ ’ye bağlı enerji özdeğerleri ise aşağıdaki gibi yazılabilir (Bastard, 1988)

$$E_{in\sigma_z} = E_i + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + g^* \mu_B \sigma_z \quad (4.3)$$

burada $n=0,1,2,\dots$ pozitif bir tamsayı, $\omega_c = eB/m^*$ sinklotron frekansı, g^* malzemenin Lande g faktörü, μ_B Bohr manyetonu ve σ_z sadece $\pm 1/2$ değerlerini alabilen spin projeksiyonudur. E_i manyetik alan yokken kuantum kuyusundaki enerji düzeyleridir, ikinci terim manyetik alan altında i ’inci alt banda bağlı olan Landau düzeyleridir. Denklem 4.3’deki spin yarılmaması (spin splitting) gösteren terim bu çalışmanın geri kalan kısmında ihmal edilmiştir. Böylece denklem 4.3’te sadece i ’ninci alt banda bağlı olan n ’inci Landau düzeyinin enerjisi kalır.

Her bir Landau düzeyindeki elektronların yoğunluğunu hesaplayabilmek için elektron durumlarının yoğunluk fonksiyonunun bilinmesi gerekir. Durum yoğunluğu her i alt bandına bağlı durumların yoğunluğunun bir toplamı olarak yazılabilir

$$D(E) = \sum_i^M D_i(E) \quad (4.4)$$

burada M alt bantların sayısıdır. Birim alan başına her alt bant için durum yoğunluğu aşağıdaki gibi yazılabilir

$$D_i(E) = \frac{1}{2\pi\lambda^2} \sum_n \delta(E - E_{in}) \quad (4.5)$$

burada $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ manyetik uzunluk olarak bilinir ve E_{in} denklem 4.3'te verilmiş olan i 'ninci alt banda bağlı n 'inci Landau düzeyinin enerjisidir. Denklem 4.5'teki durum yoğunluğuna benzeyen delta, safsızlıklar ve fononlardan saçılan elektronlardan kaynaklanır. Bunun bir sonucu olarak durum yoğunluğu genişler. Düzey genişlemesi olan Γ 'nın çıkarılışı Ando ve Uemura (Ando, 1974) tarafından yapılmıştır. Çalışmalarında mobilite μ_m ile $\Gamma \propto \mu^{1/2}$ oranına sahip bir lorentziyan tipi genişleme olduğunu göstermişlerdir. Bununla birlikte genişlemenin gausyen formu gibi başka yapılarda önerilmiş (Ando, 1982; Gornik, 1985) ve geniş bir alanda çalışılmıştır. Bu çalışmada gausyen ve lorentziyan tipi genişlemelere ek olarak teorik bir ispatlama yapmadan eksponansiyel tipi genişlemede kullanıldı ve bu üç tip genişlemeye bağlı sonuçlar karşılaştırıldı. Bazı çalışmalarda (Schwarz, 2002) deneysel ve teorik sonuçları uyumlu hale getirebilmek için sabit bir fon (background) durum yoğunluğu, sıfır alan durum yoğunluğuna eklenmiştir. Bu çalışmada böyle bir terim göz önüne alınmamıştır.

Gausyen ve lorentziyan tipi genişlemeler sırasıyla aşağıdaki gibi verilir(Ando, 1982; Gornik, 1985)

$$D_i(E) = \frac{1}{2\pi\lambda^2} \sum_n \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma_G} e^{-(E-E_{in})^2/2\Gamma_G^2} \quad (4.6)$$

$$D_i(E) = \frac{1}{2\pi\lambda^2} \sum_n \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_L}{(E-E_{in})^2 + \Gamma_L^2} \quad (4.7)$$

Bu çalışmada eksponansiyel tipi genişlemenin aşağıdaki formda olduğu varsayılmıştır

$$D_i(E) = \frac{1}{2\pi\lambda^2} \sum_n \frac{1}{2\Gamma_E} e^{-|E-E_{in}|/\Gamma_E} \quad (4.8)$$

burada denklem (4.6-4.7-4.8)'de bulunan Γ 'lar her düzey genişlemesine bağlı düzey genişleme parametreleridir. Bu çalışmada tüm sıcaklıklar ve manyetik alan değerleri için Γ 'ların sabit olduğu varsayılmıştır. İki boyutlu elektronların toplam yoğunluğu aşağıdaki gibi verilir:

$$n = \int_0^\infty D(E) f(E) dE = \sum_i \int_0^\infty D_i(E) f(E) dE \quad (4.9)$$

burada $f(E) = [1 + \exp((E - \mu)/k_B T)]^{-1}$ Fermi-Dirac fonksiyonu ve $D_i(E)$ kullanılan genişleme tipine uygun durum yoğunluğu fonksiyonudur. Göz önüne alınan sistem şu durumlar için incelenebilir: (i) elektron konsantrasyonu sabit iken manyetik alan değişimine karşı kimyasal potansiyeli değiştirmek, (ii) kimyasal potansiyeli sabit tutup manyetik alan değişimine karşı elektron konsantrasyonunu değiştirmek, (iii) hem elektron konsantrasyonunu hem de kimyasal potansiyeli manyetik alanın bir fonksiyonu olarak değiştirmek. Çalışmamızda göz önüne alınan alanlar için elektron konsantrasyonu sabit varsayıldı, buna göre yukarıdaki durumlardan sadece (i) göz önüne alınmıştır. Bu duruma göre verilen bir manyetik alan, sıcaklık ve elektron yoğunluğu için denklem (4.9)'daki tek bilinmeyen μ kimyasal potansiyeldir.

Denklem (4.9) $\mu(B)$ için yarılama metodu (Press, 1986) kullanılarak çözülmüş ve son derece hızlı yakınsadığı görülmüştür.

Üç tip genişleme modelini karşılaştırmayı kolaylaştırmak amacıyla lorentziyan ve eksponansiyel genişleme için düzey genişleme parametrelerinin genişlemelere bağlı durum yoğunluğu fonksiyonu, gausyen genişlemenin yarı maksimum değerinde olacak biçimde alınmıştır. Örneğin genişleme parametreleri $\Gamma_L = \sqrt{2 \ln 2} \Gamma_G = 1.2 \Gamma_G$ olarak seçilirse gausyen ve lorentziyan yapıdaki genişleme yarı maksimum değerine eşit olur. Benzer hesaplama gausyen ve eksponansiyel yapıdaki genişlemeler içinde yapılabilir. Böylece bu çalışmanın bundan sonraki aşamalarında lorentziyan ve eksponansiyel genişlemeler için düzey genişleme parametreleri, gausyen tipi genişlemeye bağlı olarak aşağıdaki gibi alınmıştır:

$$\Gamma_L = 1.2 \Gamma_G \quad (4.10)$$

$$\Gamma_E = 1.7 \Gamma_G$$

4.2.2. Sonuçlar ve Tartışma

Bir, iki ve üç alt bant dolu iken hesaplarda kullanılan heteroeklem parametreleri, ilk üç özdeğer ve bunlara ait elektron konsantrasyonları tablo 4.1’de gösterilmiştir. Tabloda verilen enerji özdeğerleri ve elektron konsantrasyonları $T=4.2$ K’de hesaplanan değerlerdir. Yüksek sıcaklıklarda elektron konsantrasyonlarında küçük değişiklikler olur. Bu değişiklikler alt bant enerjilerinde herhangi bir farklılık yaratmazlar. Örneğin tek bantın dolu olduğu durumda sıcaklık 4.2’den 30 K değerine artırılırsa elektron sayısı yüzde birden daha az artarken, ikinci alt bant toplam sayının yüzde ikisinden daha az artar. GaAs ve GaAlAs’ın dielektrik sabitleri sırasıyla 12.9 ve 13.1 olarak alınmıştır. Etkin kütle, m_0 serbest elektron kütlesi olmak üzere, $m^*=0.069m_0$ olarak alınmıştır. Al konsantrasyonu her zaman $x=0.3$ olarak alınmıştır.

dolu alt bantlar bant	1. alt bant	2. alt bant	3. alt
d_1 (Å°)	152	152	152
d_2 (Å°)	200	152	190
w (Å°)	52	52	12
L (Å°)	252	252	452
N_{D1} (10^{18} cm ⁻³)	1	1	0.5
N_{D2} (10^{18} cm ⁻³)	1.2	2.4	2.5
n_{si} (10^{11} cm ⁻²)	4.57	9.68	15.2
	-	1.11	3.02
	-	-	0.46
E_1 (meV)	44.2	71.1	90.7
E_2 (meV)	65.2	100.5	132.5
E_3 (meV)	97.0	129.6	141.3

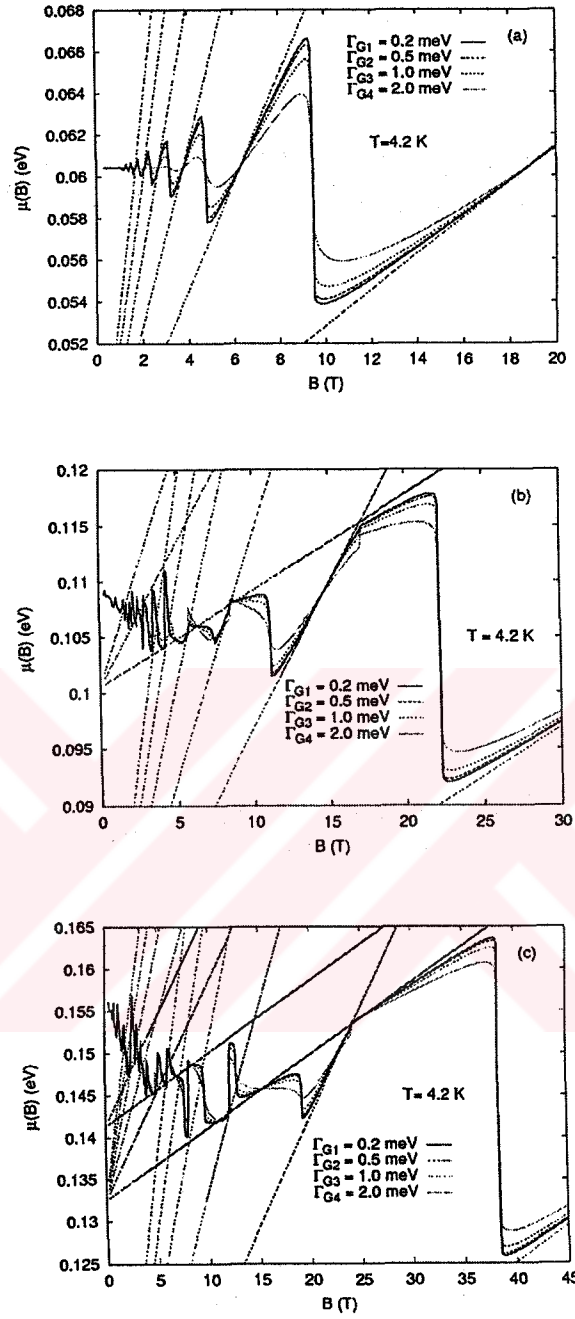
Tablo 4.1. Malzeme parametreleri, ilk üç E_i alt bant enerjisi ve bunlara bağlı n_{si} elektron konsantrasyonları kuantum kuyusundaki bir, iki ve üç alt bant elektronlarla dolu iken $T=4.2$ K° de hesaplanmıştır.

Şu andaki problemde genişleme parametresi ve sıcaklık olmak üzere iki temel parametre vardır. Bu çalışma boyunca gausyen tipi genişleme için genişleme parametresi değerleri $\Gamma_G=0.2, 0.5, 1$ ve 2 meV olarak alınmıştır. Lorentziyan ve eksponansiyel yapıdaki düzey genişleme parametreleri, gausyen genişleme parametresiyle denklem 4.10'da gösterildiği gibi ilişkilendirilmiştir. Bütün genişleme tipleri için sıcaklık: $4.2, 10, 20, 30$ K olarak alınmıştır.

İlk adımda sabit bir sıcaklık için düzey genişleme parametresinin kimyasal potansiyel üzerine olan etkisi göz önüne alındı. Şekil 4.12(a-c)'de gausyen yapıdaki düzey genişlemesi, sırasıyla bir iki ve üç bandın dolu olduğu durumlar göz önüne alınarak, $T=4.2$ K'de $\Gamma_G=0.2, 0.5, 1$ ve 2 meV Landau düzey genişleme parametreleri için uygulanan manyetik alanın bir fonksiyonu olarak elde edilmiştir. Şekil 4.12a sadece bir alt bandın dolu olduğu durumu göstermektedir. İlk alt banda bağlı olan Landau düzeylerinin enerjisi de (Landau fanı) şekilde gösterilmiştir. Γ_G arttıkça kimyasal potansiyeldeki salınımların genliği azalmaktadır. Mutlak sıfırda kimyasal potansiyelin (ve Fermi düzeyinin) elektronlarla dolu olan son Landau düzeyine sabitlenmesi beklenir.

Manyetik alan arttıkça her düzeydeki elektron doluluk kapasitesi artar, bundan dolayı elektronlar yüksek Landau enerji düzeylerinden düşük olanlarına doğru geçiş yapar. Manyetik alanın kritik bir değerinde kısmen dolu en üst düzey tamamen boşalır ve böylece kimyasal potansiyel keskin bir şekilde aşağıdaki Landau enerji düzeyine düşer. Bu davranış sıcaklığın yeterince düşük olduğu ve düzey genişlemesinin küçük olduğu durum için ($T=4.2K$) şekil 4.12a'da görülebilir. Düzey genişlemesi arttıkça farklı Landau düzeylerine bağlı olan durum yoğunlukları üst üste binmeye (overlapping) başlar ve böylece düzeyler arasındaki fark daha az belirginleşir. Bu şekil 4.12a'da görüldüğü gibi $\mu(B)$ 'deki salınımların keskinliğini azaltır. Burada gösterilmemiş olmasına rağmen lorentziyan ve eksponansiyel yapıdaki düzey genişlemeleri şekil 4.12a'da gösterilmiş olan durumla nitelik olarak benzerlik gösterir.

Dolu alt bantların sayısı artırıldığında sabit bir manyetik alan altındaki kimyasal potansiyelin davranışı daha kompleks olur. İki alt bantın dolu olduğu durum için her alt banda bağlı ayrı Landau düzeyleri oluşur. Bu durumda kimyasal potansiyel farklı alt bantlara bağlı Landau düzeyleri arasında da geçiş yapabilir. Şekil 4.12b gausyen yapıda genişleme olduğunun varsayıldığı $T=4.2 K$ 'de $\Gamma_G=0.2, 0.5, 1$ ve $2 meV$ düzey genişleme parametreleri için uygulanan manyetik alanın bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyelin değişimini gösterir. Düşük manyetik alanlarda farklı alt bantlara bağlı Landau düzeyleri birbirine karışmıştır (intermixed). Bundan dolayı $\mu(B)$ birinci ve ikinci alt banda bağlı Landau düzeyleri arasında keskin salınımlar yapar. Manyetik alan arttıkça Landau düzeylerinin yoğunluğu azalır ve $\mu(B)$ daha düzgün değişmeye başlar. Manyetik alan daha çok artırıldığında şekilden görüldüğü üzere μ 'nün değeri birinci alt banda bağlı enerji düzeylerine düşer. Farklı alt bantlara bağlı Landau düzeyleri arasında oluşan bu geçişlerden dolayı şekil 4.12b'de görüldüğü üzere kimyasal



Şekil 4.12. $T=4.2$ K değerinde gaussian tipi genişlemesinin $\Gamma_G = 0.2, 0.5, 1.0$ ve 2.0 meV düzey genişleme parametreleri için B 'nin bir fonksiyonu olarak μ 'deki salınımlar (a) sadece bir alt bant (b) iki alt bant (c) üç alt bant dolu iken. Her durum için hesaplanmış olan elektron konsantrasyonları ve alt bant enerjileri tablo 1'de verilmiştir. Her bir alt bantta bağlı olan E_{in} (Landau fanı) Landau düzeylerinin enerjileri de gösterilmiştir (düz çizgiler).

potansiyel iki kritik manyetik alan arasında farklı oranlarda (farklı eğimlere sahip olarak) değişir. İki bandın dolu olduğu durum içinde sadece bir alt bandın dolu olduğu duruma benzer biçimde düzey genişleme parametresinin artmasıyla kimyasal potansiyelin salınımlarının genliği azalır.

Üç alt bandın dolu olduğu durumda B 'nin bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyelin davranışı nitelik olarak iki alt bandın dolu olduğu duruma benzerdir. Şekil 4.12c gaussyen yapıda genişleme olduğunun varsayıldığı $T=4.2$ K'de $\Gamma_G=0.2$, 0.5, 1 ve 2 meV düzey parametreleri için uygulanan B 'nin bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyelin değişimini gösterir. Düşük alan değerlerinde farklı alt bantlara bağlı Landau düzeyleri arasında salınımlar olur. Manyetik alan artırıldıkça birinci Landau düzeyleri ile sırasıyla ikinci ve üçüncü alt bantlara bağlı Landau düzeyleri arasında salınımlar başlar. Şekilden görüldüğü gibi yüksek manyetik alanlarda tüm elektronlar birinci alt banda bağlı birinci Landau düzeyine geçiş yapar.

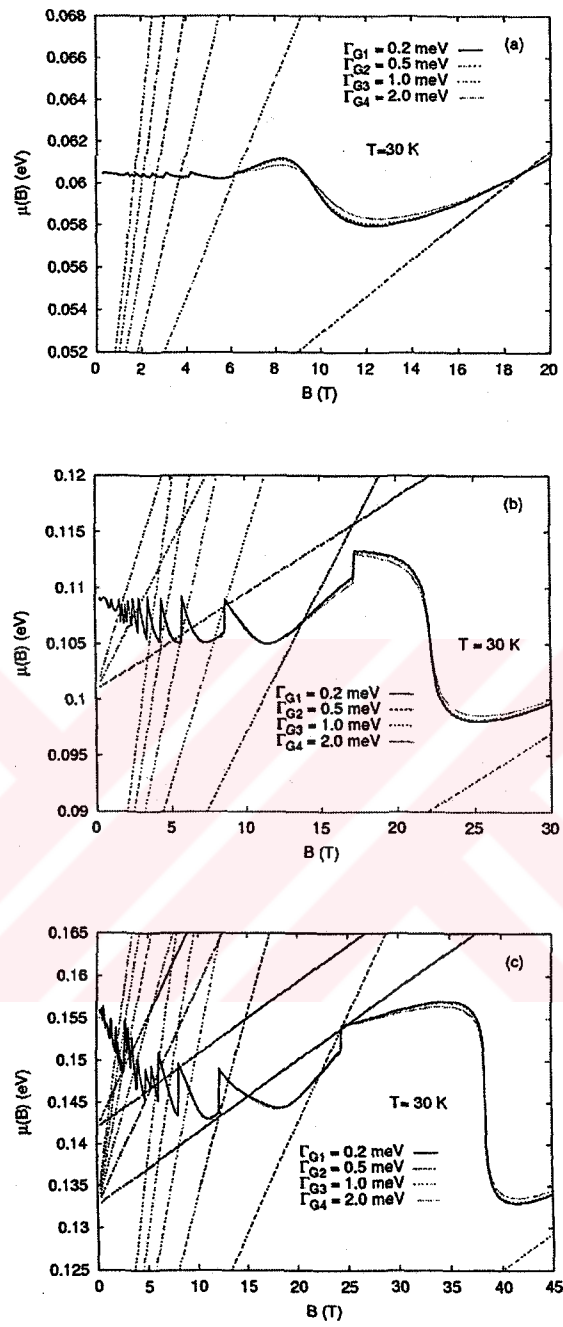
Elektronlarla dolu alt bantların sayısı artırıldığı zaman özellikle düşük alanlarda μ sivri uçlu demirler gibi davranır. Tek bandın dolu olduğu durum için düşük alanlarda kimyasal potansiyel iki kritik manyetik alan arasında düzgün değişir ve özellikle küçük genişleme parametreleri için kimyasal potansiyel birinci alt banda bağlı Landau düzeylerinden birini yakın olarak takip eder. İki veya üç alt bandın dolu olduğu durumda özellikle düşük alanlarda farklı alt bantlara bağlı çapraz olarak yerleşmiş bir çok Landau düzeyi mevcuttur. Bundan dolayı sıcaklık düşük ve genişleme parametreleri küçükse kimyasal potansiyel bu değerlerden uygun olan biri olarak alınabilir (şekil 4.12b ve c). Manyetik alan arttıkça iki ve üç bandın dolu olduğu durum için kimyasal potansiyelin değişimi daha düzgündür. Fakat farklı alt bantlara bağlı farklı Landau düzeylerini takip ettiğinden dolayı farklı oranlarda değişir.

Sıcaklığın artırılmasının μ 'nün salınımları üzerindeki etkisi şekil 4.13(a-c)'de gösterilmiştir. Sıcaklık artırıldığı zaman göz önüne alınan tüm düzey genişleme parametreleri için salınımların genliği ve keskinliği azalır. Şekil 4.13 $T=30$ K değerinde fakat diğer tüm parametre değerleri şekil 4.12 ile aynı olan duruma karşılık gelir. Şekil 4.13a'da gösterildiği gibi tek bant dolu olduğunda bu çalışmada göz önüne alınan tüm genişleme parametreleri için μ 'nün değişimi hemen hemen aynıdır.

Benzer sonuçlar şekil 4.13b ve 4.13c’de gösterildiği gibi sırasıyla iki ve üç alt bandın dolu olduğu durumlarda da gözlenmiştir. Burada gösterilmemiş olmasına rağmen lorentziyan ve eksponansiyel yapıdaki genişlemeler de şekil 4.13 (a-c)’de gösterilen durumla nitelik olarak aynıdır. Bundan dolayı bu çalışmada göz önüne alınan farklı düzey genişleme parametrelerinin yüksek sıcaklıklarda μ üzerinde önemli bir etkisi olmadığı sonucu çıkarılabilir.

Sıcaklık artışının önemli bir etkisi, komşu Landau düzeyleri arasındaki kimyasal potansiyel değişiminin daha düzgün olmasıdır. Daha açık bir deyişle sıcaklık arttıkça kritik manyetik alanlarda daha düşük Landau enerji düzeylerine giden μ ’in negatif eğimi daha küçük olmaktadır. Düşük sıcaklıklarla karşılaştırıldığı zaman keskin bir şekilde artmakta sonra yavaşça azalmaktadır (şekil 4.12 ve 4.13’ü karşılaştırınız).

Bir sonraki adımda sabit bir düzey genişleme parametresi değerinde sıcaklığın μ üzerindeki etkisi göz önüne alındı. Önce gausyen düzey genişleme parametresi $\Gamma_G=0.2\text{meV}$ iken $T=4.2, 10, 20, 30$ K değerindeki sıcaklıklar için elde edilen sonuçları göz önüne alalım. Sadece bir alt bant dolu iken kimyasal potansiyelin sıcaklığa bağlılığı şekil 4.14a’da gösterilmiştir. Sıcaklık artırıldığı zaman daha önce $T=0$ K’de boş olan daha yüksek Landau düzeyleri de dolmaktadır. Düşük enerjilere sahip olan düzeyler artık tamamen dolu olmayıp kısmen doludur ve kimyasal potansiyeldeki değişim düşük sıcaklıklardaki değişime göre daha düzgündür. Bundan dolayı sıcaklık artırıldığı zaman elde edilen kimyasal potansiyelin değeri ile sabit bir sıcaklıkta düzey genişleme parametresinin artırılmasıyla elde edilen sonuçlar birbirine çok benzemektedir. Böylece farklı nedenlere dayanmasına rağmen şekil 4.12a ve şekil 4.14a arasındaki benzerlik dikkat çekicidir. İki ve üç alt bandın dolu olduğu durum için elde edilen sonuçlar sırasıyla şekil 4.14b ve şekil 4.14c’de gösterilmiştir. İki alt bandın dolu olduğu durum için şekil 4.12b ve şekil 4.14b ve üç alt bandın dolu olduğu durum için de şekil 4.12c ve şekil 4.14c arasındaki benzerlikler dikkat çekicidir. Şekil 4.12 ve şekil 4.14 arasındaki

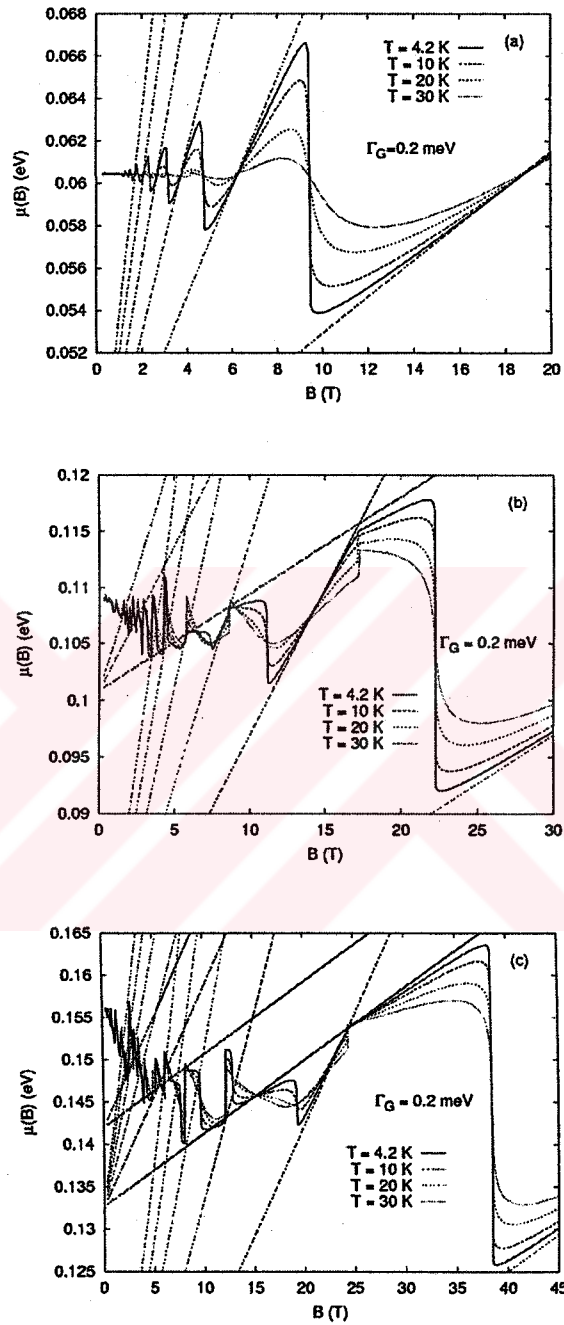


Şekil 4.13. Parametreler şekil 4.12'deki ile aynı ancak sıcaklık $T=30$ K. μ' 'in salınım genliğinin azaldığına ve sıcaklık artırıldıkça her durum için düzey genişleme parametrelerinin birbirine çok yakın sonuçlar verdiğine dikkat ediniz.

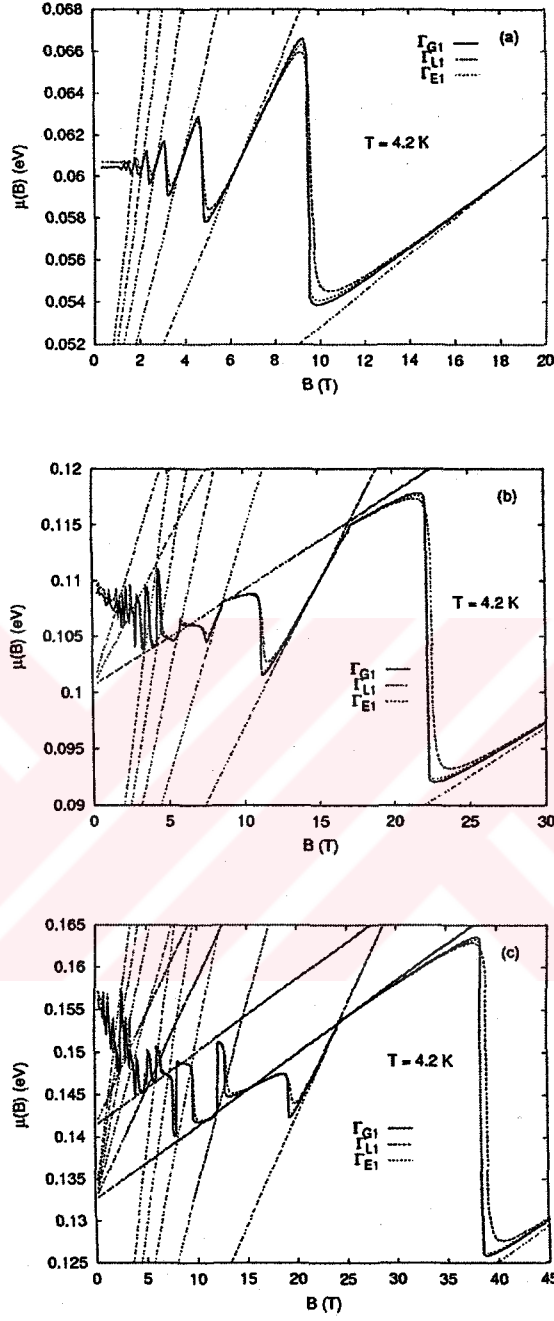
benzerlikler basitçe şöyle açıklanabilir: Toplam elektron sayısı Fermi-Dirac fonksiyonu ve durum yoğunluğunun çarpımına eşittir. Fermi Dirac fonksiyonu sıcaklık arttıkça $E=\mu$ civarında düzgündür. Benzer biçimde bu çalışmada kullanılan durum fonksiyonlarının yoğunluğu genişleme parametresi arttıkça artmaktadır. Böylece bunlardan biri arttığı zaman çarpımları düzgün bir şekil ortaya koyar ve bunun bir sonucu olarak kimyasal potansiyele yakın olan komşu Landau düzeylerine ait değerler üst üste binmeye başlar. Bu kimyasal potansiyel salınımlarının görülmeyecek kadar küçük genliklere sahip olmasına neden olur.

Lorentziyan ve eksponansiyel yapıdaki düzey genişlemeleri için sıcaklıkla kimyasal potansiyelin değişimi niteliksel olarak şekil 4.14(a-c)'de gösterilen gaussyen düzey genişleme sonuçlarıyla aynı davranışı ortaya koyar. Genişleme parametreleri daha fazla artırılrsa bile sonuçlar yine de niteliksel olarak şekil 4.14'te elde edilen sonuçlara benzer çıkar.

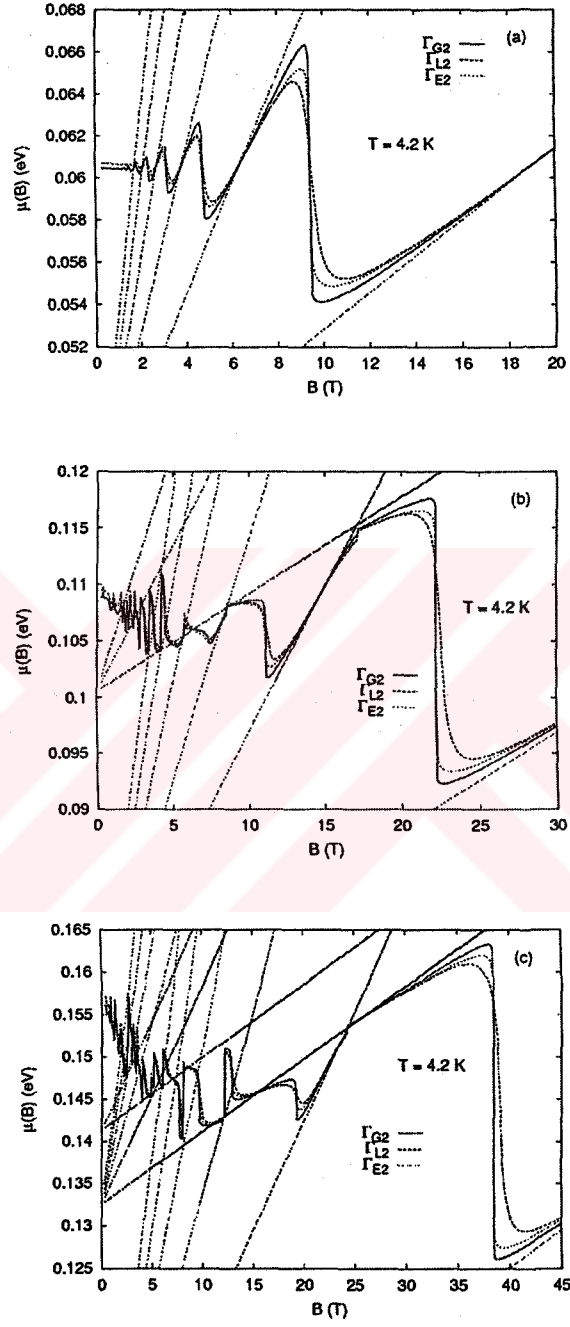
Sonuç olarak üç ayrı yapıdaki düzey genişleme parametreleri karşılaştırıldı. $T=4.2$ K'de gaussyen lorentziyan ve eksponansiyel yapıdaki üç düzey genişleme parametresi için manyetik alanın bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyelin değişimi şekil 4.15(a-c)'de gösterilmiştir. Lorentziyan (Γ_L) ve eksponansiyel (Γ_E) yapıdaki düzey genişleme parametreleri için gaussyen durumdaki Γ_G düzey genişleme parametresine bağlı olan ilişki denklem (4.10)'da verilmiştir. Şekil 4.15a $T=4.2$ K'de $\Gamma_G=0.2$ meV değeri için elde edilen durumu göstermektedir. İki ve üç alt bandın dolu olduğu durum için μ 'deki değişime dair bulunan sonuçlar sırasıyla şekil 4.15b ve şekil 4.15c'de gösterilmiştir. Küçük genişleme parametreleri için her genişleme yapısındaki kimyasal potansiyel değişimi birbirine çok yakındır. Verilen bir sıcaklık için düzey genişlemesi artırıldığında farklı genişleme formları arasındaki ayrım şekil 4.16 (a-c)'de gösterildiği üzere daha fazla olmaktadır. Şekil 4.15 ile şekil 4.16 Γ_G değeri dışında tamamen aynıdır.



Şekil 4.14. $T=4.2, 10, 20, 30$ K değerlerinde gaussian tipi genişlemenin $\Gamma_G = 0.2$ meV düzey genişleme parametresi için B 'nin bir fonksiyonu olarak μ 'deki salınımlar (a) sadece bir alt bant (b) iki alt bant (c) üç alt bant dolu iken. Her durum için hesaplanmış olan elektron konsantrasyonları ve alt bant enerjileri tablo 1'de verilmiştir. Şekil 4.12(a-c) ile şekil 4.14(a-c) arasındaki benzerliğe dikkat ediniz.



Şekil 4.15. $T=4.2$ K'de gaussian, lorentziyan ve eksponansiyel düzey genişlemelerinin karşılaştırılması (a) sadece bir alt bant (b) iki alt bant (c) üç alt bant dolu iken. Gaussian durum için düzey genişleme parametresi $\Gamma_{G1}=0.2$ meV, lorentziyan (Γ_{L1}) ve eksponansiyel (Γ_{E1}) düzey genişleme parametreleri Γ_{G1} 'e denklem (4.10)'da verildiği gibi bağlıdır (yani $\Gamma_{L1}=1.2\Gamma_{G1}$ ve $\Gamma_{E1}=1.2\Gamma_{G1}$).



Şekil 4.16. Parametreler şekil 4.15 ile aynı sadece gaussyen formdaki düzey genişleme parametresi $\Gamma_{G2}=0.5$ meV alınmıştır.

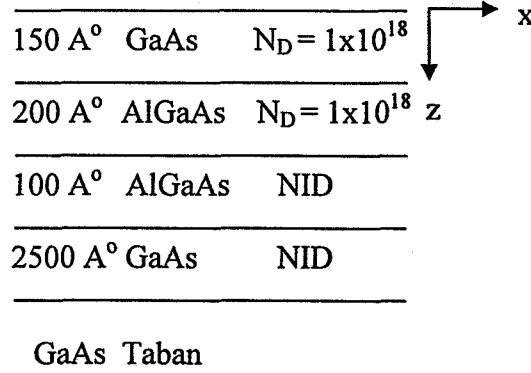
4.3. Monte Carlo Simülasyonları

Yarıiletken malzemelerin sınırlandırılmış ve düşük boyutlardaki elektronik özellikleri uzun bir süredir yaygın olarak çalışılmaktadır (Ando, 1982; Weisbuch, 1991; Jacoboni, 1983). Yüksek performanslı elektronik aygıtları (MODFET, HEMT) ve optik aygıtları (lazerler, kuantum kuyu fotodetektörleri) inşa edebilmek için iki boyutlu sistemlerin elektronik özellikleri geniş bir alanda çalışılmıştır (Wang, 1985). Elektronlar ve verici (donor) safsızlıkların birbirinden ayrılmasıyla oluşturulan yüksek elektron mobiliteli transistörler (HEMTs) elektron hızı konusunda büyük avantajlar sağlamışlardır. Tekli bir heteroeklemden oluşan bir iletim kanalında elektron durumları kesikli (kuantize) olup elektron hareketi iki boyutludur. Bu iki boyutlu elektron gazı (2BEG) oldukça yüksek bir elektron hızına ve iyi geçirgenlik özelliklerine sahiptir. Aygıt fiziğini anlayabilmek ve olası yeni aygıt mimarilerini geliştirebilmek için kullanılan en gözde ve kullanışlı metot Monte Carlo tekniğidir (Jacoboni, 1983; Jacoboni, 1989; Tomizawa, 1993). Bu bölümde iki boyutlu elektron gazının ara yüzeyindeki elektron geçirgenliğini anlamak için alt bant seviyelerini ve 3-boyutlu vadi elektron doluluklarını da içeren bazı grafikler sunulmuştur.

4.3.1. AlGaAs/GaAs Yapısı için İki Boyutlu Elektron Gazının Taşınım Özellikleri

Modelimizde kullandığımız modülasyon katkılı GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As yapısının kendi içinde uyumlu olarak hesaplanmış potansiyel profili ve taban durum ile birinci uyarılmış duruma ait dalga fonksiyonları sırasıyla Şekil.4.17 ve Şekil.4.18'de gösterilmiştir. Al yüzdesi $x=0.3$ ve AlGaAs ve GaAs'in dielektrik sabitleri sırasıyla 13.1 ve 12.9 olarak alınmıştır. Şekil.4.18 AlGaAs tabakasında $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ verici (donor) katkılanmış örgü uyumlu GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As heteroyapısında 4.2 K° için hesaplanmış olan alt bant dalga fonksiyonlarını göstermektedir. Bu sıcaklıkta potansiyelin minimumuna göre ölçülmüş olan enerji özdeğerleri taban durumu ve birinci uyarılmış durum için sırasıyla 33 ve 41 meV'dir. İki boyutlu elektron gazının

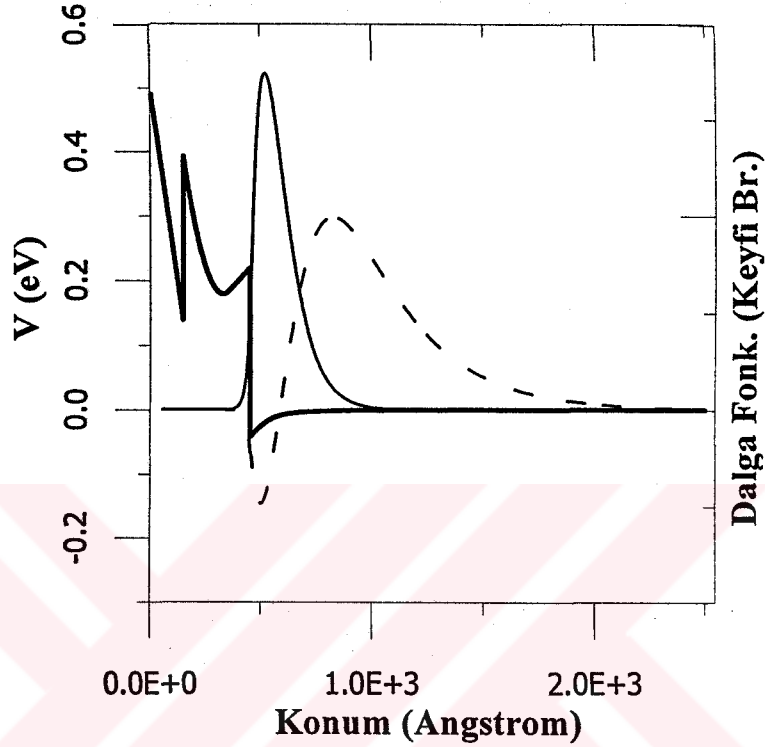
geçirgenliğinde saçılmanın etkilerini görebilmek için kararlı durum Monte Carlo simülasyonu yardımıyla 0.1-6 kV/cm gibi farklı elektrik alanlarındaki geçirgenlik



Şekil 4.17. Modülasyon katkılı GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As heteroyapısında bir boyutlu kanalın yapısı. AlGaAs ve GaAs'in dielektrik sabitleri sırasıyla 13.1 ve 12.9 olarak alınmıştır.

özellikleri hesaplandı. İletim bandının iki vadisinin (Γ ve L) 3-boyutlu özelliklere sahip olduğu varsayılmıştır. En üst alt bandın enerjisinden daha büyük enerjilere sahip olan elektronlar da üç boyutlu olarak ele alınmıştır. Bu varsayım yüksek enerjilerdeki düzeylerin birbirine çok yakın olması nedeniyle külçe materyaldeki benzer sürekli bir yapı oluşmasından dolayı akla yakındır. Elektronun yörüngesi zamana göre önce iki boyutlu saçılma mekanizmalarından etkilenir ve elektronun enerjisi en üst alt bandın enerji değerini geçtikten sonra artık üç boyutlu olarak kabul edilir. Kuantum kuyusunda göz önüne alınan saçılma mekanizmaları akustik fonon saçılması, polar optik fonon saçılması ve iyonize olmuş uzak iyonlardan kaynaklanan saçılma değildir. İki boyutlu saçılma oranlarının hesaplanmasında kendi içinde uyumlu olarak hesaplanan elektronik durumlar kullanılmıştır. Modülasyon katkılı GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As heteroyapısı için farklı elektrik alanlardaki hız-zaman karakteristikleri Şekil.4.19'da gösterilmiştir. Şekilden kolayca görülebileceği gibi hız değerleri yüksek alanlarda kararlı durum değerlerine ulaşmadan önce geçici bir ani yükseliş (overshoot) göstermektedir. Bu elektron enerjisinin bir fonksiyonu olarak momentum ve enerji durulma zamanlarının farklı olmasından kaynaklanan bir durumdur. Tipik olarak geçici ani yükseliş, elektronlara uygulanan elektrik alan

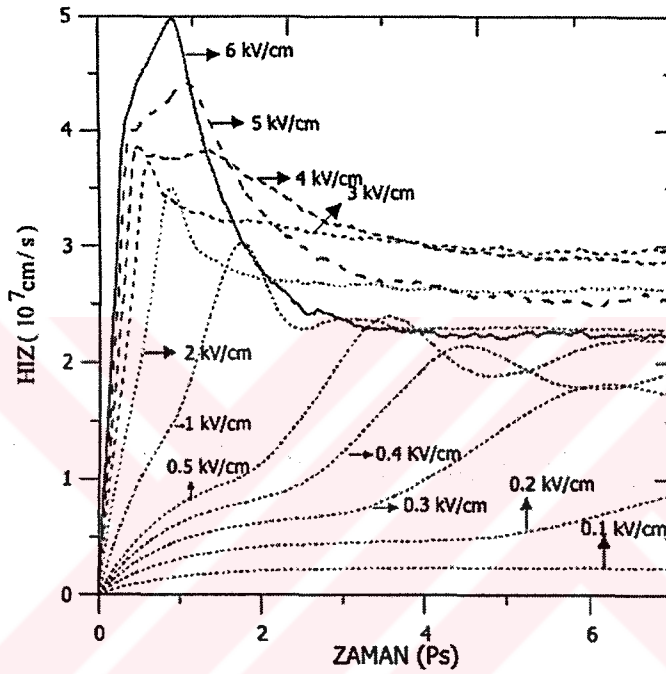
momentum durulma zamanının enerji durulma zamanından daha küçük olduğu yüksek enerji bölgelerine ulaştığı zaman gözlenir. İlerleyen zamanlarda enerjinin



Şekil 4.18. Potansiyel profili (Kalın çizgi), taban duruma bağlı dalga fonksiyonu (ince çizgi) ve birinci uyarılmış duruma ait dalga fonksiyonunun (kesikli çizgi) gösterimi.

durulması etkin olur ve böylece fonksiyon yayvanlaşarak sürüklenme hızı azalır. Ayrıca GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As içinde hızda oluşan bu ani yükselişin elektrik alan 0.5 kV/cm'den daha yüksek alanlarda iken olduğu gözlenmiştir. Bu değer üzerindeki alanlarda Γ ve L vadileri arasında güçlü eşdeğer olmayan vadiler arası fonon saçılmaları olur, bundan dolayı momentum durulma zamanı daha küçüktür. Şekil 4.19'a daha ayrıntılı bakabiliriz. Uygulanan tüm alan değerleri için maksimum hıza ulaşıncaya kadar iki farklı eğime sahip bölge olduğu görülüyor. Örneğin 0.5 kV/cm değerindeki hız-zaman eğrisini göz önüne alalım. Hız hemen hemen 2 Ps değerine kadar belirli bir eğim ile artmaktadır 2 Ps'den sonra maksimum değerine ulaşana kadar farklı bir eğim ile artışına devam etmektedir. İlk artış oranı iki boyutlu sistemdeki elektronlardan diğer artış oranı ise iki boyuttan üçüncü boyuttaki Γ

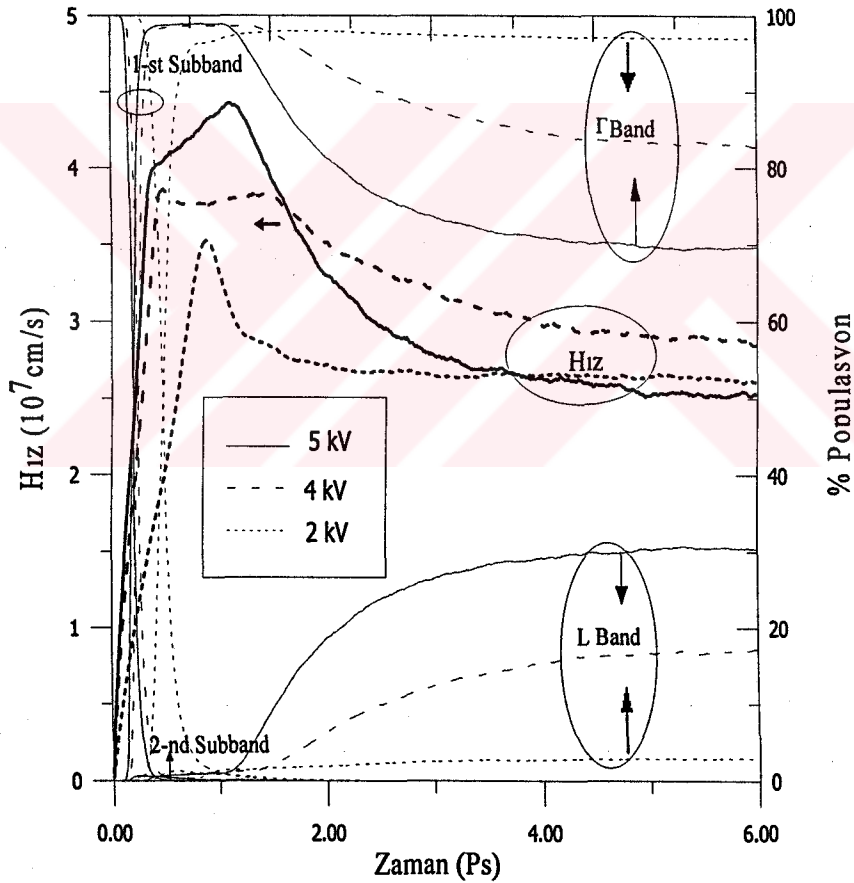
vadisine geçişten kaynaklanmaktadır. Bu davranış şekilde görülen tüm eğriler için oluşmaktadır. Şekildeki hız eğrilerinden 2 kV/cm değerine sahip olan eğriyi göz önüne alalım. Aynı eğrinin iki boyutlu enerji düzeyleri ve üç boyutlu Γ ve L düzeylerinin elektron dolulukları da şekil 4.20’de gösterilmiştir. Şekil 4.20’den görüldüğü gibi tüm elektronlar



Şekil 4.19. Farklı elektrik alanlarda zamanın bir fonksiyonu olarak elektronların ortalama hızı.

taban ve birinci düzeyden Γ düzeyine doluncaya kadar (0.5 Ps değerine kadar) hız belirli bir oranda artmaktadır ve tüm elektronlar Γ düzeyine dolduktan sonra farklı bir oranda artışına devam etmektedir. Hız maksimum değerine ulaştığında tüm elektronlar artık tamamen Γ düzeyinde olup L düzeyi hemen hemen boştur. Fakat uygulanan alan daha fazla arttırıldığında iki boyutlu elektronlar kısa bir sürede yüksek hızlara ulaşır ve çabucak iki boyutlu sistemden 3-boyuta geçerler. Elektronlar 3-boyutta iken uygulanan alan değerine bağlı olarak 3 kV/cm değerinde görüldüğü gibi ya hız azalır ve kararlı durum değerine ulaşır yada şekil 4.19’da 5 kV/cm değerinde görüldüğü gibi daha düşük bir oranla artmaya devam eder. Bu iki farklı davranış uygulanan alana göre geçiş bölgelerinin olduğunu gösteriyor. Şekil

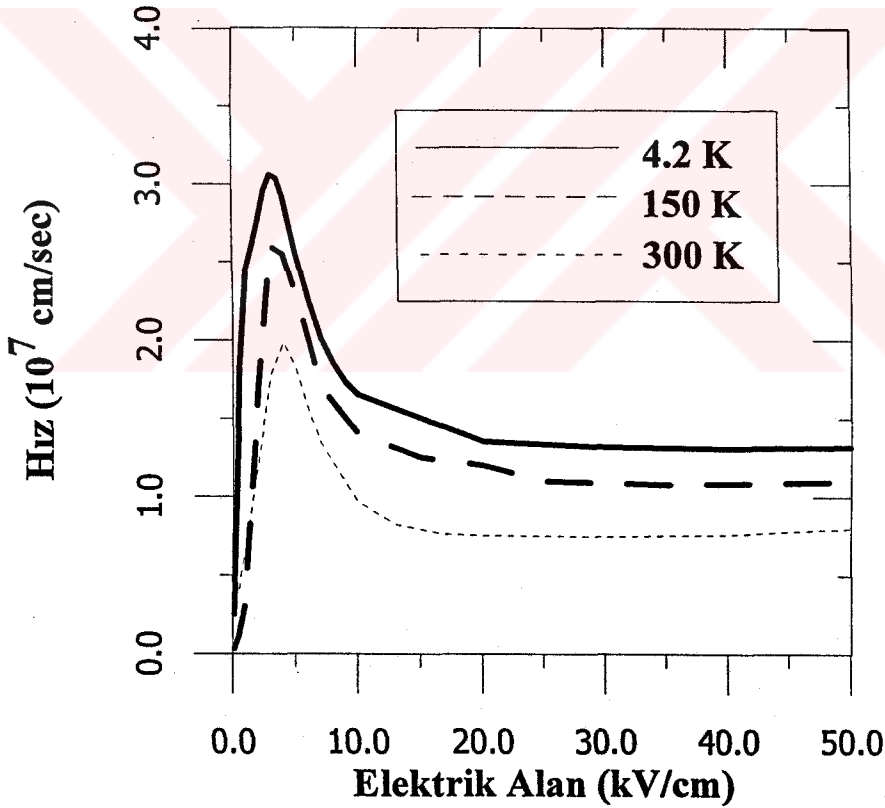
4.19'daki hız-zaman karakteristiğinde iki farklı maksimumun oluştuğu 4 kV/cm değerini göz önüne alalım. Zamanla iki boyuttaki elektronlar lineer olarak hızlanarak bir maksimuma ulaşmaktadır. Γ vadisi dolmaya başladıktan sonra hız bir süre azalmakta ve sonra tekrar artarak ikinci maksimumu oluşturmaktadır. Elektronlar Γ vadisine geçerek tamamen üç boyutlu olduktan sonra hızları iki boyuttaki hızın artış oranına göre daha düşük bir artış hızıyla lineer olarak artmaya devam eder. Elektronlar 4 kV/cm değerinde kaldıkları zamana göre Γ bandında daha az süre kalmalarına rağmen uygulanan alan elektronların



Şekil 4.20 2, 4 ve 5 kV/cm alanları ve 4.2 K için zamanın bir fonksiyonu olarak vadi ve düzeylerin dolulukları

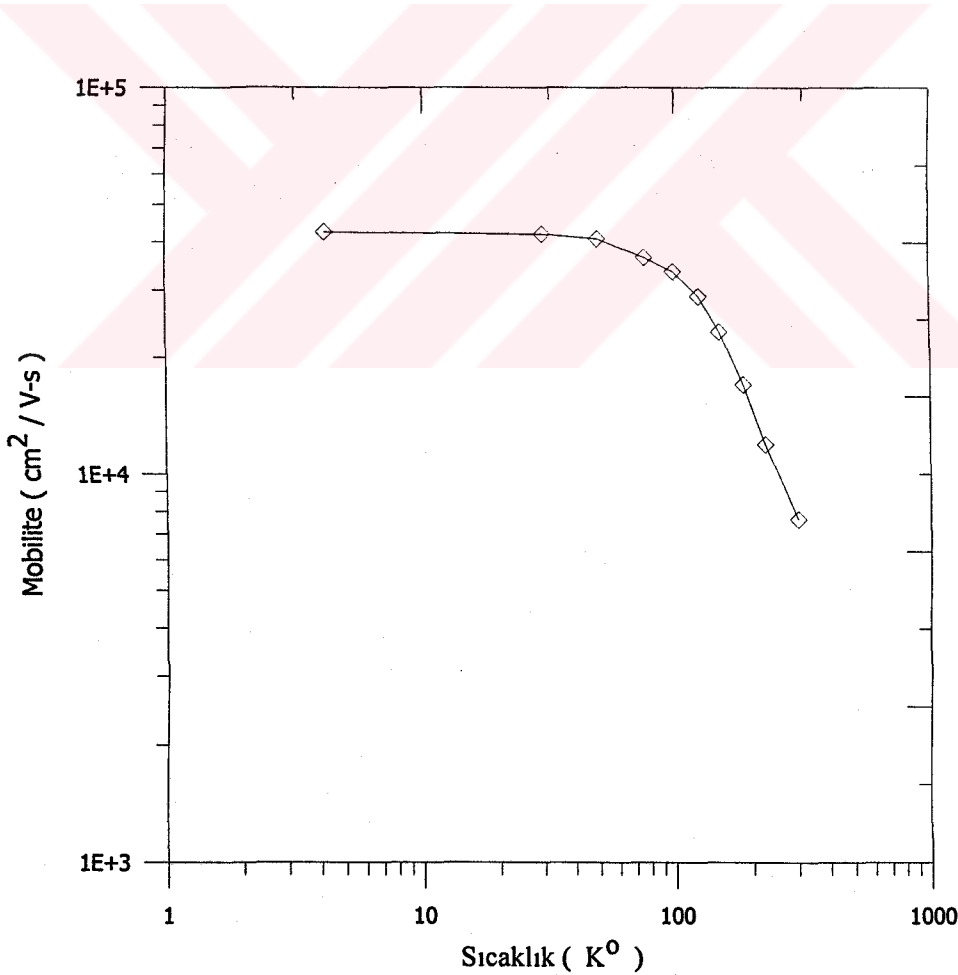
hızlanmasına yeterli olduğu için hızdaki artış devam eder. Şekil 4.20'den görüldüğü gibi yüksek alanlarda hızdaki azalış her zaman L bandı dolmaya başladığı anda

ortaya çıkar. L bandındaki elektronun etkin kütlesi daha büyük olduğu için göz önüne alınan bütün durumlar için L bandı dolmaya başladıktan hemen sonra hız azalmaya başlar. Uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak değişik sıcaklıklar için elektron hızının değişimi şekil 4.21’de gösterilmiştir. Her bir sıcaklık için düşük alanlarda hız hemen hemen lineer olarak artarak bir maksimuma ulaşmakta sonra negatif diferansiyel direnç olarak bilinen olgudan dolayı azalmaya başlamaktadır. Sıcaklık arttıkça verilen bir alandaki hız değeri azalmaktadır. Hızdaki bu azalış optik fononların saçılma oranlarındaki artıştan kaynaklanmaktadır. Şekil 4.21’de sıcaklık arttıkça maksimum hız değerinde de büyük alanlara doğru küçük bir kayma olduğu görülmektedir. Bu kaymanın nedeni de optik fononların saçılma oranındaki artıştan



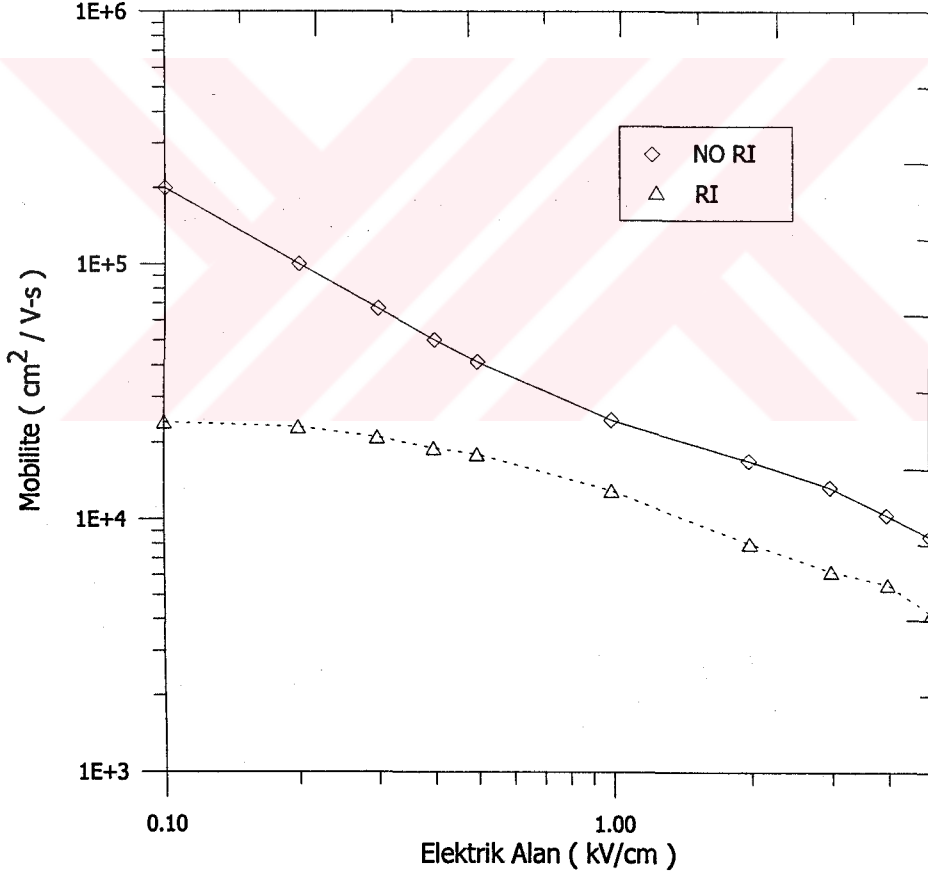
Şekil 4.21. Üç farklı sıcaklık için ortalama elektron hızının elektrik alana göre değişim eğrileri.

dolayı maksimum hızı sağlayabilmek için daha büyük alanlara gerek duyulmasıdır. Düşük alanlar dışında şekil 4.21'de görülen hız-alan karakteristiklerinin tamamı elektronların Γ ve L vadilerine geçişlerinden kaynaklandığından dolayı sistemin iki boyutlu durumu sadece düşük alanlar ve düşük sıcaklıklar için sağlanabilir. Parçacıklar kararlı duruma ulaştığında taban ve birinci alt bantlar tamamen boşalarak Γ ve L bandına dağılırlar. Alan uygulandıktan kısa bir süre sonra taban durumdaki doluluk keskin biçimde azalır ve elektronlar daha yüksek düzey ve vadilere geçer. Bundan dolayı elektronlar ılımlı alan değerlerinde kısa zaman iki boyut özelliği sergiler ve bir süre sonra tamamen üç boyutlu duruma geçer. Bu yüzden iki boyutlu sistem Γ ve L bandına önemsiz denebilecek kadar az sayıda parçacığın geçtiği düşük sıcaklıklar (<100 K) ve düşük alanlarda (<0.5 kV/cm) elde edilebilir. Göz önüne



Şekil 4.22 0.5 kV/cm elektrik alanı için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak mobilitenin değişimi.

alınan sistemin mobilité değerleri de deęişik sıcaklıklar ve deęişik alanlar için elde edilmiştir. Sıcaklığın bir fonksiyonu olarak elektron mobilitésinin deęişimi şekil 4.22’de gösterilmiştir. Uygulanan alan 0.5 kV/cm olarak alınmıştır böylece sistem 100 K° den küçük deęerler için tamamen iki boyutlu özellik sergilemektedir. Bu sıcaklıktan sonra taşıyıcıların çoęu Γ bandına geçtiğinden dolayı sistem üç boyutlu olmaktadır. Düşük sıcaklıklarda en yüksek mobilité deęeri $4 \times 10^4 \text{ cm}^2 / \text{V-s}$ deęerlerine ulaşmaktadır fakat oda sıcaklığında sistem artık üç boyutlu karakteristik gösterdiğinden mobilité de külçe(bulk) deęerine yaklaşmaktadır. Uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak uzak safsızlık saçılması (remote impurity) varken ve yokken



Şekil 4.23. Uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak mobilitenin deęişimi. Uygulanan alan ve/veya sıcaklık arttıkça mobilité azalmaktadır.

mobilitenin 4.2 K° deki değişimi şekil 4.23'te gösterilmiştir. Yüksek mobiliteler sadece düşük alanlar ve düşük sıcaklıklarda elde edilebilir. Sıcaklık veya alan arttıkça mobiliteler azalır ve oda sıcaklığındaki külçe (bulk) değerine yaklaşır. Uzak safsızlık saçılmasının mobiliteler üzerindeki etkilerini görmek için 100 Å luk bir aralık (spacer) kalınlığı için mobiliteler hesaplanmıştır. Şekil 4.23'den görüldüğü gibi düşük alanlarda mobiliteler değerleri uzak safsızlık saçılması yokken on kat fazla olmaktadır. Uzak safsızlık saçılmasının etkilerini azaltabilmek için aralık kalınlığının artırılması gerekir ancak aralık kalınlığı çok fazla olursa o zaman eklem yerinde elektronların tuzaklanabileceği iki boyutlu bir potansiyelin oluşması zorlaşır. Bundan dolayı iki boyutlu sistemdeki elektronların yeterli sayıda olması ve verici iyonları ile iki boyutlu elektronlar arasında etkileşimin az olması için optimum bir aralık kalınlığı seçilmelidir.

4.3.2. Kuantum Kuyusu için Elektron Taşınım Özellikleri ve Mobiliteler Hesabı

Bu bölümde GaAs/GaAlAs kuantum kuyusunda oluşan iki boyutlu elektron gazının ara yüzey boyunca uygulanan bir elektrik alanı altında taşınım özellikleri incelenmiş, özellikle sıcaklık, verici konsantrasyonu, ara yüzeyin vericilere olan uzaklığı gibi parametrelerin mobilitelere etkisi araştırılmıştır.

4.3.2.1. Monte Carlo Simülasyonunun Genel Özellikleri

Elektron taşınım karakteristikleri ensemble Monte Carlo tekniği ile incelenmiştir. Ortalama elektron sürüklenme hızlarını bulmak için belirli sayıdaki elektronun zaman içinde hareketi takip edilmiştir. Kullanılan elektron sayısı 10-30 bin arasındadır. Hem iki hem de üç boyutlu elektronların saçılmaları göz önüne alınmıştır. Başlangıçta bütün elektronların iki boyutlu sistemin en alt enerji seviyesinde olduğu kabul edilmiş ve ara yüzeye paralel uygulanan bir elektrik alanı altında elektronların taşınımını araştırılmıştır. Elektronlar elektrik alanı altında hızlandıkça enerjileri artmakta ve saçılmaların da etkisi ile kuantum kuyusu içinde

daha yüksek enerji seviyelerine çıkmaktadır. Elektron enerjisi biraz daha artarsa kuantum kuyusunu terk ederek üç boyutlu hale gelmektedir. Enerjileri kuantum kuyusunun en yüksek enerji seviyesini geçen elektronların üç boyutlu Γ vadisine geçtikleri kabul edilmiş ve o andan itibaren iki boyutlu sisteme geri dönene kadar üç boyutlu olarak incelenmiştir. GaAs ve GaAlAs malzemesinde sadece Γ ve L vadileri göz önüne alınmış, X vadisi ihmal edilmiştir.

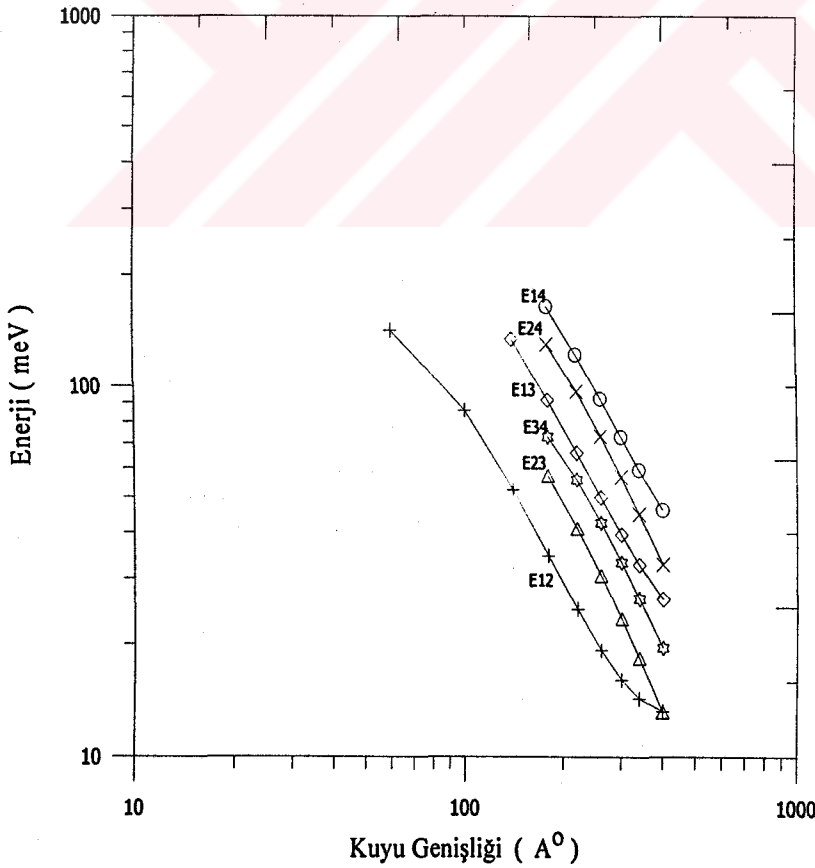
Göz önüne alınan saçılma mekanizmaları şunlardır: Akustik fonon, polar ve polar olmayan optik fonon, uzak safsızlık ve buruşuk yüzey saçılması. Anılan saçılma mekanizmaları hem iki hem de üç boyut için hesaplamıştır. Fakat uzak safsızlık ve buruşuk yüzey saçılması sadece iki boyutlu elektronlar için etkindir. İki boyutlu elektronların saçılma oranları Schrödinger/Poisson denklemlerinin kendi içinde uyumlu sayısal hesabından bulunan enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak bulunmuştur. Kuantum kuyusu içinde bulunan seviye sayısı bu çalışmada kullanılan parametreler için en fazla beş tane olarak ortaya çıkmaktadır. İki boyutlu saçılma oranları için analitik sonuçlar elde etmek bazı özel durumlar haricinde oldukça zordur, bu nedenle saçılma oranlarının hemen hemen tamamı sayısal olarak hesaplanmıştır. Ayrıca iki boyutlu optik ve akustik fonon saçılmalarının hesabında fononlar üç boyutlu olarak kabul edilmiştir.

Göz önüne alınan yapıda belirli bir andaki elektron sayısı kuantum kuyusundaki enerji seviyelerinde bulunan elektronlar ile üç boyutlu Γ ve L vadilerinde bulunan elektronların toplamından oluşmaktadır. Elektronlar için ortalama sürüklenme hızları bulunurken bu elektronların hepsinin hızları göz önüne alınmıştır. Elektronların enerji seviyelerindeki ve üç boyutlu vadilerdeki yoğunluğu sürekli takip edilmiş ve sistemin iki boyutlu karakterini kaybedecek kadar yüksek elektrik alanları kullanılmamıştır.

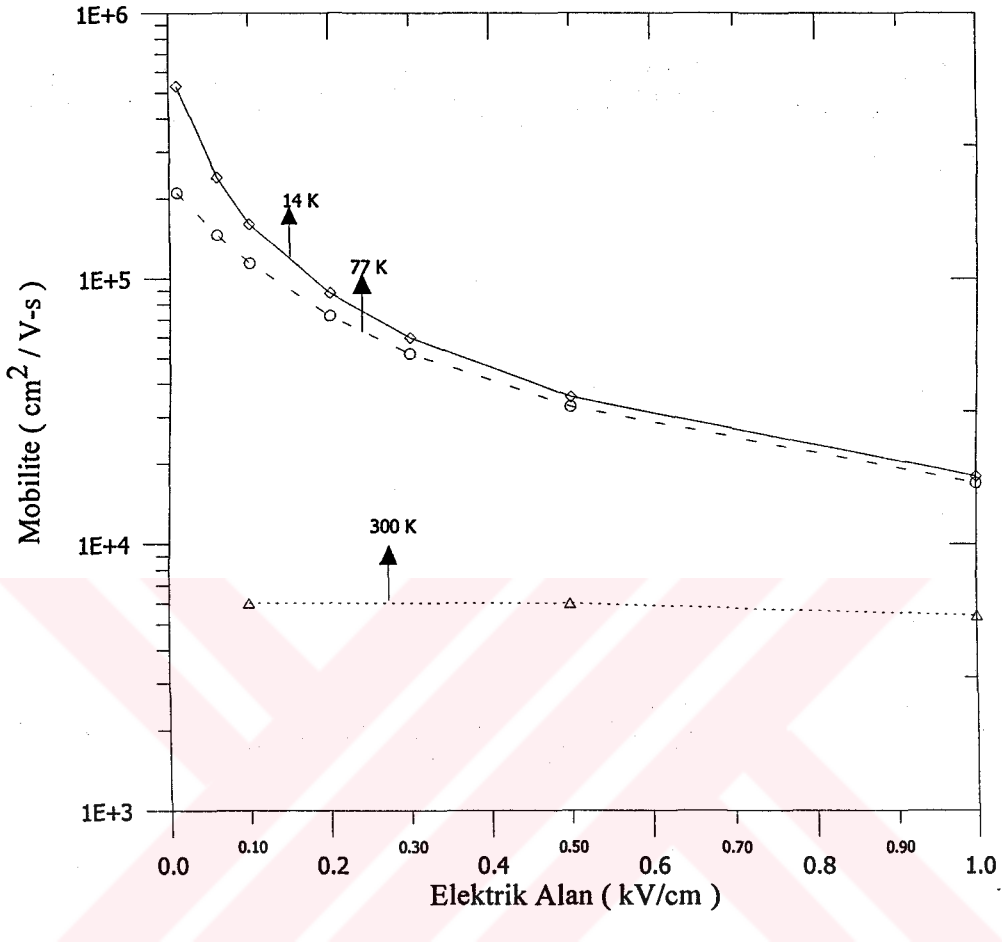
Model için kullanılan modülasyon katkılı GaAs/GaAlAs kuantum kuyu yapısının kendi içinde uyumlu olarak hesaplanmış potansiyel profili ve taban durum ile birinci ve ikinci uyarılmış duruma ait dalga fonksiyonları sırasıyla Şekil.4.10 ve Şekil.4.11'de gösterilmiştir. Al yüzdesi $x=0.3$ ve AlGaAs ve GaAs'in dielektrik sabitleri sırasıyla 13.1 ve 12.9 olarak alınmıştır. Şekil.4.11 $N_{D1}=N_{D2}=1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ verici (donor) katkılanmış örgü uyumlu GaAs/GaAlAs kuantum kuyu yapısında 4.2

K^0 için hesaplanmış olan alt bant dalga fonksiyonlarını göstermektedir. Bu sıcaklıkta kuyu içindeki toplam elektron yoğunluğu $n_s=2.37 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ve potansiyelin minimumuna göre ölçülmüş olan enerji özdeğerleri taban durumu ile birinci ve ikinci uyarılmış durum için sırasıyla 33.5, 85.6 ve 167.5 meV'dir. Potansiyel profili için kullanılan parametreler ise $d_1=152 \text{ Å}$, $d_2=200 \text{ Å}$, $w=52 \text{ Å}$, $L=252 \text{ Å}$ ve $m^*=0.069 m_0$ olarak alınmıştır.

Şekil 4.24'te kuyu içindeki enerji düzeyleri arasındaki farkın kuyu genişliğine göre değişimi gösterilmiştir. Bölüm 4.1'de bir heteroeklem için elde edilmiş olan şekil 4.1'e göre elektron yoğunluğu sıcaklıkla doğrusal olarak değişmektedir. Birden fazla enerji düzeyinin olduğu kuyu için enerji düzeyleri arasındaki fark, kuyu çok büyük olmadığı sürece önemsenmeyecek kadar azdır. Kuyu genişliği çok büyük olursa (220 Å dan fazla) özellikle taban enerji düzeyi ile diğer enerji düzeyleri arasındaki fark artar.



Şekil 4.24. Kuyu içindeki enerji düzeyleri arasındaki farkın kuyu genişliğine göre değişimi



Şekil 4.25. Değişik sıcaklıklar için mobilitenin elektrik alana göre değişimi

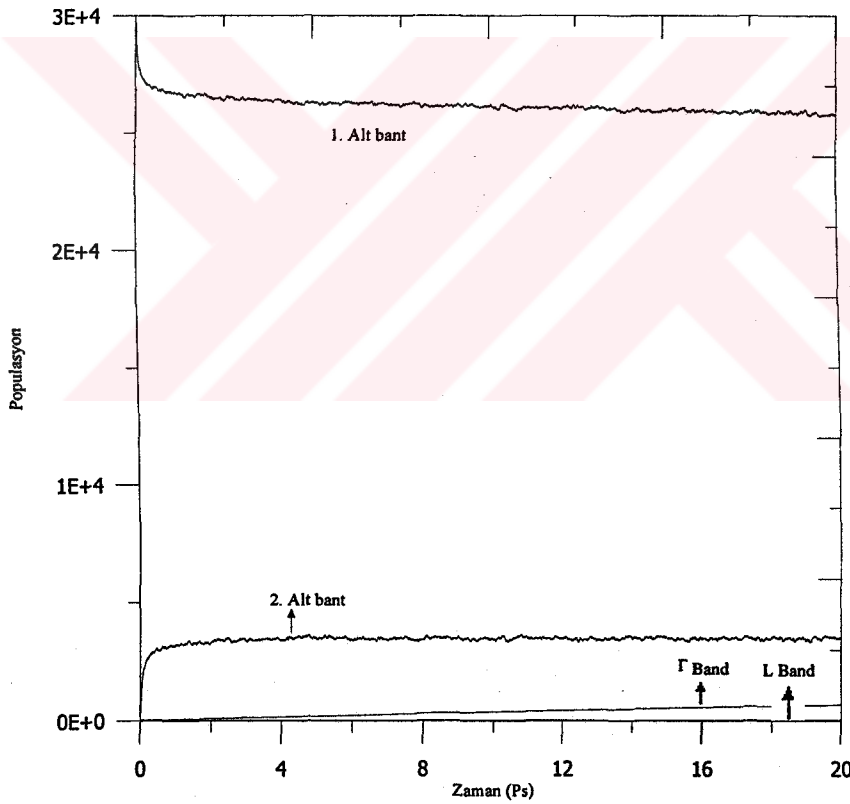
Artan sıcaklık kuyunun tabanındaki eğimin büyümesine bundan dolayı enerji düzeylerinin de büyümesine neden olur (şekil 4.1, şekil 4.2). Ancak daha üst düzeyler arasındaki fark kuyu genişliğinden bağımsızdır.

4.3.2.2. Mobilite Hesaplamaları

Göz önüne alınan kuantum kuyusu için elektron mobilitésinin uygulanan alana, sıcaklığa, aralık kalınlığına ve donör safsızlık yoğunluğuna göre değişimi incelenmiştir. Ayrıca özellikle iki boyutlu sisteme özgü olarak ortaya çıkan uzak safsızlık saçılması ile buruşuk yüzey saçılmasının mobiliteye etkisi araştırılmıştır.

Buruşuk yüzey saçılması hem ortalama yüzey buruşukluğuna (Δ) hem de saçılma merkezinin ara yüzey düzlemi boyunca etkin olduğu uzaklığa (L) bağlıdır. (Detaylar için Bölüm 3.6'ya bkz.). Bu nedenle mobilitenin etkin uzaklığa bağımlılığı da göz önüne alınmıştır.

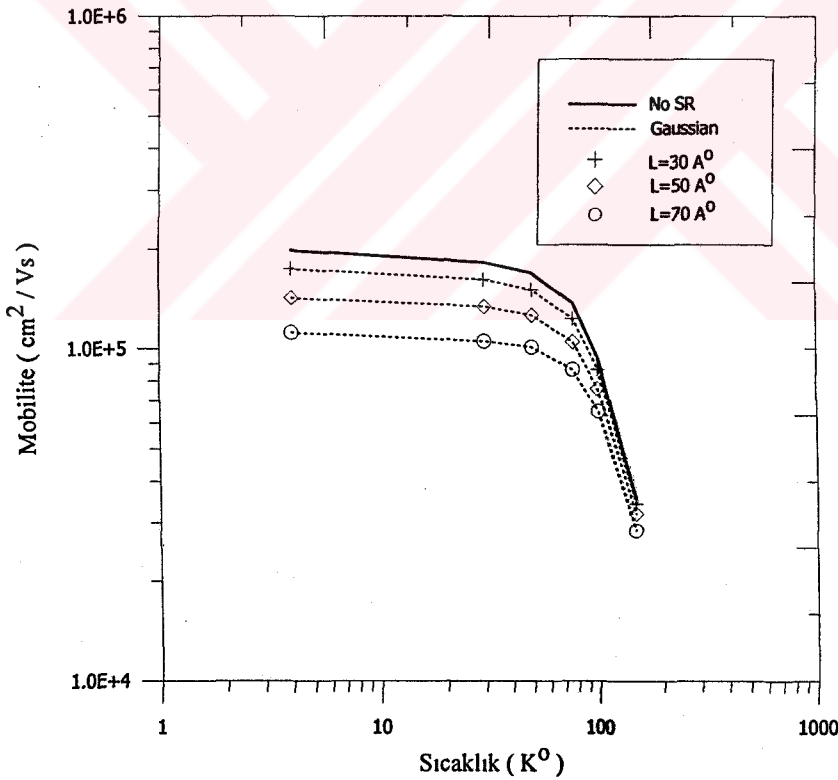
Elektron mobilitesinin uygulanan alana bağımlılığı $T=14$, 77 ve 300 K sıcaklıkları için Şekil 4.25'te gösterilmiştir. Burada uzak safsızlık saçılması göz önüne alınmamıştır. Düşük alan ve düşük sıcaklıklarda mobilite hacimsel mobiliteden yaklaşık iki mertebe daha büyük iken, sıcaklık ve/veya alan arttıkça bu değer azalmaktadır. Göz önüne alınan saçılma mekanizmaları içinde doğrudan uygulanan alana bağlı olan mekanizma yoktur. Fakat saçılma oranları elektron



Şekil 4.26. Kuyu içinde bulunan enerji düzeyleri ile Γ ve L bandının doluluk oranları

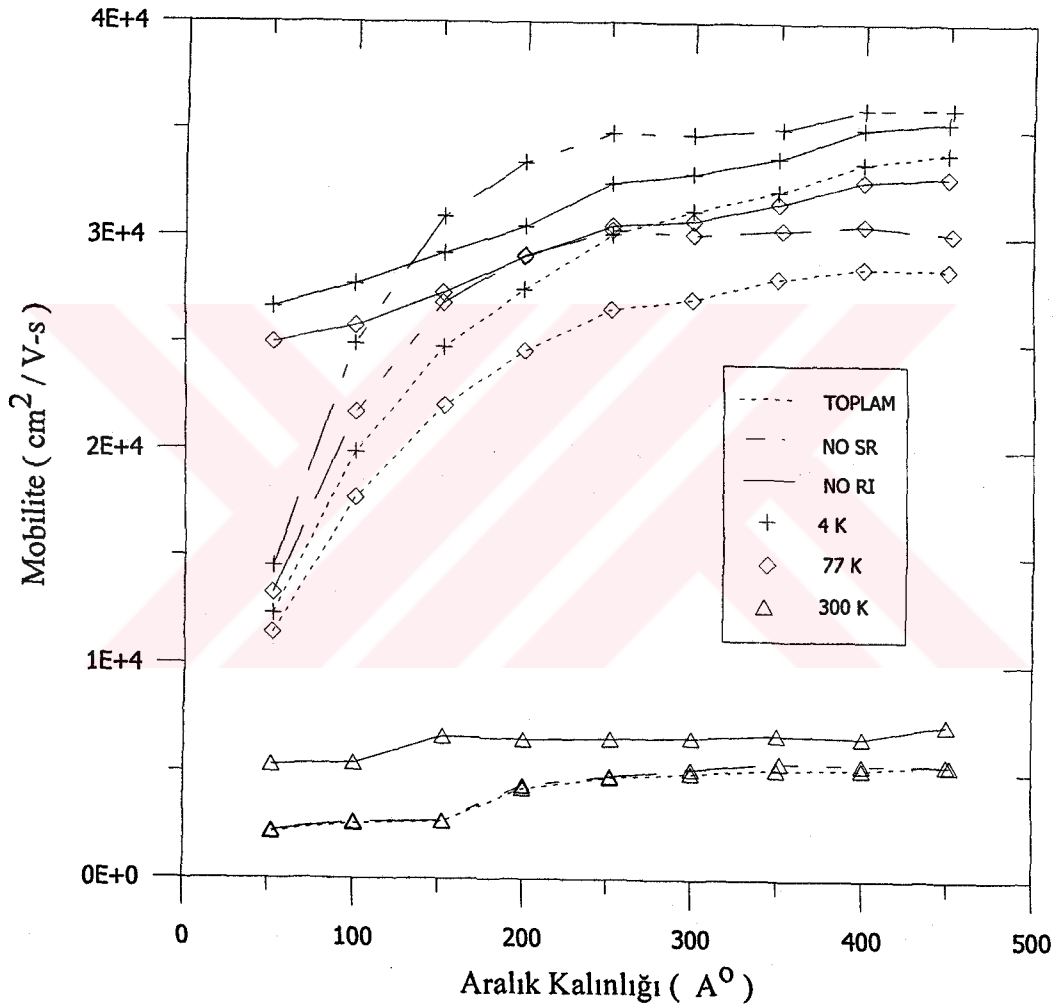
enerjisine bağlıdır. Saçılma oranları elektron enerjisi ile bazı saçılma mekanizmaları için artmakta diğerleri için ise azalmakta veya hemen hemen sabit kalmaktadır.

Düşük sıcaklıklarda en etkin mekanizmalardan biri olan akustik fonon saçılması ise elektron enerjisi ile beraber artmaktadır. Bu nedenle burada düşük sıcaklıklarda alanın artması ile beraber ortaya çıkan mobilité azalması akustik fonon saçılmasındaki artışa bağlıdır. Sıcaklık arttıkça mobilitédeki azalma ise saçılma oranları çok daha yüksek olan optik fonon saçılmasının etkin olmaya başlamasından kaynaklanmaktadır. Yüksek sıcaklıklarda 1 kV/cm'ye kadar mobilitéde belirgin bir değişim meydana gelmemektedir. Şekil 4.26'da kuyu içindeki enerji düzeylerinin ve üç boyutlu Γ ve L bantlarının doluluk oranları görülmektedir. Bu sistem için ortaya çıkan enerji düzey sayısı iki tanedir. Burada sıcaklık $T=300$ K, kuyu 100 Å^0 , $N_D=1 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$, aralık kalınlığı $W_s=52 \text{ Å}^0$ elektrik alan 0.5 kV/cm ve eksponansiyel oto korelasyon fonksiyonu için $L=30 \text{ Å}^0$ $\Delta=4.3 \text{ Å}^0$ olarak alınmıştır.



Şekil 4.27. Buruşuk yüzey saçılması yokken ve Gaussien oto korelasyon fonksiyonu için buruşuk yüzey saçılması varken farklı L değerlerinde sıcaklığın bir fonksiyonu olarak mobilitenin değişimi

Şekilden açıkça görüldüğü üzere kuyu içinde bulunan taban enerji düzeyi ve ikinci enerji düzeyi yüksek oranda dolu iken üç boyutlu sisteme ait Γ ve L bandı çok az sayıda parçacık içermektedir. Buna göre parçacıkların önemli bir çoğunluğu kuyu içinde olduğu için göz önüne alınan düşük elektrik alan değerleri için sistem tamamen iki boyutlu karakteristik sergilemektedir.



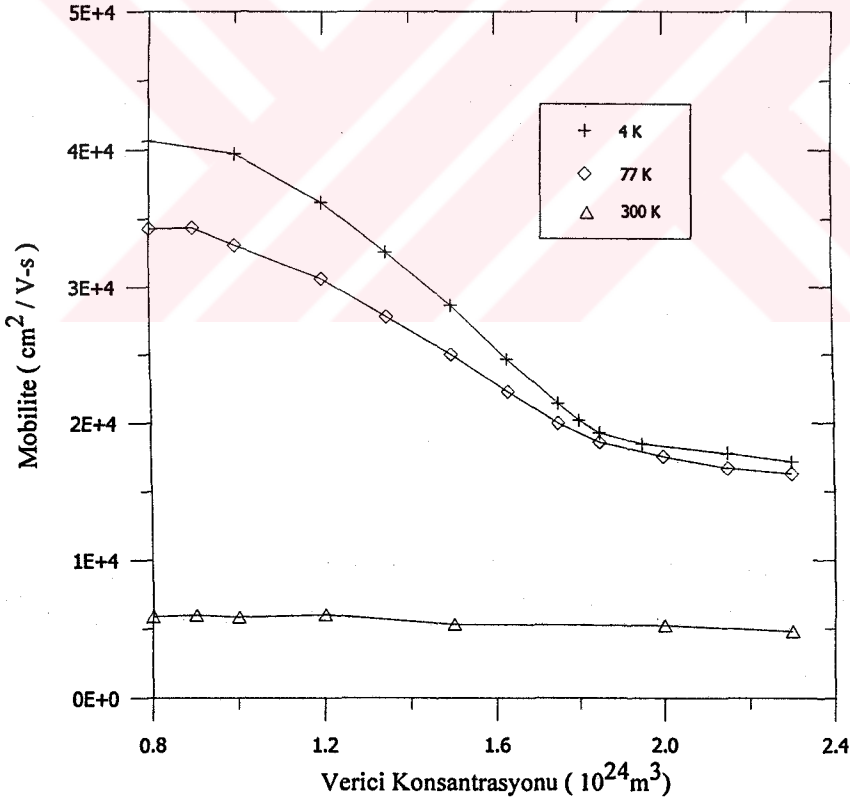
Şekil 4.28. Uzak safsızlık saçılması ve buruşuk yüzey saçılmasının değişik sıcaklıklar için aralık kalınlığına göre mobiliteye etkisi

Mobilitenin sıcaklık ile değişimi buruşuk yüzey saçılmasının değişik parametreleri için Şekil 4.27'de gösterilmiştir. Burada uzak safsızlık saçılması göz önüne alınmamış olup, sisteme uygulanan alan 0.1 kV/cm'dir. Buruşuk yüzey

saçılmasının olmadığı durumda (kalın düz çizgi) mobilite en yüksek değerindedir. Buruşuk yüzey saçılması göz önüne alınırken elde edilen saçılma oranları saçılma merkezlerinin dağılımını veren oto korelasyon fonksiyonuna bağlıdır. Şekil 4.27’de gaussiyen oto korelasyon fonksiyonu için mobilitenin etkin saçılma uzunluğuna ($L=30, 50$ ve 70 Å° , $\Delta=4.3 \text{ Å}^\circ$) bağımlılığı da gösterilmiştir. Buruşuk yüzey saçılmasının ara yüzey boyunca olan etkin mesafesi arttıkça saçılma oranları artmakta ve bu da mobilitenin şekilde görüldüğü gibi azalmasına sebep olmaktadır. Şekilde gösterilen en etkin buruşuk yüzey saçılması ($L=70 \text{ Å}^\circ$) göz önüne alındığında buruşuk yüzey saçılma mekanizmasının olmadığı duruma göre mobilite de yaklaşık iki kat fark olduğu görülmektedir. Sıcaklık 100 K üzerine çıktıktan sonra mobilite bütün parametre değerleri için hemen hemen aynıdır.

Mobilitenin iyonize olmuş safsızlıkları ara yüzeyden ayıran uzaklığa (W_s) bağımlılığı Şekil 4.28’de gösterilmiştir. Bu durum için kuyu genişliği 140 Å° , $N_D=1.5 \times 10^{24} \text{ m}^3$, elektrik alan 0.5 kV/cm ve eksponansiyel oto korelasyon fonksiyonu için $L=30 \text{ Å}^\circ$ ve $\Delta=4.3 \text{ Å}^\circ$ olarak alınmıştır. Uzak safsızlık saçılmasının olmadığı düşük sıcaklık değerlerinde mobilite W_s ile hemen hemen doğrusal olarak artmaktadır. Bunun en temel sebebi buruşuk yüzey saçılmasının azalmasından kaynaklanmaktadır. İyonize safsızlıkların ara yüzeye uzaklığı küçük iken (W_s küçük ise), kuantum kuyusunun ara yüzeye yakın bölgede potansiyelindeki eğim daha büyüktür, yani ara yüzey civarındaki etkin elektrik alan değeri büyüktür. Bu durum dalga fonksiyonlarının ara yüzeye daha yakın bir bölgede lokalize olmasına yol açar ve bu sebepten dolayı buruşuk yüzey saçılmasında artış olur. Buda mobilitenin azalması ile sonuçlanır. Ara bölge uzunluğu (W_s) arttıkça, kuyudaki eğim azalır (etkin elektrik alan azalır) ve saçılma oranları azaldığından mobilitede artış gözlenir. Yüksek sıcaklıklarda ise mobilite de W_s ’ye göre belirgin bir değişim yoktur çünkü bu sıcaklıklarda buruşuk yüzey saçılması etkin bir saçılma mekanizması değildir. Uzak safsızlık saçılması göz önüne alınırsa bu durumda mobilitenin W_s ’ye bağımlılığı özellikle küçük W_s değerlerinde çok belirgindir. Uzak safsızlık saçılma oranları W_s ile eksponansiyel olarak azaldığından, belirli bir W_s değerinden sonra mobilitede fazla bir değişim meydana gelmez.

Şekil 4.29'da buruşuk yüzey saçılmasının değişik sıcaklıklar için verici konsantrasyonuna göre mobiliteye etkisi görülmektedir. Özellikle düşük sıcaklık değerlerinde mobilité N_D ile azalmaktadır. Bu durum buruşuk yüzey saçılmasının artmasından kaynaklanmaktadır. Verici konsantrasyonunun değeri küçük iken (N_D küçük ise), kuantum kuyusunun ara yüzeye yakın bölgede potansiyelindeki eğim daha küçüktür, yani ara yüzey civarındaki etkin elektrik alan değeri küçüktür. Bu durumda dalga fonksiyonları ara yüzeye daha uzak bir bölgede bulunacağından buruşuk yüzey saçılmasında azalma olur. Buda mobilitenin artmasına neden olur. Verici konsantrasyonu artırıldığı zaman kuyudaki eğimde artacağından saçılma oranları artar ve bu da mobilitenin azalmasına neden olur. Yüksek sıcaklıklarda ise mobilité de N_D 'ye göre belirgin bir değişim yoktur çünkü bu sıcaklıklarda buruşuk



Şekil 4.29. Değişik sıcaklıklar için verici konsantrasyonuna göre buruşuk yüzey saçılmasının mobiliteye etkisi

yüzey saçılması etkin bir saçılma mekanizması değildir.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında farklı yarıiletken malzemelerin üretim esnasında uygun şekilde birleştirilmesi ile elde edilen heteroeklem yapılarda, arayüzeyde oluşan iki ve daha düşük boyutlardaki yapıların elektronik özellikleri farklı elektrik ve manyetik alanlar altında teorik olarak incelendi. Bu inceleme için önce iki ve daha fazla farklı yasak enerji aralığına sahip malzemenin birleştirilmesi ile elde edilen çoklu bir heteroeklemin iletim bant yapısını sayısal olarak çözen çok amaçlı bir program yazıldı. Burada hiçbir uyum parametresi kullanılmamış, sadece başlangıçtaki malzeme parametrelerinin ve her katmandaki verici ve alıcı safsızlık yoğunluklarının verilmesi yeterli olmuştur. Göz önüne alınan sistemin çözümü Hartree ve etkin kütle yaklaşımları çerçevesinde Poisson ve Schrödinger denklemlerinin kendi içinde uyumlu hesabı ile yapılmıştır. Çözümün sonucunda çok katmanlı yapı için iletim enerji bandının yapısı, yük dağılımı, düşük boyutlara hapsolmuş taşıyıcılar için enerji seviyeleri ve bunlara karşılık gelen dalga fonksiyonları bulunmuştur.

Bu veriler elde edildikten sonra bölüm 4.1'de modülasyon katkılama tekniğinin kullanıldığı bir yapı için değişik parametreler ışığında Schrödinger ve Poisson denklemlerinin kendi içinde uyumlu çözümünden hetero eklemlerde toplam elektron konsantrasyonunun ve birinci enerji düzeyinin aralık kalınlığı, Al konsantrasyonu ve sıcaklığa göre değişimleri incelendi. Sıcaklık ve verici konsantrasyonu arttıkça toplam elektron konsantrasyonunun arttığı görülmüştür. Bunun yanında aralık kalınlığı büyüdükçe toplam elektron konsantrasyonu ve birinci enerji düzeyinin değerinin azaldığı bulunmuştur. Alüminyum konsantrasyonu artırıldıkça iki boyutlu elektron gazının daha iyi tuzaklanması sağlandığından dolayı şekil 4.8 ve 4.9'da görüldüğü üzere enerji düzeyinin değerinin de büyüdüğü bulunmuştur.

Bölüm 4.2'de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ kuantum kuyusunda oluşan 2BEG göz önüne alınmış ve düzgün ve sabit bir manyetik alan altında birinci, ikinci ve üçüncü alt bantların bazıları veya tamamı elektronlarla dolu iken sistemin kimyasal potansiyelindeki değişim incelenmiştir. İletim enerji bant profili, enerji alt bantları her bir banttaki elektron konsantrasyonu manyetik alan yokken sayısal olarak

Poisson ve Schrödinger denklemlerinin kendi içinde uyumlu çözümü ile bulunmuştur. Bu çözümler her sıcaklık için ayrı ayrı elde edilmiştir. Sonra kuyu içindeki elektron konsantrasyonunun manyetik alanla değişmediği varsayımıyla, farklı sıcaklıklarda ve değişik formlardaki düzey genişlemeleri için uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyelin değişimi bulunmuştur. Kimyasal potansiyel salınımlarına genişlemenin etkisi düzey genişlemesinin eksponansiyel, lorentziyan ve gausiyen olduğu durumlar için bakılmıştır. Karşılaştırmayı daha kolay yapabilmek için düzey genişleme parametre değerleri, durum fonksiyonunun yoğunluğuna bağlı genişlik yarı maksimum değerine eşit olacak biçimde seçilmiştir. Ayrıca GaAs/GaAlAs kuantum kuyusundaki elektronlarla dolu düzeylerin sayısına göre de karşılaştırmalar yapılmıştır.

Genişleme parametresi değeri olan Γ arttıkça kimyasal potansiyeldeki salınımların genliğinin azaldığı bulunmuştur. Manyetik alan arttıkça her düzeydeki elektron doluluk kapasitesi artar, bundan dolayı elektronlar yüksek Landau enerji düzeylerinden düşük olanlarına doğru geçiş yapar. Manyetik alanın kritik bir değerinde kısmen dolu en üst düzeyin tamamen boşalarak kimyasal potansiyelin keskin bir şekilde en aşağıdaki Landau enerji düzeyine düştüğü gözlenmiştir. Dolu alt bantların sayısı artırıldığında kimyasal potansiyelin farklı alt bantlara bağlı Landau düzeyleri arasında geçiş yaptığı ve düşük manyetik alanlarda, farklı alt bantlara bağlı Landau düzeylerinin birbirine karışmış (intermixed) olduğu gözlenmiştir. Bundan dolayı $\mu(B)$ farklı alt bantlara bağlı Landau düzeyleri arasında keskin salınımlar yapmaktadır. Manyetik alan arttırıldıkça Landau düzeylerinin yoğunluğu azalır ve $\mu(B)$ daha düzgün değişmeye başlar. Manyetik alan daha çok artırıldığında ise μ 'nün değerinin birinci alt banda bağlı enerji düzeylerine düştüğü bulunmuştur.

Temelde birbirinden farklı süreçler olmasına rağmen sabit bir sıcaklıkta düzey genişlemesini artırmak veya sabit bir düzey genişleme değerinde sıcaklığı artırmak göz önüne alınan tüm durumlar için niteliksel olarak kimyasal potansiyel üzerinde aynı etkileri yaratmaktadır. Bu durum kimyasal potansiyele çok yakın olan Landau düzeyleri için $D(E)f(E)$ çarpımının üst üste binmesinin bir sonucudur.

Düzey genişleme parametreleri küçük olduğu zaman, özellikle küçük manyetik alanlarda kimyasal potansiyel salınımları her üç genişleme formu için hemen hemen aynı sonuçları vermektedir.

Kimyasal potansiyel salınımları verilen bir sıcaklık veya düzey genişleme parametresinde, düzey genişlemesinin gausyen formu için en keskin değişimleri ortaya koymaktadır.

Bölüm 4.3.1'de modülasyon katkılı GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As yapısının kendi içinde uyumlu olarak hesaplanmış potansiyel profili ve taban durum ile birinci uyarılmış duruma ait dalga fonksiyonları elde edildi. Bu yapı içinde tutulan iki boyutlu serbest elektronların taşınımı hetero ekleme paralel olarak uygulanan elektrik alan altında ensemble Monte Carlo yöntemi ile incelendi. Modülasyon katkılı GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As hetero yapısı için farklı elektrik alanlardaki hız-zaman karakteristikleri, iki boyutlu enerji düzeyleri ve üç boyutlu Γ ve L düzeylerinin elektron dolulukları, uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak değişik sıcaklıklar için elektron hızının değişimi, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak elektron mobilitesinin değişimi ve uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak uzak safsızlık saçılması (remote impurity) varken ve yokken mobilitenin değişimine bakılmıştır. 0.5 kV/cm değerlerinin üzerindeki alanlarda hızda ani artışlar olduğu ve bundan başka çalışılan tüm sıcaklıklarda GaAs tipi malzemeler için vadiler arası saçılmalarından kaynaklanan negatif diferansiyel direnç olgusu açıkça gözlenmiştir. Alt bant düzeylerinin ve vadilerin elektron dolulukları farklı elektrik alanlar için zamanın bir fonksiyonu olarak elde edilmiş ve sonuçların ortalama elektron hızının değişimi ile uyumlu olduğu görülmüştür. Yüksek mobilite değerleri ancak uygulanan düşük alan değerlerinde ve/veya düşük sıcaklıklarda elde edilmiştir. Simülasyon sonuçları uzak safsızlık saçılmasının mobilite üzerine çok büyük etkisinin olabileceğini göstermiş ve uzak safsızlık saçılmasının göz önüne alınmadığı bir durum için mobilitenin on kat daha büyük olacağı görülmüştür. Yüksek alan değerlerinde veya yüksek sıcaklıklarda sistem iki boyutlu olma özelliklerini hızla kaybetmekte ve üç boyutlu hale gelmektedir. Γ ve L bandına önemsiz denebilecek kadar az sayıda parçacığın geçtiği iki boyutlu sistemin düşük sıcaklıklar (<100 K) ve düşük alanlarda (<0.5 kV/cm) elde edilebilir olduğu bulunmuştur. Uygulanan alan 0.5 kV/cm olduğu bir durum için düşük sıcaklıklarda

en yüksek mobilité deęerinin $4 \times 10^4 \text{ cm}^2 / \text{V-s}$ deęerlerine ulařtıęı fakat oda sıcaklıęında sistemin artık üç boyutlu karakteristik gösterdięinden dolayı mobilitenin de külçe(bulk) deęerine yaklařtıęı bulunmuřtur.

Bölüm 4.3.2’de GaAs/GaAlAs kuantum kuyusunda oluřan iki boyutlu elektron gazının ara yüzey boyunca uygulanan bir elektrik alanı altında tařınım özellikleri ensemble Monte Carlo teknięi ile incelenmiřtir. Ortalama elektron sürüklenme hızlarını bulmak için belirli sayıdaki elektronun zaman içinde hareketi takip edilmiřtir. Kullanılan elektron sayısı 10-30 bin arasındadır. Hem iki hem de üç boyutlu elektronların saılmaları göz önüne alınmıřtır. İki boyutlu elektronların saılma oranları Schrödinger/Poisson denkleminin kendi içinde uyumlu sayısal hesabından bulunan enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak bulunmuřtur. Elektron mobilitésinin uygulanan alana bağımlılıęı $T=14, 77$ ve 300 K sıcaklıkları için elde edilmiř ve düşük sıcaklıklarda alanın artması ile beraber mobilitenin azaldıęı gözlenmiřtir. Bu azalma akustik fonon saılmasındaki artıřtan kaynaklanmaktadır. Çalışılan sistemdeki parçacıkların önemli bir çoęunluęu kuyu içinde olduęu için göz önüne alınan düşük elektrik alan deęerleri için sistem tamamen iki boyutlu karakteristik sergilemektedir.

Mobilitenin sıcaklık ile deęiřimi buruřuk yüzey saılmasının deęiřik parametreleri için incelenmiř ve en etkin buruřuk yüzey saılması ($L=70 \text{ Å}$) göz önüne alındıęında buruřuk yüzey saılma mekanizmasının olmadıęı duruma göre mobilité de yaklaşık iki kat fark oluřtuęu gözlenmiřtir. Mobilitenin iyonize olmuř safsızlıkları ara yüzeyden ayıran uzaklıęa (W_s) bağımlılıęı da incelenmiř ve uzak safsızlık saılmasının olmadıęı düşük sıcaklık deęerlerinde mobilitenin W_s ile hemen hemen doęrusal olarak arttıęı bulunmuřtur. Bu durum buruřuk yüzey saılmasının azalmasından kaynaklanmaktadır. Buruřuk yüzey saılmasının deęiřik sıcaklıklar için verici konsantrasyonuna göre mobilitéye etkisi arařtırılmıř, özellikle düşük sıcaklık deęerlerinde mobilitenin N_D ile azaldıęı bulunmuřtur. Bu durum buruřuk yüzey saılmasının artmasından kaynaklanmaktadır.

KAYNAKLAR

- ANDO,T., FOWLER,A.B. and STERN,F., 1982. Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, 54, 437.
- ANDO,T. and UEMURA, Y., 1974. Theory of quantum transport in a two dimensional electron system under magnetic fields I. Characteristics of level broadening and transport under strong fields. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 36, 959.
- ASHCROFT, N.W., MERMIN, N.D., 1976. *Solid State Physics*, Saunders College, West Washington Square, Philadelphia.
- AVERKIEV, N. S., GOLUB, L. E., TARASENKO, S. A., and WILLANDER, M., J. 2001. Theory of magneto-oscillation effect in quasi two dimensional semiconductor structures. *Phys., Condens. Matter*, 13, 2517.
- BASTARD,G., 1988. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique, Fransa.
- BERGH, A.A., 1976. *Light Emitting Diodes*, Clarendon Press, Oxford.
- CAPASSO,F., 1987. *Heterojunction Band Discontinuities*, North Holland, Amsterdam.
- CASEY, H.C., PANISH, M.B., 1978. *Heterostructure Lasers*, Academic Press, New York.
- CROW, G.C., ABRAM, R.A.,1999, Monte Carlo Simulations of Electron Transport in Coupled Si Quantum Wells, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, s.1107-1113
- DAVIES, J. H., 1998. *The Physics of Low Dimensional Semiconductors, an Introduction*. Oxford: Cambridge Univ. Press, 438s.
- DINGLE, R., STORMER, H. L.,GOSSARD, A. C., and WIEGMANN, W., 1978., *Appl. Phys. Lett.*, 33, 665.
- EDMONDS, K. W., GALLAGHER, B. L., MAIN, P. C., NOGARET, A., HENINI, M., MARROWS, C. H. and MACINTYRE, D. S., 2002. Magneto resistance oscillations in a periodic magnetic field due to internal Landau band structure. *Physica E*, 12, 212.

- EISENSTEIN, J. P. and STORMER, H. L., 1990. The fractional quantum Hall effect. *Science*, 1510.
- GRIVEI, E., BEUKEN, J-M., MARIAGE, G., BAYOT, V., and SHAYEGAN, M., 1998. Heat capacity of a 2DEG. *Physica B*, 90, 256-258.
- GOANO, M., 1993. *Solid-State Electronics*, 36, 217.
- GOANO, M., 1995. *Trans. Math. Software* 21, 221.
- GORNIK, E., LASSING, R., STRASSER, G., STÖRMER, H. L., GOSSARD A. C. and WIEGMANN, W., 1985. Specific heat of two dimensional electrons in GaAs-GaAlAs multilayers. *Phys. Rev. Lett.*, 54, 1820.
- GRADSHTEYN, I.S., RYZHIK, I.M., 1965, *Table of Integrals Series and Products*, Academic Press, New York
- HANG, D. R., HUANG, C. F., HUNG, W. K., CHANG, Y. H., CHEN, J. C., YANG, H. C., CHEN, Y. F., SHIH, D. K., CHU, T. Y., and LIN, H. H., 2002. Shubnikov-de Haas oscillations of two dimensional electron gas in an InAsN/InGaAs single quantum well. *Semicond. Sci. Technol.*, 17, 999.
- HARRISON, P., 2000. *Quantum Wells Wires and Dots*, John Wiley & Sons Ltd., İngiltere.
- HARRIS, J.S., 1990. From Bloch Functions to Quantum Wells, *Int. Journal of Modern Physics B*, 4, 1149.
- ITKOVSKY, M. A., 2001. Magnetoquantum de Haas-van Alphen oscillations in spin split two dimensional liquid. *Eur. Phys. J. B* 23, 283.
- JACOBONI, C., and REGGIANI, L., 1983. *Rev. Mod. Phys.*, 55, 645.
- JACOBONI, C., LUGLI, P., 1989. *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*, Springer-Verlag Wien, New York.
- JAROS, M., 1989, *Physics and Applications of Semiconductor Microstructures*, Clarendon Press, Oxford.
- KISHIGI, K., and HASEGAWA, Y., 2002. Quantum interference oscillation and effect of spin in de Haas van Alphen effect in the quantum well materials. *Surf. Sci.*, 514, 130.
- KITTEL, C., 1996. *Introduction to Solid State Physics* 7th ed. New York: John Wiley and Sons, Inc.

- KLITZING, K., DORDA, G., and PEPPER, M., 1980. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45, 494.
- KRESSEL, H., BUTLER, J.K., 1977. *Semiconductor Lasers and Heterojunction LEDs* (Academic, New York).
- KROWNE, C.,M., 1989. *J. Appl. Phys.*, 65, 1602.
- LANDAU L, D., 1930. *Z. Physik*, 64, 629.
- LI, Z-F, LU, W., SHEN, S. C., HOLLAND, S., HU, C. M., HEITMANN, D., SHEN, B., ZHENG, Y.D., SOMEYA, T., and ARAKAWA, Y., 2002. Cyclotron resonance and magnetotransport measurements in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures for $x=0.15-0.30$. *Appl. Phys. Lett.*, 80, 431.
- MOGLESTUE, C., 1993. *Monte Carlo Simulation of Semiconductor devices*, Cambridge, Londra.
- MORROW R.A. and BROWNSTEN, K.R., 1984. Model effective-mass Hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions. *Phys. Rev. B*, 30, 678.
- PEETERS, F. M., VASILOPOULOS, P. and SHI, J., 2002. Density of states and Fermi level of a periodically modulated two dimensional electron gas. *J. Phys.: Condens. Matter*, 14, 8803.
- POTTS, A., SHEPHERD, R., HERRENDEN-HARKER, W. G., ELLIOT, M., JONES, C. L., USHER, A., JONES, G. A., RITCHIE, D. A., LINFIELD, E. H. AND GRIMSHAW, M., 1996. Magnetization studies of Landau level broadening in two dimensional electron systems. *J. Phys.: Condens. Matter* 8, 5189.
- PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY S. A. and VETTERLING, W. T., 1986. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge: Cambridge University Press.
- SANCHEZ-DEHESA, J., MESEGUER, F. BORONDO, F. and MAAN, J. C., 1987. Self consistent calculations of the electronic properties of a selectively doped AlGaAs-GaAs quantum well under high magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 36, 5070.

- SCHWARZ, M. P., GRUNDLER, D., ROLFF, H., WILDE, M., GROTH, S., HEYN CH., AND MEITMANN, D., 2002. De Haas-van Alphen effect in a two dimensional electron system. *Physica E*, 12, 140.
- SHANKAR, R., 1980. *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press, New York.
- SHIK, A., 1997. *Quantum Wells Physics and Electronics of Two-Dimensional Systems*, World Scientific, Singapore.
- SHOCKLEY, W., PEARSON, G.L., 1948. Modulation of conductance of thin films of semiconductors by surface charges. *Phys. Rev.*, 74, s232-233.
- SNOWDEN, C. M., 1988. *Semiconductor device modelling*. Peter peregrinus ltd., London, United Kingdom, 213s.
- STORMER, H. L., 1980. *J. Phys. Soc. Japan Suppl. A*. 49, 1013.
- SZE, S.M., 1985. *Semiconductor devices physics and technology*, John Wiley & Sons, Singapore.
- TAN, H., SNIDER, G. L., CHANG L. D. and HU, E. L., 1990. A self consistent solution of Schrödinger-Poisson equations using a nonuniform mesh. *J. Appl. Phys.* 68, 4071.
- TOMIZAWA, K., 1993. *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*, Artech House Inc, Japonya.
- TRELLAKIS, A., GALICK, T., PACELLI A. and RAVAIOLI, U., 1997. Iteration scheme for the solution of the two dimensional Schrödinger-Poisson equations in quantum structures. *J. Appl. Phys.*, 81, 7880.
- TSUI, D.C., STÖRMER, H. L., and GOSSARD, A. C., 1982. Two dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48, 1559.
- WANG, T., and HESS, K., 1985. *J. Appl. Phys.* 57, 5336.
- WEIMER, P. K., 1962. The TFT-A new thin-film transistor. *Proc. IRE*, 50, s1462-1469.
- WEISBUCH, C., and VINTER, B., 1991. *Quantum Semiconductor Structures*. Academic Press, New York.
- YAMAKAWA, S., UENO, H., TANIGUCHI, K., HAMAGUCHI, C., MIYATSUJI, K., MASAKI, K., RAVAIOLI, U., 1996. Study of Interface Roughness

Dependence of Electron Mobility in Si Inversion Layers Using the Monte Carlo Method, J. Appl. Phys. 79 (2)

ZAWADSKI, W., LASSNIG, R., 1984. Surf. Sci., 142, 225.

ZAWADSKI W., LASSNIG, R., 1984. Specific heat and magneto-thermal oscillations of two- dimensional electron gas in a magnetic field. Solid State Commun., 50, 537.



ÖZGEÇMİŞ

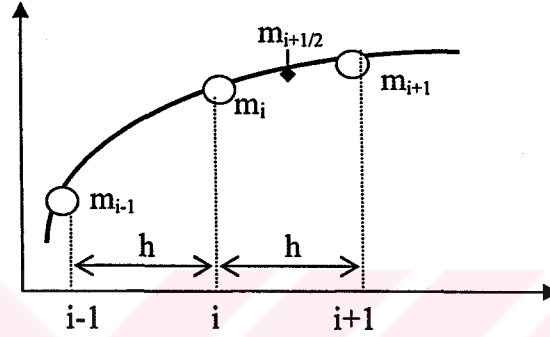
1972 yılında Adana'da doğdu. İlk, orta lise öğrenimini Adana'da tamamladıktan sonra 1990 yılında Çukurova Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girmeye hak kazandı. 1995 yılında iyi dereceyle mezun oldu. Aynı yıl Mersin Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde yüksek lisans eğitimine başladı. 1999 yılında master derecesi aldıktan sonra Çukurova Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde doktora eğitimine başladı. 1996 yılından bu yana araştırma görevlisi olarak çalışmaktadır.



EK A.

Schrödinger Denkleminin Formülasyonu

Schrödinger denklemini sayısal olarak çözebilmek için denklemin diferansiyel kısmı şekildeki gibi indisler kullanılarak kesikli formda yazılabilir



$$\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi}{dz} \right) = \frac{d}{dz} \left(\frac{\Psi'}{m(z)} \right) \quad (A1)$$

$$= \frac{(\Psi'/m(z))_i - (\Psi'/m(z))_{i-1}}{h}$$

$$= \frac{1}{h} \left\{ \frac{\Psi'_i}{m_i} - \frac{\Psi'_{i-1}}{m_{i-1}} \right\}$$

$$= \frac{1}{h} \left\{ \frac{1}{m_i} \left(\frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{h} \right) - \frac{1}{m_{i-1}} \left(\frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h} \right) \right\}$$

$$= \frac{1}{h^2} \left\{ \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{m_i} - \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{m_{i-1}} \right\} \quad (A2)$$

$$m_i \text{ yerine } m_{i+1/2} = \frac{1}{2}(m_i + m_{i+1}) \quad \text{ve} \quad m_{i-1} \text{ yerine } m_{i-1/2} = \frac{1}{2}(m_{i-1} + m_i)$$

kullanılarak denklem yeniden düzenlenirse

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi}{dz} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \left\{ \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{m_{i+1/2}} - \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{m_{i-1/2}} \right\} \quad (\text{A3})$$

olur. Böylece i noktasına göre düzenlenmiş olan kesikli yapıdaki Schrödinger denklemi

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{m_{i+1/2}} - \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{m_{i-1/2}} \right) + V_i \Psi_i = E \Psi_i \\ & -\frac{\hbar^2}{2\hbar^2} \left[\frac{\Psi_{i+1}}{m_{i+1/2}} - \left(\frac{1}{m_{i+1/2}} + \frac{1}{m_{i-1/2}} \right) \Psi_i + \frac{1}{m_{i-1/2}} \Psi_{i-1} \right] + V_i \Psi_i = E \Psi_i \\ & -\frac{\hbar^2}{2\hbar^2} \frac{\Psi_{i+1}}{m_{i+1/2}} + \left[\frac{\hbar^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{m_{i+1/2}} + \frac{1}{m_{i-1/2}} \right) + V_i \right] \Psi_i - \frac{\hbar^2}{2\hbar^2} \frac{\Psi_{i-1}}{m_{i-1/2}} = E \Psi_i \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

biçiminde olur. Burada

$$\begin{aligned} A_{i,i+1} &= \frac{\hbar^2}{2\hbar^2} \frac{1}{m_{i+1/2}} \\ A_{i,i-1} &= \frac{\hbar^2}{2\hbar^2} \frac{1}{m_{i-1/2}} \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

$$A_{i,i} = \left[\frac{\hbar^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{m_{i+1/2}} + \frac{1}{m_{i-1/2}} \right) + V_i \right] = -A_{i,i+1} - A_{i,i-1} + V_i$$

olarak tanımlanırsa

$$\sum_{j=1}^n A_{ij} \Psi_j = E \Psi_i \quad (A6)$$

şeklinde bir matris denklemi oluşturulabilir. Burada A 'nın yukarıda tanımlanan elemanları, j 'nin alabileceği komşu durumlarını belirler bunun dışında kalan tüm değerler için A sıfırdır:

$$A_{ij} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2h^2} \frac{1}{m_{i+1/2}} & j = i+1 \\ -\frac{\hbar^2}{2h^2} \frac{1}{m_{i-1/2}} & j = i-1 \\ -A_{i,i+1} - A_{i,i-1} + V_i & j = i \\ 0 & \text{diğer durumlarda} \end{cases} \quad (A7)$$

i indisi şekilde gösterildiği gibi her bir aralığın hangi noktaya karşılık geldiğini gösteren bir indistir. İndisteki yarım tamsayılar iki komşu nokta arasındaki orta noktayı gösteren mesafeye karşılık gelir. Komşu noktalar arasındaki h mesafesi tüm noktalar için düzenli ve aynı ise aşağıdaki gibi simetrik üçlü köşegenel (tridiagonal) elemanları olan bir matris elde edilir. Matrisin ilk ve son değerleri sınır koşulları tarafından belirlenir. Elektronlar bağımlı bir hareket yaptıklarından dolayı dalga fonksiyonunun kendisi ve türevi $\pm\infty$ da sıfır olmalıdır. Sayısal olarak $\pm\infty$ alamayacağımızdan bunlara karşılık gelen z_I ve z_N değerlerini yeterince büyük seçmeliyiz. Bu değerleri belirlemenin bir yolu olarak genelde bulunan öz değerler bu değerlerden bağımsız olana kadar z_I ve z_N arttırılmalıdır.

Sınır koşulları kullanılırsa

$$\Psi(z = z_1) = 0 \quad \Rightarrow \Psi_1 = 0 \quad (A8)$$

$$\Psi(z = z_N) = 0 \quad \Rightarrow \Psi_N = 0$$

$$\left. \frac{d\Psi}{dz} \right|_{z=z_1} = 0 \quad \Rightarrow \frac{\Psi_2 - \Psi_1}{h} = 0 \quad \Rightarrow \Psi_1 = \Psi_2 \quad (A9)$$

$$\left. \frac{d\Psi}{dz} \right|_{z=z_N} = 0 \quad \Rightarrow \frac{\Psi_N - \Psi_{N-1}}{h} = 0 \quad \Rightarrow \Psi_N = \Psi_{N-1}$$

denklemleri elde edilir ve bu koşullar kullanılarak açık halde matris eşitliği yazılırsa aşağıdaki şekilde gösterildiği gibi olur:



EK B

Poisson Denkleminin Formülasyonu

Lineer olmayan Poisson denkleminin çözümü için Newton metodu kullanıldı. Bu metodun genelleştirilmiş hali denklem (3.292)'yi çözmek için uygulanabilir. Elektron yoğunluğu $\phi(z)$ potansiyelinin Schrödinger denkleminde kullanılmasıyla bulunabilir, bu durumda elektron yoğunluğu denklem (3.292), (3.293) ve (3.294)'e göre $\phi(z)$ 'nin bir fonksiyonudur. Bu fonksiyon $n=n(\phi)$ ile ve bu denklemin tam (exact) çözümü $\phi^{(0)}(z)$ ile gösterilsin

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d}{dz} \right) \phi(z) = -\frac{q}{\epsilon_0} (N_D - n[\phi] - N_A) \quad (B1)$$

Burada amaç verilen bir $\phi(z)$ deneme fonksiyonu için düzeltme fonksiyonu olan $\delta\phi(z)$ fonksiyonunu bulmak olduğundan

$$\phi^{(0)}(z) = \phi(z) + \delta\phi(z) \quad (B2)$$

yazılabilir. Bu ifade Poisson denkleminde kullanılırsa

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d}{dz} \right) [\phi + \delta\phi] = -\frac{q}{\epsilon_0} (N_D - n[\phi + \delta\phi] - N_A) \quad (B3)$$

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d\phi}{dz} \right) = -\frac{q}{\epsilon_0} (N_D - n[\phi + \delta\phi] - N_A) - \frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d\delta\phi}{dz} \right)$$

elde edilir. Burada

$$n[\phi + \delta\phi] = n[\phi] + \delta n[\phi] = n[\phi] + \frac{\partial n}{\partial \phi} \delta\phi \quad (\text{B4})$$

tanımı kullanılarak denklem yeniden düzenlenirse

$$-\left[\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d\phi}{dz} \right) + \frac{q}{\epsilon_0} (N_D - n[\phi] - N_A) \right] = -\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d\delta\phi}{dz} \right) - \frac{q}{\epsilon_0} \delta n[\phi] \quad (\text{B5})$$

olur. Eğer $\phi(z)$ tam çözüm ise sol taraf sıfır olur, o yüzden bu terim Poisson denklemindeki hatayı verir. $\delta n(\phi)$ için bir ifade bulabilmek amacıyla denklem (3.294) kullanılırsa

$$n[\phi] = \sum_{k=1}^m \Psi_k^*[\phi] \Psi_k[\phi] n_k \quad (\text{B6})$$

yazılabilir.

$$f = g.h \quad (\text{B7})$$

$$\delta f = h\delta g + g\delta h = h \frac{\partial g}{\partial z} \delta z + g \frac{\partial h}{\partial z} \delta z \quad (\text{B8})$$

özellği kullanılırsa

$$\delta n[\phi] = \sum_{k=1}^m \left[\delta(\Psi_k^* \Psi_k) n_k + \Psi_k^* \Psi_k \delta n_k \right] \quad (\text{B9})$$

elde edilir, burada sağ taraftaki ilk terim ikinciye göre çok küçük olduğu için ihmal edilebilir. Buna göre ilk terim düşürülerek δn_k terimi $\delta\phi$ cinsinden ifade edilebilir

$$\delta n_k = n_k [\phi + \delta\phi] - n_k [\phi] = \frac{\partial n_k}{\partial \phi} \delta\phi \quad (\text{B10})$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial \phi} = \frac{\partial n_k}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \phi} \quad (\text{B11})$$

Denklem (3.295)'in türevi burada kullanılırsa

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_k}{\partial \phi} &= \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left[\frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/k_B T}} \right]_{E_k}^{\infty} \frac{\partial E}{\partial \phi} \\ \frac{\partial n_k}{\partial \phi} \delta\phi &= \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left[\frac{-1}{1 + e^{(E_k - E_F)/k_B T}} \right]_{E_k}^{\infty} \frac{\partial E_k}{\partial \phi} \delta\phi \\ &= -\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left[\frac{1}{1 + e^{(E_k - E_F)/k_B T}} \right]_{E_k}^{\infty} \delta E_k \end{aligned} \quad (\text{B12})$$

olur. E_k^0 tam çözümün enerjisi olmak üzere δE_k için bir ifade yazılabilir

$$E_k^0 = \langle \Psi_k | H | \Psi_k \rangle$$

$$E_k + \delta E_k = \langle \Psi_k | H + q\delta\phi | \Psi_k \rangle \quad (\text{B13})$$

$$\delta E_k = \langle \Psi_k | q\delta\phi | \Psi_k \rangle$$

bu sonuç denklem (B12)'de yerine konulursa

$$\frac{\partial n_k}{\partial \phi} \delta\phi = -\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left(\frac{1}{1 + e^{(E_k - E_F)/k_B T}} \right) \langle \Psi_k | q\delta\phi | \Psi_k \rangle \quad (\text{B14})$$

olur. Bu ifade denklem (B9)'da kullanılırsa

$$\begin{aligned}\delta n[\phi] &\cong \sum_{k=1}^m [\Psi_k^* \Psi_k \delta n_k] \\ &= - \sum_{k=1}^m \Psi_k^* \Psi_k \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left(\frac{1}{1 + e^{(E_k - E_F)/k_B T}} \right) \langle \Psi_k | q \delta \phi | \Psi_k \rangle\end{aligned}\quad (B15)$$

sonucuna ulaşılır. Böylece Poisson denklemi potansiyelin her adımında $\delta\phi$ artışı olacak biçimde aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\begin{aligned}& - \left[\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d\phi}{dz} \right) + \frac{q}{\epsilon_0} (N_D(z) - n(z) - N_A(z)) \right] \\ &= - \frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d\delta\phi}{dz} \right) + \frac{q}{\epsilon_0} \sum_{k=1}^m \Psi_k^* \Psi_k \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left(\frac{1}{1 + e^{(E_k - E_F)/k_B T}} \right) \langle \Psi_k | q \delta \phi | \Psi_k \rangle\end{aligned}\quad (B16)$$

Yukarıdaki denklem elde edilirken vericilerin tamamının iyonize olduğu ve dalga fonksiyonu değişiminin $\delta\phi$ 'ye göre çok küçük olduğu varsayılmıştır. Bu integro-diferansiyel denklemi çözmek güç olmasına rağmen sağdaki ikinci terimde bulunan integral, birinci dereceden bir yaklaşıklık kullanılarak, $q\delta\phi$ olarak alınabilir (Krowne, 1989). Schrödinger denkleminde olduğu gibi Poisson denklemini de kesikli hale getirerek denklem bu varsayıma göre düzenlenebilir

$$\begin{aligned}\frac{d}{dz} \left(\epsilon \frac{d\phi}{dz} \right) &= \frac{d}{dz} [\epsilon \phi'] = \frac{\epsilon_i \phi'_i - \epsilon_{i-1} \phi'_{-1i}}{h} \\ &= \frac{1}{h} \left[\epsilon_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h} - \epsilon_{i-1} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} \right] \\ &= \frac{1}{h^2} [\epsilon_i (\phi_{i+1} - \phi_i) - \epsilon_{i-1} (\phi_i - \phi_{i-1})]\end{aligned}\quad (B17)$$

$$\varepsilon_i \text{ yerine } \varepsilon_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}) \quad \text{ve} \quad \varepsilon_{i-1} \text{ yerine } \varepsilon_{i-1/2} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{i-1} + \varepsilon_i)$$

kullanılarak denklem yeniden düzenlenirse

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left(\varepsilon \frac{d\phi}{dx} \right) &= \frac{1}{h^2} [\varepsilon_{i+1/2} (\phi_{i+1} - \phi_i) - \varepsilon_{i-1/2} (\phi_i - \phi_{i-1})] \\ &= \frac{\varepsilon_{i+1/2}}{h^2} \phi_{i+1} - \frac{1}{h^2} (\varepsilon_{i+1/2} + \varepsilon_{i-1/2}) \phi_i + \frac{\varepsilon_{i-1/2}}{h^2} \phi_{i-1} \end{aligned} \quad (B18)$$

$$= \sum_{j=1}^n C_{ij} \phi_j$$

olur. Burada Schrödinger denklemine benzer biçimde

$$C_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{h^2} \varepsilon_{i+1/2} & j = i+1 \\ \frac{1}{h^2} \varepsilon_{i-1/2} & j = i-1 \\ -C_{i,i+1} - C_{i,i-1} & j = i \\ 0 & \text{diğer durumlarda} \end{cases} \quad (B19)$$

olarak tanımlanmıştır. Böylece i noktasına göre düzenlenmiş olan kesikli yapıdaki Poisson denklemi

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dz} \left(\epsilon \frac{d\phi}{dz} \right) + \frac{q}{\epsilon_0} (N_D(z) - n(z) - N_A(z)) \\
= \sum_{j=1}^n C_{ij} \phi_j + \frac{q}{\epsilon_0} [N_{Di} - n_i - N_{Ai}] \\
= e_i
\end{aligned} \tag{B20}$$

olur. Düzeltme fonksiyonunu içeren (B16) denklemi buna göre düzenlenirse

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s \frac{d\delta\phi}{dz} \right) = \sum_{j=1}^n C_{ij} \delta\phi_j \\
-e_i = -\frac{d}{dz} \left(\epsilon \frac{d\delta\phi}{dz} \right) + \frac{q}{\epsilon_0} \sum_{k=1}^m \Psi_k^* \Psi_k \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left(\frac{1}{1 + e^{(E_k - E_F)/k_B T}} \right) q \delta\phi
\end{aligned} \tag{B21}$$

elde edilir. Burada $f(E_k) = \frac{1}{1 + e^{(E_k - E_F)/k_B T}}$ Fermi-Dirac fonksiyonu olmak üzere

$$-e_i = \sum_{j=1}^n C_{ij} \delta\phi_j + \frac{q}{\epsilon_0} \sum_{k=1}^m |\Psi_k|^2 \left(\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \right) f(E_k) q \delta\phi_i \tag{B22}$$

$$\begin{aligned}
&= C_{i,i+1} \delta\phi_{i+1} + C_{i,i} \delta\phi_i + C_{i,i-1} \delta\phi_{i-1} + \\
&\quad \frac{q}{\epsilon_0} \sum_{k=1}^m |\Psi_k|^2 \left(\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \right) f(E_k) q \delta\phi_i
\end{aligned} \tag{B23}$$

$$\begin{aligned}
&= C_{i,i+1} \delta\phi_{i+1} + \left[C_{i,i} + \frac{q^2}{\epsilon_0} \sum_{k=1}^m |\Psi_k|^2 \left(\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \right) f(E_k) \right] \delta\phi_i \\
&\quad + C_{i,i-1} \delta\phi_{i-1}
\end{aligned} \tag{B24}$$

$$\begin{aligned}
-e_i &= -\left[C_{i,i+1}\phi_{i+1} + C_{i,i}\phi_i + C_{i,i-1}\phi_{i-1} + \frac{q}{\epsilon_0}(N_{Di} - n_i - N_{Ai}) \right] \\
&= C_{i,i+1}\delta\phi_{i+1} + \left[C_{i,i} + \frac{q^2}{\epsilon_0} \sum_{k=1}^m |\Psi_k|^2 \left(\frac{m^*}{\pi\hbar^2} \right) f(E_k) \right] \delta\phi_i \\
&\quad + C_{i,i-1}\delta\phi_{i-1}
\end{aligned} \tag{B25}$$

olur. Matrisi yazarken kolaylık olması için son denklemden sağ taraftaki köşeli parantez içindeki ifade b_i ve yük yoğunluğunu içeren parantez ρ_i olsun. Komşu noktalar arasındaki h mesafesi tüm noktalar için düzenli ve aynı ise aşağıdaki gibi simetrik üçlü köşegenel (tridiagonal) elemanları olan bir matris elde edilir. Matrisin ilk ve son değerleri sınır koşulları tarafından belirlenir. $\hbar^2$ mertebesinde bir yaklaşıklık kullanılarak en genel haldeki sınır koşulları yazılabilir. Buna göre a_1 , a_2 ve a_3 rasgele sayılar olmak üzere en genel başlangıç şartı aşağıda verildiği gibi yazılır ve bu başlangıç şartı kesikli hale getirilirse

$$\begin{aligned}
a_1\phi_0 + a_2 \frac{\partial\phi}{\partial z} \Big|_{z=0} &= a_3 \\
a_1\phi_0 + a_2 \frac{\phi_1 - \phi_{-1}}{2h} &= a_3 \Rightarrow 2ha_1\phi_0 + a_2\phi_1 - a_2\phi_{-1} = 2ha_3 \\
\phi_{-1} &= \frac{2ha_1\phi_0 + a_2\phi_1 - 2ha_3}{a_2}
\end{aligned} \tag{B26}$$

elde edilir. Son noktadaki sınır şartı benzer şekilde b_1 , b_2 ve b_3 rasgele sayılar olmak üzere aşağıda gösterildiği gibi yazılır ve denklemlerde kesikli hale getirilirse

$$b_1\phi_{N+1} + b_2 \left. \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|_{z=N+1} = b_3$$

$$b_1\phi_{N+1} + b_2 \frac{\phi_{N+2} - \phi_N}{2h} = b_3 \Rightarrow 2hb_1\phi_{N+1} + b_2\phi_{N+2} - b_2\phi_N = 2hb_3 \quad (\text{B27})$$

$$\phi_{N+2} = \frac{2hb_1\phi_{N+1} + b_2\phi_N - 2hb_3}{b_2}$$

elde edilir. Sınır koşulları da dahil edilerek yazılan matris eşitliği şekilde gösterildiği gibi olur.



EK-C

Çizelge1. Materyal Parametreleri

Özellikler (GaAs)	Sembol	Değeri
Kütle yoğunlukları(kg/m ³)	ρ	5320.0
Dielektrik sabiti (F/m)	ϵ_s	12.9 ϵ_0
	ϵ_∞	10.9 ϵ_0
Ses hızı (m/s)	v_s	5240
Elektronun etkin kütlesi	m^*/m_0	0.067(Γ)
	m_l^*, m_t^*	1.20, 0.2 (L)
Parabolik olmama faktörü	α	0.64 (Γ)
		0.46 (L)
Deformasyon potansiyeli:		
Akustik fonon (eV)	D	7.0
Optik fonon (eV/m)	D_{ij}	1x10 ¹¹ (Γ -L)
		1x10 ¹¹ (L-L)
Boyuna optik fonon enerjisi (eV)	$\hbar\omega_0$	0.0354
Enerji aralığı (eV)	E_g	1.424

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için enerji aralığı Al oranına bağlı olarak değişir ve $0 < x < 0.45$ aralığı için

$$E_g = 1.424 + 1.247x$$

olarak alınmıştır (Casey,1978).