

T.C.
YÜZÜNCÜ YIL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

ÖLÇÜYE GÖRE KUANTLANMANIN
ELEKTRON GAZININ BAZI TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNE ETKİSİ

Abdulkadir KURKUT

YÜKSEK LİSANS TEZİ

YÖNETİCİ

Prof. Dr. Ramazan Ferruhoğlu EMİNOV

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

VAN-1999

T.C.
YÜZÜNCÜ YIL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

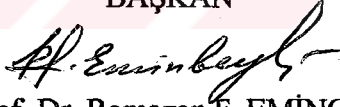
**ÖLÇÜYE GÖRE KUANTLANMANIN ELEKTRON GAZININ BAZI
TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNE ETKİSİ**

Abdulkadir KURKUT

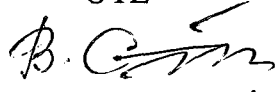
YÜKSEK LİSANS TEZİ

JÜRİ ÜYELERİ

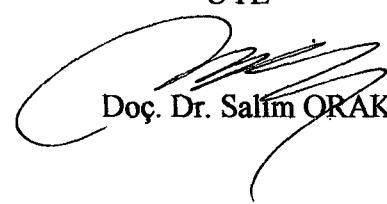
BAŞKAN


Prof. Dr. Ramazan F. EMİNOV

ÜYE


Prof. Dr. Bahşeli GULİEV

ÜYE


Doç. Dr. Salim ORAK

TEZİN KABUL TARİHİ

...../...../1999

İÇİNDEKİLER

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	V
ŞEKİLLER DİZİNİ	VIII
ÇİZELGELER DİZİNİ	X
ÖNSÖZ.....	XI
TEŞEKKÜR.....	XII
ÖZ.....	XIII
ABSTRACT	XIV
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Ölçüye Bağlı Olaylar	1
1.2. Yarıiletkenlerde Taşınma Olayları	2
1.3. Çalışmanın Kapsamı.....	2
2. LİTERATÜR BİLDİRİŞLERİ.....	3
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	5
3.1. MATERYAL	5
3.1.1. $A^{III}B^{IV}$ Tip Yarıiletkenlerin Band Yapısı(NP Kane Modeli).....	5
3.1.2. Ölçüce Kuantum Olayları	14
3.1.3. Enerji Spektrumu ve Hal Yoğunluğu.....	14
3.1.4. Yük Taşıyıcılarının Konsantrasyonu ve Fermi Seviyesi.....	19
3.1.5. Ölçüye Bağlı Kuantum Olaylarının Gerçeklenme Şartları	23
3.2. YÖNTEM.....	26
3.2.1. Non-Parabolik Enerji Spektrumu.....	26
3.2.1.1. İki Bandlı Kane Yaklaşımıyla Genel Enerjiden Non-Parabolik Enerjinin Türetimi.....	26
3.2.1.2. Büyük Termodinamik Gibbs Potansiyelinin Türetimi.....	28
3.2.1.3. Termodinamik Gibbs Potansiyeli (NP Enerji Spektrumlu)	31
3.2.2. Genel İfadelerin Bulunması(Konsantrasyon, Entropi, Isı Sığası).....	36
3.2.2.1. Konsantrasyon (n_{el})	36
3.2.2.2. Entropi (S).....	37
3.2.2.3. Isı Sığası (C_v)	38

3.2.3. Dejenere Hal ($\eta \gg 1$)	40
3.2.3.1. Yardımcı Fonksiyonlar (Fermi İntegrali).....	40
3.2.3.2. Konsantrasyon [DH].....	40
3.2.3.3. Kimyasal Potansiyel [DH].....	41
3.2.3.3.1. Kalınlık Sınır Değerlerini Belirleyen Eşitsizlikler [DH]	42
3.2.3.3.2. Fermi Seviyesi Altındaki Alt Bandların Tam Sayısı ($\bar{n}$) [DH]	45
3.2.3.3.3. Kalınlığın Ortalama Hal Sayısına Bağlılığı [DH].....	45
3.2.3.3.4. Maksimum Kalınlık [DH].....	46
3.2.3.4. Entropi [DH]	48
3.2.3.5. Isı Sığası [DH].....	48
3.2.4. Non-Dejenere Hal ($-\eta \gg 1$)	50
3.2.4.1. Yardımcı Fonksiyonlar.....	50
3.2.4.1.1. F ve Θ Fonksiyonları.....	50
3.2.4.1.2. Θ Fonksiyonunun Toplama Biçimi	50
3.2.4.1.3. Θ Fonksiyonunun Türevi	51
3.2.4.2. Zayıf Non-Parabolik Durum ($\beta \ll 1$) [NDH].....	51
3.2.4.2.1. Konsantrasyon [NDH, ZNPD]	51
3.2.4.2.2. Konsantrasyon ($\beta=0$) [NDH, ZNPD].....	53
3.2.4.2.3. Entropi [NDH, ZNPD].....	53
3.2.4.2.4. Entropi ($\beta=0$) [NDH, ZNPD].....	54
3.2.4.2.5. Isı Sığası [NDH, ZNPD]	55
3.2.4.2.6. Isı Sığası ($\beta=0$) [NDH, ZNPD].....	56
3.2.4.3. Aşırı İnce Film ($v_1 \gg 1$) ($\beta \ll 1$) [$A\dot{I}$, NDH, ZNPD].....	57
3.2.4.3.1.0. Θ Fonksiyonunun Türevleri.....	57
3.2.4.3.2.1. Konsantrasyon [$A\dot{I}$, NDH, ZNPD]	57
3.2.4.3.2.2. Kimyasal Potansiyel [$A\dot{I}$, NDH, ZNPD].....	58
3.2.4.3.2.3. Kimyasal Potansiyel ($\beta=0$) [$A\dot{I}$, NDH, ZNPD].....	58
3.2.4.3.3.1. Entropi [$A\dot{I}$, NDH, ZNPD].....	59
3.2.4.3.3.2. Entropi ($\beta=0$) [$A\dot{I}F$, NDH, ZNPD]	59
3.2.4.3.3.3. Entropinin Konsantrasyona Bağlılığı [$A\dot{I}F$, NDH, ZNPD]	60
3.2.4.3.3.4. Kalınlık Sınır Değerleri [$A\dot{I}F$, NDH, ZNPD].....	60

3.2.4.3.3.5. Entropiyi Sıfır Yapan Kalınlık [AİF, NDH, ZNPD]	61
3.2.4.3.4.1. Isı Sığası [AİF, NDH, ZNPD]	62
3.2.4.3.4.2. Isı Sığası ($\beta=0$) [AİF, NDH, ZNPD]	62
3.2.4.3.4.3. Isı Sığasının Konsantrasyona Bağlılığı [AİF, NDH, ZNPD]	62
3.2.4.4. Kalın Film ($1/v_1 \gg 1$) ($\beta \ll 1$) [KF, NDH, ZNPD]	64
3.2.4.4.1.0. Θ Fonksiyonunun Türevleri	64
3.2.4.4.2.1. Konsantrasyon [KF, NDH, ZNPD]	64
3.2.4.4.2.2. Kimyasal Potansiyel [KF, NDH, ZNPD]	64
3.2.4.4.3.1. Entropi [KF, NDH, ZNPD]	65
3.2.4.4.3.2. Entropinin Konsantrasyona Bağlılığı [KF, NDH, ZNPD]	66
3.2.4.4.3.3. Entropiyi Sıfır Yapan Kalınlık ve Kimyasal Potansiyel [KF, NDH, ZNPD]	67
3.2.4.4.4.1. Isı Sığası [KF, NDH, ZNPD]	68
3.2.4.4.4.2. Isı Sığasının Konsantrasyona Bağlılığı [KF, NDH, ZNPD]	69
3.2.4.5. Güçlü Non-Parabolik Durum ($\beta \gg 1$) [NDH]	71
3.2.4.5.1.0. Yardımcı Eşitlikler	71
3.2.4.5.2.1. Konsantrasyon [NDH, GNPĐ]	71
3.2.4.5.2.2. Konsantrasyon ($k \ll 1$) ($d \rightarrow \infty$) [KF, NDH, GNPĐ]	72
3.2.4.5.2.3. Kimyasal Potansiyel ($k \ll 1$) ($d \rightarrow \infty$) [KF, NDH, GNPĐ]	73
3.2.4.5.2.4. Konsantrasyon ($k \gg 1$) ($d \rightarrow 0$) [İF, NDH, GNPĐ]	74
3.2.4.5.2.5. Kimyasal Potansiyel ($k \gg 1$) ($d \rightarrow 0$) [İF, NDH, GNPĐ]	74
3.2.4.5.3.1. Entropi [NDH, GNPĐ]	74
3.2.4.5.3.2. Entropi ($k \ll 1$) ($d \rightarrow \infty$) [KF, NDH, GNPĐ]	75
3.2.4.5.3.3. Entropinin Konsantrasyona Bağlılığı [KF, NDH, GNPĐ]	76
3.2.4.5.3.4. Entropiyi Sıfır Yapan Kalınlık [KF, NDH, GNPĐ]	77
3.2.4.5.3.5. Entropi ($k \gg 1$) ($d \rightarrow 0$) [İF, NDH, GNPĐ]	78
3.2.4.5.3.6. Entropinin Konsantrasyona Bağlılığı [İF, NDH, GNPĐ]	79
3.2.4.5.3.7. Entropiyi Sıfır Yapan Kalınlık [İF, NDH, GNPĐ]	80
3.2.4.5.4.1. Isı Sığası [NDH, GNPĐ]	80
3.2.4.5.4.2. Isı Sığası ($k \ll 1$) ($d \rightarrow \infty$) [KF, NDH, GNPĐ]	81
3.2.4.5.4.3. Isı Sığasının Konsantrasyona Bağlılığı [KF, NDH, GNPĐ]	82

3.2.4.5.4.4. Isı Sığası ($k \gg 1$) ($d \rightarrow 0$) [$\dot{I}F$, NDH, GNPD].....	83
3.2.4.5.4.5. Isı Sığasının Konsantrasyona Bağlılığı [$\dot{I}F$, NDH, GNPD].....	84
4. BULGULAR.....	85
5. SONUÇLAR.....	86
6. TARTIŞMA.....	87
7. ÖZET.....	88
8. SUMMARY	89
KAYNAKLAR	90
ÖZGEÇMİŞ.....	92



SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

1. Simgeler

$A^{\text{III}}B^{\text{V}}$: III. ve V. Grup Elementlerden Oluşmuş Bileşikler

$A^{\text{II}}B^{\text{IV}}$: II. ve IV. Grup Elementlerden Oluşmuş Bileşikler

α : Termogüç

β : Non – Paraboliklik Parametresi

C_v : Isı Sığası

d : Film kalınlığı(kuantlanma boyutu)

d_o : En Düşük Kuantlanma Kalınlığı

d_n : Kuantlı Film Kalınlığı($\bar{n}$ – tamsayı)

Δ_o : Valans Bandın Spin – Orbit Yarıma Aralığı

$\bar{\epsilon}$: Ortalama Karakteristik Enerji

ϵ : Enerji

ϵ_n : Kuantlı Enerji

ϵ_o : İnce Katın 1. Enerji Seviyesi

ϵ_o^* : İnce Katın İndirgenmiş 1. Enerji Seviyesi

ϵ_1 : Kuantlanmış 1. Enerji Seviyesi Değeri

ϵ_1^* : İndirgenmiş 1. Kuantlı Enerji

ϵ_g : Gap Enerjisi

f_o : Fermi Dağılım Fonksiyonu

$F_r(\eta)$: Fermi İntegrali

$\Gamma(r)$: Gamma Fonksiyonu

g_b : Hal Yoğunluğu(Hacmi Numunenin)

g_f : Hal Yoğunluğu(İnce Katın)

$g(\epsilon)$: Hal Yoğunluğu

$\Gamma_{6,7,8}$: İletim Band Tabanı Değeri(En Düşük Minimum Hali)

$\hbar$: $(h / 2\pi)$ Planck Sabiti

$k(s)$: Hız Boyutlu Parametre

k_z : $(p_z = \hbar k_z)$ Elektronun Dalga Vektörünün z yönünde İzdüşümü(k –uzayında)

$k_{\perp}$: İnce katın Düzleminde İki Boyutlu Dalga Vektörünün Sayısal Değeri(k – uzayında)

k_o : Boltzmann Sabiti

λ : Parametre

λ_D : De Broglie Dalgaboyu

m : Kütle

m_o : Durgun Kütle

m_n : Elektron Kütle

m^* : Etkin Kütle

$\bar{n}$: Seviye Sayısı(Adedi)

n_{el} : Konsantrasyon(Yoğunlaşma)

n : Ölçü Kuantlanma Sayısı, $n = 1,2,3,...(n \Rightarrow \text{Tam Sayı})$

v_1 : İnce Katın Enerji Parametresi

Ω : Termodinamik Gibbs Potansiyeli

Ω_o : Siklotron Frekansı

P : Enerji Boyutlu Parametre

p : Momentum

$\Theta(v_1)$: Parametre Fonksiyonu

S : Entropi

s : Hız Birim Ölçülü Büyüklük (Katıda) $\approx 10^6 \text{ m.sn}^{-1}$

s_s : Spin Özdeğeri

s_o : Kalınlık Parametresi

T : Sıcaklık

u : Dalga Hızı

$V_{1,2,3}$: Valans Band

ζ : Kimyasal Potansiyel

ζ^* : İndirgenmiş Kimyasal Potansiyel

ζ_F : Fermi Seviyesi

Z : İstatistik Toplam

2. Kısaltmalar

BZ: Brillouin Zone

QSE: Ölçüce Kuant Olayları

DH: Dejenere Hal

NDH: Non-Dejenere Hal

ZNPD: Zayıf Non-Parabolik Durum

GNPD: Güçlü Non-Parabolik Durum

AİF: Aşırı İnce Film

KF: Kalın Film

İF: İnce Film

NP: Non-Parabolik

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1-a	Spin-Orbital yarılmasının hesaba katıldığı Ge için iletim ve valans band kıyı yapısı.....	8
Şekil 1-b	Spin-Orbital yarılmasının hesaba katıldığı Ge için iletim ve valans band kıyı yapısı	8
Şekil 2-a	$A^{III}B^V$ tip yarıiletkenler için spin-orbit yarılmasının hesaba katıldığı Ge için iletim ve valans band kıyı modeli (InSb)(Askerov, 1994)	9
Şekil 2-b	$A^{III}B^V$ tip yarıiletkenler için spin-orbit yarılmasının hesaba katıldığı Ge için iletim ve valans band kıyı modeli (HgTe)(Askerov, 1994)	9
Şekil 3	İnce film(d kalınlıklı).....	15
Şekil 4	Bir İnce filmde kısmi kuantlı enerji spektrumu.....	16
Şekil 5	Bir ince filmin k-uzayında elektron hal dağılımı.....	16
Şekil 6	Sabit kalınlık için parabolik bandlı kuantlanmış filmde enerjinin fonksiyonu olarak elektron hal yoğunluğu	17
Şekil 7	Sabit özgül enerjili ölçü-kuantlı filmin kalınlığının fonksiyonu olarak elektron hal yoğunluğu	18
Şekil 8	Ölçü-kuantlı filmin kalınlığının fonksiyonu olarak Fermi seviyesi	21
Şekil 9	Sınır kalınlık değerlerine göre kalınlığın ve ortalama hal sayısının fonksiyonu olarak non-parabolik kimyasal potansiyelin değişimi	42
Şekil 10	Sınır kalınlık değerlerine göre kalınlığın ve ortalama hal sayısının fonksiyonu olarak entropi ve ısı sığası. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	49
Şekil 11	Aşırıince film için kalınlığının fonksiyonu olarak kimyasal potansiyel. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal	59
Şekil 12	Aşırıince film için kalınlığının fonksiyonu olarak entropi. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	60
Şekil 13-a	Aşırıince filmde kalınlığının ve konsantrasyonun fonksiyonu olarak ısı sığası. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	63
Şekil 13-b	Aşırıince filmde kalınlığının ve konsantrasyonun fonksiyonu olarak ısı sığası. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22}m^{-3}$	63

Şekil 14-a Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	66
Şekil 14-b Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22}m^{-3}$	67
Şekil 15-a Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	70
Şekil 15-b Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22}m^{-3}$	70
Şekil 16 Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	76
Şekil 17 İnce film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	79
Şekil 18-a Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	82
Şekil 18-b Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22}m^{-3}$	83
Şekil 19-a İnce film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16}m^{-3}$	84
Şekil 19-b İnce film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22}m^{-3}$	84

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 1 Ge ve Si esas band kıyılarının parametreleri.....	7
Çizelge 2 Bazı yarıiletken bileşiklerin esas band kıyılarının parametreleri	7
Çizelge 3 Sınır kalınlık eşitsizliğinden elde edilen kalınlık değerleri	44



ÖNSÖZ

Sunulan bu çalışmada, ölçü kuantlanmasına uğramış Kane dispersiyon kanunlu yarıiletken ince katlarda elektron gazının bazı termodinamik özellikleri araştırılacaktır.

Gibbs yöntemi dikkate alınarak non-parabolik enerji spektrumlu iki boyutlu elektron gazının Büyük Termodinamik Potansiyeli Fermi İntegral değerleri cinsinden üretilmektedir.

Bu ifade kullanılarak elektronların konsantrasyonu, entropisi, ısı sığası için genel denklemler bulunacaktır. Genel formüller, dejenere ve non-dejenere hallerde non-paraboliklik parametresinin keyfi, birden çok küçük(zayıf non-parabolik) ve çok büyük(güçlü non-parabolik) durumlarına göre, aşırı ince, ince ve kalın filmlerin kalınlığın fonksiyonu olarak incelenecektir. Elde edilen sonuçlar, yayınlanmış makale sonuçlarıyla karşılaştırılacaktır. Bulguların daha önceki sonuçlardan çok farklı olacağı düşünülmemektedir. Ayrıca denklemlerin çalıştığı kalınlık sınır değerleri elde edilerek, araştırmacılar için referans sağlanacaktır.

Materyal kısmında ölçü kuantlanmasının oluşma ölçütleri belirtilmiş, ölçü kuantlanmasının deneysel bulguları ve olayın görüldüğü $A^{III}B^V$ tip bileşikler hakkında bilgi verilmiştir.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans tez çalışması süresince bilgi ve yardımlarını esirgemeyen danışmanım, Prof. Dr. Ramazan F. EMİNOV' a, Fizik Bl. Bşk.1 Prof. Dr. Remzi ENGİN' e ve Prof. Dr. Bahşeli GULİEV' e, Merkez Kütüphanesi ve Fen Bilimleri Enstitüsü yönetici ve çalışanlarına teşekkür ederim.



ÖZ

**ÖLÇÜYE GÖRE KUANTLANMANIN ELEKTRON GAZININ BAZI
TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNE ETKİSİ**

KURKUT, Abdulkadir

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Ana Bilim Dalı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Ramazan F. EMİNOV

Ekim, 1999, 106 sayfa

Sunulan bu çalışmada, Gibbs yöntemiyle ölçüce kuantlanmış non-parabolik enerji spektrumlu ince katlarda iki bandlı Kane modeli yaklaşımında elektron gazının bazı termodinamik özellikleri incelenmiştir. Büyük termodinamik Gibbs potansiyeli yöntemi kullanılarak, elektron gazının konsantrasyonu, entropisi ve ısı sığası enerji spektrumunun non-parabolikliği dikkate alınarak, ince katın kalınlığına bağlılığı dejenere ve non-dejenere durumlar için araştırılmıştır.

Anahtar kelimeler: QSE, Non-Parabolik Enerji, Ölçü olayları, Kane yaklaşımı, İnce filmler, InSb.

ABSTRACT

**EFFECT TO SOME TERMODINAMICAL PROPERTIES OF ELECTRON
GAS IN DIMENSIONALLY QUANTISED**

KURKUT, Abdulkadir

Msc, Physics Science

Supervisor: Ramazan Ferruhoglu EMINOV

October, 1999, 106 pages

A theoretical study is made of concentration, entropy, and heat capacity in dimensionally quantised films by Gibbs style in semiconductors with Kane's dispersion law. Expressions are determined that the non-parabolicity parameters of energy spectrum to depends on thickness of thin film in degenerate and non-degenerate states are considered, by using the Big Termodinamical Gibbs potential.

Key words: QSE, Non-Parabolic Energy, Size effects, and Kane's law, Thin films, InSb.

1. GİRİŞ

Günümüzde yarıiletken ve yarımetal ince katlar hem teorik hem de pratik olarak yoğun bir şekilde araştırılır. İnce katlara böyle bir ilgi, mikroelektronikğin hızlı gelişmesi ve bu nesnelerde hacmi-numunelerinden kesin şekilde farklı yeni ilginç fiziksel olayların oluşmasına bağlanır. Bu yeni fiziksel olayların incelenmesi, maddelerin esas özelliklerinin araştırılması için ek bilgi kaynağı olabilir.

1.1. Ölçüye Bağlı Olaylar

Ölçüye kuant olayları, belli bir doğrultuda numunenin çizgisel boyutlarından biri yük taşıyıcılarının de Broglie dalgasının uzunluğu λ_D mertebesinde olduğunda meydana gelir. Bu halde yük taşıyıcılarının enerji spektrumu kısmen kesikli(discret) karakter alır, yani ölçüye kuantlanma oluşur ve dalga fonksiyonunun şekli değişir(Askerov, 1994). Tüm bunlar, ince katlarda fiziksel özelliklerin hacmi numunelerdekinden nitelikçe farklılaşmasına neden olur.

Ölçüye kuant olaylarının oluşma ölçütü gerçek olarak yarımetal ve yarıiletken ince katlarda daha iyi belirlenir. Şöyle ki; bu tür maddelerde yük taşıyıcılarının de Broglie dalgasının boyu atomlar arası mesafeden birkaç mertebe büyük olur. Bu durumda yük taşıyıcılarının λ_D 'si onların etkin kütesine(m^*), konsantrasyonuna(n_{el}) ve sıcaklığına(T) bağlı olur(Askerov,1994). Bu nedenle, belli koşullar altında yarıiletken ve yarımetal ince katlarda kalınlığın 10^{-5} cm. değerlerinde ölçüye kuantlanma meydana gelir.

Yarıiletkenlerde ölçüye kuantlanmanın pratik gözlenmesi açısından en elverişli numune yük taşıyıcılarının etkin kütlesi “küçük”, hareketliliği(mobility) ise yeterince büyük olan $A^{III}B^V$ tip non-parabolik enerji spektrumlu bileşiklerdir(Askerov, 1994). Bu numunelerde ölçüye kuantlanma olayları deneysel olarak ilk kez InSb kristalinde görülmüştür. Belli olmuştur ki; bu numunelerde ölçüye kuantlanma elektron hareketliliğinin $\approx 3.10^3 \text{cm}^2/\text{V.sn.}$ değerlerinde oda sıcaklığında da gözlenebilir. Bunun için gerekli film kalınlığını $\leq 3.10^{-6}$ cm. seçmek yeterlidir.

Önerilen bu araştırmada non-parabolik enerji bandlı ölçüce kuantlanmış ince katlarda iki zonalı Kane modeli yaklaşımında elektron gazının bazı termodinamik özellikleri incelenecektir.

1.2. Yarıiletkenlerde Taşınma Olayları

Fizikte uzunluk boyutlu farklı parametreler vardır. Bunlardan dördünden söz edelim; yük taşıyıcı serbest kaçış yolunun uzunluğu $\ell = v\tau$, siklotron yörüngesinin yarıçapı $r = v/\Omega_0$, numunenin kalınlığı d ve yük taşıyıcıların de Broglie dalgaboyu $\lambda_D = h/\sqrt{2m\epsilon}$ burada ϵ iletim elektronlarının karakteristik enerjisidir. Sözü edilen parametrelerin birbirine göre keyfi oranları için taşınma olaylarının genel teorisini kurmak son derece zordur.

Eğer De Broglie dalgaboyu üç parametrenin her birinden yeterince küçük ise, yani $\lambda_D \ll r, \ell, d$ ise, bu hal için oluşturulan teori klasik karakter taşır ve burada esas olarak kinetik denklem kullanılır. Bu durumda, $d \gg \ell$ ise, yük taşıyıcılarının numunenin sınırlarıyla etkileşmesi ihmal edilir ve iletkenin tüm özellikleri hacimdeki saçınma ile belirlenir. Bu halde $\ell/r = \Omega_0\tau$ oranının keyfi olabileceği dikkate alınmalıdır.

Yukarıda sözü edilen eşitsizlik sağlanmadığında termodinamik ve kinetik olayların teorisi kuant karakter taşır. Örneğin; $\lambda \geq r$ olduğunda magnetik alan kuantlayıcı olur. $\lambda \geq \ell$ durumunda ise, iletkenliğin basit teorisi geçersiz olduğundan, küçük sürüklenmenin kuant teorisi oluşturulur. $\lambda \geq d$ halinde ise, yük taşıyıcılarının hareketinin ölçüce kuantlanma olayı meydana gelir.

1.3. Çalışmanın Kapsamı

Sunulan bu çalışmada Gibbs yöntemi kullanılarak non-parabolik enerji spektrumlu yarıiletken ince katlarda elektron gazının Büyük termodinamik potansiyeli, konsantrasyonu, kimyasal potansiyeli, entropisi ve ısı sığası için genel ifadeler bulunacak, bulunan genel denklemler dejenere ve non-dejenere hallerde keyfi, zayıf ve güçlü non-parabolik durumlar için özel denklemler şeklinde ele alınarak araştırılacaktır.

2. LİTERATÜR BİLDİRİŞLERİ

Bizmut film örneğinde ilk kez ölçüce kuantlanmanın deneysel olarak oluştuğu rapor edildi(Lifshits ve Kosevich, 1953). Ölçüce kuantum olayının teorisi ilk kez (Lifshits ve Kosevich, 1953; Lifshits ve Kagonov, 1959, 1962, 1965) makalesinde geliştirilmiştir, orada yüksek dejenere elektron gazının önemli termodinamik salınımları sınırlı metal örnekleri için araştırılır. Ölçüce kuant olaylarının gözlemlendiği $A^{III}B^V$ tip bileşiklerin yapısı teorik olarak (Herman, 1955, 1959; Callaway, 1957) araştırılmıştır. InSb için Γ noktası civarında bandların dağılım kanunu iletim ve valans band etkileşimleri (Kane, 1957, 1966) ayrıntılı olarak sonuçlandırılmıştır.

Oldukça çok sayıda makalede yarıiletken ve yarımetal filmlerde QSE olaylarının araştırması anlatılır (Tavger ve Demikhovskii, 1968; Sandomirskii, 1967, 1962; Demikovsky ve Tavger, 1964; Gladun ve Ryzhii, 1969; Romanov ve ark., 1970; Ryzhii, 1969; Ando, 1974; Korneyev, 1977; Bloch ve Tavger, 1972). Bu makalelerde QSE bildirisi için gerekli şartlar formüle edilelerek ve kuantlı filmlerin değişik termodinamik ve galvanometrik özellikleri üzerinde çalışılır. Ölçüce kuantlanma sırasındaki termomagnetik fenomenler teorik olarak araştırılır(Bloch, 1975; Askerov ve ark., 1977).

Ölçü kuantlanmasının bildirisi için şartlar genellikle birkaç atomarası mesafeyi aşan, onların de Broglie dalgaboyunda, yarıiletken ve yarımetal filmlerde gerçek çalışma sunulmuştur(Lutsky, 1965; Lutsky ve ark., 1966; Orgin ve ark., 1967; Petrosyan, 1973) yarımetal ve (Filatov ve Karpovich, 1969) yarıiletken filmlerde ölçüce kuant olayının varlığının kesin deneysel açıklaması vardır. Bu makalede ölçü kuantlanması Bi ve InSb için gösterilir.

Ölçüce kuantlanmanın oluşması için gerekli deneysel şartlar analiz edilerek tartışılmıştır(Sandomirsky, 1962; Tavger ve Demikovsky,1968). Kuantlanmış İnce filmlerde güçlü magnetik alanda termogüç problemi çözülmüştür(Askerov ve ark., 1977).

Ölçü kuantlanmasının galvanomagnetik olaylara etkisi enine ve boyuna elektrik ve magnetik alanın varlığında ince filmlerde incelenmiştir(Tellier ve Tosser, 1982).

Düşük sıcaklıkta güçlü magnetik alanda ince filmlerin termomagnetik özellikleri ölçü kuantum şartları altında Kadanoff-Baym yöntemiyle incelenmiştir(Kondratyev ve ark., 1991). Yarıiletken ve yarımetal filmlerde taşınma olayları ayrıntılı olarak araştırılmıştır(Askerov, 1994).

Aşırı ince filmlerin bazı fiziksel özelliklerinin kalınlığa bağılılığı yüzey özelliklerinin araştırılmasında elektronik yapı hesapları birden yirmi atom kalınlığa kadar bazı zorlukların Al(111) için aşılmasında çalışılmıştır(Boettger, 1998).



3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. MATERYAL

3.1.1. A^{III}B^V Tip Yarıiletkenlerin Band Yapısı(Non-parabolik Kane Modeli)

Periyodik tablonun III. ve V. grup elementlerinin bir çok bileşikleri yarıiletken doğasında ve çinko sülfür diye bilinen bir yapıda kristalleşir. Çinko sülfürün yapısı elmasinkine benzer. Her iki yapı kübik yüzey merkezli alt örgülerin nüfuz derinliğine bağlıdır. Ancak elmasın aksine, bu alt örgüler değişik atomlar(Zn,S,In,Sb,Ga,As vb.) içeren çinko sülfürün bir alt örgü biçimindedir. Bu nedenle ZnS yapısında simetrik element yoktur, yani elmas yapısında birinden diğerine alt örgülerin ters dönüşümü yoktur. ZnS örgü, elmas örgü gibi bir tetra-hedral faza bağlanır, ancak burada her bir A^{III} atomu, bir tek tetra-hedron başına çapraz dört adet B^V atomuyla çevrilir. ZnS yapı için birinci BZ elmasta olduğu gibidir. A^{III}B^V bileşiklerinin band yapısı (Herman, 1955, 1959; Callaway, 1957) yayınlarında teorik olarak araştırılır. Bu bileşiklerin esas band parametreleri çizelge-1 de verilir. Spini hesaba katmadan, A^{III}B^V valans bandının üst sınırı k=0 noktasındadır ve şekil-2-b de veya şekil-1-a-b de gösterilen Ge ve Si gibi aynı yapıya sahiptir. Böylece, A^{III}B^V için küçük “k” larda valans bandlar için dağılıma kanunu (1) veya (2) ve (3)de ki gibi şekillenir.

$$\varepsilon_{1,2}(\vec{k}) = -(\hbar^2 / 2m_0) \left[Ak^2 \mp \sqrt{B^2 k^2 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)} \right] \quad 1$$

$$\varepsilon_1(k) \approx -(\hbar^2 k^2 / 2m_1), \quad \varepsilon_2(k) \approx -(\hbar^2 k^2 / 2m_2) \quad 2$$

$$\varepsilon_3(k) = -\Delta_0 - \hbar^2 k^2 / 2m_3 \quad 3$$

A,B ve C sabitlerinin değerleri m_1 , m_2 ve m_3 ler, eşit eksenli bazı A^{III}B^V ler için bu dağılım kanuna girilen değerler çizelge-1 de verilirler. Çizelge-1 den görüldüğü gibi, taban iletim bandı A^{III}B^V de olmayan BZ nin merkezinde bulunur. AlSb ve GaP nın iletim bandının en düşük minimumu Δ -minima [100] doğrultusunda bulunur. Bu minimumlar yanındaki eş enerji yüzeyleri [100] doğrultusu üzerinden geçen dönme eksenleriyle doğal devir elipsoidleridir. Bu nedenle, GaP ve AlSb de band kenar yapısı şekil-1 de asimtotik olarak gösterilen Si ile aynıdır. AlSb ve GaP in birçok band parametrelerinin dikkate değer ilginçliği, Si un band parametrelerine yakın çift sayılar

olmasıdır(Çizelge-1 ve 2). Ancak pek çok yarıiletkenler için iletim band tabanı BZ nin yani Γ_6 minimumun merkezindedir(Çizelge-2). $A^{III}B^V$ yarıiletken bileşiklerin Γ noktasındaki iletim band tabanı InSb örgüde olduğu gibi tanımlanır. InSb tip yarıiletkenler için valans ve iletim bandının kenar yapıları şekil-2 de sunulur.

InSb için Γ noktası civarında bandların dağılma kanunu Kane tarafından türetilmiştir(Kane, 1957; Kane ve ark., 1966). (Löwdin,1951)nin yöntemini kullanarak, Kane V_1, V_2, V_3 valans bandıyla iletim bandının etkileşmesini hesaba katmıştır ki(şekil -2), uzak durgun bandların etkisi yetersiz $k.p^1$ yönteminin basitliğini göz önüne almıştır(Walter, 1979; Anselm, 1981). İletim bandıyla etkileşmeyen V_1 valans bandı döndürülür, bu nedenle band biçimi uzak bandlarla etkileşmeye bağlıdır. Hesaba katılan bu etkileşmeler, k da; lineer ve kuadratik terimler içeren V_1 bandı için anizotrop dağılma kanunu oluşturur. Üstte belirtildiği gibi, k -uzayında ortalama sağlamak ve k da lineer terimi ihmal etmek mümkündür. İletim band tabanı sıfır enerji seviyesi olarak alınırsa, yaklaşımın üstünde V_1 bandı ağır hole için m_1 etkin kütlesiyle bir basit parabolik şekil kullanılabilir(Çizelge-2).

$$\epsilon_{v_1} = -\epsilon_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \quad 4$$

InSb de iletim bandı, V_2 , hafif hole bandı ve V_3 , spin-orbit yarılama bandı diğer iki valans bandlarıyla etkileşir. Bu etkileşmelerin hesabını doğru yapılarak, Kane enerji için aşağıdaki denklemi bulmuştur(Kane, 1957; 1966);

$$\epsilon'(\epsilon' + \epsilon_g)(\epsilon' + \epsilon_g + \Delta_o) - k^2 P^2 \left(\epsilon' + \epsilon_g + \frac{2}{3} \Delta_o \right) = 0 \quad 5$$

bu denklemden etkileşen bandların dağılma kanununu tanımlamak mümkündür. Burada enerji iletim band tabanından ölçülür, Γ_6 , $\epsilon' = \epsilon - (\hbar^2 k^2 / 2m_o) = \epsilon - \epsilon_o$, m_o serbest elektron kütlesidir, $\epsilon_g = \epsilon(\Gamma_6) - \epsilon(\Gamma_8)$ $k=0$ da enerji valans band ve iletim bandı arasında

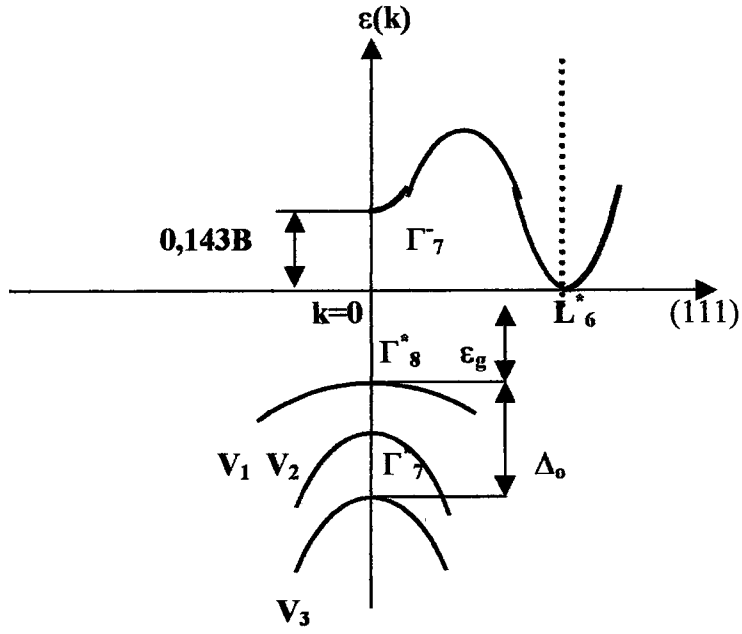
¹ BZ de max. ve min. enerji civarında serbest yük taşıyıcılarının enerji spektrumunu incelemek amacıyla oluşturulan teoridir.

Çizelge-1 Ge ve Si band kıyılarının esas parametreleri(Askerov, 1994).

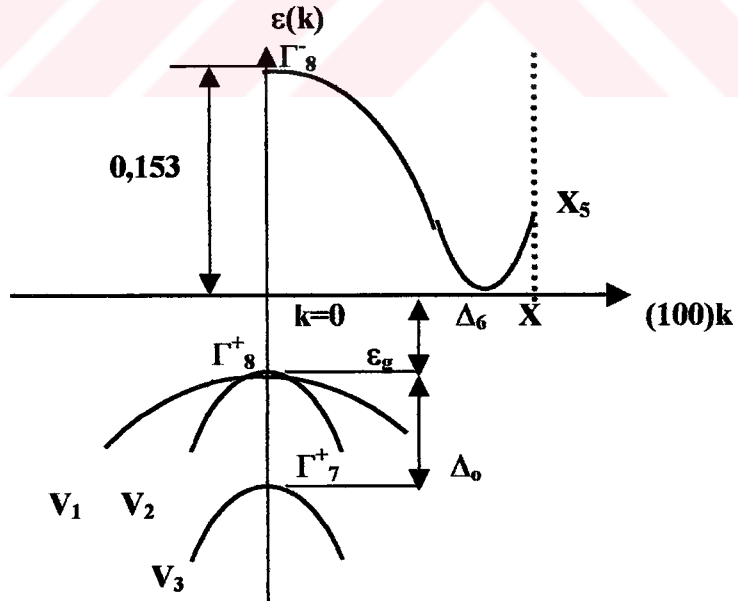
Parametreler	Ge	Si	Parametreler	Ge	Si
m_{II}/m_0	1,58	0,92	A	-13,1	-4,1
m_I/m_0	0,08	0,19	B	-8,9	-1,1
$\gamma=m_{II}/m_0$	19,3	4,8	C	12,4	4,1
$\varepsilon_g(\text{eV})$	1,1	0,6	m_I/m_0	0,33	0,49
0 K°de	0,74	1,21	m_2/m_0	0,042	0,160
300 K°de	0,66	1,09	m_3/m_0	0,077	0,245
$10^4 \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}(\text{eV/K})$	-4,4	-4,1	m_1/m_2	7,9	3,1
$\Delta_0(\text{eV})$	0,280	0,035			

Çizelge-2 Bazı yarıiletken bileşiklerin esas band kıyı parametreleri(Askerov, 1994).

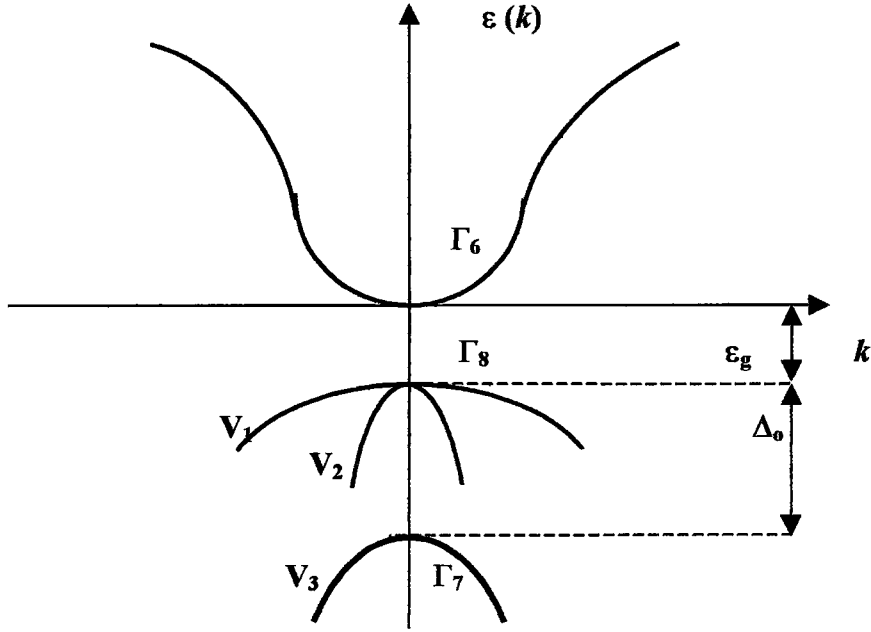
Parametreler		InSb	InAs	GaSb	GaAs	InP	GaP	AlSb
1. En düşük minimum durumu, yani İletim band tabanı.		Γ	Γ	Γ	Γ	Γ	Δ	Δ
2. Upper-lying iletim band minimum.				Δ, Δ	Δ	Δ	Γ	Γ
3. Taban ve upper-lying iletim band min. arası uzaklık. $\varepsilon(\Delta)-\varepsilon(\Gamma)(\text{eV})$ $\varepsilon(\Delta)-\varepsilon(\Gamma)(\text{eV})$				0,07 0,4	0,25-0,4	0,7	-0,35	-0,29
4. Enerji gapı $\varepsilon_g(\text{eV})$	4 K° 300 K°	0,23 0,18	0,42 0,36	0,81 0,70	1,52 1,43	1,42 1,26	2,32 2,24	1,7 1,6
5. Enerji gapının sıcaklık katsayısı	$10^4 \cdot \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T} \left(\frac{\text{eV}}{\text{K}^\circ} \right)$	-2,8	-2,8	-3,5	-5	-4,6	-5,5	-3,5
6. Valans bandlarının spin-orbit yarılmaları $\Delta_o(\text{eV})$		0,90	0,38	0,75	0,34	0,10	0,13	0,75
7. Valans bandlarının dağılıma kanununa girdi sabiti	A B C	-26,5 -24,1 13,9	-17,1 -14,9 10,9	-11,2 -7,9 10,2	-7,4 -4,9 5,06	-8,1 -5,8 5,11	-4,7 -2,5 2,7	-5,5 -2,8 3,55
8. m_o serbest elektron birimli m_n iletim band tabanında etkin kütle	4K° 300 K	0,016 0,011	0,023- 0,027	0,047	0,065	0,073	$m_n=1,1$ $m_l=0,22$	$m_n=1,1$ $m_l=0,2$
9. m_o serbest elektron kütle birimli etkin hole kütle	m_1 m_2 m_3	0,5 0,015 0,12	0,3-0,8 0,025 0,11	0,23-0,71 0,053 0,16	0,5-1,0 0,11 0,15	0,2-1,0 0,08 0,18	0,5 0,13 0,22	0,4-0,9 0,12 0,27



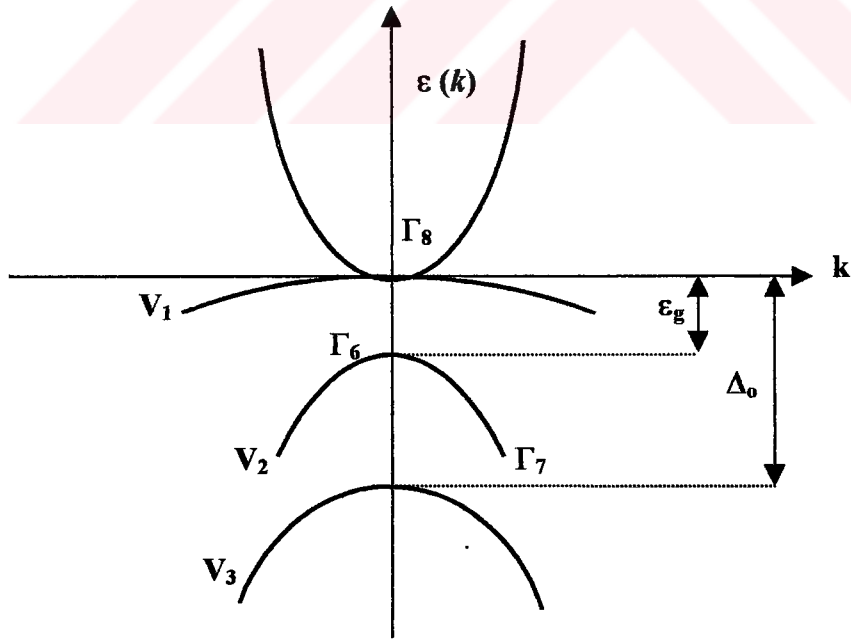
Şekil-1-a Spin-orbit yarılmasının hesaba katıldığı Ge için iletim ve valans band kıyı yapısı(Askerov, 1994)



Şekil-1-b Spin-orbit yarılmasının hesaba katıldığı Si için iletim ve valans band kıyı yapısı(Askerov, 1994)



Şekil-2-a $A^{III}B^V$ tip yarıiletkenler için spin-orbit etkileşmesinin hesaba katıldığı iletim ve valans band kırığı modeli(InSb)(Askerov, 1994).



Şekil-2-b $A^{II}B^{IV}$ tip yarıiletkenler için spin-orbit etkileşmesinin hesaba katıldığı iletim ve valans band kırığı modeli (HgTe)(Askerov, 1994).

$$P = -i \left(\frac{\hbar}{m_o} \right) \langle S | \hat{p}_x | X \rangle \quad 6$$

valans band ve iletim bandı arasında etkileşimde hesaba katılan matris elemanıdır, S ve X s ve p simetrisinin dalga fonksiyonlarıdır, $\hat{p}_x$ momentum operatörünün bileşenidir,

$$\Delta_o = -3i \left(\frac{\hbar}{4m_o^2 c^2} \right) \langle X | (\Delta V \cdot p)_g | Z \rangle \quad 7$$

valans bandın spin-orbit yarımla enerjisidir. Eşitlik (5)den görülür ki $k=0$ da

$$\epsilon = 0, \quad \epsilon_{v_1} = -\epsilon_g, \quad \epsilon_{v_3} = -\epsilon_g - \Delta_o \quad 8$$

iletim band tabanına ve V_2 ve V_3 valans bandının tepesine uyumlu enerjinin üç özdeğeri vardır(Şekil-2). (8) değerleri ayrı ayrı (5)de yerine konursa aşağıdaki biçimde ve küçük k için geçerli, k da yaklaşıklıkla her band için dağılıma kanunlarını buluruz.

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} + \frac{k^2 P^2}{3} \left(\frac{2}{\epsilon_g} + \frac{1}{\Delta_o + \epsilon_g} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \quad 9$$

$$\epsilon_{v_2} = -\epsilon_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} - \frac{k^2 P^2}{\epsilon_g} = -\epsilon_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} \quad 10$$

$$\epsilon_{v_3} = -\epsilon_g - \Delta_o + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} - \frac{k^2 P^2}{3(\epsilon_g + \Delta_o)} = -\epsilon_g - \Delta_o - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_3} \quad 11$$

burada m_1, m_2, m_3 sırasıyla iletim band tabanındaki hafif hole bandının tepesindeki ve spin-orbit yarımla valans bandının etkin kütleleridir. Daha geçerli bir parametre ise,

$$s = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{P}{\hbar} \quad 12$$

yeterli bilgi verir, aşağıdaki tanımları elde ederiz;

$$\frac{1}{m_n} = s^2 \left(\frac{2}{\epsilon_g} + \frac{1}{\epsilon_g + \Delta_o} \right) + \frac{1}{m_o} \quad 13$$

$$\frac{1}{m_2} = 2 \frac{s^2}{\epsilon_g} - \frac{1}{m_o} \quad 14$$

$$\frac{1}{m_3} = \frac{s^2}{(\epsilon_o + \Delta_o)} - \frac{1}{m_o} \quad 15$$

(9)-(11) arasında hesaba katılan üst etkin kütleler için. Küçük k da band kenarı yakınında geçerli olan (9)-(11) dağılma kanunları $k.p$ yöntemiyle de elde edilebilir, bu nedenle (13-15) etkin kütleler s bandlarının etkileşme parametresine ve etkileşen bandların ϵ_g ve $\epsilon_g + \Delta_o$ arasında sıralı enerji ayırımına doğal olarak bağlı olacaktır. (6) ve (12) ile uyumlu, parametreler, (13)ün kullanımıyla tahmin edilebilir ve hız boyutlarına sahiptir, ϵ_g , Δ_o ve m_n , m_2 , m_3 etkin kütlelerinden biri deneysel olarak bulunur. Çizelge-2 deki verilerin kullanımıyla parametreyi $s \approx 10^8 \text{ cm/s}$ olarak tahmin etmek kolaydır. İki valans bandıyla iletim bandının etkileşmesinin tam karşılığı (5)den görülür ki, k^2 dalga vektörünün yalnız karesini içeren bir kübik denklemle sonuçlanır. Parabolik dağılma kanunu (9)-(11) k 'nın küçük değerleri için bu denklemden türetilir. Bir genel şekilde, parabolik olmayan küresel simetrik dağılma kanunları (5)den elde edilebilir. Düşünülen durumlar tek bandların dağılma kanunu için tam biçimini yazmak mümkündür. İki band yaklaşımı $\Delta_o \gg \epsilon_g$ uygulaması InSb için tamamen doğrulanmıştır. Bu yaklaşımda (5) denklemini parabolik olmayan dağılma kanunu veren çözüm bir kuadratik denkleme dönüşür,

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} + \frac{\epsilon_g}{2} \left[1 + \left(\frac{2s\hbar k}{\epsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{\epsilon_g}{2} \quad 16$$

iletim bandı için ve

$$\epsilon_{v_2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} - \frac{\epsilon_g}{2} \left[1 + \left(\frac{2s\hbar k}{\epsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{\epsilon_g}{2} \quad 17$$

(12) hafif hole bandı için hesaba katılır. Eğer, $\Delta_o \gg \epsilon_g$ şartıyla yan yanaysa InSb için $m_n \ll m_o$ olması da hesaba katılır, o zaman (13) ile uyumlu, enerji aralığı ve iletim band tabanında etkin kütle arasında bir basit ilişki bulabiliriz,

$$\epsilon_g = 2m_n s^2 \quad 18$$

$1/m_0$ terimini ihmal ederek aşağıdaki gibi düzenleriz,

$$\epsilon = \frac{\epsilon_g}{2} \left\{ \left[1 + \left(\frac{2s\hbar k}{\epsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - 1 \right\} \quad 19$$

(18)in hesaba katılmasını dikkate almak ilginçtir, son formül bir serbest relativistik parçacığın dağılma ilişkisi şeklini alır,

$$\epsilon = \sqrt{m_n^2 s^4 + s^2 p^2} - m_n s^2 \quad 20$$

burada s ince katta ışık hızıdır ve $p=\hbar k$ momentumdur, m_n durgun kütle, $m_n s^2$ durgun enerji, ϵ parçacığın kinetik enerjisidir. $\Delta_0 \ll \epsilon_g$ yaklaşımı GaAs ve InSb için yapılır(Çizelge-2). Bu durumda, (5)de iletim bandı dağılma kanununu bulmak için $\Delta_0 \rightarrow 0$, Δ_0 1 sıfıra yaklaştırmak mümkündür. Böylece bir kuadratik denklem buluruz, çözümlerden biri aşağıdaki iletim bandı için dağılma kanununu verir,

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\epsilon_g}{2} \left\{ \left[1 + \frac{3}{2} \left(\frac{2s\hbar k}{\epsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{\epsilon_g}{2} \right\} \quad 21$$

(5)de hafif hole bandı için dağılma kanunu bulduğumuzda Δ_0 'ı sıfıra yaklaştırmak mümkündür, bu durumda $\epsilon'|_{k=0+\epsilon_g}=0$, ve alt sınır Δ_0 da yerine konulabilir, yani $s\hbar k \ll \Delta_0 \leq \epsilon_g$ farz edilebilir. Bu yaklaşımla hafif bandlar için (10) parabolik dağılma kanununu buluruz. $\epsilon' \ll \epsilon_g + (2/3) \Delta_0$, ϵ_g ve Δ_0 arasında tek ilişki için geçerli $\epsilon' \ll \epsilon_g + (2/3) \Delta_0$ yaklaşımdır, bu durum olmadığı zaman onlar sıfıra aynı anda yönelir. Bu nedenle, bu yaklaşım sadece $\Delta_0 \ll \epsilon_g$ ve daha önemli iki durum değil, aynı zamanda da $\Delta_0 \approx \epsilon_g$ uygulanabilirliğini kapsar. Sonrakiler bazı yarıiletkenlerde yer alır, InSb ve GaAs gibi(Çizelge-2). $\epsilon' \ll \epsilon_g + (2/3) \Delta_0$ yaklaşımında (5) denklemi kuadratik olur. Bu denklemin bir çözümü iletim bandı için dağılma kanununu verir;

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} + \frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 + \frac{2(s\hbar k)^2}{\varepsilon_g} \left(\frac{2}{\varepsilon_g} + \frac{1}{\varepsilon_g + \Delta_o} \right) \right]^{1/2} - \frac{\varepsilon_g}{2} \quad (22)$$

Dağılma kanunu sırasıyla $\Delta_o \gg \varepsilon_g$ de ve $\Delta_o \ll \varepsilon_g$ (16) ve (21) de dönüşür. Ek olarak, (22) denklemi InSb ve GaSb yarıiletkenlerin iletim bandını tanımlar $\Delta_o \approx \varepsilon_g$ olduğunda işgal çok fazla değildir. Üç band yaklaşımı; genel halde, Δ_o valans bandlarının spin-orbit yarılması ve ε_g enerji aralığının kesin değerleri için, onlar arasındaki tek şart, eşitsizliği yazmak olası olduğunda, kübik denklem (5), bandların dağılma kanunlarını belirlemeyi $\varepsilon' = \varepsilon - \varepsilon_o$, sırayla sağlar, ancak bu her zaman olası değildir. Fakat, kinetik katsayıları hesaplamak için bu denklemin çözümüne ihtiyaç yoktur, ε ile k nın değişimini bilmek yeterlidir (bunun tersi geçersizdir). Çok küçük kütleli yarıiletkenler için ($m_n \ll m_o$) örgüde ε elektron enerjisiyle karşılaştırılabilen ε_o 'ı ihmal etmek daima mümkündür. O halde, (5) den ε ile k nın değişimini bulmak kolaydır,

$$k^2(\varepsilon) = \frac{2}{3\hbar^2 s^2} \frac{\varepsilon(\varepsilon + \varepsilon_g)(\varepsilon + \varepsilon_g + \Delta_o)}{\left(\varepsilon + \varepsilon_g + \frac{2}{3}\Delta_o \right)} \quad (23)$$

(23) ilişkili n-InSb tip yarıiletkenlerde (19) dağılma kanununun yerine kullanılabilir. Üç band Kane modelindeki gibi bu durum ele alınır. $\Delta_o \gg \varepsilon_g$ olduğu özel durumda, yani, iki band yaklaşımında, k ve ε arasında bir basit ilişki (23)den elde edilebilir. (18) hesaba katılarak aşağıdaki şekle sahip olunur,

$$\varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \quad (24)$$

Bu kuadratik denklemin bir çözümü (19) iletim bandını ve diğer hafif hole bandlarının çözümünü sağlar. $\varepsilon_g \gg \varepsilon$ için, (24) standart dağılma kanununa indirgenir, yani parabolik iletim bandına.

3.1.2. Ölçüce Kuantum Olayları

Bu çalışmada, yük taşıyıcılarının de Broglie dalga boyuna uygun film kalınlığındaki hal düşünülür. Bu durumda, taşıyıcılarının enine hareketi kuantlanır ve spektrum kısmen kesikli olur.

Ölçü kuantlanmasının bildirisi için şartlar genellikle birkaç atom arası mesafeyi aşan, onların de Broglie dalga boyunda, yarıiletken ve yarımetal filmlerde gerçek çalışma altta sunulacaktır. Yarıiletken filmlerde ölçüce kuant olayının varlığının kesin deneysel açıklaması vardır (Filatov ve Karpovich, 1969; 1968). Bu makalede ölçü kuantlanması Bi ve InSb için gösterilir. Ölçü kuantlanma olayının bazı özellikleri aşağıda bir film modeli kullanılarak analiz edilir.

3.1.3. Enerji Spektrumu ve Hal Yoğunluğu

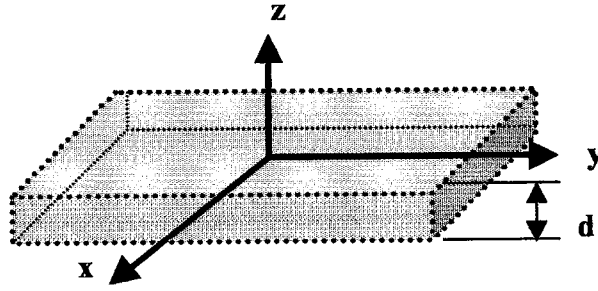
Bir izotropik dağılma ilişkili ince filmi düşünelim. Eğer z eksenini filmin normali yanı sıra yönelirse film düzleminde iletim elektronlarının x ve y eksenleri boyunca hareketi serbest, z eksenini boyunca ise film yüzeyiyle sınırlanacaktır. Düzlem tabanlı sonsuz yüksek duvarlı bir dikdörtgen kuyu $U(z)$ potansiyelli bir film modeli ele alınır (Şekil-3),

$$U(z) = \begin{cases} 0 & \Rightarrow 0 < z < d \\ \infty & \Rightarrow z > d \end{cases} \quad 25$$

yani d film kalınlığıdır. (x, y) film düzleminde $U(x, y) = \text{sabit}$ olsun. Normalize edilmiş bir elektronlu dalga fonksiyonları ve bir özgün potansiyel dağılımı için yük taşıyıcılarının enerji spektrumu aşağıdaki biçime sahip olur,

$$\Psi_{n k_x k_y}(x, y, z) = \left(\frac{2}{L_x L_y d} \right)^{1/2} \sin \frac{\pi n}{d} z \cdot \exp[i(k_x x + k_y y)] \quad 26$$

$$\epsilon(n, k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{d} \right)^2 n^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(k_x^2 + k_y^2)}_{k_{\perp}^2} \quad 27$$



Şekil-3 İnce film (d kalınlıklı)

burada m yük taşıyıcılarının etkin kütlesidir. L_x ve L_y sırasıyla (x,y) düzleminde ince filmin esas bölgesinin ölçüleridir, $n=1,2,3,\dots$ ölçü kuantum sayılarıdır. Görülür ki, iletim elekt ronları halleri üç kuantum sayısı(n,k_x,k_y) ile tanımlanır, n sayısı pozitif tam sayıları gösterir. Enerji spektrumu, (27)ye göre, n 'in tam değerlerine uyan kendine özgü iki boyutlu alt bandların üst üste çakıştığı $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(k_x, k_y)$ 'i taksim eder. Şekil-4 üç alt bandın şemasını gösterir. Elektron hareketi iki boyutlu k -uzayında (k_x, k_y) süreklidir, üçüncü doğrultuda “ k ” hareketi ya yasaklanır yada sınırlanır. Bu, elektron hareketi iki boyutludur. Filmde spektrumun ayırıcı özelliği, belirsizlik ilkesiyle uyumlu sınırlı minimum enerjinin varlığıdır. Önemlidir ki, bir kesiklenme kuantum sayısı n , dalga vektörü $|k_z| = (\pi/d)n$ nin z bileşeninin mutlak değerlerine uygun seçilebilir. O halde, şekil-5 de gösterilen k -uzayında kuantum hal uzayını göz önüne almak mümkündür.

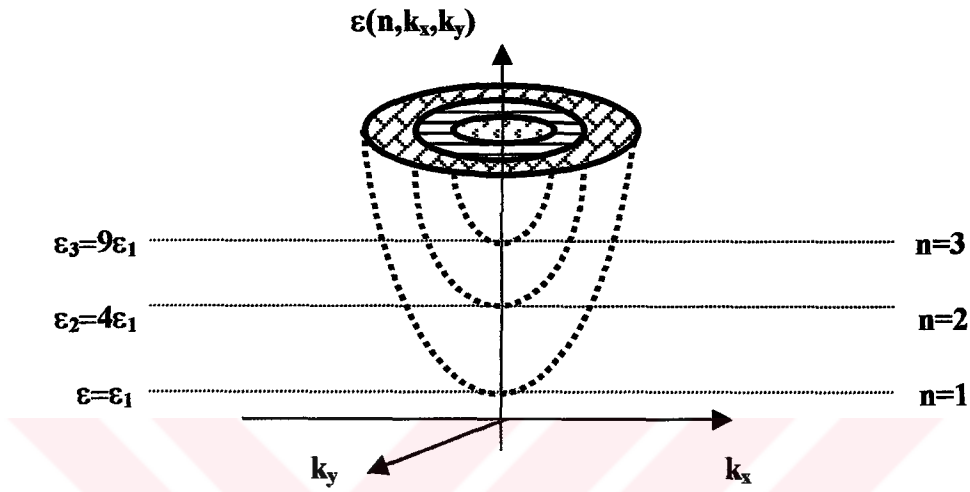
$$\varepsilon_1 = \varepsilon(n=1, k_x = k_y = 0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{d} \right)^2 \Rightarrow \varepsilon_0 \quad 28$$

Görülür ki, k -uzayının hacmi kadar bir film için verilen ε enerjisinin kapalı eş enerji yüzeyleriyle sınırlı n 'in tam değerlerine uyumlu kısmının bir sayısına bölünür(taksim edilir). Şimdi bir kuantlı filmde hal(durum) yoğunluğunu bulacağız. n, k_x, k_y kuantum sayılarının bütün değerlerinin kapsamlı toplamıyla, ε den küçük enerjili birim hacim başına elektron hallerinin toplam sayısını bulmak mümkündür.

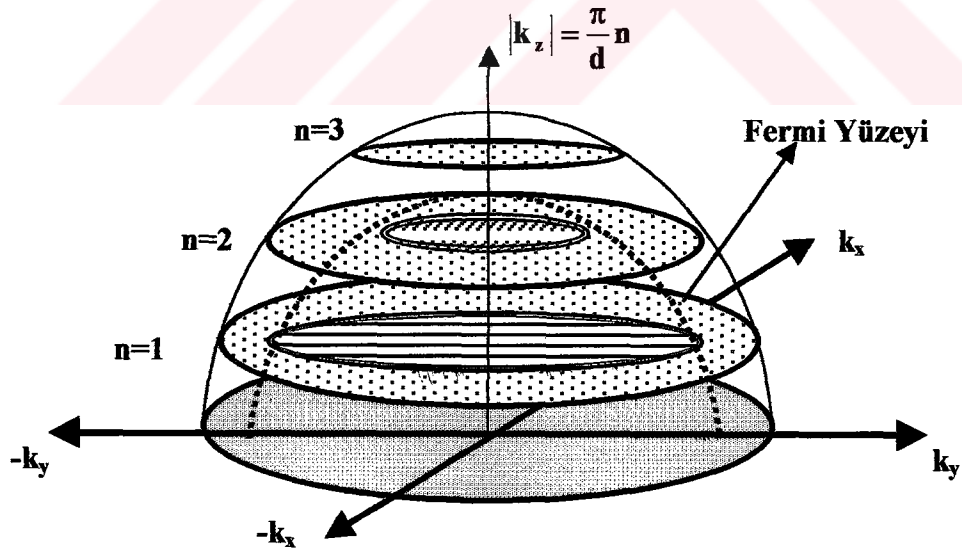
$$Z(\varepsilon) = \frac{2}{V} \sum_{n k_x k_y} \int dk_x dk_y = \int g_f(\varepsilon') d\varepsilon'$$

29

burada iki faktör hesaba katılır: spin hal dejenereliği; $V=L_x.L_y.d$ asıl film bölgesinin hacmi.



Şekil-4 Bir İnce filmde kısmi kuantlı enerji spektrumu(Askerov, 1994).



Şekil-5 Bir ince filmin k-uzayında elektron hal dağılımı. İç halkalar iletim elektronları tarafından işgal edilmiştir. Kesikli küre ζ_F Fermi enerjisine uyumludur (Askerov, 1994).

$$g_f(\epsilon) = \frac{1}{\pi d} \sum_n k_{\perp}(\epsilon, n) \frac{dk_{\perp}(\epsilon, n)}{d\epsilon} \quad 30$$

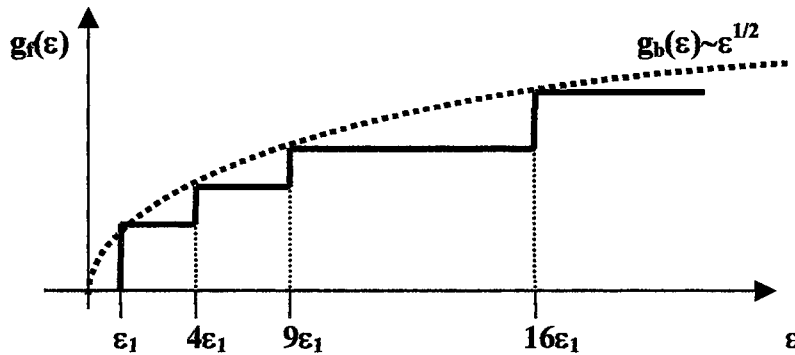
bu denklem ölçüce kuantlanmış bir filmde elektron hallerinin yoğunluğudur ve $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ iki boyutta dalga vektörünün büyüklüğüdür. Özel durumda n , ϵ enerjisinden daha düşük tabanların bütün alt bandlarına tesir eder. Bir parabolik band için, (27)ye göre, $k_{\perp} = (\epsilon, n)$ (31) basit biçimine sahiptir;

$$k_{\perp}(\epsilon, n) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} (\epsilon - \epsilon_1 n^2)^{1/2} \quad 31$$

Bu ifadenin ve (31)in kullanımıyla bir parabolik bandlı kuantlanan filmde hal yoğunluğunu elde ederiz;

$$g_f(\epsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \left[\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_1}} \right] \quad 32$$

Burada $[\epsilon/\epsilon_1]$, $(\epsilon/\epsilon_1)^{1/2}$ in tam sayı kısmıdır, yani ϵ özgül enerjisinden daha küçük tabanların altbandlarının sayısıdır. (32)den görülür ki, herbir alt band hal yoğunluğuna aynı katkıyı yapar. Sabit kalınlıklı bir film için hal yoğunluğu $g_f(\epsilon)$ birle karşılaştırılabilir $(\epsilon/\epsilon_1)^{1/2}$ olduğu değere kadar enerjiye bağlı olmaz. Bu nedenle, $g_f(\epsilon)$ 'e genel bağlılık şekil-6 da gösterildiği gibi kademelidir.



Şekil-6 Sabit kalınlık için parabolik bandlı kuantlı filmde enerjinin fonksiyonu olarak elektron hal yoğunluğu. Kesikli çizgiler hacmi numune için $g_b(\epsilon)$ i gösterir (Askerov, 1994).

Hal yoğunluğu sıçraması bitişik alt bandın tabanının ε enerjisine denk olduğu her zaman oluşur, yani $\varepsilon = \varepsilon_n = \varepsilon_1 n^2$. Bu enerji değerleri için filmdeki hal yoğunluğu hacimdekiyle dengelenir; $g_f(\varepsilon) = g_b(\varepsilon)$.

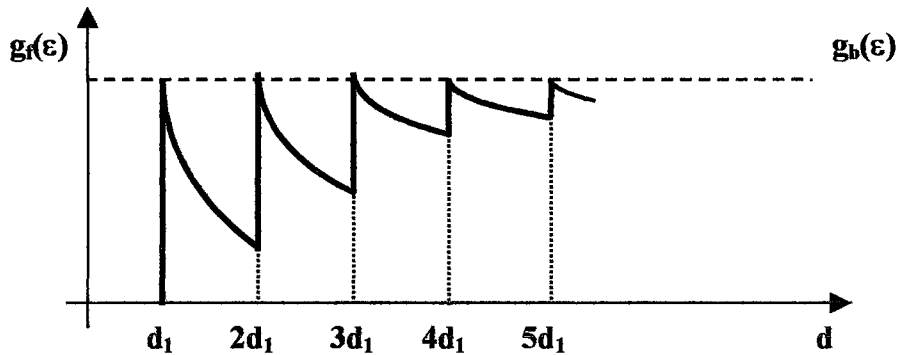
Kolaylıkla gösterilir ki, $[(\varepsilon/\varepsilon_1)^{1/2}]$ (32)de basitçe $(\varepsilon/\varepsilon_1)^{1/2}$ ile değiştirilerek (28)de kullanılır. Film kalınlığıyla değişen sabit ε enerjisi için ölçüce kuant şartı altında hal yoğunluk davranışı bununla ilgilidir. Hacimde hal yoğunluğuyla $g_f(\varepsilon, d)$ nin davranışını karşılaştırmak için $g_b(\varepsilon)$ aşağıdaki gibi sunulur,

$$g_f(\varepsilon, d) = g_b(\varepsilon) \left[\frac{\sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_1}}}{\sqrt{\varepsilon_1}} \right] \quad (33)$$

burada $\varepsilon = \varepsilon_1(d)$ (28)de en düşük film seviyesinin enerjisidir.

$$g_b(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_1}} = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi \hbar^3} \varepsilon^{1/2} \quad (34)$$

hal yoğunluğu modelinin hacmidir. (33)den görülür ki, d_n kalınlığı için, $(\varepsilon/\varepsilon_1)^{1/2}$ bir tam sayıya eşit olur, yani bir alt bandın tabanı ε özgül enerjisine denk olduğunda $g_f(\varepsilon, d_n) = g_b(\varepsilon)$ ye sahip olur. Diğer kalınlıklar için d artarken $g_f(d)$ hal yoğunluğu ε seviyesinden bir aşağı çapraz alt bandların sayısı $1/d$ ile oranlı azalır. $g_f(d)$ ye bağlılık şekil-7 de verilir. Bir karakteristik hal yoğunluğu hacimdekinden daha küçüktür ve $g_f(d)$ non-monoton değişir.



Şekil-7 ε =sabit özgül enerjili ölçü-kuantlı filmin kalınlığının fonksiyonu olarak hal yoğunluğu. Kesikli çizgiler hacmi numune için $g_b(\varepsilon)$ i gösterir (Askerov, 1994).

Ani değişen hal yoğunluğunun kalınlık değerleri $(\epsilon/\epsilon_1)^{1/2}=n$ şartından bulunur, n tam sayıdır, bu şarttan kalınlık değerlerini bulabiliriz;

$$d_n = \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\epsilon} \right)^{1/2} \cdot n = d_1 n \quad 35$$

burada $n=1,2,3,\dots$ olmak üzere $d = \pi \hbar / \sqrt{2m\epsilon}$ ϵ özgün enerjisine denk en düşük bandın tabanının kalınlığıdır, yani $\epsilon=\epsilon_1$ şartından bulunur. $d < d_1$ kalınlığında hallerin olmaması önemlidir(şekil-7). $\epsilon > \epsilon_1$ 'e uyumlu kalınlık aralığında olduğu gibi, ϵ enerji gapında dengini bulur. Şekil-7 den görülür ki, $g_f(d)$ kalınlığın bir fonksiyonudur. Kalınlığın fonksiyonu olarak ölçüce kuant şartı altında film karakteristiklerinin kinetik ve termodinamik titreşimleri hal yoğunluklarının bu davranışına tam olarak uyar. $g_f(d)$ titreşim periyodu kolaylıkla (35)den elde edilir;

$$\Delta d = d_1 = \hbar / 2\sqrt{2m\epsilon} = \lambda / 2 \quad 36$$

$\lambda = \hbar / \sqrt{2m\epsilon}$ ϵ enerjili bir elektronun de Broglie dalgaboyudur. Böylece kalınlıkla orantılı hal yoğunluğunun titreşim periyodu de Broglie dalgaboyunun yarısına eşittir. Önemlidir ki, dispersiyon ilişkisinin parabolikliğinde sınırsız dikdörtgen tabanlı sonsuz kuyu biçimli filmin hal yoğunluğunu bulabiliriz. Bir keyfi dağılım ilişkisi ve farklı film potansiyel yaklaşımı durumunda $g_f(\epsilon, d)$ fonksiyonları şekil-6 ve 7 de verilen fonksiyonlardan farklı olacak, ancak kesiklenme kuantum sayısı n 'in varlığında esas teklik koşulunda sonuçlanır, yani monoton davranış gözükcektir.

3.1.4. Yük Taşıyıcı Konsantrasyonu ve Fermi Seviyesi

Bir tip yük taşıyıcılı filmi düşünelim(açıktır ki,elektronlar) ve onların n_{el} özgün konsantrasyonunu hayal edelim. Basit film modeli durumunda bilinen (37) formülünden yararlanarak Fermi seviyesinin konsantrasyonla ilişkisini bulacağız;

$$n_{el} = \int g_f(\epsilon) f_o(\epsilon) d\epsilon \quad 37$$

burada $g_f(\epsilon)$ hal yoğunluğudur, $f_0(\epsilon)$ Fermi dağılım fonksiyonudur. (30), (37)de yerine yazılır ve önce kısmi integral alınırsa (38)i elde ederiz;

$$n_{el} = \left(\frac{1}{2\pi d} \right) \sum \int k_{\perp}^2(\epsilon, n) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon \quad 38$$

Parabolik dağılıma ilişkisi (31) durumunda konsantrasyon(38), (39) biçimine sahip olur,

$$n_{el} = \frac{m}{\pi d \hbar^2} \sum_{\epsilon_n} \int_{\epsilon_n}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_n) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon \quad 39$$

burada $\epsilon_n = \epsilon_1 n^2$ dir. Bir filmdeki elektron gazı ise yüksek dejeneredir. $(\zeta_F - \epsilon_1) \gg k_B T$, (39)den (40)yı elde etmek kolaydır,

$$n_{el} = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \sum_{n=1}^{\bar{n}} (\zeta_F - \epsilon_n) = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \sum_{n=1}^{\bar{n}} (\zeta_F - \epsilon_1 n^2) \quad 40$$

burada $\bar{n} = [(\zeta_F / \epsilon_1)^{1/2}]$, (ζ_F / ϵ_1) sayısının tam kısmıdır. Son ifadede, $\bar{n}$ üzerinden toplam kolaylıkla tamamlanır, sonuçta (41)i elde ederiz;

$$n_{el} = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \bar{n} \left[\zeta_F - \epsilon_1 \frac{(\bar{n} + 1)(2\bar{n} + 1)}{6} \right] \quad 41$$

$\bar{n} = [(\zeta_F / \epsilon_1)^{1/2}]$, (41) ifadesi keyfi kalınlıklı filmler için, n_{el} konsantrasyonu ve Fermi seviyesi arasında bir genel ilişkidir. Dikkat edilirse kalın filmler için $\bar{n} \gg 1$ (alt bandların çoğu doludur), sadece bir alt bandın dolu olduğu aşırı ince film için, $\bar{n} = 1$ (Fermi seviyesi 1. ve 2. film seviyeleri arasındadır), (41)den (42)ye ulaşılır,

$$\zeta_F(d) = \epsilon_1 + \left(\frac{\pi \hbar^2}{m} \right) n_{el} d \quad 42$$

$d \rightarrow 0$ da görülür ki, Fermi seviyesi $\zeta_F(d) \rightarrow \epsilon_1$ dir. Orta kalınlık durumunda, yani $\bar{n}$ ın ara değerleri için (41)den $\zeta_F(\infty)$ Fermi seviyeli hacim için, $\zeta_F(d_n^-)$ 'ı karşılaştırmak ve $\bar{n}$ sahip altbandların tabanıyla denk Fermi seviyesi için d_n^- kalınlık değerleri analitik

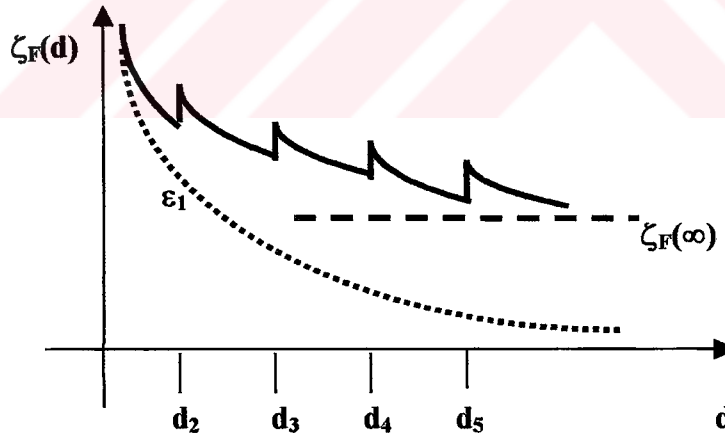
olarak hesaplanabilir. Farzedilen filmde Fermi seviyesi $\zeta_F(d_n) = \epsilon_1 \bar{n}^2$ olduğunda, $\bar{n}$ band tabanına denk olur. Bu gibi kalınlıklar için $(\zeta_F(d_n)/\epsilon_1)^{1/2}$ bir tam sayıdır. Bu değer (41)de yerine yazılır ve (28)de kullanıldığında (43) elde edilir,

$$d_n = d_0 \bar{n} \left[1 - \frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6\bar{n}^2} \right]^{1/3} \quad 43$$

burada $d_0 = (\pi/2n_{el})^{1/3}$ dır. $\bar{n}$, (43)de, $\bar{n} = 2, 3, 4, \dots$ değerlerini aldığından bir dejenere durumdaki Fermi Seviyesi sadece $\bar{n} = 2$ tabanlı alt banda tam olarak denk olur. (41)den hacimdeki Fermi seviyesinin $\zeta_F(d_n) = \epsilon_1 n^2$ ile ilişkisini bulmak mümkündür. Böylece (44)'e sahip oluruz;

$$\zeta_F(d_n) = \zeta_F(\infty) \left[\frac{3}{2} - \frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{4\bar{n}^2} \right]^{2/3}, \bar{n} = 2, 3, 4, \dots \quad 44$$

Bir filmde Fermi seviyesinin kalınlığa bağıllığı, $\zeta_F(d)$, şekil-8 de verilir.



Şekil-8 Ölçü kuantlı filmin kalınlığının fonksiyonu olarak Fermi seviyesi (Askerov, 1994).

Görülür ki, büyük kalınlıklar için, $\zeta_F(d)$ bir magnetik model için $\zeta_F(\infty)$ Fermi seviye değerini kullanır ve $\zeta_F(d)$ çok ince filmler için ϵ_1 enerjisiyle hareket eder ve (42) ile tanımlanır. Kalınlıklar arasında $\zeta_F(d)$ salınım yapar. Bu salınımlar $\Delta d \approx 0,9d_0$ periyoduna

hemen hemen yakındır. Anlaşılması için, (44) ve (43) formülü kullanılarak elde edilir, bazı nümerik değerler aşağıda sunulur; $[d_2=1,44d_0, \zeta_F(d_2)=1,48\zeta_F(\infty)]$; $[d_3=1,44d_0, \zeta_F(d_3)=1,24\zeta_F(\infty)]$; $[d_4=3,24d_0, \zeta_F(d_4)=1,17\zeta_F(\infty)]$; $[d_5=4,12d_0, \zeta_F(d_5)=1,12\zeta_F(\infty)]$; ve diğerleri.

Şimdi bir filmde dejenere olmamış elektron gazını ele alalım. Bu durumda $f_0(\epsilon) = \exp(\zeta - \epsilon)/k_0T$ ve (39)dan (45)i elde etmek kolaydır.

$$\exp\left(\frac{\zeta}{k_0T}\right) = \frac{2\pi\hbar^2 d n_{el}}{mk_0T\Theta(v_1)-1} \quad 45$$

burada fonksiyon

$$\Theta(v_1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-\pi v_1 n^2) \quad 46$$

$v_1 = \epsilon_1/\pi k_0T$ ile verilir. (45) ifadesinin tam şeklini bulmak için v_1 sonucunun küçük ve büyük değerleri için $\Theta(\epsilon_1)$ fonksiyonunun davranışını kullanabiliriz. $v_1 \gg 1$ geniş değerleri için (aşırı ince filmler), (46)da iki terimin birini sınırlamak mümkün olur,

$$\Theta(v_1) \approx 1 + 2 \exp(-\pi v_1), \quad v_1 \gg 1 \quad 47$$

bu halde (35)den (48) elde edilir,

$$\zeta(d) = \epsilon_1 + k_0T \ln\left(\frac{\pi\hbar^2 d n_{el}}{mk_0T}\right) \quad 48$$

$v_1 \ll 1$ sonucunun küçük değerleri için $\Theta(v_1)$ in asimtotikliğini bulmak için (aşırı ince filmler, yarı klasik durum), fonksiyonel ilişkisini kullanabiliriz(Rumer ve Ryvkin, 1977),

$$\Theta(v_1) = \frac{1}{\sqrt{v_1}} \Theta\left(\frac{1}{v_1}\right) \quad 49$$

ve $v_1^{-1} \gg 1$ hesaba katılarak (26)nın asimtotikliğine uygulanır. Sonuç olarak, (50)ye sahip oluruz,

$$\Theta(v_1) \approx v_1^{-1/2} \left[1 + 2 \exp\left(-\frac{\pi}{v_1}\right) \right], \quad v_1 \ll 1 \quad 50$$

Bu ifade (45)de yazıldığında, birinci yaklaşımda hacim modeli durumu için bilinen sonucu ve sonraki yaklaşımda ölçüce kuantlanmanın kuantum ayarı elde edilir.

3.1.5. Ölçüye Bağlı Kuantum Olayının Gerçeklenme Şartları

Deneyssel gösterilsin diye, ölçüye bağlı kuant olaylarının deney şartları ve film materyalleri gereksinimi tam sağlamalıdır. Bu koşullar de tartışılarak analiz edilmiştir(Tavger ve Demikovskii, 1968; Sandomirsky, 1962). İlk önce kesişen altbandlardan oluşan şekil-4 de görüldüğü gibi filmde yük dağılımı dikkate alınır. Bu kesişen alt bandların çoğu yük taşıyıcılarıyla işgal edildiğinde, spektrum kuantlanması hesaba katılmayabilir. Ölçüce kuantlanma $\bar{\varepsilon}$, ε_1 kuantlanma enerjisinin bir karakteri olsun diye, sadece iletim elektronlarının ortalama enerjisiyle yer değiştirebilir, yani alt bandlar taşıyıcıların küçük bir kısmıyla işgal edilmelidir. Böylece, ölçüce kuant olaylarını değiştirmek için zorunlu şart (51)dir,

$$\varepsilon \approx \varepsilon_1 \quad \text{veya} \quad d \approx \pi \hbar / \sqrt{2m\varepsilon} \approx \lambda \quad 51$$

burada bir genel elektron gazı için $\bar{\varepsilon}$, ζ_F Fermi enerjisinin izindedir ve dejenere olmayanlardan biri için $\varepsilon \approx k_B T$ dir, m etkin yük taşıyıcı kütlesidir. Çoğunlukla, ölçüce kuant olaylarını değiştirmek için, d film kalınlığı de Broglie iletken elektronlarının dalgaboyunun mertebesinde olmalıdır. (51)den görülür ki, ölçüce kuantlanmayı gerçek kalınlıkla değiştirmek için, bir küçük etkin kütle, bir düşük spektrum işgali veya düşük sıcaklık gerekir. Metaller için $\varepsilon=5$ eV, serbest elektron kütlesi $m \approx m_0$ dır ve (51)den $d \approx 10^{-8}$ cm. bulunur. Bu kalınlık non-realistiktir(gerçeğe uygun değildir). Bir gerçek kalınlık yarımetal ve yarıiletken filmler için elde edilir. Örneğin, Bi için $m^* \approx 10^{-2} m_0$, ve $\bar{\varepsilon} \approx 10^{-2}$ eV. $d \approx 10^{-2}$ cm. ye uygundur. İkinci şart, yük taşıyıcı saçılmasında sınırlamayı düzenler. Saçılma nedeniyle, yarı kesikli taşıyıcı spektrumu $\hbar/\tau$ ile kısmen mikroskopla incelenir, τ relaksasyon zamanıdır. Spektrum için ayrıklığı azaltma şartı;

$$\frac{\hbar}{\tau} \ll \varepsilon(n+1) - \varepsilon(n) \quad \text{yada} \quad \frac{\hbar}{\tau} \ll (2n+1)\varepsilon_1 \quad 52$$

(52) ile sağlanmalıdır. Filmlerde yarı ayrık spektrumun varlığı şartı gereklidir, sadece ortalama serbest yol genişliğine sahip olan saf filmler ve yalnız yeterince mükemmellikte ise yerine gelir. Küçük n lerde yük taşıyıcı hareketliliği karşılaştırmalı bilmelidir ki, (53) şartını sağlasın.

$$u \gg \frac{ed^2}{\pi\hbar} \quad 53$$

Örneğin, $d \approx 10^{-5}$ cm. için u dalga hızı 10^3 cm³/V.s den daha büyük olmalıdır. Bu iki şarta ek olarak; dikkat edilmelidir ki, ölçüce kuant olaylarının oluşabilmesi için, film kalınlığı oldukça düzgün kalınlıklı olmasına bağlıdır ki, ölçü seviyesinde değişim, onun rastgele kalınlık nedeniyle farklı kısımlarda saçılmaması için arasındaki mesafeden oldukça az olmalıdır. Bu amaca uygun relatif kalınlık saçılmasının (54) şartını sağladığını göstermek kolaydır,

$$\frac{|\Delta d|}{d} \ll \frac{2n+1}{2n^2} \quad 54$$

Burada n altband numarasıdır. (54)den görülür ki, yüksek (n)lerde kalınlık saçılması $|\Delta d|$, üst üste çakışmamış farklı kısımların filmin alt-bandlarına göre d/n den daha az olmasıdır. Film kalınlığının düzgünlüğü pürüzsüz olan yüzeyde taşıyıcı saçılması için gereklidir, öyle ki, yarı-impuls $\hbar |k_z|$ izdüşümü yüzeyden yansımayla değişmez. Bu nedenle, ölçü bozukluğu $|\Delta d|$ yük taşıyıcısının de Broglie dalga boyundan küçük olmalıdır. Ölçüye bağlı salınım olaylarını gözlemek için, bir filmde yük taşıyıcıları $k_0 T \ll \zeta_F$ için dejenere olmalıdır. Üstelik, Fermi dağılımı incelenerek alt-bandların komşuluğu arasındaki mesafenin çok daha küçük olması zorunludur;

$$k_0 T \ll (2n+1)\varepsilon_1 < \zeta_F \quad 55$$

(55) son eşitsizliği, Fermi seviyesinin altında en azından birkaç tane ince kat enerji seviyesinin olmasını gerektirir. Yalnız bu gibi durumda ölçüce kuant olaylarını gözlemek mümkün olur. Böylece, ölçüce kuant olaylarını gerçeklemek için (55) düşük

sıcaklıklarda yapılabilen deneyler; düşük film kalınlığı, pürüzsüz yüzey saçılması, yüksek hareketlilik, düşük işgal(Fermi seviyesi), yük taşıyıcılarının küçük etkin kütlesi ile karakterize edilmeyi gerektirir. Yarı metal filmler, bu koşulları oldukça iyi sağlar. Bi filmler ilk örneklerdir(Lifshits ve Kosevich, 1953). Yarımetaller, katkısız yarıiletkenlerde dejenere haldeki taşıyıcılar da dikkate değerdirler ve onların dejenerelelik dengesi kalınlık değişimi idare edilir. Kalınlık azaldığında enerji gaplı bir dejenere halden, dejenere olmayan yarıiletken hale geçirmek mümkündür².



² (3.1) bölümü, parabolik spektrumlu materyaller ve ölçüce kuantlanma hakkında teorik ön bilgi vermek ve daha sonraki bulgulara referans gösterilmek amacıyla Askerov, B.I. 1994. Transport Phenomena in Semiconductors'den çeviri yapılmıştır.

3.2. YÖNTEM

3.2.1. Non-Parabolik Enerji Spektrumu

3.2.1.1. İki Bandlı Kane Yaklaşımıyla Genel Enerjiden Non-Parabolik Enerji Spektrumunun Türetimi

(5) formülünü $\Delta_o \gg \epsilon_g$ için (iki bandlı Kane yaklaşımı) $\epsilon' = \epsilon - \epsilon_o \Rightarrow \epsilon' = \epsilon$ kullanarak düzenleyelim.

$$\epsilon(\epsilon + \epsilon_g) \left(\underbrace{\epsilon + \epsilon_g}_{\Delta_o \gg \epsilon_g \Rightarrow 0} + \Delta_o \right) - k^2 P^2 \left(\underbrace{\epsilon + \epsilon_g}_{=0} + \frac{2}{3} \Delta_o \right) = 0$$

$$\epsilon(\epsilon + \epsilon_g) \Delta_o - k^2 P^2 \frac{2}{3} \Delta_o = 0$$

$$\epsilon(\epsilon + \epsilon_g) = k^2 P^2 \frac{2}{3} \quad 56$$

$$s^2 = \frac{\epsilon_g}{2m} \quad ; \quad s^2 = \frac{2 P^2}{3 \hbar^2} \Rightarrow P^2 = \frac{3}{2} \hbar^2 s^2 = \frac{3 \hbar^2 \epsilon_g}{2 \cdot 2m} \quad 57$$

(57), (56)da yazılarak

$$\frac{\epsilon(\epsilon + \epsilon_g)}{\epsilon_g} = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$$

son denklem düzenlendiğinde

$$\epsilon \left(1 + \frac{\epsilon}{\epsilon_g} \right) = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad 24$$

bulunur.

Boyutları z eksenine doğrultusunda $L_z = d \leq \lambda_D$, x,y eksenleri doğrultusunda ise L_x, L_y gibi keyfi olan bir tip yük taşıyıcılı (iletken elektronlar) ve izotrop dispersion ka-

nunlu yarıiletken ince kat göz önüne alınır. Bu halde ölçü kuantlanması nedeniyle katı cisimde tam diskret enerji spektrumlu elektron sistemi oluşur. İnce katın $U(z)$ potansiyeli olarak düzgün tabanlı ve sonsuz yüksek duvarlı model kullanıldığında (ince katın (x,y) düzleminde $U(x,y)=\text{sabit}$. kabul edilir), iki bandlı Kane modeli yaklaşımında iletken elektronların enerji spektrumu için aşağıdaki ifade bulunur.

Kane'nin non-parabolik enerji ifadesini kullanarak ϵ enerjisini türetelim(Kane, 1957). $k_z=0$ da non-parabolik enerjiyle filmdeki ϵ_n enerjisine eşittir.

$$B(\epsilon) = \epsilon(1 + \frac{\epsilon}{\epsilon_g}) \Rightarrow \epsilon_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \epsilon_o n^2$$

ifadeleri eşitlenirse

$$\epsilon(1 + \frac{\epsilon}{\epsilon_g}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \epsilon_o n^2 \Rightarrow \epsilon + \frac{\epsilon^2}{\epsilon_g} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \epsilon_o n^2 \Rightarrow k = 0$$

$$\frac{\epsilon^2}{\epsilon_g} + \epsilon - \epsilon_o n^2 = 0 \Rightarrow \epsilon^2 + \epsilon \epsilon_g - \epsilon_g \epsilon_o n^2 = 0$$

Denklemin kökleri

$$\epsilon_{1,2} = \frac{-\epsilon_g}{2} \mp \frac{\sqrt{\epsilon_g^2 + 4\epsilon_g \epsilon_o n^2}}{2} = \frac{-\epsilon_g}{2} + \sqrt{\frac{\epsilon_g^2}{4} (1 + 4\frac{\epsilon_o}{\epsilon_g} n^2)} \quad 58$$

$$\beta \epsilon_g = k_o T, \quad k_o T = \frac{\epsilon_o}{\epsilon_o^*} \Rightarrow \beta \epsilon_g = \frac{\epsilon_o}{\epsilon_o^*} \Rightarrow \beta \epsilon_o^* = \frac{\epsilon_o}{\epsilon_g} \quad 59$$

dönüşümü (58)de yazılarak

$$\epsilon_{1,2} = \frac{\epsilon_g}{2} \left[\sqrt{1 + 4\beta \epsilon_o^* n^2} - 1 \right]$$

$$\epsilon_{1n} = \frac{k_o T}{2\beta} \left[\sqrt{1 + 4\beta \epsilon_o^* n^2} - 1 \right] \quad 60$$

sonuç ifade bulunur. Burada,

$$\beta = \frac{k_o T}{\epsilon_g} \quad 61$$

β non-paraboliklik parametreliğı, ϵ_g yasak enerji aralığı ,

$$\epsilon_o^* = \frac{\epsilon_o}{k_o T} \quad 62$$

$$\epsilon_o = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \quad 63$$

ϵ_o ince katın 1. enerji seviyesi, $n=1,2,3,\dots$ ölçü kuant sayısıdır. $k = \{n, k_x, k_y\}$ elektronun ince kattaki halini belirleyen kuant sayıları, k_x, k_y elektron dalga vektörünün x ve y-ekseni üzerindeki bileşenleridir.

3.2.1.2. Büyük Termodinamik Gibbs Potansiyelinin Türetimi

Büyük kanonik Gibbs dağılımını kullanarak ve kuantum mekaniğinin prensiplerini hesaba katarak taneciklerin kuantum istatistiğindeki dağılım fonksiyonunu araştıralım. Ele alınan sistem birbiriyle etkileşmede bulunmayan N sayıda tanecikten oluşmuş ve V hacmini kaplamış olsun. Taneciklerin $\vec{k}(k_x, k_y, k_z)$ kuant sayıları ile temsil edilen kuant halleri üzerine dağıldığı varsayalım. Özel bir durum için $\vec{k}$ kuant halindeki tanecik sayısı $n_{\vec{k}}$ ile işaret edilsin. Böyle bir sisteme Gibbs dağılımı uygulansın.

Bu dağılıma göre N sayıda taneciklerden oluşmuş sistemin i. kuant halinde ϵ_{Ni} enerjisine sahip olma olasılığı

$$W_{Ni} = \exp\left(\frac{\Omega + \zeta N - \varepsilon_{Ni}}{k_o T}\right) \quad 64$$

ile verilir(Landau ve Lifshits, 1980). Bu ifade kullanılarak, k-halindeki, taneciklerin $\bar{n}_{\vec{k}}$ istatistik ortalama sayısını bulmak(dolma sayısı) amaçlanır. Çoğu zaman bu büyüklük $\bar{n}_{\vec{k}} = f_{\vec{k}}$ olarak tanımlanır ve dağılım fonksiyonu denir.

k halinde bir taneciğin enerjisi $\varepsilon_{\vec{k}}$, bu enerjiye sahip parçacıkların sayısı $n_{\vec{k}}$ olduğu düşünölsün.

Genel halde sistemdeki taneciklerin tam sayısı

$$N = \sum_{\vec{k}} \bar{n}_{\vec{k}} \quad 65$$

ve sistemin enerjisi

$$\varepsilon_{Ni} = \sum_{\vec{k}} \bar{n}_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \quad 66$$

(65) ve (66) (64)de yazılır.

$$W_{Ni} = e^{\frac{\Omega}{k_o T}} e^{\frac{\sum (\zeta - \varepsilon_{\vec{k}}) n_{\vec{k}}}{k_o T}}$$

$$W_{Ni} = e^{\frac{\Omega}{k_o T}} \prod_{\vec{k}} e^{\frac{(\zeta - \varepsilon_{\vec{k}}) n_{\vec{k}}}{k_o T}} \quad 67$$

Son ifade normlandığında

$$\sum_{n_{\vec{k}}} W_{Ni} = 1 \Rightarrow e^{\frac{\Omega}{k_o T}} \sum_{n_{\vec{k}}} \prod_{\vec{k}} e^{\frac{(\zeta - \varepsilon_{\vec{k}}) n_{\vec{k}}}{k_o T}} = 1$$

k üzerinden toplam çarpma işlemini yer değıştirerek

$$e^{-\frac{\Omega}{k_o T}} = \prod_{\vec{k}} \sum_{n_{\vec{k}}} e^{\frac{(\zeta - \epsilon_{\vec{k}})}{k_o T} n_{\vec{k}}}$$

Her iki tarafın doğal logaritması(ln) alınır, bu halde tüm sistemin termodinamik potansiyeli bulunur,

$$\Omega = -k_o T \ln \left[\prod_{\vec{k}} \sum_{n_{\vec{k}}} e^{\frac{(\zeta - \epsilon_{\vec{k}})}{k_o T} n_{\vec{k}}} \right]$$

$$\Omega = -k_o T \sum_{\vec{k}} \ln \sum_{n_{\vec{k}}} e^{\frac{(\zeta - \epsilon_{\vec{k}})}{k_o T} n_{\vec{k}}} = \sum_{\vec{k}} \Omega_{\vec{k}} \quad 68$$

burada

$$\Omega_{\vec{k}} = -k_o T \ln \sum_{n_{\vec{k}}} \left(e^{\frac{(\zeta - \epsilon_{\vec{k}})}{k_o T}} \right)^{n_{\vec{k}}} \quad 69$$

şeklinde olan, sistemin $\vec{k}$ - haline karşılık gelen termodinamik Gibbs potansiyeldir.

(69) formülünde yer alan $n_{\vec{k}}$ sayısı fermionlar için ya $n_{\vec{k}} = 0$ yada $n_{\vec{k}} = 1$ değerlerini, bozonlar için ise $n_{\vec{k}} = 0, 1, 2, 3, \dots, \infty$ gibi tüm tam sayıları alır. $n_{\vec{k}}$ nın fermionlar ve bozonlar için verilen değerlerinden yararlanarak, (68)de toplama işlemleri tek-tek sonlandırıldığında, büyük termodinamik Gibbs potansiyeli Ω için şu genel ifade bulunur;

$$\Omega = \mp k_o T \sum_{\vec{k}} \ln(1 \pm e^{\frac{(\zeta - \epsilon_{\vec{k}})}{k_o T}}) \quad 70$$

burada (-) işareti Fermionlar($-\infty < \zeta < +\infty$), (+) işareti Bozonlar($\zeta < 0$) için geçerlidir.

Gibbs yönteminde

$$n_{\vec{k}} = f_{\vec{k}} = -\frac{\partial \Omega_{\vec{k}}}{\partial \zeta} = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}} - \zeta}{k_o T}} \pm 1}$$

şeklindedir. f_k^- , paydadaki (+) ve (-) işaretlerinin sırasına bağlı olarak taneciklerin Fermi-Dirac(+) ve Bose-Einstein(-) dağılım fonksiyonlarıdır. Dolayısıyla, f_k^- , T-sıcaklığında ε_k^- enerji seviyesindeki taneciklerin ortalama sayısı(ortalama işgal sayısı) veya T-sıcaklığında ε_k^- enerji seviyesinin taneciklerle işgal olunma olasılığıdır.

3.2.1.3. Termodinamik Gibbs Potansiyeli (Non-Parabolik Enerji Spektrumlu)

Fermionlar için (70) denklemi

$$\Omega = -k_o T \sum_{k_x k_y n} \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \varepsilon}{k_o T}\right)}) \quad 71$$

olarak alınır ve

$$\Omega = -\frac{k_o T L_x L_y 2}{(2\pi)^2} \iint \sum_n \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \varepsilon}{k_o T}\right)}) dk_x dk_y$$

$$\Omega = -\frac{k_o T V 2}{(2\pi)^2 d} \int_0^{k_{\perp}} \int_0^{2\pi} \sum_n \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \varepsilon}{k_o T}\right)}) D dk_{\perp} d\varphi$$

$$D = \begin{vmatrix} \frac{\partial k_x}{\partial k_{\perp}} & \frac{\partial k_y}{\partial k_{\perp}} \\ \frac{\partial k_x}{\partial \varphi} & \frac{\partial k_y}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = k_{\perp} \quad k_x = k_{\perp} \cos \varphi, \quad k_y = k_{\perp} \sin \varphi$$

$$\Omega = -\frac{k_o T V 2}{(2\pi)^2 d} \varphi \int_0^{k_{\perp}} \sum_n \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \varepsilon}{k_o T}\right)}) k_{\perp} dk_{\perp}$$

$$\Omega = -\frac{k_o T V}{\pi d} \int_0^{k_{\perp}} \sum_n \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \varepsilon}{k_o T}\right)}) k_{\perp} dk_{\perp} \quad 72$$

$$\varepsilon(n, k_{\perp}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} + \varepsilon_o n^2 \Rightarrow \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} = \varepsilon - \varepsilon_o n^2 \quad 27$$

(27) denklemi düzenlenerek

$$d\left(\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m}\right) = 2 \frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp} dk_{\perp} \Rightarrow \frac{d}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}^2\right) = \frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp} dk_{\perp} \quad 73$$

bulunur. (73) ve (24) eşitlenerek

$$B(\epsilon) = \epsilon \left(1 + \frac{\epsilon}{\epsilon_g}\right) \Rightarrow B(\epsilon) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} + \epsilon_o n^2 \Rightarrow \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} = B(\epsilon) - \epsilon_o n^2$$

$$d\left(\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m}\right) = d(B(\epsilon) - \epsilon_o n^2) \quad 74$$

elde edilir. (74), (72)de yazarak,

$$\begin{aligned} \Omega &= -\frac{k_o TVm}{\pi \hbar^2 d} \int_0^{k_{\perp}} \sum_n \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \epsilon}{k_o T}\right)}) . d\left(\frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}\right) \\ \Omega &= -\frac{k_o TVm}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \int_{\epsilon_1}^{\infty} \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \epsilon}{k_o T}\right)}) . d[B(\epsilon) - \epsilon_o n^2] \\ \Omega &= -\frac{k_o TVm}{\pi \hbar^2 d} \underbrace{\sum_n \int_{\epsilon_1}^{\infty} \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \epsilon}{k_o T}\right)}) . \frac{\partial}{\partial \epsilon} [B(\epsilon) - \epsilon_o n^2] d\epsilon}_{I(n, \eta)} \quad 75 \end{aligned}$$

tipine dönüştürülür. (75) formülünde kısmi integral alınarak

$$I(n, \eta) = \int_{\epsilon_1}^{\infty} \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \epsilon}{k_o T}\right)}) \frac{\partial}{\partial \epsilon} [B(\epsilon) - \epsilon_o n^2] d\epsilon \quad 76$$

$$\int u dv = uv - \int v du$$

$$u = \ln(1 + e^{\left(\frac{\zeta - \epsilon}{k_o T}\right)}) \Rightarrow du = \frac{\exp\left(\frac{\zeta - \epsilon}{k_o T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{\zeta - \epsilon}{k_o T}\right)} \left(-\frac{d\epsilon}{k_o T}\right) = -\frac{1}{k_o T} f(\epsilon, \eta) d\epsilon$$

v ifadesinde (74) yazılır

$$v = \int \frac{\partial B}{\partial \epsilon} d\epsilon \Rightarrow v = \int d[B(\epsilon) - \epsilon_o n^2] = B(\epsilon) - \epsilon_o n^2$$

ve son iki ifade (76)da yazılarak,

$$I(\epsilon, \eta) = \underbrace{\ln(1 + \exp(\frac{\zeta - \eta}{k_o T}))}_{\epsilon \rightarrow \infty \Rightarrow 0} [B(\epsilon) - \epsilon_o n^2] \Big|_{\epsilon_1}^{\infty} + \int_{\epsilon_1}^{\infty} [B(\epsilon) - \epsilon_o n^2] f(\epsilon, \eta) d\epsilon \quad 77$$

elde edilir. BZ nin merkezinde $k_z=0$ olduğundan (77)deki $[B(\epsilon) - \epsilon_o n^2]=0$ dır. Sonuçta

$$I(\epsilon, \eta) = \frac{1}{k_o T} \int_{\epsilon_1}^{\infty} B(\epsilon) f(\epsilon, \eta) d\epsilon \quad 78$$

bulunur. (78) de enerji bir alt sınırdan başlamaktadır, bunu ortadan kaldırmak için şöyle bir dönüşüm yapılır;

$$\chi = \frac{\epsilon - \epsilon_1(n)}{k_o T} \Rightarrow \epsilon = \chi k_o T + \epsilon_1 \Rightarrow d\epsilon = k_o T d\chi$$

$$\eta(n) = \frac{\zeta - \epsilon_1(n)}{k_o T}$$

$$\frac{\epsilon - \eta}{k_o T} = \frac{\chi k_o T + \epsilon_1 - \zeta}{k_o T} = \chi - \frac{\zeta - \epsilon_1}{k_o T} = \chi - \frac{\zeta'}{k_o T} = \chi - \eta$$

$$f(\epsilon, \eta) d\epsilon = f(\chi, \eta) k_o T d\chi$$

$B(\epsilon)$ χ cinsinden ifade edilir,

$$B(\epsilon) = \epsilon \left(1 + \frac{\epsilon}{\epsilon_g} \right) = (\chi k_o T + \epsilon_1) \left(1 + \frac{\chi k_o T + \epsilon_1}{\epsilon_g} \right) = \chi k_o T + \epsilon_1 + \frac{(\chi k_o T + \epsilon_1)^2}{\epsilon_g}$$

$$B(\epsilon) = k_o T \left\{ \chi + \frac{\epsilon_1}{k_o T} + \frac{k_o T (\chi + (\epsilon_1 / k_o T))^2}{\epsilon_g} \right\} \quad 79$$

$$\epsilon_1^* = \frac{\epsilon_1}{k_o T} \quad 80$$

(80) ve (61), (79)da yazılarak gerekli sadeleştirmelerden sonra $B(\epsilon)$ elde edilir.

$$B(\epsilon) = k_o T \{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \chi + \beta \chi^2 \} \quad 81$$

(81) formülü (78)de yerine yazılarak

$$I(\epsilon, \eta) = \frac{1}{k_o T} \int_{\epsilon_1}^{\infty} k_o T \{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \chi + \beta \chi^2 \} f(\chi, \eta) d\epsilon$$

elde edilir, integral açılır ve

$$I(\epsilon, \eta) = \int_0^{\infty} \{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \chi \} f(\chi, \eta) d\chi + \beta \int_0^{\infty} \chi^2 f(\chi, \eta) d\chi \quad 82$$

olur. Fermi integralinden faydalanılarak

$$F_r(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\chi^r d\chi}{1 + e^{\chi - \eta}} = \int_0^{\infty} \chi^r f(\chi, \eta) d\chi \quad 83$$

$$F_r(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\partial f}{\partial \chi} \chi^r d\chi = r F_{r-1}(\eta) \quad 84$$

(82) denklemi

$$I(n, \eta) = k_o T \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) F_1(\eta) + \beta F_2(\eta) \right\} \quad 85$$

dönüşür, son olarak Ω

$$\Omega = -\frac{(k_o T)^2 V m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) F_1(\eta) + \beta F_2(\eta) \right\} \quad 86$$

veya Fermi

$$F_r(\eta) = e^\eta \Gamma(r+1) \quad 87$$

Gama fonksiyonu

$$\Gamma(\eta) = \int_0^\infty x^{\eta-1} e^{-x} dx \Rightarrow F_r(\eta) = \frac{1}{r+1} F_{r+1}(\eta) \quad 88$$

dönüşümü kullanılarak

$$\Omega = -\frac{(k_o T)^2 V m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_2(\eta)}{2} + \beta \frac{F_3(\eta)}{3} \right\} \quad 89$$

Termodinamik Gibbs Potansiyeli elde edilmiş olur.

3.2.2. Genel İfadeler [Konsantrasyon. Entropi, Isı Sığası]

3.2.2.1. Konsantrasyon(n_{el})

Konsantrasyon Ω 'a Şu şekilde bağlıdır,

$$n_{el} = \frac{N_{zn}}{V} = -\frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\frac{\Omega}{V} \right)_{T,V} \quad 90$$

Ω 'ı n_{el} de yazarak

$$\begin{aligned} \frac{\Omega}{V} &= -\frac{(k_o T)^2 m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_2(\eta)}{2} + \beta \frac{F_3(\eta)}{3} \right\} \\ n_{el} &= -\frac{\partial}{\partial \zeta} \left\{ -\frac{(k_o T)^2 m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_2(\eta)}{2} + \beta \frac{F_3(\eta)}{3} \right\} \right\} \\ n_{el} &= -\left\{ -\frac{(k_o T)^2 m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{\partial F_2(\eta)}{2 \partial \zeta} + \beta \frac{\partial F_3(\eta)}{3 \partial \zeta} \right\} \right\} \\ n_{el} &= \frac{m(k_o T)^2}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{\partial F_2(\eta)}{2 \partial \zeta} + \beta \frac{\partial F_3(\eta)}{\partial \zeta} \right\} \end{aligned} \quad 91$$

$$F_r(\eta) = r F_{r-1}(\eta) \Rightarrow F_r'(\eta) = \frac{\partial F(\eta)}{\partial \eta} = r F_{r-1}(\eta) \quad 92$$

$$\eta(n) = \frac{\zeta - \epsilon_1}{k_o T} \Rightarrow \partial \eta(n) = \partial \left(\frac{\zeta}{k_o T} \right) \quad 93$$

(93), (92) de kullanılır,

$$\frac{\partial F_r(\eta)}{\partial \eta} = \frac{1}{k_o T} \frac{\partial F_r(\eta)}{\partial \left(\frac{\zeta}{k_o T} \right)} = \frac{1}{k_o T} \frac{\partial F_r(\eta)}{\partial \eta} = \frac{1}{k_o T} r F_{r-1}(\eta) \quad 94$$

dönüşümü (91) de yerine yazılarak

$$n_{el} = \frac{m(k_o T)^2}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_1(\eta)}{k_o T} + \beta \frac{F_2(\eta)}{k_o T} \right\}$$

$$n_{el} = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) F_1(\eta) + \beta F_2(\eta) \} \quad 95$$

genel konsantrasyon bulunur.

3.2.2.2. Entropi(S)

Entropi

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_v \quad 96$$

şeklinde tanımlanır.

(89) Termodinamik Gibbs Potansiyelini (96)da yerine yazarak

$$S = - \frac{\partial}{\partial T} \left\{ - \frac{k_o^2 T^2 m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left[(1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_2}{2} + \beta \frac{F_3}{3} \right] \right\}$$

$$S = \underbrace{\frac{k_o^2 m}{\pi \hbar^2 d}}_D \frac{\partial}{\partial T} \left\{ T^2 \sum_n \left[(1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_2}{2} + \beta \frac{F_3}{3} \right] \right\}$$

$$S = D \left[\left\{ 2T \sum_n \left[(1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_2}{2} + \beta \frac{F_3}{3} \right] \right\} + T^2 \left\{ \sum_n (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{\partial F_2}{2 \partial T} + \frac{k_o}{\epsilon_g} \frac{F_3}{3} + \frac{k_o T}{\epsilon_g} \frac{\partial F_3}{3 \partial T} \right\} \right] \quad 97$$

$$S = D \left\{ 2T \sum_n \left[(1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_2}{2} + \beta \frac{F_3}{3} \right] \right\} + D T^2 \left\{ \sum_n (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{\partial F_2}{2 \partial T} + \frac{k_o}{\epsilon_g} \frac{F_3}{3} + \beta \frac{\partial F_3}{3 \partial T} \right\}$$

$$\frac{\partial F_n(\eta)}{\partial T} = - \frac{n\eta}{T} F_{n-1}(\eta) \quad 98$$

$$\frac{\partial F_1(\eta)}{\partial T} = -\frac{\eta}{T} F_{1-1}(\eta) = -\frac{\eta}{T} F_0(\eta) \quad 99$$

$$\frac{\partial F_2(\eta)}{\partial T} = -\frac{2\eta}{T} F_{2-1}(\eta) = -\frac{2\eta}{T} F_1(\eta) \quad 100$$

$$\frac{\partial F_3(\eta)}{\partial T} = -\frac{2\eta}{T} F_{3-1}(\eta) = -\frac{3\eta}{T} F_2(\eta) \quad 101$$

(100) ve (101) türetilmeleri (97)de yerine yazılır;

$$S = D \left\{ 2T \sum_n \left[(1 + 2\beta \epsilon_1^*) \frac{F_2}{2} + \beta \frac{F_3}{3} \right] \right\} + DT^2 \left\{ \sum_n (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \left(-\frac{\eta F_1}{T} \right) + \frac{k_o}{\epsilon_g} \frac{F_3}{3} - \beta \frac{\eta F_3}{T} \right\}$$

gerekli sadeleştirmelerden sonra

$$S = \frac{mk_o^2 T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) [F_2 - \eta F_1] + \beta [F_3 - \eta F_2] \} \quad 102$$

genel entropiye ulaşılır.

3.2.2.3. Isı Sığası(C_v)

Isı sığası ve entropi

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\zeta, V}, \quad C_v = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\zeta, V} \quad 103$$

tanımlanır.

$$S = \frac{mk_o^2 T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) [F_2 - \eta F_1] + \beta [F_3 - \eta F_2] \} \quad 102$$

Entropi denklemi için bulunan (102) ifadesinin sıcaklığa göre türevi alınır,

$$\frac{\partial S}{\partial T} = D \left\{ \sum_n \left\{ (1 + 2\beta\epsilon_1^*) [F_2 - \eta F_1] + \beta [F_3 - \eta F_2] \right\} + T \left[(1 + 2\beta\epsilon_1^*) \left[\frac{\partial F_2}{\partial T} + \frac{\eta}{T} F_1 - \eta \frac{\partial F_1}{\partial T} \right] + \frac{k_o}{\epsilon_g} (F_3 - \eta F_2) + \beta \left[\frac{\partial F_3}{\partial T} + \frac{\eta}{T} F_2 - \eta \frac{\partial F_2}{\partial T} \right] \right] \right\} \quad 104$$

(99-101) dönüşümleri (104)de yerleştirilir,

$$\frac{\partial S}{\partial T} = D \left\{ \sum \left\{ (1 + 2\beta\epsilon_1^*) [F_2 - \eta F_1] + \beta [F_1 - \eta F_2] + (1 + 2\beta\epsilon_1^*) \left[-\frac{2\eta F_1 T}{T} + \frac{\eta T F_1}{T} + \frac{\eta^2 T F_o}{T} \right] + \frac{k_o T}{\epsilon_g} (F_3 - \eta F_2) + \beta \left[-\frac{3\eta T F_2}{T} + \frac{\eta T F_2}{T} + \frac{2\eta^2 T F_1}{T} \right] \right\} \right\}$$

uygun kısaltma ve dönüşümler yapılarak

$$\frac{\partial S}{\partial T} = D \sum_n \left\{ (1 + 2\beta\epsilon_1^*) \underbrace{[F_2 - \eta(2F_1 + \eta F_o)]}_{=[F_2 - \eta F_1] - \eta[F_1 - \eta F_o]} + 2\beta \underbrace{[F_3 - \eta(2F_2 + \eta F_1)]}_{=[F_3 - \eta F_2] - \eta[F_2 - \eta F_1]} \right\}$$

Sonuçta C_V

$$C_V = \frac{k_o^2 m T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta\epsilon_1^*) [(F_2 - \eta F_1) - \eta(F_1 - \eta F_o)] + 2\beta [(F_3 - \eta F_2) - \eta(F_2 - \eta F_1)] \right\} \quad 105$$

elde edilir.

(95), (102), (105) kullanılarak, aranan büyüklüklerin ince katın kalınlığına ve diğer fiziksel parametrelere analitik bağlılığını bulmak için dejenere ($\eta \gg 1$) ve non-dejenere ($-\eta \ll 1$) elektron sistemleri halinde keyfi (β), zayıf ($\beta \ll 1$) ve güçlü ($\beta \gg 1$) non-parabolik durumlara ayrıca uygulamak gerekir. Elde edilen ifadelerden non-parabolik enerjili ölçüce kuantlanmış yarıiletkenlerin yeni fiziksel yapısı ve nitelikleri hakkında yeni bilgilere ulaşılır.

3.2.3. DEJENERE HAL($\eta \gg 1$)

3.2.3.1. Yardımcı Fonksiyonlar

$$F_r = \eta^r \left[1 + r(r-1) \frac{\pi^2}{6} \eta^{-2} + \dots \right] \quad 106$$

$$F_0 = 1 \quad 107$$

$$F_1 = \eta \quad 108$$

$$F_2 = \eta^2 + \pi^2/3 \quad 109$$

$$F_3 = \eta^3 + \pi^2 \eta = \eta(\eta^2 + \pi^2) \quad 110$$

$$\eta(n) = \zeta^* - \epsilon_1^* \quad 111$$

3.2.3.2. Konsantrasyon [Dejenere Hal($\eta \gg 1$)]

$$n_{el} = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) F_1(\eta) + \beta F_2(\eta) \right\} \quad 92$$

(107-111) dönüşümleri (92) genel konsantrasyon denkleminde yazarak

$$n_{el} = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \eta + \beta \left(\eta^2 + \frac{\pi^2}{3} \right) \right\}$$

$$n_{el} = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) (\zeta^* - \epsilon_1^*) + \beta (\zeta^* - \epsilon_1^*)^2 + \beta \frac{\pi^2}{3} \right\}$$

toplam içi düzenlendiğinde $\beta \pi^2/3$ terimi ihmal edilir ve $\epsilon_o^* n^2$ terimi de bir eklenir bir çıkarılır,

$$n_{el} = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ \zeta^* + \beta \zeta^{*2} - \epsilon_1^* - \beta \epsilon_1^{*2} + \epsilon_o^* n^2 - \epsilon_o^* n^2 \right\}$$

son düzenleme sonunda

$$n_{el} = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ \zeta^* + \beta \zeta^{*2} - \underbrace{(\beta \epsilon_1^{*2} + \epsilon_1^* - \epsilon_o^* n^2)}_{=0} \epsilon_o^* n^2 \right\}$$

$$n_{el}(\beta, d) = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ \zeta^* + \beta \zeta^{*2} - \epsilon_o^* n^2 \right\} \quad 112$$

(112) denkleminde toplam sona erdirildiğinde

$$n_{el}(\beta, d) = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \left\{ \sum_{n=1}^{\bar{n}} \zeta^* + \beta \sum_{n=1}^{\bar{n}} \zeta^{*2} + \epsilon_o^* \sum_{n=1}^{\bar{n}} n^2 \right\}$$

$$n_{el}(\beta, d) = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \left\{ \zeta^* \bar{n} + \beta \zeta^{*2} \bar{n} - \epsilon_o^* \underbrace{\frac{\bar{n}(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6}}_{n'} \right\}$$

$$n_{el}(\beta, d) = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \bar{n} \left\{ \zeta^* + \beta \zeta^{*2} - \epsilon_o^* n' \right\} \quad 113$$

β nın keyfi değerleri için dejenere halde konsantrasyon denklemi bulunur.

3.2.3.3. Kimyasal Potansiyel [Dejenere Hal($\eta \gg 1$)]

Son ifade düzenlendiğinde Homojen denklemin çözümü kimyasal potansiyeli verir.

$$\frac{n_{el} d \pi \hbar^2}{mk_o T \bar{n}} = \left\{ \zeta^* + \beta \zeta^{*2} - \epsilon_o^* n' \right\} \Rightarrow \beta \zeta^{*2} + \zeta^* - (\epsilon_o^* n' + D_1^*) = 0$$

$$\zeta_{1,2}^* = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4\beta(\epsilon_o^* n' + D_1^*)}}{2\beta} = \frac{1}{2\beta} \left\{ \sqrt{1 + 4\beta(\epsilon_o^* n' + D_1^*)} - 1 \right\}$$

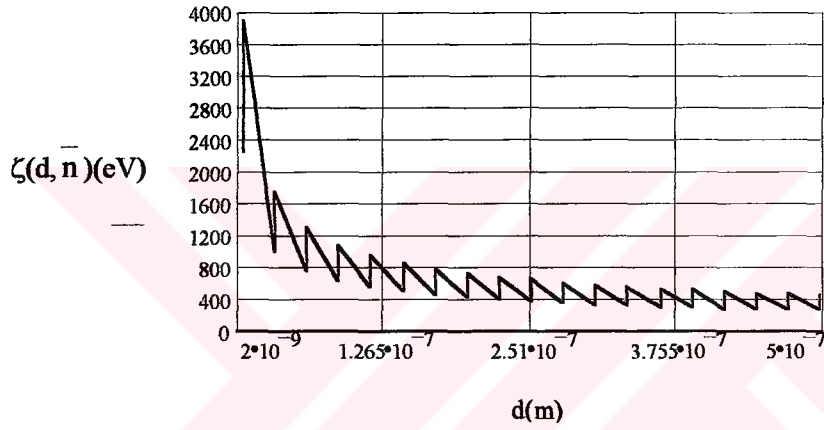
$$D_1^* = \frac{\pi \hbar^2 d n_{el}}{mk_o T \bar{n}} = \epsilon_o^* \frac{2d^3 n_{el}}{\underbrace{\pi \bar{n}}_{D'}}$$

$$\zeta^* = \frac{1}{2\beta} \left\{ \sqrt{1 + 4\beta(\epsilon_o^* n' + \epsilon_o^* D'')} - 1 \right\}$$

son denklem açık olarak yazıldığında

$$\zeta_F = \frac{k_o T}{2\beta} \left\{ \sqrt{1 + 4\beta\epsilon_o^* \left[\frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6} + \frac{2n_{el}d^3}{\pi\bar{n}} \right]} - 1 \right\} \quad 114$$

kimyasal potansiyel veya Fermi enerjisi bulunur.



Şekil-9 Sınır kalınlık değerlerine göre kalınlığın ve ortalama hal sayısının fonksiyonu olarak non-parabolik kimyasal potansiyel- Dejenere Hal

3.2.3.3.1. Kalınlık Sınır değerlerini Belirleyen Eşitsizlikler

(60) denklemi kullanılarak $\beta \gg 1$ için birler ihmal edilir,

$$\frac{\epsilon_1}{k_o T} = \frac{1}{2\beta} \left[\sqrt{1 + 4\beta\epsilon_o^* n^2} - 1 \right]_{\beta \gg 1} \Rightarrow \frac{\epsilon_1}{k_o T} = \frac{1}{2\beta} \left[\sqrt{4\beta\epsilon_o^* n^2} \right] = \sqrt{\frac{4\beta\epsilon_o^* n^2}{4\beta^2}}$$

$$\frac{\epsilon_1}{k_o T} = \sqrt{\frac{\epsilon_o^*}{\beta}} n = \sqrt{\frac{\epsilon_o \epsilon_g}{(k_o T)^2}} n = \sqrt{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \epsilon_g} n = \frac{\pi \hbar}{k_o T d} \sqrt{\frac{\epsilon_g}{2m}} n = \frac{\pi \hbar s}{k_o T} n$$

$$1 \leq \frac{\varepsilon_1}{k_o T} = \frac{\pi \hbar s}{k_o T d}$$

$$k_o T \leq \frac{\pi \hbar s}{d}$$

115

dejenerelik şartı kullanılarak(114), (60) denklemlerini son eşitlikte yazılır, $\bar{n} = n = 1$ alınır

$$\zeta - \varepsilon_1 \gg k_o T \Rightarrow \zeta^* - \varepsilon_1^* \gg 1 \Rightarrow \zeta^* \gg \varepsilon_1^* + 1$$

$$\frac{1}{2\beta} \left\{ \sqrt{1 + 4\beta \varepsilon_o^* \left[\frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6} + \frac{2n_{el} d^3}{\pi \bar{n}} \right]} \right\} - \frac{1}{2\beta} \gg \frac{1}{2\beta} \sqrt{1 + 4\beta \varepsilon_o^* n^2} - \frac{1}{2\beta} + 1 \quad 116$$

$$\left\{ \sqrt{1 + 4\beta \varepsilon_o^* \left[\frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6} + \frac{2n_{el} d^3}{\pi \bar{n}} \right]} \right\} - \sqrt{1 + 4\beta \varepsilon_o^* n^2} \gg 2\beta$$

$$\sqrt{1 + 4\beta \varepsilon_o^* \left(1 + \frac{2n_{el} d^3}{\pi} \right)} - \sqrt{1 + 4\beta \varepsilon_o^*} \gg 2\beta$$

$\beta \gg 1$ için son denklem içindeki bir ihmal edilir

$$\sqrt{4\beta \varepsilon_o^* \left(1 + \frac{2n_{el} d^3}{\pi} \right)} - \sqrt{4\beta \varepsilon_o^*} = \sqrt{4\beta \varepsilon_o^*} \left[\sqrt{\left(1 + \frac{2n_{el} d^3}{\pi} \right)} - 1 \right] \gg 2\beta$$

$$\sqrt{1 + \frac{2n_{el} d^3}{\pi}} - 1 \gg \sqrt{\frac{\beta}{\varepsilon_o^*}} = \frac{k_o T}{\sqrt{\varepsilon_o \varepsilon_g}}$$

soldaki kök ifadesi Binom Serisine açılarak

$$\sqrt{1 + \frac{2n_{el} d^3}{\pi}} - 1 \gg \frac{k_o T}{\sqrt{\varepsilon_o \varepsilon_g}} \Rightarrow 1 + \frac{n_{el} d^3}{\pi} - 1 \gg \frac{k_o T}{\sqrt{\varepsilon_o \varepsilon_g}}$$

$$\frac{n_{el}d^3}{\pi} \gg \frac{k_o T}{\sqrt{\epsilon_o \epsilon_g}} = \frac{k_o T}{\underbrace{\sqrt{\frac{\epsilon_g}{2m}}}_{s} \sqrt{\frac{\pi^2 \hbar^2}{d^2}}} = \frac{k_o T d}{\pi \hbar s} \Rightarrow n_{el} d^2 \gg \frac{k_o T}{\hbar s} \Rightarrow \frac{k_o T}{\hbar n_{el} d^2 s} \gg 1$$

Uygun sıcaklık ve konsantrasyon için bu eşitsizlik geçerlidir. Dejenerelik sınırlarını birleştirerek kalınlık için

$$\frac{k_o T}{\hbar n_{el} s} \gg d^2 \Rightarrow \sqrt{\frac{k_o T}{\hbar n_{el} s}} \gg d \quad 117$$

$$d \leq \frac{\pi \hbar s}{k_o T} \quad 118$$

$$\sqrt{\frac{k_o T}{\hbar n_{el} s}} \ll d \leq \frac{\pi \hbar s}{k_o T} \quad 119$$

eşitsizliği bulunur. Alt ve üst sınır değerleri bazı sıcaklık ve konsantrasyon değerleri için çizelge-3 de verilmiştir.

Çizelge-3 Sınır kalınlık eşitsizliğinden bulunan kalınlık değerleri^{III}.

$\sqrt{\frac{k_o T}{\hbar n_{el} s}} \ll d \leq \frac{\pi \hbar s}{k_o T}$			
$n_{el}=1 \times 10^{16} m^{-3}$	$6.827 \times 10^{-6} m.$	d	$6.741 \times 10^{-6} m.$
$n_{el}=1 \times 10^{18} m^{-3}$	$6.827 \times 10^{-7} m.$	d	$6.741 \times 10^{-6} m.$
$n_{el}=1 \times 10^{20} m^{-3}$	$6.827 \times 10^{-8} m.$	d	$6.741 \times 10^{-6} m.$
$n_{el}=1 \times 10^{22} m^{-3}$	$6.827 \times 10^{-9} m.$	d	$6.741 \times 10^{-6} m.$
$T=4K^\circ ; m^*=0.016m_o ; m_o=9.109 \times 10^{-31} kg. ; \hbar=6.626 \times 10^{-34} J.sn. ; k_o=1.381 \times 10^{-23} J/K^\circ. ; s=1.124 \times 10^{-6} m/sn$			

^{III} Çizelge-3 deki veriler sonraki hesaplamalarda da kullanılacaktır ve hesaplamalar için MKS sistemi baz alınacaktır.

3.2.3.3.2. Fermi Seviyesi Altındaki Alt Bandların Tam Sayısı $[(\bar{n})]$

$$\zeta_F = \frac{k_o T}{2\beta} \left\{ \sqrt{1 + 4\beta\epsilon_o^* \left[\frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6} + \frac{2n_{el}d^3}{\pi\bar{n}} \right]} - 1 \right\} \quad 114$$

Ortalama hal sayısını; (114) Fermi enerjisiyle, enerjinin eşit olduğunda durumda bulmak mümkündür.

$$\zeta_F = \epsilon_1(\bar{n}) \Rightarrow \zeta_F = \epsilon_1(\bar{n}) = \frac{k_o T}{2\beta} \left\{ \sqrt{1 + 4\beta\epsilon_o^*(\bar{n})^2} - 1 \right\}$$

Eşitliğin her iki tarafının karesi alınarak

$$\frac{\zeta_F 2\beta}{k_o T} + 1 = \left\{ \sqrt{1 + 4\beta\epsilon_o^*(\bar{n})^2} \right\} \Rightarrow \left(\frac{\zeta_F 2\beta}{k_o T} + 1 \right)^2 = \left(\sqrt{1 + 4\beta\epsilon_o^*(\bar{n})^2} \right)^2 = 1 + 4\beta_o^* \bar{n}^2$$

$$\left(\frac{\zeta_F 2\beta}{k_o T} + 1 \right)^2 - 1 = 4\beta\epsilon_o^*(\bar{n})^2 \Rightarrow (\bar{n})^2 = \frac{\left(\frac{\zeta_F 2\beta}{k_o T} + 1 \right)^2 - 1}{4\beta\epsilon_o^*}$$

son denklem $a^2 - b^2 = (a+b)(a-b)$ tipinde yazılarak aşağıdaki son ifadeye ulaşılır.

$$\sqrt{(\bar{n})^2} = \sqrt{\frac{\zeta_F}{\epsilon_o} \left(\frac{\zeta_F}{\epsilon_g} + 1 \right)}$$

$$\bar{n} = \sqrt{\frac{\zeta_F}{\epsilon_o} \left(1 + \frac{\zeta_F}{\epsilon_g} \right)}$$

120

3.2.3.3.3. Kalınlığın Ortalama Hal Sayısına Bağlılığı (d_n)

(60) ve (114) denklemleri eşitlendiğinde $\zeta_F = \epsilon_1(\bar{n})$ d_n bulunur.

$$\frac{k_o T}{2\beta} \left\{ \sqrt{1 + 4\beta \epsilon_o^* \left[\frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6} + \frac{2n_{el} d^3}{\pi \bar{n}} \right]} - 1 \right\} = \frac{k_o T}{2\beta} \left\{ \sqrt{1 + 4\beta \epsilon_o^* \bar{n}^{-2}} - 1 \right\}$$

gerekli kısaltmalardan sonra

$$\left[\frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6} + \frac{2n_{el} d^3}{\pi \bar{n}} \right] = \bar{n}^{-2} \Rightarrow d^3 = \frac{\pi}{2n_{el}} \bar{n} \left[\bar{n}^{-2} + \frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6} \right]$$

$$d_{\bar{n}} = \underbrace{\left(\frac{\pi}{2n_{el}} \right)}_{d_o} \bar{n} \left[1 + \frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6\bar{n}^2} \right]^{1/3}$$

$$d_{\bar{n}} = d_o \bar{n} \left[1 - \frac{(\bar{n}+1)(2\bar{n}+1)}{6\bar{n}^2} \right]^{1/3}$$

43

elde edilir(Askerov, 1994).

3.2.3.3.4. Maximum Kalınlık

$\bar{n}$ nın verilen değerinde (Fermi seviyesi her hangi bir levha seviyesi ile çakıştığında) kalınlık azaldıkça aranılan termodinamik tanımların değeri artar. Fakat, d azaldıkça komşu alt enerji seviyeleri arasındaki enerjetik mesafe de artar ve ne zaman ki bir sonraki alt enerji seviyesi Fermi seviyesini geçer, bu halde, $\bar{n}$ bir sayı azalır. Kalınlığın sonraki azalması yeniden komşu alt seviyelerden birinin Fermi seviyesi ile çakışmasına ve $\bar{n}$ nın tekrar bir sayı azalmasına kadar aranılan termodinamik tanımların değerinin artmasına neden olur. Şu halde d nin azalması ile tekrarlanan bu süreç ζ_F den aşağıda bir alt enerji seviyesi kalana kadar sürecektir. Böylece, d nin azalması ile dejenere elektron gazlı ince katın aranılan termodinamik tanımları non-monoton değişir. Termodinamik(konsantrasyon, entropi, ısı sığası) tanımlar maksimum değerini alt enerji seviyelerinden biri Fermi sınır enerjisi ile kesiştiğinde, yani $\zeta_F(d_{\bar{n}}) = \epsilon_1(\bar{n})$ şartı sağlandığında alır. Bu şarttan ve (114) den yararlanırsak Fermi enerjisinin (veya konsantrasyonun)

verilen değerde kalınlığın aranılan termodinamik ifadeleri maksimum yapan kalınlık değeri bulunur.

Max. kalınlık $\zeta_F(d_n^-) = \epsilon_1(\bar{n})$ şartından bulunur,

$$\bar{n} = \sqrt{\frac{\zeta_F}{\epsilon_o} \left(1 + \frac{\zeta_F}{\epsilon_g} \right)} \quad 121$$

$$\bar{n} = \sqrt{\frac{\zeta_F}{\epsilon_o} \left(1 + \frac{\zeta_F}{\epsilon_g} \right)} \Rightarrow (\bar{n})^2 = \frac{\zeta_F}{\epsilon_o} \left(1 + \frac{\zeta_F}{\epsilon_g} \right)$$

ϵ_o enerjisi açık olarak yazılır ve

$$(\bar{n})^2 = \frac{\zeta_F}{\pi^2 \hbar^2} \left(1 + \frac{\zeta_F}{\epsilon_g} \right) = \frac{2m\zeta_F d_{\max}^2}{\pi^2 \hbar^2} \left(1 + \frac{\zeta_F}{\epsilon_g} \right)$$

Her iki tarafın karekökü alınarak

$$\sqrt{\frac{(\bar{n})^2 \pi^2 \hbar^2}{2m\zeta_F \left(1 + \frac{\zeta_F}{\epsilon_g} \right)}} = \sqrt{d_{\max}^2}$$

$$d_{\max} = \frac{\pi \hbar}{\sqrt{2m\zeta_F \left(1 + \frac{\zeta_F}{\epsilon_g} \right)}} \bar{n} \quad 122$$

aranılan maksimum kalınlık denklemi bulunur.

3.2.3.4. Entropi [Dejenere Hal($\eta \gg 1$)]

(107-111) ifadeleri genel entropi denkleminde yazılır,

$$S(\beta, d) = \frac{k_o^2 T m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \underbrace{[F_2 - \eta F_1]}_{\pi^2/3} + \beta \underbrace{[F_3 - \beta F_2]}_{(2/3)\pi^2 \eta} \right\}$$

(111) kısaltması entropide yazılarak sadeleştirilir,

$$S(\beta, d) = \frac{k_o^2 T m}{\pi \hbar^2 d} \sum_{n=1}^{\bar{n}} \left(\frac{\pi^2}{3} + \frac{\pi^2}{3} 2\beta \zeta^* \right) \quad 123$$

toplama işlemini sona erdirerek

$$S(\beta, d) = \frac{k_o^2 T m}{\pi \hbar^2 d} \bar{n} \left(\frac{\pi^2}{3} + \frac{\pi^2}{3} 2\beta \frac{\zeta}{k_o T} \right)$$

$$S(\beta, d) = \frac{k_o^2 T m \pi}{3 \hbar^2 d} \left(1 + 2\beta \frac{\zeta}{k_o T} \right) \bar{n} \quad 124$$

sonucu bulunur. Bu ifadede β 'a orantılı terim enerji spektrumunun non-parabolikliğine bağlıdır. $\beta \rightarrow 0$, $\epsilon_g \rightarrow \infty$ için parabolik, $\beta \rightarrow 1$, $\epsilon_g \rightarrow 0$ için güçlü non-paraboliktir (Şekil-11).

3.2.3.5. Isı Sığası [Dejenere Hal($\eta \gg 1$)]

(107-111) dönüşümleri (105)de yazılarak sadeleştirilir,

$$C_v = \frac{k_o^2 m T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \left[\underbrace{(F_2 - \eta F_1)}_{=(1/3)\pi^2} - \underbrace{\eta(F_1 - F_o)}_{=0} \right] + 2\beta \left[\underbrace{(F_3 - \eta F_2)}_{=(2/3)\pi^2 \eta} - \underbrace{\eta(F_2 - \eta F_1)}_{=(1/3)\pi^2 \eta} \right] \right\}$$

$$C_v = \frac{k_o^2 m T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ \frac{\pi^2}{3} + \frac{2}{3} \pi^2 \beta \epsilon_1^* + \frac{2}{3} \beta \pi^2 \eta \right\} \quad 125$$

$\eta = \zeta^* - \varepsilon_1^*$ ifadesini (125)de yazarak

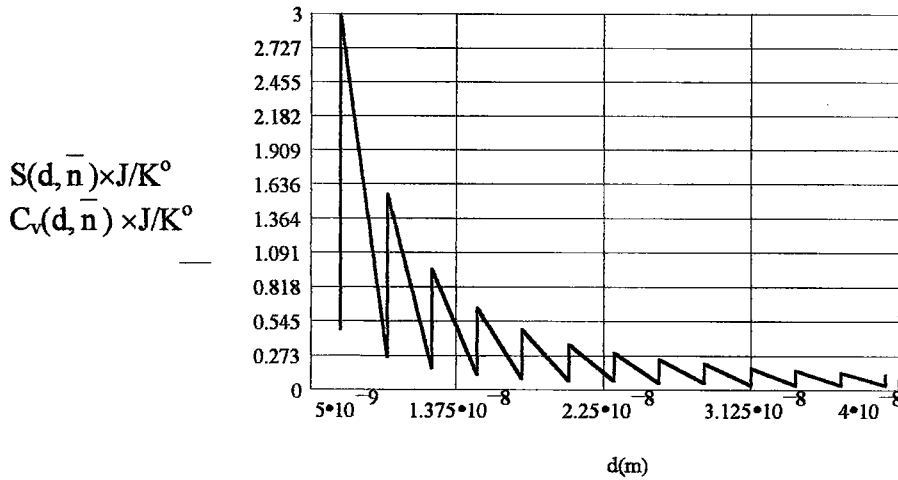
$$C_v(\beta, d) = \frac{k_o^2 m T}{\pi \hbar^2 d} \frac{\pi^2}{3} \sum_{n=1}^{\bar{n}} \left(1 + 2\beta \frac{\zeta}{k_o T} \right) \quad 126$$

Toplama işlemi sona erdirilir,

$$C_v(\beta, d) = \frac{k_o^2 m T \pi}{3 \hbar^2 d} \left(1 + 2\beta \frac{\zeta}{k_o T} \right) \bar{n} \quad 127$$

β nın keyfi durumu için son formüle ulaşılır(Şekil-11).

Dejenere halde entropi ve ısı sığası grafiklerinin kesikli(testere dişli) şekil almasından non-parabolik Kane yaklaşımı sonucunda Gibbs yönteminden elde edilen denklemlerin ölçü kuantlanması sağladığı görülür. Dikkat edilmesi gereken sonuç; entropi ve ısı sığasının birbirine eşit olmasıdır. Entropi ve ısı sığasının büyüklüğü ortalama hal sayısının artmasıyla yükselir, ancak kalınlığın artmasıyla keskin bir düşüş göstererek, ortalama hal sayısının bir sayı eksildiği kalınlık değerinde yeniden yükselir. Kalınlığın artmasıyla tekrar azalır. Bu durum dejenere halde ölçü kuantlanmasının karakteristik bir sonucudur.



Şekil-10 Sınır kalınlık değerlerine göre kalınlığın ve ortalama hal sayısının fonksiyonu olarak entropi ve ısı sığası. Dejenere-Hal.

3.2.4. Non-Dejenere Hal(-η>>1)

3.2.4.1. Yardımcı Fonksiyonlar

3.2.4.1.1. F ve Θ Fonksiyonları

$$F_r(\eta) = e^\eta \Gamma(r+1) \quad 128$$

$$\Gamma(r+1) = (r-1)! \quad 129$$

$$F_0(\eta) = e^\eta \quad 130$$

$$F_1(\eta) = e^\eta \quad 131$$

$$F_2(\eta) = 2e^\eta \quad 132$$

$$F_3(\eta) = 6e^\eta \quad 133$$

3.2.4.1.2. Teta Fonksiyonunun Toplama Biçimi

$$\Theta(v_1) = \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} \quad 46$$

(46) eşitliği parçalara ayrılarak

$$\Theta(v_1) = \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} = \sum_{n=-\infty}^0 e^{-\pi v_1 n^2} + \sum_1^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2}$$

$$\Theta(v_1) = \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} = \sum_0^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} + \sum_1^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} \quad n=0 \text{ için}$$

$$\Theta(v_1) = 1 + \sum_1^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} + \sum_1^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2}$$

$$\Theta(v_1) = 1 + 2 \sum_1^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2}$$

düzenlendikten sonra

$$\sum_1^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} = \frac{1}{2} [\Theta(v_1) - 1] \quad 134$$

fonksiyonu bulunur.

3.2.4.1.3. Teta Fonksiyonunun Türevi

$$\frac{\partial}{\partial v_1} \left(\sum_1^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_1} [\Theta(v_1) - 1]$$

$$\pi \left(\sum_1^{\infty} n^2 e^{-\pi v_1 n^2} \right) = -\frac{1}{2} \Theta'(v_1) \Rightarrow 1.\text{türev} \quad 135$$

$$\pi^2 \left(\sum_1^{\infty} n^4 e^{-\pi v_1 n^2} \right) = \frac{1}{2} \Theta''(v_1) \Rightarrow 2.\text{türev} \quad 136$$

$$\pi^3 \left(\sum_1^{\infty} n^6 e^{-\pi v_1 n^2} \right) = -\frac{1}{2} \Theta'''(v_1) \Rightarrow 3.\text{türev} \quad 137$$

3.2.4.2. Zayıf Non-Parabolik Durum ($\beta \ll 1$) [Non-Dejenere Hal],

3.2.4.2.1. Konsantrasyon [Non-Dejenere Hal ($-\eta \gg 1$), Zayıf Non-Parabolik Durum ($\beta \ll 1$)]

F_1 ve F_2 ifadelerini (92)de yazılır,

$$n_{el} = \frac{mk_o T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) e^n + 2\beta e^n \right\}$$

$\eta = \zeta^* - \epsilon_1^*(n)$ denklemini kullanılarak ,

$$n_{el} = D'e^{\zeta^*} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta\epsilon_1^*)e^{-\epsilon_1^*} + 2\beta e^{-\epsilon_1^*} \right\}$$

toplam kısmını açılır,

$$n_{el} = D'e^{\zeta^*} \left\{ (1 + 2\beta) \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\epsilon_1^*} + 2\beta \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon_1^* e^{-\epsilon_1^*} \right\}$$

ϵ_1^* , v_1 cinsinden yazılarak

$$\pi v_1 = \frac{\epsilon_o}{k_o T} = \epsilon_o^* \quad 138$$

$$\epsilon_1^* = \epsilon_o n^2 \Rightarrow \epsilon_1^* = \pi v_1 n^2 \quad 139$$

(139) konsantrasyon denkleminde yazılır,

$$n_{el} = D'e^{\zeta^*} \left\{ (1 + 2\beta) \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\epsilon_1^*} + 2\beta \sum_{n=1}^{\infty} v_1 \pi n^2 e^{-\epsilon_1^*} \right\}$$

$\Theta(v_1)$ fonksiyonu cinsinden ifade edilerek, $(\Theta-1)/(\Theta-1)$ denklemin sağ tarafı çarpılır,

$$n_{el} = D'e^{\zeta^*} \frac{1}{2} \left\{ (1 + 2\beta) [\Theta(v_1) - 1] - 2\beta v_1 \Theta'(v_1) \right\} \quad 140$$

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^*} (\Theta - 1)}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ (1 + 2\beta) - \frac{2\beta v_1 \Theta'(v_1)}{\Theta - 1} \right\} \quad 141$$

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^*} (\Theta - 1)}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ 1 + 2\beta \left(1 - \frac{v_1 \Theta'(v_1)}{\Theta - 1} \right) \right\} \quad 142$$

elde edilir.

3.2.4.2.2. Konsantrasyon [NDH(-η>>1), ZNPD(β=0)]

β=0 için (142) denklemi incelendiğinde;

$$n_{el} = \frac{mk_o Te^{\zeta^*} (\Theta - 1)}{2\pi\hbar^2 d} \left\{ 1 + 2.0 \left(1 - \frac{v_1 \Theta'(v_1)}{\Theta - 1} \right) \right\}$$

$$n_{el} = \frac{mk_o Te^{\zeta^*}}{2\pi\hbar^2 d} \{\Theta - 1\} \quad 143$$

non-dejenere halde zayıf non-parabolik durumda konsantrasyon ifadesi bulunur(Askerov, 1994).

3.2.4.2.3. Entropi [Non-Dejenere Hal(-η>>1), Zayıf Non-Parabolik Durum(β<<1)]

(129-132, 111) ifadeleri (102)de yazılır ve sadeleştirmelerden sonra

$$S = \underbrace{\frac{mk_o^2 T}{\pi\hbar^2 d}}_{=D'} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta\epsilon_1^*) \underbrace{[F_2 - \eta F_1]}_{=E^\eta(2-\eta)} + \beta \underbrace{[F_3 - \eta F_2]}_{=2\beta E^\eta(3-\eta)} \right\}$$

$$S = D'e^{\zeta^*} \sum \left\{ \underbrace{2 + 6\beta - (1 + 2\beta)\zeta^*}_A + \underbrace{(1 + 6\beta - 2\beta\zeta^*)\epsilon_1^*}_C + \underbrace{2\beta\epsilon_1^*}_E \right\} e^{-\epsilon_1^*}$$

toplama kısmını açılarak

$$S = D'e^{\zeta^*} \left\{ A \sum_1^\infty e^{-\epsilon_1^*} + C \sum_1^\infty \epsilon_1^* e^{-\epsilon_1^*} + E \sum_1^\infty \epsilon_1^{*2} e^{-\epsilon_1^*} \right\} \quad 144$$

$\epsilon_1^* = \pi v_1 n^2$ enerjisi (144)de yazılarak

$$S = D'e^{\zeta^*} \left\{ A \sum_1^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} + C \sum_1^{\infty} \pi v_1 n^2 e^{-\pi v_1 n^2} + E \sum_1^{\infty} \pi^2 v_1^2 n^4 e^{-\pi v_1 n^2} \right\} \quad 145$$

Teta ve türev eşitlikleri kullanılır,

$$S = D'e^{\zeta^*} \left\{ A \frac{1}{2} [\Theta(v_1) - 1] - C \frac{1}{2} v_1 \Theta'(v_1) + E \frac{1}{2} v_1^2 \Theta'' \right\}$$

$$S = \frac{D'e^{\zeta^*}}{2} \left\{ (2 + 2\beta - (1 + 2\beta)\zeta^*)[\Theta - 1] - (1 + 6\beta - 2\beta\zeta^*)v_1 \Theta' + 2\beta v_1^2 \Theta'' \right\} \quad 146$$

$(\Theta-1)/(\Theta-1)$ ile çarpıldığında,

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*} (\Theta - 1)}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ (2 + 2\beta - (1 + 2\beta)\zeta^*) - \frac{(1 + 6\beta - 2\beta\zeta^*)v_1 \Theta'}{\Theta - 1} + \frac{2\beta v_1^2 \Theta''}{\Theta - 1} \right\} \quad 147$$

non-dejenere halde zayıf non-parabolik durumda entropi ifadesi bulunur.

3.2.4.2.4. Entropi [NDH($-\eta \gg 1$), ZNPD($\beta=0$)]

$\beta=0$ için (147) denklemi incelendiğinde,

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*} (\Theta - 1)}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ (2 + 2.0 - (1 + 2.0)\zeta^*) - \frac{(1 + 6.0 - 2.0\zeta^*)v_1 \Theta'(v_1)}{\Theta - 1} + \frac{2.0.v_1^2 \Theta''}{\Theta - 1} \right\}$$

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*} (\Theta - 1)}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ 2 - \zeta^* - \frac{v_1 \Theta'(v_1)}{\Theta - 1} \right\} \quad 148$$

(148) denklemi zayıf non-parabolik durum için entropi ifadesidir.

3.2.4.2.5. Isı Sığası [Non-Dejenere Hal(-η>>1), Zayıf Non-Parabolik Durum(β<<1)]

(105) denkleminde (130, 132) ifadeleri yazılarak

$$C_v = \frac{k_o^2 m T}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) \left[\underbrace{(F_2 - \eta F_1)}_{=e^\eta(2-\eta)} - \underbrace{\eta(F_1 - \eta F_0)}_{=e^\eta(1-\eta)} \right] + 2\beta \left[\underbrace{(F_3 - \eta F_2)}_{=e^\eta(6-2\eta)} - \underbrace{\eta(F_2 - \eta F_1)}_{=e^\eta(2-\eta)} \right] \right\}$$

son düzeltmelerden sonra

$$C_v = D' \sum_n \left\{ (1 + 2\beta \epsilon_1^*) [2 - 2\eta + \eta^2] + 2\beta [6 - 4\eta + \eta^2] \right\} e^\eta$$

elde edilir, (111) eşitliği son denklemde yerine yazılır,

$$C_v = D' e^{\zeta^*} \sum_n \left\{ \underbrace{2 + 12\beta - 2(1 + 4\beta)\zeta^* + (1 + 2\beta)\zeta^{*2}}_p + \underbrace{[2 + 12\beta - 2(1 + 4\beta)\zeta^* + 2\beta\zeta^{*2}]\epsilon_1^*}_q + \underbrace{[1 + 4\beta(1 - \zeta^*) + 2\beta]\epsilon_1^{*2}}_r + \underbrace{2\beta\epsilon_1^{*3}}_t \right\} e^{-\epsilon_1^*}$$

$$C_v = D' e^{\zeta^*} \left\{ p \sum_n e^{-\epsilon_1^*} + q \sum_n \epsilon_1^* e^{-\epsilon_1^*} + r \sum_n \epsilon_1^{*2} e^{-\epsilon_1^*} + t \sum_n \epsilon_1^{*3} e^{-\epsilon_1^*} \right\} e^{-\epsilon_1^*}$$

$\epsilon_1^* = \pi v_1 n^2$ ve teta türevleri eşitliğe eklenerek Θ fonksiyonu cinsinden ifade edilir,

$$C_v = D' e^{\zeta^*} \left\{ p \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\pi v_1 n^2} + r \sum_{n=1}^{\infty} \pi v_1 n^2 e^{-\pi v_1 n^2} + s \sum_{n=1}^{\infty} \pi^2 v_1^2 n^4 e^{-\pi v_1 n^2} + t \sum_{n=1}^{\infty} \pi^4 v_1^4 n^6 e^{-\pi v_1 n^2} \right\}$$

$$C_v = D' e^{\zeta^*} \left\{ p \frac{1}{2} (\Theta - 1) - r \frac{1}{2} v_1 \Theta' + s \frac{1}{2} v_1^2 \Theta'' - t \frac{1}{2} v_1^3 \Theta''' \right\}$$

$(\Theta-1)/(\Theta-1)$ ile denklemin sağ tarafı çarpılır ve çarpanlar yazılarak

$$C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*} (\Theta-1)}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ [2 + 12\beta - (2 + 8\beta)\zeta^* + (1 + 2\beta)\zeta^{*2}] - \right. \\ \left. - \frac{2[1 + 6\beta - (1 + 4\beta)\zeta^* + \beta\zeta^{*2}]\nu_1 \Theta'}{\Theta-1} + \right. \\ \left. + \frac{[1 + 2\beta + 4\beta(1 + \zeta^*)]\nu_1^2 \Theta''}{\Theta-1} - \frac{2\beta\nu_1^3 \Theta'''}{\Theta-1} \right\} \quad 149$$

non-dejenere halde zayıf non-parabolik durumda için ısı sığası bulunur.

3.2.4.2.6. Isı Sığası [NDH($-\eta \gg 1$), ZNPD($\beta=0$)]

$\beta=0$ için ısı sığasını bulalım,

$$C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*} (\Theta-1)}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ [2 + 12.0 - (2 + 8.0)\zeta^* + (1 + 2.0)\zeta^{*2}] - \right. \\ \left. - \frac{2[1 + 6.0 - (1 + 4.0)\zeta^* + 0.\zeta^{*2}]\nu_1 \Theta'}{\Theta-1} + \right. \\ \left. + \frac{[1 + 2.0 + 4.0.(1 + \zeta^*)]\nu_1^2 \Theta''}{\Theta-1} - \frac{2.0.\nu_1^3 \Theta'''}{\Theta-1} \right\} \\ C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*} (\Theta-1)}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] - \frac{2[1 - \zeta^*]\nu_1 \Theta'}{\Theta-1} + \frac{\nu_1^2 \Theta''}{\Theta-1} \right\} \quad 150$$

(150) denklemi zayıf non-parabolik durumda ısı sığasına karşılık gelir.

3.2.4.3. Aşırı İnce Film [Non-Dejenere Hal($v_1 \gg 1$), Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

3.2.4.3.1.0. $\Theta(v_1)$ Fonksiyonunun Türevleri

$$\Theta(v_1) \big|_{v_1 \gg 1} \cong 1 + 2e^{-\pi v_1} \quad 47$$

$$\Theta'(v_1) \big|_{v_1 \gg 1} \cong -2\pi e^{-\pi v_1} \quad 151$$

$$\Theta''(v_1) \big|_{v_1 \gg 1} \cong 2\pi^2 e^{-\pi v_1} \quad 152$$

$$\Theta'''(v_1) \big|_{v_1 \gg 1} \cong -2\pi^3 e^{-\pi v_1} \quad 153$$

3.2.4.3.2.1. Konsantrasyon [Aşırı İnce Film ($v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(47,151-153) fonksiyonları (142)de yazılarak Θ fonksiyonu ve türevi cinsinden ifade edilir, Θ fonksiyonu açık olarak denklemde yazılır, enerjiye bağlı olarak ifade edilir,

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^*}}{2\pi \hbar^2 d} \{ \Theta - 1 + 2\beta [\Theta - 1 + v_1 \Theta'] \}$$

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^*} e^{-\pi v_1}}{2\pi \hbar^2 d} 2 \{ (1 + 2\beta) - 2\beta v_1 \pi \}$$

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^* - \epsilon_o^*}}{\pi \hbar^2 d} \{ (1 + 2\beta) - 2\beta \epsilon_o^* \} \quad 154$$

aşırıince film durumunda konsantrasyon için son denklem bulunur.

3.2.4.3.2.2. Kimyasal Potansiyel [Aşırı İnce Film($v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

Son denklem aşağıdaki biçimde düzenlenerek

$$e^{(\zeta^* - \varepsilon_o^*)} = \frac{\pi \hbar^2 dn_{el}}{mk_o T [(1 + 2\beta) - 2\beta \varepsilon_o^*]} \quad 155$$

elde edilir. (155) denkleminin logaritması(ln) alınarak

$$\ln e^{(\zeta^* - \varepsilon_o^*)} = \ln \frac{\pi \hbar^2 dn_{el}}{mk_o T [(1 + 2\beta) - 2\beta \varepsilon_o^*]} \quad 156$$

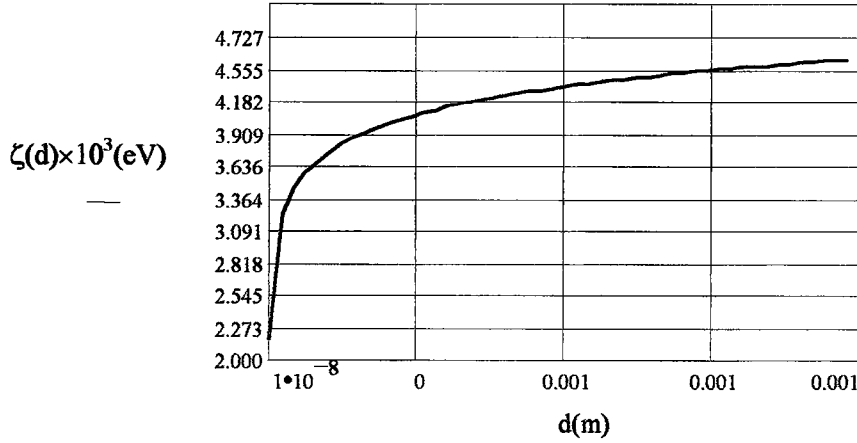
β cinsinden kimyasal potansiyel bulunur.

3.2.4.3.2.3. Kimyasal Potansiyel [AİF($v_1 \gg 1$), NDH, ZNPD, $\beta=0$]

Son ifade non-dejenere halde zayıf non-paraboliklik durumunda kimyasal potansiyeldir. Bu denklemden $\beta=0$ için non-dejenere elektron gazlı ince kattaki parabolik enerji spektrumlu (48)ifadesine ulaşılır(Şekik-11)(Askerov, 1994).

$$\zeta(d) = \varepsilon_o + k_o T \ln \left[\frac{\pi \hbar^2 dn_{el}}{mk_o T [(1 + 2.0) - 2.0 \varepsilon_o^*]} \right]$$

$$\zeta(d) = \varepsilon_o + k_o T \ln \left[\frac{\pi \hbar^2 dn_{el}}{mk_o T} \right] \quad 48$$



Şekil-11 Aşırıince film için kalınlığın fonksiyonu olarak kimyasal potansiyel- Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22}m^{-3}$

3.2.4.3.3.1. Entropi [Aşırı İnce Film ($v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal, Zayıf

Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(151-153) fonksiyonları (147) denkleminde yazılarak

$$S(\beta, d) = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^* - \epsilon_o^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ (2 + 2\beta - (1 + 2\beta)\zeta^*) + (1 + 6\beta - 2\beta\zeta^*)\epsilon_o^* + 2\beta\epsilon_o^{*2} \right\} \quad 157$$

aşırıince film için entropi denklemi β cinsinden bulunur.

3.2.4.3.3.2. Entropi [AİF($v_1 \gg 1$), NDH, ZNPD($\beta=0$)]

Son ifade non-dejenere halde zayıf non-paraboliklik durumunda kimyasal potansiyele bağlı entropidir. Bu denklemden $\beta=0$ için non-dejenere elektron gazlı aşırı ince kattaki parabolik enerji spektrumlu ifadeye ulaşılır.

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^* - \epsilon_o^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ (2 + 2.0 - (1 + 2.0)\zeta^*) + (1 + 6.0 - 2.0\zeta^*)\epsilon_o^* + 2.0\epsilon_o^{*2} \right\}$$

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^* - \epsilon_o^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ 2 - \zeta^* + \epsilon_o^* \right\} \quad 158$$

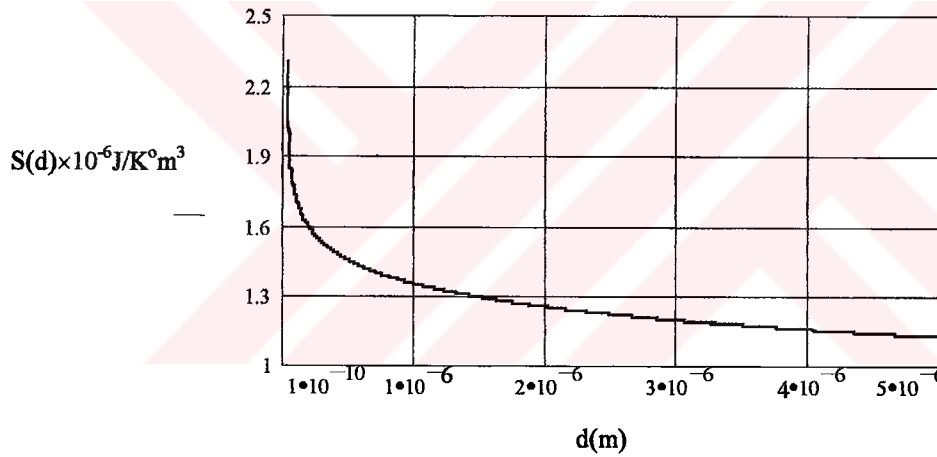
3.2.4.4.3.3. Entropinin Konsantrasyona Bağlılığı [Aşırıince Film($v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(155) denklemi $\beta=0$ için (158)da kullanılarak,

$$S = k_o n_{el} [2 - \zeta^* + \varepsilon_o^*] \quad 159$$

$$S = k_o n_{el} \left[2 - \ln \left[\frac{\pi \hbar^2 dn_{el}}{mk_o T} \right] \right] \quad 160$$

entropi denkleminin konsantrasyona bağlı ifadesi elde edilir ve entropinin kalınlığa bağlı değişimi şekil-14 de gösterilir.



Şekil-12 Aşırıince film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16} \text{ m}^{-3}$.

3.2.4.3.3.4. Kalınlık Sınır Değerleri [Aşırı İnce Film($v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal Zayıf, Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

$-\eta \gg 1$, $-(\zeta^* - \varepsilon_1^*) \gg 1$ non-dejenerelik şartında kimyasal potansiyel ve enerji ifadeleri yerine yazılır. $\beta \ll 1$ için non-parabolik enerji denklemi $\varepsilon_1^* = \varepsilon_o^* n^2$ olur. $n=1$ alınarak (48) denklemi yazılır,

$$-(\zeta^* - \varepsilon_o^*) \gg 1 \Rightarrow -(\zeta^* - \varepsilon_o^*) = -\ln \left[\frac{\pi \hbar^2 n_{el}}{m k_o T} \right] \gg 1$$

$$-\ln \left[\frac{\pi \hbar^2 n_{el}}{m k_o T} \right] \gg 1 \Rightarrow \left[\frac{\pi \hbar^2 n_{el}}{m k_o T} \right]^{-1} \gg e^1$$

$$d \ll \frac{m k_o T}{e \pi \hbar^2 n_{el}}$$

$T=4K^o$, $m^*=0.016m_o$, $n_{el}=1.10^{16}$ alındığında $d \ll 8.478 \times 10^{-4}m$. bulunur. Bu kalınlık eşitsizliği non-dejenere hal zayıf non-parabolik durumda araştırılan ifadeler için maksimum sınırdır.

3.2.4.3.3.5. Entropiyi Sıfır Yapan Kalınlık [Aşırı İnce Film($v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(159) entropi denklemi sıfıra eşitlenerek entropiyi sıfır yapan kalınlık değeri bulunur.

$$S = k_o n_{el} \{ 2 - \zeta^* + \varepsilon_o^* \} = 0 \Rightarrow 2 - \zeta^* + \varepsilon_o^* = 0 \Rightarrow \zeta^* - \varepsilon_o^* = 2$$

Kimyasal potansiyel yazılarak

$$\ln \left[\frac{\pi \hbar^2 n_{el}}{m k_o T} \right] = 2 \Rightarrow \frac{\pi \hbar^2 n_{el}}{m k_o T} = e^2$$

$$d = \frac{e^2 m k_o T}{\pi \hbar^2 n_{el}}$$

çizelge-3 deki kütle, sıcaklık ve konsantrasyon değerleri kullanılarak $d=0.017 m$. bulunur. Bu kalınlık değeri aşırıince film durumunda entropiyi sıfır yapan kalınlık değeridir.

3.2.4.3.4.1. Isı Sığası [Aşırı İnce Film($v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(47,151-153) denklemleri (149)da yazılarak düzenlendiğinde

$$C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^* - \epsilon_o^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ [2 + 12\beta - (2 + 8\beta)\zeta^* + (1 + 2\beta)\zeta^{*2}] + \right. \\ \left. + 2[1 + 6\beta - (1 + 4\beta)\zeta^* + \beta\zeta^{*2}]\epsilon_o^* + \right. \\ \left. + [1 + 2\beta + 2\beta(1 + \zeta^*)]\epsilon_o^{*2} + 2\beta\epsilon_o^{*3} \right\} \quad 161$$

β ya bağlı olarak aşırıince film için ısı sığası bulunur.

3.2.4.3.4.2. Isı Sığası [AİF($v_1 \gg 1$), NDH, ZNPD ($\beta=0$)]

Son ifade non-dejenere halde zayıf non-paraboliklik durumunda kimyasal potansiyele bağlı ısı sığasıdır. Bu denklemden $\beta=0$ için non-dejenere elektron gazlı aşırı ince kattaki non-parabolik enerji spektrumlu ifadeye ulaşılır.

$$C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^* - \epsilon_o^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ [2 + 12.0 - (2 + 8.0)\zeta^* + (1 + 2.0)\zeta^{*2}] + \right. \\ \left. + 2[1 + 6.0 - (1 + 4.0)\zeta^* + .0.\zeta^{*2}]\epsilon_o^* + \right. \\ \left. + [1 + 2.0 + 2.0.(1 + \zeta^*)]\epsilon_o^{*2} + 2.0.\epsilon_o^{*3} \right\}$$

$$C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^* - \epsilon_o^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] + 2[1 - \zeta^*]\epsilon_o^* + \epsilon_o^{*2} \right\} \quad 162$$

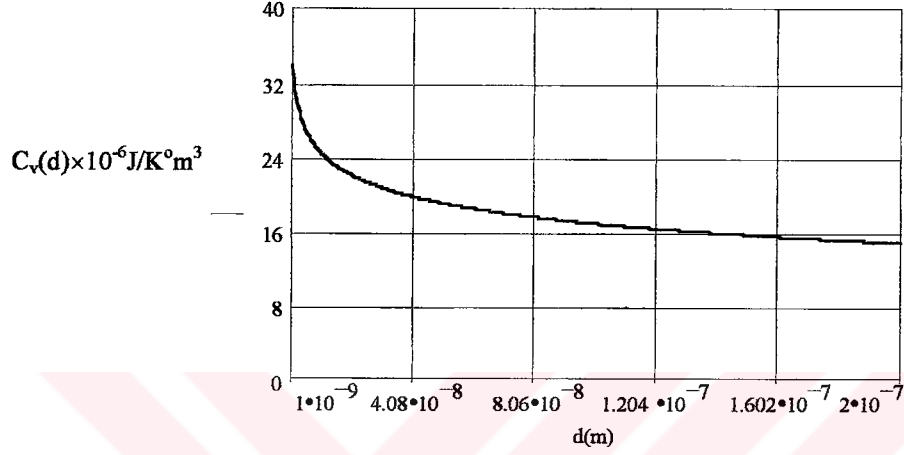
3.2.4.3.4.3. Isı Sığasının Konsantrasyona Bağlılığı [Aşırıince Film($v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(162) denkleminde (155) ifadesi $\beta=0$ için kullanılır, (48) eşitliği yerine yazılarak

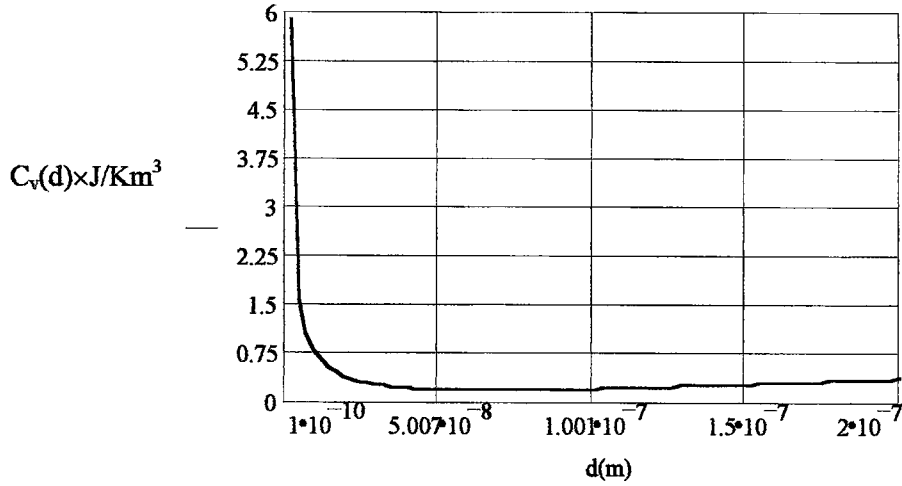
$$C_v = k_o n_{el} \left\{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] + 2[1 - \zeta^*]\epsilon_o^* + \epsilon_o^{*2} \right\}$$

$$C_v = k_o n_{el} \left\{ 1 + \left[\ln \left[\frac{\pi \hbar^2 dn_{el}}{mk_o T} \right] - 1 \right]^2 \right\} \quad 163$$

olarak ısı sığası konsantrasyon cinsinden ifade edilir. Bu durumda ısı sığasının kalınlığa göre değişimi şekil-13 da verilir.



Şekil-13-a Aşırıince film için kalınlığın ve konsantrasyonun fonksiyonu olarak ısı sığası. Zayıf non-parabolik durum, Non-dejenere Hal. $n_{el}=10^{16} \text{m}^{-3}$.



Şekil-13-b Aşırıince film için kalınlığın ve konsantrasyonun fonksiyonu olarak ısı sığası. Zayıf non-parabolik durum, Non-dejenere Hal. $n_{el}=10^{22} \text{m}^{-3}$.

3.2.4.4. Kalın Film($1/v_1 \gg 1$) [Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

3.2.4.4.1.0. $\Theta(v_1)$ Fonksiyonunun Türevleri

$$\Theta(v_1) \big|_{v_1^{-1} \gg 1} = \frac{1}{\sqrt{v_1}} (1 + 2e^{-\pi/v_1}) \quad 50$$

$\exp(-\pi/v_1)$ ifadesi birden küçük olduğundan ihmal edilir.

$$\Theta(v_1) \big|_{v_1^{-1} \gg 1} \cong \frac{1}{\sqrt{v_1}} = \left(\sqrt{\frac{\pi k_o T}{\epsilon_o}} \right)^{-1} = \frac{d}{h} \sqrt{8m\pi k_o T} \quad 164$$

$$\Theta'(v_1) \big|_{v_1^{-1} \gg 1} \cong -\frac{1}{2} v_1^{-3/2} \quad 165$$

$$\Theta''(v_1) \big|_{v_1^{-1} \gg 1} \cong \frac{3}{4} v_1^{-5/2} \quad 166$$

3.2.4.4.2.1. Konsantrasyon [Kalın Film ($1/v_1 \gg 1$), Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(143) denkleminde (164) ifadesi kullanılarak, konsantrasyon elde edilir.

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^*}}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ \sqrt{\frac{\pi k_o T}{\epsilon_o}} - 1 \right\} \quad 167$$

3.2.4.4.2.2 Kimyasal Potansiyel [KF($1/v_1 \gg 1$), NDH, ZNPD]

(167) konsantrasyon ifadesi düzenlenerek

$$\exp\left(\frac{\zeta}{k_o T}\right) = \frac{2\pi\hbar^2 dn_{el}}{mk_o T \left[\sqrt{\pi k_o T / \epsilon_o} - 1 \right]} = e^{\zeta^*} \quad 168$$

her iki tarafın logaritması(ln) alınır,

$$\zeta^* = \ln \left[\frac{2\pi\hbar^2 dn_{el}}{mk_o T \left[\sqrt{\frac{\pi k_o T}{\epsilon_o}} - 1 \right]} \right] \quad 169$$

$$\zeta = k_o T \ln \left[\frac{2\pi\hbar^2 dn_{el}}{mk_o T \left[\sqrt{\frac{\pi k_o T}{\epsilon_o}} - 1 \right]} \right] \quad 170$$

bulunur.

3.2.4.4.3.1. Entropi [Kalın Film($1/v_1$) $\gg 1$, Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(149) denkleminde (164-166) denklemleri kullanılır ve gerekli işlemler yapılarak

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*}}{2\pi\hbar^2 d} \left\{ (2 - \zeta^*)(\Theta - 1) - v_1 \Theta' \right\}$$

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*}}{2\pi\hbar^2 d} \left\{ (\zeta^* - 2) - (\zeta^* - \frac{5}{2}) v_1^{-1/2} \right\} \quad 171$$

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*}}{2\pi\hbar^2 d} \left\{ (\zeta^* - 2) - (\zeta^* - \frac{5}{2}) \sqrt{\frac{\pi k_o T}{\epsilon_o}} \right\} \quad 172$$

ϵ_o açık olarak yazılır.

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*}}{2\pi\hbar^2 d} \left\{ (\zeta^* - 2) - (\zeta^* - \frac{5}{2}) \sqrt{\frac{2mk_o T}{\pi\hbar^2}} \cdot d \right\} \quad 173$$

kalınlığa bağlı entropi eşitliği bulunur.

3.2.4.4.3.2. Entropinin Konsantrasyona Bağlılığı [Kalın Film($1/v_1 \gg 1$, Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

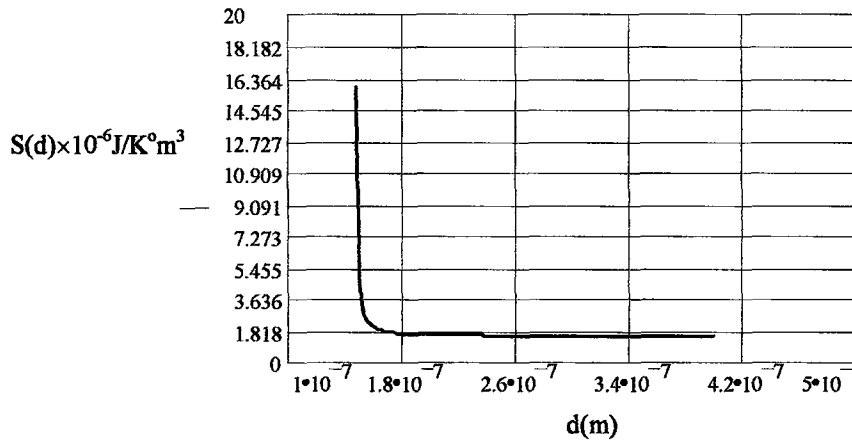
Entropi denklemi farklı bir şekilde de yazılabilir, (168) ifadesi (149)da yazılarak

$$S = k_o n_{el} \left\{ 2 - \zeta^* - \frac{v_1 \Theta'(v_1)}{\Theta - 1} \right\}$$

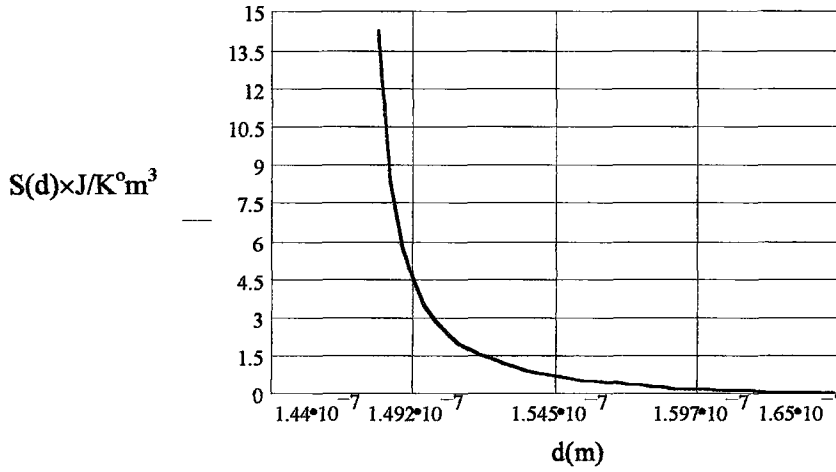
$$S = k_o n_{el} \left\{ 2 - \zeta^* + \frac{1}{2(1 - \sqrt{\frac{\epsilon_o}{\pi k_o T}})} \right\} \quad 174$$

$$S = k_o n_{el} \left\{ 2 - \ln \left[\frac{2\pi\hbar^2 dn_{el}}{mk_o T \left[(2d\sqrt{2m\pi k_o T}/h) - 1 \right]} \right] + \frac{1}{(2 - (h/d\sqrt{2m\pi k_o T}))} \right\} \quad 175$$

konsantrasyona ve kalınlığa bağlı entropi ifadesi bulunarak, şekil-14 de entropinin kalınlığa bağlı değişimi gösterilmiştir.



Şekil-14-a Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal.



Şekil-14-b Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22}m^{-3}$.

3.2.4.4.3. Entropiyi Sıfır Yapan Kalınlık ve Kimyasal Potansiyel [Kalın Film $(1/v_1) \gg 1$, Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum ($\beta < 1$)]

(173) yeniden düzenlenerek sıfıra eşitlenir,

$$S = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*}}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ (\zeta^* - 2) - \left(\zeta^* - \frac{5}{2}\right) \sqrt{\frac{2mk_o T}{\pi \hbar^2}} \cdot d \right\} = 0$$

$$(\zeta^* - 2) - \left(\zeta^* - \frac{5}{2}\right) \sqrt{\frac{2mk_o T}{\pi \hbar^2}} \cdot d = 0$$

Eşitlikte

$$(\zeta^* - 2) \cong \left(\zeta^* - \frac{5}{2}\right) \Rightarrow \left(\zeta^* - \frac{5}{2}\right)$$

176

alınabilir ve

$$\left(\zeta^* - \frac{5}{2}\right) - \left(\zeta^* - \frac{5}{2}\right) \sqrt{\frac{2mk_o T}{\pi \hbar^2}} \cdot d = 0$$

$$\left(\zeta^* - \frac{5}{2}\right) \left[1 - \sqrt{\frac{2mk_o T}{\pi \hbar^2}} \cdot d\right] = 0 \quad 177$$

Sıfır şartının sağlanması için iki denklem olur, ilki

$$\zeta^* - \frac{5}{2} = 0 \quad 178$$

diğeri

$$\left[1 - \sqrt{\frac{2mk_o T}{\pi \hbar^2}} \cdot d\right] = 0 \quad 179$$

dir ve kalınlık değeri

$$d = \sqrt{\frac{\pi \hbar^2}{2mk_o T}} = \sqrt{\frac{h^2}{8m\pi k_o T}} \quad 180$$

çizelge-3 verileri kullanılarak $d = 1.4733 \times 10^{-7} \text{ m} = 1.4733 \times 10^{-5} \text{ cm}$ bulunur.

Kimyasal Potansiyel ise,

$$\zeta^* - \frac{5}{2} = 0 \Rightarrow \zeta^* = \frac{5}{2} \Rightarrow \zeta = \frac{5}{2} k_o T$$

değerleri yazılarak $\zeta = 2.5 \times k_o T = 3.45 \times 10^{-23} \text{ J} = 0.00021 \text{ eV}$ bulunur.

3.2.4.4.1. Isı Sığası [Kalın Film($1/v_1$) $\gg 1$, Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)]

(150)denklemini farklı bir biçimde

$$C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*}}{2\pi \hbar^2 d} \{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] (\Theta - 1) - 2(1 - \zeta^*) v_1 \Theta' + v_1^2 \Theta'' \} \quad 181$$

olarak ifade edilir ve Θ fonksiyonları yazılarak

$$C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*}}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] (v_1^{-1/2} - 1) + \left(\frac{7}{4} - \zeta^*\right) v_1^{-1/2} \right\}$$

elde edilir ve v_1 açık olarak yazılır,

$$C_v = \frac{k_o^2 T m e^{\zeta^*}}{2\pi \hbar^2 d} \left\{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] \left(\sqrt{\frac{\pi k_o T}{\epsilon_o}} - 1 \right) + \left(\frac{7}{4} - \zeta^*\right) \sqrt{\frac{\pi k_o T}{\epsilon_o}} \right\} \quad 182$$

enerjiye bağlı ısı sığası denklemini bulunur.

3.2.4.4.2. Isı Sığasının Konsantrasyona Bağlılığı [Kalın Film($1/v_1$)>>1,

Non-Dejenere Hal, Zayıf Non-Parabolik Durum($\beta \ll 1$)

(163,165,167) denklemi (150)de yazılarak

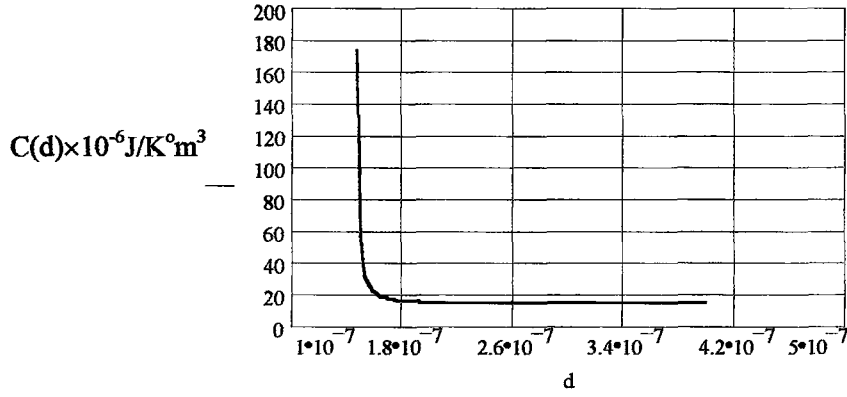
$$C_v = k_o n_{el} \left\{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] + \frac{[1 - \zeta^*] v_1 v_1^{-1/2}}{v_1^{-1/2} - 1} + \left(\frac{3}{4}\right) \frac{v_1^2 v_1^{-3/2}}{v_1^{-1/2} - 1} \right\}$$

$$C_v = k_o n_{el} \left\{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] + \frac{[1 - \zeta^*] v_1^{-1/2}}{v_1^{-1/2} - 1} + \left(\frac{3}{4}\right) \frac{v_1^{-1/2}}{v_1^{-1/2} - 1} \right\}$$

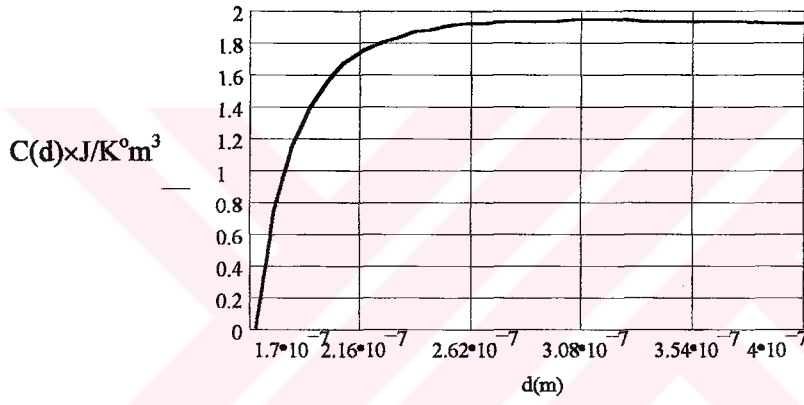
$$C_v = k_o n_{el} \left\{ [2 - 2\zeta^* + \zeta^{*2}] + \left(\frac{7}{4} - \zeta^*\right) \frac{1}{\left(1 - \sqrt{\frac{\epsilon_o}{\pi k_o T}}\right)} \right\} \quad 183$$

$$C_v = k_o n_{el} \left[\left[\ln \left[\frac{2\pi \hbar^2 d n_{el}}{m k_o T \left[\frac{2d \sqrt{2m \pi k_o T}}{h} - 1 \right]} \right] - 1 \right]^2 + 1 + \left(\frac{7}{4} - \ln \left[\frac{2\pi \hbar^2 d n_{el}}{m k_o T \left[\frac{2d \sqrt{2m \pi k_o T}}{h} - 1 \right]} \right) \right) \frac{1}{\left[1 - \frac{h}{2d \sqrt{2m \pi k_o T}} \right]} \right] \quad 184$$

konsantrasyona bağlı ısı sığası elde edilir. Isı sığasının kalınlığa bağlı değişim grafiği şekil-15 de verilmiştir. Şekiller incelendiğinde, kalın film durumunda entropi ve ısı sığası eğrileri tipleri özdeşdir. Sadece aynı kalınlık değerlerinde büyüklük olarak farklılık vardır.



Şekil-15-a Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el} = 10^{16} \text{ m}^{-3}$.



Şekil-15-b Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Zayıf non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el} = 10^{22} \text{ m}^{-3}$.

3.2.4.5. Güçlü Non-Parabolik Durum($\beta \gg 1$) [Non-Dejenere Hal]

3.2.4.5.1.0. Yardımcı Eşitlikler

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-kn} = e^{-k}(1 + e^{-k} + e^{-2k} + \dots) = e^{-k} \frac{1}{1 - e^{-k}} = \frac{1}{e^k - 1} \quad 185$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} n e^{-kn} = -\frac{\partial}{\partial k} \left(\sum_{n=1}^{\infty} e^{-kn} \right) = \frac{e^k}{(e^k - 1)^2} \quad 186$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{-kn} = -\frac{\partial^2}{\partial k^2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} e^{-kn} \right) = \frac{e^k(1 + e^k)}{(e^k - 1)^3} \quad 187$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} n^3 e^{-kn} = -\frac{\partial^3}{\partial k^3} \left(\sum_{n=1}^{\infty} e^{-kn} \right) = \frac{e^k(1 + e^k + e^{2k})}{(e^k - 1)^4} \quad 188$$

$$\left. \begin{aligned} 2\sinh k &= e^k - e^{-k} \\ 2\cosh k &= e^k + e^{-k} \end{aligned} \right\} \quad 189$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-kn} = \frac{1}{e^k - 1} = \frac{1}{2} \frac{e^{-k/2}}{\sinh(k/2)} \quad 190$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} n e^{-kn} = \frac{e^k}{(e^k - 1)^2} = \frac{1}{4 \sinh^2(k/2)} \quad 191$$

3.2.4.5.2.1. Konsantrasyon [Non-Dejenere Hal, Güçlü Non-Parabolik Durum($\beta \gg 1$)]

(95) denklemi yeniden düzenlenerek

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \sum_n [1 + 2\beta(1 + \epsilon_1^*)] e^{-\epsilon_i} \quad 192$$

tipine dönüştürülür ve (60) denklemi eklenerek, $\beta \gg 1$ için şöyle yazılabilir,

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left[1 + 2\beta \left(1 + \frac{1}{2\beta} [\sqrt{1 + 4\beta \epsilon_o^*} - 1] \right) \right] e^{-\epsilon_i^*} \quad 193$$

(60) denklemi $\beta \gg 1$ için aşağıdaki gibi düzenlenir,

$$\epsilon_i^* = \frac{1}{2\beta} \left[\sqrt{1 + 4\beta \epsilon_o^*} - 1 \right] \Big|_{\beta \gg 1} \approx \frac{1}{2\beta} \sqrt{4\beta \epsilon_o^* n^2} = \sqrt{\frac{\epsilon_o^*}{\beta}} n = kn \quad 194$$

$$m\beta = \frac{mk_o T}{\epsilon_g} = \frac{2mk_o T}{2\epsilon_g} = \frac{k_o T}{2s^2} \quad 195$$

$$n_{el} = \frac{mk_o T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left[2\beta + 2\beta \sqrt{\frac{\epsilon_o^*}{\beta}} n \right] e^{-\sqrt{\frac{\epsilon_o^*}{\beta}} n} \quad 196$$

(194,195) iki ifadeleri (196)de yazılır ve (187-193) denklemlerinden yararlanarak

$$n_{el} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} \sum_n \left[1 + kn \right] e^{-kn} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} \left\{ \sum_n e^{-kn} + \sum_n kn e^{-kn} \right\}$$

toplama işlemi sona erdirilerek

$$n_{el} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} \left\{ \frac{1}{e^k - 1} + \frac{ke^k}{(e^k - 1)^2} \right\} \quad 197$$

güçlü non-parabolik durumda genel konsantrasyon denklemi bulunur.

3.2.4.5.2.2. Konsantrasyon [$k \ll 1$ ve $k \rightarrow 0$ için $d \rightarrow \infty$ Durumu (Kalın Film)]

(185-191) dönüşümleri denklemi (197)de yazılır,

$$n_{el} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} \left\{ \frac{e^{-k/2}}{2 \sinh(k/2)} + \frac{k}{4 \sinh^2(k/2)} \right\}_{k \rightarrow 0} \quad 198$$

$$n_{el} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} \left\{ \frac{1}{2(1/2)[1 + (k/2) - 1 + (k/2)]} + \frac{k}{4(k/2)^2} \right\}_{k \rightarrow 0}$$

$$n_{el} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} \frac{2}{k}$$

$$k = \sqrt{\frac{\epsilon_o^*}{\beta}} = \frac{1}{k_o T} \sqrt{\epsilon_o \epsilon_g} = \frac{1}{k_o T} \sqrt{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \epsilon_g} = \frac{1}{k_o T} \frac{\pi \hbar}{d} \sqrt{\frac{\epsilon_g}{2m}} = \frac{\pi \hbar}{k_o T d} s$$

$$k = \frac{s}{s_o} ; \quad s_o = \frac{k_o T d}{\pi \hbar} \quad 199$$

$$n_{el} = \frac{2(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} \cdot \frac{k_o T d}{\pi \hbar s}$$

$$n_{el} \Big|_{\substack{k \rightarrow 0 \\ d \rightarrow \infty}} = \frac{2(k_o T)^3}{\pi^2 \hbar^3 s^3} e^{\zeta^*} \quad 200$$

sonuç olarak konsantrasyon non-dejenere hal non-parabolik durumda kalınlığa bağlı olmaz, bu nedenle konsantrasyon hacmi numunelerdeki değerine denk olur.

3.2.4.5.2.3. Kimyasal Potansiyel [$k \ll 1$ ve $k \rightarrow 0$ için $d \rightarrow \infty$ Durumu (Kalın Film)]

(200)den yararlanarak logaritması(ln) alınır,

$$\frac{n_{el} \pi^2 \hbar^3 s^3}{2(k_o T)^3} = e^{\zeta^*} \quad 201$$

$$\zeta = k_o T \ln \left[\frac{n_{el} \pi^2 \hbar^3 s^3}{2(k_o T)^3} \right] \quad 202$$

bulunur. Bu denklem kalın filme karşılık gelen kimyasal potansiyeldir.

3.2.4.5.2.4. Konsantrasyon [$k \gg 1$ ve $k \rightarrow \infty$ için $d \rightarrow 0$ Durumu (İnce Film)]

(197) denkleminde $k \gg 1$ olduğundan bir ihmal edilir, eksponansiyel terim seriyeye açılarak,

$$n_{el} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} \left\{ \frac{1}{e^k} + \frac{k}{e^k} \right\}_{k \gg 1} \quad 203$$

$$n_{el} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} (1 + k) e^{-k} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} (1 + k)(1 - k)$$

$$n_{el} = \frac{(k_o T)^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 s^2 d} (1 - k^2) \quad 204$$

güçlü non-parabolik durumda k ya bağlı konsantrasyon ifadesi elde edilir.

3.2.4.5.2.5. Kimyasal Potansiyel [$k \gg 1$ ve $k \rightarrow \infty$ için $d \rightarrow 0$ Durumu (İnce Film)]

(204) denklemini kullanılarak

$$e^{\zeta^*} = \frac{\pi \hbar^2 s^2 dn_{el}}{(k_o T)^2 (1 - k^2)} \quad 205$$

her iki tarafın logaritması (ln) alınır,

$$\zeta = k_o T \ln \left[\frac{\pi \hbar^2 s^2 dn_{el}}{(k_o T)^2 (1 - k^2)} \right] \quad 206$$

ince film için güçlü non-parabolik durumda kimyasal potansiyel bulunur.

3.2.4.5.3.1. Entropi [Non-Dejenere Hal, Güçlü Non-Parabolik Durum ($\beta \gg 1$)]

$\beta \gg 1$ için (144) entropi denkleminde (185,191) denklemleri yazılarak

$$S = D'e^{\zeta^*} \sum_n \left\{ \underbrace{2 + 6\beta - (1 + 2\beta)\zeta^*}_A + \underbrace{(1 + 6\beta - 2\beta\zeta^*)\epsilon_1^*}_C + \underbrace{2\beta\epsilon_1^{*2}}_E \right\} e^{-\epsilon_1^*} \quad 144$$

$$S = \frac{mk_o^2 Te^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left\{ A + Ckn + Ek^2 n^2 \right\} e^{-kn}$$

toplamların karşılıkları yazılır,

$$S = \frac{mk_o^2 Te^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ \frac{2 + 6\beta - (1 + 2\beta)\zeta^*}{e^k - 1} + \frac{(1 + 6\beta - 2\beta\zeta^*)ke^k}{(e^k - 1)^2} + \frac{2\beta k^2 e^k (1 + e^k)}{(e^k - 1)^3} \right\} \quad 207$$

entropi denklemi bulunur. $\beta \gg 1$ için β nın yanında bir ve diğer sayılar ihmal edilerek

$$S = \frac{2\beta mk_o^2 Te^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ (3 - \zeta^*) \left[\frac{1}{e^k - 1} + \frac{ke^k}{(e^k - 1)^2} \right] + \frac{k^2 e^k (1 + e^k)}{(e^k - 1)^3} \right\} \quad 208$$

güçlü non-parabolik durumda kalın film için entropi denklemi bulunmuş olur.

3.2.4.5.3.2. Entropi [$k \ll 1$ ve $k \rightarrow 0$ için $d \rightarrow \infty$ Durumu(Kalın Film)]

$k \ll 1$ için (208) ifadesi eksponansiyel terim seriye açılır,

$$S = \frac{2\beta mk_o^2 Te^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \frac{1}{k} \left\{ 8 - 2\zeta^* + (6 - \zeta^*)k + k^2 \right\} \quad 209$$

(195,199) formülleri k ve s cinsinden yeniden düzenlenerek (209)de yazılır,

$$S = \frac{2k_o^2 Te^{\zeta^*}}{\pi \hbar^3 d} \frac{k_o T}{2s^2} \frac{k_o T d}{\pi \hbar s} \left\{ 8 - 2\zeta^* + (6 - \zeta^*)k + k^2 \right\}$$

$$S = \frac{k_o^4 T^3 e^{\zeta^*}}{\pi^2 \hbar^3 s^3} \left\{ 8 - 2\zeta^* + (6 - \zeta^*)k + k^2 \right\} \quad 210$$

$$S = \frac{k_o^4 T^3 e^{\zeta^*}}{\pi^2 \hbar^3 s^3} \left\{ 8 - 2\zeta^* + (6 - \zeta^*) \frac{s}{s_o} + \frac{s^2}{s_o^2} \right\} \quad 211$$

güçlü non-parabolik durumda hız cinsinden entropi ifadesi elde edilir.

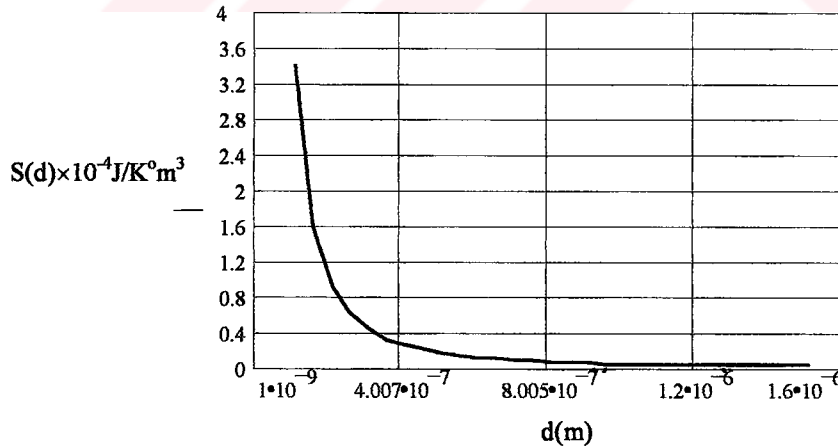
3.2.4.5.3.3. Entropinin Konsantrasyona Bağlılığı [$k \ll 1$ ve $k \rightarrow 0$ için $d \rightarrow \infty$ Durumu(Kalın Film)]

(211)de (201) ifadesi yazılır,

$$S = \frac{k_o^4 T^3}{\pi^2 \hbar^3 s^3} \frac{n_e \pi^2 \hbar^3 s^3}{2(k_o T)^3} \left\{ 8 - 2\zeta^* + (6 - \zeta^*) \frac{s}{s_o} + \frac{s^2}{s_o^2} \right\}$$

$$S = \frac{1}{2} k_o n_{el} \left\{ 8 - 2 \ln \left[\frac{\pi^2 \hbar^3 s^3 n_{el}}{2(k_o T)^3} \right] + (6 - \ln \left[\frac{\pi^2 \hbar^3 s^3 n_{el}}{2(k_o T)^3} \right]) \frac{s}{s_o} + \frac{s^2}{s_o^2} \right\} \quad 212$$

tipine dönüştürülerek konsantrasyona bağlı entropi denkleminin kalınlığa bağlı değişimi şekil-16 da verilir.



Şekil-16 Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal

3.2.4.5.3.4. Entropiyi Sıfır Yapan Kalınlık [Kalın Film, Non-Dejenere Hal, Güçlü Non-Parabolik Durum($\beta \gg 1$)]

$\lambda = 1/s_0$ dönüşümü (212) entropi ifadesinde yazılarak

$$S = \frac{k_o^4 T^3 e^{\zeta^*}}{\pi^2 \hbar^3 s^3} \left\{ 8 - 2\zeta^* + (6 - \zeta^*) \frac{s}{s_0} + \frac{s^2}{s_0^2} \right\} = 0 \quad 213$$

$$\{8 - 2\zeta^* + (6 - \zeta^*)s\lambda + s^2\lambda^2\} = 0 \quad 214$$

$$\underbrace{s^2\lambda^2}_a + \underbrace{(6 - \zeta^*)s\lambda}_b + \underbrace{(8 - 2\zeta^*)}_c = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

sabitler kök denkleminde yerine yazılır ve iki köke sahip olunur. s_0 ifadesi açık olarak yazılır ve kalınlık denklemi bulunur.

$$\frac{1}{s_{0,1,2}} = \frac{(\zeta^* - 6) \pm (\zeta - 2)}{2s} \Rightarrow \frac{\pi \hbar}{k_o T d_1} s = \zeta^* - 4$$

$$d_1 = \frac{\pi \hbar s}{k_o T (\zeta^* - 4)} \quad 215$$

Bu kalınlık non-dejenere halde non-parabolik enerjili entropiyi sıfır yapan kalınlıktır. Bu kalınlık değerinde ince filmin elektron düzenliliği ideal durumdadır. Bu kalınlığın geçerli olması $(\zeta^* - 4) \geq 1$ şartıyla sağlanır.

$$\zeta^* \geq 5 \Rightarrow \frac{\zeta}{k_o T} = 5 \Rightarrow \zeta = 5k_o T \quad 216$$

sınır şartı d_1 de yazılarak

$$d_1 = \frac{\pi \hbar s}{k_o T \left(\frac{\zeta}{k_o T} - 4 \right)} = \frac{\pi \hbar s}{k_o T \left(\frac{5k_o T}{k_o T} - 4 \right)} = \frac{\pi \hbar s}{k_o T}$$

$$d_1 = \frac{\pi \hbar s}{k_o T}$$

118

bulunur. (118) sonucu kalınlık için alt sınır eşitsizliğidir. Bu sonuç aynı zamanda $k=1$, yani $s=s_o$ durumuna karşılık gelir. Çizelge-3 verileri kullanılarak

$$d_1 \Big|_{T \rightarrow 4K^o} = 6.741 \times 10^{-6} \text{ m}, = 674.1 \times 10^{-6} \text{ m} = 674.1 \text{ nm}$$

bulunur. İkinci kök denkleminde d_2 kalınlığı incelendiğinde

$$\frac{\pi \hbar}{k_o T d_2} s = -2 \Rightarrow d_2 = \frac{\pi \hbar s}{(-2)k_o T}$$

Bu ifadenin geçerli olması için sıcaklığın eksi değerde olması gerekir. Bu durum deneysel olarak uygulanabilir değildir.

3.2.4.5.3.5. Entropi [$k \gg 1$ ve $k \rightarrow \infty$ için $d \rightarrow 0$ Durumu (İnce Film)]

(208) denkleminde $k \gg 1$ için birler ihmal edilir, e^{-k} terimi seriye açılır ve

$$S = \frac{2\beta m k_o^2 T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ (3 - \zeta^*)(1 + k) + k^2 \right\} e^{-k}$$

$$S = \frac{2\beta m k_o^2 T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ (3 - \zeta^*)(1 + k) + k^2 \right\} (1 - k)$$

denkleminde ulaşılır. (195) ve (199) ifadeleri son denkleminde yazılarak,

$$S = \frac{k_o^3 T^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 ds^2} \left\{ (3 - \zeta^*) - (2 - \zeta^*) k^2 - k^3 \right\} \quad 217$$

$$S = \frac{k_o^3 T^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 ds^2} \left\{ (3 - \zeta^*) - (2 - \zeta^*) \frac{s^2}{s_o^2} - \frac{s^3}{s_o^3} \right\} \quad 218$$

güçlü non-parabolik durumda ince film için entropi eşitliği elde edilir.

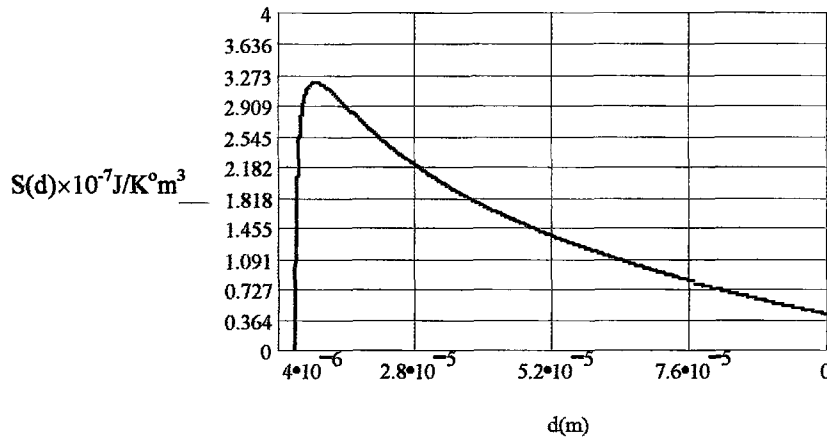
3.2.4.5.3.6. Entropinin Konsantrasyona Bağlılığı [$k \gg 1$ ve $k \rightarrow \infty$ için $d \rightarrow 0$ Durumu(İnce Film)]

(218) denkleminde (205) yazılarak

$$S = \frac{k_o^3 T^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 ds^2} \frac{\pi \hbar^2 s^2 dn_{el}}{(k_o T)^2 (1 - k^2)} \left\{ (3 - \zeta^*) - (2 - \zeta^*) \frac{s^2}{s_o^2} - \frac{s^3}{s_o^3} \right\}$$

$$S = k_o n_{el} \left\{ (3 - \ln \left[\frac{\pi \hbar^2 s^2 dn_{el}}{(k_o T)^2 (1 - [s/s_o]^2)} \right]) - (2 - \left[\frac{\pi \hbar^2 s^2 dn_{el}}{(k_o T)^2 (1 - [s/s_o]^2)} \right]) \frac{s^2}{s_o^2} - \frac{s^3}{s_o^3} \right\} \left(1 - \frac{s^2}{s_o^2} \right) \quad 219$$

güçlü non-parabolik durumda ince film için entropi eşitliği elde edilir. s_o terimi açılarak kalınlığa bağlı entropi eşitliği şekil-17 de verilmiştir.



Şekil-17 İnce film için kalınlığın fonksiyonu olarak entropi. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el} = 10^{16} \text{ m}^{-3}$.

3.2.4.5.3.7. Entropiyi Sıfır Yapan Kalınlık [Non-Dejenere Hal, Güçlü Non-Parabolik Durum($\beta \gg 1$) (İnce Film)]

(219) denkleminin türevi sıfıra eşitlenerek,

$$S' = \frac{k_o^3 T^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar d s^2} \{2(\zeta^* - 2)k - 3k^2\} = 0$$

$$\{2(\zeta^* - 2)k - 3k^2\} = 0 \Rightarrow k\{2(\zeta^* - 2) - 3k\} = 0$$

kökün biri sıfır, diğeri k yerine (199) dönüşümü yazılarak kalınlık değeri bulunur.

$$\{2(\zeta^* - 2) - 3k\} = 0 \Rightarrow k = \frac{2}{3}(\zeta^* - 2)$$

$$\frac{\hbar s}{2k_o T d} = \frac{2}{3}(\zeta^* - 2) \Rightarrow d = \frac{3\hbar s}{4k_o T(\zeta^* - 2)}$$

bu şart ($\zeta^* - 2$) ≥ 1 için geçerli olur, çizelge-3 verileri kullanılarak $d_1 = 1.011 \times 10^{-5}$ m. bulunur ki, bu kalınlık değeri entropi denkleminin minimumuna karşılık gelir.

3.2.4.5.4.1. Isı Sığası [Non-Dejenere Hal, Güçlü Non-Parabolik Durum($\beta \gg 1$)]

(105) denkleminde (130-135 ve 111) dönüşümleri yazılır,

$$C_v = D'e^{\zeta^*} \sum_n \left\{ \underbrace{2 + 12\beta - 2(1 + 4\beta)\zeta^* + (1 + 2\beta)\zeta^{*2}}_p + \underbrace{[2 + 12\beta - 2(1 + 4\beta)\zeta^* + 2\beta\zeta^{*2}]}_q \epsilon_1^* + \underbrace{[1 + 4\beta(1 - \zeta^*) + 2\beta]}_r \epsilon_1^{*2} + \underbrace{2\beta\epsilon_1^{*3}}_t \right\} e^{-\epsilon_1^*} \quad 220$$

$$C_V = D'e^{\zeta^*} \left\{ p \sum_n e^{-\epsilon_1^*} + q \sum_n \epsilon_1^* e^{-\epsilon_1^*} + r \sum_n \epsilon_1^{*2} e^{-\epsilon_1^*} + t \sum_n \epsilon_1^{*3} e^{-\epsilon_1^*} \right\}$$

$$C_V = D'e^{\zeta^*} \left\{ p \sum_n e^{-kn} + q \sum_n k n e^{-kn} + r \sum_n k^2 n^2 e^{-kn} + t \sum_n k^3 n^3 e^{-kn} \right\}$$

tipine dönüştürülür, toplamaların karşılıklarını ve sabitler yazarak

$$C_V = \frac{mk_o^2 Te^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ \frac{2+12\beta-(2+8\beta)\zeta^*+(1+2\beta)\zeta^{*2}}{e^k-1} + \right. \\ \left. + \frac{2[1+6\beta-(1+4\beta)\zeta^*+\beta\zeta^{*2}]ke^k}{(e^k-1)^2} + \frac{[1+2\beta+4\beta(1-\zeta^*)]k^2e^k(1+e^k)}{(e^k-1)^3} + \right. \\ \left. + \frac{2\beta k^3e^k(1+4e^k+e^{2k})}{(e^k-1)^4} \right\} \quad 221$$

güçlü non-parabolik durumda genel ısı sığası eşitliği elde edilir.

3.2.4.5.4.2. Isı Sığası [$k \ll 1$ ve $k \rightarrow 0$ için $d \rightarrow \infty$ Durumu(Kalın Film)]

(221)de $e^k=1+k$ dönüşümü yapılarak $\beta \gg 1$ için bir ve bire yakın sayılar ihmal edilir.

$$C_V = \frac{2\beta mk_o^2 Te^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ \frac{\overbrace{6-4\zeta^*+\zeta^{*2}}^{p'}}{k} + \frac{\overbrace{[6-4\zeta^*+\zeta^{*2}]}^{r'}(1+k)}{k} + \right. \\ \left. + \frac{\overbrace{1+2(1-\zeta^*)}^{s'}(1+k)(2+k)}{k} + \frac{(1+k)[6+6k]}{k} \right\}$$

$$C_V = \frac{2\beta mk_o^2 Te^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \frac{1}{k} \left\{ p' + (1+k)[r' + s'(2+k) + (6+6k)] \right\}$$

(195,199) ifadeleri son denklemde yazılarak sadeleştirilir.

$$C_v = \frac{2k_o^2 T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \frac{k_o T}{2s^2} \frac{k_o T d}{\pi \hbar s} \left\{ p' + (1+k)[r' + s'(2+k) + (6+6k)] \right\}$$

sonuç olarak

$$C_v = \frac{k_o^4 T^3 e^{\zeta^*}}{\pi^2 \hbar^3 s^3} \left\{ 24 - 12\zeta^* + 2\zeta^{*2} + (27 - 10\zeta^* + \zeta^{*2})k + (9 - 2\zeta^*)k^2 \right\} \quad 222$$

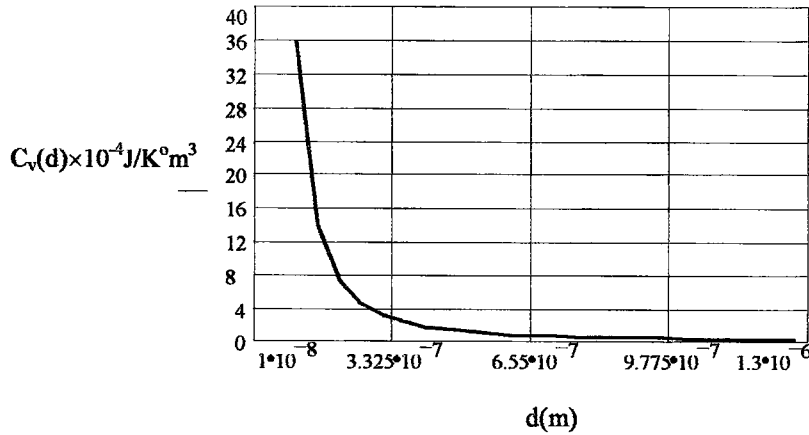
güçlü non-parabolik durumda kalın film için entropi eşitliği elde edilir.

3.2.4.5.4.3. Isı Sığasının Konsantrasyona Bağlılığı [$k \ll 1$ veya $k \rightarrow 0$ için $d \rightarrow \infty$ Durumu (Kalın Film)]

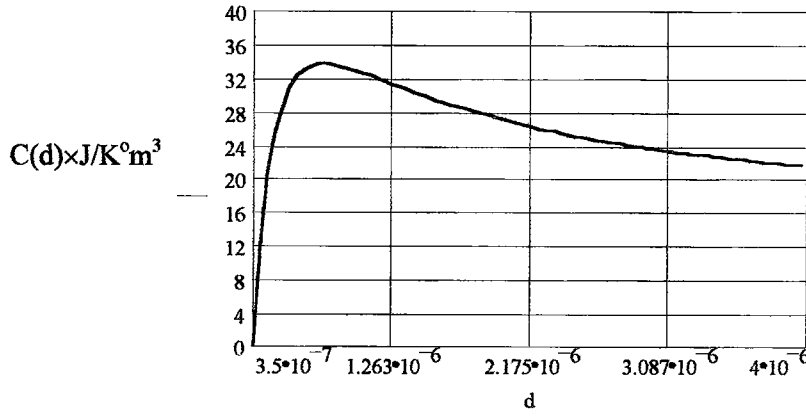
(222)de (201)denklemini yazılır, ve

$$C_v = \frac{1}{2} k_o n_{el} \left\{ \left[\ln \left[\frac{\pi^2 \hbar^3 s^3 n_{el}}{2(k_o T)^3} \right] - 3 \right]^2 + 3 \right] + \left[\ln \left[\frac{\pi^2 \hbar^3 s^3 n_{el}}{2(k_o T)^3} \right] - 5 \right]^2 + 2 \right] \frac{s}{s_o} + \left(9 - 2 \left[\frac{\pi^2 \hbar^3 s^3 n_{el}}{2(k_o T)^3} \right] \right) \left(\frac{s}{s_o} \right)^2 \right\} \quad 223$$

güçlü non-parabolik durumda kalın film için entropi eşitliği elde edilir. Kalınlığa bağlı entropi eşitliği şekil-18 de verilmiştir.



Şekil-18-a Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Güçlü non-parabolik durum, Non-dejenere Hal. $n_{el} = 10^{16} \text{ m}^{-3}$.



Şekil-18-b Kalın film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22}m^{-3}$.

3.2.4.5.4.4. Isı Sığası $[k \gg 1$ ve $k \rightarrow \infty$ için $d \rightarrow 0$ Durum(İnce Film)]

(221)denkleminde $k \gg 1$ için bir ihmal edilir, $e^{-k}=1-k$ dönüşümü uygulanarak

$$C_v = \frac{2\beta m k_o^2 T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ [(6 - 4\zeta^* + \zeta^{*2}) + (6 - 4\zeta^* + \zeta^{*2})k + (3 - 2\zeta^*)k^2]e^{-k} + (4e^{-2k} + e^{-k})k^3 \right\}$$

$$C_v = \frac{2\beta m k_o^2 T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ [(6 - 4\zeta^* + \zeta^{*2}) + (6 - 4\zeta^* + \zeta^{*2})k + (3 - 2\zeta^*)k^2](1 - k) + [4(1 - 2k) + (1 - k)]k^3 \right\}$$

$$C_v = \frac{2\beta m k_o^2 T e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d} \left\{ (6 - 4\zeta^* + \zeta^{*2}) - (3 - 2\zeta^* + \zeta^{*2})k^2 + 2(1 + \zeta^*)k^3 - 9k^4 \right\} \quad 224$$

(195)deşitliği son denklemde yazılır ve

$$C_v = \frac{k_o^3 T^2 e^{\zeta^*}}{\pi \hbar^2 d s^2} \left\{ (6 - 4\zeta^* + \zeta^{*2}) - (3 - 2\zeta^* + \zeta^{*2})k^2 + 2(1 + \zeta^*)k^3 - 9k^4 \right\} \quad 225$$

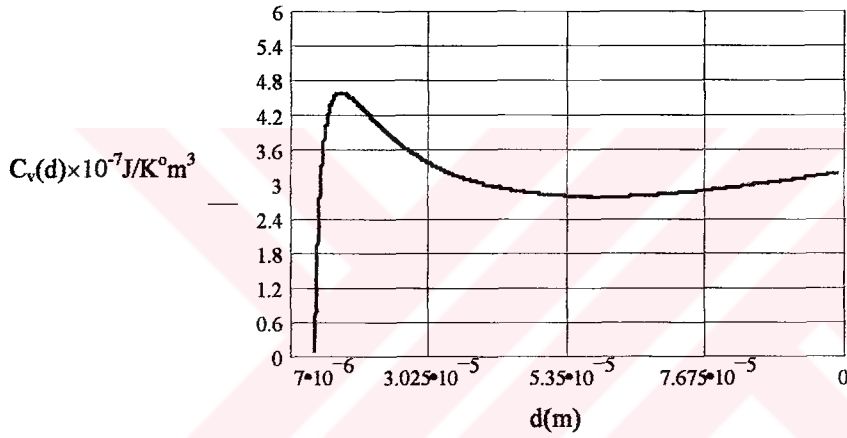
güçlü non-parabolik durumda ısı sığası denklemi elde edilir

3.2.4.5.4.5. Isı Sığasının Konsantrasyona Bağlılığı [$k \gg 1$ veya $k \rightarrow \infty$ için $d \rightarrow 0$ Durumu (İnce Film)]

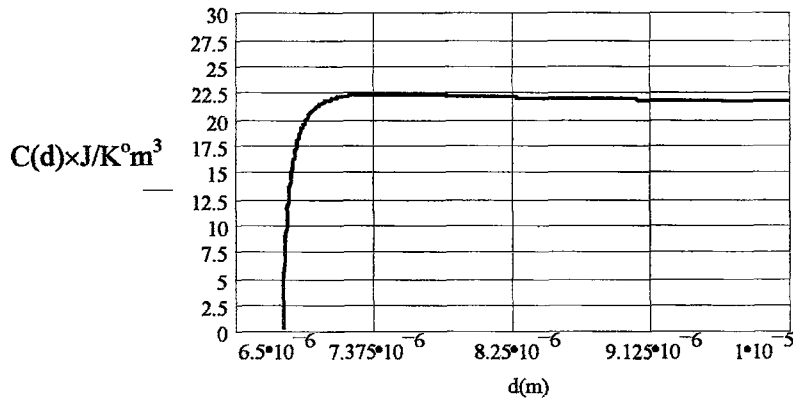
(225)de (205) eşitliği yazılarak,

$$C_V = \frac{k_o n_{el}}{(1-k^2)} \left\{ \left[\ln \left(\frac{\pi (\hbar s)^2 dn_{el}}{(k_o T)^2 (1-k^2)} \right) - 1 \right]^2 + 2 \left[\ln \left(\frac{\pi (\hbar s)^2 dn_{el}}{(k_o T)^2 (1-k^2)} \right) - 1 \right]^2 + 2k^2 + 2(1 + \ln \left[\frac{\pi (\hbar s)^2 dn_{el}}{(k_o T)^2 (1-k^2)} \right])k^3 - 9k^4 \right\} \quad 226$$

konsantrasyona bağlı ısı sığası bulunur. Bu durumda ısı sığasının kalınlığa bağlı değişimi şekil-19 de gösterilir.



Şekil-19-a İnce film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Güçlü non parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{16} \text{ m}^{-3}$.



Şekil-19-b İnce film için kalınlığın fonksiyonu olarak ısı sığası. Güçlü non-parabolik durum, Non-Dejenere Hal. $n_{el}=10^{22} \text{ m}^{-3}$.

4. BULGULAR

Ölçüce kuantlanmış yarıiletken ince filmlerde enerji spektrumunun non-parametreliğı dikkate alınarak elektron gazının bazı termodinamik özellikleri; konsantrasyon, kimyasal potansiyel, entropi, ısı sığası, dejenere ve non-dejenere hallerde keyfi, zayıf ve non-dejenere durumlar için incelenmiştir.

Dejenere halde; konsantrasyon kalınlığa bağılı olarak elde edilmiş ve ondan, kimyasal potansiyel türetilmiştir. Entropi ve ısı sığasının yaklaşık eşit olduğu görülmüştür. Ayrıca kalınlık için sınır değerler araştırılarak, sözü edilen fiziksel büyüklükler için kalınlığa bağılı sınır değerleri elde edilmiştir.

Non-Dejenere halde; konsantrasyon, kimyasal potansiyel, entropi, ısı sığası denklemleri elde edilerek, zayıf non-parabolik ve güçlü non-parabolik durumlar için türetilmiştir. Bu ifadeler non-paraboliklik parametreliğinin birden çok büyük ve çok küçük değerleri için araştırılmıştır.

Ayrıca, elde edilen sonuç denklemlerin Mathcad Plus 5.0 yazılım bilgisayar programı kullanılarak grafikleri çizilerek analitik incelemesi yapılmıştır.

5. SONUÇLAR

Ölçü kuantlanmış Kane dispersiyon kanunlu yarıiletken ince katlarda elektron gazının bazı termodinamik büyüklükleri(konsantrasyon, kimyasal potansiyel, entropi ve ısı sığası) araştırılmıştır. Bu büyüklükler için ince katın kalınlığının keyfi değerlerinde ve elektron gazının keyfi dejenere derecesinde geçerli olan genel ifadeler bulunarak, bu ifadeler bir dizi özel hallere uygulanmıştır.

Dejenere elektron gazlı ince katlarda ısı sığası ince katın kalınlığına göre non-monoton değişir ve bu değişimin periyodu iletken elektronlarının konsantrasyonuna ve paraboliklik parametresine bağlı olduğu belli olmuştur.

Non-dejenere elektron gazlı ince katlarda ise ısı sığasının sayısal değeri aynı tür hacmi kristallerdeki değerinden daha büyük olabilir.

Genel ifadelerden dejenere ve non-dejenere haller için non-parabolik enerjinin keyfi, birden çok büyük ve çok küçük değerleri için film kalınlığının fonksiyonu olarak özel ifadelere ulaşılmıştır. Her durumda non-parabolik enerji spektrumlu yarıiletkenlerin ölçüce kuantlandığı görülür.

Çizelge-3 verileri kullanılarak dejenere ve non-dejenere şartlarından ve entropi denklemlerinin sıfıra eşitlenerek bulunan kalınlık değerlerinin ölçüce kuantlanmanın olduğu kriterleri sağladığı anlaşılmıştır. Kimyasal potansiyel, entropi ve ısı sığası denklemlerinde kullanılarak bu eşitliklerin konsantrasyonun ve kalınlığın fonksiyonu olarak en basit biçime dönüştürülmüştür. Araştırmanın genelinde aynı tip film modelleri için bulunan entropi ve ısı sığasının eğrilerinin birbiriyle özdeş oldukları(dejenere durumda eşit), ancak büyüklüklerinin farklı oldukları anlaşılmıştır. Bu büyüklüklerin sadece non-dejenere halde ve güçlü non-parabolik durumda kısmen özdeş oldukları görülmektedir.

İlginç bir sonuç da, ele alınan durumlarda kalın film için araştırılan fiziksel büyüklükler kalınlığa bağlı olmaz, hacmi-numunelerindeki değerine denk olur.

6. TARTIŞMA

Dejenere halde ısı sığası eğrisinin kesikli azalan biçim göstermesi ölçüce kuantlanmanın varlığını gösterir. Isı sığası eğrisinin tipi Ghatak, 1982 den farklı görünmektedir. Bunun nedeni kullanılan yöntemlerin farklı olması, asimtotik yaklaşımlarda ilk terimin yeterli görülmesi olabilir. Ayrıca Ghatak, 1982 nin makalesinde kalınlık değerleri 5-60 nm. alınmıştır, bu kalınlık aralığının, çalışma sırasında elde edilen sınır kalınlık değerlerine uyduğu görülmüştür. Sunulan bu araştırmada elde edilen kalınlık değerleri ölçüce kuantlanma şartını sağlamakta, aynı zamanda hacmi numunelerdeki değerlerine de uymaktadır.

Araştırmanın genelinde aynı tip film modelleri için bulunan entropi ve ısı sığasının birbiriyle özdeş oldukları(dejenere durumda eşit) anlaşılmıştır. Sadece non-dejenere halde güçlü non-parabolik halde kısmen özdeş oldukları görülmektedir. Aynı kalınlık değerleri kullanıldığında entropinin hızlıca yükseldiği ve sonra kalınlığın artmasıyla azaldığı, ısı sığasının ise önce entropi gibi davrandığı sonra kalınlığın artmasıyla arttığı görülür. Bunun nedeni kalınlığın artmasıyla ölçü kuantlanmasının oluşma şartlarının bozulması olabilir. Konsantrasyon $n_{el}=10^{16}-10^{22}m^{-3}$. aralığında alındığında entropi ve ısı sığasına kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu gözlemlenir.

7. ÖZET

İki bandlı Kane modeli yaklaşımıyla genel enerji spektrumundan elde edilen non-parabolik enerji spektrumu araştırmada baz alınmış, ve onun ölçüce kuantlanmayı sağladığı anlaşılmıştır.

Gibbs yöntemi kullanılarak Büyük Termodinamik Gibbs Potansiyelinden elde edilen denklemlerin dejenere ve non-dejenere durumlarda zayıf ve güçlü non-parabolik yaklaşımlar için çalıştığı görülmüştür.

Dejenere haldeki kimyasal potansiyel, entropi ve ısı sığası denkleminin ölçüce kuantlanma nedeniyle şekilde keskin eğimler göstermektedir. Ancak, bilinen sonuçlara uymaktadır(Askerov, 1994). Dejenere elektron gazlı ince katlarda ısı sığası ince katın kalınlığına göre non-monoton değişir ve bu değişimin "osilasyon periyodu" iletken elektronlarının konsantrasyonuna ve paraboliklik parametresine bağlı olur. Bu iki değişken kalınlık sınır değerlerini tam olarak belirler ve deneyçiler için araştırma alanının sınırını gösterir.

Non-dejenere halde zayıf non-parabolik durumda aşırıince film için elde edilen enerji ve kimyasal potansiyel akla uygun yaklaşımda(Askerov, 1994)ün sonucuna uymuştur. Konsantrasyon ve kimyasal potansiyel eşitlikleri kullanılarak, ince ve kalın film için zayıf ve güçlü non-parabolik durumda entropi ve ısı sığası en basit biçimde bulunmuştur. Entropi ve ısı sığası grafikleri incelendiğinde aynı tip filmde eğrilerin özdeş olduğu sadece büyüklüklerinin farklı olduğu görülmüştür. Non-dejenerelik, aşırıince film, kalın film ve entropinin sıfıra eşitlenerek elde edilen kalınlık değerleri ölçüce kuantlanma için fikir vermiş, ölçüce kuantlanma için öngörülen kalınlığa uyduğu görülmüştür.

Seçilen yöntemin karakteristik özelliği, işlem esnasında yapılan kısaltma ve asimtotik denklemlerin ilk iki teriminin kullanılması, elde edilen ifadelerde diğer araştırma sonuçlarından, küçük farklar yaratabileceği hatırd tutulmalıdır.

8. SUMMARY

Using two-band approximation by Kane Model non-parabolic energy spectrum is obtained. The energy spectrum explained above is taken as basis energy.

Needed equations are used in degeneracy and non-degeneracy states. It is seen that they study. In degeneracy state chemical potential, entropy and heat capacity show discrete curved due to existence quantum size effect for arbitrary and degeneracy criterion of thickness' values. Oscillation period depends on concentration of electrons and parabolicity parameter.

In non-degeneracy states it is seen that energy and chemical potential are conformed to known expression for superthin films (Askerov, 1994). For thin and thick films in thin and strong non-parabolic states entropy and heat capacity are written as elementary form. It is observed that entropy and heat capacity figures have similar qualifications, but they distinguish in magnitudes for the same model films.

As entropy is equated to zero, thickness for quantum size effect is obtained and it is shown that this thickness is for quantum size effect criterion.

As a result needed expressions have been obtained and yield to quantum size effects. It is remembered that there may be little error portion, because for asymptotically expressions first two terms are used.

KAYNAKLAR

- ANDO, T. J. 1974. Phys. Soc. Jpn. 37:1332.
- ANSELM, A. 1981. Introduction to Semiconductor Theory. 1st.ed. MIR Publisher. Moscow.
- ASKEROV, B.M. 1994. Electron Transport Phenomena in Semiconductors. World Scientific, Singapore.
- ASKEROV, B.M., KULIEV, B.I., EMINOV, R.F. 1977. Fiz. Nizk. Temp. 35:344.
- BLOCH, M.D. 1975. Fiz.Tverd. Tela. 17:896.
- BLOCH, M.D., TAVGER, B.A. 1972. Fiz. Met. Metalloved. 34:691.
- BOETTGER, J.C. 1998. Thickness dependencies in the calculated properties of metallic ultra-thin films. Proceeding of the MRS Fall Meeting. Boston, USA. 157-167.
- CALLAWAY, J. 1957. J. Electronics. 2:330.
- DEMIKOVSKY, B.Y., TAVGER, B.A. 1964. Fiz.Tverd. Tela. 6:960.
- GHATAK, K.P. 1982. Effect of Size Quantization. Phys. Stat. Sol. (b). 110:323.
- GLADUN, A.D., RYZHII, V.I. 1969. Zh.Eksp.Teor. 57:978.
- HERMAN, F. 1955. J. Electronics. 1:105.
- HERMAN, F. 1959. Phys. Chem. Solids. 8:380.
- KANE, E.O. 1957. Band Structure of InSb. Phys. Chem. Solids. vol.1:249-261.
- KANE, E.O. 1966. Semiconductors and Semimetals. 1st.ed. WILLARSON, R.K., BEER, C. Vol.1:75.
- KONDRATYEV, A.S., LYUBLINSKAYA, I.E., UZDIN, V.M. 1991. Low temperature thermomagnetic properties of thin films in high magnetic fields. Thin Solid Films. vol. 202:21-28.
- KORNEYEV, V.V. 1977. Fiz.Tverd. Tela. 19:357.
- LANDAU, L.D., LIFSHITS, E.M. 1980. Statistics of Physics. 3st.ed. Permagon Press, Ltd. England.
- LIFSHITS, I.M., KAGANOV, M.I. 1959;1962;1965. Usp. Fiz. Nauk. 69:419;78:411;87:389.
- LIFSHITS, I.M., KOSEVICH, A.M. 1953. Dok. Akad. Nauk. SSSR. 91:795.
- LÖWDIN, P.J. 1951. Chem.Phys. 19:1396.
- LUTSKY, V.N. 1965. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 2:391.

- LUTSKY, V.N., KORNEYEV, D.N., ELINSON, M.I. 1966. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 4:267.
- OGRIN, Y.F., LUTSKY, V.N., ATIFOVA, M.U., KOVALEV, V.I.,
SANDOMIRSKY, V.B., ELINSON, M.I. 1967. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 53:1218.
- ROMANOV, A.A., MAGARILL, L.I., SARDARYAN, V.S. 1970. Fiz. Tekh. Poluprovodn. 4:1262.
- RYZHII, V.I. 1969. Fiz. Tekh. Poluprovodn. 3:1704.
- SANDOMIRSKY, V.B. 1962. Radiotekh. Elektron. 7:1971.
- SANDOMIRSKY, V.B. 1962. Zh. Eksp. Fiz. 43:2309.
- SANDOMIRSKII, V.B. 1967. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 52:158.
- TAVGER, B.A., DEMIKOVSKII, V.N. 1968. Usp. Fiz. Nauk. 96:61.
- TAVGER, T. 1967. Transport Phenomena in Semiconducting Thin Film. Phys. Stat. Sol. 22:31.
- TELLIER, C.R., TOSSER, A.J. Size Effects in Thin Films. Vol.2. Elsevier Scientific Publishing Company. Oxford, England.
- WALTER, A.H. 1979. Solid State Theory. Dover Publications. Inc. London.

ÖZGEÇMİŞ

1966 yılında Kayseri’de doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini İzmir Karşıyaka’da tamamladı. 1983 yılında girdiği Gazi Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünden 1988(Şubat) da Fizikçi olarak mezun oldu. 1988(Ağustos)-1989(Kasım) döneminde askerlik görevini yaptı. 1990-1993 yıllarında İzmir sanayisinde Elektronik montaj teknisyeni olarak çalıştı. 1993(Nisan-Ekim) de Marmara Üniversitesi Atatürk Eğitim Fakültesinden Öğretmenlik Formasyon sertifikası aldı. İstanbul Vatan Lisesinde ve İstanbul Gelenbevi Lisesinde ücretli ders verdi. 1994 de M.E.B. Bitlis Ahlat Selçuklu Lisesine Fizik öğretmeni olarak atandı. İki yıl görev yaptı. 1996(Eylül)de YYÜ Fen Bilimleri Enstitüsünde Yük. Lis. öğrenimine başladı. 1997(Şubat) Van Suphan İlköğretim Okuluna tayin oldu. 1998(Ocak) de YYÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Yardımcı Öğretim Görevliliği kadrosuna atandı. Ekim-1999 'da görevi sona ermiştir.

TC. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ