

YARI-PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNDA
SAFSIZLIK DÜZEYLERİ
VE ÖZKUTUPLANMA

FATMA AYDIN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
2012

CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YARI-PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNDA
SAFSIZLIK DÜZEYLERİ
VE ÖZKUTUPLANMA

FATMA AYDIN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI
PROF. DR. HÜSEYİN SARI

SİVAS
2012

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ'NE

Bu çalışma Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanmış ve jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Prof. Dr. Rauf AMİROV

Üye: Prof. Dr. Esin KASAPOĞLU

Üye (Danışman) : Prof. Dr. Hüseyin SARI

ONAY

Bu tez çalışması, 09/11/2012 tarihinde Enstitü Yönetim Kurulu tarafından belirlenen ve yukarıda imzaları bulunan jüri üyeleri tarafından kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Mustafa DEĞİRMENCİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

Bu tez Cumhuriyet Üniversitesi Senatosu'nun 24.09.2008 tarihli ve 009 sayılı toplantısında kabul edilen Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Tez Yazım Kılavuzu adlı yönergeye göre hazırlanmıştır.

ÖZET

YARI-PARABOLİK KUANTUM KUYUSUNDA SAFSIZLIK DÜZEYLERİ VE ÖZKUTUPLANMA

Fatma AYDIN

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Hüseyin SARI

2012, 57 sayfa

Tez çalışmasında, simetrik olmayan düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin elektronik devre elemanlarının oluşturulmasındaki önemi üzerinde durularak katkılı yarı-parabolik kuantum kuyusunun elektronik yapısı elde edildi. Donor bağlanma enerjisi ve kutuplanma farklı boyut parametrelerine göre hesaplandı. Çalışmanın son aşamasında elde edilen fiziksel sonuçlar yorumlandı.

Anahtar kelimeler: Kuantum kuyusu, Öz-kutuplanma, Safsızlık, Yarıiletken

ABSTRACT

IMPURITY LEVELS AND SELF-POLARIZATION IN A SEMI-PARABOLIC QUANTUM WELL

Fatma AYDIN

Master of Science Thesis, Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Hüseyin SARI

2012, 57 pages

In this study, the importance of the low dimensional semiconductor structures on the developing the electronic devices and the electronic structure of the doped semi-parabolic quantum wells are investigated. Donor binding energy and self-polarization are obtained for different values of system parameters. Finally the obtained results are discussed.

Key Words: Quantum well, Self-polarization, Impurity, Semiconductor

TEŐEKKÖR

Tez konumun seiminde ve alıőmamın her aőamasında bilgi ve deneyimlerinden faydalandığım deęerli hocam Prof. Dr. Hőseyin SARI'ya teőekkőr ederim.

alıőmam boyunca yardımcı olan tőm hocalarıma, her zaman yanımda olan ve desteklerini esirgemeyen aileme, yőksek lisans arkadaşlarıma teőekkőr ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
İÇİNDEKİLER	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	v
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	vii
1. GİRİŞ.....	1
2. YARIİLETKENLER.....	2
2.1 Yarıiletkenlerin Band Yapısı ve Saf Yarıiletkenler.....	2
3. KATKILI YARIİLETKENLER	4
3.1 n-tipi yarıiletkenler.....	4
3.2 p-tipi yarıiletkenler.....	6
4. HETEROYAPILAR.....	8
4.1 Kuantum Kuyuları, Kuantum Telleri ve Kuantum Noktaları.....	10
4.2 Donor Katkılı Heteroyapılar.....	13
5. KUTUPLANMA.....	18
5.1 Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda Safsızlık Bağlanma Enerjisi ve Özkutuplanma	20
6. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	42
7. KAYNAKLAR.....	43
ÖZGEÇMİŞ	46

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Metal, yarıiletken ve yalıtkanların bant yapıları	2
Şekil 2.2 (a) $T = 0$ K de yarıiletkenlerin band yapısı, (b) $T > 0$ K de yarıiletkenlerin band yapısı.....	3
Şekil 3.1 (a) Silisyum kristalinin fosfor ile katkılanması, (b) iletim elektronunun oluşumu	5
Şekil 3.2 n-tipi bir yarıiletkenin enerji bant diyagramı.....	5
Şekil 3.3 (a) Silisyum kristaline bor atomu katkılanması (b) deşik hareketi.....	6
Şekil 3.4 p-tipi bir yarıiletkenin enerji bant diyagramı.....	7
Şekil 4.1 Oda sıcaklığında bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve band aralıkları. Katı çizgiler direkt band aralığını ve kesikli çizgiler ise indirekt band aralığını göstermektedir.....	8
Şekil 4.2 İki yarıiletkenden heteroyapıların elde edilmesi.....	9
Şekil 4.3 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunun elektronik band yapısı.....	11
Şekil 4.4 Kuantum kuyusundan kuantum telinin elde edilmesi.....	12
Şekil 4.5 Kuantum noktasının elde edilmesi.....	13
Şekil 4.6 Külçe yarıiletkendeki nötral donörün şematik gösterimi.....	14
Şekil 4.7 Kuyu genişliğinin donör dalga fonksiyonu üzerindeki etkisinin şematik gösterimi.....	15
Şekil 4.8 Donör konumunun dalga fonksiyonu üzerindeki etkisinin şematik gösterimi.....	16
Şekil 5.1 Yarı-parabolik kuantum kuyusunda $z_i = 0$ konumunda bulunan safsızlık atomu-elektron sisteminin yük dağılımının şematik gösterimi.....	18
Şekil 5.2 Yarı-parabolik kuantum kuyusunda $z_i \neq 0$ konumunda bulunan safsızlık atomu-elektron sisteminin yük dağılımının şematik gösterimi.....	19
Şekil 5.3 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyu profili.	20
Şekil 5.4 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda kuşatma doğrultusunda parçacığın hareketini temsil eden enerji düzeylerinin açısız frekansa (ω_0) göre değişimi.....	25

Şekil 5.5 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $\tilde{z}_i = 0$ konumunda bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin açısıl frekansa (w_0) göre değişimi.....	27
Şekil 5.6 Farklı açısıl frekans değerlerinde kuyu genişliğinin değişimi.....	28
Şekil 5.7 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $\tilde{z}_i = 0$ için kutuplanmanın açısıl frekansa (w_0) göre değişimi.....	29
Şekil 5.8 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda $n = 1$ ve $n = 2$ düzeylerinde bulunan elektron için bağlanma enerjisinin açısıl frekansa (w_0) göre değişimi.....	30
Şekil 5.9 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda farklı açısıl frekans değerlerine göre dalga fonksiyonlarının değişimi.....	32
Şekil 5.10 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yarı-parabolik kuantum kuyusunda farklı frekans değerleri için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin donör safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.....	33
Şekil 5.11 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda kutuplanmanın safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.....	35
Şekil 5.12 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda farklı frekans değerleri için kutuplanmanın safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.....	36
Şekil 5.13 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda safsızlık atomunun farklı üç konumu için bağlanma enerjisinin açısıl frekansa (w_0) göre değişimi.....	37
Şekil 5.14 Yarı-parabolik GaAs/Ga _{1-x} Al _x As kuantum kuyusunda farklı safsızlık atomu konumları için kutuplanmanın açısıl frekansa göre değişimi.....	39
Şekil 5.15 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yarı-parabolik kuantum kuyusunda taban ve ilk uyarılmış durumda bulunan elektron için bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.....	40

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1 Dört temel sistem için elektron hareketinin serbestlik derecesi sayısı D_s ve kısıtlama yönü sayısı D_k	10
---	----

1. GİRİŞ

Opto-elektronik aletlerin oluşturulmasında yaygın olarak kullanılan kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktalarının optik özellikleri birçok araştırmacı tarafından incelenmiştir [1-5]. Yapılan çalışmalarda önce yük taşıyıcılarının bir yöndeki hareketleri kısıtlanarak iki-boyutlu kuantum kuyusu, kuşatılma boyutları artırılarak bir boyutlu kuantum telleri ve sıfır-boyutlu kuantum kutuları yapılmıştır. Geliştirilen sistemlerde boyut azaldıkça yani kuşatılma arttıkça fiziksel özellikleri belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelmektedir. Bu sayede özel fonksiyonlara sahip devre elemanları tasarlanmaktadır.

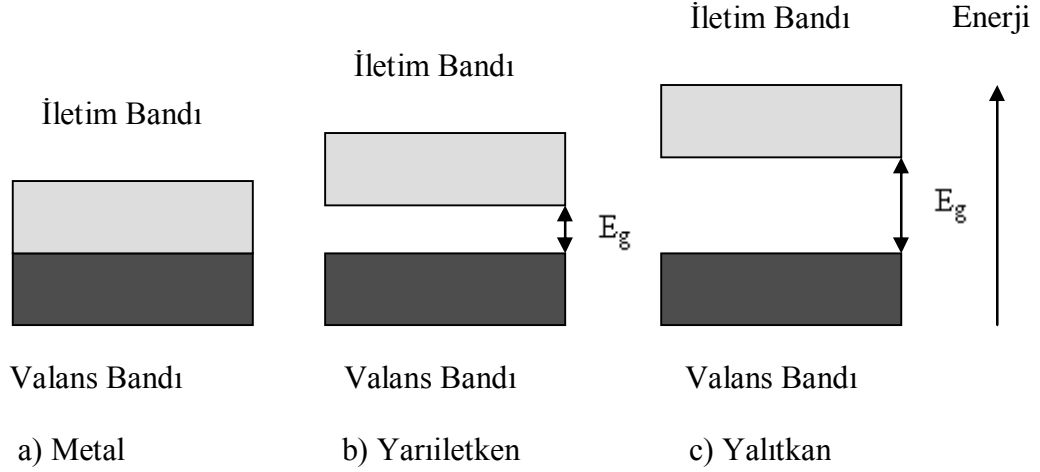
Son yirmi yılda yarıiletken kuantum kuyularında lineer olmayan optiksel özelliklerin belirlenmesi konusunda yoğun çalışmalar yapılmıştır [6, 7]. Bu çalışmalar kapsamında özellikle optiksel kırınım, ikinci-harmonik elektro-optik gibi ikinci-derece optik etkiler konusu önem kazanmıştır [2, 8, 9, 10].

Bilindiği gibi ikinci-derece optiksel etkiler, simetrik kuantum kuyu yapılarında kaybolur. Anlamlı büyüklüğe sahip ikinci-derece duygunluk sadece kuşatma potansiyelinin simetrisi kırıldığı zaman gözlenebilir. Sonuç olarak, asimetrik bir sistem olan yarı-parabolik kuantum kuyusunda lineer olmayan optiksel özelliklerin belirlenmesi önem kazanmaktadır. Ayrıca parabolik kuantum kuyusu ile kıyaslandığında yarı-parabolik kuantum kuyusundaki kuşatmanın daha büyük enerji düzeyleri verdiği ve optiksel duygunlukta büyük değişikliklere neden olduğu görülür [2, 11, 12, 13]. Özellikle ikinci-mertebe lineer olmayan optiksel özelliklerin önem kazandığı asimetrik kuantum sistemleri genellikle iki yöntemle gerçekleştirilebilmektedir. İlk yöntem, MBE (Molecular-Beam Epitaxy), MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) gibi gelişmiş meteryal-büyütme tekniklerinin kullanıldığı yöntemdir [6, 14, 15, 16]. İkinci yöntemde ise, simetrik kuşatma potansiyeline dışarıdan elektrik alan uygulanarak asimetrik yapı elde edilmektedir [10, 17, 18].

2. YARIİLETKENLER

2.1 Yarıiletkenlerin Band Yapısı ve Saf Yarıiletkenler

Metal, yarıiletken ve yalıtkanların $T = 0$ K sıcaklığındaki bant yapıları şematik olarak şekil 2.1' de verilmiştir.

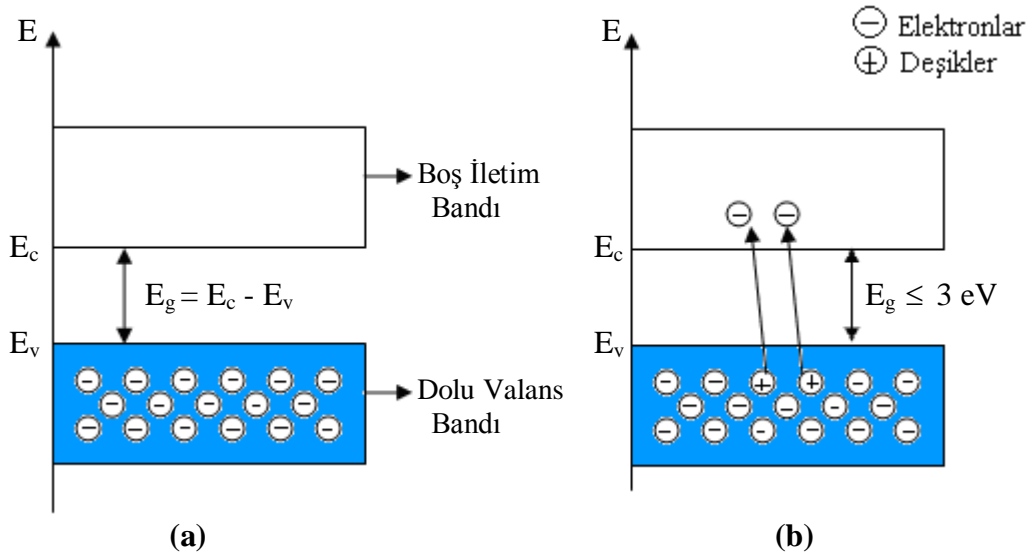


Şekil 2.1 Metal, yarıiletken ve yalıtkanların bant yapıları

Tamamen elektronlarla dolu olan banda valans bandı, bu banttan sonra gelen izinli banda da iletim bandı denir. İletim bandı ile valans bandı arasındaki enerji aralığı ise yasak enerji aralığıdır [19, 20]. Valans bandı tamamen dolu ve iletim bandı tamamen boş olan katılara yalıtkan denir. Yalıtkanlarda yasak enerji aralığı büyüktür. Dolayısıyla yalıtkanlarda elektronların valans bandından iletim bandına geçme olasılıkları yoktur. İletim bandı kısmen dolu olan veya boş olan katılara iletken denir. İletkenlerde yasak enerji aralığı (E_g) yoktur ve elektriği iyi iletirler. Yarıiletkenlerin yasak enerji aralığı genellikle 3 eV' dan küçüktür [21].

Mutlak sıfır sıcaklığında ($T = 0$ K) yalıtkan olan yarıiletken maddeler; ısı, ışık, manyetik ya da elektriksel uyarmalar gibi dış etkiler altında bir miktar değerlik elektronlarının iletim bandına geçmesi sonucu elektriği iletirler. Uygulanan bu dış etkiler ortadan kaldırıldığında saf yarıiletkenler yalıtkan hale geri dönerler. Bir yarıiletkenin elektriksel iletkenliği sıcaklıkla orantılıdır. Sıcaklık arttığında yarıiletkenin özdirenci küçülür. Yarıiletkende yabancı madde konsantrasyonunun artmasına (katılama) bağlı olarak özdirenç yine azalır [21, 22].

Yarıiletkenlerde elektriksel iletim, iletim bandındaki elektronlar ve valans bandındaki deşiklerle (elektronların boş bıraktığı yerler) sağlanır. Bir yarıiletkenin enerji bant yapısı, şekil 2.2' de görüldüğü gibi mutlak sıfır sıcaklıkta ($T = 0 \text{ K}$) tamamen dolu elektronik durumlardan oluşan bir valans bandı, tamamen boş bir iletim bandı ve bu iki bant arasında dar bir yasak enerji aralığı şeklindedir. Yarıiletken, mutlak sıfır sıcaklığında kısmen dolu bandı bulunmadığı için mükemmel bir yalıtkandır [23]. Bu sıcaklıkta saf bir yarıiletkenin E_f Fermi enerjisi yasak enerji aralığının tam ortasındadır [22]. Sıcaklık artırılırsa ($T > 0 \text{ K}$) elektronlar yasak enerji aralığını geçecek kadar uyarılır ve değerlik (valans) bandında bir deşik (boşluk) bırakarak iletim bandına geçerler. Bu nedenle yüksek sıcaklıklarda yarıiletkenler iletken gibi davranırlar. Deşikler ise pozitif yüklü tanecikler gibi davranır ve elektronun yükü ile zıt yüke sahiptir. Yarıiletkene elektrik alan uygulandığında, deşiklerin ve elektronların her ikisi de elektrik alandan etkilendiği için ilettime katkıda bulunurlar [21].



Şekil 2.2 (a) $T = 0 \text{ K}$ de yarıiletkenlerin band yapısı, (b) $T > 0 \text{ K}$ de yarıiletkenlerin band yapısı

Yarıiletkenlerin tipi iletim bandındaki elektronların ve valans bandındaki deşiklerin yoğunluklarına bakılarak belirlenir. İletim bandındaki elektron yoğunluğu, valans bandındaki deşik yoğunluğuna eşit ise bu yarıiletkenlere saf yarıiletken, eşit değilse saf olmayan yarıiletken denir [22, 23]. Saf yarıiletkenlerde akım iletimine katkıda bulunan elektron ve deşik yoğunluğu az olduğundan aygıt yapımında nadir olarak kullanılır [21, 24].

3. KATKILI YARIİLETKENLER

Yarıiletkenlerde elektron ve deşikler olmak üzere iki tip yük taşıyıcıları bulunur. Saf bir yarıiletkende elektron ve deşik konsantrasyonları birbirine eşittir. Çünkü bir elektron valans bandından iletim bandına herhangi bir uyarılma ile çıkarılırken geride daima bir deşik bırakır. Saf yarıiletkenlerde taşıyıcı yoğunluğunu artırmak için kullanılan en yaygın yöntem yarıiletken içine dikkatli bir şekilde belirlenmiş safsızlık maddesi katmaktır. Safsızlıkları katma işlemine katkılama denir. Bu katkılamalar, yarıiletkenin elektriksel özelliğini önemli ölçüde etkiler [25, 26]. Yarıiletkenler katkılama işleminden sonra n-tipi veya p-tipi özellik gösterir [27]. Katkılama, yarıiletkenlerin taşıyıcı konsantrasyonunu artırırken çeşitli elektronik devre elemanlarının yapımına da olanak sağlar [25].

3.1 n-tipi yarıiletkenler

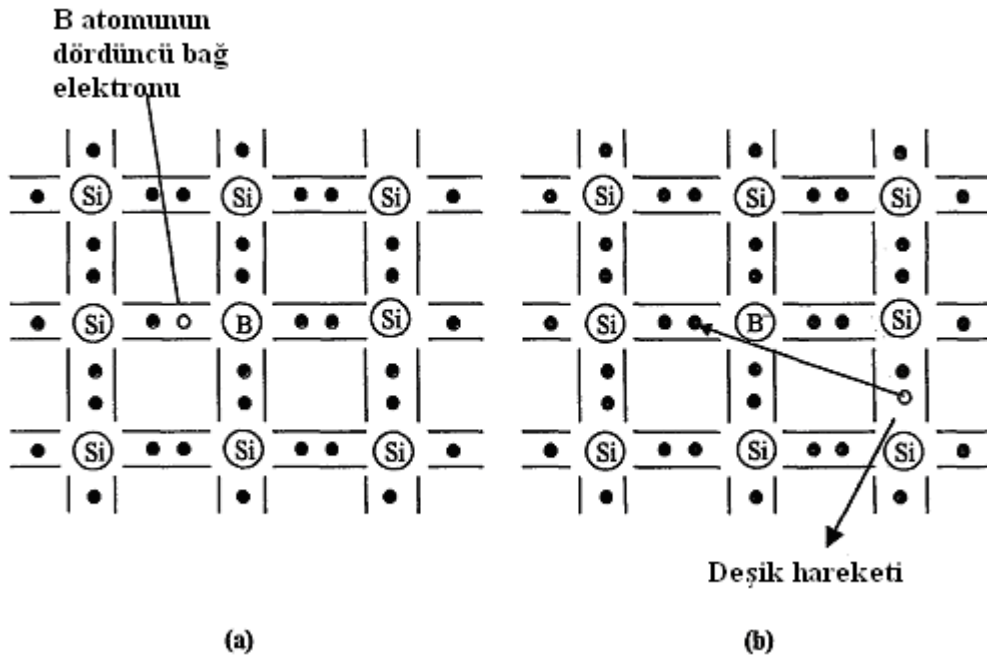
Kristal yapıda olan malzemelerde her atom komşu dört atomla kovalent bağlı olup değerliği dördür. Değerliği beş olan fosfor, arsenik, antimon gibi bir katkı atomu örgüdeki normal bir atom ile yer değiştirirse, dört kovalent bağı tamamladıktan sonra geriye bir valans elektronu kalır ve bir katkı atomu örgüyü en az bozacak şekilde yerleşmiş olur [25].

Şekil 3.1'de görüldüğü gibi Silisyum kristaline P atomu katkılanırsa, Si atomunun dört elektronu ile kovalent bağ oluşturur. P atomu beş elektronlu olduğu için bağlanmalar sonunda P atomunun bir elektronu boşta kalır. Bu beşinci elektron, P atomuna zayıf bir kuvvet ile bağlıdır ve kolaylıkla P atomundan ayrılabilir. Dolayısıyla serbest bir elektron gibi davranır ve oda sıcaklığında iletim bandında yük taşıyıcı olarak bulunur. Boşta kalan bu tür katkı atomlarına donör (verici) ve bu donör atomların bulunduğu enerji seviyesine de donör enerji seviyesi denir. Bu şekilde oluşan katkılı yarıiletkene ise n-tipi yarıiletken denir. n-tipi yarıiletkenlerde elektron yoğunluğu deşik yoğunluğundan fazladır.

3.2 p-tipi yarıiletkenler

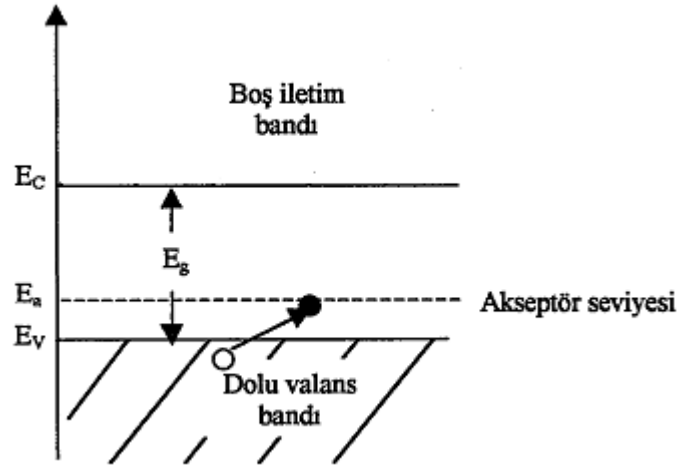
Silisyum kristali içerisine şekil 3.3' de görüldüğü gibi değerlik elektron sayısı üç olan bor atomu katkılanırsa, üç elektron komşu atomlarla kovalent bağ oluşturur ve dördüncü bağda bir elektron eksik kalır. Dörtlü bağı tamamlayabilmek için bu elektron, başka bir atomdan alınan elektron ile tamamlanır ve valans bandında bir deşik (boşluk) bırakır. Bu deşik, safsızlık atomu çevresinde Coulomb potansiyeli etkisinde hareket eder ve Coulomb etkileşmesi zayıf olduğu için serbest parçacık gibi davranır. Bor atomu kovalent bağı tamamlayabilmek için bir elektron aldığından dolayı bor atomuna alıcı yani akseptör denir ve buldukları enerji seviyesine de akseptör enerji seviyesi denir. Bu şekilde oluşan katkılı yarıiletken ise p-tipi yarıiletken denir. p-tipi yarıiletkenlerde deşik yoğunluğu, elektron yoğunluğundan fazladır.

Akseptör enerji seviyesi, akseptör tarafından bir deşiğin yakalanabilmesi için gerekli enerjiye eşittir. Akseptör iyonlaştığında, yani, bir elektron valans bandından deşiğin bulunduğu yeri dolduracak şekilde uyarıldığında, deşik valans bandının en üst enerji seviyesine düşer ve serbest bir taşıyıcı haline gelir. Bu yüzden iyonlaşma olayı, enerji diyagramında elektronun yukarıya doğru çıkışı, deşiğin ise aşağıya inışı olarak temsil edilebilir [29].



Şekil 3.3 (a) Silisyum kristaline bor atomu katkılanması, (b) deşik hareketi [28]

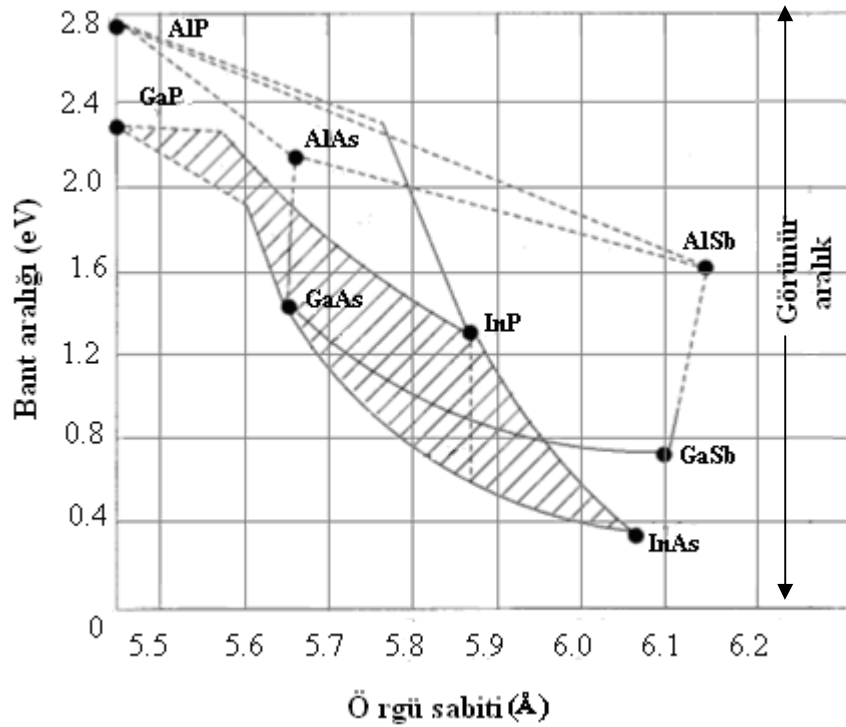
Şekil 3.4’de B atomu katkılanan Si kristalinin enerji bant diyagramı görülmektedir. Enerji bant diyagramında görüldüğü gibi bir elektron enerji aldığı anda valans bandın üst tarafına çıkar, deşik ise aşağı iner. Akseptörün enerji seviyesi, valans band sınırının biraz yukarısında bulunur. Ayrıca p-tipi yarıiletkenlere Fermi enerji seviyesi yasak enerji aralığın orta kısmından ayrılarak valans bandına doğru, katkı yoğunluğuna bağlı olarak bir kayma yapar [29].



Şekil 3.4 p-tipi bir yarıiletkenin enerji bant diyagramı [28]

4. HETEROYAPILAR

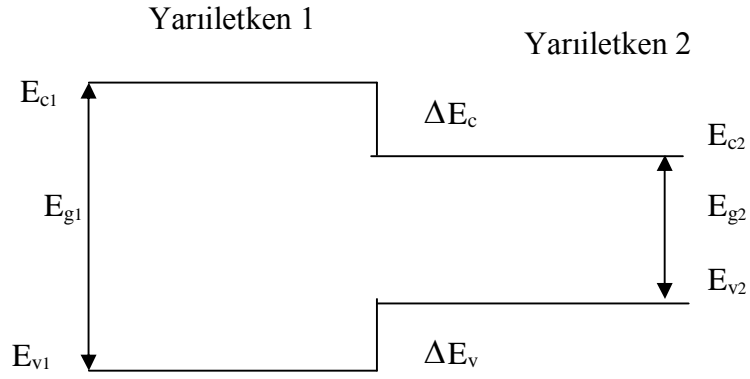
Birbirinden farklı iki yarıiletkenin bir araya getirilmesi ile oluşan yapıya heteroyapı denir. Heteroyapıyı oluşturan bir yarıiletkenin kristal potansiyeli ile elektronik yapısının, ara yüzey düzlemine kadar değişmediği kabul edilir. Örgü sabiti, bir yarıiletkenin heteroyapı oluşturabilme uygunluğu belirler. Bir araya getirilen heteroyapıların örgü sabiti ve örgü yapısı birbirine yakın olmalıdır [30]. Şekil 4.1’ de bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve band aralıkları verilmiştir. $Ga_{1-x}Al_xAs$ yarıiletkeninde enerji band aralığı AlAs ve GaAs birleşiklerinin örgü sabitlerine bağlıdır. AlAs ve GaAs materyallerinin örgü sabitleri arasındaki fark yaklaşık 0.01 \AA ’dur. $Ga_{1-x}Al_xAs$ alaşım sistemi $0 \leq x \leq 1$ için GaAs ile hemen hemen mükemmel bir eşleşme sağladığından çok yüksek kaliteli çoklu tabakalar halinde heteroyapılar oluşturulabilir [30, 31].



Şekil 4.1 Oda sıcaklığında bazı yarıiletkenlerin örgü sabitleri ve band aralıkları. Katı çizgiler direkt band aralığını ve kesikli çizgiler ise indirekt band aralığını göstermektedir [31]

Örgü sabitleri birbirine yakın yarıiletkenlerin oluşturdukları heteroyapıda, eğer bu yarıiletkenin temel bant aralığı direkt ise, bant süreksizlik profili, kuantum kuyusu modelini temsil eder. Kuantum kuyusunu oluşturan yarıiletkenlerin bant yapıları, bant sınırlarında benzer olduklarından dolayı, engelde ve çukurda etkin kütle farkı önemsenmeyebilir. Bir boyutlu potansiyel içinde z-doğrultusunda kuşatılan elektron ve deşik, kuşatma doğrultusuna dik (x-y) düzleminde serbest parçacık karakterinde olup, sanki iki boyutlu davranış gösterirler.

Heteroyapının ara yüzeyinin her iki yanındaki ortalama elektron yoğunluğu eşit kabul edilirse, serbest elektron modeline göre Fermi enerji düzeyi yasak enerji aralığının ortasında bulunur. Elektronik yapıları aynı veya çok yakın olan iki yarıiletken birleştirildiğinde, bir süre sonra fermi enerji düzeyleri aynı seviyeye gelir.



Şekil 4.2 İki yarıiletkenden heteroyapıların elde edilmesi

Şekil 4.2' de görüldüğü gibi heteroyapı oluşturmak için iki malzeme bir araya getirildiğinde iletim ve valans bandında sırasıyla ΔE_c ve ΔE_v süreksizlikleri oluşur. Valans bandında oluşan süreksizlik;

$$\Delta E_v = \frac{E_{g1} - E_{g2}}{2} \quad (4.1)$$

eşitliği ile verilmektedir. ΔE_v bilinirse iletkenlik bandındaki süreksizlik;

$$\Delta E_c = |E_{g1}^f - E_{g2}^f| - |\Delta E_v| \quad (4.2)$$

ile verilebilir. E_{g1}^f , E_{g2}^f külçelerin deneysel olarak belirlenen yasak band aralıklarıdır.

Eğer heteroyapıyı oluşturan yarıiletkenlerin ikisi de direkt bant aralıklı ise, ΔE_c yukarıda verilen bağlantı ile kolayca hesaplanır. Fakat her iki yarıiletken dolaylı bant aralığına sahipse, iletim bandındaki kesiklik hesaplanırken aynı iletim bandı minumumlarının farkı alınmalıdır. Yani külçe bant diyagramında \vec{k} dalga vektörleri aynı olmalıdır. Böylece heteroyapılardaki süreklilik koşulu sağlanır.

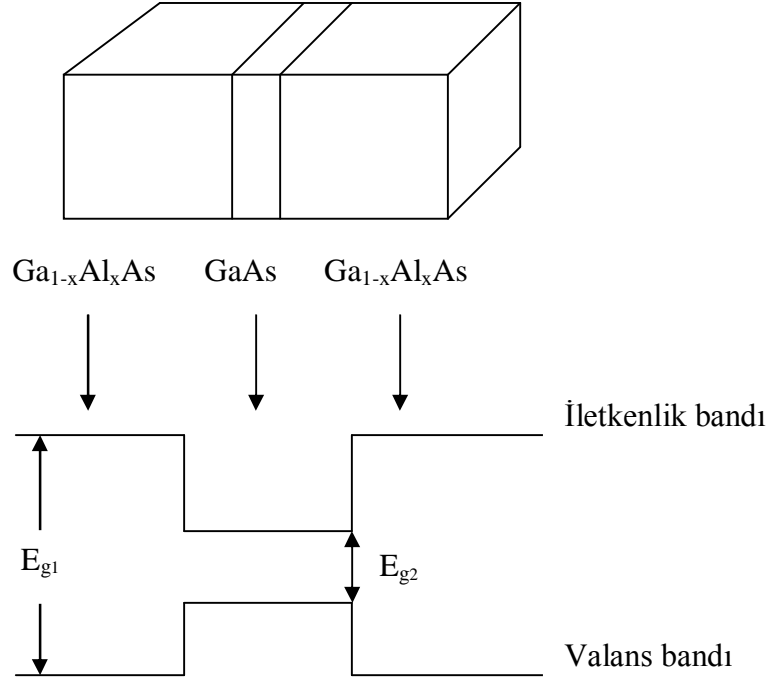
4.1 Kuantum Kuyuları, Kuantum Telleri ve Kuantum Noktaları

Belirli özelliklere sahip bir materyalin elektronik ve optik özellikleri, sistemin boyutu küçültülerek değiştirilebilir ve yeni özellikler kazandırılabilir. Düşük boyutlu yapılar kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak tanımlanırlar. Bu yapılar, hareketli parçacıkların de Broglie dalga boyu mertebesinde kuşatılarak hareket serbestliklerinin indirgendiği sistemlerdir. Kısıtlanmamış bir katıda elektron (ya da boşluk) üç yönde de serbesttir. Yani serbestlik derecesi sayısı üçtür. Serbestlik derecesi sayısı D_s , kısıtlanmış yön sayısı D_k ile gösterilirse $D_s + D_k = 3$ eşitliği tüm katılar için geçerli olur. Kuantum kuyularında elektronun kısıtlanmış yön sayısı $D_k = 1$ olduğundan bu yapı iki boyutlu, kuantum tellerinde $D_k = 2$ olduğundan yapı bir boyutlu, kuantum noktalarında ise $D_k = 3$ olduğundan yapı sıfır boyutlu. Aşağıdaki çizelgede boyutlar ve serbestlik dereceleri gösterilmiştir [32].

Çizelge 4.1 Dört temel sistem için elektron hareketinin serbestlik derecesi sayısı D_s ve kısıtlama yönü sayısı D_k [32]

Sistem	D_k	D_s
Külçe malzeme	0	3
Kuantum kuyusu	1	2
Kuantum teli	2	1
Kuantum noktası	3	0

Kuantum kuyularında, elektronun hareketi bir boyutta sınırlandırılmıştır ve diğer iki boyutta serbestçe hareket edebilmektedir. Bu yüzden bu yapılara iki boyutlu yapılar denir. Uygulamada GaAs ve GaAlAs bileşikleri sıkça kullanılır.



Şekil 4.3 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunun elektronik band yapısı

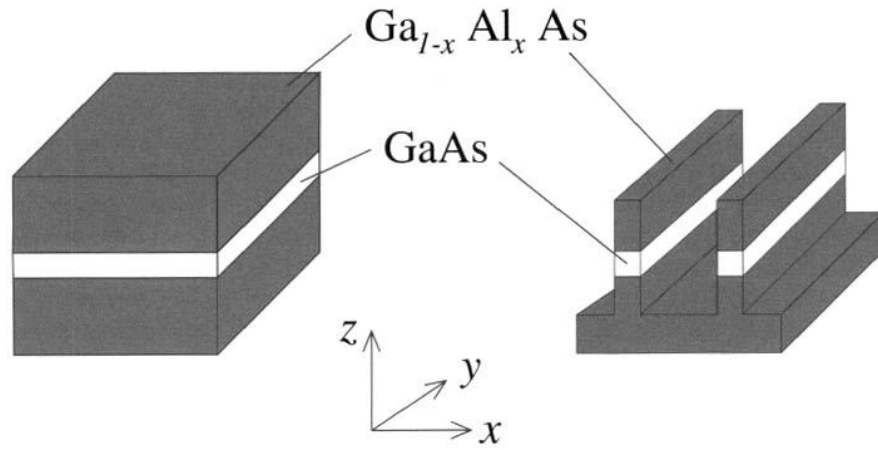
Şekil 4.3' de verilen kuantum kuyusunundaki elektronun davranışı incelenirse, elektron en düşük enerjiyi yani GaAs tabakasını tercih edecektir. Bunun sonucu olarak, elektron GaAs katmanında kuşatılır ve sistemin enerji spektrumu iki boyutlu hale gelir. GaAs tabakasının 20 Å-400 Å arasında olması sağlanırsa (GaAs içinde elektronun ortalama serbest yolundan küçük, GaAs kristalinin makroskobik özelliklerini gösterecek kadar büyük) GaAs katmanı külçe özelliklerini gösterir ve elektron bir çarpışma yapmadan kuyunun bir ucundan diğer ucuna gidebilir [30].

Kuantum kuyusunda bulunan elektronun enerjisi $E_e = E_c + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_e^*}$ ile

verilir. m_e^* , GaAs'ın en düşük iletkenlik bandındaki elektronun külçe etkin kütlesi, E_c iletkenlik bandı sınırındaki enerji değeri ve k ise E_c iletkenlik bandı sınırında sıfır değeri alan dalga vektörüdür. Bu durumda bir kuyudaki parçacık problemine ulaşılmış olur.

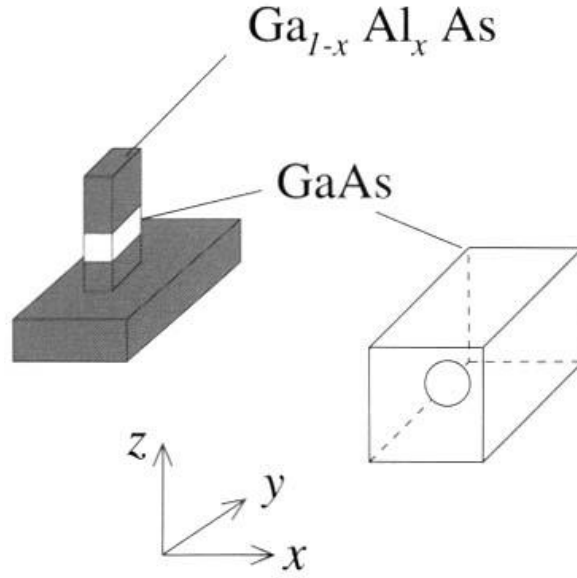
Aradaki tek fark elektronun etkin kütlesidir. Bu da elektronun serbest uzayda değil de GaAs'ın içinde hareket ediyor olmasından kaynaklanır. Etkin kütle'nin büyüklüğü kristal potansiyelinin şiddetini yansıtır ve bu değer maddeden maddeye değişir. GaAs için elektronun etkin kütle değeri, m_0 serbest elektronun kütlesi olmak üzere, $0.067 m_0$ 'dır ve AlAs için ise $0.1 m_0$ kadardır [30]. Kuantum kuyusunun oluşmasını sağlayan iki yarıiletkenin bant yapıları birbirine çok benzer olduğu için GaAs ve $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ arasındaki etkin kütle farkı ihmal edilebilir.

Kuantum tellerinde, elektron hareketi iki boyutta sınırlandırılmış ve tek boyutta serbestçe hareket edebilmektedir. Kuantum telleri incelenirken kuşatma yapılan doğrultularda oluşan kuantum kuyuları birbirinden bağımsız olarak ele alınır. Şekil 4.4' de bir kuantum kuyusundan kuantum telinin elde edilmesi gösterilmiştir.



Şekil 4.4 Kuantum kuyusundan kuantum telinin elde edilmesi [32]

Şekil 4.5' de görüldüğü gibi taşıyıcılar üç boyutta kuşatılırsa, taşıyıcılar artık serbestçe hareket edemez ve yapı artık sıfır boyutlu hale gelir. Bu yapı kuantum noktası ile temsil edilebilir.

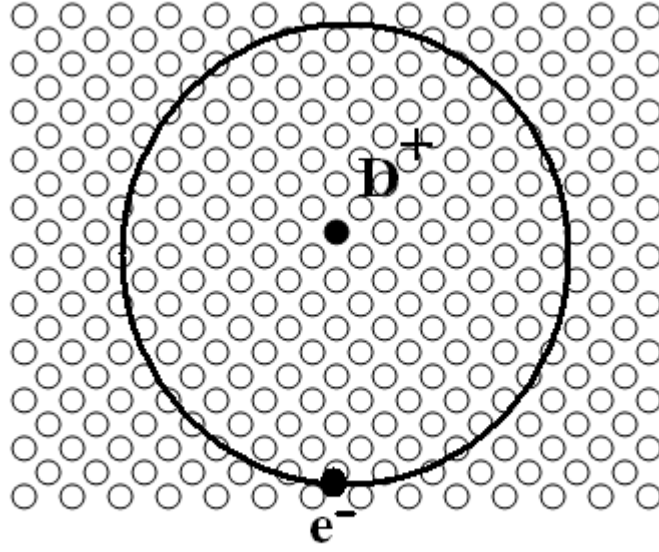


Şekil 4.5 Kuantum noktasının elde edilmesi [32]

Kuantum telinde olduğu gibi, kuantum noktasında da kuantum kuyuları birbirinden bağımsız olarak ele alınabilir. Kuşatılma etkisini artırdığımızdan, kuşatılmış bir durumun kuyu genişliğine duyarlılığı kuantum telinden daha fazladır [32].

4.2 Donor Katkılı Heteroyapılar

Yarıiletkenlere yabancı atom eklenerek yapılan işleme katkılama denir. Katkılama yapmanın amacı serbest taşıyıcı yoğunluğunu kontrol etmektir. Katkı atomu verici (donor) veya alıcı (akseptör) olmak üzere ikiye ayrılır. Atomlar kimyasal bağ yapmak için gerekli olan elektronlardan daha fazla elektron eklenirse, bu atomlar iyonize olur ve bu atomlara donör (verici) denir. Kimyasal bağ yapabilmek için ihtiyacı olan elektron sayısının bir eksiği kadar elektrona sahip olabilen safsızlık atomları, en yakın bağdan bir elektron alabilir. Bu yüzden valans bandında bir boşluk oluşur. Bu tip atomlara da akseptör (alıcı) denir. Bu boşluklar kristal içerisinde hareket edebilir ve iletkenliğe katkıda bulunabilir [32].



Şekil 4.6 Külçe yarıiletkendeki nötral donörün şematik gösterimi [32]

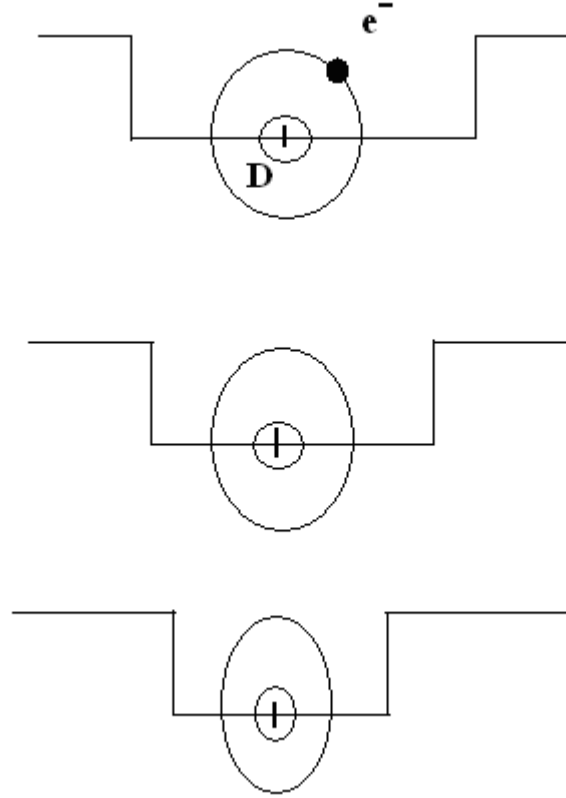
Şekil 4.6’ da görüldüğü gibi iyonize olmuş bir donör, hidrojen atomundaki elektron-proton çiftine benzer. Bunun fiziği iyi anlaşılır ve ilk olarak Bohr tarafından yarı-klasik model olarak tanımlanmıştır [33] ve daha sonra tam bir kuantum-mekaniksel tanımlama ile problem tüm ayrıntıları ile çözülmüştür [34]. Buna göre donör enerji seviyesi;

$$E_d = E_i - \frac{e^4 m_e^*}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.3)$$

şeklinde verilir. Burada m_e^* elektronun etkin kütlesi, E_i iletkenlik bandı kenarındaki enerjidir.

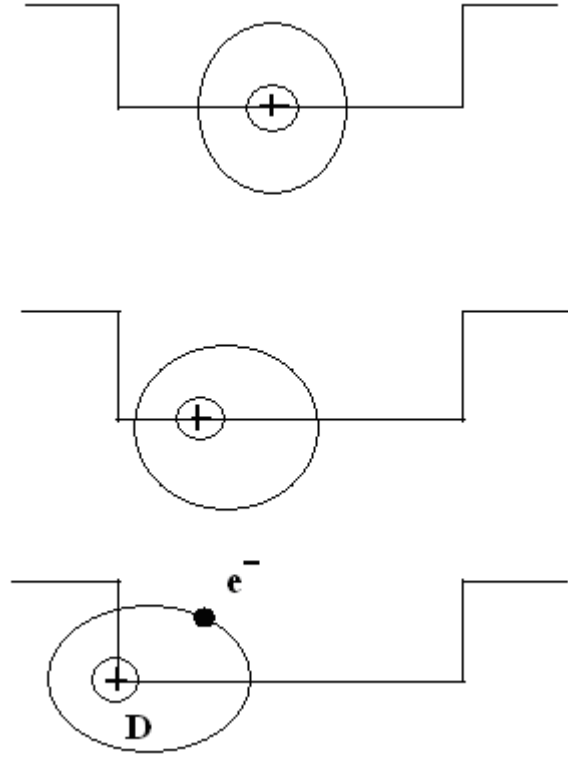
Donör durumundan farklı olarak akseptörün enerji seviyesi, deneysel olarak ölçülen değerlerle uyumlu değildir [35]. Gerçekte akseptör enerji seviyesi birçok sebepten dolayı daha çok karışıktır. Bu karışıklığın birinci nedeni, Γ minimumda valans bandında iki dejenere duruma (hafif ve ağır-boşluk) sahip olmasıdır. Bu yüzden hangisinin etkin kütlesinin kullanılacağı belli değildir. İkincisi, çok büyük olan ağır-boşluk kütlesi, çok küçük olan Bohr yarıçapı üretme etkisine sahiptir. Yani değişik yörüngeleri merkezi Coulombic alan merkezine çok daha olmaları beklenir [32].

Bir donör bir kuantum kuyusu içine yerleştirildiğinde oluşan durum, yapının iki serbestlik derecesi yüzünden külçe yapıdakinden daha karışık olacaktır. İlk olarak bağlanma enerjisi, kuantum kuyusunun yapısına bağlı olmasından dolayı kuşatma potansiyeline de bağlıdır. Bunun sonucu olarak bağlanma enerjisi kuyu genişliğine oldukça duyarlıdır. Bu durum şekil 4.7’ de gösterilmiştir.



Şekil 4.7 Kuyu genişliğinin donör dalga fonksiyonu üzerindeki etkisinin şematik gösterimi [32]

İkinci olarak donör bağlanma enerjisi ve dalga fonksiyonu, heteroyapı içerisindeki donör pozisyonunun bir fonksiyonu olacaktır. Şekil 4.8’de gösterildiği gibi kuyunun bir ucundaki bir donörün bağlanma enerjisi, kuyunun merkezindeki bir donörün bağlanma enerjisinde farklı olacaktır.



Şekil 4.8 Donor konumunun dalga fonksiyonu üzerindeki etkisinin şematik gösterimi [32]

Bir heteroyapıda bulunan nötral donörlerin temel özelliklerinin belirlenmesi amacıyla yapılan çalışmada, Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Zarf fonksiyonu ve etkin kütle yaklaşımı ile bir heteroyapıda kuşatılmış bir elektron ve donör için Hamiltonian, Coulombic etkileşim terimini de içermektedir. Elektron-safsızlık atomundan oluşan sistemin Hamiltoniyen'i

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \quad (4.4)$$

biçimindedir. Elektron ve donör arasındaki uzaklık;

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_i)^2} \quad (4.5)$$

ile verilir. Burada z_i , z büyütme yönündeki donörün konumudur. x - y düzleminin merkezi, donör atomunun konumu olarak tanımlanmıştır ($x_i=y_i=0$). Analizi basitleştirmek için heteroyapı içinde her yerde etkin kütle m^* sabit kabul edildi.

Schrödinger denkleminin çözümü iki temel yaklaşımla yapılmıştır. Bunların ilki Gaussian fonksiyonlarının lineer bir kombinasyonu olarak elektron dalga fonksiyonlarını içerir [36, 37]. Bu teknik basit kuantum kuyularındaki donör özelliklerinin hesaplamada başarılı olmuştur. İkinci yaklaşım ise varyasyonel ilkelere dayanır. Bu yöntemde bir deneme dalga fonksiyonu seçilir. Bunun fonksiyonel formu birden fazla bilinmeyen parametre içerebilir. Bu parametreler sistematik olarak değiştirilebilir ve her bir düzey için enerjinin beklenen değeri hesaplanır.

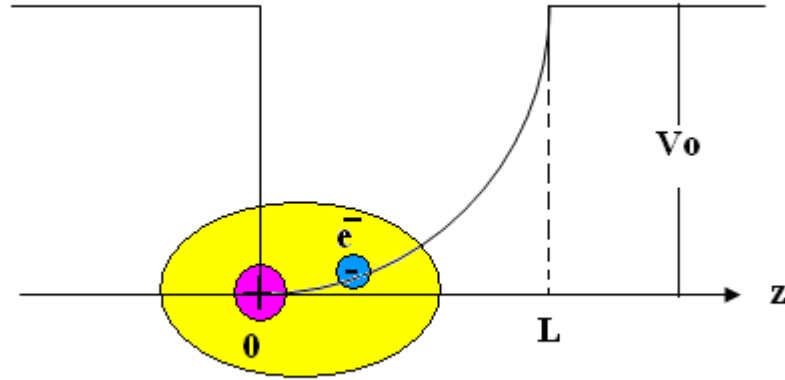
Varyasyonel yaklaşımının başarısı, seçilen deneme dalga fonksiyonuna bağlıdır. Genel bir seçim iki terim içerir [38].

$$\psi = \psi(z)e^{-r/\lambda} \quad (4.6)$$

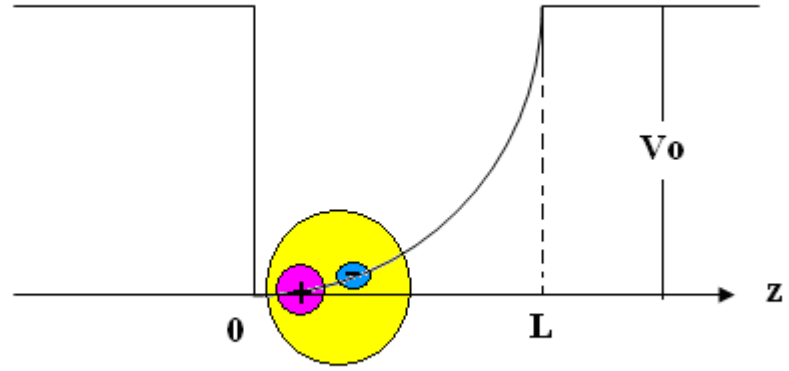
Burada r elektron-donor arasındaki uzaklıktır ve yörünge yarıçapının ölçüsü olan λ varyasyonel parametredir. Böylece ikinci çarpan basit bir hidrojenik dalga fonksiyonudur [32].

5. KUTUPLANMA

Son yıllarda düşük boyutlu sistemlerde sınırlanan taşıyıcılar için kutuplanabilirlik üzerinde yoğun çalışmalar yapılmıştır [39, 40]. Katılarda atomik seviyede üç çeşit kutuplanmadan söz edilir. Birincisi, polar moleküllerin elektrik alan ile kısmi ya da tamamen kutuplanması sonucu oluşan kutuplanma; ikincisi tamamen ya da kısmi iyonik kristallerde pozitif ve negatif iyonların elektrik alan altında göreceli hareketleri sonucu oluşan dipolün indüklediği iyonik kutuplanma; üçüncüsü ise tüm dielektrikte mevcut olan elektronik kutuplanmadır [41]. Çalışmamızda yarı-parabolik kuantum kuyusunda bulunan elektron-safsızlık atomu çiftinden oluşan sistemde, safsızlık atomunun konumuna ve kuşatma potansiyeline bağlı olarak kutuplanma incelenmektedir. Şekil 5.1’ de yarı-parabolik kuantum kuyusunda $z_i = 0$ konumunda bulunan safsızlık atomu-elektron sisteminin yük dağılımı şematik olarak verilmiştir. Şekil 5. 2’ de ise aynı durum $z_i \neq 0$ için verilmiştir.



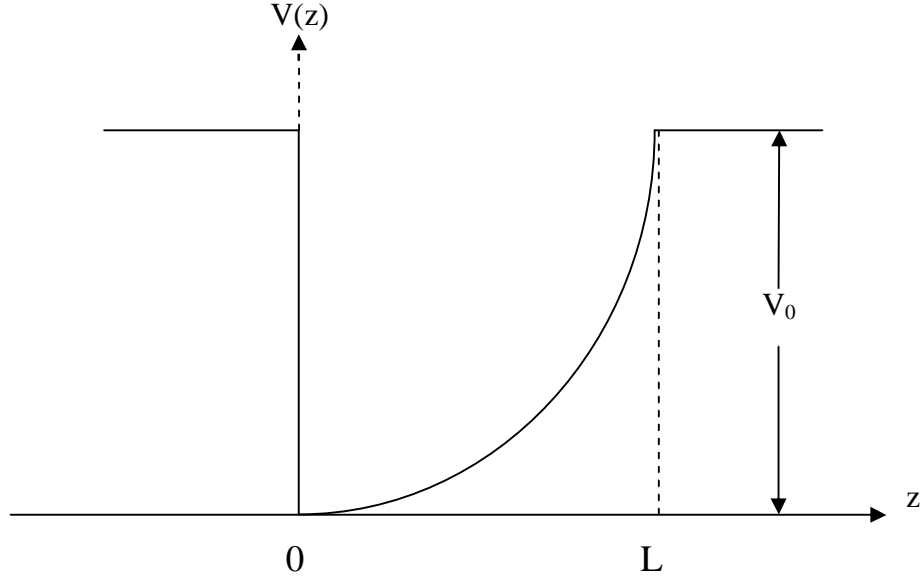
Şekil 5.1 Yarı-parabolik kuantum kuyusunda $z_i = 0$ konumunda bulunan safsızlık atomu-elektron sisteminin yük dağılımının şematik gösterimi



Şekil 5.2 Yarı-parabolik kuantum kuyusunda $z_i \neq 0$ konumunda bulunan safsızlık atomu-elektron sisteminin yük dağılımının şematik gösterimi

5.1 Yarı-parabolik Kuantum Kuyusunda Safsızlık Bağlanma Enerjisi ve Özkutuplanma

Bu bölümde şekil 5.3’ te verilen yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda safsızlık atomunun bağlanma enerjisi ve özkutuplanması etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenecektir.



Şekil 5.3 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyu profili

Etkin kütle yaklaşımı ile z doğrultusunda kuşatılmış elektron ve donör safsızlık atomundan oluşan sistemin Hamiltonian’i;

$$H = \frac{\vec{P}_e^2}{2m_e^*} + V(z) - \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_e - \vec{r}_i|} \quad (5.1)$$

biçiminde verilir. Burada m_e^* elektronun etkin kütlesi, \vec{p}_e elektron momentumu, e elektronun yükü, $V(z)$ z-doğrultusunda tanımlı yarı-parabolik kuşatma potansiyeli, ϵ dielektrik sabiti, \vec{r}_e ve \vec{r}_i sırası ile elektron ve donör safsızlık atomunun konum vektörleridir. Burada $m_e^* = 0.0665 m_0$ (m_0 , serbest elektronun kütlesi), $\epsilon = 12.58$

GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As yapısının iletkenlik bandı süreksizliği $V_0 = 228$ meV olarak alınmıştır [42].

L kuyu genişliği olmak üzere, kuşatma potansiyelinin fonksiyonel formu aşağıdaki gibidir.

$$V(z) = \begin{cases} \frac{1}{2} m_e^* w_0^2 z^2, & 0 < z < L \\ V_0, & z \geq L \text{ ve } z \leq 0 \end{cases} \quad (5.2)$$

$$L = \sqrt{\frac{V_0}{\beta}}, \quad \beta = \frac{1}{2} m_e^* w_0^2, \quad L = \sqrt{\frac{2V_0}{m_e^* w_0^2}} \quad (5.3)$$

biçimindedir. Burada w_0 açısal frekansı kuşatma potansiyelinin biçimini belirleyen parametredir.

Momentum operatörü ve $V(z)$ kuşatma potansiyeli yerine yazılıp gerekli düzeltmeler yapıldıktan sonra denklem 5.1

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \beta z^2 - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} \quad (5.4)$$

biçimine dönüşür. Burada (x_i, y_i, z_i) safsızlık atomunun konumunu, (x, y, z) ise elektronun konumunu göstermektedir.

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \phi \\ y &= \rho \sin \phi \\ z &= z \end{aligned} \quad (5.5)$$

dönüşümleri ile silindirik koordinatlardaki Hamiltonian

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \beta z^2 - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (5.6)$$

biçiminde elde edilir. Burada $\rho = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$ (x-y) düzlemindeki elektron ve safsızlık atomu arasındaki bağıl uzaklıktır.

Hamiltonian'deki bütün uzunluklar Bohr yarıçapı $\left(a_0 = \frac{\epsilon \hbar^2}{m_e^* e^2} \right)$ ve tüm enerji terimleri de Rydberg'e $\left(R = \frac{m_e^* e^4}{2\epsilon^2 \hbar^2} \right)$ göre normalize edilirse, boyutsuz Hamiltonian

$$\tilde{H} = -\left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\phi}^2} \right] - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{\beta} \tilde{z}^2 - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} \quad (5.7)$$

biçiminde elde edilir. Burada $\tilde{\beta} = \frac{m_e^* \omega_0^2 a_0^2}{2R}$ ve $\tilde{z} = \frac{z}{a_0}$ şeklindedir.

Elektron – safsızlık atomu sistemi için Schrödinger Denklemini,

$$\tilde{H} \phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = \tilde{E} \phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) \quad (5.8)$$

biçiminde yazılabilir. Sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu

$$\phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = f(\tilde{z}) g(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) \quad (5.9)$$

ile verilir. Burada $f(\tilde{z})$ elektronun z doğrultusundaki hareketini tanımlayan dalga fonksiyonudur. Bu fonksiyonu bulurken, genişliği L_b olan sonsuz kuyunun öz

fonksiyonlarından oluşan çözümler baz olarak kullanılır ve L_b 'nin değeri ($L_b > L$) enerji öz değerlerinin yakınsanmasına göre belirlenir.

Bunun yanında incelediğimiz yapıda x ve y doğrultusunda kuşatma olmadığı için bu doğrultuda elektron sadece Coulombic etkileşimin etkisindedir. Elektron ile safsızlık atomu arasındaki bu etkileşim sonucunda hidrojen atomuna benzer bir yapı ortaya çıkar. Bu yüzden bu doğrultudaki hareketi tanımlamak için hidrojen tipi atomları tanımlayan Gaussian tipte bir dalga fonksiyonu tanımlanır. Bu dalga fonksiyonu,

$$g(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha) = N \exp\left[-\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2} / \alpha\right] \quad (5.10)$$

formundadır. Burada tanımlı olan α varyasyon parametresidir.

Sistemin toplan enerjisi,

$$\min_{\alpha} \langle \phi | \tilde{H} | \phi \rangle = \tilde{E} \quad (5.11)$$

eşitliğinden elde edilir. Burada \tilde{E} özdeğerini minimum yapan α değeri belirlenir.

Boyutsuz Hamiltonian' in beklenen değeri

$$\langle \tilde{H} \rangle = \langle \phi | \left[-\left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\phi}^2} \right] - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{\beta} \tilde{z}^2 - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} \right] | \phi \rangle \quad (5.12)$$

biçiminde bulunur.

Taban durumunda bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisi ise boyutsuz olarak,

$$\tilde{E}_b = \tilde{E}_z - \langle \tilde{H} \rangle \quad (5.13)$$

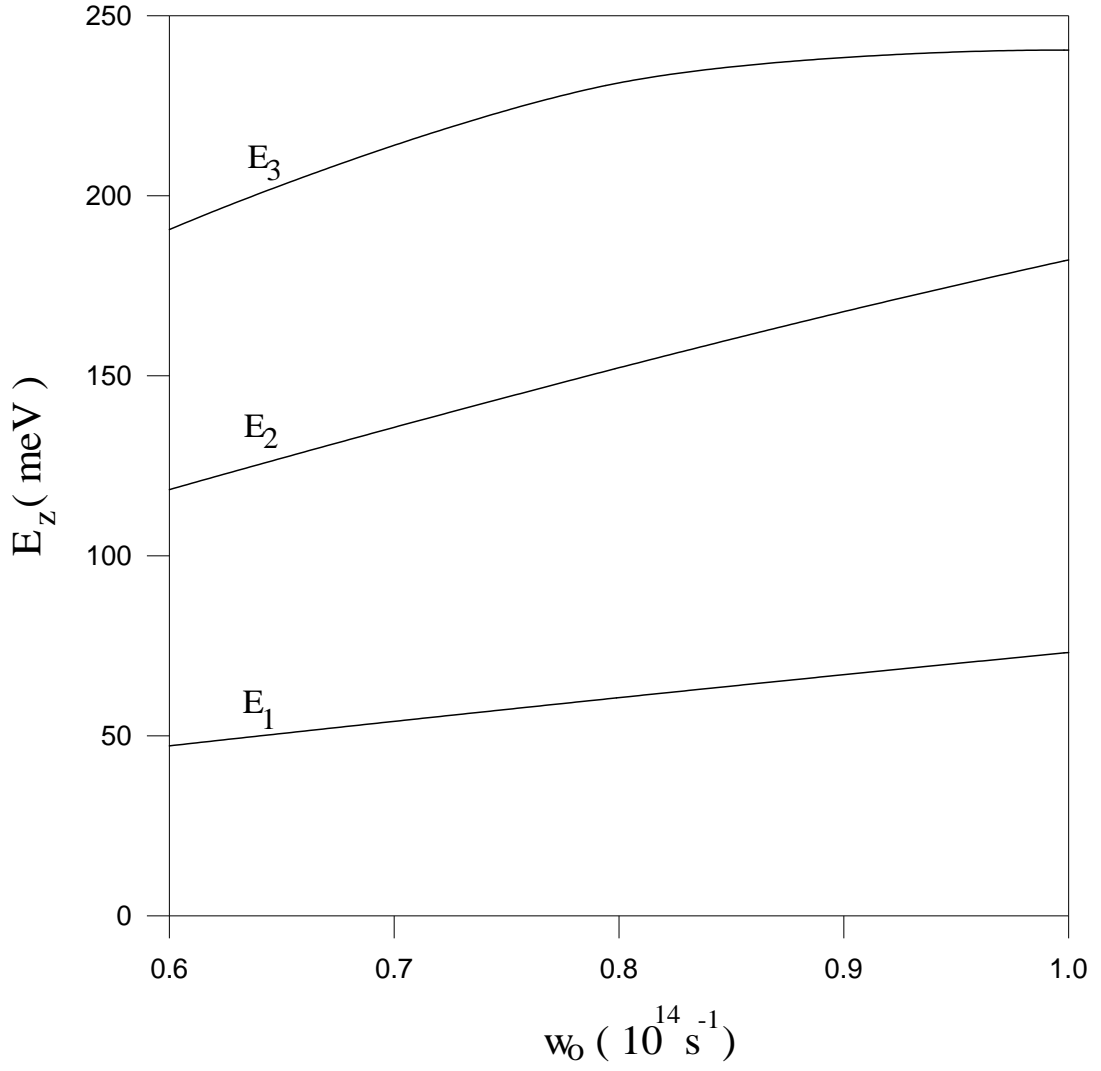
şeklinindedir. Burada \tilde{E}_z elektronun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen normalize taban durumu enerjisidir.

Safsızlık atomu için kutuplanma;

$$\frac{P}{e} = -\langle \psi(\tilde{\rho}, \tilde{z}) | (\tilde{z} - \tilde{z}_i) | \psi(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \rangle + \langle \psi_1(\tilde{\rho}, \tilde{z}) | (\tilde{z} - \tilde{z}_i) | \psi_1(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \rangle \quad (5.14)$$

$$\psi_1(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = N \exp \left[\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2} / \alpha \right] \quad (5.15)$$

biçimindedir. Burada N, normalizasyon katsayısı olmak üzere $\psi_1(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ dalga fonksiyonu V(z) kuşatmasının olmadığı durumda sistemi tanımlayan fonksiyondur [43].

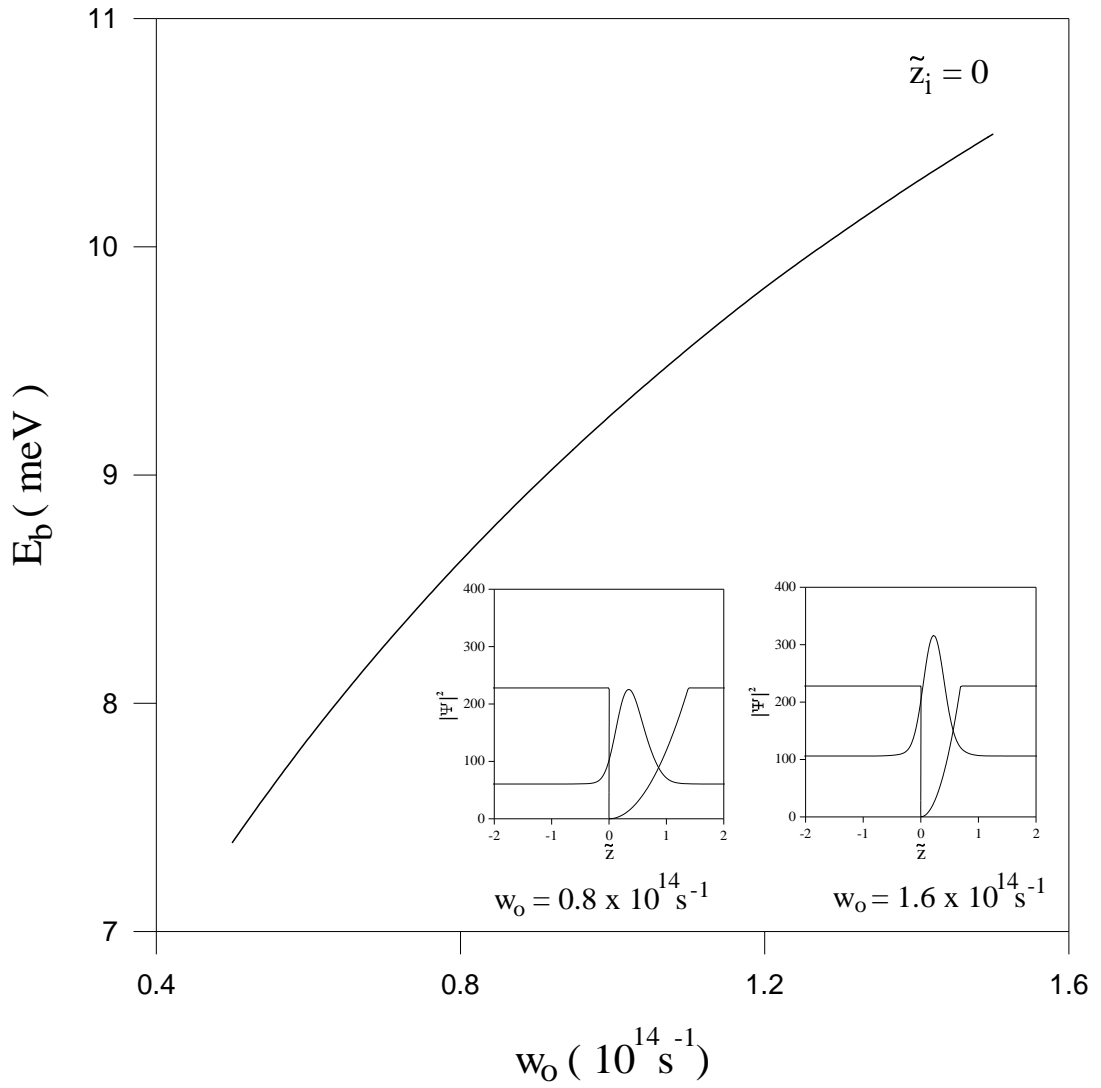


Şekil 5.4 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda kuşatma doğrultusunda parçacığın hareketini temsil eden enerji düzeylerinin açısal frekansa (w_0) göre değişimi.

Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda E_{z,n} enerji düzeylerinin açısıl frekansa (ω_0) göre deęişimi Őekil 5.4' de verilmiřtir. Bilindięi gibi kuřatma potansiyelinde bulunan parçacıkların baęlı enerji düzeyleri, kuřatma potansiyelinin geniřlięi ile ters orantılı olarak deęiřir. Üzerinde çalıřtıęımız yarı-parabolik kuantum

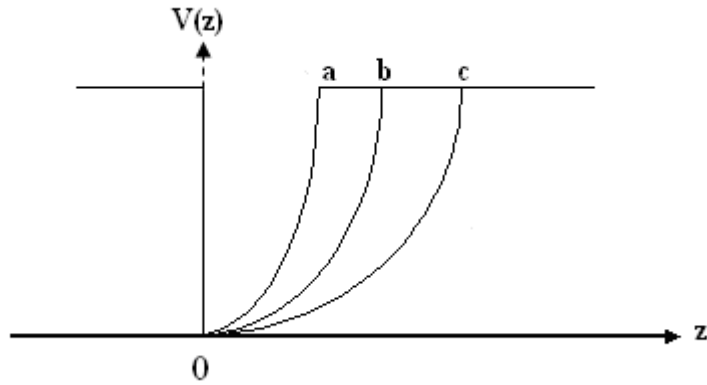
kuyusunun efektif geniřlięi, $L = \sqrt{\frac{2V_0}{m_e^* \omega_0^2}}$, biçiminde tanımlanmıřtır. Bu tanımlamaya

göre efektif kuyu geniřlięi ω_0 açısıl frekans ile ters orantılı olarak azalmaktadır. Böylece, ω_0 frekansının artan deęerleri ile birlikte parçacıęın kuřatıldıęı bölge daralacaktır ve daha küçük bir bölgeye lokalize olacaktır. Artan bu kuřatma ile birlikte enerji spektrumu daha yüksek seviyelere çıkar. Bu durum Őekil 5.4' de açıkça görölmektedir. Özellikle taban ve ilk uyarılmıř enerji düzeylerinin ω_0 'a daha duyarlı oldukları görölmektedir.



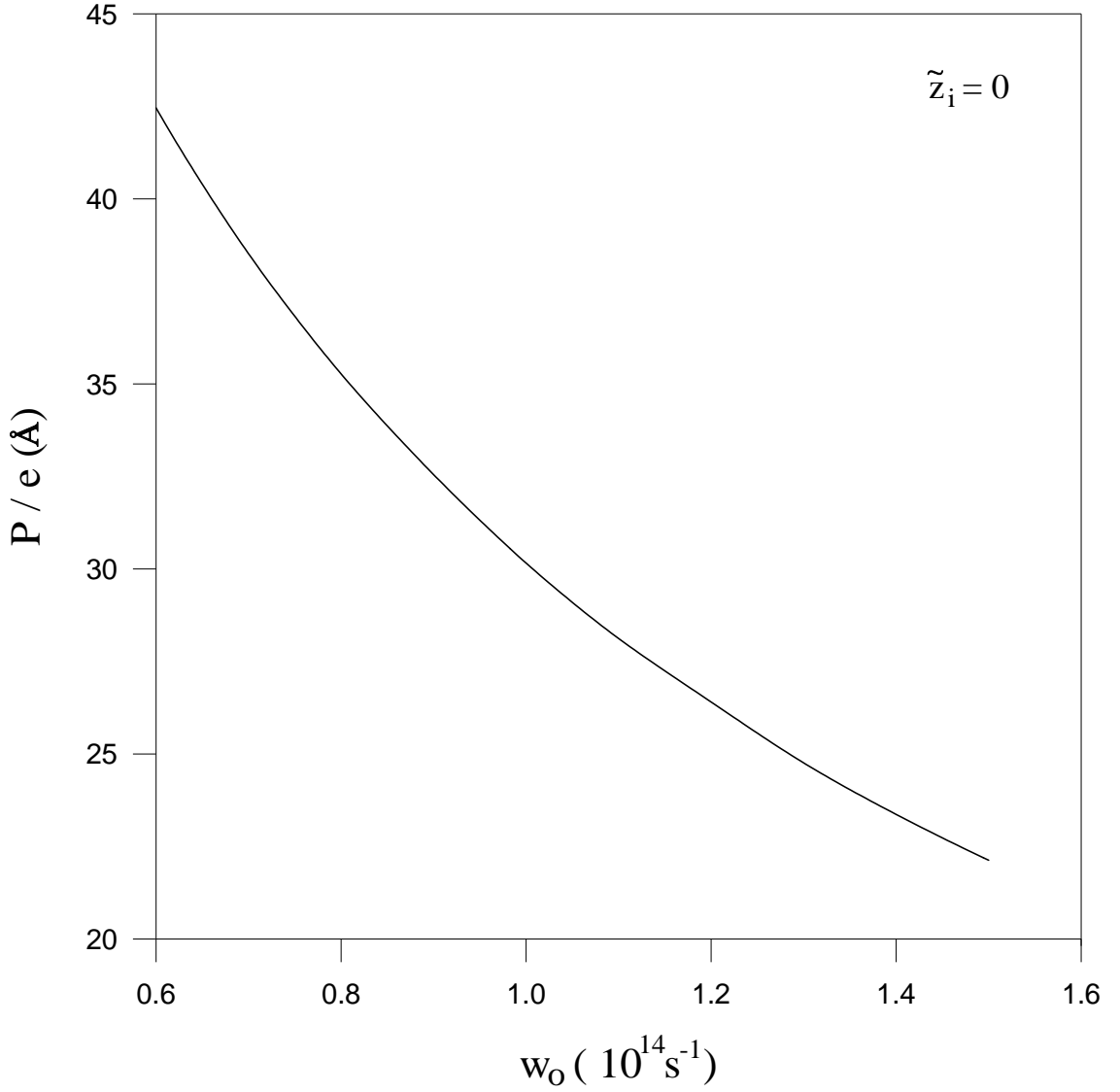
Şekil 5.5 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $\tilde{z}_i = 0$ konumunda bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin açısal frekansa (w_0) göre değişimi.

GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yarı-parabolik kuantum kuyusunda $\tilde{z}_i = 0$ konumunda bulunan safsızlık atomun bağlanma enerjisinin açısal frekansa göre değişimi şekil 5.5' te verilmiştir. Şekilde açıkça görüldüğü gibi bağlanma enerjisi w_0 açısal frekansı ile lineere yakın olarak artmaktadır. Bu davranışı daha iyi açıklamak amacıyla farklı açısal frekans değerleri için kuşatma potansiyelinin değişimi şekil 5.6' da verilmiştir. Şekil 5.6' da görüldüğü gibi artan açısal frekans değerleri (w_0) ile kuyu genişliği ters orantılı bir biçimde değişir. Artan açısal frekans ile birlikte etkin kuyu genişliği azalır ve parçacığın kuşatıldığı bölge daralır. Bu etki, şekil 5.5 içinde farklı iki w_0 değeri için verilen $|\Psi|^2$ dağılımından da açıkça görülmektedir. Böylece elektron ile safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı artar. Bu durumda elektron-safsızlık atomu arasındaki Coulombic etkileşim artar ve bunun sonucu olarak bağlanma enerjisinde artma gözlenir.



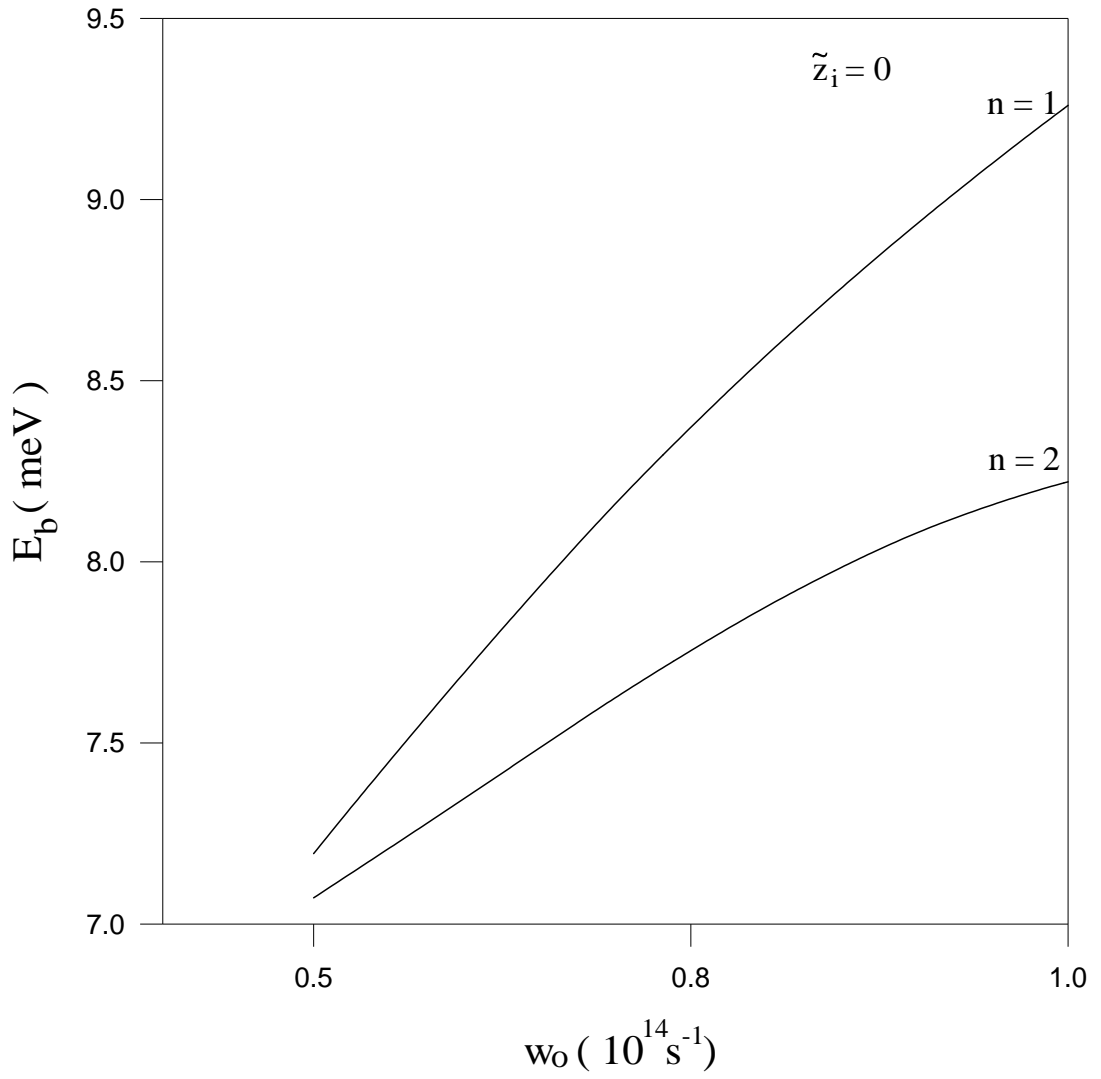
Şekil 5.6 Farklı açısal frekans değerlerinde kuyu genişliğinin değişimi.

Şekilde görüldüğü gibi w_0 açısal frekans değeri arttıkça ($a > b > c$) efektif kuyu genişliği hızla azalmaktadır.



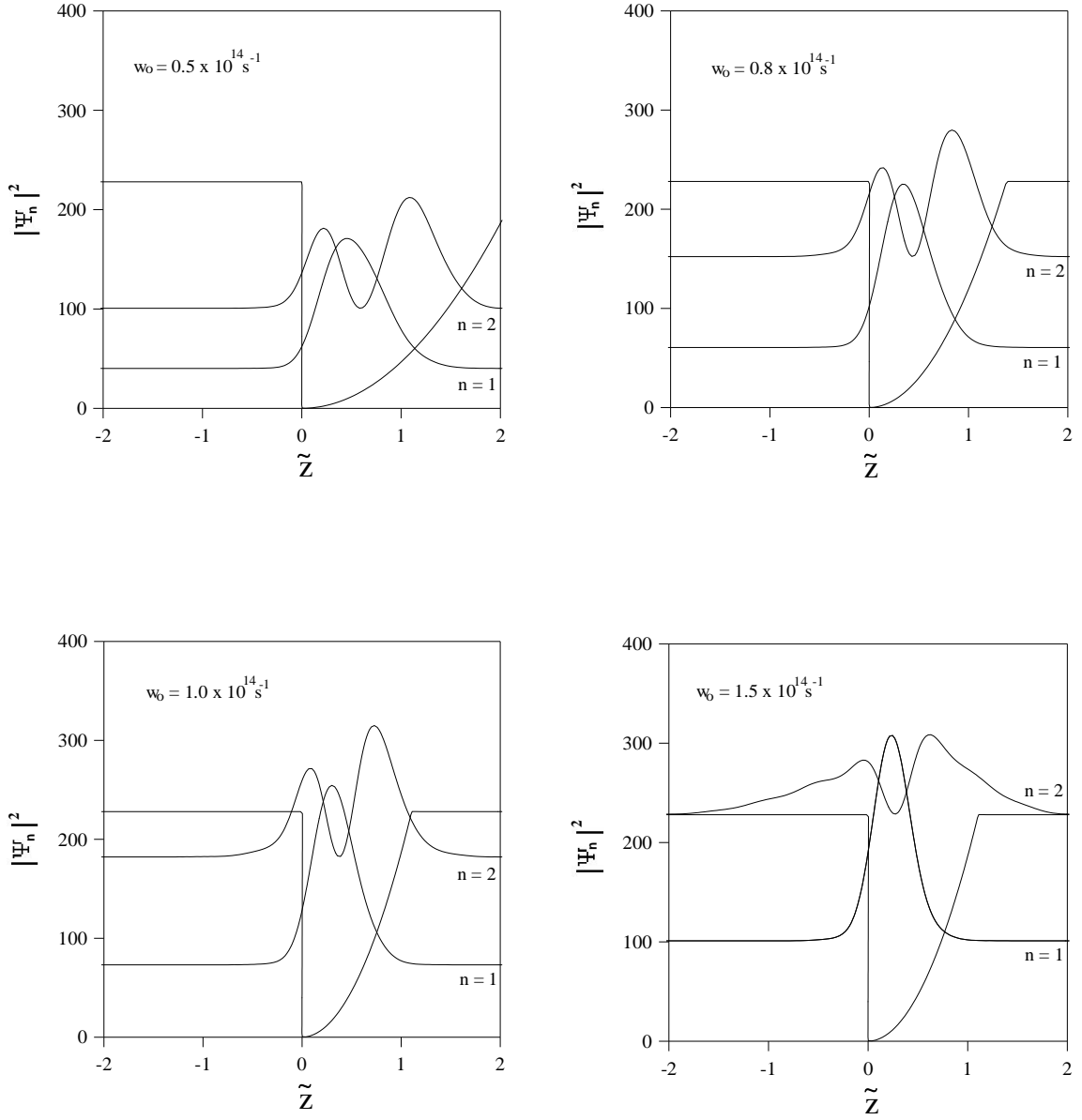
Şekil 5.7 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $\tilde{z}_i = 0$ için kutuplanmanın açısal frekansa (ω_0) göre değişimi.

Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $\tilde{z}_i = 0$ için kutuplanmanın açısal frekansa göre değişimi şekil 5.7’ de verilmiştir. Kutuplanma, safsızlık atomu ve elektron arasındaki mesafeyle orantılı bir biçimde değişir. Elektronun kuşatılmasına bağlı olarak elektron ile safsızlık atomu arasındaki mesafe ω_0 ile azaldığı için kutuplanma da açısal frekans ile birlikte azalmaktadır.

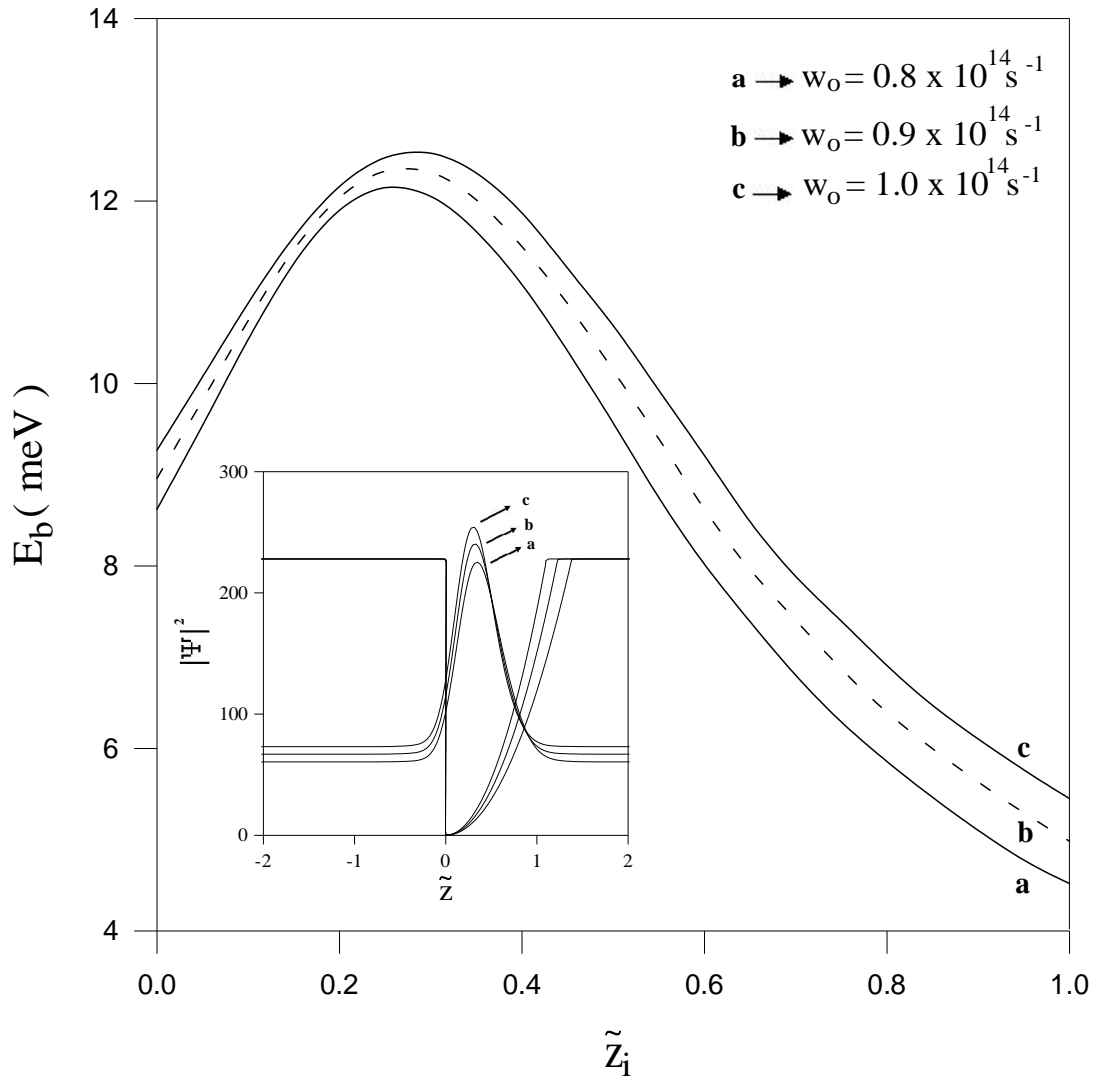


Şekil 5.8 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $n = 1$ ve $n = 2$ düzeylerinde bulunan elektron için bağlanma enerjisinin açısal frekansa (w_0) göre değişimi.

Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $\tilde{z}_i = 0$ konumunda bulunan safsızlık atomu için iki farklı düzeye karşılık gelen ($n = 1$ ve $n = 2$) bağlanma enerjisinin açısal frekansa göre değişimi şekil 5.8' de gösterilmiştir. Yarı-parabolik kuantum kuyuları için açısal frekansın artması kuyu genişliğinin azalması anlamına gelmektedir. Bu durumda w_0 değeri arttıkça elektron ile safsızlık atomunun birbirini aynı düzlemde görme olasılığı artacağından, bağlanma enerjisi de artacaktır. Safsızlık atomu $\tilde{z}_i = 0$ konumundayken $n = 2$ düzeyinin bağlanma enerjisi $n = 1$ taban durumun bağlanma enerjisine göre daha küçüktür. Beklenildiği gibi taban durumdan üst seviyelere çıktıkça elektron ile safsızlık atomunun birbirini görme olasılığı azalacağından, bağlanma enerjisi de taban duruma göre daha küçük olacaktır. Çünkü efektif kuyu genişliği üst enerji düzeylere çıktıkça artmaktadır. Bu davranışı ayrıntılı incelemek amacıyla $n = 1$ ve $n = 2$ durumlarına karşılık gelen dalga fonksiyonlarının farklı w_0 değerlerine göre dağılımı şekil 5.9' da verilmiştir.



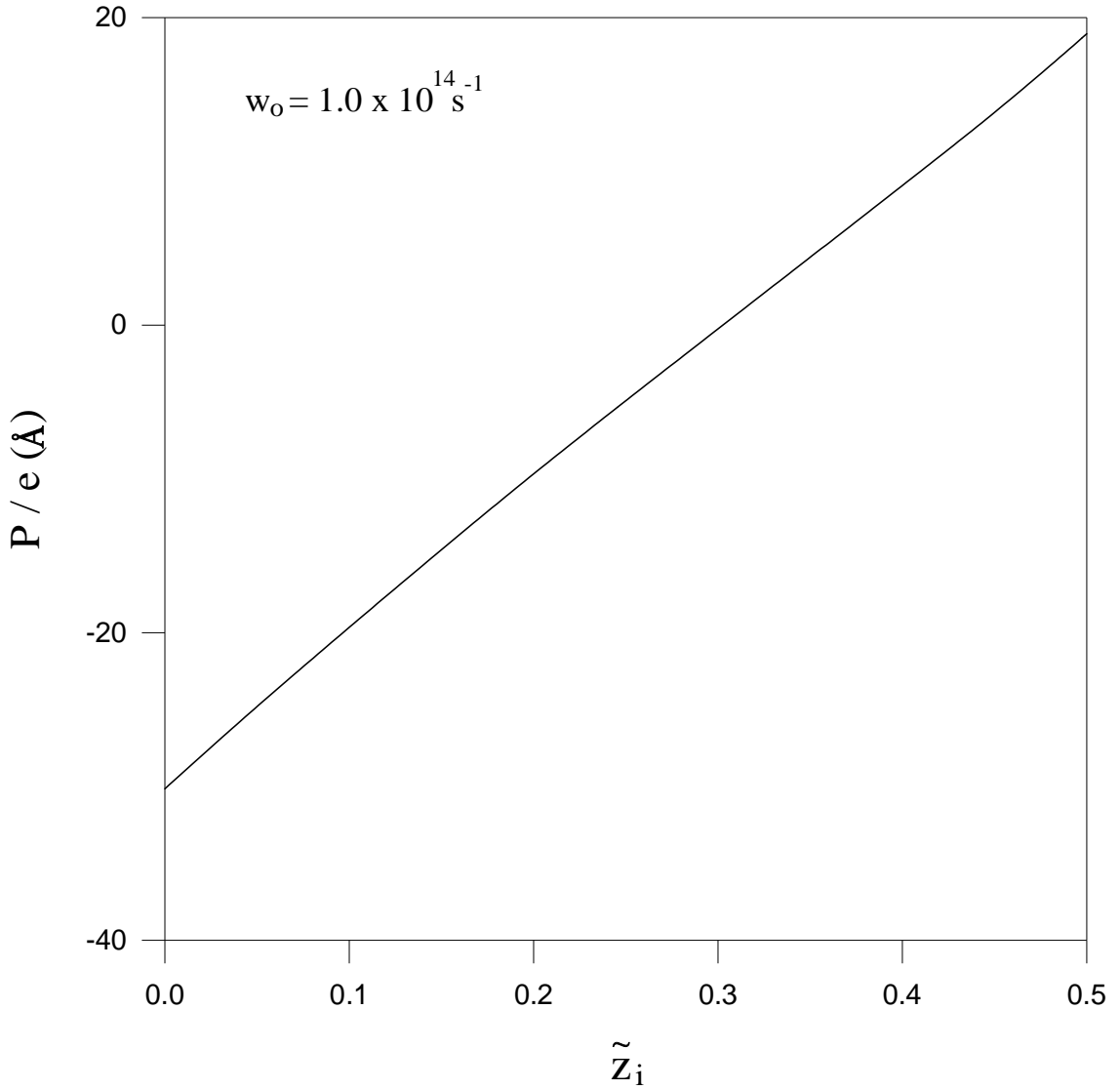
Şekil 5.9 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda farklı açılal frekans değerlerine göre dalga fonksiyonlarının değişimi.



Şekil 5.10 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yarı-parabolik kuantum kuyusunda farklı frekans değerleri için donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin donör safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.

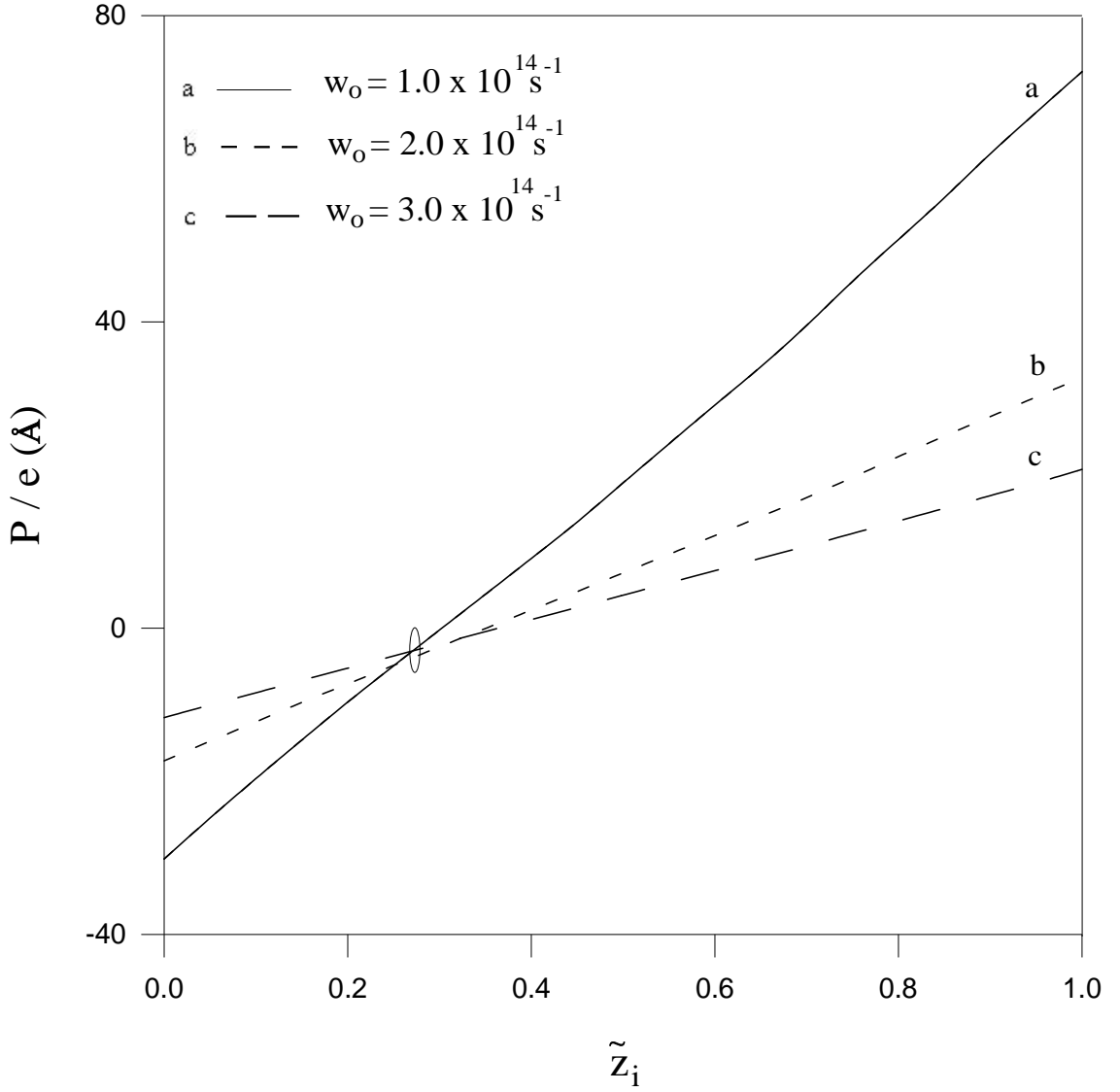
GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yarı-parabolik kuantum kuyusunda farklı w_0 değerleri için bağlanma enerjisi safsızlık konumunun fonksiyonu olarak şekil 5.10' da verilmiştir. Şekilde açıkça görüldüğü gibi kuşatma potansiyelinin frekansı w_0 ' in artan değerleri ile birilikte parçacığın kuşatıldığı bölge daralmaktadır. Bu etki, elektronun bulunma olasılığını tanımlayan fonksiyonun analizinden de açıkça anlaşılmaktadır. Sonuç olarak; safsızlık atomunun bütün konumları için sistemin kararlılığının w_0 ' a bağlı olarak artmakta olduğu söylenebilir.

Herhangi bir w_0 değerleri için bağlanma enerjisinin \tilde{z}_i ' ye göre değişimi incelendiğinde; safsızlık atomunun konumu $\tilde{z}_i = 0$ ' dan $\tilde{z}_i = 0.3$ ' e kadar ötelendiğinde bağlanma enerjisi artarak $\tilde{z}_i \cong 0.3$ civarında maksimum değere ulaştığı görülmektedir. Bu davranış şu şekilde açıklanabilir; elektronun olasılık yoğunluğuna bakıldığında $\tilde{z}_i \cong 0.3$ civarında en büyük olasılığa sahip olduğu görülür. Dolayısıyla $\tilde{z}_i \cong 0.3$ için safsızlık atomu ile elektronun aynı düzlemde bulunma olasılığı maksimum olur ve elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulombic etkileşme en büyük değerini alır. Safsızlık atomunun konumu $\tilde{z}_i > 0.3$ olduğu durumlarda elektron ile safsızlık atomunun birbirini aynı düzlemde görme olasılığı azalmaya başlar ve buna bağlı olarak bağlanma enerjisi de azalır.



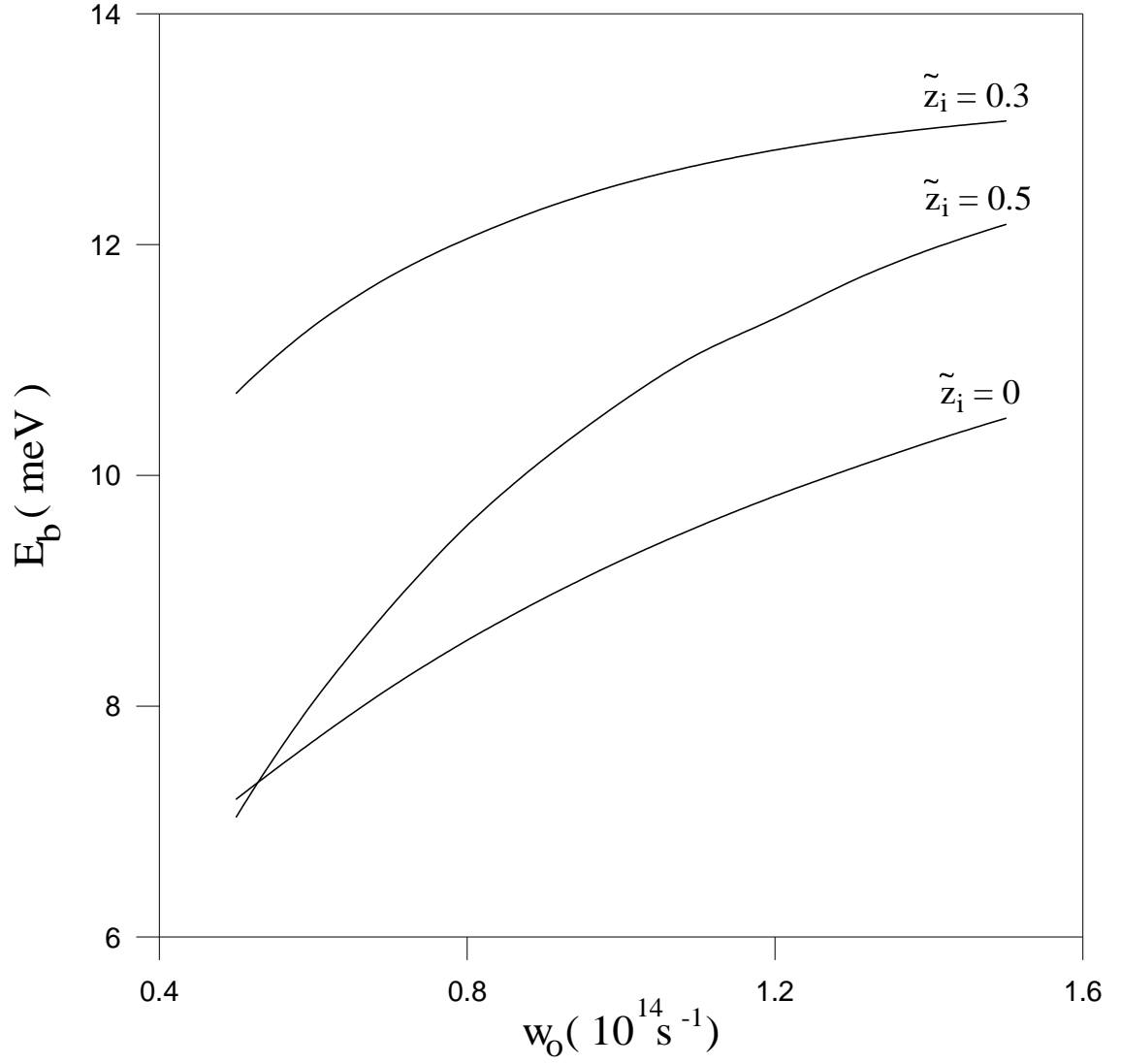
Şekil 5.11 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda kutuplanmanın safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.

Şekil 5.11’ de $w_0 = 1.0 \times 10^{14} \text{s}^{-1}$ açısal frekans değeri için kutuplanmanın safsızlık atomunun konumuna göre değişimi gösterilmiştir. Safsızlık atomunun konumu $\tilde{z}_i = 0$ ’ dan $\tilde{z}_i = 0.3$ konumuna kadar ötelendiğinde elektron ile safsızlık atomu arasındaki mesafe azaldığından kutuplanma lineer olarak azalır ve elektronun en büyük olasılıkla bulunduğu $\tilde{z}_i \cong 0.3$ civarında ise sıfır olmaktadır. $\tilde{z}_i > 0.3$ bölgelerinde ise yük dağılımına paralel olarak kutuplanmanın işareti değişir ve lineer olarak \tilde{z}_i ’ ye göre artmaktadır.



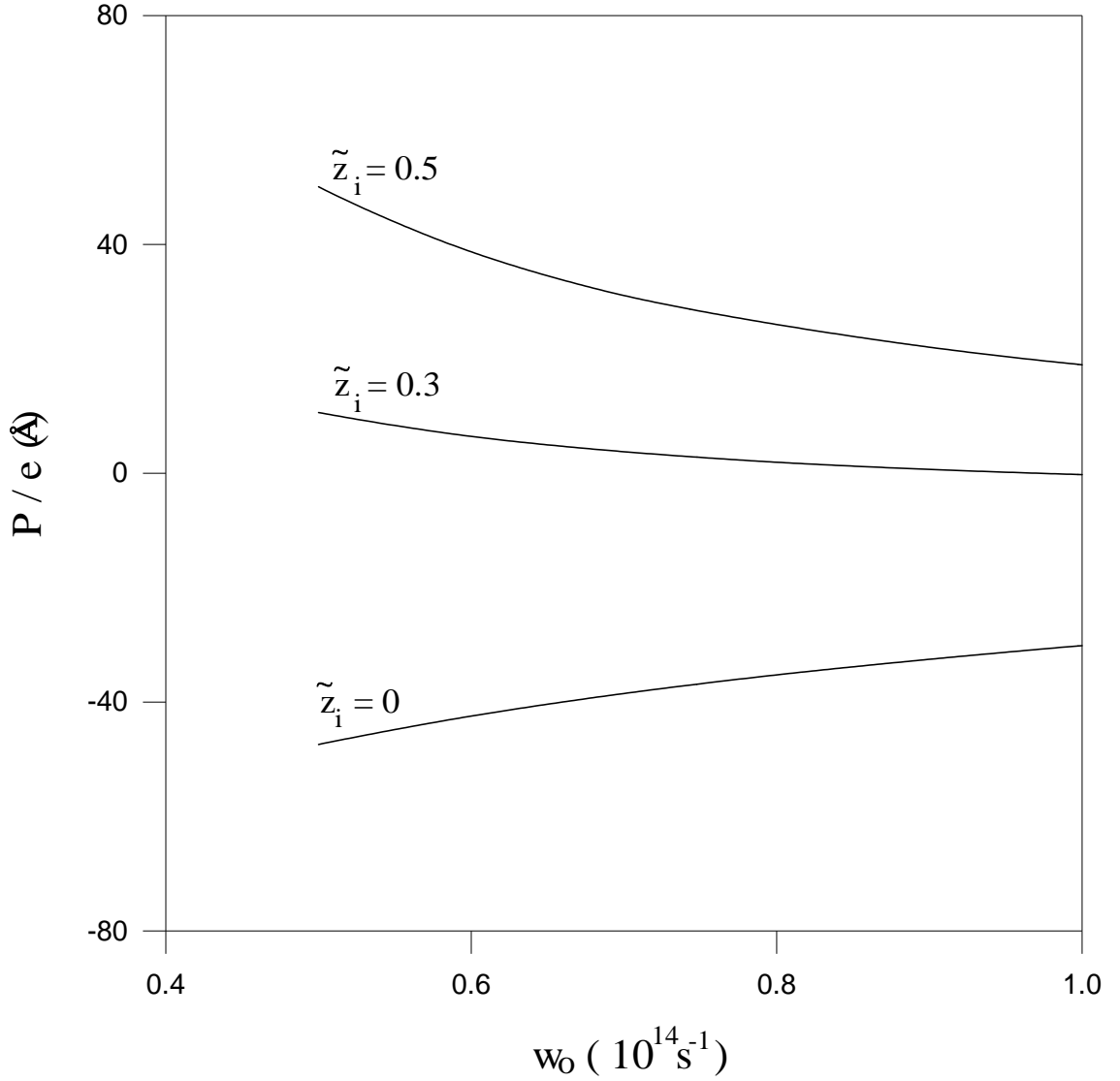
Şekil 5.12 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda farklı frekans değerleri için kutuplanmanın safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.

Kutuplanmanın farklı frekans değerleri için safsızlık konumuna göre değişimi şekil 5.12’ de verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi açısal frekans değerlerinin kuşatma potansiyeli üzerindeki etkisine bağlı olarak kutuplanmanın safsızlık atomu konumuna duyarlılığı her w_0 değeri için değişmektedir. Kuşatmanın kuvvetli olduğu açısal frekansın büyük değerlerinde kutuplanmanın safsızlık konumuna duyarlılığı oldukça zayıflamaktadır.



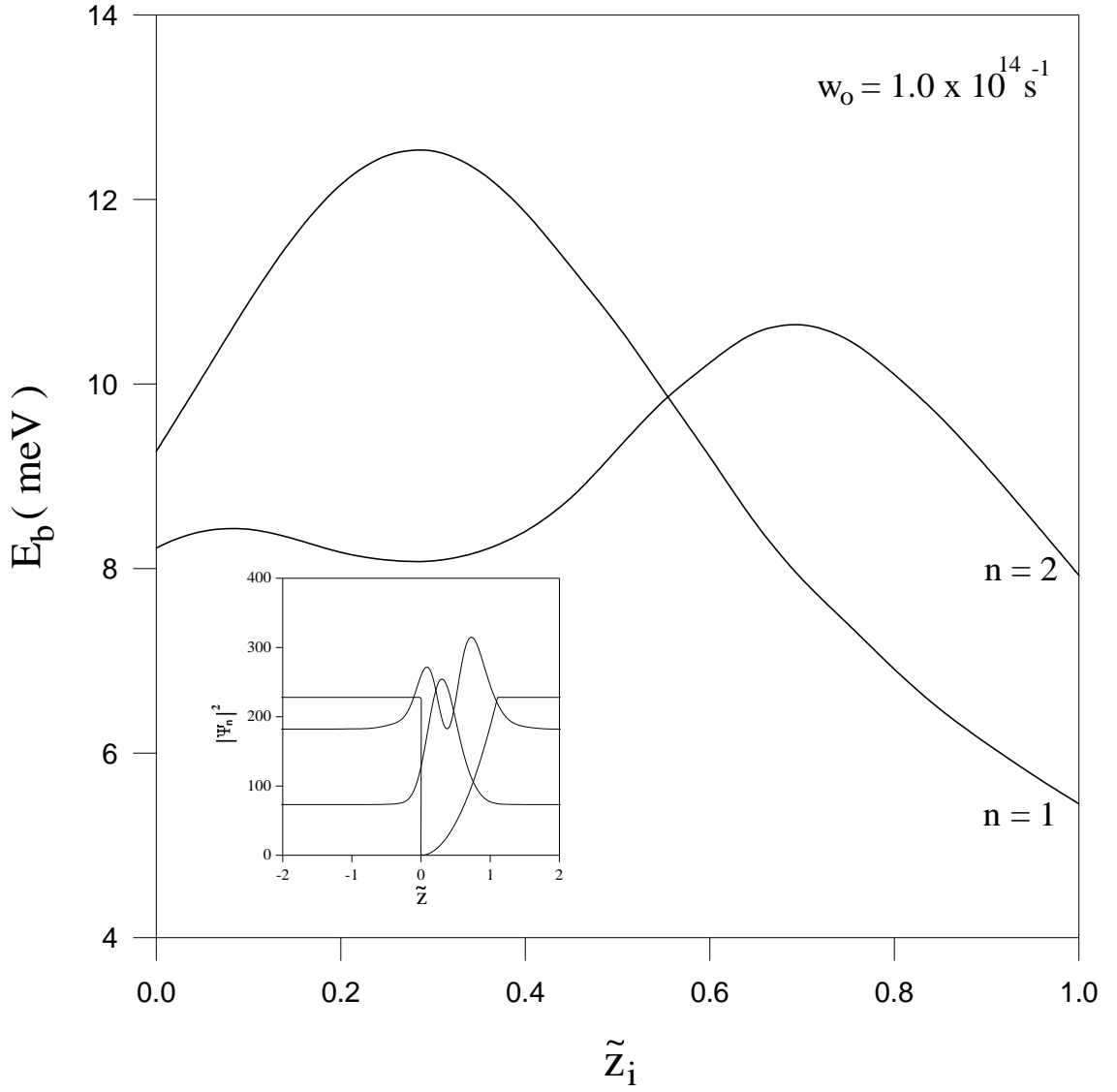
Şekil 5.13 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda safsızlık atomunun farklı üç konumu için bağlanma enerjisinin açısal frekansa (w_0) göre değişimi.

Şekil 5.13' de yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda donör safsızlık atomunun farklı konumları için bağlanma enerjisinin frekansa göre değişimi gösterilmiştir. Daha önce belirtildiği gibi yarı-parabolik kuantum kuyusunda açılal frekans arttıkça etkin kuyu genişliđi azalmaktadır. Safsızlık atomu $\tilde{z}_i = 0$ konumundan $\tilde{z}_i = 0.3$ konumuna kadar ötelendiđinde elektron ile safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılıđı giderek artar ve $\tilde{z}_i \cong 0.3$ civarında maksimum deđerine ulaşır. $\tilde{z}_i > 0.3$ 'ten büyük konumlarda safsızlık atomu ile elektronun birbirini aynı düzlemde görme olasılıđı azalmaya başladığından bu konumdan itibaren bağlanma enerjisi de \tilde{z}_i ile birlikte azalmaya başlar. Bu durumda safsızlık atomunun $\tilde{z}_i = 0.5$ konumuna karşılık gelen bağlanma enerjisi $\tilde{z}_i = 0.3$ ' te ki bağlanma enerjisinden daha küçük olacaktır.



Şekil 5.14 Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda farklı safsızlık atomu konumları için kutuplanmanın açısal frekansa göre değişimi.

Farklı safsızlık atomu konumları için kutuplanmanın açısal frekansa göre değişimi şekil 5.14’ de verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi, kutuplanma için yapılan tanımlamaya göre safsızlık atomunun konumuna ve elektronun yük dağılımına bağlı olarak kutuplanma negatif veya pozitif değerler alabilmektedir. Ayrıca, bütün \tilde{z}_i değerleri için kutuplanmanın artan ω_0 değerleri ile birlikte sifıra yakınsadığı görülmektedir. Bu davranış kutuplanma için daha önce yapılan değerlendirmeler ile uyushmaktadır.



Şekil 5.15 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yarı-parabolik kuantum kuyusunda taban ve ilk uyarılmış durumda bulunan elektron için bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre değişimi.

Yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusunda $n = 1$ ve $n = 2$ için bağlanma enerjisinin safsızlık atomunun konumuna göre değişimi şekil 5.15' de verilmiştir. $n = 1$ taban durumu için safsızlık atomunun konumu $\tilde{z}_i = 0$ 'dan sağa doğru ötelendiğinde elektron ile safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı artacağından bağlanma enerjisi de artar ve $\tilde{z}_i \cong 0.3$ civarında maksimum olur. Bu durum şekil 5.10' da açıklandığı gibi $\tilde{z}_i \cong 0.3$ civarında elektron yoğunluğunun maksimum olmasının bir sonucudur ve safsızlık atomu ile elektron bu konumda aynı düzlemde bulunma olasılığı maksimum olur ve bağlanma enerjisi bu nokta civarında en büyük değerini alır. Safsızlık atomunun konumunun daha büyük değerleri için ($\tilde{z}_i > 0.3$) safsızlık atomu ile elektronun birbirini görme olasılığı azalacaktır ve aralarındaki Coulombic etkileşim azalmaya başlayacaktır. Şekilden de görüldüğü gibi (küçük şekil) kuyunun simetrisinden dolayı $n = 2$ düzeyi için elektron ile safsızlık atomunun birbirini aynı düzlemde görme olasılıkları $n = 1$ durumuna göre farklılık gösterir ve $\tilde{z}_i \cong 0.7$ civarında maksimum olur. Beklenildiği gibi, $n = 2$ düzeyine karşılık gelen bağlanma enerjisinin safsızlık atomu konumuna göre değişimi bu düzeye karşılık gelen dalga fonksiyonu dağılımına benzer bir davranış sergilemektedir.

6. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, donör katkılı yarı-parabolik GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyusu ele alınmıştır. Sistem içerisinde bulunan elektron ve donör atomu arasındaki bağlanma enerjisinin ve öz-kutuplanın, açısızlık atomunun konumuna göre değişimi incelenmiştir. Bağlanma enerjisi ve safsızlık atomu problemi etkin kütle yaklaşımı varyasyonel hesap tekniği ile çözülmüştür.

Tez çalışmasında elde edilen sonuçlara göre, GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yarı-parabolik kuantum kuyusunda bulunan safsızlık atomu-elektron sisteminin bağlanma enerjisi kuşatma potansiyelinin biçimini belirleyen açısızlık atomuna oldukça duyarlıdır. Kuşatmanın çok zayıf olduğu küçük açısızlık atomu değerlerinde elektron serbest parçacık gibi davranır ve bunun sonucu olarak bağlanma enerjisinin külçe yapı değerine yakınsadığı görülür.

Tez çalışmasının son aşamasında safsızlık atomu-elektron sistemi için tanımlanan öz-kutuplanma açısızlık atomunun konumuna göre incelenmiştir. Elde edilen sonuçlara göre elektron olasılık yoğunluğunun kuşatma potansiyelindeki dağılımının öz-kutuplanma üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu belirlenmiştir. Ayrıca, elektron olasılık yoğunluğunun açısızlık atomu ile ayarlanarak bağlanma enerjisi ve öz-kutuplanmanın da amaca uygun olarak ayarlanabileceği sonucuna varılmıştır.

7. KAYNAKLAR

1. G.H. Wang, K.X. Guo, *Physica B* 315 (2002) 234
2. L. Zhang, H.J. Xie, *Physica E* 22 (2004) 791
3. D.M. Sedrakian, A.Z. Khachatryan, G.M. Andresyan, V.D Badalyan, *Opt. Quantum Electron.* 36 (2004) 893
4. Y.B Yu, K.X Guo, S.N Zhu, *Physica E* 27 (2005) 62
5. G.H. Wang, K.X. Guo, S.N. Zhu, *Physica E* 28 (2005) 62
6. E. Rosencher, Ph. Bois, *Phys. Rev. B* 44 (1991) 11315
7. L.T. Canham, *Appl. Phys. Lett.* 57 (1990) 1046
8. K.X. Guo, S.W. Gu, *Phys. Rev. B* 47 (1993) 16322
9. İ.Karabulut, H.Şafak, *Physica B* 368 (2005) 82
10. L.Tsang, S.L. Chuang, S.M. Lee, *Phys. Rev. B* 41 (1990) 5942
11. İ.Karabulut, H.Şafak, M.Tomak, *Solid State Commun.* 135 (2005) 735
12. Y.B.Yu, S.N.Zhu, K.X. Guo, *Phys.Lett.A* 335 (2005) 175
13. L. Zhang, H.J. Xie, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 235315
14. M.K. Gurnick, T.A. Detemple, *IEEE J.Quant. Electr.* QE-19 (1983) 791
15. J. Khurgin, Second-order intersubband nonlinear optical susceptibilities of asymmetric quantum well structures, *Optical Society of America, Washington, DC, (1989), p. 69*
16. P.F. Yuh, K.L. Wang, *J.Appl. Phys.* 65 (1989) 4377
17. D.Ahn, S.L. Chuang, *IEEE Quant. Electr.* QE-23 (1987) 2196
18. M.M. Fejer, S.J.B Yoo, R.L.Byer, A. Harwit, J.S.Harris Jr., *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989) 1041
19. Köksal, F., Altunbaş, M., Başaran, E., *Katıhal Fiziği, Literatür Yayıncılık, İstanbul, ISBN 975-7860-93*
20. Karaoğlu, Bekir., *Katıhal Fiziğine Giriş, Bilgi Tek Yayıncılık, İstanbul, (1996)*
21. Jasprit Sing, *Semiconductor Devices, Mc Graw-Hill Inc., (1994)*
22. Kittel, C. ,*Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons,Inc., (1986)*
23. Mckelvey, J.P., *Solid State and Semiconductor Physics, Harper & Row Pres, New York, (1966)*
24. Sze S.M., ‘*Semiconductor Devices Physics and Technology*’, *John Wiley&Sons, New York, 85-127 (2002)*

25. Kittel, C., Katıhal Fiziğine Giriş, (çev: B. Karaoğlu), Güven Yayınları, İstanbul (1996)
26. Omar, M.A., Elementary Solid State Physics, Addison-Wesley Publishing, California, ABD (1975)
27. Milton Abramowitz, Irene A. Segun, Handbook of Mathematical Functions. (Dover, New York, (1965) p. 504
28. Smith, W.T., Principles of Materials Science and Engineering, McGraww-Hill, Inc., USA (1990)
29. Dikici, M., Katıhal Fizigine Giriş, On Dokuz Mayıs Üniversitesi Yayınları, Samsun, Türkiye (1993)
30. Jaros, M., “Physics and Applications of Semiconductor Heterostructures” Oxford University Press, New York (1989)
31. Casey H. C., Panish M. B., “Heterostructure Lasers”, Academic, New York,193, (1978)
32. Harrison, P., “Quantum Wells, Wires and Dots” The University of Leeds, UK (1999)
33. R.T.Weidner and R.L.Sells, Elemetary Modern Physics , Allyn and Bacon, Boston, Third edition, (1980)
34. R.M.Eisberg, Fundamentals of Modern Physics, Wiley, New York,1961; L.I.Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill, London, (1968)
35. S.M.Sze, Physics of Semiconductor Devices, Wiley, New York, Second edition, (1981)
36. C. Mailhot, Yia-Chung Chang, and T.C.McGill, ‘Energy spectra f donors in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum well structures in the effective mass approximation’, Phys. Rev. B, 26:4449, (1982)
37. R.L.Greene and K.K.Bajaj, ‘Energy levelsof hydrogenic impurity states in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum well structures’, Solid State Commun., 45:825, (1983)
38. G.N.Carneiro, G.Weber, and L.E.Oliveira, ‘Binding eergies and intra-donor absorption spectra in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum well structures’, Semi-cond. Sci. Technol., 10:41, (1995)
39. K. Navaneethakrishnan, B. Sukumar, Phys. Rev. B Vol:41 No:18 12911-12914.
40. V. Narayni, B. Sukumar, Solid State Commun. 97 (1996) 643

41. Ambacher, O., Smart, J., Shealy, J.R., Weimann, N.G., Chu, K., Murphy, M., Schaff, W.J., Eastman, L.F., Dimitrov, R., Wittmer, L., Stutzmann, M., Rieger, W., and Hilsenbeck, J., "Two dimensional electron gas", *J.Appl.Phys.*, 85, 3222, (1999)
42. G. Bastard 'Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures Halsted, New York (1998)
43. I. Erdogan, O. Akankan and H. Akbas, *Physica E* 42 (2009) 136-140

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Fatma AYDIN
Doğum Yeri ve Tarihi : Sivas, 13.05.1987
Medeni Hali : Bekar
İletişim Adresi : Cumhuriyet Üniversitesi, Fen Fakültesi Fizik Bölümü
58140-Sivas
Lisans : Cumhuriyet Üniversitesi, 2008
Yüksek Lisans : Cumhuriyet Üniversitesi, 2012