

T.C.

GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ

MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**POTANSİYEL KUYULARI VE TÜNEL OLAYI
İLE İLGİLİ UYGULAMALAR VE YARI
İLETKEN KARAKTERİZASYONU**

Zeynep ŞAHAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

GEBZE

2003

T.C.

GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

POTANSİYEL KUYULARI VE TÜNEL OLAYI
İLE İLGİLİ UYGULAMALAR VE YARI
İLETKEN KARAKTERİZASYONU

Zeynep ŞAHAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI

Doç. Dr. Serhat ÖZDER

GEBZE
2003

ÖZET

Günümüzde, hızla ilerleyen teknolojiye paralel olarak gelişen kuantum fiziğinin temel kavramlarından olan potansiyel kuyuları ve tünelleme üzerine uygulamalar önem kazanmıştır. Mikroskoplar, entegre devreleri ve yarı iletken hetero yapıları ile elde edilen lazerler gibi kullanım alanları genişletilmiştir.

Bu tezde, kullanım alanlarının genişliği ve öneminden dolayı, potansiyel kuyuları ve tünelleme üzerine temel teorik bilgiler türetilmiştir. Ayrıca literatür taraması yapılarak uygulama alanları araştırılmıştır.

SUMMARY

According to rapidly growing technology one of the basic concepts of Quantum Physics, namely Quantum Wells and tunnelling applications has gained importance. They had a wide usage areas like in lasers which were obtained from semiconductor heterojunctions, microscopes and integrated circuits.

In this thesis, as a result of large areas of applications and importance, basic theoretical basis were acquired about Quantum wells and tunnelling. In addition, by a detailed survey, application fields were investigated.

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasında, her türlü bilgi ve tecrübesini bana aktaran, çalışmalarım sırasında desteğini benden esirgemeyen değerli hocam ve danışmanım Sayın Doç. Dr. Serhat ÖZDER'e teşekkürü borç bilirim.

Literatür taramamda bana yardımcı olan Sayın Arş. Gör. Mustafa Eginligil'e, bugünlere gelmemi sağlayan aileme, manevi desteğini esirgemeyen arkadaşlarıma teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

	Sayfa
ÖZET	iv
SUMMARY	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	xiii
I. BÖLÜM	1
1. GİRİŞ	1
II. BÖLÜM	2
2. POTANSİYEL KUYULARI VE TÜNEL OLAYI	2
2.1 Sonsuz Kuyu Potansiyeli	2
2.2 Kare Kuyu Potansiyeli	6
2.2.1 $E > 0$ Serbest Durumlar	7
2.2.2 $E < 0$ Bağlı Durumlar	9
2.2.2.1 Çift Çözümler	11
2.2.2.2 Tek Çözümler	11
2.2.3 Enerji Öz Değerleri	12
2.3 Üç Boyutlu Sistemlerde Potansiyel Kuyuları	13
2.3.1 Serbest Parçacık Hali	19
2.3.2 Sonsuz Kuyu Potansiyeli	21
2.3.3 Küresel Kuyu Potansiyeli	21
2.3.3.1. $E > 0$ Serbest Durumlar	21
2.3.3.2. $E < 0$ Bağlı Durumlar	22
2.4 Kare Potansiyel Engelinde Tünel Olayı	24
2.4.1 $E > 0$ Serbest Durumlar	25
2.4.2 $E < 0$ Bağlı Durumlar	29
III. BÖLÜM	33
3. POTENSİYEL KUYU UYGULAMALARI	33
3.1 AlGaAs / GaAs Potansiyel Kuyuları	33
3.1.1. Kuantum Kuyularda Bağlı Durumlar	35

3.1.2.	Kuantum Kuyularda Durum Yoğunluğu	37
3.1.3.	Kuantum Kuyularda Excitonlar	40
3.1.4.	Kuantum Optik Geçişten Işık Soğurulması ve Işıma	43
3.2	GaAs/AlGaAs Lazerleri	47
3.3	InGaAs/AlGaAs ile Sıkıştırılmış Kuantum Kuyuları	52
3.4	InGaAs/InP Lazerleri	58
IV.	BÖLÜM	63
4.	MONTE CARLO SİMÜLASYONLARI	63
4.1	SiGe/Ge Kuantum Kuyularında Boşluk Taşınımının Monte Carlo Simülasyonları	63
V.	BÖLÜM	75
5.	TARAMIL TÜNELLEME MİKROSKOBU (S.T.M)	75
5.1	Basit Harmonik Birleştirici	75
VI.	BÖLÜM	87
6.	SONUÇ	87
	KAYNAKLAR	88
	ÖZGEÇMİŞ	90

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

SDD	:	Schrödinger dalga denklemi
$V(x)$	:	Potansiyel enerji fonksiyonu
L	:	Kuyu eni
$\hbar$	:	Planck sabitinin $\frac{1}{2\pi}$ katı
m	:	Parçacığın kütlesi
$\psi_{(x)}$	:	Dalga fonksiyonu
E	:	Parçacığın Enerjisi
k	:	Dalga vektörü
A,B,C,D,F,G	:	Dalga fonksiyonu Sabitleri
n	:	Baş kuantum sayısı
E_n	:	Enerji öz değerleri
$\psi_n(x)$	:	Dalga fonksiyonu öz değerleri
V_o	:	Potansiyel duvarının yüksekliği
a	:	Kare kuyu eni
R	:	Yansıma katsayısı
T	:	Geçme katsayısı
k'	:	Dalga Vektörü ($V_{(x)} \neq 0$ için)
$\vec{P}$	:	Momentum operatörü
$\vec{P}_x, \vec{P}_y, \vec{P}_z$	:	Momentum operatörünün bileşenleri
t	:	Zaman
r	:	Uzay değişkeni ve yarıçap
∇^2	:	x, y, z değişkenlerine bağlı fonksiyonun ikinci dereceden kısmi türevleri toplamı
$T(t)$	:	Zaman fonksiyonu
θ	:	z eksenine r arasındaki açı
Φ	:	x eksenine r 'nin xy düzlemindeki izdüşümü arasındaki açı
L	:	Açısal momentum
$R_{(r)}$	:	Dalga fonksiyonu radyal kısmı
$Y(\theta, \Phi)$	:	Dalga fonksiyonu açısal kısmı

ℓ	:	Yöresel kuantum sayısı
λ	:	Öz değer
ρ	:	Bulunma olasılığı yoğunluğu
$J(\rho)$	:	Küresel Bessel Fonksiyonu
$n(\rho)$	:	Neumann Fonksiyonu
V_n	:	Potansiyel enerjinin öz değerleri
B_ℓ, C_ℓ	:	Potansiyel enerji öz değerleri fonksiyonunun katsayıları
$S(x)$	:	Olasılık akışı
V	:	Dalga hızı
$\rho_{(x,t)}$	:	Bulunma olasılığı yoğunluğu fonksiyonu
ϵ_g	:	Yasak bant enerji aralığı
m^*	:	Etkin kütle
E_z	:	z yönündeki enerji
$E_c(z)$	:	Bir elektronun potansiyel kuyudaki enerji fonksiyonu
E_{zn}	:	z yönündeki enerji öz değerleri
A	:	Birleşme yüzey alanı
$N(E_{xy})$	:	Toplam durum sayısı
$D(E)$	:	Toplam durum yoğunluğu fonksiyonu
R_{3D}	:	3 boyutlu bir iletkenin exciton zemin durumu
a^*	:	Exciton yarıçapı
a_{3D}^*	:	3 boyutlu excitonun yarıçapı
m_c^*	:	Elektronun etkin kütlesi
m_v^*	:	Boşluğun etkin kütlesi
m_r^*	:	Elektron ve boşluğun indirgenmiş etkin kütlesi
ϵ	:	Yarı iletkenin dielektrik sabiti
H	:	Hamiltonyen
P_{ze}	:	Elektronun z yönündeki momentumu
P_{zh}	:	Boşluğun z yönündeki momentumu
T	:	Sıcaklık
k	:	Boltzmann sabiti
n_e	:	Elektronun bulunduğu bandın baş kuantum sayısı
n_h	:	Boşluğun bulunduğu bandın baş kuantum sayısı

E_c	:	Elektron enerjisi
E_v	:	Boşluğun enerjisi
E_n	:	Elektronların n bağlı durum enerji seviyeleri
H_m	:	Ağır boşlukların m bağlı durum enerji seviyeleri
L_m	:	Hafif boşlukların m bağlı durum enerji seviyeleri
TE	:	Elektromanyetik dalganın elektrik kısmının enlemesine bileşeni
TM	:	Elektromanyetik dalganın manyetik kısmının enlemesine bileşeni
hh	:	Ağır boşluk
lh	:	Hafif boşluk
h	:	Planck sabiti
ν	:	Frekans
G_{pk}	:	Pik kazancı
α_{pk}	:	Pik kazanç frekansı
ϕ	:	Çizgi genliği
Kv	:	Kazanç enerjisi
N_{th}	:	Eşik taşıyıcı yoğunluğu
G_{tn}	:	Eşik kazancı fonksiyonu
∂	:	Kırıcı endeks
$V_{hh/lh}$	:	Ağır boşluğun potansiyelinin hafif boşluğa oranı
b	:	Değerlik bandı determasyon potansiyeli
E_{11}	:	İkili eksen baskısı
A_j^-	:	-z yönünde giden dalga fonksiyonunun katsayısı
A_j^+	:	+ z yönünde giden dalga fonksiyonunun katsayısı
α_j	:	j hücresi için dalga vektörü
$m_z(j)$	:	j hücresi için enlemesine etkin kütle
$m_n(j)$	:	j hücresi için düzlem içi etkin kütle
R_j	:	j hücresi için bağlanma enerjisi
L_j	:	j hücresi için açısal momentum
$\mathcal{A}_v$	:	alaşım potansiyeli
$\mathcal{A}_A$	:	Kabalık parametresi
STM	:	Taramalı tünelleme mikroskobu
w	:	Açısal frekans

λ	:	De Broglie dalga boyu
v	:	Hız
Φ	:	İş fonksiyonu
u	:	Engel yüksekliği
j	:	Akım yoğunluğu
c	:	Işık hızı

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil	Sayfa
2.1. Sonsuz Kuyu Potansiyeli.	2
2.2. Sonsuz Kuyu Potansiyelinde Enerji Düzeyleri ve Dalga Fonksiyonları.	5
2.3. V_0 Derinliğinde Kare Kuyu Potansiyeli.	6
2.4. $U^2 + v^2 = R^2$ Çemberi a) $v = \text{utanu}$ b) $V = - \text{ucotv}$ Eğrileri.	13
2.5. Küresel Koordinatlar.	15
2.6. Küresel Bessel ve Neumann Fonksiyonları.	20
2.7. Kare Potansiyel Engeli.	24
2.8. Potansiyel Engelinde $0 < E < V_0$ İçin Dalga Fonksiyonu.	30
2.9. Geçiş Katsayısının (T), E/V_0 'la Değişimi.	30
2.10. Rezonans Halleri ($E_1, E_2, E_3, \dots$).	32
3.1. AlGaAs/GaAs Elektron ve Boşluk Kuantum Kuyularının Öz Fonksiyon Öz Değerleri.	33
3.2. AlGaAs için x' e Bağlı İletkenlik Vadisi Enerjileri.	34
3.3. Potansiyel Kuyusundaki Parçacığın Enerji Değerleri.	36
3.4. Durum Yoğunluğu $\left(\frac{A}{(2\pi)^2} \right)$.	37
3.5. Kuantum Kuyuda Enerjiye Bağlı Durum Yoğunluğu Fonksiyonu.	39
3.6. Exciton Bağlanma Enerjisi ve Sonsuz Potansiyel Kuyuda Bohr Yarıçapı Yaklaşımı.	41
3.7. Kuyu Eninin Bir Fonksiyonu Olarak Sonlu Kuantum Kuyuları İçin Exciton Bağlanma Enerjisi Sonsuz Bariyerini Gösterir. Sürekli Çizgiler Ağır Boşluk, Kesik Çizgiler Hafif Boşluk Excitonları.	42
3.8. Üç Boyutta ve İki Boyuttaki Yarı iletkenlerde Exciton Soğurma Spektra - sının Karşılaştırılması.	42
3.9. a) Maddenin İletim Bandı Durum Yoğunluğuyla Birlikte Gösterilen Exciton Etkilerini İçeren, GaAs Bloğu Band Uçlu Soğrulma Profili. b) Basit Bir Enerji Bandının İki Boyutlu (2D) Kuantum Sınırlı Durum Yoğunluğu ve Maddenin Hacim Karşılaştırılması. c) Her İki Boyutlu Bant Ucunda, Exciton Etkileri Olsun veya Olmasın, Değerlik Bandından Kuantize İletkenlik Bandı Geçişleri İçin Şekilsel Soğrulma Spektrası.	43

3.10. Soğrulma Spektrumu ($\theta = 140^\circ$, $\lambda = 210\text{\AA}$, $\lambda = 4000\text{\AA}$) GaAs/Al _{0,2} Ga _{0,8} As İçin.	44
3.11. Potansiyel Kuyuda Optik Taşınım ($\Delta n=0$).	44
3.12. GaAs/Al _{0,13} Ga _{0,87} As Kuantum Kuyusunun Aydınlanma Uyarma Spektrumu ($\lambda=50\text{\AA}$).	46
3.13. GaAs/Al _{0,2} Ga _{0,8} As Kuantum Kuyu Bant Yapıları.	47
a) 5 nm b) 10 nm	
3.14. K'nın Fonksiyonu Olarak Dipol Matris Elemanlarının Mutlak Karesi.	48
3.15. GaAs/Al _{0,2} Ga _{0,8} As Kuantum Kuyularında $N = 4x, 6x$ ve $8x \cdot 10^{18} / \text{cm}^3$ Taşıyıcı Yoğunlukları İçin TE ve TM Kazanç Spektrumları.	
a) 5nm b) 10 nm	49
3.16. GaAs/Al _{0,2} Ga _{0,8} As İçin Çizgi Genliği İyileştirme Faktör Spektrası.	
a) 5 nm b) 10 nm	50
3.17. GaAs/Al _{0,2} Ga _{0,8} As İçin Pik Kazanç Frekanslarında TE Çizgi Genliği İyileştirme Faktörü.	
a) 5 nm(kalın) b) 10 nm (kesikli)	51
3.18. 5nm In Ga _{1-x} As / Al _{0,2} Ga _{0,8} As Sıkıştırılmış Kuantum Kuyularının Bant Yapıları.	
a) $x = 0,1$ b) $x = 0,2$	53
3.19. 5 nm In Ga _{1-x} As / Al _{0,2} Ga _{0,8} As Boşluk Kimyasal Potansiyelleri.	
a) $x = 0$, b) $x = 0,2$	53
3.20. 5 nm In Ga _{1-x} As / Al _{0,2} Ga _{0,8} As $x = 0$, $x = 0,1$ ve $x = 0,2$ İçin Taşıyıcı Yoğunluğunun Bir Fonksiyonu Olarak Pik Kazancı Çizimleri.	54
3.21. 5 nm In Ga _{1-x} As / Al _{0,2} Ga _{0,8} As İçin.	
a) TE b) TM Kazanç Spektrası	54
3.22. In Ga _{1-x} As / Al _{0,2} Ga _{0,8} As İçin Pik Kazancında Çizgi Genliği İyileştirme Fonksiyonu.	
a) 5nm b) 10 nm	55
3.23. 6nm In Ga _{1-x} As / Al _{0,2} Ga _{0,8} As Sıkıştırılmış Kuantum Kuyuları İçin Hesaplamalarla, Deneysel Ölçülmüş α Değerlerinin Karşılaştırılması.	56
3.24. 5nm'lik Bant Yapısı.	
a) In _{0,2} Ga _{0,8} As / GaAs b) In _{0,1} Ga _{0,9} As / GaAs İçin	57
3.25. 5 nm'lik In Ga _{1-x} As / Al _{0,2} Ga _{0,8} As / InP Bant Yapıları.	
a) $x = 0,33$ b) $x = 0,53$ c) $x = 0,73$ İçin	58

- 3.26.** $x = 0,33, 0,53$ ve $0,73$ İndiyum Yoğunlukları İçin $\text{InGa}_{1-x}\text{As}$ / $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ TE Modu (Kalın Çizgi ve TM Modu (Kesikli Çizgi) Kazanç Spektrası. 59
- 3.27.** 5nm $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / Inp İçin Eşik Taşıyıcı Yoğunluğunun İndiyum İçeriği Fonksiyonu. 60
 $G_{\text{th}} =$ **a)** 0 **b)** 2000/cm **c)** 4000/cm **d)** 6000/cm **e)** 8000/cm
- 3.28.** Pik Kazançtan Diferansiyel Kazancının 5 nm $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / Inp İçin $G_{\text{th}} =$ **a)** 2000/cm **b)** 4000/cm **c)** 6000/cm **d)** 8000/cm Eşik Kazançlarında İndiyum Yoğunluğu Fonksiyonu. 61
- 3.29.** Kırıcı Endeks Türevinin $\left(\frac{d\epsilon n}{dN}\right)$ InGaAs 'ta İndiyum Yoğunluğu Fonksiyonu Pik Kazancında Taşıyıcı Yoğunluğu Türevinin 5nm 'lik $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / Inp İçin Eşik Kazanç İndiyum Yoğunluğu Fonksiyonu. **a)** 2000/cm **b)** 4000/cm **c)** 6000/cm **d)** 8000/cm 61
- 4.1.** 90 Å 'luk $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ / Si Kuantum Kuyularının Kuantum Kuyu Alt Bantlarına Dağılımını Gösteren Parçalı, Düz Ağır Boşluk, Hafif Boşluk Kuyu Profilleri. 66
- 4.2.** Simülasyon Zamanına Bağlı Olarak Oranlı Alt Bant Doluluğu. 67
- 4.3.** Şekil 4.1'in SiGe Kuantum Kuyusunda Boşluklar İçin Ani Hız Aşırılığı. 67
- 4.4.** Düzlem İçi Elektrik Alanın Bir Fonksiyonu Olarak 90 Å 'luk $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ / Si , Kuantum Kuyuları İçin (300 K) Sapma Hızları ve Sapma Mobiliteleri. 68
- 4.5.** 300 K 'de Değişken Düzlem İçi Elektrik Alan İçin Şekil 4.1'in Kuantum Kuyusunun Alt Bantlarının En Alt Seviyelerini Dolduran Parçacık Kümelerinin Durağan Durum Yüzdeleri. **a)** 10^6 Vm^{-1} den Küçük Uygulanan Elektrik Alan En Çok Enerjili Parçaları Kuantum Kuyusundan Saçtırmak İçin Yeterlidir. **b)** Değişken Düzlem İçi Elektrik Alan İçin, En Düşük 6 Alt Bandını Dolduran Parçacık Kümesinin Durum Yüzdesi. 69
- 4.6.** Şekil 4.2 –4'te Açıklanan Simülasyon İçin 300 K 'de Farklı İşlemler Sayılan Saçılım Olaylarının Oranlı Dağılımı. 71
- 4.7.** Düzlem İçi Elektrik Alanın Bir Fonksiyonu Olarak, 90 Å 'luk Ge / $\text{Ge}_{0,7}\text{Si}_{0,3}$ Kuantum Kuyusu İçin 300 K 'de Sapma Hızları Ve Sapma Mobiliteleri. 71
- 4.8.** Değişken Düzlem İçi Elektrik Alan İçin 300 K 'de 90 Å 'luk Ge / $\text{Ge}_{0,7}\text{Si}_{0,3}$ Kuantum Kuyusunun Alt Bantlarını Dolduran Parçacık Kümesinin

Durağan Durum Yüzdesi.	71
4.9. Şekil 4.6-7’de Açıklanan Simülasyonlar İçin 300 K’de Değişik İşlemler İçin Sayılan Saçılım Olaylarının Oransal Dağılımı.	71
4.10. Pseudomorphic (Şekilliymiş Gibi).	72
5.1. Kristalik Altın Yüzeyinin Taramalı Tünelleme Mikroskobu ile Görüntüsü.	77
5.2. Gerçek Bir STM Üst ve Tabanının Ana Bileşenlerini Gösteren Resim.	78
5.3. a) İncelenecek Malzemenin Yüzeyindeki Bir Elektronun Dalga Fonksiyonu.	
b) İletken Bir Sondanın (prob) Sivri Ucu Yüzey Yakınında İken Bir Yüzey Elektronunun Dalga Fonksiyonu.	79
5.4. Bir Metaldeki Elektronun Konumuna Göre Potansiyel Enerji Değişimi Grafiği.	80
5.5. Bir Metaldeki Elektronun Konumuna Göre Potansiyel Enerji Değişimi Grafiği.	81
5.6. Sıvı Azot İçine Batırılmış Bir Tantalyum Disülfid Yüzeyindeki Atomların Görüntüsü.	83
5.7. Gümüş Kaplama İçin Kullanılan Bir Elektrot İçindeki Bir Grafit Elektrodunun Görüntüsü.	83
5.8. Bir Taramalı Tünelleme Mikroskobuyla “Görüntülenmiş” Grafit Yüzeyi.	84
5.9. STM’nin Teknolojik Uygulama Örnekleri:	
a) Bir Altın Kırınım Ağı Kalıbının 6,6 nm’lik Bir Taraması.	
b) Bir İnce Film Manyetik Kaydedici Başlığı.	
c) Bir Kompakt Disk Damgalayıcısı Üzerindeki Yumrular.	
d) Bir Elmas Kesme Aletinin Keskin Ağızı.	85

I.BÖLÜM

1. GİRİŞ

Parçacığın dalga ve dalganın parçacık özelliklerine sahip olması, kuantum mekaniğini ilginç kılar. Klasik fizik ile açıklanamayan, kuantum fiziğinin temel kavramlarından olan potansiyel kuyuları ile tünel olayı üzerine, birçok uygulama yapılmaktadır. Öncelikle teorik bilgiler üzerinde durmak gerekir.

Tek boyutlu ve üç boyutlu sistemlerde bir parçacığın genel hareketi incelenerek, potansiyel kuyularda serbest ve bağlı parçacık durumları için dalga fonksiyonları tanımlanır. Tünelleme olayında yansıma ve geçme katsayıları; parçacığın enerjisine, potansiyel engelinin değerine ve genişliğine bağlıdır.

Bazı yarı iletken hetero birleşmelerinde potansiyel kuyular incelenerek yarı iletkenler hakkında bilgi edinilebilir. Kuyularda durum yoğunluğu, excitonlar ve enerji bantları karakteristik özellik taşır. Optik geçişten ışık soğurulması ve ışıma ile Ga, As, In, Al, P gibi elementlerden lazerler yapılabilir.

SiGe/Ge kuantum kuyularında boşluk taşınımı hakkında bilgi , IV. Bölümde bulunabilir. Hareketlilik, alaşım saçılımına ve etkin kütleyle bağlı olarak simülasyonlar yardımıyla açıklanabilir.

Tünel olayının bir uygulaması olan Taramalı Tünelleme Mikroskobu'nun (STM) çalışma prensipleri ve bazı görüntü örnekleri V. Bölümde yer almaktadır. STM atomun boyutuyla karşılaştırılabilir çözme gücü ile yüzeylerin çok ayrıntılı görüntülerini elde etmeye olanak sağlar.

II. BÖLÜM

2. POTANSİYEL KUYU VE TÜNEL OLAYI

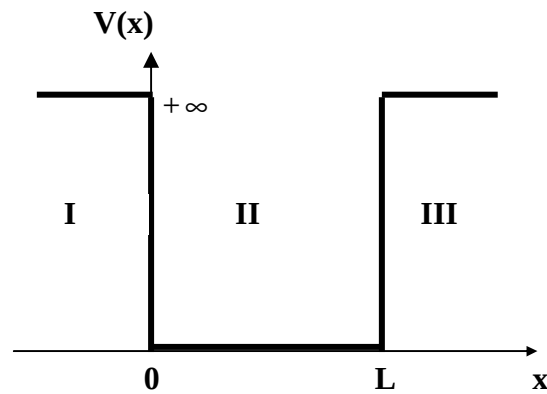
2. 1. Sonsuz Kuyu Potansiyeli

Bir parçacığın üç boyutlu bir potansiyelde genel hareketini incelemeden önce, tek boyutlu sistemler incelenecektir. İki potansiyel duvarı arasına sıkışmış parçacıklar için duvar yüksekliği farklı değerlerde olabilir. Matematiksel kolaylık açısından, duvar yüksekliği sonsuz seçilen kuyu için çözüm yapılacaktır. Zamandan bağımsız Schrödinger Dalga Denklemini (S.D.D.) kullanılarak parçacığın dalga fonksiyonları bulunacaktır [Karaoğlu, 1998].

Potansiyel fonksiyonu

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ +\infty & 0 \geq x \text{ ve } x \geq L \end{cases}$$

olarak tanımlanır.



Şekil 2. 1. Sonsuz Kuyu Potansiyeli

Toplam enerjisi E olan parçacık için S.D.D. :

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (E > 0)$$

II. bölgede $V(x) = 0$ olduğundan;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x) : \quad \left(\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \right)$$

olur. Bu denklemi düzenlersek;

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{II}(x) &= 0 \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) + k^2 \psi_{II}(x) &= 0 \quad \left(\frac{d}{dx} \rightarrow u \right) \\ (u^2 + k^2) \psi_{II}(x) &= 0 \quad (u^2 = -k^2 \Rightarrow u = \pm ik) \\ \psi_{II}(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \end{aligned}$$

elde ederiz. Sonsuz potansiyel kuyusunda II. Bölge için bulduğumuz dalga fonksiyonunu, $e^{\pm ikx}$ gibi iki düzlem dalganın toplamıdır. Çözüm Eigler dönüşümleri yardımıyla düzenlenerek; sinüs ve kosinüs fonksiyonları cinsinden yazılabilir.

$$\begin{aligned} \begin{cases} e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx \\ e^{-ikx} = \cos kx - i \sin kx \end{cases} \\ \psi_{II}(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) = A_1 (\cos kx + i \sin kx) + B_1 (\cos kx - i \sin kx) \\ \psi_{II}(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (2.1) \\ [A = (A_1 - B_1)i, \quad B = A_1 + B_1] \end{aligned}$$

I. ve III. Bölgede potansiyelin değeri $V(x) = \infty$ olduğundan dalga fonksiyonunun fiziksel bir anlam taşıyabilmesi için dalga fonksiyonu sifıra eşit olmak zorundadır.

$$\psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0 \quad (2.2)$$

$x = 0$ ve $x = L$ duvarlarında sınır koşulları yazılırsa;

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= 0 \quad \rightarrow A \sin k0 + B \cos k0 = 0 \\ A \cdot 0 + B \cdot 1 &= 0 \quad (B=0) \\ \psi_{II}(L) &= \psi_{III}(L) = 0 \\ A \sin kL + B \cos kL &= 0 \\ A \sin kL &= 0 \end{aligned}$$

birinci denklemden $B = 0$ olduğu çıkar. İkinci denklemin sıfır olabilmesi için sinüs fonksiyonunun argümanı π sayısının katları olmalıdır.

$$\begin{aligned} \sin kL &= 0 \\ kL &= n\pi \\ k_n &= \frac{n\pi}{L} \quad (n=1,2,3,\dots) \end{aligned}$$

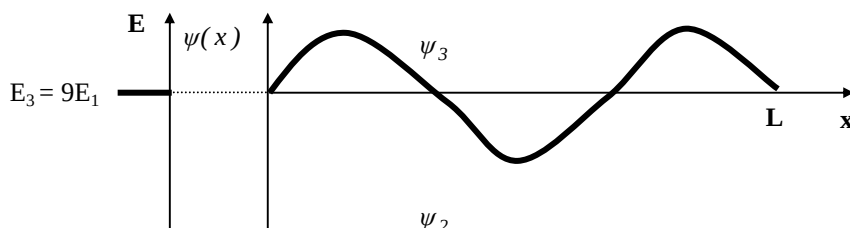
Enerji değeri hesaplanırsa,

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

şeklinde bulunur. Bu sonuca göre, potansiyel kuyusundaki bir parçacığın alabileceği enerji değerleri bir n (baş kuantum sayısı) tam sayısına bağlı olarak kesikli değerlerde bulunabilir. Belli enerji seviyeleri olduğundan kuantizasyon vardır; süreklilik yoktur. Sonsuz kuyu potansiyeli için enerji düzeyleri ve dalga fonksiyonları;

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= A \sin kx \\ E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 = E_1 n^2 \end{aligned}$$

denklemlerinden yararlanarak çizilebilir.



Dalga fonksiyonları normalize edilerek A katsayıları bulunabilir.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^L \sin^2 x dx = 1 \quad \left\{ \begin{array}{l} \sin^2 x = 1 - \cos^2 x \\ = 1 - \frac{1 + \cos 2x}{2} \\ = \frac{1}{2} + \frac{\cos 2x}{2} \end{array} \right.$$

$$1 = A^2 \int_0^L \frac{1}{2} (1 + \cos 2x) dx$$

$$1 = A^2 \left[\int_0^L \frac{1}{2} dx + \int_0^L \cos 2x dx \right]$$

$$= A^2 \frac{L}{2} + A^2 \underbrace{[\sin 2L - \sin 0]}_0$$

$$1 = A^2 \frac{L}{2} \Rightarrow \frac{2}{L} = A^2 \Rightarrow \sqrt{\frac{2}{L}} = A$$

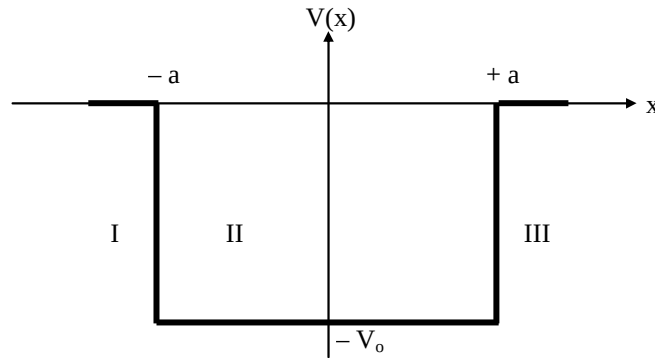
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad E_n = \frac{\hbar^2 k n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi}{2mL^2} n^2 \quad (2.3)$$

Böylece sonsuz kuyu potansiyelindeki parçacık için dalga fonksiyonları ve enerji değerleri hesaplanabilir. E enerji değeri, potansiyel duvarının yüksekliği olan V_0 dan çok küçükse, sonsuz potansiyel kuyusu gibi işlemler yapılır. Metallerde iletim elektronları, bir hacim içindeki gaz molekülleri sonsuz kuyudaki parçacıklar olarak alınabilir. Daha sonra üç boyutta kartezyen ve küresel koordinatlar için çözümler yapılacaktır.

2. 2. Kare Kuyu Potansiyeli

Parçacık uzayın bir bölgesinde çekici bir potansiyelin etkisi altında bazen serbest, bazen de bağlı durumda olabiliyorsa sonlu bir kare kuyu düşünmek yerinde olur.

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a < x < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$



Şekil 2. 3. Derinliğinde Kare Kuyu Potansiyeli

Enerjinin 0 dan büyük ya da küçük oluşuna göre iki durum söz konusudur.

2. 2. 1. $E > 0$ Serbest Durum

Parçacığın soldan gönderildiği düşünülerek, k ve k' 'ne bağlı serbest dalga çözümleri her bölge için yazılış sınır şartları uygulanabilir.

$$\text{I. bölgede } V(x) = 0 \quad \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{II. bölgede } V(x) = 0 \quad \psi = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x}, \quad k'^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}$$

$$\text{III. bölgede } V(x) = 0 \quad \psi = F \cdot e^{ikx}$$

$x = \pm a$ 'da ψ ve $\frac{d\psi}{dx}$ sürekli olmalıdır. Bu koşullar uygulanarak B, C, D, F katsayıları A cinsinden bulunabilir. III. Bölgede artık potansiyel duvarı olmadığından sadece ilerleyen dalga vardır, yansıyan dalga yoktur. $x = -a$ için $\psi_I = \psi_{II}$ olmalıdır.

$$A e^{-ika} + B e^{ika} = C e^{-ik'a} + D e^{ik'a}$$

$$A e^{-ika} = -B e^{ika} + C e^{-ik'a} + D e^{ik'a} \quad (2.4)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \text{ (sürekli olmalı)}$$

$$ik(A e^{-ika} - B e^{ika}) = ik'(C e^{-ik'a} - D e^{ik'a})$$

$$A e^{-ika} = B e^{ika} + C \frac{k'}{k} e^{-ik'a} - D \frac{k'}{k} e^{ik'a} \quad (2.5)$$

$x = +a$ için $\psi_{II} = \psi_{III}$ olmalıdır.

$$0 = 0 - C e^{ik'a} - D e^{-ik'a} + F e^{ika} \quad (2.6)$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx}$$

$$ik'(C e^{ik'a} - D e^{-ik'a}) = ik F e^{ika}$$

$$0 = 0 - C e^{ik'a} + D e^{-ik'a} + F \frac{k}{k'} e^{ika} \quad (2.7)$$

Bu dört denklem yardımıyla B, C, D, F katsayıları A cinsinden bulunabilir. Bu katsayılar yardımıyla R, yansıma katsayısı ve T, geçme katsayıları bulunabilir.

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 \quad R = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

şeklinde bulunur. Dört denklemde B, C, D, F 'nin katsayılarından oluşan determinant;

$$\Delta = \begin{vmatrix} -e^{ika} & e^{-ik'a} & e^{ik'a} & 0 \\ e^{ika} & \frac{k'}{k}e^{-ik'a} & -\frac{k'}{k}e^{ik'a} & 0 \\ 0 & -e^{ik'a} & -e^{-ik'a} & e^{ika} \\ 0 & -e^{ik'a} & e^{-ik'a} & \frac{k}{k'}e^{ika} \end{vmatrix}$$

şeklinde yazılarak katsayılar determinanı oluşturulur. $\Delta=0$ ise sisteme Cramer Sistemi denir.

$$B = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad C = \frac{\Delta_2}{\Delta}, \quad D = \frac{\Delta_3}{\Delta}, \quad F = \frac{\Delta_4}{\Delta}$$

Bu bağıntılarla katsayılar bulunur. T geçme katsayısı için, F'nin A cinsinden bulunması yeterlidir.

$$\Delta_4 = \begin{vmatrix} -e^{ika} & e^{-ik'a} & e^{ika} & Ae^{-ika} \\ e^{ika} & \frac{k'}{k}e^{-ik'a} & -\frac{k'}{k}e^{ik'a} & Ae^{-ika} \\ 0 & -e^{ik'a} & -e^{-ik'a} & 0 \\ 0 & -e^{ik'a} & e^{-ik'a} & 0 \end{vmatrix}$$

$$F \left(F = \frac{\Delta_4}{\Delta} \right), A \text{ cinsinden bulunup, } \left(T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 \right) \text{ geçme katsayısı formülünde}$$

yerine yazılırsa (2.8) denklemi bulunur.

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_o^2}{4E(E + V_o)} \sin^2 2k' a} \quad (2.8)$$

2. 2. 2. $E < 0$ Bağlı Durumlar

Parçacığın enerjisi potansiyel bariyerinden daha büyük fakat, negatif bir değere sahip ise bağlı durumlar söz konusudur. Her üç bölge için Schrödinger dalga denklemi yazılabilir. Dalga sabitlerinin pozitif olması için enerji mutlak değeri alınarak yazılır.

$$\begin{aligned} a^2 &= \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0 \\ (u^2 - \alpha^2)\psi &= 0 \\ u^2 &= \alpha^2 \Rightarrow u = \mp \alpha \end{aligned}$$

I. Bölgede $\psi_I(x) = C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x}$ fonksiyonunun fiziksel anlam taşıması için sonlu bir değere sahip olması gerekir. I. Bölgede $x \rightarrow -\infty$ olduğundan $D e^{-\alpha x} \rightarrow \infty$ olur.

$$\boxed{\psi_I(x) = C e^{\alpha x}} \quad (2.9)$$

II. Bölgede ;

$$k'^2 = \frac{2m(V_o - |E|)}{\hbar^2} \quad (E > -V_o)$$

$$\frac{d^2 \psi_{II}(x)}{dx^2} + k'^2 \psi_{II}(x) = 0 \quad (u^2 + k'^2) \psi = 0$$

$$u = \mp ik$$

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ &= A_1 (\sin k'x + i \cos k'x) + B_1 (\sin k'x - i \cos k'x) \end{aligned}$$

$$\psi_{II}(x) = A \cos k'x + B \sin k'x \quad (2.10)$$

$$A = i(A_1 - B_1) \quad B = A_1 + B_1$$

III. Bölgede, I. Bölge ile aynı dalga sabiti geçerlidir.

$$\alpha^2 = 2m(E/\hbar^2) \quad \frac{d^2 \psi_{III}}{dx^2} - \alpha^2 \psi_{III} = 0$$

$$\psi_{III}(x) = E e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x}$$

Şeklindeki çözümde $x \rightarrow +\infty$ gider. Bu yüzden;

$$\psi_{III}(x) = D e^{-\alpha x} \quad (2.11)$$

olmalıdır. Kuyu duvarlarında yine sınır koşulları yazılır. $x = \pm a$ da ψ 'nin sürekli olması için sınırlarda fonksiyonlar eşit olmalıdır.

$$\psi_I = \psi_{II} \rightarrow C e^{-\alpha a} = A \cos ka - B \sin ka$$

$$\psi_{II} = \psi_{III} \rightarrow D e^{\alpha a} = A \cos ka + B \sin ka$$

$x = \pm a$ da $d\psi/dx$ in sürekli olması için ;eşitlikler sağlanmalıdır.

$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \rightarrow \alpha C e^{-\alpha a} = kA \sin ka + kB \cos ka$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx} \rightarrow -\alpha D e^{-\alpha a} = -kA \sin ka + kB \cos ka$$

Yukarıdaki ilk iki ve son iki denklem kendi aralarında toplanır ve çıkarılırsa;

$$2A \cos ka = (C + D) e^{-\alpha a}$$

$$2kA \sin ka = \alpha (C + D) e^{-\alpha a}$$

$$2B \sin ka = -(C - D) e^{-\alpha a}$$

$$2kB \cos ka = \alpha (C - D) e^{-\alpha a}$$

şeklinde olduğundan bu denklemlerin dördünün birden doğru olması mümkün değildir. Çözüm için katsayılardan biri sıfır yazılmalıdır. Bunu görmek için ilk ikisini ve son ikisi taraf tarafa bölersek şu iki denklemi elde ederiz.

$$k \tan ka = \alpha$$

$$k \cot ka = -\alpha$$

ikisini taraf tarafa çarparsak şunu buluruz:

$$k^2 = -\alpha^2$$

2. 2. 2. 1. Çift Çözümler

Yukarıdaki dört denklemden $B = 0$ alınırsa II. Bölgedeki çözümler $\cos kx$ şeklinde çift fonksiyon olur. Bu durumda ; $A \neq 0$ ve $C = -D$ olur.

$$k \cot ka = -\alpha \quad \psi_{II}(x) = B \sin kx \quad (2.12)$$

2. 2. 2. 2. Tek Çözümler

$A = 0$ seçilirse II. Bölgedeki çözümler $\sin kx$ şeklinde tek fonksiyon olur. Bu durumda $k \tan ka = \alpha$ ve $k \cot ka = -\alpha$ denklemlerinde; $B \neq 0$ $C = -D$

$$k \cot ka = -\alpha \quad \psi_{II}(x) = B \sin kx \quad (2.13)$$

$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_o - |E|)}{\hbar^2}}$ k ve α yerine yazılarak enerji öz değerleri bulunur.

2. 2. 3. Enerji Öz Değerleri

(2.8) ve(2.9) denklemleri çözülerek parçacığın enerjisi elde edilir. Grafik yöntemiyle yaklaşık çözümler bulunup sonuçlar elde edilecek. α ve k değişkenleri yerine; $u = ka$ ve $V = \alpha a$ tanımlanarak ;

$$u^2 + v^2 = (k^2 + \alpha^2).a^2 = \frac{2mV_o}{\hbar^2}.a^2 = R^2$$

$$R = \sqrt{\frac{2mV_o a^2}{\hbar^2}}$$

olur. Bu çözüm , uv koordinatlı bir düzlemde R yarıçaplı bir çember denklemdir. Çözümler bu çemberin üzerinde oluşacaktır. $u^2 + V^2 = R^2$ çemberi ile $V = u \tan u$ ve $V = -u \cot u$ eğrileri çizilerek çözüm yapılır. Çember ile eğrilerin kesişme noktaları bağlı durum eğrilerini verir. Grafik çözümü sonuçları;

– $R = \frac{\sqrt{2mV_o a^2}}{\hbar}$ olduğundan potansiyel kuyusunun derinliği ve $2a$ genişliği

bilindiğinden çember çizilebilir.

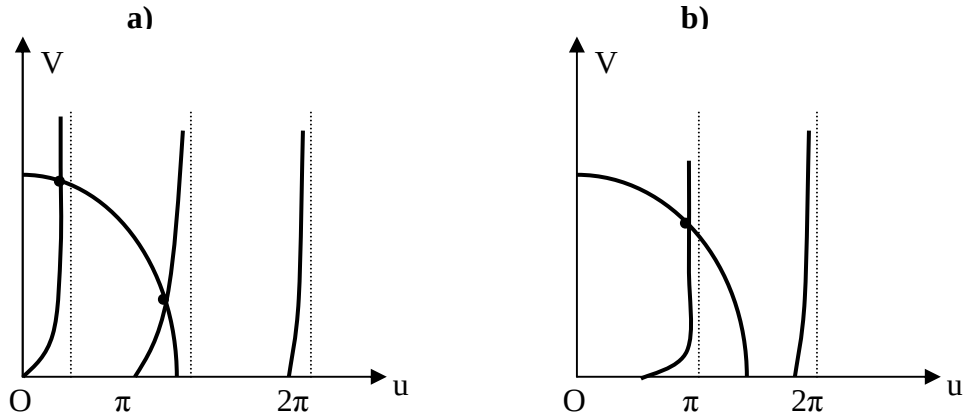
– Eğrilerin asimtot değerleri $\left(\tan \rightarrow \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \dots \cot \rightarrow \pi, 2\pi, \dots \right)$ bilindiğinde

çemberle kesişimleri enerji öz değerlerini verir. Tek ve çift pariteli çözümlerin enerji öz değerleri büyüklük bakımından alması sıralanır.

– Tanjant eğrisi sıfırdan, kotanjant ise $\frac{\pi}{2}$ den başlar. R ne kadar küçük olursa

olsun çift parateli çözüm mutlaka vardır. $R \geq \frac{\pi}{2}$ ise tek çözüm de vardır. $R < \frac{\pi}{2}$ ise

tek bağı durum olur. $R < \frac{\pi}{2}$ veya $V_o a^2 < \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m}$ dır.



Şekil 2. 4. $u^2 + v^2 = R^2$ Çemberi ve a) $v = u \tan u$, b) $v = -u \cot u$ Eğrileri

2. 3. Üç Boyutlu Sistemlerde Potansiyel Kuyuları

Üç boyutlu uzayda parçacıkların dalga fonksiyonları ve çözümleri işlenecektir. Öncelikle momentum ve enerjisi belirtilecek ve Schrödinger dalga denkleminde çözüm aranacak. Potansiyel sadece konuma bağlı olup zamandan bağımsız olduğundan S.D.D uzay – zaman kısımlarına ayrılıp incelenecektir [Gasiorowicz, 1974].

Üç boyutlu uzayda momentum operatör karşılığı;

$$\vec{P} = \vec{P}_x + \vec{P}_y + \vec{P}_z \text{ ve } P_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad P_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad P_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

olan ve $V(r) = V(x,y,z)$ potansiyelinde hareket eden bir parçacığın toplam enerjisi;

$$E = \frac{1}{2m} (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + V(x,y,z)$$

dir. Momentum bileşenlerinin kareleri alınıp yerine yazılırsa;

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)$$

olur. Buna karşılık gelen S.D.D ise ;

$$\frac{i\hbar \partial \psi(r, t)}{\partial t} = e\psi(r, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{\nabla^2} + v(x, y, z) \right] \psi(r, t) \quad (2.14)$$

S.D.D'nin uzay – zaman kısımlarını ayırmak için $\psi(r, t)$ dalga fonksiyonuna değişken ayrımı yöntemi uygulanır. $\psi(r, t) = \psi(r) \cdot T(t)$ şeklinde yazıp S.D.D'e yerleştirirsek;

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r) T(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} T(t) \nabla^2 \psi(r) + V(r) \cdot \psi(r) T(t) \quad (2.15)$$

(2.15) denkleminin her iki tarafını $1/\psi(r) T(t)$ ile çarparsak;

$$\frac{i\hbar \psi(r)}{\psi(r) T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{T(t)}{\psi(r) T(t)} \nabla^2 \psi(r) + \frac{V(r) \psi(r) T(t)}{\psi(r) T(t)}$$

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\psi(r)} \cdot \nabla^2 \psi(r) + V(r) = E \quad (2.16)$$

$\leftarrow \text{zaman} \rightarrow \qquad \qquad \leftarrow \text{uzay} \rightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial T(t)}{\partial t} = E T(t) \quad (2.17)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r) \quad (2.18)$$

Üç boyutta karşılaşılan parçacıklar küresel simetrik sistemlerdir. V sadece r'ye bağlıdır. Küresel simetrik bir potansiyelin içindeki parçacığa etkiyen kuvvet merkez-seldir. Yani parçacığın açısal momentumu korunur. Burada yarıçap tanımlanarak

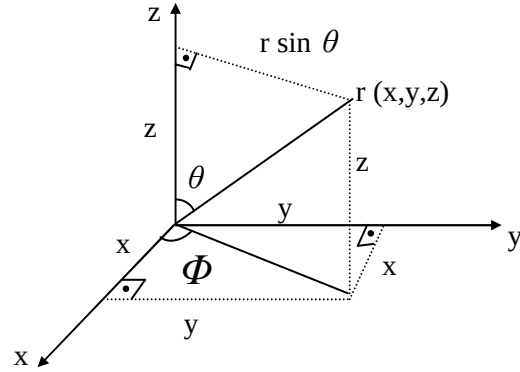
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \text{ ve } \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \text{ bulunabilir.}$$

Küresel koordinatlarda;

$$x = r \sin \theta \cos \Phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \Phi$$

$$z = r \cos \theta$$



Şekil 2.5. Küresel Koordinat

∇^2 'yi bulmak için $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial}{\partial y}$, $\frac{\partial}{\partial z}$ bulunmalıdır. Küresel koordinatlarda x, r'ye, θ 'ya ve Φ 'ye bağlıdır.

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad (2.19)$$

Küresel koordinat denklemlerinin x'e göre türevini alalım:

$$x \text{ için ; } 1 = \sin \theta \cos \Phi \frac{\partial r}{\partial x} + r \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} - r \sin \theta \sin \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

$$y \text{ için ; } 0 = \sin \theta \sin \Phi \frac{\partial r}{\partial x} + r \cos \theta \sin \Phi \frac{\partial \theta}{\partial x} + r \sin \theta \cos \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

$$z \text{ için; } 0 = \cos \theta \frac{\partial r}{\partial x} - r \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} + 0$$

3 bilinmeyenli denklemden $\frac{\partial r}{\partial x}$, $\frac{\partial \theta}{\partial x}$, $\frac{\partial \Phi}{\partial x}$ bulunabilir.

Determinant çözümü ; $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\Delta_1}{\Delta}$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} 1 & r \cos \theta \cos \Phi & -r \sin \theta \sin \Phi \\ 0 & r \cos \theta \sin \Phi & r \sin \theta \cos \Phi \\ 0 & -r \sin \theta & 0 \\ \hline \sin \theta \cos \Phi & r \cos \theta \sin \Phi & -r \sin \theta \sin \Phi \\ \sin \theta \sin \Phi & r \cos \theta \sin \Phi & r \sin \theta \cos \Phi \\ \cos \Phi & -r \sin \theta & 0 \end{vmatrix}$$

den bulunur. $\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\Delta_2}{\Delta}$ ve $\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\Delta_3}{\Delta}$ 'den bulunabilir. Bu değerler (2.19) nolu denklemde yerine yazılırsa;

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \Phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \Phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \Phi}{r \sin \theta} \frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

bulunur. Bunun gibi, $\frac{\partial}{\partial y}$ 'yi bulmak için, küresel koordinat denklemlerinin y'ye göre

türevleri alınıp $\frac{\partial r}{\partial y}$, $\frac{\partial \theta}{\partial y}$, $\frac{\partial \Phi}{\partial y}$ bulunarak determinant çözümü yapılır.

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad (2.20)$$

Denkleminde determinant çözümlerinden $\frac{\partial r}{\partial y}$, $\frac{\partial \theta}{\partial y}$, $\frac{\partial \Phi}{\partial y}$ bulunup yazılarak $\frac{\partial}{\partial y}$ elde edilir. Aynı şekilde küresel koordinat denkleminin z'ye göre türevi alınarak $\frac{\partial r}{\partial z}$, $\frac{\partial \theta}{\partial z}$, $\frac{\partial \Phi}{\partial z}$ ve sonuçta $\frac{\partial}{\partial z}$ bulunur.

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \Phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \Phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \Phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

∇^2 'yi bulmak için $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}$ ve $\frac{\partial}{\partial z}$ denklemlerinin 2. türevleri $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

şeklinde toplanmalıdır.

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \\ &= \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right]}_{\text{Radyal kısım}} \end{aligned}$$

$$\left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 = -\frac{L^2}{\hbar^2}$$

Küresel koordinatlarda S.D.D. şu şekli alır.

$$\nabla^2 \psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi(r) = 0 \quad (\text{uzay kısmı})$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \right) \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0 \quad (2.21)$$

Küresel simetrik sistemler için potansiyel sadece r 'ye bağlı olduğundan; ψ genel dalga fonksiyonunun r 'ye bağlı radyal kısmını ve açısal kısmını ayıralım.

$$\psi(r, \theta, \Phi) = R(r).Y(\theta, \Phi) = 0$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \right] R(r).Y(\theta, \Phi) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R(r).Y(\theta, \Phi) = 0$$

$$Y(\theta, \Phi) \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \right] R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R(r).Y(\theta, \Phi) = 0$$

Her iki tarafı $\frac{r^2}{R(r) Y(\theta, \Phi)}$ ile çarparsak denklem;

$$\frac{r^2}{R(r)} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] R(r) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = - \frac{\left(\frac{L}{2\pi} \right)^2}{Y(\theta, \Phi)} Y(\theta, \Phi) \quad (2.22)$$

sadece r 'ye bağlı kısım ve sadece açısal kısım ayrılmış olur. Her iki tarafı aynı sabite (λ) eşitlersek r, θ, Φ için tek çözüm elde edilebilir.

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R(r) - \frac{\lambda R(r)}{r^2} = 0 \quad (2.23)$$

$$-\frac{t^2}{Y(\theta, \Phi)} Y(\theta, \Phi) = \lambda \Rightarrow t^2 Y(\theta, \Phi) + \lambda Y(\theta, \Phi) = 0 \quad (2.24)$$

$$\left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 + \lambda = 0$$

Açılarla bağlı olan denklemde parçacığın içinde bulunduğu potansiyel bulunmaz. Dolayısıyla herhangi bir problemi çözmek için radyal denklem çözülür. $R(r)$ bulunur. (2.24) denkleminin çözümünden elde edilen $Y(\theta, \Phi)$ ile $R(r)$ çarpılarak $\psi(r, \theta, \Phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \Phi)$ genel çözüm elde edilir. (2.23) denklemini çözmek için λ değerini bulmak gerekir. λ , (2.24) denkleminden hesaplanıp, (2.23)'da yerine yazılır. $\lambda = \ell(\ell+1)$ ise (2.23) denkleminde yazılarak;

$$-\left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 = \lambda = \frac{L^2}{\hbar^2} \quad L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2$$

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R(r) = 0 \quad (2.25)$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R(r) - \frac{2m}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} R(r) = 0$$

şeklinde S.D.D nin küresel koordinatlardaki sadece r 'ye bağlı olan kısmıdır (Radyal kısım) Bu denklemin çözümü için $V(r)$ ve ℓ bilinmelidir. $\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}$ terimi merkez-cil potansiyel olarak bilinir.

2. 3. 1. Serbest Parçacık Hali

Parçacığın serbestçe dolaşabilmesi için hareketini uzayın belli bir bölgesinde sınırlayarak potansiyelin olmaması gerekir. $V(r) = 0$ ve x, y, z kartezyen koordinatlarda genel çözüm Radyal diferansiyel denkleminde $V(r) = 0$ ve $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ yazılır.

$$\psi(x, y, z) = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = A e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + k^2 R(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R(r) = 0 \quad (2.26)$$

$\rho = k.r$ olsun $k \rightarrow \frac{1}{r}$ boyutunda $\rho \rightarrow$ boyutsuz değişkendir.

$$\frac{dR}{dr} = \frac{dR}{d\rho} \cdot \frac{d\rho}{dr}, \quad \frac{d\rho}{dr} = k \quad \Rightarrow \quad \frac{dR}{dr} = \frac{kdR}{d\rho}$$

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{dR(r)}{dr} \right) = \frac{d}{dr} \left(\frac{kdR}{d\rho} \right) = k \frac{d^2 R}{dr d\rho} = k^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2}$$

$$k^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2k^2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)k^2}{\rho^2} \right] R(r) = 0 \quad (2.27)$$

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (2.28)$$

Bu diferansiyel denkleme **Bessel Denklemi** denir. İki çözümü vardır. Bunlar; $\rho = kr \rightarrow 0$ da ρ' olarak sonlu davranan $J_1(\rho) = J_1(kr)$ şeklinde verilen küre-

sel Bessel fonksiyonlarıdır ve $\rho = kr \rightarrow 0$ $\frac{1}{\rho^1}$ olarak ıraksayan (sonsuzaya giden) $n_1(\rho)$ şeklinde verilen Neumann fonksiyonlarıdır.

$$J_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right) \quad \text{Bessel} \quad (2.29)$$

$$n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right) \quad \text{Neumann} \quad (2.30)$$

$$J_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \quad n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}$$

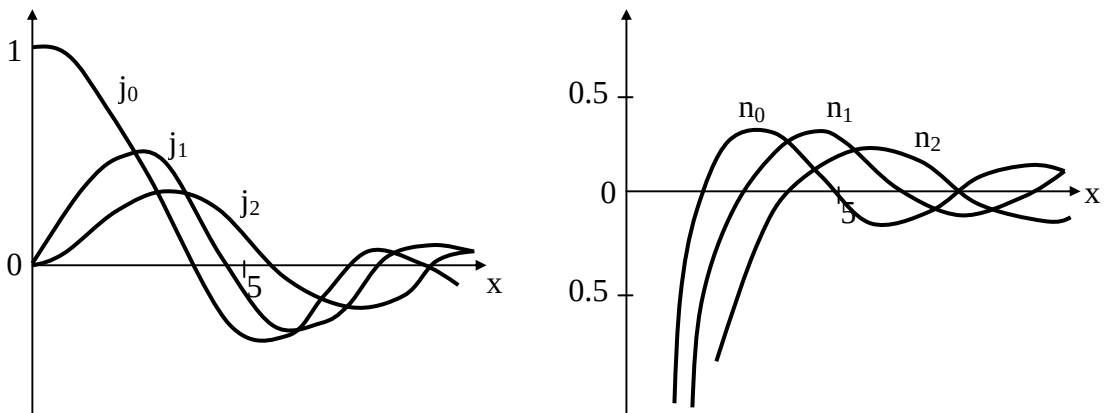
$$J_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} \quad n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$J_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho$$

$$n_2(\rho) = -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho$$

Çözümlerden n_ℓ fonksiyonlarının $r = 0$ da ıraksak olmasından çözüm şu şekildedir:

$$R_\ell(r) = A J_\ell(k, r) \quad \text{ve} \quad \psi_{k\ell m}(r, \theta, \Phi) = A J_\ell(kr) \cdot Y_\ell^m(\theta, \Phi) \quad (2.31)$$



Şekil 2. 6. Küresel Bessel ve Neumann Fonksiyonları

2. 3. 2. Sonsuz Kuyu Potansiyeli

$$V(r)=\begin{cases} 0 & r \leq a \\ +\infty & r > a \end{cases}$$

şeklinde olur. $r \leq a$ için $V(r) = 0$ olduğundan kuyu içinde serbest parçacık çözümü geçerlidir.

$$R_\ell(r) = A_\ell J_\ell(kr) \quad (k^2 = 2mE / \hbar^2)$$

Bu çözümler $r = 0$ da yakınsaktır. $r = a$ sınırında $V(a) = \infty$ $J_\ell(ka) = 0$ olmalıdır. Enerji öz değerleri bulunur.

$$k_{n\ell}a = \rho_{n\ell} \quad E_{n\ell} = \frac{\hbar^2 k_{n\ell}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \rho_{n\ell}^2}{2ma^2}$$

2. 3. 3. Küresel Kuyu Potansiyeli

Kürenin içi ve dışı için ayrı çözüm yapılır.

$$V(r)=\begin{cases} -V_o & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

2. 3. 3. 1. $E > 0$ Serbest Durumlar

Kuyu içinde :

$$\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_o) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0$$

$$\alpha^2 = 2m \frac{(E + V_o)}{\hbar^2} \Rightarrow U_\ell^I = A_\ell J_\ell(\alpha r) \quad (r \leq a)$$

Bessel Fonksiyonu

(2.32)

Kuyu dışında: $r \neq 0$ ve Neumann ıraksamaz. $V(r) > 0$;

$$U_{\ell}'' = B_{\ell} J_{\ell}(kr) + C_{\ell} n_{\ell}(kr) \quad (2.33)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (r > a)$$

Serbest parçacık için ($E > 0$) kuyu içinde (2.32) ve dışında (2.33) çözümleri elde edilir.

2. 3. 3. 2. $E < 0$ Bağlı Durumlar

Sonlu küresel kuyu potansiyelinde bağlı parçacık hali; $-V_o < E < 0$ ise kuyu içi ve dışı için çözümler :

Kuyu içi $V(r) = -V_o$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0$$

$$\alpha^2 = \frac{2m[E - V(r)]}{\hbar^2} = \frac{2m(E + V_o)}{\hbar^2}$$

$$U_{\ell} = A_{\ell} J_{\ell}(\alpha r) \quad (2.34)$$

Kuyu dışı $E < 0$

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \quad -k^2 = (ik)^2$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[-k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0$$

$$U_{\ell}^{II} = B_{\ell} J_{\ell}(ikr) + C_{\ell} n_{\ell}(ikr) \quad (2.35)$$

olur. Sınır koşulları (asimtotik davranışlar) kullanılarak;

$$\lim_{r \rightarrow \infty} J_{\ell}(\rho) \cong \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right) \text{ ve } \lim_{r \rightarrow \infty} n_{\ell}(\rho) \cong -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} U_{\ell}^I(\rho) = \frac{B_{\ell}}{ikr} \sin\left(ikr - \frac{\ell\pi}{2}\right) - \frac{C_{\ell}}{ikr} \cos\left(ikr - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} U_0^{II}(\rho) = \frac{B_0}{ikr} \sin(ikr) - \frac{C_0}{ikr} \cos(ikr) \quad (2.36)$$

$$\sin ij = -\frac{e^y - e^{-y}}{2i} \quad \text{ve} \quad \cos ij = \frac{e^y + e^{-y}}{2} \quad y = kr \quad \ell = 0$$

(2.36) formülünde yerine yazılırsa ;

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} U_0^{II} &= -\frac{B_0}{ikr} \left(\frac{e^{kr} - e^{-kr}}{2i} \right) - \frac{C_0}{ikr} \left(\frac{e^{kr} + e^{-kr}}{2} \right) \\ &= \left(\frac{B_0 + iC_0}{2k} \right) e^{kr} + \left(-\frac{B_0 + iC_0}{2kr} \right) e^{-kr} \end{aligned}$$

yakınsak olmalıdır. $C_0 = iB_0$ olur. O halde ;

$$U_0^I = A_0 \frac{\sin ar}{ar} \quad (r \leq a) \quad (2.37)$$

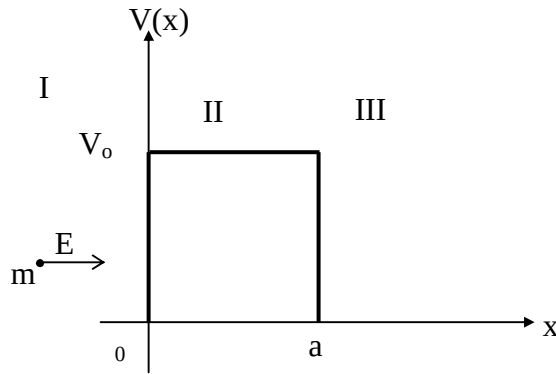
$$U_0^{II} = B_0 [J_0(ikr) + i n_0(ikr)] = -\frac{B_0 e^{-kr}}{kr} \quad (r > a) \quad (2.38)$$

$r = a$ 'da $U_0^I(a) = U_0^{II}(a)$ ve $U_0^{I'}(a) = U_0^{II'}(a)$ olmalı.

$$\alpha \cot(\alpha a) = -k \quad (2.39)$$

sonucu bulunur Bu ise sonlu potansiyel kuyusu için elde edilen tek pariteli çözümlerin öz değerlerini veren denklemdir. 3 boyutlu s durumlarının öz değerleri tek boyutlu kare kuyunun tek pariteli çözümlerin öz değerleriyle aynıdır.

2. 4. Kare Potansiyel Engelinde Tünel Olayı



Şekil 2. 7. Kare Potansiyel Engeli

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & a \geq x, 0 \leq x \end{cases}$$

Klasik olarak toplam enerjisi E olan bir parçacık I bölgesinde $x=0$ noktasına doğru $+x$ yönünde ilerliyorsa E enerjisine bağlı olarak hareketi belirlenir. Klasik açıdan;

- * $E < V_0$ ise parçacığın geriye yansıma olasılığı 1'dir.
- * $E > V_0$ ise parçacığın III bölgesine geçme olasılığı 1'dir.

Bu durum kuantum mekaniği ile çelişki yaratır. Kuantum mekaniği açısından incelendiğinde;

- * $E > V_0$ olsa bile dalganın bir kısmının geri yansıdığı
- * $E < V_0$ olsa bile dalganın bir kısmının III bölgesine geçtiği gözlenir.

Bunun için parçacığın enerjisine bağlı olarak dalga fonksiyonlarını inceleyelim. Bunun için zamandan bağımsız S.D.D. çözeceğiz.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.40)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - [E - V(x)]\psi(x) = 0$$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E - V(x))\psi(x) = 0$$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0 \quad (2.41)$$

2. 4. 1. E > 0 Serbest Durumlar

E > V₀ durumunda zamandan bağımsız SDD çözümü;

I. ve III. Bölgede V(x) = 0 ;

II. Bölgede V(x) = V₀

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$k^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0$$

$$\psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\psi_{II} = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x}$$

$$\psi_{III} = F e^{ikx} + \underbrace{G e^{-ikx}}$$

0 → G = 0 (Engel olmadığı için yansıma yok)

Sınır koşullarını uygulayalım.

$x = 0$ 'da;

$$\psi_I = \psi_{II}$$

$$A + B = C + D$$

$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx}$$

$$ik(A - B) = ik'(C - D)$$

$x = a$ 'da

$$\psi_{II} = \psi_{III}$$

$$C e^{ik'a} + D e^{-ik'a} = F e^{ika}$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx}$$

$$ik'(C e^{ik'a} - D e^{-ik'a}) = ik F e^{ika}$$

Bu dört denklemdeki beş sabitten dördü A cinsinden çözülür.

$$B - C - D + 0 = -A$$

$$-ikB - ik'C + ik'D + 0 = ikA$$

$$0 + e^{ik'a} C + e^{-ik'a} D - e^{ika} F = 0$$

$$0 + ik'e^{ik'a} C + e^{-ik'a} D - e^{ika} F = 0$$

Katsayılar determinanı oluşturularak sabitler A cinsinden bulunabilir.

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ -ik & -ik' & ik' & 0 \\ 0 & e^{ik'a} & e^{-ik'a} & -e^{ika} \\ 0 & ik'e^{ik'a} & -ik'e^{-ik'a} & -ike^{ika} \end{vmatrix}$$

Dört denklemde B, C, D, F'nin katsayılarından oluşan determinant Δ elde edildi.

$$B = \frac{A_1}{A}, \quad C = \frac{A_2}{A}, \quad D = \frac{A_3}{A}, \quad F = \frac{A_4}{A}$$

bağıntılarıyla A cinsinden B, C, D, F bulunur. Yansıma ve geçme katsayıları için B ve F' yi bulmak yeterlidir.

$$A_1 = \begin{vmatrix} -A & -1 & -1 & 0 \\ ikA & -ik' & ik' & 0 \\ 0 & e^{ik'a} & e^{-ik'a} & -e^{ika} \\ 0 & ik'e^{ik'a} & -ik'e^{ik'a} & -ike^{ika} \end{vmatrix} \quad \frac{A_1}{A} = B \Rightarrow$$

$$B = \frac{(k^2 - k'^2) \sin k'a}{(k^2 + k'^2) \sin k'a + 2ikk' \cos k'a} A$$

$$A_4 = \begin{vmatrix} -1 & -1 & -1 & -A \\ -ik & -ik' & ik' & ikA \\ 0 & e^{ik'a} & e^{ik'a} & 0 \\ 0 & ik'e^{ik'a} & -ik'e^{ik'a} & 0 \end{vmatrix} \quad \frac{A_4}{A} = F \Rightarrow$$

$$F = \frac{2kk'}{e^{ika} [2kk' \cos k'a + i(k^2 + k'^2) \sin k'a]} A$$

B ve F' yi A cinsinden bulduğumuza göre R (yansıma katsayısı) ve T (geçme katsayısı) belirlenir. Ancak k ve k' yerine bunların E ve V_o cinsinden değerleri

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_o)}{\hbar^2}} \text{ yazılırsa;}$$

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{4E(E - V_o)}{\hbar^2} \right]^{-1} \quad (2.42)$$

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{V_o \sin^2 k'a}{4E(E - V_o)} \right]^{-1} \quad (2.43)$$

$$R + T = 1$$

$$R = \frac{\text{Yansıyan dalganın olasılık akısı}}{\text{Gelen dalganın olasılık akısı}} \quad S(x,t) = v \cdot \rho(x,t)$$

$$R = \frac{B^* \cdot B \cdot U_1}{A^* \cdot A \cdot U_1} = \frac{B^* \cdot B}{A^* \cdot A} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

$$T = \frac{\text{Geçen dalganın olasılık akısı}}{\text{Gelen dalganın olasılık akısı}}$$

$$T = \frac{\rho_{II}(x,t) \cdot U_1}{\rho_I(x,t) \cdot U_1} = \frac{\psi_{III}^* \psi_{III}}{A^* A} = \frac{F^* e^{-ika} \cdot F e^{ika}}{A^* A}$$

$$T = \frac{F^* \cdot F}{A^* \cdot A} = \left| \frac{F}{A} \right|^2$$

(2.42) ve (2.43) nolu denklemlerin toplamı 1 dir.

$$R = \left[1 + \frac{4E(E - V_o)}{V_o^2 \sin^2 k' a} \right]^{-1}$$

$$T = \left[1 + \frac{V_o^2 \sin^2 k' a}{4E(E - V_o)} \right]^{-1}$$

$$R = \frac{V_o^2 \sin^2 k' a}{4E(E - V_o) + V_o^2 \sin^2 k' a} \quad (2.44)$$

$$T = \frac{4E(E - V_o)}{4E(E - V_o) + V_o^2 \sin^2 k' a} \quad (2.45)$$

$R + T = 1$ $E > V_o$ halinde dalğanın engelden kısmen bir kısmı bir yansıma ve kısmen de III. Bölgeye geçme olasılığı vardır.

2. 4. 2. $0 < E < V_0$ Bağlı Durumlar

$0 < E < V_0$ için üç bölgedeki SDD genel çözümleri;

I. ve III Bölge

II bölge

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0$$

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\psi_{II} = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$$

$$\psi_{III} = F e^{ikx}$$

Sınır koşullarını yazalım.

$x = 0$ 'da

$$\psi_I = \psi_{II}$$

$$A + B = C + D$$

$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx}$$

$$ik(A - B) = \alpha(C - D)$$

$x = a$ 'da

$$\psi_{II} = \psi_{III}$$

$$Ce^{\alpha a} + De^{-\alpha a} = F e^{ika}$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx}$$

$$\alpha(Ce^{\alpha a} - De^{-\alpha a}) = ik F e^{ika}$$

Katsayıları yine determinant yardımıyla bulabiliriz. Ancak serbest durum için yapılan çözüm ile bağlı durum arasındaki tek farkı ik ' yerine α gelmiş olmasıdır.

$$k' = -i\alpha$$

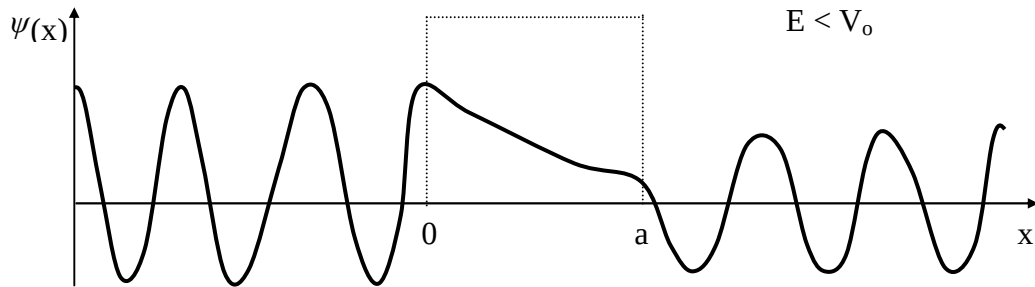
$$\sinh iy = i \sin y$$

$$\cosh iy = \cos y$$

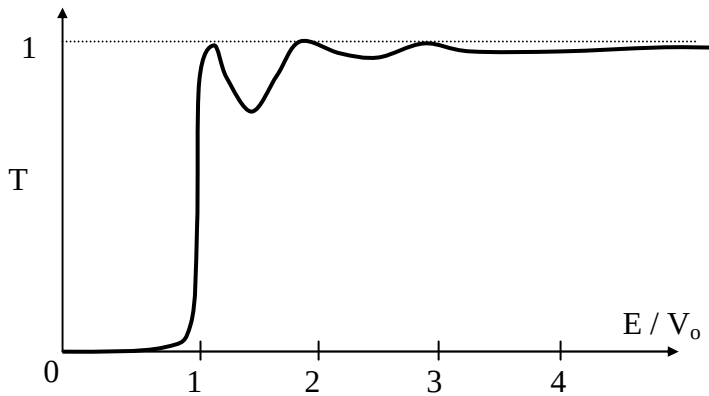
$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{4E(V_o - E)}{V_o^2 \sinh^2 \alpha a} \right]^{-1} \quad (2.46)$$

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{V_o^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_o - E)} \right]^{-1} \quad (2.47)$$

$E < V_o$ olmasına rağmen geçiş katsayısı T , 0 ile 1 arasındadır. Parçacığın enerjisi engelden küçükken dahi III. Bölgeye geçme olasılığı vardır. Klasik mekanikte karşılığı olmayan bu duruma tünel olayı denir.



Şekil 2.8 .Potansiyel Engeline $0 < E < V_o$ İçin Dalga Fonksiyonu



Şekil 2. 9. Geçiş Katsayısının (T), E / V_o 'la Değişimi

$E / V_o < 1$ olan bölge tünel olasılığını gösterir.

Tünelleme olasılığı parçacığın (E) enerjisine, potansiyel engelinin (V_o) değerine ve engelin (a) genişliğine bağlıdır.

Limit durumlarda $E < V_o$ için, $a \rightarrow \infty$ ise;

$$\sin \hbar^2 \alpha a \rightarrow 0 \quad V_o \rightarrow \infty$$

$$T = \left[1 + \frac{V_o^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_o - E)} \right]^{-1} \Rightarrow T = \frac{1}{1 + \infty} \Rightarrow 0$$

$$E \cong V_o, \alpha^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2}, \quad T = \left[1 + \frac{V_o^2 m a^2}{2\hbar^2} \right]^{-1} \cong 1$$

$$E \rightarrow V_o \quad \alpha \rightarrow 0 \quad \sinh \alpha a \cong \alpha a \Rightarrow \sinh^2 \alpha a = (\alpha a)^2$$

$$T = \left[1 + \frac{V_o^2 \alpha^2 a^2}{4E(V_o - E)} \right]^{-1}$$

$$T = \left[1 + \frac{V_o^2 \cdot 2m(V_o - E)}{4E(V_o - E)\hbar^2} \right]^{-1}$$

$$= \left[1 + \frac{V_o^2 m a^2}{2E \hbar^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{V_o m a^2}{2\hbar^2} \right] \cong 1$$

Geçiş olasılığı a genişliği ile ters orantılıdır. Ancak E değeri V_o 'a ne kadar yakın ise geçme olasılığı o kadar fazladır.

$$\alpha a \gg 1 \quad \frac{\sqrt{2m(V_o - E)}}{\hbar} \quad a \gg 1 \Rightarrow E \ll V_o$$

$$\sinh \alpha a = e^{\alpha a} - e^{-\alpha a} \cong e^{\alpha a / 2}$$

$$T = \frac{4E(V_o - E)}{V_o^2} e^{-2\sqrt{2m(V_o - E)}\alpha / \hbar} \quad E \ll V_o$$

T geçme katsayısını bir de $E > V_o$ için inceleyelim.

$$T = \left[1 + \frac{V_o^2 \sin^2 k' a}{4E(E - V_o)} \right]^{-1}$$

T'nin max olması için paydanın min olması gerekir.

i) $k = k'$ ise $V_o = 0$ $\sin^2 ka \neq 0$ ise $T \cong 1$ olacaktır.

ii) $k \neq k'$ ve $\sin^2 ka = 0$ ise $ka = n\pi$

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad (\text{öz değerler})$$

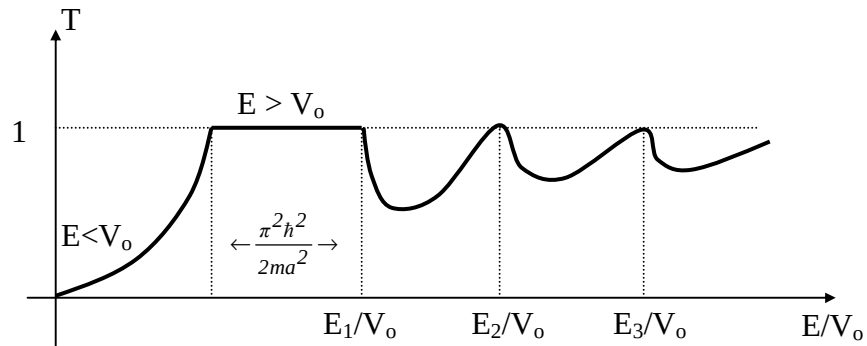
$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_o)}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow T \cong 1 \text{ dir.}$$

$$E - V_o = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow n. \text{ enerji seviyesi}$$

$$n = 1, 2, \dots$$

$$E_n = V_o + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (\text{öz fonksiyonlar}) \quad (2.48)$$

Böylece enerji öz fonksiyonları belirlendi.



Şekil 2.10. Rezonans Halleri ($E_1, E_2, E_3, \dots$)

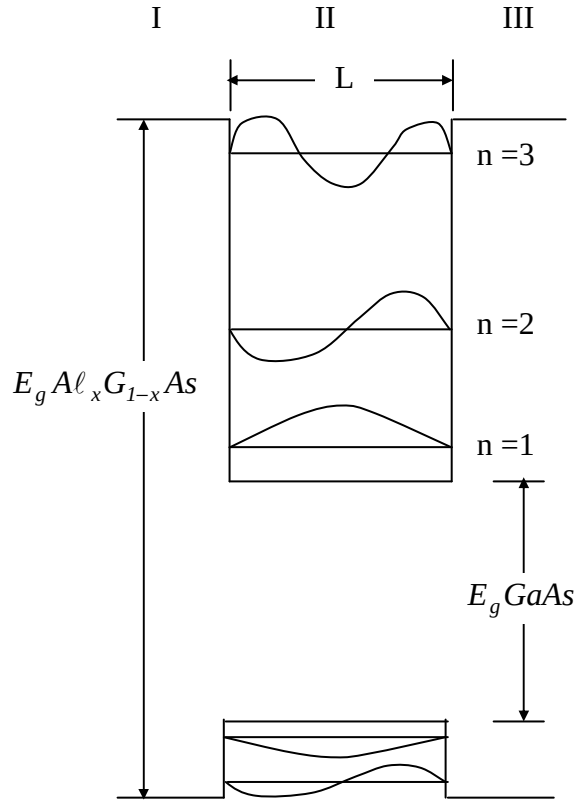
$$E_1 = V_o + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad E_2 = V_o + \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad E_3 = V_o + \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Bunlara rezonans halleri denir. Bu $E_1, E_2, E_3, \dots$ enerji durumlarında parçacığın tamamı III bölgeye geçer.

III. BÖLÜM

3. POTANSİYEL KUYU UYGULAMALARI

3. 1. AlGaAs / GaAs Potansiyel Kuyuları



Şekil 3. 1. AlGaAs/GaAs Heterojen Birleşmelerden Oluşan Elektron Ve Boşluk Kuantum Kuyularının Öz Fonksiyon Öz Değerleri.

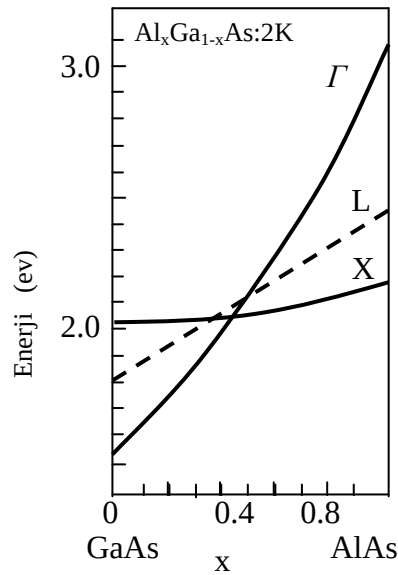
Deneyisel uygulamalarda potansiyel kuyuları ve parçacık davranışları incelenmiştir. Dingle ve arkadaşları özellikle AlGaAs ve GaAs arasındaki kuyuları incelemiştir [Ming-FuLi, 1994].

AlGaAs /GaAs ard arda yerleştirilirse aralarında bir kuantum kuyusu oluşur. Burada GaAs bölgesi, iletkenlik bandı elektronları için kuyu oluşturmakla kalmaz; aynı zamanda valans bandı elektronları için de kuyu oluşturur. Bu incelemelerle

karmaşık kristal büyütmelemleri, yeni cihaz gelişimiyle, birçok problem çözümü ve neredeyse mükemmel kristalin değişken ince film seviyeleri büyütülmesi mümkün olabilir.

GaAs / Al_xGa_{1-x}As'den oluşan heterojen birleşmeler ve kuantum kuyular incelenmiştir. Al_xGa_{1-x}As'in enerji bandı yapısında alüminyumla enerji açığı değişimi diyagramda x ile gösterilmiştir. Dingle ve arkadaşları fotoabsorpsiyon ve fotoluminescence (aydınlanma) deneyleriyle incelemeler yaparak x'in farklı değerleri için potansiyel kuyuyu incelemişlerdir.

x yaklaşık 0,43 olduğu zaman enerji açığı dolaylı bir açık olmaktan, dolaysız bir açık olmaya döner. Belirgin bir örnek için, x = 0,2 olarak alalım. Buna dayanarak Al_{0,2}Ga_{0,8}As enerji aralığı 1,52 eV civarındadır. Bununla birlikte iletkenlik bandı ve valans bandı derinlikleri toplamı 0,25 ev civarındadır [Dingle et al, 1977].



Şekil 3. 2 . Γ , L, X Al_xGa_{1-x}As İçin Al_x' x'in Bir Fonksiyonu Olduğu İletkenlik Vadisi Enerjileri. Referans enerjisi valans bandının başındadır. x = 0,43 olduğu zaman enerji aralığı dolaylıdan dolaysıza taşınır.

3. 1. 1. Kuantum Kuyularda Bağlı Durumlar

Etkin kütle yaklaşımı kullanılarak, iletkenlik bandı elektronlarının kuantum kuyudaki hareketini anlatan denklem şu şekildedir.

$$\left[\frac{Px^2 + Py^2}{2m^*} + \frac{Pz^2}{2m^*} + E_c(z) \right] \psi = E\psi \quad (3.1)$$

GaAs bölgesindeki ℓ uzunluğunda (kuyu genişliği) bir elektronun potansiyel kuyusu $E_c(z)$ dir.

$$\psi = e^{i(k_x x + k_y y)} \cdot \psi(z) \quad (3.2)$$

$$E_z \psi = \left[\frac{P_z^2}{2m^x} + E_c(z) \right] \psi \quad (3.3)$$

$$E = \hbar^2 \frac{(kx^2 + ky^2)}{2m^x} + E_z \quad (3.4)$$

Burada z eksenini birleşmedeki ara yüze dik olarak alıyoruz. xy düzleminde, sabit bir potansiyelde m^* etkin kütlesiyle hareket eden bir elektronunun hareketi belirtilmiştir. Z doğrultusu boyunca elektron hareketi tek boyuttaki potansiyel kuyusu gibidir. Z yönündeki hareket kuantize olmuştur. Bağlı enerji durumları da E_z dir. II. Bölgedeki $E_c(z) = 0$ farz edelim ve I. – III. Bölgelerde $E_c = \infty$ olsun (Sonsuz potansiyel kuyusu yaklaşımı).

$$\psi = A.e^{ik_z z} + B.e^{-ik_z z} \quad (3.5)$$

$$k_z = \sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}} \quad (3.6)$$

$$E_{zn} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{\ell} \right)^2, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (3.7)$$

Normalizasyon ve sınır koşulları uygulanarak ;

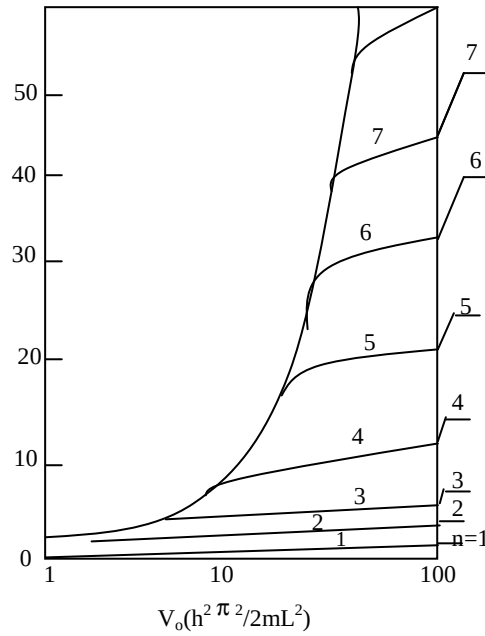
$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin\left(\frac{n\pi z}{\ell}\right) \quad (3.8)$$

olur. I. ve III. Bölgelerde $E_c = V_o$ sınırlı bir potansiyel olduğunda $E_z < V_o$ durumunda dalga fonksiyonu şu şekilde tanımlanır.

$$\psi = A^I e^{k_I z} + B^I e^{-k_I z}, \quad k_I = \sqrt{\frac{2m^*(V_o - E)}{\hbar^2}}$$

Kuyu dışındaki bölgelerde (I ve III) dalga fonksiyonu sonlu olma şartı uygulanarak bulunur. II. Bölge için (3.3) denklemi yeterlidir.

$$\psi_I = A^I e^{k_I z}, \quad \psi_{III} = B^I e^{-k_I z} \quad (3.9)$$



Şekil 3.3 . Potansiyel Kuyusundaki Parçacığın Enerji Değerleri

Bu dalga fonksiyonlarından, $z = 0$ ve $z = L$ de sürekli olma sınır şartlarından $E_{nz} < V_o$ enerji seviyelerinin değerlerini ve dalga fonksiyonlarını bulabiliriz. Bunlar basit analitik çözümler değildir ve sonuçlar bilgisayar veya grafik metoduyla sayısal olarak hesaplanabilir. Yukarıdaki şekil Dingle ve arkadaşlarının hesaplamalarını gösteriyor.

Diyagramdan bant konum enerjilerinin ve seviyeler arasındaki enerjinin, V_0 kuyu derinliğindeki azalmayla azaldığını görüyoruz. Burada şunu da söylemeliyiz ki, V_0 ne kadar küçük olursa olsun en azından bir tane bağlı durum bulunur. Bunun da ötesinde kuantize enerji seviyeleri arasındaki enerji farkı yaklaşık olarak ℓ^{-2} ile sabit bir potansiyelde, kesikli enerji seviyeleri bir parçacığın sürekli enerji spektrumuna dönüşür. Yukarıdaki sonuç kuantum boyut etkisi olarak bilinir.

Basit bir örnekleme yapacak olursak, yukarıdaki metodu kullanarak valans bandı boşluk kuantum kuyusu çözülebilir. Burada boşluğun etkin kütesinin, elektronun etkin kütesiyle yer değiştirdiğini belirtmeliyiz. Kuantize enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonu Şekil 3.1 deki gibidir. Gerçekte boşluk kuantum kuyusu çok daha karmaşıktır. Çünkü en yukarıdaki değerlik bandı dejeneredir.

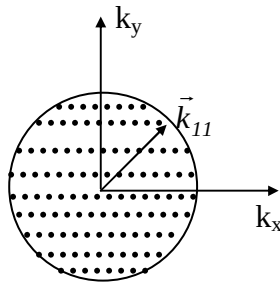
3. 1. 2. Kuantum Kuyularda Durum Yoğunluğu

Tartışılan kuantum kuyu probleminde E_z nin kuantizasyonu, elektronun toplam enerjisi E 'nin kuantize olduğu anlamına gelmez.

$$E = E_{xy} + E_z \quad (3.4.1)$$

$$E_{xy} = \hbar^2 \frac{(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k_{11}^2}{2m^*} \quad (3.4.2)$$

3 boyutlu uzayda elektron enerjisinin iki bağımsız bölümde çözülebileceği açıktır. Enerjinin E_z bölümü kuantize olmuştur. Çünkü z yönündeki elektron hareketi kuantum kuyusu tarafından sınırlandırılmıştır. Dalga fonksiyonu kuyu içine yerleştirilmiştir.



Şekil 3.4 . Durum Yoğunluğu $\frac{A}{(2\pi)^2}$

E_{xy} bölümü xy düzlemindeki elektronların serbest hareketine göre sürekli. Tek E_z kesikli seviyelerine göre değişik E_{xy} enerji alt bantları vardır. Böyle bir alt bandın durum yoğunluğu; $\frac{A}{(2\pi)^2}$ dir. A, birleşme yüzeyi alanıdır. Elektron spini dahil edilerek durum yoğunluğunu hesaplırsak $\frac{2A}{(2\pi)^2}$ dir. $\vec{k}_{11}$ yarıçaplı çember içinde durum sayısı şöyledir:

$$\pi \cdot k_{11}^2 \frac{2A}{(2\pi)^2} = \frac{A k_{11}^2}{2\pi} \quad (3.10)$$

Öte yandan $E_{xy} = \frac{\hbar^2 k_{11}^2}{2m^*}$ den, durumların enerjilerinin sıfırla bu değer arasında olduğunu biliyoruz. $N(E_{xy})$ toplam durum sayısıdır.

$$N(E_{xy}) = \frac{A k_{11}^2}{2\pi} = \frac{A m^*}{\pi \hbar^2} E_{xy} \quad (3.11)$$

$$m^* = \hbar^2 \frac{dk^2}{d^2 E} \quad (3.11.1)$$

Toplam durum sayısına karşılık gelen durum yoğunluğu;

$$\rho(E_{xy}) = \frac{\partial N}{\partial E_{xy}} = \frac{A m^*}{\pi \hbar^2} \quad (3.12)$$

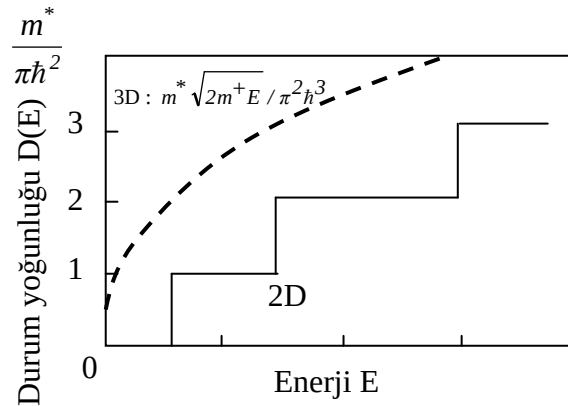
olur. Buna göre xy düzlemindeki elektron hareketine göre alt bandın durumlar

yoğunluğu sabittir. Birim alandaki durum yoğunluğu $\frac{m^*}{\pi\hbar^2}$ dir. Bu sonuçlar doğrultusunda E_2 'nin E_{1z} , E_{2z} kuantize değerleri belirlenir. Kuantum kuyusu için $D(E)$ durumları yoğunluğu;

$$D(E) = \sum_n \rho_n(E) \quad (3.13)$$

şeklindedir. Ne zaman enerji bir E_{iz} değerini aşarsa alt banttan üst banda bir ek katılım olur. N alt bant durum yoğunluğu;

$$\rho_n(E) = \begin{cases} m^* / \pi\hbar^2 & E \geq E_{nz} \\ 0 & E < E_{nz} \end{cases} \quad (3.14)$$



Şekil 3. 5 . Kuantum Kuyudaki Durum Yoğunluğu

Bir kuantum kuyusundaki durum yoğunluğu 3. boyutta kesikli çizgilerle gösterilmiştir. Durum yoğunluğu bir adım fonksiyondur ve adım yüksekliği $\frac{m^*}{\pi\hbar^2}$ dir.

Durum yoğunluğu ancak iletkenlik bandındaki elektron kuantum kuyusu için kullanılabilir. Valans bandındaki boşluk kuantum kuyusundaki hal için durum dejenerelik gösterir. Ayrıca valans bandının başındaki bantlar arasındaki etkileşmeden dolayı çok daha karışıktır.

E_{zn} ler arasındaki enerji ayrımı artan ℓ kuyu eni ile azalır. Buna kuantum boyut etkisi denir. Elektron ve boşluk kuantum kuyularında optik geçişler $\Delta n=0$ seçim kuralına uyar; ancak ihlal edildiği durumlar da vardır. Kuantum kuyusundaki boşluk alt seviyesi enerjisi, valans bandının başındaki dejenerelik ve band karışım etkisinden ötürü xy ve z gibi bileşenlerine ayrılmaz. Bu sonuçlar optik deneylerle elde edilmiştir. Özellikle kuantum kuyuda optik geçişten ışık soğurulması incelenmiştir.

3. 1. 3. Kuantum Kuyudaki Excitonlar

Bir kuantum kuyusu içerisindeki excitonların kuantum sıkışma etkisini kısaca tasvir edebiliriz. 3 boyutlu kalın bir yarı iletkenin exciton zemin durumu bağlanma enerjisi;

$$R_{3D} = \frac{m_r^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2} \quad (3.15)$$

ile gösterilir. Exciton yarı çapları da şu şekildedir.

$$a_{3D}^* = a_0 E \frac{m}{m_l^*} \quad (3.16)$$

Burada m_r^* elektron ve boşluğun indirgenmiş etkin kütesidir .

$$\frac{1}{m_r^*} = \frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*} \quad (3.17)$$

bağıntısındaki m_c^* ve m_v^* sırasıyla elektronun ve boşluğun etkin kütesidir. ϵ yarı iletkenin dielektrik sabitidir. GaAs için $R_{3D} = 4\text{meV}$ ve $a^* = 130\text{\AA}$ dur.

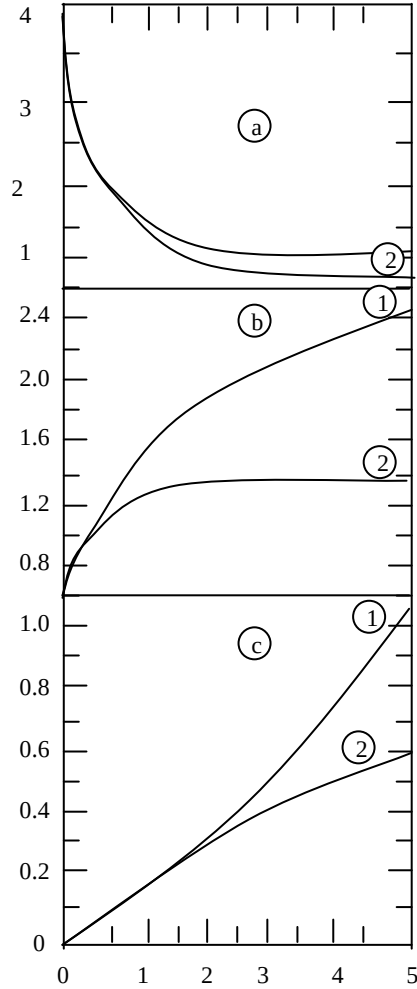
Kuantum kuyusu üç boyutlu exciton yarıçaplarından daha ince olacağından, excitondaki elektron-boşluk çifti exciton bağlanma enerjisini arttıracaktır. Sınırlı iki boyutlu (2D) halde kuyunun genişliği a 'dan çok küçüktür ($\ell \ll a$) iki boyutlu Rydberg değeri bu sonsuz boyutlu kuyu için geçerlidir. Enerji seviyeleri ;

$$R_{2D} = 4R_{3D} \quad (3.18)$$

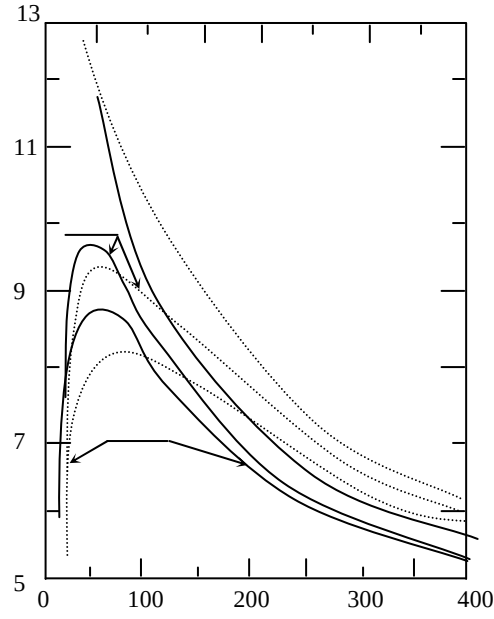
$$R_{n,2D} = R_{3D} \left[\frac{1}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2} \right] \quad (3.19)$$

ile belirtilmiştir. Sınırlı kuantum kuyuları için exciton bağlanma enerjileri hesaplanabilir. Üç boyutlu (3D) için excitondaki elektron boşluk çiftinin etkin kütle Schrödinger denklemi aşağıda kuantum kuyudaki hamiltonyene indirgenmiştir.

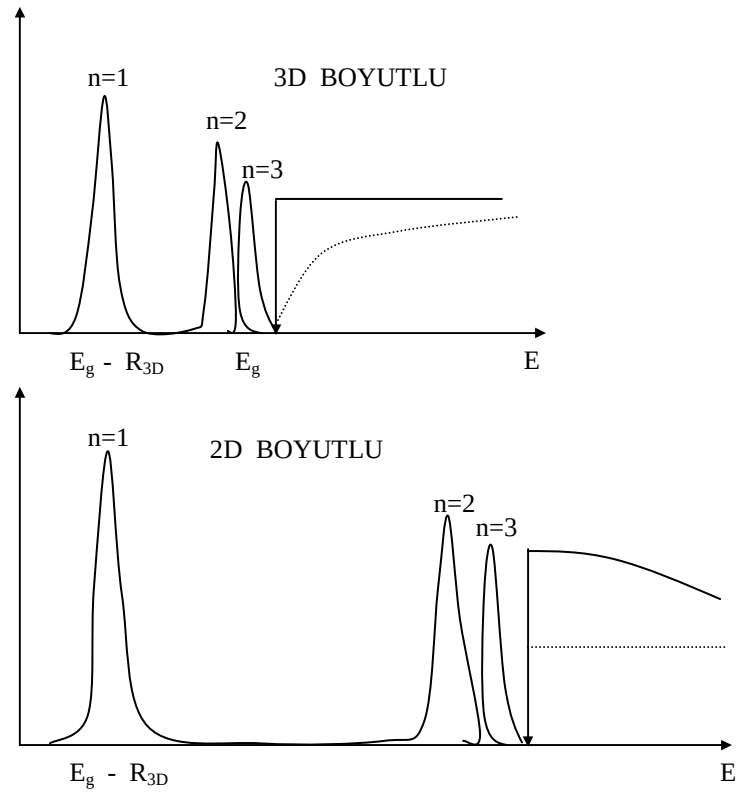
$$H = \frac{P_{ze}^2}{2m_c^*} + \frac{P_{zh}^2}{2m_v^*} + \frac{P_x^2 + P_y^2}{2(m_c^* + m_v^*)} + \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m_r^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon \left[x^2 + y^2 + (z_e - z_h)^2\right]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.20)$$



Şekil 3. 6. Kuyu Genişliği Sıfır Olduğu Zaman R_{2D} , $4R_{3D}$ 'ye Ve Exciton Yarıçapları. $a^* 3D \sqrt{3/8}$ 'e İndirgenir.



Şekil 3. 7. 3 Boyutta Ve 2 Boyuttaki Yarı İletkenlerde Exciton Soğurma Spektrasını Karşılaştıran Şekilsel Diagramı.



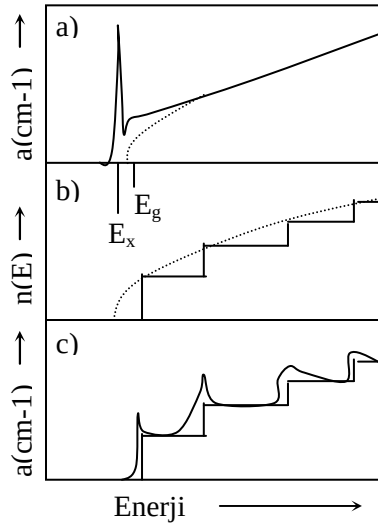
Şekil 3. 8. Üç Boyutta Ve İki Boyuttaki Yarı İletkenlerde Exciton Soğurma Spektrasının Karşılaştırılması.

oplam etkin kütlesi $m_c^* + m_v^*$ ve kütle merkezi momentumları P_x, P_y terimleri ile kullanılmıştır. Kuyu düzlemine dik z doğrultusunda elektron ve boşluk kütleleri m_c^*, m_v^* elektron ve boşluk momentumları P_{ze}, P_{zh} ile gösterilir. Sonsuz derin kuyuda tamamen sıkıştırılmış olan değişim dalga fonksiyonları, bağlanma enerjilerini ve indirgenmiş exciton yarıçaplarını hesaplamak için kullanılabilir. Bu sonuç şekilde gösterilmiştir [Weisbuch et al,1991].

3. 1. 4. Kuantum Optik Geçişten Işık Soğurulması Ve Işıma

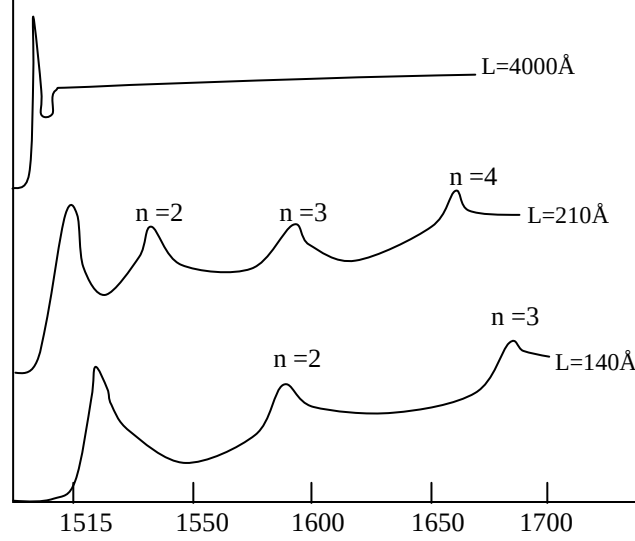
Kuantum kuyuda valans bandı bağlı durumlarından, iletkenlik bandı bağlı durumlarına elektron geçişlerine göre ışık soğurulma deneyleri yapılmıştır. Deneylerle $Al_xGa_{1-x}As / GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ çok kuantum kuyu yapıları kullanılmıştır.

GaAs katları, $40\text{\AA} - 5000\text{\AA}$ kalınlığı arasında ve aralarında $Al_xGa_{1-x}As$ katlarıyla bölünmüştür. Bu katlar komşu kuyularla aralarında üst üste gelme olmayacak şekilde kalınlıklara sahiptirler. Yapıda, yeterli soğurulmayı elde etmek için, 100 GaAs kuyusuna kadar kuyu içeren örnekler büyütülür. Ana tabaka (GaAs) ve tampon tabakalar ($Al_xGa_{1-x}As$) seçici bir kimyasal ayırma ile kaldırılır. Bu yöntem soğurulma sonuçlarının sadece çoklu tabakaların bir karakteri olmasını garantiler.



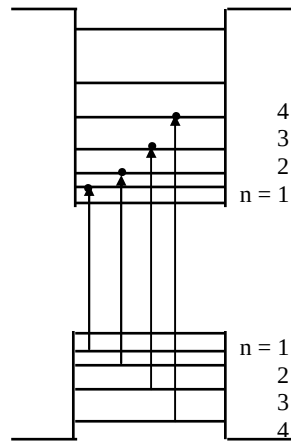
Şekil 3. 9. **a)** Maddenin İletim Bandı Durum Yoğunluğuyla Birlikte Gösterilen, Exciton Etkilerini İçeren, GaAs Bloğu Band Uçlu Soğurulma Profili. **b)** Basit Bir Enerji Bandının İki Boyutlu (2D) Kuantum Limitli Durum Yoğunluğu Ve Maddenin Hacim Karşılaştırılması. **c)** Her İki Boyutlu Band Ucunda, Exciton Etkileri Olsun Ve Olmasın, Değerlik Bandından Kuantize İletkenlik Bandı Geçişleri İçin Şekilsel Soğurulma Spektrasi.

Soğurulma spektrasının şekli, katılmış durum yoğunluğu şeklini yansıtır. Kuantum kuyusu için durum yoğunluğunun bir adım fonksiyonu olduğunu daha önce inceledik. Şekil 3. 9 şemasal olarak, excitonik etki dahil edildiği zaman, kuantum kuyusu soğurulma spektrumunun beklenen şeklini gösterir.



Şekil 3. 10 . Soğurulma Spektrumu ($\ell=140\text{\AA}$, $\ell=210\text{\AA}$ ve $\ell=4000\text{\AA}$)

Gerçek deneysel soğurulma spektrası Şekil 3.10’da gösterilmiştir. Beklenen ile gerçek spektra arasında mükemmel bir uyum vardır. Şekil 3.10’da en yüksekteki spektrum $\ell = 4000\text{\AA}$ olan bir kuantum kuyusu içindir. Bu kadar büyük bir kuantum kuyusunda, kuantum boyut etkisi yok olur ve spektrum GaAs bloğu iç soğurulması için olan spektrum karşılık gelir. Özellikle, soğurulma, exciton soğurulmasına göre 1,515eV’te pik verir [G. Allen et al, 1986].



Şekil 3. 11. Potansiyel Kuyuda Optik Taşınım. ($\Delta n = 0$)

İki en alt spectra $\ell = 210\text{\AA}$ ve $140\text{\AA}$ olan kuyu genliğinde gelir. Bu enliklerde kuantum boyut etkisi belirlemeye başlar. Pikler n_h kuantum sayısı ile valans band kuantum kuyusu bağlı durumundan, n_e kuantum sayılı iletkenlik bandı bağlı durumuna geçiş yapan elektronların soğurulmasına karşılık gelir. Bunun da ötesinde:

1. Şekil 3.11'e bakarsak, geçiş $\Delta n = n_h - n_e = 0$ seçim kuralına uyar. Çünkü aynı n 'e sahip durumlar dalga fonksiyonlarında aynı sayıda düğüm noktalarına ve buna karşılık gelen dalga fonksiyonları, en büyük üst üste gelme durumuna sahiptirler; bu da en büyük geçiş olasılığına sebebiyet verir.

2. Pikler, exciton soğurulma pikleridir. Soğurulan fotonun enerjisi iletkenlik ve valans bandlarının n bağlı durumlarıyla, exciton bağlanma enerjisi arasındaki enerji farkına eşittir. (Şekil 3. 10)

3. En büyük değerlik bandı için, hafif ve ağır boşluklar vardır. Kuantum kuyuda, bunlar iki değişik bağlanma durum enerjisine karşılık gelirler. Soğurulma spektrumunda her n için, iki pik vardır. Gerçekte sadece en ince kuyu için ($\ell = 140\text{\AA}$) ve $n = 1$ de iki pik ayırtedilebilir. $n = 2,3$ için bir pik verir. Sebep valans bandı kuantum kuyusunun çok sıkı olması ve hafif boşluklar için, sadece $n = 1$ bağlı durumu olması olabilir.

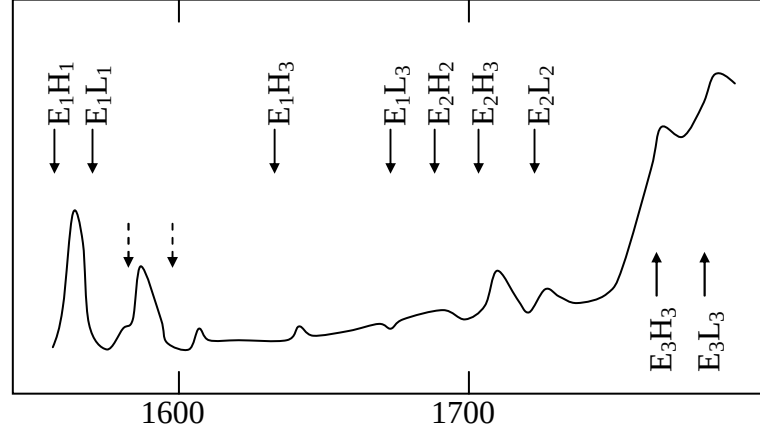
Bu deneylerde iyi bilinen GaAs iletkenlik bandı etkin kütlelerini $m^* = 0,067 m_0$, (m_0 , serbest elektronun kütlesidir), hafif boşluk etkin kütlesi olarak $0,45 m_0$ ve ℓ enlik bilinen bir kuantum kuyu kullanıldı. Şekil 3.3'ün parametreleriyle, elektronların ve boşluğun bağlı durum enerjileri hesaplanır ve soğurulma spektralleriyle karşılaştırılabilir. Şekil 3.2'den belirli bir x değeri için; $\Delta E_g = \Delta E_c + |\Delta E_v|$ değerini elde edebiliriz. Geriye kalan düzeltilebilir parametre $\frac{\Delta E_c}{\Delta E_g}$ dir. $\frac{\Delta E_c}{\Delta E_g} = 0,85$ 'i kullandık-

ları zaman, deney ve teori en iyi uyumluluğu verir. Bu, iletkenlik ve valans bandı değerlerinin deneysel belirlenmesini verir. Halbuki, yukarıdaki metodla belirlenen

$\frac{\Delta E_c}{\Delta E_g}$ değeri daha sonraki metodlarla elde edilen değerlerle iyi bir uyuşma göster-

mez. Farklı n deneysel parametreler serisi kullanarak (Dingle ve arkadaşları) sonuç-

ları 1,509 eV exciton soğrulma enerjilerini $n = 0$ için elde etmek üzere kaydirdılar ($\ell < 100\text{\AA}$ için). 1,515 eV'lu GaAs bloğu exciton enerjileriyle karşılaştırarak kuantum kuyu exciton bağlanma enerjisi 9 meV'dur. Bu, 9meV teorik değerle tam bir uyum içerisindedir.



Şekil 3. 12 . GaAs / $\text{Al}_{0.13}\text{Ga}_{0.87}\text{As}$ Kuantum Kuyusunun Aydınlatma Uyarma Spektrumunu Gösterir. Kuantum Kuyusunun Eni $50\text{\AA}$ dır.

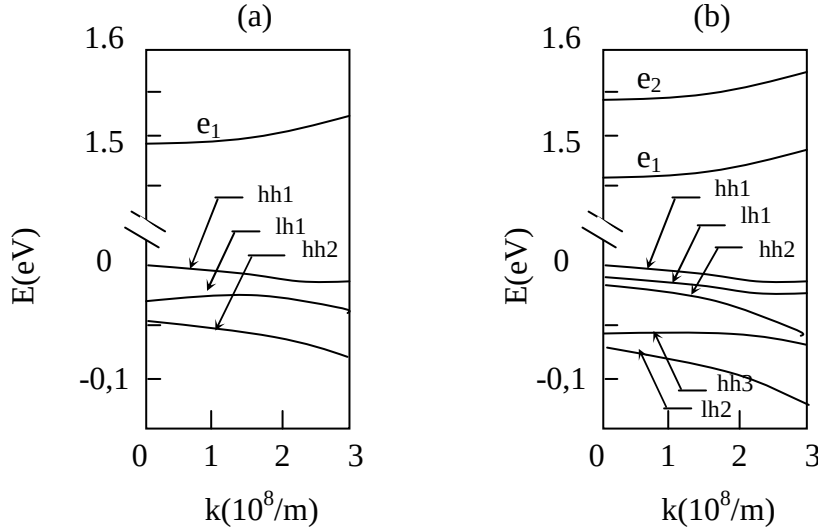
Şekilde, spektral çizgilerle şu notasyona sahiptirler: E_n elektronların n bağlı durum enerji seviyeleridir; H_m , ağır boşlukların m bağlı durum enerjileri ve L_m de hafif boşlukların m bağlı durum enerjileridir. Şekil 3.10 ve 3.12 şu özel karakteristikleri verir: 1) Foton ışıma olayı için, E_n enerjili elektronlardan H_m veya L_m boşluğuna geçişte, n kuantum sayısı m , kuantum sayısına eşit olmak zorunda değildir. Şekilden E_2H_3 geçişi, 2) L_m hafif boşluk bağlı durum enerji seviyesi birden çok enerji seviyesinden oluşur ve bu Dingle ve arkadaşlarının analizinden farklıdır. Şekil 3.12.de ışığa ve ağır boşluklara karşılık gelen spektrum açık bir şekilde ayrılmıştır. Bunun da ötesinde E_1H_1 ve E_1L_1 excitonlarının 2s durumlarına karşılık gelen ve spektral çizgileri görebiliriz. Aydınlanma spektrumu, soğrulma spektrumundan daha fazla çözünürlüğe sahiptir.

Exciton bağlanma enerjisindeki artışın kuantam kuyusunun optik özellikleri üzerinde derin bir etkisi vardır. GaAs bloğunda exciton atması (pik) sadece düşük sıcaklıklarda araştırılmıştır ve oda sıcaklığında pik kaybolur. Çünkü GaAs exciton bağlanma enerjisi, oda sıcaklığında $kT = 26\text{meV}$ olmasına karşın, sadece 4meV dur.

Excitonların bağlanma enerjisindeki artış kuantum kuyularına GaAs'de oda sıcaklığında bile exciton etkileri tarafından yönlendirilen optik özelliklere sahip olmasına izin verir.

3. 2. GaAs / AlGaAs Laserleri

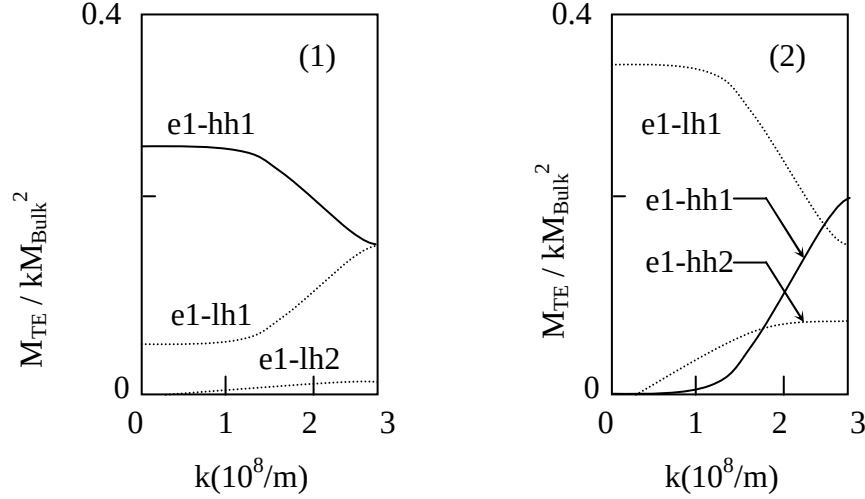
Mevcut yarı iletken laserleri arasında geniş bir alanda kullanılan heteroyapı AlGaAs bariyerleri arasında GaAs kuantum kuyusudur. Bu yapı 780 ile 870 nm arasındadır. Büyütme teknolojisi yerleşmiştir ve alete göre önemli bilgi elde edilmiştir. Bu yapıyla oluşturulan aletler ilk lazer görünümünü içerir [Chow et al,1994].



Şekil 3.13. a) 5 nm b) 10 nm GaAs - Al_{0,2}Ga_{0,8}As Kuantum Kuyuları İçin Bant Yapıları. Bu Bölümün Geri Kalanındaki Tüm Örnekler 300 K Sıcaklığındadır.

Şekil 3.13'de GaAs / AlGaAs kuantum kuyu bant yapılarının iki örneği gösterilmiştir. Dar kuyu genişlikleri için, bant yapısı göreceli olarak basittir; az banttandır. Örneğin, Şekil 3.13'de 5 nm için GaAs kuantum kuyusu sadece bir iletkenlik ve 3 valans bantı gösterir. Her bant $k = 0$ alan merkezinde, durumuna göre isimlendiriyoruz. İletkenlik bantı şu şekilde isimlendirilir: $n = 1$ ve 2 kare kuyu bağlı durumlarının kuantum sayılarıdır. Benzer şekilde valans bantları hh1, lh1 ve hh2 şeklinde isimlendirilir. hh ve lh, ağır boşluk ve hafif boşluk anlamına gelir. Vurgulamak gerekir ki bölge merkezinden uzakta, valans bantları, mümkün farklı kare kuyu kuantum sayılarıyla ağır ve hafif boşlukların karışımlarına dönüşürler. $k > 0$, bu durumda

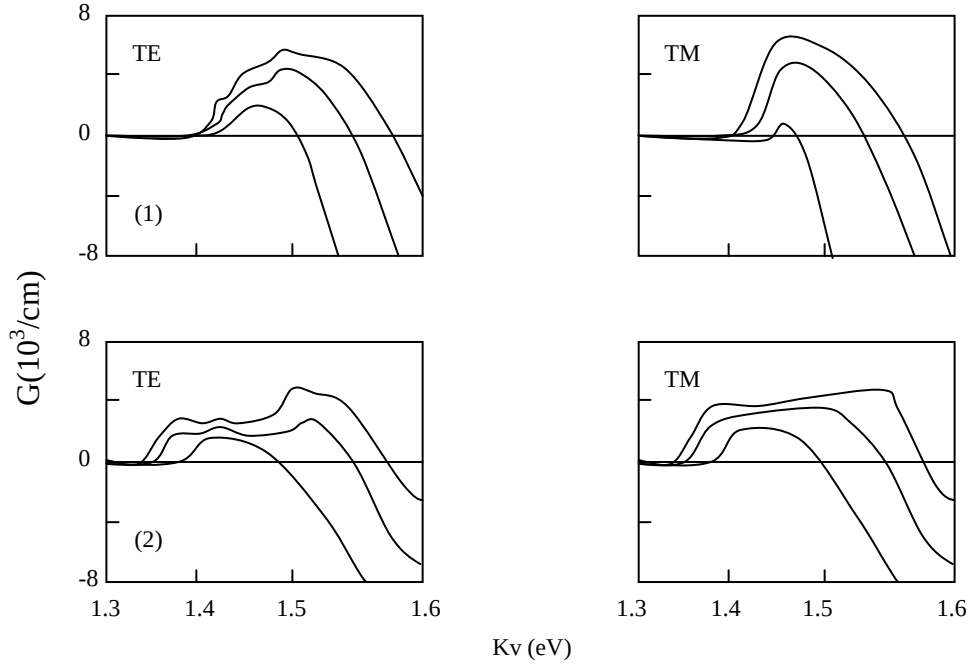
bant eğrilerindeki değişiklikler kaçınılmazdır. Amaç, bantta bölge merkezinin komşuluğunda baskın durumu göstermektedir. Daha geniş kuantum kuyusuyla bant yapısı, bant sayısının artmasından ötürü, daha karmaşık hale gelir. Şekil 3.13. b) 10 nm'lik kuantum kuyusuyla, valans bantlarının sayısı beş, iletkenlik bantlarının sayısı iki olur. $k = 0$ 'da üç ağır boşluk ve iki hafif boşluk durumlarıyla beş valans bandı oluşur.



Şekil 3. 14 . Dipol Matris Elemanlarının Mutlak Karesi k 'nın Fonksiyonu (Şekil 3.13'de Gösterilen Bant Yapısı İçin Olarak Çizilmiştir.) Geçişler e1-hh1 (Çizgi) e1-lh1 (Uzun Kesikli Çizgi) Ve e1-hh2 (Kısa Kesikli Çizgi) Şeklinde. M_{Bulk} Elektron İçin Ağır Boşluk Geçiş Kalıp GaAs Dipol Matris Elemanıdır.

Bant yapısı hesaplaması bize elektron ve boşluk öz fonksiyonlarını da verir, ki böylece dipol geçiş matris elemanları hesaplanabilir. Şekil 3.14 5 nm kuantum kuyu için sonuçları gösterir. Eğriler kuvvetli bir şekilde k bağımlılığını gösterir. Kazanç anlamında, dipol matris elemanlarının önemli değerleri bölge merkezi civarındakilerdir. Çünkü terslemenin en yüksek olduğu bölge burasıdır. Burada genelde küçük bant karışımları olduğundan, simetri argümanları doğrultusunda dipol matris elemanlarının tek geçişlerinin öneminin ayırdına varabiliriz. Elektron ve boşluk örgü periyodik fonksiyonlarının simetrisinden, TM dipol matris elemanının, sadece elektron TE dipol matris elemanının hem elektrondan ağır boşluğa hem de elektrondan hafif boşluğa geçişlerin katkısını e1 – hh1 dipol matris elemanı, küçük k 'lar için ihmal edilir ve hafif boşluk durumları hh1 bandında karışırlar. Dipol matris elemanları zarf fonksiyonlarının iç çarpımlarını içerir. Zarf fonksiyonları, bir kare potansiyel kuyu-

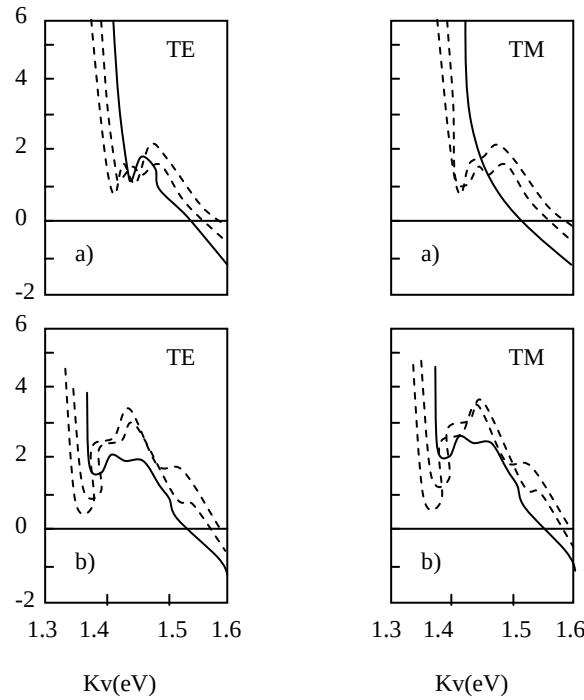
sunun orta normal öz fonksiyonları olduğunda, bir dipol matris elemanı değişik kare kuyu kuantum sayılarıyla eşlenerek bölge merkezi durumlarında ihmal edilebilir. Bu şekildeki $e1 - hh2$ eğrileri için küçük değerleri açıklar. Yine, durum karışımlarından ötürü, bu matris elemanları artan k ile büyür.



Şekil 3.15 .a) 5nm ve b) 10nm de GaAs/Al_{0,2}Ga_{0,8}As Kuantum Kuyularında $N = 4x, 6x$ ve $8x 10^{18}/cm^3$ Taşıyıcı Yoğunlukları İçin TE ve TM Kazanç Spektrumları

Değişik kuyu genişlikli kuantum kuyu yapılarının karşılaştırmalarından genişliğiyle bant yapısı kayda değer şekilde değiştiği görülür. Şekil 3.15a) ve 3.15 b)'nin karşılaştırması, kazanç spektrumunda karşılık gelen değişimleri göstermektedir. Bu spektrumlar çok kütle kazanç teorisi kullanılarak hesaplanmıştır. İlk olarak, 5nm GaAs - Al_{0,2}Ga_{0,8}As kazanç spektrumlarını inceleyelim. TM kazanç spektrumlarının daha yüksek frekanslara doğru kaydığına dikkat edelim ve geçirgenliğe ulaşmak için daha yüksek taşıyıcı yoğunluğu gereklidir. Ağır boşluk durumlarında TM geçişleri yasak olduğundan bu yapılar oluşur. Şekil 3.15. daha geniş kuyu enlerinin daha yaygın kazanç spektrumları vereceğini gösterir. Taşıyıcı yoğunluklu kazanç spektrumunun şeklinde çok büyük değişiklikler de olur. $N = 4x10^{18}/cm^3$ taşıyıcı yoğunluğunda, TE ve TM 10 nm kuantum kuyu kazanç spektrumları basit şekillere sahiptir. Çünkü küçük taşıyıcı yoğunluğu, sadece, takdir edilmiş elektron ve boşluk popülasyonu $e1$, $hh1$ ve $lh1$ bantlarında oluşturulabilirler. Pik kazanç frekansında, ana katılım geçişle-

ri, e1'den bir elektron ve hh1 ve lh1'den bir boşluğun birbirlerini elemelerinin devreye girmesiyle olur.

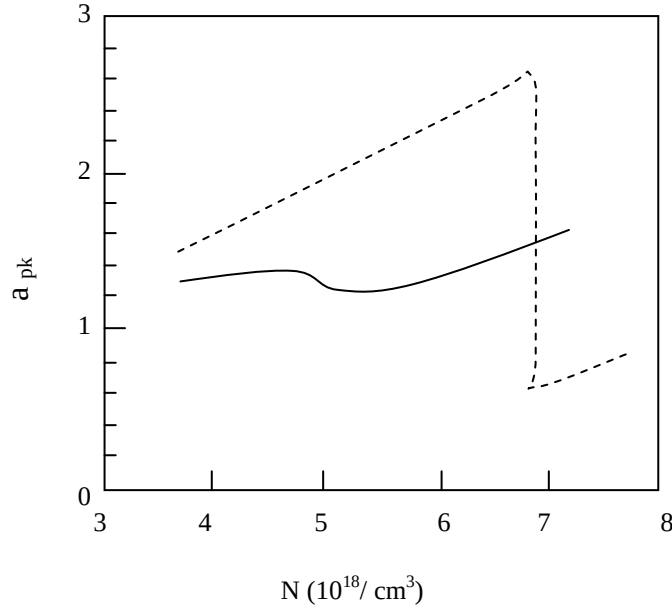


Şekil 3. 16. a) 5nm Ve b) 10 nm GaAs-A_{0,2}Ga_{0,8}As Çizgi Genliği İyileştirme Faktör Spektrası Kalın Çizgi 4×10^{18} , Uzun Kesikli Çizgi $6 \times 10^{18}/\text{cm}^3$, Kısa Kesikli Çizgi $8 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ Taşıyıcı Yoğunluklar İçindir.

Farklı valans bandlarında biten geçişler, esas olarak farkedilmezdirler. Çünkü bantlar arası enerji farklılıkları geçiş çizgi eni $h\gamma$ dan daha büyük değildir. Ne zaman ki taşıyıcı yoğunluğu yeterince artar ve iletken bandı e2 ve hh2, lh2 valans bantları arasından terslenme kurulur, o zaman kazanç eğrisinde $N = 6 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ ve $8 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ te TE ve TM kazanç spektrumunda görüldüğü gibi, ikincil bir zirve belirir. Bu pik e1 ve e2'den kaynaklanan geçişlerin bir araya gelmiş katılımlarından ötürüdür.

Artırılmış band yapısı karmaşıklığı, daha geniş kuantum kuyularında α spektrasında ek yapılara sebebiyet verir. Şekil 3.16, kazancın varolduğu frekans bölgesinde, 0 civarında 3'ün üzerine kadar değişen değerlerle (10 nm) kuantum kuyunun α çizgi genliği geliştirme faktöründeki değişiklikleri gösterir. Dispersiyon çok kütleli Coulomb etkilerinden ötürüdür. Bazı frekanslarda minimum olarak anılan bu

α kuantum kuyu lazerlerinin temel çizgi genliği önemli etkileri olur. α sıfıra yaklaşırken kırıcı endeks, kazançtaki değişikliklerden artan bir fonksiyonla ayrılır (örneğin skendiliğinden yayılımlar sayesinde); spontane yayılımda lazer çizgi genliğine katılım olarak bir azaltıma sebep olur. Kırıcı endeks ve kazanç arasındaki bağlantı filemantasyona (iplikleşmeye) ya da kendi kendine odaklaşmaya da sebep olur; ki bu durum yarı iletken lazerlerinin derecelendirilebilirliğini daha büyük çıktı gücüne sınırlar. Burada küçük α değerleri eşik enerjisinin çok daha ötesinde çalışılabilmesi için geniş alanlı yarı iletken lazerlerine müsaade eder.



Şekil 3.17. 5 nm (Kalın Çizgi) ve 10 nm (Kesikli Çizgi) GaAs/Al_{0,2}Ga_{0,8}As Kuantum Kuyuları İçin Pik – Kazanç Frekanslarında T.E Çizgi Genliği İyileştirme Faktörüdür.

Avantajlardan nasıl yararlanmamız gerektiği, lazerin işlem yaptığı noktadan zirve (pik) kazanç frekansındaki α 'ya bağlıdır. Şekil 3.17, TE çizgi genliği iyileştirme faktörünün (α_{pk}) pik kazanç frekansında taşıyıcı yoğunluğunun 5 nm ve 10 nm kuantum kuyularındaki fonksiyonları olarak çizilmiştir. 5 nm kuantum kuyusu için α_{pk} , göreceli olarak sabit olmasına karşın, 10 nm kuantum kuyusu için kayda değer bir biçimde değişir. Hatta pik – kazanç frekansındaki ani kaymadan ötürü bir süreksizliği vardır (Şekil 3.14 b). Dikkat etmek gerekir ki α_{pk} önemli bir şekilde süreksizlikten sonra daha küçük oluyor; bu da daha yüksek bir eşikte işlem yapmak üzere dizayn edilmek suretiyle daha kararlı bir lazer elde etmek düşüncesini doğurur.

3. 3. InGaAs / AlGaAs İle Sıkıştırılmış Kuantum Kuyuları

Kuantum kuyuları değişik örgü sabitleri olan malzemelerle büyütülebilir. İnce kuantum kuyu malzemesi bariyere bağlı örgü olabilmek için deforme olur. Bu deformasyon kuantum kuyusunda bir sıkıştırma oluşturur. Sıkıştırılmış kuantum kuyusunun büyütülebilme kabiliyeti yarı iletken lazere daha geniş bir dalga bölgesinde işlem izni verir. Çok sıkça kullanılan sıkıştırılmış kuantum kuyu yapısı InGaAs tir (AlGaAs bariyerleri arasındadır) [Pikus et al, 1974].

Bu yapıyla üretilen lazerler tipik olarak 910 nm ve 980 nm arasındadır; InGaAs için örgü sabiti AlGaAs içindekinden daha büyüktür. Kuantum kuyu baskılı bir sıkıştırma altındadır. In GaAs bant aralığı için şu amprik formülleri kullanıyoruz

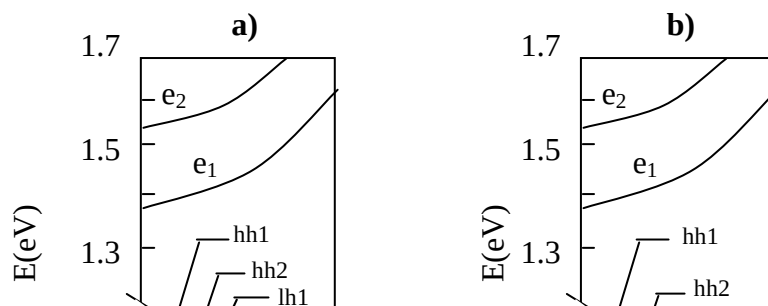
$$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} \quad 77^\circ\text{K}'\text{de}$$

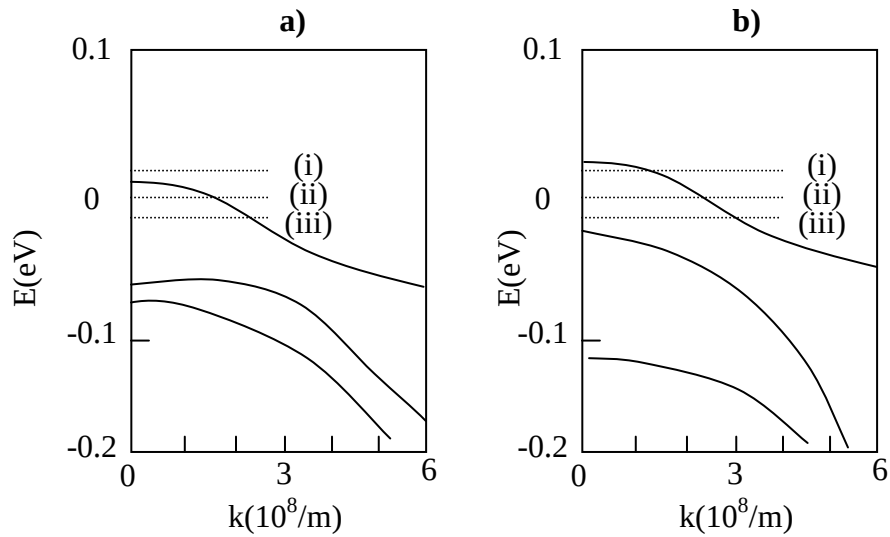
$$\epsilon_g = 1,508 - 1,47x + 0,375x^2 \quad (3.21)$$

$$300^\circ\text{K}'\text{de}$$

$$\epsilon_g = 1,43 - 1,53x + 0,45x^2 \quad (3.22)$$

Burada bant aralıkları, diğer sıcaklıklarda çizgisel kısaltma ve uzatma yoluyla hesaplandığı düşünülür. Şekil 3.18 indiyum yoğunluğu 0,1 ve 0,2 olan InGaAs / Al_{0,2}Ga_{0,8}As için hesaplanmış bant yapılarını gösteriyor. Baskılı sıkıştıran kuvvet, ağır ve hafif boşluk kare kuyu durumlarının kaymasına sebep olur; böylece hh1 ve lh1 bantları arasında k = 0'da enerji aralığı artar. Bu, ağır ve hafif boşluk bantlarının eşleştirmesini daha büyük k değerlerine doğru iter. Sonuç olarak k, en yüksek valans bandı hh1, geniş bir bölgede daha küçük eğrilerini sürdürür. Kalın ve kesikli eğrilerin Şekil 3.18'de karşılaştırılmasıyla görülebileceği gibi... Indiyum yoğunluğunun 0,2'ye artırılması ortalama hh1 bant eğriliğinin artmasını sağlar.

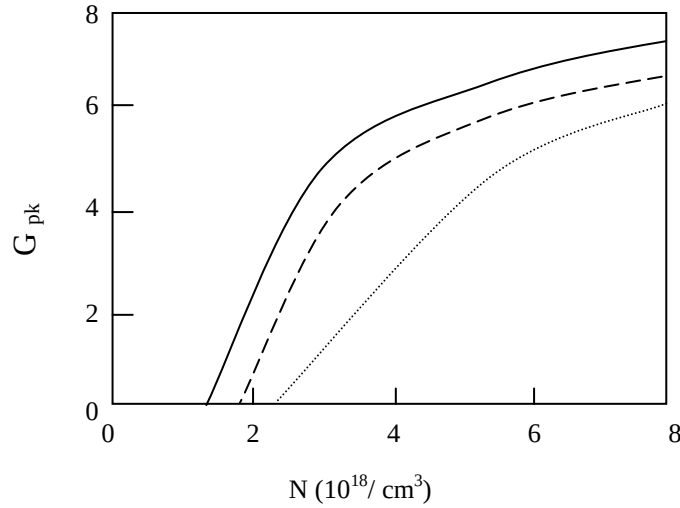




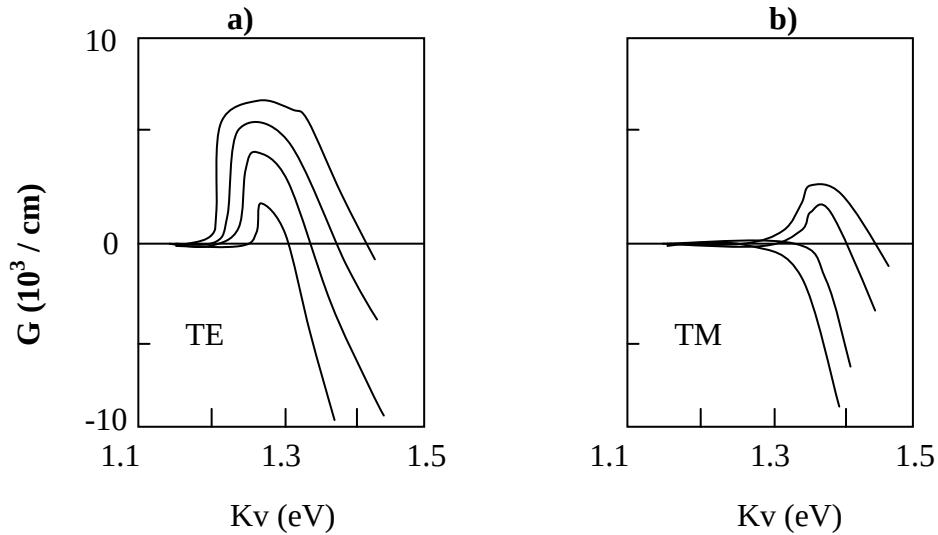
Şekil 3. 19. 5 nm $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ İçin Boşluk Kimyasal Potansiyelleri
a) $x = 0,1$ **b)** $x = 0,2$ Yoğunluklar $N =$ (i) $2x$, (ii) $4x$ ve (iii) $6x \cdot 10^{18} / \text{cm}^3$. Sıkıştırılmamış GaAs - AlGaAs İçin, Boşluk Kimyasal Potansiyelleri, Aynı Yoğunluklarda Hepsı Bant Ağırlığı İçindir.

Baskılı sıkıştırmanın sayesinde bant yapısındaki değişikliklerin bir sonucu taşıyıcı yoğunluğunda bir azalmadır. Bir bant eğriliğinin artması (ya da eşdeğer bir deyişle parabolik bir bant için, etkin kütle sinin azalması) durumlarının yoğunluğunu azaltır. Belirli bir taşıyıcı yoğunluğu için, boşluk kimyasal potansiyelinin, daha büyük İndiyum yoğunluğunda valans bandının daha fazla içinde olduğunu gösteriyor.

Yarı iletken ortamda kazanç oluşumu bir şişe burnu (bottleneck) boşluk durumlarının popülasyonunda olur. Sıkıştırmanın ortaya çıkması en yüksek enerjili bant eğrisini arttırır. Burada InGaAs / AlGaAs için pik kazancının taşıyıcı yoğunluğu fonksiyonu çizilmiştir.



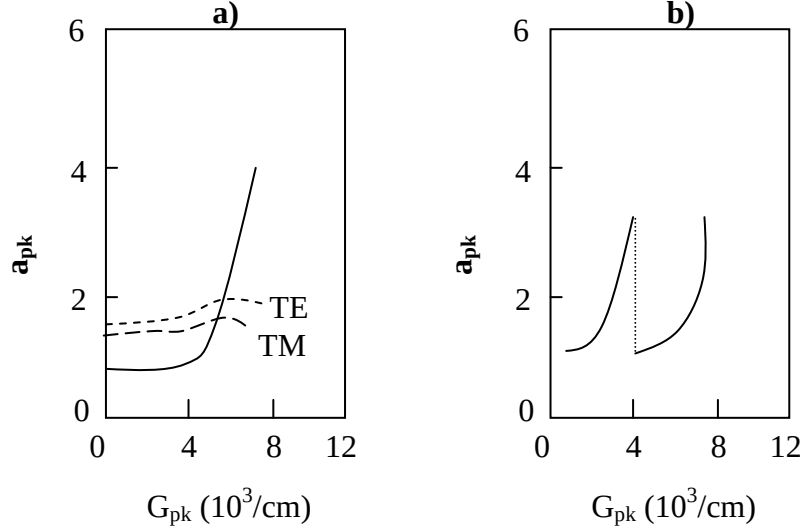
Şekil 3. 20 . 5 nm $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As} / \text{Al}_{0.2} \text{Ga}_{0.8} \text{As}$ $x = 0$ (Kısa Kesikli Eğri) $x = 0,1$ (Uzun Kesikli Çizgi) ve $x = 0,2$ (Kalın Çizgi) İçin Taşıyıcı Yoğunluğunun Bir Fonksiyonu Olarak Pik Kazancı Çizimleri. Eğriler Çok Cisim Kazanç Formülü Kullanılarak Hesaplanmaktadır.



Şekil 3. 21. 5nm $\text{In}_{0.2} \text{Ga}_{0.8} \text{As} / \text{Al}_{0.2} \text{Ga}_{0.8} \text{As}$ İçin **a)** TE Ve **b)** TM Kazanç Spektrası. Aynı Taşıyıcı Yoğunluğundaki Daha Düşük TM Kazançlarını Gösteriyor. Taşıyıcı Yoğunluğu $N = 2x, 4x, 8x 10^{18} / \text{cm}^3$ dür.

Baskılı sıkıştırmanın bir diğer sonucu polarizasyon ayrımıdır. Baskılı sıkıştırılmış yapılar TE kazancından fark edilir şekilde daha küçük TM kazancına sahiptir-

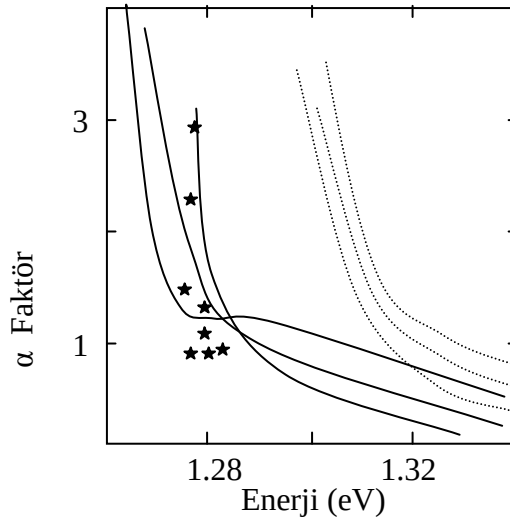
ler. Sadece elektron ve hafif boşluk durumlarının arasında oluşan TM dipol geçişlerinin bir diğer sonucu budur. hh1 ve lh1 bantları arasında arttırılmış ayrılma, TM kazancının çoğunu sağlar ve çoğaltılması daha zordur. Bunun da ötesinde daha büyük hh1 ve lh1 bant ayrılmalarından ötürü, TE ve TM kazanç spektralleri, sıkıştırılmamış yapıya göre, frekansta daha fazla ayrılmıştır.



Şekil 3. 22 . a) Pik Kazancında Çizgi Genliği İyileştirmesinin 5nm $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As} / \text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ (kalın çizgi) TE Modu İçin Pik Kazancının Bir Fonksiyonu. TM Kazancı Bu Durumda İhmal Edilebilir. Kısa, Kesikli Ve Uzun Kesikli Çizgi, Sırasıyla GaAs - $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ Kuantum Kuyuda TE ve TM Modlarının Sonuçlarını Gösterir. **b)** Pik Kazancında Çizgi Genliği İyileştirme Faktörünün 10 nm $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As} / \text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ İçin Pik Kazancının Bir Fonksiyonu.

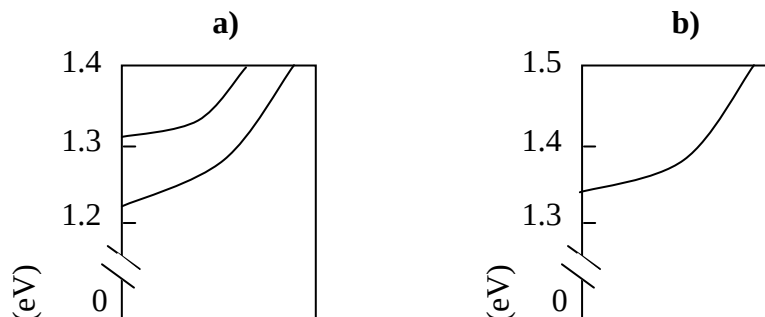
Şekil 3.22 a) α_{pk} pik kazanç frekansında çizgi genliği iyileştirme faktörüyle, 5nm $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As} - \text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ ve 5nm $\text{GaAs} / \text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ yapıları için G_{pk} pik kazancını karşılaştırır. Pik kazancının düşük değerleri için α_{pk} , sıkıştırılmış kuantum kuyuda sıkıştırılmamışa göre daha düşük bir değerdedir. Öte yandan α_{pk} dereceli olarak G_{pk} arttıkça artar; böylelikle 7000 cm^{-1} 'lik bir pik kazancı için, gerek sıkıştırılmış gerekse sıkıştırılmamış ortamda aynı α_{pk} değerine sahiptir. Bu noktanın ötesinde, zirve – kazanç sonuçlarında daha fazla bir artış, sıkıştırılmış kuantum kuyu için α_{pk} 'da daha büyük bir değişime neden olur. Kuyu eninin etkisi Şekil 3.22 b'de gösterilmiştir. 10 nm $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As} - \text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ sıkıştırılmış kuantum kuyusunda TE modu için sonuçlar Şekil 3.22 b'de çizilmiştir. Sıkıştırılmamış duruma benzer şekilde

$e2 - hh2$ geçişinin kurulumu α_{pk} da daha büyük bir düşüşe neden olur. Buraya kadar durum sabit olaysal çizgi genliği $\wp = 10^{13} / s$ olan bir lorentziyen çizgi şekli önerir. Gerçekte yarı iletken çizgi şekli bir lorentziyen olmadığı gibi çizgi genliği sabiti de değildir. Ancak, değişik çizgi genlikleri için α_{pk} hesaplama sonuçlarında çizgi genliğinin etkisini tahmin edebiliriz. $\wp = 10^{13} / s$ ve $4 \times 10^{13}/s$ için sonuçları karşılaştırarak, bir şekilde nicel sonuçların değiştiği ama nitel sonuçların kuvvetli bir biçimde çizgi genliğine bağımlı olduğu bulunur. Özellikle α_{pk} 'daki ani düşüş geniş çizgi genliği durumu için bile sürer.



Şekil 3. 23 . 6nm $In_{0,2} Ga_{0,8}As / GaAs$ Sıkıştırılmış Kuantum Kuyuları İçin Hesaplamalarla, Deneysel Ölçülmüş α Değerlerinin Karşılaştırılması. Çok Cisim Sonuçları Kalın Eğrilerle Gösterilmiştir. (Sağdan Sola $N = 1,5x, 2x, 2,5x 10^{18}/cm^3$) Serbest Taşıyıcı Sonuçları Kesikli Eğrilerle Çizilmiştir. (Sağdan Sola $N = 2,5x, 2x, 1,5 x 10^{18}/cm^3$)

Şekil 3.23 6nm $In_{0,2} Ga_{0,8} As / GaAs$ sıkıştırılmış kuantum yapılarıyla işlem yapan lazer için α spektrumunda deneysel veri 1,28 eV ve 1,29 eV arasında kritik bir nokta gösterir. Taşıyıcı yoğunluğu $N \approx 2,5 \times 10^{18} / cm^3$ civarında, hesaplanmış α spektrasında bu özelliği yeniden oluşturabiliriz. Kritik nokta çok cisimli Coulomb $GaAs / AlGa As$ kuantum kuyularında α spektrasındaki dispersiyonda olduğu gibi aynı orijine sahiptir. Buna zıt olarak, bir serbest taşıyıcı teorisi (kesikli çizgiler) frekansla düzgün azalan bir α ile sonuçlanır.

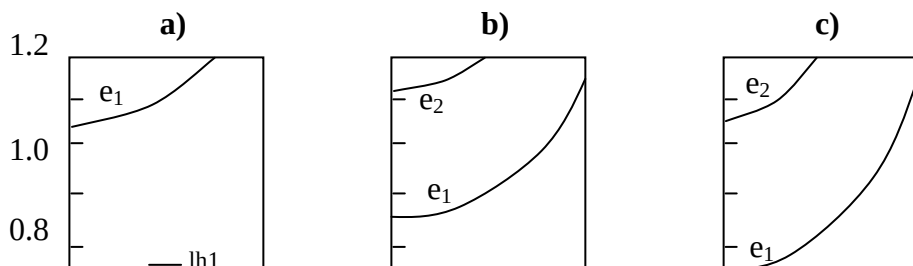


Bir önceki paragrafta ortaya atılan InGaAs / GaAs yapısı, InGaAs sıkıştırılmış kuantum kuyularının ilginç bir yapısını gün ışığına çıkarır. Eğer bariyerler AlGaAs yerine GaAs ise sınırlama potansiyeli kuyu genliği dikkate alınmaksızın, hafif boşluğu bağlayamayacak kadar zayıf bir duruma gelir. Sonuç olarak, sadece ağır boşluk bantları var olur. Küçük bant karışımları vardır. Bunlar aynı etkin kütlelerle alan merkezine yakın birer paraboliktir.

3.4. InGaAs / InP Lazerleri

InP bariyerleri arasında $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ kuantum kuyularından oluşan hetero yapılar, sıkıştırılmış ya da sıkıştırılmamış olabilir. Yapı, gerilim veya baskılı sıkıştırma altında sırasıyla daha küçük veya daha büyük indiyum yoğunluklarıyla, $x = 0,53$ için sıkıştırılmamış durumdadır. InGaAs'ın bant aralığı (3.21) ve (3.22) denklemlerinde verilmiştir ve InP bant aralığı;

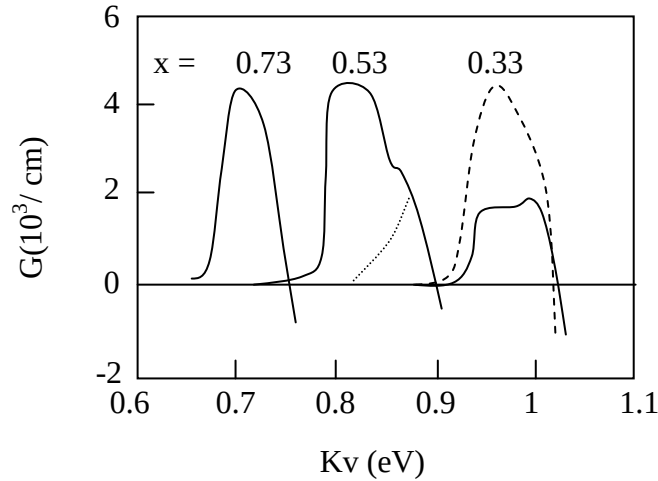
$$\epsilon_g = 1,42667 - 0,000326436T \quad (3.23)$$



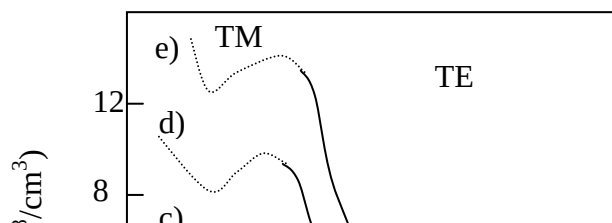
Bu, Landolt – Börnstein da verilerin çizgisel fiti kullanılarak belirlenmektedir. $x = 0,33$ için $k = 0$ 'da en üst valans bandıyla birleştirilmiş hafif boşluk durumlarıyla, bir hafif ve iki ağır boşluk durumlarından kaynaklanan üç valans bandı vardır. $x = 0,53$ 'de iletkenlik ve valans bantlarının sayısı sırasıyla iki ve dörde artar; çünkü kuyu daha derindir. Dikkat edilmelidir ki, şimdi en üst valans bandı daha çok ağır boşluk karakterindedir ve böylelikle $x = 0,33$ 'lü durumdan ortalama bant eğrisine sahiptir. $x = 0,73$ için, hafif boşluk bant aralığı, iki ağır boşluk durumlarının üzerinde bulunan noktanın ötesine kaymıştır. Bu daha da ötede, en üst valans bandında ağır ve hafif boşluk durumlarının karışımını azaltır. Bu da daha geniş ortalama hh1 bant eğilimiyle sonuçlanır. Sıkıştırılmalı toplam bant aralığı değişim ($x = 0,73$ 'de 0,73 eV'tan $x = 0,33$ 'de 1,01 eV'a kadar) lazerleme için kabul edilebilir dalga boyu menziline genişletir. InGaAs – InP kuantum kuyularıyla yapılan lazerler tipik olarak 1,45 Mm ve 1,62 Mm arasında bulunur. Bu yüzden fiber optik iletişimlerde ilgi konusu olmuşlardır [Landolt-Börnstein, 1982].

Şekil 3.26 , Şekil 3.25'de gösterilen değişik yapılar için kazanç spektrasını çizer. Eğriler, çok cisim teorisi kullanılarak hesaplanır ve taşıyıcı yoğunluğu, bütün yapılar için, yaklaşık olarak 4000/cm pik kazancı vermek üzere değiştirilmektedir. Kazanç spektrumu $e1 - hh1$ geçişiyle üstün hale getirilir. Çünkü bu

bantlar $N = 1.6 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ seçilmiş yoğunluğunda en yüksek elektron ve boşluk popülasyonuna sahiptirler. TM kazancı yoktur; çünkü lh1 bandı, ilk katılımcı olarak, bu yoğunlukta çoğaltılmaya göre bant ucundan çok fazla uzaklaştırılmıştır. $x = 0,53$ 'lü sıkıştırılmamış yapılar için en yüksek valans bandı halen hh1'dir. Böylelikle e1 – hh1 geçişi halen üstün gelir, hükmeder. Ama hh1 ve lh1 arasında enerji ayrımı azalmıştır. Bunun iki etkisi vardır. Biri lh1'de daha büyük boşluk popülasyondur; diğeri hh1'de hafif boşluk içeriğini artıran, daha güçlü hafif boşluk – ağır boşluk eşlemesidir. Tam tersi de lh1'de ağır boşluk içeriğidir. Şekilde gösterildiği gibi, TE ve TM modları arasında pik kazanç değerlerindeki farklılıktaki azalmadan bu sorumludur. En büyük valans bandı lh1'dir. Bölge merkezi etrafında karakter çoğunlukla hafif boşluktur. Böylelikle TE modundan daha çok TM moduna katılım olur. Görüldüğü gibi, TM modu hükmeder. $x > 0,53$ indiyum yoğunlukları için, TE kazanç spektrası TM kazanç spektrasına göre kırmızı – kaymalıdır; çünkü en üst valans bandı, öncelikle, bölge merkezi çevresinde ağır boşluktur. Öte yandan $x < 0,53$ indiyum yoğunluğu için en üst valans hafif boşluktur. Böylelikle TE kazanç spektrası, TM kazanç spektrasına göre mavi kaymalıdır. Bu, InGaAs'da alaşım bant aralığındaki artış yüzünden, azalan indiyum yoğunluğuyla, daha büyük frekanslara kazanç spektrasının toplam kaymasıdır [Addachi, 1982].

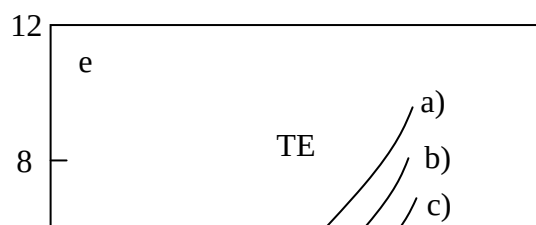


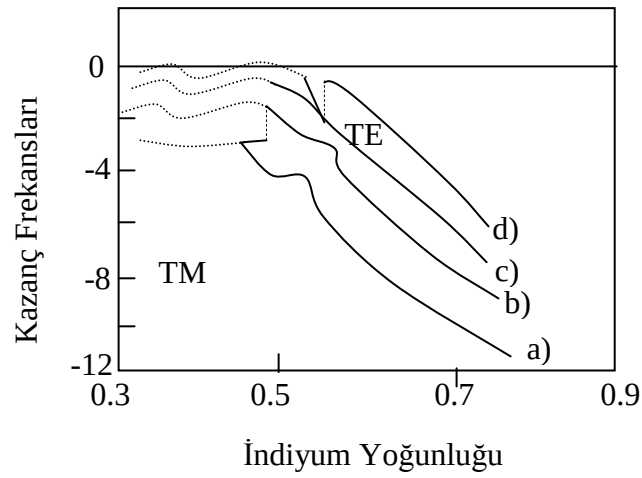
Şekil 3. 26 . $x = 0,33, 0.53$ ve 0.73 İndiyum Yoğunlukları İçin $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{InP}$ TE Modu (Kalın Çizgi) Ve TM Modu (Kesikli Çizgi) Kazanç Spektrası. $N = 4.5 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ $x = 0.53$ İçin Ve $N = 1.6 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ $x = 0.73$ İçin Yoğunluklar Pik Kazancının $4000/\text{Cm}$ Vermek Üzere Seçilmiştir.



Şekil 3.27 N_{th} eşik taşıyıcı yoğunluğunun G_{th} değişik eşik kazançları için InGaAs'da indiyum konsantrasyonuna olan bağıntısını gösteren bir fonksiyon çizer. $G_{th} = 0$ eğrisinin transparansı taşıyıcı yoğunluğunu verir. Ele alınan indiyum yoğunlukları 5nm'den daha büyük kritik kalınlıklı ortalama aralığı kapsar. Eşik taşıyıcı yoğunluğu baskılı sıkıştırmayla azalmıştır. Gerilim sıkıştırmayla TM modu için eşik taşıyıcı yoğunluğunda belirgin bir azalma da olabilir. Eğriler sıkıştırmamanın, polarizasyon seçiciliği için kullanılabileceğini gösterir. Gerilim TM moduna, baskı TE moduna sebep olur.

Şekil 3.28, G 'in InGaAs'ta, değişik eşik kazançları için, indiyum yoğunluğunun bir fonksiyonudur. G değerleri pik kazanç frekansları için olan değerlerdir. Şekilde diferansiyel kazancın baskılı sıkıştırmayla arttığı görülür. Süreksizliklerin bir nedeni TE'den TM moduna geçiştir. Diğer bir sebep ise, ikinci iletkenlik bandı takdir edilecek kadar büyüdüğünde pik kazanç frekansındaki atlamadır. 5nm kuantum kuyu genliği için, ikinci iletkenlik bandı sadece $x < 0,69$ için vardır. Daha geniş kuyu genliklerinde yüksek baskılı sıkıştırmalarda ikincil bir iletkenlik bandı olasıdır.





Şekil 3. 29. Kırıcı endeks türevinin $\left(\frac{d\delta n}{dN}\right)$ InGaAs'ta indiyum yoğunluğu fonksiyonu. Değerler Pik Kazanç Frekansları İçin Olanlardır. Pik Kazancında Taşıyıcı Yoğunluğu Türevinin, 5nm'lik $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / InP İçin Eşik Kazanç İndiyum Yoğunluğu Fonksiyonu. **a)** 2000/cm **b)** 4000 /cm **c)** 6000 /cm **d)** 8000 /cm.

Deneylerde elde edilen sonuçlarla uyumlu olarak, α_{pk} , kazanca (veya taşıyıcı yoğunluğuna) ve sıkıştırmaya karmaşık bir bağımlılık gösterir. Değişik malzemelerin ve boyutların sıkıştırılmış kuantum kuyu yapıları arasında ortak özellikler vardır. Biri, daha büyük eşik kazancıyla α 'nın, sıkıştırma üzerinde bağımlılığının daha bü-

yük olmasıdır. Bir diğeri, α_{pk} 'da adı geçen piklerin sayısının sıkıştırmaya olan bağımlılığının fonksiyonun bir eksiği iletkenlik bandına eşit olmasıdır. Daha yüksek iletkenlik bandının varlığı yüksek baskılı sıkıştırmayla ve dar kuyularda mümkündür. Piklerin $d\alpha_{pk}/dx$ kısmında, azalan sıkıştırmayla α_{pk} 'daki artış bant yapısı etkilerinden ötürüdür. $d\alpha_{pk}/dx > 0$ kısmında azalan sıkışmayla, α_{pk} 'deki izafi olarak daha keskin düşüş pik kazanç frekansında ani atmadan ötürüdür.

IV. BÖLÜM

4. MONTE CARLO SİMÜLASYONLARI

4. 1. SiGe/Ge Kuantum Kuyularında Boşluk Taşınımının Monte Carlo Simülasyonları

Gevşek SiGe sanal yapı maddeleri üzerinde büyütülen modülasyon etkili kuvvetli bir biçimde sıkıştırılmış Si kuantum kuyularının kalitesi oldukça ilerlemiştir. Öyle ki, yüksek hareketliliğe (mobility) sahip 2 boyutlu elektron gazları oluşturmak şu anda mümkündür. Tamamlayıcı mantık uygulamaları için, yapısında SiGe valans bandı kuantum kuyuları bulunan uyumlu p- tipi Si yapılarına büyüyen bir ilgi vardır. SiGe/Si kuyularının hareketliliği olmuştur. SiGe/Si kuyularının karşısındaki başlıca problem $300 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ civarındaki, düşük sıcaklık boşluk hareketliliği olmuştur. Bunun sebebi de zayıf arayüz kalitesi ve alaşım saçılmasıdır. Ama, $\text{Si}_{0,2} \text{Ge}_{0,8} / \text{Si}_{0,7} \text{Ge}_{0,3}$ yapıları üzerindeki son ölçümler gösterdi ki 300 K de en iyi n kanalı SiGe MODFET'lerde elektron hareketliliğine % 3 lük bir oranda yakın olan $1000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ hareketliliği elde etmek mümkündür [Crow et al, 1999].

SiGe/Si'a bir alternatif olarak $\text{Ge}_{x_s} \text{Si}_{1-x_s}$ ($x_s > \% 60$)'da depolanan Ge kuyularının ele alınması gerekir. Bu sistem iki avantaj sağlar. İlki, GeSi bariyer bölgesinden alaşım saçılımı SiGe/Si'a göre kayda değer bir biçimde azaltılmalıdır. İkincisi, düzlem içi etkin boşluk kütlesi 0,1 me'dan daha küçüktür. Öte yandan SiGe/Si ise yaklaşık olarak 0,3 m_0 dır. Son ölçümler, boşluk hareketliliğinin SiGe/Si'dakine göre % 10 daha fazla olduğunu öne sürüyor. Ama Ge/GeSi'un başlıca dezavantajları kalın ($> 3 \text{ mm}$) GeSi derecelendirilmiş tamponun Si üzerine yanlış yerleştirilmesi ve zayıf arayüz kalitesine eğilimidir [Köning, 1996].

Başlıca amaç hem SiGe/Si hem de Ge/GeSi için düzlem içinde boşluk hareketliliğini tanımlayan saçılma işleminin göreceli önemini belirlemek ve hız aşımı gibi taşıma olaylarının yapısını ortaya çıkarmaktır. SiGe/Si durumunda kuyu genişliğinin menzili ve yüksek boşluk hareketliliği gösteren yapıları ayırtetmek için alaşım kompozisyonları ele alınmıştır. Boşluk dinamiği bir Monte Carlo simülasyonu ile incelenmiştir. Valans band yapısının etkin kütle modeli kullanılmıştır. Burada basitlik amaç edinilmiştir. Eğilim odur ki gelecekte $\vec{k} \cdot \vec{P}$ hesaplamalarının daha detaylı

SiGe/Si ve Ge/GeSi valans alt bandı dispersiyonlarının yapılması öngörülmüştür ve simülasyonlar oluşturulmuştur. Böylelikle taşıma doğrulukları alan etkili transitörleri, ($10^6 - 10^7 \text{ Vm}^{-1}$) kanalları boyunca büyük elektrik alanlarda modellenebilir [Laikhtman et al, 1993].

Bu simülasyonda ağır ve hafif boşluk valans band yapıları kullanılmıştır. Splitsiz (kaymamış) spin durumları büyük Si (44 meV)'a karşı spin – yörünge splittingler düzlem içi etkin boşluk $\vec{K} \cdot \vec{P}$ Hamiltonyenin diagonal elemanlarından üretilebilir. Bu metod karıştırma, karşı çaprazlama alt bantlarının ayrıntılarını oluşturmamasına karşılık, düşük olan (10^5 Vm^{-1}) taşımasının vuku bulmasına kadar varan dispersiyon özelliklerini sağlar. Bir $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x / \text{Si}_{1-x}\text{Ge}_{xs}$ heterojunction'ı için valans bandı ofsetleri şu şekilde ifade edilebilir.

$$V_{hh/h} = 0.67(1 - x_s)x \pm 2b\epsilon_{ii} \quad (4.1)$$

Burada b değerlilik bandı deformasyon potansiyeli ve ϵ_{ii} ikili eksen baskısıdır. Şekillendirilmiş kuantum kuyu yapıları benzer geometriye sahiptirler. Kuantum kuyu genleri değişmesine karşın, nominal ara eni 170 Å dur. Üretici tabaka dopingi (extrinsic) $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ve bağlı yaprak yoğunluğu $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ dir [Shäffler, 1997].

Baskıyla sıkıştırılmış SiGe ve Ge ağır ve hafif boşluk bandlarından çıkarılan kuantum kuyu bağlı durumları transfer matris metodundan elde edilebilir. Her şekillenmiş kuyu asimetriktir; düzgün bir yerel elektrik alanı, bağlı yaprak boşluk yoğunluğuna orantılı olarak kuyu boyunca yerleştirilir. (Gauss kanunun bir yaklaşımı) Schrödinger denklemi parça yollu düz potansiyel varsayılarak çözülebilir. Böyle bir durumda kuyu ve bariyer bölgeler göreceli olarak küçük hücrelerden oluşan bir ızgaraya dönüşür. Bir birim büyüklük dalgası, sol taraftaki bariyerden kuantum kuyu üzerine geldiği düşünülür ($J < J_{\text{başlangıç}}$, $J_{\text{başlangıç}}$ kuyu bölgesinin ilk ızgara hücresini belirtir.) Birbirini takip eden J, J + 1 gibi her hücre arasında geçen ve yansıyan dalgaların büyüklükleri, dalga fonksiyonlarının ortak sınırları boyunca eşleştirilmesiyle

çözülebilir. A_j^- 'yi dalganın $-z$ yönünde hareket eden bileşenin katsayısı olarak alır-

sak ve A_j^+ 'yi de $+z$ yönü için alırsak vektör $\alpha_j = \begin{pmatrix} A_j^- \\ A_j^+ \end{pmatrix}$

$$R_J \alpha_J = L_{J+1} + \alpha_{J+1} \quad (4.2)$$

bağıntısına uyum gösterir.

$$R_J = \begin{vmatrix} e^{-ik_z(j)z(j)} & e^{ik_z(j)z(j)} \\ -[k_z(j)/m_z(j)] e^{ik_z(j)z(j)} & [k_z(j)/m_z(j)] e^{ik_z(j)z(j)} \end{vmatrix}$$

$$L_{J+1} = \begin{vmatrix} e^{-ik_z(j+1)z(j)} & e^{ik_z(j+1)z(j)} \\ -[k_z(j+1)/m_z(j+1)] e^{ik_z(j+1)z(j)} & [k_z(j+1)/m_z(j+1)] e^{ik_z(j+1)z(j)} \end{vmatrix}$$

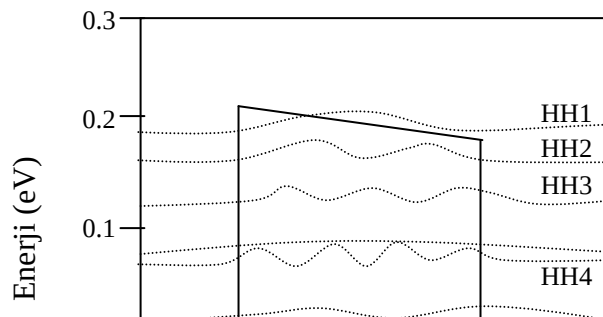
$$k_z(j) = \left\{ 2m_z(j)[E - v(j)]/\hbar^2 - m_z(j)k_H^2/m_H(j) \right\}^{1/2} \quad (4.3)$$

$m_z(j)$ ve $m_H(j)$ J hücresi için enlemesine ve düzlem içi etkin kütlelerdir. α başlangıç-1 = $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ den başlayarak kuantum kuyunun zıt tarafının ötesinde ilk ızgara hücresine

$J_{duruş+1}$, transfer olan dalga büyüklüğü;

$$\alpha_{duruş+1} = L_{jduruş+1}^{-1} R_{jduruş} L_{duruş}^{-1} \dots R_1 L_1^{-1} R_0 \alpha_{jbaşlangıç-1} \quad (4.4)$$

Düzlem içi (k_H) valans alt bandı dispersiyonları E enerjilerinden (dalga vektörleri k_z ($J_{duruş} + 1$) çıkarılır. Bunlar için (+) yöndeki giden dalganın katsayısı ik_z ($J_{duruş} + 1$) . z ($J_{duruş} + 1$) bariyer üzerinde expotansiyel azalış gösterir. R_{J-1} ve L_J^{-1} matrislerinde enerji öz değerlerini yerine yerleştirirsek, α_J öz vektörleri, birbirini izleyen (J) hücre indisleri tarafından çözülür. Bu bağlı durum zarf fonksiyonlarını vermektedir. Alt bant dispersiyon dataları kübik spline fitting prosedürü, kullanılarak birbirine bağlanır. Burada amaç saçılma hızlarını çözmektir [Rieger et al, 1993].



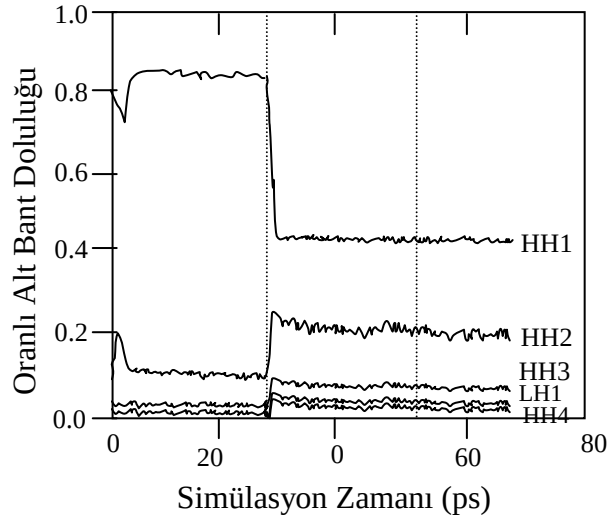
LH1

LH2

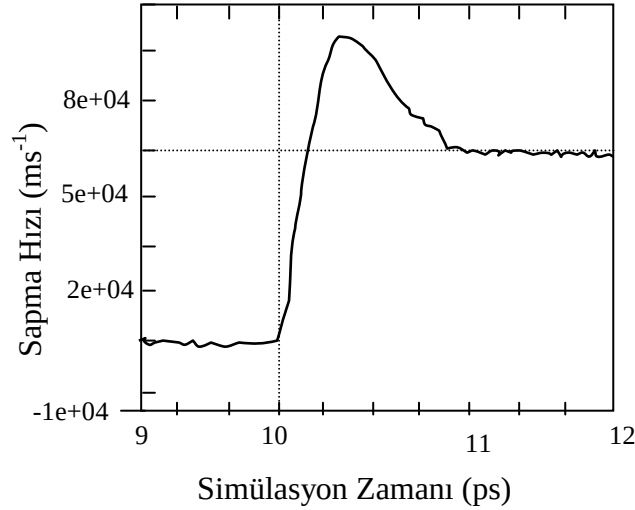
Monte Carlo taşıma simülasyonlarında boşluk parçacıkları uygulanan elektrik alanın etkisinde alt bantlar boyunca daha geniş dalga vektörü durumlarına yönelirler. Boşluk dinamiği amaçları için bant boyunca giden herhangi bir ağır – hafif boşluk alt bandının bant boyunu aştığı düşünülür. Boşluklar emilim ve yayım hızlarının eş dağılım yaklaşımı altında kombine olduğu elastik ses fononları ve ineleastik boylamasına optik (LO. Longitudinal optical) fonon emilim ve yayılımlarından saçılım yaşarlar. Brooks – Herring modelinin görüntülenmiş Coulomb potansiyeli kullanılarak, kuantum kuyuda ve ana parçada (yoğunluk 10^{17} cm^{-3}) arka plan iyonize bozukluklardan ve tek üretimli tabakada uzaktan kontrollü iyonize alıcılar dahil edilmiştir. Ek elastik saçılım kaynakları, kuyu ve bariyer bölgelerinde ara yüz kabalıkları ile alaşım düzensizlikleridir. Ortalama yüksekliği 8 Å ve yüzey menzili 10 Å olan yüzey kabalıkları bütün simülasyonlar boyunca kullanılmıştır. Alaşım potansiyeli için $\Delta u = 0.7 \text{ eV}$ alınır. Etkin kütle modelinden kalan bant karışımları saçılım hızlarında anlamlı bir etkiye sahip olacaktır. Bunu yerleştirmek için, iki değişik saçılım modeli test edilmiştir ve saçılım modeli (1) ve (2) diye adlandırılmıştır. (1) Metotta etkin kütle yaklaşımında ağır ve hafif boşluk karakterlerine ciddi bir şekilde sahip olan alt bantların enerji öz fonksiyonlarının Bloch periyodik parçaları birim integralle üst üste geldiği düşünülmektedir. Yani $\langle hh/lh \rangle = \langle lh / hh \rangle = \text{metotta üst üste gelme integrali}$ $\langle hh/lh \rangle = 0$ dır. Böylece değişik karakterlerine öz durumları arasında saçılım kesinlikle yasaktır.

Her taşıma hesaplaması için prosedür şu şekildedir: Her simülasyonu başlangıçta $10^4 - 10^5$ boşluk parçacıklarının bir ensmeblesi sıkıştırılmış $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ veya Ge

alt bantların (HH1) yer durumunda ısısal olarak dağıtılmıştır. Bunlar, HH1 içinde gevşemeye bırakılmıştır; aynı zamanda sıfır uygulanan alanla 30 ps'ye kadar bir “yerleştirme” zamanı üzerinde, diğer beş en aşağı seviyedeki alt bantlara kadar serbesttirler. Rahat dağılım kullanılarak, durağan bir elektrik alan uygulanır ve ensemble yeni bir dinamik dengeye ulaşır.



Şekil 4. 2. Simülasyon Zamanına Bağlı Olarak Oranlı Alt Bant Doluluğu

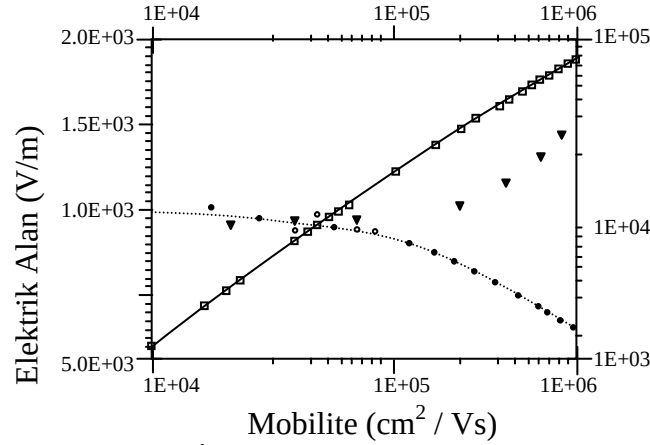


Şekil 4. 3. Şekil 4.1'in SiGe Kuantum kuyusunda Boşluklar için Ani Hız Aşırılığı

İlk an hız aşımı Şekil 4. 3'te gösterildiği gibi 300 K'de ve 10^6 Vm^{-1} alanlarında simüle bağlı boşluk parçacık ensemblesi için gözlemlenmiştir. Zirve – ergotik yöne-

lim hız oranı $4/3$ tür. $5/2$ faktörüne göre oldukça azdır (Bu bastırılmış Si X2 vadisi kuantum kuyularında elektron taşınımı için tahmin edilen $5/2$ oranıdır) [Miyata et al, 1993].

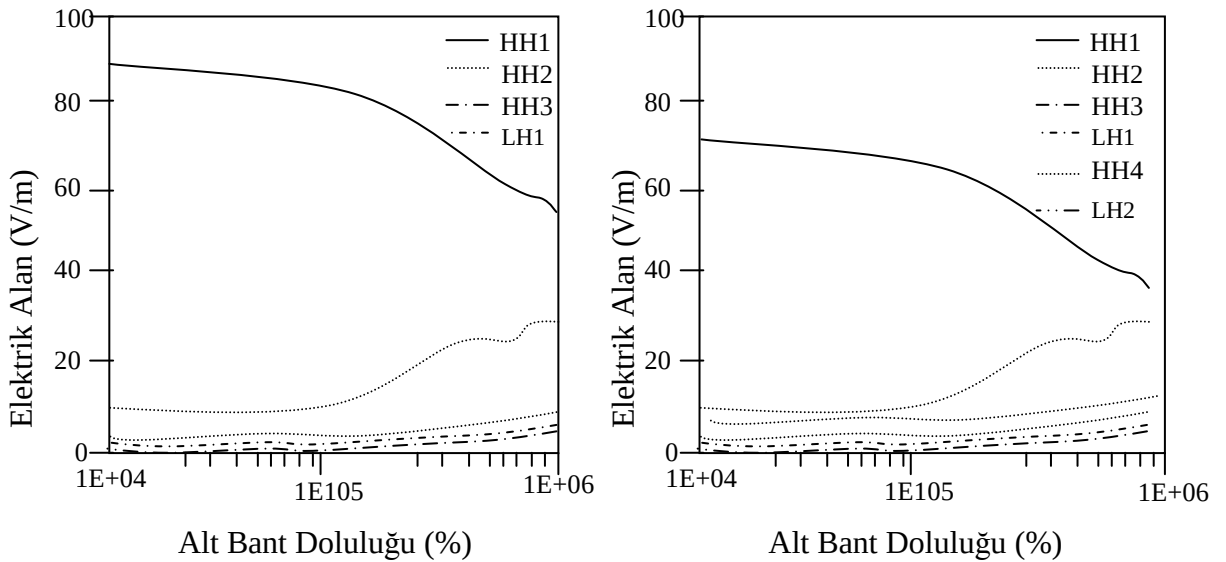
Şekil 4. 4. $10^4 - 10^6 \text{ Vm}^{-1}$ menzilineki uygulanan elektrik alanları için Şekil 4.1'in yoğun sıkıştırılmış 90 Å $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25} / \text{Si}$ kuantum kuyularında, oda sıcaklığında, taşıma simülasyonlarından not edilmiş durağan durum datalarını sunar.



Şekil 4. 4. Düzlem İçi Elektrik Alanın Bir Fonksiyonu Olarak, 90 Å 'lık $\text{Si}_{0,75} \text{Ge}_{0,25} / \text{Si}$ Kuantum Kuyuları için 300 K 'de Sapma Hızları ve Sapma Mobiliteleri.

Şekil 4.4. hafif ve ağır boşluk öz durumlarının arasında saçılımın mümkün olduğu metot kullanılarak beklenen yönelim hızları (tam eğri kutular) ve yönetim hareketliliklerini (kırılmış eğri ve çemberler) gösterir. Simüle hareketlilik beklenen eğilimi elektrik alanın bir fonksiyonu olarak izler. Yani hareketlilik düşük alan limitinde doygunluğa ulaşır. Çünkü iç alaşımın, yüksek alanlarda alt bantlar arası saçılımın sonucu olarak azalması, kabalık ve Coulomb saçılımı etkilidir. $600 - 1200 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ menziline yönelim hareketlilikleri $10^4 - 10^6 \text{ Vm}^{-1}$ alanları için $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x / \text{Si}$ ($x < 0.3$) için hesaplanmıştır. Bu datalar bastırılmış kalıp SiGe ve $\text{Si}_{1-x} \text{Ge}_x$ kuantum kuyuları ($x < 0.4$) için daha önceki teorik değerlerden daha küçüktür. Ama kötü sonuç veren düşük deneysel hareketliliklerden yine de iki üç kez daha büyüktür. Deney ve teori arasındaki tarihi ayrımın nedeni açık değildir. Belki, mevzu bahis olan saçılım modelleri, SiGe hetero yapılarında zayıf arayüz kalitesinin etkisi altındadır; belki de, valans alt bantları karışımı ve eğrilmesi beklenenden daha anlamlıdır.

Şekil 4. 4.'te (tüm, ters üçgenler) bir ek semboller seti Bloch karakterli durumlar arasında saçılımın yasak olduğu (2). saçılım metodunu kullanarak, hareketlilik hesaplamasını gösterir. Düşük alan limitinde; ki burada boşluk parçacıklarının ensemblesi taban ve ilk uyarılma ağır boşluk bantlarına sınırlandırılmıştır; metot (1) ve (2) aynı hareketliliği verirler. 10^5 Vm^{-1} 'den daha büyük alanlarda iki metodun tahmin ettiği hareketlilik farklılık gösterir. Bunun sebebi (2). saçılım metodunun etkin kütle yaklaşımıyla kesin bir uyum içerisinde olmasına karşın sıkıştırılmış kuantum kuyularının hafif boşluk durumlarından serbestlemenin atılabilemesidir ; ki bu yüksek alanlarda ve yüksek yönelme hızında bu alt bantların büyük popülasyonlarına sebep olur.



Şekil 4. 5. a) 10^6 Vm^{-1} den küçük uygulanan elektrik alan en çok enerjili parçaları kuantum kuyusundan saçtırmak için yeterlidir.

Şekil 4. 5. b) Değişken Düzlem içi Elektrik alan için, en düşük 6 alt bandını dolduran parçacık kümesinin durum yüzdesi.

Şekil 4. 5. 300 K'de Değişken Düzlem İçi Elektrik Alan İçin Şekil 4.1'in Kuantum Kuyusunun Alt Bantlarının En Alt Seviyelerini Dolduran Parçacık Kümelerinin Durağan Durum Yüzdeleri.

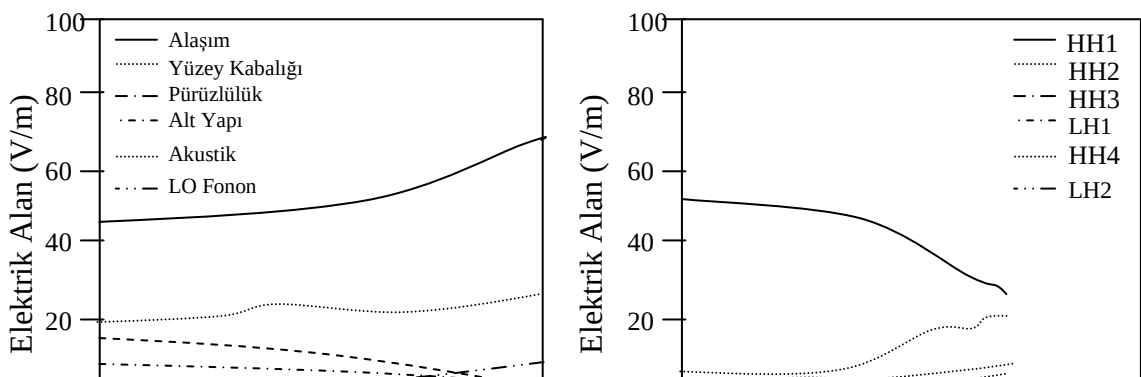
Şekil 4. 5.a) ve b) metot(1) ve (2) sırasıyla kullanılarak taşıyıcıların oranının, elektrik alanının bir fonksiyonu olarak, elde edilebilir alt bantlarını çoğaltmasını gösterir. Şekil a) ve b)'nin karşılaştırılması, (2). saçılım metodu kullanıldığında, yüksek elektrik alanlarda LH_1 ve LH_2 alt bantlarının kayda değer çoğalmasını gösterir.

En düşük seviye ötesindeki HH_1 ve HH_2 alt bantlarında anlamlı doldurmalar elde etmek için 10^6 Vm^{-1} gibi alanların gerektiğini belirtmek gerekir. Şekil 4.6 bunun, büyük ölçüde, baskın alaşım ve yüzey kabalığı saçılımının bir sonucu olduğunu gösterir. Simülasyonlar, SiGe'den akustik ve LO fononların saçılımının düşük önemde olduğunu öngörüyor; öte yandan uzaktan kontrollü bozukluk saçılımı sadece 10^4 Vm^{-1} gibi düşük elektrik alanlarda anlamlıdır. Simülasyonlar 10^6 Vm^{-1} den daha büyük alanlarda yürütülemiyor. Çünkü taşıyıcı dağılımı öyle bir şekildedir ki enerjisi yüksek parçacıklar Si bariyerlerinin içine doğru saçılabilirlerdi. Bariyer üretici tabakalarda paralel iletim, bu simülasyonlarda bulunmamaktadır ve böylece yüksek alanlarda simülasyon uygunsuz olacaktır.

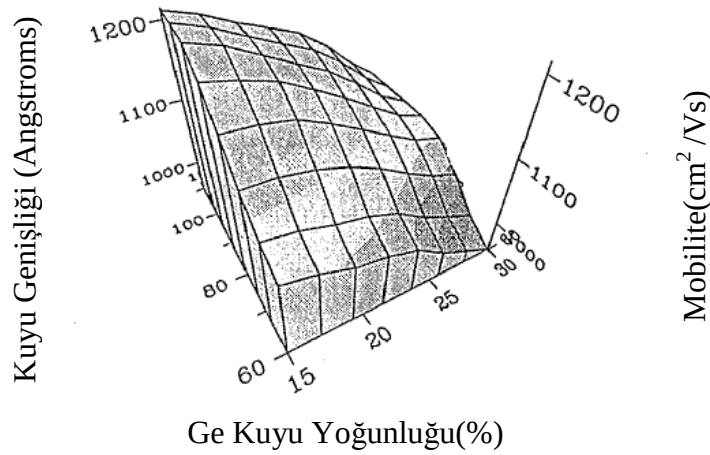
% 1,25 sıkıştırılmış bastırılmış $90\text{\AA}$ Ge / $\text{Ge}_{0,7}\text{Si}_{0,3}$ kuantum kuyularında yapılan benzer taşıma simülasyonları için sonuçları Şekil 4.7 –9'da gösterilmiştir. Saçılım metodu bütün bu hesaplamalar boyunca kullanılmıştır. Şekil 4.7 hesaplanmış boşluk yönelme hareketliliği ve hızını gösterir ve iki önemli özellik farkedilir. İlki, 300 K'de $13000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}\text{s}^{-1}$ de, düşük olan hareketliliği SiGe/Si da olduğundan daha büyük olması tahmin edilir. İkincisi hareketlilik grafiğinin çizimi (dizi) iyice belirgindir ve $4 \times 10^4 \text{ Vm}^{-1}$ alanı civarındadır.

Boşluk parçacıkları, kolaylıkla yüksek boşluk alt bantlarının içine saçılmıştır. (Şekil 4.8) ve yüksek enerjili taşıyıcıların $3 \times 10^5 \text{ Vm}^{-1}$ 'den daha büyük alanlar için GeSi bariyerleri içine saçılması beklenir.

Bu son gözlem, Ge/Ge Si p-MODFET ve bir mantık devresinde tamamlayıcı bir Si n – MODFET durumuyla uyur. Ge'da boşluklar, düzlem için yüksek hareketlilik gösterebilecek olmalarına rağmen, düşük hareketlilik kalıp GeSi'a p – FET performansını kayda değer bir şekilde sınırlayacaktır.



Şekil 4.9 Ge kuyu simülasyonları süresince saçılım olaylarının oransal önemini gösterir. Burada alaşım saçılımının gözle görülür şeklide azaldığına dikkat edilir. Onun yerine, yüzey kabalığı baskındır. (Bu simülasyonda kabalık parametresi $\Delta l = 20 \times 100 \text{ Å}^2$ 'dir.) Ge'de LO fonon enerjisi SiGe'dekine oranla daha önemli bir hale gelir. (akustik fonon saçılımında olduğu gibi.)



Şekil 4. 10. Pseudomorphic (Şekilliymiş Gibi) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ / Si Kuantum Kuyularının Bir Kısım İçin 10^5 Vm^{-1} lik Elektrik Alanda 300K'de Sapma Mobiliteleri

Son olarak Şekil 4. 10 $x = 0,15 - 0,3$ ve kuyu eni $60 - 110 \text{ Å}$ 'lü $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ / Si kuantum kuyularının bir seti için simüle edilmiş 300 K yönelme hareketliliklerini gösterir. Durağan uygulanmış elektrik alan 10^5 Vm^{-1} dir. Tahmin edildiği gibi, yönelim hareketliliği artan Ge oranıyla birlikte azalmaya başlar. Çünkü alaşım saçılımı vardır. Yine kuyu eni l ile azalır, çünkü baskın alaşım saçılımı için (fonon da dahil) saçılım matris elemanları $1/1$ şeklinde değişir. Sonuçlar 90 Å SiGe kuyuları % 15 - & 18 Ge, 1) kendiliğinden yüksek iç hareketliliğin ve 2) sınır tabaka kalınlığında l kuyularını sunan SiGe /Si p – FET kanalları için daha uygun olabileceğini, böylece yanlış yerleştirmelerin ve zayıf ara yüz kalitesinin daha az problem olacağını öngörmektedir.

Özet olarak Monte Carlo simülasyonları, Si'da depolanan , sıkıştırılarak bastırılmış $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0,15 - 0,30$) kuantum kuyularının içinde ortalama elektrik alanlar için ($10^4 - 10^6 \text{ Vm}^{-1}$) 300 K'de boşluk taşınımını etkileyen faktörleri ortaya çıkarmak için yapılmıştır. Düşük alan yönelim hareketlilikleri ($900 - 1200 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ aralığında) kuyu enleri $60 - 110 \text{ Å}$ 'lü pseudomorphic yapılar için hesaplanmıştır. SiGe alaşım düzensizliği ve arayüz kabalığı, hareketliliği sınırlayan başlıca faktörlerdir. Elastik olmak LO fonon saçılımı için daha az anlamlıdır, çünkü yüksek fonon

enerjileridir (~ 60 MeV, böylelikle saçılımın onsetinde karıştırmalı olarak büyük taşıyıcı dalga vektörleri demektir.) Bu simülasyonlardan hız aşımı saptanmıştır. İlk an zirve (pik) hızının ergodik yönelme hızına oranı $4/3$ tür.

Simüle edilen hareketlilikler bastırılmış kalıp SiGe ve $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ kuantum kuyuları için ($x < 0,4$) rapor edilen önceki teorik değerlerden daha küçük olmasına rağmen, bu değerler halen deneysel hareketliliklerden üç kere daha büyüktür. Teori ve deney arasındaki ayrımın nedeni halen açık değildir. Belki saçılım modelleri yüzey kabalığı ve arayüz yükünün istediklerini karşılayamamaktadır ya da valans alt bantlarının anizotropisi beklenenden daha kayda değerdir.

$\text{Ge}_{0,7}\text{Si}_{0,3}$ te depolanan Ge kuyuları için hesaplanan hareketlilik SiGe/Si için elde edilenden 10 kere daha büyüktür, bu ölçülen hareketlilik oranıyla uyumludur. Hareketlilikte gelişim için iki başlıca sebep (i) anlamlı şekilde alaşım saçılımı azalmıştır, (ii) karşılaştırmalı olarak düşük düzlem içi boşluk etkin külesidir. ($< 0,1$ mo). Düzlem içi elektrik alanlar ($< 10^{15} \text{ Vm}^{-1}$) için yüzey kabalığı baskın saçılım, büyük alanlar için bu akustik ve inelastik LO fonon yayımıyla yer değiştirir. Simülasyon, boşlukların, Ge kuyulardan saçılıp düşük hareketlilik kalıp GeSi içine gitmek üzere ortalama elektrik alanlarda ($3 \times 10^5 \text{ Vm}^{-1}$) yeterli enerji almaları gerektiğini öngörür. 10^6 Vm^{-1} 'den büyük elektrik alanların SiGe kuyularda boşlukları saçtırmaları gerekir. Ortalama elektrik alan Si Ge/Si'de daha büyük boşluk sınırlamaları bu alaşım düzenlemesinin p – kanallı FET'ler için Ge/GeSi'dan (göreceli olarak düşük boşluk hareketliliğine karşın) daha uygun olduğu anlamına gelir.

Konunun başında etkin kütle bant yapısının, düzlem içi boşluk hareketliliğini belirleyen alt bantlar için başlıca özelliklerini içeren basit, bilgisayarlı etkin taşıma hesaplaması oluşturmak üzere kullanıldığı belirtilmişti.

Etkin kütle bant yapısı ağır ve hafif boşluk bantları için, $\vec{k} \cdot \vec{P}$ Hamiltonyen matrisinden çıkarılır. Diagonelde olmayan matris elemanları sıfır değerindeki (bu elemanlar ağır boşluk (hh) ve hafif boşluğun (lh) karışımından oluşur normalde.) Bu hareket ağır ve hafif boşlukları birbirinden ayırır ve böylece kuantum kuyu öz değerleri bu yaklaşımda, karakterde tamamıyla ağır ya da hafiftir. $\vec{k} \cdot \vec{P}$ baz durumları (hh

ve lh böyle merkez durumları) tanımdan, oradadır. ($\langle hh / lh \rangle \equiv 0$). Açıkça, değişik Bloch fonksiyonları karakterine sahip olan alt bantların bölgeleri arasında geçişler, burada kullanılan etkin kütle yaklaşımında yasaktır. Ama full $\vec{k} \cdot \vec{P}$ hesaplamalarınca tahmin edilen, sıfırdan farklı düzlem içi dalga vektörleri (k_{II}) alt bant karışımı, oldukça ciddi değerlere sahiptir. Etkin kütle alt bantları kullanılarak yapılan taşıma olayında, kuantum kuyu öz değerleri arasında saçılım olaylarının iki uç şekillendirme yolu vardır:

1) Bloch periyodik dalga fonksiyonları bileşenleri arasındaki farklılığı, $\langle hh / lh \rangle = 1$, bant karışımının ortalama etkisini göz önünde bulundurmak için, bilmezlikten gelmek.

2) $\langle hh / lh \rangle = 0$ alalım; aynı karakterlerin öz durumları arasında sadece saçılım geçişlerine izin vermeli ve etkin bir şekilde bütün bant karışımlarını göz ardı etmeli.

V. BÖLÜM

5 . TARAMALI TÜNELLEME MİKROSKOBU

Taramalı Tünelleme Mikroskobu veya STM, bir tek atomun karşılaştırılabilircek ayırma gücü ile, yüzeylerin görüntüsünü oluşturmak için tünelleme olayını kullanan önemli bir alettir. Çok ince uçlu küçük bir sonda (probe) bir örneğin yüzeyinde çok yakın gezdirilerek tarama yapılır. Sonda ve numune arasında bir tünelleme akımı uygulanır. Akım sonda ve numune arasındaki uzaklığa çok duyarlıdır. Sabit bir tünelleme akımının tutulmasıyla, yüzey inceden inceye taranırken, sondayı yukarı çıkarmak ve aşağı indirmek için kullanılan bir geri besleme sinyali elde edilir. Son-
danın yüzey üzerinde düşey hareketi örneğin dış çizgisini izlediği için yüzeyin bir görüntüsü elde edilir [Serway, 1990]

5. 1. Basit Harmonik Birleştirici

Son olarak, doğrusal (lineer) geri çağırıcı bir $F = - kx$ kuvvetinin etkisinde bulunan bir parçacık problemini inceleyelim. Burada x , parçacığın denge konumundan ($x = 0$) olan uzaklık, k da kuvvet sabitidir. Böyle bir parçacığın klasik hareketi basit harmonik harekettir. Böyle bir sistemin potansiyel enerjisi;

$$U = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}mw^2x^2$$

ile verilir. Burada $w = \sqrt{klm}$ titreşiminin açısal frekansıdır. Klasik olarak, eğer parçacık denge konumundan ayrılır ve bırakılırsa $x = -A$ ve $x = +A$ noktaları arasında bir titreşim hareketi yapar. Burada A hareketin genliğidir. Dahası parçacığın toplam enerjisi;

$$E = K + U = \frac{1}{2}kA^2 = \frac{1}{2}mw^2A^2$$

ile verilir. Klasik modelde, E nin her değeri izinlidir ve parçacık $x = 0$ noktasında hareketsiz ise toplam enerjisi sıfır olur.

Bu problem için Schrödinger denklemi, $U = \frac{1}{2}mw^2x^2$ değeri iş fonksiyonu eşitliğinde yerine konarak elde edilir. Bu da aşağıdaki ifadeyi verir:

$$\frac{d\psi^2}{dx^2} = - \left[\left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right) - \left(\frac{mw}{\hbar} \right)^2 x^2 \right] \psi \quad (5.1)$$

Bu problemi çözmek için matematiksel teknik bu kitabın düzeyinin üzerindedir. Bununla beraber bir çözüm tahmin etmek öğretici olur. Böyle bir tahmin olarak aşağıdaki fonksiyonu alıyoruz.

$$\psi = Be^{-Cx^2} \quad (5.2)$$

$$C = \frac{mw}{2\hbar} \quad E = \frac{1}{2}hw \quad (5.3)$$

Schrödinger denklemini sağlayan bir çözüm olduğu bulunur. Önerilen bu çözümün sistemin taban durumuna karşılık geldiği görülür. Taban durumu, sistemin en küçük enerjisi olan $\frac{1}{2}hw$ ye sahip olduğu durumdur. Bu enerji sistemin sıfır nokta enerjisidir. $C = mw / 2\hbar$ olduğundan bu durum için dalga fonksiyonu şu hale gelir.

$$\psi = Be^{-(mw/2\hbar)x^2} \quad (5.4)$$

Parçacığın dalga ve dalgaların parçacık özelliklerine sahip olması şeklinde kuantum mekaniğinin temel fikri, bilimde her yerde en tuhaf bulunan şeyler arasındadır. Bu tuhaflığın sebebi, kuantum mekaniği daha çok küçük nesnelerle uğraştığından çok az pratik uygulamaya sahip görünmesidir. Kuantum mekaniğinin temel olaylarından biri, bir taneciğin tünelleme yapması hali hazır yapılmış en güçlü mikroskoplardan biri olan çok pratik bir aygıtın esasını oluşturur. Bu aygıt, taramalı, tünelleme mikroskobu veya STM (The Scanning Tunneling Microscope), fizikçilere bir tek atomun boyutuyla karşılaştırılabilir çözme gücü ile yüzeylerin çok ayrıntılı görüntü-

lerine elde etmeye olanak sağlar. Böyle görüntüler atomik ölçekte yapıları ve olayları anlamamızı bütünüyle değiştirmeyi vaat etmektedir.

Şekil 5. 1. Kristalik Altın Yüzeyinin Taramalı Tünelleme Mikroskobu İle Görüntüsü. Ölçek Üzerindeki Bölmeler 5 Å dır. Ardışık Taramalar Yaklaşık 1,5 Å Aralıklıdır [Binning, 1988].

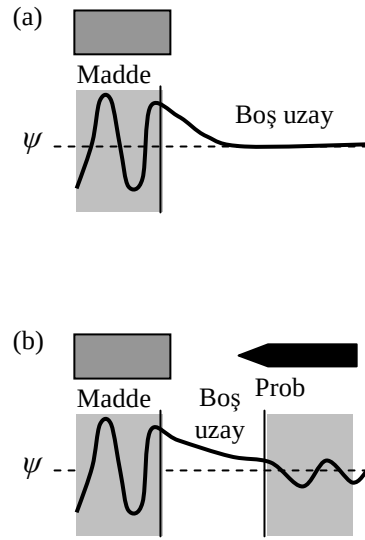
STM nin nasıl çalıştığını tartışmadan önce, ilk olarak STM nin yapabildiği bir numuneye bakalım. Bir altın parçasının yüzeyinin, taramalı tünelleme mikroskobu ile alınmış bir resim (görüntüsü) şekil 5. 1. de görülmektedir. Yüzeyin tekdüze düzgün olmadığı fakat sadece bir atom yüksekliğinde olan basamaklarla ayrılmış bir taracalar serisi olduğu kolayca görülebilir. Taracalar içinde, altın atomlarının kolayca ayırt edilemez biçimde incelikte yerleşmiş olmalarının neden olduğu, hafif dalgalanmalar görülebilir.

STM nin ne kadar dikkate değer kıldığı, ayrıntının güzelliği ve inceliği Şekil 5. 1. deki resimlerde görülebilir. Bu resimlerde ayırma ve çözme gücü yani ayırt edilebilen en küçük ayrıntının boyutu – yaklaşık olarak 2 Å (2×10^{-10} m) dir. Herhangi bir adi mikroskop için ayırma gücü, görüntü yapmak için kullanılan dalgaların dalga boylarıyla sınırlıdır. O halde, bir optik mikroskop, 2000 Å dan daha iyi bir ayırma gücüne sahip olamaz. Bu dalga boyunun yarısıdır ve bu yüzden Şekil 5. 1. deki beli-

ren ayrıntılar asla görülemez. Elektron mikroskopları 4 Å veya daha kısa dalga boylu elektron dalgaları kullanarak 2 Å lük bir ayırma gücüne sahip olabilirler. $\lambda = h / p$ de Broglie formülünden bu dalga boyunu verecek elektronun gerekli momentumu 3100 eV/c olmalıdır. Bu momentum $v = p/m = 1,8 \times 10^6$ m/s lik bir elektron hızına karşılık gelir. Bu kadar yüksek hızda giden elektronlar Şekil 5. 1 deki altın parçasının içine girecek ve bu yüzden tek tek yüzey atomları hakkında hiçbir bilgi vermeyeceklerdir.

STM nin bir tasarımı Şekil 5. 2. de gösterilmiştir. Aletin çalışmasının arkasındaki temel fikir, Şekil 5. 3. de görüldüğü gibi çok basittir. Çok sivri uçlu iletken bir sonda (probe) incelenecek yüzeyin yanına götürülür. Bu prob, yüzey içindeki pozitif iyonlara doğru çekildiği için, yüzeydeki bir elektron yüzey ve prob ucu arasındaki boş uzay içindeki bir elektronun sahip olacağından daha düşük bir toplam enerjiye sahip olur. Aynı şey probun ucundaki elektronlar için de doğrudur. Klasik Newton mekaniğinde, elektronlar yüzey ve uç arasında hareket edemezler. Çünkü onlar madde içinden kaçacak enerjiden yoksun olurlar. Fakat elektronlar kuantum mekaniğine uydukları için yüzey ve uç arasındaki boşluk engeline “tünelleme” yapabilirler.

Şekil 5. 2. Gerçek Bir STM Üst Ve Tabanının Ana Bileşenlerini Gösteren Resim. Uçun Numuneye Mekanik Yaklaşımını Kontrol Etmek İçin Kullanılan Üç Vidanın Resmi De Çizilmiştir. Başarılı Bir STM Tasarımı İçin Üç Anahtar Şunlardır : a) Yumuşak Bir Mekanik Yaklaşım Mekanizması b) Katılık (Rigidlik) c) Numune Ve Ucu Değiştirmede Uygunluk.

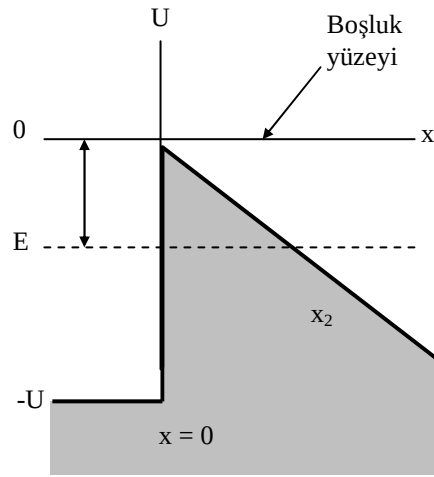


Şekil 5. 3. a) İncelenecek Malzemenin Yüzeyindeki Bir Elektronun Dalga Fonksiyonu. Dalga Fonksiyonu, Yüzeyin Ötesindeki Boş Bölge İçin Uzanır.
b) İletken Bir Sondanın (Prob) Sivri Ucu Yüzeyin Yakınına Getirilir. Bir Yüzey Elektronunun Dalga Fonksiyonu Sağda Ucuna Doğru Girer Ve Böylece Elektron, Yüzeyden Uca Doğru “Tünelleme” Yapabilir.

Şekil 5. 2. ve 5. 3. deki düzeneklerde bir elektron için, konumun fonksiyonu olarak enerji grafiği şekil 5. 4 de görüldüğü gibidir. Bu şekildeki yatay koordinat elektronun konumunu göstermektedir. Şimdi, L yüzey ve “uç” arasındaki uzaklık olarak yorumlanabilir. Öyle ki, o dan daha küçük koordinatlar malzeme yüzeyinin iç kısmındaki konumları, L den daha büyük koordinatlar “ucun” iç kısmındaki konumları gösterir. Engel yüksekliği $U = q\Phi$, malzemenin dış tarafındaki bir elektron ve malzemenin içindeki bir elektron arasındaki potansiyel enerji farkıdır. Yani, yüzeydeki bir elektron veya –uç, boşluk içindeki potansiyelle karşılaştırıldığında, $-U$ potansiyel enerjisine sahip olur. (Şimdilik uç ve yüzeyin aynı malzemeden yapılmış olduklarını kabul ediyoruz. Bu kabulü kısaca açıklayacağız). Burada Φ malzemenin iş fonksiyonudur. Yüzeydeki bir elektronun kinetik enerjisi E dir. Bir elektronu yüzeyden hareket ettirmek için ona $(U - E)$ miktarına eşit bir enerji verilmesi gerekir. O halde, $(U - E)$ yüzeydeki bir elektronun iş fonksiyonudur.

Şekil 5. 4. potansiyel enerji eğrisi için, yüzeyden uca doğru olduğu kadar ters yönde de (yani uçtan yüzeye doğru da) tünelleme olabilecek yön, yüzey ve uç arasında bir gerilim uygulayarak kontrol edilir. Yüzeyden uca doğru tünelleme tercih edilir. Böylece yüzeyin içindeki ve üzerindeki elektronların dağılımını uç alır. Bu ön geri-

lim sebebiyle, yüzeyin ve ucun iş fonksiyonları farklıdır. Bu tercihli tünelleme yönü verir. Yüzey ve uç farklı malzemeden yapılırsa da bu hal otomatik olarak oluşur. Ayrıca, Şekil 5. 4. de engelin tepesi düz olmayacak fakat yüzey ve uç arasındaki elektrik alanı yansıtmak için dalgalı olacaktır. Fakat engel U enerjisi yüzey ve iş fonksiyonları arasındaki farka göre büyükse ön gerilim (bias voltajı) $\Phi = U / q$ ya göre küçükse, hesaplarda bu karışıklıklar dikkate alınmayabilir.



Şekil 5. 4. Bir Metaldeki Elektronun Konumuna Göre Potansiyel Enerji Değişimi Grafiği. Elektron Metal İçinde ($x < 0$) Olduğu Zaman Enerji $-U$ Dur Ve Elektron Metal Dışında ($x > 0$) Olduğu Zaman Potansiyel Enerji x İle Orantılıdır. E Enerjili Bir Elektron, $x = 0$ Dan x_2 Noktasına Metalden Tünelleme İle Kaçabilir.

Tünelleme için karakteristik uzunluk ölçeği $(U - E)$ iş fonksiyonu ile düzenlenir. $(U - E) = 4,0$ eV luk tipik bir değer için bir uzunluk ölçeği;

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}} = \frac{\hbar c}{\sqrt{2mc^2(U-E)}} \\ &= \frac{1,973 \text{ keV} \cdot \text{\AA}}{\sqrt{2(511 \text{ keV})(4,0 \times 10^{-3} \text{ keV})}} = 0,98 \text{ \AA} = 1,0 \text{ \AA} \end{aligned}$$

dir. Belli bir elektronun engelden tünelleme yapacağı olasılık $T \cong e^{-2L/\delta}$ geçme katsayısıdır. Burada L engelin genişliğidir. Eğer yüzey ve uç arasındaki L aralığı δ ile karşılaştırıldığında küçük değilse o zaman engel “geniş” tir ve T için yaklaşık bir

sonuç kullanılabilir. Engelden tünelleme yapan elektronların akımı basitçe T ile orantılıdır. Tünelleme akım yoğunluğunun,

$$j = \frac{e^2 V}{4\pi^2 L \delta \hbar} e^{-2L/\delta} \quad (5.5)$$

olduğu gösterilebilir. Bu ifade e elektronun yükü, V yüzey ve uç arasındaki ön gerilim (bias voltajı) dır.

Bu ifadeye göre STM – uç ve yüzey arasındaki L aralığına çok duyarlı olduğu görülebilir. Bunun sebebi tünelleme akımının L ye üstel bağlı olmasıdır. (Bu, $1/L$ bağımlılığından daha çok önemlidir.) Yukarıda görüldüğü gibi tipik olarak $\delta = 1,0 \text{ \AA}$ lük artırma tünelleme akımının $e^{-2(0,01)/(1,0 \text{ \AA})} = 0,98$ kadar çarpanla çarpılmasına neden olur. Bu da ölçülebilir bir değişimdir. $10 \text{ \AA}$ dan (yani birkaç atomun çapının) daha büyük L uzunlukları için esasen hiçbir tünelleme olmaz. L ye karşı duyarlılık, STM in çalışmasının temelidir: Uç, yüzey üzerini tararken tünelleme akımı monitörü verir. Böylece STM $0,01 \text{ \AA}$ veya yaklaşık bir atom çapının yüzde birine kadar yüzey özelliklerinin yüksekliğini ölçebilir.

Şekil 5. 5. Bir Metaldeki Elektronun Konumuna Göre Potansiyel Enerji Değişimi Grafiği. Elektron İçinde ($x < 0$) Olduğu Zaman Potansiyel Enerji $-U$ dur Ve Elektron Metal Dışında ($x > 0$) Olduğu Zaman Potansiyel Enerji X İle Orantılıdır. E Enerjili Bir Elektron, $x = 0$ dan x_2 Noktasına Metalden Tünelleme İle Kaçabilir.

STM için, Şekil 5. 5. de görüldüğü gibi, iki çalışma modu vardır. Sabit akım modundan önce yüzey ve uç arasına uygun bir çalışma voltajı (2 milivolt ve 2 volt arasında) uygulanır. O zaman ölçülebilir tünelleme akımı elde etmek için uç, yüzeye yeteri kadar yakınlaşır. O halde, tünelleme akımı I ölçülürken uç yüzeyi tarar. Bir geri besleme devresi, tünelleme akımını sabit tutmak, dolayısıyla uç ve yüzey arasındaki L uzaklığını sabit hale getirmek için, ucun dikey konumu Z yi değiştirir. (x,y) yan konumuna göre Z nin grafiği çizilerek yüzeyin bir resmi yani görüntüsü yapılır. Görüntüyü çizmek için en basit şema aşağıdaki şekilde grafikte görülmektedir. Z yüksekliği tarama konumu olan x e göre çizilmiştir. Bir görüntü veya resim y yönünde yanal olarak birbirinin yerini olan çoklu taramalardan meydana gelir.

Sabit akım modu tarihsel olarak ilk kullanıldı ve atomik olarak düz olmayan (Şekil 5. 1. de olduğu gibi) yüzeyleri izlemek için kullanılabilme avantajına sahipti. Bununla beraber, geri besleme devresi taramanın son derece yavaş olarak yapılmasını gerektirir. Sonuç olarak taranan örnek, görüntü bozukluklarından kaçınmak için, uzun süre yerinde sabit olarak tutulmalıdır.

Bu moda seçenек olarak, sabit yükseklikli modda akım monitörde izlenirken uç, sabit voltajda ve hemen hemen sabit yükseklikte, yüzeyi tarar. Bu halde geri besleme devresi ortalama akımı sabit tutmak için yeteri kadar hızlı yanıt verir. Bunun anlamı, uç, yüzeyden aynı ortalama uzaklıkta tutulur. O zaman görüntü, şekil 5. 5. 'de görüldüğü gibi, (x,y) yanal konumuna karşılık gelen I akımının grafiğidir. Yine, y yönünde yanal olarak yer alan, x eksenini boyunca çoklu taramalar ortaya çıkar. Görüntü, uç, bireysel atomlar gibi yüzey şekilleri üzerinden geçerken tünelleme akımının önemli değişimini gösterir.

Sabit yükseklikli mod, atomsal düz yüzeyleri daha hızlı (sabit akım modundan 100 kez daha hızlı) taramayı sağlar. Çünkü uç, yüzey üzerinde her noktada aşağı yukarı hareket etmek zorunda değildir. Bu hızlı tarama bir yüzeyin görüntüsünü yapmak için çok kısa bir "poz süresi" gerektirir. Böyle görüntü serileri elde ederek araştırmacılar, bir STM "filmi" yapma anlamında yüzeylerin kendi kendilerini yeniden düzenlediği gerçek zaman süreçlerinde inceleyebilirler.

Atomların iki boyutlu katmanlar içinde doğal olarak yer aldığı, tabakalı malzemeler denen malzemelerin yüzeyleri de dahil, muhtelif yüzeyler üzerindeki bireysel atomlar görüntülenebilmiştir. Şekil 5. 6. bu tabaklı malzemelerden biri üzerindeki atomların bir örneğini göstermektedir. Bu görüntüde yalnız tek – tek atomların görülmesi değil, fakat bir kısım eksik atomların da işaret edilmesi büyüleyicidir. Özel olarak, Şekil 5. 6. da üç eksik atom vardır. Onların ait oldukları yerleri bulabilir misiniz?

Şekil 5. 6. Sıvı Azot İçine Batırılmış Bir Tantalyum Disülfid Yüzeyindeki Atomların Görüntüsü. [Slough et al, 1986]

Şekil 5. 7. Gümüş Kaplama İçin Kullanılan Bir Elektrot İçindeki Bir Grafit Elektronun Görüntüsü. [Sonnenfeld et al, 1986]

Şekil 5. 6. da STM görüntüsünün dikkate değer başka bir görünümü sıvı azot içine daldırılmış yüzey ve uç ile elde edilmiş olmasıdır. Bu makalede daha önce yüzey ve uç arasındaki uzayın boş olması gerektiği kabul edilmişti. Gerçekte elektron tünellemesi, sadece boşlukta değil fakat gazlarda ve sıvılarda –hatta suda- da meydana gelebilir. Suyu, özellikle tuz çözeltisi suyu, bir iletken olarak düşündüğümüz için bu olgu çok ilginç görünmektedir. Fakat su yalnız iyonik bir iletkendir. Elektronlar için su, boşluğun bir yalıtkan olarak davranmasına benzer şekilde, bir yalıtkan gibi

davranış gösterir. O halde, elektronlar suda yalnız tünelleme ile akabilirler. Bu da “su altında” taramalı tünelleme mikroskobu yapmayı mümkün kılar.

Bir örnek olarak Şekil 5. 7. grafit bir yüzeydeki bireysel karbon atomlarını göstermektedir. Bu şekil, iyonlar için çok iletken fakat elektronlar için yalıtkan bir davranış gösteren bir gümüş kaplanma çözeltisine daldırılmış bir yüzey için elde edilmiştir.

İletken sondanın kenarları bir yalıtkanla kaplanmıştır, böylece baskın akım sondaya açık uca doğru tünelleme yapan elektronlardan gelir. Bu özel görüntüyü yapmak için kullanılan STM nin tasarımı Şekil 5. 2. de gösterilmiştir. Sonnenfeld ve Schardt bu grafit yüzey üzerindeki atomları, önce onu gümüşle düzgün kaplayarak, sonra yüzey üzerine gümüş atomları “adaları” halinde kaplayarak ve daha sonra da elektrokimyasal olarak yüzeyden gümüşü çıkararak gözlediler. Onların çalışması, atomik bir ölçekte yer alan olayları görmek ve anlamak için taramalı tünelleme mikroskobundan umulanı açıkça ortaya koymaktadır.

Şekil 5. 8. Bir Taramalı Tünelleme Mikroskobuyla “Görüntülenmiş” Grafit Yüzeyi. Bu Teknik Bilim Adamlarına, 2 Å lük Bir Ayırma Gücü İle, Yüzeylerdeki Küçük Ayrıntıları Görme Olanağı Verir. Burada Görünen Yüzey Çizgileri Kristal Yüzeyindeki Bireysel Atomların Yerleşimini Temsil Etmektedirler.

İlk STM'ler birer laboratuvar aygıtı niteliğinde iken kısa zaman önce ticari STM'lerde hizmete sunuldu. Şekil 5. 8. böyle bir ticari STM ile havada yapılmış grafit bir yüzeyin görüntüsüdür. Bu görüntünün yüksek niteliğine ve karbon atomlarının fark edilebilir halkalarına dikkat ediniz. Her bir halka içinde, altı karbon atomundan üçünün diğer üçünden daha aşağıda ortaya çıktığını görebilirsiniz. Gerçekte altı atomun hepsi aynı düzeydedir fakat daha aşağıda görünen üçü doğrudan altında alt atom tabakasında bulunan karbon atomlarına bağlıdırlar. Daha yüksek görünen atomlar için, atomlara bağlananlarla ilgili elektron yoğunluğunun bir kısmı yüzeyin altı yerine üzerindeki boşluğa doğru uzanır. STM haritası elektron yoğunluğunun topografisi olduğundan, bu fazla elektron yoğunluğu, Şekil 5.8. de bu atomları daha yüksek gösterir.

Şekil 5. 9. STM nin Teknolojik Uygulama Örnekleri. **a)** Bir Altın Kırınım Ağı Kalıbının 6,6 nm lik Bir Taraması. Ağ Milimetrede 375 Çizgiye Sahiptir Ve Basamaklar 120 nm Yüksekliğindedir. **b)** Bir İnce Film Manyetik Kayıtedici Başlığı. Manyetik Malzeme Yaklaşık 0,5 nm Genişliğindedir. Ölçümler, Başka Bir Malzeme Üzerine Sarma Esnasında Yaklaşık Olarak 20 nm Altından Kesildiğini Göstermektedir. **c)** Bir Kompakt Disk Damgalayıcısı, Üzerindeki Yumrular. Bu Resimde Beş Adet İz Görünmektedir. **d)** Bir Elmas Kesme Aletinin Keskin Ağızı. Elmas STM Görüntülemesi İçin Yeteri Kadar İletken Olan 2B Mavi Elmas Tipidir. Bu Şekillerin Hepsinde Ölçekler Nanometredir. Bu Görüntüler NanoscopeII İle De Elde Edilmişlerdir [Hansma et al, 1988].

Ticari aletlerin hizmete sunulmuş olması, taramalı tünelleme mikroskopunun muhtelif uygulamalarda kullanımını hızlandırdı (Şekil 5. 9.). Bu uygulamalar, elektrokimya için elektrotları karakterize etmeyi (elektrot daha elektrolit içinde iken) yüzey dalgalanmalarını yani pürüzlerini karakterize etmeyi, optik süzgeçlerin niteliğini ölçmeyi ve hatta biyolojik yapıların taklitlerini görüntülemeyi içerirler.

Taramalı tünelleme mikroskobu hakkında en dikkate değer şey, çalışma ilkesinin kuantum mekaniksel bir olaya - tünellemeye - dayanmasıdır. Bu olay 1920 li yıllarda iyi anlaşıldığı halde 1980 li yıllara kadar STM yapılamadı.

6. SONUÇ

Bu tez çalışmasında potansiyel kuyuları ve tünel olayı üzerine teorik bilgiler üretilerek, parçacığın dalga fonksiyonu elde edilmiştir. Parçacığın enerjisi, potansiyel engelinden küçükken dahi engeli geçme olasılığı belirtilmiştir. Bu olasılık, parçacığın enerjisine, engelin derinliğine ve genişliğine bağlı olarak elde edilmiştir. Engelin genişliği ile ters orantılıdır. Parçacığın enerjisi engel değerine ne kadar yakınsa geçme olasılığının o kadar yüksek olduğu bulunmuştur.

Kuantize enerjileri seviyeleri ayrımının artan kuyu eni ile azaldığı gösterilerek, kuantum boyut etkisi ortaya konmuştur. Elektron boşluk kuantum kuyularında optik geçişlerin $\Delta n = n_h - n_e = 0$ seçim kuralına uyduğu belirtilmiştir.

Excitonların bağlanma enerjisindeki artışın, sınırlı kuantum kuyularının oda sıcaklığında bile (300°K) exciton etkileri tarafından yönlendirilen optik özellikler kazanmasına neden olduğu sonucuna varılmıştır.

Yarı iletken hetero birleşmeleriyle elde edilen lazerlerde pik kazancının, taşıyıcı yoğunluğuna ve sıkıştırmaya karmaşık bir bağlılık gösterdiği belirtilmiştir.

Dar kuyularda yüksek baskılı sıkıştırmayla daha yüksek iletkenlik bandı elde edildiği bulunmuştur.

Boşluk taşınımını etkileyen faktörler; alaşım düzensizliği ve ara yüz kabalığı olarak elde edilmiştir.

KAYNAKLAR

- 1- Karaoğlu B., Mekaniğine Giriş, B. 4, S. 51-64, 1998
- 2- Gasiorowicz, S., Quantum Physics, John Wiley And Sons, Vol. 9, pp. 155-165, 1974
- 3- Ming-Fu Li, Modern Semiconductor Quantum Physics, Vol. 530, pp. 413-429, 1994
- 4- Dingle, R., Logan, L.A., Arthur, J.R., Jr, Inst. Phys. Conf. Ser. Vol. 33, pp. 210, 1977
- 5- Weisbuch C. And Vinter B. Quantum Semiconductor Structure, Academic Press, Boston, 1991, C. Weisbuch, Semiconductors And Semimetals, Academic Press, New York, Vol. 24, pp. 1, 1987
- 6- Allen, G., Bastard, G., Boccaro, N., Lannoo, M. And Voos, M., Heterojunctions And Semiconductor Superlattices, Springer-Verlag, 1986
- 7- Chow, Koch And Sarget, Semiconductor Laser Physics, Vol. 6, pp. 206-223, 1994
- 8- G.L. And G.E., Pikus, Symmetry And Strain-Induced Effects İn Semiconductors ,Wiley And Sons, New York, 1974,
- 9- Landolt-Bärnstein, Numerical Data And Functional Relationships İn Science And Technology, Vol. 17, 1982
- 10- Addachi, J. Appl. Phys., Vol. 53, pp. 8875, 1982
- 11- Crow, G.C., And Abram, R.A., Monte Carlo Simulations, pp. 7-13, 1999
- 12- Köning, U., Phys. Scr. , Vol. 68, pp. 90, 1996
- 13- Laikhtman, B. And Kiehl, R.A., Phys, Rev. B 47, Vol. 10, pp. 515, 1993
- 14- Schäffler, F. , Semicand. Sci. Technol., Vol. 12, pp. 1515, 1997
- 15- Rieger, M.M. And Vogl, P. Phys, Rev. B 48, Vol. 14, pp. 276, 1993
- 16- Miyata, H., Yamada T. And Ferry D.K. , Appl, Phys. Lett., Vol. 62, pp. 2661, 1993
- 17- Serway, R. A. , Physics, B. 41, S. 1204-1211, 1990
- 18- Binning, G. Rohrer, H. , Ch. Gerber And E. Stoll, Surface Science, Vol. 144, pp. 321, 1984
- 19- Sough, C. G., McNairy, W.W., Coleman, R. V. , Drake B. And Hansma, P.K, Physical Review Vol. 34, pp. 934, 1986

- 20- Sonnenfeld R. And Schardt, B. Applid Physres Letters; Vol. 49, pp. 1172, 1986
- 21- Hansma, P.K., Elings, V.B., Marti O., And Bracker, C.E. , Sience, Vol. 209, pp. 209-216, 1988

ÖZGEÇMİŞ

1977 yılında Sındırgı’da doğdu. 1994 yılında D.E.Ü. Buca Eğitim Fakültesi Fizik Bölümü’nde üniversite eğitime başladı. 1998 yılında bu bölümü başarıyla tamamladı.

1998 yılında M.E.B’na bağlı olarak Kocaeli ilinde Fen Bilgisi Öğretmenliğine başladı. 2000 yılında G.Y.T.E. Fizik Anabilim dalında yüksek lisans programına başladı. Halen M. E. B.’da görev yapmaktadır.