T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TINLAŞIM TÜNELLEME DİYOTLARINDA POTANSİYEL GEOMETRİSİ ETKİLERİ

GÖZDE KALEM

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HESAPLAMALI BİLİMLER ANABİLİM DALI

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Şevket Erol OKAN

EDİRNE-2020

GÖZDE KALEM'in hazırladığı "**TINLAŞIM TÜNELLEME DİYOTLARINDA POTANSİYEL GEOMETRİSİ ETKİLERİ**" başlıklı bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından **Hesaplamalı Bilimler** Anabilim Dalında bir **Yüksek lisans tezi** olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri (Ünvan, Ad, Soyad): İmza

Prof. Dr. Şevket Erol Okan .....

Prof. Dr. Şaban Aktaş .....

Dr. Öğr. Üyesi Deniz Ekşi .....

Tez Savunma Tarihi: / /2020

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

İmza

Tez Danışmanı Prof. Dr. Şevket Erol Okan .....

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

.....

Prof. Dr. Murat Yurtcan

T.Ü.FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HESAPLAMALI BİLİMLER YÜKSEK LİSANS PROGRAMI

DOĞRULUK BEYANI

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında, tüm verilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini, kullanılan verilerde tahrifat yapılmadığını, tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını, kullanılan tüm literatür bilgilerinin bilimsel normlara uygun bir şekilde kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını ve bu tezin tamamı ya da herhangi bir bölümünün daha önceden Trakya Üniversitesi ya da farklı bir üniversitede tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

.... / .... / 2020

Gözde Kalem

…….

Yüksek Lisans Tezi

Tınlaşım Tünelleme Diyotlarında Potansiyel Geometrisi Etkileri

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü

Hesaplamalı Bilimler Anabilim Dalı

ÖZET

Dikdörtgen ve gaussian kesitli potansiyel engel ve kuyu kombinasyonundan oluşan tınlaşım geçişli diyotların elektronik özellikleri tam çözüm yöntemleri ve sayısal çözümleme yöntemleri kullanılarak hesaplanmıştır. Engel-kuyu sayıları ve potansiyel biçimleri ile farklılaştırılmış çeşitli örnekler için akım-gerilim karakteristikleri elde edilmiştir. Bu sonuçlara göre de tınlaşım diyodlarının nasıl düzenlenmesi gerektiği konusunda öneriler sunulmuştur.

Yıl :2020

Sayfa Sayısı :51

Anahtar Kelimeler :Kuantum Tınlaşım Diyotları, Potansiyel Engelleri, Tınlaşım Geçişleri, Potansiyel kuyuları, Akım Gerilim Karakteristikleri

Master of Science

THE POTENTIAL GEOMETRY EFFECTS IN RESONANT TUNNELLING DIODS

Trakya University Institute of Natural Sciences

Department of Computational Sciences

ABSTRACT

The electronic properties of some resonance tunneling diodes, which are the combination of rectangular and Gaussian shaped quantum barriers and wells, have been investigated by using exact solution methods and numerical methods. The current-voltage characteristics for the diode samples, which are diversified by barrier and well numbers in the structure and their potential shapes, have been exhibited. Accordingly, the suggestions are given for the design of the sort of the diodes.

Year : 2020

Number of Pages : 51

Keywords : Quantum Resonance Diodes, Potential Barriers, Potantial Wells, Current-Voltage Characteristics

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmamda bana yardımları dokunan ve her daim yanımda olan danışmanım Prof. Dr. Şevket Erol Okan ve yardımlarını hiç esirgemeyen Prof. Dr. Şaban Aktaş'a teşekkürlerimi sunarım. Son olarak aileme, yakın arkadaşlarıma ve burada sayamadığım herkese sonsuz teşekkürler ediyorum.

İÇİNDEKİLER

Sayfa No:

ÖZET……v

ABSTRACT ……...……...…….……vi

TEŞEKKÜR……...…….……...vii

SEMBOLLER DİZİNİ……...…….……x

ÇİZELGELER DİZİNİ ……...……...……xi

ŞEKİLLER DİZİNİ ……...…xi

BÖLÜM 1: GİRİŞ……..……..…...1

BÖLÜM 2: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARIN BETİMLEMESİ.…….……5

2.1 Düşük Boyutlu Yapılar…….5

2.2 Tınlaşım Tünelleme Aygıtları……...7

BÖLÜM 3: TEORİK İNCELEME…….……...……8

3.1. Basamak potansiyel kuantum sistemi ……8

3.1.a E>Vo durumu……...……..9

3.1.b E<Vo durumu ……...……10

3.2. Potansiyel engel kuantum sistemi……..……....11

3.2.a E>Vo durumu……12

3.2.b E<Vo durumu. ……..……14

3.3. Çift engel potansiyelli yapı……...……...……....17

BÖLÜM 4: SONUÇLAR VE TARTIŞMA……..…24

4.1 Dikdörtgen üstünörgülerde tınlaşım geçişi……....24

4.2. Gaussian potansiyelli üstünörgülerde geçiş katsayısı…….…….....…27

4.3. TTD'lere Dışarıdan Uygulanan Voltajın Etkisi……....…...….29

4.4. *TTD*'de elektrik akım……..……31

4.5 Çeşitli TTD seçimlerinde akım yoğunlukları……....32

KAYNAKLAR ……..…….35

ÖZGEÇMİŞ……...……38

SEMBOLLER DİZİNİ

ħ Planck sabiti

e Elektron yükü

ψ Dalga fonksiyonu

E Enerji

V Potansiyel enerji

m^* Elektronun etkin kütlesi

a^* Etkin bohr yarıçapı

R^* Etkin Rydberg sabiti

$\vec{A}$ Vektör potansiyeli

$\vec{P}$ Momentum vektörü

H Hamilton fonksiyonu

C Sabit sayı

$sin(x)$ Sinüs dalga fonksiyonu

$cos(x)$ Kosinüs dalga fonksiyonu

$sinh(x)$ Sinüs hiperbolik fonksiyonu

$cosh(x)$ Kosinüs hiperbolik fonksiyonu

$\psi_{\text{çift}}$ Çift pisi dalga fonksiyonu

ψ_{tek} Tek pisi dalga fonksiyonu

λ Varyasyonel parametresi

N Normalizasyon katsayısı

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1. Beş potansiyel kuyusu ve dört potansiyel engelden oluşan dikdörtgen üstün örgünün yapı parametreleri. Potansiyel engel ve kuyu kalınlıkları tek tabaka (1 tt=2.83 Å), potansiyel enerji değerleri meV ve etkin kütleler ise serbest elektron kütlesi cinsinden verilmiştir. **……..…….26**

Çizelge 4.2 Dokuz farklı kuantum potansiyel engel ve kuyu sistemlerinin bölgelere göre yapı parametreleri verilmiştir. Birinci sütunda bölgelerdeki kullanılan yarı iletken malzemeler, ikinci sütundaki bu yarı iletkenliklerin kalınlıkları tek tabaka kalınlığı ($1\ tt = 2.83$ Å) cinsinden verilmiştir. Katkı oranları ve etkin kütle değerleri Tablo 4.1'de verilen değerlerle aynı olduğundan burada yansıtılmamıştır. **…….…….32**

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Düşük boyutlu yapıların sınıflandırılması ve gösterimi: (a) yığın yarı iletken kristal, (b) kuantum kuyu, (c) kuantum teli, (d) kuantum noktası. Koyu renkteki bölgeler dış bölgelere göre farklı bileşim veya alaşımla büyütülmüş yarı iletkenleri temsil eder**.....5**

Şekil 2.2 Tınlaşım tünelleme kuantum yapısının içerisinde x yönünde ilerleyen bir elektronun gördüğü potansiyelin temsili gösterimi**…….……...7**

Şekil 3.1 Basamak potansiyel kuantum engelini potansiyel biçimi**…….…….9**

Şekil 3.2 V_0=20 R_y^* değerindeki basamak potansiyel kuantum sisteminde bulunan bir elektronun iki farklı E<V_0 değerleri için yapıdaki olasılık dağılımları. Sol tarafta gelen elektronun enerjisi 5R_y^*, sağ taraftaki grafik ise gelen elektronun enerjisi 19,9R_y^* içindir **…….....…11**

Şekil 3.3 Potansiyel engel kuantum sisteminin potansiyel profili**……..…….11**

Şekil 3.4 $E > Vo$ olan bir elektronun potansiyel engelindeki olasılık dağılımları. Sol tarafta engel genişliği $L = 1\ a^*$, sağ taraftaki grafikte ise $L = 5\ a^*$ alınmıştır. Kesikli çizgiler bariyer kalınlığını temsil etmektedir**……...….14**

Şekil 3.5 $V_0 = 20R_y^*$ değerindeki potansiyel engel yüksekliği için iki farklı $E < V_0$ değerinde elektron olasılık dağılımları. Kesikli çizgiler bariyer kalınlığını temsil etmektedir**……..….16**

Şekil 3.6 Sol tarafta $V_0 = 20R_y^*$ ve L=4a* değerindeki potansiyel engel kuantum sisteminde ilerleyen bir elektronun enerjisine bağlı geçme katsayısı değişimi. Sağ tarafta Vo=50R_y^* ve L=1a* değerindeki potansiyel engel kuantum sisteminde ilerleyen bir elektronun enerjisine bağlı geçme katsayısı değişimi. Kesik çizgili asimptot potansiyel engel yüksekliklerini temsil eder**…….……...…..17**

Şekil 3.7 Çift engel potansiyelli kuantum sisteminin potansiyel profili**…….....…….18**

Şekil 3.8 Bir çift engel sisteminde elektron enerjisinin fonksiyonu olarak geçiş katsayısı. İlk kırmızı nokta tınlaşım geçişinin gerçekleştiği, ikinci kırmızı nokta ise geçiş olasılığının bulunmadığı iki elektron enerjisini belirtir. Kesik çizgili asimptot potansiyel engel yüksekliklerini temsil eder**……..20**

Şekil 3.9 Örneklenen çift engel sisteminde elektron enerjisinin iki $E < V_0$ değerinde olasılık dağılımları. Sol grafik Şekil 3.8 'deki ilk kırmızı nokta ile belirtilen elektron enerjisi, sağdaki ise ikinci kırmızı noktayla belirtilen elektron enerjisi için olasılık dağılımları göstermektedir**……..…….21**

Şekil 3.10 Aynı potansiyel değerlerine ancak farklı engel ve kuyu genişliklerine sahip iki çift engel sisteminde geçiş olasılıkları. Sağ grafikte sol grafiğe göre tüm bileşenlerin genişlikleri yarı yarıya azaltılmıştır. Kesik çizgili asimptot potansiyel engel yüksekliklerini temsil eder**…….……..…22**

Şekil 3.11 Sol tarafta iki engel arasında potansiyel kuyusunun olmadığı sağ tarafta söz konusu kuyunun varlığında geçiş olasılıkları olan sistemde ilerleyen bir elektronun enerjisine bağlı geçme katsayısı değişimleri. Kesik çizgili asimptot potansiyel engel yüksekliklerini temsil eder**…….…..……22**

Şekil 4.1 İncelenen dikdörtgen süper örgünün temsili gösterimi. 'L_i' ile gösterdiklerimiz kalınlık, 'V_i' ile gösterdiklerimiz potansiyel, 'm_i' ile gösterdiklerimiz etkin kütleyi ifade etmektedir**…..……..…..24**

Şekil 4.2 a) Beş potansiyel kuyusu ve dört potansiyel engelden oluşan dikdörtgen üstünörgünün içerisinde x doğrultusunda ilerleyen bir elektronun gördüğü ölçeklenmiş potansiyel profili. b) İncelenen süperörgüde geçiş katsayısının elektron enerjisine bağlılığı**…….……..….26**

Şekil 4.3 Düzgün fonksiyon ile betimlenemeyen bir potansiyel engelin şematik gösterimi ve bu potansiyelin dikdörtgen potansiyellere bölünerek modellenmiş hali**..……....27**

Şekil 4.4 Gaussian engel potansiyelin temsili olarak gösterimi**……...…….28**

Şekil 4.5 Gaussian potansiyel dağılımına sahip olan ve on bir bölgeden oluşmuş sistemin içerisinde x doğrultusunda ilerleyen bir elektronun gördüğü potansiyel profili (a) ve bu sistemden geçen elektronun geçiş katsayısının elektron enerjisine bağlılığı (b)**…….....29**

Şekil 4.6 a) $+1\,V$ ile düz ön gerilimlenmiş söz konusu Gaussian potansiyelli *TTD*'nin potansiyel profili. b) $+1\,V$ ile düz ön gerilimlenmiş *TTD*'nin geçiş katsayısı. c) Şekil 4.6a'nın aynısı ancak $-1\,V$ ile ters ön gerilimlenmiş hali d) Şekil 4.6b'nın aynısı ancak $-1\,V$ ile ters ön gerilimlenmiş hali**…….....…..30**

Şekil 4.7 a) Gaussian biçimli on bir engel ve kuyudan oluşan TTD için düz ve ters ön gerilim uygulandığında oluşan akım yoğunlukları ve potansiyel profilleri. b) Şekil 4.7a'nın aynısı, ancak Gaussian yerine dikdörtgen biçimli engel ve potansiyeller**…….…..31**

Şekil 4.8 a) Tablo 2'de enerji ve geometrik parametreleri verilen *TTD*1'in Gaussian kesitli engel ve kuyulardan oluşan, on bir katmanlı süperörgünün düz ve ters ön gerilim uygulandığında akım yoğunlukları. b) Şekil 4.8.a'nın aynısı, ancak Gaussian kesitli engel ve kuyulardan oluşan *TTD1*. **……..…..33**

Şekil 4.9 a) Tablo 2'de enerji ve geometrik parametreleri verilen *TTD*2'nin Gaussian kesitli engel ve kuyulardan oluşan, dokuz katmanlı süperörgünün düz ve ters ön gerilim uygulandığında akım yoğunlukları. b) Şekil 4.9.a'nın aynısı, ancak Gaussian kesitli engel ve kuyulardan oluşan *TTD2*. **……..34**

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Gelişen teknoloji sayesinde düşük boyutlu yapıların oluşturulması yüksek kaliteli ve daha ucuz üretilebilir hale gelmiştir. Bu söz konusu yarı iletken sistemler, elektronik ve optik devre elemanlarının üretiminde başlıca araştırma konusu olmuştur. Buna bağlı olarak konu üzerindeki teorik çalışmaların sayısı da, zaman ve maliyetten tasarruftaki önemine ilişkin olarak deneysel çalışmalarla birlikte giderek artmaktadır.

En önemli düşük boyutlu yapı örneklerinden birisi Tınlaşım Tünelleme Diyotlarıdır (İng. Resonance Tunneling Diodes) ki bu yapılar süperörgü olarak da isimlendirilir. Bir kuantum kuyusu ile ayrılmış iki kuantum engelinden tınlaşım tünelleme diyotunun elektronik ilk kez 1951 yılında yaklaşıklık yöntemleri kullanılarak hesaplandı (Bohm, 1951). Hesaplamalar, elektronun belirli enerjileri için geçiş katsayısının bire eşit olduğunu, başka bir deyişle iki engelli yapının belirli enerjilerde saydam olduğunu göstermekteydi. Yarı iletken kristallerde tınlaşım geçişi uygulamasının mümkün olup olamayacağı on üç yıl sonra tartışıldı (Iogansen, 1964). Yetmişli yılların başında ise tınlaşım tünellemenin akım-gerilim karakteristiklerine de yansıyabileceği gösterildi (Tsu ve Esaki, 1973)

Daha sonraki yıllarda yapılan çalışmalarda diyot aygıtlarının özelliklerini geliştirmek için, elektron geçişi ve tınlaşım tünelleme olaylarının üzerinde çalışmalar yoğunlaştırılmıştır (Yamamoto, 1987). Düşük güç tüketen, çok hızlı anahtarlama yapabilen tınlaşım tünelleme diyotlarının keşfi ile hızlı çalışabilen ve teknolojik olarak birçok uygulama alanına sahip elektronik devre elemanları üretilebilmektedir (Yamamoto, Miyamoto ve Hayashi 1998). Tınlaşım olayı, bu yapıların içinde bulunan elektronun enerjisi, potansiyel engelden çok daha düşük olmasına rağmen engelden hızlıca geçebilmesidir. Tınlaşım tünelleme olayının hesaplanmasında kullanılan

yöntemlerden birkaçı; transfer matris tekniği (Dai, Ni, Sun ve Wang-2007), Wigner fonksiyonu yöntemi (Zhao ve Yamamoto, 1999, Yamamoto ve Zhao, 2000], Monte Carlo benzetim (İng. Simulation) tekniği (Niketić, Milanović ve Radovanović, 2014 ve Valadares, 1990) olarak verilebilir. Kuyu-bariyer yapıları tınlaşım tünelleme diyotlarının tercih edilmesindeki temel nedene az enerji harcamaları ve hızlı olmalarıdır. Ancak bunun yanı sıra, kuantum tünelleme olayının nano teknolojinin gelişimiyle, kuantum bilgisayarı ve tünelleme mikroskobu gibi cihazların geliştirilmesinde de önemli bir rol oynayacağı öngörülmektedir.

Dikdörtgen kesitli potansiyel yapılarda geçiş katsayısının teorik hesabı, Gaussian dağılımlı potansiyel yapılara göre daha kolaydır. Dikdörtgen kesitli potansiyel sistemlerdeki geçiş katsayıları Yamamoto ve arkadaşları tarafından teorik olarak hesaplanmış ve tınlaşım enerjisinin, sistemde kullanılan yapının fiziksel özelliklerine bağlı olduğu ayrıntılı bir şekilde gösterilmiştir (Yamamoto, Sano, Kanie ve Taniguchi, 1993). Farklı yarıiletkenler kullanılarak yapılan kuantum sistemlerinde de tınlaşım tünelleme ve geçiş katsayıları incelenmiştir. Rezonans tünellemenin lazer ile kontrol edilebilmesinden dolayı bu araştırmalara büyük önem verilmiştir. Lazer alanının geçiş katsayısı ile akım-voltaj üzerindeki etkilerine bakılmıştır. Bariyer kalınlığı arttırıldığında akım yoğunluğunun tepe noktasının düşük voltaj bölgesine doğru kaydığı bulunmuştur (Miyamoto ve Yamamoto, 2000). İkili ve üçlü asimetrik bariyer sistemlerini inceleyen çalışmalarda tınlaşım olayları yapı parametrelerine göre çalışılmış ve iki bariyerli sistemlerde bir tane tınlaşım değeri oluşurken üçlü bariyer sistemlerinde iki tınlaşım değeri oluşmaktadır (Zhao ve Yamamoto, 1999) ve (Yamamoto ve Zhao, 2000). Harici bir manyetik alanda dikdörtgen kuantum kuyularında bulunan bir elektronun dalga fonksiyonlarını, enerjilerini, akım yoğunluklarını ve geçiş tınlaşımlarını incelenmiştir. Yarı iletken malzemeden yapılmış kuantum kuyularının enerji spektrumlarının oluşturduğu tınlaşım durumlarını belirlenmiştir (Niketić, 2020). Tınlaşım tünellemenin lazer alan ile kontrol edilmesi kuantum sistemlerinde ayrıca önemli bir araştırma konusu olmuştur. Bu durum için lazer alanının geçiş katsayısı ve akım-voltaj üzerindeki etkileri incelenmiştir (Valadares, 1990), (Dai, Sun, Wang, 2007) ve (Zhang, Cao, Feng, 2005).

Simetrik ve asimetrik (Ga, Al)As/GaAs yarı iletken malzemelerden tasarlanmış çift bariyerli yapılarda, bir elektronun geçiş katsayısını yoğun lazer alanı altında

incelenmiştir (Aktas, Bilekkaya, Boz ve Okan, 2015). Dışarıdan uygulanan yoğun lazer ile potansiyel görüntüsü değiştirilerek, iletim katsayısının kontrol edilebileceği ve simetrik yapıdaki bir elektronun tınlaşımının, asimetrik yapıya göre daha yüksek olduğunu hesaplanmıştır. Bu yüzden cihaz uygulamalarında simetrik yapıların, asimetrik yapılara kıyasla tercih edilmesi gerektiği ve iletim katsayısının başka bir kontrol mekanizması olmaksızın lazer alan şiddeti değiştirilerek kontrol edilebileceği belirlenmiştir.

Asimetrik kuyulardan oluşturulmuş potansiyel engel kuantum yapılarında tınlaşım tünelleme olayını sayısal hesaplama yöntemi ile araştırılması da bu alanda yapılan çalışmalardandır (Aktas ve Yilmaz, 2016) . Çalışmada yapıdaki bir elektronun geçiş olasılığının bire eşit olması için yapının geometrik parametre sabitlerini optimize edilmiştir. Optimize edilmiş yapılar üzerine yüksek frekanslı ve tek yönde polarize olmuş lazer uygulayarak potansiyel görüntüsündeki değişim gözlenmiştir. Asimetrik kuyu genişliklerinin, derinliklerinin ve lazerin iletim katsayısı ve bekleme süresi üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğunu belirlenmiştir. Diğer bir çalışmada ise GaAs/ $In_xGa_{1-x}As/Al_{0,3}Ga_{0,7}As/In_yGa_{1-y}As$/AlAs/GaAs kuyu-bariyer sistemlerinde bulunan bir elektronun tınlaşım tünelleme olayını, yoğun lazer alanı altında, sayısal hesaplama yöntemleri kullanarak incelenmiştir (Aktas, Kes, Boz ve Okan, 2016). Yoğun lazer alanlarının varlığında, yapının içinde bulunan bir elektronun iletim katsayısını ve bekleme süresini InGaAs kuyularının derinliğine ve genişliğine bağlı olarak bulunmuştur. Tınlaşım tünelleme koşullarındaki geometrik kısıtlamalara rağmen, dışarıdan uygulanan yoğun bir lazer alanının cihazın performansı üzerinde tam kontrol sağladığını belirlenmiştir. Ayrıca, dışarıdan uygulanan lazer şiddetine bağlı olarak tınlaşım enerji değeri seçiminin mümkün olduğunu gösterilmiştir.

Teorik olarak önerilen diyotlarda sabit tınlaşım enerjisi için çeşitli modellemeler gerçekleştirilmiştir (Okan, Boz ve Aktas, 2019). Bu kapsamda alüminyum katkı oranlarına göre dokuz farklı yapı incelenmiştir. Ek olarak, lazer alanın bu yapılar üzerindeki etkileri rapor edilmiştir. Lazer alan uygulamasının bu cihazların uygulamalardaki işlevselliğini zenginleştirdiğini gösterilmiştir. Bunların yanı sıra, dışarıdan uygulanan lazer alanının, tınlaşım diyotlarının akım-gerilim karakteristikleri üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Bunların yanı sıra gauss potansiyel bariyerleri ve

kuyuları tarafından saçılmalar, varyasyonel yaklaşım ve benzetimlerle incelenerek, varyasyonel yaklaşıma dayalı olarak geliştirilen modelin tahminlerini elde edilen sonuçlarla doğrulanmıştır (Umarov, Aklan, Baizakov, Abdullaev, 2016). Bunların yanı sıra bir çift bariyer sisteminden geçen bir Gauss kuantum dalga paketinin açığa çıkardığı tınlaşımlı ve tınlaşımsız yapı spektrumları başlangıç özelliklerinin ve potansiyel parametrelerinin bir fonksiyonu olarak incelemiş ve tünel geçiş zamanlarını da hesaplanmıştır (Petrillo ve Olkhovsky, 2005).

Elektrik alan ile beslenen ters parabolik çift engelli bir yapı için tınlaşım tünelleme teorik olarak incelenmiş, tünel iletim katsayısı ve durum yoğunluğu, sonlu farklar metoduna dayanan denge dışı Green fonksiyon yaklaşımını kullanarak analiz edilmiştir (Batı, Sakiroglu ve Sökmen, 2016). Farklı bir geometrik yapıyla üçgen formlu çift bariyer yapılar ise transfer matris yöntemi ile incelenmiştir (Ohmukai, 2005). İletim katsayısı, yapının içinde bulunan elektron enerjisinin bir fonksiyonu olarak sistematik olarak hesaplaması sonucunda bariyer yüksekliği ve bariyer genişliği gibi çeşitli parametrelerin spektrum üzerine ayırt edici özelliklerde olduğunu vurgulanmıştır. Bariyer kalınlaştığında veya yükseldiğinde, ya da hem kalınlaşıp hem yükselmesi durumunda grafikte tınlaşım tepenin keskinleştiği ve daha yüksek enerji değerine ulaştığını gösterilmiştir. Öte yandan yine üçgen çift bariyerli diyotların tınlaşım tünelleme özellikleri, zamandan bağımsız Schrödinger dalga denkleminde Airy fonksiyon yaklaşımını kullanılarak sistematik olarak incelenmiş, eğinle farklılaştırılmış bu diyotların mutlak sıfır sıcaklığında akım yoğunlukları sayısal olarak hesaplanmıştır (Wang, Xu ve Zhang, 2006). Çalışmada, negatif diferansiyel direnç davranışlarının akım-voltaj karakteristiklerinde gözlendiğini ve akım-voltaj karakteristiklerinin üçgen potansiyelinin eğim genişliğine bağlı olduğunu belirtmiştir. Dışarıdan uygulanan elektrik alan varlığında çok bariyerli yapıların iletkenliği üzerine sıcaklık, bariyer genişliği ve bariyerin yüksekliğinin etkisi de konu üzerinde örneklenebilecek araştırmalardan biridir (Luo, Yu ve Xia, 2015).

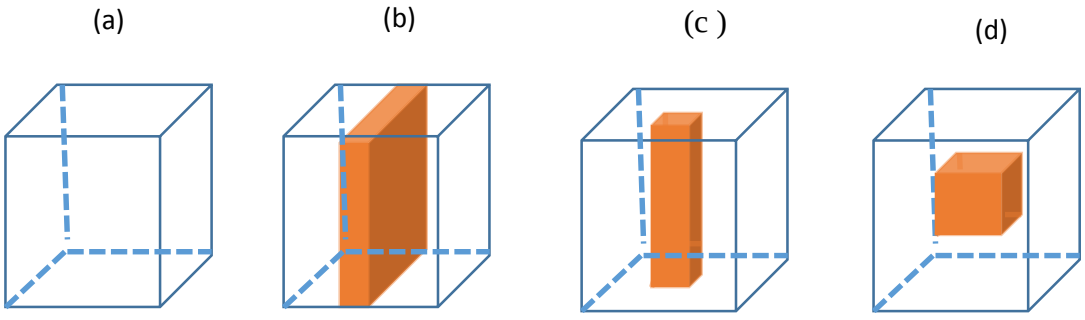
Temel olarak dört potansiyel kuyusu ve beş potansiyel engelinden oluşan dikdörtgen ve Gaussian biçimli tınlaşım geçişli diyotlarda geçiş katsayısı sayısal çözümleme teknikleri kullanılarak hesaplanacaktır. Daha sonra çeşitli diyot örnekleri için akım-gerilim karakteristikleri elde edilecektir.

BÖLÜM 2

DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARIN BETİMLEMESİ

2.1 Düşük Boyutlu Yapılar

Bir yarı iletken yapıdaki iletim elektronlarının ve deşiklerin hareketi kuantum engelleri veya kuantum kuyuları aracılığıyla oluşturulan potansiyeller yardımıyla kontrol edebilir. Bu tür yarı iletken yapı sistemleri düşük boyutlu yapılar olarak isimlendirilir. Düşük boyutlu yapıların sınıflandırılması, kuantum özelikleri, kullanılan malzemenin fiziksel yapısı ve elektriksel özelliklerinin incelenmesiyle yeni uygulama olanakları yaratılmasına aracılık etmektedir. Parçacıkların kuantum sınırlandırması ve yapının özelliklerinin (potansiyel derinlik, potansiyel yükseklik ve potansiyel kalınlığı) değişimleri parçacığın hareketinde davranış değişikliğine yol açar. Bu davranış değişimleri ile yaratılan yeni nano yapı özelliklerinin elektronik cihazlarda kullanımı son yıllarda giderek artmaktadır. Elektronun serbestlik derecesinin sınırlandırılma derecesi düşük boyutlu yapının tipini belirler. Kuantum kuyusu, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak sınıflandırılan bu yapılar Şekil 2.1'de gösterilmektedir.



Şekil 2.1. Düşük boyutlu yapıların sınıflandırılması ve gösterimi: (a) yığın yarı iletken kristal, (b) kuantum kuyu, (c) kuantum teli, (d) kuantum noktası. Koyu renkteki bölgeler dış bölgelere göre farklı bileşim veya alaşımla büyütülmüş yarı iletkenleri temsil eder.

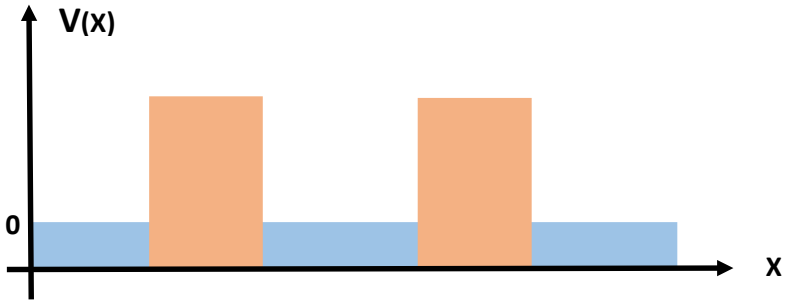
Şekil 2.1 (a) tek cins atomdan ya da tek alaşımdan ibaret bir yarı iletken kristali temsil etmektedir. Kristalin boyutlarının ortalama serbest yola göre çok büyük olduğu varsayılmalıdır. Bu yapının içinde yük taşıyıcılar elektrik alan uygulanma yönüne bağlı olarak her üç boyutta da doğal direnç dışında serbest hareket edebilir. Bu tür yapılara yığın (İng. bulk) kristal denir. Az sayıda taşıyıcı barındırmaları nedeniyle çok yüksek bir dirence sahip olmalarıyla birlikte bant aralıklarını aşan uyarı aldıklarında yeni taşıyıcılar kazanmaktan öteye herhangi bir yarı iletken özelliği göstermezler.

Yük taşıyıcıların tek bir boyutunun kısıtlanması ile oluşan düşük boyutlu yapıya kuantum kuyusu veya engeli denir. Diyot özellikleri gösterebilen böyle bir yapı Şekil 2.1 (b) ile temsil edilmektedir. Burada koyu renk bölge içinde bulunduğu hacme göre farklı bileşimde veya farklı alaşımda büyütülmüş yarı iletken kristalleri gösterir. Geliştirilen teknolojiler sayesinde bu tür yapılar kristal büyütme teknikleri uygulanarak nanometre mertebesinde hassasiyetle üretilebilmektedir. Taşıyıcıların bahse konu şekildeki yapıda sayfa düzleminde soldan sağa hareketleri veya tersi yönelimleri kuantum sınırlaması ile karşılaşırken diğer iki yön olan sayfa düzlemine dik ve sayfa düzleminde düşey yönelimleri bu sınırlamayla karşılanmaz. Şekil 2.1 (c) görüldüğü biçimde farklı yarı iletken bir araya getirilirse elektronun serbestlik derecesi iki boyutta kısıtlanır. Diğer bir boyutta serbestçe hareket edebilir. Bu tür yapılara kuantum telleri denir. Şekil 2.1 (d) deki gibi farklı yarı iletkenler bir araya getirildiğinde elektronun serbestlik derecesi üç boyutta kısıtlanır. Bu tür yapılara kuantum noktası denir.

Elektriksel ve optik özellikleriyle yarı iletkenler elektronik endüstrisinin temel yapıtaşıdır. Modern üretim tekniklerinin gelişmesiyle birkaç nanometre kalınlıkta farklı yarı iletkenler bir araya getirilebilmektedir. Oluşturulan bu yapılarla elde edilen çok verimli ve hızlı elektronik devre elemanları günümüz teknolojisinde kullanılmaya başlanmıştır. Düşük boyutlu yapılarda kullanılan yarı iletken kristal çiftlerinin en bilinenlerinden birisi $GaAs\ /Al_yGa_{1-y}As$ ikilisidir. Buradaki y yarı iletken kristalin içindeki alüminyum konsantrasyonudur. En yaygın olarak kullanılan bu yarı iletkenlerin örgü sabitleri birbirine çok yakındır bu yüzden kolaylıkla birbirleri üstünde büyütülerek taşıyıcıların serbestlik derecelerinin kısıtlandığı düşük boyutlu sistemler üretilebilir.

2.2 Tınlaşım Tünelleme Aygıtları

Kuantum tünelleme, bir elektronun enerjisinin karşılaştığı engel ya da kuyudan daha küçük olduğu halde geçiş yapabilmesidir. Gönderilen elektronun enerjisi bariyerden küçük dahi olsa klasik mekanikteki gibi davranmayıp tünelleme ile bariyeri geçebilme olasılığı vardır. Tek bir kuantum engelinin tünellenmesinde, geçiş katsayısı 1 (bir) olamaz veya tünelleme olasılığı daima %100'den azdır.



Şekil 2.2. Tınlaşım tünelleme kuantum yapısının içerisinde x yönünde ilerleyen bir elektronun gördüğü potansiyelin temsili gösterimi.

Şekil 2.2'deki gibi bir potansiyel görünümü ya da birbirine yakın iki kuantum engelli yapı göz önüne alındığında elektronun belirli ve kesin bazı enerjilerinde ki bu enerji bariyer yüksekliğinden küçüktür iletim katsayısı 1(bir) bulunur. Bu kavram tınlaşım tünelleme olarak isimlendirilir ve deneysel olarak ta gözlenen bir olgudur. Bu nedenle bu tür çok engelli yapılar üzerindeki araştırmalar yaygın olarak sürdürülmektedir.

BÖLÜM 3

TEORİK İNCELEME

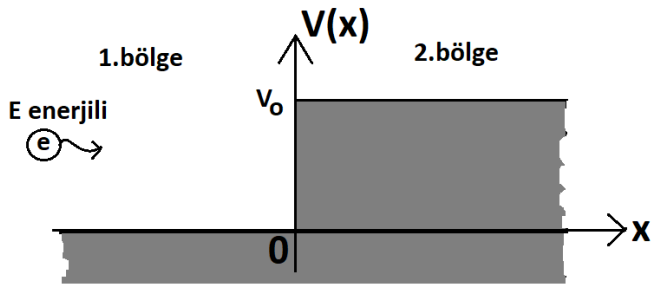
Düşük boyutlu yapılardaki teorik hesaplamalarda tam sonuç elde edilebilen çözümleri, Schrödinger denkleminin katkı atom problemi gibi lineerliğini bozmayan etkileşmeler göz önüne alınmadığında mümkündür. Aksi takdirde ya yaklaşıklık yöntemleri benimsenir ya da sayısal çözümleme gerçekleştirilir. Bu bölümde tam çözüm elde edilebilen problemler sıralanmaktadır. Sayısal çözümlerin tercih edildiği bir durum da tam çözümlerin mümkün olması halinde bile elde edilmesinin zaman sarfı ve hesaplama hatalarından kaçınılması gerektiği problemlerdir. Tam çözümlerle çok uyumlu sonuçlar verebilen sayısal çözümleme tekniklerine tezin izleyen bölümlerindeki çözümlemelerde başvurulmuştur. Bu nedenle bu bölümde incelenen tam çözümlü problemler kuantum kuyu potansiyellerinin oluşturulmasında kullanılan $GaAs$ ve kuantum engellerinin oluşturulmasında kullanılan $GaAs$ ile aynı örgü sabitine ve yapısına sahip $Al_yGa_{1-y}As$ alaşımları üzerinden sergilenecektir. Burada y, galyum yerine GaAs kristaline katkılanan alüminyum konsantrasyonudur. Bu bağlamda $1a^* = \frac{\hbar^2\mathcal{E}^*}{e^2m^*} \cong 100$ Å, $1R_y^* = \frac{e^4m^*}{2\hbar^2\mathcal{E}^{*2}} \cong 5.83\ meV$ Rydberg birim sistemi dönüşümleri üzerinden sonuçlar verilmiştir.

3.1. Basamak potansiyel kuantum sistemi

İki bölgeli basamak potansiyel kuantum sistemini oluşturmak için birinci bölgedeki $GaAs$ üzerine ikinci bölgeye $Al_yGa_{1-y}As$ büyütülerek elde edilebilir. Şekil 3.1 böyle bir kuantum sistemini temsil etmektedir. Matematiksel olarak ise bu profil

$$V(x)=\begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & x>0 \end{cases} \quad (3.1)$$

fonksiyonu ile ifade edilir.



Şekil 3.1. Basamak potansiyel kuantum engelini potansiyel biçimi.

Söz konusu potansiyel için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V_{(x)}\psi(x)=E\psi(x) \quad (3.2)$$

olarak ifade edilir. Denklem ara yüzeyin oluşturduğu koşullar yüzünden bölge için tekrar yazılırsa

1.bölgede (x<0) $$-\frac{\hbar^2}{2m_1^*}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=E\psi_1(x) \quad (3.3)$$

2.bölgede (x>0) $$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+V_0\psi_2(x)=E\psi_2(x) \quad (3.4)$$

biçiminde sınır değer problemlerinin göz önüne alınmasını gerektiren denklem seti elde edilir. Çözümlerin elektron enerjisinin engel yüksekliğinden büyük ya da küçük olduğu iki ayrı durum üzerinden gerçekleştirilmesi gerekir.

3.1.a E>Vo durumu

Denklem 3.3 'de $k_1{}^2=\frac{2m_1^*E}{\hbar^2}$ ve Denklem 3.4'de $k_2{}^2=\frac{2m_2^*(E-V_0)}{\hbar^2}$ dönüşümleri sırasıyla yapılırsa 1.Bölgedeki Schrödinger denklemi çözümü

$$\psi_1(x)=A_1e^{ik_1x}+B_1e^{-ik_1x} \quad (3.5)$$

2.Bölgedeki Schrödinger denklemi çözümü ise

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \tag{3.6}$$

olur. Yansıma ve geçme katsayıları ise $T + R = 1$ olmak üzere $R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2$ ve $T = \frac{k_3}{k_1}\left|\frac{A2}{A_1^2}\right|^2$ ile verilir. Elektron 1.bölgeden 2.bölgeye gönderilmiştir. $x = 0$'dan ötede sağa doğru ilerleyen dalga e^{ikx} koşulu sağlamak için Denklem 3.6'daki e^{-ikx} teriminin katsayısı sıfır olmalıdır. Dalga fonksiyonunun sağlaması gereken $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ ve $\frac{1}{m_1^*}\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{1}{m_2^*}\frac{d\psi_2(0)}{dx}$ süreklilik koşullarından

$$A_1 + B_1 = A_2 \tag{3.7}$$

$$\frac{1}{m_1^*} ik_1(A_1 - B_1) = \frac{1}{m_2^*} ik_2 A_2 \tag{3.8}$$

elde edilir. 3.6 ve 3.7 çözümlerinin kullanılması ile de yansıma ve geçiş katsayıları bulunur.

3.1.b E<Vo durumu

Denklem 3.3'de $k_1^2 = \frac{2m_1^* E}{\hbar^2}$ ve Denklem 3.4'de $k_3^2 = \frac{2m_2^*(V_0 - E)}{\hbar^2}$ dönüşümleri sırasıyla yapılırsa 1.Bölgedeki Schrödinger denklemi çözümü

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \tag{3.9}$$

2.Bölgedeki Schrödinger denklemi çözümü ise

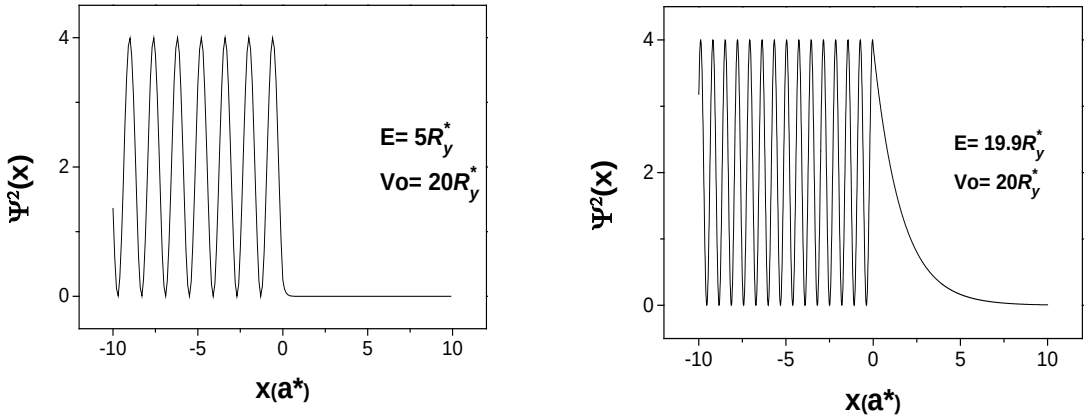
$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_3 x} + B_2 e^{-ik_3 x} \tag{3.10}$$

olur. Yine $B_2 = 0$ olmalıdır. Süreklilik koşulları dikkate alındığında

$$A_1 + B_1 = A_2 \tag{3.11}$$

$$\frac{1}{m_1^*} ik_1(A_1 - B_1) = -\frac{1}{m_2^*} k_3 A_2 \tag{3.12}$$

elde edilir. Gerekli hesaplamalar yapıldığında $R = \left|\frac{B1}{A1}\right|^2 = 1$ olur. Başka bir deyimle elektron E<Vo enerjisiyle mutlak surette yansımaya uğrayacak ve engeli geçemeyecektir. Bu olgu Şekil 3. 2'de olasılık dağılımları üzerinden yansıtılmaktadır.

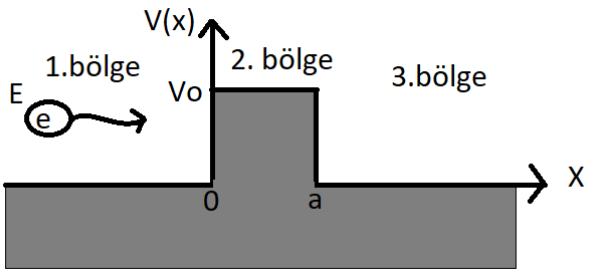


Şekil 3.2. V_0=20 R_y^* değerindeki basamak potansiyel kuantum sisteminde bulunan bir elektronun iki farklı E<V_0 değerleri için yapıdaki olasılık dağılımları. Sol tarafta gelen elektronun enerjisi $5R_y^*$, sağ taraftaki grafik ise gelen elektronun enerjisi $19{,}9R_y^*$içindir.

Görülebileceği gibi enerjinin potansiyel yüksekliğinden küçük olması durumunda potansiyel engelinde ya da $x \geq 0$ bölgesinde elektronun bulunma olasılığı yoktur. Ancak enerji değeri potansiyel yüksekliği ile yaklaşık olduğunda elektronun engel bölgesinde bulunma olasılığı sıfırdan farklı olabilmektedir.

3.2. Potansiyel engel kuantum sistemi

Bir potansiyel engel kuantum sistemine örnek olarak GaAs üzerine belli bir kalınlıkta $Al_xGa_{1-x}As$ ve onun üzerine de yeniden GaAs kristali büyütülerek elde edilen bir yapı verilebilir.



Şekil 3.3. Potansiyel engel kuantum sisteminin potansiyel profili.

Söz konusu kuantum engel sistemi Şekil 3.3'de gösterilmektedir. $Al_yGa_{1-y}As$ kristalinin oluşturduğu L kalınlığındaki engelin x ekseni üzerinde $0 \leq x \leq a$ aralığına yerleştiğini varsayarsak, engel potansiyeli

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq a \; ise \\ 0 & diğer \; yerlerde \end{cases} \tag{3.13}$$

ile ifade edilir. Böylece Şekil 3.3'de gösterilen üç bölgede zamandan bağımsız Schrödinger denklemleri

$$x \leq 0 \;\; (1.bölge) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m_1^*}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1(x) \tag{3.14}$$

$$0 < x < a \; (2.bölge) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m_2^*}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + V_0\psi_2(x) = E\psi_2(x) \tag{3.15}$$

$$x \geq a \;\; (3.bölge) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m_1^*}\frac{d^2\psi_3}{dx^2} = E\psi_3(x) \tag{3.16}$$

olarak ifade edilir. ($m_1^* = 0.0665\, m_o$, $m_2^* = 0.0808\, m_o$)

3.2.a $E > V_0$ durumu

Denklemler 3.14 ve 3.16'da $k_1{}^2 = \frac{2m_1^* E}{\hbar^2}$ ve Denklem 3.15'de $k_2{}^2 = \frac{2m_2^*(E-V_0)}{\hbar^2}$ dönüşümleri

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \tag{3.17}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \tag{3.18}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_2 x}$$
(3.19)

Üçüncü bölgede yansıma olamayacağından bu bölgede elektronu temsil eden dalga fonksiyonu sadece ilerleyen bir dalgadan ibarettir. $\psi_1(x)$ ve $\psi_2(x)$'in $x = 0$'da, $\psi_2(x)$ ve $\psi_3(x)$'ün de $x = a$'da ki süreklilik koşulları dikkate alındığında Denklemler 3.17, 318 ve 3.19'daki B_1, A_2, B_2, A_3 katsayıları $A_1{}'$ e bağlı olarak

$$\alpha_1 = (k_1^2 m_2^2 - k_2^2 m_1^2)^2 cos^2 k_2 a - (k_1^2 m_2^2 + k_2^2 m_1^2)^2 \tag{3.20}$$

$$\beta_1 = -(k_1^4 m_2^4 - k_2^4 m_1^4)\, sin^2 k_2 a \tag{3.21}$$

$$\beta_2 = 2k_1m_2k_2m_1(k_1^4m_2^4 - k_2^4m_1^4)\sin k_2a\cos k_2a \quad (3.22)$$

olmak üzere

$$B_1 = \frac{(\beta_1+i\beta_2)}{\alpha_1}\,A_1 \quad , \quad (3.23)$$

$$\gamma_1 = -k_1m_2(k_1m_2 + k_2m_1)\,[(k_1m_2 - k_2m_1)^2\,sin^2k_2a - 2k_1m_2k_2m_1] \quad (3.24)$$

$$\gamma_2 = -k_1m_2(k_1m_2 + k_2m_1)(k_1m_2 - k_2m_1)^2\sin k_2a\cos k_2a \quad (3.25)$$

olmak üzere

$$A_2 = \frac{(\gamma_1+i\gamma_2)}{\alpha_1}A_1 \quad , \quad (3.26)$$

$$\delta_1 = k_1m_2(k_1m_2 - k_2m_1)\,[(k_1m_2 + k_2m_1)^2\,sin^2k_2a + 2k_1m_2k_2m_1] \quad (3.27)$$

$$\delta_2 = k_1m_2k_2m_1(k_1m_2 + k_2m_1)(k_1^2m_2^2 - k_2^2m_1^2)\sin k_2a\cos k_2a \quad (3.28)$$

olmak üzere

$$B_2 = \frac{\delta_1+i\delta_2}{\alpha_1}A_1 \quad , \quad (3.29)$$

ve son olarak

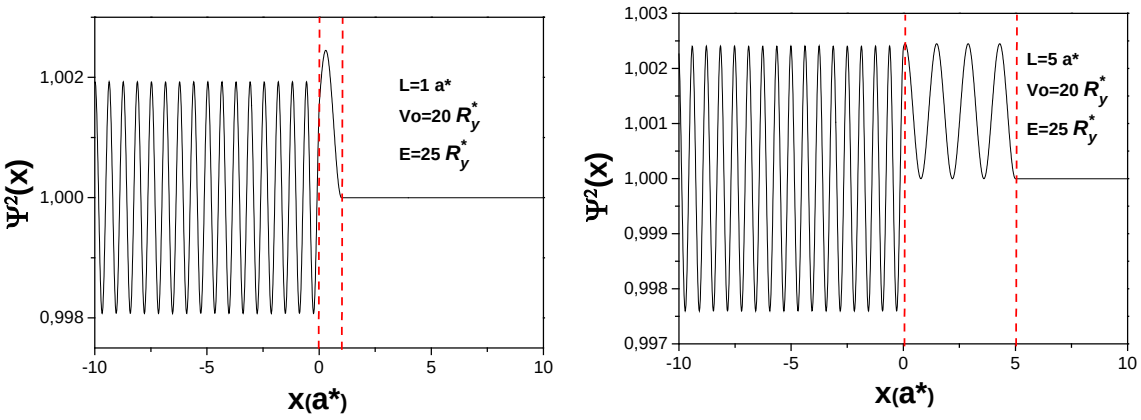
$$\theta_1 = 4k_1^2m_2^2k_2^2m_1^2\,\cos k_1a\cos k_2a + (k_1^2m_2^2 + k_2^2m_1^2)\sin k_1a\sin k_2a \quad (3.30)$$

$$\theta_2 = 4k_1^2m_2^2k_2^2m_1^2\,\sin k_1a\cos k_2a - (k_1^2m_2^2 + k_2^2m_1^2)\cos k_1a\sin k_2a \quad (3.31)$$

olmak üzere

$$A_3 = \frac{\theta_1+i\theta_2}{\alpha_1}\,A_1 \quad (3.32)$$

elde edilir. Bu katsayılar kullanılarak iki farklı engel genişliği için hesaplanan olasılık dağılımları Şekil 3.4'te gösterilmektedir.



Şekil 3.4. $E > Vo$ olan bir elektronun potansiyel engelindeki olasılık dağılımları. Sol tarafta engel genişliği $L = 1\ a^*$, sağ taraftaki grafikte ise $L = 5\ a^*$ alınmıştır. Kesikli çizgiler bariyer kalınlığını temsil etmektedir.

Yukarıdaki ilgili grafiklerden görülebileceği gibi olasılık dağılımı engelin sol tarafında gelen dalganın yansıyan dalga ile girişim sonucu sinüzoidal iken bu görünümü süreklilik koşullarını sağlayarak girdiği engel içinde yine sinüzoidal olarak sürdürmektedir. Ancak $L = 1\ a^*$ iken tek bir dalga biçimine sahipken $L = 5\ a^*$ alındığında dört tepeli bir dalga biçimine sahip olmaktadır. Engelden sağa doğru çıkışta bu bölgede yansıyan dalga olamayacağı için elektronun bulunma olasılığı birim değerde sabitlenmektedir. Başka bir deyimle $E > Vo$ olan elektron %100 olasılıkla yapıda ilerlemeye devam eder.

3.2.b $E < V_0$ durumu

Denklemler 3.14 ve 3.16'da ${k_1}^2 = \frac{2m_1^* E}{\hbar^2}$ ve Denklem 3.15'de ${k_2}^2 = \frac{2m_2^*(V_0 - E)}{\hbar^2}$ dönüşümleri sırasıyla yapılırsa

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \tag{3.33}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x} \tag{3.34}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_2 x} \tag{3.35}$$

$\psi_1(x)$ ve $\psi_2(x)$'in $x = 0$'da, $\psi_2(x)$ ve $\psi_3(x)$'ün de $x = a$'da ki süreklilik koşulları dikkate alındığında Denklemler 3.17, 318 ve 3.19'daki B_1, A_2, B_2, A_3 katsayıları A_1' e bağlı olarak

$$\alpha_2 = (k_1^2 m_2^2 + k_2^2 m_1^2)^2 (\mathrm{e}^{2k_2 a} + 1)^2 - 20 k_1^2 m_2^2 k_2^2 m_1^2 \, \mathrm{e}^{2k_2 a} \tag{3.33}$$

$$\beta_3 = (k_1^4 m_2^4 + k_2^4 m_1^4)(\mathrm{e}^{2k_2 a} + 1)^2 \tag{3.34}$$

$$\beta_4 = -2k_1 m_2 k_2 m_1 \, (k_1^2 m_2^2 + k_2^2 m_1^2)(\mathrm{e}^{4k_2 a} - 1) \tag{3.35}$$

olmak üzere

$$B_1 = \frac{(\beta_3 + i\beta_4)}{\alpha_2} \, A_1 \quad , \tag{3.36}$$

$$\gamma_3 = -2k_1^2 m_2^2 (k_1^2 m_2^2 - k_2^2 m_1^2)(\mathrm{e}^{2k_2 a} - 1) - 4k_1^4 m_2^4 k_2^4 m_1^4 \mathrm{e}^{2k_2 a} \tag{3.37}$$

$$\gamma_4 = 2k_1 m_2 k_2 m_1 \, [2k_1^2 m_2^2 - (k_1^2 m_2^2 + k_2^2 m_1^2)(\mathrm{e}^{2k_2 a} - 1)] \tag{3.38}$$

olmak üzere

$$A_2 = \frac{(\gamma_3 + i\gamma_4)}{\alpha_2} A_1 \quad , \tag{3.39}$$

$$\delta_3 = 2k_1^2 m_2^2 (k_1^2 m_2^2 + k_2^2 m_1^2)(\mathrm{e}^{4k_2 a} - \mathrm{e}^{2k_2 a}) - 4k_1^4 m_2^4 k_2^4 m_1^4 \mathrm{e}^{2k_2 a} \tag{3.40}$$

$$\delta_4 = 2k_1 m_2 k_2 m_1 \, [4k_1^2 m_2^2 + (k_1^2 m_2^2 + k_2^2 m_1^2)(\mathrm{e}^{2k_2 a} - 1)] \tag{3.41}$$

olmak üzere

$$B_2 = \frac{\delta_3 + i\delta_4}{\alpha_2} A_1 \quad , \tag{3.42}$$

ve son olarak

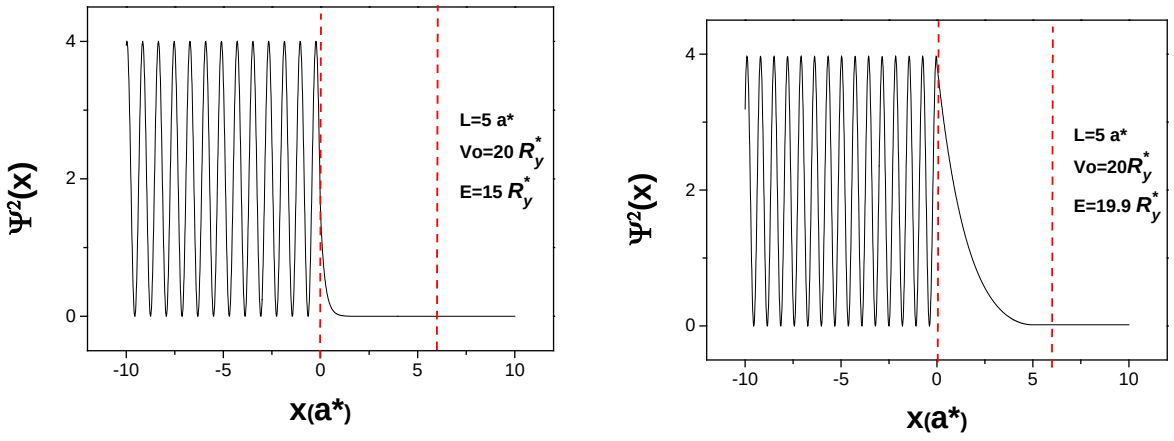
$$\theta_3 = 8k_1^2 m_2^2 k_2^2 m_1^2 \, (\mathrm{e}^{4k_2 a} + \mathrm{e}^{2k_2 a}) \cos k_1 a + 4k_1 m_2 k_2 m_1 (k_1^2 m_2^2 - k_2^2 m_1^2)(\mathrm{e}^{4k_2 a} - \mathrm{e}^{2k_2 a}) \sin k_1 a \tag{3.43}$$

$$\theta_4 = 8k_1^2 m_2^2 k_2^2 m_1^2 \, (\mathrm{e}^{4k_2 a} + \mathrm{e}^{2k_2 a}) \sin k_1 a + 4k_1 m_2 k_2 m_1 (k_1^2 m_2^2 - k_2^2 m_1^2)(\mathrm{e}^{4k_2 a} - \mathrm{e}^{2k_2 a}) \cos k_1 a \tag{3.44}$$

olmak üzere

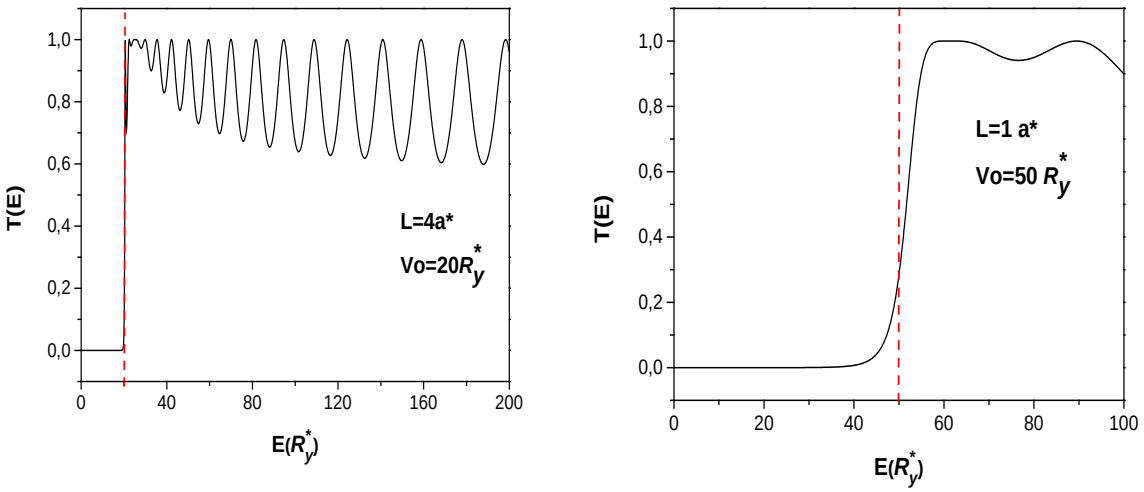
$$A_3 = \frac{\theta_3 + i\theta_4}{\alpha_2} A_1 \tag{3.45}$$

elde edilir. Bu katsayılar kullanılarak sabit bir engel genişliği için hesaplanan olasılık dağılımları Şekil 3.5'te gösterilmektedir.



Şekil 3.5. $V_0 = 20R_y^*$ değerindeki potansiyel engel yüksekliği için iki farklı $E < V_0$ değerinde elektron olasılık dağılımları. Kesikli çizgiler bariyer kalınlığını temsil etmektedir.

Görülebileceği gibi enerjinin potansiyel yüksekliğinden küçük olması durumunda potansiyel engelinden geçiş ya da $x \geq a$ bölgesinde elektronun bulunma olasılığı yoktur. $V_0 = 20\ R_y^*$ engele enerji değeri potansiyel yüksekliğine çok yakın $E = 19{,}9R_y^*$değerinde bir elektronun gönderilmesi durumunda elektron ancak engelin içine geçebilmektedir. Bu geçiş de engelin $x = a$ sınırına doğru sönümlüdür. $E = 19{,}9\ R_y^*$ için ise engelin $x = 0$ sınırına çok yakın bölgesine düşük olasılıklı bir geçiş mümkün olabilmektedir. Sonuç olarak $x \geq a$ bölgesinde olasılık daima sıfır yani ele alınan problem için elektron geçişi mümkün değildir.

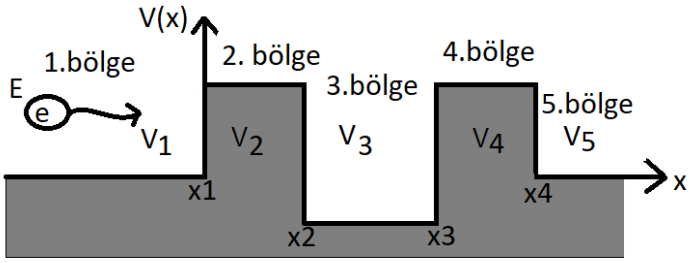


Şekil 3.6. Sol tarafta $V_0 = 20R_y^*$ ve L=4a* değerindeki potansiyel engel kuantum sisteminde ilerleyen bir elektronun enerjisine bağlı geçme katsayısı değişimi. Sağ tarafta Vo=50R_y^* ve L=1a* değerindeki potansiyel engel kuantum sisteminde ilerleyen bir elektronun enerjisine bağlı geçme katsayısı değişimi. Kesik çizgili asimptot potansiyel engel yüksekliklerini temsil eder.

Şekil 3.6 birbirinden farklı iki potansiyel engel kuantum sisteminde ilerleyen bir elektronun geçiş katsayısının elektron enerjisine bağlılığı gösterilmiştir. Her iki sistemde de geçişler potansiyel değerine yakın olduğunda geçiş gerçekleştiği gözlenmekte, potansiyel engelinde $E < V_0$ değerlerinde tünelleme veya tınlaşım geçişinin mümkün olmadığı teyit edilmektedir.

3.3. Çift engel potansiyelli yapı

Çift engelli düşük boyutlu yapılar beş katmanlı kristal büyütme ile gerçekleştirilebilir. Yapı, Şekil 3.7 tarafından temsil edilir. Böyle bir potansiyel kuantum sistemini oluşturmak için birinci bölgeye $GaAs$, ikinci bölgeye L_l kalınlığında $Al_yGa_{1-y}As$, üçüncü bölgeye iki engel arasında potansiyel kuyusu oluşturan L_w kalınlığında $In_yGa_{1-y}As$, dördüncü bölgeye L_l kalınlığında $Al_yGa_{1-y}As$ kristali büyütülerek üretilebilir.



Şekil 3.7. Çift engel potansiyelli kuantum sisteminin potansiyel profili.

Örnek verilen çift engelli yapının genelleştirilmiş potansiyeli

$$V(x)=\begin{cases} V_1(=0) & x \le x_1 \\ V_2(=V_{01}) & x_1 \le x \le x_2 \\ V_3(=-V_0) & x_2 \le x \le x_3 \\ V_4(=V_{02}) & x_3 \le x \le x_4 \\ V_5\,(=0) & x_4 \le x \le x_5 \end{cases} \tag{3.46}$$

olarak yazılabilir. ($m_1^* = m_5^* = 0.0665\, m_o\,, m_2^* = m_4^* = 0.1092\, m_o, m_3^* = 0.0482\, m_o$) Her bölgedeki çözüm için öncelikle Denklem 3.4 ile verilen Schrödinger denkleminde $k_i^2 = \frac{2m_i^*|(V_i - E)|}{\hbar^2}$ dönüşümü yapılırsa, çözümler her bölge için sırasıyla

$$\psi_1(x) = A_1\, e^{k_1 x} + B_1\, e^{-k_1 x} \tag{3.47}$$

$$\psi_2(x) = A_2\, e^{k_2 x} + B_2\, e^{-k_2 x} \tag{3.48}$$

$$\psi_3(x) = A_3\, e^{k_3 x} + B_3\, e^{-k_3 x} \tag{3.49}$$

$$\psi_4(x) = A_4\, e^{k_4 x} + B_4\, e^{-k_4 x} \tag{3.50}$$

$$\psi_5(x) = A_5\, e^{k_1 x} \tag{3.51}$$

olarak yazılabilir. Buradaki dalga fonksiyonları hem sayısal hesaplamaların algoritmasını hem de $E > V_2$ (ve/veya V_4) ve $E < V_2$ (ve/veya V_4) durumlarını aynı anda yansıtabilmek üzere sadece ilerleyen ve yansıyan dalga formlarını içerecek şekilde reel değerlerle genelleştirilmiştir. Gerçekte ise bu problem için hesaplamalarda her iki durumda da $k_1 = ik_1$, $k_3 = ik_3$ kullanılırken, $E < V_2$ (ve V_4) durumunda k_2 ve k_4 reel kalırken $E > V_2$ (ve V_4) durumunda ise $k_2 = ik_2$ ve $k_4 = ik_4$ kullanılır. Katsayıları hesaplamak üzere her

bölgedeki dalga fonksiyonlarına $x = x_j \ \ (j = 1,2,3,4)$ asimptotunda $\psi_j = \psi_{j+1}$ ve $\frac{1}{m_j}\frac{d\psi_j}{dx} = \frac{1}{m_{j+1}}\frac{d\psi_{j+1}}{dx}$ sınır koşullarını uygularsak, $x = x_1$ için

$$A_1\, e^{k_1 x} + B_1\, e^{-k_1 x} = A_2\, e^{k_2 x} + B_2\, e^{-k_2 x} \quad , \tag{3.52}$$

$$A_1 \left(\frac{k_1}{m_1}\right) e^{k_1 x} - B_1 \left(\frac{k_1}{m_1}\right) e^{-k_1 x} = A_2 \left(\frac{k_2}{m_2}\right) e^{k_2 x} - B_2 \left(\frac{k_2}{m_2}\right) e^{-k_2 x} \tag{3.53}$$

denklemleri elde edilir. Denklem 3.52 $\left(\frac{k_1}{m_1}\right)$ ile çarpılıp Denklem 3.53 ile toplanırsa

$$A_1 = e^{(k_2-k_1)x}\left(\frac{k_1 m_2 + k_2 m_1}{2k_1 + m_2}\right) A_2 \ + e^{-(k_2+k_1)x}\left(\frac{k_1 m_2 - k_2 m_1}{2k_1 m_2}\right) B_2 \quad , \tag{3.54}$$

aynı biçimde Denklem 3.52 $\left(\frac{k_1}{m_1}\right)$, Denklem 3.53 (-1) ile çarpılıp birbirleriyle toplanırsa

$$B_1 = e^{(k_2+k_1)x}\left(\frac{k_1 m_2 - k_2 m_1}{2k_1 m_2}\right) A_2 + e^{(k_1-k_2)x}\left(\frac{k_1 m_2 + k_2 m_1}{2k_1 m_2}\right) B_2 \tag{3.55}$$

bulunur. Denklemler 3.54 ve 3.55 matris formunda

$$\begin{vmatrix} A_1 \\ B_1 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}^1 & a_{12}^1 \\ a_{21}^1 & a_{22}^1 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_2 \\ B_2 \end{vmatrix} \begin{bmatrix} e^{(k_2-k_1)x}\left(\frac{k_1 m_2 + k_2 m_1}{2k_1 m_2}\right) & e^{-(k_2+k_1)x}\left(\frac{k_1 m_2 - k_2 m_1}{2k_1 m_2}\right) \\ e^{(k_2+k_1)x}\left(\frac{k_1 m_2 - k_2 m_1}{2k_1 m_2}\right) & e^{(k_1-k_2)x}\left(\frac{k_1 m_2 + k_2 m_1}{2k_1 m_2}\right) \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_2 \\ B_2 \end{vmatrix} \tag{3.56}$$

yazılabilir. Benzer işlemler diğer sınırlarda tekrarlanırsa diğer katsayılar için

$$\begin{vmatrix} A_2 \\ B_2 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}^2 & a_{12}^2 \\ a_{21}^2 & a_{22}^2 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_3 \\ B_3 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} e^{(k_3-k_2)x}\left(\frac{k_2 m_3 + k_3 m_2}{2k_2 m_3}\right) & e^{-(k_3+k_2)x}\left(\frac{k_2 m_3 - k_3 m_2}{2k_2 m_3}\right) \\ e^{(k_3+k_2)x}\left(\frac{k_2 m_3 - k_3 m_2}{2k_2 m_3}\right) & e^{(k_2-k_3)x}\left(\frac{k_2 m_3 + k_3 m_2}{2k_2 m_3}\right) \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_3 \\ B_3 \end{vmatrix} \tag{3.57}$$

$$\begin{vmatrix} A_3 \\ B_3 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}^3 & a_{12}^3 \\ a_{21}^3 & a_{22}^3 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_4 \\ B_4 \end{vmatrix} \begin{bmatrix} e^{(k_4-k_3)x}\left(\frac{k_3 m_4 + k_4 m_3}{2k_3 m_4}\right) & e^{-(k_4+k_3)x}\left(\frac{k_3 m_4 - k_4 m_3}{2k_3 m_4}\right) \\ e^{(k_4+k_3)x}\left(\frac{k_3 m_4 - k_4 m_3}{2k_3 m_4}\right) & e^{(k_3-k_4)x}\left(\frac{k_3 m_4 + k_4 m_3}{2k_3 m_4}\right) \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_4 \\ B_4 \end{vmatrix} \tag{3.58}$$

$$\begin{vmatrix} A_4 \\ B_4 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}^4 & a_{12}^4 \\ a_{21}^4 & a_{22}^4 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_5 \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} e^{(k_5-k_4)x}\left(\frac{k_4 m_5 + k_5 m_4}{2k_4 m_5}\right) & 1 \\ e^{(k_5+k_4)x}\left(\frac{k_4 m_5 - k_5 m_4}{2k_4 m_5}\right) & 1 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_5 \\ 0 \end{vmatrix} \tag{3.59}$$

Birbirine bağlı olan bu matris denklemlerini Denklem 3.59'dan Denklem 3.56 birleştirerek

$$\begin{vmatrix} A_1 \\ B_1 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}^1 & a_{12}^1 \\ a_{21}^1 & a_{22}^1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}^2 & a_{12}^2 \\ a_{21}^2 & a_{22}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}^3 & a_{12}^3 \\ a_{21}^3 & a_{22}^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}^4 & a_{12}^4 \\ a_{21}^4 & a_{22}^4 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_5 \\ 0 \end{vmatrix} \tag{3.60}$$

ya da sonuç olarak

$$\begin{vmatrix} A_1 \\ B_1 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{vmatrix} A_5 \\ 0 \end{vmatrix} \tag{3.61}$$

buluruz. Böylelikle son denklemin kullanılması ile genellikle birim değer olarak kabul edilen A_1cinsinden

$$A_5 = \frac{A_1}{M_{11}} \tag{3.62}$$

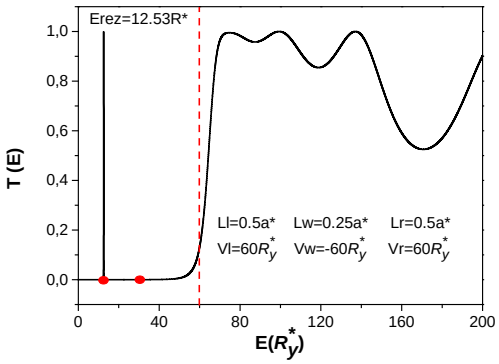
ve

$$B_1 = M_{21} \frac{A_1}{M_{11}} \tag{3.63}$$

elde edilir. Bu ise tüm diğer katsayıların hesaplanabilmesi veya her bölgedeki dalga fonksiyonlarının tam çözüm olarak ifade edilebilmesi demektir. Daha önemlisi ise T+R=1 koşulu altında T geçiş katsayısının

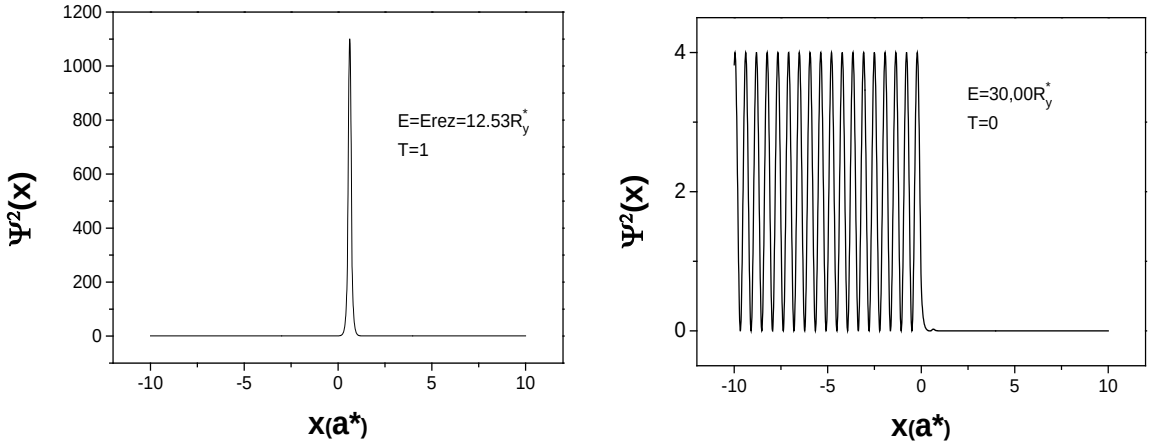
$$T(E) = \frac{k_5}{k_1} \frac{m_1}{m_5} \frac{|A_5|^2}{|A_1|^2} \tag{3.64}$$

olarak bulunmasıdır.



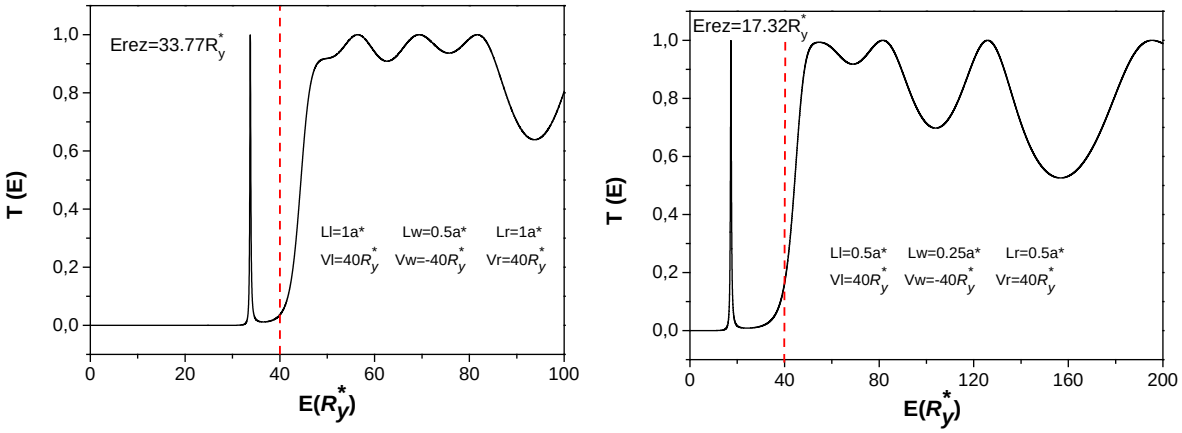
Şekil 3.8. Bir çift engel sisteminde elektron enerjisinin fonksiyonu olarak geçiş katsayısı. İlk kırmızı nokta tınlaşım geçişinin gerçekleştiği, ikinci kırmızı nokta ise geçiş olasılığının bulunmadığı iki elektron enerjisini belirtir. Kesik çizgili asimptot potansiyel engel yüksekliklerini temsil eder.

Şekil 3.8 aynı birinci ve ikinci bariyer yüksekliğinin aynı olduğu ve aynı ölçüde de kuyu potansiyeline sahip çift engel sisteminde geçiş olasılığının elektronun enerjisine göre nasıl değiştiğini betimler. 60 R_y^* engel yüksekliğine rağmen 12.53 R_y^* enerjili bir elektron yüzde yüz olasılıkla ve tünelleme olarak isimlendirilen etkiyle geçiş yapmaktadır. Bu olay tınlaşım tünelleme olarak isimlendirilir. Gözlenen diğer $E > V_0$ geçişleri yukarıda daha önce incelenen mutat geçişlerdir.



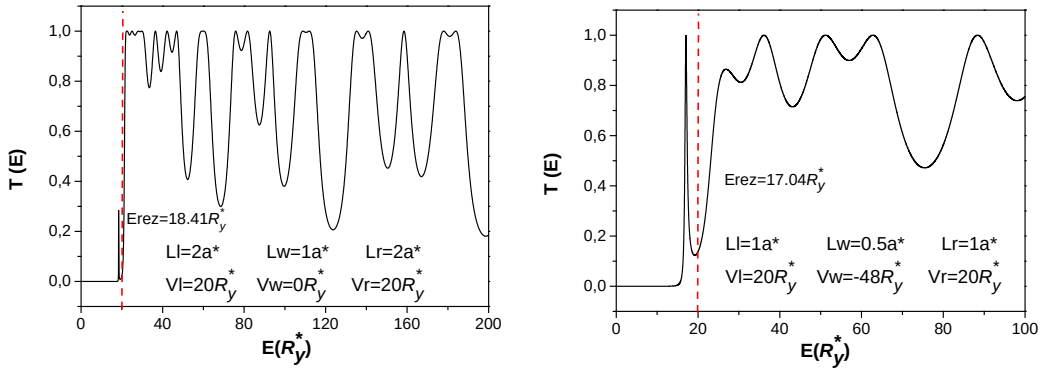
Şekil 3.9. Örneklenen çift engel sisteminde elektron enerjisinin iki $E < V_0$ değerinde olasılık dağılımları. Sol grafik Şekil 3.8 'deki ilk kırmızı nokta ile belirtilen elektron enerjisi, sağdaki ise ikinci kırmızı noktayla belirtilen elektron enerjisi için olasılık dağılımları göstermektedir.

Tınlaşım tünellemenin gerçekleştiği enerji değeri için ve hiçbir geçişin olmadığı bir $E < V_0$ değeri için olasılık dağılımları Şekil 3.9'da verilen iki grafikte gösterilmektedir. Beklendiği şekilde tınlaşım tünelleme enerjisindeki olasılık dağılımı tınlama geçiş olasılığı ile tamamen aynı biçime sahipken diğer grafikte olağan bir tınlaşım dağılımının oluşmadığı $E < V_0$ enerjisindeki dalga fonksiyonun olasılık dağılımı gözlenmektedir.



Şekil 3.10. Aynı potansiyel değerlerine ancak farklı engel ve kuyu genişliklerine sahip iki çift engel sisteminde geçiş olasılıkları. Sağ grafikte sol grafiğe göre tüm bileşenlerin genişlikleri yarı yarıya azaltılmıştır. Kesik çizgili asimptot potansiyel engel yüksekliklerini temsil eder.

Şekil 3.10'da üyelerinin potansiyel enerjileri eşdeğer ancak bariyer ve kuyu kalınlıkları karşılıklı olarak yarı yarıya farklı olan iki farklı çift engel yapısındaki geçişler elektron enerjisine bağlı olarak incelenmektedir. Her iki sistemde de sisteme gönderilen elektronların enerjileri bariyerden daha küçük olmasına rağmen tınlaşım tünelleme olgusunu gerçekleştirdiği görülmektedir. Ancak, verilen parametrelere göre bariyer ve kuyu kalınlığı azaldığında tınlaşım değerinin daha küçük enerjilerde gerçekleşmektedir.



Şekil 3.11. Sol tarafta iki engel arasında potansiyel kuyusunun olmadığı sağ tarafta söz konusu kuyunun varlığında geçiş olasılıkları olan sistemde ilerleyen bir elektronun enerjisine bağlı geçme katsayısı değişimleri. Kesik çizgili asimptot potansiyel engel yüksekliklerini temsil eder.

İki engel arasındaki kuyunun varlığının tınlaşım geçişlerini nasıl etkilediği Şekil 3.11'de gösterilmektedir. Kuyu olmadığında her iki örgüde de tünellemenin gerçekleştiği fakat kuyu olmadığında tınlaşımın gerçekleşmediği geçiş olasılığının birim değerden çok küçük değerlerde olduğu görülmektedir. Bariyer kalınlığı azaltılıp sisteme çekici kuyu eklendiğinde tınlaşım tünelleme gerçekleşmektedir.

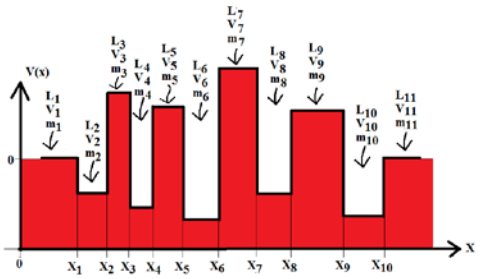
BÖLÜM 4

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

İkiden fazla kuantum engeli ve/veya kuyu potansiyeli barındıran tınlaşım geçiş yapıları süperörgü (İng. superlattice) olarak isimlendirilebilir. Bu tez kapsamında, araştırmalarımıza göre daha önce ele alınmayan, dört engel ve aralarına kuyu yerleştirilmiş bir üstünörgüyü inceleyeceğiz. Ayrıca potansiyel geometrisi veya kristal büyütme geometrisi de üstünörgülerin elektronik özelliklerini değiştirebildiği için dikdörtgen ve Gaussian geometrilerde incelenmektedir.

4.1 Dikdörtgen üstünörgülerde tınlaşım geçişi

Bu kısımda seçilen süperörgü de ki tüm potansiyellerin kare biçimli olduğu varsayılmıştır. On bir kuantum potansiyelinden oluşan söz konusu GaAs tabanlı bu yapı temsili olarak Şekil 3.12'de gösterilmektedir.



Şekil 4.1. İncelenen dikdörtgen süper örgünün temsili gösterimi. 'L_i' ile gösterdiklerimiz kalınlık, 'V_i' ile gösterdiklerimiz potansiyel, 'm_i' ile gösterdiklerimiz etkin kütleyi ifade etmektedir.

Kısım 3.2'de çift engel sistemi için özetlenen matematik ele alınan süperörgü için aşağıdaki gibi genelleştirilebilir. Her bir potansiyel bölgesindeki Schrödinger dalga denklemi çözümleri

$$k_i = \begin{cases} \sqrt{m_i(E - V_i)} & (E > V_i) \\ \sqrt{-m_i(V_i - E)} & (E < V_i) \end{cases} \quad , \quad i = 1,2,3, \dots ,10 \qquad (4.1)$$

olmak üzere

$$\psi_i = A_i e^{k_i x} + B_i e^{-k_i x} \qquad (4.2)$$

olur. $x = x_i$ sınırındaki $\psi_i(x_i) = \psi_{i+1}(x_i)$ ve $\frac{1}{m_i}\frac{d\psi_i}{dx} = \frac{1}{m_{i+1}}\frac{d\psi_{i+1}}{dx}$ süreklilik denklemleri ile katsayılar denklemleri

$$\begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}^i & a_{12}^i \\ a_{21}^i & a_{22}^i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} e^{(k_{i+1} - k_i)x}\left(\frac{k_i\, m_{i+1} + k_{i+1}\, m_i}{2\, k_i\, m_{i+1}}\right) & e^{-(k_{i+1} + k_i)x}\left(\frac{k_i\, m_{i+1} - k_{i+1}\, m_i}{2\, k_1 m_2}\right) \\ e^{(k_{i+1} + k_i)x}\left(\frac{k_i m_{i+1} - k_{i+1}\, m_i}{2\, k_i\, m_{i+1}}\right) & e^{(k_i - k_{i+1})x}\left(\frac{k_i\, m_{i+1} + k_{i+1}\, m_i}{2\, k_i\, m_{i+1}}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} \qquad (4.3)$$

biçimde ifade edilebilir. Böylece 1. Bölgede gelen ve yansıyan dalga ile 11. Bölgede ilerleyen dalga arasındaki ilişki

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \left(\prod_{i=1}^{10} \begin{bmatrix} a_{11}^i & a_{12}^i \\ a_{21}^i & a_{22}^i \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} A_{11} \\ B_{11} \end{bmatrix} \qquad (4.4)$$

veya $M_{ij}(i, j = 1,2)$, Denklem 4.4'deki kare matrislerin çarpımı sonucu çıkan katsayılar varsayımıyla

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} \\ B_{11} \end{bmatrix} \qquad (4.5)$$

olarak ifade edilebilir. Buradan $A_{11} = \frac{A_1}{M_{11}}$ ve $B_1 = M_{21}\frac{A_1}{M_{11}}$ ile geçiş katsayısı T

$$T(E) = \frac{m_1}{k_1}\frac{k_{11}}{m_{11}}\frac{|A_{11}|^2}{|A_1|^2} \qquad (4.6)$$

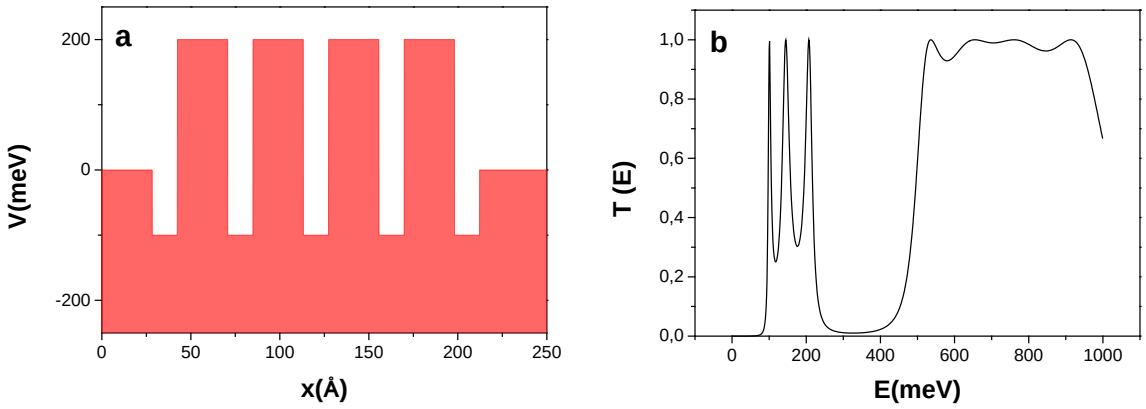
bulunur.

Bu sonuçlardan hareketle incelenen tınlaşım diyotunun fiziksel parametreleri Çizelge 4.1'de verilmektedir. Uygulamaya daha dönük olarak, engel ve kuyu kalınlıkları tektabaka (İng. monolayer) kalınlığı $1\ tt = 2.83$ Å biriminden, potansiyel enerji birimi olarak ise meV kullanılmıştır.

Çizelge 4.1. Beş potansiyel kuyusu ve dört potansiyel engelden oluşan dikdörtgen üstünörgünün yapı parametreleri. Potansiyel engel ve kuyu kalınlıkları tektabaka ($1\ tt = 2.83$ Å), potansiyel enerji değerleri meV ve etkin kütleler ise serbest elektron kütlesi cinsinden verilmiştir.

Katmanlar	L_i/tt		V_i/meV		$y_i/oran$		m_i^*/m_e	
$GaAs$	L_1(giriş)	10	V_1	0	y_1	0	m_1^*	0.0665
$In_{y_2}Ga_{1-y_2}As$	L_2	6	V_2	-100	y_2	0.1083	m_2^*	0.0618
$Al_{y_3}Ga_{1-y_3}As$	L_3	11	V_3	200	y_3	0.2361	m_3^*	0.0910
$In_{y_4}Ga_{1-y_4}As$	L_4	9	V_4	-100	y_4	0.1083	m_4^*	0.0618
$Al_{y_5}Ga_{1-y_5}As$	L_5	8	V_5	200	y_5	0.2361	m_5^*	0.0910
$In_{y_6}Ga_{1-y_6}As$	L_6	10	V_6	-100	y_6	0.1083	m_6^*	0.0618
$Al_{y_7}Ga_{1-y_7}As$	L_7	7	V_7	200	y_7	0.2361	m_7^*	0.0910
$In_{y_8}Ga_{1-y_8}As$	L_8	6	V_8	-100	y_8	0.1083	m_8^*	0.0618
$Al_{y_9}Ga_{1-y_9}As$	L_9	7	V_9	200	y_9	0.2361	m_9^*	0.0910
$In_{y_{10}}Ga_{1-y_{10}}As$	L_{10}	8	V_{10}	-100	y_{10}	0.1083	m_{10}^*	0.0618
$GaAs$	L_{11}(çıkı	10	V_{11}	0	y_{11}	0	m_{11}^*	0.0665

Çizelge 4.1'de parametrelendirilen süperörgünün ölçeklendirilmiş profili Şekil 4.2a'da, elektron enerjisine bağlı olarak geçiş katsayısı ise Şekil 4.2b'de gösterilmektedir.



Şekil 4.2. a) Beş potansiyel kuyusu ve dört potansiyel engelden oluşan dikdörtgen üstünörgünün içerisinde x doğrultusunda ilerleyen bir elektronun gördüğü ölçeklenmiş potansiyel profili. b) İncelenen süperörgüde geçiş katsayısının elektron enerjisine bağlılığı.

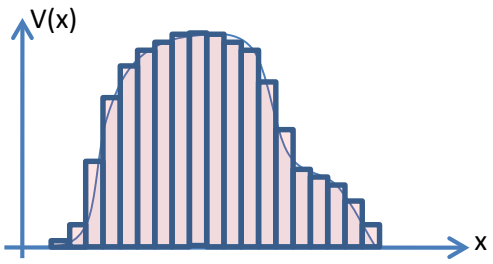
Şekil 4.2a ve b'den görülebileceği üzere, gelen elektron yönü karşılaştığı ilk engel ve sonraki engellerin 200 meV olan yüksekliği göz önüne alındığında enerjisi $E < V_i$ olan iki ve 200 meV civarında bir olmak üzere birinci bölgeden on birinci bölgeye geçebilen üç adet tınlaşım geçişi gözlenmektedir. Bu durum daha önce örneğini verdiğimiz tek olan tınlaşım geçişinden farklı bir durum oluşturmaktadır. Farklı elektron enerjilerinin tınlaşım

geçişi olanaklarının bulunmasının cihaz uygulamalarında avantaj oluşturacağı kesindir. Örneğin böyle bir diyotun ışın detektörü olarak kullanıldığını düşünürsek cihaz üç farklı dalgaboyunda ki ışınları tespit edebilecektir.

4.2. Gaussian potansiyelli üstünörgülerde geçiş katsayısı

Farklı geometrik şekillere sahip potansiyeller ile büyütülmüş Tınlaşım Tünelleme Diyotların (*TTD*) dikdörtgen biçimli potansiyellerle üretilen *TTD*'lere göre ne gibi fiziksel özellik değişimlerine yol açtığı araştırılması gereken bir konudur. Ayrıca üretim sırasından arayüzey kusurlarının oluşabileceği dikkate alındığında her zaman ideal dikdörtgen şekle sahip potansiyeller üretilmesi mümkün olmayabilir veya bu kusurlarında göz önüne alınması gerekebilir. Bu durumdaki potansiyeller integrallenebilir düzgün fonksiyonlar olarak ifade edilemeyeceğinden diyotun fiziksel özelliklerinin tam çözümlerinin bulunması olanaksız hale gelir. Böyle bir potansiyel sistemlerinde her bir potansiyeli yine dikdörtgen potansiyellere bölerek sayısal çözümleme yapılabilir.

Şekil 4.3'de düzgün bir matematiksel fonksiyon ile ifade edilemeyecek rastlantısal bir potansiyel ve sayısal çözümleme yöntemlerini uygulamak için elverişli dikdörtgen potansiyellere ne şekilde bölündüğü gösterilmektedir.



Şekil 4.3. Düzgün fonksiyon ile betimlenemeyen bir potansiyel engelin şematik gösterimi ve bu potansiyelin dikdörtgen potansiyellere bölünerek modellenmiş hali.

Dikdörtgenlere bölme işleminin sayısı ne kadar büyük olursa tam çözümü o kadar gerçekçi modelleyebiliriz. Başka bir deyimle sayı arttıkça hata payı da azalır. Örnek olarak burada her bir engel ya da potansiyel yirmi bir (N=21) dikdörtgene bölünerek hesaplamalar yapılmıştır. Bir önceki kısımda tasvir edilen matris yöntemini bu yeni modele uygulayarak elektronun geçiş katsayısını hesaplayabiliriz.

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \left(\prod_{i=1}^{21} \begin{bmatrix} a_{11}^i & a_{12}^i \\ a_{21}^i & a_{22}^i \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} A_{21} \\ B_{21} \end{bmatrix} \tag{4.7}$$

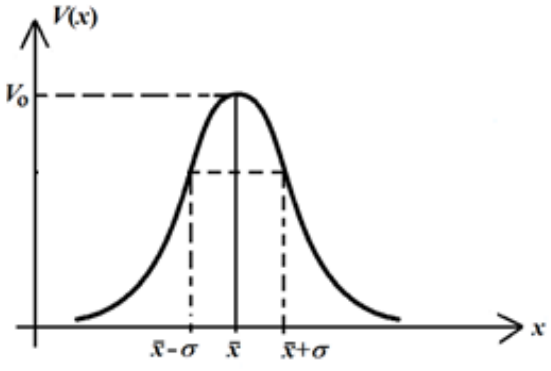
Böylece geçiş katsayısı her bir engel için

$$T(E) = \frac{m_1}{k_1} \frac{k_{21}}{m_{11}} \frac{|A_{21}|^2}{|A_1|^2} \tag{4.8}$$

Dikdörtgen potansiyellere bölerek modellediğimiz yeni sistemimizi sınamak için Çizelge 4.1'de yapı parametreleri verilen on bir bölgeli kuantum bariyer-kuyu sistemi Gaussian biçimli potansiyeller kullanarak ele alınmıştır. Sistemdeki çukur veya engel Gaussian potansiyelleri

$$V_i(x) = V_{0i} e^{-(x-\bar{x_i})^2/(2\sigma_i^2)} \tag{4.9}$$

denklemi ile verilmiştir. V_{0i} on bir (11) bölgenin gaussian potansiyel engel/çukurun maksimum ve minimum değerleridir. L_i engel veya kuyunun taban uzunluğu olmak üzere, $\bar{x_i} = L_i + (\frac{L_{i+1}-L_i}{2})$ her bir bölgedeki Gaussian potansiyelin orta noktalarını veya konumunu belirleyen parametredir. Gaussian potansiyelin yarı değer genişliğini belirleyen parametre σ_i, a genişlik belirleyici parametre olmak üzere $2\sigma_i^2 = \left(\frac{L_i^2}{a}\right)$ denklemiyle bulundu. Hesaplamalarda $a = 25$ seçildi. Denklem 4.9'daki tek bir bölge için Gaussian potansiyeli Şekil 4.4 temsili olarak gösterilmiştir.

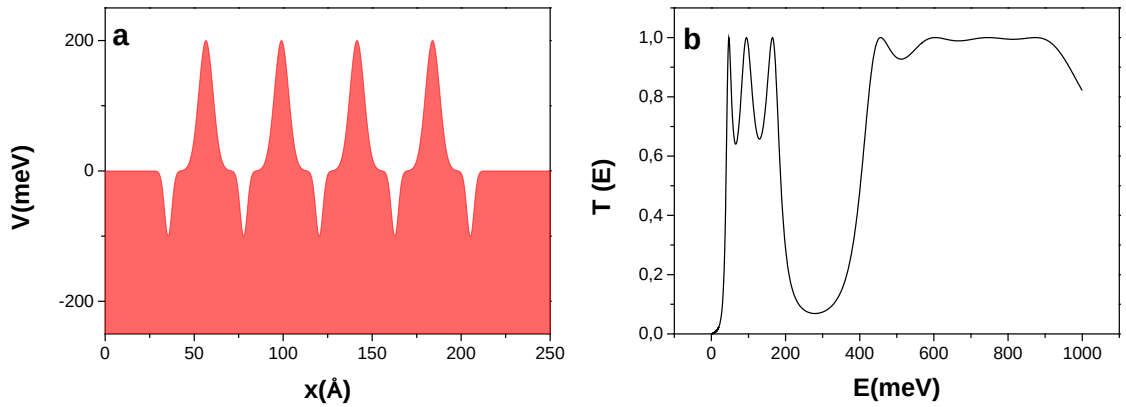


Şekil 4.4. Gaussian engel potansiyelin temsili olarak gösterimi.

Böylece yapının toplam potansiyeli

$$V(x) = \sum_{i=1}^{11} V_i(x) \tag{4.10}$$

olarak elde edilir. Bu yapı $N = 1001$ bölgeye bölünerek dikdörtgen potansiyellerle modellenmiştir. Yaklaşık modeli çözmek için matris çarpımı Fortran programlama diliyle gerçekleştirilmiştir. Çözümlerin sonucu Şekil 4.4a ve b'de verilmektedir. Şekil 4.4a yapının içinde ilerlerken elektronun gördüğü Gaussian biçimli potansiyelleri, Şekil 4.4b ise elektronun birinci bölgeden on birinci bölgeye, elektronun enerjisine bağlı geçiş katsayısını göstermektedir.



Şekil 4.5 a)Gaussian potansiyel dağılımına sahip olan ve on bir bölgeden oluşmuş sistemin içerisinde x doğrultusunda ilerleyen bir elektronun gördüğü potansiyel profili, b) ve bu sistemden geçen elektronun geçiş katsayısının elektron enerjisine bağlılığı

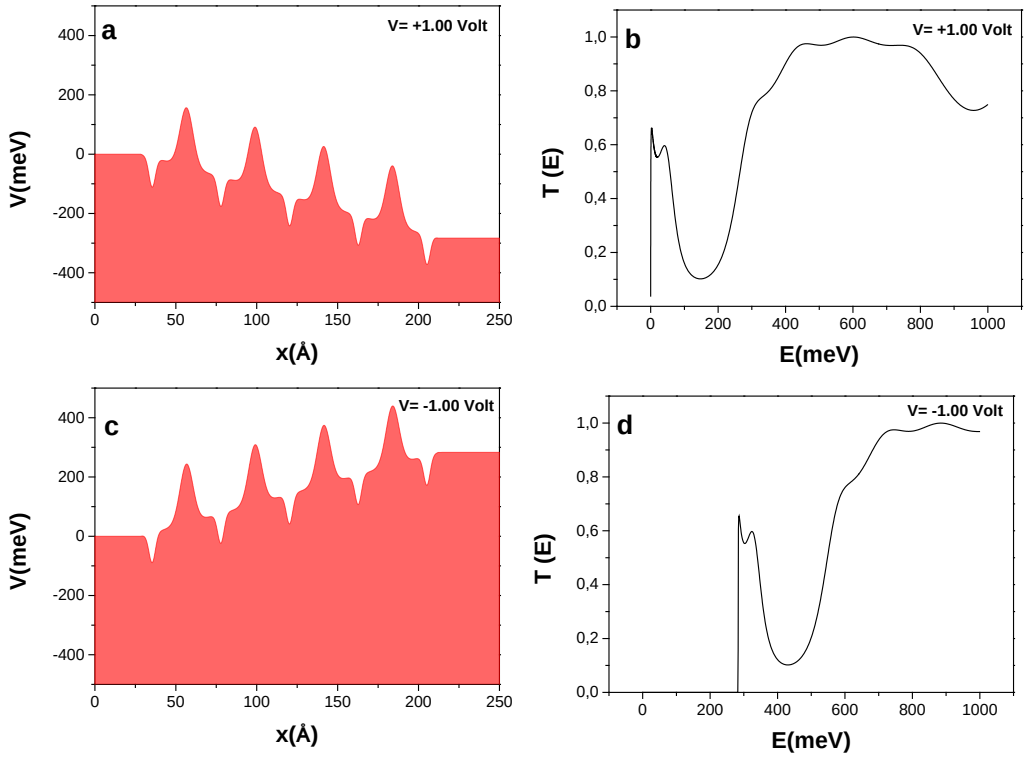
Gelen elektronların enerjisi sistemin potansiyel engel değerinden küçük olmasına rağmen birinci bölgeden on birinci bölgeye geçebilen üç adet tınlaşım olayı görülmüştür. Bir önceki bölümdeki incelenen dikdörtgen potansiyelli örneğin sonuçlarına benzer sonuçlar elde edilmiştir. Ancak Gaussian biçimli potansiyel sisteminde tınlaşım olayı daha küçük enerjilerde gerçekleşmiştir.

4.3. TTD'lere Dışarıdan Uygulanan Voltajın Etkisi

İncelenen bu diyotlar ön gerilimlenerek akım oluşturabilir. Yapıya uygulanan voltaj ile yapının içinde bulunan bir elektronun gördüğü potansiyel profili değişmektedir. Yapıdaki elektrik alanın eklenmesi ile oluşan yeni potansiyel

$$V^{yeni}(x) = V^{eski}(x) - \frac{100\ a^*\ V_a(volt)}{R_y^*\ (L_2+\cdots+L_{10})}\ x \qquad (4.11)$$

ile ifade edilebilir. Bu denklemdeki a^* etkin Bohr yarıçapı ($1a^*$=98.67 Å), R_y^* etkin Rydberg enerjisi ($1\,R_y^* = 5.88meV$) ve $V_a(volt)$ ise sisteme dışarıdan uygulanan gerilimdir. Düz ön gerilimleme olarak isimlendirdiğimiz durum olan diyotun giriş kısmına pozitif V_a gerilimi uygulandığında yapının içinde ilerleyen elektronun gördüğü potansiyel Şekil 4.6a, ters yapıldığında, başka bir deyişle ters ön gerilimleme yapıldığında ise Şekil 4.6c'deki biçimine bürünür.



Şekil 4.6. a) $+1\,V$ ile düz ön gerilimlenmiş söz konusu Gaussian potansiyelli *TTD*'nin potansiyel profili. b) $+1\,V$ ile düz ön gerilimlenmiş *TTD*'nin geçiş katsayısı. c) Şekil 4.6a'nın aynısı ancak $-1\,V$ ile ters ön gerilimlenmiş hali d) Şekil 4.6b'nın aynısı ancak $-1\,V$ ile ters ön gerilimlenmiş hali.

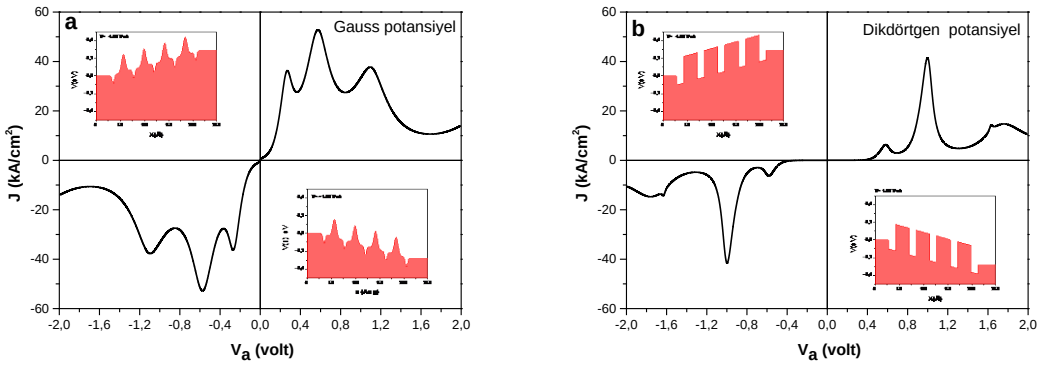
Şekiller 4.6b ve 4.6d incelendiğinde düz ön gerilimleme, geçiş katsayısındaki tınlaşım enerji değerlerini sola kaydırırken, ters ön gerilimlemenin bu değerleri daha büyük elektron enerji değerlerine kaydırdığı gözlenmektedir. Ayrıca, uygulanan elektrik alanın enerjiye bağlı geçiş katsayısı karakteristiğini değiştirdiği, alan olmadığı durumdaki üç tınlaşım pikinin, pozitif veya negatif voltaj uygulandığında iki tınlaşım pikine indirgenmesinden anlaşılmaktadır. Yapı simetrik seçildiğinden geçiş katsayısında karakteristik değişim gözlenmemektedir.

4.4. TTD'de elektrik akım

Elektrik alan uygulanması sonucu *TTD*'lerde oluşan elektrik akım yoğunluğu J , $\frac{kA}{cm^2}$ biriminde

$$J(T_K, V_a) = \frac{em_1^* k_B T_K}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E, V_a) \ln \left\{ \frac{1+\exp\left\{\frac{E_F - E}{k_B T_K}\right\}}{1+\exp\left\{\frac{E_F - E - eV_a}{k_B T_K}\right\}} \right\} dE \qquad (4.12)$$

denklemi ile hesaplanabilir (Miyamoto ve Yamamoto, 1998). Buradaki T_K ortamın sıcaklığını belirler ve 77 K , E_F elektron denizinin 77 K Fermi enerjisidir. $E_F \cong 4\ meV$ alınmıştır. k_B Boltzmann sabitidir. Öncelikle her bir V_a voltaj değerinde $T(E, V_a)$ geçiş katsayıları ve bunlar kullanılarak da denklemde gösterilen integral nümerik olarak hesaplanarak J akım yoğunluğu elde edilir. Çizelge 4.1'de verilen yapı sabitleri kullanılarak Gaussian biçimli potansiyelli *TTD* için akım yoğunluğu Şekil 4.7a'da, dikdörtgen kesitli TTD için ise Şekil 4.7b'de gösterilmiştir.



Şekil 4.7. a) Gaussian biçimli on bir engel ve kuyudan oluşan TTD için düz ve ters ön gerilim uygulandığında oluşan akım yoğunlukları ve potansiyel profilleri. b) Şekil 4.7a'nın aynısı, ancak Gaussian yerine dikdörtgen biçimli engel ve potansiyeller.

Daha önce de karşılaştığımız üzere, her iki *TTD* de simetrik olduklarından bireysel olarak düz ve ters ön gerilimlemede herhangi bir akım yoğunluğu farkı gözlenmemektedir. Bununla birlikte aynı geometrik ve enerji parametrelerine sahip olmalarına rağmen Gaussian *TTD* ile dikdörtgen *TTD* arasında önemli akım yoğunluğu farklılıkları gözlenmektedir. Gaussian TTD'de daha önce geçiş katsayılarının incelenmesi sırasında bulunan üç adet, $E < V_{engel}$ tınlaşım geçişine karşılık gelen akım maksimumları gözlenmekte iken dikdörtgen *TTD*'de geçişlerden birine karşılık gelen

akım çok zayıflayarak kaybolmaktadır. Bununla birlikte dikdörtgen TTD'de net tanımlı bir maksimum akıma karşılık Gaussian *TTD*'de bu netlik azalmakta ve daha geniş bir yayılma olarak karşımıza çıkmaktadır. Daha önce de karşılaştığımız geçişlerin Gaussian *TTD'*de dikdörtgen *TTD*'ye göre daha küçük elektron enerjilerinde gerçekleşmesine paralel olarak, akım yoğunlukları da Gaussian *TTD'*de dikdörtgen *TTD*'ye göre daha küçük ön gerilimlemelerde gerçekleşmektedir.

4.5 Çeşitli TTD seçimlerinde akım yoğunlukları

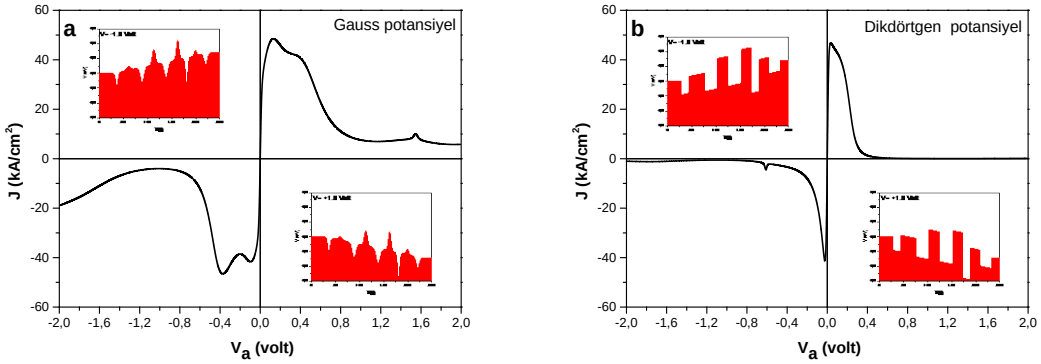
Dört engel ve beş kuyudan oluşan ve yukarıda Gaussian ve dikdörtgen biçimli olarak farklı geometrilerde incelenen simetrik *TTD*'ler ile elde edilen sonuçların anlaşılabilmesi için diğer *TTD* örneklerinin de göz önüne alınması gereklidir. Bunun için katmanlardaki kristalleri ve yabancı atom konsantrasyonlarını değiştirmeksizin asimetrik ve/veya farklı sayılarda engel ve kuyudan oluşan süperörgüler incelenmiştir. *TTD1*, *TTD2*, *TTD3* ve *TTD4* olarak isimlendirdiğimiz bu süperörgülerin enerji ve geometrik parametreleri Çizelge 4.2'de verilmektedir. Hesaplamalarda atomik oranlar ve etkin kütle değerleri Çizelge 4.1'de verildiği şekilde seçilmiştir.

Çizelge 4.2 Dokuz farklı kuantum potansiyel engel ve kuyu sistemlerinin bölgelere göre yapı parametreleri verilmiştir. Birinci sütunda bölgelerdeki kullanılan yarı iletken malzemeler, ikinci sütundaki bu yarı iletkenliklerin kalınlıkları tek tabaka kalınlığı ($1\ tt = 2.83$ Å) cinsinden verilmiştir. Katkı oranları ve etkin kütle değerleri Çizelge 4.1'de verilen değerlerle aynı olduğundan burada yansıtılmamıştır.

Katmanlar	L_i/tt		V_i/meV	*TTD1*	*TTD2*
$GaAs$	L_1(giriş)	10	V_1	0	0
$In_{y_2}Ga_{1-y_2}As$	L_2	6	V_2	-180	–
$Al_{y_3}Ga_{1-y_3}As$	L_3	11	V_3	46	46
$In_{y_4}Ga_{1-y_4}As$	L_4	9	V_4	-201	-201
$Al_{y_5}Ga_{1-y_5}As$	L_5	8	V_5	204	204
$In_{y_6}Ga_{1-y_6}As$	L_6	10	V_6	-198	-198
$Al_{y_7}Ga_{1-y_7}As$	L_7	7	V_7	259	259
$In_{y_8}Ga_{1-y_8}As$	L_8	6	V_8	-359	-359
$Al_{y_9}Ga_{1-y_9}As$	L_9	7	V_9	74	74
$In_{y_{10}}Ga_{1-y_{10}}As$	L_{10}	8	V_{10}	-144	–
$GaAs$	L_{11}(çıkış)	10	V_{11}	0	0

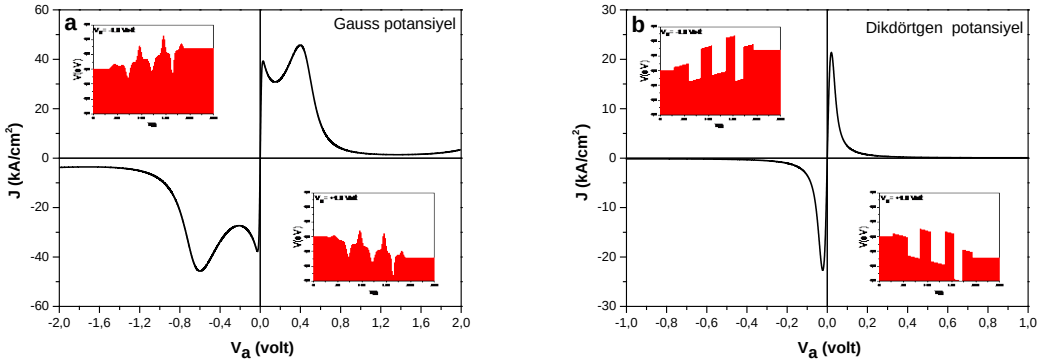
İlk örnek olan *TTD1* yine dört engel ve beş kuyudan oluşurken engel yükseklikleri ve kuyu derinlikleri asimetrik olarak belirlenmiştir. İlişkin akım yoğunlukları Gaussian

TTD1 için Şekil 4.8.a, dikdörtgen *TTD1* için ise Şekil 4.8b'de verilmektedir. Görülebileceği üzere Gaussian potansiyeller ve dikdörtgen potansiyeller arasındaki ayrışmaya ek olarak hem Gaussian potansiyeller hem de dikdörtgen potansiyeller seçimi için düz ve ters gerilimleme arasında da önemli farklılıklar oluşmaktadır. Gaussian TTD1'de ters ön gerilimde düz ön gerilime göre daha net iki maksimum gözlenirken, bu sayı dikdörtgen TTD1'de bire indirgenmekte ve 0,4'ten daha büyük gerilimler için her iki yönde de akım yoğunluğu çok küçülmektedir. Şekil 4.7.a ve b deki simetrik özdeşleriyle karşılaştırdığında ise asimetrik seçimin daha esnek uygulama olanakları sağladığı kesindir.



Şekil 4.8. a) Çizelge 2'de enerji ve geometrik parametreleri verilen *TTD*1'in Gaussian kesitli engel ve kuyulardan oluşan, on bir katmanlı süperörgünün düz ve ters ön gerilim uygulandığında akım yoğunlukları. b) Şekil 4.8.a'nın aynısı, ancak Gaussian kesitli engel ve kuyulardan oluşan *TTD1*.

TTD2 seçiminde potansiyel kuyusu sayısı *TTD1*'e göre giriş ve çıkışta birer tane olmak üzere toplamda iki azaltılmış, böylece asimetrik özellikleri korurken hem potansiyel sayısının değiştiği hem de kuyu yerine engellerin karşılayıcı olduğu örnekleme yapılması hedeflenmiştir. Gaussian biçimli TTD2'nin akım yoğunluğu Şekil 4.9.a, dikdörtgen TTD2'nin akım yoğunluğu ise Şekil 4.9.b'de verilmektedir. Her iki yapıda da düz ve ters ön gerilim arasındaki farklılığın azaldığı ancak bunun tamamen keyfi engel yüksekliği ve kuyu derinliklerinde gerçekleştiği dikkate alınmalıdır. En çarpıcı özellik olarak ise dikdörtgen *TTD2*'de dikdörtgen *TTD1*'e benzer biçimde Gaussian *TTD2*'ye göre maksimum sayısı azalırken, bu defa akım yoğunluğu genliğinin de yarı yarıya azalmasıdır.



Şekil 4.9. a) Çizelge 2'de enerji ve geometrik parametreleri verilen *TTD*2'nin Gaussian kesitli engel ve kuyulardan oluşan, dokuz katmanlı süperörgünün düz ve ters ön gerilim uygulandığında akım yoğunlukları. b) Şekil 4.9.a'nın aynısı, ancak Gaussian kesitli engel ve kuyulardan oluşan *TTD2*.

Sonuç olarak gerek fiziksel olgu olarak son derece önemli bir yere sahip gerekse elektronik uygulamalarında yeni teknolojik gelişmelere yol açabilecek kapasitede olan kuantum fiziğine özgü tınlaşım tünelleme olayı beş adet $In_yGa_{1-y}As$ potansiyel kuyusu, dört adet $Al_yGa_{1-y}As$ potansiyel engeli ile giriş ve çıkış kontakları olarak $GaAs$'den oluşan tınlaşım diyotunda incelenmiştir. Geçiş katsayıları ve akım yoğunlukları bunların engel ve kuyularının Gaussian ve dikdörtgen geometriye sahip olduğu simetrik yapılar için irdelenmiştir. Yapılan seçimlerle $E < V_{engel}$ geçişlerinin sayısının sabit olmadığı ve engel veya kuyu sayısına bağlı olarak kontrol edilebileceği bulunmuştur. Gaussian *TTD*'de dikdörtgen *TTD*'ye göre akım yoğunlukları daha küçük ön gerilimlemelerde gerçekleşmektedir.

KAYNAKLAR

Aktas, S., Bilekkaya, A., Boz, F.K., & Okan, S.E. (2015). Electron transmission in symmetric and asymmetric double-barrier structures controlled by laser fields. *Superlattices and Microstructures*, *85*, 266–273.

Aktas, S., Kes, H., Boz, F.K., & Okan, S.E. (2016). Control of a resonant tunneling structure by intense laser fields. *Superlattices and Microstructures, 98*, 220-227.

Aktas, S., & Yilmaz, M. (2016). Electronic transmission and dwell time on a double barrier system with an accelerating quantum well. *Physica E*, *75*, 47–51.

Bati, M., Sakiroglu, S., & Sokmen, I. (2016) Electron transport in electrically biased inverse parabolic double-barrier structure. *Chinese Physics B, 25*(5), No: 057307

Bohm, D. (1951), *Quantum Theory*. Prentice-Hall: New York.

Dai, Z.H., Ni, J., Sun, Y.M., & Wang, W.T. (2007). *Dynamical behavior of electron transport in AlGaAs/GaAs double-barrier structures under a high-frequency radiation field*, *European Physical Journal B*, *60*, 439–446.

Iogansen, L. V. (1964). *The possibility of resonance transmission of electrons in crystals through a system of barriers*, *Soviet Physics JETP*, *18*(1),146-150.

Luo, M., Yu, G., Xia, L. (2015). Calculation of conductance for triangular multi-barrier structure in a constant electric field, *Superlattices and Microstructures, 83*, 168–175.

Miyamoto, H., Yamamoto, H. (1998). Resonant tunneling in asymmetrical double-barrier structures under an applied electric field, *Journal of Applied Physics, 84*, 311-318.

Niketić, N., Milanović, V., Radovanović, J. (2014). Properties of the resonant tunneling diode in external magnetic field with inclusion of the Rashba effect, *Solid State Communications, 189*, 52–57.

Ohmukai, M. (2005). Triangular double barrier resonant tunneling, *Materials Science and Engineering B, 116*, 87–90.

Okan, S.E., Boz, F.K., Aktas, S. (2019). *Theoretical suggestions of resonant tunneling diodes and laser field effects on their current-voltage characteristics*, Superlattices and Microstructures, 133, No: UNSP 106207

Petrillo, V., Olkhovsky, V.S. (2005). Tunneling time of a Gaussian wave packet through two potential barriers. *Central European Journal of Physics*, *3*(3), 339-350.

Tsu, R., Esaki, L. (1973). Tunneling in a finite superlattice. *Applied Physics Letters*, *22*(11), 562.

Umarov, B.A., Aklan, N.A.B., Baizakov, B.B., Abdullaev, F.K. (2016). Scattering of a two-soliton molecule by Gaussian potential barriers and wells. *Journal of Physics: Conference Series*, *697*, No: 012023.

Valadares, E. C. (1990). Resonant tunneling in double-barrier heterostructures tunable by long-wavelength radiation. *Physical Review B*, *41*(2), 1282-1285.

Wang, H., Xu, H., Zhang, Y. (2006). A theoretical study of resonant tunneling characteristics in triangular double-barrier diodes. *Physics Letters A. 355*, 481–488.

Yamamoto, H. (1987). Tunneling Condition and Transmission Coefficient in a Symmetrical One Dimensional Rectangular Double-Barrier System. *Applied Physics A-Materials Science & Processing*, *42*(3), 245-248.

Yamamoto, H., Miyamoto, K., Hayashi, T. (1998). Analytical Expression for the Tunneling Time in Symmetrical Rectangular Double-Barrier Structures. *Physica Status Solidi b- Basic Research*, *209*, 305-310.

Yamamoto, H., Sano, H. Kanie, Y., Taniguchi, K. (1993). Resonant tunneling and confining phenomena in symmetrical rectangular quadruple-barrier structures**.** *Superlattices and Microstructures*, *13*(1), 29-36.

Yamamoto, H., Tsuji, K., Ikeda, Y., Taniguchi, K. (1995) Theoretical study of resonant tunneling in symmetrical rectangular triple-barrier structures with deep wells. *Materials Science and Engineering B, 35*, 421-428.

Yamamoto, H., Zhao, X.B. (2000). Resonance conditions and independent resonance energy selection in asymmetrical rectangular triple-barrier structures. *Physica Status Solidi B-Basic Research*, *217*(2), 793-804.

Zhang, Y. H., Cao, J. C., Feng, S. L. (2005) Dynamical instability and switching of resonant tunneling device under terahertz radiation, *Journal of Applied Physics*, *98*, 033718.

Zhao, X.B., Yamamoto, H. (1999). Two independent resonance conditions in asymmetrical rectangular triple-barrier structures, *Physica Status Solidi B-Basic Research*, *214*(1), 35-44.

ÖZGEÇMİŞ

Gözde Kalem 1988 yılında İstanbul ’ da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini İstanbul ’ da tamamladı. 2007 yılında Trakya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünde başladığı lisans öğrenimini 2011 yılında tamamladı. 2017 yılında Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Hesaplamalı Bilimler ve Mühendislik bölümünde tezli yüksek lisans öğrenimine başladı. İstanbul ve Edirne ’ de özel öğretim kurumları ve kolejlerde Fizik öğretmeni olarak çalıştı.