T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM KUYU YAPILARDA OPTİK FONON MODLARI

Fatma ÖZÜTOK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KATIHAL FİZİĞİ ANABİLİM DALI

KONYA, 2009

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KUANTUM KUYU YAPILARDA OPTİK FONON MODLARI

Fatma ÖZÜTOK

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Katıhal Fiziği Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Haluk ŞAFAK

2009, 84 sayfa

Jüri : Doç.Dr.Haluk Şafak

Yrd.Doç.Dr.Ömer Faruk Yüksel

Yrd.Doç.Dr.Haziret Durmuş

Son yıllarda, fononlar ve onların hacimsel malzemelerdeki etkileşimleri oldukça dikkat çekicidir. Bu çalışmada, biz alaşım yarıiletkenleri içeren tekli ve çift heteroyapılarda elektron-optik-fonon etkileşimini inceledik. Etkileşim Hamiltoniyeni, Loudon'un tek eksenli kristal modelini ve dielektrik süreklilik modelinin uygulanmasıyla türetilir, bunlar genellikle kesit modları olarak bilinen sınırlı optik fonon modlarının setini verirler. Bu kesit modları dielektrik süreklilik modelinin uygulanması ve herbir heteroarayüzeyde elektrostatik sınır koşullarının etkimesiyle belirlenir. Transfer matrix yaklaşımı da çift-bariyerli heteroyapılarda IF fononlarını anlamak için kullanışlıdır. Özel bir örnek olarak, bu çalışmada GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs malzeme sistemi teorik ve nümerik verilerle çalışıldı.

Anahtar Kelimeler: Optik Fonon, Dielektrik Süreklilik Modeli, Fröhlich Etkileşim Hamiltonyanı, Kuantum Nanoyapılar

ABSTRACT

MC. S. THESİS

OPTİCAL PHONON MODES İN QUANTUM WELL STRUCTURES

Fatma ÖZÜTOK

Selcuk University

Graduate School of Natural and Applied Sciences Department of Physics

Supervisor: Doç. Dr. Haluk ŞAFAK

2009, 84 page

Jury : Doç.Dr.Haluk Şafak

Yrd.Doç.Dr.Ömer Faruk Yüksel

Yrd.Doç.Dr.Haziret Durmuş

Recently, phonons and their interaction in bulk materials gain much more attention. In this work, we investigate the electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures containing alloy semiconductors. The interaction Hamiltonian are derived by applying the uniaxial model of Loudon and the dielectric continuum model, which predicts a set of confined optical phonon modes commonly referred to as the slab modes. These slab modes may be determined by applying the dielectric continuum model and by imposing electrostatic boundary conditions at each heterointerface. The transfer matrix approach is also useful in understanding the IF phonons in the double-barrier heterostructures. For a specific example, in this work the $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ material system is discussed with theoretical and numerical data.

Key Word: Optical Phonon, Dielectric Continuum Model, Fröhlich Interaction Hamiltonian, Quantum Nanostructures

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilmleri Enstitüsü'ne yüksek lisans tezi olarak sunulmuştur. Çalışmam süresince bilgi ve tecrübeleri ile bana her konuda destek olan danışmanım sayın Doç Dr. Haluk ŞAFAK'a en içten teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmada desteklerini esirgemeyen anneme ve babama da teşekkür ederim.

Fatma Özütok

Konya, 2009

İÇİNDEKİLER

ÖZET i

ABSTRACT ii

ÖNSÖZ ii

İÇİNDEKİLER iv

SİMGELER vi

1. GİRİŞ 1

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI 3

3. MATERYAL VE METOT 5

3.1. Hacimsel Kübik Kristallerde Fononlar 5

3.1.1. Kübik yapılar 5

3.1.2. İyonik bağlı polar yarıiletkenler 5

3.1.3. Lineer-zincir modeli 6

3.1.3.1. Yüksek frekanslı ve düşük frekanslı modlar için dispersiyon bağıntıları 7

3.1.3.2. Fononlar için yerdeğiştirme modelleri 9

3.1.3.3. Polarizasyon 10

3.1.3.4. Loudon modelini kübik kristallerde inceleme(Huang-Born teorisi) 13

3.2. Hacimsel Würtzite Kristallerde Fononlar 17

3.2.1. Würtzite yapıdaki fononların temel özellikleri 17

3.2.2. Loudon'un tek-eksenli kristal modeli 21

3.3. Fononlarda Süreklilik Modeli 27

3.3.1. Fononların Dielektrik Süreklilik Modeli 27

3.3.2. Boyutsal olarak sınırlı yapılarda optik modlar 36

3.3.2.1. Kesit modları için dielektrik süreklilik modeliyle arayüzey modlarının normalizasyonu 36
3.3.2.2. Kesit modları için elektron-fonon etkileşimi 43
3.3.2.3. Sınırlı würtzite yapılarda kesit modları.....48
3.3.2.4. Çok heteroarayüzeyli yapılarda transfer matrix modeli.....55
3.3.2.5. Çift-heteroarayüzeyli würtzite yapılarda arayüzey optik fononları 62
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI 67
5. KAYNAKLAR…… 84

SİMGELER

GaAs = Galyum arsenid

AlN = Aliminyum nitrat

GaN = Galyum nitrit

AlAs = Aliminyum arsenid

InP = İndiyum fosfat

ZnO = Çinko oksit

u = İki iyonun nispeten yerdeğiştirmesi

A = Normalizasyon katsayısı

q = Fonon dalga vektörü

ω = Frekans

μ = İndirgenmiş kütle

N = Krisalde birim hücrelerin sayısı

V = Kristal hacmi

$E(r)$ = Elektrik alanı

$D(r)$ = Yerdeğiştirme

$P(r)$ = Polarizasyon alanı

ω_{LO} = Boyuna optik fonon frekansı

ω_{TO} = Enine optik fonon frekansı

$\in(\omega)$ = Dielektrik sabiti

$\in(0)$ = Statik dielektrik sabiti

$\in_{\perp}(\omega)$ = Dik yönde izotropik dielektrik sabiti

$\in_{\parallel}(\omega)$ = Paralel yönde izotropik dielektrik sabiti

θ = q ve c ekseni arasındaki açı

m = Osilatör kütlesi

w_q = Fonon frekansı

u_q = u(r)'nin Fourier dönüşümü

P_q = Fonon momentumu

n_q = q dalga vektörüne sahip olan fononların numarası

$\Phi(r)$ = Optik fonon modlarından kaynaklanan elektrostatik potansiyel

$\Phi(q)$ = $\Phi(r)$ 'nin Fourier dönüşümü

$\phi_{Fr}(r)$ = Fröhlich etkileşimi ile ilgili potansiyel enerji

e_{qj} = $P(r)$ ile ilgili polarizasyon vektörü

H_{Fr} = Fröhlich etkileşim Hamiltonyanı

$\delta_{N_q^{'},N_q}$ = Kronecker delta fonksiyonu

n_n = n bölgesindeki birim hücrelerin sayısı

e^* = Etkin yük

a_q = Alçaltma operatörü

$a_q^{\dagger}$ = Yükseltme operatörü

$\hbar$ = Planck sabiti

$\Psi_n(z)$ = Enerji özdurumları

α_n = Birim hücre başına kutuplanabilirlik

KISALTMALAR

DCM = Dielektrik süreklilik modeli

HS = Half-space

IF = Arayüzey

LO = Boyuna optik

MESFET = Radar cihazlarında katıhal yüksek güç yükselteçlerinde kullanılır

HBT = Hızlı sayısal devreler, osilatörler için uygun cihazlar

POP = Polar optik fonon

PR = Propagating

SL = Süperörgü

TO = Enine optik

QD = Kuantum dot (kuantum nokta)

QW = Kuantum kuyu

1. GİRİŞ

Kuantumlanmış elemanter örgü titreşimleri dalga-parçacık karakterindedir ve burada parçacık özelliği taşıyan kısım fonon olarak isimlendirilir.

Fononlar ve onların hacimsel malzemelerdeki etkileşimleri; fizikte katıhal fiziği, katıhal elektroniği, optoelektronik, ısı transferi, kuantum elektroniği ve süperiletkenlik alanlarında oldukça sık kullanılmasının yanısıra kimya ve biyoloji alanlarında da kullanımı mevcuttur.

Düşük-boyutlu yarıiletken heteroyapılarda optik fonon modları problemi, elektron-fonon etkileşmesi ve saçılması, örneğin; heterobağlanmalar, kuantum kuyular (QW'ler) ve süperörgüler, oldukça dikkat çekmektedir. Çünkü bunlar yarıiletken heteroyapılarla oluşturulan aletlerde kullanılan önemli özelliklerin birçoğuna sahiptir. Ayrıca akustik fonon etkileşimlerinin, materyallerin termal özelliklerini belirlediği de bilinmektedir.

Örneğin, GaAs gibi polar yarıiletkenlerdeki taşıyıcı mobiliteleri ve dinamik süreçler boyuna optik (LO) fononların yük taşıyıcılarıyla olan etkileşimiyle belirlenmektedir. Elektron mobilitesi, elektron-fonon etkileşiminden oldukça etkilenir.

Fononların süperiletkenlerdeki önemine gelirsek; Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) süperiletkenlik teorisi, fononlarca üretilen dolaylı etkileşim sayesinde sınırlanmış elektron çiftlerinden (Cooper çiftleri olarak da bilinir) gelen boson oluşumuna dayalıdır.

Nanoteknoloji şu ana kadar, oda sıcaklığında kuantum dot yarıiletken lazerler, kuantum tel yarıiletken lazerler, terahertz frekans bölgesinde çift-bariyerli kuantum kuyu diodlar, biyolojikal sınıflamalar için kullanılan yarıiletken nanokristaller gibi pekçok keşfe sahiptir. Dahası, nanoölçekli yapı ve aletlerin üretimine yönelik teknoloji giderek gelişmekte ve ihtiyaç artmaktadır. Elektronik ve optoelektronik aletlerde boyutun küçülmesi, çeşidi artan yarıiletkenler ve teknolojideki ilerlemeler bu aletlerin performans seviyeleri ve fonksiyonlarını arttırmak için uygun zemini sağlamaktadır.

Nanoteknoloji, 100 ångstromdan küçük ya da ona eşit bir ya da çok boyutlu alet ve yapının geniş bir alanda çalışılmasına ve üretilmesine imkan vermektedir. Buradaki temel problem, hem boyutsal sınırlamanın bu tür nanoyapılardaki fononlar üzerindeki özelliklere hem de nanoyapılardaki fonon etkileşimlerinin özelliklerine etkisinden dolayı ortaya çıkmaktadır.

Nano-yapılardaki dielektrik ve diğer süreklilik modelleri; deformasyon potansiyelini, Fröhlich'i ve piezoelektrik etkileşimlerini (kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktalarını içeren) farklı nanoyapılarda tanımlamak için uygundur. Bu etkileşimler, malzemelerin elektronik, optik ve akustik özelliklerini belirlemede önemli bir rol oynamaktadırlar.

Tezin birinci bölümünde hacimsel kübik kristallerde fononlar anlatılmaktadır. Dispersiyon bağıntısı, Lyddane-Sachs-Teller bağıntısı ve Huang-Born teorisinden bahsedilen bölümdür.

Tezin ikinci bölümünde hacimsel würtzite kristallerde fononlar anlatılmaktadır. Bu bölümde, hacimsel würtzite yapılardaki fononların temel özellikleri üzerine düşünülmekte ve tek-eksenli kristallerin özellikleri würtzite nanoyapılardaki Fröhlich potansiyellerini belirlemek amacıyla kullanılmaktadır.

Tezin üçüncü bölümünde fononlarda dielektrik süreklilik modelinden bahsedilmektedir. Özellikle arayüzey (IF) optik fononları üzerinde durulmuştur.

Araştırma sonuçları bölümünde üç bölgeli bir kuantum heteroyapı için fonon frekansları ve potansiyel değerleri teorik ve nümerik olarak hesaplanmıştır.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Lyddane ve ark. (1941) Lyddane-Sachs-Teller bağıntısında statik dielektrik sabitiyle frekanslar arasındaki ilişkiyi vermişlerdir.

Fröhlich (1954); Fröhlich Hamiltoniyeni ifadesini vererek fizikte yeni bir sayfa açmıştır. Bu ifade, elektron-fonon etkileşiminin tespitinde temel oluşturmuştur,

$$H_{Fr} = -i\sum_{q} V_q (a_q + a_{-q}^{\dagger}) e^{-iq.r}$$

Born ve Huang (1954) verdikleri makroskopik denklemlerle P elektrik polarizasyonu ve E elektrik alanı arasında bir ilişki tespit etmişlerdir. Loudon (1964) tek eksenli kutupsal bir kristalin makroskopik denklemlerini tanımlayan kullanışlı bir model vermiştir.

Dielektrik süreklilik modeli (DCM) Fuchs ve Kliewer (1965) tarafından verildi. Daha sonra pek çok bilim adamının hacimsel ve heteroyapılarda optik fonon modları çalışması yaparken bu modeli seçmelerinin nedeni basitliği ve deneysel sonuçlarla uyuşmasıydı. Licari ve Evrard (1977) DCM yi fonon modları üzerindeki elektronik polarizibilite konusunu incelemek için kullandılar. DCM modeliyle beraber kullanılan Loudon'un (1964) tek eksenli kristal modeli, yapılan bazı teorik araştırmalarla würtzite heteroyapılarda polar optik fononların özelliklerini belirledi. Loudon'un denklemlerine ilaveten klasik elektrostatik denklemleriyle Licari ve ark. (1977) hacimsel bir yarıiletken için sınır koşullarını, elektron-fonon etkileşim Hamiltoniyenine uygulayarak, elektron-fonon etkileşim Hamiltoniyenine dair çok aydınlatıcı fiziksel bir türetim sundular.

Mori ve Ando (1989) çift-heteroarayüzlü yapılar için bütün bir optik fonon modlarının setini vermişlerdir. Bu Hamiltoniyen Q2D'da elektron-fonon etkileşmesinin daha doğru tanımlanmasını sağladı. Kim ve Stroscio (1990) ikili/üçlü yapılar için ($GaAs/Al_yGa_{1-y}As$), y'nin 0.01 ve 0.99 aralığındaki değerleri için, arayüzey modlarının 3 normal mod frekansına sahip olduğunu gösterdiler. Bölge 1'deki frekansın GaAs

modlarından, bölge 2'deki frekanslardan birinin GaAs –benzeri ötekinin AlAs-benzeri modlardan geldiğini gösterdiler.

Çok hetero-arayüzlü yapılar için analitik çözümler elde etmek zordu. Transfer matrix metodu (TMM) würtzite ve heteroyapılarda analitik çözümlerin zor elde edildiği yerlerde Stroscio ve ark. (1997) tarafından verildi. Ayrıca transfer matrix yaklaşımı, yeni tür elektronik diyotlar ve transistörlerle ilişkili olarak yaygın bir şekilde tartışılan çift-bariyerli heteroyapılardaki IF fononlarını anlamak için de yarar sağlamıştır. Yu ve ark. (1997), tranfer matrix metoduyla farklı yarıiletken tabakaları ayıran çoklu paralel hetero-arayüzeyleri içeren heteroyapılar için, normalizasyon koşullarına ilişkin oldukça yararlı bir denklem seti ürettiler.

Shi ve ark. (1995) IF optik fonon modları, boyuna optik fonon modları ve onların elektronlarla etkileşmini transfer matrix metoduyla(TMM) 4 tabakalı heteroyapıda (FFLHS) araştırmışlardır. Dutta ve ark.(1998) würtzite GaN yapısı için dielektrik süreklilik modeli çerçevesinde elektron-optik fonon etkileşimini çalıştılar. Elde edilen sonuçlardan birisi şudur; böyle würtzite malzemelerde toplam Fröhlich saçılma oranları açıkça zincblende malzemeler için elede edilen oranlardan yöne bağlı düzeltmeler vasıtasıyla %10 oranında sapmaktadır.

Stroscio ve ark. (1999-2004 yılları arasında) würtzite ve heteroyapılarda fononlar ve elektron-fonon etkileşmelerine dair sistematik araştırma yaptılar. Fonon dispersiyon bağıntısının analitik ifadesini ve incelenen yapılarda elektron-optik-fonon saçılım oranını türettiler. Shi ve ark. (2003-2004) GaN /$Al_xGa_{1-x}N$ kuantum kuyularda (QWs) hem interface (IF) hem de propagating (PR) modlarını çalıştılar.

Würtzite GaN/AlN kuantum noktalarında (QDs) elektron-fonon etkileşmeleri ve polar optik fonon modları Fonoberov ve ark. (2004) tarafından araştırılmıştır. Aynı çalışmayı süperörgülerde (SLs) Gleize ve ark. (1999), kuantum nokta ve kuantum kuyularda (QDs/QWs) Comas ve ark. (2003 - 2004) yapmıştır.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Hacimsel Kübik Kristallerde Fononlar

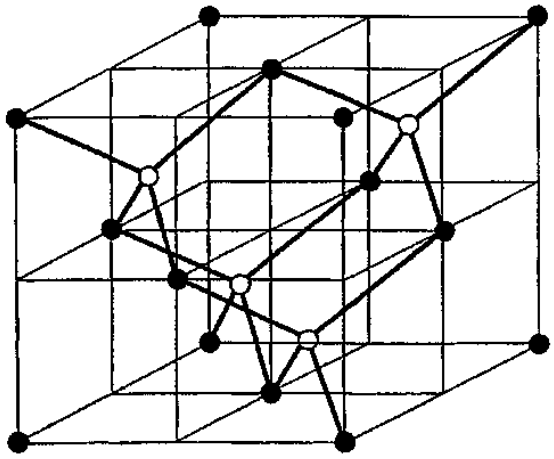
3.1.1. Kübik yapılar

Kübik yapılı kristal yapılar, elektronik ve optoelelektronik alanlarında büyük önem taşımaktadır. Silikon, germanyum ve galyum arsenid gibi zincblende kristaller, iki yüzey-merkezli kübik örgünün (fcc) birbirleriyle göreceli olarak a vektörü kadar (a/4 a/4, a/4) yerdeğiştirmesi olarak kabul edilebilir. Burada a, fcc yapının en küçük birimidir. Şekil 1 zincblende yapıda bir örgüyü göstermektedir.

İlgili olduğumuz konu boyutsal olarak bir, iki veya üç boyutlarda sınırlanması olan kristal yapılardaki fononlar ile ilgilidir. Bir boyutlu sınırlanma kuantum kuyuları, iki boyutlu sınırlanma kuantum telleri ve üç boyutlu sınırlanma kuantum dotlarda gerçekleşir. Boyutsal olarak sınırlı yapılarda fononları incelemeye bir başlangıç olarak, hacimli yapılarda fononların temel durumunun ele alalım.

3.1.2. İyonik bağlı polar yarıiletkenler

Silikonun kristal yapısı şekil 1'de gösterilen zincblende yapıdır. Silikondaki kovalent bağ silikon atomları arasında herhangi net bir yük transferiyle sonuçlanmaz. Bu durum, galyum arsenid (GaAs) gibi polar yarıiletkenler için farklıdır. Çünkü buradaki iyonik bağlanma Grup V arsenik atomlarından grup III galyum atomlarına doğru net yük transferi ile neticelenir. Grup V atomlarının dış yörüngesinde beş elektronu, grup III atomlarının ise dış yörüngesinde üç elektronu vardır. Bu nedenle, galyum bölgeleri net bir negatif yük, arsenik bölgeleri ise net bir pozitif yük kazanır.



Şekil 1. Zincblend kristal. Beyaz ve siyah noktalar farklı fcc örgülerin üstündedir.

3.1.3. Lineer-zincir modeli

Tek boyutlu, çift-atomlu kristalin lineer-zincir modeli, şekil 2'de gösterilen tek-boyutlu zincir boyunca yerleştirilmiş m ve M kütlelerine sahip iki atomlu sisteme dayanır. Kütleler değişimli olarak zincir boyunca yerleşmiştir ve herbirinin arasındaki uzaklık a'dır. Böyle bir zincir üzerinde, tek bir atomun kendi denge konumundan yaptığı yerdeğiştirme, ona komşu olan atomların konumunu bozacaktır.

Ele alınan basit lineer-zincir modelinde, sadece en yakın komşuların birleştirildiği ve bu atomlar arasındaki etkileşimin Hooke kanunu ile tanımlandığı varsayılır. Yay sabiti α, harmonik osilatördeki gibi alınır. Bu model iki atomlu bir örgünün temel özelliklerini tanımlar. Fakat fonon bozunma sürecini tanımlamak için harmonik etkileşimleri anhormanik etkileşimler ile tamamlamak gerekir.



Şekil 2. Bir diatomik örgünün bir boyutlu lineer zincir gösterimi

3.1.3.1. Yüksek frekanslı ve düşük frekanslı modlar için dispersiyon bağıntıları

Şekil 2'deki sistemin kütlelerinin normal modlarını modellemek için, zincir boyunca atomik yerdeğiştirmeler,

$$u_{2r} = A_1 e^{i(2rqa-\omega t)} \tag{3.1}$$

$$u_{2r+1} = A_2 e^{i[(2r+1)qa-\omega t]} \tag{3.2}$$

ile verilir. En yakın komşu uzaklığında, boyuna yerdeğiştirmeler için,

$$\begin{aligned} m\left(d^2u_{2r}/dt^2\right) &= -\alpha\left(u_{2r}-u_{2r-1}\right)-\alpha\left(u_{2r}-u_{2r+1}\right) \\ &= \alpha\left(u_{2r+1}+u_{2r-1}-2u_{2r}\right) \end{aligned} \tag{3.3}$$

$$\begin{aligned} M\left(d^2u_{2r+1}/dt^2\right) &= -\alpha\left(u_{2r+1}-u_{2r}\right)-\alpha\left(u_{2r+1}-u_{2r+2}\right) \\ &= \alpha\left(u_{2r+1}+u_{2r}-2u_{2r+1}\right) \end{aligned} \tag{3.4}$$

$$-m\omega^2 A_1 = \alpha A_2\left(e^{iqa}+e^{-iqa}\right)-2\alpha A_1 \tag{3.5}$$

$$-M\omega^2 A_2 = \alpha A_1\left(e^{iqa}+e^{-iqa}\right)-2\alpha A_2 \tag{3.6}$$

A_1 ve A_2'nin çekilmesiyle,

$$\omega^2 = \alpha\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\pm\alpha\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2-\frac{4\sin^2 qa}{mM}\right]^{1/2} \tag{3.7}$$

Frekans ve dalga-vektörü arasındaki bu ilişki genellikle "dispersiyon bağıntısı" olarak adlandırılır. Zincir boyunca olan yerdeğiştirmeler, $-\pi/2a$ 'den $+\pi/2a$ 'ye kadar olan alanda, q dalga-vektörleri açısından tanımlanabilir.

Brillouin bölgesinin merkezinde, q=0,

$\omega = [2\alpha(1/m+1/M)]^{1/2}$ maksimum LO modu

Brillouin bölgesinin sınırlarında, q= $\pm\pi/2a$,

$\omega = (2\alpha/m)^{1/2}$ minimum LO modu

Yüksek frekans için çözüm optik mod olarak bilinir. Düşük frekans için çözüm akustik mod olarak bilinir. Sadece boyuna yerdeğiştirmeler modellenmiş olduğu için; bu iki çözüm, lineer zincir örgünün boylamsal optik (LO) ve boylamsal akustik (LA) modlarına karşılık gelir. Benzer şekilde, LA modları Brillouin bölgesi sınırında maksimum $(2\alpha / M)^{1/2}$ frekansına, Brillouin bölgesinin merkezinde ise sıfıra yakın bir minimum frekansa sahiptirler.

İkili polar yarıiletkenlerde, m ve M kütleleri sırasıyla e^* ve $-e^*$ zıt etkin yüklerini taşırlar. Yarıiletkende E elektrik alanının varlığında kuvvet denklemine elektrik alanın katkısı ilave edilir. E elektrik alanının uzun-dalga boyu limitinde, kuvvet denklemleri aşağıdaki gibi olur,

$$\begin{aligned} -m\omega^2 u_{2r} &= m\left(d^2u_{2r}/dt^2\right) = \alpha\left(u_{2r+1} + u_{2r-1} - 2u_{2r}\right) + e^*E \\ &= \alpha\left(e^{i2qa} + 1\right)u_{2r-1} - 2\alpha u_{2r} + e^*E \end{aligned} \qquad 3.8$$

$$\begin{aligned} -M\omega^2 u_{2r+1} &= M\left(d^2u_{2r+1}/dt^2\right) = \alpha\left(u_{2r+2} + u_{2r} - 2u_{2r+1}\right) - e^*E \\ &= \alpha\left(1 + e^{-i2qa}\right)u_{2r+2} - 2\alpha u_{2r+1} - e^*E \end{aligned} \qquad 3.9$$

Fonon yerdeğiştirmelerine ilişkin olarak, uzun-dalga boyu limitinde, verilen bir kütle için farklı bölgeler arasında ayrım yapmaya gerek yoktur. Çünkü bütün atomların benzer kütleleri aynı miktarda yer değiştirir. Çift sayılı bölgelerin yerdeğiştirmelerini u_1, tek sayılı bölgelerinkini u_2 ile gösterirsek, uzun-dalga boyu limitinde, kuvvet denklemleri aşağıdaki gibi olur,

$$-m\omega^2 u_1 = 2\alpha\left(u_2 - u_1\right) + e*E \qquad 3.10$$

$$-M\omega^2 u_2 = 2\alpha\left(u_1 - u_2\right) - e*E \qquad 3.11$$

Bu denklemler toplanırsa, $-m\omega^2 u_1 = -M\omega^2 u_2 = 0$ ve $mu_1 = Mu_2$ olur.

$$-m\omega^2 u_1 = 2\alpha\left(-\frac{m}{M}u_1 - u_1\right) + e*E \qquad 3.12$$

$$-M\omega^2 u_2 = 2\alpha\left(u_1 + \frac{m}{M}u_1\right) - e^* E \qquad 3.13$$

$$-(\omega^2 - \omega_0^2)u_1 = e^* E / m \qquad 3.14$$

$$-\left(\omega^2 - \omega_0^2\right)u_2 = e^* E / M \qquad 3.15$$

Burada, e^*=0 için $\omega_0^2 = 2\alpha(1/m + 1/M)$ olur. ω_0^2, Coulomb etkileri olmadığında rezonans frekansının karesidir ve enine optik fonon frekansına karşılık gelir. Böyle polar çift-atomlu bir örgü tarafından üretilen P elektrik polarizasyonu ise aşağıdaki denklem ile verilir,

$$P = \frac{Ne^* u}{\in(\infty)} = \frac{Ne^*(u_1 - u_2)}{\in(\infty)} = \frac{1}{\in(\infty)}\frac{Ne^{*2}}{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)}\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)E \qquad 3.16$$

Burada $u = u_1 - u_2$, N birim hacme düşen çiftlerin sayısıdır. Bu denklem bir sürükleyici osilatörü tanımlamak için yeniden yazılırsa,

$$\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)u = e^*\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)E \qquad 3.17$$

3.1.3.2. Fononlar için yerdeğiştirme modelleri

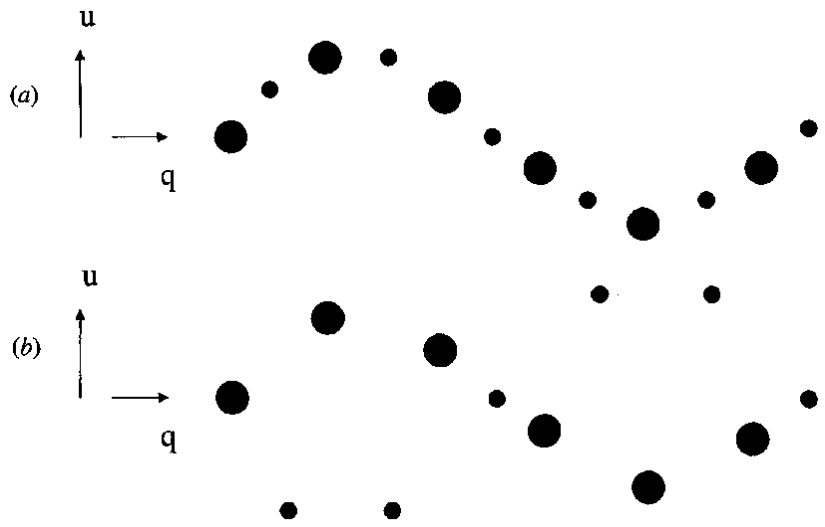
q→0 limitinde, optik modlara ait u_1 ve u_2 yerdeğiştirmeleri için $mu_1 = Mu_2$ ve iki kütle türünün genlikleri zıt işaretlere sahiptir. Optik modlar için atomlar, faz dışı titreşim yapmalarına karşın kütle merkezleri sabittir. A_2 / A_1 oranı,

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2\alpha\cos qa}{2\alpha - M\omega^2} = \frac{2\alpha - m\omega^2}{2\alpha\cos qa} \qquad 3.18$$

Brillouin bölgesinin merkezinin yanındaki akustik fononlar için, yerdeğiştirme genliklerinin oranının yaklaşık olarak bir olduğu görülür. Bu yüzden, optik modların

tersine, akustik modlar, farklı m ve M kütlelerine ait faz-içi hareket ile tanımlanırlar. Yani, akustik modlar için atomlar ve onların kütle merkezleri birlikte hareket eder.

Bölge-merkezli akustik ve optik modlar için tipik mod modelleri şekil 3'de gösterilmektedir. Boyuna modların grafiksel olarak gösterilmesi daha zor olduğu için, burada enine modlar örneklenmektedir. Daha yüksek frekanslı optik modlar, komşu iyonların faz-dışı titreşimini kapsamaktadır. Fakat daha düşük frekanslı akustik modlar, aynı sinüs eğrisi üzerindeki komşu iyonların hareketiyle tanımlanmaktadır.



Şekil 3. Ağır ve hafif iyonların q doğrultusunda enine yerdeğiştirmeleri,

a) enine akustik modlar

b) enine optik modlar

3.1.3.3. Polarizasyon

Enine elektrik alanda, polar malzemenin enine optik (TO) fononları güçlü bir şekilde elektrik alanı ile etkileşir. Elektrik alanın dalga-vektörleri ve frekansları TO fononuyla rezonans halinde iken, bağlanan bir fonon-foton alanı, sistemi tanımlamak için gereklidir. Bu bağlanma alanının kuantumu polarizasyon olarak bilinmektedir. Özellikle E olan bir enine elektrik alanı için, osilatör denklemi aşağıdaki şekli alır:

$$\left(\omega_{TO}^2-\omega^2\right)P=\frac{Ne^{*2}}{\in(\infty)}\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)E \qquad 3.19$$

Elektromanyetik dalga denklemine göre,

$$C^2\nabla^2E=\partial^2D/\partial t^2 \qquad 3.20$$

$$D=E+4\pi P \qquad 3.21$$

Elektromanyetik dalgaya ait E elektrik alanını TO fononuna ait P elektrik polarizasyonu ile beraber tanımlayan dispersiyon bağıntısı aşağıdaki gibidir,

$$c^2q^2E=\omega^2\left(E+4\pi P\right) \qquad 3.22$$

$$4\pi\omega^2P=\left(c^2q^2-\omega^2\right)E \qquad 3.23$$

Burada dalgaların $e^{i(qr-\omega t)}$ formunda olduğu düşünülmüştür. Sürükleyici osilatör denklemi ve elektromanyetik dalga denklemi aşağıdaki gibi ortak bir çözüme sahiptir,

$$\begin{vmatrix} \omega^2-c^2q^2 & 4\pi\omega^2 \\ \dfrac{Ne^{*2}}{\in(\infty)}\left(\dfrac{1}{m}+\dfrac{1}{M}\right) & -\left(\omega_{TO}^2-\omega^2\right) \end{vmatrix}=0 \qquad 3.24$$

q=0 için iki kök vardır:

ω=0

$$\omega^2=\omega_{TO}^2+4\pi\frac{Ne^{*2}}{\in(\infty)}\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)=\omega_{LO}^2 \qquad 3.25$$

dielektrik fonksiyonu $\in(\omega)$ aşağıdaki gibi verilmektedir,

$$\begin{aligned}\in(\omega)&=\frac{D(\omega)}{E(\omega)}=1+\frac{4\pi P_e(\omega)}{E(\omega)}+\frac{4\pi P(\omega)}{E(\omega)}\\ &=1+\frac{4\pi P_e(\omega)}{E(\omega)}+\frac{4\pi}{\left(\omega_{TO}^2-\omega^2\right)}\ \frac{Ne^{*2}}{\in(\infty)}\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\end{aligned} \qquad 3.26$$

Burada hem elektronik katkıdan dolayı olan polarizasyon $P_e(\omega)$, hem de iyonik katkıdan dolayı olan polarizasyon $P(\omega)$ ilave edilmiştir. Elektronik tepkiden kaynaklanan dielektrik sabiti $\in(\omega)$ aşağıdaki gibi verilir,

$$\in(\infty)=1+\frac{4\pi P_e(\omega)}{E(\omega)} \tag{3.27}$$

$$\in(\omega)=\in(\infty)+\frac{4\pi}{\left(\omega_{TO}^2-\omega^2\right)}\frac{Ne^{*2}}{\in(\infty)}\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \tag{3.28}$$

Statik dielektrik sabiti $\in(0)$ aşağıdaki gibi verilir,

$$\in(0)=\in(\infty)+\frac{4\pi}{\omega_{TO}^2}\frac{Ne^{*2}}{\in(\infty)}\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \tag{3.29}$$

Bu son iki sonuçtan ortaya çıkan denklem,

$$\begin{aligned}\in(\omega)&=\in(\infty)+\frac{[\in(0)-\in(\infty)]\omega_{TO}^2}{\left(\omega_{TO}^2-\omega^2\right)}\\&=\in(\infty)+\frac{\in(0)-\in(\infty)}{1-\omega^2/\omega_{TO}^2}\end{aligned} \tag{3.30}$$

Elektromanyetik teoriden, LO fononlarına ait frekans ω_{LO} için, $\in(\omega_{LO})=0$ olmalıdır. Bu, elektromanyetik biliminde, boyuna elektromanyetik dalganın yayılmasının bir ön koşulu olarak bilinir,

$$\begin{aligned}&\in(\omega_{LO})=0\\&\quad=\in(\infty)+\frac{\in(0)-\in(\infty)}{1-\omega_{LO}^2/\omega_{TO}^2}\end{aligned} \tag{3.31}$$

$$\omega_{LO}=\left[\frac{\in(0)}{\in(\infty)}\right]^{1/2}\omega_{TO} \tag{3.32}$$

$$\in(\omega)=\in(\infty)+\frac{\in(0)-\in(\infty)}{1-\omega^2/\omega_{TO}^2}=\in(\infty)+\frac{(\omega_{LO}/\omega_{TO})^2\in(\infty)-\in(\infty)}{1-\omega^2/\omega_{TO}^2}$$
$$=\in(\infty)\left\{1+\frac{(\omega_{LO}/\omega_{TO})^2-1}{1-\omega^2/\omega_{TO}^2}\right\}$$
$$=\in(\infty)\left(\frac{\omega_{TO}^2-\omega^2}{\omega_{TO}^2-\omega^2}+\frac{\omega_{LO}^2-\omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2-\omega^2}\right) \qquad 3.33$$
$$=\in(\infty)\frac{\omega_{LO}^2-\omega^2}{\omega_{TO}^2-\omega^2}$$

$$\frac{\in(\omega)}{\in(\infty)}=\frac{\omega_{LO}^2-\omega^2}{\omega_{TO}^2-\omega^2} \qquad 3.34$$

ω=0 olduğu özel durumda, bu bağıntı, bilinen Lyddane–Sachs–Teller bağıntısına dönüşür,

$$\in(0)=\in(\infty)\frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2} \qquad 3.35$$

$$\omega_{TO}^2+4\pi\frac{Ne^{*2}}{\in(\infty)}\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)=\omega_{LO}^2 \qquad 3.36$$

Silikon gibi polar olmayan malzemelerde, bölge-merkezli fononlar için $\omega_{LO}=\omega_{TO}$ olduğu görülür. GaAs gibi polar malzemelerde ise ω_{TO} ve ω_{LO} arasında, *e**'den kaynaklanan Coulomb enerji yoğunluğu ile ilişkili olan, bir boşluk vardır. $\omega=\omega_{TO}$ olduğu zaman $\in(\omega_{TO})^{-1}=0$ olur. $(\omega_{TO},\omega_{LO})$ aralığı boyunca, $\in(\omega)$ negatiftir ve elektromanyetik dalgalar yayılmaz.

3.1.3.4. Loudon modelini kübik kristallerde inceleme(Huang-Born teorisi)

Loudon (1964), würtzite kristaller gibi tek-eksenli kristallerde optik fonon özelliklerinin tanımlanmasında, makroskopik alanlara dayalı bir optik fonon modelini

savundu. Loudon modelini, kübik kristaller bağlamında ele alalım. Maxwell denklemler çiftinden,

$$\nabla \times E + \frac{1}{c}\frac{\partial B}{\partial t} = 0 \qquad 3.37$$

$$\nabla \times B + \frac{1}{c}\frac{\partial D}{\partial t} = J$$

$$\nabla \times (\nabla \times E) + \frac{1}{c}\frac{\partial (\nabla \times B)}{\partial t} = \nabla(\nabla . E) - \nabla^2 E + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 D}{\partial^2 t} = 0 \qquad 3.38$$

Burada kaynak akım olan J, sıfıra eşit olacak şekilde alınmıştır. Öyleyse,

$$\nabla . D = \nabla . E + 4\pi \nabla . P = 4\pi\rho = 0 \qquad 3.39$$

Düzenlersek,

$$-4\pi \nabla(\nabla . P) - \nabla^2 E + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial^2 t} + 4\pi \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 P}{\partial^2 t} = 0 \qquad 3.40$$

Polarizasyon P ve elektrik alan E'nin $e^{i(qr-\omega t)}$ formunda olduğunu varsayarak,

$$E = \frac{-4\pi\left[q(q.P) - \omega^2 P / c^2\right]}{q^2 - \omega^2 / c^2} \qquad 3.41$$

q.P = 0 koşulu enine dalgaya karşılık gelir. Bu durumda,

$$E = \frac{-4\pi\omega^2 P / c^2}{q^2 - \omega^2 / c^2} \qquad 3.42$$

Ayrıca, Huang (1951) ve Born (1954) bir denklem çifti ile diatomik polar kristallerin mikroskopik teorisini ele aldılar,

$$\begin{aligned} \ddot{\omega} &= a\omega + bE \\ P &= d\omega + cE \end{aligned} \qquad 3.43$$

Enerji korunumunun bir sonucu olarak d'nin b'ye eşit olduğunu gösterdiler.

Frekansın verilişi,

$$\omega = \sqrt{\mu N / V u} \tag{3.44}$$

Zamana bağlı olarak alınan $e^{-i\omega t}$ ve ω'nın bu denklemlerden elimine edilmesi sonucu oluşan denklemler,

$$P = \left(c + \frac{b^2}{-a - \omega^2} \right) E \tag{3.45}$$

$$D = E + 4\pi P = \in (\omega) E$$

$$\in (\omega) = 1 + 4\pi c + \frac{4\pi b^2}{-a - \omega^2} \tag{3.46}$$

Daha önce verilen Lyddane-Sachs-Teller bağıntısının genelleştirilmesiyle,

$$\begin{aligned} \in (\omega) &= \in (\infty) \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} = \in (\infty) \frac{\left[(\omega_{TO}^2 - \omega^2) + (\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2 \right]}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \\ &= \in (\infty) + \in (\infty) \frac{\omega_{LO}^2 / \omega_{TO}^2 - 1}{1 - \omega^2 / \omega_{TO}^2} \\ &= \in (\infty) + \in (\infty) \frac{\in (0) - \in (\infty)}{1 - \omega^2 / \omega_{TO}^2} \end{aligned} \tag{3.47}$$

Katsayılar olan a, b ve c'nin verilişi,

$$\begin{aligned} c &= \frac{\in (\infty) - 1}{4\pi} \\ a &= -\omega_{TO}^2 \\ b &= \left[\frac{\in (0) - \in (\infty)}{4\pi} \right]^{1/2} \omega_{TO} \end{aligned} \tag{3.48}$$

Düzenlenirse,

$$(\omega_{TO}^2 - \omega^2)\omega = \left[\frac{\in (0) - \in (\infty)}{4\pi} \right]^{1/2} \omega_{TO} E \tag{3.49}$$

$$P = \left[\frac{\in(0) - \in(\infty)}{4\pi} \right]^{1/2} \omega_{TO}\omega + \frac{\in(\infty) - 1}{4\pi} E \qquad 3.50$$

ve

$$(\omega_{TO}^2 - \omega^2)u = \left(\frac{V}{4\pi\mu N} \right)^{1/2} \sqrt{\in(0) - \in(\infty)}\,\omega_{TO} E \qquad 3.51$$

Polarizasyonun verilişi,

$$P = \left(\frac{\mu N}{4\pi V} \right)^{1/2} \sqrt{\in(0) - \in(\infty)}\,\omega_{TO} u + \frac{\in(\infty) - 1}{4\pi} E \qquad 3.52$$

ve

$$P = \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{[\in(0) - \in(\infty)]\omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} + [\in(\infty) - 1] \right\} E \qquad 3.53$$

Öyleyse,

$$\frac{q^2 - \omega^2 / c^2}{\omega^2 / c^2} = \frac{[\in(0) - \in(\infty)]\omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} + [\in(\infty) - 1] \qquad 3.54$$

ve

$$\frac{q^2 c^2}{\omega^2} = \frac{\omega_{TO}^2 \in(0) - \omega^2 \in(\infty)}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \qquad 3.55$$

Boyuna dalgalar için, q.P = q P, $q = (q / P)P$ ' dir ve aşağıdaki sonuca varılır:

$$\begin{aligned} E &= \frac{4\pi\omega^2 P / c^2}{q^2 - \omega^2 / c^2} - \frac{4\pi q P q}{q^2 - \omega^2 / c^2} \\ &= \frac{4\pi}{q^2 - \omega^2 / c^2} \left(\frac{\omega^2}{c^2} - q^2 \right) P \\ &= -4\pi P \end{aligned} \qquad 3.56$$

Polarizasyonun verilişi,

$$P = \frac{1}{4\pi}\left\{\frac{[\in(0) - \in(\infty)]\omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} + [\in(\infty) - 1]\right\}E \qquad 3.57$$

Lyddane-Sachs-Teller bağıntısı yeniden elde edilmiş olur.

3.2. Hacimsel Würtzite Kristallerde Fononlar

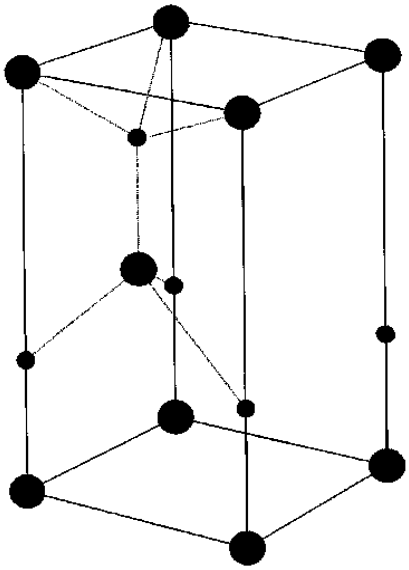
3.2.1. Würtzite yapıdaki fononların temel özellikleri

Geniş bant aralıklı würtzite yapıların tabanında oluşturulmuş kuantum heteroyapılar örneğin, ZnO, GaN ve AlN yüksek hızda ve güçte optoelektronik aletlerdeki uygulamalarında oldukça dikkat çekmektedirler. Özellikle grup-III nitritleri, örneğin GaN ve AlN, hem mavi hem de ultraviolet dalga-boyları olan yarıiletken lazerleri üretmek için hem de optoelektronik alanında büyük önem taşımaktadırlar. Bunun yanısıra yüksek çalışma sıcaklıklarında tasarlanmış elektronik aygıtlar için uygun olan geniş elektronik bant aralıkları vardır. Bu yapıların çoğu optoelektronik özelliğinde fonon dinamikleri ve taşıyıcı-fonon etkileşmeleri önemli rol oynar. Bu malzemelerde fonon dinamikleri ve taşıyıcı-fonon etkileşimleri kübik olanlardan farklıdır.

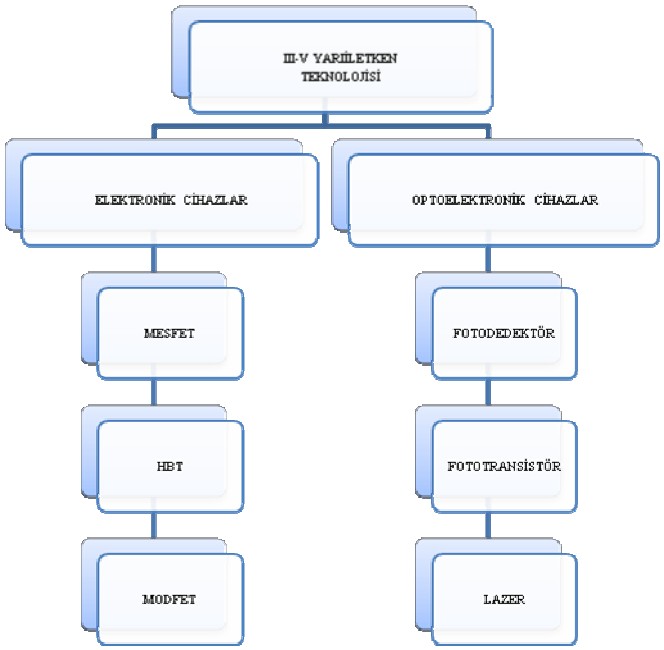
Bu III-V nitritler, hem zincblend hem de würtzite yapılarda olurlar, şekil 5'te kullanım alanları verilmektedir. Bu bölümde zincblende yapılardan çok würtzite yapıların ele alınma sebebi fononların würtzite yapılarda davranışı, zincblende için olandan çok daha karışıktır. Ayrıca, würtzite kristaller, çalışılan zincblende karşılıklarıyla kıyaslandığında genellikle farklı bir birim hücre yapısına ve düşük simetriye sahiptir.

Würtzite kristalin yapısı şekil 4'de gösterilmektedir. Würtzite kristal bir hekzagonal yapıdır. Würtzite yapı, uygun işlemlerle zincblende yapıdan üretilebilir. Şekil 4'de gösterildiği gibi, würtzite yapının birim hücresi dört atomludur.

.



Şekil 4. Hekzagonal würtzite kristalin birim hücresi



Şekil 5. III-V yarıiletken teknolojisinin kullanım alanları

Mod tipi	Modların sayısı
Boyuna akustik (LA)	1
Enine akustik (TA)	2
Tüm akustik modlar	3
Boyuna optik (LO)	s-1
Enine optik (TO)	2s-2
Tüm optik modlar	3s-3
Tüm modlar	3s

Tablo 1. s atomlu birim hücrenin fonon modları

s atoma sahip birim hücre için normal titreşim modlarının toplam sayısı 3s'dir

Kübik malzemeler için uzun-dalga-boyu limitinde biri boyuna ve diğer ikisi enine olan üç akustik mod vardır. Böylece, optik modların toplam sayısı 3s-3'dir. Bu optik modlar için, enine modların boyuna modlara oranı 2'dir. Çeşitli uzun-dalga-boylu modların sayısı Tablo 1' de özetlenmektedir.

Zincblende durum için, s = 2 ve altı mod vardır;

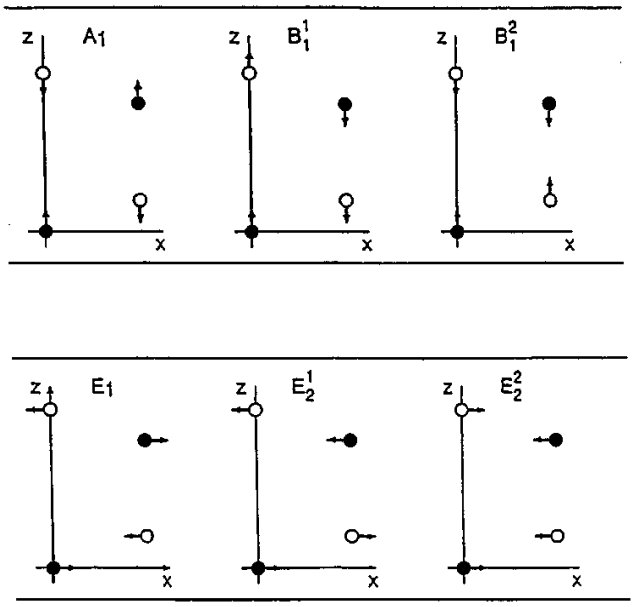
bir LA, iki TA, bir LO ve iki TO.

Würtzite durum için, s = 4 ve 12 mod vardır;

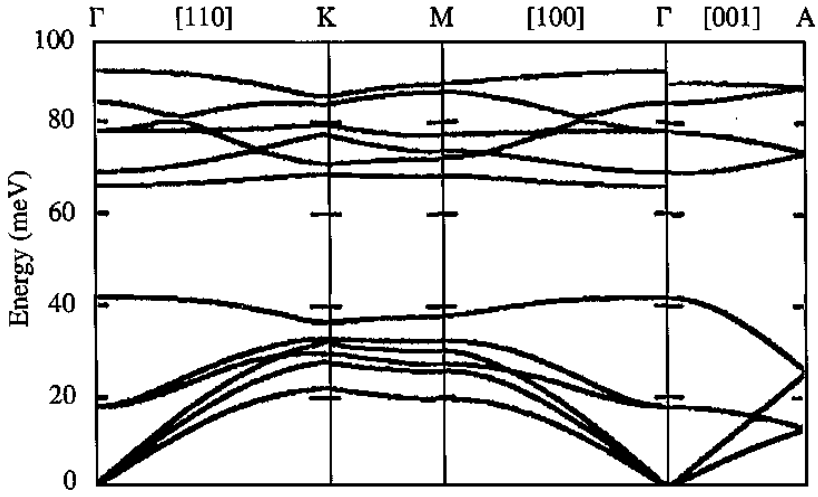
bir LA, iki TA, üç LO ve altı TO.

Uzun dalga boyu limitinde, akustik modlar basit dönüşümsel modlardır. Bir würtzite yapı için optik modlar şekil 6'da gösterilmiştir. Şekil 6'dan görüldüğü gibi, bağlanma iyonik olduğunda, A_1 ve E_1 modları büyük elektrik polarizasyonu alanları üreteceklerdir. Böyle büyük polarizasyon alanları güçlü taşıyıcı-optik-fonon saçılmasının sonucudur. Bu fonon modları infrared aktif olarak bilinirler. Bu infrared modlarla ilişkili alanlar, bu tür modların taşıyıcı-fonon etkileşimini tanımlayan bir

potansiyelden türemiştir. Bu taşıyıcı-fonon etkileşim potansiyeli "Fröhlich etkileşimi" olarak adlandırılmaktadır. Würtzite yapıya ait 12 fonon modu için dispersiyon bağıntıları şekil 7' de gösterilmiştir.



Şekil 6. Würtzite yapıda optik fononlar



Şekil 7. Würtzite yapıdaki GaN kristalinin fonon dispersiyon eğrileri

Bu modların Γ işaretinin yanındaki düşük-frekanslı davranışı, bu 12 modun üçünün akustik modlar olduğunu açıkça göstermektedir. Bu davranış, tablo 1'de verilen akustik modların sayısı ile uyumludur.

3.2.2. Loudon'un tek-eksenli kristal modeli

Loudon(1964) tek eksenli kristallerden olan würtzite kristallerdeki boyuna optik fononların tanımını sağlayan kullanışlı bir model ortaya koydu. Loudon'un tek-eksenli kristal modelinde, örneğin; GaN ya da AlN için, c-ekseni ve q arasındaki açı θ ile gösterilir,

$$\in(\omega)=\begin{pmatrix} \in_{\perp}(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & \in_{\perp}(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \in_{\perp}(\omega) \end{pmatrix} \qquad 3.58$$

ve

$$\in(\omega)=\in(\infty)\frac{\omega_{LO}^2-\omega^2}{\omega_{TO}^2-\omega^2}$$

Benzer şekilde,

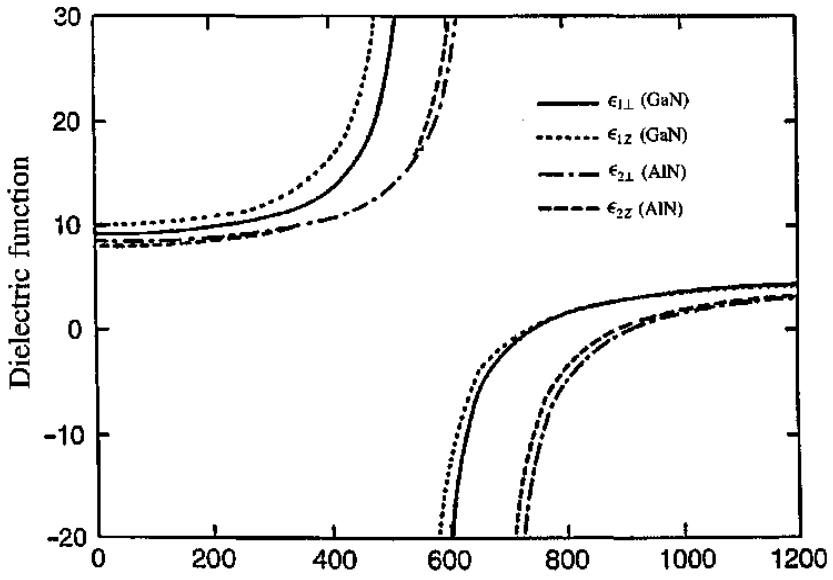
$$\in_{\perp}(\omega)=\in_{\perp}(\infty)\frac{\omega^2-\omega_{LO,\perp}^2}{\omega^2-\omega_{TO,\perp}^2}$$
$$\in_{\|}(\omega)=\in_{\|}(\infty)\frac{\omega^2-\omega_{LO,\|}^2}{\omega^2-\omega_{TO,\|}^2} \qquad 3.59$$

Denklemler Lyddane–Sachs–Teller bağıntısının gerektirdiği gibidir. c-ekseni çoğu kez z-yönünde alınır ve dielektrik sabiti çoğu kez z-koordinatı ile ilişkilendirilir.

Şekil 8, hem GaN hem de AIN için dielektrik sabitlerini göstermektedir. Böyle bir tek eksenli kristalde iki tür fonon dalgası vardır;

a) Olağan dalgalar, herhangi bir θ açısı için, hem elektrik alanı E'nin hem de polarizasyon P'nin c-eksenine ve q'ya eş zamanlı olarak dik olduğu dalgalardır. Olağan dalga, E_1 simetrisine sahiptir, enine dalgadır ve $\perp$_ düzleminde polarizedir.

b) Olağandışı dalgalar, q'ya ve c-eksenine bağlı olarak E ve P arasındaki ilişkinin daha karmaşık olduğu dalgalardır. İki olağandışı dalga vardır. Birisi $\perp$_ polarize titreşimlerle ilişkilidir ve A_1 simetrisine sahiptir. Diğeri ise ||_ polarize titreşimlerle ilişkilidir ve E_1 simetrisine sahiptir. $\theta = 0$ için, bu modlardan birisi $A_1(\mathrm{LO})$ modudur ve diğeri $E_1(\mathrm{TO})$ modudur. θ, 0 ve $\pi/2$ arasında değiştiği için bu modlar sırasıyla $A_1(\mathrm{LO})$ ve $E_1(\mathrm{TO})$'ya dönüşürler. LO ve TO karakterine veya A_1 ve E_1 simetrisine sahip değildirler.



Şekil 8. GaN ve AlN için dielektrik sabitleri. Lee ve ark.(1998)

Würtzite yapılar için Γ noktasında dokuz optik fonon modundan sadece üçü, bunlar $A_1(Z)$ ve E(X,Y) modları, önemli taşıyıcı-optik-fonon saçılma oranları üretir. Bunlar infrared aktif modlar olarak bilinir. Würtzite yapı durumu için, Loudon'un tek-

eksenli kristal modeli, Huang-Born denklemlerinin genellenmesine dayalıdır. Bu denklemlerden herbiri için c-eksenine paralel olan ve c-eksenine dik olan değerler açısından iki denklem daha yazılır,

$$\left(\omega_{TO,\perp}^2-\omega^2\right)u_\perp=\left(\frac{V}{4\pi\mu N}\right)^{1/2}\sqrt{\in_\perp(0)-\in_\perp(\infty)}\,\omega_{TO,\perp}E_\perp \qquad 3.60$$

ve

$$\left(\omega_{TO,\parallel}^2-\omega^2\right)u_\parallel=\left(\frac{V}{4\pi\mu N}\right)^{1/2}\sqrt{\in_\parallel(0)-\in_\parallel(\infty)}\,\omega_{TO,\parallel}E_\parallel \qquad 3.61$$

Polarizasyonun verilişi,

$$P_\perp=\left(\frac{\mu N}{4\pi V}\right)^{1/2}\sqrt{\in_\perp(0)-\in_\perp(\infty)}\,\omega_{TO,\perp}u_\perp+\left[\frac{\in_\perp(\infty)-1}{4\pi}\right]E_\perp \qquad 3.62$$

$$P_\parallel=\left(\frac{\mu N}{4\pi V}\right)^{1/2}\sqrt{\in_\parallel(0)-\in_\parallel(\infty)}\,\omega_{TO,\parallel}u_\parallel+\left[\frac{\in_\parallel(\infty)-1}{4\pi}\right]E_\parallel \qquad 3.63$$

Elektrik alanın verilişi,

$$E=\frac{-4\pi\left[q(q.P)-\omega^2P/c^2\right]}{q^2-\omega^2/c^2}$$

$\perp$ ve $\parallel$ düzlemler için verilişi,

$$E_\perp=\frac{-4\pi\quad[q_\perp(q.P)-\omega^2P_\perp/c^2]}{q^2-\omega^2/c^2}$$
$$E_\parallel=\frac{-4\pi\quad[q_\parallel(q.P)-\omega^2P_\parallel/c^2]}{q^2-\omega^2/c^2} \qquad 3.64$$

3.60 ve 3.61 denklemlerindeki $u_\perp$ ve $u_\parallel$ 3.62 ve 3.63 denklemlerinde yerine konursa;

$$P_{\perp} = \frac{1}{4\pi}\left\{\frac{[\in_{\perp}(0) - \in_{\perp}(\infty)]\omega_{TO,\perp}^2}{\omega_{TO,\perp}^2 - \omega^2} + [\in_{\perp}(\infty) - 1]\right\}E_{\perp} = \frac{1}{4\pi}A_{\perp}E_{\perp} \quad 3.65$$

$$P_{\parallel} = \frac{1}{4\pi}\left\{\frac{[\in_{\parallel}(0) - \in_{\parallel}(\infty)]\omega_{TO,\parallel}^2}{\omega_{TO,\parallel}^2 - \omega^2} + [\in_{\parallel}(\infty) - 1]\right\}E_{\parallel} = \frac{1}{4\pi}A_{\parallel}E_{\parallel} \quad 3.66$$

Burada $A_{\perp}$ ve $A_{\parallel}$ şöyle yazılabilir;

$$A_{\perp} = \frac{\omega_{LO,\perp}^2 - \omega^2}{\omega_{TO,\perp}^2 - \omega^2} \in_{\perp}(\infty) - 1 \quad 3.67$$

$$A_{\parallel} = \frac{\omega_{LO,\parallel}^2 - \omega^2}{\omega_{TO,\parallel}^2 - \omega^2} \in_{\parallel}(\infty) - 1, \quad 3.68$$

Lyddane-Sachs-Teller bağıntısı uygulanırsa,

$$\omega_{TO,\perp}\left[\frac{\in_{\perp}(0)}{\in_{\perp}(\infty)}\right]^{1/2} = \omega_{LO,\perp} \qquad \omega_{TO,\parallel}\left[\frac{\in_{\parallel}(0)}{\in_{\parallel}(\infty)}\right]^{1/2} = \omega_{LO,\parallel} \quad 3.69$$

Olağan dalga için;

$$P_{\perp} = 0 \qquad P_{\parallel} = 0 \qquad q.P = 0 \quad 3.70$$

$$\frac{q^2c^2}{\omega^2} = \frac{\omega_{TO,\perp}^2 \in_{\perp}(0) - \omega^2 \in_{\perp}(\infty)}{\omega_{TO,\perp}^2 - \omega^2} \quad 3.71$$

Olağan mod için, ayrıca, şu sonuca varılır, $u_{\perp} = u_{\parallel} = 0$

Olağandışı dalga için,

$$q_{\perp} = q.\sin\theta$$
$$q_{\|} = q.\cos\theta \qquad 3.72$$

$$q.P = (q\sin\theta, q\cos\theta).(P_{\perp}, P_{\|}) = q \quad P_{\perp}\sin\theta + q \quad P_{\|}\cos\theta \qquad 3.73$$

Düzenlenirse,

$$q_{\perp}(q.P) = q^2 \quad \left(P_{\perp}\sin^2\theta + P_{\|}\sin\theta\cos\theta\right)$$
$$q_{\|}(q.P) = q^2 \quad \left(P_{\perp}\sin\theta\cos\theta + P_{\|}\cos^2\theta\right) \qquad 3.74$$

Gecikme etkilerinin ihmal edildiği limitte, $c \to \infty$ dir. Elektrik alanların verilişi,

$$E_{\perp} = \frac{-4\pi[q_{\perp}(q.P) - \omega^2 P_{\perp}/c^2]}{q^2 - \omega^2/c^2} \to -4\pi\left(P_{\perp}\sin^2\theta + P_{\|}\sin\theta\cos\theta\right)$$
$$= -\sin^2\theta A_{\perp}E_{\perp} - \sin\theta\cos\theta A_{\|}E_{\|} \qquad 3.75$$

$$E_{\|} = \frac{-4\pi \quad [q_{\|}(q \quad . \quad P) - \omega^2 P_{\|}/c^2]}{q^2 - \omega^2/c^2} \to -4\pi\left(P_{\perp}\sin\theta\cos\theta + P_{\|}\cos^2\theta\right)$$
$$= -\sin\theta\cos\theta \quad A_{\perp}E_{\perp} - \cos^2\theta A_{\|}E_{\|} \qquad 3.76$$

Düzenlersek,

$$\begin{pmatrix} 1+\sin^2\theta \quad A_{\perp} & \sin\theta\cos\theta \quad A_{\|} \\ \sin\theta\cos\theta \quad A_{\perp} & 1+\cos^2\theta \quad A_{\|} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} E_{\perp} \\ E_{\|} \end{pmatrix} = 0 \qquad 3.77$$

Bu denklemi açarsak,

$$(1+\cos^2\theta A_{\|} + \sin^2\theta A_{\perp} +$$
$$\sin^2\theta\cos^2\theta A_{\perp}A_{\|} - \sin^2\theta\cos^2\theta A_{\perp}A_{\|})(E_{\perp} + E_{\|}) = 0 \qquad 3.78$$

ve

$$(1+\cos^2\theta A_{\|} + \sin^2\theta A_{\perp})[\in_{\perp}(\omega)\sin^2\theta + \sin^2\theta] = 0 \qquad 3.79$$

yüzeysel-olmayan çözümlerin varlığı için koşul:

$$1+\sin^2\theta \quad A_\perp+\cos^2\theta \quad A_\parallel = \frac{\omega_{LO,\perp}^2-\omega^2}{\omega_{TO,\perp}^2-\omega^2}\in_\perp(\infty)\sin^2\theta + \frac{\omega_{LO,\parallel}^2-\omega^2}{\omega_{TO,\parallel}^2-\omega^2}\in_\parallel(\infty)\cos^2\theta = \in_\perp(\omega)\sin^2\theta + \in_\parallel(\omega)\cos^2\theta = 0 \qquad 3.80$$

Böylece,

$$\in_\perp(\omega)\ \ q_\perp^2+\in_\parallel\ (\omega)\ \ q_\parallel^2=0 \qquad 3.81$$

Bir malzemenin elektrik sabiti kristalin düzlemlerinden bağımsız olduğu için genellikle $\in_\perp(\infty)\approx\in_\parallel(\infty)$ olduğu varsayılır (Loudon 1964). Böylece:

$$\frac{\omega_{LO,\perp}^2-\omega^2}{\omega_{TO,\perp}^2-\omega^2}\sin^2\theta+\frac{\omega_{LO,\parallel}^2-\omega^2}{\omega_{TO,\parallel}^2-\omega^2}\cos^2\theta=0 \qquad 3.82$$

Düzenlenirse,

$$\omega^4-\left(\omega_1^2+\omega_2^2\right)\ \ \omega^2+\omega_{TO,\perp}^2\ \ \omega_{LO,\parallel}^2\ \ \cos^2\theta+\omega_{LO,\perp}^2\ \ \omega_{TO,\parallel}^2\ \ \sin^2\theta=0 \qquad 3.83$$

Böylece,

$$\omega_1^2+\omega_2^2=(-\omega_{LO,\perp}^2-\omega_{TO,\parallel}^2)\sin^2\theta+(-\omega_{LO,\parallel}^2-\omega_{TO,\perp}^2)\cos^2\theta \qquad 3.84$$

Denklemin köklerinin kareleri,

$$\omega_1^2=\omega_{TO,\parallel}^2\sin^2\theta+\omega_{TO,\perp}^2\cos^2\theta$$
$$\omega_2^2=\omega_{LO,\parallel}^2\cos^2\theta+\omega_{LO,\perp}^2\sin^2\theta \qquad 3.85$$

$\left|\omega_{TO,\parallel}-\omega_{TO,\perp}\right|$, $\omega_{LO,\parallel}-\omega_{TO,\parallel}$ ve $\omega_{LO,\perp}-\omega_{TO,\perp}$'den çok daha küçük olduğu zaman bu denklemin kökleri,

$$\omega^2=\frac{1}{2}\left\{\left(\omega_1^2+\omega_2^2\right)\pm\left[\left(\omega_1^2-\omega_2^2\right)+2\,\Delta\,\omega^2(\theta)\right]\right\} \qquad 3.86$$

ve

$$\Delta\omega^2(\theta) = 2\frac{\left(\omega_{LO,\parallel}^2 - \omega_{LO,\perp}^2\right)\left(\omega_{TO,\parallel}^2 - \omega_{TO,\perp}^2\right)}{\omega_2^2 - \omega_1^2}\sin^2\theta\cos\theta \qquad 3.87$$

Böylece,

$$\begin{aligned}\omega^2 &= \omega_{TO,\parallel}^2\sin^2\theta + \omega_{TO,\perp}^2\cos^2\theta \\ &\quad -\frac{\left(\omega_{LO,\parallel}^2 - \omega_{LO,\perp}^2\right)\left(\omega_{TO,\parallel}^2 - \omega_{TO,\perp}^2\right)}{\omega_2^2 - \omega_1^2}\sin^2\theta\cos^2\theta \\ &\approx \omega_{TO,\parallel}^2\sin^2\theta + \omega_{TO,\perp}^2\cos^2\theta\end{aligned} \qquad 3.88$$

ve

$$\begin{aligned}\omega^2 &= \omega_{LO,\parallel}^2\cos^2\theta + \omega_{LO,\perp}^2\sin^2\theta \\ &\quad +\frac{\left(\omega_{LO,\parallel}^2 - \omega_{LO,\perp}^2\right)\left(\omega_{TO,\parallel}^2 - \omega_{TO,\perp}^2\right)}{\omega_2^2 - \omega_1^2}\sin^2\theta\cos^2\theta \\ &\approx \omega_{LO,\parallel}^2\cos^2\theta + \omega_{LO,\perp}^2\sin^2\theta\end{aligned} \qquad 3.89$$

3.3. Fononlarda Süreklilik Modeli

3.3.1. Fononların Dielektrik Süreklilik Modeli

Dielektrik süreklilik modeli (DCM); Fuchs ve Kliewer (1965) tarafından önerildi. DCM, yarıiletken nanoyapılardan üretilen bir çok elektronik ve optoelektronik cihazdaki boyutsal olarak sınırlı optik fononların özelliklerini tanımlamayı sağlar (Mitin ve ark. 1999). Bunlar kuantum kuyularını, süperörgüleri, kuantum tellerini, kuantum noktalarını içermektedir. Ayrıca, dielektrik süreklilik modeli haricinde hidrodinamik model ve yeniden formüle edilmiş dielektrik süreklilik modeli de bulunmaktadır. DCM'nin tercih edilme sebebi, basitliği ve deneysel çalışmalarla uyumlu oluşudur.

Polar malzemelerdeki optik fononların dielektrik süreklilik modeli, bu yapının hacminin, periyodik sınır koşulları ile birlikte, L^3 ($-L/2 \le x, y, z \le + L/2$) olduğunu ve

iyonlar arası yük transferi olmadığını varsayar. $P(r)$ ile ilişkili olan potansiyel $\Phi(r)$ aşağıdaki şekilde verilir (Kim ve ark. 1990),

$$\nabla^2\Phi(r) = 4\pi\nabla.P(r) \qquad 3.90$$

Elektrik alanı $E(r)$'nin verilişi,

$$E(r) = -\nabla\ \Phi\ (r) \qquad 3.91$$

$P(r)$ ve $E(r)$'nin n ortamında, $x_n(\omega)$ dielektrik alınganlığı aracılığıyla verilişi,

$$P(r) = x_n(\omega)E(r) \qquad 3.92$$

ve dielektrik alınganlığı,

$$x_n(\omega) = [\in_n(\omega) - 1]/4\pi \qquad 3.93$$

n ortamı için Lydanne-Sachs-Teller bağıntısı ikili bir polar yarıiletken olan AB için aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$\in_n(\omega) = \in_n(\infty)\frac{\omega^2 - \omega_{LO,n}^2}{\omega^2 - \omega_{TO,n}^2} \qquad 3.94$$

Üçlü bir polar malzeme olan $A_yB_{1-y}C$ için, alt indis a, dipol AC çifti ile ilgili frekansları, b ise dipol BC çifti ile ilgili frekansları göstermektedir.

$$\in_n(\omega) = \in_n(\infty)\frac{\omega^2 - \omega_{LO,n,a}^2}{\omega^2 - \omega_{TO,n,a}^2}\frac{\omega^2 - \omega_{LO,n,b}^2}{\omega^2 - \omega_{TO,n,b}^2} \qquad 3.95$$

Yerdeğiştirme alanı, sürükleyici osilatör denklemi ve e_n^* efektif yük vasıtasıyla $P(r)$ ve $E(r)$ alanları ile ilgilidir. İkili bir ortamı n ile gösterirsek,

$$-\mu_n\omega^2u_n(r) = -\mu_n\omega_{0n}^2u_n(r) + e_n^*E_{local}(r),$$

$$P(r) = n_ne_n^*u_n(r) + n_n\alpha_nE_{local}(r) \qquad 3.96$$

Burada, $\mu_n = m_n M_n /(m_n + M_n)$ indirgenmiş kütledir ve burada Lorentz bağıntısı ile,

$$E_{local}(r) = E(r) + \frac{4\pi}{3} P(r) \tag{3.97}$$

Üçlü bir ortamı m ile gösterip AC(BC) dipol çiftleri için, aşağıdaki denklemler yazılabilir,

$$\begin{aligned} &-\mu_{m,a(b)}\omega^2 u_{m,a(b)}(r) = -\mu_m \omega_{0m,a(b)}^2 u_{m,a(b)}(r) + e^*_{m,a(b)} E_{local}(r), \\ &P(r) = n_m [y e^*_{m,a} u_{m,a}(r) + (1-y) e^*_{m,b} u_{m,b}(r)] + n_m \alpha_m E_{local}(r). \end{aligned} \tag{3.98}$$

İkili malzeme için, Huang-Born teorisinden şunları yazabiliriz,

$$\begin{aligned} &\ddot{u} = -\omega_{TO}^2 u + \left(\frac{V}{4\pi\mu N}\right)^{1/2} \sqrt{\in(0) - \in(\infty)}\,\omega_{TO} E \\ &P = \left(\frac{\mu N}{4\pi V}\right)^{1/2} \sqrt{\in(0) - \in(\infty)}\,\omega_{TO} u + \left[\frac{\in(\infty) - 1}{4\pi}\right] E \end{aligned} \tag{3.99}$$

Bu denklem çifti, hesaplamaları yapmada ve kutupsal tek eksenli malzemelerdeki optik fononları gösteren makroskopik denklemlerin türetilmesi için iyi bir başlangıç noktasıdır.

Loudon'un tek eksenli kristal modelinde, $\in_{\|}$, c-eksenine paralel yönde dielektrik sabiti ve $\in_{\perp}$, c-eksenine dik yönde diğer dielektrik sabiti olarak alınır. Bu modelde, Huang-Born denklemlerinden ayrı bir denklem setine ihtiyaç vardır. n ile gösterilen bir ortam için yerdeğiştirme, polarizasyon ve dielektrik sabiti,

$$\begin{aligned} &\ddot{u}_{\perp,n} = -\omega_{TO,\perp,n}^2 u_{\perp,n} + \sqrt{\frac{V}{4\pi\mu_n N}} \sqrt{\in(0)_{\perp.n} - \in(\infty)_{\perp,n}}\,\omega_{TO,\perp,n} E_{\perp,n} \\ &P_{\perp,n} = \sqrt{\frac{\mu_n N}{4\pi V}} \sqrt{\in(0)_{\perp.n} - \in(\infty)_{\perp,n}}\,\omega_{TO,\perp,n} u_{\perp,n} + \left[\frac{\in(\infty)_{\perp,n} - 1}{4\pi}\right] E_{\perp,n} \end{aligned} \tag{3.100}$$

$$\in_{\perp,n}(\omega) = \in_{\perp,n}(\infty)\left(\frac{\omega^2 - \omega_{LO,\perp,n}^2}{\omega^2 - \omega_{TO,\perp,n}^2}\right)$$

Paralel bileşen için benzer denklemlerin verilişi,

$$\ddot{u}_{\|,n} = -\omega_{TO,\|,n}^2 u_{\|,n} + \sqrt{\frac{V}{4\pi\mu_n N}}\sqrt{\in(0)_{\|,n} - \in(\infty)_{\|,n}}\,\omega_{TO,\|,n} E_{\|,n}$$

$$P_{\|,n} = \sqrt{\frac{\mu_n N}{4\pi V}}\sqrt{\in(0)_{\|,n} - \in(\infty)_{\|,n}}\,\omega_{TO,\|,n} u_{\|,n} + \left[\frac{\in(\infty)_{\|,n} - 1}{4\pi}\right] E_{\|,n}$$

$$\in_{\|,n}(\omega) = \in_{\|,n}(\infty)\left(\frac{\omega^2 - \omega_{LO,\|,n}^2}{\omega^2 - \omega_{TO,\|,n}^2}\right) \qquad 3.101$$

Loudon'ın modelindeki bu altı denklem, hiç serbest yük olmadığı durumda, aşağıdaki üç elektrostatik denklemle tamamlanmalıdır. DCM yaklaşımında, optik fonon modları gecikmesiz limitte klasik elektrostatik denklemleri sağlar,

$$\begin{aligned} &E(r) = -\nabla\phi\,(r) \\ &D(r) = E(r) + 4\pi\,P(r) \\ &D(r) = \in_{\perp}(\omega) E_{\perp}(r)\hat{\rho} + \in_{\|}(\omega) E_{\|}(r)\hat{z} \\ &\nabla . D(r) = 0 \end{aligned} \qquad 3.102$$

Yukarıdaki dokuz denklemlik set, würtzite kristallerdeki taşıyıcı-optik fonon dispersiyonunu tanımlamak için uygun bir temel oluşturur.

Nanoyapılardaki taşıyıcı-fonon etkileşimlerine ilişkin çalışmada doluluk oranı prensibini kullanmak uygundur. Bu prensipte fonon sistemi, basit bir harmonik Hamiltoniyen tarafından modellenir. Yer ve momentumun bilinen eşlenik değişkenleri, alçaltma ve yükseltme operatörleriyle yer değiştirir. Bu alçaltma ve yükseltme operatörleri, herbiri belirli bir sayıda fonona sahip olan durumlarda çalışırlar. Özellikle q dalga vektörüne ait n_q fononlarının durumuna göre hareket eden yükseltme operatörü,

fonon numarasını $n_q + 1$'e yükseltir,öte yandan fonon alçaltma operatörü de fonon numarasını $n_q - 1$'e indirir.

q dalga-vektörüne ait fonon modu ile ilgili harmonik osilatörü tanımlayan Hamiltoniyen aşağıdaki gibidir:

$$H_q = \frac{P_q^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_q^2 u_q^2 \qquad 3.103$$

a_q ve $a_q^\dagger$ operatörlerini gösterirsek,

$$a_q = \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} u_q + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_q}} P_q \qquad 3.104$$

$$a_q^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} u_q - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_q}} P_q$$

Burada,

$$\begin{aligned} a_q^\dagger \; a_q &= \left(\sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} u_q - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_q}} P_q \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_q}} P_q \right) \\ &= \frac{1}{2} \; \frac{m\omega_q^2}{\hbar\omega_q} \; u_q^2 + \frac{1}{2m} \frac{1}{\hbar\omega_q} \; P_q^2 + \frac{i}{2\hbar} [u_q, P_q] \end{aligned} \qquad 3.105$$

Komütatör özelliğinden; $\left[u_q, P_q\right] \equiv u_q P_q - P_q u_q = i\hbar$,

$$\frac{P_q^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_q^2 u_q^2 \; = \; \hbar\omega_q \left(a_q^\dagger \; a_q + \frac{1}{2} \right) \qquad 3.106$$

$u(r)$, u_q modları üzerinden bir Fourier serisidir. Fonon absorbsiyon süreçlerinde, fonon gelen dalga olarak görünür ve $e^{i(qr-\omega t)}$ sabiti, fonon alanları ile ilgili genlikleri çoğaltır. Aynı şekilde, fonon emisyon sürecinde, fonon giden bir dalga olarak görülmekte ve $e^{i(-qr-\omega t)}$ sabiti, fonon alanlarıyla ilgili genlikleri çoğaltır. Ayrıca, herbir

gelen ya da giden fonon bir birim polarizasyon vektörü ile ilişkilenecektir. Bu birim polarizasyon vektörleri gelen dalgalar için $\hat{e}_{q.j}$ ile, giden dalgalar içinse $\hat{e}^{*}_{q.j}$ ile gösterilecektir.

u_q'nın Fourier dönüşümü,

$$\begin{aligned} u(r) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q} \sum_{j=1,2,3} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_q}} \left(a_q e^{iq.r} \hat{e}_{q.j} + a_q^{\dagger} e^{-iq.r} \hat{e}^{*}_{q,j} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q} \sum_{j=1,2,3} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_q}} \hat{e}_{q.j} \left(a_q + a_{-q}^{\dagger} \right) e^{iq.r} \equiv \sum_{q} u(q) e^{iq.r} \end{aligned} \qquad 3.107$$

Burada q'nın Brillouin bölgesindeki bütün dalga-vektörleri üzerinden toplamı alınır. Burada iki ana değişiklik söz konusu olur:

1) Faz boşluğu sınırlanır
2) fononun düzlem-dalga yapısı değişir.

Denklem 3.107'den görüldüğü gibi hacimsel yapılarda tüm uzay üzerinden işlem yapılırken, heteroyapılarda q üzerinden toplam alınır. Ayrıca, a_q ve $a_q^{\dagger}$'ın u_q ve P_q aracılığıyla tanımlarından yola çıkarak, aşağıdaki sonuç ortaya çıkar,

$$\begin{aligned} u'_q &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_q}} \left(a'_q + a'^{\dagger}_q \right) \\ \frac{P'_q}{m\omega_q} &= -i \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_q}} \left(a'_q - a'^{\dagger}_q \right) \end{aligned} \qquad 3.108$$

Burada şu dönüşümler de ilave edilmiştir: $a'_q \to -ia_q$ ve $a'^{\dagger}_q \to +ia^{\dagger}_q$. Bu değişiklikler ile aşağıdaki sonuca varırız:

$$u_q' \to \frac{P_q}{m\omega_q}$$
$$\frac{P_q'}{m\omega_q} \to -u_q \qquad 3.109$$

Bu kanonik dönüşüm ister u_q ve P_q ile ilgili olarak ifade edilsin ister a_q ve $a_q^\dagger$ ile ilgili olarak ifade edilsin, harmonik osilatör Hamiltoniyenini değiştirmez.

Yarıiletkenlerdeki en önemli taşıyıcı-fonon saçılımı mekanizmalarından birisi, yük taşıyıcılarının, pozitif ve negatif iyonların göreceli yerdeğiştirmesiyle üretilen P(r) elektrik polarizasyonu ile etkileşmesiyle olmaktadır. GaAs, InP ve GaN gibi düşük-kusurlu polar yarıiletkenlerde, oda sıcaklığında polar yarıiletkenlerdeki taşıyıcı saçılımı, bu polar-optik fonon (POP) saçılım mekanizması ile kontrol edilmektedir.

Fröhlich, POP-taşıyıcı etkileşimini doğru şekilde formülleştirdiği için Fröhlich etkileşimi olarak adlandırılmaktadır. Polarizasyonla arasındaki ilişki,

$$\nabla^2 \varphi_{Fr}(r) = 4\pi e \nabla . P(r) \qquad 3.110$$

Fonon alçaltma ve yükseltme operatörleri cinsinden, P(r) aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$P(r) = \xi \sum_{j=1,2,3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left(a_q e^{iq.r} e_{q.j} + a_q^\dagger e^{-iq.r} e_{q.j}^* \right) \qquad 3.111$$

O halde,

$$\nabla . P(r) = \sum_{j=1,2,3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left(a_q e^{iq.r} qi.e_{q.j} - a_q^\dagger e^{-iq.r} qi.e_{q,j}^* \right) \qquad 3.112$$

ifadenin 4π ile çarpımı,

$$4\pi\nabla.P(r) = 4\pi i\xi \sum_{j=1,2,3} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left(a_q e^{iq.r} q.e_{q.j} - a_q^{\dagger} e^{-iq.r} q.e_{q.j}^{*}\right) \qquad 3.113$$

GaAs gibi birim hücre başına iki atoma sahip polar kristalin durumunu ele alalım. P(r)'ye baskın katkı, pozitif ve negatif yük düzlemleri arasındaki dik mesafenin farklılık gösterdiği fonon modlarından gelmektedir. Bu tür modlar LO modlarıdır. Çünkü LO modları durumu için $e_{q.j}$, q' ya paraleldir. Bununla birlikte; TO fonon modları için yük düzlemleri birbirlerini kaydırır fakat farklı yük düzlemleri arasındaki dik uzaklık değişmez. Bu yüzden TO modları P (r) 'ye ihmal edilebilir katkı sağlarlar. TO fononları için $e_{q,j}.q = 0$. Bu nedenle,

$$4\pi\nabla.P(r) = 4\pi i\xi \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left(a_q e^{iq.r} q - a_q^{\dagger} e^{-iq.r} q\right) \qquad 3.114$$

Fröhlich etkileşimi ile ilgili potansiyel enerjinin verilişi,

$$H_{Fr} = \phi_{Fr}(r) = -4\pi ie\xi \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{q}\left(a_q e^{iq.r} - a_q^{\dagger} e^{-iq.r}\right) \qquad 3.115$$

LO modları için,

$$\begin{aligned} H_{Fr} = \phi_{Fr}(r) &= -4\pi ie\xi \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3 q}\left(a_q e^{iq.r} - a_q^{\dagger} e^{-iq.r}\right) \\ &= -i\sqrt{\frac{2\pi e^2\hbar\omega_{LO}}{V}\left[\frac{1}{\in(\infty)} - \frac{1}{\in(0)}\right]}\sum_q \frac{1}{q}\left(a_q e^{iq.r} - a_q^{\dagger} e^{-iq.r}\right) \end{aligned} \qquad 3.116$$

Bu noktada yeniden Loudon'un modeline dönersek; c-eksenine dik (paralel) yerdeğişimini kullanmak suretiyle,

$$u(r)_{\perp(\|)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q} \sum_{j=1,2,3} \sqrt{\frac{h}{2m\omega_q}} \hat{e}_{q.j.\perp(\|)} \left(a_q + a_{-q}^{\dagger} \right) e^{iq.r} \qquad 3.117$$

ve

$$\phi(r)_{\perp,(\|)} = \sum_{q} \phi(q)_{\perp,(\|)} e^{iq.r} \qquad 3.118$$

Elektrik alanın verilişi,

$$E(r)_{\perp,(\|)} = -\nabla \phi(r)_{\perp,(\|)} = -iq \sum_{q} \phi(q)_{\perp,(\|)} e^{iq.r} \qquad 3.119$$

$m = \mu_n$, $\omega^2 = \omega_q^2$ olarak alınmakta ve $u(r,t)$ için zamana sinusoidal bağlılık olduğu varsayılmaktadır. (Lee ve ark 1997),

$$\begin{aligned} &(\omega_{TO,\perp,(\|),n}^2 - \omega_q^2) \sqrt{\frac{h}{2\mu_n N \omega_q}} \hat{e}_{q.j.\perp(\|)} \left(a_q + a_{-q}^{\dagger} \right) \\ &\quad = \sqrt{\frac{V}{4\pi\mu_n N}} \sqrt{\in(0)_{\perp(\|),n} - \in(\infty)_{\perp(\|),n}} \, \omega_{TO,\perp(\|),n} (-i) q_{\perp(\|)} \phi(q) \end{aligned} \qquad 3.120$$

$\hat{e}_{q,j,\perp}^2 + \hat{e}_{q,j,\|}^2 = 1$

$q_\perp = q \sin\theta$, $q_\| = q \cos\theta$ ve θ (burada z-ekseni olarak alınan) q ve c-ekseni arasındaki açıdır.

$$\sqrt{\frac{2\pi h}{V\omega_q}} \hat{e}_{q,j,\perp,(\|)} \left(a_q + a_{-q}^{\dagger} \right) = \frac{\sqrt{\in(0) - \in(\infty)_{\perp,(\|),n}} \, \omega_{TO,\perp,(\|),n}}{\omega_{TO,\perp,(\|),n}^2 - \omega_q^2} \qquad 3.121$$

Böylece,

$$\begin{aligned} \phi(q) = -i \sqrt{\frac{2\pi h}{Vq^2\omega_q}} &\left(a_q + a_{-q}^{\dagger} \right) \left(\omega_{TO,\perp}^2 - \omega_q^2 \right) \left(\omega_{TO,\|}^2 - \omega_q^2 \right) \\ &\times \{ [\in(0)_\perp - \in(\infty)_\perp] \omega_{TO,\perp}^2 (\omega_{TO,\|}^2 - \omega_q^2)^2 \sin^2\theta \\ &+ [\in(0)_\| - \in(\infty)_\|] \omega_{TO,\|}^2 (\omega_{TO,\perp}^2 - \omega_q^2)^2 \cos^2\theta \}^{-1/2} \end{aligned} \qquad 3.122$$

Hacimsel tek-eksenli malzeme için elektron-optik-fonon Hamitoniyeni,

$$H = \sum_q (-e)\phi(q) e^{iq.r}(a_q + a_{-q}^{\dagger})$$

$$= i\sum_q \sqrt{\frac{2\pi e^2 h}{V\omega_q}} \frac{1}{q} e^{iq.r}(a_q + a_{-q}^{\dagger})(\omega_{TO,\perp}^2 - \omega_q^2)(\omega_{TO,\parallel}^2 - \omega_q^2)$$

$$\times\{[\in(0)_\perp - \in(\infty)_\perp]\omega_{TO,\perp}^2(\omega_{TO,\parallel}^2 - \omega_q^2)^2 \sin^2\theta$$

$$+[\in(0)_\parallel - \in(\infty)_\parallel]\omega_{TO,\parallel}^2(\omega_{TO,\perp}^2 - \omega_q^2)^2 \cos^2\theta\}^{-1/2}$$

$$= i\sum_q \left\{ \frac{4\pi e^2 \hbar V^{-1}}{(\partial/\partial\omega)[\in(\omega)_\perp \sin^2\theta + \in(\omega)_\parallel \cos^2\theta]} \right\} \frac{1}{q} e^{iq.r}(a_q + a_{-q}^{\dagger}) \qquad 3.123$$

Genel Lyddane-Sahch-Teller bağıntısından,

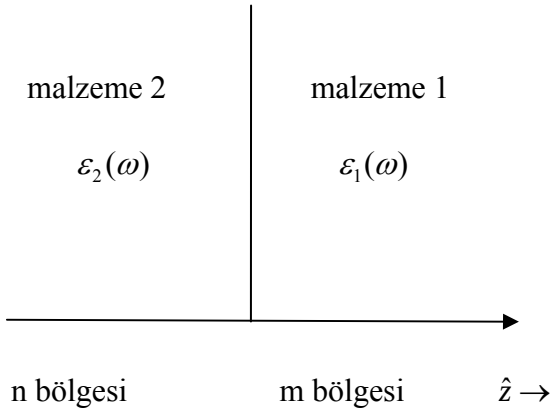
$$\frac{\omega_{TO}^2 - \omega_{LO}^2}{\omega_{TO}\sqrt{\in(0) - \in(\infty)}} = -\omega_{LO}\left[\frac{1}{\in(\infty)} - \frac{1}{\in(0)}\right]^{1/2} \qquad 3.124$$

3.3.2. Boyutsal olarak sınırlı yapılarda optik modlar

3.3.2.1. Kesit modları için dielektrik süreklilik modeliyle arayüzey modlarının normalizasyonu

Dielektrik süreklilik modeli, kesit modları olarak adlandırılan bir sınırlı optik fonon modları setini gösterir. Bu kesit modları, herbir arayüzeyde dielektrik süreklilik modelini ve elektrostatik sınır koşullarını uygulayarak belirlenebilir. Normal mod frekansları ve birbirine dik sınırlı fonon modları, dielektrik süreklilik modelinde ortaya çıkan denklemlerin eşzamanlı çözümüyle elde edilir. Bu durum potansiyel $\Phi(\mathrm{r})$ nin ve $D(r)$'nin dik bileşeninin herbir arayüzeyde sürekli olduğuna dair sınır koşullarına bağlıdır. Arayüzeyleri z-eksenine dik alalım. $R_i = (z_i, z_{i+1})$ bölgesindeki elektrostatik potansiyel $\Phi_i(r)$ ve onun iki boyuttaki Fourier dönüşümü olan $\Phi_i(q,z)$ aşağıdaki denklemle birbirlerine bağlıdır,

$$\Phi_i(r) = \sum_q \Phi_i(q,z) e^{iq.\rho} \qquad 3.125$$



Şekil 9. İki faklı malzemeyle oluşturulmuş tek-heteroarayüzeyli yapı

Burada $\rho \equiv (x,y)$ ve q ; xy-düzleminde iki boyutlu dalga vektörüdür; yani, $q = q_x\hat{x} + q_y\hat{y}$, $\hat{x}$ ve $\hat{y}$ birim vektörlerdir. O halde,

$$\begin{aligned} E_i(r) &= -\nabla\Phi_i(r) = \sum_q E_i(q,z) e^{-iq.\rho} \\ P_i(r) &= x_i(\omega) E_i(r) = \sum_q P_i(q,z) e^{-iq.\rho} \end{aligned} \qquad 3.126$$

Mod normalizasyon koşulundan, fononun modu q ise enerjisi $\hbar\omega_q$ olmalıdır. Şekil 9'da gösterildiği gibi z=0'da n ve m olmak üzere iki bölgeye ayrılan tek bir arayüzey durumu için bu koşulun verilişi,

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty L^2[\sqrt{(\mu_n n_n)}u_n(q,z)]^*.[\sqrt{(\mu_n n_n)}u_n(q,z)]\ dz \\ &+y\int_{-\infty}^0 L^2\sqrt{(\mu_m n_m)}u_{m.a}(q,z)]^*.[\sqrt{(\mu_m n_m)}u_{m.a}(q,z)]dz \\ &+(1-y)\int_{-\infty}^0 L^2\sqrt{(\mu_m n_m)}u_{m.b}(q,z)]^*.[\sqrt{(\mu_m n_m)}u_{m.b}(q,z)]dz = \frac{\hbar}{2\omega_q} \end{aligned} \qquad 3.127$$

Bu bir-heteroarayüzeyli sistem için bölge 1 ve 2'de çeşitlenen fonon enerji spektrumuna bağlı olarak üç farklı optik-fonon türü ortaya çıkar. Bu modlar, arayüzey (IF), half-space (HS) ve propagating (PR) modlardır.

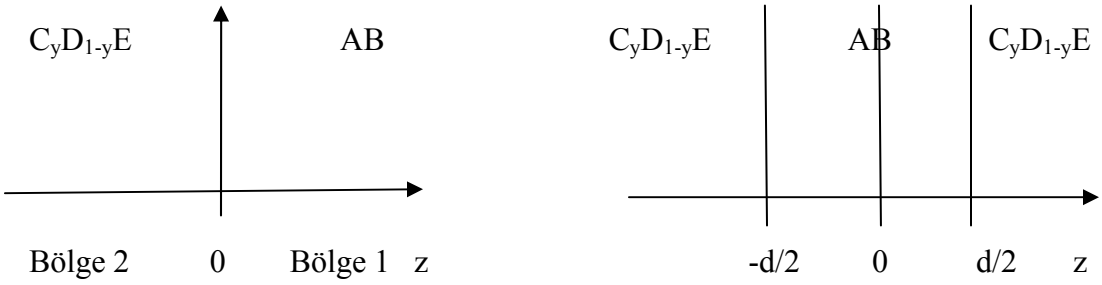
Normalizasyon işlemini örneklerle açıklayabilmek için, bu bir-heteroarayüzeyli yapı için mevcut olan optik fonon modları türlerinden bir tanesini alalım. Dalga denkleminin özellikle üslü karakteri olan çözümlerini alalım. Arayüzey (IF) modları olarak bilinen bu modlar için aşağıdakini yazabiliriz,

$$\Phi(r) = \sum_q \Phi(q,z) e^{-iq.\rho} = \sum_q c e^{-q|z|} e^{-iq.\rho} \qquad 3.128$$

Elektrik alan ve polarizasyon ise,

$$E_i(q,z) = \begin{cases} c(iqe^{-qz}\hat{q} - qe^{-qz}\hat{z}) & z \geq 0 \\ c(iqe^{qz}\hat{q} + qe^{qz}\hat{z}) & z \leq 0 \end{cases}$$
$$P_i(q,z) = \begin{cases} x_i c(iqe^{-qz}\hat{q} - qe^{-qz}\hat{z}) & z \geq 0 \\ x_i c(iqe^{qz}\hat{q} + qe^{qz}\hat{z}) & z \leq 0 \end{cases} \qquad 3.129$$

Burada $\hat{q}$, $q \equiv (q_x, q_y)$ yönünü belirleyen birim vektördür. Şekil 10'de gösterildiği gibi, n malzemesi , $z \geq 0$ bölge 1'yi dolduran ikili bir yarıiletken olsun ve m malzemesi de $z \leq 0$ bölge 2'i dolduran üçlü bir yarıiletken olsun,



Şekil 10. z ekseni örgünün ilerleme yönü olarak alınmıştır. AB'nin ikili bir yarıiletken ve $C_yD_{1-y}E$ nin üçlü bir yariletken olduğu, tekli heteroyapı ve çift-heteroyapı. Kim ve Stroscio (1990)

Sağ taraftaki 1. malzeme için,

$$-\mu_1\omega^2 u_1(q,z) = -\mu_1\omega_{01}^2 u_1(q,z) + e_1^* E_{local}(r) \tag{3.130}$$

$$\begin{aligned} P_1(q,z) &= n_1 e_n^* u_1(q,z) + n_1\alpha_1 \frac{\mu_1\left(\omega_{01}^2 - \omega^2\right)}{e_1^*} u_1(q,z) \\ &= n_1 e_1^* \left[1 + \frac{\alpha_1\mu_1(\omega_{01}^2 - \omega^2}{e_1^{*2}}\right] u_1(q,z) \\ &= x_1 c(iqe^{-qz}\hat{q} - qe^{-qz}z) \end{aligned} \tag{3.131}$$

ve yerdeğiştirme,

$$u_1(q,z) = \frac{x_1 c(iqe^{-qz}\hat{q} - qe^{qz}\hat{z})}{n_1 e_1^*[1 + \alpha_1\mu_1(\omega_{01}^2 - \omega^2)/e_1^{*2}]} \tag{3.132}$$

2. malzeme için, iki sürükleyici osilatör denklemi vardır: birisi a ile gösterilen CE çifti için, diğeri ise b ile gösterilen DE çifti içindir,

$$\begin{aligned} -\mu_{2,a(b)}^2\omega^2 u_{2,a(b)}(q,z) = &-\mu_{2,a(b)}\omega_{02,a(b)}^2 u_{2,a(b)}(q,z) \\ &+ e_{2,a(b)}^* E_{local}(q,z) \end{aligned} \tag{3.133}$$

elektrik polarizasyonu,

$$\begin{aligned} P_2(q,z) &= n_2[(1-y)e_{2b}^* u_{2b}(q,z) + ye_{2a}^* u_{2a}(q,z)1 + n_2\alpha_2 E_{local}(q,z) \\ &= n_2\left[\frac{ye_{2a}^{*2}}{\mu_{2,a}(\omega_{02,a}^2 - \omega^2)} + \frac{(1-y)e_{2b}^{*2}}{\mu_{2,b}\left(\omega_{02,b}^2 - \omega^2\right)} + \alpha_2\right] E_{local}(q,z) \\ &= x_2 c(iqe^{qz}\hat{q} + qe^{qz}\hat{z}) \end{aligned} \tag{3.134}$$

Elektrik alan ve yerdeğiştirme ifadesi,

$$E_{local}(q,z)=\frac{x_2 c(iqe^{qz}\hat{q}+qe^{qz}\hat{z})}{n_2\left[\dfrac{ye_{2a}^{*2}}{\mu_{2,a}(\omega_{02,a}^2-\omega^2}+\dfrac{(1-y)e_{2b}^{*2}}{\mu_{2,b}(\omega_{02,b}^2-\omega^2)}+\alpha_2\right]}$$

$$u_{2,a(b)}(q,z)=\frac{e_{2,a(b)}^{*}}{\mu_{2,a(b)}(\omega_{02,a(b)}^2-\omega^2)} \qquad 3.135$$

$$x\frac{x_2 c(iqe^{qz}\hat{q}+qe^{qz}\hat{z}}{n_2\left[\dfrac{ye_{2a}^{*2}}{\mu_{2,a}\left(\omega_{02,a}^2-\omega^2\right)}+\dfrac{\left(1-y\right)e_{2b}^{*2}}{\mu_{2},b\left(\omega_{02,b}^2-\omega^2\right)}+\alpha_2\right]}$$

Böylece,

$$\left(\frac{\hbar}{2\omega}\right)\frac{1}{L^2c^2}=\frac{\mu_1 n_1\chi_1^2 q}{\{n_1e_1^*[1+\alpha_1\mu_1e_1^{*-2}(\omega_{01}^2-\omega^2)]\}^2}$$
$$+\mu_{2a}n_2y\left[\frac{e_{2a}^{*}}{\mu_{2,a}}(\omega_{02,a}^2-\omega^2)\right]^2 q$$
$$x\left\{\frac{x_2^2}{n_2^2}\left[\frac{ye_{2a}^{*2}}{\mu_{2,a}(\omega_{02,a}^2-\omega^2)}+\frac{(1-y)e_{2b}^{*2}}{\mu_{2,b}(\omega_{02,b}^2-\omega^2)}+\alpha_2\right]^2\right\} \qquad 3.136$$
$$+\mu_{2b}n_2\left(1-y\right)\left[\frac{e_{2b}^{*}}{\mu_{2,b}}(\omega_{02,b}^2-\omega^2)\right]^2 q$$
$$x\left\{\frac{x_2^2}{n_2^2}\left[\frac{ye_{2a}^{*2}}{\mu_{2,a}(\omega_{02,a}^2-\omega^2)}+\frac{(1-y)e_{2b}^{*2}}{\mu_{2,b}(\omega_{02,b}^2-\omega^2)}+\alpha_2\right]^2\right\}$$

Burada birinci terimdeki integral aşağıdaki ifade kullanılarak gerçekleştirilmiştir,

$$\int_0^\infty dz(iqe^{-qz}\hat{q}-qe^{qz}z)*.(iqe^{-qz}\hat{q}-qe^{-qz}\hat{z})=\int_0^\infty dz\,2q^2e^{-2qz}=q \qquad 3.137$$

ikinci ve üçüncü integraller ise aşağıdaki ifadelerle gerçekleştirilmiştir,

$$\int_{-\infty}^0 dz(iqe^{qz}\hat{q}-qe^{qz}\hat{z})*.(iqe^{qz}\hat{q}-qe^{qz}\hat{z})=\int_0^\infty dz\,2q^2e^{-2qz}=q \qquad 3.138$$

Böylece, normalizasyon sabiti c belirlenir. Bu ifadeyi Wendler'in Green fonksiyon yaklaşımıyla türettiği koşulları kullanarak yeniden yazmak mümkündür. Wendler'in

dielektrik polarizibilitenin etkisi işlemi boyutça sınırlı yapılarda optik fononlar üzerine yapılan pekçok çalışma için temel sağlar. Bu noktada yararlı olan koşullar şöyledir,

$$
\begin{aligned}
&\in_n(\infty) = 1 + 4\pi \frac{n_n \alpha_n}{1 - \frac{4}{3}\pi n_n \alpha_n}, \\
&\omega_{LO,n}^2 = \omega_{0,n}^2 + \frac{2}{3}\omega_{plasma,n}^2 \frac{1}{1 + \frac{8}{3}\pi n_n \alpha_n}, \\
&\omega_{TO,n}^2 = \omega_{0,n}^2 + \frac{1}{3}\omega_{plasma,n}^2 \frac{1}{1 - \frac{4}{3}\pi n_n \alpha_n}, \\
&\omega_{LO,n}^2 - \omega_{TO,n}^2 = \frac{2}{3}\omega_{plasma,n}^2 \frac{1}{1 + \frac{8}{3}\pi n_n \alpha_n} + \frac{1}{3}\omega_{plasma,n}^2 \frac{1}{1 - \frac{4}{3}\pi n_n \alpha_n} \\
&\qquad = \frac{\omega_{plasma,n}^2}{\left(1 + \frac{8}{3}\pi n_n \alpha_n\right)\left(1 - \frac{4}{3}\pi n_n \alpha_n\right)}
\end{aligned}
\qquad 3.139
$$

Lyddane–Sachs–Teller bağıntıları bu frekansları sağlar (Wendler 1985). Burada alt indis n; 1.malzemeyi ya da 2.malzemeyi temsil etmektedir. Bu bağıntılarda, plazma frekansının karesi, $\omega_{plasma,n}^2$ aşağıdaki gibi verilir,

$$\omega_{plasma,n,a(b)}^2 = 4\pi n_n e_{n,a(b)}^{*2} / \mu_{n,a(b)} \qquad 3.140$$

Wendler'in bu sonuçları ile, doğru ancak uzun bir türev ortaya çıkar.

$$
\begin{aligned}
c &= -\left[\frac{\hbar}{2\omega}\left(\frac{8\pi\omega}{L^2 q}\right)\right]^{1/2}\left[\frac{\partial E_1(\omega)}{\partial\omega} + \frac{\partial E_2(\omega)}{\partial\omega}\right]^{-1/2} \\
&= -\left(\frac{4\pi\hbar}{L^2 q}\right)^{1/2}\left[\frac{\partial E_1(\omega)}{\partial\omega} + \frac{\partial E_2(\omega)}{\partial\omega}\right]^{-1/2}
\end{aligned}
\qquad 3.141
$$

Potansiyelin verilişi,

$$\Phi(r)=\sum_q \Phi(q,z)e^{iq.\rho}=\sum_q ce^{-q|z|}e^{iq.\rho}$$
$$=\sum_q\left(\frac{4\pi\hbar}{L^2q}\right)^{1/2}\left[\frac{\partial E_1(\omega)}{\partial\omega}+\frac{\partial E_2(\omega)}{\partial\omega}\right]^{-1/2}e^{q|z|}e^{-ip.\rho} \qquad 3.142$$

Sonuç olarak, $\Phi(r)$'yi –e ile çarparak ve a_q ve $a_q^\dagger$'yi işleme dahil ederek, arayüzey (IF) optik fonon modu için etkileşim Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi yazılabilir (Kim ve ark. 1990),

$$H_{IF}=\sum_q\left(\frac{4\pi e^2\hbar}{L^2q}\right)^{1/2}\left[\frac{\partial E_1(\omega)}{\partial\omega}+\frac{\partial E_2(\omega)}{\partial\omega}\right]^{-1/2}e^{-q|z|}e^{iq.\rho}\left(a_q+a_{-q}^\dagger\right) \qquad 3.143$$

Burada $\hat{e}_{q,j}$ ve $\hat{e}_{q,j}^*$ boyuna birim vektörler olarak alınmıştır, çünkü dikkate alınan IF fonon modları boyuna optik (LO) fononlardır. Bu optik fonon modu için dispersiyon bağıntısı, elektrik yerdeğiştirme alanının dik bileşeninin, z=0'da sürekli olması gerekliliğinden verilmektedir,

$$\in_2(\omega)E_{2,z}|_{z=0}=\in_1(\omega)E_{1,z}|_{z=0} \qquad 3.144$$

Bu koşuldan, IF optik fononlarına ait frekansların $\in_1(\omega)+\in_2(\omega)=0$ koşulunu sağlaması gerektiğini görüyoruz. Burada optik fonon frekansları $\in(\omega)=0$ şartını sağlamalıdır. Ayrıca, bu durumun herhangi bir boyuna elektromanyetik dalganın oluşması için gerekli koşul olması nedeniyle, boyuna optik fononların frekanslarının, bu dispersiyon bağıntısını sağlaması gerekir.

İki bölgeli, tek-heteroarayüzeyli yapı durumunda, IF boyuna optik fonon frekansları hem $\in_1(\omega)$'ye hem de $\in_2(\omega)$'ye bağlıdır. Bu yüzden, IF optik fonon modları her iki malzemenin ortak modudur. Bu mod için, heteroarayüzeyden uzaklaştıkça, elektrostatik fonon potansiyeli eksponansiyel olarak aniden düşer ve IF fonon elektrostatik potansiyeli arayüzeyde tek bir değere sahiptir. Bundan dolayı, böyle bir IF optik fonon modu, iki bölgeli heteroyapı boyunca tek bir ortak elektrostatik fonon potansiyeline sahip olmalıdır.

IF optik fonon modları, iki bölgeli, tekli-heteroyapı durumu için, tam bir optik fonon seti oluşturmaz. Bu IF modları $|z| \rightarrow \infty$ için eksponansiyel olarak kaybolurlar ancak hacimsel optik fononların heteroarayüzeyin kaldırıldığı bölgelerde mevcut olması gerekir. Buradaki modlara half-space modlar denir. Sınırlı ve arayüzey optik fonon modların çeşitli setlerine; elektrostatik sınır koşullarını sağlayan tabaka modları, tabaka modlarının yeniden formülüze olmasıyla Huang-Zhu modları ve mekanik sınır koşullarını sağlayan guided modları dahil olmuştur. Bütün fonon setleri, her bir setin bütün ve ortogonal fonon modları setinden oluşması koşuluyla, aynı intra-altbant ve inter-altbant saçılma oranlarını öngörürler.

3.3.2.2. Kesit modları için elektron-fonon etkileşimi

İlk olarak dielektrik bir kesitteki elektron-fonon etkileşimlerine dair Licari ve ark.(1977) tarafından sunulan teoriyi dikkate almak bilgilendiricidir. Bu teoride, x ve y yönlerinde sonsuz genişlikte tek bir dielektrik kesit, -a ve +a'da levhanın yüzleriyle birlikte ve z ≥ a olan bölgesindeki bir vakum tarafından sınırlanmış kesitin yüzeyi ile bulunmaktadır. Bu dielektrik kesitin içerisinde, $\nabla.D = 0$,

$$D(r) = \in(\omega)E(r) = E(r) + 4\pi P(r) \qquad 3.145$$

Burada, $\in(\omega)$ kesitin dielektrik sabiti ve P(r) kesitteki optik fononlar ile ilgili elektrik polarizasyonudur. Basamak potansiyeli,

$$E(r) = -\nabla\phi(r) \qquad 3.146$$

Sistem dönüşümsel xy-düzleminde sabit olduğu için, $\phi(r)$, $\phi(r) = \phi(z)e^{iq_{||}\cdot\rho}$ şeklinde alınırsa, $\rho = (x, y)$ ve $q_{||} = (q_x, q_y)$

$$\in(\omega)\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q_{||}^2\right)\phi(z) = 0 \qquad 3.147$$

Burada $q_{\|}^2 = q_x^2 + q_y^2$ dir. Bu denklem $\in(\omega) = 0$ ya da $\left(\partial^2 / \partial^2 z - q_{\|}^2\right)\phi(z) = 0$ şartını sağlamalıdır. $\in(\omega)$ genel ifadesinden ve Lydanne–Sachs–Teller bağıntısından, $\in(\omega) = 0$ şartı, $\omega = \omega_{LO}$ olduğunda tekli-heteroarayüzey sistemi için sağlanır. Bu durumda, keyfi fonksiyon, $\phi(z)$, dalga denkleminin bir çözümüdür. Kesit içerisinde, (-a,+a) aralığında, aşağıdaki şekildedir,

$$\phi(z) = \sum_{q_z} (\phi_1 \sin q_z z + \phi_2 \cos q_z z) \qquad 3.148$$

Kesitin dışında, $\in = 1$ olduğu yerde, çözümler $\phi(z) = \phi_{\pm} \exp\left(\pm\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, z\right)$ formundadır, burada pozitif işaret, z ≤ a, negatif işaret ise z ≥ a için sağlanır. $\phi_1, \phi_2, \phi_+, \phi_-$ sabitleri, genel sınır koşullarınca sağlanır, E'nin tanjantsal bileşeni ve D'nin dik bileşeni, $z = \pm a$ 'da süreklidir. Bu koşullardan $\phi_{\pm} = 0$ olduğu görülür ve bu mod için $\phi(z), E(r), D(r)$ tabakayı çevreleyen bölgelerde sıfırdır. Özellikle $\phi(z)$ yüzeylerinde kaybolur. (-a, +a) aralığında z için, sınır koşulları $\phi_1 = 0$ veya $\phi_2 = 0$ tarafından sağlandığından iki polarizasyon vektörüne karşılık iki çözüm vardır:

$$P_+^m(r) = \frac{\phi_2}{4\pi a} e^{iq_{\|}\cdot\rho} i\left(iq_{II} a \quad \cos\frac{m\pi}{2a} z - \hat{z}\frac{m\pi}{2} \sin\frac{m\pi}{2a} z \right) \qquad m = 1,\ 3,\ 5,\ \ldots,$$

$$P_-^m(r) = \frac{\phi_1}{4\pi a} e^{iq_{\|}\cdot\rho} i\left(iq_{II} a \quad \sin\frac{m\pi}{2a} z - \hat{z}\frac{m\pi}{2} \cos\frac{m\pi}{2a} z \right) \qquad m = 2,\ 4,\ 6,\ \ldots, \qquad 3.149$$

Bu durağan modlar, günümüzde yaygın olarak, bir kesitteki sınırlı optik fonon modları olarak bilinmektedir. Kalan sonuç, kesit içerisinde $\in(\omega) \neq 0$ durumuna karşılık gelir,

$$\varphi(x) = \varphi_1 \exp(+\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, z) + \varphi_2 \exp(-\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, z) \qquad 3.150$$

z ≥ a olduğunda, $\phi(z) = \phi_{\pm} \exp(\pm\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, z)$ çözümdür. Sınır koşulları modları aşağıdaki gibi sınrlamaktadır,

$$
\begin{aligned}
P_{+}^{0}(r) &= -\phi_1 \sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, \frac{1-\in}{4\pi} e^{iq_{\parallel}\cdot\rho} i \\
&\quad \times (i\hat{q}_{\parallel} \cosh\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, z + \hat{z} \sinh\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, z) \\
P_{-}^{0}(r) &= -\phi_1 \sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, \frac{1-\in}{4\pi} e^{iq_{\parallel}\cdot\rho} i \\
&\quad \times (i\hat{q}_{\parallel} \sinh\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, z + \hat{z} \cosh\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, z)
\end{aligned}
\qquad 3.151
$$

Bu son iki mod, 2a kalınlığındaki polar yarıiletkende yer alan, IF optik fonon modlarını tanımlamaktadır. Sınır koşulları, bu modlar için frekans çözümlerini,

$$
\frac{1+\in(\omega)}{1-\in(\omega)} = \pm\exp(-2\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, a) \qquad 3.152
$$

verir. Bu ifadeyi $\in(\omega) = \in(\infty) + [\in(0) - \in(\infty)]/(1 - \omega^2/\omega_{TO}^2)$ eşitliğini kullanarak aşağıdaki gibi yazabiliriz,

$$
\omega_{\pm}^2 = \omega_{TO}^2 \frac{[\in(0)+1] \mp [\in(0)-1]\exp\left(-\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, a\right)}{[\in(\infty)+1] \mp [\in(\infty)-1]\exp\left(-\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\, a\right)} \qquad 3.153
$$

Burada artı(+) işareti çift modu, eksi (-) işareti ise tek modu göstermektedir.

Licari ve ark. (1977) tarafından belirtildiği gibi, bu süreklilik modeli hem sınırlı LO fononlarını hem de IF arayüzey optik fononlarını belirlemede başarılıdır, çünkü her iki mod için de bir polarizasyon yük yoğunluğu mevcuttur. Daha da önemlisi hem hacimsel yük yoğunluğu olan $\rho' = -\nabla.P$ hem de yüzeysel yük yoğunluğu olan $\sigma' = -P.\hat{n}$, sınırlı LO modlarına katkıda bulunurlar; burada $\hat{n}$ yüzeye dik olan birim vektördür. IF modları için, yalnız σ' bir katkı sağlar. Açıkçası, bu modelde polarizasyon yükü, bu fonon modları ile ilişkili olan alanların kaynağı olarak hareket

eder. Enine modlar bu süreklilik yaklaşımı ile belirlenmez, çünkü bu tür modlar için, $\nabla.P = 0$ ve $P.\hat{n} = 0$ olur.

Licari ve ark.(1977), hacimsel bir yarıiletken için, sınır koşullarını, elektron-fonon etkileşim Hamiltoniyenine uygulayarak, elektron-fonon etkileşim Hamiltoniyenine dair çok aydınlatıcı bir fiziksel türetim sundular. Fröhlich etkileşimi için optik fononlar modellendiğinde, yalnızca sınır koşullarını almak yeterli olur; buna göre, akustik fononları modellemek için gereken elastik süreklilik sınır koşullarını dikkate almamız gerekmeyecektir. Daha önce ele aldığımız hacimsel Fröhlich etkileşimi için olan ifade ile başlarsak,

$$\begin{aligned} H_{Fr} &= -i\left\{\frac{2\pi e^2\hbar\omega_{LO}}{V}\left[\frac{1}{\in(\infty)}-\frac{1}{\in(0)}\right]\right\}^{1/2}\sum_q\frac{1}{q}\left(a_q+a_{-q}^{\dagger}\right)e^{-iq.r} \\ &= -i\sum_q\left\{\frac{2\pi e^2\hbar\omega_{LO}}{Vq^2}\left[\frac{1}{\in(\infty)}-\frac{1}{\in(0)}\right]\right\}^{1/2}\left(a_q+a_{-q}^{\dagger}\right)e^{-iq.r} \\ &= -i\sum_q V_q(a_q+a_{-q}^{\dagger})e^{-iq.r} \end{aligned} \qquad 3.154$$

Licari ve ark.(1997) , $q = (q_{\|},q_z)$ ifadesi ile $q_{\|}q_z > 0$ üzerinden toplamı alarak,

$$\begin{aligned} H_{Fr} = \sum_{q_{\|},q_z>0} V_q e^{-iq_{\|}.r}[&e^{iq_zz}\left(a_{q_{\|}.q_z}+a_{-q_{\|},-q_z}^{\dagger}\right) \\ &+e^{iq_zz}(a_{q_{\|},-q_z}+a_{-q_{\|},q_z}^{\dagger})] \end{aligned} \qquad 3.155$$

$e^{\pm iq_zz}$'i yazmak için $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ ifadesini kullanarak,

$$\begin{aligned} H_{Fr} = \sqrt{2}\sum_{q_{\|},q_z>0} &V_q e^{-iq_{\|}.r} \\ &\times\{\cos\ q_zz[a_+(q_{\|})+a_+^{\dagger}(-q_{\|})]+\sin q_zz[a_-(q_{\|})+a_-^{\dagger}(-q_{\|})]\} \end{aligned} \qquad 3.156$$

Burada alçaltma ve yükseltme operatörleri,

$$\begin{aligned} a_+(q_{\|}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{q_{\|},q_z}+a_{q_{\|},-q_z}) \\ a_-(q_{\|}) &= \frac{-i}{\sqrt{2}}(a_{q_{\|},q_z}+a_{q_{\|},-q_z}) \end{aligned} \qquad 3.157$$

$a_+^\dagger(-q_\parallel)$ ve $a_-^\dagger(-q_\parallel)$ operatörleri; x ve y yönlerinde düzlem dalgalar olarak yayılan, ancak z yönünde durağan modlar olarak, fononları tanımlar. $q_z = m\pi/2a$ olması nedeniyle, iki boyutlu kesit için Fröhlich Hamiltoniyeni şu şekli alır:

$$H_{Fr} = \left\{\frac{4\pi e^2\hbar\omega_{LO}}{V}\left[\frac{1}{\in(\infty)}-\frac{1}{\in(0)}\right]\right\}^{1/2}\sum_{q_{II}} e^{-iq_\parallel.r}$$
$$\times\left\{\sum_{m=1,3,5,\ldots}\frac{\cos(m\pi/2a)z}{[q_x^2+q_y^2+(m\pi/2a)^2]^{1/2}}[a_m+(q_\parallel)+a_{m+}^\dagger(-q_\parallel)]\right. \qquad 3.158$$
$$\left.+\sum_{m=2,4,6,\ldots}\frac{\sin(m\pi/2a)z}{[q_x^2+q_y^2+(m\pi/2a)^2]^{1/2}}[a_m+(q_\parallel)+a_{m-}^\dagger(-q_\parallel)]\right\}$$

Bu Hamiltoniyen, $z=\pm a$ için kaybolur. Çünkü Fröhlich etkileşim Hamiltoniyeni, - eϕ tarafından verilir ve dielektrik kesitteki fonon modları ile ilişkili alanları tanımlayan potansiyel ϕ(±a) = 0 olur. Bu Hamiltoniyeni, kesitteki IF optik fononlarının katkılarını içermez. Çünkü, $z=\pm a$ yani $H_{Fr}(a) = -e\phi(\pm a) = 0$ iken, sadece sınırlı optik fonon modları için sınır koşullarını karşılar. Licari ve ark. (1977) tarafından gösterildiği gibi, dielektrik kesitteki IF optik fonon modları için Fröhlich etkileşim Hamiltoniyeni şöyledir:

$$H_{Fr} = -\left\{\frac{2\pi e^2\hbar\omega_{TO}}{L^2}[\in(0)-\in(\infty)]\right\}^{1/2}$$
$$\times\sum_{q_{II}} e^{-iq_\parallel.r}\left(\frac{\sinh 2\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}{\sqrt{q_x^2+q_y^2}}\right)^{1/2} e^{-\sqrt{q_x^2+q_y^2}a} \qquad 3.159$$
$$\times\left\{G_+\left(\sqrt{q_x^2+q_y^2},z'\right)[a_{0+}(q_\parallel)+a_{0+}^\dagger(-q_\parallel)]\right.$$
$$\left.+G_-\left(\sqrt{q_x^2+q_y^2},z'\right)[a_{0-}(q_\parallel)+a_{0-}^\dagger(-q_\parallel)]\right\}$$

Burada

$$G_{+}\left(\sqrt{q_x^2+q_y^2},z'\right)=\frac{\cosh\sqrt{q_x^2+q_y^2}z' \;\; / \;\; \cosh\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}{[\in(\infty)+1]-[\in(\infty)-1]e^{-2\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}} \times\left\{\frac{[\in(\infty)+1]-[\in(\infty)-1]e^{-2\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}}{[\in(0)+1]-[\in(0)-1]e^{-2\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}}\right\}^{1/4} \quad 3.160$$

$$G_{-}\left(\sqrt{q_x^2+q_y^2},z'\right)=\frac{\sinh\sqrt{q_x^2+q_y^2}z' \;\; / \;\; \sinh\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}{[\in(\infty)+1]-[\in(\infty)-1]e^{-2\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}} \times\left\{\frac{[\in(\infty)+1]-[\in(\infty)-1]e^{-2\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}}{[\in(0)+1]-[\in(0)-1]e^{-2\sqrt{q_x^2+q_y^2}a}}\right\}^{1/4} \quad 3.161$$

olarak verilmektedir. 3.160'taki sonuçta, sadece iki IF optik fonon modu olması nedeniyle; fonon alçaltma ve yükseltme operatörleri m üzerinden toplanmaz. Sınırlı optik fonon modları için alçaltma ve yükseltme operatörlerindeki m alt-karakteri, 0 ile değiştirilir; ve alt-karakterdeki artı işareti çift moda, eksi işareti ise tek moda işaret eder. İki heteroarayüzey tarafından sınırlanmış olan bölge dışında ($\in=1$ olduğu özel durumda) bir çift-heteroarayüzeyli heteroyapıya ait optik modlar olarak tanınır. Bütün malzeme kesitlerinin kutupsal yarıiletkenlerden oluştuğu durum, çift-arayüzeyli bir heteroyapı için, sıkça kullanılan üç komple optik fonon setine karşılık gelmektedir.

3.3.2.3. Sınırlı würtzite yapılarda kesit modları

Boyutsal olarak sınırlanmış würtzite yarıiletken yapılar için kesit modları hesaplanırken, Loudon'ın tek-eksenli yarıiletken kristaller için normalizasyon şartı, $u_{\perp,n}$ ve $u_{\|,n}$'i kontrol eden farklı denklemler olduğu hesaba katılacak şekilde yeniden düzenlenmelidir. Burada; alt indisler, n ortamının malzeme özelliklerini ve tek eksenli bir yarıiletkenin c-eksenine dik ve paralel olan bileşenlerini göstermektedir.

Böyle bir ortam için, tek bir mod olan q ($\omega_q = \omega$ ile birlikte) için normalizasyon koşulu şöyle olur,

$$\int \left\{ \left| \sqrt{n_n \mu_n} u_{\perp,n}(r) \right|^2 + \left| \sqrt{n_n \mu_n} u_{\|,n}(r) \right|^2 \right\} dr = \frac{\hbar}{2\omega} \tag{3.162}$$

Yerdeğiştirmenin verilişi,

$$u_{\perp,\|}(r) = \sum_q u_{\perp,\|}(q) e^{iq.r} \tag{3.163}$$

Böylece,

$$\left| \sqrt{n_n \mu_n} u_{\perp,n}(q) \right|^2 + \left| \sqrt{n_n \mu_n} u_{\|,n}(q) \right|^2 = \frac{\hbar}{2\omega} \frac{1}{V} \tag{3.164}$$

bu da tek eksenli kristal durumuna gerekli genellemeyi sağlar. $u_{\perp,n}$ ve $u_{\|,n}$'i veren denklemler aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$u_{\perp(\|),n} = \frac{1}{\sqrt{4\pi \mu_n n_n}} \frac{\sqrt{\in(0)_{\perp(\|),n} - \in(\infty)_{\perp(\|),n}}}{\omega_{TO,\perp(\|),n}^2 - \omega^2} \omega_{TO,\perp(\|),n} E_{\perp,n} \tag{3.165}$$

Burada her bir yerdeğiştirmenin zamana bağlılığının $e^{i\omega t}$ formunda olduğu farzedilmiştir. O halde,

$$\begin{aligned} &\left| \sqrt{n_n \mu_n} u_{\perp,n}(r) \right|^2 + \left| \sqrt{n_n \mu_n} u_{\|,n}(r) \right|^2 \\ &\quad = \frac{1}{4\pi} \frac{\left[\in(0)_{\perp,n} - \in(\infty)_{\perp,n} \right] \omega_{TO,\perp,n}^2}{(\omega_{TO,\perp,n}^2 - \omega^2)^2} \left| E_{\perp,n} \right|^2 \\ &\quad + \frac{1}{4\pi} \frac{\left(\in(0)_{\|,n} - \in(\infty)_{\|,n} \right) \omega_{TO,\|,n}^2}{(\omega_{TO,\|,n}^2 - \omega^2)^2} \left| E_{\|,n} \right|^2 \end{aligned} \tag{3.166}$$

Bununla birlikte genelleştirilmiş Lydanne-Sachs-Teller bağıntısından,

$$\in(\omega)_{\perp(\|),n} = \in(\infty)_{\perp(\|),n} \left(\frac{\omega_{LO,\perp(\|),n}^2 - \omega^2}{\omega_{TO,\perp(\|),n}^2 - \omega^2} \right) \tag{3.167}$$

ve

$$\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in(\omega)_{\perp(\|),n}}{\partial\omega}=\frac{\left[\in(0)_{\perp(\|),n}-\in(\infty)_{\perp(\|),n}\right]}{(\omega^2_{TO,\perp(\|),n}-\omega^2)^2}\omega^2_{TO,\perp(\|),n} \qquad 3.168$$

Böylece,

$$\left|\sqrt{n_n\mu_n}u_{\perp,n}(r)\right|^2+\left|\sqrt{n_n\mu_n}u_{\|,n}(r)\right|^2 = \frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in(\omega)_{\perp,n}}{\partial\omega}\left|E_{\perp,n}\right|^2+\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in(\omega)_{\|,n}}{\partial\omega}\left|E_{\|,n}\right|^2 \qquad 3.169$$

Bu özdeşliği kullanarak, normalizasyon şartı aşağıdaki gibi olur:

$$\int\left(\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in(\omega)_{\perp,n}}{\partial\omega}\left|E_{\perp,n}\right|^2+\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in(\omega)_{\|,n}}{\partial\omega}\left|E_{\|,n}\right|^2\right)dr=\frac{\hbar}{2\omega} \qquad 3.170$$

Sadece z yönünde boyutsal sınırlamanın olduğu durum için normalizasyon şartı,

$$\int L^2\left(\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in(\omega)_{\perp,n}}{\partial\omega}\left|E_{\perp,n}\right|^2+\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in(\omega)_{\|,n}}{\partial\omega}\left|E_{\|,n}\right|^2\right)dz=\frac{\hbar}{2\omega} \qquad 3.171$$

Zincblende durumuna gelirsek, elektron-optik-fonon Hamiltoniyeni,

$$H_{IF}=-e\sum_q\Phi(q,z)e^{iq.\rho}(a_q+a^{\dagger}_{-q}) \qquad 3.172$$

Burada potansiyel Φ (q, z) , $E_{\perp,n}$ ve $E_{\|,n}$ ile bağlantılıdır. Normalizasyon durumu, özellikle dielektrik süreklilik modelindeki optik modlar için uygundur, çünkü fononlar ilgili elektrik alanları ve potansiyeller açısından tanımlanabilirler.

Tek eksenli bir kristale kuantizasyon şartını uygulamanın amacı; tekli bir hetero-yapı içerisindeki arayüzey için, elektron-optik fonon etkileşim Hamiltoniyenini belirlemektir.

z=0'da bulunan, tekli-heteroyapı durumunda, iki yarı-sonsuz bölgeden oluşan würtzite bir yapıdaki arayüzey optik modlarını ele alalım. c-ekseni heteroarayüzeye dik olarak alınır. Dielektrik fonksiyonları ;

z<0 için $\in(\omega)_{\perp(\|),2}$

z>0 için $\in(\omega)_{\perp(\|),1}$

Bu dört fonksiyondan herbiri $\in(\omega)_{\perp(\|),1(2)}$ genel Lydanne-Sachs-Teller bağıntısına uyar.

GaAs/AlAls gibi ikili zincblende heteroyapılar için IF modları; $\omega_{TO,AlAs}<\omega<\omega_{LO,AlAs}$ ve $\omega_{TO,GaAs}<\omega<\omega_{LO,GaAs}$ olan iki aralıkta ortaya çıkar. Bu iki aralığın üstüste binmemesi nedeniyle; bütün izinli IF mod frekansları için, frekans koşulu $\in_{GaAs}(\omega)\in_{AlAs}(\omega)<0$ ile verilir. Böyle bir tanımlama tek-eksenli kristaller için olası değildir.

Bu durum würtzite ve zincblend yapılarda bulunan optik fonon modlarında önemli farklılıklara yol açmaktadır. Zincblend durumu için:

$$\phi(r)=e^{iq.\rho}\times\begin{cases}Ae^{\kappa_2 z} & z<0\\ Be^{-\kappa_1 z} & z>0\end{cases} \qquad 3.173$$

Serbest yük yokluğunda $\nabla.D=0$. Bu nedenle,

$$\begin{aligned}&\in(\omega)_{\|,1}\kappa_1^2-\in(\omega)_{\perp,1}q^2=0 \qquad &&\in(\omega)_{\|,1}\in(\omega)_{\perp,1}>0\\ &\in(\omega)_{\|,2}\kappa_2^2-\in(\omega)_{\perp,2}q^2=0 \qquad &&\in(\omega)_{\|,2}\in(\omega)_{\perp,2}>0\end{aligned} \qquad 3.174$$

z=0'da elektrik alanının tanjantsal bileşeninin sürekliliğinden, A=B 'dir.

z=0'da elektrik yerdeğiştirme alanının dik bileşeninin sürekliliğinden,

$$\in_{\|,2}\kappa_2 A=-\in_{\|,1}\kappa_1 B$$

ve

$$\in_{\|,2}\kappa_2+\in_{\|,1}\kappa_1=0$$

Ancak,

$$\begin{aligned}\kappa_1^2&=\frac{\in(\omega)_{\perp,1}}{\in(\omega)_{\|,1}}q^2 \qquad\qquad \in(\omega)_{\|,1}\in(\omega)_{\perp,1}>0\\ \kappa_2^2&=\frac{\in(\omega)_{\perp,2}}{\in(\omega)_{\|,2}}q^2 \qquad\qquad \in(\omega)_{\|,2}\in(\omega)_{\perp,2}>0\end{aligned} \tag{3.175}$$

Düzenlenirse,

$$\in_{\|,1}\kappa_1+\in_{\|,2}\kappa_2=\in(\omega)_{\|,1}\sqrt{\frac{\in(\omega)_{\perp,1}}{\in(\omega)_{\|,1}}}q+\in_{\|,2}(\omega)\sqrt{\frac{\in(\omega)_{\perp,2}}{\in(\omega)_{\|,2}}}=0 \tag{3.176}$$

Buna göre,

$$\begin{aligned}-\sqrt{\in(\omega)_{\perp,1}\in(\omega)_{\|,1}}+\sqrt{\in(\omega)_{\perp,2}\in(\omega)_{\|,2}}=0 \qquad &\in(\omega)_{\|,1}<0 \quad ve \quad \in(\omega)_{\|,2}>0\\ +\sqrt{\in(\omega)_{\perp,1}\in(\omega)_{\|,1}}+\sqrt{\in(\omega)_{\perp,2}\in(\omega)_{\|,2}}=0 \qquad &\in(\omega)_{\|,1}<0 \quad ve \quad \in(\omega)_{\|,2}<0\end{aligned}$$

ve

$$\sqrt{\in(\omega)_{\perp,1}\in(\omega)_{\|,1}}=\sqrt{\in(\omega)_{\perp,2}\in(\omega)_{\|,2}}$$

Bu yüzden iki bölge için,

$$\begin{aligned}\phi(r)&=\phi_0 e^{iq.\rho}\times\begin{cases}Ae^{\kappa_2 z} & z<0\\ Be^{-\kappa_1 z} & z>0\end{cases}\\ &=\phi_0 e^{iq.\rho}\times\begin{cases}\exp(\sqrt{\in(\omega)_{\perp,2}/\in(\omega)_{\|,2}}qz) & z<0\\ \exp(-\sqrt{\in(\omega)_{\perp,1}/\in(\omega)_{\|,1}}qz) & z>0\end{cases}\end{aligned} \tag{3.177}$$

$E_\perp$ ve E_{II} , ϕ_0 'ın uygun gradyantları tarafından verilir ve normalizasyon koşulunu hesaplamak için gereken integraller aşağıda gösterilenler aracılığıyla ile $\left|E_{\perp,n}\right|^2$ ve $\left|E_{\|,n}\right|^2$ ilgilidir. Normalizasyon şartı,

$$\int_{-\infty}^{0}\left|E_{\perp,2}\right|^2 dz=\phi_0^2 q^2 \quad \int_{-\infty}^{0} e^{2\kappa_2 z}dz=\frac{q^2}{2_{K_2}}\phi_0^2=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\in(\omega)_{\perp,2}}{\in(\omega)_{\|,2}}}q\phi_0^2$$

$$\int_{0}^{\infty}\left|E_{\perp,1}\right|^2 dz=\phi_0^2 q^2 \quad \int_{0}^{\infty} e^{-2\kappa_1 z}dz=\frac{q^2}{2_{K_1}}\phi_0^2=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\in(\omega)_{\perp,1}}{\in(\omega)_{\|,1}}}q\phi_0^2$$

$$\int_{-\infty}^{0}\left|E_{\|,2}\right|^2 dz=\phi_0^2 \kappa_2^2 \quad \int_{-\infty}^{0} e^{2\kappa_2 z}dz=\frac{\kappa_2}{2}\phi_0^2=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\in(\omega)_{\perp,2}}{\in(\omega)_{\|,2}}}q\phi_0^2 \qquad 3.178$$

$$\int_{0}^{\infty}\left|E_{\|,1}\right|^2 dz=\phi_0^2 \kappa_1^2 \quad \int_{0}^{\infty} e^{-2\kappa_1 z}dz=\frac{\kappa_1}{2}\phi_0^2=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\in(\omega)_{\perp,1}}{\in(\omega)_{\|,1}}}q\phi_0^2$$

Uygun dönüşümlerin yapılmasıyla,

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{L^2}\frac{\hbar}{2\omega}\\
&=\int\left(\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial\in(\omega)_{\perp,n}}{\partial\omega}\left|E_{\perp,n}\right|^2+\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial\in(\omega)_{\|,n}}{\partial\omega}\left|E_{\|,n}\right|^2\right)dz\\
&=\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\int_{-\infty}^{0}\frac{\partial\in(\omega)_{\perp,2}}{\partial\omega}\left|E_{\perp,2}\right|^2 dz+\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\int_{0}^{\infty}\frac{\partial\in(\omega)_{\perp,1}}{\partial\omega}\left|E_{\perp,1}\right|^2 dz \qquad 3.179\\
&\quad+\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\int_{-\infty}^{0}\frac{\partial\in(\omega)_{\|,2}}{\partial\omega}\left|E_{\|,2}\right|^2 dz+\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\int_{0}^{\infty}\frac{\partial\in(\omega)_{\|,1}}{\partial\omega}\left|E_{\|,1}\right|^2 dz\\
&=\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{q}{2}\left[\left(\frac{\partial\in_{\perp,1}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_1}+\frac{\partial\in_{\|,1}}{\partial\omega}\frac{\kappa_1}{q}\right)+\left(\frac{\partial\in_{\perp,2}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_2}+\frac{\partial\in_{\|,2}}{\partial\omega}\frac{\kappa_2}{q}\right)\right]\phi_0^2
\end{aligned}$$

ϕ_0 'ın verilişi,

$$\phi_0^2=\frac{4\pi\hbar}{L^2}\frac{2}{q}\left[\left(\frac{\partial\in_{\perp,1}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_1}+\frac{\partial\in_{\|,1}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_1}\right)+\left(\frac{\partial\in_{\perp,2}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_2}+\frac{\partial\in_{\|,2}}{\partial\omega}\frac{\kappa_2}{q}\right)\right]^{-1} \qquad 3.180$$

IF optik fonon Hamiltoniyeni,

$$
\begin{aligned}
H_{IF} &= \sum_q -\left(e\Phi(q,z)\right)e^{iq.\rho}(a_q + a_{-q}^{\dagger}) \\
&= \sum_q \sqrt{\frac{4\pi e^2\hbar}{L^2}}\left(2q^{-1}\right)^{1/2} \\
&\times\left[\left(\frac{\partial \in_{\perp,1}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_1}+\frac{\partial \in_{\|,1}}{\partial\omega}\frac{\kappa_1}{q}\right)+\left(\frac{\partial \in_{\perp,2}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_2}+\frac{\partial \in_{\|,2}}{\partial\omega}\frac{\kappa_2}{q}\right)\right]^{-1/2} \\
&\times e^{iq.\rho}(a_q + a_{-q}^{\dagger})\times\begin{cases} e^{-\sqrt{\in(\omega)_{\perp,1}/\in(\omega)_{\|,1}}\,qz} & z>0 \\ e^{\sqrt{\in(\omega)_{\perp,2}/\in(\omega)_{\|,2}}\,qz} & z<0 \end{cases}
\end{aligned}
\qquad 3.181
$$

Aşağıdaki bağıntıyla alternatif bir şekilde de yazılabilir,

$$
\begin{aligned}
&2\left|\frac{\partial}{\partial\omega}\left(\sqrt{\in(\omega)_{\perp,1}\in(\omega)_{\|,1}}-\sqrt{\in(\omega)_{\perp,2}\in(\omega)_{\|,2}}\right)\right| \\
&=\left[\left(\frac{\partial \in_{\perp,1}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_1}+\frac{\partial \in_{\|,1}}{\partial\omega}\frac{\kappa_1}{q}\right)+\left(\frac{\partial \in_{\perp,2}}{\partial\omega}\frac{q}{\kappa_2}+\frac{\partial \in_{\|,2}}{\partial\omega}\frac{\kappa_2}{q}\right)\right]
\end{aligned}
\qquad 3.182
$$

Bu Hamiltoniyen tarafından tanımlanan modlar için dispersiyon bağıntısının $\sqrt{\in(\omega)_{\perp,1}\in(\omega)_{\|,1}}=\sqrt{\in(\omega)_{\perp,2}\in(\omega)_{\|,2}}$ koşulu ile verilmesinde hem tanjantsal elektrik alanı bileşeninin hem de dik yerdeğiştirme alanı bileşeninin heteroarayüzeyde sürekli olması gerektiğine dair koşullar etkilidir.

c-ekseninin heteroarayüzeylere dik olduğu bir GaN/AlN süperörgüsüne ve şekil 11'de gösterildiği gibi, bir süperörgü periyodu d olan özel kuantum kuyusu durumu için alanlar üzerindeki periyodiklik koşulu ve sınır koşulları, aşağıdaki dispersiyon bağıntılarına yol açar. Antisimetrik modlar için,

$$
a_1(\omega)\cosh\left[\gamma_1(\omega)d/2\right]+a_2\sinh\left[\gamma_1(\omega)d/2=0\right] \qquad 3.183
$$

Simetrik modlar için,

$$
a_1(\omega)\sinh\left[\gamma_1(\omega)d/2\right]+a_2\cosh\left[\gamma_1(\omega)d/2=0\right] \qquad 3.184
$$

Bu dispersiyon bağıntılarından,

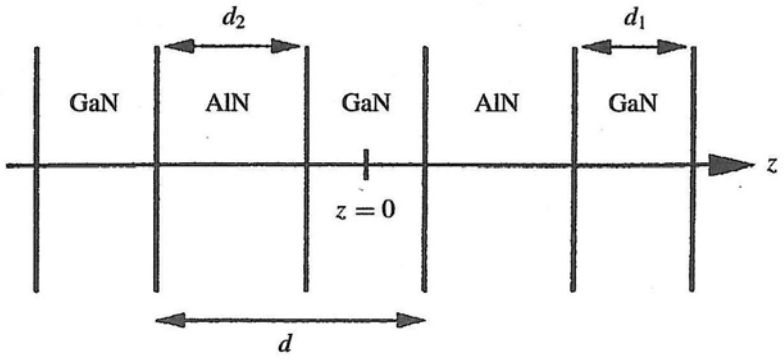
$$\gamma_1(\omega) = q_\perp \sqrt{\in(\omega)_{\perp,1} / \in(\omega)_{\|,1}}$$
$$a_1(\omega) = sign[\in(\omega)_{\|,1}] \sqrt{\in(\omega)_{\perp,1} / \in(\omega)_{\|,1}} \qquad 3.185$$
$$a_2(\omega) = sign[\in(\omega)_{\|,2}] \sqrt{\in(\omega)_{\perp,2} / \in(\omega)_{\|,2}}$$

Bu dispersiyon bağıntıları, $\sqrt{\in(\omega)_{\perp,1} \in(\omega)_{\|,1}} = \sqrt{\in(\omega)_{\perp,2} \in(\omega)_{\|,2}}$ koşuluyla verilir. Çünkü kısa dalga boyu limitinde bu modların frekansları d'ye bağlı değildir, GaN ve AlN arasındaki tek bir heteroarayüzey için dispersiyon bağıntıları bu koşul tarafından sağlanmalıdır,

Tekli-heteroyapı için Hamiltoniyeni daha detaylı bir şekilde ele alalım. $\in(\omega)_{\perp,1} = \in(\omega)_{\|,1}$ ve $\in(\omega)_{\perp,2} = \in(\omega)_{\|,2}$, $q^2 = \kappa_1^2 = \kappa_2^2$ durumu için ve Hamiltoniyeni aşağıdaki şekli alır,

$$H_{IF} = \sum_q \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar L^2}{\partial \in_1 (\omega)/\partial\omega + \partial \in_2 (\omega)/\partial\omega}} \frac{1}{\sqrt{q}} e^{-q|z|} e^{iq\cdot\rho} (a_q + a_{-q}^\dagger) \qquad 3.186$$

Bu ifade zincblende tekli-heteroyapı sistemindeki IF fonon modları için Hamiltoniyen olarak yazılabilir.



Şekil 11. Gleize ve ark.tarafından düşünülen würtzite süperörgü. Gleize ve ark.(1999)

3.3.2.4. Çok heteroarayüzeyli yapılarda transfer matrix modeli

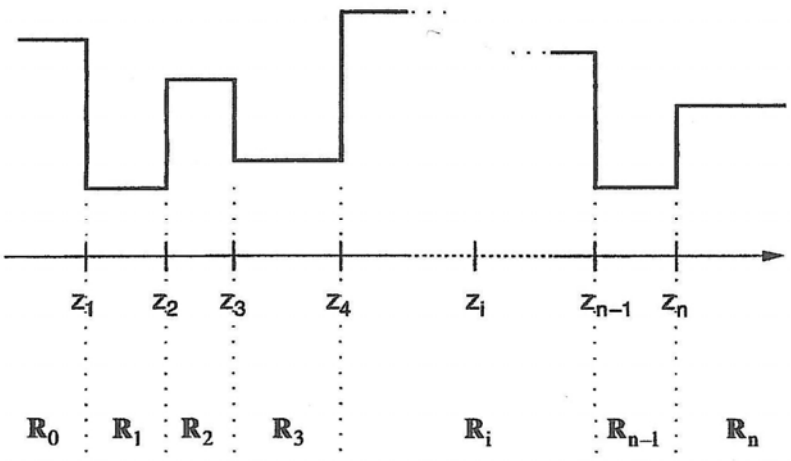
Yu ve ark. (1997), çoklu paralel heteroarayüzeyleri ayıran farklı yarıiletken tabakaları içeren heteroyapılar için, normalizasyon koşullarına ilişkin bir denklem seti

verdiler. Bu normalizasyon koşulları, süperörgülerdeki optik fonon bant yapısını incelemek için gereklidir. Dönüşümsel sabitin , heteroarayüzeylere paralel iki boyutlu düzlemlerde tutulması nedeniyle, $R_i = (z_i, z_i + 1)$ olan her bölgede taşıyıcı-optik-fonon etkileşimini tanımlayan elektrostatik potansiyel $\Phi_i(r)$ aşağıdaki şekilde alınır,

$$\Phi_i(r) = \sum_q e^{-iq.\rho} \Phi_i(q, z) \qquad 3.187$$

$$\Phi_i(q, z) = c_{i-} e^{-qz} + c_{i+} e^{+qz} \equiv c_{i-} \phi_{i-} + c_{i+} \phi_{i+}, \qquad 3.188$$

Burada z- ekseni heteroarayüzeylere dik olarak alınır, $\rho = (x, y)$, c_{i-} ve c_{i+} eksponansiyel olarak bozunan ve çoğalan potansiyellerin genlikleridir. i tabakasına bu göreceli genlikler bir transfer matriksiyle bağıntılıdır. Şekil 12, $R_0, R_1, ..., R_n$ bölgeleri için, genelleyici bir potansiyel olan $\Phi_i(z)$'yi göstermektedir.



Şekil 12. $R_0, R_1, ..., R_n$ bölgeleri için mümkün olan bir genelleyici potansiyel. Yu ve ark.(1997)

Elektrostatik sınır koşullarına göre, elektrostatik potansiyel $\Phi_i(q, z)$ ve dik elektrik yerdeğiştirme bileşeni $\in_i E_i = - \in_i \partial \Phi_i(q, z) / \partial_z$ her bir heteroarayüzeyde sürekli olmalıdır; böylelikle, z_i de bulunan heteroarayüzeyde,

$$\Phi_i(q,z_i)=\Phi_{i-1}(q,z_i)$$

$$\in_i \frac{\partial\Phi_i(q,z_i)}{\partial z}=\in_{i-1}\frac{\partial\Phi_{i-1}(q,z_i)}{\partial z} \qquad 3.189$$

$R_{i-1}=(z_{i-1},z_i)$ ve $R_i=(z_i,z_{i+1})$ bölgelerini ayıran heteroarayüzde sınır koşulları yukarıdaki gibidir. Yu ve ark. (1997) bu sonuçları matrix formunda şu şekilde vermiştir,

$$C_i=\begin{pmatrix}c_{i-}\\ c_{i+}\end{pmatrix} \qquad 3.190$$

$$M_i(z)=\begin{pmatrix}\phi_{i-}(z) & \phi_{i+}(z)\\ \in_i \phi'_{i-}(z) & \in_i \phi'_{i+}(z)\end{pmatrix}$$

ve

$$M_i(z_i)C_i=M_{i-1}(z_i)C_{i-1} \qquad 3.191$$

R_0 bölgesi için C_0 matrixiyle, basamak vektörü C_1 ve elektrostatik potansiyel $\Phi_i(q,z_i)$ dizi boyunca herhangi bir bölgede belirlenebilir.

$$C_i=Q_i(z_i)C_{i-1}=Q_i(z_i)O_{i-1}(z_{i-1})...Q_1(z_1)C_0 \qquad 3.192$$

Burada R_{i-1} ve R_i ile bağlantılı transfer matrixi,

$$\Phi_i(z_i)=M_i(z_i)^{-1}M_{i-1}(z_i) \qquad 3.193$$

n- arayüzeyli bir heteroyapı için elektrostatik potansiyel, $\Phi(q,z_i)$, her bir bölge için $\Phi_i(q,z)$ çözümleri birleştirilerek verilir:

$$\Phi_0(q,z),\ \ z\in R_0;...\Phi_i(q,z),\ \ z\in R_i;...\Phi_n(q,z),\ \ z\in R_n \qquad 3.194$$

Ayrıca, her bölgede $\in(\omega)$ ve $\in(\infty)$, genelleşmiş Lyddane–Sachs–Teller bağıntıları aracılığıyla ilişkilidir. Arayüzey optik fononları için, potansiyeller eksponansiyel olacak şekilde $z\to\pm\infty$ için azalmalıdır. n- bölgeli bir heteroyapı için,

$c_{n+}=0$ ve $c_{0-}=0$ 'dir. Bu yüzden, bu arayüzey modu için dispersiyon bağıntısı, sıfıra eşit olan transfer matrixinin (2,2) kısmını kurarak elde edilir,

$$\left[Q_n\left(z_n,q,\omega\right)Q_{n-1}\left(z_{n-1},q,\omega\right)...Q_1\left(z_1,q,\omega\right)\right]_{2,2}=0 \qquad 3.195$$

Arayüzey optik fonon modlarının sayısı, bu yolla elde edilen dispersiyon bağıntısı incelenerek belirlenebilir. İkili ve üçlü yarıiletkenlerden oluşan böyle değişimli bir heteroyapı, 3n arayüzey optik fonon moduna sahiptir.

Bu modlar için normalizasyon koşulu, basit heteroyapıda optik fonon modlarının normalizasyon koşuluna ilişkin basit bir genellemedir,

$$\sum_i L^2\int_{R_i}dz\left|\mu_i n_i u_i\left(q,z\right)\right|^2=\frac{\hbar}{2\omega} \qquad 3.196$$

Böyle çoklu heteroarayüzeyli yapılara ait optik fonon modlarını normalize etmek için,

$$\begin{aligned}E_i(q,z)&=-\nabla\Phi_i\left(q,z\right)=-iq\Phi_i\left(q,z\right)\hat{q}-\frac{\partial\Phi_i\left(q,z\right)}{az}\hat{z}\\ P_i\left(q,z\right)&=-\chi_i(\omega)\left[iq\Phi_i\left(q,z\right)\hat{q}+\frac{\partial\Phi_i\left(q,z\right)}{az}\hat{z}\right]\end{aligned} \qquad 3.197$$

O halde, R_i için, daha önceki elektrik polarizasyonu için yerdeğiştirmeyle ilgili olan ifadeden aşağıdaki ortaya çıkmaktadır,

$$\begin{aligned}u_i(q,z)&=\frac{P_i(q,z)}{n_i e_i^*\left[1+\alpha_i\mu_i e_i^{*-2}\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)\right]}\\ &=\frac{-x_i(\omega)\left[iq\Phi_i(q,z)\hat{q}+\frac{\partial\Phi_i(q,z)}{az}\hat{z}\right]}{n_i e_i^*\left[1+\alpha_i\mu_i e_i^{*-2}\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)\right]}\end{aligned} \qquad 3.198$$

ve

$$\left|\mu_i n_i u_i\left(q,z\right)\right|^2=\mu_i n_i\frac{\chi_i^2\left(\omega\right)\left[q^2\left|\Phi_i\left(q,z\right)\right|^2+\left|\frac{\partial\Phi_i\left(q,z\right)}{\partial z}\right|^2\right]}{\left\{n_i e_i^*\left[1+\alpha_i\mu_i e_i^{*-2}\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)\right]\right\}^2} \tag{3.199}$$

$P_i(q,z)$ için önceki ifadeyi, i. katmanı için yapılan sonuca genellersek,

$$\begin{aligned}P_i\left(q,z\right)&=n_i e_i^* u_i\left(q,z\right)+n_i\alpha_i E_{local,i}\left(q,z\right)\\&=\left[n_i e_i^*\frac{e_i^*}{\mu_i\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)}+n_i\alpha_i\right]E_{local,i}\left(q,z\right)\\&=\left[n_i e_i^*\frac{e_i^*}{\mu_i\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)}+n_i\alpha_i\right]\left[E_i\left(q,z\right)+\frac{4\pi}{3}P_i\left(q,z\right)\right]\end{aligned} \tag{3.200}$$

Böylece,

$$\begin{aligned}P_i\left(q,z\right)&=\chi_i\left(\omega\right)E_i\left(q,z\right)\\&=\frac{n_i e_i^*\frac{e_i^*}{\mu_i\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)}+n_i\alpha_i}{1-\frac{4}{3}\pi\left[n_i e_i^*\frac{e_i^*}{\mu_i\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)}+n_i\alpha_i\right]}E_i\left(q,z\right)\end{aligned} \tag{3.201}$$

Wendler'in ifadesine uygun şekilde açılım yapılırsa,

$$\frac{\left|\mu_i n_i u_i(q,z)\right|^2}{q^2\left|\Phi_i(q,z)\right|^2+\left|\partial\Phi_i(q,z)/\partial z\right|^2}$$

$$=\mu_i n_i\left\{n_i e_i^*\left[1+\frac{\alpha_i\mu_i\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)}{e_i^{*2}}\right]\right\}^{-2}$$

$$\times\frac{\left[n_i e_i^*\dfrac{e_i^*}{\mu_i\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)}+n_i\alpha_i\right]^2}{\left\{1-\dfrac{4}{3}\pi\left[n_i e_i^*\dfrac{e_i^*}{\mu_i\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)}+n_i\alpha_i\right]\right\}^2}$$

$$=n_i\frac{e_i^{*2}}{\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)^2}\left\{-1+\frac{4}{3}\pi n_n\left[\frac{e_i^{*2}}{\mu_i\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)}+\alpha_i\right]\right\}^{-2}$$

$$=\frac{1}{4\pi}\frac{\omega_{pi}^2}{\left(1-\dfrac{4\pi}{3}n_n\alpha_n\right)^2}\left[-\left(\omega_{0i}^2-\omega^2\right)+\frac{\dfrac{1}{3}\omega_{pi}^2}{1-\dfrac{4\pi}{3}n_n\alpha_n}\right]^{-2} \qquad 3.202$$

Düzenlenirse,

$$\frac{\left|\mu_i n_i u_i(q,z)\right|^2}{\left(q^2\left|\Phi_i(q,z)\right|^2+\left|\dfrac{\partial\Phi_i(q,z)}{\partial z}\right|^2\right)}=\frac{1}{4\pi}\in_i(\infty)\frac{\omega_{LO,i}^2-\omega_{TO,i}^2}{\left(\omega^2-\omega_{TO,i}^2\right)^2} \qquad 3.203$$

$$=\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial\in_i(\omega)}{\partial\omega}$$

i üzerinden toplam alınırsa,

$$\sum_i\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial\in_i(\omega)}{\partial\omega}\int dz\left\{q^2\left|\Phi_i(q,z)\right|^2+\left|\frac{\partial\Phi_i(q,z)}{\partial z}\right|\right\}=\frac{\hbar}{2\omega L^2} \qquad 3.204$$

Böylece, fonon potansiyeli,

$$\Phi_i(q,z)=A\left(c'_{i-}e^{-qz}+c'_{i+}e^{+qz}\right)=A\Psi_i(q,z) \qquad 3.205$$

Normalizasyon sabiti olan A,

$$A=\left(\frac{\hbar}{2\omega L^2}\right)^{1/2}\left(\sum_i \frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in_i(\omega)}{\partial\omega} x\int_{R_i} dz\left\{q^2\left|\Psi_i(q,z)\right|^2+\left|\frac{\partial\Psi_i(q,z)}{\partial z}\right|^2\right\}\right)^{-1/2} \quad 3.206$$

Bu nedenle IF optik fonon Hamiltoniyeni şudur:

$$\begin{aligned} H_{IF} &= e\Phi_i(r)=e\sum_q e^{-iq.\rho}\Phi_i(q,z)\left(a_{-q}^{\dagger}+a_q\right) \\ &= e\sum_q e^{-iq.\rho}A\Psi_i(q,z)\left(a_{-q}^{\dagger}+a_q\right). \end{aligned} \quad 3.207$$

z=0'da tek bir arayüzeyeyde birleşmiş olan iki yarı-sonsuz yarıiletken bölgenin durumu için arayüzey optik fononları düşünürsek;

$$z \le 0 \qquad \Psi_0(q,z)=c_{0-}e^{+qz}=e^{+qz}$$

$$z \ge 0 \qquad \Psi_1(q,z)=c_{1-}e^{-qz}=e^{-qz}$$

A normalizasyon sabiti,

$$\begin{aligned} A&=\left(\frac{4\pi\hbar}{2\omega L^2}\right)^{1/2}\left[\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in_0(\omega)}{\partial\omega}\int_{-\infty}^{0} dz 2q^2e^{+2qz}\right. \\ &\qquad \left.+\frac{1}{2\omega}\frac{\partial \in_0(\omega)}{\partial\omega}\int_0^{\infty} dz 2q^2e^{-2qz}\right]^{-1/2} \\ &=\left(\frac{4\pi\hbar}{2\omega L^2}\right)^{1/2}\left\{\frac{1}{2\omega}q\left[\frac{\partial \in_0(\omega)}{\partial\omega}+\frac{\partial \in_1(\omega)}{\partial\omega}\right]\right\}^{-1/2} \end{aligned} \quad 3.208$$

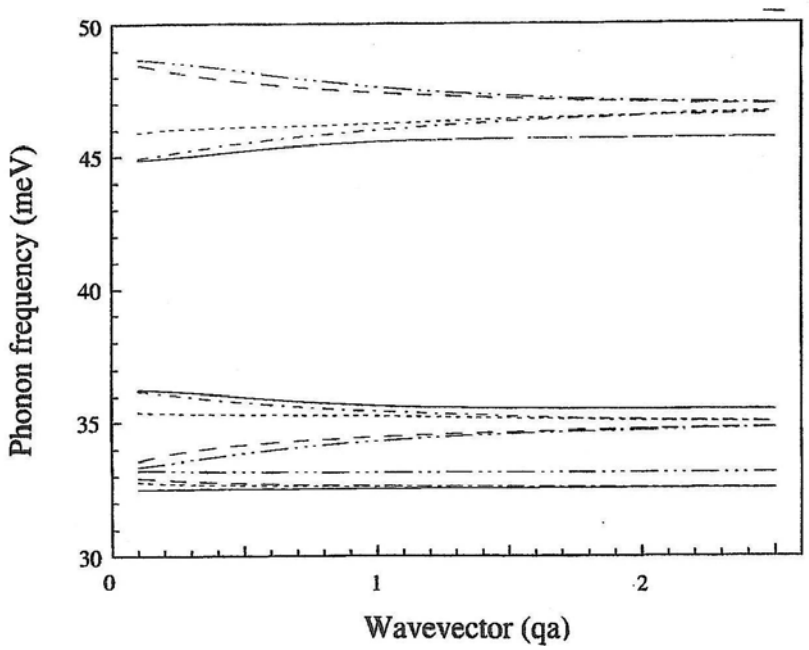
IF optik fonon Hamiltoniyeninin verilişi,

$$H_{IF}=\sum_q\sqrt{\frac{4\pi e^2\hbar L^{-2}}{\partial \in_0(\omega)/\partial\omega+\partial \in_1(\omega)/\partial\omega}}\sqrt{\frac{1}{q}}e^{-iq.\rho}e^{-|z|}\left(a_{-q}^{\dagger}+a_q\right) \quad 3.209$$

Yukarıdaki bu sonuç daha önce elde edilen sonuca benzerdir.

Yu ve ark. (1997) transfer matrix yaklaşımı, süperörgüdeki fononların doğasının daha iyi anlaşılmasına yardımcı olabilir. Transfer matrix metodunun, çoklu-bariyeri

olan AlAs/GaAs yapısına uygulanması, farklı AlAs/GaAs heteroyapılar için şekil 13'de gösterilen dispersiyon bağıntılarına yol açar.



Şekil 13. Beş-arayüzeyli AlAs/GaAs heteroyapısının 15 arayüzey modu için dispersiyon bağıntıları.Yu ve ark. (1997)

Yu ve ark. (1997)'nın transfer matrix metodu, IF optik fonon dispersiyon bağıntılarını ve bağlantılı IF fonon potansiyellerini belirlemek amacıyla uygulanabilir. Beş-arayüzeyli, üçlü bir heteroyapıda toplam 15 IF modu vardır. İkili ve üçlü yarıiletkenlerden oluşan çeşitli tabakaları olan böyle bir n-interfazlı yapının 3n IF optik fonon moduna sahip olduğu bilinmektedir.

3.3.2.5. Çift-heteroarayüzeyli würtzite yapılarda arayüzey optik fononları

Şekil 10'da gösterilen çift-heteroarayüzeyli tek eksenli yapı durumunu inceleyelim. $z=-d/2$'den $z=+d/2$' ye kadar olan bölgede bulunan bir malzeme alalım ve diğer bir malzemenin iki yarı-sonsuz bölgesince sınırlandığını düşünelim. Örneğin, d kalınlığındaki AlAs bariyerlerine gömülü GaAs kuantum kuyusunu düşünebiliriz. Kuantum kuyusunun merkezi z= 0'dadır. Bu durum için fonon potansiyeli

eksponansiyel olarak $z \to \pm\infty$ için azalmalıdır ve kuantum kuyusundaki fonon potansiyeli eksponansiyel olarak artan ve azalan değerlerin kombinasyonu olmalıdır. Kuantum kuyusundaki dielektrik sabiti $\in_1(\omega)$ ve bariyerlerinki ise $\in_0(\omega)$ ve $\in_2(\omega)$ olsun. Bariyerler aynı malzemeden yapıldığı için, $\in_2(\omega) = \in_0(\omega)$ dir. Kuantum kuyusundaki fonon potansiyelinin çift olduğu durumu alırsak,

$$\begin{aligned} z \le -d/2 \qquad & \Psi_0(q,z) = e^{q(z+d/2)} \\ |z| < d/2 \qquad & \Psi_1(q,z) = (\cosh qz)/(\cosh qd/2) \\ z \ge d/2 \qquad & \Psi_2(q,z) = e^{-q(z-d/2)} \end{aligned} \tag{3.210}$$

Normalizasyon uygulanırsa,

$$\begin{aligned} &\int_{R_0} dz \left(q^2 \left|\Psi_0(q,z)\right|^2 + \left|\frac{\partial \Psi_0(q,z)}{\partial z}\right|^2 \right) = \int_{-\infty}^{-d/2} dz 2q^2 e^{2qz} e^{qd} = q \\ &\int_{R_1} dz \left\{ q^2 \left|\Psi_1(q,z)\right|^2 + \left|\frac{\partial \Psi_1(q,z)}{\partial z}\right|^2 \right\} \\ &\qquad = \int_{-d/2}^{+d/2} dz q^2 \frac{\cosh^2 qz + \sinh^2 qz}{\cosh^2 qd/2} = 2q \tanh qd/2 \\ &\int_{R_2} dz \left\{ q^2 \left|\Psi_2(q,z)\right|^2 + \left|\frac{\partial \Psi_2(q,z)}{\partial z}\right|^2 \right\} = \int_{d/2}^{\infty} dz 2q^2 e^{-2qz} e^{qd} = q \end{aligned} \tag{3.211}$$

Normalizasyon katsayısı A,

$$A = \left(\frac{4\pi\hbar}{2\omega L^2}\right)^{1/2} \left[\frac{1}{2\omega} \frac{\partial \in_0(\omega)}{\partial \omega} 2q + \frac{1}{2\omega} \frac{\partial \in_1(\omega)}{\partial \omega} 2q \tanh \frac{qd}{2} \right]^{-1/2} \tag{3.212}$$

Bu yüzden simetrik durum için Hamiltoniyeni,

$$H_{IF,S} = \sum_q \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar L^{-2}}{\frac{\partial \in_0(\omega)}{\partial \omega} + \frac{\partial \in_1(\omega)}{\partial \omega} \tanh qd/2}} \sqrt{\frac{1}{2q}} e^{-iq.\rho} \; fs(q,z) \; (a_{-q}^{\dagger} + a_q) \tag{3.213}$$

Burada $f_s(q,z) = \Psi_i(q,z)$ dir. Bu optik fonon modu için dispersiyon bağıntısı, elektrik yerdeğiştirme alanının dik bileşeninin heteroarayüzeylerde sürekli olması koşulundan verilmektedir. $z = -d/2$ 'de $\in_0(\omega)E_{0,z}|_{z=-d/2} = \in_1(\omega)E_{1,z}|_{z=-d/2}$ 'dir.

Bu koşuldan şu sonuca varırız. IF optik fononlarına ait frekanslar $\in_0(\omega) + \in_1(\omega)\tanh qd/2 = 0$ şartını sağlamalıdır Aynı dispersiyon bağıntısı, $z = d/2$ 'de elektrik yerdeğiştirme alanının dik bileşeninin sürekliliğinden elde edilir.

Bu Hamiltoniyen tarafından tanımlanan mod, düşünülen kuantum kuyusu için simetrik IF optik fononudur. Kuantum kuyusundaki fonon potansiyelinin tek olduğu durumu alırsak,

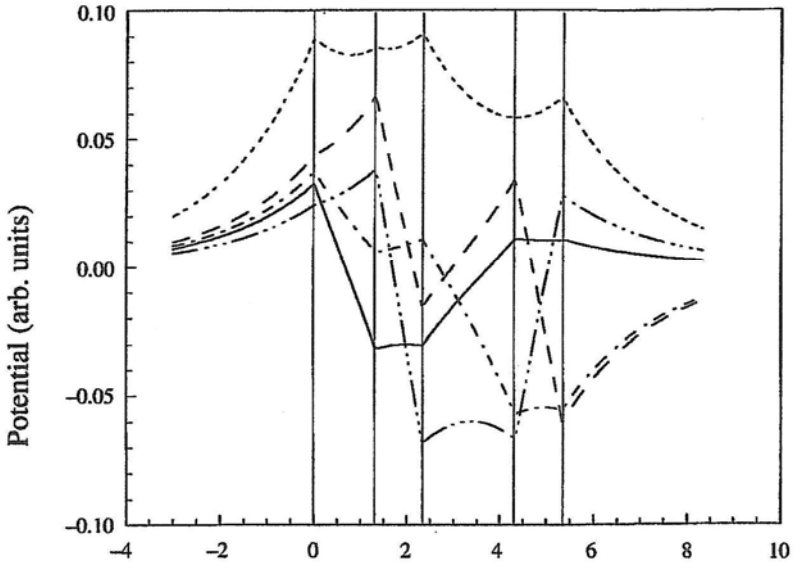
$$\begin{aligned} z \le -d/2 \quad & \Psi_0(q,z) = -e^{+q(z+d/2)} \\ |z| < d/2 \quad & \Psi_1(q,z) = (\sinh qd)/\sinh qd/2) \\ z \ge +d/2 \quad & \Psi_2(q,z) = e^{-q(z-d/2)} \end{aligned} \qquad 3.214$$

Bu aşağıdaki antisimetrik durumu ortaya çıkarır,

$$H_{IF,A} = \sum_q \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar L^{-2}}{\frac{\partial \in_0(\omega)}{\partial\omega} + \frac{\partial \in_1(\omega)}{\partial\omega}\coth\frac{qd}{2}}} \sqrt{\frac{1}{2q}} e^{-iq.\rho} f_A(q,z)(a_{-q}^{\dagger} + a_q) \qquad 3.215$$

Burada $f_A(q,z) = \Psi_i(q,z)$ 'dir. Yine bu mod için dispersiyon bağıntısı elektrik yerdeğiştirme alanının dik bileşeninin heteroarayüzeyde sürekli olması koşulundan kaynaklanmaktadır.Bu durumda, $\in_0(\omega) + \in_1(\omega)\coth qd/2 = 0$ 'dir.Bu sonuç, bahsedilen kuantum kuyu sistemine ait antisimetrik IF optik fononu için Hamiltoniyeni yeniden türetir.

Tipik bir çift-heteroyapı için potansiyel profili şekil 14'de verilmiştir. Şekil 14'de gösterilen genel türde bir heteroyapı için Fröhlich etkileşim Hamiltoniyeni ve dispersiyonu Mori ve ark. (1992) ve Kim ve ark. (1992) tarafından, Yu ve ark.(1997)'nın transfer-matrix metodundan yararlanmadan türetilmiştir. Bu sonuçlar aşağıdaki şekilde özetlenebilir:



Şekil 14. Şekil 13'teki beş AlAs-benzeri arayüzey fonon modu için fonon potansiyelleri. Yu ve ark. (1997)

$$H_{IF.S}=\sum_{q}\left(4\pi e^{2}\hbar L^{-2}\right)^{1/2}$$
$$\times\left[\frac{\partial\in_{1}(\omega)}{\partial\omega}\left(\tanh\frac{qd_{1}}{2}+a^{2}\right)+\frac{\partial\in_{2}(\omega)}{\partial\omega}\left(b^{2}+c^{2}\right)\left(1-e^{-2qd_{2}}\right)\right]^{-1/2}$$
$$\times\sqrt{\frac{1}{2q}}e^{-iq.\rho}\left(a_{-q}^{\dagger}+a_{q}\right) \qquad 3.216$$
$$\times\begin{cases} ae^{-q(z-d_{1}/2-d_{2})} & d_{1}/2+d_{2}\le z,\\ be^{-q(z-d_{1}/2)}+ce^{q(z-d_{1}/2-d_{2})} & d_{1}/2\le z\le 2+d_{2},\\ (\cosh qz)/(\cosh qd_{1}/2 & |z|\le d_{1}/2,\\ be^{q(z+d_{1}/2)}+ce^{-q(z+d_{1}/2+d_{2})} & -d_{1}/2-d_{2}\le z\le -d_{1}/2,\\ ae^{q(z+d_{1}/2+d_{2})} & z\le -d_{1}/2-d_{2}\end{cases}$$

Yukarıdaki simetrik LO fonon arayüzey modları için Fröhlich etkileşim Hamiltoniyenidir.

$$
\begin{aligned}
H_{IF.A} = & \sum_{q} \left(4\pi e^2 \hbar L^{-2}\right)^{1/2} \\
& \times \left[\frac{\partial \in_1 (\omega)}{\partial \omega} \left(\coth \frac{qd_1}{2} + a^2 \right) + \frac{\partial \in_2 (\omega)}{\partial \omega} \left(b^2 + c^2\right)\left(1 - e^{-2qd_2}\right) \right]^{-1/2} \\
& \times \sqrt{\frac{1}{2q}} e^{-iq.\rho} \left(a_{-q}^{\dagger} + a_q\right) \\
& \times \begin{cases} ae^{-q(z-d_1/2-d_2)} & d_1/2 + d_2 \le z, \\ be^{-q(z-d_1/2)} + ce^{q(z-d_1/2-d_2)} & d_1/2 \le z \le 2 + d_2, \\ (\sinh qz)/(\sinh qd_1/2 & |z| \le d_1/2, \\ -be^{q(z+d_1/2)} - ce^{-q(z+d_1/2+d_2)} & -d_1/2 - d_2 \le z \le -d_1/2, \\ -ae^{q(z+d_1/2+d_2)} & z \le -d_1/2 - d_2 \end{cases}
\end{aligned}
\qquad 3.217
$$

Yukarıdaki ise antisimetrik modlar için Fröhlich etkileşim Hamiltoniyenidir.

Simetrik modlar için,

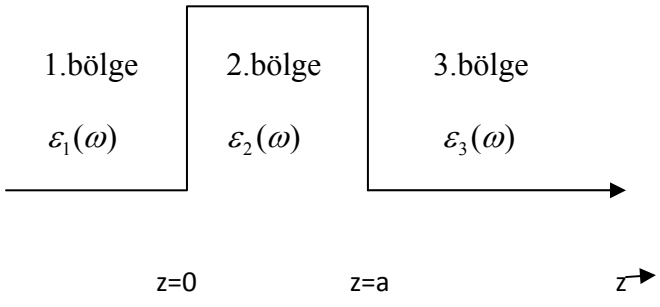
$$
\begin{aligned}
a &= \cosh qd_2 + \frac{\in_1}{\in_2} \tanh \frac{qd_1}{2} \sinh qd_2, \\
b &= \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\in_1}{\in_2} \tanh \frac{qd_1}{2}\right), \\
c &= \frac{1}{2} e^{qd_2} \left(1 + \frac{\in_1}{\in_2} \tanh \frac{qd_1}{2}\right),
\end{aligned}
\qquad 3.218
$$

Dispersiyon bağıntısı aşağıdaki denklem tarafından sağlanır,

$$
\begin{aligned}
0 = & \left(1 \pm \left\{1 - 2\left[(2 \tanh qd_2)/(1 + \tanh qd_1/2)\right]^2 \tanh qd_1\right\}^{1/2}\right) \\
& \times \in_1 (1 + \tanh qd_1/2)/(2 \tanh qd_2) + \in_2
\end{aligned}
\qquad 3.219
$$

Antisimetrik modlar için olan a, b, c ve dispersiyon bağıntısı; $\tanh d_1/2$ yerine $\coth d_1/2$ konarak bu sonuçlardan elde edilir.

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI



Şekil 15. Üç bölgeli bir heteroyapının şematik gösterimi.

Şekil 15'te gösterildiği gibi üç bölgeli bir heteroyapı için 3 bölge belirlenmiştir. Sınır noktaları z=0 ve z=a'dır. Herbir bölgeye ait potansiyel denklemleri şu şekilde yazılabilir;

$$\Phi_1(q,z) = c_{1-}e^{-qz} + c_{1+}e^{+qz} = c_{1-}\phi_{1-} + c_{1+}\phi_{1+}$$
$$\Phi_2(q,z) = c_{2-}e^{-qz} + c_{2+}e^{+qz} = c_{2-}\phi_{2-} + c_{2+}\phi_{2+}$$
$$\Phi_3(q,z) = c_{3-}e^{-qz} + c_{3+}e^{+qz} = c_{3-}\phi_{3-} + c_{3+}\phi_{3+} \qquad 4.1$$

z=0 ve z=a noktalarında;

$$\Phi_1\big|_{z=0} = \Phi_2\big|_{z=0}$$
$$\Phi_2\big|_{z=a} = \Phi_2\big|_{z=a} \qquad 4.2$$

Dolayısıyla,

$$\varepsilon_1 \left.\frac{d\Phi_1}{dz}\right|_{z=0} = \varepsilon_2 \left.\frac{d\Phi_2}{dz}\right|_{z=0}$$
$$\varepsilon_2 \left.\frac{d\Phi_2}{dz}\right|_{z=a} = \varepsilon_3 \left.\frac{d\Phi_3}{dz}\right|_{z=a} \qquad 4.3$$

ifadeleri yazılabilir. Böylece,

$$\begin{aligned}
&c_{1-} + c_{1+} = c_{2-} + c_{2+} \\
&c_{2-}e^{-qa} + c_{2+}e^{qa} = c_{3-}e^{-qa} + c_{3+}e^{qa} \\
&-\varepsilon_1 q c_{1-} + \varepsilon_1 q c_{1+} = -\varepsilon_2 q c_{2-} + \varepsilon_2 q c_{2+} \\
&-\varepsilon_2 q c_{2-}e^{-qa} + \varepsilon_2 q c_{2+}e^{qa} = -\varepsilon_3 q c_{3-}e^{-qa} + \varepsilon_3 q c_{3+}e^{qa}
\end{aligned} \qquad 4.4$$

Bu son dört denklemden 1.ve 3.'nü kullanarak şu ifadeleri,

$$\begin{pmatrix} c_{1-} \\ c_{1+} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -q\varepsilon_1 & q\varepsilon_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{2-} \\ c_{2+} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -q\varepsilon_2 & q\varepsilon_2 \end{pmatrix} \qquad 4.5$$

2.ve 4.'nü kulanarak,

$$\begin{pmatrix} c_{2-} \\ c_{2+} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-qa} & e^{qa} \\ -q\varepsilon_2 e^{-qa} & q\varepsilon_2 e^{qa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{3-} \\ c_{3+} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-qa} & e^{qa} \\ -q\varepsilon_3 e^{-qa} & q\varepsilon_3 e^{qa} \end{pmatrix} \qquad 4.6$$

ifadelerini elde ederiz. Matrix formunda ise,

$$\begin{aligned}
&c_1 M_1 = c_2 M_{20} \\
&c_2 M_{2a} = c_3 M_3 \\
&c_3 = c_2 M_3^{-1} M_{2a} \\
&c_2 = c_1 M_{20}^{-1} M_1 \\
&c_3 = M_3^{-1} M_{2a} M_{20}^{-1} M_1 c_1
\end{aligned} \qquad 4.7$$

Buradan M matrixi şu şekilde yazılabilir;

$$M = M_3^{-1} M_{2a} M_{20}^{-1} M_1 = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}$$

$$c_3 = \begin{pmatrix} c_{3-} \\ c_{3+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{3-} \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$c_1 = \begin{pmatrix} c_{1-} \\ c_{1+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ c_{1+} \end{pmatrix} \qquad 4.8$$

$$\begin{pmatrix} c_{3-} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ c_{1+} \end{pmatrix} \qquad 4.9$$

Buradan,

$$c_{3-} = M_{12} c_{1+}$$
$$0 = M_{22} c_{1+}$$
$$M_{22} = 0 \qquad 4.10$$

halini alır. Böylece M_{22} matrixi,

$$M_{22} = -\frac{1}{4\varepsilon_1\varepsilon_2}[-\varepsilon_2\varepsilon_3 e^{-\alpha} + {\varepsilon_2}^2 e^{-\alpha} - \varepsilon_2\varepsilon_3 - {\varepsilon_2}^2 + \varepsilon_1\varepsilon_3 e^{-\alpha} - \varepsilon_1\varepsilon_2 e^{-\alpha} - \varepsilon_1\varepsilon_3 - \varepsilon_1\varepsilon_2] \qquad 4.11$$

Denklemi kolaylaştırmak için,

$\alpha = 2qa$ olarak alınır. 1.ve 3.bölgede aynı malzeme olduğu için,

$\varepsilon_1 = \varepsilon_3$

Böylece,

$$M_{22} = -\frac{1}{4\varepsilon_1\varepsilon_2}[-\varepsilon_1\varepsilon_2 e^{-\alpha} + {\varepsilon_2}^2 e^{-\alpha} - \varepsilon_1\varepsilon_2 - {\varepsilon_2}^2 + {\varepsilon_1}^2 e^{-\alpha} - \varepsilon_1\varepsilon_2 e^{-\alpha} - {\varepsilon_1}^2 - \varepsilon_1\varepsilon_2]$$
$$-\frac{1}{4\varepsilon_1\varepsilon_2}[e^{-\alpha}({\varepsilon_1}^2 + {\varepsilon_2}^2 - 2\varepsilon_1\varepsilon_2) - ({\varepsilon_2}^2 + {\varepsilon_1}^2 - 2\varepsilon_1\varepsilon_2)]$$
$$-\frac{1}{4\varepsilon_1\varepsilon_2}[e^{-\alpha}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2] = 0 \qquad 4.12$$

Buradan ise,

$$\left[\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{\varepsilon_1-\varepsilon_2}\right]^2 = e^{-\alpha} \qquad 4.13$$

$$e^{-\alpha/2} = \mp\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{\varepsilon_1-\varepsilon_2}$$

Denklemin pozitif kökü alınırsa,

$$\varepsilon_1 e^{-\alpha/2} - \varepsilon_2 e^{-\alpha/2} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$$

Düzenlenirse,

$$\varepsilon_1 \tanh(\alpha/4) + \varepsilon_2 = 0$$

Ya da

$$\varepsilon_1 \tanh(qa/2) + \varepsilon_2 = 0 \qquad 4.14$$

Bu ifade simetrik çözümdür.

Benzer şekilde negatif kökü alınırsa,

$$e^{-\alpha/2} = \frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}$$

Düzenlenirse,

$$\varepsilon_2 + \varepsilon_1 \coth(\alpha/4) = 0$$

Ya da

$$\varepsilon_2 + \varepsilon_1 \coth(qa/2) = 0 \qquad 4.15$$

Bu ifade antisimetrik çözümdür.

Normalizasyon işleminde ise,

$$\begin{aligned}\phi_1 &= c_1 e^{-qz} + c_{1b} e^{qz} = c_{1b} e^{qz}\\ \phi_2 &= c_{2a} e^{-qz} + c_{2b} e^{qz}\\ \phi_3 &= c_{3a} e^{-qz} + c_{3b} e^{qz} = c_{3a} e^{-qz}\end{aligned} \qquad 4.16$$

ifadeleri belirlenir. Buradan,

$$\phi_1\big|_{z=0} = \phi_2\big|_{z=0}$$
$$\phi_2\big|_{z=a} = \phi_2\big|_{z=a}$$
$$\varepsilon_1 \frac{d\phi_1}{dz}\bigg|_{z=0} = \varepsilon_2 \frac{d\phi_2}{dz}\bigg|_{z=0}$$
$$\varepsilon_2 \frac{d\phi_2}{dz}\bigg|_{z=a} = \varepsilon_3 \frac{d\phi_3}{dz}\bigg|_{z=a} \qquad 4.17$$

Bu ifadenin yukarıdaki denklemlere uygulanmasıyla,

$$c_{1b} = c_{2a} + c_{2b}$$
$$\varepsilon_1 c_{1b} = -\varepsilon_2 (c_{2a} - c_{2b}) \qquad 4.18$$

Denklemler düzenlenirse,

$$c_{2b} = c_{2a}\left[\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\right]$$
$$c_{1b} = c_{2a}\left[\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\right] \qquad 4.19$$

Ayrıca,

$$c_{3a} e^{-qa} = c_{2a} e^{-qa} + c_{2b} e^{qa}$$

ve

$$c_{2a} e^{-qa} - c_{2b} e^{qa} = \frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_2} c_{3a} e^{-qa} \qquad 4.20$$

Toplanırsa,

$\varepsilon_1 = \varepsilon_3$ olduğu için,

$$c_{3a} = c_{2a}\left[\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}\right] \qquad 4.21$$

Buna göre;

$$\phi_1 = c_{2a}\left[\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right]e^{qz}$$

$$\phi_2 = c_{2a}e^{qz} + c_{2a}\left[\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right]e^{qz} = c_{2a}\left[e^{-qz} + \left(\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right)e^{qz}\right]$$

$$\phi_3 = c_{2a}\left[\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}\right]e^{-qz} \qquad 4.22$$

ifadeleri elde edilir. Normalizasyon ifadesi,

$$\frac{\hbar}{2\omega} = \sum_i \frac{\varepsilon_0}{2\omega}\frac{\partial\varepsilon_i(\omega)}{\partial\omega}\int_{R_i}\left\{q^2|\phi_i|^2 + \left|\frac{\partial\phi_i}{\partial z}\right|^2\right\}dz \qquad 4.23$$

Bu ifadeyi ele aldığımız üç bölgeli yapıya uygularsak,

$$\frac{\hbar}{2\omega} = \frac{\varepsilon_0}{2\omega}\frac{\partial\varepsilon_1(\omega)}{\partial\omega}\int_{-\infty}^{0}\left\{q^2|\phi_1|^2 + \left|\frac{\partial\phi_1}{\partial z}\right|^2\right\}dz +$$

$$\frac{\varepsilon_0}{2\omega}\frac{\partial\varepsilon_2(\omega)}{\partial\omega}\int_{0}^{a}\left\{q^2|\phi_2|^2 + \left|\frac{\partial\phi_2}{\partial z}\right|^2\right\}dz +$$

$$\frac{\varepsilon_0}{2\omega}\frac{\partial\varepsilon_3(\omega)}{\partial\omega}\int_{a}^{\infty}\left\{q^2|\phi_3|^2 + \left|\frac{\partial\phi_3}{\partial z}\right|^2\right\}dz \qquad 4.24$$

Dielektik sabitlerinin verilişi,

$$\in_1(\omega) = \in_1(\infty)\frac{\omega^2-\omega_{LOG}^2}{\omega^2-\omega_{TOG}^2} \qquad 4.25$$

ve

$$\in_2(\omega) = \in_2(\infty)\frac{(\omega^2-\omega_{LOA}^2)}{(\omega^2-\omega_{TOA}^2)}\frac{(\omega^2-\omega_{LOB}^2)}{(\omega^2-\omega_{TOB}^2)} \qquad 4.26$$

$\in_1(\omega) = \in_3(\omega)$ olduğu için,

$$\frac{\partial\varepsilon_1(\omega)}{\partial\omega} = -2\omega\varepsilon_1(\infty)\frac{(\omega_{TOG}^2-\omega_{LOG}^2)^2}{(\omega_{TOG}^2-\omega^2)^2} \qquad 4.27$$

Gerekli düzenlemeler yapılırsa,

$$\frac{\partial \varepsilon_2(\omega)}{\partial \omega} = \frac{2\varepsilon_2(\omega)\omega}{(\omega^2-\omega_{TOA}^2)(\omega^2-\omega_{TOB}^2)}\Big[(\omega^2-\omega_{LOA}^2)(\omega^2-\omega_{LOB}^2) - (\omega^2-\omega_{LOA}^2)(\omega^2-\omega_{LOB}^2)\left(\frac{1}{(\omega^2-\omega_{TOA}^2)}+\frac{1}{(\omega^2-\omega_{TOB}^2)}\right)$$ 4.28

ve

$$\frac{\partial \varepsilon_3(\omega)}{\partial \omega} = \frac{\partial \varepsilon_1(\omega)}{\partial \omega} - 2\omega\varepsilon_1(\infty)\frac{(\omega_{TOG}^2-\omega_{LOG}^2)^2}{(\omega_{TOG}^2-\omega^2)^2}$$ 4.29

Üç bölge için yazdığımız normalizasyon ifadesi böylece,

$$\frac{\varepsilon_0}{\hbar}\left\{\frac{\partial \varepsilon_1(\omega)}{\partial \omega}\int_{-\infty}^{0}\left\{q^2|\phi_1|^2+\left|\frac{\partial \phi_1}{\partial z}\right|^2\right\}dz + \frac{\partial \varepsilon_2(\omega)}{\partial \omega}\int_{0}^{a}\left\{q^2|\phi_2|^2+\left|\frac{\partial \phi_2}{\partial z}\right|^2\right\}dz + \frac{\partial \varepsilon_1(\omega)}{\partial \omega}\int_{a}^{\infty}\left\{q^2|\phi_3|^2+\left|\frac{\partial \phi_3}{\partial z}\right|^2\right\}dz \quad =1$$ 4.30

halini alır.

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial z} = c_{2a}\left[\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right]qe^{qz}$$
$$\frac{\partial \phi_2}{\partial z} = c_{2a}q\left[-e^{-qz}+\left(\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right)e^{qz}\right]$$
$$\frac{\partial \phi_3}{\partial z} = -c_{2a}\left[\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}\right]qe^{-qz}$$ 4.31

olarak ifade edilir. Normalizasyon sabiti;

$$c_{2a} = C$$

olarak alınırsa, böylece 4.30 denklemi şu hali alır;

$$q^2|\phi_1|^2+\left|\frac{\partial\phi_1}{\partial z}\right|^2=3q^2c_{2a}^2\left(\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}\right)^2e^{2qz}+q^2c_{2a}^2\left(\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}\right)e^{2qz}$$

$$q^2|\phi_2|^2+\left|\frac{\partial\phi_2}{\partial z}\right|^2=c_{2a}^2 2q^2\left[e^{-2qz}+\left(\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right)e^{2qz}\right]$$

$$q^2|\phi_3|^2+\left|\frac{\partial\phi_3}{\partial z}\right|^2=2q^2c_{2a}^2\left(\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right)^2e^{-2qz} \qquad 4.32$$

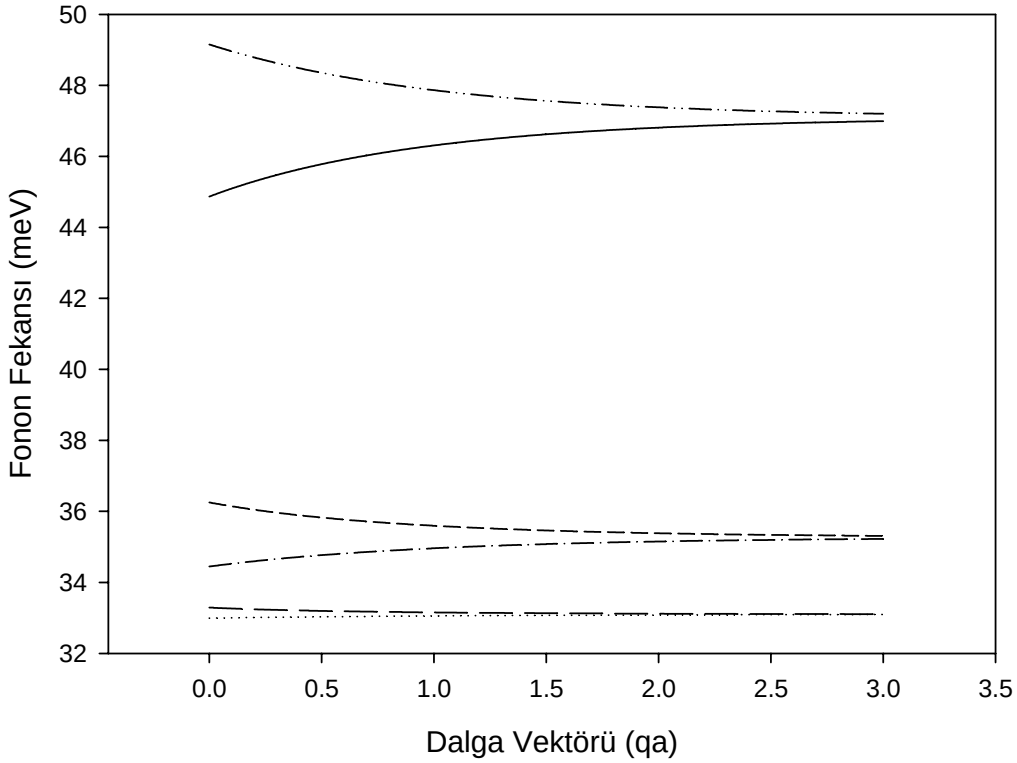
Bu üç ifadenin düzenlenmesiyle,

$$\frac{q\varepsilon_0C^2}{\hbar}\left\{\frac{\partial\varepsilon_1}{\partial\omega}\left[\left(\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}\right)^2+\left(\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}\right)^2e^{-2qa}\right]+\right.$$
$$\left.\frac{\partial\varepsilon_2}{\partial\omega}\left[(1-e^{-2qa})+\left(\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\right)^2(e^{-2qa}-1)\right]\right\}=1 \qquad 4.33$$

elde edilmiş olur.

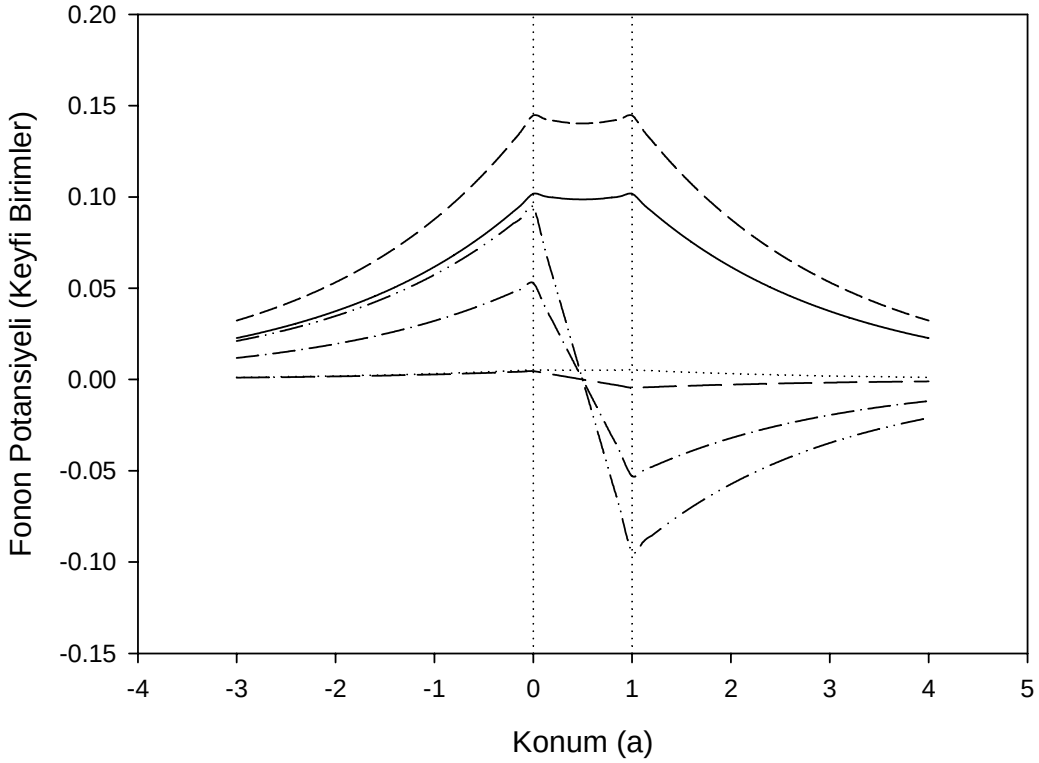
Bu tezde inceleme GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/ GaAs yapısı üzerine yapıldı. Grafikleri hazırlamak için kullanılan değerler aşağıda verilmektedir. Burada A, GaAs-benzeri ve B ise AlAs-benzeri modları göstermektedir. Fonon modlarının frekansları ve potansiyelleri değişik durumlar için aşağıdaki grafiklerde gösterildi.

$$\omega_{LOA}=36.25-6.55x+1.79x^2$$
$$\omega_{TOA}=33.29-0.64x-1.16x^2$$
$$\omega_{LOB}=44.63+8.78x+3.32x^2$$
$$\omega_{TOB}=44.63+0.55x-0.30x^2$$



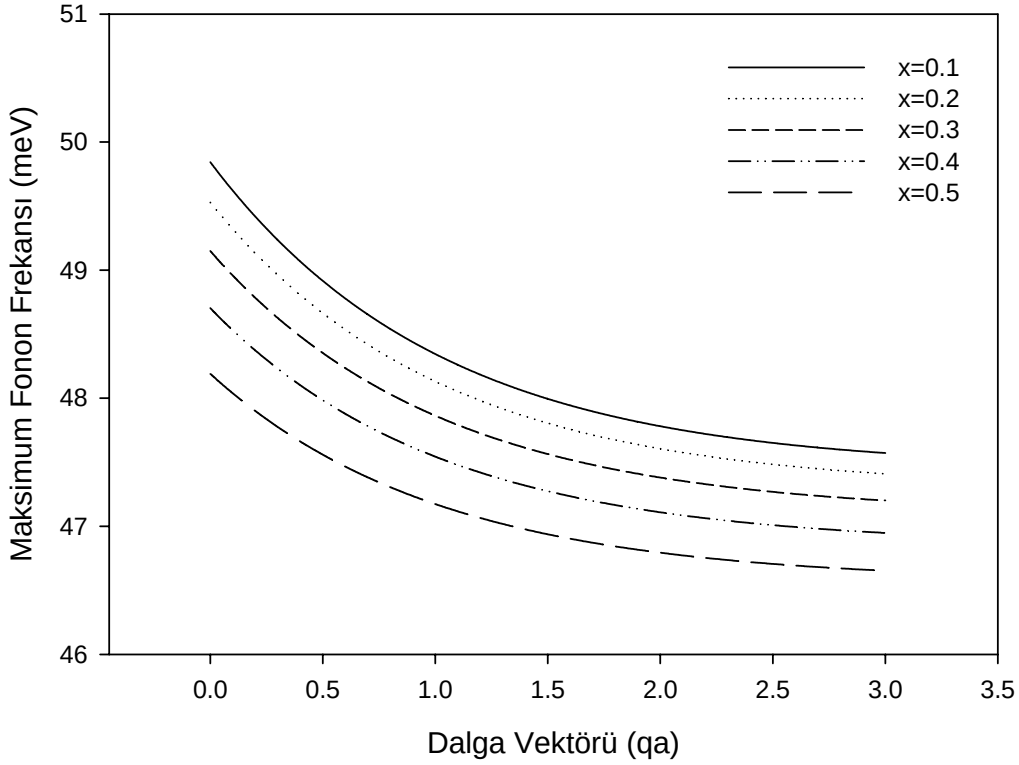
Şekil 16. GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs heteroyapı için 6 arayüzey fonon modunun dalga vektörü ile değişimi (dispersiyon). Burada a=1 ve x= 0.3 alınmıştır.

Şekil 16'da görüldüğü gibi incelediğimiz heteroyapı için, iki arayüzey olması nedeniyle 6 tane fonon frekansı ortaya çıkmıştır. Grafiğin altından başlamak şartıyla, ilk dördü GaAs modlarını göstermekte, diğer ikisi ise AlAs modlarını göstermektedir.



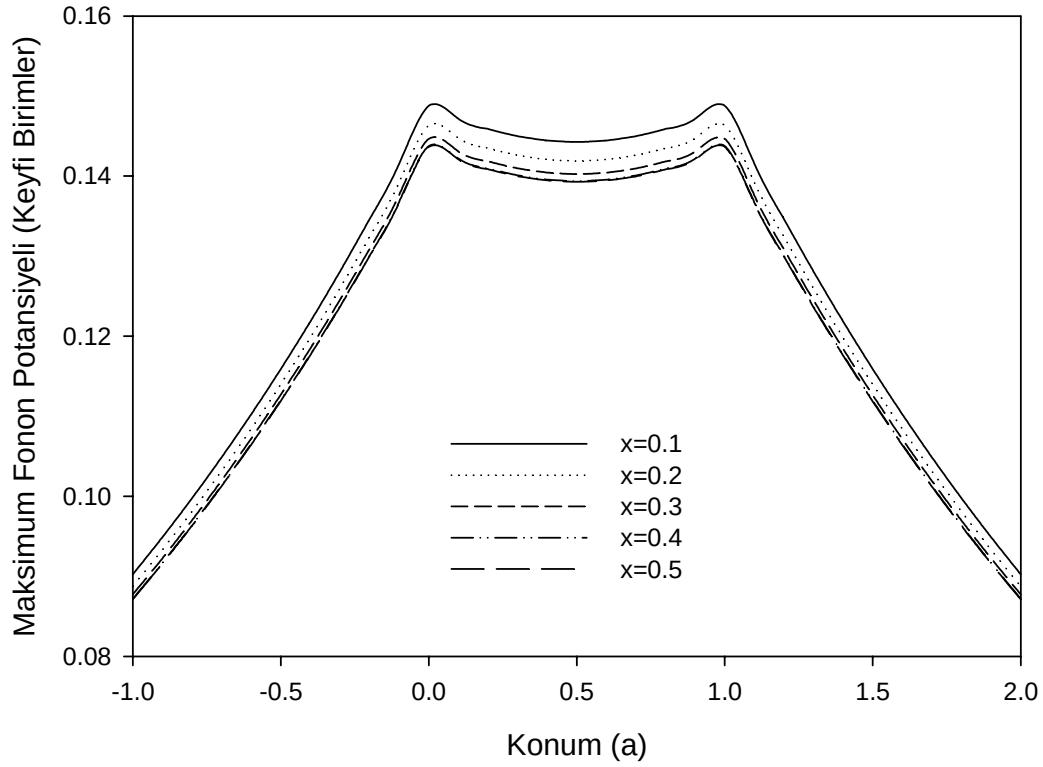
Şekil 17. GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/GaAs heteroyapı için 6 arayüzey fonon moduna ait fonon potansiyellerinin konumla değişimi. Burada a=1 ve x= 0.3 alınmıştır.

Şekil 17'de kuyu içerisindeki bölgede fonon potansiyelinde ciddi bir sapma gözlenmektedir. Fonon potansiyeli kuyunun 1. ve 3. bölgelerindeki üç potansiyel değeri simetrik fakat zıt işaretli ve iki tanesi simetrik değerlere sahiptir.



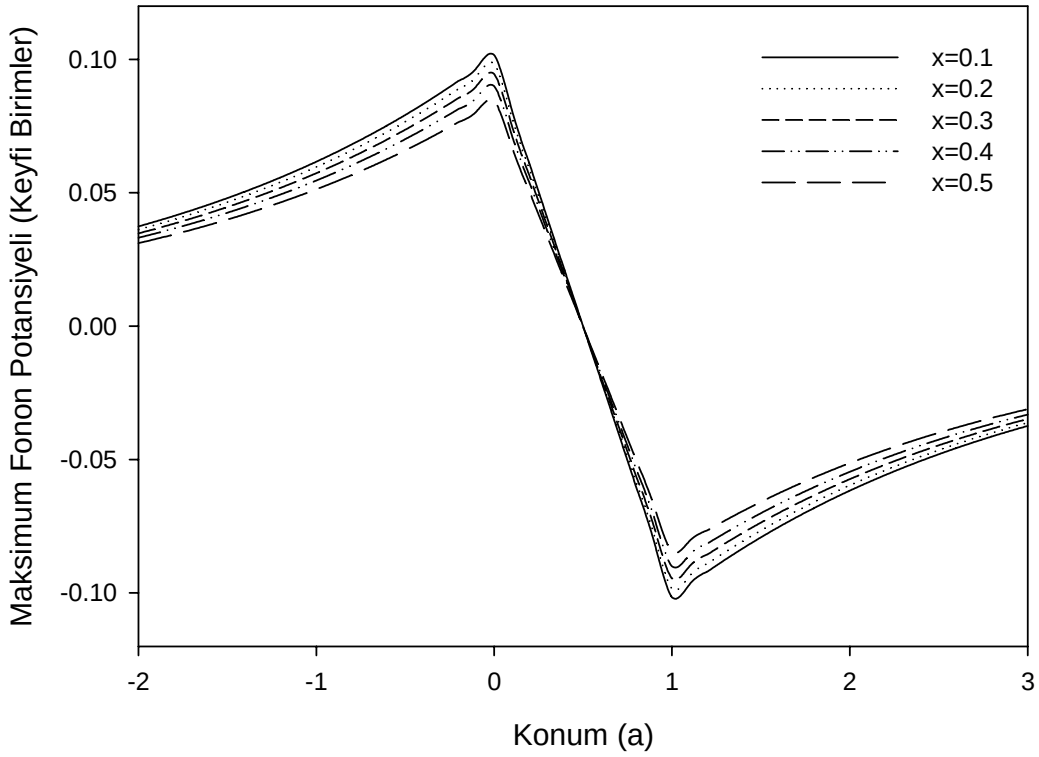
Şekil 18. $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ heteroyapı için maksimum arayüzey fonon mod frekansının (ω_{3a}) dispersiyonu. Burada farklı stokiyometrik oran (x) değerleri göz önüne alınmıştır ve a=1 dir.

Şekil 18'de stokiyometrik orana bağlı olarak, sabit kuyu genişliğinde dalga vektörü ile maksimum fonon frekansı arasında eksponansiyel bir azalma gözlenmektedir.



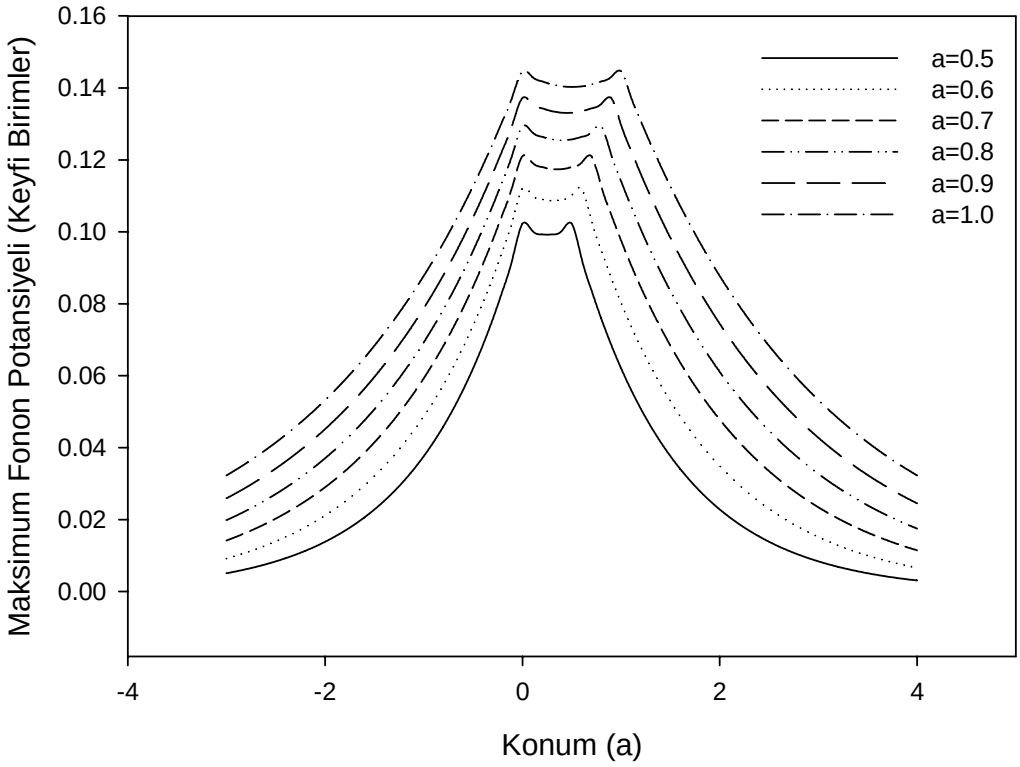
Şekil 19. GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/GaAs heteroyapı için maksimum simetrik fonon potansiyelinin (ω_{2s}) konumla değişimi. Şekilde farklı stokiyometrik oran (x) değerleri için sonuçlar verilmiştir ve a=1 dir.

Şekil 19'da stokiyometrik orana bağlı olarak potansiyel değerindeki düşme görülmektedir. Kuyu içerisinde fononun maksimum potansiyelinin farklılaştığı görülmektedir. Kuyunun 1.bölgesinden 2.bölgesine yaklaştıkça maksimum fonon potansiyeli artmakta, 2.bölgesinden 3.bölgeye geçildiğinde aynı oranda azalma görülmektedir.



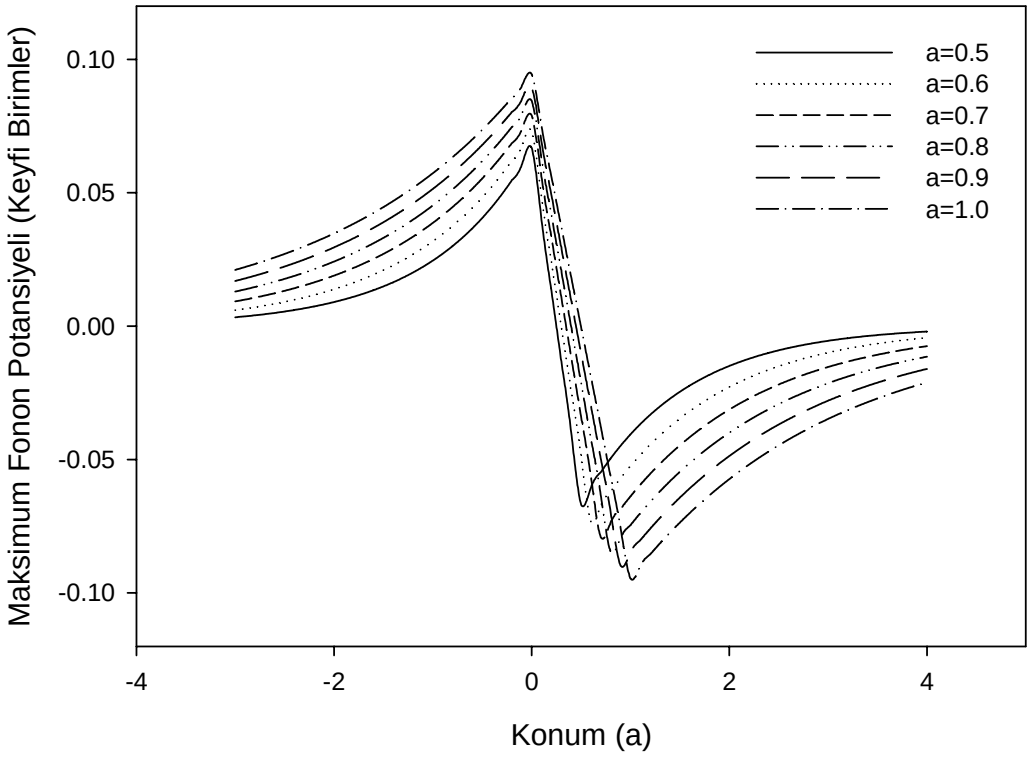
Şekil 20. GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/GaAs heteroyapı için maksimum asimetrik fonon potansiyelinin (ω_{3a}) konumla değişimi. Şekilde farklı stokiyometrik oran (x) değerleri için sonuçlar verilmiştir ve a=1 dir.

Şekil 20'de kuyu içerisinde maksimum fonon potansiyelinde ciddi bir düşüş vardır. Kuyunun 1. ve 3. bölgelerinde bariyerlere yaklaştıkça maksimum fonon potansiyelinin x değerine de bağlı olarak artış gösterdiği görülmektedir.



Şekil 21. GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/GaAs heteroyapı için maksimum simetrik fonon potansiyelinin (ω_{2s}) konumla değişimi. Burada x= 0.3 alınmıştır ve farklı a kuyu genişlikleri için sonuçlar verilmiştir.

Şekil 21'de kuyunun z=0 noktasına kadar eksponansiyel artış, 0 noktasında kısa bir denge durumundan sonra artış oranında bir düşüş görülmektedir. Kuyu genişliğinin daha küçük değerleri için bu durum daha net görülmektedir.



Şekil 22. GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/GaAs heteroyapı için maksimum asimetrik fonon potansiyelinin (ω_{3a}) konumla değişimi. Burada x= 0.3 alınmıştır ve farklı a kuyu genişlikleri için sonuçlar verilmiştir.

Şekil 22'deki grafiği 3 bölgede incelemek mümkündür. Grafiğin 1.bölgesinde kuyu genişliği artışıyla maksimum asimetrik fonon potansiyeli eksponansiyel olarak artmış, 2.bölgede keskin bir düşüş görülmüş ve 3.bölgede tekrar eksponansiyel olarak artmıştır.

5. KAYNAKLAR

Adachi S., J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985)

Anselm A., Introduction to Semiconductor Theory (Prentice Hall, Englewood Cilffs, NJ, 1981)

Azuhata T., Sota T., Suzuki K., and Nakamura S., J. Phys. Condens. Matter. **7**, L129 (1995)

Born M. and Huang K., Dynamical Theory of Crystal Lattices (Clarendon Press Oxford, England, 1954)

Bungaro C., Rapcewicz K. and Bernholc J., Phys. Rev. B **61**, 6720 (2000)

Chen C., Dutta M., and Stroscio M. A.,Phys. Rev. B **70**, 075316 (2004)

Chen C., Dutta M., and Stroscio M. A., J. Appl. Phys. **95**, 2540 (2004)

Comas F., Trallero-Gıner C., and Rıera R., Phys. Rev. B **39**, 5907 (1989)

Degani M. H., Hipolito O. : Surf. Sci. 196, 459 (1988); Superlatt. Microstruct. **5**, 141 (1989)

Esaki I. and Tsu R. (1970), Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors, IBM Journal of Research and Development, **14**, 61-65

Fasol G., Tanaka M., Sakaki H., and Horikosh Y. (1988), Interface roughness and dispersion of confined LO phonons in GaAs / AlAs quantum wells, Physical Review, B **38**, 6056-6065

Fröhlich H., Adv, Phys. 3, 325 (1954)

Fuchs R. and Kliewer K., Phys. Rev. 140, A2076 (1965)

Gleize J., Renucci M. A., Frandon J., and Demangeot F. (1999), Anisotropy effects on polar optical phonons in würtzite GaN/AlN superlattices, Physical Review, B **60**, 15 985- 15992

Gleize J., Demangeot F., Frandon J., Renucci M. A., Kuball M., Grandjean N., and Massies J. (2000), Resonant Raman scattering in (Al,Ga)N/GaN quantum well structures, Thin Solid Films, **364**, 156-160

Hai G. Q., Peeters F. M., and Devreese J. T., Phys. Rev. **B42**, 11 063 (1991)

Haken H. , Quantum Field Theory of Solids (North-Holland, Amsterdam, 1976)

Kim, K. W. and Stroscio, M. A. (1990), Electron-optical-phonon interaction in binary/ternary heterostructures, Journal of Applied Physics, **68**, 6289-6292

Kim K.W., Bhatt A.R., Stroscio M.A., Turley P.J., and Teitsworth S. W. (1992), Effects of interface phonon scattering in multi-heterointerface structures, Journal of Applied Physics, **72**, 2282-2287

Komirenko S.M., Kim K.W., M.A. Stroscio, and Dutta M., Phys. Rev. B **59**, 5013 (1999)

Komirenko S.M., Kim K.W., M.A. Stroscio, and Dutta M., Phys. Rev. B **61**, 2034 (2000)

Landolt- Börnstein Tables, edited by O. Madelung (Springer, Berlin, 1987), Group III, Vol. 22a, pp. 136 – 139

Liang X.X., Gu S., Lin D.L.: Phys. Rev. B **34**, 2807 (1986)

Liang X.X. and Wang.X. , Phys. Rev. B **43**, 5155 (1991)

Liang X.X. and Yan Z.W., Int. J. Mod. Phys. B **15**, 3359 (2001)

Licari J.J. and Evrard R. (1977), Electron-phonon interaction in a dielectric slab: effect of the electronic polarizibility, Physical Review , **B15**, 2254-2264

Loudon R., Adv. Phys. **13**, 423 (1964) ; Hayes W. and Loudon R., Scattering of Light by Crystals (Wiley, New York, 1978)

Lucas A., Kartheuser E., and Badro R.G., Phys. Rev. B **2**, 2488 (1970)

Lü J.T. and Cao J.C. , Phys. Rev. B **71**, 155304 (2005)

Lyddane R.H., Sachs R.G., and Teller E., Phys. Rev. **59**, 673 (1941)

Mitin, V.V., Kochelap, V.A., and Stroscio M.A. (1999), quantum heterostructures: Microelectronics and optoelectronics. Cambridge University press, Cambridge

Mori N. and Ando T., Phys. Rev. B **40**, 6175 (1989)

Mori N., Taniguchi K., and Hamaguchi C. (1992), Effects of electron-interface phonon interaction on resonant tunneling in double-barrier heterostructures, Semiconductors Science and Technology, **7**, B83-B87

Nash K.J., Phys. Rev. B **46**, 7723 (1992)

Pankove I.J., Moustakas T.D. 1998. Gallium nitride(GaN) Semiconductors and Semimetals, Volume 50, Washington

Sharpe W.N., Jackson K.M., Hemker K.J., and Xie Z., "Effect of Specimen Size in Young's Modulus and Fracture Strength of Polysilicon", J. Microeletromechanical Systems, vol. 10, no. 2, 317-326 (2001)

Shi J.J., Phys. Rev. B **68**, 165335 (2003)

Shi. J.J., Chu X.L., and Goldys E.M., Phys. Rev. B **70**, 115318 (2004)

Stroscio M.A., Phys. Rev. B **40**, 6428 (1989)

Stroscio M.A. and Dutta M., Phonons in Nanostructures (Cambridge University Press, Cambridge, 2001)

Teng H.B., Sun J.P., Haddad G.I., Stroscio M.A., Yu S.G. and Kim K.W., J. Appl. Phys. **84**, 2155 (1998)

Wendler L. (1985), Electron-phonon interaction in dielectric bilayer systems: effects of the electronic polarizability, Physica Status Solidi B, **129**, 513-530

Wendler L. and Pechsredt R., Phys. Status Solidi **B141**, 129 (1987)

Yu S.G., Kim K.W., Stroscio M.A., Iafrate G.J., Sun J.P., and Haddad G.I., (1997), Transfer matrix method for interface optical-phonon modes in multiple-interface heterostructure systems, journal of applied physics, 82, 3363- 3367

Zianni X., Simserides C.D., Triberis G.P.: Phys.Rev. B **55**, 16325 (1996)

Zheng R., Ban S., Liang X.X. : Phys. Rev. B **49**, 1996 (1994); Phys. C. : 6, 10307 (1994)