

Antisimetrik $Al_{xL}Ga_{1-xL}As/GaAs/Al_{xR}Ga_{1-xR}As$ Kuantum Kuyusunda Hidrostatik Basıncın Etkisi

Sema MİNEZ¹, Serpil SUCU¹, Hasan AKBAŞ¹

¹ Trakya Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, EDİRNE

ÖZET

Bu çalışmada sıcaklık ve hidrostatik basınç etkisi altında simetrik $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ve antisimetrik $Al_{xL}Ga_{1-xL}As/GaAs/Al_{xR}Ga_{1-xR}As$ kuantum kuyularında engel yükseklik oranlarının etkileri, etkin kütle yaklaşımında varyasyonel yöntem kullanılarak çalışıldı. Taban durum yabancı atom enerjileri, yabancı atom enerjisinin dönüm noktaları ve taban durum normalize edilmiş bağlanma enerjileri hesaplandı. Sıcaklık, hidrostatik basınç, farklı engel yükseklikleri ve yabancı atom konumunun, taban durum yabancı atom enerjisini ve yabancı atom enerjisinin dönüm noktalarını önemli ölçüde değiştirdiği gösterildi.

Anahtar kelimeler: Dönüm noktası, Hidrostatik basınç, Yabancı atom enerjisi, Bağlanma enerjisi

The hydrostatic pressure effects in the asymmetric $Al_{xL}Ga_{1-xL}As/GaAs/Al_{xR}Ga_{1-xR}As$ quantum well

ABSTRACT

In this work, we studied the effects of barrier height ratio V_L/V_R on simetric $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ and asymmetric $Al_{xL}Ga_{1-xL}As/GaAs/Al_{xR}Ga_{1-xR}As$ quantum wells under the presence of hydrostatic pressure by using variational method within the effective mass approximation. We calculated ground state impurity energies and impurity energy turning points as functions of the impurity position. We observed that the ground state impurity energies and impurity energy turning points depends strongly on hydrostatic pressure, different barrier heights and impurity positions.

Keywords: Turning point, hydrostatic pressure, impurity energy, binding energies

1.GİRİŞ

Günümüzde düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin araştırılması, kuantum fiziği ile açıklanabilen davranışlara sahip yeni elektronik devre elemanlarının üretilmesine olanak sağladığından büyük önem kazanmıştır. Düşük boyutlu yapıların iletkenliği, yapıldığı yarıiletken malzemeye yabancı atomlar katılmasıyla arttırılabilir. Bu yüzden bir yabancı atomun yapıya eklediği ilave elektronun enerji özdeğerleri ve bağlanma enerjileri yapıyı karakterize eder.

Kuantum nokta yapıların fiziksel özellikleri araştırılırken çeşitli hesaplama yöntemleri kullanılır. Bu yöntemler analitik, varyasyonel veya nümerik işlemlere dayanmaktadır. Son yıllarda düşük boyutlu heteroyapılardaki yabancı atomun fiziksel özelliklerini araştırmak amacıyla pek çok teorik ve deneysel çalışma yapılmıştır[1][2][3][4][5][6][7]. Antisimetrik kuantum kuyusuna yabancı atomun bağlanma

enerjisine etkileri Zang[8], hidrostatik basınç ve elektrik alan etkisi Niculescu vd. tarafından çalışılmıştır [9]. Herhangi bir dış etkinin olmadığı antisimetrik $Al_{xL}Ga_{1-xL}As/GaAs/Al_{xR}Ga_{1-xR}As$ kuantum kuyusuna farklı bariyer yükseklik oranlarının etkileri Akbas vd. tarafından çalışılmıştır[10].

Biz bu çalışmada etkin kütle yaklaşımında varyasyonel yöntem kullanarak hidrostatik basıncın etkisi altındaki simetrik $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ve antisimetrik $Al_{xL}Ga_{1-xL}As/GaAs/Al_{xR}Ga_{1-xR}As$ kuantum kuyusunu inceledik. Farklı bariyer yükseklik oranları ve farklı hidrostatik basınç değerleri için taban durum yabancı atom enerjisinin pozitif değerlerden negatif değerlere geçtiği dönüm noktalarını (DN) hesapladık. Bariyer yükseklik oranlarını ve yabancı atom konumunu değiştirmek elektron-yabancı atom mesafesini değiştirmektedir ve aynı zamanda z doğrultusundaki dalga fonksiyonunu kaydırmakta ve sistemin simetrisini

bozmaktadır. Bu durum kuantum kuyusunun elektronik ve optiksel özelliklerini değiştirmede önemli rol oynamaktadır. Bu nedenle bizim sonuçlarımız yeni elektronik cihazların tasarlanmasında kullanılabilir. Bu çalışmada hidrostatik basınç $P=0-30$ kbar birimindedir.

II. TEORİ

Etkin kütle yaklaşımında $\text{Al}_{x_L}\text{Ga}_{1-x_L}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{x_R}\text{Ga}_{1-x_R}\text{As}$ kuantum kuyusunda hidrostatik basınç etkisi altında $\vec{r}_i = (0,0,z_i)$ de konumlandırılmış hidrojenik donör yabancı atom için silindirik koordinatlarda Hamiltonyen [10].

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

Burada e elektron yükü, $\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}$ elektron ile yabancı atom arasındaki mesafe, $m^*(P)$ etkin kütle, $\epsilon(P)$ kuantum kuyusunun içindeki ortamın dielektrik sabitidir ve her ikisi de hidrostatik basınç fonksiyonu olarak

$$m^*(P) = m_0^* e^{0.078P}, \quad (2)$$

$$\epsilon(P) = \epsilon(0) - 0.8 P, \quad (3)$$

dir [11]. Burada m_0 serbest elektron kütlesi olmak üzere $m_0^* = 0.067 m_0$ ve $\epsilon(0) = 13.1$ dir [10]. Antisimetrik kuantum kuyusu için V_L sol taraftaki ve V_R sağ taraftaki engel yüksekliği olmak üzere sınırlayıcı potansiyel $V(z,P)$

$$V(z,P) = \begin{cases} V_L(x_L,P) & , z < 0 \\ 0 & , 0 \leq z \leq L(P) \\ V_R(x_R,P) & , L(P) < z \end{cases} \quad (4)$$

dir [10]. Kuantum kuyusunun kuyu genişliği, dış etki yokken L_0 ile gösterilir ve hidrostatik basınç etkisi altındayken

$$L(P) = L_0 (1 - 1.5082 \times 10^{-3} P) \quad (5)$$

şeklinde hidrostatik basınç bir fonksiyondur [10]. [12] [13] $x(z)$ sınırlayıcı potansiyel profili farklı β mol kesirleri ile üç katmanlı olarak üretilir ve

$$x(z) = \begin{cases} x_L & , z < 0 \\ 0 & , 0 \leq z \leq L(P) \\ x_R & , L(P) < z \end{cases} \quad (6)$$

şeklinde [9]. Biz bu çalışmada $\beta = x_L/x_R$ 'yı antisimetrik parametre olarak tanımladık. Hesaplarımızda herhangi bir dış etkinin olmadığı durumda, sabit β mol kesirinin $x_L = 0.3$ olduğu duruma karşılık gelen $V_L = 228 \text{ meV}$ değerini kullandık [10].

Uygulanan basınç etkisi altında bariyer yüksekliği

$$V_{L,R}(x,P) = Q_c \Delta E_g(x_{L,R},P) \quad (7)$$

dir. Burada $Q_c = 0.658$ iletkenlik bant aralığı ve $\Delta E_g(x_{L,R},P) = \Delta E_g(x_{L,R}) + D(x_{L,R})$ dir. ΔE_g eV ve $D(x_{L,R})$ eV/kbar biriminde olmak üzere

$$\Delta E_g = 1.155 x_{L,R} + 0.3 x_{L,R}^2 \quad (8)$$

$$D(x_{L,R}) = -1.3 \times 10^{-3} x_{L,R} \quad (9)$$

dir [12].

Yabancı atomun yokluğunda Hamiltonyenin özfonksiyonları taban durum için

$$\psi_0(z) = \begin{cases} B_l e^{\alpha_l z} & , 0 < L(P) \\ A_c \sin(\alpha_c z + \Phi) & , 0 \leq z \leq L(P) \\ B_r e^{-\alpha_r z} & , L(P) < z \end{cases} \quad (9)$$

olarak ifade edilir [10]. Burada

$$\alpha_{l,r} = \sqrt{2m^*(P)(V_{L,R}(x,P) - E_0(L(P),P))/\hbar^2} \quad \text{ve} \\ \alpha_c = \sqrt{2m^*(P)E_0(L(P),P)/\hbar^2} \quad (10)$$

dir. Burada $E_0(L(P),P)$;

$$\tan(\Phi + \alpha_c L(P)) = -\frac{\alpha_c}{\alpha_r} \text{ ve } \sin(\Phi) = \sqrt{\frac{E_0(L(P) P)}{V_L(x_L, P)}} \quad (11)$$

Transandantal denklem ile verilen taban durum enerjisidir. Hidrostatik basıncın varlığında antisimetrik kuantum kuyusu için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi yaklaşık yöntemlerden varyasyonel yöntemle çözülecektir. Bu durum için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi(\rho, z) = N \psi_0(z) \exp(-\lambda \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}) \quad (12)$$

olarak seçilir. Burada λ varyasyonel parametre ve N normalizasyon sabitidir.

$E_i(L(P) z_i, V_{L,R}(x, P))$ deneme yabancı atom enerjisi

$$E_i(L(P) z_i, V_{L,R}(x, P)) = \min_{\lambda} \frac{\langle \psi(\rho, z) | \hat{H} | \psi(\rho, z) \rangle}{\langle \psi(\rho, z) | \psi(\rho, z) \rangle} \quad (13)$$

ifadesinden λ 'nın minimizasyonu ile elde edilir. Bu çalışmada yabancı atom enerjisi üzerine farklı bariyer yükseklik oranları β 'nin etkileri ve yabancı atom konumundaki değişikliklerin etkileri araştırıldı. Yabancı atomun olmadığı durumda taban durum enerjisi $E_0(L(P) P)$ ve yabancı atom varlığında taban durum yabancı atom enerjisi $E_i(L(P) z_i, V_{L,R}(x, P))$ olmak üzere sistemin bağlanma enerjisi

$$E_b(L(P) z_i, V_{L,R}(x, P)) = E_0(L(P) P) - E_i(L(P) z_i, V_{L,R}(x, P)) \quad (14)$$

şeklinde tanımlanır.

III. SONUÇ TARTIŞMA

Bu kısımda $z_i \in [0, L]$ için simetrik $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ve antisimetrik $\text{Al}_{xL}\text{Ga}_{1-xL}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{xR}\text{Ga}_{1-xR}\text{As}$ tekli kuantum kuyuları için nümerik hesaplamalar gerçekleştirildi. Farklı bariyer yükseklikleri $\beta = 0.3$, $\beta = 1$, $\beta = 1.5$ olarak seçildi. Sınırlayıcı potansiyel değeri için herhangi bir dış etkinin olmadığı durumda, sabit \hbar mol kesrinin $x_L = 0.3$ olduğu duruma karşılık gelen $V_L = 228 \text{ meV}$ değerini kullandık [10]. Dış etki yokken kuantum kuyu genişliği $L_0 = 240 \text{ \AA}$ alınmıştır. Hidrostatik basınç (0–30) kbar, aralığında incelenmiştir. Nümerik hesaplamalarda $m_0^* = 0.067 m_0$ ve $\varepsilon(0) = 3.3$ kullanıldı [10].

Şekil 1'de hidrostatik basıncın farklı sabit değerleri için yabancı atomun simetrik kuantum kuyusunun merkezinde

olduğu durum $z_i = L(P)/2$ için (a) taban durum yabancı atom enerjisinin (b) taban durum bağlanma enerjisinin kuantum kuyusunun genişliğine göre değişim grafiği gösterilmektedir. (a) da E_i taban durum yabancı atom enerjisi kuyu genişliği ve basınç arttıkça azalmaktadır [3]. Ayrıca basıncın artırılmasıyla taban durum yabancı atom enerjisinin pozitif değerlerden negatif değerlere geçtiği nokta olan dönüm noktalarının (DN) daha küçük kuyu genişliklerinde olduğu gözlenmektedir. (b) de E_b taban durum bağlanma enerjisi kuyu genişliği arttıkça azalmakta, hidrostatik basınç arttıkça artmaktadır [14][15][16]

Şekil 2'de hidrostatik basıncın farklı sabit değerleri için simetrik ve antisimetrik kuantum kuyusunda taban durum yabancı atom enerjisinin dönüm noktalarının yabancı atomun konumunun bir fonksiyonuna bağlı olarak değişim grafiği gösterilmektedir. Burada dönüm noktası taban durum yabancı atom enerjisinin pozitif değerlerden negatif değerlere geçtiği kuantum kuyu genişliğidir. Bu nokta E_i taban durum yabancı atom enerjisi için bir dönüm noktasıdır. Yabancı atom konumunun merkezde olduğu durumda yabancı atom enerjisinin en küçük değeri aldığı görülmektedir. Kuantum kuyusunun bariyer yükseklik oranı $\beta = 1$ simetrik olduğu durumda dönüm noktası eğrisinin $z_i = L(P)/2$ etrafında simetrik olduğu görülmektedir. $\beta = 0.3$ ve $\beta = 1.5$ durumlarında dönüm noktası eğrisi kuantum kuyusunun merkezine göre antisimetrik dağılmaktadır. Dönüm noktaları bariyer yükseklik oranı arttıkça azalmaktadır. Ayrıca hidrostatik basıncın artmasıyla dönüm noktalarının azaldığı görülmektedir.

Şekil 3'de üç farklı bariyer yükseklik oranı $\beta = 0.3$, $\beta = 1$, $\beta = 1.5$ ve yabancı atomun konumunun kuantum

kuyusunun merkezinde olduğu durum $z_i = L(P)/2$ için simetrik ve antisimetrik kuantum kuyusunda taban durum yabancı atom enerjisinin dönüm noktalarının hidrostatik basınca göre değişimi gösterilmektedir. Dönüm noktaları artan hidrostatik basınç ile azalmaktadır. Bariyer yükseklik oranı arttıkça dönüm noktaları azalmaktadır.

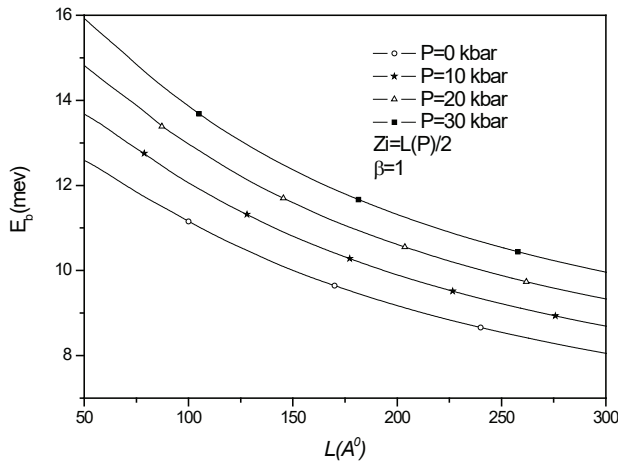
Şekil 4'de Üç farklı bariyer yükseklik oranı $\beta = 0.3$, $\beta = 1$, $\beta = 1.5$ ve herhangi bir etkinin olmadığı durumda kuyunun genişliği $L_0 = 240 \text{ \AA}$ için taban durum yabancı atom enerjisi ve taban durum bağlanma enerjisinin yabancı atom konumunun fonksiyonu olan $z_i / L(P)$ 'ye göre değişim grafiği gösterilmektedir. Her iki grafikte de $\beta = 1$ simetrik kuantum kuyu durumu için eğrilerin kuantum

kuyusunun merkezi $z_i = L(P)/2$ 'ye göre simetrik olduğunu görmekteyiz. $\beta = 0.3$, $\beta = 1.5$ için bu simetrisinin bozulduğu görülmektedir. (a) da bariyer yükseklik oranı arttıkça taban durum yabancı atom enerjisi E_i nin azaldığı görülmektedir. $\beta = 0.3$ için taban durum yabancı atom enerjisinin negatif bölgede kapladığı alan en küçük iken $\beta = 1.5$ için taban durum yabancı atom enerjisinin negatif bölgede kapladığı alan en büyüktür. Ayrıca $z_i > L(P)/2$ durumu için taban durum yabancı atom enerjisi arasındaki fark $z_i < L(P)/2$ durumuna göre belirgin şekilde artmaktadır. (b) de bağlanma enerjisi eğrisinin maksimum değeri $\beta = 0.3$ durumu için kuantum kuyusunun sol bölgesine doğru ve $\beta = 1.5$ için kuantum kuyusunun sağ bölgesine doğru kaymaktadır.

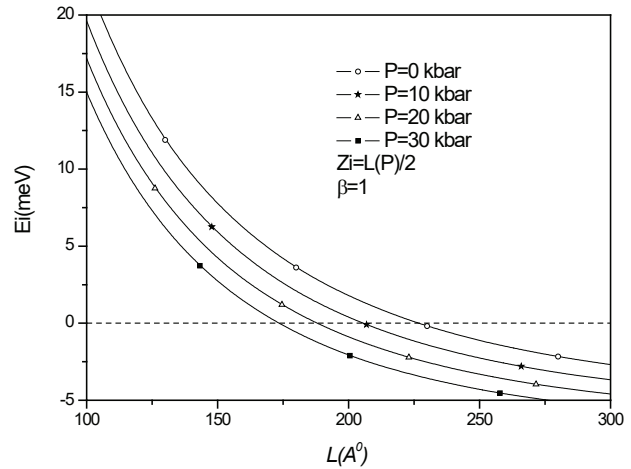
Sonuç olarak bu çalışmada etkin kütle yaklaşımı içerisinde varyasyonel yöntem kullanılarak antisimetrik kuantum kuyusu üzerinde farklı bariyer yükseklik oranlarının ve

hidrostatik basıncın taban durum yabancı atom enerjisi, yabancı atom enerjisi dönüm noktaları ve taban durum bağlanma enerjileri üzerine etkileri araştırıldı. Hesaplamalarımız sonucunda dönüm noktalarının konumunun kuyunun antisimetrikliğine önemli ölçüde bağlı olduğu gözlemlendi. Elektron-yabancı atom mesafesinin, yabancı atomun konumu z_i ve bariyer yükseklik oranı β ile değiştiği gözlemlendi. β ve z_i nin yalnızca elektron-yabancı atom mesafesini etkilemediği aynı zamanda z doğrultusundaki dalga fonksiyonunu kaydıracağı ve sistemin simetrisini bozduğu gözlemlendi. Bariyer yükseklik oranının ve hidrostatik basıncın artmasıyla dönüm noktalarının azaldığı görüldü. Bu çalışmadaki bulgulara göre

Kuantum kuyu genişliği, hidrostatik basınç ve yabancı atom konumu, istenilen bağlanma enerjisinin, yabancı atom enerjisinin ve dönüm noktalarının elde edilmesi için değiştirilebilir parametreler olarak kullanılabilir. Bu çalışmanın düşük boyutlu yapılardaki deneysel çalışmalara örnek teşkil edeceğini umut ediyoruz.

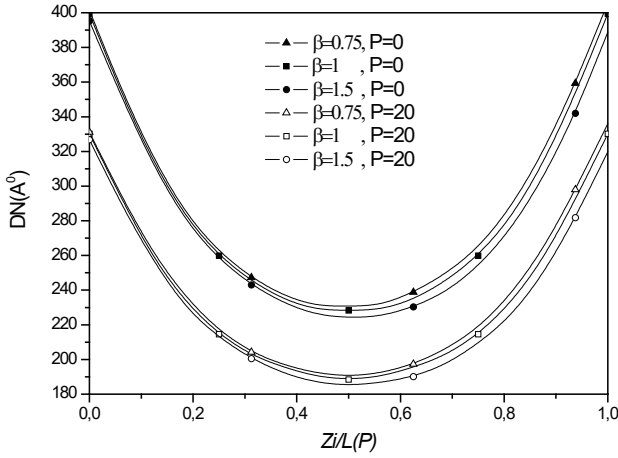


(a)

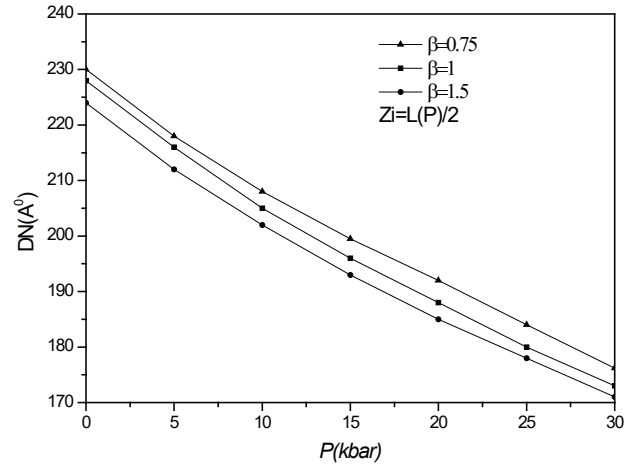


(b)

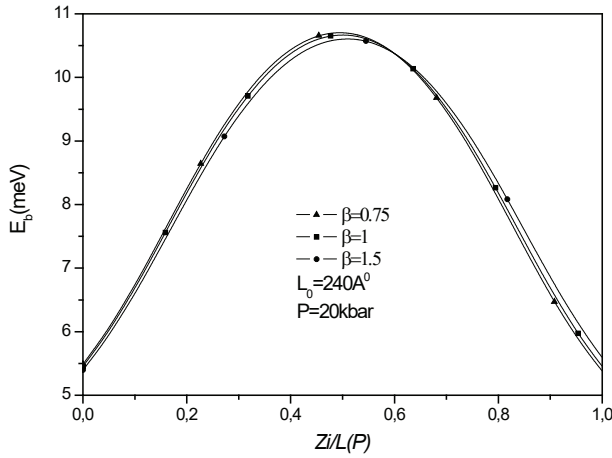
Şekil 1: Hidrostatik basıncın farklı sabit değerleri için yabancı atomun simetrik kuantum kuyusunun merkezinde olduğu durum $z_i = L(P)/2$ için (a) taban durum yabancı atom enerjisinin (b) taban durum bağlanma enerjisinin kuantum kuyusunun genişliğine göre değişimi



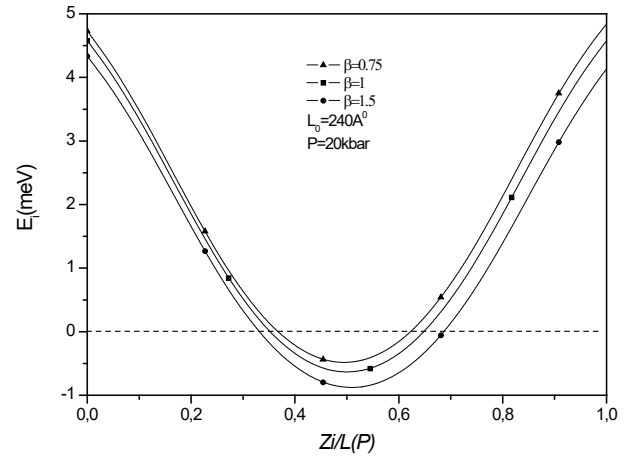
Şekil 2: Hidrostatik basıncın farklı sabit değerleri için simetrik ve antisimetrik kuantum kuyusunda taban durum yabancı atom enerjisinin dönüm noktalarının yabancı atomun konumunun fonksiyonu olan $z_i / L(P)$ 'ye göre değişim grafiği.



Şekil 3: Simetrik ve antisimetrik kuantum kuyusunda taban durum yabancı atom enerjisinin dönüm noktalarının hidrostatik basınca göre değişim grafiği



(a)



(b)

Şekil 4: Herhangi bir etkinin olmadığı durumda kuyunun genişliği $L_0=240A^0$ ve hidrostatik basınç $P=20$ kbar için simetrik ve antisimetrik kuantum kuyusunun (a) taban durum yabancı atom enerjisi (b) taban durum bağlanma enerjisinin yabancı atomun konumunun fonksiyonu olan $z_i / L(P)$ 'ye göre değişim grafiği.

KAYNAKÇA

- [1] E., H. Kasapoğlu, I. Sari ve Sökmen,(2006), shallow donors in the triple-graded quantum well under the hydrostatic pressure and external fields, *physica B*, pp. 280-283.
- [2] H. Akbas, C. Dane, I. Erdogan ve O. Akankan, 2014. Hydrogenic donor in asymmetric Al_xGal_{1-x}Las/GaAs/Al_xR-Gal_{1-x}RAs quantum wells, *Physica E*, cilt 60, pp. 196-199 .
- [3] C. Dane, H. Akbas, A. Guleroglu ve S. Minez, 2011, The hydrostatic pressure and electric field effects on the normalized binding energy of hydrogenic impurity in a GaAs/AlAs spherical quantum dot, *Physica E*, cilt 44, no. 1, pp. 186-189.
- [4] H. D. Karki, S. Elagöz ve P. Baser, 2011, The high hydrostatic pressure effect on shallow donor binding energies in GaAs-(Ga, Al)As cylindrical quantum well wires at selected temperatures, *PHYSICA B-CONDENSED MATTER*, cilt 406, no. 11, pp. 2116-2120.
- [5] H. Akbas, I. Erdogan ve O. Akankan, 2011, Hydrostatic pressure effects on impurity states in GaAs/AlAs quantum wells, *SUPERLATTICES AND MICROSTRUCTURES*, cilt 50, no. 1, pp. 80-89.
- [6] U. Yesilgul, E. Kasapoglu, S. H. ve S. I., 2010, The effects of temperature and hydrostatic pressure on the photoionization cross-section and binding energy of shallow donor impurities in quantum dots, *SUPERLATTICES AND MICROSTRUCTURES*, cilt 48, no. 6, pp. 106-113.
- [7] A. J. Peter, 2005, The effect of hydrostatic pressure on binding energy of impurity states in spherical quantum dots, *Physica E*, cilt 28, no. 3, pp. 225-229.
- [8] C. Zang, Z. Wang, Y. Liu ve K. Guo, 2010, Binding energy of shallow donor impurity in asymmetric quantum wells, *Physica E*, cilt 43, pp. 372-374.
- [9] E. N. Niculescu ve N. Eseau, 2010, Hydrostatic pressure and electric field effects on the normalized binding energy in asymmetrical quantum wells, *Eur. Phys. J.B*, cilt 75, pp. 247-251.
- [10] I. Erdogan, O. Akankan ve H. Akbas, 2013, Simultaneous effects of temperature, hydrostatic pressure and electric field on the self-polarization and electric field polarization in GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As spherical quantum dot with a donor impurity, *Süperlattices and Microstructures*, cilt 59, pp. 13-20.
- [11] C. Dane, H. Akbas, S. Minez ve A. Guleroglu, 2008, Electric field effect in a GaAs/AlAs spherical quantum dot, *Physica E*, cilt 41, pp. 278-281.
- [12] W. Xie ve Q. Me, 2009, Electric field effects of hydrogenic impurity states in a disc-like quantum dot,» *Physica B*, cilt 404, no. 12-13, pp. 1625-1628.
- [13] I. Mikhail ve I. Ismail, 2007, Binding energy of an off-centre hydrogenic donor impurity in a spherical quantum dot, *PHYSICA STATUS SOLIDI B-BASIC SOLID STATE PHYSICS*, cilt 244, no. 10, pp. 3647-3659.
- [14] C. Dane, H. Akbas, S. Minez ve A. Guleroglu, 2010, Simultaneous effects of electric and magnetic fields in a GaAs/AlAs spherical quantum dot with a hydrogenic impurity, *Physica E*, cilt 42, pp. 1901-1904.
- [15] A. J. Peter ve K. Navaneethakrishnan, 2008, Effects of position-dependent effective mass and dielectric function of a hydrogenic donor in a quantum dot, *Physica E*, cilt 40, pp. 2747-2751.
- [16] H. Akbas, C. Dane, A. Guleroglu ve S. Minez, 2009, The effect of magnetic field in a GaAs/AlAs spherical quantum dot with a hydrogenic impurity, *Physica E*, cilt 41, pp. 605-608.