

## GaAs/GaInAs Kuantum Kuyularının Elektronik Enerji Spektrumu

Pınar BAŞER<sup>1</sup>, Mehmet Ali TOPRAK<sup>1</sup>, Sezai ELAGÖZ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Cumhuriyet Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Sivas,

<sup>2</sup>Nanofotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Cumhuriyet Üniversitesi, 58140 Sivas, Türkiye

### Özet

Bu çalışmada tek kuantum çukuru içeren  $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$  tabakalarından oluşan yapının elektronik enerji düzeyleri analitik olarak hesaplandı. Sayısal sonuçlar, elektronik enerji düzeylerinin In konsantrasyonu, engel yüksekliği ve çukur genişliği gibi yapı parametreleri ile değişimini ortaya koymuştur.

**Anahtar Kelimeler:** Elektronik Enerji Seviyeleri, Kare Kuyu,  $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$

## GaAs/GaInAs Quantum Wells Electronic Energy Spectrum

### Abstract

In this study, the electronic energy levels of  $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$  single square quantum well (SQW) have been analytically calculated. The numerical results have clearly illustrated the electronic energy levels dependency to the SQW structure parameters. Such as, In concentration, the barrier height and the width of the well.

**Keywords:** Electronic Energy Levels, Square Well,  $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$

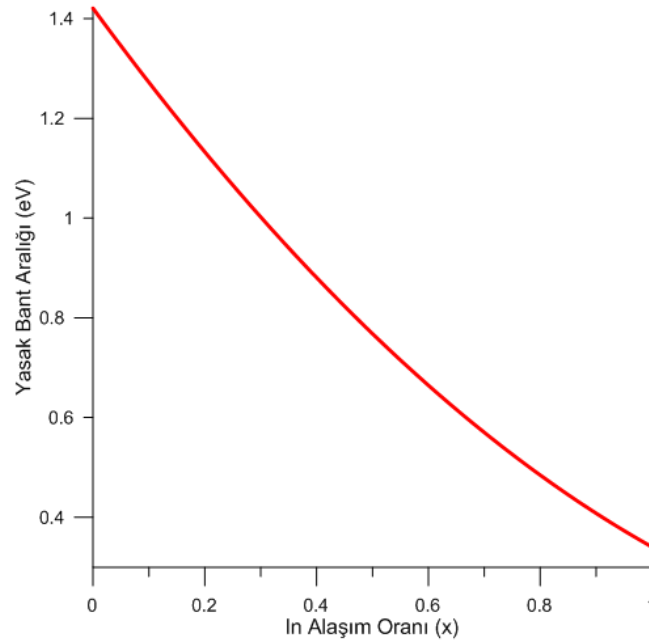
### 1. Giriş

Elektro-optik sistemler ve bu alandaki ihtiyaçların karşılanabilmesi için kullanılan yarıiletken materyaller arasında en önemlilerinden birisi de InGaAs üçlü alaşımıdır.  $In_xGa_{1-x}As$  üçlü alaşımlarının örgü sabiti GaAs ikili bileşiğinin ( $x=0$ , bant aralığı 1,42 eV) örgü sabiti 5.65 Å ve InAs ikili bileşiğinin ( $x=1$ , bant aralığı 0,35 eV) örgü sabiti 6.05Å değerleri arasında yer alır [1]. Bu alaşımlar ve daha geniş yasak bant aralıklı yarıiletken çoklu yapıları, yüksek performanslı elektronik ve optoelektronik aygıtların geliştirilmesinde ve kuantum sistemlerinin incelenmesinde çok önemli bir rol oynarlar. InGaAs temelli aygıtlar; fotodiyotları, metal-yarıiletken-metal fotodedektörleri, çoklu yapılı lazerleri, yüzeyden-ışımali dikey-kavite lazerleri (VSCSEL), rezonant tünellemeli yapıları, kauntum tel ve noktalarını, modülasyon katkılı alan etkili transistörleri (HEMT) ve heteroeklem bipolar trasnsistörleri içermektedir [2,3].  $GaAs/In_xGa_{1-x}As$  kuantum kuyu yapıları, temel araştırma ve aygıt

geliştirmesi ile ilgili çalışmalarda büyük bir öneme sahiptir. Son yıllarda,  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  gibi III-V grubu kuantum kuyuları taşıyıcıların düşük etkin kütleleri ve yüksek optik kazançtan dolayı optoelektronik ve mikroelektronik cihaz uygulamalarındaki tercih edilmelerinden dolayı bu yapılar üzerine olan ilgi oldukça artmıştır [4-8]. III-V grubu yarıiletkenlerden olan InAs kızıl-ötesi bölgede aktif olduğundan dolayısıyla optoelektronik sistemlerde geniş uygulama alanı bulmuştur. Özellikle yarıiletken teknolojisinde  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  gibi alaşımlar, dedektör yapılarında kullanılmaktadır.

Galyum indiyum arsenikte, galyum arseniğe indiyum eklenmesi sureti ile elde edilen bir direk aralıklı bileşik yarıiletkenidir. Genelde yüksek güçlü, yüksek frekanslı elektronikte kullanılabilir ve bu malzeme grubunda bulunan elektronun oldukça yüksek hızlı hareketinden ve taşıyıcıların femtosaniye yaşam sürelerinden dolayı da silikon ve galyum arsenik gibi bilinen diğer yarı iletkenlere göre daha üstün özelliklidir. İndiyum galyum arseniğin (InGaAs) bant aralığı bu malzemeyi dedektör yapımında özellikle de 1300 ve 1500 nm civarında fiber optik iletişimde kullanımını vazgeçilmez kılmıştır. İndiyum galyum arsenik ilk defa 1976 da T. P. Pearsall tarafından indiyum fosfat (InP) üzerine büyüterek elde edilmiştir [9]. Pearsall bu malzemenin bant aralığını, elektronların ve hollerin etkin kütlelerini, bunların mobilitelerini ve  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 'ın özelliklerini bulmuştur.

In'un x mol konsantrasyonu  $x=1-0$  arasında değiştirildiğinde, InGaAs'ın bant aralığı, 0.36'dan 1.42 eV aralığında değiştiği (Şekil-1) için 1.1 mikrometre dalga boyunda THz mertebesinde ışınım yapan materyaller de yapılabilmektedir [10].



**Şekil 1**  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 'ın bant aralığının In kompozisyonuna göre değişimi

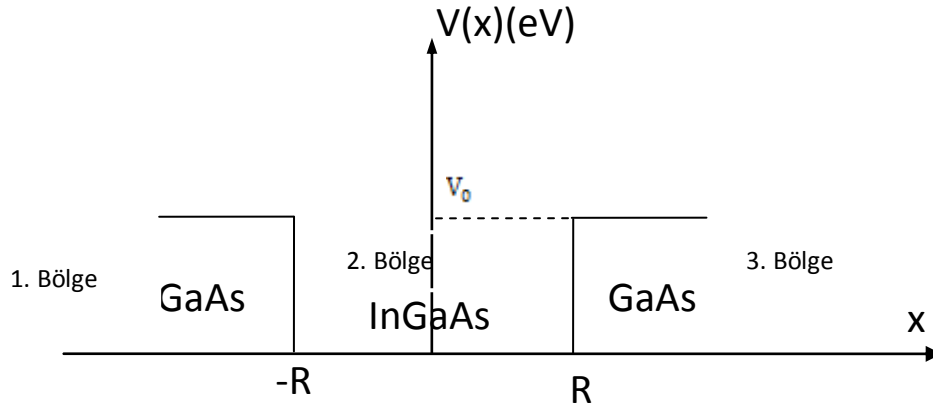
$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  kullanılarak yapılan HEMT (High Electron Mobility Transistor) cihazları en hızlı transistör tiplerinden biridir [11].  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  kızılötesi dedektörler için çok popüler bir malzemedir. Özellikle bu malzemelerde kullanılan germanyumun yüksek akım kararlılığının

daha zayıf olması nedeni ile  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  daha çok tercih edilir hale gelmiştir (Germanyum ile yer değiştirmiştir). Genelde kısa dalga boylu kızılötesi kameralarda kullanılır. Ayrıca  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  lazer üretmekte kullanılabılır. 905 nm, 980 nm, 1060 nm ve 1300 nm lazerler üretilmiştir. Özellikle  $\text{In}_{0,015}\text{Ga}_{0,985}\text{As}$  çok eklemli güneş pilleri kullanılır ve germanyum mükemmel bir örgü uyumu vardır. Yine bu malzemede  $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$  olduğu kompozisyonu ise indiyum fosfat üzerine mükemmel bir örgü uyumu ile büyütülebilir. Bu özelliklerinden dolayı GaAs/InGaAs/GaAs yapısının elektronik özellikleri önemlidir. Bu çalışmada elektronik enerji düzeylerinin hesaplanması verilmiştir. Bu hesap sonuçları ilerleyen çalışmalarda sığ safsızlık ve eksitonik bağlanma etkilerinin teorik olarak hesaplanmasında kullanılacaktır.

## 2. Materyal ve Yöntem

### Elektron Ve Oyuklar İçin Enerji Özdeğerinin Hesaplanması

Şekil 2 de GaAs/  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs dan oluşan kare kuyudan oluşan sisteme ait potansiyel profili verilmiştir.



Şekil 2 Kare kuyu potansiyeli

Şekil 2 deki kuyuyu temsil eden potansiyel fonksiyonu  $V(x)$  aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < |x| \\ 0 & R < |x| \end{cases} \quad (1)$$

Burada  $V_0$  değeri GaAs ve GaInAs arasında oluşan engel potansiyelinin yüksekliğidir. Oda sıcaklığında GaAs için yasak bant aralığı

$$E_{g \text{ GaAs}} = 1.42 \text{ eV} \quad (2)$$

ve  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  alaşımı için yasak bant aralığı In konsantrasyonuna bağlı olarak

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = E_{g\text{GaAs}} - 1.53x + 0.45x^2 \quad (3)$$

ile verilir [12].

İki GaAs tabakası arasında büyütülen InGaAs sistemin yasak bant aralığı  $\Delta E_g$  enerjisi, ise bantların süreksizliğinden kaynaklanır ve

$$\Delta E_g = E_g(\text{GaAs}) - E_g(\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}) \quad (4)$$

bağıntısı ile verilir. Elektronlar ve oyuklar için potansiyel yüksekliği  $V_{0e}$ ,  $V_{0h}$  ise bant süreksizliklerine bağlı olarak  $\Delta E_c / \Delta E_v$  oranı 70:30 göz önüne alınarak belirlenir[13]. Bu nedenle elektronlar için bariyer yüksekliği

$$V_{0e} = \Delta E_g (0.7) \quad (5)$$

ve oyuklar için bariyer yüksekliği

$$V_{0h} = \Delta E_g (0.3) \quad (6)$$

olarak alınır.

Tek çukurlu quantum kuyusu için, zamandan bağımsız bir boyutlu Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{(e,h)}} \frac{d^2\psi_{e,h}(x)}{dx^2} + V_{0(e,h)}(x)\psi_{e,h}(x) = E_{e,h}\psi_{e,h}(x) \quad (7)$$

ile ifade edilir ve çözümü literatürde ayrıntılı bir şekilde verilmiştir[14]. Denklemden  $m$ ,  $V_0$  ve  $\psi$  sırası ile elektron (oyuk) için etkin kütle  $m_e$  ( $m_h$ ), bariyer yüksekliği  $V_{0e}$  ( $V_{0h}$ ) ve dalgafonksiyonu  $\psi_e$  ( $\psi_h$ ) ifade etmektedir. Denklemin tek ve çift olmak üzere (simetrik kuantum kuyusu) iki çözümü aşağıda verilmiştir[14]. Ağır oyuk [13] ve hafif oyuk için etkin kütle [15] sırasıyla

$$m_{hh}^* = (0.45 - 0.07x)m_0 \quad (8)$$

$$m_{hh}^* = (0.1343 - 0.044x)m_0 \quad (9)$$

Denklemleri ile verilir.

$$k_1 \cot(k_1 R) = -K \quad \text{tek çözüm} \quad (10)$$

$$k_1 \tan(k_1 R) = K \quad \text{çift çözüm} \quad (11)$$

Denklem [10] ve [11] da K, ve k1 aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{ve} \quad K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (12)$$

Bu denklemler transandantal denklemlerdir ve çözüm kümeleri Mathematica programı kullanılarak sayısal yöntemler ile elde edilmiştir. Çözümler bize k<sub>1</sub> ve Denklem [12] den anlaşıldığı üzere sistemin enerji özdeğeri E yi verir.

### 3. Bulgular ve Tartışma

Sayısal hesaplamalarda In alaşım oranı x=0.1, 0.2 ve 0.3 olarak alınmıştır. Bu değerler aralığında GaAs ve InGaAs malzemeleri için elektron ve oyuk etkin kütlelerinde %1 den düşük bir değişim olduğundan etkin kütle farkından hesaplamalara gelecek katkı oldukça düşüktür. Bu yüzden hetero yapıdaki etkin kütle değişimi göz önüne alınmamış ve hesaplamalarda etkin kütleler olarak GaAs etkin kütle değerleri olan elektron için  $m_e^* = 0.067m_0$ , ağır oyuk için  $m_{hh} = 0.45m_0$  ve hafif oyuk için  $m_{hh} = 0.134m_0$  değeri kullanılmıştır. Bu konsantrasyon değerlerinde InGaAs için etkin kütle değerleri Tablo 1 de verilmiştir.

Farklı değerleri için sayısal hesaplamada kullanılan parametreler Denklem [5] ve denklem [6] kullanılarak elde edilmiş ve Tablo 2 de özetlenmiştir.

Tablo 1: Farklı In konsantrasyonlarında GaAs ve InGaAs için etkin kütle değerleri

GaAs	InGaAs (x=0.1)	InGaAs (x=0.2)	InGaAs (x=0.3)
------	----------------	----------------	----------------

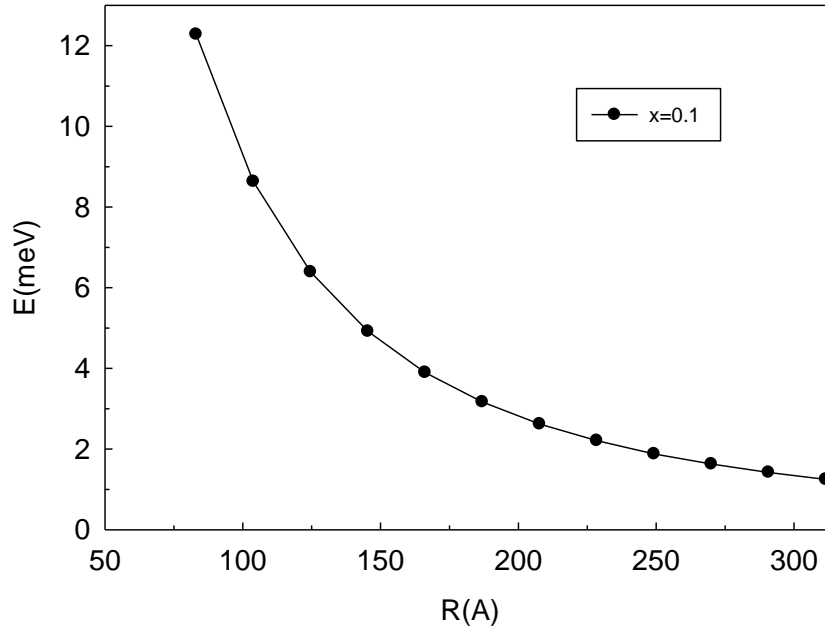
$m_e^* = 0.067m_0$	$0.062m_0$	$0.057m_0$	$0.053m_0$
$m_{hh}^* = 0.45m_0$	$0.443m_0$	$0.436m_0$	$0.429m_0$
$m_{lh}^* = 0.134m_0$	$0.129m_0$	$0.125m_0$	$0.121m_0$

Tablo 2: Farklı In konsantrasyonları için bariyer yükseklikleri

%x (In Kons.)	$V_{oe}$ (meV)	$V_{oh}$ (meV)
0.1	103.95	44.55
0.2	201.6	86.4
0.3	292.95	125.55

### x= 0.1 In konsantrasyonu için Elektronik enerji özdeğerleri

Elektronik enerjinin kuyu genişliği R ve In konsantrasyonu x'e göre nasıl değiştiği incelendi. GaAs/ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs'dan oluşan kuantum kuyusunda elektronik enerjinin kuyu genişliğine göre değişimi Şekil 3 'de gösterilmiştir.

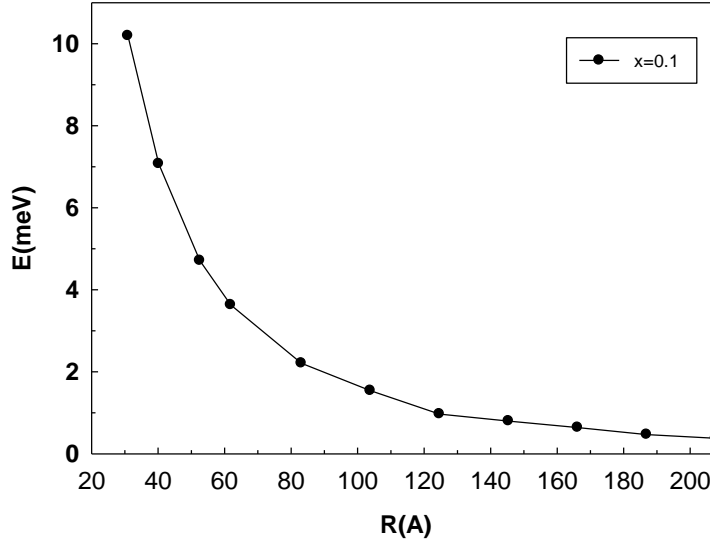


Şekil 3 GaAs/ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs kuantum kuyusunda elektronik enerjinin kuyu genişliğine göre değişimi

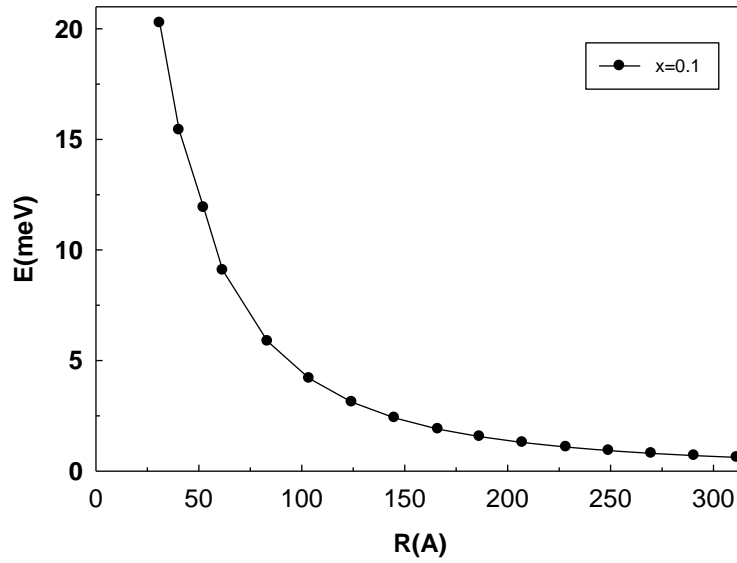
GaAs/ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs kuantum kuyusunda kuyu genişliğinin küçük değerlerinde taban durum elektronik enerjisi en yüksek değerini alır. Kuantum kuyusunun genişliği arttıkça bu maksimum değer giderek düşer ve kuyu etkilerinin görülmediği daha büyük yarıçaplarda külçe yapı etkileri görülmeye başlanır ve taban durum elektronik enerjisinin azaldığı görülür.

### $x=0.1$ In konsantrasyonu için oyuk enerji özdeğerleri

Oyuk için enerjinin kuyu genişliği  $R$  ve  $In$  konsantrasyonu  $x$  e göre nasıl değiştiği incelendi. GaAs/  $In_xGa_{1-x}As$ /GaAs dan oluşan kuantum kuyusunda oyuk enerjinin engel genişliğine göre değişimi Şekil 4 'de gösterilmiştir.



(A)



(B)

Şekil 4 (A) GaAs/  $In_xGa_{1-x}As$ /GaAs kuantum kuyusunda ağır oyuk enerjisinin engel genişliğine göre değişimi, (B) GaAs/  $In_xGa_{1-x}As$ /GaAs kuantum kuyusunda hafif oyukenerjisinin engel genişliğine göre değişimi

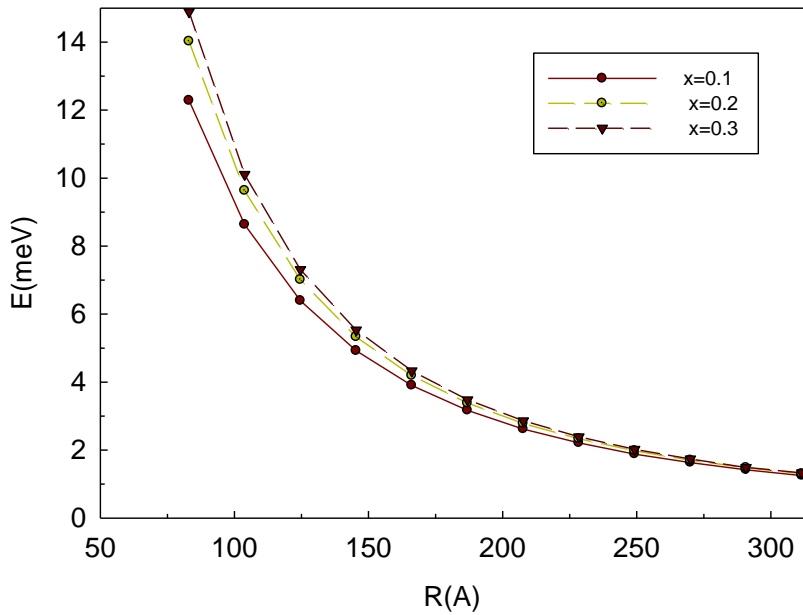
$x=0.1, 0.2$  ve  $0.3$  In konsantrasyonu için Elektronik enerji özdeğerleri

Şekil 5’de  $GaAs/In_xGa_{1-x}As$  kuantum kuyusunda elektronik enerjinin kuyu genişliğine göre değişimi farklı  $In$  konsantrasyonları ( $x$ ) de incelenmiştir.

$In$  konsantrasyonu olan  $x$ 'in değeri arttıkça potansiyel yüksekliği artmaktadır. Bu durumda kuyu yüksekliği arttığı için taban durum elektronik enerjisi de üst seviyelere çıkmaktadır. Ayrıca elektronik enerjinin büyük kuyu genişliğinde külçe  $In_xGa_{1-x}As$  materyalinin değerlerine yaklaştığı görülür.

### $x=0.1, 0.2$ ve $0.3$ $In$ konsantrasyonu için oyuk enerji özdeğerleri

Engel Şekil 6’de  $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$  kuantum kuyusunda oyuk enerjinin kuyu genişliğine göre değişimi farklı  $In$  konsantrasyonları ( $x$ )da incelenmiştir.

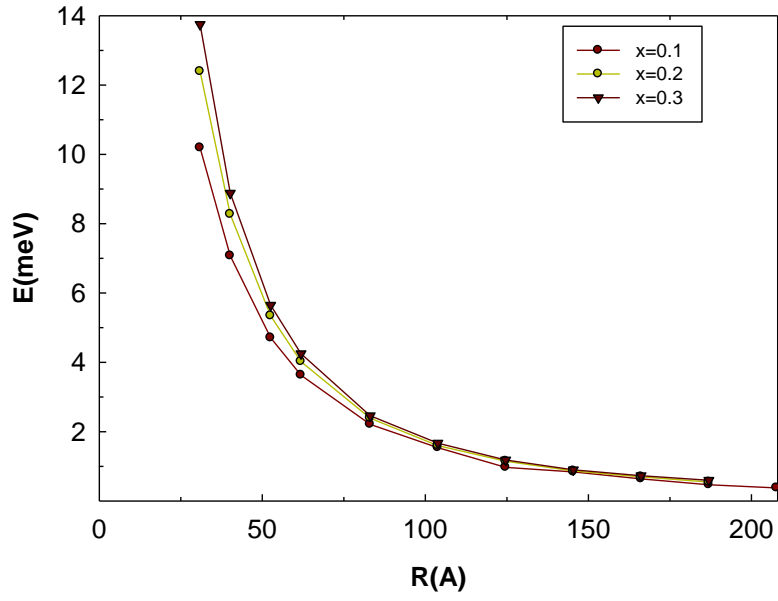


**Şekil 5**  $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$  kuantum kuyusunda farklı  $In$  konsantrasyonlarında elektronik enerjinin kuyu genişliğine göre değişimi

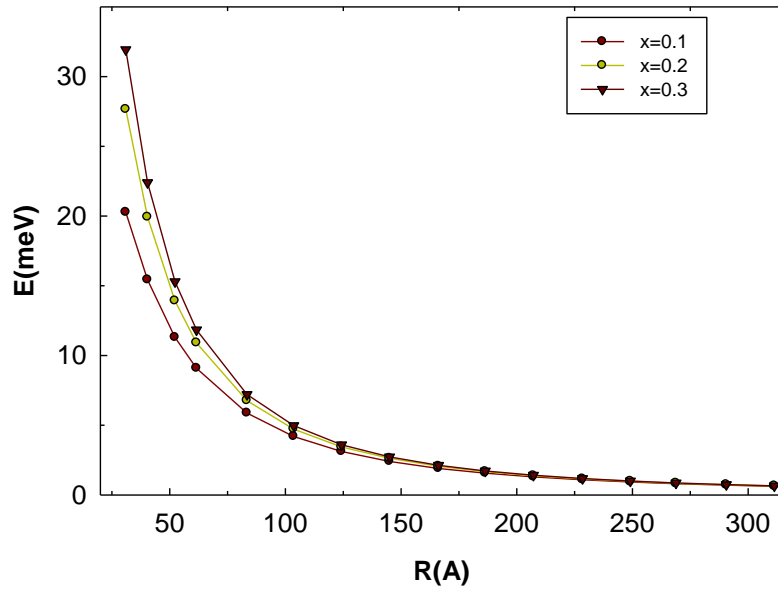
$In$  konsantrasyonu olan  $x$ 'in değeri arttıkça potansiyel yüksekliği artmaktadır. Bu durumda kuyu yüksekliği arttığı için taban durum elektronik enerjisi de üst seviyelere çıkmaktadır. Ayrıca elektronik enerjinin büyük kuyu genişliğinde külçe  $In_xGa_{1-x}As$  materyalinin değerlerine yaklaşır.

$x=0.2$  için için  $R=75 \text{ Å}$  ve  $V_{oe}=202 \text{ meV}$ dir.  $V_{oh}=86 \text{ meV}$  [16] değerlerinde elektron ve oyuk enerjileri ve parçacık lokalizasyonları Şekil 7 de verilmiştir.



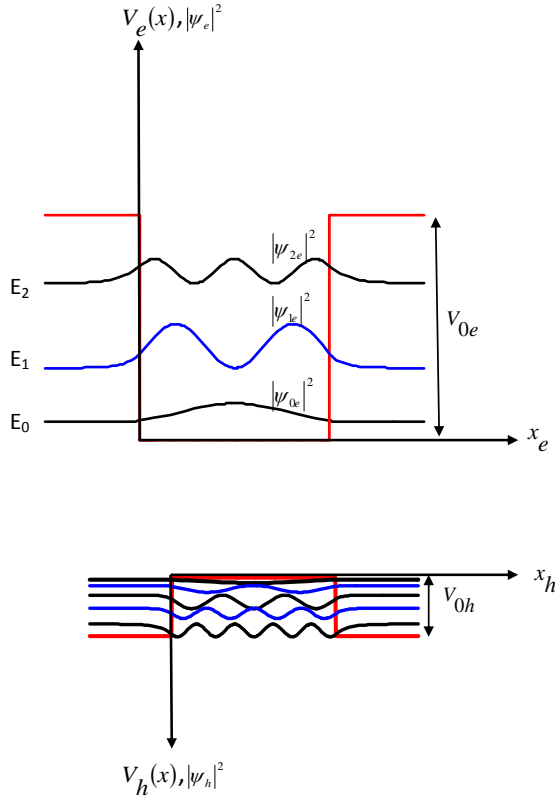


(A)



(B)

**Şekil 6** (A) GaAs/ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs kuantum kuyunda farklı In konsantrasyonlarında ağır oyuk enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi, (B) GaAs/ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs kuantum kuyunda farklı In konsantrasyonlarında hafif oyuk enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi



Şekil 7 Elektron ve oyuk enerjileri ve parçacık lokalizasyonları

#### 4. Sonuç

GaAs/  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs kuantum kuyusunun genişliği  $R$ ' nin küçük değerlerinde, farklı  $x$  değerleri için genel olarak taban durum elektronik enerjisinin en yüksek değeri aldığı ve kuantum kuyusunun genişliği arttıkça bu maksimum değer giderek azaldığı ve daha büyük kuyu genişliğinde ise parçacığın külçe yapı değerine yaklaştığı görülmüştür.  $\text{In}$  konsantrasyonu olan  $x$ 'in değeri arttıkça potansiyel yüksekliği artmaktadır yani bu durumda kuyu yüksekliği arttığı için taban durum elektronik enerjisinin de  $\text{In}$  konsantrasyonunun artmasıyla birlikte arttığı görülmektedir..

Şekil 7 de parçacık lokalizasyonunu kuyu genişliği ve yüksekliğine bağlı olarak nasıl değiştiği özellikle bağlanma enerji hesaplarında bağlanma enerjisinin yüksek olacağı değerler hakkında bilgi vermesi bakımından önemlidir.

Düşük boyutlu sistemlerin önemi sistemin fiziksel parametrelerinin ayarlanabilir olmasıdır. Örneğin, iki boyutlu sistemlerde optik özellikler kuşatılmış durumlara duyarlı bir biçimde bağlıdır. Sözü edilen bu durumlar ise, kuantum kuyusunun ayarlanabilir parametreleri olan kuyu genişliği ve engel yüksekliğinin değiştirilmesi ile istenildiği biçimde elde edilirler. Hetero yapılarda yasak bant aralığı da ayarlanabilir olduğu için, sonuçta bu sistemlerde optiksel özelliklerin değiştirilmesi mümkündür. İki boyutlu sistemlerde kuantum kuyusunun fiziksel parametreleri değiştirilerek, sistemin optik özellikleri istenilen biçimde ayarlanabilir. Aynı şekilde bir boyutlu sistemlerde kuantum telinin ayarlanabilir fiziksel parametreleri kullanılarak, sistemin optik özellikleri daha hassas bir biçimde ayarlanabilir. Çünkü kuantum

tellerinde sistemin kuşatma boyutu arttırıldığından ayarlanabilir parametrelerin sayısı daha fazladır. Ayarlanabilir parametrelerin artması da optik özelliklerin daha hassas bir biçimde ayarlanabilmesi anlamına gelir. QW, QWWs, QDs gibi düşük boyutlu yapılarıdaki safsızlık düzeylerini araştırmak, terahertz mertebesindeki cihazlar ve optoelektronikteki cihaz uygulamalarından dolayı önemli bir konudur. Bu çalışmamızla GaAs/ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs malzemelerindeki elektronik enerjilerini hesaplayarak, ilerde yapmayı planladığımız safsızlık ve excitonik bağlanma enerji hesaplamaları ve benzeri teorik çalışmaların için gerekli olan elektronik enerji düzeyleri hesaplandığından bu tip çalışmaların ilk adımı tamamlanmış olmaktadır.

### Teşekkür

Bu çalışma F-401 numaralı proje kapsamında Cumhuriyet Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Başkanlığı (CUBAP) tarafından desteklenmiştir.

### KAYNAKLAR

- [1] <http://www.semiconductors.co.uk>
- [2] K.C. Hsu<sup>a</sup>, C.H. Ho<sup>b</sup>, Y.S. Lin<sup>b</sup>, Y.H. Wu<sup>c</sup>, R.T. Hsu<sup>c</sup>, K.W. Huang<sup>b</sup>, *Journal of Alloys and Compounds*, 471 (2009) 567.
- [3] N Ledentsov<sup>a, b</sup>, D Bimberg<sup>a</sup>, V.M Ustinov<sup>b</sup>, Zh.I Alferov<sup>b</sup>, J.A Lott<sup>c</sup>, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 13 (2002) 871.
- [4] M. DiDio, M. Lomascolo, A. Passaseo, C. Gerardi, C. Giannini, A. Quirini, L. Tapfer, P.V. Giugno, M. De Vittorio, D. Greco, A.L. Convertino, L. Vasanelli, R. Rinaldi, R. Cingolani, *J. Appl. Phys.* 80 (1996) 482.
- [5] S. Martini, A.A. Quivy, E.C.F. da Silva, J.R. Leite, *Appl. Phys. Lett.* 81 (2002) 2863.
- [6] S. Martini, A.A. Quivy, A. Tabata, J.R. Leite, *J. Vac. Sci. Technol. A* 18 (2000) 1991.
- [7] H.P. Yu, C. Roberts, R. Murray, *Appl. Phys. Lett.* 66 (1995) 2253.
- [8] S. L. Tyan et. al., “InGaAs/GaAs quantum wells and quantum dots on (111) B orientation” *Solid State Communications* 117 (2001) 649-954
- [9] [http://en.wikipedia.org/wiki/Indium\\_gallium\\_arsenide](http://en.wikipedia.org/wiki/Indium_gallium_arsenide)
- [10] Y. A. Goldberg, and N. M. Shmidt, “Gallium Indium Arsenide” in *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, M. Levinshtein, S. Rumyantsev, and M. S. Shur, (Eds.) vol. 2, 62, World Scientific, Singapore (1999).
- [11] <http://www.sciencedirect.com/science/journal/09611290>
- [12] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* 58, R 1 (1985)
- [13] S. H. Pan, H. Shen, Z. Hang, F. H. Pollak, Weihua Zhuang, Qian Xu, A. P. Roth, R. A. Masut, C. Lacelle, and D. Morris, *Phys. Rev. B* 38, 3375.
- [14] <http://ph.qmul.ac.uk/sites/default/files/finitewell.pdf>
- [15] Shudong Wu, Zhi Huang, Yuan Liu, Qiufeng Huang, Wang Guo, Yongge Ca, *Superlattices and Microstructures*, 46 (2009) 618.
- [16] TOPRAK, M. Ali “GaAs/ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Kuantum Kuyularının Elektronik Enerji Spektrumu” :s.n. 2013