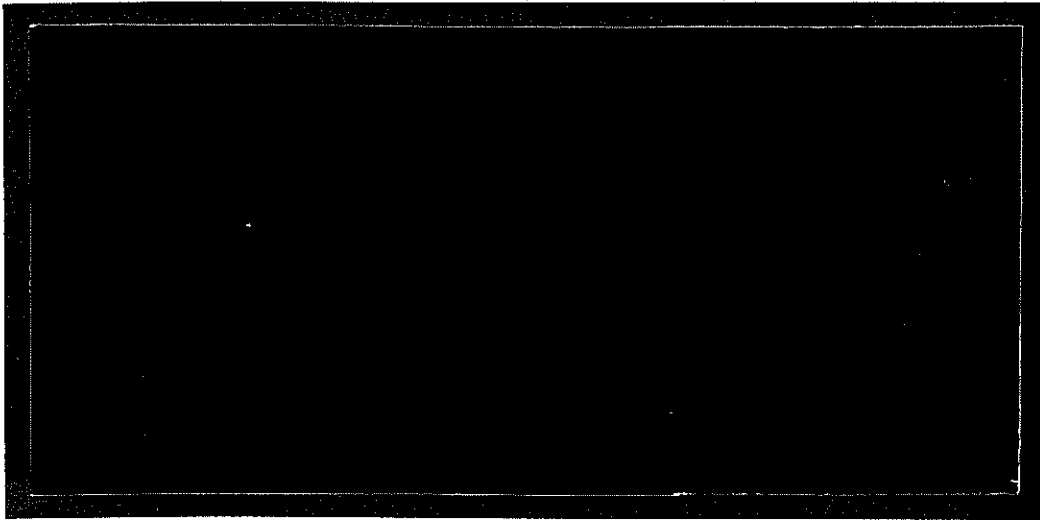


1997-448



TÜRKİYE BİLİMSEL VE
TEKNİK ARAŞTIRMA KURUMU

THE SCIENTIFIC AND TECHNICAL
RESEARCH COUNCIL OF TURKEY



Temel Bilimler Araştırma Grubu

Basic Sciences Research Grant Committee

**ÇOK- KATMANLI YARI-İLETKEN
KRİSTALLERİN ELEKTRONİK
YAPILARININ İNCELENMESİ**

PROJE NO: TBAG-1439

**DOÇ.DR. ŞENAY KATIRCIOĞLU
PROF.DR. ŞAKİR ERKOÇ**

**ARALIK 1997
ANKARA**

ÖNSÖZ

Projede, etkin kütle teorisi yaklaştırması kullanılarak, kendi içinde tutarlı elektronik hesaplarla, çok katmanlı Si/Ge ve InSe/GaSe yapıların elektrik ve optik özellikleri incelenmiştir. Elde edilen sonuçların, yeni opto-elektronik aygıt arayışı içinde olan çalışmalara faydalı olacağı düşünülmektedir. Proje TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

İçindekiler

Sayfa No

1. Giriş	1
2. Gelişme	2
2.1 Metod	2
2.2 Çok katmanlı Si/Ge yapıları	4
2.3 Çok katmanlı InSe/GaSe yapıları	5
3. Sonuç	8
Referanslar	12
Tablo 1	15
Tablo 2	16
Tablo 3	17
Tablo 4	18
Şekil 1	19
Şekil 2	20
Şekil 3	21
Şekil 4	22
Şekil 5	23
Şekil 6	24
Şekil 7	25
Ek 1	
Ek 2	
Ek 3	

ÖZ

Etkin- Kütle- teorisi yaklaştırması kullanılarak kendisiyle- çelişmeyen- alan yöntemine göre yapılan hesaplarda (Si/Ge) ve (InSe/GaSe) çok- katmanlı yarı-iletken malzemelerin elektronik enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları hesaplanmıştır. Bu değerler kullanılarak bu malzemelerin değerlik bandı ile iletkenlik bandında yer alan enerji seviyeleri arasındaki optik geçiş ihtimallerinin matris elemanları ile iletkenlik bandındaki enerji seviyeleri arasındaki geçişlerin enerji aralığına göre değişimlerinin matris elemanları hesaplanmıştır. Ayrıca (InSe/GaSe) malzemesinde elektronik enerji seviyeleri ile optik geçiş ihtimallerinin matris elemanları malzemenin katman sayılarına göre değişimleri incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Çok katmanlı kristal, yarı-iletken, elektronik yapı, etkin-kütle

Investigation of the Electronic Structure of Semiconductor Superlattices

Şakir Erkoç and Şenay Katırcıoğlu

Department of Physics, Middle East Technical University,
06531 Ankara, Turkey

December 1997

Abstract

The electronic structure of *Si/Ge* and *InSe/GaSe* superlattices have been investigated. Self-consistent-field calculations have been performed using the effective-mass-theory approximation. The optical transition matrix elements involving transitions from the hole states in the valence band to the electron states in the conduction band have been calculated. The oscillator strength matrix elements for the transitions between the states in the conduction band have been also calculated. The dependence of energy levels and optical transition matrix elements in the *InSe/GaSe* superlattices on well and/or barrier widths have been investigated.

TUBITAK Project No: TBAG-1439

1. Giriş

“Epitaxial” tekniklerinin geliştirilmesiyle, yarı-iletken malzemelerin birbiri üzerine büyütülmesi sağlanmış ve kuantum kuyuları, çok katmanlı (veya hetero) yapılar, yarı-iletken fiziğinin en önde gelen araştırma alanları olmuşlardır. Son yıllarda yapılan çalışmalarda, çok katmanlı Si/Ge [1-7] ve InSe/GaSe [8-31] yapılarının elektrik ve optik özelliklerinin modern yarı-iletken teknolojisine olan katkıları araştırılmış ve bu özelliklerin yapıların büyüme parametrelerine (kuantum kuyu ve bariyer genişliği, elektron katkı seviyesi gibi) bağlı olarak değişebileceği anlaşılmıştır. Bu da yeni opto-elektronik aygıt arayışı yolunda çalışmaları başlatmıştır.

Bu proje kapsamında Si/Ge, InSe/GaSe çok katmanlı yarı-iletken malzemelerin elektronik yapıları, muhtelif fiziksel ve geometrik parametrelere bağlı olarak incelenmiştir. Yaptığımız çalışmanın ilk kısmında, eşit dağılımlı olarak katkılanmış Si/Ge ve InSe/GaSe çok katmanlı yapıların elektron ve boşluk durumları hesaplanmıştır. Proje çalışmasının ikinci kısmında, boşluk durumlarıyla iletim bandı durumları arasındaki optik geçişleri gösteren matris elemanları ve elektron durumları arasındaki geçişleri gösteren “oscillator-strength” matris elemanları hesaplanmıştır. Proje çalışmasının son kısmında InSe/GaSe malzemesinde elektronik enerji seviyeleri ile optik geçiş ihtimallerinin matris elemanları, malzemenin katman sayılarına göre değişimleri incelenmiştir.

Yapılan çalışmada, Si/Ge ve InSe/GaSe çok katmanlı yapıları, birbiri ardı sıra dizilen, Ge, InSe bölgelerini temsil eden potansiyel kuyularıyla, yüksekliği her yapı için iletim (değerlik) bandı kesikliği kadar olan ve Si, GaSe bölgelerini temsil eden potansiyel bariyerleriyle tanımlanmıştır. Bir Ge (InSe) (kuyu) ve bir Si (GaSe) (bariyer) bölgesi, Si/Ge ve InSe/GaSe çok katmanlı yapıların bir periyodunu oluşturur. Böylece bir potansiyel kuyusu ve bir potansiyel bariyer, periodik sınır koşullarıyla birlikte çok katmanlı bir yapıyı tümünden tanımlar. Proje kapsamında yapılan hesaplamalarda başlangıç potansiyeli olarak kare potansiyel alınmıştır. Kendi içinde tutarlı olan hesaplamalar etkin kütle yaklaşımına dayanmaktadır. “Ab-initio” metodlar kısa periyotlu çok katmanlı yapılarda iyi sonuç verirken

uzun periyotlu bu tür yapılarda etkin kütle yaklaşımı daha iyi sonuç vermektedir [32-33]. Düşük sıcaklıktaki çok katmanlı Si/Ge ve InSe/GaSe yapıların bulk Ge (InSe) ve bulk Si (GaSe) içindeki elektron hareketi lokalize olup z-ekseni (c-ekseni) boyunca hareket sınırlı, fakat bu yöne dik x-y düzleminde ise serbesttir. Böylece düşük sıcaklıklarda, Si/Ge, GaSe/InSe çok katmanlı yapılar simetrilerini bozmadan, sistemin boyutunu üçten ikiye düşürürler. Bu durum Si/Ge, GaSe/InSe sistemlerinin iki boyutlu çok katmanlı yapılar olarak çalışılmasını sağlamaktadır [34].

2. Gelişme

2.1. Metod

Yapılan hesaplamalarda Si/Ge, GaSe/InSe çok katmanlı sistemlerin periyodik potansiyeli, başlangıç kare potansiyeli V_o ($= \Delta E_c$ veya ΔE_v) yanında “coulomb” ve “exchange” etkileşmeleri de içerir,

$$V(z) = V_o + V_{co} + V_{ex}(z) \quad (1)$$

“Central point difference” metodu kullanılarak, bir boyutlu periodik “Schrödinger” denklemi aşağıda verilen “recursion” denklemine indirgenir [33].

$$\alpha \psi_{i-1} + (\beta - \lambda) \psi_i + \alpha^* \psi_{i+1} = 0 \quad (2)$$

Burada, $\Psi_1 = \Psi(k_z, k_x)$, z yönündeki “Bloch” dalga fonksiyonunun periyodik kısmı olup α ve β da aşağıdaki denklemlerle tanımlanır:

$$\alpha = -\hbar^2/2m^*(1 - i2\pi k_z \delta/d) \quad (3)$$

$$\beta = \hbar^2/2m^*(2 + 4\pi k_z^2 \delta^2/d^2) + \delta^2 V(z_i) \quad (4)$$

2. denklemden görülen λ , δE_n olarak tanımlanır. Bu eşitlikte δ , hareket yönündeki adım uzunluğudur. $D = d_1 + d_2$, çok katmanlı birim hücrenin genişliğini, E_n , band enerjileri, k_z ise

dalga vektörünü göstermektedir. Bu çalışmada Si/Ge, InSe/GaSe yapıları tanımlayan bir boyutlu “ Schrödinger” deklemleri (2), periodik sınır koşulları sağlayarak nümerik olarak çözülmüştür. Periyodik potansiyel $V(z)$ ifadesindeki “exchange” potansiyel, lokal yük yoğunluğu cinsinden yazılabilir:

$$V_{ex}(z_i) = -(3\rho_i/\pi)^{1/3} \quad (\text{atomik birimde}) \quad (5)$$

$V(z)$ bünyesindeki “coulomb” potansiyel, “Poisson” denkleminin nümerik çözümüyle elde edilir. Si/Ge ve InSe/GaSe çok katmanlı sistemlerin enerjileri, dalga fonksiyonları önceden belirlenen hassasiyette, kendi içinde tutarlı bir şekilde bulunur. Yapılan hesaplamalarda, kendi içindeki tutarlılığa enerji değerlerinde, 10^{-4} atomik birim hassasiyetiyle ulaşılmıştır.

Si/Ge ve InSe/GaSe çok katmanlı yapılarda, değerlik bandı ile iletim bandı arasındaki optik geçişleri tanımlayan matris elemanları, sistemlerin ilgili dalga fonksiyonları cinsinden

$$T_{vi,ej} = | \langle \psi_{vi} | \mathbf{p} | \psi_{ej} \rangle |^2 \quad (6)$$

şeklinde tanımlanabilir [27-29]. Burada ψ_{vi} ve ψ_{ej} , Γ noktasındaki değerlik ve iletim bandlarının dalga fonksiyonlarını, \mathbf{p} ise momentum operatörünü göstermektedir. Çalışılan çok katmanlı sistemlerde yük taşıyıcılar sadece x-y düzleminde serbest hareket ettiklerinden, z-yönünde band bükülmesi yoktur, bu yüzden problem sadece bir boyutlu ve skaldır[35]. Diğer taraftan z-yönünde radyasyonun polarize olduğu varsayılarak optik matris elemanlarının açık ifadesi aşağıdaki denklemle verilebilir:

$$T_{vi,ej} = | \langle \psi_{vi} | \mathbf{d} \psi_{ej} / dz \rangle |^2 \quad (7)$$

Si/Ge ve InSe/GaSe çok katmanlı yapıların iletim bandı içindeki optik geçişlerin hızını tanımlayan “Oscillator strength” matris elemanları, $F_{ci,ej}$, Ref.[6] de verilen

$$F_{ci,ej} = T_{ci,ej} / (E_{ej} - E_{ci}) \quad (8)$$

ifadesiyle tanımlanabilir. Burada E_{ci} ve E_{ej} iletim bandının geçişten önceki ve sonraki durumlarının enerjileridir. $T_{ci,ej}$ ise 6 numaralı denklemde tanımlandığı gibi geçişten önceki ve

sonraki iletim bandı durumlarına göre hesaplanmış momentum matris elemanlarının karesidir.

2.2 Çok Katmanlı Si/Ge yapıları

Dolaylı enerji aralıklı (“indirect gap” li) bulk malzemelerin üzerine dolaysız enerji aralıklı (“direct gap”li) malzemenin oluşturulabilme ihtimalinin ortaya çıkmasıyla [1,36], Si/Ge çok katmanlı yapılar önem kazanmışlardır. Dolaylı enerji aralığına sahip çok katmanlı Si/Ge malzeme elde etmek için Si/Si_{1-x}Ge_x çok katmanlı malzemelerde, silikon katkısının (x) 0.25’den fazla, katman kalınlığının ise 100Å’den küçük olma gerekliliği yapılan çalışmalarla [2,4-5] belirlenmiştir. Son yıllarda yapılan çalışmalarda [5], Si_n/Ge_n tipindeki çok katmanlı yarıiletken malzemelerin 10’monolayer’lık (kısa periyot) periyot ile yarı dolaysız enerji aralığına sahip olabileceği gösterilmiştir. Fakat kısa periyotlu çok katmanlı Si/Ge yapıların oluşmasında hala denge problemleri giderilememiştir [5]. Kısa periyotlu, dolaysız enerji aralıklı, çok katmanlı Si/Ge yapıların oluşturulabiliniyor olmasına rağmen bandlar arasındaki optik geçişleri gösteren, geçiş matris elemanları, bu malzemelerde dolaysız enerji aralıklı III-yarıiletkenlerinkine göre en az bir merteye daha düşüktür.

Çok katmanlı yapıların parametre değişimlerinin kısıtlı olmasını (periyot gibi) ve de kısa periyotlu Si/Ge yapılarıdaki denge problemlerini düşünerek, bu projede uzun periyotlu Si/Ge yapıları etkin kütle teorisiyle çalışılmıştır. Bu çalışma, kısa ve uzun periyotlu Si/Ge yapılarıdaki optik geçiş ihtimalleri arasındaki farkı gösteren ilk çalışmadır. Si/Ge çok katmanlı yapıları, birbiri ardı sıra dizilen Ge bölgesini temsil eden potansiyel kuyularıyla, yüksekliği iletim (veya değerlik) bandı kesikliği kadar olan ve Si bölgesini temsil eden potansiyel bariyerleriyle tanımlanmıştır. Hesaplamalarda çok katmanlı Si/Ge yapıları bir boyutlu ‘Schrödinger’ denklemleriyle (2) tanımlanmış ve bu denklem periyodik sınır koşullarını sağlayacak şekilde nümerik olarak çözülmüştür. Nümerik çözüm sonucunda enerji değerleri (E_n), “Coulomb” (V_{co}) ve “exchange” (V_{ex}) potansiyelleri ayrı ayrı hesaplanarak, toplam potansiyel (1) elde edilmiştir. Hesaplamalarda kullanılan Si/Ge çok katmanlı yapıları tanımlayan parametreler: kuyu genişliği (Ge bölgesi), d₁= 197.75Å, bariyer genişliği (Si bölgesi), d₂= 190.05Å, alınan toplam genişlik [100] yönünde 140 tabakaya karşılık gelmektedir; değerlik bandındaki bariyer yüksekliği (veya kesikliği), V_v= 0.8eV; iletim

bandının deęişme miktarı, $V_c = 0.7\text{eV}$ ve yasak enerji aralığı, $\Delta E_g = 0.4\text{eV}$ dir [7]. Dielektrik sabiti [3] Ge bölgesi (kuyu) için $\epsilon_1 = 16.0$, Si bölgesi (bariyer) için $\epsilon_2 = 11.8$ dir. Kullanılan elektron etkin kütlesi Ge bölgesi için $m_{1e} = 0.082 m_e$, Si bölgesi için $m_{2e} = 0.19 m_e$ [3]; boşluk etkin kütlesi Ge bölgesi için $m_{1h} = 0.28 m_e$, Si bölgesi için $m_{2h} = 0.49 m_e$ [3]. Hesaplamalarda elektron yoğunluğu $n = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ seviyesinde olup, her iki bölgede eşit dağılımlıdır.

Çok katmanlı Si/Ge malzemenin, potansiyel profilini, yük dağılımını ve enerji seviyelerini kapsayan hesaplama sonuçları Şekil 1’de verilmiştir. Şekil 1’de verilen enerji seviyelerine karşılık gelen dalga fonksiyonları Şekil 2’de gösterilmiştir. Ayrıca Si/Ge yapılarda değerlik bandı ile iletim bandı arasındaki geçişleri gösteren optik matris elemanları 7 numaralı denklem kullanılarak hesaplanmış ve sonuçlar Tablo 1’de verilmiştir. Uzun periyotlu, çok katmanlı Si/Ge yapılarda değerlik bandıyla iletim bandı arasındaki optik geçişler şematik olarak Şekil 3’de gösterilmiştir. İletim bandı içindeki optik geçişlerin hızını gösteren “oscillator strength” Si/Ge yapıları için 8 numaralı denklemle hesaplanarak sonuçlar Tablo 2’de verilmiştir.

2.3 Çok Katmanlı InSe/GaSe yapıları

InSe/GaSe malzemeleri kristal yapının anisotropisi ile ilgili elektrik ve optik özelliklerinden dolayı uzun zamandır incelenen malzemelerdir [8-21]. Her ikisi de zayıf etkileşmelerden oluşan InSe ve GaSe kristalleri, esas olarak iki boyutlu olup, her boyutu dört atom kalınlığında tabaka yapılarıdır. İki boyutlu bu yapılar deęişik yöntemlerle birleştirilerek D_{3h}^1 , D_{6h}^4 ve C_{4v}^5 simetrilere sahip üç boyutlu InSe ve GaSe yapıları elde etmek mümkündür [10-13]. “Brigman” yöntemiyle büyütülen InSe ve GaSe, ϵ -InSe ve ϵ -GaSe tipinde kristalleşir. InSe ve GaSe politiplerinin tanımlanması, nötron saçılması, IR ve Raman spektroskopisi deneyleriyle mümkündür [14-21].

Son yıllarda ϵ -InSe/ ϵ -GaSe hetero yapılar, elektrik ve optik özelliklerinin yarı-iletken teknolojisine olan katkılarını anlamak için incelenmiştir [22-26]. Vander Waals "epitaxy" yönteminin Koma ve grubu [37-38] tarafından geliştirilmesiyle, iki taraf arasındaki örgü uyumsuzluğundan kaynaklanan “strain” olmaksızın InSe ince filmleri GaSe üzerine (veya GaSe filmleri InSe üzerine) büyütülmüştür. ϵ -InSe/GaSe sistemleri AES, LEELS ve XPS [22-24] deney yöntemleriyle incelenmiş ve iki taraf arasında %7 gibi örgü uyumsuzluğu olmasına

rağmen, InSe ve GaSe tarafları oda sıcaklığında bulk InSe ve bulk GaSe gibi karakterize edilmiştir. Düşük sıcaklıklarda, bulk InSe ve bulk GaSe içindeki elektron hareketi lokalize olup c- ekseni boyunca hareket sınırlı, fakat bu yöne dik x-y düzleminde ise serbesttir. Yüksek sıcaklıklarda taşıyıcılar üst seviyelere geçerek üç boyutlu davranış gösterirler. Böylece düşük sıcaklıklarda ϵ -InSe/ ϵ -GaSe hetero yapılarının simetrilerini değiştirmeden, boyutlarını 3 den 2 ye düşürmek mümkündür. Bu durum ϵ -InSe/GaSe sistemlerinin teorik olarak iki boyutlu InSe/GaSe çok katmanlı yapılar gibi çalışılmasına imkan sağlamıştır [34].

InSe/GaSe çok katmanlı yapıları, birbiri ardı sıra dizilen InSe bölgesini temsil eden potansiyel kuyularıyla, yüksekliği iletim (değerlik) bandı kesikliği kadar olan ve GaSe bölgesini temsil eden potansiyel bariyerleriyle tanımlanmıştır. Hesaplamalarda etkin kütle yaklaşımına dayalı bir boyutlu "Schrödinger" dekleme (2) periyodik sınır koşulları kullanılarak, nümerik olarak, kendi içinde tutarlı bir şekilde çözülmüştür. Hesaplamalarda elektronlar için bariyer yüksekliği, $\Delta E_c = 400 \text{ meV}$ (bu değer, InSe ve GaSe band değerleri (InSe için 1.25 eV , GaSe için 2.02 eV) düşünülerek bulunmuştur), değerlik bandı kesikliği, $\delta V = 0.35 \text{ eV}$ (Ref. [23]den alınmıştır), boşluklar için bariyer yüksekliği (doğal değerlik bandı kayması), $\Delta E_v = 370 \text{ meV}$, bariyer ve kuyu genişliği eşit olup $d_1 = d_2 = 76.8 \text{ \AA}$ (bu mesafe GaSe içindeki "exciton" ların iki çaplarının uzunluğudur [39]), z-eksen yönündeki elektronların etkin kütlesi, InSe bölgesi için $m_{1e} = 0.13 m_e$, GaSe bölgesi için $m_{2e} = 0.28 m_e$ [39], z-eksen yönündeki boşlukların etkin kütlesi, InSe bölgesi için $m_{1h} = 1.54 m_e$ [19], GaSe bölgesi için $m_{2h} = 0.2 m_e$ [21], dielektrik sabitleri, InSe bölgesi için $\epsilon_1 = 8.5$ [40], GaSe bölgesi için $\epsilon_2 = 7.6$ [20] olarak alınmıştır.

InSe/GaSe çok katmanlı sistemi tanımlayan parametreler kullanılarak, bir boyutlu "Schrödinger" denklemi (2), kendi içinde tutarlı bir şekilde çözülmüş, enerji değerleri (E_n), "Coulomb" (V_{co}) ve "exchange" (V_{ex}) potansiyelleri ayrı ayrı hesaplanarak toplam potansiyel (1) elde edilmiştir. Potansiyel profili, yük dağılımı ve enerji seviyelerini kapsayan hesap sonuçları şekil 4'de gösterilmiştir. Şekil 4'de, InSe/GaSe sisteminin iletim bandının yük dağılımı $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ alınarak bulunan potansiyel $V_c(z)$, en düşük altı enerji değerleri, "Fermi" seviyesi verilmiştir. Şekil 4'de ayrıca InSe/GaSe çok katmanlı yapıların değerlik bandının potansiyel profili, $V_v(z)$, en yüksek sekiz enerji değeri gösterilmiştir. Şekil 4'de verilen enerji seviyelerine karşılık gelen dalga fonksiyonları Şekil 5'de gösterilmiştir.

Bölüm 1'de tanımlanan boşluk durumlarından elektron durumlarına optik geçiş ihtimallerini gösteren optik geçiş matris elemanları, $T_{vi,cj}$ (7), InSe/GaSe çok katmanlı yapılar için de hesaplanmış ve sonuçlar Tablo 3'de verilmiştir. Tablo 3 çok katmanlı InSe/GaSe yapıların geçiş matris elemanlarının göreceli büyüklüklerini göstermektedir. InS/GaSe yapılardaki değerlik bandıyla iletim bandı arasındaki optik geçişler şematik olarak Şekil 6'da gösterilmiştir. İletim bandı içindeki optik geçişlerin hızını gösteren “oscillator strength”, çok katmanlı InSe/GaSe yapıları için hesaplanarak (8), matris elemanları, $F_{ci,cj}$, Tablo 4'de verilmiştir.

Giriş bölümünde bahsedildiği gibi, çok katmanlı sistemlerin elektronik yapıları, etkin kütle, dielektrik sabiti, kuyu genişliği, bariyer genişliği gibi birçok fiziksel parametrelere bağlı olarak değişir [27]. Bu sebeple, bu tür yapıların elektronik özellikleri daha çok sabit olmayan, kolayca değiştirilebilen parametreye/parametrelere göre incelenmektedir [28]. Bu araştırmalar, bu yapıların seçilen parametreleriyle oynayarak/ayarlıyarak istenilen çok katmanlı sisteme sahip olunabileceğini göstermiştir. Deneysel açıdan bakıldığında, çok katmanlı sistemlerin elektronik özelliklerinin en kolay olarak ayarlanması geometrik parametrelerin değişimiyle yapılabilmektedir. Böylece kuyu ve/veya bariyer genişlikleri değiştirilerek bazı çok katmanlı sistemler için istenilen elektronik özelliklere, giderek optik özelliklere sahip olunabilir [29-31].

Proje çalışmasının son aşamasında, daha önce ikinci bölümde bahsedilen nedenlerden dolayı seçilen InSe/GaSe çok katmanlı sistemlerin, enerji seviyelerinin, giderek optik geçişlerinin geometrik parametrelere göre değişimi incelenmiştir. InSe/GaSe yapıların kuyu ve bariyer genişlikleri değiştirilerek iletim ve değerlik bandı durumlarının elektronik enerjileri, dalga fonksiyonları, etkin kütle yaklaşımıyla kendi içinde tutarlı bir şekilde hesaplanarak değerlik bandıyla iletim bandı arasındaki geçiş ihtimallerini gösteren matris elemanları bulunmuştur.

InSe/GaSe çok katmanlı sistemler üzerine yapılan bu çalışmada, etkin kütle yaklaşımında kullanılan, iletim ve değerlik bandı tanımları için gerekli, etkin kütle (m_e, m_h), dielektrik sabiti (ϵ), elektronlar için bariyer yüksekliği (ΔE_c), boşluklar için bariyer yüksekliği (ΔE_v), değerlik bandı kesikliği (δV) gibi parametreler bir önceki bölümde alınanlarla aynıdır. Katkılanmamış çok katmanlı sistemlerin uygulamada önemi olmadığından

[29], hesaplamalar, eşit dağılımlı olarak katkılanmış ($n= 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) InSe/GaSe sistemleri için yapılmıştır. InSe/GaSe sistemlerin elektronik özellikleri geometrik parametrelere (d_1, d_2) göre incelenirken, dikkate alınan değişik kuyu ve bariyer genişlikleri, InSe ve GaSe kristallerinin ayrı ayrı z-yönündeki tabakaları arasındaki mesafeleri (c_i) cinsinden tanımlanmıştır: $d_i= 2c_i, 3c_i, 4c_i, 5c_i, 6c_i, i=1,2$. Burada c_i birinci bölge için (InSe) $c_1= 16.70\text{\AA}$ ve ikinci bölge için (GaSe) $c_2= 15.94\text{\AA}$ dır [25].

Etkin kütle yaklaşımına dayalı bir boyutlu "Schrödinger" denklemi (2), seçilen kuyu ve bariyer genişliğine (d_1, d_2) göre kendi içinde tutarlı olarak çözümlenerek, iletim bandına ait en düşük beş enerji seviyesiyle, değerlik bandına ait en yüksek üç enerji seviyesi Şekil 7'de gösterilmiştir. Şekil 7'deki her panel verilen d_1 değeri için, iletim bandının ilk beş enerji seviyesini, değerlik bandının ilk üç enerji seviyesini göstermektedir. Şekil 7'nin her panelinde ikinci bölge genişliği, d_2 , değişken olarak alınmıştır. Ayrıca InSe/GaSe çok katmanlı yapılar için optik geçiş ihtimallerini gösteren, optik geçiş matris elemanları, T_{V_i, C_j} , seçilen her (d_1, d_2) geometrik parametre seti için 7 numaralı denklem yardımıyla hesaplanarak Şekil 7'de verilmiştir. Şekil 7 en yüksek değerlik bandı durumundan (V_1), iletim bandının ilk beş durumuna ($C_j; j=1-5$) olan geçiş ($V_1 \rightarrow C_j$) matris elemanlarının geometrik parametreye göre değişimini göstermektedir. Ayrıca aynı şekil üzerinde "Fermi" seviyesi ve iletim bandı potansiyel kuyusunun minimum değeri (V_c) gösterilmiştir.

3. Sonuç

Şekil 1 ve 4, $n= 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ seviyesinde katkılanmış Si/Ge ve InSe/GaSe yapıların iletim ve değerlik bandının ayrı ayrı potansiyel profilini ($V_c(z), V_v(z)$) göstermektedir. Her iki şekilde de görüldüğü gibi "confined" durumları elektronların itmesi nedeniyle, başlangıçtaki kare-kuyu potansiyel profili, iletim ve değerlik bandının her ikisi için kuyu bölgesi içinde parabolik itme potansiyeli gibi, bariyer bölgesinde ise çekme potansiyeli gibi değişir. Şekil 1 aynı zamanda Si/Ge yapılarının iletim ve değerlik bandlarının içinde kalan enerji seviyelerini de göstermektedir. Şekil 1'de bariyer bölgesinin minimum potansiyel seviyesinin hemen üstünde yer alan iletim bandının 9 numaralı durumu farklı karaktere sahiptir. 9 numaralı

durumun farklı karaktere sahip olduğunu, ilgili enerji seviyelerinin dalga fonksiyonlarını gösteren Şekil 2'den anlamak mümkündür. Şekil 2'de birinci sütun Γ noktasında en düşük on elektron dalga fonksiyonlarını, ikinci sütun ise Γ noktasındaki en yüksek on boşluk fonksiyonlarını göstermektedir. İletim bandındaki 9 numaralı durum, bariyer bölgesindeki büyük genlikle değişik karaktere sahiptir. Bu çeşit potansiyel bariyeri (V_0) üzerinde bulunan elektron durumları band bükülmesi ihmal edildiğinde “resonance” durumları olarak tanımlanırlar. Band bükülmesi etkisiyle bu rezonans durumları aşağıya kayarak potansiyel bariyeri içinde kalırlar. Çalışılan Si/Ge sistemin iletim bandınının 10 numaralı durumdan sonraki durumları serbest parçacık karakterine sahiptirler. Şekil 4 ve 5 InSe/GaSe yapılar için aynı gözle incelendiğinde iletim bandındaki 5 numaralı durum ile, değerlik bandındaki 7 numaralı durumun rezonans durum oldukları anlaşılmaktadır. Şekil 5'de görülen 6 numaralı durumdan sonraki InSe/GaSe iletim bandı durumları serbest parçacık karakterine sahiptirler.

Tablo 1 ve Tablo 3 ayrı ayrı, çok katmanlı Si/Ge ve InSe/GaSe yapıların optik geçiş matris elemanlarını göstermektedir. Tablo 1'de verilen optik geçiş matris elemanlarının göreceli büyüklüklerine bakarak Si/Ge yapılarda ihtimali büyük geçişler $V1 \rightarrow C4$, $V2 \rightarrow C6$, $V2 \rightarrow C10$, $V5 \rightarrow C4$, $V5 \rightarrow C7$, $V6 \rightarrow C6$, $V9 \rightarrow C1$, $V9 \rightarrow C5$, $V10 \rightarrow C3$, $V10 \rightarrow C7$ ve $V10 \rightarrow C10$ şeklinde belirlenebilir. Bu çalışmada tesbit edilen önemli bir sonuç da II. tipli Si/Ge çok katmanlı sistemlerde $V1 \rightarrow C1$ geçiş ihtimalinin düşük olduğudur. Oysa bu geçiş I. tipli Si₅/Ge₅ çok katmanlı sistemlerde en yüksek ihtimale sahiptir [6]. Tablo 3'de görüldüğü üzere, çok katmanlı InSe/GaSe yapılar için en yüksek ihtimalli geçiş $V1 \rightarrow C1$, ikinci derecede olası optik geçiş $V1 \rightarrow C5$ olarak belirlenebilir.

Tablo 2 ve Tablo 4 ayrı ayrı, çok katmanlı Si/Ge ve InSe/GaSe yapılarda, iletim bandı durumları arasında tanımlanan ve geçiş hızını ölçen “oscillator strength” matris elemanlarını göstermektedir. Tablo 2'de görüldüğü gibi, $C1 \rightarrow C3$, $C1 \rightarrow C4$, $C2 \rightarrow C5$, $C3 \rightarrow C5$, $C4 \rightarrow C5$, $C5 \rightarrow C6$, $C5 \rightarrow C10$, $C6 \rightarrow C7$, $C8 \rightarrow C10$ ve $C9 \rightarrow C10$ geçişleri için geçiş hızı yüksektir.

Tablo 4'de görünen matris elemanlarından, InSe/GaSe yapılarda $C1 \rightarrow C2$ geçişinin en fazla geçiş hızına, $C5 \rightarrow C6$ geçişinin ise ikinci derecede fazla geçiş hızına sahip olduğu bulunmuştur.

Şekil 7, InSe/GaSe çok katmanlı yapıların iletim ve değerlik bandı enerji seviyelerini ve optik geçiş matris elemanlarının göreceli büyüklüklerinin geometrik parametrelere (d_1 ve

d_2) göre deęişimini göstermektedir. Şekil 7(b) de görüldüğü ve önceden tahmin edilebildiği gibi, iletim bandı enerji seviyeleri sabit kuyu genişliği (d_1) ve deęişken bariyer genişliği (d_2) durumunda dereceli olarak yukarıya kayar. Aynı deęişim daha hızlı olarak deęerlik bandı enerji seviyelerinde de gözlenmektedir. Şekil 7(a)'da görüldüğü gibi, bariyer bölgesinin genişliği (d_2), $4c_2$ ye kadar deęişirken, geçiş ihtimali $V1 \rightarrow C1$ geçişinde fazla fakat, yüksek d_2 deęerlerinde en yüksek geçiş ihtimali $V1 \rightarrow C3$ için tanımlanabilir. Bunun sebebi bariyer genişliği $4c_2$ den büyük olma durumunda, bariyerin hemen üzerinde bulunan, rezonans karaktere [33-41] sahip $C3$ enerji seviyesidir. Şekil 7(b) de görüldüğü gibi, $d_1 = 3c_1$ ve $d_2 < 4c_2$ alındığında geçiş ihtimali $V1 \rightarrow C3$ geçişi için en yüksek olmasına rağmen, $d_2 = 4c_2$ alındığında, dięerlerine göre en fazla geçiş ihtimali, en yüksek boşluk durumundan dięer rezonans durumuna ($C5$) geçtiir. Dięer taraftan $d_1 = 4c_1$ alındığında $V1, C5$ arasındaki geçiş ihtimali $d_2 < 3c_2$ için en yüksektir, fakat daha sonraki d_2 deęerlerinde $V1 \rightarrow C1$ geçişi başta gelir. Şekil 7'nin dięer panellerinden gözlendiği gibi (Şekil 6(c-e)), $d_1 > 4c_1$ ve $d_2 = 6c_2$ olduğunda InSe/GaSe çok katmanlı yapılarda $V1 \rightarrow C1$ geçişi en fazla ihtimale sahiptir. Bu inceleme sonucunda InSe/GaSe yapılarda, en fazla geçiş ihtimalinin birinci ve ikinci bölge genişliklerine (d_1, d_2) sistematik bağımlılık göstermediği anlaşılmıştır. Ayrıca kuyu ve bariyer genişliğinin ikisi birden arttırıldığında, bariyer yükseklięi altında kalan enerji seviyelerinin çok yavaş deęiştiiği gözlenmiştir.

Özet olarak, proje kapsamında, eşit dağılımlı olarak katkılanmış InSe/GaSe ve Si/Ge çok katmanlı yapıların "confined" elektron ve boşluk durumları hesaplanmıştır. Boşluk durumlarıyla, elektron durumları arasındaki yüksek ihtimalli geçişleri tanımlamak için, optik geçiş matris elemanları hesaplanmıştır. InSe/GaSe yapılar üzerinde elde edilen sonuçlar, bu konuda deneysel sonuçların olmaması nedeniyle karşılaştırılamamıştır. Fakat bu sonuçlar, bundan sonraki InSe/GaSe yapıları inceleyecek deneysel ve teorik çalışmalara faydalı olabilecektir. Daha önce, kısa periyotlu Si/Ge çok katmanlı yapılar bu proje çerçevesinde yapılan çalışmalara benzer bir şekilde incelenmiştir [5]. Kısa ve uzun periyotlu çok katmanlı yapılar farklı karakter gösterdiklerinden, bu çalışmada bulunan geçiş matris elemanları ve bandlar arası belli başlı geçişler kısa periyotlu Si/Ge yapılarda farklı olacaktır. Sonuç olarak, çok katmanlı yapıların parametre deęişikliklerinin kısıtlı olması ve kısa periyotlu çok

katmanlı yapıların oluřturma zorluęu dūřünūldūęinde, uzun periyotlu ok katmanlı yapıların opto elektronik aygıt uygulamasında tercih edilebileceęini, bu durumda da yapılan proje alıřmasının bu tūr arařtırmalara katkısının būyūk olacaęını dūřünmek mūmkūndūr.

Referanslar

- [1] U. Schmid, N.E. Christensen and M. Cardona, Phys. Rev. Lett., **65** (1990) 2610.
- [2] R. Zachai, K. Eberi, G. Abstreiter, E. Kasper and H. Kibbel, Phys. Rev. Lett., **64** (1990) 1055; T.P. Pearsall, J.M. Vanderberg, R. Hull and J.M. Bonar, Phys. Rev. Lett., **63** (1989) 2104.
- [3] A.M. Ferendeci, "Physical Foundations of Solid State and Electron Devices", McGraw-Hill, New York, 1991.
- [4] M. Ikeda, K. Terakura and T. Oguchi. Phys. Rev., **B45** (1992) 1496.
- [5] Thin Solid Films, Vol. **222** (1992).
- [6] M. Jaros, A.W. Beavis, P.J. Hagon, R.J. Turton, A. Miloszewski and K.B. Wong, Thin Solid Films, **222** (1992) 205.
- [7] U. Menczigar, J. Brunner, E. Friess, M. Gail, G. Bstreiter, H. Kibel, H. Presting and E. Kasper, Thin Solid Films, **222** (1992) 227.
- [8] V. Capozzi, Phys. Rev. **B28** (1983) 4620.
- [9] A. Segura, F. Pomer, A. Cantarero, W. Kraus and A. Chevy, Phys. Rev. **B29** (1984) 5708.
- [10] K. Schubert, E. Dorre and M. Kluge, Z. Metalkd., **46** (1955) 216.
- [11] A. Kuhn, A. Chevy and R. Chevalier, Phys. Stat. Sol. (a) **64** (1975) 469.
- [12] R.M. Hoff, J.C. Irwin and R.M.A. Lieth, Can. J. Phys. **53** (1975) 1606.
- [13] K.R. Allahverdi, E.Yu. Salaev, M.M. Tagyev and S.S. Babaev, Solid State Commun., **59** (1986) 133.
- [14] P.C. Leung, G. Andermann, W.G. Spitzer and C.A. Mead, J. Phys. Chem. Solids, **27** (1966) 849.
- [15] R.M. Hoff and J.C. Irwin, Phys.Rev. **B10** (1974) 3464.
- [16] A. Mercier and J.P. Voitchovsky, Solid Stata Commun., **14** (1974) 757.
- [17] E. Finkman and A. Rizzo, Solid State Commun., **15** (1974) 1841.
- [18] G.B. Abdullaev, K.R. Allahverdi, R.Kh. Nani, E.Yu. Salaev and M.M. Tagyev, Phys. Stat. Sol. (a) **53** (1979) 549.
- [19] E.K. Rogers, R.J. Nicholas, J.C. Portal and A. Chevy, Solid State Commun., **44**

- (1982) 379.
- [20] J.Y. Emery, L. Brahim-Ostmane, C. Hirlimann and A. Chevy, *J. Appl. Phys.* **71** (1991) 3256.
- [21] G. Ottaviani, C. Canali and F. Nava, *Solid State Commun.* **14** (1974) 933.
- [22] C. Tatsuyama, T. Tanbo, and N. Nakayama, *Appl. Surf. Sci.* **41/42** (1989) 539.
- [23] N. Nakayama, T. Kuramachi, T. Tanbo, H. Ueba and C. Tatsuyama, *Surf.Sci.*, **244** (1991) 58.
- [24] C. Tatsuyama, T. Kuramachi, T. Tanbo and H. Ueba, *Appl. Surf. Sci.*, **56-58** (1992) 672.
- [25] Ş. Erkoç, K. Allahverdi and Z. Ibrahim, *Solid State Commun.* **90** (1994) 553.
- [26] R. Schwarez and M.A. Kanehisa, *Solid State Commun.* **92** (1994) 689.
- [27] Eds.F. Henneberger, S. Schmitt-Rink and E.O. Göbel, "Optics of Semiconductor Nanostructures", Akademik Verlag GmbH, Berlin 1993.
- [28] Ed.H.T. Grahn, "Semiconductor Superlattices: Growth and Electronic Properties", World Scientific Publishing 1995.
- [29] G. Bastard, "Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures", Halsted Press 1988.
- [30] C. Weisbuch and B. Vinter, "Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals and Applications", Academic Press 1991.
- [31] Ed.H.G. Grimmeiss, "Heterostructures of Semiconductors", *Physica Scripta*, Vol. **T68** (1996).
- [32] L.J. Sham and M. Nakayama, *Phys. Rev.*, **B20** (1979) 734..
- [33] Ş. Erkoç and S. Ciraci, *Phys. Rev.*, **B34** (1986) 4360.
- [34] T. Ando, A.B. Fowler and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.*, **54** (1982) 437.
- [35] R. Ferreira and G. Bastard, *Rep. Prog. Phys.*, **60** (1997) 345.
- [36] U. Gnutzman and K. Clausecker, *Appl. Phys.*, **3** (1974) 9.
- [37] A. Koma, K. Sunouchi and T. Miyajima, *J. Vac. Sci. Tec.* **B3** (1985) 724.
- [38] A. Koma and J.Yoshimura, *Sur. Sci.*, **174** (1986) 556.
- [39] Landolt- Bornstein, in "Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology", Eds. K.H. Hellwege and O. Madelung, Vol. **2**, Springer-

Verlag, Berlin, 1983, p 525.

[40] V. Reidl, H. Neumann, H. Sobotta and F. Levy, *Solid State Commun.* **34** (1980)

229.

[41] Ş. Erkoç *Phys. Rev.*, **B36** (1987) 3459.

Tablo 1. Si/Ge yapıları için hesaplanan atomik birimli optik geçiş matris elemanları ($T_{vi;cj}$).
Değerlerler $m(n)=0. m \times 10^n$ formülüne göre formatlanmıştır.

(vi)	(cj)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1		928(-5)	378(-3)	104(-2)	101(-1)	439(-3)	409(-5)	542(-2)	316(-2)	281(-2)	434(-3)
2		248(-2)	979(-3)	201(-3)	655(-3)	119(-3)	118(-1)	729(-2)	445(-2)	520(-4)	430(-3)
3		456(-3)	117(-1)	291(-2)	607(-2)	433(-3)	339(-2)	696(-3)	900(-3)	711(-3)	765(-2)
4		577(-2)	829(-4)	587(-3)	615(-3)	447(-3)	113(-2)	272(-2)	287(-3)	375(-2)	128(-1)
5		271(-4)	202(-4)	321(-4)	124(-1)	751(-2)	503(-2)	181(-1)	126(-2)	439(-3)	171(-2)
6		260(-2)	965(-2)	705(-4)	466(-2)	737(-3)	125(-1)	881(-2)	579(-2)	232(-2)	425(-2)
7		143(-3)	162(-5)	219(-2)	377(-3)	100(-2)	261(-2)	150(-2)	786(-3)	179(-2)	385(-2)
8		166(-3)	616(-2)	284(-2)	236(-2)	217(-2)	116(-4)	461(-3)	746(-5)	427(-2)	692(-3)
9		265(-1)	663(-3)	555(-2)	559(-2)	169(-1)	934(-3)	455(-2)	107(-2)	384(-4)	641(-2)
10		239(-2)	245(-2)	100(-1)	335(-3)	979(-3)	468(-3)	230(-1)	235(-3)	884(-3)	145(-1)

Tablo 2. Si/Ge yapılar için hesaplanan atomik birimli "oscillator strength" matris elemanları ($F_{ic,j}$). Değerler Tablo 1'de verilen formülle formatlanmıştır.

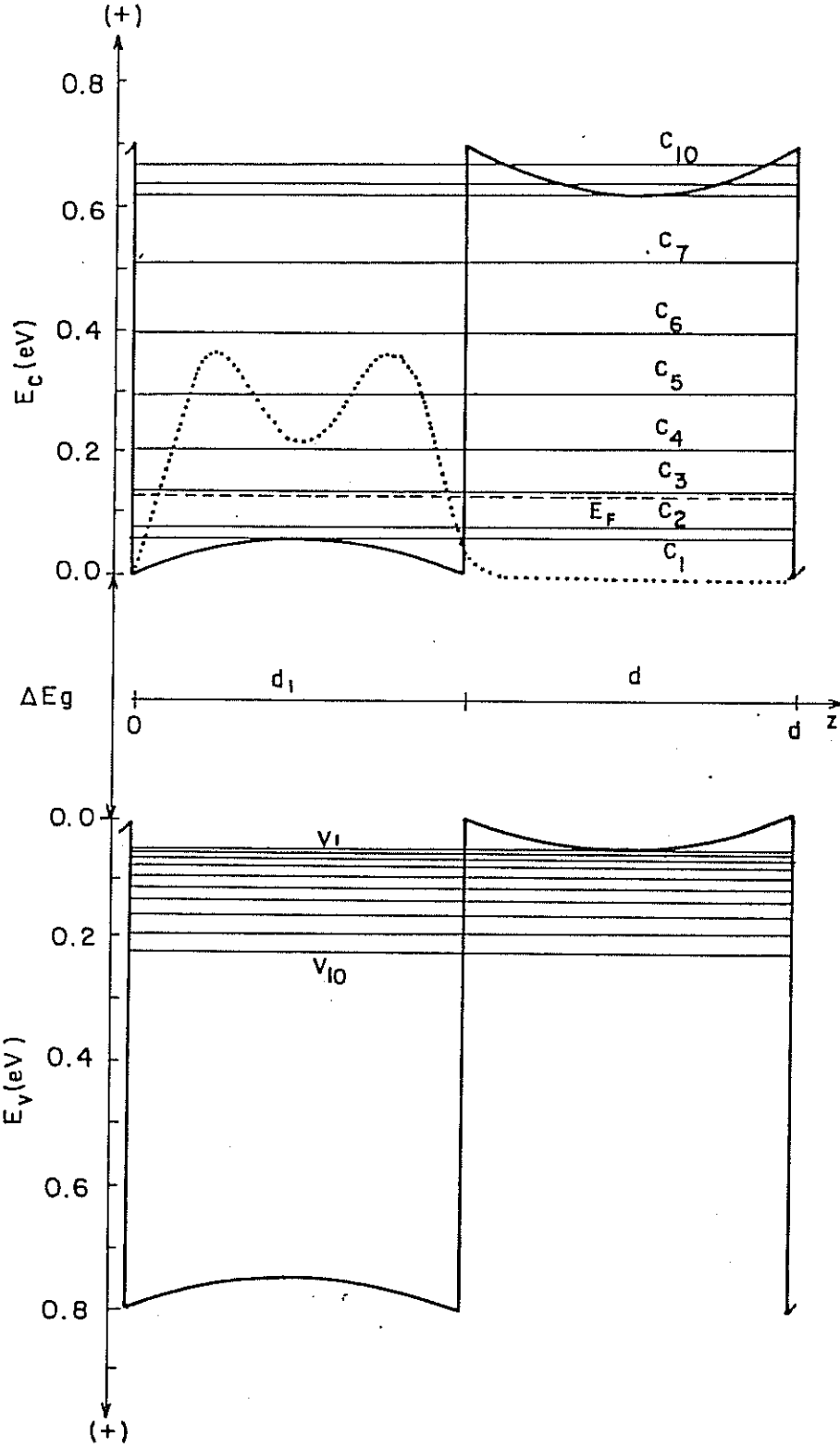
(ci)	(cj)	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1		115(-1)	176(+1)	554(+1)	419(-1)	209(0)	216(0)	813(0)	333(-2)	204(0)
2			609(0)	119(+1)	125(+1)	743(-2)	439(0)	587(-1)	500(-1)	486(0)
3				670(-2)	157(+1)	128(-1)	125(-1)	331(0)	166(-2)	836(-1)
4					111(+1)	265(-1)	802(0)	675(-2)	100(0)	181(-1)
5						127(+1)	190(0)	612(0)	640(-1)	109(+1)
6							521(+1)	687(0)	352(-1)	134(0)
7								216(-1)	548(0)	201(-2)
8									329(0)	739(+1)
9										423(+1)

Tablo 3. InSe/GaSe yapılar için hesaplanan atomik birimli optik geçiş matris elemanları ($T_{vi,cj}$). Değerler Tablo 1'de verilen formülle formatlanmıştır.

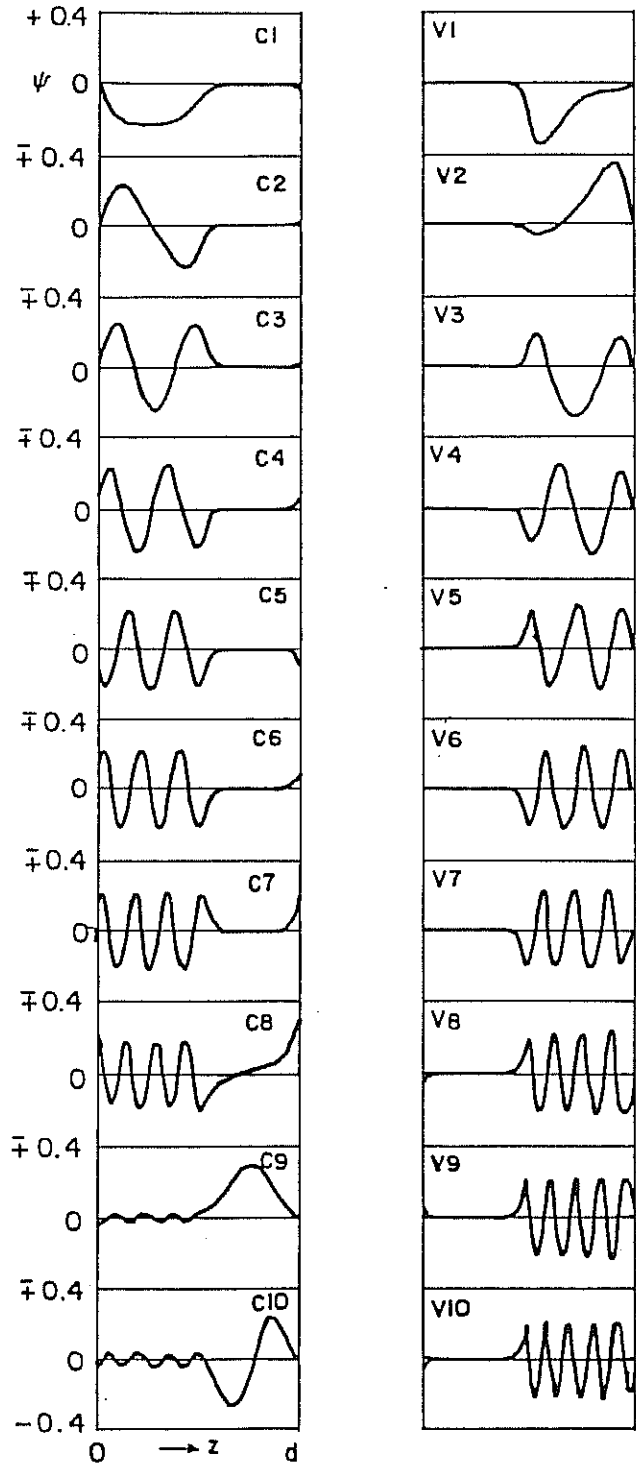
(vi)	(cj)	1	2	3	4	5	6
1		671(-1)	428(-2)	253(-2)	856(-3)	282(-1)	133(-3)
2		145(-1)	199(-2)	167(-2)	245(-1)	915(-2)	299(-2)
3		169(-1)	719(-2)	709(-3)	112(-1)	472(-3)	765(-4)
4		447(-2)	741(-3)	216(-2)	712(-3)	735(-2)	363(-2)
5		600(-2)	748(-2)	122(-1)	194(-3)	928(-3)	232(-2)
6		281(-2)	724(-5)	399(-2)	379(-2)	449(-3)	462(-2)
7		181(-2)	212(-1)	213(-1)	806(-2)	884(-4)	147(-3)
8		343(-3)	335(-3)	850(-2)	238(-3)	945(-3)	636(-2)

Tablo 4. InSe/GaSe yapılar için hesaplanan atomik birimli "oscillator strength" matris elemanları ($F_{ci,cj}$) Değerler Tablo 1'de verilen formülle formatlanmıştır.

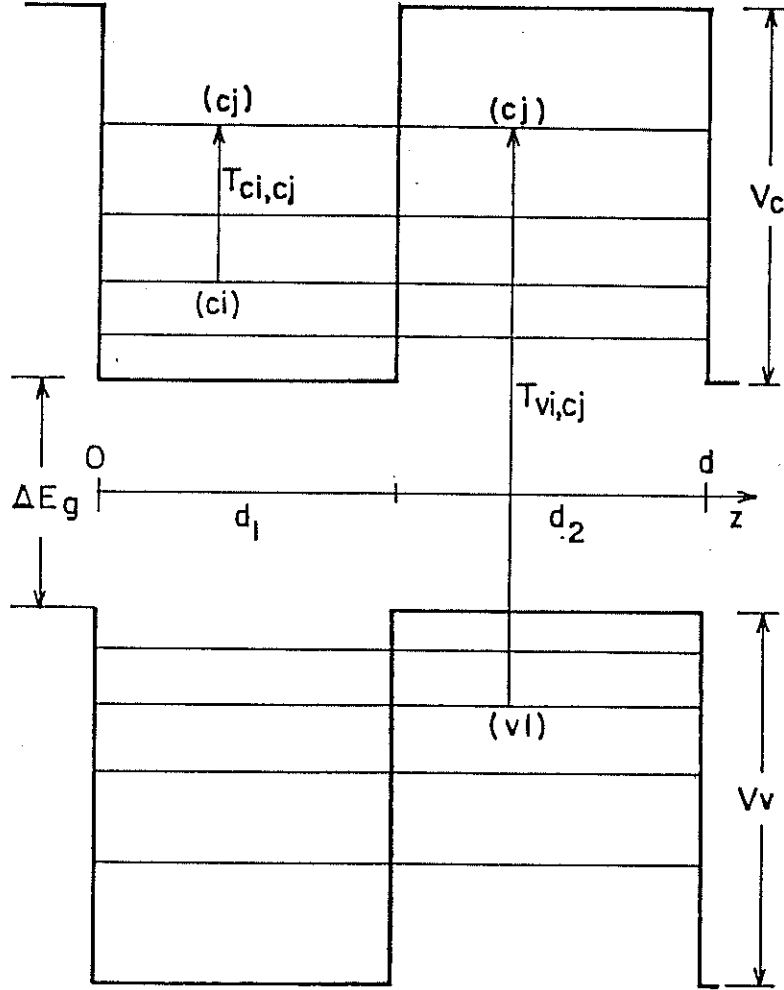
(c_j)	2	3	4	5	6
(c_i)					
1	740(+1)	105(+1)	405(-2)	249(-3)	363(-1)
2		316(0)	123(+1)	379(-2)	136(-1)
3			718(-1)	270(-2)	114(-1)
4				438(0)	478(-1)
5					153(+1)



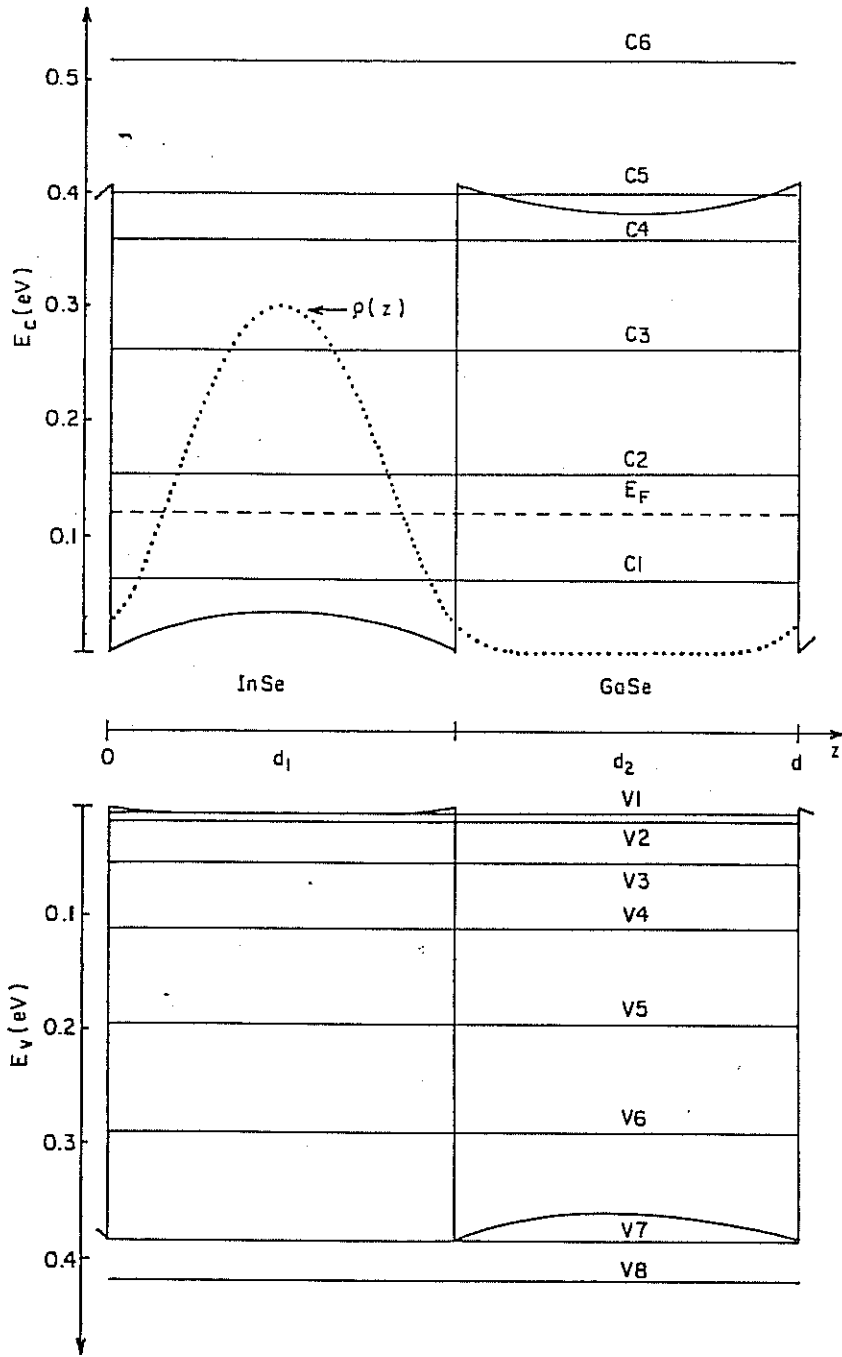
Şekil 1. Çok katmanlı Si/Ge yapılarının iletim (üst) ve değerlik (alt) bandlarının hesaplanan potansiyel profilleri (kalın çizgiler), yük yoğunluğu (noktalı çizgi) ve elektronik enerji seviyeleri (ince düz çizgiler).



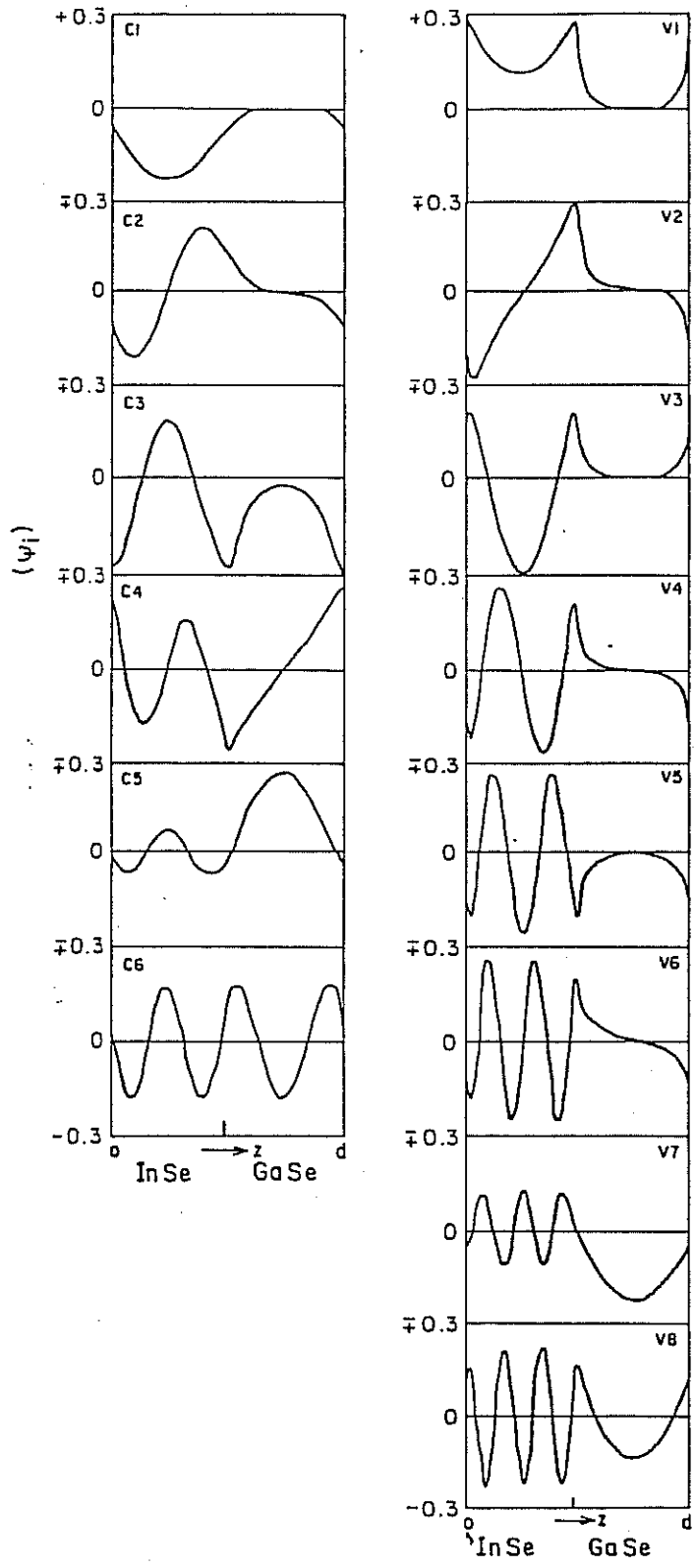
Şekil 2. Şekil 1'de gösterilen Si/Ge enerji seviyelerinin dalga fonksiyonları.



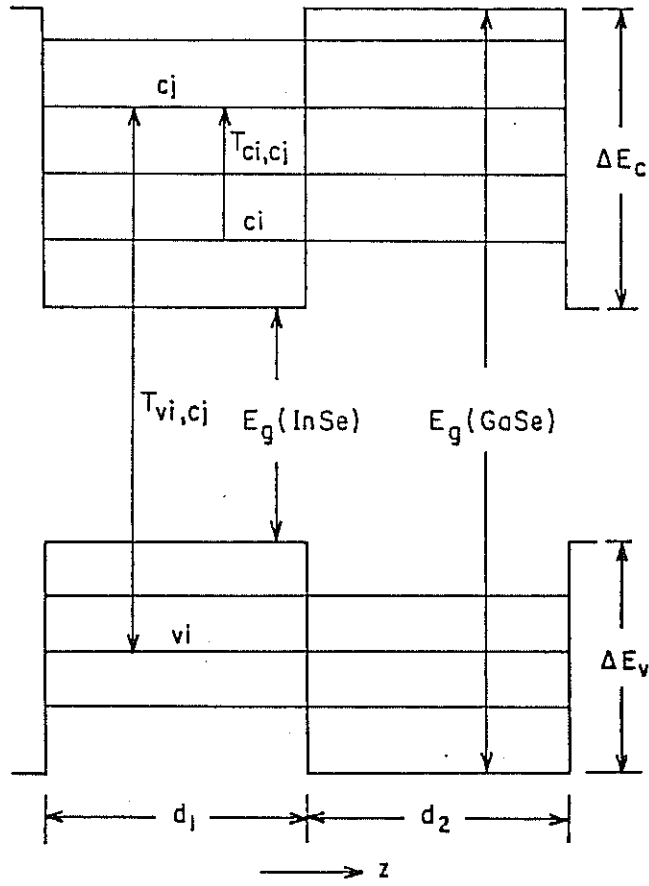
Şekil 3. Çok katmanlı Si/Ge yapılarıdaki optik geçişlerin şematik gösterimi.



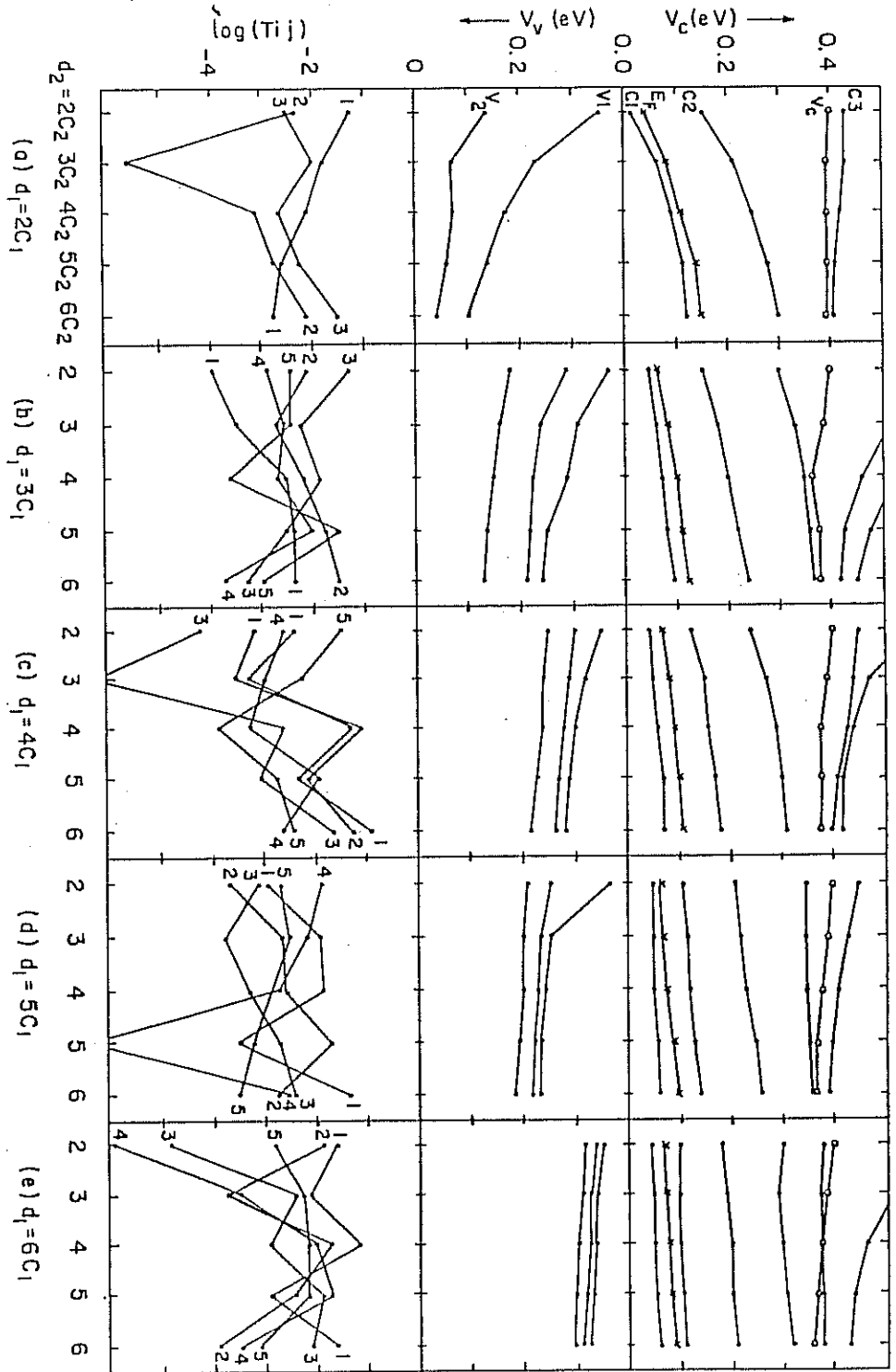
Şekil 4. Çok katmanlı InSe/GaSe yapılarının iletim (üst) ve değerlik (alt) bandlarının hesaplanan potansiyel profilleri (kalın çizgiler), yük yoğunluğu (noktalı çizgi) ve elektronik enerji seviyeleri (ince düz çizgiler).



Şekil 5.Şekil 4'de gösterilen InSe/GaSe enerji seviyelerinin dalga fonksiyonları.



Şekil 6. Çok katmanlı InSe/GaSe yapılarıdaki optik geçişlerin şematik gösterimi.



Şekil 7. InSe/GaSe çok katmanlı yapıların iletim (en üst panel) ve değerlik bandı (orta panel) enerji seviyelerini ve optik geçiş matris elemanlarının ($V1 \rightarrow Cj$) (en alt panel) bariyer genişliğine (d_2) göre değişimi. Kuyu genişliği d_1 , a) $2C_1$, b) $3C_1$, c) $4C_1$, d) $5C_1$, e) $6C_1$ olarak tanımlanmıştır.



Optical transitions in Si/Ge superlattices

Şakir Erkoç, Şenay Katircioğlu

Department of Physics, Middle East Technical University, 06531 Ankara Turkey

Received 4 October 1995; accepted 22 August 1996

Abstract

We have performed self-consistent field calculations of the electronic structure of Si/Ge square-well superlattices within the effective-mass theory. We have computed the optical transition matrix elements involving transitions from the hole states to states in the conduction band, and we have also computed the oscillator strength matrix elements for the transitions between the states in the conduction band. © 1997 Elsevier Science S.A.

Keywords: Electronic structure; Optical properties; Semiconductors; Superlattices

1. Introduction

With the development of advanced epitaxial techniques, quantum wells and superlattices (or heterostructures) have become one of the most promising research fields in semiconductor physics. Among these structures, the coherently grown lattice-mismatched Si/Ge superlattices have been an object of considerable interest because of their electronic and optical properties, which can be modified strain effects, zone folding of the bands and quantum confinement effects. These superlattices are particularly interesting because of the possibility of creating a direct gap material based on bulk materials with indirect gaps [1,2]. If this can be achieved, then new optoelectronic devices can be integrated on silicon using the already highly advanced silicon-based technology.

For obtaining a direct bandgap Si/Ge superlattice the conditions in the case of Si/Si_{1-x}Ge_x superlattice are determined as $x > 0.25$ and a thickness < 100 Å [3–5]. In the case of a layered Si_n/Ge_n superlattice a period length of about 10 monolayers (short period) results in the folding of the both side band structures and leads to the possibility of creating a quasi direct fundamental bandgap [3–5]. But still there are some stability problems on the formation of the short period Si/Ge superlattices [5]. Even if the short-period Si/Ge superlattice of the direct gap was formed, transition matrix elements between the intersubbands are calculated to be at least one order of magnitude lower than that of the direct gap of III–V semiconductors.

In the present work, considering the limited variation of superlattice parameters (such as period) and the stability problems of short-period Si/Ge superlattices, the long-period

Si/Ge superlattice is studied by effective mass theory. On the other hand, the present work is the first calculation to show the difference between the transition probabilities of the short- and long-period Si/Ge superlattices. From the theoretical point of view, ab-initio methods give accurate results for short-period superlattices, however effective-mass theory is more applicable for long-period superlattices [6,7].

2. Calculation of eigenstates

In this work we carried out calculations for the electron states in the conduction band and hole states in the valence band of the Si/Ge superlattice within the effective-mass theory. By assuming a free-particle behavior in the xy plane we solved the one-dimensional Schrödinger equation in the z direction self-consistently for a uniform charge distribution. The periodic potential $V(z)$ contains both coulomb and exchange contributions in addition to the initial square-well potential V_0 , namely

$$V(z) = V_0 + V_{\text{co}}(z) + V_{\text{ex}}(z) \quad (1)$$

In the solutions, we assumed that self-consistency is reached when the difference in energy eigenvalues and potentials are within a preset value of 10^{-4} a.u. The parameters of the superlattice are given in Fig. 1.

Considering the central point difference method the periodic one-dimensional Schrödinger equation is reduced to a recursion relation [7].

$$\alpha\psi_{i-1} + (\beta - \lambda)\psi_i + \alpha^*\psi_{i+1} = 0 \quad (2)$$

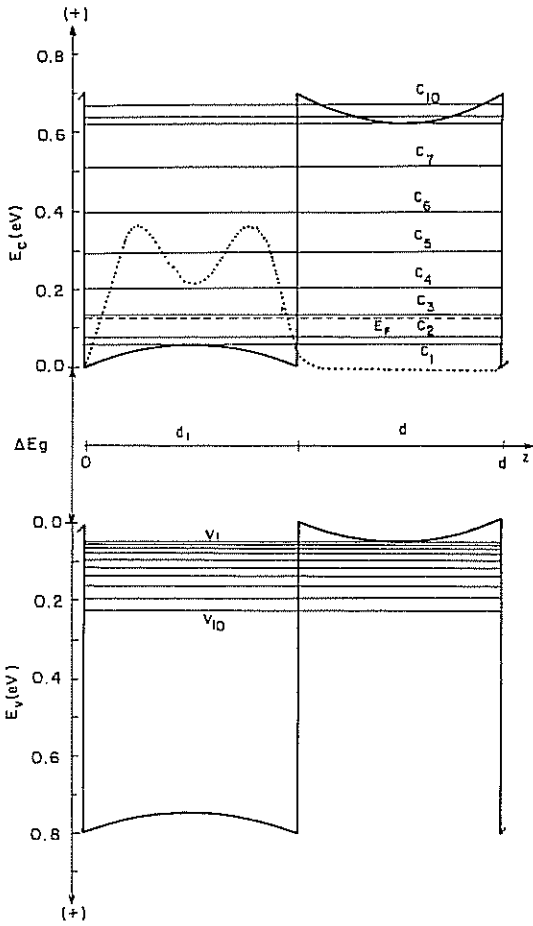


Fig. 1. Calculated potential profiles (thick lines), charge density (dotted line), and electronic energy levels (thin straight lines) for the conduction (upper) and valence (lower) bands of the Si/Ge superlattice. The unit cell parameters used: subscript 1 and 2 in the parameters represent the well (Ge) and barrier (Si) regions, respectively. The width of the well $d_1 = 197.75 \text{ \AA}$ and the width of the barrier $d_2 = 190.05 \text{ \AA}$ (these widths correspond to 140 layers along the [100] direction). The barrier height (or the discontinuity) of the valence band $V_v = 0.8 \text{ eV}$, the corresponding conduction band line-up $\epsilon_c = 0.7 \text{ eV}$, and the bandgap $\Delta E_g = 0.4 \text{ eV}$ [10]. The dielectric constants [11], $\epsilon_1 = 16.0$, $\epsilon_2 = 11.8$; the effective masses of the conduction band [11], $m_1^* = 0.082m_e$, $m_2^* = 0.19m_e$, the effective masses of the valence band [11], $m_1^* = 0.28m_e$, $m_2^* = 0.49m_e$. The electron concentration, $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

where $\psi_i = \psi(k_z, z_i)$ is the periodic part of the Bloch wave in the z direction,

$$\chi = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(1 - i \frac{2\pi k_z}{d} \delta \right) \quad (3)$$

$$\beta = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(2 + \frac{4\pi k_z^2}{d^2} \delta^2 \right) + \delta^2 V(z_i) \quad (4)$$

where $\lambda = \delta^2 E_n$. In these equations δ is the step length in the z direction. $d = d_1 + d_2$ is the width (period) of the superlattice unit cell, E_n is the band energy and k_z is the wave vector. Other quantities have conventional meanings. The periodic boundary conditions for ψ are taken into account in considering the matrix from the recursion relation. The exchange potential is expressed as a function of the local charge density of the form,

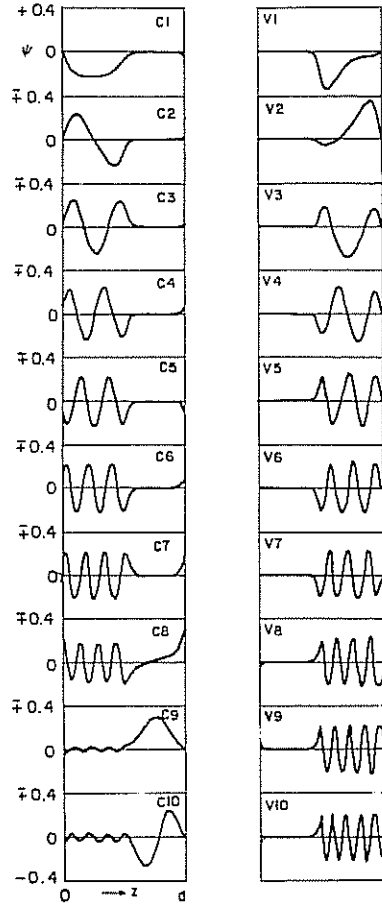


Fig. 2. Wavefunctions for the energy levels shown in Fig. 1.

$$V_{cx}(z_i) = -\left(\frac{3}{\pi} \rho_i \right)^{1/3} \quad (\text{in a.u.}) \quad (5)$$

The coulomb potential is obtained from the numerical solution of the Poisson equation. The result of the calculations are shown in Fig. 1, which includes the potential profiles, charge distribution and the energy levels. The corresponding wave functions of the energy levels shown in Fig. 1 are plotted in Fig. 2.

3. Calculation of transition matrix elements

Transitions between the levels lying in valence and conduction bands of $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ are observable, and they were classified as optical transitions [8]. Similar transitions are also possible for the Si/Ge system [5].

We have calculated the optical transition matrix elements

$$T_{vi,cj} = |\langle \psi_{vi} | \vec{p} | \psi_{cj} \rangle|^2 \quad (6)$$

where ψ_{vi} and ψ_{cj} are, respectively, valence and conduction wave functions generated at the center of the superlattice Brillouin zone, and \vec{p} is the momentum operator. Since the charge carriers move freely in the xy plane, the explicit form of the optical matrix elements may be expressed as

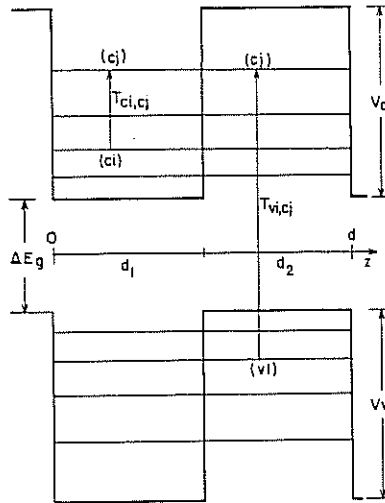


Fig. 3. Schematic diagram showing the optical transitions.

$$T_{vi,cj} = \left| \langle \psi_{vi} | \frac{d\psi_{cj}}{dz} \rangle \right|^2 \quad (7)$$

Fig. 3 shows schematically the considered transitions. Calculated optical transition matrix elements are given in Table 1 for the transitions between the levels shown in Fig. 1.

Table 1
Calculated optical transition matrix elements (in a.u.), $T_{vi,cj}$. Entries are formatted as $m(n) = 0.m \times 10^n$

(vi)	(cj)									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	928(-5)	378(-3)	104(-2)	101(-1)	439(-3)	409(-5)	542(-2)	316(-2)	281(-2)	434(-3)
2	248(-2)	979(-3)	201(-3)	655(-3)	119(-3)	118(-1)	729(-2)	445(-2)	520(-4)	430(-3)
3	456(-3)	117(-1)	291(-2)	607(-2)	433(-3)	339(-2)	696(-3)	900(-3)	711(-3)	765(-2)
4	577(-2)	829(-4)	587(-3)	615(-3)	447(-3)	113(-2)	272(-2)	287(-3)	375(-2)	128(-1)
5	271(-4)	202(-4)	321(-4)	124(-1)	751(-2)	503(-2)	181(-1)	126(-2)	439(-3)	171(-2)
6	260(-2)	965(-2)	705(-4)	466(-2)	737(-3)	125(-1)	881(-2)	579(-2)	232(-2)	425(-2)
7	143(-3)	162(-5)	219(-2)	377(-3)	100(-2)	261(-2)	150(-2)	786(-3)	179(-2)	385(-2)
8	166(-3)	616(-2)	284(-2)	236(-2)	217(-2)	116(-4)	461(-3)	746(-5)	427(-2)	692(-3)
9	265(-1)	663(-3)	555(-2)	559(-2)	169(-1)	934(-3)	455(-2)	107(-2)	384(-4)	641(-2)
10	239(-2)	245(-2)	100(-1)	335(-3)	979(-3)	468(-3)	230(-1)	235(-3)	884(-3)	145(-1)

Table 2
Calculated oscillator strength matrix elements (in a.u.), $F_{ci,cj}$. Entries are formatted as in Table 1

(ci)	(cj)									
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
1	115(-1)	176(+1)	554(+1)	419(-1)	209(0)	216(0)	813(0)	333(-2)	204(0)	
2		609(0)	119(+1)	125(+1)	743(-2)	439(0)	587(-1)	500(-1)	486(0)	
3			670(-2)	157(+1)	128(-1)	125(-1)	331(0)	166(-2)	836(-1)	
4				111(+1)	265(-1)	802(0)	675(-2)	100(0)	181(-1)	
5					127(+1)	190(0)	612(0)	640(-1)	109(+1)	
6						521(+1)	687(0)	352(-1)	134(0)	
7							216(-1)	548(0)	201(-2)	
8								329(0)	739(+1)	
9									423(+1)	

We have also calculated the oscillator strength matrix elements $F_{ci,cj}$, between the states in the conduction band, which is a measure of the transition rate; it is usually expressed as [9]

$$F_{ci,cj} = \frac{T_{ci,cj}}{E_{cj} - E_{ci}} \quad (8)$$

where E_{ci} and E_{cj} are the energies of the initial and final conduction states, respectively, and $T_{ci,cj}$ is the square of the momentum matrix elements between them as defined in Eq. (6). Calculated oscillator strength matrix elements for the transitions between the conduction band states are given in Table 2.

4. Discussion and conclusion

Because of the repulsion of electrons occupying the confined states the original square-well potential profile modifies as a parabolic repulsive potential in the well region and an attractive potential in the barrier region for both conduction and valence bands. The state #9 in the conduction band looks like a confined resonance state which places it just above the

tential minimum in the barrier region. The conduction states after #10 have free particle character.

Table 1 contains the relative magnitudes of the optical transition matrix elements. As seen from the table the most probable transitions are $V1 \rightarrow C4$, $V2 \rightarrow C6$, $V2 \rightarrow C10$, $V5 \rightarrow C4$, $V5 \rightarrow C7$, $V6 \rightarrow C6$, $V9 \rightarrow C1$, $V9 \rightarrow C5$, $V10 \rightarrow C3$, $V10 \rightarrow C7$, and $V10 \rightarrow C10$. It is worth mentioning that the transition from the first state of the valence band ($V1$) to the first state of the conduction band ($C1$) is not favorable as expected in type-II Si/Ge superlattices, contrary to the short-period case (type I). In Si_5/Ge_5 superlattices the $V1 \rightarrow C1$ transition was calculated to be the most probable [1].

Table 2 contains the relative magnitudes of the oscillator strength matrix elements for the transitions between the conduction states. As seen from the table the high transition rates take place for the transitions $C1 \rightarrow C3$, $C1 \rightarrow C4$, $C2 \rightarrow C4$, $C2 \rightarrow C5$, $C3 \rightarrow C5$, $C4 \rightarrow C5$, $C5 \rightarrow C6$, $C5 \rightarrow C10$, $C6 \rightarrow C7$, $C8 \rightarrow C10$, and $C9 \rightarrow C10$.

In recent years similar investigations have been done on short period Si/Ge superlattices because of the potential applications in IR devices, such as detectors and modulators [2]. Since the electronic structure of short- and long-period superlattices show different characteristics, the calculated transition matrix elements and the dominant band to band transition sets are expected to be different. Considering the limited variation of superlattice parameters (such as period) and the difficulty in the fabrication of short-period superlat-

tices the long-period superlattices may be preferred in optoelectronic device applications; in that case the present calculation will be a valuable contribution.

Acknowledgements

The authors would like to thank TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) for partial support through the project TBAG-1439.

References

- [1] U. Gnuzman and K. Clausecker, *Appl. Phys.*, **3** (1974) 9.
- [2] U. Schmid, N.E. Christensen and M. Cardona, *Phys. Rev. Lett.*, **65** (1990) 2610.
- [3] M. Ikeda, K. Terakura and T. Oguchi, *Phys. Rev.*, **B45** (1992) 1496.
- [4] R. Zachai, K. Eberl, G. Abstreiter, E. Kasper and H. Kibbel, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990) 1055; T.P. Pearsall, J.M. Vanderberg, R. Hull and J.M. Bonar, *Phys. Rev. Lett.*, **63** (1989) 2104.
- [5] *Thin Solid Films*, Vol. 222 (1992).
- [6] L.J. Sham and M. Nakayama, *Phys. Rev.*, **B20** (1979) 734.
- [7] Ş. Erkoç and S. Ciraci, *Phys. Rev.*, **B34** (1986) 4360.
- [8] D. Ninno, K.B. Wong, M.A. Gell and M. Jaros, *Phys. Rev.*, **B32** (1985) 2700.
- [9] M. Jaros, A.W. Beavis, P.J. Hagon, R.J. Turton, A. Miloszewski and K.B. Wong, *Thin Solid Films*, **222** (1992) 205.
- [10] U. Menczgar, J. Brunner, E. Friess, M. Gail, G. Abstreiter, H. Kibel, H. Presting and E. Kasper, *Thin Solid Films*, **222** (1992) 227.
- [11] A.M. Ferendeci, *Physical Foundations of Solid State and Electron Devices*, McGraw-Hill, New York, 1991.

Thin Solid Films

Editor-in-Chief: Professor Joe Greene

An International Journal on the Science and Technology of Condensed Matter Films
Published by Elsevier Science S.A., Lausanne

Prof. S. Erkoc
Middle East Technical Univ.
Physics Department
06531 Ankara
Turkey

Re: E 2841

Oxford, 6-11-1997

Dear Prof. Erkoc,

I am pleased to inform you that your manuscript:

Optical transitions in InSe/GaSe superlattices
(Katircioglu S., S.Erkoc and K.Allahverdi).

has been accepted for publication in TSF. You will receive a proof in due course. Please let me know of any change of address for the proof and return the corrected proof as quickly as possible after receipt to the address in Ireland shown below. If you do not return the proof by the date indicated on it, it will be published as it stands.

PLEASE ADDRESS FURTHER CORRESPONDENCE ABOUT YOUR PAPER

TO: Rosemary Beacom, Elsevier Science Ireland Ltd, Bay 15K, Shannon
Industrial Estate, Shannon, Co Clare, Ireland
Tel: +353 61 471944 Fax: +353 61 472144

Yours sincerely,
EDITORIAL OFFICE



Dr Martin J. Ruck, Corresponding Editor
(on behalf of Professor J.E. Greene, Editor-in-Chief, Thin Solid Films)
Engineering and Technology, Elsevier Science Ltd., The Boulevard, Langford
Lane, Kidlington, Oxon OX5 1GB, UK Tel: +44 1865 843296 Fax: +44 1865 843920

Optical Transitions in *InSe/GaSe* Superlattices

Şenay Katırcıoğlu, Şakir Erkoç, and Kerim Allahverdi*

Department of Physics, Middle East Technical University,

06531 Ankara, Turkey

*Marmara Research Centre of TUBITAK, P.O. Box 21,

41470 Gebze, Kocaeli, Turkey

October 24, 1997

Abstract

We have performed self-consistent-field (SCF) calculations of the electronic structure of *InSe/GaSe* superlattices with square-well potential profile within the effective-mass theory. We have calculated the optical transition matrix elements involving transitions from the hole states to electron states, and we have also computed the oscillator strength matrix elements for the transitions among the electron states.

PACS No: 73.20.Dx , 78.66.Li

Keywords: Superlattices, Heterostructures, Optical properties, Gallium selenide.

Corresponding autor: Ş. Erkoç, erkoc@newton.physics.metu.edu.tr

The *InSe* and *GaSe* materials have long been of interest from their electrical and optical properties related to the anisotropy of the crystal structure [1-14]. *InSe* and *GaSe* are both semiconducting layer structure compounds that are made up of weakly interacting, essentially two dimensional sheets, each of which is four atoms thick. The sheets can be stacked in a variety of ways to give the full three-dimensional structures mainly (space group D_{3h}^1), (space group D_{6h}^1) and (space group C_{1v}^5) polytypes [3-6]. *InSe* and *GaSe* that were grown by the Brigman technique crystallize in the type ($\epsilon - InSe$, $\epsilon - GaSe$). The identification of the *InSe* and *GaSe* polytype were made by means of neutron diffraction, IR and Raman scattering spectroscopy [7-14].

In recent years, the $\epsilon - InSe/\epsilon - GaSe$ heterostructures have been investigated to understand the contributions of their separate electrical and optical properties of *InSe* and *GaSe* on modern semiconductor technology [15-19]. By developing the Van der Waals epitaxy by Koma et al. [20-22], *InSe* thin film has been grown on *GaSe* (or *GaSe* on *InSe*) free from the strain due to the lattice mismatch of two sides. $\epsilon - InSe/\epsilon - GaSe$ systems have been investigated by AES, LEELS, and XPS [15-17], and each side layers grown at elevated temperature ($\approx 300\text{ C}$) were characterized as the bulk *InSe* and bulk *GaSe* crystals inspite of the large lattice mismatch of about 7%. At low temperatures, electron motion in both bulk *InSe* and *GaSe* appear to be localized such that the motion along the *c*-axis (*z*-axis) is restricted and motion perpendicular to this axis (*x*-*y* plane) is free, while at higher temperatures the carriers are excited into states showing three dimensional behaviour. Therefore, at low temperatures, $\epsilon - InSe/\epsilon - GaSe$ heteroepitaxy (generally layered-material based heteroepitaxies) lowers the system dimensionality from three to two, without changing the symmetry. Hence the $\epsilon - InSe/\epsilon - GaSe$ system can be studied theoretically, as two dimensional *InSe/GaSe* superlattice. It is meant by two-dimensional that the charge carriers are free to move in two dimensions (*x*- and *y*-directions) [23].

In the first part of the present work we have calculated the confined states of both electrons and holes of uniformly doped $\varepsilon\text{-InSe}/\varepsilon\text{-GaSe}$ superlattice. In the second part, we have calculated the optical transition matrix elements involving transitions from the hole states to the states in the conduction band and the oscillator strength matrix elements for the transitions between the electron states.

InSe/GaSe superlattice is described by multiple potential wells of *InSe* region which are separated by *GaSe* barriers as high as the conduction (valence) band discontinuity (Fig.1). One *InSe* (well) and one *GaSe* (barrier) region form the one period of the superlattice. Therefore, one potential well and one potential barrier with the imposed periodic boundary conditions describe the whole superlattice. The initial (starting) potential profile is in square well form. Self-consistent calculations are based on the effective mass approximation (EMA). By considering a free particle (electron or hole) behaviour in the xy -plane (basal (001) plane) a one-dimensional Schrödinger equation in z -direction (i.e. the direction of optical c -axis) was solved. Such a heterostructure system (superlattice) is considered as a two-dimensional system from the free motion of charge carriers point of view; on the other hand it may be considered as a one-dimensional system from the bound and/or localized motion of charge carriers point of view. Therefore the corresponding Schrödinger equation describing the bound states of charge carriers is one-dimensional.

The values of the parameters used for the calculations are as follows: Barrier height for electrons $\Delta E_c = 400 \text{ meV}$ (estimated using values of the band gaps of *InSe*(= 1.25 eV) and *GaSe*(= 2.02 eV), and the value of the valence band discontinuity $\delta V = 0.35 \text{ eV}$, given in Ref.16); barrier height for holes $\Delta E_v = 370 \text{ meV}$ (natural valence line up); equal width of the well and barrier $d_1 = d_2 = 76.8 \text{ \AA}$ (length of two diameters of excitons in *GaSe* [24]); effective masses of electrons in the direction of z -axis $m_{1e} = 0.13m_o$, $m_{2e} = 0.28m_o$ [24]; effective masses of holes in the direction of z -axis $m_{1h} = 1.54m_o$ [12], $m_{2h} = 0.2m_o$ [14]; dielectric constants $\varepsilon_1 = 8.5$ [25], $\varepsilon_2 = 7.6$ [13]. Here indices 1 and 2 refer to *InSe* and *GaSe* respectively.

In the present calculation the periodic potential $V(z)$ contains both coulomb and exchange contributions in addition to the initial square-well potential V_o ($= \Delta E_c$ or ΔE_v), namely

$$V(z) = V_o + V_{co}(z) + V_{ex}(z) \quad (1)$$

Considering the central point difference method the periodic one-dimensional Schrödinger equation is reduced to a recursion relation [26].

$$\alpha\psi_{i-1} + (\beta - \lambda)\psi_i + \alpha^*\psi_{i+1} = 0 \quad (2)$$

where $\psi_i = \psi(k_z, z_i)$ is the periodic part of the Bloch wave in the z -direction,

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(1 - i \frac{2\pi k_z}{d} \delta \right) \quad (3)$$

$$\beta = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(2 + \frac{4\pi k_z^2}{d^2} \delta^2 \right) + \delta^2 V(z_i) \quad (4)$$

here $\lambda = \delta^2 E_n$. In these equations δ is the step-length in the motion direction. $d = d_1 + d_2$ is the width (period) of the superlattice unit cell, E_n is the band energy and k_z is the wave vector. Other quantities have conventional meanings. In our work, one-dimensional Schrödinger equation describing the *InSe/GaSe* periodic system is solved numerically. The periodic boundary conditions for ψ are taken into account in considering the matrix from the recursion relation. The exchange potential is expressed as a function of the local charge density of the form,

$$V_{ex}(z_i) = - \left(\frac{3}{\pi} \rho_i \right)^{1/3} \quad (\text{in a.u.}) \quad (5)$$

The coulomb potential is obtained from the numerical solution of Poisson equation. Solutions, namely the energies and wave functions, are obtained within a self-consistent iteration for a predetermined precision. During the self-consistent iterations 20% mixing is taken into account. Convergency was reached within 10 iterations with a precision of 10^{-4} a.u. in energy. Eq. 2 is solved self-consistently, and energy eigenvalues (E_n), Coulomb (V_{co}) and exchange (V_{ex}) potentials, and total potential, Eq. 1, are iterated for self-consistency. The result of the calculations

are shown in Fig.2, which includes the potential profiles, charge distribution and the energy levels. The wave functions for the corresponding energy levels shown in Fig.2 are plotted in Fig.3.

In the following stage, we have calculated the optical transition matrix elements [27-29]

$$T_{vi,cj} = | \langle \psi_{vi} | \bar{p} | \psi_{cj} \rangle |^2 \quad (6)$$

where ψ_{vi} and ψ_{cj} are, respectively, valence and conduction bands wave functions generated at the center of the superlattice Brillouin zone. \bar{p} is the momentum operator. The charge carriers move freely in the xy -plane, and we assume that there is no band bending along z -direction. In the absence of band bending the problem is purely one-dimensional and scalar [27]. On the other hand, if we assume that the polarization of radiation is in z -direction, then the explicit form of the optical matrix elements may be expressed as

$$T_{vi,cj} = | \langle \psi_{vi} | \frac{d\psi_{cj}}{dz} \rangle |^2 \quad (7)$$

Figure 1 shows schematically the considered transitions. Calculated optical transition matrix elements are given in Table 1 for the transitions between the states shown in Fig.2.

We have also calculated the oscillator strength matrix elements, $F_{ci,cj}$, between the states in the conduction band, which is a measure of the transition rate; it is usually expressed as [28]

$$F_{ci,cj} = \frac{T_{ci,cj}}{E_{cj} - E_{ci}} \quad (8)$$

where E_{ci} and E_{cj} are the energies of the initial and final conduction states, respectively, and $T_{ci,cj}$ is the square of the momentum matrix elements between them as defined in Eq.6. Calculated oscillator strength matrix elements for the transitions between the conduction band states are given in Table 2.

The self-consistent field calculation results for $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (electron concentration per unit volume), the potential profile, $V_c(z)$, the lowest six eigenvalues, the

Fermi level (E_f) and charge densities, $\rho(z)$ of the *InSe/GaSe* conduction band are presented in Fig.2. The potential profile, $V_r(z)$, the highest eight eigenvalues, of the *InSe/GaSe* valence band are also presented in Fig.2. Because of the repulsion of electrons occupying the confined states the original square-well potential profile modifies as a parabolic repulsive potential in the well region and an attractive potential in the barrier region for both conduction and valence bands. Recently, it was found that [18], the change in the potential profile of the conduction band was noticeable for highly doped ($n \geq 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) *InSe/GaSe* systems. In the same work, it was also found that [18], for highly doped $\epsilon - \text{InSe}/\epsilon - \text{GaSe}$ systems, the modifications in the potential barrier (that is band bending) shifts the energy levels up for electrons with respect to the energies of the low concentrated *InSe/GaSe* systems ($n \leq 10^{16}$). In the present work the calculated energy values of the confined electron states are more positive with respect to the energies of *InSe/GaSe* system with low concentration ($n=10^{16} \text{ cm}^{-3}$) [18].

The corresponding confined states are illustrated in Fig.3. The first and second columns show the lowest six Γ -like confined electron states and highest eight Γ -like confined hole states respectively. The state #5 in conduction band and the state #7 in the valence band display a different character with a large amplitude in the barrier region. Such states for electrons were identified as resonance states [26] and were found to occur above the barrier potential V_o , when band bending was neglected. With the band-bending effect, these resonance states fall down and occur in the bare barrier potential. The conduction states after #6 have free particle character.

In the following stage, we have calculated the optical transition matrix elements to determine the most probable transitions from the hole states to the electron states. Table 1 contains the relative magnitudes of the optical transition matrix elements. As seen from the table the most probable transition is from the first state of the valence band (V1) to the first state of the conduction band (C1), ($V1 \rightarrow C1$). In this calculation the next most probable transition is $V1 \rightarrow C5$.

To determine the most probable transitions among the conduction band states, the oscillator strength matrix elements were calculated and given in Table 2. As seen from the table the maximum transition rate takes place for the transition $C1 \rightarrow C2$, the next largest rate is in the transition $C5 \rightarrow C6$.

In summary, we have calculated the confined electron and hole states for uniformly doped ($n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) *InSe/GaSe* system. By calculating the oscillator strength matrix elements and optical transition matrix elements we have determined the most probable transitions among the electron states and between the hole and electron states. Since this is the first calculation on optical transitions of the *InSe/GaSe* system, we are not able to compare the present results with experimental findings and other calculations. However, this work may be useful for further experimental and theoretical studies in the *InSe/GaSe* system.

Acknowledgement

The authors (Ş.K. and Ş.E.) would like to thank TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) for partial support through the project TBAG-1439.

References

- [1] V. Capozzi, Phys. Rev. B 28, 4620(1983).
- [2] A. Segura, F. Pomer, A. Cantarero, W. Kraus, and A. Chevy, Phys. Rev. B 29, 5708(1984).
- [3] K. Schubert, E. Dorre, and M. Kluge, Z. Metallkd. 46, 216(1955).
- [4] A. Kuhn, A. Chevy, and R. Chevalier, Phys. Stat. Sol. (a) 64, 469(1975).
- [5] R.M. Hoff, J.C. Irwin, and R.M.A. Liieth, Can. J. Phys. 53, 1606(1975).
- [6] K.R. Allakhverdiev, E.Yu. Salaev, M.M. Tagyev, and S.S. Babaev, Solid State Commun. 59, 133(1986).
- [7] P.C. Leung, G. Andermann, W.G. Spitzer, and C.A. Mead, J. Phys. Chem. Solids 27, 849(1966).
- [8] R.M. Hoff, and J.C. Irwin, Phys. Rev. B 10, 3464(1974).
- [9] A. Mercier and J.P. Voitchovsky, Solid State Commun., 14, 757(1974).
- [10] E. Finkman and A. Rizzo, Solid State Commun. 15, 1841(1974).
- [11] G.B. Abdullaev, K.R. Allakhverdiev, R.Kh. Nani, E.Yu. Salaev, and M.M. Tagyev, Phys. Stat. Sol. (a) 53, 549(1979).
- [12] E.K. Rogers, R.J. Nicholas, J.C. Portal, and A. Chevy, Solid State Commun., 44, 379(1982).
- [13] J.Y. Emery, L. Brahim-Ostmane, C. Hirlimann, and A. Chevy, J. Appl. Phys. 71, 3256(1991).
- [14] G. Ottaviani, C. Canali, and F. Nava, Solid State Commun. 14, 933(1974).
- [15] C. Tatsuyama, T. Tanbo, and N. Nakayama, Appl. Surf. Sci. 41/42, 539(1989).

- [16] N. Nakayama, T. Kuramachi, T. Tanbo, H. Ueba, and C. Tatsuyama, *Surf. Sci.* **244**, 58(1991).
- [17] C. Tatsuyama, T. Kuramachi, T. Tanbo, and H. Ueba, *Appl. Surf. Sci.* **56-58**, 672(1992).
- [18] Ş. Erkoç, K. Allahverdi, and Z. Ibrahim, *Solid State Commun.* **90**, 553(1994).
- [19] R. Schwarcz, and M.A. Kanehisa, *Solid State Commun.* **92**, 689(1994).
- [20] A. Koma, K. Sunouchi, and T. Miyajima, *J. Vac. Sci. Tech. B* **3**, 724(1985).
- [21] A. Koma, and J. Yoshimura, *Surf. Sci.* **174**, 556(1986).
- [22] F.S. Ohichi, B.A. Parkinson, K. Ueno, and A. Koma, *J. Appl. Phys.* **68**, 2168(1990).
- [23] T. Ando, A.B. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437(1982).
- [24] Landolt-Bornstein, in *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Eds. K.H. Hellwege and O. Madelung, Vol. 2, Springer-Verlag, Berlin, 1983, p. 525.
- [25] V. Reidl, H. Neumann, H. Sobotta, and F. Levy, *Solid State Commun.* **34**, 229(1980).
- [26] Ş. Erkoç and S. Ciraci, *Phys. Rev. B* **34**, 4360(1986); Ş. Erkoç, *Phys. Rev. B* **36**, 3459(1987).
- [27] R. Ferreira and G. Bastard, *Rep. Prog. Phys.* **60**, 345(1997).
- [28] M. Jaros, A.W. Beavis, P.J. Hagon, R.J. Turton, A. Miloszewski, and K.B. Wong, *Thin Solid Films* **222**, 205(1992).
- [29] Ş. Erkoç and Ş. Katircioglu, *Thin Solid Films* **295**, 206(1997).

Table 1: Calculated optical transition matrix elements (in *a.u.*), $T_{vi,cj}$. Entries are formatted as $m(n) = 0.m \times 10^n$.

(<i>vi</i>)	(<i>cj</i>)	1	2	3	4	5	6
1	1	671(-1)	428(-2)	253(-2)	856(-3)	282(-1)	133(-3)
2	1	145(-1)	199(-2)	167(-2)	245(-1)	915(-2)	299(-2)
3	1	169(-1)	719(-2)	709(-3)	112(-1)	472(-3)	765(-4)
4	1	447(-2)	741(-3)	216(-2)	712(-3)	735(-2)	363(-2)
5	1	600(-2)	748(-2)	122(-1)	194(-3)	928(-3)	232(-2)
6	1	281(-2)	724(-5)	399(-2)	379(-2)	449(-3)	462(-2)
7	1	181(-2)	212(-1)	213(-1)	806(-2)	884(-4)	147(-3)
8	1	343(-3)	335(-3)	850(-2)	238(-3)	945(-3)	636(-2)

Table 2: Calculated oscillator strength matrix elements (in *a.u.*), $F_{ci,cj}$. Entries formatted as in Table 1.

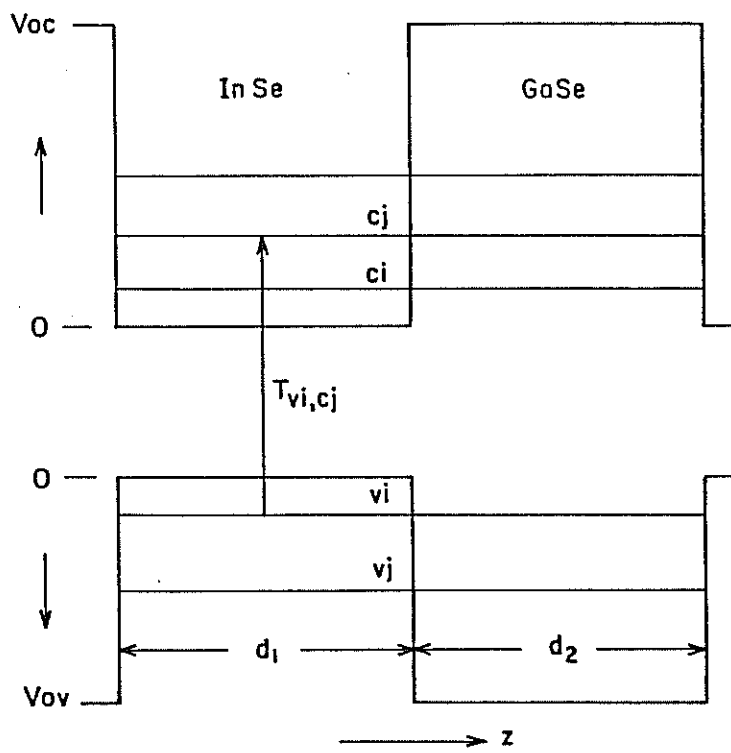
(<i>ci</i>)	(<i>cj</i>)	2	3	4	5	6
1		740(+1)	105(+1)	405(-2)	249(-3)	363(-1)
2			316(0)	123(+1)	379(-2)	136(-1)
3				718(-1)	270(-2)	114(-1)
4					438(0)	478(-1)
5						153(+1)

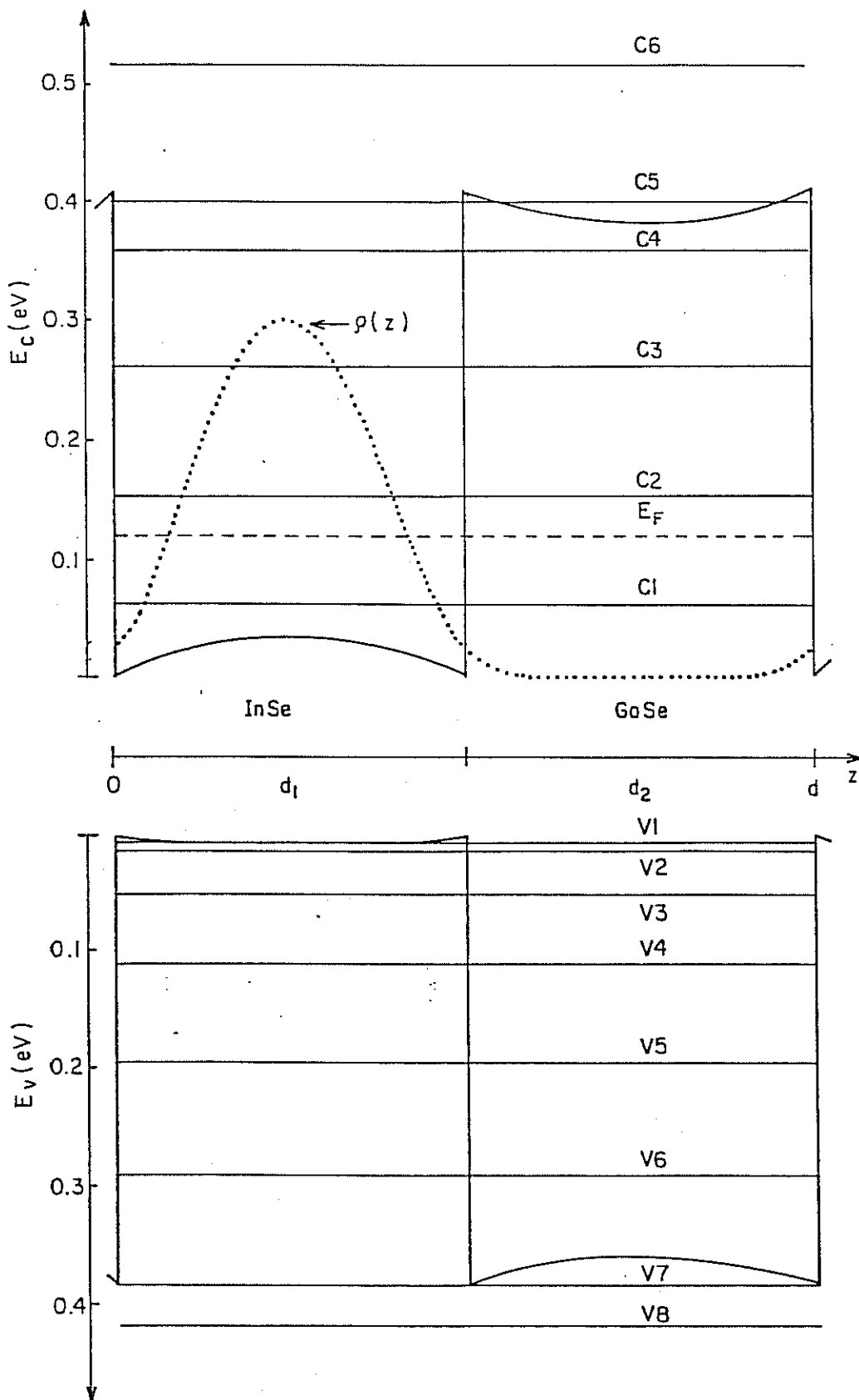
Figure Captions

Figure 1. Square-well structure of *InSe/GaSe* superlattice showing the optical transitions.

Figure 2. Calculated potential profiles (thick lines), charge density (dotted line), and electronic energy levels (thin straight lines) for the conduction (upper) and valence (lower) bands of the *InSe/GaSe* superlattice. The unit cell parameters used: the subscripts 1 and 2 in the parameters represent the well (*InSe*) and barrier (*GaSe*) regions, respectively. The width of the well and barrier, $d_1 = d_2 = 76.8 \text{ \AA}$; the barrier height (or the discontinuity) of the valence band, $V_v = 0.37 \text{ eV}$, the corresponding conduction band line-up, $V_c = 0.4 \text{ eV}$; the dielectric constants, $\epsilon_1 = 8.5$, $\epsilon_2 = 7.6$; the effective masses of electrons, $m_1^* = 0.13m_e$, $m_2^* = 0.28m_e$, the effective masses of holes, $m_1^* = 1.54m_e$, $m_2^* = 0.2m_e$; the electron concentration, $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Figure 3. Wave functions of electrons and holes which correspond to the energy levels shown in Figure 2.





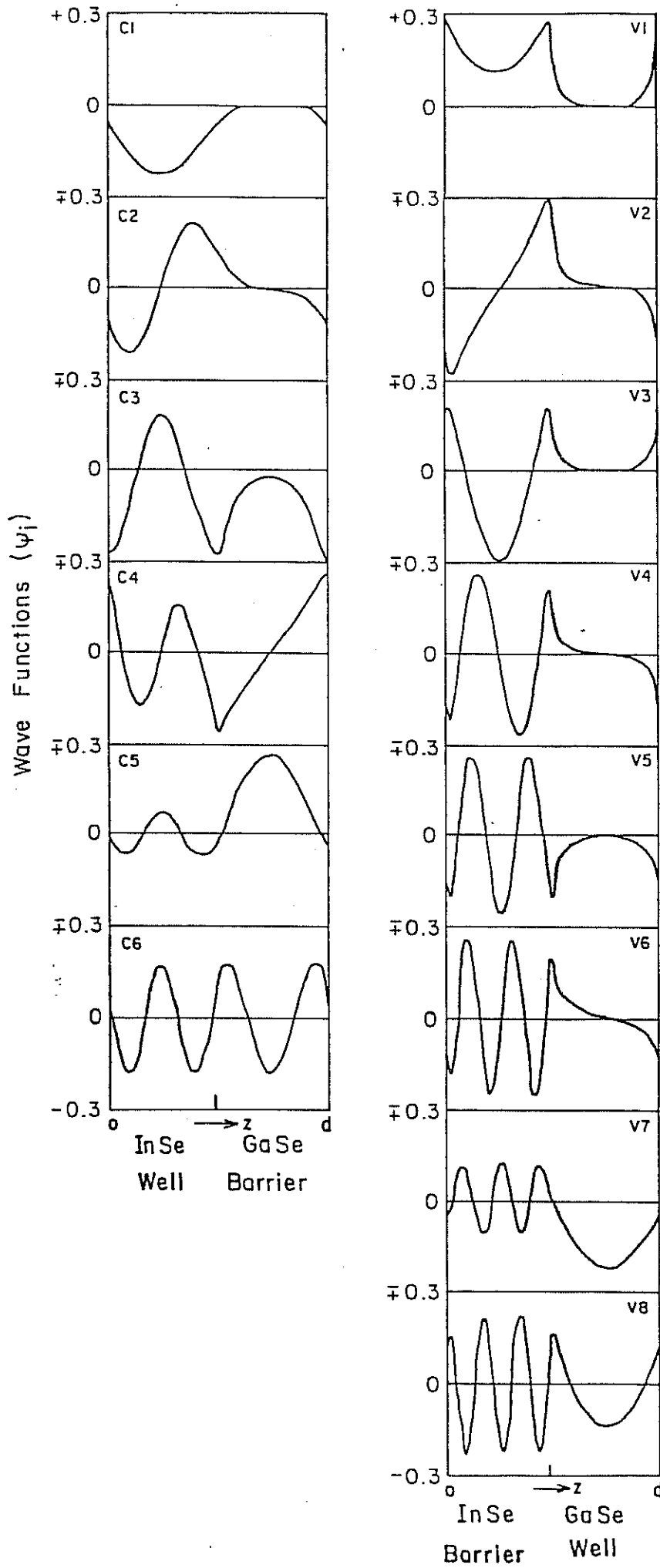


Fig. 3



ELSEVIER

Journal of Crystal Growth 000 (1998) 000–000

JOURNAL OF
CRYSTAL
GROWTH

Dependence of energy levels and optical transitions on layer thicknesses in InSe/GaSe superlattices

Şakir Erkoç*, Şenay Katırcıoğlu

Department of Physics, Middle East Technical University, 06531 Ankara, Turkey

Received 18 March 1998; accepted 21 July 1998

Abstract

We have investigated the dependence of energy levels and optical transition matrix elements in InSe/GaSe superlattices on well and/or barrier widths. Self-consistent-field calculations have been performed within the effective-mass theory approximation. © 1998 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

PACS: 73.20.Dx; 78.66.Li

Keywords: Superlattices; Heterostructures; Optical properties; Gallium selenide

Electronic states in superlattices depend on various physical parameters such as effective mass, dielectric constant, band line-up, etc., and also geometrical parameters such as well width, barrier width etc., [1]. Therefore, the electronic structure of such systems are usually investigated with respect to the parameters which are not constant and they can be changed easily [2]. This allows one to make a required system by playing and/or adjusting some of the parameters. From experimental point of view, the easiest one is the variation of the geometrical parameters. Hence, by varying the well and/or barrier widths one may obtain a required electronic properties and consequently the optical properties of a particular superlattice [3–5].

The InSe and GaSe materials have long been of interest from their electrical and optical properties [6–9], and the InSe/GaSe heterostructures have been investigated to understand the contribution of their separate electrical and optical properties of InSe and GaSe on modern semiconductor technology [10–14].

In a recent work [13] the effect of doping level and doping distribution type on the electronic structure of InSe/GaSe superlattices were investigated for a fixed well and barrier width. In this work, we have investigated the effect of geometrical parameters on the electronic energy levels and therefore on the optical transitions in InSe/GaSe superlattices. By varying the well width and the barrier width we have calculated the electronic energies and wave functions using the effective-mass-theory (EMT) approximation self-consistently both

* Corresponding author. E-mail: erkoc@newton.physics.metu.edu.tr.

for conduction and valence states. Transition probability matrix elements have been calculated for the transitions taking place between the states in valence and conduction bands.

In the first part of this work, we have calculated the confined states of both electrons and holes of uniformly doped InSe/GaSe superlattice. In the second part, we have calculated the optical transition matrix elements involving transitions from the hole states to the states in the conduction band. The considered transitions are shown schematically in Fig. 1.

Since the undoped superlattices have no practical importance [3], we have investigated the effect of geometrical parameters on the electronic structures on doped InSe/GaSe superlattices. Consequently, we have chosen the commonly used uniformly doped InSe/GaSe superlattice.

InSe/GaSe superlattice is described by multiple potential wells of InSe region which are separated by GaSe barriers as high as the conduction (valence) band discontinuity (Fig. 1). One InSe (well) and one GaSe (barrier) region form the one period of the superlattice. Therefore, one potential well and one potential barrier with the imposed periodic

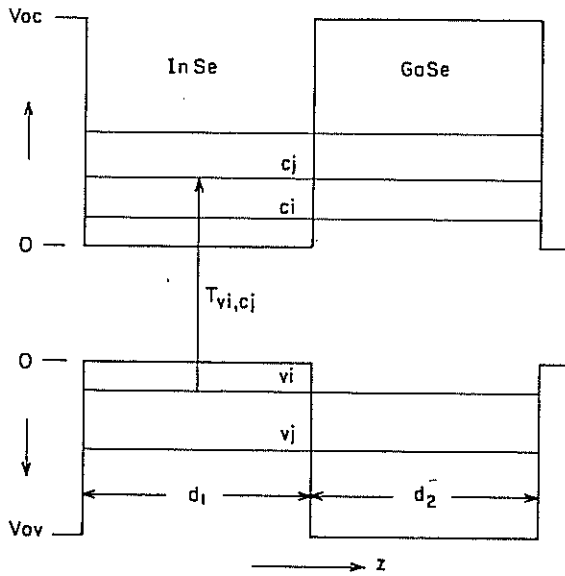


Fig. 1. Square-well structure of InSe/GaSe superlattice showing schematically the energy levels and the optical transitions considered.

boundary conditions describe the whole superlattice. The initial (starting) potential profile is in square well form. Self-consistent calculations are based on the effective-mass approximation (EMA). By considering a free particle (electron or hole) behaviour in the xy -plane (basal (001) plane), a one-dimensional Schrödinger equation in z -direction (i.e. the direction of optical c -axis) was solved. Such a heterostructure system (superlattice) is considered as a two-dimensional system from the free motion of charge carriers point of view; on the other hand, it may be considered as a one-dimensional system from the bound and/or localized motion of charge carriers point of view. Therefore, the corresponding Schrödinger equation describing the bound states of charge carriers is one-dimensional.

The details of the calculations and the properties of the material studied for a particular well width and barrier width are given in our recent works [13,15]. The numerical values of the parameters used in the present calculations are as follows: the conduction band line-up, $V_c = 0.4$ eV, the barrier height of the valence band, $V_v = 0.37$ eV; the dielectric constant ϵ of InSe and GaSe is 8.5 and 7.6, respectively; the effective mass of electrons in InSe, $m_e^* = 0.13m_e$, the effective mass of electrons in GaSe, $m_e^* = 0.28m_e$; the effective mass of holes in InSe, $m_h^* = 1.54m_e$, and the effective mass of holes in GaSe, $m_h^* = 0.2m_e$.

In the present calculation, the periodic potential $V(z)$ contains both coulomb and exchange contributions in addition to the initial square-well potential $V_0 (= \Delta E_c$ or ΔE_v), namely

$$V(z) = V_0 + V_{co}(z) + V_{ex}(z). \quad (1)$$

Considering the central point difference method the periodic one-dimensional Schrödinger equation is reduced to a recursion relation [16,19].

$$\alpha\psi_{i-1} + (\beta - \lambda)\psi_i + \alpha^*\psi_{i+1} = 0, \quad (2)$$

where $\psi_i = \psi(k_z, z_i)$ is the periodic part of the Bloch wave in the z -direction,

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(1 - i \frac{2\pi k_z}{d} \delta \right), \quad (3)$$

$$\beta = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(2 + \frac{4\pi k_z^2}{d^2} \delta^2 \right) + \delta^2 V(z_i); \quad (4)$$

here $\lambda = \delta^2 E_n$. In these equations, δ is the step-length in the motion direction, $d = d_1 + d_2$ is the width (period) of the superlattice unit cell, E_n is the band energy and k_z is the wave vector. Other quantities have conventional meanings. In our work, one-dimensional Schrödinger equation describing the InSe/GaSe periodic system is solved numerically. The periodic boundary conditions for ψ are taken into account in considering the matrix from the recursion relation. The exchange potential is expressed as a function of the local charge density of the form

$$V_{\text{ex}}(z_i) = - \left(\frac{3}{\pi} \rho_i \right)^{1/3} \quad (\text{in a.u.}) \quad (5)$$

The coulomb potential is obtained from the numerical solution of Poisson equation. Solutions, namely the energies and wave functions, are obtained within a self-consistent iteration for a pre-

determined precision. During the self-consistent iterations, 20% mixing is taken into account. Convergency was reached within 10 iterations with a precision of 10^{-4} a.u. in energy. Eq. (2) is solved self-consistently, and energy eigenvalues (E_n), Coulomb (V_{co}) and exchange (V_{ex}) potentials, and total potential, Eq. (1), are iterated for self-consistency.

Calculations are carried out for various widths d_1 and d_2 ; here indices 1 and 2 refer to InSe and GaSe, respectively. The lowest five electronic energy levels in the conduction band and the highest three hole energy levels in the valance band are plotted as a function of width in Fig. 2.

In the following stage, we have calculated the optical transition matrix elements [15,17]

$$T_{vi,cj} = |\langle \psi_{vi} | p | \psi_{cj} \rangle|^2 \quad (6)$$

where ψ_{vi} and ψ_{cj} are, respectively, valence and conduction band wave functions generated at the

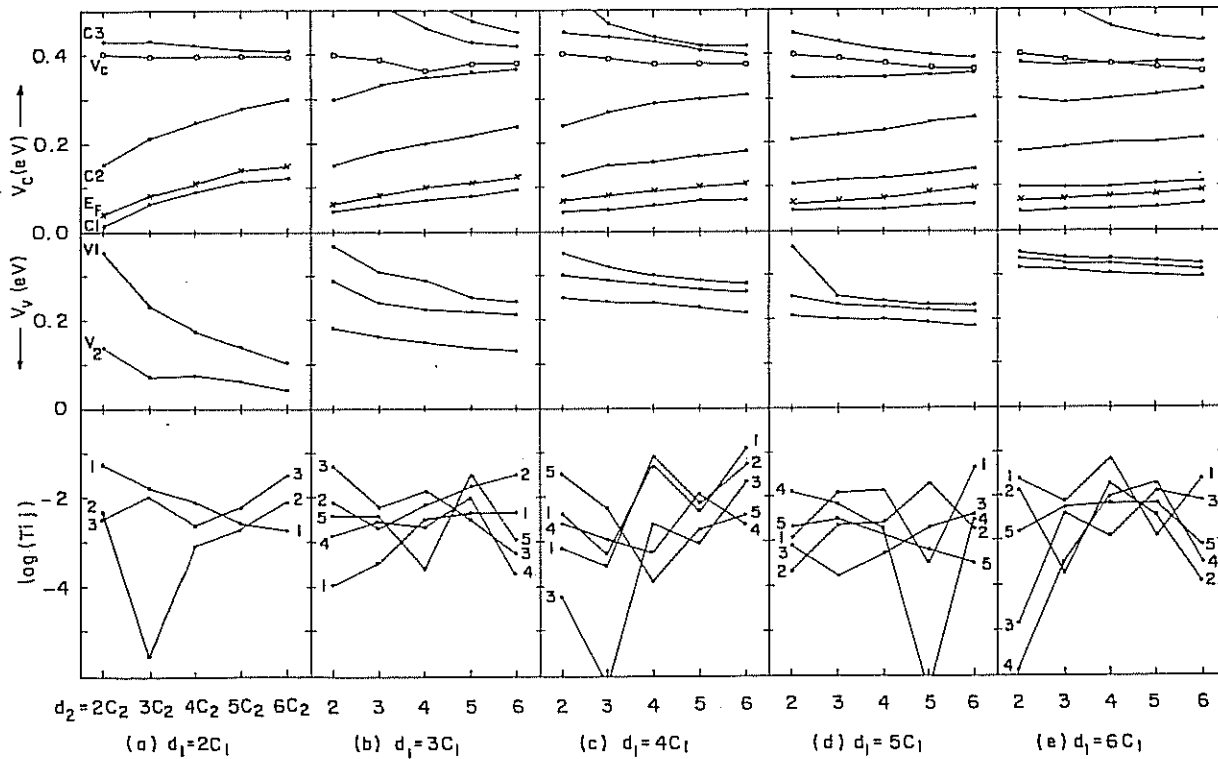


Fig. 2. Variation of energy levels (upper panel for conduction, middle panel for valence) and optical transition matrix elements ($V1 \rightarrow Cj$) (lower panel) with respect to width of the barrier $d_2 = 2c_2, 3c_2, 4c_2, 5c_2, 6c_2$; $c_2 = 15.94 \text{ \AA}$. The well widths d_1 are (a) $2c_1$, (b) $3c_1$, (c) $4c_1$, (d) $5c_1$, (e) $6c_1$; $c_1 = 16.70 \text{ \AA}$.

center of the superlattice Brillouin zone, and p is the momentum operator. The charge carriers move freely in the xy -plane, and we assume that there is no band bending along the z -direction. In the absence of band bending, the problem is purely one-dimensional and scalar [18]. On the other hand, if we assume that the polarization of radiation is in the z -direction, then the explicit form of the optical matrix elements may be expressed as

$$T_{vi,ej} = |\langle \psi_{vi} | d\psi_{ej} / dz \rangle|^2. \quad (7)$$

Fig. 1 shows schematically the considered transitions. Variation of the calculated optical transition matrix elements versus width are also shown in Fig. 2.

The self-consistent field calculation results for uniformly doped InSe/GaSe superlattice with $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (electron concentration per unit volume) are shown in Fig. 2. In these figures, the calculated energy levels and transition matrix elements are displayed as a function of supercell width.

In the calculations we have considered the following well widths (d_1) and barrier widths (d_2): $d_i = 2c_i, 3c_i, 4c_i, 5c_i, 6c_i, i = 1, 2$; here the parameters c_i correspond to the interlayer separations of InSe and GaSe crystals, respectively, along the z -axis. The numerical values are $c_1 = 16.70 \text{ \AA}$ and $c_2 = 15.94 \text{ \AA}$ [13].

Each panel in Fig. 2 displays the variation of the first five conduction and the first three valence energy levels for given d_1 . In these figures, the variable quantity is d_2 . Each panel in Fig. 2 also displays the variation of optical transition matrix elements for the transitions ($V1 \rightarrow Cj$). Transitions from the highest valence state (V_1) to the first five conduction states ($C_j, j = 1-5$) are considered. Fermi level (E_F) and the minimum of the potential barrier (V_c) in conduction are also shown on Fig. 2.

In the case of smallest well width ($d_1 = 2c_1 = 33.40 \text{ \AA}$), Fig. 2a, as the barrier width increases the conduction levels go up gradually as expected. Similar variation in valence levels are faster than the conduction levels. Transition probability is higher for the transition $V1 \rightarrow C1$ for d_2 value upto $4c_2$, then the transition $V1 \rightarrow C3$ becomes most probable for larger d_2 values. This is due to the resonance character of level $C3$, which

lies just above the barrier [16,19] for the barrier width larger than $4c_2$. In the case with $d_1 = 3c_1$ (Fig. 2b) although the transition probability is the highest for the transition $V1 \rightarrow C3$ when $d_2 < 4c_2$ but when $d_2 = 4c_2$, the transition probability from the highest hole state to the other resonance state ($C5$) is higher than the others. In the other case, with $d_1 = 4c_1$ (Fig. 2c), the transition probability from $V1 \rightarrow C5$ is the highest when $d_2 < 3c_2$, but then the transition from $V1 \rightarrow C1$ is dominant. As it is observed from the panels (Fig. 2c–Fig. 2e), the transition probability for $V1 \rightarrow C1$ is the highest for InSe/GaSe superlattices when the well width $d_1 > 4c_1$ and the barrier width $d_2 = 6c_2$. Furthermore, it seems that the most probable transitions do not show a systematic dependence on widths.

Another interesting feature of the energy levels is that as the widths (both well and barrier) increase, the levels below the barrier height vary slowly.

In summary, we have calculated the confined electron and hole states for uniformly doped ($n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) InSe/GaSe system. By calculating the optical transition matrix elements we have determined the most probable transitions between the hole and electron states ($V1 \rightarrow Cj$). We are not able to compare the present results with experimental findings and other calculations. However, this work may be useful for further experimental and theoretical studies in the InSe/GaSe system.

Acknowledgements

The authors would like to thank TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) for partial support through the project TBAG-1439.

References

- [1] F. Henneberger, S. Schmitt-Rink, E.O. Göbel (Eds.), *Optics of Semiconductor Nanostructures*, Akademie Verlag GmbH, Berlin, 1993.
- [2] H.T. Grahn (Ed.), *Semiconductor Superlattices: Growth and Electronic Properties*, World Scientific, Singapore, 1995.
- [3] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Halsted Press, New York, 1988.

- [4] C. Weisbuch, B. Vinter, *Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals and Applications*, Academic Press, New York, 1991.
- [5] H.G. Grimmeiss (Ed.), *Heterostructures of Semiconductors*, *Physica Scripta* vol. T68, 1996.
- [6] E. Finkman, A. Rizzo, *Solid State Commun.* 15 (1974) 1841.
- [7] G.B. Abdullaev, K.R. Allakhverdiev, R.Kh. Nani, E.Yu. Salaev, M.M. Tagyev, *Phys. Stat. Sol. (a)* 53 (1979) 549.
- [8] E.K. Rogers, R.J. Nicholas, J.C. Portal, A. Chevy, *Solid State Commun.* 44 (1982) 379.
- [9] J.Y. Emery, L. Brahim-Ostmane, C. Hirlimann, A. Chevy, *J. Appl. Phys.* 71 (1991) 3256.
- [10] C. Tatsuyama, T. Tanbo, N. Nakayama, *Appl. Surf. Sci.* 41/42 (1989) 539.
- [11] N. Nakayama, T. Kuramachi, T. Tanbo, H. Ueba, C. Tatsuyama, *Surf. Sci.* 244 (1991) 58.
- [12] C. Tatsuyama, T. Kuramachi, T. Tanbo, H. Ueba, *Appl. Surf. Sci.* 56–58 (1992) 672.
- [13] Ş. Erkoç, K. Allahverdi, Z. Ibrahim, *Solid State Commun.* 90 (1994) 553.
- [14] R. Schwarcz, M.A. Kanehisa, *Solid State Commun.* 92 (1994) 689.
- [15] Ş. Katircioğlu, Ş. Erkoç, K. Allahverdi, *Thin Solid Films*, in press.
- [16] Ş. Erkoç, S. Ciraci, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 4360.
- [17] Ş. Erkoç, Ş. Katircioğlu, *Thin Solid Films* 295 (1997) 206.
- [18] R. Ferreira, G. Bastard, *Rep. Prog. Phys.* 60 (1997) 345.
- [19] Ş. Erkoç, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 3459.

BİBLİYOGRAFİK BİLGİ FORMU	
1- Proje No: TBAG-1439	2- Rapor Tarihi: 29/12/1997
3- Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 1/3/1996 - 28/2/1998 (29/12/1997)	
4- Projenin Adı: Çok katmanlı yarı-iletken kristallerinin elektronik yapılarının incelenmesi	
5- Proje Yürütücüsü ve Yardımcı Araştırmacılar: Doç.Dr. Şenay Katırcıoğlu Prof.Dr. Şakir Erkoç	
6- Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi: Fizik Bölümü, ODTÜ, Ankara	
7- Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi: TÜBİTAK ODTÜ	
8- Öz (Abstract): <p style="text-align: center;">ÖZET:</p> <p>Etkin-kütle-teorisi yaklaştırması kullanılarak kendisiyle-çelişmeyen-alan yöntemine göre yapılan hesaplarda (Si/Ge) ve (InSe/GaSe) çok-katmanlı yarı-iletken malzemelerin elektronik enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları hesaplanmıştır. Bu değerler kullanılarak bu malzemelerin değerlik bandı ile iletkenlik bandında yer alan enerji seviyeleri arasındaki optik geçiş ihtimallerinin matris elemanları ile iletkenlik bandındaki enerji seviyeleri arasındaki geçişlerin enerji aralığına göre değişimlerinin matris elemanları hesaplanmıştır. Ayrıca (InSe/GaSe) malzemesinde elektronik enerji seviyeleri ile optik geçiş ihtimallerinin matris elemanları malzemenin katman sayılarına göre değişimleri incelenmiştir.</p>	
Anahtar Kelimeler: çok-katmanlı yarı-iletken, etkin-kütle teorisi, optik geçişler	
9- Proje ile ilgili Yayın/Tebliğlerle ilgili Bilgiler Makaleler sonuç raporunun ekindedir.	
10- Bilim Dalı: Doçentlik B. Dalı Kodu: 404.05.01 Uzmanlık Alanı Kodu: ISIC Kodu:	
11- Dağıtım (*): <input type="checkbox"/> Sınırlı <input checked="" type="checkbox"/> Sınırsız	
12- Raporun Gizlilik Durumu : <input type="checkbox"/> Gizli <input checked="" type="checkbox"/> Gizli Değil	

(*) Projenizin Sonuç Raporunun ulaştırılmasını istediğinizi kurum ve kuruluşları ayrıca belirtiniz

BİBLİYOGRAFİK BİLGİ FORMU	
1- Proje No: TBAG-1439	2- Rapor Tarihi: 29/12/1997
3- Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 1/3/1996 - 28/2/1998 (29/12/1997)	
4- Projenin Adı: Investigation of the Electronic Structure of Semiconductor Superlattices.	
5- Proje Yürütücüsü ve Yardımcı Araştırmacılar: Doç.Dr. Şenay Katırcıoğlu Prof.Dr. Şakir Erkoç	
6- Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi: Physics Dept.,METU, Ankara	
7- Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi: TÜBİTAK ODTÜ	
8- Öz (Abstract): Abstract <p>The electronic structure of <i>Si/Ge</i> and <i>InSe/GaSe</i> superlattices have been investigated. Self-consistent-field calculations have been performed using the effective-mass-theory approximation. The optical transition matrix elements involving transitions from the hole states in the valence band to the electron states in the conduction band have been calculated. The oscillator strength matrix elements for the transitions between the states in the conduction band have been also calculated. The dependence of energy levels and optical transition matrix elements in the <i>InSe/GaSe</i> superlattices on well and/or barrier widths have been investigated.</p> Anahtar Kelimeler: Semiconductor superlattices, effective -mass theory, optical transitions.	
9- Proje ile ilgili Yayın/Tebliğlerle ilgili Bilgiler Three published papers are added into the resultant report.	
10- Bilim Dalı: Doçentlik B. Dalı Kodu: 404.05.01 ISIC Kodu: Uzmanlık Alanı Kodu:	
11- Dağıtım (*): <input type="checkbox"/> Sınırlı <input checked="" type="checkbox"/> Sınırsız	
12- Raporun Gizlilik Durumu: <input type="checkbox"/> Gizli <input checked="" type="checkbox"/> Gizli Değil	

*) Projenizin Sonuç Raporunun ulaştırılmasını istediğiniz kurum ve kuruluşları ayrıca belirtiniz