

AIN Yarıiletken Bileşiminin İletim Özelliklerinin Monte Carlo Yöntemi İle İncelenmesi

Nilgün Erol

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

Fizik Anabilim Dalı

Ağustos, 2011

Monte Carlo Study of Electron Transport Properties of AlN Compound Semiconductor

Nilgün Erol

**MASTER OF SCIENCE THESIS**

Department of Physics

August, 2011

AIN Yarıiletken Bileşiminin İletim Özelliklerinin Monte Carlo Yöntemi İle İncelenmesi

Nilgün Erol

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Lisansüstü Yönetmeliği Uyarınca  
Fizik Anabilim Dalı  
Katıhal Fiziği Bilim Dalında  
YÜKSEK LİSANS TEZİ  
Olarak Hazırlanmıştır

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Ömer Özbaş

Ağustos, 2011

## ONAY

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi Nilgün EROL'un YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı "AIN Yarıiletken Bileşiğinin İletim Özelliklerinin Monte Carlo Yöntemi İle İncelenmesi" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğın ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

**Danışman** : Yrd. Doç. Dr. Ömer ÖZBAŞ

**İkinci Danışman** : -

**Yüksek Lisans Tez Savunma Jürisi:**

**Üye:** Yrd. Doç. Dr. Ömer ÖZBAŞ

**Üye:** Yrd. Doç. Dr. Şadan KORKMAZ

**Üye:** Yrd. Doç. Dr. Huriye Senem AYDOĞU

**Üye:** Yrd. Doç. Dr. Suat PAT

**Üye:** Yrd. Doç. Dr. Mustafa Zafer BALBAĞ

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun ..... tarih ve ..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Nimetullah BURNAK

Enstitü Müdürü

## ÖZET

Monte Carlo yöntemi, materyal modellemesine uygulanabilen ve deneysel olarak doğrudan gözlenemeyecek fiziksel süreçlerin incelenmesinde kullanılan bir simülasyon tekniğidir.

Alüminyum nitrit (AlN) materyali, geniş bant aralıklı, III-V grubu yarıiletkenidir. Bu materyal yüksek ısı iletkenliğe sahiptir, son derece sert, çok kuvvetli piezoelektrik özelliktedir ve yüksek sıcaklıklarda sıra dışı bir direnç ortaya koyar. Bu özellikleriyle yarıiletken uygulamaları için çok ilgi çekicidir.

Bu çalışmada AlN yarıiletkeninin taşınım özellikleri incelendi. AlN yarıiletken materyali 6,2 eV'luk geniş bant aralığı nedeniyle deneysel olarak incelemesi zor bir materyaldir. Monte Carlo simülasyon yöntemi bu amaçla kullanıldı. Elektrik alanın bir fonksiyonu olarak elektronun sürüklenme hızı, ortalama elektron enerjisi, ortalama serbest zaman, mobilite;  $\Gamma$  ve L vadi saçılmaları dikkate alınarak incelendi. Simülasyonda; akustik fonon, polar optik fonon, iyonize safsızlık, dislokasyon, vadilerarası saçılmaları dikkate alındı.

Bulunan sonuçlar, literatürdeki diğer çalışmalarla karşılaştırıldı.

Anahtar Kelimeler: Monte Carlo yöntemi, alüminyum nitrit, kristal yapı, saçılma mekanizmaları

## SUMMARY

Monte Carlo method is simulation technique which can be applied in material modelling and can be used in physical process that will not be observed directly experimental.

Aluminum nitride (AlN) is a wide band gap III-V semiconductor with a high thermal conductivity, an extreme hardness, very strong piezoelectric properties and an extraordinary resistance to high temperatures. This material is interesting with these properties for semiconductor device applications.

In this study, transport properties of AlN semiconductor compound was investigated. The investigating AlN material is difficult because of 6,2 eV wide band gap.

Monte Carlo simulation method was used for this purpose. As a function of electric field, drift velocity, mean electron energy, mean free time, mobility was investigated account  $\Gamma$  and L valley. In simulation, acoustic phonon, polar optic phonon, ionized impurity, dislocation, intervalley scattering mechanisms were taken into consideration.

The results obtained were compared with other results in literature.

**Key Words:** Monte Carlo method, aluminium nitrite, crystal structure, scattering mechanisms.

## TEŞEKKÜR

Yüksek lisans tezi hazırlama çalışmalarım boyunca değerli zamanımı ayıran ve yardımlarda bulunan, manevi desteği ve tükenmeyen sabrı ile her zaman yanımda olan kıymetli hocam Yrd. Doç. Dr. Ömer ÖZBAŞ'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Çalıştığı programı paylaşan, grafik çizimlerini öğreten, kendi bilgilerini her fırsatta bana aktaran ve yardımlarını gördüğüm değerli hocam Arş. Gör. Dr. Mustafa AKARSU'ya teşekkür ederim.

Çeviri çalışmalarına yardım eden ve arkadaşlığı ile yanımda olan değerli hocam Arş. Gör. Seniye KARAKAYA'ya teşekkür ederim.

Tanıştığım andan itibaren; bana maddi manevi yardımlarda bulunan ; her zor anımda yanımda olan canım arkadaşlarım Derya AYIN'a, Gözde SÜRMEİ'ye, Yılmaz GÜNEY'e, Güneş SEVGİ'ye ve Gönül SEYRAN'a yürekten teşekkür ederim.

Hayatım boyunca her zaman yanımda olan, aldığım her kararda beni destekleyen; sonsuz sevgilerini ve dualarını benden hiç eksik etmeyen; canım annem Menduha EROL'a, canım babam Salih EROL'a, her şeyim biricik kardeşim Mustafa EROL'a ve canım anneannem Şemsi UYKUN'a sonsuz teşekkürler...

## İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
<b>ÖZET .....</b>	<b>V</b>
<b>SUMMARY.....</b>	<b>VI</b>
<b>TEŞEKKÜR.....</b>	<b>VII</b>
<b>ŞEKİLLER.....</b>	<b>XI</b>
<b>ÇİZELGELER .....</b>	<b>XIII</b>
<b>SİMGELER VE KISALTMALAR.....</b>	<b>XIV</b>
<b>1.GİRİŞ.. .....</b>	<b>1</b>
<b>2.KRİSTAL YAPI.....</b>	<b>3</b>
2.1 Örgü Yapıları.....	4
2.1.1 İki Boyutta Örgü Çeşitleri .....	4
2.1.2 Üç Boyutlu Örgü Çeşitleri.....	6
2.1.3 Zincblende Yapı.....	10
2.1.4 Wurtzite Yapı.....	10
2.2 Bragg Yasası.....	11
2.3 Wigner-Seitz Primitif Hücresi.....	12
2.4 Ters Örgü, Miller İndisleri ve Brillouin Bölgesi.....	13



## İÇİNDEKİLER ( devam )

### Sayfa

<b>3.YARIİLETKEN BANT YAPISI.....</b>	<b>17</b>
3.1 Atomik Seviyeden Bantlara .....	17
3.2 Bant Aralığı.....	17
3.2.1 Direkt Bant aralıklı Yarıiletkenler.....	17
3.2.2 İndirekt Bant Aralıklı Yarıiletkenler.....	18
3.3 Geniş Enerji Aralıklı Yarıiletkenler .....	19
3.3.1 III-V Grubu Yarıiletken Bileşikler.....	20
3.4 Etkin kütle.....	21
3.5 Yarıiletkenlerde Hız-Elektrik Alan İlişkisi.....	23
3.5.1 Düşük elektrik alan, mobilite.....	24
3.5.2 Yüksek Alan İletimi.....	26
3.6 Boltzmann Taşınım Denklemi.....	26
<b>4. MONTE CARLO YÖNTEMİ .....</b>	<b>28</b>
4.1 Tek Parçacık Monte Carlo Simülasyonu.....	28
4.2 Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu.....	29
4.3 Taşıyıcı Taşınımının Monte Carlo Simülasyonu.....	30
4.4 Serbest Uçuş.....	31
4.5 Saçılma Süresi.....	32
<b>5.YARIİLETKENLERDE SAÇILMA.....</b>	<b>34</b>
5.1 Yarıiletkenlerde Saçılma Mekanizmaları.....	35
5.1.1 İyonize Safsızlık Saçılması.....	36
5.1.2 Polar Optik Fonon Saçılması.....	37
5.1.3 Akustik Fonon Saçılımı.....	39
5.1.4 Vadiler Arası Saçılma.....	40

**İÇİNDEKİLER (devam )**

	<b><u>Sayfa</u></b>
5.1.5 Piezoelektrik Saçılması.....	40
5.1.6 Dislokasyon Saçılması.....	41
<b>6. AIN YARIİLETKEN MATERYALİNİN ÖZELLİKLERİ.....</b>	<b>42</b>
6.1 Nitritlerin Kristal Yapıları.....	42
6.2 AIN Yarıiletkeni.....	42
<b>7. AIN YARIİLETKENİNİN TAŞINIM ÖZELLİKLERİNİN MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE BELİRLENMESİ.....</b>	<b>45</b>
<b>8. SONUÇ VE TARTIŞMA .....</b>	<b>53</b>
<b>EK AÇIKLAMALAR.....</b>	<b>55</b>
Deneyde kullanılan materyal parametreleri .....	55
<b>KAYNAKLAR.....</b>	<b>56</b>

## ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1 İki boyutta beş Bravais örgü türü .....	5
2.2 Üç boyutlu bir örgünün ilkel hücresi .....	6
2.3 Düzlemlerin kristal eksenini kestiği noktalar.....	6
2.4 Üç boyutta 14 Bravais örgü türü.....	9
2.5 Zincblende yapıda birim hücre ( A; Zn; B;S).....	10
2.6 Wurtzite yapıda birim hücre .....	11
2.7 Işığın kristalde kırınımı .....	11
2.8 Wigner Seitz Primitif hücresi.....	12
2.9 Bragg saçılması.....	14
2.10 Brillouin bölgesi sınırında Bragg kırınımı.....	15
2.11 fcc örgüsünün ters uzaydaki örgüsü.....	16
3.1 Yarıiletkenlerde direkt (doğrudan) geçiş.....	18
3.2 Yarıiletkenlerde indirekt (dolaylı) geçiş.....	19
3.3 AlN materyelinin Işık spektrumundaki yeri.....	20
3.4 Etkin kütle.....	21
3.5 $\epsilon \sim k$ grafiğinde etkin kütle davranışı.....	22
4.1 Tek parçacık Monte Carlo simülasyonu için akış şeması.....	28
4.2 Monte Carlo yönteminin fiziksel sürecinin gelişimi.....	31
6.1 AlN yarıiletken materyalinde bant geçişleri.....	43
6.2 AlN'ın elektronik bant yapısı grafiği.....	44
7.1 AlN yarıiletken bileşiğinin sürüklenme hızının uygulanan elektrik alanla dislokasyon yoğunluğu 0 ve $1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ değerleri için değişimi.....	45
7.2. AlN yarıiletken bileşiğinin uygulanan elektrik alana göre enerji değişimi.....	46

**ŞEKİLLER DİZİNİ (devam )**

<b><u>Sekil</u></b>	<b><u>Sayfa</u></b>
7.3 AIN yarıiletken bileşiği için uygulanan elektrik alanla $\Gamma$ vadisinde gerçekleşen saçılmalar.....	50
7.4 Simülasyon boyunca $\Gamma$ ve L vadisinde gerçekleşen saçılma yüzdeleri.....	51
7.5 Simülasyon boyunca L vadisinde gerçekleşen saçılma yüzde.....	52
7.6 Ortalama serbest zamanın elektrik alan ile değişimi.....	53
7.7 Simülasyon boyunca gerçekleşen $\Gamma$ ve L vadi saçılmalarının elektrik alan değişimi.....	54
7.8 Elektron sürüklenme mobilitesinin sıcaklık ile değişimi.....	55

**ÇİZELGELER DİZİNİ**

<b><u>Çizelge</u></b>	<b><u>Sayfa</u></b>
Çizelge 2.1 İki boyutta beş Bravais örgü türü.....	6
Çizelge 2.2 Üç boyutta 14 Bravais örgü türü.....	10
Çizelge 7.1 Deneyde kullanılan materyal parametreleri .....	55

## SİMGELER VE KISALTMALAR

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklama</u>
$\lambda$	Işığın dalga boyu
$d$	Düzlemler arası uzaklık
$T$	Örgü öteleme vektörü
$G$	Ters örgü öteleme vektörü
$k$	Gelen dalganın dalga vektörü
$k'$	Saçılan dalganın dalga vektörü
$J$	Akım yoğunluğu
$F_{dış}$	Dış kuvvet
$E$	Elektrik alan
$e$	Elektron yükü
$\tau_{sac}$	Toplam saçılma süresi
$\tau_{top}$	Toplam saçılma hızı
$\varepsilon$	Enerji
$\sigma$	İletkenlik
$\mu$	Mobilite
$T$	Sıcaklık
$P(\tau)$	Elektronun birim zamanda saçılma olasılığı
$W_T(E_{\vec{k}})$	Toplam saçılma hızı
$\hbar k$	Elektronların etkin kristal momentumu

## SİMGELER VE KISALTMALAR (devam)

<u>Simgeler</u>	<u>Acıklama</u>
$N_A$	Akseptör yoğunluğu
$N_D$	Donör yoğunluğu
$W(k, k')$	İyonize safsızlık saçılma oranı
$\epsilon_\infty$	Yüksek frekans dielektrik sabiti
$\epsilon_s$	Statik dielektrik sabiti
$\mu_k$	Kimyasal potansiyel
$v$	Sürüklenme hızı
$m^*$	Etkin kütle
$\alpha$	Nonparaboliklik parametresi
$\hbar$	Planck sabiti
$n$	Taşıyıcı yoğunluğu
$R_{tot}$	$m$ kez saçılma olayından sonra bütün saçılma hızlarının toplamı
$D$	Deformasyon potansiyeli
$\rho$	Kütle yoğunluğu
$ M_{K,K'} $	Geçişler için matris elemanı
$n(w_0)$	Fononlar için yerleşme olasılığı
$w_0$	Fonon frekansı
$Z_e$	Eşdeğer vadilerin sayısı
$\lambda_p$	Perdeleme uzunluğunun tersi

**SİMGELER VE KISALTMALAR (devam)**

<b><u>Simgeler</u></b>	<b><u>Açıklama</u></b>
$R_n$	(0-1) arasında rastgele sayı
RF	Radyo frekansı
$N_d$	Dislokasyon yoğunluğu
AlN	Alüminyum nitrit
GaAs	Galyum arsenik
GaSb	Galyum antimon
InAs	İndiyum arsenik
InP	İndiyum fosfor
CdS	Kadmiyum sülfür
Si	Silisyum
Ge	Germanyum
AlAs	Alüminyum arsenik
AlSb	Alüminyum antimon
GaP	Galyum fosfor
GaN	Galyum nitrit



## 1.GİRİŞ

Monte Carlo yöntemi, bir simülasyon çalışmasında, olasılık dağılımından rastgele sayılar seçme tekniğidir. Bu tekniğin tarihi, bilgisayardan daha eskidir. Monte Carlo ismi, ilk defa Nicolas Metropolis tarafından 1949'da Monaco'nun başkenti olan Monte Carlo'nun bir kumar merkezi olmasından esinlenilmiş ve şans oyunlarının istatistiksel simülasyon ile benzerlik göstermesinden dolayı bu isim konmuştur. Monte Carlo yöntemi, başlangıçta integral problemlerinin çözümünde kullanıldı. Bazı araştırmacılar yıllar sonra  $\pi$  sayısının yaklaşık değerini hesaplamak için bu tekniği kullandılar. Bunlardan en ünlüsü Mario Lazzarini, 1901 yılında 3408 defa tekrarlayarak  $\pi$  sayısı için 3,1415929 değerini hesapladı.

19. yüzyılda mekanik hesaplama makinelerinin kullanılmasıyla, nümerik yöntemler de hızla gelişmeye başladı. Bu makineler çok büyük rakamları kullanarak sayısal "deneyler" oluşturabildi. 1901 yılında ise, yöntem W. Thomson tarafından bir gazdaki moleküllerin çarpışması ve hareketinin incelenmesi için kullanıldı. 1916'da Fransız matematikçi Henri Soudee, gazların hidrodinamik özelliklerini hesapladı (Newman and Barkema, 1999).

1930'lu yılların başında fizikçi Enrico Fermi ise, olasılık probleminin yer aldığı nötron difüzyonunu çalışmıştır. Simülasyon kelimesinin modern anlamda kullanılışı John Von Neuman ve Ulam'ın kendi çalışmalarına Monte Carlo simülasyonu adını vermeleri ile başlar. Savaştan sonra Ulam, Metropolis, John Von Neuman ve Fermi Monte Carlo'nun gelişimi ile ilk dijital bilgisayar olan Eniac'ın yapımına hız verdiler (Metropolis,1987).

Yeni yöntemlerin tanımlanması ile istatistik mekanik, radyasyon taşınımı, ekonomik modelleme gibi çeşitli alanlarda ve malzeme biliminde mikro yapıyı anlatmakta kullanıldı.

Monte Carlo yöntemi çok çeşitli şekillerde kullanılabilir. Örneğin; fonksiyonun integrasyon tekniği olarak, normal süreçleri modellemek için; enerji, sıcaklık, hız gibi durum özelliklerini hesaplamak için, karşılıklı etkileşen parçacıkların sistemini taklit etmek için kullanılmaktadır. Fakat malzeme biliminde, Monte Carlo yöntemi öncelikle mikro yapısal evrimi taklit etmek için kullanılmaktadır. Bu evrimde denge yerel bir kaynak üzerinde gerçekleşmektedir (Newman and Barkema, 1999; Metropolis and Ulam, 1949).

## 2. KRİSTAL YAPI

Katıların fiziksel özelliklerinin çalışılması, 20.yy başından itibaren başlar. Kristal ve kristaldeki elektronların davranışlarının çalışılması ile katıhal fiziği ortaya çıkmıştır. 1910'lu yılların sonunda fizikçiler kristalin atomik modelleriyle ilgilenmişler ve yaptıkları başarılı hesaplamalar sayesinde kristallerin özellikleri ile ilgili öngörülerde bulunmuşlardır (Kittel, 1986).

Kristal yapı; belirli bir düzen içerisinde bir araya gelen atomların bu düzenlerini üç boyutta periyodik olarak devam ettirmeleri sonucu oluşur. Malzemelerin içindeki elektronların özelliklerini kontrol etmek için kristallerin periyodikliği anahtardır. Böylece yapay olarak değiştirilen kristal yapının, elektronik özellikleri de değiştirilebilir. Tanımlanan bir kristali anlamamız için iki önemli kavramı bilmemiz gerekir: örgü ve baz. Örgü; uzaydaki noktaların periyodik olarak dizilmesiyle oluşur. Baz ise; atom veya atom gruplarının oluşturduğu bir temeldir. Kristal, örgü noktasına bazların yerleşmesi ile oluşur. Kısaca,

$$\text{kristal yapı} = \text{örgü} + \text{baz} \quad (2.1)$$

diye ifade edilebilir ( Van der Ziel, 1976; Kittel, 1986; Singh, 1994).

Kristaldeki atom veya atom grupları düzenli bir dizilişte olduğundan dolayı, kristali belli yönlerde ve belli mesafelerde hareket ettirmek mümkündür. Böylece bir örgü noktasından en yakın örgü noktalarına giden  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  vektörlerine örgü vektörleri adı verilir. Örgü öteleme vektörü ise

$$\vec{T} = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3 \quad (2.2)$$

şeklinde ifade edilir. Burada  $u_1, u_2, u_3$  tamsayılardır.  $u_1, u_2, u_3$  tamsayılarının seçilen tüm kombinasyonları için birer örgü öteleme vektörü mevcuttur. Bu vektörler ile tanımlanan bir kristali temsil eden en küçük hacimli birim yapıya primitif (ilkel)

birim hücre denir. Birim hücre toplam kristalin bütün geometrik özelliklerine sahiptir. Birim hücrenin yan yana dizilmesinden yapının tamamı elde edilir (Van der Ziel, 1976; Kittel, 1986; Gezci, 1992).

## 2.1. Örgü Yapıları

Örgü öteleme vektörlerinin boyları ve aralarındaki açılarının değerlerinde, bir kısıtlama olmadığı için mümkün örgü türü sayısı sınırsızdır. Belli sınırlamalar sonucu elde edilen örgü türlerine Bravais örgüleri adı verilir.

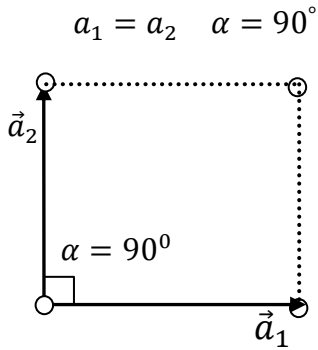
### 2.1.1 İki boyutta örgü türleri

İki boyutta beş tane Bravais örgüsü vardır. Bunlar:

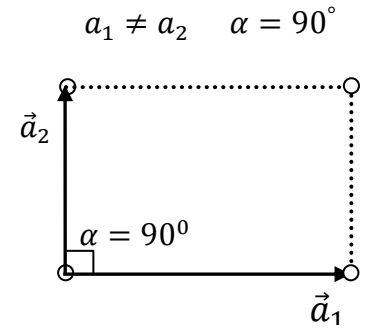
- Kare örgü
- Dikdörtgen örgü
- Yüzey merkezli dikdörtgen örgü
- Hegzagonal (altıgen) örgü
- Eğik örgü

şeklinde (Şekil 2.1) ve birim hücre parametreleri Çizelge 2.1’de verilmiştir.

#### a. Kare örgü

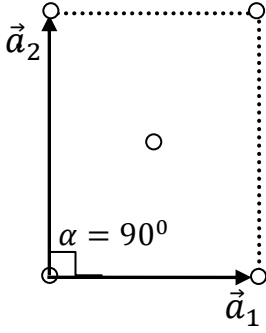


#### b. Dikdörtgen örgü



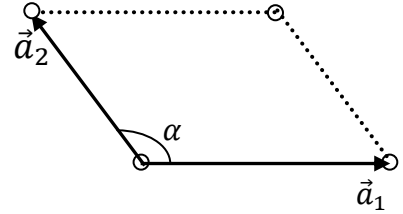
**c. Yüzey merkezli dikdörtgen örgü**

$$a_1 \neq a_2 \quad \alpha = 90^\circ$$



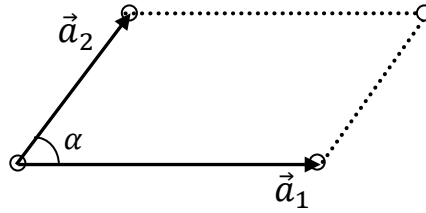
**d. Altıgen örgü**

$$a_1 = a_2 \quad \alpha = 120^\circ$$



**e. Eğik örgü**

$$a_1 \neq a_2 \quad \alpha \neq 90^\circ \quad \alpha < 90^\circ$$



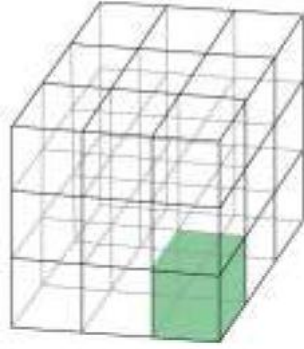
Şekil 2.1 İki boyutta beş Bravais örgü türü

Çizelge 2.1 İki boyutta beş Bravais örgünün birim hücre parametreleri (Kittel,1986)

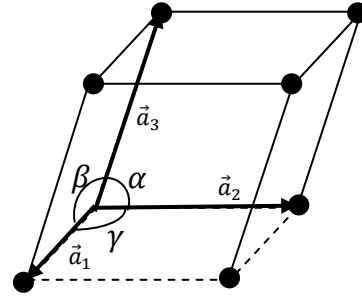
	Örgü Sayısı	Birim hücre eksen ve açılarının özellikleri
Kare Örgü	1	$a_1 = a_2 \quad \alpha = 90^\circ$
Dikdörtgen Örgü	2	$a_1 \neq a_2 \quad \alpha = 90^\circ$
Altıgen Örgü	1	$a_1 = a_2 \quad \alpha = 120^\circ$
Eğik Örgü	1	$a_1 \neq a_2 \quad \alpha \neq 90^\circ \quad \alpha < 90^\circ$

### 2.1.2 Üç boyutta örgü türleri

Üç boyutta biri genel on üç tanesi de özel olmak üzere on dört tane Bravais örgüsü vardır (Şekil 2.4). Genel olan örgü türü triklinikdir. Bu on dört örgü türü, yedi temel kristal sistemi altında sınıflandırılır (Çizelge 2.2).



Şekil 2.2 Üç boyutlu bir örgünün primitif hücresi

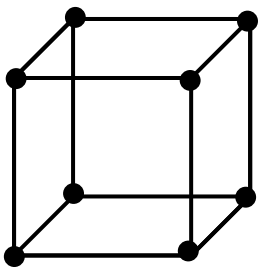


Şekil 2.3 Düzlemlerin kristal eksenini kestiği noktalar

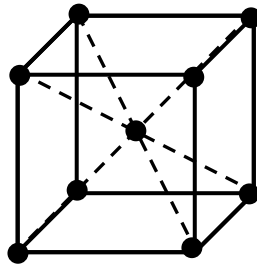
#### a. Kübik örgü

$$a_1 = a_2 = a_3$$

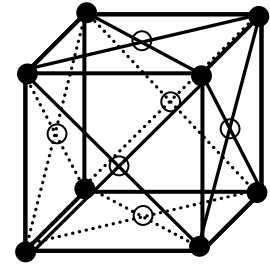
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Basit kübik  
(sc veya kübik P)



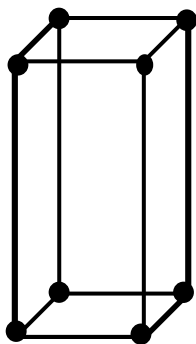
Hacim merkezli kübik  
(bcc ve kübik I)



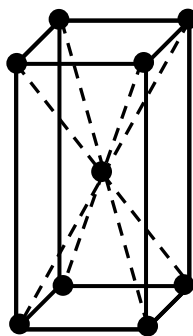
yüzey merkezli kübik  
(fcc veya kübik F)

b. Tetragonal örgü

$$a_1 = a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



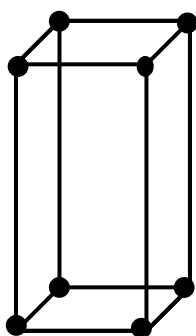
Tetragonal P



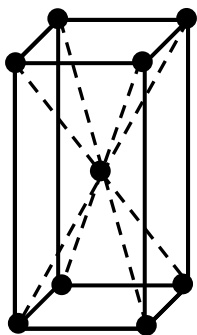
Tetragonal I

c. Ortorombik örgü

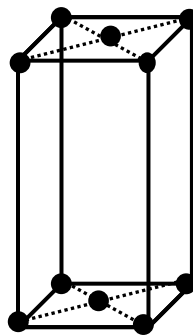
$$a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



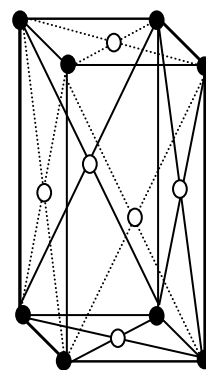
Ortorombik P



Ortorombik I



Ortorombik C

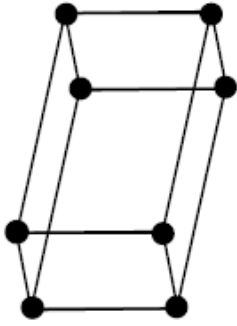


Ortorombik F

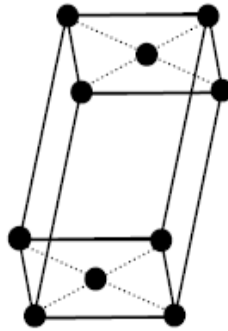
d. Monoklinik örgü

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



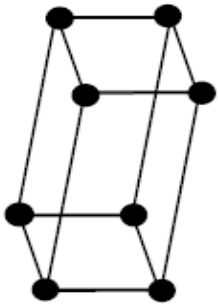
Monoklinik P



Monoklinik C

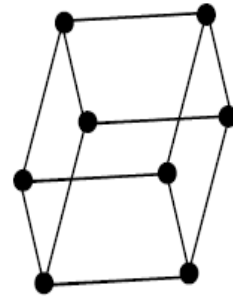
e. Triklinik örgü

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad \alpha \neq \gamma \neq \beta$$



f. Trigonal (rombohedral) örgü

$$a_1 = a_2 = a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$$



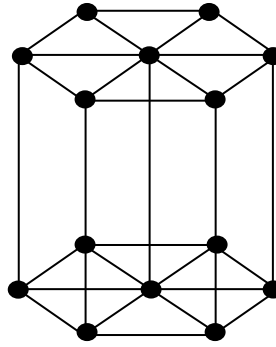
f. Hegzagonal (altıgen) örgü

$$a_1 = a_2 \neq a_3$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\gamma = 120^\circ$$





Şekil 2.4 Üç boyutta 14 Bravais örgü türü

Çizelge 2.2 Üç boyutta, 14 Bravais örgü için birim hücre parametreleri (Kittel,1986)

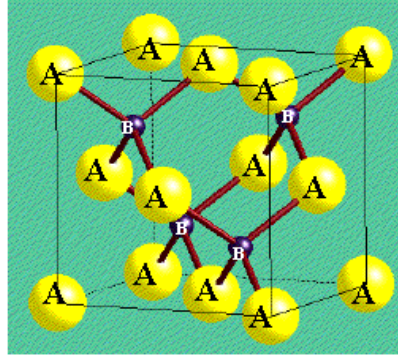
Sistem	Örgü sayısı	Birim hücre eksen ve açılarının özellikleri
Kübik	3	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ortorombik	4	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Monoklinik	2	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Triklinik	1	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Trigonal (Rombohedral)	1	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$
Hegzagonal	1	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Materyallerin iletim özellikleri enerji bant-yapısı ve çarpışma işlemlerinin doğası ile yakından ilgilidir.

Yarıiletken bileşiklerin kristallenmeleri temel olarak üç grupta gerçekleşir. Özellikleri iyi bilinen yarıiletken bileşik kristallerinin üç yapısı vardır: ZB (çinko olarak bilinir), WZ (bazen zincite denir) ve kaya tuzu (rock salt) (Nag, 1980; Kittel, 1986; Snoke, 2009; Rössler, 2004)

### 2.1.3 Zinblendede (çinko sülfür) yapı

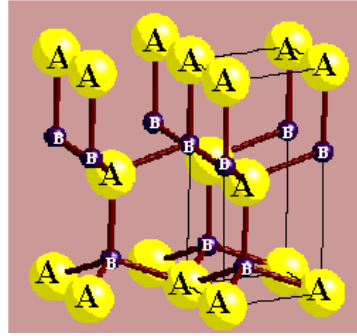
Zinblendede yapıda, birinci çeşide A, ikinci çeşide de B atomu dersek; A atomu kendisine eşit uzaklıkta 4 tane B atomu tarafından çevrelenir. Böylece A atomları, köşelerinde B atomlarının bulunduğu üçgen piramidin merkezinde yer alır. Zinblendede yapı, iç içe geçmiş iki yüzey merkezli kübik hücreye sahiptir. Bunlardan birisinin köşesi diğerinin ana köşegeninin  $\frac{1}{4}$  mesafesinde bulunacak şekilde yerleşerek yapıyı oluştururlar (Şekil 2.5). Temel öteleme vektörleri ABCABC şeklindedir (Nag,1980)



Şekil 2.5: Zinblendede yapıda birim hücre ( A; Zn; B;S)

### 2.1.4 Wurtzite yapı

Wurtzite yapı da zinblendede yapıya benzerdir. A atomları B atomlarının köşelerinde yer aldığı bir üçgen piramidin merkezinde yer alır. Her biri sadece A ve B atomlarından oluşan iki tane hegzagonal örgünün iç içe geçmesinden oluşur (Şekil 2.6). Bunların her ikisinde de c eksenleri ortaktır. Temel vektör hegzagonal eksenler boyunca yönlendirilir ve uzunluğu  $(3/8)c$ 'dir (Nag,1980).

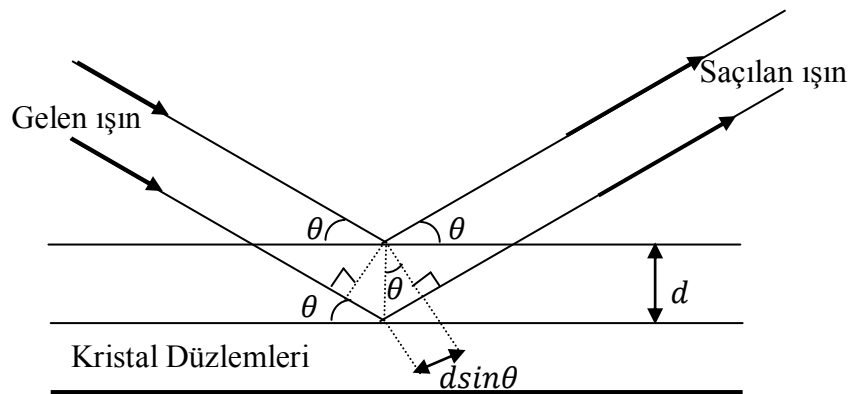


Şekil 2.6 Wurtzite yapıda birim hücre

## 2.2 Bragg Yasası

Bu yasa; X- ışınlarının kristal düzlemlerinden difraksiyonunu ifade eder. Işığın düzlem aynadan yansımaları dikkate alınarak Bragg yasası açıklanır (Şekil 2.7). Buna göre;

- Gelen demet, düzlemin normali ve difraksiyona uğrayan demet aynı düzlemdir.
- Gelen demet ile difraksiyon demeti arasındaki açı daima  $2\theta$ 'dır. Bu açı difraksiyon açısı olarak bilinir ve çoğunlukla deneysel olarak ölçülür (Gezci, 1992).



Şekil 2.7 Işığın kristalde kırınımı

İki ardışık düzlemden saçılan ışınlar arasındaki yol farkı, dalga boyunun tam katı ise yapıcı girişim gerçekleşir. Yani

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad (2.3)$$

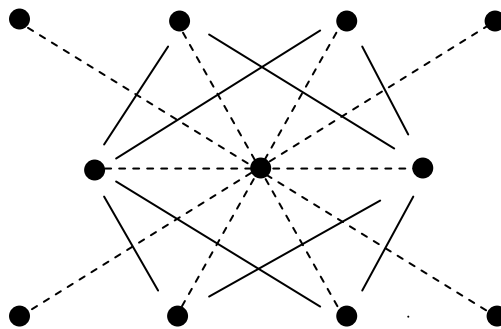
şeklinde oluşur. Burada  $\lambda$ , ışığın dalga boyu;  $d$ , düzlemler arası uzaklık ve  $n$  ise bir tamsayıdır. Denklem (2.3) Bragg yasasıdır (Hook,1999).

### 2.3 Wigner-Seitz Primitif Hücresi

Bir primitif hücre, verilen bir örgü noktasından, sırasıyla en yakın, ikinci yakın ve daha sonraki yakın komşulara çizilen vektörlerin orta noktalarından geçen düzlemlerin kapattığı en küçük hacimdir. Bu şekilde oluşturulan en küçük hacme Wigner – Seitz primitif hücresi denir.

Wigner - Seitz tarafından birim hücreyi tanımlamak için bir yöntem gösterilmiştir. Bu yöntemeye göre:

- 1) Verilen bir örgü noktasından tüm komşu örgü noktalarına birer vektör çizilir.
  - 2) Çizilen bu vektörlerin orta noktalarından dik düzlemler geçirilir. Bu düzlemlerin kapattığı en küçük hacme; Wigner-Seitz Primitif hücresi denir. (Şekil 2.8)
- Periyodik yapılardaki elektronik durumları açıklamakta kullanılan birim hücreyi bulmak için oldukça yararlı bir yöntemdir (Singh, 1994).



Şekil 2.8: Wigner - Seitz hücresi

## 2.4 Ters Örgü, Miller İndisleri ve Brillouin Bölgesi

Kristal örgüler, gerçek uzayda incelenir. Ters örgü ise kristalin kırınım desenlerinin oluştuğu uzay olduğundan Fourier uzayı veya  $\vec{k}$  uzayında incelenir. Bu uzayda kristal gerçek uzayla ilişkilidir. Gerçek örgüde vektörler [uzunluk] boyutunda iken ters örgüdeki vektörler [1/uzunluk] boyutundadır.

$\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  ters örgü vektörleri olmak üzere;

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \quad (2.4)$$

şeklinde tanımlanır ve kısaca;

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij} , (i, j = 1, 2, 3) \quad (2.5)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, i = j \text{ ise} \\ 0, i \neq j \text{ ise} \end{cases}$$

eşitliğini sağlamalıdır.

Kristal yapılar her doğrultuda ve düzlemde farklı özellikler gösterir. Bu nedenle, kristal yapı analizleri için her bir düzlem indisler ile tanımlanmaktadır. Bu indislere Miller indisleri denir. Miller indisleri elde edilirken aşağıdaki yol izlenir:

Belirtmek istenen düzlemin kristal eksenini kestiği noktalar örgü sabitleri  $a_1, a_2, a_3$  örgü vektörleri cinsinden bulunur.

Bu sayıların tersleri alınır ve aynı orana sahip en küçük üç tam sayı elde edecek şekilde indirgenir. Bulunan bu sayılar  $(h k l)$  şeklinde aralarına virgül konulmadan parantez içine yazılır ve o düzlemin Miller indisleri adını alır. Miller indisleri kullanılarak ters uzayda  $\vec{G}$ , ters örgü öteleme vektörü;

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (2.6)$$

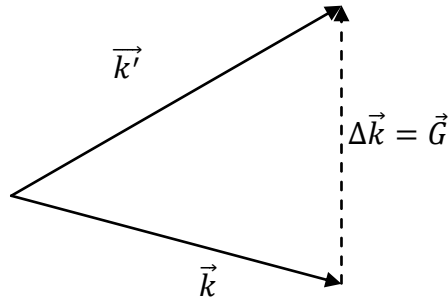
şeklinde ifade edilir. Burada  $h, k, l$  birer tamsayıdır.

Ters örgünün ;  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  vektörleri kristal örgünün düzlemlerine dik olduğundan ters örgü noktaları arasındaki herhangi bir vektör de kristal örgünün düzlemine diktir. Bu durumda elde edeceğimiz ters örgü birim hücrelerine de “birinci Brillouin bölgesi ” adı verilir. Bir Brillouin bölgesi ters örgünün Wigner- Seitz primitif hücresi olarak tanımlanır. Brillouin bölgesi sınırlarında Bragg saçılma şartı sağlanmalıdır.

Bir kristale gelen ışığın dalga vektörü  $\vec{k}$ , difraksiyona uğrayan ışığın dalga vektörü de  $\vec{k}'$  olsun. Yapıcı girişimin oluşması için, yani ters örgünün biçimlenmesi için (Şekil 2.9),

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \quad (2.7)$$

şartının gerçekleşmesi gerekir.



Şekil 2.9: Bragg saçılması

Denklem (2.7) Bragg- Laue kırınım şartı adını alır. Buradan;

$$\vec{k}' - \vec{k} = \Delta\vec{k} = \vec{G} \quad (2.8)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} \quad (2.9)$$

yazılıp, her iki tarafın karesi alınırsa;

$$k'^2 = k^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 \quad (2.10)$$

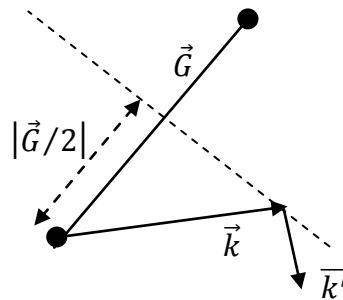
olur. Dalganın esnek saçıldığını kabul edersek  $k'^2 = k^2$  olacaktır ve Denklem (2.9)

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 = 0 \quad (2.11)$$

şeklini alır.  $\vec{G}$ , bir ters örgü öteleme vektörü ise  $-\vec{G}$  'de bir ters örgü öteleme vektörüdür. Bu değişiklik yapılırsa;

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2 \quad (2.12)$$

bulunur. Hem Denklem (2.11) hem de Denklem (2.12) Bragg koşulunu sağlar ve her ikisi de denklem (2.3)'ün değişik bir ifadesidir. Bunlardan Denklem (2.12)'ün geometrik yorumu yapıldığında  $\vec{k}$  vektörü, ters örgü vektörü  $\vec{G}$ 'yi dik olarak ikiye bölen düzlemde bulunuyorsa, saçılma şartları sağlanıyordur, denir (Şekil 2.10) .

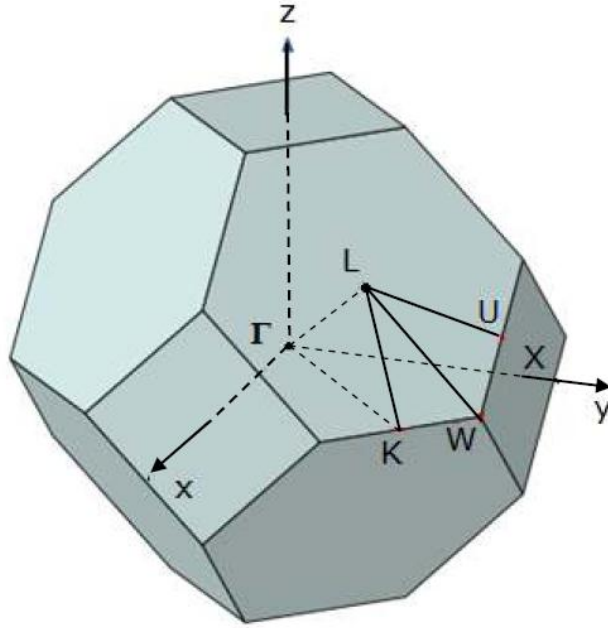


Şekil 2.10 Brillouin bölgesi sınırında Bragg kırınımı

Bir yüzey merkezli kübik (fcc) örgünün ters uzayda birinci Brillouin Bölgesi Şekil 2.11'deki gibi oluşur, bunun sembolik sınırları;

- **$\Gamma$  noktası :** (0,0,0) ; Brillouin bölgesinin merkezi,
- **$X$  noktası:** (1,0,0) ; bir kare yüzün merkezi,
- **$L$  noktası:** (1/2,1/2,1/2) ; bir hegzagonal yüzün merkezi,

- **K noktası:**  $(3/4, 3/4, 0)$  ; iki hegzagonal yüzün kesiştiği kenarın ortası,
- **W noktası:**  $(1, 1/2, 0)$  ; köşe noktası,
- **U noktası:** bir kare yüzle, bir hegzagonal yüzün kesiştiği kenarın orta noktası, harfleriyle gösterilir (Singh, 1994).



Şekil 2.11: fcc örgüsünün ters uzaydaki örgüsü (Aşan, 2010)



### 3. YARIİLETKENLERİN BANT YAPISI

#### 3.1 Atomik Seviyeden Bantlara

Bir atomda elektron seviyeleri, kesikli enerji seviyelerinden oluşurlar. Eğer atomlar bir kristal oluşturmak için bir araya getirilirse, son yörüngedeki elektronların durumuna göre bağ yaparlar ve bir katı oluştururlar. Örneğin sodyum (Na) atomunu dikkate alırsak; N tane sodyum atomu bir araya geldiğinde metalik bağ oluşturur. Her bir sodyum atomunun çekirdeği ve on elektronu iyon merkezi adını alırken on birinci elektronu da iletim elektronu adını alır. Bu elektron iletimden sorumludur. Bunun gibi her atom da benzer şekilde kristal oluşturabilir. Serbest atom enerji seviyeleri kristalde enerji bantlarına dönüşür. Yasaklı aralıklar ise yasak bantlara dönüşür (Singh, 1993).

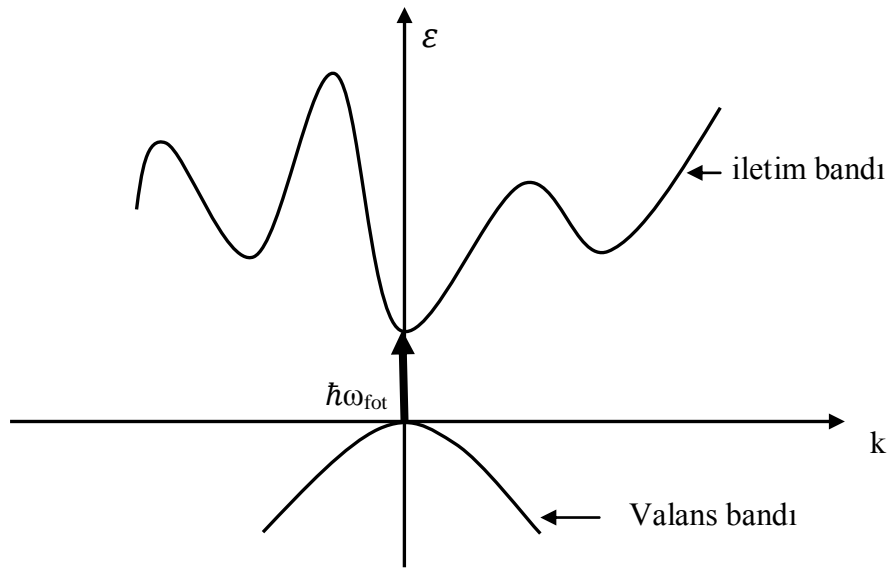
#### 3.2 Yasak Bant Aralığı

Saf iletkenlik ve saf taşıyıcı konsantrasyonu yasak enerji aralığına  $e^{-E_g/k_B T}$  çarpanıyla bağlıdır. Bu oran büyükse saf taşıyıcıların konsantrasyonu düşük ve iletkenlikte düşük olacaktır. Bant aralığı yaygın olarak en iyi iki yolla belirlenir:

- a) Optik soğurma,
- b) Sıcaklığa bağlı iletkenliğin analizi ile elde edilir (Singh, 1993; Gezci,1992).

##### 3.2.1 Direkt (doğrudan) bant aralıklı yarıiletkenler

En üst valans bandının maksimumu ve en alt iletim bandının minimumu ve Brillouin bölgesindeki aynı dalga vektörüne sahiptir ve momentum aracı olmadan korunur (Şekil 3.1). GaAs, GaSb, InAs, InP, CdS... gibi yarıiletken bileşikler direkt bant aralığına sahiptirler (Wolf, 1971).

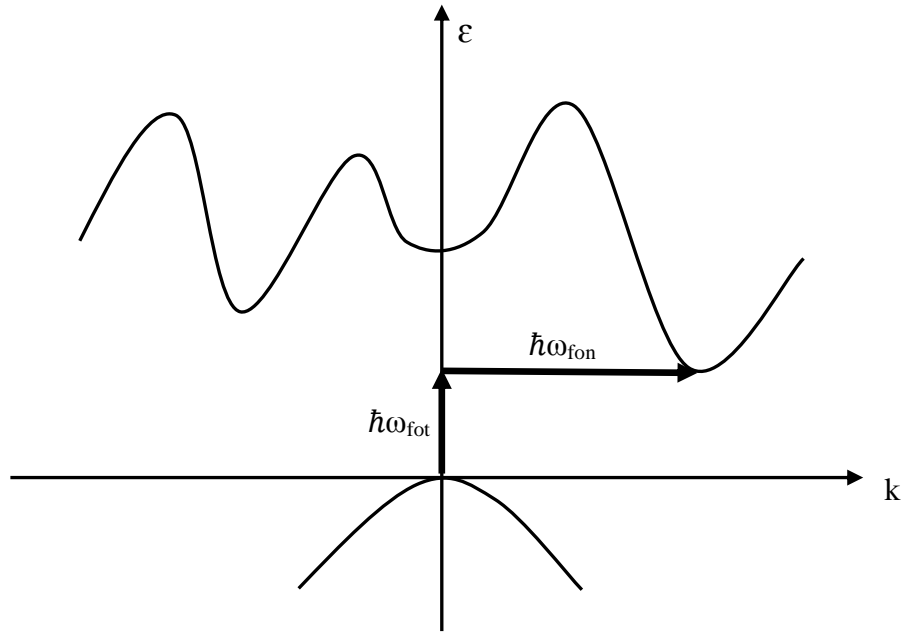


Şekil 3.1: Yarıiletkenlerde direkt geçiş

Direkt absorpsiyon sürecinde bir foton; bir elektron ve bir holün oluşturulmasıyla kristal tarafından soğurulur (Kittel, 1986).

### 3.2.2 İndirekt (dolaylı) bant aralıklı yarıiletkenler

En üst valans bandının maksimumu ve en alt iletim bandının minimumu farklı dalga vektörlerine sahiptirler. Momentum korunmaz ve momentum ve enerji korunumu için optik geçiş fononlar veya diğer saçılma merkezleri yardımı ile yapılır (Şekil 3.2). Uygun optik geçiş ve ışınımlı geçişler zayıftır. Örnekler: Si, Ge, AlAs, AlP, AlSb, GaP, SiC... (Wolf, 1971).

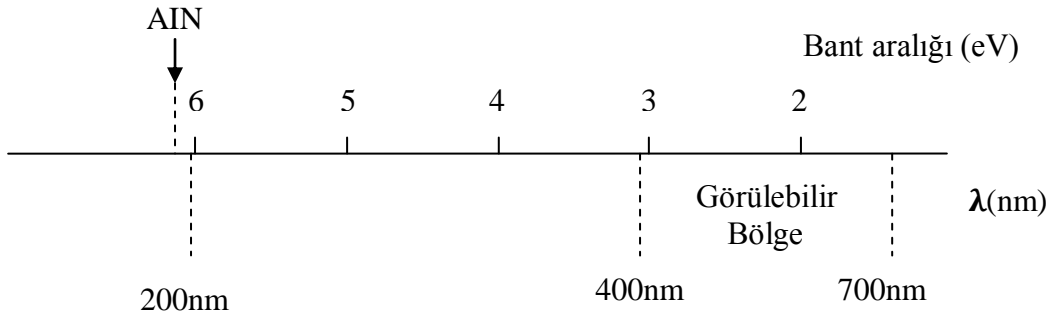


Şekil 3.2: Yarıiletkenlerde indirekt geçiş (Kittel, 1986)

### 3.3. Geniş Enerji Aralıklı Yarıiletkenler

Geniş bant aralıklı yarıiletkenler yüksek sıcaklık bölgesinde çalıştırılabilir olduklarından, ısıya dayanıklı yarıiletkenler olarak bilinirler. Geniş bant aralığına ek olarak, elmasın bazı tipik özelliklerine de sahiptirler ve III- V grubu nitritler; yüksek ısı iletkenlik, yüksek doyum elektron sürüklenme hızı, yüksek kırılım (breakdown) elektrik alan ve üstün fiziksel ve kimyasal kararlılık içerir. Bu özellikleri şöyle sıralanabilir;

- i) Geniş bant aralığı, bu materyallere kısa dalga boyu bölgesinde ( mavi ve mor ötesi içeren bölgede) çalışma imkanı sağlar (şekil 3.3). Ayrıca geniş bant aralığı çeşitli elektronik aletlerde oldukça yüksek sıcaklıklarda ( $600^{\circ}\text{C}$ 'den büyük) çalışmasını sağlar.



Şekil 3.3: AIN materyelinin ışık spektrumundaki yeri (Taniyasu and Kasu, 2010)

- ii) Yüksek ısı iletkenlik özellikleri nedeniyle; çok yüksek güç seviyelerinde çalışabilirler.
- iii) Yüksek doyum elektron sürüklenme hızına sahip oldukları için yüksek frekanslarda çalışabilirler (RF, mikrodalga gibi) .
- iv) Yüksek kırınım elektrik alanı, yüksek-güç elektronik aletlerin yapımına imkan sağlar. Ayrıca bileşik devreler (entegre devre) için yüksek paketleme yoğunluğunu sağlar. Bu durumda dikkat edilmelidir ki, II-VI grubu bileşiklerinin ısı iletkenliği diğer geniş bant aralıklı bileşiklere göre daha düşüktür (Yacobi, 2003;).

### 3.3.1 III-V grubu yarıiletken bileşikler

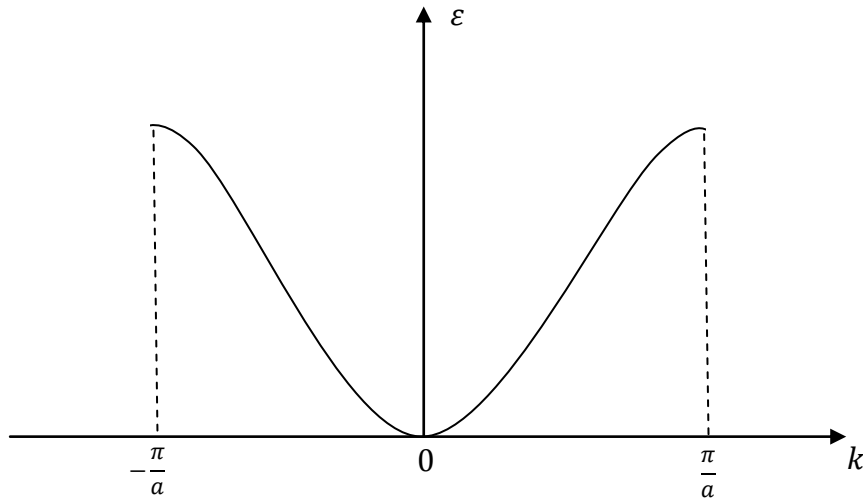
III-V grubu bileşikler (GaAs, GaP, GaN...) çok fazla uygulama alanı bulabilen yarıiletkenlerdir. Bunlar n tipi ve p tipi katkılamalar sonucunda yeni özellikler kazanabilmektedir. Bu bileşiklerin bir kısmı (GaAs, InAs, InP ve InSb ) direkt bant aralığına ve yüksek taşıyıcı mobilitesine sahiptirler.

Bu bileşikler içerisinde dar yasak enerji aralığına sahip olan yarıiletkenler (enerji aralığı 0,5 eV'un altında olanlar InSb ve InAs gibi), çoğunlukla kızılötesi, optoelektronik cihaz uygulamalarında kullanılır.

Bazı III-V grubu yarıiletkenler GaN ve AlN gibi geniş bant aralıklı yarıiletkenlerdir ki görünür bölgenin mor ötesi tarafında yer alırlar, optoelektronik, yüksek-sıcaklık ve yüksek-güç cihazlarının yapımında kullanılırlar (Yacobi, 2003).

### 3.4 Etkin Kütle

Etkin kütle; bir materyalde iletim elektronlarının kristal potansiyeli ile etkileşmesinin bir ölçüsü olarak ifade edilir. Bir materyale, bir  $\vec{E}$  elektrik alanı uygulandığında, materyal içerisindeki iletim elektronları alana zıt yönde ivmelenecek ve enerji kazanacaklardır. Elektronlar dış alanın yanı sıra diğer elektronlar ve periyodik iyonik potansiyelden de etkileneceklerdir. Bu iç alanların sonucunda  $\varepsilon \sim k$  eğrisinin şekli ortaya çıkar (Şekil 3.4 ).



Şekil 3.4: Yarıiletkenlerde  $\varepsilon \sim k$  grafiği

Elektronun etkin kütlesi,  $m^*$ ;

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2}} \quad (3.1)$$

şeklinde tanımlanır ve kütle boyutundadır. Burada;  $\hbar$ , Planck sabitidir

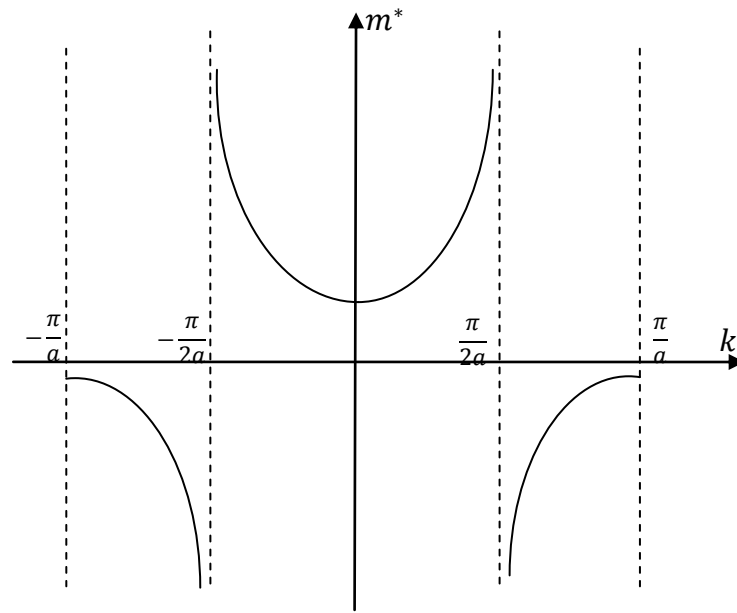
$\varepsilon \sim k$  grafiği dikkate alındığında etkin kütle aşağıdaki özellikleri gösterir (Şekil 3.5);

i) Birinci türevin sıfır olduğu  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = 0$  noktalar fonksiyonun maksimum ve minimum noktalarıdır,  $\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} > 0$  ise bu nokta fonksiyonun minimum noktasını gösterir. Denklem (3.1)'den  $m^* > 0$  olur.

ii)  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = 0$  iken,  $\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} < 0$  ise bu nokta fonksiyonun maksimum noktasını gösterir. Denklem (3.1)'den  $m^* < 0$  olur

iii)  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}$ 'nin artış yaptığı noktalarda,  $\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} = 0$  olursa burası bir dönüm noktasıdır.

Burada da denklem (3.1)'den  $m^* = \infty$  olur (Shur, 1995).



Şekil 3.5  $\varepsilon \sim k$  grafiğinde etkin kütle davranışı

### 3.5 Hız -Alan İlişkileri

Bir kristalde iletim elektronları uygulanan elektrik alan altında çeşitli saçılmalar yaparlar. Deneysel durumda, bütün saçılma mekanizmaları aynı anda mümkün olabilir. Serbest taşıyıcıların, dış elektrik alana verdikleri tepki, elektrik alanla olan ilişkisi ile belirlenir. Sıcaklığa, katkılamaya vb. bağlı bu ilişki elektronik cihazların oluşturulması için gerekli olan bilgiler içerir. Elektrik alanın yük taşınmasında önemli üç bölgesi vardır:

- i) Hız-alan ilişkisinin lineer olduğu ve mobilite için

$$\mu = \left| \frac{v}{E} \right| \quad (3.2)$$

bağıntısının geçerli olduğu bölgedir. Burada  $v$  : sürüklenme hızı,  $\mu$  de mobilitedir.

ii) Hız-alan ilişkisinin lineerliğinin bozulduğu daha yüksek elektrik alan bölgesi, bu bölgeden direkt bant aralığı olan yarıiletkenler oldukça karışık negatif direnç bölgeleri içerebilirler.

iii) Son olarak, oldukça yüksek elektrik alan bölgesi, bu bölge yarıiletkenlerde kırılma (breakdown) voltajı yakınlarıdır. Transistor, diyot gibi birçok elektronik alet bu yüksek alan limitinin biraz altında çalışır. Çünkü bu sınırın üstünde elektrik akımı kontrolden çıkmış gibi davranır.

Hız alan ilişkilerinin kararlı hali, elektronların ilk saçılmaları yapmasıyla başlar. Çarpışma ilişkileri genellikle pikosaniye, elektron hızları  $10^7 cm/s$ , aldıkları serbest yol ise  $1000 \text{ \AA}$  mertebesindedir.

### 3.5.1 Düşük alan iletimi, mobilite

Düşük elektrik alanda, materyalin makroskobik taşınım özellikleri (mobilite, iletkenlik gibi) mikroskobik özelliklere (saçılma hızı, durulma hızı gibi) bağlı olabilir.

Yarıiletkenlerde elektronların birbiriyle etkileşimleri çok zayıf olduğundan dikkate alınmaz. Bu yaklaşım serbest elektron yaklaşımı olarak adlandırılır.

Elektronlar farklı saçılma merkezlerinde çarpışmaya uğrarlar ve ardışık zamanlar arasındaki süre,  $\tau_{sac}$ , ortalama zaman olarak adlandırılır.

Elektronlar, yaptıkları çarpışmalar arasında, serbest elektron denklemine

$$\hbar d\vec{k}/dt = \vec{F}_{dış} \quad (3.3)$$

göre hareket ederler. Bir çarpışmadan sonra, elektronlar ortalamanın üstündeki fazla enerjilerini kaybederler. Bu yüzden elektron gazı ısıl dengesini muhafaza eder. Bu varsayım, sadece çok düşük elektrik alanlarda geçerlidir.

Saçılmalarda elektronun sürüklenme hızı,

$$\vec{v} = -\frac{e\vec{E}\tau_{sac}}{m^*} \quad (3.4)$$

olarak verilir. Akım yoğunluğu ise

$$\vec{J} = -nev_s = \frac{ne^2\tau_{sac}}{m^*}\vec{E} \quad (3.5)$$

şeklindedir. Burada; n, taşıyıcı yoğunluğudur. Ohm yasası da

$$\vec{J} = \sigma\vec{E} \quad (3.6)$$

olarak ifade edilir.



$$\sigma = \frac{ne^2\tau_{sac}}{m^*} \quad (3.7)$$

şeklinde elde edilir. Burada  $\sigma$ , iletkenliktir. Yarıiletkenin öz direnci de iletkenliğin tersi olarak ifade edilir. Mobilitenin tanımından (Denklem 3.2), sürüklenme hızı

$$v = \mu E \quad (3.8)$$

şeklinde ve mobilite saçılma sürecine

$$\mu = \frac{e\tau_{sac}}{m^*} \quad (3.9)$$

denklemleriyle bağlıdır.

Dikkat edilmelidir ki, mobilite açıkça  $\frac{1}{m^*}$ 'a bağlıdır. Ek olarak  $\tau_{sac}$  ve etkin kütle durum yoğunluğunun azalmasından dolayı azalır. Böylece, mobilitenin taşıyıcı kütesine güçlü bir bağımlılığı vardır.

Bir materyaldeki taşıyıcıların iletimi, bir tek saçılma yapmıyor olabilir. Farklı saçılma hızları gerçekleştiğinde toplam saçılma hızı,

$$\frac{1}{\tau_{top}} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (3.10)$$

ifadesiyle bulunur. Aynı şekilde son mobilite de,

$$\frac{1}{\mu_{top}} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} \quad (3.11)$$

ifadesi ile verilir.

Bu Mathieson kuralı olarak bilinir. Bütün saçılma mekanizmaları aynı enerji bağımlılığı olduğunda geçerlidir. Saçılma mekanizmasının enerjiye bağımlılığı

$$\tau(\varepsilon) = \tau_0 \left( \frac{\varepsilon}{k_b T} \right) \quad (3.12)$$

olarak verilir. Akustik fononlar tarafından kısıtlanan mobilite,  $T^{-3/2}$  oranına uygun olarak sıcaklıkla azalır.

### 3.5.2 Yüksek alan iletimi

Elektronik cihazların büyük bir kısmı güçlü elektrik alan altında, elektronik taşınımını ortaya koyarlar. Yüksek elektrik alanda (  $E \sim 1-100$  kV/cm ) onların sıcaklıkları (elektronların sıcaklığı onların ortalama enerjilerine göre tanımlanır) örgü sıcaklığından daha yüksek de olabilir. Güçlü elektrik alan nedeniyle enerjileri ve sürüklenme hızları da oldukça yüksektir.

Yüksek elektrik alanda hareket eden elektronlar “yüksek enerjili elektronlar (hot elektronlar)” olarak adlandırılır. Modern cihazlarda genellikle boyutlar küçük, elektrik alanları yüksek ve elektronlar da yüksek enerjilidir. (Singh, 1993)

### 3.6 Boltzmann Taşınım Denklemi

Yarıiletkenlerde saçılma problemleri Boltzmann denklemi çözülerek elde edilir. Bir elektron gazının taşınım özelliklerini tanımlayabilmek için, elektron gazının dağılım fonksiyonu bilinmelidir. Bu dağılım, elektronun k uzayında veya faz uzayında nasıl davranış gösterdiğini açıklar. Elektronlar Fermi-Dirac fonksiyonuna uyar ve bu fonksiyonda,

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_k}{k_B T}\right) + 1} \quad (3.13)$$

olarak ifade edilir. Bu dağılım fonksiyonu denge halindeki elektron gazı ile tanımlanır ve herhangi bir çarpışmadan bağımsızdır. Çarpıştığında elektronlar sürekli olarak bir  $\vec{k}$  uzayından başka bir  $\vec{k}$  uzayına taşınır, elektronların net dağılımı dengeyi bozmak için dış etkiler olmadıkça her zaman Fermi-Dirac dağılım fonksiyonu tarafından verilir (Singh, 1993).

İstatistik mekanikte dağılım fonksiyonunun biçiminin bilinmesi çok önemlidir. Isıl dengede olmayan bir sistemin dağılım fonksiyonu ısıl dengede olandan biraz farklıdır. Bu farklılık bir pertürbasyonla oluşturulabilir. Pertürbasyon ortadan kalktığında sistemin dağılım fonksiyonunun ısıl dengede olanla aynı olması gerekir. Bu işlem Boltzmann denklemi ile başarılabilir. Bu denklemin türetilmesi sistemin, faz uzayında  $(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$  noktasındaki civarında bir bölgede, bir pertürbasyon aldığını düşünülerek ortaya konur. Dağılım fonksiyonunun zamanla değişimi;

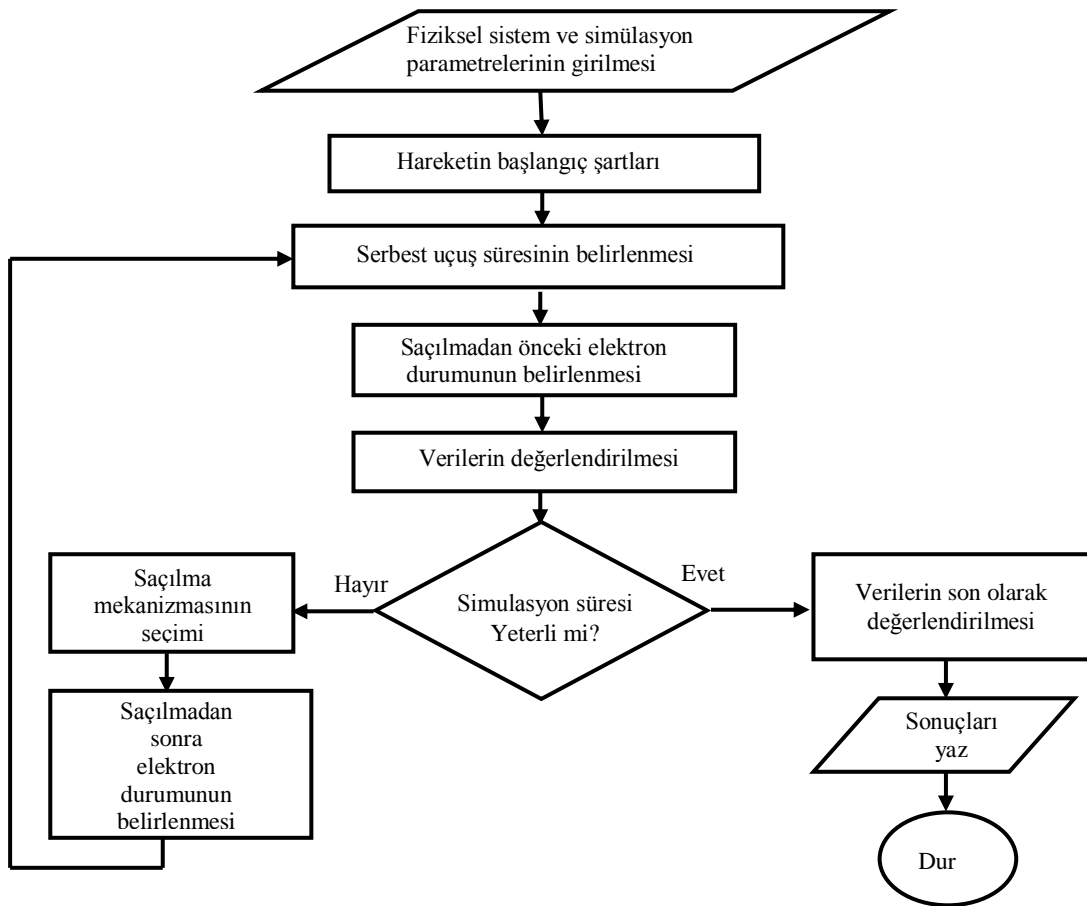
$$\frac{df}{dt} = -\vec{V} \cdot \vec{\nabla} f - \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_p f + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarpışma}} \quad (3.14)$$

şeklinde ifade edilir. Burada; sağdaki ilk terim, konumdaki değişimi verir. İkinci terim momentumdaki değişimi verir. Üçüncü terim ise sistemdeki parçacıkların yaptıkları çarpışmaları ifade eder (Mc Kelvey, 1966).

## 4. MONTE CARLO YÖNTEMİ

### 4.1 Tek Parçacık Monte Carlo Simülasyonu

Yarıiletkenlerde taşıyıcı hareketinin incelenmesi, çok sayıda taşıyıcının etkileşmesini ifade eden, çok parçacık problemini kapsar. Bu nedenle oldukça zor iştir. Bununla beraber, çok parçacık sistemi, bağımsız taşıyıcıların bir topluluğu olarak düşünülebilir.



Şekil 4.1: Tek parçacık Monte Carlo simülasyonu için akış şeması (Akarsu,2003)

Taşıyıcılar topluluğunu, pek çok saçılmaya uğrayan tek bir taşıyıcıyı izleyerek, uygun bir yöntemle simüle etmek mümkündür. Bu, tek parçacık Monte Carlo yönteminin düşüncesidir. Tek parçacık Monte Carlo yöntemi homojen bulk (iç bölge) yarıiletkenlerde taşınım özelliklerini hesaplamak için kullanılır. Hesaplama dağılım fonksiyonuna ihtiyaç duyulmaksızın doğrudan yapılabilir (Şekil 4.1) (Akarsu, 2003).

## 4.2 Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu

Taşıyıcı hareketine tek parçacık Monte Carlo yönteminin uygulanmasının temeli, momentum uzayındaki tek bir taşıyıcının hareketinin simülasyonudur. Bu, taşıyıcı serbest uçuş süresi ve saçılma olaylarının gelişigüzel seçilmesi ile yapılır. Bu yüzden simülasyon için bir rastgele sayı serisi türetilir. Simülasyon programı sürüklenme ve saçılma süreçlerini simüle eden alt programların hazırlanmasıyla oluşturulur.

Simülasyon süreci, sabit bir elektrik alanda; safsızlıklar, fononlar, kusurlar nedeniyle saçılmalarla tekrarlanan, sürüklenme hareketini değerlendirir. Serbest uçuş süresi çeşitli saçılma hızlarının toplamı olan toplam saçılma hızına bağlıdır. Her bir saçılma mekanizması için saçılma hızı elektron enerjisinin bir fonksiyonu olduğundan toplam saçılma hızı da elektron enerjisinin bir fonksiyonudur. Elektronun  $\tau_{\text{sac}}$  zamanı kadar hareket edip daha sonra birim zamandaki saçılmasının olasılığı;

$$P(\tau) = W_T(E_{\vec{k}}) \exp\left[-\int_0^{\tau} W_T(E_{\vec{k}}) dt\right] \quad (4.1)$$

ile verilir.  $W_T(E_{\vec{k}})$  toplam saçılma hızıdır.

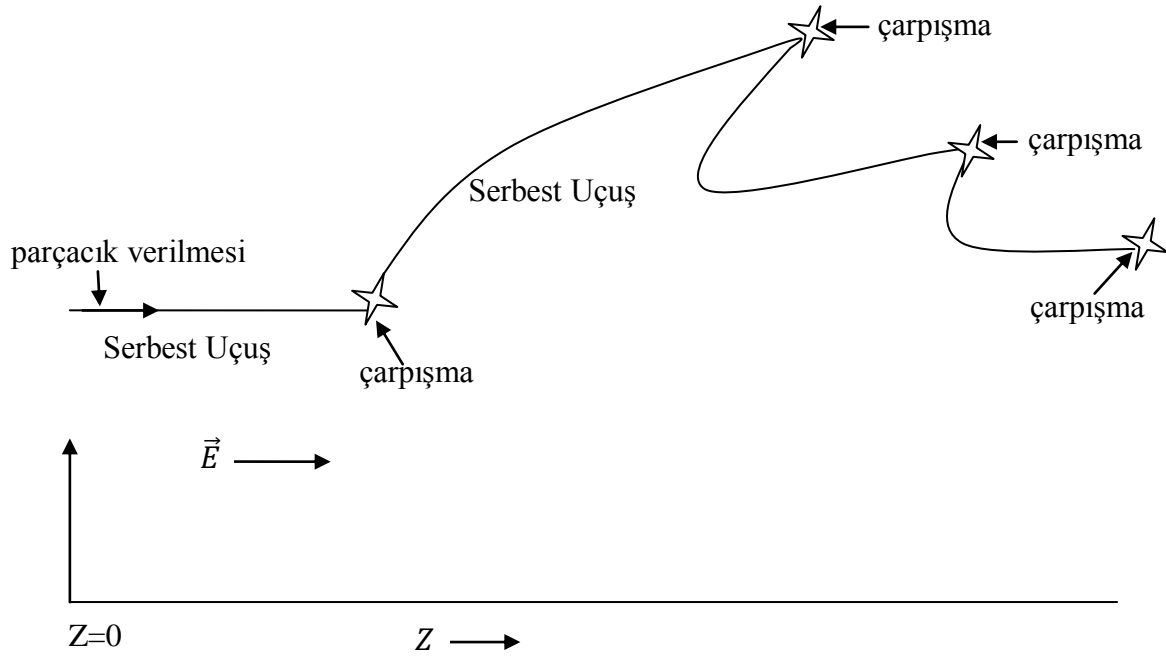
### 4.3 Taşıyıcı Taşımının Monte Carlo Simülasyonu

Monte Carlo yöntemi bir yarıiletken içerisinde hareket eden elektronun simülasyonunu bulma üzerine kuruludur. Bir yarıiletken cihazda, meydana gelen elektrik alan, yük yoğunluğu... gibi bölgesel değişimleri inceleyebilmek için çok esnek ve güçlü bir tekniktir. Ayrıca mikrondan daha küçük kanallardaki taşınım özelliklerini incelemek için de çok faydalıdır.

Monte Carlo yönteminde elektron, Fermi altın kuralı ile verilen saçılma oranlarına sahip bir noktasal parçacıkmiş gibi düşünülür (Lokalizasyon olmuş dalga paketi tanımlamasında olduğu gibi). Bu yöntem, taşıyıcı taşınımı sırasında meydana gelen gerçek fiziksel olguların mümkün olduğu kadar yakından belirtmek için kullanılan bilgisayar simülasyonunu içerir. Genel olarak, bu simülasyon aşağıdaki fiziksel süreçlerden oluşur:

- **Çalışma bölgesine parçacık verilmesi:** Parçacıklar önceden seçilmiş taşıyıcı momentumu ile birlikte bölgeye gönderilir. Taşıyıcı momentumu kompleks de olabilir.
- **Taşıyıcının serbest uçuşu:** Bu, Monte Carlo yönteminin önemli bir bileşenidir. Monte Carlo yaklaşımında saçılma olayının anlık olduğu düşünülür ve elektronların elektrik alan altında hareket ederken iki çarpışma arasında geçen süreler, saçılma süreci olarak adlandırılır.
- **Saçılma olayı:** Ardışık saçılma olayları arasındaki zamanın kullanılması Monte Carlo'nun temelini oluşturur. Her serbest uçuş sonunda bir saçılma olur. Bu da elektronun bir uçuş çizelgesini verir.
- **Saçılma olayının seçilmesi:** Çok sayıda saçılma mekanizması eş zamanlı olarak mevcut olduğu için, bunlardan hangisinin gerçekleşeceğine karar verilmesi gerekir. Bu seçim Monte Carlo yönteminin temelini oluşturur.

- **Saçılmadan sonra elektronun durumu:** Son olarak, Monte Carlo yöntemi elektronun çarpışmadan sonraki momentumunu belirler (Singh,1993, Jacoboni, 2010).



Şekil 4.2 : Monte Carlo yönteminin fiziksel süreci (Singh, 1993)

#### 4.4 Serbest Uçuş

Monte Carlo yaklaşımı, saçılma olaylarında ortaya çıkan serbest uçuş serilerini dikkate alan bir taşınım problemi için işletilir. Serbet uçuş süresince elektronun elektrik alan içindeki hareketi serbest elektron denkleminde göre,

$$d\vec{P} / dt = e\vec{E} \quad (4.2)$$

şeklinde ifade edilir.

Elektronun serbest uçuş zaman aralığı için tipik bir değer  $10^{-13}$  s mertebesinde dir. Elektronu z eksenini boyunca bir elektrik alan uygulanmış olsun; bu elektronun t zaman sonra ki momentumu,

$$\begin{aligned}
p_x(t) &= p_x(0) \\
p_y(t) &= p_y(0) \\
p_z(t) &= p_z(0) + eFt
\end{aligned} \tag{4.3}$$

olurken; t zaman sonra ki yerdeğiřtirmesi

$$\begin{aligned}
x(t) &= x(0) + \frac{p_x(0)}{m^*}t \\
y(t) &= y(0) + \frac{p_y(0)}{m^*}t \\
z(t) &= z(0) + \frac{\varepsilon(t) - \varepsilon(0)}{eE}
\end{aligned} \tag{4.4}$$

şeklindedir ve enerji deęiřimi ise,

$$\varepsilon(t) - \varepsilon(0) = \frac{p^2(t)}{2m^*} - \frac{p^2(0)}{2m^*} \tag{4.5}$$

denklemleri ile verilir.

#### 4.5 Saçılma Süresi

Monte Carlo yöntemindeki önemli parametrelerden birisi de çarpışmalar arasındaki zaman aralığının ölçümüdür. Bunun için aşağıdaki iki kural önem kazanır.

1) Toplam saçılma hızı Fermi'nin altın kuralı ile verilir:

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k'} |M_{k,k'}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i) \tag{4.6}$$



$$R_{tot} = \sum_{i=1}^m W_i(k) \quad (4.7)$$

Burada;  $R_{tot}$  m kez saçılma olayından sonra bütün saçılma hızlarının toplamını temsil eder.  $|M_{k,k'}|$  ise geçişler için matris elemanıdır.

## 2) Saçılma sürecinin açısal bağımlılığı

$$W(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{k,k'}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i) \quad (4.8)$$

şeklinde verilir (Singh, 1993).

## 5. YARIİLETKENLERDE SAÇILMA

Bloch teoremine göre, ideal periyodik potansiyelerde, elektronlar, serbest elektron davranışı gösterirler ve saçılmaya uğramazlar. Gerçek yarıiletkenlerde ise, kusurlardan dolayı, elektron demetini bir elektron olarak düşünürsek saçılma sürecinden sonra momentum ve enerji değerleri ilk durumdakinden yavaş yavaş azalır. Saçılma süreci ve durulma zamanı yarıiletkenlerdeki elektronların mikroskobik özellikleriyle bağlantılıdır. Hemen hemen tüm önemli parametreler saçılma sürecine mobilite, absorpsiyon katsayısı, emisyon katsayısı, etki iyonizasyonu gibi, hepsi elektronun saçılmasına bağlıdır. Durulma zamanı artarken; saçılma hızı azalır.

Önemli saçılma süreçlerinin çoğu iyonize safsızlık ve örgü titreşimlerindenidir. Bir donör kendi fazla elektronunu yarıiletkene verirken, bir iyonize safsızlık oluşturur. Elektron saçılması bu iyonize safsızlıklardan olur. İyonize safsızlık saçılması düşük sıcaklıklarda oldukça önemlidir, katkılı malzemelerde baskın saçılma sürecidir.

Ölçülebilir sıcaklıklarda, termal enerjilerinden dolayı kristaldeki atomlar titreşirler. Elektronlar bu titreşimlerden saçılır. Kristalin sıcaklığı artarken, titreşim genliği artar, saçılma hızının da artışına sebep olur. Genellikle, yarıiletkende elektron hareket ederken, çeşitli saçılma süreçlerinden saçılmaya uğrarlar. Bu süreçler bağlantısızdır; ayrıca elektronlar farklı enerjilerde dağılırlar ve ortalama saçılma hızı ile saçılma zamanı içerirler. Toplam saçılma hızı

$$R_{tot} = \sum_i R_i \quad (5.1)$$

ile tanımlanır. Toplam tüm mümkün saçılma süreçlerini kapsar. Toplam saçılma süresi ( $\tau_{sac}$ ) ise tüm saçılma sürelerini kapsayacak şekilde

$$\frac{1}{\tau_{sac}} = \sum_i \frac{1}{\tau_{sac}^{(i)}} \quad (5.2)$$

İle verilir. Denklem (5.2)'de Mathieson kuralı olarak adlandırılır.

Serbest elektronun hareket denklemi basitçe,

$$\frac{\hbar d\vec{k}}{dt} = \vec{F}_{dış} \quad (5.3)$$

$\hbar k$ ; elektronların etkin kristal momentumudur. Böylece eğer bir dış kuvvet yoksa elektronun etkin momentumu  $\hbar k$  değişmez. Sadece kusurların varlığı elektronun yarıiletkende saçılmasının bir nedenidir. Aslında, tüm yarıiletkenlerde safsızlık ve kusurlar vardır, ya kasıtlı ya da kasıtsız ve bu elektronun saçılma sebebine dönüşür.

Elektronun saçılmasının diğer önemli kaynağı, fotonlardır. Yarıiletkenlerinin üzerine ışık düştüğünde ve uygun şartlar oluşturulduğunda, bir elektron valans bandından iletim bandına çıkar ve ışığı absorbe eder. Ayrıca ters bir süreç de meydana gelebilir. İletim bandındaki bir elektron boş valans bandındaki duruma iner ve bir foton yayınlar.

### 5.1 Yarıiletkenlerde Saçılma Mekanizmaları

Bu bölümde AlN için mümkün olan saçılma mekanizmaları incelenecektir. Genel olarak kullanılan saçılma mekanizmaları;

- polar optik fonon emisyon
- polar optik fonon yayma saçılmaları,
- vadilerarası polar optik fonon emisyon ve yayma saçılması,
- alaşım saçılması,
- iyonize safsızlık saçılması,

- dislokasyon saçılması,
- akustik fonon saçılması

şeklinde sıralanabilir. Yaptığımız simülasyon çalışmasında; iyonize safsızlık saçılması, polar optik fonon saçılması, akustik fonon saçılması, vadiler arası saçılma, piezoelektrik saçılması, dislokasyon saçılması kullanılmıştır.

### 5.1.1 İyonize safsızlık saçılması

Kristaldeki safsızlık atomları iletim elektronlarının taşınımında bir saçılma oluştururlar. Bu saçılmaya iyonize safsızlık saçılması adı verilir. İyonize safsızlık saçılması düşük sıcaklıklarda baskındır çünkü taşıyıcıların termal hızı düşerken, uzun mesafe Coulomb etkileşimlerinin etkisi taşıyıcının hareketini artırır. İyonize safsızlık saçılmasının var olduğu bir materyalde mobilite,

$$\mu_I = \frac{128(2\pi)^{\frac{1}{2}}\epsilon_s^2(kT)^{3/2}}{q^3(m^*)^{\frac{1}{2}}(n + 2N_A)} \left[ \ln(1 + b) - \frac{b}{1 + b} \right]^{-1} \quad (5.4)$$

olarak verilir.  $b$  ve  $n'$ ,

$$b = \frac{24m^*\epsilon_s(kT)^2}{q^2\hbar^2n'} \quad (5.5)$$

$$n' = n + \frac{(N_D - N_A - n)(n + N_A)}{N_D} \quad (5.6)$$

denklemleri ile ifade edilir. Burada  $n$ , elektron konsantrasyonu;  $N_A$ , akseptör yoğunluğu;  $N_D$ , donör yoğunluğu (Morkoç,1999).

İyonize Safsızlık Saçılmasında, saçılma matris elemanı

$$W(k, k') \propto \frac{1}{\left[4k^2 \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \lambda_p^2\right]^2} \quad (5.7)$$

şeklinde bir açısal bağımlılığa sahiptir.

Burada;  $W(k, k')$  ; iyonize safsızlık saçılma oranı,  $\lambda_p$  ise perdeleme uzunluğunun tersidir. Saçılma açısı;

$$\cos\alpha = 1 - \frac{2(1 - R_n)}{1 + 4\frac{\varepsilon}{\varepsilon_\beta}R_n} \quad (5.8)$$

olarak verilir. (Denklem 5.8)'deki  $\varepsilon_\beta$  ve  $\varepsilon$

$$\varepsilon_\beta = \frac{h^2 \lambda_p^2}{2m^*} \quad (5.9)$$

$$\varepsilon = \frac{h^2 \lambda_p^2}{2m^*} \quad (5.10)$$

şeklindedir.

Eğer  $\lambda_p \rightarrow 0$  ise perdeleme yoktur ve saçılma açısı  $0^\circ$ 'ye yaklaşır. Diğer yandan perdeleme çok güçlü ise alaşım saçılmasında olduğu gibi saçılma rastgele oluşur (Singh,1993)

### 5.1.2 Polar optik fonon saçılması

Bir kristalde optik fononlar bir elektrik alanla uyarılır ve farklı yüke sahip iyonlaşmış atomlar zıt yönlerde hem enine hem de boyuna olmak üzere titreşime zorlanırlar. Böyle bir titreşim optik bir uyararla yapıldığı için oluşan fononlara optik fonon adı verilir. III-V grubu ve II-VI grubu yarıiletkenlerde titreşimle optik modun

oluşumu elektrik alanın kutuplanmasını arttırır. Optik modlardan sadece boyuna oluşturulan fononlar, bu etkide rol üstlenirler (Moglestue, 1993).

Polar optik fonon genellikle yüksek alan iletiminde en önemli saçılma mekanizmasıdır. Bu yüksek alanlarda elektronun enerjisi oldukça yüksektir ve parabolik olmayan (nonparabolik) etkiler önem kazanır. Bu yüzden bandın non-parabolik özelliği olması dikkate alınır. Saçılma oranının açılma bağımlılığı,

$$W(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_0}{V |k - k'|^2} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) G(k, k')$$

$$\times \begin{cases} n(\omega_0) \delta(\epsilon(k') - \epsilon(k) - \hbar \omega_0) & (\text{soğurma}) \\ (n(\omega_0) + 1) \delta(\epsilon(k') - \epsilon(k) + \hbar \omega_0) & (\text{emisyon}) \end{cases} \quad (5.11)$$

denklemleri ile verilir.  $n(\omega_0)$  optik fononlar için yerleşme olasılığı,  $\epsilon_\infty, \epsilon_s$  sırasıyla yüksek frekans ve durgun dielektrik sabitleri,  $\omega_0$  ise optik fonon frekansıdır. Nonparaboliklik ise,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \gamma(\epsilon) \quad (5.12)$$

olarak verilir. Burada  $\alpha$  nonparaboliklik parametresidir. Çakışma integrali de,

$$G(k, k') = [a_k a_{k'} + c_k c_{k'} \cos \beta]^2 \quad (5.13)$$

olarak ifade edilir. Burada  $\beta$  açısı  $k$  ve  $k'$  arasındaki açıdır.  $a_k$  ve  $c_k$

$$a_k = \left[ \frac{1 + \alpha\epsilon(k)}{1 + 2\alpha\epsilon(k)} \right]^{1/2} \quad (5.14)$$

$$c_k = \left[ \frac{\alpha \varepsilon(k)}{1 + 2\alpha \varepsilon(k)} \right]^{1/2} \quad (5.15)$$

şeklindedir. Ayrıca,  $\alpha_k'$  ve  $c_k'$  ise  $\varepsilon(k)$ 'nin aynı fonksiyonuna karşı gelirler. Eğer  $\alpha = 0$  ise, çakışma integrali tektir. Toplam saçılma oranı

$$W(k) = \frac{e^2 m^{*1/2} w_0}{\sqrt{2} \hbar} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{1 + 2\alpha \varepsilon'}{\gamma^{\frac{1}{2}}(\varepsilon)} F_0(\varepsilon, \varepsilon')$$

$$x \begin{cases} n(w_0) & (\text{soğurma}) \\ (n(w_0) + 1) & (\text{emisyon}) \end{cases} \quad (5.16)$$

şeklinde ifade edilir. Fakat Monte Carlo simülasyonunda kullanımı oldukça basittir (Singh,1993).

### 5.1.3 Akustik fonon saçılması

Bir kristalde akustik fononlar, “çarpma” şeklinde bir etkiyle oluşturulur. Katıdaki bütün atomlar enine ve boyuna olan her iki durumda da aynı yönde titreşim gösterirler. Böyle bir etkiyle oluşturulan dalga elastik (akustik) dalgalara benzediği için oluşturulan fononlara da akustik fonon adı verilir.

Akustik fonon saçılması düşük elektrik alanda özellikle de optik fonon işgal sayısının düşük olduğu düşük sıcaklıklarda önemli bir saçılma mekanizmasıdır. Akustik fonon saçılmasında toplam saçılma hızı

$$W(k) = \frac{(2m^*)^{\frac{3}{2}} k_B T D_{ac}^2}{2\pi \rho v^2 h^4} \gamma^{\frac{1}{2}}(\varepsilon) (1 + 2\alpha \varepsilon) E_a(\varepsilon) \quad (5.17)$$

$$E_a(\varepsilon) = \frac{(1 + \alpha \varepsilon)^2 + \frac{1}{3}(\alpha \varepsilon)^2}{(1 + 2\alpha \varepsilon)^2} \quad (5.18)$$

olarak verilir.

#### 5.1.4 Vadiler arası saçılma

Vadiler arası saçılma mekanizması, sadece Si ve Ge gibi indirekt bant aralıklı yarıiletkenler için değil, aynı zamanda GaAs gibi direkt bant aralıklı yarıiletkenler için de çok önemli bir saçılmadır. Bu saçılmaya ait saçılma hızı;

$$W(k) = \frac{(Z_e - 1)m^{*3/2}D_{ij}^2}{\sqrt{2\pi\rho w_{ij}}\hbar^3} E'^{1/2} \begin{cases} n(w_{ij}) & (\text{soğurma}) \\ n(w_{ij}) + 1 & (\text{emisyon}) \end{cases} \quad (5.19)$$

$$\varepsilon' = \begin{cases} \varepsilon(k) + \hbar w_{ij} & (\text{soğurma}) \\ \varepsilon(k) - \hbar w_{ij} & (\text{emisyon}) \end{cases} \quad (5.20)$$

şeklinde verilir. Öncelikle direkt bant aralıklı malzemelerdeki elektronlar bir elektrik alan (ya da optik pertürbasyon) tarafından hareketlendirilir. Elektronların  $\Gamma$  vadisindeki enerjileri  $\Gamma$ -L veya  $\Gamma$ -X'e ulaşır. Bu elektronlar uygun fononlar tarafından  $\Gamma$  vadisinden X vadisine saçılır (Singh,1993).

#### 5.1.5 Piezoelektrik saçılması

Bir kristal üzerine basınç uygulandığında karşılıklı iki paralel yüzey arasında zıt yüklerle yüklenme olur. Bu yük farklılığı bir elektrik alan kurulmasına neden olur. Bu olaya piezoelektrik etki adı verilir. Basınç ortadan kaldırıldığında ise elektrik alan da ortadan kalkar.

Polar optik fonon saçılmasının kaynağı, wurtzite ve zinc-blende kristallerdeki inversiyon simetrisinin oluşmamasıdır. Hem optik fononların hem de akustik fononların varoluşu elektrik alana neden olur. Akustik fononlar nedeniyle polarizasyon alanı piezoelektrik saçılmaya sebep olur. Ama oda sıcaklığında önemli değildir. Piezoelektrik saçılma çok düşük sıcaklıklarda, çok saf yarıiletkenler için önem kazanır. VI. Grup elementler piezoelektrik göstermezken, III-V grubu yarıiletkenler çok zayıf,



II-VI grubu yarıiletkenler ise güçlü piezoelektrik özellik gösterirler (Moglestue, 1993; Singh 1993).

### **5.1.6 Dislokasyon saçılması**

Dislokasyon saçılmasının kenar ve vida olmak üzere iki çeşidi vardır. Her ikisi de örgüdeki atomların periyodik dizilişindeki hatalardan meydana gelir (Moglestue,1993).

Etkin taşıyıcı kütlesi konsantrasyonun bir fonksiyonu olduğu için dislokasyon saçılma mobilitesi, taşıyıcı konsantrasyonuna bağlıdır, sıcaklık ve dislokasyon yoğunluğuyla da orantılıdır (Wolf, 1971).

## 6. AlN YARIİLETKEN MATERYALİNİN ÖZELLİKLERİ

### 6.1 Nitritlerin Kristal Yapıları

III. Grup elementlerinin V. Grupta bulunan azot (N) ile yaptığı bileşikler genellikle üç kristal yapıda gerçekleşir. Bunlar wurtzite, zincblende ve rocksalt yapılarıdır (Bölüm 2). Normal şartlar altında bulk AlN, GaN ve InN yapılar için en kararlı termodinamik yapı wurtzitedir.

Wurtzite yapı hegzagonal birim hücreden oluşur ve örgü sabitleri  $c$  ve  $a$ 'dır. Herbir hücre aynı türden 6 atom içerir. Wurtzite yapı için uzay grubu  $P6_3mc(C_{6v}^4)$  şeklindedir. Wurtzite yapı da iki iç içe geçmiş hegzagonal sıkı paketten oluşur. Bunların her ikisi için  $c$  ekseninin  $5/8$ 'i ortak kullanılır.

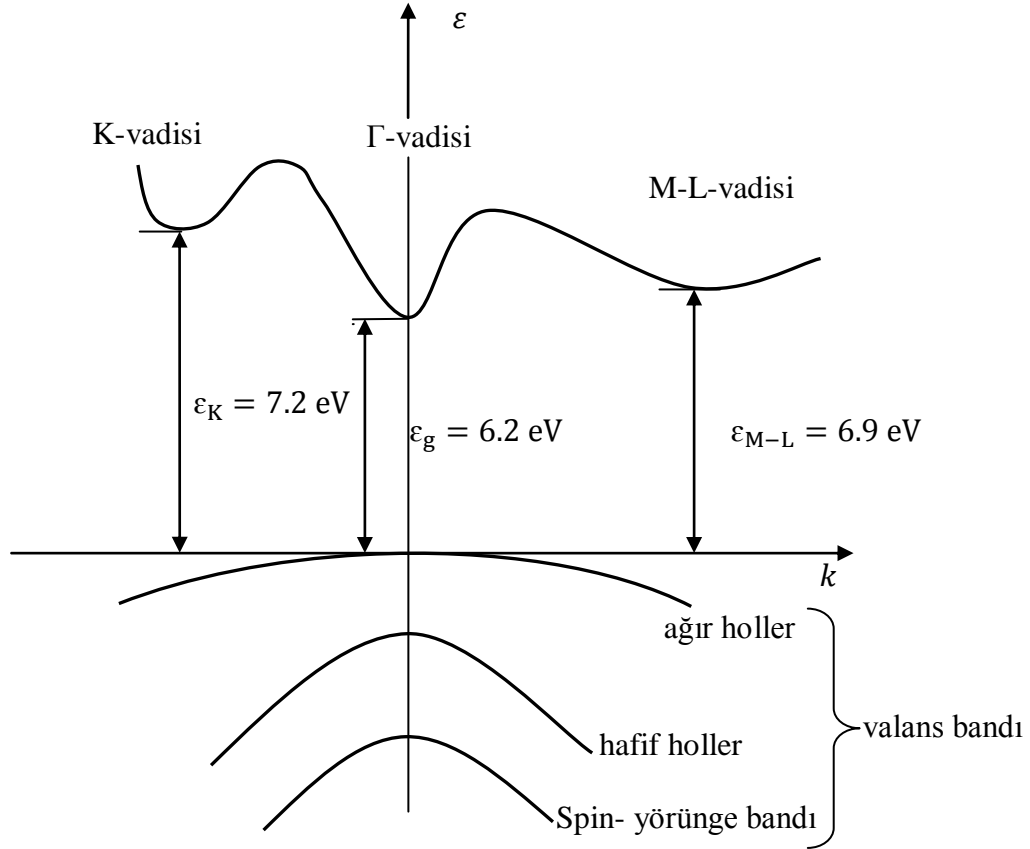
AlN 'in yer aldığı zincblende ve wurtzite yapılar benzerdir. Her iki durumda da, III. Grup atomları 4 tane azot atomuyla çevrelenir. Bunun aksine olarak, her bir azot atomu da 4 tane III. Grup atomları tarafından çevrelenir. Bu iki yapı arasındaki temel fark iki atomdan oluşan düzlemlerin istiflenme sırası farklıdır. Wurtzite yapı için yüzeyin yağma dizisi yüzeyde ABABAB ve  $\langle 0001 \rangle$  yönündedir. Zincblende yapı için, yağma dizisi yüzeyde ABCABC  $\langle 111 \rangle$  yönündedir.

### 6.2 AlN Yarıiletkeni

AlN yüksek termal iletkenliğe sahip, çok güçlü piezoelektrik özellikli ve yüksek sıcaklıklarda çok fazla direnç gösterebilen, geniş bant aralıklı III-V grubu yarıiletkenidir (Şekil 6.1). AlN'i çekici hale getiren özelliği Si ve GaAs ile aynı özelliklere sahip olması ve elektronik ve optoelektronik aletlerdeki uygulamalarda alternatifi olarak düşünülmesidir (Morkoç,1999).

AlN'in yararlı birçok mekanik ve elektronik özelliğe sahiptir. Örneğin, sertliği, yüksek termal iletkenliği, yüksek sıcaklıklar için direnç ve kristalize olmamış biçimdeki

kimyasal birleşimi AlN'in elektronik paket uygulamaları için dikkat çekici hale gelmesini sağlamıştır.

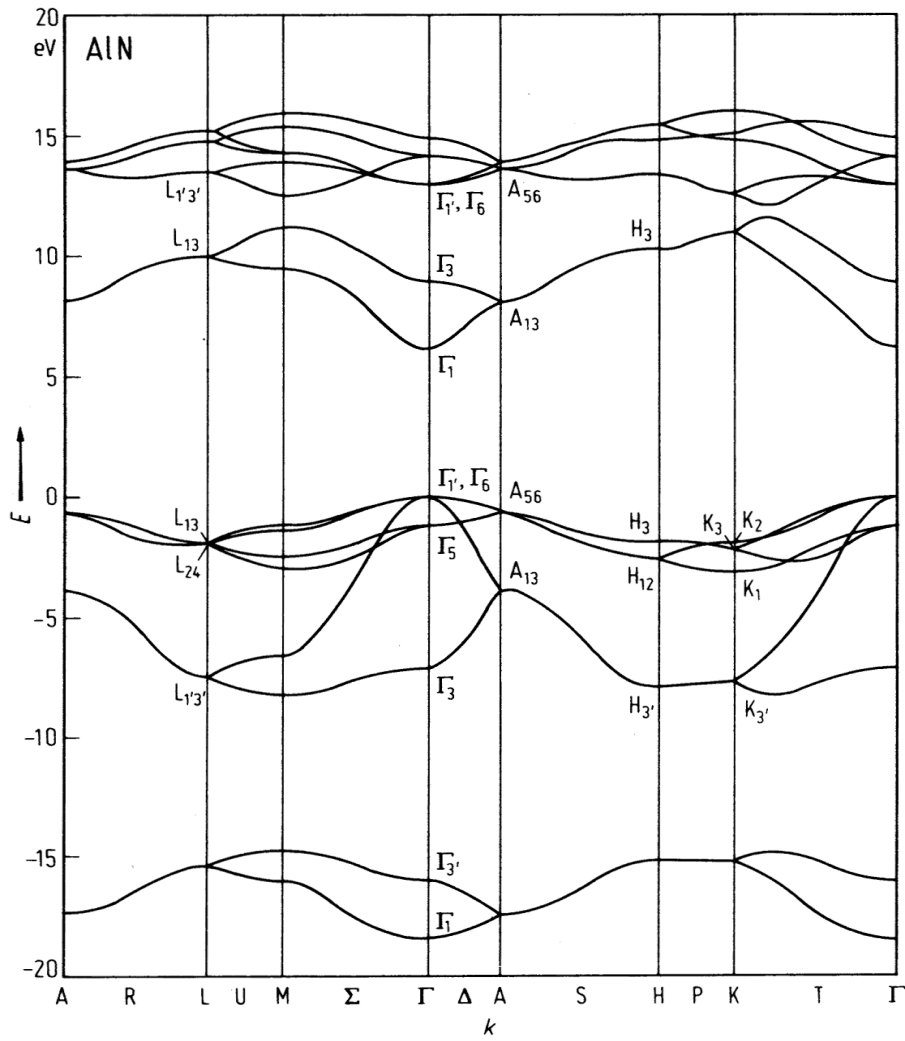


Şekil 6.1 AlN yarıiletken materyalinde 300K için bant geçişleri

AlN geniş bant aralığına sahip bir materyal olmasından dolayı, yarıiletken cihaz uygulamalarında yalıtkan materyal olarak kullanılmaktadır. Piezoelektrik özellikleri ile AlN yüzey-akustik-dalgı cihazı uygulamaları için uygun bir malzemedir.

AlN, oksijen kaplarıyla yaptığı yüksek reaktifliği nedeniyle kolay üretilen bir materyal değildir. Son zamanlarda yapılan çalışmalar sonucu AlN'in birçok fiziksel özelliği güvenilir biçimde ölçülmüş ve bulk AlN sentezlenmiştir.

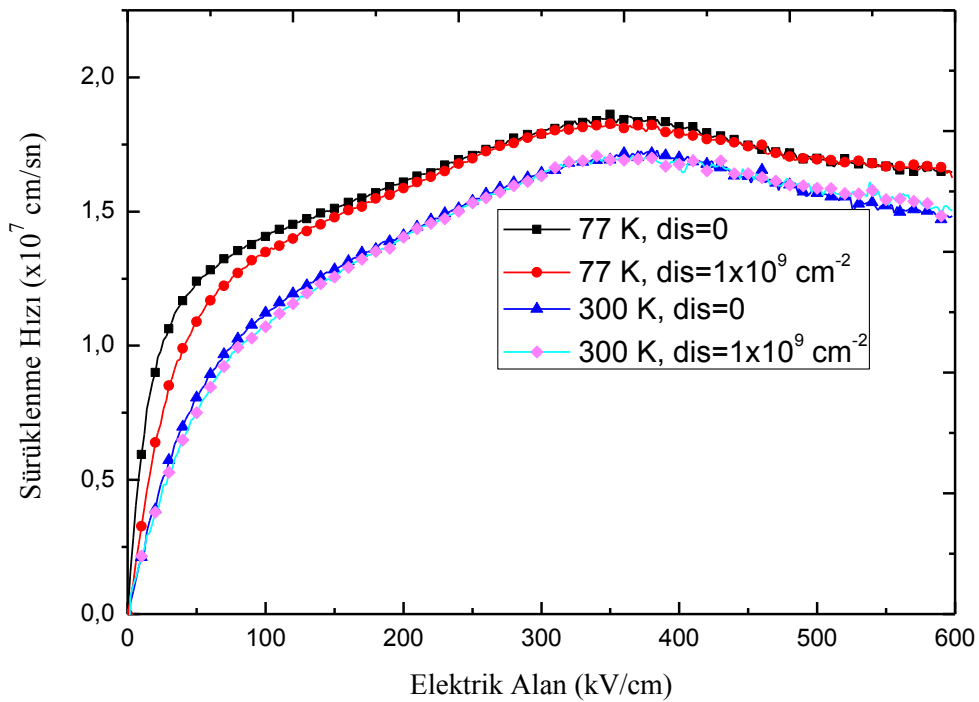
Hegzagonal wurtzite yapıda kristallendiğinde, AlN kristali 20,495 g/mol kütleyle sahip olur. Uzay grup simetrisi  $C_{6V}^4(P6_3mc)$  ve nokta grup simetrisi  $C_{6V}(6mm)$ 'dir. Örgü parametresi  $a$ ; 3.110 Å'dan 3.113 Å'a kadar;  $c$  ise 4,978 Å'dan 4,982 Å'a kadar değişir.  $c/a$  oranı 1.000 ile 1.602 arasındadır. (Morkoç, 1999; Levinshtein et al, 2001). AlN bileşiğinin bant yapısı aşağıdaki şekilde verilmiştir (Şekil 6.2).



Şekil 6.2 AlN'in elektronik bant yapısı

## 7. AIN YARIİLETKENİNİN TAŞINIM ÖZELLİKLERİNİN MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE BELİRLENMESİ

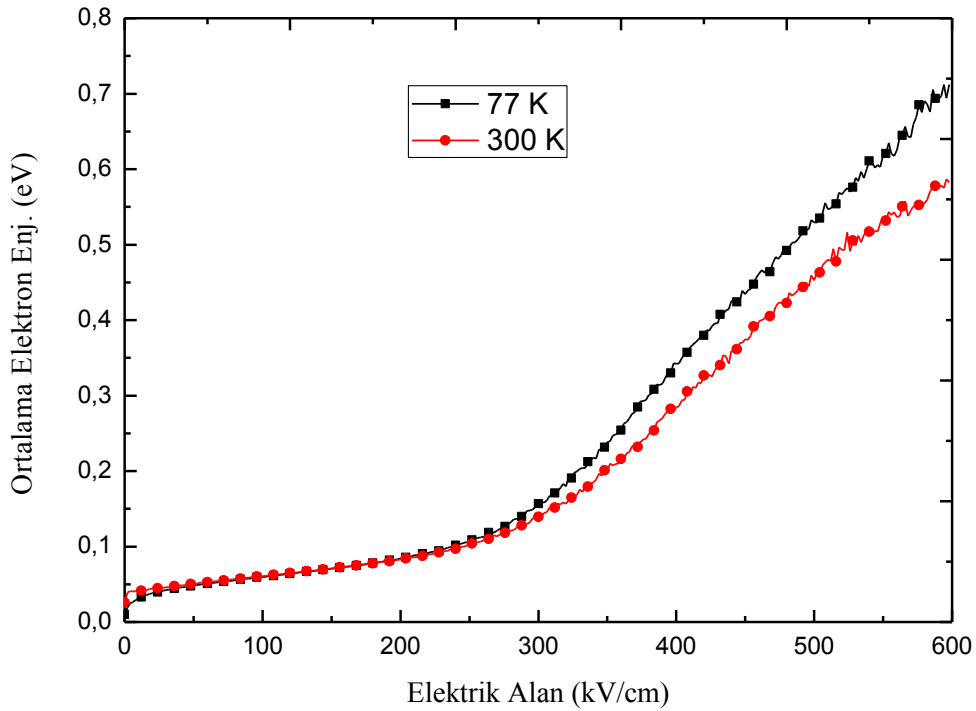
Bu bölümde Monte Carlo yöntemi ile Çizelge 7.1’de verilen materyal parametreleri kullanılarak AIN yarıiletken bileşiğinin taşınım özellikleri incelenmiştir. Çalışmamızda 77K ve 300K değerleri için uygulanan elektrik alanın bir fonksiyonu olarak sürüklenme hızı ve ortalama elektron enerjisi grafikleri çizilmiştir. Simülasyonda polar optik fonon, vadilerarası polar optik fonon, iyonize safsızlık, dislokasyon ve akustik fonon saçılmaları incelenmiştir.



**Şekil 7.1** AIN yarıiletken bileşiğinin sürüklenme hızının uygulanan elektrik alanla dislokasyon yoğunluğu 0 ve  $1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$  değerleri için değişimi

Çalışmamızda AIN yarıiletken materyalinin taşınım özelliklerini belirlemek için öncelikle sürüklenme hızının uygulanan elektrik alan ile değişimi 77K ve 300K sıcaklıkları için incelendi. Çalışmada dislokasyon saçılmasının da hız üzerindeki etkisini görebilmek için dislokasyon yoğunluğunu 0 ve  $1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$  olarak alındı. 300K

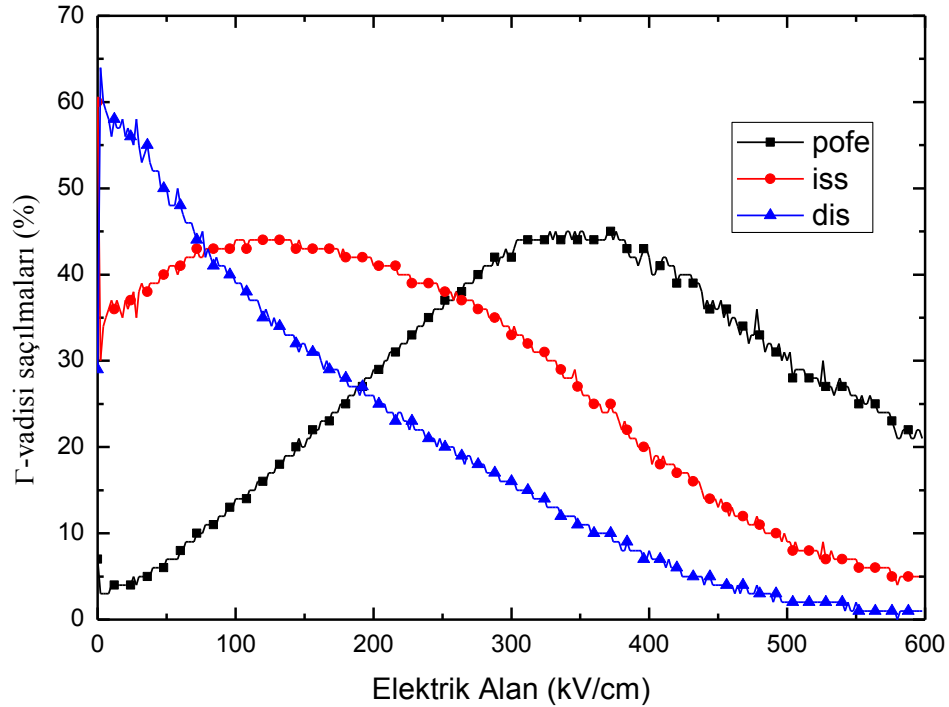
sıcaklığında, dislokasyon yoğunluğu 0 ve  $1 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  değerleri için en yüksek sürüklenme hızı  $1,7 \times 10^7 \text{cm/sn}$  bulundu (O'Leary et al, 1998; 1999; 2006). Bu grafiği yorumlamadan önce daha anlaşılabilir olması için elektrik alan ile ortalama elektron enerjisi ve vadi saçılmalarına bakılmalıdır.



Şekil 7.2. AlN yarıiletken bileşiğinin uygulanan elektrik alana göre enerji değişimi

Uygulanan elektrik alanın bir fonksiyonu olarak ortalama elektron enerjisini incelersek, Şekil 7.2'de yaklaşık 300kV/cm elektrik alan değerine kadar elektron enerjisini yaklaşık olarak 0.1 eV değerlerinde bastırıldığını görüyoruz. Bu elektrik alan değerinden sonra ortalama elektrik enerjisinin artan elektrik alan ile belirgin bir artış gösterdiğini görülmektedir.

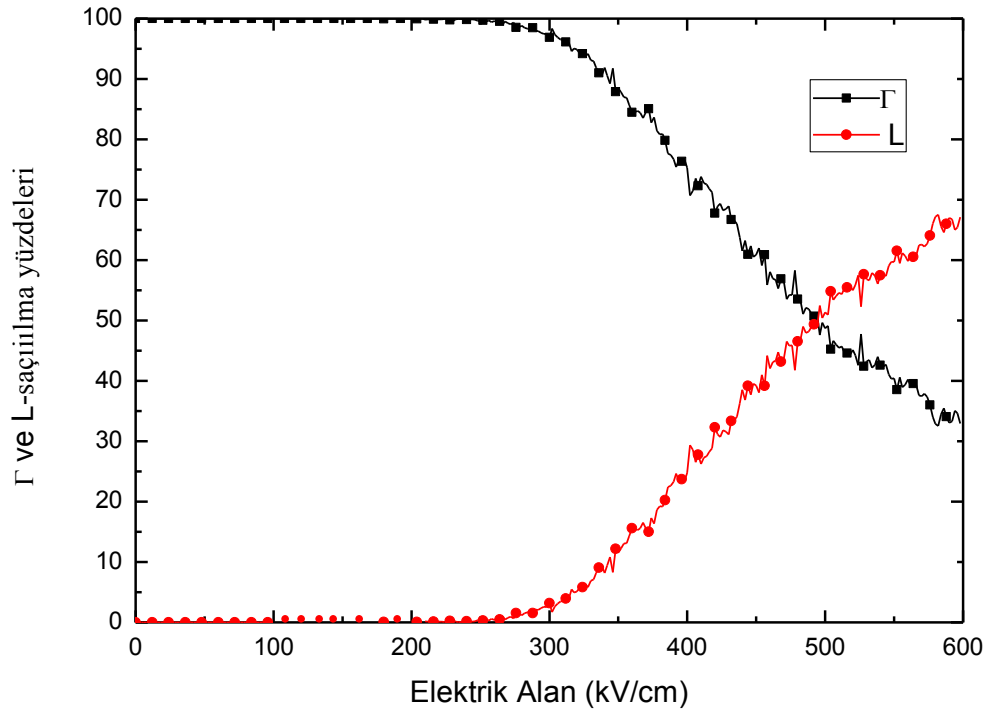
Bunun nedenlerini daha iyi anlayabilmek için de  $\Gamma$  vadisi saçılmalarına bakabiliriz.



Şekil 7.3. AlN yarıiletken bileşiği için uygulanan elektrik alanla  $\Gamma$  vadisinde gerçekleşen saçılmalar

Şekil 7.3'te başlangıçta yaklaşık %60 oranla dislokasyon saçılımının, %30'luk değerle de iyonize safsızlık saçılmasının etkili olduğunu görüyoruz. Artan elektrik alanla birlikte polar optik fonon emisyon saçılmasının artarken, dislokasyon saçılmasında azalmaktadır. Elektrik alanın 300kV/cm'lik değerinden sonra ise polar optik fonon emisyon saçılımının yaklaşık 400 kV/cm'lik elektrik alan değerine kadar sabit kaldığı; bu değerden sonra azalmaya başladığı iyonize safsızlık saçılımı ve dislokasyon saçılımlarının ise azalmaya devam ettikleri gözlemlenmektedir. 300kV/cm'de elektronun enerjisine bakıldığında bu değerden sonra ani bir artış gösterdiği görülmektedir. Dislokasyon ve iyonize safsızlık saçılmaları elastik saçılmalardır ve elektronun enerjisinde bir değişikliğe yol açmazlar. 300kV/cm elektrik alan değerine kadar elektron her polar optik fonon saçılımına uğradığında elektrik alandan kazanmış olduğu enerjisini dengelemiştir. Bu değerden sonra polar optik fonon saçılmaları elektron enerjisini baskılayamaz ve artan elektrik alan değeri ile elektrolar bir üst vadiye geçebilecek kadar enerji kazanır. Bu değerden sonra ise polar optik fonon emisyon

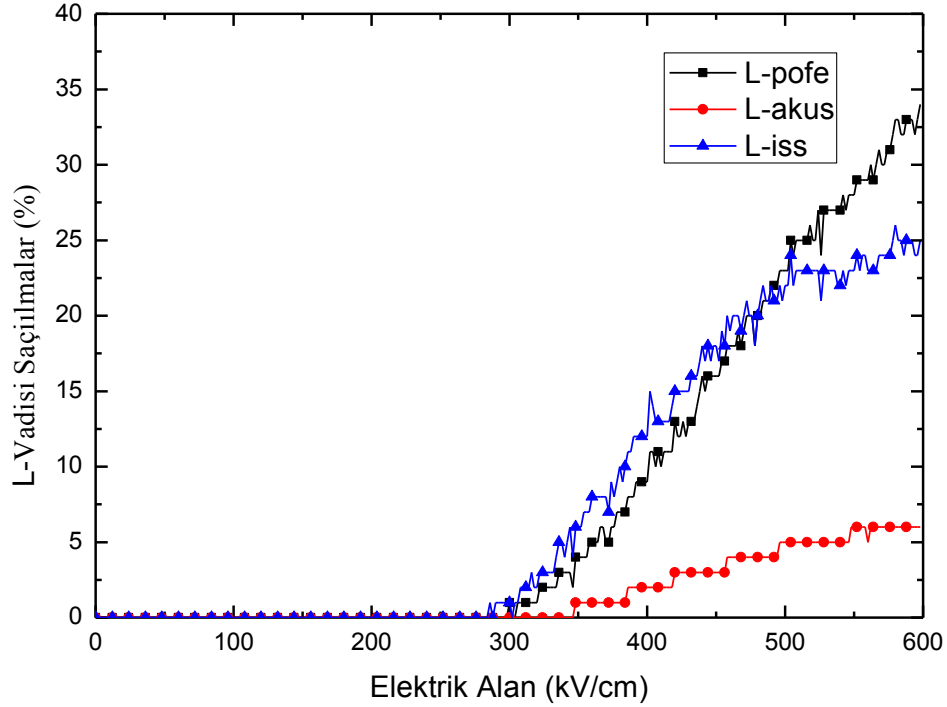
saçılmaları elektron ortalama elektronun enerjisi ani bir artışa geçmiştir. Şekil 7.4'deki grafik incelendiğinde,



Şekil 7.4. Simülasyon boyunca  $\Gamma$  ve L vadisinde gerçekleşen saçılma yüzdeleri

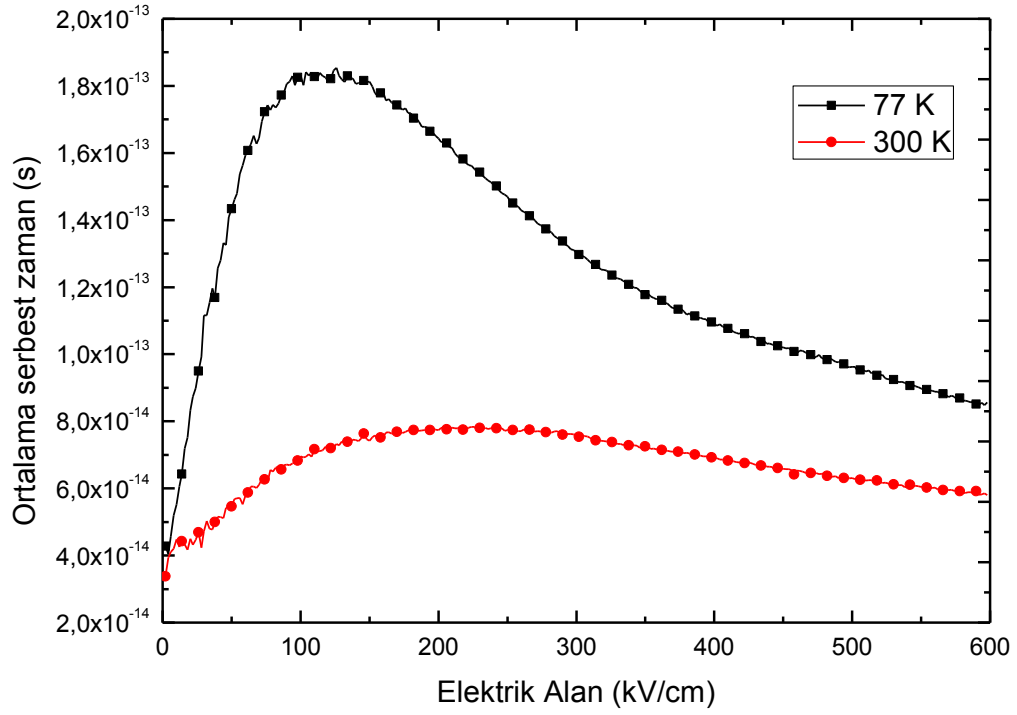
yaklaşık 270kV/cm'lik elektrik alan değerinden başlayarak 2. Vadiye geçişlerin başladığını gözlemledik. 2.vadide ki saçılmalar için Şekil 7.5'e bakılırsa





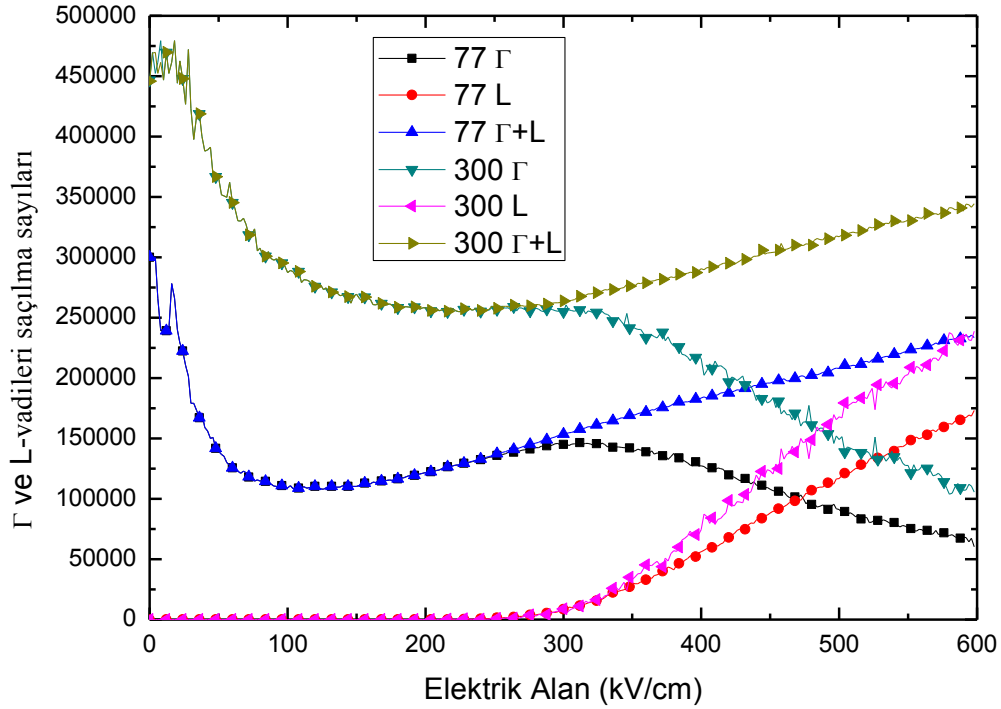
Şekil 7.5. Simülasyon boyunca L vadisinde gerçekleşen saçılma yüzdeleri

yaklaşık 270 kV/cm değerinden sonra iyonize safsızlık saçılımı, polar optik fonon saçılımı ve akustik fonon saçılımı artış göstermiştir. Şekil 7.1'deki hız grafiğine tekrar bakılırsa, 350 kV/cm'lik elektrik alan değerinden sonra sürüklenme hızı azalmaya başlamıştır. Şekil 7.5'e bakıldığında, bu değerden itibaren iyonize safsızlık saçılımının artmaya başladığını bunun da hızın düşmesine neden olduğunu göstermektedir.



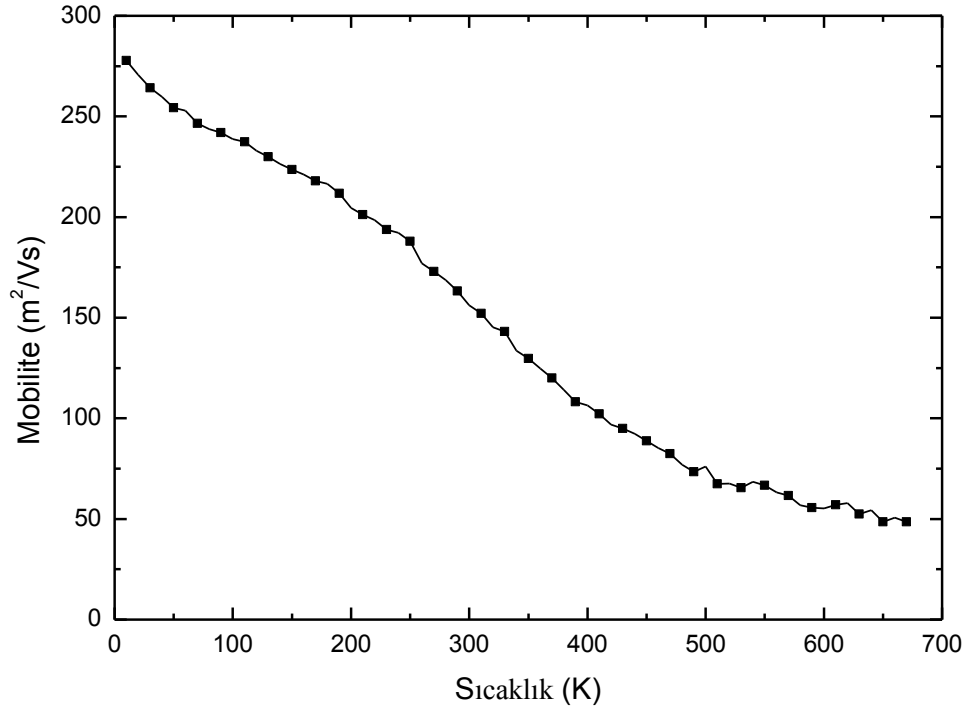
Şekil 7.6. Ortalama serbest zaman elektrik alan ile değişimi

Şekil 7.6' da artan elektrik alana karşı ortalama serbest zaman grafiğini görüyoruz. Buna göre 300K sıcaklık değeri için başlangıçta  $3.10^{-14}$  s olan ortalama serbest zaman toplam saçılma sayısının azalması ile birlikte  $6.10^{-14}$  s lik değere çıkmıştır.



Şekil 7.7. Simülasyon boyunca gerçekleşen  $\Gamma$  ve L vadi saçılmalarının elektrik alanla değişimi

Şekil 7.7' de ,  $\Gamma$  ve L vadilerindeki saçılmalara baktığımızda 300K sıcaklığı için artan elektrik alanla birlikte başlangıçta yaklaşık 450000 olan saçılma sayısının; 600kV/cm' lik elektrik alan değerinde yaklaşık 350000 saçılma sayısına düştüğü görülmektedir.  $\Gamma$  ve L vadilerindeki saçılma sayılarına baktığımızda (Şekil 7.3 ve 7.5) iyonize safsızlık saçılması ve dislokasyon saçılmalarının baskın saçılmalar olduğunu görüyoruz. Bu saçılmalar elastik saçılmalar oldukları için elektron enerjisinde bir değişime neden olmazlar, ancak diğer saçılmaların etkinliklerini azaltırlar. Bu da toplam saçılma sayısında bir azalmaya neden olur.



Şekil 7.8: Elektron sürüklenme mobilitesinin sıcaklık ile değişimi

Şekil 7.8 'de elektron mobilitesinin sıcaklıkla değişimi görülmektedir. Grafiğe göre mobilite 50K sıcaklık değerinde iken yaklaşık 275 m<sup>2</sup>/Vs değerinde, artan sıcaklıkla birlikte 650K sıcaklık değerinde ise 50 m<sup>2</sup>/Vs değerine düşmüştür (Albrecht et al, 1998; Pugh et al, 1999; Purton et al, 2007; Bulutay et al, 2002; Li et al; 2003; GuO B. and Ravaioli U. ,2002 ) .

## SONUÇ VE TARTIŞMA

Monte Carlo yöntemi, istatistiksel temellere dayalı sayısal bir yöntemdir ve fiziksel problemleri çözmeyi hedefler. Problemlerin çözümünde olasılıksal bir benzerlik kurulmaya çalışılır. Deneysel örnekleme teknikleri kullanılır dolayısıyla yüksek hızda ve bellekte bilgisayar kullanımı gerektirir.

Monte Carlo tekniği ile deneysel çalışmaların tam bir benzeşimi bilgisayarda gerçekleştirilmiştir. Monte Carlo yöntemi öncelikle AIN materyali için denenmiş ve daha literatürdeki benzer çalışmalarla karşılaştırılmıştır. AIN için Monte Carlo sonuçları kıyaslandığında çok iyi bir uyum elde edildiği görülmüştür. AIN materyelinin deneysel olarak çalışması zor bir materyeldir. Ancak Monte Carlo tekniğinin kullanılması tüm bu deneysel zorlukları ortadan kaldırmış ve çalışmanın teorik olarak çok daha kısa zamanda ve daha az hata ile yapılması sağlanmıştır.

Çalışmamızda Monte Carlo yöntemi; katı, wurtzite fazdaki AIN'in iki vadi analitik bant yapısı kullanılarak elektron iletiminin simülasyonu yapmak için kullanıldı. Simülasyon sonucunda; elektrik alanın bir fonksiyonu olarak sürüklenme hızı, ortalama elektron enerjisi,  $\Gamma$  ve L vadilerindeki saçılma yüzdeleri ve sayıları, ortalama serbest zaman ve mobilite grafikleri çizildi.

Hız - elektrik alan grafiğinde üç bölge gözlemlenmiştir (Şekil 7.1). Bunlardan ilk bölgede elektronların sürüklenme hızı artan elektrik alanla birlikte bir lineer artış göstermiştir; ikinci bölgede bu artış daha küçük bir ivme ile devam etmiş, üçüncü bölgede ise hızı düşüşe geçmiş ve negatif diferansiyel mobilite oluşmuştur.

Buna göre ilk bölgede elektronların sürüklenme hızı artan elektrik alanla birlikte yaklaşık 100kV/cm'lik elektrik alan değerine kadar ani bir artış göstermiştir. Bu değerden sonra ise fonon oluşması için gerekli olan 99,2 meV 'lik enerji sağlanması ile birlikte; sürüklenme hızı da daha küçük bir ivme ile artış göstermeye başlamıştır.

Ortalama elektron enerjisine baktığımızda ise bu sebepten dolayı elektronların ortalama enerjisinin yaklaşık 300 kV/cm'lik değere kadar yaklaşık 0,1 eV değerinde sabit kaldığı gözlenmiştir. Artan elektrik alanla birlikte polar optik fonon emisyon saçılmalarının etkinliğinin azalmasıyla enerji kazanan elektronlar bir üst vadiye geçmişlerdir. Böylece yaklaşık 300kV/cm'lik elektrik alan değerinden sonra üçüncü bölgede incelediğimiz negatif olayı gerçekleştirmiş; elektronun sürüklenme hızı azalmıştır. Yüksek elektrik alanlarda, ısınan elektronlar, bu sıcaklığın belli bir değerinde bazı elektronların üst vadiye saçılmasına izin verirler. Bu noktada elektronların daha yüksek bir etkin kütle ile üst vadiye yerleşmeleri beklenir. Bu grafikte üçüncü bölgenin başlangıç kısmına denk gelir ki yaklaşık 300kV/cm'lik elektrik alan değerinde L vadisine saçılmaların başladığını gözlemlemiştir. Buradan elektron sürüklenme hızının; elektronun etkin kütlesine bağlı olduğunu söyleyebiliriz.

Ayrıca artan elektrik alanla birlikte sürüklenme hızı azalır veya başka bir ifadeyle negatif diferansiyel mobilite oluşur. AlN için negatif diferansiyel mobilitenin oldukça düşük bir etkiye sahip olduğu görülmektedir.

Grafiği 77K ve 300K sıcaklık değerleri için incelediğimizde ise sürüklenme hızının düşük sıcaklıklarda daha yüksek olduğu yorumu yapılabilir.

Saçılmalara bakıldığında düşük elektrik alanlarda iyonize safsızlık saçılması ve dislokasyon saçılmalarının wurtzite AlN materyalinin elektron taşınımında önemli rol oynadığını görülmüştür.

Sıcaklığın artmasıyla birlikte üst vadiye geçişlerin başlaması ile mobilitenin azaldığı görülmüştür. Bu da yüksek sıcaklıklarda elektron çok fazla saçılmaya uğradığı için hareketliliği azalır; dolayısıyla da mobilitesi düşer şeklinde ifade edilebilir.

## Ek Açıklamalar

Çizelge 7.1 Deneyde kullanılan materyal parametreleri

Parametreler	AlN
Yasak enerji aralığı (eV)	6.2
$\Gamma - L$ vadisi arası yasak enerji aralığı (eV)	0.7
Materyal yoğunluğu ( $\text{g/cm}^3$ )	3.23
Etkin kütle ( $m_1^*/m_0$ )	0.48
Etkin kütle ( $m_2^*/m_0$ )	1
Düşük frekans dielektrik sabiti ( $\epsilon_s/\epsilon_0$ )	4.77
Yüksek frekans dielektrik sabiti ( $\epsilon_\infty/\epsilon_0$ )	8.5
Ses hızı (m/s)	9060
Akustik deformasyon potansiyeli (eV)	9.5
Optik fonon enerjisi (meV)	110
Vadiler arası optik fonon enerjisi (meV)	99.2
Vadiler arası deformasyon potansiyeli (V/cm)	$1 \times 10^9$

## KAYNAKLAR

- Akarsu, M., 2003, Hg katkılanmış CdTe yarıiletken bileşiminde taşınım özelliklerinin Monte Carlo simülasyonu ile belirlenmesi, Doktora tezi, ESOGÜ, 118p
- Albrecht J.D., Wang R.P. , Ruden P.P., Farahmand M. And Brennan K.F., 1998, Monte Carlo calculation of electron transport properties of bulk AlN, American Institute of Physics, 83, 1446-1449.
- Aşan, Ö.,2010, Fotonik kristaller, Yüksek lisans tezi, ESOGÜ, 74p
- Bulutay C., Ridley B.K. and Zakhleniuk N.A., 2002, High-energy electron relaxation and full-band electron Dynamics in aluminium nitride, Elsevier Science, 314, 63-67.
- Gezci,S.,1992, Katılmal Fiziđi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Gümüşsuyu, 542p
- Jacoboni, C., 2010, Theory of Electron Transport in Semiconductors, Springer, New York, 588p
- Gu O.B. and Ravalli U., 2002, Full band Monte Carlo simulation of wurtzite AlGaIn/GaN modfets, Journal of computational electronic, 1, 309-311.
- Hook, J.R., Hall H.E., 1999, Katılmal Fiziđi, (Çev: Köksal F., Altunbaş M.), Literatür, İstanbul, 467s
- Jacoboni , C., 2010, Theory of Electron Transport in Semiconductors, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 587p
- Kittel, C., 1986, Introduction to solid state physics, Wiley, New York, 646p
- Levinshtein, M. E., Rumyantsev, S. L. and Shur, M.S., 2001, Properties of advanced semiconductor materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe, John Wiley, New York, 194p
- Mckelvey, J.P.,1966, Solid State and Semiconductor Physics, Harper & Row, New York Evanston & London, and John Weatherhill, Inc., Tokyo,512p.
- Metropolis N., Ulam S., 1949, The Monte Carlo method, Journal Of The American Statistical Association, 44, 335-341.
- Metropolis, N., 1987, The Beginning of the Monte Carlo method, Los Alamos Science Special Issue, 125-130p.
- Mogestue, C., 1993, Monte Carlo simulation of semiconductor devices, Chapman & Hall, London, 326p



### KAYNAKLAR (Devam)

Morkoç, H., 1999, Nitride semiconductors and devices, Springer, Berlin, New York, 488p

Nag, B.R., 1980, Electron transport in compound semiconductors, Springer-Verlag, New York, 461p

Newman, M.E.J. and Barkema G.T., 1999, Monte Carlo methods in statistical physics, Oxford University Press, New York, 475 p.

Li J., Nam K.B., Nakarmi M.L., Lin J.Y., Jiang H.X. , Carrier P. and Wei S.H., 2003, Band structure and fundamental optical transitions in wurtzite AlN, Applied physics letters, 83, 5163-5165.

O'Leary S.K., Fourtz B.E., Shur M.S., Brapkar U. V. and Eastman L.F., 1998, Monte Carlo simulation of electron transport in wurtzite aluminum nitride , Solid State Communications, 105, 621-626.

O'Leary S.K., Fourtz B.E., Shur M.S and Eastman L.F., 1999, Transient electron transport in wurtzite GaN, InN and AlN, Journal of applied physics, 85, 7727-7733.

O'Leary S.K., Fourtz B.E., Shur M.S and Eastman L.F., 2006, Steady-state and transient electron transport within the III-V nitride semiconductors, GaN, AlN and InN: A review, J Mater Sci: Mater electron, 17, 87-126.

Pugh S.K., Dugdale D.J., Brand S. And Abram R.A., 1999, Electronic structure calculations on nitride semiconductors, Semicond. Sci. Technol. , 14, 23-31.

Purton J.A., Lavrentiev M.Y and Allan N.L., 2007, Monte Carlo simulation of GaN/AlN and AlN/InN mixtures, Science Direct, 105, 179-184.

Rössler, U., 2004, Solid state theory an introduction, Springer, Berlin, 346p

Shur M., 1995, Introduction to electronic devices, John Wiley&Sons, Inc., Kanada, 577p

Singh, J.,1993, Physics of semiconductors and their heterostructures, McGraw-Hill, 851p

Singh, J., 1994, Semiconductor devices : An introduction, McGraw-Hill, New York, 669p

Snoke D.W., 2009, Solid state physics essential concept, Pearson, San Francisco, 619p

**KAYNAKLAR (Devam)**

Taniyusu, Y. and Kasu, M., 2010, Improved emission efficiency of 210-nm deep ultraviolet aluminum nitride light-emitting diode , NTT technical review, 5p

Van der Ziel, A., 1976, Solid state physical electronics, Englewood Cliffs, N.J. : Prentice Hall, 528p

Wolf, H.F., 1971, Semiconductors, Wiley-Interscience, Canada, 552p

Yacobi, B.G., 2003, Semiconductor materials : an introduction to basic principles, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 228p