

GaN Yarıiletken Bileşiminde Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu ile
Belirlenmesi

Fatih Erkan ÇEVİK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Mayıs 2015

Monte Carlo Study of Transport Properties in GaN

Fatih Erkan ÇEVİK

MASTER OF SCIENCE THESIS

Department of Physics

May 2015

GaN Yarıiletken Bileşiminde Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu ile
Belirlenmesi

Fatih Erkan ÇEVİK

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

Danışman: Yrd. Doc. Dr. Mustafa Akarsu

Mayıs 2015

ONAY

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi Fatih Erkan ÇEVİK'in YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı "GaN Yarıiletken Bileşiminde Taşımın Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu ile Belirlenmesi" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

Danışman : Yrd.Doç.Dr.Mustafa AKARSU

İkinci Danışman : -----

Yüksek Lisans Tez Savunma Jürisi:

Üye : Yrd. Doç. Dr. Mustafa AKARSU

Üye : Yrd. Doç. Dr. Sema KURTARAN

Üye : Doç. Dr. H. Senem AYDOĞU

Üye : Prof. Dr. İdris AKYÜZ

Üye : Prof. Dr. Ferhunde ATAY

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

Prof. Dr. Hürriyet ERŞAHAN
Enstitü Müdürü

ETİK BEYAN

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kılavuzuna göre, Yrd.Doç.Dr. Mustafa AKARSU danışmanlığında hazırlamış olduğum ‘GaN Yarıiletken Bileşiminde Elektron Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu ile Belirlenmesi’ başlıklı YÜKSEK LİSANS tezimin özgün bir çalışma olduğunu; tez çalışmamın tüm aşamalarında bilimsel etik ilke ve kurallarına uygun davrandığımı; tezimde verdiğim bilgileri, verileri akademik ve bilimsel etik ilke ve kurallarına uygun olarak elde ettiğimi; tez çalışmamda yararlandığım eserlerin tümüne atıf yaptığımı ve kaynak gösterdiğimi ve bilgi, belge ve sonuçları bilimsel etik ilke ve kurallara göre sunduğumu beyan ederim.

05/05/2015

Fatih Erkan ÇEVİK

İmza

ÖZET

Monte Carlo yönteminin yarıiletkenlerde yük iletimine uygulanması, kristal içerisinde elektrik alana maruz kalan bir elektronun hareketinin izlenmesinden oluşur. Elektrik alan içindeki bir elektronun hareketi sürüklenme ve saçılma süreçlerinden oluşur. Sürüklenme hareketine maruz kalan elektronun hızı, ivmesi, enerjisi, momentumu, dalga vektörü belirlenir. Elektron sahip olduğu enerji ile uyumlu olarak bir saçılmaya uğrar, saçılmanın tipine göre saçılmadan sonraki momentumu, enerjisi, hızı belirlenir. Bu süreç yeterince uzun bir süre izlenerek ortalamalar üzerinden elektronun hızı, enerjisi ve mobilitesi belirlenmiş olur.

GaN bileşiğinde elektron taşınımı farklı dislokasyon yoğunlukları için sürüklenme hızının elektrik alan şiddeti ile değişimi, 2 ns simülasyon süresince incelendi. Elektron sürüklenme hızı, ortalama elektron enerjisi ve ortalama serbest zamanın elektrik alan ile değişimleri belirlendi. Simülasyon boyunca gerçekleşen saçılmaların etkinlikleri, toplam saçılma olayları içerisindeki yüzde olarak belirlenir, elektron sürüklenme hızı ve ortalama elektron enerjisi üzerindeki etkileri incelendi. Elektron mobilitesinin örgü sıcaklığı ve elektrik alan ile değişimi incelendi.

GaN üzerinde uygulanan elektrik alan, sıcaklık ve safsızlık konsantrasyonu değerleri değiştirilerek hareket hesapları yapılmış ve sonuçlar üzerinde karşılaştırmalar ve değerlendirmeler yapılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Saçılım, saçılma teorisi, Galyum nitrit, Monte Carlo yöntemi, mobilite, simülasyon, yarıiletken.

SUMMARY

The implementation of Monte Carlo method to load transmission in semiconductors consists of following the movement of an electron exposed to electric field in crystal. A movement of an electron in electric field consists of the processes of drift and scattering. The velocity, acceleration, energy, momentum, wave vector of an electron exposed to the movement of drift. Electron scatters correspondingly with its energy. According to the types of the scattering, its momentum and energy after scattering are determined. Electron's velocity, energy, mobility are determined taking averages into consideration after this process is followed enough.

Electron transport in GaN semiconductor compound was examined at exchange rate of drift of the electric field strength for different dislocation densities time of 2 ns. Changes of electron drift velocity, mean electron energy, and mean free time with the electric field were determined. The scattering activities occurred during the simulation were determined as percentages in total scattering events, and effects of these scatterings on the electron drift velocity and mean electron energy were examined. Electron mobility was studied as a function of lattice temperature and electric field.

Calculations of motion are done thereby values of applied electric field on GaN, temperature and concentration of impurity are changed, comparisons and evaluations are done about the results.

Keywords: Scattering, scattering theory, Gallium nitrit, Monte Carlo Method, mobility, simulation, semiconductor

TEŐEKKÜR

Yüksek lisans çalışmam boyunca, tez çalışmalarımda, bana danışmanlık ederek, beni yönlendiren ve her türlü olanağı sağlayan değerli hocam sayın Yrd. Doç. Dr. Mustafa AKARSU' ya en içten saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Çok büyük yardımları ve desteğı olan, yolun sonuna kadar benim yanımda olan, çok yardımsever arkadaşım Bekir DEVECİ'ye ve sabırla beni destekleyen eşim ve kızıma sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	vi
SUMMARY	vii
TEŞEKKÜR	viii
İÇİNDEKİLER	ix
ŞEKİLER DİZİNİ	xi
TABLolar DİZİNİ	xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ	1
2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI	3
3. MONTE CARLO YÖNTEMİNİN TEMELLERİ	6
3.1. Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu.....	7
3.2. Sürüklenme Süreci.....	10
3.3. Saçılma Süreci.....	10
3.4. Hız Hesabı.....	17
4. SAÇILMA HIZLARI	20
4.1. Safsızlık saçılma Hızı.....	20
4.2. Fonon Saçılımı.....	25
4.3. Akustik Fonon Saçılma Hızı.....	26
4.4. Kutupsal Olmayan Optik Fonon Saçılma Hızı.....	31
4.5. Vadiler Arası Optik Fonon Saçılma Hızı.....	33
4.6. Kutupsal Optik Fonon Saçılma Hızı.....	34
4.7. Dislokasyon Saçılma Hızı.....	38

İÇİNDEKİLER (devam)**Sayfa**

5. GaN MATERYALİNİN TEMEL ÖZELLİKLERİ.....	41
5.1. Kristal Yapısı.....	41
5.2. Materyal Parametreleri.....	43
5.3 Bant Yapısı.....	44
6. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	45
KAYNAKLAR DİZİNİ.....	52

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
3.1. Monte Carlo yönteminin temelleri.....	6
3.2. Tek parçacık Monte Carlo simülasyonu akış şeması.....	8
3.3. Saçılma mekanizmasının seçimi için akış şeması.....	12
3.4. Laboratuvar çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ve başlangıç dalga vektörü \vec{k} 'nın eksenine paralel olduğu yeni koordinat çerçevesi arasındaki ilişki	13
3.5. Başlangıç dalga vektörü \vec{k} 'ya göre \vec{k} ' nün θ ve ϕ açılarının belirlenmesi.....	15
4.1. Pozitif bir iyon yakınında yük nötralliğinin bozunumu, n_0 denge elektron yoğunluğu, r iyondan olan uzaklık.....	20
4.2. θ ; \vec{k} ve \vec{k} ' arasındaki kutup açısı.....	23
4.3 \vec{k} ile \vec{q} arasındaki θ ve, \vec{k} ile \vec{k} arasındaki \vec{q} kutup açısı.....	29
5.1 GaN Materyaline ait kristal yapısı.....	41
5.2 GaN'ın bant yapısı.....	44
6.1 GaN için elektron sürüklenme hızının uygulanan elektrik alanla değişimi.....	45

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam)

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
6.2. Ortalama elektron enerjisinin elektrik alan şiddeti ile değişimi.....	46
6.3 Γ_1 -vadisinde saçılma mekanizmalarının 2ns lik simulasyon süresince etkinlikleri.	47
6.4. Γ_2 -vadisinde saçılma mekanizmalarının 2ns lik simulasyon süresince etkinlikleri.....	47
6.5. Elektron vadi işgaliyeti.....	48
6.6. Farklı dislokasyon yoğunlukları için sürüklenme hızının elektrik alan şiddeti değişimi.....	49
6.7. 50 kV/cm elektrik alan değerinde düşük alan mobilitesinin sıcaklıkla değişimi	50
6.8. 300 K örgü sıcaklığında ve 50 kV/cm lik sabit elektrik alan şiddetinde $\mu=v_d/E$ bağıntısına göre belirlenen düşük alan mobilitesinin dislokasyon yoğunluğu ile değişimi.....	51

ÇİZELGELER DİZİNİ**Cizelge****Sayfa**

5.1. GaN materyalinin hesaplamalarda kullanılan parametreleri.....	42
--	----

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklamalar</u>
τ	Ortalama serbest zaman
$p(t)$	Birim zamanda saçılma olasılığı
j	Saçılma mekanizması sayısı
Λ	Toplam saçılma hızı
r	Rasgele sayı
\vec{k}	Elektron dalga vektörü
$\Delta\vec{k}$	Dalga vektöründeki değişim
\hbar	Planck sabiti
H	Hamiltoniyen
Ψ	Dalga fonksiyonu
T	Simülasyon süresi
\vec{v}	Elektron hızı
θ	Kutup açısı
ϕ	Azimut açısı
\vec{E}	Elektrik alan
$V(\vec{r})$	Etkin elektrostatik potansiyel
H'	Permütasyon potansiyeli
$E_{\vec{k}}$	\vec{k} dalga vektörlü elektron enerjisi
Ω	Kristal hacmi
ξ	Durumlar arası geçiş hızı
$c_{\vec{k}}(t)$	Zaman değişim katsayısı

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ (devam)

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklamalar</u>
δ	Dirac fonksiyonu
\vec{e}_q	Birim kutuplanma vektörü
$W(\vec{k})$	Saçılma hızı
$\hbar\omega$	Fonon Enerjisi
E_g	Yasak enerji aralığı
m^*	Etkin elektron kütlesi
m_0	Serbest elektron kütlesi
α	Parabollükten sapma vektörü
q	Elektron yükü
Ze	Safsızlık atomunun yükü
N_D^+	İyonize safsızlık yoğunluğu
ϵ_s	Statik dielektrik sabiti
ϵ_∞	Yüksek frekans dielektrik sabiti
$1/q_D$	Debye uzunluğu
$V(r)$	Perdelenmiş Coulomb potansiyeli
$N(E_{\vec{k}})$	Durum yoğunluğu
$a_{\vec{q}}$	Yoketme operatörü
$a_{\vec{q}}^+$	Yaratma operatörü
ρ	Yoğunluk
c_l	Materyalin elastik sabiti

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ (devam)

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklamalar</u>
v_s	Materyaldeki ses hızı
m_1^*	Γ –vadisindeki etkin elektron kütlesi
m_2^*	L –vadisindeki etkin elektron kütlesi
e^*	Etkin yük
E_d	Akustik deformasyon sabiti
$n_{\vec{q}}$	Fonon sayısı
k_B	Boltzmann sabiti
T_L	Örgü sıcaklığı
\vec{D}_0	Optik deformasyon potansiyeli
$\hbar\omega_{if}$	Vadiler arası optik fonon enerjisi
D_{if}	Vadiler arası deformasyon potansiyeli
Z_f	Vadi sayısı
ϵ_0	Boşluğun elektrik geçirgenliği
\vec{u}	Fononlar için bağıl yerdeğiştirme
\vec{p}	Kutuplanma
N_s	İyonize safsızlık konsantrasyonu

Kısaltmalar

Afs

İss

Kofe

Kofa

Vkofe

Vkofa

Açıklamalar

Akustik fonon saçılması

İyonizise safsızlık saçılması

Kutupsal optik fonon yayınlama saçılması

Kutupsal optik fonon soğurma saçılması

Vadiler arası kutupsal optik fonon yayınlama

Vadiler arası kutupsal optik fonon soğurma

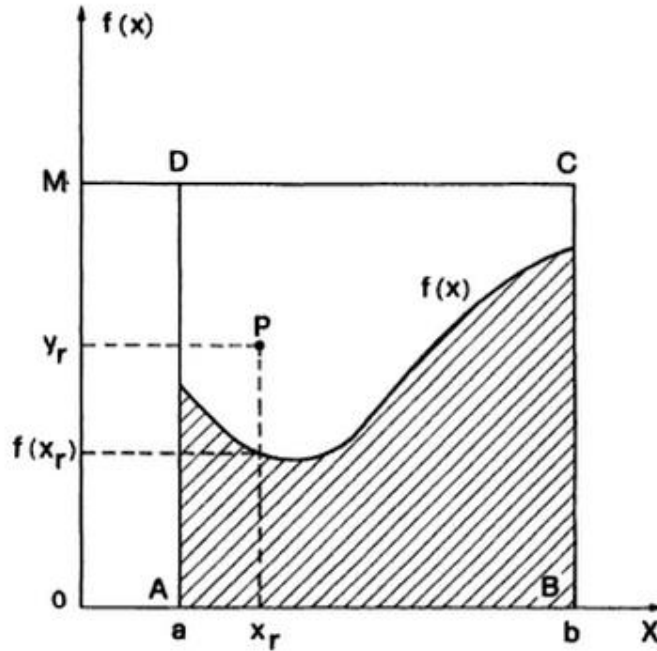
1.GİRİŞ

Monte Carlo yöntemi, adını Monaco'nun başkenti olan Monte Carlo'nun kumar oyunlarından alır. Bu yöntemin kullandığı matematiksel teknikler rasgele sayıların seçimine dayanır. Yöntem şimdiki haliyle ilk olarak ikinci dünya savaşında, atom bombasının yapımı için Los Alamos'daki gizli araştırmalarda nötron taşınımı probleminin çözümü için Enrico Fermi ve Von Neuman tarafından kullanılmıştır (Carlo Jacoboni ve Paulo Lugli 1989).

Monte Carlo yöntemi çeşitli problemlerin çözümü için genel bir matematiksel araçtır. Bunu basit bir örnekle açıklamak istersek;

$$\int_a^b f(x) dx \quad (1.1)$$

belirli integralin çözümünü düşünelim,



Şekil 1.1. Monte Carlo metodu ile integral çözümü

Burada $f(x)$ Şekil 1.1’de görüldüğü gibi pozitif bir fonksiyondur. M ($a-b$ aralığında) $f(x)$ ’in maksimum değerinden daha büyük bir sayı olsun. ($a-b$) ve $(0-M)$ aralığında düzgün dağılmış x_r ve y_r sayı çiftleri üretelim. Her çift için x - y koordinatına karşılık gelen noktayı belirleyelim. $f(x)$ eğrisinin altına düşen noktaların oranı $y_r \leq f(x_r)$, ABCD kutusunun alanı ve eğrinin altında kalan alan arasındaki oranı verir. Böylece Denklem 1.1’deki integralin değeri elde edilir.

Yukarıdaki örnek tüm Monte Carlo tekniklerinin önemli bir özelliğini açıklar, integralin tam sonucu çok daha fazla sayıda x_r ve y_r sayı çiftlerinin üretilmesi ile elde edilebilir.

Monte Carlo yönteminin en önemli özelliği fiziksel bir problemin çözümüne ulaşmak için rasgele örnekleme tekniği kullanmasıdır. Diğer yandan uygun bir sayısal çözümün elde edilmesi fiziksel durumun bilinmeyen durumları için diferansiyel denklemlerin çözümünün yapılarak sistemin matematik modeli ile başlar.

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 ve Barkema, 1999).

Monte Carlo yöntemi ilk olarak 1966 Kurasowa tarafından yarıiletkenlerde elektrik alan taşınımı problemine uygulandı. Monte Carlo yönteminin önemli bir özelliği de materyal modellemesine uygulanabilmesi ve deneysel olarak doğrudan gözlenemeyecek fiziksel süreçlerin simülasyonunu gerçekleştirebilmesidir (Moglestue, 1993).

2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI

Yapmış olduğumuz çalışmada Monte Carlo yönteminin yarıiletkenlerde yük iletimine uygulanması, kristal içerisinde elektrik alana maruz kalan bir elektronun hareketinin izlenmesinden oluşur. Elektrik alan içindeki bir elektronun hareketi sürüklenme ve saçılma süreçlerinden oluşur. Sürüklenme hareketine maruz kalan elektronun hızı, ivmesi, enerjisi, momentumu, dalga vektörü belirlenir. Elektron sahip olduğu enerji ile uyumlu olarak bir saçılmaya uğrar, saçılmanın tipine göre saçılmadan sonraki momentumu, enerjisi, hızı belirlenir. Bu süreç yeterince uzun bir süre izlenerek ortalamalar üzerinden elektronun hızı, enerjisi ve mobilitesi belirlenmiş olur. GaN bileşiğinde elektron taşınımı farklı dislokasyon yoğunlukları için sürüklenme hızının elektrik alan şiddeti ile değişimi, 2 ns'lik simülasyon süresince incelendi.

Paige (1964) ve Conwell (1967) bu alanda gerçekleştirilen araştırmaların ilk aşamasının tüm detaylarını vermektedir. Konuyla ilgili devam etmekte olan tartışmalardan anlaşılıyor ki bu problemle ilgili iki yeni sayısal yaklaşım Monte Carlo tekniği (Kurosowa, 1966) ve yineleme tekniği (Budd, 1966) 1966'daki Kyoto Yarı İletken Konferansında sunulduğunda sıcak elektron fizikçileri bu yeni önerileri büyük coşkuyla karşıladı. Aslında dikkate değer karışıklıktaki mikroskobik fiziksel modeller için Boltzmann denkleminin kesin sayısal çözümlerini elde etmenin modern büyük ve hızlı bilgisayarlar sayesinde mümkün olacağı açıktı. Bu iki teknik daha sonra Price (1968), Rees (1969) ve Fawcett ve vd. (1970) tarafından geliştirilerek daha yüksek bir konuma getirildi. O zamandan beri neredeyse istenilen tüm materyaller, farklı durumlardaki sonuçlara ulaşmak için kullanılmıştır. Monte Carlo yöntemi şimdiye kadar yukarıda bahsedilen iki tekniğin içindeki en yaygın olanıdır. Çünkü hem kullanımı kolaydır hem de fiziksel bakış açısına göre direkt olarak yorumlanabilir.

Monte Carlo tekniğinin en önemli gelişmeleri arasında Malvern grubunun kendiliğinden saçılma şeması (Rees, 1968, 1969), parabolik olmayan etkiler (Fawcett ve vd., 1969), dağılım anizotropisi (Fawcett ve Rees, 1969) ve difüzyona (Fawcett, 1973) giriş özelliği taşıyan önemli çalışmalardan bahsetmemiz gerekir. Diğer gelişme alanları içerisinde çok partiküllü simülasyon (Lebwohl ve Price, 1971) ile geçici dalgaların zaman

içindeki hesaplaması, bunların eşdeğerlikleri (Ruch, 1972 ve Baccarani. 1977), harmonik zaman değişimi (Price, 1973), alarım yarı iletkenlerin işlenmesi (Hauser ve vd., 1976) ve güçlü elektrik alanlarının kuantum etkileri (Barker ve Ferry, 1979) bulunmaktadır.

Monte Carlo matematiksel problemleri çözmek için kullanılan istatistiksel sayısal bir yöntemdir. Böyle olduđu için de taşınma problemlerine uygulanmasından çok önceleri doğmuş (Buslenko vd., 1966) ve pek çok bilimsel alana uygulanmıştır (Meyer,1956; Marchuk vd., 1980). Ancak, yük taşınımı meselesinde ise Boltzmann eşitliğinin çözümü için kullanılacak istatistiksel sayısal yaklaşım, kristal içerisindeki yük taşıyıcı dinamiklerinin direkt bir simülasyonu olacağını ortaya koymaktadır. Böylece eşitliklerin çözümü kurulmakta iken gerekli olan herhangi bir fiziksel bilgi kolaylıkla elde edilebilir. Bu açıdan değerlendirildiğinde, verilen bir problemin sayısal bir çözümü sağlandığında, incelenmekte olan süreçlerin anlaşılması bakımından onu takip eden fiziksel yorumunun da hala çok önemli olduđu dikkatlerden kaçmamalıdır. Deneysel ulaşılmaz olan belli fiziksel durumların simülasyonunu veya çalışılmakta olan süreçlerin kendine has özelliklerini vurgulamak için kullanılan, gerçek olmayan materyallerin araştırılmasını mümkün kıldığı için Monte Carlo yöntemi bu amaca ulaşmada çok faydalı bir araç olduğunu kanıtlamaktadır. Monte Carlo yönteminin bu kullanımı deneysel bir tekniğe benzer bir özellik taşır. Aslında simüle edilen deney analitik olarak formüle edilmiş teoriyle karşılaştırılabilir.

Evren Kalaycıkhıođlu (2008) yarıiletkenlerdeki yük taşıyıcılarının hareketlerinin ve taşınım denklemlerinin analiz edilmesi, yarıiletken aygıtların gelişimi için büyük önem taşımaktadır. Bu analizler için gereken etkileşmelerin, elektronik etkileşmelerin bant yapısının tanımlamaları yapıldıktan sonra fonon saçılması, safsızlık saçılması gibi saçılma işlemlerinin tanımlaması ve fiziksel olarak çözümlenmeleri Monte Carlo yöntemi ile yapılmıştır.

Nilgün Erol (2011) Monte Carlo tekniđi 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 edildiđi görülmüştür. AIN materyalinin deneysel olarak çalışması zor bir materyaldir. Ancak Monte Carlo tekniđinin

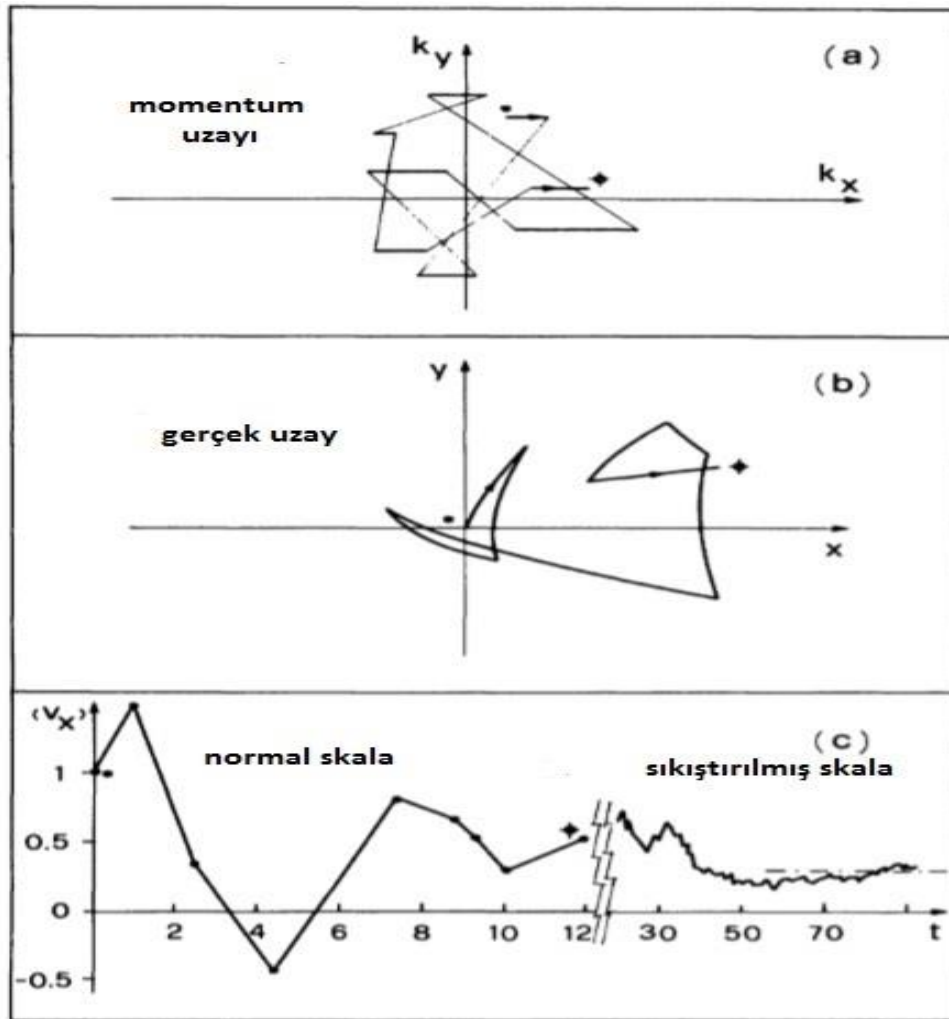
kullanılması tüm bu deneysel zorlukları ortadan kaldırmış ve çalışmanın teorik olarak çok daha kısa zamanda ve daha az hata ile yapılması sağlanmıştır.

Mustafa Akarsu (2003) CdTe yarıiletken bileşiminde elektron taşınımı 77 K ve 300 K sıcaklıklarında 2 ns'lik simülasyon süresince incelendi. Elektron sürüklenme hızı, ortalama elektron enerjisi ortalama serbest zamanın elektrik alan ile değişimlerinin incelemiştir. Simülasyon boyunca gerçekleşen saçılmaların etkinlikleri, toplam saçılma olayları içerisindeki yüzdeleri belirlenip, elektron sürüklenme hızı ve ortalama elektron enerjisi üzerindeki etkilerini incelemiştir.

Bekir Deveci (2015) yaptığı çalışmada GaAs bileşiminde elektron taşınımı 77 K, 300 K ve 450 K sıcaklıklarda, 2 ns lik simülasyon süresince incelendi. Elektron sürüklenme hızı, ortalama elektron enerjisi ve ortalama serbest zamanın elektrik alan ile değişimleri belirlendi. Simülasyon boyunca gerçekleşen saçılmaların etkinlikleri, toplam saçılma olayları içerisindeki yüzdeleri belirlenerek, elektron sürüklenme hızı ve ortalama elektron enerjisi üzerindeki etkileri incelendi. Elektron mobilitesinin örgü sıcaklığı ve elektrik alan ile değişimini incelemiştir.

3. MONTE CARLO YÖNTEMİNİN TEMELLERİ

Monte Carlo yönteminin yarıiletkenlerde yük taşımına uygulanması kristal içerisinde dışarıdan uygulanan Elektrik alan ve saçılma mekanizmalarına maruz kalan elektronun hareketinin simülasyonundan oluşur. Monte Carlo yönteminin temelleri Şekil 3.1'de görüldüğü gibidir.



Şekil 3.1. Monte Carlo yönteminin temelleri. (a) Pozitif x doğrultusunda ivmelendirici bir kuvvete maruz kalan parçacığın \vec{k} uzayındaki simülasyonu. (b) Gerçek uzayda parçacığın izlediği yol. (c) Simülasyon süresinin bir fonksiyonu olarak parçacığın ortalama hızı.

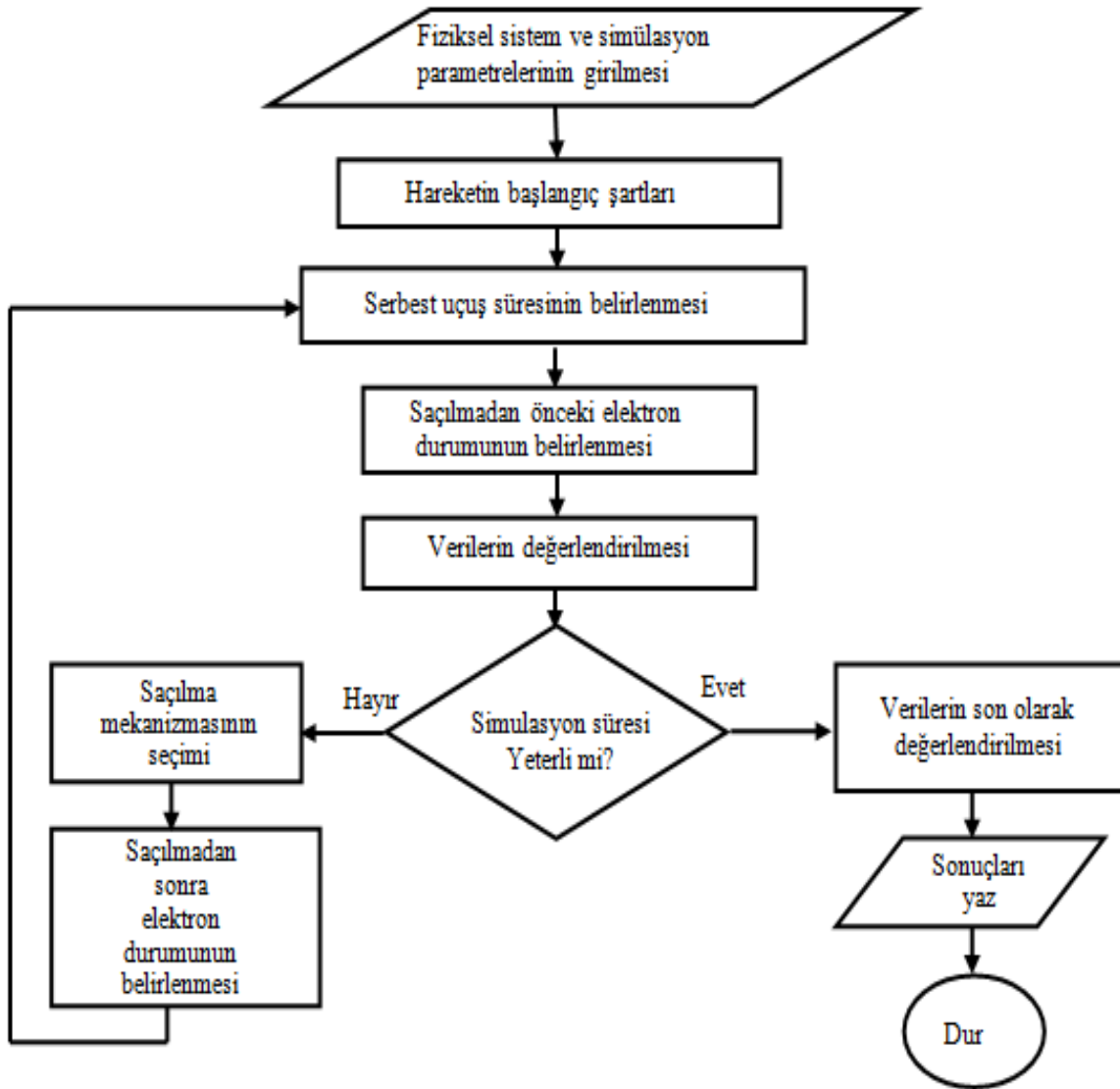
Elektronun ardışık iki saçılma arasında geçen serbest uçuş süresi ve saçılma mekanizması mikroskobik süreçleri tanımlayan olasılıklarla uyumlu olarak rastgele seçilir. Kararlı bir durumdaki homojen olaylar incelenirken elektronun hareketini uzunca bir süre incelenerek tüm elektron gazının davranışı hakkında bilgi edinilir. Tüm elektron gazının davranışını belirlemek için tek bir elektronun hareketini uzunca bir süre incelemek yeterlidir. Simülasyon başlangıç şartlarındaki bir elektronun \vec{k}_0 dalga vektörünü belirleyerek başlar. İlk serbest uçuş süresi saçılma olasılıkları ile belirlenen olasılık dağılımı ile belirlenir. Serbest uçuş süresince uygulanan elektrik alan altında

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{E} \quad (3.1)$$

bağıntısına göre bir kuvvete maruz kalır. Simülasyonun bu aşamasında elektronun hızı ve enerjisi belirlenir. Daha sonra serbest uçuşu sonlandıran bir saçılma mekanizması mümkün olan tüm saçılma mekanizmalarının bağıl olasılığına göre seçilir. Seçilen bu saçılma mekanizmasına göre saçılmadan sonra ki yeni bir \vec{k} dalga vektörü durumu, yeni serbest uçuş süresinin başlangıç durumu olarak rasgele seçilir ve bu işlem ardışık olarak tekrarlanır. Simülasyon ilerledikçe hesaplama sonuçları daha doğru sonuçlar verir simülasyon yeterince uzun süre tekrarlanarak ilgilenilen fiziksel niceliklerde tam olarak belirlenir. Tek parçacık Monte Carlo yöntemi homojen bulk yarıiletkenlerde taşınım özelliklerini hesaplamak için kullanılır. Hesaplama dağılım fonksiyonuna ihtiyaç duyulmaksızın doğrudan yapılabilir (Akarsu,2003).

3.1. 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 gerçekleşir. Bu yüzden simülasyon için bir rastgele sayı serisi türetilir. Simülasyon programı sürüklenme ve saçılma süreçlerini simüle eden alt programların hazırlanmasıyla oluşturulur.



Şekil 3.2. Tek parçacık Monte Carlo simülasyonu için akış şeması (Akarsu,2003)

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 τ saçılma zamanı kadar hareket edip daha sonra birim zamandaki saçılmasının olasılığı;

$$P(\tau) = W_T(E_{\vec{k}}) \exp\left[-\int_0^\tau W_T(E_{\vec{k}}) dt\right] \quad (3.2)$$

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

$$W_T(E_{\vec{k}}) = \sum_{J=1}^N W_J(E_{\vec{k}}) \quad (3.3)$$

$J = 1, 2, \dots, N$ mümkün olan N tane saçılma mekanizmasıdır. Denklem 3.1 kullanılarak uçuş süresinin belirlenebilmesi için, 0 ve 1 arasında düzgün olarak dağılmış r_1 rasgele sayısı ile belirlenen $\frac{P(\tau)}{W_T(E_{\vec{k}})}$ için τ belirlenmelidir. Fakat her bir $W_J(E_{\vec{k}})$ 'nin karmaşıklığı nedeniyle integral analitik olarak çözülemez. Bu güçlüğü üstesinden gelmek için basit bir alternatif teknik geliştirilmiştir. Parçacığın \vec{k} dalga vektöründe değişiklik yapmayan ve saçılma hızı $W_0(E_{\vec{k}})$ olan kendiliğinden saçılma mekanizması seçilir, yeni toplam saçılma hızı Λ , sabit olur (Rees, 1969), böylece;

$$W_0(E_{\vec{k}}) = \Lambda - \sum_{J=1}^N W_J(E_{\vec{k}}) \quad (3.4)$$

veya

$$\Lambda = \sum_{J=1}^N W_J(E_{\vec{k}}) \quad (3.5)$$

olur. Bu yaklaşım Denklem 3.1'in,

$$P(\tau) = \Lambda \exp(-\Lambda \tau) \quad (3.6)$$

olarak yazılmasını sağlar. Sonuç olarak uçuş süresi,

$$\tau = -\frac{\ln(r_1)}{\Lambda} \quad (3.7)$$

ile belirlenir.

2.2. Sürüklenme Süreci

Elektron için potansiyel enerji konumun bir fonksiyonu olarak çok hafif değişiyorsa, yarıiletken kristaldeki elektronun sürüklenme hareketi yarı klasik olarak incelenebilir ve böylece elektronlar etkin kütleli serbest parçacıklar olarak düşünülebilir.

Hareket denkleminin dayanarak τ uçuş zamanı boyunca dalga vektöründeki değişim, hareket denkleminin zamana göre integralinin alınmasıyla bulunur.

$$\Delta \vec{k} = -\frac{1}{\hbar} \int_t^{t+\tau} \vec{\nabla} H dt \quad (3.8)$$

H toplam enerji veya Hamiltoniyen' dir.

$$H = E_{\vec{k}} - eV(\vec{r}) \quad (3.9)$$

$E_{\vec{k}}$ elektronun kinetik enerjisi ve $V(\vec{r})$ elektrostatik potansiyeldir. Düzgün bir \vec{E} elektrik alan yarıiletken boyunca uygulanırsa; dalga vektöründeki değişim,

$$\Delta \vec{k} = -\frac{e\vec{E}}{\hbar} \tau \quad (3.10)$$

olur (Snowden, 1988; Kunikiyo, 1994).

2.3 Saçılma Süreci

Yarıiletken kristallerde taşınım hareketi sürüklenme ve saçılma süreçlerinden oluşur. Bu nedenle yük taşınım simülasyonlarında taşıyıcı saçılması en önemli konulardan biridir. Bloch teoremine göre, ideal periyodik potansiyellerde elektronlar kristal yapı içinde hareket ederlerken saçılmazlar. Bununla beraber gerçek yarıiletken kristallerde çeşitli

kusurlardan dolayı saçılırlar. Kristal içindeki elektronun serbest uçuş süresi ve saçılması yarıiletkenin mikroskobik özellikleriyle bağlantılıdır. Serbest uçuş süresi artarken; saçılma hızı azalır.

Önemli saçılma süreçlerinin çoğu iyonize safsızlık ve örgü titreşimlerindenidir. Bir donör kendi fazla elektronunu yarıiletkenine 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. Elektronun saçılmasının diğer önemli bir kaynağı, fotonlardır. Yarıiletkenlerinin üzerine ışık düştüğünde ve uygun şartlar oluşturulduğunda, bir elektron valans bandından iletim bandına çıkar ve ışığı soğurur. Ayrıca ters bir süreç de meydana gelebilir. İletim bandındaki bir elektron boş valans bandındaki duruma iner ve bir foton yayınlar.

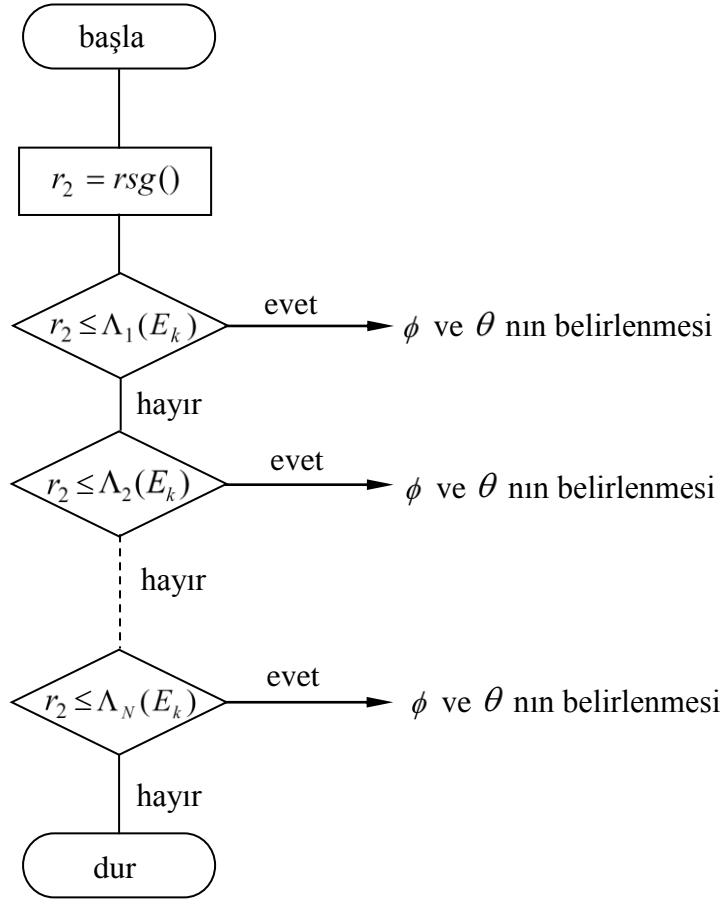
Saçılma hesaplamasında ilk olarak bir saçılma mekanizması (elektronun saçılacağı mekanizma) seçilir ve saçılmadan sonra elektronun durumu belirlenir. Saçılma mekanizmasının seçimi $\Lambda_n(E_{\vec{k}})$ fonksiyonu kullanılarak yapılabilir;

$$\Lambda_n(E_{\vec{k}}) = \frac{\sum_{J=1}^n W_J(E_{\vec{k}})}{\Lambda} \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (3.11)$$

bu fonksiyon Λ ile normalize edilmiş saçılma hızları toplamıdır. $E_{\vec{k}}$ enerjili elektron için bir saçılma mekanizması 0 ile 1 arasında ikinci bir rastgele sayı r_2 'nin türetilmesiyle yapılır, r_2 , Denklem 3.11'de,

$$\Lambda_{n-1}(E_{\vec{k}}) < r_2 \leq \Lambda_n(E_{\vec{k}}) \quad (3.12)$$

kıyaslanarak n . saçılma mekanizması seçilir. Bu seçimde Pauli dışarlama ilkesi hesaba katılmaz, çünkü son durumda taşıyıcının işgal ettiği durum ihmal edilir. Bu kabul tüm Monte Carlo simülasyonu boyunca kullanılır.



Şekil 3.3. Saçılma mekanizmasının seçimi için akış şeması (Tomizawa, 1993).

Saçılma mekanizması belirlendikten sonra saçılmadan sonraki \vec{k}' dalga vektörü belirlenir. \vec{k}' 'nün büyüklüğü enerji korunumundan, doğrultusu ise laboratuvar koordinatlarına göre kartezyen koordinatlardaki bileşenlerine göre belirlenir (Lundstrom, 2000).

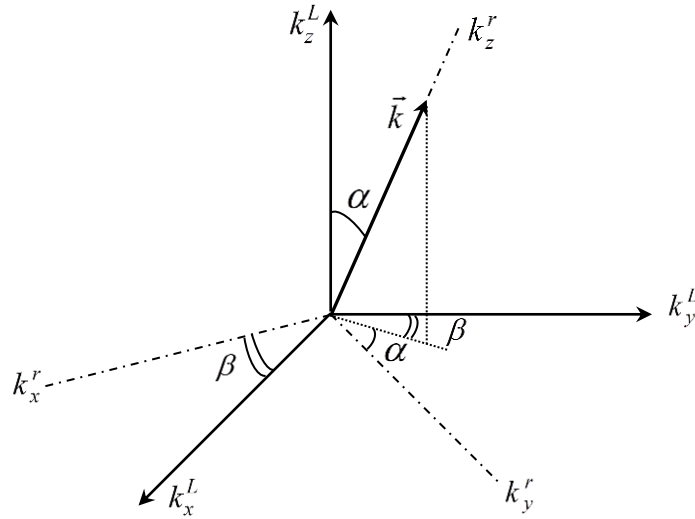
Saçılma izotropik ise, yani saçılan elektron saçılmadan sonra her bir doğrultuda aynı bulunma olasılığına sahipse, k'_x , k'_y , k'_z bileşenleri olasılık yoğunluğu dikkate alınarak bulunur. Olasılık yoğunluğu $p(\phi', \theta') d\phi' d\theta'$, k'

yarıçaplı bir kürede elde edilebilir durumların sayısı ile orantılıdır, ϕ' ve θ' k_z^L 'ye göre \vec{k} 'nün azimut ve kutup açılarıdır. Her ϕ' eşit olasılığa sahip olduğu için $p(\phi',\theta')$ değeri $\sin\theta'$ ye eşittir. Bu yüzden ϕ' ve θ' değerleri, 0 ve 1 arasında düzgün dağılmış r_3 ve r_4 rasgele sayı çifti ile belirlenebilir.

$$\begin{aligned}\phi' &= 2\pi r_3 \\ \cos\theta' &= 1 - 2r_4\end{aligned}\quad (3.13)$$

Denklem 3.12 ile verilen ϕ' ve θ' için laboratuvar çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) bileşenleri aşağıdaki gibi elde edilir (Nag,1980).

$$\begin{aligned}k'_x &= k' \sin\theta' \cos\phi' \\ k'_y &= k' \sin\theta' \sin\phi' \\ k'_z &= k' \cos\theta'\end{aligned}\quad (3.14)$$



Şekil 3.4. Laboratuvar çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ve başlangıç dalga vektörü \vec{k} 'nin k_z eksenine paralel olduğu yeni koordinat çerçevesi arasındaki ilişki.

Bu ifadeler yalnız izotropik saçılma durumunda geçerlidir. Safsızlık ve kutupsal optik fonon saçılmaları gibi anizotropik saçılma süreçlerinde, \vec{k}' son durumu, \vec{k} başlangıç dalga vektörüne göre, θ ve ϕ açıları ile Şekil 3.3'de görüldüğü gibi belirlenir. Burada \vec{k}' seçilen laboratuvar koordinatlarında k'_x, k'_y, k'_z bileşenleri cinsindedir.

Geçiş hızı ϕ 'den bağımsız olduğu için azimut açısı ϕ rasgele belirlenebilir.

$$\phi = 2\pi r_3 \quad (3.15)$$

Burada r_3 , 0 ve 1 arasında düzgün dağılmış bir rasgele sayıdır.

Safsızlık saçılması için kutup açısı θ ,

$$\cos\theta = 1 - \frac{2r_4}{1 + (1 - r_4) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (3.16)$$

olarak bulunur, burada r_4 , 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış bir rasgele sayıdır.

Kutupsal optik fonon saçılması için kutup açısı θ ise,

$$\cos\theta = \frac{1 + f - (1 + 2f)^{r_4}}{f} \quad (3.17)$$

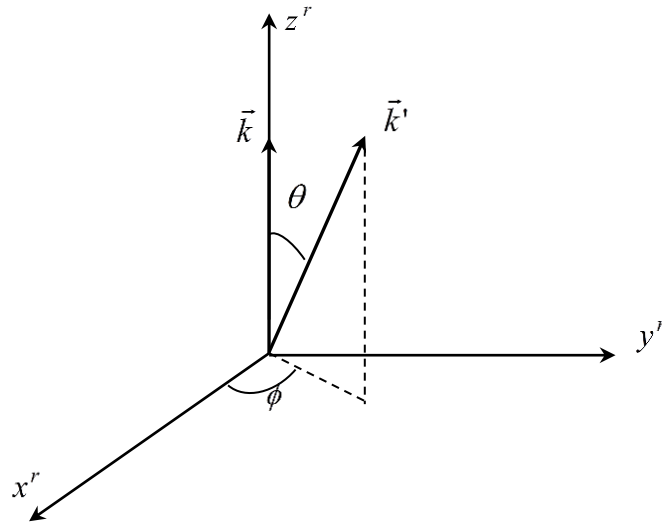
$$f = \frac{2\sqrt{E_{\vec{k}} E_{\vec{k}'}}}{(\sqrt{E_{\vec{k}}} - \sqrt{E_{\vec{k}'}})^2}$$

bağıntısıyla verilir (Canali, 1975). Burada; $\vec{E}_{\vec{k}}$ ve $\vec{E}_{\vec{k}'}$, saçılmadan önceki ve sonraki elektron enerjisidir.

Safsızlık ve kutupsal optik saçılmaları gibi anizotropik saçılma durumlarında, \vec{k}' 'nün laboratuvar koordinatlarındaki bileşenlerinin belirlenmesi için aşağıdaki yol izlenir. ϕ azimut açısı Denklem 3.14 ve θ kutup açısı Denklem 3.15 veya 3.16 ile belirlenir.

Laboratuvar koordinatlarında (k_x^L, k_y^L, k_z^L) elektron dalga vektöründeki değişim belirlenirken, başlangıç dalga vektörü \vec{k} 'nın k_z eksenine paralel olduğu yeni bir (k_x^r, k_y^r, k_z^r) koordinat çerçevesi ile çalışmak daha uygun olur. Yeni koordinat çerçevesi, (k_x^L, k_y^L, k_z^L) laboratuvar koordinat çerçevesini k_x ekseninde α açısı kadar, k_z ekseninde β açısı kadar döndürerek elde edilir.

Laboratuvar koordinat çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ni yeni koordinat çerçevesi (k_x^r, k_y^r, k_z^r) ne dönüştürmek için aşağıdaki dönüşüm matrisi ile çarpılır,



Şekil 3.5. Başlangıç dalga vektörü \vec{k} ya göre \vec{k}' nün θ ve ϕ açılarının belirlenmesi.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta & -\sin\beta & 0 \\ \sin\beta & \cos\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

burada θ ve ϕ , \vec{k}' nün \vec{k} başlangıç dalga vektörüne göre, Şekil 2.4'te görüldüğü gibi kutup ve azimut açılarıdır. (k'_x, k'_y, k'_z) koordinat çerçevesinde k_x, k_y ve k_z bileşenleri;

$$(k' \sin\theta \cos\phi, k' \sin\theta \sin\phi, k' \cos\theta) \quad (3.19)$$

olur. Bu yüzden (k_x^L, k_y^L, k_z^L) laboratuvar çerçevesindeki \vec{k}' vektörü Denklem 3.17

$$\begin{pmatrix} \cos\beta & \cos\alpha \sin\beta & \sin\alpha \sin\beta \\ -\sin\beta & \cos\alpha \cos\beta & \sin\alpha \cos\beta \\ 0 & -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

deki matrisin tersi ile çarpılarak bulunur.

Denklem 2.18 matris elamanlarındaki sinüs ve kosinüs değerleri Şekil 3.3'den;

$$\begin{aligned} \sin\alpha &= \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k}, & \cos\alpha &= \frac{k_z}{k} \\ \sin\beta &= \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}, & \cos\beta &= \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \end{aligned} \quad (3.21)$$

olarak bulunur. Denklem 3.17, 3.18 ve 3.19 birleştirilerek, saçılmadan sonraki dalga vektörü (k_x^L, k_y^L, k_z^L) laboratuvar koordinat çerçevesinde;

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ -k_x & \frac{k_y k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \sin\theta \cos\phi \\ k' \sin\theta \sin\phi \\ k' \cos\theta \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

olarak elde edilir (Jung ,1996).

Eliptik bantlardaki izotropik saçılma durumunda, laboratuvar koordinat çerçevesinde son durum dalga vektörü,

$$\vec{k}^* = U\vec{k} \quad (3.23)$$

eliptik yüzeyleri küresel yüzeylere dönüştüren Herring-Vogt dönüşümü ile belirlenir, burada U,

$$U = \begin{bmatrix} \left(\frac{m_f}{m_x^*}\right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_f}{m_y^*}\right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_f}{m_z^*}\right)^{1/2} \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

m_x^* , m_y^* ve m_z^* x -, y - ve z -eksenleri boyunca etkin kütlelerdir, $m_f = (m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/3}$, \vec{k}^* cinsinden elektron enerjisi;

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right) = \frac{(\hbar k^*)^2}{2m_f} \quad (3.25)$$

olur (Nag, 1980; Vogelsang, 1991).

3.4. Hız Hesabı

Yarıiletkenlerde taşınım sürecini incelerken Monte Carlo yönteminin kullanılması, Boltzmann taşınım denkleminin çözümüne eşdeğerdir. Bu yüzden, k -uzayındaki her bir hacim elemanındaki bir elektronun serbest uçuş süreleri belirlenirse, ortalama hız ve enerjilerinin hesaplanabileceği dağılım fonksiyonu belirlenebilir. Hız ve enerjinin ortalama değerleri elektronun her bir uçuşunun

gözlenmesiyle doğrudan hesaplanabilir ve tüm uçuşlar üzerinden bir ortalama alınır.

Anlık taşıyıcı hızı;

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \quad (3.26)$$

olduğundan, τ uçuş süresi boyunca ortalama taşıyıcı hızı;

$$\langle \vec{v} \rangle_{\tau} = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E_{\vec{k}}}{\Delta k} \quad (3.27)$$

olarak yazılabilir. Burada $\Delta E_{\vec{k}}$ ve $\Delta \vec{k}$, τ süresi boyunca taşıyıcı enerjisi ve dalga vektöründeki küçük artışlardır. Sabit bir elektrik alan \vec{E} altında elektron dalga vektöründeki artış, Denklem 3.9 ile verildiği gibidir. Denklem 3.9 Denklem 3.26'da yazılırsa;

$$\langle v \rangle_{\tau} = -\frac{\Delta E_k}{eE\tau} \quad (3.28)$$

olur.

Denklem 3.27 ile verilen τ süresince ortalama taşıyıcı hızını kullanarak toplam simülasyon süresi T boyunca ortalama taşıyıcı hızı;

$$\begin{aligned} \langle \vec{v} \rangle_T &= \frac{1}{T} \sum \langle \vec{v} \rangle_{\tau} \tau \\ &= -\frac{1}{eET} \sum \Delta E_{\vec{k}} \\ &= -\frac{1}{eET} \sum (E_f - E_i) \end{aligned} \quad (3.29)$$

olur, burada E_i elektronun uçuşa başladığındaki taşıyıcı enerjisi ve E_f uçuş sonundaki enerjisidir. Toplam, tüm serbest uçuşlar için yapılmalıdır.

Ortalama taşıyıcı enerjisi $\langle E \rangle_T$;

$$\langle E \rangle_T = \frac{1}{T} \sum \langle E \rangle_{\tau} \tau \quad (3.30)$$

olur, burada $\langle E \rangle_\tau$, iyi bir yaklaşımla;

$$\langle E \rangle_\tau = \frac{E_i + E_f}{2} \quad (3.31)$$

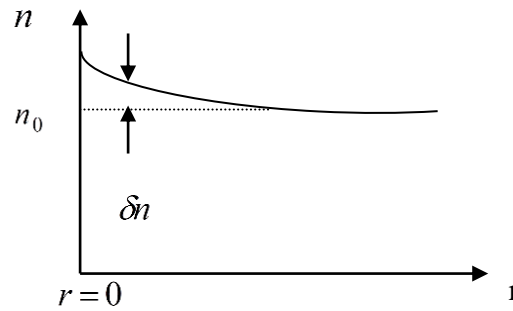
olarak alınabilir (Tomizawa, 1993).

4. SAÇILMA HIZLARI

4.1. Safsızlık Saçılma Hızı

Bir yarıiletkende taşıyıcılar, genellikle taşıyıcı depoları olarak kabul edilen yüksek oranlarda katkılanmış bölgelerden sağlanır. Böyle yüksek oranlarda katkılanmış bölgelerdeki taşıyıcı hareketi gelişigüzel dağılmış iyonize safsızlıklarla dağıtılır. Bu durum, iki gözlem ile anlaşılır. Bunlardan birincisi, taşıyıcılar yüksek oranda katkılanmış bölgelerde düşük elektrik alanlardan yüksek enerji seviyelerine ulaşamazlar, ikincisi safsızlık saçılmalarının, düşük enerjili taşıyıcılar için belirgin olmasıdır (Jacoboni, 1983).

Vakum ortamındaki bir nokta yükün oluşturduğu elektrostatik potansiyel Coulomb yasasına uyar, fakat kristaldeki bir safsızlığın oluşturduğu potansiyel; ne kadar serbest taşıyıcının bulunduğuna bağlı olarak değişir. Perdeleme potansiyeli nedeniyle saçılma başlangıçta Conwell-Weisskopf ve Brooks-Herring yaklaşımları ile incelenir (Seeger,1989; Herbert, 1992). Bunlar, modelde kullandıkları perdeleme potansiyeli ile ayrılırlar, fakat her ikisinde Born yaklaşımını kullanırlar.



Şekil 4.1 . Pozitif bir iyon yakınında yük nötralliğinin bozunumu, n_0 denge elektron yoğunluğu, r iyondan olan uzaklık.

İlk olarak ısı dengedeki n-tipi bir yarıiletkenin perdeleme potansiyeli belirlenmelidir. İyonize safsızlıkların ve hareketli taşıyıcıların neden olduğu elektrostatik potansiyel için, orijinde pozitif bir yük $Ze\delta(r)$ düşünülürse (e , elektron yükü ve Ze , safsızlık atomunun yüküdür.), δ -fonksiyonu; $\delta(r)$ yükün orijinde olduğunu gösterir, yük nötralliği bu nokta civarında pertürbe edilir, yani elektron yoğunluğu Şekil 4.1'de görüldüğü gibi $\delta n = n - N_D^+$ kadar artar, N_D^+ iyonize safsızlıkların yoğunluğudur.

Etkin elektrostatik potansiyel, küresel koordinatlarda;

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) = -\frac{e}{\epsilon_s} [Z\delta(r) - \delta n] \quad (4.1)$$

Poisson denkleminin çözümü ile elde edilir, burada r orijinden olan uzaklık ve ϵ_s yarıiletkenin statik dielektrik sabitidir (Tomizawa, 1993). n_0 , klasik dağılım fonksiyonunun kullanılabileceği bir T_L sıcaklığında, denge elektron yoğunluğu olursa; δn ,

$$\delta n = n_0 \exp\left(\frac{eV}{k_B T_L}\right) - n_0 \approx \frac{en_0}{k_B T_L} V \quad (4.2)$$

şeklinde bulunur. Denklem 3.34 ve 3.35'in birleştirilmesiyle;

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) - q_D^2 V = -\frac{Ze}{\epsilon_s} \delta(r) \quad (4.3)$$

elde edilir. Burada q_D ;

$$q_D = \sqrt{\frac{e^2 n_0}{\epsilon_s k_B T_L}} \quad (4.4)$$

olarak verilir ve $1/q_D$ Debye uzunluğudur (Lundstrom, 2000).

Denklem 3.37'nin özel çözümü,

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_s r} \exp(-q_D r) \quad (4.5)$$

olarak verilir ve perdelenmiş coulomb potansiyeli olarak adlandırılır (Canali et al., 1975). Bu yüzden uygun pertürbasyon potansiyeli;

$$H' = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_s r} \exp(-q_D r) \quad (4.6)$$

olur. Elektron saçılması için pertürbasyon potansiyeli belirlendikten sonra H' Denklem 3.27'de yerine yazılarak matris elemanı aşağıdaki gibi

$$\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_s} \int_{\Omega} \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}) \frac{\exp(-q_D r)}{r} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (4.7)$$

elde edilir, Denklem 3.41'in kristal hacmi Ω üzerinden integrali alınarak,

$$\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle = \frac{Ze^2}{\Omega\epsilon_s} \frac{1}{|\vec{q}|^2 + q_D^2} \quad (4.8)$$

şeklinde bulunur. $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ saçılma süreci boyunca momentum değişimiyle orantılıdır. Denklem 3.42, Denklem 3.20'de yerine yazılarak tek bir safsızlıktan saçılma için geçiş hızı;

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{Ze^2}{\Omega\epsilon_s} \right)^2 \frac{\delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}})}{(q^2 + q_D^2)^2} \quad (4.9)$$

olarak bulunur. Perdelenmiş Coulomb potansiyeli zamandan bağımsız olduğu için δ -fonksiyonu saçılma boyunca elektron enerjisinin korunduğunu gösterir.

$\vec{k}' = \vec{k}$ olduğu için;

$$q^2 = (\vec{k}' - \vec{k})^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) \quad (4.10)$$

$N(E_{\vec{k}})$ birim enerji başına son durumların yoğunluğudur. Böylece k' ne göre olan integral $E_{k'}$ ne göre integrale dönüşmüş olur,

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi N_s Z^2 e^4 N(E_{\vec{k}})}{\hbar \varepsilon_s^2} \int_{-1}^1 \frac{d(\cos\theta)}{[2k^2(1-\cos\theta) + q_D^2]^2} \quad (4.14)$$

bu ifadenin integrali alınarak,

$$W(\vec{k}) = \frac{2\pi N_s Z^2 e^4 N(E_{\vec{k}})}{\hbar \varepsilon_s^2} \frac{1}{q_D^2(4k^2 + q_D^2)} \quad (4.15)$$

iyonize safsızlıklar için saçılma hızı Denklem 3.49 ile belirlenir, burada $N(E_k)$,

$$N(E_{\vec{k}}) = \frac{(2m^*)^{3/2} \sqrt{E_{\vec{k}}}}{4\pi^2 \hbar^3} \quad (4.16)$$

olarak verilen durum yoğunluğudur (Canali, 1975; Ruch, 1970).

İyonize safsızlıklar için saçılma hızı belirlendikten sonra, saçılmadan sonra elektronun son durumu belirlenir. Geçiş hızı azimut açısı ϕ 'den bağımsız olduğu için 0 ile 2π arasındaki rasgele bir sayı ile ve kutup açısı θ Şekil 3.2 deki tanımdan belirlenebilir. θ ve $\theta + d\theta$ arasındaki bir açıya saçılma olasılığı Denklem 3.48'den;

$$P(\theta)d\theta = \frac{\pi N_s Z^2 e^4 N(E_{\vec{k}})}{\hbar \varepsilon_s^2} \frac{\sin\theta d\theta}{[2k^2(1-\cos\theta) + q_D^2]^2} \quad (4.17)$$

olarak bulunur.

0 ve θ arasında bir açıya saçılma olasılığı, Denklem 3.51'in 0'dan θ 'ya kadar integralinin alınıp saçılma hızına bölünmesiyle,

$$\begin{aligned} \frac{W(\theta)}{W(\vec{k})} &= \frac{1}{W(\vec{k})} \int_0^\theta P(\beta) d\beta \\ &= \int_{-1}^{\cos\theta} \frac{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)}{2[2(1-\eta)k^2 + q_D^2]^2} d\eta \end{aligned} \quad (4.18)$$

olarak bulunabilir (Nag, 1972). Denklem 3.52'nin integralinin alınmasıyla,

$$\frac{W(\theta)}{W(\vec{k})} = \frac{(1 - \cos\theta) \left[1 + \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2 \right]}{2 + (1 - \cos\theta) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (4.19)$$

elde edilir. $W(\theta)/W(\vec{k})$ sıfırdan büyük ve θ ile giderek arttığı için, Denklem 3.53 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayıya eşitlenerek,

$$\cos\theta = 1 - \frac{2r}{1 + (1-r) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (4.20)$$

belirlenebilir. Denklem 3.54'de iyonize safsızlık saçılmasından sonra dalga vektörünün θ kutup açısını belirlemede kullanılır (Jacoboni, 1983).

4.2. Fonon Saçılımı

Yarıiletkenlerde oluşan saçılımların çoğu örgü titreşimlerinden kaynaklanır. Bu nedenden dolayı bu saçılmaların temel özelliklerin anlaşılması gerekir. Bir atom denge noktasından uzaklaştırılırsa bağ kuvvetleri onu geri dönmeye zorlar. Böylece denge noktası civarında bir salınım ortaya çıkar.

Örgü dalgaları periyodik bir ortamda ilerlediğinden, Bloch dalgalarının özelliklerine çok benzer özellikler ortaya koyarlar. Bloch elektronları, mükemmel bir kristaldeki kendi öz durumlarında buldukları için, kristalin periyodik potansiyeli

tarafından saçılmazlar. Çünkü kristal potansiyelinin periyodikliği çeşitli nedenlerle bozulabilir. Kristaldeki bir iyonun küçük bir yer değiştirmesi kristal potansiyelinde küçük bir değişime neden olur, bu yüzden kristal potansiyelinin periyodiklikten sapması teorik olarak örgü titreşimlerinin genlikleriyle ifade edilebilir. Fakat kristal potansiyelinin bilinmemesi nedeniyle bu sapma deformasyon potansiyeliyle ifade edilir. Örgü titreşimlerinin elektron hareketleri üzerindeki etkisi elektron fonon etkileşmesi olarak adlandırılan bir kuantum süreciyle ifade edilebilir.

Akustik ve optik olarak adlandırılan iki çeşit fonon modu vardır. Akustik fononlar için komşu atomlar aynı yönde yer değiştirirler ve örgüdeki değişimler, küçük değişimler ve gerilmelerle oluşur. Optik fononlar için komşu atomlar zıt yönlerde yer değiştirirler, bu nedenle yer değiştirme örgüde doğrudan bir değişikliğe neden olur. Akustik ve optik fonon saçılmaları band enerjilerindeki değişimlerle, örgü titreşimleriyle ilişkili olan deformasyon potansiyeli ile ifade edilebildiği için bunlar, deformasyon potansiyel saçılması olarak adlandırılırlar (M.Akarsu, 2003).

4.3. Akustik Fonon Saçılma Hızı

Bir kristalde titreşen atomlar, normal mod salınımlarının süperpozisyonu olarak tanımlanabilir. Her bir normal mod, bağımsız bir harmonik salınıcı gibi salınım yapar ve kuantize edilebilir. Fononlar $a_{\vec{q}}^+$ ve $a_{\vec{q}}$ yaratma ve yok etme operatörleri yardımıyla yaratılıp yok edilebilirler. t zamanında \vec{r} noktasındaki örgüdeki yer değiştirme (Ashcroft ve Mermin, 1976; Tomizawa, 1993),

$$u(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\vec{q}}} \right)^{1/2} \vec{e}_{\vec{q}} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^+) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (4.21)$$

bağıntısı ile verilir. Burada normal mod salınımı bir kuantum limitiyle ifade edilir, ρ materyalin yoğunluğu, Ω kristalin hacmi olarak, $\vec{e}_{\vec{q}}$ birim polarizasyon vektörü, \vec{q} dalga vektörü ve $w_{\vec{q}}$ salınımın açısal frekansıdır.

Uzun dalga boylu akustik fononlar için,

$$\frac{w_q}{q} = v_s = \sqrt{\frac{c_l}{\rho}} \quad (4.22)$$

dispersiyon yasası sağlanır. Denklem 3.33'de v_s boyuna elastik dalgaların hızı ve c_l materyalin elastik sabitidir. Örgü sabitindeki küçük bir değişim için enerji bandında da küçük bir değişim beklenebilir. Bu değişimin örgüdeki değişimle orantılı olması düşünülebilir ve etkiyen gerilme $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t)$ ile ifade edilebilir. Örgüdeki değişim yalnızca $u(\vec{r}, t)$ yer değiştirmesiyle ifade edilemez. Böylece akustik fononlar için etkileşme potansiyeli,

$$H' = \mathcal{E}_d \vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t) \quad (4.23)$$

olarak yazılabilir (Fawcett, 1970). Burada orantı sabiti \mathcal{E}_d deformasyon potansiyeli olarak adlandırılır. Denklem (4.32), (4.34)'de yerine yazarsak,

$$H' = \sum_{\vec{q}} iq \mathcal{E}_d \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\vec{q}}} \right)^{1/2} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^+) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (4.24)$$

elde edilir. Burada dalga vektörünün polarizasyon vektörüne paralel yani; $q = \vec{e}_q \cdot \vec{q}$ olduğu kabul edilir. Pertürbasyon potansiyeli için matris elemanı denklem (4.35)'in fonon durumlarının da dikkate alındığı;

$$\langle \vec{k}', n_{\vec{q}} - 1 | H' | \vec{k}, n_{\vec{q}} \rangle = iq \mathcal{E}_d \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\vec{q}}} \right)^{1/2} \sqrt{n_{\vec{q}}} \delta(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \quad (4.25)$$

$$\langle \vec{k}', n_{\vec{q}} + 1 | H' | \vec{k}, n_{\vec{q}} \rangle = iq \mathcal{E}_d \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\vec{q}}} \right)^{1/2} \sqrt{n_{\vec{q}} + 1} \delta(\vec{k}' - \vec{k} + \vec{q}) \quad (4.26)$$

$$n_{\vec{q}} = 1 / [\exp(\hbar w_q / k_B T) - 1] \quad (4.27)$$

elde edilir. Burada $n_{\vec{q}}$; Bose-Einstein dağılımıyla verilen fonon sayısıdır. Herbir denklemdeki δ –fonksiyonu elektron-fonon etkileşmesi boyunca kristal momentumunun korunduğunu ifade eder. Denklem (4.36) ve (4.37) Denklem (4.19) da yerine yazılırsa akustik fononlar için geçiş hızı;

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi \varepsilon_d^2 q^2}{\rho \Omega w_{\vec{q}}} \left(n_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \mp \hbar w_{\vec{q}}) \quad (4.28)$$

olarak bulunur (Jakumeit, 1994). Denklem (4.39)'daki δ –fonksiyonları enerji ve momentumun korunumunu ifade eder.

$$E_{\vec{k}'} = E_{\vec{k}} \pm \hbar w_{\vec{q}} \quad (4.29)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (4.30)$$

burada $\hbar w_{\vec{q}}$ fonon enerjisini ve \vec{q} fonon dalga vektörüdür, \pm fonon soğurma ve yayılma durumunu belirtir. Parabolik ve küresel enerji bandları için Denklem (4.40)'daki enerji korunum bağıntısı,

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar w_{\vec{q}} \quad (4.31)$$

olarak yazılabilir. Denklem (4.25), (4.26)'de yerine yazılırsa δ –fonksiyonları birleştirilebilir;

$$\delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{\vec{k}'} + E_{\vec{k}} \mp \hbar w_{\vec{q}}) = \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar w_{\vec{q}} \right) \quad (4.32)$$

burada θ' , şekil 3.4'te görüldüğü gibi \vec{k} ve \vec{q} vektörleri arasındaki kutup açısıdır. Denklem (4.27)'ün sağ tarafı θ' ve q arasındaki bağıntıyı verir;

$$\cos \theta' = \frac{1}{2} \left(\mp \frac{q}{k} + \frac{\hbar w_{\vec{q}} k}{E_{\vec{k}'}} \right) \quad (4.33)$$

Denklem (4.28)'teki θ , fononun başlangıç enerjisi, momentum ve açısal frekansına dayalı iki momentum durumu arasındaki açıdır.



Şekil 4.3. \vec{k} ile \vec{q} arasındaki θ' ve, \vec{k} ile \vec{k}' arasındaki θ kutup açısı.

Akustik fonon enerjisi $\hbar\omega_{\vec{q}}$, oda sıcaklığı civarında $k_B T$ enerjisinden çok küçüktür, bu nedenle $\hbar\omega_{\vec{q}}$ sıfır alınarak akustik fonon saçılmasının elastik olduğu ve Denklem 3.40 bağıntısında enerjinin değişmediği kabul edilir. Böylece $n_{\vec{q}} \approx \frac{k_B T_L}{\hbar\omega_{\vec{q}}}$ alınabilir. $n_{\vec{q}} \gg 1$ den çok büyük olduğu için $n_{\vec{q}} = n_{\vec{q}} + 1$ 'de kullanılabilir. Denklem (4.33) bu yaklaşımlar altında yeniden düzenlenirse;

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi \varepsilon_d^2 k_B T_L}{\hbar c_l \Omega} \frac{k}{q E_{\vec{k}}} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) \quad (4.34)$$

elde edilir. Bu bağıntı fonon soğurma ve yayınlama süreçlerinin her ikisinde kapsar. Saçılma hızı Denklem (4.34)'in \vec{k}' üzerinden integralinin alınmasıyla elde edilir,

$$\begin{aligned} W(\vec{k}) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' \\ &= \frac{\varepsilon_d^2 k_B T_L}{8\pi^2 \hbar c_l} \frac{k}{E_k} \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\vec{q} \end{aligned} \quad (4.35)$$

kutupsal koordinatlarda q üzerinden integral alınırsa,

$$\vec{I}_q = \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\vec{q}$$

(4.36)

$$= \int_0^\infty \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\phi d(\cos\theta') q dq$$

olarak düzenlenir. ϕ üzerinden integral doğrudan alınabilir, $\cos\theta'$ üzerinden integral δ –fonksiyonundan dolayı kolayca alınır. q üzerinden integral $\cos\theta'$ nün -1 ve $+1$ arasındadır. $\hbar\omega_{\vec{q}} \approx 0$ kabul edildiği için q_{min} ve q_{max} Denklem 4.35' den bulunabilir.

$$q_{min} = 0$$

(4.37)

$$q_{max} = 2k$$

$$I_q = 2\pi \int_{q_{min}}^{q_{max}} q dq = \pi (q_{max}^2 - q_{min}^2) = 4\pi k^2$$

(4.38)

elde edilir. Sonuç olarak akustik fonon saçılma hızı;

$$W(\vec{k}) = \frac{2\pi\epsilon_d^2 k_B T_L}{\hbar c_l} N(E_{\vec{k}})$$

(4.39)

olur. Burada $N(E_{\vec{k}})$ Denklem 4.27 ile verilen durum yoğunluğudur.

Monte Carlo yönteminde saçılmadan sonraki elektron durumları bir çift rastgele sayı ile belirlenebilir. Azimut açısı ϕ , 0 ve 2π arasında düzgün dağılmış bir rastgele sayı ile ve k ve k' arasındaki açının kosinüsü $\cos\theta$, -1 ile $+1$ arasında dağılmış diğer bir rastgele sayı ile belirlenebilir (Fawcette, 1970).

4.4. Kutupsal Olmayan Optik Fonon Saçılma Hızı

Kutupsal olmayan optik fononlara bağlı taşıyıcı saçılması, komşu atomlar zıt yönde titreşmeler bile akustik kusur potansiyeli saçılmasına benzer düşünülebilir. Bu problemi çözmek için optik yer değiştirme parametresinin tanımlanması gerekir. Etkinleşme potansiyeli aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$H'(\vec{r}, t) = \vec{D}_0 \cdot u(\vec{r}, t) \quad (4.40)$$

\vec{D}_0 optik kusur potansiyeli, $u(\vec{r}, t)$ ise optik yer değiştirme olup aşağıdaki gibi verilir,

$$u(\vec{r}, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (4.41)$$

şeklinde verilir. e_q polarizasyon birim vektörü, w_q açısal frekanstır. Simetri sınırlaması nedeniyle $D_0 = 0$ olabilir.

Denklem (4.40), (4.41)' de yerine yazılırsa,

$$H' = \sum_q D_0 \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_q} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^+) e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (4.42)$$

ifadesi bulunur. Denklem (4.23)' den hesaplanan optik kusur potansiyel saçılması kare matris elemanların yerine yazılmasıyla,

$$|\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{D_0^2 \hbar}{2\rho\Omega w_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \quad (4.43)$$

denklemini elde edilir. Denklem (3.41)'ün (3.42) denklemini ile verilen Fermi'nin altın kuralı'nda yerine yazılması, enerji ve momentum korunumunun dikkate alınması gereken hesaplamaların yapılmasıyla,

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi D_0^2}{2\rho\Omega w_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\theta'}{m^*} \mp \hbar w_0 \right) \quad (4.44)$$

optik fononlar için geçiş oranı elde edilir. Ayrıca enerji ve momentum korunumu ile eş zamanlı olarak verilir. $\cos\theta'$, -1 ile $+1$ aralığında tanımlı olduğundan (4.46) ifadesindeki δ -fonksiyonu saçılmaya ilgili minimum ve maksimum fonon dalga vektörleri,

$$q_{min} = k \left| 1 - \left(1 \pm \frac{\hbar w_0}{E_k} \right)^{1/2} \right| \quad (4.45)$$

$$q_{max} = k \left| 1 + \left(1 \pm \frac{\hbar w_0}{E_k} \right)^{1/2} \right| \quad (4.46)$$

olarak yazılabilir. Saçılma oranı (3.55) denkleminin sonuç durumları için integre edilmesiyle,

$$\begin{aligned} W(\vec{k}) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' \\ &= \frac{D_0^2}{8\pi^2 \rho w_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \int \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\theta'}{m^*} \mp \hbar w_0 \right) d\vec{q} \end{aligned} \quad (4.47)$$

elde edilir. q üzerinden olan integral kutupsal koordinatlara taşınarak, saçılma oranı,

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi D_0^2}{\rho w_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) N(E_k \pm \hbar w_0) \quad (4.48)$$

şeklinde elde edilir. Burada $N(E_k \pm \hbar w_0)$ ile verilen üç boyutta serbest Fermi elektron gazı için durum yoğunluğudur.

Akustik fonon saçılmasında fonon enerjisi $k_B T$ den küçük ve saçılma esnek iken, optik fonon enerjisi, oda sıcaklığındaki taşıyıcıların ısısal enerjileri ile kıyaslanabilir ve bu nedenle ihmal edilemez, yani optik saçılması inelastik bir süreçtir (Jacoboni, 1983).

4.5. Vadiler Arası Optik Fonon Saçılma Hızı

Kutupsal olmayan optik fononlar taşıyıcıların vadiler arasında geçişlere neden olur. Vadiler arası saçılma için büyük momentum değişimi gerektiği için, vadiler arası saçılmayı yalnızca sınırlı bölge yakınındaki dalga vektörü yapabilir. Bölge sınırı yakınındaki optik fonon enerjisi $\hbar w_{ij}$ ile gösterilebilir.

Vadiler arası saçılma için etkinleşme potansiyeli,

$$H' = \vec{D}_{ij} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t) \quad (4.49)$$

şeklindedir. \vec{D}_{ij} i . vadiiden j . vadiye saçılma şiddetini temsil eden vadiler arası deformasyon potansiyelidir.

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho \Omega w_{ij}} \left(n(w_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \mp \hbar w_{ij} + \Delta E_{ij}) \quad (4.50)$$

Denklem (3.55)'e benzer şekilde vadiler arası kutupsal olmayan optik fonon saçılması için geçiş hızı bulunur. Z_j saçılmanın olabileceği vadi sayısı, ΔE_{ij} , i . vadinin tabanından ölçülen j . vadinin taban enerjisidir. Kutupsal olmayan fonon saçılmasındaki aynı işlemler tekrarlanarak,

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho w_{ij}} \left(n(w_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) N(E_{\vec{k}} \pm \hbar w_{ij} - \Delta E_{ji}) \quad (4.51)$$

vadiler arası kutupsal olmayan optik fonon saçılma hızı elde edilir.

3.6. Kutupsal Optik Fonon Saçılma Hızı

Boyuna örgü titreşimleri iyonik yarı iletkenlerde kutuplanma dalgalarını oluşturur. Kutuplanma dalgaları da elektronlarla güçlü bir şekilde etkileşerek elektronların kutupsal saçılmasına neden olur. Kutupsal saçılmalar, akustik ya da optik fononlardan dolayı oluşabilir. Bu saçılma çok saf yarı iletkenlerde ve düşük sıcaklıklarda etkin olup, oda sıcaklığında son derece önemsizdir.

Kutupsal optik fonon saçılması çok güçlü olup oda sıcaklığında bileşik yarı iletkenler için baskın saçılma mekanizmalarıdır. Boyuna optik fononlar için bağlı yer değiştirme \vec{u} ($\vec{u} = \vec{u}_+ - \vec{u}_-$, \vec{u}_+ ve \vec{u}_- pozitif ve negatif iyonların yer değiştirmesi) dipol momentini tedirgin eder. Bağlı yer değiştirme;

$$\vec{u}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\hbar}{2NMw_0} \right)^{1/2} \vec{e}_q (\vec{a}_q + \vec{a}_{-\vec{q}}^+) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (4.52)$$

ile verilir. N iyon çifti sayısı, M pozitif ve negatif iyonların indirgenmiş kütesidir ($\frac{1}{M} = \frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-}$). Dielektrik yer değiştirme \vec{D} ve \vec{P} kutuplanmanın yanı sıra iyonların yer değiştirmesi de katkıda bulunur,

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_{ion} + \vec{P} \quad (4.53)$$

ϵ_0 boşluğun dielektrik geçirgenliği, \vec{E} elektrik alan, \vec{P}_{ion} dipol momentidir. \vec{P} kutuplaşması;

$$\vec{P} = \frac{e^* N}{\Omega} (\vec{u}_+ - \vec{u}_-) = \frac{e^* N}{\Omega} \vec{u} \quad (4.54)$$

bağlı yer değiştirme ile ifade edilir. e^* etkin yüküdür. \vec{P}_{ion} ve ϵ_∞ optik frekans bölgesinin dielektrik sabiti arasında $\epsilon_\infty \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E}$ bağıntısı vardır.

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_\infty \vec{E} + \frac{e^* N}{\Omega} \vec{u} \quad (4.55)$$

olarak yazılır (Moglestue, 1993).

Boyuna elastik dalgalarla ilgili yer deęiřtirme, $\vec{D} = D \vec{e}_{\vec{q}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r})$ baęıntısıyla ve kutuplanmış y¼kler i¼in ise $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0$ baęıntısı ile deęiřir. B¼ylece;

$$i\vec{q} \cdot \vec{D} = 0 \quad (4.56)$$

yazılabilir. Denklem (3.66)'da $\vec{D} = \vec{0}$ i¼in,

$$\vec{E} = -\frac{Ne^* \vec{u}}{\Omega \varepsilon_\infty} \quad (4.57)$$

elde edilir. Elektrostatik potansiyel,

$$U(\vec{r}) = -\int \vec{F} d\vec{r} = -i \frac{Ne^*}{\Omega q \varepsilon_\infty} \vec{u}(\vec{r}) \quad (4.58)$$

olarak bulunur. Etkin y¼k e^* ;

$$e^* = \left(\frac{\Omega M}{N} \right)^{1/2} w_0 \varepsilon_\infty \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right)^{1/2} \quad (4.59)$$

ile verilir (Tomizawa, 1993). Kutupsal optik fonon sa¼ılması i¼in pert¼rbe potansiyel;

$$H' = -eU(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} i \frac{e}{q} \left(\frac{\hbar w_0}{2\varepsilon_p \Omega} \right)^{1/2} (\vec{a}_{\vec{q}} + \vec{a}_{-\vec{q}}^+) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (4.60)$$

olur. Burada,

$$\frac{1}{\varepsilon_p} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \quad (4.61)$$

dir (Brennan, 1988). Kutupsal optik fonon saçılması için matris elemanlarının kullanılmasıyla,

$$|\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_0}{2 \varepsilon_p \Omega} \frac{1}{q^2} \left(n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \quad (4.62)$$

elde edilir. Geçiş hızı Ferminin altın kuralından,

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi e^2 \omega_0}{\varepsilon_p \Omega} \frac{1}{q^2} \left(n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'} \mp \hbar \omega_0) \quad (4.63)$$

olarak elde edilir (Yokoyama vd., 1986). Saçılma hızı Denklem 3.74'ün integralinin alınmasıyla bulunur.

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi e^2 \omega_0}{\varepsilon_p \Omega} \left(n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \times \int \frac{1}{q^2} \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_0 \right) d\vec{q} \quad (4.64)$$

\vec{q} üzerinden integral Şekil 3.5' de görüldüğü gibi \vec{k} ve \vec{q} arasındaki kutup açısının θ' olduğu kutupsal koordinatlarda alınır.

$$\begin{aligned} \vec{I}_q &= \int \frac{1}{q^2} \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_0 \right) d\vec{q} \\ &= \int_0^\infty \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_0 \right) dq d(\cos \theta') d\phi \\ &= \frac{2\pi m^*}{\hbar^2 k} \ln \left(\frac{q_{max}}{q_{min}} \right) \end{aligned} \quad (4.65)$$

Sonuç olarak optik fononlar nedeniyle saçılma hızı;

$$W(\vec{k}) = \frac{e^2 w_0}{8\pi\epsilon_p} \frac{k}{E_{\vec{k}}} \left(n(w_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{q_{max}}{q_{min}} \right) \quad (4.66)$$

olarak bulunur. q_{max} Denklem (3.57) ve q_{min} Denklem (3.56) ile verildiği gibidir (Borowik, 1997; Popov, 1996).

Kutupsal optik fonon saçılması izotropik olmadığı için, Monte Carlo hesaplamalarında saçılma açısını veren bir bağıntı gereklidir, 0 ile θ' arasında saçılma olasılığı;

$$\frac{W(\theta')}{W(\vec{k})} = \frac{\int_{q_{min}}^{q_{max}} \int_{-1}^{+1} \frac{1}{q} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta' \mp \frac{\hbar w_0}{E_k} \frac{k}{2q} \right) dq d(\cos\theta')}{\int_{q_{min}}^{q_{max}} \int_{-1}^{+1} \frac{1}{q} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta' \mp \frac{\hbar w_0}{E_k} \frac{k}{2q} \right) dq d(\cos\theta')} \quad (4.67)$$

$$\frac{\ln(q_{\theta'}) - \ln(q_{min})}{\ln(q_{max}) - \ln(q_{min})} = \frac{\ln(q_{\theta'}/q_{min})}{\ln(q_{max}/q_{min})}$$

olarak elde edilir. $q_{\theta'}$, θ' ile ilişkilidir, δ –fonksiyonu enerji ve momentumun korunumunu ifade eder.

$0 \leq W(\theta')/W(\vec{k}) \leq 1$ ve $W(\theta')/W(\vec{k})$, θ' ile arttığı için saçılma açısı θ' , denklem (3.78)'in 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış bir rastgele sayıya eşitlenmesiyle bulunur.

3.7. Dislokasyon saçılma Hızı

GaN kristalinin büyük boyutlarda elde edilmesi oldukça zor olduğu için bir alt taban üzerinde büyütülür. Fakat GaN kristali ile örgü uyumu olan bir alt taban yoktur. Yapılan çalışmalarda safir (Al_2O_3) alt taban olarak kullanılmaktadır. Safir kristali ve GaN kristalinin örgü uyumsuzluğu % 14 ve temel genleşme katsayılarındaki uyumsuzluk % 34 'dür. Bu nedenle Al_2O_3 üzerine GaN büyütüldüğünde 10^9 - 10^{11} cm^{-2} gibi yüksek konsantrasyonlarda kenar ve vida dislokasyonları içerir.

Kristal içinde dislokasyonlara dik hareket eden elektronların etkilendiği dislokasyon potansiyeli Bonch-Bruevich ve Glasko potansiyeli ile verilir..

$$V(r) = \frac{e}{2\pi\epsilon_s} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \quad (4.68)$$

Burada ; K_0 ; sıfırıncı Bessel fonksiyonu ve perdeleme parametresi, λ ;

$$\lambda = \left(\epsilon_s k_b \frac{T}{e^2 n'}\right)^{1/2} \quad (4.69)$$

n' etkin perdeleme konsantrasyonu ;

$$n' = n + (n + N_A) \left[1 - (n + N_A)/N_D\right] \quad (4.70)$$

N_D ve N_A bulk donör ve bulk akseptör konsantrasyonlarıdır.

Dislokasyon akseptörleri donörlerden elektronları çekerler ve bu durumun yük denge denkleminde dikkate alınmalıdır.

$$N + N_A + \frac{N_{dis}}{C} = \frac{N_d}{1 + \frac{n}{\Phi}} \quad (4.71)$$

Burada ;

$$\phi = \left[\left(\frac{g_0}{g_1} \right) N_c \exp\left(\frac{\alpha}{k_b}\right) \right] T^{\frac{3}{2}} \exp(-E_D / kT) \quad (4.72)$$

burada g_0 ve g_1 ; işgal edilmiş ve edilmemiş donör durumlarıdır.

N_C ; T=1 K 'de etkin iletim bandı durum yoğunluğudur. E_D ; T=0 K 'de donörlerin aktivasyon enerjisidir. α ; $E_D = E_{D0} - \alpha T$ ile verilen sıcaklık katsayısıdır.

Dislokasyon çizgi yüklerinden saçılma iki boyutlu olduğundan yalnızca dislokasyon da dik hareket eden elektronlar saçılırlar.

$$q = \vec{k}'_1 - \vec{k}_1 \quad (4.73)$$

Burada \vec{k} gelen \vec{k}' saçılan dalga vektörüdür.

Saçılma potansiyelinin Fourier dönüşümü ;

$$A(\vec{q}) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{e^2 \lambda^2}{2\pi \epsilon_0} K_0(x) e^{-iq\lambda \cos \phi} x d\Phi dx \quad (4.74)$$

$$x = \frac{r}{\lambda} \text{ buradan } A(\vec{q}) = \frac{e^2 \lambda^2}{\epsilon c (1 + q^2 \lambda^2)} \quad (4.75)$$

$$q^2 = \left\| \vec{k}_1 - \vec{k}'_1 \right\|^2 \quad (4.76)$$

\vec{k} dalga vektörlü elektronlar için saçılma hızı ;

$$S(\vec{k}) = \frac{1}{\pi^2} \frac{2\pi}{\hbar} \int A^2(k_1 k'_1) (1 - \cos \partial_k) \partial(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}) d\vec{k}'_1 \quad (4.77)$$

Burada $(2\pi)^2$; iki boyutlu k uzayında durum yoğunluğu;

θ_k ; \vec{k}_1 ve \vec{k}'_1 arasındaki açı;

E ; $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ elektron enerjisi

δ – fonksiyonu $\vec{k}_1 = \vec{k}'_1$ olmasını gerektirir. Öyleki $q^2 = 2k_1^2(1 - \cos\theta_k)$

Böylece dislokasyon saçılma hızı ;

$$W(\vec{k}) = \frac{N_{dis} m^* e^4}{\hbar^3 \mathcal{E}^2 c^2} \frac{\lambda^4}{(1 + 4\lambda^2 k_1^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (4.78)$$

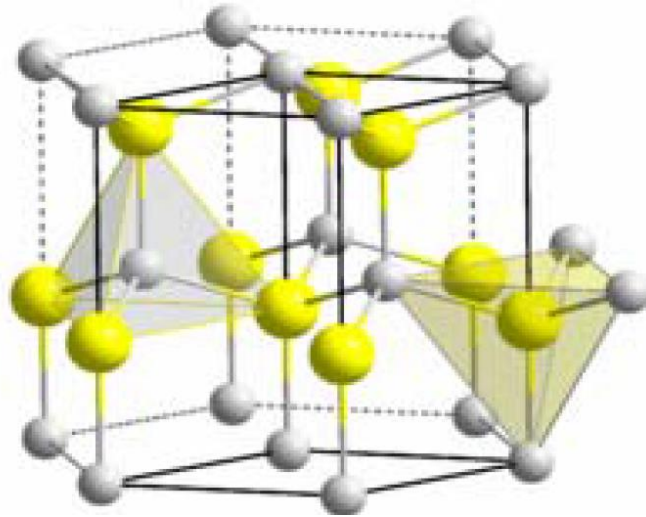
olur.

5. GaN MATERYALİNİN TEMEL ÖZELLİKLERİ

5.1. GaN Materyalinin Kristal yapısı

GaN; 1990' lardan beri çoğunlukla ışık yayan diyotlarda (LED) kullanılan ikili III-V direkt bant aralıklı bir yarıiletkenidir. Şekil 5.1'de görüldüğü gibi bileşimleri hegzagonal kristal yapısına sahip olan çok sert materyallerdir. Geniş bant aralığına ($\sim 3,4$ eV) sahip olan GaN, optoelektronik, yüksek güç ve frekans cihazlarında oldukça yaygın olarak kullanılmaktadır.

GaN ve alttaş arasındaki örgü sabitlerindeki uyumsuzluklarına rağmen SiC ve Si materyaller üzerine ince film olarak büyütülebilirler (Akasaki 1997). GaN materyali Si ve O ile katkılanırsa n-tipi (Yoshida 1983), Mg ile katkılanırsa p-tipi olur (Akasak 1997). Bununla birlikte, Si ve Mg atomları yerdeğiştirerek oluşan GaN kristal büyümesi sonucu tensile gerilme oluşur ve yapıyı daha kırılğan hale dönüştürebilir (Terao 2001). GaN bileşikleri cm^2 başına 100 milyon kadar çok büyük kusura sahiptir (Nakamura 2000). GaN' a ait oda sıcaklığındaki temel parametreler Tablo 5.1' de verilmiştir.



Şekil 5.1. GaN Materyaline Ait Kristal yapı

Yüksek kristal kaliteli GaN düşük sıcaklıkta oluşturulan tampon tabaka teknolojisi ile elde edilebilir (Amano 1986). Bu yüksek kristal kaliteli GaN, p-tipi GaN, p-n eklemli mavi/UV-LED' leri ve lazer davranışları için olanaksız olarak görülen oda sıcaklığında uyarılma emisyonunun bulunmasına sebep olmuştur (Akasaki 1995). Bu olay; nitrat tabanlı transistörlerin gelişmesi için ve yüksek-performanslı mavi-ledlerin, uzun ömürlü mor lazer diotların ticarileştirilmesine olanak verir.

İlk GaN-tabanlı şiddetli ışık veren LED' ler safir üzerine MOCVD ile büyütülen bir GaN ince filmi kullanılıyordu. GaN ile kullanılan alttaş arasındaki örgü sabiti uyumu hemen hemen %2 olan diğer alttaşlar ZnO ve SiC gibi ikililerdir (Morkoç 1994). Grup III-Nitrat yarıiletkenler görünür bölge kısa dalga boylu ve UV bölgesinde optiksel cihazlar üretmek için yarıiletken ailesinde gelecek vaad etmektedirler.

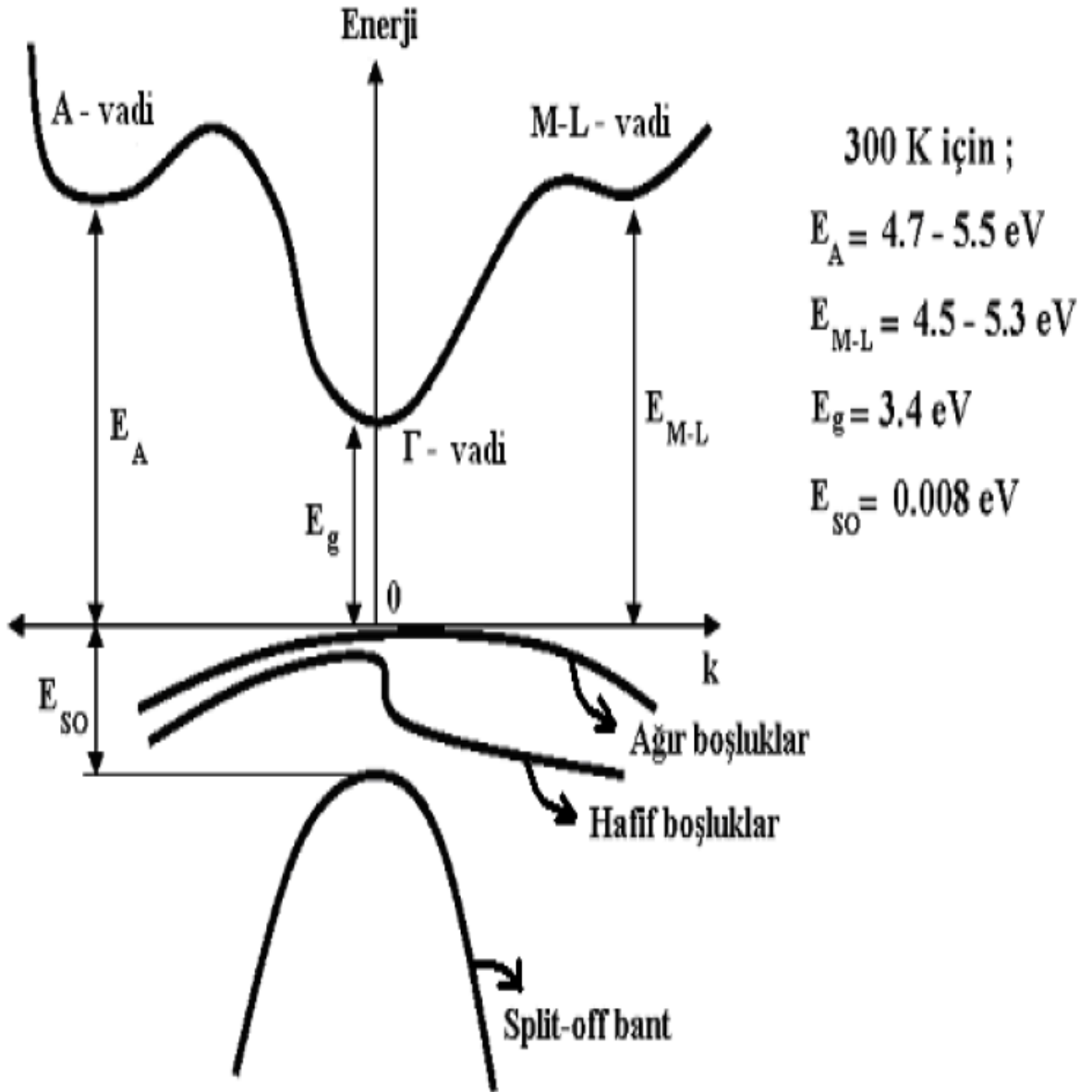
GaN transistörlerin performansını arttıran büyük yasak enerji aralığı sebebiyle Si transistörlerden daha yüksek sıcaklıklara kadar GaN-tabanlı cihazlar çalışabilir. İlk GaN metal/oksit yarıiletken alan-etkili transistörler (GaN MOSFET) 1993' de deneysel olarak elde edilmiştir ve geliştirilmiştir (Asif 1993).

GaN HEMT' ler 2006' dan beri ticari olarak önerilmişlerdir ve onların yüksek voltaj, yüksek güç etkileri sebebiyle çeşitli kablosuz altyapı uygulamalarında kullanılabilirler. Ayrıca yüksek frekanslı telekomünikasyon ve uzay uygulamaların da da kullanılmaktadırlar (Wisniewski 2006). GaN tabanlı MOSFET transistörler, yüksek güç elektroniklerinde özellikle otomotiv ve elektrikli araba uygulamalarında çok avantaj sağlarlar. GaN' in nanotüpleri nanoçapta elektroniklerde, optoelektronik ve biyokimyasal- algılama uygulamalarındaki uygulamalar için önerilir (Zhang 2005).

Çizelge 5.1. GaN materyalinin hesaplamalarda kullanılan parametreleri (Stephen 2001, Stephen 2003).

Parametreler	GaN
Yasak enerji aralığı (eV)	3.39
Materyal yoğunluğu (g/cm ³)	6.150
Etkin kütle (m^*/m_0)	0.21
Statik dielektrik sabiti (ϵ_s/ϵ_0)	8.9
Yüksek frekans dielektrik sabiti ($\epsilon_\infty/\epsilon_0$)	5.35
Ses hızı (m/s)	6560
Akustik deformasyon potansiyeli (eV)	8.3
Optik fonon enerjisi (meV)	92
Vadiler arası optik fonon enerjisi (meV)	92
Vadiler arası deformasyon potansiyeli (eV/cm)	1×10^9

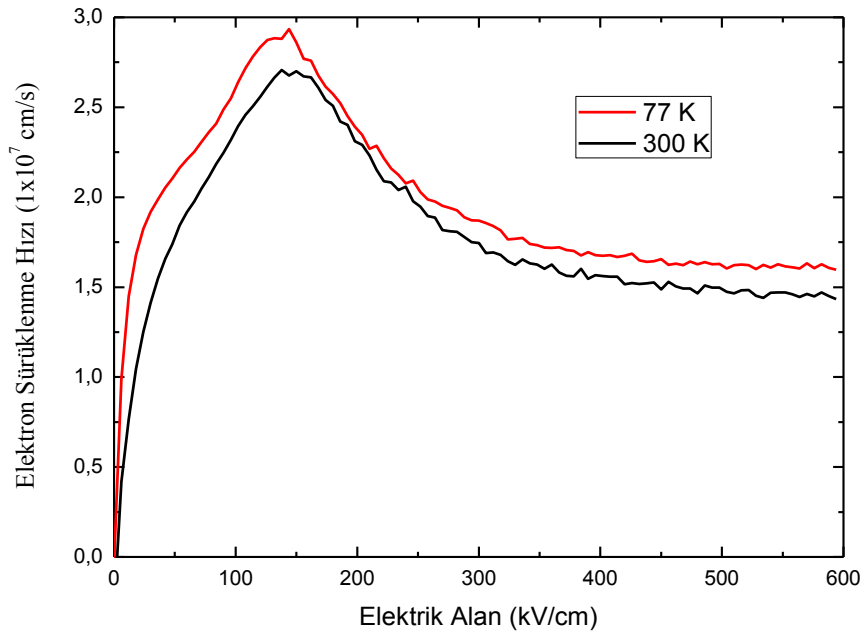
4.2 Materyalin bant yapısı



Şekil 5.2. GaN 'ın Bant yapısı (Madelung, 1996).

6. SONUÇ VE TARTIŞMA

Wurtzite GaN yarıiletken bileşiğinde elektron dinamiği Monte Carlo simülasyonu ile incelendi. Simülasyona iletim bandındaki Γ_1 ve Γ_2 vadileri için iyonize safsızlık, polar optik fonon, vadiler arası polar optik fonon, akustik fonon ve dislokasyon saçılmaları dahil edildi. Elektron sürüklenme hızı, ortalama elektron enerjisi uygulanan elektrik alanın fonksiyonu olarak elde edildi. Saçılma mekanizmalarının sürüklenme hızı üzerindeki etkilerini incelemek için saçılma mekanizmalarının etkinliklerinin elektrik alanla değişimi belirlendi. Dislokasyon yoğunluğunun sürüklenme hızı üzerindeki etkisini belirlemek için dislokasyon yoğunluğu $1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ve $5 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ alınarak tekrarlandı. Elektron sürüklenme mobilitésinin sıcaklıkla değişimi 50-500 K sıcaklık aralığında incelendi. Uygulanan düşük elektrik alanda elektron sürüklenme mobilitésinin dislokasyon yoğunluğu ile değişimi belirlendi. Hesaplamalar literatürden elde edilen ve Tablo 5.1.'de verilen materyal parametreleri kullanılarak 2 ns' lik simülasyon süresi için yapıldı.

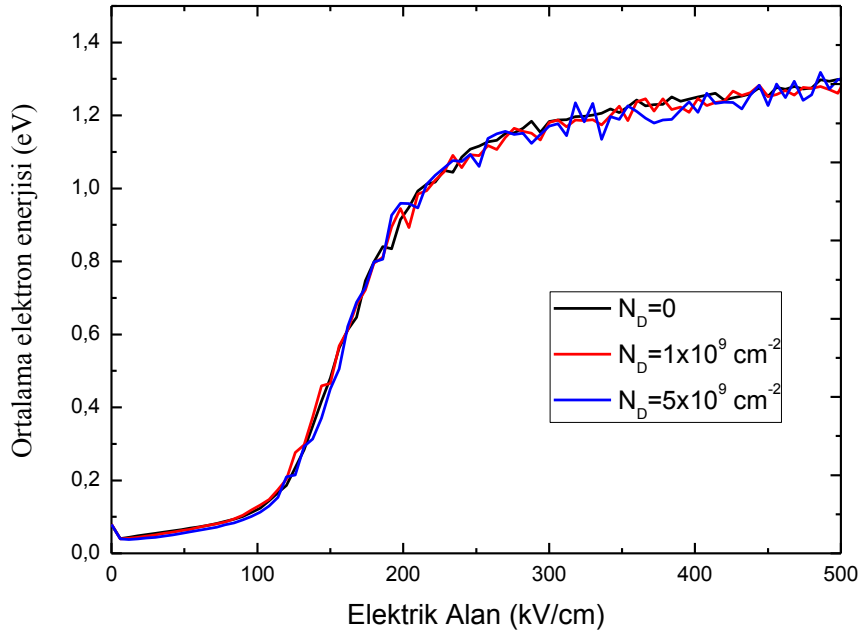


Şekil 6.1. GaN için elektron sürüklenme hızının uygulanan elektrik alanla değişimi

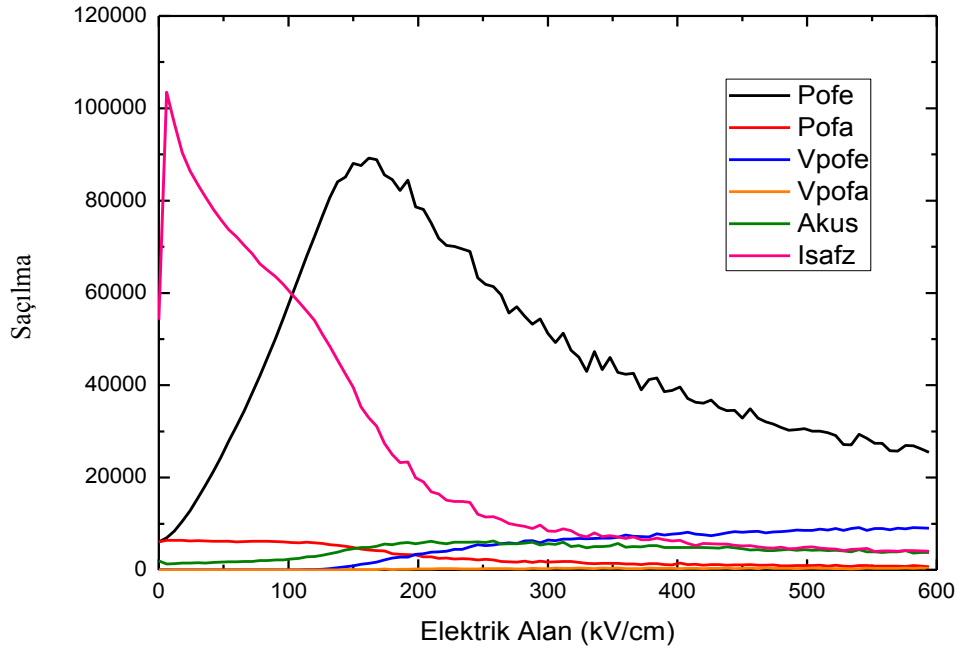
Şekil 6.1 de elektron sürüklenme hızı uygulanan elektrik alanın fonksiyonu olarak 77 ve 300 K sıcaklık değerleri için dislokasyon saçılma mekanizması hesaplamalara katılmadan belirlendi. Elektron sürüklenme hızı 300 K için yaklaşık 150 kV/cm elektrik alan değerine kadar lineer olarak artarak $2,5 \times 10^7$ cm/s lik pik değerine ulaştı. Elektrik alan şiddetinin daha da artışı elektron sürüklenme hızında düşüşe neden oldu. Elektrik alanın 400 kV/cm değerinden sonra ise $1,5 \times 10^7$ cm/s lik kararlı bir doyum değerine ulaştı. Literatürde sürüklenme hızının pik değeri $2,1 \times 10^7$ cm/s ile $2,8 \times 10^7$ cm/s değerleri arasında verilmiştir (Stephen 2003).

Elektron sürüklenme hızının bu değişimini açıklamak için Şekil 6.2’de verilen ortalama elektron enerjisinin ve Şekil 6.3’te elektron vadi işgalietinin uygulanan elektrik alan şiddeti ile değişimini incelemek daha açıklayıcı olacaktır.

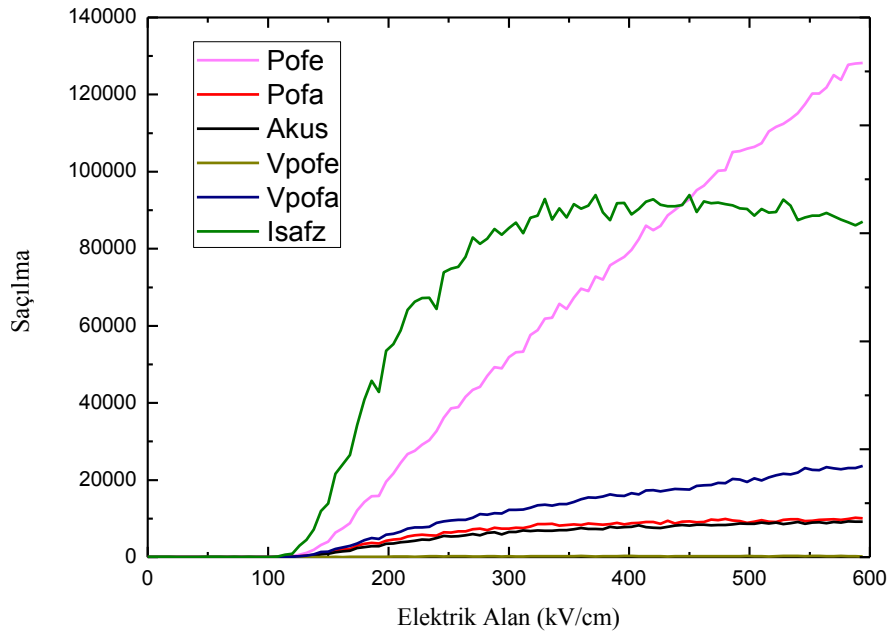
Ortalama elektron enerjisi yaklaşık 100 kV/cm elektrik alan değerine kadar 0,1 eV değerlerinde baskılanır bu alan değerinden sonra hızlı bir artış gösterir. Bu alan değerine kadar baskın olan saçılma mekanizmaları iyonize safsızlık ve polar optik fonon emisyon saçılmalarıdır.



Şekil 6.2. Ortalama elektron enerjisinin elektrik alan şiddeti ile değişimi.



Şekil 6.3. Γ_1 -vadisinde saçılma mekanizmalarının 2ns lik simulasyon süresince etkinlikleri. Pofe: polar optik fonon emisyon, Pofa: polar optik fonon soğurma, Vpofe: vadiler arası polar optik fonon emisyon, Vpofa: vadiler arası polar optik fonon soğurma, Akus: akustik fonon, Isafz: iyonize safsızlık saçılma mekanizması.

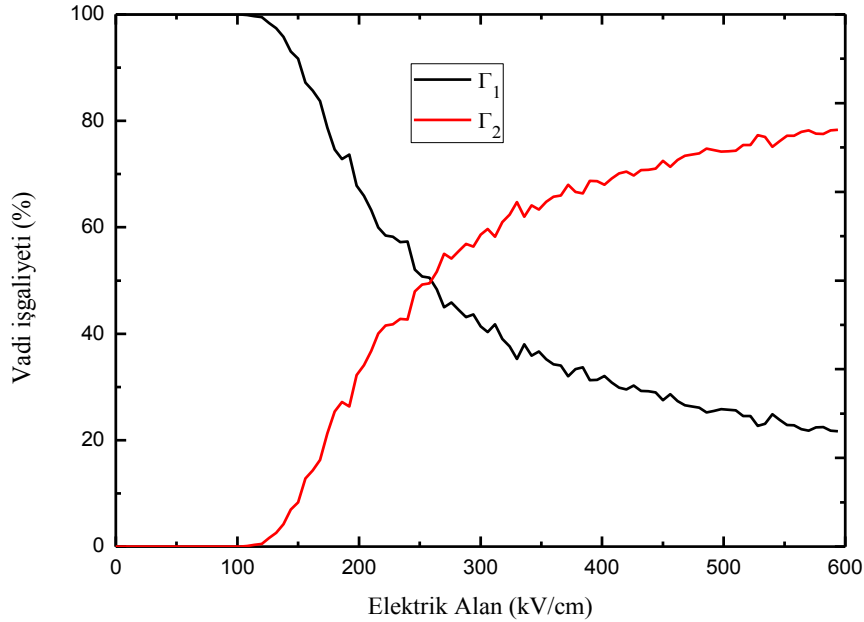


Şekil 6.4. Γ_2 -vadisinde saçılma mekanizmalarının 2 ns' lik simulasyon süresince etkinlikleri.

İyonize safsızlık saçılmaları elastik saçılmalar, saçılmadan sonra elektron enerjisinde bir değişiklik meydana getirmezler. Polar optik fonon saçılmaları da inelastik saçılmalarıdır, emisyon türü saçılmada elektron bir fonon yayınlayarak enerji kaybeder. Elektron her serbest uçuşu boyunca elektrik alandan kazandığı enerji ile 0.92 meV luk bir fonon yayınlayarak ortalama enerjisini 100 kV/cm elektrik alan değerine kadar 0.1 eV değerinde dengeler ve bu alan değerine kadar elektron Şekil 6.5 de görüldüğü gibi merkez vadidedir.

Elektrik alan şiddetinin 100 kV/cm lik değeri aşmasıyla polar optik fonon emisyon saçılmaları elektron enerjisini dengeleyemez ve ortalama elektron enerjisi artmaya başlar. Elektron enerjisinin artışıyla Γ_1 ve Γ_2 vadileri arasındaki 1.9 eV luk enerji ayırımını aşabilen elektron Γ_2 vadisine çıkar ve buradaki saçılmalarda Şekil 6.5 de görüldüğü gibi etkin hale gelir.

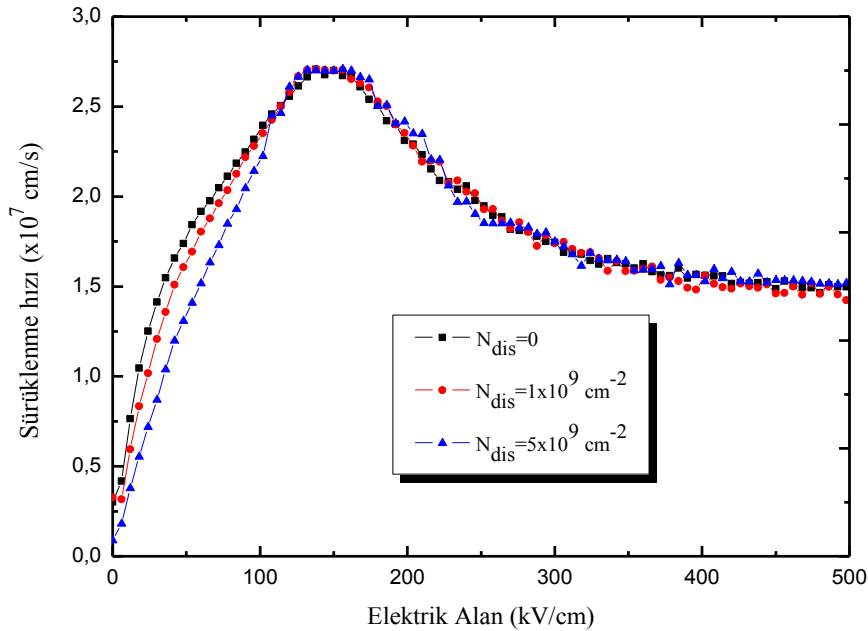
Elektronun Γ_1 -vadisindeki etkin kütlesi $0.21m_e$ ve Γ_2 -vadisindeki etkin kütlesi $1m_e$ dir. Etkin kütlelerin Γ_2 -vadisinde yaklaşık 5 kat artmasıyla artık elektron Γ_1 -vadisindeki gibi sürüklenme hızını artıramaz.



Şekil 6.5. Elektron vadi işgaliyeti

Elektrik alan şiddetinin 150 kV/cm değerini aşmasıyla Γ_2 -vadisindeki saçılmaların etkinlikleri artar. Elektronun Γ_2 -vadisinde ağır etkin külesiyle ortalama enerjisi artarken sürüklenme hızında düşüş başlar. Artan elektrik alan şiddeti ile 2ns' lik simülasyon boyunca elektron daha fazla saçılmaya maruz kalır ve ortalama serbest zamanı kısalmır bunun sonucunda sürüklenme hızı ve ortalama elektron enerjisi 400 kV/cm elektrik alan şiddeti civarlarında kararlı hale gelirler.

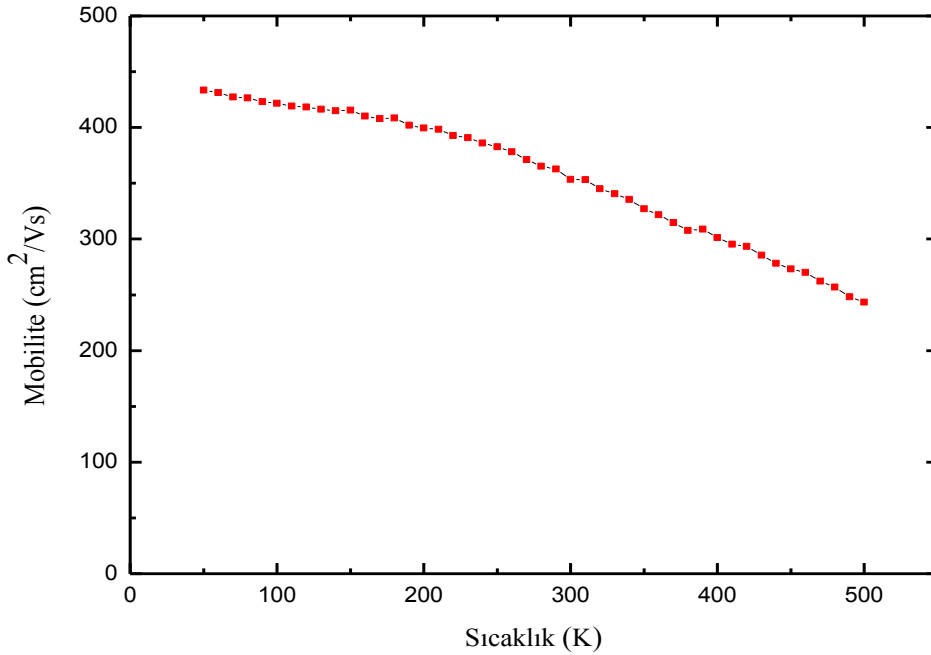
Dislokasyon yoğunluğunun sürüklenme hızı üzerindeki etkilerini incelemek için 300 K örgü sıcaklığında dislokasyon yoğunluğu $1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ve $5 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ alınarak simülasyon tekrarlandı Şekil 6.6. Dislokasyon saçılmaları elastik saçılmalardır, saçılmadan sonra elektron enerjisinde bir artış veya azalış olmaz. Dislokasyon saçılmaları düşük elektrik alan değerlerinde sürüklenme hızında Şekil 6.6 da görüldüğü gibi bir azalışa neden olur. 50 kV/cm elektrik alan değerinde dislokasyon yoğunluğu $N_{\text{dis}}=0$ alındığında elektron sürüklenme hızı yaklaşık $1.8 \times 10^7 \text{ cm/s}$ değerinde iken dislokasyon yoğunluğu $N_{\text{dis}}=5 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ olarak alındığında aynı alan değerinde sürüklenme hızı $1.3 \times 10^7 \text{ cm/s}$ olarak belirlendi.



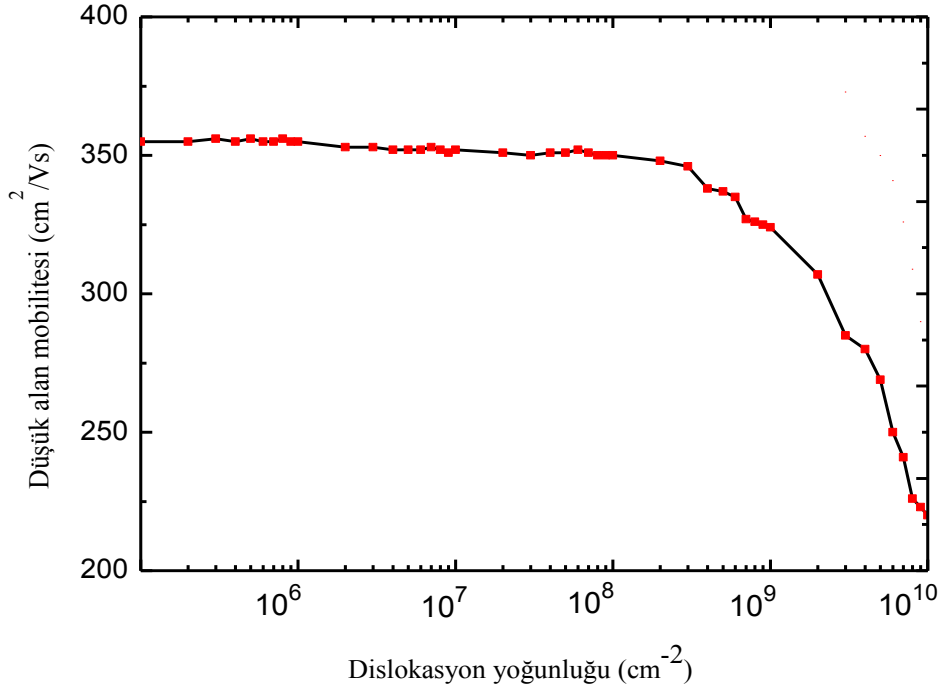
Şekil 6.6. Farklı dislokasyon yoğunlukları için sürüklenme hızının elektrik alan şiddeti ile değişimi.

Elektrik alan şiddetinin 100 kV/cm değerinden daha yüksek olduğu bölgelerde dislokasyon saçılmalarının sürüklenme hızı üzerinde belirgin bir etkisi yoktur, bu bölgelerde vadiler arası saçılmalar ve optik fonon saçılmalarının sürüklenme hızı üzerindeki etkisi daha baskındır.

Düşük alan mobilitesinin sıcaklıkla değişimini belirlemek için; sürüklenme hızındaki artışın lineer olduğu düşük elektrik alan bölgesinde 50 kV/cm sabit elektrik alan şiddetinde 50-500 K sıcaklık aralığında sürüklenme mobilitesinin sıcaklıkla değişimi Şekil 6.7 de görüldüğü gibi belirlendi. 50 kV/cm lik sabit bir elektrik alana maruz kalan elektron düşük sıcaklıklarda yani düşük termal enerjiye sahip olduğunda örgü içinde daha az saçılmaya uğrar. Bunun sonucunda düşük sıcaklık değerlerinde sürüklenme hızı yüksek olur ve sürüklenme mobilite değeri de yüksektir. Artan örgü sıcaklığı ve termal enerji ile elektron daha enerjik hale gelip daha fazla saçılmaya uğrar sürüklenme hızı ve sürüklenme mobilite değeri düşer. Şekil 6.1 de 77 ve 300 K sıcaklık değerlerinde 50 kV/cm elektrik alan değerinde sürüklenme mobiliteleri $\mu = v_d/E$ bağıntısından sırasıyla 425 cm²/Vs ve 360 cm²/Vs olarak belirlendi.



Şekil 6.7. 50 kV/cm elektrik alan değerinde düşük alan mobilitesinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 6.8. 300 K örgü sıcaklığında ve 50 kV/cm lik sabit elektrik alan şiddetinde $\mu=v_d/E$ bağıntısına göre belirlenen düşük alan mobilitesinin dislokasyon yoğunluğu ile değişimi.

Elektron sürüklenme mobilitesi $\mu=v_d/E$ sürüklenme hızının elektrik alan şiddetine oranı olarak düşünüldüğünde; dislokasyon saçılmalarının özellikle düşük alan mobilitesi üzerinde etkili oldukları görüldü. 50 kV/cm sabit elektrik alan değerinde sürüklenme mobilitesi dislokasyon yoğunluğu $N_{dis}=0$ için 360 cm²/Vs lik bir değere sahip iken $N_{dis}=5 \times 10^9$ cm⁻² lik dislokasyon yoğunluğunda 260 cm²/Vs değerine düştüğü görüldü.

KAYNAKLAR DİZİNİ

- Alfaramawi, K. 2010, Nümerical calculations of elektron mobiltiy of n-GaN, 922p
- Akarsu, M., 2003, Hg katkılanmış CdTe yarıiletken bileşiğinde taşınım özelliklerinin Monte Carlo simülasyonu ile belirlenmesi, Doktora tezi, ESOGÜ, 118p
- Akarsu, M , 2011, Calculation of elektron mobility of GaN semiconductor compound using Monte Carlo method
- Akarsu M. 2013, Wurzite GaN yarıiletken bileşiğinde dislokasyon saçılmalarının elektron iletimine etkisi
- Akasaki,I,Amano,H. 1997 ”Crystal Growth and conductivity Control of Group III Nitride Semiconductors
- Amano, H.,1986 Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film
- Ammon Y.,1975, Quantum Electronics, John Wiley & Sons, inc., 570p.
- Asif, K, 1993 Metal semiconductor field effect transistor based single crystal GaN
- Brian E.F. , 1999 , Transient electron transport in wurzite GaN, InN, AlN 7727-7734p
- Chin V.W. 1994, Electron mobilities in gallium,indium, and aluminum nitrides 739p
- Farahmand M. ,2001 Monte Carlo simulation of electron transport in the III-Nitride Wurzite Phase materials system 535p
- Fawcett W., Boardmann A.D Swain S., 1970, Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide, J.Phys.Chem.Solids, 31, 1963-1990.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam ediyor)

Hsu L. 2007, Electron mobility in InN and III –N alloys 102p

Jacoboni C., Reggiani L., 1983, The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials, Reviews of Modern Physics, 55, 645-705.

Jacoboni C., Reggiani L., 1970, High field transport in GaAs at 300 K, Physics Letters, 33A, 333-334.

Jacoboni C., Lugli P., 1989, The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation, Springer-Wien New York, 356p.

Jasprit S., 1995, Semiconductors Optoelectronics, McGraw-Hill Inc., 725p.

Jaszek R. 2001, Carrier scattering by dislocations in semiconductors 1-9p

Jonardan K., 2007 Calculation of electron mobility and effect of dislocation scattering in GaN 1-3p

Kalaycıkoğlu, E., 2008, Yarıiletkenlerde Yük Taşıyıcılarının taşınım denklemlerinin Monte Carlo yöntemiyle çözümü, Yüksek Lisans, DEÜ, 80p

Karthik R., 2011, Effect of dislocation scattering on electron mobility in GaN 813p

Karlheinz S., 1989, Semiconductors Physics, Springer-Verlag, 480p

Kazutaka T., 1993, Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices, Artech Hause Inc., 341p

Kittel, C., 1996 Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons, 7.Baskı.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam ediyor)

Kosisa H., Nedjalkov M., Selberherr S., 2000, A Monte Carlo method for small signal analysis of the Boltzmann equation, Journal of Applied Physics, 87, 4308-4314.

Lundstrom Mark, 2000, Fundamentals of Carrier Transport, Cambridge University Press, 418p.

Look, D.C., 1989, Electrical characterization of GaAs materials and Devices, John Wiley & Sons, 74-112p

Look, D.C., 1999, Dislocation scattering in GaN 1237p

Madelung Otfried, 1996, Semiconductors Basic Data, Springer, 317p.

Moglestue C., 1993, Monte Carlo Simulation of Semiconductors Devices, Chapman & Hall, 326p.

Morkoç H., 1994 Large band gap SiC III-V nitride semiconductor devices

Nag B.R., 1972, Theory of Electrical Transport in Semiconductors, Pergamon Press, 227p.

Nag B.R., 1980, Electron Transport in Compound Semiconductors, Springer-Verlag, 461p.

Nag B.R., Sanghamitra M., Madhumita D., 1999, Interface roughness scattering-limited electron mobility in AlAs/GaAs and Ga_{0.5}In_{0.5}P/GaAs wells, Journal of Applied Physics, 86, 459-463.

Nakamura, S, Fasol, 2000 The blue laser diode: The complete story

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam ediyor)

Ridley B.K. 2009, The physics of III-V nitrides 2p

Ruch J.G., Fawcett W., 1970, Temperature dependence of the transport properties of gallium arsenide determined by a Monte Carlo Method, Journal of Applied Physics, 41, 3843-3849.

Schwierz, F. 2005 , An elektron mobility model for Wurtzite GaN, 895p

Snowden C.M., 1988, Semiconductors Device Modelling, Peter Peregrinus Ltd., London, United Kingdom, 215p.

Stephen K. O'Leary ,2003, Steady State Electron Transport in the III-V Nitride Semiconductors: A Sensitivity Analysis, Journal of Electronic Materials.

Stephen K. O'Leary, 2001, Polar optical Phonon instability and intervalley transfer in III-V semiconductors 80p

Terao, S, Iwaya , 2001 AlGa_N/Ga_N heterostructure- Compositional and Impurity Dependence

Tomita Y.2007 , Monte Carlo study of high field electron transport characteristics in AlN/GaN heterostructure considering dislocation scattering Nitride Semiconductor GaN, AlN .and InN :A Review , 40p

Valentin O.T. 2005 , A modified transferred elektron high field mobility model for GaN devices simulation

Weimann G.N. 1998 The role of dislocation scattering in N-type GaN films, 821p

Wisniewski, P, 2006 , Broad-area high power CW operated InGa_N laser diodes

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam ediyor)

Yoshida, S., Misawa , S., Gonda, 1983 Epitaxial growth of GaN/AlN heterostructures

Yu Gang X. ,2007 , Effects of dislocations on electron transport in wurzite InN, 103p

Zanato ,D. 2003, Momentum relaxation of elektrons in n-type bulk GaN, 85p