

III-V Nitrit Yarıiletkenlerde Yk Tařınımının Monte Carlo Simlasyonu İle İncelenmesi

Muhammed Vehbi PEKTAŐ

DOKTORA TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Ocak 2021

Investigation of Particle Transportation in III-V Nitride Semiconductors by Monte Carlo
Simulation

Muhammed Vehbi PEKTAŞ

DOCTORAL DISSERTATION

Department of Physics

January 2021

III-V Nitrit Yarıiletkenlerde Yk Tařınımının Monte Carlo Simlasyonu İle İncelenmesi

Muhammed Vehbi PEKTAŐ

EskiŐehir Osmangazi niversitesi
Fen Bilimleri Enstits
Lisansst YnetmeliĐi Uyarınca
Fizik Anabilim Dalı
Katıhal FiziĐi Bilim Dalında
DOKTORA TEZİ
Olarak HazırlanmıŐtır

DanıŐman: DoĐ. Dr. Mustafa AKARSU

Ocak 2021

ETİK BEYAN

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kılavuzuna göre, Doç. Dr. Mustafa AKARSU danışmanlığında hazırlamış olduğum “III-V Nitrit Yarıiletkenlerde Yük Taşınımının Monte Carlo Simülasyonu İle İncelenmesi” başlıklı DOKTORA tezimin özgün bir çalışma olduğunu; tez çalışmamın tüm aşamalarında bilimsel etik ilke ve kurallara uygun davrandığımı; tezimde verdiğim bilgileri, verileri akademik ve bilimsel etik ilke ve kurallara 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. 21.01.2021

Muhammed Vehbi PEKTAŞ
İmza

ÖZET

Elektronik dünyası, yarı iletkenlere ihtiyaç duydukça, yarı iletken teknolojisindeki çalışmalarda büyük gelişmeler olmaktadır. Bu çalışmada, yarı iletken sahasında büyük öneme sahip III-V yarı iletkenlerin üçlü alaşımlarından elde edilen $Al_xIn_{(1-x)}N$ yarıiletkeninde elektrik alan ile elektron sürüklenme hızının nasıl etkilendiği araştırılmıştır. Çünkü, bu yarı iletken 0,7 eV ile 6,2 eV arasında değiştirilebilir geniş yasak enerji aralığına sahiptir. Bu özelliği optoelektronik sahası için gerçekten dikkat çekicidir. Bunun yanı sıra sürüklenme hızını etkileyebilecek saçılma mekanizmaları hesaba katılarak hesaplamalar yapılmış, hesaplamalarda kullanılan parametrelerin etkisi araştırılmış ve elde edilen veriler sonuç ve tartışma bölümünde ele alınmıştır.

Anahtar Kelimeler: AlInN, III-V Nitrit Yarı iletkenler, Monte Carlo, Sürüklenme Hızı, Saçılma Hızı

SUMMARY

As the world of electronics needs semiconductors, there are great advances in the work of semiconductor technology. In this study, the effect of electric field and electron drift velocity on $\text{Al}_x\text{In}_{(1-x)}\text{N}$ semiconductor obtained from triple alloys of III-V semiconductors of great importance in semiconductor field was investigated. Because, the first opportunities about this alloy is its variable bandgap energy which can be changed from 0,7 to 6,2 eV. So it is so attractive for optoelectronic technology. In this study, calculations were made taking into account scattering mechanisms that may affect drift velocity. The effect of the parameters used in the calculations was investigated and the data obtained were discussed in the conclusion and discussion section.

Keywords: AlInN, III-V Nitride Semiconductors, Monte Carlo, Drift Velocity, Scattering Rate

İÇİNDEKİLER

ÖZET	v
SUMMARY	vi
TEŞEKKÜR.....	viii
İÇİNDEKİLER.....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	x
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	xi
1. GİRİŞ	14
2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI.....	16
2.1. Elektron Taşınımı	16
2.1.1. Elektronun termal hareketi	16
2.1.2. Elektronun sürüklenme hareketi.....	17
2.1.3. Mobilite	18
2.2. Boltzman Taşınım Denklemi	20
2.3. Etkin Kütle	21
2.4. Elektronların saçılması	22
2.4.1. Kusur ve Taşıyıcı-Taşıyıcı Saçılmaları	23
2.4.1.1. <u>İyonize safsızlık saçılması</u>	23
2.4.1.2. <u>Dislokasyon saçılmaları</u>	24
2.4.1.3. <u>Taşıyıcı-taşıyıcı saçılmaları</u>	25
2.4.2. Fonon Saçılmaları	26
2.4.2.1. <u>Akustik fonon saçılmaları</u>	26
2.4.2.2. <u>Optik fonon saçılmaları</u>	29
2.5. Fermi'nin Altın Kuralı	32
2.6. III-V Nitrit Yarı İletkenler	33
3. ELEKTRON TAŞINIMI İÇİN MONTE CARLO YÖNTEMİ.....	35
3.1. Bant Yapısı İçin Bir Yaklaşım	35
3.2. Yarı İletken İçin Algoritmanın Oluşturulması.....	36
3.2.1. Elektronun başlangıç durumu.....	36
3.2.2. Elektronun sürüklenmesi ve uçuş zamanı	37
3.2.3. Elektronun saçılması ve saçılma hızı	40

3.2.4. Elektronun hızı	41
3.2.5. Elektronun enerjisi	42
4. MATERYAL.....	43
4.1. AlInN Yarı iletkeni	43
4.2. Kristal Yapısı.....	43
4.3. Elektronik Özellikleri Ve Bant Yapısı	44
4.4. Yasak Enerji Aralığı.....	45
4.5. Kullanılan Parametreler.....	47
5. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	49
6. SONUÇ VE ÖNERİLER	61
KAYNAKLAR DİZİNİ.....	64

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. Hiçbir etki altında olmayan serbest elektronun hareketi	17
2.2. Elektrik alan etkisi altında sürüklenen serbest elektronun hareketi	18
2.3. Akustik fonon saçılması E_k - k grafiği.....	29
3.1. Farklı Alüminyum konsantrasyonları ile $Al_xIn_{(1-x)}N$ 'in yasak bant aralığı	36
4.1. Zink-Blend yapıda $Al_{0.25}In_{0.75}N$ üçlü alaşım (Moussa vd., 2018).....	44
4.2. (a) $Al_{0.25}In_{0.75}N$ için bant yapısı (b) $Al_{0.5}In_{0.5}N$ için bant yapısı.....	45
4.3. $AlInN$ bant yapısının örnek grafiksel gösterimi	45
4.4. Yasak enerji aralığının alüminyum konsantrasyonu ile değişim grafiği	46
5.1. $Al_{0.2}In_{0.8}N$ için Hız-Alan grafiği.....	49
5.2. $Al_xIn_{(1-x)}N$ yarı iletkeninde 300 K'de farklı Al konsantrasyonlarında elektron sürüklenme hızı – elektrik alan grafiği.....	50
5.3. $Al_xIn_{(1-x)}N$ yarı iletkeninde 300 K'de farklı Al konsantrasyonlarında elektron enerjisi – elektrik alan grafiği.	51
5.4. Farklı sıcaklık değerlerinde $Al_{0.2}In_{0.8}N$ için sürüklenme hızı-elektrik alan grafiği.....	52
5.5. Ortalama serbest zamanın elektrik alan ile değişiminin grafiği	53
5.6. Farklı konsantrasyon değerlerinde elektron sürüklenme hızı-elektrik alan grafiği.....	54
5.7. Ortalama elektron enerjisi-elektrik alan grafiği.....	55
5.8. Γ ve X vadilerinde 2 ns'lik simülasyon süresince elektronun bulunma yüzdeleri	56
5.9. Γ – vadisindeki saçılma sayılarının yüzdeleri	57
5.10. X vadisindeki saçılma mekanizmalarının yüzdeleri	58
5.11. Γ , X – vadilerindeki saçılma sayılarının elektrik alanla değişim grafiği.....	59
5.12. $Al_{0.5}In_{0.5}N$ için simülasyon süresi boyunca elektron sürüklenme hızı	60

ÇİZELGELER DİZİNİ

Cizelge

Sayfa

4.1. AlN,InN ve AlInN için parametreler	47
---	----

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Simge</u>	<u>Açıklamalar</u>
τ	Ortalama serbest zaman
$\delta(t)$	Birim zamanda saçılma olasılığı
j	Saçılma mekanizması sayısı
Λ	Toplam saçılma hızı
r	Rastgele sayı
\vec{a}	İvme
\vec{k}	Elektron dalga vektörü
$\overrightarrow{\Delta k}$	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>Simge</u>	<u>Açıklamalar</u>
δ	Dirac fonksiyonu
$\vec{e}_{\vec{q}}$	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
$V(\mathbf{r})$	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>Simge</u>	<u>Açıklamalar</u>
v_s	Materyaldeki ses hızı
m_1^*	Γ -vadisindeki etkin elektron kütlesi
m_2^*	X-vadisindeki etkin elektron kütlesi
e^*	Etkin yük
Ξ_d	Akustik deformasyon sabiti
$n_{\vec{q}}$	Fonon sayısı
k_B	Boltzmann sabiti
T_L	Örgü sıcaklığı
\vec{D}_0	Optik deformasyon potansiyeli
$\hbar w_{if}$	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
e-e	Elektron-elektron

1. GİRİŞ

III-V yarı iletkenler, uzun zamandır yeni tasarlanmakta olan elektronik ve optoelektronik cihazların uygulamaları için umut verici malzemeler olarak bilinmektedir (Strite ve Morkoç, 1992). Elektronik dünyası açısından, bu yarı iletkenlerin geniş yasak enerji aralıkları, yüksek ısı iletkenlikleri ve uygun elektron taşıma özellikleri önemlidir. Ayrıca bu tür özellikleri bu malzemelerin alaşımlarını, yüksek güç ve yüksek frekanslı elektronik cihazlar için ideal kılmaktadır. Bu materyalleri incelemek için ilk çabalar büyüme zorlukları ile engellenmiş olsa da, materyal kalitesindeki son gelişmeler, bir dizi III-V nitrit yarı iletken tabanlı elektronik (Khan vd., 2000) ve optoelektronik (Burk vd., 1999) cihazlarının gerçekleştirilmesini sağlamıştır. Bu gelişmeler, III – V nitrit yarı iletkenlere zamanla büyük ilgi uyandırmıştır.

III-V nitrit yarı iletken tabanlı cihazların tasarımını analiz etmek ve geliştirmek için, bu malzemeler içinde gerçekleşen elektron taşınımının da iyi anlaşılması gerekir. III-V yarı iletkenlerden özellikle AlN ve InN içerisinde, elektron taşınımı yıllar içerisinde yoğun bir şekilde incelenmiştir (Littlejohn vd., 1975). Ne yazık ki, AlN ve InN ile ilişkili temel parametrelerdeki belirsizlik, bu malzemeler içindeki elektron taşınımının analizinde belirsizliğin temel kaynağı olmaya devam etmektedir (Hadi vd., 2013). Ek olarak, bazı deneysel (Wraback vd., 2000) ve teorik (Krishnamurthy vd., 1997) gelişmeler, III-V nitrit yarı iletkenler, AlN ve InN içindeki elektron taşınım mekanizmaları hakkındaki bazı gelişmeler yaygın olarak kabul edilen kavramların geçerliliğinden şüphe duyulmasına neden olmuştur. Bunun en bariz örneği uzun süre (1970-2002) InN yarı iletkenin yasak bant aralığının 1,89 eV olarak kabul görmesi ve bu değer üzerinden araştırma ve ölçüm yapılmasıdır. Daha sonraları teknolojik ve hassas cihazlarla InN için yasak bant aralığının yaklaşık 0,7 eV olarak kabul görmüştür.

Hızla gelişmekte olan bu araştırma halkasına bu çalışma da dahil olacaktır. Bu çalışmadaki amacın üçlü alaşım yarı iletkenlerde yük taşınımının ve buna bağlı olarak hız, enerji hesaplamalarının daha doğru ve isabetli yapılabilmesi için bir basamak oluşturacağı önemlidir. Bu nedenle bugüne kadar daha az çalışılmış ancak daha fazla ve önemli bir uygulama sahası bulunan alüminyum indiyum nitrit yarı iletkeni üzerinde duruldu.

Literatürdeki diğer teorik ve deneysel çalışmalar da incelenerek tartışıldı. Bu inceleme ve tartışmalar en azından üçlü alaşım yarı iletkenlerin geleceği konusunda daha kuvvetli bir vizyon sunması ümidindedir.

Daha önce üçlü alaşım yarı iletkenlerle ilgili Monte Carlo yöntemi kullanılarak yapılmış birçok çalışma bulunmaktadır. Ancak, özellikle AlInN üçlü alaşım yarı iletkenlerde elektronların taşınımı ile ilgili daha önceden yapılmış sınırlı sayıda çalışma vardır. Söz konusu malzeme üzerindeki bu çalışmalarda da hesaplamalar yapılırken Monte Carlo yöntemi kullanılmıştır. Bunlardan, 2010 yılında Abadi'nin yapmış olduğu çalışmada elektron sürüklenme hızı-elektrik alan karakteristiği incelenmiştir (Arabshahi vd., 2010). Söz konusu malzeme ile yapılmış diğer çalışma ise 2014 yılında Bachir tarafından yapılmıştır. Bu çalışmada da yine elektron sürüklenme hızının uygulanan elektrik alan karşısında değişimi incelenmiştir (Bachir vd., 2014).

Bu çalışmada, AlInN yarı iletkeninde yük taşınımının simülasyonu Monte Carlo yöntemi ile incelendi. Öncelikle yarı iletkenlerin temel ilkeleri ve yük taşınımının sistematiği ile ilgili bilgi verildi. Boltzman taşınım denklemleri ile, taşıyıcıların dış elektrik alan etkisinde hareketi anlatıldı. Sonraki bölümde Monte Carlo yöntemi açıklandı, AlInN yarı iletkeni için parametre değerleri verildi ve bu değerler için Monte Carlo yönteminin nasıl kullanıldığı açıklandı. Ayrıca elektron dinamiğinin çarpışmalar ve sonrasında ilerleyişi açıklandı. Son bölümde elde edilen sonuçlar grafikler halinde verildi ve tartışma bölümünde literatürdeki diğer çalışmalarla kıyaslanarak açıklandı.

2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI

2.1. Elektron Taşınımı

Bu bölümde elektronun kristal içerisinde farklı etkilerle taşınımını tanımlandı. Bunlardan birincisi durgun halde termal enerjisi, diğeri de dış elektrik alan etkisinde sürüklenme hareketidir.

2.1.1. Elektronun termal hareketi

Dışarıdan uygulanan bir elektrik alan olmasa bile taşıyıcılar normal şartlarda durağan değillerdir ancak sonlu bir kinetik enerjiye sahiptirler. Bunun için ortalama bir kinetik enerjiden bahsedilir ve bu da aşağıdaki şekilde tanımlanır;

$$\text{Ortalama kinetik enerji} = \frac{\text{toplam kinetik enerji}}{\text{elektron sayısı}} \quad (2.1)$$

Yukarıda basit olarak yazılmış ifadeye yer alan integrallerin ve türevlerin çözümü ile sonuçta ortalama kinetik enerji ifadesini aşağıdaki şekilde yazılabilir;

$$\text{Ortalama kinetik enerji} = \frac{3}{2} k_B T \quad (2.2)$$

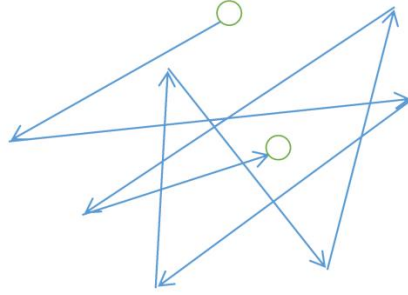
Bu ifadeden ve kinetik enerjinin $mv^2/2$ eşitliğinden yararlanılarak elektronun termal hızı, v_{th} aşağıdaki şekilde yazılır;

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} \quad (2.3)$$

eşit olur.

Taşıyıcılar kristal içerisinde termal hızlarıyla ilerlerken doğrusal bir yol izlemezler. Kristal kusurları ve/veya fonon vb. etkilerden dolayı çarpışma veya saçılma sonucunda

yönlerinde deęişiklik olur. Taşıyıcılar Şekil 2.1’de gösterildięi gibi zikzak çizerler. İki saçılma veya çarpışma arasında geçen zamana ortalama serbest zamanı denmektedir. İlerleyen başlıklarda bu konuya değinilmiştir. Saçılmalar arasında geçen ortalama serbest zaman yaklaşık 0,1 piko saniye ve çarpışmalar arasındaki yol ise birkaç nanometre mertebesindedir. Termal hız sıfırdır, bundan dolayı sabit bir akım üretilmesine katkı sağlamaz sadece termal gürültüyü artırır. (He vd., 2010).

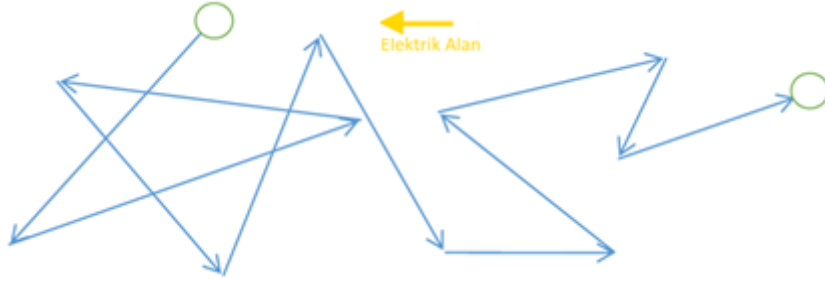


Şekil 2.1. Hiçbir etki altında olmayan serbest elektronun hareketi

2.1.2. Elektronun sürüklenme hareketi

Sürüklenme, yarı iletken dış bir elektrik alan uygulanması ile taşıyıcıların bu dış kuvvetle birlikte belirli bir yöne doğru etkilenmesi demektir. Aslında sürüklenme etkisi yarı iletken voltaj uygulanmaya başladığında ortaya çıkan bir durumdur.

Bir yarı iletken dışarıdan uygulanan E , elektrik alanı taşıyıcıların sürüklenmesine neden olduğundan artık ortalama hızları sıfırdan farklıdır. Bu sıfırdan farklı hız değeri sürüklenme hızı olarak tanımlanmaktadır (He vd., 2010). Sürüklenme hızı, yarı iletken cihazlardaki termal hızdan çok daha önemlidir, bu nedenle hız terimi genellikle sürüklenme hızı anlamına gelir. Yarı iletken bir cihaz veya devrenin daha yüksek bir hızda çalışmasına katkıda bulunduğu için daha hızlı bir taşıyıcı hızı istenir.



Şekil 2.2. Elektrik alan etkisi altında sürüklenen serbest elektronun hareketi

Bir tanımlama yapabilmek için iki çarpışma arasında geçen zamana ortalama serbest zaman denilir ve τ_{mp} olarak belirtilir. Taşıyıcı her çarpışmadan sonra sürüklenme momentini $m_p v$ kadar kaybeder. Çarpışmalar arasında kazanılan sürüklenme momentumu kuvvete eşittir, qE ve zaman da ortalama serbest zamana eşittir. Buradaki kaybı kazanca eşitleyerek, sürüklenme hızı bulunabilir;

$$m_e v = qE \tau_{mp} \quad (2.4)$$

$$v = \frac{-qE \tau_{mp}}{m_e} \quad (2.5)$$

genellikle bu denklem aşağıdaki şekilde yazılmaktadır;

$$v = -\mu_e E \quad (2.6)$$

bu denklemde (-) işaret elektronun elektrik alanın zıt yönüne doğru hareket ettiğini ifade etmektedir. Ayrıca denklemde görüldüğü gibi elektronun hızı, uygulanan elektrik alanın şiddeti ile doğru orantılıdır.

2.1.3. Mobilite

Bir dış elektrik alan etkisindeki yüklü bir parçacık için hareket denklemi aşağıdaki gibidir;

$$F = m^* a = eE \quad (2.7)$$

Denklem (2.7)'de e , parçacığın elektriksel yükünü, E , uygulanan dış elektrik alan şiddetini, a , ivmelenmesini ve m^* da parçacığın etkin kütesini ifade etmektedir. Bahsi geçen parçacık eğer elektron ise elektronun etkin kütesini ve yükünü, eğer deşik ise, onun etkin kütesini ve yükü tanımlanmaktadır. Bu denklemde de görüldüğü gibi eğer uygulanan dış elektrik alan sabit olacak olursa, beklenen hız değeri lineer bir şekilde artış gösterecektir. Bununla birlikte, bir yarı iletkendeki yüklü parçacıklar, iyonize safsızlık atomları ve termal olarak titreşimli örgü atomları hareketi boyunca çarpışmalara maruz kalacaktır. Bu çarpışmalar ilerleyen bölümlerde “saçılma” olarak tanımlandı. Yüklü parçacıklar, dış elektrik alan etkisiyle ivmelendikçe hızı artar. Yüklü parçacık kristal içindeki bir atomla çarpıştığında, enerjisinin çoğunu veya tümünü kaybeder. Parçacık, başka bir saçılmaya uğrayana kadar tekrar hızlanmaya ve enerji kazanmaya başlayacaktır. Bu işlem tekrar tekrar devam edecektir. Bu işlem boyunca, parçacık, düşük elektrik alanları için uygulanan dış elektrik alana bağlı olarak ortalama bir sürüklenme hızı kazanacaktır. Hız aşağıdaki şekilde ifade edilir;

$$v = -\mu E \quad (2.8)$$

Burada, μ , ifadesi orantılılık faktörüdür ve mobilite olarak adlandırılmaktadır. (-) ifadesi elektronun yükünden dolayıdır.

Mobilite ifadesi, yarı iletkenler için önemli bir parametredir. Çünkü elektrik alandan dolayı nasıl daha iyi hareket edeceğini açıklamaktadır (Neamen, 2011). Bu nedenle aslında hareketlilik tanımlaması daha uygun olacaktır. Genel olarak mobilitenin birimi $\text{cm}^2/\text{V-s}$ olarak kullanılmaktadır.

Mobilite ifadesini elektron için yukarıdaki denklemden çekildiğinde;

$$\mu = -\frac{v}{E} = -\frac{e\tau}{m^*} \quad (2.9)$$

şeklinde olacaktır. Burada, e , elektronun yükünü, τ , iki çarpışma arasındaki serbest zamanı ve m^* , elektronun etkin kütesini ifade etmektedir.

Elektronların kristal içerisinde saçılmaya uğrayacağı üç temel mekanizma vardır. Bunlar ana başlıklar halinde; kristal kaynaklı saçılmalar, fonon kaynaklı saçılmalar ve taşıyıcıların birbirleriyle olan etkileşiminden kaynaklanan saçılmalar. Bunların detaylarına sonraki bölümde değinilecektir. Burada mobiliteye farklı bir boyut kazandırmak için, bu iki mekanizmanın kaynağından bahsedilecektir. Bu mekanizmalardan ilki, fonon, yani örgü titreşimleri kaynaklı, diğeri de safsızlıklardan kaynaklı saçılmalar. Örgü titreşimlerinden kaynaklanan saçılmalar termal hareketlilikten kaynaklandığı için saçılma hızı örgü sıcaklığına bağlı olacaktır. Eğer örgü kaynaklı mobilite, μ_L olarak gösterilecek olursa,

$$\mu_L \propto T^{-\frac{3}{2}} \quad (2.10)$$

şeklinde bir orantı olduğu ifade edilmektedir (Neamen, 2011). Kristal örgü kaynaklı saçılmalara bağlı hareketlilik, sıcaklık azaldıkça artar. Örgü titreşimlerinin sıcaklık azaldıkça azalması beklenir, bu da saçılma olayının olasılığının da azaldığını ve böylece hareketliliğin arttığını göstermektedir.

2.2. Boltzman Taşınım Denklemleri

Yarı iletkenlerde yük taşınmasının yarı klasik tanımlanması Boltzmann taşınım denklemi (Boltzmann Transport Equation) tarafından açıklanmaktadır. Bu denklem yarı iletkenlerde taşıyıcı hareketinin gerçek uzay ve momentum uzayındaki davranışını incelemektedir.

Hızı v olan bir elektronun dış elektrik alan E , etkisinde ve $f(k, v)$ dağılım fonksiyonunu kullanarak elektron dağılımını açıklamak için, Boltzmann taşınım denklemini şu şekilde yazılır;

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarpışma}} - (v \cdot \nabla_r f + F \cdot \nabla_p f) \quad (2.11)$$

Yukarıdaki denklemde, çarpışmalardan (saçılmalar) ve sürüklenmeden kaynaklanan durumlar hesaba katılmıştır. Bu aşamada, aslında Boltzmann taşınım denkleminin altı

boyutlu bir diferansiyel denklem olmasından dolayı (gerçek uzayda üç r, momentum uzayında üç p) denklemin analitik çözümünü yapmak oldukça güçtür.

Hız ve enerji denklemlerinin çözümü için, Dyson ve Ridley (Dyson ve Ridley, 2011) şöyle bir öneri getirmişlerdir;

$$\frac{d\langle v \rangle}{dt} = eF \left\langle \frac{1}{m} \right\rangle - \frac{\langle v \rangle}{\tau_m} \quad (2.12)$$

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = eF \langle v \rangle - \frac{\langle E \rangle}{\tau_E} \quad (2.13)$$

Bu denklemde τ_m ve τ_E enerji ve momentum için durulma zamanını ifade etmektedir. $\langle E \rangle$ ve $\langle v \rangle$ de sistemin ortalama enerji ve hız değerlerini ifade etmektedir. Bu basite indirgenmiş yol ve yöntemlerle birlikte, Boltzmann taşınım denklemi Monte Carlo yöntemi gibi sayısal metotlar kullanılarak da çözülebilmektedir.

2.3. Etkin Kütle

Bir elektrona E elektrik alanı uygulanırsa, elektronun ivmelenmesini aşağıdaki gibi ifade edebiliriz;

$$\vec{a} = \frac{-q\vec{E}}{m_e} \quad (2.14)$$

Bu ifadede, -q elektronun yükünü, m_e elektronun kütesini ve \vec{E} de uygulanan elektrik alanın şiddetini ifade etmektedir. Herhangi bir kristal içerisinde elektronun hareketini tanımlarken ise; kristaldeki bir elektriksel alanla etkileşime girer bundan dolayı elektrona bir etkin kütle tanımlaması yapmalıdır. Çünkü kristal içerisinde elektronun kütesi serbest elektron kütesinden farklıdır.

Ayrıca, kristal içerisindeki bir elektronun tam bir tanımlamasını yapmak için sadece parçacık özelliğinden bahsetmesi doğru olmaz. Bu nedenle kristal içerisindeki elektronun

dalga özelliğinden de bahsetmek gerekir. Elektronun dalga fonksiyonunu, üç boyutlu Schrödinger dalga denkleminin çözümü ifade edilecek aşağıdaki gibi yazılır;

$$-\frac{\hbar}{2m_0} \nabla^2 \Psi + V(r)\Psi = E\Psi \quad (2.15)$$

Bu ifadede $\hbar=h/2\pi$, yani Planck sabitinin indirgenmiş hali, m_0 da elektronun serbest kütlesi, $V(r)$ alan potansiyeli ve E de elektronun enerjisidir. Sonuçta $\exp(\pm \vec{k} \cdot \mathbf{r})$ formun da bir çözüm yazabilir. \vec{k} elektron dalga vektörünü temsil etmektedir ve E 'nin bir fonksiyonu olarak tanımlanır, yani her k değerine karşılık bir E değeri vardır. k değeri $2\pi/\lambda_e$ ve E - k arasındaki bağıntı küresel bir simetri göstermektedir. Bu durumda söz konusu elektrik alan elektron dalga paketini aşağıdaki şekilde ivmelendirecektir; (He vd., 2010);

$$\vec{a} = -\frac{q\vec{E}}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} \quad (2.16)$$

İvmeyi F/m formunda yazabilmek için etkin kütle kavramını tanımlayarak yazmak daha uygun olacağından, aşağıdaki şekilde yazıldığında;

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \quad (2.17)$$

şeklinde olur.

Her yarı iletkenin kendine özgü potansiyel değerinden dolayı kendine has bir E - k bağıntısı vardır. Bu da kendine has bir etkin kütlesi olması demektir.(He vd., 2010)

2.4. Elektronların saçılması

Bir kristal sistem içerisinde sürüklenme sırasında gerçekleşen bir saçılmanın etkisini Boltzmann taşınım denklemini normal olarak sağlamaktadır. Çünkü mükemmel bir kristal içerisinde elektronlar elektrik alanın etkisine bağlı olarak doğrusal bir yönde ilerlerler. Ancak gerçekte bu durum böyle değildir, doğrusal yönünü ve enerjisini değiştirerek yoluna devam eder. Bu yön ve enerji değişimine başka bir değişle saçılma denilir. Birçok saçılma mekanizması yani, saçılmaya neden olan etken vardır. Ancak her

sistemde tüm saçılma mekanizmalarından söz edilemez. Örneğin alaşım saçılması saf element yarı iletkenlerde olmamaktadır. Bu nedenle, bu çalışmada da ilgilenilen materyale uygun saçılma mekanizmaları dikkate alınarak çalışma yapılmıştır.

Bu bölümde bazı önemli saçılma mekanizmaları ile ilgili özet bilgiler verilmiştir. Elektronun enerjisine bağlı olarak saçılma hızlarının formülleri de ayrıca verilmiştir.

2.4.1. Kusur ve Taşıyıcı-Taşıyıcı Saçılmaları

Normalde, yarı iletken bir kristal ideal kabul edilerek hesaplamalar ve değerlendirmeler yapılmaktadır ve örgü periyodikliği kusursuz olarak düşünülmektedir. Tabii ki, gerçekte, bu doğru olamaz çünkü mutlak sıfırdan büyük herhangi bir sıcaklıkta, sonlu boyutta hiçbir kristal mükemmel değildir. Herhangi bir saf malzemenin kristal örgüsü içinde bulunabilecek birkaç farklı türde kusur vardır. Genel olarak, bu tür iç örgü kusurlarını, boyutluluk, nokta, çizgi, düzlem ve uzaysal hacim kusurları bakımından geniş bir şekilde sınıflandırılır. Dahası, kristal örgü içinde mevcut olan herhangi bir tür önceden görülmemiş bir tür kusur olarak da kabul edilebilir. Bu bölümde kristal içerisindeki kusurlardan kaynaklı elektron saçılmalarını ve kristal içerisindeki taşınım süresince elektron-deşik ve elektron-elektron saçılmalarından kısaca bahsedildi.

2.4.1.1. İyonize safsızlık saçılması

Bir yarı iletkenin kristal yapısında oluşan kusurlar, elektronlardan çok daha ağırdır ve etkileşimleri statik bir potansiyel $V(r)$ ile tanımlanabilir (Jacoboni, 2010). Dolayısıyla çarpışmalar elastiktir; elektron momentumunu gevşetirler ancak enerjide değişikliğe neden olamazlar. Bu nedenle, taşıyıcıların termal hareketleri ve tek başına yabancı maddeler taşıma özelliklerini etkileyebilir. Elektron safsızlık etkileşimi, bir elektronun safsızlık alanı tarafından saçılması olarak tanımlanmaktadır. Bir saçılma olayı, en düşük dereceli Born yaklaşımı ile açıklanabilir. Ayrıca, bir elektronun bir safsızlık tarafından saçılması, diğer tüm safsızlıklardan bağımsız olarak muamele görür, bu durumun yalnızca düşük safsızlık konsantrasyonlarında geçerli olduğu düşünülebilir.

Bu aşamada bu durumun yani safsızlıktan kaynaklanan saçılmanın nedenini şu şekilde açıklanabilir. Bir iyonize safsızlık için saçılmanın kaynağı aslında Coulomb potansiyeli tarafından oluşan perdelemedir. Bunun için Brooks ve Herring bir yaklaşım sunmaktadır. Saçılma potansiyeli aşağıda verildiği gibidir;

$$V_i(r) = \frac{Ze(-e)}{4\pi\epsilon r} e^{-q_0 r} \quad (2.18)$$

Denklemden ϵ , malzemenin dielektrik sabiti ve q_0 'da ters perdeleme uzunluğunu, Z safsızlık atomunun elektrik yükünü ifade etmektedir.

2.4.1.2. Dislokasyon saçılmaları

Kristalin büyütülmesi sırasında ortaya çıkabilen bazı kusurlar vardır. Bu kusurlar; i) nokta kusurları; ii) hat hataları; iii) düzlemsel kusurlar ve iv) hacimsel kusurlar. Bu kusurlar elektronik ve optoelektronik cihazların performansını olumsuz etkiler ve mümkün olduğunca azaltılmaya çalışılmalıdır. Bu bölümde bu kusurlara özet şekilde değinildi.

- **Nokta kusurları**

Bir nokta kusuru, yalnızca bir veya birkaç birim hücrede kristalin periyodikliğini etkileyen oldukça lokalize bir kusurdur. Farklı türde nokta kusurları vardır ve bu tür kusur hemen hemen her kristal görülmektedir. Konsantrasyona bağlı olarak şu ifade ile verilmektedir:

$$\frac{N_d}{N_{Top}} = k_d \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right) \quad (2.19)$$

N_d boşluk yoğunluğunu ifade ederken, N_{Top} kristaldeki toplam parçacık yoğunluğunu ifade etmektedir. Bunun yanı sıra, E_d kusur oluşum enerjisini, k_d yarı iletkenlerde 1 ile 10 arasında değişen boyutsuz parametreyi ve T 'de kristalin büyütme sıcaklığını göstermektedir.

- **Hat kusurları**

Nokta kusurlarının aksine, hat kusurları (çıkık denir), bir doğru boyunca bağlanabilen çok sayıda atomik bölgeyi içerir. Dislokasyon ise bir atomik yarı dizinin komple çıkarılması veya eklenmesi ile oluşan kusurdur. Bu tür çıkıklara kenar çıkıkları denir. Kristalde bir kayma varsa, kristal bağlarının bir kısmının kırılması ve kaymadan sonra atomlarla yeniden bağlanması durumunda çıkıklar oluşabilir.

Çıkıklar, özellikle gerilmiş çok eklemlili yapıların büyütülmesinde ciddi bir problem olabilir. Optoelektronik cihazlarda, yer değiştirmeler cihazın performansını bozabilir ve cihazı işe yaramaz hale getirebilir. Bu nedenle, çıkıkların hesaba katılması çok önemlidir.

- **Düzlemsel kusurlar ve hacim kusurları**

Tek kristalli malzemelerde düzlemsel kusurlar ve hacim kusurları önemli değildir, ancak çok kristalli malzemelerde önemli olabilir. Kristal büyüme işlemi zayıfsa, hacim hataları üretilebilir. Kristal, şekilsiz bölgeler içerebilir veya boşluk içerebilir.

2.4.1.3. Taşıyıcı-taşıyıcı saçılmaları

Kristal yapıda birçok taşıyıcı aynı anda hareket etmektedir. Bundan dolayı birbirlerini etkilemeleri hatta momentumlarında dahi değişiklik yapabilmeleri muhtemeldir. Bundan dolayı elektronlar ve deşikler arasında Coulomb etkileşimi olabilmektedir. Hem e-e saçılmaları hem de deşik-elektron saçılmaları özellikle malzeme taşıyıcı yoğunlukları 10^{18} cm^{-3} ve üzerinde olan malzemelerde daha etkin görülmektedir.

- **Elektron-deşik saçılmaları**

Elektronlar hem deşikler tarafından hem de diğer elektronlar tarafından saçılırlar. Çünkü etkileşim içindeki her iki parçacıkta yüklüdür dolayısıyla aralarında Coulomb etkileşimi vardır.

- **Elektron-elektron saçılmaları**

Diğer bir saçılma türü olarak e-e saçılmaları yarı iletken kristal içerisinde genellikle görülen bir türdür. Bununla birlikte, e-e saçılmasının, taşıyıcıların diğer mevcut saçılma mekanizmalarından kuvvetli bir şekilde etkilenen Brillouin bölgesinin bölümlerine veya dışına saçılmasıyla, bir sistemin mobilitesini yarı klasik olarak etkileyebileceği uzun süredir tartışılan bir durumdur (Hu, 1996).

e-e saçılmaları temel olarak diğer iletim elektronlarının varlığında ortaya çıkan bir durumdur. Bu nedenle, parçacıklar birbirlerini Coulomb etkileşimi $U(q)$ ile engellenir. Ayrıca, ilgilendiğimiz orta düzey sıcaklıklarda, saçılma olayında elektronlar arasındaki enerji transferi genellikle elektronların kinetik enerjisinin önemli bir bölümüdür. Bu nedenle, e-e etkileşimleri için saçılma matris elemanları, Coulomb etkileşimi kullanılarak hesaplanmıştır: $V(q, \omega) = U(q)/\epsilon(q, \omega)$, burada $\epsilon(q, \omega)$ dielektrik fonksiyonu ifade etmektedir.

2.4.2. Fonon Saçılmaları

Yarı iletken kristalde atomlar örgü içerisinde titreşim hareketi yaparlar. Örgü içerisindeki taşıyıcılar işte bu titreşimlerden dolayı saçılırlar. Bu tür saçılmalara fonon saçılmaları denmektedir. Gerçek bir kristal yapıda atomlar sabit bir şekilde konumlandıkları yerde durmazlar, belirli bir periyodiklik içerisinde titrerler ve bu kristal sıcaklığı arttıkça titreşim de artmaktadır. Bu bölümde bu titreşimlerden yani fononlardan kaynaklı titreşimleri inceleyeceğiz. Bilindiği gibi iki farklı titreşim modu vardır. Bunlardan birisi optik fonon diğeri akustik moddan kaynaklanan akustik fononlar. Bunlardan kaynaklanan saçılmalara da optik fonon saçılmaları ve akustik fonon saçılmaları denmektedir. Bu iki fonon tipinden kaynaklanan saçılma mekanizmalarına bu bölümde değinildi.

2.4.2.1. Akustik fonon saçılmaları

Fononların akustik modta titreşimleri bilinen bir durum aslında ancak bu titreşim hareketi sebebiyle taşıyıcıların saçılması durumunu incelemek istediğinde deformasyon

potansiyeli kavramından bahsetmek daha doğru olacaktır. Deformasyon potansiyeli teorisi daha önceden Bardeen ve Shockley tarafından önerilmiştir (Hamaguchi, 2009). Bu teori örgü deformasyonu nedeniyle bir elektronun enerji değişimine dayanmaktadır. Enerji değişimi kristaldeki hacim değişikliğine bağlıdır, $\Delta(r) = \delta V/V$ (V: Hacim), elektron-fonon etkileşimi Hamiltonuna H_{el} denildiğinde;

$$H_{el} = D_{ac} \frac{\delta V}{V} = D_{ac} \text{div} \mathbf{u}(\vec{r}) \quad (1.20)$$

olarak tanımlanır. Burada D_{ac} terimi akustik fononlar kaynaklı elektron saçılmalarının deformasyon potansiyelini ifade etmektedir.

Akustik fononun yer değiştirme vektörü olan $u(\vec{r})$ 'nin aşağıdaki gibidir (Hamaguchi, 2009),

$$u(r) = \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} e_q [a_q e^{iqr} + a_q^* e^{-iqr}] \quad (2.21)$$

e_q hareket yönündeki birim vektörü temsil etmektedir. $u(\vec{r})$ yukarıdaki denklemde yerine yazıldığında, H_{el} aşağıdaki gibi yazılır;

$$H_{el} = D_{ac} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} (ie_q \cdot q) [a_q e^{iqr} + a_q^\dagger e^{-iqr}] \quad (2.22)$$

Etkileşim Hamiltonu için matrix elemanını hesaplayıp gerekli integrallerin çözümü için Fourier dönüşümüne yazıldığında aşağıdaki denklem elde edilir;

$$H_{el}(r) = \sum_q [C(q) a_q e^{iqr} + C^\dagger(q) a_q^\dagger e^{-iqr}] \quad (2.23)$$

$$C(q) = D_{ac} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} (ie_q \cdot q) \quad (2.24)$$

Matrix elemanında yerlerine konulduğunda;

$$H_{el}(q) = C(q) a_q + C^\dagger(-q) a_{-q}^\dagger \quad (2.25)$$

$$\langle n'_q | H_{el}(k' - k) | n_q \rangle = \langle n'_q | C(k' - k) a_{k'-k} + C^\dagger(k' - k) a_{k'-k}^\dagger | n_q \rangle \quad (2.26)$$

elde edilir ve her iki durum için sonuç aşağıdaki gibi ortaya çıkar;

$$H_{el}(q) = \begin{cases} C(q) \sqrt{n_q} k' = k + q & ; \text{absorbsiyon} \\ C^\dagger(q) \sqrt{n_q + 1} k' = k - q & ; \text{emisyon} \end{cases} \quad (2.27)$$

- **Vadiler arası akustik fonon saçılması**

Kristal potansiyel içerisinde, enerjisi E_k ve dalga vektörü \vec{k} olan bir elektron ve bu elektron, enerjisi E_p ve dalga vektörü \vec{q} olan akustik fonon tarafından, başka bir $E_{k'}$ enerjisi ve k' durumuna saçıldığı düşünülür. Periyodik örgü içerisinde saçılan, elektronun ve fononun toplam enerjisi ve dalga vektörü korunacağından, ilk ve son enerjileri ve ilk ve son dalga vektörlerinin durumu aşağıdaki gibi olacaktır;

$$E_{k'} - E_k = E_p \quad (2.28)$$

ve

$$k' - k = q \quad (2.29)$$

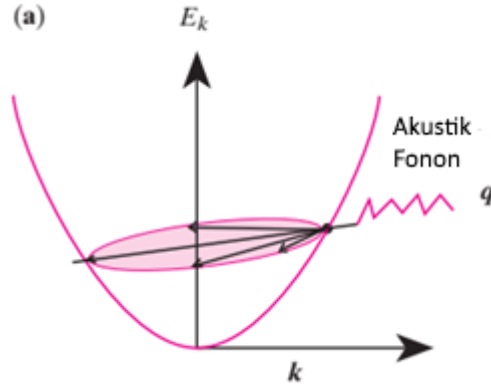
Küçük q değerinde bir akustik fonon için, E_p ile q ilişkili olacaktır;

$$E_p = \hbar v_s q \quad (2.30)$$

v_s ifadesi ses hızını ifade etmektedir.

Ayrıca elektronun m^* etkin kütle ile parabolik bir bantta olduğunu ve aynı bant içinde akustik fononlar tarafından saçıldığını varsayıldığında (bant içi saçılma) saçılma işlemi enerji ve dalga vektörünü koruduğundan izin verilen q değeri, son iki denklemin birleştirilmesi ile elde edilebilir.

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) (k^2 - |k - q|^2) = \hbar v_s q \quad (2.31)$$



Şekil 2.3. Akustik fonon saçılması E_k - k grafiği

Şekil 2.3'den de anlaşıldığı gibi izin verilen q değerlerinin minimum (q_{min}) ve maksimum (q_{maks}) arasında olduğu açıkça görülebilmektedir.

Burada $k > mv_s/\hbar$ için q_{min} değeri sıfırdır. k' yatayda k ya karşıt olduğu zaman da q_{maks} değerine ulaşılır. Bu demek oluyor ki elektron 180° saçılır. q_{maks} hesaplamak için;

$$q_{maks} = 2k - (2mv_s/\hbar) \quad (2.32)$$

ifadesi kullanılır. Bu fononun yayılmasında elektron tarafından kaybedilen enerji ise,

$$E_k - E_{k'} = \hbar v_s q_{maks} = 2\hbar v_s k - 2mv_s^2 \quad (2.33)$$

olarak bulunabilir.

Dalga vektörü q_{maks} ile bir akustik fonon yayınlarken, elektron yönünü tamamen tersine çevirir ancak enerjisi sadece %13 oranında değişir (Yu ve Cardona, 2010). Dolayısıyla elektronlar ve akustik fononlar arasında saçılma neredeyse elastiktir (veya yarı elastik) ve bu çarpışmaların ana etkisi elektron momentumunun gevşetilmesidir.

2.4.2.2. Optik fonon saçılmaları

Bir birim hücrede iki veya daha fazla atom bulunan bir kristalde titreşimler (optik fonon modları), birim hücredeki atomlar arasındaki nispi yer değiştirmeye ve nispi yer

değiştirmenin indüklediği potansiyel ile elektron saçılmasına neden olurlar. Bu etkileşim potansiyeli u , yer değiştirme ile orantılıdır. Yarı iletkenlerdeki optik fononlar tipik olarak onlarca meV mertebesinde enerjiye sahiptir. Dolayısıyla düşük sıcaklıklarda ($T < 100$ K) çoğu elektron, optik fonon yaymak için yeterli enerjiye sahip olamazlar (Yu ve Cardona, 2010). Ayrıca, optik fononların termal işgal sayısı N_q çok düşüktür ve sonuç olarak bir optik fononu absorbe eden bir elektronun olasılığı da azdır (Yu ve Cardona, 2010). Bu nedenle, optik fonon saçılma işlemleri düşük sıcaklıklarda ihmal edilebilir. Öte yandan, oda sıcaklığında, optik fonon yaymak için yeterli yüksek enerjili elektronun olduğu yerlerde, akustik fonon saçılması üzerinde baskın olma eğilimindedirler. Akustik fononlar tarafından saçılma temelde elektron momentumunu gevşetirken, optik fononlar tarafından saçılma hem momentuma hem de enerji gevşemesine katkıda bulunur.

Optik fonon saçılmaları için temelde iki tip saçılma vardır. Bunlardan birisi polar optik fonon saçılmaları diğeri ise polar olmayan optik fonon saçılmaları.

- **Polar optik fonon saçılmaları**

Oda sıcaklığında, optik mod titreşimlerinden kaynaklı olarak oluşan elektriksel kutuplanma nedeniyle oluşan bir saçılma türüdür. Akustik modda olduğu gibi enerjisi $k_B T$ ile karşılaştırıldığında ihmal edilemeyecek derece de olduğundan, elastik olmayan bir olaydır. Boyuna örgü titreşimleri iyonik yarı iletkenlerde kutuplanmaya neden olmaktadır. Kutuplanma dalgaları kristaldeki elektronlarla güçlü bir etkileşime girerler bu nedenle de elektronların kutupsal saçılmalarına sebep olurlar. Bu kutupsal saçılmalar hem akustik moddan hem de optik moddan kaynaklı olabilmektedir. Akustik moddan kaynaklı kutuplanma olursa buna piezoelektrik saçılma, ki bu saçılma türü genellikle çok düşük sıcaklıklarda gayet saf yarı iletkenlerde görülmektedir. Ancak bazı tip yarı iletkenlerde oda sıcaklığında da oluşabilmektedir. Kutupsal polar optik fonon saçılmaları ise oda sıcaklığında ve genellikle bileşik yarı iletkenlerde çok güçlü ve baskın olarak görülmektedir.

Boyuna optik fononlar için, görece yer değiştirme olan u dipol momentin bulmasına neden olur. Bunun için görece yer değiştirme;

$$u(r, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_0} \right)^{1/2} e_q (a_q - a_{-q}^+) e^{iq \cdot \vec{r}} \quad (2.34)$$

gibidir. Denklemden, N iyon çifti sayısını, M, negatif ve pozitif iyonların indirgenmiş kütlelerini ($1/M = 1/M_+ + 1/M_-$) ifade etmektedir. İyonların göreceli yer değiştirmesinin eşlik ettiği kutuplaşma, P, dielektrik yer değiştirmeye, D, katkıda bulunur.

$$D = \epsilon_0 F + P_{iyon} + P \quad (2.35)$$

ϵ_0 , vakum ortamındaki dielektrik sabitini, F kuvvet değerini, P_{iyon} iyonların kendi aralarındaki dipol momentini, P' de göreceli yer değiştirmeyi ifade etmektedir.

$$P = \frac{e^* N}{\Omega} (u_+ - u_-) = \frac{e^* N}{\Omega} u \quad (2.36)$$

P_{iyon} , ϵ_∞ (optik frekans aralığında dielektrik sabiti) ile ilgili olduğundan,

$$\epsilon_\infty F = \epsilon_0 F + P_{iyon} \quad (2.37)$$

$$D = \epsilon_\infty F + F = \epsilon_\infty F + \left(\frac{e^* N}{\Omega} \right) u \quad (2.38)$$

boyuna elastik dalgalarla dielektrik yer değiştirme birleştirilirse ($D = D e_q e^{iq \cdot \vec{r}}$ ve $\nabla \cdot \vec{D} = 0$) polarize yükler için sağlayacaktır;

$$iq \cdot \vec{D} = 0 \quad (2.39)$$

q'nun sıfır olmadığı durumlarda $D=0$ ifadesini sağlar ve aşağıdaki gibi olur;

$$F = - \frac{N e^* u}{\Omega \epsilon_\infty} \quad (2.40)$$

Böylece, elektrostatik potansiyel aşağıdaki şekilde yazılabilir;

$$U(r) = - \int F \cdot d\vec{r} = -i \frac{N}{\Omega} \frac{e^*}{q\epsilon_\infty} u(r) \quad (2.41)$$

e^* etkin yüküdür. Fröhlich'e göre aşağıdaki şekilde verilmiştir (Martin Galler, 2005).

$$e^* = \left(\frac{\Omega M}{N} \right)^{1/2} \omega_0 \epsilon_\infty \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right)^{1/2} \quad (2.42)$$

sonuç olarak, kutupsal optik fonon saçılması için, girişim potansiyeli;

$$H' = -eU(r) = \sum_q i \frac{e}{q} \left(\frac{\hbar \omega_0}{2\epsilon_s \Omega} \right)^{1/2} (a_q - a_{-q}^+) e^{iq \cdot \vec{r}} \quad (2.43)$$

olarak elde edilir ve denklemden $(1/\epsilon_p = 1/\epsilon_\infty + 1/\epsilon_s)$ 'dır.

2.5. Fermi'nin Altın Kuralı

Fermi'nin Altın Kuralı, geçiş hızını hesaplamada kullanılan bir denklemi ifade etmektedir (Tomizawa, 1993). Bu denklemin sonucu, zamana bağlı pertürbasyon teorisinin, bir başlangıç durumundan, bu durumun bir parçası olan son duruma geçişinin, bir sisteme uygulanması ile elde edilir.

Zamana bağlı pertürbasyon teorisi için denklem yazıldığında;

$$H = H_0 + W(t) \quad (2.44)$$

Burada H_0 , pertürbe olmamış sistemin Hamiltonu ve $W(t)$ 'de sisteme uygulanan pertürbasyonu ifade etmektedir.

Pertürbe olmamış Hamilton H_0 , zamandan bağımsız Schrödinger denklemini sağlamalıdır,

$$H_0 |\varphi_n \rangle = E_n |\varphi_n \rangle \quad (2.45)$$

Yukarıda elektronun bir k durumundan başka bir k' durumuna geçişindeki zaman için durulma zamanı τ ifade edilmişti. Bu ifade analitik olarak ilerletecek olunursa, τ_k ifadesi momentum durulma zamanı olan τ_m 'ye eşitlenir. Böylece elektron taşınımında saçılmanın en önemli etkisinin elektronun hızının rastgele hareketinin etkisi olduğu kanıtlanabilir. τ_m momentum durulma zamanını ifade etmek için aşağıdaki eşitlik yazıldığında;

$$\langle dk/dt \rangle = k(\tau_m)^{-1} = \sum_{k' \neq k} (k' - k) \vec{P}(k, k') \quad (2.46)$$

şeklinde olur.

Saçılma hızı $\vec{P}(k, k')$ Fermi'nin Altın kuralı ile hesaplanabilir,

$$\vec{P}(k, k') = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\langle k | H_{sac} | k' \rangle|^2 \rho_f \quad (2.47)$$

H_{sac} , terimi, hem dalga vektörünü hem de enerjiyi koruyan saçılma işlemi için Hamiltonu ifade etmektedir. ρ_f ise kristalin birim hacmine karşılık gelen durum yoğunluğunu ifade etmektedir. Daha önceden yukarıdaki bölümlerde bahsedilen saçılma olaylarından, elektron momentumunu rastgele bir düzen içerisinde olmasında en etkili olanlar iyonize safsızlık saçılmaları ve fonon kaynaklı saçılmalardır.

2.6. III-V Nitrit Yarı İletkenler

Grup III-V yarı iletken bileşikler, en belirgin yarı iletken malzemelerden biri olarak, optoelektronik sistemlerde ve uzun dalga boylu fotonik cihazlarda (Wu vd., 2002) özel olarak değer verilen geniş spektral aralıkta bant boşlukları sunar. Örneğin, III-nitrit yarı iletken bileşikler, Nakamura ve Fasol (Nakamura ve Fasol, 1997) tarafından mavi ışık yayan diyotların (LEDler) imalatı için stratejik bir malzeme sistemi olarak başarıyla oluşturulmuştur. Özellikle dar yasak bant aralığına sahip İndium nitrit (InN) yarı iletkenleri III veya V grubu yarı iletkenlerinden katkılama yapılarak yasak enerji aralığının ayarlanabilir hale getirilmesi ile geniş bir uygulama alanı oluşturmaktadır. Bu alanda optoelektronik, yüksek sıcaklık ve yüksek güç elektroniği, LED'ler, lazer diyotlar, kör

güneş foto algılayıcılar ve çok eklemli alan etki transistörleridir. Daha önce, Galyum konsantrasyonunun InGaN alaşımında sürekli olarak değiştirerek, yasak bant aralığının 0,8 eV (InN) ila 3,5 eV (GaN) arasında ayarlandığını belirten bir rapor yayınlandı (Gan, 2006). Buna benzer bir çalışma olarak InAlN yarı iletkeni 0,7 eV (InN) ve 6,2eV (AlN) üzerine yapılmış olan çalışmalarda önemli çalışmalardandır. Bu özellikleri InAlN yarı iletkenlerini ultraviyole (UV)'den yakın kızılötesi (IR) bölgeye kadar geniş bir yelpazede optik uygulamalar için iyi aday yapmaktadır.

3. ELEKTRON TAŞINIMI İÇİN MONTE CARLO YÖNTEMİ

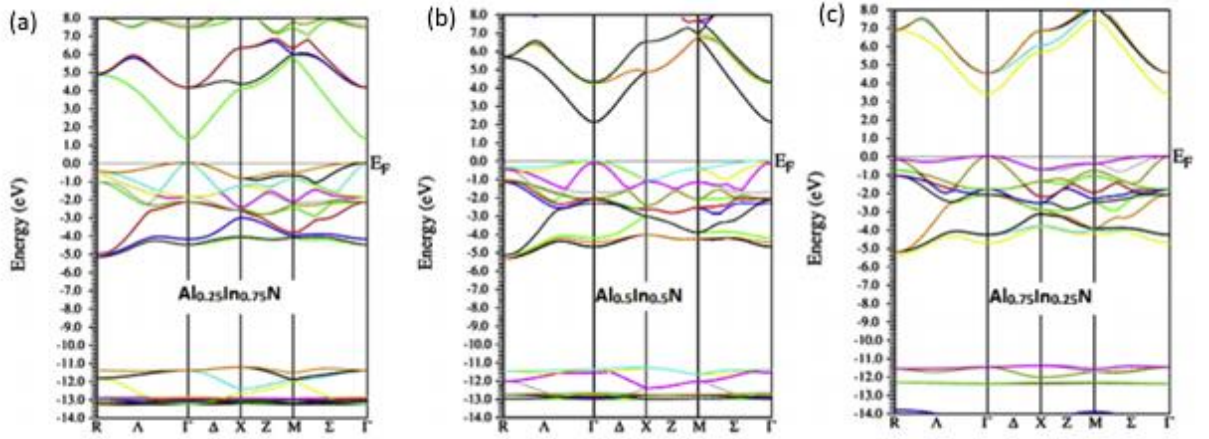
Elektronun yarı iletken içerisindeki taşınımını Monte Carlo yöntemi ile ifade etmenin temel mantığı rastgele saçılmalarla sonlandırılan dış elektrik alanla hareket ettirilen parçacığın hareketini simüle etmektir. Bu aşamada Monte Carlo yöntemi ile oluşturulan algoritmada elektronun serbest uçuş süresini belirlemek ve bu uçuş süresinin sonunda saçılmaya uğrayacağı mekanizmayı seçmek ve saçılma sonucunda parçacığın rastgele sayılar üreterek son enerjisini ve momentumunu belirlemek bu yöntemin temel esaslarıdır. Sonunda da tüm bu hesaplamaları tekrarlayarak en doğru sonuca ulaşmak bu algoritmanın amacına yöneliktir (Akarsu ve Özbaş, 2005).

3.1. Bant Yapısı İçin Bir Yaklaşım

Yarı iletkenlerde taşıyıcıların $\vec{E}-\vec{k}$ grafikleri bize önemli bilgiler vermektedir. Bu nedenle, enerji bantlarının durumuna göre yarı iletkenleri iki sınıfa ayırılır;

- Doğrudan yarı iletkenler: Eğer iletim bantı ile değerlik bantı arasındaki enerji en düşük değere $\vec{k}=0$ 'da sahipse bunlara doğrudan yarı iletkenler denir.
- Dolaylı yarı iletkenler: Eğer iletim bantı en düşük enerji seviyesine $\vec{k}\neq 0$ 'da sahipse bu tür yarı iletkenlere de dolaylı (doğrudan olmayan) yarı iletkenler denir.

Bir yarı iletkenin doğrudan veya dolaylı bant aralığına sahip olması onun optik özelliklerini belirler. İncelemiş olduğumuz Aluminyum İndiyum Nitrit yarı iletkenin bant yapısını farklı yaklaşımlar kullanarak daha önceden bazı fizikçiler incelemişlerdir. Moussa'nın 2018 (Moussa vd., 2018) yılında yapmış olduğu çalışmada tam potansiyel doğrusallaştırılmış artırılmış düzlem dalga (FP-LAPW) metodu kullanılarak Aluminyumun farklı konsantrasyonları için AlInN' in bant yapıları hesaplanmıştır. Bu çalışmada da Moussa vd. tarafından oluşturulmuş bant yapısını referans alarak hesaplamalar Γ ve X vadilerine göre yapıldı.



Şekil 3.1. Farklı Alüminyum konsantrasyonları ile $Al_xIn_{(1-x)}N$ 'in yasak bant aralığı
(a) $x=0.25$ (b) $x=0.5$ (c) $x=0.75$ (Moussa vd., 2018)

3.2. Yarı İletken İçin Algoritmanın Oluşturulması

Elektronun yarı iletken içerisindeki hareketini Monte Carlo yöntemi ile incelemek için bir algoritmaya ihtiyaç vardır. Hesaplamaların yapıldığı algoritmayı kısaca şu şekilde tanımlarız. Elektronun ilk konumunu rastgele belirlenir ve bu konuma göre enerjisi ve momentumu tanımlandıktan sonra elektron hareketine başlar. Elektronun kristal içerisinde ilerlemesi serbest uçuş süresi ile tanımlandıktan sonra rastgele bir saçılma tipi seçilir ve buna göre hesaplamalar yapılır. Saçılma sonrasında elektronun momentumu ve enerjisi belirlendikten sonra, konumu da belirli olan elektron için yukarıdaki sistematik tekrar edilir. Burada bahsedilen tüm basamaklar aşağıda detaylı olarak tartışıldı.

3.2.1. Elektronun başlangıç durumu

Kristal içerisinde elektronlar aslında bilindiği gibi durağan halde değildirler, termal enerjilerinden dolayı hareket halindedirler. Bundan dolayı Belirsizlik ilkesi gereği, konumları tam bilinmemektedir ancak hesaplamalarda kullanılmak üzere konum açısından bir yer tayin edilmesi gerekmektedir. Bu nedenle Monte Carlo yönteminin temel ilkelerinden de biri olarak rastgele sayı üreterek ilk konum olarak elektron için rastgele bir başlangıç durumu belirlenmektedir (Tomizawa, 1993). Bunun için öncelikle Fermi-Dirac dağılım fonksiyonunu kullanılır;

$$f(E) = \frac{1}{1+e^{(E-E_F)/kT}} \quad (3.1)$$

dönüşümü elde edebilmek için E yerine E_k eşitliği yazılırsa;

$$f(E_k) = \frac{1}{1+e^{(E_k-E_F)/(\frac{3k_B T}{2})}} \quad (3.2)$$

denklemden verilen k_B , Boltzman sabiti ve T'de kristal sıcaklığıdır ve $0 \leq f(E_k) \leq 1$ 'dir.

Denklemden $e^{[(E_k-E_F)(3k_B T/2)]} \gg 1$ teriminin birden çok çok büyük olduğu varsayalım. Bununla birlikte Fermi enerji seviyesinin, E_F iletim bantının üst kısmına çok çok yakın olduğunu varsayıldığında ve 0 olarak alındığında sonuç olarak;

$$f(E_k) = \frac{1}{e^{[(E_k)(3k_B T/2)]}} \quad (3.3)$$

şeklinde düzenlenir ve E_k çekildiğinde;

$$E_k = -\frac{3k_B T}{2} \ln [f(E_k)] \quad (3.4)$$

elde edilir.

Artık bu denklemden yer alan $f(E_k)$ ifadesi düzgün dağılım gösteren 0 ile 1 arasındaki sayılardan oluştuğu için rastgele seçilen sayılarla herhangi bir elektronun enerjisi bulunabilir. Daha sonra elektronun dalga vektörü bu enerji yardımı ile bulunabilir. Dalga vektörünün büyüklüğü de bant yapısı için verilen yaklaşımdan bulunabilir.

3.2.2. Elektronun sürüklenmesi ve uçuş zamanı

Elektronların bir kristal yapı içerisinde ilerlerken bazı etkiler nedeniyle momentumunu ve enerjisini değiştirdiği yukarıda bahsedilmişti. Bu iki saçılma olayı arasında yine elektrik alanın da etkisiyle belli bir zaman süresince sürüklenme meydana gelmektedir. Bu iki saçılma arasında geçen zamana serbest uçuş zamanı denilmektedir. Ve

bu serbest uçuş zamanı oluşturulan algoritmanın temel taşlarından biridir. Serbest uçuş zamanı ifadesi, Monte Carlo hesaplamalarında genelde ortalama serbest uçuş zamanını ifade etmekte kullanılmaktadır. Saçılma olasılığı ile ilişkili olduğundan serbest uçuş zamanına bazı kaynaklarda saçılma zamanı da denmektedir.

Her i işlemi ile tanımlı geçiş hızı $S_i(\vec{k}, \vec{k}')$ için saçılma hızı hesaplamak için;

$$\lambda_i(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \iiint d\vec{k}' S_i(\vec{k}, \vec{k}') \quad (3.5)$$

denklemini küresel koordinat sisteminde yazılmak istenirse, şu şekilde yazabilir;

$$\lambda_i(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dk' d\theta d\phi k'^2 \sin\theta S_i(\vec{k}, \vec{k}') \quad (3.6)$$

Toplam saçılma hızını $\Lambda(\vec{k}) = \sum \lambda_i(\vec{k})$ şekilde tanımlayalım. $\Lambda[\vec{k}(t)]dt$ ifadesi de dt zaman aralığında elektronun saçılma olasılığını göstermektedir. $t=t_0$ anında saçılmaya uğramış bir elektron henüz t anında başka bir işleme geçmediğinden, saçılma olasılığı aşağıdaki denklemle ifade edilir;

$$P_0(t, t_0) = \exp\left\{-\int_{t_0}^t dt' \Lambda[\vec{k}(t')]\right\} \quad (3.7)$$

$P_1(t, t_0)$ olasılığına sahip bir elektron t ile $t+dt$ zaman aralığı arasında saçılacağından bir önceki saçılma olasılığı şu şekilde olacaktır;

$$P_1(t, t_0)dt = \Lambda[\vec{k}(t)] \exp\left\{-\int_{t_0}^t dt' \Lambda[\vec{k}(t')]\right\} dt \quad (3.8)$$

İşlemleri daha anlaşılır hale getirmek ve basitleştirmek için, serbest uçuşun uzunluğu, saçılma süreci ve saçılmanın bir sonucu olarak elektronun durumunun değişmesi, eşit dağılımlı rastgele sayılar yardımıyla seçilmektedir. Genel olarak, x değişkeninin belirli bir $f(x)$ ile rastgele seçilmesi, rastgele r sayısının düzgün dağılımını $f(x)$ üzerine eşleyerek yapılmıştır, bu da aşağıdaki şekilde gösterilir;

$$\int_0^{\tilde{r}} dr = \int_0^{\tilde{x}} dx f(x) \quad (3.9)$$

İntegralin çözümü ile daha basit şekilde yazıldığında;

$$\tilde{r} = F(\tilde{x}) \quad (3.10)$$

ile ifade edilir. Burada $F(\tilde{x})$ toplam dağılım fonksiyonunu belirtmek üzere yazılmıştır.

\tilde{x} 'i elde etmek için tersinir işlem uygulandığında,

$$\tilde{x} = F^{-1}(\tilde{r}) \quad (3.11)$$

şeklinde yazılır.

Sonuç olarak serbest uçuş zamanı aşağıdaki gibi yazıldığında;

$$\tau = \left[\int_0^{\tilde{r}} dt P_1(t, t_0) \right]^{-1} \quad (3.12)$$

ifadesine eşit olacaktır.

Bu denklem üzerinde analitik bir hesaplamak yapmak, çok zaman alacağından bunu biraz daha basit hale getirmek için şöyle bir ilerleme yapılabilir ki bu sorun için bir çözüm Rees (1968, 1969) tarafından önerilmiştir. Elektronun durumunu hiçbir şekilde etkilemeyen ve kendi kendine saçılma olarak adlandırılan “sahte” bir saçılma durumunun bu süreci başlattığı varsayımı ile ve bu süreçte hızın sabit olduğu düşünülerek (denklemden Γ hızı ifade etmektedir) denklem aşağıdaki gibi yazılır;

$$P_1(t, t_0) = \Gamma \exp(-\Gamma t) \quad (3.13)$$

ve

$$\tau = \frac{\ln(1-\tilde{r})}{\Gamma} \quad (3.14)$$

olur. Bununla birlikte rastgele seçilen sayılar dizisi $[0,1]$ arasında düzgün bir dağılım gösterdiğinden; denklemi tekrar yazıldığında;

$$\tau = \frac{\ln(\tilde{r})}{\Gamma} \quad (3.15)$$

ifadesi elektronun serbest uçuş zamanı olarak tanımlanır.

3.2.3. Elektronun saçılması ve saçılma hızı

Bu çalışma iki süreç ve bu iki sürecin Monte Carlo yöntemi ile tekrarlandırılması yöntemi kullanılarak yapılan hesaplamaları içermektedir. Bu iki süreçten birisi elektronun sürüklenmesi diğeri de elektronun saçılması, sürüklenme bir zaman dilimi içerisinde gerçekleştiğinden yukarıda da bahsedilen ortalama serbest uçuş zamanını gerektirmektedir. Saçılma durumunda da farklı saçılma mekanizmalarından birinin seçilmesi işlemini gerektirmektedir. Bu olaylar sonucunda elektronun hızı, enerjisi ve son durumu tespit edilerek hesaplamalar yapılmaktadır.

Bir önceki bölümde elektronun sürüklenme sürecinden bahsedildi, bu kısımda ise elektronun saçılacağı mekanizma türünün seçimi ve saçılma hızının nasıl tespit edildiğine dair hesaplamaları ele alındı.

- **Akustik fonon saçılmaları**

Monte Carlo yöntemini Akustik fonon saçılma hızlarını hesaplamak için kullanırken birtakım düzenlemeler yapılması gerekmektedir. Bu nedenle kullanılan algoritma üç boyutlu olacak şekilde hesaplandı. Yukarı bölümlerde akustik fononlardan kaynaklanan saçılmalar için hesaplamalar yapılmıştı, bu bölümde ise Monte Carlo yönteminde daha rahat ve basit olarak kullanılabilecek format incelendi. Bunun için geçiş hızı aşağıdaki gibi düzenlenir (Rode, 1978);

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = 2 \frac{2\pi D_a^2 k_B T}{\hbar 2V\rho v_s^2} G(\vec{k}, \vec{k}') \delta(W - W') \quad (3.16)$$

3.2.4. Elektronun hızı

\vec{k} uzayındaki bir elektronun hızı aşağıdaki gibidir;

$$\langle v \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_k}{dk} \quad (3.17)$$

Yukarıdaki hız denkleminin algoritmada daha işlevsel hale getirebilmek ve fiziksel şartları sağlayabilmesi için, birkaç işlemle daha uyumlu hale getirildi. Bunun için sürüklenmenin birkaç adım ileri, j noktasına ulaştığını, sürüklenme süresinin de τ , olduğunu ve enerji değişim hızının sabit olduğu varsayıldı. Bu aşamada, τ süre sonunda enerji değişiminin çok küçük olduğu düşünüldü ve türev terimlerinde aşağıdaki gibi bir yaklaşım yapılır, $\frac{dE_k}{dk} = \frac{\Delta E_k}{\Delta k}$. Hız ifadesi düzenlenerek yeniden yazıldığında;

$$\langle v \rangle_j = -\frac{\Delta E_k}{eF\tau} = -\frac{E_f - E_i}{eF\tau} \quad (3.18)$$

şeklinde olur. Burada; $\Delta E_k = E_f - E_i$ ifadesi sürüklenme sırasındaki, başlangıç ve bitiş noktalarındaki enerjilerini göstermektedir.

Bu denklem simülasyon süresi boyunca yapılacak olan n adımlı ortalama bir hız ifadesine dönüştürmek istenirse, şu şekilde yazılır;

$$\langle v \rangle_T = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^n \langle v \rangle_{\tau_j} \tau_j = -\frac{1}{eF\tau} \sum (E_{f_j} - E_{i_j}) \quad (3.19)$$

burada , T toplam simülasyon süresini ifade etmektedir.

3.2.5. Elektronun enerjisi

Yukarıda hız ifadesini oluştururken kullanılan varsayımlar enerji ifadesi için de kullanılır ve sürüklenme süresinin de τ olduğu ve enerji değişim hızının sabit olduğu varsayılır. Sürüklenme süreci boyunca elektronun ortalama enerjisi aşağıdaki gibidir;

$$\langle E \rangle_j = \frac{E_i + E_f}{2} \quad (3.20)$$

Toplam simülasyon süresi T zaman diliminde ortalama elektron enerjisi;

$$\langle E \rangle_T = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^n \langle E \rangle_j \tau_j = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^n \frac{E_{f_j} + E_{i_j}}{2} \tau_j \quad (3.21)$$

olarak bulunur.

4. MATERYAL

4.1. AlInN Yarı iletkeni

Grup III-V Nitrit yarı iletkenler gerek elektronik, gerekse optoelektronik özellikleri nedeniyle dikkat çeken ve yarı iletken üretiminde önemli bir yer tutan bir malzemedir (Butté vd., 2007). AlInN, elektromanyetik spektrumun kızılötesi (IR), görünür ışık ve ultraviyole (UV) aralıklarında ve ayarlanabilir yasak bant aralığına sahiptir. Bu nedenle, AlInN'in ayarlanabilir geniş yasak bant aralığı ve örgü sabiti, ışık yayan diyotlar (LEDler), (Butté vd., 2007) lazer diyotlar (LDler), (Satter vd., 2012) kör fotodiyotlar (Chen vd., 2009), vb. aygıt uygulamaları için kullanılmaktadır. AlInN ayrıca, yüksek frekanslı ve yüksek güç-yüksek elektronlu mobil transistörlerin (HEMT) performansını optimize etmek için mükemmel bir bariyer tabakası olarak kullanılmaktadır.

4.2. Kristal Yapısı

Alüminyum İndiyum Nitrit yarı iletkenleri elektronik ve optoelektronik uygulamalarında başarılı ve etkin sonuçlar verdiği için bu zamana kadar ilgi çekici bulunmuş ve üzerinde gün geçtikçe çalışmalar yapılmakta olan bir malzemedir. III-V-nitrit yarı iletkenlerin genelinde olduğu gibi AlInN yarı iletkeni de yüksek elektron mobilitesi, düşük taşıyıcı konsantrasyonları ve iyi bir termal stabilite (durgunluk) ile karakterize edilir (Moussa vd., 2018). Bu özellikleri ışık yayan diyot, lazer diyotlar, güneş pilleri, yüksek mobilite elektron geçişleri ve Bragg reflektörleri, vb. gibi çeşitli teknolojik uygulamalar için onları mümkün kılar (Magnusson vd., 2014).

Ancak, yarı iletken üretimi birçok zorlukları olan bir işlemler dizisi gerektirmektedir. AlInN yarı iletkeninin büyütülmesi hakkında çok az rapor bulunmaktadır, çünkü yüksek karışma kabiliyeti ve AlN ile InN arasındaki termal stabilite arasındaki fark nedeniyle AlInN yarı iletkenini büyütme zordur (Guo vd., 2008).

Normal şartlar altında (normal basınç ve sıcaklık) AlN ve InN ikili yarı iletkenler wurtzite yapıda kristalleşirler (Schulz ve Thiemann, 1977). Ancak basınç altında (yaklaşık

12.9GPa), AlN yarı iletkeni wurtzite (altıgen) yapıdan kaya tuzu (kübik) yapıya doğru şekil değiştirdiği gözlenmiştir (Van Camp vd., 1991).

Şekil 4.1.'de de gösterildiği gibi AlInN yarı iletkeni de zink-blend yapıda kristalleşmektedir (Moussa vd., 2018).

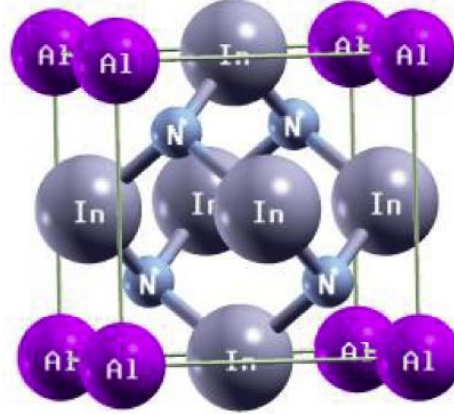
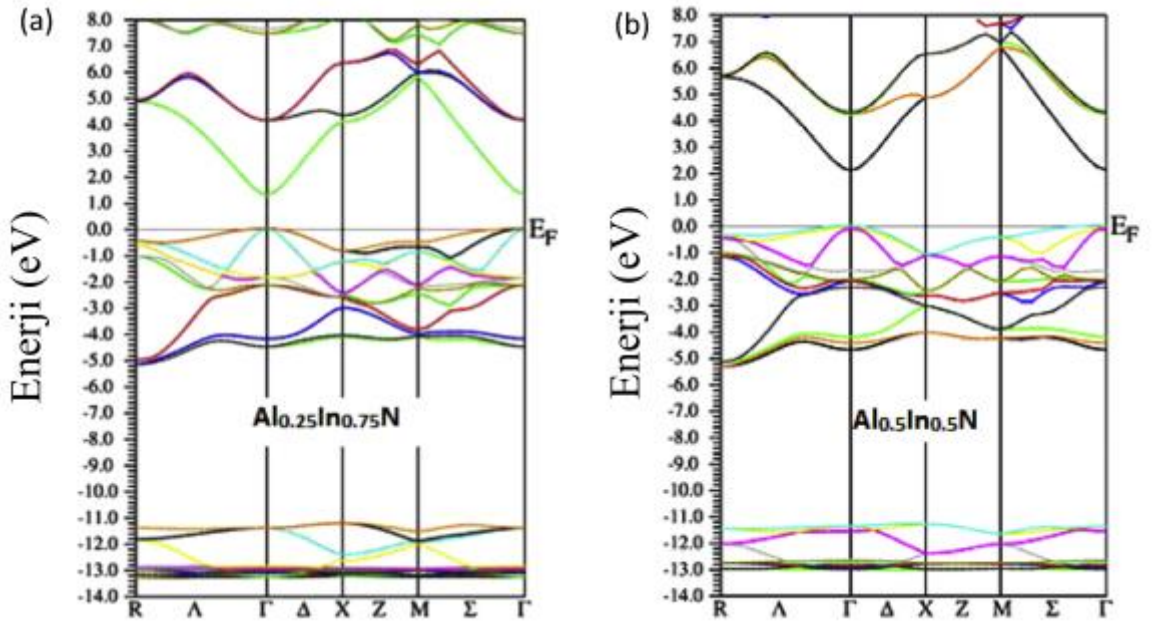


Fig. 2. Zinc-blende structure of the $Al_{0.25}In_{0.75}N$ ternary alloy.

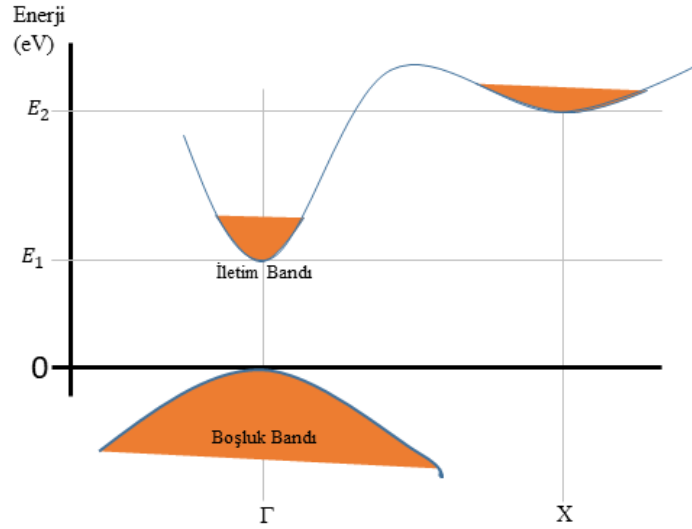
Şekil 4.1. Zink-Blend yapıda $Al_{0.25}In_{0.75}N$ üçlü alaşım (Moussa vd., 2018)

4.3. Elektronik Özellikleri Ve Bant Yapısı

Moussa'nın 2018 yılında (Moussa vd., 2018) yaptığı çalışmaya göre AlN'in bant yapısında değerlik bantının tepe noktasının Γ -noktasında olduğunu ve iletim bantının minimumunun X-noktasında olduğunu ve zink-blend yapıdaki AlN'nin dolaylı bir bant aralığına ($\Gamma \rightarrow X$) sahip olduğunu göstermektedir. Bununla birlikte söz konusu çalışmada yapılan hesaplamalara göre, AlInN yarı iletkeni doğrudan bant yapısına sahiptir. Şekil 4.2.'de AlInN yarı iletkeni için bant yapısı verilmiştir.



Şekil 4.2. (a) $Al_{0.25}In_{0.75}N$ için bant yapısı (b) $Al_{0.5}In_{0.5}N$ için bant yapısı
(Moussa vd., 2018)



Şekil 4.3. $AlInN$ bant yapısının örnek grafiksel gösterimi

Şekil 4.3.'de $AlInN$ yarı iletkenin bant yapısının görsel olarak örneği verilmiştir.

4.4. Yasak Enerji Aralığı

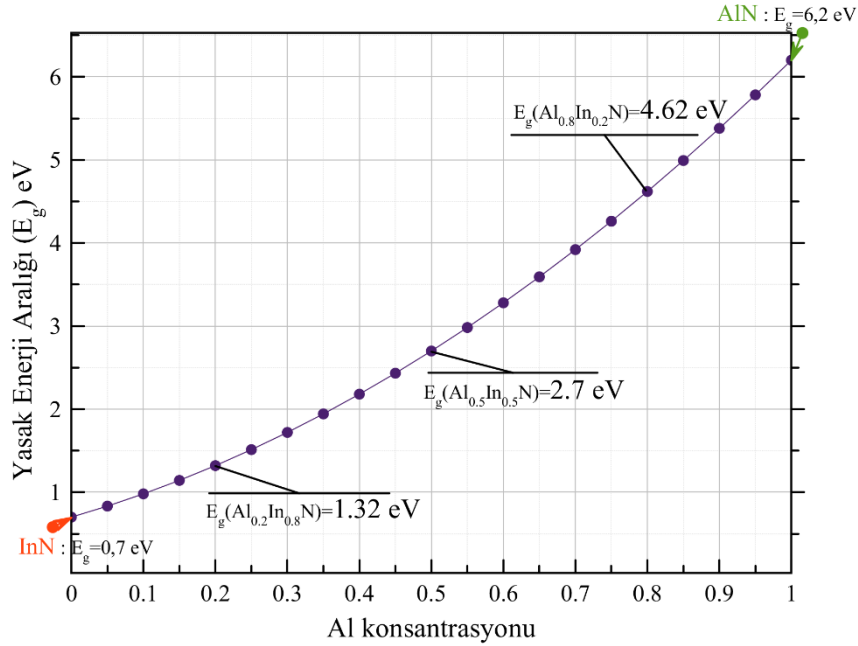
Yasak enerji aralığı her yarı iletkenin karakterizasyonunu belirleyen bir parametredir. Bu nedenle yarı iletkenler için çok önemlidir. Hatta üçlü alaşım yarı

iletkenlerinde bu niceliğin ayarlanabilir olması daha da dikkat çekicidir. Çalışmamızda kullanılan AlInN yarı iletkeninin yasak bant aralığını hesaplamak için Vegard yasası kullanılmıştır (Denton ve Ashcroft, 1991). Bu yasaya göre yasak bant aralığı ifadesi E_g ;

$$E_g(x) = x \cdot E_{g,AlN} + (1 - x) \cdot E_{g,InN} - b \cdot x \cdot (1 - x) \quad (4.1)$$

Burada kullanılan ifadelerden $E_g(x)$, AlInN yarı iletkeninin yasak enerji aralığını, $E_{g,AlN}$, AlN yarı iletkeninin yasak enerji aralığını, $E_{g,InN}$, InN yarı iletkeninin yasak enerji aralığını ve b de, AlInN için bowing parametresini ifade etmektedir. b'nin değerini daha önceden Liou vd.'nin hesapladığı değer olan, 3,668 eV alınmıştır (Liou vd., 2005).

Şekil 4.4.'te $Al_xIn_{1-x}N$ yarı iletkenini yasak enerji aralığı Vegard Yasası kullanılarak yapılan hesaplamalarda alüminyum konsantrasyonun değişmesi ile elde edilen sonuçları görülmektedir.



Şekil 4.4. Yasak enerji aralığının alüminyum konsantrasyonuyla değişim grafiği

4.5. Kullanılan Parametreler

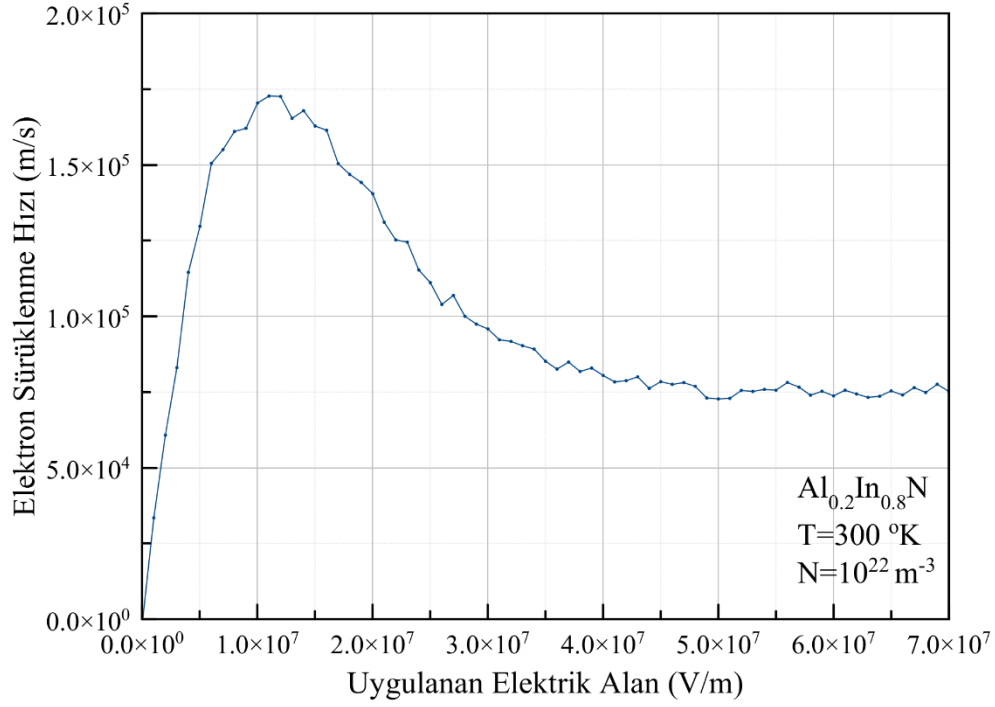
Saçılma hızlarının hesaplanmasında kullanılan denklemlerde yer alan bazı parametre değerleri aşağıda ki tabloda yer almaktadır. Mümkün olduğunca güncel veriler kullanılarak hesaplamalar yapıldı.

Çizelge 4.1. AlN , InN ve $AlInN$ için parametreler

AlN	InN	$Al_xIn_{1-x}N$
Örgü Sabiti (Å)		
$a_{Al} = 3,112$ (Goldberg vd., 2001)	$a_{In} = 3,533$ (Levinshtein vd., 2001, ss. 49-66)	$a_{AlInN} = xa_{Al} + (1-x)a_{In}$
Malzeme Yoğunluğu (g/cm³)		
$\rho_{Al} = 3,23$ (Goldberg vd., 2001)	$\rho_{In} = 6,81$ (Pearson, 1967)	$\rho_{AlInN} = \frac{xa_{Al}a_{Al}^3 + (1-x)a_{In}a_{In}^3}{a_{AlInN}^3}$
Boyuna polar optik fonon enerjisi (meV)		
$\hbar\omega_{LO,AlN} = 0,992$ (Hadi vd., 2013)	$\hbar\omega_{LO,InN} = 0,730$ (Hadi vd., 2013)	$\hbar\omega_{LO,AlN} = \left[\frac{\epsilon_{s,AlInN}}{\epsilon_{\infty,AlInN}} \left\{ x \frac{\epsilon_{\infty,Al}}{\epsilon_{s,AlN}} \hbar^2 \omega_{LO,AlN}^2 + (1-x) \frac{\epsilon_{\infty,In}}{\epsilon_{s,In}} \hbar^2 \omega_{LO,InN}^2 \right\} \right]^{1/2}$
Ses Hızı (cm/s)		
$v_{s,AlN} = 9,06 \times 10^5$ (Hadi vd., 2013) $H_{AlN} = \frac{\epsilon_{\infty,Al}}{\epsilon_{s,AlN}} \hbar^2 \omega_{LO,AlN}^2$ $C = \left[\frac{V_{AlN}}{a_{AlN}} \right]^2$	$v_{s,InN} = 6,24 \times 10^5$ (Hadi vd., 2013) $H_{InN} = \frac{\epsilon_{\infty,InN}}{\epsilon_{s,InN}} \hbar^2 \omega_{LO,InN}^2$ $A = \left[\frac{V_{InN}}{a_{InN}} \right]^2$	$B = \left(\frac{d_{AlN}}{d_{InN}} \right) \left(\frac{a_{AlN}}{a_{InN}} \right)^3$ $D = BAH_{InN} + \frac{CH_{AlN}}{B}$ $VN = x^2AH_{AlN} + x(1-x)D + (1-x)^2CH_{InN}$ $VD = xH_{AlN} + (1-x)H_{InN}$ $V_{AlInN} = a_{AlInN} \sqrt{\frac{VN}{VD}}$
Statik dielektrik sabiti (ϵ_0)		
$\epsilon_{s,AlN} = 8,5 \epsilon_0$ (Goldberg vd., 2001) $F_{AlN} = \frac{\epsilon_{s,AlN} - 1}{\epsilon_{s,AlN} + 2}$	$\epsilon_{s,InN} = 15,3 \epsilon_0$ (Levinshtein vd., 2001) $F_{InN} = \frac{\epsilon_{s,InN} - 1}{\epsilon_{s,InN} + 2}$	$F_{AlInN} = xF_{AlN} + (1-x)F_{InN}$ $\epsilon_{s,AlInN} = \frac{1 + 2F_{AlInN}}{1 - F_{AlInN}}$
Akustik deformasyon potansiyel enerjisi (eV)		
$D_{\Gamma,AlN} = 9,5$ (Hadi vd., 2013)	$D_{\Gamma,InN} = 7,1$ (Hadi vd., 2013)	$D_{AlInN} = xD_{AlN} + (1-x)D_{InN}$

Etkin Kütle (kg)		
$m_{\Gamma,AlN}^* = 0,4m_0$ (Xu ve Ching, 1993) $m_{L,AlN}^* = m_0$	$m_{\Gamma,InN}^* = 0,11m_0$ (Lambrech ve Segall, 1993) $m_{L,InN}^* = m_0$	$m_{AlInN} = \frac{m_{AlN}m_{InN}}{xm_{AlN} + (1-x)m_{InN}}m_0$
Non-Parabolik faktörü (eV⁻¹)		
$\alpha_{\Gamma,AlN} = 0,32$ $\alpha_{L,AlN} = 0,03$	$\alpha_{\Gamma,InN} = 0,419$ $\alpha_{L,InN} = 0,3$ (Arabshahi vd., 2010)	$\alpha_{\Gamma,AlInN} = \frac{(1 - m_{\Gamma,AlInN}^*/m_0)^2}{E_{g,\Gamma,AlInN}}$ $\alpha_{L,AlInN} = (1-x)\alpha_{AlN} + x\alpha_{InN}$
Vadiler Arası Fonon Enerjisi (meV)		
$\hbar\omega_{AlN} = 99,2$ (Arabshahi vd., 2010)	$\hbar\omega_{InN} = 89$ (Arabshahi vd., 2010)	
Yasak Enerji Aralığı (eV)		
$E_{g,\Gamma,AlN} = 6,2$ (Hadi vd., 2013)	$E_{g,\Gamma,InN} = 0,7$ (Hadi vd., 2013)	$E_g(x) = x \cdot E_{g,AlN} + (1-x) \cdot E_{g,InN} - b \cdot x \cdot (1-x)$
Yüksek Frekans dielektrik sabiti		
$\epsilon_{\infty,AlN} = 4,6 \epsilon_0$ (Goldberg vd., 2001) $F_{AlN} = \frac{(\epsilon_{\infty,AlN} - 1)}{(\epsilon_{\infty,AlN} + 2)}$	$\epsilon_{\infty,InN} = 5,8 \epsilon_0$ (Inushima vd., 1999) $F_{InN} = \frac{(\epsilon_{\infty,InN} - 1)}{(\epsilon_{\infty,InN} + 2)}$	$F_{AlInN} = xF_{AlN} + (1-x)F_{InN}$ $\epsilon_{\infty,AlInN} = \frac{(1 + 2F_{AlInN})}{(1 - f_{AlInN})}$
Elektron afiniti (eV)		
$\chi_{0,AlN} = 0,6$ (Goldberg vd., 2001)	$\chi_{0,InN} = 4,7$ (Lin vd., 2012)	$\chi_{0,AlInN} = x\chi_{0,AlN} + (1-x)\chi_{0,InN}$
Piezoelektrik sabiti (C/m²)		
$P_{z,AlN} = 9,2 \times 10^{-5}$ (Hadi vd., 2013)	$P_{z,InN} = 3,75 \times 10^{-5}$ (Hadi vd., 2013)	$P_{z,AlInN} = \frac{xP_{z,AlN}\epsilon_{s,AlN}a_{AlN}^2 + (1-x)P_{z,InN}\epsilon_{s,InN}a_{InN}^2}{\epsilon_{s,AlInN}(a_{AlInN})^2}$
Optik deformasyon potansiyeli (eV/m)		
$D_{0,\Gamma,AlN} = 0$	$D_{0,\Gamma,InN} = 0$	$D_{0,AlInN} = xD_{0,AlN} + (1-x)D_{0,InN}$
Optik fonon enerjisi (meV)		
$\hbar\omega_{0,AlN} = 99,2$ (Hadi vd., 2013)	$\hbar\omega_{0,InN} = 73$ (Levinshtein vd., 2001)	$\hbar\omega_{0,AlInN} = x\hbar\omega_{0,AlN} + (1-x)\hbar\omega_{0,InN}$

5. BULGULAR VE TARTIŞMA



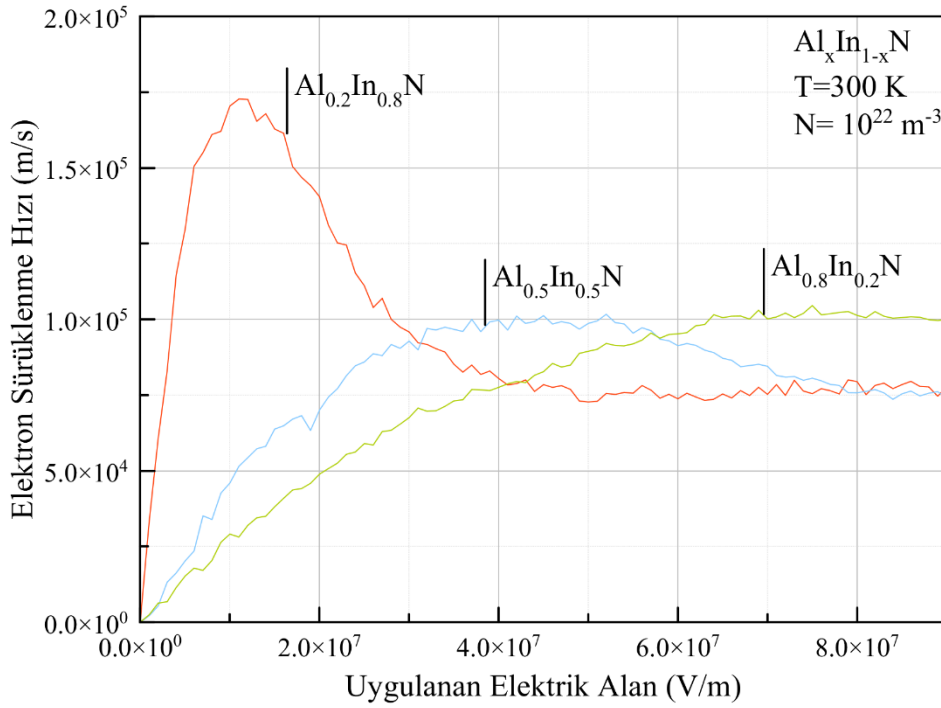
Şekil 5.1. Al_{0.2}In_{0.8}N için Hız-Alan grafiği

Hesaplama sonuçlarından ilki Al_{0.2}In_{0.8}N yarı iletkenine uygulanan elektrik alana karşılık gelen sürüklenme hızının grafiğidir. Bu grafik Şekil 5.1’de gösterilmiştir. Söz konusu hesaplamada taşıyıcı yoğunluğu $1,0 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ ve kristal sıcaklığı da 300 K olarak alındı. Bu sonuca göre, Şekil 5.1.’de görüldüğü gibi, uygulanan elektrik alan şiddeti $1,0 \times 10^7 \text{ V/m}$ ’ye kadar elektronların ortalama hızları lineer bir artış göstermektedir. Bu aşamada, düşük elektrik alanlarda elektron sürüklenme hızı uygulanan elektrik alana bağlıdır ($v_s = \mu \epsilon$) (Siddiqua ve O’Leary, 2018) ve lineer bir artış göstermektedir.

Düşük enerjili elektronlar için, akustik fonon çarpışmaları ve optik fonon absorpsiyonları baskındır. Her iki durumda da fononların yoğunluğu çok küçüktür ve etkileşim olasılıkları çok düşüktür.

Ancak, yüksek elektrik alan değerinden sonra elektronlar maksimum hıza ulaşmakta ve sonra aniden hızlarında düşüş olmaktadır. $3,5 \times 10^7$ V/m gibi çok yüksek elektrik alan değerlerinde de hızda doyuma ulaşmaktadır.

Uygulanan elektrik alanın $1,0 \times 10^7$ V/m değerinden sonra elektronların hızında düşüş meydana geldiği görülmektedir. Bunun bir başka nedeni ise üst vadiye geçen elektronların etkin kütleleri üst vadide, bir alt vadiye göre daha ağır olduğundan hızlarında da bir yavaşlama meydana gelmesidir.

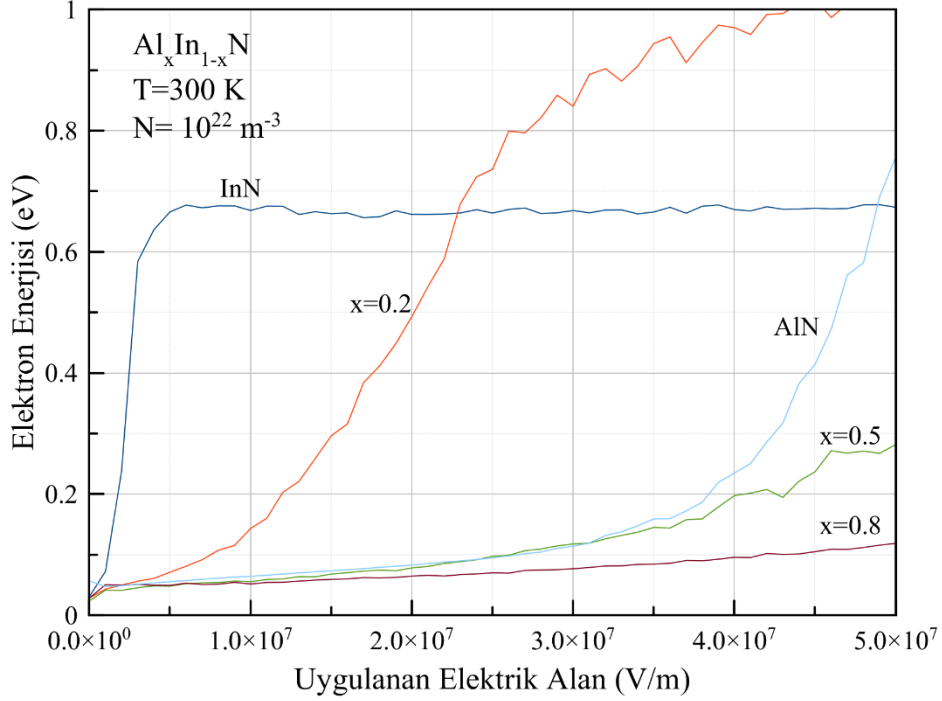


Şekil 5.2. $\text{Al}_x\text{In}_{(1-x)}\text{N}$ yarı iletkeninde 300 K'de farklı Al konsantrasyonlarında elektron sürüklenme hızı – elektrik alan grafiği.

Yukarıda bahsedilen saçılma mekanizmalarını içeren hesaplamalarda, farklı alüminyum konsantrasyonları kullanılarak ($x=0.0$, $x=0.2$, $x=0.5$, $x=0.8$, $x=1.0$) 300 K'de çalışıldı ve sonuçlar Şekil 5.2'de gösterildi.

Alüminyum konsantrasyonu arttıkça elektron ortalama hızı başlarda artmakta, ama sonradan azalmaktadır. Bunun nedeni ise, alüminyum konsantrasyonunun artması ile birlikte yasak enerji aralığında da artış olmasıdır. Bir üst vadiye geçen elektronlar daha ağır

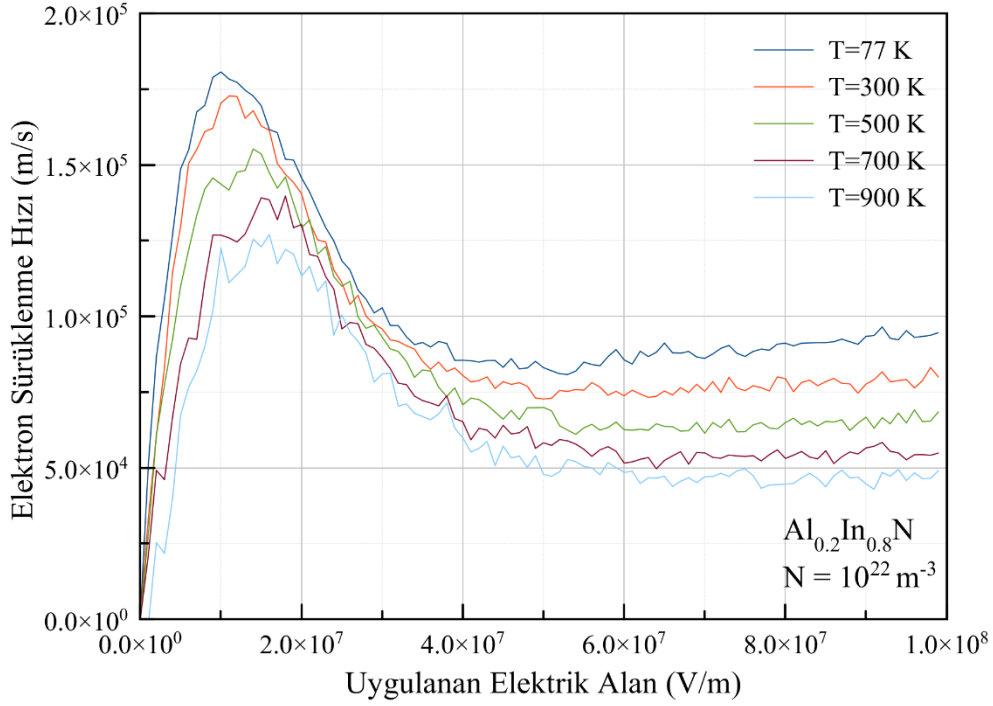
etkin kütleye sahip olmaktadır, bu da elektronların hız kaybına uğramalarına neden olmaktadır. Ancak, kritik bir elektrik alan değerinden sonra elektron hızlarının doyuma ulaştığı görüldü.



Şekil 5.3. Al_xIn_(1-x)N yarı iletkeninde 300 K’de farklı Al konsantrasyonlarında elektron enerjisi – elektrik alan grafiği.

Yukarıda bahsedilen saçılma mekanizmalarını içeren hesaplamalarda, farklı alüminyum konsantrasyonları kullanılarak (x=0.2, x=0.5, x=0.8) kristal sıcaklığının 300 K olduğu durumda uygulanan elektrik alan şiddetine karşılık gelen ortalama elektron enerjisinin hesaplanması çalışıldı. Bu hesaplamalar da Şekil 5.3’te gösterildi.

Buna göre, alüminyum konsantrasyonu arttıkça ortalama elektron enerjisinin doyuma ulaşması için gerekli olan kritik elektrik alan değeri artmaktadır.

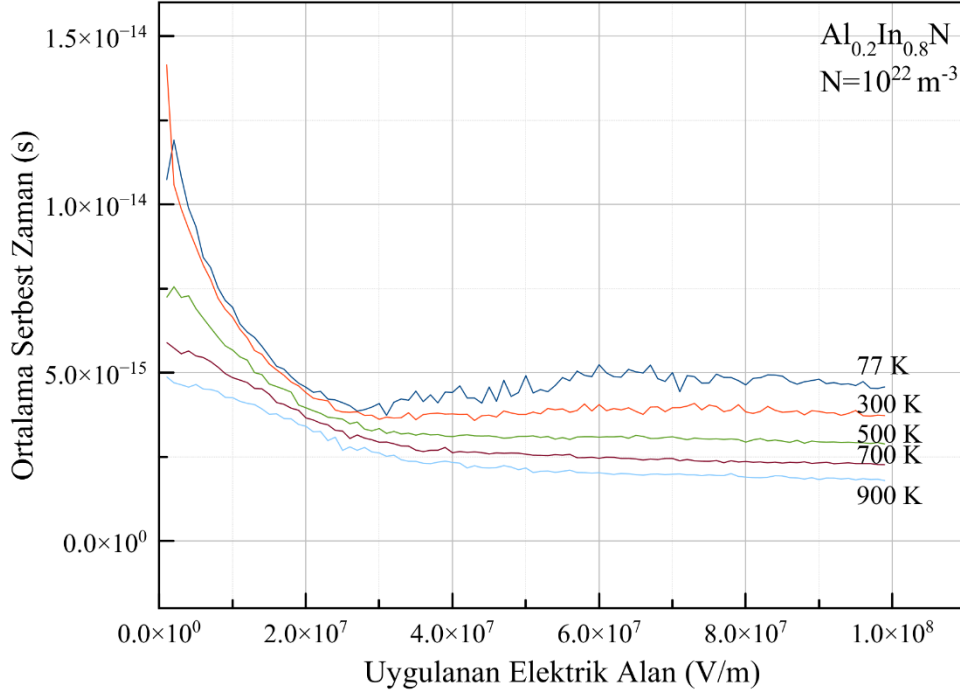


Şekil 5.4. Farklı sıcaklık değerlerinde $Al_{0.2}In_{0.8}N$ için sürüklenme hızı-elektrik alan grafiği

Şekil 5.4.'te gösterildiği gibi $Al_{0.2}In_{0.8}N$ yarı iletkeni için farklı kristal sıcaklıkları (77 K, 300 K, 500 K, 700 K, 900 K) değerlerinde elektrik alana karşılık gelen sürüklenme hızları incelendi. Safsızlık konsantrasyonu $1 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ alındı ve tüm atomların iyonize olduğu varsayıldı.

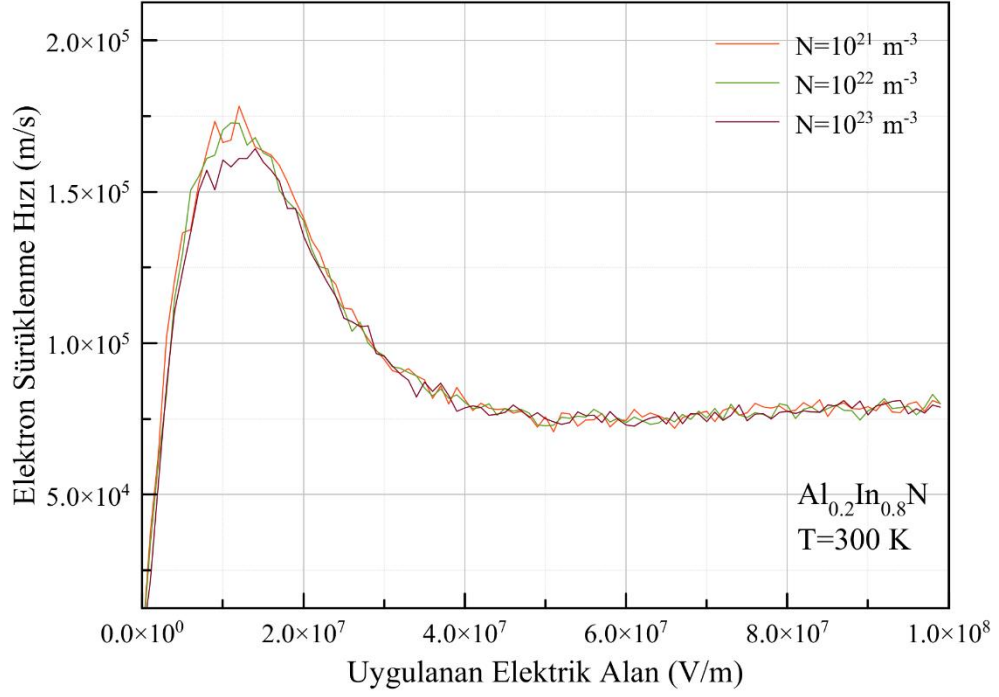
Tüm kristal sıcaklık değerlerinde, Şekil 5.4'te görüldüğü gibi, uygulanan elektrik alan şiddeti yaklaşık $1,0 \times 10^7$ V/m olduğunda elektronlar maksimum hıza ulaşmakta ve sonra aniden hızlarında düşüş olmaktadır. 4×10^7 V/m gibi yüksek elektrik alan değerlerinde de hızda doyuma ulaşmaktadır.

Ancak kristal sıcaklığı arttıkça, elektronların sürüklenme hızlarında da bir azalma görülmektedir. Kristal sıcaklığı çok düşük olduğunda termal enerji ($\frac{3}{2}k_bT$) değeri polar optik fonon enerjisinden ($\hbar\omega_0 = 91,2 \text{ meV}$) daha düşük olmaktadır. Düşük enerjili elektronlar için, akustik fonon saçılmaları ve optik fonon absorpsiyon saçılmaları daha baskın olmaktadır. Kristal sıcaklığı, 77 K olduğunda fonon yoğunluğu az olduğundan elektronların etkileşim olasılıkları daha düşük olmaktadır.



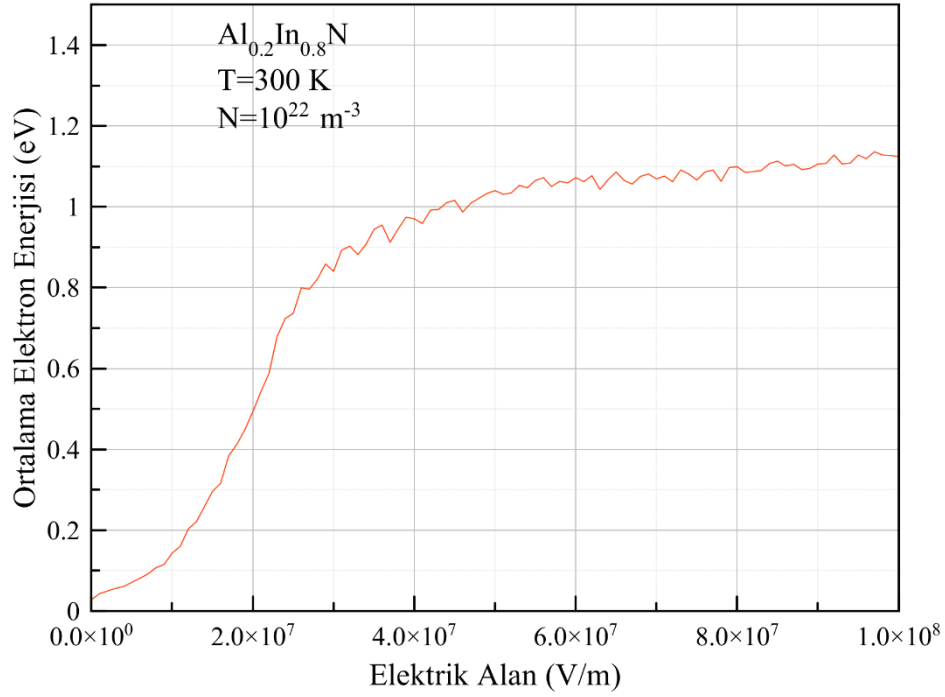
Şekil 5.5. Ortalama serbest zamanın elektrik alan ile değişiminin grafiği

Tüm sıcaklık değerlerinde elektronun kristal içinde aldığı ortalama serbest zaman değeri, başlarda daha fazlayken $2,0 \times 10^7$ V/m değerinden sonra daha az olduğu görüldü. Bu hesaplamalar da Şekil 5.5'te gösterildi. Ayrıca, sıcaklık arttıkça, elektronun ortalama serbest zamanında azalma görüldü. Bunun nedeni; sıcaklığın artması ile elektronların enerjilerinde artış olması ve bunun yanı sıra optik fonon sayısında da artış olmasıdır.



Şekil 5.6. Farklı konsantrasyon değerlerinde elektron sürüklenme hızı-elektrik alan grafiği

Şekil 5.6'da gösterilen çalışma da ise $\text{Al}_{0.2}\text{In}_{0.8}\text{N}$ için farklı katkı değerlerinde sürüklenme hızının değişimi incelendi. Bu sonuçlara göre konsantrasyonun farklı değerlerde olması sürüklenme hızında değişikliğe neden olmadığı görüldü.

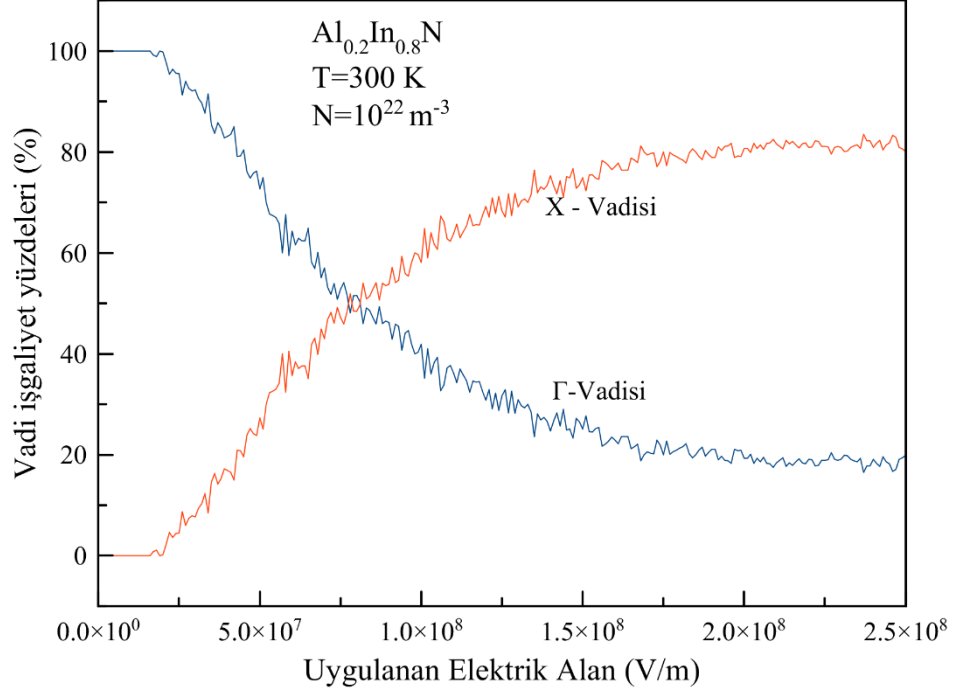


Şekil 5.7. Ortalama elektron enerjisi-elektrik alan grafiği

Şekil 5.7’de elektrik alan etkisindeki elektronun ortalama enerjisinin grafiği çalışıldı. Bu sonuçlara göre de, başlangıçta, ortalama elektron enerjisi yavaş bir artış göstermektedir. Çünkü elektronun enerjisi termal enerjiden ($\sim \frac{3}{2}k_B T$) biraz fazladır. Ancak, $1,0 \times 10^7$ V/m’den sonra hızlı bir şekilde elektron enerjisi artmaktadır. Bunun nedeni, uygulanan elektrik alanın etkisi ile kazanılan tüm enerjinin polar optik fonon saçılma mekanizması tarafından absorblanmasıdır.

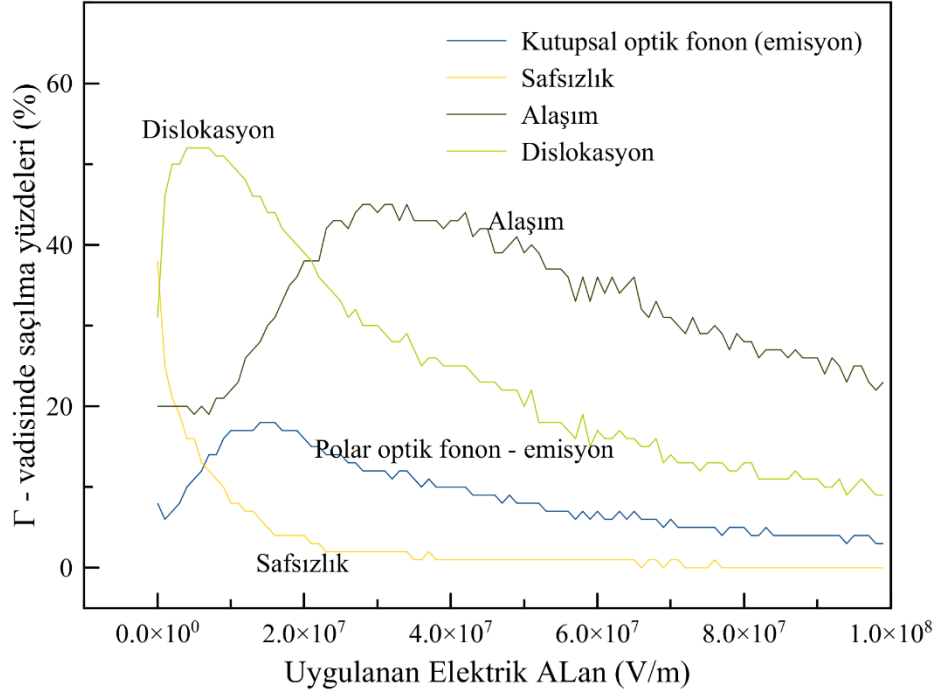
Yarı iletkene uygulanan elektrik alan $1,0 \times 10^7$ V/m’nin altında olduğunda elektronun elektrik alandan kazandığı tüm enerjisini polar optik fonon saçılması ile kaybeder. Diğer saçılma mekanizmaları, iyonize safsızlık, akustik deformasyon potansiyeli vb. elastik saçılma olduklarından dolayı elektronda enerji kaybına neden olamazlar. Bu nedenle enerji üzerinde herhangi bir etkileri yoktur.

Ancak belli bir elektrik alan değerine kadar hızla artan elektron enerjisi kritik bir değerden sonra sakin bir seyir izler. Bu kritik değerde artık vadiler arası saçılma mekanizmaları baskın olmaya başlar. Üst vadiye geçen elektronların etkin kütleleri bir alt vadiye göre daha ağır olduğundan elektronlar üst vadede yavaşlamaya başlarlar.



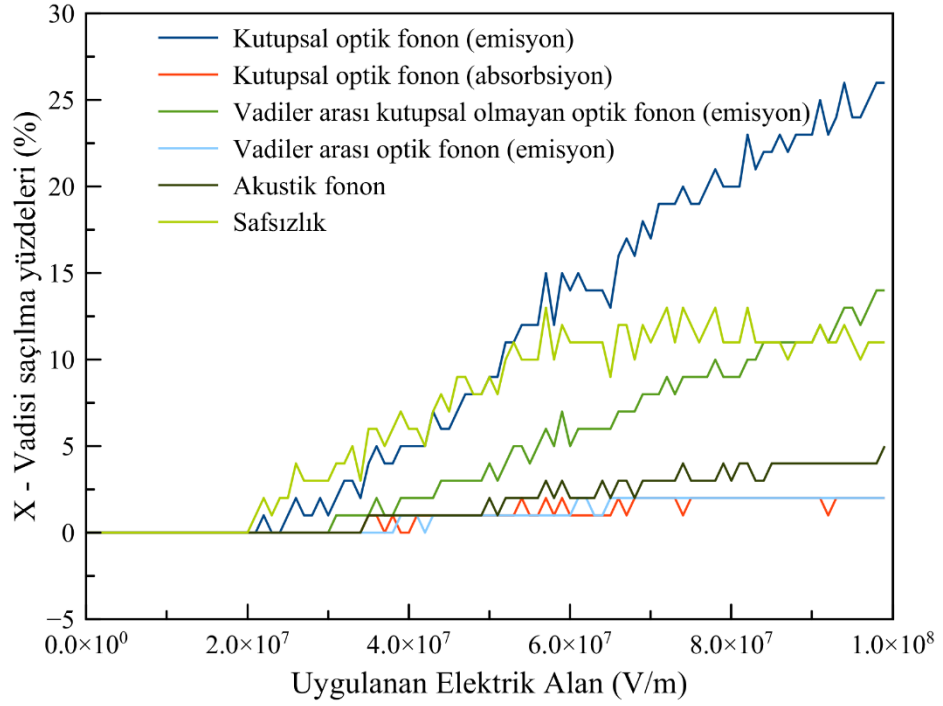
Şekil 5.8.Γ ve X vadilerinde 2 ns'lik simülasyon süresince elektronun bulunma yüzdeleri

Şekil 5.8'de ki grafikte de görüldüğü gibi uygulanan elektrik alan şiddeti arttıkça elektronların vadilerde bulunma durumları değişiklik göstermektedir. Uygulanan elektriğin 8×10^7 V/m olduğu durumlarda her iki vadedeki işgalie durumu %50 civarlarında olduğu görüldü. Uygulanan elektrik alan şiddeti 2×10^7 V/m olana kadar tüm elektronların merkez vadede oldukları bu değerden sonra bir üst vadiye geçişlerin gerçekleştiği görüldü.



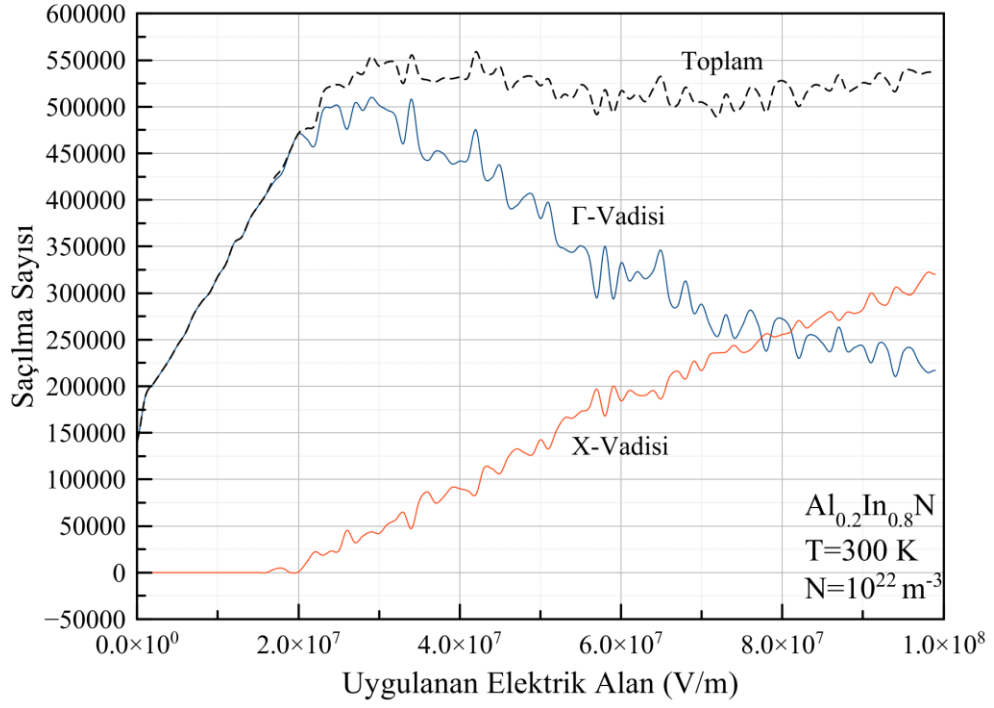
Şekil 5.9. Γ – vadisindeki saçılma sayılarının yüzdeleri

Şekil 5.9’da elektrik alan etkisinde Γ vadisindeki saçılma yüzdelerinin grafiği verildi. Başlangıçta iyonize safsızlık saçılmalarının var olduğu görülmektedir. Ancak, iyonize safsızlık saçılmaları elastik saçılmalar olduğundan, saçılmadan sonra elektron enerjisinde bir değişiklik meydana getirmezler. Bu nedenle elektrik alan arttıkça iyonize safsızlık saçılmalarında azalma görülmektedir. Polar optik fonon saçılmaları da inelastik saçılmalar olduğundan, emisyon türü saçılmada elektron bir fonon yayımlayarak enerji kaybeder.



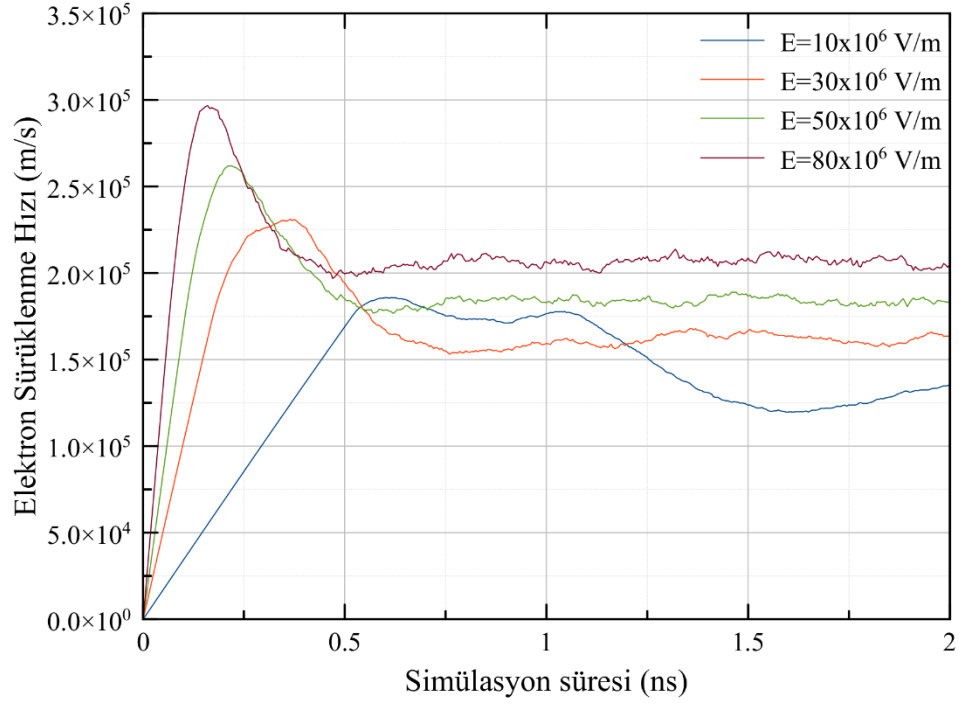
Şekil 5.10.X vadisindeki saçılma mekanizmalarının yüzdeleri

Şekil 5.10’da elektrik alan etkisinde X vadisindeki saçılma yüzdelerinin grafiği verildi. Başlangıçta yukarıda verilen vadiler arası geçiş grafiği ile de uyumlu olarak $2,0 \times 10^7$ V/m civarında bu vadiye geçişlerin olduğu görüldü. Süreç içerisinde, kutupsal optik fonon saçılma mekanizması emisyon etkisiyle baskın olduğu görüldü. Polar optik fonon saçılmaları da inelastik saçılmalar olduğundan, emisyon türü saçılmada elektron bir fonon yayınlamaya enerji kaybeder. Ayrıca vadi geçişleri olduğundan vadiler arası kutupsal olmayan optik fonon saçılmaları da baskın görüldü. Aynı şekilde safsızlıkların etkisi bu vadideki saçılmalarda da görüldü.



Şekil 5.11. Γ , X – vadilerindeki saçılma sayılarının elektrik alanla değişim grafiği

Şekil 5.11’de ise simülasyon süresince saçılmaların yüzdeleri görülmektedir. Buna göre; elektrik alanın $2,0 \times 10^7$ V/m olduğu değere kadar saçılmaların tümünün Γ -vadisinde gerçekleştiği görüldü. $2,0 \times 10^7$ V/m değerinden sonra ise Γ -vadisindeki saçılma sayısı azalmakta buna karşılık X-vadisindeki saçılma sayısında artış görülmektedir. Buna karşılık toplam değerle kontrol edildiğinde artış ve azalış değerlerinin tutarlı olduğu gözlemlendi.



Şekil 5.12. $Al_{0.5}In_{0.5}N$ için simülasyon süresi boyunca elektron sürüklenme hızı

Son olarak, 2 ns lik simülasyon süresince farklı sabit elektrik alan etkisinde elektronun sürüklenme hızının değişimi incelendi. Bu hesaplamaların grafiği Şekil 5.12’de görüldüğü gibi elektrik alanın artırılmasıyla erken dönemde elektronların hızlarının arttığı görüldü, buna bağlı olarak da saçılma mekanizmalarının daha başlangıçta baskın olacağı görüldü.

6. SONUÇ VE ÖNERİLER

Yukarıda da bahsedildiği gibi mevcut kullanım alanlarının önemli olması, değişen ve dijitale dönüşen dünyamızda yakın gelecekte de yerini koruyacağından III-V nitrit temelli yarı iletkenler araştırmaya değer olacaktır. Sonuç olarak bu çalışmada III-V nitrit üçlü alaşımlardan AlInN yarı iletkeninde elektron dinamiği detaylı olarak incelendi.

Bu çalışmada, sıcaklık, katkı konsantrasyonları, gibi etmenler dikkate alınarak ve değişiklikler yapılarak tutarlı ve kararlı sonuçlar elde edilmeye çalışıldı. Farklı elektrik alan değerleri uygulanarak elektronların sürüklenme hızlarındaki değişim ve enerjilerindeki değişimin incelenmesinin yanı sıra, farklı sabit elektrik alan değerleri hesaba katılarak simülasyon süresince elektronların sürüklenme hızlarındaki değişim gözlemlendi. Ayrıca farklı vadilerdeki baskın saçılma etkenleri hesaplandı ve bunların hangi elektrik alan değerlerinde gerçekleştiği gözlemlenerek tutarlılık oluşturuldu. Elektronların enerjilerindeki değişimin etkisiyle oluşabilecek farklı sıcaklık değerleri için de hesaplamalar yapılarak elektronların sürüklenme hızları hesaplandı. Son olarak alaşımın katkı oranları değiştirilerek en uygun katkı değerinin tespiti için hesaplamalar yapıldı.

İlk olarak belirli katkı değerlerinde ($Al_{0.2}In_{0.8}N$) 300 K sıcaklık değeri alınarak alaşıma uygulanan değişken elektrik alan etkisinde elektronun sürüklenme hızı hesaplandı, böylece hangi elektrik alan değerinde sürüklenen elektronun nasıl tepki vereceği izlenmiş oldu.

Sonuçlara göre uygulanan 1.0×10^7 V/m elektrik alan değerine kadar elektron hızı lineer bir şekilde artmakta ve bu değerden sonra hızı düşüşe geçmektedir. Bu gözlem bize yarı iletkende düşük enerjili elektronlar için akustik fonon çarpışmalarının ve optik fonon soğrulmalarının baskın olduğu bilgisi için destekleyici ve yardımcı olacaktır. 3.5×10^7 V/m elektrik alan değerine kadar elektronların hızlarındaki düşüş, artık elektronların üst vadiye geçiş yaptıklarının ve dolayısıyla üst vadideki etkin kütlelerinin daha ağır olmaları sebebiyle yavaşlamaya başladıklarının da bir ispatı olarak karşılandı.

İkinci olarak, saçılma mekanizmalarını içeren hesaplamalarda, farklı alüminyum konsantrasyonları kullanılarak ($x=0.2$, $x=0.5$, $x=0.8$) 300 K'de elektrik alana karşılık gelen

ortalama elektron enerjisinin hesaplanması çalışıldı. Alüminyum konsantrasyonu arttıkça ortalama elektron enerjisinin doyuma ulaşması için gerekli olan kritik elektrik alan değerinin arttığı görüldü.

Sıcaklık faktörü açısından hesaplamalar 77 K – 900 K aralığında farklı değerler için yapıldı. Beklendiği gibi kristal sıcaklığı 77 K’de düşük olduğundan fonon yoğunluğu daha az ve bunun neticesi olarak da saçılmaların daha az olması nedeniyle elektronların sürüklenme hızının daha fazla olduğu görüldü. Kristal sıcaklığı çok düşük olduğunda termal enerji değeri polar optik fonon enerjisinden ($\hbar\omega_0 = 91,2 \text{ meV}$) daha düşük olmaktadır. Düşük enerjili elektronlar için, akustik fonon saçılmaları ve optik fonon absorpsiyon saçılmaları daha baskın olduğu da aynı şekilde saçılma sayılarından kıyaslanarak gözlemlendi.

İletim elektronlarının kristal içerisinde ne kadar süre ilerleyeceğinin hesaplanması olan ortalama serbest zamanı sıcaklık faktöründen nasıl etkilendiğini gözlemlmek için ayrıca irdelendi. Sonuçta, sıcaklık arttıkça, elektronun ortalama serbest zamanında azalma görüldü. Bunun nedeni; sıcaklığın artması ile elektronların enerjilerinde artış olması ve bunun yanı sıra optik fonon sayısında da artış olması olarak yorumlandı.

Elektron enerjisinin, uygulanan elektrik alanın değişkenlik göstermesi ile nasıl etkileneceğinin hesaplanması da ayrıca yapıldı. Başlangıçta, ortalama elektron enerjisi yavaş bir artış göstermektedir. Çünkü elektronun enerjisi termal enerjiden biraz fazladır. Ancak, $1,0 \times 10^7 \text{ V/m}$ ’den sonra hızlı bir şekilde elektron enerjisinin arttığı görüldü. Bunun nedeni, uygulanan elektrik alanın etkisi ile kazanılan tüm enerjinin polar optik fonon saçılma mekanizması tarafından emilmesi olarak değerlendirildi. Ancak belli bir elektrik alan değerine kadar hızla artan elektron enerjisi kritik bir değerden sonra sakin bir seyir izledi, çünkü bu kritik değerde artık vadiler arası saçılma mekanizmaları baskın olmaya başladı. Üst vadiye geçen elektronların etkin kütleleri bir alt vadiye göre daha ağır olduğundan elektronlar üst vadiye yavaşlamaya başladığı sonucuna ulaşıldı. Bu sürece vadi bazında bakıldığında ve süreç bu açıdan irdelendiğinde ise, başlangıçta iyonize safsızlık saçılmalarının var olduğu, ancak, iyonize safsızlık saçılmaları elastik saçılmalar olduğundan, saçılmadan sonra elektron enerjisinde bir değişiklik meydana getirmeyeceğinden elektrik alan arttıkça iyonize safsızlık saçılmalarında azalma görüldü.

Polar optik fonon saçılmaları da inelastik saçılmalar olduğundan, emisyon türü saçılmada elektron bir fonon yayınlayarak enerji kaybettiği gözlemlendi.

Son olarak bu çalışmanın AlInN yarı iletkeni üzerinde yapılacak diğer çalışmalara da bir ışık tutacağı görüldü. Bu çalışmada kristal içerisinde tek bir elektronun hareketi simülasyon süresince incelendi. Farklı bir açıdan bakıldığında demet halindeki elektronun kristal içerisindeki hareketi de başka bir çalışmanın konusu olarak konuya detay kazandırabilecektir.

KAYNAKLAR DİZİNİ

- Akarsu, M., Özbaş, Ö. 2005. "Monte Carlo Simulation for Electron Dynamics in Semiconductor Devices". *Mathematical and Computational Applications*, 10(1), 19-26.
- Arabshahi, H., Rokn-Abadi, M. R., Badieyan, F., Moghadam, Z. E. 2010. "Steady-state and Transient Electron Transport Within Bulk III-V Nitride Semiconductors Using an Updated Semiclassical Three-valley Monte Carlo Method", 7.
- Bachir, N., Hamdoune, A., Sari, N. E. C. 2014. "Steady-State Electron Transport within InAlN Bulk Ternary Nitride, using the Monte Carlo Method". *International Journal of Materials Science and Applications*, 3(2), 20.
- Burk, A. A., O'Loughlin, M. J., Siergiey, R. R., Agarwal, A. K., Sriram, S., Clarke, R. C., ... Brandt, C. D. 1999. "SiC and GaN wide bandgap semiconductor materials and devices". *Solid-State Electronics*, 43(8), 1459-1464.
- Butté, R., Carlin, J.-F., Feltin, E., Gonschorek, M., Nicolay, S., Christmann, G., ... Grandjean, N. 2007. "Current status of AlInN layers lattice-matched to GaN for photonics and electronics". *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40, 6328.
- Chen, Z. T., Tan, S. X., Sakai, Y., Egawa, T. 2009. "Improved performance of InAlN-based Schottky solar-blind photodiodes". *Applied Physics Letters*, 94(21), 213504.
- Denton, A. R., Ashcroft, N. W. 1991. "Vegard's law". *Physical Review A*, 43(6), 3161-3164.
- Dyson, A., Ridley, B. K. 2011. "The lifetime of optical phonons in a single heterostructure". *Journal of Applied Physics*, 109(5), 054509.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

- Goldberg, Y., Levinshtein, M., Rumyantsev, S. 2001. "Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe". SciTech Book News, 25, 93-146.
- Guo, Q., Tanaka, T., Nishio, M., Ogawa, H. 2008. "Structural and Optical Properties of AlInN Films Grown on Sapphire Substrates". Japanese Journal of Applied Physics, 47(1), 612-615.
- Hadi, W. A., Guram, P. K., Shur, M. S., O'Leary, S. K. 2013. "Steady-state and transient electron transport within wurtzite and zinc-blende indium nitride". Journal of Applied Physics, 113(11), 113709.
- Hamaguchi, C. 2009. "*Basic Semiconductor Physics*" (2 edition). Springer.
- He, H., Cao, Y., Fu, R., Guo, W., Huang, Z., Wang, M., ... Wang, H. 2010. "Band gap energy and bowing parameter of In-rich InAlN films grown by magnetron sputtering". Applied Surface Science, 256(6), 1812-1816.
- Inushima, T., Davydov, V. Yu., Emtsev, V. V., Goncharuk, I. N., Smirnov, A. N., Petrikov, V. D., ... Smirnov, M. B. 1999. "Experimental and theoretical studies of phonons in hexagonal InN". Applied Physics Letters, 75(21), 3297-3299.
- Jacoboni, C. 2010. "*Theory of electron transport in semiconductors: a pathway from elementary physics to nonequilibrium green functions*". Heidelberg; New York: Springer.
- Krishnamurthy, S., van Schilfgaarde, M., Sher, A., Chen, A.-B. 1997. "Bandstructure effect on high-field transport in GaN and GaAlN". Applied Physics Letters, 71(14), 1999-2001.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

- Lambrecht, W. R. L., Segall, B. 1993. "Anomalous band-gap behavior and phase stability of c-BN--diamond alloys". *Physical Review B*, 47(15), 9289-9296.
- Levinshtein, M. E., Rumyantsev, S. L., Shur, M., Zubrilov A. 2001. "*Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*". New York: Wiley.
- Lin, S., Kuo, C.-T., Liu, X., Liang, L.-Y., Cheng, C.-H., Lin, C.-H., ... Gwo, S. 2012. "Experimental Determination of Electron Affinities for InN and GaN Polar Surfaces". *Applied Physics Express*, 5, 1003.
- Liou, B.-T., Yen, S.-H., Kuo, Y.-K. 2005. "Vegard's law deviation in band gap and bowing parameter of Al_xIn_{1-x}N". *Applied Physics A*, 81(3), 651-655.
- Littlejohn, M. A., Hauser, J. R., Glisson, T. H. 1975. "Monte Carlo calculation of the velocity-field relationship for gallium nitride". *Applied Physics Letters*, 26(11), 625-627.
- Magnusson, R., Birch, J., Sandström, P., Hsiao, C.-L., Arwin, H., Järrendahl, K. 2014. "Optical Mueller matrix modeling of chiral Al_xIn_{1-x}N nanospirals". *Thin Solid Films*, 571, 447-452.
- Martin Galler. 2005. "Multigroup Equations for the Description of the Particle Transport in Semiconductors". Geliş tarihi 25 Kasım 2019, gönderen https://kissly.net/book/9007DC4E7431E1597DF3?utm_source=ps81&utm_medium=cudemure.tk&utm_campaign=fnom&x=423096

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

- Moussa, R., Abdiche, A., Khenata, R., Wang, X. T., Varshney, D., Sun, X. W., ... Rai, D. P. 2018. "Structural, electronic, optical, thermodynamic and elastic properties of the zinc-blende Al_xIn_{1-x}N ternary alloys: A first principles calculations". Journal of Physics and Chemistry of Solids, *119*, 36-49.
- Nakamura, S., Fasol, G. 1997. "*The Blue Laser Diode: GaN Based Light Emitters and Lasers*". Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- Neamen, D. A. 2011. "*Semiconductor Physics And Devices: Basic Principles*" (4th edition). New York, NY: McGraw-Hill.
- Pearson, W. B. 1967. "A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys". Geliş tarihi 18 Ocak 2021, gönderen https://books.google.com.tr/books/about/A_Handbook_of_LATTICE_SPACINGS_AND_STRUC.html?id=r9mWdgWKN4YC&redir_esc=y
- Satter, Md. M., Kim, H.-J., Lochner, Z., Ryou, J.-H., Shen, S.-C., Dupuis, R. D., Yoder, P. D. 2012. "Design and Analysis of 250-nm AlInN Laser Diodes on AlN Substrates Using Tapered Electron Blocking Layers". IEEE Journal of Quantum Electronics, *48*(5), 703-711.
- Schulz, H., Thiemann, K. H. 1977. "Crystal structure refinement of AlN and GaN". Solid State Communications, *23*(11), 815-819.
- Siddiqua, P., O'Leary, S. K. 2018. "Electron transport within the wurtzite and zinc-blende phases of gallium nitride and indium nitride". Journal of Materials Science: Materials in Electronics, *29*(5), 3511-3567.
- Strite, S., Morkoç, H. 1992. "GaN, AlN, and InN: A review". Journal of Vacuum Science Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, *10*, 1237-1266.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

- Tomizawa, K. 1993. "*Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*" (Printed Book). Boston: Artech House Publishers.
- Van Camp, P. E., Van Doren, V. E., Devreese, J. T. 1991. "High-pressure properties of wurtzite- and rocksalt-type aluminum nitride". *Physical Review B*, 44(16), 9056-9059.
- Wraback, M., Shen, H., Carrano, J. C., Li, T., Campbell, J. C., Schurman, M. J., Ferguson, I. T. 2000. "Time-resolved electroabsorption measurement of the electron velocity-field characteristic in GaN". *Applied Physics Letters*, 76(9), 1155-1157.
- Wu, J., Walukiewicz, W., Yu, K. M., Ager, J. W., Haller, E. E., Lu, H., ... Nanishi, Y. 2002. "Unusual properties of the fundamental band gap of InN". *Applied Physics Letters*, 80(21), 3967-3969.
- Xu, Y.-N., Ching, W. 1993. "Electronic, optical, and structural properties of some wurtzite crystals". *Physical review. B, Condensed matter*, 48, 4335-4351.
- Yu, P. Y., Cardona, M. 2010. "*Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*" (4th ed). Berlin ; New York: Springer.