AlGaAs Yarıiletken Bileşiğinde Elektron Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu İle İncelenmesi

Tuna Özkar

DOKTORA TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Nisan 2024

Investigation of Electron Transport Properties in AlGaAs Semiconductor Compound with Monte Carlo Simulation

Tuna Özkar

DOCTORAL DISSERTATION

Department of Physics

April 2024

AlGaAs Yarıiletken Bileşiğinde Elektron Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu İle İncelenmesi

Tuna Özkar

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği Uyarınca

Fizik Anabilim Dalı

Katıhal Fiziği Bilim Dalında

DOKTORA TEZİ

olarak hazırlanmıştır.

Danışman: Doç. Dr. Mustafa Akarsu

YÖK 100/2000 Doktora Bursiyeri

Mikro ve Nanoteknoloji Alt Alanı

Nisan 2024

ONAY

Fizik Anabilim Dalı Katıhal Fiziği Bilim Dalı Doktora öğrencisi Tuna Özkar' ın DOKTORA tezi olarak hazırladığı "AlGaAs Yarı İletken bileşiğinde Elektron Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu ile İncelenmesi" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek oybirliği ile kabul edilmiştir.

Danışman : Doç. Dr. Mustafa AKARSU

İkinci Danışman :

Doktora Tez Savunma Jürisi:

Üye: Doç. Dr. Mustafa AKARSU

Üye: Prof. Dr. H. Senem AYDOĞU

Üye: Prof. Dr. Hamza Yaşar OCAK

Üye: Prof. Dr. Sadiye ÇETİNKAYA ÇOLAK

Üye: Dr. Öğr. Üyesi Ali ÇETİN

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

Prof. Dr. ....

Enstitü Müdürü

ETİK BEYAN

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kılavuzuna göre, Doç. Dr. Mustafa Akarsu danışmanlığında hazırlamış olduğum "AlGaAs Yarı İletken bileşiğinde Elektron Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu ile İncelenmesi" başlıklı 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. 05/04/2024

Tuna ÖZKAR

İmza

ÖZET

Yarı iletkenlerde elektron taşınımına son yıllardaki araştırmalarda dikkate değer şekilde ilgi duyulmaktadır. Uygulanan elektrik alanın elektron sürüklenme hızına olan bağımlılığı bu tip araştırmalarda ana amaç haline gelmiştir.

Direkt geçişli yarı iletkenlerin önemli karakteristiklerinden biri, sürüklenme hızının elektrik alan artarken, maksimumunun yüksek değerler almasıdır. İndirekt geçişli malzemeler de ise sürüklenme hızının maksimumunun daha düşük değerler alması beklenebilir.

Galyum Arsenit yarı iletken bileşiğinin direkt geçişli bir yarı iletken olduğu bilinmektedir. Galyum Arsenit içerisine alüminyum ilave edilerek yeni bir yarıiletken bileşik olan alüminyum galyum arsenit elde edilmektedir. Alüminyum galyum arsenit düşük oranlarda alüminyum içeriyorsa direkt geçişli bir malzemedir. Ancak alüminyum galyum arsenit bileşiğinin içerisindeki alüminyum miktarı arttıkça malzeme indirekt geçişli hale gelmektedir. Bundan dolayı, bu tez çalışmasında alüminyum galyum arsenit malzemesindeki alüminyum oranı arttırıldıkça sürüklenme hızının elektrik alan ile nasıl değiştiği ve bu değişim esnasında, hangi tip saçılmaların rol aldığı ve bu saçılmaların sürüklenme hızı elektrik alan grafiğine olan etkisi 77K, 300K ve 450K sıcaklıkları için incelenmiştir.

Anahtar kelimeler: Monte Carlo Metodu, yarıiletken, elektron taşınımı, alüminyum galyum arsenit

SUMMARY

Electron transport in semiconductors has received considerable research attention in recent years. The dependence of the applied electric field on the electron drift rate has become the main goal in this type of research.

An important characteristic of direct transition semiconductors is that the drift velocity reaches high values as the electric field increases. In indirect transition materials, the maximum drift speed can be expected to take lower values.

Gallium Arsenide semiconductor compound is known to be a direct transition semiconductor. By adding aluminum to Gallium Arsenide, a new semiconductor compound, aluminum gallium arsenide, is obtained. Aluminum gallium arsenide is a direct transition material if it contains low amounts of aluminum. However, as the amount of aluminum in the aluminum gallium arsenide compound increases, the material becomes indirectly transitional. Therefore, in this thesis study, how the drift velocity changes with the electric field as the aluminum ratio in the aluminum gallium arsenide material is increased, what type of scattering takes part during this change, and the effect of these scattering on the drift velocity electric field graph is examined for 77K, 300K and 450K temperatures.

Keywords: Monte Carlo Method, semiconductor, electron transport, aluminum gallium arsenide

TEŞEKKÜR

Doktora çalışmam sırasında bana zaman ayıran ve yol gösteren değerli hocam Doç. Dr. Mustafa Akarsu' ya teşekkür ederim.

Doktora çalışmam esnasında her zaman yanımda olan aileme teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET ……...vi
SUMMARY ……vii
TEŞEKKÜR ……...……...viii
İÇİNDEKİLER ……...ix
ŞEKİLLER DİZİNİ ……xi
ÇİZELGELER DİZİNİ ……....xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ ……xiv
1.GİRİŞ VE AMAÇ ……...……...1
2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI …….. 3
3.MONTE CARLO METODU …….. 5
3.1. Tek Parçacık Monte Carlo Metodu ……6
3.1.1. Taşıyıcı hareketinin simülasyonu ……...6
3.1.2. Sürüklenme süreci ……10
3.1.3. Saçılma süreci …….. 10
3.1.4. Hız hesabı ……17
4.TAŞIYICI SAÇILMA MEKANİZMALARI ……... 19
4.1. Fermi Altın Kuralı ……... 19
4.2. İyonize Safsızlık Saçılması ……...22
4.3. Fonon Saçılması ……...28
4.4. Akustik Fonon Saçılması …… 29
4.5. Kutupsal Olmayan Optik Fononların Saçılması ……..… 33
4.6. Vadiler Arası Optik Fononların Saçılması ……... 36
4.7. Kutupsal Optik Fononların Saçılması ……...36
4.8. Alaşım Saçılması ……..40
5. MATERYAL VE YÖNTEM ……..42
5.1. GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ Kristal Yapısı …….. 42
5.2. GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ Bant Yapısı ……....43
6. BULGULAR VE TARTIŞMA ……..46
7.SONUÇ VE ÖNERİLER ……... 57

İÇİNDEKİLER

KAYNAKLAR DİZİNİ …… 60

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil **Sayfa**

3.1. Tek parçacık Monte Carlo metodu akış şeması ..……7
3.2. Saçılma tipi seçimi için akış şeması ...……11
3.3. Laboratuvar sistemime göre koordinat sistemi ……...13
3.4. **k** dalga vektörüne göre **k′** dalga vektörünün Θ ve Ø açılarının belirlenmesi……15
4.1. Pozitif bir iyon yakınında yük nötralliğinin bozunumu…… 23
4.3. Θ′ **k** ve **q** arasındaki kutup açısı ……...32
5.1. GaAs çinkosülfür yapısı ……42
5.2. $Al_xGa_{1-x}As$ çinkosülfür yapısı ……...43
5.3. GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ bant yapısı ……44
6.1. GaAs için sürüklenme hızı ve sıcaklık karşılaştırması…….. 47
6.2. $Al_xGa_{1-x}As$ için sürüklenme hızı ve sıcaklık karşılaştırması …… 47
6.3. $Al_xGa_{1-x}As$ için 77K sürüklenme hızı elektrik alan grafiği ……..48
6.4. $Al_xGa_{1-x}As$ için 77K enerjinin uygulanan elektrik alanla değişimi ……..48
6.5. $Al_xGa_{1-x}As$ 300K için sürüklenme hızı elektrik alan grafiği …… 49
6.6. $Al_xGa_{1-x}As$ için enerjinin 300K' de uygulanan elektrik alanla değişimi …….. 49
6.7. $Al_xGa_{1-x}As$ 450K için sürüklenme hızı elektrik alan grafiği …… 50
6.8. $Al_xGa_{1-x}As$ için enerjinin 450K' de uygulanan elektrik alanla değişimi …….. 50
6.9. Γ vadisi için 77K' de saçılma yüzdeleri ……51
6.10. L vadisi için 77K' de saçılma yüzdeleri ……..52
6.11. Γ vadisi için 300K' de saçılma yüzdeleri ……52
6.12. L vadisi için 300K' de saçılma yüzdeleri …… 53
6.13. Γ vadisi için 450K' de saçılma yüzdeleri ……... 53
6.14. L vadisi için 450K' de saçılma yüzdeleri …… 54
6.15. 77K' de vadi işgaliyeti ……55
6.16. 300K' de vadi işgaliyeti …….. 55
6.17. 450K' de vadi işgaliyeti …….. 56

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge **Sayfa**

5.1. GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ için parametreler …….. 45
7.1. Γ ve L vadileri için enerji değerleri …… 57

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler	**Açıklamalar**
τ	Ortalama serbest zaman
$P(\tau)$	Birim zamanda saçılma olasılığı
$W_\tau(E_\mathbf{k})$	Toplam saçılma hızı
$W_0(E_\mathbf{k})$	Kendiliğinden saçılma hızı
j	Saçılma mekanizması sayısı
Λ	Toplam saçılma hızı
r	Rastgele sayı
$\mathbf{k}$	Elektron dalga vektörü
$\Delta\mathbf{k}$	Dalga vektöründeki değişim
$\hbar$	Planck sabiti
H	Hamiltonyen
H'	Pertürbasyon potansiyeli
$E_\mathbf{k}$	**k** dalga vektörlü elektron enerjisi
$V(\mathbf{r})$	Etkin elektrostatik potansiyel
$\mathbf{E}$	Elektrik alan
Θ	Kutup açısı
$\emptyset$	Azimut açısı
$\mathbf{v}$	Elektron hızı
T	Simülasyon süresi
Ω	Kristal hacmi
$C_\mathbf{k}(t)$	Zaman değişim katsayısı
$\mathbf{e_q}$	Birim kutuplanma vektörü
δ	Dirac fonksiyonu
$\hbar w$	Fonon enerjisi
$W(\mathbf{k})$	Saçılma hızı
E_g	Yasak enerji aralığı
m^*	Etkin elektron kütlesi
m_0	Serbest elektron kütlesi

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler	Açıklamalar
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
$N(E_{\mathbf{k}})$	Durum yoğunluğu
E_g	Yasak enerji aralığı
m^*	Etkin elektron kütlesi
m_0	Serbest elektron kütlesi
$a_{\mathbf{q}}^+$	Yaratma operatörü
$a_{\mathbf{q}}$	Yoketme operatörü
ρ	Yoğunluk
C_l	Malzemenin elastik sabiti
$\boldsymbol{\nu}_s$	Malzemede ses hızı
m_1^*	Γ-vadisinde etkin elektron kütlesi
m_2^*	L-vadisinde etkin elektron kütlesi
e^*	Etkin yük
Ξ_d	Akustik deformasyon sabiti
$n_{\mathbf{q}}$	Fonon sayısı
k_B	Boltzman sabiti
$\mathbf{D}_0$	Optik deformasyon potansiyeli
$\hbar w_{ij}$	Vadiler arası optik fonon enerjisi
ε_0	Boşluğun elektrik geçirgenliği
P	Kutuplanma
a	Örgü sabiti
N_s	İyonize safsızlık konsantrasyonu

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler	**Açıklamalar**
Ξ_{al}	Alaşım deformasyon potansiyeli
q	Elektron yükü
Γ	Kristal yapıda [100] doğrultusu
L	Kristal yapıda [111] doğrultusu

Kısaltmalar	**Açıklamalar**
pope	polar optik fonon saçılması
iss	İyonize safsızlık saçılması
alloy	Alaşım saçılması
npope	Polar olmayan optik fonon emisiyon saçılması

1.GİRİŞ VE AMAÇ

III-V grubu yarı iletkenlerde elektron taşınım özelliklerinin belirlenmesi, son yıllardaki araştırmalarda dikkate değer şekilde artmıştır. Uygulanan elektrik alanın elektron sürüklenme hızına olan bağımlılığı bu tip araştırmalarda ana amaç haline gelmiştir. Birçok III-V grubu yarıiletken, belli bir kritik elektrik alanda sürüklenme hızının pik değer yaptığı, daha sonrasında ise uygulanan elektrik alanın artmasıyla beraber sürüklenme hızının düştüğü negatif diferansiyel mobilitesi sergilemektedir. Bu tip negatif diferansiyel mobilitesi sergileyen yarı iletkenlere çoğunlukla aşağı ve yukarı vadiler arasında, vadiler arası geçiş atfedilmektedir. Direkt geçişli III-V grubu yarı iletkenlerin önemli karakteristiklerinden birisi, sürüklenme hızı elektrik alan grafiğinde, elektrik alan artarken, sürüklenme hızının şiddetli şekilde artması biçiminde görülmektedir. İndirekt geçişli malzemeler de ise sürüklenme hızı elektrik alan grafiğinde, elektrik alan artarken, sürüklenme hızının şiddetli arttığı görülmemektedir.

$Al_xGa_{1-x}As$ malzemesine, modern elektronikte mikrodalga cihazlarda ve optoelektronik uygulamalarında, band yapısının ve örgü sabitinin değiştirilebilir olması gibi sebeplerden ötürü dikkate değer bir ilgi vardır. $Al_xGa_{1-x}As$ malzemesinin özellikle kızıl ötesi dedektör ve lazerlerde kullanımı oldukça yaygındır.

$Al_xGa_{1-x}As$ malzemesinde $x = 0,4$ değerinden sonra malzemenin indirekt geçişli hale geldiği görülmüştür. Bundan dolayı, bu çalışmada $x = 0,4$ değerine yaklaşıldıkça sürüklenme hızının nasıl değiştiği ve bu değişim esnasında, hangi tip saçılmaların rol aldığı ve bu saçılmaların sürüklenme hızı elektrik alan grafiğine olan etkisi Monte Carlo metodu kullanılarak incelenmiştir.

Monte Carlo metodu, nümerik sonuçlar elde etmek için, çok fazla tekrar eden gelişigüzel örneklemeler kullanır. İlk olarak Nicholas Constantine Metropolis kullanmıştır. Daha sonrasında Stanislaw Ulam, nükleer bomba patlaması sonrasında nötron salınımına karşı kalkan geliştirmek için 1940 ‘larda kullanılmıştır.

Son otuz yılda Monte Carlo yöntemi yarı iletkenlerde ve yarı iletken cihazlarda çok çeşitli taşıma olaylarını araştırmak için başarıyla kullanılan güvenilir ve sık kullanılan bir araca dönüşmüştür. Yöntem, konum ve dalga vektörlerinin oluşturduğu altı boyutlu faz uzayında yük taşıyıcıların hareketinin simülasyonundan oluşur.

Bir dış kuvvetin etkisine maruz kalan nokta benzeri taşıyıcılar, Newton yasası ve taşıyıcının dağılım ilişkisi tarafından belirlenen yörüngeleri takip eder. Kristal örgünün kusurları nedeniyle sürüklenme süreci, uzayda yerel ve zamanda anlık olduğu düşünülen saçılma olayları tarafından kesintiye uğrar. Bir sürüklenme sürecinin süresi ve saçılma mekanizmasının türü, mikroskobik süreci tanımlayan verilen olasılıklara göre rastgele seçilir.

2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI

Monte Carlo yöntemi, karmaşık problemleri rastgele örnekleme ve istatistiksel analiz yoluyla çözmek için kullanılan bir hesaplama tekniği olarak ortaya çıkan bir yöntemdir. Bu yöntemin adı, rastgelelik öğesinin ön planda olduğu bir yöntem olduğunu vurgulayan bir tercihle, Monaco'daki Monte Carlo Kumarhanelerinden esinlenmiştir.

Monte Carlo yöntemi, 1940’ lı yıllarda İkinci Dünya Savaşı sırasında atom bombasının geliştirilmesiyle bağlantılı olarak ortaya çıktı. Bilim insanları, John Von Neumann, Stanislaw Ulam ve Nicholas Metropolis gibi isimler, fisil izotop malzemelerde nötronların davranışını simüle etmek için olasılık temelli teknikler kullanmışlardır. Bu çalışma, Monte Carlo simulasyonlarının temelini atmıştır.

II. Dünya Savaşı'nın ardından, Monte Carlo yöntemi çeşitli bilimsel ve mühendislik alanlarında uygulama bulmuştur. İlk başlarda nükleer fizikdeki sorunlar, özellikle nötron yayılma problemleri için kullanılmıştır.

Bilgisayarların 1950 'lerde ve 1960' larda gelişmesi, Monte Carlo yönteminin yeteneklerini büyük ölçüde artırmıştır. Araştırmacılar artık daha karmaşık simulasyonlar yapabiliyorlardı, bu simulasyonlar parçacık fiziği, istatistik ve matematik problemleri, akışkanlar dinamiği dahil olmak üzere birçok alanda kullanılmıştır.

1960'ların sonlarından itibaren, Monte Carlo yöntemi yarı iletken fiziği alanında popüler hale geldi. Yarıiletkenlerdeki taşıyıcıların (elektronlar ve boşluklar) hareketini ve etkileşimlerini simüle etmek için kullanıldı. Bu yöntem, yarı iletkenlerin elektriksel özellikleri üzerindeki farklı etkileşim mekanizmalarının ve saçılma olaylarının etkilerini incelemek için oldukça önemli bir araç haline geldi.

Fawcett vd. (1970) Monte Carlo metodunu galyum arsenit için uygulayarak elektrik alan, sürüklenme hızı arasındaki ilişkiyi ve elektronun enerjisi ile elektrik alan arasındaki ilişkiyi ortaya koymuştur. Aynı zamanda Γ ve L vadilerindeki saçılma mekanizmalarını incelemişlerdir.

Buldukları sonuçları önceki yapılmış teorik çalışmalar ve deneysel çalışmalar ile kıyaslamışlardır.

Arabshahi vd. (2008) AlAs, AlGaAs, GaAs malzemelerini elektrik alan ve sürüklenme hızı arasındaki ilişkiyi ve saçılma mekanizmalarını Monte Carlo metodu ile inceleyerek malzemeleri birbirleri ile kıyaslamışlardır.

Abou EL-Ela (2005) $Al_xGa_{1-x}As$ malzemesini x = 0 ile x = 3.25 aralığında sürüklenme hızı ve elektrik alan arasındaki ilişkiyi ve sürüklenme hızında rol oynayan saçılma mekanizmalarını incelemiştir.

Hava ve Auslender (1993) AlGaAs malzemesini Maxwell yaklaşımı kullanarak yüksek elektrik alan altında sürüklenme hızını farklı alaşım kompozisyonları için incelemiştir.

3. MONTE CARLO METODU

Yarıiletkenlerdeki yük transferi, temel fiziksel ve elektronik cihazlar açısından büyük öneme sahiptir. Yarıiletken elektronik cihazların performansı, kullanılan malzemelerin düşük ve yüksek alan elektron taşıma özelliklerine bağlıdır. Taşıma özelliklerini hesaplamak için kullanılan çeşitli yöntemler vardır. Bu yöntemler arasında varyasyon ilkesi, yinelemeli yöntem, gevşeme süresi yaklaşımı, Matthiessen kuralı ve Monte Carlo yöntemi bulunmaktadır. Bu sayısal teknikler, orijinal olarak Boltzmann taşıma denklemlerine dayanan yarı iletken denklemlerini çözmek için kullanılır (Özbaş ve Akarsu, 2002).

Monte Carlo yöntemi, diğer yöntemlerden farklı bir metodolojiye sahiptir, ancak çözüm hala Boltzmann denklemine dayanmaktadır. Bu yöntem, yarı iletken malzemelerde ve cihazlarda taşıyıcı taşıma olaylarını incelemek için çok yönlü bir araçtır. Yöntem, konum ve momentum tarafından oluşturulan faz uzayındaki yük taşıyıcılarının hareketini simüle eder. Nokta benzeri taşıyıcılar, dış kuvvet alanının etkisi altında Newton'un yasasına ve taşıyıcının dağılım ilişkisine göre belirlenen yörüngeleri takip eder. Bu sürüklenme süreçleri, uzayda lokal ve zamanda anlık olarak meydana gelen saçılma olayları tarafından kesilir.

Bir sürüklenme sürecinin süresi, saçılma mekanizmasının tipine ve saçılma sonrası duruma bağlı olarak, mikroskobik sürece özgü olasılıklara göre rastgele seçilir. Bu prosedür temelde, bir Boltzmann denklemini karşılayan bir taşıyıcı dağılımını ortaya çıkarır (Lundstrom, 2000).

Monte Carlo yöntemi, yarı iletkenlerde yük taşıyıcılarının dış kuvvet alanlarına ve saçılma mekanizmalarına maruz kalarak hareketinin simülasyonunu gerçekleştirir.

Yük taşıyıcısının ardı ardına gerçekleşen iki saçılma arasındaki geçen zaman ve farklı saçılma tipleri, malzemedeki mikroskobik durumları göz önüne alarak gerçekleşen olasılıklar ile uyumlu olmalıdır. Elektronun malzeme içerisindeki hareketini bulmak için bir tek parçacığın hareketini ele almak yeterli olacaktır. Başlangıçta simülasyon için $\mathbf{k_0}$ ilk durum dalga vektörü bulunmalıdır. Serbest uçuş süresince uygulanan elektrik alan altında

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{E} \tag{3.1}$$

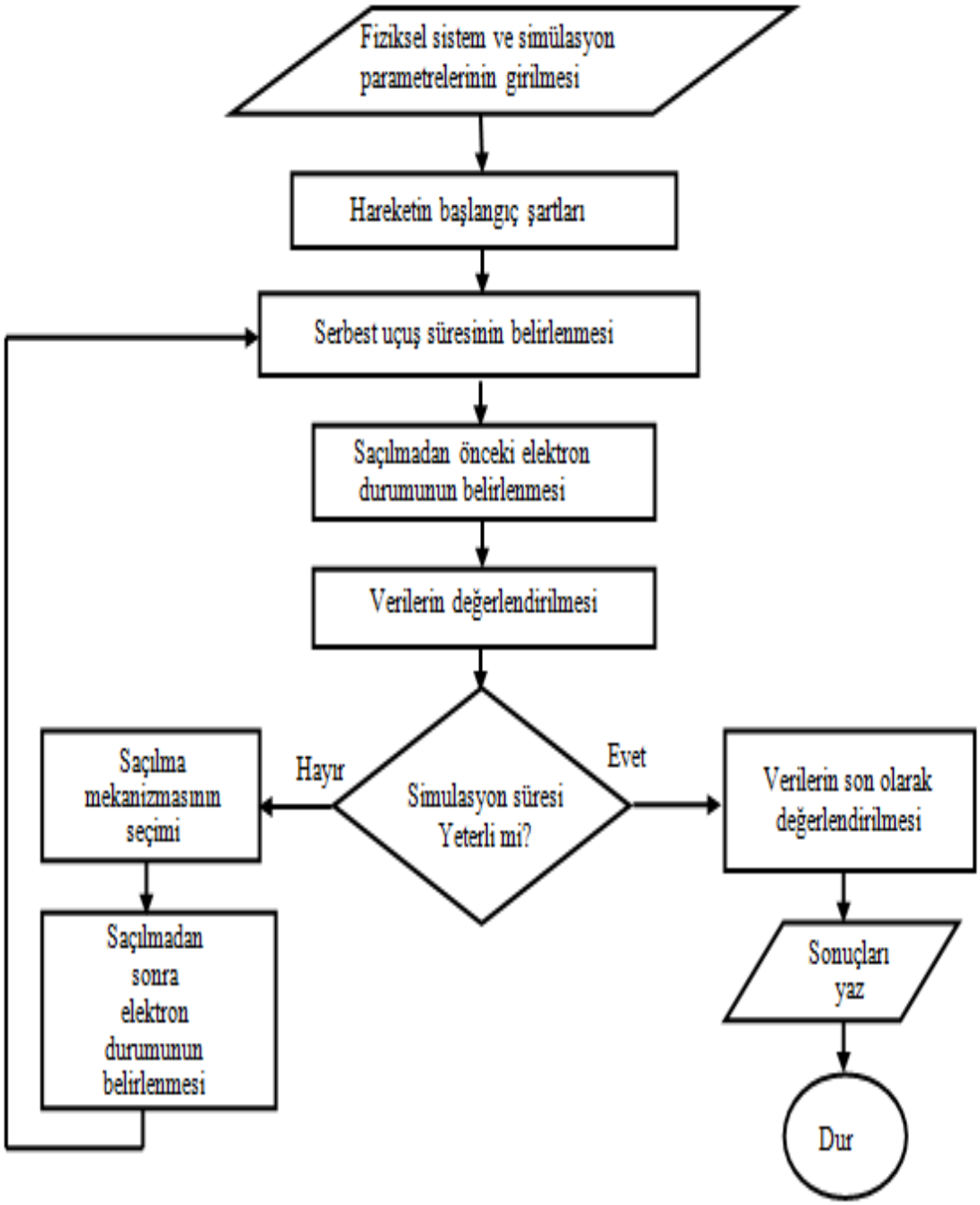
bağıntısına uygun olarak elektrik alan kuvvetine maruz kalır. Başlangıç durumu için enerji ve parçacığın hızı bulunur. Daha sonra parçacığın hareketinin sona ermesi için bir saçılma mekanizması kullanılmalıdır. Saçılma mekanizmasının seçimi gerçekleşebilecek bütün saçılma mekanizmaları göz önüne alınarak bu mekanizmaların bağıl olasılıklarına göre seçilir. Saçılma gerçekleştikten sonra elektron yeni bir k dalga vektörü ile temsil edilir ve bu dalga vektörü yeni saçılma mekanizmasına bağlı olarak seçilir. Bu saçılma işlemi ardı ardına tekrar edilir. Devam eden simülasyon ile daha doğru sonuçlar elde edilmesi olasılığı artar (Akarsu, 2003).

3.1. Tek Parçacık Monte Carlo Metodu

Bir yarı iletkende elektron hareketini incelemek zorlayıcı bir problemdir. Bunun sebebi yük taşıyıcılarının aralarında gerçekleşen etkileşimdir. Bu durumu çözebilmek için çok sayıdaki parçacık sistemini birbirinden bağımsız parçacıkların bir topluluğu olarak düşünmek kolaylık sağlar. Tek bir taşıyıcının malzeme içindeki davranışını incelemek, ve bu yük taşıyıcısının maruz kaldığı saçılmaları incelemek toplam yük taşıyıcılarının davranışını simüle edilmesini sağlar.

3.1.1. Taşıyıcı hareketinin simülasyonu

Monte Carlo metodunda yük taşıyıcısının davranışını incelemek için tek bir parçacığın momentum uzayındaki davranışı simüle edilir. Bunun için yük taşıyıcısının saçılma tipleri ve serbest uçuş için geçen süre rastlantısal olarak belirlenir. Bundan dolayı bir rasgele sayı dizisi simülasyon için üretilmelidir.



Şekil 3.1. Tek parçacık Monte Carlo metodu akış şeması

Simülasyon boyunca farklı sebeplerden ötürü kaynaklanan saçılmalar elektrik alan altında elektronların sürüklenmesi boyunca değerlendirilir (Jacoboni ve Reggiani 1983).

Elektron için serbest uçuş süresi farklı tipteki saçılmaların hızlarının toplamına bağlıdır. Saçılma hızlarına bakıldığında, bu saçılma hızlarının elektronun bir fonksiyonu olduğu görülür. Bundan dolayı parçacığın enerjisi de toplam saçılmanın bir fonksiyonudur. Bir elektronun τ süresi boyunca hareketi ve hareketi sonunda birim zaman başına saçılma olasılığı $P(\tau)$;

$$P(\tau) = W_T(E_k)\exp\left[-\int_0^{\tau} W_T(E_k)d_t\right] \tag{3.2}$$

denklemi ile gösterilir. Burada $W_T(E_k)$ toplam saçılma hızıdır.

$$W_T(E_k) = \sum_{j=1}^{N} W_j(E_k) \tag{3.3}$$

Burada j alt simgesi, bir saçılma mekanizmasını belirtir ve N olası saçılma mekanizması için 1,2,3,…,N değerlerini alır. Uçuş süresini belirlemek için Denklem 3.1 den yararlanır ve 0 ve 1 arasında homojen dağılmış rastgele bir r_l sayısıyla belirtilen $P(\tau)/W_T(E_k)$ için τ belirlenmelidir. Ancak integral her $W_j(E_k)$ 'nın karmaşıklığından dolayı analitik olarak çözülemez. Bundan dolayı alternatif bir metod kullanılır. Saçılma hızı $W_0(E_k)$ olan ve $\vec{k}$ parçacığın dalga vektöründe farklılık oluşturmayan kendiliğinden saçılma tipi belirlenir ve yeni toplam saçılma hızı Λ sabittir.

$$W_0(E_k) = \Lambda - \sum_{j=1}^{N} W_j(E_k) \tag{3.4}$$

$$\Lambda = \sum_{j=0}^{N} W_j(E_k) \tag{3.5}$$

biçiminde iki farklı şekilde gösterilebilir.

Bu sayede (3.1) Denklemi;

$$P(\tau) = \Lambda \exp(-\Lambda\tau) \tag{3.6}$$

biçiminde yazılabilir. Son olarak uçuş süresi;

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

denklemi ile belirlenir. İlgilenilen enerji aralığında negatif bir $W_0(E_k)$ değerinden kaçınmak için sabit Λ, $W_0(E_k)$ 'nın en büyük değerinden daha büyük olarak alınır. Ancak, daha küçük bir Λ değeri kendiliğinden saçılma olaylarının sayısını minimuma indirmek için istenir. Elektronun serbest uçuş zamanına sahip olunduğu için, hareket denklemine bağlı olarak sürüklenme sürecini hesaplamaya imkan sağlar (Jacoboni ve Lugli, 1989).

Elektron serbest uçuşundan sonra saçılma mekanizmalarından biri tarafından, kendiliğinden saçılmalar da dahil, tekrar saçılacaktır. Saçılma hesaplamalarında, elektronun hangi saçılma mekanizması ile saçıldığı öncelikli olarak belirlenmeli, daha sonra elektronun saçılmalar sonrasındaki durumu belirlenmelidir.

Parçacık için gelişigüzel bir dalga vektörü, başlangıç koşulu olarak seçilir ve simülasyon bu şekilde başlar. Aynı zamanda parçacığın tekrar eden hareketleri ve birçok saçılma mekanizması oluşana kadar devam eder. Toplam parçacığın hareketi için geçen süre, başlangıçtaki parçacık durumunun etkisinin minimum olabilmesi için uzun seçilmelidir. Bu sayede simülasyon sonuçları daha doğru hale gelmeye yaklaşır.

3.1.2. Sürüklenme süreci

Eğer elektronun potansiyel enerjisi elektronun pozisyonuna bağlı olarak değişiyorsa, yarıiletken içindeki taşıyıcıların sürüklenme davranışı yarı-klasik olarak ele alınabilir. Bundan dolayı yük taşıyıcıları kristal içerisinde etkin kütleli bağımsız taşıyıcılar olarak düşünülür.

Elektronun hareketini gösteren eşitlikleri göz önünde bulundurarak, uçuş süresi τ sürecinde dalga vektöründeki değişim, zamana bağlı olarak hareket denkleminin integrasyonu ile elde edilir. Bu yüzden;

$$\Delta\mathbf{k} = -\frac{1}{\hbar}\int_{t}^{t+\tau}\nabla H dt' \tag{3.8}$$

burada H, -e yüklü elektronun toplam enerjisidir ve aşağıdaki gibi elde edilir;

$$H = E_k - eV(\mathbf{r}) \tag{3.9}$$

Burada E_k elektronun kinetik enerjisi, $V(\mathbf{r})$ elektrostatik potansiyeldir. Eğer bir elektrik alan malzemeye uygulanırsa, çözüm;

$$\Delta\mathbf{k} = -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar}\tau \tag{3.10}$$

olur.

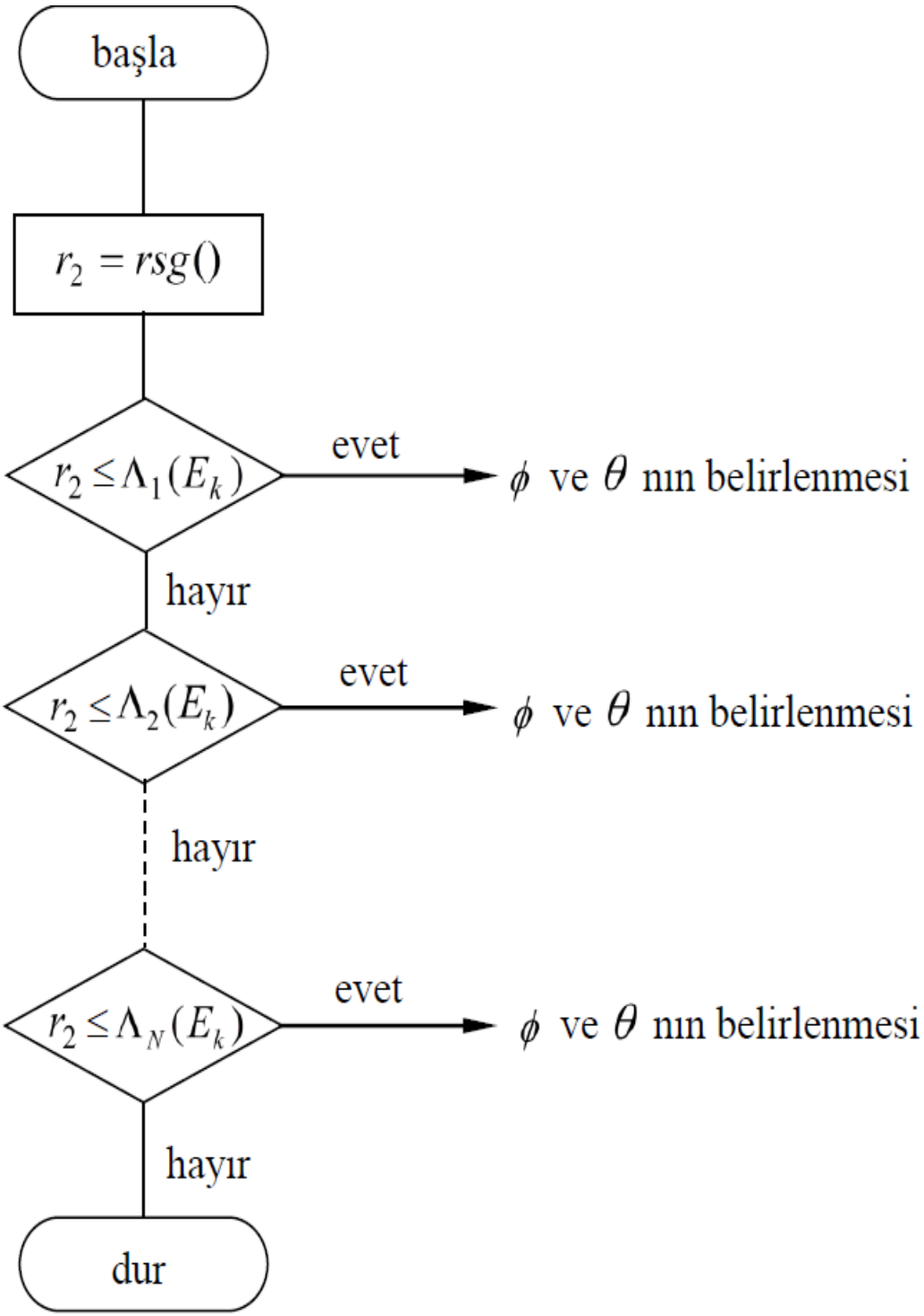
3.1.3. Saçılma süreci

Saçılma süresinde saçılma tipi $\Lambda_n(E_\mathbf{k})$ ifadesinden yola çıkarak elde edilebilir. Öncelikle saçılmanın tipi belirlenir ve daha sonra taşıyıcının ne durumda olduğu tespit edilir.

$$\Lambda_n(E_k) = \frac{\sum_{j=1}^{n}(E_\mathbf{k})}{\Lambda} \qquad n = 1,2,\ldots..N \tag{3.11}$$

bu ifade saçılma hızlarının Λ ile normalize olmuş toplam saçılma hızlarını verir.

Enerjisi $E_\mathbf{k}$ olan bir parçacık düşünülerek saçılma tipini belirlerken yeni bir gelişigüzel sayı sıfır ile bir arasında belirlenerek yapılır. Gelişigüzel seçilen sayı burada r_2 olarak gösterilmiştir.



Şekil 3.2. Saçılma tipi seçimi için akış şeması

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

Burada n saçılma tipini temsil eder. Denklem (3.11) kullanılarak seçilen rastsal sayı r_2 karşılaştırılır ve hangi saçılma tipinin rol oynayacağı seçilir.

Saçılmadan sonraki durumu belirlemek için $\mathbf{k}'$ olarak ifade edilen saçılma sonrasındaki taşıyıcının dalga vektörünün bilinmesi gereklidir. Bunu yapabilmek için $\mathbf{k}'$ vektörünün büyüklüğü ve doğrultusu bulunmalıdır. $\mathbf{k}'$ vektörünün doğrultusunu kartezyen koordinatlardaki bileşenleri yardımıyla bulmak mümkündür. Vektörün büyüklüğünü bulurken ise enerji korunumundan yola çıkmak gerekmektedir.

Ele alınan taşıyıcı saçılma sürecinden sonra bütün doğrultular için bulunma olasılığı aynı olarak düşünülür. Bundan dolayı $P(\emptyset', \theta')d\emptyset' d\theta'$ olarak verilen olasılık yoğunluğu hesaba katılmalıdır. Burada $\mathbf{k}'$ vektörünün bileşenlerini hesaplarken labratuvar koordinat sistemi düşünerek koordinatları k_x^L , k_y^L , k_z^L şeklinde yazmak kolaylık sağlar. Bu çerçeve düşünüldüğünde $\emptyset'$ ve θ' sırasıyla k_z^L eksenine göre $\mathbf{k}'$ vektörünün sahip olduğu azimut ve kutup açısıdır. $\emptyset'$ ve θ' değerlerinin bulunabilmesi için, sıfır ve bir arasında iki yeni ayrı sayı belirlenmelidir. Burada bu sayılar r_3 ve r_4 olarak verilmiştir.

$$\emptyset' = 2\pi r_3 \tag{3.13}$$

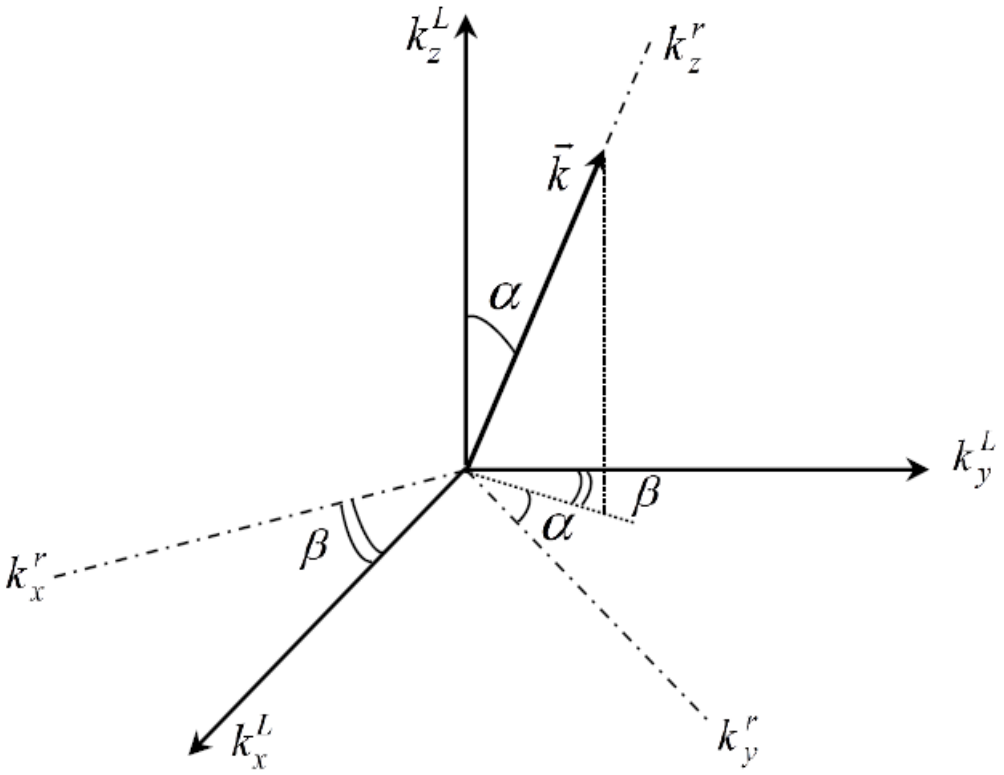
$$\cos\theta' = 1 - 2r_4 \tag{3.14}$$

(3.12) ve (3.13) Denklemlerindeki açıları bulmak için ise küresel koordinatlarda kullanılan bileşenlerin denklemleri kullanılır.

$$k_x' = k'\sin\theta'\cos\emptyset' \tag{3.15}$$

$$k_y' = k'\sin\theta'\sin\emptyset' \tag{3.16}$$

$$k_z' = k'\cos\theta' \tag{3.17}$$



Şekil 3.3. Laboratuvar sistemine göre koordinat sistemi

(3.14), (3.15) ve (3.16) Denklemleri saçılmadan sonra saçılacak parçacığın yönünün her yönde eşit olasılıkta saçılma olasılığı olduğu düşünüldüğü durumlarda geçerlidir. Safsızlık saçılmaları ve polar optik fonon gibi saçılmaların doğrultusu ise her yönde eşit olasılıkla gerçekleşmez. Bundan dolayı yeni denklemler belirlenmelidir. Bu denklemler belirlenirken Şekil 3.3 koordinat sistemi düşünülerek hareket edilir.

Ø belirlenirken, geçiş hızı Ø açısından bağımsız olduğu için aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$Ø = 2\pi r_3 \tag{3.18}$$

Θ kutup açısı safsızlıklardan kaynaklanan saçılmalar için,

$$\cos\Theta = 1 - \frac{2r_4}{1 + (1 - r_4)\left(\frac{2k}{q_D}\right)^2} \tag{3.19}$$

Denklemi ile belirlenir. Burada r_3 ve r_4 gelişigüzel olacak şekilde sıfır ve bir arasında seçilmiş sayıdır.

Kutupsal optik fonon saçılması düşünüldüğünde ise,

$$\cos\Theta = \frac{1 + f - (1 + 2f)^{r_4}}{f} \tag{3.20}$$

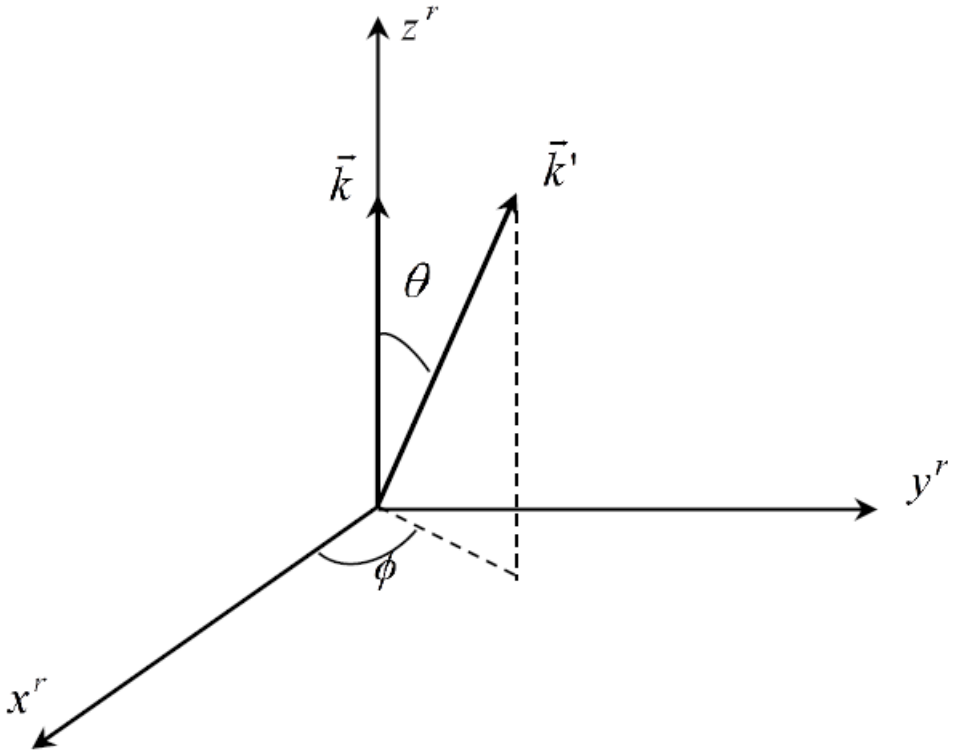
$$f = \frac{2\sqrt{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}}}{\left(\sqrt{E_{\mathbf{k}}} - \sqrt{E_{\mathbf{k}'}}\right)^2} \tag{3.21}$$

denklemleri ile verilir. E_k saçılma öncesindeki taşıyıcı enerjisi, $E_{k'}$ ise saçılmadan sonraki saçılma enerjisidir.

Her yönde aynı saçılma olasılığına sahip olmayan saçılmalar yani anizotiropik olan saçılmalarda, $\mathbf{k}'$ nün koordinatlarının bulunabilmesi için farklı bir yol izlenmelidir. Ø ve Θ açıları (3.18) ve (3.19) Denklemleri kullanılır.

Yeni izlenecek yolda laboratuvar için belirlenen koordinatlar yerine, taşıyıcı dalga vektöründeki değişimi bulmak için yeni $\mathbf{k}'$ dalga vektörünün k_z eksenine paralel olduğu düşünülen yeni bir koordinat sistemi kullanmak yerinde olacaktır. Yeni koordinat sistemi laboratuvar sisteminin k_x ekseni çevresinde α açısı, k_z etrafında ise β açısı kadar dönmesi ile bulunabilir.

Bu işlem için bir dönüşüm matrisi kullanılması gerekir. Yeni koordinat sistemi k_x^r, k_y^r, k_z^r olarak aşağıda verilir.



Şekil 3.4. k dalga vektörüne göre $\mathbf{k}'$ dalga vektörünün Θ ve Ø açılarının belirlenmesi

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta & -\sin\beta & 0 \\ \sin\beta & \cos\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.22}$$

Ø ve Θ son durum dalga vektörü $\mathbf{k}'$ 'nün ilk durum dalga vektörü **k** arasındaki sırası ile azimut ve kutup açılarıdır. Yeni koordinat sisteminde $(\mathbf{k_x^r}, \mathbf{k_y^r}, \mathbf{k_z^r})$, $\mathbf{k_x}, \mathbf{k_y}, \mathbf{k_z}$ bileşenleri,

$$k_x = k'\sin\Theta\cos\emptyset \tag{3.23}$$

$$k_y = k'\sin\Theta\sin\emptyset \tag{3.24}$$

$$k_z = k'\cos\Theta \tag{3.25}$$

biçiminde yazılabilir. Laboratuvar koordinat sistemi düşünülerek yazılan $\mathbf{k}'$ vektörü (3.21) Denklemindeki matrisin tersi ile çarpılarak elde edilir.

$$\begin{pmatrix} \cos\beta & \cos\alpha\sin\beta & \sin\alpha\sin\beta \\ -\sin\beta & \cos\alpha\cos\beta & \sin\alpha\cos\beta \\ 0 & -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \tag{3.26}$$

Burada sinüs ve kosinüs fonksiyonları, Şekil 3.3 ‘den yola çıkarak bulunabilir.

$$\mathrm{Sin}\alpha = \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k}, \qquad \cos\alpha = \frac{k_z}{k} \tag{3.27}$$

$$\sin\beta = \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}, \qquad \cos\beta = \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \tag{3.28}$$

Laboratuvar koordinat sisteminde saçıldıktan sonra taşıyıcının dalga vektörünü, son olarak,

$$\begin{pmatrix} k_x' \\ k_y' \\ k_z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x k_z}{k\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ -\frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y k_z}{k\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ 0 & \frac{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k'\sin\theta\cos\phi \\ k'\sin\theta\sin\phi \\ k'\cos\theta \end{pmatrix} \tag{3.29}$$

bulunur.

Eliptik bandlar düşünüldüğünde, parçacığın saçılma olasılığı her doğrultu için aynı olasılıkta olduğunda elipsoidal yüzeyleri küresel yüzeylere küçülten Herring-Vogt dönüşümü kullanılır.

$$\mathbf{k}^* = U\mathbf{k} \tag{3.30}$$

Burada U etkin kütledir ve aşağıdaki matris ile ifade edilir.

$$U = \begin{pmatrix} \left(\frac{m_f}{m_x^*}\right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_f}{m_y^*}\right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_f}{m_z^*}\right)^{1/2} \end{pmatrix} \tag{3.31}$$

Burada, $m_f = (m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/3}$, m_x^*, m_y^*, m_z^* değerleri, sırası ile x, y, ve z eksenleri üzerinden tanımlanan etkin kütlelerdir. Buradan yola çıkarak enerji yazılırsa;

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*}\right) = \frac{(\hbar k^*)^2}{2m_f} \tag{3.32}$$

olarak bulunur.

3.1.4. Hız hesabı

Taşınım sürecinde Boltzmann taşınım denkleminin çözülmesi gereklidir. Bu süreç için Monte Carlo yöntemini kullanmak büyük bir kolaylık sağlar. Taşıyıcı serbest uçuş zamanı bütün hacim elemanlarında, momentum uzayında bulunursa, sürüklenme hızının ortalaması ve parçacıkların enerjisinin ortalaması bir dağılım fonksiyonu yardımıyla bulunabilir. Yük taşıyıcısının her bir katı içerisindeki hareketini gözlemleyerek hız ortalamaları ve enerji ortalamaları belirlenebilir. Tüm taşıyıcı hareketi için bir ortalama alınır.

$$\boldsymbol{\nu} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \tag{3.33}$$

Denklemi anlık hız olarak verilir. T taşıyıcı uçuş zamanı süresince ortalama hız ise;

$$\langle \nu \rangle_\tau = \frac{1}{\hbar}\frac{\Delta E_{\mathbf{k}}}{\Delta \mathbf{k}} \tag{3.34}$$

Denklemi ile verilir. $\Delta E_{\mathbf{k}}$ ile $\Delta\mathbf{k}$ sırası ile yük taşıyıcısının enerjisi, $\mathbf{k}$ 'daki küçük değişimler olarak verilmiştir. Denklem (3.10) kullanılarak $\Delta\mathbf{k}$ ifadesi yalnız bırakılıp, (3.34) Denkleminde yerine yazılırsa, ortalama hız elektrik alan kullanılarak,

$$\langle \boldsymbol{\nu} \rangle_{\tau} = -\frac{\Delta E_{\mathbf{k}}}{eE\tau} \tag{3.35}$$

tekrardan yazılabilir.

Toplam taşıyıcı hızı ortalamasını bulmak istersek,

$$\langle \nu \rangle_{T} = \frac{1}{T}\langle \boldsymbol{\nu} \rangle_{\tau}\tau \tag{3.36}$$

$$= \frac{1}{eET}\sum \Delta E_{\mathbf{k}} \tag{3.37}$$

$$= -\frac{1}{eET}\sum (E_f - E_i) \tag{3.38}$$

biçiminde yazılabilir. E_f ve E_i sırasıyla son durum ve ilk durum enerjisidir.

Toplam ortalama taşıyıcı enerjisi ise,

$$\langle E \rangle_{T} = \frac{1}{T}\sum \langle E \rangle_{\tau}\tau \tag{3.39}$$

olarak elde edilir. Son olarak;

$$\langle E \rangle_{T} = \frac{E_f + E_i}{2} \tag{3.40}$$

yaklaşık olarak yazılabilir.

4.TAŞIYICI SAÇILMA MEKANİZMALARI

Bir yarı iletkenin kristal yapısı içindeki taşıyıcı hareketi Bloch Teoremi tarafından verilir. Bu teorem, periyodik bir potansiyelin varlığında, taşıyıcının dalga fonksiyonunun, bir hücre periyodik bileşeni tarafından modüle edilmiş bir düzlem dalga şeklinde yazılabileceğini belirtir. Böylece, tek parçacık modeli içinde, Schrödinger dalga denkleminin çözümleri taşıyıcı hareketi;

$$\Psi_{n,k}(\mathbf{r}) = U_{n,k}(\mathbf{r})e^{\mathbf{ikr}} \tag{4.1}$$

Bloch fonksiyonu olarak bilinen formda verilir. Burada **k** ve **r** sırasıyla, dalga vektörü ve gerçek uzay konum vektörünü, n ise hücre periyodik fonksiyonu $U_{n,k}(\mathbf{r})$ 'nin bant indisini verir.

İdeal bir periyodik potansiyelde parçacık hareketi için saçılma olmaz. Gerçekte ise, kristal potansiyelinin periyodikliği, bir taşıyıcının momentumunu ve kinetik enerjisini değiştirebilen kuantum mekanik saçılma mekanizmalarının temelini oluşturan rastgele pertürbe potansiyeller tarafından bozulur.

4.1. Fermi Altın Kuralı

Kuantum fiziğinde Fermi'nin altın kuralı, zayıf bir pertürbasyonun sonucu olarak bir kuantum sisteminin bir enerji öz durumundan başka bir enerji öz durumuna geçiş oranını (birim zaman başına geçiş olasılığı) açıklayan bir formüldür.

$H^{/}$ büyüklüğünün hamiltonyeninin petürbasyonundan dolayı bir taşıyıcının $\psi(\mathbf{k},\mathbf{r})$ durumundan $\psi(\mathbf{k}^{/},\mathbf{r})$ durumuna geçişinin birim zamandaki saçılma oranı, birinci dereceden pertürbasyon teorisi olarak;

$$S(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar}|<\mathbf{k}'|H'|\mathbf{k}>|^2\delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega) \tag{4.2}$$

verilir. Burada k' ve k durum vektörleridir. Burada Kronecker-delta fonksiyonu δ, başlangıç enerjisi $E_k$ve son durum enerjisi $E_{k'}$ arasındaki enerji korunumunu verir. ħ burada Planck sabiti ω ise fonon frekansıdır (Moglestue, 1993). Bu denklem Fermi altın kuralı olarak adlandırılır. ħω ise yayınım veya soğurma olayları sırasındaki fonon enerjisidir. Fermi altın kuralından yola çıkarak saçılma oranına ulaşılabilir. Bunun için H' Fourier serisine açılır.

$$H' = \sum_{\mathbf{q}} U_q \exp(i\mathbf{q}.\mathbf{r}) \tag{4.3}$$

H' beklenen değeri ifadesi yazılır ve Denklem (4.3) içine yazılırsa,

$$< \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k} > = \int_{\Omega} U^*_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q}.\mathbf{r})\, U_{\mathbf{k}}(r) \exp(i\mathbf{k}.\mathbf{r}) d_{\mathbf{r}} \tag{4.4}$$

$$< \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k} > = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} \int_{\Omega} U^*_{\mathbf{k}'}(r) U_{\mathbf{k}}(r) \exp[i(\mathbf{q} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}).\mathbf{r}]\, d_r \tag{4.5}$$

Burada $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ haricindeki $\mathbf{q}$ değerleri integre edilirse, değeri 0 olur. Bunun sebebi üstel fonksiyonun kendini tekrar eden bir fonksiyon olmasıdır. Bu sebeple matris elemanı;

$$< \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k} > = U_q I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\mathbf{q} + \mathbf{k} - \mathbf{k}') \tag{4.6}$$

$$< \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k} > = U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tag{4.7}$$

biçiminde elde edilir. $I(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ faktörü örtüşme integralidir ve yalnızca H' değerinin uzamsal değişiminin Bloch fonksiyonunun periyodik bileşenine kıyasla yavaş olması koşuluyla geçerlidir. S-benzeri orbitallerden kaynaklanan ve küresel ve parabolik bantları kabul eden iletim bantları durumu için, $I(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ yaklaşık bir değerini alır.

$$I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int_{\Omega} U^*_{k'}(\mathbf{r}) U_k(\mathbf{r}) d_{\mathbf{r}} \tag{4.8}$$

şeklinde yazılabilir. $U_{\mathbf{k'-k}}$ ise aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$U_{\mathbf{k'-k}} = \int_{\Omega} \exp(-i\mathbf{k'}.\mathbf{r})\, U(\mathbf{r},t) \exp(i\mathbf{k}.\mathbf{r}) \mathbf{d_r} \tag{4.9}$$

$$< \mathbf{k'}|H'|\mathbf{k} > \cong \int_{\Omega} \exp(-i\mathbf{k'}.\mathbf{r})\, U(\mathbf{r},t)\, \exp(i\mathbf{k}.\mathbf{r})\, \mathbf{d_r} \tag{4.10}$$

biçiminde tekrar yazabiliriz.

Bu durumda düzlem dalgalar, neredeyse parabolik biçimli bandlar için pertürbe edilmemiş haller şeklinde değerlendirilebilir.

Fermi altın kuralı ile verilen $S(\mathbf{k},\mathbf{k'})$ değerinin integrali $\mathbf{k'}$ değerine bağlı olarak alınırsa;

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\mathbf{k},\mathbf{k'}) \mathbf{d_{k'}} \tag{4.11}$$

değerler yerine konursa;

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int | < \mathbf{k'}|H'|\mathbf{k} > |^2 \delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar\omega) \mathbf{d_{k'}} \tag{4.12}$$

saçılma hızı elde edilmiş olur. Parabolik olmayan band için;

$$|I(\mathbf{k},\mathbf{k'})|^2 = (a_k a_{k'} + c_k c_{k'} \cos\Theta)^2 \tag{4.13}$$

ifadesi şeklindedir. Θ burada $\mathbf{k}$ ve $\mathbf{k'}$ arasındaki açıdır. A_k ve c_k ise;

$$a_k = \left[\frac{1+\alpha E(k)}{1+2\alpha E(k)}\right]^{1/2} \tag{4.14}$$

$$c_k = \left[\frac{1+\alpha E(k)}{1+2\alpha E(k)}\right]^{1/2} \tag{4.15}$$

şeklinde verilir. Burada α parabolden sapma faktörü,

$$\alpha = \frac{1}{E_g}\left[1 - \frac{m^*}{m_0}\right] \tag{4.16}$$

biçimindedir. Son olarak δ fonksiyonu da hesaba katılmalıdır.

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} S(\mathbf{k},\mathbf{k}')d_{k'}d_{\theta}d_{\emptyset} \tag{4.17}$$

Malzemelerde, etkin kütle sürekliliği olan bir ortam varlığı düşünülerek hesaplandığı için W(**k**), Ø açısına bağlı olmaktan çıkar. Bundan dolayı ifade aşağıdaki gibi yazılabilir.

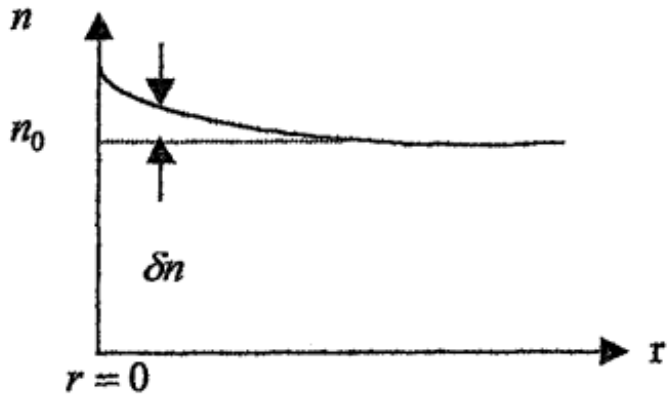
$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^{\pi}\int_0^{0} S(\mathbf{k},\mathbf{k}')d_{k'}d_{\theta} \tag{4.18}$$

4.2. İyonize Safsızlık Saçılması

İyonize safsızlık saçılması, doğası gereği elastiktir ve bir dış alanın mevcudiyetinde taşımayı kendi başına kontrol edemez. Uygun enerji dağılımını elde etmek için bazı enerji tüketen saçılma mekanizmaları eşlik etmelidir. İyonize safsızlık için saçılma kaynağı, bir Coulomb perdeleme potansiyelidir. Bunun nedeni, donör safsızlık atomunun kütlesinin bir elektronunkinden çok daha büyük olmasıdır. Sonuç olarak, böyle bir saçılma işlemi sırasında elektron enerjisinin değişimi, saçılmadan önceki elektron enerjisine kıyasla ihmal edilebilir düzeydedir.

Boşlukta tek bir yük bir Coulomb yasasına uyacak şekilde elektrostatik potansiyel oluşturur. Ancak safsızlıkların oluşturduğu potansiyel malzemenin içindeyken serbest taşıyıcıların sayısına bağlıdır. Saçılma perdeleme potansiyelinden dolayı Conwell-Weisskopf ve Brooks-Herring yaklaşımları kullanılarak başlangıçta incelenir.

Öncelikle yarıiletken termal dengedeyken perdeleme potansiyeli belirlenir. Hareketli yük taşıyıcıları ve iyonize haldeki safsızlıkların hareketinden kaynaklanan elektrostatik potansiyeli bulmak için, orijinde yükü Ze olan ve orijine uzaklığı δ_n ile gösterilen pozitif bir yük düşünülürse, yük nötralliği bu nokta civarında pertürbe edilir. $\delta_n = n - N_D^+$ kadar elektron yoğunluğu artar. Bu durum Şekil 4.1 'de gösterilmiştir.



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

Küresel koordinatlarda etkin elektrostatik potansiyel;

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dV}{dr}\right) = \frac{e}{\varepsilon_s}[Z\delta(r) - \delta_n] \tag{4.19}$$

Poisson denklemi çözerek bulunur. Burada r ve ε_s sırasıyla orijinden uzaklık ve statik dieletrik sabitidir. Dengedeki elektron yoğunluğu n_0 olursa klasik dağılım fonksiyonu kullanılarak T_L sıcaklığında δ_n,

$$\delta_n = n_0 \exp\left(\frac{eV}{k_B T_L}\right) - n_0 \approx \frac{en_0}{k_B T_L} V \tag{4.20}$$

olur. (4.18) ve (4.19) eşitlikleri birleştirilirse;

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dV}{dr}\right) - q_D^2 V = -\frac{Ze}{\varepsilon_s}\,\delta(r) \tag{4.21}$$

bulunur.

$$Q_D = \sqrt{\frac{e^2 n_0}{\varepsilon_s k_B T_L}} \tag{4.22}$$

olarak verilir. Q_D Debye uzunluğunun tersidir.

(4.21) eşitliğinin özel çözümü,

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_s r}\exp\left(-q_D r\right) \tag{4.23}$$

şeklindedir. Bu ifade perdelenmiş Coulomb potansiyelidir. Bundan dolayı pertürbasyon potansiyeli;

$$H' = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_s r}\exp\left(-q_D r\right) \tag{4.24}$$

H' (4.10) Denkleminde yerinde yazılırsa;

$$< \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k} > \cong \frac{1}{\Omega}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_s}\int_{\Omega}\exp(-i\mathbf{k}'.\mathbf{r})\frac{\exp\left(-q_D r\right)}{r}\exp(i\mathbf{k}.\mathbf{r})\,\mathbf{d_r} \tag{4.25}$$

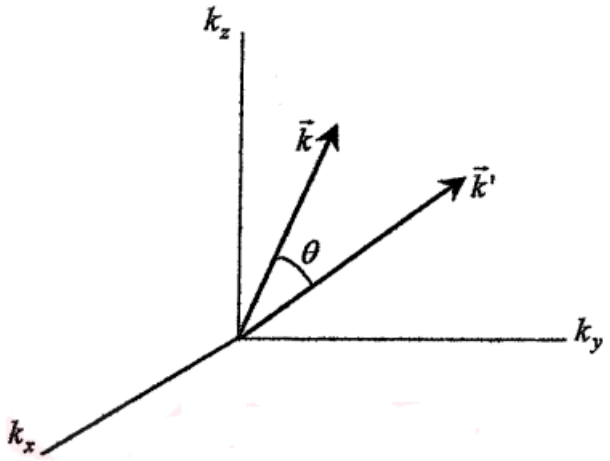
bulunur. Ω hacmi üzerinden integrali alınırsa,

$$< \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k} >= \frac{Ze^2}{\Omega\varepsilon_s}\frac{1}{|\mathbf{q}|^2 + q_D^2} \tag{4.26}$$

olur. $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ değeri, momentum korunumu ile orantılı olur. (4.2)' de (4.26) Denklemi yazılırsa;

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{Ze^2}{\Omega\varepsilon_s}\right)^2 \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{(q^2 + q_D^2)^2} \tag{4.27}$$

elde edilir. δ – fonksiyonu, perdelenmiş Coulomb potansiyeli zamandan bağımsız olmasından dolayı, saçılma sürecinde elektronun enerjisinin korunduğunu göstermektedir.



Şekil 4.2. Θ, **k**, **k**′ arasındaki kutup açısı

$\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ olduğu için,

$$q^2 = (\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 = 2k^2(1 - \cos\Theta) \tag{4.28}$$

olur.

$N_s\Omega$ toplam Ω hacmindeki safsızlık sayısı olarak alınır ve Denklem (4.27) ile çarpılırsa;

$$\frac{2\pi}{\hbar}\frac{N_S Z^2 e^4}{\Omega\varepsilon_s^2}\frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - cos\Theta) + q_D^2]^2} \tag{4.29}$$

Denklemi elde edilir. Saçılma hızı bu durumda (4.29) Denklemi (4.11) 'de yerine yazılırsa $W(\mathbf{k})$,

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{N_S Z^2 e^4}{\varepsilon_s^2 \Omega}\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} d\emptyset \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} dk' \frac{k'^2 \sin\theta \delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1-\cos\theta)+q_D^2]^2} \tag{4.30}$$

olarak bulunur. İfade daha sonra;

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{N_S Z^2 e^4}{\varepsilon_s^2 \Omega}\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} dk' \frac{k'^2 \sin\theta \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}})}{[2k^2(1-\cos\theta)+q_D^2]^2} \tag{4.31}$$

k uzayında $E_{\mathbf{k}}$ ile $E_{\mathbf{k}} + dE_{\mathbf{k}}$ enerji aralığında hacim $4\pi^2 k^2 d_k$ olduğundan integralde bulunan $\Omega 4\pi k'^2 d_{k'}/(2\pi)^3$ ifadesi, $N(E_{\mathbf{k}'})dE_{\mathbf{k}'}$ yerdeğiştirilir. $N(E_{\mathbf{k}'})$ ifadesi birim enerji başına düşen son durumların yoğunluğudur. Bu durumda integral, $E_{\mathbf{k}'}$ 'ne göre alınabilir.

$$W(k) = \frac{\pi N_s Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \varepsilon_s^2}\int_{-1}^{1} \frac{d(cos\theta)}{[2k^2(1-cos\theta)+q_D^2]^2} \tag{4.32}$$

integrali alındığında,

$$W(k) = \frac{\pi N_s Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \varepsilon_s^2}\frac{1}{q_D^2(4k^2+q_D^2)} \tag{4.33}$$

denklemi ile saçılma hızı iyonize safsızlıklar için yazılabilir.

$$N(E_{\mathbf{k}}) = \frac{(2m^*)^{3/2}\sqrt{E_{\mathbf{k}}}}{4\pi^2\hbar^3} \tag{4.34}$$

eşitliği yukarıda söylenen durum yoğunluğu ifadesidir.

Elektronun son durumunu belirlemek için geçiş hızı belirlenmelidir. İyonize safsızlıklar için geçiş hızı Ø azimut açısından bağımsız olduğundan kutup açısı Θ, ile 2π arasında rastgele bir sayı olarak seçilir. Θ ve dΘ arasında bulunan bir açıya göre saçılma olasılığı (4.32) Denklemi kullanılarak;

$$P(\Theta)\mathrm{d}\Theta = \frac{\pi N_s Z^2 e^4 N(E_{\mathbf{k}})}{\hbar \varepsilon_s^2} \frac{sin\Theta \mathrm{d}\Theta}{[2k^2(1-cos\Theta)+q_D^2]^2} \tag{4.35}$$

biçiminde yazılır.

(3.35) ifadesi 0' dan Θ 'ya integrali alınır ve saçılma hızına bölünürse

$$\frac{\mathrm{W}(\Theta)}{\mathrm{W}(\mathbf{k})} = \frac{1}{\mathrm{W}(\mathbf{k})} \int_0^{\Theta} \mathrm{P}(\beta)\mathrm{d}\beta \tag{4.36}$$

$$= \int_{-1}^{\cos\Theta} \frac{\mathrm{q_D^2}(4\mathrm{k}^2+\mathrm{q_D^2})}{2[2(1-\eta)\mathrm{k}^2+\mathrm{q_D^2}]^2}\mathrm{d}\eta \tag{4.37}$$

şeklinde bulunabilir. İntegral alındıktan sonra;

$$\frac{\mathrm{W}(\Theta)}{\mathrm{W}(\mathbf{k})} = \frac{(1-\cos\Theta)\left[1+\left(\frac{2\mathrm{k}}{\mathrm{q_D}}\right)^2\right]}{2+(1-\cos\Theta)\left(\frac{2\mathrm{k}}{\mathrm{q_D}}\right)^2} \tag{4.38}$$

$W(\Theta)/\mathrm{W}(\mathbf{k})$ değeri, sıfırdan büyük olmasından dolayı ve Θ açısının artmasından dolayı Denklem (4.38) 0 ve 1 arasında düzgün dağılmış gelişigüzel olacak şekilde bellli bir sayıya eşitlenerek aşağıdaki gibi bulunur (Kazutaka T, 1993).

$$\cos\Theta = 1 - \frac{2\mathrm{r}}{1+(1-\mathrm{r})\left(\frac{2\mathrm{k}}{\mathrm{q_D}}\right)^2} \tag{4.39}$$

4.3. Fonon Saçılması

Fononlar, kristal yapıdaki bir malzemede titreşimlerin veya dalga hareketlerinin kuantum mekaniği ile açıklanan temel birimlerdir. Fononlar, malzemenin ısı iletimi, elektriksel iletkenlik, termal genleşme gibi fiziksel özelliklerini anlamak için önemlidir.

Fononlar, atomlar arasındaki bağları ve yerel ortamlardaki malzeme özelliklerini etkileyen titreşimlerin kuantum mekaniksel dalga fonksiyonları olarak düşünülür. Bu dalga fonksiyonları, malzeme içindeki atomların titreşimlerini ve enerji dağılımını tanımlar. Fononların enerji seviyeleri, Planck'ın enerji kuantizasyon ilkesine tabidir.

Fononlar, katıların termal davranışını anlamak için kullanılır ve malzemelerin ısı iletkenliği, elektriksel iletkenlik ve elektron-fonon etkileşimleri gibi özelliklerini etkilerler. Fononlar ayrıca malzeme tasarımı ve yarıiletkenler gibi birçok uygulamada önemlidir. Bu nedenle fononlar, katı hal fiziği ve malzeme biliminde önemli bir yere sahiptir.

İki farklı fonon modu vardır. Bunlar akustik fonon ve optik fonon modlarıdır. Optik fononlar, kristal yapının yüksek frekansta titreşen modlarını temsil ederler.

Optik fononlar genellikle malzemenin optik özellikleriyle ilgilidir. Işıkla etkileşimleri, malzemenin dielektrik sabiti ve optik dağılımı üzerinde etkili olabilir. Optik fononların hareketi, kristal içerisinde birbirine zıt olacak şekildedir. Bundan dolayı bu zıt yönlü hareket yüzünden optik fononlar örgüde değişikliğe neden olabilirler.

Akustik fononlar, kristal yapının düşük frekansta titreşen modlarını temsil ederler. Akustik fononlar, kristal yapının düşük frekansta titreşen modlarıdır. Bu titreşimler, malzeme içindeki atomların elastik deformasyonlarından kaynaklanır. Akustik fononlar, malzemenin temel titreşimlerini temsil ederler ve bu nedenle frekansları genellikle daha düşüktür. Akustik fononlar, ses dalgalarıyla benzer özelliklere sahiptir ve malzemenin ses iletimi ve mekanik özellikleri üzerinde etkilidirler. Bu nedenle akustik fononlar, sesin iletimi gibi olayları etkiler. Akustik fononlarda, kristaldeki atomlar birbirleri ile aynı yönde hareket ederler.

4.4. Akustik Fonon Saçılması

Bir kristal içerisindeki atomlar titreştiklerinde normal mod titreşimlerinin süperpozisyonu olarak ele alınır. Her normal mod birbirinden bağımsız olarak bir harmonik osilatöre benzer şekilde titreşirler ve bu titreşimler kuantize olarak ele alınır. Bu kuantaya fonon denir. Fononlar kuantum mekaniğinde yaratma ve yok etme operatörleri olarak bilinen, $a_{\mathbf{q}}^{+}$ ve $a_{\mathbf{q}}$ operatörleri ile elde edilir. Herhangi bir t anında **r** noktasındaki yer değiştirmeye bakıldığında;

$$\mathbf{u}(\mathbf{r},t)=\sum_{\mathbf{q}}\left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\mathbf{q}}}\right)^{\frac{1}{2}}\mathbf{e}_{\mathbf{q}}\left(a_{\mathbf{q}}+a_{\mathbf{q}}^{+}\right)\exp\left(i\mathbf{q}.\mathbf{r}\right) \tag{4.40}$$

denklemi ile verilir. Burada ρ, Ω, $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$, **q** ve $w_{\mathbf{q}}$, sembolleri sırasıyla, malzeminin yoğunluğu, kristalin toplam hacmi, polarizasyon birim vektörü, dalga vektörü ve titreşimin açısal frekansı olarak verilmiştir.

Dalga boyu uzun olan akustik fononlarda;

$$\frac{w_q}{q}=v_s=\sqrt{\frac{c_l}{\rho}} \tag{4.41}$$

bağıntısı ile dispersiyon yasası elde edilir. Burada v_s ve c_l sembolleri sırasıyla boyuna elastik dalga hızı ve malzemenin elastik sabiti olarak verilmektedir. Bu durumda denge konumunda bulunan malzemedeki iyonların salınımları, malzemenin enerji bandında anlık değişimlere neden olur. Bu salınımlar yük taşıyıcılarının saçılmasına sebep olmaktadır.

Enerji bandındaki değişimlerin örgü sabitindeki değişimler ile orantılı olduğu söylenebilir. Örgüdeki değişim ile oluşan gerilmeyi, $\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$ ifadesi ile gösterebiliriz. Bu sayede akustik fononlar için etkileşme potansiyelini;

$$H'=\Xi_d\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{u}(\mathbf{r},t) \tag{4.42}$$

biçiminde yazarız. Ξ_d ile gösterilen ifade burada deformasyon potansiyelini temsil etmektedir. (4.40) Denkleminde (4.42) Denklemi yerine yazılırsa;

$$H' = \sum_{\mathbf{q}} iq\Xi_d \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\mathbf{q}}}\right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{e_q} \left(a_{\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}}^{+}\right) \exp\left(i\mathbf{q}.\mathbf{r}\right) \tag{4.43}$$

Denklemi elde edilir. Buradaki dalga vektörü polarizasyon vektörüne paralel olduğu düşünülerek $\mathbf{q}.\mathbf{e_q} = q$ olarak kullanılırsa pertürbasyon potansiyelinin matris elemanını,

$$< \mathbf{k}', n_{\mathbf{q}} - 1|H'|\mathbf{k}, n_{\mathbf{q}} >= iq\Xi_d \left(\frac{\hbar}{2\rho w_{\mathbf{q}}\Omega}\right)^{1/2} \sqrt{n_q}\,\delta(\mathbf{k}' - k - \mathbf{q}) \tag{4.44}$$

$$< \mathbf{k}', n_{\mathbf{q}} + 1|H'|\mathbf{k}, n_{\mathbf{q}} >= iq\Xi_d \left(\frac{\hbar}{2\rho w_{\mathbf{q}}\Omega}\right)^{1/2} \sqrt{n_q}\,\delta(\mathbf{k}' - k - \mathbf{q}) \tag{4.45}$$

$$n_{\mathbf{q}} = 1/\left[\exp\left(exp\,\hbar w_{\mathbf{q}}/k_B T\right) - 1\right] \tag{4.46}$$

olarak buluruz. Bose-Einstein dağılımına göre $n_{\mathbf{q}}$ toplam fonon saysısı, δ-fonksiyonu ise malzeme boyunca elektron ve fonon etkileşimlerinde kristalin momentumunun korunduğunu söyleyen fonksiyondur. Verilen denklemler Fermi altın kuralı kullanılarak yerine yazılır ve akustik fononların geçiş hızını soğurma ve yayınlanması için;

$$S(k, k') = \frac{\pi\Xi_d{}^2 q^2}{\rho w_{\mathbf{q}}\Omega}\left(n_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)\delta(k' - k \pm q)\,\delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar w_{\mathbf{q}}) \tag{4.47}$$

olarak elde edilir.

$$E_{k'} = E_k \pm \hbar w_{\mathbf{q}} \tag{4.48}$$

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \tag{4.49}$$

$\hbar w_{\mathbf{q}}$ ve **q** sırasıyla kristaldeki fonon enerjisi, fonon dalga vektörü olarak verilir. Malzemenin enerji bandının parabolik veya küresel olması durumunda enerji korunumu;

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar w_{\mathbf{q}} \tag{4.50}$$

ifadesi biçiminde yazılabilir. δ-fonksiyonlarını birleştirmek için 4.48 denklemi, 4.49' da yerine yazılırsa;

$$\delta(k' - k \pm q)\delta\left(E_{k'} - E_k \pm \hbar w_{\mathbf{q}}\right) = \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq\cos\Theta'}{m^*} \pm \hbar w_{\mathbf{q}}\right) \tag{4.51}$$

Θ' bu denklemde kutup açısıdır. Bu durumda;

$$\cos\Theta' = \frac{1}{2}\left(\pm\frac{q}{k} + \frac{\hbar w_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{k}}}\frac{k}{q}\right) \tag{4.52}$$

(4.52) Denkleminde Θ açısı fononun soğurma ve yayınlanma esnasındaki momentumunun açısal frekansına bağlı durumu arasında olan açıdır ve Şekil.4.3' de verilmiştir.



Şekil.4.3. Θ' **k** ve **q** arasındaki kutup açısı, Θ, **k** ve $\mathbf{k}'$ arasında kalan kutup açısı olmak üzere, sol taraf soğurmayı, sağ taraf yayınımı göstermektedir.

Oda sıcaklığında akustik fononların enerjisi $k_B T$ enerjisinden oldukça küçük olmasından dolayı $\hbar w_{\mathbf{q}}$ akustik fonon enerjisi sıfır kabul edilerek saçılmanın elastik olduğu kabul edilir. Bundan dolayı, Denklem (4.48) de enerji değişmez olarak alınır. Bu sayede,

$$n_q \approx \frac{k_B T_L}{\hbar w_{\mathbf{q}}} \tag{4.53}$$

olarak kabul edilebilir. Bu sayede $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ifadesi;

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi \Xi_d{}^2 k_B T_L}{\hbar c_l \Omega} \frac{k}{q E_{\mathbf{k}}} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) \tag{4.54}$$

bulunur. Bu denklem saçılmadaki iki durumu da içerir. Bu durumda saçılma hızı;

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\mathbf{k}' \tag{4.55}$$

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Xi_d{}^2 k_B T_L}{8\pi^2 \hbar c_l} \frac{k}{E_k} \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\mathbf{q} \tag{4.56}$$

integral daha sonra;

$$\mathbf{I}_q = \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\mathbf{q} \tag{4.57}$$

$$\mathbf{I}_q = \int_0^{\infty} \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\emptyset d(\cos\theta') q dq \tag{4.58}$$

(4.52) Denklemi kullanılarak q değerinin minimumu ve maksimumu bulunabilir.

$$\begin{aligned} q_{min} &= 0 \\ q_{max} &= 2k \end{aligned} \tag{4.59}$$

Bu sayede;

$$I_q = 2\pi \int_{q_{min}}^{q_{max}} qdq = \pi(q_{max}^2 - q_{mn}^2) = 4\pi k^2 \quad (4.60)$$

Bu durumda saçılma hızı;

$$W(\mathbf{k}) = \frac{2\pi \Xi_d{}^2 k_B T_L}{\hbar c_l} N(E_{\mathbf{k}}) \quad (4.61)$$

olarak bulunur.

4.5. Kutupsal Olmayan Optik Fononların Saçılması

Kutupsal olmayan optik fonon saçılması, deformasyon potansiyeli saçılması gibi düşünülmelidir. Bundan dolayı birim hücrede bulunan atomların yer değiştirmesi ile ilgili olan optik yer değiştirme parametresi kullanılmalıdır. Bu parametre elektronun enerjisini doğrudan etkiler. Bu sayede etkileşme potansiyeli;

$$H' = (\mathbf{r}, t) = \mathbf{D_0}.\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (4.62)$$

$\mathbf{D_0}$ burada optik deformasyon potansiyelidir. Optik yer değiştirme ise;

$$u(r,t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\mathbf{q}}}\right)^{1/2} \mathbf{e_q}(a_q + a_{-q}^{+})e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \quad (4.63)$$

olarak verilir. Burada $\mathbf{e_q}$, $w_{\mathbf{q}}$ ifadeleri sırasıyla, kutuplanmanın birim vektörü, $\mathbf{q}$ dalga vektörünün açısal frekansıdır.

Bu durumda etkileşme potansiyeli,

$$H' = \sum_q D_0 \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\mathbf{q}}}\right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^{+})\exp(i\mathbf{q}.\mathbf{r}) \quad (4.64)$$

olarak bulunur. Bu durumda optik deformasyon potansiyelinin matris elemanını yazmak istersek,

$$|\langle k'|H'|k\rangle|^2 = \frac{D_0^2\hbar}{2\rho\Omega w_{\mathbf{q}}}(n_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \tag{4.65}$$

elde edilir. $w_{\mathbf{q}}$ ve n_q sabit olarak düşünülebilir. Bunun sebebi optik fononun enerjisinin sabit kabul edilmesidir. Bundan dolayı $w_{\mathbf{q}}$ ve n_q ifadeleri yerine w_0 ve n_0 olarak yazılabilir.

Bu durumda (4.65) Denklemini Fermi altın kuralında yazarsak;

$$S(k,k') = \frac{\pi D_0^2}{\rho w_0 \Omega}\left(n_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)\delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq\cos\Theta'}{m^*} \pm \hbar w_0\right) \tag{4.66}$$

geçiş hızı elde edilir. Burada $\cos\Theta'$ -1 ve +1 arasında değer alabilir. Bu sayede;

$$q_{min} = k\left|1 - \left(1 \pm \frac{\hbar w_0}{E_{\mathbf{k}}}\right)^{1/2}\right| \tag{4.67}$$

$$q_{max} = k\left|1 + \left(1 \pm \frac{\hbar w_0}{E_{\mathbf{k}}}\right)^{1/2}\right| \tag{4.68}$$

bulunur. Bu ifadeler üzerinden saçılma hızını yazmak istediğimizde (4.66) ifadesinin integrali, k' üzerinden almak gerekir.

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int S(\mathbf{k},\mathbf{k}')d\mathbf{k}' \tag{4.69}$$

$$W(\mathbf{k}) = \frac{D_0^2}{8\pi^2\rho w_0}\left(n_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)\int \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq\cos\Theta'}{m^*} \pm \hbar w_0\right) d\mathbf{q} \tag{4.70}$$

Bu durumda kutupsal koordinatlarda integral yazılırsa;

$$\mathbf{I}_q = \int \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\Theta'}{m^*} \pm \hbar w_0\right) d\mathbf{q} \tag{4.71}$$

$$\mathbf{I}_q = \frac{k}{2E_\mathbf{k}} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \int_{-1}^{+1} \int_{0}^{2\pi} \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\Theta' \pm \frac{\hbar w_0}{E_k} \frac{k}{2q}\right) d\emptyset d(\cos\Theta') q^2 dq \tag{4.72}$$

$$\mathbf{I}_q = \frac{2\pi k^3}{E_\mathbf{k}} \left(1 + \frac{\hbar w_0}{E_k}\right)^{1/2} = 8\pi^3 N(E_k \pm \hbar w_0) \tag{4.73}$$

sonucu elde edilir. Bu durumda bu sonuç 4.70' de yerine yazılırsa;

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi D_0^2}{\rho w_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right) N(E_k \pm \hbar w_0) \tag{4.74}$$

saçılma hızı olarak bulunur.

Optik fonon enerjisi akustik fonona göre daha fazladır. Optik fonon enerjisinn $k_B T_L$ ile kıyaslanabilir olduğu görülmektedir. Bundan ötürü bu tip saçılmalar elastik olmayan saçılma olarak kabul edilir.

4.6. Vadiler Arası Optik Fononların Saçılması

Vadiler arası optik fononların gerçekleşebilmesi için fonon dalga vektörünün bölge sınırında olması gerekir. Bunun sebebi bu tip saçılmalar için büyük momentum değişim değerleri gerektirmesidir. $\hbar w_0$ olan optik fonon enerjisi, bölge merkezindeki optik fononlar için geçerlidir. Bu enerji bölge sınırlarında bir miktar daha azdır. Bu enerjiyi $\hbar w_{ij}$ olarak yazılır.

$$H' = \mathbf{D}_{ij} . \mathbf{u}(r, t) \tag{4.75}$$

ifadesi etkileşme potansiyeli olarak vadiler arası saçılma için yazılabilir. Burada i ve j alt indisleri vadileri temsil eder. $\mathbf{D}_{ij}$ ise deformasyon potansiyelidir. Bu durumda geçiş hızını yazmak istersek,

$$S(k,k') = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho w_{ij}\Omega}\left[n(w_{ij}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right]\delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar w_{ij} + \Delta E_{ij}) \tag{4.76}$$

biçiminde elde edilir. Burada Z_j ve E_{ij} ifadeleri sırasıyla, saçılmanın gerçekleşebileceği vadi sayısının mümkün olan değerleri, i ile verilen vadinin tabanındaki enerjinin j. vadideki taban enerjisi olarak verilir. Bu durumda saçılma hızı yazıldığında;

$$W(k) = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho w_{ij}}\left[n(w_{ij}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right]N(E_k \pm \hbar w_{ij} - \Delta E_{ij}) \tag{4.77}$$

biçiminde elde edilir.

4.7. Kutupsal Optik Fononların Saçılması

Elektronların kutupsal saçılmaları, kutuplanma dalgalarının yük taşıyıcısı ile etkileşimi sebebi ile oluşur. Bu kutuplanma dalgaları ise kristallerde boyuna örgü titreşimlerinin bir sonucudur. Bu kutupsal saçılmalar farklı tipte fonon saçılmalarından kaynaklanabilir.

Dipol momenti e^* etkin yük ile bağlantılıdır. Kutupsal etkileşme şiddeti ise bu dipol moment ile orantılıdır. **u** bağıl yer değiştirme dipol momenti tedirgin eder. Bu bağıl yer değiştirme;

$$\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \sum_{\mathbf{q}}\left(\frac{\hbar}{2NMw_0}\right)^{1/2}\mathbf{e_q}(a_{\mathbf{q}} + a^{+}_{-\mathbf{q}})\exp(i\mathbf{q}.\mathbf{r}) \tag{4.78}$$

ifadesi ile verilir. N ve M burada sırasıyla, iyon çiftlerinin sayısı, pozitif ve negatif iyonlar için indirgenmiş kütledir. **D** dielektrik yer değiştirme vektörüne **P** kutuplanma vektörüne ek olarak artı ve eksi yüklü iyonların bağıl yer değiştirmesinin katkısı da vardır.

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_{\text{ion}} + \mathbf{P} \tag{4.79}$$

ε_0, **E**, **P** sırasıyla boşluğun dielektrik sabiti, elektrik alan ve kutuplanma vektörü temsil eder. **P** kutuplanma vektörü;

$$\mathbf{P} = \frac{e^* N}{\Omega}(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) = \frac{e^* N}{\Omega}\mathbf{u} \tag{4.80}$$

olarak verilir.

$$\varepsilon_\infty \mathbf{E} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_{\text{ion}} \tag{4.81}$$

4.81 ile verilen ifade yüksek frekans için dielektrik sabiti ile iyon dipol momenti arasındaki ilişkiyi verir. Bu sayede;

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \varepsilon_\infty \mathbf{E} + \frac{e^* N}{\Omega}\mathbf{u} \tag{4.82}$$

biçiminde yazılabilir. Boyuna elastik dalgalar ve kutuplanmış yükler ile ilgili olarak sırasıyla $\mathbf{D} = \mathbf{D}\mathbf{e}_\mathbf{q}\exp(i\mathbf{q}.\mathbf{r})$ ve $\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{D} = 0$ bağıntıları ile yer değiştirilir. Bu sayede;

$$i\mathbf{q}.\mathbf{D} = 0 \tag{4.83}$$

olduğu yazılabilir. (4.83) Denklemi, $\mathbf{q}$ vektörünün sıfır olmadığı yerlerde $\mathbf{D} = 0$ yazılabileceğini bize söyler. Bu durumda (4.82) Denkleminde $\mathbf{D} = 0$ yazılırsa;

$$\mathbf{E} = \frac{N}{\Omega}\frac{e^* \mathbf{u}}{\varepsilon_\infty} \tag{4.84}$$

ifadesi elde edilir. Bu durumda elektrostatik potansiyel;

$$\mathrm{U}(\mathbf{r}) = -\int \mathbf{F}.\,\mathrm{d}\mathbf{r} = -\mathrm{i}\frac{\mathrm{N}}{\Omega}\frac{\mathrm{e}^{*}}{\mathrm{q}\varepsilon_{\infty}}\mathbf{u}(\mathbf{r}) \tag{4.85}$$

şeklinde yazılabilir.

$$e^{*} = \left(\frac{\Omega M}{N}\right)^{1/2} w_0 \varepsilon_{\infty}\left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_s}\right)^{1/2} \tag{4.86}$$

(4.86) Denklemi etkin yük olarak verilir. Pertürbe potansiyelini yazarsak;

$$\mathrm{H}' = -\mathrm{eU(r)} = \sum_{\mathrm{q}} \mathrm{i}\frac{\mathrm{e}}{\mathrm{q}}\left(\frac{\hbar \mathrm{w}_0}{2\varepsilon_{\mathrm{p}}\Omega}\right)^{1/2}\left(\mathrm{a}_{\mathrm{q}} + \mathrm{a}^{+}_{-\mathrm{q}}\right)\exp\left(\mathrm{i}\mathbf{q}.\mathbf{r}\right) \tag{4.87}$$

olur.

$$\frac{1}{\varepsilon_p} = \frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_s} \tag{4.88}$$

ε_{∞} ile ε_s ifadeleri arasındaki bağıntı (4.88) ile verilmiştir. Bu durumda matris elemanı kutupsal optik fononlar için;

$$|\langle \mathbf{k}'|\mathrm{H}|\mathbf{k}\rangle|^2 = \frac{\mathrm{e}^2\hbar \mathrm{w}_0}{2\varepsilon_{\mathrm{p}}\Omega}\frac{1}{\mathrm{q}^2}\left[\mathrm{n}(\mathrm{w}_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right]\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \tag{4.89}$$

olarak bulunur. Geçiş hızı ise;

$$\mathrm{S}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi \mathrm{e}^2 \mathrm{w}_0}{\varepsilon_{\mathrm{p}}\Omega}\frac{1}{\mathrm{q}^2}\left[\mathrm{n}(\mathrm{w}_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right]\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \pm \mathbf{q})\delta(\mathrm{E}_{\mathbf{k}} - \mathrm{E}_{\mathbf{k}'} \pm \hbar \mathrm{w}_0) \tag{4.90}$$

biçiminde bulunur.

Saçılma hızı ise;

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi e^2 w_0}{\varepsilon_p \Omega}\left[n(w_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right]\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \times \int \frac{1}{q^2}\delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\Theta'}{m^*} \pm \hbar w_0\right) d\mathbf{q} \tag{4.91}$$

olarak yazılabilir. Burada **q** üzerinden integral kutupsal koordinatlar üzerinden alınır.

$$\mathbf{I}_q = \int \frac{1}{q^2}\delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\Theta'}{m^*} \pm \hbar w_0\right) d\mathbf{q} \tag{4.92}$$

$$\mathbf{I_q} = \int_0^{\infty}\int_{-1}^{+1}\int_0^{2\pi} \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\Theta'}{m^*} \pm \hbar w_0\right) dq d(\cos\Theta') d\emptyset \tag{4.93}$$

$$\mathbf{I}_q = \frac{2\pi m^*}{\hbar^2 k}\ln\left(\frac{q_{max}}{q_{min}}\right) \tag{4.94}$$

Bu durumda saçılma hızı integral sonucunda;

$$W(\mathbf{k}) = \frac{e^2 w_0}{8\pi\varepsilon_p}\frac{k}{E_{\mathbf{k}}}\left[n(w_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right]\ln\left(\frac{q_{max}}{q_{min}}\right) \tag{4.95}$$

Saçılma hızı hesabını yapabilmek için saçılma açısı bulunmalıdır. Ancak kutupsal optik fononlarda saçılma her yönde aynı olasılık ile gerçekleşmez. Bundan dolayı yeni bir bağıntı yazmak gerekir.

$$\frac{W(\Theta')}{W(\mathbf{k})} = \frac{\int_{q_{min}}^{q_{\theta'}}\int_{-1}^{+1}\frac{1}{q}\delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\Theta' \pm \frac{\hbar w_0}{E_k}\frac{k}{2q}\right) dq d(\cos\Theta')}{\int_{q_{min}}^{q_{max}}\int_{-1}^{+1}\frac{1}{q}\delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\Theta' \pm \frac{\hbar w_0}{E_k}\frac{k}{2q}\right) dq d(\cos\Theta')} \tag{4.96}$$

$W(\Theta')/W(\mathbf{k})$ ifadesi Θ' ile artar. Bundan dolayı Θ' 0 ve 1 arasında gelişigüzel seçilen değerler kullanılarak bulunabilir. Bunun dışında $\mathbf{k}$ ve $\mathbf{k}'$ arasındaki açının da bulunması gerekir. Bundan dolayı;

$$r = \frac{\ln (q_\Theta/q_{min})}{\ln (q_{max}/q_{min})} \tag{4.97}$$

Eşitliği $\cos\Theta$ düşünülerek çözülmelidir. q_Θ ifadesi de;

$$q_D^2 = k'^2 + k^2 - 2k'k\cos\Theta \tag{4.98}$$

denklemi yazılabilir. Bu denklemden yola çıkarak;

$$q_{min}^2 = k'^2 + k^2 - 2k'k \tag{4.99}$$

$$q_{max}^2 = k'^2 + k^2 + 2k'k \tag{4.100}$$

burada $\Theta = 0$ ve $\Theta = \pi$ olarak alınmıştır.

4.8. Alaşım Saçılması

$A_xB_{1-x}C$ formülüne uygun şekilde bir malzemede, A ve B atomları malzeme boyunca gelişigüzel şekilde yerleşmiştir. Bundan dolayı malzemedeki iyonların da potansiyelleri değişim gösterir. Bu durumda A bölgesinde potansiyel V_A ve B bölgesinde V_B potansiyeli olduğu düşünülebilir. Ortalama potansiyeli yazmak istersek $V = xV_A + (1-x)V_B$ olarak yazabiliriz. Bir $\mathbf{r}_a$ konum vektörü düşünülürse bu vektöre A bölgesinden etkiyen potansiyel $\Delta V = V_a(V - V_A)\,\delta(\mathbf{r} - \boldsymbol{r}_a)$ biçiminde yazılabilir. Burada V_a saçılmaların oluştuğu hacimdir. Buradan V_a ifadesini $V_a = 1/N_a/2$ olarak yazılabilir. N_a burada atomik konsantrasyon olarak alınmıştır.

$$|\langle \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k}\rangle|_A^2 = \frac{V_a^2}{V_c^2}(V - V_A)^2 I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tag{4.101}$$

A bölgesi için matris elemanı olarak yazılabilir. Toplam A bölgesi sayısı ve Toplam B bölgesi sayısı sırasıyla yazılırsa $\left(\frac{N_a V_c}{2}\right) x$, $\left(\frac{N_a V_c}{2}\right)(1-x)$ olur. Toplam matris elemanı;

$$|\langle \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k}\rangle|^2 = \frac{V_a^2}{V_c^2}\frac{N_a V_c}{2}[x(V-V_A)^2 + (1-x)(V-V_B)^2]|I(\mathbf{k},\mathbf{k}')|^2 \qquad (4.102)$$

$$|\langle \mathbf{k}'|H'|\mathbf{k}\rangle|^2 = \frac{V_a}{V_c}x(1-x)(V_A-V_B)^2|I(\mathbf{k},\mathbf{k}')|^2 \qquad (4.103)$$

olarak bulunur. $V_A - V_B = \Xi_{al}$ yazılırsa,

$$W(\mathbf{k}) = \frac{3\sqrt{2}\pi x(1-x)\Xi_{al}^2 (m^*)^{3/2}}{16 n_c \hbar^4} \times \sqrt{E_{\mathbf{k}}(1+2aE_k)}(1+2aE_{\mathbf{k}})\left(a_k^2 + \frac{c_k^2}{3}\right) \qquad (4.104)$$

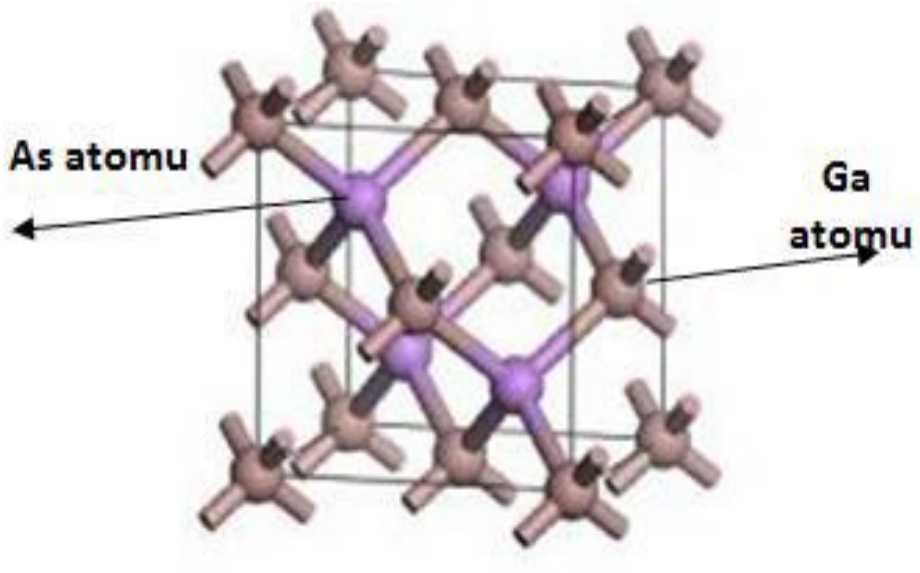
saçılma hızı elde edilir. Ξ_{al}, n_c sırasıyla A ve B bölgesi için malzemenin iş fonksiyonları arasındaki fark, atomların sayısal yoğunluğu olarak verilmiştir.

5. MATERYAL VE YÖNTEM

5.1. GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ Kristal Yapısı

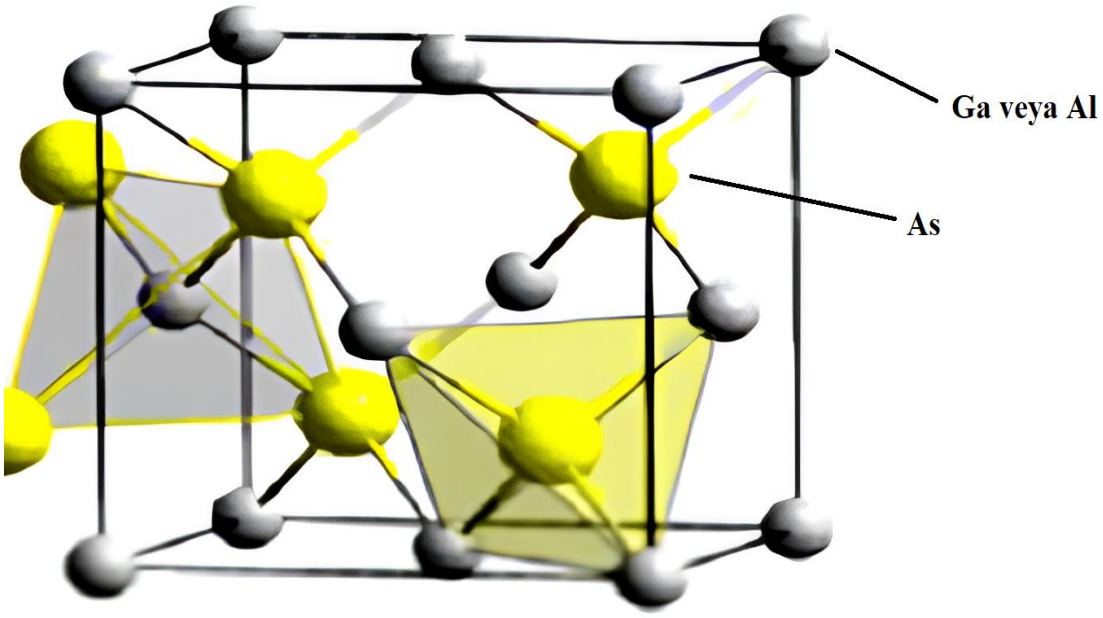
III-V grubu yarıiletkenler teknolojide önemli bir yere sahiplerdir. GaAs, elementlerin periyodik tablonun III. sütunundaki galyum (Ga) elementinden ve V. sütunundaki arsenik (As) elementinden oluşan bir III-V grubu bileşik yarı iletkendir. GaAs ilk olarak Goldschmidt tarafından oluşturuldu ve 1929'da rapor edildi, ancak III-V grubu yarı iletken olarak bildirilen ilk elektronik özellikleri 1952'ye kadar ortaya çıkmadı.

Çoğunlukla III-V grubu yarıiletkenler çinkosülfür kristal yapısındadırlar. III-V grubu yarı iletkenlerde iyonik bağ ve kovalent bağ aynı anda görülebilmektedir. Bunun sebebi yarı iletkeni oluşturan elementlerin farklı elektronegatifliklere sahip olmasıdır. Ancak kovalent bağ, iyonik bağa göre daha fazla görülür. İki farklı element yüzünden malzemedeki elektron dağılımı simetrik değildir. Elektron dağılımı büyük olan atoma doğru yoğunlaşır. Elektronların büyük atoma doğru kaymasından dolayı bağlar iyonik davranış sergilerler. Bu iyonik davranış yüzünden III-V grubu yarı iletkenler polar doğaya sahiptirler (Feenstra ve Stroscio, 1993).



Şekil 5.1. GaAs çinkosülfür yapısı

$Al_xGa_{1-x}As$ ‘de III-V grubu bir yarıiletkendir. Kristal yapısı olarak GaAs yarı iletkenine oldukça benzerdir. GaAs gibi, $Al_xGa_{1-x}As$ ‘de çinkosülfür yapıdadır. Örgü sabiti GaAs ile oldukça yakındır. GaAs için örgü sabiti, 5,65325 Å olarak verilirken, $Al_xGa_{1-x}As$ için ise 5,6533 + 0,0078x Å formülü ile bulunmaktadır. Örgü sabitlerinin bu kadar yakın olması ve kristal yapısının benzer olması, bu iki malzemenin teknolojide yaygın şekilde beraber kullanılmasına sebep olmuştur.



Şekil 5.2. $Al_xGa_{1-x}As$ çinkosülfür yapısı

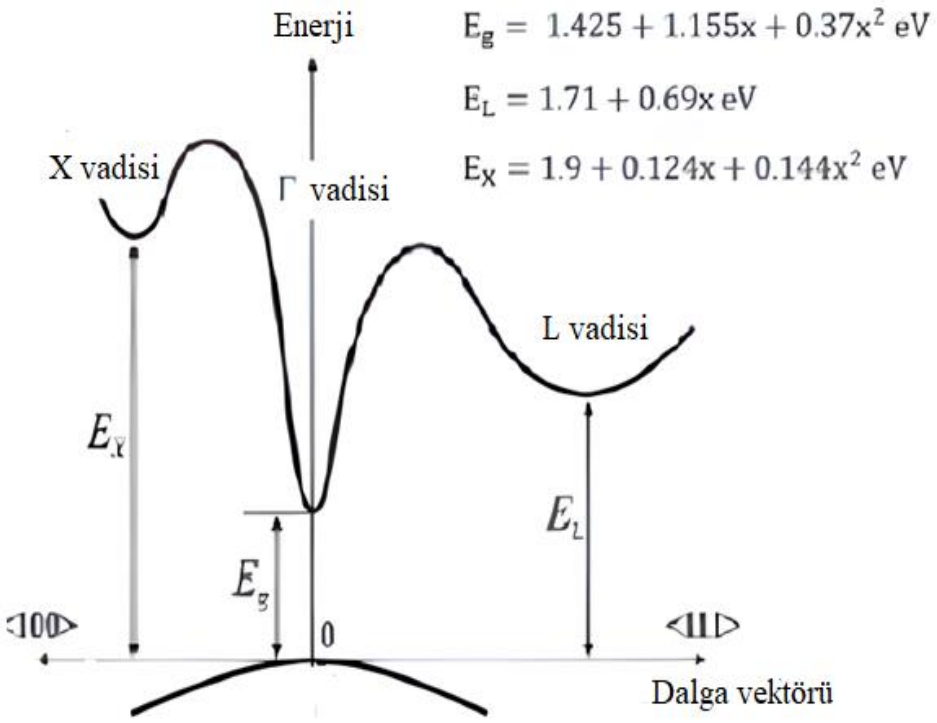
5.2. GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ Bant Yapısı

0 K’ de yarıiletkenlerde son dolu banda valans bandı, onun bir üstündeki boş banda ise iletim bandı denir. Valans bandı ile iletim bandı arasında kalan bölgeye ise yasak enerji aralığı denir. Metallerde valans ve iletim bandı çakışıktır. Bundan dolayı yasak enerji aralığı yoktur. Yarıiletkenlerde ise yasak enerji aralığı birkaç elektron volt değerinde olabilir. Elektrona dışarıdan ısıl veya optik bir yolla enerji verilirse ve bu enerji en az yasak enerji aralığı kadar olursa, valans bandındaki elektronlar iletim bandına geçebilirler. Bu geçiş esnasında valans bandında elektron bir boşluk oluşturur. Elektriksel iletim elektron ve boşluklar ile beraber gerçekleşir.

Valans bandının maksimumu ile iletim bandının minimumu k uzayında aynı k dalga vektörü değerinde olduğunda, bu tip yarıiletkenlere doğrudan geçişli yarıiletkenler denir. Bu tip malzemelerde elektron valans bandından iletim bandına geçerken enerji ve momentum korunumu için fonon gibi üçüncü bir parçacığa gerek duyulmaz (Kittel,1996).

Valans bandının maksimumu ile iletim bandının minimumu k uzayında farklı k dalga vektörü değerinde olduğunda ise bu tip yarıiletkenlere dolaylı geçişli yarıiletkenler denir. Bu tip yarı iletkenlerde elektron valans bandından iletim bandına geçerken, enerji ve momentumun korunumu için üçüncü bir parçacık olan fonon gereklidir.

GaAs direkt geçişli bir yarıiletkendir. $Al_xGa_{1-x}As$ yarıiletkeni ise $x < 0,4$ değeri için direkt geçişli, $x > 0,4$ den sonraki değerler için ise indirekt geçişli bir malzemedir (Saxena, 1981).



Şekil 5.3. GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ bant yapısı

Çizelge 5.1. GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ için parametreler

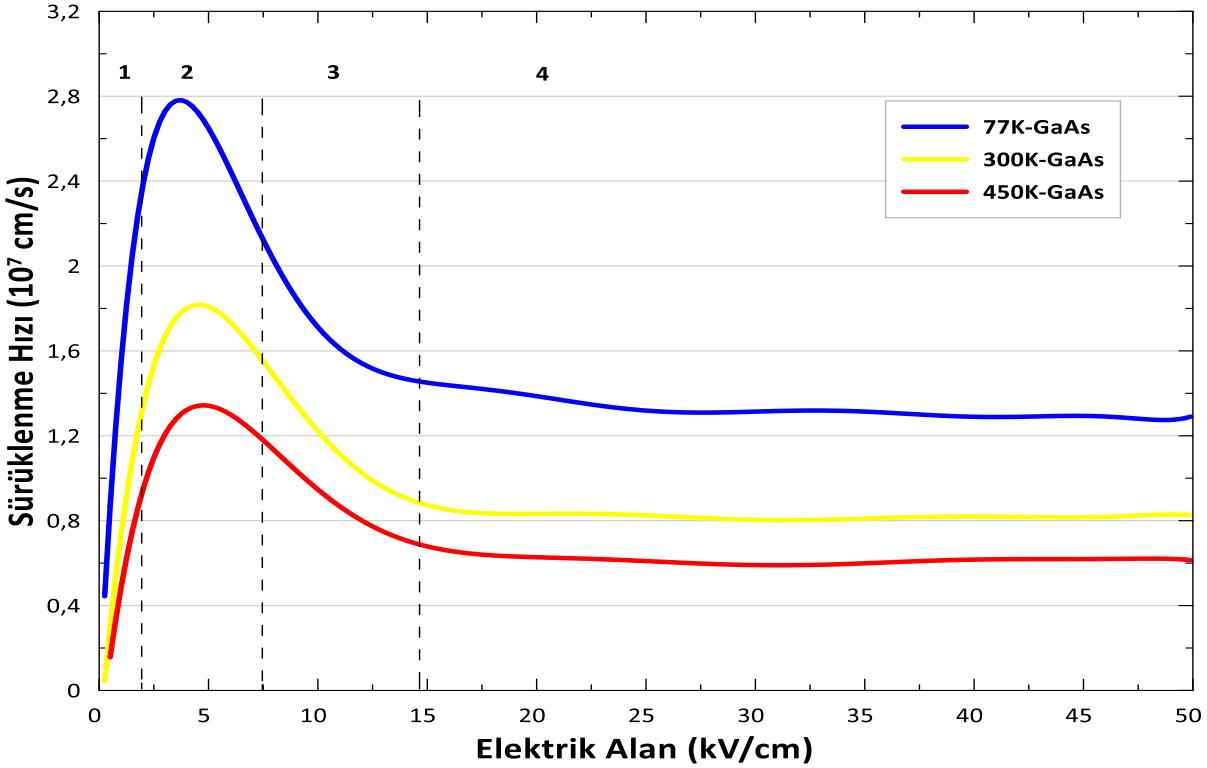
PARAMETRELER	**$Al_xGa_{1-x}As$**
Eg(eV)	$1.425+(1.155x) + 0.37x^2$
ε_s	$(13.18-(3x))\ \varepsilon_0$
ε_f	$(10.89- (2.73x))\ \varepsilon_0$
ρ (g/cm^{-3})	5320-(1560x)
$\hbar w_0$ (meV)	$(0.03625 + (0.00183x) + (0.01712x^2) -(0.00511x^3))$
$\hbar w_{ij}$ (meV)	0.030
m_1^*/m_0	(0.063+(0.083x))
m_2^*/m_0	(0.35+(0.25x))
v_s (ms^{-1})	5240-1000x
imp$(1/m^3)$	1.10^{22}

Çizelge 5.1. ‘de Monte Carlo metodu için gerekli olan parametreler GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ yarı iletkenleri için verilmiştir (Guen-Bouazza vd, 2013). Burada Eg yasak enerji aralığı, ε_s statik dielektrik sabiti, ε_f , yüksek frekans dielektrik sabiti, ρ özkütle, $\hbar w_0$, fonon enerjisi, $\hbar w_{ij}$, vadiler arası optik fonon enerjisi, m_1^* Γ vadisindeki etkin elektron kütlesi, m_2^* L vadisindeki etkin elektron kütlesi, v_s, ses hızı, imp ise safsızlık miktarı olarak, Vegard yasasına uygun şekilde verilmiştir.

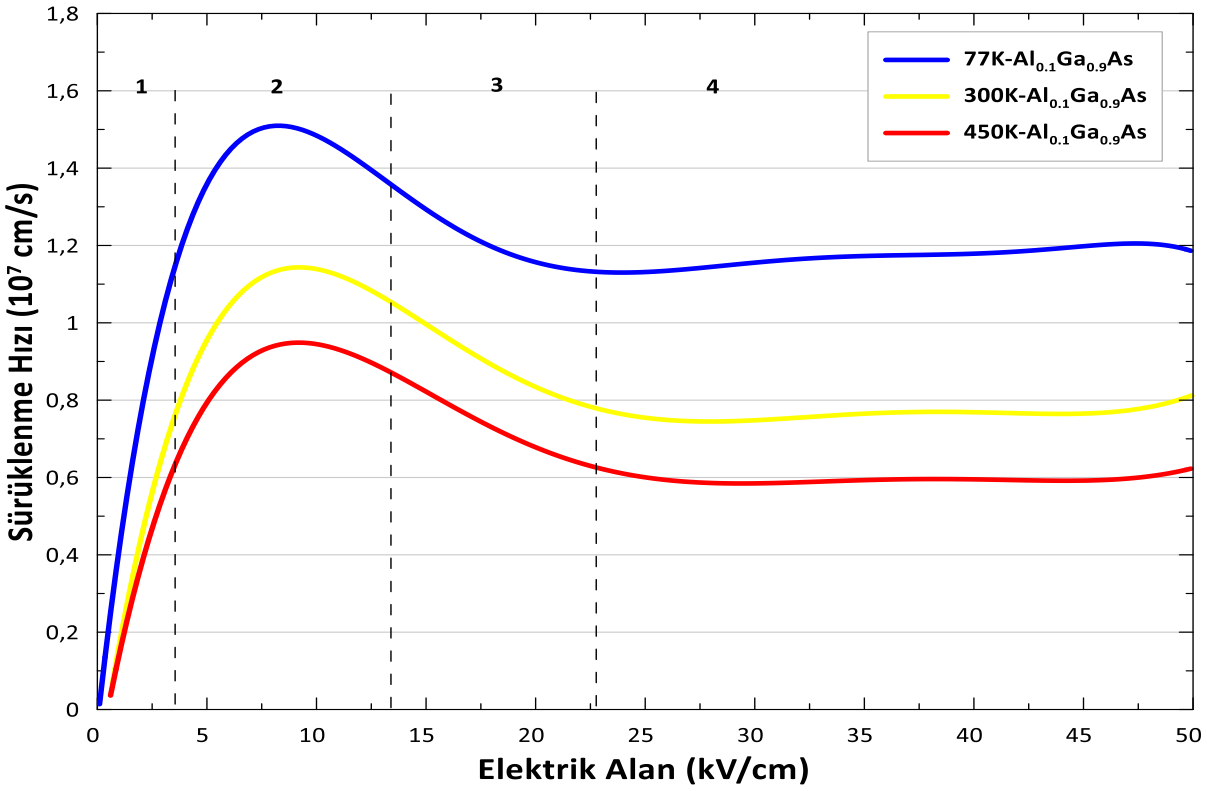
6. BULGULAR VE TARTIŞMA

$Al_xGa_{1-x}As$ yarıiletken bileşiği, x=0, x=0,1, x=0,2, x= 0,3, x=0,4 değerleri için, 77K, 300K, 450K sıcaklıklarında 2ns'lik simülasyon süresi uygulanarak incelenmiştir. Kullanılan parametreler Tablo 5.1'de verilmiştir (Vurgafman vd, 2001). Uygulanan elektrik alanın; elektron sürüklenme hızı, elektron enerjisi, Γ ve L vadisi için saçılma hızları ve yüzdelerine bakıldı. Saçılma mekanizmaları için Γ ve L vadileri dikkate alındı ve hesaplamalar; iyonize safsızlık, kutupsal optik fonon, akustik fonon, kutupsal olmayan optik fonon, vadiler arası optik fonon, alaşım ve dislokasyon saçılma mekanizmaları göz önünde bulundurularak yapıldı.

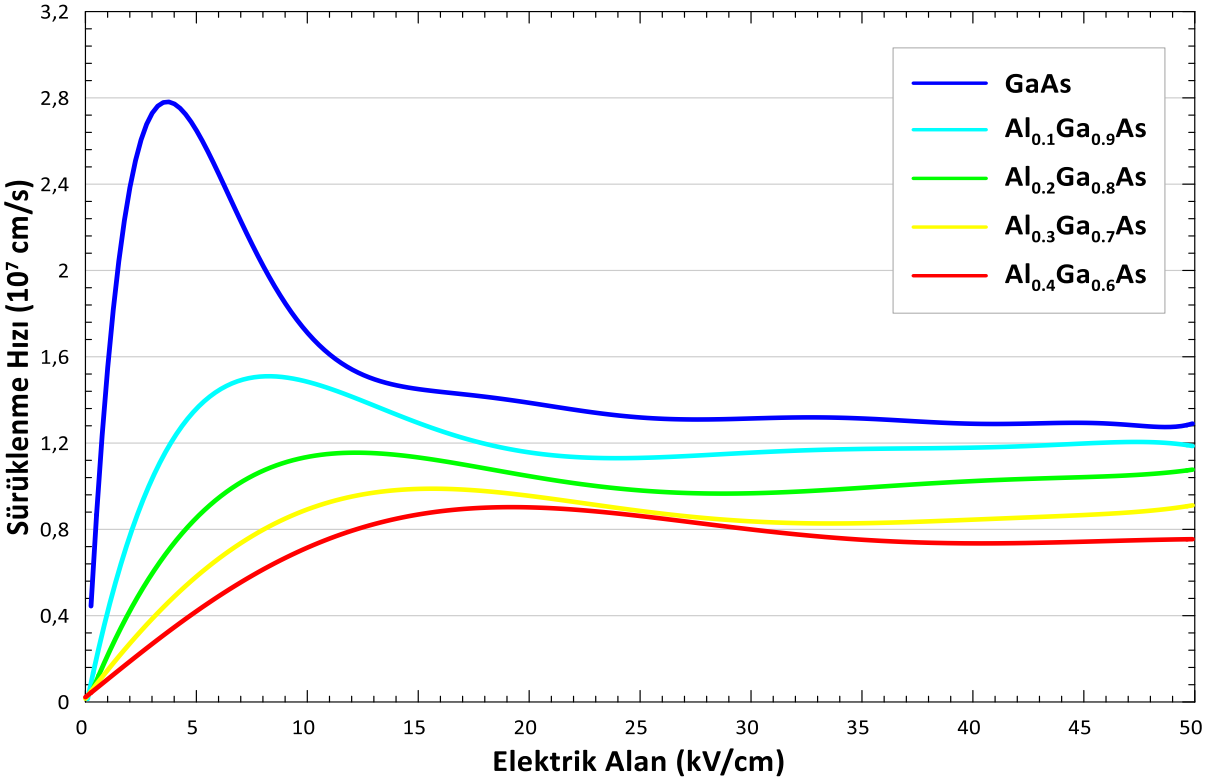
Şekil 6.1. ve Şekil 6.2 dört farklı bölgeye ayrılarak incelenmiştir.1. bölgeye ohmik bölge denir. Burada sürüklenme hızı ohm yasasına uygun olarak artar. 2. bölge sürüklenme hızının pik yaptığı bölgedir. Bu bölge vadiler arası geçişlerin başladığı bölgedir. 3. Bölge negatif diferansiyel mobilite bölgesidir. Bu bölge L vadisindeki saçılmaların çoğunlukta olduğu bölgedir ve sürüklenme hızı düşer. 4. Bölge ise satürasyon bölgesidir. Bu bölge sürüklenme hızının dengeye oturduğu bölgedir.



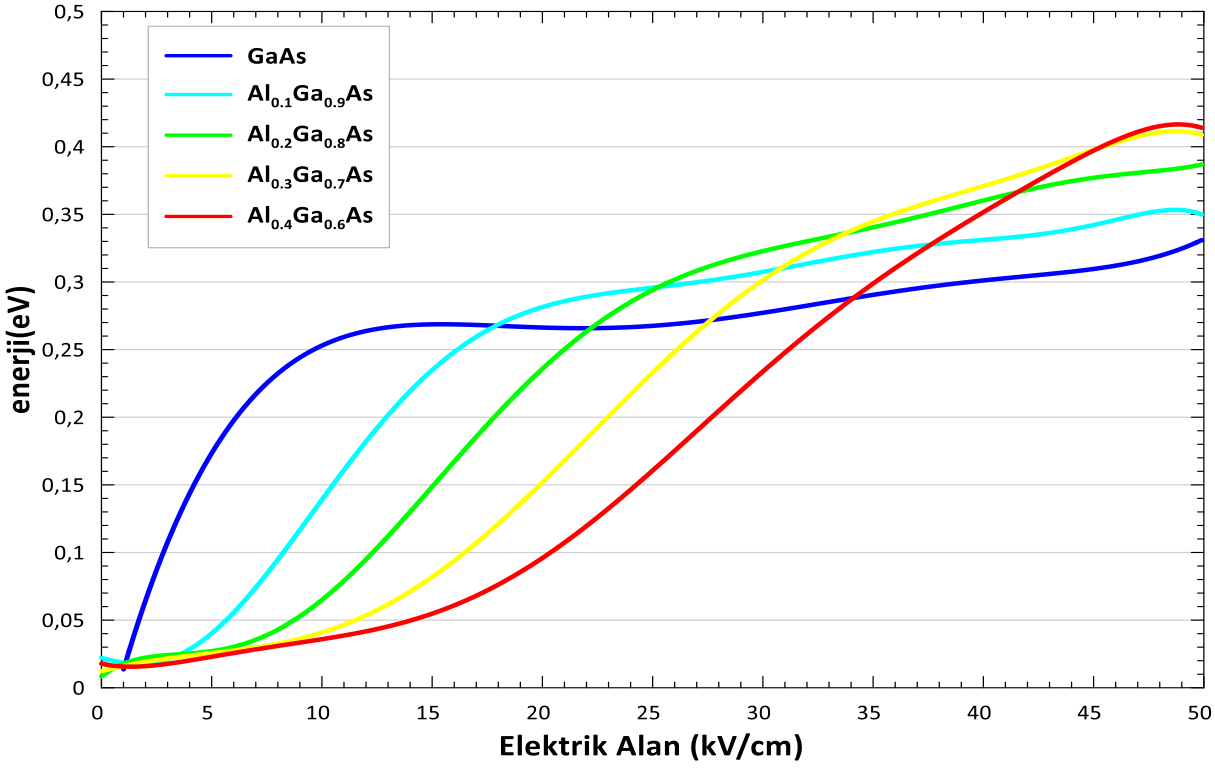
Şekil 6.1. GaAs için sürüklenme hızı ve sıcaklık karşılaştırması



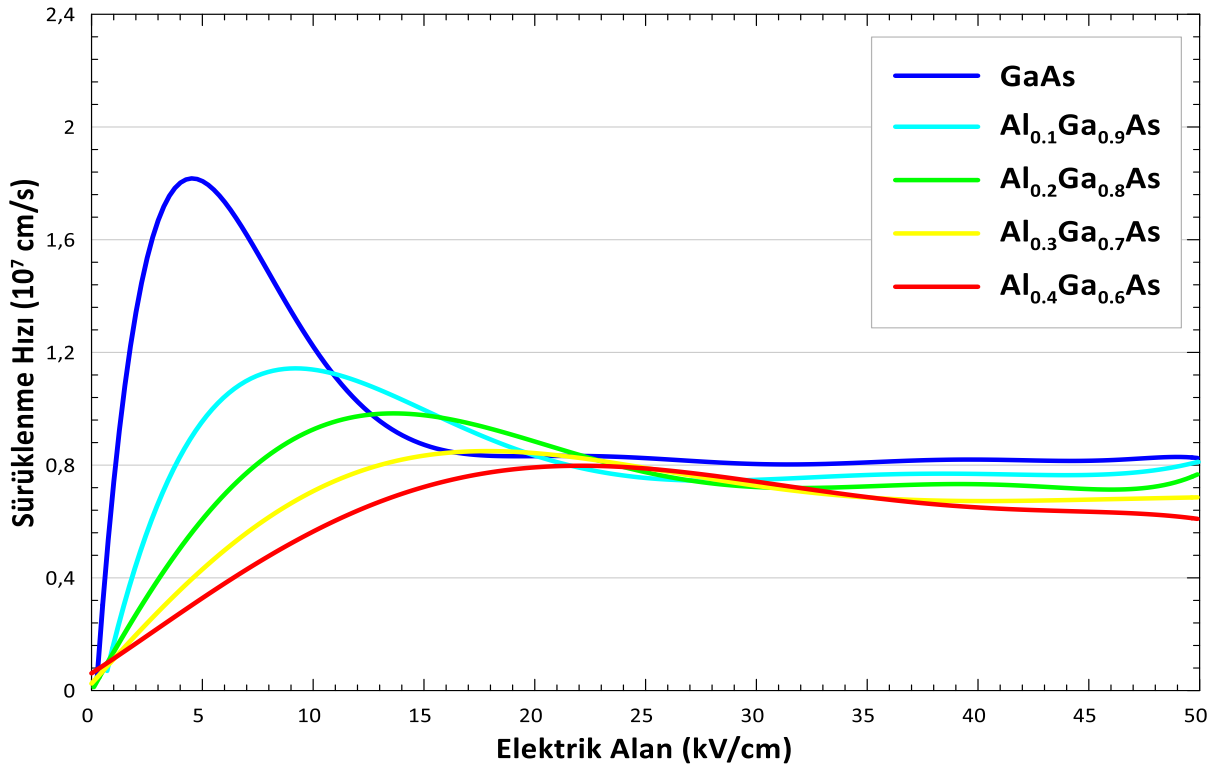
Şekil 6.2. $Al_xGa_{1-x}As$ için sürüklenme hızı ve sıcaklık karşılaştırması



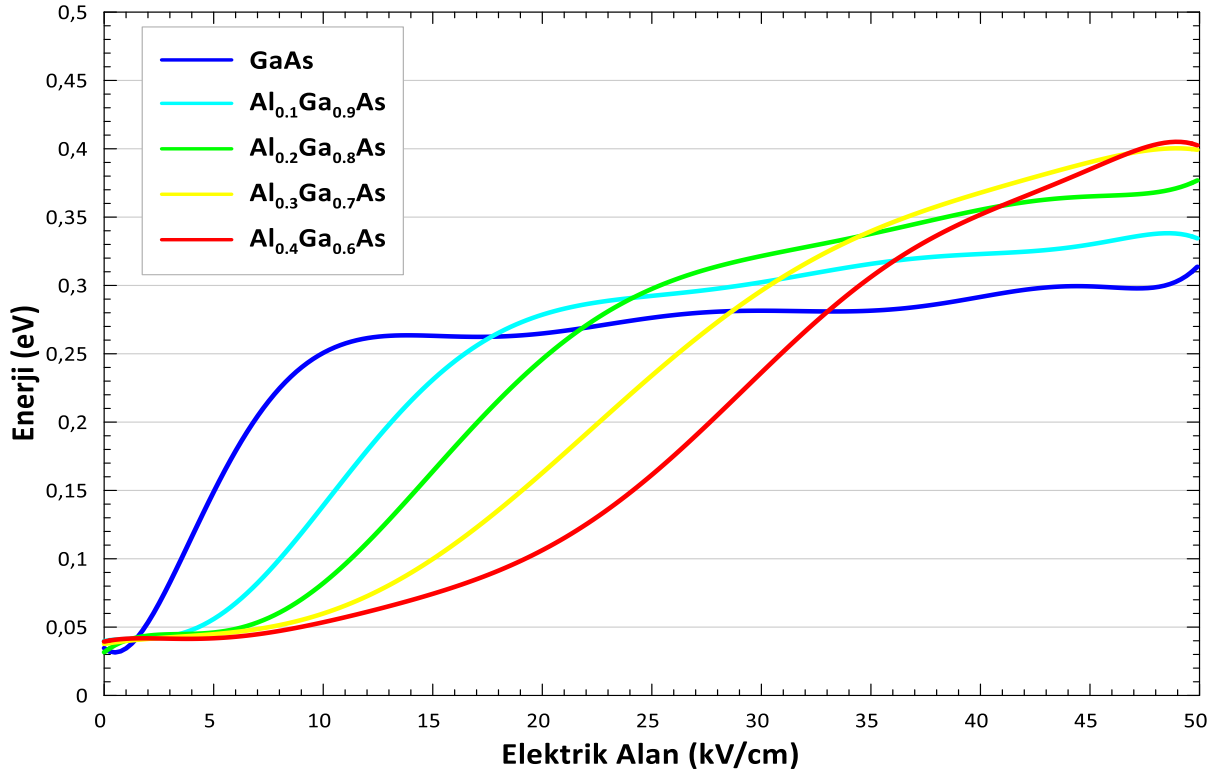
Şekil 6.3. $Al_xGa_{1-x}As$ 77K için sürüklenme hızı elektrik alan grafiği



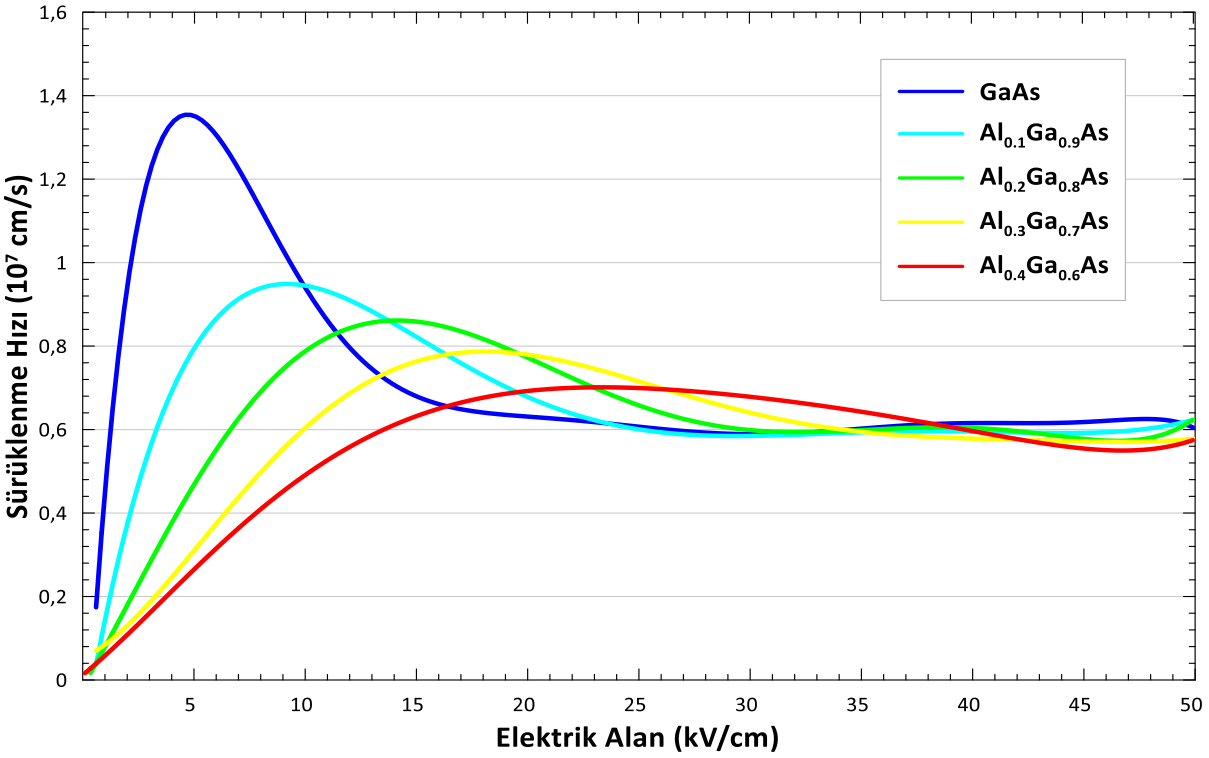
Şekil 6.4. $Al_xGa_{1-x}As$ için enerjinin 77K' de uygulanan elektrik alanla değişimi



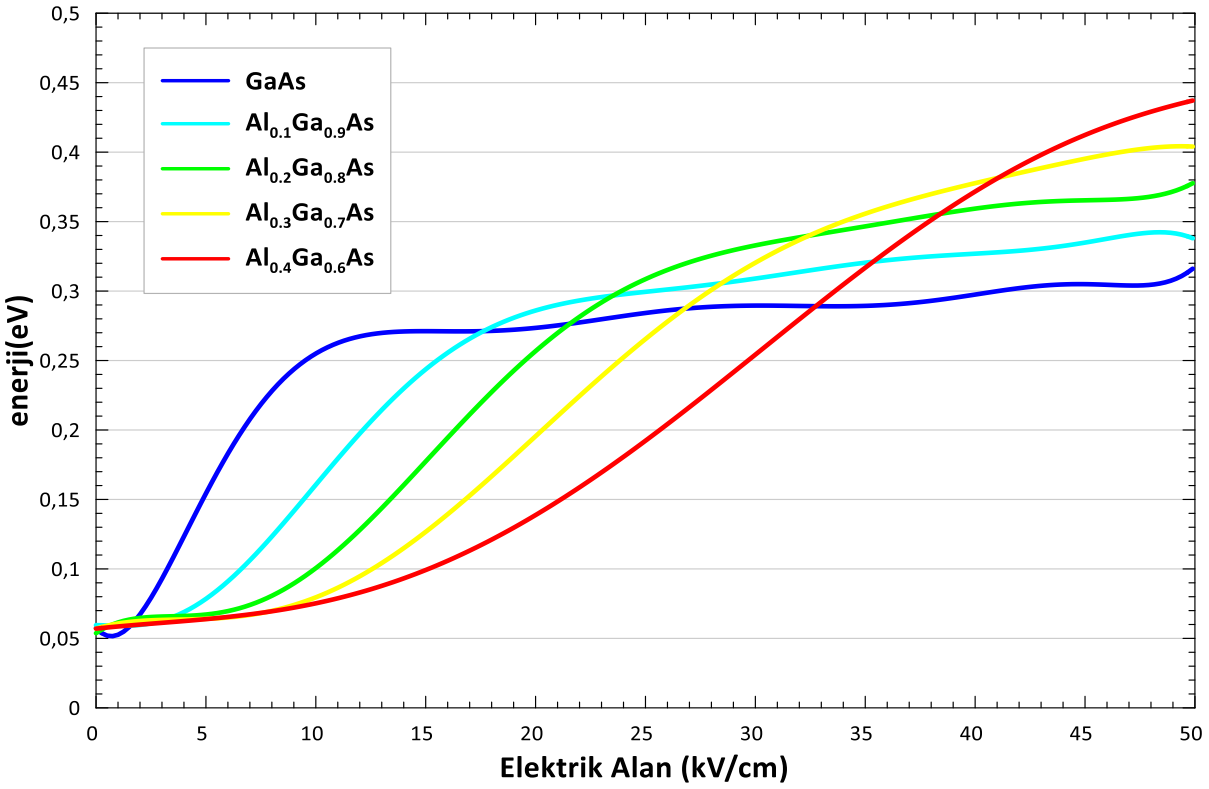
Şekil 6.5. $Al_xGa_{1-x}As$ için 300K sürüklenme hızı elektrik alan grafiği



Şekil 6.6. $Al_xGa_{1-x}As$ için 300K enerjinin uygulanan elektrik alanla değişimi

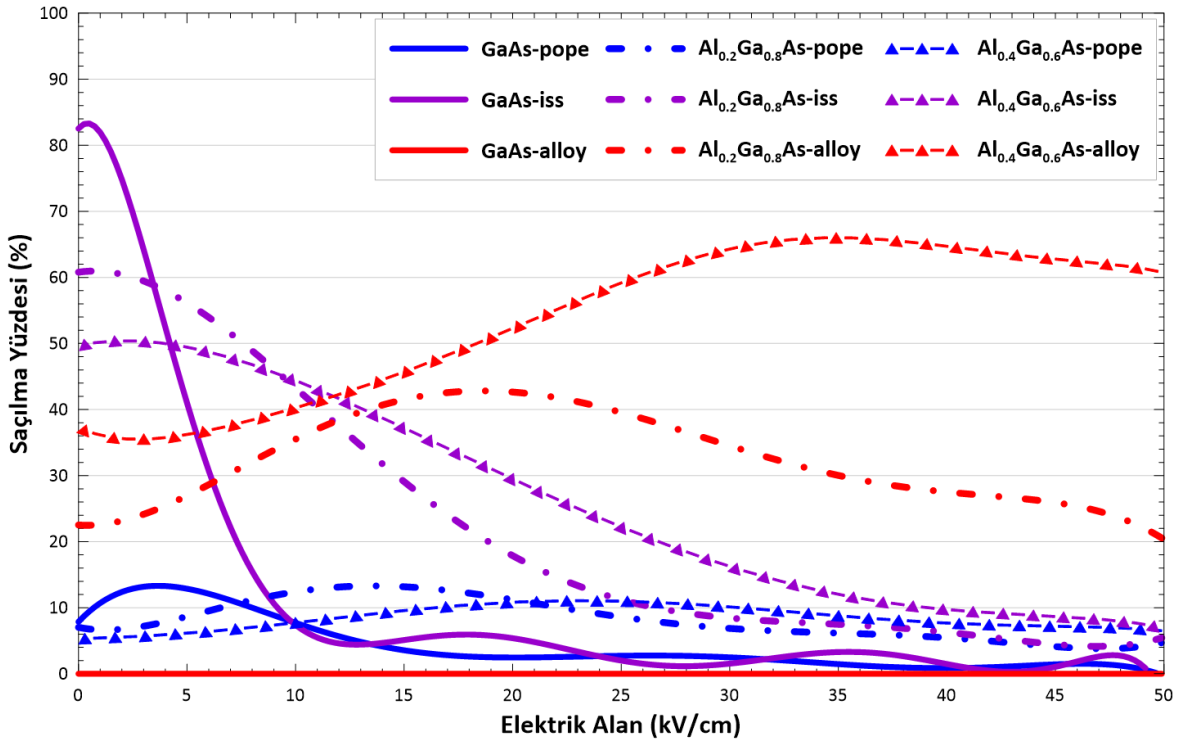


Şekil 6.7. $Al_xGa_{1-x}As$ için 450K sürüklenme hızı elektrik alan grafiği

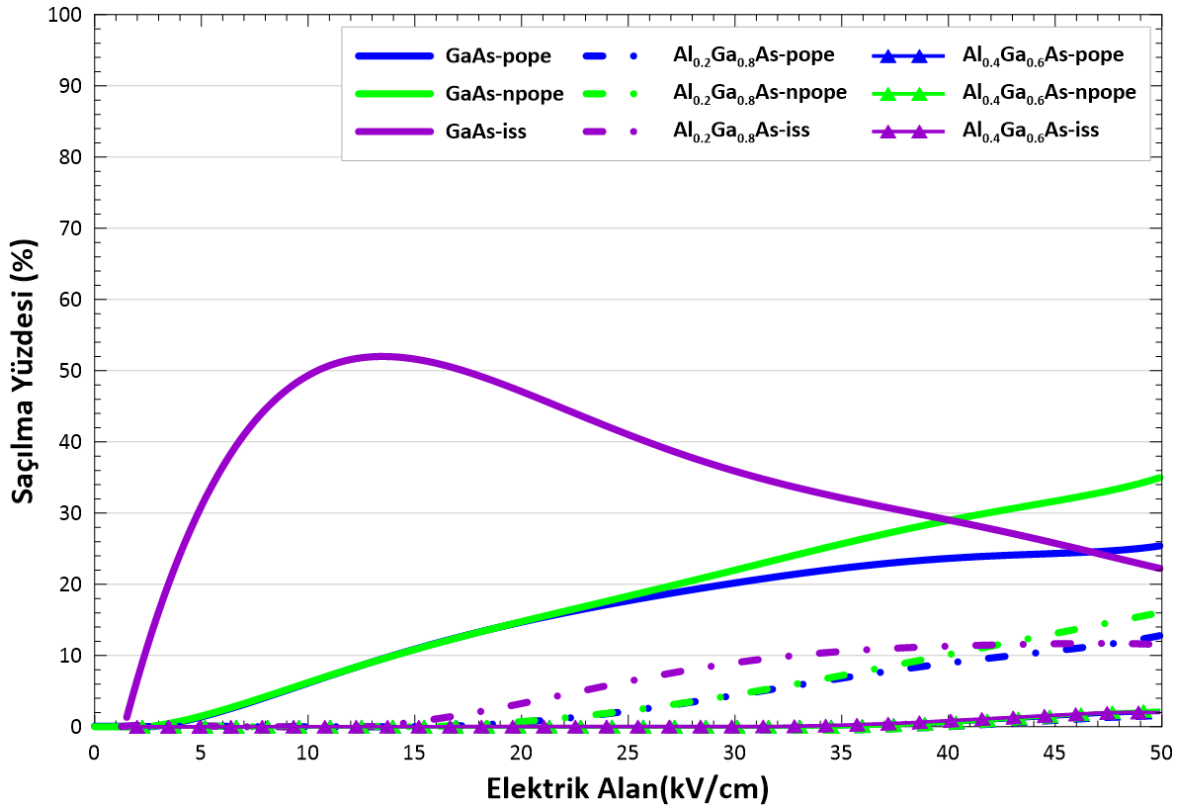


Şekil 6.8. $Al_xGa_{1-x}As$ için 450K enerjinin uygulanan elektrik alanla değişimi

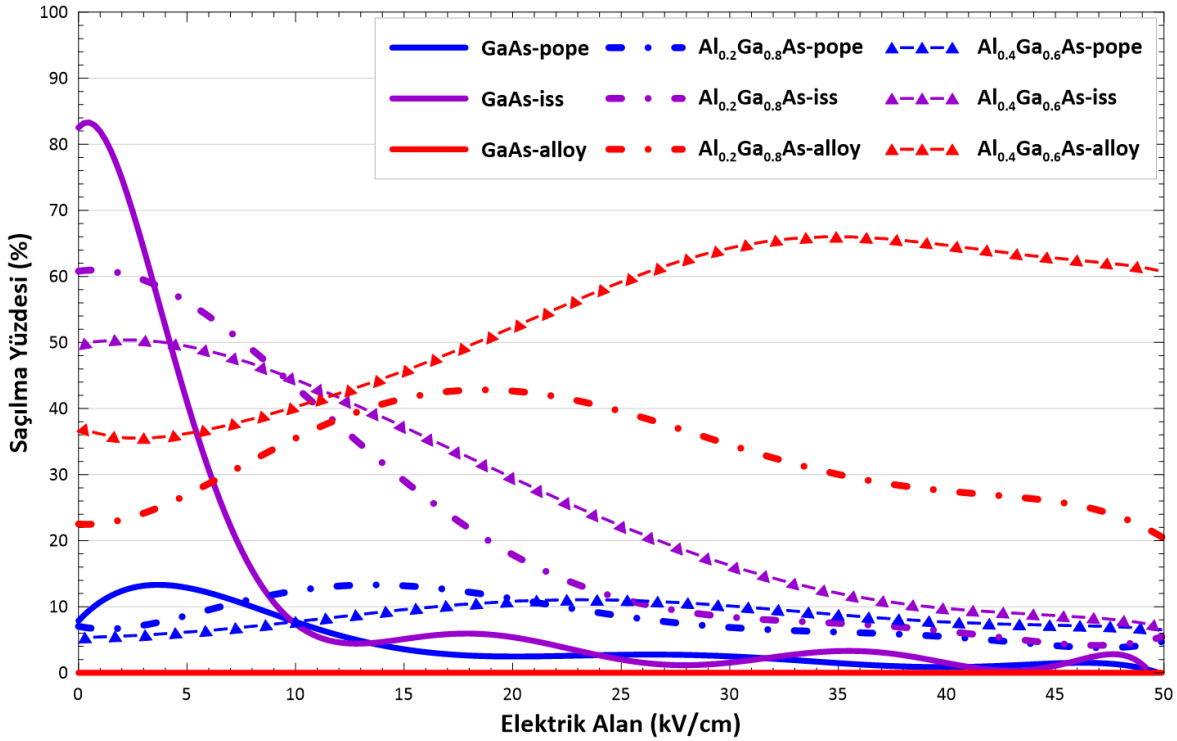
Γ vadisi için, incelenen saçılmalar polar optik fonon yayınım, polar optik fonon soğurma, vadiler arası optik fonon yayınım, vadiler arası optik fonon soğurma, akustik fonon, iyonize safsızlık, alaşım ve dislokasyon saçılmalarıdır. L vadisi için ise polar optik fonon yayınım, polar optik fonon soğurma, polar olmayan optik fonon yayınım, polar olmayan optik fonon soğurma, vadiler arası optik fonon yayınım, vadiler arası optik fonon soğurma, akustik fonon, iyonize safsızlık saçılmaları incelenmiştir. Yüzde beşin altında kalan saçılmaların etkisi önemsiz olacağından Şekil-6.9, Şekil-6.10, Şekil-6.11, Şekil-6.12, Şekil-6.13 ve Şekil-6.14 'de gösterilmemiştir.



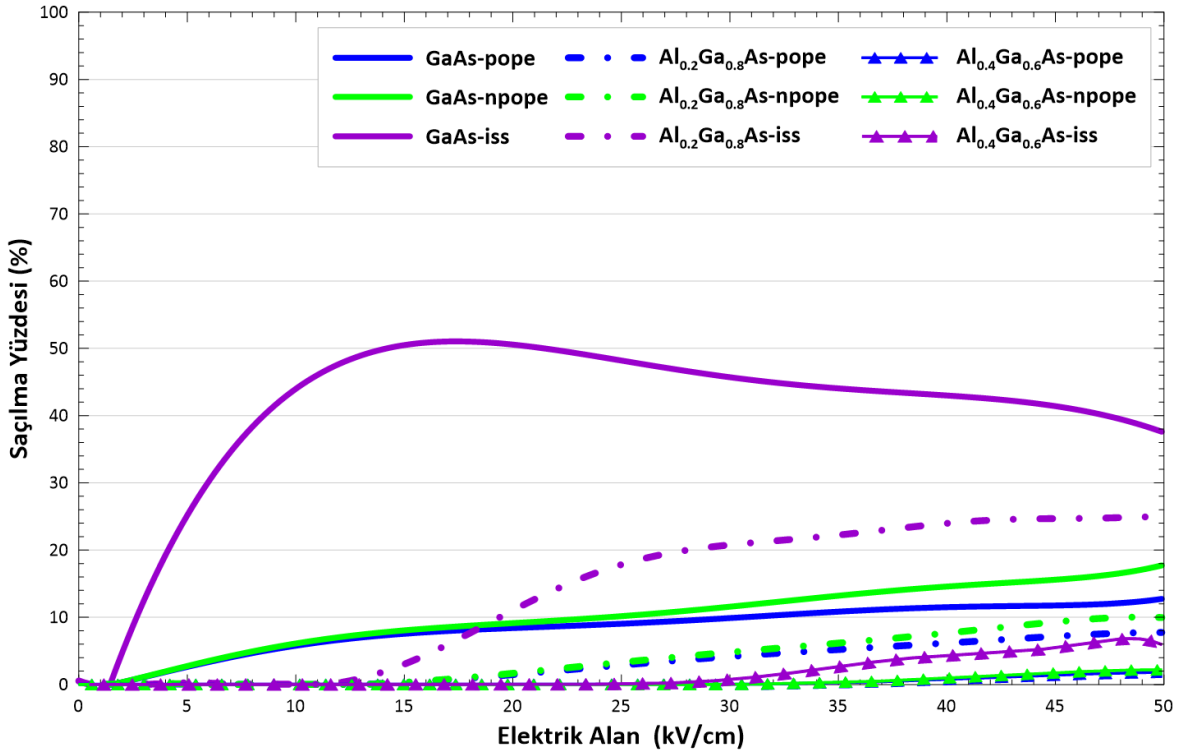
Şekil 6.9. Γ vadisi için 77K' de saçılma yüzdeleri



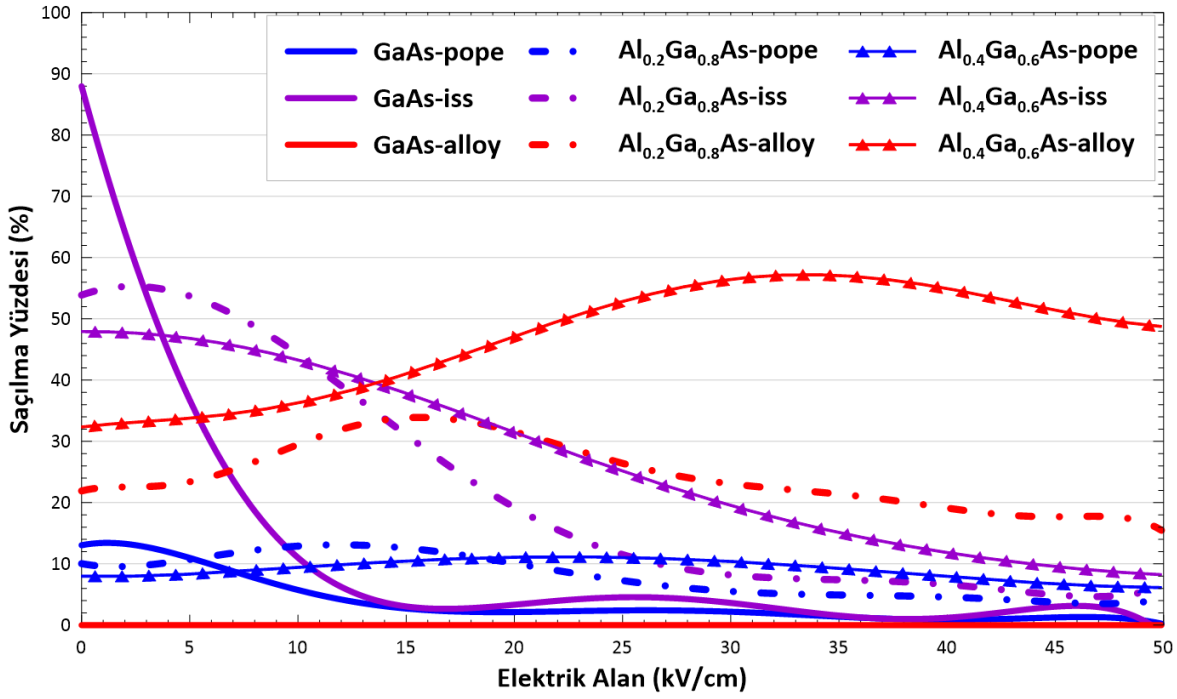
Şekil 6.10. L vadisi için 77K' de saçılma yüzdeleri



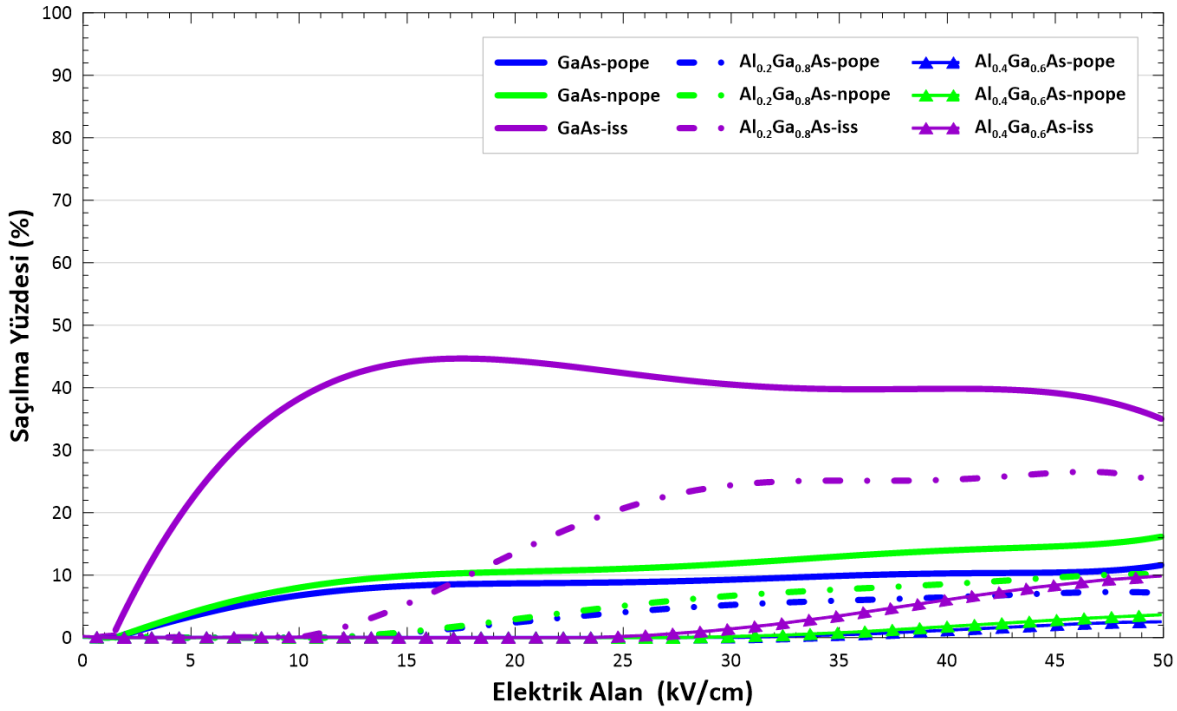
Şekil 6.11. Γ vadisi için 300K' de saçılma yüzdeleri



Şekil 6.12. L vadisi için 300K' de saçılma yüzdeleri

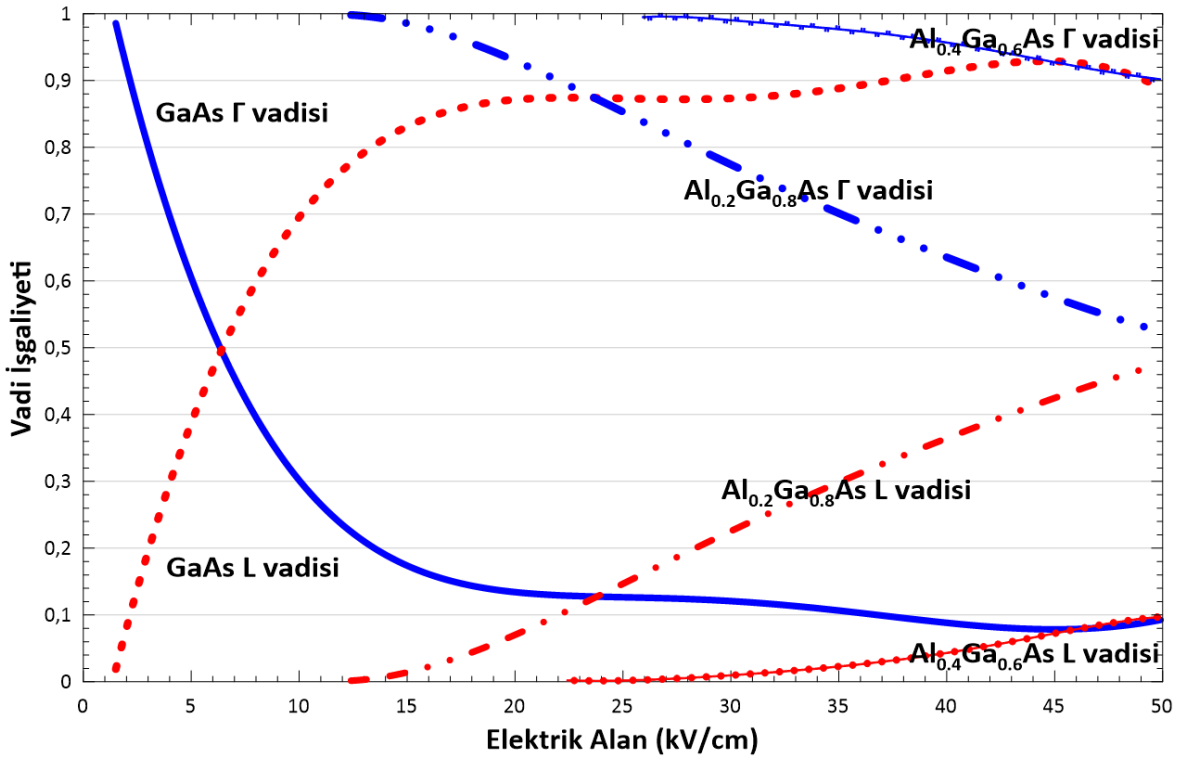


Şekil 6.13. Γ vadisi için 450K' de saçılma yüzdeleri

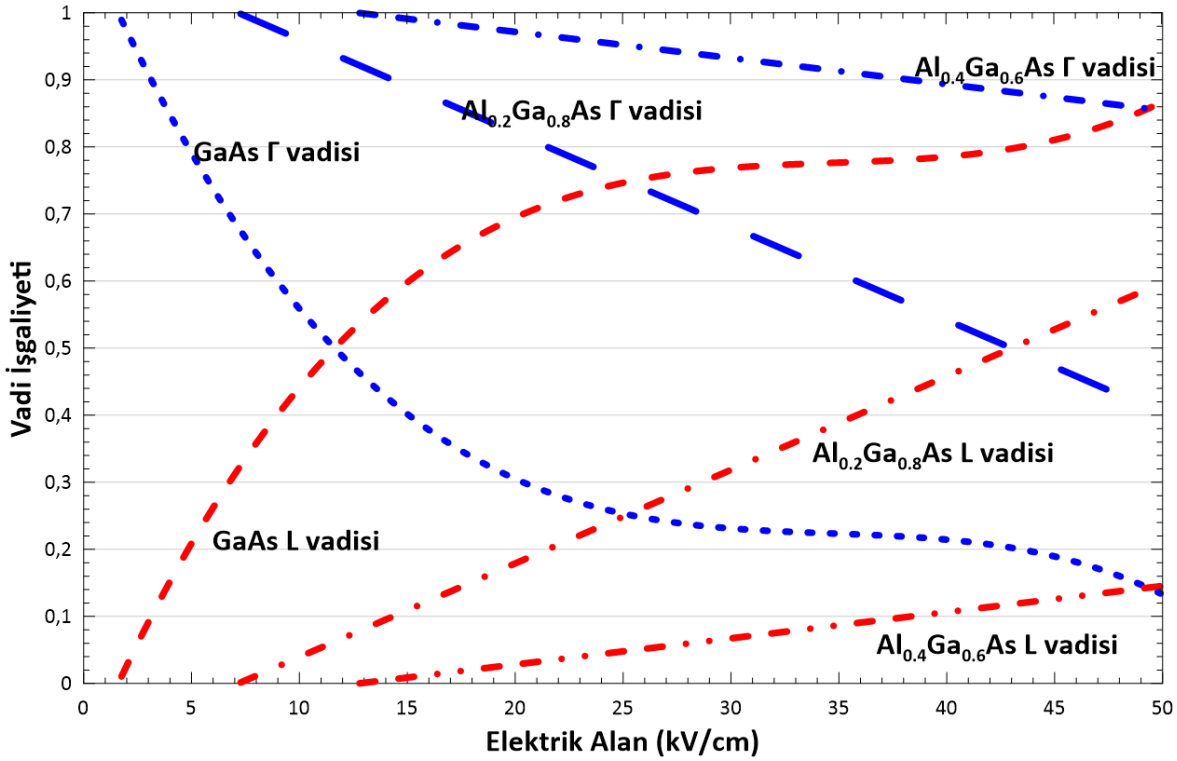


Şekil 6.14. L vadisi için 450K' de saçılma yüzdeleri

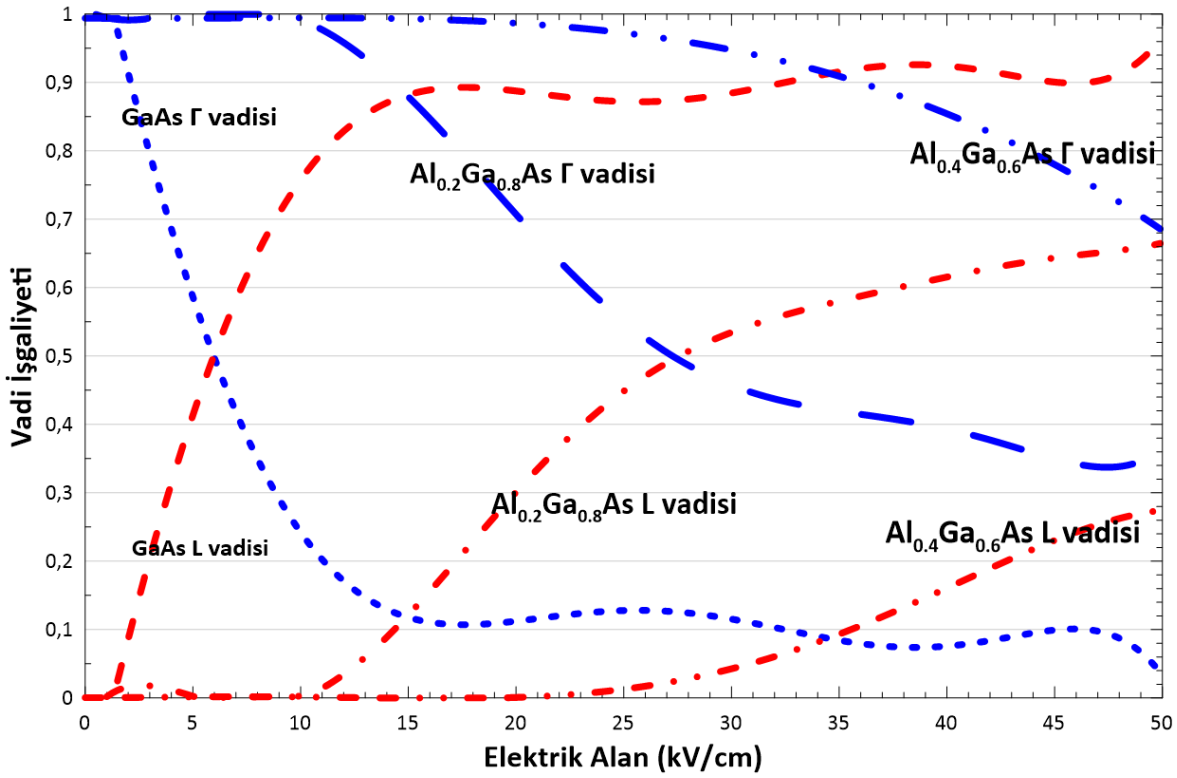
Şekil-6.9, Şekil-6.11 ve Şekil-6.13' de polar optik fonon yayınım saçılmaları, pope, iyonize safsızlık saçılmaları iss, alaşım saçılmaları alloy olarak gösterilmiştir. Şekil-6.10, Şekil- 6.12 ve Şekil-6.14' de ise polar optik fonon yayınım saçılmaları, pope, polar olmayan optik fonon yayınım saçılmaları npope, iyonize safsızlık saçılmaları, iss olarak gösterilmiştir.



Şekil 6.15. 77K' de vadi işgaliyeti



Şekil 6.16. 300K' de vadi işgaliyeti



Şekil 6.17. 450K' de vadi işgaliyeti

Şekil 6.15., Şekil 6.16, Şekil 6.17' de elektrik alana bağlı olarak vadi işgaliyeti, sırası ile 77K, 300K ve 450K sıcaklıkları için gösterilmiştir.

7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Şekil 6.5' de $Al_xGa_{1-x}As$ 300K için sürüklenme hızı elektrik alan grafiği, Şekil 6.6' da enerjinin uygulanan elektrik alanla değişimini gösteren grafik verilmektedir. $Al_xGa_{1-x}As$ yarıiletken bileşiği için sırası ile x=0, x=0,1, x=0,2, x= 0,3, x=0,4 değerlerinde incelenerek tek parçacık Monte Carlo simülasyonundan elde edilen elektron sürüklenme hızı elektrik alanın bir fonksiyonu olarak 77K, 300K ve 450K sıcaklığı için elde edildi. 300K GaAs elektron sürüklenme hızının uygulanan elektrik alanla, yaklaşık 4,1 kV/cm elektrik alan değerine kadar, lineer olarak $1.8x10^7$ cm/s lik bir pik değerine kadar arttığı görülmüştür. GaAs içine, Al elementinin katılması ile beraber elektrik alana karşılık gelen pik değerlerinin düştüğü görülmektedir. $Al_xGa_{1-x}As$ malzemesinin yasak enerji aralığının, GaAs ye göre daha geniş olması, elektronun enerjisinin daha fazlasının valans bandından kopmak için harcandığını ve sürüklenme hızına kalan enerjinin daha az katkıda bulunduğunu bundan dolayı da sürüklenme hızının pik değerlerinin $Al_xGa_{1-x}As$ için daha düşük çıkmasını açıklayabilir. Aynı zamanda GaAs malzemesi direkt bant geçişli bir malzemeyken, içerisine Al elementinin katılması ile beraber indirekt geçişli bir malzemeye dönüştüğü bilinmektedir. Literatürde x = 0,4 değerinden sonra $Al_xGa_{1-x}As$ malzemenin indirekt geçişli hale gelmektedir (Saxena, 1981). Sürüklenme hızındaki ani artış direkt geçişli malzemelerle de ilişkilendirilmektedir. GaAs malzemesinin içine Al katılması ile beraber sürüklenme hızının pik değerindeki düşüş bu durum ile de açıklanabilir. Γ ve L vadileri için enerji hesaplamaları Vegard yasasına göre yapıldığında Çizelge 7.1. 'deki sonuçlar elde edilmiştir.

Çizelge 7.1. Γ ve L vadileri için enerji değerleri

x = 0	$E_\Gamma = 1{,}42eV$	$E_L = 1.71eV$
x = 0,1	$E_\Gamma = 1{,}54eV$	$E_L = 1.77eV$
x = 0,2	$E_\Gamma = 1{,}67eV$	$E_L = 1.84eV$
x = 0,3	$E_\Gamma = 1{,}80eV$	$E_L = 1.91eV$
x = 0,4	$E_\Gamma = 1{,}94eV$	$E_L = 1.98eV$

x = 0,4 değerine yaklaşılırken Çizelge 7.1' e göre, Γ ve L vadilerinin enerji değerleri birbirine yaklaşmaktadır ve x değeri büyürken L vadisine geçiş için gerekli olan enerjinin, Γ vadisine geçiş için gerekli olan enerjiden daha fazla olduğu anlaşılmaktadır. Bu durumda x değeri büyüdüğünde indirekt geçiş olasılığının da arttığı söylenebilir. İndirekt geçiş için gerekli olan enerjinin daha fazla olması ve Γ vadisinde saçılmalar azalırken L vadisinde polar optik fonon yayınım saçılmaları ile polar olmayan optik fonon yayınım saçılmalarının başlaması, x değeri büyürken sürüklenme hızının pik değerinin azalmasına katkıda bulunduğu söylenebilir.

Sıcaklık değeri arttıkça sürüklenme hızının pik yaptığı değerlerde azalma görülmüştür. Bunun sebebi sıcaklık arttıkça saçılma miktarının da artmasıdır. Enerji grafikleri incelendiğinde ise farklı sıcaklıklar için enerji değerlerinin çok değişmediği görülmüştür. Bunun sebebi ise elektronun termal enerjisinin dışardan uygulanan kuvvet sebebi ile kazandığı enerji yanında oldukça küçük olması olarak gösterilebilir. $^3/_2\, k_B T$ formülüne göre bu enerjiler 77K, 300K ve 450K için yaklaşık olarak sırasıyla 0.009eV, 0.038eV ve 0.058eV olarak bulunur. Bu değerler enerji grafiğindeki değerler ile yaklaşık olarak aynıdır.

77K, 300K ve 450K' de bütün x değerleri için iyonize safsızlık saçılmalarının en etkin saçılma olduğu görülmüştür. Aynı zamanda, x değeri artarken iyonize safsızlık saçılmalarının yanında, alaşım saçılmalarının da ortaya çıktığı ve x değeri arttıkça alaşım saçılmalarının da arttığı görülmüştür. İyonize safsızlık saçılmaları ve alaşım saçılmaları elastik saçılmalardır. Bundan dolayı enerji grafiği incelendiğinde enerjinin pik yapmış olduğu değerlerin GaAs için sorumlusunun iyonize safsızlık saçılmaları, $Al_xGa_{1-x}As$ için iyonize safsızlık saçılmaları ve alaşım saçılmaları olduğu söylenebilir.

Saçılma grafikleri incelendiğinde, iyonize safsızlık saçılmaları, Γ vadisinde bütün x değerleri için azalırken, L vadisinde artmaya başlamıştır. Γ vadisi için polar optik fonon yayınım saçılmaları, genel olarak, iyonize safsızlık saçılmaları ile beraber görülmüştür. L vadisinde ise polar optik fonon yayınım saçılmalarının yanında, polar olmayan optik fonon yayınım saçılmaları da görülmüştür. Bu yayınım

saçılmaları sayesinde elektron fazla olan enerjisini yayınlayarak, sürüklenme hızını dengelemiş ve sürüklenme hızında şiddetli bir artış olmasına engel olmuştur.

Negatif diferansiyel mobilite bölgesinde L vadisindeki saçılmalar Γ vadisine göre çok daha fazladır. Enerji grafiği incelendiğinde bu bölgede enerjide elektrik alan artmasına rağmen fazla artış olmadığı görülmektedir. L vadisinde Γ vadisine göre elektronun kütlesi daha büyüktür. Bundan dolayı sürüklenme hızında ani düşüş yaşanırken enerji az miktarda da olsa artmaya devam eder. İyonize safsızlık saçılmaları ve alaşım saçılmaları elastik saçılmalardır. Bundan dolayı GaAs için iyonize safsızlık saçılmaları elektronun enerjisinin negatif diferansiyel bölgesinde artış yapmasında rol oynadığı söylenebilir. Aynı şekilde $Al_xGa_{1-x}As$ için alaşım saçılmaları ve iyonize safsızlık saçılmaları, sürüklenme hızı azalırken enerjinin artışında rol oynadığı ve GaAs' ye göre enerjinin daha fazla artması bu sayede açıklanabilir.

Satürasyon bölgesinde enerji artsa da, yayınım saçılmaların artması ve L vadisinde elektronun kütlesinin daha fazla olmasından dolayı sürüklenme hızı elektrik alan arttıkça dengeye oturmuştur. Bu durum vadi işgaliyeti incelendiğinde daha net görülmektedir. Vadi işgaliyetleri incelendiğinde satürasyon bölgesinde L vadisinde saçılmaların çoğunun gerçekleştiği görülmektedir.

Sıcaklık azaldıkça sürüklenme hızının tüm değerler için arttığı görülmüştür. Bu durumun düşük sıcaklıkta saçılmaların azalmasından kaynaklandığı söylenebilir. Enerji grafiğinin ise tüm değerler için çok değişmediği görülmüştür. Taşıyıcı enerjisi fazla değişmiyorken sürüklenme hızının artmasından dolayı, saçılmaların sürüklenme hızına etki eden asıl mekanizma olduğu söylenebilir. Düşük sıcaklıkta alaşım ve iyonize safsızlık saçılmalarının Γ vadisinde daha fazla olması, yüksek sıcaklıktaki duruma göre elektrik alan artarken daha uzun süre varlıklarını göstermeleri ve bu saçılmaların esnek saçılmalar olması sürüklenme hızının daha yüksek değerler almasını açıklayabilir. Aynı zamanda yayınım saçılmalarının da arttığı görülmüştür. Bu saçılmalar sayesinde enerji dengelenmiştir.

KAYNAKLAR DİZİNİ

Abou El-Ela F. M., (2005), *Monte Carlo Simulation of Electron Transport in AlGaAs,* AIP Conference Proceedings, 748(1). 86-92. https://doi.org/10.1063/1.1896479

Akarsu, M., (2003), *Hg katkılanmış CdTe yarıiletken bileşiğinde taşınım özelliklerinin Monte Carlo simülasyonu ile belirlenmesi*, Doktora tezi, ESOGÜ, 118s.

Akarsu, M., Özbaş, Ö. (2005), *Monte Carlo Simulation for Electron Dynamics in Semiconductor Devices*. Mathematical and Computational Applications, *10*(1), 19-26. https://doi.org/10.3390/mca10010019

Adachi S., (1985). *GaAs, AlAs, and AlxGa1−xAs: Material parameters for use in research and device applications,* Journal of Applied Physics, 58(2). https://doi.org/10.1063/1.336070

Arabshashi H., Khalvati M., Roknabadi M., (2008) *Monte Carlo Modeling of Hot Electron Transport in Bulk AlAs, AlGaAs and GaAs at Room Temperature*, Modern Physics Letters, 22(18), 1777-1784. DOI:10.1142/S0217984908016376

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. https://doi.org/10.1016/0022-3697(70)90001-6

Guen-Bouazza A., Sayah C., Bouazza B., Chabane-Sari N. E.,(2013), *Steady-State and Transient Electron Transport within Bulk InAs, InP and GaAs: An Updated Semiclassical Three-Valley Monte Carlo Simulation Analysis*, Journal of Modern Physics, 4, 616-621, 10.4236/jmp.2013.45089

Hava S., Auslender M., (1993), Velocity-field relation in GaAlAs versus alloy composition, Journal of Applied Physics, 73(11), 7431-7434 https://doi.org/10.1063/1.353985

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. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.55.645

Jacoboni C., Lugli P., (1989), *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation,* Springer-Wien New York, 356p. https://doi.org/10.1007/978-3-7091-6963-6

Jacoboni, C. (2010). *Theory of electron transport in semiconductors: a pathway from elementary physics to nonequilibrium green functions*. Heidelberg; New York: Springer.

KAYNAKLAR DİZİNİ

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. 182p.

Lundstrom Mark, (2000), Fundamentals of Carrier Transport, Cambridge University Press, 2.Baskı, 418p.

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

Mostefai A., (2022), *Characterization of Aluminum Gallium Arsenide ($Al_xGa_{1-x}As$) Semiconductors Using matlab,* Journal of Nano and Electronic Physics, 14. https://doi.org/10.21272/jnep.14(2).02029

Özbaş Ö., Akarsu M., (2002) *Monte Carlo Simulation of Electron Transport in InSb,* Turkish Journal of Physics, 26, 283-286. https://journals.tubitak.gov.tr/physics/vol26/iss4/6/, Erişim Tarihi: 4.12.2023

Feenstra R.M., Stroscio J. A., (1993), *5.3. Gallium Arsenide*, Methods in Experimental Physics 27, 251-276. https://doi.org/10.1016/S0076-695X(08)60012-5

Saxena A. K., (1981) *Intervalley scattering in $Ga_{1-x}Al_xAs$ alloys*, 52, 5643–5646 https://doi.org/10.1063/1.329498

Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. R., (2001), *Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys,* Journal of Applied Physics, 89, 5815–5875, https://doi.org/10.1063/1.1368156