

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**Delta Katkılı Yarıiletkenlerde Elektronların Taşınım  
Özelliklerinin Monte Carlo Yöntemi ile İncelenmesi**

**Melike YILMAZ**

*Fizik Anabilim Dalı*

Mayıs, 2024

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZ ONAYI

**Delta Katkılı Yarıiletkenlerde Elektronların Taşınım  
Özelliklerinin Monte Carlo Yöntemi ile İncelenmesi**

**Melike YILMAZ**

*Fizik Anabilim Dalı*

Bu Yüksek Lisans Tezi 6/5/2024 Tarihinde Aşağıdaki Jüri Üyeleri Tarafından Değerlendirilmiş ve Oy Birliği / Oy Çokluğu ile Kabul Edilmiştir.

Jüri : Doç. Dr. Berrin ÖZDEMİR (Danışman) .....  
: Doç. Dr. Mustafa AKYOL .....  
: Dr. Öğr. Üye. M. Zeki KURT .....

**Bu Tez Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalında Hazırlanmıştır.**

**Tez No:**

**Prof.Dr. Sadık DİNÇER**  
**Enstitü Müdürü**

**Not:** Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaktan yapılan bildirişlerin, çizelge ve fotoğrafların kaynak gösterilmeden kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.

## İÇİNDEKİLER

ÖZ .....	I
ABSTRACT .....	II
TEŞEKKÜR.....	III
ÇİZELGELER DİZİNİ .....	IV
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	V
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	VII
1. GİRİŞ .....	1
1.1. Yarıiletken.....	1
1.2. Yarıiletkenlerde Katkılama .....	4
1.2.1. P-Tipi Yarıiletkenler .....	5
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR.....	9
3. MATERYAL VE METOT.....	13
3.1. Düşük Boyutlu Kuantum Sistemleri .....	13
3.2. Delta Katkılama .....	14
3.3. İki Boyutlu Sistemler İçin Schrödinger Denklemi.....	16
3.5. Fermi Altın Kuralı.....	20
3.6. Saçılma Mekanizmaları.....	21
3.6.1. Akustik Fonon Saçılmaları.....	23
3.6.2. Polar Optik Fonon Saçılmaları.....	25
3.8. Monte Carlo Benzetişim Yöntemi ile Parçacık Taşınım Özelliklerinin Bulunması .....	28
4. BULGULAR VE TARTIŞMA .....	31
4.1. Poisson ve Schrödinger Denklemlerinin Kendi İçinde Uyumlu Çözümü.....	31
4.2. Saçılma Oranları .....	32
4.2.1. Akustik Fononlardan Saçılma Oranları.....	32
4.2.2. Polar Optik Fononlardan Saçılma Oranları .....	35
4.3. Kinetik Monte Carlo Simülasyonları .....	36
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER .....	45
KAYNAKLAR .....	47
ÖZGEÇMİŞ .....	51

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**Delta Katkılı Yarıiletkenlerde Elektronların Taşınım  
Özelliklerinin Monte Carlo Yöntemi ile İncelenmesi**

**Melike YILMAZ**

*Danışman: Doç. Dr. Berrin ÖZDEMİR*

*Fizik Anabilim Dalı*

**ÖZ**

Bir yarıiletken malzemenin delta katkılması sonucu oluşan kuyuya hapsedilen elektronlar yarı iki boyutlu bir elektron gazı (2BEG) oluştururlar. Bu tez çalışmasında oluşan bu iki boyutlu elektron gazının taşınım özellikleri ve taşıyıcı (elektron) mobilitesi Monte Carlo yöntemi ile değişik sıcaklık, katkılama oranı, katkılama geometrisi ve malzeme parametreleri için bulunmuştur. Belirtilen yapı için önce Schrödinger ve Poisson denklemleri kendi içinde uyumlu olarak çözülmüştür. Bu çözümde elektronların içine hapsediği potansiyel enerji profili, enerji seviyeleri, her seviyede tutulan elektron yoğunluğu ve her seviyeye karşılık gelen dalga fonksiyonları Hartree ve etkin kütle yaklaşımları çerçevesinde çözülmüştür. Bulunan dalga fonksiyonları kullanılarak iki boyutlu elektronların akustik ve polar optik fononlardan kaynaklanan seviyelere karşılık gelen bantlar içinde ve bantlar arası saçılma oranları Fermi'nin altın kuralından faydalanılarak hesaplanmıştır. Bulunan saçılma oranları Monte Carlo hesaplamalarında kullanılarak elektronların malzeme düzlemine paralel uygulanan bir elektrik alanı altında taşınım özellikleri farklı sıcaklıklar için hesaplanmıştır. Elektronların zamana göre ortalama hızları ve ortalama kararlı hızları, taşıyıcıların ortalama kararlı hızlarının uygulanan alana göre değişimi sayısal yöntemlerle bulunmuştur. Son olarak hız-uygulanan alan eğrilerinden faydalanılarak mobilite (devingenlik) hesabı yapılmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** Delta Katkılama, Kendi İçinde Uyumlu Hesap, Akustik ve Optik Fonon Saçılmaları, Monte Carlo, Mobilite Yarıiletkenler

---

**Investigation of Electron Transport Properties in Delta  
Doped Semiconductors by Monte Carlo Method**

---

**Melike YILMAZ**

*Advisor: Doç Dr. Berrin ÖZDEMİR*

*Department of Physics*

**ABSTRACT**

Electrons trapped in the well formed by delta doping of a semiconductor material form a quasi-two-dimensional electron gas (2BEG). In this thesis study, the transport properties and carrier (electron) mobility of this two-dimensional electron gas were found for different temperatures, doping ratio, doping geometry and material parameters using the Monte Carlo method. For the specified structure, Schrödinger and Poisson equations were first solved self-consistently. In this solution, the potential energy profile in which the electrons are trapped, the energy levels, the electron density at each level, and the wave functions corresponding to each level are solved within the framework of Hartree and effective mass approaches. Using the found wave functions, the scattering rates of two-dimensional electrons within and between energy bands corresponding to energy levels resulting from acoustic and polar optical phonons were calculated by using Fermi's golden rule. Using the found scattering rates in Monte Carlo calculations, the transport properties of electrons under an electric field applied parallel to the material plane were calculated for different temperatures. The average velocity of electrons as a function of time and their average steady state velocities, and the variation of the average steady state velocities of carriers as a function of the applied field, have been found by numerical methods. Finally, mobility calculation was made using the speed-applied field curves.

**Keywords:** Delta Doping, Self-Consistent Solution, Acoustic and Optical Phonon Scattering, Monte Carlo, Semiconductors

## TEŐEKKÜR

Bu tezi hazırlamamda bana her türlü konuda yardımını esirgemeyen danışman hocam Doç. Dr. Berrin ÖZDEMİR'e öncelikle teşekkür etmek istiyorum.

Yoğun çalışma günlerimde bana ilgisini ve desteğini esirgemeyen, engin bilgisi ve tecrübesi ile yol gösteren değerli hocam Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR'e çok teşekkür etmek istiyorum.

Hayatım boyunca benim için her türlü fedakârlıkları gösteren değerli annem, babam, abim ve Pera YILMAZ'a sonsuz sevgi ve teşekkürlerimi sunarım.



## ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 1.1. Değerlik ve iletim bantları arasındaki enerji aralığı (Kittel, 1996) .....	2
Çizelge 4.1. GaAs için kullanılan parametreler .....	37



## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1. İletken,yalıtkan ve yarıiletken malzemelerin enerji bant yapılarının şematik gösterimi ...	2
Şekil 1.2. Elmasın kristal yapısı .....	3
Şekil 1.3. GaAs elementi için enerji bant yapısı .....	4
Şekil 1.4. Yarıiletken özellik gösteren elementler .....	4
Şekil 1.5. P tipi yarıiletken oluşturulması .....	5
Şekil 1.6. N tipi yarıiletken oluşturulması .....	6
Şekil 1.7. GaAs ve Si katkılanmış AlGaAs ın iletim bandının şematik gösterimi.....	7
Şekil 1.8. Si atomlarının iyonlaştıktan sonraki iletim bandının yapısı.....	7
Şekil 2.1. Başlığında ‘‘Delta’’ ve ‘‘Dope’’ kelimeleri geçen yayın sayısının yıllara göre değişimi	11
Şekil 3.1. Si ile delta katkılanmış GaAs.....	16
Şekil 3.2. Ge kristali için akustik ve optik fononların dağınım eğrileri.....	22
Şekil 3.3. Boyuna akustik (LA) ve optik (LO) dalgalarının temsili gösterimi.....	23
Şekil 3.4. Denklem (3.29)’ da temsil edilen enerji değerlerinin bir boyutta gösterimi.....	25
Şekil 3.5. Optik fononlardan kaynaklanan elektron saçılmaları (geçişleri) .....	27
Şekil 3.6. Monte Carlo simülasyonu için akış şeması.....	29
Şekil 4.1. Delta katkılı GaAs için potansiyel profili ve enerji seviyeleri ( $\Delta z = 20 \text{ \AA}$ , $N_{3D} = 5 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ ) .....	31
Şekil 4.2. Delta katkılı GaAs için potansiyel profili ve ilk üç enerji seviyesi.....	32
Şekil 4.3. Akustik fononlara karşılık gelen elektron saçılma oranları .....	33
Şekil 4.4. İki boyutlu elektron fonon etkileşimlerinde z- yönündeki momentum korunmaz G <sub>ij</sub> ler etkileşimin matris elemanlarıdır.....	34
Şekil 4.5. Polar optik fononlarda fonon soğurma mekanizmasına karşılık gelen elektron saçılma	35
Şekil 4.6. Polar optik fononlarda fonon soğurma mekanizmasına karşılık gelen elektron saçılma oranlarının grafiği .....	36
Şekil 4.7. Delta katkılı GaAs’ de kuyu içindeki elektronların T= 77 K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri.....	37
Şekil 4.8. Delta katkılı GaAs’ de kuyu içindeki elektronların T= 100 K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri..	38
Şekil 4.9. Delta katkılı GaAs’ de kuyu içindeki elektronların T= 150 K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri..	38
Şekil 4.10. Delta katkılı GaAs’ de kuyu içindeki elektronların T= 200 K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri..	39

Şekil 4.11. Delta katkılı GaAs' de kuyu içindeki elektronların T= 300 K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri..	39
Şekil 4.12. Elektronların ortalama kararlı hızlarının uygulanan elektrik alana göre değişimi .....	41
Şekil 4.13. Sıcaklığa bağlı mobilite hesabı yapmak için hız-alan eğrilerine uydurulan $f(x)=a*x+b*x*x+c$ şeklinde fonksiyon ve gerçek veri noktaları .....	42
Şekil 4.14. Hız-alan eğrilerinin bütün sıcaklıklar için topluca gösterimi .....	43
Şekil 4.15. Elektron mobilitésinin sıcaklığa göre değişimi .....	43



## SİMGELER VE KISALTMALAR

$\epsilon$	: Dielektrik Sabiti
$\hbar$	: Planck Sabiti
$k$	: Dalga Vektörü
$\beta$	: Yay Sabiti
$\omega$	: Fonon Frekansı
$t$	: Zaman
$m^*$	: Etkin Kütle
$m$	: Durgun Kütle
2BEG	: İki Boyutlu Elektron Gazı
$\pi$	: Pi Sayısı
$V(z)$	: Potansiyel Enerji
$E_i$	: Enerji Özdeğerleri
$T$	: Mutlak Sıcaklık
$v$	: Hız
$\mu$	: Mobilite
$c_l$	: Elastik Sabiti
$n(z)$	: Elektron Yoğunluğu
$N_D(z)$	: Verici İyon Yoğunluğu
$N_A(z)$	: Alıcı İyon Yoğunluğu
$E_f$	: Fermi Enerjisi
$k_B$	: Boltzmann Sabiti

## 1. GİRİŞ

Bu çalışmada delta katkılı III-V grubu bileşiklerden olan GaAs malzemesinin çok ince bir katman halinde katkılanması sonucu ortaya çıkan elektronik özellikler sayısal yöntemlerle incelenecektir. GaAs bileşiğinin Si (Silisyum) ile katkılı olduğu ve Ga atomlarının yerine Si atomlarının geçtiği kabul edilecektir. Bu yapılar genel olarak delta katkılı yapılar olarak bilinmektedir ve yarıiletken teknolojisinde önemli bir yere sahiptirler (Schubert, 1995).

Delta katkılı yapılarda, normal bir yarıiletken malzemesine çok ince bir tabaka (10-40 Å kalınlığında) katkı yapılır. Buradaki katmanın, bir delta fonksiyonuna benzerliğinden dolayı işlem delta katkılama olarak adlandırılır. GaAs malzemesinde fazladan serbest elektron veya deşik (hole) taşıyıcıları yaratmak için çoğunlukla Si (silisyum) katkı maddesi olarak kullanılır. Bu yapılar optoelektronik cihazların üretiminde kullanılır. Örneğin, yüksek hızlı elektronik cihazlar (Chabg vd., 2000; Zhao vd., 2020), lazerler (Buchinsky vd., 1996; Buchinsky vd., 1998), optik sensörler (Jaffe vd., 2020) ve yüksek performanslı güneş pilleri (Polly vd., 2014; Sun vd., 2022) gibi birçok uygulamada kullanılabilirler.

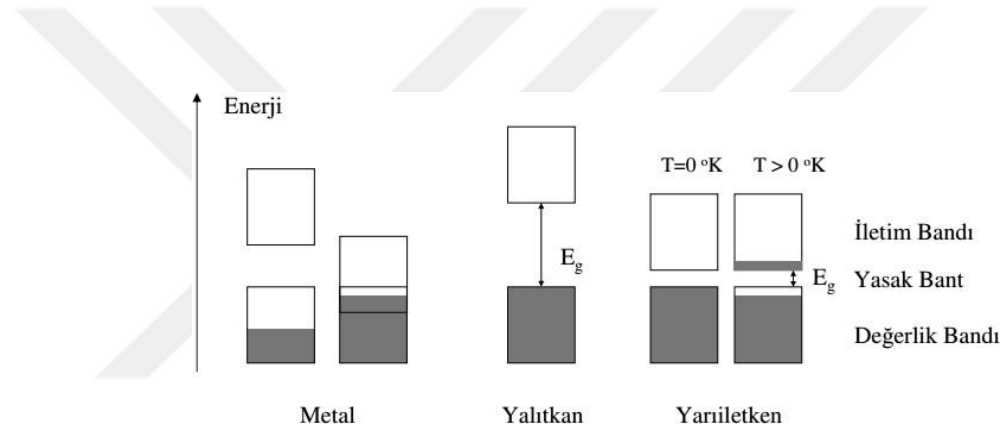
### 1.1. Yarıiletken

Yarıiletken malzemeler iletkenlikleri sıcaklığa hassas bir şekilde bağlı malzemelerdir. Ayrıca bu malzemelerin elektriksel özellikleri yerel olarak değiştirilebilmektedir. Bu nedenle elektronik aygıt yapımında kullanılabilirler. Sıcaklığa bağlı olarak yarıiletkenler hem iletken hem yalıtkan özellikler gösterebilirler (Kittel, 1996).

Maddelerin iletkenlik ve optik özelliklerinin anlaşılabilmesi için enerji bant yapılarının bilinmesi gerekir. Yarıiletkenler için değerlik bandı, atomların dış yörüngesindeki elektronları barındıran banttır ve elektronların bulunduğu en düşük enerji seviyesindedir. İletim bandı ise malzeme içindeki serbest hareket eden elektronların bulunduğu banttır. Şekil 1.1.'de metallerin, yalıtkanların ve yarıiletkenlerin enerji bant yapıları şematik olarak gösterilmiştir. Yarıiletken malzemeler için bant aralığı değerlik bandının en yüksek noktası ile iletim bandının en düşük noktası arasındaki enerji farkıdır (Kittel, 1996). Tüm yarıiletken malzemeler bant aralığına sahiptir. İletim bandının minimum olduğu nokta ile değerlik bandının maksimum olduğu nokta ters örgü uzayında aynı dalga vektörü değerinde oluşuyorsa bu yarıiletken doğrudan (direk) bant yapısına sahiptir denir. Eğer bahsedilen minimum ve maksimum değerler farklı dalga vektörü değerlerinde oluşursa bu yarıiletken dolaylı (indirekt) bant yapısına sahiptir denir. Sıcaklık arttığında değerlik bandındaki elektronların bir kısmı iletim bandına geçebilirler, böylece yarıiletken iletkenlik elektronlarına sahip olur. Örneğin GaAs yarıiletkeni oda sıcaklığında iletken hale gelebilir. Ayrıca yarıiletkenler katkılama yöntemi ile iletkenlik bandında serbest elektronlara sahip olabilirler. Yarıiletkenlerde yasak enerji aralığı genel olarak  $E_g = 0,1 - 5,0$  eV kadardır. Çizelge 1.1.'de bazı elementel ve bileşik yarıiletkenlerin yasak enerji aralıkları 0 K ve 300 K sıcaklıklarında ayrı ayrı verilmiştir. Yasak enerji

aralığının büyüklüğü ve tipi malzemeyi oluşturan atomların etkileşmelerine ve oluşan bağların biçimine bağlıdır.

Günümüzde külçe (bulk) halinde çalışılan yarıiletkenlerin büyük çoğunluğu II-VI grup elemanı olan malzemelerden oluşur. Şekil 1.3'te olası yarıiletken malzemelerini periyodik tablo üzerinden göstermektedir. Örneğin ZnS, II ve VI grup elemanlarıdır, Zn'nin değerlik elektron sayısı 2, S'nin değerlik elektron sayısı 6'dır. Benzer şekilde III. Grup elemanı Ga elementinde 3 adet değerlik elektronu, As'de ise 5 adet değerlik elektronu vardır. IV. Grup elemanı Si ve Ge'de ise 4 adet değerlik elektronu vardır. Bu elementel veya bileşik halindeki yarıiletkenlerin kristal yapısı elmas ve ZnS (çinko sülfür) yapısındadır. Her bir atomun dört adet en yakın komşu atomu vardır ve baskın olarak kovalent bağ yaparlar. Si için, her Si atomunun dört adet Si komşusu vardır, GaAs için her Ga (As) atomunun dört adet As (Ga) en yakın komşu atomu vardır. Şekil 1.2'de elmas yapısı gösterilmiştir.



Şekil 1.1. İletken, yalıtkan ve yarıiletken malzemelerin enerji bant yapılarının şematik gösterimi (Kittel, 1996).

Çizelge 1.1. Değerlik ve iletim bantları arasındaki enerji aralığı (i: indirekt, d: direk band bant yapısı) (Kittel, 1996)

Kristal	Aralık tipi	0 K	300 K	Kristal	Aralık tipi	0 K	300 K
Elmas	i	5.4		SiC (heks)	i	3.0	-
Si	i	1.17	1.11	Tc	d	0.33	-
Ge	i	0.744	0.66	HgTe	d	-0.30	
GaSn	d	0.00	0.00	PbS	d	0.286	0.34-0.37
InSb	d	0.23	0.17	PbSe	i	0.165	0.27
GaP	i	2.32	2.25	CdSe	d	1.840	1.74
GaAs	d	1.52	1.43	CdTe	d	1.607	1.44
GaSb	d	0.81	0.68	SnTe	d	0.3	0.18

Enerji bant yapısının tam olarak belirlenmesi için kristal içindeki bütün etkileşmeler dikkate alınarak Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Örnek olarak Şekil 1.3.'de GaAs enerji bant yapısı ters örgü uzayında belirli yüksek simetri noktaları boyunca gösterilmiştir. Şekilde görüldüğü

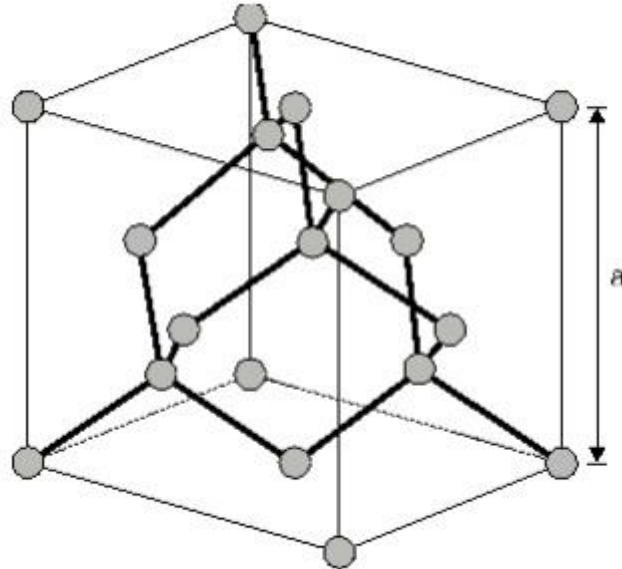
gibi GaAs direk bant yapısına sahip olup yasak enerji aralığı 1.424 eV kadardır. Değerlik enerji bandının maksimum değeri referans alınarak bu civardaki değerlik ve iletim bandı enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi yazılabilir. Değerlik bandı için enerji

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad (1.1)$$

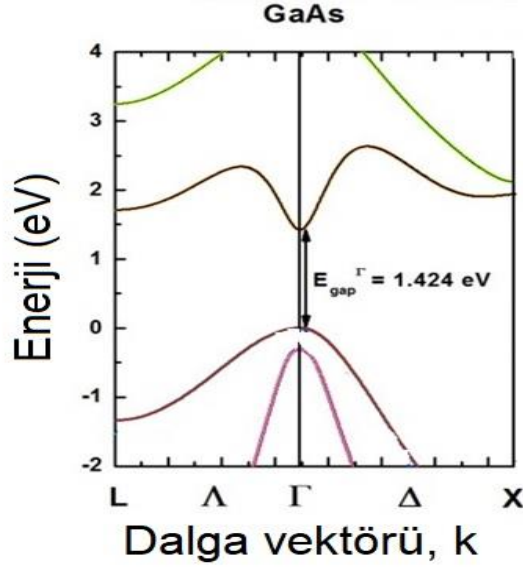
şeklinde yazılabilir. Burada  $m_h$  boşluklar için etkin kütle değeridir. En düşük işgal edilmemiş enerji bandı iletkenlik bandı olarak bilinir ve değerlik bandından tipik olarak 1eV mertebede bir aralık ile ayrılır (Hook, 1999). İletkenlik bandı,

$$E = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (1.2)$$

olarak yazılabilir. Burada  $m_e$  elektronların etkin kütlesidir.



Şekil 1.2. Elmas'ın kristal yapısı (Kittel, 1996).



Şekil 1.3. GaAs elementi için enerji bant yapısı. GaAs yasak enerji aralığı 1.424 eV olan direk yapısına sahip bir yarıiletkenidir. (Kittel, 1996).

Bu çalışma yarıiletken malzemeleri kullanarak elde edilen düşük boyutlu kuantum sistemlerinin elektronik ve taşıma özellikleri üzerinedir. Çalışmada delta katkılamasıyla oluşturulan iki boyutlu elektron gazının taşıma özellikleri Monte Carlo yöntemi ile araştırılmıştır.

IA		IIA		f Transition Elements										IIIB		IVB		VB		VIB		VIIB		VIIIB															
1	H	2	He											3	Li	4	Be											5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne
11	Na	12	Mg											13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar														
19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr				
37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe				
55	Cs	56	Ba	57	La <sup>a</sup>	72	Hf	73	Ta	74	W	75	Re	76	Os	77	Ir	78	Pt	79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn				
87	Fr	88	Ra	89	Ac <sup>a</sup>	104	Unq	105	Unp	106	Uns											111	Sn	112	Pb	113	Bi	114	Po	115	At	116	Lv	117	Ts	118	Og		

Şekil 1.4. Yarıiletken özellik gösteren elementler

## 1.2. Yarıiletkenlerde Katkılama

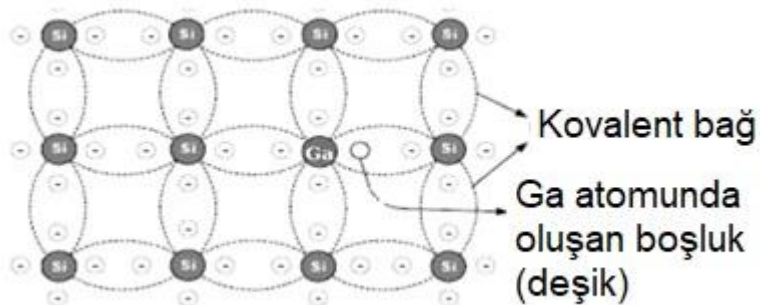
Yarıiletkenlerde katkılama, malzemeye kontrollü bir şekilde belirli atomların eklenmesi veya çıkarılması işlemidir. Bu işlem, yarıiletkenin elektriksel özelliklerini değiştirerek özellikle iletkenlik ve elektriksel kontrol gibi önemli özellikleri ayarlamak için kullanılır. Bir yarıiletken uygun katkı maddeleri ile katkılandığında çoğunluk taşıyıcıları elektronlar veya boşluklar (deşik, hole) olan bir numune elde edilebilir. Bu yolla yarıiletkenlerin elektrik iletim özellikleri değiştirilebilir.

### 1.2.1. P-Tipi Yarıiletkenler

P-tipi yarıiletken, pozitif yüklüymiş gibi davranan aslında bir elektronun olması gereken yerin boş kalmasından dolayı boşluk (deşik) olarak adlandırılan taşıyıcılara sahiptir. P-tipi yarıiletkenler, aşağıda göreceğimiz n-tipi yarıiletkenlerle birlikte, yarıiletken tabanlı elektronik cihazların temelini oluşturan bileşenlerdir.

P-tipi katkılama, örneğin dört değerlikli atomlardan oluşan yarıiletken malzemeye üç değerlikli atomlar ekleyerek gerçekleştirilir. Bu atomlar genellikle bor (B) veya alüminyum (Al) gibi üç değerlikli yarıiletkenlere ait atomlardır. Örneğin Si'nin üç değerlik elektronu olan Ga ile yer değiştirme şeklinde katkıladığını düşünelim. Bir Si atomunu çıkarıp yerine bir Ga atomu koyduğumuz kabul edelim. Her Si atomunun dört komşusu olduğundan, her Si atomu dört komşusuyla dört elektronunu paylaşarak kovalent bağ yapar. Katkılama ile konulan Ga atomunun üç adet değerlik elektronu vardır, bunlarla üç komşusu ile kovalent bağ yapar fakat dördüncü komşu atom için eşleşecek elektronu bulunmaz. Bir elektronun olması gereken yerde olmaması şeklinde oluşan yapıya boşluk (deşik) denir. Şekil 1.5. burada anlatılanları şematik olarak göstermektedir. Deşik pozitif yüklü bir taşıyıcı gibi davranır, elektriksel iletkenliğe katkısı aynı elektronlar gibidir. Bir boşluğun yerini komşu elektronlardan birinin alması Ga atomunun iyonlaşması olarak bilinir ve bu işlem için gerekli enerji meV mertebesinde. Oda sıcaklığında bile termal enerji olarak elektronlar bir boşluğu doldurarak iyonlaşmaya sebep olabilir. Çoğunluk taşıyıcıları deşikler olan yarıiletkenlere p-tipi yarıiletken denir. P-tipi yarıiletkenlerin yapısında deşiklerin yoğun olarak bulunması yarıiletkenin özelliklerini n tipi yarıiletkenlerden farklılaştırır.

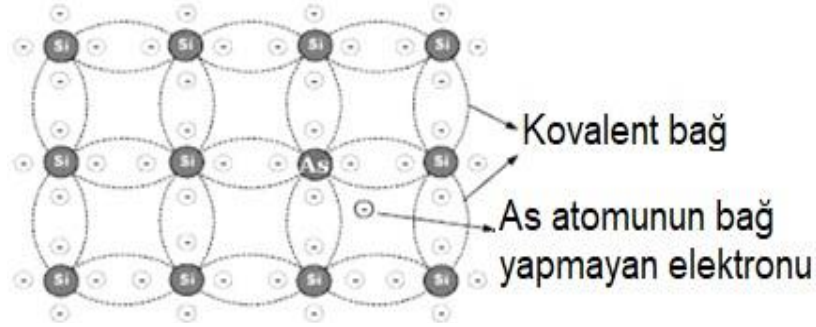
P-tipi yarıiletkenler, birçok elektronik cihazın temel bileşenlerini oluştururlar. P-tipi yarıiletkenlerle n-tipi yarıiletkenlerin art arda gelmesiyle oluşturulan p-n eklemi diyotlar, transistörler ve bütünleşik devreler gibi birçok cihazda kullanılan birçok yarıiletken bileşenin temelini oluşturur.



### 1.2.2. N-Tipi Yarıiletkenler

N-tipi yarıiletken, negatif yük taşıyıcıları (serbest elektronlar) ağırlıklı olarak taşıyan bir yarıiletken türüdür. Si'nin yer değiştirme yoluyla beş değerlik elektronu olan V. Grup elemanı P (fosfor) ve As (arsenik) ile katkıladığını kabul edelim. Bu durumda P'nin dört elektronu komşu dört

Si ile kovalent bağ yapar ve bir elektron açıkta kalır. Bu elektron P atomuna çok zayıf bir bağ ile bağlıdır ve oda sıcaklığında bile termal enerji olarak P atomunda ayrılarak serbest hale gelir. Bu olaya iyonlaşma denir. Çoğunluk taşıyıcıların elektronların olduğu yarıiletkenlere n-tipi yarıiletken denir. N-tipi yarıiletken elde etmek için yapılan katkılama işlemi Şekil 1.6’de şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 1.6 N-tipi yarıiletken oluşturulması

Sonuç olarak yarıiletkenlerde katkılama malzemeye kontrollü bir şekilde uygun atomların eklenmesi işlemidir. Temel amaç yarıiletkenin elektriksel özelliklerini yerel olarak değiştirmektir.

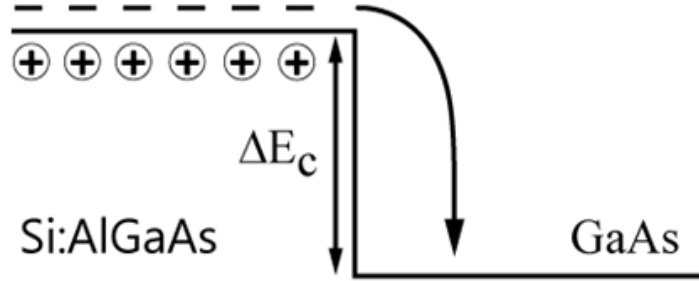
Bu tez çalışmasında iki boyutlu elektron gazının taşınım özellikleri üzerine yoğunlaşmıştır. GaAs yarıiletkenin çok dar bir bölgesinin Si ile katkılanması ile elde edilen iki boyutlu elektron gazının (2BEG) taşınım özellikleri Monte Carlo yöntemi ile incelenmiştir. Konunun detayları 3. ve 4. Bölümlerde verilecektir.

### 1.3. İki Boyutlu Elektron Gazı

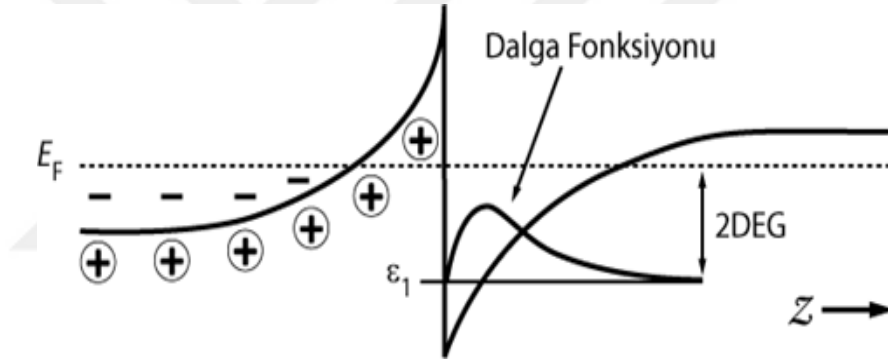
Yukarıda görüldüğü gibi katkılama yöntemi ile sistemdeki serbest elektron sayısı artırılabilir. Bu durum sistemin iletkenliğini etkiler. Bu tezin konusu delta katkılı GaAs için elektron taşınım özellikleri olduğundan, iletkenlik n-tipi olacak şekilde katkılama yapılacaksa, GaAs silisyum atomları ile katkılanır ve katkılama Si, Ga atomları ile yer değiştirecek şekilde yapılır. Böylece eklenen her Si atomu sisteme bir serbest elektron kazandırır. Delta katkılama malzemenin çok ince bir tabakasında yapıldığından, 3. ve 4. Bölümlerde göreceğimizi gibi elektronlar ve iyonlaşan katkılama atomları bir potansiyel kuyusu oluşturur. Bu tek boyutlu bir potansiyel kuyusudur ve katkılı tabakaya dik yönde elektron hareketi kısıtlanmış olur. Böylece iki boyutta serbestçe hareket edebilen elektronların oluşturduğu bir sistem elde edilir ve bu sistem iki boyutlu elektron (2BEG) gazı olarak isimlendirilir.

İki boyutlu elektron gazı elde etmenin bir başka yolu, yasak enerji aralıkları farklı iki yarıiletkenin peş peşe büyütülmesi ile elde edilen hetero yapıları kullanmaktır. Bu yapıda daha büyük yasak enerji aralığı değerine sahip malzeme tarafında bir potansiyel bariyeri oluşur (Şekil 1.6). İki boyutlu elektron gazı oluşturmak için band aralığı büyük olan yarıiletken n-tipi yapı elde edilecek şekilde katkılanır. Katkılama sonucu oluşan serbest elektronlar gidebilecekleri en düşük enerji

seviyelerine yerleşir. Böylece artı ve eksi yükler arasında bir elektrik alanı oluşur, arayüzeyde Şekil 1.7’de gösterildiği gibi üçgensel bir kuantum kuyusu oluşur elektronların hareketi bir yönde tamamen kısıtlanmış olur. Çünkü elektronların geldikleri tarafta bariyer, gidebilecekleri yönde ise elektrik alan hareketlerini kısıtlar.



Şekil 1.7. GaAs ve Si katkılanmış AlGaAs'ın iletim bandının şematik gösterimi (Bastard, 1991).



Şekil 1.8. Si atomlarının iyonlaştıktan sonraki iletim bandının yapısı (Bastard, 1991)



## 2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Farklı elektronik özelliklerin anlaşılması ve metaller ile yarıiletkenler arasındaki ayrım, ancak 1930'lu yıllarda kuantum mekaniği ile gelişmeye başlamıştır. Bu alandaki ilk araştırmalar, Bloch'un ideal kristal yapısındaki periyodik olarak düzenlenmiş atomların potansiyelinin de periyodik olduğu önerisine dayanmaktadır. Bu noktadan yola çıkarak, Schrödinger denklemi, kristal yapıdaki atomların oluşturduğu periyodik bir potansiyel için çözüldüğünde, elektronların belirli enerji seviyelerini alabileceğini göstermek mümkündür. Metaller, yalıtkanlar ve yarıiletkenler arasındaki temel farklılıklar, enerji bandı modeli veya teorisi ile açıklanmaktadır.

Bass tarafından 1979'da yapılan ilk delta katkılama çalışması, silikon metal-oksit-yarıiletken (MOS) transistörlerinin özellikleri üzerindeki etkilerini incelemiştir. Bu çalışmada, uzak delta katkılamanın (remote delta doping) MOS transistörlerinin performansına etkisi araştırılmıştır. Delta katkılamanın, yarıiletkenin özelliklerini nasıl değiştirdiği ve bu değişikliklerin transistör performansına nasıl yansıdığı üzerinde durulmuştur. Bass'ın çalışması, delta katkılamanın yarıiletken cihazlarda kullanımının önemli bir potansiyele sahip olduğunu ve yarıiletken endüstrisi için önemli bir gelişme olduğunu göstermiştir.

Wood ve çalışma grubu (1980), yönlendirilmiş moleküler ışın (MBE, Molecular Beam Epitaxy) yöntemini kullanarak GaAs (Galyum Arsenür) materyali üzerine çalışmıştır. MBE yöntemi, yarıiletken film ve yapıların üretilmesinde kullanılan bir tekniktir ve moleküler demetlerin düzenlemeleri yüzeyde atomik mertebede kontrol edilerek ince film büyütme işlemi gerçekleştirilir. Bu çalışmada GaAs materyali tabakalar halinde Ge atomları ile katkılanmış ve Ga atomlarının yerini Ge atomlarının alması nedeniyle n-tipi malzeme elde edilmiştir. Bu tür çalışmalar, yarıiletken endüstrisinde ve fotonik uygulamalarda kullanılan malzemelerin geliştirilmesine katkı sağlamıştır.

Malik ve çalışma grubu GaAs malzemesini p-tipi delta katkılama yaparak üçgen potansiyel kuyusu elde etmiştir (Malik, 1980). 1980'li yılların ortasına doğru delta katkılama daha çok önem verilmiştir. Düzlemsel delta katkılı alan etkili transistör (FET, Field Effect Transistor) modeli bu yıllarda Board ve ark. (1981) tarafından önerilmiştir. Manyetik alan içerisinde mobilite çalışması sonuçları hızla elde edilmiştir (Zrenner, 1984).

Daha iyi performans özelliği gösteren alan etkili transistörlerin (FET) III-V grubu yarıiletkenler üzerinde farklı delta katkılı yapıların oluşturulmasıyla elde edilmektedir. FET'lerin hemen hepsinde, arayüzeyde oluşan iki boyutlu elektron gazı (2BEG) iletim için kullanılır. Daha sonra bazı avantajları nedeniyle FET'lere alternatif olarak Si delta katkılı alan etkili transistör (DFET) önerilmiştir. Delta katkılı GaAs malzemesinden elde edilen delta katkılı transistör 1986 yılında Schubert tarafından çalışılmıştır (Schubert, 1986).

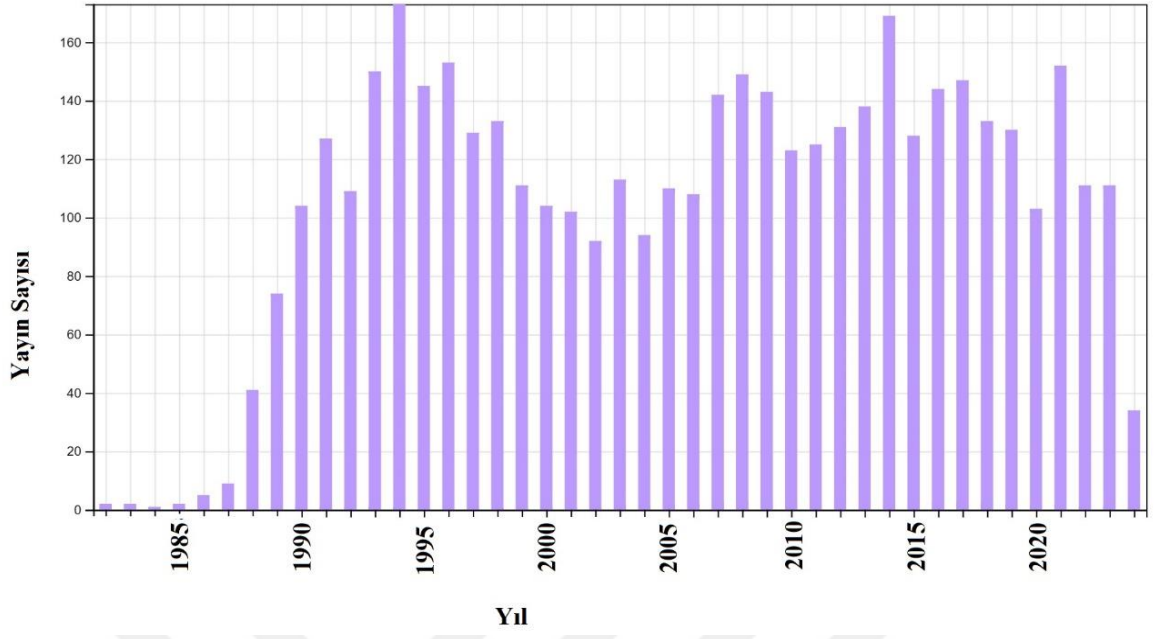
Zrenner (1984) tarafından Si-delta katkılı GaAs üzerine yapılan mobilite çalışması, bir manyetik alanın varlığında elektronların hareketi üzerindeki etkileri incelemektedir. Manyetik alanlar, yarıiletkenlerdeki yük taşıyıcıların hareketini etkileyerek taşıyıcıların yönünde sapmalara sebep olduğundan mobilitenin azalmasına neden olabilir.

Epitaksiyel büyütme yönteminde büyütme ara verilerek delta benzeri katkılamının nasıl yapılacağı ve olası aygıt uygulamaları 1990 yılında Schubert tarafından tartışılmıştır. Delta katkılamının nasıl yapıldığı, epitaksiyel büyütmenin getirdiği yeni olanaklar, iki boyutlu taşıyıcıların eldesi, bunların düşük sıcaklıklardaki özellikleri ve aygıt uygulamaları Whall (1992) tarafından tartışılmıştır. Delta katkılama ile ilgili önemli derleme makalelerden biri 1993'te Harris tarafından yapılmıştır (Harris, 1993). Bu çalışmada daha çok GaAs malzemesinden örnekler verilerek epitaksiyel yöntemle delta katkılanan yarıiletkenlerin yapısal, elektronik ve optik özellikleri tartışılmıştır.

Delta katkılı yarıiletkenlerin büyütülmesi, elektronik yapıları, katkılama bölgesinde oluşan V şekilli kuyu potansiyeli, katkılı bölgede katkılama atomlarının dağılımı, delta katkılı homo ve hetero yapıların elektronik özellikleri, alan etkili transistörler ile ilgili en kapsamlı ilk çalışmalardan biri Schubert (1994) tarafından yapılmıştır. Daha sonra diğerlerinin yanında delta katkılı yarıiletkenlerin teorisi, üretimi, özelliklerinin analizi ve aygıt uygulamaları üzerine kapsamlı ilk kitap Schubert'in editörlüğünde yayınlanmıştır (Schubert, 1995). Bu katkılamalar modern yarıiletken teknolojisinin gelişmesinde anahtar rolü oynamışlardır.

Delta katkılı yarıiletkenlerin elektronik özellikleri teorik olarak sayısal yöntemlerle çalışılmıştır. Bu durumda Schrödinger ve Poisson denklemleri Hartree ve etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde kendi içinde uyumlu çözümlenerek yapının elektronik özellikleri elde edilir. Oluşan V biçimli potansiyel kuyusunun profili, enerji seviyeleri, her seviyede bulunan elektron yoğunluğu, her seviyeye karşılık gelen dalga fonksiyonları kendi içinde uyumlu hesaplardan bulunur (Bastard, 1991; Takagaki ve Ploog, 1995).

Delta katkılı yarıiletkenler ile ilgili yukarıda özeti verilen öncü çalışmalardan sonra konuyu değişik yönlerden inceleyen pek çok çalışma yapılmıştır. Bu çalışmaların yıllara göre değişimi Şekil 2.1'de gösterilmiştir. Bu grafik makale başlığında "Delta" ve "Dope" kelimeleri geçen yayın sayısını vermektedir. Kesin bir rakam olarak alınamamalıdır sadece bir fikir vermesi açısından konulmuştur. Çünkü delta katkılama ile ilgili olup başlığında bu kelimelerin geçmediği yayınlar olabileceği gibi, başlığında bu kelimelerin olduğu fakat konu ile ilgi olmayan yayınlarda olabilecektir.



Şekil 2.1. Başlığında “Delta” ve “Dope” kelimeleri geçen yayın sayısının yıllara göre değişimi.



### 3. MATERYAL VE METOT

#### 3.1. Düşük Boyutlu Kuantum Sistemleri

Düşük boyutlu kuantum sistemleri için boyut kavramı fiziki boyutu değil elektronun serbestçe hareket ettiği yönü, yönleri ifade eder. Örneğin taşıyıcılar (Elektron) iki boyutta hareket ediyorsa sistem iki boyutlu, tek boyutta hareket ediyorsa sistem tek boyutludur. Taşıyıcı herhangi bir yönde hareket etmiyorsa bu tür sistemlere sıfır boyutlu sistemler denir ve büyük bir atom gibi düşünülebilir. Taşıyıcıların üç boyutta serbestçe hareket ettiği malzemelere külçe (Bulk) malzemeler denir. Burada parçacığın hareketi kısıtlanmadığı için bir enerji bandı içindeki enerjisi sürekli olarak alınabilir.

Bu tez çalışmasında GaAs yarıiletkeninin Si ile delta tipi katkıladığı kabul edilerek iki boyutlu elektron gazı (2BEG) elde edilmiş ve teorik olarak elektron taşınım özellikleri Monte Carlo yöntemi kullanılarak araştırılmıştır. Elektronlar için akustik fonon ve polar optik fonon saçılmaları göz önüne alınmıştır. Delta katkılama sonucu oluşan V tipi potansiyel detayları aşağıda anlatıldığı gibi Poisson ve Schrödinger denklemlerinin kendi içinde uyumlu sayısal çözümünden bulunmuştur. Bu çözümde bulunan dalga fonksiyonları ve diğer parametreler kullanılarak elektron saçılma oranları hesaplanmıştır.

Düşük boyutlu kuantum sistemlerinde serbest taşıyıcıların hapsedildiği bölgenin boyutları elektronun de Broglie dalga boyuyla karşılaştırılabilir ölçülerdedir. Bu bölgede taşıyıcıların hareketi bir yönde kısıtlandığından elektronun alabileceği enerji değerleri kuantumlaşır, kesikli enerji seviyelerinde bulunmaya başlarlar. Örneğin bir boyutlu sonsuz bir potansiyel kuyusu için parçacıkların bulunacağı enerji seviyeleri

$$E_N = \frac{\pi^2 \hbar^2 N^2}{2m^*L}, N = 1,2,3 \dots \quad (3.1)$$

ile verilir. Burada  $m^*$  elektronun etkin kütlesi,  $L$  kuyu genişliği  $E_N$  enerji seviyelerini ifade eder. Bu çalışmada parçacığın hareketinin kısıtlandığı yön (katkılama yönü)  $z$  yönü olarak seçilmiştir.

Kuantum sistemlerinde sistemin özelliklerini belirleyen önemli bir parametre durum yoğunluğudur, yani elektronların birim enerji aralığı başına girebilecekleri durum sayısıdır. Boyutları  $L_x$  ve  $L_y$  olan  $S = L_x L_y$  alanlı iki boyutlu bir elektron gazından oluşan bir sistemin durum yoğunluğu

$$D(E) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \quad (3.2)$$

ile verilir (Davies, 1997 ; Bastard, 1991). Eğer elektronun spin durumları göz önüne alınacaksa, bu durumda her enerji seviyesinde iki elektron bulunabileceğinden bu sonucun 2 ile çarpılması gerekir.

Göz önüne alınan iki boyutlu elektron gazı (2BEG) için durum yoğunluğu kullanılarak elektron yoğunluğu için bir ifade bulunabilir. Herhangi bir  $T$  mutlak sıcaklığında elektron yoğunluğu

$$n = \int_0^{\infty} \frac{m^*}{\pi \hbar^2} D(E) f(E) dE \quad (3.3)$$

ile verilir. Burada  $f(E)$  Fermi-Dirac dağılımıdır ve bir durumun bir elektron tarafından işgal edilme olasılığıdır.  $\mu$  2BEG'nin kimyasal potansiyeli ve  $k_B$  Boltzmann sabiti olmak üzere Fermi-Dirac dağılımı

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)/k_B T}} \quad (3.4)$$

ile verilir.  $T = 0$  mutlak sıcaklığından kimyasal potansiyelin değeri Fermi enerjisi  $E_f$  olarak bilinir ve sistemin alabileceği en yüksek enerjili durumun enerjisidir ve bu seviyenin üzerindeki durumlarda elektron bulunmaz. Çoğu durumda kimyasal potansiyelin sıcaklık ile değişimi çok küçük olduğundan  $\mu$  yerine  $E_f$  alınabilir. Ayrıca kuantize olmuş bir sistem için elektronların alabileceği enerji değerleri kesiklidir. Böylece  $E_i$  enerjili bir  $i$  enerji seviyesinde bulunan elektron yoğunluğunu veren ifade

$$n_i = \int_{E_i}^{\infty} \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \frac{1}{1 + e^{(E-E_f)/k_B T}} dE \quad (3.5)$$

olur. Bu integral kolayca alınabilir ve elektron yoğunluğu ifadesi için

$$n_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \cdot \ln \left\{ 1 + \exp \left[ \frac{(E_f - E_i)}{k_B T} \right] \right\} \quad (3.6)$$

elde edilir.  $T = 0$  sıcaklığında ise  $f(E) = 1$  olduğundan bu ifade aşağıdaki gibi basitleşir.

$$n_i = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_f - E_i) \quad (3.7)$$

### 3.2. Delta Katkılama

Yarıiletkenlerde serbest taşıyıcı yoğunluk değişimini kontrollü bir şekilde yapmak için katkılama yapılır. Böylelikle boyutların biri yönünde hareket kabiliyeti olmayan fakat iki boyutta tamamen serbest olan iki boyuta kısıtlanmış serbest elektronlar elde etmek mümkündür. Bu şekilde

elde edilen elektronlara “iki boyutlu elektron gazı” (2BEG) denir. Bir yarıiletkende belirli bir bölgeye kısıtlanmış 2BEG’ı elde etmenin bir yolu yasak enerji aralıkları farklı olan yarıiletkenleri üst üste büyüterek hetero eklemlerin ara yüzeyinde hapsedilmiş serbest elektron elde etmektir (Davies, 1997). Bu tez çalışmasında kullanılacak diğer bir yöntem ise delta katkılama’dır. Yarıiletken çok ince bir tabaka halinde katkılanır. Bu şekilde elde edilen yapıya çok dar bir bölgenin katkılanmış olmasından dolayı “delta katkılı” yarıiletken denir. Katkılama atomları yarıiletkene fazladan elektron verme potansiyeli olan verici veya yarıiletkene fazladan boşluk (hole) sağlama potansiyeli olan alıcı atomlarla yapılabilir.

Delta katkılama katkılanan yarıiletken içindeki tüm katkılama atomları birkaç atomik tabaka ile sınırlanarak dar bir katkı profili oluşur (Şekil 3.1). Katkılama atomlarının yoğunluğu ve konumu delta katkılı malzemenin elektronik özelliklerini belirlemede gerekli önemli iki parametredir. Şekil 3.1’de gösterildiği gibi katkılama yönü  $z$ -olarak seçilirse, katkılama atomları  $xy$ -düzlemi üzerinde bulunur.  $z = z_d$  düzlemi, katkılama atomlarının bulunduğu düzlemi temsil eder. Katkılama atomlarının dağılımı, katkılama çok dar bir bölgede yapıldığından bir delta fonksiyonu ile temsil edilebilir.

$$N(z) = N^{2D} \delta(z - z_d) \quad (3.8)$$

Burada  $N(z)$  katkılama yoğunluğunun değişimini verir.  $N^{2D}$  Birim alan başına düşen katkılama atom yoğunluğudur. Bu denklem  $z = z_d$  hariç tüm konumlarda katkılama yoğunluğunun sıfır olduğunu ifade eder (Schubert, 1996). İki boyutlu katkı yoğunluğu, denklem (3.7)’in integrali ile elde edilir:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N(z) dz = N^{2D} \quad (3.9)$$

Katkılama atomları katkılanan yarıiletkene fazladan serbest elektronlar kazandırıyor ise verici katkılama atomu, fazladan boşluk kazandırıyor ise alıcı katkılama atomu olarak bilinir. Bu tez çalışmasında Si (silisyum) katkılı GaAs malzemesinin elektronik ve elektron taşınım özellikleri incelenecektir. GaAs malzemesine üretim esnasında belirli bir tabaka içinde bazı Ga atomlarının yerine Si atomlarının katkıladığını düşünelim. Ga’nın en dış yörüngesinde 3 adet elektron, Si’nin en dış yörüngesinde 4 elektron vardır. Si atomu 3 elektronunu Ga ile kovalent bağ yapmak için kullanır, bir elektronu boşta kalır. Bu elektron Si atomuna çok düşük bir enerji (meV) ile bağlanır. Bu elektron oda sıcaklığında kolaylıkla iyonlaşabilir yani serbest hale gelir. Geride kalan bir elektronu kaybetmiş Si atomu pozitif bir iyondur. Oda sıcaklığında bütün verici atomların iyonlaştığı kabul edilebilir, iyonlaşma enerjisi (Kittel, 1996)

$$E_d = \frac{m^* e^4}{2(4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar)^2} \quad (3.10)$$

ile verilir. Burada  $\epsilon_0$  serbest uzayın elektriksel geçirgenliği,  $\epsilon$  malzemenin dielektrik sabiti ve  $e$  elektronun yüküdür. GaAs için  $m^* = 0.067m$  ve  $\epsilon = 13.1$  değerleri kullanılırsa,  $E_d = 5.7$  meV bulunur. Oda sıcaklığında  $k_B T = 26$  meV olduğu düşünülürse, bütün verici atomların iyonlaştığı kabul edilebilir.

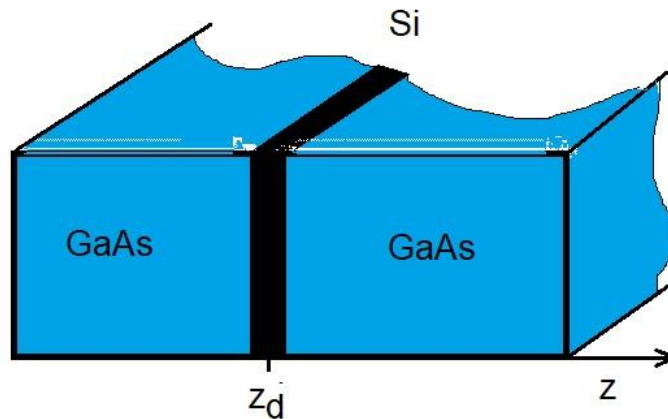
Denklem (3.7) tarafından verilen katkılama atomlarının dağılımının oluşturduğu potansiyel kuyusu Poisson denkleminin

$$\frac{d^2V}{dz^2} = \frac{4\pi}{\epsilon} eN(z) \quad (3.11)$$

çözümünden bulunabilir, sonuç aşağıda verildiği gibidir

$$V(z) = \begin{cases} -\frac{eN_D^{2D}(z-z_d)}{2\epsilon} & \text{for } z \leq z_d \\ +\frac{eN_D^{2D}(z-z_d)}{2\epsilon} & \text{for } z \geq z_d \end{cases} \quad (3.12)$$

Yukarıdaki denklem tarafından tanımlanan potansiyel,  $z_d$ 'ye göre simetrik bir V şekli sergilemektedir. Bu çözüm ancak yaklaşık bir çözümü temsil etmekte olup, çözüme V biçimindeki potansiyel kuyusu içinde bulunan elektron yoğunluğu probleme dahil edilmemiştir.



Şekil 3.1. Si ile delta katkılanmış GaAs.

### 3.3. İki Boyutlu Sistemler İçin Schrödinger Denklemi

Düşük boyutlu kuantum sistemlerinden iki boyutlu elektron gazının Schrödinger denklemini yazmak için parçacığın davranış biçimi göz önüne alınır. Elektronlar iki boyutta serbest olarak hareket edebildiği için bu yönlerdeki dalga fonksiyonları düzlem dalgalarıdır. Elektronun hareketinin

kısıtlandığı yöndeki dalga fonksiyonu ise ilerdeki denklemlerde vereceğimiz gibi tek boyutlu Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilir. İki-boyutlu kuantum sistemleri için bir örnek olarak, sonsuz kuyu potansiyeli sıklıkla ele alınır. Sonsuz kuyu potansiyeli, parçacığın tamamen hapsedildiği bir potansiyel enerji durumunu temsil eder.

Bir parçacık için en genel Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*}\right) \nabla^2 \psi + V(x, y, z) \psi = E \psi \quad (3.13)$$

Ele alınan problemde sadece z yönünde sınırlayıcı bir potansiyel olduğundan Schrödinger denklemi aşağıdaki verildiği gibi yazılabilir.

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*}\right) \nabla^2 \psi + V(z) \psi = E \psi \quad (3.14)$$

$V(z)$  z-yönündeki sınırlayıcı potansiyeli,  $m^*$  ise elektronun etkin kütlesini temsil eder. Çözüm  $x$  ve  $y$  yönleri için serbest elektronu temsil etmek üzere düzlem dalgalar,  $z$  yönü için henüz bilmediğimiz  $\chi(z)$  dalga fonksiyonunu varsayalım. Bu durumda dalga fonksiyonu

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_x x} e^{ik_y y} \chi(z) \quad (3.15)$$

olur. Burada  $k_x$  ve  $k_y$  elektronun dalga vektörünün  $x$  ve  $y$  bileşenleridir.

Bu ifadeyi Schrödinger denkleminde (3.12) yerine yazalım:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\right) \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] e^{ik_x x} e^{ik_y y} \chi(z) + V(z) e^{ik_x x} e^{ik_y y} \chi(z) = E e^{ik_x x} e^{ik_y y} \chi(z) \quad (3.16)$$

Gerekli türevler alınır ve denklem yeniden düzenlenirse

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \chi(z)}{\partial z^2} + V(z) \chi(z) = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad (3.17)$$

elde edilir.

$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad (3.18)$$

olmak üzere denklemin son hali

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \chi(z)}{\partial z^2} + V(z)\chi(z) = \varepsilon\chi(z) \quad (3.19)$$

olur. Burada,  $\hbar$  Planck sabitinin indirgenmiş hali,  $m^*$  etkin kütle,  $\chi(z)$  parçacığın dalga fonksiyonu,  $V(z)$  parçacığın konumuna bağlı potansiyel enerjisi,  $\varepsilon$  enerji özdeğeridir. (3.11) ve (3.19) denklemleri kendi içinde uyumlu çözümlenmelidir çünkü potansiyelin biçimi, içinde tutulan elektron yoğunluğunu belirlemekte, diğer yanda ise elektron yoğunluğu potansiyelin biçimini belirlemektedir. Analitik yaklaşık çözümler bulunabilir fakat çok uzun ve sıkıcı denklem kümeleri ile uğraşmayı gerektirir (Bastard, 1991). Bunun yerine bu çalışmada Poisson ve Schrödinger denklemleri kendi içinde uyumlu olarak sayısal yöntemlerle çözülecektir.

### 3.4. Yarıiletkende Poisson/Schrödinger Denklemlerinin Kendi İçinde Uyumlu Çözümü

Schrödinger ve Poisson denklemlerinin kendi içinde uyumlu çözümünde Hartree ve etkin kütle yaklaşımları kullanılmıştır. Delta katkılı dar bölge (delta katkılama),  $L_0$  genişliğinde sonsuz bir kuantum kuyusuna yerleştirilmiş olarak modellenmiştir. Kuantize enerji seviyeleri  $E_i$  ve bunlara karşılık gelen dalga fonksiyonları  $\chi_i(z)$ , aşağıdaki Schrödinger denklemiyle ifade edilir:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \chi_i(z) + V(z)\chi_i(z) = \varepsilon_i \chi_i(z) \quad (3.20)$$

Bu denklemde  $V(z)$  Hartree potansiyelini ifade eder. Hartree potansiyeli, yüklü parçacıklar arasındaki Coulomb etkileşiminin genel ifadesidir. Bir elektron diğer tüm elektronların yarattığı ortak potansiyelin etkisinde olarak ele alınır. Böylece çok parçacıklı sistem tek parçacıklı sisteme indirgenebilir. Normalde klasik ve kuantum mekaniğinde ikiden fazla etkileşen parçacık var ise problem analitik olarak çözülemez. Birden fazla yüklü parçacığın olduğu problemlerde Hartree potansiyeli yaklaşımı problemin çözümünü kolaylaştırır. Bu bağlamda tek bir parçacık için Schrödinger denklemi Hartree yaklaşımı kullanılarak yazıldı. (Kittel, 1996). Kısaca bir elektron diğer tüm elektronların oluşturduğu potansiyelin (Hartree potansiyeli) etkisi altında olduğu göz önüne alınır.

Bu sayede, tek bir elektron için Schrödinger denklemi yazılarak, elektronun maruz kaldığı Hartree potansiyeli, Poisson ve Schrödinger denklemlerinin kendi içinde uyumlu olarak sayısal hesabından elde edilmiştir. Poisson denkleminin çözümünde sistemde bulunan bütün yükler göz

önüne alınmalıdır.  $N_d(z)$  iyonlaşmış verici katkı atomlarından kaynaklanan yük yoğunluğu ve  $\epsilon$  GaAs için dielektrik sabiti olmak üzere,

$$\frac{d^2V(z)}{dz^2} = -4\pi e \frac{1}{\epsilon} [n(z) - N_d(z)] \quad (3.21)$$

Elektron yoğunluğu ile dalga fonksiyonları arasındaki bağıntı,  $n_i$  her seviyedeki elektron yoğunluğu ve  $M$  dolu seviye sayısı olmak üzere, aşağıdaki şekildedir:

$$n(z) = \sum_{i=1}^M n_i |\chi_i(z)|^2 \quad (3.22)$$

Enerji seviyelerindeki elektron yoğunluğu daha önce denklem (3.6)'da verildiği gibi

$$n_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \cdot \ln \left\{ 1 + \exp \left[ \frac{(E_F - E_i)}{k_B T} \right] \right\} \quad (3.23)$$

ile verilir. Burada,  $k_B$  Boltzmann sabiti ve  $E_F$  Fermi enerjisidir. Fermi enerjisi bir parçacığın bir enerji seviyesini yüzde elli olasılıkla işgal edebildiği enerji seviyesidir. Örneğin mutlak sıfır sıcaklıkta Fermi enerjine kadar bütün durumlar elektronlar tarafından işgal edilmiştir.

(3.20) ve (3.21) denklemlerinde verilen Schrödinger ve Poisson denklemlerinin kendi içinde uyumlu sayısal çözümü için bu denklemlerde türevler için sonlu farklar yaklaşımı kullanılarak bir boyutta eşit aralıklı bir noktalar kümesi için ayrı denklemler elde edildi ve yineleme (iteratif) yöntemi kullanılarak sayısal olarak çözüldü (Press vd., 1986; Tan vd., 1990; Yazar vd., 2005). İlk önce  $V(z)$  potansiyeli için bir varsayım yapılarak (3.20) ve (3.21) denklemlerinden dalga fonksiyonları  $\chi_i(z)$  ve enerji özdeğerleri  $\epsilon_i$ 'ler hesaplandı. Daha sonra (3.22) ve (3.23) denklemlerinden her seviyedeki elektron yoğunluğu  $n_i$  ve toplam elektron yoğunluğu  $n(z)$  hesaplandı. (3.21) denklemi yeniden çözülerek yeni bir  $V(z)$  potansiyeli sayısal olarak hesaplandı. Bu işlemlere potansiyel için peş peşe gelen iki çözüm arasındaki fark daha önce belirlenmiş bir değerden küçük oluncaya kadar devam edildi. Bu şekilde bulunan bir potansiyel enerji profili Şekil 4.1'de verilmiştir.

### 3.5. Fermi Altın Kuralı

Yarıiletken kristallerdeki taşıyıcı hareketi uygulana bir alan altında sürüklenme ve saçılma süreçlerinden oluşur. Genel olarak taşıyıcının bir süre serbest olarak ivmeli sürüklenmesi ardından aniden bir saçılmaya uğraması kabul edilirse problemi takip etmek ve çözmek daha kolay olur. Taşıyıcılar kristal içinde çeşitli kaynaklardan, örneğin kristal örgü titreşimlerinden (Fononlar), iyonlardan başka safsızlık atomlarından, kristal kusurlarından dolayı saçılmaya uğrayabilirler. Taşıyıcı saçılması, taşıyıcı taşıma simülasyonları için önemli bir konudur. Bu bölüm, kuantum mekaniğinde birinci dereceden zamana bağlı pertürbasyon teorisine dayanan taşıyıcı saçılmasının temel bilgilerini vermek amacını taşımaktadır.

Saçılma teorisi, Fermi'nin altın kuralına dayanmaktadır. Bu yöntemde saçılmaya sebep olan mekanizmaya karşılık gelen potansiyel, toplam kristal Hamiltonyenine göre bir pertürbasyon potansiyeli olarak ele alınır. Dalga fonksiyonlarında ve enerji seviyelerinde pertürbasyon potansiyelinden dolayı meydana gelen değişimler, pertürbasyona uğramamış sistemin dalga fonksiyonları ve enerji seviyeleri cinsinden ifade edilir. Fermi'nin altın kuralı pertürbasyondan dolayı bir taşıyıcının birim zamanda uğrayacağı saçılma oranını verir. Pertürbasyon teorisinin temelleri (Sakurai ve Napolitano, 2011; Landau ve Lifschitz, 1977; Messiah, 1966) kitaplarından takip edilebilir. Bu tez çalışmasında kullanılan yönüyle konuyu daha iyi takip etmek için (Lundstorm, 2000; Harrison ve Valavanis, 2016; Tomizawa, 1993) kaynaklarına bakılabilir.

Zamana bağlı kuantum mekaniksel pertürbasyon teorisinden çıkartılabilen, yarıiletkenlerde taşıyıcıların saçılma oranını veren, Fermi'nin altın kuralı olarak bilinen temel denklem aşağıda verilmiştir.

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k' | H' | k \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega) \quad (3.24)$$

Bu denklemde  $H'$  saçılma mekanizmasını temsil eden pertürbasyon potansiyelinin konuma bağlı kısmıdır.  $\mathbf{k}$  elektronun saçılmadan önceki dalga vektörünü,  $\mathbf{k}'$  ise saçılmadan sonraki dalga vektörünü gösterir.  $|k\rangle$  ve  $|k'\rangle$  elektronun saçılmadan önceki ve sonraki dalga fonksiyonlarını gösterir ve genel olarak bunlar düzlem dalgalar olarak alınır. Karesi alınmış birinci terim etkileşme matrisi olarak bilinir ve hesaplanması en zor olan ve teorisinin en önemli kısmıdır, buradan diğerleri yanında momentumun korunumu ile ilgili terimler gelir. (3.24) denlemindeki delta fonksiyonu enerjinin korunumunu gösterir.  $\hbar\omega$  terimi elektron fonon etkileşmelerinin olduğu bir durum için fononların enerjisini temsil eder. Bu terimin önündeki negatif işareti alındığında saçılmadan sonraki elektronun enerjisi artmış olur, yani fonon soğurulmuş olur, bu olay fonon soğurma olayı veya soğurmaya karşılık gelen saçılma olarak bilinir. Pozitif işareti alınırsa saçılmadan sonra elektronun enerjisi azalır, elektronun enerjisinin bir kısmını bir fonon oluşturmak için kullanılmıştır, bu olaya fonon yayılımı denir veya yayılım saçılması olarak adlandırılır.

Toplam saçılma oranının bulunması için (3.24) denkleminin bütün olası  $\mathbf{k}'$  vektörleri üzerinden integralinin alınması gerekir. Bu durumda toplam saçılma oranı  $W(k)$

$$W(k) \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(k, k') d^3 k' = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \left| \langle k' | H' | k \rangle \right|^2 \delta(Ek' - Ek \mp \hbar\omega) d^3 k' \quad (3.25)$$

ile verilir (Tomizawa, 1993; Lundstrom, 2000).

### 3.6. Saçılma Mekanizmaları

Düşük boyutlu kuantum sistemlerinde gerçekleşen saçılma, bir parçacığın diğer bir parçacıkla etkileşime girerek enerji, momentum veya açısal momentum alışverişi gerçekleştirdiği bir fiziksel süreçtir. Bu etkileşim sonucu saçılan parçacık, yeni bir momentum ve enerji kazanırken, saçılan ortam ise momentum ve enerji kaybına uğrar. Bu saçılma mekanizmaları, düşük boyutlu kuantum sistemlerinin özelliklerini belirlemede kritik bir rol oynamaktadır.

Bu çalışmada sadece iki saçılma mekanizması göz önüne alınmıştır: Akustik fonon ve polar optik fonon saçılmaları. Kristal içindeki atomlar kendi denge noktaları civarında salınım hareketi yaparlar. Elektronlar bu örgü titreşimlerinden saçılabilirler ve bu saçılma fonon saçılması olarak bilinir. Fononlar kristal içinde kuantize olmuş elastik dalgaları temsil eden parçacıklar olarak düşünülebilir. Kristalin birim hücresi başına bir atom varsa bu kristalde sadece akustik fononlar vardır. Birim hücre başına iki veya daha fazla atom varsa hem akustik hem de optik fononlardan bahsedilebilir. Fononların titreşim frekanslarını dalga vektörünün bir fonksiyonu olarak veren eğrilere fonon dağılım eğrisi denir (Şekil 3.2).

Akustik fononlar ile optik fononların hem titreşim karakteristikleri hem de enerjileri birbirlerinden epey farklıdır. Akustik fononlarda titreşim frekansı dalga vektörüne orijine yakın bölgelerde lineer olarak bağlıdır. Akustik fononların titreşim frekansı  $\omega$  ile malzeme içindeki ses hızı arasında

$$\omega = v_s q \quad (3.26)$$

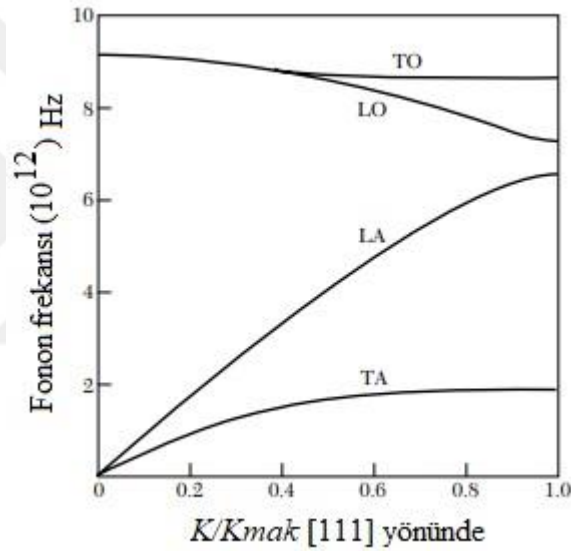
şeklinde bir ilişki vardır,  $q$  akustik fononların dalga vektörüdür. Ses hızı ile malzemenin yoğunluğu  $\rho$  ve elastik sabiti  $c_1$  arasında aşağıda verilen bir ilişki daha vardır.

$$v_s = \sqrt{\frac{c_1}{\rho}} \quad (3.27)$$

Akustik fononların enerjisi oldukça küçüktür, bu nedenle akustik fononlardan kaynaklanan saçılmaların çoğu enerjinin korunduğu elastik etkileşimler olarak düşünülür. Enerjileri düşük

olduğundan düşük sıcaklıklarda sadece akustik fononların olması beklenir. Akustik dalda (uzun dalga boyu limitinde) her iki atomun yer değiştirmeleri aynı büyüklükte, yönde ve fazdadır, bu nedenle akustik bölge salınımlarında kristalin kütle merkezi yer değiştirir. Bu özelliklerinden dolayı elektron-fonon etkileşmelerinin biçimi optik fononlardan farklıdır.

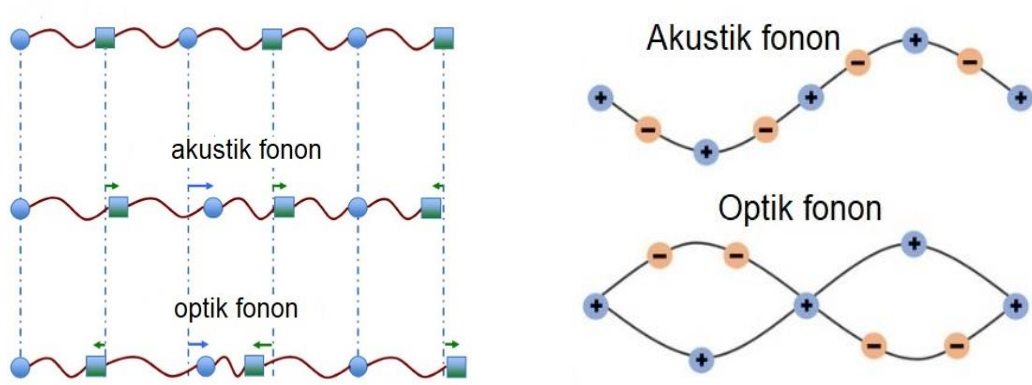
Optik fononların enerjileri akustik fononlara göre daha yüksektir. Optik fononlar için dağılım eğrisi hemen hemen sabit bir değerdir. Yüksek sıcaklıklarda daha çok optik fononların bulunması beklenir. Optik frekans bölgesinde (uzun dalga boyu limitinde), birim hücre içindeki iki atom birbirlerine göre zıt yönde hareket eder (faz dışı salınır) ve hafif kütleli atom daha büyük genlikle hareket eder, bu nedenle kütle merkezi yer değiştirmez. Fakat atomlar birbirlerine yaklaştıklarından kutuplanma etkileri ortaya çıkabilir. Ge kristali için akustik ve optik fononlar için dağılım eğrileri Şekil 3.2'de gösterilmiştir (Kittel, 1996).



Şekil 3.2. Ge kristali için akustik ve optik fononların dağılım eğrileri.

Şekil 3.2.de LA, akustik bölgede boyuna salınımlara karşılık gelen dağılım eğrisini, TA ise aynı bölgede enine salınımlara karşılık gelen dağılımı göstermektedir. LO ve TO optik bölge için benzer dağılımları göstermektedir (Kittel, 1996).

Akustik ve optik fononlara karşılık gelen salınımlar enine veya boyuna olabilir. Şekil 3.3'te birim hücrede kütleleri farklı iki atomun bulunduğu bir boyutlu kristal için boyuna akustik (LA), boyuna optik (LO), enine akustik (TA) ve enine optik (TO) fonon salınımları gösterilmiştir.



Şekil 3.3 Boyuna akustik (LA) ve optik (LO) dalgaların temsili gösterimi (Soldaki şekil). Enine akustik (TA) ve optik (TO) dalgaların temsili gösterimi (Sağdaki şekil)

Optik fononlar birim hücre başına iki veya daha fazla atom varsa oluşabilirler. Akustik fononlarda iki komşu atomun salınımı aynı fazlıdır. Optik fononlarda ise iki komşu atomun salınımı faz dışıdır.

### 3.6.1. Akustik Fonon Saçılmaları

Elektronların akustik fononlardan saçılması elektron-fonon etkileşimleri kapsamında kuantum mekaniği seviyesinde ele alınmalıdır. Elektronların akustik fononlardan saçılmaları Fermi'nin altın kuralı kullanılarak incelenebilir. Saçılma oranları doğrudan sayısal olarak hesaplanabildiği gibi bazı parametrelerin bilinmesi durumunda analitik fonksiyonlar kullanılarak da hesaplanabilir. Bu çalışmada analitik olarak yazılabilen saçılma oranları kullanılacaktır.  $u(r, t)$  atomların denge konumları civarındaki titreşimlerine karşılık gelen yerdeğiştirme vektörü olmak üzere  $H'$  yer değiştirme vektörünün diverjansı şeklinde yazılabilir (Tomizawa, 1993; Lundstrom, 2000).

$$H' = D_0 \nabla \cdot u(r, t) \quad (3.28)$$

Burada geçen  $D_0$  akustik fononlar için deformasyon potansiyeli olarak bilinir. Bu parametre deneysel olarak ölçülebilir veya sayısal yöntemlerle hesaplanabilir.

Fermi'nin altın kuralının tanımlandığı (3.25) denkleminde (3.26)'da verilen ifade yerine konular ve gerekli integraller alınırsa akustik fononlardan kaynaklanan saçılma oranları bulunabilir. Bu çalışmada kuantize olmuş iki boyutlu bir elektron gazı ele alınmaktadır. Elektronların hareketinin iki boyuta sınırlandırılmış olmasından dolayı kesikli enerji seviyeleri oluşur, yani elektronlar her enerji değerini alamaz. Elektronların alabileceği enerji değerleri denklem (3.18)'de verildiği gibi

$$E = \varepsilon_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad (3.29)$$

ile verilir. Burada görüldüğü gibi *inci* seviyede olan bir elektron aslında parabolik bir enerji bandı içindedir ve bu band içinde sahip olabileceği en küçük enerji değeri  $\varepsilon_i$  olacaktır. Elektronların saçılma probleminde band içi saçılmalarının yanında seviyeler arası saçılmalar da göz önüne alınmalıdır. Şekil 3.4, denklem (3.29)'da verilen enerji değerlerini bir boyutta göstermektedir.

Fermi'nin altın kuralında gerekli integraller alınırsa 2BEG'ında elektronların akustik fononlardan kaynaklanan bir *m* seviyesinden bir *n* seviyesine saçılma oranı

$$W_{i \rightarrow f}(k) = \frac{2\pi D_0^2 k_B T_L}{\hbar c_1} \phi(f, i) N_i(E_k) \quad (3.30)$$

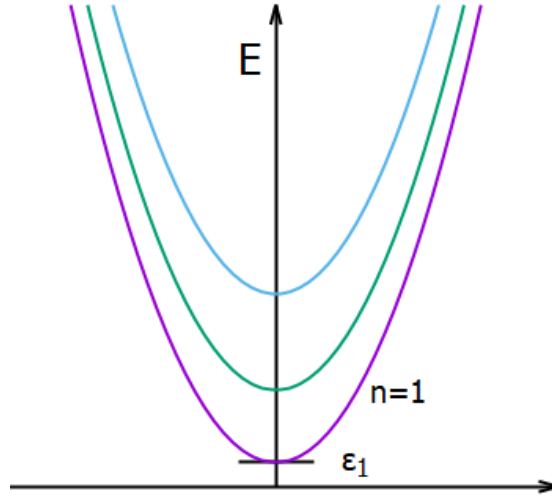
ile verilir. Burada  $T_L$  örgü sıcaklığını,  $k_B$  Boltzmann sabitini,  $D_0$  akustik deformasyon sabitini,  $N_i(E_k)$  ise *inci* seviye için durum yoğunluğunu (denklem (3.2)) temsil eder.  $i = f$  olduğu durum band içi saçılmaları temsil eder.  $\phi(i, f)$  terimi ise

$$G_{if}(q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_f(z) e^{ikq_z z} \chi_i(z) dz \quad (3.31)$$

matris elemanları olmak üzere

$$\phi(f, i) = \int_{-q_{max}}^{q_{max}} |G_{fi}(q_z)|^2 dq_z \quad (3.32)$$

ile verilir.  $G_{if}(q_z)$  terimi *z*-yönünde momentumun korunmamasından kaynaklanır. Bazı *i* ve *f* değerleri için delta katkılı GaAs için Şekil 4.4'de gösterilmiştir.



Şekil 3.4 Denklem (3.29)'da temsil edilen enerji değerlerinin bir boyutta gösterimi.

### 3.6.2. Polar Optik Fonon Saçılmaları

Bir birim hücre içerisinde iki veya daha çok atom olan bir kristalde optik fonon kipleri (titreşimler) oluşur. Atomlar denge noktaları etrafında titreşimleri nedeniyle yer değiştirirler ve böylece potansiyel değişimlerine sebep olurlar. Bu değişimlerden etkilenen elektronlar saçılmaya uğrar. Polar olmayan optik fonon saçılmalarında yer değiştirme ile etkileşim potansiyeli orantılıdır, akustik fononlarda ise potansiyel yer değiştirmelerin diverjansı ile orantılıdır (Denklem 3.28). Bunun sebebi optik fononlarda kütle merkezi sabit kalırken akustik fononlarda yer değiştirmesidir.

Boyuna kristal titreşimleri GaAs gibi iyonik karakteri olan bileşik yarıiletkenlerde kutuplanmaya sebep olabilir. Kutuplanma dalgaları elektronlarla etkileşir ve saçılmalarına sebep olur. Kutuplanma dalgaları akustik veya optik fononlardan kaynaklanabilir. Akustik fononlardan kaynaklanan saçılmalar düşük sıcaklıklarda çok fazla etkilidir, oda sıcaklığında etkileri zayıftır. Boyuna optik fononlardan kaynaklanan kutuplanma nedeniyle saçılmalar ise oda sıcaklığında en baskın saçılma olayıdır (Tomizawa, 1993; Lundstrom, 2000; Harrison ve Valavanis, 2016). Bu çalışmada boyuna optik fononlardan kaynaklanan polar optik fonon saçılması göz önüne alınacaktır.

Polar optik fonon saçılmaları yüksek ve düşük frekansa ve sabit dielektrik sabiti cinsinden çıkartılabilir. İki boyutlu bir yapı için saçılma oranlarının çıkartılması uzun hesaplamalar gerektirmesine rağmen nispeten standart bir yöntemdir. Saçılma oranı farklı yaklaşımlar altında değişik formlarda çıkartılabilir, tam bir çıkarım için Harrison ve Valavanis (2016) takip edilebilir. Onların elde ettiği sonuç doğrudan buraya alınacaktır. İki boyutlu bir yapı için bir  $i$  bandından bir  $f$  bandına saçılma oranı

$$W_{if}(k_i) = \frac{A}{2} \Theta\left(k_i^2 - \frac{2m^*\Delta}{\hbar^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi |G_{if}(q_z)|^2}{\sqrt{q_z^4 + 2q_z^2 \left(2k_i^2 - \frac{2m^*\Delta}{\hbar^2}\right) + \left(\frac{2m^*\Delta}{\hbar^2}\right)^2}} dq_z \quad (3.33)$$

Bu denklemde geçen parametrelerin tanımları şöyledir: A parametresinin değeri yüksek frekans dielektrik sabiti  $\epsilon_{\infty}$ , düşük frekans sabiti  $\epsilon_s$ , elektronun yükü  $e$  ve birim hacim başına düşen fonon sayısı  $n_0$  cinsinden aşağıdaki gibidir.

$$A = \frac{2m^*e^2}{4\pi^2\hbar^2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_s}\right) \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \quad (3.34)$$

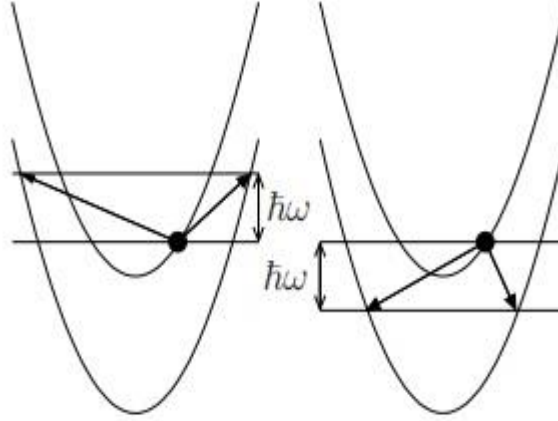
Fononlar bozonlar olup sayıları Bose-Einstein dağılımı ile verilir:

$$n_0 = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (3.35)$$

Burada  $\hbar\omega$  optik fononların enerjisidir.  $G_{if}(q_z)$  fonksiyonları denklem (3.31)'de tanımlandığı gibidir.  $\Delta = \epsilon_f - \epsilon_i \mp \hbar\omega$  olarak tanımlanmıştır. (3.33) denkleminde geçen  $\Theta$  fonksiyonu

Heavyside fonksiyonu olarak bilinir ve  $k_i^2 > \frac{2m^*\Delta}{\hbar^2}$  için  $\Theta=1$  ve  $k_i^2 < \frac{2m^*\Delta}{\hbar^2}$  için  $\Theta=0$  olur.

Polar optik fononlardan kaynaklanan bandlar arası saçılmalar sembolik olarak Şekil 3.5'te gösterilmiştir.



Şekil 3.5. Optik fononlardan kaynaklanan elektron saçılmaları (geçişleri)

Soldaki şekilde üst bantta bulunan bir elektronun bir alt banda fakat enerjisini artırarak (bir fonon soğurarak) geçişi gösterilmiştir. Sağdaki şekilde yine üst bantta bulunan bir elektronun bir alt banda enerji kaybederek (enerjisinin bir kısmını bir fonon oluşturmak için harcayarak) geçişi gösterilmiştir. Aynı band içinde de saçılmalar olabilir fakat bu şekilde gösterilmemiştir.

### 3.7. Mobilite

Mobilite, yüklü taşıyıcıların elektrik alan altında hareket etme yeteneğinin bir ölçüsüdür. Mobilite, tam olarak birim elektrik alanı başına düşen hız olarak tanımlanabilir. Taşıyıcının uygulanan elektrik alanı altında hızlanabilme kabiliyetini gösterir. E elektrik alanı altında taşıyıcıların ortalama sürüklenme hızları  $v_d$  ise, bu alana karşılık gelen mobilite

$$\mu = \frac{v_d}{E} \quad (3.36)$$

şeklinde tanımlanabilir, bu haliyle mobilite uygulanan alana bağlı bir değerdir ve alan bağlı mobilite olarak bilinir. Başka bir tanım ise taşıyıcıların ortalama hızının uygulanan alana göre değişim oranı olarak olarak yapılabilir:

$$\mu = \frac{\partial v_d}{\partial E} \quad (3.37)$$

Bu tez çalışmasında elektronların ortalama kararlı sürüklenme hızları uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak Monte Carlo yöntemi ile bulunmuştur. Burada ilgilenilen düşük alan mobilitesi olduğundan hız-alan eğrisinin türevi düşük alanlar için sayısal olarak hesaplanmıştır, yani

$$\mu = \left. \frac{\partial v_d}{\partial E} \right|_{E=0} \quad (3.38)$$

değeri bulunmuştur ve düşük alan mobilitesi olarak bilinir. Hesaplamaların detayları Bölüm +’te verilmiştir.

Mobilitiyi etkileyen temel parametreler taşıyıcı yoğunluğu, varsa safsızlık oranı, çeşitli saçılma mekanizmaları (fonon, iyon, safsızlık, kusur, elektron-elektron saçılmaları) ve sıcaklıktır. Taşıyıcı yoğunluğu bir malzemede bulunan taşıyıcı sayısını ifade eder. Malzemenin iletkenlik özellikleri sıcaklıktan büyük ölçüde etkilenir çünkü fononların enerjileri ve yoğunluğu sıcaklığa bağlıdır. Genel olarak düşük sıcaklıklarda akustik fononlar etkili olurken yüksek sıcaklıklarda optik fononlar daha etkindir.

### 3.8. Monte Carlo Benzetişim Yöntemi ile Parçacık Taşınım Özelliklerinin Bulunması

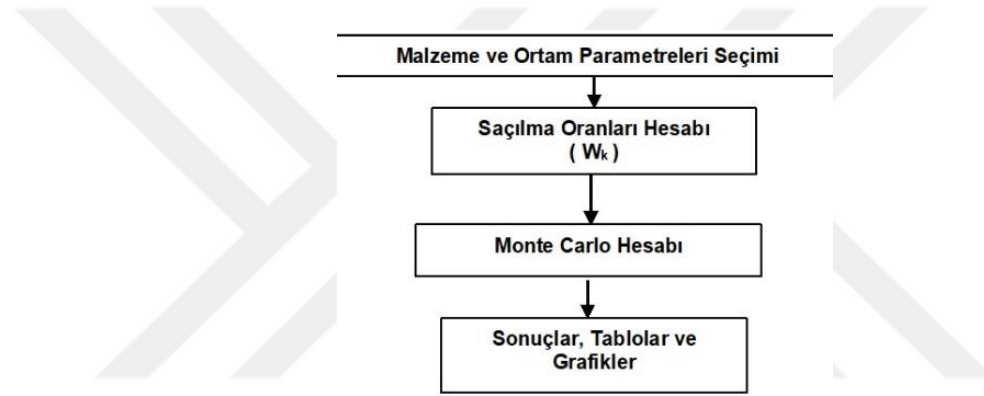
Yarıiletken içindeki elektronların çeşitli mekanizmalardan (akustik ve optik fonon, kusurlar, iyonlar) kaynaklanan saçılma oranları kullanılarak elektronların malzeme içinde taşınım karakteristikleri Monte Carlo metodu ile araştırılabilir. Monte Carlo stokastik süreçlerin bilgisayar ile simülasyonuna dayanan bir yöntemdir (Jacoboni ve Reggiani, 1983; Jacoboni ve Lugli, 1989). Bu çalışmada elektronların taşınım özellikleri Kinetik Monte Carlo yöntemi kullanılarak araştırılacaktır (Fichthorn ve Weinberg, 1991).

Monte Carlo metodu, olasılık teorisini temel alan bir yöntem olup, gerçekte meydana gelen doğal bir süreç istatistiksel yöntemler ile modellenerek, olayın simülasyonunun bilgisayar ortamında gerçekleştirilmesi hedeflenir. MC yöntemi örneklem dünyasından yeterli sayıda ve *rasgele* seçilen olayların gerçek sistemin özelliklerini yansıtacağı kanaatine dayanır. Bu sayede olay hakkında nicel birikim elde edilmesi sağlanılarak olayın analizini yapmak mümkün olur. Monte Carlo yöntemi katı hal fiziğinde elektron taşınım simülasyonlarında sıklıkla kullanılan bir yöntem olup, pek çok bilimsel disiplinde de kullanılmaktadır (nükleer fizik, parçacık fiziği, astrofizik, akışkanlar mekaniği). Yarı iletkenlerde yük taşınımında kullanılan Monte Carlo metodu, bir dış elektrik alanı altında sürüklenen elektronun uğradığı saçılma mekanizmaları, saçılma açıları rastgele sayılar kullanılarak belirlenir ve elektronların ortalama sürüklenme hızını ve konumunu sayısal olarak hesaplar. Bu sürüklenme esnasında önceden kararlaştırılmış saçılma türlerinin meydana gelme olasılığı yukarıda bahsedilen deformasyon potansiyelinden türetilir.

Yarıiletkenlerde yük taşınımında kullanılan Monte Carlo metodunda, uygulanan bir elektrik alanın varlığında ve çeşitli saçılma mekanizmalarının etkisinde, kristal içindeki bir ya da daha fazla elektronun hareketinin simülasyonu söz konusudur. Elektronların yarıiletken içinde taşınım süreci araştırılırken sistem hakkında yeterince doyurucu veri elde etmek için çok sayıda parçacığın simüle edilmesi gerekir ve ilgilenilen süreçte istenen bilgiyi elde etmek için de her bir parçacığın dinamik

geçmiş izlenmelidir. Bu yöntem ensemble veya kinetik Monte Carlo yöntemi olarak bilinir. Günümüzde kullanılan Monte Carlo yöntemlerinin temeli yaklaşık kırk yıl önce atılmaya başlamıştır (Jacoboni ve Reggiani, 1983; Jacoboni ve Lugli, 1989).

Yarıiletken içinde belirli bir alan altında taşınan bir parçacığın hareketi en genel haliyle *saçılma* ve saçılmalar arasında parçacığın *sürüklenme* olaylarının toplamından oluştuğu düşünülebilir. Parçacıkların çeşitli merkezlerden saçılma oranları biliniyorsa, rasgele sayıları kullanarak parçacığın hangi mekanizmaya göre ve hangi açı ile saçılacağı istatistiki olarak bulunabilir. Saçılmanın niteliğine göre saçılmadan sonra parçacığın enerjisi hesaplanabilir, elastik saçılmalarda parçacık enerjisini korurken, fonon saçılmalarında soğurma veya yayılım durumuna göre enerjisi artabilir veya azalabilir. Saçılmadan sonra parçacık serbest uçuş süresi boyunca sürüklenecektir ve bu sürenin her parçacık için ayrı ayrı bilinmesi gerekir.



Şekil 3.6. Monte Carlo simülasyonu için akış şeması.

MC yönteminde saçılma oranlarının kısmi toplamları alınarak normalize edilir ve saçılma olayları  $[0,1]$  aralığına ölçeklenir. Bilgisayarla üretilen rasgele sayılar  $[0, 1]$  aralığına ölçeklidir. Bu aralıktan rasgele seçilen bir sayının karşılık geldiği mekanizma saçılma mekanizması olarak seçilir ve elektronun yeni durumu (Enerjisi, momentumu, saçılma açısı) bu mekanizmanın gerektirdiği şekilde yapılır. Burada görüldüğü gibi MC yöntemlerinde sürekli bir şekilde rasgele sayılara ihtiyaç duyulacaktır. Bilgisayarda üretilen rasgele sayılar genel olarak bir dizinin elemanları olduğundan çoğunlukla yarı rasgele sayılar olarak anılırlar. Bu nedenle daha önce kullanılmış ve test edilmiş, periyodu çok yüksek iyi bir rasgele sayı üreticinin (Algoritmasının) kullanılması çok önemlidir. Bu çalışmada Mersenne Twister adı ile bilinen rasgele sayı üretici kullanılacaktır (Matsumoto ve Hishimura, 1998). Bir MC simülasyonunda program akışı sembolik olarak Şekil 3.6'da gösterilmiştir.

Monte Carlo simülasyonlarında fiziksel sisteme ait malzeme parametrelerinin, enerji bant yapısının, saçılma oranlarının ve örgü sıcaklığının ayrıntılı olarak tanımlanması gerekir. Uygulanan dış alan ve başlangıç koşulları ayrıca tanımlanmalıdır. Bu veriler kullanılarak stokastik saçılma

süreçlerini kontrol eden rasgele sayılarla, elektron hareketinin hem ters örgü uzayında hem de gerçek uzayda simülasyonu elde edilebilir. Rasgele seçilen bir mekanizmaya göre saçılan elektronun bir sonraki etkileşmeye kadar geçen süre “serbest uçuş süresi” olarak ifade edilmektedir. Saçılmalar arasındaki süreçte elektronun sabit bir alanda ivmelendirildiği ve malzemenin enerji bant yapısının belirlediği yarı klasik hareket yasalarına (Denk. (3.40)) uyduğu varsayılır. Çarpışmalar enerjinin bir fonksiyonu olarak belirli olasılıklara sahip rasgele olaylardır. Rasgele sayılar kullanılarak, serbest uçuş zamanı ve saçılma süreçleri (saçılma mekanizmasının seçimi ve parçacığın saçılmadan sonraki özellikleri) kontrol edilir. Elektronlara ait bütün bilgiler her adımda kaydedilerek dinamik olarak taşınım süreci izlenmiş olur ve bilgiler ortalama hız gibi makro büyüklüklerin hesaplanmasında kullanılır (Snowden,1988).

Verilen bir elektronun herhangi bir saçılma sonunda kazandığı yeni enerjisi ve momentumu enerjinin ve kristal momentumunun korunum denklemleri (Denk. (3.39)) ve elektron için yazılan yarı-klasik denklemler (Denk. (3.40)) bulunarak hesaplanır. Korunum kuralları aşağıda verildiği gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned} E' &= E \mp \hbar\omega \\ \vec{k}' &= \vec{k} \mp \vec{q} \end{aligned} \quad (3.39)$$

Burada  $E$  taşıyıcının saçılmadan önceki enerjisi,  $E'$  taşıyıcının saçılmadan sonraki enerjisi olup  $\hbar\omega$  fonon enerjisidir.  $\vec{k}$  ( $\vec{k}'$ ) taşıyıcının saçılmadan önce ve sonraki dalga vektörü,  $\vec{q}$  ise fonon momentumudur. Üst işaret (-) fonon yayınımları, alt işaret (+) ise fonon soğurulmasını temsil eder. Elektron taşınımları temsil eden yarı klasik denklemler ise şöyledir (Sadece bir boyut için yazılmıştır),

$$\begin{aligned} \frac{dk_x}{dt} &= \frac{1}{\hbar} F_x \\ \frac{dx}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_x} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Burada  $F_x$  elektrona uygulanan net kuvveti,  $k_x$  dalga vektörünün  $x$ -bileşenini ve  $x$  elektronun konumunu temsil eder.

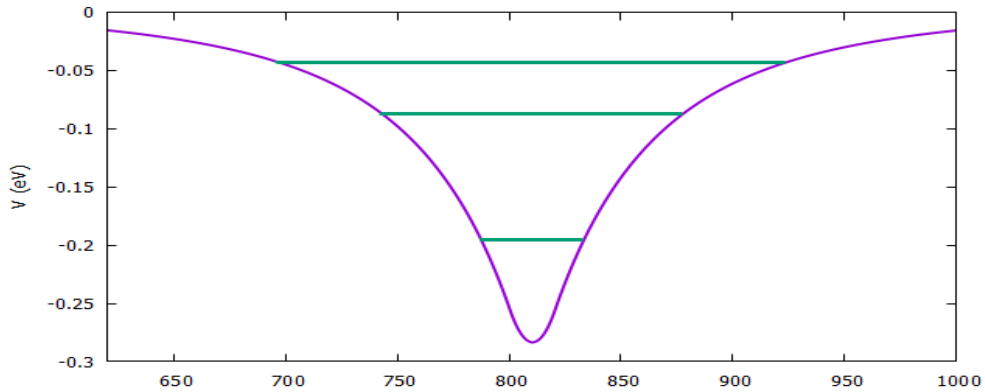
Monte Carlo simülasyonları sonunda taşıyıcıların uygulanan her alan ve sıcaklık değeri için zamana göre ortalama hızları, ulaştıkları ortalama kararlı hız, ortalama kararlı hızın uygulanan alan ile değişimi, parçacıkların ortalama konumu hesaplanabilir. Kararlı hızların uygulanan alan ile değişiminden faydalanarak çeşitli malzeme parametrelerine ve sıcaklığa bağlı olarak taşıyıcıların mobiliteleri hesaplanabilir. Bu ve benzeri çalışmalar Bölüm 4'te sunulmuştur.

#### 4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada 2BEG elde etmek için GaAs materyali silikon atomuyla delta tipi katkılamıştır. GaAs malzemesinin kendisinin de sonlu bir kuyu potansiyeli içinde gibi düşünülmüştür. Silikon atomu ile katkılanan bölge bir potansiyel kuyusu oluşturarak o yöndeki elektronların hareketini kısıtlar. Bu çalışmada bu yön  $z$  yönü olarak seçilmiştir. Yaklaşık olarak her silikon atomundan bir serbest elektron sisteme kazandırıldığı kabul edilmiştir, yani bütün Si verici atomlarının iyonlaştığı kabul edilmiştir. Böylece serbest elektronlar ve iyonların Coulumb etkileşiminden kaynaklanan bir potansiyel kuyusu oluşur. Bu potansiyel kuyu problemi Hartree ve etkin kütle yaklaşımları çerçevesinde Schrödinger denklemi ile kendi içinde uyumlu olarak çözülmüştür.

##### 4.1. Poisson ve Schrödinger Denklemlerinin Kendi İçinde Uyumlu Çözümü

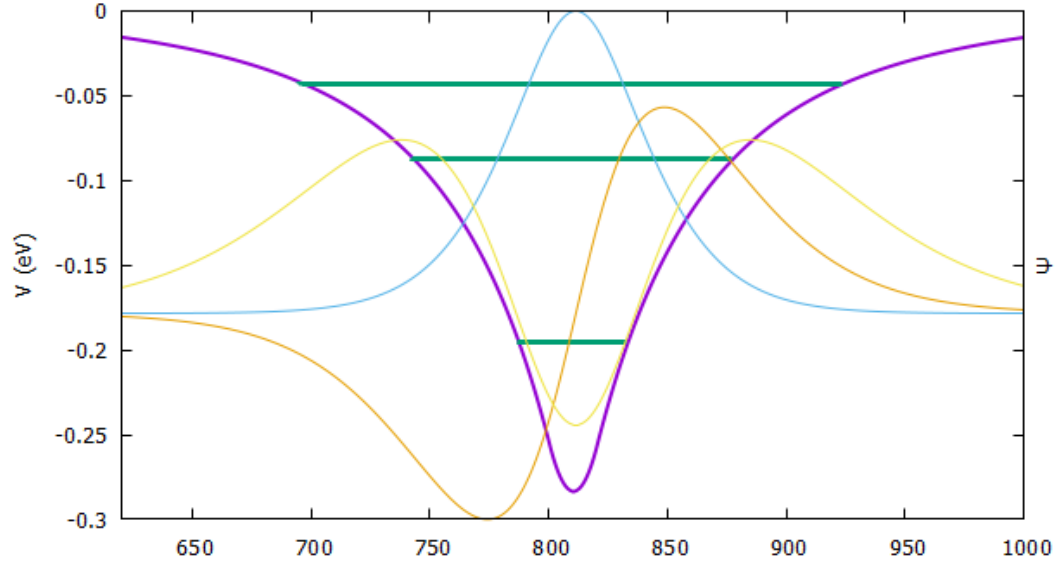
Önce Şekil 3.1’de verilen geometriye uygun olarak Si ile katkılanan GaAs yarıiletkeni için Poisson (Denk. 3.21) ve Schrödinger (Denk. 3.20) denklemlerinin kendi içinde uyumlu çözümlerinin sonuçları verilecektir. Kullanılan malzeme parametreleri Çizelge 4.1’de verilmiştir. Katkılama bölgesi  $\Delta z = 20 \text{ \AA}$  ve katkılama yoğunluğu  $N_{3D} = 5 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$  olarak seçildiğinde elde edilen sonuçlar özetle Şekil 4.1’de gösterilmiştir. Burada  $E_1 = -0.195 \text{ meV}$ ,  $E_2 = -0.087 \text{ meV}$  ve  $E_3 = -0.043 \text{ meV}$ ’dir. Bu üç seviyede tutulan elektron yoğunlukları ise  $n_1 = 1.85 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ,  $n_2 = 9.94 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  ve  $n_3 = 7.3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  olarak bulunmuştur.



Şekil 4.1. Delta katkılı GaAs için potansiyel profili ve enerji seviyeleri ( $\Delta z = 20 \text{ \AA}$ ,  $N_{3D} = 5 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ ).

Şekil 4.1’de delta katkılama sonucu GaAs içinde oluşan ve 2BEG’ini oluşturan elektronların içinde buldukları üçgen benzeri potansiyel profili gösterilmiştir. Potansiyelin genişliği arttıkça enerji seviyeleri arasındaki fark beklendiği gibi azalmaktadır. Kuyu potansiyelinin derinliği ise katkılama oranı arttıkça artmaktadır. Şekil 4.2 ise ek olarak Şekil 4.1’de gösterilen potansiyel kuyusu ve enerji seviyelerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarını göstermektedir. Şekil 4.1’de görüldüğü

gibi üç enerji seviyesinden bağıllık durumu en fazla olan birinci enerji seviyesidir.  $E_2$  ve  $E_3$  enerji seviyelerindeki elektronların serbest hale gelmesi daha kolaydır, çünkü bu enerji seviyeleri delta katkılarından kaynaklanan potansiyel kuyusunun dışına yaklaşmıştır. Şekil 4.2’de gösterilen dalga fonksiyonları bu karakteri yansıtmaktadır, birinci seviyede tutulan elektronlar daha dar bir bölgeye sıkışmış durumdadır.



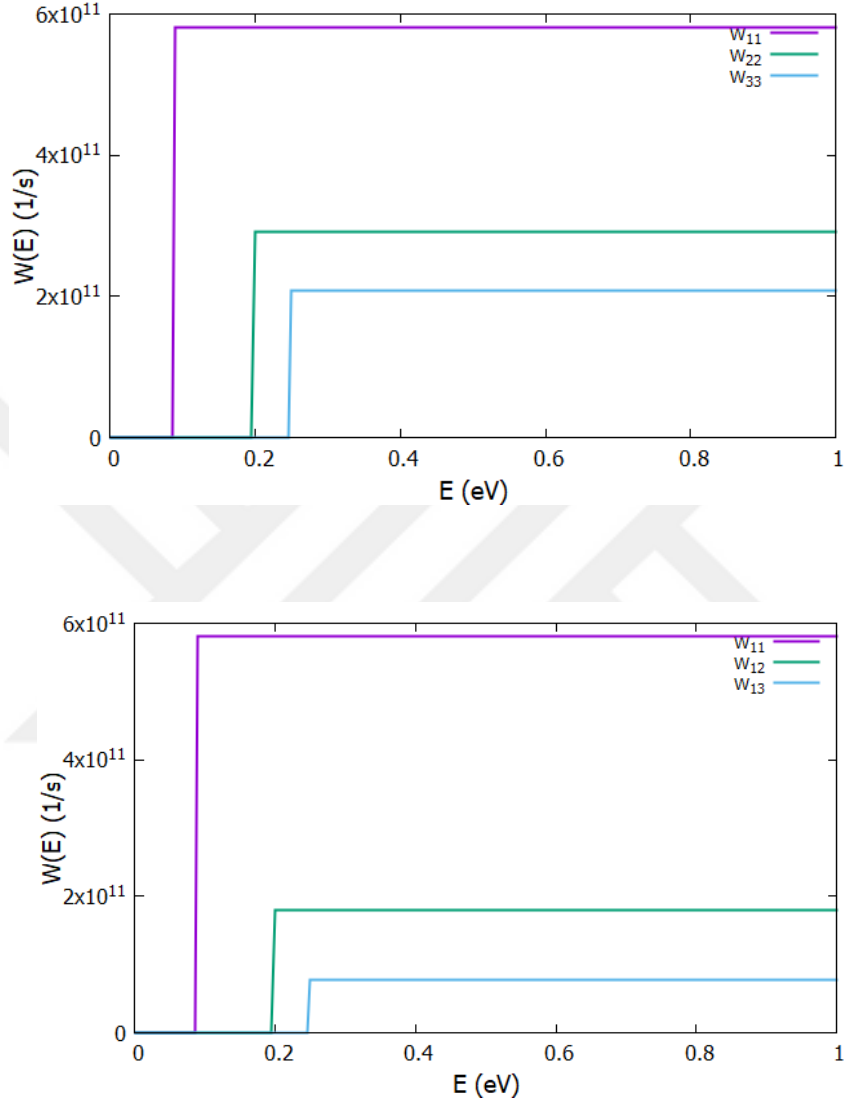
Şekil 4.2. Delta katkılı GaAs için potansiyel profili ve ilk üç enerji seviyesi

## 4.2. Saçılma Oranları

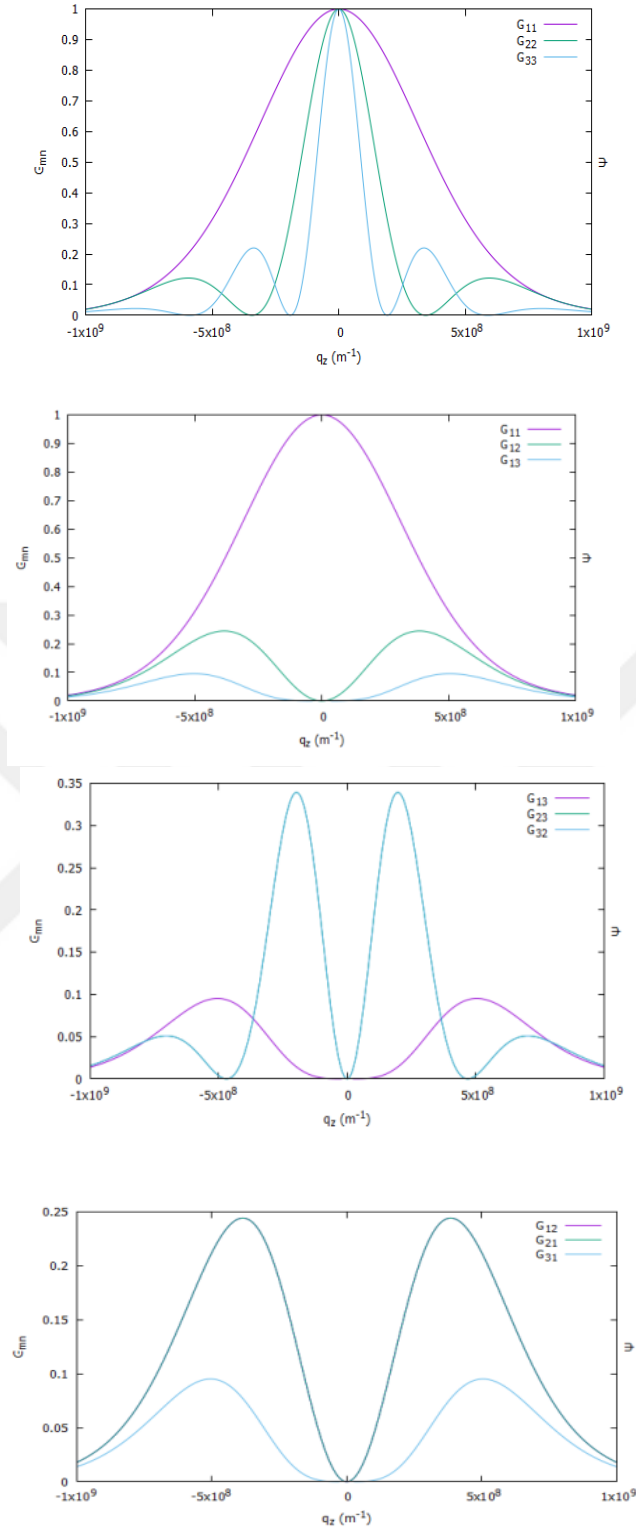
### 4.2.1. Akustik Fononlardan Saçılma Oranları

Si ile delta katkılanan GaAs içinde oluşan potansiyel içinde tutulan elektronlar  $z$ -yönünde kısıtlanmışlardır fakat  $xy$ -düzlemi üzerinde serbest parçacık gibi davranırlar. Bu elektronların akustik fononlardan kaynaklanan saçılma oranları Bölüm 3.6.1’de verilen denklemler kullanılarak hesaplanmıştır. Saçılma oranlarının hesaplanmasında Şekil 4.2’de gösterilen dalga fonksiyonları kullanılmıştır. Elektronlar her seviyede enerjisi  $E(k) = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$  ile verilen bir band içinde bulunur. Elektronlar her bandın kendi içinde saçılabilirler gibi bandlar arası geçişler de yapabilirler. Şekil 4.3 akustik fononlardan kaynaklanan saçılma oranlarını göstermektedir. Burada  $W_{11}$  ile gösterilen elektronların birinci seviyeye ait band içindeki saçılma oranlarını,  $W_{12}$  ise elektronların birinci seviyeye ait banddan ikinci seviyeye ait banda saçılma oranlarını göstermektedir. Her bir seviye için band içi saçılmalar her zaman bandlar arası saçılmalardan daha yüksektir. Akustik fononların enerjisi çok düşük olduğundan saçılmalar elastik kabul edilmiştir. Yani akustik saçılmaya uğrayan elektronların enerjileri değişmez. Şekil 4.3’te görüldüğü gibi akustik saçılmada saçılma oranı elektronun enerjisine bağlı değildir.

Şekil 4.5'te gösterilen eğriler ise Denklem (3.31)'de geçen  $G_{if}(q_z)$  eğrileridir. Bu terimler hem akustik hem de optik fonon saçılmalarında ortaya çıkar ve aslında  $z$ -yönünde momentumun korunmamasından kaynaklanır.



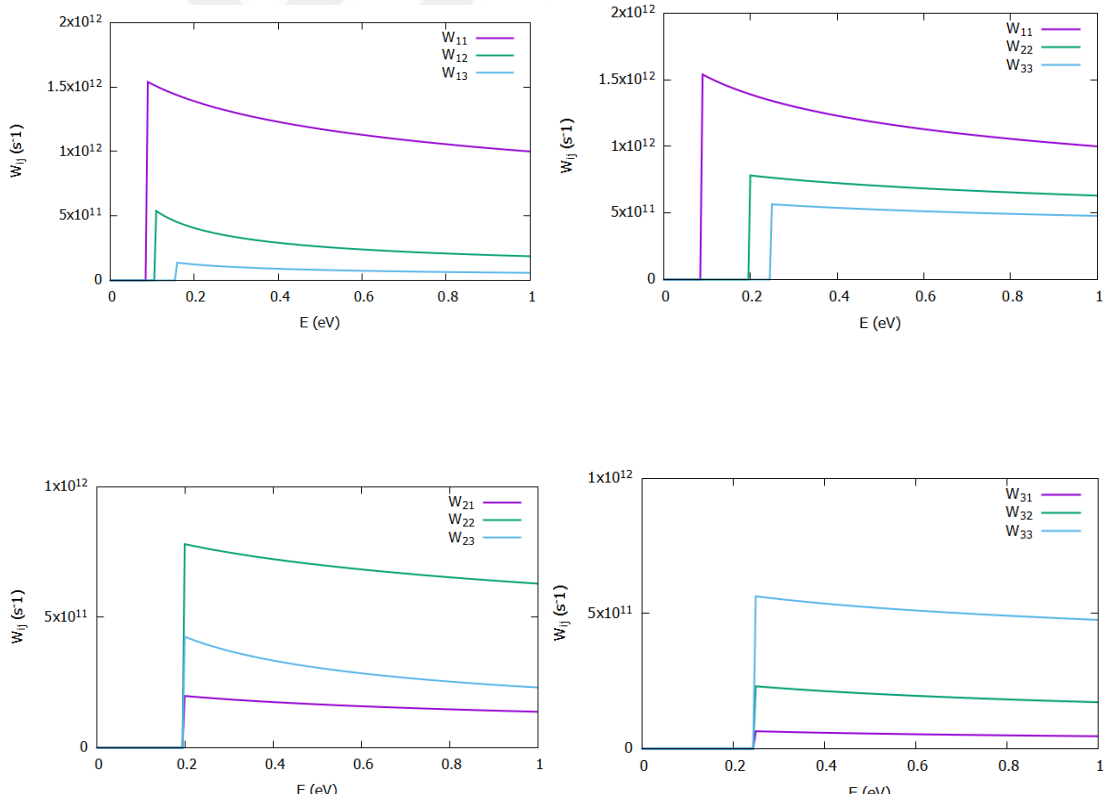
Şekil 4.3. Akustik fononlara karşılık gelen elektron saçılma oranları



Şekil 3.4. İki boyutlu elektron fonon etkileşimlerinde  $z$ - yönündeki momentum korunmaz. Burada  $G_{ij}$ 'ler etkileşimin matris elemanlarıdır.

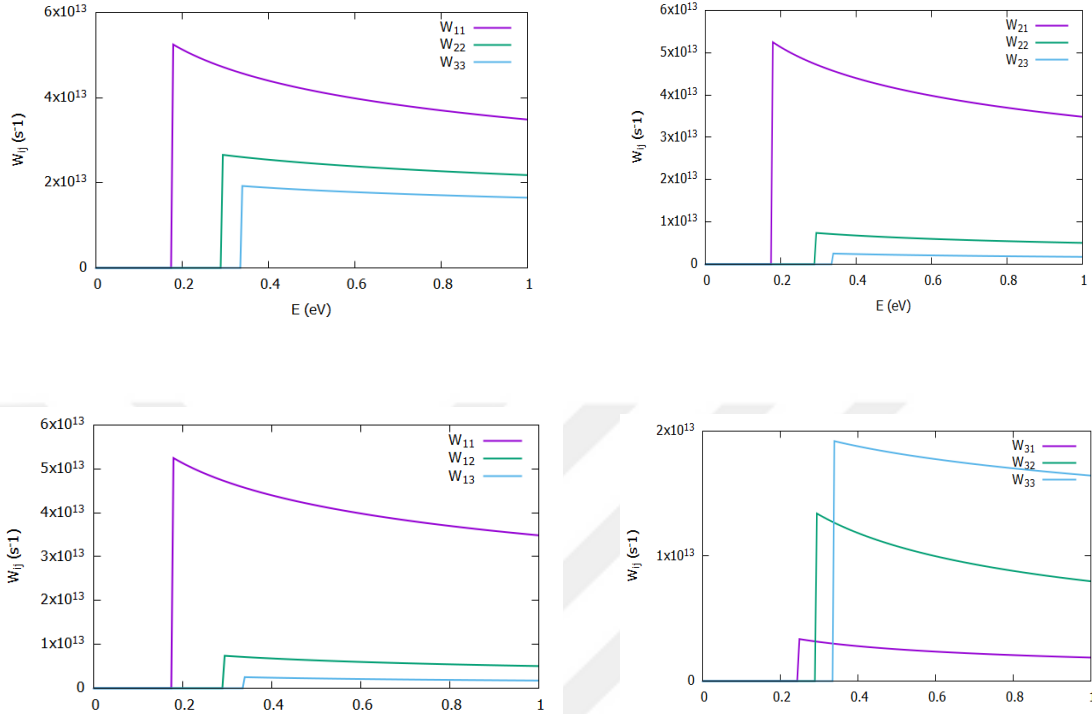
#### 4.2.2. Polar Optik Fononlardan Saçılma Oranları

Optik fononların polar olan ve olmayan optik fononlardan saçılma olabilir. Bu çalışmada sadece polar optik fonon saçılmaları göz önüne alınmıştır. Polar optik fononlarda soğurmada kaynaklanan saçılma oranları Şekil 4.5'te gösterilmiştir. Optik fonon enerjileri yüksek olduğundan fonon enerjileri ihmal edilmemiştir, saçılma esnasında elektron enerji alarak veya kaybederek enerjisi değişir. Saçılma bir fonon yaratılması yoluyla oluyorsa yani elektron enerjisinin bir kısmını fonon oluşturulması için kullanarak saçılıyorsa buna “yayınım” saçılması denir. Diğer yanda elektron bir fononun enerjisini alarak yani örgü titreşim kipinden bir tanesini yok ederek saçılıyorsa buna “soğurma” saçılması denir. Yayınım olabilmesi için elektronun fonon yaratacak kadar enerjisinin olması gerekir, aksi halde böyle bir işlem gerçekleşmez. Optik fononlar ancak yüksek sıcaklıklarda olduğundan optik fonon saçılması yüksek sıcaklıklarda en kısıtlayıcı saçılma mekanizmasıdır. Düşük sıcaklıklarda ise akustik fonon ve varsa iyonik saçılmalar daha etkindir. Şekil 4.5 soğurma mekanizmasına karşılık gelen saçılma oranlarını, Şekil 4.6 ise yayınım mekanizmasına karşılık gelen saçılma oranlarını göstermektedir.



Şekil 4.5. Polar optik fononlarda fonon soğurma mekanizmasına karşılık gelen elektron saçılma

Şekil 4.5 ve 4.6'nın karşılaştırılmasında görüleceği gibi fonon yayınımları ile saçılma, fonon soğurması ile oluşan saçılma oranından en az bir merteye daha büyüktür. Ayrıca akustik fononların tersine optik fononlarda saçılma oranı enerjiye bağlıdır, enerji arttıkça saçılma oranı azalır.



Şekil4.6. Polar optik fononlarda fonon yayınımlarına karşılık gelen elektron saçılma oranları

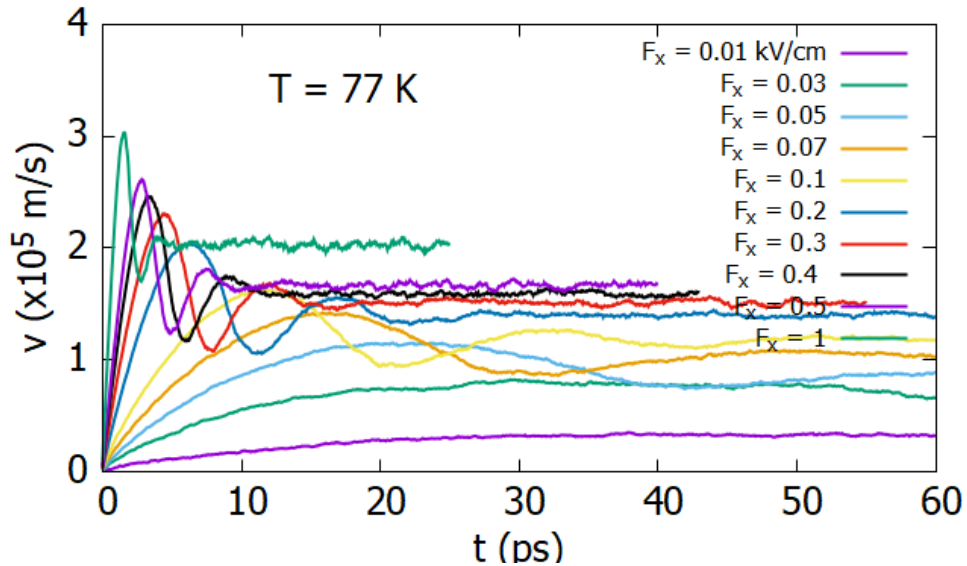
### 4.3. Kinetik Monte Carlo Simülasyonları

Delta katkılı GaAs yapısı için potansiyel profili ve elektronların saçılma oranları hesaplandıktan sonra malzemeye 2BEG'nin bulunduğu düzleme paralel olarak uygulanan bir elektrik alanı altında elektronların taşınım özellikleri incelenmiştir. Elektronların taşınım hareketi Kinetik Monte Carlo yöntemi ile araştırılmıştır. Bu yöntemde tamamen rasgele olan elektron saçılmaları bilgisayarda çok hızlı üretilen rasgele sayılar kullanılarak simüle edilmiştir. Başlangıçta belirli sayıda elektronların tamamının birinci seviyeye ait band içinde buldukları varsayılmıştır. Her elektrona var olan örgü sıcaklığına göre rasgele bir enerji ve momentum değeri atanmıştır. Daha sonra her elektronun uğrayabileceği saçılma mekanizması saçılma oranları kullanılarak rasgele sayılarla belirlenmiş, bu mekanizmaya uygun enerji ve momentum korunum denklemleri kullanılarak elektronun saçılmadan sonra sahip olduğu enerji ve saçılmadan sonra, saçılmadan önceki yöne göre hangi yönde saçıldığı bulunmuştur. Bu işlemler her elektron için bulunan serbest uçuş süresi sonunda bütün elektronlar için yapılmıştır. Bandlar arası saçılmalar nedeniyle bandlar içindeki elektron sayıları değiştiğinden her banddaki elektron sayılarının istatistiği düzenli olarak tutulmuştur. Enerjisinin çok artması sonucu kuyu potansiyeli dışına çıkan elektronlar üç boyutlu kabul edilmiş hesaplamalara dahil edilmemiştir.

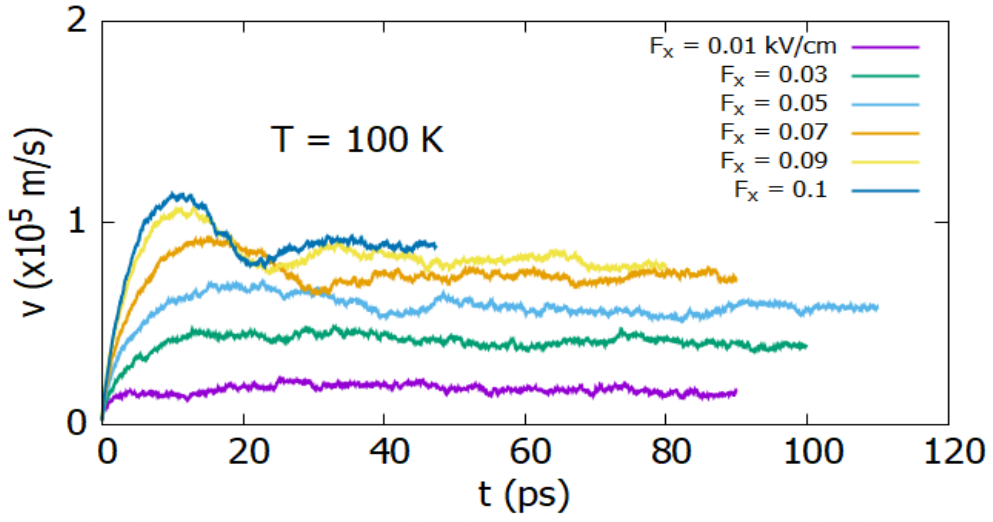
Şekil 4.7-4.11’de değişik elektrik alanları altında elektronların ortalama hızlarının zamanla değişimi sırası ile  $T = 77, 100, 150, 200$  ve  $300$  K sıcaklıklarında gösterilmiştir. Malzeme parametreleri Şekil 4.1’de verilenlerle aynıdır ve detayları Çizelge 4.1’de gösterilmiştir. Simülasyona elektronlar belirli kararlı bir hıza erişene kadar devam edilmiştir. Düşük alanlarda elektronların kararlı hıza erişmeleri daha uzun bir süre almaktadır. Her sıcaklık elektronların hızının “overshoot” etkisi gösterdiği alanlar farklıdır. “Overshoot” elektronların önce hızlanıp bir süre sonra yavaşlayarak bazen salınımlar yaptıktan sonra kararlı hıza erişmeleri durumu olarak tanımlanan etkidir. Örneğin  $77$  K sıcaklığında “overshoot” etkisi ancak  $3 \times 10^3$  V/m alan değerinden sonra gözlenmeye başlamaktadır. Aynı sıcaklıkta  $1 \times 10^5$  uygulanan alan değerinde elektronların ulaşabildiği maksimum ortalama hız  $3 \times 10^5$  m/s kadardır, bu alana karşılık gelen kararlı hız değeri ise  $2.2 \times 10^5$  m/s kadardır. Şekil 4.7-4.11’de verilen hız-zaman eğrileri kullanılarak elektronların kararlı duruma hızlarının uygulanan alana göre değişimleri bulunabilir.

Çizelge 4.1 GaAs için kullanılan parametreler.

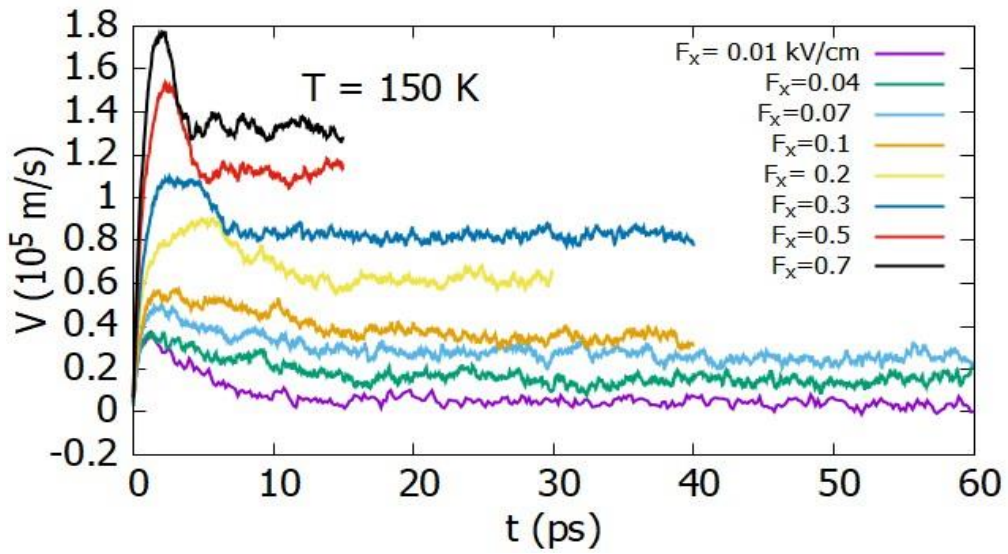
	Birim	
Akustik Deformasyon Potansiyel Sabiti	eV	7.0
Dielektrik sabiti, $\epsilon_s$	--	12.9
Dielektrik sabiti, $\epsilon_\infty$	--	10.92
Yasak Enerji Aralığı	eV	1.424
Boyuna optik fonon enerjisi	meV	35.0
Ses hızı	m/s	5117
Yoğunluk	Kg/m <sup>3</sup>	5317.5
Elektron kütlesi, $m_0$	kg	$9.1 \times 10^{-31}$
Etkin kütle	kg	$0.067m_0$



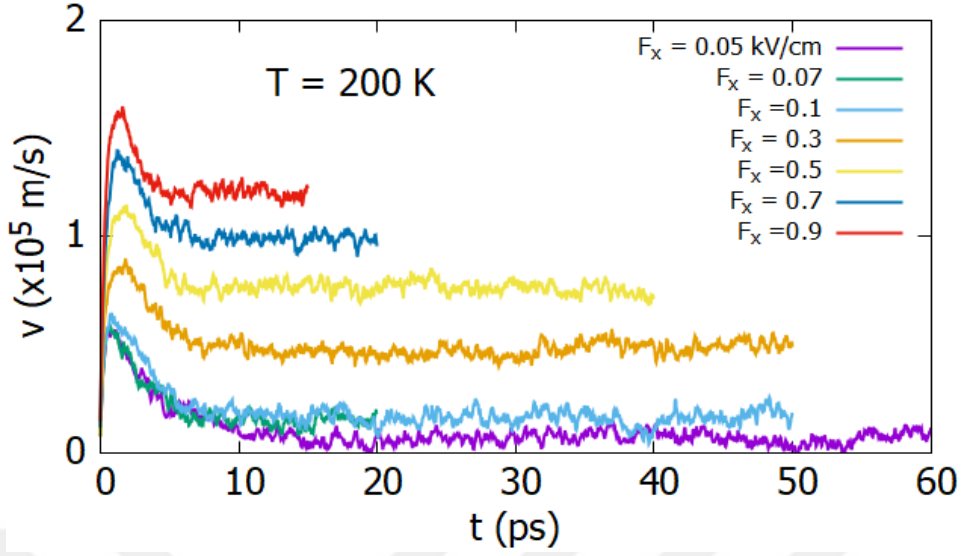
Şekil 3.7. Delta katkı GaAs 'de kuyu içindeki elektronların  $T = 77$  K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri.



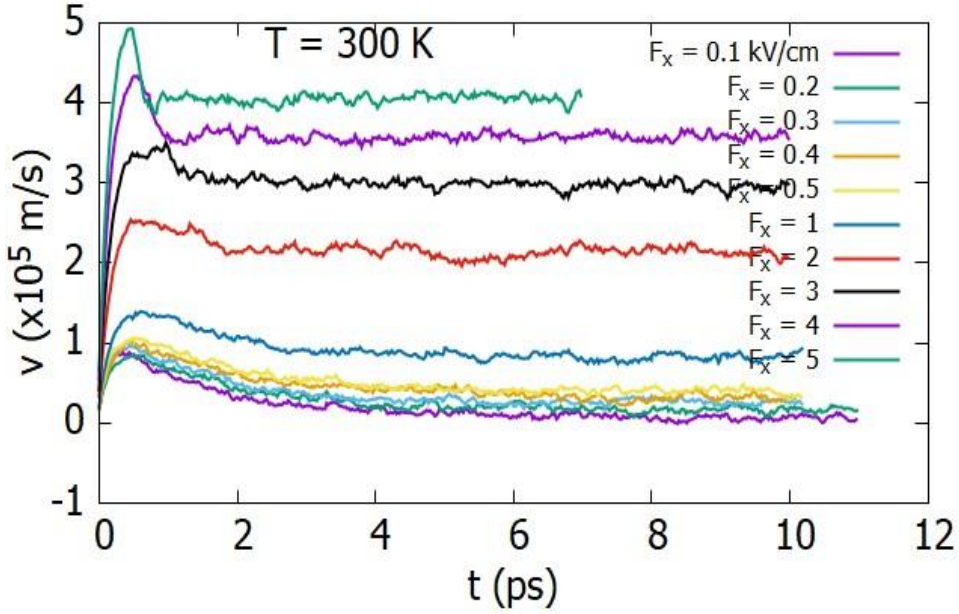
Şekil 4.8. Delta katkılı GaAs 'de kuyu içindeki elektronların  $T = 100$  K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri.



Şekil 4.9. Delta katkılı GaAs 'de kuyu içindeki elektronların  $T = 150$  K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri.



Şekil 3.10. Delta katkılı GaAs 'de kuyu içindeki elektronların  $T = 200$  K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri.



Şekil 3.11 Delta katkılı GaAs 'de kuyu içindeki elektronların  $T = 200$  K sıcaklığında farklı elektrik alanları altında Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-zaman eğrileri.

Elektronların Şekil 4.7-4.11'de gösterilen hız-zaman eğrilerinden, her sıcaklık değerinde uygulanan her alan değeri için ulaştıkları kararlı hızlar bulunabilir. Böylece elektronların kararlı hızlarının uygulanan elektrik alanı ile nasıl değiştiği elde edilir. Bu sonuçlar her sıcaklık için Şekil 4.12'de topluca gösterilmiştir. Bu tez çalışmasında temel amaç düşük alan mobilitelerini hesaplamak

olduğundan düşük alanlardaki ortalama hız değerleri bulunmuştur, çok yüksek alan değerleri kullanılmamıştır.

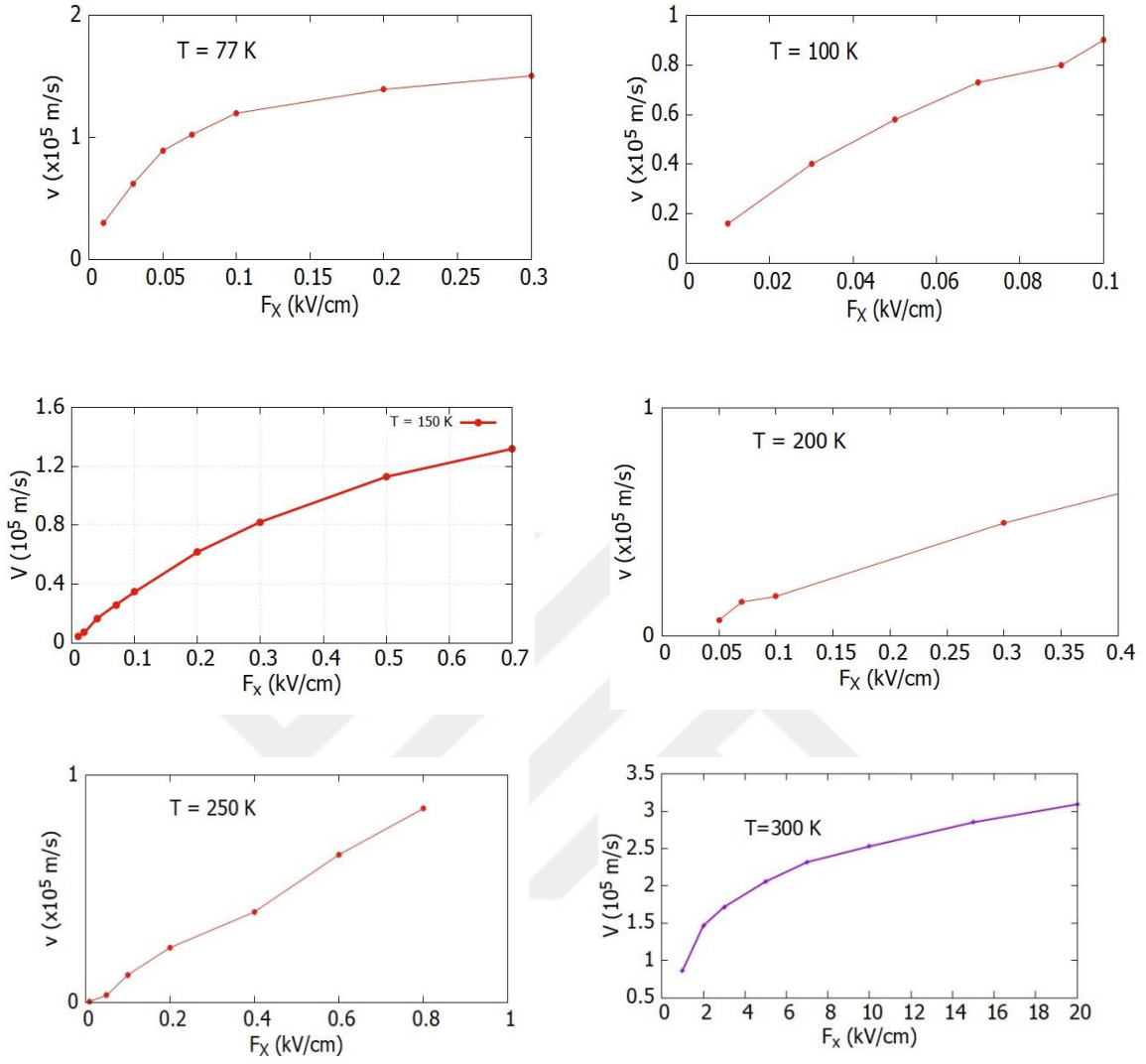
Hız-elektrik alan eğrileri dikkatle incelendiğinde düşük alanlarda eğimin sıcaklık arttıkça azaldığı görülmektedir ve bu beklenen bir durumdur. Sıcaklık arttıkça elektronlar uygulanan alan başına hızlanma kabiliyetlerini yitirmekte yani mobiliteleri azalmaktadır. Bunun temel sebebi sıcaklık arttıkça polar optik fonon saçılmalarının baskın olmaya başlamasıdır. Polar optik fonon saçılma oranları akustik fonon saçılmalarına göre en az bir merteye daha yüksek olduğundan mobiliteler azalmaktadır.

Elektronların verilen bir sıcaklık için mobiliteleri hız-alan eğrilerinin eğimlerinden hesaplanmıştır. Bu amaçla Monte Carlo simülasyonlarından bulunan hız-alan eğrileri,  $x$  malzemeye uygulanan alanı ve  $f(x)$  hızı temsil etmek üzere

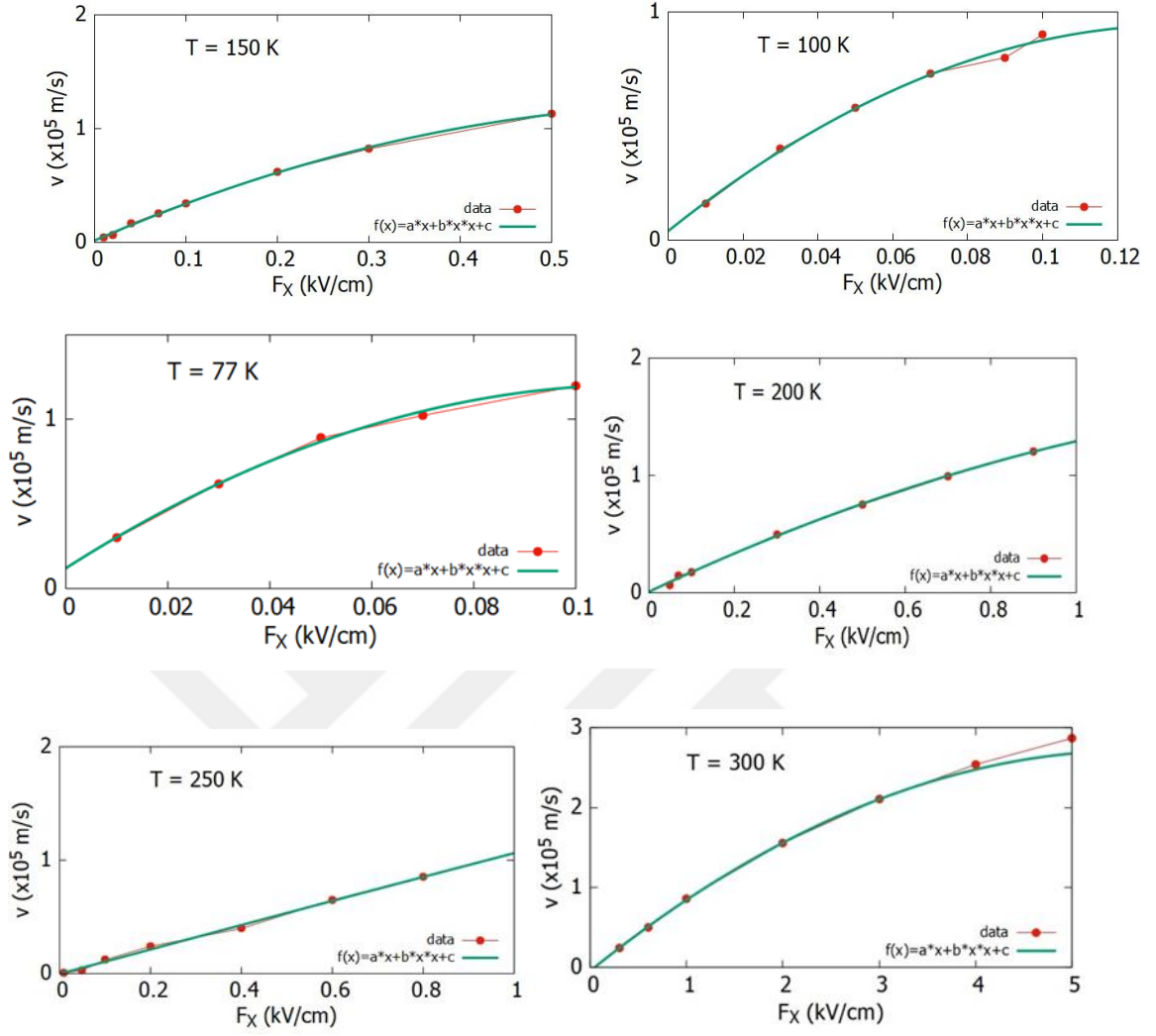
$$f(x) = a * x + b * x * x + c \quad (4.1)$$

Şeklinde bir fonksiyonu uydurulmuştur. Düşük alan mobilitesi  $\mu = \left. \frac{dv}{dF} \right|_{F_x=0}$  olduğundan, uydurulan

eğrileri temsil eden  $f(x)$  fonksiyonunda “ $a$ ” değeri ilgili sıcaklıkta aranan mobiliteler değerini verecektir. Bu amaçla uydurulan eğriler Şekil 4.13’te bütün sıcaklıklar için topluca gösterilmiştir.



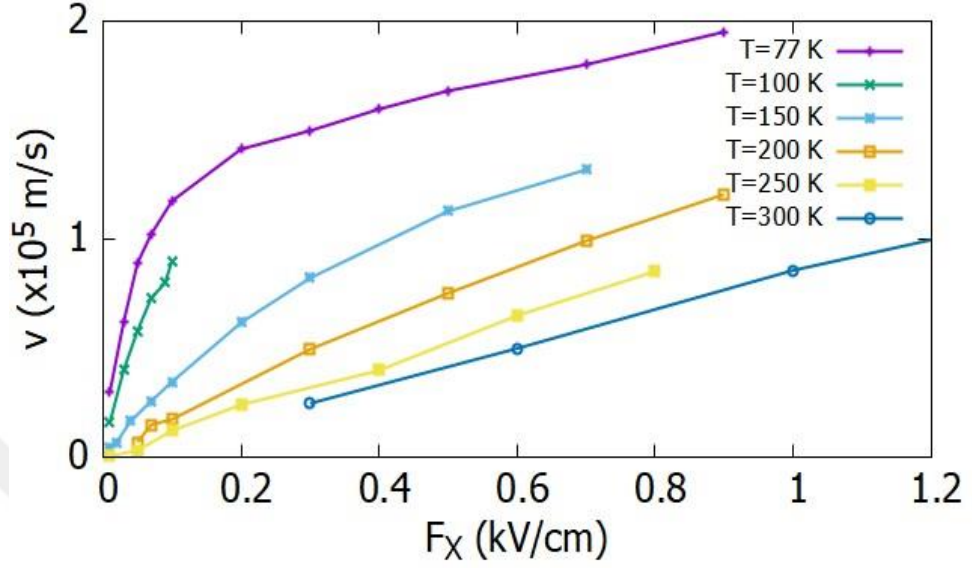
Şekil 4.12. Elektronların ortalama kararlı hızlarının uygulanan elektrik alanına göre değişimi



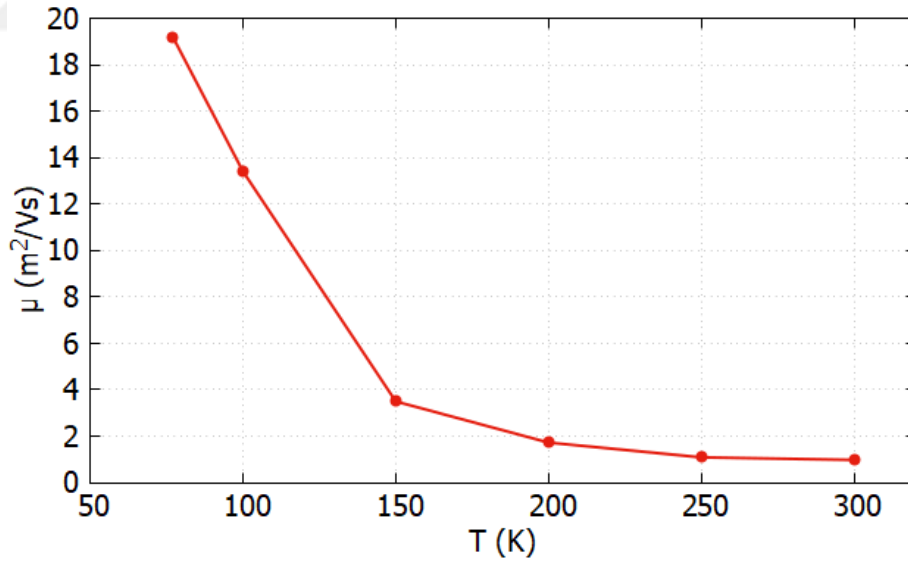
Şekil 4.13. Sıcaklığa bağlı mobilite hesabı yapmak için hız-alan eğrilerine uydurulan  $f(x) = a*x + b*x^2 + c$  şeklindeki fonksiyon ve gerçek veri noktaları.

Şekil 4.13'te gösterilen uydurma eğrileri en küçük kare farkı yöntemi ile bulunmuştur. Her sıcaklık için mobilite değeri "a" parametresinin değerine eşittir. Hız-alan eğrilerinin değişik sıcaklıklarda nasıl değiştiği ve birbirlerine göre farklarını görebilmek için hız-alan eğrileri bütün sıcaklıklar için topluca Şekil 4.14'te gösterilmiştir. Burada da sıcaklık arttıkça hız-alan eğrilerinin düşük alanlardaki eğimi yani elektronların mobilitesi azalmaktadır. Şekil 4.12'de gösterilen uydurma eğrilerinin "a" parametresinin değeri o sıcaklıktaki mobilitesini verdiğini belirtmiştik. Bu mobilite değerleri Şekil 4.15'te sıcaklığın bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. 77 K'de mobilite  $192\ 000\ \text{cm}^2/\text{Vs}$  değerine sahip iken, 300 K'de mobilite  $9725\ \text{cm}^2/\text{Vs}$  değerine azalmıştır. Bu çalışmada iyonik saçılmalar göz önüne alınmadığından 77 K'de anılan yüksek mobilite değeri elde edilmektedir. Delta katkılı GaAs malzemesinde bütün Si katkı atomlarının iyonlaştığı kabul edildiğinden ve V-şeklindeki potansiyelde tutulan iki boyutlu serbest elektronlar tam olarak iyonların bulunduğu bölgede olduklarından,

elektron-iyon etkileşmelerinin mobilite üzerine etkisinin yüksek olması beklenebilir. Oda sıcaklığında mobilite için elde edilen değer, bulk GaAs 'de elektron mobilitesi için beklenen 8500  $\text{cm}^2/\text{Vs}$  değerine yakındır (www.ioffe.ru).



Şekil 4.14. Hız-alan eğrilerinin bütün sıcaklıklar için topluca gösterimi. Sıcaklık arttıkça düşük alanlardaki eğimler azalır.



Şekil 4.15. Elektron mobilitesinin sıcaklığa göre değişimi.



## 5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında delta katkılı GaAs malzemesinin elektronik özellikleri ve elektron taşınım karakteristikleri kinetik Monte Carlo yöntemi ile incelenmiştir. Si  $\delta$ -katkılı GaAs yapısının potansiyel profili Schrödinger ve Poisson denklemlerinin öz uyumlu (self-consistent) çözümüyle sayısal olarak hesaplanmıştır. Bu çözümlerden potansiyel profili yanında enerji seviyeleri, her seviyedeki elektron yoğunluğu ve her seviyeye karşılık gelen dalga fonksiyonları bulunmuştur. Bulunan dalga fonksiyonları kullanılarak potansiyel kuyusu içine kısıtlanmış elektronların akustik ve polar optik fononlardan kaynaklanan saçılma oranları her durum için ayrı ayrı hesaplanmıştır. Elektronlar iki boyuta sınırlandırıldıklarından elektronların alabileceği enerji değerleri kesiklidir. Kesikli enerji seviyelerinde bulunan elektronlar iki boyutta serbest olduklarından dolayı, minimumu kesikli enerji olan parabolik bir bant içinde bulunurlar (denklem 3.29) ve Şekil 3.4'e bakınız). Saçılmalar aynı bant içinde olabileceği gibi bantlar arası saçılmalarda olabilir. Çalışmada her iki saçılma durumu da göz önüne alınmıştır.

Saçılma oranları kullanılarak malzeme düzlemine paralel uygulanan bir elektrik alanı altında elektronların taşınım karakteristikleri kinetik Monte Carlo yöntemi ile incelenmiştir. Bu hesaplamalarda elektronların ortalama sürüklenme hızları, uygulanan her alan için ortalama kararlı hız değerleri bulunmuştur. Hız-uygulanan alan eğrileri kullanılarak farklı sıcaklıklarda düşük alan mobilite değerleri bulunmuştur.

Çalışmada polar olmayan optik fononların ve iyonlardan kaynaklanan saçılmaların göz önüne alınmamış olmasından dolayı düşük sıcaklık değerlerinde bulunana mobilite değerleri yüksektir. Oda sıcaklığında bulunan mobilite değeri ise bulk GaAs değerine çok yakındır. Bu beklenen bir sonuçtur çünkü yüksek sıcaklıklarda en etkin saçılma mekanizması polar optik fonon saçılmasıdır ve bu mekanizma bu çalışmada göz önüne alınmıştır.



## KAYNAKLAR

- Messiah, A., 1966. Quantum Mechanics. John Wiley & Sons, USA, 86s.
- Bass, S. J., 1979. J. Cryst. Growth, 47: 613
- Bastard, G., 1991. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures (Monographs of Physics (Les Editions de Physique)), Wiley-Interscience, USA, 454s.
- Board, K., Chandra, A., Wood, C.E.C., Judaprawira, S. ve Eastman, L.F., 1981. Characteristics of Planar Doped FET Structures, Ieee transactions on electron devices, 28(5)
- Buchinsky, O., Blumin, M., Sarfaty, R., Fekete, D., Samid, I., Yust, M., 1996. N-type delta-doped quantum well lasers with extremely low transparency current density, Appl. Phys. Lett., 68(15), 2043
- Buchinsky, O., Blumin, M., Fekete, D., 1998. N-type delta-doped strained quantum well lasers for improved temperature-dependent performance, Appl. Phys. Lett., 72(12), 1484.
- Chang, W-L., Pan, H-J., Wang, W-C., Thei, K-B., Yu, K-H., Lin, K-W., Cheng, C-C., Lour, W-S., Liu, W-C., 2000. High-performance double delta-doped sheets Ga<sub>0.51</sub>In<sub>0.49</sub>P/In<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>As/Ga<sub>0.51</sub>In<sub>0.49</sub>P pseudomorphic heterostructure transistors, Semicond. Sci. Technol. 15 1.
- Davies, J.H., 1997. The Physics of Low-dimensional Semiconductors, Cambridge University Press. USA, 458s.
- Fichthorn, K. A., Weinberg, W. H. 1991. "Theoretical foundations of dynamical Monte Carlo simulations", J. Chem. Phys., 95, 1090-1096.
- Hook, J.R. ve Hall, H.E., 1999. Katihal Fiziği, Literatür Yayıncılık, İstanbul, 467s.
- Jacoboni, C., Lugli, P. 1989. "The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation", New York: Springer-Verlag.
- 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.
- Jaffe, T., Attrash, M., Kuntumalla, M.K., Akhvlediani, R., Michaelson, S., Gal, L., Felgen, N., Fischer, M., Reithmaier, J.P., Popov, C., Hoffman, A., ve Orenstein, M., 2020. Novel Ultra Localized and Dense Nitrogen Delta-Doping in Diamond for Advanced Quantum Sensing, Nano Letters 20 (5), 3192-3198, DOI: 10.1021/acs.nanolett.9b05243
- H. Tan, G. L. Snider, L. D. Chang and E. L. Hu, J. Appl. Phys. 68, (1990), 407
- Harrison, P., Valavanis, A., 2016. Quantum Wells, Wires and Dots. John Wiley & Sons Ltd, United Kingdom, 266s.
- Harris, J.J., 1993, Delta-doping of semiconductors, Journal of Materials science: materials in electronics, 4, 93-105
- Kazama, Y. vd., 1989. High Efficiency Amorphous Silicon Solar Cells with "Delta-Doped" P-Layer, Jpn. J. Appl. Phys. 28 1160

- Kittel, C., 1996. *Katıhal Fiziğine Giriş*. Güven Kitap Yayın Dağıtım Ltd. Şti, İstanbul, 434s.
- K. W.Kim, 1988. Monte Carlo Studies of Nonlinear Elektron Transport IN III-V Semiconductors, Champaign,136s.
- Landau, L. D.; Lifschitz, E. M. 1977. *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory* (3rd ed.). Pergamon Press.
- Lundstrom, U.S., van Breemen, N. and Bain, D.C. 2000 The Podzolization Process. A Review. *Geoderma*, 94, 91-107.
- L.C. Feldman and J.C. Mayer, *Fundamentals of Surface and Thin Film Analysis* (PrenticeHall, NJ, 1986), pp.189–207.
- Malik, R. J., Aucoin, T. R., Ross, R. L., Board, K., Wood, C. E. C. ve Eastman, L. F., 1980. Planar-doped barriers in GaAs by molecular beam epitaxy, *Electron. Lett.* 16: 836.
- Matsumoto M., Nishimura T. 1998. “Mersenne Twister: A 623-Dimensionally Equidistributed Uniform Pseudo-Random Number Generator”, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, Vol. 8, No. 1, January 1998, Pages 3–30.
- Polly, S.J., Forbes, D.V., Driscoll, K., Hellstrom, S. ve Hubbard, S.M., 2014. Delta-Doping Effects on Quantum-Dot Solar Cells, *IEEE JOURNAL OF PHOTOVOLTAICS*, VOL. 4, NO. 4
- R. Y. Rubinstein., 1981. *Simulation and the Monte Carlo Method*. 10 vols. USA: Wiley, 396s.
- Sakurai, J.J., and Napolitano, J., 1964,2011. *Modern Quantum Mechanics* (2nd ed.), Addison Wesley.
- Schubert, E.F., 1990, Delta doping of III–V compound semiconductors: Fundamentals and device applications, *J. Vac. Sci. Technol. A* 8, 2980–2996.
- Schubert, E.F.,1994. Delta-Doping of Semiconductors: Electronic, Optical and Structural Properties of Materials and Devices, *Semiconductors and Semimetals* 40, s 1.
- Schubert, E.F.,Fischer, A. ve Ploog, K. 1986, The delta-doped field-effect transistor ( $\delta$ FET), *Ieee Transactions On Electron Devices*, 33(5), 1986.
- Schubert, E. F., 1995. *Delta Doping of Semiconductors*, edited by E. F. Schubert Cambridge University Press, London. 2980s.
- Schubert, E. F., 1996. *Delta doping of Semiconductors*, Cambridge University Press, Cambridge, 604s.
- Schubert, E. F., 2015, *Physical Foundations of Solid-State Devices*, NY, USA, Rensselaer Polytechnic Institute, ISBN: 978-0-9863826-2-8.
- Sun, Y., Li, B.D., Hool, R.D., Fan, S., Kim, M., Lee, M.L., 2022. Improving the performance of GaInP solar cells through rapid thermal annealing and delta doping, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 241, 111725.
- Takagaki, Y. ve Ploog, K., 1995. Self-consistent energy levels in low-dimensionally delta-doped structures, *J. Phys.: Condens. Matter* 7, 731-743.

- Tomizawa, K., 1993, Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices, Artech House, Boston, London :341p
- Yarar Z., Ozdemir B., Ozdemir M., 2005. Mobility of electrons in a AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> QW: Effect of temperature, applied field, surface roughness and well width, Physica status solidi b-basic solid state physics, 242, 2872-2884
- Zhao Y, Xu S, Tao H, Zhang Y, Zhang C, Feng L, Peng R, Fan X, Du J, Zhang J, Hao Y., 2020. Enhanced P-Type Ga<sub>N</sub> Conductivity by Mg Delta Doped AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> Superlattice Structure, Materials (Basel),14(1):144. doi: 10.3390/ma14010144.
- Zrenner, A., Resinger, H., Koch, F., ve Ploog, K., 1984. Proceedings of Seventeenth International Conference on Physics of Semiconductors, San Francisco, ed. D. J. Chadi (Springer, NY, 1985) p. 325.
- Watling, J.R., Walker, A.B., Harris J.J., ve Roberts, J.M., 1999. Monte Carlo simulation of electron transport in delta-doped lattice-matched and strained balanced InGaAs/InAlAs quantum wells, Semicond. Sci. Technol. 14, 12–22.
- W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing (Cambridge: Cambridge University Press,1986)
- Whall, T.E., 1992. A plain man's guide to delta-doped semiconductors, Contemporary Physics, 33(6), 369-381, DOI: 10.1080/00107519208211064
- Wood, C. E. C., Metze, G., Berry, J. ve Eastman, L. F., 1980. Complex free-carrier profile synthesis by "atomic-plane" doping of MBE GaAs, J. Appl. Phys. 51: 383



## ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel Bilgiler

Soyadı, Adı : YILMAZ, Melike

### Eğitim

Derece	Kurum	Mezuniyet Yılı
Yüksek Lisans	Çukurova Üniversitesi	2024
Lisans	Çukurova Üniversitesi Fizik	2013
	İnönü Üniversitesi Fen ve Teknoloji Ö.	2016
	Korkut Ata Üniversitesi Makine Müh.	2021
Ortaöğretim	Adana Erkek Lisesi	

### Çalışma Tecrübesi

Yıl	İşyeri	Unvan
2009-Halen	Dershane, Kolej	Öğretmenlik
2023 Haziran	Asansör Firması	Makine Mühendisliği