

GaAs Yarıiletken Bileşiminde Elektron Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo
Simülasyonu ile İncelenmesi

Bekir Deveci

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Mart 2015

Monte Carlo Study of Electron Transport Properties in GaAs

Bekir Deveci

MASTER OF SCIENCE THESIS

Department of Physics

March 2015

GaAs Yarıiletken Bileşiminde Elektron Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo
Simülasyonu ile İncelenmesi

Bekir Deveci

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

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Mustafa Akarsu

Mart 2015

ONAY

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi Bekir Deveci'nin YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı "GaAs Yarıiletken Bileşiminde Elektron Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu ile İncelenmesi" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

Danışman : Yrd.Doç.Dr.Mustafa AKARSU

İkinci Danışman : -----

Yüksek Lisans Tez Savunma Jürisi:

Üye : Yrd. Doç. Dr. Mustafa AKARSU

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ömer ÖZBAŞ

Üye : Yrd. Doç. Dr. Sema KURTARAN

Üye : Doç. Dr. H. Senem AYDOĞU

Üye : Prof. Dr. Ferhunde ATAY

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

Prof. Dr. Hürriyet ERŞAHAN
Enstitü Müdürü

ETİK BEYAN

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kılavuzuna göre, Yrd.Doç.Dr. Mustafa AKARSU danışmanlığında hazırlamış olduğum “GaAs Yarıiletken Bileşiminde Elektron Taşınım Özelliklerinin Monte Carlo Simülasyonu ile İncelenmesi” başlıklı YÜKSEK LİSANS tezimin özgün bir çalışma olduğunu; tez çalışmamın tüm aşamalarında bilimsel etik ilke ve kurallara uygun davrandığımı; tezimde verdiğim bilgileri, verileri akademik ve bilimsel etik ilke ve kurallara uygun olarak elde ettiğimi; tez çalışmamda yararlandığım eserlerin tümüne atıf yaptığımı ve kaynak gösterdiğimi ve bilgi, belge ve sonuçları bilimsel etik ilke ve kurallara göre sunduğumu beyan ederim. 24/03/2015

Bekir Deveci

İmza

ÖZET

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

Bu çalışmada GaAs bileşiğinde elektron taşınımı 77 K, 300 K ve 450 K sıcaklıklarda, 2 ns lik simülasyon süresince incelendi. Elektron sürüklenme hızı, ortalama elektron enerjisi ve ortalama serbest zamanın elektrik alan ile değişimleri belirlendi. Simülasyon boyunca gerçekleşen saçılmaların etkinlikleri, toplam saçılma olayları içerisindeki yüzdeleri belirlenerek, elektron sürüklenme hızı ve ortalama elektron enerjisi üzerindeki etkileri incelendi. Elektron mobilitesinin örgü sıcaklığı ve elektrik alan ile değişimi incelendi.

GaAs üzerinde uygulanan elektrik alan, sıcaklık ve safsızlık konsantrasyonu değerleri değiştirilerek hareket hesapları yapıldı ve sonuçlar karşılaştırılarak değerlendirildi.

Anahtar Kelimeler: Saçılma, saçılma teorisi, Galyum arsenit, Monte Carlo yöntemi, mobilite, sürüklenme hızı.

SUMMARY

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

Electron transport in GaAs semiconductor compound was examined at 77 K, 300 K and 450 K temperatures during the simulation time of 2 ns. Changes of electron drift velocity, mean electron energy, and mean free time with the electric field were determined. The scattering activities occurred during the simulation were determined as percentages in total scattering events, and effects of these scatterings on the electron drift velocity and mean electron energy were examined. Electron mobility was studied as a function of lattice temperature and electric field.

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

Keywords: Scattering, scattering theory, Gallium arsenide, Monte Carlo Method, mobility, drift velocity.

TEŐEKKÜR

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

Çok büyük yardımları ve desteęi olan, yolun sonuna kadar benim yanımda olan, çok yardımsever arkadaşım Fatih ÇEVİK'e ve kardeşim Hakan İNAN'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	vi
SUMMARY	vii
TEŞEKKÜR	viii
İÇİNDEKİLER	ix
ŞEKİLER DİZİNİ	xi
TABLolar DİZİNİ	xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ	1
2. MONTE CARLO YÖNTEMİ	4
2.1. Tipik Bir Monte Carlo Programı.....	4
2.1.1. Fiziksel Sistemin Tanımı.....	8
2.1.2. Hareketin İlk Şartları.....	8
2.1.3. Uçuş Süresi Kendiliğinden Saçılım.....	10
2.1.4. Saçılma Mekanizmasının Seçimi.....	15
2.1.5. Saçılım Sonrası Durum Seçimi.....	15
2.1.6. Sabit Durum Olgusu İçin Sonuçların Toplanması.....	16
2.1.6.1. Zaman Ortalamaları.....	16
2.2. Enerjinin Dalga Vektörüyle İlişkisi.....	17
2.3. Parabolik Olmama.....	19
2.4. Herring ve Vogt dönüşümü.....	21
3. YARIİLETKENLERDE SAÇILMA	23
3.1. Elektronların Saçılımı.....	24

İÇİNDEKİLER (devam)

3.2. Safsızlık Saçılması.....	26
3.3. Fonon Saçılımı.....	31
3.4. Akustik Fonon Saçılması.....	32
3.5. Kutupsal Olmayan Optik Fonon Saçılması.....	37
3.6. Vadiler Arası Optik Fonon Saçılması.....	39
3.7. Kutupsal Optik Fonon Saçılması.....	40
4. GaAs MATERYALİNİN TEMEL ÖZELLİKLERİ.....	44
4.1. Kristal Yapısı.....	44
4.2. Bant Yapısı.....	45
4.3. Materyal Parametreleri.....	46
5. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	47
KAYNAKLAR DİZİNİ.....	53

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. Tek parçacık Monte Carlo simülasyonu için akış şeması.....	6
2.2. Monte Carlo yönteminin temelleri.....	7
2.3. Termal denge ortalama enerjisiyle başlayan bir taşıyıcı yolunun yüksek bir elektrik alanın etkisi altında gerçek uzay düzlemindeki iz düşümü.....	9
2.4. Kendiliğinden saçılım $\Gamma(\epsilon)$ içeren, tek seviyeli bir seçim (Γ_2) açısından kendiliğinden saçılım olgularının sayısını azaltmaya uygun iki seviyeli basamak şekilli toplam saçılım oranının çizimi.....	13
2.5. Sürekli enerji yüzeylelerinin farklı şekilleri.....	18
2.6. Etkin kütle durum yoğunluğunun sıcaklığa bağlı değişim grafiği.....	21
3.1. Herhangi bir saçılma olmadan ve bir elektrik alanı olduğunda bant üzerinde bir elektronun hareketi.....	23
3.2. Bir yarı iletkendeki elektrik alanı altında hareket eden bir elektronun şematik görünümü.....	24
3.3. Pozitif bir iyon yakınında yük nötralliğinin bozunumu, n_0 , denge elektron yoğunluğu, r iyondan olan uzaklık.....	27
3.4. \vec{k} ile \vec{q} arasındaki θ' ve, \vec{k} ile \vec{k}' arasındaki θ kutup açısı.....	35
4.1. GaAs'nin çinkosülfür yapısı.....	44

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam)

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
4.2. GaAs'nin şematik bant diyagramı.....	45
5.1. GaAs için elektron sürüklenme hızının uygulanan elektrik alanla değişimi....	47
5.2. GaAs için ortalama elektron enerjisinin elektrik alanla değişimi.....	48
5.3. 2 ns lik simulasyon süresince Γ vadisinde gerçekleşen saçılmaların etkinlikleri. kofe, kutupsal optik fonon yayınlama; iss, iyonize safsızlık; afs, akustik fonon; vkofa, vadiler arası kutupsal optik fonon soğurma; vkofe, vadiler arası kutupsal optik fonon yayınlama saçılmaları.....	49
5.4. Simulasyon boyunca gerçekleşen saçılmaların Γ ve L-vadilerinde gerçekleşme yüzdeleri.....	50
5.5. 5 kV/cm Elektrik alan değerinde, elektron sürüklenme mobilitesinin örgü sıcaklığı ile değişimi.....	52

TABLÖLAR DİZİNİ

<u>Tablo</u>	<u>Sayfa</u>
4.1. GaAs için Simülasyonda Kullanılan Materyal Parametreleri.....	46

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

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

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ (devam)

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

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ (devam)

Simgeler

Acıklamalar

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

Kısaltmalar

Acıklamalar

İss	İyonize safsızlık saçılması
-----	-----------------------------

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ (devam)**Kısaltmalar**

Afs

Kofe

Kofa

Vkofe

Vkofa

Açıklamalar

Akustik fonon saçılması

Kutupsal optik fonon yayınlama saçılması

Kutupsal optik fonon soğurma saçılması

Vadiler arası kutupsal optik fonon yayınlama

Vadiler arası kutupsal optik fonon soğurma

1. GİRİŞ

Yarı iletkenlerdeki yük taşınım çalışmaları hem temel fizik hem de elektronik cihazlara uygulanması açısından büyük önem taşır. Yük taşınım sürecinin analizi kristaller, bant yapısı, yaşam süreleri ve çarpışma iyonizasyonu gibi konularına ışık tutmaktadır. Diğer taraftan tüm insan eylemlerindeki etkisi durmaksızın artmakta olan modern mikro elektronikler büyük ölçüde yarı iletkenlerdeki yük taşınımı konusunun pek çok yönüyle ilgili karmaşık bir bilgiye dayandığı için, problemin uygulamalı yönü çok daha önemlidir.

1950'lerin ilk yıllarından başlayarak, transistörlerin icadından hemen sonra, Ohm yasası alanlarının yarı iletkenlerde ya da örneklerde görüldüğü lineer (doğrusal) tepki bölgesinin dışında elektriksel alan kuvvetlerinin çok yüksek olduğu fark edilmiştir (Shockley, 1951). Çok önceleri bir kaç öncü makale (Landau ve Kompanejev, 1934; Dvydov, 1936, 1937) tarafından başlatılmış olan doğrusal olmayan taşınma alanı (sıcak elektron problemi) hızlı bir gelişme dönemine girmiş ve böylece giderek artan sayıda araştırmacı çalışmalarını bu konunun bilimsel bilgisini geliştirmeye adanmıştır. Üstelik, bu yüksek alan problemlerini çalışma sürecinde yeni süreçler de keşfedildi (Gunn, 1963) ve bu keşiflere dayanılarak yeni cihazlar tasarlandı ki bu durum da yeni ve daha yakından araştırmalar yapmayı gerektirdi. Böylece bu yüzyıldaki bilim ile teknoloji arasındaki olumlu geribildirim en ilginç durumlarından biri ortaya çıktı. Cihazların boyutlarını düşürmek makul bir voltaj sinyali için Ohmik tepki bölgesinin dışında yüksek alan ortamına yol açmıştır. Modern çok büyük ölçekli entegrasyon (ÇBÖE) teknolojisine yol açan, cihazların minyatürleştirilmesindeki takip eden eğilim de sonrasında yüksek alan taşınımının önemini arttırdı. Yük taşınımı genel olarak hem matematiksel hem de fiziksel bakış açısına göre zor bir problemdir. Aslında problemi açıklayan integro-diferansiyel denklemi (Boltzmann denklemi) çok az durum için hariç basit ya da karmaşık bile olsa analitik çözümler sunmaz ve bu durumlarda genellikle gerçek sistemlere pek uygulanamaz. Üstelik taşınım miktarları pek çok fiziksel süreç hakkındaki ortalamalardan elde edildiği için araştırılmakta olan fiziksel sistem için güvenilir mikroskobik modeller üretilmesi de zordur. Doğrusal olandan doğrusal olmayan tepki şartlarına doğru gidildikçe zorluklar daha da artar. Boltzmann taşınım denkleminin dış kuvvet ile ilgili doğrusallaşma

olmaksızın analitik çözümü son on yıldır pek çok araştırmalara dayanmak zorunda kalmış, çözülmesi güç bir matematiksel problemdir. Sonuçlardaki ilgi alanı özelliklerinin mikroskobik modelden mi yoksa matematiksel tahminlerden mi kaynaklandığı artık belirgin olmadığından dolayı, herhangi bir sonuç elde etmek için böylesi aşırı tahmin yaklaşımlarını gerçekleştirmek gerekir.

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

Monte Carlo tekniğinin en önemli gelişmeleri arasında Malvern grubunun kendiliğinden saçılma şeması (Rees, 1968, 1969), parabolik olmayan etkiler (Fawcett ve vd., 1969), dağılım anizotropisi (Fawcett ve Rees, 1969) ve difüzyona (Fawcett, 1973) giriş özelliği taşıyan önemli çalışmalardan bahsetmemiz gerekir. Diğer gelişme alanları içerisinde çok partiküllü simülasyon (Lebwohl ve Price, 1971) ile geçici dalgaların zaman içindeki hesaplaması, bunların eşdeğerlikleri (Ruch, 1972 ve Baccarani vd., 1977), harmonik zaman değişimi (Price, 1973), alayım yarı iletkenlerin işlenmesi (Hauser ve vd., 1976) ve güçlü elektrik alanlarının kuantum etkileri (Barker ve Ferry, 1979) bulunmaktadır.

Monte Carlo matematiksel problemleri çözmek için kullanılan istatistiksel sayısal bir yöntemdir. Böyle olduğu için de taşınma problemlerine uygulanmasından çok önceleri

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

Bu çalışmanın amacı, pek çok değişik okuyucu için değerli olacak yarı iletken taşınımına kapsamlı bir şekilde uygulanan Monte Carlo yöntemini tanıtmaktır. Kolay anlaşılması adına, yöntem hem kendi içerisinde hem de örneğin dördüncü grup elmas, silikon ve germanyumun kovalent yarıiletkenleri gibi özel materyallere uygulaması açısından tartışılmıştır. Makul bir ölçüde kalması için, bu çalışmanın alanı tüm yarı iletkenleri kapsayacak şekilde geniş düşünülmemiştir. Özellikle III-V ve II-VI bileşikleri gibi kutup materyalleri dikkate alınmamıştır. Aynı sebepten dolayı, yığınsal materyallerin fiziksel özelliklerinin araştırması ile sınırlandırılmıştır. Yöntemin özel yapılara uygulanması bir kenara bırakılmış ve cihaz simülasyonuna da kısaca değinilmiştir. Çünkü kendi içerisinde çok ilginç olan bu konu, araştırmacıları büyük bir alan olan katı madde elektronigi alanına yönlendirebilirdi ama bu durum mevcut çalışmanın sınırlarının çok dışında kalmaktadır. Öncesinde yapılan çalışmaların gelişmesiyle alakalı olduğu sürece, Yarıiletken taşınımı ve Monte Carlo uygulamaları üzerine yapılan çalışmalara değinmek ve bunların bilimsel yönlerini ortaya koymak çalışmanın asıl amacıdır.

2. MONTE CARLO YÖNTEMİ

Yarı iletkenlerdeki yük taşımına uygulanan Monte Carlo yöntemi, uygulanan elektrik ve manyetik alanlardan kaynaklanan dış kuvvetlere ve bahsedilen saçılım mekanizmalarının etkisine maruz kalan, kristal içerisindeki bir ya da daha fazla elektron hareketinin simülasyonundan oluşur.

Taşıyıcı serbest uçuş süresi (yani iki ardışık çarpışma arasındaki zaman) ve simülasyonda var olan dağılıma olayları mikroskopik süreçleri tanımlayan mevcut olasılıklarla uyumlu olacak şekilde rastgele olarak seçilir. Sonuç olarak her bir Monte Carlo yöntemi mevcut dağılım olasılıkları olan bir dizi rastgele sayının üretilmesine dayanır. Böylesi bir teknik, günümüzde herhangi bir bilgisayarın yeterli derecede hızlı bir oranda 0 ile 1 arasında eşit şekilde dağılan rastgele sayılar dizileri ürettiği gerçeğinden faydalanır. Analizin amacı; değişmez durumun, homojen süreç ve incelenmekte olan durum için genel olarak bir tek elektronun hareketini simüle eder. Ergodik açısından bu örnek elektronun takip ettiği yeterli derecede uzun bir yolun tüm elektron gazının davranışı hakkında bilgi vereceğini düşünülebilir. Diğer taraftan, incelenmekte olan taşınım süreci homojen değilse ya da hareketsiz değilse, büyük miktarda elektronu simüle etmek ve ilgilenilen süreç hakkında istenilen bilgiyi elde etmek için onları dinamik geçmişleri içinde takip etmek gerekir.

2.1. Tipik Bir Monte Carlo Programı

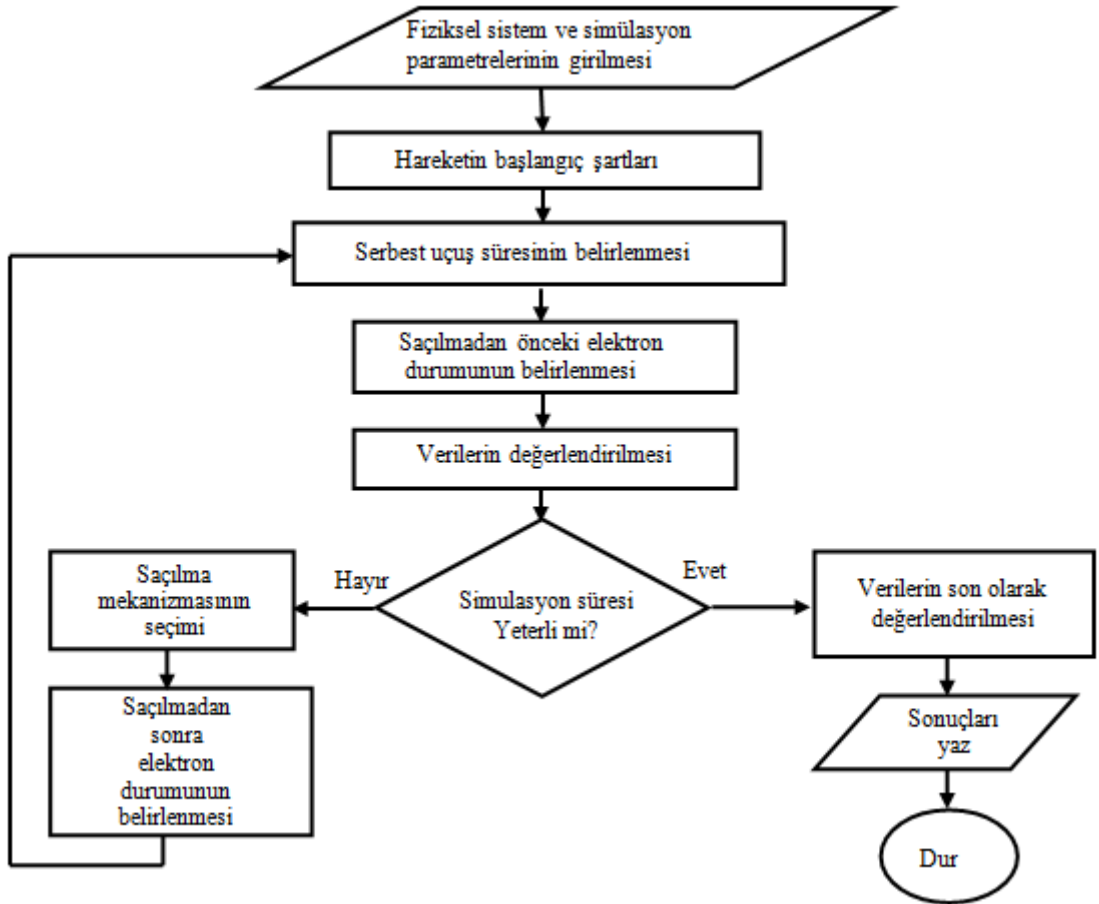
Burada hareketsiz, homojen bir taşınma sürecinin simülasyonuna uyan tipik bir Monte Carlo programının yapısını özetleyelim. İşlemin her bir aşamasının ayrıntıları aşağıdaki bölümlerde verilecektir. Basitleştirmek adına, dış bir \vec{E} elektrik alanına maruz kalan basit bir yarıiletkendeki elektronların durumuna başvuracağız. Simülasyon k_0 dalga vektörü olan, bahsedilen ilk şartlardaki bir elektron ile başlar, daha sonra ilk serbest uçuş süresi dağılım olasılıkları tarafından belirlenen bir olasılık dağılımı ile seçilir. Serbest uçuş sırasında dışsal kuvvetler bağıntıya göre harekete geçirilir.

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = e\vec{E} \quad (2.1)$$

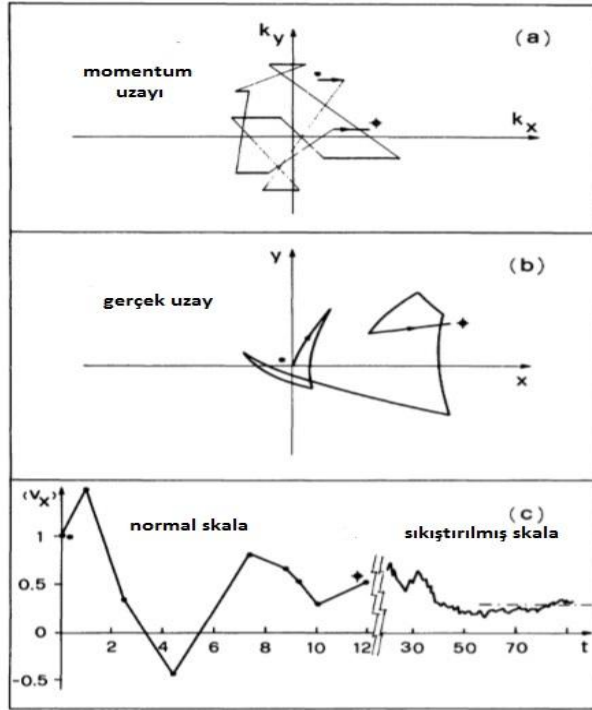
Bağıntıda; \vec{k} taşıyıcı dalga vektörü, e elektron yükü (elektronlar için $e < 0$ ve hol için $e > 0$) ve $\hbar, 2\pi$ e bölünen Planck sabitidir. Simülasyonun bu bölümünde ilgili tüm miktarlar, hız, enerji vb. kaydedilir. Daha sonra olası tüm dağılım mekanizmalarının görece olasılıklarına göre serbest uçuşun sonlanmasından sorumlu olacak şekilde bir dağılım mekanizması seçilir. Bu mekanizmanın diferansiyel dik kesitinden dağılımdan sonra yeni bir k durumu, yeni serbest uçuşun ilk durumu olarak rastgele seçilir ve tüm süreç tekrarlayan şekilde yinelenir. Hesaplamanın sonuçları simülasyon devam ettikçe daha da kesin hale gelir ve bahis konusu miktarlar istenilen kesinlikte bilinince simülasyon sona erer.

Bu çalışmada yük taşıyıcılarını anlatmak için taşıyıcılara “elektronlar” denecektir; başka bir deyişle elektron ya da holler fiziksel özellikler açısından nötr olarak kullanılacaktır.

Taşınım miktarlarının kesinliğini, yani istatistiksel belirsizlik, belirlemenin basit bir yolu tüm geçmişi eşit zaman aralıkları olan pek çok ardışık alt geçmişlere bölmek ve her biri için bahis konusu miktarı belirlemektir. Daha sonra her bir miktarın ortalama değeri belirlenip, bu ortalamanın standart sapmasını istatistiksel belirsizliğin bir tahmini olarak alınır.



Şekil 2.1. Tek parçacık Monte Carlo simülasyonu için akış şeması.



Şekil 2.2. Monte Carlo yönteminin temelleri.

Monte Carlo yönteminin daha kolay anlaşılabilmesi için iki boyutlu bir model Şekil 2.2' de verilmektedir.

(a) Dalga-vektör (k) uzayında, pozitif x yönünde yönlendirilen hızlanan bir kuvvete (alan) maruz kalan örneklem partikülünün simülasyonu. Ağır alt kesitler serbest uçuş sırasındaki alan etkisinden kaynaklanmaktadır. Eğriler saçılım süreçleri nedeniyle k 'nın süreksiz değişimlerini temsil etmektedir.

(b) Partikülün gerçek uzaydaki yolu. Şeklin (a) bölümündeki sekiz serbest uçuşa karşılık gelen sekiz parabol fragmanından oluşmaktadır.

(c) Partikülün simülasyon zamanının bir fonksiyonu olarak ortalama hızı eğrinin ($t < 12$) sol bölümü şeklin (a) ve (b) bölümlerinde gösterilen simülasyon ile elde edilmiştir. Yatay noktalı çizgiler çok uzun bir simülasyon zamanı ile elde edilen "kesin" sürüklenme hızını temsil etmektedir. Özel semboller şeklin üç bölgesindeki karşılıklı

noktaları göstermektedir (şekildeki yıldız simgesi başlangıç noktasıdır). Tüm birimler keyfi kullanılmaktadır.

2.1.1. Fiziksel Sistemin Tanımı

Programın başlangıç noktası, materyalin parametreleri, T_0 (örgü) sıcaklığı ve elektrik alanı gibi fiziksel miktarların değerlerini içeren ilgilenilen fiziksel sistemin tanımlanmasıdır. Bu noktada belirtmek gerekir ki materyali karakterize eden parametreler arasında, en az bilinen, genellikle değiştirilebilen parametreler olarak alınan, kristalin içerisindeki örgü ve kusurları olan elektron etkileşimlerini tanımlayan bağlanma dayanımları bulunur. Bu düzeyde her bir alt geçmişin, sonuçların istenilen kesinliğinin ve benzeri süresi gibi simülasyonu kontrol eden parametrelerinde tanımlanması gerekir.

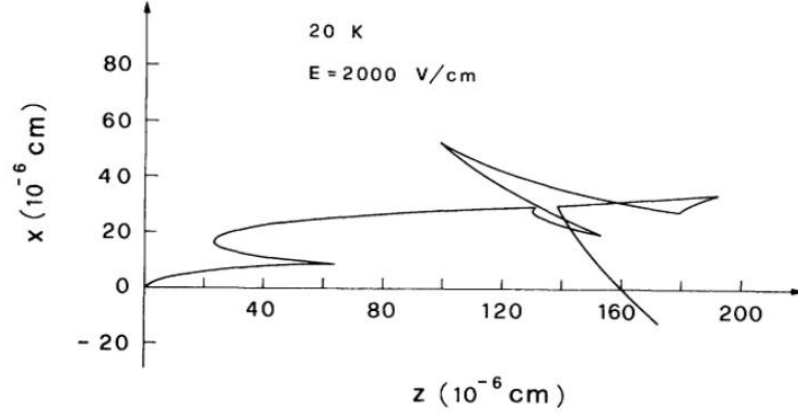
Programdaki bir sonraki aşama elektron enerjisinin bir fonksiyonu olarak her bir dağılım oranının önceden hesaplanmasıdır. Bu aşama, simülasyonun etkinliğini arttırmada faydalı olacak olan bu fonksiyonların maksimum değeri hakkında bilgi sağlayacaktır. Son olarak programın bu ön bölümünde tüm kümülatif miktarlar sıfıra konulmalıdır.

2.1.2. Hareketin İlk Şartları

İçerisinde değişmez durum şartlarının simüle edildiği, incelenmekte olan durumda, simülasyon zamanı, elektron hareketinin ilk şartlarının son sonuçlarını etkilemeyecek ölçüde, uzun olması gerekir. İyi bir simülasyon zamanı seçimi ergodik ihtiyacı ($t \rightarrow \infty$) ile bilgisayar zamanını arttırma isteği arasındaki uyumdur. Elektronun dalga vektörü \vec{k} için yüksek derecede mümkün olmayan bir ilk değer seçildiğinde, simülasyonun ilk bölümü bu uygunsuz seçimden güçlü bir şekilde etkilenebilir.

Çok yüksek bir elektrik alan gibi özel bir durumda $k_B T_0$ (k_B Boltzmann sabiti) düzeninin bir enerjisi başlangıçta elektrona verilirse, bu enerji değişmez durum şartlarındaki ortalama enerjiden daha düşük olacaktır. Geçicilik sırasında değişmez-durum değerine doğru artacaktır. Sonuç olarak, alana doğru elektron tepkisi, hareket açısından, başlangıçta hareketsiz şartlarından daha yüksek olacaktır. Bu, başlangıçtaki anormal

derecede büyük bir momentum yatışma zamanı nedeniyle, değişmez şartlarda olduğundan daha uzun olan ilk serbest uçuşlar vasıtasıyla gerçek uzayda yansıtılır.



Şekil 2.3. Termal denge ortalama enerjisiyle başlayan bir taşıyıcı yolunun yüksek bir elektrik alanının etkisi altında gerçek uzay düzlemindeki iz düşümü.

İyi yönlendirilmiş başlangıç serbest yolları düşük enerjinin bir sonucu olarak değişmez durum şartları altındakinden daha uzun momentum durulma zamanlarının değerlerini yansıtmaktadır.

Simülasyon zamanı uzadıkça başlangıç şartlarının ortalama sonuçlar üzerindeki etkisi daha az olacaktır; ancak uygun olmayan bir başlangıç seçiminin istenmeyen etkilerinden kaçınmak ve daha iyi bir yakınsaklık elde etmek için simülasyonun ilk bölümünün istatistikten çıkartılması avantajlı olacaktır. Simülasyon pek çok alt geçmişlere bölündüğünde her bir yeni alt geçmişin başlangıç durumu öncekinin son durumuna eşitlendirildiğinde durağan durum için daha iyi yakınsaklık elde edilebilir. Bu şekilde sadece ilk alt geçmişin başlangıç şartı son sonuçları bir taraf lehine etkileyecektir.

Diğer taraftan, bir simülasyon homojen olmayan bir sistemdeki (örneğin, küçük bir cihazdaki elektron taşınımı analiz edildiğinde) bir geçicilik süreci veya bir taşınma sürecini çalışmak için planlandığında pek çok elektronu ayrı ayrı simüle etmek gereklidir. Bu durumda incelenmekte olan özel fiziksel durum için başlangıçtaki elektron durumlarının dağılımı dikkate alınmalıdır ve başlangıçtaki geçicilik amaçlanan sonuçların önemli bir parçası haline gelir.

2.1.3. Uçuş Süresi Kendiliğinden Saçılım

Eşitlik (2.1)'e göre uygulamalı alan nedeniyle elektron dalga vektörü k bir serbest uçuş sırasında sürekli olarak değişir. Bu yüzden $P[k(t)]dt$, k durumundaki bir elektronun dt zamanı sırasında çarpışma yaşadığı bir olasılık ise, $t = 0$ zamanında bir çarpışma yaşamış olan bir elektronun bir t zamanından sonra başka bir çarpışma yaşamamış olma olasılığı aşağıdaki gibidir:

$$\exp\left(-\int_0^t P[k(t')]dt'\right) \quad (2.2)$$

Bu denklem genellikle $(0, t)$ aralığının bir saçılım içermediği olasılığı verir. Sonuç olarak, elektronun t civarındaki dt sırasında bir sonraki çarpışmaya uğrayacağı $p(t)$ olasılığı:

$$p(t)dt = P[k(t)]\exp\left(-\int_0^t P[k(t')]dt'\right)dt \quad (2.3)$$

ile verilir.

Üsteki integralin karmaşıklığı nedeniyle olası serbest uçuşları, eşit şekilde dağıtılmış rastgele sayılar r 'den başlayarak uygun bir yaklaşımla bu integral eşitliği her bir dağılım olayı için çözülmesi gerekecektir (Kurosowa, 1966). Denklemi (2.3)'ün dağılımı ile çözmek kolay olmayacaktır. Rees (1968, 1969) bu zorluğun üstesinden gelmek için çok basit bir yöntem geliştirdi. Eğer $\Gamma \equiv 1/\tau_0$ ilgili k uzamı bölgesinde $P(k)$ maksimum değeriye, bu kendi dağılımı da içeren toplam dağılım olasılığı değişmez ve Γ ye eşit olacak şekilde yeni bir kurgusal “kendiliğinden saçılım” kullanılır. Eğer taşıyıcı böylesi bir kendiliğinden saçılıma maruz kalıyorsa, pratikte elektron yolu sanki hiç bir saçılma olmamış gibi etkilenmeden devam edecek şekilde, çarpışma sonrasındaki k durumu çarpışma öncesindeki k durumuyla eşit hale getirilir. Genellikle Γ 'nin $P(k)$ 'nin maksimum değerinden daha az olmaması yeterlidir. Üstelik, aşağıda göreceğimiz gibi Γ uygun bir enerji fonksiyonu olabilir.

Bu durumda $P(k) = (\tau_0)^{-1}$ deęişmezi ile denklem (2.3)

$$p(t) = \frac{1}{\tau_0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_0}\right) \quad (2.4)$$

denklem (2.4)'e indirgenir. Rastgele r sayıları olasılıksal serbest uçuşlar üretmek için çok basit şekilde kullanılabilir. Bunlar denklem (2.5) ile verilebilir.

$$t_r = -\tau_0 \ln(1 - r) \quad (2.5)$$

Ancak r ; 0 ile 1 arasında eşit şekilde dağıldığı için $(1 - r)$ de öyledir ve pratikte denklem (2.5) yerine genellikle denklem (2.6) kullanılır. Kendiliğinden saçılım olgularının uygulanmasında sarf edilen bilgisayar zamanı serbest uçuş süresinin hesaplanmasının basitleştirilmesi ile fazlasıyla giderilir.

$$t_r = -\tau_0 \ln(r) \quad (2.6)$$

Γ deęişmezinin seçimi açısından, genelde $P(k)$ 'nin basit olarak $P(\epsilon)$ elektron enerjisinin bir fonksiyonu olduğunu ve Γ için uygun bir seçimin simülasyon sırasında örneklendirilmesi umulan enerji bölgesinde $P(\epsilon)$ 'nin maksimum deęeri olduğunu belirtmeliyiz. $P(\epsilon)$ E 'nin monotonik bir fonksiyonu olmadığı durumda maksimum deęeri bilgisayar programının başlangıcında bir tablolandırma yapılarak tahmin edilmelidir. Genellikle olduğu gibi, $P(\epsilon)$ E 'nin artan bir fonksiyonu olduğu durumda ise, $\Gamma = P(\epsilon_M)$ alınabilir. Burada ϵ_M simülasyon sırasında taşıyıcı tarafından ulaşılabilmenin önemsiz olasılıklı bir maksimum elektron enerjisidir. Ancak eęer Γ seçilecekse, simülasyon sırasında elektron tarafından etkilenen enerji deęişim oranının başlangıçta bilinmedięi gözlemlenmelidir. Kendiliğinden saçılım olguları için bilgisayar zamanının boşa geçirilmesine yol açacak gereksiz oranda büyük bir deęerden kaçınmak isteniyorsa ϵ_M 'nin çok büyük alınamayacağı akılda tutularak ϵ_M için bir tahmin yapılmalıdır. Simülasyon sırasında ϵ elektron enerjisi bilgisayar ilk çalıştırıldığında belirlenen maksimum ϵ_M deęerini aşacak olursa hangi işlemin alınacağına da karar verilmelidir. Bazı uzmanlar bu gibi durumlarda E enerjisini keyfi olarak ϵ_M den daha düşük bir deęere indirger ve sadece

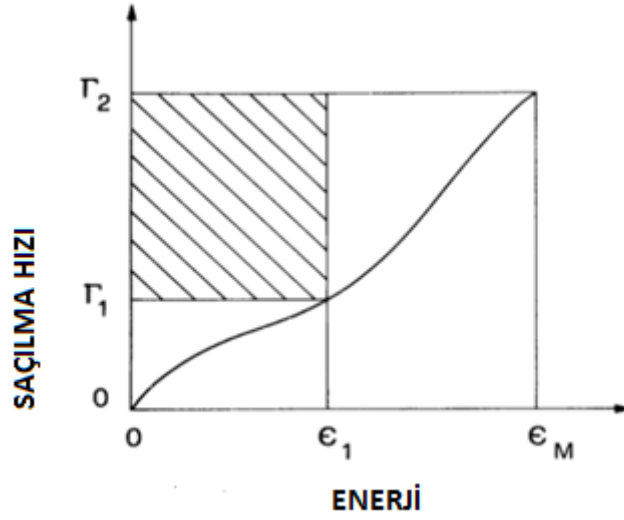
bilgisayarın çalıştırılmasının sonunda böylesi bir durumun sınırlı kez olduğunu kontrol eder.

Bu prosedür ϵ_M 'ye yakın kritik bir değerin yukarısındaki enerjilerde gerçekleştiğinde elektron enerjisinin (elektron kaçıışı) belirsiz artış oluşumunu gizleyebileceği için tehlikeli olabilir. Simülasyonun devam etmesi için daha güvenli bir yol, elektron enerjisine müdahale etmeden ϵ_M 'nin ve eğer gerekirse benzer şekilde Γ 'nin değerini arttırmaktır. Γ simüle edilen uçuştan bağımsız olması gerektiği için Γ 'nin çok fazla kez değiştirilmemiş olduğunu daima kontrol etmek gerekir. Program çalıştırılırken kurulum aşamasında E_M düşük tahmin edildiği zaman bu garanti edilir çünkü elektron enerjisinin nadiren ulaşabileceği bir değerin üzerine hızlı bir şekilde çıkacaktır.

Birkaç vadi içeren bir yarıiletken modeli için her bir vadi türü için uygun bir şekilde farklı bir E_M değeri alınabilir. Bazen toplam saçılım olasılığı $P(\epsilon)$ bahsedilen aktivasyon enerjisi olan güçlü bir saçılım mekanizması nedeniyle bir eşik değer etrafında büyük bir farklılık gösterebilir (tipik bir durum kutup yarıiletkenlerinde merkezden üst koyalara doğru vadiler arası dağılımdır). Bu durumda Γ 'nin tek değeri düşük elektron enerjilerinde çok büyük sayıda kendiliğinden saçılım olgularına yol açabilir. Bu durumda

$$\Gamma(\epsilon) = \begin{cases} \Gamma_1 = \tau_1^{-1}, & \epsilon \leq \epsilon_1 \\ \Gamma_2 = \tau_2^{-1}, & \epsilon > \epsilon_1 \end{cases} \quad (2.7)$$

ile verilen adım saçılım oranı $r(\epsilon)$ kullanmak mümkündür. Bu denklemde ϵ_1 uygun bir eşik enerjisi iken Γ_1 ve Γ_2 karşılıklı iki enerji değişiminin maksimum $P(\epsilon)$ oranlarıdır.



Şekil 2.4. Kendiliğinden saçılım $\Gamma(\epsilon)$ içeren, tek seviyeli bir seçim (Γ_2) açısından kendiliğinden saçılım olgularının sayısını azaltmaya uygun iki seviyeli basamak şekilli toplam saçılım oranının çizimi.

Metinde anlatıldığı gibi, Γ_1 , 0 ile ϵ_1 arasındaki enerjiler için kullanılır. Gölge bölge iki seviyeli seçimden kaynaklanan artan etkinliği gösterir.

$\Gamma(\epsilon)$ 'yi denklem (2.7) ile verildiği gibi kullanırken elektron enerjisinin serbest bir uçuşta ϵ_1 değerini aşabileceğini unutmamalıyız. Aşağıdaki iki durum serbest uçuşun başlangıç durumuna göre meydana gelebilir.

- i) Bir elektron ϵ_1 'den düşük bir enerjiyle bir serbest uçuşa başlar.

$$t_r = -\tau_1 \ln(r) \quad (2.8)$$

ile verilen rastgele bir r rakamı r_1 ile süresi t_r olan bir serbest uçuş üretmek için kullanılır. Bu serbest uçuşun sonunda eğer elektron enerjisi hala ϵ_1 'den düşükse t_r muhafaza edilir ve simülasyon her zamanki gibi devam eder. Diğer taraftan eğer bu serbest uçuşun sonunda elektron enerjisi ϵ_1 'in üzerindeyse denklem (2.8) ile verilen t_r muhafaza edilemez. Aynı rastgele r rakamı aşağıdaki gibi serbest uçuşun yeni bir süresini üretmek için kullanılır. Denklem (2.4)'ün yerine denklem (2.7)'den

$$p(t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_1} \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right), & t < \tilde{t} \\ \frac{1}{\tau_2} \exp\{-[\tilde{t}/\tau_1 + (t - \tilde{t})/\tau_2]\}, & t \geq \tilde{t} \end{cases} \quad (2.9)$$

denklem (2.9)'a ulaşılır. Burada \tilde{t} elektronun ϵ_1 enerjisine ulaşması için gereken zamandır ve elektron dinamiklerinden kolaylıkla bulunabilir. Direkt tekniğin uygulanmasıyla, t_r

$$t_r = -\tau_2 \ln(r) + \tilde{t} \left(1 - \frac{\tau_2}{\tau_1}\right) \quad (2.10)$$

ile verilir.

ii) Bir elektron ϵ_1 'in üzerinde bir enerji ile bir serbest uçuşa başlar. Bu serbest uçuşun süresi her zaman $\tau = \tau_2$ iken denklem (2.7) ile belirlenebilir. Aslında son enerji ϵ_1 'den düşük olsa bile bu Γ 'nin özel değerinden bağımsız yapıldığı sürece daha düşük enerjilere uzanan $\Gamma(\epsilon)$ 'nin Γ_2 üst değeri dikkate alınarak biri doğrulanır. Elbette bu durumda Γ_2 'nin serbest uçuşun sonlanmasına neden olan saçılım mekanizmasının belirlenmesinde sürekli olarak dikkate alınması gerekir (özellikle kendiliğinden saçılım için). Yukarıdaki tartışmada açıklanmayan tek durum, tek serbest uçuş sırasında, ϵ_1 'den düşük değerlerden başlayan elektron enerjisinin ilk kez ϵ_1 'in üzerine çıktığı ve daha sonra ϵ_1 'in altına düştüğü durumdur; ancak bu durum statik alanlar ve normal band yapıları için gerçekleşmez. Yukarıdaki fikir birden fazla aşamayla $\Gamma(\epsilon)$ parçalı fonksiyonlarına kadar genişletilebilir, ancak, böylesi bir prosedür bilgisayar zamanını korumak açısından kendiliğinden saçılım diye isimlendirilen teknikle karşılaştırılmalıdır.

2.1.4. Saçılma Mekanizmasının Seçimi

Serbest uçuş sırasında elektron dinamiği Denklem (2.1) tarafından yönetilir, böylece sonunda, elektron dalga vektörü ve enerjisi bilinmektedir ve tüm saçılma olasılıkları $P_i(\epsilon)$ değerlendirilebilir. Burada i , i 'inci saçılma mekanizmasını belirtir. Kendi kendine saçılma olasılığı, P_i 'lerin toplamının Γ 'nin tamamlayıcısı olacaktır. Öyleyse, mümkün olanların arasından bir mekanizma seçilmelidir. Rastgele bir sayı r verildiğinde, $r\Gamma$ değeri, P_i 'lerin ardışık toplamlarıyla karşılaştırılır.

Her bir saçılma olasılığı $P_i(\epsilon)$ rastgele bir sayı ile bir mekanizma seçilene kadar değerlendirildiği için başlamadan önce bilgisayar programında P_i 'leri olasılık sırasına göre sıralamak uygundur. Ancak şu da belirtilmelidir ki çeşitli saçılımların meydana gelmesi aynı zamanda sıcaklık ve alana'da bağlıdır. Bu yüzden, bazen göreceli sıklıklarını tahmin etmek zor olabilir. Eğer tüm saçılmalar denenmiş ve hiçbiri seçilmemişse, bu $r\Gamma > P(\epsilon)$ ve kendi kendine bir saçılmanın meydana geldiği anlamına gelir. Tüm P_i 'lerin açık bir şekilde hesaplanması gerektiğinden, bu işlem ile kendi kendine bir saçılmanın meydana geldiğini belirlemek oldukça zaman alıcıdır. Ancak, hızlı kendi kendine saçılma diye adlandırılabilir bir çare ile süreç kısaltılabilir. Bu, simülasyonun başlangıcında incelenmekte olan enerji aralığının bir örgüsünü kurma ve ardından her bir enerji aralığında $\Delta\epsilon^{(l)}$ (logaritmik bir ölçekte eşit şekilde dağılmış enerji aralıkları yararlı olabilir) maksimum toplam saçılım olasılığını $P^{(n)}$ bir vektörde kaydetmekten oluşur. Uçuş sonunda eğer elektron enerjisi n 'inci aralıkta düşerse, tüm P_i 'ler ayrı ayrı denenmeden önce $r\Gamma$ ile $P^{(n)}$ karşılaştırılır. Bu aşamada eğer $r\Gamma > P^{(n)}$ ise, kendi kendine saçılma kesinlikle gerçekleşir. Aksi durumda tüm P_i 'ler sırayla değerlendirilecektir. Bu yüzden yalnızca $P(\epsilon) < r\Gamma < P^{(n)}$ olduğunda kendi kendine bir saçılma meydana gelir. Bu da P_i 'lerin değerlendirilmesini gerektirir.

2.1.5. Saçılım Sonrası Durum Seçimi

Elektron serbest uçuşunun bitmesine neden olan saçılım mekanizması belirlendiğinde elektronun saçılımından sonraki yeni durum k_a , saçılım olayının son durumu olarak seçilmelidir. Eğer serbest uçuş kendi kendine bir saçılım ile bitmişse, k_a

saçılım öncesi durum olan k_b 'ye eşit olarak alınmalıdır. Tersine, gerçek bir saçılım olduğunda ise k_a o mekanizmanın diferansiyel kesitine göre olasılıksal olarak üretilir.

2.1.6. Sabit Durum Olgusu İçin Sonuçların Toplanması

Her bir serbest uçuş için toplanan veriler, ilgi miktarının belirlenmesinin temelinin oluşturur.

2.1.6.1. Zaman Ortalamaları

Genelde geçen bir süre boyunca, T bir miktarın ortalama değerini, $\mathcal{A}[k(t)]$ (sürüklenme hızı, ortalama enerji vb.), şu şekilde elde edebiliriz:

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{A} \rangle_T &= \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{A}[k(t)] dt \\ &= \frac{1}{T} \sum_i \int_0^{t_i} \mathcal{A}[k(t')] dt'\end{aligned}\quad (2.11)$$

Burada, tüm simülasyon zamanı T üzerindeki integral, tüm serbest uçuş süresi t_i üzerindeki integraller toplamına ayrılmıştır. Sabit bir durum araştırıldığında T yeteri kadar uzun alınmalıdır ki denklem (2.11)'deki $\langle \mathcal{A} \rangle_T$ elektron gazı üzerindeki miktarın \mathcal{A} ortalamasının tarafsız bir tahmin edicisi olabilsin.

Benzer şekilde elektron dağılım fonksiyonu da elde edilebilir. Bilgisayar çalışması başlangıcında bir k alanı (ya da enerji) örgüsü kurulur. Simülasyon sırasında örgünün her bir hücresinde örnek elektronun geçirdiği zaman kaydedilir ve büyük T için, uygun şekilde normalize edilen bu zaman, Boltzmann denkleminin çözümü olan elektron dağılım fonksiyonunu temsil edecektir (Fawcett vd., 1970). Bu dağılım fonksiyonu değerlendirmesi, Denklem (2.11)'in özel bir durumu olarak düşünülebilir. Burada, \mathcal{A} için $n_j(k)$ fonksiyonlarını, eğer k örgünün j 'inci hücresindeyse 1 değeriyle, yoksa 0 değeriyle, seçilir. Bu yöntem Monte Carlo simülasyonlarından taşıma miktarını elde etmede en yaygın kullanılanıdır.

2.2. Enerjinin Dalga Vektörüyle İlişkisi

Yük taşıyıcıların enerji-dalga vektör ilişkisinin $\epsilon = \epsilon(k)$ formu dış bir gücün etkisi altındaki dinamiksel özelliklerini belirlemektedir. Aşağıda, sırasıyla iletim ya da valans bandına ait k durumlarını ele alırken açık bir şekilde elektronlar ya da hollerden bahsedeceğiz. Genellikle vadiler olarak adlandırılan iletim bandının minimumu çevresindeki alanda, ya da valans bandının maksimumu çevresinde, $\epsilon(k)$ fonksiyonu k 'nın ikinci derece fonksiyonuyla (parabolik bandlar) verilir; bu da aşağıdaki formlardan birini alabilir.

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.12)$$

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_l^2}{m_l} + \frac{k_t^2}{m_t} \right], \quad (2.13)$$

$$\epsilon(k) = ak^2 [1 \mp g(\mathcal{V}, \psi)] \quad (2.14)$$

Denklemler (2.12) ve (2.13) elektronlar için kullanıldığında, k vadilerin merkezlerinden ölçülür. Denklem (2.12) (küresel durum) sayısal etkin kütleli m , küresel eş-enerjili yüzeylerle bir bandı temsil eder ve iletim bandın minimumunun Γ 'da yerleşmesi için ve ayrılmış valans bandının maksimumu için uygundur. Bu durum, en basit olanıdır ve taşıma özelliklerinin kabaca tahmini yapılmak istendiğinde herhangi bir materyal için genelde kullanılan basit bir modeldir.

Denklem (2.13) elipsoidal durum, etkin kütle tensörüdür ($1/m_l$ ve $1/m_t$ ters etkin-kütle tansörünün sırasıyla boyuna ve enine bileşenleridir). Elipsoidal eş-enerjili düzeylerinden oluşan bir bandı temsil eder. Elipsoitler, vadilerin merkezini içeren kristalografik yönler etrafında rotasyonel simetriye sahiptir. Bu durum, L 'de ve Δ boyunca bulunan iletim bandının minimumu için uygundur. Simetri nedeniyle birkaç eşdeğer vadi mevcuttur (çoklu-vadi modeli; bu modelde, çok yüksek enerjiye sahip k boşluğunun ara

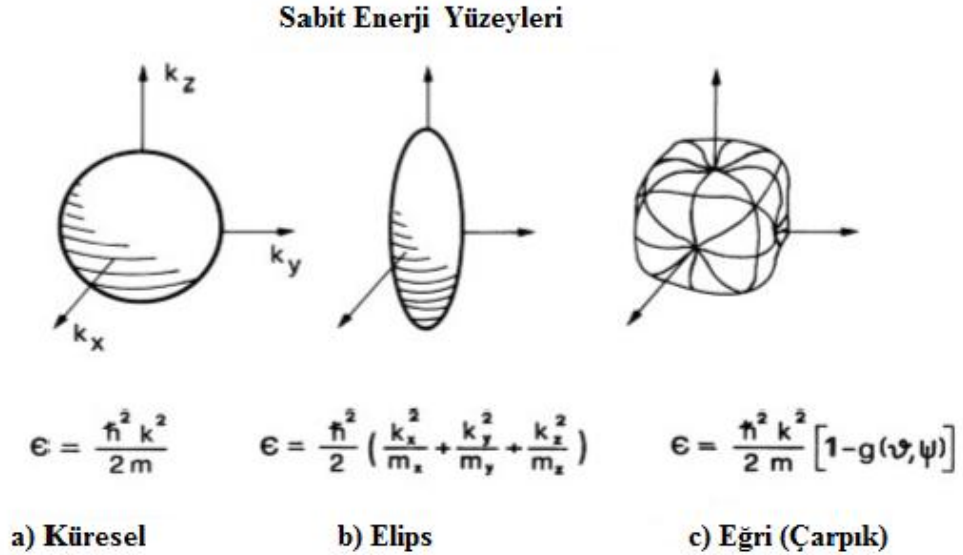
alanlarının varlığı nedeniyle, elektronların k değerleri sürekli değişerek vadiden vadiye hareket edemedikleri varsayılır).

Denklem (2.13) bükülmüş eş-enerjik yüzeylerle (bükülmüş durum) bir bandı temsil eder ve valans bandının bozulmuş iki maksimumu için uygundur (burada \pm sırasıyla ağır ve hafif holleri göstermektedir). \mathcal{V} ve ψ , kristalografik eksenlerle ilgili k 'nın polar ve azimutsal açılarıdır. Bu şekilde $g(\mathcal{V}, \psi)$, etkin kütlelerin açısallı bağımlılığını içerir; Ottaviani vd. tarafından şu şekilde verilir (Ottaviani vd., 1975) :

$$g(\mathcal{V}, \psi) = \left[[b^2 + c^2(\sin^4 \mathcal{V} \cos^2 \psi \sin^2 \psi + \sin^2 \mathcal{V} \cos^2 \mathcal{V})] \right]^{1/2} \quad (2.14)$$

$$a = \frac{\hbar^2 |A|}{2m_0}, \quad b = \frac{|B|}{|A|}, \quad c = \frac{|C|}{|A|} \quad (2.15)$$

Burada A , B ve C ters valans bandı parametreleridir (Dresselhaus vd., 1955) ve m_0 serbest elektron kütleleridir.



Şekil 2.5. Sürekli enerji yüzeylerinin farklı şekilleri.

2.3. Parabolik Olmama

İletim bandının minimumundan veya valans bandı maksimumundan çok uzakta olan k değerleri için, enerji ikinci dereceden ifadelerden sapor ve parabolik olmama durumu meydana gelir.

İletim bandı için, parabolik olmamayı tanıtan basit analitik bir yol, enerji-dalga-vektör türü bir ilişkiyi incelemektir (Conwell ve Vassel, 1968).

$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = Y(k) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.16)$$

$$\epsilon(k) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha Y}}{2\alpha} \quad (2.17)$$

Burada Denklem (2.16)'nın sağ tarafı Denklemler (2.12) ve (2.13)'ün sağ taraflarından biriyle değiştirilebilir ve α diğer bant miktarlarıyla ilişkili parabolik olmayan bir parametredir. Özellikle aşağıdaki yaklaşık ifadeler Γ (Fawcett vd., 1970), L (Paige, 1964) ve Δ 'de minimumlar için verilmiştir.

$$\alpha(\Gamma) = \frac{1}{\epsilon_\Gamma} \left[1 - \frac{m_\Gamma}{m_0} \right]^2 \quad (2.18)$$

$$\alpha(L) = \frac{1}{\epsilon_{L'_{3v}} - \epsilon_{L_{1c}}} \quad (2.19)$$

$$\alpha(\Delta) = \frac{1}{2(\epsilon_{\Delta'_{2c}} - \epsilon_{\Delta_{1c}})} \left[1 - \frac{m_l}{m_0} \right]^2 \quad (2.20)$$

Burada m_Γ , Γ vadisinin altındaki etkin kütleyi, ϵ_Γ , Γ 'deki doğrudan enerji aralığını, L'_{3v} ve L_{1c} verilen simetriyle birlikte valans ve iletim bandının durumlarını, Δ'_{2c} ve Δ_{1c} Δ boyunca minimumlar için verilen simetriyle iletim bandının durumlarını temsil eder.

Valans bandı için, parabolik olmama Denklem (2.16)'daki gibi bir formda parametrelerle ifade edilemez. Bu durumda, parabolik olmama iki temel özelliğe sahiptir (Kane, 1956).

- Ağır ve hafif holler için sırasıyla $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ yönleri boyunca daha belirgindir.
- Eğer ϵ_{so} en düşük valans bandının ayrılan enerjisi ise, parabolik olmama en çok $\frac{1}{3}\epsilon_{so}$ yakınındaki enerjilerde etkindir. $\epsilon/\epsilon_{so} \ll 1$ ve $\epsilon/\epsilon_{so} \gg 1$ sınırları içinde paraboliktir.

Denklem (2.16)'da parabolik olmayan bir bant türü için, bir k durumuyla ilişkili hız şu şekilde bulunur:

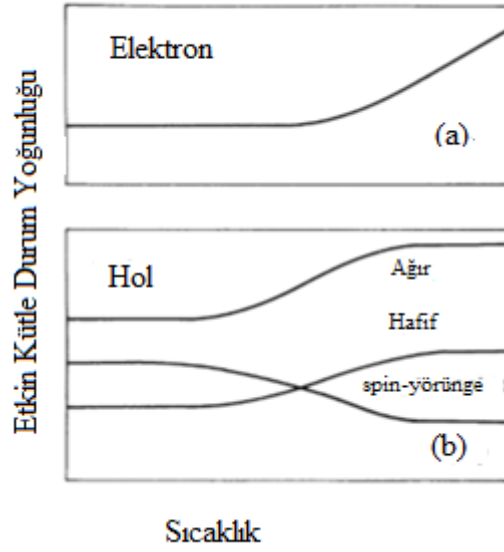
$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m(1 + 2\alpha\epsilon)} \quad (2.21)$$

Böylece iletkenlik etkin kütlesi m_c , $v = \frac{\hbar k}{m_c}$ şeklinde tanımlanır ve $m_c = m(1 + 2\alpha\epsilon)$ ile verilir. Parabolik olmamanın durum yoğunluğu etkin kütle m_d üzerine etkisi Gagliani ve Reggiani (1975)'i izleyerek şu şekilde hesaplanır:

$$m_{de}^{3/2} = (m_t^2 m_l)^{1/2} (2\beta/\pi)^{1/2} \exp(\beta) K_2(\beta) \quad (2.22)$$

$$m_{di}^{3/2} = \pi^{-3/2} \int \exp[-\epsilon_i^v(x)/(K_B T_0)] dx, \quad i = h, l, so \quad (2.23)$$

Burada, alt simgeler e ve i sırasıyla iletim ve valansı belirtmektedir. $\beta = (2\alpha K_B T_0)^{-1}$; K_2 sıra 2'nin değiştirilmiş Bessel fonksiyonudur. $x = \hbar k / (2m_0 K_B T_0)^{1/2}$; ϵ_i^v işaretiyle birlikte alındığında ağır ($i = h$), hafif ($i = l$) ve dönme-yörünge ($i = so$) valans bandı enerji-dalga vektör ilişkisidir. Tümleştirme tüm k uzayında gerçekleşir.



Şekil 2.6. Etkin kütle durum yoğunluğunun sıcaklığa bağlı değişim grafiği.

Bu şekilden, üç tip holler için etkin kütlelerin artışı (ya da ayrılma bandı için düşüşü) iyi tanımlanmış bir enerji alanıyla sınırlıyken, parabolik olmamanın etkilerinin elektronlar için etkin kütlelerin sınırsız bir artışına nasıl neden olduğu görülebilir.

2.4. Herring ve Vogt dönüşümü

Denklem (2.13)'ün ellipsoidal durumu düşünüldüğünde, analitik hesaplamaları basitleştirmek için, ellipsoidal eş-enerjik yüzeyleri kürelere küçülten ve

$$k_i^{*(m)} = T_{ij} k_j^{(m)} \quad (2.24)$$

şeklinde tanımlanan Herring-Vogt (1956) dönüşümünü tanıtmak yararlıdır. Burada $k^{*(m)}$ dönüştürülen dalga vektörüdür. m 'inci vadedeki elektron için, dönüşüm matrisi T_{ij} , simetri eksenini boyunca z eksenine birlikte vadinin merkezine merkezlenmiş olan vadi referans çerçevesinde şu şekli alır:

$$T^{(m)} = \begin{vmatrix} \left(\frac{m_0}{m_t}\right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_0}{m_t}\right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_0}{m_l}\right)^{1/2} \end{vmatrix} \quad (2.25)$$

Sonuç olarak, yıldızlı boşluktaki enerji-dalga-vektör ilişkisi küresel türe dönüşür:

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m_0} T_{ij} T_{il} k_j k_l = \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_0} \quad (2.26)$$

ve hacim elementi dk , $dk^* = (m_0/m_d)^{3/2} dk$ olarak değiştirilir ve burada $m_d = (m_l m_t^2)^{1/3}$ durum yoğunluğu etkin kütlelerdir.

Vektör denklemlerini korumak için, Denklem (2.24)'deki dönüşüm, itme kuvveti ve titreşim dalga vektörleri gibi diğer vektör miktarlarına da uygulanmalıdır. Böylece, elektronun F kuvveti altında hareket denklemi şu şekilde olur:

$$\frac{d}{dt}(\hbar k^*) = F^* \quad (2.27)$$

k^* 'nin bir fonksiyonu olarak elektron hızı,

$$v_i = \frac{\hbar}{m_0} T_{ij} k_j^* \quad (2.28)$$

ile verilir. Bu da yine sadece m_0 'yi, $m_0(1 + 2\alpha\epsilon)$ ifadesiyle değiştirerek parabolik olmayan duruma genellenebilir.

3. YARIİLETKENLERDE SAÇILMA

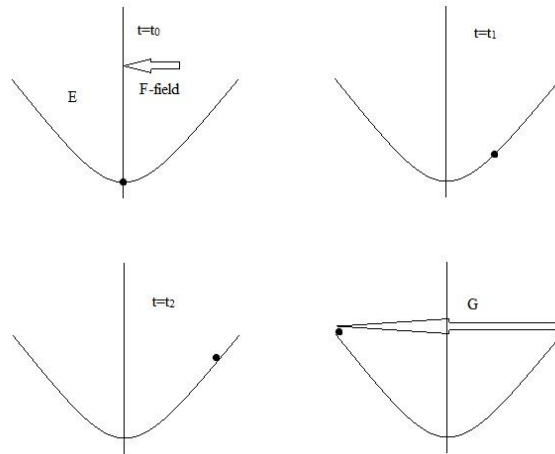
Bloch teoremine göre, mükemmel bir yarı iletkende elektron dalga fonksiyonları (zamana bağlı kısımda alan) şu forma sahiptir:

$$\psi_k(r, t) = v_k \exp i(k \cdot r - wt) \quad (3.1)$$

Burada $w = E/\hbar$ elektron dalga frekansıdır. Mükemmel sistemde elektronların saçılımı diye bir şey yoktur. Eğer bir \vec{E} elektrik alanı uygulanmışsa, elektron aşağıdaki hareket denkleminin uyararak serbest bir elektron gibi davranır:

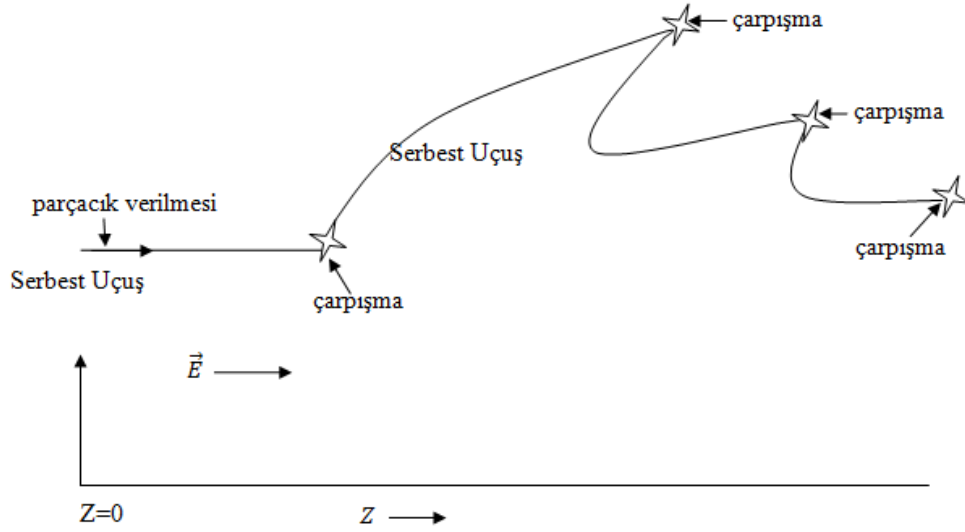
$$\frac{\hbar d\vec{k}}{dt} = \vec{F}_{ext} = -e\vec{E} \quad (3.2)$$

Şekil (3.1)'de gösterildiği gibi elektron, belirli bir $E - k$ bandında enerjisini artırarak ve düşürerek hareket eder. Bu titreşimlere, Bloch titreşimleri denir ve çok yüksek frekanstaki uygulamalar için kullanılabilirlerinden bilim adamları on yıllardır onları aramışlardır. Ne yazık ki, çok düşük sıcaklıklar ve çok özel heteroyapı örnekleri dışında bu titreşimler meydana gelmez çünkü elektronlar gerçek yarı iletkenlerde saçılır.



Şekil 3.1. Herhangi bir saçılma olmadan ve bir elektrik alanı olduğunda bant üzerinde bir elektronun hareketi.

Elektron, alandan enerji kaybederek ve kazanarak k alanında titreşir. Gerçek bir yarı iletkende elektronların saçılımına neden olan kusurlar hep vardır; bu yüzden, elektron hareketinin denklemi, Denklem (3.1) ile verilmez. Elektron taşınımının kavramsal çerçevesi, elektronlar uzayda bir süre hareket edip ardından saçıldığında ve tekrar uzayda hareket edip yine saçıldığında geliştirilebilir. Bu süreç Şekil (3.2)'de gösterilmiştir. Elektron grubunun ortalama davranışı elektronun taşınım özelliklerini temsil edecektir.



Şekil 3.2. Bir yarı iletkendeki elektrik alanı altında hareket eden bir elektronun şematik görünümü.

Elektron hareket ettikçe saçılıma uğrar. Saçılım arasında elektron, serbest elektron hareketi denklemine göre hareket eder.

3.1. Elektronların Saçılımı

Elektronların dengesizlik özelliklerini anlamamanın anahtarı elektronların saçılım sürecini anlamaktır. Yarı iletkenlerdeki saçılım problemi, kuantum mekaniğinde pertürbasyon teorisi kullanılarak çözülür. Biz, aşağıdaki formül ile gösterilen kuantum mekaniği problemini çözmeye ilgilieniyoruz:

$$H\phi = E\phi \quad (3.3)$$

Burada H problemin tam Hamilton'udur (potansiyel enerji + kinetik enerji operatörü). Bizim durumumuzda bu Hamilton, mükemmel kristal H_0 'nin Hamilton'u ve saçılmaya neden olan kusurla ilgili enerji operatörü V 'nin toplamıdır. Böylece:

$$H = H_0 + V \quad (3.4)$$

$$H_0\psi = E\psi \quad (3.5)$$

Bu bize sadece yarı iletkenin band yapısını verir. Pertürbasyon teorisinde, pertürbasyon etkisi V 'nin mükemmel bir kristalize halden bir diğerine saçılmasına neden olduğu yaklaşımı kullanılır. Bu teori, pertürbasyon küçük olduğunda işe yarar.

Önce i durumunda olan bir elektronun f durumuna saçılma oranı

$$V(r, t) = V(r) \exp(i\omega t) \quad (3.6)$$

şeklinde bir pertürbasyon olduğunda Fermi altın kuralı ile verilir.

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{ij}|^2 \delta(E_i \pm \hbar\omega - E_f) \quad (3.7)$$

Burada ; $\frac{2\pi}{\hbar}$ hesaplama detaylarında ortaya çıkan bir faktördür ve $|M_{ij}|^2$ ye saçılımın matris elementi denir ve şu şekilde verilir.

$$M_{ij} = \int \psi_f^* V(r) \psi_i d^3r \quad (3.8)$$

Matris elementi bize potansiyelin önceki ve sonraki duruma nasıl eşlik ettiğini söyler. $\delta(E_i \pm \hbar\omega - E_f)$ δ fonksiyonu, enerji korunumunu temsil eder.

$$E_f = E_i + \hbar\omega \quad (3.9)$$

olduğu sürece soğurma denirken;

$$E_f = E_i - \hbar\omega \quad (3.10)$$

olduğu sürece yayma denir. Enerjinin hem soğurma hem de emisyonu pertürbasyonun bir süre bağımlılığı $exp(i\omega t)$ olduğunda meydana gelebilir. Eğer potansiyel, süreden bağımsız ise saçılım elastiktir. ($E_i = E_f$)

Prensipite, saçılma oranlarının değerlendirilmesi kısmen kolaydır çünkü sadece bazı integrallerin hesaplanmasını içerir. Pratikte ise, problem karmaşıktır çünkü saçılma potansiyeli $V(r)$ iyi tanımlanmamıştır ve bir kusuru düzgün bir potansiyel ile temsil etmek için modeller oluşturulmak zorundadır. Bu yüzden, kusurun fiziksel yapısını açıklamak kolay olsa da bu kusur nedeniyle elektronun gördüğü potansiyel pertürbasyonu temsil etmek oldukça zordur. Şimdi yarı iletkenlerde bazı önemli saçılma nedenlerini kısaca ele alacağız.

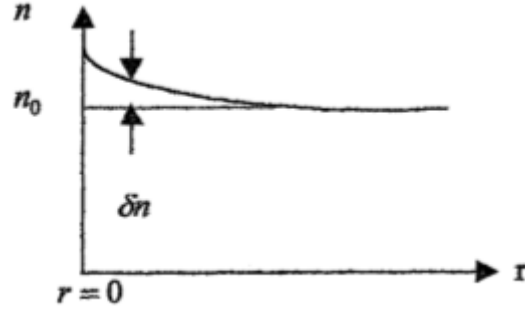
3.2. Safsızlık Saçılması

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

Kristaldeki bir safsızlığın oluşturduğu potansiyel serbest taşıyıcının ne kadar bulunduğuna bağlı olarak değişir. Perdeleme potansiyeli nedeniyle saçılma başlangıçta Conwell-Weisskopf ve Brooks-Herring yaklaşımları ile incelenir (Seeger,1989 ;Herbt vd.,1992). Bunlar kullandıkları perdeleme potansiyeli ile ayrılırlar ve her ikisinde Born yaklaşımını kullanırlar.

İlk olarak ısı dengedeki n-tipi yarıiletkende perdeleme potansiyeli belirlenmelidir. iyonize safsızlıkların ve hareketli taşıyıcıların neden olduğu elektrostatik potansiyel için, orijinde pozitif bir yük $Ze\delta(r)$ düşünülürse (e, elektron yükü ve Ze, safsızlık atomun yüküdür.) δ –fonksiyonu; $\delta(r)$ yükünün orijinde olduğunu gösterir. Yük nötralliği bu

nokta civarında pertürbe edilir. Elektron yoğunluğu Şekil (3.3)'te görüldüğü gibi $\delta n = n - N_D^+$ kadar artar, N_D^+ iyonize safsızlığın yoğunluğudur.



Sekil 3.3. Pozitif bir iyon yakınında yük nötralliğinin bozunumu, n_0 , denge elektron yoğunluğu, r iyondan olan uzaklık.

Etkin elektrostatik potansiyel, küresel koordinatlarda;

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) = -\frac{e}{\epsilon_s} [Z\delta(r) - \delta n] \quad (3.11)$$

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

$$\delta n = n_0 \exp\left(\frac{eV}{k_B T_L}\right) - n_0 \approx \frac{en_0}{k_B T_L} V \quad (3.12)$$

bulunur. Denklem (3.11)'in (3.12)'de yazılmasıyla,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) - q_D^2 V = -\frac{Ze}{\epsilon_s} \delta(r) \quad (3.13)$$

elde edilir.

$$q_D = \sqrt{\frac{e^2 n_0}{\epsilon_s k_B T_L}} \quad (3.14)$$

ile verilir. $1/q_D$ Debye uzunluğu olarak bilinir. Denklem 3.13'ün özel çözümü

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_s r} \exp(-q_D r) \quad (3.15)$$

olarak bulunur. Burada potansiyel, uzaklık ile üstel olarak azalmaktadır. Bu da Coulomb perdeleme potansiyeli olarak adlandırılır. Böylece ele alınan pertürbasyon potansiyeli,

$$H' = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_s r} \exp(-q_D r) \quad (3.16)$$

olur. Elektron saçılması için ele alınan pertürbasyon potansiyeli matris elemanlarının H' ifadesinde yerine yazılmasıyla,

$$\langle k' | H' | k \rangle = \frac{Ze^2}{\Omega\epsilon_s} \frac{1}{|q|^2 + q_D^2} \quad (3.17)$$

bulunur. Burada

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \quad (3.18)$$

saçılma işlemi sırasındaki momentum transferinin büyüklüğüdür.

$$S(\vec{k}_i, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k' | H'_0 | k_i \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega) \quad (3.19)$$

Fermi'nin Altın Kuralı olarak bilinir. Denklem (3.17)'yi (3.19)'da yerine yazarsak,

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{Ze^2}{\Omega\epsilon_s} \right)^2 \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{(q^2 + q_D^2)^2} \quad (3.20)$$

elde edilir. Coulomb potansiyel perdelenmesi zamandan bağımsız olduğundan, saçılma sırasında enerjinin korunduğunu gösterir. Böylece $k' = k$ ve

$$q^2 = (k' = k)^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) \quad (3.21)$$

olacaktır. Burada θ , k' ve k arasındaki açıdır. Sonuç olarak (3.20) denkleminin Ω hacmi içerisindeki safsızlıkların sayısı $N_I\Omega$ ile toplanması ve denklem (3.11)'in kullanılmasıyla

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{N_I Z^2 e^4}{\Omega \epsilon_s^2} \right)^2 \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2} \quad (3.22)$$

elde ederiz. Saçılma hızı,

$$W(\vec{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' \quad , \quad d\vec{k}' = k'^2 \sin\theta d\theta d\phi dk' \quad (3.23)$$

ile verilir. (3.22) ifadesi (3.23)'de yerine yazılırsa saçılma hızı hesaplanabilir.

$$W(k) = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4}{\hbar \Omega \epsilon_s^2} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dk' \frac{k'^2 \sin\theta \delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2} \quad (3.24)$$

saçılma oranı elde edilir. Yukarıdaki integral ϕ ye bağlıdır ve bir zıt faktörü ile çarpılmıştır. Ancak geçiş oranı ϕ 'den bağımsızdır. Böylece $4\pi k^2$ ile verilen E_k 'den $E_k + dE_k$ 'ye kadar olan enerji aralığındaki k-uzayının hacmi $4\pi k'^2 dk'$, $N(E_{k'}) dE_{k'}$ ile yer değiştirebilir. Burada $N(E_{k'})$ birim enerji başına sonuç durumunun yoğunluğudur. Buradan k' integrali $E_{k'}$ ile yer değiştirebilir ve saçılma hızı,

$$W(k) = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon_s^2} \int_{-1}^1 \frac{d\cos\theta}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2} \quad (3.25)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifade kolayca integre edilerek,

$$W(k) = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \varepsilon_s^2} \frac{1}{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)} \quad (3.26)$$

yazılabilir. Burada durum yoğunluğu,

$$N(E_k) = \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{E_k}}{4\pi^2 \hbar^3} \quad (3.27)$$

şeklindedir.

Monte Carlo hesaplamalarında, saçılma hızının yanında saçılmadan sonraki elektronların sonuç durumlarının da bir formül ile bilinmesi gerekiyordu. Bu ifade kutupsal eksen k 'ye göre k' için kutupsal koordinatlar şeklinde azimutsal açı ϕ , 0 ile 2π arasında düzgün rastgele sayı ile tanımlanıyordu. Böylece saçılma hızı ϕ 'den bağımsızdır.

θ ve $\theta + d\theta$ arasındaki saçılma hızı $P(\theta)d\theta$,

$$P(\theta)d\theta = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \varepsilon_s^2} \frac{\sin\theta d\theta}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2} \quad (3.28)$$

olarak bulunur.

0 ile θ arasındaki saçılma olasılığı bir önceki ifadenin 0 ile θ arasında integre edilmesi ve (3.26) ifadesine bölünmesi ile,

$$\begin{aligned} \frac{W(\theta)}{W(k)} &= \frac{1}{W(k)} \int_0^\theta P(\beta) d\beta \\ &= \int_{-1}^{\cos\theta} \frac{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)}{2[2(1 - \eta)k^2 + q_D^2]^2} d\eta \end{aligned} \quad (3.29)$$

bulunur ve bu ifade integre edilerek,

$$\frac{W(\theta)}{W(k)} = \frac{(1 - \cos\theta) \left[1 + \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2 \right]}{2 + (1 - \cos\theta) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (3.30)$$

elde edilir. $W(\theta)/W(k)$ sıfırdan büyük ve θ ile giderek arttığı için, denklem (3.30) 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rastgele bir sayıya eşitlenerek ,

$$\cos\theta = \frac{2r}{1 + (1 - r) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (3.31)$$

belirlenebilir. Denklem (3.31) iyonize safsızlık saçılmasından sonra dalga vektörünün θ kutup açısını belirlemede kullanılır (Jacoboni vd.,1983).

3.3. Fonon Saçılımı

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

Örgü dalgaları periyodik bir ortamda ilerlediğinden, Bloch dalgalarının özelliklerine çok benzer özellikler ortaya koyarlar. Bloch elektronları, mükemmel bir kristaldeki kendi öz durumlarında buldukları için, kristalin periyodik potansiyeli tarafından saçılmazlar. Çünkü kristal potansiyelinin periyodikliği çeşitli nedenlerle bozulabilir. Kristaldeki bir iyonun küçük bir yer değiştirmesi kristal potansiyelinde küçük bir değişime neden olur, bu yüzden kristal potansiyelinin periyodiklikten sapması teorik olarak örgü titreşimlerinin genleriyle ifade edilebilir. Fakat kristal potansiyelinin bilinmemesi nedeniyle bu sapma deformasyon potansiyeliyle ifade edilir. Örgü titreşimlerinin elektron hareketleri üzerindeki etkisi elektron fonon etkileşmesi olarak adlandırılan bir kuantum süreciyle ifade edilebilir.

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

3.4. Akustik Fonon Saçılması

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

$$u(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\vec{q}}} \right)^{1/2} \vec{e}_{\vec{q}} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^+) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (3.32)$$

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

Uzun dalga boylu akustik fononlar için,

$$\frac{w_q}{q} = v_s = \sqrt{\frac{c_1}{\rho}} \quad (3.33)$$

dispersiyon yasası sağlanır. Denklem 3.33'de v_s boyuna elastik dalgaların hızı ve c_1 materyalin elastik sabitidir. Örgü sabitindeki küçük bir değişim için enerji bandında da küçük bir değişim beklenebilir. Bu değişimin örgüdeki değişimle orantılı olması

düşünülebilir ve etkiyen gerilme $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{u}(\vec{r}, t)$ ile ifade edilebilir. Örgüdeki değişim yalnızca $\mathbf{u}(\vec{r}, t)$ yer değiştirmesiyle ifade edilemez. Böylece akustik fononlar için etkileşme potansiyeli,

$$H' = \varepsilon_d \vec{\nabla} \cdot \mathbf{u}(\vec{r}, t) \quad (3.34)$$

olarak yazılabilir (Fawcett vd.,1970). Burada orantı sabiti ε_d deformasyon potansiyeli olarak adlandırılır. Denklem (3.32), (3.34)'de yerine yazarsak,

$$H' = \sum_{\vec{q}} iq\varepsilon_d \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\vec{q}}} \right)^{1/2} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^+) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (3.35)$$

elde edilir. Burada dalga vektörünün polarizasyon vektörüne paralel yani; $q = \vec{e}_q \cdot \vec{q}$ olduğu kabul edilir. Pertürbasyon potansiyeli için matris elemanı denklem (3.35)'in fonon durumlarının da dikkate alındığı;

$$\langle \vec{k}', n_{\vec{q}} - 1 | H' | \vec{k}, n_{\vec{q}} \rangle = iq\varepsilon_d \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\vec{q}}} \right)^{1/2} \sqrt{n_{\vec{q}}} \delta(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \quad (3.36)$$

$$\langle \vec{k}', n_{\vec{q}} + 1 | H' | \vec{k}, n_{\vec{q}} \rangle = iq\varepsilon_d \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_{\vec{q}}} \right)^{1/2} \sqrt{n_{\vec{q}} + 1} \delta(\vec{k}' - \vec{k} + \vec{q}) \quad (3.37)$$

$$n_{\vec{q}} = 1 / [\exp(\hbar w_q / k_B T) - 1] \quad (3.38)$$

elde edilir. Burada $n_{\vec{q}}$; Bose-Einstein dağılımıyla verilen fonon sayısıdır. Herbir denklemdeki δ –fonksiyonu elektron-fonon etkileşmesi boyunca kristal momentumunun korunduğunu ifade eder. Denklem (3.36) ve (3.37) Denklem (3.19) da yerine yazılırsa akustik fononlar için geçiş hızı;

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi \varepsilon_d^2 q^2}{\rho \Omega w_{\vec{q}}} \left(n_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \mp \hbar w_{\vec{q}}) \quad (3.39)$$

olarak bulunur (Jakumeit vd.,1994). Denklem (3.39)'daki δ –fonksiyonları enerji ve momentumun korunumunu ifade eder.

$$E_{\vec{k}'} = E_{\vec{k}} \pm \hbar w_{\vec{q}} \quad (3.40)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (3.41)$$

burada $\hbar w_{\vec{q}}$ fonon enerjisini ve \vec{q} fonon dalga vektörüdür, \pm fonon soğurma ve yayılma durumunu belirtir. Parabolik ve küresel enerji bandları için Denklem (3.40)'daki enerji korunum bağıntısı,

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar w_{\vec{q}} \quad (3.42)$$

olarak yazılabilir. Denklem (3.40), (3.41)'de yerine yazılırsa δ –fonksiyonları birleştirilebilir;

$$\delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{\vec{k}'} + E_{\vec{k}} \mp \hbar w_{\vec{q}}) = \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar w_{\vec{q}} \right) \quad (3.43)$$

burada θ' , şekil 3.4'te görüldüğü gibi \vec{k} ve \vec{q} vektörleri arasındaki kutup açısıdır. Denklem (3.43)'ün sağ tarafı θ' ve q arasındaki bağıntıyı verir;

$$\cos \theta' = \frac{1}{2} \left(\mp \frac{q}{k} + \frac{\hbar w_{\vec{q}} k}{E_{\vec{k}'} q} \right) \quad (3.44)$$

Denklem (3.44)'teki θ , fononun başlangıç enerjisi, momentum ve açısal frekansına dayalı iki momentum durumu arasındaki açıdır.



Şekil 3.4. \vec{k} ile \vec{q} arasındaki θ' ve, \vec{k} ile \vec{k}' arasındaki θ kutup açısı.

Akustik fonon enerjisi $\hbar\omega_{\vec{q}}$, oda sıcaklığı civarında $k_B T$ enerjisinden çok küçüktür, bu nedenle $\hbar\omega_{\vec{q}}$ sıfır alınarak akustik fonon saçılmasının elastik olduğu ve Denklem 3.40 bağıntısında enerjinin değişmediği kabul edilir. Böylece $n_{\vec{q}} \approx \frac{k_B T_L}{\hbar\omega_{\vec{q}}}$ alınabilir. $n_{\vec{q}} \gg 1$ den çok büyük olduğu için $n_{\vec{q}} = n_{\vec{q}} + 1$ 'de kullanılabilir. Denklem (3.39) bu yaklaşımlar altında yeniden düzenlenirse;

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi \varepsilon_d^2 k_B T_L}{\hbar c_l \Omega} \frac{k}{q E_{\vec{k}}} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) \quad (3.45)$$

elde edilir. Bu bağıntı fonon soğurma ve yayınlama süreçlerinin her ikisinde kapsar. Saçılma hızı Denklem (3.45)'in \vec{k}' üzerinden integralinin alınmasıyla elde edilir,

$$\begin{aligned} W(\vec{k}) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' \\ &= \frac{\varepsilon_d^2 k_B T_L}{8\pi^2 \hbar c_l} \frac{k}{E_k} \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\vec{q} \end{aligned} \quad (3.46)$$

kutupsal koordinatlarda q üzerinden integral alınırsa,

$$\begin{aligned}\vec{I}_q &= \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\vec{q} \\ &= \int_0^\infty \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) d\phi d(\cos\theta') q dq\end{aligned}\quad (3.47)$$

olarak düzenlenir. ϕ üzerinden integral doğrudan alınabilir, $\cos\theta'$ üzerinden integral δ –fonksiyonundan dolayı kolayca alınır. q üzerinden integral $\cos\theta'$ nün -1 ve $+1$ arasındadır. $\hbar\omega_{\vec{q}} \approx 0$ kabul edildiği için q_{min} ve q_{max} Denklem 3.44'den bulunabilir.

$$q_{min} = 0 \quad (3.48)$$

$$q_{max} = 2k$$

$$I_q = 2\pi \int_{q_{min}}^{q_{max}} q dq = \pi (q_{max}^2 - q_{min}^2) = 4\pi k^2 \quad (3.49)$$

elde edilir. Sonuç olarak akustik fonon saçılma hızı;

$$W(\vec{k}) = \frac{2\pi \Xi_d^2 k_B T_L}{\hbar c_l} N(E_{\vec{k}}) \quad (3.50)$$

olur. Burada $N(E_{\vec{k}})$ Denklem 3.27 ile verilen durum yoğunluğudur.

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

3.5. Kutupsal Olmayan Optik Fonon Saçılması

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

$$H'(\vec{r}, t) = \vec{D}_0 \cdot u(\vec{r}, t) \quad (3.51)$$

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

$$u(\vec{r}, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_q^\dagger) e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (3.52)$$

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

Denklem (3.52), (3.51)'de yerine yazılırsa,

$$H' = \sum_q D_0 \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega w_q} \right)^{1/2} (a_q + a_q^\dagger) e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (3.53)$$

ifadesi bulunur. Denklem (3.23)'den hesaplanan optik kusur potansiyel saçılması kare matris elemanların yerine yazılmasıyla,

$$|\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{D_0^2 \hbar}{2\rho\Omega w_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \quad (3.54)$$

denklemini elde edilir. Denklem (3.54)'ün (3.53) denklemi ile verilen Fermi'nin altın kuralı'nda yerine yazılması, enerji ve momentum korunumunun dikkate alınması gereken hesaplamaların yapılmasıyla,

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi D_0^2}{2\rho\Omega w_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\theta'}{m^*} \mp \hbar w_0 \right) \quad (3.55)$$

optik fononlar için geçiş oranı elde edilir. Ayrıca enerji ve momentum korunumu ile eş zamanlı olarak verilir. $\cos\theta'$, -1 ile $+1$ aralığında tanımlı olduğundan (3.55) ifadesindeki δ –fonksiyonu saçılmayla ilgili minimum ve maksimum fonon dalga vektörleri,

$$q_{min} = k \left| 1 - \left(1 \pm \frac{\hbar w_0}{E_k} \right)^{1/2} \right| \quad (3.56)$$

$$q_{max} = k \left| 1 + \left(1 \pm \frac{\hbar w_0}{E_k} \right)^{1/2} \right| \quad (3.57)$$

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

$$W(\vec{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' \quad (3.58)$$

$$= \frac{D_0^2}{8\pi^2 \rho w_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \int \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\theta'}{m^*} \mp \hbar w_0 \right) d\vec{q}$$

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

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi D_0^2}{\rho w_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) N(E_k \pm \hbar w_0) \quad (3.59)$$

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

Akustik fonon saçılmasında fonon enerjisi $k_B T$ den küçük ve saçılma esnek iken, optik fonon enerjisi, oda sıcaklığındaki taşıyıcıların ısısal enerjileri ile kıyaslanabilir ve bu nedenle ihmal edilemez, yani optik saçılma esnek olmayan bir iştir.

3.6. Vadiler Arası Optik Fonon Saçılması

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

Vadiler arası saçılma için etkinleşme potansiyeli,

$$H' = \vec{D}_{ij} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t) \quad (3.60)$$

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

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho \Omega w_{ij}} \left(n(w_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \mp \hbar w_{ij} + \Delta E_{ij}) \quad (3.61)$$

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

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho w_{ij}} \left(n(w_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) N(E_{\vec{k}} \pm \hbar w_{ij} - \Delta E_{ji}) \quad (3.62)$$

vadiler arası kutupsal olmayan optik fonon saçılma hızı elde edilir.

3.7. Kutupsal Optik Fonon Saçılması

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

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

$$\vec{u}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\hbar}{2NMw_0} \right)^{1/2} \vec{e}_q (\vec{a}_q + \vec{a}_{-\vec{q}}^+) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (3.63)$$

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

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_{iyon} + \vec{P} \quad (3.64)$$

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

$$\vec{P} = \frac{e^* N}{\Omega} (\vec{u}_+ - \vec{u}_-) = \frac{e^* N}{\Omega} \vec{u} \quad (3.65)$$

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

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_\infty \vec{E} + \frac{e^* N}{\Omega} \vec{u} \quad (3.66)$$

olarak yazılır (Moglestue, 1993).

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

$$i\vec{q} \cdot \vec{D} = 0 \quad (3.67)$$

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

$$\vec{E} = -\frac{Ne^* \vec{u}}{\Omega \varepsilon_\infty} \quad (3.68)$$

elde edilir. Elektrostatik potansiyel,

$$U(\vec{r}) = -\int \vec{F} d\vec{r} = -i \frac{Ne^*}{\Omega q \varepsilon_\infty} \vec{u}(\vec{r}) \quad (3.69)$$

olarak bulunur. Etkin y¼k e^* ;

$$e^* = \left(\frac{\Omega M}{N} \right)^{1/2} w_0 \varepsilon_\infty \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right)^{1/2} \quad (3.70)$$

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

$$H' = -eU(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} i \frac{e}{q} \left(\frac{\hbar w_0}{2\varepsilon_p \Omega} \right)^{1/2} (\vec{a}_{\vec{q}} + \vec{a}_{-\vec{q}}^+) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (3.71)$$

olur. Burada,

$$\frac{1}{\varepsilon_p} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \quad (3.72)$$

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

$$|\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_0}{2 \varepsilon_p \Omega} \frac{1}{q^2} \left(n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \quad (3.73)$$

elde edilir. Geçiş hızı Ferminin altın kuralından,

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi e^2 \omega_0}{\varepsilon_p \Omega} \frac{1}{q^2} \left(n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'} \mp \hbar \omega_0) \quad (3.74)$$

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

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi e^2 \omega_0}{\varepsilon_p \Omega} \left(n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \times \int \frac{1}{q^2} \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_0 \right) d\vec{q} \quad (3.75)$$

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

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

$$= \frac{2\pi m^*}{\hbar^2 k} \ln \left(\frac{q_{max}}{q_{min}} \right) \quad (3.76)$$

Sonuç olarak optik fononlar nedeniyle saçılma hızı;

$$W(\vec{k}) = \frac{e^2 w_0}{8\pi \epsilon_p} \frac{k}{E_{\vec{k}}} \left(n(w_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{q_{max}}{q_{min}} \right) \quad (3.77)$$

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

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

$$\frac{W(\theta')}{W(\vec{k})} = \frac{\int_{q_{min}}^{q_{max}} \int_{-1}^{+1} \frac{1}{q} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta' \mp \frac{\hbar w_0}{E_k} \frac{k}{2q} \right) dq d(\cos\theta')}{\int_{q_{min}}^{q_{max}} \int_{-1}^{+1} \frac{1}{q} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta' \mp \frac{\hbar w_0}{E_k} \frac{k}{2q} \right) dq d(\cos\theta')} \quad (3.78)$$

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

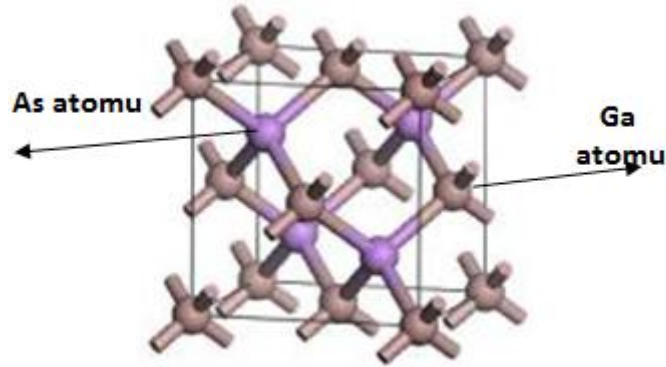
olarak elde edilir. $q_{\theta'}$, θ' ile ilişkilidir, δ -fonksiyonu enerji ve momentumun korunumunu ifade eder.

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

4. GaAs MATERYALİNİN TEMEL ÖZELLİKLERİ

4.1. Kristal Yapısı

Çeşitli teknolojik ve elektronik aygıtların yapımında kullanılan III – V yarı iletkenler genellikle çinkosülfür (zinc blende) kristal yapısına sahiptir.



Şekil 4.1. GaAs'nin çinkosülfür yapısı

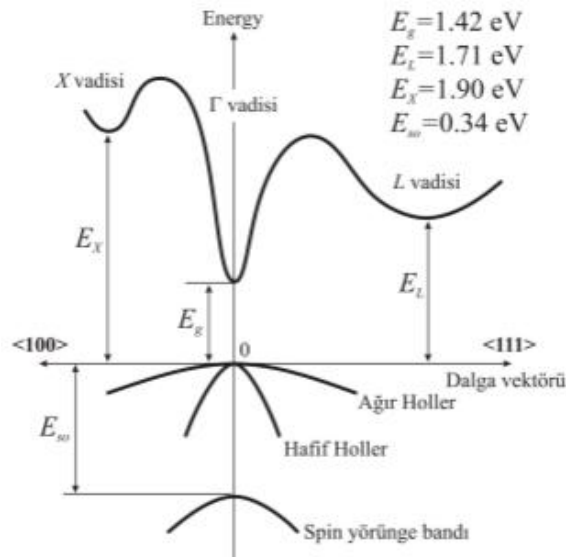
Çinkosülfür kristal yapısında her bir III grup atomu en yakın komşu olarak dört tane V grup atomuna sahiptir. III-V yarıiletken grubunun farklı üyeleri göz önüne alındığında komşu atomlar arasındaki uzaklık, 0.236 nm'den 0.280 nm'e kadar yaklaşık %20 oranında değişir.

III-V yarıiletkenlerde, iki elementin farklı elektronegatifliklerinden dolayı hem iyonik hem de kovalent bağlanma görülür. Kovalent bağlanma diğerine göre daha baskındır. Bileşik farklı iki element içerdiğinden, bağ boyunca elektronların dağılımı simetrik değildir ve yük dağılımı büyük atoma doğru kaymıştır. Atomlardan biri net bir elektrik yükü fazlalığına sahip olduğundan, bağdaki elektron dağılımı elektronegatifliği fazla olan atoma doğru kayar. Bu kayma süreci bağa iyonik bir karakter kazandırır. Ayrıca, III-V yarıiletken bileşikler polar doğaya sahiptirler ve bu özellikleri saçılma mekanizmalarının belirlenmesinde önemlidir.

4.2. Bant Yapısı

Klasik bant teorisi, yarıiletkenlerin elektriksel iletkenliklerini başarıyla açıklar. $k = 0$ durumu ayrıcalıklı bir öneme sahiptir. Valans bant maksimumu Γ noktası olarak bilinen $k = 0$ 'da oluşur. Valans bant maksimumu ve iletim bandının minimumu aynı doğrultuda olan yani, iletkenlik bant minimumu $k = 0$ 'da olan yarıiletkenlere direkt bant aralıklı yarıiletkenler denir. Benzer şekilde, valans bandı ve iletim bandı için böyle bir doğrultu yoksa, materyallere indirekt bant aralıklı yarıiletkenler denir. GaAs direkt bant aralıklı bir yarıiletkenidir ve 300K'de $E_g = E_{\Gamma} = 1,42$ eV, $E_L = 1.71$ eV, $E_X = 1.90$ eV, $E_{so} = 0.34$ eV dir.

Yarıiletkenlerde, 0 K'de en son dolu banda valans bandı denirken, onun üstündeki ilk boş banda iletim bandı denir. Valans bandı ve iletim bandı arasındaki yasak enerji aralığı materyalin elektriksel ve optiksel özelliklerine etki eden önemli bir parametredir. Metallerde enerji aralığı yoktur yani, valans bandı ile iletim bandı çakışmıştır. Yarıiletkenlerde bu aralık birkaç eV değerindedir. Elektronu ısı, optik veya mekanik yollarla verecek uyarma enerjisi, yasak enerji aralığının bir ölçüsüdür.



Şekil 4.2. GaAs'nin şematik bant diyagramı.

Valans bandındaki elektronlar iletim bandına geçecek kadar enerji kazandıklarında, valans bandı maksimumunda boşluklar bırakarak iletim bandı minimumuna geçerler ve burada

Bloch elektronu gibi davranırlar. Hem elektron hem de boşluk elektrik alandan etkilendiğinden, her ikisi de elektriksel iletkenliğe katkıda bulunur. Sıcaklık arttıkça Bloch elektronlarının ve hollerin sayısı hızlı bir şekilde artar. Bunun sonucu olarak, yarıiletken materyalin elektriksel iletkenliği sıcaklıkla artar.

4.3. Materyal Parametreleri

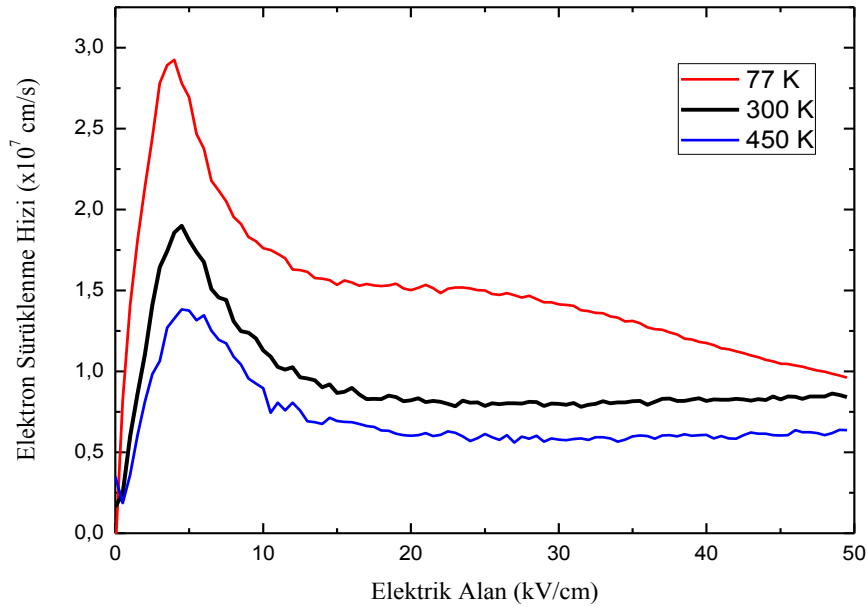
Yasak enerji aralığı (eV)	1.424
Materyal yoğunluğu (g/cm ³)	5.32
Etkin kütle (m^*/m_0)	0.067
Statik dielektrik sabiti (ϵ_s/ϵ_0)	12.9
Yüksek frekans dielektrik sabiti ($\epsilon_\infty/\epsilon_0$)	10.9
Ses hızı (m/s)	5240
Akustik deformasyon potansiyeli (eV)	7.0
Optik fonon enerjisi (eV)	0.0354
Vadiler arası optik fonon enerjisi (eV)	0.030
Vadiler arası deformasyon potansiyeli (eV/cm)	1×10^9

Tablo 4.1. GaAs için Simülasyonda Kullanılan Materyal Parametreleri

5. SONUÇ VE TARTIŞMA

GaAs yarıiletken bileşiğinde elektron taşınımı, 77 K, 300 K ve 450 K sıcaklık değerleri için tek parçacık Monte Carlo yöntemi kullanılarak incelendi. Uygulanan elektrik alanın; elektron sürüklenme hızı, elektron enerjisi ve sürüklenme mobilitesi üzerine etkileri belirlendi. Hesaplamalar; iyonize safsızlık, kutupsal optik fonon, akustik fonon, kutupsal olmayan optik fonon ve vadiler arası optik fonon saçılma mekanizmaları için Γ ve L vadileri dikkate alınarak şekil (4.3)'de verilen materyal parametreleriyle 2 ns'lik simülasyon süresi için yapıldı.

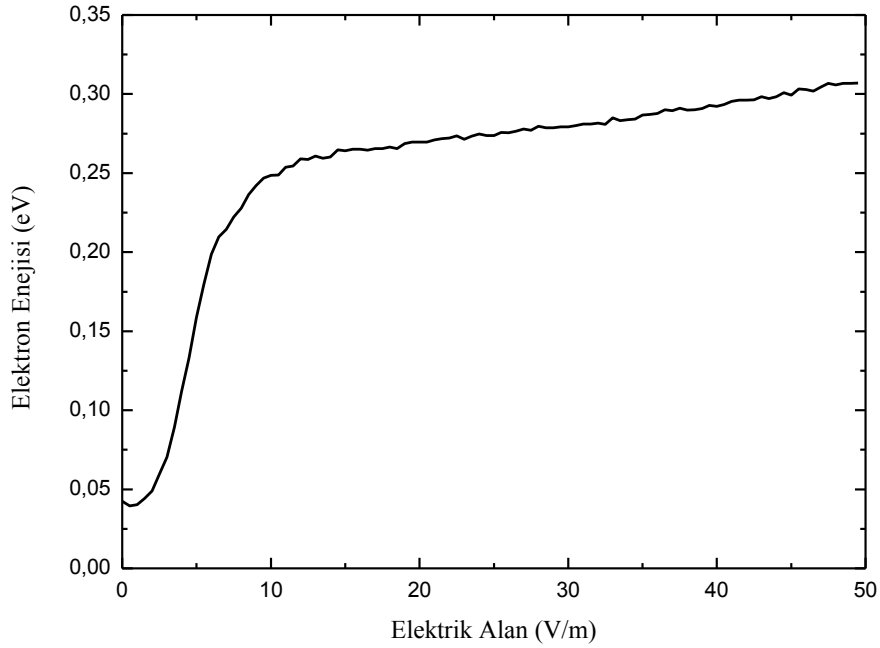
Şekil (5.1)'de GaAs yarıiletken bileşiği için tek parçacık Monte Carlo simülasyonundan elde edilen elektron sürüklenme hızı elektrik alanının bir fonksiyonu olarak 77 K, 300 K ve 450 K için elde edildi.



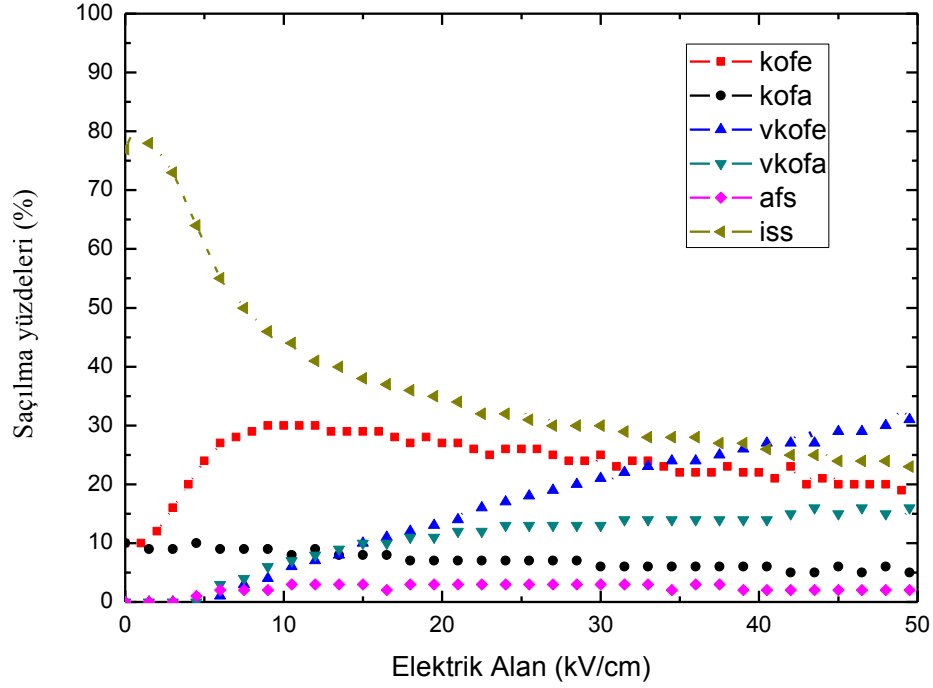
Şekil 5.1. GaAs için elektron sürüklenme hızının uygulanan elektrik alanla değişimi.

Şekilde; 77 K için elektron sürüklenme hızının uygulanan elektrik alanla, 5 kV/cm elektrik alan değerine kadar, lineer olarak yaklaşık $2,9 \times 10^7$ cm/s'lik bir pik değerine kadar arttığı görüldü. Elektrik alanın bu alan değerinin üzerine çıkmasıyla elektron sürüklenme hızı azalmaya başladı ve 20 kV/cm'lik bir elektrik alan değeri civarında $1,5 \times 10^7$ cm/s değerinde kararlı hale geldiği görüldü. 300 K sıcaklığında elektron sürüklenme hızının yine aynı elektrik alan değerinde $1,9 \times 10^7$ cm/s ve 450 K sıcaklığında $1,4 \times 10^7$ cm/s'lik pik değerlerine ulaştığı, elektrik alan şiddetinin artışı ile sürüklenme hızlarının azalarak 300 K değerlerinde için 20 kV/cm elektrik alan civarlarında 1×10^7 cm/s ve 450 K için $0,6 \times 10^7$ cm/s kararlı hale geldiği görüldü.

Elektron sürüklenme hızındaki bu davranışı görebilmek için Şekil (5.2)'de verilen ortalama elektron enerjisi ve Şekil (5.3)'de verilen saçılma etkinliklerinin grafiklerini irdelemek daha iyi olacaktır.



Şekil 5.2. GaAs için ortalama elektron enerjisinin elektrik alanla değişimi.



Şekil 5.3. 2 ns lik simulasyon süresince Γ vadisinde gerçekleşen saçılmaların etkinlikleri. kofe, kutupsal optik fonon yayınlama; iss, iyonize safsızlık; afs, akustik fonon; vkofa, vadiler arası kutupsal optik fonon soğurma; vkofe, vadiler arası kutupsal optik fonon yayınlama saçılmaları.

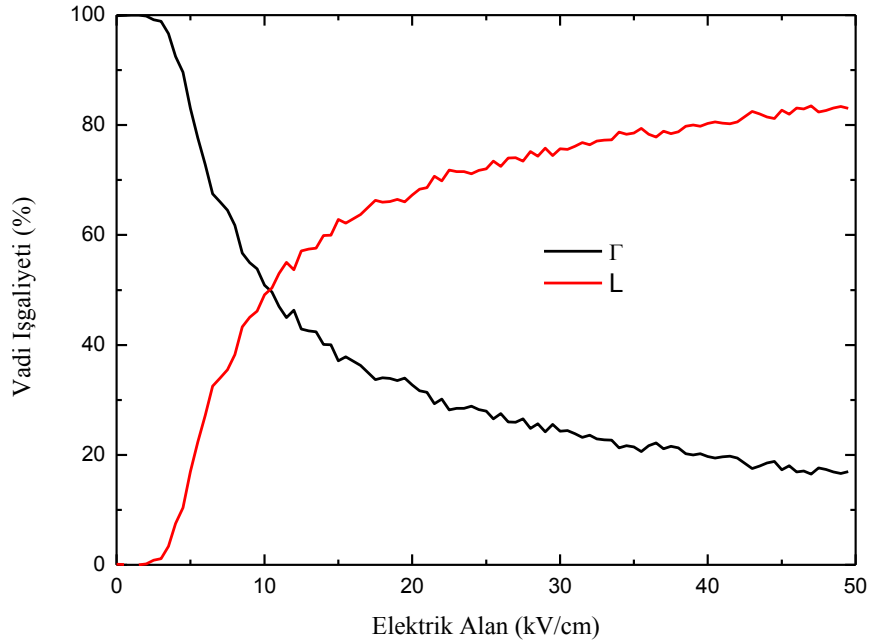
GaAs yarıiletken bileşiğinde, ortalama elektron enerjisinin oldukça düşük olduğu 5 kV/cm' lik elektrik alan değerine kadar en baskın saçılma mekanizmaları iyonize safsızlık ve kutupsal optik fonon yayınlama saçılmaları olduğu, Şekil (5.3)'den belirlendi. Elektrik alanın 5 kV/cm' lik değerinde gerçekleşen saçılmaların yaklaşık % 30' u kutupsal optik fonon yayınlama ve yaklaşık % 50' si iyonize safsızlık saçılmaları şeklinde oluştu. Bu elektrik alan değerinde diğer tüm saçılmaların etkinliği % 20 de kaldı.

Ortalama elektron enerjisi 5 kV/cm' lik elektrik alan değerine kadar oldukça düşük seviyelerde kaldı. Bu elektrik alan değerine kadar ortalama elektron enerjisini dengeleyen saçılmanın, kutupsal optik fonon yayınlama saçılmaları olduğu görüldü. Elektron serbest uçuşu esnasında elektrik alandan kazanmış olduğu enerjiyi optik fonon yayınlamakla harcadığı, ortalama elektron enerjisindeki ani bir artışın, bu saçılmalarla önlendiği ortaya

çıktı. Bu esnada iyonize safsızlık saçılmaları elastik saçılmalar olduklarından ortalama elektron enerjisinde doğrudan etkili olmadı.

Elektrik alanın 5 kV/cm' lik değerine kadar ortalama elektron enerjisi 0.15 eV değerine kadar kararlı bir şekilde artış gösterdi. Bu elektrik alan değerine kadar elektron sürüklenme hızı tam bir omik davranış sergiledi. Ortalama elektron enerjisinin lineer artışında etkin olan saçılma mekanizmaları kutupsal optik fonon saçılmaları ve L-vadisindeki saçılmalardır. Bu saçılmalar nedeniyle, elektron serbest uçuş esnasında elektrik alandan kazandığı enerjisini düzgün bir şekilde arttırdığı görüldü.

Elektrik alanın 5 kV/cm' lik değerinden daha yüksek elektrik alan değerlerinde; elektron, elektrik alanda daha büyük bir ivme ile daha verimli bir şekilde enerji kazandı. Bundan sonra tek başına kutupsal optik fonon yayınlama saçılmaları elektron enerjisini dengeleyemediği, bu elektrik alan değerinden sonra, elektronun L-vadisine çıkabilecek kadar enerji kazanmasıyla, L-vadisindeki saçılmalar etkili olmaya başladığı görüldü.



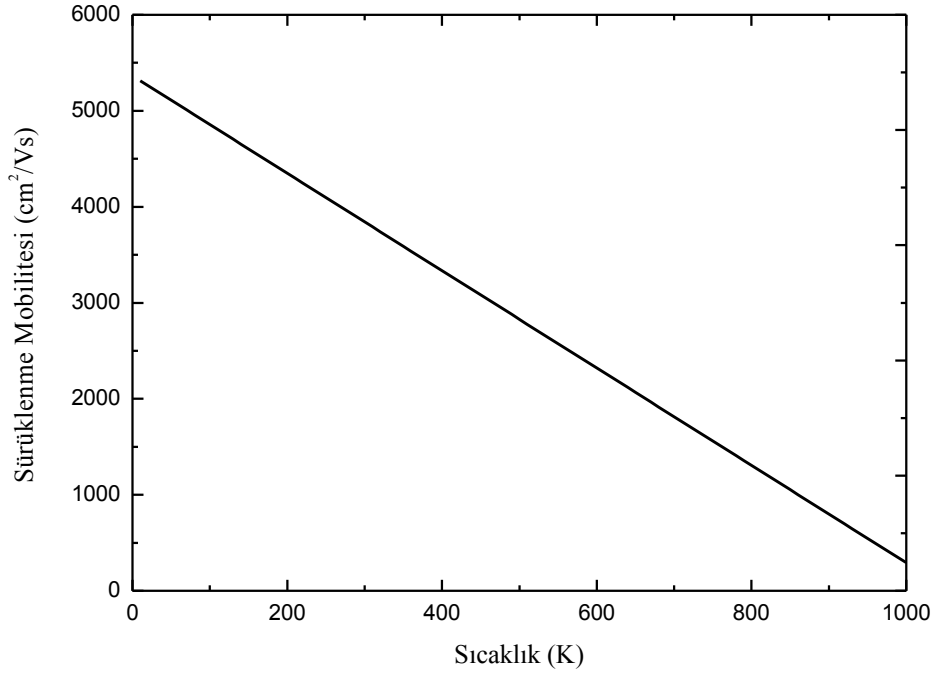
Şekil 5.4. Simulasyon boyunca gerçekleşen saçılmaların Γ ve L-vadilerinde gerçekleşme yüzdeleri.

Şekil (5.4)'te simulasyon boyunca gerçekleşen saçılmaların Γ ve L-vadilerinde bulunma yüzdeleri görülmektedir. Buna göre elektrik alanın 3 kV/cm' lik değerine kadar saçılmaların neredeyse tamamı Γ -vadisinde gerçekleşti. Elektrik alanın 5 kV/cm değerinde saçılmaların % 90 ı merkez vadiye, % 10 ise L-vadisindedir. L-vadisinde gerçekleşen saçılmaların artışıyla elektron sürüklenme hızının $1,9 \times 10^7$ cm/s lik pik değerinden düşüş başladı. Elektrik alanın 15 kV/cm değerinde gerçekleşen saçılmaların % 35 i merkez vadiye iken % 65 i L-vadisinde gerçekleşti. Elektronun etkin kütlesi L-vadisinde, merkez vadiye göre yaklaşık 5 kat (0,067 & 0,35) daha ağırdır, bunun sonucunda ortalama elektron enerjisi çok hafif de olsa artış gösterirken sürüklenme hızı azaldı.

L-vadisinde gerçekleşen saçılmalar yayınlama türü saçılmalarla ve Γ -vadisinden L-vadisine vadiler arası kutupsal optik fonon yayınlama saçılmaları sonucunda elektron, elektrik alandan kazandığı enerjinin neredeyse tümünü fonon yayınlamak için harcadı. Böylece elektron enerjisindeki ani bir artış yani, yarıiletkenin elektriksiz kırılması engellenmiş oldu.

Elektrik alanın 3 kV/cm' lik değerinden sonra elektronun düşük etkin kütleli Γ -vadisinden büyük etkin kütleli L-vadisine saçılmalarıyla elektron sürüklenme hızı $1,9 \times 10^7$ cm/s' lik pik değerinden sonra azalmaya başladı. Elektrik alanın 15 kV/cm' lik değerinden sonra ise elektron sürüklenme hızı kararlı bir değere ulaştığı görüldü. Elektrik alanın artışıyla sürüklenme hızının azalma gösterdiği 5 kV/cm ile 15 kV/cm' lik elektrik alan bölgesinde negatif diferansiyel mobilite yada negatif diferansiyel iletkenlik olarak bilinen olay gözlemlendi. GaAs yarıiletken bileşiğinde negatif diferansiyel mobilite elektronların düşük etkin kütleyle sahip oldukları Γ -vadisinden, büyük etkin kütleyle sahip oldukları L-vadisine geçişlerinden kaynaklandığı belirlendi.

Elektron sürüklenme mobilitesinin elektrik alan ile değişimi Şekil (5.5)'de görüldüğü gibidir. Düşük alan mobilitesi olarak elektron sürüklenme hızının pik değerine ulaştığı 5 kV/cm' lik elektrik alan değerindeki mobilitesi $4000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ olarak elde edildi.



Şekil 5.5. 5 kV/cm Elektrik alan değerinde, elektron sürüklenme mobilitesinin örgü sıcaklığı ile değişimi.

Şekil (5.5)'te elektron mobilitesinin sıcaklık ile değişimini belirlemek için; elektron sürüklenme hızının maksimum değerine ulaştığı 5 kV/cm' lik sabit elektrik alan değerinde sürüklenme mobilitesi 10 K ile 1000 K sıcaklık aralığında belirlendi.

GaAs yarıiletken bileşiğinin Monte Carlo yöntemi ile incelenmesi ile bulunan sonuçlar literatürdeki verilerle uyumlu olduğu görüldü.

KAYNAKLAR DİZİNİ

- Akarsu, M., 2003, Hg katkılanmış CdTe yarıiletken bileşiğinde taşınım özelliklerinin Monte Carlo simülasyonu ile belirlenmesi, Doktora tezi, ESOGÜ, 118 s.
- Ammon Y.,1975, Quantum Electronics, John Wiley & Sons, inc., p.570.
- Fawcett W., Boardmann A.D Swain S., 1970, Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide, J.Phys.Chem.Solids, 31, 1963-1990.
- Jacoboni C., Reggiani L., 1983, The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials, Reviews of Modern Physics, 55, 645-705.
- Jacoboni C., Reggiani L., 1970, High field transport in GaAs at 300 K, Physics Letters, 33A, 333-334.
- Jacoboni C., Lugli P., 1989, The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation, Springer-Wien New York, p.356.
- Jasprit S., 1995, Semiconductors Optoelectronics, McGraw-Hill Inc.,p.725.
- Kalaycıoğlu, E., 2008, Yarıiletkenlerde Yük Taşıyıcılarının taşınım denklemlerinin Monte Carlo yöntemiyle çözümü, Yüksek Lisans, DEÜ, 80 s.
- Karlheinz S., 1989, Semiconductors Physics, Springer-Verlag, p.480.
- Kazutaka T., 1993, Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices, Artech Hause Inc., p.341.
- Kittel, C., 1996 Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons, 7.Baskı. p.182.
- Kosisa H., Nedjalkov M., Selberherr S., 2000, A Monte Carlo method for small signal analysis of the Boltzmann equation, Journal of Applied Physics, 87, 4308-4314.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam ediyor)

- Lundstrom Mark, 2000, Fundamentals of Carrier Trnsport, Cambridge University Press, p.418.
- Look, D.C., 1989, Electrical characterization of GaAs materials and Devices, John Wiley & Sons, 74-112
- Madelung Otfried, 1996, Semiconductors Basic Data, Springer, p.317.
- Moglestue C., 1993, Monte Carlo Simulation of Semiconductors Devices, Chapman & Hall, p.326.
- Nag B.R., 1972, Theory of Electrical Transport in Semiconductors, Pergamon Press, p.227.
- Nag B.R., 1980, Electron Transport in Compound Semiconductors, Springe-Verlag, p.461.
- Nag B.R., Sanghamitra M., Madhumita D., 1999, Interface roughness scattering-limited electron mobility in AlAs/GaAs and $GA_{0.5}In_{0.5}P/GaAs$ wells, Journal of Applied Physics, 86, 459-463.
- Ruch J.G., Fawcett W., 1970, Temparature dependence of the transport properties of gallium arsenide determined by a Monte Carlo Method, Journal of Applied Physics, 41, 3843-3849.
- Snowden C.M., 1988, Semiconductors Device Modelling, Peter Peregrinus Ltd., London, United Kingdom, p.215.