

88081

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

M. İzzettin YILMAZER

Yarıiletken Aletlerin Nümerik Modellemesi

88081

FİZİK ANABİLİM DALI

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS TEZİ

ADANA
EYLÜL, 1999

**ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**YARIİLETKEN ALETLERİN
NÜMERİK MODELLEMESİ**

M. İZZETTİN YILMAZER

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

**Bu Tez 27/9/1999 Tarihinde Aşağıdaki Jüri Üyeleri Tarafından
Oybirliği/Oyçokluğu İle Kabul Edilmiştir.**

İmza: *Metin Özdemir*

Y. Doç. Dr. Metin Özdemir

DANIŞMAN

İmza: *Yüksel Ufuktepe*

Prof. Dr. Yüksel Ufuktepe

ÜYE

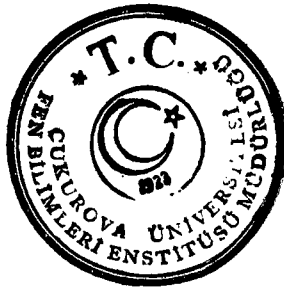
İmza: *Ramazan Esen*

Doç. Dr. Ramazan Esen

ÜYE

Bu tez Enstitümüz Fizik Anabilim Dalında hazırlanmıştır.

Kod No: 1634



Melih Boral

Prof. Dr. Melih Boral

Enstitü Müdürü

İmza ve Mühür

Bu Çalışma Ç.Ü. Araştırma Fonu Tarafından Desteklenmiştir.

Proje No: FBE.98.YL.97

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

ÖZ
YÜKSEK LİSANS TEZİ

**YARIİLETKEN ALETLERİN
NÜMERİK MODELLEMESİ**

M. İzzettin YILMAZER

**ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
Danışman: Y. Doç. Dr. Metin ÖZDEMİR
Yıl: 1999, Sayfa: 98
Jüri: Y. Doç. Dr. Metin ÖZDEMİR
: Prof. Dr. Yüksel UFUKTEPE
: Doç. Dr. Ramazan ESEN**

Yarıiletken aygıtlar endüstrinin bir çok alanında kullanılmaktadır. Aygıtların elektrik ve optik özelliklerinin bilinmesi, kullanım alanlarının gelişmesine yardımcı olacaktır. Bu özelliklerin araştırılması laboratuvar çalışmaları ile yapılabileceği gibi bilgisayar simülasyon yöntemleri kullanılarak da yapılabilir.

Bu çalışmada yarıiletken malzemelerin nümerik olarak simülasyonunun nasıl yapılabileceğinin araştırılması ve böylece modelleme yardımı ile verilen bir yarıiletken aygıtın çeşitli koşullar altında karakteristiklerinin bulunması amaçlanmıştır. Ayrıca çeşitli malzeme parametrelerinin ve ortam koşullarının etkisi de incelenmiştir.

Nümerik simülasyon yöntemi olarak Monte Carlo yöntemi kullanılmıştır. Bu yöntemi kullanmak için yarıiletken malzeme içerisindeki yük taşıyıcılarının malzeme içindeki çeşitli merkezlerle olan etkileşme biçimi bilinmeli ve böylece aygıt Monte Carlo yöntemi ile etkin şekilde modellenebilmektedir. Bu modelleme ile aygıtın performansının ve temel karakteristiklerinin taşıyıcı yoğunluğu; malzemenin safsızlık konsantrasyonu, modellemede kullanılan parçacık sayısı, ortamın sıcaklığı gibi parametrelere bağlılığı da araştırılmıştır. Ayrıca bu işlemler için gerekli olan Fortran programları da yazılmıştır.

Monte Carlo yöntemi, birden fazla parçacığın aynı anda simule edilmesini sağladığı, malzeme özelliklerinin kolayca simülasyon programına eklenebilmesine izin verdiği ve ayrıca bütün uzayda çözülmesi gereken bir dalga fonksiyonu yazılmasını gerektirmediğinden uygun ve hızlı bir çözüm yöntemidir.

Anahtar Kelimeler: Yarıiletken, Monte Carlo Metodu, Saçılma mekanizmaları, Simülasyon, Modelleme.

**ABSTRACT
MSc THESIS**

**NUMERICAL MODELING OF
SEMICONDUCTOR DEVICES**

M. İzzettin YILMAZER

**DEPARTMENT OF PHYSICS
INSTITUTE OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES
UNIVERSITY OF ÇUKUROVA**

Supervizor: Assist. Prof. Metin ÖZDEMİR

Year: 1999, Pages: 98

Jury: Assist. Prof. Metin ÖZDEMİR

: Prof. Yüksel UFUKTEPE

: Assoc. Prof. Ramazan ESEN

Semiconductor devices are used in many different fields in industry. It is important to know the electrical and optical properties of these devices for both their optimum use and for new areas of applications. These properties can be investigated in laboratory studies as well as using computer simulation techniques.

The aim of the present study is first to investigate the methods of numerical simulation of semiconductor devices and then to find the characteristics of a given semiconductor device under various conditions. The effects of environmental conditions and some material parameters on device characteristics are also to be studied.

The Monte Carlo Method is used as the numerical simulation technique. In order to use this method effectively, the details of interaction between the charge carriers and the various imperfections in the crystal (phonons, ions, dislocations, impurities etc.) must be known and these interactions should be able to be simulated by the Monte Carlo technique. In this modelling process, the effects of parameters such as temperature, carrier density, impurity concentration on the performance and basic characteristics of the device are also analysed. The required computer programs are written in Fortran language.

The Monte Carlo Method is a suitable and fast method to solve many body problems such as transport of charge carriers because it provides simultaneous simulation of many particles, and permits an easy addition of material properties to the simulation program. More importantly it does not require the solution of a wave function for each carrier in the whole space, which would require a tremendous amount of computation time.

Key Words: Semiconductor, Monte Carlo Method, Scattering mechanism, Simulation, Modeling.

TEŞEKKÜR

Bu çalışma sırasında benden, değerli desteklerini esirgemeyen Danışmanım Sayın Y. Doç. Dr. Metin ÖZDEMİR'e teşekkürlerimi sunarım.

Yardımlarını gördüğüm Niğde Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'ndeki bütün Öğretim Elemanı arkadaşlarıma teşekkür ederim.



İÇİNDEKİLER

SAYFA

İÇİNDEKİLER.....	I
ÖZ.....	III
ABSTRACT	IV
TEŞEKKÜR	V
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	VI
1. GİRİŞ.....	1
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR.....	2
3. TEORİK ALTYAPI	5
3.1. Saçılma Mekanizmaları	5
3.2. Saçılmanın Kuantum Mekaniksel Teorisi	7
3.3. Saçılmaların Sınıflandırılması ve Fiziksel Tartışma	15
3.3.1. Akustik Fonon Saçılması.....	17
3.3.2. Optik Fonon Saçılması	23
3.3.2.1. Kutupsal Olmayan Optik Fonon Saçılması	23
3.3.2.1.1. Vadiler Arasındaki Fonon Saçılması.....	25
3.3.2.2 Kutupsal Optik Fonon Saçılması.....	26
3.3.3. Safsızlık Saçılması.....	28
3.4. Tek Parçacık için Monte Carlo Metodu	36
3.4.1. Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu	37
3.4.2. Sürüklenme.....	40
3.4.3. Saçılma	40
3.4.4. Hız Hesaplanması	48
3.5. Hacimsel Elektronlar için Çok Parçacıklı Monte Carlo Yöntemi	49

3.5.1. Çok Sayıdaki Parçacığın Hareketi.....	50
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	53
4.1. Tek Parçacık İçin Monte Carlo Metodu	53
4.1.1. Hacimsel GaAs İçinde Elektron Hareketinin ve Çeşitli Özelliklerinin İncelenmesi.....	53
4.2. Çok Parçacık için Monte Carlo Metodu.....	63
4.2.1. Hacimsel Si.....	63
4.3. Çok Parçacık için Monte Carlo Metodu ile Cihaz Simülasyonu.....	66
4.3.1. GaAs Diyot.....	66
4.3.2. Bulk GaAs için Elektron Dağılımı	76
KAYNAKLAR.....	86
ÖZGEÇMİŞ.....	90

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

SAYFA

Şekil 3.1. Saçılma Mekanizmalarının Sınıflandırılması (Nag, 1980).....	6
Şekil 3.2. Silikon için frekans dağılım eğrileri (Weber, 1977).....	6
Şekil 3.3. $[\sin(\xi t)/\xi t]^2$ fonksiyonunun gösterimi. Burada $t=0.1$ ps $\xi = E/2\hbar$ ve E elektron enerjisidir (Tomizawa, 1993).....	11
Şekil 3.4. Kutupsal eksen k ya göre k' için kutupsal koordinatlar (Tomizawa, 1993)	14
Şekil 3.5. GaAs'in Enerji Bant yapısı (Tomizawa, 1993).....	17
Şekil 3.6. Kristal örgüdeki kusur sonucunda oluşan bant enerjisindeki değişim (Tomizawa, 1993)	18
Şekil 3.7. k ve q arasındaki kutupsal θ açısı ile k ve k' arasındaki θ' açılarının tanımlanması (Tomizawa, 1993).....	21
Şekil 3.8. GaAs'in Γ vadisindeki elektronlar için 77 ve 300 °K'deki akustik fonon saçılma oranı (Tomizawa, 1993)	22
Şekil 3.9. Hacimsel GaAs içindeki elektronlar için kutupsal olmayan optik fononların saçılma oranları. Enerji Γ -vadisinin en alt kısmında ölçülmüştür (Tomizawa, 1993).....	27
Şekil 3.10. Pozitif iyon komşuluğundaki elektrik yük dengesinin bozulması. Burada n_0 denge elektron yoğunluğu ve r ise iyona olan uzaklıktır. ...	29
Şekil 3.11. k' ve k arasındaki kutupsal açı θ' 'nin gösterimi (Tomizawa, 1993) ..	31
Şekil 3.12. $n_0 = N_I$ iken iyonize safsızlıklar için saçılma oranı (Tomizawa, 1993)	33
Şekil 3.13. Elektron enerjisi 50 meV iken, $n_0 \approx N_I$ varsayılarak $p(\theta)$ 'nin N_I 'ya karşılık çizimi (Tomizawa, 1993)	35
Şekil 3.14. Bir rasgele sayı r ve $W(\theta)/W(k)$ 'nin kullanılması ile saçılma açısı θ' 'nin tanımlanması (Tomizawa, 1993)	35

Şekil 3.15. Tek parçacık için Monte Carlo Programının akış diyagramı (Tomizawa, 1993)	38
Şekil 3.16 Monte Carlo Yönteminde saçılma mekanizmalarının seçimi	41
Şekil 3.17. Saçılma mekanizması seçimi için akış diyagramı	42
Şekil 3.18. $\Lambda_n(E_k)$ nin kullanılması ile saçılma mekanizmasının seçilmesi. $W_4(E_k)r_2$ rasgele sayısı tarafından seçilmiştir (Tomizawa, 1993)	43
Şekil 3.19. Gözlem çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ile yeni gözlem çerçevesi (k'_x, k'_y, k'_z) arasındaki ilişki. Burada k_z eksenini başlangıçtaki dalga vektörü k' ya paraleldir	44
Şekil 3.20. Başlangıçtaki dalga vektörü k ile k' nün kutupsal ve azimuthal açıları olan θ ve ϕ nin tanımlanması (Tomizawa, 1993)	46
Şekil 3.21. Çok parçacık için Monte Carlo simülasyonunun şematik gösterimi.	50
Şekil 3.22. Alt program emc için akış diyagramı (Tomizawa, 1993)	52
Şekil 4.1. GaAs için elde edilen Elektron Hızı-Elektrik Alan grafiği.	55
Şekil 4.2. GaAs için elde edilen Elektron Enerjisi-Elektrik Alan grafiği.	56
Şekil 4.3. GaAs için elde edilen Elektron Doluluğu-Elektrik Alan grafiği.	58
Şekil 4.4. Farklı safsızlık konsantrasyonlarında GaAs için elde edilen Elektron Hızı-Elektrik Alan grafiği.	60
Şekil 4.5. Farklı safsızlık konsantrasyonlarında GaAs için elde edilen mobilite- sıcaklık grafiği.	62
Şekil 4.6. 300 °K'de GaAs için elde edilen mobilite-safsızlık konsantrasyonu grafiği.	64
Şekil 4.7. Safsızlık konsantrasyonu çok düşük iken mobilitenin sıcaklığa göre değişimi	65
Şekil 4.8. Hacimsel silikonda sürüklenme hızının zamanın bir fonksiyonu olarak farklı elektrik alanlarındaki değeri.	67
Şekil 4.9. Hacimsel silikonda sürüklenme hızının uzaklığın bir fonksiyonu olarak farklı elektrik alanlarındaki değeri.	68

Şekil 4.10. n^+-i-n^+ GaAs diyotun şematik gösterimi.....	69
Şekil 4.11. n^+-i-n^+ GaAs diyot içindeki taşıyıcı yoğunluğunun dağılımı.....	71
Şekil 4.12. 300°K ve 0.75 gerilim farkıyla n^+-i-n^+ GaAs diyot için uzaklığa karşı taşıyıcı yoğunluğu grafiği.....	72
Şekil 4.13. 77°K ve 0.75 gerilim farkıyla n^+-i-n^+ GaAs diyot için uzaklığa karşı taşıyıcı yoğunluğu grafiği.....	73
Şekil 4.14. 300°K ve 0.75 gerilim farkıyla n^+-i-n^+ GaAs diyot için uzaklığa karşı elektron hızı grafiği.....	74
Şekil 4.15. 77°K ve 0.75 gerilim farkıyla n^+-i-n^+ GaAs diyot için uzaklığa karşı elektron hızı grafiği.....	75
Şekil 4.16. 300°K ve 0.75 gerilim farkıyla n^+-i-n^+ GaAs diyot için uzaklığa karşı potansiyel grafiği.	76
Şekil 4.17. 77°K ve 0.75 gerilim farkıyla n^+-i-n^+ GaAs diyot için uzaklığa karşı potansiyel grafiği	77
Şekil 4.18. 0 V/m elektrik alanında hacimsel GaAs için vadilere göre elektron dağılımı	79
Şekil 4.19. 1×10^{16} V/m elektrik alanında hacimsel GaAs için vadilere göre elektron dağılımı	80
Şekil 4.20. Hacimsel GaAs in Γ -vadisindeki elektron sayısının enerjilerine göre çizimi.....	82
Şekil 4.21. Hacimsel GaAs in L-vadisindeki elektron sayısının enerjilerine göre çizimi.....	83

1. GİRİŞ

Yarıiletkenlerdeki yüklü parçacıkların taşınmasının gözlenmesi için yapılan çalışmalar, temel fizikte ve onun uygulamalarından olan elektronik aygıtların yapımında önemli bir yer tutmaktadır. Yük taşınmasının analiz edilebilmesi için kristallerin bant yapısının, elektronik etkileşmelerin, geçiş sürelerinin, elektronlar ve iyonların kristal yapı kusurları ile olan etkileşmelerinin bilinmesi gerekir. Yarıiletkenlerdeki yük taşınmasının incelenmesi fikri, ileri düzeydeki bilgilere sıkı bir şekilde bağlı olan modern mikroelektronikğin gelişmesinden bu yana oldukça önem kazanmıştır.

Bu çalışmanın amacı, yarıiletkenlerde yük taşınmasına kapsamlı bir şekilde uygulanabilen Monte Carlo Yönteminin anlaşılabilir bir biçimde ifade edilmesi ve yarıiletken malzemelerin nümerik olarak simülasyonunun uygulanmasıdır. Böylece modelleme yardımı ile verilen bir yarıiletken aygıtın çeşitli koşullar altında temel karakteristikleri bulunabilmektedir. Bunun yanında çeşitli malzeme parametrelerinin ve ortam koşullarının etkisi de incelenecektir. Çalışmanın bilgisayar simülasyonu ile yapılacak olması deneysel çalışmalara kıyasla daha az maddi harcama ve zaman gerektirecektir.

Kullanacağımız yöntemin anlaşılması için, silisyum ve germanyum gibi kovalent yarıiletken materyaller için Monte Carlo Yönteminin özel uygulamaları tartışılmıştır. Ayrıca GaAs ve benzeri kutuplanmış bileşik materyaller de incelenecektir. Çalışmalarımız hacimsel (bulk) malzemelerin fiziksel özelliklerinin araştırılması ve metodun özel yapılara uygulanmasını da kapsamaktadır. Aygıt simülasyonu ayrı bir konu olarak ele alınacaktır.

YÜKSEKÖĞRETİM ENSTİTÜSÜ
FİZİK BÖLÜMÜ
M. İZZETTİN YILMAZER

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Monte Carlo yönteminin ismi, Monaco prensliğinin bir şehri olan Monte Carlo'daki kumarhanelerde kullanılan ve gerçekte basit bir rasgele sayı üretici olan rulet masalarından gelmektedir. Bu yöntemin sistematik gelişmesi 1944 yılından sonra olmuştur ve temelde rasgele üretilen sayıların seçimine dayanır. Bu yöntemle ilgili bilinen ilk bilimsel yayın 1901'de Kelvin tarafından yapılmıştır (Moglestue, 1993). Ancak çok daha önceki yıllarda da basit örnekler bulmak mümkündür. Örneğin, 19. yüzyılın ikinci yarısında gerçekleştirilen bir deneyde ilk olarak bir iğne rasgele bir şekilde tahta bir cetvel üzerine atılmış, tahta üzerindeki noktaların paralel düzgün çizgilerle birleştirilmesi ve iğne ile çizgilerin arasındaki kesişme sayılarının gözlenmesiyle π -sayısı çıkarılmaya çalışılmıştır (<http://random.mat.sbg.ac.at>). Bilimsel anlamda ilk kullanılışı ise ünlü Manhattan projesinde Atom bombasının yapımı sırasında ortaya çıkmıştır. Yöntemin bugünkü haliyle ortaya çıkışı, bu çalışmada uranyumun bozunmasıyla ortaya çıkan nötronların yönlerini bulmak için rasgele sayılar kullanan Fermi, Von Neumann ve Ulam'a atfedilir. "Monte Carlo" ismini yöneme veren de Enrico Fermi olmuştur. Fermi'nin daha 1930'larda nötron taşınımı ile bağlantılı Monte Carlo teknikleri kullandığı bilinmektedir (Anderson, 1986).

1950'li yılların başlarında transistörün icat edilmesinden hemen sonra, Ohm Yasasına dayanan çizgisel tepki bölgesinin dışında yarıiletken örneklerle karşılaşılmasında oldukça büyük bir etken olan yüksek elektrik alanının farkına varıldı. Çizgisel olmayan alandaki geçişler (hot-electron problemi) hızlı bir gelişme periyoduna girdi ve bu problem üzerindeki araştırmaların sayısının artması bu konudaki bilimsel bilgilerin değerini daha da artırdı. Kısa bir sürede yüksek elektrik alanını da göz önünde bulunduran çalışmaların yapılması, yeni fikirlerin keşfedilmesi [örneğin Gunn Etkisi (1963)] ile araştırmacılar yeni cihazların yapımına yöneldi. Böylece bilim ve teknoloji arasındaki birçok ilginç olaydan biri olan pozitif geri-besleme olgusu ortaya çıkmıştır. Teknolojinin gelişmesi büyük ölçekte bütünleşme özelliğine (VLSI) sahip olan

elektronik aletlerin yapılmasına ve boyutların küçülmesine yol açtı. Boyutların küçülmesi herhangi uygun bir voltaj sinyali için, Ohmik tepki bölgesinin dışında, yüksek alan dayanıklılığına sahip olan elektronik aletlerde, yüksek alandaki yük geçişlerinin önemini artırdı.

Matematiksel ve fiziksel açıdan bakıldığında, yük taşınması genel olarak zor bir problemdir. Gerçekten, Boltzmann Taşınım Denklemi (Rae, 1992) gerçek sistemlere zor uygulanabilen, çok sınırlı analitik çözümleri olan bir problemdir. Yarıiletkenlerdeki yük taşınması probleminin çözümü için iki önemli teknik geliştirilmiştir. Bunlar Monte Carlo tekniği (Kurosawa, 1966) ve iterasyon tekniğidir (Budd, 1966). Bu teknikler modern ve hızlı bilgisayarların yapılmasından sonra mikroskobik fiziksel modeller için Boltzmann Denklemi'nin tam sayısal çözümlerinin net olarak elde edilmesini sağlamışlardır.

Elektrik akımının rasgele sayılar üretilerek hesaplanmasını belki de ilk yapanlar Lüthi ve Wyder'dir (1960). Kurosawa (1966) bu tekniği hızlı elektron (hot electron) problemini çözmek için kullandılar. Bu konuya ilgi duyan ilk araştırmacılar çoğunlukla parçacıkların düzgün bir elektrik alanı içindeki hareketi ile ilgilendiler. Boardman ve ark. (1968), GaAs içindeki yük taşıyıcılarının elektrik alanına karşı sürüklenme hızlarını hesapladılar.

İlk Monte Carlo modelleri çoğunlukla tek-parçacık modelleri olarak bilinir çünkü hemen hepsinde parçacıklar arası etkileşimler ihmal edilmiştir. Gerekli bilgiyi elde etmek için sadece bir tek parçacık yeterince uzun sürelerde takip edilmiştir. Hesaplamalar sadece ters uzayda (momentum uzayı) yapılmış ve daha sonra yarıiletken aygıtların çalışmalarına duyulan ilgi nedeniyle hem normal hem ters uzayda çözümler yapılmıştır. 1970'lerde parçacık transferi ve Poisson denkleminin çözümünün beraberce yapıldığı bir modeli Hockney (1965) geliştirildi. Daha sonraları Warriner (1977) taşıyıcıların fononlarla olan etkileşmelerini de ekleyerek modeli, transistörlere de uygulanabilecek hale getirmiştir. Monte Carlo yöntemi ile ilk alet simülasyonu Hockney ve ark. (1974b) tarafından yayınlanmıştır. Daha sonraları kendi içinde uyumlu Monte Carlo hesaplamaları Mogilestue ve Beard (1979) ve Warriner (1977) tarafından yayınlanmıştır. Yöntem ancak son yıllarda bilim insanlarının şüpheli yaklaşımlarını

yıkılmış ve popüler olarak kullanılmaya başlanmıştır. Son yılların bu alandaki en önemli araştırmacıları olarak; Kızılyallı ve Hess (1987), Kızılyallı ve ark. (1987), Wang ve Hess (1985), Fischetti ve Laux (1988), Park ve Brennan (1990), Througnumchai ve ark. (1986), Tomisawa ve ark. (1988), Jacoboni ve Reggiani (1979 ve 1983), Fauquembergue ve ark. (1980) ve Nedjalkov ve Vitanov (1989) sayılabilir.

Monte Carlo Yöntemi yukarıda sözü edilen iki yöntem arasında en fazla popüler olanıdır. Çünkü kullanımı daha kolaydır ve fiziksel olarak daha iyi yorumlanabilir. Monte Carlo tekniğine en önemli katkılar Price (1968) ve Malvern grubunun (Rees, 1968, 1969, Fawcett ve ark., 1969a, 1970, 1969b, 1973) kendinden saçılma (self-scattering) kavramı konusundaki çalışmaları, yöntemin çoklu parçacıklar sistemine (Lebwohl ve Price, 1971), harmonik alanlara (Price, 1973) ve dejenere istatistik durumlarına (Bosi ve Jacoboni, 1976; Lugli ve Ferry, 1985) uygulanması olarak gösterilebilir. Diğer önemli gelişme alanları; bir yarıiletken içinde geçiş yapan elektronların ve aynı zamanda bunların denk boşluğunun hesaplanması (Ruch, 1972; Baccarani ve Ark., 1977), alaşım yarıiletkenlerin ele alınış tarzı (Hauser ve Ark., 1976) ve güçlü elektrik alanlardaki kuantum etkiler (Barker ve Ferry, 1979) olarak gösterilebilir.

Monte Carlo, matematiksel problemlerin çözülmesi için kullanılan istatistiksel-nümerik bir metottur (Buslenko ve Ark., 1966). Yük taşınması durumunda, Boltzmann Denkleminin istatistiksel nümerik çözümü ile kristal içindeki yük taşıyıcılarının hareketleri simüle edilebilir. Böylece denklemlerin, yeterli fiziksel bilgi ile istenilen sisteme kolaylıkla uygulanmasıyla, çözümleri yapılmaya başlanabilir.

Monte Carlo Yöntemi, deneylerle ulaşılamayan özel fiziksel durumlara da uygulanabildiğinden çok kullanışlı bir tekniktir. Bu özelliğiyle, üzerinde fazla durulmayan ve deneysel olarak incelenemeyen hatta var olmayan birçok malzeme Monte Carlo Yöntemi ile incelenebilir. Bu kullanımıyla Monte Carlo Yöntemi deneysel bir teknik özelliği de gösterir.

3. TEORİK ALTYAPI

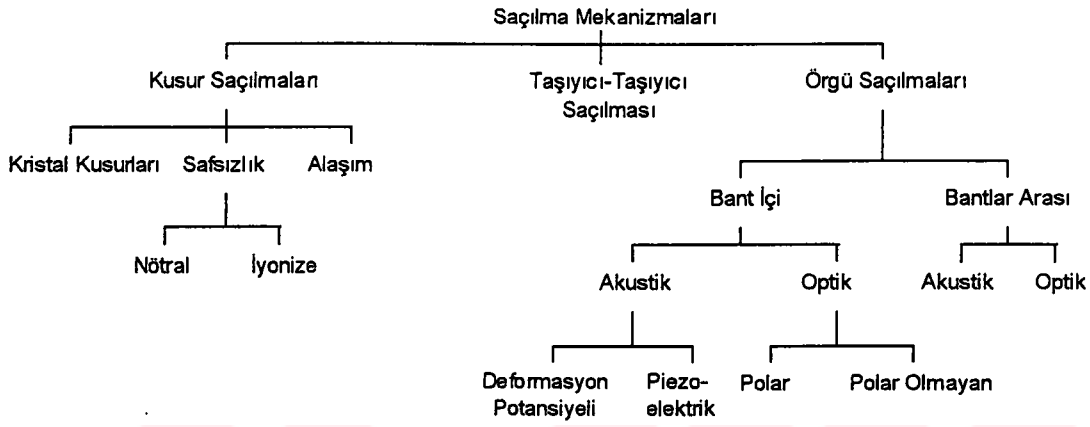
Bu bölümde elektronların kristal içerisinde saçılmasının kuantum mekaniksel temelleri verilecek, saçılma mekanizmalarının sınıflandırılması yapılacak ve bu saçılma mekanizmalarının Monte Carlo yöntemine nasıl uygulanacağı anlatılacaktır. Yöntem, tek parçacık Monte Carlo ve çok parçacık Monte Carlo yöntemi olarak iki ana başlık altında incelenecektir.

3.1. Saçılma Mekanizmaları

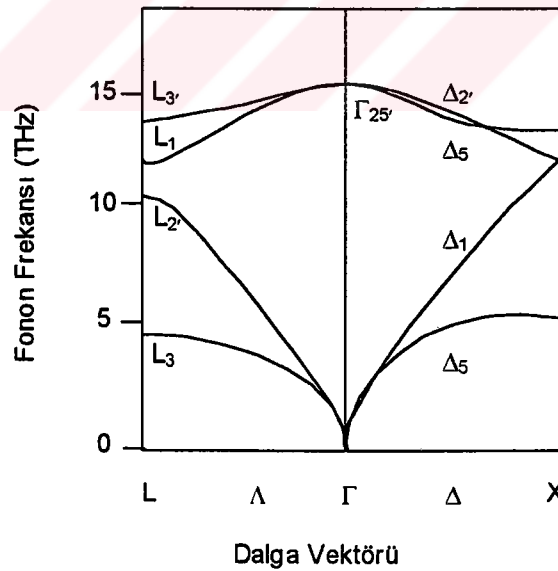
Yarı klasik taşınımında elektron etkileşmesinin ve çarpışmalarının dinamiğinin, uygulanan elektrik ya da manyetik alana bağlı olduğu kabul edilir. Saçılmaların ve geçiş olasılıklarının hesaplanması için birinci dereceden pertürbasyon (Rae, 1992) yaklaşımı kullanılacaktır. Bu sebeple yalnızca iki cisim etkileşmesi incelenecektir (Jacoboni ve Lugli, 1989).

Saçılma mekanizmaları Şekil 3.1'deki gibi bir şema ile verilebilir. Bu çalışma sırasında kullanılan saçılma mekanizmaları örgü ve kusur saçılma mekanizmaları olarak iki ana grup altında toplanabilir. Taşıyıcı-taşıyıcı saçılması ihmal edilmiştir. Bu nedenle sadece örgü ve kusur saçılmaları üzerinde durulmuştur. Kusur saçılmalarında iyonize olmuş safsızlık etkileşmeleri göz önüne alınmış, diğerleri ihmal edilmiştir. Örgü saçılmalarının sebep olduğu saçılmalar aynı enerji bandı içindeki saçılmalar ve aynı bant içindeki vadiler arası saçılmalar olarak iki ana gruba ayrılabilir. Örgü saçılmalarının kaynağı ise düşük enerjili akustik veya yüksek enerjili optik fononlardır. Bant içi ve vadiler arasında olan saçılmaların her ikisi de akustik ve optik fononlardan kaynaklanabilir. Şekil 3.2'deki dalga vektörüne karşılık fonon frekansı grafiğinde L_2' , L_3 ve Δ_1 , Δ_5 ile verilen eğri akustik, L_1 , Δ_5 ve L_3' , Δ_2' ile verilen eğri ise optik fononların dağılımını göstermektedir. Bant içindeki akustik saçılmalar kendi arasında deformasyon potansiyelinden kaynaklanan saçılmalar ve Piezo-elektrik saçılmalar olarak iki grupta

incelenebilir. Yine aynı gruptaki optik fonon saçılmaları ise kutupsal ya da kutupsal olmayan saçılmalar olarak iki sınıfta ele alınabilir.



Şekil 3.1. Saçılma Mekanizmalarının Sınıflandırılması (Nag, 1980)



Şekil 3.2. Silikon için frekans dağılım eğrileri (Weber, 1977)

3.2. Saçılmanın Kuantum Mekaniksel Teorisi

Saçılma teorisi, zamana bağlı birinci dereceden pertürbasyon teorisinden hesaplanan “Fermi’nin Altın Kuralı” ve buradaki olasılık integralinin çözülmesindeki zorluğu yenmek için “Born Yaklaşımının” kullanılması (Rae, 1992) üzerine kurulmuştur. Bu kural pertürbasyon potansiyeli H' ile pertürbe edilmemiş Hamiltonian operatörü H_0 için Schrödinger dalga denkleminin çözümleri olan iki öz durum arasındaki geçiş olasılığını verir. S, bir elektronun k dalga vektörü durumundan çarpışmadan sonraki k' dalga vektörü durumuna geçme olasılığı olmak üzere birinci dereceden $S(k, k')$ geçiş olasılığını hesaplamak için, H' pertürbasyon potansiyeli ifadesindeki H' nü $\lambda H'$ ile değiştirelim. λ burada gerçek, boyutsuz bir parametredir. Buradaki amacımız, H_0 Hamiltoniyeni ile temsil edilen tedirgin edilmemiş öz durumların birinde bulunan bir elektronun, herhangi bir tedirginleme potansiyeli H' altında başka bir öz duruma geçme olasılığını hesaplamaktır. Bu yaklaşımın doğru olması için H' , H_0 'a göre küçük olmalıdır. λ aynı mertebedeki terimlerin izlenmesi için kullanılmıştır ve en sonunda 1'e eşitlenecektir. Böylece Schrödinger denklemi aşağıdaki şekilde yazılabilir (Tomizawa, 1993).

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (H_0 + \lambda H') \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.1)$$

Pertürbe edilmemiş Hamiltonian operatörü H_0 'ın kesin çözümlerinin

$$H_0 \psi_k = E_k \psi_k \quad (3.2)$$

olduğunu kabul ediyoruz. Burada E_k enerji özdeğeri ve ψ_k da bu enerji özdeğerine karşılık gelen özfonksiyondur. Böylece zamana bağlı çözüm,

$$\Psi_k^0(\vec{r}, t) = \psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t / \hbar} \quad (3.3)$$

şeklinde yazılabilir. Özfonksiyon Ψ_k^0 , ortonormal bir set oluşturur. Pertürbe edilmiş problemin çözümü Ψ_k^0 'nın lineer bir birleşimi olarak ifade edilebilir. Böylece;

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k c_k(t) \Psi_k^0(\vec{r}, t) = \sum_k c_k(t) \psi_k(\vec{r}, t) e^{-iE_k t / \hbar} \quad (3.4)$$

olarak yazılabilir. Burada $c_k(t)$ lineer bir birleşim için gerekli olan katsayılarıdır. (3.4) denkleminin (3.1)'de yerine yazılmasıyla

$$i\hbar \sum_k \frac{\partial c_k(t)}{\partial t} \psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} = \lambda \sum_k H' c_k(t) \psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (3.5)$$

elde edilir. Bu ifadenin her iki yanının Ψ_k^0 'nin kompleks eşleniği $\psi_k^* e^{iE_k t/\hbar}$ ile çarpılması, $(\vec{r})$ üzerinden integre edilmesi ve ψ_k 'nin ortogonalliğinin kullanılmasıyla $c_k(t)$ 'ler için aşağıdaki diferansiyel denklemi elde ederiz.

$$i\hbar \frac{\partial c_k(t)}{\partial t} = \lambda \sum_k \langle k' | H' | k \rangle c_k(t) e^{i[E_{k'} - E_k]t/\hbar} \quad (3.6)$$

Burada $\langle k' | H' | k \rangle$

$$\langle k' | H' | k \rangle = \int_{\Omega} \psi_k^*(\vec{r}) H' \psi_k(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.7)$$

şeklinde tanımlanan beklenen değerin Dirac gösterimidir, Ω ise kristalin hacmidir. Denklem (3.7), k ve k' durumları arasındaki pertürbasyon potansiyelinin matris elemanlarını gösterir.

Eğer λ sıfırdan farklı ise (3.6) denkleminde $c_k(t)$ 'nin zamana bağlı olduğunu görürüz. Eğer pertürbasyon zayıf ise $c_k(t)$ 'nin çok yavaş değişmesini bekleyebiliriz. Böylece $c_k(t)$ 'yi λ 'ya bağlı olarak kuvvet serisine açabiliriz.

$$c_k(t) = c_k^0 + \lambda c_k^1(t) + \lambda^2 c_k^2(t) + \dots \quad (3.8)$$

(3.8) denklemini (3.6)'da yerine konulur ve λ 'nın aynı kuvvetli terimleri sağ ve sol yanlarda eşitlenirse

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial c_k^0}{\partial t} &= 0 \\ i\hbar \frac{\partial c_k^1(t)}{\partial t} &= \sum_k \langle k' | H' | k \rangle c_k^0 e^{i[E_{k'} - E_k]t/\hbar} \\ i\hbar \frac{\partial c_k^2(t)}{\partial t} &= \sum_k \langle k' | H' | k \rangle c_k^1 e^{i[E_{k'} - E_k]t/\hbar} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.9)$$

denklemleri elde edilir. (3.9)'daki ilk eşitlik, sıfırıncı dereceden $c_k^{(0)}$ katsayısının

zamandan bağımsız olduğunu göstermektedir. $c_k(t)$ 'nin birinci dereceden yaklaşımı olan $c_k^{(1)}(t)$, (3.9)'daki ikinci eşitlikten hesaplanabilir.

Şimdi başlangıç şartları için $t=0$ olduğunu düşünelim. Böylece elektron başlangıçta pertürbe edilmemiş öz durumların birinde (k_i 'de) olacaktır. O halde başlangıç şartları

$$\begin{aligned} c_{k'}(0) &= c_{k_i}^{(0)} = 1 \\ c_k(0) &= c_k^{(0)} = 0 \quad (k \neq k_i) \end{aligned} \quad (3.10)$$

olacaktır. Buradan

$$i\hbar \frac{\partial c_{k'}}{\partial t} = \langle k' | H' | k_i \rangle e^{i(E_{k'} - E_{k_i})t/\hbar} \quad (3.11)$$

elde ederiz. Burada $c_{k'}(t)$ 'nin üst indisi kolaylık açısından yazılmamıştır. (3.11) zamana bağlı H' için de geçerlidir. Eğer H' pertürbasyonu zamana harmonik olarak bağlıysa denklem (3.11) özellikle basit bir biçimdedir. Bu durumda

$$H'(t) = H' e^{\pm i\omega t} \quad (3.12)$$

şeklinde yazılabilir. Bu gösterim bize zaman fonksiyonunun daha genel bir Fourier bileşeni olarak kolaylık sağlayabilir. Üstel fonksiyonun negatif ve pozitif işaretlerinin her ikisini de almamız gerekir. Çünkü kompleks bir fonksiyon ile onun kompleks eşleniğinden oluşan potansiyel gerçek bir fonksiyondur. (3.12) ifadesinin (3.11)'de yerine yazılmasıyla,

$$i\hbar \frac{\partial c_{k'}}{\partial t} = \langle k' | H' | k_i \rangle e^{i(E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega)t/\hbar} \quad (3.13)$$

denklemini elde edilir ve bu denklemin 0 dan t 'ye integre edilmesi

$$c_{k'}(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle k' | H' | k_i \rangle \frac{e^{i(E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega)t/\hbar} - 1}{i(E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega)/\hbar} \quad (3.14)$$

ifadesini verir. Eğer, frekans boyutunda olan

$$\xi = (E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega)/2\hbar \quad (3.15)$$

tanımlarsak (3.14) ifadesi

$$c_{k'}(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle k' | H' | k_i \rangle e^{i\xi t} \frac{\sin(\xi t)}{\xi t} \quad (3.16)$$

şeklinde yazılabilir.

Böylece $t = 0$ 'da k_i dalga vektörüne sahip elektronun t anında k' dalga vektörüne sahip olma olasılığı $|c_{k'}(t)|^2$ ile verilir. Birim zaman için k_i durumundan k' durumuna geçiş oranı $S(k_i, k')$ ise

$$S(k_i, k') = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|c_{k'}(t)|^2}{t} \quad (3.17)$$

ile verilir. (3.16) denkleminin (3.17) de yerine yazılması ile geçiş oranı

$$S(k_i, k') = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|\langle k' | H' | k_i \rangle|^2}{\hbar^2} \left[\frac{\sin(\xi t)}{\xi t} \right]^2 t \quad (3.18)$$

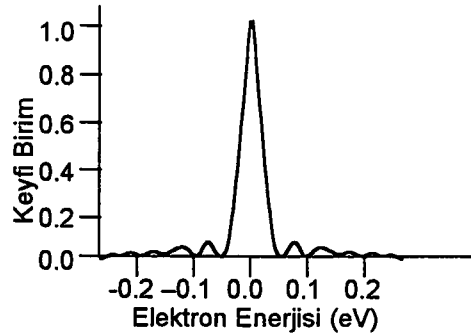
olarak ifade edilebilir. Şekil 3.3, (3.18)'deki $[\sin(\xi t)/\xi t]^2$ ifadesinin değerlerini göstermektedir. $t \rightarrow \infty$ limiti için Şekil 3.3'deki ana pikin genişliği çok küçük bir hale gelir ve tıpkı Dirac δ -fonksiyonu gibi davranır. Ayrıca

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\sin(\xi t)}{\xi t} \right]^2 d\xi = \frac{\pi}{t} \quad (3.19)$$

olduğundan, (3.18)'deki köşeli parantez içindeki değer, $\delta(\xi)\pi/t$ ile değiştirilebilir. Böylece

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k' | H' | k \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar\omega) \quad (3.20)$$

elde edilir. Burada başlangıç durumunu gösteren i alt indis kolaylık için yazılmamıştır.



Şekil 3.3. $[\sin(\xi t)/\xi t]^2$ fonksiyonunun gösterimi. Burada $t=0.1$ ps $\xi = E/2\hbar$ ve E elektron enerjisidir (Tomizawa, 1993)

(3.20) eşitliğinde verilen ifade sadece δ -fonksiyonunun argümanı sıfır ise, sıfırdan farklıdır ve bu enerjinin korunumunu gösterir. δ -fonksiyonunda (+) işareti seçilirse, (3.20) ifadesindeki δ -fonksiyonunun argümanı $E_{k'} = E_k - \hbar\omega$ şekline dönüşecektir. Burada $\hbar\omega$ geçiş sırasında yayınlanan fotonun enerjidir. Yani elektron $\hbar\omega$ enerjisine sahip bir fonon yaratarak geçiş yapmıştır. δ -fonksiyonunda (-) işareti seçilirse, (3.20) ifadesi $E_{k'} = E_k + \hbar\omega$ şekline dönüşecektir. Burada $\hbar\omega$ parçacık tarafından soğurulan enerjidir, yani elektron kristalden bir fonon yok ederek geçiş yapmıştır. (3.20) eşitliği yarıiletkenlerdeki taşıyıcıların saçılmasını hesaplamak için kullanacağımız saçılma teorisinin temel bir sonucudur. Bu sonucun kullanılabilmesi için etkileşmenin zayıf olması gerekir. Bu çarpışmalar (iki saçılma) arasındaki zamanın yeterince uzun olmasını garantiler ve aslında formülün çıkarılmasında kullanılan birinci derece yaklaşımın bir sonucudur. Elde edilen sonuç Fermi'nin Altın Kuralı olarak bilinir. Dikkat edilirse Altın Kural'da parçacık momentumu ile ilgili herhangi bir terim görünmemektedir. Altın Kuralın uygulanabilmesi ve $\langle k'|H'|k \rangle$ matris elemanlarının hesaplanması için pertürbasyon potansiyeli H' nün bilinmesi gerekmektedir ve gerçekte momentum korunumu ile ilgili bilgiler buradan çıkacaktır.

Şimdi (3.7) denkleminde verilen matris elemanlarına dönelim. Pertürbasyon potansiyeli H' nün Fourier serisine açılabileceğini varsayarak

$$H' = \sum_q U_q e^{iqr} \quad (3.21)$$

yazabiliriz. Burada q toplamı $-\infty$ dan $+\infty$ 'a kadardır. Eğer pertürbasyon potansiyeli gerçekse, U_q^* , U_q nun kompleks eşleniği olmak üzere, $U_q^* = U_{-q}$ ilişkisini elde ederiz. Bloch (Kittel, 1976), Schrödinger denklemindeki potansiyel terimi $U(x)$ yerine $-eU(x)$ değerini almış ve bu denklemin periyodik bir potansiyel için çözümünün de $\psi_k(r) = u_k(r).e^{ikr}$ şeklinde olması gerektiğini göstermiştir. Buradaki $u_k(r)$ fonksiyonu k dalga vektörünün değerine bağlıdır ve kristalin veya potansiyelin periyodu ile aynı periyoda sahip periyodik bir fonksiyondur. Bu teoreme Bloch Teoremi ve bu fonksiyonlara da Bloch fonksiyonları denir. Denklem (3.21)'in (3.7) de yerine yazılması ve matris elemanlarının Bloch fonksiyonları için hesaplanması ile

$$\langle k' | H' | k \rangle = \int_{\Omega} u_{k'}^*(\vec{r}) e^{-ik'.r} \sum_q U_q e^{iq.r} u_k(\vec{r}) e^{ik.r} dr \quad (3.22)$$

bulunur. Böylece

$$\langle k' | H' | k \rangle = \sum_q U_q \int_{\Omega} u_{k'}^*(\vec{r}) e^{-ik'.r} u_k(\vec{r}) e^{i(q-k'+k).r} dr$$

eşitliğini yazabiliriz. Üstel fonksiyonun periyodik olmasından dolayı, $q = k' - k$ dışındaki bütün q değerleri için integral sıfırdır. Böylece q üzerindeki toplam düşer ve matris elemanları

$$\begin{aligned} \langle k' | H' | k \rangle &= U_q I(k, k') \delta(q + k - k') \\ &= U_{k'-k} I(k, k') \end{aligned} \quad (3.23)$$

şekline indirgenir. $q = k' - k$ şartı (3.23) deki δ -fonksiyonu için tekrar yazılacak olursa bu momentumun korunumu olarak ifade edilir ve

$$I(k, k') \equiv \int_{\Omega} u_{k'}^*(\vec{r}) u_k(\vec{r}) dr \quad (3.24)$$

superposition integrali olarak adlandırılır ve $U_{k'-k}$,

$$U_{k'-k} = \int_{\Omega} e^{-ik'.r} U(\vec{r}, t) e^{ik.r} dr \quad (3.25)$$

ile verilir. Yaklaşık olarak parabolik olan enerji bantları için $I(k, k') \approx 1$ dir. Böylece

matris elemanları

$$\langle k'|H'|k\rangle \approx \int_{\Omega} e^{-ik'.r} U(\vec{r}, t) e^{ik.r} dr \quad (3.26)$$

şeklinde yazılabilir. Bu yaklaşık parabolik bantlar için, pertürbe edilmemiş durumdaki gibi düzlem dalgalar kullanabileceğimiz anlamına gelir.

(3.20) denklemi ile verilen $S(k, k')$ 'nin olası bütün sonuç durumlar k' 'ye göre integralinin alınması ile, saçılma oranı

$$W(k) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(k, k') dk' \quad (3.27)$$

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int |\langle k'|H'|k\rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar\omega) dk' \quad (3.28)$$

olarak bulunur. Burada karesi alınmış olan matris elemanı $\langle k'|H'|k\rangle$ parabolik bantların yakın en alt seviyesi çevresi civarında bire çok yakın olan $|I(k, k')|^2$ faktörünü de içerir. $\langle k'|H'|k\rangle$ matris elemanları için (3.23)'de verilen denklem, momentumun korunumunu da içerdiğinden, (3.28) eşitliğindeki integral enerji ve momentum korunumunu sağlayan son durumlar için alınmalıdır. Bu integral her bir saçılma mekanizması için ilerde ayrı ayrı çözülecektir.

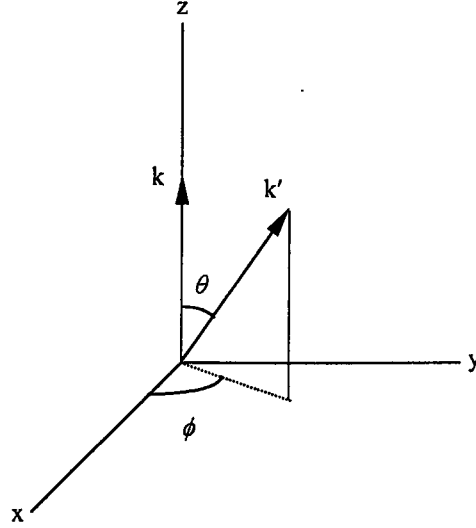
Parabolik olmayan bantlar için $|I(k, k')|^2$ iyi bir yaklaşım ile aşağıdaki şekilde verilebilir (Ridley, 1982).

$$|I(k, k')|^2 = (a_k a_{k'} + b_k b_{k'} \cos \theta)^2 \quad (3.29)$$

Burada θ , k ve k' arasındaki açıdır. Ayrıca a_k ve b_k nicelikleri aşağıdaki şekildedir.

$$a_k = \left[\frac{1 + \alpha E(k)}{1 + 2\alpha E(k)} \right]^{1/2} \quad b_k = \left[\frac{\alpha E(k)}{1 + 2\alpha E(k)} \right]^{1/2} \quad (3.30)$$

α burada parabolik olmama faktörüdür ve E_g kristalin yasak enerji aralığı, m^* etkin kütle ve m_0 serbest bir elektronun kütlesi olmak üzere, $\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m_0} \right)$ olarak tanımlanır (Ridley, 1982).



Şekil 3.4. Kutupsal eksen k ya göre k' için kutupsal koordinatlar

(3.27) eşitliğinin son durum k' 'ler üzerinden integrali alınırken enerji ve momentumun korunumunu sağlayan δ -fonksiyonları uygun biçimde hesaba katılmalıdır. Şekil 3.4'de gösterilen kutupsal koordinatlar kullanılır ve $\bar{k}$ yönü şekilde gösterildiği gibi seçilirse (3.27) ifadesi

$$W(k) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty S(k, k') dk'^3 \quad (3.31)$$

$$dk'^3 = k'^2 \sin \theta dk' d\theta d\phi$$

ϕ burada azimuthal açı, θ ise kutupsal açıdır.

Geçiş oranı ϕ den bağımsız olduğundan direkt olarak alınabilir. Böylece;

$$W(k) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} S(k, k') k'^2 \sin(\theta) dk' d\theta \quad (3.32)$$

Enerji ve momentum korunumundan dolayı θ ve k' birbirlerinden bağımsız değildir. Böylece, yukarıdaki çift integralli ifade tek integrale indirgenebilir. Denklem (3.28) bu bölümün en önemli sonucudur. Bu denklemde H' bilindiğinde, bir yarıiletken kristal hacim içerisindeki saçılma oranları kolay bir şekilde bulunabilir. Ayrıca bu denklemden saçılma sırasında toplam enerji ve momentumun da korunduğu görülebilir.

3.3. Saçılmaların Sınıflandırılması ve Fiziksel Tartışma

Yarı-klasik taşınımında olduğu gibi elektron etkileşimleri uygulanan alandan bağımsız ve çarpışmaların anlık olduğu kabul edilebilir. Yarıiletkenlerdeki yük taşınmasını ilgilendiren elektronik geçiş, başlangıç ve bitiş durumlarının aynı vadede olması durumunda vadi-içi geçiş, farklı vadilerde olması durumunda ise vadiler-arası geçiş olarak sınıflandırılabilir.

Saçılma mekanizmaları Şekil 3.1'deki gibi bir şema ile verilebilir. Bu çalışma sırasında kullanılan saçılma mekanizmaları kusur (iyonize olmuş safsızlıklar) ve örgü saçılma mekanizmaları olduğundan, bu saçılmalar üzerinde daha detaylı durulmuştur. Örgü saçılmaları kendi arasında ikiye ayrılmaktadır. Bunlar iletim ve değerlik bantlarının arasındaki saçılmalar ve iletim ya da değerlik bantlarının kendi içlerinde olan saçılmalar olmak üzere iki sınıfta incelenebilir. Bant içi ve bantlar arasında olan saçılmaların her ikisi de akustik ve optik fononlardan kaynaklanabilir. Şekil 3.2'deki dalga vektörüne karşılık fonon frekansı grafiğinde L_2' , Δ_1 ve L_3 , Δ_5 ile verilen eğri akustik fononların frekans dağılımını, L_1 , Δ_5 ve L_3' , Δ_2' ile verilen eğri ise optik fononların frekans dağılımını göstermektedir. Bant içindeki akustik saçılmalar kendi arasında deformasyon potansiyelinden kaynaklanan saçılmalar ve Piezo-elektrik saçılmalar olarak iki grupta incelenebilir. Yine aynı gruptaki optik fonon saçılmaları ise kutupsal ya da kutupsal olmayan saçılmalar olarak iki sınıfta ele alınabilir.

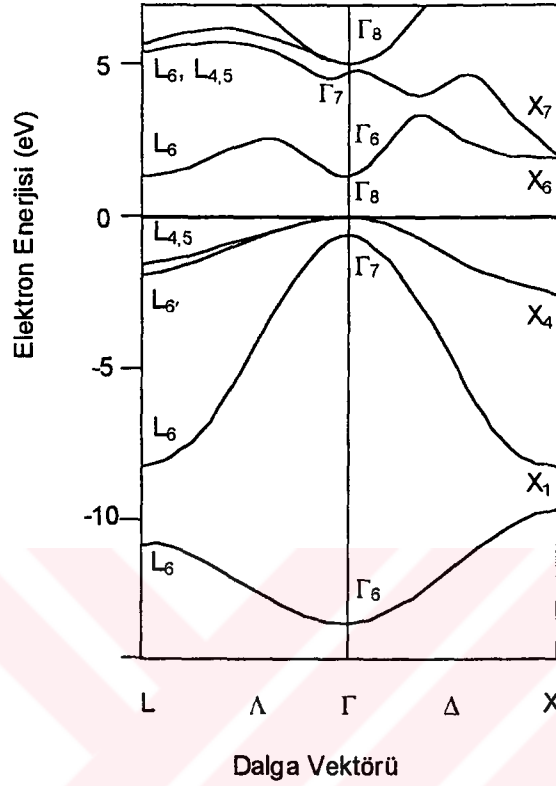
Fononlar ile yük taşıyıcıları arasındaki etkileşme, fononlara eşlik eden polarizasyon dalgaları tarafından üretilen elektrostatik kuvvetler ve mükemmel olan kristalin fononların yarattığı deformasyon nedeniyle oluşturduğu deformasyon potansiyel mekanizması yoluyla olur. İlk etkileşme türü polar malzemeler için tipik bir etkileşme türü olup, akustik fononlar için piezoelektrik etkileşme, optik-fononlar için polar etkileşme olarak adlandırılır. İkincisi ise kovalent yarıiletkenlerde tipik bir etkileşme türüdür.

Momentum transferi Δk 'nın artması ile Coulomb etkileşmesinin önemi hızlı bir şekilde azalır. Vadiler arasındaki geçişlerin olabilmesi için büyük Δk 'lar gerekir. Genel olarak iyonize safsızlıkların oluşturduğu Coulomb alanından saçılan taşıyıcılar (elektronlar) sadece vadi içi geçişlere sebep olur.

Yukarıda sözü edilen saçılma mekanizmaları yanında, bazı özel durumlarda önemli hale gelebilecek diğer saçılma mekanizmaları da göz önüne alınmalıdır. Örneğin, tanımlı bir yüzey bölgesindeki taşıyıcı hareketi ya da iki farklı malzemenin birleştiği bir eklem bölgede bulunan bir bozulma (kusur) potansiyeli ek bir saçılmaya neden olabilir. Bu saçılma genellikle “buruşuk yüzey saçılması” olarak adlandırılır.

Düzensiz alaşımlarda, homojenliği bozan konsantrasyon değişimleri, homojen sistemin öz durum elektronları için saçılma kaynağı gibi düşünülebilir. Bu mekanizma genellikle “alaşım saçılması” olarak adlandırılır. GaAlAs tabanlı farklı yapılarda bazı etkileri olma ihtimaline rağmen cihaz yapımında bu konuya gereken özen gösterilmemiştir.

Diğer saçılma mekanizmaları ise, hızlı elektronların atomlardan elektron kopararak iyonizasyona sebep olduğu ‘çarpma iyonizasyon etkisi’ (impact ionization), yarıiletkenlerdeki yüklerin tuzaklanması ve bırakılması olayları olarak sayılabilir (Jacoboni ve Lugli, 1989).



Şekil 3.5. GaAs'in Enerji Bant yapısı (Tomizawa, 1993)

3.3.1. Akustik Fonon Saçılması

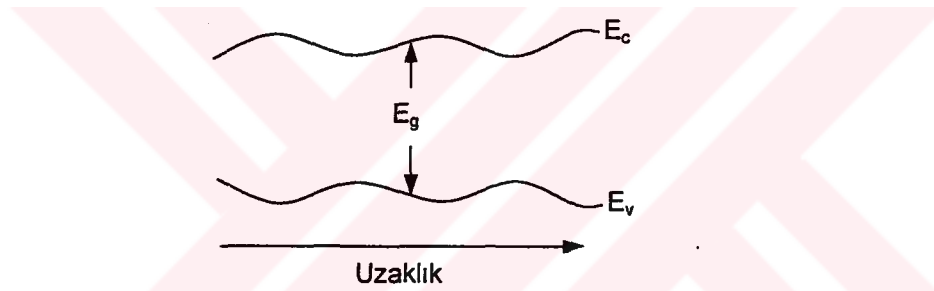
Bir kristal içindeki atomların salınımları normal kip osilasyonlarının süperpozisyonu olarak tanımlanabilir. Her bir normal kip salınımlara bağlıdır ve harmonik salınıcı gibi tanımlanabilir. Elastik dalgalardaki enerji kuantaları fonon olarak adlandırılır. Fonon yaratma ve yok etmeyi temsil eden yükseltme ve indirgenme operatörleri sırasıyla a_q^+ ve a_q olarak tanımlanırsa, örgünün r noktası ve t zamanındaki yer değiştirmesi (Ashcroft ve Mermin 1976),

$$u(r, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} e_q (a_q + a_{-q}^+) e^{iq \cdot r} \quad (3.33)$$

ile verilir. Burada normal kip salınımı sürekli bir limit ile tanımlanır. ρ materyalin yoğunluğu, Ω kristalin hacmi, e_q birim polarizasyon vektörü, q dalga vektörü ve ω_q ise salınımın açısal frekansıdır. Uzun dalga boylu küçük dalga vektörlerinin eşlik ettiği akustik fononlar aşağıdaki dağılım kanununa uyarlar (Kittel, 1976). Bu Şekil 3.2’de gösterilen grafikte L_2 ve Δ_1 ile verilen eğriye karşılık gelmektedir.

$$\frac{\omega_q}{q} = v_s = \sqrt{\frac{c_L}{\rho}} \quad (3.34)$$

Yani ω_q dalga vektörü q ’ya doğrusal olarak bağlıdır. v_s boyuna elastik dalgaların maddesel ortamdaki ses hızını, c_L ise materyalin esneklik sabitini göstermektedir. İyon salınımları Şekil 3.6’da gösterildiği gibi enerji bandındaki ani değişimlerin oluşmasını sağlar ve bunun sonucu olarak elektronlar saçılmaya uğrar (Tomizawa, 1993).



Şekil 3.6. Kristal örgüdeki kusur sonucunda oluşan bant enerjisindeki değişim (Tomizawa, 1993)

Elektronik etkileşimdeki enerji taşınması optik fononlar ile gerçekleşir. Akustik fononların enerjisi genel olarak elektron enerjisinden daha küçüktür. Böylece akustik saçılma elastik, optik saçılma ise elastik olmayan bir süreçtir.

Eğer Ohmic taşınma analitik olarak araştırılırsa, enerji dağılım fonksiyonunun Maxwell ya da Fermi dağılımına uyduğu varsayılabilir ve enerji değişimi olmayan elektronların ısısal değişim göstermemesi gerekir. Diğer yandan bir simülasyon yaklaşımı kullanılırsa, lineer olmayan bir davranışın araştırılması için kristal ve elektronlar arasında bölünemeyecek kadar küçük bir enerji değişimine sahip olan bir mekanizmaya ihtiyaç duyarız. Yüksek sıcaklıklar ya da yüksek alanlar düşündüğümüz

zaman ortalama elektron enerjisi optik fononların enerjisinden daha büyüktür ve bu tür bir fonon, elektronlar ile kristal arasındaki enerji değişmesi görevini yerine getirebilir (Jacoboni ve Lugli, 1989).

Örgü sabitindeki küçük bir değişme enerji bandında da küçük bir değişme meydana getirir. Bu değişmeyi hesaplamak mümkündür. Bu değişmenin örgü sabitindeki değişimle orantılı olduğu düşünülebilir. Yani kısaca $\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ dir. Böylece akustik fononlar için etkileşme potansiyeli

$$H' = \Xi_d \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (3.35)$$

şeklinde yazılabilir. $\nabla \cdot \mathbf{u}$ terimi aslında birim hacim içinde salınımlardan dolayı oluşan madde değişimine karşılık gelmektedir. Bu değişimde bant yapısında değişimlere sebep olmaktadır. Ξ_d deformasyon potansiyel sabiti olarak tanımlanır. (3.35) eşitliğinde $\nabla \cdot \mathbf{u}$ terimi dikine salınan fononlar için sıfırdır ve bu nedenle yalnızca boyuna fononlar için sıfırdan farklı sonuçlar verir. (3.34) ifadesinin (3.35) da yerine yazılmasıyla,

$$H' = \sum_{\mathbf{q}} i q \Xi_d \left(\frac{\hbar}{2 \rho \omega_{\mathbf{q}} \Omega} \right)^{1/2} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^+) e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (3.36)$$

elde edilir. Burada dalga vektörünün polarizasyon vektörüne paralel olduğu varsayılarak, $\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}} = q$ alınmıştır. (3.36) eşitliğinin matris elemanları için çözülmesiyle,

$$\langle \mathbf{k}', n_{\mathbf{q}} - 1 | H' | \mathbf{k}, n_{\mathbf{q}} \rangle = i q \Xi_d \left(\frac{\hbar}{2 \rho \omega_{\mathbf{q}} \Omega} \right)^{1/2} \sqrt{n_{\mathbf{q}}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \quad (3.37a)$$

ve

$$\langle \mathbf{k}', n_{\mathbf{q}} + 1 | H' | \mathbf{k}, n_{\mathbf{q}} \rangle = i q \Xi_d \left(\frac{\hbar}{2 \rho \omega_{\mathbf{q}} \Omega} \right)^{1/2} \sqrt{n_{\mathbf{q}} + 1} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (3.37b)$$

elde edilir. Buradaki $\sqrt{n_{\mathbf{q}}}$ ve $\sqrt{n_{\mathbf{q}} + 1}$ fonon matris elemanlarından ortaya çıkmaktadır. Sağ taraftaki $n_{\mathbf{q}}$ Bose-Einstein dağılım denklemi ile verilen akustik fononların sayısıdır. Her bir denklemde hesaplanan δ -fonksiyonu elektron-fonon etkileşmesi esnasındaki kristal momentumunun korunumuna karşılık gelir.

(3.37a) ve (3.37b) ifadelerinin Fermi'nin Altın Kuralında yerine konması ve yayma

ve soğurma işlemlerinin her ikisinin de birlikte göz önüne alınmasıyla, akustik fononlar için aşağıdaki geçiş oranı bulunur:

$$S(k, k') = \frac{\pi \Xi_d^2 q^2}{\rho \omega_q \Omega} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(k' - k \mp q) \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar \omega_q) \quad (3.38)$$

Bu ifadedeki δ -fonksiyonları aşağıda verildiği gibi enerji ve momentumun korunumuna karşılık gelir.

$$E_{k'} = E_k \pm \hbar \omega_q \quad (3.39)$$

ve

$$k' = k \pm q \quad (3.40)$$

(3.39) eşitliğindeki $\hbar \omega_q$ fonon enerjisini, q fonon dalga vektörünü ve $\pm$ işareti ise fononun yayılma ya da soğurulma durumunu göstermektedir. Parabolik ve küresel enerji bantları için enerji korunum denklemi,

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar \omega_q \quad (3.41)$$

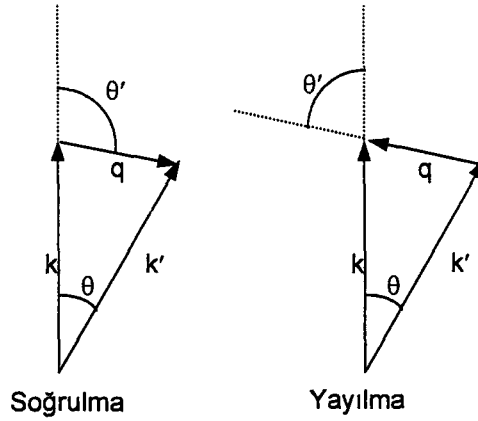
ile verilir. (3.40) ve (3.41) ifadelerinin beraber kullanılması ile yukarıdaki iki δ -fonksiyonu tek eşitlikte gösterilebilir:

$$\delta(k' - k \mp q) \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar \omega_q) = \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_q\right) \quad (3.42)$$

θ' , Şekil 3.7'de gösterilen k ve q arasındaki kutupsal açıdır. (3.42) eşitliğinin sağ tarafı θ' ve q arasındaki ilişkiyi vermektedir:

$$\cos \theta' = \frac{1}{2} \left(\mp \frac{q}{k} + \frac{\hbar \omega_q}{E_k} \frac{k}{q} \right) \quad (3.43)$$

Bu peş peşe gelen iki momentum durumu arasındaki açıyı fononların açısal frekansı ve başlangıçtaki momentum cinsinden tanımlar.



Şekil 3.7. k ve q arasındaki kutupsal θ açısı ile k ve k' arasındaki θ' açılarının tanımlanması (Tomizawa, 1993)

Yukarıdaki hesaplamalar oda sıcaklığı için basitleştirilebilir. Çünkü, akustik fononun enerjisi oda sıcaklığında $k_B T$ 'den oldukça küçüktür. Böylece akustik fonon saçılması enerji değişimi olmayan yani elastik bir saçılma olarak düşünülebilir. Dolayısıyla (3.39) denklemindeki fonon enerjisi sıfır olarak alınabilir. O halde sıcaklığın mutlak sıfıra yakın olmaması koşuluyla n_q yaklaşık olarak $n_q \approx k_B T / \hbar \omega_q$ yazılabilir. Ayrıca n_q birden çok daha büyük olduğundan $n_q \cong n_q + 1$ olur. Bu yaklaşımlar altında (3.38) ifadesi yeniden,

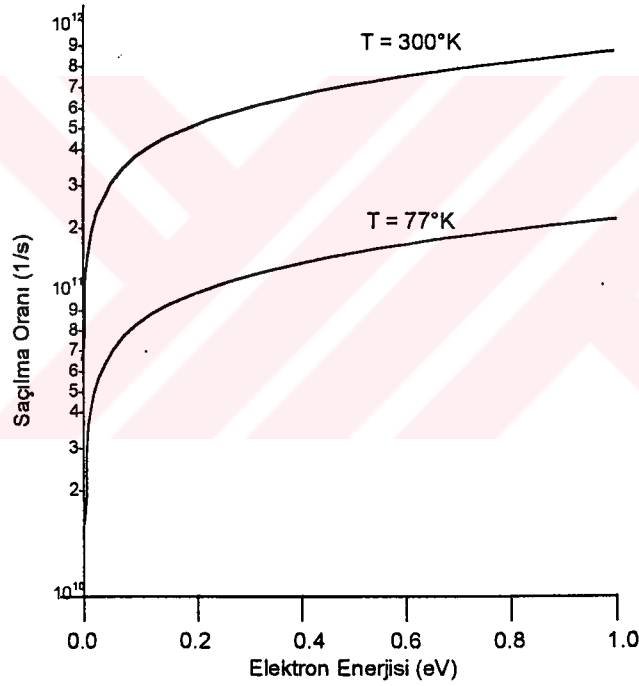
$$S(k, k') = \frac{\pi \Xi_d^2 k_B T_L}{\hbar c_L \Omega} \frac{k}{q E_k} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta'\right) \quad (3.44)$$

olarak yazılabilir. Burada, δ -fonksiyonu fonon enerjisi sıfır alınarak elde edilmiştir. (3.44) ifadesi fononun hem soğurulma hem de yayılma işlemlerinin her ikisini de içerir. Bu ifadenin k' üzerinden integre edilmesi ile saçılma oranı hesaplanabilir. Fakat integrali k' yerine q üzerinden almak şu andaki problem için daha kolaydır. Böylece saçılma oranı,

$$\begin{aligned}
W(k) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(k, k') dk' \\
&= \frac{\pi \Xi_d^2 k_B T_L}{8\pi^2 \hbar c_L} \frac{k}{E_k} \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta'\right) dq \\
&= \frac{2\pi \Xi_d^2 k_B T_L}{\hbar c_L} N(E_k)
\end{aligned} \tag{3.45}$$

ile verilir. Burada $N(E_k)$ ise serbest elektronlar için durum yoğunluğudur.

$$N(E_k) = \frac{(2m^*)^{3/2} \sqrt{E_k}}{4\pi^2 \hbar^3} \text{ ile verilir (Tomizawa, 1993).}$$



Şekil 3.8. GaAs'in Γ vadisindeki elektronlar için 77 ve 300 °K'deki akustik fonon saçılma oranı (Tomizawa, 1993)

3.3.2. Optik Fonon Saçılması

3.3.2.1. Kutupsal Olmayan Optik Fonon Saçılması

Kutupsal olmayan optik fononlara bağlı olan taşıyıcı saçılması komşu atomlar zıt yönde salınsa bile akustik kusur potansiyeli saçılmasına oldukça benzer bir şekilde incelenebilir. Bu problemi çözmek için optik yer değiştirme parametrelerini tanımlamamız gerekir. Etkileşme potansiyeli aşağıdaki şekilde verilebilir:

$$H'(r, t) = D_o \cdot u(r, t) \quad (3.46)$$

Burada D_o optik kusur potansiyeli sabiti, $u(r, t)$ ise optik yer değiştirmedir ve

$$u(r, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} e_q (a_q + a_{-q}^+) e^{iq \cdot r} \quad (3.47)$$

şeklinde verilebilir. e_q polarizasyon birim vektörü ve ω_q açısal frekanstır. Simetri sınırlamaları nedeniyle bazı durumlarda D_o sıfır olabilir.

(3.47) ifadesinin (3.46)'da yerine konmasıyla etkileşme potansiyeli

$$H' = \sum_q D_o \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^+) e^{iq \cdot r} \quad (3.48)$$

haline gelir. Etkileşme potansiyeli (3.48) ifadesinden hesaplanan optik kusur potansiyel saçılması için kare matris elemanının (3.7) ifadesinde yerine yazılmasıyla bulunabilir. Bu işlemlerden sonra düzenlemeler yapılarak

$$|\langle k' | H' | k \rangle|^2 = \frac{D_o^2 \hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(k' - k \mp q) \quad (3.49)$$

şeklinde elde edilir. Şekil 3.2'de gösterildiği gibi, optik fonon enerjisi q 'nın yaklaşık olarak sabit bir fonksiyonu gibidir ve daha sonraki denklemlerde ω_q ve n_q nun sabit olduğu varsayılarak ω_o ve n_o ile yer değiştirecektir.

(3.49) ifadesinin (3.20) Altın Kuralında yerine yazılması ve enerji ve momentum korunumunun da dikkate alınarak gereken hesaplamaların yapılmasıyla optik fononlar

için geçiş oranı elde edilir.

$$S(k, k') = \frac{\pi D_o^2}{\rho \Omega \omega_o} \left(n_o + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_o \right) \quad (3.50)$$

δ -fonksiyonu enerji ve momentum korunumu ile eşzamanlı olarak verilir. $\cos \theta'$, -1 ile +1 aralığında tanımlı olduğundan (3.50) ifadesindeki δ -fonksiyonu saçılma ile ilgili minimum ve maksimum fonon dalga vektörleri

$$q_{\min} = k \left| 1 - \left(1 \pm \frac{\hbar \omega_o}{E_k} \right)^{1/2} \right| \quad (3.51a)$$

$$q_{\max} = k \left[1 + \left(1 \pm \frac{\hbar \omega_o}{E_k} \right)^{1/2} \right] \quad (3.51b)$$

olarak yazılabilir. Saçılma oranı (3.50) denkleminin mümkün sonuç durumları için integre edilmesiyle,

$$\begin{aligned} W(k) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(k, k') dk' \\ &= \frac{D_o^2}{8\pi^2 \rho \omega_o} \left(n_o + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \int \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_o \right) dq \end{aligned} \quad (3.52)$$

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

$$W(k) = \frac{\pi D_o^2}{\rho \omega_o} \left(n_o + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) N(E_k \pm \hbar \omega_o) \quad (3.53)$$

şeklinde elde edilir. Burada $N(E_k \pm \hbar \omega_o)$ ile verilen 3-boyutlu serbest bir Fermi elektron gazı için durum yoğunluğudur.

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

3.3.2.1.1. Vadiler Arasındaki Fonon Saçılması

İki vadi arasındaki elektron geçişleri fonon saçılması ile meydana gelir. Bu saçılma optik ya da akustik saçılmalardan kaynaklanabilir. Polar ya da piezoelektrik etkileşme vadi içi saçılma için genellikle ihmal edilir. Büyük momentum transferleri göz önüne alındığında vadi içi saçılmaların meydana gelme olasılığı çok küçüktür.

Geçişler, fononların geçtiği Brillouin Bölgesi ve onun simetriği olan vadilerin pozisyonuna göre yasaklanmış ya da izin verilen geçişler olarak ikiye ayrılır. Elektronun enerjisi yeteri kadar yüksek olduğu zaman, her birine karşılık gelen mutlak minimumdan çok daha yüksek bir enerji ile vadi içine saçılabilirler. Bu çeşit bir saçılmanın incelenmesi iki eşit minimum arasındaki vadiler arası saçılmaya hemen hemen özdeştir. Brillouin Bölgesinde alınan Δk elbette, başlangıç ve bitiş vadilerinin minimumlarının enerji farklarına bağlı olan elektronik kinetik enerji değişimi ile birlikte düşünülmelidir. Bileşik yarıiletkenlerin çoğundaki ve Germanyumdaki Gunn Etkisinin temelinde bulunan negatif mobilite farkından, eşit olmayan vadiler arasındaki saçılma sorumludur (Jacoboni ve Lugli, 1989).

Vadiler arası saçılmada etkileşme potansiyelinin (3.46) denklemine benzer şekilde

$$H' = D_{ij} \cdot u(r, t) \quad (3.54)$$

olarak verilebileceğini varsayıyoruz. Burada D_{ij} saçılmanın başladığı i vadisinden saçılmanın bittiği j vadisine kadar olan vadiler arasındaki deformasyon potansiyelidir. (3.50) denklemine benzer olarak,

$$S(k, k') = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho \Omega \omega_{ij}} \left[n(\omega_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar \omega_{ij} + \Delta E_{ji}) \quad (3.55)$$

yazılabilir. Z_j saçılmanın mümkün olduğu bitiş vadilerinin sayısı ve ΔE_{ji} i vadisinin tabanından j vadisinin tabanına ölçülen enerjidir. Vadi içi saçılmalarda yapılan benzer hesaplamaların tekrar edilmesiyle saçılma oranı,

$$W(k) = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho \omega_{ij}} \left[n(\omega_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] N(E_k \pm \hbar \omega_{ij} - \Delta E_{ji}) \quad (3.56)$$

şeklinde bulunur (Tomizawa, 1993).

3.3.2.2 Kutupsal Optik Fonon Saçılması

Boyuna örgü salınımları GaAs ve InP gibi iyonik yarıiletkenlerde polarizasyon dalgalarına neden olur. Bu polarizasyon dalgaları elektronlar ile kuvvetli bir etkileşmeye girerek onların kutupsal saçılmalarına neden olur. Kutupsal saçılma akustik ve optik fononların her birinden ya da her ikisinden de oluşabilir. Kutupsal akustik fonon saçılması piezoelektrik saçılma olarak da adlandırılır. Kutupsal optik fonon saçılması oda sıcaklığı civarında alaşım yarıiletkenlerde oldukça kuvvetli ve baskın olan saçılma mekanizmasıdır.

Kutupsal etkileşmenin gücü etkin yük e^* ile ilişkili olan dipol momentle orantılı olmasından kaynaklanmaktadır. Kristallerde etkin yük için statik ve optik dielektrik sabitini de kapsayan formülü elde etmeyi ilk defa Fröhlich başarmıştır (Jacoboni ve Lugli, 1989). Boyuna optik fononlar için görelî yerdeğiştirme u dipol momentleri direkt olarak etkiler. u burada pozitif ve negatif iyonların birbirlerine göre yer değiştirmesi, yani $u = u_+ - u_-$ olarak tanımlanır. Görelî yer değiştirmesi,

$$u(r,t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_o} \right)^{1/2} e_q (a_q + a_{-q}^+) e^{iq \cdot r} \quad (3.55)$$

şeklinde verilir. N iyon çiftlerinin sayısı ve M pozitif ve negatif iyonların indirgenmiş kütesidir. Böylece, $1/M = 1/M_+ + 1/M_-$ olur.

Burada Fröhlich tarafından tanımlanan etkin yük aşağıdaki şekilde verilebilir.

$$e^* = \left(\frac{\Omega M}{N} \right)^{1/2} \omega_o \epsilon_\infty \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right)^{1/2} \quad (3.56)$$

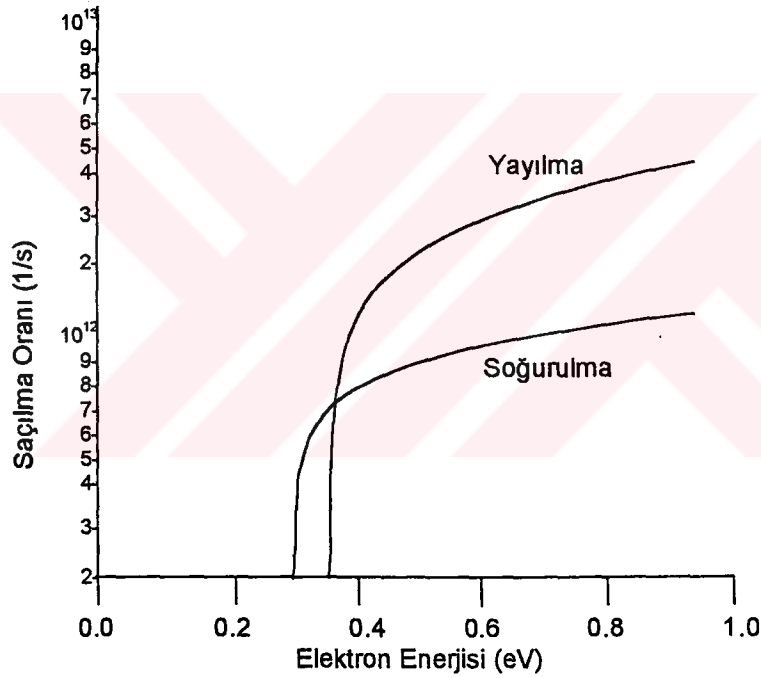
Kutupsal optik fonon saçılması için sonuç durumundaki pertürbasyon potansiyeli,

$$H' = -eU(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} i \frac{e}{q} \left(\frac{\hbar \omega_o}{2 \epsilon_p \Omega} \right)^{1/2} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^+) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (3.57)$$

olarak verilir. Burada $1/\epsilon_p = 1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s$ alınmıştır.

Daha önceki hesaplamalar kullanılarak kutupsal optik fononlar için saçılma oranı aşağıdaki biçimde yazılabilir.

$$W(\mathbf{k}) = \frac{e^2 \omega_o}{8\pi \epsilon_p} \frac{k}{E_k} \left[n(\omega_o) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \ln \left(\frac{q_{\max}}{q_{\min}} \right) \quad (3.58)$$



Şekil 3.9. Bulk GaAs içindeki elektronlar için kutupsal olmayan optik fononların saçılma oranları. Enerji Γ -vadisinin en alt kısmında ölçülmüştür (Tomizawa, 1993)

Burada $q_{\max}$ ve $q_{\min}$,

$$q_{\min} = k \left| 1 - \left(1 \pm \frac{\hbar \omega_o}{E_k} \right)^{1/2} \right| \quad (3.59a)$$

$$q_{\max} = k \left[1 + \left(1 \pm \frac{\hbar \omega_o}{E_k} \right)^{1/2} \right] \quad (3.59b)$$

olarak daha öncede verilmişti.

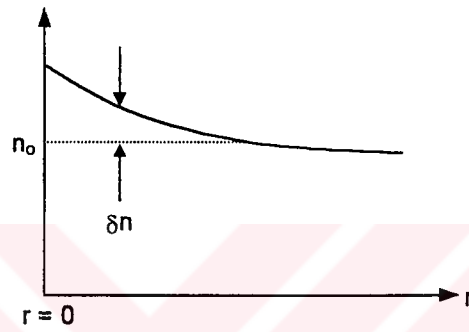
3.3.3. Safsızlık Saçılması

Yarıiletken aygıtlar içindeki taşıyıcılar, genellikle sayılarının sabit tutulması amacıyla rezervuar olarak tanımlanan yüksek derecede iyonize olmuş safsızlıklar içeren bölgelerden yavaş bir şekilde azaltılır veya artırılırlar. Çok büyük sayıda safsızlıklar içeren bu bölgelerde, aslında taşıyıcılar rasgele dağılmış iyonize safsızlıklardan dolayı saçılmaya uğrarlar. Bu olay iki gözlem ile açıklanabilir. Birincisi, bu gibi bölgelerde taşıyıcılar düşük elektrik alanlarında yüksek enerji düzeylerine yükseltilemezler. İkincisi ise, safsızlık saçılması düşük enerjili taşıyıcılar için çok daha etkindir.

Vakum içindeki bir nokta yükün yarattığı elektrostatik potansiyel Coulomb yasasına uyar, yani şiddeti uzaklığın tersi ile orantılı şekilde azalır. Ancak kristal içindeki bir safsızlık yükünün yarattığı potansiyel, kristal içerisindeki serbest taşıyıcı sayısına bağlı olmak üzere az ya da çok perdelenir. Perdelenme potansiyelinden dolayı olan saçılma, başlangıçta iki farklı yöntem ile hesaplanmıştır. Bunlar Conwell-Weisskopf ve Brooks-Herring yaklaşımlarıdır (Ridley, 1982). Bu yaklaşımların her ikisi de Bölüm 3.2'de anlatılan Born yaklaşımını kullanmalarına rağmen, perdelenme potansiyelinin model içindeki kullanımı ile farklılaşırlar. Bu bölümde temel olarak Brooks-Herring yaklaşımı anlatılacaktır. Ancak Conwell-Weisskopf yaklaşımına kısa bir şekilde değinerek bu iki yaklaşım arasındaki ilişkiyi vermeye çalışacağız.

İlk önce yarı-ısısal denge şartı altında bulunan n-tipi bir yarıiletkenindeki perdelenme potansiyelini hesaplayacağız. İyonize safsızlıklar ve denge halindeki taşıyıcıların her ikisinden dolayı oluşan elektrostatik potansiyeli hesaplamak için bir $Ze\delta(r)$ pozitif yükünün orijin olarak tabir edeceğimiz bir noktaya konulmuş olduğunu kabul edelim. Burada e elektronik yükün büyüklüğünü ve Ze ise safsızlık atomundaki

yükü göstermektedir. δ -fonksiyonu ve $\delta(r)$ orijindeki nokta yükü işaret etmektedir. Toplam yük miktarının kristal içinde nötr olması kuralı bu noktanın etrafında az miktarda değişmiştir. Bu pertürbasyonla değişen elektrik yük yoğunluğu yani $\delta n = n - N_D^+$ kadar bir artışa neden olur. Burada N_D^+ iyonize olmuş donör sayısıdır. Bu durum Şekil 3.10'da şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 3.10. Pozitif iyon komşuluğundaki elektrik yük dengesinin bozulması. Burada n_0 denge elektron yoğunluğu ve r ise iyonla olan uzaklıktır.

Etkin elektrostatik potansiyel Poisson Denkleminin küresel koordinatlardaki çözümünden elde edilir.

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) = -\frac{e}{\epsilon_s} [Z\delta(r) - \delta n] \quad (3.60)$$

Burada r orijinden olan uzaklık ve ϵ_s ise yarıiletkenin dielektrik sabitidir. Eğer n_0 bir T sıcaklığında elektron yoğunluğuna eşitse ve eğer n_0 klasik dağılım fonksiyonunun kullanılmasına izin verecek kadar düşükse,

$$\delta n = n_0 e^{eV/k_B T} - n_0 \approx \frac{en_0}{k_B T} V \quad (3.61)$$

yazılabilir. Denklem (3.60)'ın (3.61)'de kullanılmasıyla,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) - q_D^2 = -\frac{Ze}{\epsilon_s} \delta(r) \quad (3.62)$$

elde ederiz. Burada,

$$q_D = \sqrt{\frac{e^2 n_o}{\epsilon_s k_B T}} \quad (3.63)$$

ve $1/q_D$ Debye uzunluğu olarak bilinir. Denklem (3.62)'nin özel çözümü

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_s r} e^{-q_D r} \quad (3.64)$$

olarak bulunur. Burada potansiyel uzaklık ile üstel olarak azalmaktadır. Bu da Coulomb perdeleme potansiyeli olarak tanımlanır. Böylece ele alınan pertürbasyon potansiyeli aşağıdaki gibidir.

$$H' = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_s r} e^{-q_D r} \quad (3.65)$$

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

$$\langle k' | H' | k \rangle = \frac{1}{\Omega} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_s} \int_{\Omega} e^{-ik' \cdot r} \frac{e^{-q_D r}}{r} e^{ik \cdot r} dr \quad (3.66)$$

elde edilir. (3.66) ifadesindeki integral kristal hacmi Ω üzerindendir. Böylece

$$\langle k' | H' | k \rangle = \frac{Ze^2}{\Omega \epsilon_s} \frac{1}{|q|^2 + q_D^2} \quad (3.67)$$

buluruz. Burada

$$q = k' - k \quad (3.68)$$

saçılma işlemi sırasındaki momentum transferinin büyüklüğüdür. (3.67) ifadesinin (3.20)'de yerine yazılmasıyla tek bir iyonize safsızlıktan oluşan saçılmaya bağlı olan geçiş oranını elde ederiz.

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{Ze^2}{\Omega \epsilon_s} \right)^2 \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{(q^2 + q_D^2)^2} \quad (3.69)$$

Coulomb Potansiyel perdelenmesi zamandan bağımsız olduğundan, gerçekten de δ -fonksiyonu saçılma sırasında enerjinin korunduğunu gösterir. Böylece $k' = k$ ve

$$q^2 = (k' - k)^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) \quad (3.70)$$

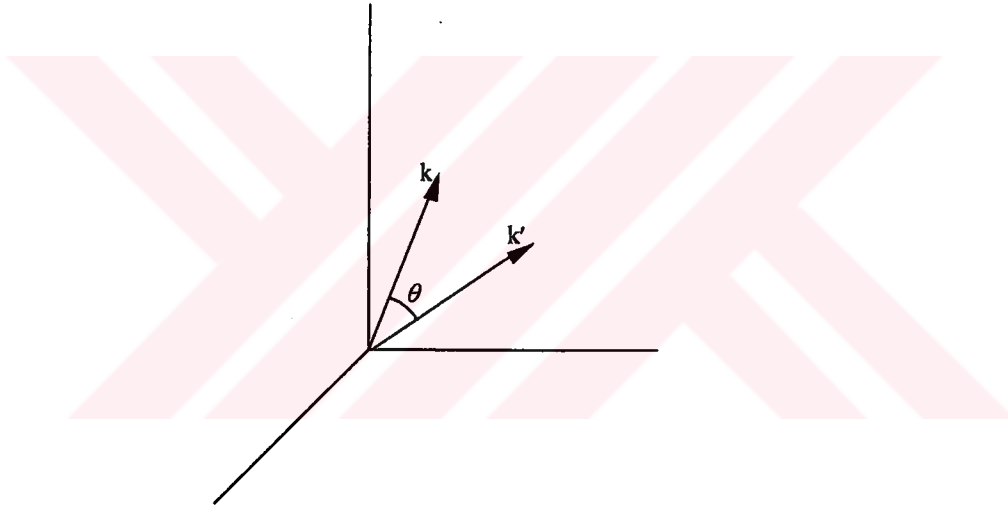
olacaktır. Burada θ Şekil 3.11'de gösterilen k' ve k arasındaki açıdır. Sonuç olarak, (3.69) denkleminin Ω hacmi içerisindeki safsızlıkların sayısı $N_I\Omega$ ile toplanması ve (3.70) eşitliğinin kullanılmasıyla

$$S(k, k') = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4}{\hbar \Omega \epsilon_s^2} \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2} \quad (3.71)$$

elde ederiz. Saçılma oranı (3.71) ifadesinin (3.27) da yerine konması ile hesaplanabilir. Böylece,

$$W(k) = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4}{\hbar \Omega \epsilon_s^2} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dk' \frac{k'^2 \sin\theta \delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2} \quad (3.72)$$

saçılma oranı elde edilir.



Şekil 3.11. k' ve k arasındaki kutupsal açı θ 'nın gösterimi
(Tomizawa, 1993)

Daha önceden de tanımlandığı gibi, yukarıdaki ifadedeki integral açıkça görüldüğü üzere ϕ 'ye bağlıdır ve bir 2π faktörü ile çarpılmıştır. Ancak bir önceki ifade olan geçiş oranı ϕ 'den bağımsızdır. Böylece, $4\pi k^2 dk$ ile verilen E_k 'den $E_k + dE_k$ 'ye olan enerji aralığındaki k -uzayının hacmi $\Omega 4\pi k'^2 dk'$, $N(E_{k'}) dE_{k'}$ ile yer değiştirebilir. Burada $N(E_{k'})$ birim enerji başına sonuç durumunun yoğunluğudur. Buradan k' integrali E_k ile yer değiştirebilir ve saçılma oranı,

$$W(k) = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon_s^2} \int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \quad (3.73)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifade kolayca integre edilerek,

$$W(k) = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon_s^2} \frac{1}{q_D^2(4k^2 + q_D^2)} \quad (3.74)$$

yazılabilir. Burada, daha öncede verilmiş olan durum yoğunluğu

$$N(E_k) = \frac{(2m^*)^{3/2} \sqrt{E_k}}{4\pi^2 \hbar^3} \quad (3.75)$$

şeklindedir.

Şekil 3.12, son ifade ile $n_o = N_I$ olduğu varsayılarak $N_I = 1 \times 10^{16} [\text{cm}^{-3}]$ ve $N_I = 1 \times 10^{18} [\text{cm}^{-3}]$ için elde edilen saçılma oranlarını göstermektedir. Özellikle düşük enerji bölgelerindeki yüksek N_I değeri için $W(k)$ neden daha düşüktür? Bu sorunun cevabı en son verdiğimiz saçılma oranı ifadesinden anlaşılabilir. Burada pay $n_o \approx N_I$ koşuluna bağlı olan N_I ile orantılı iken, payda da küçük k değerleri için yaklaşık olarak n_o^2 ile orantılıdır. Ancak bu anlatım, perdelenmenin belirgin bir şekilde arttığı zaman, saçılma açısının da büyüme eğiliminde olacağından dolayı, daha büyük N_I değerleri için daha fazla mobilite anlamına gelmez.

Monte Carlo hesaplamalarında, saçılma oranının yanı sıra saçılmadan sonraki elektronların sonuç durumlarının da bir formül ile bilinmesi gerekmektedir. Bu ifade daha önce verilmiş olan kutupsal eksen k' 'ye göre k' için kutupsal koordinatlar şeklinde azimuthal açı ϕ , 0 ile 2π arasındaki düzgün bir rasgele sayı ile tanımlanıyordu. Böylece saçılma oranı ϕ 'den bağımsızdı.

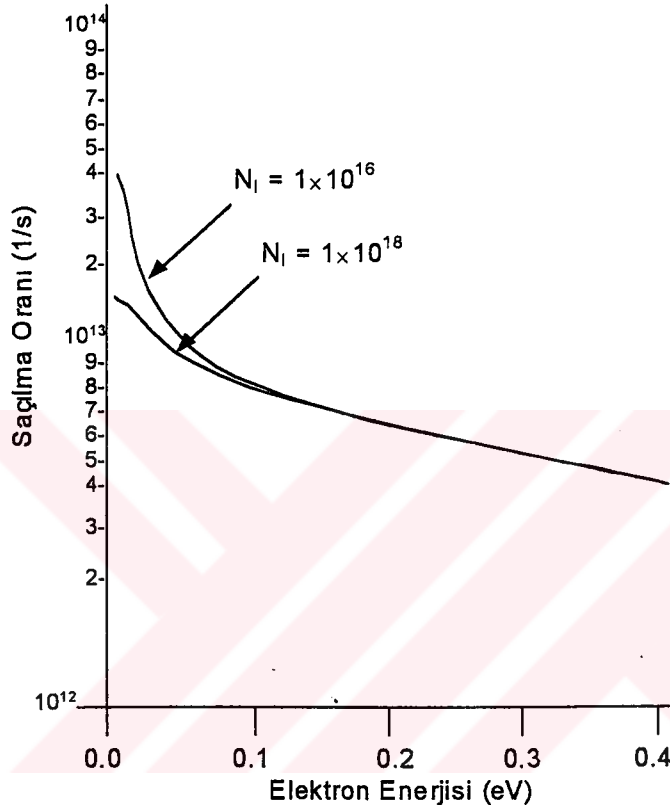
θ ve $\theta + d\theta$ arasındaki saçılma oranı $P(\theta)d\theta$,

$$P(\theta)d\theta = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon_s^2} \frac{\sin \theta d\theta}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \quad (3.76)$$

olarak bulunur.

Şekil 3.13, elektrik alanı 50 meV iken değişik N_I ($n_o \approx N_I$) değerleri için $P(\theta)$

çizimini göstermektedir. Şekilden de görüleceği gibi N_I değerleri düştükçe saçılma açısı artmaktadır.



Şekil 3.12. $n_0 = N_I$ iken iyonize safsızlıklar için saçılma oranı (Tomizawa, 1993)

0 ile θ arasındaki saçılma olasılığı bir önceki ifadenin 0 ile θ arasında integre edilmesi ve (3.74) ifadesine bölünmesi ile,

$$\begin{aligned} \frac{W(\theta)}{W(k)} &= \frac{1}{W(k)} \int_0^\theta P(\beta) d\beta \\ &= \int_{-1}^{\cos \theta} \frac{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)}{2[2(1-\eta)k^2 + q_D^2]^2} d\eta \end{aligned} \quad (3.77)$$

bulunur ve kolayca integre edilerek,

$$\frac{W(\theta)}{W(k)} = \frac{(1 - \cos \theta) \left[1 + \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2 \right]}{2 + (1 - \cos \theta) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (3.78)$$

elde edilir.

$W(\theta)/W(k)$ oranının sıfırdan büyük olma durumunda θ açısı ile nasıl arttığı Şekil 3.14'de görülmektedir. Saçılma açısı θ bir önceki denklem ve 0 ile 1 arasında uniform dağılıma sahip olan bir rasgele sayı kullanılarak tanımlanabilir.

$$\cos \theta = \frac{2r}{1 + (1 - r) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (3.79)$$

Bu ifade iyonize safsızlık saçılmalarının kutupsal açısı ile bağ kurmaktadır.

Kristal çok sıkı bir yapıda ise, çok az sayıdaki taşıyıcı, iyonize safsızlıklar tarafından $q_D \rightarrow 0$ durumundaki gibi perdelenebilir. Burada perdeleme çok küçüktür ve saçılma oranı daha önce verilen ifadeden farklıdır. Bu farklılığı ortadan kaldırmak için Conwell ve Weisskopf, safsızlıklar ile temel yarı uzaklık arasında bir kesmeye sahip olan basit bir Coulomb potansiyeli kullanmışlardır. Burada,

$$b_{\max} = \frac{N_i^{-1/3}}{2} \quad (3.80)$$

dir ve etki parametresi olarak tanımlanır. Etki parametresi, Rutherford teorisi ile verilebilen minimum kusur (defect) açısı $\theta_{\min}$ ile ilişkilidir.

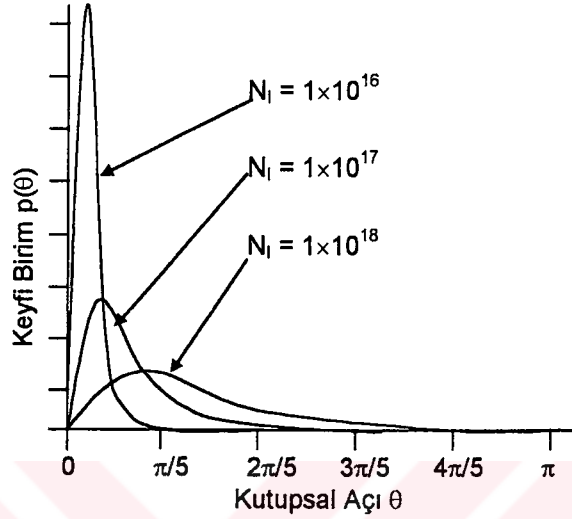
$$\cos \theta_{\min} = 1 - \frac{2}{1 - \left(\frac{8\pi\epsilon_s b_{\max} E_k}{e^2} \right)^2} \quad (3.81)$$

(2.48) de verilen saçılma oranı ifadesindeki $\cos \theta$ 'lar $\cos \theta_{\min}$ ile değiştirilirse,

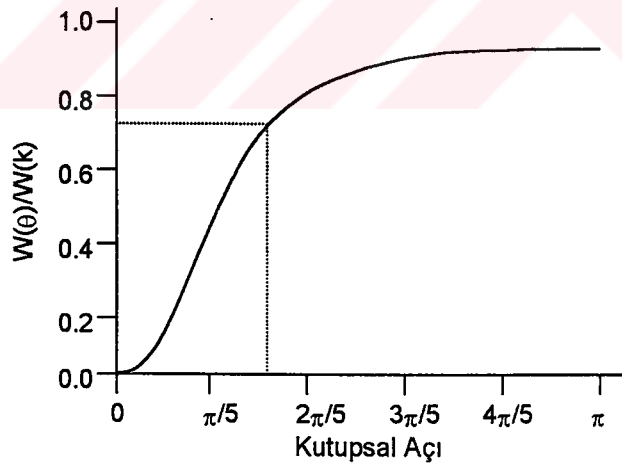
$$W(k) = \frac{\pi N_i Z^2 e^4 (E_k)}{\hbar \epsilon_s^2} \frac{1 + \cos \theta_{\min}}{(4k^2 + q_D^2)[q_D^2 + (1 - \cos \theta_{\min})2k^2]} \quad (3.82)$$

elde edilir. Son elde edilen ifadenin $q_D \rightarrow 0$ için limiti alınır, Conwell ve Weisskopf

tarafından verilen eşitliğe denk bir formül elde edilmiş olur (Jacoboni ve Lugli, 1989).



Şekil 3.13. Elektron enerjisi 50 me/V iken, $n_o \approx N_I$ varsayılarak $p(\theta)$ 'nin N_I 'ya karşılık çizimi (Tomizawa, 1993)



Şekil 3.14. Bir rasgele sayı r ve $W(\theta)/W(k)$ 'nin kullanılması ile saçılma açısı θ 'nın tanımlanması (Tomizawa, 1993)

3.4. Tek Parçacık için Monte Carlo Metodu

Bir yarıiletken içindeki taşıyıcı geçişinin incelenmesi çok sayıdaki taşıyıcının birbiriyle etkileşmesi ile, bir çok cisim problemi. Bu nedenle bu problemi çözmek çok zordur. Ancak çok cisim sisteminin birbirinden bağımsız parçacık yığınlarından (ensemble) oluştuğu varsayılırsa, bu durumda her bir yığını temsil eden bir tek parçacığın bir çok saçılmaya uğrayarak zaman içinde nasıl değiştiği simüle edilebilir. Bu fikir tek parçacık için Monte Carlo tekniğinin temelidir.

Pratikte kullanılan bütün rasgele-sayı üreticileri, sadece tekrarlanan sınırlı sırayı üretirler. Monte Carlo hesaplamaları için rasgele sayı üretici, üretilen sayıların tipine göre sınıflandırılabilir. Bunlar gerçek rasgele sayılar ve yaklaşık-rasgele sayılardır. Gerçek rasgele sayılar, ancak radyoaktif çürüme gibi önceden kestirilemeyen ve tamamen rasgele olan fiziksel bir işlem tarafından üretilebilirler. Yaklaşık-rasgele sayılar ise bilgisayar tarafından basit nümerik işlemler sonucunda oluşturulurlar. Rasgele sayı üreticinin uzun sayı dizileri oluşturabilmesi, taşınabilirlik ve verim oranı, periyot ve iyi dağılım gibi özellikleri olmalıdır (L'Ecuyer, 1990).

Rasgele sayıları üretmek için yazı-tura, zar, rulet masaları, yaklaşık-rasgele sayılar ve diğer fiziksel cihazlar (mekanik ve elektronik) gibi bazı yaygın teknikler vardır. Zar, yazı-tura veya fiziksel cihazların dezavantajı, sayıların sonuçta oluşan sırasının çoğaltılabilir olmamasıdır (<http://random.mat.sbg.ac.at>).

Rasgele sayı üreticilerinin üç sınıfı kullanılmaktadır. Bu üreticiler, lineer çoğaltıcı, Fibonacci üretici ve Tausworthe üretici olarak bilinirler (<http://random.mat.sbg.ac.at>). Basit bir üretici, bilgisayar tarafından temsil edilebilen durumların sayısı ile sınırlandırılan maksimum periyot ile tanımlanır.

Monte Carlo yönteminde kullanılacak rasgele sayı üretici için aşağıdaki kriterler göz önünde bulundurulmalıdır. Bu kriterler,

- a) Rasgele sayı üreticinin periyodu, simülasyon için yeterince uzun olmalıdır.
- b) Beklenmeyen sıkıntılarla karşılaşmamak için rasgele sayı üretici iyi

yapılandırılmış olmalıdır.

- c) Rasgele sayı üreticinin dağılımının uniform olup olmadığı incelenilmelidir.
- d) Normallik, normal eğride istatistiksel karar ve standart sapma kaydedilmelidir.
- e) Seçilen aralıkta üretilen sayı miktarının (n) 10.000'den fazla olması tercih edilmelidir.

şeklinde verilebilir.

Tek parçacık için Monte Carlo metodu homojen bulk yarıiletkenlerdeki taşıyıcı geçişlerinin bazı özelliklerinin hesaplanması için kullanılacaktır. Bu yöntem dağılım fonksiyonunun şeklinin bilinmesini gerektirmeyen basit bir yoldur. Aynı zamanda öğrenmesi çok kolay olan ve gelişmeye açık bir metottur.

3.4.1. Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu

Tek parçacık için Monte Carlo metodunun temel prensibi momentum uzayındaki bir tek taşıyıcının hareketinin simüle edilerek taşınımının incelenmesidir. Bu saçılma olaylarının ve taşıyıcının serbest uçuş süresinin yaklaşık olarak seçilmesi ile yapılır. Böylece simülasyon bir dizi rasgele sayının üretilmesi ile yapılır. Simülasyon programı saçılma ve sürüklenme olaylarının simüle edildiği bir çift alt program üzerine inşa edilebilir. Eğer sürüklenme ve saçılma olayları için olan alt programlar drift ve scat olarak adlandırılırsa, simülasyon programı aşağıdaki gibi basit bir akış şeması ile gösterilebilir. Simülasyon işlemi sabit elektrik alan altında çarpışmalar ve diğer etkiler altında sürüklenme hareketinin tekrar tekrar hesaplanması ile yapılır. Akış diyagramında da görüldüğü gibi her iki alt program ve serbest uçuş zamanı her bir iterasyon için yeniden hesaplanır.

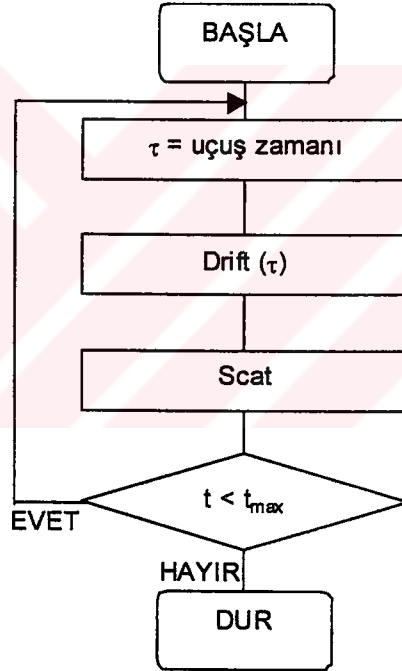
Serbest uçuş zamanı değişik saçılma oranlarının toplamı olan toplam saçılma oranına bağlıdır. Böylece saçılma oranı ve elbette toplam saçılma oranı da bütün saçılma mekanizmaları için elektron enerjisinin bir fonksiyonudur. Bir elektronun τ süresi kadar taşınıp, bu süre sonunda (birim zamandaki) bir saçılmaya uğrama olasılığı

$$P(\tau) = W_{\tau}(E_k) \exp \left[- \int_0^{\tau} W_{\tau}(E_k) dt \right] \quad (3.83)$$

ile verilir. Burada $W_{\tau}(E_k)$ toplam saçılma oranıdır ve

$$W_{\tau}(E_k) = \sum_{j=1}^N W_j(E_k) \quad (3.84)$$

ile verilir. Burada alt indis j saçılma mekanizmasına karşılık gelir ve N olası saçılma mekanizmalarının toplam sayısıdır. Uçuş zamanı olasılık denklemi ile tanımlanabilir. Bunun için, 0 ile 1 aralığında uniform bir rasgele sayı olan r_1 ile tanımlanan bir $P(\tau)/W_{\tau}(E_k)$ oranı için τ değerini hesaplamak zorundayızdır. Ancak olasılık integrali $W_j(E_k)$ 'lerin karmaşıklığı nedeniyle analitik olarak çözülemez.



Şekil 3.15. Tek parçacık için Monte Carlo Programının akış diyagramı (Tomizawa, 1993)

Olasılık integralinin çözülmesindeki zorluğu yenmek için basit bir alternatif teknik geliştirilmiştir (Jacoboni ve Lugli, 1989). Bu teknik “kendinden saçılma” olarak adlandırılan sanal bir saçılma oranına, $W_o(k)$, saçılma mekanizmalarına eklenmesi ile elde edilir. Bu metotta parçacık kendinden saçılmaya uğradığında, parçacığın k

vektöründe ve enerjisinde herhangi bir değişme olmaz. Böylece Γ 'yı, kendinden saçılma $W_0(E_k)$ 'de dahil olmak üzere, saçılma oranlarının toplamı olarak tanımlarsak,

$$W_0(E_k) = \Gamma - \sum_{j=1}^N W_j(E_k) \quad \text{ya da} \quad \Gamma = \sum_{j=0}^N W_j(E_k) \quad (3.85)$$

olacaktır. Γ nın sabit olduğu buradan açıkça görülür. Bu yazılım bize bazı avantajlar sağlayacaktır. Çünkü böylelikle olasılık denklemi,

$$P(\tau) = \Gamma e^{-\Gamma\tau} \quad (3.86)$$

şeklinde basit bir ifade olarak yazılabilir. Aynı şekilde uçuş zamanı bir rasgele sayı olan r_1 'e bağlı olarak aşağıdaki gibi gösterilebilir.

$$\tau = -\frac{\ln(r_1)}{\Gamma} \quad (3.87)$$

Bir sabit olan Γ , ilgilendiğimiz enerji aralığında $W_0(E_k)$ 'nin negatif değerlerinden sakınmak için, $W_i(E_k)$ nın en büyük değerinden daha büyük olarak seçilmelidir. Diğer yandan ise kendinden saçılma olaylarının sayısını en az düzeye çekmek ve böylece boşa harcanan bilgisayar zamanını en aza indirmek için Γ mümkün olduğunca küçük tutulmalıdır.

Elektron, serbest uçuştan sonra kendinden saçılmayı da içeren bir saçılma mekanizması tarafından tekrar saçılacaktır. Saçılmanın hesaplanmasında, öncelikle hangi elektronun hangi saçılma mekanizması tarafından saçılmaya uğratıldığının ve bu saçılmadan sonraki elektronun durumunun tanımlanması gerekmektedir.

Parçacığın başlangıç durumu için rasgele bir dalga vektörü seçilerek simülasyon başlatılır ve birkaç uçuş ve saçılma olayı gerçekleşene kadar simülasyonun devam etmesine izin verilir. Her bir uçuş zamanının toplamı olan toplam uçuş zamanı, başlangıç durumunun sonuç durumuna en az etkisi oluncaya kadar devam edecek büyüklükte olmalıdır. Böylece simülasyon sonucu elde edilen değerler başlangıç şartlarından bağımsız olacaktır.

3.4.2. Sürüklenme

Bir yarıiletken kristal içindeki elektronların sürüklenme hareketi, eğer elektronun potansiyel enerjisi konumunun bir fonksiyonu olarak yavaş bir şekilde değişiyor ve elektronlar etkin bir kütle ile serbest bir parçacıkmış gibi kabul edilebiliyorsa yarı-klasik bir şekilde incelenebilir. Elektronlar için olan hareket denklemi temel olarak bilinmektedir. Uçuş zamanı τ esnasındaki dalga vektörü değişimi Δk hareket denkleminin integre edilmesi ile bulunabilir. Bu ilişki

$$\Delta k = -\frac{1}{\hbar} \int_t^{t+\tau} \nabla H dt' \quad (3.88)$$

şeklinde yazılabilir. $H = E_k - eV(r)$ burada bir $-e$ yükü ile verilen elektronun toplam enerjisi (ya da Hamiltonian)'dir. E_k elektronun kinetik enerjisi ve $V(r)$ ise elektrostatik potansiyeldir. Eğer bir bulk yarıiletken boyunca düzgün bir elektrik alan F uygulanacak olursa çözüm aşağıdaki şekle dönüşecektir.

$$\Delta k = -\frac{e\bar{F}}{\hbar} \tau \quad (3.89)$$

Bu konu bölüm 3.4.4'de daha detaylı olarak anlatılacaktır.

3.4.3. Saçılma

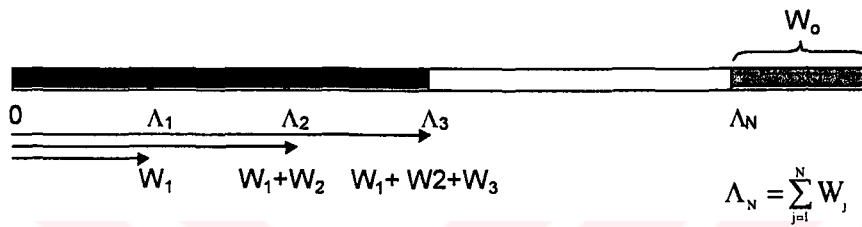
Burada bir alt program tarafından simüle edilen saçılmanın hesaplanmasında ilk önce elektron tarafından oluşturulan saçılma ve saçılmadan sonraki elektronun durumu bir arada ele alınmaktadır. Burada yapılan, saçılma mekanizmalarının Monte Carlo Yönteminde kullanılabilecek şekilde 0 ile 1 arasında Şekil 3. 16'da gösterildiği gibi sıralanmasıdır. Saçılma mekanizması (n) aşağıdaki şekilde tanımlanan $\Lambda_n(E_k)$ fonksiyonunun kullanılması ile anlaşılabilir.

$$\Lambda_n(E_k) = \frac{\sum_{j=1}^n W_j(E_k)}{\Gamma} \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (3.90)$$

Bu ifadede saçılma oranlarının toplamı Γ ile normalize edilir. Buradaki Γ daha önce verilen Γ ifadesi ile aynıdır ve N toplam saçılma mekanizması sayısıdır. E_k enerjili bir elektron için saçılma mekanizması 0 ile 1 arasından rasgele sayı üretici tarafından seçilen r_2 rasgele sayısı ile $\Lambda_n(E_k)$ 'nin karşılaştırılması ile yapılır. Eğer r_2

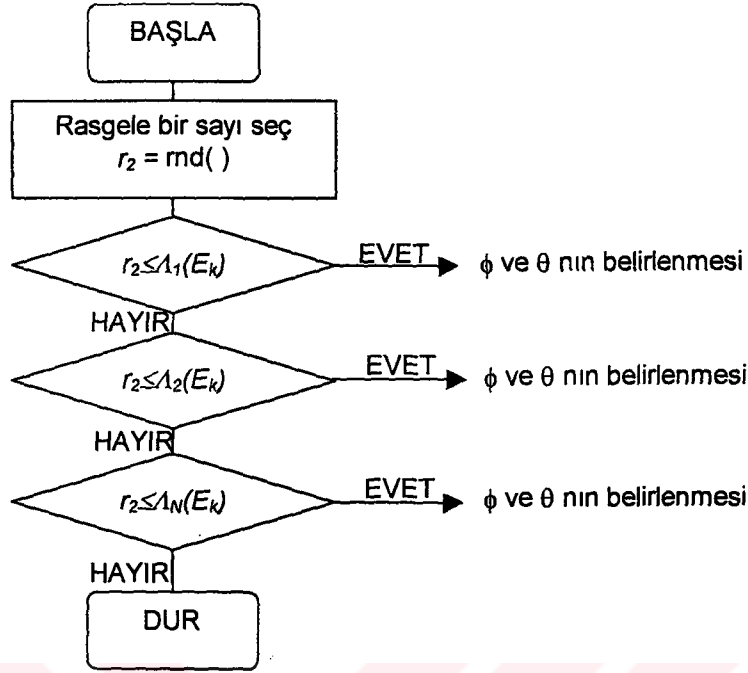
$$\Lambda_{n-1}(E_k) < r_2 \leq \Lambda_n(E_k) \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (3.91)$$

eşitsizliğini sağlıyorsa n . mekanizma elektronun durumunu değiştiren mekanizma olarak seçilir.



Şekil 3.16 Monte Carlo Yönteminde saçılma mekanizmalarının seçimi

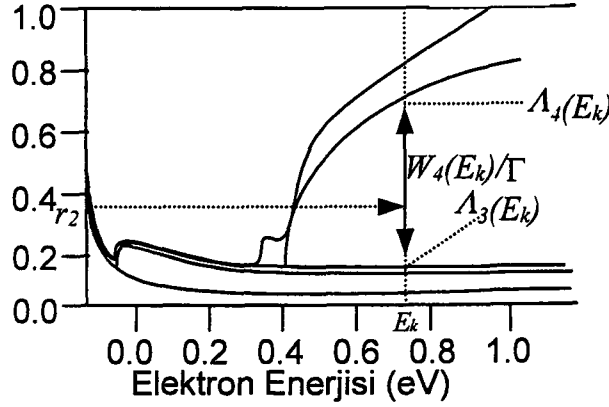
Bu şekilde yapılan bir seçim Pauli Dışarlama ilkesini ihmal etmektedir. Fakat durum yoğunlukları ve Fermi-Dirac dağılımı yardımı ile bu ilke göz önüne alınabilir. Çünkü sonuç durumundaki taşıyıcı doluluğu ihmal edilmiştir. Bu tür bir tahmin Monte Carlo simülasyonunda doğrudan kullanılmıştır. Aşağıdaki akış diyagramı saçılma mekanizması seçiminin nasıl yapıldığını göstermektedir. $W_j(E_k)$ (ya da $\Lambda_n(E_k)$)'nin hesaplanması simülasyon zamanının tamamlandığı bir E_k için verilmiştir. Farklı E_k değerleri için arzu edilen şekilde hesaplanmış $\Lambda_n(E_k)$ ve bir alt program içinde gerçeğe yakın bir biçimde verilmiştir.



Şekil 3.17. Saçılma mekanizması seçimi için akış diyagramı

Saçılma mekanizması, bant içi ve bantlar arası fonon saçılmaları ve iyonize safsızlık saçılmaları için ayrı ayrı verilmelidir. $\Lambda_n(E_k)$ her bir saçılma için ayrı bir alt program tarafından hesaplanmalı ve $swk(iv, n, ie)$ boyutu içine kaydedilmelidir. iv burada vadi indeksi, n n. Saçılma mekanizması ve ie ise parçacık enerjisi için orantılı olarak tanımlanmış olan bir tam sayıdır.

Saçılma mekanizmasını tanımlamak için saçılmadan sonraki dalga vektörü olan k' dalga vektörünü tanımlamak gerekmektedir. k' nün büyüklüğü enerji korunumundan bulunabilir. k' nün doğrultusunu tanımlamak için onun kartezyen koordinatlardaki bileşenleri olan (k_x^L, k_y^L, k_z^L) e göre simüle edilen cihaz için seçilen laboratuvar çerçevesinin bileşenleri olan (x^L, y^L, z^L) nin tanımlanması gerekmektedir.



Şekil 3.18. $\Lambda_n(E_k)$ 'nin kullanılması ile saçılma mekanizmasının seçilmesi.
 $W_4(E_k)r_2$ rasgele sayısı tarafından seçilmiştir (Tomizawa, 1993)

Eğer saçılma izotropik ise (saçılan elektronlar saçılmadan sonra bütün doğrultularda aynı başlangıç olasılığına sahipse) k'_x , k'_y ve k'_z bileşenleri, $p(\phi', \theta')d\phi'd\theta'$ olasılık yoğunluğundan bulunabilir. Burada olasılık yoğunluğu, k' yarıçaplı bir küre üzerindeki mevcut durumların sayısı ile orantılıdır. ϕ' azimuthal ve θ' ise k'_z e göre k' nün kutupsal açılarıdır. $p(\phi', \theta') \sin\theta'$ ne eşit olacaktır. Bu da herhangi bir olasılık yoğunluğuna eşittir. Böylece ϕ' ve θ' bir çift 0 ile 1 arasında değişen r_3 ve r_4 gibi uniform rasgele sayılar ile tanımlanabilir.

$$\phi' = 2\pi r_3$$

$$\cos\theta' = 1 - 2r_4 \quad (3.92)$$

Yukarıdaki eşitlikte verilen ϕ' ve θ' için gözlem çerçevesi bileşenleri (k'_x, k'_y, k'_z) için,

$$\begin{aligned} k'_x &= k' \sin\theta' \cos\phi' \\ k'_y &= k' \sin\theta' \sin\phi' \\ k'_z &= k' \cos\theta' \end{aligned} \quad (3.93)$$

eşitlikleri yazılabilir. Bu eşitlikler sadece izotropik saçılma durumu için geçerlidir.

İzotropik olmayan saçılma durumunda, kutupsal optik fonon saçılması ve safsızlık saçılmalarında olduğu gibi k' final durumu, k başlangıç dalga vektörü ile k' nün

kutupsal ve azimuthal açıları ϕ ve θ ile ifade edilir. İzotropik durumdaki gibi k' ve bileşenlerini seçilen gözlem çerçevesinde tanımlanabilir.

Geçiş oranı ϕ 'den bağımsız olduğundan azimuthal açı ϕ rasgele bir sayı ile tanımlanabilir.

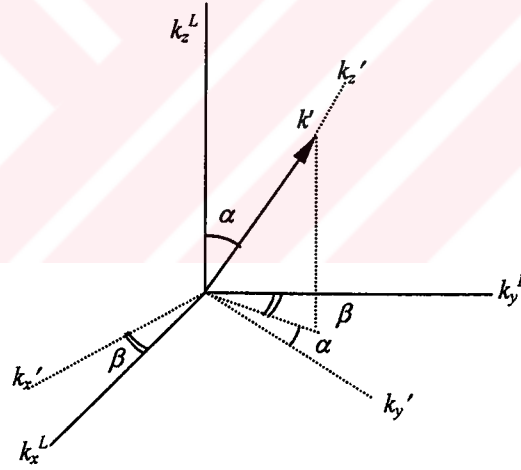
$$\phi = 2\pi r_3 \quad (3.94)$$

Burada r_3 , 0 ve 1 arasında değişen uniform rasgele bir sayıdır.

Safsızlık saçılması ve kutupsal optik fonon saçılması için kutupsal açı θ ifadelerinin burada tekrar yazılması ile,

$$\cos \theta = 1 - \frac{2r_4}{1 + (1 - r_4) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (3.95)$$

safsızlık saçılması ve kutupsal optik fonon saçılması için,



Şekil 3.19. Gözlem çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ile yeni gözlem çerçevesi (k_x', k_y', k_z') arasındaki ilişki. Burada k_z eksenini başlangıçtaki dalga vektörü k' 'ya paraleldir

$$\cos \theta = \frac{1+f-(1+2f)^{1/2}}{f} \quad (3.96)$$

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

eşitlikleri yazılabilir.

Elektron dalga vektörü k , gözlem çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) için güncelleştirilirse çalışma açısından daha kullanışlı olan yeni bir gözlem çerçevesi olan (k'_x, k'_y, k'_z) elde edilir. Yeni gözlem çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) gözlem çerçevesinin etrafında k_x ekseninin α açısı, k_z ekseninin de β kadar döndürülmesi ile elde edilmiştir. Bu işlem aşağıdaki şekilde gösterilmektedir. Böylece dönüşüm sonucunda (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ve (k'_x, k'_y, k'_z) gözlem çerçeveleri için oluşan matris elemanlarının çarpılması gerekmektedir.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.97)$$

Buradan başlangıçtaki k dalga vektörüne göre final durumu olan k' dalga vektörünün kutupsal ve azimuthal açıları olan ϕ ve θ Şekil 3.20'de gösterilmiştir. Buradan (k'_x, k'_y, k'_z) gözlem çerçevesi için k_x , k_y ve k_z bileşenleri için,

$$(k' \sin \theta \cos \phi, k' \sin \theta \sin \phi, k' \cos \theta) \quad (3.98)$$

yazılabilir. Buradan da (k_x^L, k_y^L, k_z^L) gözlem çerçevesi içindeki k' vektörü yukarıdaki matris çarpımının tersi ile verilebilir.

$$\begin{pmatrix} \cos \beta & \cos \alpha \sin \beta & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \alpha \cos \beta & \sin \alpha \cos \beta \\ 0 & -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (3.99)$$

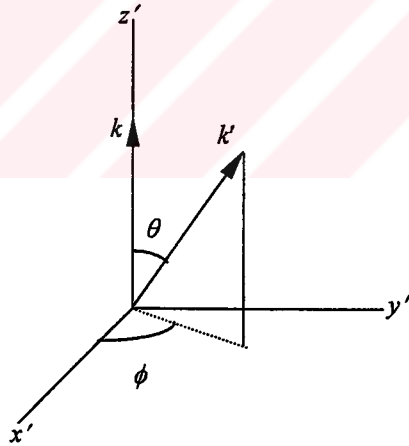
Burada matris ifadesinde verilen sinüs ve cosinüs bileşenleri de,

$$\begin{aligned} \sin \alpha &= \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k}, & \cos \alpha &= \frac{k_z}{k} \\ \sin \beta &= \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}, & \cos \beta &= \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \end{aligned} \quad (3.100)$$

ile verilir. (3.98), (3.99) ve (3.100) eşitliklerinin birleştirilmesi ile saçılmadan sonraki (k_x^L, k_y^L, k_z^L) gözlem çerçevesi içindeki dalga vektörünün bileşenleri,

$$\begin{pmatrix} k_x' \\ k_y' \\ k_z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ -\frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ 0 & -\frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \sin \theta \cos \phi \\ k' \sin \theta \sin \phi \\ k' \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.101)$$

şeklinde elde edilir.



Şekil 3.20. Başlangıçtaki dalga vektörü k ile k' nün kutupsal ve azimuthal açıları olan θ ve ϕ nin tanımlanması (Tomizawa, 1993)

Elipsoidal bantlardaki izotropik saçılma durumunda gözlem çerçevesi içindeki sonuç dalga vektörü k' elipsoidal bantlardaki geçiş oranları için Herring-Vogt

dönüşümünün (Nag, 1980) kullanılması ile,

$$k^* = Uk \quad (3.102)$$

elde edilir. Buradaki dönüşüm elipsoidal yüzeylerden küresel yüzeyleredir. Bu dönüşüm için kullanılan U;

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

ile verilebilir. Böylece k^* taşıyıcı enerjisi

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right) = \frac{(\hbar k^*)^2}{2m_f} \quad (3.103)$$

şeklinde verilebilir. Bu denklemin kullanılması ile $k'^* = \sqrt{2m_f E_k / \hbar}$ elde edilir. Buradan da $(k_x'^*, k_y'^*, k_z'^*)$ bileşenlerini küresel yüzey için (3.92) ve (3.93) eşitlikleri kullanılarak hesaplanabilir. Sonuç olarak, (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ifadesi, $(k_x'^*, k_y'^*, k_z'^*)$ ifadesi ile U matrisinin tersinin çarpılması ile elde edilebilir.

Üç boyutlu gösterimde (k_x, k_y, k_z) gösterimi bulk yarıiletkenlerdeki taşıyıcı geçişlerinin incelenmesi için gerekli olmayabilir. Ancak, bu gösterim bizim çalışmalarımız sırasında Monte Carlo metodunun tek parçacık ve cihaz simülasyonu için olan alt programların geliştirilmesi için kullanılacaktır.

3.4.4. Hız Hesaplanması

Şimdiye kadar tek parçacık için Monte Carlo metodunun ana hatları verilmeye çalışıldı. Bu noktadan sonra kullanılacak teknik için, uygulanan düzgün bir elektrik alanı altında bir bulk yarıiletken içindeki ortalama taşıyıcı hızının hesaplanması verilecektir. İlk önce, bu yöntem için ortalama taşıyıcı hızının ve enerjisinin tanımlanması gerekmektedir.

Monte Carlo metodu Boltzmann Geçiş Denkleminin çözümüne eşdeğer olarak tanımlanır. Böylece, eğer k -uzayının her bir hacim elemanı için uçuş zamanı toplanırsa, dağılım fonksiyonu şekillendirilebilir ve taşıyıcının ortalama hızı ve enerjisi hesaplanabilir. Bu işlemin yerine getirilmesi yüksek teknolojiye sahip bir bilgisayar ile mümkün olabilir. Çünkü bütün k -uzayı üzerinden verilerin hesaplanması ve yazılması gerekmektedir. Ancak, bu işlemin hem uzun süre alması, hem de işlem gücü çok yüksek bir bilgisayar gerektirmesi bizi diğer bir yola sevk etmiştir. Bu da, taşıyıcı hızı ve enerjisinin her bir uçuş zamanının toplanması ve en sonunda bu zamanların ortalamasının alınarak hesaplanmasıdır.

Anı taşıyıcı hızı aşağıdaki eşitlikle verilebilir.

$$\bar{v} = \frac{1}{\hbar} \bar{v}_k E_k \quad (3.104)$$

Böylece, τ uçuş zamanı boyunca ortalama taşıyıcı hızı,

$$\langle v \rangle_\tau = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E_k}{\Delta k} \quad (3.105)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ΔE_k ve Δk , τ esnasındaki, taşıyıcı enerjisi ve dalga vektöründeki çok küçük değişimlerdir. (3.89) eşitliğine göre, sabit bir elektrik alan altındaki elektron dalga vektörünün artışı,

$$\Delta k = -\frac{eF}{\hbar} \tau \quad (3.106)$$

ile verilir. (3.106) ifadesinin (3.105) de yerine konmasıyla,

$$\langle v \rangle_{\tau} = -\frac{\Delta E_k}{eF\tau} \quad (3.107)$$

bağıntısı elde edilir.

Son elde edilen eşitliğin kullanılması ile, τ zamanındaki ortalama taşıyıcı hızı toplam simülasyon zamanının T olarak tanımlanması ile,

$$\begin{aligned} \langle v \rangle_T &= \frac{1}{T} \sum \langle v \rangle_{\tau} \tau \\ &= -\frac{1}{eFT} \sum \Delta E_k \\ &= -\frac{1}{eFT} \sum (E_f - E_i) \end{aligned} \quad (3.108)$$

olarak yazılabilir. Bu eşitlikteki E_i elektronun çarpışmadan önceki, E_f ise τ süresi sonundaki çarpışmadan sonraki taşıyıcı enerjisidir. Bu toplam, bütün serbest uçuşların göz önüne alınması ile elde edilmiştir. (3.108) ifadesi hız hesaplanması için her bir serbest uçuş sırasındaki enerji artışlarının toplanmasına ihtiyacımız olduğunu gösterir. Bu sonuçtan hareketle ortalama taşıyıcı enerjisi,

$$\langle E \rangle_T = \frac{1}{T} \sum \langle E \rangle_{\tau} \tau \quad (3.109)$$

olarak elde edilir. $\langle E \rangle_{\tau}$ burada çok iyi bir yaklaşımla,

$$\langle E \rangle_{\tau} = \frac{E_i + E_f}{2} \quad (3.110)$$

olarak alınabilir.

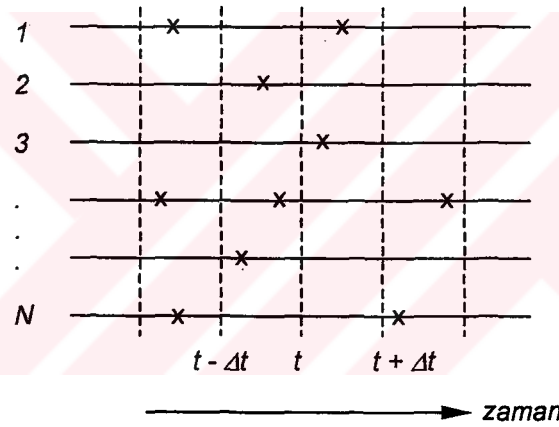
3.5. Bulk Elektronlar için Çok Parçacıklı Monte Carlo Metodu

Daha önceki bölümde anlatılan Tek parçacık için Monte Carlo Metodu taşıyıcı geçişlerinin hesaplanmasında, özellikle de durgun ve uniform bir elektrik alan etkisi altındaki kararlı durumda bulunan taşıyıcı geçişleri için çok kullanışlı bir yöntemdir. Çok parçacık için Monte Carlo Metodu ise, durgun olmayan taşıyıcıların davranışı, homojen olmayan bir alandaki taşıyıcı geçişleri ve taşıyıcı difüzyonu gibi konuların

incelenmesinde kullanılabilir. Bu bölümde, bir bulk kristal içindeki taşıyıcı geçişlerinin çok parçacık için Monte Carlo Metodu ile nasıl incelenebileceği verilecektir.

3.5.1. Çok Sayıdaki Parçacığın Hareketi

Çok parçacık için Monte Carlo Metodu küçük bir zaman artışı Δt esnasındaki çok sayıdaki parçacığın hareketinin eşzamanlı ve birbiri ardına hesaplanmasına dayanmaktadır. Bu yöntem aslında dinamik bir yöntemdir ve bundan dolayı süresiz olan taşıyıcı hareketinin incelenmesi için uygundur. Ancak, bu yöntem sistem kararlı hale ulaşmaya kadar devam eden hesaplamalar ile durağan problemlere de uygulanabilir.



Şekil 3.21. Çok parçacık için Monte Carlo simülasyonunun şematik gösterimi

Şekil 3.21 şematik olarak çok parçacık için Monte Carlo hesaplamasını göstermektedir. Yatay çizgiler zaman koordinatındaki parçacıkların yörüngesini belirtmektedir. Zaman sağa doğru artmaktadır. Düz çizgiler her bir parçacığın izini, kesikli çizgiler ise seçilen zamanı ve düz çizgiler üzerindeki x işareti çarpışma zamanını göstermektedir. İki x arasındaki zaman parçacıklar için serbest uçuş zamanını vermektedir. Bütün parçacık sisteminin gözlenmesi için parçacıkların hem momentum uzayında hem de gerçek uzayda bütün Δt 'ler için hesaplanmasını gerektirir. Uygulanan

elektrik alan kararlı bile olsa, elektron enerjisinin zamanla değişimi ile saçılma oranının güncelleştirilebilmesi için Δt 'ler yeterince küçük seçilmelidir.

Bir önceki bölümde ele alınan Tek Parçacık için Monte Carlo Metodunda küçük birkaç değişiklik yapılarak Çok parçacık için Monte Carlo Metodu içinde kullanmak mümkündür. Bunun için yeni bir alt program olan emc nin tanımlanması gerekmektedir. Bu alt program, bütün parçacıklar için sürüklenme ve saçılma işlemlerini tekrarlamaktadır.

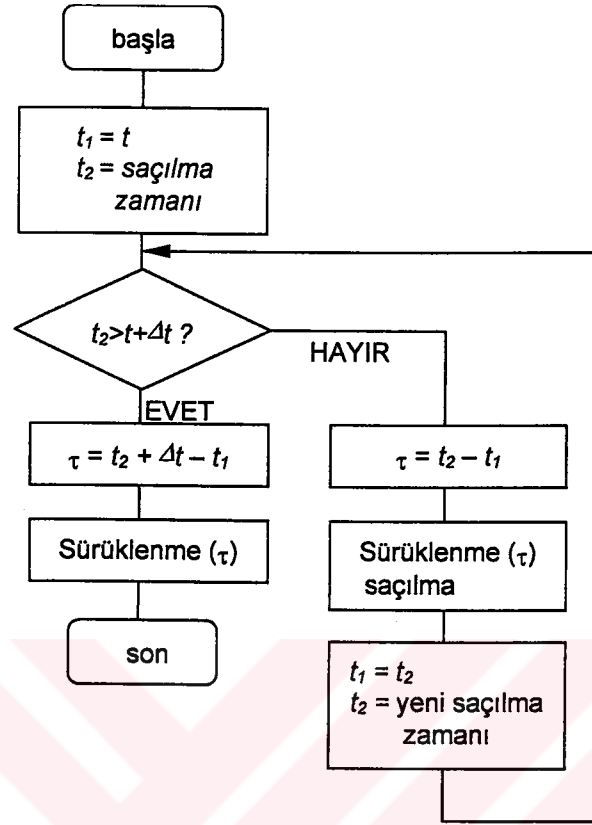
Eğer bir parçacığın t ve $t+\Delta t$ arasındaki hareketine dikkat edilecek olursa, saçılma olayının rasgele gerçekleştiği görülebilir. Böylece Δt süresince bir parçacığın kaç kere saçılacağı kesin olarak söylenemez.

t ve $t+\Delta t$ arasındaki hareketi simüle etmek için t anındaki momentum ve konum vektörlerinin bilindiği ve t den sonraki ilk saçılma zamanı t_s in rasgele bir sayı ile belirlenebileceği varsayılmaktadır. Eğer t_s , $t+\Delta t$ den daha büyük olursa, parçacık Δt süresinde sadece sürüklenmektedir. Eğer t_s , $t+\Delta t$ den daha küçük olursa, parçacık $t+\Delta t$ süresinden önce saçılmıştır. Bu durumda, parçacık $t_s - t$ zamanında sürüklenmiş, t_s zamanında ise saçılmıştır. Yeni saçılma zamanı t_s farklı bir rasgele sayı ile tanımlanmıştır. Burada, öncelikle yeni saçılma zamanı t_s in $t+\Delta t$ den daha büyük olup olmadığına bakılacaktır. Bu açıklamalar ışığı altındaki bir Monte Carlo Simülasyon programı için alt program emc Şekil 3.22 deki gibidir.

Uçuş zamanı τ esnasındaki konum vektörü Δr nin artışı hareket denklemini kullanılarak hesaplanabilir. Eğer elektrik alan F 'nin, Δt esnasında sabit olduğu varsayılırsa, uçuş süresi boyunca ortalama taşıyıcı hızı ve uçuş zamanının çarpılması ile Δr hesaplanabilir. Böylece,

$$\Delta r = \langle v \rangle_\tau \tau \quad (3.111)$$

$\langle v \rangle_\tau$ ifadesi daha önce (3.107) eşitliği ile verilmişti.



Şekil 3.22. Alt program emc için akış diyagramı (Tomizawa, 1993)

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu bölümde daha önce detayları anlatılan tek parçacık ve çok parçacık için Monte Carlo yöntemleri kullanılarak, GaAs ve Si'nun çeşitli özellikleri incelenmiş daha sonra GaAs bir diyot simule edilmiştir.

4.1. Tek Parçacık İçin Monte Carlo Metodu

Tek Parçacık için Monte Carlo Metodu kullanılarak bulk GaAs'in çeşitli özellikleri incelendi.

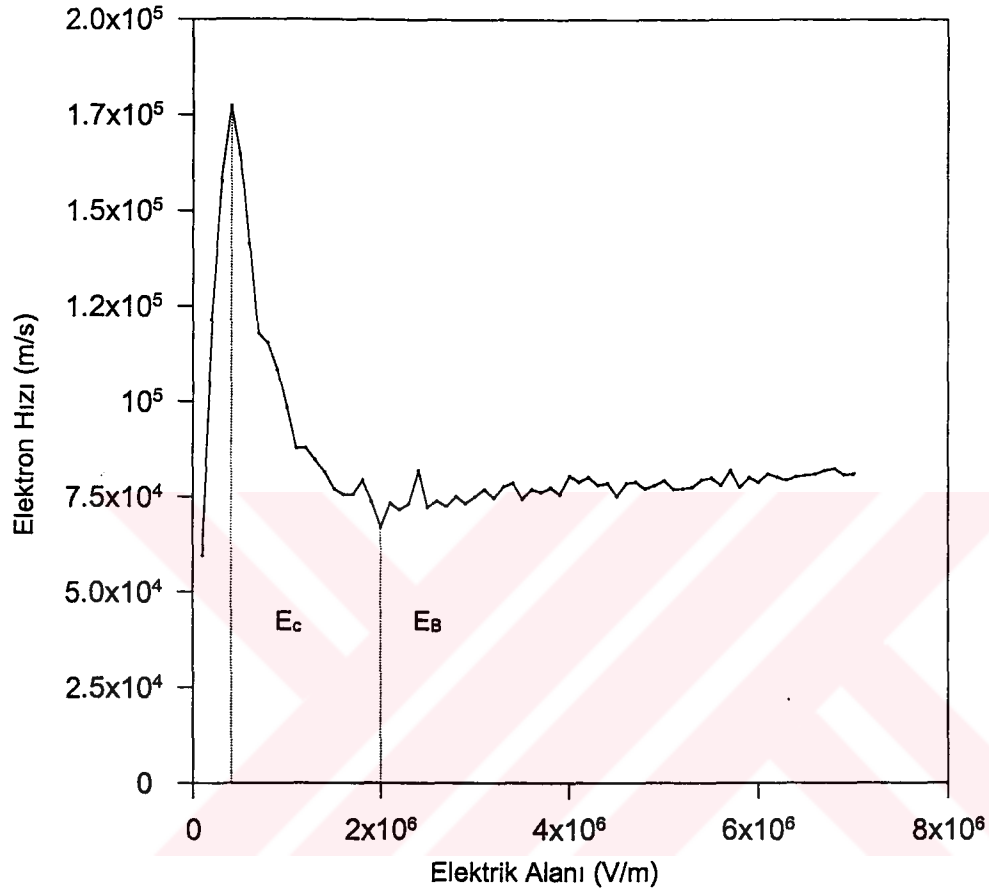
4.1.1. Bulk GaAs

Bu kesimde, Tek Parçacık için Monte Carlo Metodu kullanılarak $T = 300$ °K de Si ve GaAs'in çeşitli özellikleri incelenmiştir. Bunlardan ilki, Şekil 4.1'de gösterildiği gibi GaAs içindeki elektronların uygulanan elektrik alanına göre değişimidir. Grafikte de görüldüğü gibi hız belirli bir üst limite kadar artmakta ve belirli bir doyuma ulaşmaktadır. Daha sonra ise hızda önemli bir düşüş gözlenmektedir. Hızın E_c kritik elektrik alanına kadar artıp daha sonra azalması olgusu "Negatif Diferansiyel Direnç" olarak bilinir. Bu özelliği anlamak için hem elektronun uygulanan elektrik alanı arttıkça kazandığı enerji ve buna bağlı olarak en etkin olan saçılma mekanizması nedir ona bakmak ve hem de Şekil 3.5'te GaAs için verilen enerji bant yapısına bakmak gereklidir.

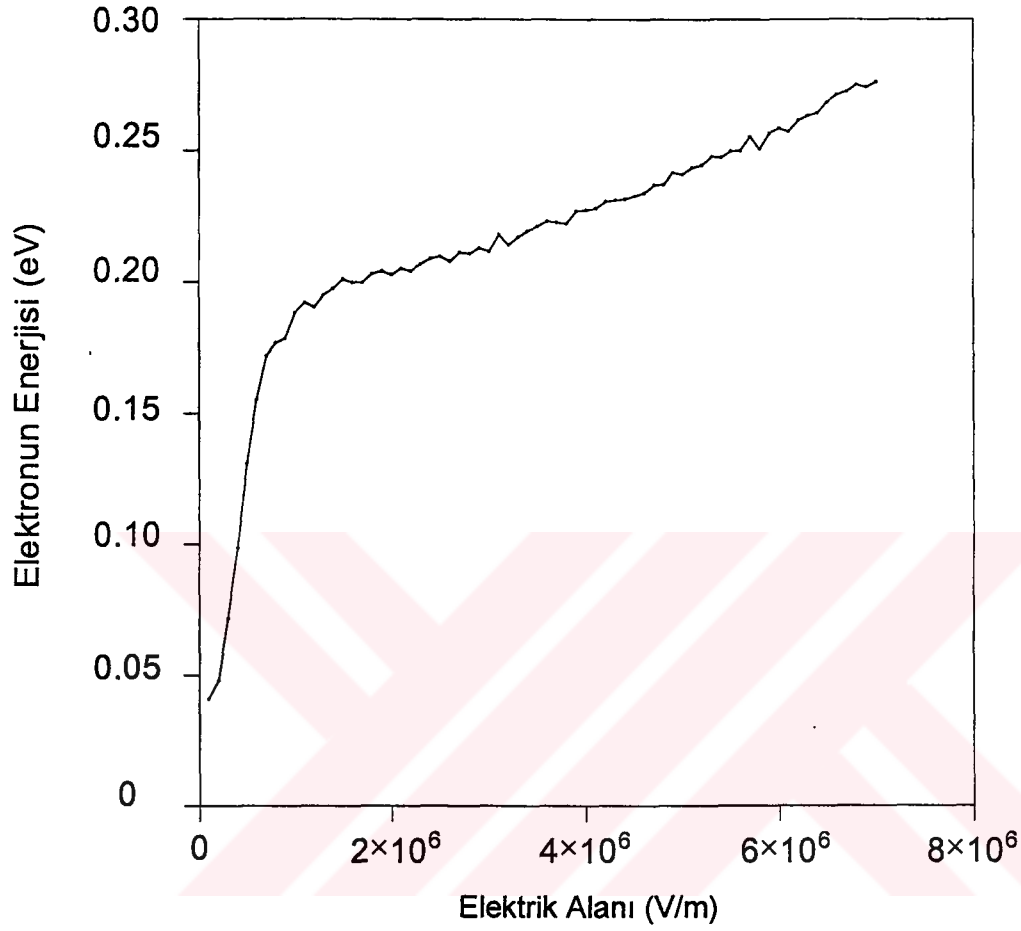
Elektronlar düşük elektrik alanlarında Γ -vadisindedirler ve etkin kütleleri küçüktür ($m_{\Gamma}^* = 0.067m_0$). Bu enerjilerdeki saçılma mekanizması ise çoğunlukla akustik fononlar ile olmakta ve Bölüm 3'te anlatıldığı gibi akustik fonon saçılması fonon enerjilerinin elektron enerjisine göre çok küçük olması sebebi ile elastik bir saçılma olarak alınabilir. Yani bu saçılmalar elektron enerjisinde kayda değer bir değişikliğe yol açmazlar. Elektrik alanının şiddeti arttıkça elektronun enerjisi artmaya, buna karşılık etkin saçılma mekanizması optik fonon saçılması olmaya başlar. Optik fonon saçılması inelastik bir saçılma olduğundan, elektronların uygulanan alandan dolayı kazandıkları enerjinin bir kısmını optik fonon saçılması

nedeniyle kaybetmeye başlarlar ve öyle bir denge hali oluşur ki, alandan kazanılan enerji ile saçılma nedeniyle kaybedilen enerji hemen hemen eşit hale gelir. Bu durumda elektronun enerjisi sabit hale gelir, yani elektronun hızı sabit bir doyum hızına ulaşır ($\approx 10^7$ cm/s) ve bundan sonra elektrik alanı artsa da hızda bir artış gözlenmez. $T = 300$ °K'de bu hız limiti hemen hemen bütün malzemeler için aynıdır. Elektron enerjisinin bu değerleri için aynı zamanda optik saçılmalar nedeniyle vadiler arası geçişlerde başlar. Şekil 4.1'de gösterilen modelde GaAs'ın enerji bandındaki sadece Γ ve L vadileri gözönüne alınmıştır. Bu durumda elektronlar Γ vadisinden daha yüksek enerjiye sahip L vadisine geçmeye başlarlar. Fakat L vadisinde elektronun etkin kütlesi Γ vadisindekine göre çok daha büyük olduğundan ($m_L^* = 0.350m_0$, $m_L^* \approx 5 m_\Gamma^*$), hızda ani bir azalma meydana gelir. Bu olgu yukarıda da belirtildiği gibi negatif diferansiyel direnç olarak bilinir.

Elektron enerjisinin uygulanan alana göre değişimi Şekil 4.2'de gösterilmiştir. Dikkat edilirse enerjide, hızda olduğu gibi ani bir düşüş olmaz. Ama hemen hemen sabit hale gelir. Çünkü $E = \frac{1}{2}m^*v_d^2$ olduğundan, elektron vadi değiştirdiğinde hızı (v_d) azalır, buna karşılık etkin kütle (m^*) artar. Öyle ki, enerjide herhangi önemli bir azalma görülmez, ama v_d sabit olduğundan enerji de hemen hemen sabittir. Yine dikkat edilirse aslında L vadisinde elektronun hızı tamamen sabit değildir ve Şekil 4.1'de görüldüğü gibi azda olsa elektrik alanı ile lineer bir artış gösterir.



Şekil 4.1. Tek Parçacık için Monte Carlo Metodu kullanılarak 300 °K sıcaklık, $1 \times 10^{25} \text{ 1/m}^3$ safsızlık konsantrasyonu ve $2 \times 10^{-9} \text{ s}$ simülasyon zamanında bulk GaAs için elde edilen Elektron Hızı-Elektrik Alan grafiği. Gerekli açıklamalar için metne bakınız.

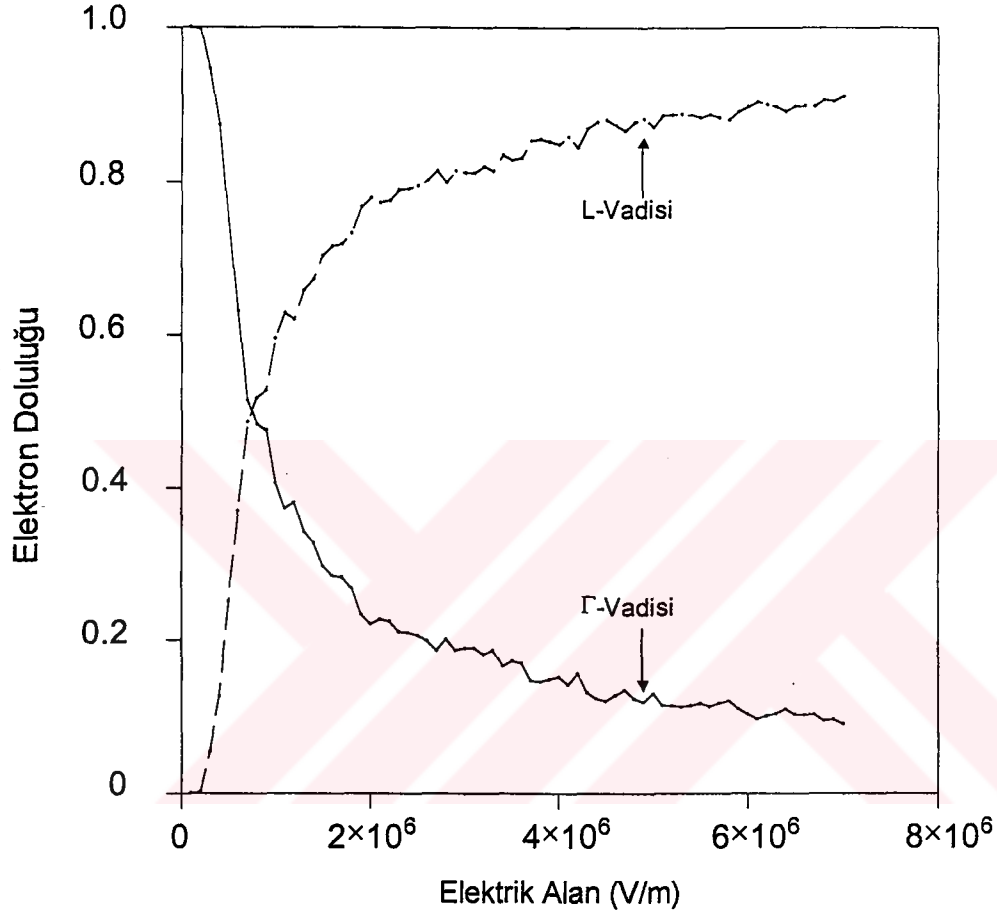


Şekil 4.2. Tek Parçacık için Monte Carlo Metodu kullanılarak 300 °K sıcaklık, $1 \times 10^{25} \text{ 1/m}^3$ safsızlık konsantrasyonu ve $2 \times 10^{-9} \text{ s}$ simülasyon zamanında bulk GaAs için çizilen ve Şekil 4.1'e karşılık gelen Elektron Enerjisi-Elektrik Alan grafiği.

Elektronların Γ vadisinden L vadisine geçişi, elektronların her bir vadiye toplam zamana göre bulunma oranı çizilerek gösterilebilir. Şekil 4.3 her bir vadinin elektrik alanına karşılık doluluk oranını göstermektedir. Görüldüğü gibi elektrik alanı arttıkça elektron Γ vadisinden L vadisine vadiler-arası saçılmaya uğrayarak geçiş yapar. Çok yüksek alanlarda hemen hemen bütün elektronlar L vadisine geçmiş olurlar.

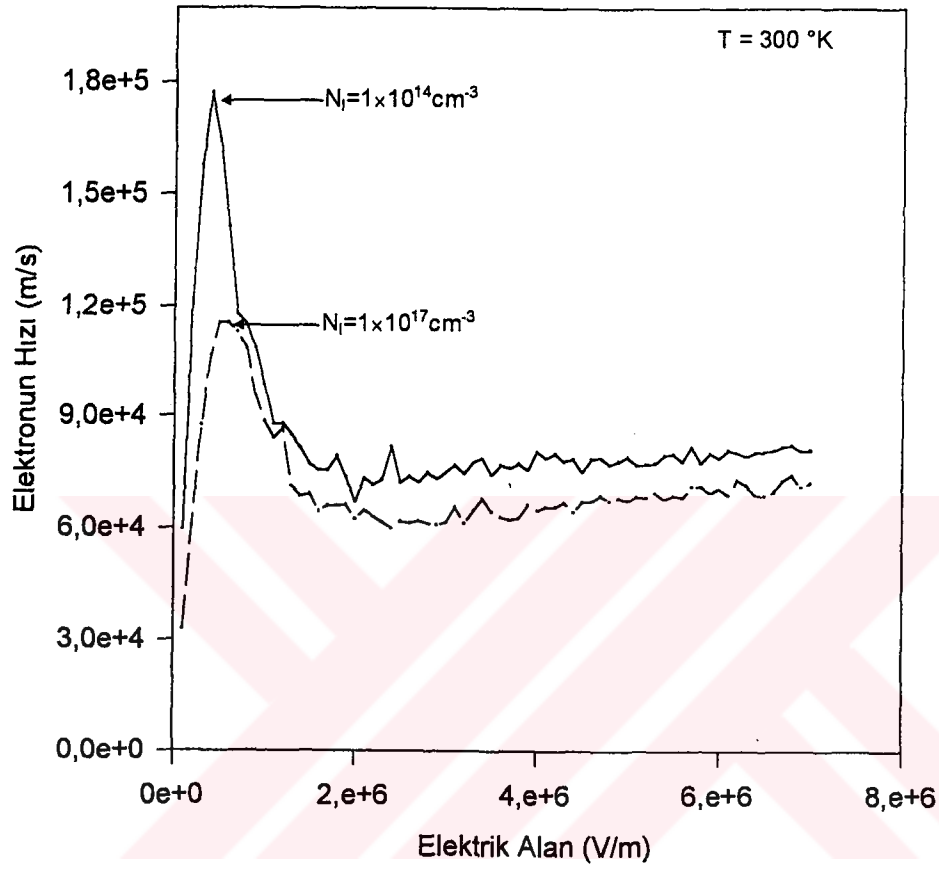
Kısaca belirtmek gerekirse, negatif diferansiyel direnç olgusunun gözlenebilmesi için yarıiletkenin farklı etkin kütle değerlerine sahip farklı vadilere sahip olması gerekmektedir. Bu vadilerin taban enerji değerleri farklı olmalı fakat bu fark yasak enerji aralığından küçük olmalıdır.





Şekil 4.3. Tek Parçacık için Monte Carlo Metodu kullanılarak 300 °K sıcaklıktaki bulk GaAs için çizilen Γ ve L-vadilerinde toplam zamana göre elektron bulunma oranını gösteren grafik. Burada tek elektronun verilen bir elektrik alanı altında vadilerde [Γ ve L] bulunma oranları gösterilmiştir.

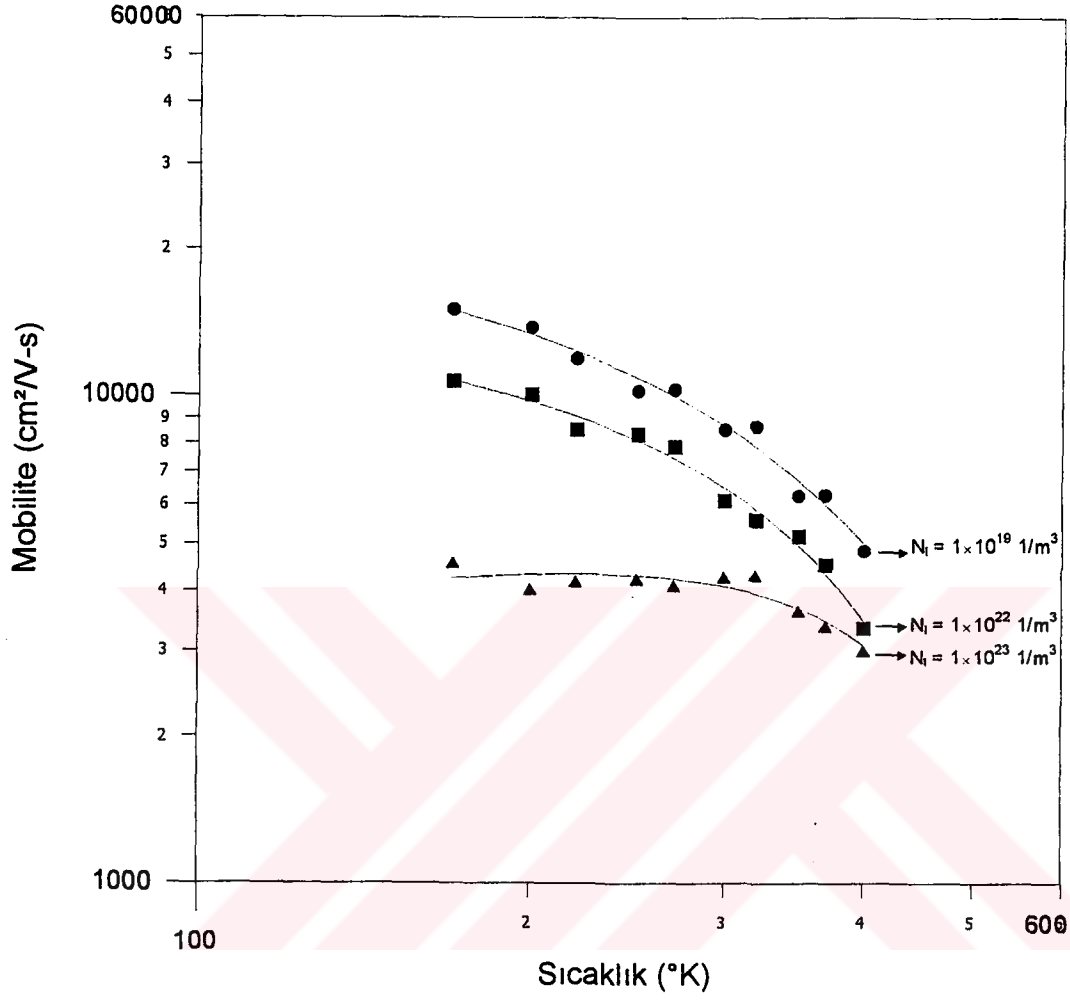
Elektronun alanla hızının değişiminin safsızlık konsantrasyonu N_1 'ya bağımlılığı, N_1 'nin iki değeri için Şekil 4.4'de gösterilmiştir. Görüldüğü gibi N_1 arttıkça hızın alacağı maksimum değer azalmaktadır. Buradan da görülebileceği gibi N_1 'yi artırarak negatif diferansiyel direnç özelliğini yok etmek mümkündür. Ayrıca dikkat edilirse, küçük elektrik alan değerleri için, elektronun hızının uygulanan alana göre artış oranı, yani mobilite de azalmaktadır. Şekil 4.4'de gösterilen safsızlık konsantrasyonu arttıkça elektronun ulaşacağı maksimum hızdaki azalma denklem (3.74) gözönüne alınarak anlaşılabilir. Bu denklemde eğer kabaca elektron ile iyonize olmuş safsızlık konsantrasyonunu eşit alırsak, payda N_1^2 ile orantılı hale gelir. Pay ve payda sadeleşirse saçılma oranının N_1 ile ters orantılı olduğu görülür. Hızdaki azalma veya saçılma oranındaki azalma düşük enerjilerde (düşük elektrik alanlarında) daha etkin olup, enerji arttıkça bu fark gittikçe azalır. Burada saçılma oranının azalması mobilitenin arttığı şeklinde anlaşılmamamalıdır, tersine saçılma açıları arttığından mobilitede Şekil 4.4'de de görüldüğü gibi bir azalma meydana gelmektedir.



Şekil 4.4. Tek Parçacık için Monte Carlo Metodu kullanılarak çeşitli safsızlık konsantrasyonları ve 2×10^{-9} s simülasyon zamanında bulk GaAs için çizilen Elektron Hızı-Elektrik Alan grafiği.

Şekil 4.1 veya 4.4’de verilen hız elektrik alan grafiklerinden faydalanarak mobilite hesabı yapmak mümkündür. Bu yolla mobilitenin hem sıcaklığa hem de safsızlık konsantrasyonu N_I ’ya bağımlılığı incelenebilir. Şekil 4.1 veya 4.4’de görüldüğü gibi, elektrik alanının 10^6 V/m değerine kadar, elektronun hızı hemen hemen lineer olarak değişmektedir (Ohmik Bölge). Daha sonra bu ilişki lineer olmaktan uzaklaşır. Dolayısı ile elektrik alanı $F < 10^6$ V/m için, hızın F ’ye bağımlılığının lineer kısmı alınarak mobilite hesabı yapılabilir. Çünkü ohmik bölgede mobilite v/F oranı olarak tanımlanır. Şekillerde verilen hız ve F -alanı daha detaylı incelenirse, bu ilişkinin tamamen lineer olmadığı kolaylıkla görülebilir. Bu nedenle mobilite hesabı yapmak için, hızın maksimum değere ulaştığı noktaya kadar olan veri noktaları, A , B ve C sabitler olma üzere, $v = A + BF + CF^2$ biçiminde bir fonksiyona uyarlanmış daha sonra mobilite $\mu = \left. \frac{dv}{dF} \right|_{F=0} = B$ denkleminde hesaplanmıştır. Burada da görüldüğü gibi uyarlamadaki B katsayısı direk olarak mobilitayı vermektedir.

Bu yolla mobilitenin verilen bir N_I değeri için sıcaklıkla veya verilen bir sıcaklık için safsızlık konsantrasyonu ile değişimi bulunabilir. Bunlar sırası ile Şekil 4.5 ve 4.6’da verilmiştir.

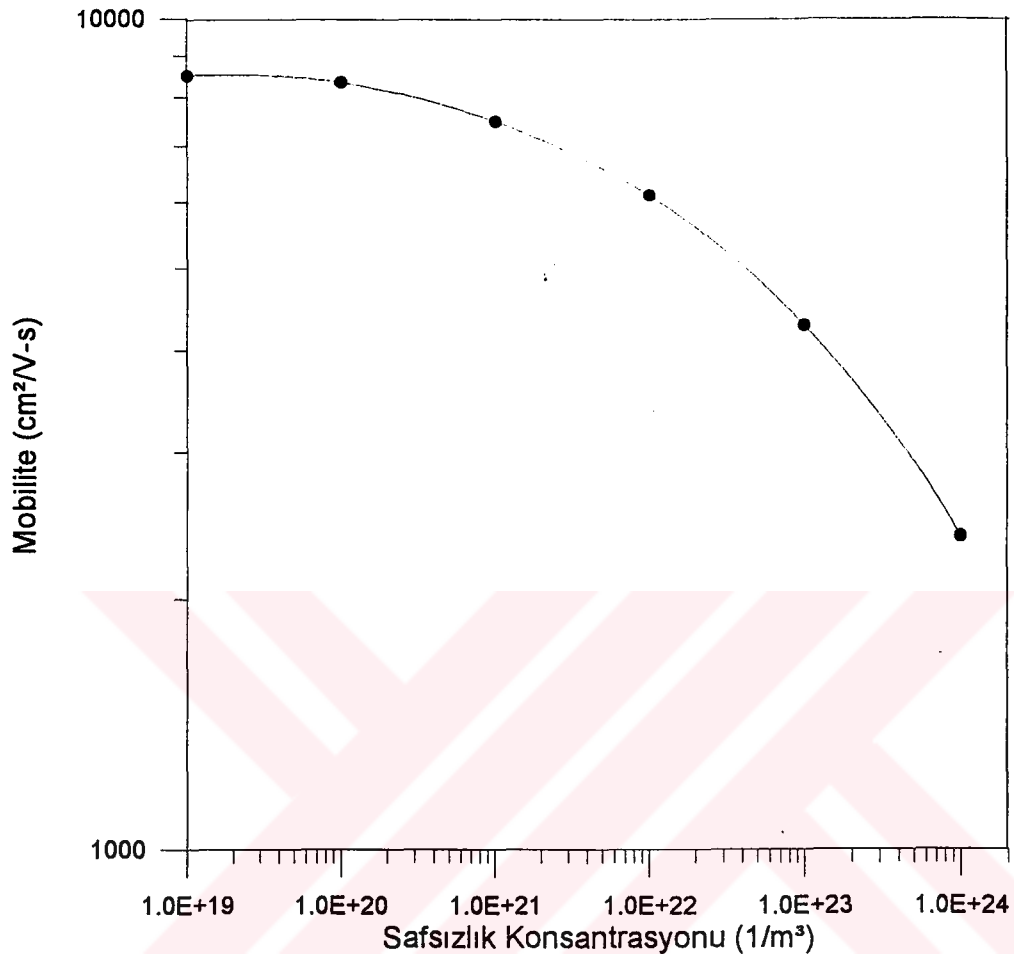


Şekil 4.5. Mobilitenin değişik safsızlık değerlerinde sıcaklığa göre değişimi. Hesaplamanın detayları metinde açıklanmıştır. Kesiksiz düz çizgiler elde edilen data noktalarından geçen en iyi eğri olarak çizilmiştir.

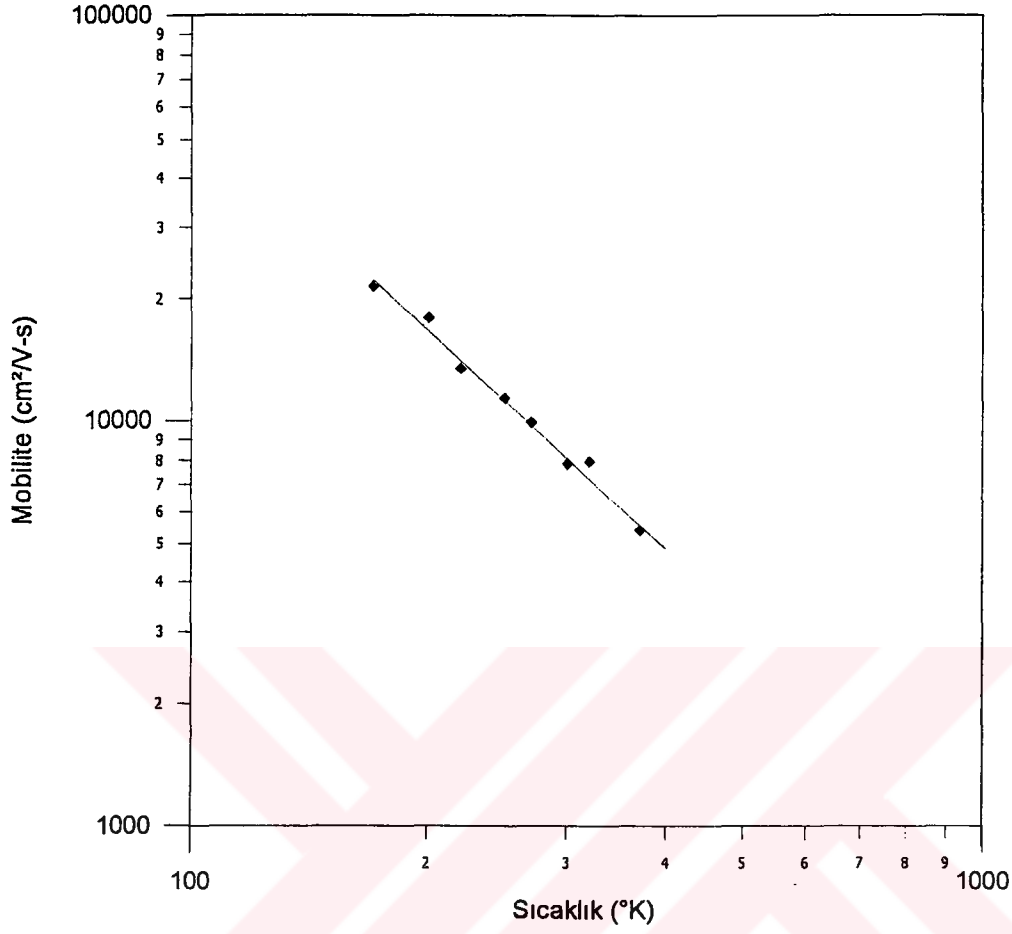
YATIRILMIŞ
KURUMUN KUTUPHANESİ
19.05.2014

Şekil 4.5 mobilitenin çeşitli iyonize olmuş safsızlık değerleri için sıcaklıkla değişimini göstermektedir. Görüldüğü gibi safsızlık konsantrasyonu arttıkça mobilite azalmaktadır. Bu olgu Şekil 4.4 incelenirse daha iyi anlaşılabilir. Bu şekilde N_I arttıkça maksimum hız azalmakta, aynı zamanda hızın elektrik alanına göre artış oranı da düşmektedir. Yani, yukarıda da anlatıldığı gibi mobilite de azalmaktadır.

Diğer gözlenen bir olgu ise, sıcaklık arttıkça mobilitenin azalmasıdır. Bunun sebebi, sıcaklık arttıkça fonon sayısının artması ve dolayısıyla fononlardan dolayı oluşan saçılmaların artmasıdır. Yani sıcaklık arttıkça mobilitayı azaltan temel sebep elektron-fonon, özellikle elektron-polar optik fonon saçılmasıdır. Çünkü düşük sıcaklıklarda saçılmalar genellikle iyonlardan, yüksek sıcaklıklarda ise fononlardan kaynaklanmaktadır. Düşük sıcaklıklarda saçılma eğer dominant olarak iyonize olmuş safsızlıklardan kaynaklanıyorsa, mobilitenin $T^{3/2}$ ile orantılı, yüksek sıcaklıklarda ise saçılma dominant olarak özellikle optik fononlardan kaynaklandığında mobilite $T^{-3/2}$ ile orantılıdır (Ridley, 1982). Mobilitenin düşük safsızlık değerleri için sıcaklıkla gerçekten beklenen değere uygun biçimde değişip değişmediğini görmek için çok düşük safsızlık konsantrasyonları ($1 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$) için mobilite hesabı yapılmış ve sonuçlar Şekil 4.7’de gösterilmiştir. Burada mobilitenin sıcaklık ile yaklaşık olarak $T^{-3/1.67}$ şeklinde değiştiği gözlenmiştir. Bu değer sadece fonon saçılmalarının etkin olduğu durum için beklenen değere oldukça yakındır.



Şekil 4.6. Sıcaklık 300°K maksimum simülasyon zamanı 1×10^{-9} s'de safsızlık konsantrasyonlarına karşılık mobilité için elde edilen grafik.



Şekil 4.7. Safsızlık konsantrasyonu çok düşük iken mobilitenin sıcaklığa göre değişimi. Kesiksiz düz çizgi elde edilen data noktalarından geçen en iyi doğrudur. Bu doğrunun eğimi $-3/1.67 (= -1.8)$ civarındadır ve beklenen değer $-3/2$ 'ye yeterince yakın olarak alınabilir.

4.2. Çok Parçacık için Monte Carlo Yöntemi

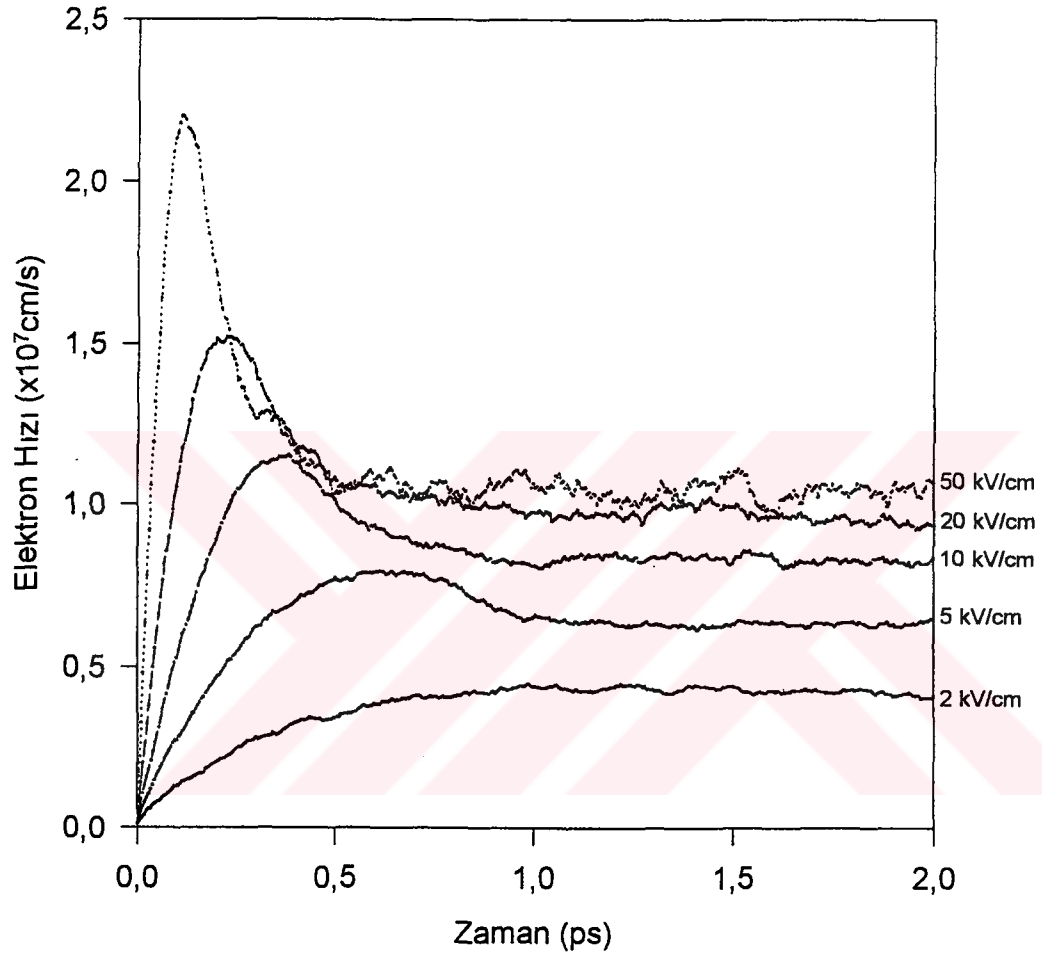
4.2.1. Hacimsel Si

Bu bölümde Çok Parçacık için Monte Carlo Metodu kullanılarak hacimsel silikon için Elektron Hızına karşılık zaman ve Elektron Hızına karşılık uzaklık grafikleri çizildi.

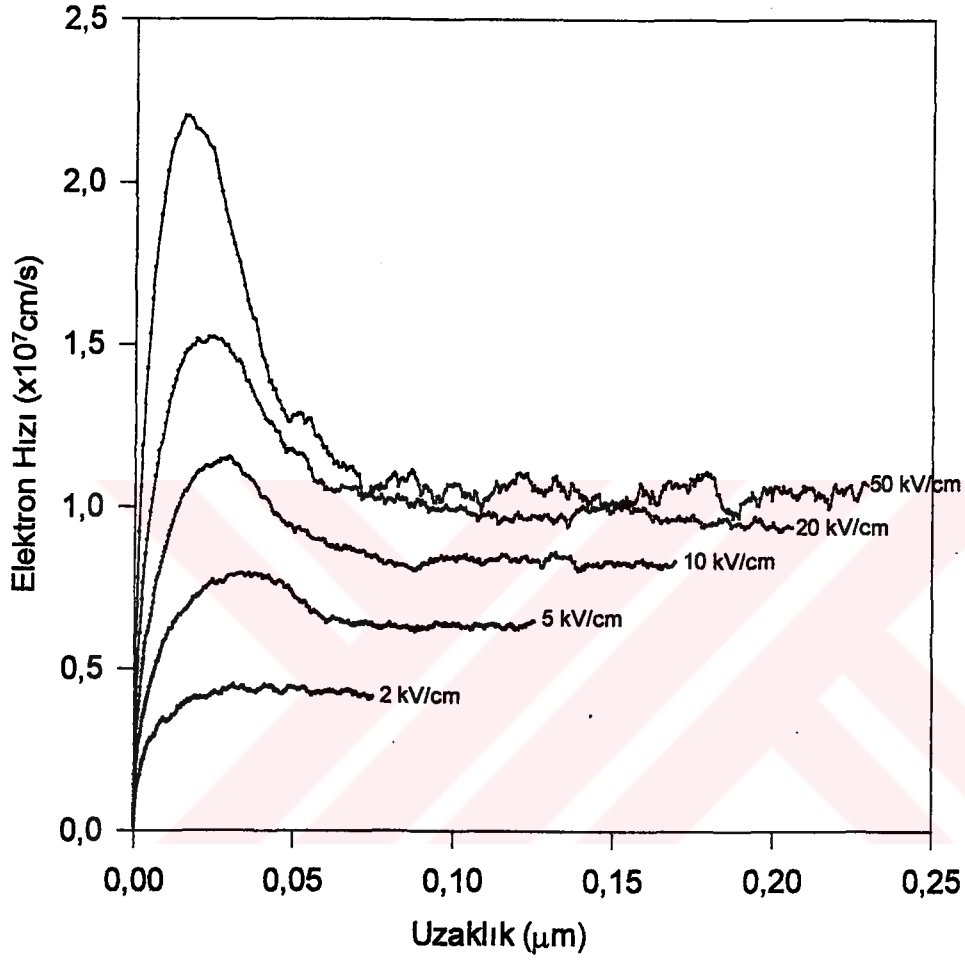
İlk grafikte (Şekil 4.8), sıcaklığın 300°K ve toplam parçacık sayısının 8000 alınması ile hacimsel silikonda sürüklenme hızı zamanın bir fonksiyonu olarak farklı elektrik alanlarında çizildi. Grafikten elektrik alanının artmasının sürüklenme hızına etkileri gözlenmeye çalışıldı.

İkinci grafikte ise sıcaklığın 300°K ve toplam parçacık sayısının 8000 alınması ile hacimsel silikonda sürüklenme hızının uzaklığın bir fonksiyonu olarak farklı elektrik alanlarında çizimi yapıldı. Grafikten elektrik alanının artması ile sürüklenme hızının nasıl değiştiği ve elektronların aldığı uzaklıkların değişimi gözlenmeye çalışıldı (Şekil 4.9).

Yarıiletken aletler içinde, mümkün olan yüksek hız ve yüksek frekansta elektron geçişleri için ilginç bir olay vardır. Bu olay hızın aşırı yükselmesi (velocity overshoot) olarak adlandırılır. Silisyum ve GaAs'de hızların yüksek elektrik alanlarında geçici olarak aşırı yükselme göstermesi kararlı duruma ulaşılmadan öncedir. Bu durum momentum ve enerji gevşeme zamanları eşitsizliğinin elektrik alanının bir fonksiyonu olmasına bağlıdır. Geçici aşırı yükselme genel olarak, uygulanan elektrik alan çok yüksek olduğunda gözlenir. Çünkü bu durumda elektronlar, momentum uzayında momentum gevşeme zamanındaki değişimin, enerji gevşeme zamanındaki değişimden daha küçük olduğu yüksek enerji bölgesine geçerler. Daha sonra enerji gevşemesi etkin hale gelir ve böylece dağılım fonksiyonu yayılır. Bundan dolayı da sürüklenme hızı düşer. Bu olay Şekil 4.8'den gözlenebilir. Elektronların sürüklenme hızlarının düşük olması, alabilecekleri mesafelerin de düşük olması anlamına gelmektedir. Bu olay da Şekil 4.9'dan gözlenebilir.



Şekil 4.8. Sıcaklığın 300°K ve toplam parçacık sayısının 8000 alınması ile bulk silikonda sürüklenme hızının zamanın bir fonksiyonu olarak farklı elektrik alanlarındaki değeri.

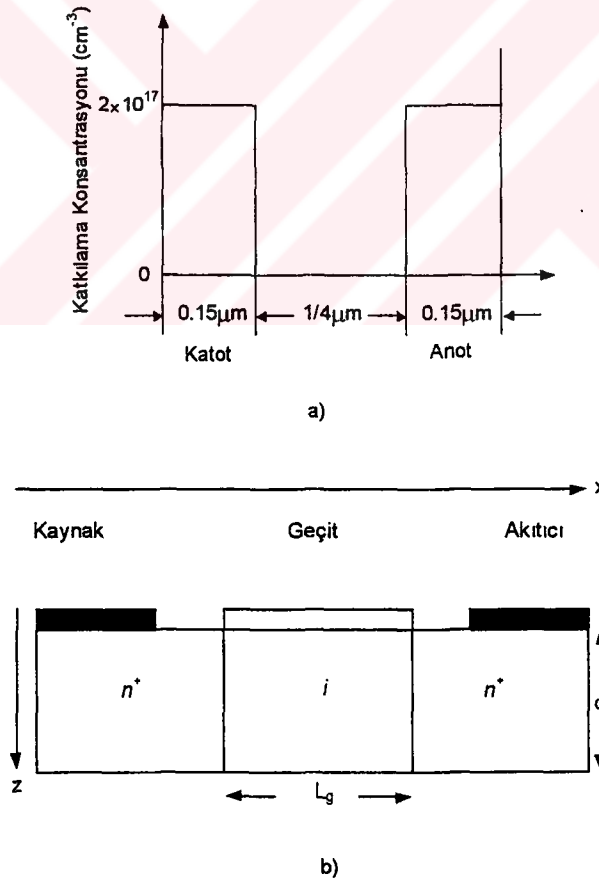


Şekil 4.9. Sıcaklığın 300°K ve toplam parçacık sayısının 8000 alınması ile bulk silikonda sürüklenme hızının uzaklığın bir fonksiyonu olarak farklı elektrik alanlarındaki çizimi.

4.3. Çok Parçacık için Mote Carlo Metodu ile Cihaz Simülasyonu

4.3.1. GaAs Diyot

Bu kesimde, Çok Parçacık için Monte Carlo Metodu kullanılarak bir $n^+ - i - n^+$ GaAs diyot için cihaz simülasyonu yapıldı. Şekil 4.10'da şematik gösterimi bulunan bu diyot, $0.15 \mu\text{m}$ kalınlığında bir anotla yine $0.15 \mu\text{m}$ kalınlığında bir katot arasındaki aktif i -katmanından oluşmaktadır. Buradaki aktif katmanın kalınlığı Şekil 4.10 a)'da görüldüğü gibi $1/4 \mu\text{m}$ 'dir. Burdaki iletim bandı parabolik olmayan Γ ve L vadilerinden iki vadili bir modeldir. Saçılma mekanizmaları vadi-içi akustik ve polar optik fonon saçılmaları, vadiler arasındaki fonon saçılması ve iyonize safsızlık saçılması olarak ele alınmıştır (Bölüm 3.3).

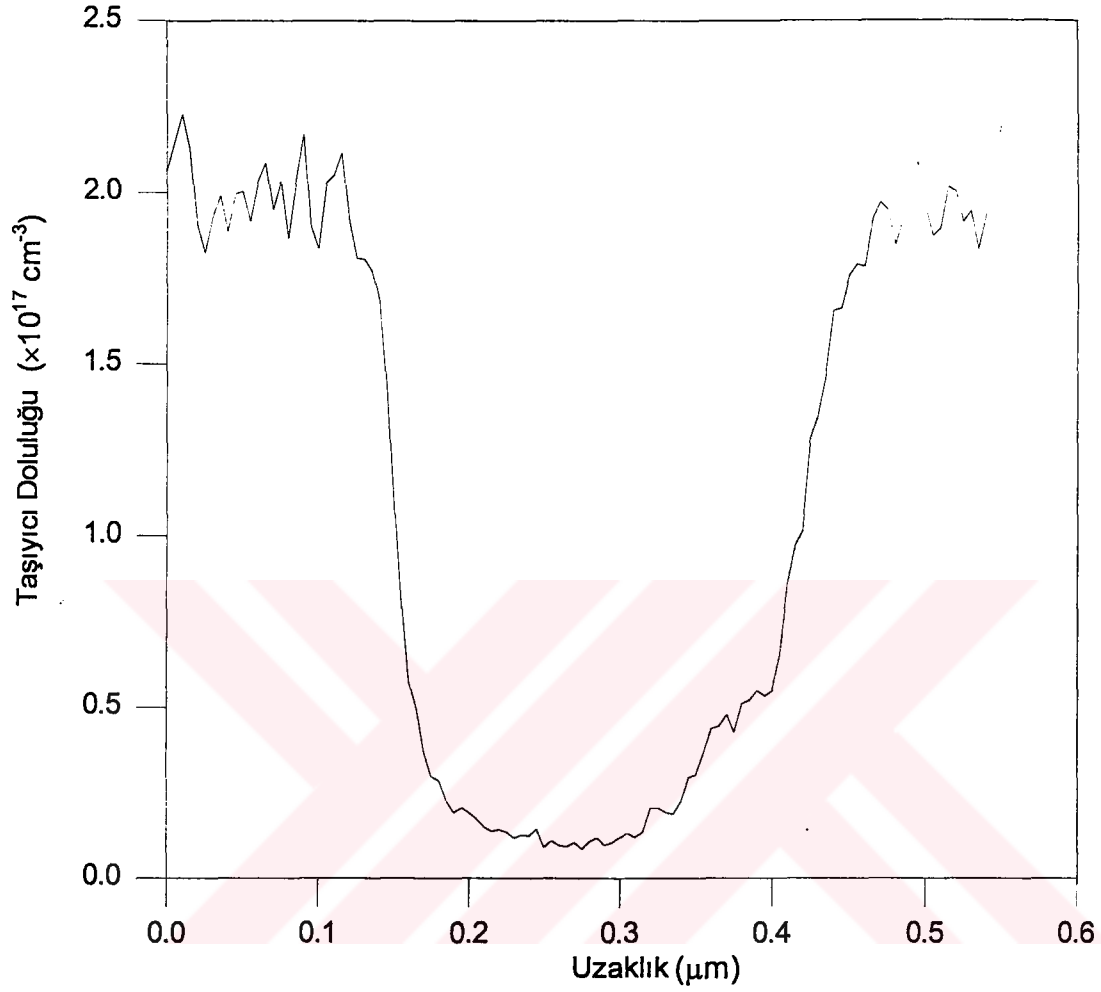


Şekil 4.10 $n^+ - i - n^+$ GaAs diyotun şematik gösterimi ($L_g = 0.25 \mu\text{m}$, $d = 0.1 \mu\text{m}$ katkılama konsantrasyonları $n = 7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ve $n = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)

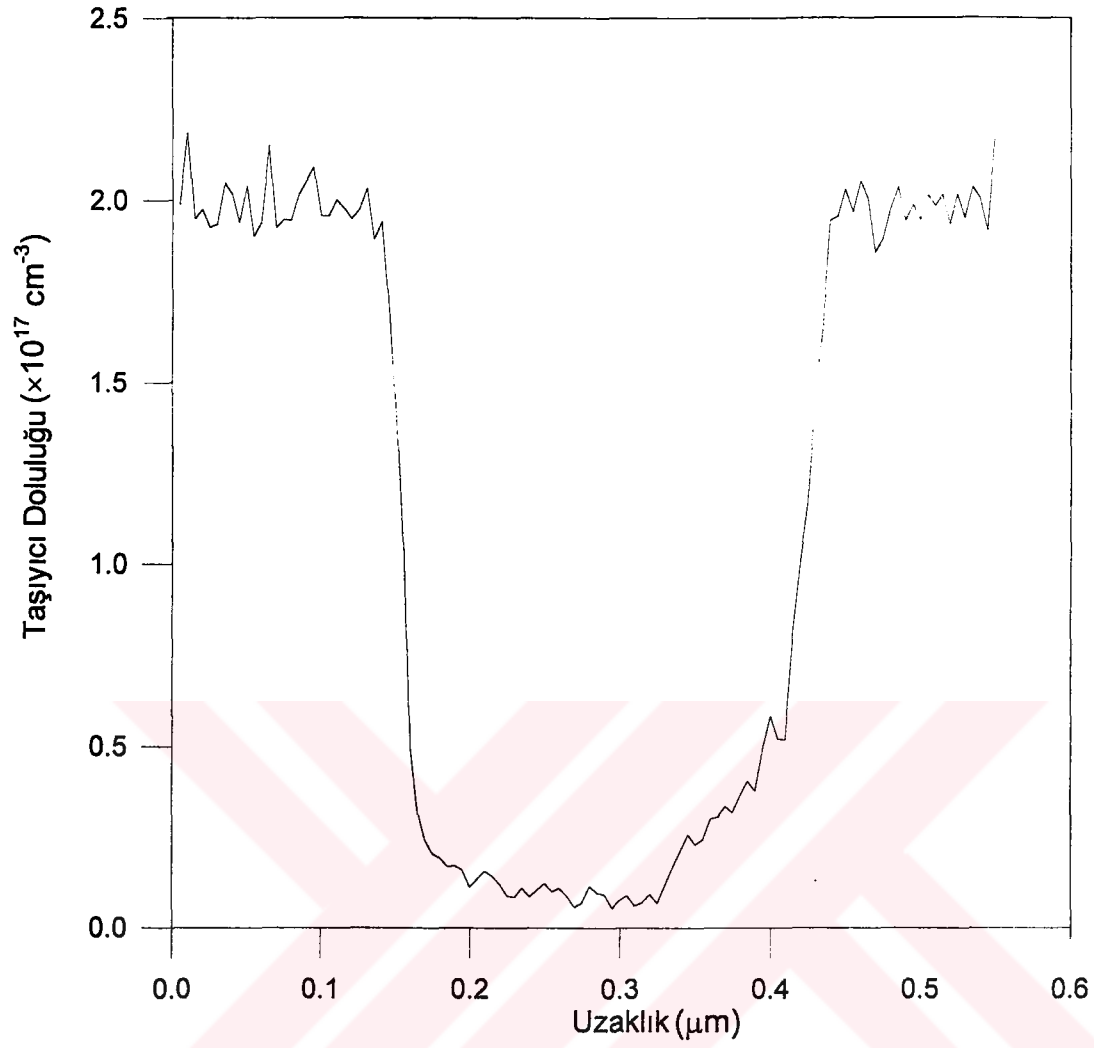
Şekil 4.11 ve 4.12’de sıcaklık 300 ve 77°K ve 0.75 V gerilim farkı altında $n^+ - i - n^+$ GaAs diyot için taşıyıcı yoğunluğuna karşılık uzaklığın grafiği gösterilmiştir. Bu grafikte katotdan etkin katman olan yarıiletken geçiş sırasında 77°K’deki grafikteki çizginin daha düz olması bu bölgedeki elektronların sayısının daha az olduğunu göstermektedir. Ayrıca aynı grafiklerdeki 0.3-0.4 μm bölge arasında bir yığılmanın olması gerilim farkından dolayıdır (Şekil 4.13’e bakınız).

Sıcaklık 300 ve 77°K ve 0.75 V gerilim farkı altında parçacık sayısının 24.400 alınması ile $n^+ - i - n^+$ GaAs Diyot için ortalama elektron hızına karşılık uzaklığın grafikleri çizildi. Bu grafiklerle sıcaklığın elektron hareketi üzerindeki etkisini incelendi. Şekil 4.14 ve 4.15 incelenirse, elektronların maksimum hıza ulaştığı bölgelerin sıcaklıkla farklılaştığı gözlenir. Çünkü sıcaklık arttıkça yarıiletken içindeki çarpışmalarda artmakta ve elektronlar yüksek sıcaklıklarda daha erken maksimum hıza ulaşırken (Şekil 4.14), düşük sıcaklıklarda ise daha yüksek hızlara ulaşmakta fakat, hızın maksimuma ulaştığı uzaklık anota daha yakın olan bölgeler olarak gözlenmektedir (Şekil 4.15).

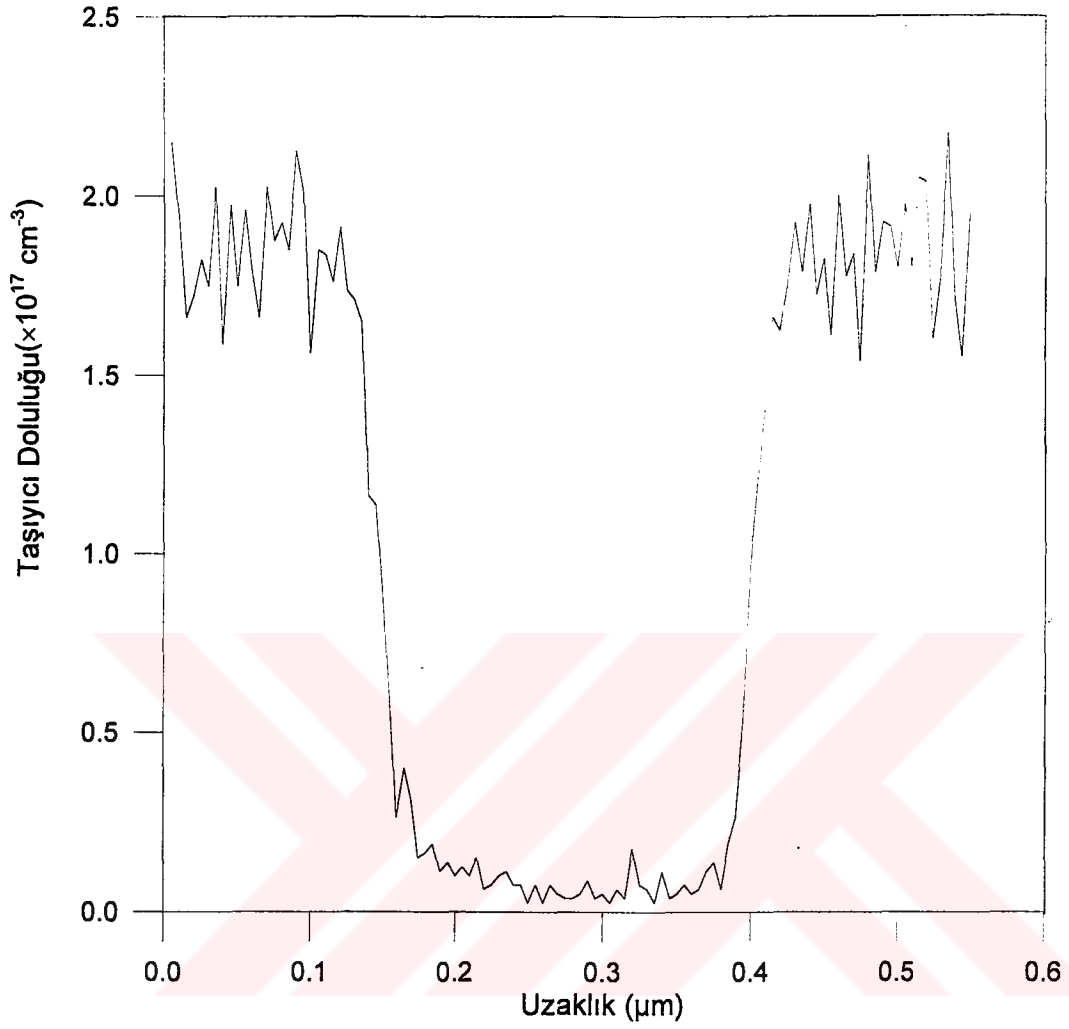
Son olarak Şekil 4.16 ve 4.17’de sıcaklık 300°K ve 77°K ve 0.75 V gerilim farkı altında $n^+ - i - n^+$ GaAs Diyot için potansiyele karşılık uzaklığın grafikleri çizildi. Bu grafiklerde dikkati çeken en önemli nokta sıcaklığın 300°K olduğu grafikte (Şekil 4.16) potansiyelin katot bölgesinden etkin bölgeye geçer geçmez negatif değerler almasıdır. Çünkü buradaki potansiyel hesaplanması Poisson Denklemi ile yapıldığından, elektron sayısındaki artış, daha yüksek negatif potansiyel anlamına gelmektedir. Sıcaklığın 77°K olduğu durumda ise negatif potansiyel bölgesinin hemen hemen olmaması, bu bölgedeki elektron yığılmasının yüksek sıcaklıklardaki elektron yığılmasına göre daha az olmasındandır.



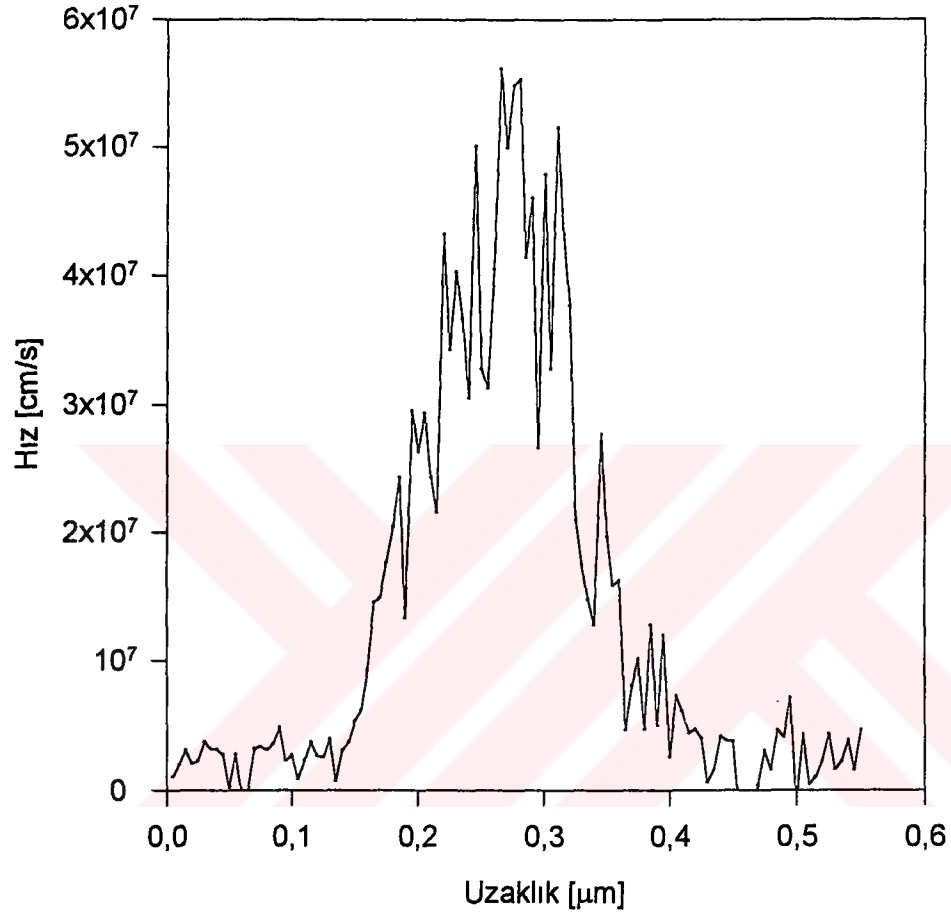
Şekil 4.11. Sıcaklık 300°K ve 0.75 V gerilim farkı altında n^+-i-n^+ GaAs Diyot içindeki taşıyıcı yoğunluğunun dağılımı. 0.3 ile 0.4 μm aralığındaki yığılma anottaki yansılardan kaynaklanır ve gerilim farkı azaldıkça bu yığılma da azalır, ayrıca Şekil 4.13'e bakınız.



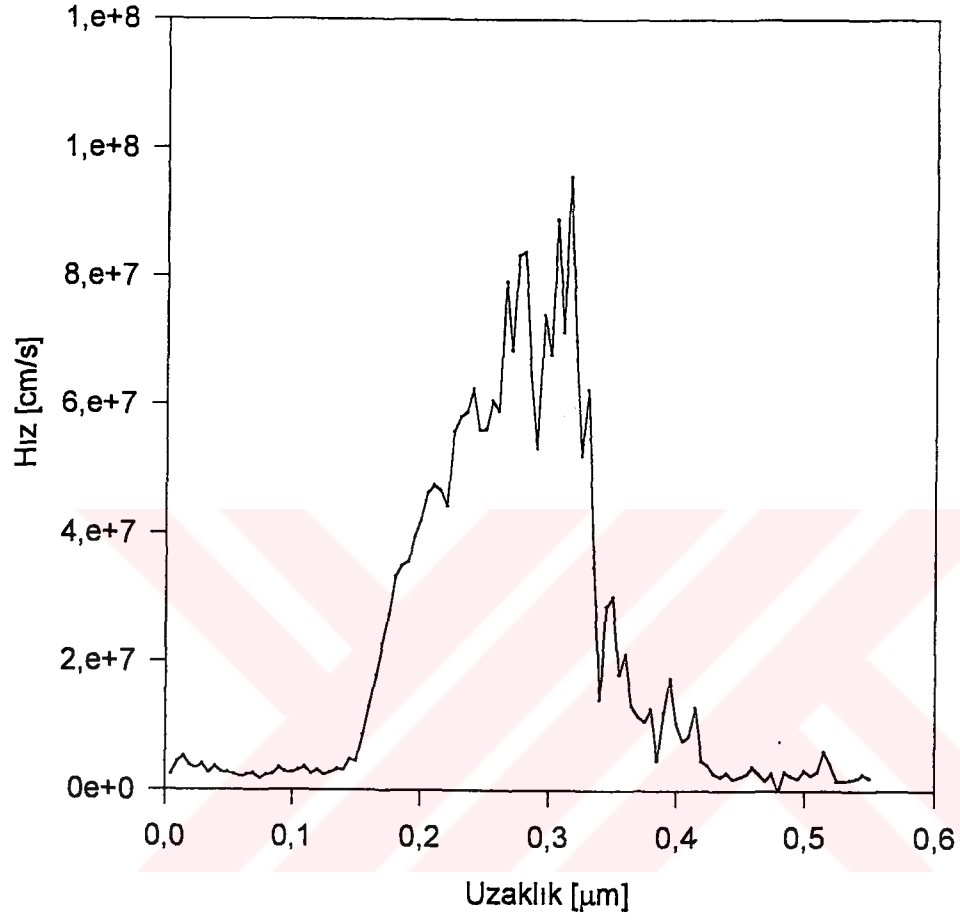
Şekil 4.12. Sıcaklık 77°K ve 0.75 V gerilim farkı altında n^+-i-n^+ GaAs Diyot içindeki taşıyıcı yoğunluğunun dağılımı.



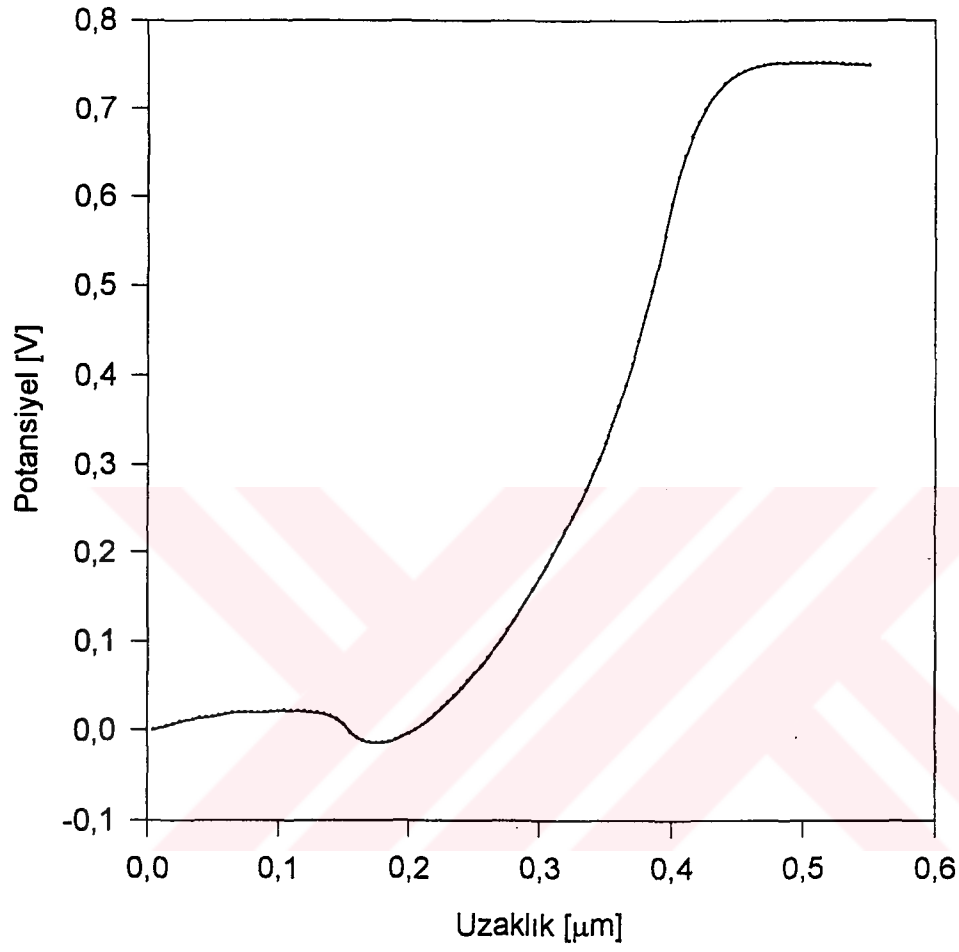
Şekil 4.13. Sıcaklık 300°K ve 0.25 V gerilim farkı altında n^+-i-n^+ GaAs Diyot için taşıyıcı yoğunluğuna karşılık uzaklığın çizimi. Şekil 4.10 ve Şekil 4.11'deki 0.3 ile 0.4 μm arasındaki yığılmanın bu şekilde olmamasına dikkat ediniz.



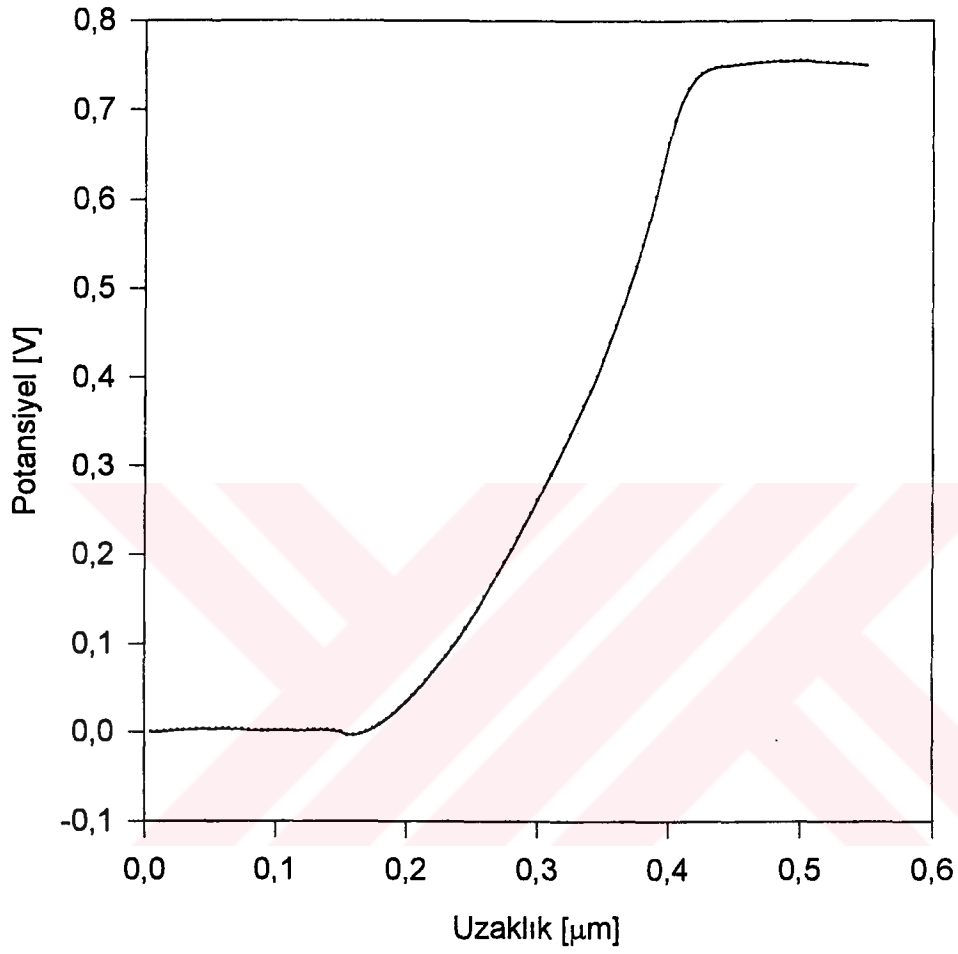
Şekil 4.14. Sıcaklık 300°K ve 0.75 V gerilim farkı altında parçacık sayısının 24.400 alınması ile $n^+ - i - n^+$ GaAs Diyot için ortalama elektron hızına karşılık uzaklığın çizimi.



řekil 4.15. Sıcaklık 77°K ve 0.75 V gerilim farkı altında parçacık sayısının 24.400 alınması ile n^+-i-n^+ GaAs Diyot için ortalama elektron hızına karşılık uzaklığın çizimi.



Şekil 4. 16. Sıcaklık 300°K ve 0.75 V gerilim farkı altında $n^+ - i - n^+$ GaAs Diyot için potansiyele karşılık uzaklığın çizimi.



Şekil 4. 17. Sıcaklık 77°K ve 0.75 V gerilim farkı altında $n^+ - i - n^+$ GaAs Diyot için potansiyele karşılık uzaklığın çizimi.

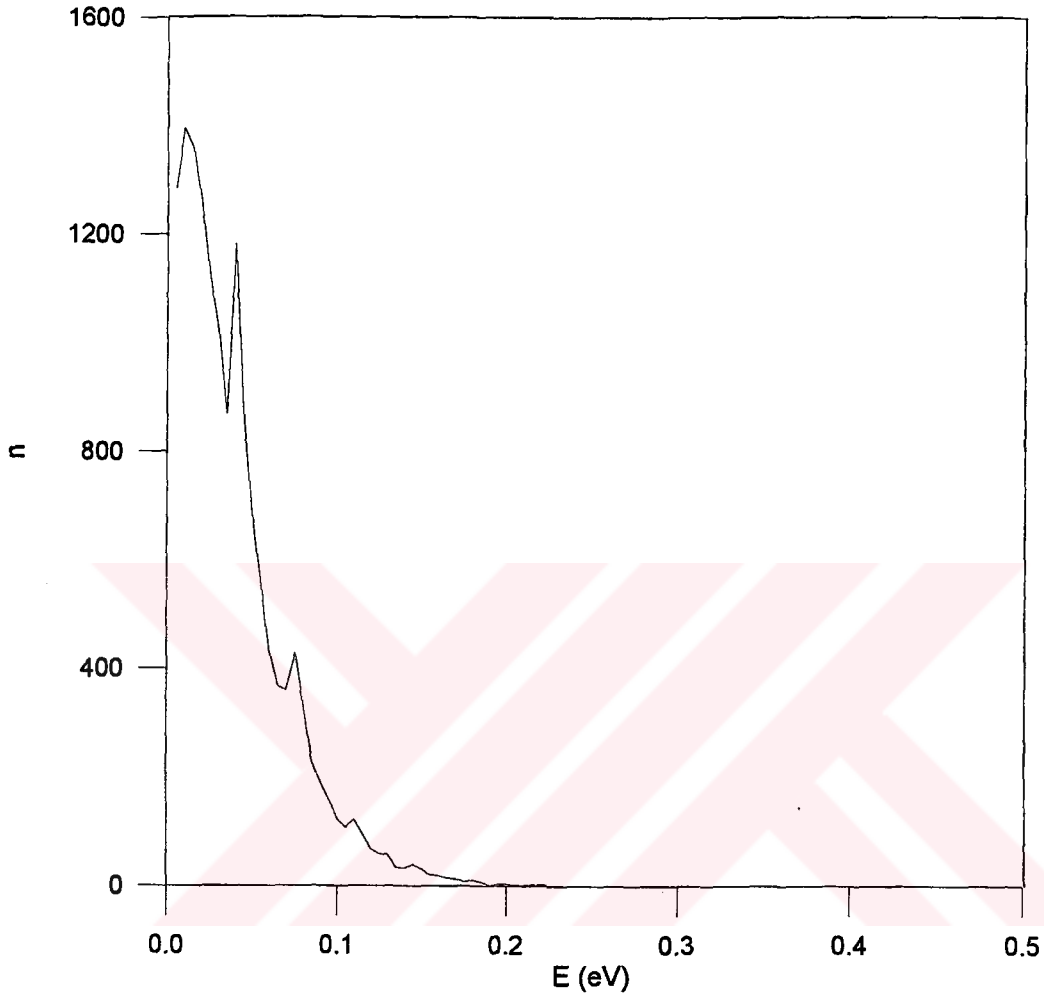
4.3.2. Hacimsel GaAs için Elektron Dağılımı

Uygulanan elektrik alanın 0 V/m, 1×10^6 V/m, sıcaklığın 300°K parçacık sayısının 15.000 alınarak hacimsel GaAs in vadilere göre elektron dağılımının incelenmesi için grafikler çizildi.

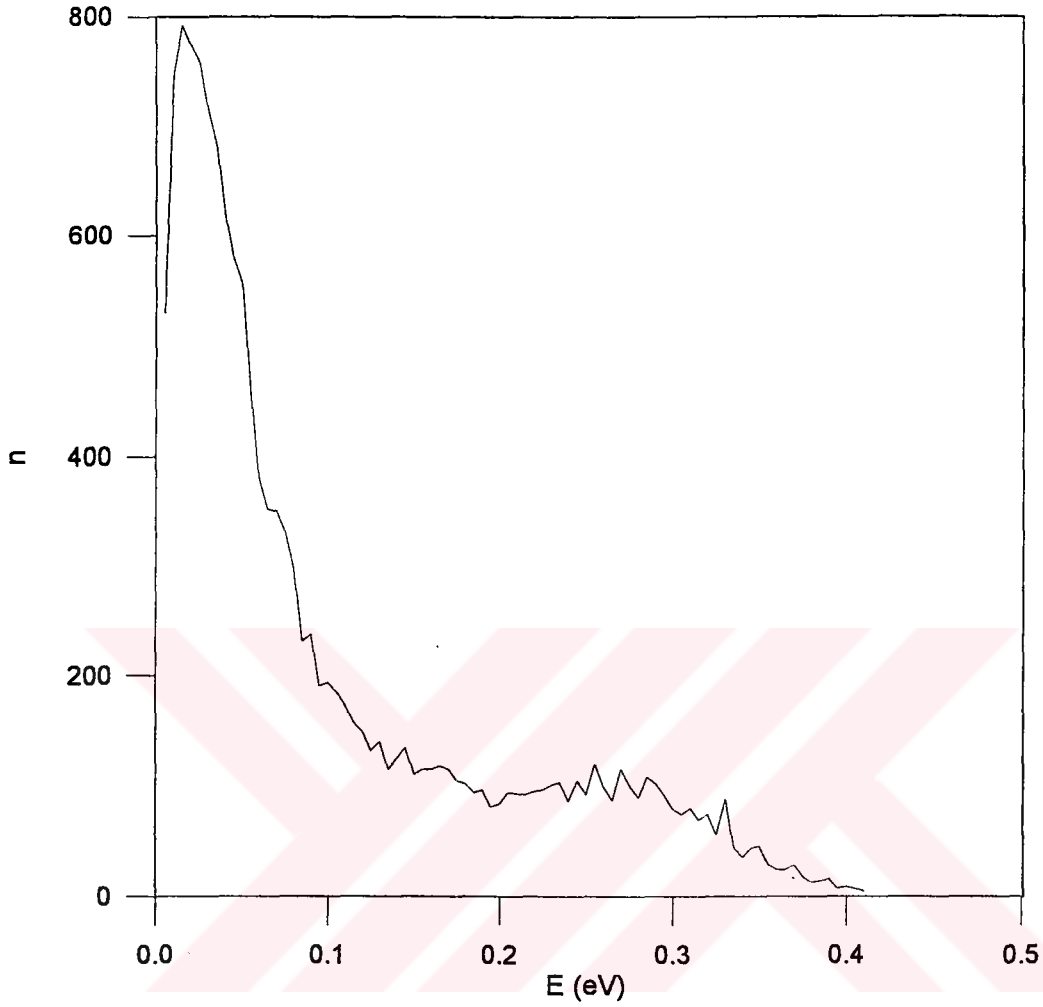
Şekil 4.18’de gözlenen ikincil pikler, düşük elektrik alanları ve 300°K’deki fononların enerjilerinin ($\approx 0,03$ eV) elektronlar tarafından soğurulması ile oluşmaktadır. Elektrik alanı arttığı zaman fononların enerjilerini soğuracak elektron sayısı azaldığından ikincil pikler oldukça küçülmekte ve hemen hemen kaybolmaktadır.

Bu grafiklerdeki parçacık dağılımlarının $n \approx e^{-E/k_B T}$ eşitliğine uyduğu gözlenmiştir.

Uygulanan elektrik alanının artması ile grafiklerdeki ikincil piklerin azaldığı ve elektronların ilk vadiyi terk ederek ikinci vadiye geçmeye başladıkları gözlenmiştir (Şekil 4.19’a bakınız).



Şekil 4.18. GaAs için elektron yoğunluğunun enerjiye göre dağılımı (uygulanan alan 0 V/m, parçacık sayısı 15000). Bu grafikteki parçacık dağılımı $n \approx e^{-E/k_B T}$ eşitliğine uymaktadır.

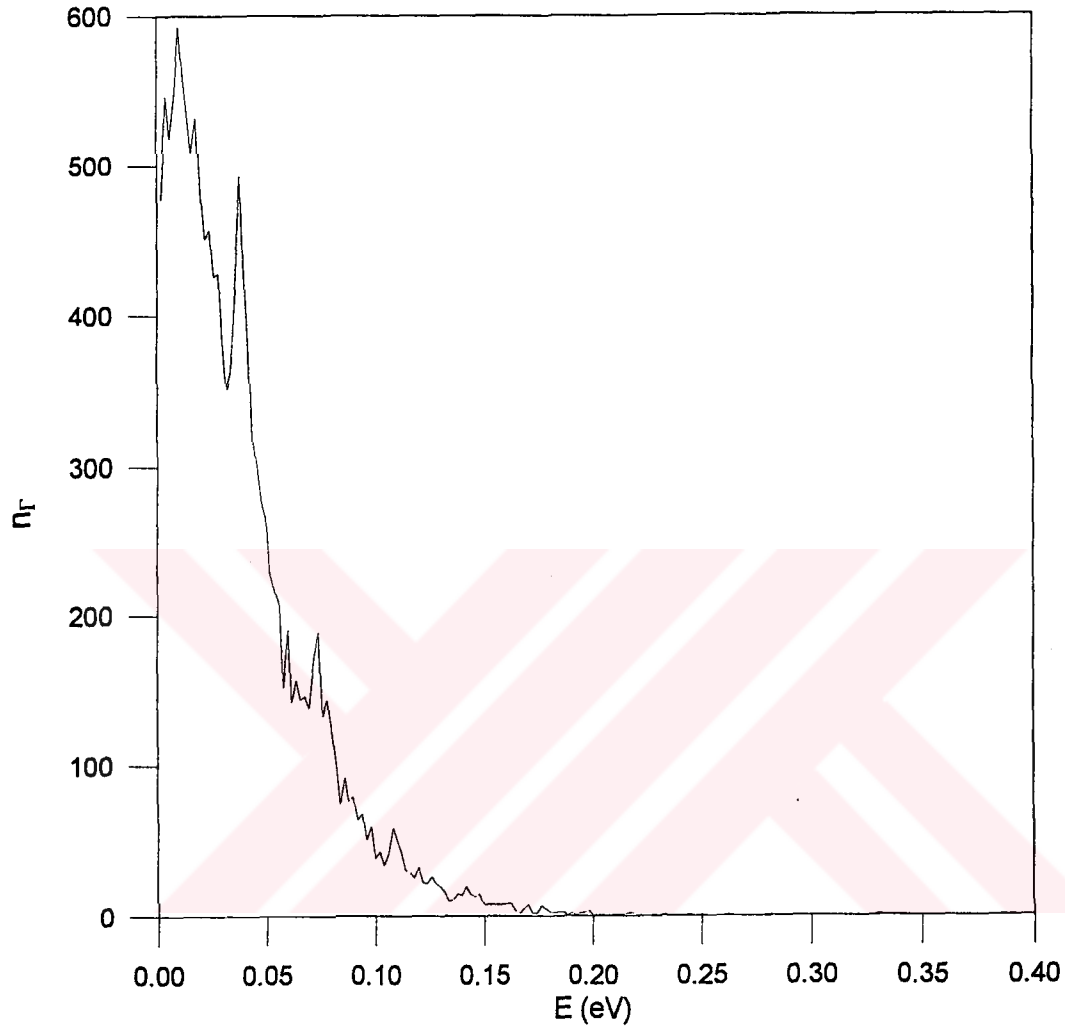


Şekil 4.19. Uygulanan elektrik alanın 1×10^6 V/m, sıcaklığın 300°K bulk GaAs için elektron yoğunluğunun enerjiye göre değişimi. Bu grafikte artık ikincil piklerin olmadığı ve elektronların ilk vadiyi terk ederek ikinci vadiye geçmeye başladıkları açıkça görülmektedir. Çünkü elektrik alan iyice artmış ve elektronların enerjileri de artarak diğer vadiye geçmeye başlamışlardır. Bu nedenle artık $n \approx e^{-E/k_B T}$ uyumu daha kötüdür.

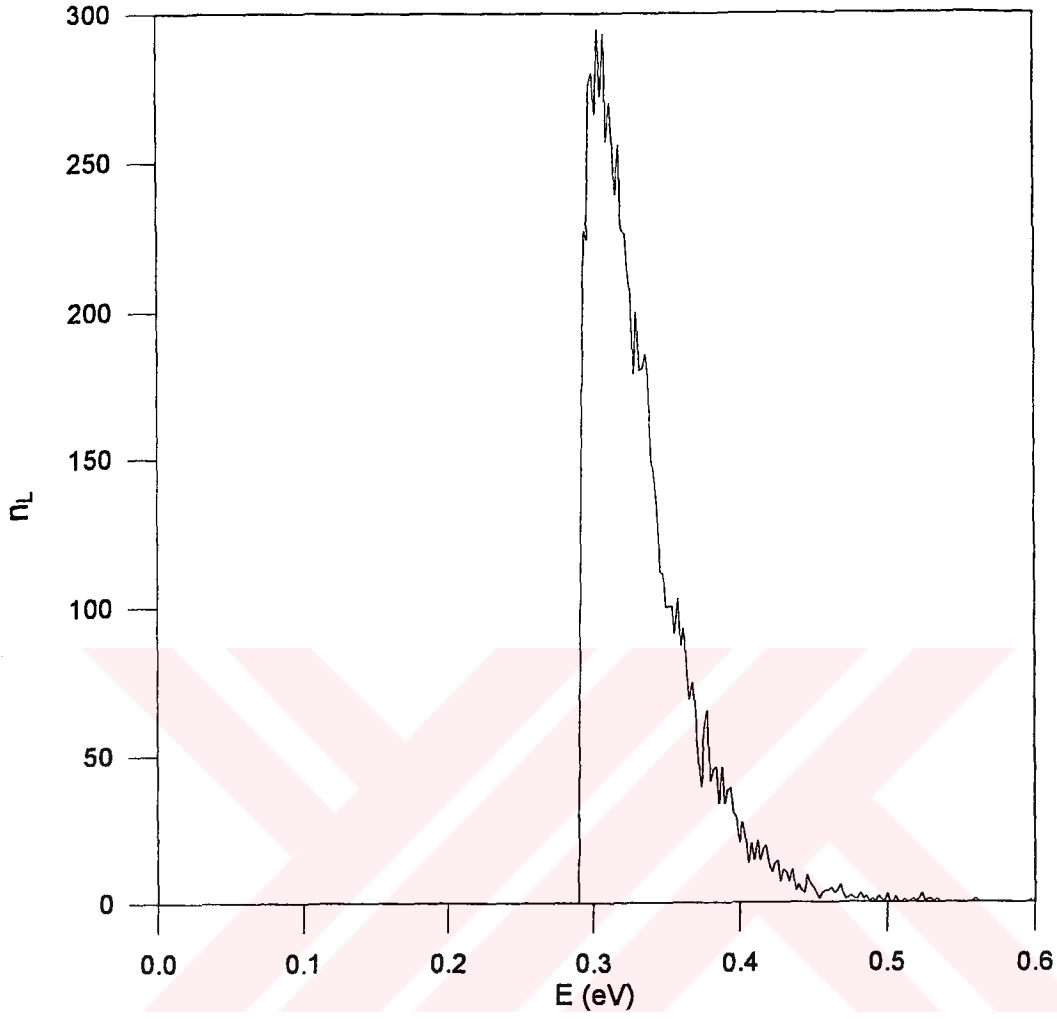
Elektronların her bir vadide nasıl dağıldıklarını gözlemek için Γ ve L vadilerindeki elektron yoğunlukları enerjinin bir fonksiyonu olarak ayrı ayrı sırası ile Şekil 4.20 ve 4.21’de gösterilmiştir.

Şekil 4.20’de gözlenen pikler yine elektronların fonon enerjilerini soğurmasından kaynaklanmaktadır.





Şekil 4.20. Safsızlık konsantrasyonu 1×10^{25} , $1/\text{m}^3$ sıcaklık 300°K , toplam parçacık sayısı 15000, minumum zaman artışı 5×10^{-15} s, uygulanan elektrik alanı 0 V/m ve simülasyon zamanı 500 ps için bulk GaAs in Γ -vadisindeki elektron sayısının enerjilerine göre çizimi. Bu grafiklerde gözlenmek istenen parçacıkların enerjilerinin artması ile vadiler arasındaki taşınım olayının nasıl gerçekleştiğidir.



Şekil 4.21. Safsızlık konsantrasyonu 1×10^{25} , $1/\text{m}^3$ sıcaklık 300°K , toplam parçacık sayısı 15000, uygulanan elektrik alanı 1×10^6 V/m ve simülasyon zamanı 500 ps için bulk GaAs in L-vadisindeki elektron sayısının enerjilerine göre çizimi. Parçacıkların bir kısmı L-vadisine geçmiştir.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışmada yarıiletken malzemelerin nümerik olarak simülasyonunun nasıl yapılabileceği araştırılmış ve böylece modelleme yardımı ile verilen bir yarıiletken aygıtın çeşitli koşullar altında karakteristiklerinin bulunması sağlanmıştır. Ayrıca çeşitli malzeme parametrelerinin ve ortam şartlarının etkisi de incelenmiştir.

Nümerik simülasyon yöntemi olarak üçüncü bölümde detayları verilmiş olan Monte Carlo metodu kullanılmıştır. Bu yöntemin kullanılması için literatürde bulunan alt programlar kullanılmış, bunlara ek olarak gerekli temel ve alt programlarda yazılmıştır. Bu tezde Monte Carlo yöntemi, düşük enerjiler (0-0.5 eV) ve elektron iletim bandının minimumuna yakın bölgelerinde bulunduğu durumlar için kullanılmıştır. Daha yüksek enerjilere çıkıldığında çok daha detaylı hesaplamaların yapılması gerektiği gibi burada temel olarak alınan Born yaklaşımı da artık kullanılamaz hale gelir, çünkü Born yaklaşımın da saçılma mekanizmalarının yarattığı pertürbasyonun çok küçük olduğu varsayılmıştır. Dahası simülasyonlar sadece bir boyut için yapılmıştır. Daha kapsamlı bir simülasyon için momentum uzayının tamamının taranması ve bütün enerji değerlerinin kullanılması gerekir. Fakat bütün bu eksikliklerine rağmen, yöntem kullanıldığı hali ile negatif diferansiyel direnç, yarıiletken içinde taşıyıcı hızının uygulanan alandan bağımsız ve sabit hale gelişi, yarıiletken malzemelerde gözlenen elektron hızının ani artış ve daha sonra kararlı hale gelişi (velocity overshoot), mobilitenin sıcaklık ile değişimi ve bazı yarıiletken cihazların çalışma prensipleri ve özellikleri gibi olguların doğru ve beklenen değerler içinde başarılı bir şekilde simülasyonuna izin vermiştir.

Negatif diferansiyel direncin tam olarak anlaşılması yıllar almış, burada üzerinde durulmayan Gunn etkisi ancak bu olgu ile açıklanabilmektedir. Yine yarıiletken aletlerde gözlenen malzemeden malzemeye farklılık gösteren ve cihazın çalışma prensiplerini boyutuna bağlı olarak etkileyen “velocity overshoot” olgusu da eldeki yöntem ile rahatlıkla simüle edilebilmiştir.

Dördüncü bölümün ilk kesiminde bulk GaAs için elektrik alanı–elektron hızı, elektrik alanı–elektron enerjisi, elektrik alanı–elektron doluluğu ve farklı safsızlık konsantrasyonları için elektrik alanı–elektron hızı grafikleri Tek Parçacık için Monte

Carlo metodu kullanılarak çizilmiştir. Bu grafiklerde dikkat edilmesi gereken önemli nokta negatif diferansiyel dirençtir.

Yine bu bölümde, Şekil 4.1 ve 4.4’de verilen elektron hızı-elektrik alan grafiklerinden faydalananarak mobilité hesabı da yapılmıştır. Bu yolla mobilitenin hem sıcaklığa hem de safsızlık konsantrasyonuna olan bağımlılığı incelenmiştir. Sıcaklık ve safsızlık konsantrasyonu arttıkça mobilitenin azalması gözlemlenen bir olgudur. Şekil 4.7’de fononlardan kaynaklanan mobilité hesaplanmış ve bu grafiğin eğiminin -1.78 olduğu görülmüştür. Eğer istenirse, iyonlardan kaynaklanan mobilité içinde aynı işlemler tekrarlanabilir.

İkinci kesimde Çok Parçacık için Monte Carlo metodu kullanılarak Si için elektron hızı-zaman ve elektron hızı-uzaklık grafikleri elde edildi. Bu grafikler yardımı ile elektrik alanının artması ile sürüklenme hızının nasıl değiştiği gözlemlendi. Bu kesimde gözlemlenen en önemli olgunun hızın aşırı yükselmesi (velocity overshoot) olduğu söylenebilir.

Dördüncü bölümün üçüncü kesiminde GaAs diyot için 0.75 ve 0.25 V gerilim farkı altında taşıyıcı yoğunluğu-uzaklık ve elektron hızı-uzaklık grafikleri çizildi. Ayrıca 0.75 V gerilim farkı altında potansiyel-uzaklık grafikleri de elde edildi. Bu grafiklerden 0.3-0.4 μm arasındaki taşıyıcı yığılmasının gerilim farkından kaynaklandığı anlaşıldı. Taşıyıcı hızı-uzaklık grafiklerindeki piklerin sıcaklığın azalması ile grafiğe göre soldan sağa doğru kaydığı yani, sıcaklık azaldıkça taşıyıcıların daha uzun sürede maksimum hıza ulaştıkları, ancak bu sıcaklıkların yüksek sıcaklıklardaki hızlardan daha fazla olduğu anlaşılmıştır.

Daha sonra bulk GaAs için, vadilere göre elektron dağılımlarının gözlenmesi için Çok Parçacık için Monte Carlo metodu kullanılarak cihaz simülasyonu yapıldı. Bu çalışmayla elektrik alanının elektron hareketi üzerindeki etkileri gözlemlendi.

Son olarak bulk GaAs için Γ ve L vadilerindeki elektron enerjisi-elektron sayısı grafikleri çizildi. Bu grafiklerden parçacıkların enerjilerinin artması ile vadiler arasındaki taşınım olayının nasıl gerçekleştiği gözlemlendi.

KAYNAKLAR

- ANDERSON, H. L., 1986. J. Stat. Phys. 43, 731.
- ASCHROFT, N. W., MERMIN N. D., 1976. Solid State Physics. Philadelphia: Sounders.
- BACCARANI, G., JACOBONI, C., MAZZONE A. M., 1977. Solid State Electr. 20, 5.
- BARKER, J. R. and FERRY, D. K., 1979. Self-scattering path-variable formulation of high-field, time dependent, quantum kinetics equation for semiconductor transport in finite- collision-duration regime. Phys. Rev. Lett. 26, 1779-81.
- BOARDMAN, A. D., FAWCETT, W. and RESSI H. D., 1968. Monte Carlo calculation of the velocity-field relationship for gallium arsenide. Solid State Communications 6, 305-7.
- BOSI, S. and JACOBONI, C., 1976. Monte Carlo high-field transport in degenerate GaAs. J. Phys. C: Solid State Physics 9, 315-9.
- BUDD, H., 1966. In: Proc. Int. Conf. Semiconductors, Kyoto. J. Phys. Soc. Japan Suppl. 21, 420.
- CANALI, C., JACOBONI, C., NAVA, F., OTTAVIANI, G. and ALBERIGI-QUARANTA, A., 1975. Electron Drift Velocity in Silicon, Phys. Rev. B, 12(4), 2265-2284
- FAUQUEMBERGUE, R., ZIMMERMANN, J., KASZYNSKI, A., CONSTANT, E. and MICROONDES, G., 1980. Diffusion and the power spectral density and correlation function of velocity fluctuation for electrons in Si and GaAs by Monte Carlo methods. J. Appl. Phys. 51, 1065-71.
- FAWCETT, W., 1973. In Electron in Crystalline Solids (Salam, A., ed.), p531. Vienna: IAEA.
- FAWCETT, W., BOARDMAN, A. D. and SWAIN, S., 1970. Monte Carlo Determination of electron determination of electron transport properties in gallium arsenide. J. Phys. Chem. Sol. 31, 1963-90.
- FAWCETT, W., HILSUM, C., REES, H. D., 1969a. Solid State Commun. 7, 1257.

- FAWCETT, W., REES, H. D., 1969b. Phys. Lett. 11, 731.
- FISCHETTI, V., M., and LAUX, S., E., 1988. Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects, Phys. Rev. B, 38(14), 9721-9745
- HAUSER, J. R., LITTLEJOHN, M. A., GLISSON, T. H., 1976. Appl. Phys. Lett. 28, 458.
- HOCKNEY, R. W., 1965. A fast direct solutions of Poissons equation using Fourier analysis. J Assoc Comput Machinery 12, 95-113.
- HOCKNEY, R. W., WARRINER, R. A. and REISER, M., 1974b. Two-dimensonal models in semiconductor device analysis. Electr. Lett. 10, 484-6.
- JACOBONI, C. and REGGIANI L., 1979. Bulk hot-electron properties of cubic semiconductors. Advances in Physics. 28, 493-553.
- JACOBONI, C. and REGGIANI L., 1983. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials, Rev. Mod. Phys., 55(3), 645-705
- JACOBONI, C., LUGLI, P., 1989. The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation, Springer-Verlag Wien New York, 356
- JACOBONI, C., NAVA, F., CANALI, C. and OTTAVIANI, G., 1981. Electron drift velocity and diffusivity in germanium, Phys. Rev. B, 24(2), 1014-1026
- KITTEL, C., 1976. Introduction to Solid State Physics, John Willey and Sons Inc., 646
- KIZILYALLI, I. C. and HESS, K., 1987. Ensemble Monte Carlo Simulation of a velocity modulation field-effect transistor (VMT) Jap. J. Appl. Phys. 26, 1519-24.
- KIZILYALLI, I. C., HESS, K. and IAFRATE, G. J., 1987. Electron Transfer between adjacent channels simulated by ensemble Monte Carlo Methods. J. Appl. Phys. 61, 2395-8.
- LEBWOHL, P. A., PRICE, P. J., 1971. Solid State Commun. 9, 1221 and Appl. Phys. Lett. 19, 530.
- L'ECUYER, P., 1990. Random numbers for simulation. Comm. ACM, 33: 85-97.

- LUGLI, P. and FERRY, D. K., 1985. Electron-electron interaction and high-field transport in Si. *Appl. Phys. Lett.* 46, 594-6.
- LÜTHI, B. and WYDER P., 1960. A Monte Carlo calculation for a size effect problem. *Helv. Phys. Acta.* 33, 667-74.
- MOGLESTUE, C. and BEARD, S. J., 1979. A particle model simulation of field effect transistor. In Browne, B. T. and Miller, J. J. H. (eds), *Numerical Analysis in Semiconductor Devices*, Boole Press, Dublin, 232-6.
- MOGLESTUE, C., 1993. *Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices*. Printed in Great Britain at the University Press, Cambridge. 325.
- NAG, B. R., 1980. *Electron Transport in Compound Semiconductors*, Springer-Verlag Berlin, 461
- NEDJALKOV, M. and VITANOV, P., 1989. Iteration approach for solving the Boltzmann equation with the Monte Carlo method. *Solid State Electronics.* 33, 407-10.
- PARK, D. H. and BRENNAN, K., 1990. Monte Carlo Simulation of 0.35- μm gate-length GaAs and InGaAs HEMT's *IEEE Trans Electron Devices.* 37, 618-28.
- PRICE, P. J., 1968. In: *Proc., 9th Int. Conf. Phys. Semic.* (Ryukin, S. M., ed.), p. 753. Leningrad: Nauka. 1968.
- PRICE, P. J., 1973. Transport properties of the semiconductor superlattice. *IBM J. Res. and Dev.* Jan. 1973, 39-46.
- RAE, A. I. M., 1992. *Quantum Mechanics*, IOP Publishing Ltd., London, 264
- REES, H. D., 1968. Calculation of steady state distribution function by exploiting stability. *Phys. Lett.* 26A, 416-7.
- REES, H. D., 1969. *J. Phys. Chem. Solids.* 30, 643.
- RIDLEY, B. K., 1982. *Quantum Processes in Semiconductors*, Clarendon Press, Oxford, 286
- RUCH, J. G., and FAWCETT, W., 1970. Temperature Dependence of the Transport Properties of Gallium Arsenide Determined by a Monte Carlo Method, *J. Appl. Phys.*, 41(9), 3843-3849

- THROUGNUMCHAI, K., ASADA, K. and SUGANO, T., 1986. Modelling of a 0.1- μm MOSFET on SOI structure using Monte Carlo simulation technique. *IEEE Trans Electron Devices*. 33, 1005-11.
- TOMISAWA, K., YOKOYAMA, K. and YOSHII, A., 1988. Non-stationary carrier dynamics in quarter-micron in Si MOSFET's *IEEE Trans Computer Aided Design*. 7, 254-8.
- TOMIZAWA, K., 1993. *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*, Artech House, Boston-London, 341.
- WANG, T. and HESS, K., 1985. Calculation of the electron mobility transistors using an ensemble Monte Carlo method. *J. Appl. Phys.* 57, 5336-9.
- WANG, T. and HESS, K., 1985. Calculation of the electron velocity distribution in high electron mobility transistors using an ensemble Monte Carlo method, *Journal of Applied Physics*, 57(12), 5336-5339
- WARRINER, R. A., 1977. Distribution function relaxation times in gallium arsenide. *IEE Proc I: Solid State and Electron Devices*. 13, 537-9.
- YU, P. Y., CARDONA, M., 1996. *Fundamentals of Semiconductors*. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, Germany. 617.

ÖZGEÇMİŞ

1970 Gaziantep-Oğuzeli doğumluyum. İlköğrenimimi Gaziantep'te, lise eğitimimi ise İskenderun'da tamamladım. 1993 yılında Erciyes Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nden mezun oldum. 239. Kısa Dönemde askerlik yükümlülüğümü yerine getirdim. Eylül, 1995 tarihinde Niğde Üniversitesi'nde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladım. Halen bu göreve devam etmekteyim. Şubat, 1996 tarihinde Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilimdalı'nda Yüksek Lisans eğitimine başladım. Evli ve bir çocuk babasıyım.



NOASVİT
MİLLÎ EĞİTİM BAKANLIĞI
T.C. MİLLÎ EĞİTİM BAKANLIĞI
T.C. MİLLÎ EĞİTİM BAKANLIĞI