

DOKUZ EYLÜL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YARI İLETKENLERDE YÜK TAŞIYICILARININ
TAŞINIM DENKLEMLERİNİN
MONTE CARLO YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMÜ

Evren KALAYCIKLIOĞLU

Eylül, 2008
İZMİR

**YARI İLETKENLERDE YÜK TAŞIYICILARININ
TAŞINIM DENKLEMLERİNİN
MONTE CARLO YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMÜ**

**Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Yüksek Lisans Tezi
Fizik Anabilim Dalı**

Evren KALAYCIKLIOĞLU

**Eylül, 2008
İZMİR**

YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU

EVREN KALAYCIKLIOĞLU tarafından Yrd. Doç. Dr. KADİR AKGÜNGÖR yönetiminde hazırlanan "YARI İLETKENLERDE YÜK TAŞIYICILARININ TAŞINIM DENKLEMLERİNİN MONTE CARLO YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMÜ" başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

.....
Yrd. Doç. Dr. Kadir AKGÜNGÖR

Danışman

.....
Prof. Dr. İsmail SÖKMEN

Jüri Üyesi

.....
Prof. Dr. Serap ALP

Jüri Üyesi

Prof. Dr. Cahit HELVACI

Müdür

Fen Bilimleri Enstitüsü

TEŐEKKÜR

Bütün üniversite öğrenimim süresince bana yardımcı olan, yol gösteren, tez çalışmalarımnda bana bütün bilgisini ve ilgisini sunan, destek olan, sonsuz sabrını veren Sayın Yrd. Doç. Dr. Kadir AKGÜNGÖR'e,

Bana sınırsız konular öğreten, bir çok bilgiyi kazanmamı sağlayan ve sadece varlığı ile bile güven veren Sayın Prof. Dr. İsmail SÖKMEN'e,

Çok büyük yardımları ve desteęi olan, yolun sonuna kadar hedeften şaşmamamı sağlayan, çok yardımsever arkadaşım Araş. Gör. Sevil SARIKURT'a

sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Evren KALAYCIKLIOĞLU

YARI İLETKENLERDE YÜK TAŞIYICILARININ TAŞINIM DENKLEMLERİNİN MONTE CARLO YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMÜ

ÖZ

Yarı iletkenlerdeki yük taşıyıcılarının hareketlerinin ve taşınım denklemlerinin analiz edilmesi, yarı iletken aygıtların gelişimi için büyük önem taşımaktadır. Bu analizler için gereken etkileşmelerin, elektronik etkileşmelerin, bant yapısının tanımlamaları yapıldıktan sonra fonon saçılması, safsızlık saçılması gibi saçılma işlemlerinin tanımlaması ve fiziksel olarak çözümlenmeleri yapılmıştır.

Bu analizlerin yapılmasının kolaylaştırılması için bilgisayar simülasyonu kullanılmıştır ve bu sayede nümerik değerler üzerinden kolayca çalışma imkanı bulunmuştur. Bu simülasyonlar için Monte Carlo yöntemi kullanılmıştır. Monte Carlo yönteminin çok geniş bir şekilde ve kolaylıkla yük taşıyıcıların taşınım denklemlerine uygulanabiliyor olması, işi oldukça kolay ve verimli hale getirmektedir.

Monte Carlo yöntemi hakkında genel bir bilgi verildikten sonra saçılma işlemlerinin uygulamalarının bu yöntemle nasıl uyarlanacağı üzerine çalışılmıştır. Yazılan Monte Carlo programının bazı bölümlerinin hangi fiziksel problemi çözmek için kullanıldığı anlatılmıştır. Bundan sonra bulk GaAs üzerinde uygulanan elektrik alan, sıcaklık ve safsızlık konsantrasyonu değerleri değiştirilerek hareket hesapları yapılmış ve sonuçlar üzerinde karşılaştırmalar ve değerlendirmeler yapılmıştır.

Anahtar sözcükler: Saçılım, saçılma teorisi, Monte Carlo yöntemi, yarı iletken, mobilite, simülasyon

THE SOLUTION OF CARRIER TRANSPORT EQUATIONS IN SEMICONDUCTORS BY USING MONTE CARLO METHOD

ABSTRACT

The analysis of motions and transport equations of carrier transport in semiconductors take great importance for development of semiconductor devices. The definitions and physical solutions of scattering processes such as necessary interactions for these analysis, electronic interactions, phonon scattering after doing definitions of band structure, impurity scattering are considered.

To make simpler of these analysis computer simulations are used and by the agency of this possibility of study over the numerical values are found easily. For these simulations Monte Carlo method is used. Monte Carlo method applicable to carrier transport equations widely and easily. Therefore, calculations become simpler and efficient.

After giving general information about Monte Carlo method, calculations are done about applications of scattering processes, how to adapt to this method. Some parts of Monte Carlo program which are used for solving whichever physical problem are explained. After that, calculations of motion are done thereby values of applied electric field on bulk GaAs, temperature and concentration of impurity are changed, comparisons and evaluations are done about the results.

Key Words: Scattering, scattering theory, Monte Carlo Method, semiconductor, mobility, simulation

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU	ii
TEŞEKKÜR	iii
ÖZ	iv
ABSTRACT	v
BÖLÜM BİR - GİRİŞ	1
BÖLÜM İKİ - MONTE CARLO YÖNTEMİ	3
2.1 Monte Carlo Yöntemi	3
2.2 Rastgele Sayı Üretici	4
BÖLÜM ÜÇ - YARI İLETKEN TEMELLERİ	6
3.1 Bir Bant Yapısındaki ve Kristaldeki Elektronlar	6
3.2 Bant Modeli	7
3.3 Elektron Dinamiği	8
3.4 Örgü Titreşimleri (Fononlar)	10
BÖLÜM DÖRT-TAŞIYICI SAÇILIMI	13
4.1 Saçılımın Kuantum Mekaniksel Teorisi	13
4.2 Safsızlık Saçılımı	23
4.3 Fonon Saçılımı	29
4.3.1 Akustik Fonon Saçılımı	32
4.3.2 Kutupsal Olmayan Optik Fonon Saçılımı	38
4.3.3 Kutupsal Optik Fonon Saçılımı	40

BÖLÜM BEŞ - MONTE CARLO TAŞIYICI HESAPLARI . . .	51
5.1 Tek Parçacık Monte Carlo Simülasyonu	51
5.1.1 Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu	53
5.1.2 Sürüklenme İşlemi	56
5.1.3 Saçılma İşlemi	56
5.1.4 Hareket Hesabı	63
5.2 Yığın Elektronlar İçin Toplu Monte Carlo Simülasyonu	65
5.2.1 Toplu Parçacık Hareketi	65
BÖLÜM ALTI - SONUÇLAR	69
KAYNAKLAR	81

BÖLÜM BİR

GİRİŞ

Yarı iletkenlerdeki yük taşıyıcılarının hareketlerinin incelenmesi ve analiz edilmesi, elektronik aygıtların geliştirilmesinde çok büyük önem taşımaktadır. Bu inceleme ve analizlerin yapılabilmesi için etkileşmelerin, elektronik etkileşmelerin, bant yapısının çok iyi bilinmesi gerekmektedir. Yük taşıyıcılarda bu çalışmaların yapılması, yapısında yarı iletken bulunduran diyot, transistör ve transistörlerin özel işler için düzenlenmiş ve toplanmış hali olan entegre devre, mikrokontrolör, işlemci gibi yapıların gelişmesini sağlamaktadır.

Bahsedilen yük taşıyıcıların analiz edilmesi deneysel yollar ile çok maliyetli ve uzun süreli işlemlerdir. Bunun yerine bilgisayar simülasyonları ile yük taşıyıcıları üzerinde araştırma yapılabilir. Bu sayede hem zamandan hem de maliyetten çok büyük kazanç sağlanmaktadır. Bilgisayar simülasyonları kullanılarak araştırmalar yapılacakken en önemli nokta, gerekli her şeyin çok dikkatlice kullanılmasıdır. Göz ardı edilen bir parametre, değer ya da olasılık, sistemde çok önemli etkilere yol açıyor olabilir ve deneysel sonuçlardan çok uzaklara gidebilir. Bu nedenle simülasyon öncesi her etkileşim her olasılık dikkatlice ele alınıp hesaplanmalı, hangisinin hesaba katılmasının gerekli olup olmadığı belirlenmelidir.

Bilgisayar simülasyonları ile taşıyıcıların simüle edilmesinde en çok başvurulan yöntem Monte Carlo yöntemidir. Monte Carlo yöntemi, yük taşıyıcılarının incelenmesine çok kapsamlı bir şekilde uygulanabilmekte, hem tek parçacık için hem de yığın modeller için Monte Carlo yöntemi uygulanabilmektedir. Böylece ister tek bir parça üzerinde ister bir yığın üzerinde geçiş süreleri, sıcaklık, safsızlık oranları gibi değerleri değiştirerek, sisteme yaptığı değişimleri sayısal olarak görebilmekte ve analiz edebilmekteyiz.

Bu çalışmaların hızlanması ve gelişmesi sayesinde yük taşıyıcıları üzerine daha çok bilgi edinilmekte, yarı iletkenlerin geliřtirmeleri her gün daha ileri seviyelere ulaşmaktadır. Bu da özellikle günümüzün deęişmez bir parçası olan bilgisayarların, işlemci ve yonga setleri olmak üzere, hayatımızın her noktasında var olan yarı iletken aygıtların gelişimine büyük katkı sağlamaktadır.

Bu çalışmada öncelikle yarı iletkenlerin bant yapılarından, elektron hareketlerinden, örgü titreşimlerinden bahsedeceğiz. Ardından saçılma işlemlerini inceleyip sisteme etkilerine bakacağız. Bir sonraki adımda Monte Carlo yöntemini bizim yapımıza uygulayacağız ve son olarak GaAs üzerinde yük taşıyıcılarını inceleyeceğiz.

BÖLÜM İKİ

MONTE CARLO YÖNTEMİ

Monte Carlo yöntemi, çok büyük sayı kümelerinin rastgele örnekleme temeline dayalı bir yöntemdir. Bu yöntemde kullanılan Monte Carlo integrasyonu, çalışılan fonksiyonu, noktaların rastgele bir örnekleme üzerinden değerlendirip, bu rastgele örnekleme dayanarak integralin sonucunu bulmaktır.

2.1 Monte Carlo Yöntemi

Monte Carlo yöntemi matematiksel bir problemi çözmek için rastgele sayılar kullanan bir tekniktir. Monte Carlo yöntemi olarak bilinen sayısal metodlar istatistiksel benzetme metodları olarak da bilinir (Devries, 1994). Monte Carlo yöntemi çok uzun zamandır bilinmesine rağmen, son yirmi yıldan bu yana geliştirilerek, karmaşık problemlere ve uygulamalara yeterli yaklaşıklıkta çözümler üretebilecek düzeye getirilmiştir. Bu yöntemin adı, Monaco'nun başkenti olan Monte Carlo'nun bir kumar merkezi olmasından ve bu şans oyunlarının, sayıların istatistiksel dağılımının benzetiminden gelmesinden dolayıdır.

Monte Carlo yöntemi, dünya atmosferindeki radyasyon geçişinden, yüksek enerji fiziği deneylerine, şans oyunlarından hava tahminlerine kadar bir çok simülasyonda kullanılmaktadır.

İstatistiksel simülasyon metodları, bazı matematiksel ve fiziksel sistemleri tarif eden genel veya kısmi diferansiyel denklemler üzerine uygulanan sayısal mantık metodları olarak tanımlanırlar. Monte Carlo yönteminin birçok uygulamasında fiziksel işlevi doğrudan simüle edilebilir ve sistemin hareketini ifade eden diferansiyel denklemlerin yazılmasına ihtiyaç duyulmaz. İhtiyaç duyulan tek şey, sistemi açıklayan olasılık yoğunluğu fonksiyonunun bilinmesidir.

Bir fiziksel sistemin gelişiminin olasılık yoğunlukları ile tarif edilebileceği düşünülürse, Monte Carlo simülasyonu bunları kullanarak örnekleme yoluyla çözüme ulaşır. Problem üzerine bütün olarak dağıtılan rastgele sayıları üretmek için, hızlı ve etkili bir yöntem gerekmektedir. Bu rastgele örneklemlerin ve kararların sonuçları istenen problemin sonucunu üretmek için uygun bir yöntem ve kararlılıkta arttırılarak birbirleriyle ilişkilendirilmelidir (Binder, 1986). Monte Carlo yönteminin önemli karakteristiği, fiziksel problemin bir çözümüne ulaşmak için rastgele örnekleme tekniğini de kullanmasıdır. Diğer yandan uygun bir sayısal çözümün elde edilmesi fiziksel sistemin bilinmeyen durumları için diferansiyel denklemlerin çözümünün yapılarak sistemin matematiksel modeli ile başlar.

Monte Carlo yöntemi lineer denklemler sisteminin tersi ya da sınırlı bir integralin sonucu gibi stokastik içerik görünümüne sahip olmadığından, rastgele veya stokastik işlemlerin simülasyonunda gerçekteki gibi sınırlı değildir.

2.2 Rastgele Sayı Üretici

Monte Carlo yönteminde kullanılan rastgele sayıların sıralanması torbadan numara çekme, zar atma, yazı-tura, rulet masaları gibi bazı rastgele işlemlerle üretilebilir. Pratikte Monte Carlo hesaplamasında bilgisayar kullandığımız için rastgele sayıların üretilmesini de bilgisayara yaptırırız. İyi tanımlanmış bir aritmetik prosedüre göre üretilen sayıların gerçek rastgele sayılar gibi düşünülemezliği açıktır. Bu nedenle bilgisayarın ürettiği bu sayıları rastgelemsi (pseudorandom) olarak isimlendirebiliriz.

Bir çok metod kullanarak rastgele sayılar sırasını elde etmek mümkündür. Sıralamadaki her bir rakam kendisinden sonra gelecek rakamı bulmak için bazı matematiksel prosedürler kullanır. Böylelikle bütün sıralama ilk rakamı vermekle belirlenir. Rastgele sayı üreticilerinin üç sınıfı kullanılmaktadır,

bunlar; lineer çoğaltıcı, Fibonacci üretici ve Tausworthe üretici olarak bilinirler. Bilgisayar üzerindeki rastgele sayıları üreten matematiksel prosedür, bazı numaralardan sonra kendini tekrar eden bir sıralama da oluşturabilir. En yaygın aritmetik işlemlerden biri olan yöntem şöyledir:

$$X_n = C \bmod(X_{n-1}, N),$$

Burada tekrarlanma periyodunun mümkün olduğu kadar büyük olması tercih edilir. Periyodu artıran koşullar; (i) N değerinin büyük olması, (ii) başlangıç değerinin büyük ve tek sayı olması, (iii) $C = 8m \pm 3$, m 'nin pozitif tamsayı olmasıdır.

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

- a) Rastgele sayı üreticinin periyodu, simülasyon için yeterince uzun olmalıdır.
- b) Beklenmeyen sıkıntılarla karşılaşmamak için rastgele sayı üreticinin iyi yapılandırılmış olması gerekmektedir.
- c) Rastgele sayı üreticinin dağılımının değişmez olup olmadığı incelenmelidir.
- d) Normal eğride istatistiksel karar ve standart sapma kaydedilmelidir.
- e) Seçilen aralıkta üretilen sayı miktarının (N) 10.000'den fazla olması tercih edilmelidir.

şeklinde verilebilir.

BÖLÜM ÜÇ

YARI İLETKEN TEMELLERİ

3.1 Bir Bant Yapısındaki ve Kristaldeki Elektronlar

Yarı iletken kristal içindeki elektronlar, atomik çekirdekte ve elektronların kendilerinden ibaret olan bir periyodik kristal potansiyel içinde hareket ederler. Kristal içindeki elektron taşınımı üzerine çalışılırken, çok karmaşık bir çok-madde problemi ile ilgilinmemiz gerekir. Ancak, elektronun kristal içindeki hareketine gereken dikkati verirsek ve seçilen elektron üzerinde, atomik çekirdeğin ve diğer elektronların etkisinin yaklaşık olarak öngörölmüş potansiyelini $V(r)$ kabul edersek, çok-madde problemi tek bir elektrona indirgenmiş olur. $V(r)$ 'nin periyodikliği ile örgünün periyodikliği aynı olmak zorundadır. Bu özellik

$$V(r + la + mb + nc) = V(r) \quad (3.1.1)$$

olarak ifade edilir. Burada a,b ve c ilkel baz vektörleri, l,m ve n ise tamsayılardır.

Periyodik potansiyel $V(r)$ 'nin elektronik durumlarına karar verebilmek için, Schrödinger denklemini çözmemiz gerekmektedir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (3.1.2)$$

Burada $\Psi(r)$ belirlenecek olan özfonksiyonunu, E enerji özdeğerini, m_0 elektronun boşluktaki ağırlığını ifade etmektedir. Bloch teoremine göre

$$\Psi_k(r) = u_{k,j}(r)e^{ik \cdot r} \quad (3.1.3)$$

$u_{k,j}(r)$, $V(r)$ ile aynı periyodiklikte olduğundan

$$u_{k,j}(r + la + mb + nc) = u_{k,j}(r) \quad (3.1.4)$$

olarak yazılır. k elektronun dalga vektörünü, j bantların indekslerini ifade eder. Enerji özdeğeri $E_{k,j}$ ters örgünün periyodikliği ile periyodiktir, bu şekilde

$$E_{k+G,j} = E_{k,j} \quad G = ga^* + hb^* + kc^* \quad (3.1.5)$$

yazılır. g , h ve k tam sayılar, a^* , b^* ve c^* ise ters örgünün baz vektörleridir. Bu ters örgü vektörleri

$$a^* = 2\pi \frac{b \times c}{a \cdot b \times c} \quad b^* = 2\pi \frac{c \times a}{a \cdot b \times c} \quad c^* = 2\pi \frac{a \times b}{a \cdot b \times c} \quad (3.1.6)$$

$E_{k,j}$ ilişkisinin bütün bilgisi, enerji bant yapısı, $E_{k,j}$ periyodikliğinden dolayı ters örgünün bir periyodunda ifade edilebilir.

3.2 Bant Modeli

İletim bandı için, iletim bandının minimumu çevresindeki bölgelerde E_k k'nın ikinci dereceden fonksiyonu (k 'nın parabolik bantları)

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3.2.1)$$

etkin kütlelerin tersinin

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_k}{\partial k^2} \quad (3.2.2)$$

olduğu yerdir.

İletim bantları aşağıdaki formlarda kabul edilebilir.

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_l^2}{m_l^*} \frac{k_t^2}{m_t^*} \right] \quad (3.2.3)$$

Birinci denklem etkin m kütleli eş enerji yüzeyli bant yapısı içindir, bu basit yapılar için anlatılan modele uygundur. İkinci denklem ise elipsoidal eş enerji yüzeyleri içindir ve etkin kütle terimi içerir. Elipsler kristografik yönlerde çevrimsel simetriye sahiptir. Bu durumda k_l ve k_t sırası ile k 'nın boylamsal ve ters bileşimleridir.

Yarı iletkenlerde değerlik bantları hafif ve ağır hole bantlarından ve spin-orbit split-off bantlarından oluşur. İkinci derece $k \cdot p$ pertürbasyon teorisi, hafif ve ağır hole değerlik bantlarının $E - k$ ilişkilerini verir.

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)]^{1/2} \right\} \quad (3.2.4)$$

Burada m_0 elektronun boşluktaki ağırlığını, \pm hafif ve ağır hole bantları için durumu belirtir. A, B ve C değerleri sabit katsayılardır.

3.3 Elektron Dinamiği

Kristal içindeki elektronlar, kütlelerindeki değişimler hariç, boşluktaki bir elektron gibi davranırlar. Elektronun kristal içindeki bu hareketinden dolayı klasik hareket denklemleri ile tanımlanabilir.

Bir elektronun klasik hareketi toplam enerji tabanlı (Hamiltonian) hareket denklemleri üzerinden tanımlanır, $H = E_k + U$, E_k kinetik enerji, U ise potansiyel

enerjiyi ifade etmek üzere. İletim bandındaki elektronun Hamiltonian'ı

$$H = E_k + E_c(r) \quad (3.3.1)$$

E_k , kristalin momentumu ve etkin kütle terimleri olarak kinetik enerjiyi gösterir. $E_c(r)$ ise iletim bantının minimumudur,

$$E_c(r) = \text{sabit} - \chi(r) - eV(r) \quad (3.3.2)$$

olarak ifade edilir. $\chi(r)$ elektron çekimi, e elektron yükünün büyüklüğü, $V(r)$ elektrostatik potansiyeli ve *sabit* elektron enerjisinin referansı ile ilişkilidir. Materyal düzgün dağılım göstermişse, $\chi(r)$ değeri sabittir ve 3.3.2 denkleminde elenebilir.

Hareket denklemleri, Hamiltonian hareket denklemlerinin benzerlikleri ile kolayca oluşturulabilir.

$$\frac{dk}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \nabla H \quad (3.3.3)$$

$$\frac{dr}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k H \quad (3.3.4)$$

∇ ve ∇_k r durum vektörü ve k dalga vektörüne göre kısmi türevlerdir. Grup hızları:

$$v = \frac{\hbar k}{m^*} \quad (3.3.5)$$

ve

$$v = \frac{\hbar k_l}{m_l^*} + \frac{\hbar k_t}{m_t^*} \quad (3.3.6)$$

serbest elektron momentumunun kütleyle bölümünün benzer formudur.

Parabolik olmayan bantlar için grup hızı 3.3.4

$$v = \frac{\hbar k}{m^*} \frac{1}{\sqrt{1 + 4\alpha\gamma(k)}} \quad (3.3.7)$$

olarak hesaplanabilir.

3.4 Örgü Titreşimleri (Fononlar)

Örgü titreşimleri, oda sıcaklığında yük taşıyıcılarının enerji ve momentum durulma işlerine çok büyük katkıda bulunurlar. Bu nedenle, fononlara göre elektron saçılımı çok önemli bir durumdur.

Örgü titreşimleri iyonların salınımlarının bir bütünüdür çünkü kristal içindeki iyonlar birbirlerine sıkıca bağlanmışlardır. Bu nedenle, örgü alanındaki bir iyonun yerdeğiştirmesi R bunların normal modlarının üstüste binmesi olarak açıklanır.

$$u(R, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} e_q (a_q \exp^{iq \cdot R} + a_q^+ \exp^{-iq \cdot R}) \quad (3.4.1)$$

Burada q dalga vektörünü, w_q açısal frekansı, ρ kristalin kütle yoğunluğunu, Ω kristalin hacmini. a_q ve a_q^+ fonon dinamik değişkenlerini ve e_q kutuplanmanın fonon birim vektörünü gösterir. Denklem

$$u(R, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} e_q (a_q + a_{-q}^+) \exp^{iq \cdot R} \quad (3.4.2)$$

şeklinde yazılabilir.

a_q için hareket denklemi

$$\frac{d}{dt}a_q(t) = -i\omega_q a_q(t) \quad (3.4.3)$$

olarak verilir.

Bu anında takip eden harmonik salınım çözümünü verir.

$$a_q(t) = a_q \exp(-i\omega_q t) \quad (3.4.4)$$

Kuantum mekaniğin a_q ve a_q^\dagger 'yi sağlayan komutasyon ilişkisi:

$$a_q a_{q'}^\dagger - a_{q'}^\dagger a_q = \delta_{qq'} \quad (3.4.5)$$

Enerji operatörü Hamiltonian a_q ve a_q^\dagger olarak

$$H = \sum_q \hbar\omega_q \left(a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2} \right) \quad (3.4.6)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Hamiltonian operatörünü özdeğerini $|n_q\rangle$ ile gösterirsek, o zaman

$$a_q^\dagger a_q |n_q\rangle = n_q |n_q\rangle \quad (3.4.7)$$

ulaşmış oluruz.

Böylece

$$\epsilon_q = \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right) \quad (3.4.8)$$

enerji özdeğerini elde etmiş oluruz.

n_q kuantum durumunun enerjisinin $\hbar\omega_q$ 'nin n_q katlarını görmemizle, a_q ve a_q^\dagger matris elemanları olarak aşağıdaki denklemleri elde ederiz.

$$\langle n_q - 1 | a_q | n_q \rangle = \sqrt{n_q} \quad (3.4.9)$$

$$\langle n_q + 1 | a_q^\dagger | n_q \rangle = \sqrt{n_q + 1} \quad (3.4.10)$$

Yukarıdaki ilişki fononlara göre elektron saçılmalarını hesaplayacağımız zaman kullanacağız.

Fononlar Bose parçacıkları olduklarından, T sıcaklığında q modu ile Bose-Einstein dağılımına göre fononların sayısı

$$\langle n_q \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_q/k_B T) - 1} \quad (3.4.11)$$

ile belirtilir.

Fonon enerjisi çok küçük ya da örgü sıcaklığı $\hbar\omega_q \ll k_B T$ kadar yüksekse eşbölüşüm uygulanabilir, bu da

$$\langle n_q \rangle \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega_q} \quad (3.4.12)$$

denklemini verir.

BÖLÜM DÖRT

TAŞIYICI SAÇILIMI

4.1 Saçılımın Kuantum Mekaniksel Teorisi

Tam çözümü yapılabilen ve zamandan bağımsız H_0 Hamiltoniani ile temsil edilen bir sistem göz önüne alalım. E_k enerji özdeğerleri olmak üzere zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$H_0\Psi_k(\vec{r}) = E_k\Psi_k(\vec{r}) \quad (4.1.1)$$

şeklinde yazılabilir. Ψ_k durumlarının zamana bağıllığı

$$\Psi_k^0(\vec{r}, t) = \Psi_k(\vec{r})e^{-iE_k t/\hbar} \quad (4.1.2)$$

ile verilir ve bu fonksiyon aslında

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_k^0(\vec{r}, t)}{\partial t} = H_0\Psi_k^0(\vec{r}, t) \quad (4.1.3)$$

ile verilen zamana bağlı Schrödinger dalga denkleminin çözümüdür. Sisteme zamana bağlı bir H' pertürbasyonunun etki ettiğini varsayarsak sistemin toplam Hamiltoniani ve zamana bağlı Schrödinger denklemleri

$$H = H_0 + \lambda H' \quad (4.1.4)$$

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

olacaktır. Burada λ pertürbasyon yaklaşıklığının derecesini takip etmek için kullanılan bir parametredir ve işlemlerin sonunda 1'e eşitlenecektir. Pertürbasyon yoksa λ sıfırdır. H' pertürbasyonunun H_0 'a göre küçük olduğu varsayılmıştır.

$\Psi_k^0(\vec{r}, t)$ fonksiyonlar kümesi tam ortonormal bir set oluşturduğundan dolayı pertürbe olmuş sistemin çözümü, $\Psi_k^0(\vec{r}, t)$ 'nin lineer bir kombinasyonu olarak alınabilir. Bu durumda

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k C_k(t) \Psi_k^0(\vec{r}, t) = \sum_k C_k(t) \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (4.1.5)$$

yazılabilir. Bu çözüm Schrödinger dalga denkleminde yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= (H_0 + \lambda H') \Psi(\vec{r}, t) \\ i\hbar \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial t} \Psi_k(\vec{r}) + i\hbar \sum_k C_k(t) \Psi_k(\vec{r}) \left(\frac{-iE_k}{\hbar} \right) e^{-iE_k t/\hbar} \\ &= (H_0 + \lambda H') \sum_k C_k(t) \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

olduğu görülür. Bu denklem yeniden düzenlenerek

$$i\hbar \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial t} \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} = \lambda \sum_k H' C_k(t) \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (4.1.7)$$

elde edilir. C_k 'ya göre birinci mertebeden olan bu denklemler Schrödinger dalga denklemini ile aynı biçimdedir. Ayrıca eğer $\Psi(\vec{r}, t)$ normalize ise bu özellik kullanılarak

$$1 = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) dV = \int \left(\sum_{k'} C_{k'}^* \Psi_{k'}^* e^{-iE_{k'} t/\hbar} \right) \left(\sum_k C_k \Psi_k e^{-iE_k t/\hbar} \right) dV \quad (4.1.8)$$

yazılabilir.

$$\int \Psi_{k'}^* \Psi_k(\vec{r}) dV = \delta(k, k') \quad (4.1.9)$$

ifadesi kullanılarak

$$\sum_k |C_k(t)|^2 = 1 \quad (4.1.10)$$

elde edilir. Burada $|C_k(t)|^2$ sistemin t zamanında pertürbe olmamış k durumunda bulunma olasılığıdır. Bunun yanında

$$\begin{aligned} \int \Psi_{k'}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) dV &= \int \sum_k C_k \Psi_{k'}^*(r) \Psi_k(r) e^{-iE_k t/\hbar} dV \\ &= C_{k'}(t) e^{-iE_{k'} t/\hbar} \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

$$C_{k'}(t) = e^{iE_{k'} t/\hbar} \int \Psi_{k'}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) dV$$

ifadesinin karesi alınırsa Dirac bra-ket notasyonuna göre olan aşağıdaki sonuç elde edilir.

$$|C_{k'}(t)|^2 = |\langle \Psi_{k'}(\vec{r}) | \Psi(\vec{r}, t) \rangle|^2 \quad (4.1.12)$$

Şimdi $C_k(t)$ için bir eşitliğin bulunması amacıyla 4.1.7 numaralı denklem $\Psi_{k'}^* e^{-iE_{k'} t/\hbar}$ ile çarpılıp hacim üzerinden integrali alınırsa

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}}{\partial t} = \lambda \sum_k \langle k' | H' | k \rangle C_k(t) e^{i(E_{k'} - E_k) t/\hbar} \quad (4.1.13)$$

elde edilir. Buradaki Dirac bra-ket notasyonu

$$\langle k' | H' | k \rangle = \int \Psi_{k'}^* H' \Psi_k dV \quad (4.1.14)$$

olarak yazılabilir. Zayıf bir pertürbasyon için $C_k(t)$ 'deki değişimin de yavaş olması

beklenir. $C_k(t)$, λ için bir kuvvet serisi olarak açılırsa

$$C_k(t) = C_k^{(0)}(t) + \lambda C_k^{(1)}(t) + \lambda^2 C_k^{(2)}(t) + \dots \quad (4.1.15)$$

olur. Bu açılım 4.1.13 diferansiyel denkleminde yerine konulursa

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \frac{\partial C_{k'}^{(0)}}{\partial t} + \lambda \frac{\partial C_{k'}^{(1)}}{\partial t} + \lambda^2 \frac{\partial C_{k'}^{(2)}}{\partial t} + \dots \right\} \\ = \lambda \sum_k \langle k' | H' | k \rangle \left(C_k^{(0)} + \lambda C_k^{(1)} + \lambda^2 C_k^{(2)} + \dots \right) e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar} \end{aligned} \quad (4.1.16)$$

elde edilir. λ ya göre katsayıları aynı olan terimler eşitlenebilir

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}^{(0)}}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad C_{k'}^{(0)} = \text{sabit} \quad (4.1.17)$$

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}^{(1)}}{\partial t} = \sum_k \langle k' | H' | k \rangle C_k^{(0)}(t) e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar}$$

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}^{(2)}}{\partial t} = \sum_k \langle k' | H' | k \rangle C_k^{(1)}(t) e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar}$$

⋮

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}^{(n)}}{\partial t} = \sum_k \langle k' | H' | k \rangle C_k^{(n-1)}(t) e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar} \quad (4.1.18)$$

zayıf bir etkileşim olduğu varsayılırsa sadece birinci mertebeden olan terimi almak yeterli olur. Başlangıç koşulu olarak sistemin k_i durumunda olduğu varsayıldığında $C_{k_i}^{(0)}(0)$ dışında kalan tüm terimler sıfır olur

$$\begin{cases} C_{k_i}^{(0)}(0) = 1 \\ C_k^{(0)}(0) = 0 \quad , \quad k \neq k_i \text{ ise} \end{cases} \quad (4.1.19)$$

ve

$$C_k^{(1)}(0) = 0 \quad \text{tüm } k \text{ değerleri için} \quad (4.1.20)$$

olarak yazılabilir. Sadece birinci mertebeden pertürbasyonu göz önüne alacağımızdan dolayı $C_k^{(1)}(t)$ teriminde üst indis atılarak basitçe $C_k(t)$ yazabiliriz. $C_k(t)$ için birinci mertebeden diferansiyel denklem aşağıdaki gibi olur

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}(t)}{\partial t} = \langle k' | H' | k \rangle \underbrace{C_{k_i}^{(0)}(t)}_{\text{sabit}} e^{i(E_{k'} - E_{k_i})t/\hbar} \quad (4.1.21)$$

$$i\hbar \frac{\partial C_{k'}(t)}{\partial t} = \langle k' | H' | k \rangle e^{i(E_{k'} - E_{k_i})t/\hbar} \quad (4.1.22)$$

H'_0 zamandan bağımsız olmak üzere aşağıdaki gibi harmonik bir pertürbasyon göz önüne alınabilir

$$H' = H'_0 e^{\pm i\omega t} \quad (4.1.23)$$

H' gerçektir olduğundan artı ve eksi işaretlerden her ikisini de almalıyız. Kompleks bir $z = x + iy$ sayısı için

$$x = \frac{1}{2}(z + z^*) \quad y = \frac{1}{2i}(z - z^*) \quad (4.1.24)$$

olarak yazılabilir, böylece

$$H' = H'_0 \sin \omega t = H'_0 \frac{[e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}]}{2i} \quad (4.1.25)$$

$$H' = H'_0 \cos \omega t = H'_0 \frac{[e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}]}{2i}$$

olur. Bu harmonik potansiyel denklem 4.1.22' de kullanılır ve

$$\xi = \frac{E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega}{2\hbar}$$

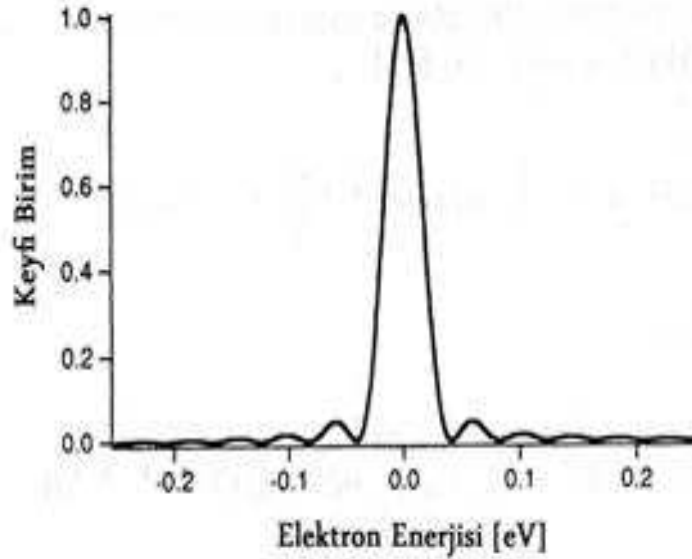
dönüşümü yapılırsa

$$C_{k'}(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle k' | H_0 | k_i \rangle e^{iut} \left(\frac{\sin(\xi t)}{\xi t} \right) t \quad (4.1.26)$$

elde edilir. Bir elektronun t zamanında \vec{k}' durumunda bulunma olasılığı $|C_{k'}(t)|^2$ ile verilir. O zaman birim zamandaki geçiş olasılığını veren geçiş oranı aşağıdaki gibidir:

$$S(\vec{k}_i, \vec{k}') = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|C_{k'}(t)|^2}{t} \quad (4.1.27)$$

$$S(\vec{k}_i, \vec{k}') = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|\langle k' | H_0 | k_i \rangle|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin(\xi t)}{\xi t} \right)^2 t \quad (4.1.28)$$



Şekil 4.1 $\left(\frac{\sin(\xi t)}{\xi t} \right)^2$ fonksiyonunun $t = 0.1$, $\xi = E/2\hbar$ ve E 'nin elektron enerjisi olduğu durumdaki gösterimidir.

t sonsuza giderken $\left(\frac{\sin(\xi t)}{\xi t} \right)^2$ fonksiyonu $\xi = 0$ civarında Dirac-delta fonksiyonuna benzer bir maksimum verir ve değerinin π/t olduğu burada

kullanılabilir. Buna göre $\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin(\xi t)}{\xi t} \right)^2$ fonksiyonu yerine $\frac{\pi}{t} \delta(\xi)$ ifadesi kullanılabilir. O zaman

$$S(\vec{k}_i, \vec{k}') = \frac{|\langle k' | H'_0 | k_i \rangle|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\pi}{t} \delta(\xi) \right) t \quad (4.1.29)$$

$$S(\vec{k}_i, \vec{k}') = \frac{\pi}{\hbar^2} |\langle k' | H'_0 | k_i \rangle|^2 \delta \left(\frac{E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega}{2\hbar} \right) \quad (4.1.30)$$

elde edilir. $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ özelliği kullanılırsa

$$S(\vec{k}_i, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k' | H'_0 | k_i \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega) \quad (4.1.31)$$

sonucuna ulaşılır. Bu eşitlik "Fermi'nin Altın Kuralı" olarak bilinir. Bu denklem, yarı iletkenlerde taşıyıcılara uygulanacak olan saçılma teorisinin temel bir sonucudur. Eşitlikte görülen delta fonksiyonu enerjinin korunumu olarak açıklanabilir ve bu eşitlik saçılma zayıf ise geçerlidir. Delta fonksiyonundaki artı işareti ($E_{k'} = E_{k_k} - \hbar\omega$) yayınımlı, eksi işareti ise ($E_{k'} = E_{k_k} + \hbar\omega$) soğurulmayı gösterir. Bu çıkarımda tüm k' son durumlarının boş olduğu varsayılmıştır. Bazı durumlar dolu olabilir, o zaman bu varsayım geçerli olmaz. Bu etkinin hesaba katılabilmesi için çıkarımda durum yoğunluğunun kullanılması gerekir. Yani son durumlara bağlı enerjiler için durum yoğunluğu $D(\varepsilon_{k'})$ değerinin bilinmesine ihtiyaç vardır. Bu durumda elde edilebilir durumların sayısı $D(\varepsilon_k)(1 - f(\varepsilon_k))$ olur, parantez içindeki ifade durumların boş olma olasılığını verir. Fermi'nin Altın Kuralı'nın uygulanabilmesi için saçılma potansiyelinin tanımlanması gerekir. Böylece Dirac bra-ket notasyonunda gösterilen terim hesaplanabilir. Mutlak değer içindeki ifade matris elemanıdır. Yarı iletkenlerdeki elektronlar için pertürbe olmamış durumun dalga fonksiyonları, Bloch dalgalarıdır. Bu problemi daha iyi anlayabilmek için H'_0 pertürbe olmamış potansiyelin konuma bağlı kısmı Fourier serisine açılabilir

$$H'_0 = \sum_q U_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad , \quad -\infty \leq q \leq \infty \quad (4.1.32)$$

Burada U_q açılım katsayısıdır. Gerçek bir potansiyel için $(H'_0)^* = (H'_0)$ olmalıdır. Bu durum ancak $U_q^* = U_{-q}$ veya $U_{-q}^* = U_q$ olmaları durumunda gerçekleşir. Şimdi matris elemanlarını hesaplamak için Bloch dalgaları kullanılabilir

$$\Psi_k(r) = U(r)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (4.1.33)$$

$U(r)$ örgü periyodikliği, R 'ye eşit periyodik bir fonksiyondur. Bundan başka $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$ olduğundan $\Psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Psi_k(\vec{r})$ yazılabilir. Bloch dalgası matris elemanı içinde kullanılırsa

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \int U_{k'}^* e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \sum_q U_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} U_k(r) e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} dV \quad (4.1.34)$$

$$= \sum_q U_q \int U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{r}} dV \quad (4.1.35)$$

yazılabilir. Yukarıdaki integral kristal hacmi üzerinden alınmalıdır. Ancak \vec{r} 'nin her bir i hücresi için \vec{R}_i ile yer değiştirmesi yapılabilir, $U_k(\vec{r} + \vec{R}) = U_k(\vec{r})$ olduğundan dolayı integrale bu terimlerden herhangi bir katkı gelmez.

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \sum_q U_q \int \sum_{\text{hücre } \vec{R}_i} U_{k'}^*(\vec{r} + \vec{R}_i) U_k(\vec{r} + \vec{R}_i) e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot(\vec{r}+\vec{R}_i)} dV \quad (4.1.36)$$

Burada R üzerinden olan toplam $R = 0$ dahil tüm olası öteleme vektörlerini içerir.

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \sum_q U_q \int \sum_{\text{hücre } \vec{R}_i} U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{r}} e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{R}_i} dV \quad (4.1.37)$$

Denklemden $\sum_{\vec{R}_i} e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{R}_i} = N\delta(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})$ ifadesi kullanılabilir (Ashcroft ve Mermin, 1976) ve R üzerinden olan toplam integral dışına alınabilir

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \sum_q U_q \sum_{\vec{R}_i} e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{R}_i} \int_{\text{hücre}} U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) e^{i(\vec{q}-\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{r}} dV \quad (4.1.38)$$

burada N ilkel hücre sayısıdır.

$$\langle k' | H'_0 | k \rangle = \sum_q U_q N \int_{\text{hücre}} U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{k}' + \vec{k}) e^{i(\vec{q} - \vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{r}} dV \quad (4.1.39)$$

$$= U_{\vec{k}' - \vec{k}} \int_{\text{hücre}} U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) dV \quad (4.1.40)$$

Bu denklemde N normalizasyon sabitinin içine yerleştirilmiştir yani $U_k \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} U_k(\vec{r})$ ile yer değiştirilmiştir. Parabolik bantlar için her bir ilkel hücre üzerinden alınan bu integral yaklaşık olarak 1'e eşittir. Etkin kütle yaklaşımına göre yaklaşık parabolik olarak kabul edilen bantlar için Bloch dalga fonksiyonları düzlem dalgalarla yer değiştirebilir. Yani matematiksel olarak $U_k(r)$ yerine bir sabit alınabilir ve parabolik bantlar için m yerine m^* kullanılabilir. Buna göre parabolik bantlar için

$$I(k', k) \equiv \int U_{k'}^*(\vec{r}) U_k(\vec{r}) dV = 1 \quad (4.1.41)$$

ifadesi üst üste binme integrali olarak bilinir. Denklem 4.1.32 kullanılarak açılım katsayıları hesaplanabilir, bunun için

$$H'_0 = U(r) = \sum_q U_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (4.1.42)$$

ifadesinde her iki taraf $e^{-i\vec{q}' \cdot \vec{r}}$ çarpılarak hacim üzerinden integral alınırsa

$$\int U(r) e^{-i\vec{q}' \cdot \vec{r}} d^3r = V \delta(q, q') \quad (4.1.43)$$

$$\begin{aligned}\int U(r)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}d^3r &= V\sum_q U_q\delta(q, q') \\ &= VU_{q'}\end{aligned}\quad (4.1.44)$$

olur. Hacim $V = \Omega$ olmak üzere

$$U_q = \frac{1}{\Omega}\int U(r)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}dV \quad (4.1.45)$$

$$U_{k'-k} = \frac{1}{\Omega}\int U(r)e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}}dV \quad (4.1.46)$$

$$U_{k'-k} = \frac{1}{\Omega}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}U(r)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}dV \quad (4.1.47)$$

yazılabilir. Bu sonuç ile parabolik bantlar için bulunan $I(k', k) = 1$ sonucu denklem 4.1.40'ta kullanılırsa

$$\langle k'|H'_0|k\rangle = \frac{1}{\Omega}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}U(r)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}dV \quad (4.1.48)$$

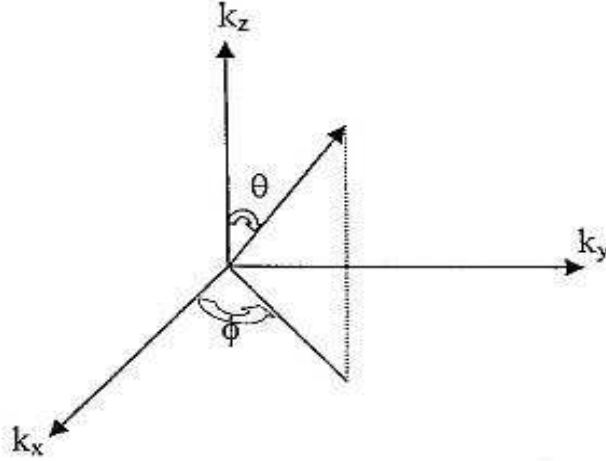
sonucu elde edilir.

Fermi'nin Altın Kuralı olarak bilinen eşitlik 4.1.31'deki $S(\vec{k}, \vec{k}')$ tüm \vec{k}' son durumları üzerinden integre edilerek saçılma oranı $W(k)$ elde edilebilir. Ters örgü uzayındaki bir dk' hacmindeki durumların sayısı $\frac{(2\pi)^3}{\Omega}$ biçimindedir (Kittel, 1996). Buna göre saçılma oranı

$$W(\vec{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int S(\vec{k}, \vec{k}')d\vec{k}' \quad , \quad d\vec{k}' = k'^2 \sin\theta d\theta d\phi dk' \quad (4.1.49)$$

$$W(\vec{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} S(\vec{k}, \vec{k}') k'^2 \sin \theta dk' d\theta d\phi \quad (4.1.50)$$

olarak elde edilir. Burada yer alan açılar Şekil 4.2 'de gösterilmiştir.



Şekil 4.2 Açılar seçimi

4.2 Safsızlık Saçılımı

Yarı iletken aygıt içindeki taşıyıcılar, 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, taşıyıcılar rastgele dağılmış iyonize safsızlıklardan dolayı saçılma uğrarlar. Bu olay iki gözlem ile açıklanabilir. Bunlardan ilki, 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 yükün yarattığı elektrostatik potansiyel Coulomb yasasına uyar. 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, iki farklı yöntem ile hesaplanmıştır. Bunlar Conwell-Weisskopf ve Brooks-Herring yaklaşımlarıdır (Ridley, 2000). Bu yaklaşımların her ikisi de Born yaklaşımını kullanmalarına rağmen, perdelenme potansiyelinin model içindeki kullanımı ile farklılaşırlar.

İlk önce yarı-ırsal denge şartı altında bulunan n -tipi bir yarı iletkendeki perdelenme potansiyelini hesaplayacağız. İyonize safsızlıklar ve denge halindeki taşıyıcıların her ikisinden dolayı oluşan elektrostatik potansiyeli hesaplamak için bir $Ze\delta(r)$ pozitif yükünün merkez olarak tabir edeceğimiz bir noktaya konulmuş olduğunu kabul edelim. Burada e elektronik yükün büyüklüğünü ve Ze ise safsızlık atomundaki yükü göstermektedir. δ -fonksiyonu ve $\delta(r)$ merkezdeki 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 $\delta = n - N_D^+$ kadar bir artışa neden olur. Burada N_D^+ iyonize olmuş donör sayısıdır.

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) = -\frac{e}{\varepsilon_s} [Z\delta(r) - \delta n] \quad (4.2.1)$$

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

$$\delta_n = n_0 e^{eV/k_B T} - n_0 \approx \frac{en_0}{k_B T} V \quad (4.2.2)$$

yazılabilir. Denklem 4.2.1'in 4.2.2'de kullanılmasıyla,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) - q_D^2 = -\frac{Ze}{\varepsilon_s} \delta(r) \quad (4.2.3)$$

elde ederiz. Burada,

$$q_D = \sqrt{\frac{e^2 n_0}{\epsilon_s k_B T}} \quad (4.2.4)$$

ve $1/q_D$ Debye Uzunluğu olarak bilinir. Denklem 4.2.3'ün özel çözümü

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_s r} e^{-q_D r} \quad (4.2.5)$$

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

$$H' = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_s r} e^{-q_D r} \quad (4.2.6)$$

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

$$\langle k' | H' | k \rangle = \frac{1}{\Omega} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_s} \int_{\Omega} e^{-ik' \cdot r} \frac{e^{-q_D r}}{r} e^{ik \cdot r} dr \quad (4.2.7)$$

elde edilir. 4.2.7 ifadesindeki integral kristal hacmi Ω üzerindedir. Böylece

$$\langle k' | H' | k \rangle = \frac{Ze^2}{\Omega\epsilon_s} \frac{1}{|q|^2 + q_D^2} \quad (4.2.8)$$

buluruz. Burada

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \quad (4.2.9)$$

saçılma işlemi sırasındaki momentum transferinin büyüklüğüdür. 4.2.8 ifadesinin 4.1.31 denkleminde yerine yazılmasıyla tek bir iyonize safsızlıktan oluşan saçılmaya bağlı olan geçiş oranını elde ederiz.

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{Ze^2}{\Omega\epsilon_s} \right)^2 \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{(q^2 + q_D^2)^2} \quad (4.2.10)$$

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

$$q^2 = (k' - k)^2 = 2k^2(1 - \cos \theta) \quad (4.2.11)$$

olacaktır. Burada θ , k' ve k arasındaki açıdır. Sonuç olarak, 4.2.10 denkleminin Ω hacmi içerisindeki safsızlıkların sayısı $N_I \Omega$ ile toplanması ve 4.2.11 eşitliğinin kullanılmasıyla

$$S(k, k') = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4}{\hbar \Omega \varepsilon_s^2} \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \quad (4.2.12)$$

elde ederiz. Saçılma oranı 4.2.12 ifadesinin 4.1.49 da yerine yazılması ile hesaplanabilir. Böylece,

$$W(k) = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4}{\hbar \Omega \varepsilon_s^2} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dk' \frac{k'^2 \sin \theta \delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \quad (4.2.13)$$

saçılma oranı elde edilir.

Daha önceden de tanımlandığı gibi, yukarıdaki ifadedeki integral ϕ 'ye bağlıdır ve bir zıt 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 kadar olan enerji aralığındaki k-uzayının hacmi $4\pi k'^2 dk'$, $N(E_{k'}) dE_{k'}$ ile yer değiştirebilir. Burada $N(E_{k'})$ birim enerji başına sonuç durumunun yoğunluğudur. Buradan k' integrali $E_{k'}$ ile yer değiştirebilir ve saçılma oranı,

$$W(k) = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \varepsilon_s^2} \int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \quad (4.2.14)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifade kolayca integre edilerek,

$$W(k) = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \varepsilon_s^2} \frac{1}{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)} \quad (4.2.15)$$

yazılabilir. Burada, daha önce de verilmiş olan durum yoğunluğu

$$N(E_k) = \frac{(2m^*)^{3/2} \sqrt{E_k}}{4\pi^2 \hbar^3} \quad (4.2.16)$$

şeklindedir.

Monte Carlo hesaplamalarında, saçılma oranının yanında 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 arasında düzgün bir rastgele sayı ile tanımlanıyordu. Böylece saçılma oranı ϕ 'den bağımsızdır.

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

$$P(\theta)d\theta = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \varepsilon_s^2} \frac{\sin \theta d\theta}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \quad (4.2.17)$$

olarak bulunur.

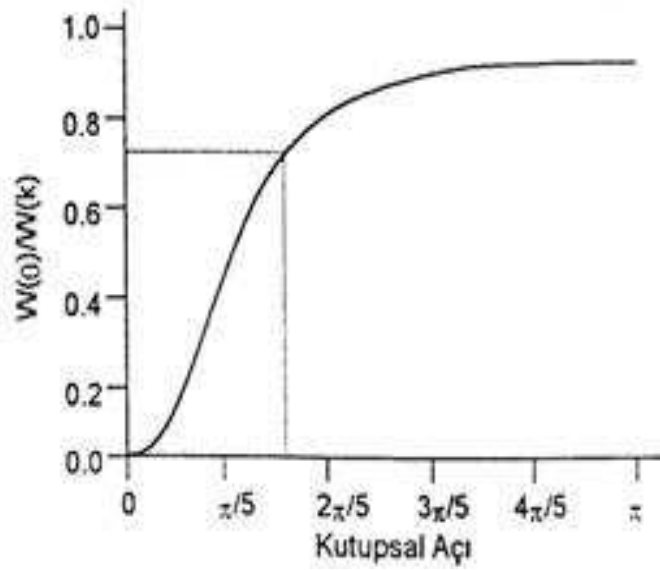
0 ile θ arasındaki saçılma olasılığı bir önceki ifadenin 0 ile θ arasında integre edilmesi ve 4.2.15 ifadesine bölünmesi ile,

$$\begin{aligned} \frac{W(\theta)}{W(k)} &= \frac{1}{W(k)} \int_0^\theta P(\beta) d\beta \\ &= \int_{-1}^{\cos \theta} \frac{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)}{2 [2(1 - \eta)k^2 + q_D^2]^2} d\eta \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

bulunur ve kolayca integre edilerek,

$$\frac{W(\theta)}{W(k)} = \frac{(1 - \cos \theta) \left[1 + \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2 \right]}{2 + (1 - \cos \theta) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (4.2.19)$$

elde edilir.



Şekil 4.3 Saçılma açısı olan θ 'nın, rastgele sayı ve $W(\theta)/W(k)$ 'nin kullanılmasıyla tanımlanması.

Saçılma açısı θ bir önceki denklem ve 0 ile 1 arasında düzgün bir dağılıma sahip olan bir rastgele sayı kullanılarak tanımlanabilir.

$$\cos \theta = \frac{2r}{1 + (1 - r) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2} \quad (4.2.20)$$

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 bu nedenle saçılma oranı daha önce verilen ifadeden farklıdır. Bu farklılığı ortadan kaldırmak için Conwell ve Weisskopf, safsızlıklar ile temel yan uzaklık arasında bir kesmeye sahip olan basit bir Coulomb potansiyeli kullanmışlardır. Burada,

$$b_{max} = \frac{N_I^{-1/3}}{2} \quad (4.2.21)$$

dir ve etki parametresi olarak tanımlanır. Etki parametresi, Rutherford teorisi ile verilebilen minimum kusur açısı θ_{min} ile ilişkilidir.

$$\cos \theta_{min} = 1 - \frac{2}{1 - \left(\frac{8\pi\epsilon_s b_{max} E_k}{e^2} \right)^2} \quad (4.2.22)$$

4.2.14 denklemi ile verilen saçılma oranı ifadesindeki $\cos \theta$ 'lar $\cos \theta_{min}$ ile değiştirilerek integre edilirse,

$$W(k) = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon_s^2} \frac{1 + \cos \theta_{min}}{(4k^2 + q_D^2) [q_D^2 + (1 - \cos \theta_{min}) 2k^2]} \quad (4.2.23)$$

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).

4.3 Fonon Saçılımı

Yarı iletkenlerde oluşan saçılımların çoğu örgü titreşimlerinden kaynaklanır. Bundan dolayı bu saçılmaların temel özelliklerinin anlaşılması gerekir. Bir atom denge noktasından uzaklaştırılırsa bağ kuvvetleri onu geri dönmeye zorlar. Böylece denge noktası civarında bir salınım ortaya çıkar. Örgü dalgaları periyodik bir ortamda ilerlediğinden, Bloch dalgalarının özelliklerine çok benzer özellikler ortaya koyarlar. Bloch elektronları, kusursuz bir kristaldeki öz durumları verir, bu

elektronlar kristali oluşturan iyonların periyodik dizilimiyle oluşmuş periyodik potansiyel tarafından saçılma uğratılmazlar. Kristal potansiyelinin periyodikliğinin bozulması söz konusu olduğunda, kristalde ilerleyen elektronlar örgü titreşimlerinden dolayı saçılma uğrarlar. Kristaldeki bir iyonun küçük bir yer değiştirmesi, kristal potansiyelinde de küçük bir değişime neden olur, periyodiklikteki bu değişim ya da bozulma teorik olarak örgü titreşimlerinin genliği ile açıklanır. Bununla birlikte kristal potansiyelinin kendisini bilmek zor olduğundan, periyodiklikteki bu sapma "deformasyon potansiyel metodu" olarak adlandırılan olgusal bir yolla açıklanır. Örgü titreşimlerinin dalga doğası "fonon" olarak kuantize edildiğinden, örgü titreşimlerinin elektron hareketine etkisi "elektron-fonon etkileşimi" olarak ifade edilen bir kuantum yöntemi yardımıyla açıklanır.

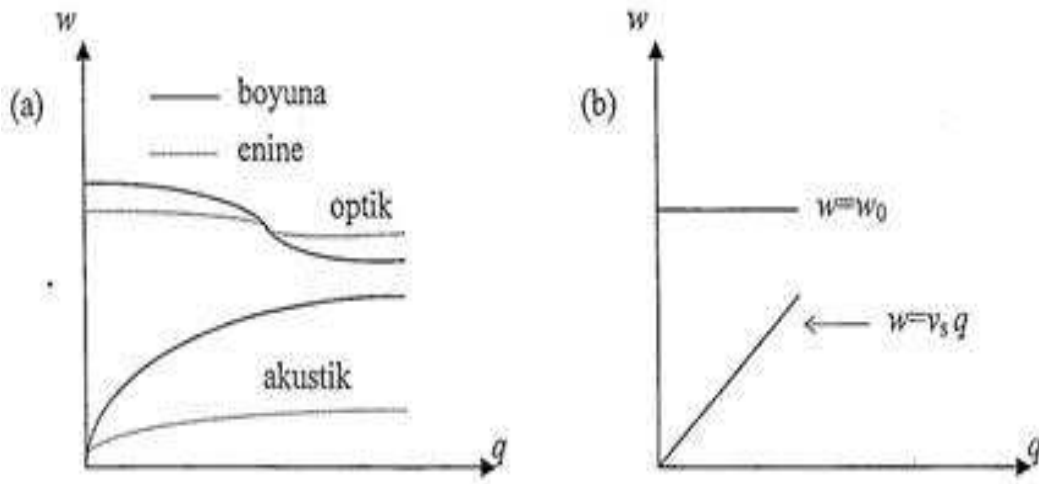
Elektron-fonon etkileşimi yarı iletken aygıtlardaki baskın saçılma mekanizmalarından birisidir. Böyle küçük ölçekteki aygıtlardaki taşıyıcılar, yüksek elektrik alan uygulanarak, daha yüksek enerji düzeylerine çıkarılabilirler. Bu nedenle fononların kendiliğinden yayınımları temel alan saçılmalar, düşük sıcaklıklarda bir kaç fonon bile olsa oluşabilirler.

Akustik ve optik olarak adlandırılan iki çeşit fonon modu vardır. Akustik moddaki fononlar ses dalgaları gibidir ve bu modda komşu atomlar aynı yönde hareket ederler. Optik fononlarda (bu titreşimler ışıkla güçlü biçimde etkileşime girdiğinden dolayı bu ismi almıştır) komşu atomlar birbirlerine zıt yönde hareket ederler. Akustik ve optik fonon saçılmaları, deformasyon potansiyeli yardımıyla açıklanabildiğinden, deformasyon potansiyel saçılması olarak adlandırılırlar.

Üçü akustik modlara ve üçü optik modlara karşılık gelen altı çeşit elastik dalga vardır. Akustik modlardan biri boyuna akustik diğer ikisi enine akustiktir. Boyuna dalgalar için atomlar ilerleme yönünde yer değiştirirler. Atomların enine yer değiştirdiği enine modlar kübik silikon ve GaAs için dejeneredir. Elektronlar

optik fononlar tarafından saçılarak aynı vadede kalırlarsa dağılım bağıntısı için w_0 bir sabit olmak üzere $w(q) = w_0$ yaklaşıklığı kullanılabilir. Brillouin bölgesi civarındaki küçük q değerleri için dağılım bağıntısı doğrusal görünmektedir ve v_s ses hızı olmak üzere aşağıdaki gibi yazılabilir

$$w(q) = v_s q \quad (4.3.1)$$



Şekil 4.4 a) İlerleyen elastik dalgaların kübik yarı iletkendeki tipik dağılımı.
b) Brillouin bölgesindeki boyuna örgü titreşimlerinin dağılımı.

Akustik ve optik deformasyon potansiyeli saçılmasına ek olarak bağların kutupsal doğasından dolayı bileşik yarı iletkenlerde güçlü bir etkileşme daha oluşabilir. Fononlardan dolayı oluşan örgüdeki yer değiştirmeler atomlar arasındaki dipol momentini bozar, bunun sonucunda oluşan elektrik alan, taşıyıcıların saçılmasına neden olur. Kutupsal saçılmalar, akustik veya optik fononlardan dolayı oluşabilir. Bunlar da sırasıyla piezoelektrik ve kutupsal optik saçılma olarak adlandırılır. Kutupsal optik saçılma bileşik yarı iletken yapılarıdaki taşıyıcılar için baskın saçılma mekanizmasıdır.

4.3.1 Akustik Fonon Saçılması

Akustik fonon saçılmasına ait saçılma oranlarının bulunabilmesi için önce denklem 4.1.14'deki matris elemanının hesaplanması gerekir. Matris elemanının hesabında ilk adım saçılmadan sorumlu olan pertürbasyon potansiyelini tanımlamaktır. Bir yarı iletkenin bant yapısı kristal potansiyeli tarafından belirlendiğinden, potansiyel örgü uzaklıklarındaki değişimlerden etkilenir. Basınç altındaki bir yarı iletkenin iletim bant kıyısında periyodik değişimler oluşur, bu nedenle örgü sabitinde de periyodik değişimler oluşur. Elektronun potansiyel enerjisi konuma bağlıdır ve $E_c(\vec{r}, t) - E_0^0 = \delta E_c$ elektron-iyon etkileşimine neden olan pertürbasyon potansiyelidir. Burada D değeri deneysel olarak bulunan deformasyon potansiyel sabiti olmak üzere

$$\delta E_c = \frac{\partial E_c}{\partial V} \delta V = V \frac{\partial E_c}{\partial V} \frac{\delta V}{V} = D \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \quad , \quad D \equiv V \frac{\partial E_c}{\partial V} \quad (4.3.2)$$

yazılabilir.

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

$$u(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(\frac{\hbar}{2m\omega_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (4.3.3)$$

şeklinde tanımlanabilir. Burada normal mod salınımı, ρ materyalin yoğunluğu, Ω kristalin hacmi olmak üzere süreklilik limiti yardımıyla yazılabilir;

$$\rho = \frac{mN}{\Omega} \quad (4.3.4)$$

$$u(\vec{r}, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.3.5)$$

\hat{e}_q birim polarizasyon vektörü, q dalga vektörü, ω_q salınımın açısal frekansı, N kristaldeki atom sayısıdır. Denklem 4.3.1 akustik fononlar için uzun dalga boyu limitinde ($q \rightarrow 0$) tanımlanmıştır. Denklemdeki $v_s = \sqrt{\frac{C_L}{\rho}}$ ses hızıdır ve C_L boyuna titreşimler için materyalin elastiklik sabitidir. Akustik fononlar için pertürbasyon potansiyeli denklem 4.3.2'te tanımlanmıştır. Sadece boyuna akustik fononların saçılmaya neden olduğu bir durum aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = i\vec{q} \cdot \vec{u} = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q \cdot \vec{q} (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.3.6)$$

$$\hat{e}_q \cdot \vec{q} = \begin{cases} 0 & \text{enine salınımlar için} \\ \neq 0 & \text{boyuna salınımlar için} \end{cases} \quad (4.3.7)$$

Polarizasyon vektörü dalga vektörüne paralel olarak alınırsa ($\hat{e}_q \cdot \vec{q} = q$) akustik fononlar için pertürbasyon potansiyeli

$$H' = \sum_q iqD \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.3.8)$$

olur.

Elektronlar için saçılmadan önce ve sonra, serbest elektron (düzlem dalga) çözümleri kullanılabilir. Yaratma ve yok etme operatörlerinin $n_q \pm 1, n_q$ durumları arasındaki matris elemanları sıfırdan farklı değerler alır. Burada n_q fonon sayısıdır.

$$\text{Fonon durumları} \quad |q\rangle = \prod_q |n_q\rangle \quad (4.3.9)$$

dalga fonksiyonları ve elektron durumları için

$$\text{Elektron durumları} \quad |k\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (4.3.10)$$

dalga fonksiyonları kullanılır ve fononlar için aşağıdaki matris özellikleri kullanılırsa

$$\begin{aligned} \langle n'|a|n\rangle &= 0 & n' \neq n-1 \\ \langle n-1|a|n\rangle &= \sqrt{n} \end{aligned} \quad (4.3.11)$$

$$\langle n+1|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}$$

denklem 4.1.14'deki matris elemanları (verilen pertürbasyon potansiyeli kullanılarak) hesaplanabilir (Shankar, 1980). Gerekli işlemlerden sonra

$$\langle k', n_q \mp 1 | H' | k, n_q \rangle = iqD \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} \begin{cases} \sqrt{n_q} \delta(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \\ -\sqrt{n_q + 1} \delta(\vec{k}' - \vec{k} + \vec{q}) \end{cases} \quad (4.3.12)$$

elde edilir. Burada her bir denklemdeki delta fonksiyonu, elektron-fonon etkileşimi sırasında kristal momentumunun korunduğunu gösterir. Bu sonuç, soğurulma ve yayılım işlemleri birleştirilerek Fermi'nin Altın Kuralı'nda yerine yazıldığında akustik fononlar için aşağıdaki geçiş oranı elde edilir

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{D^2 q^2 \hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_q) \quad (4.3.13)$$

Denklemdaki iki delta fonksiyonu enerji ve momentumun korunumunu ifade eder, artı işareti fonon soğurulması ve eksi işareti fonon yayılımını göstermek üzere aşağıdaki gibi iki denklem yazılabilir

$$E_{k'} = E_k \pm \hbar\omega_q \quad (4.3.14)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (4.3.15)$$

Parabolik ve küresel enerji bantları için enerjinin korunumu,

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar\omega_q \quad (4.3.16)$$

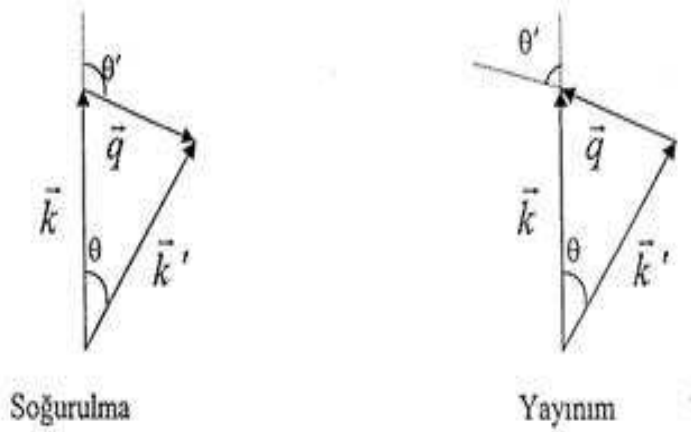
şeklindedir. Momentumun korunumu kullanılarak \vec{k}' denklemde yerine konulursa, iki ayrı delta fonksiyonu tek bir delta fonksiyonuna dönüştürülebilir:

$$\delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q})\delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_q) = \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar\omega_q\right) \quad (4.3.17)$$

burada θ' , Şekil 4.5'de gösterildiği gibi k ve q arasındaki kutupsal açıdır. Son delta fonksiyonu düzenlenirse, açı ile fonon dalga vektörü arasında aşağıdaki gibi bir ilişki elde edilir:

$$\cos \theta' = \frac{1}{2} \left(\pm \frac{q}{k} + \frac{\hbar\omega_q}{E_k} \frac{k}{q} \right) \quad (4.3.18)$$

Bu aynı zamanda fononların açısal frekansı, momentumu ve enerjisini temel alan momentum durumları arasındaki açıdır.



Şekil 4.5 Kutupsal açıların tanımları

Denklem 4.3.17'deki delta fonksiyonu kullanılarak geçiş oranı aşağıdaki gibi yazılabilir

$$S(k, k') = \frac{\pi D^2 q^2}{\rho \Omega \omega_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_q \right) \quad (4.3.19)$$

Akustik fonon enerjisi $\hbar \omega_q$ oda sıcaklığındaki $k_B T$ enerjisinden çok küçük olduğundan, eş bölüşüm ilkesi kullanılabilir. Böylece akustik fonon saçılımı elastik ($\hbar \omega_q = 0$) olarak kabul edilebilir. Bu yaklaşımlar altında geçiş oranı aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$S(k, k') = \frac{\pi D^2}{\hbar C_L \Omega} \frac{k_B T_L}{E_k} \left(\frac{k}{2q} \right) \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta' \right) \quad (4.3.20)$$

Bu sonucun k' üzerinden integrali alınarak saçılım oranı bulunabilir

$$W(k) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(k, k') d^3 \vec{k}' \quad (4.3.21)$$

Belirli bir \vec{k} değeri için $d\vec{k}' = d\vec{q}$ alınabilir;

$$W(k) = \frac{\Omega}{(8\pi)^3} \frac{\pi D^2}{\hbar C_L \Omega} \frac{k_B T_L}{E_k} \frac{k}{2} \int \frac{1}{q} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta' \right) d^3 \vec{q} \quad (4.3.22)$$

q üzerinden olan integral kutupsal koordinatlarda aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$I_q = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1}{q} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta' \right) q^2 \sin \theta' d\theta' d\phi dq \quad (4.3.23)$$

ϕ üzerinden olan integral son derece açıktır ve $\cos \theta'$ üzerinden olan integral δ - fonksiyonundan dolayı alınabilir. Denklem 4.3.18'deki $\cos \theta'$, -1 ile $+1$ arasında sınırlandırılmış olduğundan, q üzerinden olan integralde q_{min} ve q_{max} arasında sınırlıdır. $\hbar \omega_q = 0$ olarak alınmış olduğundan, q integralinin sınırları

aşağıdaki gibi verilir:

$$\begin{aligned} q_{min} &= 0 \\ q_{max} &= 2k \end{aligned} \quad (4.3.24)$$

Bu sonuçlar kullanılarak integral aşağıdaki gibi yazılabilir

$$I_q = 2\pi \int_{q_{min}}^{q_{max}} q dq = \pi(q_{max}^2 - q_{min}^2) = 4\pi k^2 \quad (4.3.25)$$

Böylece saçılma oranı

$$W(k) = \frac{\pi D^2 k_B T_L}{\hbar C_L} D(\varepsilon_k) \quad (4.3.26)$$

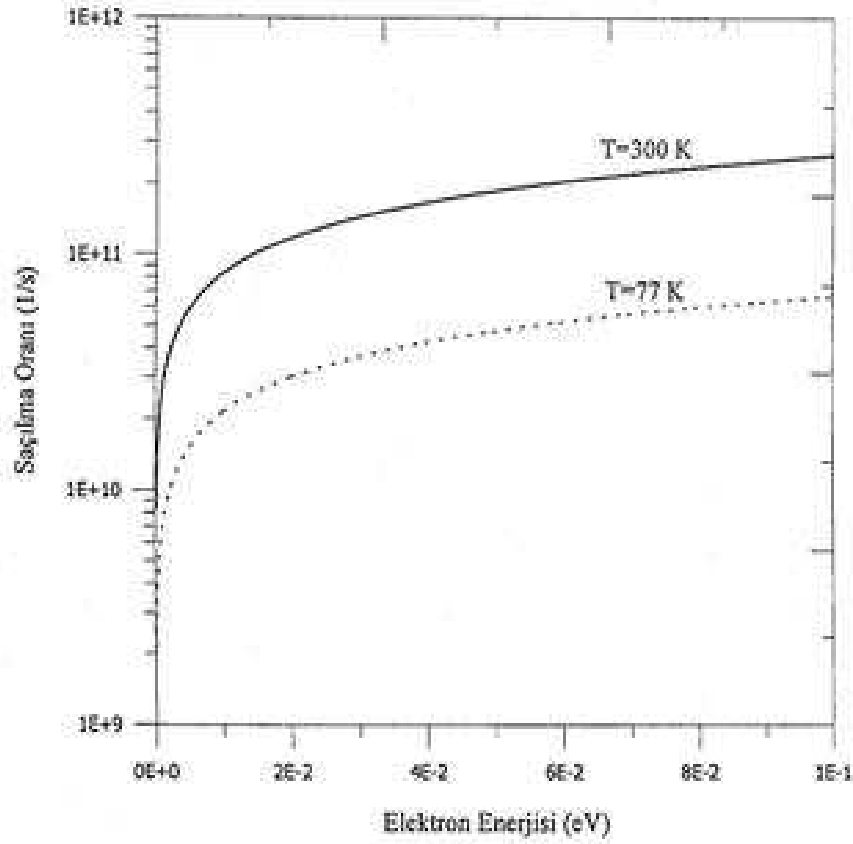
olur. Burada $D(\varepsilon_k)$ durum yoğunluğu

$$D(\varepsilon_k) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_k} \quad (4.3.27)$$

olarak yazılabilir. Saçılma oranı soğurulma ve yayılım işlemlerinin toplamı olduğundan, toplam saçılma oranının bulunması için sonucun 2 ile çarpılması gerekir

$$W(k) = \frac{2\pi D^2 k_B T_L}{\hbar C_L} D(\varepsilon_k) \quad (4.3.28)$$

Şekil 4.6 elektron enerjisine göre üç boyutlu fonon saçılma oranının $T = 77 \text{ K}$ ve $T = 300 \text{ K}$ değerleri için denklem 4.3.28 kullanılarak elde edilmiş bir sonucunu göstermektedir. Saçılma oranı elektron enerjisi ile artmaktadır çünkü saçılma oranı elektron enerjisinin artışı ile birlikte monoton bir artış gösteren durum yoğunluğuna bağlıdır.



Şekil 4.6 77 K ve 300 K sıcaklıklarında üç boyutlu akustik fonon saçılım oranı

4.3.2 Kutupsal Olmayan Optik Fonon Saçılımı

Kutupsal olmayan optik fononlara bağlı olan taşıyıcı saçılması, komşu atomlar zıt yönde salınım yapsalar 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:

$$H'(\vec{r}, t) = \vec{D}_o \cdot u(\vec{r}, t) \quad (4.3.29)$$

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

$$u(\vec{r}, t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.3.30)$$

řeklinde verilebilir. e_q polarizasyon birim vektörü ve ω_q aıřsal frekanstır. Simetri sınırlamaları nedeniyle bazı durumlarda D_o sıfır olabilir.

4.3.30 ifadesinin 4.3.29'da yerine konmasıyla etkileřme potansiyeli

$$H' = \sum_q D_o \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.3.31)$$

haline gelir. Etkileřme potansiyeli 4.3.31 ifadesinden hesaplanan optik kusur potansiyel saılması iin kare matris elemanının 4.1.14 ifadesinde yerine yazılmasıyla bulunabilir. Bu iřlemlerden sonra dzenlemeler yapılarak

$$|\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{D_o^2 \hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \quad (4.3.32)$$

denklemi elde edilir. Optik fonon enerjisi q 'nun yaklařık olarak sabit bir fonksiyonu gibidir ve daha sonraki denklemlerde ω_q ve n_q 'nun sabit olduđu varsayılarak ω_0 ve n_0 ile yer deđiřtirecektir.

4.3.32 ifadesinin 4.1.31 denklemi ile verilen Fermi'nin Altın Kuralı'nda yerine yazılması, enerji ve momentum korunumunun dikkate alınması gereken hesaplamaların yapılmasıyla optik fononlar iin geiř oranı elde edilir.

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi D_o^2}{\rho\Omega\omega_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar\omega_0 \right) \quad (4.3.33)$$

fonksiyonu enerji ve momentum korunumu ile eřzamanlı olarak verilir. $\cos \theta'$, -1 ile $+1$ aralıđında tanımlı olduđundan 4.3.33 ifadesindeki δ -fonksiyonu saılmayla

ilgili minimum ve maksimum fonon dalga vektörleri

$$q_{min} = k \left| 1 - \left(1 \pm \frac{\hbar\omega_0}{E_k} \right)^{1/2} \right| \quad (4.3.34)$$

$$q_{max} = k \left| 1 + \left(1 \pm \frac{\hbar\omega_0}{E_k} \right)^{1/2} \right| \quad (4.3.35)$$

olarak yazılabilir. Saçılma oranı 4.3.33 denkleminin mümkün sonuç durumları için integre edilmesiyle,

$$\begin{aligned} W(\vec{k}) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' \\ &= \frac{D_o^2}{8\pi^2 \rho \omega_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \int \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar\omega_0 \right) d\vec{q} \end{aligned} \quad (4.3.36)$$

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

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi D_o^2}{\rho \omega_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) N(E_k \pm \hbar\omega_0) \quad (4.3.37)$$

şeklinde elde edilir. Burada $N(E_k \pm \hbar\omega_0)$ ile verilen 3-boyutlu serbest 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 iştir.

4.3.3 Kutupsal Optik Fonon Saçılması

Boyuna örgü titreşimleri GaAs, InP gibi iyonik yarı iletkenlerde kutuplanma dalgalarını oluştururlar. Polarizasyon dalgaları, elektronlarla güçlü biçimde etkileşerek, elektronların kutupsal saçılmaya uğramasına neden olur. Kutupsal

saçılmalar, akustik ya da optik fononlardan dolayı oluşabilir. Kutupsal akustik fonon saçılması piezoelektrik saçılma olarak bilinir. Bu saçılma çok saf yarı iletkenlerde ve oldukça düşük sıcaklıklarda etkin olup, oda sıcaklığında son derece önemsizdir.

Kutupsal optik fonon saçılması çok güçlü olup oda sıcaklığında bileşik yarı iletkenler için baskın saçılma mekanizmasıdır. Bu bölümde kutupsal optik fononlardan kaynaklanan saçılmanın hesapları yapılacaktır. Polarizasyon pozitif (\vec{u}_+) ve negatif (\vec{u}_-) iyonların görelî yer deęiřtirmesiyle ($\vec{u} = \vec{u}_+ - \vec{u}_-$) orantılıdır. Bir dıř elektrik alan yokken pozitif (\vec{u}_+) ve negatif (\vec{u}_-) iyonlar için hareket denklemleri ařaęıdaki gibi yazılabilir

$$M_+ u_+'' = -k(u_+ - u_-) \quad (4.3.38)$$

$$M_- u_-'' = -k(u_- - u_+)$$

$\vec{u} = \vec{u}_+ - \vec{u}_-$ ifadesinde iki tarafın ikinci türevi alınarak yukarıdaki denklemler yerleřtirilirse

$$u'' = -\frac{k}{M_R} u \quad , \quad \frac{1}{M_R} = \frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-} \quad (4.3.39)$$

olur. M_R pozitif ve negatif iyonların indirgenmiř kütlesi, N iyon çiftlerinin sayısı ve $\omega_0^2 = \frac{k}{M_R}$ olmak üzere ikinci derece denklemin çözümleri ařaęıdaki gibi olur

$$\begin{aligned} u(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(\frac{\hbar}{2M_R \omega_0} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \\ &= \sum_q \left(\frac{\hbar}{2NM_R \omega_0} \right)^{1/2} \hat{e}_q (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \end{aligned} \quad (4.3.40)$$

Atomik polarizasyon ve yer deęiřtirme polarizasyonu olmak üzere iki tip polarizasyon vardır. Atomik polarizasyon uygulanan tüm dıř frekanslar için vardır ve mor ötesi bölgenin üstündeki frekanslarda, frekanstan baęımsızdır. Elektronik

kabuğun titreşim frekansının bir üst sınırı vardır ve dış alan frekansı bu değer civarında olmadığı sürece, polarizasyon frekanstan bağımsız olacaktır. Yer değiştirme polarizasyonunun ω_0 rezonans frekansı Debye frekansı (ω_D) civarındadır ($\hbar\omega_D \approx 0.1 - 0.01 \text{ eV}$) ve atomik kabuk frekansından $10^2 - 10^3$ kez daha küçük olabilir. Bundan dolayı yerdeğiştirme polarizasyonu kızıl ötesi ve optik bölgede önemli bir frekans bağıllığına sahiptir. Fakat bu frekansların üstünde yerdeğiştirme polarizasyonu uygulanan alana tepki vermeyecektir. Sonuç olarak κ_s ve κ_∞ , şeklinde iki optik sabit tanımlanmıştır. Birincisi statik, diğer bir deyişle düşük frekans, dielektrik sabiti olup uygulanan frekansın $\omega \ll \omega_0$ aralığında olduğu değerlerde yani atomik titreşimler için geçerlidir. Diğeri uygulanan frekansın $\omega \gg \omega_0$ değerleri için geçerli olup yüksek frekans dielektrik sabiti olarak bilinir.

İyonların görelî hareketiyle ortaya çıkan \vec{P} polarizasyonu dielektrik yer değiştirme \vec{D} 'ye aşağıdaki gibi katkıda bulunur

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_{iyon} + \vec{P} \quad (4.3.41)$$

burada ε_0 boşluğun dielektrik sabiti, \vec{E} elektrik alan, \vec{P}_{iyon} iyonların kendilerinden kaynaklanan polarizasyonun yarattığı dipol momenti ve \vec{P} ise görelî yer değiştirmeye bağılı olup aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\vec{P} = \frac{e^* N}{\Omega} (\vec{u}_+ - \vec{u}_-) = \frac{e^* N}{\omega} \vec{u} \quad (4.3.42)$$

\vec{P}_{iyon} 'un ε_∞ ile $\varepsilon_\infty \vec{E} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_{iyon}$ ilişkisi kullanılarak

$$\vec{D} = \varepsilon_\infty \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_\infty \vec{E} + \frac{e^* N}{\Omega} \vec{u} \quad (4.3.43)$$

yazılabilir. Boyuna elastik dalgalara bağılı dielektrik yer değiştirmenin değişimi

$\vec{D} = D\hat{e}_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$ ve polarize yükler için $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0$ ifadeleri kullanılırsa

$$i\vec{q} \cdot \vec{D} = 0 \quad (4.3.44)$$

olur. Sıfırdan farklı q 'lar için $\vec{D} = 0$ olması gerektiğinden denklem 4.3.43'da $\vec{D} = 0$ kullanılırsa

$$\vec{E} = -\frac{N e^* \vec{u}}{\Omega \varepsilon_\infty} \quad (4.3.45)$$

bulunur, böylece elektrostatik potansiyel

$$U(\vec{r}) = -\int \vec{E} \cdot d\vec{r} = \frac{N e^* \vec{u}}{\Omega \varepsilon_\infty} \int u(\vec{r}) \cdot d\vec{r} \quad (4.3.46)$$

$$U(\vec{r}) = \frac{N e^*}{\Omega \varepsilon_\infty} \sum_q \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_0} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^\dagger) \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \hat{e}_q \cdot d\vec{r} \quad (4.3.47)$$

olur. Burada

$$I_q = \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \hat{e}_q \cdot d\vec{r} \quad (4.3.48)$$

olarak yazılabilir. \hat{e}_q polarizasyon yönü ile \vec{q} yer değiştirmesi aynı yöndedir buna göre

$$U(r) = -i \frac{e^* N}{\Omega \varepsilon_\infty} \frac{1}{q} u(r) \quad (4.3.49)$$

olur. Burada etkin yük e^* Fröhlich (Tomizawa, 1993) tarafından

$$e^* = \left(\frac{\Omega M}{N} \right)^{1/2} \omega_0 \varepsilon_\infty \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right)^{1/2} \quad (4.3.50)$$

şeklinde tanımlanmıştır.

Elektronun kutupsal optik fononlarla etkileşim potansiyeli olan H' pertürbasyon Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi olur

$$H' = -eU(\vec{r}) = \frac{iee^* N}{\Omega \varepsilon_\infty q} u(r) \quad (4.3.51)$$

$$H' = \sum_q i \frac{e}{q} \left(\frac{\hbar \omega_0}{2\varepsilon_p \Omega} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.3.52)$$

burada $1/\varepsilon_p = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_s$ 'dir. Akustik fonon saçılmasına benzer biçimde, bu sonuç kullanılarak kutupsal optik fononlar için kare matris elemanı aşağıdaki gibi yazılabilir

$$|\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_0}{2\varepsilon_p \Omega} \frac{1}{q^2} \left[n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \quad (4.3.53)$$

Geçiş oranı Fermi'nin Altın Kuralı kullanılarak bulunabilir.

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi e^2 \omega_0}{\varepsilon_p \Omega} \frac{1}{q^2} \left[n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \delta(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \delta(E_k - E_{k'} \mp \hbar \omega_0) \quad (4.3.54)$$

İki delta fonksiyonu birleştirilir ve denklemin olası son durumlar üzerinden integrali alınır, saçılma oranı elde edilebilir.

$$W(\vec{k}) = \frac{\pi e^2 \omega_0}{\varepsilon_p \Omega \left[n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right]} \times \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{q^2} \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar \omega_0 \right) d^3 \vec{q} \quad (4.3.55)$$

Fonon momentumu q ve taşıyıcının başlangıç ve son durumları daha önce Şekil 4.5 'te gösterilmiştir. Delta fonksiyonunu düzenlemek için fonksiyonun içi $2m^*/\hbar^2$ parantezine alınıp $\delta(ax) = \delta(x)/a$ eşitliği kullanılırsa

$$W(\vec{k}) = \frac{m^* e^2 \omega_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)^2} \int \frac{1}{q^2} \delta \left(q^2 \pm 2kq \cos \theta' \mp \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} \right) d^3 \vec{q} \quad (4.3.56)$$

olur. Burada $P' = \frac{1}{\varepsilon_p} \left[n(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right]$ biçiminde tanımlanmıştır. İntegrali kutupsal koordinatlarda yazarsak birim hacim $q^2 dq \sin \theta' d\theta' d\phi$ şeklinde olur buna

göre

$$W(\vec{k}) = \frac{m^* e^2 \omega_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1}{q^2} \delta \left(q^2 \pm 2kq \cos \theta' \mp \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} \right) q^2 dq \sin \theta' d\theta' d\phi \quad (4.3.57)$$

yazılabilir. İntegral ϕ' 'den bağımsız olduğundan ϕ üzerinden olan integralden sadece 2π gelir. Buna göre,

$$W(\vec{k}) = \frac{m^* e^2 \omega_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1}{q^2} \delta \left(q^2 \pm 2kq \cos \theta' \mp \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} \right) q^2 dq \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.58)$$

olur. İntegralin başındaki sabitlere bir isim verilirse

$$Y' = \frac{m^* e^2 \omega_0 P'}{\hbar^2 (2\pi)} \quad (4.3.59)$$

ve ilk adımda integral sadece soğurulma olayı (δ -fonksiyonunda üstteki işaret) için yazılırsa

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1}{q^2} \delta \left(q^2 + 2kq \cos \theta' - \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} \right) q^2 dq \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.60)$$

olur. J-Iagston, Piorek ve Harrison'un yaklaşımları takip edilerek (Harrison, 2000) δ - fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir

$$(q - \alpha_1)(q + \alpha_2) = q^2 + (\alpha_2 - \alpha_1)q - \alpha_1 \alpha_2 \quad (4.3.61)$$

buradaki α_1 ve α_2 sabitleri gerçektir ve pozitifdir, buna göre $\alpha_1 \alpha_2$ çarpımı negatif olmalıdır. Fonon dalga vektörü k sıfırdan büyük olmak zorunda olduğundan δ -fonksiyonuna tek bir katkı gelir

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^\pi \int_0^\infty \delta((q - \alpha_1)(q + \alpha_2)) dq \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.62)$$

$q = \alpha_1$ civarındaki çözüm için $(q + \alpha_2)$ sabit olup $\delta(ax) = \delta(x)/a$ kuralına göre δ -fonksiyonu dışına alınabilir

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1}{q + \alpha_2} \delta(q - \alpha_1) dq \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.63)$$

q üzerinden integral alındığında

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^\pi \frac{1}{\alpha_1 + \alpha_2} \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.64)$$

olur. Denklem 4.3.62'e göre $0 < \theta' < \pi/2$ için $\alpha_2 > \alpha_1$ ve $\pi/2 < \theta' < \pi$ için $\alpha_1 > \alpha_2$ biçimindedir. q için kuadratik denklem

$$q^2 + 2kq \cos \theta' - \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} = 0 \quad (4.3.65)$$

biçimindedir ve bu denklemin çözümü

$$q = -k \cos \theta' \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* \omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.66)$$

olarak yazılabilir. Böylece denklemin iki ayrı çözümü aşağıdaki gibi olur,

$$q = -k \cos \theta' + \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* \omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.67)$$

ve

$$q = -k \cos \theta' - \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* \omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.68)$$

α_1 pozitif köke (q) ve α_2 negatif köke ($-q$) karşılık gelir böylece bu ikisinin toplamı,

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 2\sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^* \omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.69)$$

biçimindedir. Bu sonuç denklem 4.3.64'de yerine konulursa

$$W(\vec{k}) = Y' \int_0^{\pi} \frac{1}{2\sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}}} \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.70)$$

olur. Böylece problem θ' üzerinden tek bir integrale dönüşür, bu integrali alabilmenin bir yolu yeni bir değişkenle uygun bir dönüşüm yapmaktır.

$$\varphi = -k \cos \theta' + \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.71)$$

İntegral sınırları

$$\varphi_{min} = \varphi(\theta' = 0) = -k + \sqrt{k^2 + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.72)$$

ve

$$\varphi_{max} = \varphi(\theta' = \pi) = k + \sqrt{k^2 + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.73)$$

şeklindedir. Bu dönüşüme uygun olarak denklem 4.3.70 yeniden yazılırsa,

$$\varphi + k \cos \theta' = \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.74)$$

olur, karekökten kurtulmak için iki tarafın karesi alınırsa

$$\varphi^2 + 2\varphi k \cos \theta' + k^2 \cos^2 \theta' = k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar} \quad (4.3.75)$$

$$k \cos \theta' = \frac{m^*\omega_0}{\hbar\varphi} - \frac{\varphi}{2} \quad (4.3.76)$$

elde edilir. Bu sonuç denklem 4.3.74'de kullanılırsa

$$\varphi + \frac{m^*\omega_0}{\hbar\varphi} - \frac{\varphi}{2} = \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.77)$$

$$\frac{\varphi}{2} + \frac{m^*\omega_0}{\hbar\varphi} = \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.78)$$

olur. Denklem 4.3.76'un iki tarafının φ 'ye göre türevi alınırsa

$$\sin \theta' d\theta' = \left(\frac{m^*\omega_0}{\hbar k \varphi^2} + \frac{1}{2k} \right) d\varphi \quad (4.3.79)$$

bulunur, bulunan son iki ifade denklem 4.3.70'te kullanılır ve gerekli işlemler yapılırsa

$$W(k) = \frac{Y'}{2} \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \frac{1}{\frac{\varphi}{2} + \frac{m^*\omega_0}{\hbar\varphi}} \left(\frac{m^*\omega_0}{\hbar k \varphi^2} + \frac{1}{2k} \right) d\varphi \quad (4.3.80)$$

$$W(k) = \frac{Y'}{2} \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \frac{1}{\frac{\varphi}{2} + \frac{m^*\omega_0}{\hbar\varphi}} \times \frac{1}{k\varphi} \left(\frac{m^*\omega_0}{\hbar\varphi} + \frac{\varphi}{2} \right) d\varphi \quad (4.3.81)$$

$$W(k) = \frac{Y'}{2} \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \frac{1}{k\varphi} d\varphi \quad (4.3.82)$$

$$W(k) = \frac{Y'}{2} \frac{1}{k} [\ln \varphi]_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \quad (4.3.83)$$

sonucuna ulaşılır.

Şimdi benzer şekilde yayınım hesabı için denklem 4.3.58 yeniden yazılırsa,

$$W(\vec{k}) = \frac{m^*e^2\omega_0 P'}{\hbar^2(2\pi)} \int_0^\pi \int_0^\infty \delta \left(q^2 - 2kq \cos \theta' + \frac{2m^*\omega_0}{\hbar} \right) dq \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.84)$$

olur bu denklemin kökleri

$$q = k \cos \theta' \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' - \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.85)$$

şeklinde yazılabilir. $0 < \theta' < \pi/2$ için $\cos \theta' > 0$ olduğundan olası çarpanlar $(q+\alpha_1)(q+\alpha_2)$ biçimindedir bu aralıkta delta fonksiyonu asla sıfır olamaz, bundan dolayı bu terimden integrale bir katkı gelmez. Fonon momentumu q 'nun gerçel

olabilmesi için karekök içindeki ifade pozitif olmalıdır buna göre

$$k^2 \cos^2 \theta' - \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} > 0 \quad (4.3.86)$$

$$k^2 \cos^2 \theta' > \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} \quad (4.3.87)$$

Böylece θ' için bir minimum değer vardır

$$\cos \theta'_{min} = -\sqrt{\frac{2m^* \omega_0}{\hbar k^2}} \quad (4.3.88)$$

δ -fonksiyonu içindeki q katsayısı daha önce gerçekte ve pozitif olarak göz önüne alınan α_1 ve α_2 cinsinden $(q - \alpha_1)(q - \alpha_2)$ olarak çarpanlarına ayrılabilir, buna göre denklem 4.3.84

$$W(\vec{k}) = Y' \int_{\theta'_{min}}^{\pi} \int_0^{\infty} \delta((q - \alpha_1)(q - \alpha_2)) dq \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.89)$$

olarak yazılabilir, delta fonksiyonundaki her iki terimden de integrale katkı gelmelidir. $\alpha_1 > \alpha_2$ durumu için $\alpha_2 - \alpha_1$ negatif olacağından α_2 civarında çözüm

$$\delta((q - \alpha_1)(q - \alpha_2)) = \frac{\delta(q - \alpha_2)}{|q - \alpha_1|} \quad (4.3.90)$$

ve

$$W(\vec{k}) = Y' \int_{\theta'_{min}}^{\pi} \int_0^{\infty} \left[\frac{\delta(q - \alpha_1)}{q - \alpha_2} + \frac{\delta(q - \alpha_2)}{|q - \alpha_1|} \right] dq \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.91)$$

olur. Fonon momentumu olan q üzerinden integral alınır

$$W(\vec{k}) = Y' \int_{\theta'_{min}}^{\pi} \left(\frac{1}{\alpha_1 - \alpha_2} + \frac{1}{|\alpha_2 - \alpha_1|} \right) \sin \theta' d\theta' \quad (4.3.92)$$

olur. Burada soğurulmaya benzer biçimde yeni bir değişken tanımlanabilir,

$$\varphi = -k \cos \theta' + \sqrt{k^2 \cos^2 \theta' - \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.93)$$

φ 'nin minimum değeri denklem 4.3.86' daki karekök içindeki ifade sıfır olduğunda gerçekleşir

$$\varphi_{min} = \varphi(\theta'_{min}) = -k \cos \theta'_{min} \quad (4.3.94)$$

Denklem 4.3.88 kullanılırsa

$$\varphi_{min} = \sqrt{\frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.95)$$

olarak elde edilir. φ 'nin maksimum değeri $\cos \theta'_{min}$ 'un maksimum olduğu değerdir.

$$\varphi_{max} = \varphi(\theta' = \pi) = k + \sqrt{k^2 - \frac{2m^*\omega_0}{\hbar}} \quad (4.3.96)$$

Bu verilerle soğurulma için yapılan hesaplar takip edilirse, yayınım için saçılma oranı aşağıdaki gibi elde edilir

$$W(k) = Y' \frac{1}{k} [\ln \varphi]_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \quad (4.3.97)$$

BÖLÜM BEŞ

MONTE CARLO TAŞIYICI HESAPLARI

5.1 Tek Parçacık Monte Carlo Simülasyonu

Monte Carlo modellerinin önemli bir özelliği hem malzeme hem de aygıt simülasyonlarına uygulanabilir olmasıdır. Bu metodun ayrıcalıklı bir başka özelliği, deneylerde elde edilemeyen veya gözlenemeyen fiziksel süreçlerin simülasyonlarının yapılabilmesine izin vermesidir. Bu anlamda Monte Carlo simülasyonları deney sonuçlarına çok benzer sonuçlar üretebilir. Yarı iletken simülasyonlarında kullanılan hız-alan karakteristikleri gibi bir çok geçirgenlik özelliği Monte Carlo simülasyonları kullanılarak elde edilebilir. Elektrik alanın bir fonksiyonu olarak elde edilen mobilite, enerji, difüzyon, durulma zamanı ve etkin kütle karakteristikleri Monte Carlo modelleri kullanılarak bulunabilir. Ayrıca küçük ölçekli aygıtların modellemesinde de kullanılan Monte Carlo simülasyonları bu aygıtların fiziğinin anlaşılmasında önemli bir rol oynar.

Monte Carlo yönteminin temeli, parçacıklar arasındaki çarpışma zamanlarının bulunması gibi saçılma olaylarında artarda rastgele sayılar üreterek, mikroskobik süreçleri tanımlamak için bu sayıları kullanmasıdır. Tek parçacık Monte Carlo simülasyonları, parçacığın hareketini yeterince uzun bir zaman periyodunda takip ederek, homojen örneklerde kararlı durum olgusunu modellemede kullanılır. Zaman aralığı çok uzun tutularak, edinilen bilgiler elektron gazının davranışını tanımlamada da kullanılabilir. Bu yaklaşımın bir avantajı, sistemde sadece bir parçacık kullanıldığından, uzun bir geçmişe ait bilginin sıradan bir bilgisayarla elde edilebilir olmasıdır. Eğer örnek homojen değil ise çok sayıda parçacığın simüle edilmesi gerekir. Zaman veya konuma bağlı sistemlerde periyodiklik varsa, işlemleri tek parçacık simülasyonuna indirgeyerek basitleştirmek mümkündür. Monte Carlo simülasyonlarında

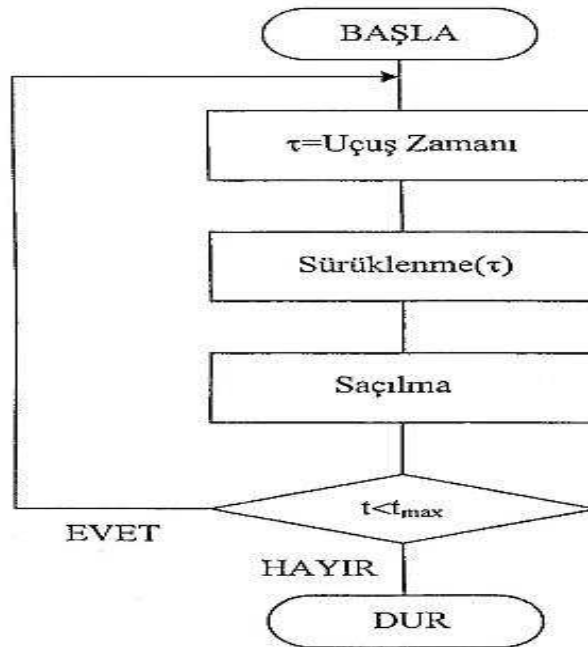
fiziksel sisteme ait malzeme parametrelerinin, enerji bant yapısının, saçılma oranlarının ve örgü sıcaklığının ayrıntılı olarak tanımlanması gerekir. Parçacıklara etki eden kuvvetler, elektrik ve manyetik alanlar ile saçılma mekanizmalarını içerir. Uygulanan dış alan ve başlangıç koşulları özel olarak tanımlanmalıdır. Bu veriler kullanılarak stokastik saçılma süreçlerini kontrol eden rastgele sayılarla, momentum uzayındaki elektron hareketini gösteren simülasyon elde edilebilir. Her bir elektronun hareketi, çarpışmalar arasındaki serbest uçuş zamanlarını içerir. Genellikle çarpışmalar arasında elektronun sabit bir alanda ivmelendirildiği ve malzemenin enerji bant yapısının belirlediği klasik hareket yasalarına uyduğu varsayılır. Çarpışmalar enerjinin bir fonksiyonu olarak belirli olasılıklara sahip rastgele olaylardır. Rastgele sayılar, serbest uçuş zamanı ve saçılma süreçlerini kontrol eder. Her bir uçuş zamanı sırasında elde edilen bilgi simülasyon için gerekli olan parametreleri bulmada kullanılır (Snowden, 1989).

Bir yarı iletken taşıyıcı geçirgenliğinin analizi karşılıklı etkileşen çok parçacık problemi olduğundan dolayı yapılması zor bir iştir. Bununla birlikte çok parçacık sistemi bağımsız parçacıkların bir bütünü olarak göz önüne alınırsa, tek bir parçacığın bir çok saçılmaya uğraması izlenerek parçacıkların bütünü simüle edecek bir basitleştirme yapılabilir. Tek parçacık Monte Carlo tekniğinin temel fikri budur.

Tek parçacık için Monte Carlo yöntemi homojen bulk yarı iletkenlerdeki 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 yöntemdir.

5.1.1 Taşıyıcı Hareketinin Simülasyonu

Geçirgenlik analizlerine uygulanan tek parçacık Monte Carlo yönteminin prensibi momentum uzayındaki bir parçacığın hareketinin simüle edilmesidir. Bu simülasyon, taşıyıcının serbest uçuş süresi ve saçılma olayı stokastik olarak seçilerek oluşturulabilir. Bundan dolayı simülasyon rastgele sayıların artarda seçilmesiyle yapılabilir. Simülasyon programı sürüklenme ve saçılma süreçlerini kontrol eden alt programlar kullanılarak yapılabilir. Taşıyıcının sürüklenme işlemini, sürüklenme ve saçılma işlemini, saçılma olarak adlandırılan alt programların yaptığı düşünülerek basit bir akış diyagramı ile programın ana hatları Şekil 5.1'deki gibi gösterilebilir. Simülasyon işlemi sırasında saçılmalar ve sabit bir elektrik alan altındaki sürüklenme hareketi sürekli kendini tekrar eden bir iterasyon işlemi olarak hesaplanır. Şekil5.1'de görüldüğü gibi bu iki alt program sürekli değişimli olarak çalışır ve her iterasyonda uçuş zamanı hesaplanır.



Şekil 5.1 Tek parçacık Monte Carlo hesabı için akış diyagramı

Serbest uçuş süresi, değişik saçılma oranlarının toplamı olan toplam saçılma oranına bağlıdır. Her bir saçılma mekanizmasının saçılma oranı enerjiye bağlı olduğundan, toplam saçılma oranı da elektron enerjisinin bir fonksiyonudur. Bir elektronun, τ süresi kadar hareket edip bu süre sonunda birim zamanda saçılmaya uğrama olasılığı $P(\tau)$

$$P(\tau) = W_T(E_k) \exp \left[- \int_0^{\tau} W_T(E_k) dt \right] \quad (5.1.1)$$

ile verilir. Burada $W_T(E_k)$ toplam saçılma oranıdır ve

$$W_T(E_k) = \sum_{j=1}^N W_j(E_k) \quad (5.1.2)$$

ile verilir. Burada alt indis j saçılma mekanizmasına karşılık gelir ve N olası saçılma mekanizmaları için $j = 1, 2, \dots, N$ değerlerini alır. Uçuş zamanının denklem 5.1.1 deki olasılık denklemi ile tanımlanabilmesi için, 0 ile 1 aralığında düzenli bir rastgele sayı olan r_1 'e bağlı olarak tanımlanan τ değerini ve $P(\tau)/W_T(E_k)$ oranını hesaplamak zorundayız ancak olasılık integrali $W_j(E_k)$ 'lerin karmaşıklığı nedeniyle analitik olarak çözülemez.

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, $W_0(k)$, saçılma mekanizmalarına eklenmesi ile elde edilir. Bu yöntemde 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,

$$W_0(E_k) = \Gamma - \sum_{j=1}^N W_j(E_k) \quad \text{ya da} \quad \Gamma = \sum_{j=0}^N W_j(E_k) \quad (5.1.3)$$

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

$$P(\tau) = \Gamma e^{-\Gamma\tau} \quad (5.1.4)$$

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

$$\tau = -\frac{\ln(r_1)}{\Gamma} \quad (5.1.5)$$

Bir sabit olan Γ , ilgilendiğimiz enerji aralığında $W_0(E_k)$ 'nin negatif değerlerinden sakınmak için, $W(E_k)$ nin en büyük değerinden daha büyük seçilmelidir. Diğer taraftan, 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 rastgele 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.

5.1.2 Sürüklenme İşlemi

Bir yarı iletken kristal içindeki elektronların sürüklenme hareketi, eğer elektronun potansiyel enerjisi konumunun bir fonksiyonu olarak yavaş bir şekilde değişiyor ve elektronlar etkin kütle ile serbest bir parçacıkmiş gibi kabul edilebiliyorsa yarı-klasik bir şekilde incelenebilir. Elektronlar için olan hareket denklemini temel olarak bilinmektedir. Uçuş zamanı, τ , esnasındaki dalga vektörü değişimi $\Delta\vec{k}$, hareket denkleminin integre edilmesi ile bulunabilir. Bu ilişki

$$\Delta\vec{k} = -\frac{1}{\hbar} \int_t^{t+\tau} \vec{\nabla} H dt' \quad (5.1.6)$$

şeklinde yazılabilir. Burada;

$$H = E_k - eV(\vec{r}) \quad (5.1.7)$$

bir $-e$ yükü ile verilen elektronun Hamiltonianidir. E_k elektronun kinetik enerjisi ve $V(\vec{r})$ ise elektrostatik potansiyeldir. Eğer bir bulk yarı iletken boyunca düzgün bir elektrik alan \vec{F} uygulanacak olursa çözüm aşağıdaki gibi olacaktır.

$$\Delta\vec{k} = -\frac{e\vec{F}}{\hbar} \tau \quad (5.1.8)$$

5.1.3 Saçılma İşlemi

Burada bir alt program tarafından simüle edilen saçılmanın hesaplanmasında ilk önce elektron tarafından oluşturulan saçılma ve saçılmadan sonraki elektronun durumu bir arada ele alınmaktadır. Bu adımda yapılan, saçılma mekanizmalarının Monte Carlo Yönteminde kullanılabilir şekilde 0 ile 1 arasında Şekil 5.2'de gösterildiği gibi sıralanmasıdır. Saçılma mekanizması (n) aşağıdaki

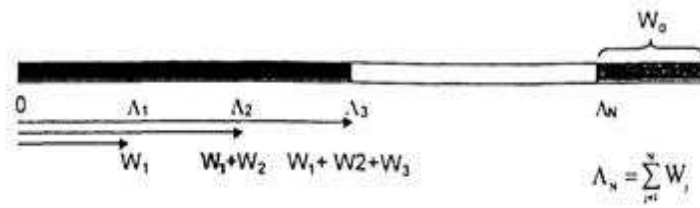
şekilde tanımlanan $\Lambda_n(E_k)$ fonksiyonunun kullanılması ile anlaşılabilir.

$$\Lambda_n(E_k) = \frac{\sum_{j=1}^n W_j(E_k)}{\Gamma} \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (5.1.9)$$

Bu Γ tarafından normalize edilmiş saçılma oranlarının toplamıdır. Γ toplam saçılma oranı, N saçılma mekanizmalarının toplam sayısıdır. E_k enerjili bir elektron için saçılma mekanizması, rastgele sayı üretici tarafından 0 ile 1 aralığından seçilen r_2 rastgele sayısı ile $\Lambda_n(E_k)$ 'nın karşılaştırılması ile yapılır. Eğer r_2

$$\Lambda_{n-1}(E_k) < r_2 \leq \Lambda_n(E_k) \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (5.1.10)$$

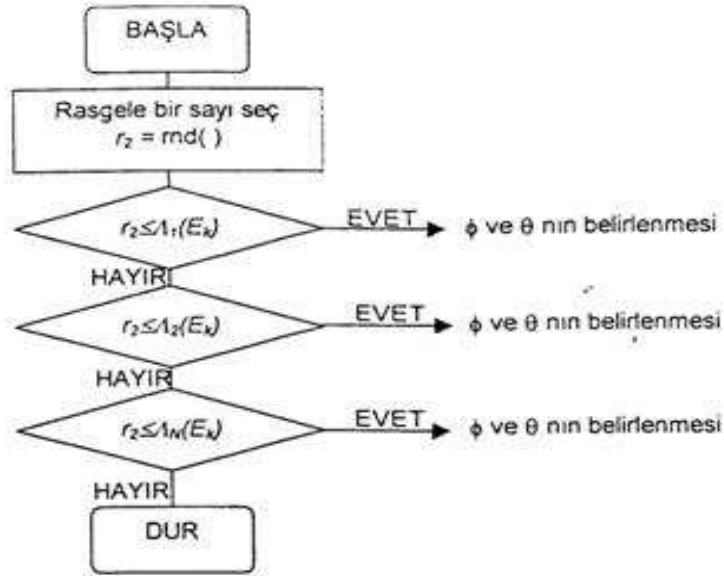
eşitsizliğini sağlıyorsa n . mekanizma elektronun durumunu değiştiren mekanizma olarak seçilir.



Şekil 5.2 Monte Carlo yönteminde saçılma işlemlerinin 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. $W_j(E_k)$ 'nin hesaplanması simülasyon zamanının tamamlandığı bir E_k için verilmiştir. Farklı E_k değerleri için arzu edilen şekilde hesaplanmış $W_j(E_k)$ ve bir alt program içinde gerçeğe yakın bir biçimde verilmiştir.

Saçılma mekanizması, bant içi ve bantlar arası fonon saçılmaları ve iyonize



Şekil 5.3 Saçılma işlemlerinin seçimi için akış diyagramı

safsızlık saçılmaları için ayrı ayrı verilmelidir. $W_j(E_k)$ 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 \vec{k}' dalga vektörünü tanımlamak gerekmektedir. \vec{k}' nün büyüklüğü enerji korunumundan bulunabilir. \vec{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.

Eğer saçılma izotropik ise (saçılan elektronlar saçılmadan sonra bütün doğrultularda aynı başlangıç olasılığına sahipse) (k'_x, k'_y, 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^L 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 düzenli rastgele sayılar ile tanımlanabilir.

$$\phi' = 2\pi r_3 \quad (5.1.11)$$

$$\cos \theta' = 1 - 2r_4$$

Yukarıdaki eşitlikte verilen ϕ' ve θ' için laboratuvar çerçevesi bileşenleri (k_x^L, k_y^L, k_z^L) için,

$$k'_x = k' \sin \theta' \cos \phi'$$

$$k'_y = k' \sin \theta' \sin \phi' \quad (5.1.12)$$

$$k'_z = k' \cos \theta'$$

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

İzotropik olmayan saçılma durumunda, kutupsal optik fonon saçılması ve safsızlık saçılmalarında olduğu gibi \vec{k}' final durumu, \vec{k} başlangıç dalga vektörü ile \vec{k}' nün kutupsal ve azimuthal açıları ϕ ve θ ile ifade edilir. İzotropik durumdaki gibi \vec{k}' ve bileşenlerini seçilen laboratuvar çerçevesinde tanımlanabilir.

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

$$\phi = 2\pi r_3 \quad (5.1.13)$$

Burada r_3 , 0 ve 1 arasında değişen düzenli rastgele bir sayıdır.

Safsızlık saçılması ve kutupsal optik fonon saçılması için kutupsal açı θ

ifadelerinin burada tekrar yazılması ile,

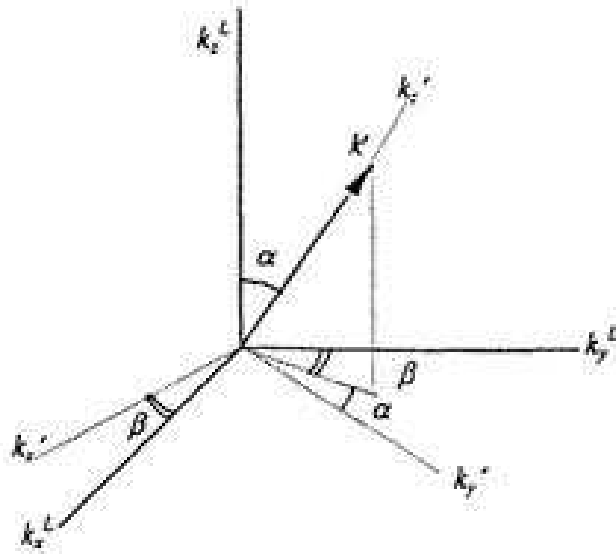
$$\cos \theta = \frac{1 + f - (1 + 2f)^{r_4}}{f} \quad (5.1.14)$$

safsızlık saçılması ve kutupsal optik fonon saçılması için,

$$\cos \theta = 1 - \frac{2r_4}{1 + (1 - r_4) \left(\frac{2k}{qD} \right)^2} \quad (5.1.15)$$

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

eşitlikleri yazılabilir.



Şekil 5.4 Gözlem çerçevesi (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ile yeni gözlem çerçevesi olan (k_x', k_y', k_z') arasındaki ilişkilerin gösterimi. k_z eksenini başlangıçtaki dalga vektörü k 'ya paraleldir.

Elektron dalga vektörü \vec{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 ekseninde β kadar döndürülmesi ile elde edilebilir. 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.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.1.16)$$

Burada (k'_x, k'_y, k'_z) gözlem çerçevesinde (k_x^L, k_y^L, k_z^L) bileşenleri için,

$$(k' \sin \theta \cos \phi, k' \sin \theta \sin \phi, k' \cos \theta) \quad (5.1.17)$$

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

$$\begin{pmatrix} \cos \beta & \cos \alpha \sin \beta & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \alpha \cos \beta & \sin \alpha \cos \beta \\ 0 & -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (5.1.18)$$

Burada matris ifadesinde verilen sinus ve cosinüs bileşenleri,

$$\begin{aligned}\sin \alpha &= \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \cos \alpha &= \frac{k_z}{k} \\ \sin \beta &= \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \cos \beta &= \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}\end{aligned}\tag{5.1.19}$$

ile verilir. 5.1.17, 5.1.18 ve 5.1.19 eşitliklerinin birleştirilmesi ile saçılmadan sonraki (k_x^L, k_y^L, k_z^L) gözlem çerçevesi içindeki dalga vektörünün bileşenleri,

$$\begin{pmatrix} k_x' \\ k_y' \\ k_z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ \frac{-k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ 0 & \frac{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \sin \theta \cos \phi \\ k' \sin \theta \sin \phi \\ k' \cos \theta \end{pmatrix}\tag{5.1.20}$$

şeklinde elde edilir.

Elipsoidal bantlardaki izotropik saçılma durumunda gözlem çerçevesi içindeki sonuç dalga vektörü \vec{k}' elipsoidal bantlardaki geçiş oranları için Herring-Vogt dönüşümünün (Nag, 1980) kullanılması ile,

$$\vec{k}^* = U \vec{k}\tag{5.1.21}$$

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

$$U = \begin{bmatrix} \left(\frac{m_f}{m_x^*}\right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_f}{m_y^*}\right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_f}{m_z^*}\right)^{1/2} \end{bmatrix} \quad (5.1.22)$$

ile verilebilir. Böylece \vec{k}^* taşıyıcı enerjisi

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right) = \frac{(\hbar k^*)^2}{2m_f} \quad (5.1.23)$$

şeklinde verilebilir. Bu denklemin kullanılması ile $k'^* = \sqrt{2m_f E_{k'}/\hbar}$ elde edilir. Buradan da $(\vec{k}'_x, \vec{k}'_y, \vec{k}'_z)$ bileşenlerini küresel yüzey için 5.1.11 ve 5.1.12 eşitlikleri kullanılarak hesaplanabilir. Sonuç olarak (k_x^L, k_y^L, k_z^L) ifadesi, $(\vec{k}'_x, \vec{k}'_y, \vec{k}'_z)$ ifadesi ile U matrisinin çarpılması ile elde edilebilir.

Üç boyutlu gösterimde (k_x, k_y, k_z) , bulk yarı iletkenlerdeki taşıyıcı geçişlerinin incelenmesi için gerekli olmayabilir. Ancak, bu yazım bizim çalışmalarımız sırasında Monte Carlo yönteminin tek parçacık için olan alt programların geliştirilmesi için kullanılacaktır.

5.1.4 Hareket Hesabı

Monte Carlo yöntemi düzgün bir elektrik alan altında, yarı iletkendeki taşıyıcı hızının hesabında da kullanılabilir. Burada taşıyıcı hızı ve enerji hesabı için temel denklemler verilecektir. k -uzayında, her bir hacim elemanı içindeki bir elektronun, uçuş zamanına ait bilgiler saklanırsa, ortalama taşıyıcı hızı ve enerjinin hesaplanabileceği dağılım fonksiyonları oluşturulabilir. Bu işlem k -uzayında çok sayıda veri saklanması ile yapılacağından büyük oranda hafıza gerektirir. Çok hafıza gerektiren bu işlemi yapmaya gerek kalmadan, her bir

elektronun uçuşu doğrudan izlenerek, hız ve enerjinin ortalama değerleri hesaplanabilir ve sonra tam uçuşlar üzerinden bir ortalama alınabilir.

Grup hızı aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k E_k \quad (5.1.24)$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{-e\vec{F}}{\hbar} \quad (5.1.25)$$

burada \vec{F} elektrik alanıdır. Serbest uçuş zamanı τ boyunca ortalama hız

$$\langle \vec{v} \rangle_\tau = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E_k}{\Delta \vec{k}} \quad (5.1.26)$$

ile verilir $\Delta \vec{k} = -\frac{e\vec{F}}{\hbar} \tau$ ifadesi yerine konulursa

$$\langle \vec{v} \rangle_\tau = -\frac{\Delta E_k}{e\vec{F}\tau} \quad (5.1.27)$$

elde edilir. τ süresi için yazılan ortalama taşıyıcı hızı kullanılarak, toplam T simülasyon zamanı boyunca ortalama hız aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\langle \vec{v} \rangle_T = \frac{1}{T} \sum \langle \vec{v} \rangle_\tau \tau \quad (5.1.28)$$

$$= -\frac{1}{e\vec{F}T} \sum \Delta E_k \quad (5.1.29)$$

$$= -\frac{1}{e\vec{F}T} \sum (E_f - E_i) \quad (5.1.30)$$

E_i elektron uçuşunun başlangıcındaki enerji, E_f ise uçuşun sonundaki enerjidir. Yukarıdaki denkleme göre her bir uçuş süresi boyunca enerjideki artışların (farkların) saklanması gerekir. Aynı mantıkla ortalama enerji de

aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\langle E \rangle_T = \frac{1}{T} \sum \langle E \rangle_{\tau} \tau \quad (5.1.31)$$

burada $\langle E \rangle_{\tau}$ iyi bir yaklaşıklıkla

$$\langle E \rangle_{\tau} = \frac{E_i + E_f}{2} \quad (5.1.32)$$

ile verilir. $\langle E \rangle_{\tau}$ ve $\langle v \rangle_{\tau}$ hesabının yapılabilmesi için $\langle E \rangle_{\tau}$ ve $\langle v \rangle_{\tau}$ hesaplarına sürüklenme alt programının eklenmesi gerekir.

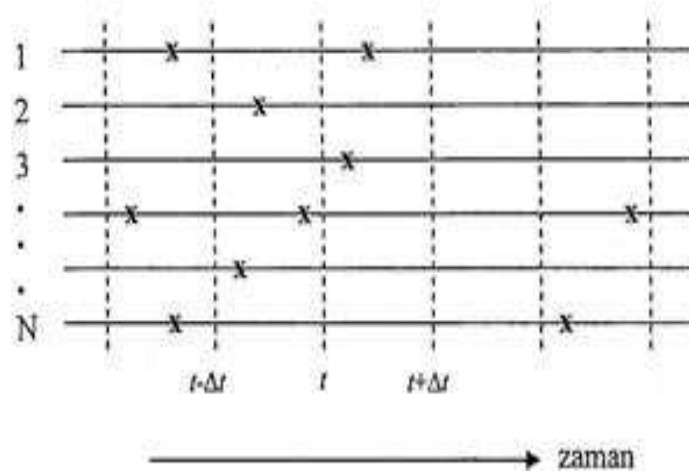
5.2 Yığın Elektronlar İçin Toplu Monte Carlo Simülasyonu

Tek parçacık Monte Carlo yöntemi özellikle statik ve düzgün bir elektrik alan altında kararlı durum taşıyıcı geçirgenliği gibi geçirgenlik hesapları için çok kullanışlı bir yöntemdir. Bununla beraber yığın Monte Carlo yöntemi taşıyıcı difüzyonunun analizi, homojen olmayan bir alanda taşıyıcı geçirgenliği, taşıyıcıların kararsız davrandığı gibi birçok değişik amaç için kullanılabilir. Böyle bir yığın Monte Carlo yöntemi bulk kristaldeki taşıyıcı geçirgenliğine uygulanabilir.

5.2.1 Toplu Parçacık Hareketi

Yığın Monte Carlo yöntemi küçük bir Δt zaman artışı esnasında birçok parçacığın eş zamanlı olarak hesaplanmasını temel alır. Yöntem dinamik olduğundan geçici parçacık hareketlerinin analizi için uygundur. Bununla birlikte sistem kararlı duruma ulaşıncaya kadar hesaplamalara devam edilirse kararlı durum problemlerine de uygulanabilir. Şekil 5.5, yığın Monte Carlo hesabının sistematik akış diyagramını göstermektedir. Yatay çizgiler zaman eksenini üzerindeki parçacıkların yörüngelerini gösterir. Eksenin sağ tarafına

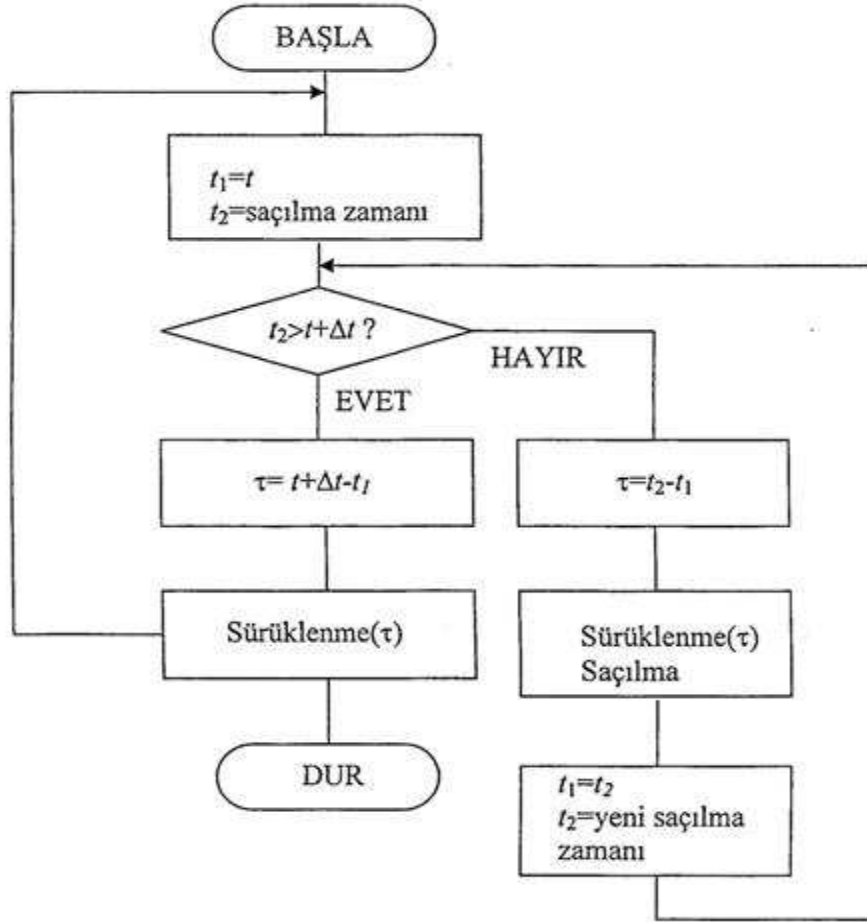
ilerledikçe zaman artmaktadır. Dikine kesikli çizgiler ise çok parçacık sisteminin gözleendiği zamanları gösterir. İki komşu kesikli çizgi arasındaki aralık iki gözlem arasındaki Δt zaman artışına bağlıdır. Yatay çizgiler üzerindeki her bir x saçılmanın olduğu zamanı gösterir. Böylece iki komşu x arasındaki mesafe serbest uçuş zamanıdır. Tam parçacık sisteminin gözlenebilmesi için gerçek uzay ve momentum uzayındaki parçacık konumlarının her bir Δt zamanı için hesaplanması gerekir. Uygulanan elektrik alan kararlı olsa bile değişen elektron enerjilerinin zamanla güncellenebilmesi için Δt zaman artışı yeterince küçük seçilmelidir.



Şekil 5.5 Yığın Monte Carlo simülasyonunun akış diyagramı

Yığın Monte Carlo yöntemi sürüklenme ve saçılma işlemlerini içeren iki alt programla yapılabilir. Tek parçacık Monte Carlo yöntemi için yazılan alt programlar küçük değişikliklerle yığın Monte Carlo yöntemi için de kullanılabilir. En önemli fark yığın Monte Carlo hesabının tüm parçacıklar için Δt zamanında saçılma ve sürüklenme hesaplarının tekrarlanmasıdır. Δt zaman aralığında (Δt ve $t + \Delta t$ arası olsun) bulunan bir parçacığın hareketine bakılırsa saçılma olaylarının rastgele olduğu görülür. Bundan dolayı Δt zamanında parçacığın kaç kez saçılacağı bilinemez. Δt 'den $t + \Delta t$ 'ye kadar olan böyle bir hareketi simüle edebilmek için t zamanındaki konum ve momentum vektörlerinin

bilindiği ve t 'den sonraki ilk saçılma zamanı t_s 'nin rastgele bir sayıyla bulunabileceği varsayalım. Eğer $t_s, t + \Delta t$ 'den büyükse o zaman parçacık Δt süresi kadar sürüklenir. $t_s, t + \Delta t$ 'den küçükse o zaman parçacık $t + \Delta t$ den önce saçılır. Bu durumda parçacık $t_s - t$ zamanı kadar sürüklenir ve t_s zamanında saçılır. O zaman yeni saçılma zamanı t_s diğer bir rastgele sayıyla bulunmalıdır. Bunun ardından yeni t_s değerinin $t + \Delta t$ değerinden büyük olup olmadığına bakılır ve bu şekilde simülasyon sonuna kadar adımlar tekrarlanır. Yığın Monte Carlo hesabı için burada anlatılan sırayı takip eden bir alt program Şekil 5.6'de gösterilmiştir.



Şekil 5.6 Yığın Monte Carlo alt programının akış diyagramı

τ uçuş zamanı esnasında $\Delta\vec{r}$ konum vektöründeki artış hareket denklemleri kullanılarak hesaplanabilir. Eğer Δt esnasındaki \vec{F} elektrik alanı sabit varsayılırsa $\Delta\vec{r}$, uçuş zamanındaki ortalama taşıyıcı hızının uçuş zamanı ile çarpılmasıyla elde edilebilir. Buna göre

$$\Delta\vec{r} = \langle \vec{v} \rangle_{\tau} \tau \quad (5.2.1)$$

yazılabilir. Burada $\langle v \rangle_{\tau}$ denklem 5.1.27 ile verilir. Eğer parçacığın konumu gerekiyorsa $\Delta\vec{r}$ 'nin hesabı sürüklenme alt programına eklenmelidir.

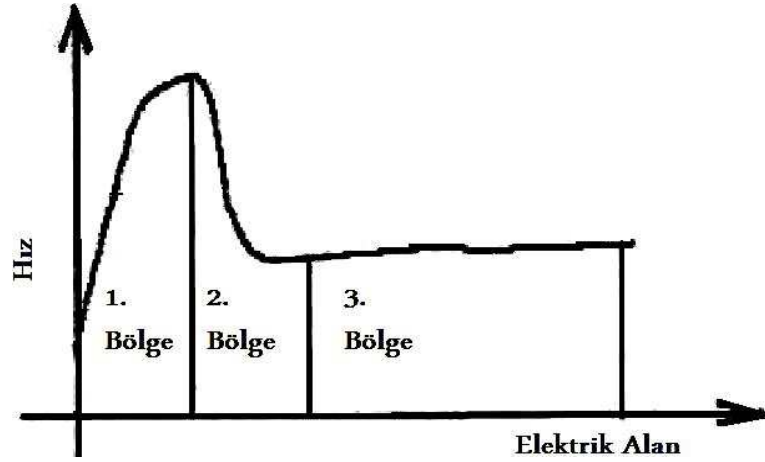
Elektron geçirgenlik aygıtları olası yüksek frekans ve yüksek hız uygulamalarından dolayı ilginç olduğundan çok çalışılmaktadır. Bir aygıt içindeki elektronların geçiş zamanı elektronların durulma zamanı ile kıyaslanabilir ya da ondan daha küçük ise, aygıtta gelen soğuk elektronlar aygıttan geçişleri sırasında kararlı durum hızına ulaşamayabilirler. Bundan dolayı tek parçacık Monte Carlo yöntemi ile hesaplanan hız-alan eğrileri küçük ölçekteki aygıtlardaki elektronların geçirgenliği için kullanılamaz. Soğuk elektronun aygıtta enjeksiyonundan sonra oluşan geçiş olayları ortalama hızın doyum hızına nazaran ani bir yükseliş göstermesine neden olur.

BÖLÜM ALTI

SONUÇLAR

Bu bölümde daha önce detayları anlatılan tek parçacık Monte Carlo yöntemleri kullanılarak GaAs'in çeşitli özellikleri incelenecek ve örnek olarak bulk GaAs kullanılacaktır. Elektrik alan, sıcaklık ve safsızlık konsantrasyonu değerleri değiştirilerek, elektron hızı ve elektron enerjisi üzerine etkisi incelenmeye çalışılacaktır.

İlk olarak elektronun hızının değişim grafiğine baktığımızda temel olarak üç bölge ile karşılaşırız.



Şekil 6.1 Elektrik alana göre taşıyıcı hızındaki değişimin şematik gösterimi.

Birinci bölge elektronların hareketlerinin hızlanarak aktifleştiği ve belirli bir doyum hızına ulaştığı bölgedir. Elektronlar düşük elektrik alanlarında Γ vadisinde dirler ve etkin kütleleri küçüktür ($m_{\Gamma}^* = 0.067m_0$). Bu enerjilerdeki saçılma mekanizması ise çoğunlukla akustik fononlar ile olmakta ve Bölüm 4'de 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.

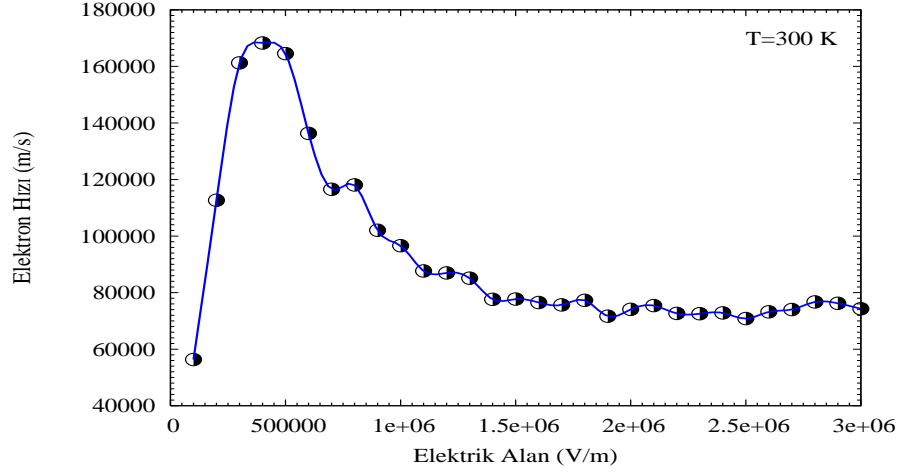
İkinci bölgede ise uygulanan elektrik alanın şiddeti artmaya devam ederken, elektronun enerjisi de artar. Buna karşılık etkin saçılma mekanizması optik fonon saçılması olmaya başlar. Optik fonon saçılması inelastik bir saçılma olduğundan, elektronlar uygulanan alandan dolayı kazandıkları enerjinin bir 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. 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 ($m_L^* = 0.350m_0, m_L^* \approx 5m_\Gamma^*$), hızda ani bir azalma meydana gelir. Bu olgu "Negatif Diferansiyel Direnç" olarak bilinir.

Üçüncü bölgede ise vadiler arası saçılma da optik fonon saçılmasına ek olarak etkin olmaya başlar. Burada vadi değiştiren taşıyıcıların etkin kütleleri arttığından ve hız azaldığından denge durumu gözlenir. Grafikler incelendiğinde hızda çok az miktarda olan artış hala devam etmektedir ancak bu göz ardı edilebilir. Daha yüksek elektrik alan uygulandığında ise kristalin deformasyonu gözlenebilir. Bu yöntem için çok yüksek elektrik alanlarda çalışması göz ardı edilmiştir.

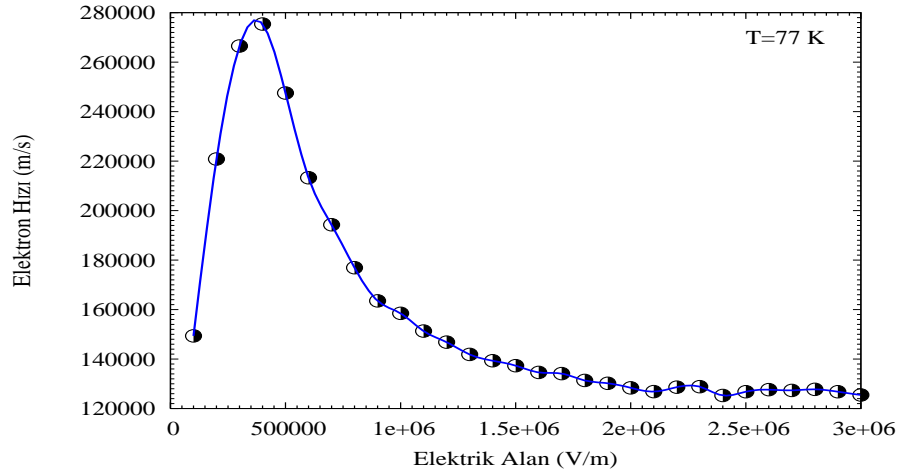
Elektronun enerjisinde uygulanan elektrik alana göre, hızda olduğu gibi ani bir düşüş yaşanmaz ancak hemen hemen sabit bir hale gelir. Çünkü $E = \frac{1}{2}m^*v_d^2$ olduğundan, elektron vadi değiştirdiğinde hızı yani v_d azalır, buna karşılık etkin kütle yani m^* artar.

Bu tezde kullanılan programlar Kazutaka Tomizawa'nın "Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices" (Tomizawa, 1993) kitabından

alınmıştır.

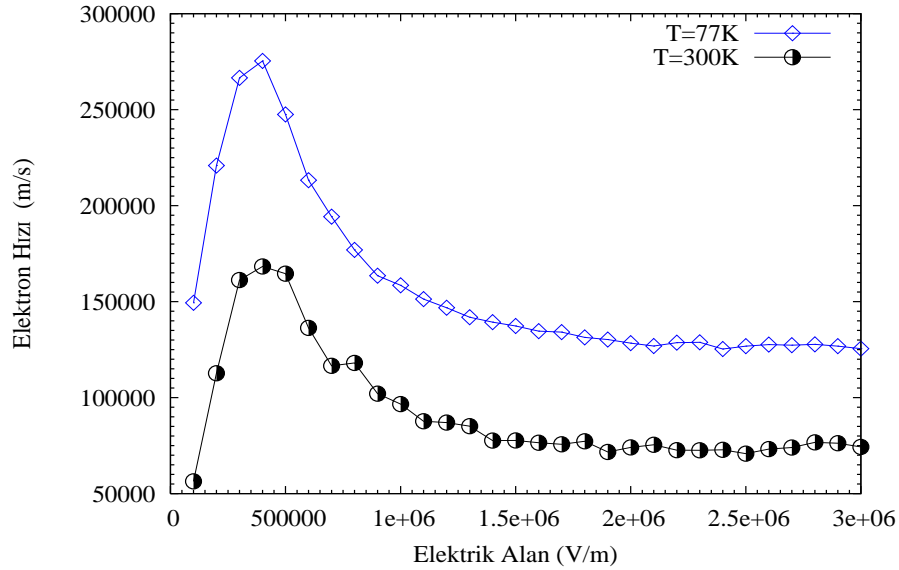


Şekil 6.2 300 K sıcaklıkta, $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda uygulanan elektrik alana göre elektron hız değişimi.



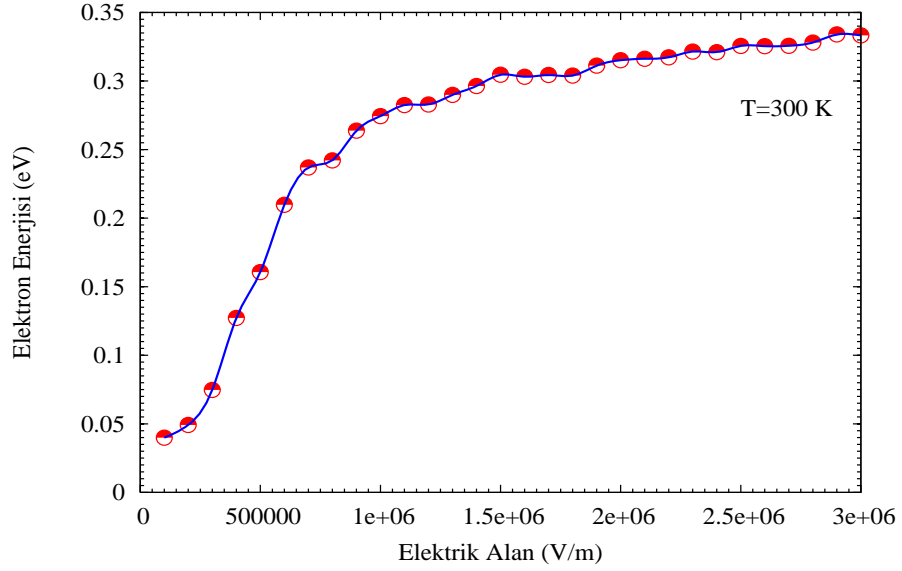
Şekil 6.3 77 K sıcaklıkta, $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda uygulanan elektrik alana göre elektron hız değişimi.

Şekil 6.2 ve Şekil 6.3'de yaptığımız hesapların elektron hızının, uygulanan elektrik alana göre değişimleri gösterilmiştir. Daha önce şematik olarak anlatılan yapıyla uyumlu olduğu görülen grafiklerde, elektron hızları, $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda, uygulanan $500000 V/m$ elektrik alanı civarlarında maksimum değerlerine ulaşmaktadır ve ardından elektron hızlarında, genel yapıya uygun olarak bir azalma görülmektedir. Şematik gösterimde üçüncü bölgede gösterilmiş olan yapıya uygun olarak, elektron hızının yaklaşık olarak sabit kaldığı görülebilmektedir.

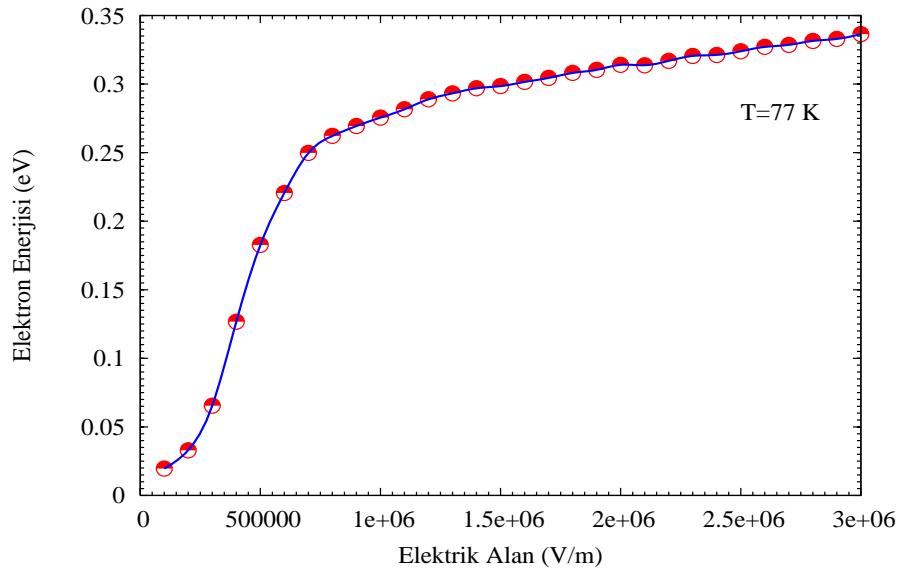


Şekil 6.4 77 K ve 300 K sıcaklıklarında, $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda uygulanan elektrik alana göre elektron hızı değişimlerinin karşılaştırması.

Şekil 6.4'de elektron hızlarının 300 K ve 77 K sıcaklık değerlerinde sabit $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda karşılaştırılmaları yapılmıştır. Görüldüğü üzere düşük sıcaklıkta yani 77 K'de elektron hızları daha yüksek çıkmaktadır. Yaptığımız çalışmada elektron saçılmasına en büyük etki fonon saçılmalarından gelmektedir, düşük sıcaklıkta fononların yani örgü titreşimlerinin daha az olması nedeni ile saçılma azalmakta ve bundan dolayı elektron hızları daha yüksek olmaktadır.

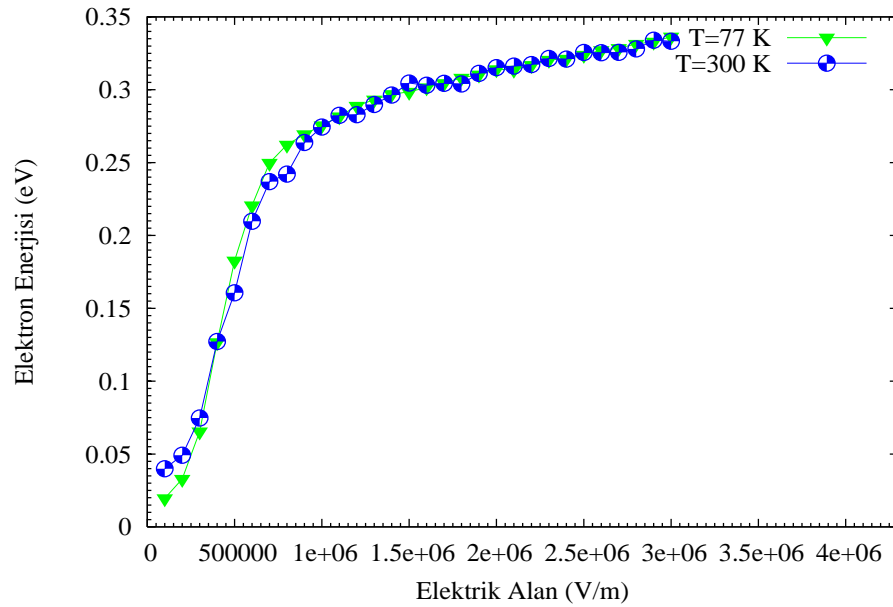


Şekil 6.5 300 K sıcaklıkta, $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda uygulanan elektrik alana göre elektron enerjisi değişimi.



Şekil 6.6 77 K sıcaklıkta, $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda uygulanan elektrik alana göre elektron enerjisi değişimi.

Şekil 6.5 ve Şekil 6.6'da yine yaptığımız hesaplarda elektron enerjisinin uygulanan elektrik alana göre değişimleri gösterilmiştir. Elektron enerjilerinin belli bir değerden sonra neredeyse sabit kaldığı, pek fazla değişime uğramadığı görülmektedir. Elektron enerjilerinin sabit kaldığı bu değer elektron hızı grafiği ile karşılaştırılırsa, elektron hızının neredeyse sabitlenmeye başladığı 1.5×10^6 V/m değerine karşılık gelmektedir ki bu zaten şematik olarak anlatılan kısımda bahsedilen elektronun enerjisinin neden sabit kaldığı ile ilgili açıklama ile uyum göstermektedir.

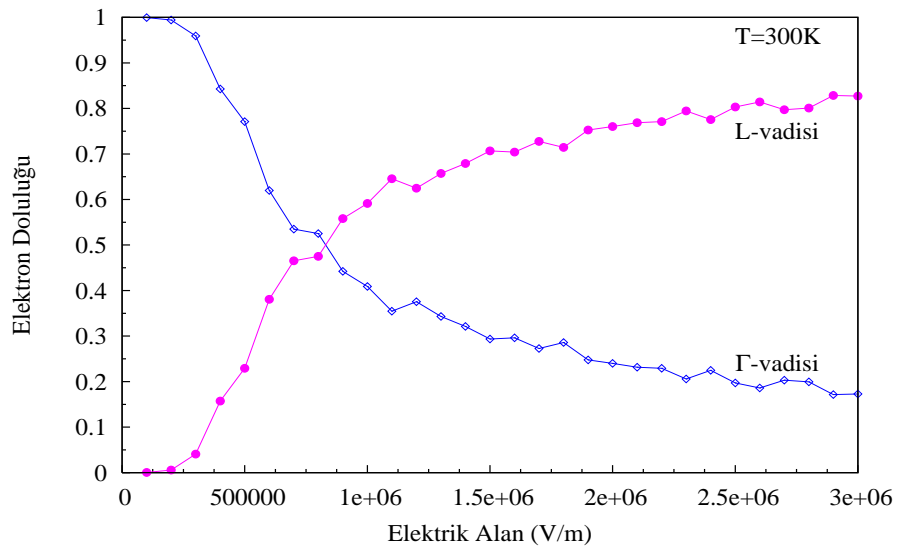


Şekil 6.7 77 K ve 300 K sıcaklıklarında, $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda uygulanan elektrik alana göre elektron enerjisi değişimlerinin karşılaştırması.

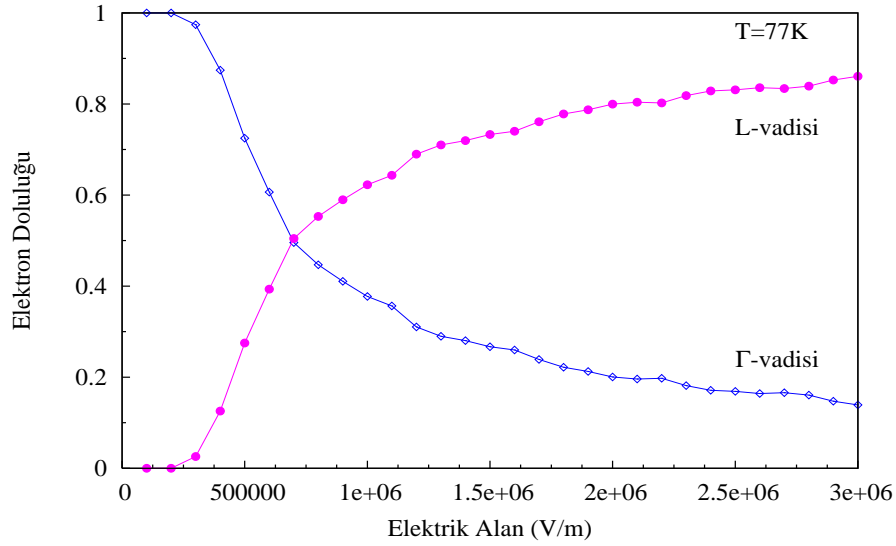
Şekil 6.7'de elektron enerjilerinin 300 K ve 77 K sıcaklık değerlerinde ve sabit $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda karşılaştırılmaları yapılmıştır. Bu grafikde, iki sıcaklık değeri için de elektron enerjisinin aynı değerlerde kaldığı görülmektedir. Bunun nedeni bulk GaAs'de Γ ve L vadilerindeki elektron doluluklarının toplamının her zaman 1 değerinde olmasıdır. Γ ve L vadilerinde elektronların etkin kütleleri değişmekte ancak bu değişim orantılı olarak hıza etki

ettiğinden elektron enerjisini hep aynı değerde tutmaktadır. Bunun sonucu olarak enerji, aynı maddede her sıcaklık için aynı değerlerde olmaktadır.

Yukarıda bahsedilen elektron doluluklarının, $1 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda 300 K ve 77 K sıcaklıklarındaki değerleri, sırası ile Şekil 6.8 ve Şekil 6.9'da verilmiştir.



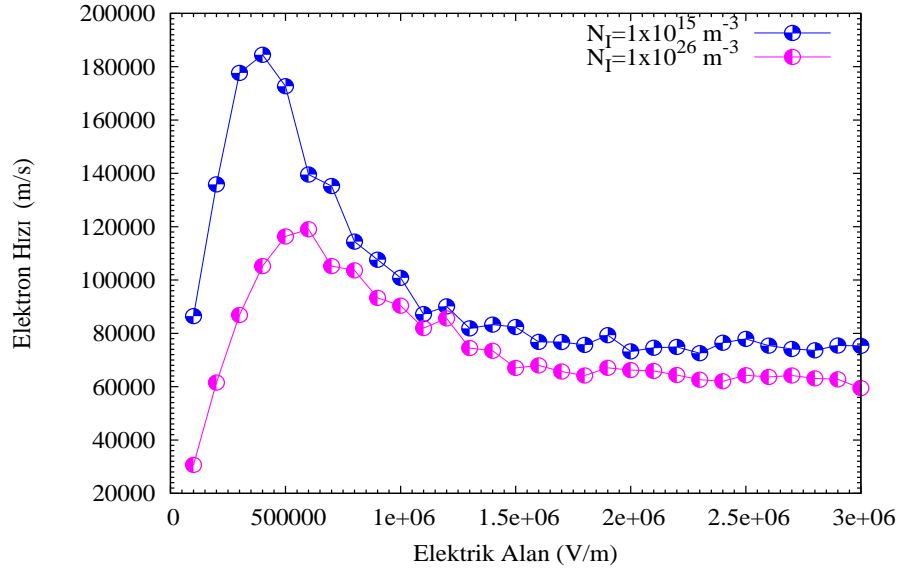
Şekil 6.8 300 K sıcaklıkta, $1 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda uygulanan elektrik alana göre elektronların dolulukları.



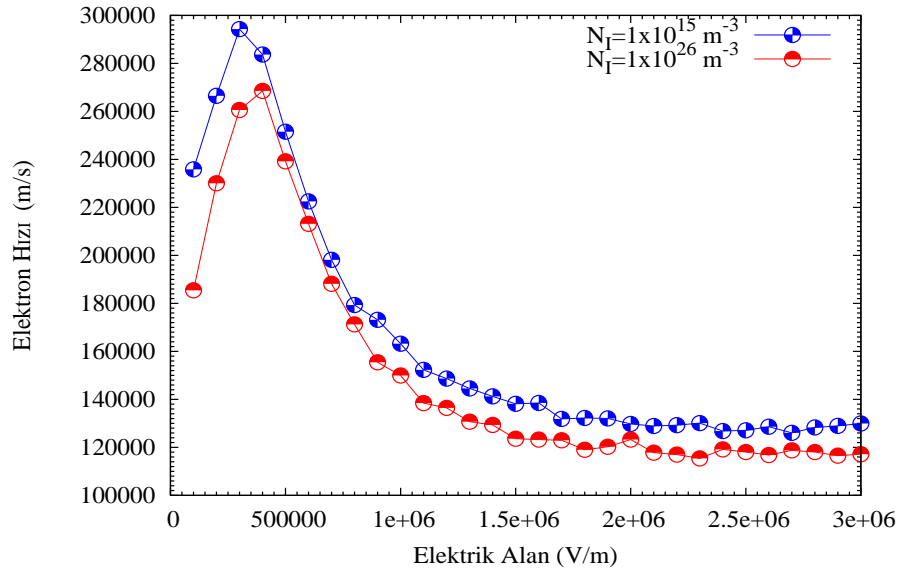
Şekil 6.9 77 K sıcaklıkta, $1 \times 10^{22} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyonunda uygulanan elektrik alana göre elektronların dolulukları.

Elektronun, elektrik alana göre hız değişimi safsızlık konsantrasyonuna (N_I) da bağlıdır, N_I 'nin iki değeri için 300 K ve 77 K sıcaklıklarında hız değişimleri Şekil 6.10 ve Şekil 6.11'de verilmiştir.

Görüldüğü gibi N_I arttıkça hızın alacağı maksimum değer azalmaktadır. Buradan da görülebileceği gibi N_I 'yi arttırarak 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. Safsızlık konsantrasyonu arttıkça elektronun ulaşacağı maksimum hızdaki azalma, denklem 4.2.15 gözönüne alınarak anlaşılabilir. Bu denklemde eğer kabaca elektron ile iyonize olmuş safsızlık konsantrasyonunu eşit alırsak, payda N ile orantılı hale gelir. Pay ve payda sadeleşirse saçılma oranınının N_I 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.



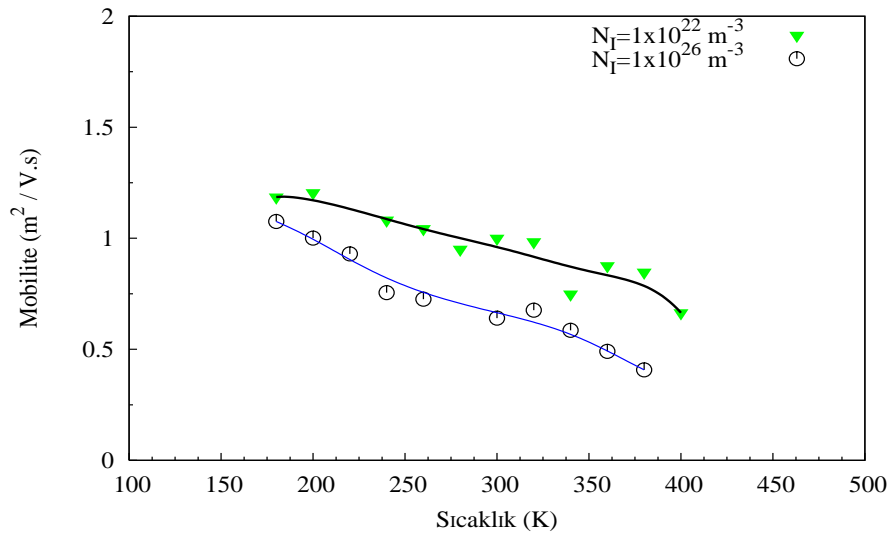
Şekil 6.10 300 K sıcaklığında, $1 \times 10^{15} m^{-3}$ ve $1 \times 10^{26} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyon değerleri için uygulanan elektrik alana göre elektron hızı değişimlerinin karşılaştırması.



Şekil 6.11 77 K sıcaklığında, $1 \times 10^{15} m^{-3}$ ve $1 \times 10^{26} m^{-3}$ safsızlık konsantrasyon değerleri için uygulanan elektrik alana göre elektron hızı değişimlerinin karşılaştırması.

Uygulanan elektrik alana göre elektron hızı grafiklerinden faydalanarak mobilite hesabı yapmak mümkündür. Bu yolla mobilitenin hem sıcaklığa hem de safsızlık konsantrasyonu N_I 'ya bağımlılığı incelenebilir. Şekil 6.2 veya Şekil 6.10'da 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 olmak üzere, $v = A + BF + CF^2$ biçiminde bir fonksiyona uyarlanmış daha sonra mobilite $\mu = \left. \frac{dv}{dF} \right|_{F=0}$ denkleminden hesaplanmıştır. Burada da görüldüğü gibi uyarlamadaki B katsayısı direk olarak mobiliteyi vermektedir.

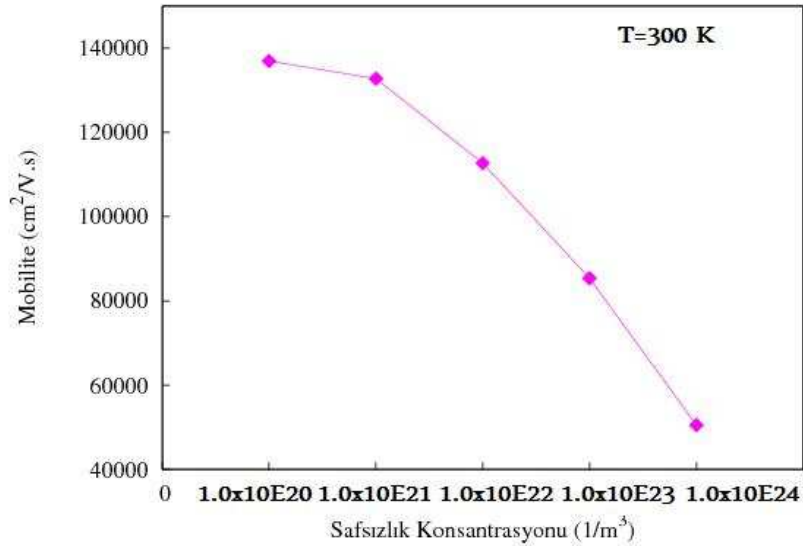
Bu yolla mobilitenin verilen bir N_I değeri için sıcaklıkla veya verilen bir sıcaklık için safsızlık konsantrasyonu ile değişimi bulunabilir.



Şekil 6.12 Mobilitenin değişik safsızlık değerlerinde sıcaklığa göre değişimi.

Şekil 6.12, mobilitenin çeşitli iyonize olmuş safsızlık değerleri için sıcaklıkla değişimini göstermektedir. Görüldüğü gibi safsızlık konsantrasyonu arttıkça mobilite azalmaktadır. Bu olgu Şekil 6.10'da incelendiğinde daha iyi anlaşılabilir. Bu şekilde N_I arttıkça maksimum hız azalmakta, aynı zamanda hızın elektrik alana göre artış oranı da düşmekte yani mobilite 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. 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 baskın olarak özellikle optik fononlardan kaynaklandığında mobilite $T^{-3/2}$ ile orantılıdır (Ridley, 2000).



Şekil 6.13 Mobilitenin 300 K sabit sıcaklık altında safsızlığa göre değişimi.

Şekil 6.13'de 300 K sabit sıcaklık değerinde safsızlığın mobiliteye etkisi görülmektedir. Grafikten oldukça açık bir şekilde görüldüğü üzere, safsızlık konsantrasyonundaki artış elektronların mobilitelerini ciddi bir biçimde azaltmaktadır.

KAYNAKLAR

- Ashcroft, N. W., ve Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics*. Brooks/Cole.
- Bielajew, A. F. (2001). *Fundamentals of The Monte Carlo Method for Neutral and Charged Particle Transport*. The University of Michigan.
- Binder, K. (1986). *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Springer-Verlag.
- Boardman, A. D., Fawcett, W., ve Rees, H. D. (1968). Monte carlo calculation of the velocity-field relationship for Gallium Arsenide. *Solid State Communications*, 6(305–307).
- Davies, J. H. (1997). *The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction*. Cambridge University Press.
- Devries, P. L. (1994). *A First Course in Computational Physics*. John Wiley & Sons.
- Fischetti, M. V., ve 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.
- Fishman, G. S. (1995). *Monte Carlo: Concepts, Algorithms and Applications*. Springer.
- Harrison, P. (2000). *Quantum Wells, Wires and Dots*. John Wiley & Sons.
- Jacoboni, C., ve Lugli, P. (1989). *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*. Springer.
- Jacoboni, C., ve Reggiani, L. (1983). The monte carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials. *Reviews of Modern Physics*, 55, 645–705.

- Kalos, M. H., ve Whitlock, P. A. (1986). *Monte Carlo Methods*. Wiley-Interscience.
- Kittel, C. (1996). *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, 7. Baskı.
- Krauth, W. (2002). Introduction to monte carlo algorithms. *arXiv: cond-mat/9612186v2*.
- Moglestue, C. (1993). *Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices*. Springer, 1. Baskı.
- Nag, B. R. (1980). *Electron Transport in Compound Semiconductors*. Springer-Verlag.
- Oylumođlu, G. (1999). *Amorf Germanyumun Büyütülmesinin Monte Carlo Simülasyonu*. Yüksek Lisans Tezi, Muđla Üniversitesi.
- Ridley, B. K. (2000). *Quantum Processes in Semiconductors*. Oxford University Press, 4. Baskı.
- Rubinstein, R. Y., ve Kroese, D. P. (2007). *Simulation and The Monte Carlo Method*. Wiley-Interscience, 2. Baskı.
- Shankar, R. (1980). *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press.
- Snowden, C. M. (1989). *Semiconductor Device Modelling*. Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K.
- Tomizawa, K. (1993). *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*. Artech House.
- Wang, T., ve Hess, K. (1985). Calculation of the electron velocity distribution in high electron mobility transistors using an ensemble monte carlo method. *J. Appl. Phys.*, 57, 5336–5339.

Yarar, Z. (2004). *Heteroeklem Yapılarda Eklem Düzlemi Boyunca Yük Taşımının Monte Carlo Yöntemi İle İncelenmesi*. Doktora Tezi, Çukurova Üniversitesi.

Yarar, Z., Özdemir, B., ve Özdemir, M. (2005). Electron transport and mobility calculation in a AlGaAs/GaAs 2Deg by monte carlo method. *Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*.

Yılmaz, İ. (1999). *Yarı iletken Aletlerin Nümerik Modellemesi*. Yüksek Lisans Tezi, Çukurova Üniversitesi.