

**T.C.
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**



**ALGA(IN)N/ALN/GAN HETEROEKLEM YAPILARIN
ENERJİ BANT PROFİLLERİNİN VE TAŞIYICI
YOĞUNLUKLARININ NEXTNANO³ SİMÜLASYON
PROGRAMI KULLANARAK İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

SEVİL TURHAN

BALIKESİR, ARALIK - 2011

**T.C.
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**



**ALGA(IN)N/ALN/GAN HETEROEKLEM YAPILARIN
ENERJİ BANT PROFİLLERİNİN VE TAŞIYICI
YOĞUNLUKLARININ NEXTNANO³ SİMÜLASYON
PROGRAMI KULLANARAK İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

SEVİL TURHAN

BALIKESİR, ARALIK - 2011

KABUL VE ONAY SAYFASI

Sevil TURHAN tarafından hazırlanan “ALGA(IN)N/ALN/GAN HETEROEKLEM YAPILARIN ENERJİ BANT PROFİLLERİNİN VE TAŞIYICI YOĞUNLUKLARININ NEXTNANO³ SİMÜLASYON PROGRAMI KULLANARAK İNCELENMESİ” adlı tez çalışmasının savunma sınavı 27.12.2011 tarihinde yapılmış olup aşağıda verilen jüri tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Danışman

Doç. Dr. Sibel GÖKDEN

.....

Üye

Prof. Dr. Ali TEKE

.....

Üye

Doç. Dr. Hilmi NAMLI

.....

Jüri üyeleri tarafından kabul edilmiş olan bu tez BAÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunca onanmıştır.

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Doç. Dr. Hilmi NAMLI

.....

ÖZET

**ALGA(IN)N/ALN/GAN HETEROEKLEM YAPILARIN ENERJİ BANT
PROFİLLERİNİN VE TAŞIYICI YOĞUNLUKLARININ NEXTNANO³
SİMÜLASYON PROGRAMI KULLANARAK İNCELENMESİ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
SEVİL TURHAN
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
(TEZ DANIŞMANI: DOÇ. DR. SİBEL GÖKDEN)**

BALIKESİR, ARALIK - 2011

Bu çalışmada, GaN tabanlı yüksek elektron mobiliteli transistör yapıların cihaz performanslarını geliştirmek için Nextnano³ simülasyon programı kullanılarak büyütme parametrelerinin optimizasyonu araştırılmıştır. Kutuplanmanın indüklediği taşıyıcıları içeren kendi içinde tutarlı 1-band, 1-boyutlu Schrödinger-Poisson denklemlerinin çözümleri, AlGa(In)N/AlN/GaN tekli kuantum kuyulu yapılar için yapıldı. AlN ara tabaka ve AlGa(In)N bariyer kalınlıklarının ve bariyerdeki Al ve In mol kesirlerinin iletkenlik bant yapıları, taşıyıcı yoğunlukları ve elektronların olasılık dalga fonksiyonları üzerine etkileri araştırılmıştır.

ANAHTAR KELİMELER: GaN, AlGaIn, AlInN, tekli kuantum kuyusu, Schrödinger-Poisson.

ABSTRACT

INVESTIGATION OF CARRIER DENSITIES AND ENERGY BAND PROFILES OF ALGA(IN)N/ALN/GAN HETEROJUNCTION STRUCTURES BY USING NEXTNANO³ SIMULATION PROGRAM

MSC THESIS

SEVİL TURHAN

BALIKESİR UNIVERSITY INSTITUTE OF SCIENCE

PHYSICS

(SUPERVISOR: ASSOC. PROF. DR. SİBEL GÖKDEN)

BALIKESİR, DECEMBER 2011

In this study, to improve the device performance of GaN-based high electron mobility transistor structures, the optimization of growth parameters is investigated by using Nextnano³ simulation program. For the AlGa(In)N/AlN/GaN single quantum wells the self-consistent 1-band, 1-dimension Schrödinger-Poisson equations including polarization induced carriers have been solved and simulated. The effects of Al interlayer and AlGa(In)N barrier layer thicknesses and Al and In mole fractions in barrier layer on conduction band structures, carrier densities, two dimensional electron gas wave functions have also been examined.

KEYWORDS: GaN, AlGaIn, AlInN, single quantum well, Schrödinger-Poisson

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET.....	i
ABSTRACT	ii
İÇİNDEKİLER	iii
ŞEKİL LİSTESİ.....	iv
SEMBOL VE KISALTMA LİSTESİ.....	vii
ÖNSÖZ.....	viii
1. GİRİŞ.....	1
2. III-NİTRÜRLERİN TEMEL FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ	7
2.1 Kristal Yapısı	7
2.2 Alt taşlar	10
2.2.1 Safir (Al ₂ O ₃)	11
2.3 III-Nitrür Yapılarda Kutuplanma.....	12
2.4 Kendiliğinden ve Piezoelektrik Kutuplanma	14
3. SİMÜLASYON	19
4. Al _x Ga _{1-x} N/AlN/GaN YAPILARDA ALAŞIM ORANI, ARA TABAKA VE BARIYER KALINLIĞININ ETKİSİ.....	25
4.1 Al-Mol Kesrinin Etkisi.....	26
4.2 AlN Ara Tabaka Kalınlığının Etkisi.....	29
4.3 AlGaN Bariyer Kalınlığının Etkisi	33
5. Al _x In _{1-x} N/AlN/GaN YAPILARDA ALAŞIM ORANI, ARA TABAKA VE BARIYER KALINLIĞININ ETKİSİ.....	38
5.1 In-Mol Kesrinin Etkisi	39
5.2 AlN Ara Tabaka Kalınlığının Etkisi.....	43
5.3 AlInN Bariyer Kalınlığının Etkisi.....	46
6. SONUÇ VE TARTIŞMA	54
7. KAYNAKLAR.....	56

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1: GaN ve GaAs temelli transistörlerin frekans ve güç aralıklarına..... göre kullanım alanları	2
Şekil 1.2: Si, GaAs ve GaN tabanlı güç transistörleri için çeşitli aygıt	3
Şekil 2.1: (a) Hekzagonal, (b) çinko sülfür ve (c) NaCl (kaya tuzu) yapıların.... şematik gösterimi	8
Şekil 2.2: Hekzagonal metal nitür yapısının şematik gösterimi	8
Şekil 2.3: (a) [0 0 0 1] (b) [1 1 -2 1] (c) [1 0 -1 0] doğrultularına sahip..... hekzagonal-GaN.....	9
Şekil 2.4: Safirin [0001] doğrultusu boyunca (a) rombohedral ve	11
(b) hekzagonal birim hücre	
Şekil 2.5: Termal genleşme katsayıları ve örgü sabitleri farkından	12
kaynaklanan zorlama.....	
Şekil 2.6: GaN tabakaların şematik gösterimi ve birim alandaki dipol..... momentler	13
Şekil 2.7: Ga-yüzlü ve N-yüzlü GaN'ın wurtzite kristal yapısının şematik	14
gösterimi.....	
Şekil 2.8: Kutuplanmadan kaynaklı tabaka yük yoğunluğu ve zorlanma	18
varken ve yokken Ga ve N yüzlü AlGaN/GaN çoklu yapıların..... kendiliğinden ve piezoelektrik kutuplanmanın yönelimin	
gösterimi.....	
Şekil 3.1: AlGaN/AlN/GaN yapısının geometrisi	22
Şekil 3.2: AlInN/AlN/GaN yapısının geometrisi.....	22
Şekil 4.1: Farklı Al mol kesirlerine göre olasılık yoğunluğunun uzaysal	26
değişimi	
Şekil 4.2: Farklı Al mol kesirlerine göre olasılık yoğunluğunun uzaysal	27
değişimi	
Şekil 4.3: Farklı Al mol kesirlerine göre 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun	28
uzaysal değişimi	
Şekil 4.4: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun Al mol kesrine göre değişimi	29
Şekil 4.5: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre enerji bant profilinin..... uzaysal değişimi	30
Şekil 4.6: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun..... uzaysal değişimi	31
Şekil 4.7: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun..... normalize olmuş uzaklığa göre değişimi.....	31
Şekil 4.8: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre 3-boyutlu taşıyıcı..... yoğunluğunun uzaysal değişimi	32
Şekil 4.9: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun AlN ara tabaka kalınlığına göre	33
değişimi	
Şekil 4.10: Farklı AlGaN bariyer kalınlıklarına göre enerji bant profilinin	34
uzaysal değişimi	
Şekil 4.11: Farklı AlGaN bariyer kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun	34
uzaysal değişimi	
Şekil 4.12: Farklı AlGaN bariyer kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun	

normalize olmuş uzaklığa göre değişimi	35
Şekil 4.13: Farklı AlGa _N bariyer kalınlıklarına göre 3-boyutlu taşıyıcı	
yoğunluğunun uzaysal dağılımı	36
Şekil 4.14: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun farklı AlGa _N bariyer kalınlığına ...	
göre değişimi	37
Şekil 5.1: Farklı In mol kesirlerine göre enerji bant profilinin uzaysal	
değişimi	39
Şekil 5.2: Farklı In mol kesirlerine göre olasılık yoğunluğunun uzaysal	
değişimi	40
Şekil 5.3: Farklı In mol kesirlerine göre olasılık yoğunluğunun normalize	
olmuş uzaklığa göre uzaysal değişimi	40
Şekil 5.4: Farklı In mol kesirlerine göre 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun	
uzaysal değişimi	42
Şekil 5.5: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun In mol kesrine göre değişimi	42
Şekil 5.6: Farklı Al _N ara tabaka kalınlıklarına göre enerji bant profilinin	
uzaysal değişimi	43
Şekil 5.7: Farklı Al _N ara tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun	
uzaysal değişimi	44
Şekil 5.8: Farklı Al _N ara tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun	
normalize olmuş uzaklığa göre değişimi	44
Şekil 5.9: Farklı Al _N ara tabaka kalınlıklarına göre 3-boyutlu taşıyıcı	
yoğunluğunun uzaysal değişimi	45
Şekil 5.10: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun Al _N ara tabaka kalınlığına	
göre değişimi	46
Şekil 5.11: Farklı AlIn _N bariyer kalınlıklarına göre enerji bant profilinin	
uzaysal değişimi	47
Şekil 5.12: Farklı AlIn _N bariyer kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun	
uzaysal değişimi	47
Şekil 5.13: Farklı AlIn _N bariyer kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun	
normalize olmuş uzaklığa göre değişimi	48
Şekil 5.14: Farklı AlIn _N bariyer kalınlıklarına göre 3-boyutlu taşıyıcı	
yoğunluğunun uzaysal dağılımı	48
Şekil 5.15: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun farklı AlIn _N bariyer kalınlığına	
göre değişimi	49
Şekil 5.16: AlGa _N ve AlIn _N bariyerli yapılarda enerji bant profillerinin	
uzaysal değişimi	51
Şekil 5.17: AlGa _N ve AlIn _N bariyerli yapılarda olasılık yoğunluklarının	
uzaysal değişimi	52
Şekil 5.18: AlGa _N ve AlIn _N bariyerli yapılarda 3-boyutlu taşıyıcı	
yoğunluklarının uzaysal değişimi	52
Şekil 5.19: AlGa _N ve AlIn _N bariyerli yapılarda 2-boyutlu taşıyıcı	
yoğunluklarının farklı Al ve In mol-kesirlerine göre değişimi	53

TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 2.1: AlN, GaN ve In için deneysel gözlenen yapısal parametreler	10
Tablo 2.2: Safir, Si, SiC ve ZnO için örgü parametreleri, ısıl genleşme katsayıları ve ısıl iletkenlik katsayısı	11
Tablo 2.3: GaN, InN ve AlN yarıiletkenlerinin kendiliğinden kutuplanma büyüklükleri, piezoelektrik ve dielektrik sabitleri	16
Tablo 3.1: İntput dosyası girdileri	22

SEMBOL VE KISALTMA LİSTESİ

P	: Kutuplanma
P_{PE}	: Piezoelektrik kutuplanma
P_{KK}	: Kendiliğinden kutuplanma
ϵ	: Dielektrik sabit
C	: Elastik sabit
A	: Örgü sabiti
μ	: Mobilite
\hbar	: İndirgenmiş Planck sabiti
Φ	: Elektrik potansiyeli
σ	: 2BEG taşıyıcı yoğunluğu
2BEG	: 2-boyutlu elektron gazı
HEMT	: Yüksek elektron mobiliteli transistör

ÖNSÖZ

Öncelikle yüksek lisans çalışmamın her aşamasında engin bilgi ve tecrübelerini paylaşan, hiçbir konuda desteklerini esirgemeyen değerli danışmanım Doç. Dr. Sibel GÖKDEN'e teşekkürlerimi sunarım.

Nextnano³ simülasyon programını öğrenmemde destek veren Gazi Üniversitesi öğretim üyesi Doç. Dr. Sefer Bora LIŞESİVDİN ve çalışma grubuna teşekkür ederim. Ayrıca çalışmam süresince bilgi ve tecrübeleriyle desteklerini esirgemeyen değerli hocam Prof. Dr. Ali TEKE'ye, yine her konuda bilgilerini paylaşan Yrd. Doç. Dr. Remziye TÜLEK'e ve Fizik Bölümündeki hocalarıma ve arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Ve son olarak da maddi ve manevi her konuda yanımda olan aileme sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

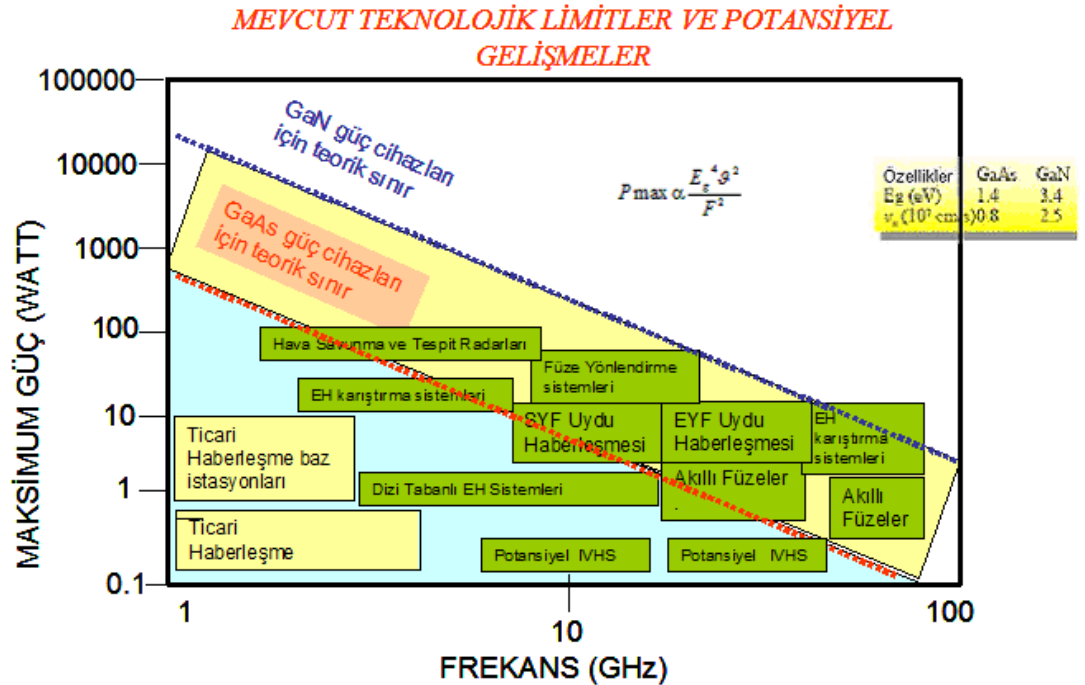
1. GİRİŞ

Son yıllarda yarıiletken teknolojisi alanında önemli arařtırmalar yapılmaktadır. Bu alanda ilk alıřmalar 1990'lardan itibaren Si ve III-V grubundan olan GaAs, AlAs gibi yarıiletken materyaller ile bařlamıřtır [1]. Ancak bu yarıiletkenlerin dar bant aralıđına (Si 1.1eV, GaAs 1.4eV gibi) sahip olmalarından dolayı kullanım alanları da kısıtlanmıřtır. Dar bant aralıklarına sahip olan bu materyallerdeki elektronlar valans bandından iletim bandına kolayca geebildiđinden dolayı bu yüksek g ve yüksek sıcaklık uygulamaları iin uygun deđildir.

III-nitrr alanındaki alıřmaların ivme kazanmaya bařlaması ile elektronik ve optoelektronik uygulamalar iin bu yarıiletkenler olduka gelecek vadeden bir materyal grubu oluřturmaya bařlamıřtır [2-3]. Bu yarıiletken materyallerden olan (GaN, AlN ve InN) termodinamik dengede hekzagonal yapıda kristallenirler. Doğrudan bant aralıđına sahip olan bu nitrrlerin en önemli zelliklerinden biri AlGaN, InGaN, InAlN ve AlGaInN gibi l ve drtl bileřiklerinin retilbilmesidir. Bu bileřiklerin enerji bant aralıkları, 0.7 eV'dan (InN), 3.4 eV (GaN) ve 6.1eV'a (AlN) kadar elektromagnetik spektrumun yakın kızıltesi blgesinden mortesi blgeye kadar uzanan ok geniř bir dalga boyu aralıđını taramaktadır [4]. Bu zelliklerinden dolayı III-nitrr yarıiletkenler grnr ve mortesi blgede alıřan ıřık yayan diyotlar (LED), lazer diyotlar (LD), fotodedektrler, optiksel dedektrler gibi birok optoelektronik cihaz retiminde ve aynı zamanda da yüksek g/sıcaklık elektronik uygulamalar iin ekici hale gelmiřtir.

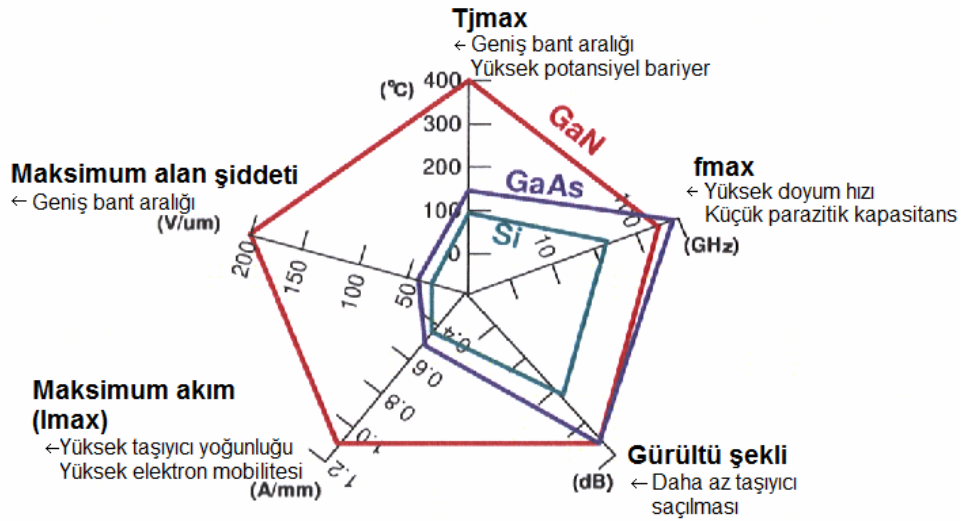
III-nitrr grubu yarıiletkenler yukarıda verilen optiksel zelliklerinin ve buna bađlı geliřtirilen optoelektronik uygulamalarının yanı sıra, son zamanlarda elektronik teknolojisi iin de yođun olarak arařtırılan malzeme gruplarından birisidir. AlGa(In)N/GaN yüksek elektron mobiliteli transistr (HEMT) yapıların yüksek frekanslı ve yüksek gl mikrodalga uygulamalar iin aranan geniř bant aralıđına, iyi bir ısıl iletkenliđe, kendiliđinden ve piezoelektrik polarizasyon alanına sahip olması, HEMT yapıların askeri ve ticari alanda (elektronik gzetimlerde, yüksek hızlı iletiřimlerde, gemi ve uak radarlarında, uydu iletiřimlerinde, telsiz slerinde ve

elektronik savaşlarda karıştırıcı olarak) kullanılmasına olanak sağlamaktadır. Fakat bu alandaki mevcut teknolojinin rekabetinden dolayı GaN tabanlı elektronik aygıtların gelişimi, optoelektronik uygulamalar kadar hızlı gerçekleşmemektedir. Buna rağmen, son zamanlardaki gelişmeler oldukça etkileyicidir. GaN ve GaAs temelli transistörlerin potansiyel kullanım alanları frekans ve güç aralıklarına göre karşılaştırmalı olarak Şekil 1.1’de verilmiştir [5]. Şekilde görüldüğü gibi bir transistörün maksimum gücü kullanılan yarıiletkenin enerji bant aralığının dördüncü kuvveti ve sürüklenme hızının karesi ile doğru orantılıdır. Dolayısıyla, nitrürlerin enerji bant aralıkları ve sürüklenme hızları Si ve GaAs gibi diğer yarıiletkenlere göre daha büyük olduğundan GaN temelli yarıiletkenlerden üretilecek olan transistörlerin daha fazla çıkış gücü vermesi beklenmektedir. Örneğin, 10 GHz frekansında çalışması için tasarlanan GaN tabanlı bir transistörden yaklaşık 200W lık bir teorik çıkış gücü öngörülürken, GaAs tabanlı bir transistörden teorik olarak ancak 10 W’lık bir çıkış gücü elde edilebilir. Transistorün maksimum çıkış gücü aynı zamanda frekansın karesi ile de ters orantılı olduğundan tasarlanacak olan transistörün maksimum çıkış gücü ve çalışma frekans aralığı seçilen uygulama alanının aradığı şartlara göre belirlenmelidir.



Şekil 1.1: GaN ve GaAs temelli transistörlerin frekans ve güç aralıklarına göre kullanım alanları.

Şekil 1.2’de ise, 0.5 μm kapı (gate) genişliğine sahip Si, GaAs ve GaN tabanlı güç transistörleri için çeşitli aygıt parametrelerinin karşılaştırılması verilmiştir [6]. Bu şekilden de görüldüğü gibi mikrodalga ya da milidalga iletim uygulamalarının yanı sıra AlGa(In)N/GaN HEMT’ler Si ve GaAs teknolojisine göre GHz frekansında güç elektroniğinde oldukça önemli avantajlara sahiptir. Yine çeşitli uygulamalar için ihtiyaç hissedilen düşük kayıplarda yüksek anahtarlama frekanslı aygıtlarda nitrür temelli transistörler silikon tabanlı metal-oksit yarıiletken (MOS) ve GaAs yapılar ile karşılaştırılabilir performans değerlerine sahiptir [6]. Ayrıca, şekilde görüldüğü gibi nitrürlerin sahip oldukları büyük bant aralığından dolayı, birim alandaki akım yoğunlukları ve maksimum alan şiddetleri diğer yarıiletken aygıtlara göre oldukça büyüktür.



Şekil 1.2: Si, GaAs ve GaN tabanlı güç transistörleri için çeşitli aygıt parametrelerinin karşılaştırılması.

Nitrürlerin sahip oldukları temel parametrelerinin belirlediği bu teorik limitlerin literatürde ne oranda gerçekleşebildiğine baktığımızda yine oldukça etkileyici sonuçlarla karşılaşmaktayız. Örneğin, SiC taban kristali üzerine kapı uzunluğunun 0.45 μm olduğu yüksek güçte GaN temelli modülasyon (seçici) katkılı alan etkili transistör (MODFET) yapılarından 125 μm genişliğinde üretilen cihazın 10 GHz’deki güç yoğunluğu 6.8 W/mm ve toplam gücü 4 W olarak ölçülmüştür [7]. GaN’ın kullanıldığı MODFET’ler ile ilgili özellikle X-bandında ve daha yüksek

frekanslarda yapılan diğerk çalıřmalarda daha da kayda deęer sonular elde edilmiřtir. HRL (Hughes Research Laboratories) laboratuvarlarındaki çalıřmalarda 10 GHz'de 1 mm geniřlięindeki cihazda grlen toplam g dzeyi 6.3 W olarak llmřtr. Daha ok ilgi ekici durum ise 0.1mm geniřlięindeki cihazdan 6.5 W olarak beklenen gcn ıřısal olarak sınırlandırılmamasıdır. 10 GHz'de 11 dB'lik bir g kazancında 0.85 dB grlt olması bir bařka nemli veri olarak deęerlendirilebilir [8]. eyrek mikronluk kapı uzunluęuna sahip bu cihazlarda kanal (drain) kırılma voltajları 60 V civarındadır. Bu deęer de FET transistrn performansının olduęa yksek olduęunun bir gstergesidir.

GaN tabanlı yarıiletken materyalin bytlmesinde karřılařılan sorunlardan bir tanesi de kullanılan alt tař malzemelerin eksiklięidir. Bir malzemenin alt tař olup olmadıęını belirlemede en nemli kavram rg uyuramazlıęıdır. Bunun yanı sıra kristal yapı, kimyasal, ıřısal ve elektriksel zellikler de nemlidir. nk bunlar bytlen filmi nemli lde etkiler. Bytlen filmin kristal ynelimi, polaritesi, ok tiplilięi, yzey morfolojisi, gerilmesi ve kusur yoęunluęu alt tař tarafından belirlenir. Bu yzden alt tař seiminde hem malzemenin fiziksel zellikleri hem de yukarıda ifade edilen ltler dikkate alınmalıdır [9]. GaN yarıiletken bytmelerde en ok karřılařılan alt tařlar silikon (Si), silikon karbr (SiC) ve safir (Al₂O₃) olarak sıralanabilir.

III-nitrrlerin dikkat ekici bir zellięi, [0001] c-doęrultusunda yksek bir makroskopik kutuplanmanın oluřudur. Bu kutuplanma, kendilięinden (spontaneous) kutuplanma ve gerilme kaynaklı piezoelektrik kutuplanmanın toplamıdır ve kristaldeki, gerilme ve kompozisyona baęlıdır [10]. [0001] doęrultusu boyunca byyen III-nitrr tabanlı oklu yapı ara yzeylerde kutuplanmanın sreksizlięi yapının tamamının zellikleri stnde nemli bir etkiye sahip olan gl bir elektrik alan retir [11]. Bu elektrik alan bir bant bklmesine ve kuantum kuyusu iindeki elektron ve bořluk dalga fonksiyonlarının rtřmesinde bir azalmaya neden olur.

Bylece III-nitrr yarıiletkenler gl kendilięinden ve piezoelektrik kutuplanma alanları gibi sahip oldukları zelliklerinden dolayı AlGa(In)N/GaN tabanlı yksek elektron mobiliteli transistrler (HEMT) ve yksek frekans ve yksek gte mikrodalga uygulamaları iin byk dikkat ekmektedir [12]. Bu nedenle yksek performanslı HEMT tasarımı ve uygulamaları iin bytme ve fabrikasyon

süreçleri önemli bir yer tutmaktadır. Büyütülen transistör yapıların istenilen kalitede olması için de bu uygulamalara yönelik optimizasyonun iyi yapılması gereklidir.

Yukarıdaki bilgiler ışığında, bu tez çalışmasında tasarımı yapılan AlGa(In)N/AlN/GaN çoklu yapılarda, mobilite ve taşıyıcı yoğunluğu gibi temel iletim özelliklerinin iyileştirilmesine yönelik, bariyer kalınlığının, bariyerdeki alaşım oranının, AlN ara tabaka kalınlığının, enerji bant profilleri ve taşıyıcı yoğunlukları üzerine etkileri Nextnano³ simülasyon programı kullanılarak incelendi. Literatürde AlGaN bariyerli AlGaN/AlN/GaN yapılarda optimum AlGaN bariyer kalınlığı 15-20nm, AlN ara tabaka kalınlığı 1nm ve bariyerdeki alaşım yüzdesi de %25-%30 olarak bulunmuştur [13-15]. AlGaN bariyer tabakalı HEMT yapılarına alternatif olarak da ilk kez Kuzmik tarafından GaN temelli HEMT yapılarının performansını geliştirmek için AlGaN bariyer yerine AlInN bariyer kullanılarak başarılı sonuçlar elde edilmiştir [16]. AlInN bariyer kullanılmadaki avantaj, alaşım oranının ayarlanması durumunda, GaN ile örgü ve kutuplanma uyumlu çoklu yapıların elde edilebilmesidir. In oranı %18 olduğu zaman AlInN ile GaN arasında örgü uyumu sağlanmaktadır. Bu durumda gerilmeden kaynaklanan piezoelektrik kutuplanma sıfır olur ve toplam kutuplanma yalnızca kendiliğinden kutuplanmadan kaynaklanır. Literatürde AlInN bariyerli AlInN/AlN/GaN yapılar için de optimum iyileştirmeler AlInN bariyer kalınlığı için 17-20 nm, AlN ara tabaka kalınlığı için 1nm ve bariyerdeki alaşım yüzdesi için de %18 olarak bulunmuştur [17,18].

Yukarıdaki literatür çalışmalarının ışığından ve neticelerinden yüksek frekans/güç uygulamaları için üretilen HEMT'ler için mobilite ve taşıyıcı yoğunluğu gibi temel iletim özelliklerinin iyileştirilmesinin zorunlu olduğu açıktır. Bu amaca yönelik olarak da cihaz dizaynı yapılarak, üretime geçilmeden önce, hızlı ve doğru bir simülasyon analizi yapılmalı ve büyütme parametreleri değiştirilerek uygun optimum değerler elde edilmelidir. Günümüzde bilgisayarların iç ve dış donanımın fiyatlarındaki hızlı düşüş, bilgisayarın çalışma gücünün her gün gittikçe artmasından dolayı, bilgisayar destekli fiziği, yarıiletken cihazların optimizasyonu için uygun bir araç yapmıştır.

Bu tez çalışmasında büyütme parametrelerinin iyileştirilmesine yönelik olmak üzere, AlGaN/AlN/GaN ve AlInN/AlN/GaN farklı iki yapı tasarlanmış ve her bir yapı için, iletim enerji bant yapıları, elektron olasılık yoğunlukları ve taşıyıcı

yoğunlukları üzerine, AlGa(In)N bariyer kalınlıklarının, AlN ara tabaka kalınlığının, AlGa(In)N bariyer tabakasındaki Al ve In mol kesirlerinin etkileri teorik olarak araştırılmıştır. Araştırmalar Nextnano³ cihaz simülasyon yazılımı kullanılarak, kutuplanmalarının indüklediği taşıyıcıları da hesaba katan kendi içinde tutarlı lineer olmayan 1-boyutlu Schrödinger-Poisson denklemlerinin çözülmesiyle gerçekleştirilmiştir.

Bu tez çalışması aşağıdaki şekilde oluşturulmuştur:

2.Bölüm: III-Nitrürlerin temel fiziksel özellikleri

3.Bölüm: Simülasyon

4.Bölüm: Al_x Ga_{1-x} N/AlN/GaN yapılarında alaşım oranı, ara tabaka ve bariyer kalınlığının etkisi

5. Bölüm: Al_x In_{1-x} N/AlN/GaN yapılarında alaşım oranı, ara tabaka ve bariyer kalınlığının etkisi

6.Bölüm: Sonuç ve Tartışma

2. III-NİTRÜRLERİN TEMEL FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ

Nitrür temelli aygıtların performanslarının artırılması ve buna bağlı olarak da tasarım parametrelerinin Optimizasyonu için bu yapılara ait temel bazı fiziksel özelliklerinin bilinmesi son derece önemlidir. Bu bölümde, AlN, GaN ve InN yarıiletkenlerin kristal yapılarından, AlGa(In)N/GaN yapıların büyütüldüğü alt taşlardan, kutuplanma ve bunun ortaya çıkardığı yüksek taşıyıcı yoğunluğu gibi fiziksel özelliklerinden bahsedilecektir [19,20].

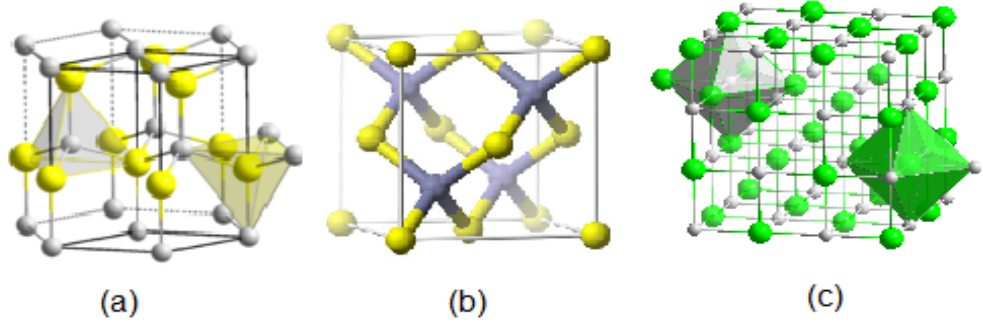
2.1 Kristal Yapısı

III-nitrür yarıiletkenler, hekzagonal, ZnS (çinko sülfür) ve NaCl (kaya tuzu) yapıda kristalleşirler (Şekil 2.1). AlN, GaN, InN yapıların NaCl yapıda kristalleşebilmesi için oldukça yüksek dış basınç gerekmektedir. GaN ve InN çinko sülfür yapı ise sadece Si, SiC, MgO, GaAs gibi kübik alt tabakalar üzerinde çoklu yapılar büyütme ile kararlı olabilir. AlN, GaN, InN bulk yapılar için termodinamik olarak en kararlı yapı olan hekzagonal (wurtzite) yapıdır.

Hekzagonal yapıda bağ başına bağlanma enerjisi, AlN, GaN, InN için sırasıyla 2.88 eV (63.5 kcal/mol), 2.20 eV (48.5 kcal/mol) ve 1.93 eV (42.5 kcal/mol)'dur [21]. Hekzagonal ve çinko sülfür arasında hesaplanan enerji farkı, sırasıyla AlN için -18.41 meV/atom, GaN için -9.88 meV/atom ve InN için -11.44 meV/atom'dur.

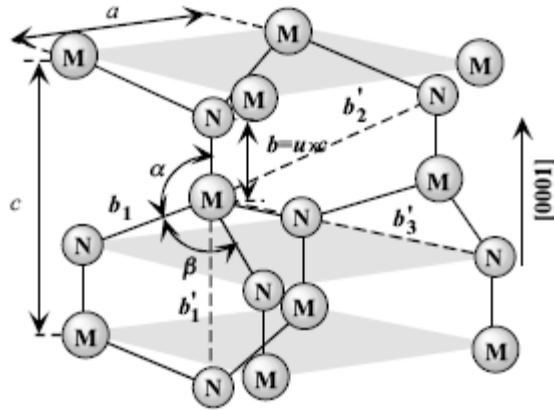
Hekzagonal yapının uzay grubu, Hermann- Mauguin notasyonunda $P6_3mc$ ve Schoenflies notasyonunda C_{6v}^4 , nokta grup simetrisi ise Hermann- Mauguin notasyonunda $6mm$ ve Schoenflies notasyonunda C_{6v} 'dir.

Hekzagonal yapı, iki sıkı paketli altıgen yapının (hcp) iç içe geçmesi ile oluşur. Her birim hücrede 4 tane atom vardır. Tetrahedral bağ yapısına sahip (atomlar arasındaki açı 109^0) hekzagonal yapıda en yakın komşu sayısı 4 ve ikinci en yakın komşu sayısı 12'dir.



Şekil 2.1: (a) Hekzagonal, (b) çinko sülfür ve (c) NaCl (kaya tuzu) yapıların şematik gösterimi.

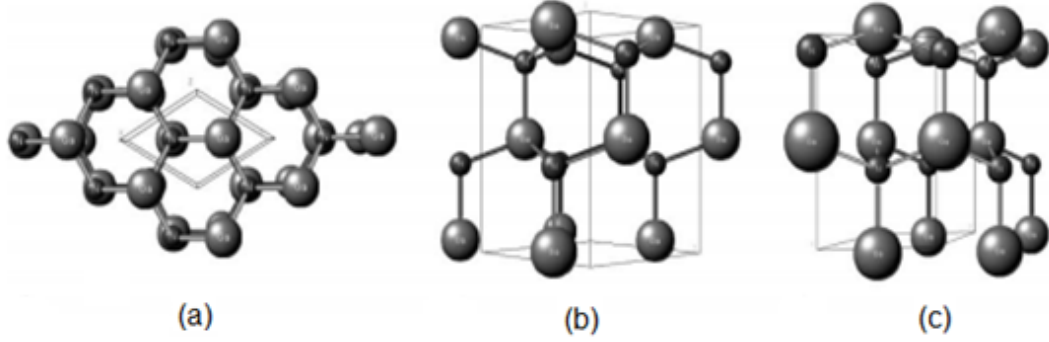
Hekzagonal yapı, a ve c örgü parametresine sahip olup ideal bir hekzagonal yapı için $c/a = 1.633$ değerini alır. Bu yapı için bir diğer parametre ise anyon ve katyon arasındaki bağ uzunluğu olan b 'nin (veya en yakın komşular arası bağ uzunluğu) c 'ye oranı olan u parametresi olup ideal bir hekzagonal yapı için $u = 0.375$ değerini alır. Şekil 2.2'de hekzagonal yapı için örgü parametreleri, birinci yakın komşuluk, ikinci yakın komşuluk ve atomlar arası açılar gösterilmiştir.



Şekil 2.2: Hekzagonal metal nitrür yapısının şematik gösterimi.

Şekil 2.2'deki a , c ve u örgü parametreleri, $b (=uc)$ en yakın komşu uzaklığı, b_1' , b_2' , b_3' üç tip ikinci yakın komşu uzaklığını, α ve β atomlar arası açığı ifade etmektedir.

Şekil 2.3'de farklı kristal doğrultuları boyunca hekzagonal GaN'ın şematik görünüşü gösterilmektedir. Burada küçük daireler atomik yarıçapı küçük olan N atomlarını, büyük olan daireler ise atomik yarıçapı büyük olan Ga atomlarını simgelemektedir.



Şekil 2.3: (a) $[0001]$ (b) $[11-21]$ (c) $[10-10]$ doğrultularına sahip hekzagonal-GaN.

Tablo 2.1'de ise AlN, GaN ve InN için deneysel olarak gözlenen örgü parametreleri, en yakın ve ikinci yakın komşuluk uzaklıkları ve bağ açıları verilmiştir [22]. c/a oranı, bileşenlerin elektronegatiflik farkı ile ilişkili olduğundan en büyük farka sahip bileşenlerde c/a oranının, ideal değerinden daha büyük sapmaları gözlenmektedir. Tablo 2.1'de görüldüğü gibi GaN için c/a oranı ve u değeri sırasıyla 1.634 ve 0.377 olarak ölçülmüş olup ideal değere yakındır. Diğer taraftan AlN için c/a oranı 1.606 ve u değeri 0.382 olarak ölçülmüştür. AlN ideal değerlerden kayda değer bir sapma göstermektedir. İncelenen örneklerdeki homojenlik, zorlama ve bunun kısmi gevşemesi ve de yüksek konsantrasyonlu yapısal kusurların farklılıklarından dolayı literatürde Tablo 2.1'de verilen değerlerden farklı değerler de bulunmaktadır [23-27].

Tablo 2.1: AlN, GaN ve InN için deneysel gözlenen yapısal parametreler [22].

Örgü parametreleri	AlN	GaN	InN
a (Å)	3.110	3.199	3.585
c (Å)	4.982	5.185	5.760
c/a	1.606	1.634	1.618
u	0.382	0.377	0.379
b (Å)	1.907	1.971	2.200
b_1 (Å)	1.890	1.955	2.185
b'_1 (Å)	3.087	3.255	3.600
b'_2 (Å)	3.648	3.757	4.206
b'_3 (Å)	3.648	3.749	4.198
α	108.19	109.17	108.69
β	110.73	109.18	110.24

2.2 Alt taşlar

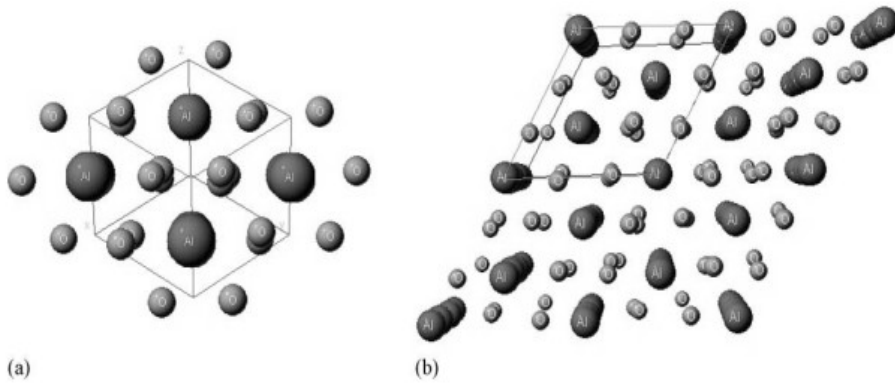
III-nitrür araştırmasında temel zorluklardan bir tanesi örgü ve ısıl uyumlu alt taşların eksikliğidir. Kullanılan alt taş, epitaksiyel filmlerin kristal yönelimini, polaritesini, yüzey morfolojisini, gerilme (strain) ve kusur yoğunluğunu belirler. GaN tek kristalin büyütülmesindeki zorluklardan dolayı Al(In)GaN/GaN yapılar genelde safir (Al_2O_3) veya SiC üzerine büyütülür. Bunlara ilaveten III-nitrürler Si, NaCl, GaP, InP, ZnO, MgAl_2O_4 , TiO_2 ve MgO üzerine de büyütülürler. Tablo 2.2'de en çok kullanılan alt taş materyallerine ait bazı parametrelerin sayısal değerleri verilmektedir [28].

Tablo 2.2: Safir, Si, SiC ve ZnO için örgü parametreleri, ısıl genleşme katsayıları ve ısıl iletkenlik katsayısı [28].

Alt taş	a (Å)	c (Å)	$\Delta a/a \times 10^{-6}$ (1/K)	$\Delta c/c \times 10^{-6}$ (1/K)	κ (W/cmK)
Safir	4.765	10.298	7.5	8.5	0.3-0.5
Si	5.4301		3.99		1.56
6H-SiC	3.0806	15.117 3	4.46	4.16	3.8
ZnO (hegzagonal)	3.2426	5.194	4.8	2.9	0.3-0.4

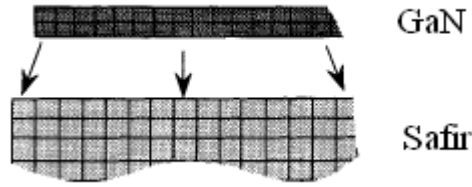
2.2.1 Safir (Al_2O_3)

Alüminyum oksit tek kristali olan safir, hegzagonal simetrisi, kolay olarak işlenebilmesi, maliyetinin ucuz olması gibi nedenlerden dolayı GaN epitaksi için en çok çalışılan alt taş yapısıdır. Şekil 2.4’de safirin [0001] doğrultusunda hegzagonal ve rombohedral birim hücreleri gösterilmektedir. Rombohedral birim hücrede toplam 10 iyon olmak üzere 4 tane Al^{+3} iyonu ve 6 tane O^{-2} iyonu vardır. Hegzagonal birim hücrede toplamda 30 iyon olmak üzere 12 tane Al^{+3} iyonu ve 18 tane O^{-2} iyonu bulunmaktadır.



Şekil 2.4: Safirin [0001] doğrultusu boyunca (a) rombohedral ve (b) hegzagonal birim hücre gösterimi.

Safir ile GaN arasında %14-16 örgü uyumsuzluğu vardır ve bundan kaynaklanan yüksek dislokasyon yoğunluğu 10^8 - 10^{10} cm^{-2} mertebesindedir. Bu yüksek kusur yoğunlukları taşıyıcı mobilitesini, termal iletimi ve taşıyıcı yaşam ömrünü azaltarak elektronik ve optoelektronik aygıtların performansını etkiler. Çizgisel kusurları en aza indirerek performans artırma işlemi olarak da, alt taş safir ile büyütülecek yapı arasına tampon tabakalar büyütülür. Safir ve GaN arasında ısıl genleşme katsayısında ki uyumsuzluk ise %34'tür. Safirin termal genleşme katsayısı GaN termal genleşme katsayısından daha büyüktür. Bundan dolayı depolama sıcaklıklarından soğumaya bırakıldığı zaman üst tabakaları sıkıştırıcı (compressive) bir zorlama oluşur [19]. Şekil 2.5'de termal genleşme katsayıları ve örgü sabitleri farkından kaynaklanan zorlama görülmektedir.

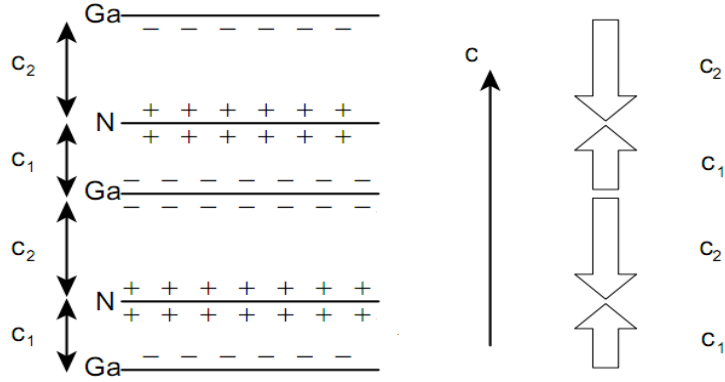


Şekil 2.5: Termal genleşme katsayıları ve örgü sabitleri farkından kaynaklanan zorlama.

2.3 III-Nitrür Yapılarda Kutuplanma

Katılarda atomik seviyede üç çeşit kutuplanma söz konusudur. Birincisi, polar moleküllerin elektrik alan ile kısmi ya da tamamen kutuplanması sonucu oluşan kutuplanma; ikincisi tamamen veya kısmi iyonik kristallerde pozitif ve negatif iyonların elektrik alan altında göreceli hareketleri sonucu oluşan dipolün indüklediği iyonik kutuplanma; üçüncüsü ise tüm dielektrik de mevcut olan elektronik kutuplanmadır [19,20].

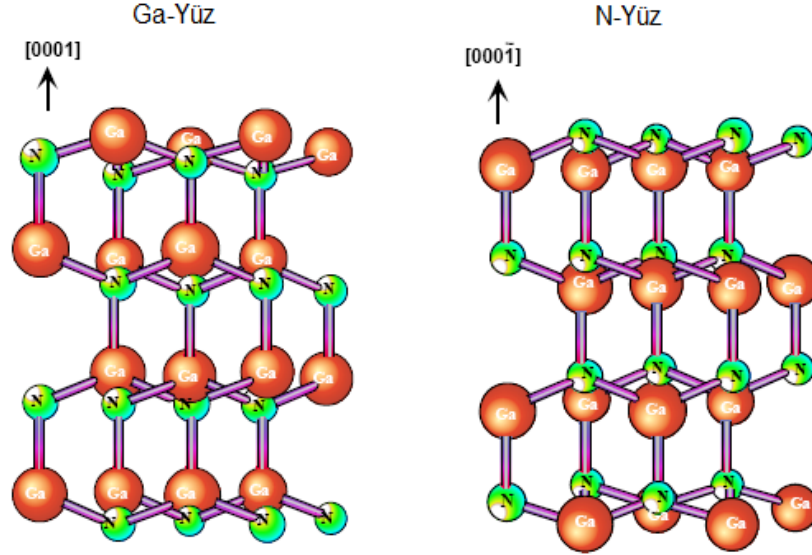
Şekil 2.6’de GaN tabakalarının şematik gösterimi ve her birim alandaki dipol moment gösterilmektedir.



Şekil 2.6: GaN tabakalarının şematik gösterimi ve birim alandaki dipol momentler.

Merkez simetrisi olmayan bileşikler kristal yapılarında, belli kristalografik eksenlere paralel iki zıt doğrultuda atomik tabakaların iki farklı düzenlenişini içerirler [29]. Sonuç olarak da bu eksenler boyunca kristalografik kutuplanma gözlemlenebilir. Hekzagonal yapılu ikili A-B bileşikleri için, A ve B bileşenlerinin atomik tabakalarının dizilmesi ya $[0001]$ doğrultusu boyunca ABAB... şeklinde ya da $[000\bar{1}]$ doğrultuları boyunca BABA... şeklinde olup birbirinin tersidir. (0001) ve $(000\bar{1})$ yüzleri sırasıyla A-yüzlü ve B-yüzlü olarak adlandırılır. Merkez simetrisi olmayan bileşiklerin ince filmlerinin çoklu yapıların büyütülmesi durumunda, materyalin kutuplanması tam olarak doğrudan tayin edilememekle birlikte bu durum deneysel olarak tespit edilir. Bu durum, GaN epitaksiyel tabakalar için ve $\{0001\}$ taban düzlemine dik olacak şekilde, büyütme doğrultusuna sahip GaN-tabanlı çoklu yapılar için geçerlidir. $\{0001\}$ düzleminde atomlar ikili tabakalar halinde düzenlenirler. Bu ikili tabakalar, birbirine yakın duran hekzagonal tabakalardır. Bunlardan birincisi katyonlar (Ga atomu) tarafından oluşurken ikincisi anyonlar (azot atomu) tarafından oluşur ki bu durum kutuplanmaya neden olur. GaN durumunda temel yüzey ya Ga ya da N yüzeyli olmalıdır. Şekil 2.7’de de görüleceği üzere Ga yüzeyli tabiri, $\{0001\}$ ikili tabakanın en üst konumunda $[0001]$ doğrultusunda

kutuplanmaya neden olan Ga atomunun olduğunu ifade eder. Geleneksel olarak \bar{z} veya $[0001]$ doğrultusu bir Ga atomundan en yakın komşu atom olan N atomuna doğru yönelmiş bir vektör gösterimi ile verilir. Ancak, GaN'ın (0001) ve $(000\bar{1})$ yüzlerinin eşdeğer aynı yüzeyler olmayıp kimyasal ve fiziksel özelliklerinin farklı olduğu unutulmamalıdır [30].



Şekil 2.7: Ga-yüzlü ve N-yüzlü GaN'ın hekzagonal kristal yapısının şematik gösterimi.

2.4 Kendiliğinden ve Piezoelektrik Kutuplanma

Dış elektrik alan yokken, GaN ve AlGaIn tabakanın toplam makroskopik kutuplanması, \mathbf{P} örgü denge durumunda iken kendiliğinden kutuplanma \mathbf{P}_{KK} ile gerilmenin indüklediği piezoelektrik kutuplanmaların, \mathbf{P}_{PE} , toplamına eşittir. Kendiliğinden kutuplanmanın yapısal parametrelere hassas şekilde bağlı olmasından dolayı, GaN ve AlN için kendiliğinden kutuplanmada da sayısal farklılıklar mevcut olacaktır. GaN'dan AlN'a doğru giderken kristal yapının ideal olmayana doğru artış göstermesi, kendiliğinden kutuplanmada da bir artışa neden olacaktır. Bunun sebebi (0001) eksen boyunca anyon ve kation bağ uzunluklarının farklı olmasıdır. Aşağıda, epitaksiyel filmler ve AlGa(In)N/GaN çoklu yapıların büyütüldüğü doğrultu olan $[0001]$ eksenini boyunca, kutuplanmalar incelenmiştir.

Hekzagonal kristalin c eksenini boyunca kendiliğinden kutuplanma $\mathbf{P}_{KK}=\mathbf{P}_{KK}\mathbf{z}$ iken piezoelektrik kutuplanma, e_{13} ve e_{33} piezoelektrik katsayılar olmak üzere (Tablo 2.3),

$$P_{PE} = e_{33}\varepsilon_z + e_{31}(\varepsilon_x + \varepsilon_y) \quad (2.1)$$

denklemini ile hesaplanabilir. $\varepsilon_z = (c - c_0)/c_0$, c eksenini boyunca gerilmedir. Düzlemdeki gerilme izotropik olup $\varepsilon_x = \varepsilon_y = (a - a_0)/a_0$ dır. Burada a_0 ve c_0 örgü sabitlerinin dengedeki değerleridir. Hekzagonal GaN'ın örgü sabitleri arasındaki ilişki;

$$\frac{c - c_0}{c_0} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \frac{a - a_0}{a_0} \quad (2.2)$$

ile verilir. Burada, C_{13} ve C_{33} elastik sabitlerdir (Tablo 2.3). Denklem (2.1) ve (2.2) kullanılarak c-eksenini boyunca piezoelektrik kutuplanmanın miktarı

$$P_{PE} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad (2.3)$$

eşitliği ile belirlenebilir. $\text{Al}_x\text{Ga}(\text{In})_{1-x}\text{N}$ bariyerinin tüm alaşım kompozisyonları için $[e_{31} - e_{33}(C_{13}/C_{33})] < 0$ olduğu için AlGa(In)N bariyer gevşeme zorlanması altında ise piezoelektrik kutuplanma negatif, sıkıştırıcı zorlanma altında ise kutuplanma pozitifdir. Böylece piezoelektrik kutuplanmanın büyüklüğü ve yönü zorlanmanın çeşidine göre (2.3) eşitliği ile bulunurken, yapısal parametrelere bağlı olan kendiliğinden kutuplanma ise Ga(In)N ve AlN için negatif olarak bulunmuştur [31]. Bunun anlamı Ga-yüzlü çoklu yapılar için kendiliğinden kutuplanmanın Şekil 2.8'de de görüldüğü üzere alt taşa doğru olduğuna işaret eder. Sonuç olarak piezoelektrik ve kendiliğinden kutuplanmanın yönleri gevşeme zorlanması durumunda birbirine paralel olup, üst tabakalar sıkıştırıcı zorlanma altında iken birbirlerine zıt yönelim sergilerler. Kutuplanma Ga-yüzlü materyalden N-yüzlü materyale dönerse, kendiliğinden kutuplanmanın ve piezoelektrik kutuplanmaların yönleri de işaret değiştirir. Şekil 2.8'de piezoelektrik ve kendiliğinden kutuplanmanın doğrultuları, Ga

yüzlü, N-yüzlü, gerilme varken ve yokken AlGaIn/GaN ve GaN/AlGaIn çoklu yapıları için gösterilmiştir.

Tablo 2.3: GaN, InN ve AlN yarıiletkenlerinin kendiliğinden kutuplanma büyüklükleri, piezoelektrik ve dielektrik sabitleri [20].

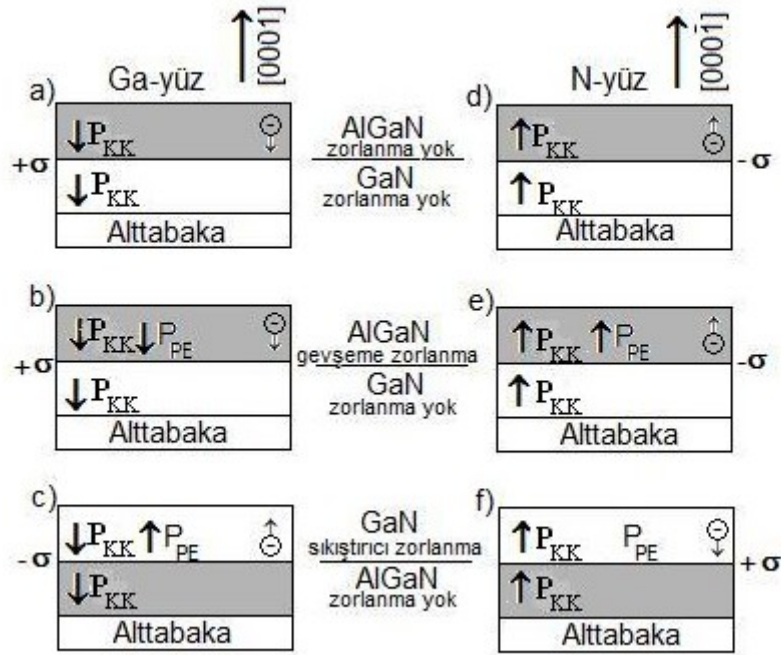
Wurtzite	AlN	GaN	InN
$e_{33}(C/m^2)$	1.46	0.73	0.97
$e_{31}(C/m^2)$	-0.60	-0.49	-0.57
ϵ_{11}	9.0	9.5	-
ϵ_{33}	10.7	10.4	14.6
C_{13}	108	103	92
C_{33}	373	405	224
$P_{KK}(C/m^2)$	-0.081	-0.029	-0.032

Uzayda kutuplanmanın gradyenti ile verilen $\rho_p = \nabla \cdot \vec{P}$ olacak şekilde kutuplanmanın indüklediği bir yük yoğunluğu vardır. Benzer şekilde, üst/alt olarak tanımlanabilecek AlGa(In)N(üst)/GaN(alt) veya GaN/AlGa(In)N çoklu yapıların ara yüzeyinde kutuplanma, ikili tabakanın içinde azalabilir veya artabilir. Böylece kutuplanmanın indüklediği iki boyutlu tabaka taşıyıcı yoğunluğu;

$$\sigma(P_{KK} + P_{PE}) = P(\text{alt}) - P(\text{üst}) = P_{KK}(\text{alt}) - \{P_{KK}(\text{üst}) + P_{PE}(\text{üst})\} \quad (2.4)$$

denklemleri ile verilir. Alaşım kompozisyonundaki değişimler, yüzey bozuklukları veya gerilmenin dağılımı, tabaka (sheet) yük yoğunluğunun indüklediği kutuplanmanın lokal dağılımını değiştirecektir. Ancak ara yüzey bölgesi boyunca kutuplanmanın değişimi ile ilişkili olan toplam tabaka yükü ara yüzeyde mevcut olanla hemen

hemen aynı olacaktır. Tabaka yük yoğunluğunun indüklediği kutuplanma eğer pozitifse ($+\sigma$), büyütmeden sonraki soğuma aşaması boyunca, serbest elektronlar kutuplanmanın indüklediği yükü dengeleme eğilimi içinde olacaktır. AlGaN/GaN bant offset değerinin yeterince büyük olduğu ve ara yüzey pürüzlülüğünün düşük olduğu kabulü yapılırsa, bu elektronlar n_s tabaka taşıyıcı yoğunluklu 2BEG oluşumuna neden olacaktır. Negatif bir tabaka taşıyıcı yük yoğunluğu da ara yüzeyde boşlukların birikmesine neden olacaktır. GaN heteroyapının üzerinde AlGaN yapının bulunduğu Ga-yüzlü durum için kutuplanmanın indüklediği tabaka taşıyıcısı pozitif olup Şekil 2.8.a'de gösterilmiştir. Eğer heteroyapı herhangi bir zorlama altında değilse (bu durum AlGaN kalınlığının $\gg 65\text{nm}$ durumunda iken gerçekleşir), AlGaN ve GaN'ın kutuplanmaları farklı olduğundan elektronlar ara yüzeyde hapsolacaktır. Eğer bu yapı Şekil 2.8.b'de görüldüğü gibi pseudomorfik büyütülmüşse, gevşeme zorlaması altında olan AlGaN bariyerinin piezoelektrik kutuplanması P(AlGaN)-P(GaN) kutuplanma farkını artıracaktır. Benzer şekilde tabaka yükü $+\sigma$ ve tabaka taşıyıcı yoğunluğu n_s de artacaktır. Bu durumda 2BEG AlGaN/GaN heteroyapının ara yüzeyinde AlGaN bariyerinin hemen altında oluşacaktır. Kutuplanmanın indüklediği tabaka taşıyıcı yoğunluğu negatif ise bu durumda da Şekil 2.8.c'de görüldüğü gibi ara yüzeyde bu kez boşluklar birikecektir. Şekil 2.8.b'deki durum için kendiliğinden kutuplanmanın yönü ile piezoelektrik kutuplanmanın yönü birbirine paralel iken, Şekil 2.8.c'deki durum için de zıt yönlü olacaktır. Benzer yorumlar N-yüzlü AlGaN/GaN heteroyapılar için de geçerlidir (Şekil 2.8.d, Şekil 2.8.e, Şekil 2.8.f).



Şekil 2.8: Kutuplanmadan kaynaklı tabaka yük yoğunluğu ve zorlanma varken ve yokken Ga ve N yüzü AlGaIn/GaN çoklu yapılarda kendiliğinden ve piezoelektrik kutuplanmanın yöneliminin gösterimi.

Elektronik cihazların optimize edilmesi ve modellenmesi için, kutuplanmanın indüklediği 2BEG'nin tabaka taşıyıcı yoğunluğunun kontrolü ve kesin bir tahmini gereklidir. Böylece yukarıdaki bilgiler doğrultusunda Ga-yüzlü AlGa(In)N/GaN ara yüzeyde yüksek oranda pozitif kutuplanmanın indüklediği yük miktarı serbest elektronlar tarafında dengelenmeye çalışılır ve sonuçta 2BEG'na ait tabaka taşıyıcı yoğunluğu, x alaşım oranına, bariyer kalınlığına, GaN kalınlığına, kapak tabaka kalınlığına, AlGa(In)N/GaN ara yüzeydeki iletkenlik bant offset değerine ve Fermi enerjisine bağlı olarak hesaplanır [13]. Bu hesaplamalar 3. bölümde bahsedilecek olan simülasyon programı olan Nextnano³ simülatörü tarafından yapılmaktadır.

3. SİMÜLASYON

Yüksek performanslı cihazların dizaynı ve üretiminde başarılı elektriksel ve optiksel optimizasyonları elde etmek için daha hızlı ve daha doğru simülasyon analizleri gerekir. Bilgisayarın iç ve dış donanımının fiyatlarındaki hızlıca düşüş, bilgisayarın çalışma gücünün hergün gittikçe artmasından dolayı bilgisayar destekli fizik yarıiletken cihazların Optimizasyonu için daha uygun bir araç olmaya başlamıştır. İyi ve doğru bir optimizasyon için Nextnano³ simülasyon programı uygun bir yazılımdır [32]. Bu tez çalışmasında Al(In)GaN/AlN/GaN gibi tekli kuantum kuyulu yapılar modellenerek, bu çoklu yapıların iletim parametrelerini en iyi verecek olan bazı büyütme parametrelerin Optimizasyonu Nextnano³ simülasyon programı kullanılarak araştırılmıştır.

Nextnano³ yazılım programı Si, Ge, SiGe gibi IV. grup materyalleri, çinko sülfür ve hekzagonal kristal yapısına sahip tüm III-V ve II-VI grup materyalleri ve bunların 3'lü bileşiklerinin bir boyutlu (1B), iki boyutlu (2B) ve üç boyutlu (3B) çoklu yapı kuantum cihazlarının elektriksel ve optiksel özelliklerini inceleyen bir simülasyon programıdır. Bu program içerisinde 8-bant-k.p modeli kullanılarak lineer olmayan (yük yoğunluğu potansiyele bağlı) 1-boyutlu Schrödinger-Poisson denklemleri kendi içinde tutarlı olarak (self-consistently) çözülür ve elektronik hesaplamalar kuantum mekaniksel olarak hesaplanır.

Poisson eşitliği;

$$-div(\epsilon(\vec{r})grad\Phi(\vec{r})) = \rho(\vec{r}) \quad (3.1)$$

denklemleri ile verilir. Burada ϵ , dielektrik sabitini, Φ , elektrik potansiyeli ve de ρ , elektronların, boşlukların, iyonize verici ve alıcıların ve de piezoelektrik ve pyroelektrik yüklerin tümünü içeren elektrik yük yoğunluğunu ifade eder. 1-boyutlu Schrödinger denklemi, bir $V(x)$ potansiyeli içinde bir boyutta bir parçacığın hareketini inceler ve

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) \quad (3.2)$$

denklemleri ile verilir.

Poisson denklemini sağlamak için uygun sınır şartları Dirichlet veya Neumann sınır şartları ile bulunur. Bu Dirichlet sınır şartları kullanılarak potansiyel belirlenir bu da Poisson denkleminin çözümü için tektir ve sabittir. Yani

$$\Phi(z)|_{SINR} = \text{sabit} \quad (3.3)$$

Neumann sınır şartları ise Poisson denkleminin çözümünü,

$$\frac{\partial \Phi(z)}{\partial z}|_{SINR} = \text{sabit} \quad (3.4)$$

eşitliğini kullanarak yapar.

Bu sınır şartları aynı zamanda Schrödinger denklemleri için de kullanılır. Dirichlet sınır şartları sınırlarda $\Phi(z)$ dalga fonksiyonunu sınırlarda tespit ederken, Neumann sınır şartları $\Phi(z)$ nin 1.türevini sınırlarda hesaplar. Schrödinger denklemleri, programın input dosyasında bizim seçtiğimiz sınır şartına göre çözülür ve normalize edilir. Bu da o enerji seviyesinin bir elektron tarafından işgal edildiğini gösterir.

Bu işlemler yapılırken diğer temel yarıiletken denklemleri olan elektron ve boşluklar için akımın sürekliliği denklemleri yani

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n - q \cdot \frac{\partial n}{\partial t} = q \cdot R \quad (3.5)$$

ve de elektron ve boşluklar için akım yoğunluğu denklemleri

$$\vec{J}_n = q \cdot n \cdot \mu_n \cdot \vec{E}_n + q \cdot D_n \cdot \vec{\nabla} n \quad (3.6)$$

$$\vec{J}_p = q \cdot p \cdot \mu_p \cdot \vec{E}_p - q \cdot D_p \cdot \vec{\nabla} p$$

çözülür. Böylece Schrödinger ve Poisson denklemleri yük nötralliklerini sağlamak için sabit bir Fermi seviyeli termodinamik denge durumu için uygun sınır şartlarında kendi içlerinde tutarlı olarak çözülerek cihaz için uygun durum yoğunluklarını ve yük taşıyıcı yoğunluklarını hesaplar.

Program tüm enerji seviyeleri için geçerli olan ve tüm uzay üzerinden deęişen bir sanki (quasi)-Fermi seviyesinin mevcut olduğunu kabul eder ve taşıyıcı yük yoğunluklarını bulur. Taşıyıcı yük yoğunlukları hesaplanırken tamamiyle klasik yaklaşım veya kuantum mekaniksel yaklaşımlar ya da bunların karışımı olan yaklaşımlar kullanılır.

Nextnano³ simülasyon programı ile

- Dalga fonksiyonları ve özdeęerleri
- Piezoelektik ve pyroelektrik yükleri
- İletim ve valans bantlarına ait enerji bant profilleri
- Elektron ve boşluk konsantrasyonu
- Gerilme (strain)
- Akım

çıktıları elde edilir. Ancak bu program çıktılarını elde etmek için cihazın yapısını gösteren geometri tespit edilerek bir input dosyası hazırlanır ve program çalıştırılır ve elde edilen sonuçlar herhangi bir çizim programı kullanılarak grafięe dökülür.

Nextnano³ simülasyon programında basit bir input dosyası girdileri Tablo 3.1'de verilmiştir.

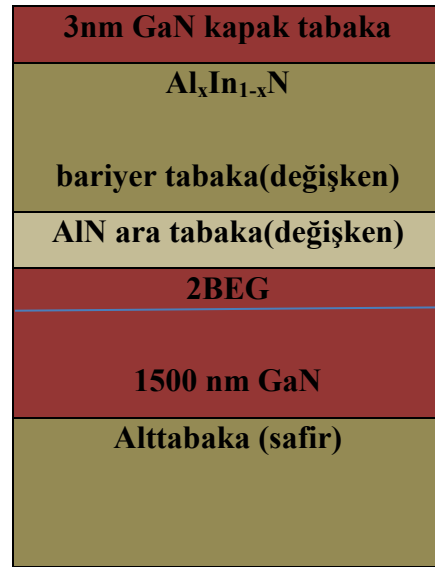
Tablo 3.1: İntput dosyası girdileri.

Sıcaklık	300K
Simülasyon boyuu	1
Simülasyon yönü	001
Gerilme hesabı	Homojen gerilme
Büyütme koordinatı	001
Pseudomorfik büyütme	GaN-üzerine
Çıkış bant yapısı	İletkenlik ve değerlik bandı
Çıkış taşıyıcı yoğunlukları	Elektron ve boşluk yük yoğunluğu, piezoelektrik ve pyroelektrik yük ve yüzey yük yoğunluğu
Katkı	p-tipi veya n-tipi(varsa)
Potansiyel	Varsa

Bu tezde AlGa(In)N/AlN/GaN tekli kuantum kuyulu yapılara ait cihaz tasarımı yapılmış ve aşağıda bu yapılar için simülasyonun akışı açıklanmıştır.



Şekil 3.1: AlGa(In)N/AlN/GaN yapısının geometrisi.



Şekil 3.2: AlInN/AlN/GaN yapısının geometrisi.

Şekil 3.1 ve Şekil 3.2 de büyütülecek ve optimizasyonu yapılacak her bir yapının tabaka sıralaması gösterilmiştir. Tabakaların tümü GaN-tampon (buffer) üzerine pseudomorfik olarak büyütülmüştür. İki boyutlu elektron gazı (2BEG) AlN/GaN tabakaları arasında meydana gelir

Simülasyonun bu yapılar için akış şeması aşağıda açıklanmıştır:

Her simülasyon süreci simülasyonu yapılan bölge üzerinde homojen bir gerilim dağılımı olduğunu kabul edip gerilme (strain) hesaplamasıyla başlar. GaN-tabanlı materyallerde gerilim piezoelektrik kutuplanma üretir ve üretilen bu piezoelektrik kutuplanma da materyalin elektriksel ve optiksel özelliklerini doğrudan etkiler [9]. Gerilim tensörü olarak tanımlanan ε_{ij} deformasyon tensörünün simetrik bir parçası olup (3.7) eşitliği ile verilebilir.

$$\varepsilon_{ij} = \frac{(u_{ij} + u_{ji})}{2} = \varepsilon_{ji} \quad (3.7)$$

Burada u, örgü deformasyonundan dolayı yerdeğiştirmedir. $i,j=\{1, 2, 3\}$ 'tür. Köşegen dışı gerilim bileşenleri açılarının değiştiği ve hacmin sabit kaldığı gerilim altında ölçülür. 0001 boyunca büyüyen hekzagonal kristal yapısı için, köşegen dışı gerilim bileşenlerinin tümünün sıfır olduğu ($\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0$) kabul edilir. Köşegen boyunca yer alan gerilim bileşenleri ise kristaldeki hacim değişmeyle ilişkili olan bileşenlerdir. 0001 büyütme doğrultusu boyunca büyüyen hekzagonal kristal yapısı için, köşegen gerilim bileşenleri ($\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz}$) birbiriyle ilişkilidir ve aşağıda verilen eşitliklerde de görüleceği üzere örgü parametrelerine bağlıdır [11].

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{(a_{alt} - a_{üst})}{a_{alt}} \quad (3.8)$$

$$\varepsilon_{zz} = -2 \left(\frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \varepsilon_{xx}$$

Burada C_{13} ve C_{33} elastik sabitlerdir, a_{alt} ve $a_{üst}$ de alt ve üst tabakaların örgü parametreleridir. ε_{xx} ve ε_{yy} iki-eksenli gerilimdir ve bunlar gerilimin oluşturduğu arayüzey düzleminde diktir. ε_{zz} ise tek-eksenli gerilim olup arayüzeye diktir.

Dirichlet sınır şartları ve gerilim dikkate alınarak, gerilim hesabından sonra bant kenarları hesaplanır. Hesaplanan gerilim ile her bir tabakanın piezoelektrik kutuplanması (3.9) eşitliği kullanılarak bulunur.

$$P_{PE} = 2\varepsilon_{xx} \left\{ \frac{e_{31} - e_{33}C_{13}}{C_{33}} \right\} \frac{C}{m^2} \quad (3.9)$$

Burada e_{31} ve e_{33} piezoelektrik sabitlerdir. Toplam kutuplanmanın uzaysal dağılımı kutuplanmanın indüklediği taşıyıcıları doğurur. İlgili tabakaların hesaplanan piezoelektrik kutuplanmaları ve kendiliğinden kutuplanmaları dikkate alınarak, bu kutuplanmanın indüklediği yük yoğunlukları hesaplanır. Kuantum durumları daha önce belirlenen kuantum bölgelerince tespit edilmiştir. Sırasıyla başlangıç bir potansiyel değer belirlenir ve lineer olmayan Poisson denklemi yukarıda hesaplanan piezoelektrik ve kendiliğinden yüklerle çözülür. Simülasyonun en son adımında, Schrödinger ve Poisson denklemleri taşıyıcı yoğunlukları, dalga fonksiyonları ve bu fonksiyonlara karşılık özdeğerler elde etmek için kendi içinde tutarlı olarak çözülür.

AlGaIn tabakalar için, örgü parametreleri, elastik sabitler, piezoelektrik sabitler Vegard's yasasıyla hesaplanır. AlGaIn tabakaların kendiliğinden kutuplanmaları bowing parametrelerini de içeren [33] (3.10) denklemi ile aşağıdaki gibi verilir.

$$P_{KK}(Al_xGa_{1-x}N) = x P_{KK}(AlN) + (1-x)P_{KK}(GaN) + 0.021x(1-x) \quad (3.10)$$

Yukarıda simülasyon akışı verilen Nextnano³ yazılım programı ile, AlN ara tabaka ve AlGa(In)N bariyer kalınlıklarının ve Al ve In mol kesirlerinin iletim enerjisi bant yapılarına, elektron yoğunluklarına ve dalga fonksiyonlarına etkisini araştırmak için tasarımı yapılan yapılar bir sonraki bölümde verilmiştir.

4. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ YAPILARDA ALAŞIM ORANI, ARA TABAKA VE BARIYER KALINLIĞININ ETKİSİ

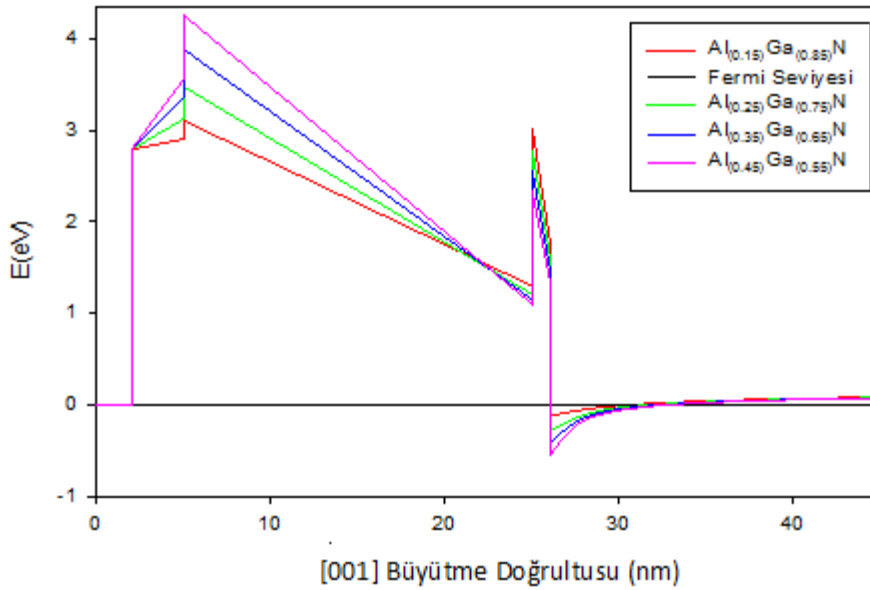
GaN-tabanlı alan etkili transistörler yüksek sıcaklık, yüksek güç ve yüksek frekans uygulamalarında dikkat çekmektedirler [34-36]. Bu transistörlerle ilgili yapılan ilk çalışmalar, GaN tabakası üzerine gerilme altında büyütülen AlGaN tabakasından oluşmaktadır. Bu tabakalar arasındaki gerilme bir piezoelektrik kutuplanma alanına sebep olur. Tüm bu tabakalar piezoelektrik kutuplanmaya ek olarak bir de kendiliğinden kutuplanmaya sahiptir. Bu kutuplanma alanları arayüzeyde oluşan iki boyutlu elektron gazında (2BEG), yüksek mobilite ve yüksek taşıyıcı yoğunluğuna ($\approx 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) sebep olur. Taşıyıcı yoğunluğu ve mobilitiyi arttırmak için, üç önemli parametre üzerinde iyileştirmeler önerilmiştir [37]. Bu iyileştirmelerden ilki AlGaN bariyer tabakasındaki Al-mol kesrinin artırılmasına yöneliktir. AlGaN bariyer tabakasındaki yüksek Al-mol kesri, kutuplanmanın ortaya çıkardığı taşıyıcı yoğunluğunu ve taşıyıcıların hapsolmesini arttırmaktadır [38]. Ancak yüksek Al mol-kesri yüksek gerilmelere neden olacağı için, mobilite ve taşıyıcı yoğunluğunda önemli bir azalma meydana getirecek olan gerilme durulmalarına (strain relaxations) sebep olur [39]. İyileştirilen parametrelerden ikincisi, ilk kez Smorchkova tarafından tasarlanan AlGaN ve GaN tabakaları arasında ince (1-2 nm) bir AlN ara tabaka eklenmesidir [14]. Bu ara tabaka elektronların alaşım saçılmasını azaltarak mobilitiyi arttırmaktadır [13, 40-41]. Ara tabakanın eklenmesiyle artan gerilmeden dolayı taşıyıcı yoğunluğunda da artma gözlenir. İyileştirilen parametrelerden üçüncüsü ise AlGaN bariyer kalınlığının artırılmasıdır. AlGaN bariyer kalınlığı arttıkça, kuantum kuyu genişliği ve derinliği artmaktadır. Bariyer kalınlığına bağlı olarak elektronların maruz kalacağı saçılma mekanizmaları da değişeceğinden optimum kalınlık elde edilir [13].

Bu açıklamalar doğrultusunda, yüksek mobilite ve yüksek taşıyıcı yoğunluklu $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapıları üzerine araştırmalar, yapının dizaynı kadar materyal kalitesinin de önemli olduğunu göstermektedir. Bu tez çalışmasında, MOCVD veya MBE büyütme teknikleriyle büyütülecek olan GaN tabanlı HEMT yapılara ait büyütme geometrileri tasarlanarak bu yapılarda, Nextnano³ simülasyon

programı kullanılarak, farklı Al-mol kesirlerinin, AlN ara tabaka ve AlGaN bariyer kalınlıklarının enerji bant profilleri, olasılık dağılım fonksiyonları ve taşıyıcı yoğunlukları üzerine etkileri araştırılmıştır. Detaylar sırasıyla aşağıda verilmiştir.

4.1 Al-Mol Kesrinin Etkisi

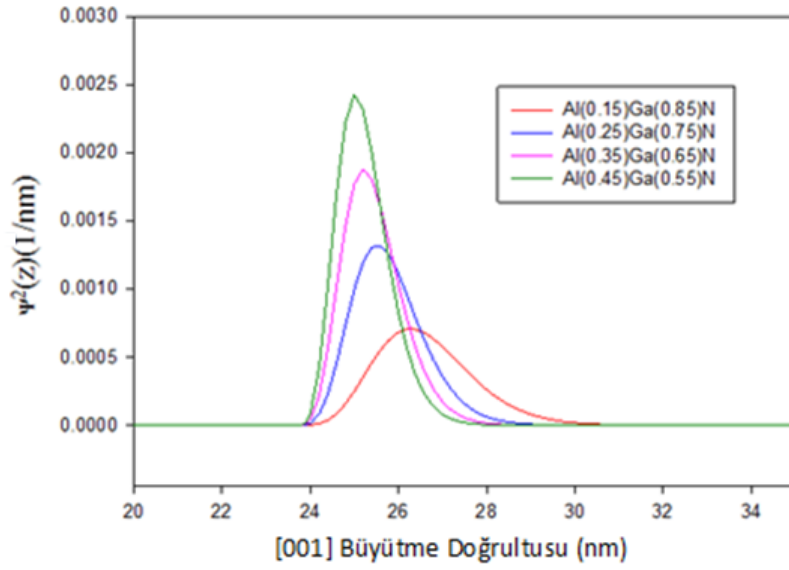
2BEG'nin iletkenliğini arttırmanın yollarından biri, bariyer tabakasındaki Al-mol kesrini arttırmaktır [38]. Şekil 4.1'de $Al_xGa_{1-x}N/AlN/GaN$ yapının Al-mol kesrine göre iletkenlik bandına ait enerji bant profillerinin değişimi görülmektedir. Bu değişim eğrileri elde edilirken AlGaN bariyer kalınlığı 20nm, AlN ara tabaka kalınlığı 1nm alınmıştır.



Şekil 4.1: Farklı Al mol kesirlerine göre enerji bant profilinin uzaysal değişimi.

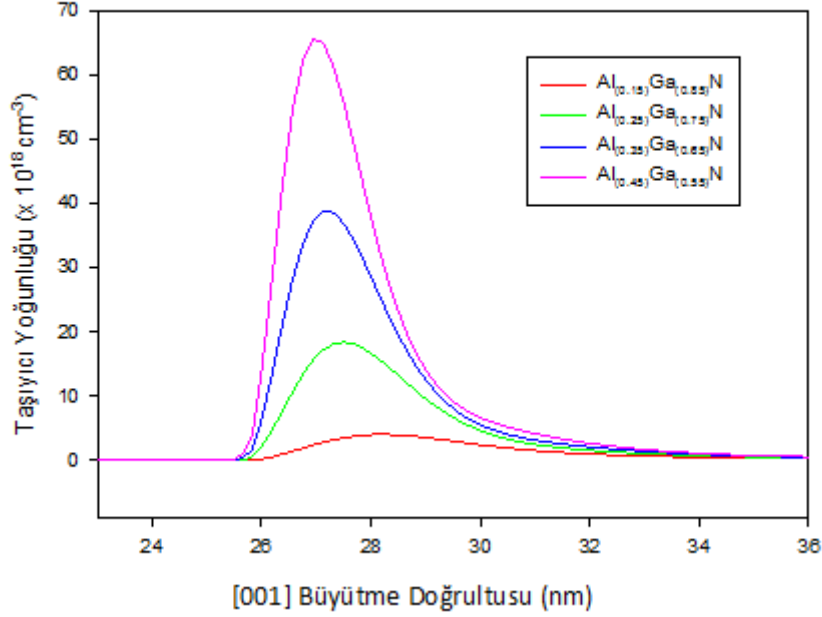
Şekil 4.1'de yapının [001] büyütme doğrultusu olup, Al-mol kesri değerleri de 0.15, 0.25, 0.35 ve 0.45 olarak alınmıştır. Şekil 4.1'den de görüldüğü gibi, Al-mol kesri değerleri arttıkça kuantum kuyu genişliği ve derinliği de artmaktadır. Böylece elektronlar kuyu içerisinde daha iyi hapsolmektedir [38]. Bunu doğrulamak için de elektronların her bir kuyu içinde bulunma olasılıkları hesaplanmış ve Şekil 4.2'de

bunlara ait deęişim eęrileri verilmiřtir. Őekil 4.2’de grldęi gibi Al-mol kesri arttıkça elektronların kuyu ierisinde bulunma olasılıkları da artmaktadır. Ayrıca Őekil 4.2’den Al-mol kesrinin artması ile elektronların ara yzeeye yakın yerlerde bulunma olasılıklarının da arttıęı sylenebilir. Bu da elektronların ara yzeeye yaklařtıkça arayzey przllę ve alařım saılmalarına maruz kalacaęı anlamına gelir. Bununla birlikte GaN zerine yksek Al-mol kesirli tabakaları bytme iřlemi rg parametrelerindeki uyumsuzluktan dolayı problem oluřturmaktadır. nk bu byk rg uyumsuzluęu gerilim durulmasından dolayı kusurlara neden olabilir [42]. HEMT yapıların 2BEG’nin iletim zellikleri de gerilim durulmasıyla sınırlandırıldıęı iin, bariyerdeki Al-mol oranı $x > 0.5$ ’den byk olan HEMT yapılara ait alıřmaların sayısı oldukça sınırlıdır [43,44].



Őekil 4.2: Farklı Al mol kesirlerine gre olasılık yoęunluęunun uzaysal deęiřimi.

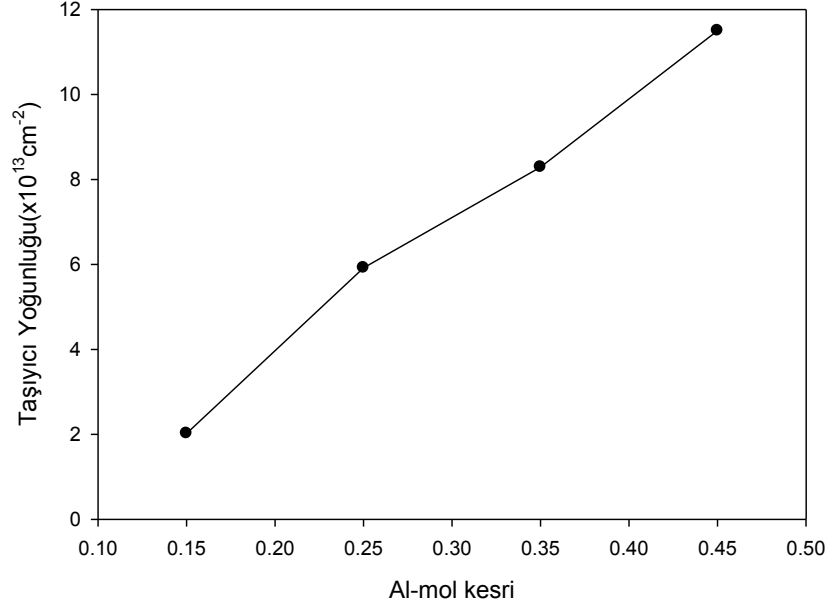
Őekil 4.3’te her bir kuyu iindeki 3-boyutlu tařıyıcı (elektronların) yoęunluęunun bytme doęrultusuna gre deęiřimi verilmiřtir. Bu deęiřim eęrilerinden, Al mol kesri arttıkça beklenildięi gibi tařıyıcı yoęunluęunun arttıęı grlmektedir.



Şekil 4.3: Farklı Al mol kesirlerine göre 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunu uzaysal değişimi.

Şekil 4.4, 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun Al mol kesrine göre değişimini göstermektedir. Bu değişim eğrisi elde edilirken, Şekil 4.2’den de görüldüğü gibi her Al-mol kesrine karşılık gelen olasılık yoğunluğu eğrilerinin FWHM’ları (Full-Width Half Maximum) hesaplanır. Sonra Şekil 4.3’de verilen her bir eğri altındaki toplam 3 boyutlu taşıyıcı yoğunlukları bulunur. Bu taşıyıcı yoğunlukları üçgen kuantum kuyusu içindeki taşıyıcıların yoğunluğunu verir. Bunun için de bu değerler her birim durum için bulunan ve yaklaşık olarak üçgen kuantum kuyu genişliğine eşit kabul edilen FWHM değerleri ile çarpılır. Böylece kuyu içindeki 2 boyutlu taşıyıcı yoğunluklarının Al-mol kesrine göre değişimleri elde edilmiş olur. Şekil 4.4 de çizgiler görsel kolaylık olması için çizilmiştir, herhangi bir fit eğrisi değildir. Şekil 4.4’den görüldüğü gibi Al mol kesri arttıkça 2 boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun değeri de artmaktadır. Simülasyonla bulunan bu değerler AlGa_n/AlN/GaN yapılar için literatürde beklenen değerlerle uyum içindedir [13]. Ancak GaN üzerine yüksek Al-mol kesirli tabakalar büyütüldüğü zaman örgü parametrelerindeki uyumsuzluktan dolayı problem oluşturmaktadır. Çünkü bu büyük örgü uyumsuzluğu gerilme (strain) durulmasından dolayı kusurlara neden olmaktadır. Bu nedenle yüksek mobiliteli yüksek taşıyıcı yoğunluklu HEMT yapılar üretmek için, optimum Al-mol oranı

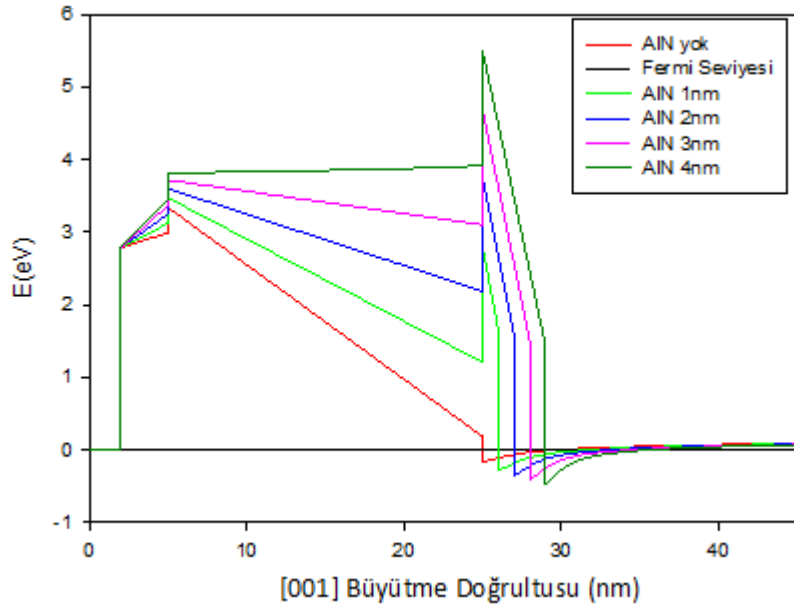
belirlenirken ara tabaka kalınlığı ve bariyer kalınlığının da optimum değerleri dikkate alınarak cihaz tasarımı yapılmalıdır.



Şekil 4.4: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun Al mol kesrine göre değişimi.

4.2 AlN Ara Tabaka Kalınlığının Etkisi

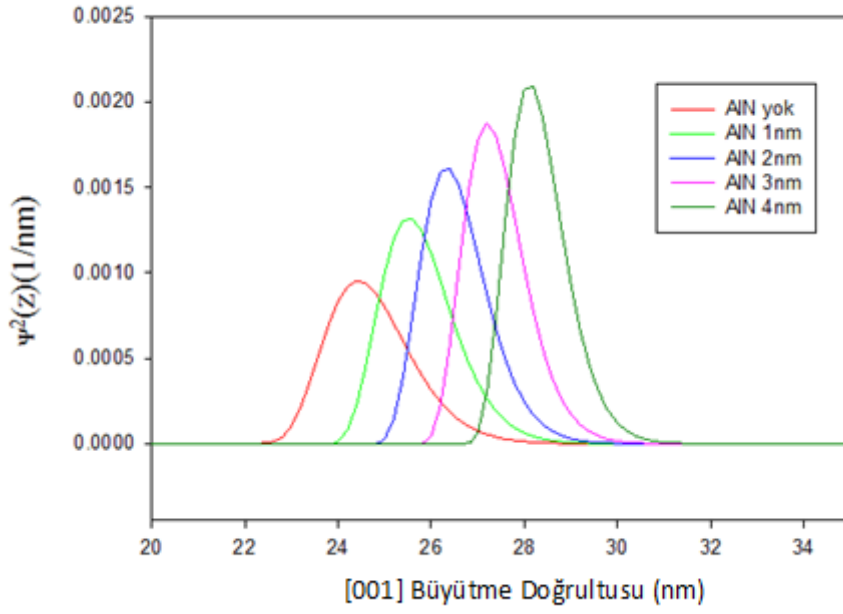
2BEG'daki taşıyıcı yoğunluğunu arttırmak için bir diğer yol ise AlGaN/GaN tabakaları arasına AlN ara tabaka yerleştirmektir. Şekil 4.5'de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/(\text{AlN})/\text{GaN}$ HEMT yapının AlN ara tabaka yokken ve varken iletkenlik bandına ait enerji bant profillerinin değişimi gösterilmiştir. Bu değişim eğrileri elde edilirken AlGaN bariyer kalınlığı 20nm, AlGaN bariyerindeki Al-mol kesri 0.25 alınmıştır.



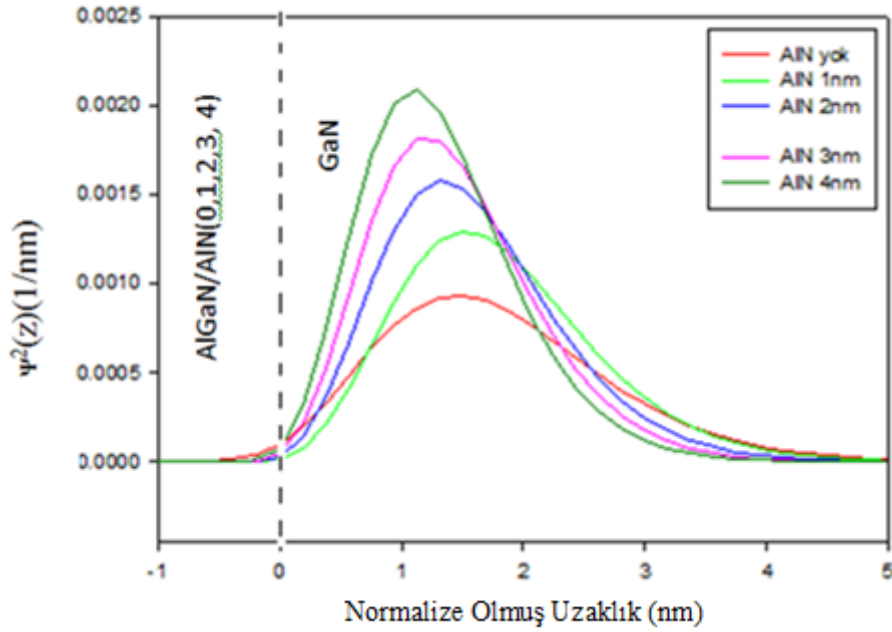
Şekil 4.5: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre enerji bant profilinin uzaysal değişimi.

Şekil 4.5’de görüldüğü gibi AlN ara tabaka yokken AlGaN bariyeri içerisinde bir elektronu bulmak daha olasıdır. Çünkü AlGaN bariyerinin iletim bant offset değeri, ΔE_c , AlN ara tabaka varken ki iletim bant offset değerinden daha küçüktür. Bu da bir elektronun ara tabaka yokken AlGaN bariyerine sızmasını olası kılar. Bunun sonucunda AlGaN bariyeri içindeki elektron, alaşım düzensizlik saçılması tarafından daha fazla etkilenmektedir [45].

Şekil 4.5’de görüldüğü gibi AlN ara tabaka kalınlığı arttıkça iletim bant offset değeri, kuyu genişliği ve derinliği artmaktadır. Bu da elektronların kuyu içerisine hapsolme olasılığını artıracaktır ki bu sonuç da Şekil 4.6’da gösterilmiştir.



Şekil 4.6: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun uzaysal değişimi.

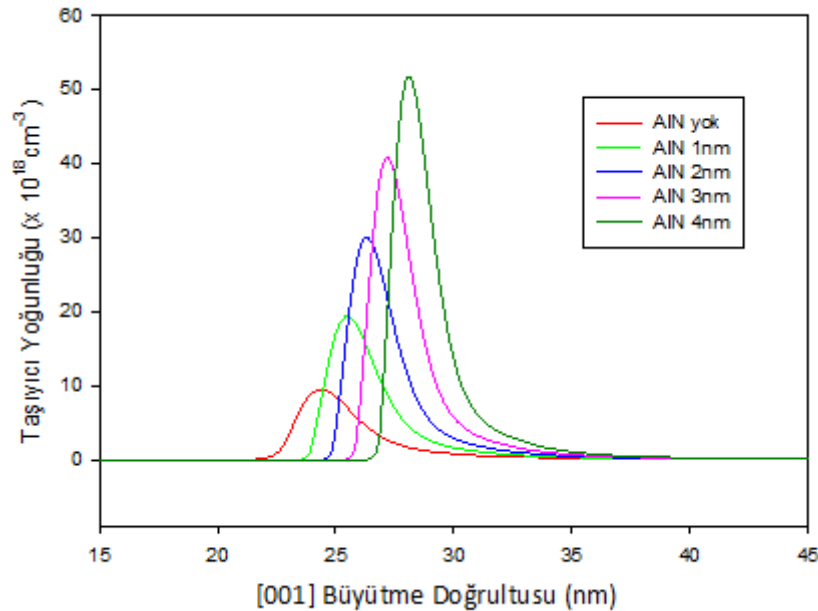


Şekil 4.7: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun normalize olmuş uzaklığa göre değişimi.

Şekil 4.7’de elektronların olasılık yoğunluğunun normalize olmuş uzaklığa göre değişimi, bariyerdeki Al mol kesri 0.25 ve farklı AlN ara tabaka kalınlıkları için elde edilmiştir.

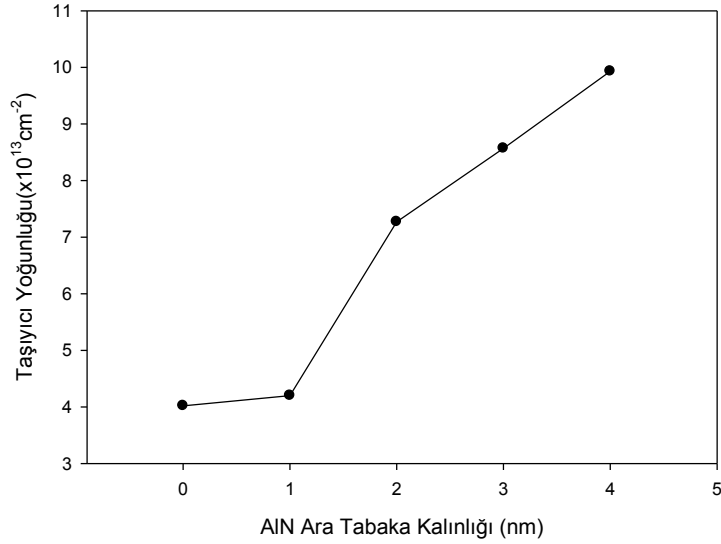
Şekil 4.7’ den AlN ara tabaka kalınlığı arttıkça, elektronların kanal içine daha iyi yerleştiğini, olasılık dağılım fonksiyonunun da ara yüzeye yaklaştığı görülmektedir. AlN yokken elektronların dalga fonksiyonu bariyer içerisine daha çok sızmakta iken. AlN kalınlığı arttıkça elektronların bariyer içine sızması azalmaktadır. Bu durumda da elektronların bariyerdeki alaşım düzensizliği saçılması azalırken, ara yüzey ile ilgili saçılmalar artmaktadır. Bu nedenle de AlN ara tabaka kalınlığının, mobilitenin azalmasını engelleyecek şekilde optimum bir değerde tutulması gereklidir. Bu değer literatürde AlGaN/AlN/GaN yapılarında 1nm olarak verilmekte olup Şekil 4.7’den de bu sonuç desteklenebilir niteliktedir [14]. Yine bu optimum değerler bulunurken bariyer kalınlığı ve alaşım yüzdesi de dikkate alınmalıdır.

Şekil 4.8’de 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluklarının farklı AlN ara tabaka kalınlıkları ile değişimi görülmektedir. Şekilden de görüleceği üzere, ara tabaka kalınlığı arttıkça (iletim bant offset değeri ve kuyu derinliği arttığı için) taşıyıcı yoğunluğu da artmaktadır.



Şekil 4.8: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun uzaysal değişimi.

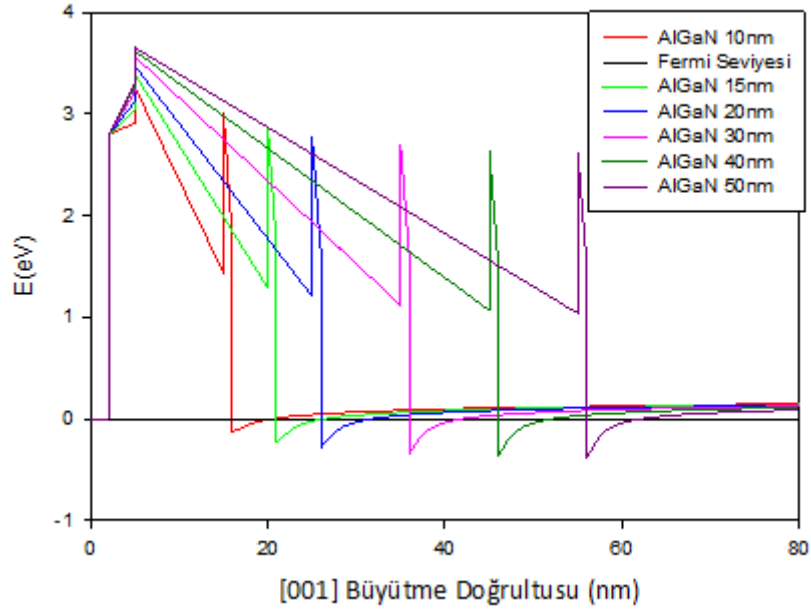
Şekil 4.9’da ise 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun AlN ara tabaka kalınlığına göre değişimi verilmiştir. Şekil 4.9 da çizgiler görsel kolaylık olması için çizilmiştir, herhangi bir fit eğrisi değildir. Bu şekilden ara tabaka kalınlığı arttıkça 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun arttığı görülmektedir. Bu değişim eğrisi Şekil 4.4’ün çizildiği gibi elde edilmiştir. Elde edilen taşıyıcı yoğunluklarının değerleri merteye olarak 10^{13} cm^{-2} olup literatürdeki değerlerle uyum içinde olduğu söylenebilir [46,47]. Ayrıca AlN ile GaN arasındaki büyük örgü uyumsuzluğundan dolayı, GaN üzerine AlN ara tabakanın püsodomorfik olarak büyütülmesi yine AlN ara tabakanın kalınlığının belli bir değere kadar anlamlı olacağı zorunluluğunu doğuracağından bu değer literatürde 5nm ve üzeri değerler olarak verilmiştir [48,49].



Şekil 4.9: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun AlN ara tabaka kalınlığına göre değişimi.

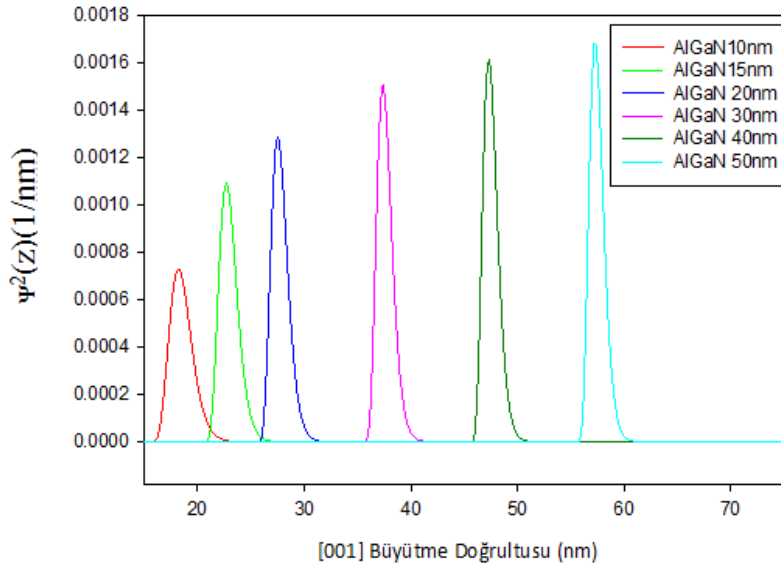
4.3 AlGaN Bariyer Kalınlığının Etkisi

2BEG’nin taşıyıcı yoğunluğunu artırmanın bir diğer yolu da, AlGaN bariyer kalınlığının artırılmasıdır. Şekil 4.10’da $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapının farklı AlGaN bariyer kalınlıklarına göre iletim enerji bant profillerinin değişim eğrileri gösterilmiştir. Bu değişim eğrileri elde edilirken, AlGaN bariyer tabakasındaki Al-mol kesri 0.25, AlN ara tabaka kalınlığı 1nm alınmıştır.

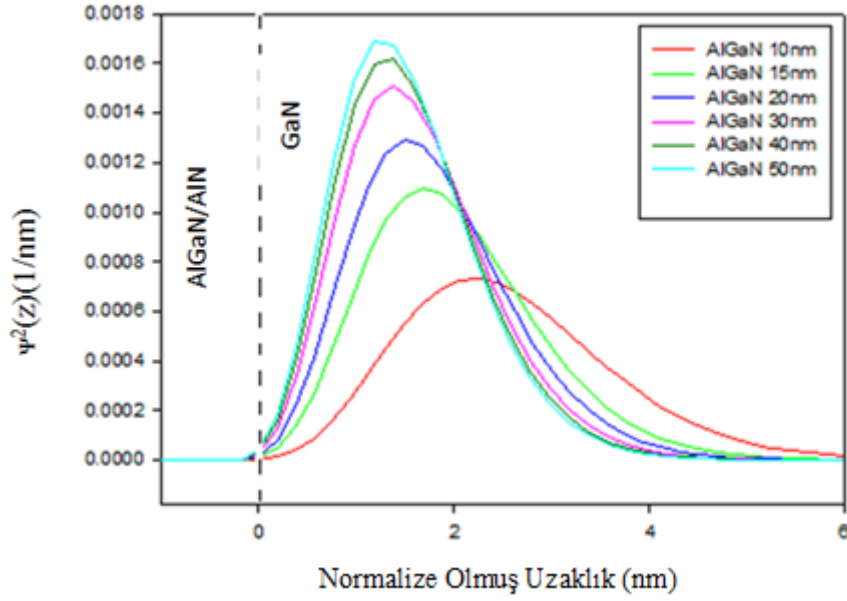


Şekil 4.10: Farklı AlGaN bariyerkalınlıklarına göre enerji bant profilinin uzaysal değişimi.

Şekil 4.10’da görüldüğü gibi, AlGaN bariyer kalınlığı arttıkça, kuantum kuyu genişliği ve derinliği artmaktadır.

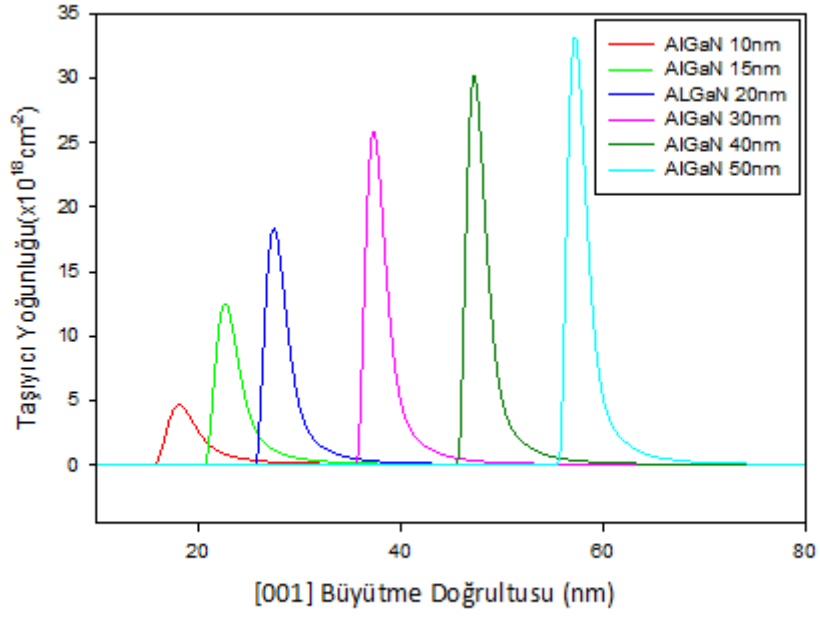


Şekil 4.11: Farklı AlGaN bariyer kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun uzaysal değişimi



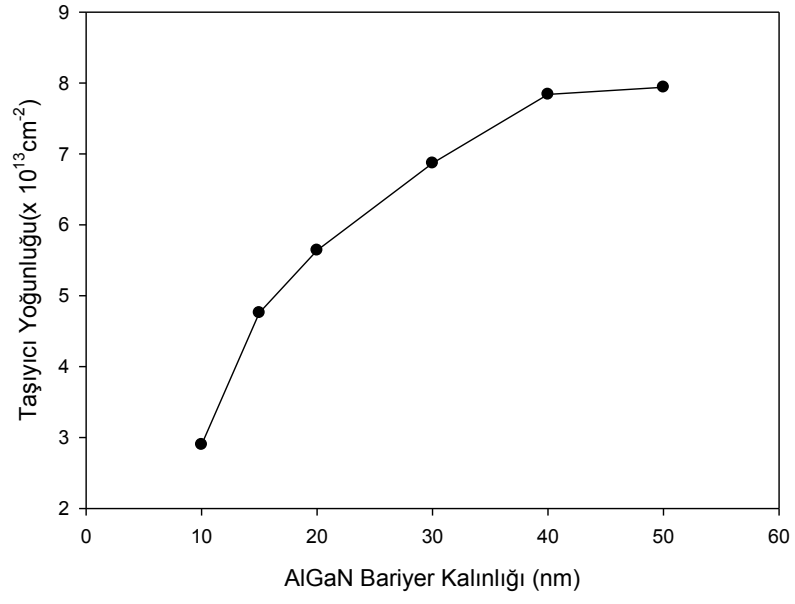
Şekil 4.12: Farklı AlGaIn bariyer kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun normalize olmuş uzaklığa göre değişimi.

Şekil 4.11’de farklı AlGaIn bariyer kalınlıklarına göre elektronların kuyu içinde bulunma olasılıklarının büyütme doğrultusuna göre değişimi verilmiştir. Bariyer kalınlığı arttıkça elektronların kuyu içinde bulunma olasılıkları artmaktadır. Şekil 4.12’de de elektronların olasılık yoğunluklarının normalize olmuş uzaklığa göre değişimi farklı bariyer kalınlıkları için çizilmiştir. Bariyer kalınlığı arttıkça, AlN/ GaN ara yüzeyine yakın bölgelerde elektronların daha iyi yerleştiği görülmektedir. Ara yüzeye daha yakın yerde elektron bulunması demek, elektronların ara yüzey ile ilgili saçılma mekanizmalarından daha çok saçılması demektir. Bariyer kalınlığı azaldıkça, elektronların GaN tabakası içinde bulunma olasılığı artar ki bu durumda da safsızlık saçılmalarının etkili olduğu söylenebilir [50].



Şekil 4.13: Farklı AlGaN bariyer kalınlıklarına göre 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun uzaysal dağılımı.

Şekilde 4.13’de görüldüğü gibi AlGaN bariyer kalınlığı arttıkça 3 boyutlu taşıyıcı yoğunluğu da artmaktadır. Her bir üçgen kuantum kuyusu içerisindeki 2 boyutlu taşıyıcı yoğunluğu da Şekil 4.14’de görüldüğü gibi bariyer kalınlığı arttıkça artmaktadır. Şekil 4.19 da çizgiler görsel kolaylık olması için çizilmiştir, herhangi bir fit eğrisi değildir.



Şekil 4.14: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun farklı AlGaIn bariyer kalınlığına göre değişimi.

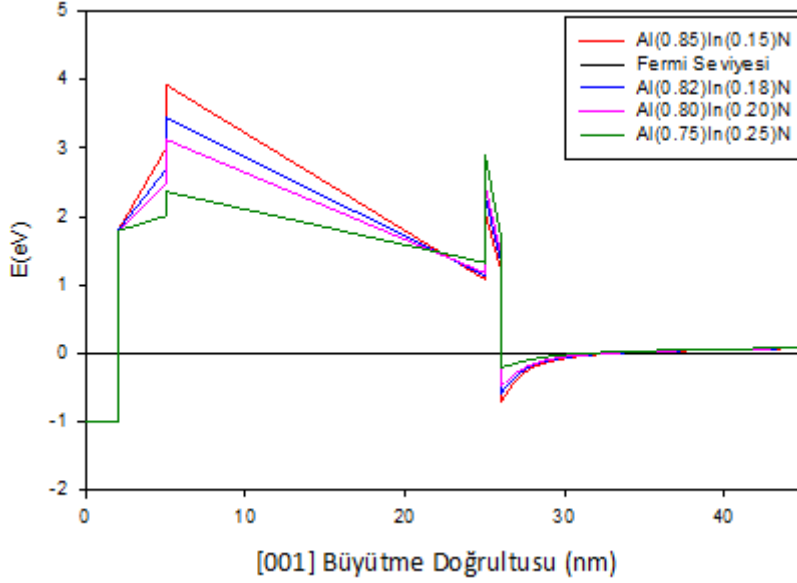
5. $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ YAPILARDA ALAŞIM ORANI, ARA TABAKA VE BARIYER KALINLIĞININ ETKİSİ

Son yıllarda, HEMT yapıların performansını iyileştirmek için AlGaN bariyeri yerine AlInN bariyer tabakası kullanılmaktadır. AlInN bariyer tabakası kullanılmasının avantajı, örgü uyumlu veya kutuplanma uyumlu çoklu yapı elde etmek için alaşım oranının ayarlanabilir olmasıdır [18]. Yüksek taşıyıcı yoğunluklu ve yüksek mobiliteli $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapıların performansını arttırmak için üç önemli parametre üzerinde iyileştirmeler önerilmiştir. Bu iyileştirme parametrelerden ilki, InAlN bariyer tabakasındaki In mol-kesrinin ayarlanmasıdır. 2001'de Kuzmik, taşıyıcı yoğunluğunu arttırmak için yaklaşık olarak örgü uyumlu $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ($x=0.18$) yapı tasarlamıştır [51]. Bu örgü uyumlu $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ($x=0.18$) yapılarda, piezoelektrik kutuplanma ihmal edilebilir büyüklükte olup, tüm taşıyıcılar yalnızca kendiliğinden kutuplanma alanının ürettiği taşıyıcılar tarafından sağlanır. InAlN ve GaN tabakaları arasındaki kendiliğinden kutuplanma farkının ortaya çıkardığı yüksek kendiliğinden kutuplanmadan dolayı bu yapılarda taşıyıcı yoğunluğu $3-3.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ mertebesinde [46,47]. İyileştirilen diğer parametre ise, InAlN ve GaN tabakaları arasına ince bir AlN ara tabaka eklenmesiyle, tabakalar arasındaki iletkenlik bant offset değeri artmakta, alaşım saçılması ihmal edilmekte ve yüksek mobilite değeri elde edilebilmektedir. Bu ince AlN ara tabaka eklenmesi piezoelektrik kutuplanma taşıyıcı yoğunluğunda artışa neden olmaktadır [15, 52-53]. AlN ara tabaka kalınlığı, gerilim durulma limitleri dikkate alınarak iyileştirmeler yapılmıştır. İyileştirilen üçüncü parametre ise, AlInN bariyer kalınlığının arttırılmasıdır. Arttırılan AlInN bariyer tabakasıyla taşıyıcı yoğunluğunda artma sağlanmaktadır.

Bu açıklamalar doğrultusunda, Nextnano³ simülasyon programı kullanılarak, farklı In-mol kesirlerinin, AlN ara tabaka ve AlInN bariyer kalınlıklarının enerji bant profilleri, olasılık dağılım fonksiyonları ve taşıyıcı yoğunlukları üzerine etkileri araştırılmıştır. Detaylar sırasıyla aşağıda verilmiştir.

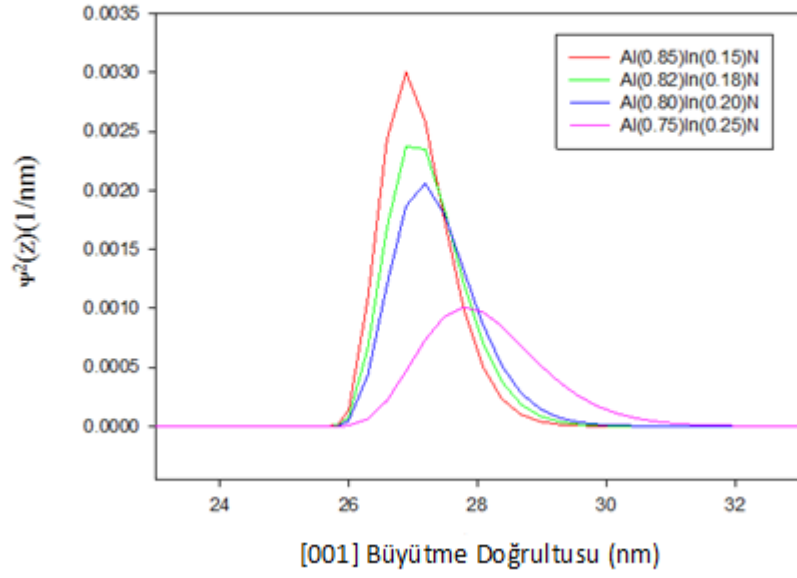
5.1 In-Mol Kesrinin Etkisi

Şekil 5.1’de, $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapının farklı In-mol kesirlerine göre iletim enerji bant profillerinin değişimi gösterilmiştir. Bu değişim eğrisi elde edilirken AlInN bariyer kalınlığı 20nm ve AlN ara tabaka kalınlığı 1nm alınmıştır.

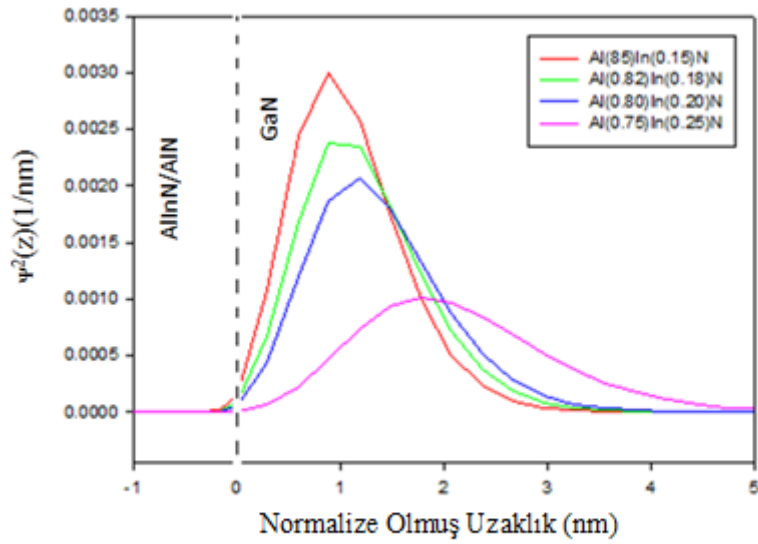


Şekil 5.1: Farklı In mol kesirlerine göre enerji bant profiline uzaysal değişimi.

Şekil 5.1’de görüldüğü gibi In oranları 0.15, 0.18, 0.20 ve 0.25 olarak alınmıştır. In oranı arttıkça kuyu derinliği ve genişliği azalmaktadır. Bunun sonucunda da elektronların kuyu içerisinde hapsolme olasılıkları azalmakta olup, bu durum Şekil 5.2’de verilmiştir.



Şekil 5.2: Farklı In mol kesirlerine göre olasılık yoğunluğunun uzaysal değişimi



Şekil 5.3: Farklı In mol kesirlerine göre olasılık yoğunluğunun normalize olmuş uzaklığa göre uzaysal değişimi.

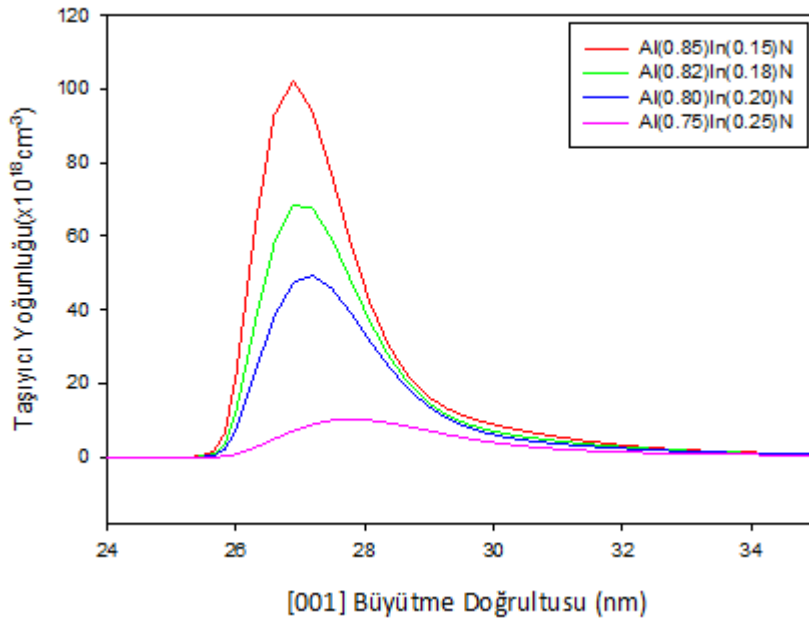
Şekil 5.2’de her bir kuyu içindeki elektronların olasılık yoğunluklarının uzaysal dağılımı görülmektedir. In oranı arttıkça elektronların olasılık yoğunluğunda azalma olmaktadır. Aynı zamanda bu sonuç üçgen kuantum kuyusu içinde hapsolan elektron taşıyıcı yoğunluğunun azaldığını da destekler bir sonuçtur. Şekil 5.3’den In oranı arttıkça AlN/GaN ara yüzeyinden elektronların uzaklaştığı sonucuna ulaşılabilir. Bu durumda elektronların GaN tabakasında bulunma olasılık yoğunluğu arttığı için o bölgede safsızlık (impurity) saçılmalarına maruz kaldığı söylenir. In oranı azaldıkça elektronlar AlN/GaN ara yüzeye yaklaşmakta ve bu durumda da ara yüzeyle ilgili saçılmalardan etkilendikleri için mobilitelerinde değişmeye sebep olacaktır.

Şekil 5.4’de elektronların 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun In oranlarına bağlı olarak uzaysal dağılımı verilmiştir. Beklenildiği gibi In oranı arttıkça taşıyıcı yoğunluğunun azaldığı görülmektedir. Taşıyıcı yoğunluğunun değişmesinin sebebi, In oranının artma veya azalmasıyla ara yüzeylerde oluşan gerilmelerin ortaya çıkardığı piezoelektrik kutuplanma ve kendiliğinden kutuplanma yüklerinin değişmesine bağlanabilir.

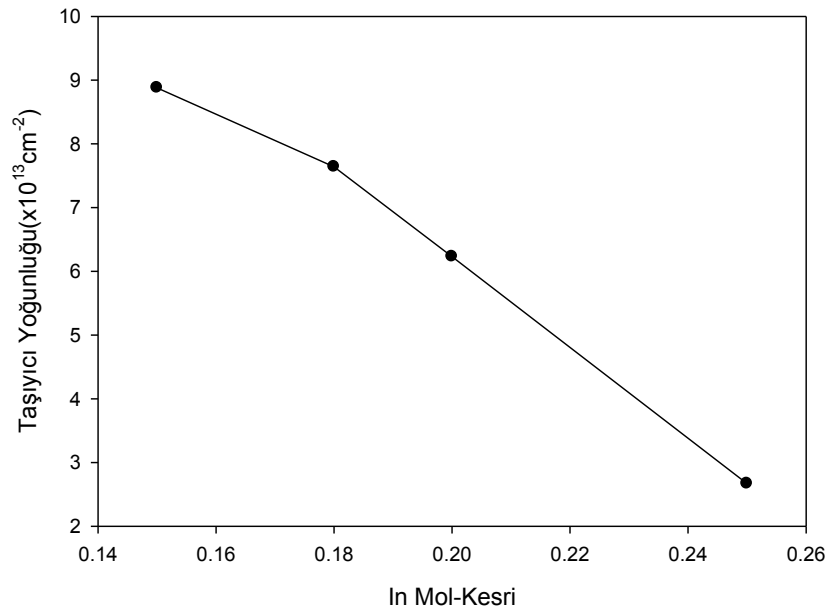
GaN üzerine yüksek In-mol kesirli tabakalar büyütüldüğü zaman örgü üzerinde sıkıştırıcı (compressive) bir gerilme meydana gelmekte ve büyütülen yapı da kusurların oluşmasına neden olmaktadır.

Halbuki In oranı 0.18 olduğunda AlInN ile GaN tabakaları arasında gerilmenin olmadığı durum olan örgü uyumu sağlanmaktadır. Örgü uyumlu $Al_{0.82}In_{0.18}N/GaN$ yapıda taşıyıcıların hemen hemen hepsi, piezoelektrik kutuplanma ihmal edildiği için yalnızca kendiliğinden kutuplanma tarafından ortaya çıkar.

Şekil 5.4’de 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun uzaysal dağılımı ve Şekil 5.5’de 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun In mol kesrine göre değişimi görülmektedir. Şekil 5.5 de çizgiler görsel kolaylık olması için çizilmiştir, herhangi bir fit eğrisi değildir. Her iki şekilden de In oranı arttıkça taşıyıcı yoğunluğunun azaldığı görülmektedir. Şekil 5.5’de elektronun dalga fonksiyonlarının FWHM’lerinden elde edilen etkin potansiyel kuyu genişlikleri Şekil 5.2’den bulunarak elde edilmiştir



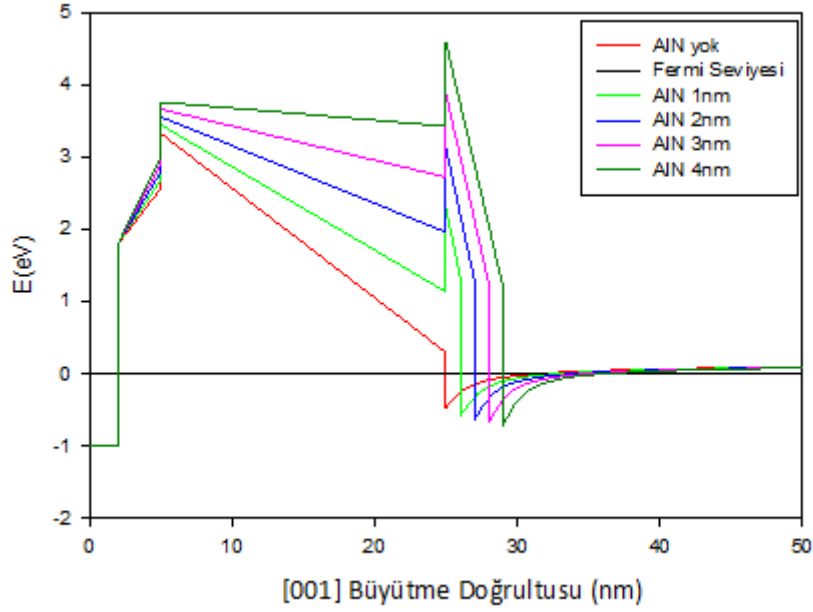
Şekil 5.4: Farklı In mol kesirlerine göre 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun uzaysal değişimi



Şekil 5.5: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun In mol kesrine göre değişimi.

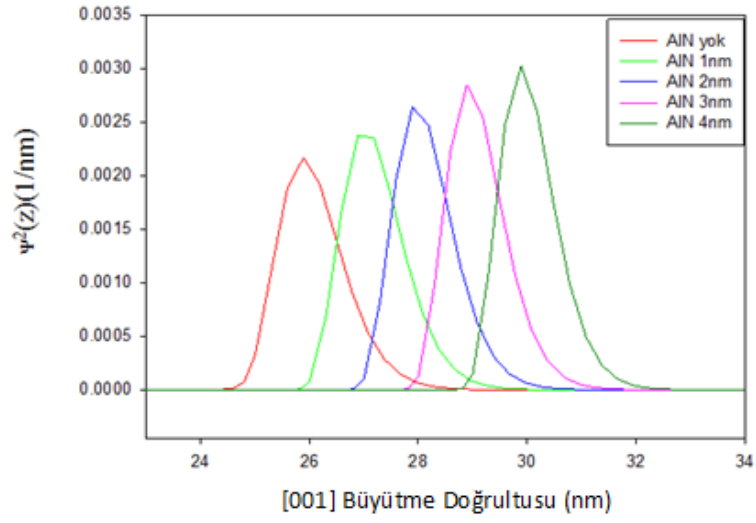
5.2 AlN Ara Tabaka Kalınlığının Etkisi

Bu kesimde 2BEG'nin taşıyıcı yoğunluğunu arttırmak için $Al_xIn_{1-x}N/AlN/GaN$ HEMT yapılarında $AlInN/GaN$ tabakaları arasında AlN ara tabaka eklenmiş ve bu AlN ara tabaka kalınlığına göre iletim enerji bant profillerindeki değişim Şekil 5.6'da gösterilmiştir. Bu değişim eğrisi elde edilirken $AlInN$ bariyer kalınlığı 20nm ve $AlInN$ bariyer tabakasındaki In mol kesri 0.18 alınmıştır.



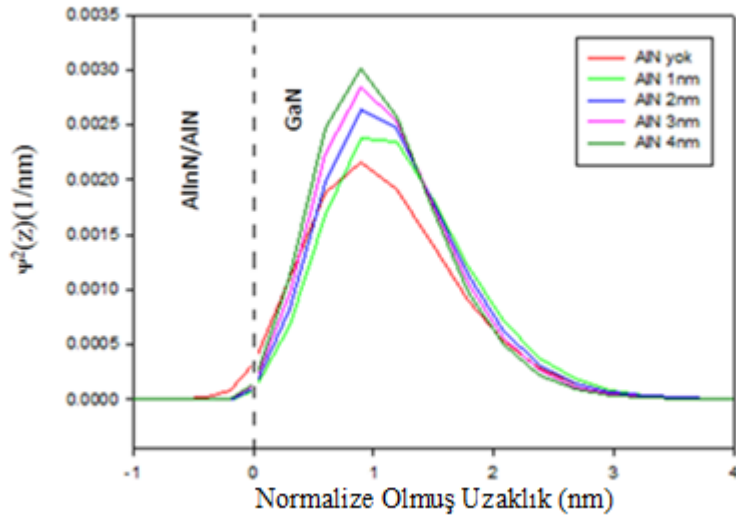
Şekil 5.6: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre enerji bant profilinin uzaysal değişimi.

Şekil 5.6'dan AlN ara tabaka yokken ki kuyu derinliğinin ve genişliğinin, AlN ara tabakanın var olduğu duruma göre daha küçük olduğu görülmektedir. AlN ara tabaka kalınlığının artmasıyla kuyu derinliği ve genişliği artmaktadır. Böylece elektronların kuyu içerisine hapsolme olasılığı ve taşıyıcı yoğunluğu da artmaktadır. Ayrıca, AlN ara tabaka varken iletkenlik bant offsett değeri arttığı için elektronların $AlInN$ bariyer tabakasına sızma olasılığı azalmakta ve bunun sonucunda da elektronların $AlInN$ bariyerindeki alaşım saçılması azalmaktadır.



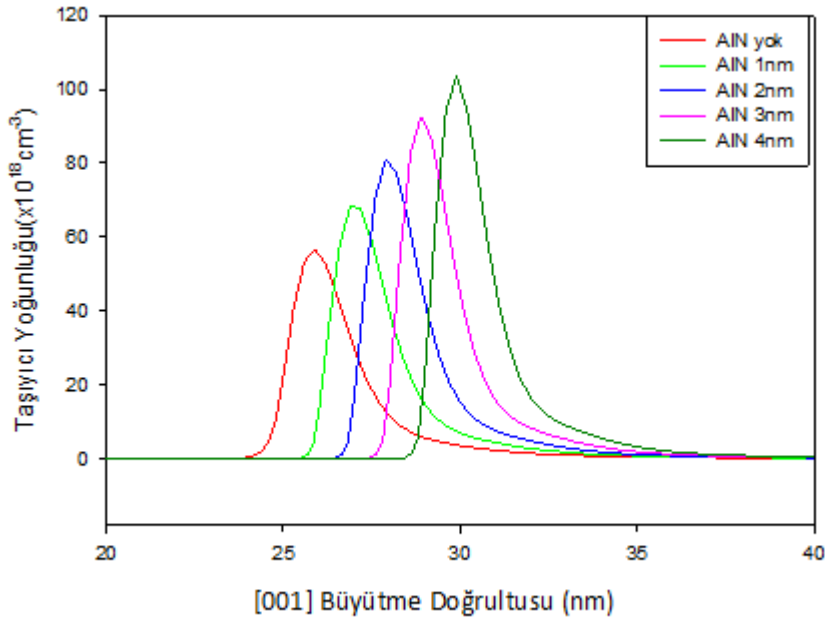
Şekil 5.7: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun uzaysal değişimi.

Şekil 5.7’de farklı AlN kalınlıklarına bağlı olarak elektronların olasılık yoğunluğunun uzaysal dağılımı görülmektedir. AlN kalınlığı arttıkça elektronların kuyu içinde bulunma olasılıkları da artmaktadır.



Şekil 5.8: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun normalize olmuş uzaklığa göre değişimi.

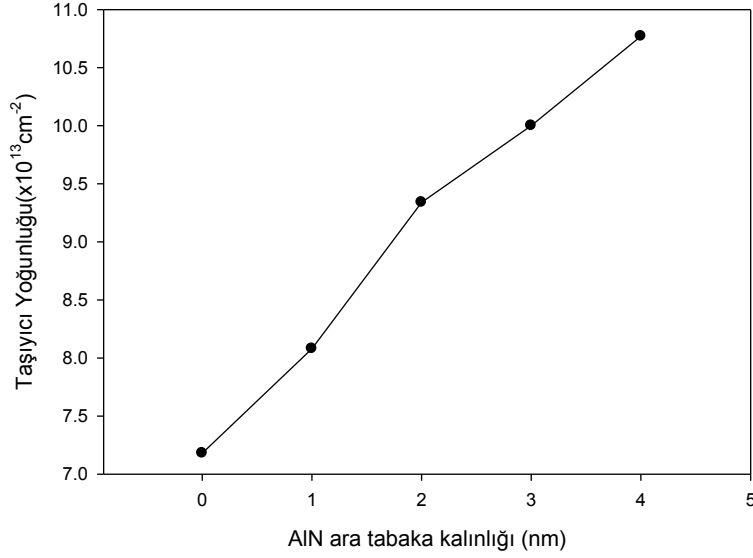
Şekil 5.8’de elektronların olasılık yoğunluğunun normalize olmuş uzaklığa göre değişimi, bariyerdeki In mol kesri 0.18 ve farklı AlN ara tabaka kalınlıkları için elde edilmiştir. Şekil 5.8’den AlN ara tabaka kalınlığı arttıkça, elektronların kanal içine daha iyi yerleştiğini, olasılık dağılım fonksiyonunun da ara yüzeye yaklaştığını görmekteyiz. AlN yokken elektronların dalga fonksiyonu bariyer içerisine daha çok sızmakta iken, AlN kalınlığı arttıkça elektronların bariyer içine sızması azalmaktadır. Bu durumda da elektronların bariyerdeki alaşım düzensizliği saçılması azalırken, ara yüzey ile ilgili saçılmalar artmaktadır. Ayrıca AlN kalınlığı arttıkça elektronların kanal içinde hapsolme olasılığı artacağından ara yüzey saçılmalarından başka etkin kuyu genişliğine bağlı olarak akustik ve optik fononlar tarafından saçılacağı da literatürde verilmiştir [18].



Şekil 5.9: Farklı AlN ara tabaka kalınlıklarına göre 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun uzaysal değişimi.

Şekil 5.9’da AlN ara tabaka kalınlığı arttıkça elektronların kuyu içerisinde bulunma olasılıklarının arttığı gösterilmiştir. Bunu sonucunda da elektronların 3-

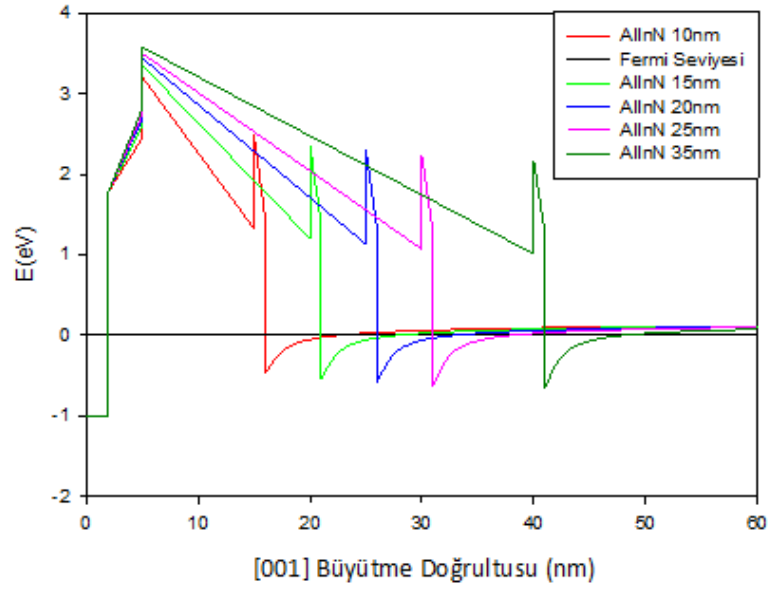
boyutlu ve 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunda artış olmaktadır. Şekil 5.10 da çizgiler görsel kolaylık olması için çizilmiştir, herhangi bir fit eğimi değildir.



Şekil 5.10: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun AlN ara tabaka kalınlığına değişimi.

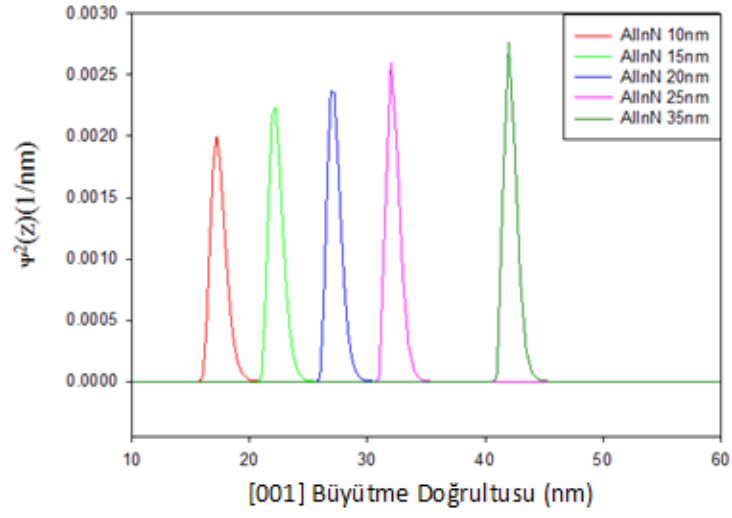
5.3 AlInN Bariyer Kalınlığının Etkisi

Son yıllarda yapılan çalışmalarda AlGaN bariyer tabakası yerine AlInN bariyer tabakasının kullanılmasının sonucunda 2BEG'da ki taşıyıcı yoğunluğunda bir artış gözlemlenmiştir. Bu nedenle de bu alt bölümde, taşıyıcı yoğunluğunda artışı sağlamaya yönelik olarak AlInN tabaka kalınlıklarında iyileştirmeye gidilmiş ve farklı AlInN bariyer tabakası kalınlığına göre iletim enerji bant profilinde, elektronun olasılık ve taşıyıcı yoğunluğundaki değişimler sabit bir %18 In mol oranında ve 1nm AlN ara tabaka kalınlığında elde edilmiştir.

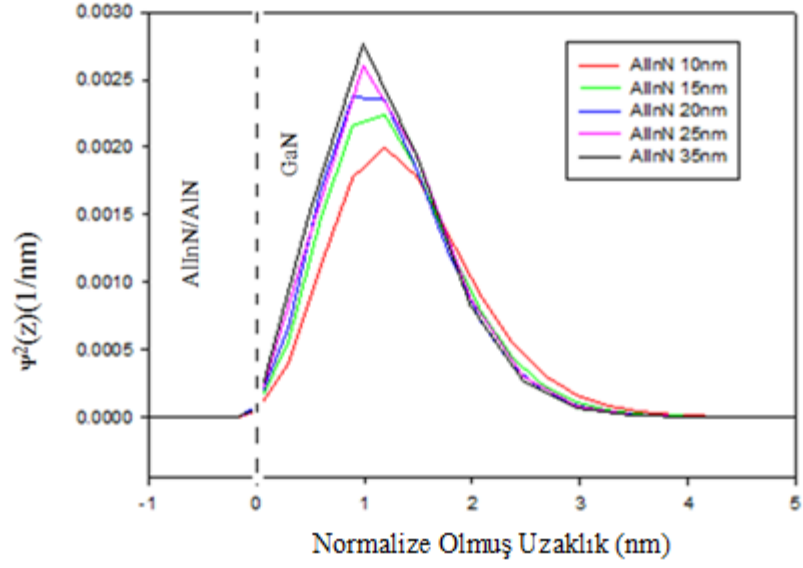


Şekil 5.11: Farklı AlInN bariyer kalınlıklarına göre enerji bant profilinin uzaysal deęiřimi.

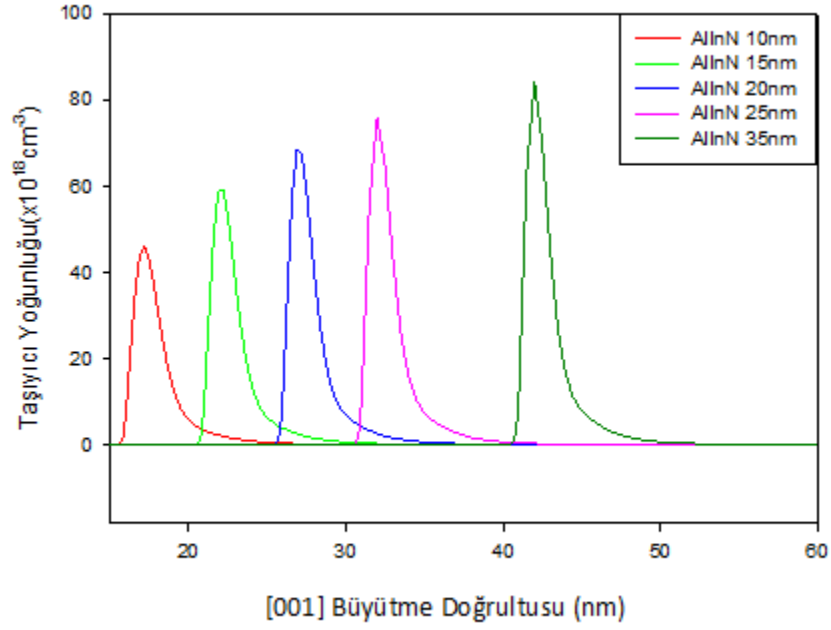
Şekil 5.11'den de görüldüğü gibi AlInN bariyer kalınlığı arttıkça kuyu derinliği ve genişliği de artmaktadır ve bunun sonucunda da elektronların kuyu içerisinde daha iyi hapsoldüğü söylenebilir. Şekil 5.12'de elektronların olasılık yoğunlukları bariyer kalınlığı arttıkça artmaktadır. Bu da elektronların kuyu içinde daha iyi hapsoldüğünü desteklemektedir. Şekil 5.13'de ise AlInN bariyer kalınlığı arttıkça elektronların olasılık yoğunluğu AlInN/AlN ara yüzeyine yaklaşmaktadır. Bu durumda da elektronların ara yüzey pürüzlülüğü gibi saçılma mekanizmalarına maruz kalarak mobilitesinde bir azalma yaratacağı söylenebilir.



Şekil 5.12: Farklı AlInN bariyer kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun uzaysal değişimi.



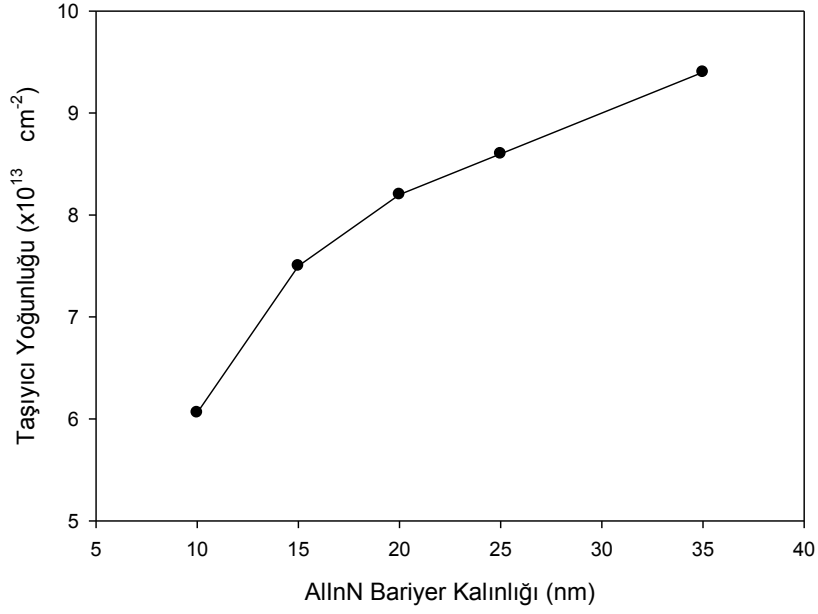
Şekil 5.13: Farklı AlInN bariyer kalınlıklarına göre olasılık yoğunluğunun normalize olmuş uzaklığa göre değişimi.



Şekil 5.14: Farklı AlInN bariyer kalınlıklarına göre 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun uzaysal dağılımı.

Şekil 5.14’de 3 boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun farklı bariyer kalınlıklarına göre değişiminin uzaysal dağılımı çizilmiştir. Bariyer kalınlığı arttıkça taşıyıcı yoğunluğunda bir artış görülmektedir. Şekil 5.15’de bariyer kalınlıklarına göre 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun değişimi verilmiştir. Bu değişimden de bariyer kalınlığı arttıkça taşıyıcı yoğunluğunun arttığı elde edilmiştir.

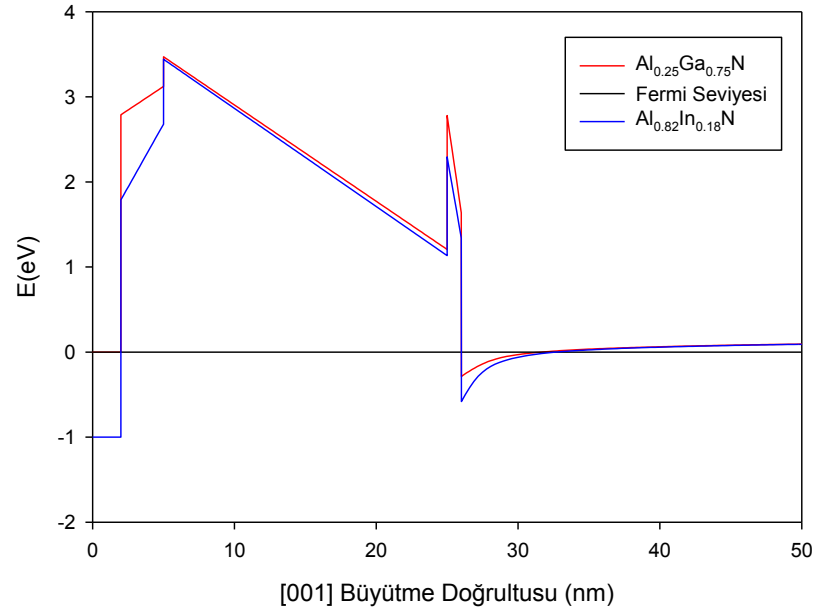
Şekil 5.15’deki çizgiler görsel kolaylık olması için çizilmiştir, herhangi bir fit eğrisi değildir.



Şekil 5.15: 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğunun farklı AlInN bariyer kalınlığına göre değişimi.

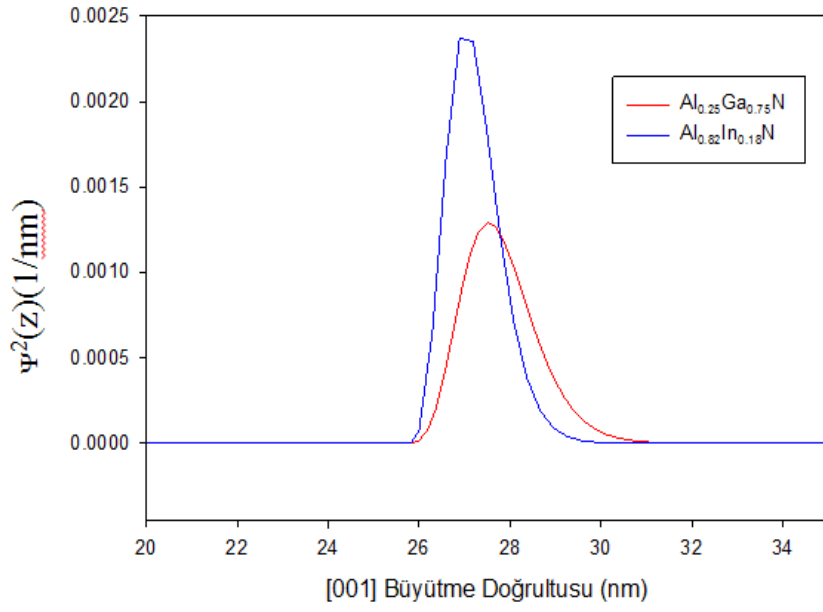
Bariyerdeki In mol kesrine, AlN ara tabaka kalınlığına ve bariyer kalınlığına bağlı olarak bulunan taşıyıcı yoğunluklarının değerleri literatürdeki değerlerle kıyaslandığında merteye olarak uyum içinde olup katsayıları daha büyüktür [18,46-47].

AlGaIn/AlN/GaN ve AlInN/AlN/GaN çoklu (hetero) yapıların enerji bant profillerinin, olasılık yoğunluklarının ve taşıyıcı yoğunluklarının karşılaştırılması sırasıyla Şekil 5.16, Şekil 5.17, Şekil 5.18 ve Şekil 5.19'da verilmiştir. Bu değişim eğrileri, Al mol kesrinin %25, In mol kesrinin %18, AlGaIn ve AlInN bariyer kalınlıklarının 20 nm ve AlN ara tabaka kalınlığının 1nm değerlerine karşılık çizilmiştir.

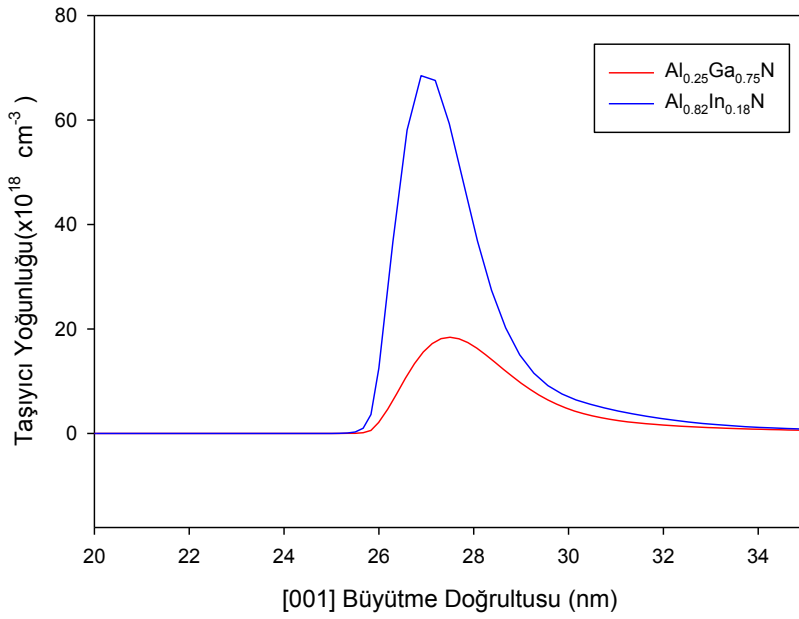


Şekil 5.16: AlGaInN bariyerli yapılarda enerji bant profilinin uzaysal değişimi

Şekil 5.16 'da AlGaInN bariyerli yapılarda iletim enerji bant profillerinin uzaysal değişimi gösterilmiştir. Şekil 5.16'da görüldüğü gibi AlInN bariyer tabakalı yapılarda kuantum kuyu derinliği ve genişliği AlGaInN bariyer tabakalı yapılara göre daha derin ve geniştir. Bunun sonucunda da elektronların kuyu içerisinde hapsolme olasılığı AlInN bariyerli yapılarda daha yüksektir, bu durum Şekil 5.17'de verilmiştir.



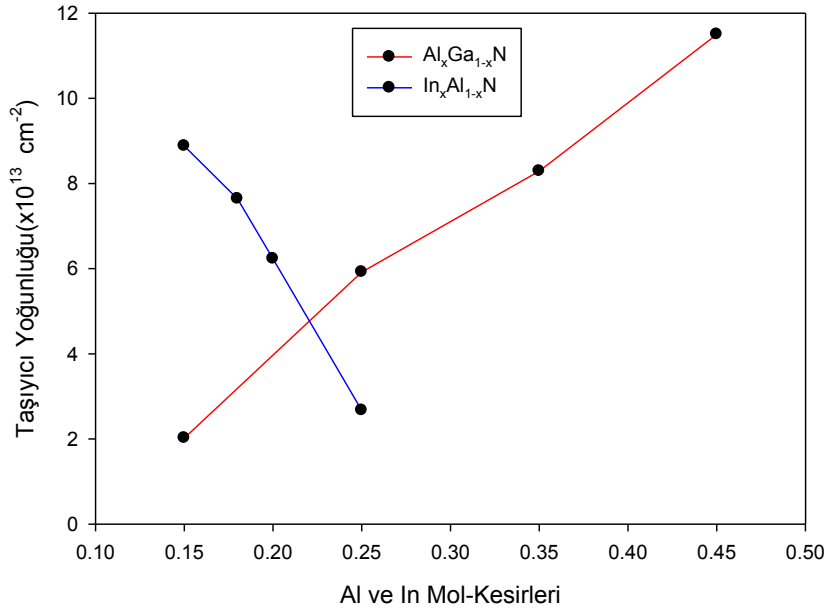
Şekil 5.17: AlGaInN bariyerli yapılarda olasılık yoğunluklarının uzaysal değişimi



Şekil 5.18: AlGaInN bariyerli yapılarda 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluklarının uzaysal dağılımı.

Şekil 5.18’de AlGaInN bariyerli yapılarda 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluklarının uzaysal değişimi gösterilmekte olup AlInN bariyer tabakalı yapılarda 3-boyutlu taşıyıcı yoğunluğu daha yüksektir.

Şekil 5.19’da AlGa_xN bariyerindeki Al mol-kesri 0.15, 0.25, 0.35 ve 0.45 ve AlInN bariyerindeki In mol-kesri 0.15, 0.18, 0.20 ve 0.25 değerlerine göre 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğundaki değişimi verilmiştir. AlGa_xN ve AlInN bariyerli yapılarda, Al ve In mol-kesirleri 0.15 iken 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğu, AlInN bariyerli yapıda daha yüksektir. Al ve In mol-kesirleri 0.25 iken 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğu AlInN bariyerli yapıda daha düşüktür.



Şekil 5.19: AlGa_xN ve AlInN bariyerli yapılarda 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluklarının farklı Al ve In mol-kesirlerine göre değişimi

6. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, GaN tabanlı HEMT yapılar olan AlGa_N/AlN/GaN ve AlIn_N/AlN/GaN yüksek performans, yüksek mobilite ve taşıyıcı yoğunluğu elde edebilmek için cihaz tasarımları yapılmış ve büyütme parametreleri olan AlN ara tabaka kalınlıklarının, AlGa_N ve AlIn_N bariyer kalınlıklarının ve de bariyerdeki Al ve In mol kesirlerinin değişimleri araştırılmıştır.

Bu değişimlerin bu yapılardaki taşıma özellikleri üzerine etkilerinin araştırılması Nextnano³ simülasyon programı ile yapılmıştır. Bu simülasyon programı, kendi içerisinde tutarlı çözümlere dayalı olan, lineer olmayan 1-boyutlu 1-bant Schrödinger-Poisson denklemlerinin çözümleri ile çalışmaktadır.

Her bir AlGa_N/GaN ve AlIn_N/GaN HEMT yapı tasarımları için elektronların iletim enerji bant profillerinin, olasılık dağılım fonksiyonlarının ve taşıyıcı yoğunluklarının uzaysal dağılımları elde edilmiştir. Bu değişim eğrileri, Al ve In mol kesirlerinin ve AlN ve bariyer kalınlıklarının değişimleri altında çizilmiştir.

Elde edilen simülasyon sonuçlarına göre AlGa_N/GaN HEMT yapılarda AlGa_N bariyer tabakasındaki Al-mol kesri, AlGa_N bariyer kalınlığı ve AlN ara tabaka kalınlığının artmasıyla taşıyıcı yoğunluğunun arttığı bulunmuştur.

Yüksek taşıyıcı yoğunluğu ve mobilite veren AlGa_N bariyer kalınlığı, Al mol yüzdesi ve AlN ara tabaka kalınlığı için literatürde verilen değerler sırasıyla, 15-20 nm, 0.25-0.30 ve 1nm olarak verilmiştir [13-15].

AlIn_N/GaN HEMT yapıların simülasyon sonuçlarından, AlN ara tabaka ve AlIn_N bariyer kalınlıklarının artmasıyla taşıyıcı yoğunluğunun arttığı bulunmuştur. AlIn_N bariyer tabakasındaki In mol-kesri arttıkça taşıyıcı yoğunluğunda azalma elde edilmiştir. Bu yapılarda, yüksek taşıyıcı yoğunluğu ve mobilite veren In mol yüzdesi, AlIn_N bariyer kalınlığı ve AlN ara tabaka kalınlığı için literatürdeki değerleri sırasıyla, 0.18, 20 nm ve 1nm olarak verilmiştir [51,17,14].

Bu neticeler, AlGaN bariyerli HEMT yapılarına alternatif olarak GaN temelli HEMT yapıların performansını geliřtirmek için AlGaN bariyer yerine AlInN bariyerin kullanılabilceęi göstermiřtir [16,17].

7. KAYNAKLAR

- [1] Sendill Gnanaeswaran, B.E, “Study of energy band diagrams of group III-nitride Heterostructures”, Master Thesis, *Texas Tech University*, Texas, (2003).
- [2] Lai, C.Y., Hsu, T.M., Chang, W.-H. and Tseng, K.U., “Direct measurement of piezoelectric field in $\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{N}/\text{GaN}$ multiple quantum electrotransmission spectroscopy”, *J. Appl.Phys.*, 91, 531, (2002).
- [3] Smith, K.V., Yu, E.T., Elsass, C.R., Heying, B. and Speck, J.S., “Localized variations in electronic structure of AlGa_N/Ga_N heterostructures grown by molecular-beam epitaxy”, *Appl. Phys. Lett.*, 79, 2749, (2001).
- [4] Wurgaftman, I., Meyer, J.R. and Ram-Mohan L.R., “Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys”, *J.Appl. Phys.*, 89, 5815, (2001).
- [5] Martinez, E.J., “Gallium nitride & related wide bandgap materials and devices”, *DARPA Tech*, (2000).
- [6] Ueda, D., Hikita, M., Nakazawa, S., Nakazawa, K., Ishida, H., Yanagihara, M., Inoue, K., Ueda, T., Uernoto, Y., Tanaka, T.,and Egawa, T., “Present and future prospects of GaN-based power electronics”, *IEEE*, 1, 4244, (2008).
- [7] Sheppard S.T., Doverspike, K., Pribble W.L., Allen, S.T., Palmour, J.W. and Kehias, L.T., et al., “High power microwave GaN/AlGa_N HEMTs on semi-insulating silicon carbide substrates”, *IEEE Electron Dev. Lett.*, 20, 161, (1999).
- [8] Sullivan G.J., Chen M.Y., Higgins J.A., Yang J.W., Chen Q. and Pierson R.L., et al. “High power 10-GHz operation of AlGa_N HFETs on insulating SiC”, *IEEE Electron Dev. Lett.* 19, 198, (1998).
- [9] Kocan, M., “AlGa_N/Ga_N MBE 2DEG Heterostructures: Interplay between Surface-, Interface-, and Device-Properties”, Ph.D. Thesis, *Pondicherry University*, Pondicherry, (2003).
- [10] Bernardi, F. and Fiorentini, V., “Macroscopic polarization and band offsets at nitride heterojunctions”, *Phys. Rev. B*, 57, R9427, (1998).
- [11] Craven, M.D., Waltereit, P., Wu, F., Speck, J. and DenBaars S.P., “Characterization of a-plane Ga_N/(AlGa)_N multiple quantum wells grown via metal organic vapor deposition”, *Jpn.J Appl. Phys.*, 42, L235, (2003).
- [12] Morkoç, H., *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices* vols I-III, New York: Wiley, (in press).
- [13] Lişesivdin, S.B., Yıldız, A. and Kasap, M., ‘Optimization of alloy composition, interlayer and barrier thicknesses in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/(\text{AlN})/\text{GaN}$ hight electron

- mobility transistors', *Adv. Mater.-Rapid Comm.*, 1, 467, (2007).
- [14] Smorchkova, I.P., Keller, S., Heikman, S., Elsass, C.R., Heying, B., Fini, P., Speck, J.S. and Mishra, U.K., *Appl. Phys. Lett.*, 77, 3998, (2000).
- [15] Atmaca, G., Elibol K., Lişesivdin, S.B., Kasap, M. and Özbay, E., "Numerical optimization of Al-mole fractions and layer thicknesses in normally-on AlGaIn-GaN double-channel high electron mobility transistors (DCHEMT's)", *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials.*, 11, 578-582, (2009).
- [16] Kuzmík, J., "Power Electronics *on InAlN/(In)GaIn: Prospect for a record Performance", *IEEE Electron Device Lett.*, 22, 510, (2001).
- [17] Tülek, R., Ilgaz, A., Gökden, S., Teke, A., Öztürk, M.K., Kasap, M., Özçelik, S., Arslan, E., and Özbay, E., "Comparison of the transport properties of high quality AlGaIn/AlN/GaN and AlInN/AlN/GaN two dimensional electron gas heterostructures", *J. Appl. Phys.*, 105(1), 013707, (2009).
- [18] Teke, A., Gökden, S., Tülek, R., Leach, J.H., Fan, Q., Xie, J., Özgür, Ü., Morkoç, H., Lişesivdin, S.B. and Özbay, E., "The effect of AlN interlayer thicknesses on scattering processes in lattice-matched AlInN/GaN two-dimensional electron gas heterostructures", *New Journal of Physics.*, 11, 063031, (2009).
- [19] Can, N., "GaN temelli heteroeklem ve kuantum yapıların optiksel özelliklerinin İncelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, *Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Fizik Anabilim Dalı, Balıkesir, (2011).
- [20] Tülek, R., "Yüksek performanslı Al(In)GaIn/AlN/(In)GaIn heteroeklem yapıların iletim özellikleri", Doktora Tezi, *Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Fizik Anabilim Dalı, Balıkesir, (2010).
- [21] Haris, W.A., *Electronic Structure and Properties of Solids*, Dover: New York, 174, (1980).
- [22] Ambacher, O., Majewski, J., Miskys, C., Link, A., Hermann, M., Eickhoff, M., Stutzmann, M., Bernardini, F., Fiorentini, V., Tilak, V., Schaff, B., and Eastman, L. F., "Pyroelectric properties of Al(In)GaIn/GaN hetero- and quantum well structures", *J. Phys: Condens. Matter.*, 14, 3399, (2002).
- [23] Leszczynski, M., Suski, T., Perlin, P., Teisseyre, H., Grzegory, I., Bockowski, M., Jun, J., Porowski, S., Pakula, K., Baranowski, J.M., Foxon, C.T. and Cheng, T.S., *Applied Physics Letters*, 69, 73, (1996).
- [24] Tanaka, M., Nakahata, S., Sogabe, K., Nakata, H. and Tabioka, M., "Morphology and X-Ray Diffraction Peak Widths of Aluminum Nitride Single Crystals Prepared by the Sublimation Method", *Japanese Journal of Applied Physics*, 36, 1062, (1997).
- [25] Angerer, H., Brunner, D., Freudenberg, F., Ambacher, O., Stutzmann,

- M., Höppler, R., Metzger, T., Born, E., Dollinger, G., Bergmaier, A., Karsch, S. and Korner, H.-J., "Determination of Al mole fraction and the band gap bowing of epitaxial $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ films", *Applied Physics Letters*, 71, 1504, (1997).
- [26] Detchprohm, T., Hiramatsu, K., Itoh, K. and Akasaki, I., "Relaxation Process of the Thermal Strain in the $\text{GaN}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ Heterostructure and Determination of the Intrinsic Lattice Constants of GaN Free from the Strain", *Japanese Journal of Applied Physics*, 31, 1454, (1992).
- [27] Leszczynski, M., Teisseyre, H., Suski, T., Grzegory, I., Bockowski, M., Jun, J., Porowski, S. and Major, J., "Lattice constants, thermal expansion and compressibility of gallium nitride", *Journal of Physics D: Applied Physics*, 69, 149, (1995).
- [28] Liu, L. and Edgar, J.H., "Substrates for gallium nitride epitaxy", *Materials Science & Engineering R, Reports*, 37, 61, (2002).
- [29] Ambacher, O., Smart, J., Shealy, J.R., Weimann, N.G., Chu, K., Murphy, M., Schaff, W.J., Eastman, L.F., Dimitrov, R., Wittmer, L., Stutzmann, M., Rieger, W. and Hilsenbeck, J., "Two dimensional electron gas", *J. Appl. Phys.*, 85, 3222, (1999).
- [30] Hellman, E. S., *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.*, 3, 11, (1998).
- [31] Bernardi, F., Fiorentini, V. and Vanderbilt, D., "Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides", *Phys. Rev. B*, 56, 10024, (1997).
- [32] Birner, S. (2004). Nextnano³-next generation 3D nano device simulator., (27.12.2011), <http://www.nextnano.de/nextnano3/>.
- [33] Vurgaftman, I. and Meyer, J.R., *J. Appl. Phys*, 96, 3675, (2003).
- [34] Shur, M.S., *Solid State Electron.*, 42, 2131, (1998).
- [35] Christou, A., *Physica B*, 296, 264 (2001).
- [36] Waki, E., Deguchi, T., Nakagawa, A. Egawa, T., *Appl. Phys.Lett.*, 92,103507 (2008).
- [37] Khan, M.A., Kuznia, J.N., Hove, J.M.V., Pan, N. and Carter, J., *Appl. Phys. Lett.*, 60, 3027, (1992).
- [38] Ambacher, O., Foutz, B., Smart, J., Shealy, J.R., Weimann, N.G., Chu, K., Murphy, M., Sierakowski, A.J., Schaff, W.J. and Eastman, L.F., *J. Appl. Phys.*, 87, 334, (2000).
- [39] Arulkumaran, S., Egawa, T., Ishikawa, H. and Jimbo, T., *J. Vac. Technol. B*, 21, 888, (2003).

- [40] Smorchova, I. P., Chen, L., Mates, T., Shen, L., Heikman, S., Moran, B., Keller, S., DenBaars, S. P., Speck, J. S. and Mishra, U. K., *J. Appl. Phys.*, 90, 5196, (2001).
- [41] Wu, Y.-F., Saxler, A., Moore, M., Smith, R. P., Sheppard, S., Chavarkar, P. M., Wisleder, T., Mishra, U. K. and Parikh, P., *IEEE Electron Devices Lett.*, 25, 117, (2004).
- [42] Bykovski, A., Gelmont, B. and Shur, M., *J. Appl. Phys.*, 81, 6332, (1997).
- [43] Nakamura, F., Hashimoto, S., Hara, M., Imanaga, S., Ikeda, M. and Kawai, H., *J. Cryst. Growth.*, 195, 280, (1999).
- [44] Alekseev, E., Eisenbach, A. and Pavlidis, D., *Electron. Lett.*, 35, 2145, (1999).
- [45] Wang, C., Wang, X., Hu, G., Wang, J., Li, J. and Wang, Z., *Appl. Surf. Sci.*, 253, 762, (2006).
- [46] Dargar, A., Schulze, F., Blasing, J., Diez, A., Krost, A., Neuburger, M., Khon, E., Daumiller, I. and Kunze, M., *Appl. Phys. Lett.*, 85, 5400, (2004).
- [47] Gonscherek, M., Carlin, J.-F., Feltin, E., Py, M. A., Grandjean, N., Darakchieva, V., Monemar, B., Lorenz, M. and Ramm, G., *J. Appl. Phys.*, 103, 093514, (2008).
- [48] Feuillet, G., Daudin, B. and Widmann, F., *J. Cryst. Growth.*, 142, 189/190, (1998).
- [49] Grandjean, N. and Massies, J., *Appl. Phys. Lett.* 71, 1816, (1997).
- [50] Gökden, S., *Phys. Stat. Sol.(a)*, 200, 369, (2003).
- [51] Kuzmik, J., *IEEE Electron Device Lett.*, 22, 510, (2001).
- [52] Medjdoub, F., Ducatteau, D., Gaquiere, C., Carlin, J.-F., Gonscherek, M., Feltin, E., Py, M. A. Grandjean, N. and Kohn, E., *Electron Lett.*, 43, 71, (2007).
- [53] Xie, J., Ni, X., Wu, M., Leach, J. H., Özgür, U. and Morkoç, H., *Appl. Phys. Lett.*, 91, 132116, (2007).