

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

**YÜKSEK PERFORMANSLI Al(In)GaN/AlN/(In)GaN HETEROEKLEM
YAPILARIN İLETİM ÖZELLİKLERİ**

DOKTORA TEZİ

Remziye TÜLEK

Balıkesir, Haziran-2010

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

YÜKSEK PERFORMANSLI Al(In)GaN/AlN/(In)GaN HETEROEKLEM
YAPILARIN İLETİM ÖZELLİKLERİ

DOKTORA TEZİ

Remziye TÜLEK

Tez Danışmanları: Doç. Dr. Ali TEKE (I. Danışman)

Doç. Dr. Sibel GÖKDEN (II. Danışman)

Sınav Tarihi: 25.06.2010

Jüri Üyeleri: Prof. Dr. Hakan KÖÇKAR (BAÜ)

Doç. Dr. Ali TEKE (Danışman-BAÜ)

Doç. Dr. Sedat AĞAN (Kırıkkale)

Yrd. Doç. Dr. Hasan TUNER (BAÜ)

Yrd. Doç. Dr. S. Bora LİSESİVDİN (Gazi)

Enstitü Yönetim Kurulunun tarih sayılı oturumunun
nolu kararı ile Mezun olmuştur.

Balıkesir, Haziran-2010

ÖZET

YÜKSEK PERFORMANSLI Al(In)GaN/AlN/(In)GaN HETEROEKLEM YAPILARIN İLETİM ÖZELLİKLERİ

Remziye TÜLEK

Balıkesir Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı

(Doktora Tezi/Tez Danışmanı: Doç. Dr. Ali TEKE)

(II. Danışman: Doç. Dr. Sibel GÖKDEN)

Balıkesir, 2010

Bu çalışmada Al(In)GaN/Ga(In)N iki boyutlu elektron gaz (2DEG) heteroyapıların iletim özellikleri, deneysel ve teorik olarak çalışıldı. Deneysel kısımda ilk olarak örnekler metal organik kimyasal buhar depozisyonu (MOCVD) yöntemi ile safir alttabaka üzerine büyütüldü ve yüksek çözünürlü X-ışını kırınımı (HRXRD) ve atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ile karakterize edildi. İletim analizleri için örneklerin fabrikasyonu omik kontaklı Van der Pauw geometrisinde yapıldı ve sıcaklığa bağlı Hall etkisi ölçüldü. Bu çalışmanın teorik kısmı, elektron mobilitesini sınırlayan, akustik ve optik fonon, iyonize safsızlık saçılması, arayüzey pürüzlülüğü, dislokasyon ve alaşım saçılması gibi temel saçılma mekanizmalarını hesaba alan analitik iletim modelini içermektedir. İlk olarak, yüksek elektron mobiliteli $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ ve yüksek tabaka taşıyıcı yoğunluklu $AlInN/AlN/GaN$ heteroyapılar araştırıldı ve karşılaştırıldı. $AlGaN/AlN/GaN$ heteroyapısı için elektron yoğunluğu $8.44 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ iken, oda sıcaklığı elektron mobilitesi $1700 \text{ cm}^2/V.s$ ve iki boyutlu tabaka direnci $435 \Omega/\square$ olarak ölçüldü. $Al_{0.88}In_{0.12}N$ dizayn edilen örnek $4.23 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ gibi çok yüksek elektron yoğunluğuna ve buna karşılık $812 \text{ cm}^2/V.s$ oda sıcaklığı mobilitesine sahiptir. İki boyutlu tabaka direnci ise $182 \Omega/\square$ olarak elde edildi. Daha sonra, 0 dan 2 nm'ye değişen AlN ara tabaka kalınlıklı örgü uyumlu $AlInN/AlN/GaN$ heteroyapıların iletim özellikleri araştırıldı. Örgü uyumlu $AlInN/GaN$ heteroyapılarda AlN ara tabakasının, yüksek elektron mobiliteli transistör (HEMT) dizaynında göz önünde tutulması gereken önemli parametrelerden biri olduğu görüldü. 1 nm AlN ara tabaka kalınlığının yüksek elektron mobilitesi için gerekli optimum ara tabaka kalınlığı olduğu belirlendi. Son olarak $AlInN/AlN/InGaN/GaN$ heteroyapılarda mobilitiyi sınırlayan saçılma mekanizmaları araştırıldı ve standart GaN kanallı HEMT ile karşılaştırıldı. Düşük ve ara sıcaklıklarda InGaN kanallı örnekler için arayüzey pürüzlülüğünün elektron mobilitesini sınırladığı görüldü. Oda sıcaklığında ise elektron mobilitesi optik fonon ve arayüzey pürüzlülüğü saçılmalarının kombinasyonu olarak belirlendi. Sonuç olarak bu çalışma, $AlInN$ bariyerli ve InGaN kuyulu heteroyapıda büyütme ve dizayn parametrelerinde yapılacak optimizasyon ile standart AlGaN bariyer ve GaN kuyulu HEMT'lere göre daha yüksek performanslı iletim elde edilebileceğini vurgulamaktadır.

ANAHTAR SÖZCÜKLER: İletim, mobilite, taşıyıcı yoğunluğu, GaN, 2DEG, saçılma mekanizmaları.

ABSTRACT

TRANSPORT PROPERTIES OF HIGH PERFORMANCE Al(In)GaN/AlN/(In)GaN HETEROSTRUCTURES

Remziye TÜLEK

Bahkesir University, Institute of Science, Department of Physics

(Phd. Thesis/Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Ali TEKE)
(Second Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Sibel GÖKDEN)

Bahkesir, 2010

In this work, transport properties of Al(In)GaN/Ga(In)N two-dimensional electron gas (2DEG) heterostructures were studied experimentally and theoretically. In experimental part, the samples were firstly grown by Metal Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) on sapphire substrate and then characterized by High Resolution X-Ray Diffraction (HRXRD) and Atomic Force Microscopy (AFM). For transport analysis the samples were fabricated in Van der Pauw geometry with ohmic contacts and then measured by temperature dependent Hall effect. The theoretical part of this study includes analytical transport models which account major scattering mechanisms such as optical and acoustic phonons, ionized impurity, interface roughness, dislocation and alloy disorder scattering, limiting the electron mobility. The transport properties of high electron mobility AlGaN/AlN/GaN and high sheet carrier density AlInN/AlN/GaN heterostructures were firstly investigated and compared. The room temperature electron mobility was measured as $1700 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ along with $8.44 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ electron density which resulted in two dimensional sheet resistance of $435 \text{ } \Omega/\square$ for $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$. The sample desing with $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}$ barrier exhibited very high sheet electron density of $4.23 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ with corresponding electron mobility of $812 \text{ cm}^2/\text{V.s}$. Two dimentional sheet resistance of $182 \text{ } \Omega/\square$ is achieved. Then, the transport properties of lattice-matched AlInN/AlN/GaN heterostructures with different AlN interlayer thickness from zero to 2 nm were investigated. It was found that the AlN spacer layer is a crucial growth parameters that must be considered in AlInN/AlN/GaN based high electron mobility transistor (HEMT) design. From transport analysis a 1 nm AlN spacer layer thickness is found to be optimum thickness required for high electron mobility. Finally, the scattering mechanisms limiting the carrier mobility in AlInN/AlN/InGaN/GaN heterostructures were investigated and compared with standart HEMT having GaN channel. It was found that scattering due to interface roughness limits the electron mobility at low and intermediate temperatures for samples having InGaN channels. The room temperature electron mobilities were determined by a combination of both optical phonon and interface roughness scattering. In conclusion, this work has emphasized that the heterostructure with AlInN bariyer and InGaN well, after the further optimization of the growth and design parametrs could show better transport performance compared to standart HEMTs with AlGaN barrier and GaN well.

KEYWORDS: Transport, mobility, carrier density, GaN, 2DEG, scattering mechanisms.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	ii
ABSTRACT	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SEMBOL LİSTESİ	vi
ŞEKİL LİSTESİ	vii
ÇİZELGE LİSTESİ	x
ÖNSÖZ	xi
1. GİRİŞ	1
2. NİTRİTLERİN TEMEL FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ	12
2.1 Kristal Yapısı	12
2.2 Mekanik Özellikleri	16
2.3 Isıl Yapısı	21
2.4 Optiksel Özellikleri	23
2.5 Alttabakanın Varlığı	24
2.6 Kusurlar	25
2.7 Elektriksel Özellikleri	28
2.8 III-V Yapılarda Kutuplanma	31
2.8.1 Kendiliğinden ve Piezoelektrik Kutuplanma	32
2.8.2 Arayüzeyde Oluşan Tabaka Taşıyıcı Yoğunluğu	36
3. DÜŞÜK ALAN ELEKTRON İLETİMİ	39
3.1 Boltzmann İletim Denklemi	43
3.1.1 İki Boyutlu Sistemlerde Genel Saçılma Teorisi	55
3.2 Saçılma Mekanizmaları	61
3.2.1 Örgü Titreşimlerinden Kaynaklanan Saçılma	62
3.2.1.1 Akustik fonon saçılması	63
3.2.1.1.a.Deformasyon Potansiyeli Saçılması	65
3.2.1.1.b.Piezoelektrik Saçılması	67
3.2.1.2 Optik fonon saçılması	69
3.2.2 İyonize Olmuş Safsızlık Saçılması	72

3.2.2.1 Uzaklaştırılmış Safsızlık Saçılması	73
3.2.2.2 Arkaplan Safsızlık Saçılması	74
3.2.3 Ara Yüzey Pürüzlülüğünden Kaynaklanan Saçılma	75
3.2.4 Alaşım Saçılması	76
3.2.5 Dislokasyon Saçılması	77
4. DENEYSEL SONUÇLAR	79
4.1 $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ ile $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ HEMT Yapılarının Karşılaştırılması	80
4.1.1 Deneysel Detaylar	80
4.1.2 Deneysel Sonuçlar ve Hesaplar	81
4.2 $AlInN/AlN/GaN$ HEMT Yapılarda AlN Ara Tabakanın Etkisi	92
4.2.1 Deneysel Detaylar	92
4.2.2 Deneysel Sonuçlar ve Hesaplar	93
4.3 $AlInN/AlN/InGaN/GaN$ ve $AlGaN/AlN/GaN$ HEMT Yapılarının Karşılaştırılması	106
4.3.1 Deneysel Detaylar	106
4.3.2 Deneysel Sonuçlar ve Hesaplar	107
5. SONUÇ VE TARTIŞMA	117
KAYNAKÇA	121

SEMBOL LİSTESİ

<u>Simge</u>	<u>Adı</u>	<u>Tanımı/Değeri</u>	<u>Birimi</u>
ϵ	Dielektrik sabiti		Fm^{-1}
μ	Mobilite		$\text{m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$
e	Elektron yükü	1.6×10^{-19}	C
k_B	Boltzmann sabiti	1.38×10^{-23}	J K^{-1}
n_s	2 BEG taşıyıcı yoğunluğu		m^{-2}
E_g	Bant enerji aralığı		meV
k	Elektron dalga vektörü		m^{-1}
m^*	Elektronun etkin kütlesi		kg
P_{PE}	Piezoelektrik polarizasyon		C m^{-2}
P_{DP}	Doğal polarizasyon		C m^{-2}
\hbar	İndirgenmiş Planck sabiti	1.054×10^{-34}	J s
E_F	Fermi Enerji seviyesi		eV
Ξ	Deformasyon potansiyeli		eV

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1.1 (a) Fremont Street Experince üzerinde, 457 metre uzunluğundaki dünyanın en büyük görüntü LED'i. (b) Dev televizyon ekranları. (c)Yeni trafik lambaları.	2
Şekil 1.2 GaN ve GaAs temelli transistörlerin frekans ve güç aralıklarına göre kullanım alanları.....	4
Şekil 1.3 Si, GaAs ve GaN tabanlı güç transistörleri için çeşitli aygıt parametrelerinin karşılaştırılması.....	5
Şekil 1.4 DNA'nın algılanmasında kullanılan sensörden bir şematik kesiti.....	7
Şekil 2.1 (a) Wurtzite, (b) zincblende ve (c) NaCl (kaya tuzu) yapıların şematik gösterimi.....	13
Şekil 2.2 Wurtzite metal nitrat yapısının şematik gösterimi (a , c ve u örgü parametreleri, b ($=uc$) en yakın komşu uzaklığı, b'_1 , b'_2 , b'_3 üç tip ikinci yakın komşu uzaklığı, α ve β atomlar arası açığı ifade etmektedir).	13
Şekil 2.3 Wurtzite ve zincblende yapılar için fonon dispersiyon eğrilerinin şematik gösterimi.....	18
Şekil 2.4 Wurtzite GaN'ta atomik titreşimler. Büyük atomlar Ga'u ve küçük atomlar N'i göstermektedir. X=(100), Y=(010) ve Z=(001) optiksel polarizasyon yönlerini göstermektedir: (a) genel dalga vektörü için, (b) merkez bölgesi için.	20
Şekil 2.5 Hegzagonal bulk GaN için hesaplanan fonon dispersiyon eğrisi ve fonon durum yoğunluğu [60].	21
Şekil 2.6 Noktasal kusurların şematik gösterimi.....	25
Şekil 2.7 Kenar dislokasyonu ve vida dislokasyonunun şematik gösterimi.	27
Şekil 2.8 Ga-yüzlü ve N-yüzlü GaN'ın wurtzite kristal yapısının şematik gösterimi	32
Şekil 2.9 Kutuplanmadan kaynaklı tabaka yük yoğunluğu ve zorlanma varken ve yokken Ga ve N yüzlü AlGaN/GaN heteroyapılarda kendiliğinden ve piezoelektrik kutuplanmanın yöneliminin gösterimi.	35
Şekil 3.1. Saçılma Mekanizmalarının şematik gösterimi	62
Şekil 3.2. Brilloun bölgesi merkezinde a-Akustik fonon b-Optik fonon.....	63

Şekil 3.3. Brillouin bölgesi sınırında $k = \pi/a$ a-Akustik fonon b-Optik fonon.....	63
Şekil 3.4 Boyuna akustik ve enine akustik fononlar için Brillouin bölgesinin (a) merkezinde ve (b) kenarında atomların yerdeğiřtirmesi.....	64
Şekil 3.5 Yüklü merkezlerin uzun mesafeli Coulomb potansiyelinin serbest taşıyıcıları saptırması.	73
Şekil 3.6 GaN/AlGaN gibi yaklaşık olarak aynı örgü sabitlerine sahip iki materyal arasındaki ara yüzeylerin şematik gösterimi.....	75
Şekil 4.1 $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ (örnek A) ve $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ (örnek B) örneklerin şematik gösterimi.	81
Şekil 4.2 $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ ve $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ heteroyapılara ait XRD sonuçları.	82
Şekil 4.3 (a) $AlGaN/AlN/GaN$ (örnek A), (b) $AlInN/AlN/GaN$ (örnek B) HEMT yapılarına ait AFM sonuçları.....	83
Şekil 4.4 $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ ve $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ heteroyapılar için tabaka taşıyıcı yoğunluğunun ve tabaka direncinin sıcaklığa baęlı grafięi.	84
Şekil 4.5 Polarizasyondan kaynaklı tabaka taşıyıcı yoğunluğunun alařım oranına baęlı grafięi.	85
Şekil 4.6 (a) $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$, (b) $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ heteroyapıların arayüzeyinde hesaplanan tabaka yük yoğunluğunun kendilięinden ve piezoelektrik polarizasyon bileřenlerinin alařım oranına baęlı grafięi.	87
Şekil 4.7 $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ heteroyapısı için teorik olarak hesaplanan ve ölçülen Hall mobilitelerin sıcaklığa baęlı karşılařtırılması.	88
Şekil 4.8. $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ heteroyapısı için teorik olarak hesaplanan ve ölçülen hall mobilitelerin sıcaklığa baęlı karşılařtırılması.	89
Şekil 4.9. A ve B örnekleri için hesaplanan iletkenlik potansiyel profilleri ve elektron dalga fonksiyon genlięinin uzaysal daęılımı (z eksenini yüzeyden başlamaktađır).	90
Şekil 4.10. $Al_{0.82}In_{0.18}N/GaN$ ve $Al_{0.82}In_{0.18}N/AlN/GaN$ yapıların şematik gösterimi.	93
Şekil 4.11 $Al_{0.82}In_{0.12}N/AlN/GaN$ heteroyapıları için HRXRD görüntüsü.....	94
Şekil 4.12 ($5 \times 5 \mu m^2$) (a) C örneęi, (b) D örneęi, (c) E örneęi, (d) F örneęi için AFM görüntüleri.	95
Şekil 4.13 Bütün numuneler için ölçülen tabaka taşıyıcı yoğunluğunun ve tabaka direncinin sıcaklığa baęlı grafięi.	96

Şekil 4.14 AlInN/AlN/GaN HEMT yapılarında, hesaplanmış maksimum tabaka elektron yoğunluğunun Al kompozisyonuna bağlı grafiği.	97
Şekil 4.15 C örneği için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen Hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.	99
Şekil 4.16 D örneği için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen Hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.	100
Şekil 4.17 E örneği için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.	101
Şekil 4.18 F örneği için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.	102
Şekil 4.19 Bütün numuneler için, hesaplanan iletkenlik potansiyel profilleri ve elektron dalga fonksiyon genliğinin uzaysal dağılımı.	103
Şekil 4.20 Δ , Λ/Δ ve düşük sıcaklık mobilitesinin AlN kalınlığına bağlı grafiği. ...	105
Şekil 4.21 AlInN/AlN/InGaN ve AlGaN/AlN/GaN HEMT yapılarına ait şematik gösterim.	107
Şekil 4.22 Bütün örnekler için (0002) etrafında elde edilen yansımalar	108
Şekil 4.23 (a) G , (b) H, (c) I ve (d) K örneklerinin AFM görüntüleri	109
Şekil 4.24 Bütün numuneler için ölçülen tabaka taşıyıcı yoğunlunun ve tabaka direncinin sıcaklığa bağlı grafiği.	110
Şekil 4.25 AlInN/AlN/InGaN/GaN ve AlGaN/AlN/GaN HEMT yapılarında, hesaplanmış maksimum tabaka elektron yoğunluğunun Al kompozisyonuna bağlı grafiği.	111
Şekil4.26 (a) G, (b) H, (c) I ve (d) K örnekleri için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen Hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması	114
Şekil 4.27. Bütün numuneler için, hesaplanan iletkenlik potansiyel profilleri ve elektron dalga fonksiyon genliğinin uzaysal dağılımı.	116

ÇİZELGE LİSTESİ

Tablo 1.1 Literatürde AlGaIn/GaN heteroyapılara ait bazı sonuçlar.....	9
Tablo 2.1 AlN, GaN ve InN için deneysel gözlenen yapısal parametreler [47].	15
Tablo 2.2 AlN, GaN ve InN için Elastik sabitleri, bulk modülü ve young modülü değerleri.	16
Tablo 2.3 Brillouin bölgesi merkezinde farklı tekniklerle hesaplanan wurtzite AlN, GaN ve InN'in optik fonon frekansları.....	19
Tablo 2.4 AlN, GaN ve InN için ısı genleşme katsayıları ve ısı iletkenlik değerleri.	23
Tablo 2.5 Safir, Si, SiC ve ZnO için örgü parametreleri, ısı genleşme katsayıları ve ısı iletkenlik katsayısı.	24
Tablo 2.6 GaN, InN ve AlN yarıiletkenlerinin kendiliğinden polarizasyon büyüklükleri, piezoelektrik ve dielektrik sabitleri.....	34
Tablo 3.1. Hesaplarda kullanılan GaN parametreleri.	78
Tablo 4.1 Örnek A ve B için düşük ve oda sıcaklık değerlerinde mobilite, tabaka taşıyıcı yoğunluğu, tabaka direnci ve AFM'den elde edilen rms değerleri.	84
Tablo 4.3 Bütün örnekler için düşük ve oda sıcaklık değerlerinde mobilite, taşıyıcı yoğunluğu, tabaka direnci ve AFM'den elde edilen rms değerleri.	109
Tablo 5.1 Bütün örnekler için düşük ve yüksek sıcaklıklarda mobilite, taşıyıcı yoğunluğu ve tabaka dirençleri.	119

ÖNSÖZ

Doktora çalışmamın her aşamasında engin bilgi ve tecrübelerini paylaşan, her konuda desteklerini esirgemeyen değerli danışmanım Doç. Dr. Ali TEKE'ye ve eş danışmanım Doç. Dr. Sibel GÖKDEN'e çok teşekkür ederim.

Bilkent Üniversitesi NANOTAM laboratuvarlarında büyütülen ve çalışmamın ilk kısmını oluşturan ilk iki örnek için ve bu örneklerle ait AFM sonuçları için Prof. Dr. Ekmel ÖZBAY ve ekibine çok teşekkür ederim. Gazi Üniversitesinden, ilk iki örneğin X-kırınımı tekniği ile yapısal analizlerinin ve Hall etkisi ölçümleri ile elektriksel özelliklerinin belirlenmesine olanak sağladığı için Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK ve ekibine teşekkür ederim. Virginia Commonwealth Üniversitesinde üretilen ve çalışmamın ikinci ve üçüncü kısmını oluşturan sekiz tane örneğin büyütülmesi ve bu örneklerle ait X-ışını kırınımı, Hall ölçümleri ve AFM sonuçları için Prof. Dr. Hadis MORKOÇ, Dr. Ümit ÖZGÜR ve çalışma arkadaşlarına çok teşekkür ederim.

Bu çalışma süresince desteklerini esirmeyen ve büyük sabır gösteren değerli eşime, dünyalar tatlısı oğluma ve destekleri için ailem ve arkadaşlarıma teşekkür ederim.

1. GİRİŞ

III-nitrat yarıiletkenler sahip oldukları fiziksel özelliklerden dolayı optoelektronik ve elektronik teknolojisinde birçok kullanım alanlarına sahiptir [1]. Bu yarıiletken materyaller (AlN, GaN ve InN) termodinamik dengede wurtzite yapıda kristallenir. Doğrudan bant aralığına sahip olan nitratların en önemli özelliklerinden biri AlGaIn, InGaIn, InAlN ve AlGaInN gibi üçlü ve dördü bileşiklerinin üretilmesidir. Bu bileşiklerin enerji bant aralıkları, 0.7 eV'den (InN), 3.4 eV (GaN) ve 6.1 eV'a (AlN) kadar elektromagnetik spektrumun yakın kızılötesi bölgesinden morötesi bölgeye kadar olan çok geniş bir dalgaboyu aralığını taramaktadır [2]. Bu özellik III-nitrat yarıiletkenleri, görünür ve morötesi bölgede çalışan ışık yayan diyotlar (LED), lazer diyotlar, fotodetektörler, optiksel modülatör ve anahtarlamalar gibi birçok optoelektronik aygıtın üretilmesinde ve geliştirilmesinde çok önemli bir yere koymaktadır. Yüksek parlaklığa sahip nitrat temelli LED'ler gelişmiş ülkelerde şimdiden birçok pratik uygulama alanı bulmuştur. Örneğin, reklam panolarında, trafik lamba ve işaretlerinde, stadyumlarda, alışveriş merkezlerinde ve büyük caddelerdeki düz ekran televizyonlarda nitrat temelli LED'lerin kullanılması güç tüketimi, maliyet ve verimlilik açısından mevcut kullanılan cihazlara göre birçok avantajlar sağlamaktadır. Morötesi (UV) bölgede ışınım yapan yüksek performanslı LED'ler ise nehir sularının ve endüstriyel su atıklarının temizlenmesi ve arıtılması gibi çevrenin korunması ile ilgili alanlarda da kullanılabilir. Ayrıca, düşük maliyetli, uzun ömürlü ve yüksek performanslı morötesi LED'ler fosfor yardımcı beyaz ışık kaynaklarında kullanılan floresans aydınlatma sistemlerine alternatif olarak iç ve dış aydınlatmalarda kullanılabilir. Görünür ve morötesi ışık kaynaklarının kullanım alanlarını tıptan, tarım ve spektroskopik ölçüm sistemlerine kadar genişletmek mümkündür. Örneğin, mavi ve morötesi LED'ler yüksek çıkış güçleri, düşük gürültüleri, nanosaniye altındaki sinyal pulsları ve yüksek frekans modülasyonları gibi çok önemli özelliklere sahip olmalarından dolayı zaman-çözümlü floresans ölçüm sistemlerde pahalı olan katı ve gaz lazerlerin veya lambaların yerini

alabilirler. GaN temelli LED'lerin uygulama alanlarından bazıları Şekil 1.1'de gösterilmektedir.



(a)



(b)



(c)

Şekil 1.1 (a) Fremont Street Experince üzerinde, 457 metre uzunluğundaki dünyanın en büyük görüntü LED'i. (b) Dev televizyon ekranları. (c)Yeni trafik lambaları.

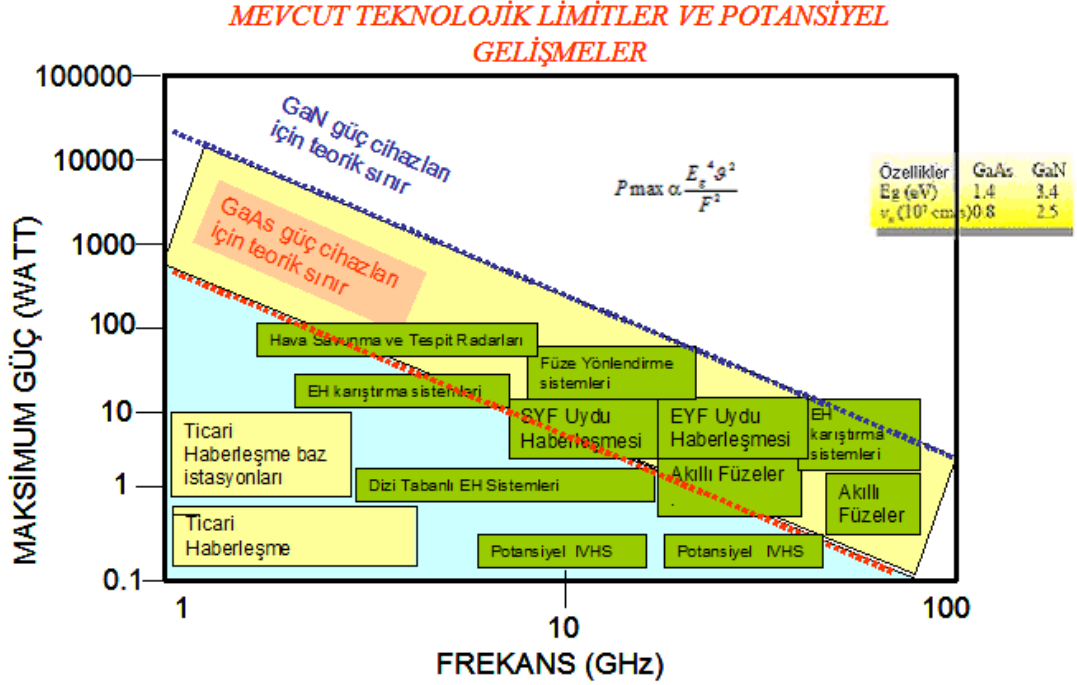
Yüksek yoğunluktaki optiksel okuma ve yazma teknolojisinde yarıiletken lazerler önemli bir yere sahiptirler. Çünkü çok fazla sayıdaki dijital verilerin depolanabilme kapasitesi kullanılan CD'nin kapasitesine bağlıdır. Bu kapasitenin miktarını belirleyen en önemli faktör kullanılan lazerin dalgaboyudur. Küçük dalgaboylarında yansımalar ve kırılmalar azalır ve optiksel depolama yoğunluğu dalgaboyunun tersinin karesi ile orantılı olarak artar. Nitrat temelli materyaller mavi ve morötesi dalgaboylarında ışınım yapacak yarıiletken lazerlere adapte edildiklerinde standart bir CD'ye yazılabilecek verinin yoğunluğu 50 Gb ve daha yukarı seviyelere çıkarılabilir. Film ve teknoloji sektörlerinin yaptıkları anlaşma gereğince DVD'lerin yerine nitrat temelli yazma ve okuma sistemlerine sahip olan ve "Blue-Ray" sistemi olarak adlandırılan bu yeni nesil kayıt teknolojisine geçilmiştir.

Jet teknolojisinde, otomobillerde ve kalorifer kazanlarında yakıtın daha verimli kullanılması ve temiz bir çevre için bu cihazların neden oldukları atıkların daha iyi kontrol edilmesi nitrat tabanlı yarıiletken malzemelerden üretilecek olan morötesi sensörler yoluyla sağlanabilir. Atmosferin 15-20 km'lik yükselti bölgesindeki ozon tabakası, güneşten gelen ışınların morötesi bölgesini (280 nm'den

küçük) büyük oranda soğurmasından dolayı yeryüzündeki UV ışımsal gürültü düzeyi son derece düşüktür. Dolayısıyla 250-280 nm dalgaboyu aralığında üretilecek olan UV dedektör (güneş-körü dedektörler) optiksel algılama özelliği oldukça yüksek olacaktır [3]. Bu nedenle bu dedektörler, düşman uçaklarının ve karadan-havaya, havadan-havaya, havadan-karaya balistik füzelerin fark edilmesinde ve tehdit altındaki uçağın ya da aracın erken uyarılmasını sağlayarak tehditin önlenmesinde çok önemli rol oynarlar. Bunun yanısıra, görünür-kör ve güneş-kör foto-dedektörler, UV astronomi çalışmalarında, uzaydan-uzaya güvenli iletişimde ve biyolojik etkilerin incelenmesinde de kullanım alanına sahiptirler.

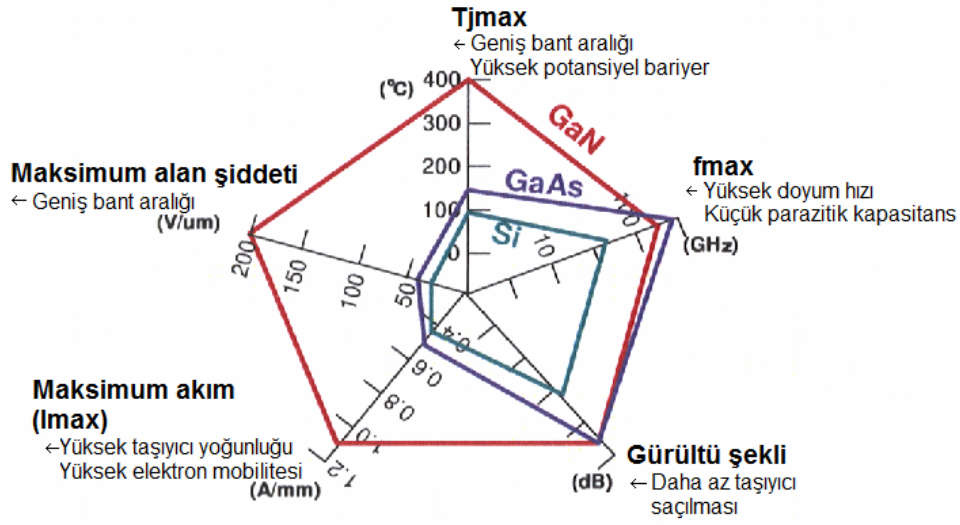
III-nitrat grubu yarıiletkenlerin yukarıda verilen sıradışı optiksel özelliklerinin ve buna bağlı geliştirilen optoelektronik uygulamalarının yanısıra, son zamanlarda elektronik teknolojisi için de yoğun olarak araştırılan malzeme gruplarından birisidir. Al(In)GaN/(In)GaN yüksek elektron mobiliteli transistör (HEMT) yapıların yüksek frekanslı ve yüksek güçlü mikrodalga uygulamalar için aranan geniş bant aralığına, iyi bir ısıl iletkenliğe, kendiliğinden ve piezoelektrik polarizasyon alanına sahip olması, HEMT yapıların askeri ve ticari alanda (elektronik gözetimlerde, yüksek hızlı iletişimlerde, gemi ve uçak radarlarında, uydu iletişimlerinde, telsiz üslerinde 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 1.2'de verilmiştir [4]. Şekilde görüldüğü gibi bir transistörün maksimum gücü kullanılan yarıiletkenin enerji bant aralığının dördüncü kuvveti ve sürüklenme hızının karesi ile doğru orantılıdır. Dolayısıyla, nitratların 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 1.2 GaN ve GaAs temelli transistörlerin frekans ve güç aralıklarına göre kullanım alanları.

Şekil 1.3’de ise, 0.5 μm kapı (gate) genişliğine sahip Si, GaAs ve GaN tabanlı güç transistörleri için çeşitli aygıt parametrelerinin karşılaştırılması verilmiştir [5]. Bu şekilden de görüldüğü gibi mikrodalga ya da milidalga iletim uygulamalarının yanı sıra Al(In)GaN/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 nitrat temelli transistörler silikon tabanlı metal-oksit yarıiletken (MOS) ve GaAs yapılar ile karşılaştırılabilir performans değerlerine sahiptir [5]. Ayrıca, şekilde görüldüğü gibi nitratların sahip oldukları büyük bant aralığından dolayı, birim alandaki akım yoğunlukları ve maksimum alan şiddetleri diğer yarıiletken aygıtlara göre oldukça büyüktür.



Şekil 1.3 Si, GaAs ve GaN tabanlı güç transistörleri için çeşitli aygıt parametrelerinin karşılaştırılması.

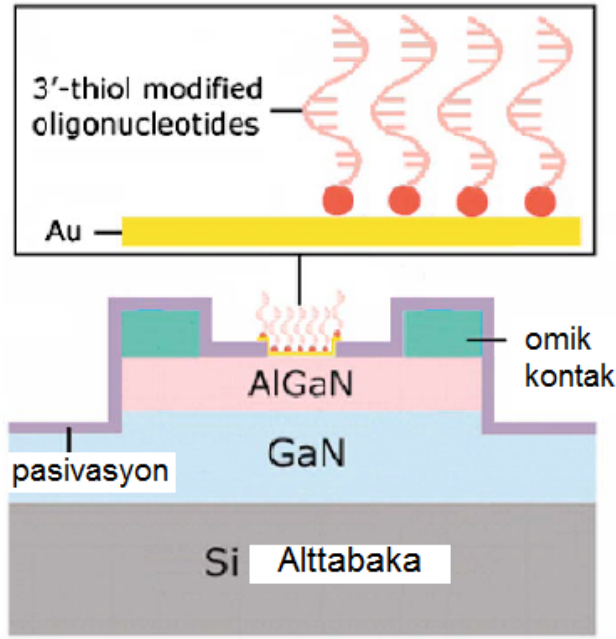
Nitratların sahip oldukları temel parametrelerinin belirlediği bu teorik limitlerin literatürde ne oranda gerçekleşebildiğine baktığımızda yine oldukça etkileyici sonuçlarla karşılaşmaktayız: Örneğin, SiC taban kristali üzerine kapı uzunluğunun $0.45\mu\text{m}$ olduğu yüksek güçte GaN temelli modülasyon (seçici) katkılı alan etkili transistör (MODFET) yapılarından $125\mu\text{m}$ genişliğinde üretilen cihazın 10 GHz'deki güç yoğunluğu 6.8 W/mm ve toplam gücü 4 W olarak ölçülmüştür [6]. GaN'ın kullanıldığı MODFET'ler ile ilgili özellikle X-bandında ve daha yüksek frekanslarda yapılan diğer çalışmalarda daha da kayda değer sonuçlar elde edilmiştir. HRL (Hughes Research Laboratories) laboratuvarlarındaki çalışmalarda 10 GHz'de 1 mm genişliğindeki cihazda görülen toplam güç düzeyi 6.3 W olarak ölçülmüştür. Daha çok ilgi çekici durum ise 0.1mm genişliğindeki cihazdan 6.5 W olarak beklenen gücün ısısal olarak sınırlandırılmamasıdır. 10 GHz'de 11 dB'lik bir güç kazancında 0.85 dB gürültü olması bir başka önemli veri olarak değerlendirilebilir [7]. Çeyrek mikronluk kapı uzunluğuna sahip bu cihazlarda kanal (drain) kırılma voltajları 60 V civarındadır. Bu değer de FET transistörün performansının oldukça yüksek olduğunun bir göstergesidir.

Benzer olarak Wakejima ve arkadaşları, yine GaN tabanlı 48 mm genişliğinde Alan modülasyon tabaka (FP) - Alan etkili transistör (FET)'den 53 V

akaç(drain)-besleme voltaj değerinde 230 W çıkış gücü elde etmişlerdir. Bu yükselteç 416 W gibi çok yüksek, sürekli çıkış gücü vermektedir [8]. Atma modunda çalıştırılan tek-paketli bir yükselticiden 2.14 GHz'de 758 W kadar bir doyum çıkış gücü elde edilmiştir [9]. İki GaN temelli FET çipli C-bandı yüksek güç yükselticisinden ise 5.0 GHz'de 11.9 dB çizgisel kazançlı ve %35 güç-eklenmiş verimli (PAE) 208 W değerinde sürekli modda bir çıkış gücü elde edilmiştir [10]. Yine 0.2 μ m uzunluğunda, 6.3 mm genişliğinde girintili-kapıya sahip Ka-bandı yüksek güç yükselticisi olarak tasarlanan GaN temelli FET tipi transistör de ise 26 GHz'de 5.4 dB çizgisel kazançlı ve % 21.3 PAE'li 20.7 W değerinde sürekli modda bir çıkış gücü sergilemiştir [11]. Yoshida ve arkadaşları, 2009 yılında yapmış oldukları çalışmada silikon alttabaka üzerine büyütülen AlGaIn/GaN FET transistörlerini kullanarak ürettikleri monolitik mikrodalga tümleşik devreler (MMIC) genişbant güç yükselticilerinden 75-81 GHz bandında 5 dB kazançlı 12 dBm çıkış gücü elde etmişlerdir [12]. Okamoto ve arkadaşları ise ürettikleri GaN tabanlı yükselticiden C-bandında 5 GHz'de 11 dB lineer kazançla sahip 171 W cw (continuous wave) çıkış gücü elde etmişlerdir. Ürettikleri bu aygıttan, aynı zamanda 50V akaç voltajında %38 civarında güç-eklenmiş verimi elde etmişlerdir [13]. Kobayashi ve arkadaşları ise, S- C-bandında tasarladıkları AlGaIn/GaN MMIC ile -30 derecede, 15 V-400 mA lik bir güç besleme aralığında ve 2 W doyum çıkış gücünde, 0.25-0.45 dB gürültü düzeyinin altında bir düşük güç yükselticisi üretebilmişlerdir [14].

Kimyasal ve biyolojik sensörler çok çeşitli çevresel ve biyolojik gazların ve sıvıların analizlerinde kullanılmaktadır. Biyolojik belirleyicileri ölçmek için genelde gaz kromatografisi, kimyasal ışım, seçilmiş iyon akış tüpü ve kütle spektroskopisi gibi gelişmiş fakat aynı zamanda pahalı ve hacimce çok büyük olan farklı yöntemler kullanılmaktadır. Al(In)GaIn/GaN HEMT yapılarında iletken taşıyıcıların bulunduğu iki boyutlu elektron gazı (2DEG) kanalı yüzeye çok yakın olduğundan dolayı yüzeydeki analitik soğurulmalara son derece hassastır. Bu yüzden HEMT sensörler çeşitli gazların, iyonların, pH değerlerinin, proteinlerin ve DNA'nın algılanmasında kullanılabilir [15,16]. Kang ve arkadaşları glikozun, böbrek belirteçlerini yaralayan moleküllerin, prostat kanserinin ve biyolojik alanda ilgi duyulan diğer genel maddelerin seçici algılanması için potansiyel kullanım alanı

bulunan Al(In)GaN/GaN HEMT yüzeylerinin fonksiyonlaşması üzerine geniş bir derleme çalışması yapmıştır [17]. Yapılan çalışmalara bir örnek Şekil 1.4 ile verilebilir. Bu şekil DNA'nın algılanmasında kullanılan AlGaN/GaN temelli biyolojik bir sensörü göstermektedir. Bir diğer çalışmada Chu ve arkadaşları, insan sağlığına ve çevreye negatif etkileri olduğu bilinen iç salgı bezi bölücülerin biyolojik belirteci olan vitellogenin'nin algılanmasında AlGaN/GaN HEMT'ler kullanmıştır [18].



Şekil 1.4 DNA'nın algılanmasında kullanılan sensörden bir şematik kesiti.

Yüksek performanslı transistör uygulamalarında büyütme ve fabrikasyon süreçleri önemli bir yer tutmaktadır. Büyütülen transistör yapıların istenilen kalitede olması, bu uygulamalara yönelik optimizasyonun ilk aşamasını oluşturmaktadır. Fabrikasyon aşaması olan ikinci aşama ise kapı uzunluğu, dielektrik pasivasyon ve kontak konfigürasyonları gibi birçok önemli dışsal parametrelerin de optimize edilmesini zorunlu kılar. Bu iki sürece paralel olarak yürütülmesi gereken üçüncü aşama ise yüksek yapısal ve elektriksel kalitede üretilen iki-boyutlu transistör yapıların bariyer tabakası ve kuantum kuyusu gibi tasarım parametrelerinin optimizasyonudur. Bu çalışmada üçüncü aşama üzerinde yoğunlaşarak yüksek kalitede büyütülmüş farklı yapısal tasarımlara sahip

Al(In)GaN/AlN/(In)GaN heteroeklem yapıların mobilite, taşıyıcı yoğunluğu ve tabaka direnci gibi temel iletim özellikleri, analitik taşıma modellerinin deneysel sonuçlara uygulanması suretiyle aydınlatılmaya çalışılmıştır.

Al(In)GaN/AlN/(In)GaN heteroeklem yapılarda elektron mobilitesi anahtar parametrelerden biridir. Elektronların uygulanan elektrik alana karşı kazandıkları hız olarak bilinen elektron mobilitesi, elektronların yapı içerisinde kusurlar, iyonlar veya fononlarla etkileşmelerinden dolayı bazı saçılmalara maruz kalarak bu saçılmalar tarafından sınırlandırılırlar. Düşük alan elektron mobilitesi ve onu sınırlayan etkiler üzerine literatürde birçok çalışma yapılmıştır. Literatürde en çok çalışılan yapılar arasında olan AlGaIn/GaN HEMT yapılar Asif Khan ve arkadaşları ile çalışılmaya başlanmıştır [19]. Smorchkova ve arkadaşlarının yaptığı çalışmada, plazma-yardımlı MBE ile büyütülen Al_{0.37}Ga_{0.63}N/GaN yapıda AlN ara tabakası kullanarak $2.15 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 2-boyutlu elektron gaz (2DEG) yoğunluğu ve 1500 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ mobilite değeri elde etmişlerdir. AlN ara tabakasının hem taşıyıcı yoğunluğunun artmasına hem de taşıyıcıların daha iyi hapsolmesine katkı sağladığı için tabaka dirençlerinde de önemli iyileşmeler gözlenmiş olup tabaka direnci $194 \ \Omega/\square$ değerindedir [20]. Jeganathan ve arkadaşlarının yaptığı çalışmada, plazma-yardımlı MBE tekniği ile Si katkılı GaN kanalın üzerine AlN bariyer tabakası büyütülerek 2DEG tabaka taşıyıcı yoğunluğu için $4.33 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ gibi yüksek bir değer elde etmişlerdir. Bu değere karşılık gelen mobilite $770 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve tabaka direnci $188 \ \Omega/\square$ değerindedir [21]. Makoto ve arkadaşlarının yaptığı çalışmada Al_{0.26}Ga_{0.74}N/AlN/GaN HEMT yapılarda 0'dan 1.5 nm'ye (0, 0.5, 0.75, 1.0, 1.25 and 1.5 nm) değişen kalınlıklarda AlN ara tabakası kullanmıştır. AlN kalınlığı 1 nm iken 2DEG yoğunluğu $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, maksimum mobilite değeri $1770 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve minimum tabaka direnci $365 \ \Omega/\square$ olarak elde edilmiştir [22]. Cao ve Jena, MBE tekniği ile büyütülen ultra ince AlN/GaN heteroyapılarda AlN kalınlığını 2nm'den 7 nm'ye değiştirerek tabaka taşıyıcı yoğunluğunun $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 'den $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 'ye arttığını gözlemlemişlerdir. Bu çalışmada mobilite $1000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değerinde iken tabaka taşıyıcı yoğunluğu $1-3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ve tabaka direnci $170 \ \Omega/\square$ gibi çok düşük bir değerdedir. Mobilitenin, düşük sıcaklıklarda arayüzey pürüzlülüğü ve yüksek

sıcaklıklarda optik fonon tarafından sınırlandırıldığı görülmüştür [23]. Literatürde AlGaIn/GaN heteroyapılara ait bazı sonuçlar Tablo 1.1’de verilmiştir.

Tablo 1.1 Literatürde AlGaIn/GaN heteroyapılara ait bazı sonuçlar.

Çalışan gruplar	Mobilite ($\text{cm}^2/\text{V.s}$) ($T=300\text{ K}$)	2DEG yoğunluğu (cm^{-2}) $\times 10^{13}$	Tabaka direnci (Ω/\square)
Gaksa ve arkadaşları [24]	2000	1	312
Frayssinet ve arkadaşları [25]	60000	2.4	43.4
Smorchkova ve arkadaşları [20]	1500	2.15	194
Manfra ve arkadaşları [26]	75000	1.5	55.5
Jeganathan ve arkadaşları [21]	770	4.33	188
Manfra ve arkadaşları [27]	167000	0.91	41
Marianne ve arkadaşları [28]	2050	1	305
Gurusinghe ve arkadaşları [29]	1500	1	416
Makoto ve arkadaşları [30]	2100	1	297
Makoto ve arkadaşları [22]	1770	1	365
Wang ve arkadaşları [31]	1460	1.54	277
Xiaoliang ve arkadaşları [32]	2215	1.044	270
Ma Zhi ve arkadaşları [33]	1806	1.1	314.5
Elhamri ve arkadaşları [34]	2100	0.92	323
Cao ve Jena [23]	1000	3	208
Kelson ve arkadaşları [35]	1180	9.5	557

Yapılan bu çalışmalara rağmen daha düşük tabaka direnci elde etmek için daha yüksek taşıyıcı yoğunluğu ve/veya mobilitesi elde edilmelidir. Polarizasyon kaynaklı yük yoğunluğunu arttırmak ve bu taşıyıcıların kuyu içerisinde daha iyi

hapsolmalarını sağlamak için bariyer olarak tasarlanan AlGaIn tabakasındaki alüminyum oranının artırılması gerekmektedir. Ancak, AlGaIn bariyerinde alüminyum oranı %30'u geçtiğinde örneklerin tabaka kalitesi kötüleşmekte ve elektron mobilitesinde önemli bir azalma görülmektedir. AlGaIn bariyer tabakalı HEMT yapılarına alternatif olarak ilk kez Kuzmik, GaN temelli HEMT yapılarının performansını geliştirmek için AlGaIn bariyer yerine AlInN bariyer kullanarak başarılı sonuçlar elde etmiştir [36]. AlInN bariyer kullanılmadaki avantaj, alaşım oranının ayarlanması durumunda, GaN ile örgü ve polarizasyon uyumlu heteroyapıların elde edilebilmesidir. In oranı %18 olduğu zaman AlInN ile GaN arasında örgü uyumu sağlanmaktadır. Bu alaşım oranında polarizasyon yükü, herhangi bir gerilme olmadığı için, sadece kendiliğinden polarizasyondan kaynaklanır ve piezoelektrik polarizasyon sıfır olur. Aynı zamanda AlInN bariyerli HEMT'lerin, AlGaIn bariyer tabakasından daha yüksek taşıyıcı yoğunluğu sağlayacağı öngörülmektedir [37]. AlInN bariyer kullanıldığında taşıyıcı yoğunluğu artacağı için aynı mobilite değerine sahip olan AlGaIn göre AlInN tabanlı malzemelerin iletkenliği daha yüksek olacak ve bu durum yüksek frekanslı ve yüksek güçte transistörlerin üretilmesine imkan sağlayacaktır. Bunun yanında AlN ile InN farklı büyütme sıcaklıkları gerektirdiğinden AlInN büyütülmesi zordur. Ayrıca, AlInN oluşumunda kompozisyon değişiminin kontrolü de oldukça zordur. Buna rağmen literatürde gerek bulk AlInN gerekse AlInN heteroeklem ve kuantum kuyulu yapıların başarılı ve yeterli kalitede büyütülmesi, çalışmaların hızlı bir şekilde arttığını göstermektedir. Katzer ve arkadaşları, MBE tekniği ile büyütülen InAlN/GaN heteroyapısı için $1.96 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ taşıyıcı yoğunluğunda ve $980 \text{ } \Omega/\square$ tabaka direnci elde etmişlerdir [38]. Gonschorek ve arkadaşları, katkısız ve yaklaşık örgü uyumlu AlInN/AlN/GaN HEMT yapıdan $1170 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ mobilite değeri, $2.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 2DEG yoğunluğu ve $210 \text{ } \Omega/\square$ tabaka direnci elde etmişlerdir. [39]. Hiroki ve arkadaşları, $\text{Al}_{0.89}\text{In}_{0.11}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapısında $1200 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ mobilite değerine karşılık $198 \text{ } \Omega/\square$ tabaka direnci elde etmişlerdir [40]. Aynı kişiler MOVPE tekniği ile büyüttükleri InAlN/AlN/GaN HEMT yapısında mobilitiyi $1100 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, taşıyıcı yoğunluğunu $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ve tabaka direncini $281 \text{ } \Omega/\square$ olarak elde etmişlerdir [41]. Jinqiao ve arkadaşları MOCVD tekniği ile büyütülen AlInN/AlN/GaN heteroyapılarda In alaşım oranını %20'den %12'ye azaltarak

2DEG yoğunluğunun $0.9 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ den $1.64 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ yükseldiğini ve mobilitenin $1600 \text{cm}^2/\text{V.s}$ 'den $1410 \text{cm}^2/\text{V.s}$ 'ye düştüğünü gözlemlemişlerdir. In alaşım oranını %20 iken tabaka direnci $434 \Omega/\square$, %12 iken $270 \Omega/\square$ değerindedir [42].

AlGaN bariyerine alternatif olarak gösterilen AlInN bariyerli çalışmalardan sonra GaN kuyusunun yerine InGaN kuyusu çalışılmaya başlanmıştır. Ancak literatürde InGaN kuyulu çalışmalar oldukça azdır. Naoya ve arkadaşları MOCVD yöntemiyle safir üzerine büyütülen 3 nm kalınlıklı InGaN kanallı AlGaN/InGaN/GaN HEMT yapısında $1.31 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ taşıyıcı yoğunluğu, $1110 \text{cm}^2/\text{V.s}$ mobilite ve bu değerlere karşılık $429 \Omega/\square$ tabaka direnci elde etmişlerdir [43]. Jinqiao ve arkadaşları ise katkısız $\text{In}_{0.18}\text{Al}_{0.82}\text{N}/\text{AlN}/\text{In}_{0.04}\text{Ga}_{0.96}\text{N}$ HFET yapısında $820 \text{cm}^2/\text{V.s}$ mobilite değerine karşılık, $2.12 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 2DEG yoğunluğu ve $359 \Omega/\square$ tabaka direnci elde etmişlerdir [44].

Bu doktora tezinin ilk aşamasında Bilkent Üniversitesi Nano Teknoloji Araştırma Merkezi'nde (NANOTAM) üretilen yüksek kaliteli farklı bariyerli AlGaN/AlN/GaN ile AlInN/AlN/GaN HEMT yapılarının iletim özelliklerinin sıcaklığa bağlı Hall ölçümleri karşılaştırılmıştır. Tezin ikinci aşamasında ise Virginia Commonwealth Üniversitesinde üretilen, AlInN/GaN HEMT yapıları daha detaylı araştırmak için heteroeklem arayüzüne farklı kalınlıklarda AlN ara tabaka büyütülmüş ve 4 örnek incelenmiştir. Tezin üçüncü aşamasında ise yine Virginia Commonwealth Üniversitesinde, farklı bariyer ve kanallı AlInN/AlN/InGaN, AlGaN/AlN/GaN HEMT yapıları üretilmiş ve iletim üzerine etkilerini araştırılmıştır.

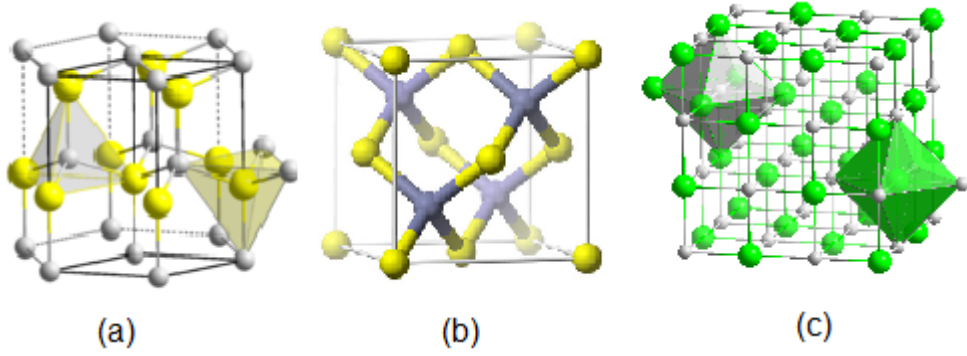
2. NİTRİTLERİN TEMEL FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ

Nitrat temelli aygıtların performanslarının artırılması ve buna bağlı olarak da tasarım parametrelerin optimizasyonu için AlN, GaN ve InN yarıiletkenlerin temel bazı fiziksel özelliklerinin bilinmesi son derece önemlidir. Bu bölümde, AlN, GaN ve InN yarıiletkenlerin kristal yapılarından, mekanik özelliklerine, ısı iletkenlik ve genleşme katsayılarından, optiksel özelliklerine kadar birçok fiziksel özellikleri verilecektir. Bunların yanı sıra nitrat temelli yapılarda gözlenen kusurlardan ve dislokasyonlardan bahsedilecek ve ardından da kutuplanma ve elektriksel özelliklerden detaylı bir şekilde bahsedilecektir.

2.1 Kristal Yapısı

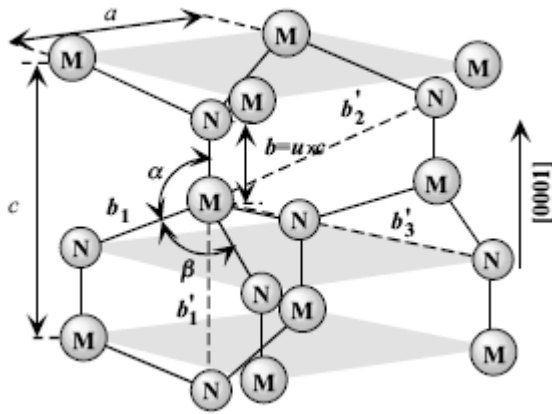
III-nitrat yarıiletkenler, wurtzite, zincblende ve NaCl (kaya tuzu) yapıda kristalleşirler (Şekil 2.1). AlN, GaN, InN yapıların NaCl yapıda kristalleşebilmesi için oldukça yüksek dış basınç gerekmektedir. GaN ve InN zincblende yapı ise sadece Si, SiC, MgO, GaAs gibi kübik alt tabakalar üzerinde heteroepitaksiyel büyütme ile kararlı olabilir. AlN, GaN, InN bulk yapılar için termodinamik olarak en kararlı yapı hegzagonal yapı olan wurtzite'dir. Wurtzite 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 [45]. Wurtzite ve zincblende arasında hesaplanan enerji farkı ΔE_{W-ZB} , AlN için -18.41 meV/atom, GaN için -9.88 meV/atom ve InN için -11.44 meV/atom'dur. Enerji farkının küçük olmasına rağmen wurtzite yapının zincblende ve kaya tuzu yapılarına göre kristallenmesi termodinamik açıdan daha uygundur.

Wurtzite 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.



Şekil 2.1 (a) Wurtzite, (b) zincblende ve (c) NaCl (kaya tuzu) yapıların şematik gösterimi.

Wurtzite 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°) wurtzite yapıda en yakın komşu sayısı 4 ve ikinci en yakın komşu sayısı 12'dir. Wurtzite yapı a ve c örgü parametresine sahip olup ideal bir wurtzite yapı için $c/a = 1.633$ değerini alır. Bu yapı için bir diğer parametre ise anyon ve kation arasındaki bağ uzunluğu b 'nin (veya en yakın komşular arası bağ uzunluğu) c 'ye oranı olan u parametresi olup ideal bir wurtzite yapı için $u = 0.375$ değerini alır. Şekil 2.2'de wurtzite yapı için örgü parametreleri, birinci yakın komşuluk, ikinci yakın komşuluk ve atomlar arası açılar gösterilmiştir.



Şekil 2.2 Wurtzite metal nitrat yapısının şematik gösterimi (a, c ve u örgü parametreleri, $b (=uc)$ en yakın komşu uzaklığı, b_1, b_2, b_3 üç tip ikinci yakın komşu uzaklığı, α ve β atomlar arası açığı ifade etmektedir).

Tüm wurtzite III-nitratlarda deneysel olarak gözlenen c/a oranları ideal değerlerden daha küçüktür. İdeal değerlerden bu sapmanın sebebi olarak iki faktör dikkate alınabilir: c/a oranının veya u değerinin değişimi. Burada c/a oranı ile u parametresi arasında güçlü bir korelasyon olduğu vurgulanmaktadır. c/a oranı azaldığında dört tetrahedral uzaklığı hemen hemen sabit tutmak için tetrahedral açıların bozulumu yoluyla u parametresi artar. Eşit bağ uzunluğunu korumak için aşağıdaki ilişkinin sağlanması gerekir.

$$u = \frac{1}{3} \frac{a^2}{c^2} + \frac{1}{4} \quad (2.1)$$

c doğrultusundaki en yakın komşuluk bağ uzunluğu b ve c doğrultusu dışında olan en yakın komşuluk bağ uzunluğu b_1 denklem (2.2)'de verildiği şekilde hesaplanabilir.

$$b = cu \quad \text{ve} \quad b_1 = \sqrt{\frac{1}{3}a^2 + \left(\frac{1}{2} - u\right)^2 c^2} \quad (2.2)$$

Bu en yakın komşuluklara ek olarak Şekil 2.3'de görüldüğü gibi b'_1 (bir tanesi c doğrultusunda) b'_2 (6 tane) ve b'_3 (3 tane) 3 tip ikinci en yakın komşuluk daha vardır ve;

$$b'_1 = c(1-u), \quad b'_2 = \sqrt{a^2 + (uc)^2} \quad \text{ve} \quad b'_3 = \sqrt{\frac{4}{3}a^2 + c^2 \left(\frac{1}{2} - u\right)^2} \quad (2.3)$$

şeklinde ifade edilir. Bağ açıları α ve β ise;

$$\alpha = \pi/2 + \arccos \left[\left(\sqrt{1 + 3(c/a)^2 (-u + 1/2)^2} \right)^{-1} \right],$$

$$\beta = 2 \arcsin \left[\left(\sqrt{4/3 + 4(c/a)^2 (-u + 1/2)^2} \right)^{-1} \right] \quad (2.4)$$

denklemleri ile verilir.

Kristal örgü parametresi genellikle oda sıcaklığında yüksek çözünürlü X-ışını kırınım (HRXRD) tekniği ile belirlenir. Üçlü veya dörtlü bileşiklerde bu teknik aynı zamanda kompozisyon oranının belirlenmesinde kullanılır. Bununla beraber, epitabakalar yabancı alttabakalar üzerine büyütüldüğünde zorlamalar, örgü

parametresi hesaplarına dahil edilmelidir. Örgü parametresi, (i) serbest elektron yoğunluğu, (ii) yabancı atom ve kusurların yoğunluğu, (iii) dış zorlamalar (örnek olarak alttabanın neden olduğu zorlamalar), (iv) sıcaklık gibi faktörlere bağlıdır [46]. Tablo 2.1’de AlN, GaN ve InN için deneysel olarak gözlenen örgü parametreleri, en yakın ve ikinci yakın komşuluk uzaklıkları ve bağ açıları verilmiştir [47]. 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 1.634 ve 0.377 olarak ölçülmüş olup ideal değere yakındır. Diğer taraftan c/a oranı 1.606 ve u değeri 0.382 olarak ölçülen AlN ideal değerlerden kayda değer bir sapma göstermektedir. İncelenen örneklerdeki homojenlik, zorlama ve bunun kısmi gevşemesi ve yüksek konsantrasyonlu yapısal kusurların farklılıklarından dolayı literatürde Tablo 2.1 de verilen değerlerden farklı değerler de bulunmaktadır [48-53].

Tablo 2.1 AlN, GaN ve InN için deneysel gözlenen yapısal parametreler [47].

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 Mekanik Özellikleri

Materyallerin mekanik özellikleri sertlik, sağlamlık, piezoelektrik sabitleri ve gerilme gibi çeşitli kavramlar ile ilişkili olması açısından çok büyük önem taşır. Hekzagonal kristallerde C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} ve C_{44} olmak üzere beş bağımsız elastik sabit vardır. C_{11} ve C_{33} elastik sabitleri sırasıyla [1000] ve [0001] yönlerinde boyuna moda karşılık gelir. C_{44} ve $C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2$ elastik sabitleri sırasıyla [0001] ve [1000] yönlerinde yayılan enine modların ses hızından belirlenebilir. C_{13} elastik sabiti ise [0011] gibi daha az simetrik olan yönde yayılan moda karşılık gelir. Elastik sabitleri ile ilgili olan bulk modülü B ;

$$B = \frac{(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2}{C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}} \quad (2.5)$$

denklemleri ile verilir. Young's modülü E ise;

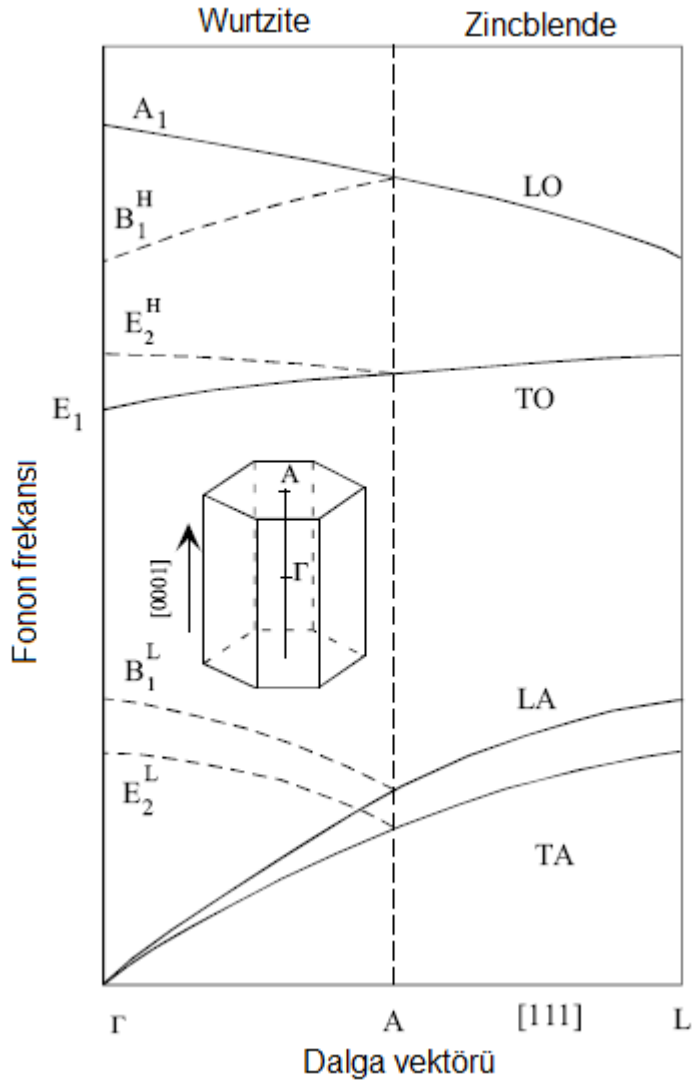
$$E = 3B/(1 - 2\nu) \quad (2.6)$$

eşitliği ile verilir. Burada $\nu = C_{13}/(C_{11} + C_{12})$ olup Poisson oranıdır. Tablo 2.2'de AlN, GaN ve InN için elastik sabitleri, bulk modülü ve young modülü değerleri verilmiştir [54].

Tablo 2.2 AlN, GaN ve InN için Elastik sabitleri, bulk modülü ve young modülü değerleri.

	AlN	GaN	InN
C_{11}	396	367	223
C_{12}	137	135	115
C_{13}	108	103	92
C_{33}	373	405	224
C_{44}	116	95	48
B	207	202	141
E	295		

III-nitrat yarıiletkenlerin yüksek ısı iletkenliğine sahip olmasından dolayı termal özelliklerin anlaşılması titreşim modlarının bilinmesini gerektirir [55]. Nitratlarda kızılötesi yansıma (Infrared Reflection) ve Raman Spektroskopisi, merkez bölgesi ve sınır bölgesi fonon modlarının belirlenmesinde kullanılırlar. Nitratların wurtzite kristal yapısı C_{6v}^4 simetrisine sahip olduğundan grup teorisi Γ bölge merkezinde sekiz tane fonon normal modlarını öngörür $2A_1, 2E_1, 2B_1, 2E_2$. A_1 ve B_1 modları c eksenini boyunca atomik yerdeğiştirme, E_1 ve E_2 modları ise c eksenine dik (taban düzlem) atomik yerdeğiştirmeyi verir. A_1 ve E_1 kolları Raman ve Infrared'in her ikisi için aktif, E_2 kolları sadece Raman-aktif, ve B_1 ise aktif değildir (sakin mod). Bunlar arasında A_1 ve E_1 mod kümesi akustik iken kalan altı mod kümesi optik kolları oluşturur. A_1 ve E_1 modlar boyuna ve enine olmak üzere iki bileşene ayrılır. Böylece optik modlar boyuna optik (LO) ve enine optik (TO), akustik modlar boyuna akustik (LA) ve enine akustik (TA) şeklinde ifade edilir. Şekil 2.3'te wurtzite ve zincblende yapıları için fonon dispersiyon eğrilerinin şematik gösterimi verilmektedir. Tablo 2.3'de ise Brillouin bölgesi merkezinde farklı tekniklerle hesaplanan wurtzite AlN, GaN ve InN'in optik fonon frekansları verilmektedir.



Şekil 2.3 Wurtzite ve zincblende yapılar için fonon dispersiyon eğrilerinin şematik gösterimi.

Tablo 2.3 Brillouin bölgesi merkezinde farklı tekniklerle hesaplanan wurtzite AlN, GaN ve InN'in optik fonon frekansları

Simetri	AlN (cm ⁻¹)	GaN (cm ⁻¹)	InN (cm ⁻¹)
A ₁ -TO	614 ^[a] , 612 ^[b]	533 ^[c] , 544 ^[b]	480 ^[d]
E ₁ -TO	673 ^[a] , 679 ^[b]	561 ^[c] , 566 ^[b]	476 ^[d]
A ₁ -LO	893 ^[a]	735 ^[c]	580 ^[d]
E ₁ -LO	916 ^[a]	743 ^[c]	570 ^[d]
E ₂ -(düşük)	252 ^[a] , 247 ^[b]	144 ^[c] , 185 ^[b]	187 ^[d]
E ₂ -(yüksek)	660 ^[a] , 672 ^[b]	569 ^[c] , 557 ^[b]	488 ^[d]
B ₁ -(düşük)	636 ^[b]	526 ^[b]	200 ^[d]
B ₂ -(yüksek)	645 ^[b]	584 ^[b]	540 ^[d]

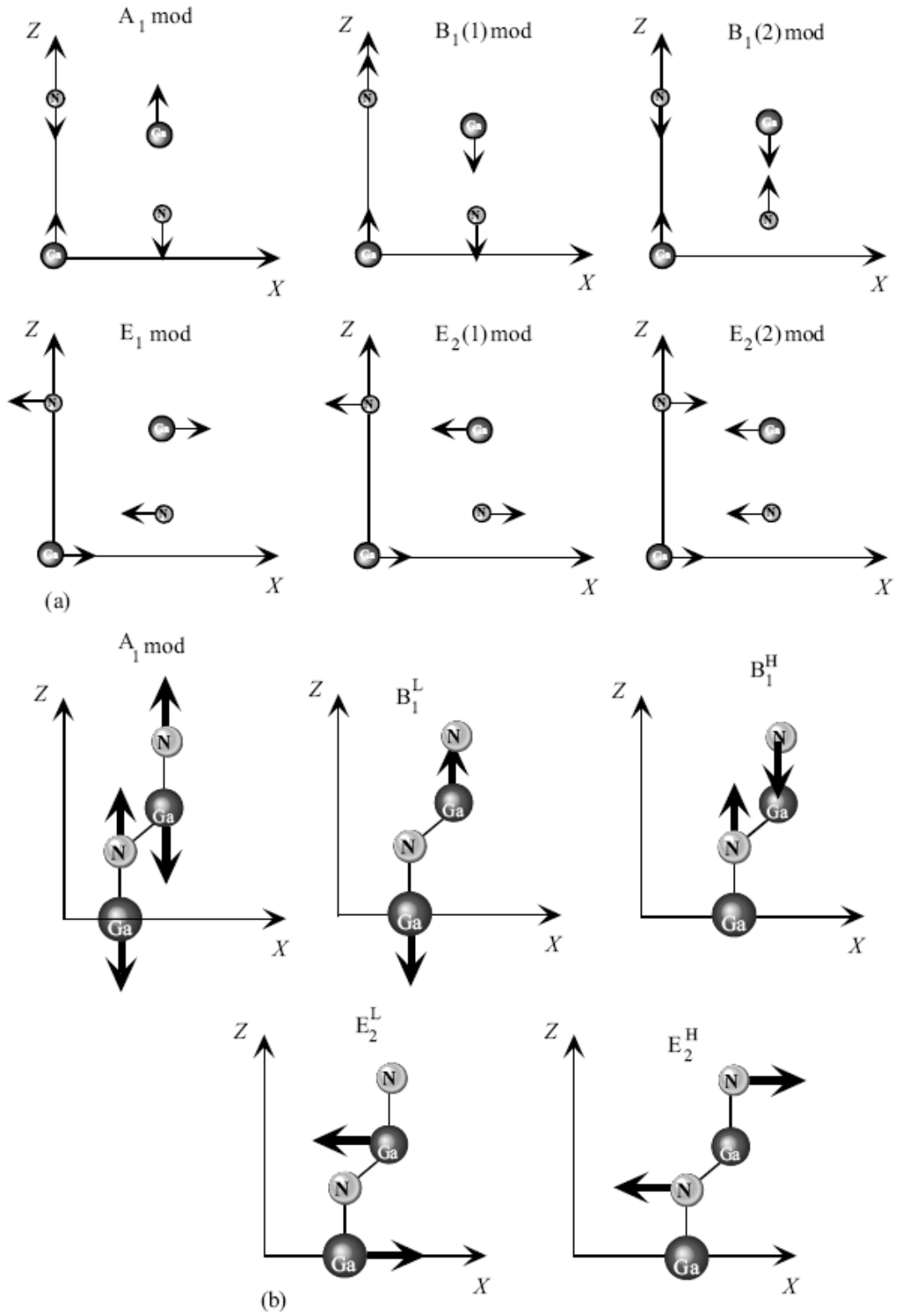
^[a]Raman scattering on sublimation recondensation AlN [56].

^[b]Calculated using first-principle total energy [57].

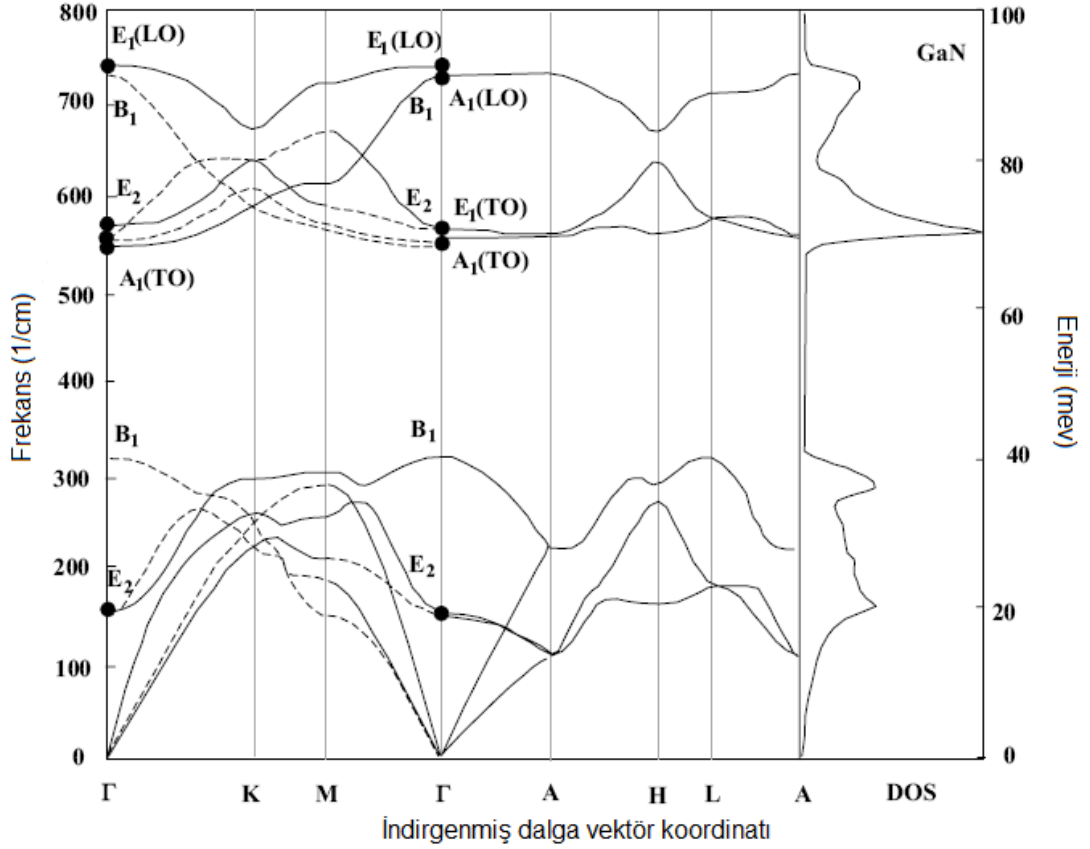
^[c]Raman scattering in Bulk GaN [58].

^[d]Raman study on InN grown on sapphire and calculation based on the pairwise interatomic potentials and rigid-ion Coulomb interaction [59].

Wurtzite simetrisi için akustik ve optik modlar Şekil 2.4'te gösterilmektedir. Şekil 2.5'te ise GaN için hesaplanan fonon dispersiyon eğrisi gösterilmektedir. Wurtzite ve zincblende yapılarda titreşim modlarının sayısı simetriye bağlı olarak başka bir yöntemle daha hesaplanabilir. Wurtzite durumunda birim hücreye düşen atom sayısı $s=4$ olduğundan toplamda $3s=3 \times 4=12$ tane mod vardır. Bunların 3 tanesi akustik mod (2 tanesi enine, 1 tanesi boyuna mod) ve $3s-3=9$ tanesi optik moddur (6 tanesi enine ve 3 tanesi boyuna mod).



Şekil 2.4 Wurtzite GaN'ta atomik titreşimler. Büyük atomlar Ga'u ve küçük atomlar N'i göstermektedir. X=(100), Y=(010) ve Z=(001) optiksel polarizasyon yönlerini göstermektedir: (a) genel dalga vektörü için, (b) merkez bölgesi için.



Şekil 2.5 Hegzagonal bulk GaN için hesaplanan fonon dispersiyon eğrisi ve fonon durum yoğunluğu [60].

2.3 Isıl Yapısı

Isıl genişleme bir Kelvin sıcaklık başına örgü parametresindeki değişimdir. Yarıiletkenlerin örgü parametreleri sıcaklığa bağlıdır ve $\Delta a/a$ (α_a) ve $\Delta c/c$ (α_c) ısı genişleme katsayısı ile ifade edilirler. Isıl genişleme katsayısı stokiyometre, kusurlara ve serbest taşıyıcı yoğunluğuna bağlıdır. GaN için 300-900 K sıcaklık aralığında yapılan ölçümlerde $\Delta a/a = 5.59 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ve 300-700 ve 700-900 sıcaklık aralıklarında sırası ile $\Delta c/c = 3.17 \times 10^{-6}$ ve $7.75 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ sonuçları elde edilmiştir [61]. AlN için $\Delta a/a = 4.2 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ve $\Delta c/c = 5.3 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [62] değerleri elde edilirken InN için 190-560 K arasında yapılan farklı 5 ölçümde sıcaklık arttıkça ısı genişleme katsayılarının ($\Delta a/a$ ve $\Delta c/c$) arttığı gözlenmiştir [63].

GaN ve diğer III-nitrat yarıiletkenler elektronik ve optoelektronik aygıtlarda yüksek güç/yüksek sıcaklıkta kullanılacağı zaman ısı iletkenlik, gerçekten büyük önem taşır. Kinetik özelliklerin belirlenmesinde önemli bir materyal özelliği olan ısı iletkenlik (κ) titreşim, dönme ve serbestlik elektronik derecesi ile belirlenir. Isı iletimi genelde fonon-fonon Umklapp (kaydırma) saçılması ve fonon saçılması (boşluklar, oksijen gibi safsızlıklar ve izotop (kütle) dalgalanmalar gibi nokta ve çizgisel kusurlar tarafından oluşan) ile belirlenir. Saf kristaller için fonon-fonon saçılması etkindir.

Saf katılarda ısı iletkenliğe örgünün katkısı (fonon saçılması) aşağıda verilen kinetik teoriden elde edilir.

$$\kappa_{\text{örgü}}(T) = \frac{1}{3} \vartheta_s C_{\text{örgü}}(T) L(T) \quad (2.7)$$

Burada T sıcaklık, ϑ_s ses hızı (yaklaşık olarak sıcaklıktan bağımsız), $C_{\text{örgü}}(T)$ ($C_{\text{örgü}}(T) \approx (T/\theta_D)^3 \theta_D$ Debye sıcaklığı) ısı sığası ve L(T) fonon ortalama serbest yol'dur. Yaklaşık bütün materyallerde ısı iletkenlik ilk önce sıcaklık ile artar, karakteristik sıcaklık T maksimuma ulaşır ve sonra azalır. Düşük sıcaklıklarda ortalama serbest yol epeyce uzun, kusurlar ve sonlu kristal boyutu gibi dışsal etkiler tarafından belirlenir. Isı iletkenliğe elektronik katkı taşıyıcı yoğunluğunun düşük olduğu ($\leq 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) durumlarda ihmal edilir.

GaN için ısı iletkenlik κ , sıcaklığın fonksiyonu olarak (25-360 K) 300 K'de Sichel ve Pankove tarafından $\kappa = 1.3 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ olarak ölçüldü [64]. Bu değer Slack'ın [65] saf GaN için öngördüğü $1.7 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerinden biraz küçük iken, Witek'in [66] hesapladığı $4.10 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerinden ise fazlaca küçüktür. Son zamanlarda ise oda sıcaklığında GaN için izotop saçılmalarının olmadığı farz edilerek ısı iletkenlik katsayısı $2.27 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ olarak hesaplandı. Bu değer yüksek kaliteli GaN örnekleri için ölçülen $2.3 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerine çok yakındır [67]. AlN için öngörülen ısı iletkenlik katsayısı κ oda sıcaklığında $3.19 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 'dir [65]. κ 300 K'de 2.5 [68] ve 2.85 [69] $\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ olarak ölçüldü.

Tablo 2.4’de AlN, GaN ve InN için XRD tekniği ile geniş sıcaklık aralığında alınan ısıl genleşme katsayısına ait sonuçlar ile bu yarıiletkenlere ait ısıl iletkenlik sonuçları verilmiştir.

Tablo 2.4 AlN, GaN ve InN için ısıl genleşme katsayıları ve ısıl iletkenlik değerleri.

	AlN	GaN	InN
$\Delta a / a (K^{-1})$	4.2×10^{-6}	5.59×10^{-6}	2.7×10^{-6}
$\Delta c / c (K^{-1})$	5.3×10^{-6}	3.17×10^{-6}	3.4×10^{-6}
$\kappa (W/cmK)$	2.85	2.3	0.8

2.4 Optiksel Özellikleri

Yarıiletkenlerin optiksel özellikleri içsel ve dışsal etkilere bağlıdır. İçsel optiksel geçişler iletkenlik bandındaki elektronlar ile valans bandındaki holler (deşik) arasında Coulomb etkileşim yolu ile oluşan eksitonik etkileri içerir. Eksitonlar serbest (hiçbir merkezle etkileşmiyorlarsa) ve bağlı (nötr veya iyonize olmuş sığ (shallow) safsızlık merkezleri, derin (deep) safsızlık merkezleri ya da yarıiletken örgüsündeki diğer kusurlar gibi çekici merkezlere bağlı) eksitonlar olarak sınıflandırılırlar. Düşük safsızlık konsantrasyonlu yüksek kaliteli numunelerde serbest eksitonlar taban durumu geçişlerine ilaveten uyarılmış durumlar sergileyebilirler. Bağlı eksitonların elektronik durumları yarıiletken materyale özellikle bant yapısına sıkıca bağlıdır. III-nitratların optiksel özelliklerinin belirlenmesi için optik soğurma, geçirgenlik, yansıma, fotoyansıma, spektroskopik elipsometre, elektrolüminesans, fotolüminesans, zaman çözümlü fotolüminesans, katodolüminesans, kalorimetrik spektroskopi gibi deneysel teknikler kullanılmaktadır. Tez konusu optiksel özellikleri kapsamadığından, optiksel özelliklerle ilgili detaylı bilgilere [1] nolu referanstan ulaşılabilir.

2.5 Alttabakanın Varlığı

III-nitrat araştırmasında temel zorluklardan bir tanesi örgü ve ısıl uyumlu alttabakaların eksikliğidir. Kullanılan alttabaka epitaksiyel filmlerin kristal yönelimini, polaritesini, yüzey morfolojisini, gerilme (strain) ve kusur yoğunluğunu belirler. GaN tek kristalin büyütülmesindeki zorluklardan dolayı Al(In)GaN/(In)GaN yapılar genelde safir veya SiC üzerine büyütülür. Bunlara ilaveten III-nitratlar Si, NaCl, GaP, InP, ZnO, MgAl₂O₄, TiO₂ ve MgO üzerine büyütülürler. Ancak hegzagonal simetrisi, kolay olarak işlenebilmesi, maliyetinin ucuz olması gibi nedenlerden dolayı safir tercih edilmektedir. Safir ile GaN arasında %14-16 örgü uyuşmazlığı vardır ve bundan kaynaklanan yüksek dislokasyon yoğunluğu 10⁸-10¹⁰ cm⁻² mertebesinde-dir. Safir ve GaN arasında ısıl genişleme katsayısında ki uyumsuzluk ise %34'tür. Bu uyumsuzluktan dolayı oluşan stres depozisyon işleminden sonra soğutulan kalın filmlerde kırılmalara neden olurken ince filmlerde ise dislokasyonlara neden olur. Tablo 2.5'de en çok kullanılan alttabaka materyallerine ait bazı parametrelerin sayısal değerleri verilmektedir [70].

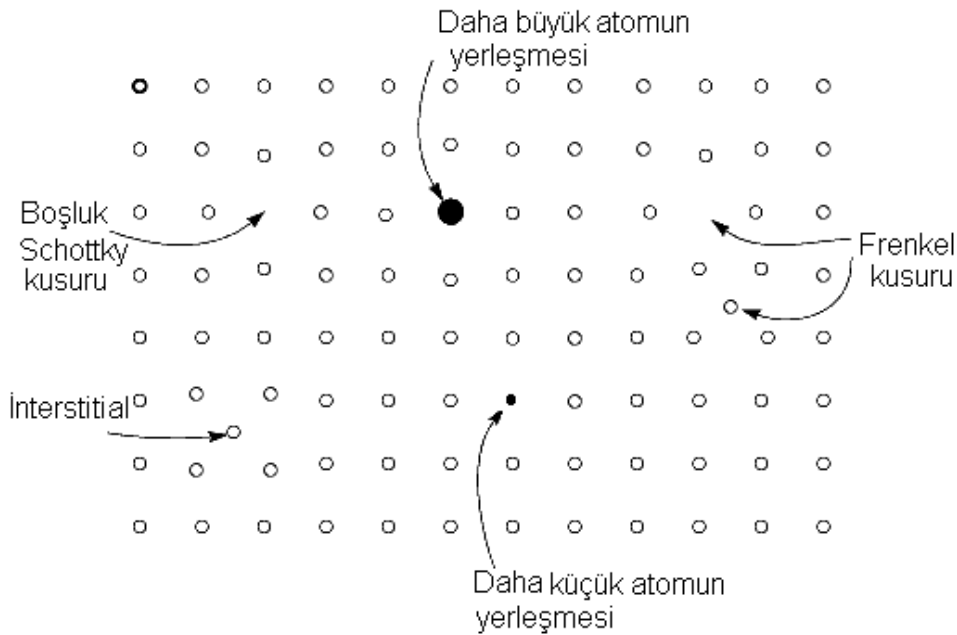
Tablo 2.5 Safir, Si, SiC ve ZnO için örgü parametreleri, ısıl genişleme katsayıları ve ısıl iletkenlik katsayısı.

Alttabaka	a (Å)	c (Å)	$\Delta a/a$ (1/K) (x10 ⁻⁶)	$\Delta c/c$ (1/K) (x10 ⁻⁶)	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	15.1173	4.46	4.16	3.8
ZnO (hegzagonal)	3.2426	5.194	4.8	2.9	0.3-0.4

2.6 Kusurlar

Yarıiletkenler hem kristalin termodinamik davranışları nedeniyle (doğuştan kusurlar) hem de büyütme işlemi sırasında ortaya çıkan safsızlıkların varlığı nedeniyle bazı kusurlar içerir. Kusurların oluşumu büyütme şartları, katkılama seviyesi, safsızlıkların cinsi, alttabaka ve tampon tabaka gibi faktörlere bağlıdır [71]. Kusurlar genellikle noktasal kusurlar ve çizgisel kusurlar (dislokasyon) olarak sınıflandırılırlar.

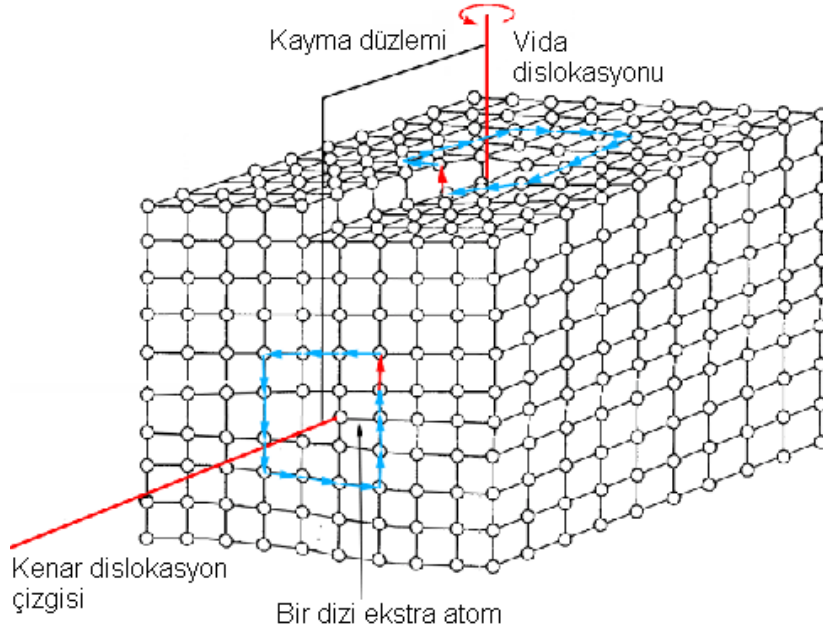
Noktasal kusurları kristalin periyodikliğini yalnızca bir veya birkaç birim hücrede etkileyen kusurlardır. Noktasal kusurlar, örgüde atom eksikliğinden kaynaklanan boşluk kusurları (Schottky kusuru), bileşik kristallerde bir ev sahibi atomun diğer ev sahibi atomun yerine yerleşmesi ile zıt-yerleşme kusurları, örgü noktalarının arasına yerleşmesi ile arayer kusurları (interstitial), istenen ve istenmeden oluşan safsızlık kusurlarını içerir. İyonik kristallerde boşluk kusuru ile orataya çıkan + veya - iyon eksikliği arayer kusuru tarafından dengelenirse (nötr) bu kusur çiftine Frenkel kusuru denir. Nokta kusurların tipi, enerji seviyeleri ve yoğunlukları deneysel olarak Hall ölçümü ve fotoluminesans gibi elektriksel ve optiksel metodlarla belirlenebilir. Şekil 2.6'da noktasal kusurların şematik gösterimi verilmiştir.



Şekil 2.6 Noktasal kusurların şematik gösterimi.

GaN içerisindeki boşluklar yüklü kusurlardır ve enerji bant aralığında birkaç kusur seviyeleri oluştururlar. Katkılama, boşluk kusurunu artırır ve n-tipi GaN'da galyum boşlukları (V_{Ga}) baskın kusur olurken, p-tipi GaN'da nitrojen kusurları (V_N) baskın olur. n-tipi GaN'ta Fermi seviyesi iletkenlik bandına yakın olduğunda V_{Ga} düşük formasyon enerjisine sahip olup, alıcı gibi davranır [72,73]. Nitrojen boşluğu durumunda ise Ga-Ga arasında metalik bir bağ oluşur ve enerji seviyeleri iletim bandının üstüne çıkar. Formasyon enerjileri Fermi enerjisi ile artan V_N ise verici gibi davranır [74]. Ga ve N arayer kusurları büyük formasyon enerjisi gerektirmektedir. Ga zıt-yerleşme ve N zıt-yerleşme kusurları GaN yapısında mevcut olan diğer içsel kusurlar olup GaN içerisinde birkaç derin seviyeler oluştururlar. Safsızlık durumunda ise genelde C, Si ve Ge safsızlıkları Ga tarafında ve O, S ve Se safsızlıkları N tarafında sığ vericiler gibi davranırken, Be, Mg, Ca, Zn ve Cd safsızlıkları Ga tarafında ve C, Si ve Ge safsızlıkları N tarafında sığ alıcı gibi davranırlar [73]. Bunlara ek olarak doğal kusurlar ve safsızlıklar arasında özellikle hidrojen içeren kompleksler oluşabilir ve bu kompleksler derin seviyeler oluşturabilirler. Örnek olarak Ga yerine yerleşen bir Mg atomu ile bir nitrojen boşluğu arasında oluşan nötral $Mg_{Ga}V_N$ kompleksi, iletkenlik bandının altında yaklaşık 0.4 eV enerji seviyeli derin verici oluşturur [73].

Dislokasyonlar genellikle büyütülen film ile alttabaka arasındaki örgü ve ısıl uyumsuzluğundan kaynaklanır ve örgü içerisinde oldukça uzun atomik boyutlarda ortaya çıkarlar. Oluşum özellikleri Burgers vektörü ile belirlenir. Bu kusurlar kristalin elektriksel ve optiksel özelliklerine etki edebilen önemli kusurlardır. Dislokasyonlar, kenar dislokasyon ve vida dislokasyonu şeklinde sınıflandırılır. Şekil 2.7'de görüldüğü gibi atomlar normal düzenlenmenin yanı sıra ekstra yarı bir düzlem oluştururlarsa bunlara kenar dislokasyonu denir (Burgers vektörü dislokasyon çizgisine dik). Aynı şekilde görüldüğü gibi kristal bağların bir bölümü kırılırsa ve atomlar normal yerlerinden kayıp tekrar birbirleriyle bağ yapmazlarsa bu dislokasyonlara da vida dislokasyonu denir (Burgers vektörü dislokasyon çizgisine paralel).



Şekil 2.7 Kenar dislokasyonu ve vida dislokasyonunun şematik gösterimi.

Yapı içerisinde dislokasyon yoğunlukları en iyi iletim elektron mikroskobu (TEM) ile belirlenir. Bu tez çalışmasında ise dislokasyon yoğunlukları XRD tekniği ile aşağıda verilen denklemler kullanılarak belirlendi. GaN yapısında üç tip dislokasyon görülür. Kenar dislokasyonu, vida dislokasyonu ve karışık tip dislokasyon sırasıyla $b = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle \langle a \rangle$, $b = \langle 0001 \rangle \langle c \rangle$ ve $b = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3 \rangle \langle a + c \rangle$ Burgers vektörleri ile ifade edilirler [71].

Dislokasyon yoğunluğu [75];

$$D_{vida} = \frac{\beta^2(0002)}{9b_{vida}^2}, \quad D_{kenar} = \frac{\beta^2(1012)}{9b_{kenar}^2} \quad (2.8)$$

$$D_{dis} = D_{vida} + D_{kenar} \quad (2.9)$$

eşitliklerinden elde edilir. Burada D_{vida} vida dislokasyon yoğunluğunu, D_{kenar} kenar dislokasyon yoğunluğunu, β , XRD eğrisinden ölçülen FWHM değerini ve b burger vektörünün uzunluğunu göstermektedir ($b_{vida} = 0.5185$ nm, $b_{kenar} = 0.3189$ nm). GaN epitabakasında oluşan dislokasyonların büyük

çoğunluğunu kenar dislokasyonu oluştururken vida dislokasyonu %5-40 oranındadır [69].

2.7 Elektriksel Özellikleri

III-nitratlar doğrudan ve büyük bant aralığına sahip olduklarından çeşitli elektronik ve optoelektronik uygulamaları için uygun materyallerdir. Büyük bant aralıklı olması yüksek kırılma voltajı, büyük elektrik alanlara dayanma yeteneği, düşük gürültü oluşumu, yüksek sıcaklık ve yüksek güçte çalışması gibi avantajlar sağlar. İletkenlik bant minimumunda küçük etkin kütleler, oldukça düşük alan mobilitesine, yüksek uydu enerji dağılımına ve yüksek fonon frekansına neden olur. Nitrat içeren yarıiletkenlerde elektron iletimi düşük ve yüksek elektrik alan durumları olarak göz önüne alınabilir. (i) Yeterince düşük elektrik alanlarda, elektronlar tarafından kazanılan enerji elektronların ısı enerjisine kıyasla küçüktür bundan dolayı elektronların enerji dağılımları böyle düşük bir elektrik alan tarafından etkilenmez. Elektron mobilitesini belirleyen saçılma oranı elektron dağılım fonksiyonuna bağlı olduğu için elektron mobilitesi uygulanan elektrik alandan bağımsızdır ve Ohm yasasına uyar. (ii) Dış alanın etkisi ile elektronların kazandığı enerji elektronların ısı enerjisi ile karşılaştırılabilir noktaya kadar arttırıldığı zaman elektron dağılım fonksiyonu denge durumundan önemli bir ölçüde değişir. Elektron sıcaklığı örgü sıcaklığından daha büyük olan bu elektronlar sıcak (hot) elektron olarak adlandırılırlar.

Elektriksel özelliklerin belirlenmesinde Hall etkisi, Shubnikov de Haas etkisi (SdH) ve yüksek hızlı akım-voltaj (I-V) ölçümleri gibi teknikler kullanılmaktadır. Hall etkisi tekniği en çok kullanılan teknik olup yarıiletken maddelerin taşıyıcı yoğunluğu, tipi ve mobilitesi hakkında bilgi verir. SdH yüksek manyetik alan etkisi altında ki elektriksel direnç olup bu yöntemle taşıyıcı yoğunluğu, etkin kütle, taşıyıcı mobilitesi belirlenebilir. Bu iki ölçüm omik davranışın sergilendiği, yeterince düşük elektrik alanlarda kullanılırken I-V ölçümlerinin bu iki teknikten farkı sıcak elektron durumunun söz konusu olduğu yüksek elektrik alanlı deneysel

ölçüm olmasıdır. Önemli bir deneysel teknik olan bu teknikle, taşıyıcı sürüklenme hızı ve mobilitesi elektrik alanın şiddetine bağlı olarak belirlenir.

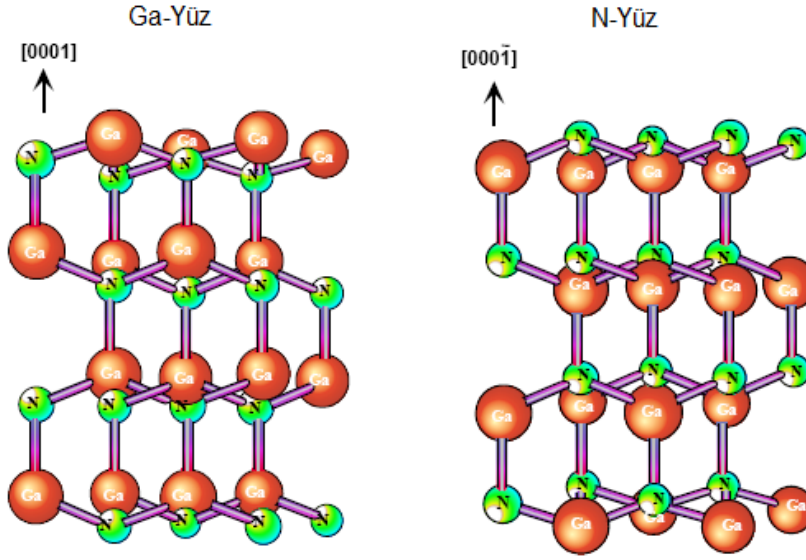
Elektron mobilitesi elektriksel özelliklerin belirlenmesinde en önemli parametrelerden bir tanesidir. Taşıyıcı mobilitesinin ve yoğunluğunun sıcaklığa bağlı deneysel incelenmesi ile temel materyal parametreleri belirlenebilmekte ve mobilitayı etkileyen saçılma mekanizmaları hakkında bilgi sahibi olunmaktadır. Nitratlarla ilgili yapılan ilk iletim çalışmalarında kristal kalitesinin düşük olmasından dolayı taşıyıcı mobilitesi beklenen değerlerin altında idi. Önceleri MBE ile SiC alttabaka üzerine büyütülen GaN tabakalarda oda sıcaklığında mobilite $580 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ olarak elde edilmiştir [76]. Bununla beraber MBE ile büyütülen filmler $100\text{-}300 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ 'den daha düşük mobilite değerleri sergilemişlerdir [77]. Nakamura ve arkadaşları tarafından oda sıcaklığında $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ elektron yoğunluğunda $600 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ mobilite değeri ölçülmüştür [78]. Oda sıcaklığında $845 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ gibi yüksek elektron mobilitesi $6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ taşıyıcı yoğunluğunda Götz ve arkadaşları tarafından elde edilmiştir [79]. Sonraki yayınlarda birkaç büyütme tekniğiyle yüksek kaliteli örneklerin büyütülmesi ile oda sıcaklığı mobilitesinde artışlar görülmüştür. Nakamura [80] ve Binari[81] oda sıcaklığında sırasıyla $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ve $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ elektron yoğunluğunda $900 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ mobilitesi elde etmişlerdir. Yakın zamanda HVPE büyütme tekniği ile büyütülen $200 \mu\text{m}$ kalınlıklı alttabakadan ayrıştırılmış n-tipi GaN template için, oda sıcaklığında $1100 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve 273 K 'de $1425 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ mobilite değerleri sırasıyla Yun ve arkadaşları [82] ve Huang ve arkadaşları [83] tarafından rapor edilmiştir. Bu başarı, kusurla ilgili saçılmaların düşük seviyeli oluşundan, GaN örneğinin mükemmel kristal yapısı olarak yorumlanmıştır. Koleske ve arkadaşları 6H- ve 4H-SiC alttabaka üzerine büyütülen GaN filmlerde AlN biriktirme tabakasının iletim özellikleri üzerine etkilerini incelemişlerdir [84]. Oda sıcaklığında 6H-SiC, 4H-SiC ve 3.5° kaymış eksen 6H-SiC alttabakalar üzerinde sırasıyla $876 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, $884 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve $932 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ elektron mobilitesi elde edilmiştir. Gözlenen yüksek elektron mobilitesi, AlN morfolojisinin geliştirilmesine ve AlN/GaN arayüzeyinde vida dislokasyon yoğunluğundaki azalmaya bağlanmıştır [84].

Düşük taşıyıcı yoğunluğu, derin doğal kusurlar ve safsızlık enerji seviyelerinden dolayı AlN'in elektriksel iletim özellikleri yaygın olarak çalışılmamaktadır ve direnç ölçümlerini sınırlandırmaktadır. İstenmeden katkılanan AlN tekli kristaller için rapor edilen direnç aralığı $\rho = 10^7 - 10^{13} \Omega\text{cm}$ 'dir [85, 86] ve bu değer literatürdeki diğer değerlerle uyum içindedir [87,88]. Modifiye edilmiş fiziksel iletim tekniği ile Rutz tarafından büyütülen, istenmeden katkılı n-AlN filmler 400 Ωcm kadar düşük dirence sahip oldukları rapor edilmiştir [89]. Bununla beraber kaynağı belirlenmeden, Rutz ve arkadaşları AlN filmlerinde uygulanan beslemenin artışı ile direncin birden yaklaşık 100 kat azalması ile ilginç geçişler gözlemladiler [90]. AlN'da teorik hesaplamalar sadece Chin ve arkadaşları tarafından yapıldı [91]. Çünkü AlN son derece düşük taşıyıcı yoğunluklu bir yalıtkan olduğundan, sadece fonon sınırlı saçılma mekanizmaları sıcaklığa bağlı mobilite hesaplarında göz önünde bulunduruldu. Mobilite 77K'de 2000 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ iken 300 K'de optik fonon mobiliteyi sınırladığı için 300 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ değerine hızlıca düşmektedir.

InN'da uygun alttabaka eksikliğinden dolayı yüksek yoğunluklu kusurlar mevcuttur. InN büyütmelerinde genelde safir alttabaka kullanılır ve örgü sabitleri arasındaki uyumsuzluk %25 kadar büyüktür. In ile N arasında atomik yarıçapdaki büyük farklılık yüksek kaliteli InN elde etmeyi zorlaştıran bir başka faktördür. Elektriksel özellikler, büyütme tekniği seçimi ile oldukça değişmektedir. Son zamanlarda MBE ve MOVPE tekniklerindeki ilerlemeler ile yüksek mobiliteli büyütme sağlanmaktadır. Morkoç tarafında MBE ile büyütülen InN filmde 1000 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ mobilitesi elde edilmiştir [92]. Yarıiletkenin kalitesine ve elektron yoğunluğuna bağlı olarak elektron mobilitesi son zamanlarda 500-2100 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ aralığında rapor edilmiştir [93-95]. Çok yüksek istenmeden katkılı verici konsantrasyonu ($>10^{18} \text{cm}^{-3}$) InN aygıt uygulamaları için temel problem olarak görülmektedir.

2.8 III-V Yapılarda Kutuplanma

Merkez simetrisi olmayan bileşikler kristal yapılarında, belli kristaliografik eksenlere paralel iki zıt doğrultuda atomik tabakaların iki farklı düzenlenişini içerirler [96]. Sonuç olarak da bu eksenler boyunca kristalografik kutuplanma gözlemlenebilir. Wurtzite (hexagonal) yapılı 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-yüzü ve B-yüzü olarak adlandırılır. Merkez simetrisi olmayan bileşiklerin ince filmlerinin heteroepitaxial büyütülmesi durumunda, materyalin kutuplanması tam olarak doğrudan tayin edilemeyebilir ancak bu durum deneysel olarak tespit edilmelidir. Bu durum, GaN epitaksiyel tabakalar için ve $\{0001\}$ taban düzlemine dik olacak şekilde, büyütme doğrultusuna sahip GaN-tabanlı heteroeklemliler için geçerlidir. $\{0001\}$ düzleminde atomlar ikili tabakalar halinde düzenlenirler. Bu ikili tabakalar, birbirine yakın duran hexagonal tabakalardır. Bunlardan birincisi katyonlar (Ga metal atomu) tarafından oluşurken ikincisi anyonlar (nitrojen) tarafından oluşur ki bu durum kutuplanmaya neden olur. GaN durumunda basal bir yüzey ya Ga ya da N yüzeyli olmalıdır. Şekil 2.8'de de görüleceği üzere Ga yüzeyli tabiri, $\{0001\}$ ikili tabakanın en üst konumunda $[0001]$ doğrultusunda kutuplanmaya neden olan Ga metal 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 [97].



Şekil 2.8 Ga-yüzlü ve N-yüzlü GaN'ın wurtzite kristal yapısının şematik gösterimi

2.8.1 Kendiliğinden ve Piezoelektrik Kutuplanma

Dış elektrik alan yokken, GaN ve AlGaN tabakanın toplam makroskopik polarizasyonu, \mathbf{P} örgü denge durumunda iken kendiliğinden polarizasyon \mathbf{P}_{KP} ile gerilmenin indüklediği piezoelektrik polarizasyonların, \mathbf{P}_{PE} , toplamına eşittir. Kendiliğinden polarizasyonun yapısal parametrelere hassas şekilde bağlı olmasından dolayı, GaN ve AlN için kendiliğinden polarizasyonda da sayısal farklılıklar mevcut olacaktır. GaN'dan AlN'a doğru giderken kristal yapının ideal olmayana doğru artış göstermesi, kendiliğinden polarizasyonda da bir artışa neden olacaktır. Bunun sebebi (0001) eksen boyunca anyon ve katyon bağ uzunluklarının farklı olmasıdır. Aşağıda, epitaksiyel filmler ve AlGaN/GaN heteroeklemlerin büyütüldüğü doğrultu olan [0001] eksenini boyunca, polarizasyonlar incelenmiştir.

Wurtzite kristalin c eksenini boyunca kendiliğinden kutuplanma $\mathbf{P}_{KP} = P_{KP}\mathbf{z}$ iken piezoelektrik kutuplanma, e_{13} ve e_{33} piezoelektrik katsayılar olmak üzere (Tablo 2.6),

$$P_{PE} = e_{33}\varepsilon_z + e_{31}(\varepsilon_x + \varepsilon_y) \quad (2.10)$$

denklemleri 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. Hexagonal GaN'ın örgü sabitleri arasındaki ilişki;

$$\frac{c - c_0}{c_0} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \frac{a - a_0}{a_0} \quad (2.11)$$

ile verilir. Burada, C_{13} ve C_{33} elastik sabitlerdir (Tablo 2.2). Denklem 2.10 ve 2.11'i kullanılarak c-eksenini boyunca piezoelektrik polarizasyonun miktarı

$$P_{PE} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad (2.12)$$

eşitliği ile belirlenebilir. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ bariyerinin tüm alaşım kompozisyonları için $[e_{31} - e_{33}(C_{13}/C_{33})] < 0$ olduğu için AlGaN bariyer gevşeme zorlanması altında ise piezoelektrik kutuplanma negatif, sıkıştırıcı zorlanma altında ise kutuplanma pozitiftir. Böylece piezoelektrik polarizasyonun büyüklüğü ve yönü zorlanmanın çeşidine göre (2.12) eşitliği ile bulunurken, yapısal parametrelere bağlı olan kendiliğinden polarizasyon ise GaN ve AlN için negatif olarak bulunmuştur [98]. Bunun anlamı Ga-yüzlü heteroeklemliler için kendiliğinden polarizasyonun Şekil 2.9'da da görüldüğü üzere alttabakaya 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 polarizasyonun ve piezoelektrik kutuplanmaların yönleri de işaret değiştirir. Şekil 2.9'da piezoelektrik ve kendiliğinden kutuplanmanın doğrultuları, Ga yüzü, N-yüzlü, gerilme varken ve yokken AlGaN/GaN ve GaN/AlGaN heteroeklemliler için gösterilmiştir.

Tablo 2.6 GaN, InN ve AlN yarıiletkenlerinin kendiliğinden polarizasyon büyüklükleri, piezoelektrik ve dielektrik sabitleri.

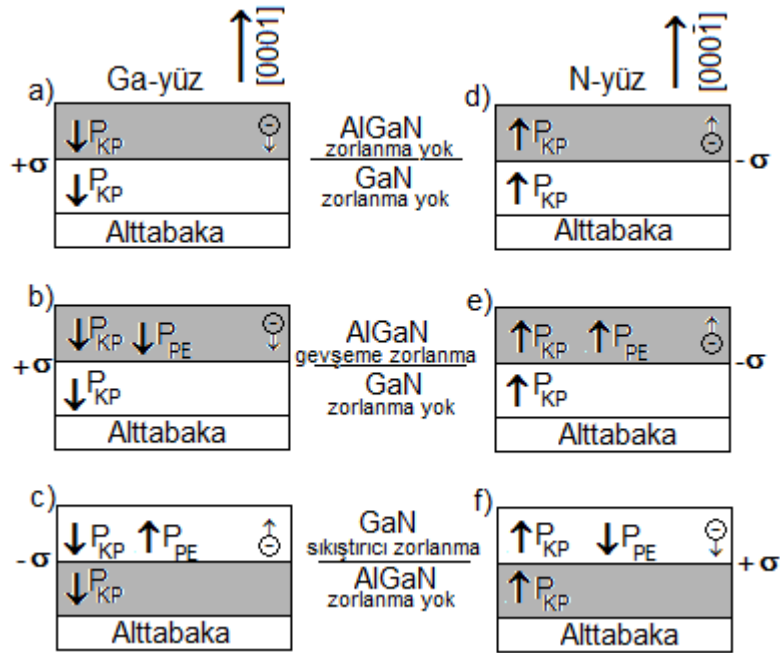
Wurtzite	AlN	GaN	InN
$e_{33}(C/m^2)$	1.46	0.73	0.97
$e_{31}(C/m^2)$	-0.60	-0.49	-0.57
ϵ_{11}	9.0	9.5	-
ϵ_{33}	10.7	10.4	14.6
$P_{KP}(C/m^2)$	-0.081	-0.029	-0.032

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 AlGaN(üst)/GaN(alt) veya GaN/AlGaN heteroeklemlerinin ara yüzeyinde kutuplanma, ikili tabakanın içinde azalabilir veya artabilir. Böylece kutuplanmanın indüklediği iki boyutlu tabaka taşıyıcı yoğunluğu;

$$\sigma(P_{KP} + P_{PE}) = P(\text{alt}) - P(\text{üst}) = P_{KP}(\text{alt}) - \{P_{KP}(\text{üst}) + P_{PE}(\text{alt})\} \quad (2.13)$$

denklemler 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 ofset değerinin yeterince büyük olduğu ve ara yüzey pürüzlülüğünün düşük olduğu kabulü yapılırsa, bu elektronlar n_s tabaka taşıyıcı yoğunluklu 2DEG oluşumuna neden olacaktır. Negatif bir tabaka taşıyıcı yük yoğunluğu da ara yüzeyde hollerin birikmesine neden olacaktır. GaN heteroyapının üzerinde AlGaN yapının bulunduğu Ga-yüzlü durum için kutuplanmanın indüklediği tabaka taşıyıcısı pozitif olup Şekil 2.9.a'da 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 2.9.b'de görüldüğü gibi pseudomorfik büyütülmüşse, gevşeme zorlaması altında olan AlGaN bariyerinin piezoelektrik polarizasyonu $P(\text{AlGaN})-P(\text{GaN})$ kutuplanma farkını artıracaktır. Benzer şekilde tabaka yükü $+\sigma$ ve tabaka taşıyıcı yoğunluğu n_s de artacaktır. Bu durumda 2DEG AlGaN/GaN heteroyapının ara yüzeyinde AlGaN bariyerinin hemen altında oluşacaktır. Polarizasyonun indüklediği tabaka taşıyıcı yoğunluğu negatif ise bu durumda da Şekil 2.9.c'de görüldüğü gibi ara yüzeyde bu kez boşluklar birikecektir. Şekil b'deki durum için kendiliğinden kutuplanmanın yönü ile piezoelektrik kutuplanmanın yönü birbirine paralel iken, Şekil 7c'deki durum için de zıt yönlü olacaktır. Benzer yorumlar N-yüzlü AlGaN/GaN heteroyapılar için de geçerlidir (Şekil 2.9.d, Şekil 2.9.e, Şekil 2.9.f).



Şekil 2.9 Kutuplanmadan kaynaklı tabaka yük yoğunluğu ve zorlanma varken ve yokken Ga ve N yüzü AlGaN/GaN heteroyapılarda kendiliğinden ve piezoelektrik kutuplanmanın yöneliminin gösterimi.

Bu doktora tezinde kullanılan farklı bariyer ve kuantum kuyulu AlInN/AlN/GaN, AlGaN/AlN/GaN ve AlInN/AlN/InGaN heteroyapılar için bariyerdeki alaşım oranına bağlı olarak kutuplanmanın indüklediği tabaka taşıyıcı yoğunluklarını hesaplamak için, aşağıda sıralanan GaN ve AlN'nin fiziksel özellikleri arasındaki lineer interpolasyon eşitlikleri kullanılmıştır [47,96].

Örgü sabitleri:

$$a(x) = (-0.77x + 3.189)10^{-10} \text{ m} \quad (2.14)$$

Elastik sabitler:

$$C_{13} = (5x + 103) \text{ GPa, ve } C_{33} = (-32x + 405) \text{ GPa} \quad (2.15)$$

Piezoelektrik sabitler:

$$e_{13} = (-0.11x - 0.49) \text{ C/m}^2 \text{ ve } e_{33} = (0.73x + 0.73) \text{ C/m}^2 \quad (2.16)$$

Kendiliğinden kutuplanma:

$$P_{KP}(x) = (-0.052x - 0.029) \text{ C/m}^2 \quad (2.17)$$

Denklem (2.10), (2.11) ve (2.17)'u kullanarak Ga-yüzlü AlGaIn/GaN arayüzeyinde kutuplanmanın indüklediği tabaka yük yoğunluğu, σ ,

$$\begin{aligned} \sigma(\text{Al}_x\text{Ga}(\text{In})_{1-x}\text{N}/\text{GaN}) &= P(\text{GaN}) - P(\text{Al}_x\text{Ga}(\text{In})_{1-x}\text{N}) \\ &= P_{KP}(\text{GaN}) - \{P_{KP}(\text{Al}_x\text{Ga}(\text{In})_{1-x}\text{N}) + P_{PE}(\text{Al}_x\text{Ga}(\text{In})_{1-x}\text{N})\} \end{aligned} \quad (2.18)$$

denklemleri ile verilir. Kutuplanmanın indüklediği yük ise σ/e olarak elde edilir.

2.8.2 Arayüzeyde Oluşan Tabaka Taşıyıcı Yoğunluğu

Elektronik cihazların optimize edilmesi ve modellenmesi için, kutuplanmanın indüklediği 2DEG'nin tabaka taşıyıcı yoğunluğunun kontrolü ve kesin bir tahmini gereklidir. Kutuplanmanın indüklediği yükün teorisinin anlaşılmasıyla, 2DEG'na ait tabaka taşıyıcı yoğunluğunu n_s ve bu yoğunluğun x alaşım oranına bağlılığını belirlemek mümkün olmuştur.

Serbest elektronlar, Ga-yüzlü AlGaIn/GaN ara yüzeyde yüksek oranda pozitif kutuplanmanın indüklediği yük miktarını dengelemeye çalışır ve katılanmamış AlGa(In)N/GaN gibi heteroyapıların ara yüzeylerinde beklenen maksimum tabaka taşıyıcı yoğunluğu, n_s ,

$$n_s(x) = \left\{ 1 + \frac{\varepsilon(x)d_{\text{GaN}}}{\varepsilon_{\text{GaN}}d_{\text{AlGa(In)N}}} \right\}^{-1} \left\{ \frac{\sigma(x)}{e} - \left(\frac{\varepsilon_0\varepsilon(x)}{d_{\text{AlGa(In)N}}e^2} \right) [e\varphi_b(x) + E_F(x) - \Delta E_c(x)] \right\} \quad (2.19)$$

ifadesi ile verilir. Burada d_{GaN} ve $d_{AlGa(In)N}$, sırasıyla en üstte bulunan kapak tabakanın ve bariyerin kalınlıklarıdır. $\varepsilon(x)$, AlGa(In)N bariyerin bağıl dielektrik sabiti, $e\phi_b(x)$, bariyer üzerindeki kapı (gate) kontağının Schottky bariyeridir. Hesaplamalarda numuneler üzerine böyle bir kontak alınmadığı için bu parametre dikkate alınmamıştır. $\Delta E_c(x)$, AlGa(In)N/GaN ara yüzeydeki iletkenlik bant offset değeridir. $E_F(x)$ Fermi enerjisidir, $\sigma(x)$ ise kutuplanmanın indüklediği tabaka yük yoğunluğudur.

AlGaIn/GaN heteroyapılar için, ara yüzeyde oluşan tabaka taşıyıcı yoğunluğu n_s 'yi denklem (2.19)'den hesaplamak için aşağıdaki eşitlikler kullanılmıştır.

Dielektrik sabiti:

$$\varepsilon(x) = -0.5x + 9.5 \quad (2.20)$$

Fermi Enerjisi ve 2DEG nin taban durumu için enerji seviyesi:

$$E_F(x) = E_0(x) + \frac{\pi\hbar^2}{m^*(x)} n_s(x) \quad (2.21)$$

$$E_0(x) = \left\{ \frac{9\pi \hbar^2}{8\varepsilon_0 \sqrt{8m^*(x)} \varepsilon(x)} n_s(x) \right\}^{2/3} \quad (2.22)$$

Burada elektronun etkin kütlesi $m^*(x) \approx 0.22m_0$ 'dır.

Bant offset:

$$\Delta E_c(x) = 0.7[E_g(x) - E_g(0)] \text{ eV} \quad (2.23)$$

ile verilir. Burada AlGaIn'ın yasak enerji bant aralığı,

$$E_g(x) = xE_g(AlN) + (1-x)E_g(GaN) - x(1-x)1.0 \text{ eV} \quad (2.24)$$

$$E_g(x) = x6.13 + (1-x)3.42 - x(1-x)1.0 \text{ eV} \quad (2.25)$$

eşitliği ile verilir. AlInN/GaN ve AlInN/InGaN heteroyapılar için kendiliğinden ve piezoelektrik kutuplanmaya ait eşitlikler ve parametreler ile tabaka taşıyıcı yük yoğunluğu n_s 'yi hesaplamaya yarayan denklem (2.19)'da kullanılması gerekli eşitlikler [47] nolu referanstan alınmıştır.

AlGa(In)N/GaN ve AlInN/InGaN heteroyapıların ara yüzeyinde oluşan 2DEG'na ait tabaka taşıyıcı yoğunlukları n_s ile kutuplanmanın indüklediği kutuplanma yük yoğunluklarının bariyerdeki alaşım yüzdesi ile değişimleri 4.Bölümde verilmiştir.

3. DÜŞÜK ALAN ELEKTRON İLETİMİ

Yarıiletken materyalin direnci, buna bağlı akım iletkenliği taşıyıcı yüklerinin sayısına ve taşıyıcıların yapı içindeki hareketine bağlıdır. Taşıyıcıların bu hareketi mobilite olarak bilinir ve n-tipi yarıiletkenlerde iletim bandındaki, p-tipi yarıiletkenlerde ise valans bandındaki iletimi içerir. Taşıyıcı mobilitesi örgü sıcaklığına, elektrik alana, katkılama oranına ve yarıiletken materyal kalitesine bağlıdır. Dolayısıyla elektron mobilitesi epitaksiyel tabakaların mikroskopik kalitesini karakterize etmek için kullanılan en önemli ve en yaygın iletim parametresidir.

Mükemmel bir kristalde taşıyıcılar uygulanan elektrik alan tarafından ivme kazanırlar. Ancak yarıiletken kristallerde kusurlar, safsızlıklar ve örgü titreşimleri gibi mekanizmalar taşıyıcıları saçar. Yarıiletkenlerdeki taşıyıcıların bu iletim özellikleri sürüklenme-difüzyon modeli ile incelendiğinde bu model difüzyon sabiti ve mobilitayı alandan bağımsız kabul ettiğinde çizgisel bir form sergilerken elektrik alana bağımlılığı dikkate alındığında ise çizgisel olmayan bir davranış gösterir. Sürüklenme-difüzyon modelinde parçacıklar klasik bir parçacık gibi davranır ve her bir parçacığın konumu ve momentumu zamanın fonksiyonu olarak Newton hareket denklemleri ile belirlenebilir. Ancak bu model klasik bir model olduğu için çok küçük boyutlu cihazlarda iletimi açıklamak için yetersiz kalmaktadır çünkü bu tip cihazların içindeki elektrik alan çok çabuk değişeceği için lokal olmayan etkilere neden olacaktır. Lokal olmayan etkileri daha doğru bir şekilde modellemek için ve momentum, konum ve zamanın bir fonksiyonu olarak taşıyıcıların davranışını tam doğru bir şekilde tanımlamak için yarı-klasik yaklaşım olarak bilinen Boltzmann İletim Denklemi (BİD) kullanılır. Bu denklem Newton mekaniği ile Fermi'nin Altın Kuralı olarak da bilinen kuantum olasılık saçılma hızlarının bir kombinasyonunu kullanarak, bir parçacığın yörüngesindeki değişimini açıklar. Boltzmann İletim Denklemi kuantum mekaniksel iletim denklem olarak bilinen Liouville-Von Neumann denkleminde türetilir [99].

Boltzmann İletim Denklemi'nin çözümünü yaparak analitik çözümlere ulaşmak için durulma zamanı yaklaşımı [100], Rode'un iterativ metodu [101], farklı araştırmacılara ait değişken metot [102-104], Ehrenceih'in değişken metoduna dayalı pseudo-analitik metotlar [105] ve Legendre Polinom açılımlarına dayalı metotlar [100] kullanılmaktadır. Bunlardan ilki olan durulma zamanı yaklaşımı 1950'lerden bu yana yaygın olarak çalışılmakta olup, çarpışma integralini enerji bağımlı durulma zamanı olarak tanımlayan sade bir yaklaşım olup, saçılma mekanizmaları için yaklaşık bir sonuç vermektedir. Boltzmann iletim denkleminde yaklaşık olarak doğru ve hızlı çözümler vermesinden dolayı da hala kullanılmaktadır [106]. Bu yaklaşımın analizinden elde edilen sonuçlar saçılma mekanizmalarını açıklamakta yeterli olduğu sürece mantıklı bir yaklaşımdır ve özellikle de elastik saçılmalar için geçerli sonuçlar vermektedir. Aşağıda ise sürüklenme-difüzyon modelinden yola çıkarak Boltzmann İletim Denklemi elde edilmiş ve bu denklemin iki boyutlu saçılma mekanizmaları için değerlendirilmesi yapılmıştır.

İlk kez Roosbroeck [106] tarafından cihaz simülasyonları için kullanılan klasik sürüklenme-difüzyon modelinde, mobilite ve difüzyon katsayıları gibi temel parametreler genellikle lokal elektrik alana bağlıdır. Dolayısıyla elektronlar için sürüklenme-difüzyon akımı;

$$\vec{J} = q\mu_n n \vec{E} + qD_n \vec{\nabla} n \quad (3.1)$$

denklemleri ile verilir. Burada μ_n elektronun hareketliliğini, D_n difüzyon katsayısını, $\vec{\nabla} n$ taşıyıcı yoğunluğu gradyentini, n_s birim hacimdeki taşıyıcı yoğunluğunu, \vec{E} elektrik alanı, q ise elektronun yükünü göstermektedir.

Elektron gibi yüklü taşıyıcılara bir kuvvet uygulandığında bir akım meydana gelir. Elektronların alandan dolayı kazandığı ortalama hız $\langle v_n \rangle$ olmak üzere birim alana düşen akım yoğunluğu

$$J = qn \langle v_n \rangle \quad (3.2)$$

olarak verilir. Eğer uygulanan elektrik alan, kaldırılırsa ortalama taşıyıcı hızı enerji bağlı durulma zamanı τ ile 0'a doğru azalır. Dış elektrik alan tarafından üretilen kararlı durum akımı aşağıdaki birinci dereceden diferansiyel kuvvet denkleminde elde edilebilir.

$$m_n^* \frac{d\langle v_n \rangle}{dt} + m_n^* \frac{\langle v_n \rangle}{\tau} = qE \quad (3.3)$$

burada m_n^* elektronun etkin kütlesi, τ durulma zamanı, ve E elektrik alan şiddetidir. Elektronların elektrik alandan dolayı kazandığı sürüklenme hızı,

$$\langle v_n \rangle = \frac{q\langle \tau \rangle}{m_n^*} E = \mu_n E \quad (3.4)$$

burada μ_n alana bağlı elektron mobilitesidir. Akım yoğunluğu

$$J = qn\langle v_n \rangle = q^2 \left(\frac{n\langle \tau \rangle}{m_n^*} \right) E = \sigma E \quad (3.5)$$

şeklinde elde edilir. Burada σ elektriksel iletkenlik olup $\sigma = q^2 n \langle \tau \rangle / m_n^*$ dir. Bu model ile taşıyıcıların elektriksel iletkenliği, elektronların ortalama hızı ve elektrik alana karşı taşıyıcıların hareketliliği yani mobilitesi hakkında bilgi elde edilir. Burada mobilite $\mu = \frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle$ 'dur.

Bu modelde yukarıda bahsedilen temel parametreler, genellikle lokal elektrik alana bağlı olduğu için, taşıyıcıların ortalama enerjisindeki değişimlerden dolayı iletim etkiler, tek başına sürüklenme-difüzyon modelinin kapsamında modellenemez. Bu da, bu modelin sadece cihazların yeterince uzun olduğu ve de cihaz içindeki elektrik alanların elektronun ortalama serbest yolu üzerinde çok hızlı değişimler yaratmadığı durumlarda geçerli olduğunu söyler. Eğer cihazın boyutu küçülürse bu durumda artık bu şartlar geçerli olmayacak ve sürüklenme-difüzyon denklemini cihaz içindeki iletimi doğru şekilde tanımlamak için yeterli bir bilgi sağlamayacaktır. Bu nedenle de yarıiletkenlerin iletim özelliklerini açıklamada birinci mertebeden kompleks kısmi diferansiyel denklemler içeren Boltzmann İletim Denklemi kullanılır.

Periyodik bir kristalde elektronlar (holler), k uzayında tanımlı enerji bantlarındaki enerji seviyelerinde bulunacaklarından, elektronun ortalama hızı ile $\xi_c(k)$ arasında $\langle v_n \rangle = (1/\hbar)\nabla_k \xi_c(k)$ şeklinde bir bağıntı vardır. Burada $\xi_c(k)$, k uzayında iletkenlik bandının enerjisini göstermektedir. Dış elektrik alan, E , altında elektronun dalga vektörü k , $k = k_0 + (q/\hbar)Et$ şeklinde değişir. Bu durumda elektronun hareketi gerçek uzayın, r , momentum uzayının, k , ve zamanın fonksiyonu, t , olarak tanımlanabilecek 7 boyutlu bir problem haline gelir. Bu durumda elektronun iletkenlik bandının enerji seviyelerine dağılımı $f = f(r,k,t)$ ile ifade edilir. Bu durumda dağılım fonksiyonu,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{q}{\hbar} E \vec{\nabla}_k f - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{car.}} = 0 \quad (3.6)$$

şeklinde yazılır. Bu denklem Boltzmann İletim Denklemi olarak bilinir. Çarpışma terimi olan son terim elektron saçılmasından kaynaklanan f 'in değişimini göstermektedir. Boltzmann İletim Denklemi'nin çözümüne dış kuvvetlerin etkisi altında bir çözümle başlanabilir. Elektrik ve manyetik alanlar olan bu dış kaynaklı alanlar denge dağılım fonksiyonunu yani f_0 'ı, $f - f_0$ gibi küçük miktarda değiştirecektir. Kararlı durumda $f - f_0$ için uygun bir ifade yazılabilir. Eğer saçılmalar elastik ise BİD'deki son terim

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{car.}} = \frac{f - f_0}{\tau(\xi)} \quad (3.7)$$

şeklinde indirgenebilir. Burada $\tau(\xi)$ enerjiye bağlı durulma zamanıdır. Optik fonon saçılması gibi inelastik saçılmalarda ise bu basitleştirme yapılamayacağından Boltzmann İletim Denklemi'nin numerik çözümlerine ihtiyaç duyulur.

Eğer durulma zaman yaklaşımı (RTA) bütün saçılmalara uygulanabilir ve her saçılmanın birbirinden ve enerjiden bağımsız olduğu dikkate alınırsa toplam durulma zamanı ve mobilite sırasıyla Matthiessen kuralı ile hesaplanabilir [107].

$$\tau^{-1} = \tau_1^{-1} + \tau_2^{-1} + \dots \quad \mu_{toplam} = \left[\sum_i \frac{1}{\mu_i} \right]^{-1} \quad (3.8)$$

3.1 Boltzmann İletim Denklemi

Yarıklasik Boltzmann iletim denklemi yarıiletkenlerdeki iletim özelliklerini açıklamak için kullanılan önemli bir eşitliktir. Bir elektron gazının iletim özelliklerinin belirlenmesi için, elektron gazının dağılım fonksiyonunun bilinmesi gerekir [108]. Boltzmann İletim Denklemi’de dağılım fonksiyonu, $f_k(r)$, ξ_k enerjisi ile verilen bir bandın, taşıyıcılar tarafından işgal edilmesi olasılığını ifade eder. Denge durumunda dağılım fonksiyonu, basitçe Fermi Dirac dağılım fonksiyonu ile verilir.

$$f_k^0 = f_0 = \frac{1}{1 + \exp[(\xi_k - \xi_F) / k_B T]} \quad (3.9)$$

burada ξ_F , Fermi enerjisi olarak da bilinen kimyasal potansiyeldir. Bu dağılım fonksiyonu denge durumundaki elektron gazını tanımlar ve olası saçılmalardan bağımsızdır. Çarpışmalar elektronları bir k durumundan diğer duruma hareket ettiren elektronların dağılımı denge durumunu bozacak dış etki olmadığı sürece daima Fermi Dirac fonksiyonu ile verilir. Dış kuvvetlerin etkisi altında ise saçılmaları da dikkate alan Boltzmann İletim denklemi,

$$\langle v \rangle \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{q}{\hbar} E \cdot \vec{\nabla}_k f - \frac{f - f_0}{\tau} = 0 \quad (3.10)$$

dir. Elektrik alan ve gradyan, sadece x bileşenine sahip ise;

$$f_k - f_0 = \frac{\hbar \tau k_z}{m_n^*} \frac{\partial f_0}{\partial x} + \frac{q \tau E_x}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial k_x} \quad (3.11)$$

eşitliği ile verilir. Burada denge dağılım fonksiyonu $f_0 = \left[n / (2\pi m_n^* k T)^{3/2} \right] \exp(p^2 / 2m_n^* k T)$ ’dir ve $p = \hbar k$ ’dir. x yönündeki akım yoğunluğu [109];

$$\begin{aligned}
J_{n,x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} qv_x f dp_x dp_y dp_z \\
&= \left(\frac{1}{3} \frac{q^2 E_x}{(m_n^*)^2 kT} \right) - \left(\frac{1}{3} \frac{q}{(m_n^*)^2} \frac{\partial n}{\partial x} \right) \int_0^\infty p^2 \tau f_0 4\pi p^2 dp
\end{aligned} \tag{3.12}$$

olarak bulunur. Cebirsel bazı kabuller yapıldığında akım yoğunluğu;

$$J_{n,x} = \frac{q^2 n E_x \langle v^2 \tau \rangle}{3kT} - \frac{q \langle v^2 \tau \rangle}{3} \frac{\partial n}{\partial x} \tag{3.13}$$

formuna gelir. Burada birinci ve ikinci terimler akım yoğunluğunun sırası ile sürüklenme, ve difüzyon bileşenini göstermektedir. Bu da geleneksel sürüklenme-difüzyon denklemdir;

$$J_{n,x} = q\mu_n n E_x - qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \tag{3.14}$$

Burada, D_n , x yönü boyunca difüzyon katsayısını göstermektedir. (3.13) eşitliği ve (3.14) eşitliği karşılaştırıldığında, mobilite ve difüzyon katsayısı elde edilir.

$$\mu_n = \frac{q_x \langle v^2 \tau \rangle}{3kT} \quad \text{ve} \quad D_n = \frac{\langle v^2 \tau \rangle}{3} \tag{3.15}$$

Eğer durulma zamanı, τ , v hızından bağımsız ise $(m_n^*) \langle v \rangle^2 = 3kT$ eşitliği kullanılarak mobilite ve difüzyon katsayısı aşağıdaki gibi olur.

$$\mu_n = \frac{q_x \langle \tau(\xi) \rangle}{m_n^*} \quad \text{ve} \quad D_n = \frac{kT \langle \tau(\xi) \rangle}{m_n^*} \quad \text{veya} \quad \frac{kT}{q} \mu_n \tag{3.16}$$

Taşıyıcı iletiminin belirlenmesi için, Boltzmann denkleminin kullanımı için bir başka yaklaşım da, taşıyıcı sürüklenme, difüzyon ve saçılma etkisini içeren eşitlik olup [110].

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} = \left(\frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{drift} + \left(\frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{dif.} + \left(\frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{saç.} \tag{3.17}$$

olarak yazılır. Difüzyon yokken veya çok küçük iken, E , elektrik alanlarında, f_k , f_k^0 etrafında aşağıdaki gibi genişletilebilir.

$$f_k = f_k^0 + g_k(E) \quad (3.18)$$

Bu yaklaşımla denklem (3.17)'deki sürüklenme (sürüklenme) bileşeni;

$$\left(\frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{drift} \approx \left(\frac{\partial f_k^0}{\partial \xi_k} \right) \left(\frac{\partial \xi_k}{\partial t} \right) = q v_k E \left(\frac{\partial f_k^0}{\partial \xi_k} \right) \quad (3.19)$$

formuna indirgenir. Burada, v_k , k dalga vektörlü taşıyıcıların hızıdır. $g(k)$, denge durumundan dağılım fonksiyonundan sapmayı göstermek üzere,

$$\left(\frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{drift} \approx - \frac{g_k}{\tau_k} \quad (3.20)$$

dır.

Denge durumunda, $\partial f_k / \partial t = 0$ olduğu için, denklem (3.19) ve (3.20) kullanılarak ve difüzyon teriminin sıfır olduğu farz edilirse,

$$g_k = q \tau_k (v_k E) \left(\frac{\partial f_k^0}{\partial \xi_k} \right) \quad (3.21)$$

denklemini elde edilir. Durulma zamanı yaklaşımında dağılım fonksiyonu zamana bağlı eksponansiyel bir fonksiyon olarak kabul edildiğinden denklem (3.7) ile uyumlu bir şekilde değişmektedir. Denklem (3.7) ile verilen durulma zamanı yaklaşımı sadece izotropik, elastik saçılmalar için geçerli iken optik fonon saçılması gibi inelastik saçılmalarda geçerli değildir. Farklı saçılma süreçleri saçılma mekanizmalarının özelliğine ve de enerjiye bağlı olarak farklı saçılma zamanlarına sahip olacaktır.

Dağılım fonksiyonu f_k ile J akım yoğunluğu arasındaki ilişki,

$$J = q \int_k f_k v_k dk \quad (3.22)$$

şeklinde verilir.

Durulma zamanı yaklaşımı altında akım yoğunluğu;

$$J = q \int_k g_k v_k dk = q^2 \int_k \tau_k v_k (v_k E) \left(\frac{\partial f_k^0}{\partial \xi_k} \right) dk \quad (3.23)$$

şeklinde ifade edilir. $q \int_k f_k^0 v_k dk = 0$ olduğuna dikkat edilmelidir.

Parabolik bantlı dejenere olmayan yarıiletkenlerde, dağılım fonksiyonu, f_k , Boltzmann dağılımı ile verilmektedir. Bu durumda denklem (3.9) için bir başka uygun form

$$f_k^0 \propto \exp\left(\frac{-\xi_k}{k_B T}\right) \quad (3.24)$$

ve

$$\left(\frac{\partial f_k^0}{\partial k} \right) \propto \frac{1}{k_B T} \exp\left(\frac{-\xi_k}{k_B T}\right) \quad (3.25)$$

şeklinde yazılır.

Akım hesabında bir sonraki adımda, denklem (3.25), (3.23)'de yerine yazılır ve k üzerinden integrali alınır. Bununla beraber durum yoğunluğu ifadesi kullanılarak bu integral ξ_k enerjisi üzerinden bir integrale dönüştürülebilir. Parabolik bantta üç-boyutlu durum yoğunluğu aşağıdaki denklem ile verilir.

$$D(\xi) = \frac{1}{\pi^2} k^2 \frac{dk}{d\xi} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \xi^{1/2} \quad (3.26)$$

Denklem (3.26), denklem (3.23)'de yerine yazılırsa elektriksel iletkenlik;

$$\sigma = \left(\frac{q}{3\pi^2 m^* k_B T} \right) \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int \tau(\xi) \xi^{3/2} \exp\left(-\frac{\xi}{k_B T}\right) d\xi \quad (3.27)$$

denklemini ile ifade edilir veya eşitlik (3.26) kullanılarak,

$$\sigma = \frac{1}{m^*} \int D(\xi) q^2 \langle \tau \rangle d\xi \quad (3.28)$$

yazılır. Burada durulma zamanının ortalama değeri;

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int \tau(\xi) f(\xi) d\xi}{\int f(\xi) d\xi} \quad (3.29)$$

eşitliği ile verilir. Bu eşitlik $f(\xi) = \xi^{3/2} \exp(-\xi/k_B T)$ dağılım fonksiyonu ile de aşağıdaki hale gelir.

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int \tau(\xi) \xi^{3/2} \exp(-\xi/k_B T) d\xi}{\int \xi^{3/2} \exp(-\xi/k_B T) d\xi} \quad (3.30)$$

$\langle \tau \rangle$ için verilen bu ifade, dejenere olmayan yarıiletkenler için tanımlanan (3.15) eşitliğinde yerine yazılırsa mobilite eşitliği elde edilir.

τ , sıcaklığa bağlı olduğundan mobilite de sıcaklığa bağlıdır. Bundan dolayı saçılma mekanizmaları sıcaklığa bağlı hesaplanmak zorundadır. Boltzmann denklemi aynı zamanda bu amaç doğrultusunda da kullanılabilir. Fakat öncelikle, k dalga vektörlü bir elektronun, k' dalga vektörlü başka bir duruma saçılmasını ifade eden birim zaman başına olasılık olarak bilinen $S(k, k')$ tanımlanmalıdır. Saçılma hızı hakkında bilgi bizi f_k 'nin değişme hızına yönlendirir ve bu da aşağıdaki denklem yardımı ile gerçekleşir [110].

$$\left(\frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{saç.} = \sum_{k \neq k'} [S(k', k) f_{k'} (1 - f_k) - S(k, k') f_k (1 - f_{k'})] \quad (3.31)$$

Sağda, parantezdeki ilk terim, k' durumundaki elektronların, k durumuna saçılma hızını ve ikinci terim ise k durumundan k' durumuna saçılanları gösterir. Toplam ifadesi, enerji ve momentum korunumlu tüm enerji durumlarını içerir. Dejenere olmayan elektron gaz durumunda f_k ve $f_{k'}$ küçüktür ve 1 ile kıyaslandığında ihmal edilebilir. $S(k', k) f_k^0 = S(k, k') f_{k'}^0$ denge prensibi uygulandığında, denklem (3.31) daha basitleşerek aşağıdaki denkleme dönüşür.

$$-\left(\frac{\partial f_k}{\partial t}\right)_{saç.} = \sum_{k \neq k'} S(k, k') \left[f_k - \frac{(f_{k'} f_k^0)}{f_k^0} \right] \quad (3.32)$$

Buradan da durulma zamanı yaklaşımını da içerecek şekilde daha ileri yaklaşımların neticesinde saçılma denklemleri;

$$-\left(\frac{\partial f_k}{\partial t}\right)_{saç.} = -(f_k - f_k^0) \sum_{k'} S(k, k') = \frac{-(f_k - f_k^0)}{\tau_s} \quad (3.33)$$

eşitliğine indirgenebilir [110]. Burada $\sum_{k'} S(k, k') = 1/\tau_s$ durulma zamanı yaklaşımını gösterir. τ_s , k durumundaki bir elektronun, k' durumuna saçılmadan önceki mevcut zamanı ifade eder. Bu, daha önce bahsedilen zaman sabiti τ_k ile aynı değildir. τ_s , pertürbe olmuş bir durumdan denge durumuna gelmesi için geçen süreyi göstermektedir. Bu esnada eletronlar pek çok kez bir enerji seviyesinden bir başka enerji seviyelerine saçılmaktadır.

$\sum_{k'} S(k, k')$ ise, Monte Carlo simülasyonlarını kullanmak suretiyle τ_k 'nin sayısal hesaplanmasına izin verir. τ_k için analitik ifadeler elde etmek için de uygun yaklaşımlar yapılmalıdır. Popüler bir yaklaşım, τ_k 'yi, momentum durulma zamanı τ_m 'ye eşitlemektir. Saçılmanın en fazla etkisinin elektronun hızını rastgele hale getirmek olduğu kabulü yapılırsa, konu ile ilgili uygun nicelik aşağıda verildiği gibi, momentum durulma zamanı olur.

$$\left\langle \frac{dk}{dt} \right\rangle = \frac{k}{\tau_m} = \sum (k' - k) S(k, k') \quad (3.34)$$

$S(k, k')$ olasılığı, saçılma süreçlerini karakterize eden Hamiltonyenden elde edilebilir. Dalga vektörü k 'dan k' 'ne bir elektronun geçiş yapabilme olasılığı

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |M(k, k')|^2 \delta(\xi_k - \xi_{k'}) \quad (3.35)$$

eşitliği ile verilir [111]. Enerji kazancı veya kaybı aşağıdaki eşitlik ile açıklanabilir.

$$S(k,k') = \frac{2\pi}{\hbar} |M(k,k')|^2 \delta(\xi_k - \xi_{k'} \pm \xi) \quad (3.36)$$

Burada $\pm \delta\xi$ enerji kazancını (+) veya kaybını (-) gösterir. $\delta(\xi_k - \xi_{k'})$ Dirac fonksiyonunu, M ise, ΔV perturbasyon potansiyelini göstermek üzere, aşağıdaki gibi bir matris elemanı olarak yazılır.

$$M(k,k') = \int_{\text{birim hücre}} \Psi_k(r) \Delta V \Psi_{k'}^*(r) dr \quad (3.37)$$

Burada, $\Psi_k(r)$, dalga fonksiyonu birim hücre üzerinden normalize edilir. Bir kristalde saçılma olayları sadece elektronun dalga fonksiyonunu etkilediği için elektronik dalga fonksiyonu aşağıdaki formda yazılır.

$$\Psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) \quad (3.38)$$

Denklemin sağ tarafında ilk terim periyodik kristal potansiyelini, ikinci terim ise düzlem dalgayı gösterir. Genelde perturbasyon potansiyeli, ΔV , aşağıdaki gibi bir Fourier serisinde ifade edilir,

$$\Delta V = \sum_q A(\vec{q}) \exp(i\vec{q}\cdot\vec{r}) \quad (3.39)$$

Burada $A(\vec{q})$, Fourier sabitidir. $\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$ ve $\exp(i\vec{q}\cdot\vec{r})$, periyodik fonksiyon terimleri, $q = k - k'$ olduğu zaman denklem (3.37)'deki matris elemanınının sıfır olduğunu ifade eden terimlerdir. Böylece,

$$M(\vec{k}, \vec{k}') = A(\vec{k} - \vec{k}') \int U_k(\vec{r}) U_{k'}^*(\vec{r}) d\vec{r} = A(\vec{k} - \vec{k}') = A(\vec{k} - \vec{k}') I(\vec{k}, \vec{k}') \quad (3.40)$$

Burada $I(k,k')$ örtüşme integralidir.

Örgü saçılmalarında bu durum daha çok komplekstir. Çünkü, örgüdeki atomun dalga fonksiyonu, çarpışmalar sonucunda değişeceği için, bu durum matris elemanında dikkate alınmayı zorunlu kılacaktır. Bu durumda toplam dalga fonksiyonu [111];

$$\chi_{k,n} = \Psi_k \prod_q \phi_{q,n} \quad (3.41)$$

ile verilir. Burada $\phi_{q,n}$, \vec{q} dalga vektörlü ve n durumlu Hermit polinomlarını gösterir. Uygulanabilir perturbasyon potansiyeli [111];

$$\Delta V = \sum_q A(\vec{q}) \left[a_q \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) + a_q^\dagger \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) \right] \quad (3.42)$$

ile ifade edilir. Burada a_q ve a_q^\dagger , sırasıyla yok etme ve yaratma operatörleri olup $\phi_{q,n}$ fonksiyonunu ve $M(k, k')$ matris elemanını aşağıdaki gibi değiştirir;

$$a_q \phi_{q,n} = \sqrt{n_q} \phi_{q,n-1} \quad \text{ve} \quad a_q^\dagger \phi_{q,n} = \sqrt{(n_q + 1)} \phi_{q,n+1} \quad (3.43)$$

$$M(k, k') = A(q) \left[n_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right]^{1/2} I(k, k') \quad (3.44)$$

Burada parantez içindeki “+” ve “-” işaretleri fonon absorpsiyon ve emisyon işlemlerini gösterir. Kusur veya yük saçılmalarında, saçılma olaylarından önceki ve sonraki enerjinin hemen hemen korunduğu ($\xi_k = \xi_{k'}$), unutulmamalıdır. Halbuki örgü saçılmalarında enerji korunmaz, yani $\xi_{k'} = \xi_k \pm \hbar\omega_q$ 'dır ve burada $\hbar\omega_q$ fonon enerjisidir. Elektron-elektron etkileşmeleri, perdeleme etkisinden dolayı örgü saçılmalarında ihmal edilirken, yük saçılmalarında Fourier katsayısı, $A(\vec{q})$ 'yu bir $q^2 / (q^2 + 1/\lambda_D)$ faktörü ile azaltmaya çalışır.

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon k T}{q^2 n}} \quad (3.45)$$

Burada λ_D , dejenere olmayan n konsantrasyonlu elektronlar için Debye uzunluğudur.

Şu ana kadar saçılma ve bunlarla ilişkili saçılma hızları hakkında belli bir yere gelindi. Şimdi daha dikkatli bir şekilde saçılma problemlerini ele alalım. Elektronun bir k vektörlü enerji seviyesinden bir başka k' lü enerji seviyesine saçılma olasılığı denklem (3.36) yardımıyla

$$S(k) = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int S(k, k') dk' = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int \frac{2\pi}{\hbar} |M(k, k')|^2 \delta(\xi_k - \xi_{k'}) dk' \quad (3.46)$$

olarak ifade edilir [111]. Burada V_c birim hücre formundaki kristalin hacmidir. Literatürde Ω olarak da kullanılır. $1/(2\pi)^3$ ise k' uzayında durum yoğunluğudur. Saçılma hızının tersi, saçılma olayları arasındaki ortalama serbest zaman anlamına gelir ki aşağıdaki denklem ile ifade edilir.

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_{k'} S(k, k') = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int S(k, k') dk' \quad (3.47)$$

Burada $\tau^{-1}(k)$ toplam saçılma hızıdır. Üç boyutlu integral aşağıdaki eşitlikte verilir.

$$\int_{k'} S(k, k') dk' = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} S(k, k') k'^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dk' \quad (3.48)$$

Matris elemanı de aşağıdaki formdadır.

$$|M(k, k')|^2 \propto |I(k, k')|^2 \equiv G(k, k') \quad (3.49)$$

Burada $G(k, k')$ örtüşme integrali olarak bilinir ve parabolik bantlar için k ve k' dalga vektörlerine karşılık gelen kristal potansiyelleri yaklaşık aynı olduğu için 1 kabul edilir. Birçok yarıiletkenin valans bandında olduğu gibi, parabolik olmayan bant yapılarında örtüşme integrali daha karmaşık yapıdadır [112].

Denklem (3.46), bir k dalga vektörü civarında, küçük bir dk bölgesinin dışında saçılma olasılığını gösterir. Bir başka deyişle bu denklem k' civarında diğer dk' bölgelerinden k dalga vektörü içine saçılmayı da açıklar. k' 'nin dışına saçılma hızı

$$\left[\frac{V_c}{4\pi^3} f(k, r, t) dk \right] \left[\frac{V_c}{8\pi^3} [1 - f(k', r, t)] dk' \right] S(k, k') \quad (3.50)$$

denklemini ile verilir. İlk terim dk' 'deki elektronun sayısını ve ikinci terim dk' 'deki mevcut durumların sayısını göstermektedir. Buradan saçılma hızı için [111],

$$\left[\frac{V_c}{4\pi^3} f(k', r, t) dk' \right] \left[\frac{V_c}{8\pi^3} [1 - f(k, r, t)] dk \right] S(k', k) \quad (3.51)$$

dk içine net saçılma hızı;

$$\left[-\frac{V_c}{4\pi^3} \frac{V_c}{8\pi^3} \int_{k'} [f(1 - f')S - f'(1 - f)S'] dk dk' \right] \quad (3.52)$$

ile verilir. Burada $f = f(k, r, t)$ ve $f' = f'(k', r, t)$ için kısaltılmış notasyonlar kullanılmıştır benzer şekilde $S = S(k, k')$ ve $S' = S(k', k)$ için de benzer kısaltılmış notasyonlar kullanılmıştır. Boltzmann denklemindeki çarpışma terimi tekrar hatırlanır ise, Denklem (3.55) ile verilen nicelik, $(V_c / 4\pi^3) dk (\partial f / \partial t)_{\text{car.}}$ 'ya eşit olmak zorunda olduğundan çarpışma terimi;

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{car.}} = -\frac{V_c}{8\pi^3} \int_{k'} [f(1 - f')S - f'(1 - f)S'] dk' \quad (3.53)$$

formunda yazılacaktır. Denklem (3.6) ile verilen Boltzmann denklemine dönülürse, dağılım fonksiyonu, f , Legendre polinom serisinde, $P_n(\cos \theta)$, açılırsa,

$$f(k) = \sum_n f_n(E) P_n(\cos \theta) \approx f_0(E) + f_1(E) \cos \theta \quad (3.54)$$

olur [111]. Burada θ, k ile E arasındaki açıyı göstermektedir. Denklem (3.54) ile gösterilen yaklaşım, Boltzmann denkleminde yazılırsa, f_0 ve f_1 için denklemler elde edilebilir. Elektrik alan sıfır olduğu zaman, f_1 büyüklüğünün de sıfır olacağı sonucuna varılabilir. Böylece, $f_1 E$ 'nin büyüklüğünün E^2 bağımlılığına sahip olacağı kabulünden yola çıkılırsa, küçük elektrik alanlar için de $f_1 E$ 'nin büyüklüğü küçük olacaktır. Sözü edilen makul nedenler doğrultusunda denklem (3.53) aşağıdaki şekilde yeniden yazılabilir.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{car.}} &= -\frac{V_c}{8\pi^3} \int_{k'} [f_0(1-f_0')S - f_0'(1-f_0)S'] dk' - \\ &\frac{V_c}{8\pi^3} \int_{k'} [f_1 \cos \theta (1-f_0'+f_0'S') - f_1' \cos \theta' (1-f_0+f_0'S)] dk' \end{aligned} \quad (3.55)$$

$E = 0$ şartını sağlamak için ilk terim, $(\partial f / \partial t)_{\text{car.}} = 0$ olur. Buna ek olarak, $S(k', k) = S(k, k')$ denge durumu için denklem (3.55) daha da basitleştirilerek;

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{car.}} = -\frac{V_c}{8\pi^3} \cos \int_{k'} S \left[f_1 \frac{1-f_0'}{1-f_0} - \frac{\cos \theta'}{\cos \theta} f_1' \frac{f_0}{f_0'} \right] dk' \quad (3.56)$$

eşitliği elde edilir [111]. Burada $\cos \theta' = \cos \theta \cos \theta_k - \sin \theta \sin \theta_k \cos \beta$ şeklinde tanımlıdır ve θ_k , k ile k' dalga vektörleri arasındaki açıyı gösterirken, β , k ve k' 'nü içeren düzlem ile k ve E 'yi içeren düzlem arasındaki açıyı göstermektedir. Referans [111,112]'de detayların bulunabileceği ve daha fazla yapılacak olan matematiksel ayarlamalarla, daha basit formdaki Boltzmann denklemi, aşağıdaki şekilde elde edilebilir.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{car.}} = -\frac{f-f_0}{\tau} = -\frac{f \cos \theta}{\tau(\xi)} \quad (3.57)$$

Buradan da durulma zamanı eşitliği elde edilir [111];

$$\frac{1}{\tau(\xi)} = -\frac{V_c}{8\pi^3} \int_{k'} S(k, k') \left[\frac{1-f_0'}{1-f_0} - \cos \theta \frac{f_1' f_0}{f_1 f_0'} \right] dk' \quad (3.58)$$

Yüksek saflıktaki örneklerde klasik Maxwell-Boltzmann istatistikleri uygulanabilir ve yaklaşımların sonucunda aşağıdaki eşitlik yardımı ile hesaplanabilen bir ortalama durulma zamanı, $\langle \tau \rangle$, elde edilir.

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^\infty \tau(x) e^{-x} x^{3/2} dx}{\int_0^\infty e^{-x} x^{3/2} dx} = \frac{1}{\Gamma(5/2)} \int_0^\infty \tau(x) e^{-x} x^{3/2} dx \quad (3.59)$$

Aşağıdaki integral ortalama durulma zamanının değerlendirilmesinde kullanılabilir.

$$\int x^n e^{ax} dx = e^{ax} \sum_{r=0}^n (-1)^r \frac{n! x^{n-r}}{(n-r)! a^{r+1}} \quad (3.60)$$

Bu denklem n=2 için aşağıdaki şekle indirgenir.

$$\int x^n e^{ax} dx = \frac{e^{ax}}{a} \left(x^2 - \frac{2x}{a} + \frac{2}{a^2} \right) \quad (3.61)$$

Elastik saçılmalarda, $f_0(\xi) \approx f_0(\xi')$ ve $f_1(\xi) = f_1(\xi')$ olduğundan denklem (3.58) aşağıdaki forma indirgenir.

$$\frac{1}{\tau(\xi)} = -\frac{V_c}{(2\pi)^3} \int_{k'} S(k, k') [1 - \cos \theta_k] dk' \quad (3.62)$$

Denklem (3.40) ile denklem (3.44) karşılaştırıldığında, denklem (3.58)'in durulma zamanı eşitliği safsızlık saçılmaları için yeniden aşağıdaki denklem şeklinde yazılabilir [111].

$$\frac{1}{\tau(\xi)} = -\frac{V_c}{(2\pi)^3} \int_{k'} \frac{2\pi}{\hbar} A^2 |k - k'| G(k, k') (1 - \cos \theta) \delta(\xi_k - \xi_{k'}) dk' \quad (3.63)$$

Örgü saçılmaları için ise,

$$\frac{1}{\tau(\xi)} = -\frac{V_c}{(2\pi)^3} \sum_{+, -} \int_{k'} \frac{2\pi}{\hbar} A^2 |k - k'| G(k, k') (1 - \cos \theta) \left(n_q \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\xi_k - \xi_{k'}) dk' \quad (3.64)$$

şeklinde olur [111]. Burada θ_k, θ_r gibi yeniden tasarlanmamıştır.

$$A(\vec{q}) = \frac{1}{V_c} \int \Delta V \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (3.65)$$

Denklem (3.62), (3.63), (3.64) ve (3.65) ΔV 'nin bilinmesi ile saçılma mekanizmaları için çözülebilir

İnelastik saçılmalarda $\xi \neq \xi'$, yani $f \neq f_1'$ olduğundan, $\tau(\xi)$, f_1' 'in bir fonksiyonu olduğundan dolayı (3.61) eşitliği çok kullanışlı olmayacaktır. Bu durumda yine aşağıdaki gibi verilen Boltzmann denkleminde dayalı çözümler yapılmak zorunda kalınacaktır [111];

$$\frac{q}{\hbar} E \cdot \vec{\nabla}_k f_1(\xi) = \frac{V_c}{8\pi^3} \cos\theta \int S(k, k') \left[f_1(\xi) \frac{1-f_0'(\xi)}{1-f_0(\xi)} - \cos\theta_k f_1'(\xi') \frac{f_0(\xi)}{f_0(\xi')} \right] dk' \quad (3.66)$$

Bu denklem $f_1(\xi)$ için Rode'un iterativ metodu gibi sayısal metodlar ile çözülmek zorundadır.

Özetlemek gerekirse elastik saçılmalar için elektronun mobilitesini elde etmek için Boltzmann iletim denklemini çözmek için durulma zamanı yaklaşımı uygun düşmektedir. Ancak polar optik fonon saçılması gibi inelastik saçılma sürecinde bu yaklaşım yetersiz kalmaktadır. Bu nedenle de durulma zamanı yaklaşımı yerine diğer numerik metotlar olan iterativ metot, değişken metot ve değişken metodu kullanarak geliştirilmiş pseudo-analitik metot kullanılmaktadır.

İterativ metot, Boltzmann İletim denklemini çözmek diğer metotlara göre daha hızlı olmakla birlikte içerisinde pek çok algoritma içerir. Herhangi bir saçılma mekanizması için uygulamaya konulmadan önce tüm sınırlamaların önceden belirlenmesi gereklidir. Böylece elektron mobilitesinin tam bir sayısal çözümü elde edilmiş olur. Mobilitiyi elde etmek için de üniform bir elektrik alan altında değişikliğe uğramış olasılık dağılım fonksiyonunu belirlemek ve bunu da Boltzmann denkleminde çözmek gerekir.

3.1.1 İki Boyutlu Sistemlerde Genel Saçılma Teorisi

Üçgen kuantum kuyusu içerisindeki elektronik enerji seviyeleri, heteroarayüzey boyunca 2-boyutlu dalga vektörü, k , $\vec{k} = (k_x, k_y)$, ve altbant indisi n ile karakterize edilir. Buna göre, elektronun dalga fonksiyonu ve enerjisi sırasıyla

$$\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}, z) = f_n(z) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (3.67)$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n + \hbar^2 k^2 / 2m^* \quad (3.68)$$

şeklinde verilir. Burada $f_n(z)$ kuantize dalga fonksiyonunu, m^* etkin kütleyi ve \hbar indirgenmiş Planck sabitini göstermektedir.

2 boyutlu taşıyıcıların saçılma sürecinde, 3-boyutlu durumda z yönünde momentumun korunumu aşağıdaki gibi tanımlı bir integralle 2-boyutluda yazılabilir [113].

$$M_{II}^2 = \int M_{III}^2 |I(q_z)|^2 dq_z \quad (3.69)$$

Burada M_{II} , ve M_{III} sırasıyla 2-boyutta ve 3-boyutta saçılma matris elemanları ve q_z hetero arayüze dik dalga vektörüdür. $I(q_z)$ integrali ise;

$$I(q_z) \equiv I_{mn}(q_z) \equiv \int f_m f_n \exp(iq_z z) dz \quad (3.70)$$

ile tanımlanır. Elektronların sadece en düşük altbandı (subband) işgal ettiği ve altbantlar arası saçılmaların olmadığı kabulü yapılmıştır. Bu durum için, $f(z)$ Fang-Howard değişken dalga fonksiyonu,

$$f(z) = \left(\frac{1}{2} b^3 z^2 \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} bz \right) \quad (3.71)$$

olarak verilir [114]. Burada b değişken parametresi;

$$b = \left(\frac{12m^* e^2}{\varepsilon_s \hbar^2} \right)^{1/3} \left(N_{boş.} + \frac{11}{32} n_s \right) \quad (3.72)$$

verilir. Burada ε_s statik dielektrik sabiti, $N_{boş.}$, 2B boşalma yük yoğunluğu, ve n_s ise 2B elektron gaz yoğunluğudur. Denklem (3.71), denklem (3.70)'de yerine yazılırsa

$$|I(q_z)|^2 = \frac{b^6}{(b^2 + q_z^2)^3} \quad (3.73)$$

elde edilir. Üç boyutlu saçılma matris elemanı M_{III} iyi tespit edildiği takdirde, iki boyutlu saçılma matrisi M_{II} ve farklı saçılma mekanizmaları için diferansiyel saçılma tesir kesiti $\nu(\theta)$ hesaplanabilir [107]. Aşağıda sadece iyonize safsızlık saçılması, akustik fonon, polar optik fonon saçılmaları ve arayüzey pürüzlülüğü için saçılma tesir kesitlerine yer verilmiştir.

Elastik saçılmalar için perdeleme etkisi, $S(q)$, [114]

$$S(q) = 1 + \frac{e^2 F(q) \Pi(q)}{2\varepsilon_s q} \quad (3.74)$$

dır. Burada, $F(q)$, Form faktörü;

$$F(q) \equiv \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' [f(z)]^2 [f(z')]^2 \times \exp(-q|z - z'|) \quad (3.75)$$

şeklinde bir eşitlikle verilir. Burada $\vec{q} = \vec{k}_2 - \vec{k}_1$ olup, \vec{k}_1 başlangıç durumundan \vec{k}_2 son duruma geçişi ifade eden 2B saçılma dalga vektörüdür ve $q = |\vec{q}|$. Denklem (3.71) denklem (3.75) de yerine yazılırsa Form Faktör için [115];

$$F(q) = b(8b^2 + 9bq + 3q^2) / 8(b + q)^3 \quad (3.76)$$

eşitliği elde edilir.

$\Pi(q)$, T sıcaklığına ve q 'ya bağlı statik kutuplanabilirlik fonksiyonudur.

$\Pi(q)$ için açık bir ifade

$$\Pi(q, T, \xi) = \int_0^\infty \frac{\Pi(q, 0, \xi)}{4k_B T \cosh^2[(\xi_F - \xi') / 2k_B T]} d\xi' \quad (3.77)$$

şeklinde hesaplanmıştır [116] Burada, ξ_F , Fermi enerjisi, k_B Boltzmann sabiti ve $\Pi(q, 0, \xi)$, $T = 0$ 'da kutuplanabilirlik fonksiyondur ve

$$\Pi(q, 0, \xi_F) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left\{ 1 - u(q - 2k_F \left[1 - \left[\frac{2k_F}{q} \right]^2 \right]^{1/2} \right\} \quad (3.78)$$

eşitliği ile verilir ve $u(x)$ birim basamak fonksiyonu ve k_F Fermi dalga vektörüdür.

İyonize safsızlık saçılmasından kaynaklanan saçılma tesir kesiti, $\nu(\theta)$,

$$\nu_{ii} = \frac{m^* Z^2 e^4}{8\pi\hbar^3 \epsilon_s^2} \int dz_i \left[\frac{F(q, z_i)}{qS(q)} \right]^2 N(z_i) (1 - \cos\theta) \quad (3.79)$$

verilir [117,118]. Burada $N(z_i)$ safsızlık dağılımını, θ , \vec{k}_1 ile \vec{k}_2 arasındaki saçılma açısı, $q = 2k|\sin(\theta/2)|$ ve burada $k = |\vec{k}_1| = |\vec{k}_2|$ 'dir. Form faktör ise aşağıdaki gibi tanımlıdır:

$$F(q, z_i) \equiv \int dz |f(z)|^2 \exp(-q|z_i - z|) \quad (3.80)$$

Akustik fononlar taşıyıcıları ya piezoelektrik etkileşmeler ya da deformasyon potansiyeli üzerinden, iki farklı ve birbirinden bağımsız yolla saçarlar. Bu saçılma mekanizmaları elastik saçılma olduğundan perdeleme etkisi dikkate alınır. Deformasyon potansiyel saçılması için diferansiyel saçılma tesir kesiti,

$$\nu_{DP}(\theta) = \frac{3bD^2 m^* k_B T (1 - \cos\theta)}{32\pi\hbar^3 c_L S(q)^2} \quad (3.81)$$

olarak verilir [113,119]. Burada D , deformasyon potansiyel sabiti, c_L boyuna elastik sabitidir. Piezoelektrik saçılma için de [113,120] diferansiyel saçılma tesir kesiti,

$$\nu_{PE}(\theta) = \frac{(eh_{14})^2 m^* k_B T}{4\pi\hbar^3} \times \frac{1}{qS(q)^2} \left[\frac{9}{32c_L} f_L(\omega) + \frac{13}{32c_T} f_T(\omega) \right] \times (1 - \cos\theta) \quad (3.82)$$

olarak verilir. h_{14} piezoelektrik tensör bileşeni, c_T , ise enine elastik sabitidir. $f_L(\omega)$ ve $f_T(\omega)$ boyuna ve enine fonon modları için boyutsuz Form faktördür. Bunlar

$$f_L(\omega) = (1 + 6\omega + 12\omega^2 + 2\omega^3)/(1 + \omega)^6 \quad (3.83)$$

$$f_T(\omega) = (13 + 78\omega + 72\omega^2 + 82\omega^3 + 36\omega^4 + 6\omega^5)/13(1 + \omega)^6 \quad (3.84)$$

şeklinde tanımlıdır. Burada $\omega = q/b$ dir.

Arayüzey pürüzlülüğünün neden olduğu saçılma için diferansiyel tesir kesitinin tersi olan durulma zamanı [121,122];

$$\frac{1}{\tau_{IFR}} = \frac{m^*}{\pi\hbar^3} \int_0^\pi (1 - \cos\theta) \frac{V_q^2}{\varepsilon_q^2} d\theta \quad (3.85)$$

olarak verilir. Burada V_q saçılma potansiyeli [117] ve ε_q dielektrik fonksiyondur [118] ve sırasıyla

$$V_q^2 = \pi\Delta^2 \lambda^2 \left[\frac{e^2 n_s}{\varepsilon} \right] \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^4}{4}\right) \quad (3.86)$$

$$\varepsilon_q = 1 + \frac{q_s}{q} \left\{ 1 - \theta(q - 2k_F) \left[1 - \left(\frac{2k_F}{q} \right)^2 \right]^{1/2} \right\} F(q) \quad (3.87)$$

eşitlikleri ile verilir. Burada q_s Thomas-Fermi perdeleme dalga sayısı, $q_s = e^2 m^* / 2\pi\hbar^2 \varepsilon_s$ 'dir.

Polar optik fononlar tarafından saçılma inelastik bir saçılma olduğu için saçılma tesir kesitini durulma zamanı yaklaşımından doğrudan hesaplamak zordur. Ancak bu yaklaşımda bazı kabullenmeler yapıldığında aşağıdaki gibi kapalı bir formda yazılabilmektedir [123].

$$\nu_{PO}(\theta) = \frac{m^* e^2 \hbar \omega_{LO}}{8\pi^2 \hbar^3 \varepsilon_0} \left[\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right] \frac{1}{1 - f_0(E)} \times \left[[1 - f_0(E + \hbar\omega_{LO})] N_q \int \frac{|I(q_z)|^2}{q_+^2 + q_z^2} dq_z + [1 - f_0(E - \hbar\omega_{LO})] (N_q + 1) \times \int \frac{|I(q_z)|^2}{q_-^2 + q_z^2} dq_z \right] \quad (3.88)$$

Burada $\hbar\omega_{LO}$ optik fonon enerjisi, N_q fonon işgal sayısı, f_0 Fermi Dirac dağılım fonksiyonu, q_+ ve q_- sırasıyla fonon soğurma ve emisyonuna ait 2B dalga vektörleridir. N_q , fonon işgal sayısı ve f_0 dağılım fonksiyonları sırasıyla,

$$N_q = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{LO}/k_B T) - 1} \quad (3.89)$$

$$f_0 = \frac{1}{\exp[(\xi - \xi_F)/k_B T] + 1} \quad (3.90)$$

olarak verilir. Saçılmalarda perdeleme etkisi optik fonon enerjisi yüksek olduğu için dikkate alınmamıştır.

Momentum durulma zamanının tersi, saçılma tesir kesitinin bir fonksiyonu olarak

$$\frac{1}{\tau(E)} = \int_0^{2\pi} v(\theta) d\theta \quad (3.91)$$

verilir. Burada

$$v(\theta) = v_{ii}(\theta) + v_{DP}(\theta) + v_{PE}(\theta) + v_{PO}(\theta) + v_{IFR}(\theta) + v_{alaş.}(\theta) + v_{dis.}(\theta) + \dots \quad (3.92)$$

Böylece birbirinden bağımsız her bir saçılma mekanizlarının toplamını veren mobilite eşitliği,

$$\mu = \frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle \quad (3.93)$$

yazılır. Burada ortalama durulma zamanı aşağıdaki şekilde verilir.

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \tau(E) E \frac{\partial f_0(E)}{\partial E} dE}{\int_0^{\infty} E \frac{\partial f_0(E)}{\partial E} dE} \quad (3.94)$$

3.2 Saçılma Mekanizmaları

Taşıyıcılar yarıiletken içerisinde hareket ederken çeşitli saçılmalara maruz kalırlar. Saçılmaya uğrayan taşıyıcıların momentumunda veya enerjisinde azalma olur. Bununla beraber mobilitesinde de bir değişme olur. Taşıyıcı mobilitesini belirleyen bu saçılma mekanizmaları, kristal içerisinde hareket eden elektronların momentumundaki değişme hızını veren durulma zamanı ile karakterize edilir. Elektron mobilitesi ile durulma zamanı arasında;

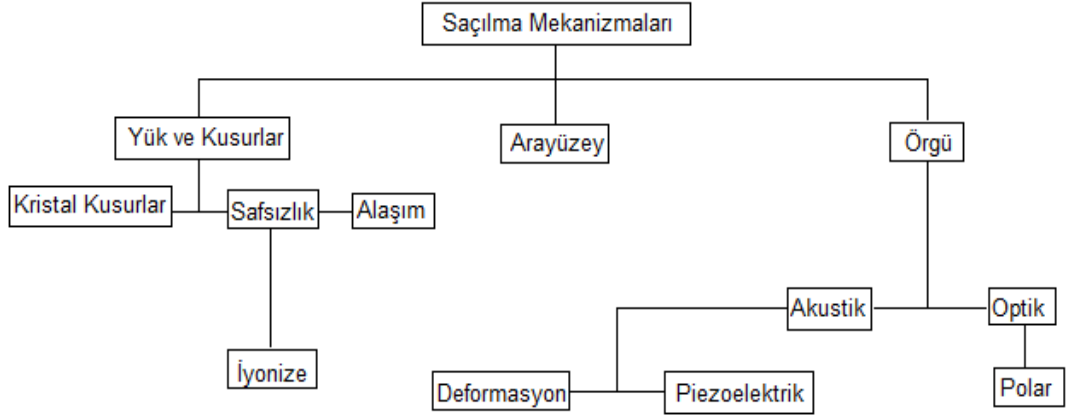
$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} \quad (3.95)$$

bağıntı vardır. Burada m^* etkin kütle, τ ise durulma zamanını göstermektedir. Elektronun hareketi farklı saçılma mekanizmaları tarafından sınırlandırılıyorsa toplam durulma zamanının tersi her bir saçılma mekanizmalarının terslerinin toplamı olarak ifade edilen Matthiessen's kuralı ile ifade edilir [107]

$$\frac{1}{\tau_t} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (3.96)$$

Burada, i her bir saçılma mekanizmasının göstermektedir.

Bu tez kapsamında incelenen AlGa(In)N/Ga(IN)N heteroeklemlili yapılarında oluşan 2DEG mobilitesi hesaplanırken iyonize safsızlık saçılmaları içinde yer alan arka plan (background) ve uzaklaştırılmış safsızlık (remote impurity) saçılmaları, deformasyon ve piezoelektrik akustik fonon saçılmaları, alaşım (alloy) düzensizliği saçılması, ara yüzey pürüzlülüğünden (interface roughness) kaynaklanan saçılma ve dislokasyon saçılmaları gibi elastik saçılma mekanizmaları ile inelastik polar optik fonon saçılması göz önüne alınmıştır ve bu saçılmalar Şekil 3.1'de şematik olarak gösterilmiştir.

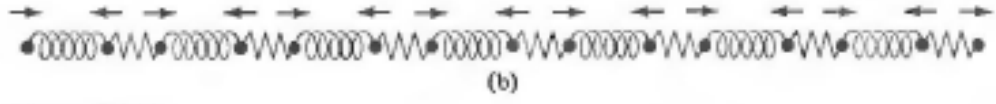
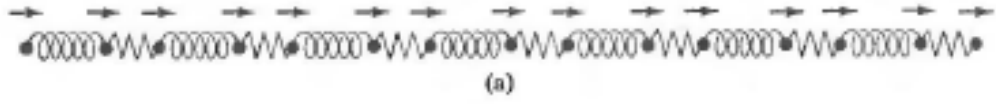


Şekil 3.1. Saçılma Mekanizmalarının şematik gösterimi

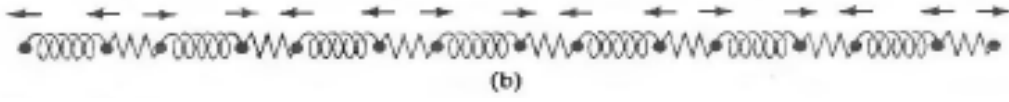
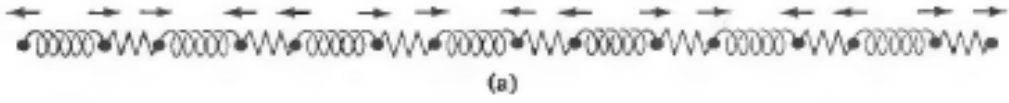
Boltzmann denklemlerinin çözümlerini tüm saçılma mekanizmaları için yapmak oldukça güç ve karmaşık olduğu için bu tezde literatürde 2-boyutlu yapılar için elde edilmiş analitik mobilite eşitlikleri kullanılmıştır.

3.2.1 Örgü Titreşimlerinden Kaynaklanan Saçılma

Örgü titreşimlerinin kuantumlanmasına fonon denir. Fononlar kristaldeki esnek dalgalardır. Fonon saçılması optik fonon ve akustik fonon olmak üzere iki şekilde gerçekleşir. Bunlar da kendi aralarında boyuna ve enine optik ve akustik olarak ayrılır. Şekil 3.2 Brillouin bölgesi merkezinde akustik ve optik fononları göstermektedir. Akustik kolda hücredeki iki atom aynı genlik ve faza sahiptir. Yani örgü bütün olarak salınır ve kütle merkezi ileri –geri veya sağa sola gider gelir. Optik kolda fononlar zıt fazda salınırlar ve kütle merkezi sabit kalır. Şekil 3.3’de $k = \pi/a$ sınırında titreşimler hücreden hücreye değişmekte ve iki kol dejenere olmaktadır [124].



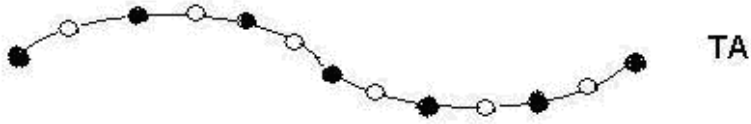
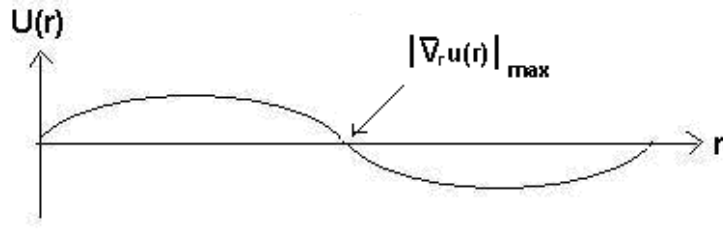
Şekil 3.2. Brillouin bölgesi merkezinde a-Akustik fonon b-Optik fonon



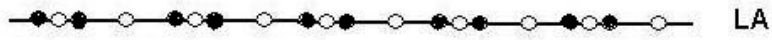
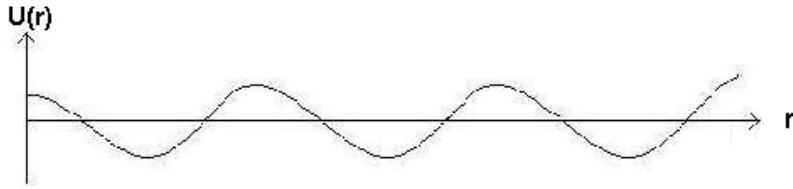
Şekil 3.3. Brillouin bölgesi sınırında $k = \pi/a$ a-Akustik fonon b-Optik fonon

3.2.1.1 Akustik fonon saçılması

Bir kristalde akustik fononlar taşıyıcıları iki farklı ve birbirinden bağımsız yolla saçarlar. Polar bir yarıiletkendeki elektronlar akustik modlarla ya deformasyon potansiyeli üzerinden ya da piezoelektrik etkileşme yoluyla elektrostatik olarak etkileşebilirler. Bu iki saçılma potansiyeli arasında 90° lik faz farkı vardır. Bu yüzden iki akustik fonon saçılmasının bileşenleri birbirinden bağımsız gerçekleşir. Şekil 3.4 boyuna akustik ve enine akustik fononlar için Brillouin bölgesinin merkezinde ve kenarında atomların yerdeğiřtirmesi şematik olarak verilmiştir.



(a)



(b)

Şekil 3.4 Boyuna akustik ve enine akustik fononlar için Brillouin bölgesinin (a) merkezinde ve (b) kenarında atomların yerdeğiřtirmesi.

3.2.1.1.a. Deformasyon Potansiyeli Saçılması

Bir kristal yapıda örgü noktalarındaki iyonlar herhangi bir dış etki olmadığında bile titreşirler. Bu titreşim hareketi bir elektrik alan meydana getirir ve bu etki elektronların hareketini etkileyerek saçılmalarına neden olur. Fononlar bu durumda katının yani kristal yapının belli bölgesinde gevşeme veya sıkışma yaratır. Böylece örgü sabitinde meydana gelen değişimler kristal potansiyelinin periyodikliğini değiştirir. Dolayısıyla örgü sabitine bağlı olarak enerji bant aralığının değişimi, LA fononlarının iletim (ϵ_c) ve değerlik (ϵ_v) bant kenarlarında bir değişim meydana getirir. Böylece düzgün bir sıkışma veya uzama ile saçılma potansiyeli arasındaki orantı katsayısı da deformasyon potansiyeli olarak tanımlanır.

Deformasyon potansiyel saçılmaları için saçılma potansiyeli gerilme (strain) ile orantılıdır. Frekansı ω_s ve dalga vektörü q_s olan bir akustik fonon tarafından meydana gelen yerdeğiştirme [125],

$$\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{a}u(\vec{r}, t) \quad (3.97)$$

ile verilir. Burada $u(\vec{r}, t)$ ise;

$$u(\vec{r}, t) = \exp[i(\vec{q}_s \cdot \vec{r} - \omega_s t)] \quad (3.98)$$

denklemi ile verilir. Bu denklemde \vec{a} yerdeğiştirmenin yönelimini ve u ise genliği ifade etmektedir. Yerdeğiştirme, yerdeğiştirme vektörünün diverjansı ile ifade edilirse,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{a} \cdot \vec{\nabla} u(\vec{r}, t) \quad (3.99)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t) = i\vec{q}_s \cdot \vec{a} u(\vec{r}, t) \quad (3.100)$$

denklemi elde edilir. Bu denklem, yerdeğiştirme ve dalga vektöre dik olan bir fononun enine bileşeni için $\vec{q}_s \cdot \vec{a} = 0$ olduğunu ve zorlamanın üretilmediğini gösterir. Bu yerdeğiştirme vektörünün diverjansının ortaya çıkardığı saçılma potansiyeli ise;

$$\Delta U(r, t) = \Xi \vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t) \quad (3.101)$$

ile verilir. Burada Ξ enerji biriminde olup, saçılma potansiyeli ile gerilme (strain) arasındaki orantı sabiti olarak tanımlanan deformasyon potansiyelidir. Bu saçılma potansiyeli en sade hali ile yukarıdaki eşitlik ile verilir.

Gaussien şekilde rastgele bir alan tarafından saçılma, dalga vektörü uzayında otokorelasyon fonksiyonu, $\langle |U(q)|^2 \rangle$ ile verilir. $U(q)$ saçılma potansiyelinin 2-boyutlu Fourier dönüşümüdür. Her bir saçılma mekanizması için elde edilen bu saçılma potansiyelleri çizgisel Boltzmann iletim denkleminde yerine konularak deformasyon potansiyelinin neden olduğu saçılmadan kaynaklanan analitik mobilite denkleme ulaşılır [128]. Bu saçılmadan kaynaklanan mobilite,

$$\mu_{DP} = \frac{16\rho e \mathcal{G}_1^2 \hbar^3}{3\Xi^2 k_B T m^{*2} b J_{DP}} \quad (3.102)$$

ile verilir. Burada \mathcal{G}_1 , boyuna akustik fonon hızı, ρ kristalin yoğunluğu, k_B Boltzmann sabiti, k elektron dalga vektörü ve m^* etkin kütlelerdir. J_{DP} bir integral sabiti olup;

$$J_{DP} = \int_0^{2k} \frac{q^4}{2\pi k^3 (q + q_s)^2 \sqrt{1 - (q/2k)^2}} dq \quad (3.103)$$

olarak tanımlıdır. Burada da $q = 2k \sin(\theta/2)$ olup θ saçılma açısıdır. b faktörü ise Fang-Howard eşitliği olarak bilinir [126] ve

$$b = \left(\frac{33e^2 m^* n_s}{8\varepsilon_s \hbar^2} \right)^{1/3} \quad (3.104)$$

olarak verilir. n_s kuyu içindeki iki boyutlu taşıyıcı yoğunluğu ve ε_s ise GaN'ın statik dielektrik sabitidir. q_s ise iki boyutta perdeleme dalga vektörü olup,

$$q_s = \frac{e^2 m^*}{2\pi \hbar^3 \varepsilon_s} F(q) f(0) \quad (3.105)$$

eşitliği ile tanımlıdır. Burada $F(q)$ Form faktörü olup [128];

$$F(q) = \frac{8 + 9(q/b) + 3(q/b)^2}{8[1 + (q/b)]^3} \quad (3.106)$$

ile tanımlıdır. $f(0)$ ise elektronlar tarafından dolu olma olasılığı olup, tüm elektronların Fermi enerjisinde olduğu kabul edilmiş ve 1 alınmıştır.

3.2.1.1.b. Piezoelektrik Saçılması

Birim hücre başına iki veya daha fazla atom içeren bazı yarıiletkenler için kristalin inversiyon simetrisi yoktur. Bu kristallerde boyuna akustik (LA) fononlar tarafından oluşturulan zorlama, iyonları polarize ederek zaman ve konuma göre değişen bir iç elektrik alan oluşturur. Bu oluşan elektrik alanının etkisinde elektronlar saçılmaya uğrarlar. Bu saçılmaya piezoelektrik saçılması denir. Elektronlar için saçılma potansiyeli;

$$\Delta U(\vec{r}, t) = -q\psi(\vec{r}, t) \quad (3.107)$$

eşitliği ile verilir. Burada $\psi(\vec{r}, t)$ iç alanlarla ilgili olan elektrostatik potansiyeldir ve

$$\psi(\vec{r}, t) = \int E(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (3.108)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (3.77)'nin çözülebilmesi için piezoelektrik etkileşmelerin neden olduğu alanların belirlenmesi gerekmektedir. Elektriksel yerdeğiştirme \vec{D} , elektrik alan \vec{E} ve kutuplanma \vec{P} olmak üzere bunlar arasında ω frekansında

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon(\omega)\vec{E} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}(\omega) \quad (3.109)$$

şeklinde bir ilişki vardır. Burada ε_0 boşluğun dielektrik sabitidir. Düşük frekans limitlerinde

$$\vec{D}(0) = \varepsilon(0)\vec{E} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}(0) \quad (3.110)$$

ile verilir. Burada $\varepsilon(0)$ statik dielektrik sabiti ve $\varepsilon(0) = \varepsilon_r(0)\varepsilon_0$ eşitliği ile verilir. Fiziksel olarak $\vec{P}(0)$ 'ın kaynağı kutuplanma yükleri (genelde atomik kor ve iyonik

dipoller) iken $\vec{D}(0)$ 'ın kaynağı uzay ve yüzey yükleri gibi gerçek dış yüklerdir. Statik dielektrik sabiti piezoelektrik kutuplanma içermediğinden denklem (3.110)'a bu etkiyi içerecek ilave bir terim gelmelidir.

$$\vec{D}(0) = \varepsilon(0)\vec{E}(\vec{r}, t) + e_{pz}\vec{\nabla}u(\vec{r}, t) \quad (3.111)$$

Burada e_{pz} piezoelektrik sabiti olup birimi C/m^2 'dir. Gerçek olmayan yüklerle, elektrik alanın kaynağı piezoelektrik, iyonik ve atomik kutuplanmalardır. Bu durumda elektrik alan;

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -e_{pz}\vec{\nabla}u(\vec{r}, t) / \varepsilon(0) \quad (3.112)$$

elde edilir. Denklem (3.107), (3.108) ile denklem (3.112) kullanılarak yerdeğiştirme terimi içeren saçılma potansiyeli aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\Delta U(\vec{r}, t) = -qe_{pz}u(\vec{r}, t) / \varepsilon(0) \quad (3.113)$$

Denklem (3.98) ve denklem (3.99) ile denklem (3.113) strain terimi ile beraber

$$\Delta U(\vec{r}, t) = iqe_{pz}\vec{\nabla}u(\vec{r}, t) / \varepsilon(0)q_s \quad (3.114)$$

denklemini elde edilir.

Piezoelektrik etkileşmelerin açısız bağımlılığı oldukça karmaşık olduğu için, Hutson tarafından önerilmiş olan [127] elektromekanik çiftleşme katsayısının küresel ortalamasının alındığı basitleştirilmiş bir denklem kullanılır ve elektronları saçan saçılma potansiyeli elde edilir. Bu saçılma potansiyeli lineer Boltzmann denkleminde yerine konularak piezoelektrik saçılmadan kaynaklanan analitik mobilite eşitliğine ulaşılır [126].

$$\mu_{PE} = \frac{\pi \varepsilon_s \hbar^3 k}{eK^2 k_B T m^{*2} J_{PE}} \quad (3.115)$$

eşitliğinde K , elektromekaniksel çiftleşme katsayısıdır. Elektromekaniksel çiftleşme katsayısının karesi

$$K^2 = \frac{\varepsilon_{LA}^2}{\varepsilon_s c_{LA}} + \frac{\varepsilon_{TA}^2}{\varepsilon_s c_{TA}} \quad (3.116)$$

eşitliği ile verilir. Bu eşitlikte ε_{LA} ve ε_{TA} etkin piezoelektrik kasayıları, c_{LA} ve c_{TA} ise ortalama elastik sabitleridir. J_{PE} integrali ise;

$$J_{PE} = \int_0^{2k} \frac{F(q)}{k^2 (q + q_s)^2 \sqrt{1 - (q/2k)^2}} q^3 dq \quad (3.117)$$

eşitliğinden elde edilir.

3.2.1.2 Optik fonon saçılması

Polar optik fonon saçılması, nitratlar gibi polar yarıiletkenlerdeki bağların iyonikliğinden kaynaklanan örgü titreşimlerinin ortaya çıkardığı elektriksel alanla, hareketli bir yük arasındaki etkileşimden kaynaklanır. Optik fononlarda da akustik fononlarda olduğu gibi iki bağımsız saçılma mekanizması vardır. Bunlar deformasyon potansiyeli ve polar optik fonon saçılmalarıdır. Optik fononlar için deformasyon potansiyel saçılması birim hücredeki atomların kutuplanmasından dolayı akustik fononlar için verilenlerle aynıdır. Akustik fononda olduğu gibi boyuna optik fononlar tarafından deformasyon potansiyel saçılmasında yine birim hücredeki uzama veya sıkışma miktarı belirler. Akustik koldaki deformasyon potansiyeli saçılmasındakinden tek fark Brillouin bölgesi merkezinde birim hücre atomlarının birbirine zıt titreşmeleridir. Bundan dolayı birim hücrede atomlar arasındaki bağıl yerdeğiştirme göz önüne alınmalıdır. Bu durumda

$$\delta \vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}_1(\vec{r}, t) - \vec{u}_2(\vec{r}, t) \quad (3.118)$$

olup $[\vec{u}_1(r, t)]$ ve $[\vec{u}_2(r, t)]$ verilen denklem (3.97) ve denklem (3.98) formundadır. İletkenlik ve valans bant kıyılarındaki değişimden saçılma potansiyeli bu bağıl yerdeğiştirme ile orantılı olmak zorundadır. Optik fonon potansiyel saçılması için saçılma potansiyeli;

$$\Delta U(\vec{r}, t) = D\delta\vec{u}(\vec{r}, t) \quad (3.119)$$

eşitliği ile verilir ve $\delta\vec{u}(\vec{r}, t)$ ise

$$\delta\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{a}\delta u(\vec{r}, t) \quad (3.120)$$

şeklinde ifade edilir. D ise deformasyon potansiyel sabiti olup enerji birimindedir.

Optik fonon polar mod saçılması, birim hücredeki iyonların kutuplanmasından kaynaklanan elektrik alandan ortaya çıkar. Boyuna optik fonon bileşenin neden olduğu bu kutuplanma iyonik kutuplanma \vec{P}_i 'ye eşittir. Saçılma potansiyeli denklem (3.107) ve denklem (3.108)'den elde edilir. Burada iç elektrik alan düşük ve yüksek frekans limitlerine göre ifade edilir.

$$\vec{D}(0) = \varepsilon(0)\vec{E} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}(0) \quad (3.121)$$

ve

$$\vec{D}(\infty) = \varepsilon(\infty)\vec{E} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}(\infty) \quad (3.122)$$

Denklem (3.121)'de düşük frekans polarizasyonu, atomik ve iyonik polarizasyonun toplamıdır.

$$\vec{P}(0) = \vec{P}(\infty) + \vec{P}_i \quad (3.123)$$

Denklem (3.123), denklem (3.121)'de yazılıp ve sonra bunu da denklem (3.122)'de yerine yazarak

$$\varepsilon(0)\vec{E} = \varepsilon(\infty)\vec{E} + \vec{P}_i \quad (3.124)$$

veya

$$\vec{D}(0) = \varepsilon(\infty)\vec{E} + \vec{P}_i \quad (3.125)$$

elde edilir. Denklem (3.125)'den birim hücrenin optik fonon polarizasyonundan kaynaklanan iç alanlar belirlenebilir.

Bir birim hücrenin kutuplanması $\vec{P}_i(\vec{r}, t)$, birim hücredeki iyonların bağlı yerdeğiştirmesi $\delta\vec{u}(\vec{r}, t)$ ve etkin iyonik yük e^* ile,

$$\bar{P}_i(\vec{r}, t) = \frac{e^*}{\Omega} \delta\bar{u}(\vec{r}, t) \quad (3.126)$$

verilir. Bu denklemde $\Omega = V/N$ Wigner-Seitz birim hücrenin hacmidir ve e^* Born etkin yük olarak tanımlanır:

$$e^* = \Omega \omega_{LO} \varepsilon(\infty) \rho^{1/2} \left[\frac{1}{\varepsilon(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon(0)} \right] \quad (3.127)$$

Burada ρ hacimsel kütle yoğunluğudur. Uzay veya yüzey yükünün olmadığı düşünülürse denklem (3.125) ve (3.126) bir dış alan verir.

$$\bar{E}(\vec{r}, t) = -\frac{-e^*}{\Omega \varepsilon(\infty)} \delta\bar{u}(\vec{r}, t) \quad (3.128)$$

Denklem (3.107), (3.108) ve (3.128) kullanılarak polar mod saçılması için saçılma potansiyeli;

$$\Delta U(\vec{r}, t) = \frac{-qe^*}{\Omega \varepsilon(\infty)} \int \delta\bar{u}(\vec{r}, t) . d\vec{r} \quad (3.129)$$

veya denklem (3.98) ve (3.120)'den

$$\Delta U(\vec{r}, t) = \frac{iqe^*}{\Omega \varepsilon(\infty) q_s} \delta\bar{u}(\vec{r}, t) \quad (3.130)$$

olarak elde edilir.

Denklem (3.119) ile (3.130) karşılaştırılırsa optik fonon bileşenleri olan deformasyon potansiyeli ve polar mod saçılması için saçılma potansiyelleri arasında 90° lik faz farkı olduğu ve bunların birbirinden bağımsız olduğu görülmektedir.

Basit bir kristal yapıda polar optik fonon saçılması (3.130) eşitliği ile verilen bir saçılma potansiyeline sahiptir. Polar optik fonon saçılması, inelastik bir saçılma olduğundan Boltzmann denkleminde durulma zamanı çözümü, örgü titreşimlerinin optiksel modlarının saçılması için uygun düşmemektedir. Çünkü τ , elektronların enerjisinin bir fonksiyonu olmak yerine, pertürbasyonun şiddetinin bir fonksiyonu

olarak karşımıza çıkmaktadır. AlGaIn/GaN gibi HEMT yapılarında GaN'ın LO fonon enerjisi oda sıcaklığında elektron enerjisinden çok büyük olduğu için Boltzmann denkleminin gerekli sayısal çözümlerini elde etmeyi ve analitik çözümler yapmayı güçleştirmektedir.

Yukarıda bahsedildiği üzere iteratif teknik bu tip saçılma mekanizmaları için oldukça doğru sonuç vermekle birlikte analitik forma indirgemek güçtür. Diğer taraftan, değişken tekniği ise iteratif teknikle kıyaslandığında hem daha fazla matematiksel hesaplamalar içermekte hem de belli bir doğruluk derecesine kadar kapalı bir formda yazılabilmektedir. Ziman ise Howard ve Sondheimer'ın yaptığı gibi Bessel fonksiyonları yardımıyla mobiliteyi açmak için ilk iki değişken terimi gözardı ederek çözümler elde etmiştir. Hesaplamalarımızda Ridley'in polar optik fononlar için türettiği mobilite eşitliği kullanılmıştır [128]. Bu eşitlik de

$$\mu_{LO} = \frac{4\pi\epsilon_p \hbar^2}{e\omega m^{*2} Z} [\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1] \quad (3.131)$$

olarak tanımlıdır. Burada

$$\frac{1}{\epsilon_p} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \quad (3.132)$$

olup, ϵ_∞ ve ϵ_s sırasıyla GaN yarıiletkenin yüksek ve düşük frekanslardaki dielektrik sabitleridir. Z ise 2-boyutlu üçgen kuantum kuyusunun genişliğidir.

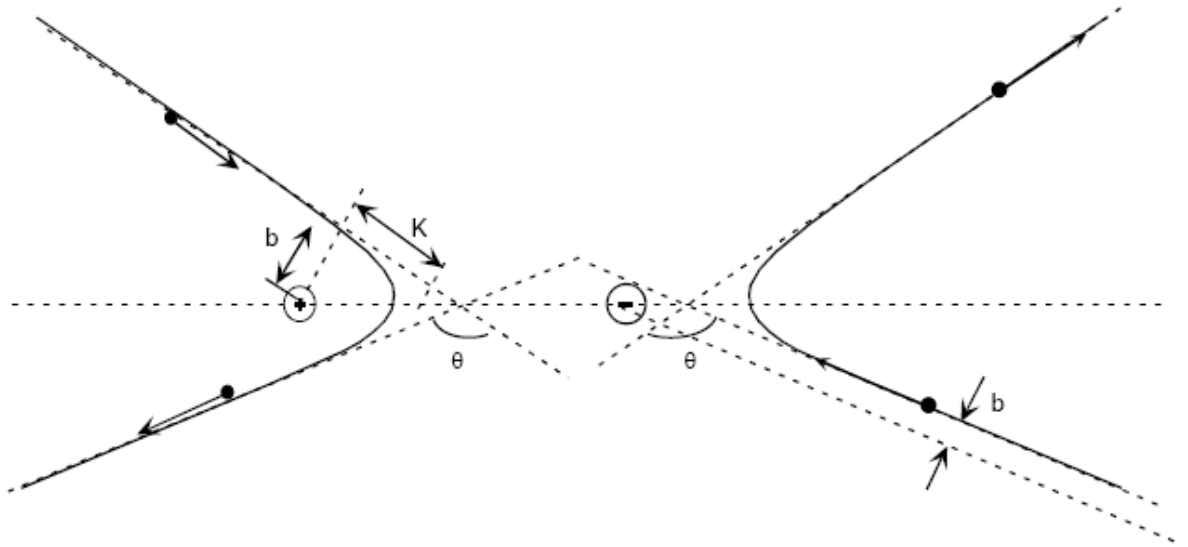
3.2.2 İyonize Olmuş Safsızlık Saçılması

Şekil 3.5'de gösterildiği gibi iyonize olmuş safsızlık saçılması kusurlar veya katkılanan safsızlıklar tarafından oluşturulan yüklü merkezlerin uzun mesafeli perdelenmiş Coulomb potansiyelinin serbest taşıyıcıları saptırması ile oluşur. Conwell-Weisskopf ve Brooks-Herring yaklaşımları bu saçılma mekanizması için bilinen yaklaşımlar içinde yer alırlar [129]. Mükemmel kristal potansiyeli üzerine pertürbasyon, Zq yüklü iyon için Coulomb enerjisi [125];

$$\Delta U(\vec{r}) = \pm Zq^2 / 4\pi\epsilon(0)\vec{r} \quad (3.103)$$

eşitliği ile verilir. Burada \vec{r} iyon ve yük taşıyıcıları arasındaki mesafedir. İyon ve taşıyıcılardaki yükler aynı polariteye sahip olursa artı işareti geçerli, zıt polariteye sahip olurlarsa eksi işareti geçerlidir.

2DEG için elastik iyonize olmuş safsızlık saçılması, uzaklaştırılmış safsızlık saçılması ve arka plan safsızlık saçılması şeklinde iki kısımda incelenebilir.



Şekil 3.5 Yüklü merkezlerin uzun mesafeli Coulomb potansiyelinin serbest taşıyıcıları saptırması.

3.2.2.1 Uzaklaştırılmış Safsızlık Saçılması

Bu safsızlık saçılması, heteroeklemin katkılanan bariyer tabakasındaki vericiler ile kuantum kuyusundaki 2-boyutlu elektronların uzun menzilli Coulomb etkileşimleri ile meydana gelir. Bu yüzden elektrostatik potansiyel, düşük sıcaklıklarda mobilitiyi sınırlar. Bu saçılma mekanizması için mobilité eşitliği [130, 131]

$$\mu_{RI} = \frac{64\pi \hbar^3 \epsilon S_0 (2\pi n_s)^{3/2}}{e^3 m^*} \left[\frac{1}{Z^2} - \frac{1}{(Z+d)^2} \right]^{-1} \quad (3.134)$$

şeklindedir. Burada n_s 2-boyutlu taşıyıcı yoğunluğu, d boşalma tabakasının genişliğidir ve $d = n_s / N_d$ eşitliğinden elde edilir. N_d ise verici tip katkılama yoğunluğudur. S_0 perdeleme dalga vektörü ise;

$$S_0 = \frac{e^2 m^*}{2\pi\epsilon \hbar^2} \quad (3.135)$$

eşitliği ile ifade edilir.

3.2.2.2 Arkaplan Safsızlık Saçılması

2 boyutlu elektron gazının AlGa(In)N/Ga(In)N heteroarayüzeyinin Ga(In)N tarafında oluşmasından dolayı arka plan safsızlıkların neden olduğu bir saçılma meydana gelir. Bu saçılmadan kaynaklanan mobilite [130];

$$\mu_{BI} = \frac{8\pi \hbar^3 \epsilon^2 k_F^2 I_B(\beta)}{e^3 m^{*2} N_{BI}} \quad (3.136)$$

denklemi ile verilir. N_{BI} arkaplan safsızlıklar nedeniyle potansiyel kuyusundaki iki boyutlu safsızlık yoğunluğudur ve $N_{BI} = N_{3BI} x Z$ ile elde edilir. θ , saçılma açısı olmak üzere $I_B(\beta)$ integrali

$$I_B(\beta) = \int_0^\pi \frac{\sin^2 \theta d\theta}{(\sin \theta + \beta)^2} \quad (3.137)$$

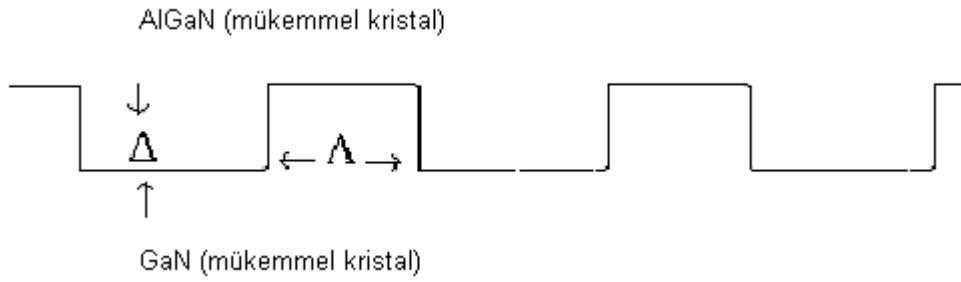
$$\beta = S_0 / 2k_F \quad (3.138)$$

şeklinde verilir. Burada k_F Fermi dalga vektörü olup $k_F = \sqrt{2\pi n_s}$ eşitliği ile verilir.

3.2.3 Ara Yüzey Pürüzlülüğünden Kaynaklanan Saçılma

Kristal büyütme tekniklerindeki ilerlemelere rağmen potansiyel dalgalanmalarının olmadığı, mükemmel arayüzeyle hetero yapılar büyütme mümkün değildir. İdeal olmayan büyütme koşulları ya da tabakaların üst üste gelmesi sırasında ara yüzeyde geometrik düzensizlikler meydana gelir. Ara yüzeylerde meydana gelen bu düzensizlikler o bölgede bulunan elektronların hareketlerini sınırlayarak, elektronların saçılmasına neden olur.

Şekil 3.6'da mükemmel kristal yapısında olduğu düşünülen GaN ile AlGaN arasında ki ara yüzey görülmektedir. Burada Δ , ortalama sapma, Λ ise ara yüzey düzleminde düzgün oranda sapma uzunluğudur.



Şekil 3.6 GaN/AlGaN gibi yaklaşık olarak aynı örgü sabitlerine sahip iki materyal arasındaki ara yüzeylerin şematik gösterimi.

Mobilite üzerine arayüzey pürüzlülüğünün etkisini tahmin etmenin kesin bir yolu yoktur. Arayüzeydeki dalgalanmaların uzaysal olarak tamamıyla rastgele olduğunu ve de bu dağılımın Gaussian bir dağılıma sahip olduğu kabul edilir. Bu da matematiksel yaklaşımlara kolaylık sağlar. Bu durumda potansiyeldeki değişim Taylor açılımının 1.dereceden yaklaşımı ile

$$\Delta V(\vec{r}) = \frac{e^2 n_s}{2\epsilon_s} \Delta(\vec{r}) \quad (3.139)$$

verilir. Perturbasyon alınarak

$$\langle \Delta(\vec{r}) \Delta(\vec{r}') \rangle = \Delta^2 \exp \left[-\frac{(\vec{r} - \vec{r}')^2}{\Lambda^2} \right] \quad (3.140)$$

eşitliği elde edilir. Burada \vec{r} ve \vec{r}' 2B uzaysal koordinatlarıdır. Ara yüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan mobilite[126] ;

$$\mu_{IFR} = \left(\frac{2\varepsilon_s}{e^2 n_s \Lambda \Delta} \right)^2 \frac{m^*}{\hbar^3 J_{IFR}} \quad (3.141)$$

ile verilir. J_{IFR} integrali ise denklem (3.142)'ki gibidir.

$$J_{IFR} = \int_0^{2k} \frac{\exp(-q^2 \Lambda^2 / 4)}{k^3 (q + q_s)^2 \sqrt{1 - (q/2k)^2}} q^4 dq \quad (3.142)$$

3.2.4 Alaşım Saçılması

Bariyer tabakasının sonlu olmasından dolayı 2DEG'dan bariyere sızan elektronlar bariyerdeki AlGa(In)N, alaşımları tarafından saçılırlar. Bu saçılmaya alaşım saçılması denir. Kuyuda hapsolan elektronların bariyer bölgesine girip saçılmasını engellemek için bariyer ile kuyu arasında AlN ara tabakalar kullanılmaktadır. Alaşım saçılmasından kaynaklanan mobilite [132,133];

$$\mu_{alaş.} = \frac{e\hbar^3}{m^{*2} x(1-x)\Omega \langle V \rangle^2 I_{alaş.}} \quad (3.143)$$

eşitliği ile verilir. Burada Ω (GaN) birim hücrenin hacmidir. $\langle V \rangle$, GaN ve AlN arasındaki iletkenlik-bant ofset değerleri olup, enerji bant aralıkları arasındaki fark, elektron ilgileri arasındaki fark veya elektronegatiflikleri arasındaki fark alınabilir.

$$I_{alaş.} = \int_{-\infty}^0 |\chi'_0(z)|^4 dz \quad (3.144)$$

$$\chi'_0(z)^2 = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_s V_0} \left(\frac{n_s}{2} + N_{bos.} \right) \exp \left[\left(8m^* V_0 / \hbar^2 \right)^{1/2} Z \right] \quad (3.145)$$

ile verilir.

3.2.5 Dislokasyon Saçılması

Safir ile III-V grubu yarıiletkenler arasındaki büyük örgü uyumsuzluğundan dolayı yarıiletken mobilitesini yani kalitesini azaltmaya çalışan büyük yoğunluklu dislokasyonlar ortaya çıkar. Dislokasyonların kristal içerisinde ortaya çıktığı bölgeler ideal durumdaki bölgelere göre daha yüksek enerjili bölgelerdir. Bundan dolayı yüksek enerji bölgeleri olarak da adlandırılmaktadır. Dislokasyonlar çizgisel kusur olarak bilinirler ve bu kusurlar taşıyıcıları saçarak taşıyıcı mobilitesini azaltırlar. Katkılama seviyesi çok olduğunda perdeleme olaylarından dolayı dislokasyon saçılması azalır. Aynı zamanda alt tabaka örgü uyumsuzluğundan doğan dislokasyon yoğunluğunu en aza indirmek için tampon tabakalar kullanılabilir. Safir üzerinde GaN büyütmeden önce AlN tampon tabakası kullanılarak GaN'daki mevcut elektron yoğunluğu azaltılırken mobilite artırılması sağlanmaktadır. Dislokasyon saçılmasından kaynaklanan mobilite [134];

$$\mu_{dis} = \frac{\hbar^3 \varepsilon^2}{N_{dis} m^{*2} e \rho_L^2} (16\pi k_F^4) \frac{1}{A(q_{TF} / 2k_F)} \quad (3.146)$$

$$A(q_{TF} / 2k_F) = \int_0^1 \frac{du}{(u + q_{TF} / 2k_F)^2 \sqrt{1-u^2}} \quad (3.147)$$

ile ifade edilir. Burada N_{dis} , birim yüzey başına 2-boyutlu elektron gazı içinde bulunan çizgi dislokasyonların yoğunluğudur. ρ_L çizgi yük yoğunluğu olup iyi bir yaklaşıklıkla ef/c_0 olarak verilebilir. Burada c_0 wurtzite GaN'ın (0001) doğrultusundaki örgü parametresi ve f ise Weimann ve arkadaşları tarafından hesaplanmış dolu durumların kesridir [135]. ε materyalin dielektrik sabitidir. $q_{TF} = 2/a_B^*$ olup iki boyutlu Thomas-Fermi dalga vektörüdür. a_B^* ise materyaldeki etkin Bohr yarıçapıdır [136]

Yukarıda bahsedilen saçılma mekanizmalarına ait analitik mobilite eşitliklerinde kullanılan GaN'a ait sayısal değerler Tablo 3.1 de verilmiştir.

Tablo 3.1 Hesaplarda kullanılan GaN parametreleri.

Elektronun etkin kütlesi (m_0)	$m^* = 0.22$
Yüksek frekans dielektrik sabiti (ϵ_0)	$\epsilon_\infty = 5.35$
Statik dielektrik sabiti (ϵ_0)	$\epsilon_s = 8.9$
LO-fonon enerjisi (meV)	$\hbar\omega = 92$
Boyuna akustik fonon hızı (m/s)	$v_L = 6.56 \times 10^3$
Kristalin yoğunluğu (kg/m^3)	$\rho = 6.15 \times 10^3$
Deformasyon potansiyeli (eV)	$\Xi = 8.3$
Elastik sabitleri (10^{11} N/m^2)	$c_{LA} = 2.65$
	$c_{TA} = 0.442$
Elektromekaniksel çiftlenim sabiti	$K^2 = 0.039$
Elektron dalga vektörü (m^{-1})	$k = 7.27 \times 10^8$
Çizgisel yük yoğunluğu (C m^{-1})	$\rho_L = 3.085 \times 10^{-10}$
Kristalin dielektrik sabiti (F.m^{-1})	$\epsilon = 8.58 \times 10^{-11}$
2 boyutlu Thomas-Fermi dalga vektörü (m^{-1})	$q_{TF} = 8.68 \times 10^8$
Etkin Bohr yarıçapı (Å)	$a_B^* = 23.1$

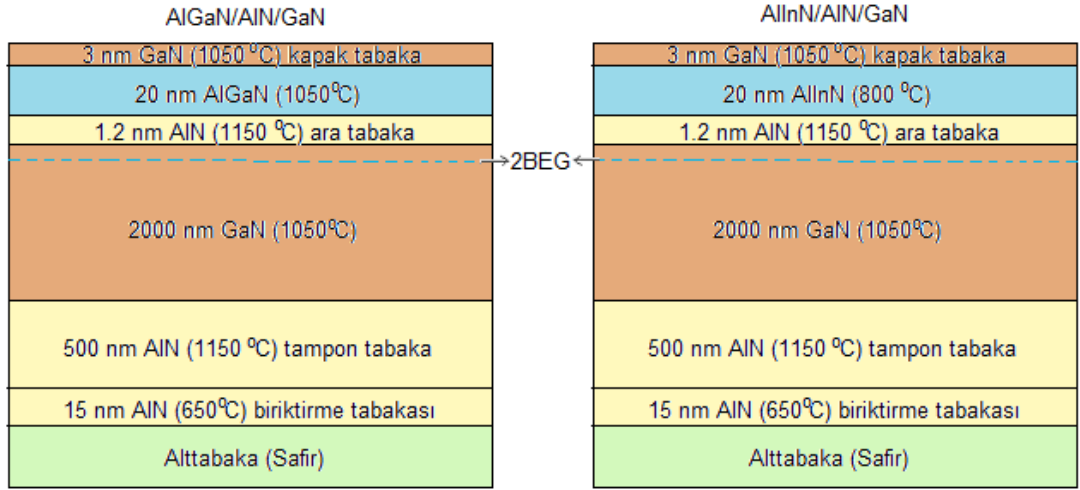
4. DENEYSEL SONUÇLAR

Bu tez çalışması incelen örneklerin yapısına göre üç kısımdan oluşmaktadır. İlk kısımda, girişte vurgulandığı üzere son yıllarda AlGa_N/AlN/GaN HEMT yapılarına alternatif olarak önerilen AlInN/AlN/GaN HEMT'in düşük alan iletim özellikleri AlGa_N/AlN/GaN HEMT yapısı ile karşılaştırmalı olarak incelendi. Bu iki örnek Bilkent Üniversitesi Nanoteknoloji Araştırma Merkezi (NANOTAM) laboratuvarında metal organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD) tekniği ile üretildi. Tezin ikinci kısmında ise Virginia Commonwealth Üniversitesinde bulunan MOCVD tekniği ile üretilen AlInN/GaN HEMT yapılarının mobilite ve taşıyıcı konsantrasyonunun kanal (GaN) ile bariyer (AlInN) arasına yerleştirilen AlN ara tabaka kalınlığına bağlı değişimleri incelenerek optimum ara tabaka kalınlığı belirlendi. Çalışmanın son bölümünde ise ilk iki kısımda incelenen yapılarda ortak olan GaN kanalı yerine konulan InGa_N kanallı yapıların taşıma özellikleri karşılaştırılmalı olarak incelendi. Bu yapılar da Virginia Commonwealth Üniversitesinde MOCVD tekniği ile üretildi. İncelenen tüm örneklerin deneysel karakterizasyonlarında yüksek çözünürlüklü X-ışını kırınımı, atomik kuvvet mikroskopu (AFM) ve sıcaklığa bağlı (10-300K) Hall etkisi gibi deneysel teknikler kullanıldı. İncelenen sıcaklık aralığında örneklerin iletim özellikleri üzerinde etkili olan saçılma mekanizmaları Bölüm 3'de detaylı olarak verilen analitik denklemleri kullanarak yapılan fit çalışmaları ile belirlendi.

4.1 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ ile $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT Yapılarının Karşılaştırılması

4.1.1 Deneysel Detaylar

İncelenen $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ ve $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ örneklerin yapıları Şekil 4.1’de şematik olarak gösterilmiştir. Her iki yapı da safir (Al_2O_3) alttabakanın c-(0001) düzlemi üzerine MOCVD yöntemi ile büyütüldü. Trimetilgalyum (TMGa), trimetilalüminyum (TMAI), trimetilindiyum (TMIn), ve amonyum (NH_3) sırasıyla Ga, Al, In ve N kaynağı olarak kullanıldı. Epitaksiyel büyütmeden önce yüzeydeki oksitleri temizlemek için alt tabaka $1100\text{ }^\circ\text{C}$ de 10 dakika boyunca nitrojen ortamında ısıl işleme tabi tutuldu. Her iki örnek içinde büyütme işlemi 15 nm kalınlığında düşük sıcaklıkta ($650\text{ }^\circ\text{C}$) AlN biriktirme tabakasının büyütülmesi ile başladı. Sonra $1150\text{ }^\circ\text{C}$ de $0.5\text{ }\mu\text{m}$ kalınlığında AlN tampon tabakası büyütüldü. Bunun üzerine iki boyutlu elektron gazının oluştuğu katkısız GaN tabakası $1050\text{ }^\circ\text{C}$ de yaklaşık $2\text{ }\mu\text{m}$ kalınlığında büyütüldü. Elektron dalga fonksiyonun bariyer tabakasına giriciliğini ve dolayısıyla da alayım saçılmasını azaltmak için $1150\text{ }^\circ\text{C}$ de ve yaklaşık 1.2 nm kalınlığında AlN ara tabaka büyütüldü. Ara tabaka üzerine 20 nm kalınlığında $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT için AlGaN ve $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT için ise AlInN bariyer tabakaları sırasıyla 1050 ve $800\text{ }^\circ\text{C}$ lerde büyütüldü. Büyütme süreci bariyer tabakalarının üzerine $1050\text{ }^\circ\text{C}$ de 3 nm kalınlıklı GaN kapak tabası ile sonlandırıldı. $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ ve $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapıları sırasıyla A ve B olarak adlandırıldı.

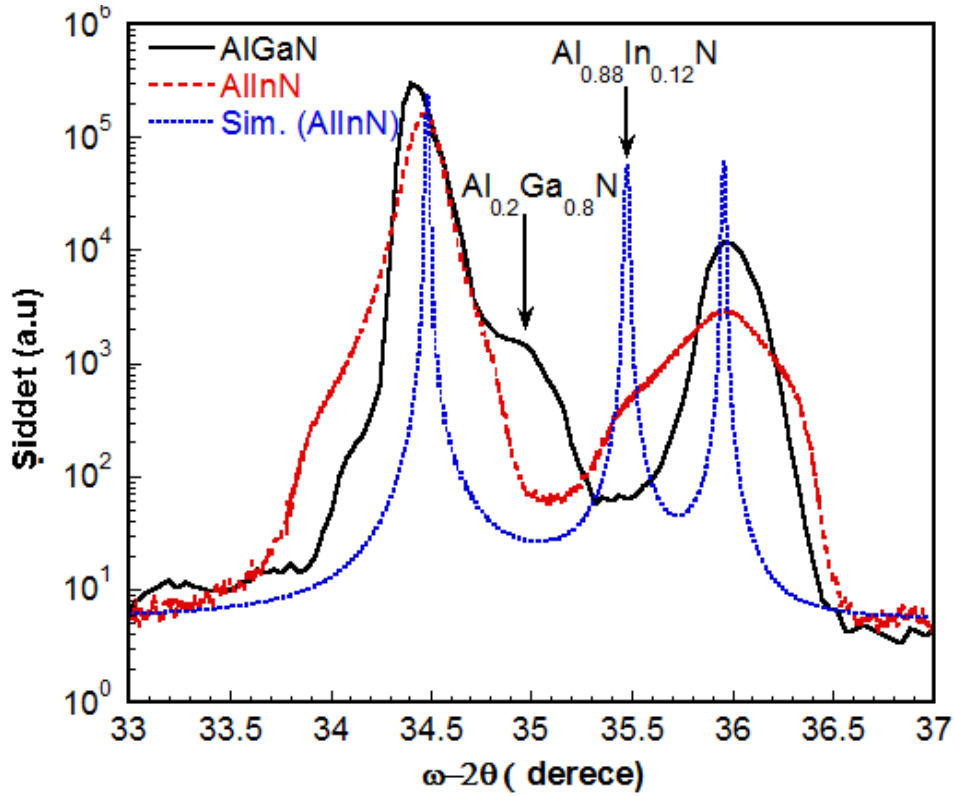


Şekil 4.1 $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ (örnek A) ve $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ (örnek B) örneklerin şematik gösterimi.

4.1.2 Deneysel Sonuçlar ve Hesaplar

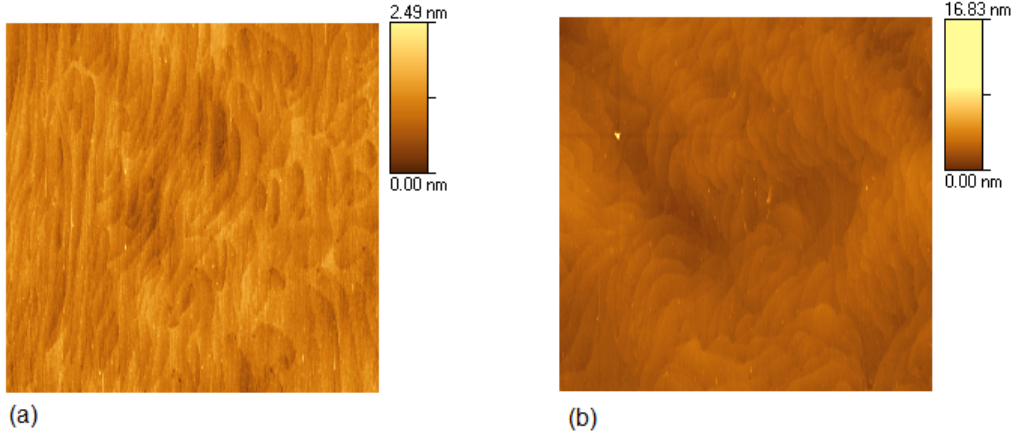
Büyütülen HEMT'lerin yapısal analizleri Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümündeki STARLAB bünyesinde bulunan Bruker D-8 yüksek çözünürlü X-ışını kırınım tekniği ile yapıldı. Bu analizlerden kristalin yapısal kalitesi ile birlikte teorik iletim hesaplamalarında kullanılmak üzere yapıların dislokasyon yoğunlukları ve bariyerdeki Al ve In oranları belirlendi. XRD verileri, (0002) ve (1231) düzlemlerinden gelen yansımalarından toplandı. Şekil 4.2 her iki örnek için de ω - 2θ taraması ile (0002) etrafında elde edilen yansımaları göstermektedir. XRD spektrumlarında yaklaşık 34.5° de gözlenen ana yansıma pikleri GaN tabakasına aittir. Yaklaşık 36° de gözlenen ek pikler ise her iki yapı içinde AlN tampon ve aratabakalarına ait yansıma spektrumlarıdır. $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ (örnek A) ve $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ (örnek B) HEMT yapılarında AlGaIn and AlInN bariyer tabakaları ile ilişkili pikler veya çıkıntılar ise karşılıklı olarak 35° and 35.5° açılarda net olarak gözlenmektedir. Ayrıca, her iki XRD eğrisinde de herhangi bir faz ayrımının olmadığını görmekteyiz. Yani, AlGaIn ve AlInN tabakalar AlN/GaN üzerine eşyümlü olarak büyütülmüşlerdir. Tablo 2.1 de verilen AlN, GaN, InN örgü sabitlerinden ve XRD'de gözlenen görelî pik pozisyonlarından Vegard yasası [137] yardımıyla, incelediğimiz $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ ve $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ HEMTler için Al ve In alaşım

oranları sırasıyla % 20 ve % 12 olarak belirlendi. AlInN bariyerdeki In kompozisyonu ölçülen XRD eğrisinin üzerine yerleştirilen simülasyon eğrisi ile doğrulandı (Şekil 4.2). Mobilite için dislokasyon saçılması hesaplarında kullanılmak üzere dislokasyon yoğunluğu kenar ve vida tipi olarak XRD'den denlem (2.8) kullanılarak hesaplandı. AlGaN (AlInN) bariyerleri için GaN'da, kenar ve vida tipi dislokasyon yoğunlukları sırasıyla $9.5 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ($5.1 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$) ve $5.2 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$ ($5.2 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$) olarak elde edildi.



Şekil 4.2 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ ve $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapılara ait XRD sonuçları.

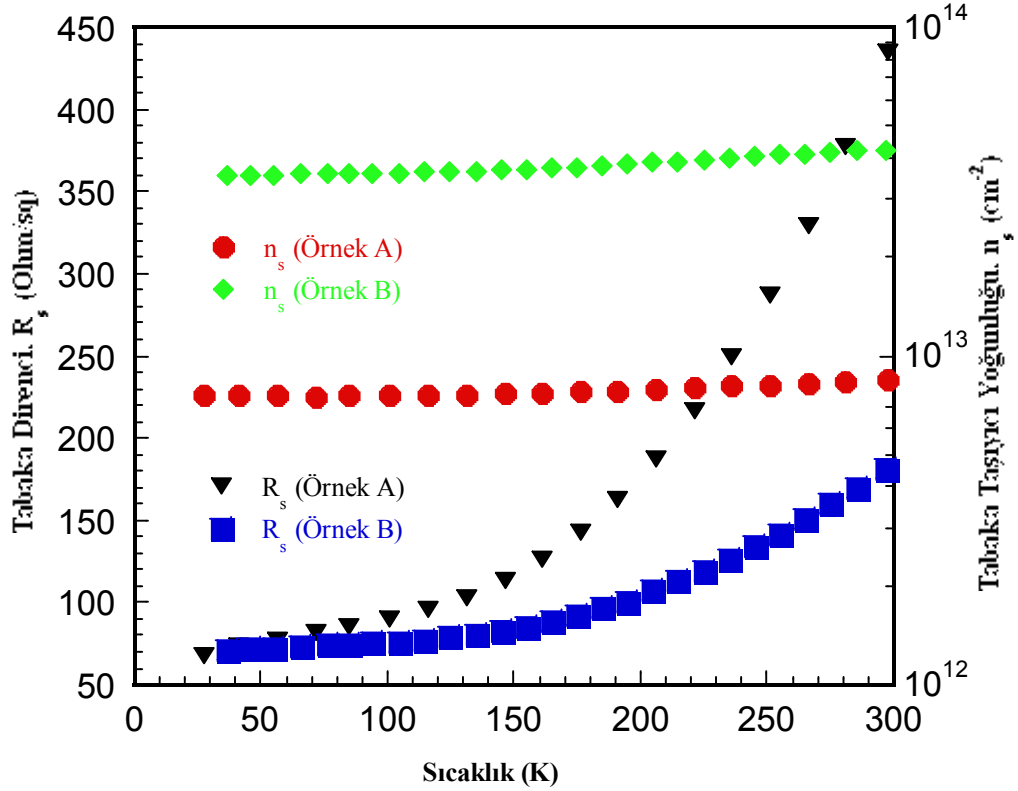
Örneklerin sıcaklığa bağlı iletim özellikleri (mobiliteleri, taşıyıcı yoğunlukları ve tabaka dirençleri) yine Gazi Üniversitesi STARLAB da bulunan kapalı-devirli He soğutuculu Lake Shore Hall etkisi ölçüm sistemi kullanılarak 30-300K sıcaklıkları arasında ölçüldü. Hall etkisi ölçümlerinde kullanılan örnekler Bilkent Üniversitesi NANOTAM laboratuvarlarında Ti/Al/Ni/Au omik kontaklar buharlaştırılarak Van der Pauw geometrisinde hazırlandı. Ölçümden önce örneklerin çeşitli akım değerlerinde I-V karakteristikleri incelenerek kontakların omik davranışları onaylandı.



Şekil 4.3 (a) AlGaInN/AlN/GaN (örnek A), (b) AlInN/AlN/GaN (örnek B) HEMT yapılarına ait AFM sonuçları.

Şekil 4.3, A ve B örneklerinin AFM görüntülerini göstermektedir. Bu örneklerin rms değerleri karşılaştırıldığında B örneğinin arayüzey kalitesinin A örneğine kıyasla bozulduğu görülmektedir. Bu örneklere ait rms değerleri Tablo 4.1’de verilmektedir.

Şekil 4.4 her iki örnek için 2DEG taşıyıcı yoğunluklarını ve tabaka dirençlerinin sıcaklığa bağlı değişimlerini göstermektedir. Oda sıcaklığında A ve B yapıları için 2DEG’deki taşıyıcı yoğunlukları sırasıyla 8.44×10^{12} ve $4.23 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ olarak ölçülmüştür. Sıcaklık azaldıkça bu değerler de azalmakta ve en düşük sıcaklıkta 7.59×10^{12} ve $3.55 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ değerlerine düşmektedirler. 2DEG taşıyıcı yoğunluğunun sıcaklık davranışından her iki yapı için taşıyıcı yoğunlukları hemen hemen sıcaklıktan bağımsızdır, her iki yapı için de sadece AlN/GaN arayüzeyindeki taşıyıcıların iletkenlikte baskın olduğu sonucunu çıkarmak mümkündür. Aynı şekilde görüldüğü gibi, A ve B yapıları için oda sıcaklığında tabaka direnci 434 ve $182 \text{ } \Omega/\square$ olarak ölçülmüştür. Bu değerler her numune için karşılaştırılmalı olarak Tablo 4.1’de verilmektedir. Örnek B için elde edilen $182 \text{ } \Omega/\square$ tabaka direnci literatürde rapor edilen en düşük değerdir. Bunun sebebi epitabakaların kalitesinin geliştirilmesi ve hetero arayüzeyde yüksek tabaka taşıyıcı yoğunluğudur. Sıcaklık düşüktüğü bu değerler de yavaş yavaş düşmektedir. Sıcaklığa bağlı Hall mobilitesi karakteristiğinden dolayı A örneğinin tabaka direncindeki düşüş B örneğine göre daha hızlı olup her ikisi de düşük sıcaklıkta yaklaşık $70 \text{ } \Omega/\square$ değerine sahiptirler.



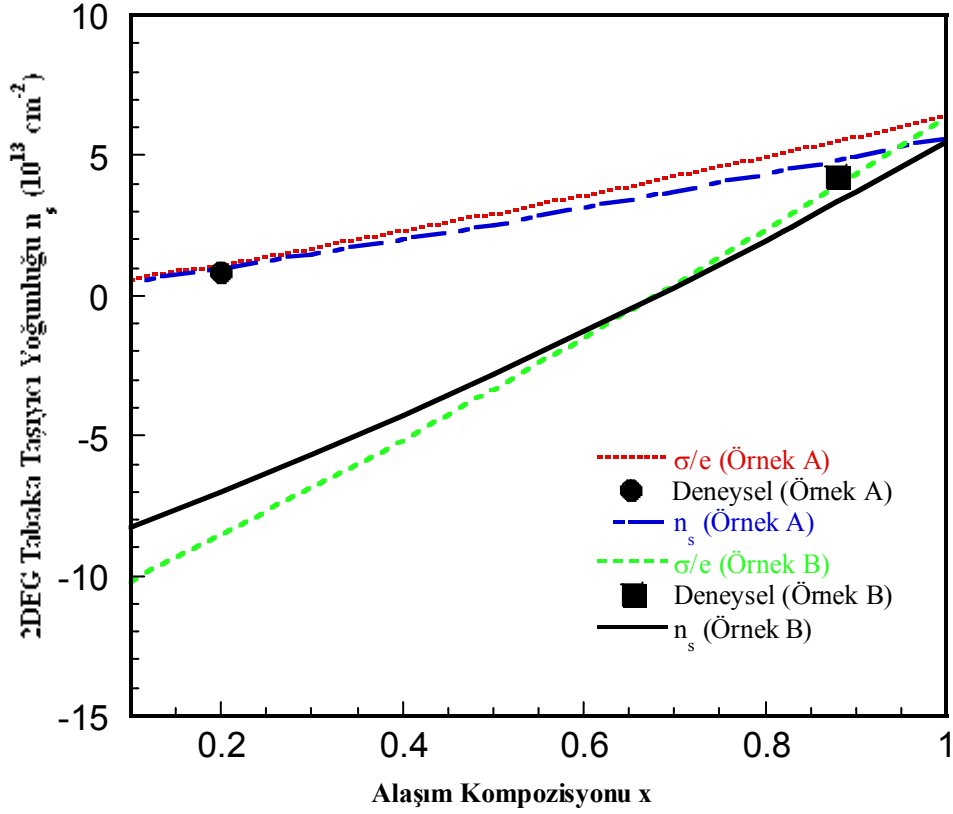
Şekil 4.4 $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AiN/GaN$ ve $Al_{0.88}In_{0.12}N/AiN/GaN$ heteroyapılar için tabaka taşıyıcı yoğunluğunun ve tabaka direncinin sıcaklığa bağlı grafiği.

Tablo 4.1 Örnek A ve B için düşük ve oda sıcaklık değerlerinde mobilite, tabaka taşıyıcı yoğunluğu, tabaka direnci ve AFM'den elde edilen rms değerleri.

Örnek	300K-mobilite ($cm^2/V.s$)	30K-mobilite ($cm^2/V.s$)	300K- n_s ($\times 10^{13} cm^{-2}$)	30K- n_s ($\times 10^{13} cm^{-2}$)	300K-Tabaka direnci (Ω/\square)	30K-Tabaka direnci (Ω/\square)	rms (nm)
A	1700	12188	0.84	0.76	435	68	0.19
B	812	2470	4.23	3.55	182	71	0.49

Serbest elektronlar, Ga-yüzlü $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AiN/GaN$ ve $Al_{0.88}In_{0.12}N/AiN/GaN$ HEMT yapıların AiN/GaN ara yüzeyinde yüksek oranda pozitif kutuplanmanın indüklediği yük miktarını dengelemeye çalıştığından dolayı, bu heteroyapıların ara yüzeylerinde beklenen maksimum tabaka taşıyıcı yoğunluğu denklem (2.18) ve (2.19) dan hesaplanmış ve deneysel olarak ölçülen tabaka

taşıyıcı yoğunlukları ile karşılaştırılmış ve sonuçlar Şekil 4.5 de birlikte verilmiştir. Hesaplarda kullanılan sabitler ise Tablo 2.6'de verilmiştir.

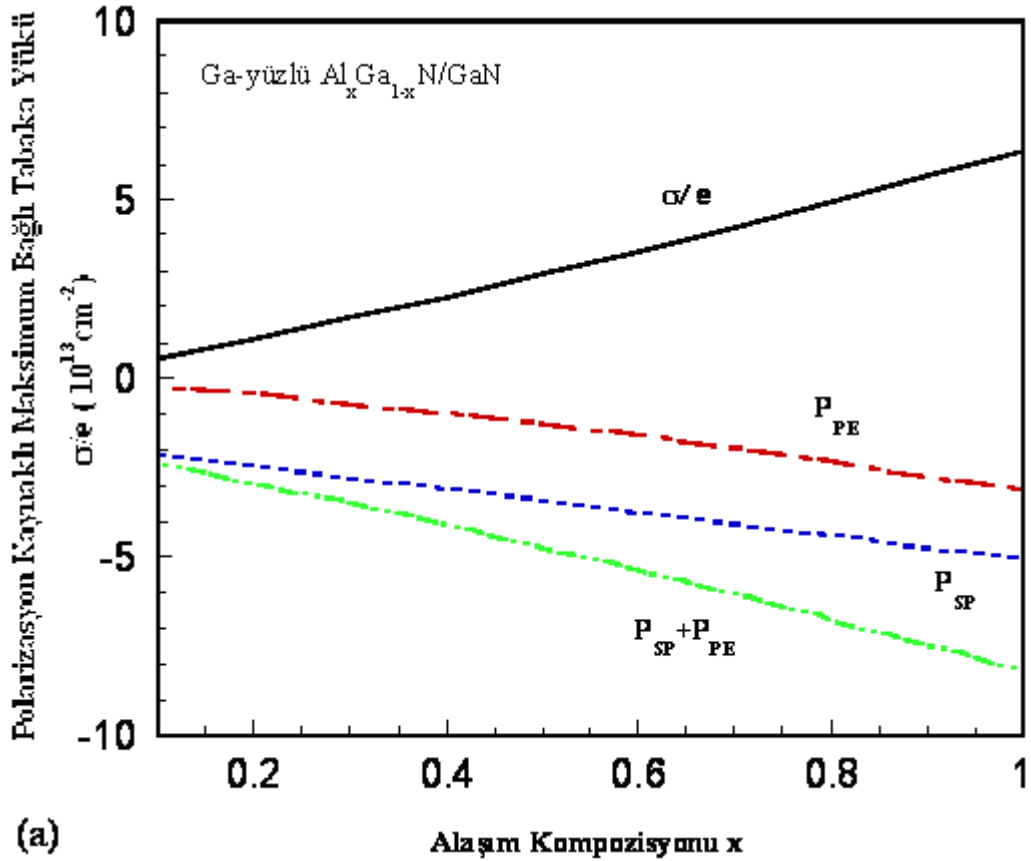


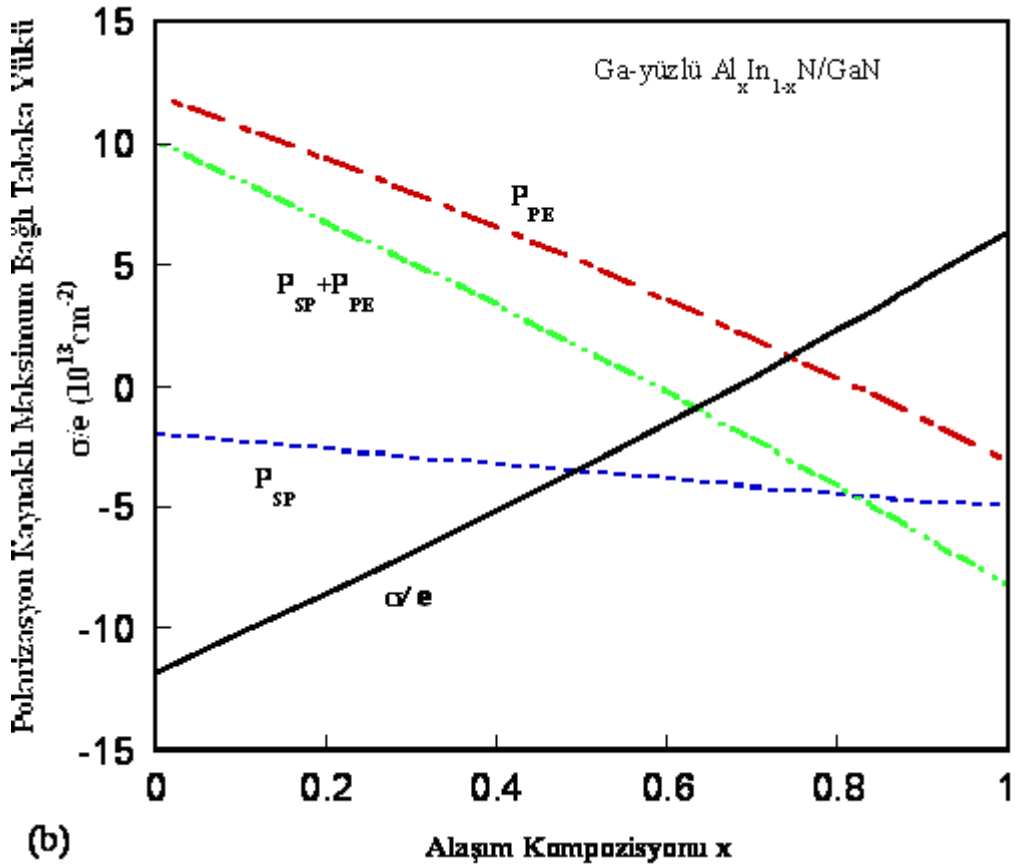
Şekil 4.5 Polarizasyondan kaynaklı tabaka taşıyıcı yoğunluğunun alaşım oranına bağlı grafiği.

Bu hesaplarda AlN ara tabakanın ve GaN kapak tabakasının etkileri de hesaba katılmıştır. Şekilden görüldüğü gibi AlGa_{0.8}N bariyer için bütün alaşım oranlarında tabaka taşıyıcı yoğunluğu daima pozitif iken AlIn_{0.2}N için Al oranının 0.7 altında negatif olmaktadır. Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN ve Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN HEMT yapılarında ara tabakası, bariyer genişliği ve kapak tabakası sırasıyla 1.2, 20 ve 3nm değerleri kullanıldı ve x=0.2 ve x=0.88 Al oranları için, iki boyutlu tabaka taşıyıcı yoğunluğu sırasıyla 0.95x10¹³ ve 3.34x10¹³ cm⁻² olarak hesaplandı. Teorik olarak beklenen bu değerler, Hall ölçümlerinden deneysel olarak belirlenen 0.84x10¹³ ve 4.23x10¹³ cm⁻² den farklıdır. Bunun nedeni olarak tabaka kalınlıkları ve alaşım oranları gibi büyütme parametrelerindeki belirsizlikler veya Vegard yasasındaki çizgisel olmayan etkiler gösterilebilir. Şekil 4.5' de GaN kapak tabakasının

etkilerini de görmek için alařım oranına karřı sadece polarizasyondan kaynaklı baėlı tabaka ykleri de (σ/e) gsterilmiřtir. $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ iin toplam tabaka tařıyıcı yoėunluėuna GaN kapak tabakasının katkısı, $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ yapı ile karřılařtırılınca nemsiz kaldıėı grlmektedir.

Her iki rnek iin maksimum tabaka tařıyıcı yoėunluėunun piezoelektrik ve kendiliėinden polarizasyon bileřenlerini karřılařtırmak iin, polarizasyon kaynaklı baėlı tabaka yk yoėunlukları Őekil 4.6'da verilmiřtir. 0.88 sabit Al kompozisyonu iin $P_{\text{KP}}/P_{\text{PE}}$ oranı AlInN bariyerde AlGaN bariyere gre iki kat daha fazla olmaktadır. 0.88 Al alařım oranlı AlInN bariyerde, yksek tabaka tařıyıcı yoėunluėu oėunlukla kendiliėinden polarizasyondan kaynaklanmaktadır. Literatrde rapor edilen rg uyumlu AlInN HEMT'lerde tabaka tařıyıcı yoėunluėu $1.2\text{-}3.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, Hall mobilitesi $1000\text{-}1700 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve en iyi tabaka direnci yaklařık $200 \Omega/\square$ 'dir [39,138]. Bundan dolayı kısmi gevřeme zorlamasına sahip AlInN tabanlı HEMT'lerin, rg uyumlu AlInN bariyer tabakasına kıyasla daha yksek bir iletkenlik saėlayabileceėini grmekteyiz.

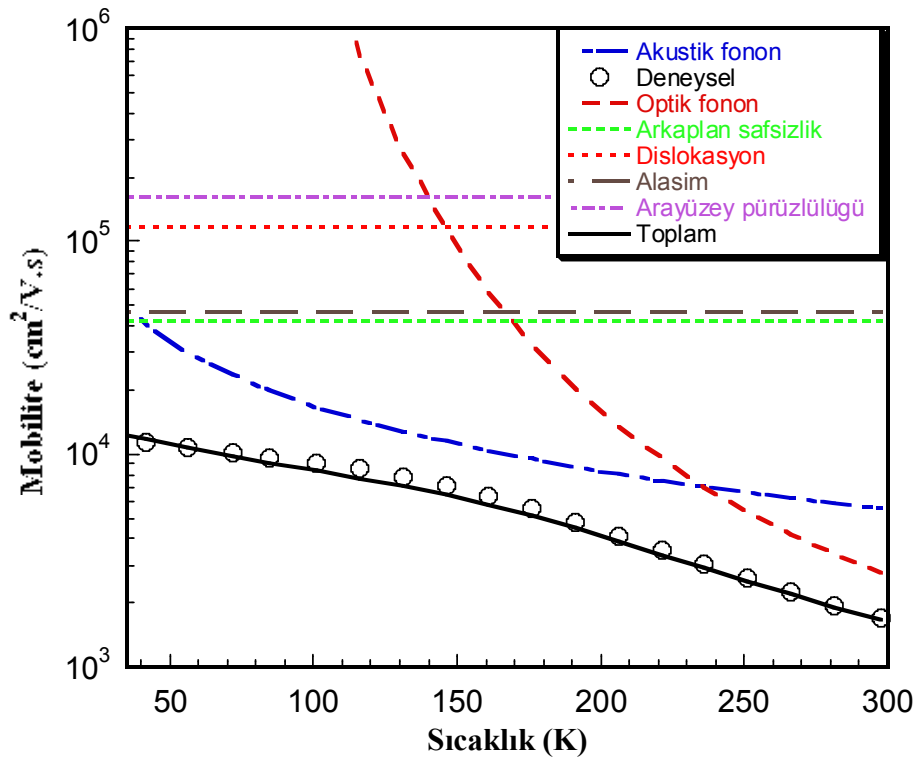




Şekil 4.6 (a) $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$, (b) $Al_{0.88}In_{0.12}N/AlN/GaN$ heteroyapıların arayüzeyinde hesaplanan tabaka yük yoğunluğunun kendiliğinden ve piezoelektrik polarizasyon bileşenlerinin alaşım oranına baęlı grafięi.

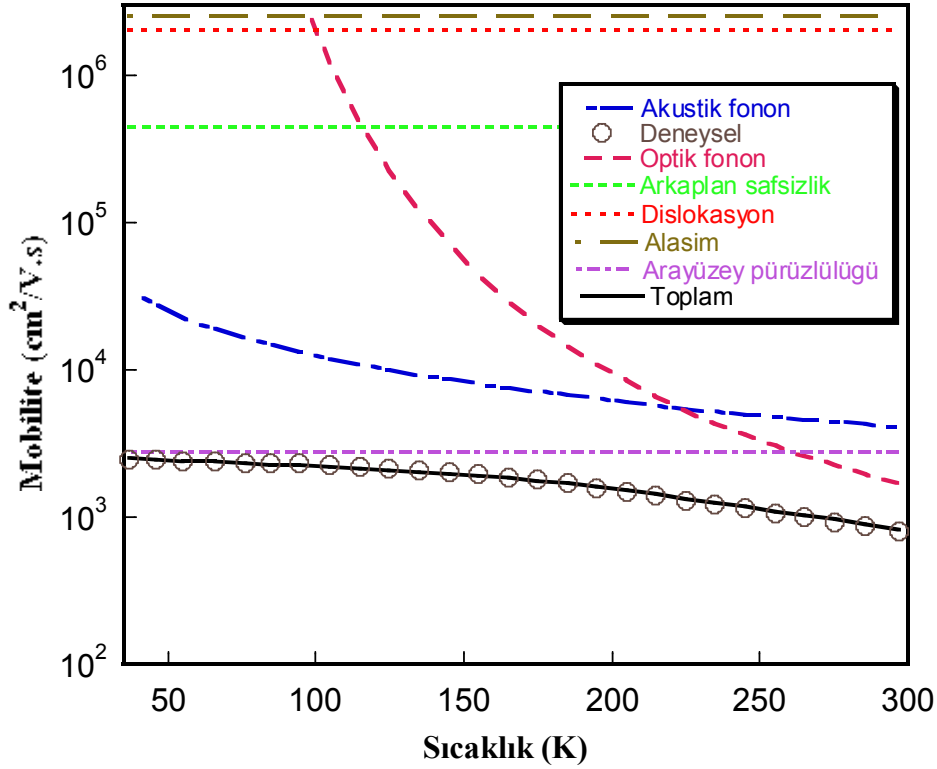
Dięer taraftan yüksek iletkenlik için yüksek tabaka taşıyıcı yoğunluęu tek bir taşıyıcı parametresi deęildir. Sıcaklıęa baęlı deneysel ölçümler, teorik bir model ile karşılaştırılarak, önemli bir dięer parametre olan taşıyıcı mobilitesi A ve B örnekleri için incelendi. Bu modelde, optik fonon, akustik fonon, arkaplan safsızlık, dislokasyon, arayüzey pürüzlülüęü ve alaşım saçılmaları gibi temel saçılma mekanizmaları hesaba alındı. Hesaplarda kullanılan parametreler Tablo 2.2'de verilmektedir. Sıcaklıęa baęlı deneysel Hall verileri ve bu verilere uydurmak için kullanılan temel saçılma mekanizmalarına ait teorik sonuçlar Şekil 4.7 ve Şekil 4.8'de verilmektedir. Toplam mobilite hesabında Bölüm 3'de bahsedilen Matthisen kuralı kullanılmıştır. $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN$ HEMT yapı için ölçülen Hall mobilitesi oda sıcaklıęında $1700 cm^2/V.s$ iken düşük sıcaklıkta (30K) $12200 cm^2/V.s$ ye ulaşmaktadır (Şekil 4.7). Sıcaklıęın fonksiyonu olarak hesaplanan toplam mobilite

deneysel sonuçlar ile mükemmel bir uyum içerisinde. Görüldüğü gibi yüksek sıcaklıklarda ($T > 180$ K) mobilite baskın olarak akustik ve optik fonon saçılmaları tarafından belirlenmektedir. Örgü sıcaklığı oda sıcaklığına doğru yaklaştıkça optik fonon saçılma mekanizması daha baskın hale gelmektedir. Ara sıcaklıklarda mobilite, deformasyon potansiyeli ve piezoelektrik yoluyla akustik fonon saçılması ile belirlenmektedir. Bu örnek için her iki etkileşimde hemen hemen aynı değerlerde katkı sağlamaktadır. Sıcaklık düştükçe mobilite, arkaplan safsızlık, alaşım ve akustik fonon saçılmalarının birleşimi ile karakterize edilmektedir. 2DEG iletim özellikleri için deneysel ve hesaplanan sonuçlar AlGaN ile GaN arasına konan AlN ara tabakanın alaşım saçılmasını etkili bir şekilde azalttığını göstermiştir. Arayüzey pürüzlülüğü ve dislokasyondan kaynaklanan diğer saçılma mekanizmalarının sıcaklığa göre etkisiz olduğu gözlenmiştir. Arayüzey pürüzlülüğü saçılmasında ara yüzey düzleminde düzgün oranda sapma uzunluğu (Λ) ve ortalama sapma (Δ) değerleri sırası ile 230 \AA ve 4 \AA olarak alındı. Bu iki saçılmanın zayıf olması düşük dislokasyonlu ve düzgün arayüzeyli yüksek kaliteli GaN kanalı ile ilgilidir.



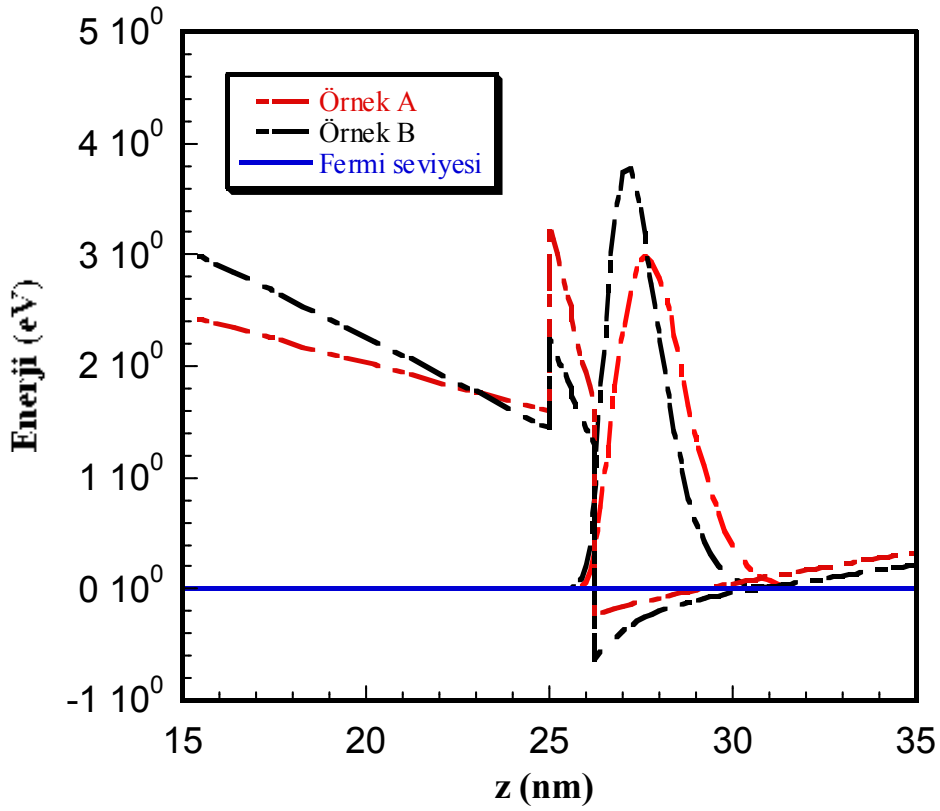
Şekil 4.7 Al_{0.2}Ga_{0.8}N/AlN/GaN heteroyapısı için teorik olarak hesaplanan ve ölçülen Hall mobilitelerinin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.

Şekil 4.8 $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapısı için sıcaklığa bağlı Hall ölçümünü ve teorik hesaplamaları göstermektedir. Bu örnek için Hall mobilite değeri oda sıcaklığında $812 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ olarak ölçülmüştür. Sıcaklık azaldıkça mobilite (40 K) $2500 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ maksimum değerine ulaşmaktadır. Şekilden görüleceği üzere sıcaklığa bağlı hesaplanan toplam mobilite ile deneysel sonuçlar arasında yine mükemmel bir uyum elde edilmiştir. Bununla beraber AlInN bariyerli heteroyapının sıcaklığa bağlı mobilite davranışında AlGaN bariyerli yapıya göre önemli farklılıkların olduğunu görmekteyiz. Şekil 4.8'den de görüldüğü gibi düşük ve ara sıcaklıklarda mobilite yaklaşık olarak ara yüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılma ile belirlenmektedir. AlN/GaN ara yüzeyinde Λ ve Δ sırasıyla 170 \AA ve 5 \AA olarak alındı. Genel olarak Δ azaldıkça ve Λ arttıkça mobilite artmaktadır. $\text{AlGaN}/\text{AlN}/\text{GaN}$ ile $\text{AlInN}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapılar arasında teorik fit parametreleri karşılaştırılırsa arayüzeyin $\text{AlInN}/\text{AlN}/\text{GaN}$ örnek için daha kötü olduğu söylenebilir.



Şekil 4.8. $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapısı için teorik olarak hesaplanan ve ölçülen hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.

Bununla birlikte arayüzey saçılmasında diğer önemli bir parametre elektron dağılım pozisyonu ile arayüzey arasındaki uzaklıktır [139,140]. 2DEG arttıkça elektron dağılım pozisyonunun maksimumu arayüze doğru kayar ve bunun sonucu olarak ara yüzey saçılmasının etkisi artar. Örnek olarak $n_s=1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ olduğunda arayüzey ile 2DEG'nin dağılım pozisyonunun maksimumu arasındaki uzaklık 2 nm iken, bu değer $n_s=2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ olduğunda 0.6 nm'ye düşmektedir. Şekil 4.9'de gösterildiği gibi AlInN bariyer tabakalı B örneğinde n_s daha fazla olduğundan elektron dağılım pozisyonu arayüze daha yakındır. Bu durum referans olarak verilen çalışmalarla uyum içerisindedir. Aynı şekilde 1-boyutlu çizgisel olmayan kendi içinde tutarlı (self-consistent) Schrödinger–Poisson denkleminin çözümünden hesaplanan iletkenlik potansiyel profili gösterilmektedir. Şekilden de görüldüğü gibi AlInN bariyerli yapıların üçgenimsi potansiyel kuyuları AlGaN bariyerli yapılara göre daha derindir. Bu da taşıyıcıların kuyu içerisinde daha iyi hapsolmesini sağlar.



Şekil 4.9. A ve B örnekleri için hesaplanan iletkenlik potansiyel profilleri ve elektron dalga fonksiyon genliğinin uzaysal dağılımı (z eksenini yüzeyden başlanmaktadır).

$\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapısı için 200 K üzerinde arayüzey pürüzlülüğünün yanında polar optik fonon saçılması ile birlikte az da olsa akustik fonon saçılması etkili olmaktadır. AlInN ve GaN da piezoelektrik alandaki azalmadan dolayı, akustik fonon saçılmasında piezoelektrik bileşeni deformasyon potansiyel bileşininden iki kat daha az etkilidir. Elektron fonon saçılma zaman sabiti, elektron dalga fonksiyonu ve dağılım yolu ile kanaldaki elektron yoğunluğuna bağlı olduğundan elektron mobilitesi sadece akustik ve optik fonon saçılmaları tarafından sınırlandırıldığı kabul edilecek olursa, $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapısında akustik ve optik fonon için elde edilecek olan mobilite değerleri sırasıyla $2700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ve $1700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ civarında olacaktır. Bu değerlerin $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapısında beklenen saf akustik ve optik fonon sınırlı mobilite (sırasıyla $5500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ve $2700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) değerleri ile karşılaştırıldığında çok daha düşük olduğu görülmektedir. Buna ilaveten $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapısında yüksek 2DEG yoğunluğundan perdeleme etkisinin ortaya çıkması, arkaplan safsızlık ve dislokasyon saçılmalarının daha az etkili olmasına neden olmuştur. Ayrıca, AlInN ve GaN arasındaki bant kenarı süreksizliliğinin AlGaN ve GaN sistemine göre daha büyük olması alaşım saçılmasını daha da etkisiz hale getirmiştir.

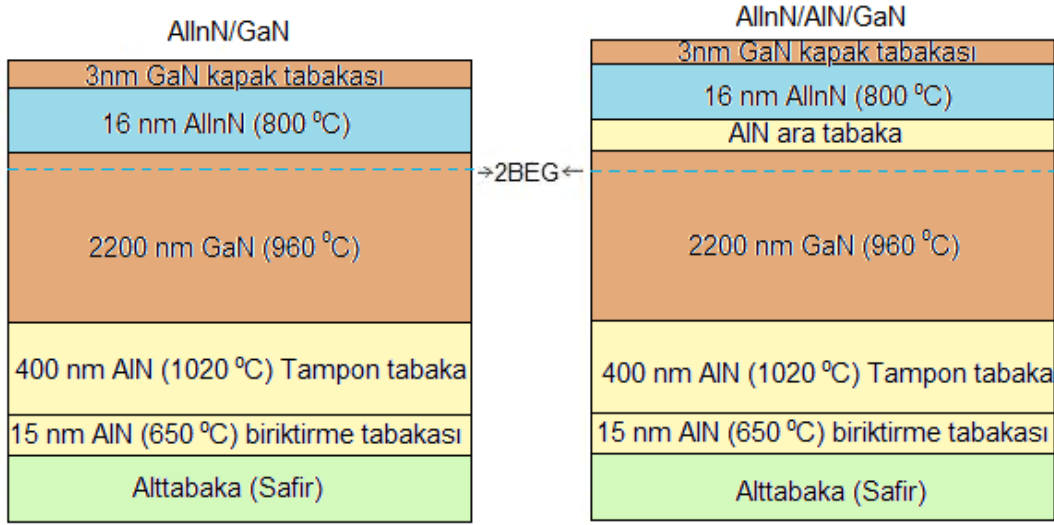
$\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroeklemlerde daha iyi arayüzeyli yapılar büyütürken ara yüzey pürüzlülüğü saçılmasının etkisini $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroeklem yapıda olduğu gibi büyük oranda ortadan kaldırıldığı farz edilirse, sadece optik fonon ve akustik fonon gibi içsel mekanizmaların baskın olduğu daha yüksek mobiliteli durumlar elde edilebilir. Bu senaryolarla $\text{Al}_{0.88}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroeklem yapılarında elde edilen taşıyıcı yoğunluğu ($4.23 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) ile oda sıcaklığı mobilitesi $1200 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ kadar çıkarılabilir. Bu şartlar altında iki boyutlu tabaka direnci de $120 \Omega/\square$ gibi son derece küçük değerlere indirilebilir. 2-boyutlu tabaka direnci, AlInN tabakasındaki Al oranı ile oynanarak biraz daha düşük taşıyıcı yoğunluğu, fakat daha iyi bir ara yüzey ve dolayısıyla daha yüksek mobilite artışı ile optimize edilebilir.

4.2 AlInN/AlN/GaN HEMT Yapılarda AlN Ara Tabakanın Etkisi

Çalışmanın bu kısmında GaN örgü-uyumlu AlInN/AlN/GaN HEMT yapısının daha detaylı araştırılması için heteroeklem arayüzeyine 0'dan 2 nm ye değişen kalınlıklarda AlN ara tabakalar kullanılarak 4 farklı AlInN/AlN/GaN HEMT yapıları büyütülerek AlInN/AlN/GaN heteroyapıların taşıma özelliklerini belirleyen saçılma mekanizmaları incelendi.

4.2.1 Deneysel Detaylar

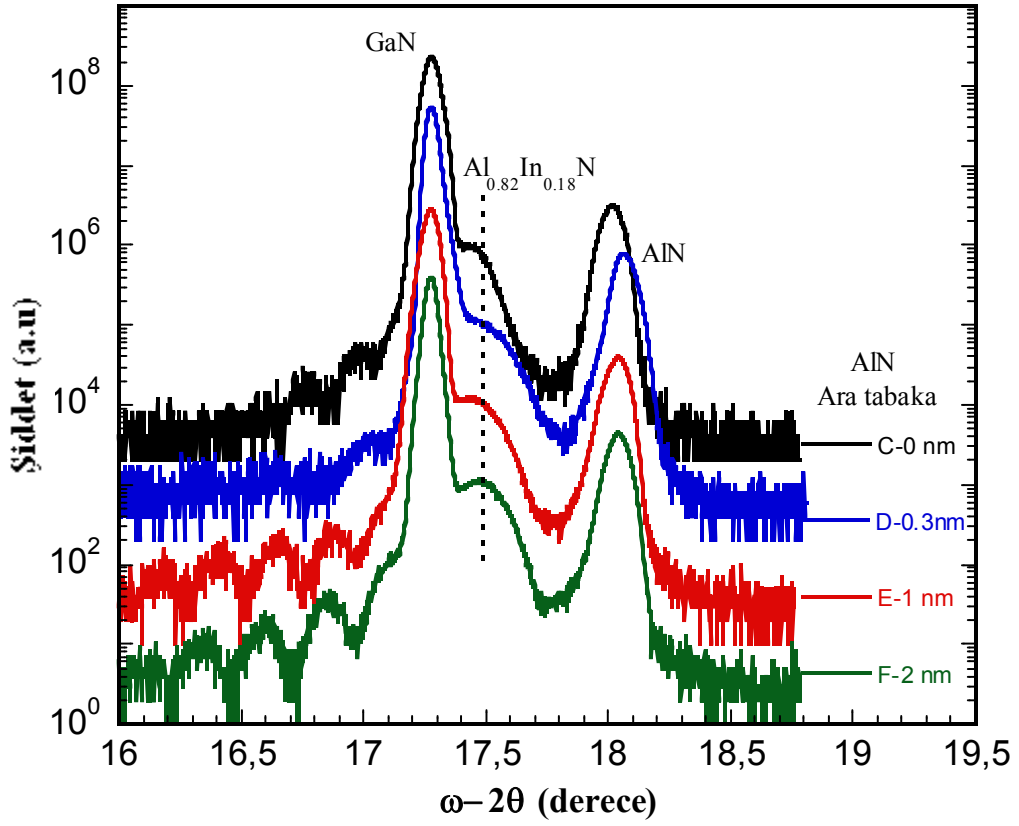
Şekil 4.10'da gösterildiği gibi $Al_{0.82}In_{0.12}N/AlN/GaN$ HEMT yapılar 2 inç (0001) safir alttabaka üzerine düşük basınçlı düşey MOCVD sistemi ile büyütüldü. Bütün yapılarda büyütme 1020 °C de 400 nm AlN tampon tabakasının depozisyonu ile başladı ve sonra 960 °C de 2.2 µm kalınlıklı katkısız GaN tabakası büyütüldü. Bunların üzerine 0.3, 1 ve 2 nm kalınlıklı yüksek sıcaklık AlN ara tabakaları büyütüldü. Bir örnek AlN spacer tabakası olmadan büyütüldü. Ara tabakaların depozisyonundan sonra, 16 nm kalınlıklı Si katkılı AlInN bariyer tabakasının büyütülmesi için sıcaklık 800 °C ye düşürüldü. Ara tabaka olmayan numune için AlInN bariyer tabakası katkısız büyütüldü. AlInN bariyerin GaN ile mükemmel örgü uyumu sağlaması için In oranı %18'e yakın tutuldu. Son olarak büyütme tüm örnekler için 3 nm kalınlıklı GaN kapak tabakası ile sonlandırıldı. AlN ve GaN tabakalarının büyütülmesinde hidrojen, AlInN tabakaların büyütülmesinde ise nitrojen taşıyıcı gaz olarak kullanıldı. Bu yapılarda ayrıca AlN ara tabakası ile AlInN bariyer tabakası arasında büyütme boyunca ortamda fazla (artık) Ga'dan dolayı 2-3 nm kalınlığında istenmeyen bir GaN tabakası büyüdüğü TEM analizlerinden anlaşıldı [141]. Ara tabakası olmayan, 0.3, 1 ve 2 nm AlN ara tabaka kalınlıklı numuneler sırasıyla C, D, E ve F olarak adlandırıldı. Büyütmeden sonra numuneler yüksek çözünürlüklü XRD, AFM ve sıcaklığa bağlı Hall ölçümleri kullanılarak karakterize edildi.



Şekil 4.10. $Al_{0.82}In_{0.18}N/GaN$ ve $Al_{0.82}In_{0.18}N/AlN/GaN$ yapıların şematik gösterimi

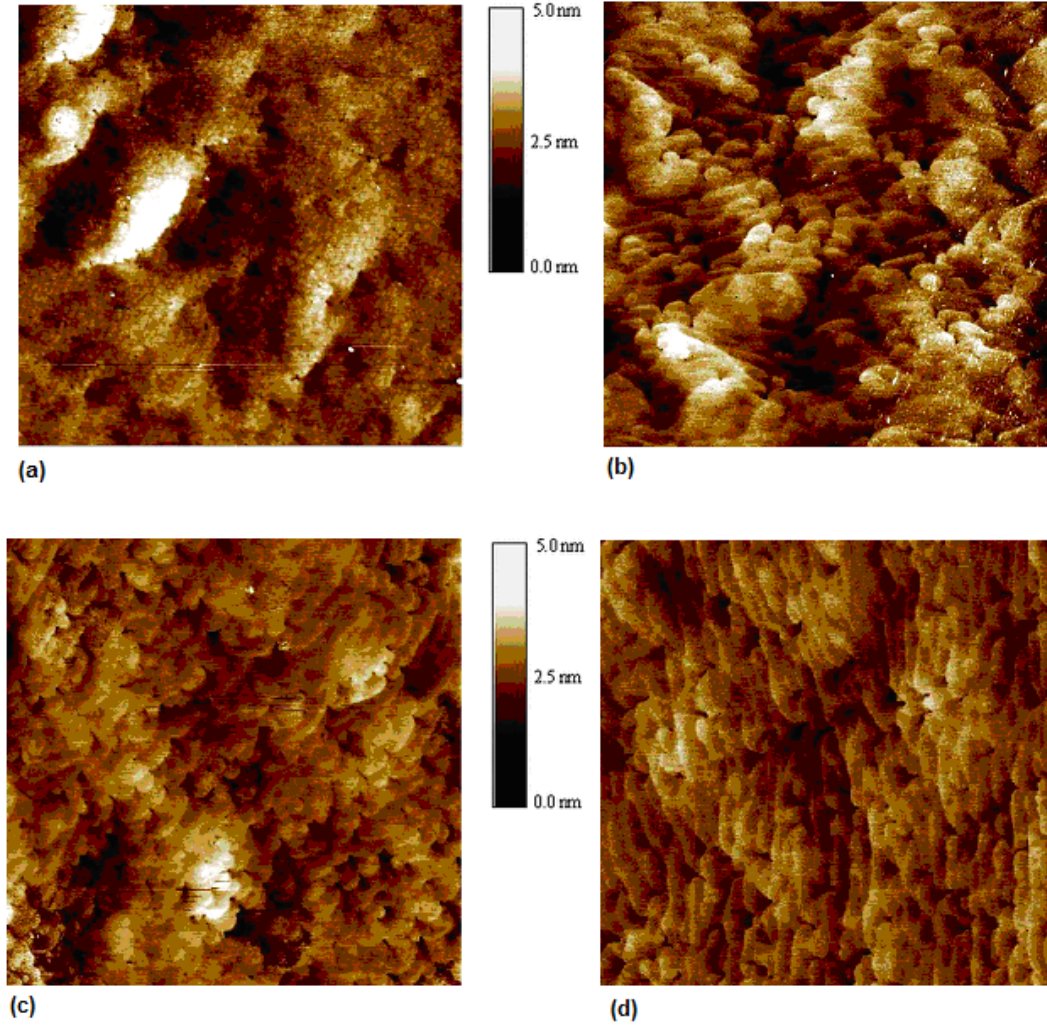
4.2.2 Deneysel Sonuçlar ve Hesaplar

Yüksek çözünürlüklü XRD ölçümleri dört numune için detaylı yapısal kalite ve alaşım oranını belirlemek için kullanıldı. XRD verileri ω - 2θ taraması ile (0002) düzleminden gelen yansımalarından toplandı. Şekil 4.11’de AlInN/AlN/GaN örnekleri için ω - 2θ taraması ile (0002) etrafında elde edilen yansımalar AlN ara tabaka kalınlığının artışı ile gösterildi. Örneklerin yapısal kalitesi Pendellösung saçakları ile HRXRD eğrisinden görüldü. AlInN bariyerli tabakalara ait pikler 35° ’de gözlemlendi. XRD sonuçlarından AlInN’deki In kompozisyonu bütün numuneler için yaklaşık % 18 olarak belirlendi. Literatürde [142] yayınlanan Vegard yasasındaki sapmadan dolayı örneklerin gerçek In oranı belirlenen değerlerden biraz farklılık gösterebilir. Fakat AlInN bariyerdeki In oranındaki bu küçük sapmalar çalışılan dört örneğin iletim özelliklerinin analizlerinde herhangi bir sakınca doğurmamaktadır.



Şekil 4.11 $\text{Al}_{0.82}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heteroyapıları için HRXRD görüntüsü.

Şekil 4.12, AlInN/GaN ve $\text{AlInN}/\text{AlN}/\text{GaN}$ örneklerin AFM görüntülerini göstermektedir. Yüzeyin altındaki tabakalar yüzeyi fazlaca etkilediğinden dolayı AFM den elde edilen rms (kare-ortalama karekök veya ortalama pürüzlülük) değerleri mobiliteyi sınırlayan arayüzey saçılmasının teorik hesaplarında AlN/GaN arayüzey pürüzlülüğünü temsil eden parametrelerinden biri olan Δ değeri olarak kullanıldı. Bu örneklerin rms değerleri karşılaştırıldığında AlN ara tabaka kalınlığı arttıkça yüzeyin dolayısıyla da AlN/GaN arayüzeyin daha düzgün hale geldiği görülmektedir. Bu değerler Tablo 4.2’te verilmektedir.

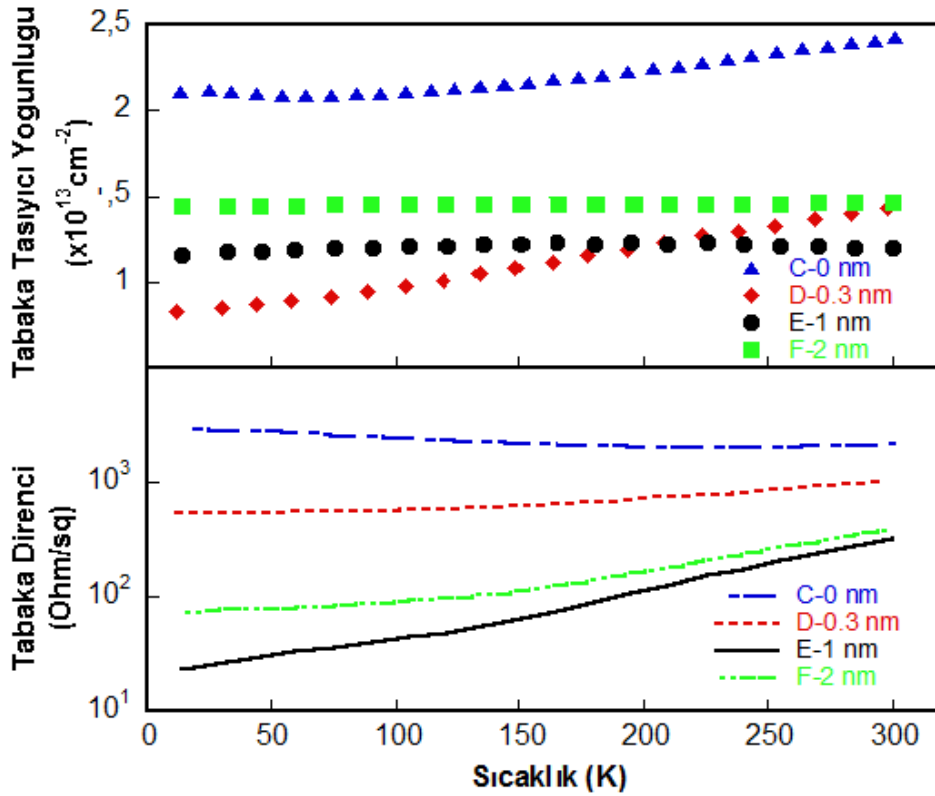


Şekil 4.12 ($5 \times 5 \mu\text{m}^2$) (a) C örneği, (b) D örneği, (c) E örneği, (d) F örneği için AFM görüntüleri.

Sıcaklığa bağlı Hall ölçümleri 10-300 K sıcaklıkları arasında Van der Pauw geometrisinde Virginia Commonwealth Üniversitesinde Lake Shore Hall ölçüm sistemi kullanılarak yapıldı. Omik kontaklar Ti/Al/Ti/Au (30/100/30/30 nm) 60 s hızlı 850°C ısıtılarda hazırlandı. Şekil 4.13 örgü uyumlu $\text{Al}_{0.82}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapıların sıcaklığa bağlı tabaka taşıyıcı yoğunluğunu ve 2-boyutlu tabaka direncini göstermektedir. Şekilden görüldüğü gibi E ve F örnekleri için tabaka taşıyıcı yoğunluğu çalışılan sıcaklık aralığında yaklaşık olarak sabittir. Tabaka taşıyıcı yoğunluğunun bu sıcaklık davranışı iletkenliğin AlN/GaN hetero arayüzündeki taşıyıcılar tarafından baskın olduğunu ifade eder. Diğer taraftan C ve D örneklerinin tabaka taşıyıcı yoğunlukları, yığın GaN ve AlInN'lardaki safsızlıkların sıcaklığa bağlı ısıl uyarılmalarından dolayı sıcaklık arttıkça artmaktadır.

Tablo 4.2 Bütün örnekler için düşük ve oda sıcaklık değerlerinde mobilite, taşıyıcı yoğunluğu, tabaka direnci ve AFM'den elde edilen rms değerleri

Örnek	300K- mobilitesi (cm ² /V.s)	10K- mobilitesi (cm ² /V.s)	300K- n _s (x10 ¹³ cm ⁻²)	10K-n _s (x10 ¹³ cm ⁻²)	300K- Tabaka direnci (Ω/□)	10K- Tabaka direnci (Ω/□)	rms (nm)
C	121	100	2.43	2.11	2962	2126	0.55
D	423	14100	1.43	0.831	1033	533	0.46
E	1630	23100	1.20	1.16	320	23	0.40
F	1110	5900	1.46	1.44	386	74	0.34

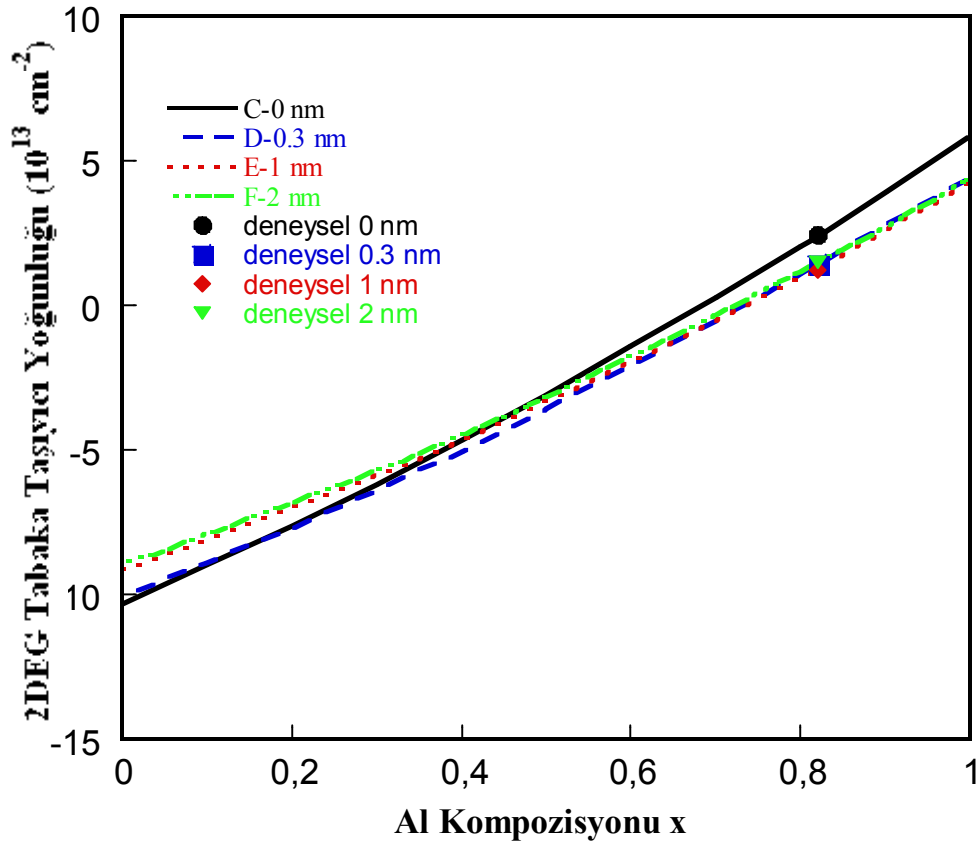


Şekil 4.13 Bütün numuneler için ölçülen tabaka taşıyıcı yoğunluğunun ve tabaka direncinin sıcaklığa bağlı grafiği.

Aynı şekilde sıcaklığa bağlı 2-boyutlu tabaka dirençleri de gösterilmiştir. E ve F örnekleri için sıcaklığa bağlı 2DEG yoğunluğu hemen hemen sabit kaldığından tabaka dirençlerinin sıcaklık bağımlılığı bu örneklerin mobilite değişimleri ile belirlenmektedir. Diğer taraftan, örnek C ve D için tabaka taşıyıcı yoğunluğu ve mobilitenin ters sıcaklık karakteristiğinden dolayı tabaka direncinin sıcaklık bağımlılığı daha azdır. Tablo 4.2'de düşük ve oda sıcaklığındaki tabaka dirençleri,

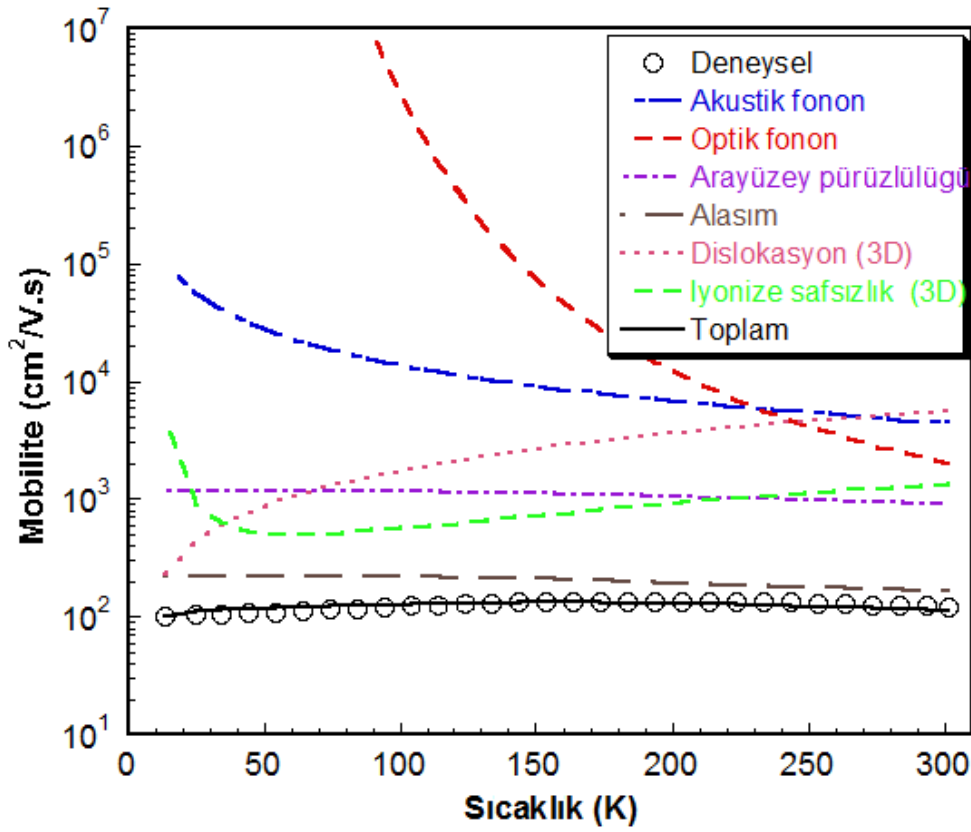
taşıyıcı yoğunlukları ve Hall mobiliteleri listelenmiştir. $1.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ taşıyıcı yoğunluğu ve $1630 \text{ cm}^2 / \text{V.s}$ mobilite değerlerine karşı, 1nm ara tabakalı E örneği için minimum oda sıcaklığı tabaka direnci $320 \Omega/\square$ olarak elde edildi. Bu çalışmada bu örnek için yüksek mobilite değerleri elde edilmesine rağmen tabaka taşıyıcı yoğunluğu beklenen değerden daha düşük olduğundan tabaka direnci yeterince düşük değildir.

Şekil 4.14 Hall ölçümlerinden elde edilen deneysel verilerle $\text{Al}_{0.82}\text{In}_{0.12}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapıların AlN/GaN arayüzeyinde oluşan hesaplanmış maksimum tabaka elektron yoğunluğunun Al oranına göre değişimini göstermektedir. Bu hesaplarda da AlN ara tabakası, GaN kapak tabakası ve istenmeden büyüyen (parazit) GaN tabakası hesaplara dahil edilmiştir. Hesaplanan tabaka taşıyıcı yoğunlukları bütün örnekler için deneysel değerlerle son derece uyum içerisindedir.



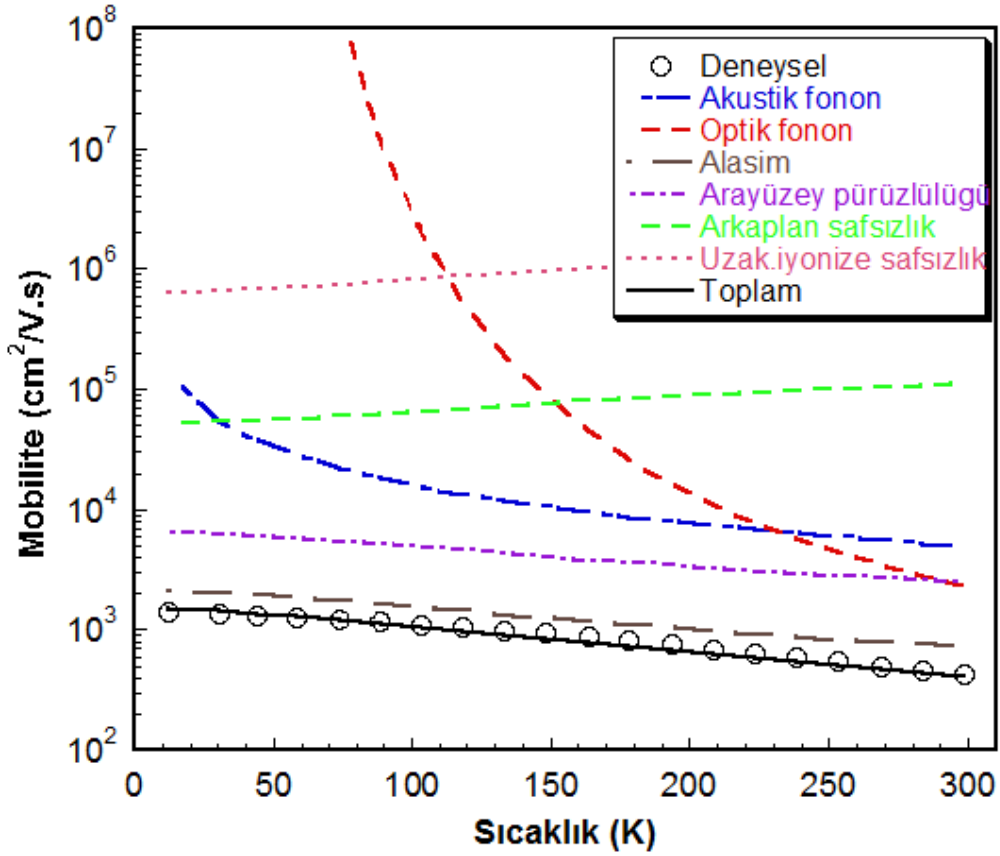
Şekil 4.14 $\text{AlInN}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT yapılarında, hesaplanmış maksimum tabaka elektron yoğunluğunun Al kompozisyonuna bağlı grafiği.

Şekil 4.15 AlN ara tabakasının kullanılmadığı C örneği için hesaplanan teorik ve deneysel mobilite değerlerinin sıcaklığa bağlı değişimlerini göstermektedir. Hesaplamalarda, A ve B örneklerinde olduğu gibi temel saçılma mekanizmalarını içeren analitik modeller kullanılarak sıcaklığa bağlı Hall verilerine fit edilmiştir. Bu teorik mobilite hesaplarında sıcaklığa bağlı taşıyıcı yoğunluğunun etkisi de göz önünde bulundurulmuştur. Oda sıcaklığında yüksek tabaka taşıyıcı yoğunluğu $2.43 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ iken, Hall mobilitesi $120 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ gibi çok düşük bir değer almaktadır. 190 K civarında Hall mobilitesi $136 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ maksimum değerine ulaşmakta olup, 10 K de $100 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ye düşmektedir. Sıcaklığa bağlı Hall mobilitesi, bu örnekteki iletkenliğin ara ve yüksek sıcaklıklarda temel olarak alaşım saçılması tarafından belirlendiğini göstermektedir. Gerçekten de AlInN yapılarında alaşım düzensizliğinin çok büyük olduğu, literatürde $\text{Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ 'a ait fotoluminesans pik çizgi genişliğinin 350 meV ve Stokes kaymasının ise 500 meV gibi oldukça büyük değerlere sahip olmasından da anlaşılmaktadır [27]. Düşük sıcaklıklarda ise Hall mobilitesi, alaşım saçılmasının sınırladığı değerden sapma eğilimindedir. Düşük sıcaklıklarda Hall mobilitesinin sıcaklık davranışı yığın tipi taşımaya benzediğinden 3 boyutlu iyonize safsızlık ve dislokasyon saçılmaları da mobilite hesaplarına dahil edilmiştir. Şekil 4.15 bütün sıcaklık değerleri için deneysel ve teorik sonuçların mükemmel bir uyum içinde olduğunu göstermektedir. Bu nedenle, bu örneğin iletimi 2 ve 3-boyutlu saçılmaların birleşimi gibi değerlendirilebilir.



Şekil 4.15 C örneği için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen Hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.

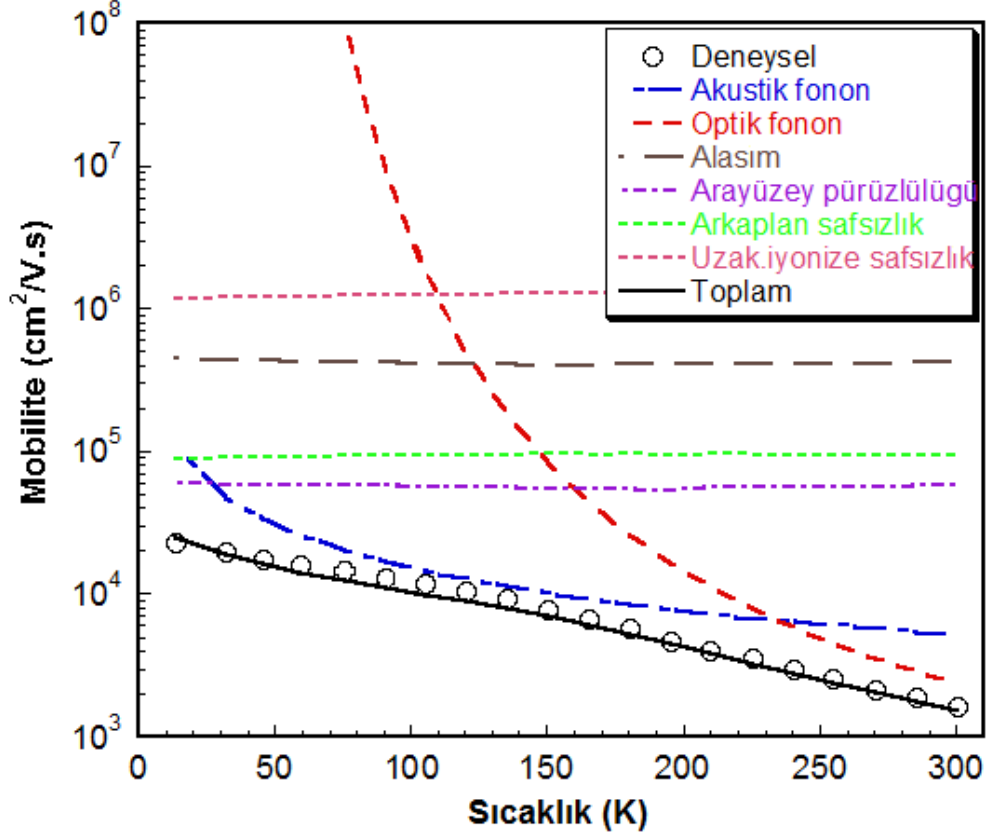
AlInN ve GaN ara yüzeylerin arasında AlN ara tabakası yerleştirildiğinde AlN kalınlığına bağlı olarak alaşım saçılması etkili bir şekilde azalmakta ve Hall mobilitesi önemli ölçüde artmaktadır. Gerçekten de 0.3 nm kalınlıklı AlN ara tabakası AlInN/GaN arayüzüne (örnek D) yerleştirildiği zaman oda sıcaklığında mobilitenin $432 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ye çıktığı ve ara tabakanın olmadığı örneğe göre 4 kat daha yüksek olduğu Şekil 4.16'de görülmektedir. Fakat bütün sıcaklık değerlerinde mobiliteler hala alaşım saçılması ve az da olsa arayüzey pürüzlülüğü saçılması tarafından sınırlanmaktadır.



Şekil 4.16 D örneği için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen Hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.

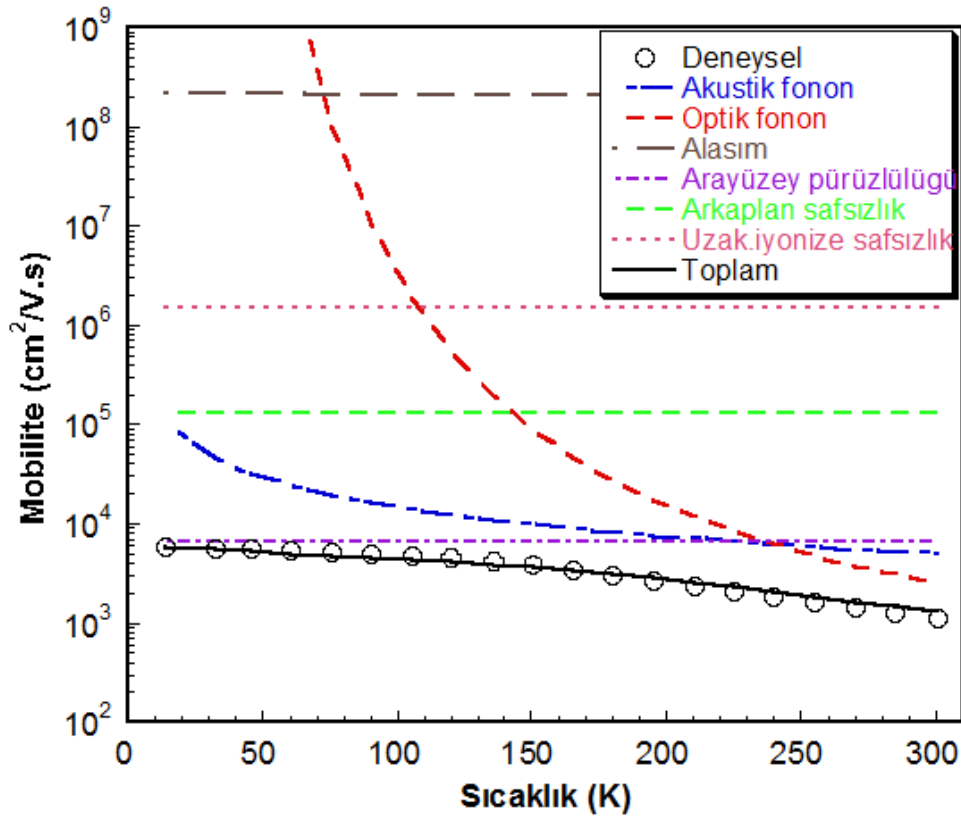
Şekil 4.17’de görüldüğü gibi, AlN ara tabakası 1nm ye çıkartıldığında (örnek E) alaşım saçılması daha fazla bastırıldığından Hall mobilitesi oda sıcaklığında $1630 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ olarak elde edilirken düşük sıcaklıklarda $23.100 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değerine ulaşılmaktadır. Örgü sıcaklığının fonksiyonu olarak hesaplanan toplam mobilitenin deneysel verilerle uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Şekilden görüldüğü gibi yüksek sıcaklık mobilitesi ($T > 240 \text{ K}$) akustik ve optik fonon saçılmaları tarafından belirlenmekte olup oda sıcaklığına gidildikçe optik fonon bileşeni daha baskın hale gelmektedir. Hall mobilitesi ara sıcaklıklarda akustik fonon saçılmasının yaklaşık olarak aynı şiddette etkilediği deformasyon potansiyeli ve piezoelektrik etkileşmesi bileşenleri tarafından karakterize edilmektedir. Sıcaklık düştükçe mobilite arkaplan safsızlık, arayüzey pürüzlülüğü ve akustik fonon saçılmaları ile belirlenmektedir. Bu nedenle, E örneğinde düşük alan iletimi hemen hemen içsel mekanizmalarla karakterize edilmektedir. Dışsal saçılma mekanizmalarının zayıf olmasının nedeni

düşük dislokasyonlu ve daha düzgün arayüzeyle yüksek kaliteli GaN kanalın oluşmasındandır.



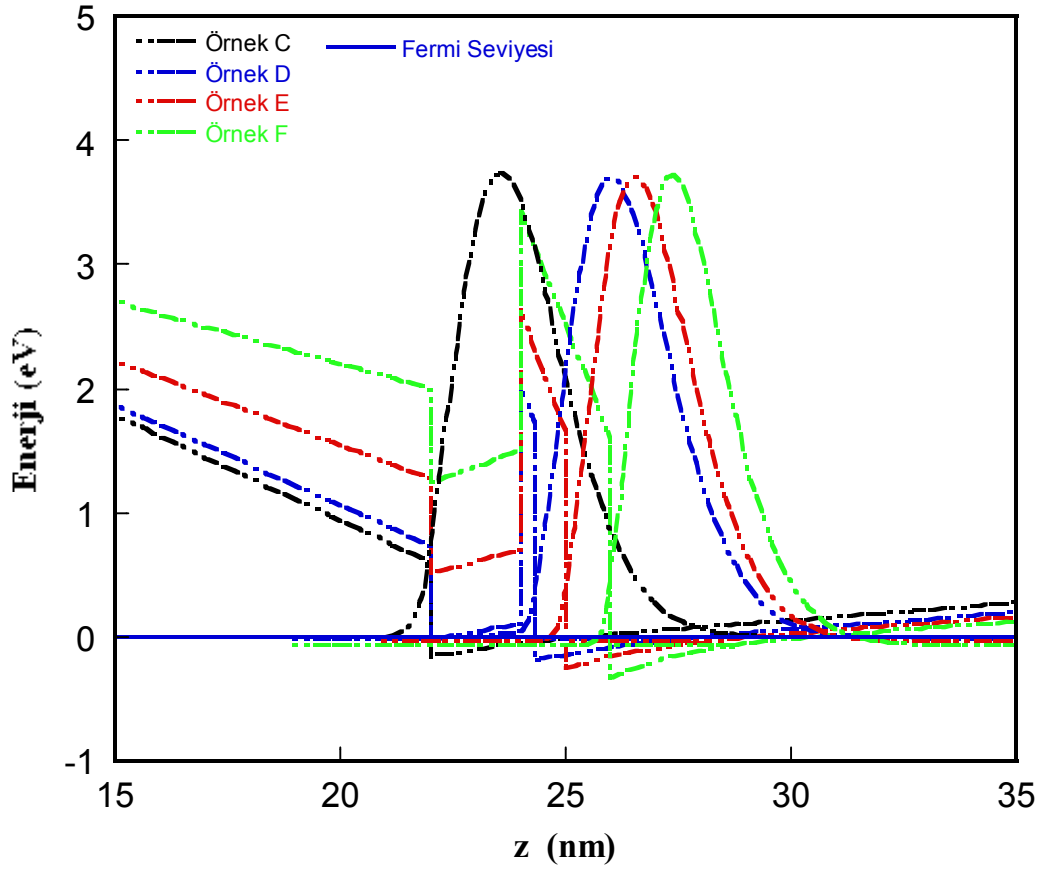
Şekil 4.17 E örneği için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.

Şekil 4.18'de 2nm AlN ara tabakalı F örneğinin sıcaklığa bağlı Hall mobilitenin, E örneğinden oldukça farklı olduğu görülmektedir. Ölçülen Hall mobilitesi düşük sıcaklıkta 5900 cm²/V.s iken oda sıcaklığında 1100 cm²/V.s değerine düşmektedir. Bununla beraber alaşım saçılması etkili olarak bastırıldığından mobilite düşük sıcaklıklarda arayüzey pürüzlülüğü, ara sıcaklıklarda akustik fonon gibi saçılma mekanizmaları tarafından belirlenmektedir. 200 K'in üzerinde arayüzey pürüzlülüğünün yanında akustik ve optik fonon saçılmaları mobilitenin belirlenmesinde etkili hale gelmektedir. Oda sıcaklığına gidildikçe optik fonon bileşeni daha baskın hale gelmektedir. Tüm bu değerlendirmeler sonucunda AlInN/AlN/GaN HEMT yapılarında AlN ara tabaka kalınlığı arttıkça (>1nm) AlN ve GaN arasındaki ara yüzeyin bozulduğu anlaşılır.



Şekil 4.18 F örneği için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması.

AlN ara tabakasının $Al_{0.82}In_{0.12}N/AiN/GaN$ HEMT yapılarının iletim karakteristiği üzerine etkilerini daha detaylı incelemek gerekir. Örgü uyumlu AlInN ve GaN arasına AlN ara tabaka yerleştirmek özellikle alaşımdan kaynaklanan saçılmanın bastırılması ile AlInN/AiN/GaN heteroyapıların iletim özelliklerini etkili bir şekilde değiştirir. Şekil 4.19 1-boyutlu çizgisel olmayan kendi içinde tutarlı (self-consistent) Schrödinger–Poisson denkleminin çözümünden hesaplanan iletkenlik potansiyel profilleri ile birlikte elektron dalga fonksiyonunun genliğinin uzaysal dağılımını göstermektedir [143]. Simülasyon için AlInN parametreleri Vegard yasası kullanılarak çıkartıldı ve tabakaların pseudomorfik olarak büyütüldüğü kabul edildi. Şekilden de görüldüğü gibi elektron dalga fonksiyonundaki uzaysal değişimleri, özellikle bariyerin içerisine girmeleri, AlN ara tabakasının artması (AlN’in bant ofsetinin yüksek olmasından dolayı) ile oldukça azalmaktadır.



Şekil 4.19 Bütün numuneler için, hesaplanan iletkenlik potansiyel profilleri ve elektron dalga fonksiyon genliğinin uzaysal dağılımı.

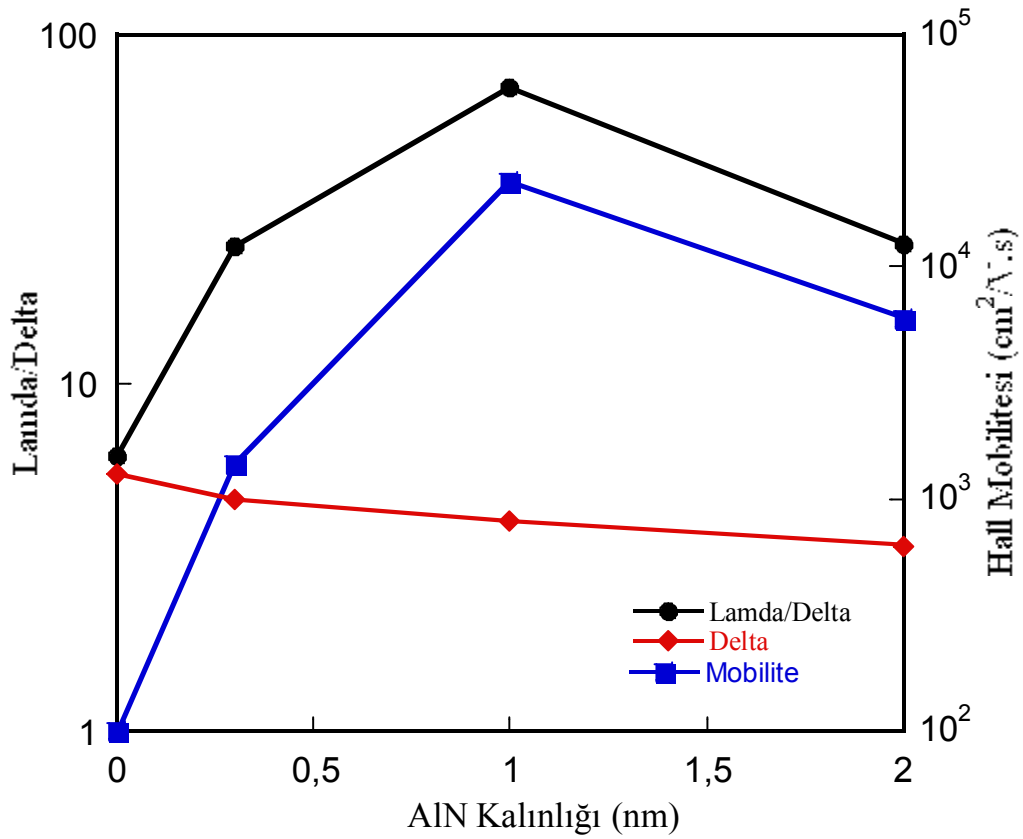
Kanaldaki taşıyıcıları saçılma merkezlerinden uzak tutmak Hall mobilitelerini oldukça artırır. Kaçınılmaz olan akustik ve optik fononlar gibi içsel saçılma mekanizmaları yük taşıyıcı yoğunluğuna, hetero arayüzeydeki etkin kuyu genişliğine ve Fermi seviyesinin pozisyonuna son derece bağlıdır. Şekil 4.19’de görüldüğü gibi AlN ara tabakası arttıkça pseudo üçgensel potansiyel kuyusu derinleşir ve bunun sonucu olarak etkin kuyu genişliği daralır. Fonon saçılmaları tarafından sınırlanan mobilite hesaplarında elektron dalga fonksiyonunun çizgi genişliğinden (FWHM) çıkarılan etkin potansiyel kuyu genişliği değeri kullanıldı. Bu nedenle oda sıcaklığı mobilitelerini belirleyen optik fonon saçılması 2nm AlN ara tabakalı F örneği için $2500 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ olan en yüksek değeri aldı.

Hesaplanan potansiyel profilinden AlN ve AlInN tabakaları arasında istenmeden oluşan GaN tabakasından kaynaklanan parazit kuantum kuyusu bant

kenarları Fermi seviyesinin üstünde (bu kanalda taşıyıcı birikimine izin verilmez) olduğundan E ve F örnekleri için paralel iletim yoktur. Bu nedenle C, E ve F örneklerin iletim özellikleri ile ilgili AlN ve GaN arasında var olan tek kanal göz önüne alınarak yapılan tartışmalar doğrudur. Bununla beraber D örneği için parazit GaN kuantum kuyusu iletkenlik bant kenarı Fermi seviyesine yakın olduğundan dolayı bu örnekte paralel iletkenlik mümkün olabilir. Fakat bu tabakanın (parazit GaN) kalınlığı tam olarak bilinmediğinden D örneği için de tek kanallı iletim yaklaşımıyla analizler yapılmıştır ki deneysel ve teorik sonuçların uyumları bu yaklaşımı desteklemektedir.

Arayüzey pürüzlülüğü saçılmasının daha etkili olduğu düşük sıcaklıklarda AlN ara tabakasının, ölçülen Hall mobilitesine olan etkisi açık değildir. AFM taramasından elde edilen rms pürüzlülüğü, hesaplarda Δ parametresi olarak kullanıldı. Δ , 50-250 Å arasında deneysel mobilite değerlerine fit edilerek serbest parametre olarak alındı [144]. Mobilite, Δ azaldıkça ve Λ artıkça artar. Şekil 4.20'de görüldüğü gibi Delta (Δ), lamda/delta (Λ/Δ) ve düşük sıcaklık mobilitesi AlN ara tabakasının fonksiyonu olarak çizdirildi. Bu hesaplarda elektron dağılımının pozisyonu ara yüzeye doğru kaydığından ve bu durumda ara yüzey pürüzlülüğünün etkisini arttırmasından dolayı tabaka taşıyıcı yoğunluğunun etkisi de hesaba alınmıştır. Görüldüğü gibi Λ/Δ oranı AlN ara tabakasının 1nm ye artması ile artmakta ancak 1 nm'nin üstüne çıktığında ise azalmaktadır. Gonschorek ve arkadaşları AlInN/GaN HEMT yapılarında AlN ara tabakasının elektron mobilitesi üzerine etkilerini araştırdıkları çalışmada ara tabakanın kalınlığının yüzey morfolojisini önemli ölçüde etkilenebileceğini ve bunun sonucunda mobilitenin değişebileceği vurgulamışlardır [39]. Bununla beraber, Gonschorek ve arkadaşlarının AlN ara tabaka kalınlığının artması ile yüzey morfolojisinin bozulduğu şeklinde elde ettikleri sonuçlara zıt olarak bu tezde incelenen Al_{0.82}In_{0.12}N/AlN/GaN örneklerde büyütme yönü ile ilgili ortalama pürüzlülükler dikkate alındığında yüzey morfolojisinin AlN ara tabaka kalınlığının artması ile hemen hemen değişmediği veya küçük bir iyileşme gösterdiği gözlenmektedir. Mobilite analizinden çıkartılan ortalama lateral pürüzlülüğü (Λ/Δ) göz önüne alındığı zaman AlN ara tabakası kanal/bariyer ara yüzeyini iyileştirir. Bu durum,

alaşım ve ara yüzey pürüzlülüğü saçılmalarını azaltarak daha yüksek elektron mobilitesi sağlar. Diğer taraftan AlN ara tabakası yaklaşık kritik değer olan 1 nm nin üzerine çıktığı zaman (arayüzeyi bozan kısmi gerilim rahatlaması artışından olabilir) Λ/Δ yeniden azalır ki bu durumda da Hall mobilitesi azalır. Bu, AlN ara tabakasının optimum değeri 1nm için, AlInN/AlN/GaN HEMT'lerin [39, 145] yanında AlGaN/AlN/GaN HEMT'lerde [146, 147] yapılan araştırmalarla uyum içerisinde dir.



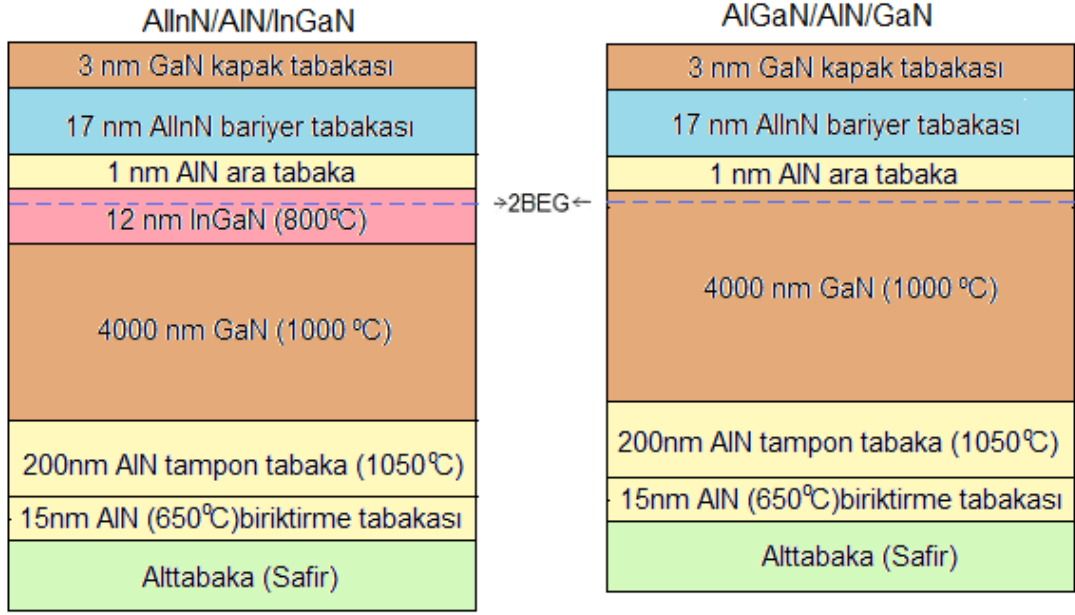
Şekil 4.20 Δ , Λ/Δ ve düşük sıcaklık mobilitesinin AlN kalınlığına bağlı grafiği.

4.3 AlInN/AlN/InGaN/GaN ve AlGaN/AlN/GaN HEMT Yapılarının Karşılaştırılması

Önceki çalışmalarda GaN kuantum kuyulu, AlGaN ve AlInN bariyerli HEMT yapıların iletim özellikleri incelendi. Bu bölümde ise InGaN kuantum kuyulu HEMT yapıların iletim özellikleri standart AlGaN/AlN/ HEMT yapısıyla karşılaştırmalı olarak incelendi.

4.3.1 Deneysel Detaylar

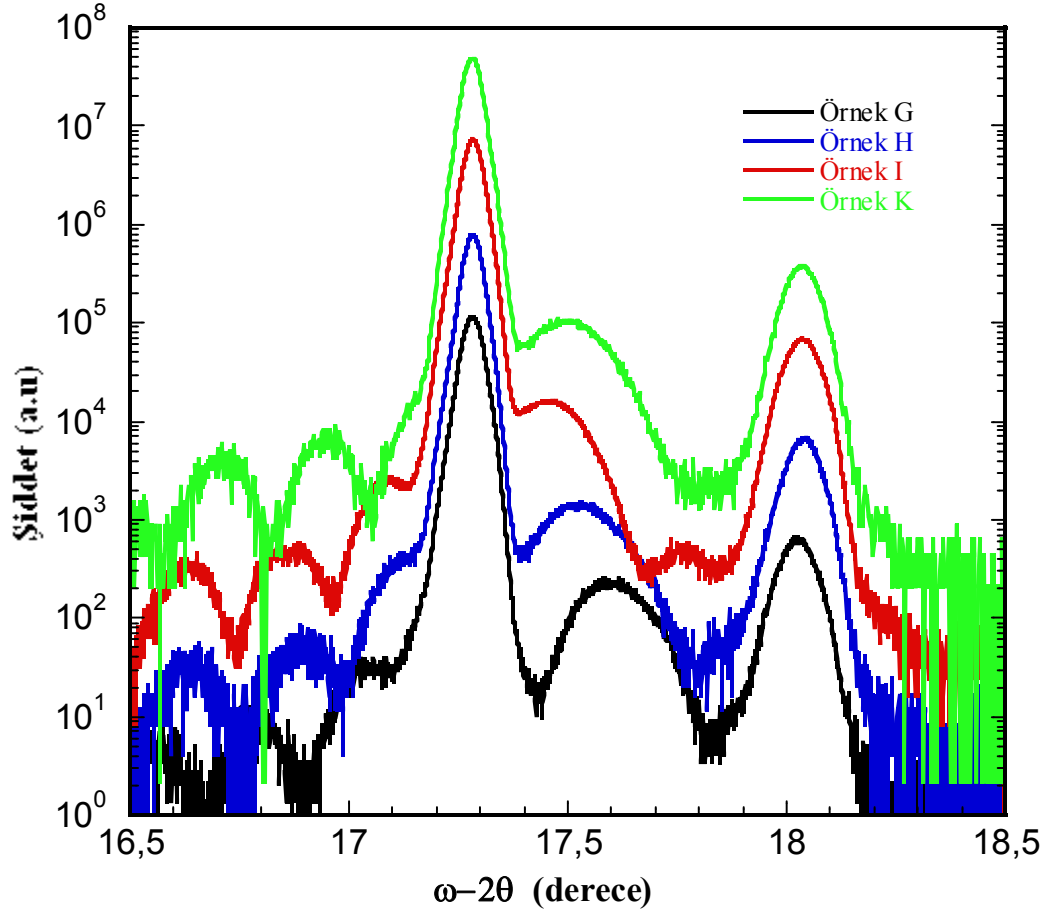
AlInN/AlN/InGaN/GaN ve AlGaN/AlN/GaN HEMT yapıların şematik gösterimi Şekil 4.21’de verilmektedir. 12 nm kalınlıklı InGaN kanallı HEMT yapılar safir (Al_2O_3) alttabakanın c-(0001) düzlemi üzerine MOCVD yöntemi ile büyütüldü. Büyütme $1050\text{ }^\circ\text{C}$ ’de 200 nm AlN tampon tabakasının depozisyonu ile başladı ve sonra $1000\text{ }^\circ\text{C}$ de 4 μm kalınlıklı katkısız GaN tabakası büyütüldü. Daha sonra sıcaklık $In_{0.04}Ga_{0.96}N$ kanalın büyütülebilmesi için $800\text{ }^\circ\text{C}$ düşürüldü. Bunların üzerine 1 nm kalınlıklı AlN ara tabaka büyütüldü. 17 nm kalınlıklı $Al_{1-x}In_xN$ bariyer tabakası 0.16, 0.18 ve 0.20 alaşım oranları ile AlN ara tabakası üzerine büyütüldü (bu örnekler sırasıyla G,H,I olarak adlandırılmaktadır). Son olarak büyütme tüm örnekler için 2-3 nm kalınlıklı GaN kapak tabakası ile sonlandırıldı. İletim özelliklerinin karşılaştırılması için $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN$ (örnek K) HEMT yapısı kullanıldı. Büyütme işlemlerinden sonra örnekler yüksek çözünürlüklü XRD, AFM ve sıcaklığa bağlı Hall ölçümleri ile karakterize edildi.



Şekil 4.21 AlInN/AlN/InGaN ve AlGaN/AlN/GaN HEMT yapılarına ait şematik gösterim.

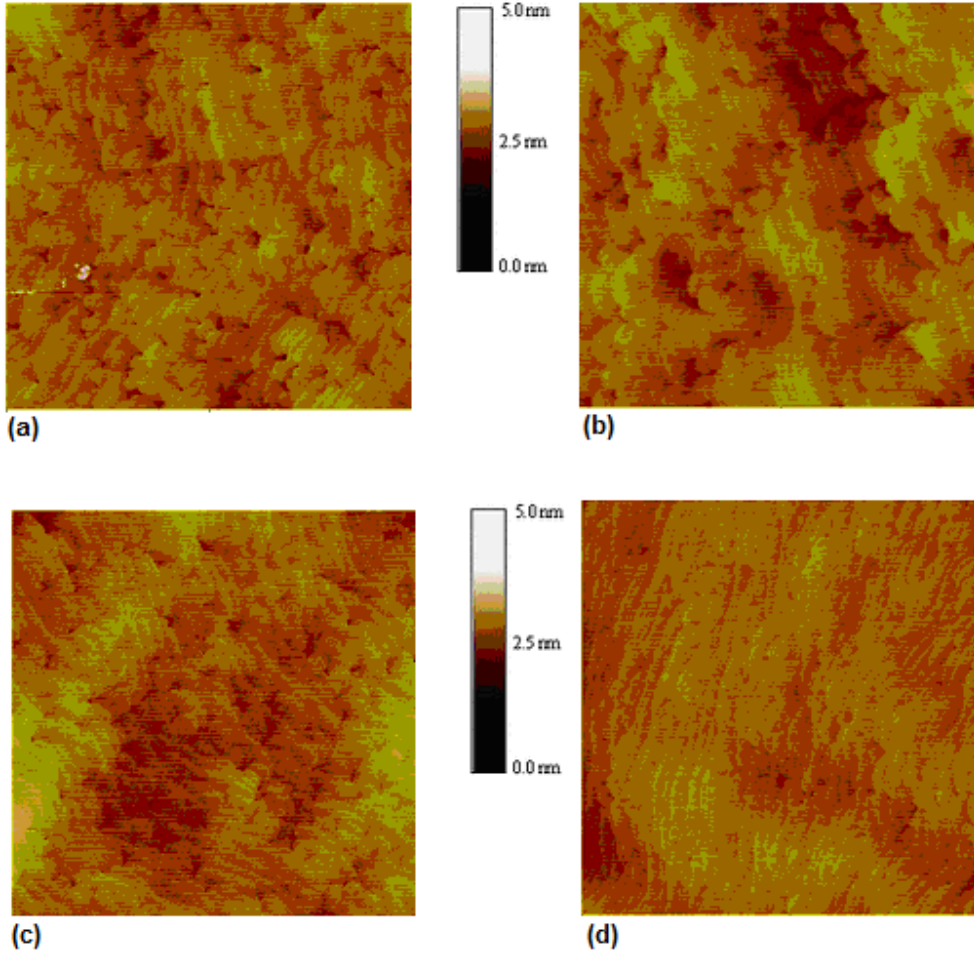
4.3.2 Deneysel Sonuçlar ve Hesaplar

Yüksek çözünürlüklü XRD ölçümleri bütün örnekler için yapısal kalite ve alaşım oranını belirlemek için kullanıldı. XRD verileri ω -2 θ taraması ile (0002) düzleminden gelen yansımalarından toplandı. Şekil 4.22’de bütün örnekler için (0002) etrafında elde edilen yansımalar gösterilmektedir. XRD eğrisinde gözlenen Pendellösung saçakları büyütülen örneklerin yapısal kalitelerini iyi olduğunu göstermektedir. AlInN bariyerli tabakalara ait pikler G,H,I örnekleri için sırasıyla 35.2, 35.04, and 34.92° lerde gözlemlendi. InGaN tabakasının piki GaN pikinin genişliğinden veya In (% 0.04) oranının çok düşük olmasından dolayı GaN pikinin içine gizlendiği düşünülmektedir. XRD sonuçlarından AlInN tabakasındaki In oranı G, H ve I örnekleri için sırasıyla % 16, % 18 ve % 20 olarak belirlendi. Örnek İ için AlGaN tabakasına ait pik 35.0°’de gözlenmekte olup Vegard yasasından alaşımdaki Al oranı % 30 olarak hesaplandı.



Şekil 4.22 Bütün örnekler için (0002) etrafında elde edilen yansımalar

Şekil 4.23’de bütün örnekler için AFM görüntüleri verildi. Arayüzey pürüzlülüğü saçılmasının teorik hesaplarında arayüzey parametresi olarak kullanılan ve AFM görüntülerinden elde edilen rms değerleri Tablo 4.3’te verilmektedir.



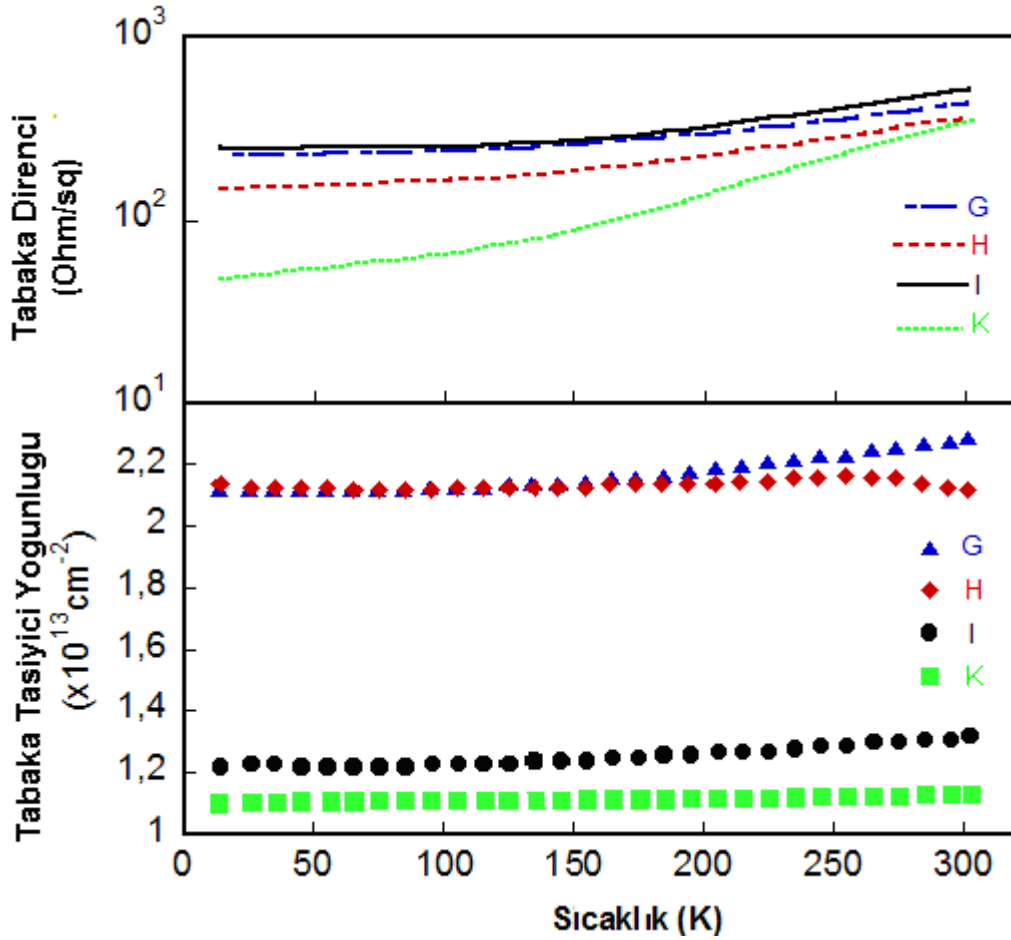
Şekil 4.23 (a) G , (b) H, (c) I ve (d) K örneklerinin AFM görüntüleri

Tablo 4.3 Bütün örnekler için düşük ve oda sıcaklık değerlerinde mobilite, taşıyıcı yoğunluğu, tabaka direnci ve AFM'den elde edilen rms değerleri.

Örnek	300K- mobilitesi ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	10K- mobilitesi ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	300K- n_s ($\times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)	10K- n_s ($\times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)	300K- Tabaka direnci (Ω/\square)	10K- Tabaka direnci (Ω/\square)	rms (nm)
G	628	1310	2.29	2.12	435	225	0.44
H	820	1950	2.12	2.14	360	150	0.59
I	903	2060	1.32	1.22	524	249	0.45
K	1573	12000	1.13	1.10	350	48	0.37

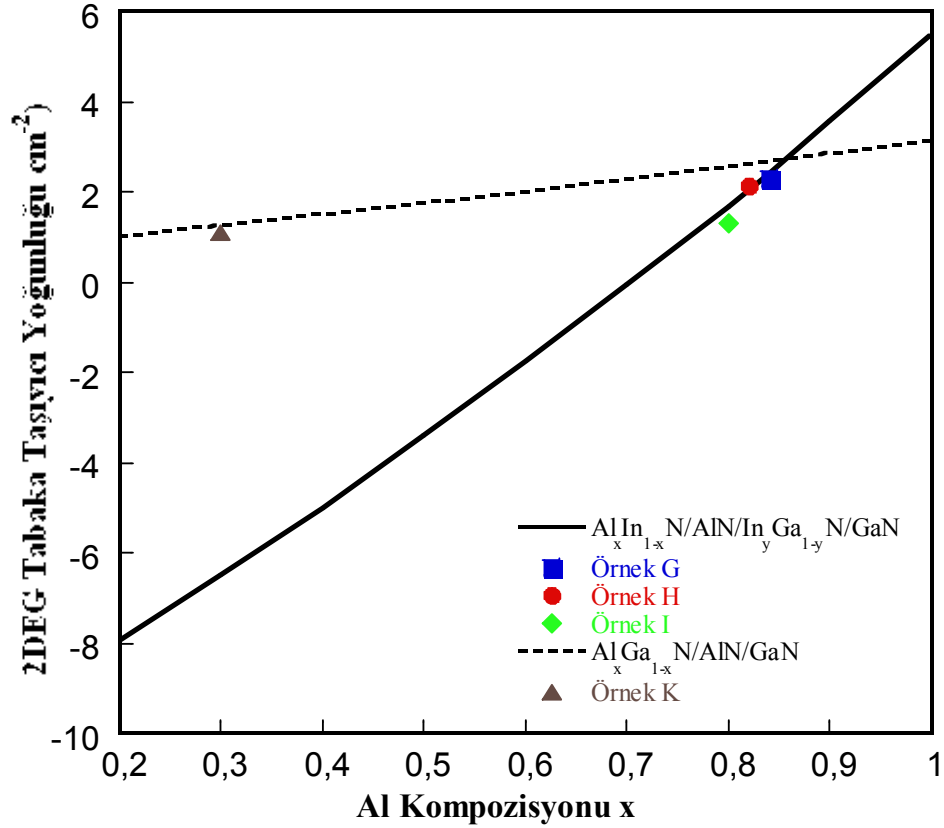
Sıcaklığa bağlı Hall ölçümleri 10-300 K sıcaklıkları arasında Van der Pauw geometrisinde Virginia Commonwealth Üniversitesinde bulunan Lake Shore Hall ölçüm sistemi kullanılarak yapıldı. Omik kontaklar Ti/Al/Ti/Au (30/100/30/30 nm) buharlaştırıldıktan sonra 850 °C'de 60 s süreyle hızlı ısıtma işlemine tabi tutuldu. Şekil 4.24 bütün HEMT yapıların sıcaklığa bağlı tabaka taşıyıcı yoğunluğunu ve

2-boyutlu tabaka direncini göstermektedir. Şekilden görüldüğü gibi bütün örnekler için tabaka taşıyıcı yoğunluğu çalışılan sıcaklık aralığında yaklaşık olarak sabittir. Tabaka taşıyıcı yoğunluğunun bu sıcaklık davranışı iletkenliğin AlN/(In)GaN hetero arayüzeyindeki taşıyıcıların baskın olduğunu göstermektedir. Aynı şekilde sıcaklığa bağlı 2 boyutlu tabaka dirençleri de gösterilmektedir. Bütün örnekler için sıcaklığa bağlı 2-boyutlu tabaka dirençleri, sıcaklık ile ters orantılı olan mobiliteleri tarafından belirlenmektedir. Tablo 4.3'te düşük ve oda sıcaklığındaki tabaka dirençleri ve taşıyıcı yoğunlukları listelenmiştir. $2.12 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ taşıyıcı yoğunluğu ve $820 \text{ cm}^2 / \text{V.s}$ mobilite değerlerine karşı, örgü uyumlu $\text{Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ bariyer tabakalı H örneği için minimum oda sıcaklığı tabaka direnci $360 \text{ } \Omega / \square$ olarak elde edildi. Bu değer oda sıcaklığı tabaka direnci $350 \text{ } \Omega / \square$ olan, GaN kanallı ve $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ bariyerli K örneği ($1.13 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ taşıyıcı yoğunluğu ve $1573 \text{ cm}^2 / \text{V.s}$ ve mobilite değeri) ile karşılaştırılabilir seviyededir.



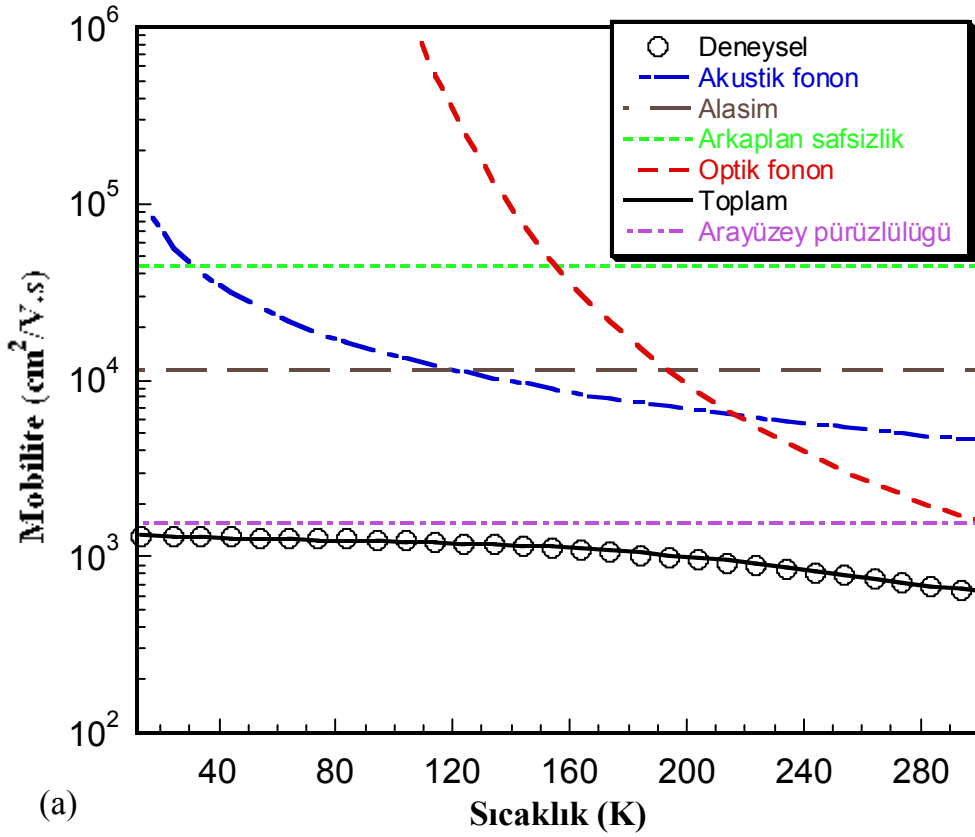
Şekil 4.24 Bütün numuneler için ölçülen tabaka taşıyıcı yoğunluğunun ve tabaka direncinin sıcaklığa bağlı grafiği.

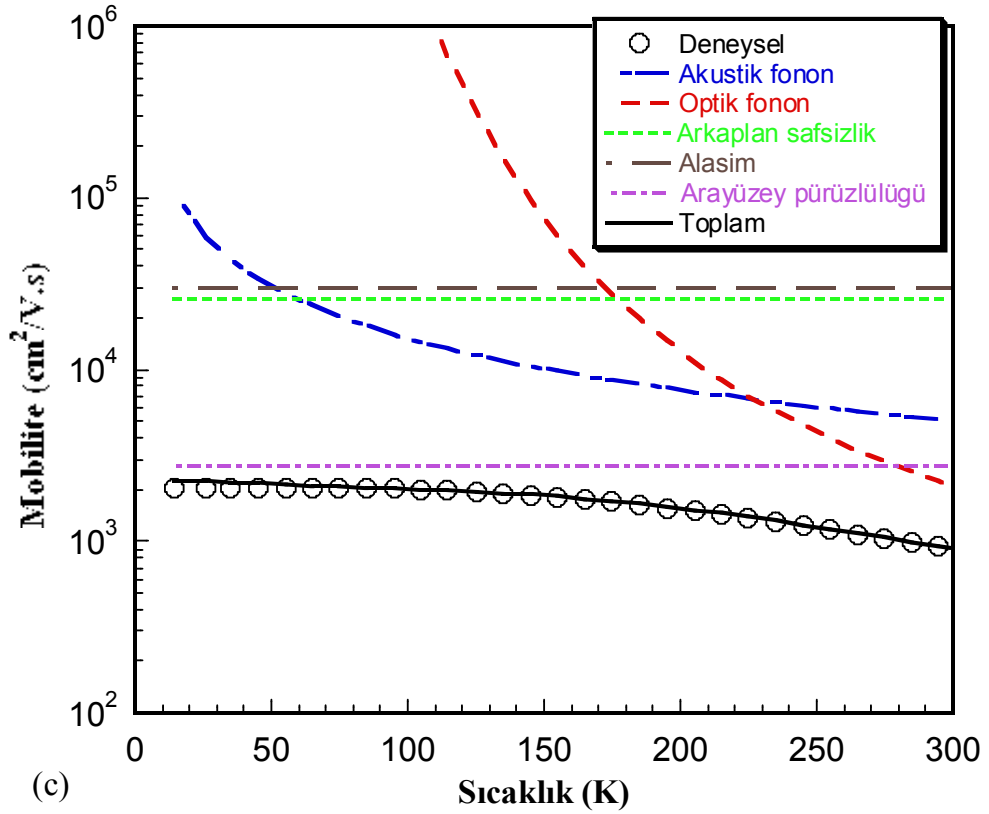
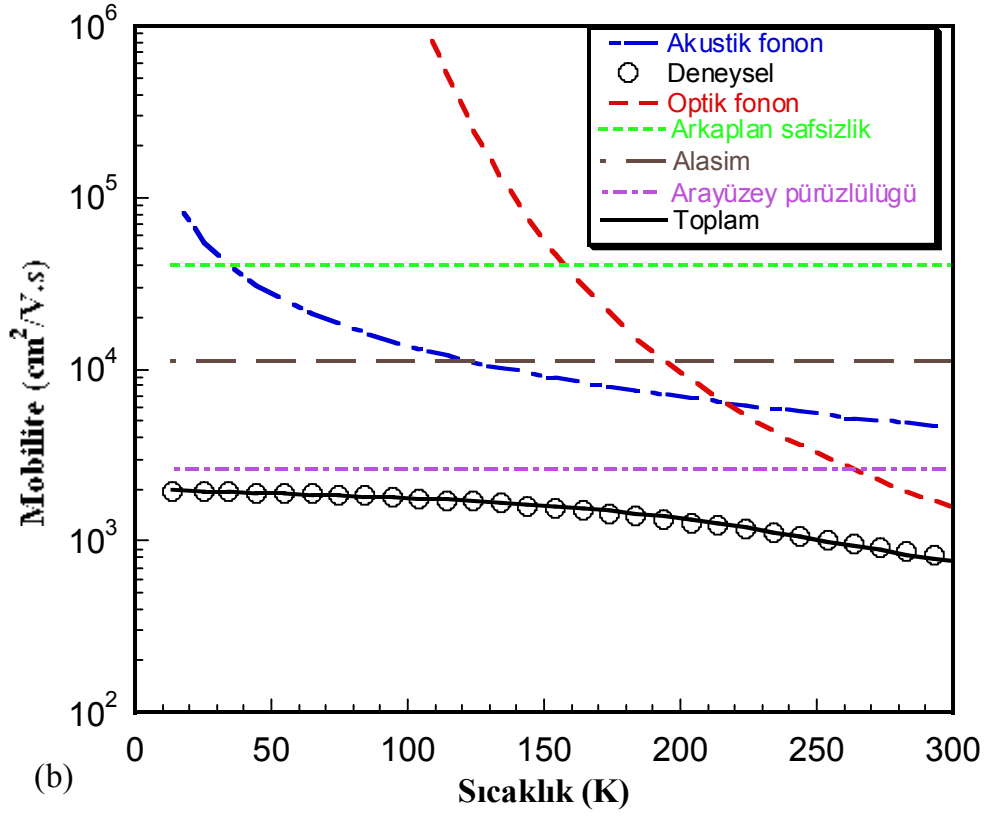
Şekil 4.25 Hall ölçümlerinden elde edilen deneysel verilerle AlGa(In)N/AlN/(In)GaN HEMT yapılarının AlN/(In)GaN arayüzeyde var olan hesaplanmış maksimum tabaka elektron yoğunluğunun Al oranına göre değişimini göstermektedir. Hesaplanan tabaka taşıyıcı yoğunlukları bütün örnekler için deneysel değerlerle son derece uyum içerisindedir. Bu hesaplarda AlN ara tabakası ve GaN kapak tabakası hesaplara dahil edildi. Hesaplanan tabaka taşıyıcı yoğunluğu G, H ve K örnekleri için deneysel sonuçlarla mükemmel bir uyum göstermektedir. Bunun yanında I örneğinde deneysel tabaka taşıyıcı yoğunluğu hesaplanan değerden daha düşüktür. Bunun nedeni olarak InGaN tabakasının kısmi gevşemesi gösterilebilir [148].

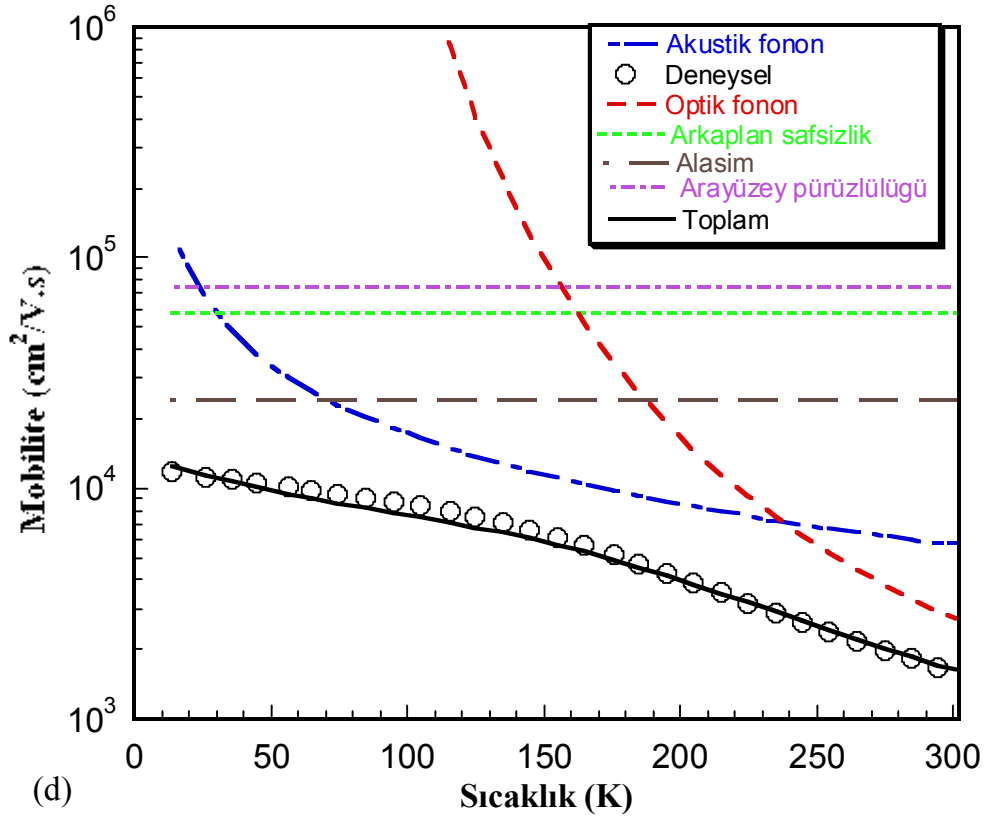


Şekil 4.25 AlInN/AlN/InGaN/GaN ve AlGaInN/AlN/GaN HEMT yapılarında, hesaplanmış maksimum tabaka elektron yoğunluğunun Al kompozisyonuna bağlı grafiği.

Bütün HEMT yapıları için taşıyıcı mobilitesi, sıcaklığa bağlı Hall mobilitesinin teorik modelle karşılaştırılması ile incelendi. Tabaka taşıyıcı yoğunluğu, çalışılan sıcaklık aralığında yaklaşık sabit olduğundan teorik hesaplarda sabit kabul edildi. Sonuçlar Şekil 4.26'da gösterildi. Örgü sıcaklığının fonksiyonu olarak hesaplanan toplam mobilitenin deneysel sonuçlarla mükemmel bir uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Şekilden görüldüğü gibi G (Şekil 4.26.a), H (Şekil 4.26.b) ve I (Şekil 4.26.c) örnekleri için düşük sıcaklıklarda Hall mobilitesi arayüzey pürüzlülüğü saçılması tarafından belirlenirken, sıcaklık 100 K'in üzerine çıktığında arayüzey pürüzlülüğü saçılmasının yanında akustik fonon saçılması baskın hale gelmektedir. Daha yüksek sıcaklıklarda ise mobilite arayüzey pürüzlülüğü ve optik fonon saçılmalarının kombinasyonu olarak belirlenirken az da olsa akustik fonon saçılması da etkili olmaktadır.







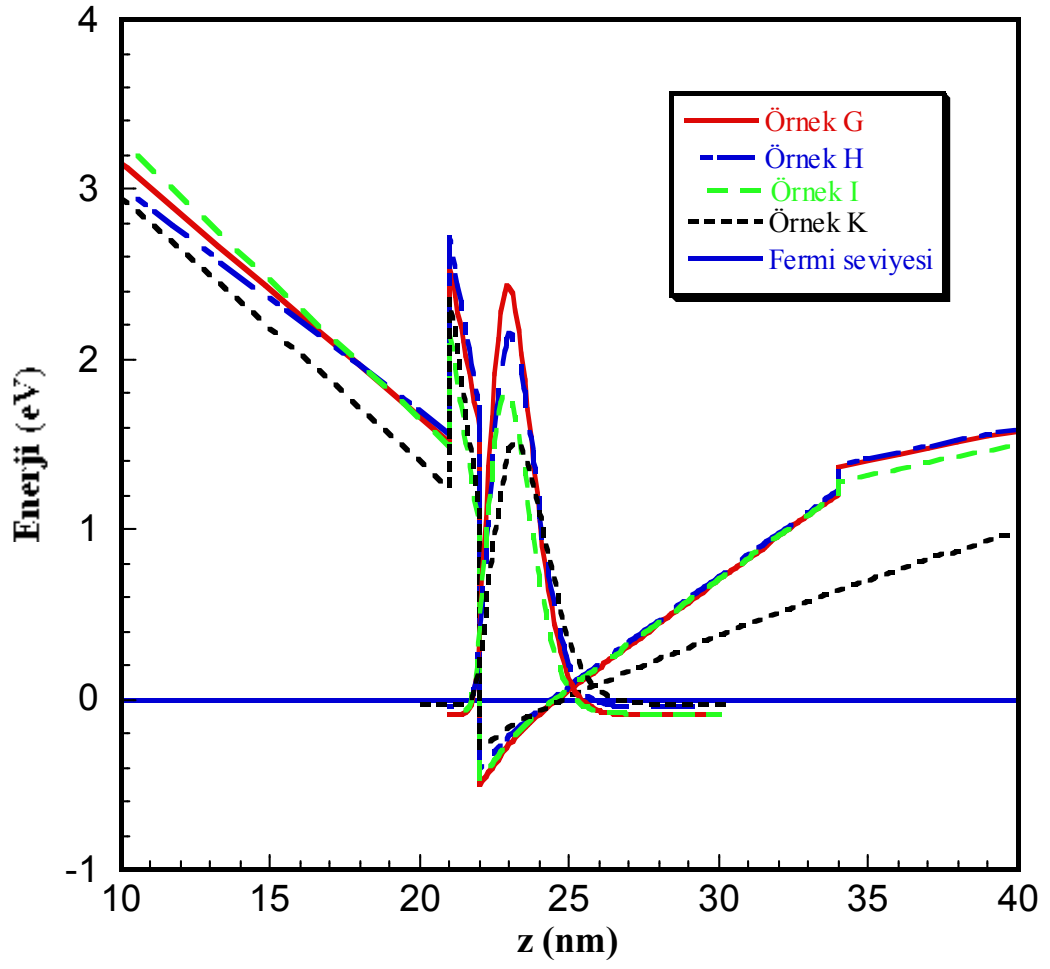
Şekil4.26 (a) G, (b) H, (c) I ve (d) K örnekleri için temel saçılma mekanizmalarını içeren teorik olarak hesaplanan ve ölçülen Hall mobilitelerin sıcaklığa bağlı karşılaştırılması

Diğer taraftan Şekil 4.26 d'den görüldüğü gibi K örneğine ait deneysel ve hesaplanmış sıcaklığa bağlı Hall mobilitesi yüksek sıcaklıklarda ($T > 240$ K) akustik ve optik fonon saçılmaları tarafından belirlenirken sıcaklık oda sıcaklığına yaklaştıkça optik fonon bileşeninin etkisi artarak baskın saçılma mekanizması haline gelmektedir. Ara sıcaklıklarda ise mobilite, akustik fonon saçılmasının yaklaşık olarak aynı şiddette etkili olan piezoelektrik etkileşimler ve deformasyon potansiyeli bileşenleri tarafından belirlenmektedir. Sıcaklık düştükçe mobilite optik fonon saçılması dışındaki diğer tüm saçılma mekanizmaları tarafından karakterize edilmektedir. Bu örnekte düşük alan iletimi yaklaşık olarak içseldir. Dışsal saçılma mekanizmalarının zayıf oluşu düşük dislokasyon yoğunluklu ve düzgün arayüzeyle yüksek kaliteli GaN kuyunun olduğunu göstermektedir.

Şekil 4.27'de iletkenlik potansiyel profili ve elektron dalga fonksiyonunun genliğinin uzaysal dağılımı gösterilmektedir. Şekil 4.27'den görüldüğü gibi

elektron dalga fonksiyonundaki uzaysal deęişimleri, özellikle bariyerin içersine girmeleri, AlN bant ofsetin yüksek olmasından dolayı oldukça azalmaktadır. Aynı şekilden InGaN kanallı yapıların pseodo üçgensel potansiyel kuyuları GaN kanallı yapılara göre daha derin olduęu görölmektedir. Fonon saçılmaları tarafından sınırlanan mobilite hesaplarında elektron dalga fonksiyonunun FWHM'dan çıkarılan etkin potansiyel kuyu genişlięi kullanıldı. Potansiyel derinlięi ve buna baęlı etkin kuyu genişlięi G,H,I örnekleri için yaklaşık aynı olmasına rağmen optik fononlar tarafından sınırlanan mobilite deęerleri G ve H örnekleri için aynı olup ($1556 \text{ cm}^2/\text{Vs}$), I örneęi için ($2057 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) daha yüksektir. Bunun nedeni I örneęi için tabaka taşıyıcı yoğunluęunun daha düşük olmasıdır (Şekil 4.24).

G, H ve I örnekleri için arayüzey pürüzlülüęü saçılması hariç dięer saçılma mekanizmalarının sınırladıęı mobilite deęerleri yukarıda tartıřıldıęı gibi birbirine yakındır. Bu nedenle arayüzey pürüzlülüęü saçılması bu örnekler için mobilitiyi sınırlayan temel saçılma mekanizması olarak dikkate alınmıřtır. Arayüzey pürüzlülüęü saçılmasının hesaplarında AFM görüntülerinden elde edilen rms deęerleri Δ parametresi olarak kullanıldı. Λ ise 50-250 Å arasında deneysel mobilite deęerlerine fit edilerek serbest parametre olarak alındı. Bu hesaplarda elektron daęılım merkezinin ara yüzeye doęru kayması ve bunun sonucu olarak ara yüzey pürüzlülüęünün etkisini arttırmamasından dolayı tabaka taşıyıcı yoğunluęunun etkisi hesaba alındı. AlN/InGaN arayüzeyinde AlInN bariyerdeki alařım oranının etkisi göz ardı edilemez. Mobilite analizlerinden elde edilen ortama lateral pürüzlülüęü (Λ veya Λ/Δ) göz önüne alındıęında kanal/bariyer arayüzeyi AlInN bariyerindeki In oranı arttıka daha düz hale gelir. Buda arayüzey pürüzlülüęü saçılmasını azaltarak Tablo 4.3 da göröldüęü gibi daha yüksek mobilite elde edilmesini saęlar. Dięer taraftan GaN kanallı K örneęinin arayüzeyinin, InGaN kuyulu örnekler ile karřılařtırıldıęında dikkat çekici kadar düzgün olduęu görölmektedir (Λ ve Δ parametrelerinden). AlN/InGaN arayüzeyindeki büyük pürüzlülüęün nedeni In oranındaki veya tabaka kalınlıęındaki dalgalanmalardan kaynaklanabilir [149]



Şekil 4.27. Bütün numuneler için, hesaplanan iletkenlik potansiyel profilleri ve elektron dalga fonksiyon genliğinin uzaysal dağılımı.

5. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışması, MOCVD yöntemiyle safir üzerine büyütülen, farklı bariyer (AlGa_N, AlIn_N) ve farklı kuyu (Ga_N, InGa_N) içeren 10 tane HEMT yapının iletim özelliklerini içermektedir.

Çalışmanın ilk kısmında yüksek mobiliteli AlGa_N/AlN/Ga_N (örnek A) ve yüksek tabaka elektron yoğunluklu AlIn_N/AlN/Ga_N (örnek B) 2DEG heteroyapılar çalışıldı. A örneği için elektron yoğunluğu $8.44 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ iken oda sıcaklığı elektron mobilitesi $1700 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve iki boyutlu tabaka direnci $435 \text{ } \Omega/\square$ olarak ölçüldü. $4.23 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ gibi çok yüksek elektron yoğunluğuna ve buna karşılık $812 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ oda sıcaklığı mobilitesine sahip olan B örneğinin iki boyutlu tabaka direnci $182 \text{ } \Omega/\square$ olarak elde edildi. İletim özelliklerini anlamak için akustik ve optik fonon, arayüzey pürüzlülüğü ve alaşım saçılması gibi çeşitli saçılma mekanizmaları ile teorik modelleme yapıldı ve bu model sıcaklığa bağlı ölçülen mobilitelere uygulandı. Arayüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılmanın oda sıcaklığında B örneğinde mobilitayı düşürdüğü görüldü. B örneğinde gözlenen yüksek 2DEG yoğunluğu büyük polarizasyon alanından oluşmaktadır.

Çalışmanın ikinci kısmında ise sıcaklığa bağlı Hall ölçümleri kullanılarak değişen AlN ara tabaka kalınlıklı örgü uyumlu AlIn_N/AlN/Ga_N heteroyapıların iletim özellikleri çalışıldı. Saçılma mekanizmaları başarılı bir şekilde analiz edildi ve bütün heteroyapılarda baskın saçılma mekanizmaları düşük ve yüksek sıcaklık bölgelerinde belirlendi. Örgü uyumlu AlIn_N/Ga_N heteroyapılarda AlN ara tabakasının HEMT dizaynında göz önünde tutulması gereken önemli parametrelerden biri olduğu keşfedildi. İletim özelliklerini belirleyen saçılma mekanizmalarının analizinden ve numunelerin AFM görüntülerinden AlN ara tabakanın alaşım ve arayüzey pürüzlülüğü saçılmalarını büyük oranda azaltıp mobilitayı arttırdığı, ancak diğer taraftan en uygun değer olan 1nm'nin üzerine çıkıldığında yapısal bozulmadan dolayı Hall mobilitesinin azaldığı görüldü. 1 nm

ara tabakalı durumda, $320 \Omega/\square$ değerinde en düşük tabaka direnci elde edildi. Alaşımından kaynaklanan saçılmanın, 0.3 nm kalınlığa kadar olan ara tabakalı numunelerde baskın olduğu görüldü. Diğer taraftan AlN ara tabaka kalınlığı arttıkça alaşım saçılmasının azaldığı ve akustik, optik ve arayüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılmaların, farklı oranlarda farklı sıcaklıklarda etkili hale geldiği görüldü. AlN ara tabaka kalınlığı arttıkça, oda sıcaklığı elektron mobilitesinin giderek arttığı gözlemlendi. 1nm AlN ara tabakası içeren E örneğinde mobilitesi $1630 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ olarak pik verdi. Sonrasında 2nm AlN ara tabakalı F örneğinde elektron mobilitesinin düştüğü görüldü. Ayrıca ölçülen 2DEG yoğunluğu, AlN/GaN arayüzeyde var olan piezoelektrik ve kendiliğinden polarizasyonun bileşenlerini içeren teorik tahminle karşılaştırıldı. Bütün AlInN/AlN/GaN HEMT yapılar için deneysel taşıyıcı yoğunluğu, AlN ve AlInN arasında istenmeden oluşan GaN tabakası da hesaba katıldığında teorik beklenti ile uyum içinde olduğu görüldü. Analizlerden 1nm AlN spacer tabaka kalınlığı, yüksek elektron mobilitesi için optimum gerekli kalınlık olarak bulundu.

Çalışmanın son kısmında ise GaN kuyusu yerine InGaN kuyulu AlInN/AlN/InGaN/GaN HEMT yapıların iletim özellikleri incelenenerek geleneksel AlGaIn/AlN/GaN HEMT yapısı ile karşılaştırıldı. AlInN/AlN/InGaN HEMT yapısının AlInN bariyer tabakasında % 16, % 18 ve % 20 farklı oranlarda In kullanılarak optimum In oranı % 18 olarak tespit edildi. Bu orana karşılık gelen tabaka direnci $360 \Omega/\square$ olarak elde edildi. Bu değer AlGaIn/AlN/GaN HEMT yapısı ile ($350 \Omega/\square$) kıyaslanacak bir değerdedir. Büyütme şartlarında yapılacak optimizasyonla, mobilitiyi önemli ölçüde sınırlayan arayüzey pürüzlülüğünü azaltmak için arayüzey kalitesi artırılabilirse tabaka direnci için daha düşük bir değer elde edilebilir. Bununla beraber AlInN/AlN/InGaN/GaN HEMT yapısının bileşenlerinin büyütme şartlarındaki farklılıklarından dolayı bu işi başarmak kolay değildir. Alternatif dizayn olarak Al(In)GaIn/AlN/GaN/InGaIn/GaN gibi çift heteroeklem kullanılarak bu problemin üstesinden gelinebilir ve InGaIn kuyusu GaIn kuyusuna alternatif olarak kullanılabilir.

Kullanılan bütün örnekler için düşük ve yüksek sıcaklıklarda mobilite, taşıyıcı yoğunluğu ve tabaka dirençlerinin sayısal değerleri Tablo 5.1'de

verilmektedir. AlGaN bariyer tabakası ve GaN kuyu içeren A ve K örneklerinde Al alaşım oranı sırasıyla % 20 ve % 30 değerlerindedir. Al alaşım oranının artması polarizasyon kaynaklı yük yoğunluğunu ve kanala taşıyıcı hapsedilmesini arttırırken diğer taraftan tabaka kalitesini düşürerek mobilitenin azalmasına neden olur. Tablo 5.1'den görüldüğü gibi A örneği için mobilite değeri yüksek, taşıyıcı yoğunluğu ise daha düşüktür. K örneğinin tabaka direnci ise A örneğine göre daha düşüktür. AlInN bariyer tabakası ile GaN kuyu içeren B, C, D, E ve F örnekleri incelendiğinde ara tabaka kalınlıkları aynı ve optimum değer olan 1 nm'li B ve E (örgü uyumlu) örnekleri için tabaka direnci en düşük değerlerdedir. Bu iki örnek kıyaslandığında ise B örneğinin tabaka direncinin çok düşük olmasının nedeni düşük mobilite değerine rağmen tablodan da görüldüğü gibi polarizasyondan kaynaklanan yük yoğunluğunun çok yüksek olmasıdır. AlInN bariyerli InGaN kuyulu G, H ve I örneklerinde In alaşım oranı arttıkça arayüzeyin daha düz olduğu ve mobilitenin arttığı görülmektedir. Ancak taşıyıcı yoğunluğunun maksimum olduğu H örneğinde en düşük tabaka direnci elde edilmektedir.

Tablo 5.1 Bütün örnekler için düşük ve yüksek sıcaklıklarda mobilite, taşıyıcı yoğunluğu ve tabaka dirençleri.

Örnek	300K- mobilite (cm ² /V.s)	30K- mobilite (cm ² /V.s)	300K-n _s (x10 ¹³ cm ⁻²)	30K-n _s (x10 ¹³ cm ⁻²)	300K- Tabaka direnci (Ω/□)	30K- Tabaka direnci (Ω/□)
A	1700	12188	0.844	0.758	435	68
B	812	2470	4.23	3.55	182	71
C	121	100	2.43	2.11	2962	2126
D	423	14100	1.43	0.831	1033	533
E	1630	23100	1.20	1.16	320	23
F	1110	5900	1.46	1.44	386	74
G	628	1310	2.29	2.12	435	225
H	820	1950	2.12	2.14	360	150
I	903	2060	1.32	1.22	524	249
K	1573	12000	1.13	1.10	350	48

10 örnek üzerinden yapılan bu çalışmada görüldüğü gibi geleneksel olarak kullanılan AlGaN bariyer yerine AlInN bariyer ve GaN kuyu yerine de InGaN kuyu alternatif olarak kullanılabilir. Yapılan bu çalışma, bütün örnekler üzerinden incelendiğinde B örneğinin 182 Ω/□ gibi minimum tabaka direncine sahip olduğu

görülmektedir. Bununla beraber büyütme şartlarında yapılacak optimizasyonlarla arayüzeyin daha düzgün olması ile ara yüzey pürüzlülüğü saçılmasının etkisini A veya İ örneklerinde olduğu gibi büyük oranda ortadan kaldırdığımızı farz edersek, sadece optik fonon ve akustik fonon gibi içsel mekanizmaların baskın olduğu daha yüksek mobiliteli durumlar elde edebiliriz. Bu varsayımlarla da oda sıcaklığı mobilitesi $1200 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ kadar çıkarabilir ve $120 \text{ } \Omega/\square$ gibi son derece küçük tabaka direnci elde edebiliriz.

KAYNAKÇA

- [1] Morkoç, H., “Handbook of Nitride Semiconductors and Devices”, Wiley- VCH, Berlin, Vols. I–III (2008).
- [2] Wurgaftman, I., Meyer, J.R., Ram-Mohan L.R., “Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys “, *J.Appl. Phys.* **89**, (2001), 5815.
- [3] Morkoç, H., Carlo, A.Di, Cingolani, R., “GaN-based modulation doped FETs and UV detectors”, *Solid State Electron.*, **46**, (2002) 157
- [4] Martinez, E.J., “Gallium Nitride & Related Wide Bandgap Materials and Devices”, *DARPA Tech*, (2000).
- [5] 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** (2008) 4244.
- [6] Sheppard S.T, Doverspike K, Pribble W.L, Allen S.T, Palmour J.W, Kehias L.T, et al., “High power microwave GaN/AlGaN HEMTs on semi-insulating silicon carbide substrates”, *IEEE Electron Dev. Lett.*, **20**, (1999) 161.
- [7] Sullivan G.J, Chen M.Y, Higgins J.A, Yang J.W, Chen Q, Pierson R.L, et al., “High power 10-GHz operation of AlGaN HFETs on insulating SiC”, *IEEE Electron Dev. Lett.* **19**, (1998) 198.
- [8] Wakejima, A., Matsunaga, K., Ota, K., Okamoto, Y., Ando, Y., Nakayama, T., ve Miyamoto, H., “” *IEEE MTT-S Int. Microwave Symp.*, (2006) 1360.
- [9] Wakejima, A., Nakayama, T., Ota, K., Okamoto, Y., Ando, Y., Kuroda, N., Tanomura, M., Matsunaga, K., and Miyamoto, H., “Pulsed 0.75kw output single-ended gan-fet amplifier for 1/s band applications,” *Devices Electron. Lett.* **42** (2006) 1349.
- [10] Okamoto, Y., Nakayama, T., Ando, Y., Wakejima, A., Matsunaga, K., Ota, K., and Miyamoto, H., “230 W C-band GaN-FET power amplifier”, *Electron. Lett.* **43** (2007) 927.
- [11] Murase, Y., Wakejima, A., Inoue, T., Yamanoguchi, K., Tanomura, M., Nakayama, T., Okamoto, Y., Ota, K., Ando, Y., Kuroda, N., Matsunaga, K., and Miyamoto, H., *Compo Semicon. Integ. Circuit Symp.*, (2007) 1.
- [12] Yoshida, S., Tanomura, M., Murase, Y., Yamanoguchi, K., Ota, K., Matsunaga, K., Shimawaki, H., “A 76 GHz GaN-on-Silicon Power Amplifier for Automotive Radar Systems” *IEEE MTT-S International Microwave Symposium* (2009) 665.

- [13] Okamoto, Y., Ando, Y., Nakayama, T., Wakejima, A., Matsunaga, K., Ota, K. and Miyamoto, H., "C-Band GaN-Based Field-Effect-Transistor Power Amplifiers with 170-W Output Power" *Jpn. J. Appl. Phys.* **46** (2007) 2312.
- [14] Kobayashi, K.W., Chen Y.C., Smorchkova I., Heying B., Luo W.B., Sutton W., Wojtowicz M., Oki A., "A Cool, Sub-0.2 dB Noise Figure GaN HEMT Power Amplifier With 2-Watt Output Power" *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, **44** (2009) 2648.
- [15] Kang, B. S., Pearton, S. J., Chen, J. J., Ren, F., Johnson, J. W., Therrien, R. J., Rajagopal, P., Robert, J. C., Piner, E. L., and Linthicum, K. J., *Appl. Phys. Lett.* **89**, (2006) 122102.
- [16] Kang, B. S., Wang, H. T., Lele, T. P., Ren, F., Pearton, S. J., Johnson, J. W., Rajagopal, P., Roberts, J. C., Piner, E. L., and Linthicum, K. J., *Appl. Phys. Lett.* **91**, (2007) 112106.
- [17] Kang, B. S., Wang, H. T., Ren, F., and Pearton, S. J. "Electrical detection of biomaterials using AlGaN/GaN high electron mobility transistors" *J. Appl. Phys.* **104** (2008) 031101.
- [18] Chu, B.H., Chang, C.Y., Kroll, K., Denslow, N., Wang, Y.L., Pearton S.J., Dabiran, A.M., Wowchak, A.M., Cui, B., Chow P.P., Ren F., "Detection of an endocrine disrupter biomarker, vitellogenin, in largemouth bass serum using AlGaN/GaN high electron mobility transistors" *Appl. Phys. Lett.* **96** (2010) 013701.
- [19] Khan, M.A., Kuznia, J.N., et al, "Microwave performance of a 0.25 μm gate AlGaN/GaN heterostructure field effect transistor", *Appl. Phys. Lett.*, **65** (1994) 1121.
- [20] Smorchkova, I.P., Chen, L., Mates, T., Shen, L., Heikman, S., Moran, B., Keller, S., Den Baars, S.P., Speck, J.S., Mishra, U.K., "AlN/GaN and (Al,Ga)N/AlN/GaN two-dimensional electron gas structures grown by plasma-assisted molecular-beam epitaxy", *Journal of Appl. Phys.*, **90** (2001) 5196.
- [21] Jeganathan, K., Ide, T., Shimizu, M., and Okumura, H., "Two-dimensional electron gases induced by polarization charges in AlN/GaN heterostructure grown by plasma-assisted molecular-beam epitaxy" *Journal of Appl. Phys.*, **94** (2003) 3260.
- [22] Miyoshi, M., Egawa, T., Ishikawa, H., "Study on mobility enhancement in MOVPE-grown AlGaN/AlN/GaN HEMT structures using a thin AlN interfacial layer", *Solid-State Electronics* **50** (2006) 1515.
- [23] Cao, Y., and Jena, D., "High-mobility window for two-dimensional electron gases at ultrathin AlN/GaN heterojunctions", *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 182112.

- [24] Gaksa, R., Shur, M. S., Bykhovski, A. D., Orlov, A. O., and Snider, G.L., "Electron mobility in modulation-doped AlGa_N-Ga_N heterostructures", *Appl. Phys. Lett.* **74** (1999) 287.
- [25] Frayssinet, E., Knap, W., Lorenzini, P., Grandjean, N., Massies, J., Skierbiszewski, C., Suski, T., Grzegory, I., Porowski, S., Simin, G., Hu, X., and Khan, M. A., Shur, M. S., Gaksa, R., and Maude, D., "High electron mobility in AlGa_N/Ga_N heterostructures grown on bulk Ga_N substrates" *Appl. Phys. Letts.*, **77** (2000) 2551.
- [26] Manfra, M.J., Weimann, N.G., Hsu, J.W.P., Pfeiffer, L.N., West, K.W., Syed, S., Stormer, H.L., Pan, W., Lang, D.V., Chu, S.N.G., Kowach, G., Sergent, A.M., Caissie, J., Molvar, K.M., Mahoney, L.J., Molnar, R.J., "High mobility AlGa_N/Ga_N heterostructures grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy on semi-insulating Ga_N templates prepared by hydride vapor phase epitaxy", *Journal of Appl. Phys.*, **92** (2002) 338.
- [27] Manfra, M.J., Baldwin, K.W., Sergent, A.M., West, K.W., Molnar, R.J. and Caissie, J., "Electron mobility exceeding 160 000 cm² /V s in AlGa_N/Ga_N heterostructures grown by molecular-beam epitaxy", *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 5394.
- [28] Germain, M., Leys, M., Boeykens, S., Degroote, S., Wang, W., Schreurs, D., Ruythooren, W., Choi, K., Daele, B.V., Tendeloo, G.V., and Borghs, G., "High electron mobility in AlGa_N/Ga_N HEMT grown on sapphire: strain modification by means of AlN interlayers" *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **798** (2004).
- [29] Gurusinghe, M.N., Davidsson, S.K., and Andersson, T.G. "Two-dimensional electron mobility limitation mechanisms in Al_xGa_{1-x}N/Ga_N heterostructures" *Phys. Rev. B*, **72** (2005) 045316.
- [30] Miyoshi, M., Egawa, T., Ishikawa, H., Asai, K., Shibata, T., Tanaka, M., and Oda, O., "Nanostructural characterization and two-dimensional electron-gas properties in high- mobility AlGa_N/AlN/Ga_N heterostructures grown on epitaxial AlN/sapphire templates" *Journal of Appl.Phys.*, **98** (2005) 063713.
- [31] Wang, C., Wang, X., Hu, G., Wang, J., Xiao, H., Li, J., "The effect of AlN growth time on the electrical properties of Al_{0.38}Ga_{0.62}N/AlN/Ga_N HEMT structures", *Journal of Crystal Growth*, **289** (2006) 415.
- [32] Wang, X., Hu, G., Ma, Z., Ran, J., Wang, C., Xiao, H., Tang, J., Li, J., Wang, J., Zeng, Y., Li, J., and Wang, Z., "AlGa_N/AlN/Ga_N/SiC HEMT structure with high mobility Ga_N thin layer as channel grown by MOCVD", *Journal of Crystal Growth*, **298** (2007) 835.
- [33] Zhi-Yong, M., Xiao-Liang, W., Guo-Xin, H., Jun-Xue, R., Hong-Ling, X., Wei-Jun, L., Jian, T., Jian-Ping, L., and Jin-Min, L., "Growth and Characterization of AlGa_N/AlN/Ga_N HEMT Structures with a Compositionally Step-Graded AlGa_N Barrier Layer", *Chinese Physics Letters*, **24** (2007) 1705.

- [34] Elhamri, S., Mitchel, W.C., Mitchell, W.D., and Landis, G.R., Berney, R., Saxler, A., “Study of the effects of an AlN interlayer on the transport properties of AlGaN/AlN/GaN heterostructures grown on SiC” *Appl.Phys.Lett.* **90** (2007) 042112.
- [35] Chabak, K.D., Gillespie, J.K., “Full-Wafer Characterization of AlGaN/GaN HEMTs on Free-Standing CVD Diamond Substrates”, *IEEE Electron Device Lett.*, **31** (2010).
- [36] Kuzmík, J., “Power Electronics on InAlN/(In)GaN: Prospect for a record performance”, *IEEE Electron Device Lett.* **22**, (2001) 510.
- [37] Kuzmík, J., “InAlN/(In)GaN high electron mobility transistors: some aspects of the quantum well heterostructure proposal”, *Semicond. Sci. Technol.*, **17**, (2002) 540.
- [38] Katzer, D.S., Storm, D.F., Binari, S.C., and Shanabrook, B.V., Torabi, A., Zhou, L., and Smith, D.J., “Molecular beam epitaxy of InAlN/GaN heterostructures for high electron mobility transistors”, *J. Vac. Sci. Technol. B* **23** (2005) 1204.
- [39] Gonschorek M., Carlin J-F., Feltin E., Py M A. ve Grandjean N., “High electron mobility lattice-matched AlInN/GaN field-effect transistor heterostructures”, *Appl. Phys. Lett.* **89** (2006) 062106.
- [40] Hiroki, M., Yokoyama, H., Watanabe, N., Kobayashi, T., “High-quality InAlN/GaN heterostructures grown by metal-organic vapor phase epitaxy”, *Superlattices and Microstructures*, **40** (2006) 214.
- [41] Hiroki, M., Maeda, N., and Kobayashi, T., “Fabrication of an InAlN/AlGaN/AlN/GaN Heterostructure with a Flat Surface and High Electron Mobility” *Applied Physics Express* **1** (2008) 111102.
- [42] Xie, J., Ni, X., Wu, M., Leach, J. H., Özgür, Ü. and Morkoç, H., “High electron mobility in nearly lattice-matched AlInN/AlN/GaN heterostructure field effect transistors”, *Appl. Phys. Lett.* **91** (2007) 132116.
- [43] Okamoto, N., Hoshino, K., Hara, N., Takikawa, M., Arakawa, Y., “MOCVD-grown InGaN-channel HEMT structures with electron mobility of over 1000 $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ”, *Journal of Crystal Growth* **272** (2004) 278.
- [44] Xie, J., Leach, J.H., Ni, X., Wu, M., Shimada, R., Özgür, Ü., and Morkoç, H., “Electron mobility in InGaN channel heterostructure field effect transistor structures with different barriers”, *Appl.Phys.Lett.* **91** (2007) 262102.
- [45] Haris, W.A., “Electronic Structure and Properties of Solids”, Dover, New York (1980) 174.

- [46] 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., "Lattice Parameters of Gallium Nitride", *Applied Physics Letters*, **69** (1996) 73.
- [47] 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)GaN/GaN hetero- and quantum well structures" *J.Phys:Condens. Matter* **14** (2002) 3399.
- [48] 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** (1996) 73.
- [49] 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** (1997) 1062.
- [50] 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** (1997) 1504.
- [51] Detchprohm, T., Hiramatsu, K., Itoh, K. and Akasaki, I. "Relaxation Process of the Thermal Strain in the GaN/ α - Al_2O_3 Heterostructure and Determination of the Intrinsic Lattice Constants of GaN Free from the Strain", *Japanese Journal of Applied Physics*, **31** (1992) 1454.
- [52] 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** (1995) 149.
- [53] Paszkowicz, W., "X-Ray Powder Diffraction Data for Indium Nitride", *Powder Diffraction* **14** (1999) 258.
- [54] Wright, A. F., "Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN", *Journal Applied Physics*, **82** (1997) 2833.
- [55] Kasap, S., Capper, P., "Handbook of Elektronik and Photonic Materials", *Springer, New York*, (2006).
- [56] McNeil, L.E., Grimditch, M., French, R.H., "Raman scattering on sublimation recondensation AlN", *J. Am. Ceram. Soc.* **76**, 1132 (1993).
- [57] Shimada, K., Sota, T., Suzuki, K., "Calculated using first-principle total energy", *Journal Applied Physics*. **84**, 4951 (1993).

- [58] Azuhata, T., Sota, T., Suzuki, K., Nakamura, S., “Raman Scattering in Bulk GaN”, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, L129 (1995).
- [59] Davydov, V.Yu., Emtsev, V.V., Goncharuk, I.N., Smirnov, A.N., Petrikov, V.D., Mamutin, V.V., Vekshin, V.A., Ivanov, S.V., Smirnov, M.B., Inushima, T., “Raman study on InN grown on sapphire and calculation based on the pairwise interatomic potentials and rigid-ion Coulomb interaction”, *Applied Physics Letters* **75**, 3297 (1999).
- [60] Davydov, V.Yu., Kitaev, Yu.E., Goncharuk, I.N., Smirnov, A.N., Graul, J., Semchinova, O., Uffmann, D., Smirnov, M.B., Mirgorodsky, A.P. and Evarestov R.A., “Phonon dispersion and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN” *Physical Review B: Condensed Matter*, **58** (1998) 12899.
- [61] Maruska, H.P., and Tietjen, J.J., “The preparation and properties of vapor-deposited single crystalline GaN”, *Applied Physics Letters*, **15** (1969) 327.
- [62] Yim, W.M., and Paff, R.J., “Thermal expansion of AlN, sapphire and silicon”, *Journal of Applied Physics*, **45** (1974) 1456.
- [63] Sheleg, AV., and Savastenko, V.A., *Vesti Akademii Nauk USSR, Seria Fiziki i Matematika Nauk*, **3** (1976) 126.
- [64] Sichel, E.K., and Pankove, J.I., *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **38** (1977) 330.
- [65] Slack, G.A., “Nonmetallic crystals with high thermal conductivity”, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **34** (1973) 321.
- [66] Witek, A., “Some aspects of thermal conductivity of isotopically pure diamond a comparison with nitrides”, *Diamond & Related Materials*, **7** (1998) 962.
- [67] Slack, G., Schowalter, L., Rojo, J., Morelli, D., and Freitas, J., “Proceedings of the International Workshop on Bulk Nitrides”, *Amazonas, Brazil, Journal of Crystal Growth*, **246** (2002) 287.
- [68] Slack, G.A., and McNelly, T.F., “AlN single crystals”, *Journal of Crystal Growth*, **42** (1977) 560 .
- [69] Slack, G.A., and Bartram, S.F., “Thermal expansion of some diamond-like crystals”, *Journal of Applied Physics*, **46** (1975) 89.
- [70] Liu, L., and Edgar, J.H., “Substrates for gallium nitride epitaxy”, *Materials Science & Engineering R: Reports*, **37** (2002)61.
- [71] Manasreh, O., ”III Nitrides Semiconductors: Electrical, Structural and Defects Properties”, *Elsevier Science B.V. Amsterdam*, (2000).

- [72] Peter, Y., Cardona, Y. M., "Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties" *Springer Berlin Heidelberg New York, 3rd, Corrected Printing 2005*.
- [73] Reshchikov, M. A., and Morkoç, H., "Luminescence properties of defects in GaN", *Applied Physics Reviews, Journal of Applied Physics*, **97** (2005) 61301.
- [74] Van de Walle, C. G., and Neugebauer, J., "First-principles calculations for defect and impurities: Application to III-nitrides", *Applied Physics Reviews Journal of Applied Physics*, **90** (2004) 3851.
- [75] Arslan, E., Öztürk, M.K., Teke, A., Özcelik, S., and Özbay, E., "Buffer optimization for crack-free GaN epitaxial layers grown on Si(111) substrate by MOCVD", *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** (2008).
- [76] Lin, M.E., Sverdlov, B., Zhou, G.L., and Morkoç, H., "A Comparative Study of GaN Epilayers Grown on Sapphire and SiC Substrates by Plasma-assisted Molecular-beam Epitaxy" *Appl. Phys. Lett.*, **62** (1993) 3479.
- [77] Ng, H.M., Doppalapudi, D., Moustakas, T.D., Weimann, N.G., and Eastman, L.F., *Appl. Phys. Lett.*, **73** (1998) 821.
- [78] Nakamura, S., Mukai, T., and Senoh, M., "Si- and Ge-doped GaN films grown with GaN buffer layers", *Jpn. J. Appl. Phys.*, **31** (1992) 2883.
- [79] Götz, W., Romano, L.T., Walker, J., Johnson, N.M. and Molnar, R.J., "Hall effect analysis of GaN films grown by hydride vapor phase epitaxy", *Appl. Phys. Lett.*, **72** (1998) 1214.
- [80] Nakamura, S., Mukai, T., and Senoh, M., "In situ monitoring and Hall measurements of GaN grown with GaN buffer layers", *J. Appl. Phys.*, **71** (1992) 5543.
- [81] Binari, S.C. and Dietrich, H.C., "In GaN and Related Materials", *S. J. Pearten, ed., Gordon and Breach, New York* (1997) 509.
- [82] Yun, F., Reshchikov, M.A., He, L., King, T., Morkoç, H., Novak, S.W. and Wei, L., "Energy band bowing parameter in $Al_xGa_{1-x}N$ alloys", *J. Appl. Phys., Rapid Commun.*, **92** (2002) 4837.
- [83] Huang D., Yun, F., Reshchikov, M.A., Wang, D., Morkoç, H., Rode, D.L., Farina, L.A., Kurdak, Ç., Tsen, K.T., Park, S.S and Lee, K.Y., "Hall mobility and carrier concentration in free-standing high quality GaN templates grown by hydride vapor phase epitaxy", *Solid State Electron*, **45** (2001) 711.
- [84] Koleske, D.D., Henry, R.L., Twigg, M.E., Culbertson, J.C., Binari, S.C., Wickenden, A.E., and Fatemi, M., "Influence of AlN nucleation layer temperature on GaN electronic properties grown on SiC" *Appl. Phys. Lett.*, **80** (2000) 4372.

- [85] Edwards, J., Kawabe, K., Stevens, G., and Tredgold, R.H., "Space charge conduction and electrical behaviour of aluminium nitride single crystals", *Solid State Commun.*, **3** (1965) 99.
- [86] Kawabe, K., Tredgold, R.H., and Inyishi, Y., *Electron. Eng. Jpn*, **87** (1967)62.
- [87] Yim, W.M., Stotko, E.J., Zanzucchi, P.J., Pankove,, J., Ettenberg, M., and Gilberts, S.L., "Epitaxially grown AlN and its optical band gap", *J. Appl. Phys.* **44** (1973) 292.
- [88] Yoshida, S., Misawa, S., Fujii, Y., Takada, S., Hayakawa, H., Gonda, S., and Itoh, A., "Reactive molecular beam epitaxy of aluminium nitride", *J. Vac. Sci. Technol.*, **16** (1979) 990.
- [89] Rutz, R.F., "Ultraviolet Electroluminescence in AlN", *Appl. Phys. Lett.*, **28** (1976) 379.
- [90] Rutz, R.F., Harrison, E.P. and Cuome, J.J., *IBM J. Res. Ser.*, **17** (1973) 61.
- [91] Chin, V.W.L., Tansley, T.L., and Osotchan, T., "Electron mobilities in gallium, indium, and aluminum nitrides", *J. Appl. Phys.* **75** (1994) 7365.
- [92] Morkoç, H., "Nitride Semiconductors and Devices", *Springer Verlag, Heidelberg* (2006).
- [93] Yamaguchi, S., Kariya, M., Nitta, S., Takeuchi, T., Wetzel, C., Amano, H. and Akasaki, I., "Structural properties of InN on GaN grown by metalorganic vapor-phase epitaxy", *J. Appl. Phys.* **85** (1999) 7682.
- [94] Saito, Y., Yamaguchi, T., Kanazawa, H., Kano, K., Araki, T., Nanishi, Y., Teraguchi, N., and Suzuki, A., "Growth of high-quality InN using low-temperature intermediate layers by RF-MBE", *J. Cryst. Growth*, **237** (2002) 1017.
- [95] Higahivaki, M. and Matsui, T., "Epitaxial growth of high-quality InN films on sapphire substrate", *J. Cryst. Growth*, **252** (2003) 128.
- [96] 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** (1999) 3222.
- [97] Hellman, E. S., *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **3**, (1998) 11.
- [98] Bernardi, F., Fiorentini, V., and Vanderbilt, D., "Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides", *Phys. Rev. B* **56** (1997) 10024.
- [99] Lundstrom, M. S. "Fundamentals of Carrier Transport", *Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1st edition*, (1990).

- [100] Conwell, E. M. "High field transport in semiconductors", *Academic Press, New York*, 1967.
- [101] Rode, D. L. "Electron mobility in direct gap polar semiconductors", *Phys. Rev. B*, **2** (1970) 1012.
- [102] Kohler, M. "Behandlung von Nichtgleichgewichtsvorgängen mit Hilfe eines Extremalprinzips", *Z.Phys.*, **124** (1948) 772.
- [103] Soundheimer, E.H. "The theory of the transport phenomena in metals", *Proc.Roy.Soc. (London) A*, **203** (1950) 75.
- [104] Ziman, J.M. "Electrons and Phonons", *Oxford, London*.
- [105] Ehrenreich, H. "Band structure and electron transport of GaAs" *Phys.Rev.* **120** (1960) 1951.
- [106] Cercignani, C., Gamba, I.M., Jerome J.W., and Shu, C.W. "Device benchmark comparisons via kinetic, hydrodynamic and high-field models", *Comput.Methods Appl. Mech. Engrg.*, **181**, (2000) 381.
- [107] Rode, D.L. "Low field electron transport in semiconductors and semimetals", *Academic Press, New York*, **10** (1975) 1.
- [108] Singh, J., "Physics of semiconductor and their heterostructures" *University of Michigan, USA*, (1993).
- [109] Morkoç, H., Ünlü, H. and Ji, G., "Fundamentals and Technology of MODFETs", *John Wiley & Sons, LTD, Chichester*, (1991).
- [110] Yu, P.Y. and Cardona, M. "Fundamentals of Semiconductors", *Springer, Berlin*, (1995).
- [111] Look, D.C., "Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices, *John Wiley & Sons, LTD*, (1989).
- [112] Nag, B.R. "Electron Transport in Compound Semiconductors", *Springer Series in Solid-State Science, Springer, Berlin*, **11** (1980).
- [112] B. L. Gelmont, M. Shur, M. Strosio, "Polar optical-phonon scattering in three- and twodimensional electron gases", *J. Appl. Phys.*, **77** (1995) 657.
- [113] Price, P.J., "Two-dimensional electron transport in semiconductor layers", *Ann.Phys. (New York)*, **133** (1981) 217.
- [114] Stern, F., "Calculated Temperature Dependence of Mobility in Silicon Inversion Layers", *Phys. Rev.Lett.*, **44** (1980) 1469.

- [115] Price, P.J., “Polar-optical-mode scattering for an ideal quantum-well heterostructure”, *Phys. Rev. B*, **30** (1984) 2234.
- [116] Maldague, F.P., *Surf. Sci.*, **73** (1978) 296.
- [117] Ando, T., Fowler, A.B., and Stern, F., “Electronic properties of two dimensional systems”, *Rev. Mod. Phys.* **54** (1982) 437.
- [118] Ando, T., J. “Self-Consistent Results for a GaAs/Al_xGa_{1-x}As Heterojunction. II. Low Temperature Mobility”, *Phys. Soc. Jpn.* **51** (1982) 3900.
- [119] Price, P.J., “Two-dimensional electron transport in semiconductor layers. I. Phonon scattering” *Surf. Sci.*, **113** (1982) 199.
- [120] Price, P.J., “Two-dimensional electron transport in semiconductor layers II: Screening” *Surf. Sci.*, **143** (1984) 145.
- [121] Gold, A., “Comment on Weak Anisotropy and Disorder Dependence of the In-Plane Magnetoresistance in High-Mobility (100) Si-Inversion Layers” *Phys. Rev. B: Condensed Matter*, **38** (1988) 798.
- [122] Gold, A., and Dolgoplov, V.T., “Temperature dependence of the conductivity for the two-dimensional electron gas: Analytical results for low temperatures”, *Phys. Rev. B: Condensed Matter*, **33** (1986) 1076
- [123] Hirakawa, K., and Sakaki, H., “Mobility of two-dimensional electron gas at selectively doped n-type Al_xGa_{1-x}As/GaAs heterojunctions with controlled electron concentrations”, *Phys. Rev. B*, **33** (1986) 8291.
- [124] Ashcroft, N.W., Mermin, N.D., “Solid State Physics”, *Cornell University*, (1975).
- [125] Wolfe, C.M., Holonyak, N., Stillman, G.E., “Physical Properties of Semiconductors”, *Prentice Hall Series in Solid State Physical Electronics* (1989).
- [126] Ridley, B. K., Foutz, B. E., Eastman, L.F., “Mobility of in bulk GaN and Al_xGa_{1-x}N/GaN heterostructures”, *Phys. Rev. B*, **61**, (2000), 16862.
- [127] Hutson, A. R., “Piezoelectric Scattering and Phonon Drag in ZnO and CdS”, *J. Appl. Phys.* **32** (1961) 2287.
- [128] Ridley B.K., “The electron-phonon interaction in quasi-two-dimensional semiconductor quantum-well structures”, *J. of Physics C: Solid State physics*, **15**, (1982) 5899.
- [129] Brooks, H., *Phys. Rev.*, **83** (1951) 879.
- [130] Lee, K., Shur, M. S., Drummond, T. J., and Morkoc, H., “Low field ... layers” *J. Appl. Phys.* **54** (1983) 6432.

- [131] Hess, K., “Impurity and phonon scattering in layered structures”, *Appl.Phys.Lett.* **35** (1979) 484.
- [132] Walukiewicz, W., Ruda, H. E., Lagowski, J., and Gatos, H. C., *Phys. Rev. B* **30** (1984) 4571.
- [133] Hsu, L., Walukiewicz, W., “Electron mobility in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures”, *Phys. Rev. B* **56** (1997) 1520.
- [134] Das Sarma, S., Stern, F., “Single-particle relaxation time versus scattering time in an impure electron gas” *Phys. Rev. B* **32** (1985) 8442.
- [135] Weimann, N.G., Eastman, L.F., Doppalapudi, D., Ng, H.M. and Moustakas, T.D., *J. Appl. Phys.* **83** (1998) 3656.
- [136] Jena, D., Gossard, A.C. and Mishra, U.K., *Appl. Phys. Lett.* **76** (2000) 1.
- [137] Bellotti, E., Bertazzi, F., Goano, M., “Alloy scattering in AlGaN and InGaN: A numerical study”, *J. Appl. Phys.* **101**, (2007) 123706.
- [138] Palacios, T., Rajan, S., Chakraborty, A., Heikman, S., Keller, S., Den-Baars, S. P., and Mishra, U. K., *IEEE Trans. Electron Devices* **52**, (2005) 2117.
- [139] Gracey, J.A.M., Dell, J. M., Faraone, L., Fisher, T. A., Parish, G., Wu, Y.-F., and Mishra, U. K., “Scattering mechanisms limiting two-dimensional electron gas mobility in $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ modulation-doped field-effect transistors”, *J. Appl. Phys.* **87** (2000) 3900.
- [140] Gurusinge, M.N., Davidsson, S.K., and Anderson, T.G., “Two-dimensional electron mobility mechanisms in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructure”, *Phys.Review B*, **72** (2005) 045316.
- [141] Teke, A., Gökden, S., Tülek, R., Leach, J H, Fan, Q., Xie, J., Özgür, Ü., Morkoç, H., Lisesivdin, 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** (2009) 063031.
- [142] Hums, C., Bläsing, J., Dadgar, A., Diez, A., Hempel, T., Christen, J., Krost, A., Lorenz, K. and Alves, E. *Appl.Phys. Lett.* **90** (2007) 022105.
- [143] Birner, S., Hackenbuchner, S., Sabathil, M., Zandler, G., Majewski, J. A., Andlauer T., Zibold, T., Morschl, R, Trellaki, A and Vogl, P. *Acta Phys. Pol. A* **110** (2006) 111.
- [144] Çörekçi, S., Usanmaz, D., Tekeli, Z., Çakmak, M., Özçelik, S., and Özbay, E. *J. Nanosci. Nanotechnol.* **8** (2008) 640.

- [145] Xie, J., Ni, X., Wu, M., Leach, J. H., Özgür, Ü., and Morkoç, H., “High electron mobility in nearly lattice-matched AlInN/AlN/GaN field effect transistor heterostructures”, *Appl. Phys. Lett.* **91** (2007) 132116.
- [146] Smorchkova, 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** (2001) 3998.
- [147] Cao, Y. and Jena, D. “High mobility window for two dimensional electron gases at ultrathin AlN/GaN heterojunctions”, *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 182112.
- [148] Chu, R. M., Zheng, Y. D., Zhou, Y. G., Gu, S. L., Shen, B. and Zhang, R. *Opt. Mater.* **23** (2003) 207.
- [149] Gökden, S., Tülek, R., Teke, A., Leach, J.H., Fan, Q., Xie, J., Özgür, Ü., Morkoç, H., Lisesivdin, S. B. and Özbay, E., “Mobility limiting scattering mechanisms in nitride-based two dimensional heterostructures with InGaN channel”, *Semicond. Sci. Technol.* **25** (2010) 045024.