İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GAN TABANLI HETEROYAPILARIN SIKI BAĞLANIM KURAMI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Ebru ŞİMŞEK

Anabilim Dalı : FİZİK

Programı : FİZİK MÜHENDİSLİĞİ

MAYIS 2003

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GAN TABANLI HETEROYAPILARIN SIKI BAĞLANIM KURAMI

YÜKSEK LİSANS TEZİ
Ebru ŞİMŞEK
(509991098)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 20 Haziran 2003
Tezin Savunulduğu Tarih : 26 Mayıs 2003

Tez Danışmanı : **Doç.Dr. Hilmi ÜNLÜ**
Diğer Jüri Üyeleri **Prof.Dr. Ahmet Togo GİZ (İ.T.Ü.)**
Doç.Dr. Ali SERPENGÜZEL (Koç Üniv.)

MAYIS 2003

ÖNSÖZ

Bu yüksek lisans tez çalışmasında yardımlarını esirgemeyen ve yapıcı eleştirileriyle beni yönlendiren değerli danışmanım Sayın Doç. Dr. Hilmi ÜNLÜ' ye; bu süre zarfında gerekli desteği gösteren aileme ve arkadaşlarıma çok teşekkür ederim.

Mayıs 2003 Ebru Şimşek

İÇİNDEKİLER

KISALTMALAR iv

TABLO LİSTESİ v

ŞEKİL LİSTESİ vii

SEMBOL LİSTESİ xi

ÖZET xiv

SUMMARY xv

1. GİRİŞ 1

2. HETEROYAPILARDA TERMOKİMYASAL SIKI BAĞLANIM KURAMI 2

2.1. Basıncın Enerji Band Yapısına Etkisi 7

2.2. Sıcaklığın Enerji Band Yapısına Etkisi 18

2.3. Kompozisyonun Enerji Band Yapısına Etkisi 25

2.4. Gerilmenin Enerji Band Yapısına Etkisi 35

3. SONUÇLAR 38

3.1. AlGaN için Basınç, Sıcaklık ve Gerilmenin Enerji Band Yapısına Etkisi 38

3.2. InGaN için Basınç, Sıcaklık ve Gerilmenin Enerji Band Yapısına Etkisi 41

KAYNAKLAR 46

ÖZGEÇMİŞ 50

KISALTMALAR

LCAO	: Atomik yörüngelerin doğrusal birleşimi
AlAs	: Alüminyum Arsenit
GaAs	: Galyum Arsenit
InAs	: İndiyum Arsenit
AlN	: Alüminyum Nitrit
GaN	: Galyum Nitrit
InN	: İndiyum Nitrit
AlGaAs	: Alüminyum Galyum Arsenit
AlGaN	: Alüminyum Galyum Nitrit
InGaN	: İndiyum Galyum Nitrit
ZB	: Zincblende (çinko sülfür)
WZ	: Wurtzide (altıgen)

TABLO LİSTESİ

Sayfa No

Tablo 2.1. Değerlik seviyeleri için Hartree-Fock atomik değerleri 6

Tablo 2.2 İncelenen ikili yarıiletkenler için örgü sabitleri a ve bağ uzunlukları d'nin angström $(1A^0 = 10^{-8} m)$ cinsinden değerleri.....7

Tablo 2.3. İncelenen ikili yarıiletkenler için deformasyon potansiyellerinin değerleri.....10

Tablo 2.4. İncelenen ikili yarıiletkenlerin 0K ve 300K'de enerji band aralıkları...10

Tablo 2.5. İncelenen ikili yarıiletkenler için bazı fiziksel parametrelerin değerleri.....10

Tablo 2.6. İncelenen ikili yarıiletkenlerde enerji band aralığının basınçla değişimini hesaplamada kullanılan fiziksel parametreler.....14

Tablo 2.7. İncelenen ikili yarıiletkenlerde enerji band aralığının sıcaklıkla değişimini hesaplamada kullanılan fiziksel parametreler.....21

Tablo 2.8. AlAs ve GaAs için 300K'de enerji band aralıkları. 28

Tablo 2.9. İncelenen ikili yarıiletkenler için gerekli parametreler.....28

Tablo 2.10. İncelenen ikili yarıiletkenler için etkin kütle değerleri.....29

Tablo 2.11. İncelenen ikili nitritlerin, zincblende (ZB) ve wurtzide (WZ) yapı için 300K' de enerji band aralıkları.....30

Tablo 2.12. İncelenen ikili nitritler için elastik sabitler.....36

Tablo 3.1. İncelenen $Al_xGa_{1-x}N$ için enerji band aralığının basınçla değişimini hesaplamada kullanılan parametreler.....38

Tablo 3.2. İncelenen $In_xGa_{1-x}N$ için enerji band aralığının basınçla değişimini hesaplamada kullanılan parametreler.....42

Tablo 3.3. İncelenen $In_xGa_{1-x}N$ için enerji band aralığının sıcaklıkla değişimini hesaplamada kullanılan parametreler.....43

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 2.1 : Heteroyapı geniş ve dar band aralıklı iki yarıiletkenin biraraya gelmesinden oluşur.....2

Şekil 2.2 : N-AlGaAs/p-GaAs heteroekleminin enerji band şeması: Heteroeklem ara yüzeyinde oluşan ΔE_c ve ΔE_v süreksizlikleri iletkenlik ve değerlik band potansiyel enerji engelleri olup, $\Delta E_c = E_{cN} - E_{cP}$ ve $\Delta E_v = E_{vP} - E_{vN}$ şeklinde belirtilirler.....3

Şekil 2.3 : GaAs için enerji band şeması.....8

Şekil 2.4 : Denklem (2.13) ve (2.14) ile hesaplanan GaAs için 300K' de değerlik band ve iletkenlik band enerjilerin basınçla değişimi.....11

Şekil 2.5 : Denklem (2.13) ve (2.14) ile hesaplanan GaN için 300K' de değerlik band ve iletkenlik band enerjilerin basınçla değişimi.....13

Şekil 2.6 : Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) AlAs için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....14

Şekil 2.7 : Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) GaAs için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [18, 19] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....15

Şekil 2.8 : Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) InAs için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....16

Şekil 2.9 : Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) AlN için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11, 8] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....17

Şekil 2.10 : Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) GaN için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11, 20] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....17

Şekil 2.11 : Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) InN için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11, 8] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....18

Şekil 2.12 : Denklem (2.22) ve (2.23)' e hesaplanan GaAs için değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin sıcaklıkla değişimi.....19
Şekil 2.13 : Denklem (2.22) ve (2.23)' e hesaplanan GaN için değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin sıcaklıkla değişimi.....20
Şekil 2.14 : Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) AlAs için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....21
Şekil 2.15 : Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) GaAs için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....22
Şekil 2.16 : Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) InAs için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....23
Şekil 2.17 : Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) AlN için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....23
Şekil 2.18 : Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) GaN için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....24
Şekil 2.19 : Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) InN için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....25
Şekil 2.20 : Denklem (2.30), (2.31) ve (2.32)' ye göre hesaplanan (-) AlGaAs için 300K' de doğrudan ve doğrudan olmayan enerji band aralıklarının deneysel (*) verilerle [23, 24] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....27
Şekil 2.21 : Denklem (2.30), (2.31) ve (2.32)' ye göre hesaplanan (-) AlGaN için 300K' de doğrudan ve doğrudan olmayan enerji band aralıklarının deneysel (*) verilerle [28, 29] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....29
Şekil 2.22 : Denklem (2.30), (2.31) ve (2.32)' ye göre hesaplanan (-) InGaN için 300K' de doğrudan ve doğrudan olmayan enerji band aralıklarının deneysel (*) verilerle [16] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....30
Şekil 2.23 : Denklem (2.33), (2.34)' a göre hesaplanan AlGaAs için 300K' de değerlik band ve iletkenlik band potansiyel enerji engelleri.....32

Şekil 2.24 : Denklem (2.33), (2.34)' e göre hesaplanan AlGaN için 300K' de değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri ve denklem (2.30)' a göre hesaplanan doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [28, 29] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....33

Şekil 2.25 : Denklem (2.33), (2.34)' e göre hesaplanan InGaN için 300K' de değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri ve denklem (2.30)' a göre hesaplanan doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [16] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....34

Şekil 2.26 : Denklem (2.35) ve (2.36)' ya göre hesaplanan AlGaN için 300K' de değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri üzerine gerilmenin etkisi ve denklem (2.30)' a göre hesaplanan doğrudan enerji band aralığı üzerine gerilmenin etkisinin deneysel (*) verilerle [31] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....36

Şekil 2.27 : Denklem (2.35) ve (2.36)' ya göre hesaplanan InGaN için 300K' de değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri üzerine gerilmenin etkisi ve denklem (2.30)' a göre hesaplanan doğrudan enerji band aralığı üzerine gerilmenin etkisinin deneysel (*) verilerle [32] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....37

Şekil 3.1 : Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) $Al_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [20] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....39

Şekil 3.2 : Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) $Al_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [28] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....40

Şekil 3.3 : $Al_xGa_{1-x}N$ için (2.27) denklemi ile (2.35) denkleminin karşılaştırılması.....41

Şekil 3.4 : Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) $In_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [33] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....42

Şekil 3.5 **:** Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) $In_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [36, 37] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.....44

Şekil 3.6 **:** $In_xGa_{1-x}N$ için (2.31) denklemi ile (2.36) denkleminin karşılaştırılması.....45

SEMBOL LİSTESİ

E_c : İletkenlik band sınırı

E_v : Değerlik band sınırı

ΔE_c : İletkenlik banddaki potansiyel enerji engeli

ΔE_v : Değerlik banddaki potansiyel enerji engeli

$\Delta_c / 3$: Serbest katyonun kristal alan ayrışma enerjisi

$\Delta_a / 3$: Serbest anyonun kristal alan ayrışma enerjisi

$\in_{oc}, \in_{oa}$: Hartree – Fock enerjileri

E : Bağ yörünge enerjisi

H : Hamilton matris ifadesi

H_{12} : Katyon ve anyon atomları arasındaki etkileşim matris elementi

ΔE_{ss} : İki çiftlenim s-durumları arasındaki bağlanma enerjisi

ΔE_{pp} : İki çiftlenim p-durumları arasındaki bağlanma enerjisi

S_{ij} : Atomik yörüngeler arasındaki örtüşme ifadesi

V_{pp} : Yörüngeler arasındaki çiftlenim elementi

a : Örgü sabiti olup;

d : Bağ uzunluğu

e^- : Tepkime sonucu oluşan serbest elektron

e^+ : Tepkime sonucu oluşan boşluk

$e^- e^+$: Elektron boşluk çifti

P_0 : Standart basınç

T : Sıcaklık

P : Basınç

$E_{ci}(0, P_0)$: 0K' de ve standart P_0 basınçta iletkenlik band enerjisi

$E_v(0, P_0)$: 0K' de ve standart P_0 basınçta değerlik band enerjisi

a_{ci} : E_c iletkenlik band enerjisinin deformasyon potansiyeli

a_v : E_v değerlik band enerjisinin deformasyon potansiyeli

B : Hacim modülü

B' : Hacim modülünün birinci dereceden basınca göre türevi

k_B : Boltzman sabiti

c_{ciP}^{0} : İletkenlik elektronlarının standart ısı kapasitesi

c_{vP}^{0} : Değerlik boşluklarının standart ısı kapasitesi

$E_{gi}(0, P_0)$: 0 K' deki ve standart P_0 basınçtaki band aralığı enerjisi

a_{gi} : Band aralığı deformasyon potansiyeli

$E_{gi}(0)$: 0K ' de enerji band aralığı

$E_{gi}(300)$: 300K'de enerji band aralığı

$\alpha(T)$: Isıl genleşme katsayısı

ϑ_e : Elektronun hızı

ϑ_h : Boşluğun hızı

m_e : Elektronun etkin kütlesi

m_h : Boşluğun etkin kütlesi

τ_e : Elektron için durulma zamanı

τ_h : Boşluk için durulma zamanı

$m_n(x)$: Gamma bandı için üçlü elektron etkin kütlesi

m_{nAC} : İkili AC' nin elektron etkin kütlesi

m_{nBC} : İkili BC' nin elektron etkin kütlesi

$\Delta(x)$: Spin-yörünge enerjisi

Δ_{AC} : İkili AC' nin spin-yörünge enerjisİ

Δ_{BC} : İkili BC' nin spin-yörünge enerjisİ

$P(x)$: Momentum matrisi

$m_{tL}(x)$: L bandı için üçlü elektron etkin kütlesi

$\in$: Gerilme

c_{11}, c_{12} : Elastik sabitler

ε_{∞} : Optik dielektrik sabiti

$\delta E_{ci}(T, \in)$: İletkenlik bandının arayüz gerilimi ile değişimi

$\delta E_{v}(T, \in)$: Değerlik bandının arayüz gerilimi ile değişimi

$\delta E_{gi}(T, \in)$: Band aralığının arayüz gerilimi ile değişimi

GAN TABANLI HETEROYAPILARIN SIKI BAĞLANIM KURAMI

ÖZET

Grup III-Nitrit'ler çinko sülfür yapıda doğrudan band aralığına sahip olup yarıiletkenlerin yeni bir sınıfını oluşturur. Bunlar geniş band aralıkları, termal iletkenlikleri ile bilinir. Bu özelliklerinden dolayı grup III-Nitrit' ler ve bunların ikili ve üçlü alaşım tabanlı heteroyapıları mavi ötesi (ultraviolet) optoelektroniğinde ve yüksek güç ve yüksek sıcaklık elektroniğindeki cihaz uygulamalarında kullanılan yarıiletken alaşımlar olarak ortaya çıkar. Özellikle AlGaN/GaN ve InGaN/GaN heteroyapıları, teknolojik önemleri kadar ilginç fiziksel özelliklerinden dolayı da dikkat gerektiren konular arasındadır.

Heteroyapıların bütününü oluşturan yarıiletkenlerin elektronik band yapıları arasındaki fark, heteroarayüzeylerdeki iletim ve değerlik potansiyel enerji engelleri ile verilmiştir. Optoelektronik cihazların çalışma prensiplerini anlamak ve performanslarını tayin edebilmek için heteroyapı enerji band yapısının, özellikle heteroyüz iletkenlik ve değerlik bandlarda oluşan bu potansiyel enerji engellerinin tasarımı son derece önemlidir. Bu tezin kapsamı içinde, GaN tabanlı heteroyapıların arayüzeylerinde oluşan enerji engellerinin sıkı bağlanım kuramı ile tasarımı incelenmiştir. Bu kuramın içeriği; komşu atomların p-yörüngelerinin dik olmaması, p-yörüngelerinin atomik spin yörünge ayrışması ve yörüngeler arasındaki etkileşim matris elementini tanımlamak için reel band yapı hesaplamalarının uygunluğudur. Bu model; sıcaklık, basınç ve gerilmenin fonksiyonu olarak grup III-Nitrit heteroyapıların enerji band engellerini tanımlamak için önerilir.

TIGHT BINDING MODELING OF GAN BASED HETEROSTRUCTURE

SUMMARY

Group III-Nitrides and their alloys form a new class of semiconductors, all of which have direct bandgaps in zincblende structure. They are known to have a large bandgap and thermal conductivity. Due to these properties, group III-Nitrides and their binary/ternary alloys based heterostructures have emerged as some of the most promising semiconductor compounds for device applications in blue-violet optoelectronics, high temperature and high power electronics. Especially the AlGaN/GaN and InGaN/GaN heterostructures have been the subject of interest because of their interesting physical properties as well as their technological importace.

The difference between the electronic band structures of constituent semiconductors of a heterojunction is accomodated by the offsets in the conduction and valance band energy levels at heterointerface. Modeling of the band offsets is important for understanding the operating principles of optoelectronic devices and their performances. In this thesis, tight binding modeling is used to model the band offset of GaN based heterostructures. The model includes the nonorthogonality of the p-orbitals of adjacent atoms, atomic spin-orbit splittings of the p-orbitals with the Hartree-Fock atomic term values and linear fitting to real band structure calculations to determine interacting matrix element between the orbitals. This model is proposed to determine the band offsets of group III-nitride heterostructure as a function of temperature, pressure and strain.

Üniversitesi : **İstanbul Teknik Üniversitesi**
Enstitüsü : **Fen Bilimleri**
Anabilim Dalı : **Fizik**
Programı : **Fizik Mühendisliği**
Tez Danışmanı : **Doç. Dr. Hilmi ÜNLÜ**
Tez Türü ve Tarihi : **Yüksek Lisans – Mayıs 2003**

ÖZET

GAN TABANLI HETEROYAPILARIN SIKI BAĞLANIM KURAMI

Ebru ŞİMŞEK

Grup III-Nitrit'ler çinko sülfür yapıda doğrudan band aralığına sahip olup yarıiletkenlerin yeni bir sınıfını oluşturur. Bunlar geniş band aralıkları, termal iletkenlikleri ile bilinir. Bu özelliklerinden dolayı grup III-Nitrit' ler ve bunların ikili ve üçlü alaşım tabanlı heteroyapıları mavi ötesi (ultraviolet) optoelektroniğinde ve yüksek güç ve yüksek sıcaklık elektroniğindeki cihaz uygulamalarında kullanılan yarıiletken alaşımlar olarak ortaya çıkar. Özellikle AlGaN/GaN ve InGaN/GaN heteroyapıları, teknolojik önemleri kadar ilginç fiziksel özelliklerinden dolayı da dikkat gerektiren konular arasındadır.Heteroyapıların bütününü oluşturan yarıiletkenlerin elektronik band yapıları arasındaki fark, heteroarayüzeylerdeki iletim ve değerlik potansiyel enerji engelleri ile verilmiştir. Optoelektronik cihazların çalışma prensiplerini anlamak ve performanslarını tayin edebilmek için heteroyapı enerji band yapısının, özellikle heteroyüz iletkenlik ve değerlik bandlarda oluşan bu potansiyel enerji engellerinin tasarımı son derece önemlidir. Bu tezin kapsamı içinde, GaN tabanlı heteroyapıların arayüzeylerinde oluşan enerji engellerinin sıkı bağlanım kuramı ile tasarımı incelenmiştir. Bu kuramın içeriği; komşu atomların p-yörüngelerinin dik olmaması, p-yörüngelerinin atomik spin yörünge ayrışması ve yörüngeler arasındaki etkileşim matris elementini tanımlamak için reel band yapı hesaplamalarının uygunluğudur. Bu model; sıcaklık, basınç ve gerilmenin fonksiyonu olarak grup III-Nitrit heteroyapıların enerji band engellerini tanımlamak için önerilir.

Anahtar Kelimeler: III-Nitrit' ler, Heteroyapı, Enerji Band Engeli, Band Aralığı

University : **İstanbul Technical University**
Institute : **Institute of Science and Technology**
Science Programme : **Physics**
Programme : **Physics Engineering**
Supervisor : **Doç. Hilmi UNLU**
Degree Awarded and Date : **MSc – May 2003**

ABSTRACT

TIGHT BINDING MODELLING OF GAN BASED HETEROSTRUCTURE

Ebru ŞIMŞEK

Group III-Nitrides and their alloys form a new class of semiconductors, all of which have direct bandgaps in zincblende structure. They are known to have a large bandgap and thermal conductivity. Due to these properties, group III-Nitrides and their binary/ternary alloys based heterostructures have emerged as some of the most promising semiconductor compounds for device applications in blue-violet optoelectronics, high temperature and high power electronics. Especially the AlGaN/GaN and InGaN/GaN heterostructures have been the subject of interest because of their interesting physical properties as well as their technological importace. The difference between the electronic band structures of constituent semiconductors of a heterojunction is accomodated by the offsets in the conduction and valance band energy levels at heterointerface. Modeling of the band offsets is important for understanding the operating principles of optoelectronic devices and their performances. In this thesis, tight binding modeling is used to model the band offset of GaN based heterostructures. The model includes the nonorthogonality of the p-orbitals of adjacent atoms, atomic spin-orbit splittings of the p-orbitals with the Hartree-Fock atomic term values and linear fitting to real band structure calculations to determine interacting matrix element between the orbitals. This model is proposed to determine the band offsets of group III-nitride heterostructure as a function of temperature, pressure and strain.

Keywords: III-Nitrides, Heterostructure, Band Offset, Band Gap

1.GİRİŞ

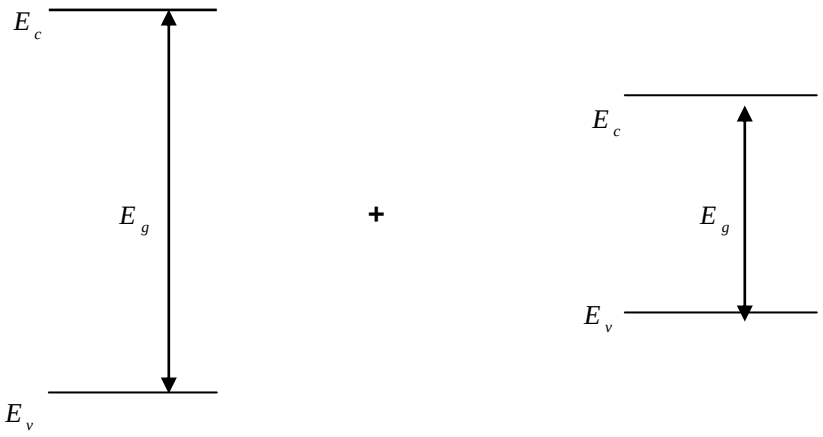
Grup III-Nitritler ve bunların ikili (GaN, AlN, InN) ve üçlü (AlGaN, InGaN) alaşımları yarıiletkenlerin yeni bir sınıfını oluşturur. Bunların hepside çinko sülfür (zincblende) yapıda olup, doğrudan band aralığına sahiptir. **[1]** Oda sıcaklığında doğrudan band aralığı AlN için yaklaşık 6,2 eV; GaN için 3,4 eV; InN için 2 eV' dur. Bu yarıiletken malzemelerin heteroyapılarının ve alaşımlarının ışıma dalgaboyu görünürden mor ötesine kadar geniş bir tayfda ortaya çıkabilir. Yeşil, mavi ve morötesi dalgaboylarında çalışan algılayıcılar ve ışın salıcılar gibi kısa dalgaboylu optik uygulamalar için, bu özellikleri nitritleri çok dikkat çekici yapmaktadır. **[2]** Geniş band aralıklı nitritlerin kaydadeğer termal ve kimyasal kararlılığı, yüksek sıcaklıklarda çalışan GaN tabanlı elektronik ve optoelektronik aygıtlara izin verir. **[2]**

Heteroeklemlerin bütününü oluşturan yarıiletkenlerin elektronik band yapıları arasındaki fark, heteroeklemdeki iletim ve değerlik band potansiyel enerji engelleri (offset) ile verilmiştir. Heteroeklem aygıtların çalışması, onların güvenirliği ve tam şekli çok önemlidir. Uzun yıllardır bu konuda deneysel ve kuramsal çalışmalar yapılmaktadır. Bu kuramların çoğu, yüksek sıcaklık ve basınçlarda çalışan heteroeklem aygıtların gelişmesinde sınırlı bir görüş ortaya koyar. **[3]** Bu cihazların performansını tayin edebilmek için; elektronik enerji band yapısının, güvenilir ve hassas bir fiziksel kuram ile tasarımı önemlidir.

Bu yüksek lisans tez çalışmasında ise, GaN tabanlı heteroyapıların arayüzeylerinde oluşan enerji engellerinin ve band aralığı enerjilerinin termokimyasal sıkı bağlanım kuramı ile tasarımı hakkında bilgi verilecektir. Grup III Nitritlerin potansiyel enerji engelleri ve band aralığı enerjileri sıcaklık, basınç ve gerilmenin fonksiyonu olarak incelenmiştir. Ayrıca kuramın doğruluğunu ispatlamak için grup-III Arseniklerin ikili (GaAs, AlAs, InAs) ve üçlü (AlGaAs) alaşımlarıda incelenerek, bu çalışma içerisine koyulmuştur. Yapılan sayısal hesaplar ve sonuçların deneysel veriler ile karşılaştırılması sonunda, termokimyasal sıkı bağlanım kuramının deney ile çok iyi bir uyum içinde olduğu gözlenmiştir.

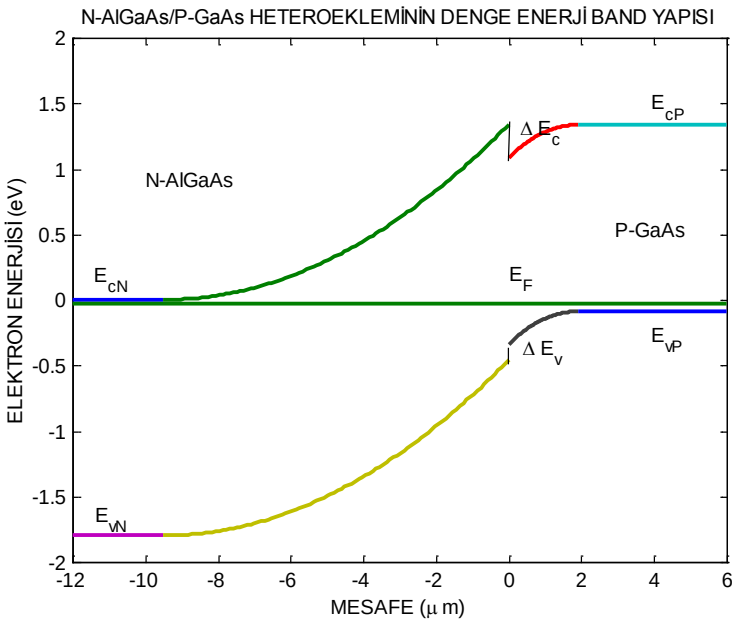
2. HETEROYAPILAR'DA TERMOKİMYASAL SIKI BAĞLANIM KURAMI

Heteroyapı fiziksel ve kimyasal özellikleri farklı geniş ve dar band aralıklı iki yarıiletkenin aşağıdaki şekilde **[5]** görüldüğü gibi biraraya getirilmesinden oluşur. Heteroyapılarda en önemli fiziksel parametreler arayüzeyde oluşan ve ΔE_c ve ΔE_v olarak tanımlanan iletken ve değerlik bandlardaki potansiyel enerji engelleridir. Heteroeklem alet dizaynının uygulanabilirliği ve niteliği bu potansiyel enerji engellerinin değerlerine bağlıdır. **[4]**



Şekil 2.1 Heteroyapı geniş ve dar band aralıklı iki yarıiletkenin biraraya gelmesinden oluşur.

Burada E_c iletkenlik band sınırını, E_v değerlik band sınırını , E_g ise enerji band aralığını belirtir.



Şekil 2.2 N-AlGaAs/p-GaAs heteroekleminin enerji band şeması: Heteroeklem ara yüzeyinde oluşan ΔE_c ve ΔE_v süreksizlikleri iletkenlik ve değerlik band potansiyel enerji engelleri olup, $\Delta E_c = E_{cN} - E_{cP}$ ve $\Delta E_v = E_{vP} - E_{vN}$ şeklinde belirtilirler.

Bu potansiyel enerji engellerinin kesin değerleri, heteroeklem aletlerin performansının tayini için önemlidir. **[5].** Bu konudaki kuramsal modellerden biride sıkı bağlanım kuramı olup **[1],** bu tez çalışmasında AlGaN ve InGaN' ün enerji band yapısı incelenecektir. Heteroyapı arayüzeyinde değerlik ve iletken bandlarındaki ΔE_v ve ΔE_c süreksizlikleri;

$$\Delta E_v = E_{vA} - E_{vB} \tag{2.1}$$

$$\Delta E_c = E_{GA} - E_{GB} - \Delta E_v \tag{2.2}$$

olarak tanımlanır ve ayrıntılı hesaplamaları 2.3.ncü bölümde incelenecektir. **[7]**

Bu yüksek lisans tez çalışmasında; termokimyasal sıkı bağlanım kuramı **[1]** ile 0 K deki yarıiletkenlerin iletim ve değerlik band enerjileri hesaplanacaktır. Termokimyasal sıkı bağlanım kuramının içeriği; (a) komşu atomların p-yörüngelerinin dik olmaması, (b) p-yörüngelerinin atomik spin yörünge ayrışması, (c) yörüngeler arasındaki etkileşim matris elementini tanımlamak için reel band yapı hesaplamalarının uygunluğudur. Bu kuramın en önemli özelliği; Hartree-fock atomik değerleriyle, p yörüngelerinin spin-yörünge ayrışmasını ve komşu atomların p-yörüngelerinin dik olma koşulunu ortadan kaldırması ve örtüşme integralinin analitik olarak komşu atom yörüngeleri cinsinden ifade edebilmesidir. X'in metal (ya da c-katyon) cinsinden, Y'nin metal olmayan (ya da a-anyon) cinsten olan (XY) ikili yarıiletken düşünelim. XY bileşiğinin 1-elektron özdurumları; X atamonun Ψ_c ve Y atomunun Ψ_a serbest atomik yörüngelerinin doğrusal kombinasyonu olarak yazılabilir. **[1]**

$$\Psi(r) = u_c \mid \psi_c > + u_a \mid \psi_a > \tag{2.3}$$

Atomik durumların doğrusal kombinasyonu ile çok atom sisteminin durumlarının bu yaklaşımına atomik yörüngelerin doğrusal birleşim yaklaşımı (LCAO) adı verilir. Bu metod da kullanılan çeşitli parametreler bazı bağımsız kaynaklardan elde edildiğinde, bu yaklaşım atomik yörüngelerin doğrusal yaklaşımından ziyade sıkı bağlanım kuramı olarak adlandırılır. Bağ yörünge enerjisi varyasyonel ilkesi kullanılarak aşağıdaki gibi hesaplanabilir. **[1]**

$$< \Psi(r) \mid H \mid \Psi(r) >= E < \Psi(r) \mid \Psi(r) >$$

$$E = \frac{< \Psi(r) \mid H \mid \Psi(r) >}{< \Psi(r) \mid \Psi(r) >} = \frac{u_c^2 \in_c + u_a^2 \in_a + 2u_c u_a < \psi_c \mid H \mid \psi_c >}{u_c^2 + u_a^2 + 2u_c u_a < \psi_c \mid \psi_a >} \tag{2.4}$$

Burada $< \psi_c \mid H \mid \psi_a >=< \psi_a \mid H \mid \psi_c >= V_{ac} = V_{ac} = V_{pp}$ 2-p durumları arasındaki etkileşim matris elementi, $< \psi_c \mid H \mid \psi_c >= \in_c$, $< \psi_a \mid H \mid \psi_a >= \in_a$, $< \psi_1 \mid H \mid \psi_2 >= S_{ac} = S_{pp}$ 2-p durumları arasındaki örtüşme terimidir. Denklem (2.4) katsayılara göre minimize edilince ($\partial E / \partial u_c = 0$ ve $\partial E / \partial u_a = 0$) iki tane doğrusal denklem elde edilir. Bunlar aşağıdaki (2X2) determinant eşitliğinin çözümleri olup; XY

bileşik yarıiletkenleri için, X ve Y atomlarının 2-p durumları ve 2-s durumları arasındaki çiftleşmeden dolayı bağlanmama ve bağlanma durumlarının enerjilerini verecektir. **[1]**

$$\det \sum_{i,j=1}^{2} (H_{ij} - ES_{ij}) = \begin{vmatrix} H_{11} - ES_{11} & H_{12} - ES_{12} \\ H_{21} - ES_{21} & H_{22} - ES_{22} \end{vmatrix} = 0 \qquad (2.5)$$

Burada $H_{11} =< \psi_c \mid H \mid \psi_c >= \in_c = \in_{0c} + \Delta_c / 3$ ve $H_{22} =< \psi_a \mid H \mid \psi_a >= \in_a = \in_{0a} + \Delta_a / 3$ Coulomb integralleri olarak bilinir. Yani, Y atomunda $\in_a$ yörüngesindeki ve X atomunda $\in_c$ yörüngesindeki elektronun enerjileridir. $\in_{oc}, \in_{oa}$ Hartree – Fock enerjileri; $\Delta_c / 3$ ve $\Delta_a / 3$ serbest katyon ve serbest anyonun kristal alan ayrışma enerjileridir. $i \neq j$ olması durumunda $H_{12} = H_{12}^{*} =< \psi_c \mid H \mid \psi_a >= V_{ac}$ katyon ve anyon atomları arasındaki etkileşim matris elementidir, bağların uzunluğunu tanımlar. $S_{ij} =< \psi_c^{*} \mid \psi_a >$ ise atomik yörüngeler arasındaki üstüste binmeleri tanımlanır. Aynı anyon ve katyondaki atomik yörüngeler dik ise $S_{cc} = S_{aa} = 1$ dir. Sıfır üstüste binmeye sahip olması için komşu anyon ve katyonlardaki atomik yörüngeler dik olmadığından $S_{ac} = S_{ca} \neq 0$ dır.

Denklem (2.5)'in çözümleri elmas yada çinko sülfür kristal yapılı yarıiletkenlerin Brillouin alanı merkezinde (k=0) iletkenlik ve değerlik band enerjilerini verir **[1]**

$$E_c = \frac{\in_{sc} + \in_{sa}}{2(1 - S_{ss}^2)} - \frac{V_{ss} S_{ss}}{(1 - S_{ss}^2)} \pm \frac{\Delta E_{ss}}{2(1 - S_{ss}^2)} \qquad (2.6)$$

$$E_v = \frac{\in_{pc} + \in_{pa}}{2(1 - S_{pp}^2)} - \frac{V_{pp} S_{pp}}{(1 - S_{pp}^2)} \pm \frac{\Delta E_{pp}}{2(1 - S_{pp}^2)} \qquad (2.7)$$

Burada ΔE_{ss} ve ΔE_{pp}, XY bileşik yarıiletkenin anyon ve katyon atomlarının iki çiftlenim s-durumları ve iki çiftlenim p-durumları arasındaki bağlanma enerjileri olup aşağıdaki analitik ifadeler ile verilir. **[1]**

$$\Delta E_{ss} = \left[(\in_{sc} - \in_{sa})^2 - 4(\in_{sc} + \in_{sa}) S_{ss} V_{ss} + 4 \in_{sc} \in_{sa} S_{ss}^2 + 4V_{ss}^2 \right]^{1/2} \quad (2.8)$$

$$\Delta E_{pp} = \left[(\in_{pc} - \in_{pa})^2 - 4(\in_{pc} + \in_{pa}) S_{pp} V_{pp} + 4 \in_{pc} \in_{pa} S_{pp}^2 + 4V_{pp}^2 \right]^{1/2} \quad (2.9)$$

Denklem (2.8) ve (2.9) ile verilen ΔE_{ss} ve ΔE_{pp}'lerin minimize edilmelerinden; 2 s-atomik yörüngeleri arasındaki S_{ss} ve 2 p-atomik yörüngeleri arasındaki S_{pp} örtüşme integralleri aşağıdaki gibi elde edilir. **[1]**

$$\frac{\partial \Delta E_{ss}}{\partial V_{ss}} = 0 \rightarrow S_{ss} = \frac{2V_{ss}}{(\in_{sc} + \in_{sa})} \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial \Delta E_{pp}}{\partial V_{pp}} = 0 \rightarrow S_{pp} = \frac{2V_{pp}}{(\in_{pc} + \in_{pa})} \quad (2.11)$$

Burada V_{pp} atomik yörüngeler arasındaki çiftlenim elementi olup, band yapı hesaplamaları için uygun bir parabolik kullanılarak aşağıdaki ifadeye göre elde edilir.

$$V_{pp} = \alpha a^{-4} + \beta a^{-2} + \gamma \quad (2.12)$$

a bileşik yarıiletkenin örgü sabiti olup; $\alpha = -6.8 * 10^3$, $\beta = 8.39 * 10^2$ ve $\gamma = -16.0476$ değerlerine sahiptir.**[1]** Bu tez çalışmasının konusunu teşkil eden yarıiletkenleri oluşturan atomların değerlik seviye enerjileri Tablo 2.1' de verilmiştir.

Tablo 2.1 Değerlik seviyeleri için Hartree-Fock atomik değerleri [6]

	Al	Ga	In	As	N
$\in_s (eV)$	-10.71	-11.55	-10.14	-18.92	-26.22
$\in_p (eV)$	-5.71	-5.67	-5.37	-8.98	-13.84

İncelenen ikili yarıiletkenler (AlAs, GaAs, InAs, AlN, GaN, InN) için bağ uzunlukları (d) ve örgü sabitleri (a) angström cinsinden tablo (2.2)' de verilmiştir.

Tablo 2.2 İncelenen ikili yarıiletkenler için örgü sabitleri a ve bağ uzunlukları d' nin angström $(1A^0 = 10^{-8} m)$ cinsinden değerleri

Yarıiletken	a A^0	d^a A^0
AlAs	5.589^a	2.43
AlN	3.11^b	1.89
GaAs	5.635^a	2.45
GaN	3.18^b	1.94
InAs	6.003^a	2.61
InN	4.945^b	2.15

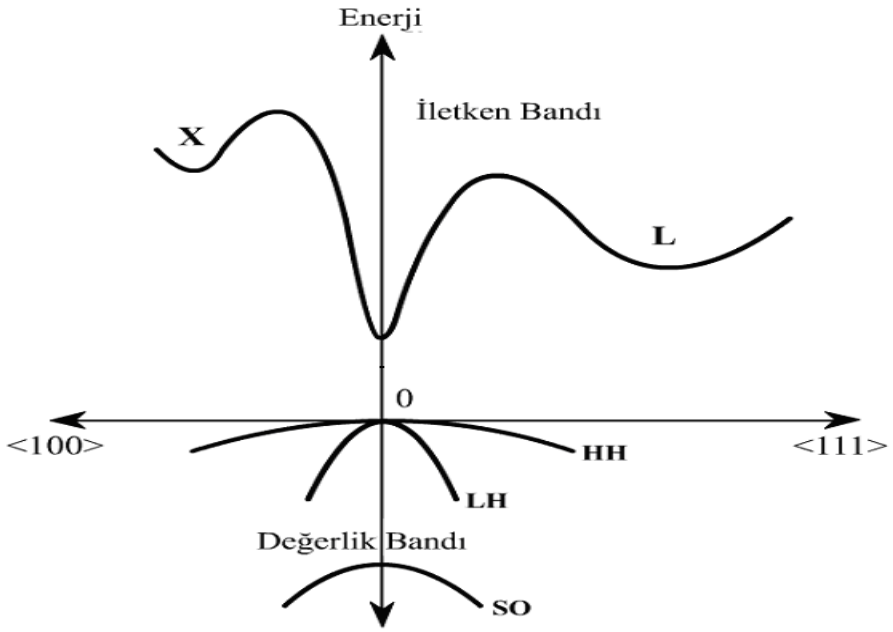
^{a} Ref.[6] ^{b} Ref.[8]

İkili yarıiletkenler için; 0 K' deki değerlik band enerjileri, denklem (2.9), (2.12) ve (2.13) ' ün yardımıyla, denklem (2.8) kullanılarak hesaplanmıştır. Yarıiletkenlerin brillouin sınırı içindeki $i = \Gamma, L, X$ yüksek simetri noktalarındaki iletkenlik band enerjileri ise $E_c^i(0) = E_v(0) + E_g^i(0)$ ifadesinden elde edilir.

2.1 Basıncın Enerji Band Yapısına Etkisi

Örgü titreşimlerinden ve hacim değişiminden dolayı; iletim ve değerlik band enerjileri sıcaklıkla, basınçla ve gerilmeyle değişecektir.**[9]** Mutlak sıfırın üzerindeki bir sıcaklıkta, $\eta\omega$ enerjili bir ışın yarıiletken üzerine gönderildiğinde, değerlik bandındaki elektronlar iletkenlik bandına iletilir ve değerlik bandında boşluklar oluşurken, iletkenlik bandında elektronlar oluşur. Böylece değerlik bandındaki elektron ve iletkenlik bandında boşluk yaratılır. İletkenlik bandındaki elektron tekrar değerlik bandına indiğinde elektron boşluk çifti oluşur. Bu fiziksel oluşum, Gibbs termodinamik denge koşulu olarak bilinen kimyasal tepkime denklemi, $e^- + e^+ = e^- e^+$ ile ifade edilir. **[9]** Burada e^- ve e^+ tepkime sonucu oluşan serbest elektron ve boşluk, $e^- e^+$ ise elektron boşluk çiftidir.

GaAs için iletkenlik ve değerlik band enerjilerini gösteren enerji band şeması aşağıda gösterilmiştir.



Şekil 2.3 GaAs için enerji band şeması

İletkenlik band ve değerlik band enerjileri, herhangi bir sıcaklık ve basınçta standart durum kimyasal potansiyeller olarak tanımlanır ve basınca bağlı ifadeleri, bağlanmama ve bağlanma enerjilerinin genişletilmesinden aşağıdaki şekilde yazılır. **[9]**

$$E_{ci}(T,P) = E_{ci}(0,P_0) + C_{ciP}^{0} T(1 - InT) - \frac{a_{ci}}{B}\left[P - \frac{P^2}{2B} - \frac{(1+B')P^3}{6B^2}\right] \qquad (2.13)$$

$$E_{v}(T,P) = E_{v}(0,P_0) + C_{vP}^{0} T(1 - InT) + \frac{a_{v}}{B}\left[P - \frac{P^2}{2B} - \frac{(1+B')P^3}{6B^2}\right] \qquad (2.14)$$

$a_{ci} = -B(\partial E_c / \partial P)$ ve $a_v = B(\partial E_v / \partial P)$ olup, E_c ve E_v iletkenlik ve değerlik band enerjilerinin deformasyon potansiyelleridir. $P_0 = 1$ bar standart basınç, P basınçtan dolayı dış bileşen ve artan sıcaklıktan dolayıda iç bileşen içeren toplam basınçtır. $E_{ci}(0,P_0)$ ve $E_v(0,P_0)$, T sıcaklığında ve standart P_0 basınçta $(i = \Gamma, L, X)$ iletkenlik

ve değerlik band enerjileri olup (2.3) ve (2.4) denklemleri ile verilmiştir. B hacim modülü, B' ise hacim modülünün birinci dereceden basınca göre türevi, c^0_{ciP} ve c^0_{vP} iletkenlik elektronlarının ve değerlik boşluklarının standart ısı kapasiteleridir.

$c^0_{vP} = c^0_{pP} = 5/2k_B$, $c^0_{ciP} = -c^0_{pP} + \Delta c^0_{iP} = 5/2k_B + \Delta c^0_{iP}$ olup; k_B Boltzman sabitidir.

Δc^0_{iP} deneysel ifadelerle karşılaştırılan band aralığının ölçülmesiyle, aşağıdaki eşitliğin fit edilmesinden elde edilir.

$$E_{gi}(T,P) = E_{gi}(0,P_0) + \Delta C^0_{iP} T(1 - InT) - \frac{a_{gi}}{B}\left[1 - \frac{P}{2B} - \frac{1+B'}{6B^2}P^2\right]P \qquad (2.15)$$

$E_{gi}(0,P_0)$ 0 K' deki ve standart P_0 basınçtaki band aralığı enerjisi , $a_{gi} = -B(\partial E_g / \partial P)$ band aralığı deformasyon potansiyelidir. **[10]** ΔC^0_{ip} ifadesini (2.15) denkleminden çekersek;

$$\Delta C^0_{ip} = \frac{1}{T(1 - InT)}\left[E_{gi}(T,P) - E_{gi}(0,P_0) + \frac{a_{gi}}{B}\left(1 - \frac{P}{2B} - \frac{1+B'}{6B^2}P^2\right)P\right] \qquad (2.16)$$

300 K de; GaAs ve GaN ikili yarıiletkenleri için iletkenlik band ve değerlik band enerjilerinin basınçla değişimi denklem (2.13), (2.14) ifadeleri kullanılarak incelenmiştir. Gerekli paremetreler tablo (2.3) ,(2.4) ve (2.5)' de yer almaktadır.

Tablo 2.3 İncelenen ikili yarıiletkenler için deformasyon potansiyellerinin değerleri (Ref.[11])

	a_v	$a_{g\Gamma}$	$a_{c\Gamma}$	a_{gL}	a_{cL}	a_{gX}	a_{cX}
Yarıiletken	eV	eV	eV	eV	eV	eV	eV
AlAs	1.53	-8.93	-7.4	-4.6	-3.07	1.01	2.54
AlN	4.94	-10.16	-5.22	-9.89	-4.95	-1.13	3.81
GaAs	-1.21	-8.15	-9.36	-3.7	-4.91	1.05	-0.16
GaN	0.69	-7.37	-6.68	-8.15	-7.46	-1.21	-0.52
InAs	-1	-5.66	-6.66	-2.89	-3.89	0.92	-0.08
InN	0.73	-3.66	-2.93	-5.23	-4.5	-1350	-0.62

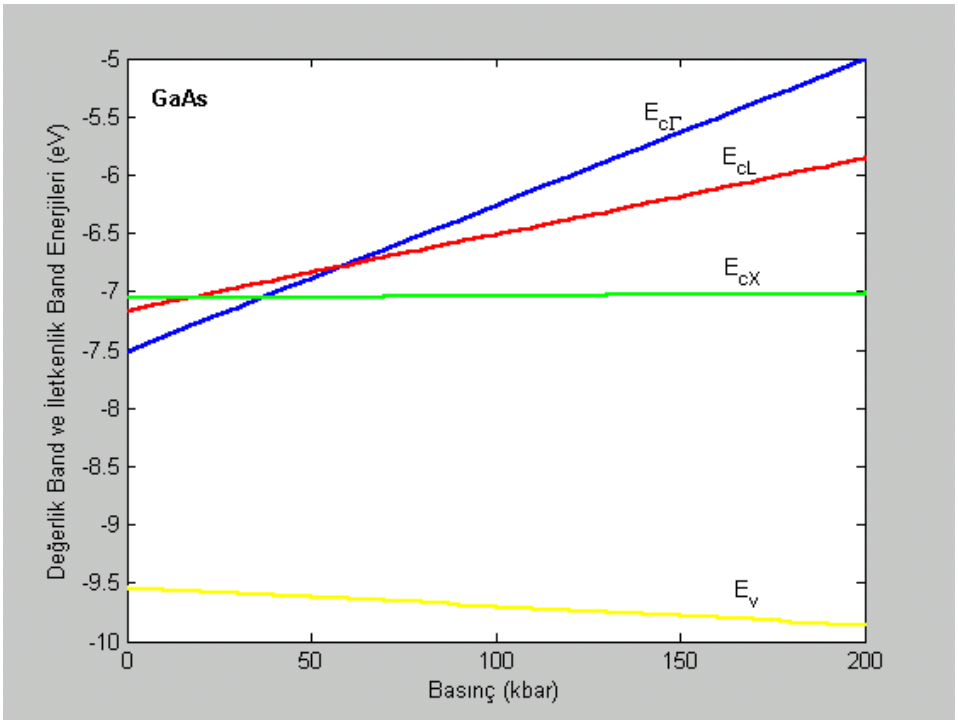
Tablo 2.4 İncelenen ikili yarıiletkenlerin 0K ve 300K'de enerji band aralıkları. (Ref.[12])

	$E_{g\Gamma}(0)$	$E_{g\Gamma}(300)$	$E_{gL}(0)$	$E_{gL}(300)$	$E_{gX}(0)$	$E_{gX}(300)$
Yarıiletken	eV	eV	eV	eV	eV	eV
AlAs	3.099	3.003	2.46	2.352	2.24	2.164
AlN	4.9	4.84	9.3	9.241	6	5.941
GaAs	1.519	1.422	1.815	1.733	1.981	1.873
GaN	3.299	3.239	5.59	5.531	4.52	4.461
InAs	0.417	0.354	1.133	1.069	1.433	1.369
InN	1.94	1.916	5.82	5.796	2.51	2.486

Tablo 2.5 İncelenen ikili yarıiletkenler için bazı fiziksel parametrelerin değerleri

	B	$\alpha(T)/10^{-6}$
Yarıiletken	GPa	1/K
AlAs	77 [a]	3.756 [d]
AlN	208 [b]	5.3 [e]
GaAs	74.8 [a]	6.928 [d]
GaN	203.66 [b]	5.59 [e]
AlAs	58 [c]	5.238 [d]
AlN	145.66 [b]	4 [e]

[a] Ref. [13] [b] Ref. [12] [c] Ref. [14] [d] Ref. [15] [e] Ref. [16]



Şekil 2.4 Denklem (2.13) ve (2.14) ile hesaplanan GaAs için 300K' de değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin basınçla değişimi.

Şekil 2.4' de GaAs için 300K' de değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin basınçla değişimi incelenmiştir. Γ ve L iletkenlik band enerjileri basınçla artarken, X iletkenlik band enerjisi ve değerlik band enerjisi basınçla azalmaktadır. Çünkü değerlik band deformasyon potansiyeli negatiftir. Γ ve X bandı arasında yaklaşık 46 kbar' da bir kesişme vardır. Yük 40 kbar' lık basınca kadar doğrudan bandda etkin kütlesi küçük olduğu için daha hızlı hareket etmektedir. Ama 46 kbar basıncın üstünde etkin kütle büyüyeceği için bu bölgede yapılan cihazların hızları daha düşük olacaktır.

Buradan da anlaşılacağı üzere band aralığı enerjisi ve yük taşıyıcılarının hareketliliği bir yarıiletkenin iki temel karekterisliğidir ve kullanılma imkanı buna bağlıdır.

Elektron ve boşluklar için hareketlilik kavramı μ_e ve μ_h; (2.17) ve (2.18) denklemleri ile ifade edilebilir.

$$v_e = -\frac{e\tau_e}{m_e}E = -\mu_e E \rightarrow \mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e} \qquad (2.17)$$

$$v_h = \frac{e\tau_h}{m_h} E = \mu_h E \rightarrow \mu_h = \frac{e\tau_h}{m_h} \tag{2.18}$$

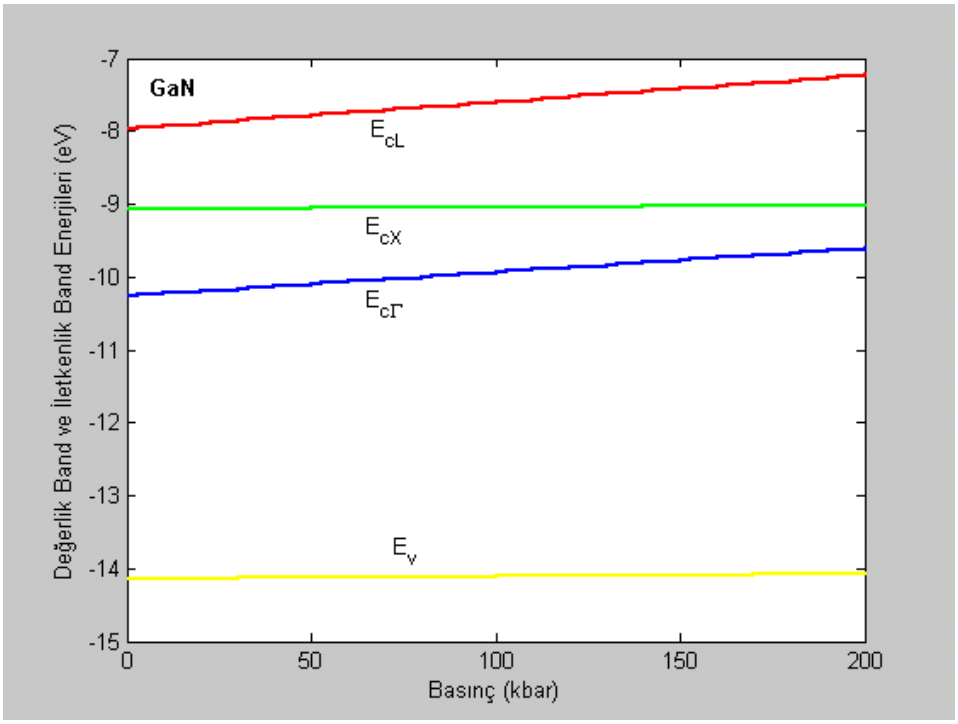
Yukarıdaki denklemlerdeki v_e ve v_h elektron ve boşluklar için hız ifadeleri, m_e ve m_h elektron ve boşlukların etkin kütleleri olup; τ_e ve τ_h elektron ve boşluklar için durulma zamanını yani iki çarpışma arasında geçen ortalama süreyi temsil etmektedir.

Denklemlerden de anlaşıldığı gibi hareketlilik kavramı durulma zamanı ile doğru, etkin kütle ile ters orantılı olarak değişmektedir. **[17]** Elektron ve boşluk etkin kütleleri parabolik enerji kavramı kullanılarak aşagıdaki gibi ifade edilir.

$$E_n(k) = \frac{\eta^2 k^2}{2m_n} \rightarrow m_n = \frac{\eta^2}{\partial^2 E_n / \partial k^2} \tag{2.19}$$

$$E_p(k) = \frac{\eta^2 k^2}{2m_p} \rightarrow m_p = \frac{\eta^2}{\partial^2 E_p / \partial k^2} \tag{2.20}$$

Dolayısıyla iletken ve değerlik band enerjilerinin basınç ve sıcaklık ile değişmesi elektron ve boşluk etkin kütlelerini ve bunların elektrik alan altındaki sürüklenme hızlarını etkiler. **[17]**



Şekil 2.5 Denklem (2.13) ve (2.14) ile hesaplanan GaN için 300K' de değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin basınçla değişimi.

Şekil 2.5' de GaN için 300K' de değerlik ve iletkenlik band enerjilerinin basınçla değişimi görülmektedir. Değerlik band enerjisi deformasyon potansiyelinin pozitif olmasından dolayı basınçla artış göstermektedir. Γ ve L iletkenlik band enerjileri deformasyon potansiyelleri negatif olduğundan dolayı basınçla artmakta, X iletkenlik band enerjisi ise basınçla azalmaktadır.

Daha önce belirtildiği gibi enerji band aralığının basıncın fonksiyonu olarak değişimi denklem (2.15)' e göre incelenecektir. Bu denklemin kullanılması ile ikili yarıiletkenler için enerji band aralığının basınçla değişimi incelendi. Gerekli parametreler tablo (2.3), (2.4) ve (2.5)' de yer almaktadır. Bu sonuçlar denklem (2.21)' deki deneysel ifade ile karşılaştırılmıştır. **[11]**

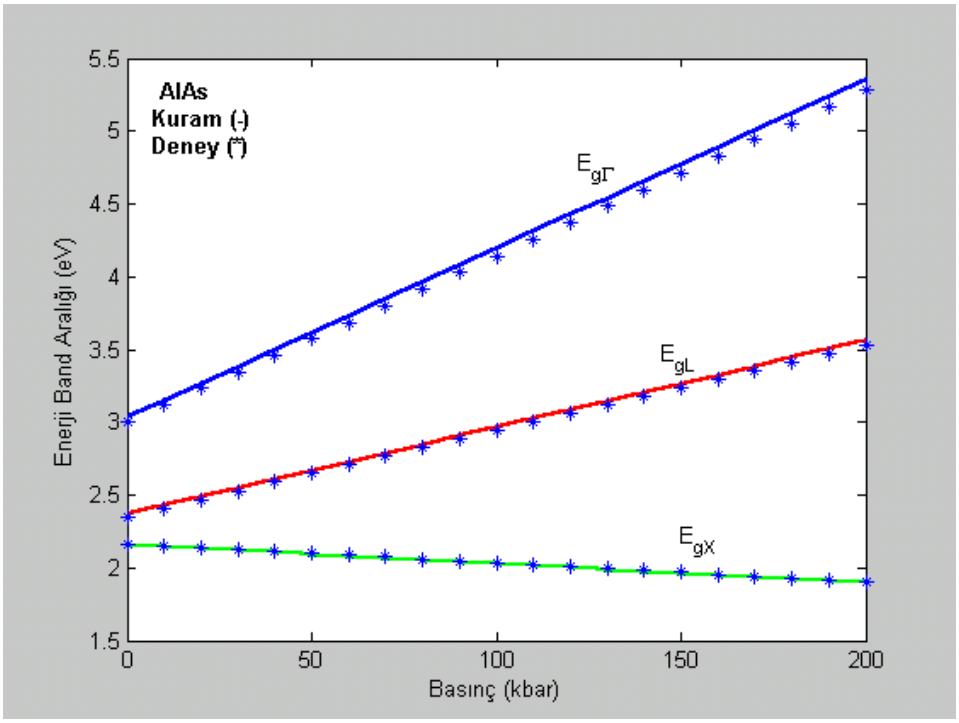
$$E_g(P) = E_g + aP + bP^2 \qquad (2.21)$$

Burada $E_g = E_g(\Gamma)$ doğrudan band aralığı, a ve b ise deneysel sabitler olup değerleri tablo (2.6)' de verilmiştir.

Tablo 2.6 İncelenen ikili yarıiletkenlerde enerji band aralığının basınçla değişimini hesaplamada kullanılan fiziksel parametreler

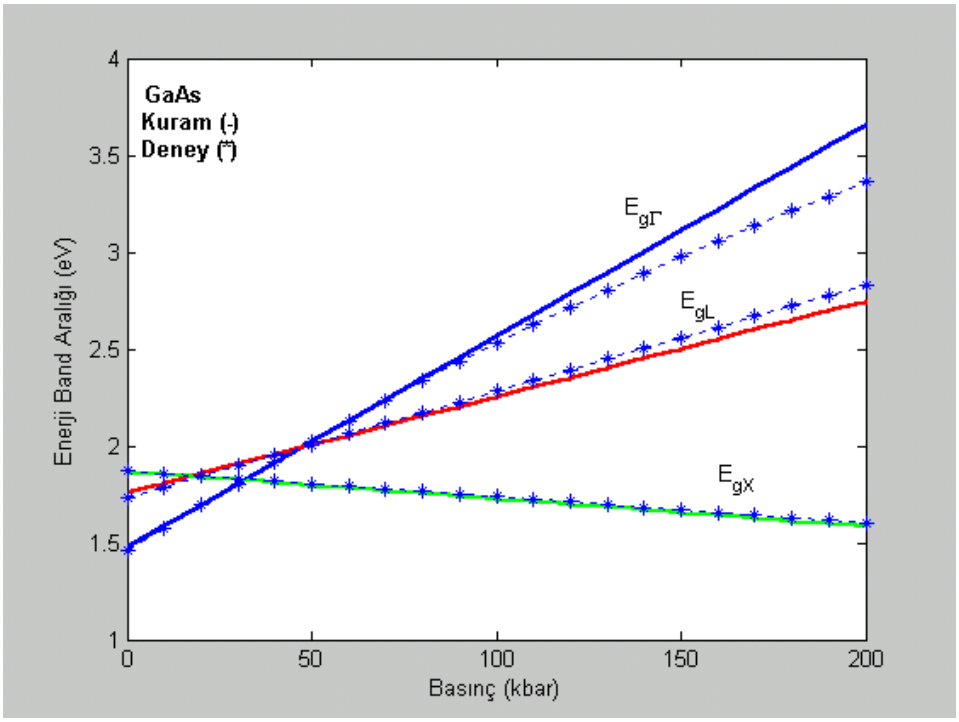
Yarıiletken	a^{Γ} meV/kbar	a^{L} meV/kbar	a^{X} meV/kbar	b^{Γ} $meV / kbar^{2}$
AlAs	11.4 [a]	5.9 [a]	−1.3 [a]	
AlN	4.3 [b]	4.6 [a]	0.5 [a]	
GaAs	11.9 [c]	5.5 [d]	−1.35 [c]	−12 [c]
GaN	3.89 [e]	4 [a]	0.6 [a]	
InAs	9.8 [a]	5 [a]	−1.6 [a]	
InN	2.533 [b]	3.5 [a]	0.9 [a]	

[a] Ref. [11] [b] Ref. [8] [c] Ref. [18] [d] Ref. [19] [e] Ref. [20]

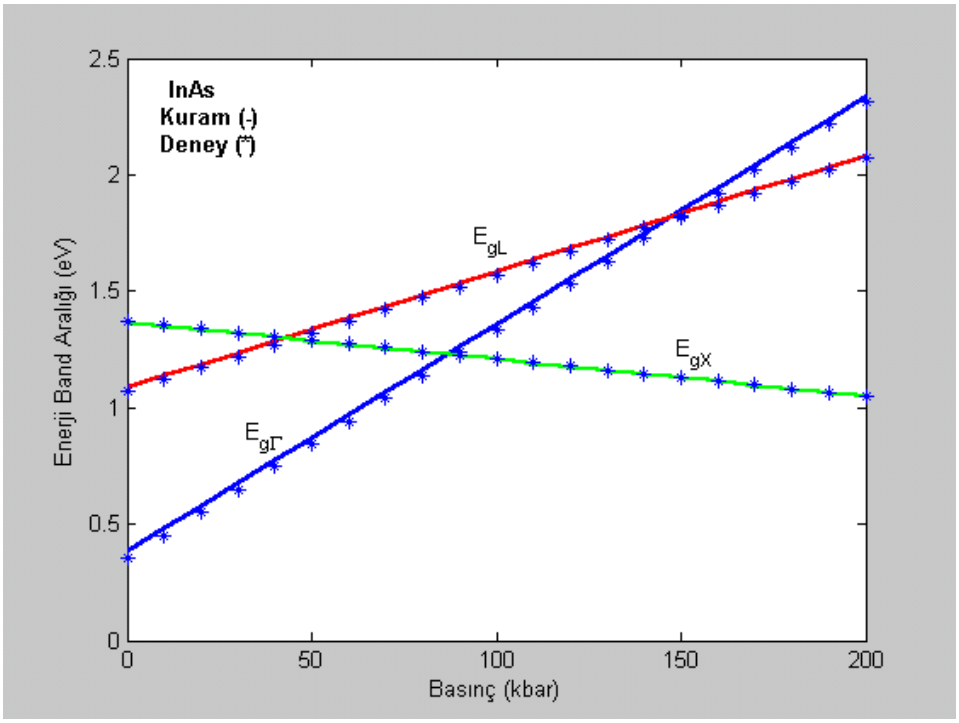


Şekil 2.6 Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) AlAs için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.6' da AlAs için 300K' de enerji band aralığının basınçla değişimi mevcut kurama göre incelenmiş ve deneysel verilerle [11] karşılaştırılmıştır. AlAs için Γ ve L enerji band aralıkları basınçla artarken, X band aralığı basınç katsayısının negatif olmasından dolayı basınçla azalmaktadır. Kuramın sonuçları deneyle uyumludur.

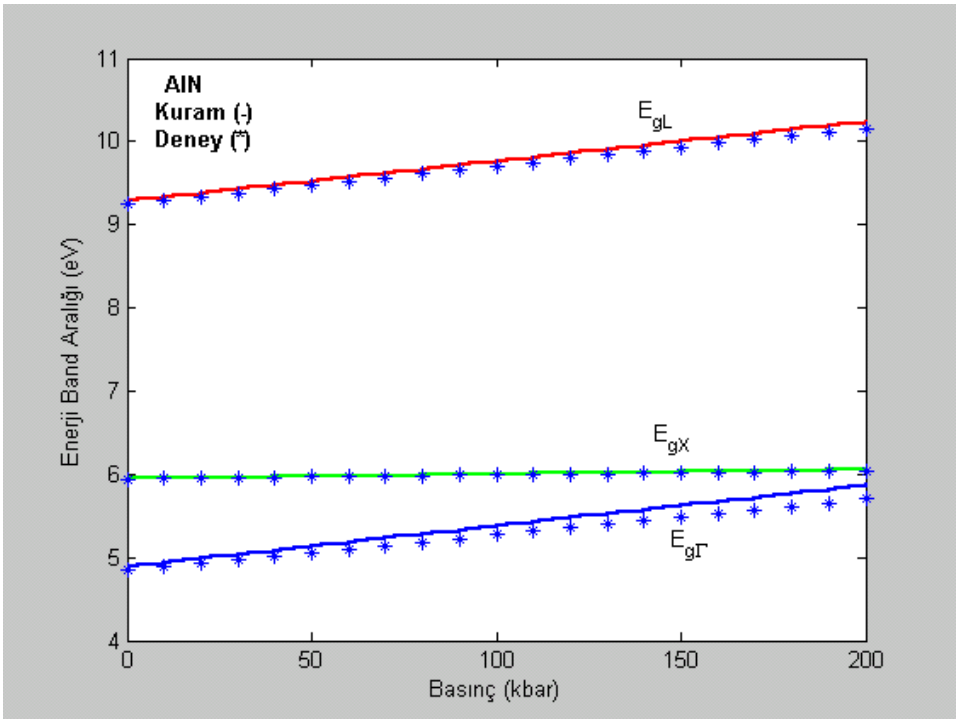


Şekil 2.7 Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) GaAs için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [18, 19] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

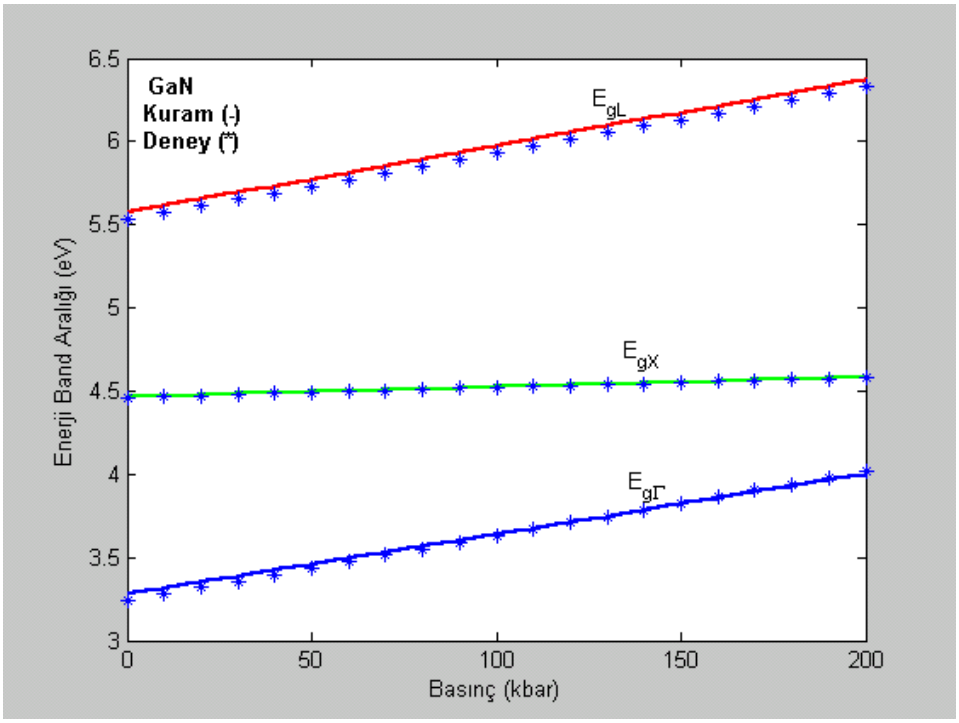


Şekil 2.8 Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) InAs için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.7 ve 2.8' de GaAs ve InAs için 300K' de enerji band aralığının basınçla değişimi mevcut kurama göre incelenmiş ve deneysel verilerle [11, 18, 19] karşılaştırılmıştır. GaAs ve InAs için Γ ve L enerji band aralıkları basınçla artarken, X band aralığı basınç katsayısının negatif olmasından dolayı basınçla azalmakta olup; bunun sonucunda doğrudan band yapılı yarıiletkenler olan GaAs ve InAs, doğrudan olmayan band yapılı yarıiletkenlere dönüşmüştür. Bu noktalardan sonra etkin kütle artarak, hareketlilik azalmakta ve yapılan cihazların verimleri düşmektedir. Kuramın sonuçlarının deneyle uyum içinde oldukları görülmektedir.

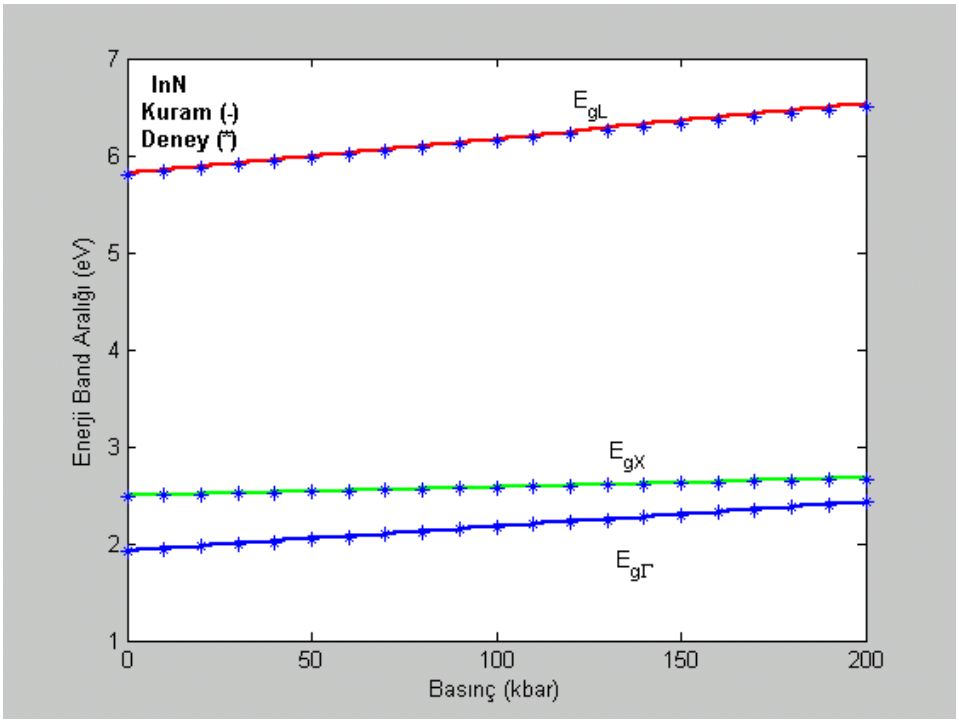


Şekil 2.9 Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) AlN için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11, 8] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.



Şekil 2.10 Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) GaN için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11, 20] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.9, 2.10 ve 2.11' de AlN, GaN ve InN için 300K' de enerji band aralığının basınçla değişimi mevcut kurama göre incelenmiş ve deneysel verilerle [11, 8, 20] karşılaştırılmıştır. AlN, GaN ve InN için Γ, L ve X enerji band aralıklarının basınçla arttığı görülmektedir. Mevcut kuramdan elde edilen sonuçlar deneysel ifadelerle uyumludur.



Şekil 2.11 Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) InN için 300K' de enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [11, 8] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

2.2 Sıcaklığın Enerji Band Yapısına Etkisi

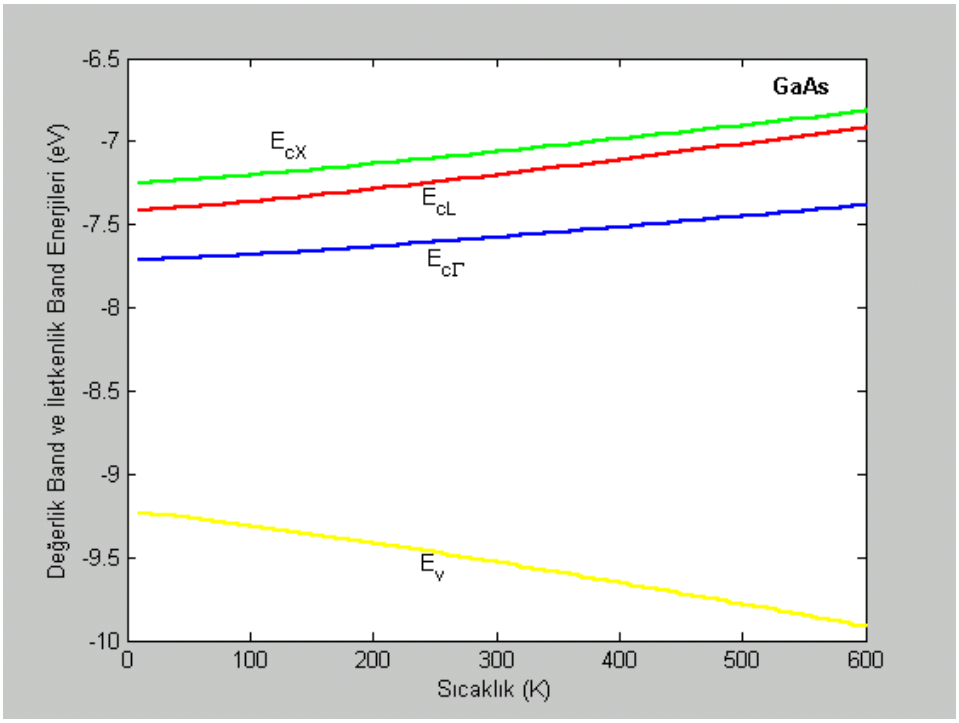
Sıcaklığın enerji band yapısına etkisini incelemek için, hacimle ısıl genleşme katsayısı arasındaki termodinamik ilişki $\left[3\alpha(T) = V^{-1}(\partial V / \partial T)_P\right]$ ve sabit hacimde hacim modülünün tersi $\left[B^{-1} = -V^{-1}(\partial V / \partial P)_T\right]$ kullanılarak, sabit hacimde $(dV = 0)$, dT sıcaklığındaki dP iç basıncı şeklinde $dP = -3B\alpha(T)dT - (B/V)dV = -3B\alpha(T)dT$ yazabiliriz **[9].** $\alpha(T)$ sabit dış basınçta sıcaklığın bir fonksiyonu olarak yarıiletkenlerin enerji band aralığında doğrusal ısıl genleşme katsayısıdır. Buradan; sabit dış basınç

altında (P_0 =1 bar), değerlik band ve iletkenlik band enerjileri sıcaklığın fonksiyonu olarak (2.13) ve (2.14) denklemleri kullanılarak aşağıdaki gibi ifade edilebilir. **[9]**

$$E_{ci}(T,P) = E_{ci}(0,P_0) + C_{ciP}^{0} T(1 - InT) + 3a_{ci}\alpha T \qquad (2.22)$$

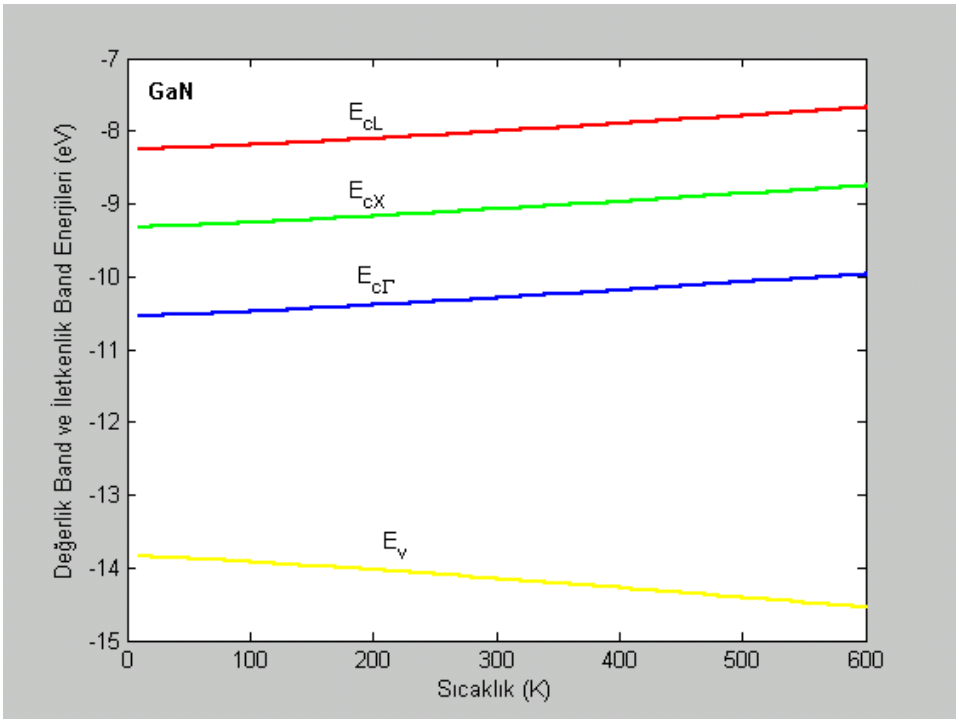
$$E_{v}(T,P) = E_{v}(0,P_0) + C_{vP}^{0} T(1 - InT) - 3a_{v}\alpha T \qquad (2.23)$$

Tablo (2.3), (2.4) ve (2.5)' deki parametreler kullanılarak, GaAs ve GaN ikili yarıiletkenleri için iletkenlik band ve değerlik band enerjilerinin sıcaklıkla değişimi incelenmiştir.



Şekil 2.12 Denklem (2.22) ve (2.23) ile hesaplanan GaAs için değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 2.12' de GaAs için değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin sıcaklıkla değişimi incelenmiştir. GaAs' in Γ, L ve X için iletkenlik band enerjileri sıcaklıkla artarken, değerlik band enerjileri sıcaklıkla azalmaktadır.



Şekil 2.13 Denklem (2.22) ve (2.23) ile hesaplanan GaN için değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 2.13' de ise GaN için değerlik band ve iletkenlik band enerjilerinin sıcaklıkla değişimi incelenmiştir. Γ, L ve X için iletkenlik band enerjilerinin sıcaklıkla artarken, değerlik band enerjilerinin sıcaklıkla azaldığı görülmektedir.

Sabit dış basınç altında (P_0=1 bar), band aralığı enerjisinin sıcaklıkla değişimi ise denklem (2.15)' deki ifade kullanılarak aşağıdaki gibi ifade edilebilir. **[9]**

$$E_{gi}(T,P) = E_{gi}(0,P_0) + \Delta C_{iP}^{0} T(1 - InT) + 3a_{gi}\alpha T \qquad (2.24)$$

Denklem (2.24) deki yarıiletken enerji band aralıkları Varshni'nin deneysel ifadesi **[21]**

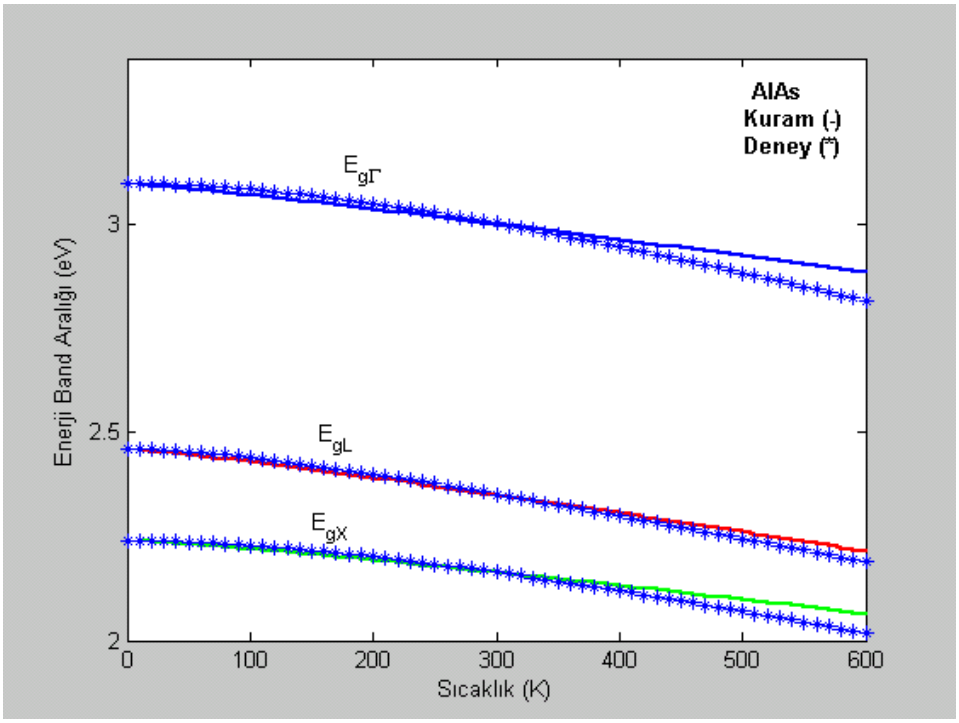
$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \qquad (2.25)$$

ile karşılaştırılabilir. $E_g(0)$ 0 K deki band aralığı enerjisi, α ve β deneysel sabitlerdir.

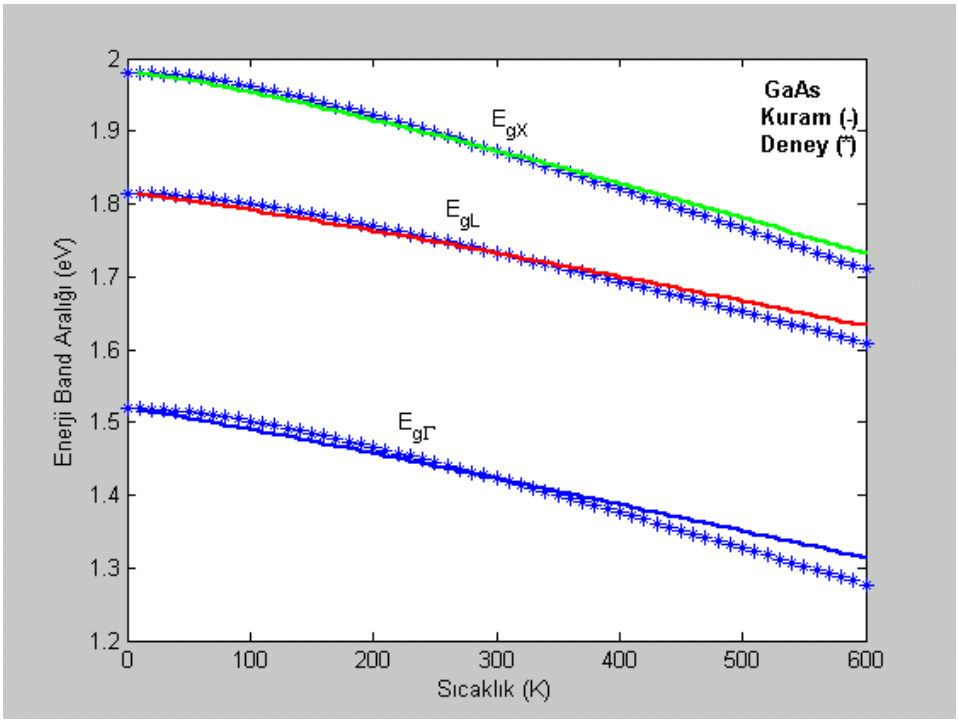
İncelenen yarıiletkenler için $E_{g\Gamma}(T)$ minimum band aralığı enerjisi sıcaklığın bir fonksiyonu olarak denklem (2.25) deki deneysel ifade ile denklem (2.24) deki mevcut olan kuramın karşılaştırması şeklinde yapılmıştır. Kullanılan parametreler tablo (2.3), (2.4), (2.5) ve (2.7)' de verilmiştir.

Tablo 2.7 İncelenen ikili yarıiletkenlerde enerji band aralığının sıcaklıkla değişimini hesaplamada kullanılan fiziksel parametreler (Ref. [12])

	α^{Γ}	β^{Γ}	α^{L}	β^{L}	α^{X}	β^{X}
Yarıiletken	$10^{-4} eV/K$	K	$10^{-4} eV/K$	K	$10^{-4} eV/K$	K
AlAs	8.85	530	6.05	204	7	530
AlN	5.93	600	5.93	600	5.93	600
GaAs	5.405	204	4.6	204	6.0	204
GaN	5.93	600	5.93	600	5.93	600
InAs	2.76	93	2.76	93	2.76	93
InN	2.45	624	2.45	624	2.45	624

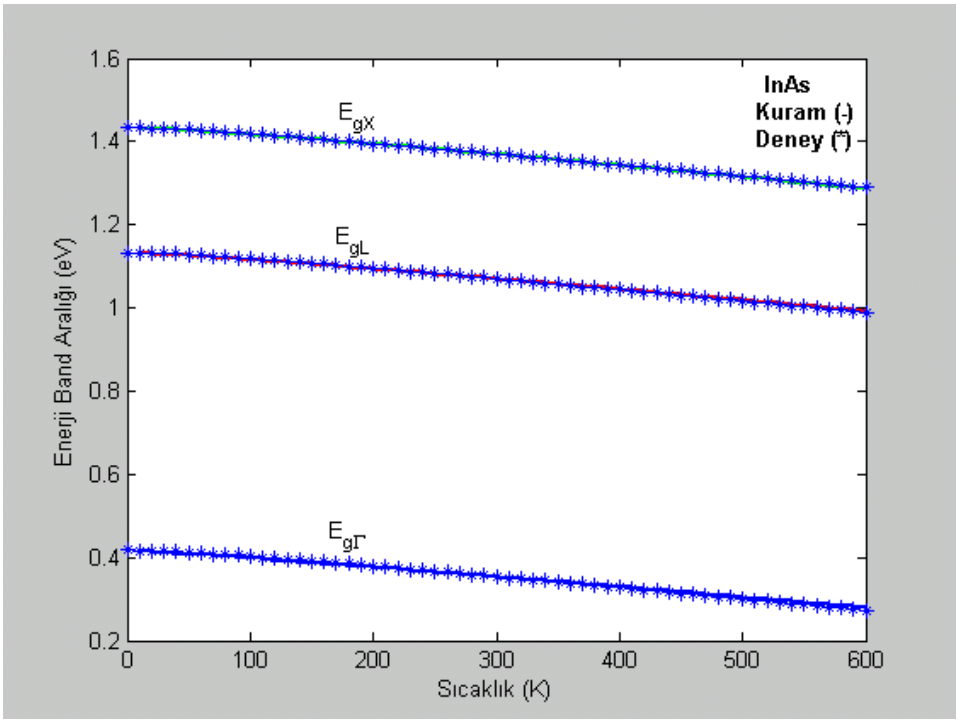


Şekil 2.14 Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) AlAs için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

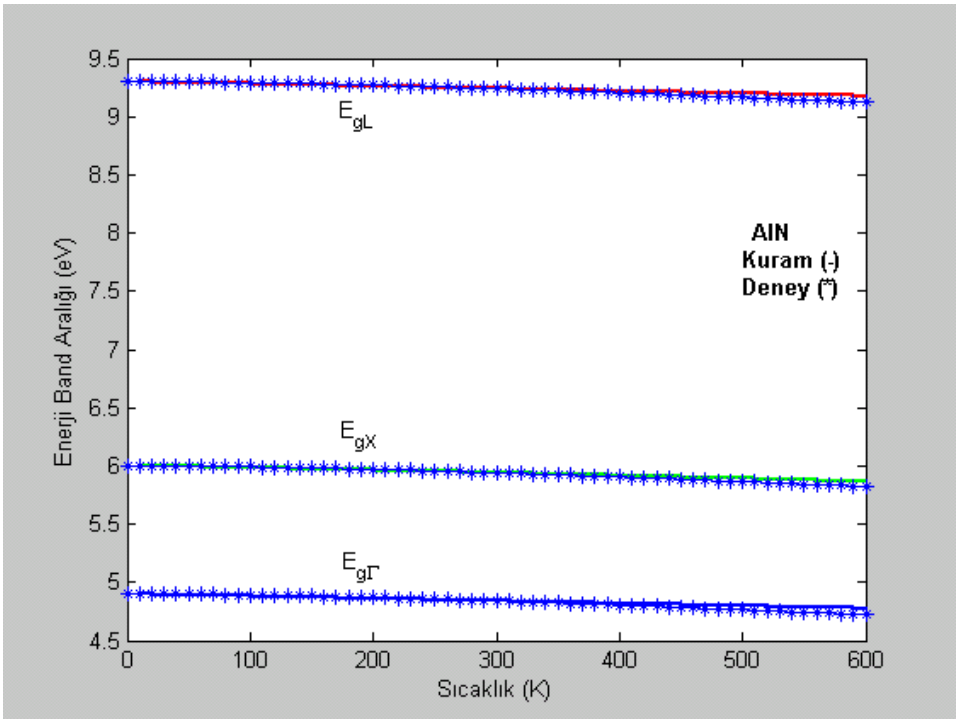


Şekil 2.15 Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) GaAs için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.14, 2.15 ve 2.16' da AlAs, GaAs ve InAs için enerji band aralığının sıcaklıkla değişimi mevcut kurama göre incelenmiş ve deneysel verilerle [12] karşılaştırılmıştır. AlAs, GaAs ve InAs için Γ , L ve X enerji band aralıklarının sıcaklık artışıyla azaldığı görülmektedir. Mevcut kurama göre yapılan incelemeler deneysel verilerle uyum içerisindedir.

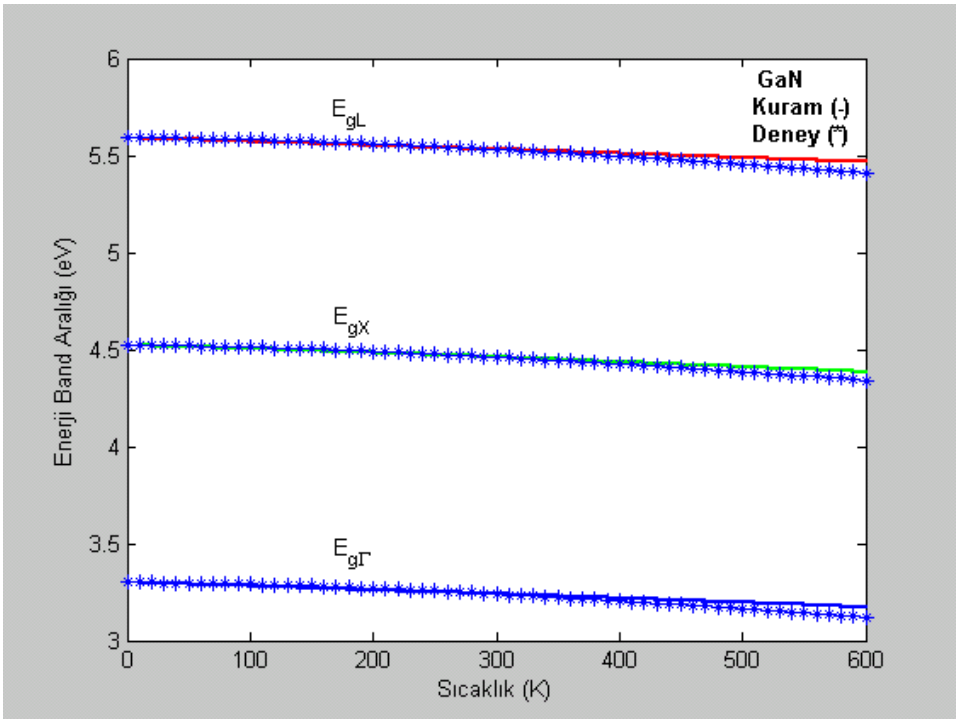


Şekil 2.16 Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) InAs için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

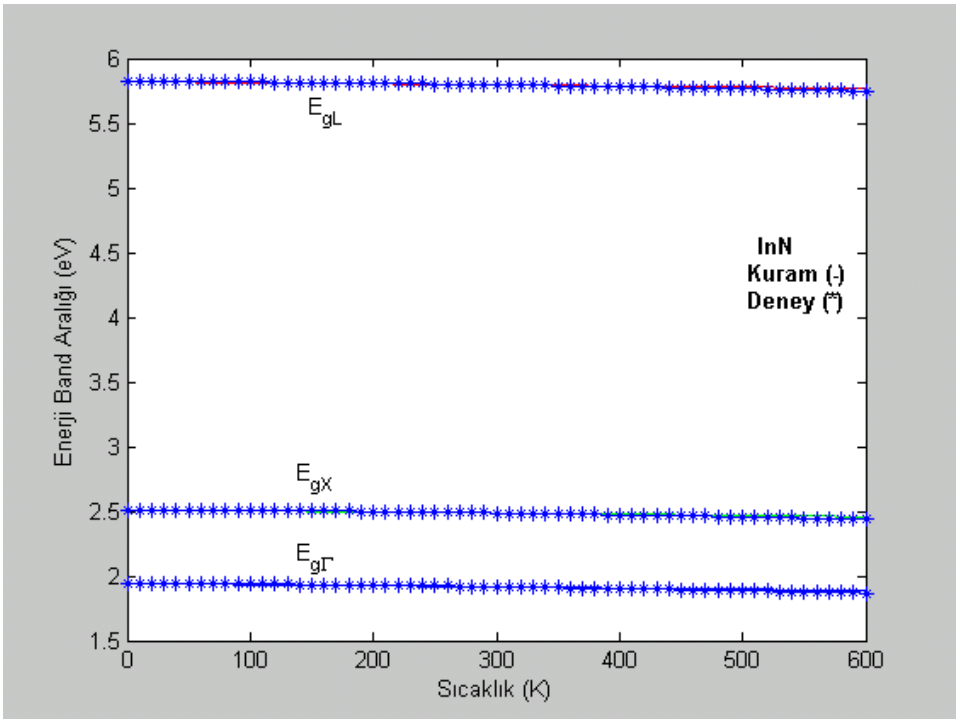


Şekil 2.17 Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) AlN için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.17, 2.18 ve 2.19' da AlN, GaN ve InN için enerji band aralıklarının sıcaklıkla değişimi görülmektedir. Enerji band aralıkları deneysel değerlerle uyum içinde olup, sıcaklıkla azalmaktadır.



Şekil 2.18 Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) GaN için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.



Şekil 2.19 Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) InN için enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [12] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Yukarıdaki şekillerde görüldüğü gibi sıcaklığın artmasıyla, yarıiletkenlerin enerji band aralığı azalmaktadır.

Alan etkili transistörlerin ve heteroyapı bipolar transistörlerin yüksek sıcaklık ve basınçta elde edilmesinden, enerji band aralıkları etkilenir.

2.3 Kompozisyonun Enerji Band Yapısına Etkisi

Geniş aralıklı yarıiletkenler üçlü olduğunda (Ör: AlGaAs, AlGaN, InGaN), $A_xB_{1-x}C / BC$ heteroarayüzeylerdeki değerlik banddaki potansiyel enerji engeli ΔE_v üzerindeki kompozisyon etkisi, üçlüün $E_v(x)$ değerlik band enerji hesabında; Vegard'ın kuralına göre örgü sabiti $a(x) = xa(AC) + (1-x)a(BC)$, katyon enerji $\in_{pc}(x) = x \in_{pc}(AC) + (1-x) \in_{pc}(BC)$ ve anyon enerji $\in_{pa}(x) = \in_{pa}(C)$ alınarak elde edilir. Enerji band aralığı üzerindeki bu kompozisyon etkisi $E_{g\Gamma}(x)$ ve $E_{gL}(x)$;

yarıiletkenler için Kane'in k.p modeli ve Vegard'ın kuralına **[7,22]** eşdeğer olarak kolayca formüle edilebilir. **[3, 4]**

$$\frac{1}{m_n(x)} = \frac{x}{m_{nAC}} + \frac{1-x}{m_{nBC}} = 1 + \frac{P^2(x)}{3}\left[\frac{2}{E_{g\Gamma}(x)} + \frac{1}{E_{g\Gamma}(x)+\Delta(x)}\right] \qquad (2.26)$$

$$\frac{1}{m_{tL}(x)} = \frac{x}{m_{tLAC}} + \frac{1-x}{m_{tLBC}} = 1 + P^2(x)\left[\frac{1}{E_{gL}(x)} + \frac{1}{E_{gL}(x)+\Delta(x)}\right] \qquad (2.27)$$

$m_n(x)$ Vegard'ın kuralından elde edilen üçlü elektron etkin kütlesi; m_{nAC} ve m_{nBC} İkili AC ve BC nin elektron etkin kütleleri; $\Delta(x) = x\Delta_{AC} + (1-x)\Delta_{BC}$ spin-yörünge enerjisi; Δ_{AC} ve Δ_{BC} ikili AC ve BC nin spin-yörünge enerjisi ve $P(x) = xP_{AC} + (1-x)P_{BC}$ momentum matrisidir. x=0 için $m_n(x)$, $\Delta(x)$ ve $E_g(x)$ in ölçülmesiyle denklem (2.26)' dan AC ve BC nin momentum matrisleri P_{AC} ve P_{BC} bulunur. L bandı için P_{AC} ve P_{BC} değerleri x=1 için (2.27) denkleminden $m_{tL}(x)$, $\Delta(x)$ ve $E_{gL}(x)$ değerleri yerine konularak hesaplanır. (2.26) ve (2.27) denklemleri $E_{g\Gamma}(x)$ ve $E_{gL}(x)$ band aralıkları ikinci dereceden eşitlikler olarak yeniden yazılabilir.**[3,4]**

$$E_{g\Gamma}^2(x) - \left[\frac{3}{y(x)} - \Delta(x)\right]E_g(x) - \frac{2\Delta(x)}{y(x)} = 0 \qquad (2.28)$$

$$E_{gL}^2(x) - \left[\frac{2}{y(x)} - \Delta(x)\right]E_{gL}(x) - \frac{\Delta(x)}{y(x)} = 0 \qquad (2.29)$$

Burada; $y_\Gamma(x) = \dfrac{3(1-m_n(x))}{m_n(x)P^2(x)}$ ve $y_L(x) = \dfrac{1-m_{tL}(x)}{m_{tL}(x)P^2(x)}$ dir.

Denklem (2.28) ve (2.29)' un aşağıdaki çözümlerinden $E_{g\Gamma}(x)$ ve $E_{gL}(x)$ band aralıklarını alaşım fonksiyonu cinsinden yazabiliriz. **[3,4]**

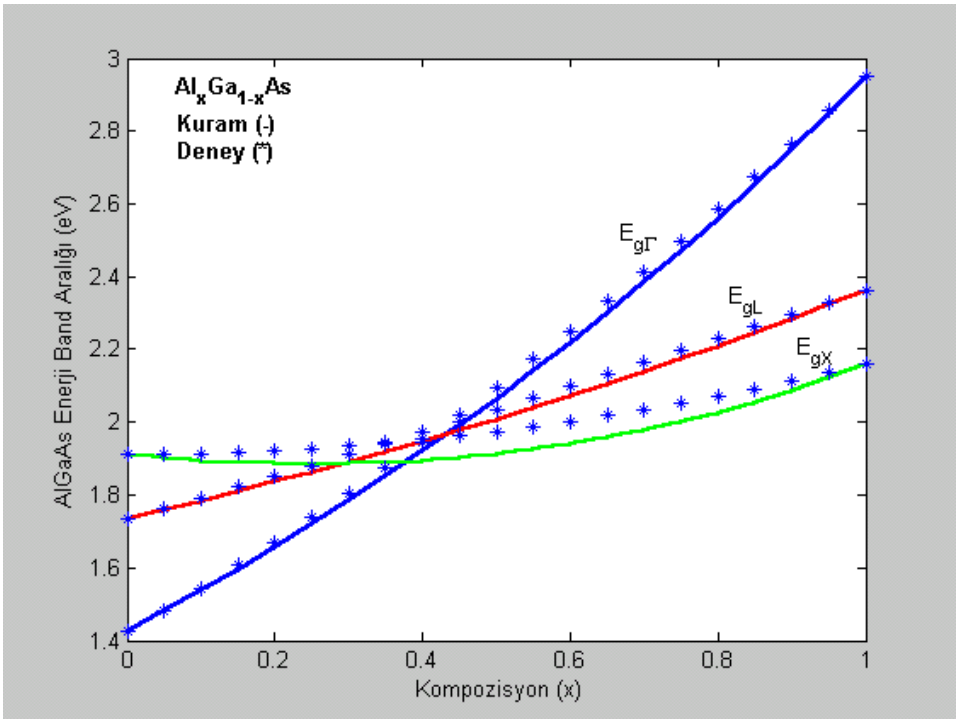
$$E_{g\Gamma}(x) = \frac{3/y(x) - \Delta(x)}{2} + \frac{1}{2}\left[(\Delta(x) - 3/y(x))^2 + 8\Delta(x)/y(x)\right]^{1/2} \qquad (2.30)$$

$$E_{gL}(x) = \frac{2/y(x) - \Delta(x)}{2} + \frac{1}{2}\left[(\Delta(x) - 2/y(x))^2 + 4\Delta(x)/y(x)\right]^{1/2} \qquad (2.31)$$

AC ve BC ikilisinin doğrudan olmayan ve doğrudan band aralıklarının E_{gXAC} , E_{gXBC} , $E_{g\Gamma AC}$ ve $E_{g\Gamma BC}$ olduğu yerde, aşağıdaki eşitlikten E_{gX} doğrudan olmayan band aralığı tanımlanabilir. **[3,4]**

$$E_{gX}(x) = E_{g\Gamma}(x) + (E_{gXAC} - E_{g\Gamma AC})x + (E_{gXBC} - E_{g\Gamma BC})(1-x) \qquad (2.32)$$

300 K de; üçlü yarıiletkenlerin band aralığı enerjilerinin kompozisyona bağlı değişimi denklem (2.30), (2.31) ve (2.32) ifadeleri kullanılarak incelenmiş ve mevcut deneysel ifadelerle karşılaştırılmıştır.



Şekil 2.20 Denklem (2.30), (2.31) ve (2.32)' ye göre hesaplanan (-) AlGaAs için 300K' de doğrudan ve doğrudan olmayan enerji band aralıklarının deneysel (*) verilerle [23, 24] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.20' de AlGaAs için 300K' de enerji band aralıklarının kompozisyona bağlı değişimi incelenmiş olup, deneysel verilerle [23, 24] karşılaştırılmıştır. AlAs kompozisyonu yaklaşık x=0.4' e giderken enerji band aralığının artışıyla etkin kütle azalmakta olup, x=0.4' den sonra etkin kütlede artış görülmektedir. Bu noktadan sonra yapılan cihazların verimi düşük olmaktadır. Mevcut kuramın sonuçlarının deneysel verilerle uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Gerekli parametreler tablo 2.9 ve tablo 2.10' dan alınmıştır. GaAs ve AlAs için kullanılan 300 K' deki enerji band aralığı değerleri ise tablo 2.8 de belirtilmiştir.

Tablo 2.8 AlAs ve GaAs için 300K'de enerji band aralıkları.

	$E_{g\Gamma}(300)$	$E_{gL}(300)$	$E_{gX}(300)$
Yarıiletken	eV	eV	eV
AlAs [a]	2.95	2.363	2.161
GaAs [a]	1.425	1.734	1.911

[a] Ref. [3]

Tablo 2.9 İncelenen ikili yarıiletkenler için gerekli parametreler

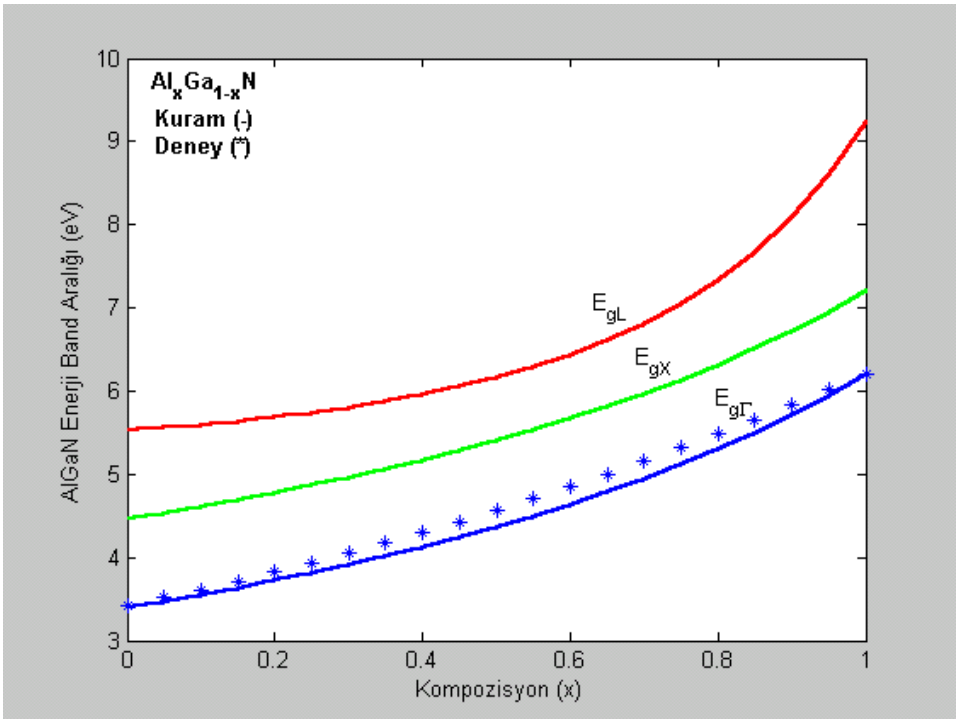
	ε_∞ [a]	Δ_0	Δ_1
Yarıiletken		eV	eV
AlAs	9.1	0.29 [b]	0.21 [b]
AlN	4.8	0.019 [c]	– 0.0932 [d]
GaAs	10.9	0.35 [b]	0.23 [b]
GaN	5.23	0.011 [c]	0.0223 [d]
InAs	12.3	0.41 [e]	0.28 [e]
InN	5.03	0.006 [f]	0.0373 [d]

[a] Ref. [6] [b] Ref. [3] [c] Ref. [25] [d] Ref. [26] [e] Ref. [27] [f] Ref. [12]

Tablo 2.10 İncelenen ikili yarıiletkenler için etkin kütle değerleri

Yarıiletken	m_n^{Γ}	m_{tL}
AlAs	0.08 [a]	0.0964 [a]
AlN	0.25 [b]	0.7 [b]
GaAs	0.063 [a]	0.0754 [a]
GaN	0.15 [b]	0.4 [b]
InAs	0.026 [c]	0.05 [c]
InN	0.1 [d]	0.11 [e]

[a] Ref. [3] [b] Ref. [25] [c] Ref. [12] [d] Ref. [26] [e] Ref. [28]



Şekil 2.21 Denklem (2.30), (2.31) ve (2.32)' ye göre hesaplanan (-) AlGaN için 300K' de doğrudan ve doğrudan olmayan enerji band aralıklarının deneysel (*) verilerle [29] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

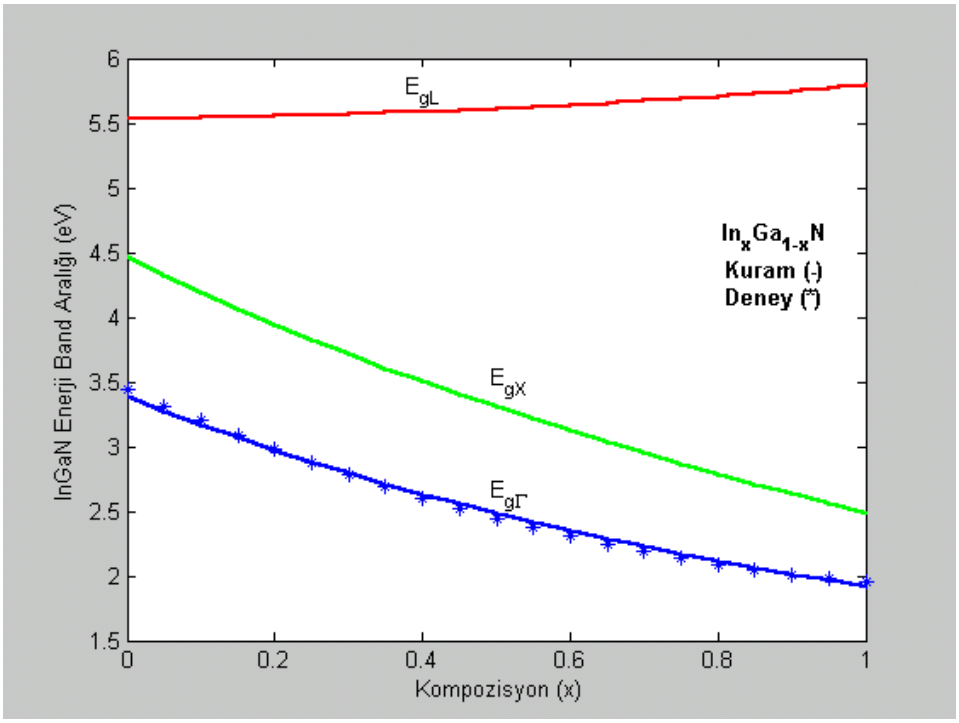
Şekil 2.21' de AlGaN için 300K' de enerji band aralıklarının kompozisyona bağlı değişimi incelenmiş olup, doğrudan enerji band aralığı deneysel verilerle [29] karşılaştırılmıştır. AlN kompozisyonunun artışıyla band aralığı değerleri artmaktadır.

Doğrudan band aralığı için mevcut kuramın sonuçları deneysel verilerle uyumdur. Gerekli parametreler tablo 2.9, 2.10 ve 2.11' den alınmıştır.

Tablo 2.11 İncelenen ikili nitritlerin, zincblende (ZB) ve wurtzide (WZ) yapı için 300K'de enerji band aralıkları.

	$E_{g\Gamma}(300)$	$E_{gL}(300)$	$E_{gX}(300)$
Yarıiletken	eV	eV	eV
$AlN\ (ZB)^a$	4.84	9.241	5.941
$AlN\ (WZ)^b$	6.2	6.9	7.2
$GaN\ (ZB)^a$	3.239	5.531	4.461
$GaN\ (WZ)^b$	3.39	4.5-5.53	4.7-5.5
$InN\ (ZB)^a$	1.916	5.796	2.486
$InN\ (WZ)^b$	1.9-2.05	4.8-5.8	2.6-4.7

[a] Ref. [12] [b] Ref. [14]



Şekil 2.22 Denklem (2.30), (2.31) ve (2.32)' ye göre hesaplanan (-) InGaN için 300K' de doğrudan ve doğrudan olmayan enerji band aralıklarının deneysel (*) verilerle [16] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

InGaN için 300K' de enerji band aralıklarının kompozisyona bağlı değişimi şekil 2.22' de incelenmiş olup, doğrudan enerji band aralığı deneysel verilerle [16] karşılaştırılmıştır. InN kompozisyonunun artışıyla Γ ve X band aralıkları azalırken, L band aralığı artmaktadır. Doğrudan band aralığı için mevcut kuramın sonucunun deneysel sonuçla uyum içerisinde olduğu şekilden görülmektedir. Gerekli parametreler tablo 2.9, 2.10 ve 2.11' den alınmıştır.

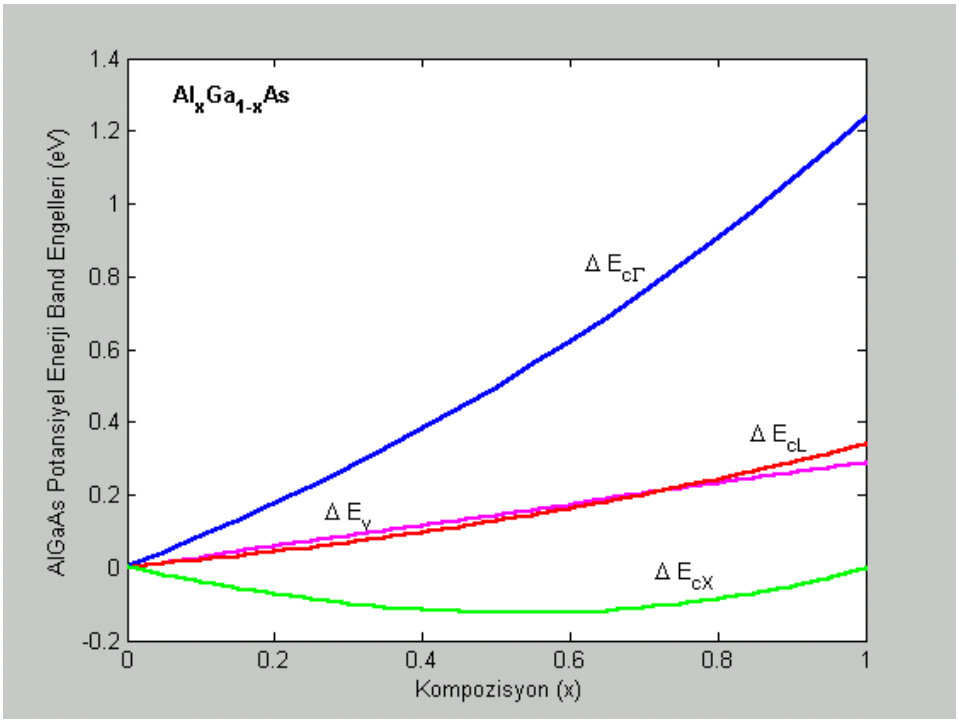
Heteroeklemlerin bütününü oluşturan yarıiletkenlerin elektronik band yapıları arasındaki fark heteroarayüzeylerdeki iletkenlik band ve değerlik band enerji seviyelerindeki potansiyel enerji engelleri ile verilmiştir. A/B heteroeklemindeki değerlik ve iletkenlik band potansiyel enerji engelleri sıcaklık ve basıncın fonksiyonu olarak aşağıdaki eşitliklerden bulunur. **[1, 3, 4, 23]**

$$\Delta E_v = \left(\frac{E_v}{\varepsilon_\infty}\right)_B - \left(\frac{E_v}{\varepsilon_\infty}\right)_A \tag{2.33}$$

$$\Delta E_{ci}(T,P) = E_{ci}(A) - E_{ci}(B) = \Delta E_{gi}(T,P) - \Delta E_v(T,P) \tag{2.34}$$

Burada E_v yüksek simetri noktasındaki değerlik band enerjisi, ε_∞ bileşen yarıiletkenin optik dielektrik sabitidir. $\Delta E_{gi} = E_{giA}(T,P) - E_{giB}(T,P)$ herhangi bir sıcaklık ve basınçtaki band aralıkları farkı olup, $i = \Gamma, L, X$ için yüksek simetri noktalarını belirtir.

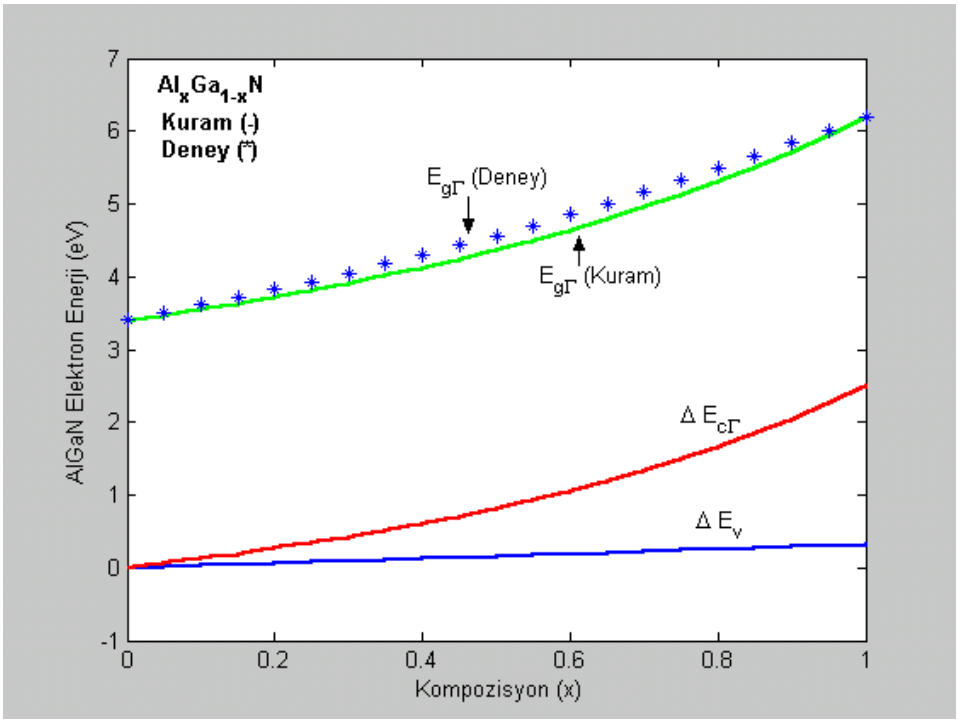
Öncelikle AlGaAs için, (2.33) ve (2.34) denklemleri kullanılarak $i = \Gamma, L, X$ için iletkenlik band ve değerlik band potansiyel enerji engelleri hesaplanmıştır. Kullanılan parametreler tablo (2.1), (2.2), (2.3), (2.4) ve (2.5)' den alınmıştır.



Şekil 2.23 Denklem (2.33) ve (2.34)' e göre hesaplanan AlGaAs için 300K' de değerlik band ve iletkenlik band potansiyel enerji engelleri.

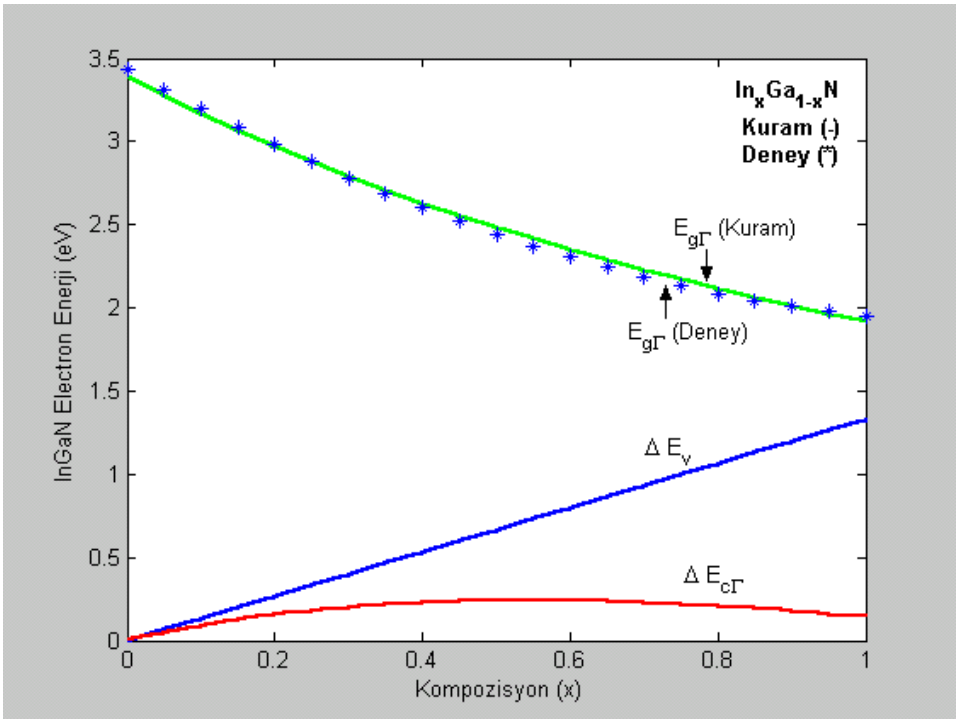
Şekil 2.23' deki AlGaAs için değerlik band potansiyel enerji engeli değeri doğrusal bir şekilde artmakta olup, Ref[4]' deki verilerle uyum içerisindedir. Γ ve L iletkenlik band potansiyel enerji engelleri kompozisyon artışıyla, değerlik band potansiyel enerji engelinde olduğu gibi doğrusal olarak artarken, X iletkenlik band potansiyel enerji engelinde deformasyon potansiyelinin büyük olmasından dolayı bir eğim ve azalış vardır.

Ayrıca üçlü nitritler (AlGaN ve InGaN) için de, (2.33) ve (2.34) denklemleri kullanılarak $i = \Gamma$ için iletkenlik band ve değerlik band potansiyel enerji engelleri incelenmiş olup, (2.30) denkleminden hesaplanan doğrudan band aralığı değeri ve deneysel ifadesiyle [29, 16] birlikte verilmiştir. Kullanılan parametreler tablo (2.1), (2.2), (2.3), (2.5) ve (2.11)' den alınmıştır.



Şekil 2.24 Denklem (2.33) ve (2.34)' e göre hesaplanan AlGaN için 300K' de değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri ve denklem (2.30)' a göre hesaplanan doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [29] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.24' de AlGaN için değerlik band potansiyel enerji engeli değeri kompozisyon artışıyla doğrusal bir şekilde artarken, Γ iletkenlik band potansiyel enerji engeli eğimli bir şekilde artış göstermektedir. Bunun nedeni; değerlik band deformasyon potansiyelinin küçük, Γ iletkenlik band deformasyon potansiyelinin büyük olmasından dolayıdır. Değerlik band potansiyel enerji engeli değeri AlN/GaN için 0.32 olup deneysel ifadeyle [30] uyum sağlamaktadır. Önceden belirttiğimiz gibi doğrudan enerji band aralığı değeri x' in artmasıyla artmakta olup deneysel ifadeleyle [29] uyumludur.



Şekil 2.25 Denklem (2.33) ve (2.34)' e göre hesaplanan InGaN için 300K' de değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri ve denklem (2.30)' a göre hesaplanan doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [16] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.25' de ise InGaN için değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri ile doğrudan enerji band aralığı incelenmiştir. Değerlik band potansiyel enerji engeli kompozisyon artışıyla doğrusal olarak artmakta olup, değeri InN/GaN için 1.33' dür ve deneysel ifadeyle [30] uyum sağlamaktadır. Γ iletkenlik band potansiyel enerji engeli de eğimli olarak artmaktadır. Doğrudan enerji band aralığı değeri x' in artmasıyla azalırken deneysel ifadeyle [16] uyum içerisindedir.

2.4 Gerilmenin Enerji Band Yapısına Etkisi

Potansiyel enerji engellerindeki ara yüzey gerilme etkilerini tanımlamak için (2.9)-(2.11) eşitlikleri yeniden yazılabilir. **[3,4]** (001) epitaxial büyütme için, ara yüzeydeki paralel ve dikey gerilme bileşenleri alttaşınkine eşittir. $\in_{xx} = \in_{yy} = \in_{zz} = \in_{s\|} = -2(C_{12}/C_{11})_s (a_{s\perp} - a_s)/a_s$. Fakat epitaxial filmdekinden farklıdır. $\in_{xx} = \in_{yy} = \in_{f\perp} = (a_{f\perp} - a_f)/a_f$ ve $\in_{zz} = \in_{f\|} = -2(C_{12}/C_{11})_f (a_{f\perp} - a_f)/a_f$ dir. $a_{f\|} = a_s$, $a_{f\perp} = a_f\left[1 - D_f (a_{f\|} - a_f)/a_f\right]$ ve $D_f = 2C_{12}/C_{11}$ olup C_{11} ve C_{12} elastik sabitlerdir.

Heterotabaka için $P = 3B_f C_f \in_{f\perp}$ ve alttaş için $P = -3B_s \in_s = 0$ kullanılarak, iletkenlik band ve değerlik band enerjilerindeki termal genleşme farkından dolayı gerilmenin etkileri elde edilir. Değerlik band ve iletkenlik band potansiyel enerji engelleri ile enerji band aralığı üzerine gerilmenin etkisi (2.35), (2.36) ve (2.37) denklemleri ile verilmiştir. **[3,4]**

$$\delta E_{ci}(T, \in) = +2a_{cif} C_f \in_{f\perp} (1 + 4C_f \in_{f\perp}) - 2a_{cif} C_f \in_{f\perp} \frac{2(1+B_f')}{3} C_f^2 \in_{f\perp}^2 \qquad (2.35)$$

$$\delta E_{v}(T, \in) = -2a_{vf} C_f \in_{f\perp} (1 + 4C_f \in_{f\perp}) - 2a_{vf} C_f \in_{f\perp} \frac{2(1+B_f')}{3} C_f^2 \in_{f\perp}^2 \qquad (2.36)$$

$$\delta E_{gi}(T, \in) = +2a_{gif} C_f \in_{f\perp} (1 + 4C_{f\perp} \in_{f\perp}) - 2a_{gif} C_f \in_{f\perp} \frac{2(1+B_f')}{3} C_f^2 \in_{f\perp}^2 \qquad (2.37)$$

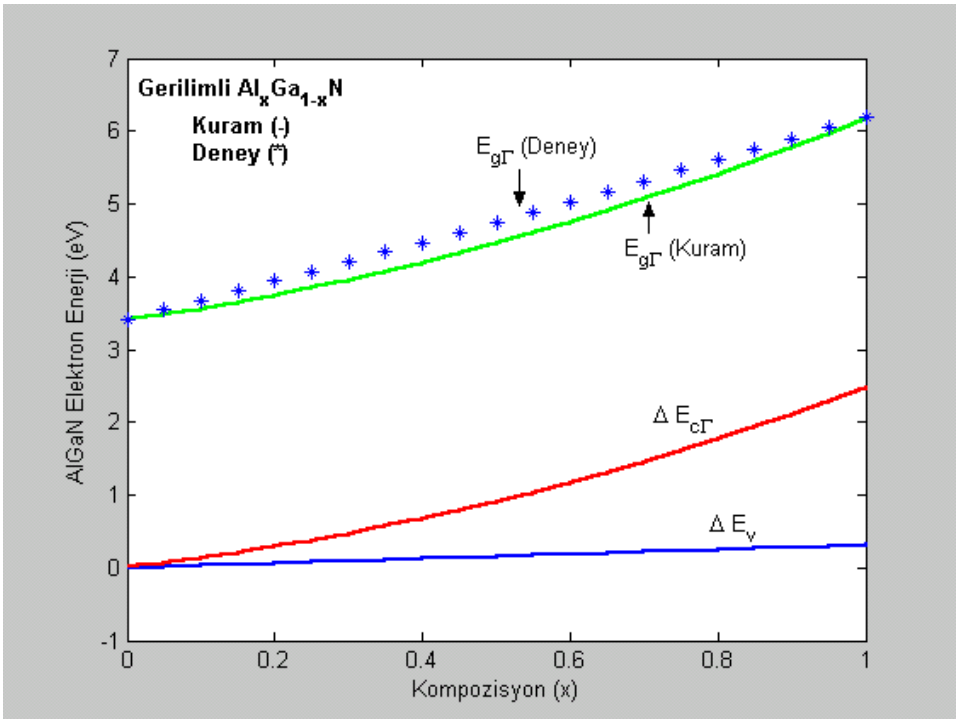
Burada $\delta E_{ci}(T, \in) = \Delta E_{ci}(T, \in) - \Delta E_{ci}(T)$, $\delta E_{v}(T, \in) = \Delta E_{v}(T, \in) - \Delta E_{v}(T)$ ve $\delta E_{gi}(T, \in) = \Delta E_{gi}(T, \in) - \Delta E_{gi}(T)$ sırasıyla iletkenlik ve değerlik bandlar ve band aralığının heteroyapı arayüzünde oluşan “arayüz gerilimi” ile değişimini göstermektedir. $Al_x Ga_{1-x} N$ ve $In_x Ga_{1-x} N$ için, (2.35) ve (2.36) denklemleri kullanılarak $i = \Gamma$ için iletkenlik band ve değerlik band potansiyel enerji engellerine gerilmenin etkisi incelenmiştir. Ayrıca denklem (2.30) kullanılarak doğrudan enerji band aralığı üzerine gerilmenin etkiside aynı grafiklerde belirtilmiş olup, deneysel ifadelerle [32, 33]

karşılaştırılmıştır. Kullanılan parametreler tablo (2.1), (2.2), (2.3), (2.5), (2.11) ve (2.12)' den alınmıştır.

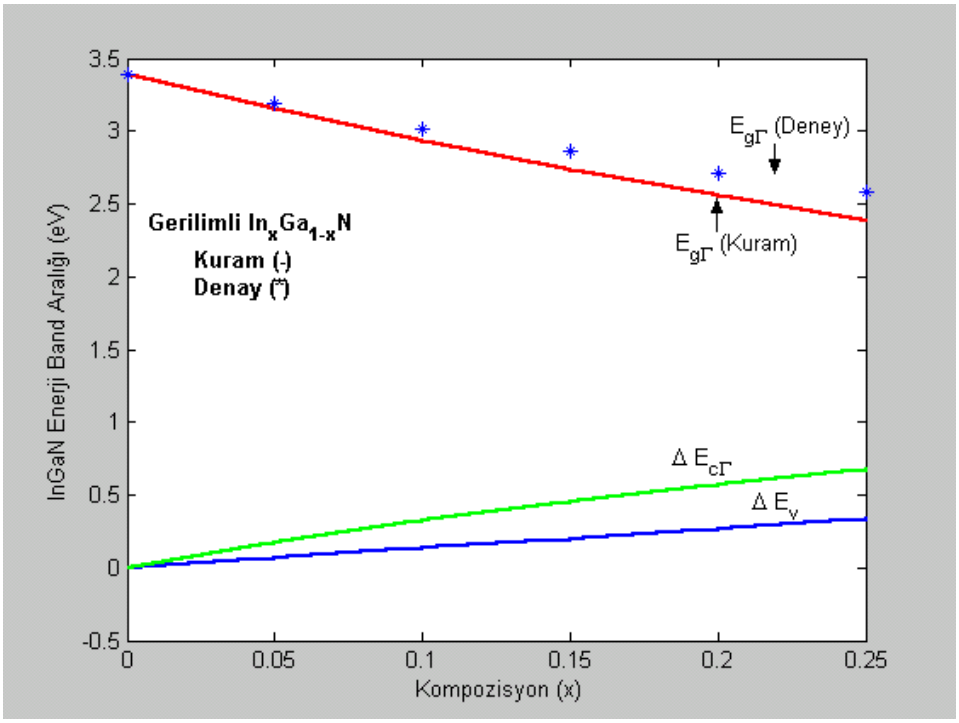
Tablo 2.12 İncelenen ikili nitritler için elastik sabitler. (Ref.[12])

	C_{11}	C_{12}
Yarıiletken	GPa	GPa
AlN	304	160
GaN	293	159
InN	187	125

Ayrıca alttaş tabaka için termal genleşme katsayıları AlN, GaN ve InN için sırasıyla $4.6/10^6 K$ **[16]**, $7.5/10^6 K$ **[31]**, $4/10^6 K$ **[16]** ' dir.



Şekil 2.26 Denklem (2.35) ve (2.36)' ya göre hesaplanan AlGaN için 300K' de değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri üzerine gerilmenin etkisi ve denklem (2.30)' a göre hesaplanan doğrudan enerji band aralığı üzerine gerilmenin etkisinin deneysel (*) verilerle [32] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.



Şekil 2.27 Denklem (2.35) ve (2.36)' ya göre hesaplanan InGaN için 300K' de değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri üzerine gerilmenin etkisi ve denklem (2.30)' a göre hesaplanan doğrudan enerji band aralığı üzerine gerilmenin etkisinin deneysel (*) verilerle [33] kompozisyonun fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 2.26 ve 2.27' de AlGaN ve InGaN için değerlik band ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelleri üzerine gerilmenin etkisi görülmektedir. Ayrıca doğrudan enerji band aralığı üzerine gerilmenin etkiside incelenmiş olup, deneysel ifadelerle [32, 33] uyumlu olduğu görülmektedir.

3. SONUÇLAR

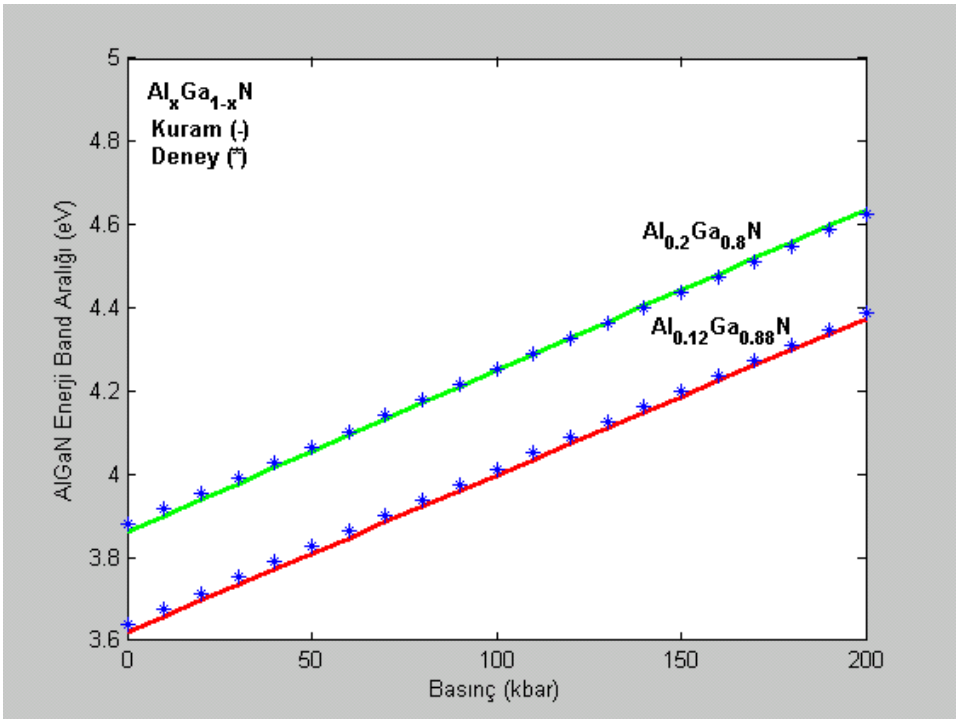
Bu kısımda, önceki kısımlarda elde ettiğimiz bilgileri kullanarak, üçlü nitritler ($Al_xGa_{1-x}N$, $In_xGa_{1-x}N$) için enerji band aralıklarının basınç, sıcaklık ve gerilmeyle değişimini tartışacağız.

3.1 AlGaN için Basınç, Sıcaklık ve Gerilmenin Enerji Band Yapısına Etkisi

İncelenen $Al_xGa_{1-x}N$ için; $E_{g\Gamma}(P)$ minimum band aralığı enerjisi basıncın bir fonksiyonu olarak denklem (2.21)' deki deneysel ifade ile denklem (2.15)' deki mevcut olan kuramın karşılaştırması şeklinde yapılmıştır. Kullanılan parametreler tablo (2.3), (2.4), (2.5), (2.11) ve (3.1)' de verilmiştir.

Tablo 3.1 İncelenen $Al_xGa_{1-x}N$ için enerji band aralığının basınçla değişimini hesaplamada kullanılan parametreler (Ref. [20])

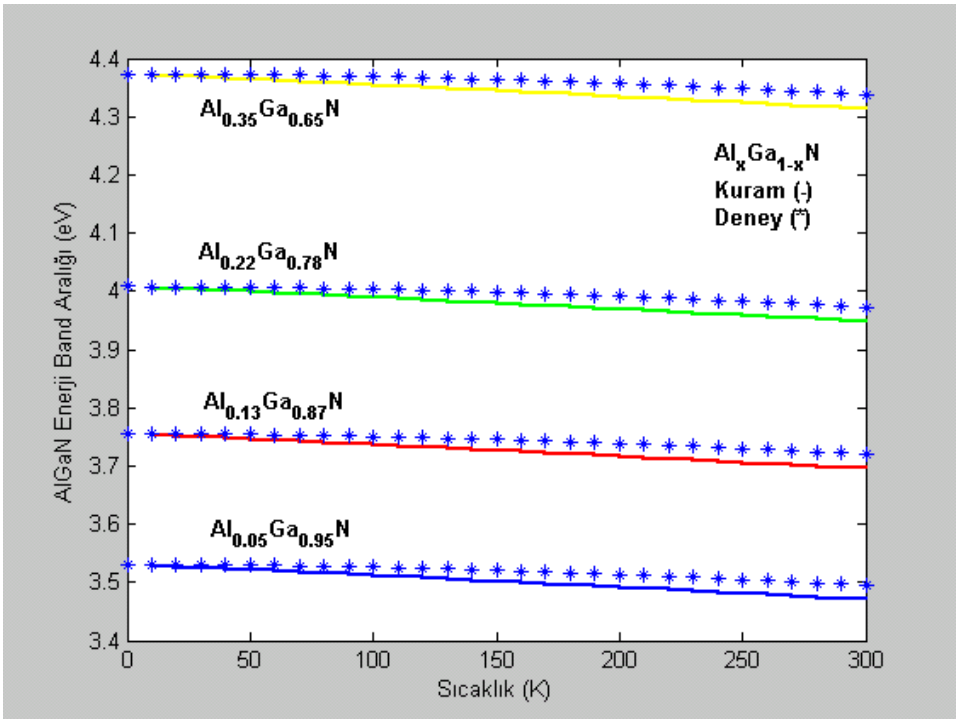
	E_g	a
Yarıiletken	eV	meV/GPa
$Al_{0.12}Ga_{0.88}N$	3.64	37.3
$Al_{0.2}Ga_{0.8}N$	3.88	37.2



Şekil 3.1 Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) $Al_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [20] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 3.1' de $Al_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının basınçla değişimi mevcut kurama göre incelenmiş ve deneysel verilerle [20] karşılaştırılmıştır. x=0.2 için doğrudan band aralığı x=0.12 için olan band aralığı değerinden daha geniştir ve basınçla hızla artmaktadır. x=0.2 için doğrudan enerji band aralığı değeri 3.8597' den 4.6349' a ve x=0.12 için de 3.6188' den 4.3735' e artış göstermektedir. Dolayısıyla x değerinin artmasıyla doğrudan enerji band aralığındaki büyüme artmaktadır. Görüldüğü gibi kuramın sonuçları deneysel sonuçlarla uyumludur.

Bunun yanında enerji band aralığının sıcaklıkla değişimi de önemlidir. Aşağıda $Al_xGa_{1-x}N$ için $E_{g\Gamma}(T)$ minimum band aralığı enerjisi sıcaklığın bir fonksiyonu olarak denklem (2.24)' deki mevcut olan modele göre hesaplanmış olup, denklem (2.25)' deki deneysel ifade ile karşılaştırılmıştır. Kullanılan parametreler tablo (2.3), (2.4), (2.5) ve (2.11) ' de verilmiştir.

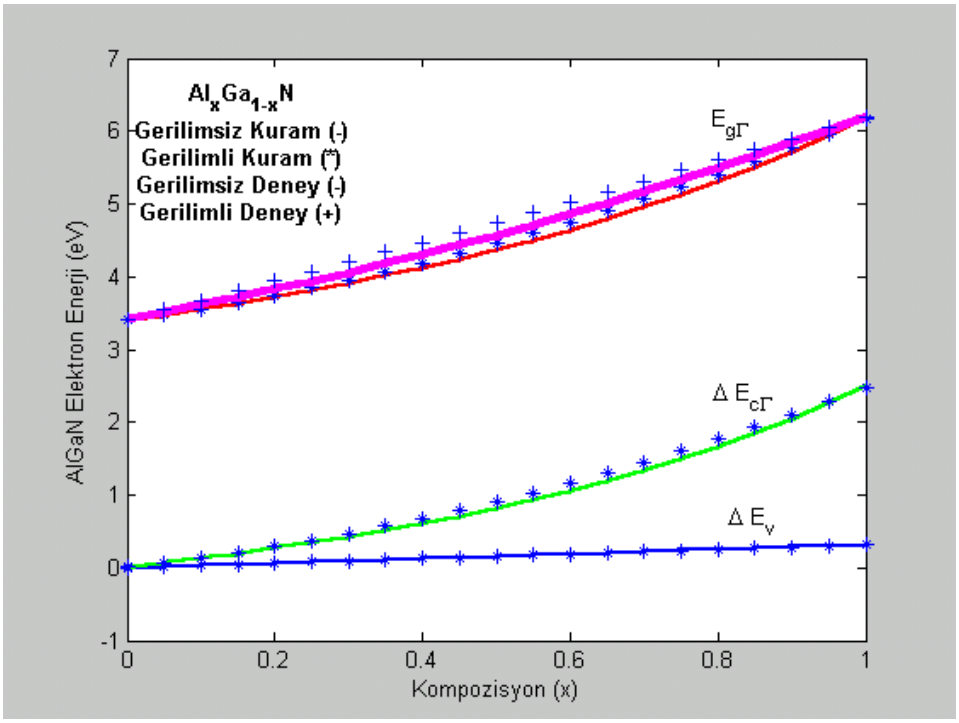


Şekil 3.2 Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) $Al_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [28] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 3.2' de $Al_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının sıcaklıkla değişimi mevcut kurama göre incelenmiş ve deneysel verilerle [28] karşılaştırılmıştır. Al kompozisyonu arttıkça band aralığı değeri büyümekte olup sıcaklıkla azalmaktadır. x=0.35 için doğrudan enerji band aralığı değeri 4.372' den 4.3136' ya; x=0.22 için 4.0067' den 3.9484' e; x=0.13 için 3.7538' dan 3.6955' e ve x=0.05 için de 3.529' dan 3.4708' e azalış göstermektedir. Dolayısıyla x değerinin artmasıyla doğrudan enerji band aralığındaki azalış artmaktadır. Basınç grafiklerinde olduğu gibi, alınan x değerlerinin seçimi mevcut deneysel verilere göre yapılmıştır. Kuramın sonuçları deneysel sonuçlarla uyumludur.

$Al_xGa_{1-x}N$ için; gerilmenin etkisini daha iyi görebilmek için, önceki bölümlerde incelenen (2.27) denklemi (2.35) denklemi ile karşılaştırmalı olarak incelenmiştir.

Şekil 3.3' de $Al_xGa_{1-x}N$ için, doğrudan enerji band aralığındaki gerilme etkisi ve $i = \Gamma$ için iletkenlik band potansiyel enerji engelindeki gerilme etkisi yavaşça artmakta, x=1 için sıfırlanmaktadır. Değerlik band ofseti üzerinde gerilme etkisi hemen hemen hiç yok denebilir.



Şekil 3.3 $Al_xGa_{1-x}N$ için (2.27) denklemi ile (2.35) denkleminin karşılaştırılması

3.2 InGaN için Basınç, Sıcaklık ve Gerilmenin Enerji Band Yapısına Etkisi

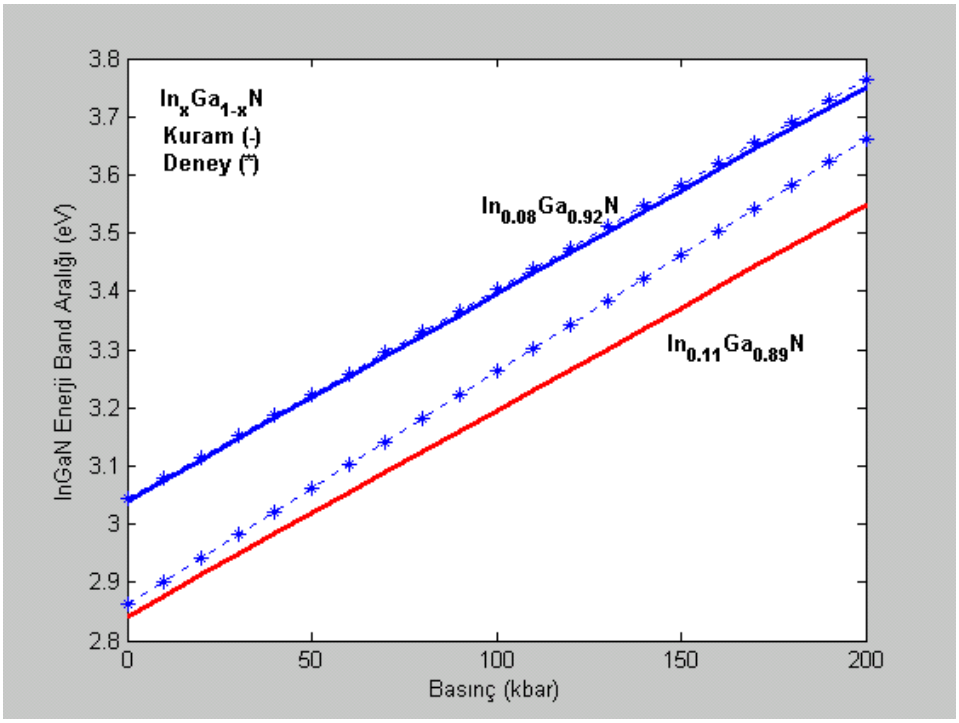
İncelenen $In_xGa_{1-x}N$ için; $E_{g\Gamma}(P)$ minimum band aralığı enerjisi basıncın bir fonksiyonu olarak denklem (2.21)' deki deneysel ifade ile denklem (2.15)' deki mevcut olan kuramın karşılaştırması şeklinde yapılmıştır. Kullanılan parametreler tablo (2.3), (2.4), (2.5), (2.11) ve (3.2)' de verilmiştir.

Şekil 3.4' de de $In_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının basınçla değişimi mevcut kurama göre incelenmiş ve deneysel verilerle [34, 35] karşılaştırılmıştır. In kompozisyonu arttıkça temel band aralığı değeri azalmaktadır. x=0.08 için doğrudan enerji band aralığı değeri 3.0385' den 3.7493' e ve x=0.11 için 2.8407' den 3.5465' e artış göstermektedir. Dolayısıyla x değerinin artmasıyla doğrudan enerji band aralığındaki büyüme $Al_xGa_{1-x}N$ ' deki değişimle zıt olarak azalmaktadır. Tablo 3.2' yi

incelediğimizde In kompozisyonundaki artışla basınç katsayısının arttığı açıkca görülmektedir.

Tablo 3.2 İncelenen $In_xGa_{1-x}N$ için enerji band aralığının basınçla değişimini hesaplamada kullanılan parametreler (Ref. [34, 35])

	E_g	a
Yarıiletken	eV	meV/GPa
$In_{0.08}Ga_{0.92}N$	3.043	36
$In_{0.11}Ga_{0.89}N$	2.862	40



Şekil 3.4 Denklem (2.15)' e göre hesaplanan (-) $In_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [34, 35] basıncın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 3.4' de görüldüğü gibi; $In_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığı değerleri basınçla artış göstermektedir. Alınan x değerlerinin seçimi mevcut deneysel verilere göre yapılmıştır. Kuramın sonuçlarının deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir.

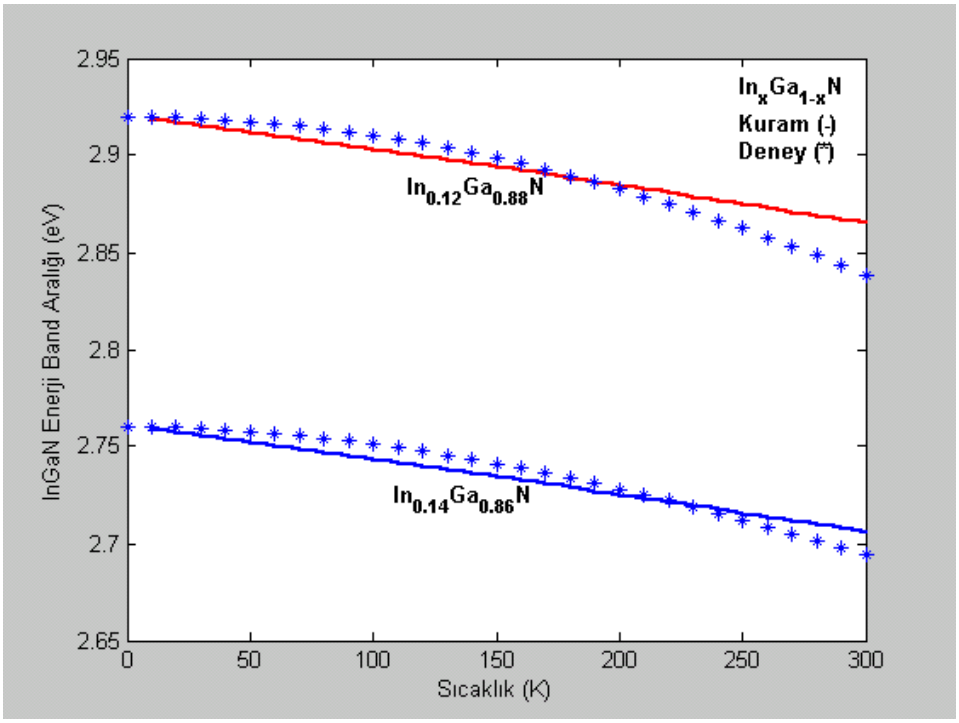
Transistör tabanlı heteroyapılar, ışın salıcı diodlar, mor ötesi dedektörler gibi aletlerin yapımı ve dizaynında gerekli olan band hizasını hesaplamak için; verilen mol oranında, $Al_xGa_{1-x}N$ ve $In_xGa_{1-x}N$ alaşımların band aralıklarının basınca bağlılığının bilinmesi gerekir. **[36]**

$In_xGa_{1-x}N$ için $E_{g\Gamma}(T)$ minimum band aralığı enerjisi bir önceki bölümde olduğu gibi sıcaklığın bir fonksiyonu olarak denklem (2.24)' deki mevcut olan modele göre hesaplanmış olup, denklem (2.25)' deki deneysel ifade ile karşılaştırılmıştır. Kullanılan parametreler tablo (2.3), (2.4), (2.5), (2.11) ve (3.3)' de verilmiştir.

Tablo 3.3 İncelenen $In_xGa_{1-x}N$ için enerji band aralığının sıcaklıkla değişimini hesaplamada kullanılan parametreler

	$E_g(0)$	α	β
Yarıiletken	eV	meV/K	K
$In_{0.12}Ga_{0.88}N$	2.92^{a}	3^{a}	3000^{a}
$In_{0.14}Ga_{0.86}N$	2.7601^{b}	83.2^{b}	835.6^{b}

[a] Ref. [37] [b] Ref. [38]

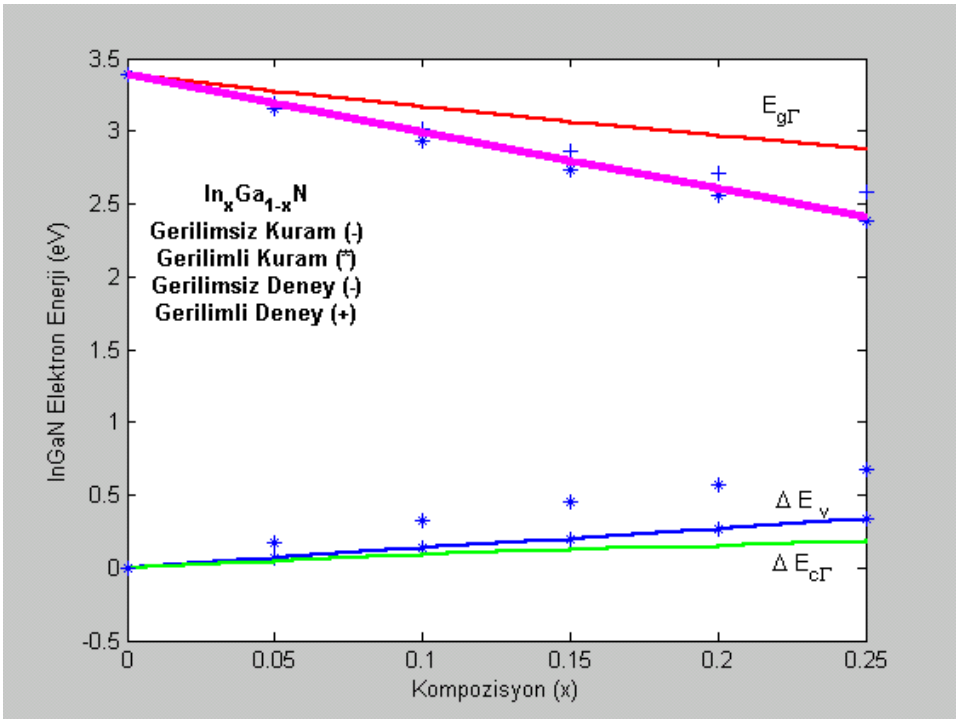


Şekil 3.5 Denklem (2.24)' e göre hesaplanan (-) $In_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının deneysel (*) verilerle [37, 38] sıcaklığın fonksiyonu olarak karşılaştırılması.

Şekil 3.5' de $In_xGa_{1-x}N$ için doğrudan enerji band aralığının sıcaklıkla değişimi mevcut kurama göre incelenmiş ve deneysel verilerle [37, 38] karşılaştırılmıştır. Deneysel parametreler tablo 3.3' de verilmiştir.

$In_xGa_{1-x}N$ için, In kompozisyonu arttıkça temel band aralığı değeri azalmaktadır. x=0.14 için doğrudan enerji band aralığı değeri 2.7588' den 2.7060' e ve x=0.12 için 2.9187' dan 2.8651' e azalış göstermektedir. Görülmektedir ki x değerinin artmasıyla doğrudan enerji band aralığındaki azalış $Al_xGa_{1-x}N$' deki değişimle zıt olarak azalmaktadır. Kuramın sonuçlarının deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir.

$In_xGa_{1-x}N$ için; gerilmenin etkisini daha iyi görebilmek için, önceki bölümlerde incelenen (2.31) denklemi (2.36) denklemi ile karşılaştırmalı olarak incelenmiştir.



Şekil 3.6 $In_xGa_{1-x}N$ için (2.31) denklemi ile (2.36) denkleminin karşılaştırılması

Şekil 3.6' da $In_xGa_{1-x}N$ mevcut deneysel verilerden dolayı 0<x<0.25 aralığında incelenmiştir. $Al_xGa_{1-x}N$ ' de olduğu gibi değerlik band potansiyel enerji engeli üzerinde gerilme etkisi yok denebilir. $i = \Gamma$ iletkenlik band potansiyel enerji engeli için gerilme etkisi ve enerji band aralığındaki gerilme etkisi giderek artmaktadır.

Yapılan sayısal hesaplar ve sonuçların deneysel veriler ile karşılaştırılması sonunda, termokimyasal sıkı bağlanım kuramının deney ile çok iyi bir uyum içinde olduğu gözlenmiştir.

KAYNAKLAR

[1] **Ünlü H.,** 1999. Extended Tight-Binding and Thermochemical Modeling of III-Nitrite Heterostructures at Any Temperature and Pressure, Phys. Stat.Sol. (b), **216**, 107-111.

[2] **Shan W., Ager III J.W., Walukiewicz W., Haller E. E., Little B. D., Song J. J., Schurman M., Feng Z. C., Stall R. A., Goldenberg B.,** 1998. Near-band-edge Photoluminescence Emission in $Al_xGa_{1-x}N$ Under High Pressure, Appl. Phys. Letters, **72 (18)**, 2274-2276.

[3] **Ünlü H.,** 2001. Tight Binding Modeling of Heterojunction Band Offsets as a Function of Pressure and Composition, Phys. Stat.Sol. (b), **223**, 195-204.

[4] **Ünlü H.,** 2001. Modeling of Heterojunction Bipolar Transistors at any Temperature, Pressure, Strain and Alloy Composition, Computational Materials Science, **21**, 453-474.

[5] **Edward T. Yu., McCaldin J. O., McGill Thomas C.,** 1992. Band Offsets in Semiconductor Heterojunctions, Solid State Physics, **46**, 1-146.

[6] **Harrison W. A.,** 1999. Elemantary Electronic Structure, Singapore, World Scientific.

[7] **Morkoç H., Ünlü H., Ji G,** 1991. Principles and Technology of MODFETs, vols.1&2, Chichester, John Wiley & Sons.

[8] **Kim K., Lambrecht W. R. L., Segall B.,** 1996. Elastic Constants and Related Properties of Tetrahedrally Bonded BN, AlN, GaN, and InN, Physical Review B, **53 (24)**, 16310-16326.

[9] **Ünlü H.,** 1992. A Thermodynamic Model For Determining Pressure and Temperature Effets on the Bandgap Energies and Other Properties of Some Semiconductors, Solid State Electronics, **35 (9)**, 1343-1352.

[10] **Ünlü H.,** 2001. Pressure Effects on Bonding and Interface Properties of GaN Based Heterostructures, High Pressure Research, **22**, 287-292.

[11] **Wei S. H., Zunger A.,** 1999. Predicted Band-Gap Pressure Coefficients of All Diamond and Zinc-Blende Semiconductors: Chemical Trends, Physical Review B, **60 (8)**, 5404-5411.

[12] **Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. R.,** 2001. Band Parameters for III-V Compound Semiconductors and Their Alloys, Applied Physics Review, **89 (11)**, 5815-5875.

[13] http://www.newton.ex.ac.uk/useful.

[14] **Landolt-Börnstein,** 1984. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Crystal and Solid State Physics, **18**.

[15] http://www.crystalresearch (2001. Cry. Researc Tec., **36**.)

[16] http://www.semiconductors.

[17] **Kittel C.,** 1986**.** Introduction to Solid State Physics, New York, John Wiley &Sons.

[18] **Goni A. R., Strössner K., Syassen K., Cardona M.,** 1987. Pressure Dependence of Direct and Indirect Optical Absorption in GaAs, Physical Review B, **36 (3)**, 1581-1587.

[19] **Olego D., Cardona M., Müller H.,** 1979. Photoluminescence in Heavily Doped GaAs. II. Hydrostatic Pressure Dependence, Physical Review B, **22 (2)**, 894-903.

[20] **Shan W., Ager III J. W., Walukiewicz W., Haller E. E., Martin M. C., McKinney W.R., Yang W.,** Dependence of the Fundamental Bandgap of $Al_xGa_{1-x}N$ on Alloy Composition and Pressure, J. Apply. Phys., **85**, 8505-8509.

[21] **Varshni Y. P.,** 1967. Pysica **34**, 149.

[22] **Adachi S.,** 1985. GaAs, AlAs and $Al_xGa_{1-x}As$: Material Parameters for Use in Research and Device Applications, J. Appl. Phys., **58 (3)**, R1-R28.

[23] **Ünlü H., Asenov A.,** 2002. Band Offsets in III-Nitrite Heterostructures, J. Phys. D: Apply. Phys., **35**, 591-594.

[24] **Lee H. J., Juravel L. Y., Woolley J. C.,** 1980. Electron Transport and Band Structure of $Ga_{1-x}Al_xAs$ Alloys, Physical Review B., **21 (2)**, 659-669.

[25] **Ünlü H.,** 2000. Band Offsets and Current Transport in GaN Based HBTs, Proc. Int. Workshop on Nitrite Semiconductors IPAP Conf. Series 1 pp., 977-980.

[26] **Pugh S. K., Dugdale D. J., Brand S., Abram R. A.,** 1999. Band-Gap and k.p. Parameters for GaAlN and GaInN Alloys, J. Appl. Phys., **86(7)**, 3768-3772.

[27] **Chadi D. J.,** 1977. Spin-yörünge Splitting in Crystalline and Compositionally Disorded Semiconductors, Physical Review B., **16(2)**, 790-797.

[28] **Chan Michael C. Y., Tsang K. O., Li E. H., Denbaars P.,** 1999. Thermal Annealing of $In_xGa_{1-x}N/GaN$ Strained- Layer Quantum Well, MRS Internet J. Nitrite Semicond. Res. **4S1, G6.25**.

[29] **Kim H. S., Mair R. A., Li J., Lin J. Y., Jiang H. X.,** 2000. Time-Resolved Photoluminescence Studies of $Al_xGa_{1-x}N$ Alloys, Appl. Phys. Letters, **76 (10)**, 1252-1254.

[30] **Martin G., Botchkarev A., Rockett A., Morkoç H.,** 1996. Valence-band Discontinuities of Wurtzide GaN, AlN, and InN Heterojunctions Measured by x-ray Photoemission Spectroscopy, Appl. Phys. Letters, **68 (18)**, 2541-2543.

[31] **Perlin P., Mattos L., Shapiro N. A., Kruger J., Wong William S., Sands T., Cheung N. W., Weber E. R.,** 1998. Reduction of the Energy Gap Coefficient of GaN due to the Constraining Presence of the Sapphire Substrate, J. Appl. Phys., **85 (4)**, 2385-2389.

[32] **Steude G., Hofmann D. M., Meyer B. K., Amano H., Akasaki I.,** 1998. The Dependence of the Band Gap on Alloy Composition in Strained $Al_xGa_{1-x}N$ on GaN, Phys. Stat. Sol. (b), **205**, R7-R8.

[33] **Parker C. A., Roberts J. C., Bedair S. M., Reed M. J., Liu S. X., El-Masry N. A., Robins L. H.,** 1999. Optical Band Gap Dependence on Composition and Thickness of $In_xGa_{1-x}N$ (0<x<0.25) Grown on GaN, Appl. Phys. Letters, **75 (17)**, 2566-2568.

[34] **Shan W., Walukiewicz W., Haller E. E., Little B. D., Song J. J., McCluskey M. D., Johnson N. M., Feng Z. C., Shurman M., Stall R. A.,** 1998. Optical Properties of $In_xGa_{1-x}N$ Alloys Grown by Metalorganic Chemical Vapor Deposition, J. Appl. Phys., **84 (8)**, 4452-4458.

[35] **Shan W., Ager III J. W., Walukiewicz W., Haller E. E., McCluskey M. D., Johnson N. M., Bour D. P.,** Pressure Dependence of Optical Transitions in $In_{0.15}Ga_{0.85}N/GaN$ Multiple Quantum Wells, Physical Review B., **58 (16)**, R10 191-R10 194.

[36] **Dridi Z., Bouhafs B., Ruterana P.,** 2002. Pressure Dependence of Energy Band Gaps for $Al_xGa_{1-x}N$, $In_xGa_{1-x}N$ and $In_xAl_{1-x}N$, New Journal of Physics, **4**, 94.1-94.15.

[37] **Moon Y. T., Kim D. J., Park J. S., Oh J. T., Lee J. M., Ok Y. W., Kim H., Park S. J.,** 2001. Temperature Dependence of Photoluminescence of InGaN Films Containing In-Rich Quantum Dots, Appl. Phys. Letters, **79 (5)**, 599-601.

[38] **Cho Y. H., Gainer G. H., Fischer A. J., Song J. J., Keller S., Mishra U. K., DenBaars S. P.,** 1998. “S-Shaped” Temperature- Dependence Emission Shift and Carrier Dynamics in InGaN/GaN Multiple Quantum Wells, Appl. Phys. Letters, **73 (10)**, 1370-1372.

ÖZGEÇMİŞ

24. 11. 1978 yılında Bartın' da doğdu. 1995 yılında D.E.Ü. Buca Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmenliği bölümüne kayıt olmaya hak kazandı. 1999 yılında mezun oldu. Mezun olduğu yıl İ.T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Mühendisliği bölümünde lisansüstü eğitimine başlamıştır.