

University : İstanbul Technical University
Institute : Informatics Institute
Science Programme : Computational Science and Engineering
Programme : Computational Science and Engineering
Supervisor : Prof. Dr. Hilmi ÜNLÜ
Degree Awarded and Date : PhD – November 2011

ABSTRACT

Computational Design And Modeling Of Semiconductor Nanostructures via Tight Binding Approximation

Özden AKINCI

The magnitude of the electronic and optoelectronic devices in today's technology is down to the order of nanometer. Quick and reliable determination of working principles and performance of devices through simulation methods have become crucial. Determination of electronic and optical properties of nano-sized devices using first principle calculation is computationally expensive and difficult. The tight binding methods, unlike the first principle calculations are applicable easily in today's nano-structures, are preferred to simulate the nano-sized devices.

Group II-VI, III-V and III-N semiconductors have different atomic properties, therefore different distance interactions such as nearest and second nearest neighbor and different atomic orbital interactions s , p , d and s^* are used to determine the closest results to the reality.

In this thesis, the electronic and optical properties of group II-VI, III-V and III-N semiconductors were determined by using tight binding methods. Various orbital and neighbor interactions were used to determine electronic and optical properties of binaries such as band gaps, electronic band structures, effective masses and density of states. Furthermore, modified virtual crystal approximation was applied to the results of the binaries to get ternaries. Changing of the band gaps and structures of ternaries with mol fraction was calculated. Electronic properties of the heterostructure combination of binaries and ternaries were determined and also lattice mismatch effects on the band offsets and gaps were investigated. Band structures changes with temperature and pressure were also investigated. The results were found to be in good agreement with available experimental results.

Keywords: Semiconductors, Tight binding approximation, Electronic properties, Effective mass, Density of states, band gap, band offset, temperature, pressure.

Üniversitesi	: İstanbul Teknik Üniversitesi
Enstitüsü	: Bilişim Enstitüsü
Anabilim Dalı	: Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik
Programı	: Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik
Tez Danışmanı	: Prof. Dr. Hilmi ÜNLÜ
Tez Türü ve Tarihi	: Doktora – Kasım 2011

ÖZET

Nanoyapı Yarıiletkenlerin Sıkı Bağlanım Kuramı ile Tasarımı ve Bilgisayar Benzetimi

ÖZDEN AKINCI

Günümüz teknolojisinde elektronik ve optielektronik cihazların boyutları nano boyut mertebesine inmiş olup; cihaz performansını ve çalışma ilkelerini benzetim yöntemleri aracılığıyla hızlı ve güvenilir bir şekilde belirlemek önemli hale gelmiştir. Sıkı bağlanım yöntemleri, birinci ilke hesaplarının aksine hesaplama yükü ve nanoboyutlara uygulamadaki başarısından dolayı günümüz nano yapılarının benzetiminde etkin bir şekilde kullanılmaktadır. Grup II-VI, III-V ve III-N yarıiletkenlerin sahip oldukları atomik özelliklerden dolayı yakın komşuluk, ikinci yakın komşuluk gibi farklı komşuluk etkileşimleri ile farklı orbital etkileşimlerini içeren sıkı bağlanım yöntemleri kullanılarak gerçeğe en yakın sonuçlar elde edilebilmektedir.

Bu tez çalışmasında, grup II-VI, III-V ve III-N yarıiletkenlerin elektronik ve optik özelliklerinin sıkı bağlanım yöntemleriyle belirlenmesi hedeflenmiştir. Bu amaç doğrultusunda öncelikle, farklı orbital ve komşuluk etkileşimleri kullanılarak yarıiletken ikililerin bant aralıkları, etkin kütleleri, elektronik bant yapıları ve durum yoğunlukları belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar ışığında, düzeltilmiş sanal kristal yaklaşımı (DSKY) ile üçlü alaşımların bant aralıkları ve elektronik bant yapıları belirlenmiş, alaşım mol oranına göre bant aralıkları ile bant yapılarının değişimleri hesaplanmıştır. İkili bileşikler ile üçlü alaşımların bir araya gelmesiyle oluşan heteroyapıların elektronik özellikleri belirlenmiş, örgü uyumsuzluğunun bant aralıkları ile bant ofsetlerine etkisi incelenmiştir. Bant yapılarının sıcaklık ve basınç ile değişimleri incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Yarıiletkenler, Sıkı bağlanım, Elektronik özellikler, Etkin kütle, Durum yoğunluğu, Bant aralığı, Bant ofset, Sıcaklık, Basınç.