

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Si (001) YÜZEYİNİN ATOMİK VE ELEKTRONİK YAPISI

Çağrı KADEROĞLU

FİZİK MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

ANKARA

2007

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

Si (001) YÜZEYİNİN ATOMİK VE
ELEKTRONİK YAPISI

Çağrı KADEROĞLU

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bora ALKAN

Bu tez çalışmasında, Si (001) yüzeyinin atomik ve elektronik özellikleri $ab - initio$ yoğunluk fonksiyoneli hesapları ile incelenmiştir. İlk olarak temiz silisyum yüzeyine ait sonuçları verdik. Daha sonra Si (001) yüzeyine 0.5 ML, 1 ML ve 2 ML olacak şekilde adsorplanmış S atomu ile 0.5 ML ve 1 ML olacak şekilde adsorplanmış Ge atomu çalışılmıştır. Son olarak, Ge kaplamalardan kararlı bulunan yapılara H atomu eklendiğinde oluşan yeni durumlar incelenmiştir. Bu işlemin, yüzeylerin özelliklerini ne yönde etkilediği tartışılmıştır.

2007, 103 sayfa

Anahtar Kelimeler: Atomik yapı, elektronik bant yapısı, yüzey yeniden yapılanması, $ab - initio$ hesaplamaları, teorik modelleme

ABSTRACT

Master Thesis

ATOMIC AND ELECTRONIC STRUCTURE OF THE Si (001) SURFACE

Çağrı KADEROĞLU

Ankara University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physical Engineering

Supervisor: Prof. Dr. Bora ALKAN

In this thesis, the atomic and electronic properties of Si (001) surface have been investigated by ab – initio density functional calculations. We have first given the results for a clean silicon surface. Then, an adsorbed S atom on Si (001) surface for 0.5 monolayer (ML), 1 ML and 2 ML were studied, while an adsorbed Ge atom has been studied for 0.5 ML and 1 ML. Finally, the new composed cases have been studied when H atom has been added to the surfaces of Ge coverages which were found as stable. It has then been discussed how this processing has affected the properties of surfaces.

2007, 103 pages

Key Words: Atomic structure, electronic band structure, surface reconstruction, ab – initio calculations, theoretical modelling

TEŐEKKÜR

Bu alıőmayı bilgi ve önerileriyle yönlendiren, her koşulda destekleyici ve teşvik edici olan danışmanım Sayın **Prof. Dr. Bora ALKAN**'a tüm hoşgörü ve iyi niyeti için teşekkürü bir borç bilirim. Ayrıca alıőmalarımda beni maddi ve manevi olarak yalnız bırakmayan anne ve babama, tüm eğitim ve sosyal hayatımda desteęini hiç bir zaman esirgemeyen **Akkız OLAK**'a ve her türlü yardımları için arkadaşım **Zeynep AYDOęAN**'a ve **Haydar OLAK**'a teşekkürlerimi sunarım.

aęılı KADEROęLU

Ankara, Temmuz 2007

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
SİMGELER DİZİNİ.....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xii
1.GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER.....	4
2.1 Kristal Geometrisi.....	4
2.1.1 Örgü yapıları.....	4
2.1.2 Miller indisleri.....	6
2.1.3 Bragg kırınımı.....	7
2.1.4 Ters örgü.....	8
2.1.5 Wigner-Seitz hücresi (W-S).....	9
2.1.6 Brillouin bölgeleri.....	10
2.1.7 Yüzey merkezli kübik örgü (fcc).....	11
2.1.8 Elmas/Çinko-Sülfit kristal yapılar (Diamond/Zinc-Blende).....	12
2.2 Yarıiletkenlerin Genel Karakteri.....	14
2.2.1 Yarıiletkenlerin band yapısı.....	14
2.2.2 Yüzey geometrisi.....	19
2.2.3 (001) Yüzeyinin Brillouin bölgesi.....	20
2.2.4 Yarıiletken çeşitleri.....	22
2.3 Yarıiletken Yüzeylerin İncelenmesinde Kullanılan Yöntemler.....	24
2.3.1 Deneysel metotlar.....	24
2.3.1.1 Düşük enerjili elektron kırınımı (Low energy electron diffraction; LEED).....	25
2.3.1.2 Taramalı tünelleme mikroskobu (Scanning tunneling microscope; STM).....	26
2.3.1.3 Atomik kuvvet mikroskobu (Atomic force microscope; AFM).....	27
2.3.1.4 Taramalı elektron mikroskobu	

(Scanning electron microscope; SEM).....	28
2.3.1.5 Taramalı tünelleme spektroskopisi	
(Scanning tunneling spectroscopy; STS).....	29
2.3.2 Teorik modelleme.....	31
2.3.2.1 Relaxation (Durulma).....	32
2.3.2.2 Reconstruction (Yeniden yapılanma).....	33
2.4 Parçacık Etkileşimleri.....	36
2.4.1 Elektron-elektron etkileşmesi	38
2.4.1.1 Dalga fonksiyonu yaklaşımı.....	39
2.4.1.1.1 Hartree Teorisi.....	39
2.4.1.1.2 Hartree-Fock Teorisi.....	40
2.4.1.2 Yoğunluk fonksiyonu yaklaşımı.....	42
2.4.1.2.1 Thomas-Fermi Teorisi.....	42
2.4.1.2.2 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT).....	42
2.4.1.2.3 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA).....	45
2.4.1.2.4 Genelleştirilmiş Eğim Yaklaşımı (GGA).....	46
2.4.2 Elektron-İyon etkileşmesi.....	46
2.4.2.1 Tüm Elektron Metodu.....	46
2.4.2.2 Düzlem dalga gösterimi.....	47
2.4.2.3 Pseudo-Potansiyel Metot.....	48
2.5 Teorik Modellemenin Temel Gereksinimleri.....	50
2.5.1 Yüzeyin ve ara yüzeyin yapısal gösterimi.....	50
2.5.2 Yüzeylerin ab initio metot ve DFT'ye dayalı superhücre tekniği ile modellenmesi.....	52
3. MATERYAL ve YÖNTEM.....	56
3.1 Materyal.....	56
3.2 Yöntem.....	60
4. BULGULAR.....	63
4.1 Bulk Si.....	63
4.2 Temiz Si (001) Yüzeyi.....	64
4.2.1 Atomik yapı.....	64
4.2.2 Elektronik yapı.....	67

4.3 Si (001) yüzeyine S Adsorplanması.....	68
4.3.1 Hemisülfit model.....	68
4.3.2 Monosülfit model.....	71
4.3.3 Disülfit model.....	74
4.4 Si (1x2) (001) yüzeyine Ge Adsorplanması.....	77
4.4.1 Si (1x2) (001) üzerine 0.5 ML Ge.....	78
4.4.2 Si (1x2) (001) üzerine 1 ML Ge.....	82
4.4.3 0.5 ML ve 1 ML kaplamaların H ile pasivize edilmesi.....	92
5. SONUÇ.....	99
KAYNAKLAR.....	101
ÖZGEÇMİŞ.....	103

SİMGELER DİZİNİ

\vec{a}	Birim hücrenin örgü vektörü
$a_1^* a_2^*$	Yeniden oluşan birim hücrenin örgü vektörleri
Å	Angström
AES	Auger elektron spektroskopisi
AFM	Atomik kuvvet mikroskobu
ARUPS	Açı çözünürlüklü ultra-viole fotoelektron spektroskopisi
bcc	Hacim merkezli kübik yapı
C	Karbon
d_{Bulk}	Sistem duruldan önce atomik tabakalar arasındaki uzaklık
d_{1-2}	Sistem durulduktan sonra atomik tabakalar arasındaki uzaklık
DFT	Density functional theory
fcc	Yüzey merkezli kübik yapı
\vec{G}	Ters örgü vektörü
Ge	Germanyum
GGA	Generalised gradient approximation
H	Hidrojen
I	Akım
\vec{k}	Dalga vektörü
\vec{K}	Ters örgü uzay vektörü
LDA	Local density approximation
LEED	Düşük enerjili elektron kırınımı
MBE	Molecular beam epitaxy
ML	Monolayer
PS	Fotoelektron spektroskopisi
PWSCF	Plane waves self-consistent field
RHEED	Yansımali yüksek enerjili elektron kırınımı
SEM	Taramalı elektron mikroskobu
Si	Silisyum
SiC	Silisyum karbür
SiCl ₄	Silisyum klörür

SiO_2	Silisyum oksit
STM	Taramalı tünelleme mikroskobu
STS	Taramalı tünelleme spektroskopisi
\vec{T}	Örgü ötelemesi
UPS	Ultra-viole fotoelektron spektroskopisi
XPS	X-ışını fotoelektron spektroskopisi
W – S	Wigner –Seitz hücresi
V	Gerilim
Ψ	Schrödinger dalga fonksiyonu
Φ	Tek parçacık dalga fonksiyonu

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1	Kübik bir kristalde bazı önemli düzlemlerin indisleri.....	6
Şekil 2.2	Bragg kırınımı.....	7
Şekil 2.3	W-S hücresinin yapısı.....	9
Şekil 2.4	Brillouin bölgesi sınırında Bragg kırınımı.....	10
Şekil 2.5	fcc örgünün a) gerçek uzaydaki b) ters uzaydaki örgüsü.....	11
Şekil 2.6	Elmas yapı.....	12
Şekil 2.7	Çinko-Sülfür kristal yapı.....	13
Şekil 2.8	$k=\pm\pi/a'$ daki Bragg yansımalarının sonucu olarak E_g enerji aralığı oluşur.....	15
Şekil 2.9	Yarıiletken bir kristalin bant yapısı.....	16
Şekil 2.10	İletken, yalıtkan ve yarıiletkenlerin enerji bant aralığı.....	17
Şekil 2.11	a. Direk ve b. indirek bant aralıklı yarıiletkenler.....	18
Şekil 2.12	fcc kristal yapının Brillouin hücresi ve temel simetri yönelimleri.....	20
Şekil 2.13	fcc yapıda (001) yüzeyinin a. (1x1) için b. (1x2) için yüzey Brillouin bölgeleri.....	21
Şekil 2.14	Katkılı yarıiletkenler.....	23
Şekil 2.15	LEED çalışma mekanizması.....	25
Şekil 2.16	Si (111) 7x7 yüzeyinin LEED ile alınmış bir görüntüsü.....	25
Şekil 2.17	STM'in çalışması.....	26
Şekil 2.18	Grafit yüzeyinin STM ile alınmış bir görüntüsü.....	26
Şekil 2.19	AFM'nin çalışması.....	27
Şekil 2.20	AFM örnek görüntüleri a. Si (111) 7x7 yüzeyi b. Si – Ge bileşiği.....	28
Şekil 2.21	SEM'in çalışma şeması.....	28
Şekil 2.22	SEM görüntüleri a. Entegre b. Çelik yüzeyindeki granüler çatlak (x2600).....	29
Şekil 2.23	STS görüntüsü.....	30
Şekil 2.24	Kırık (Dangling) bağlar.....	31
Şekil 2.25	a. yüzey relax olmadan önce b. yüzey relax olduktan sonra.....	33
Şekil 2.26	a. yeniden yapılanmamış yüzey b. yeniden yapılanmış yüzey.....	34

Şekil 2.27	Korunumlu ve korunumsuz yeniden yapılanma.....	34
Şekil 2.28	a. Simetrik dimer	
	b. yüzey dimer'larının üstten görünüşü.....	35
Şekil 2.29	Supercell geometrisinin tabakaları.....	51
Şekil 2.30	H atomları bağlanmış kristal.....	54
Şekil 2.31	a. asimetrik dimer ve tilt açısı	
	b. "c" tipi asimetrik dimer modeli.....	55
Şekil 4.1	Bulk Si'nin elektronik bant yapısı.....	63
Şekil 4.2	a. Si (1x1) relax olmadan önce	
	b. relax olduktan sonra (1x2).....	64
Şekil 4.3	Simetrik dimer formu.....	65
Şekil 4.4	Asimetrik dimer formu.....	66
Şekil 4.5	Si (001) (1x2) yüzey enerji bandı.....	67
Şekil 4.6	Hemisülfit yapının üstten görünüşü.....	69
Şekil 4.7	Hemisülfit yapının yandan (side) görünüşü.....	69
Şekil 4.8	Hemisülfit yapının yüzey enerji bandı.....	71
Şekil 4.9	Monosülfit yapının üstten görünüşü.....	72
Şekil 4.10	Monosülfit yapının yandan görünüşü.....	73
Şekil 4.11	Monosülfit yapının yüzey enerji bandı.....	74
Şekil 4.12	Disülfit yapının üstten görünüşü.....	75
Şekil 4.13	Disülfit yapının yandan görünüşü.....	75
Şekil 4.14	Disülfit yapının yüzey enerji bandı.....	77
Şekil 4.15	Alt atom konumunda 0.5 ML Ge kaplama.....	79
Şekil 4.16	Üst atom konumunda 0.5 ML Ge kaplama.....	80
Şekil 4.17	Üst atom konumundaki 0.5ML Ge kaplama için yüzey enerji bandı.....	81
Şekil 4.18	Difuz etmemiş, Ge – sonlu yapının atomik geometrisi.....	82
Şekil 4.19	Difuz etmiş Si – sonlu yapının atomik geometrisi.....	83
Şekil 4.20	Cis-diffused / Ge-up.....	85
Şekil 4.21	Cis-diffused / Si-up.....	86
Şekil 4.22	Trans - diffused / Ge – up.....	87
Şekil 4.23	Trans - diffused / Si – up.....	88
Şekil 4.24	Difuz etmemiş Ge – sonlu modelin yüzey enerji bandı.....	91

Şekil 4.25 Alt atom + H	92
Şekil 4.26 Üst atom + H.....	93
Şekil 4.27 Üst atom + H modelinin yüzey enerji bandı.....	94
Şekil 4.28 1 ML Ge –sonlu + H.....	95
Şekil 4.29 1 ML Si –sonlu + H.....	96
Şekil 4.30 Si – sonlu + H modelinin yüzey enerji bandı.....	97

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1 İki boyutta beş örgü türü	5
Çizelge 2.2 Üç boyutta 14 örgü türü.....	5
Çizelge 2.3 Çinko-Sülfid yapıda kristallenen bazı yarıiletken malzemeler.....	13
Çizelge 3.1 PWSCF programının kod yapısı.....	61
Çizelge 3.2 Programın girdi dosyasında kullanılan temel parametreler.....	62
Çizelge 4.1 Temiz yüzeyin asimetric dimer bileşeni uzunlukları	67
Çizelge 4.2 Hemisülfid bağ uzunlukları.....	70
Çizelge 4.3 Monosülfid bağ uzunlukları.....	73
Çizelge 4.4 Disülfid yapının bağ uzunlukları.....	76
Çizelge 4.5 Temiz yüzey, alt atom ve üst atom konumlarının karşılaştırılması.....	80
Çizelge 4.6 Temiz yüzey, Ge-sonlu ve Si-sonlu yüzeylerin karşılaştırılması.....	84
Çizelge 4.7 Cis-diffused modellerin temiz yüzeyle karşılaştırılması.....	86
Çizelge 4.8 Trans-diffused modellerin temiz yüzeyle karşılaştırılması.....	88
Çizelge 4.9 Cis–diffused ve trans–diffused yapıların tilt açılarının karşılaştırılması.....	89
Çizelge 4.10 1 ML modellerin kararlı Ge - sonlu modele göre görelı enerji kıyaslaması.....	90
Çizelge 4.11 1 ML Ge kaplamanın daha önceki çalışmalarla karşılaştırılması.....	90
Çizelge 4.12 H eklenmiş 0.5 ML durumların karşılaştırılması.....	94
Çizelge 4.13 H eklenmiş 1 ML durumların karşılaştırılması.....	96

1. GİRİŞ

1913'te x-ışını kırınım tekniklerinin geliştirilmesine bağlı olarak ortaya çıkan katıhal fiziği, 90 yılı aşkın zamandır sürekli gelişen bir araştırma alanıdır. Metallerin ve iyonik katıların farklı özellikleri üzerine yapılan çalışmaların artışı, bu gelişmelere bağlı olarak gerçekleşmiş ve halen günümüzde ilerleyişini sürdürmektedir.

Yarıiletken yapıların günümüz teknolojisindeki yeri tartışılmaz boyuttadır. Gerek günlük hayatımızı kolaylaştıran cihazlarda, gerekse ileri teknoloji askeri ve uzay ürünlerinde vazgeçilmez elemanlardır. İlginç optik ve elektronik özelliklerinden dolayı yarıiletken bulk (kitlese) malzemeler, 1940'lardan beri hem teorik hem de deneysel olarak yoğun bir şekilde çalışılmıştır.

Elektronik cihazlarda boyutların giderek küçülmesiyle birlikte, yarıiletken yüzeyler ve ara yüzeyler, teknolojik önemi büyük olan çok sayıda cihazın yapımında kilit rol oynamaya başlamıştır. Bu gelişmeler, 1960'larda yüzey fiziğinin doğmasına ve başlı başına yeni bir araştırma alanı haline gelmesine yol açmıştır.

Yüzey fiziği kavramının gelişmesiyle, geçtiğimiz son 30 yılda yarıiletken yüzey ve ara yüzeylerin ve buna bağlı olarak da kuantum çukurları, kuantum telleri ve kuantum noktaları gibi düşük boyutlu yapıların araştırılmasında çok büyük bir artış meydana gelmiştir.

Yarıiletken yüzeylerdeki malzeme çeşitliliği ve bir alt taş üzerine büyütülen farklı element ya da moleküllerin, malzeme yüzeyinin özelliklerini değiştirebiliyor olması, bu alandaki çalışmaların önemini artırmıştır.

Günümüzde, çeşitliliğinin geniş ve teknolojik uygulama alanının hali hazırda artıyor olması, yarıiletken yüzeylerin yapısal ve elektronik özelliklerinin mikroskobik düzeyde anlaşılmasını son derece önemli hale getirir.

Bu tip sistemlerin atomik ve elektronik yapılarını farklı açılardan incelemek için çok sayıda deneysel teknik kullanılmaktadır.

Atomik yapıyı ve yüzeylerin yeniden yapılanmalarını incelemek için, düşük enerjili elektron kırınımı (LEED), yansımali yüksek enerjili elektron kırınımı (RHEED), taramali tünelleme mikroskobu (STM), atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ve taramali elektron mikroskobu (SEM) gibi yöntemler kullanılır.

Elektronik yapı, fotoelektron spektroskopisi (PS), ultra-viole fotoelektron spektroskopisi (UPS), x-ışını fotoelektron spektroskopisi (XPS) ve taramali tünelleme spektroskopisi (STS) gibi deneysel yöntemlerle incelenir. Aynı zamanda, açılı çözümlü ultra-viole fotoelektron spektroskopisi (ARUPS) ile enerji bant dağılımı elde edilebildiği gibi, Auger elektron spektroskopisi (AES) ile de yapı hakkında kimyasal bilgilere ulaşılabilir.

Deneysel çalışmalar sonucunda elde edilen verilerin analiz edilmesi için teorik çalışmalara gereksinim vardır. Yarıiletken yüzeylerin atomik ve elektronik yapılarının doğru belirlenmesi ve yüzeye büyütülen atomların yerlerinin doğru tespit edilmesi, ancak deney ile teorinin uyuşması ile mümkündür. Bununla birlikte, yukarıda bahsedilen deneysel ortamı yaratmanın ve bu cihazlarla araştırma yapmanın maliyeti oldukça yüksektir. Bu bakış açısıyla, yarıiletken yüzey ve ara yüzeylerin teorik olarak modellenmesi, yüzey fiziğinde çok önemli bir rol oynar. Teorik modelleme maliyeti azaltacağı gibi, aynı zamanda deneysel çalışmalar için bir öngörü olanağı yaratarak zamandan da büyük ölçüde tasarruf yapılmasını sağlar.

Yarıiletken çalışmalarında kullanılan teorik yaklaşımların hemen hemen hepsi enerji bant teorisi üzerine kurulmuştur. Bu teori ilk defa Bloch tarafından ortaya konulmuştur. Bloch, kusursuz bir kristalde elektronik bant yapı hesabı için kuantum mekaniğini kullanmıştır. Bu teori, tek elektron yaklaşımı üzerine kurulmuştur. Periyodik bir potansiyel, bir elektronun katıdaki diğer tüm elektronlar ve çekirdekle etkileşimini içerir. Bununla birlikte, bu yaklaşım elektron- elektron etkileşmelerini yok saydığından ideal değildir.

Bunun için en güvenilir yaklaşım, öz-uyum alan teorisini kullanan Kohn-Sham ve Hohenberg'in Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi üzerine temellendirilir. Bu yaklaşım aynı zamanda ab-initio hesaplaması olarak da bilinir.

Silisyum, teknolojik açıdan oldukça önemli bir malzemedir. Bununla birlikte, bu malzemenin (001) yüzeyi, yüzey biliminde geniş bir yer tutar. Jenkins ve Srivastava'nın (1996) çalışmalarında, Si (001)-(2x1) yüzeyinin atomik ve elektronik özellikleri, ab-initio yöntemi kullanılarak araştırılmıştır. Si (001) yüzeyine S adsorplanmasının yapıda meydana getireceği değişiklikler, Çakmak ve Srivastava (1998) tarafından hemisülfid, monosülfid ve disülfid yapılar için ab-initio DFT kullanılarak ayrıntılı olarak modellenmiştir. Jenkins ve Srivastava (1996) ise, germanyum atomunun aynı yüzeydeki etkilerini benzer yöntem yardımıyla, 0.5 ML ve 1 ML için incelemişlerdir.

Bu tez çalışmasında, kristal yapılar ve yarıiletken yapılar hakkında temel bilgiler verildikten sonra yarıiletken yüzeylerin incelenmesinde kullanılan deneysel metotlardan kısaca bahsedilecektir. Daha sonra yarıiletken yüzeylerin teorik olarak modellenmesinin dayandığı temel matematiksel yaklaşımlar anlatılacak ve incelenen yapının bilgisayar ortamında oluşturulması için gerekli olan unsurlardan söz edilecektir. Temiz Si (001) (1x2) yüzeyinin atomik ve elektronik özellikleri ve bu özelliklerin yüzey üzerine S ve Ge atomlarının adsorplanması sonucu nasıl değiştiği ab initio Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kullanılarak araştırılacaktır. Son olarak Çakmak *et al.*'ın (2007) çalışmasından yola çıkılarak S/Si(001)-(1x2) ve Ge/Si(001)-(1x2) yapılarda en kararlı geometriler için H ile pasivize edilmiş durumlar ele alınacaktır.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1 Kristal Geometrisi

Katıhal fiziğinin başlangıcı, x-ışınlarının kırınımı olayının keşfedilmesi ve kristal özelliklerini başarıyla öngören bir dizi basit model hesapların yayınlanmasıyla olmuştur.

Bir kristal, birbirine özdeş yapıtaşlarının düzenli olarak bir araya gelmesiyle oluşur. Yapıtaşları tek atomlar veya farklı tipteki atomlardan oluşan atom grupları olabilir. Kristali iki ayrı parçadan meydana gelmiş gibi düşünebiliriz, örgü ve baz. Tüm kristallerin yapısı bir örgü ile tanımlanabilir. Örgünün her düğüm noktasında bulunan atomlar gurubuna baz denir. Bu bazın uzayda tekrarlanması ile kristal oluşur. Sembolik olarak

$$\text{Örgü} + \text{Baz} = \text{Kristal Yapı}$$

şeklinde ifade edilebilir.

Örgü noktaları matematiksel olarak $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ örgü vektörleri ile gösterilir. Bu vektörler ile tanımlanan bir kristali temsil edebilecek en küçük hacimli birim yapıya ilkel birim hücre denir(Kittel, 1996).

2.1.1 Örgü yapıları

Örgü öteleme vektörlerinin boyları ve aralarındaki açının değerlerinde kısıtlama olmadığı takdirde olabilecek örgü türü sayısı sınırsızdır. Belli kısıtlamalar sonucu elde edilen örgü türlerine Bravais örgüleri adı verilir. İki boyutta beş adet Bravais örgüsü vardır. Bunlar Çizelge 2.1'de verilmiştir. (Kittel, 1996)

Çizelge 2.1 İki boyutta beş örgü türü (Kittel 1996)

	Örgü Sayısı	Birim hücre eksen ve açılarının özellikleri
Kare Örgü	1	$a_1=a_2; \alpha=90^\circ$
Altıgen Örgü	1	$a_1=a_2; \alpha=120^\circ$
Dikdörtgen Örgü	1	$a_1 \neq a_2; \alpha=90^\circ$
Merkezli Dikdörtgen Örgü	2	$a_1 \neq a_2; \alpha=90^\circ$

Üç boyutta, yedi kristal sisteminde 14 çeşit Bravais örgü tanımlanmaktadır. Burada a_1 , a_2 , a_3 ve α , β , γ ' ların hepsine birden birim hücre parametreleri denir. Çizelge 2.2'de yedi kristal sisteminde tanımlanan bu örgülerin birim hücre eksenlerinin ve açılarının özellikleri verilmiştir.

Çizelge 2.2 Üç boyutta 14 örgü türü (Kittel 1996)

Sistem	Örgü Sayısı	Birim hücre eksen ve açılarının özellikleri
Triklinik	1	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ; \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoklinik	2	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ortorombik	4	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	$a_1 = a_2 \neq a_3 ; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Kübik	3	$a_1 = a_2 = a_3 ; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	1	$a_1 = a_2 = a_3 ; \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
Altıgen	1	$a_1 = a_2 \neq a_3 ; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

2.1.2 Miller indisleri

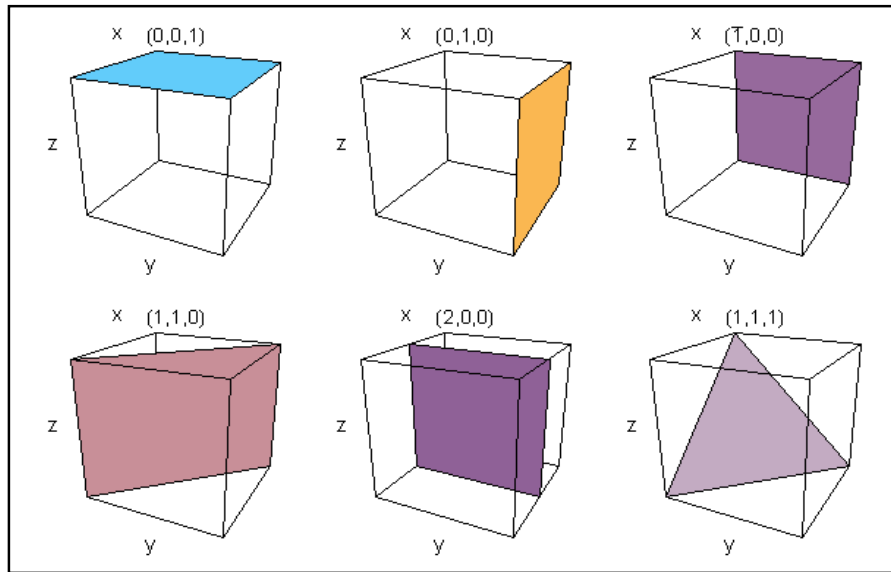
Kristal yapılar her doğrultuda ve düzlemde farklı özellik gösterirler. Bu nedenle, kristal yapı analizleri için her bir düzlem indisler ile tanımlanmaktadır. Bu indilere Miller indisleri denir ve h, k, l ile gösterilir (Kittel, 1996). Miller indisleri kullanılarak ters örgü uzayındaki bir K vektörü;

$$\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

şeklinde yazılabilir. Miller indislemesi yapabilmek için aşağıdaki yöntem takip edilir.

- Belirtmek istenen düzlemlerin kristal eksenini kestiği noktalar örgü sabitleri \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 cinsinden bulunur.
- Bu sayıların tersleri alınır ve aynı orana sahip en küçük üç tam sayı elde edecek şekilde indirgenir. (hkl) ile gösterilen bu sayı kümesi o düzlemin indisi olur.

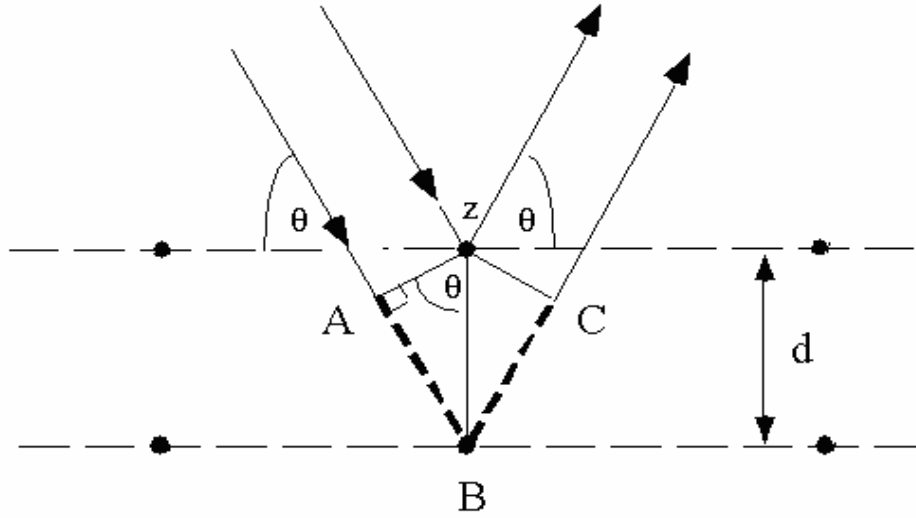
Şekil 2.1’de kübik bir kristaldeki bazı önemli düzlemlerin indisleri gösterilmiştir. Kübik kristalde matematik çözümün en kolay olduğu durum Şekil 2.1a,d,f’de verilen [001], [110] ve [111] ilerleme yönleridir.



Şekil 2.1 Kübik bir kristalde bazı önemli düzlemlerin indisleri

2.1.3 Bragg kırınımı

Kristalin yapısındaki atomları kırınım yoluyla gözleyebiliriz. Kırınım, ilerleyen dalganın farklı dalga boylu bir engelden geçerken, geliş doğrultusundan sapması şeklinde tanımlanabilir. Şekil 2.2' de Bragg kırınımı şematik olarak verilmiştir. Kırınım olayının açıklanması W. L. Bragg tarafından yapılmıştır.



Şekil 2.2 Bragg kırınımı

Paralel atom düzlemleri arasındaki uzaklık d olmak üzere, komşu iki düzlemden yansıyan ışınlar arasındaki yol farkı $2d\sin\theta$ dır. Yapıcı girişim olayı için ardışık düzlemlerden yansıyan ışınlar arasındaki yol farkı, dalga boyunun tam katları olması gerekir.

$$2d \sin\theta = n\lambda \quad (2.1)$$

Denklem 2.1 Bragg yasasını ifade etmektedir. Yasa örgünün periyodik oluşunun bir sonucudur. Kırınımın gerçekleşmesi için $\lambda < 2d$ olmalıdır. Buradan anlaşılacağı gibi kırınım dalga boyuna ve kristal yapısına bağlıdır (Kittel 1996).

2.1.4 Ters örgü

Her kristal yapısına bağlı olarak iki örgü vardır: kristal örgüsü ve ters örgü. Ters örgü, örgü periyodikliği ile birlikte verilen Fourier serisi ve Fourier dönüşümlerinin, izin verilen dalga vektörü değerlerini temsil eder (Kittel, 1996).

$$f(\vec{r}) = \int d^3k f(\vec{k}) \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.2)$$

Burada $f(k)$, $f(r)$ ' nin Fourier transformudur. Denklem (2.2) herhangi bir \vec{T} örgü ötelemesi altında yazılırsa;

$$f(\vec{r} + \vec{T}) = \int d^3k f(\vec{k}) \frac{\exp(i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{T}))}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.3)$$

şeklinde olur. Denklem (2.2) ve (2.3)'ün eşit olması gerekmektedir. Bunun için $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{T})=1$ sınırlandırması getirilir. Bu sınırlandırma ile sadece belli bir \vec{k} vektörüne izin verilmektedir. Sınırlandırmayı sağlayan vektörler ise $\vec{k} \cdot \vec{T} = 2\pi n$ olacaktır. Sonuç olarak \vec{k} vektörü ters örgü vektörüdür ve \vec{G} ile sembolize edilir (Kittel, 1996).

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

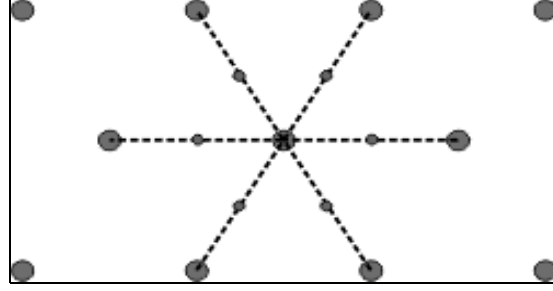
Burada h, k, l tam sayılardır ve $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ ters örgü vektörleridir. $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vektörleri cinsinden ters örgü vektörleri

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)} \quad (2.4)$$

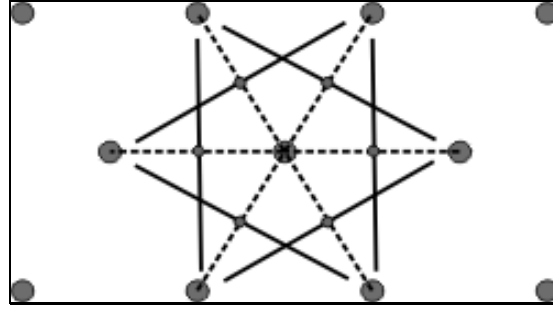
şeklinde verilir. Denklem (2.4)' deki ifadelerin paydaları birim hücrenin hacmidir ve normalizasyon sabiti olarak etki eder. Ters örgü vektörlerinin boyutu [1/uzunluk] tur.

2.1.5 Wigner-Seitz hücresi (W-S)

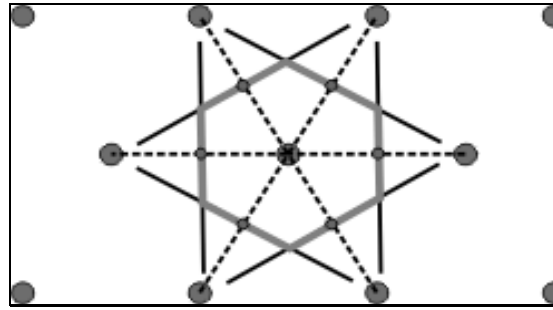
W-S hücresi örgünün tam simetrikliğini gösteren ilkel bir hücredir. Ters örgü uzayında W-S hücresi, Brillouin bölgesine karşılık gelmektedir (Kittel, 1996). Şekil 2.3'te bir W-S hücresinin yapısı verilmiştir.



(a)



(b)



(c)

Şekil 2.3 W-S hücresinin yapısı

- Bir örgü noktası seçilir ve en yakın komşu noktalarına yapı doğrusu çizilir.
- Yapı doğrusuna dik ortadan bölecek şekilde doğrular çizilir.
- En küçük kapalı alan W-S hücresini tanımlar.

2.1.6 Brillouin bölgeleri

Bir Brillouin bölgesi ters örgüde W-S ilkel hücresi olarak tanımlanır. Brillouin bölgesi sınırlarında Bragg saçılma şartı sağlanmalıdır (Kittel, 1996).

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} \quad (2.5)$$

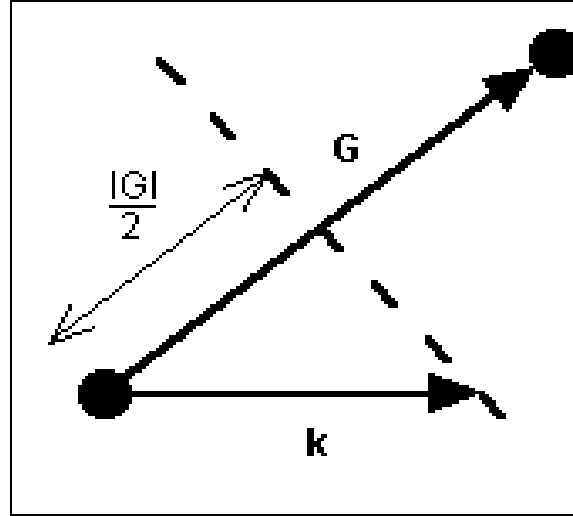
Burada k' saçılan dalganın dalga vektörü, G ters örgü vektörüdür. Her iki tarafın karesi alınırsa

$$k'^2 = k^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 \quad (2.6)$$

olur. Dalganın esnek saçıldığını kabul edersek $k'^2 = k^2$ olacaktır ve Denklem (2.6) $2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2$ haline gelir. Sonuç olarak, eğer G bir ters örgü vektörü ise ve $-G$ de öyle ise denklem şu şekilde yazılabilir.

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2 \quad (2.7)$$

Denklem (2.7)'nin geometrik yorumu, 'eğer k , örgü vektörü G 'yi dik olarak ikiye bölen düzlemde bulunuyorsa saçılma şartları sağlanmaktadır' şeklinde olacaktır (J.Y. Wah 2003). Şekil 2.4'de bu geometrik yorumun şematik gösterimi verilmiştir.



Şekil 2.4 Brillouin bölgesi sınırında Bragg kırınımı

2.1.7 Yüzey merkezli kübik örgü (fcc)

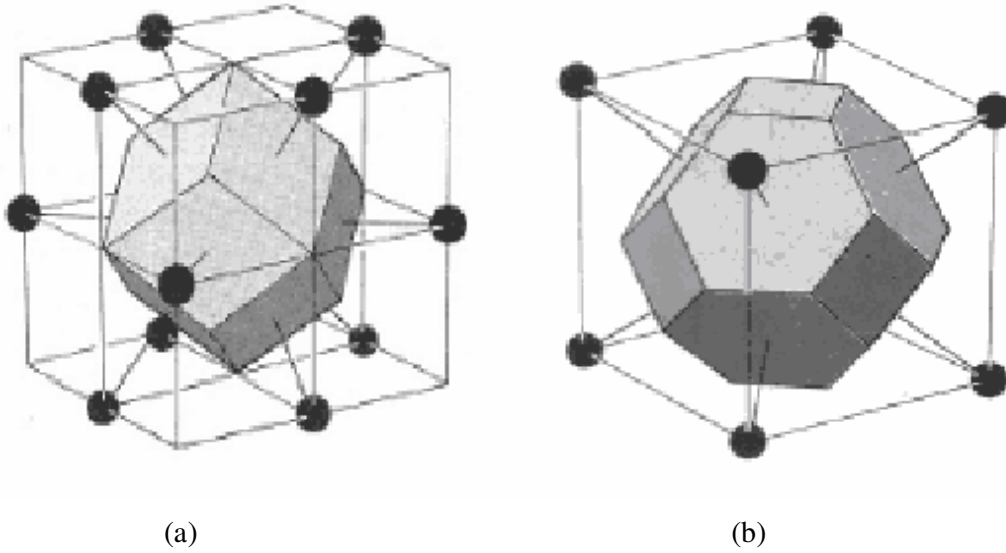
Yüzey merkezli kübik örgünün ilkel öteleme vektörleri;

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z}); \quad \vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z}); \quad \vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y}) \quad (2.8)$$

şeklindedir. Buradan ters örgünün ilkel öteleme vektörleri yazılırsa;

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}); \quad \vec{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}); \quad \vec{b}_3 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \quad (2.9)$$

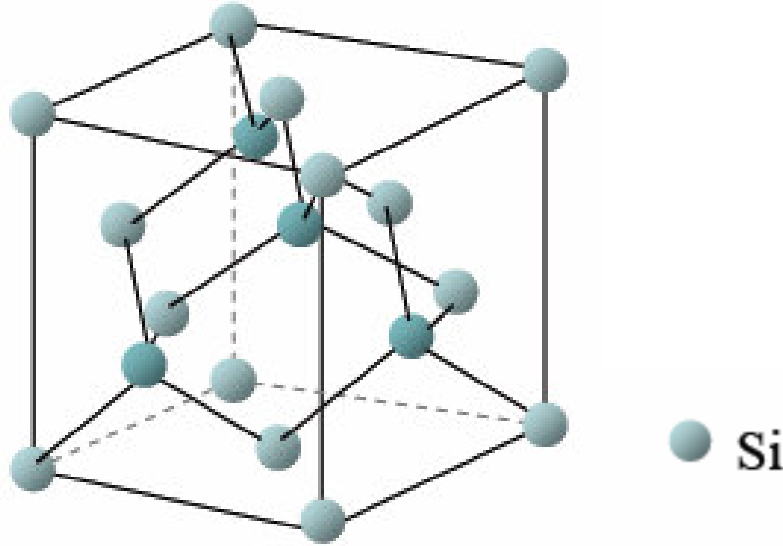
elde edilir. fcc örgünün ters örgüdeki ilkel öteleme vektörleri gerçek uzaydaki hacim merkezli kübik (bcc) örgünün ilkel öteleme vektörleri ile aynıdır. Yani fcc örgünün tersi bcc örgüdür. Ters örgünün ilkel hücrenin hacmi $4(2\pi/a)^3$ olur (Kittel, 1996).



Şekil 2.5 fcc örgünün a. gerçek uzaydaki, b. ters uzaydaki örgüsü

2.1.8 Elmas/Çinko-Sülfür kristal yapılar (Diamond/Zinc-Blende)

Elmas yapı, birinin başlangıcı (0,0,0) ve diğerini (1/4,1/4,1/4) olan iki fcc yapının içi içe geçirilmesi ile oluşturulur. Elmas yapıda ilkel küp 8 atom içerir. Her atomun en yakın komşu sayısı 4, ikinci en yakın komşu sayısı 12 dir. Karbon, Silisyum, Germanyum ve Kalay elmas yapıda kristalleşirler. Örgü sabitleri sırasıyla $a=3.65, 5.43, 5.65$ ve 6.46 \AA dur. Burada a ilkel küpün kenar uzunluğudur (Kittel, 1996).

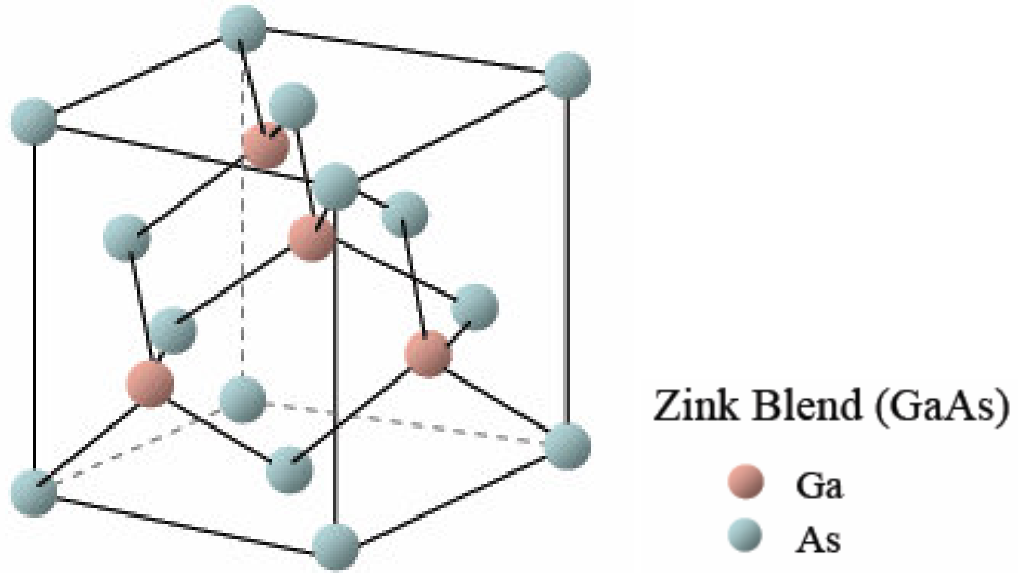


Şekil 2.6 Elmas yapı

Bileşik atomlar, elmas yapıya benzer bir şekilde kristallenir. Yapı iki farklı baz atomu içermektedir. Her atom en yakın dört atom ile kovalent bağ yapar. Ancak bu atomlar kendisinden farklıdır. Bu tür yapılar Çinko-Sülfür yapı olarak adlandırılır. Bir çok yarıiletken bu yapıda kristallenmektedir. Şekil 2.7'de bu yapının şematik görünümü, Çizelge 2.3'te bu yapıda kristallenen bazı yarıiletken malzemeler ve örgü sabitleri verilmiştir.

Çizelge 2.3 Çinko-Sülfit yapıda kristallenen bazı yarıiletken malzemeler

Kristal	a (Å)	Kristal	a (Å)	Kristal	a (Å)
CuF	4,26	ZnSe	5,65	CuCl	5,41
SiC	4,35	GaAs	5,65	InSb	6,46
ZnS	5,41	AlAs	5,66	GaP	5,45



Şekil 2.7 Çinko-Sülfit kristal yapı

2.2 Yarıiletkenlerin Genel Karakteri

Yarıiletkenler, elektrik iletkenliği bakımından, iletken ile yalıtkan arasında kalan maddelerdir. Bunun nedeni dört tane değerlik elektronu taşımalarıdır.

Normal durumda yalıtkan olan bu maddeler ısı, ışık, manyetik etki veya elektriksel gerilim gibi dış etkiler uygulandığında bir miktar değerlik elektronlarını serbest hale geçirerek iletken duruma gelirler. Uygulanan bu dış etki veya etkiler ortadan kaldırıldığında ise yalıtkan duruma geri dönerler. Bu özellik, elektronik alanında yoğun olarak kullanılmalarını sağlamıştır.

Bu tür malzemelerin elektriksel iletkenlikleri sıcaklığa oldukça bağlıdır. Yarıiletken malzemelerin oda sıcaklığındaki özdirençleri $10^{-4} - 10^{-11} \Omega\text{m}$ aralığındadır. Buna karşılık iletken malzemeler $10^{-8} \Omega\text{m}$ özdirenç gösterirken, yalıtkanlar $10^{14} - 10^{20} \Omega\text{m}$ civarında özdirence sahiptirler.

2.2.1 Yarıiletkenlerin band yapısı

Bir kristaldeki elektronlar, enerji bölgeleriyle ayrılmış enerji bantları içinde yer alırlar.

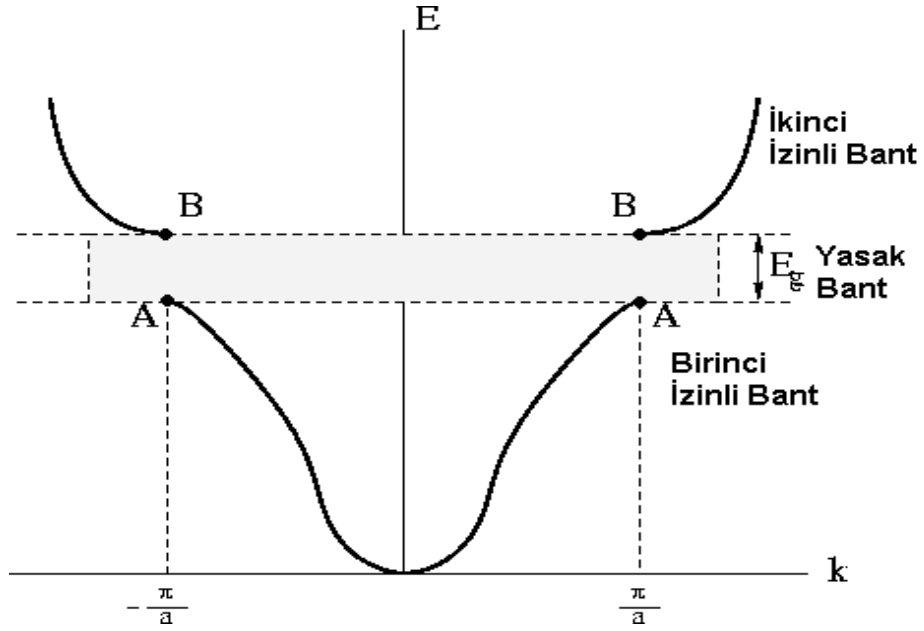
Bir kristalin bant yapısı, bant elektronları ile periyodik iyon potansiyelleri arasındaki zayıf etkileşme ile açıklanmaktadır. Kristalde ilerleyen bir dalga Bragg yansımaya uğrayacaktır. Brillouin bölgesi sınırlarında oluşan bu yansıma, kristalde enerji aralıkları oluşmasının temel nedenidir (Kittel, 1990).

Tek boyutta Bragg koşulu yazılırsa

$$|\vec{k}| = \pm \frac{1}{2} |\vec{G}| = \pm n\pi / a \quad (2.10)$$

Burada $\vec{G}=2\pi n/a$ ters örgü vektörü ve n bir tam sayıdır.

İlk yansımalar ve ilk enerji aralığı 1. Brillouin Bölgesi sınırında oluşur.



Şekil 2.8 $k=\pm\pi/a$ 'daki Bragg yansımalarının sonucu olarak E_g enerji aralığı oluşur

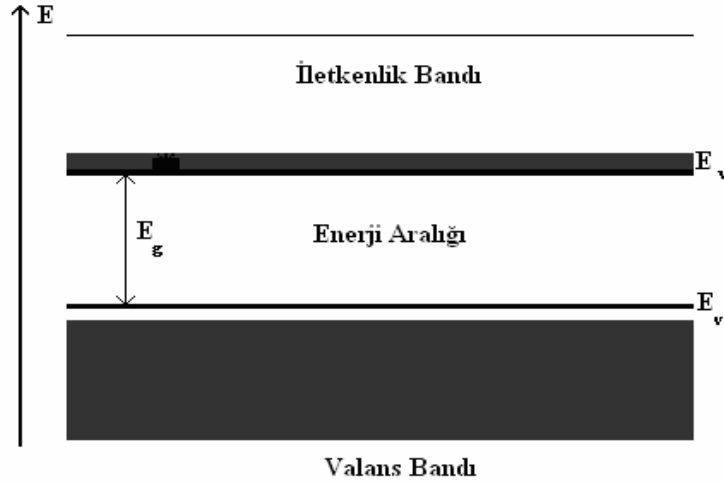
Sınırdaki ($k=\pm\pi/a$) dalga fonksiyonları ilerleyen dalga değil, durağan dalga formunda olacaktır. Yani dalga ne sağa nede sola ilerler. Durağan iki dalgayı aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\psi(+)=e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a} = 2\cos\frac{\pi x}{a} \quad (2.11)$$

$$\psi(-)=e^{i\pi x/a} - e^{-i\pi x/a} = 2i\sin\frac{\pi x}{a} \quad (2.12)$$

Durağan $\psi(+)$ ve $\psi(-)$ dalgaları elektronların farklı bölgelerde yığılmasına yol açar. Dolayısıyla iki dalga, farklı potansiyel enerjiye sahiptir. Potansiyeldeki bu fark, enerji aralığını oluşturur. Şekil 2.8'de görüldüğü gibi, bu enerji aralığına yasak bant aralığı denilir. Enerji aralığının altındaki A noktasında dalga fonksiyonu $\psi(+)$, üstündeki B noktasında $\psi(-)$ olur.

Yarıiletken bir kristal için enerji bant yapısı kabaca Şekil 2.9’da verilmiştir. Burada yasak enerji aralığının altına valans bandı, üstüne iletkenlik bandı denilmektedir. İletkenlik bandının en düşük noktası iletkenlik bant kıyısı, valans bandının en yüksek noktası valans bant kıyısı olarak adlandırılır (Kittel 1990).



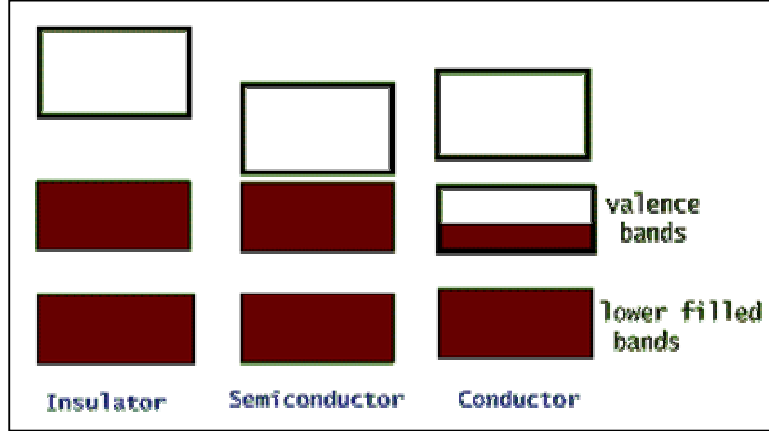
Şekil 2.9 Yarıiletken bir kristalin bant yapısı

Valans bandındaki elektronlar çeşitli yollarla uyarılarak iletkenlik bandına geçebilir. Bu şekilde, iletkenlik bandındaki elektronlar ve aynı zamanda bunların valans bandında bıraktıkları boşluklar da iletkenliğe katkıda bulunur.

Yalıtkan maddelerde, tüm elektronlar buldukları kabuğa bağlıdır. İletime katkıda bulunacak serbest elektronlar olmadığı için iletim bandı tamamen boştur.

İletken maddeler, en dış yörüngelerinde kolayca kopup malzeme içinde serbestçe dolaşacak en az bir tane elektron bulundurlar. İletkenlerde, iletim bandı ve değerlik bandı iç içe girmiş durumdadır. Elektronların hareket edebileceği boş enerji durumları bulunmaktadır.

Yarıiletken, iletken ve yalıtkan malzemelere ait enerji bant grafiği şekil 2.10’da görülmektedir.



Şekil 2.10 İletken, yalıtkan ve yarıiletkenlerin enerji bant aralığı

Yarıiletken maddeler, saf halde yalıtkan olmakla beraber, yapılarına başka bir elementten az miktarda safsızlık atomu katılması halinde yük taşıyıcıları oluşturabilen maddelerdir. Yarıiletken malzemelerde, iletim bandı ve değerlik bandı arasındaki yasak bant aralığı çok küçüktür. Bu sayede elektronlar küçük bir uyarı ile iletim bandına geçebilir ve malzemeyi iletken duruma getirebilir.

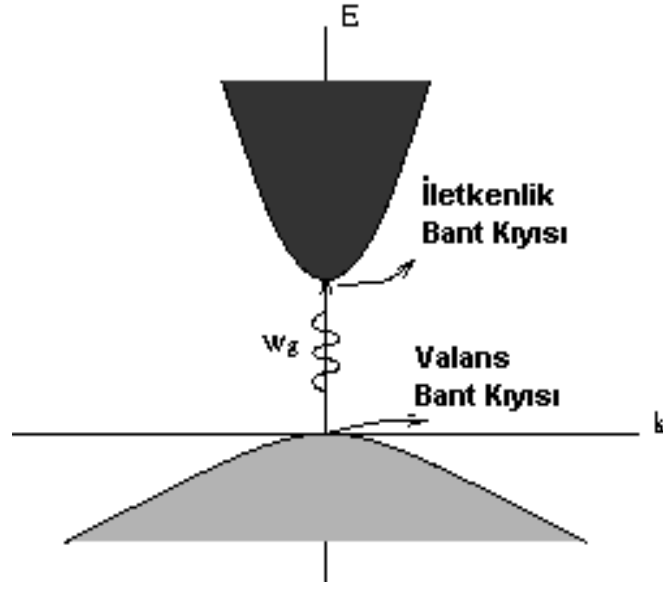
Yarıiletken kristalleri bant yapısına göre iki grupta inceleyebiliriz.

- Direk Bant Aralıklı Yarıiletkenler:

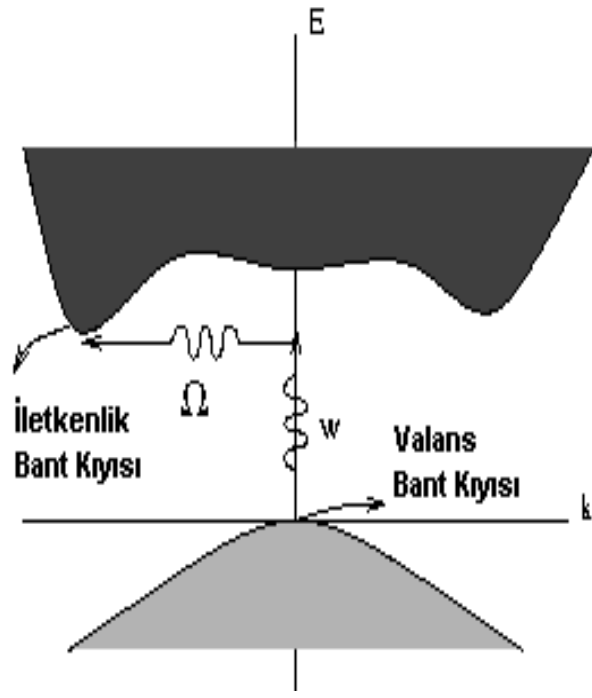
Bu tür yarıiletkenlerde elektronun iletkenlik bandına geçişinde, k değerinde önemli bir değişiklik olmaz. Çünkü valans bandının en üst noktası ile iletkenlik bandının en alt noktası aynı k değerindedir. (Şekil 2.11a). Eğer optik soğurma bölgesinin eşik frekansı w_g ise enerji aralığı $E_g = \hbar w_g$ ile belirlenir. Böyle bir yarıiletkende, kristal üzerine gelen foton soğurulurken bir elektron ve boşluk yaratılır.

- İndirek Bant Aralıklı Yarıiletkenler:

Bu tür yarıiletkenlerde, k uzayında valans ve iletkenlik bantları arasında bir boşluk vardır. Bu nedenle geçiş için eşik enerji $\hbar w = E_g + \hbar \Omega$ olup $\hbar \Omega$ fonon enerjisidir (Şekil 2.11b). Sonuç olarak indirek geçişin bant aralığı gerçek bant aralığından daha büyüktür.



(a)



(b)

Şekil 2.11. a. Direk, b. indirek bant aralıklı yarıiletkenler

2.2.2 Yüzey geometrisi

Bir yarıiletken kristalde, tabakaların periyodik bir şekilde sonsuza kadar devam ettiğini düşünelim. Kristal, Miller indisleri (hkl) ile belirlenmiş bir tabakadan kesilsin. Bu şekilde elde edilen yapıya bulk kristal yapı denir ve böyle bir yüzey ideal yüzey olarak adlandırılır. Yüzey için yapılacak örgü hesaplamaları bulk ile benzerlik göstermektedir. Öncelikle ters örgü vektörünü yazalım;

$$\vec{G}_m = \sum_{j=1,2,3} m_j \vec{b}_j \quad (2.13)$$

Burada m_j pozitif veya negatif tam sayı olabilir. \vec{b}_j ise ters örgünün ilkel dönüşüm vektörleridir. Normal örgü ve ters örgüde birim hücrelerin hacmi

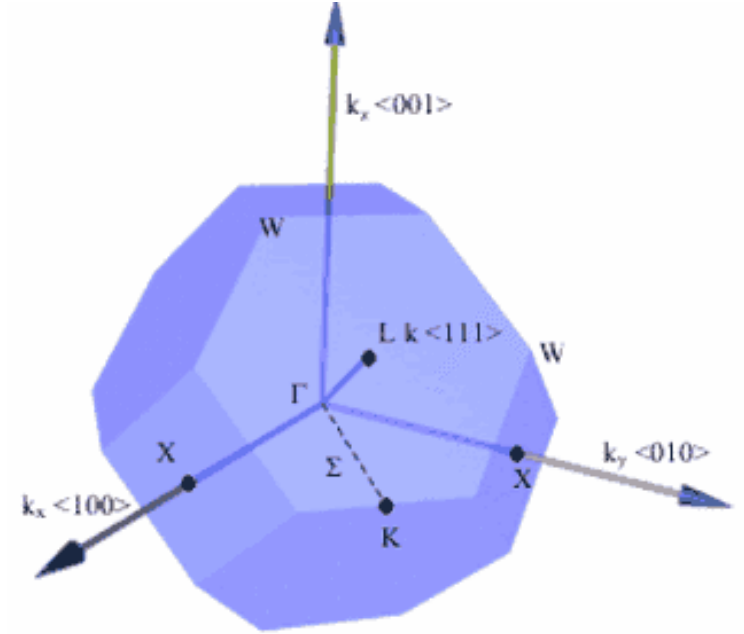
$$\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3), \quad \Omega' = \mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) \quad (2.14)$$

şeklinde yazılır. Denklem 2.8 ve 2.9'dan yararlanarak fcc yapının ters örgü ilkel dönüşüm vektörleri

$$\left| \vec{b}_1 \right| = \frac{2\pi}{a} (-1, 1, 1), \quad \left| \vec{b}_2 \right| = \frac{2\pi}{a} (1, -1, 1), \quad \left| \vec{b}_3 \right| = \frac{2\pi}{a} (1, 1, -1) \quad (2.15)$$

şeklinde yazılır. Buradan fcc örgünün ters örgüsünün cisim merkezli olduğu görülmektedir. Yapının 1. Brillouin bölgesi Şekil 2.12'de verilmiştir. Bölgedeki temel simetri yönelimleri Γ -X, Γ -L ve Γ -K doğrultularındadır.

$$\begin{aligned} \Delta &= \Gamma(0,0,0) - X \left(0, \frac{2\pi}{a}, 0 \right) \\ \Lambda &= \Gamma(0,0,0) - L \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right) \\ \Sigma &= \Gamma(0,0,0) - K \left(\frac{3\pi}{2a}, \frac{3\pi}{2a}, a \right) \end{aligned} \quad (2.16)$$



Şekil 2.12 fcc kristal yapının Brillouin hücresi ve temel simetri yönelimleri

2.2.3 (001) Yüzeyinin brillouin bölgesi

(1x1) için gerçek uzay örgüsü ilkel vektörleri

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-1,1,0), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1,1,0) \quad (2.17)$$

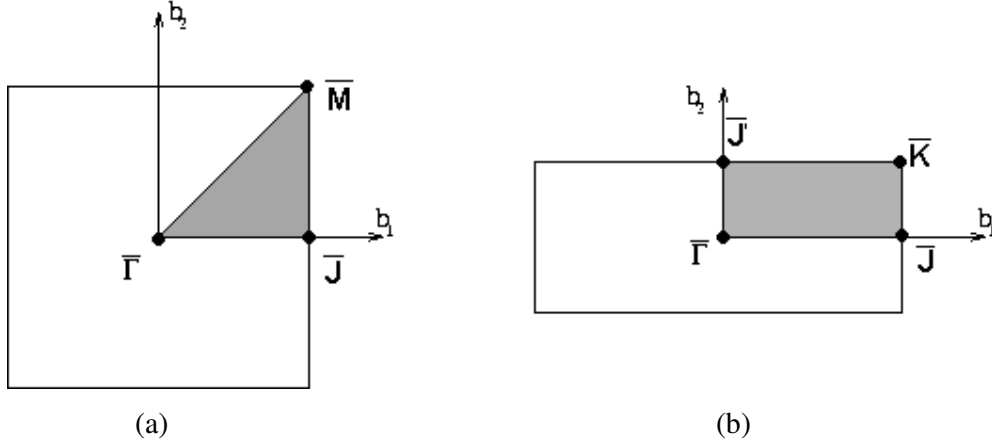
şeklindedir. Burada a örgü sabitidir. Ters örgü ilkel dönüşüm vektörleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1,1,0), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1,1,0) \quad (2.18)$$

Yüzeyin ters örgüsünün ilkel birim hücresi \vec{b}_1 ve \vec{b}_2 'nin belirlediği alandır. (1x1) yapı için (001) yüzeyinin birim hücresi Şekil 2.13 a' da verilmiştir. Burada taranan simetri noktaları

$$\bar{\Gamma} = (0,0), \quad \bar{J} = \left(\frac{1}{2}, 0\right), \quad \bar{M} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad (2.19)$$

şeklinde verilir.



Şekil 2.13 fcc yapıda (001) yüzeyinin a. (1x1) için, b. (1x2) için yüzey Brillouin bölgeleri

(1x2) yapı için aynı işlemler yapılırsa, yüzeyin gerçek uzay örgüsü

$$\bar{a}_1 = a(-1,1,0), \quad \bar{a}_2 = \frac{a}{2}(1,1,0) \quad (2.20)$$

Buradan ters örgünün ilkel dönüşüm vektörleri bulunursa

$$\bar{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1,1,0), \quad \bar{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) \quad (2.21)$$

şeklinde olur. (1x2) için yüzeyin ilkel birim hücresi Şekil 2.13 b' de verilmiştir. Bu yapı için taranan simetri noktaları aşağıdaki gibidir.

$$\bar{\Gamma} = (0,0), \quad \bar{J} = \left(\frac{1}{2}, 0\right), \quad \bar{K} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right), \quad \bar{J}' = \left(0, \frac{1}{4}\right) \quad (2.22)$$

2.2.4 Yarıiletken çeşitleri

Yarıiletkenler yapılarına göre iki grupta toplanır (Sarı, 2005):

- Tek Atomlu Yarıiletkenler:

Tek bir elementten meydana gelmiş yarıiletken malzemelerdir. Periyodik cetvelin IV B grubunda bulunurlar. En bilinenleri ve teknolojik açıdan günümüzde en çok kullanılanları silisyum (Si) ve germanyum (Ge)dir.

- Bileşik Yarıiletkenler:

İki ya da daha fazla elementin bir araya gelerek oluşturduğu yarıiletken malzemelerdir.

III ve V B grubu elementlerinin oluşturdukları yarıiletkenlere III-V bileşik yarıiletkenleri denir. GaAs, AlAs, InAs ve InP bu grubun ikilisine, $Ga_xAl_{(1-x)}As$ ve $In_xAl_{(1-x)}As$ ise üçlüsüne örnektir.

II ve VI B grubu elementlerinin oluşturdukları yarıiletkenlere II-VI bileşik yarıiletkenleri denir. HgTe ve CdTe bu grubun ikilisine, $Cd_xHg_{(1-x)}Te$ ise üçlüsüne örnektir.

Yarıiletkenler saflıklarına göre iki grupta incelenirler (Sarı, 2005):

- Özgün Yarıiletkenler:

Bu tip yarıiletkenlerin içinde herhangi bir safsızlık atomu bulunmaz. Taban durumunda bulunan özgün yarıiletkenin değerlik bandı tam dolu, iletim bantları tam boştur. Bant aralığı küçük olduğu için dışardan gelen bir etki ile değerlik bandındaki elektronlar iletim bandına geçer. Bu elektronlar iletim bandına geçtiklerinde, değerlik bandındaki yerlerini boş bırakırlar. Bu boşluklara deşik (hole) denir. “n” elektron sayısı ve “p” deşik sayısı olmak üzere özgün bir yarıiletkende $n=p$ ’dir.

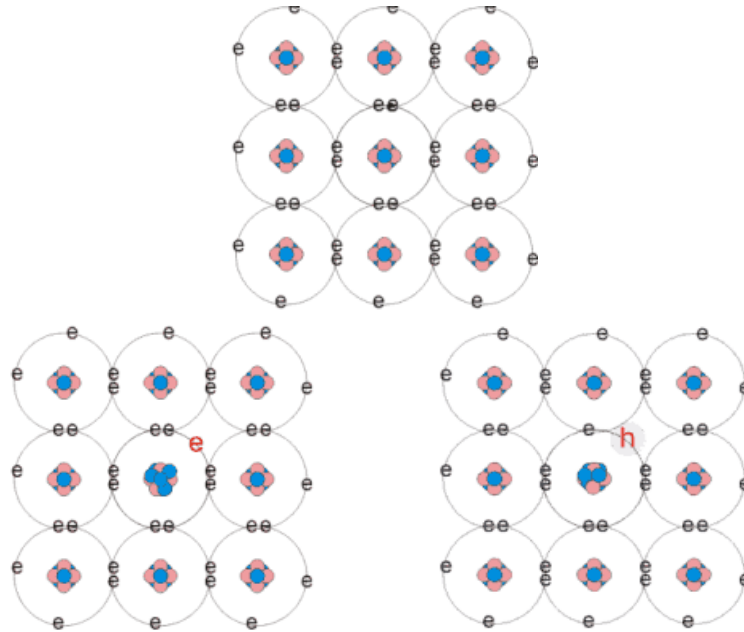
- Katkılı Yarıiletkenler:

Kristal içine safsızlık atomları yerleştirilerek elde edilen yarıiletkenlerdir. Katkılı yarıiletkenler n – tipi ve p – tipi olmak üzere ikiye ayrılır (Sarı, 2005).

I

V. gruptaki bir yarıiletken III.grup bir başka elementle katkılandığında bir elektron boşluğu (deşik) oluşur. Bunun sebebi III. grup elementin sahip olduğu üç değerlik elektronunun IV. grup elementin sahip olduğu dört elektronu çiftleyememesidir. Böyle bir sistemde yük taşıyıcısı olarakdeşikler kullanılır. Deşik üreten bu katkı maddesine “akseptör” denir. Akım taşıyıcılarının çoğunluğudeşiklerden oluştuğu için bu yarıiletkene p – tipi yarıiletken denir.

IV. gruptaki bir yarıiletken V.grup bir başka elementle katkılandığında bir elektron fazlası oluşur. Bunun sebebi V. grup elementin sahip olduğu beş değerlik elektronunun IV. grup elementin sahip olduğu dört elektronu çiftlemesi ve bir elektronunu serbest bırakmasıdır. Böyle bir sistemde yük taşıyıcısı olarak elektronlar kullanılır. Sisteme fazladan bir elektron veren bu katkı maddesine “donör” denir. Akım taşıyıcıları çoğunlukla elektron olduğu için bu yarıiletkene n – tipi yarıiletken denir.



Şekil 2.14 Katkılı yarıiletkenler (Sarı, 2005)

2.3 Yarıiletken Yüzeylerin İncelenmesinde Kullanılan Yöntemler

Yarıiletken yüzeyler teknolojik uygulamaları bakımından oldukça geniş bir alana sahiptir. Dolayısıyla bu yüzeylerin doğru şekilde karakterize edilmesi, yüzey bilimi ve uygulamaları açısından ön şarttır.

Yarıiletken yüzeyler iki şekilde incelenir:

◆ **Deneysel Metotlar**

◆ **Teorik Modelleme**

2.3.1 Deneysel metotlar

Yüzey fiziğinde kullanılan deneysel metotlar, incelenen yüzeyin geometrisini gerçek uzay analizi yaparak doğrudan gösterebilir. Aynı zamanda yüzeyin araştırılan diğer özelliklerini çeşitli parametrelere bağlı olarak grafiksel biçimde verebilir.

Yüzey analizinde kullanılan deneysel teknikler dört ana başlık altında toplanabilir:

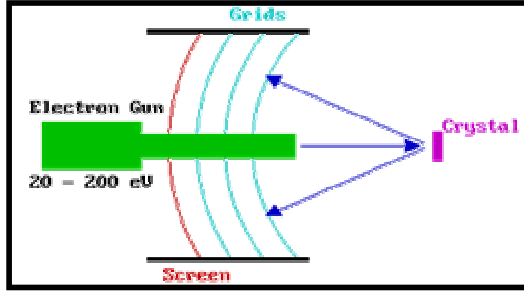
- ◆ Kırınım Metotları
- ◆ Elektron Spektroskopisi Metotları
- ◆ İyonlarla Yüzey Araştırması
- ◆ Mikroskoplar

Bu yöntemlerden en çok kullanılan bazıları şunlardır (Ayduğan, 2005):

- Düşük Enerjili Elektron Kırınımı (LEED)
- Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM)
- Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM)
- Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM)
- Taramalı Tünelleme Spektroskopisi (STS)

2.3.1.1 Düşük enerjili elektron kırınımı (Low energy electron diffraction; LEED)

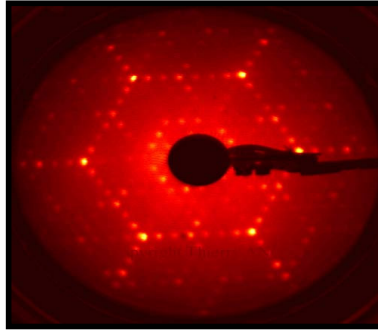
Bu yöntemde, araştırılan yüzey üzerine 20 – 200 eV enerjili elektron demeti gönderilir. De Broglie eşitliğine göre 2.2Å ile 0.5 Å aralığında dalga boyuna sahip olan bu elektron demeti, örnek yüzeyinden saçılır. Saçılan elektron demetinin deseni kaydedilip analiz edilerek yüzeydeki atomların düzeni hakkında bilgi edinilir. Desendeki keskinlik, yüzey atomlarının dizilişiyle orantılıdır.



Şekil 2.15 LEED çalışma mekanizması

Bu teknik ile elde edilen veriler iki şekilde analiz edilir:

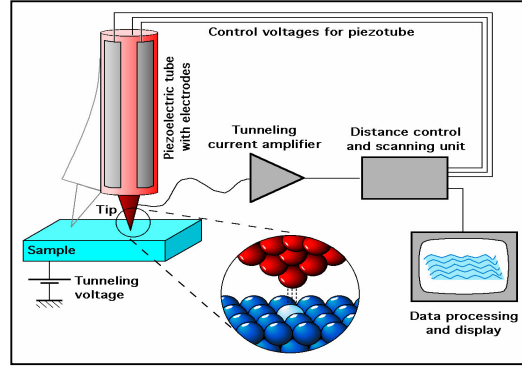
- 1. Nitel :** Adsorbe edilmiş birim hücrenin boyutu, simetrisi ve rotasyonelinden kazanılan bilgi, alttaş birim hücreye göre analiz edilerek atomların konumları bulunur.
- 2. Nicel :** Farklı şekilde kırılmış demet yoğunlukları, gelen elektron demetinin bir fonksiyonu olarak alınır. Burada çizilen I-V grafikleri teorik verilerle karşılaştırılarak atomların pozisyonları saptanır.



Şekil 2.16 Si (111) 7x7 yüzeyinin LEED ile alınmış bir görüntüsü

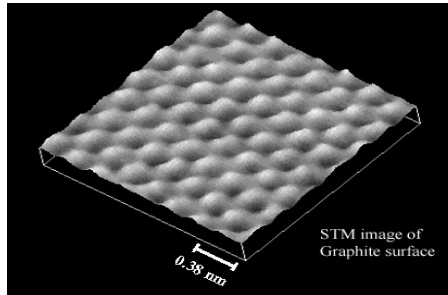
2.3.1.2 Taramalı Tünelleme Mikroskobu (Scanning Tunneling Microscope; STM)

STM, kuantum mekaniksel prensiplere göre çalışan, optiksel olmayan bir mikroskoptur. Atomik boyutta oldukça keskin olan uç (tip), araştırılan yüzey üzerinde hareket eder ve yüzey ile tip arasına bir gerilim uygulanır.



Şekil 2.17 STM'in çalışması

Uygulanan bu gerilime bağlı olarak, tipten yüzeye doğru bir elektron geçişi olur. Oluşan bu zayıf akıma "Tünelleme Akımı" denir. Tünelleme akımı örnek yüzeyi ile tip arasındaki uzaklığa eksponansiyel olarak bağlıdır. Sisteme bağlı bir geri besleme ünitesi, oluşan bu akımı sabit tutmak için tip ile yüzey arasındaki mesafeyi ayarlar. Bu ayarlama, bir piezoelektrik elementin elektrotları üzerine gerilim uygulayarak yapılır. Yüzey ile tip arasındaki yükseklik, piezoelektrik malzemeye uygulanan bu gerilimle doğru orantılıdır. Piezoelektrik malzemeye uygulanan gerilim dikkate alınarak aradaki yükseklik ölçülür ve yüzeyin topografisi elde edilir.

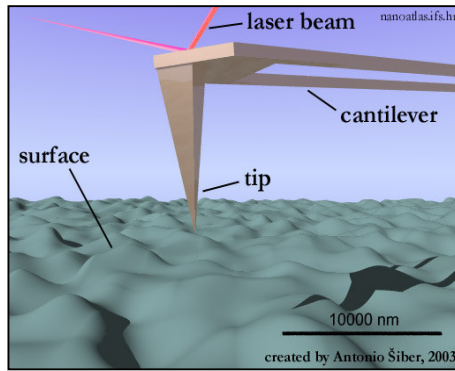


Şekil 2.18 Grafit yüzeyinin STM ile alınmış bir görüntüsü

STM’de bir tünelleme akımı oluştuğu için bu sistemle araştırılacak yüzey iletken ya da yarıiletken olmalıdır. Yalıtkan malzemelerin yüzey karakterizasyonu STM ile yapılamaz.

2.3.1.3 Atomik kuvvet mikroskobu (Atomic force microscope; AFM)

Atomik Kuvvet Mikroskobu, yüksek çözünürlüklü bir Taramalı Probe (Uç) Mikroskobu’dur. Angstrom mertebesinde ölçüm yaparak optiksel mikroskoplardan 1000 kat daha iyi bir görüntü alınmasını sağlar.



Şekil 2.19 AFM’nin çalışması

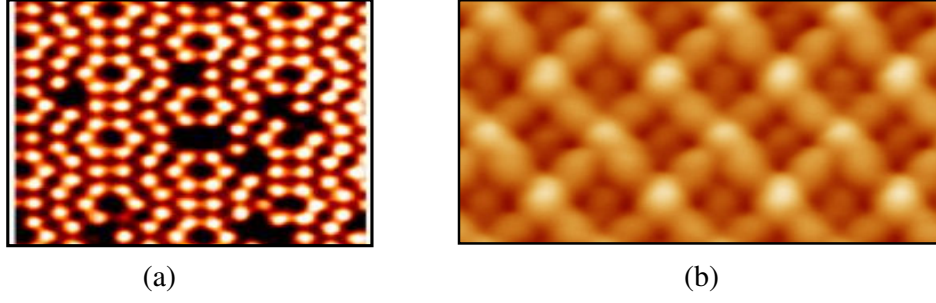
AFM’nin çalışması genel olarak cantilever’daki sapmanın ölçülmesiyle ilgilidir. Cantilever üzerine bir lazer ışını düşürülür ve bu ışın bir fotodiyot yardımıyla denetlenir. Cantileverin ucundaki tip, yüzey atomlarıyla Hook Kuralı’na uygun olarak etkileşir. Bu etkileşim ile bükülen cantileverdan sapan lazer ışını, fotodiyotta algılanır. Buna saptmaya bağlı olarak yüzey analizi yapılır.

AFM üç modda çalışır:

Kontak Mod : Bu modda tip yüzey ile sürekli temas halindedir.

Non – kontak Mod : Bu modda tip yüzeyle temas etmez. Tip ile yüzey arasındaki Van der Waals bağları etkindir.

Tapping Mod : Bu modta tip yüzey üzerinde belli bir frekansla osilasyon yapar.



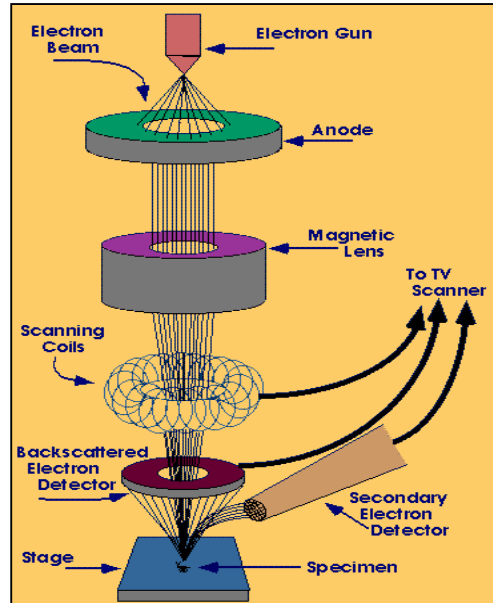
Şekil 2.20 AFM örnek görüntüleri

- a. Si (111) 7x7 yüzeyi
- b. Si – Ge bileşiği

AFM’de herhangi bir tünelleme akımı olmadığı için, yalıtkan malzemelerin de görüntüleri araştırılabilir.

2.3.1.4 Taramalı elektron mikroskobu (Scanning electron microscope; SEM)

Bu mikroskopta 30keV’e kadar hızlandırılmış elektronlar numune yüzeyine gönderilir. Elektron tabancasında hızlandırılan bu elektronlar, manyetik lensler sayesinde ince bir demet halinde örnek yüzeyine odaklandırılır. Elektronlar yüzeye çarptıklarında yüzey atomları ile etkileşirler.



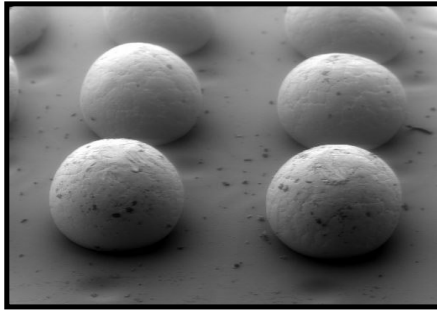
Şekil 2.21 SEM’in çalışma şeması

SEM’de görüntü üç tip analiz ile elde edilir:

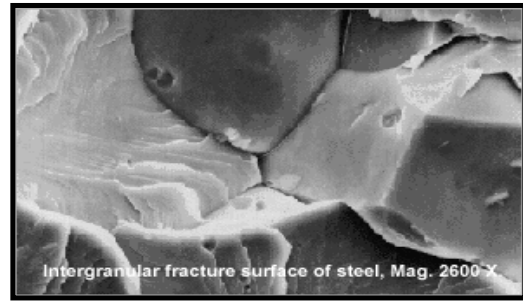
Geri Saçılan Elektronlar: Yüzeye çarpan elektronlar, yüksek enerjili oldukları için yüzey atomunun çekirdeği ile etkileşip geri saçılır. Saçılan bu elektronların analizinden yüzey hakkında bilgi alınabilir.

İkincil Elektronlar: Yüzeye çarpan yüksek enerjili elektronlar, kimi zaman çekirdekle etkileşmek yerine yüzey atomunun elektronlarıyla etkileşir. Her ikisinin de yükünün negatif olması, gelen elektronların yüzeyin kendi elektronlarını koparıp dışarı fırlatmasına neden olabilir. bu durumda çıkan bu ikincil elektronlar dedekte edilerek yüzey topografisi alınabilir.

Işımlar: Yüzeyde gerçekleşen tüm bu etkileşimler sırasında çeşitli ışınlar gözlenebilir. Yüzeyden çıkan bu ışınlar incelenerek yüzey hakkında bilgi elde edilebilir.



(a)



(b)

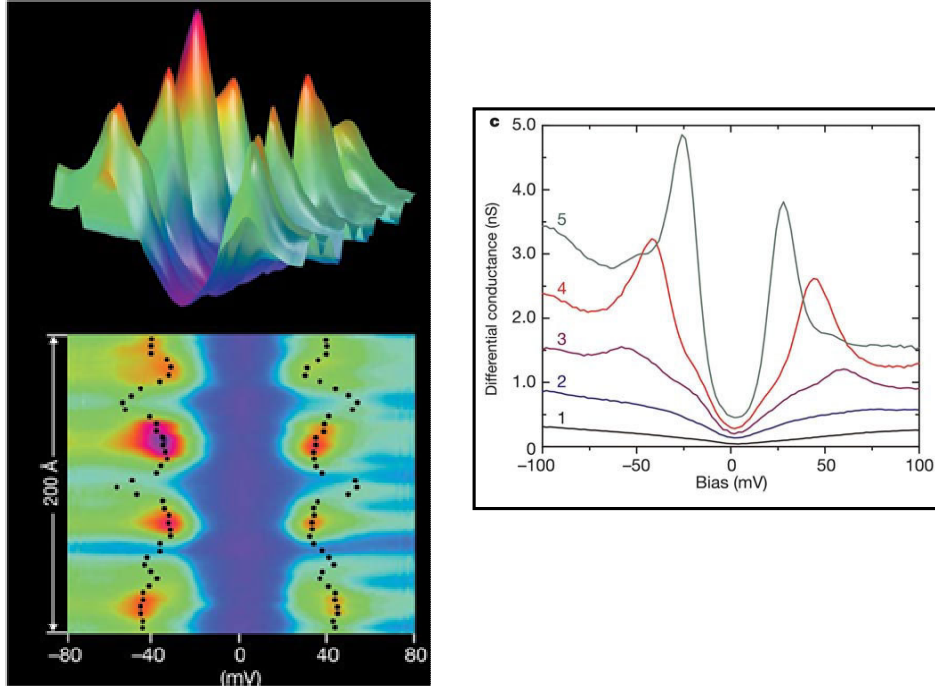
Şekil 2.22 SEM görüntüleri

a. Entegre

b. Çelik yüzeyindeki granüler çatlak (x2600)

2.3.1.5 Taramalı tünelleme spektroskopisi (Scanning tunneling spectroscopy; STS)

Taramalı Tünelleme Spektroskopisi, taramalı tünelleme mikroskobu ile yapılan bir ölçüm tekniğidir. Bu teknikle elektronik durumların yerel yoğunlukları atomik ya da moleküler düzeyde gözlenebilir.



Şekil 2.23 STS görüntüsü

STM'deki gerilim ve tünelleme akımı I değerleri dikkate alınarak $I - V$ grafiği çizilir. Bu grafiğin normalize edilmiş birinci türevine “diferansiyel iletkenlik” denir. Elektronik durum yoğunluğu, diferansiyel iletkenlikle doğru orantılıdır.

Buna göre çizilen bir $dI / dV - V$ grafiği, yüzeyin elektronik durumuyla ilişkilidir. Bu durumda yerel elektronik yoğunluk;

$$I \propto \int_0^{eV} \rho_s(E) \rho_t(-eV + E) dE \quad \text{şeklinde verilir.} \quad (2.23)$$

E , Fermi seviyesine göre elektron enerjisi, ρ_s yüzeyin elektronik durum yoğunluğu, ρ_t ise tipin elektronik durum yoğunluğudur. Örneğin ve tipin Fermi düzeyleri eşitlendiğinde diferansiyel iletkenlik şu şekilde verilir;

$$\frac{dI}{dV} \propto \rho_s(E_F - eV) \quad (2.24)$$

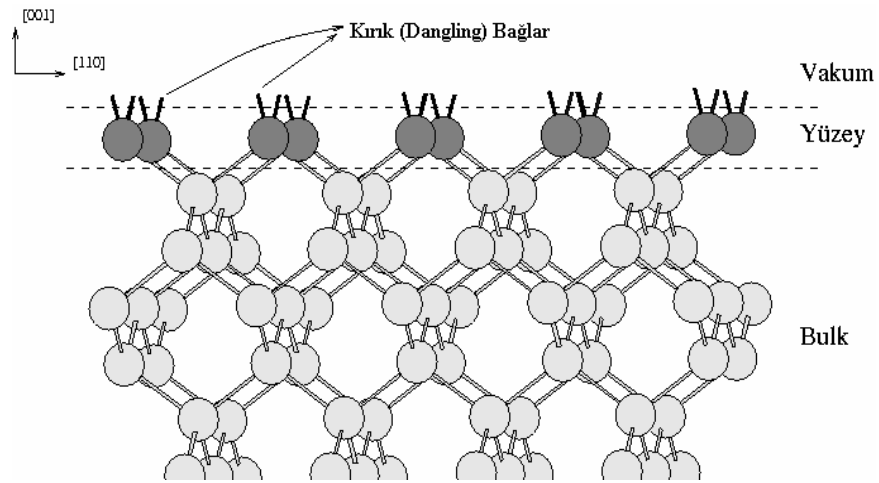
2.3.2 Teorik modelleme

Teorik modelleme konusu anlatılmadan önce yarıiletken yüzey kavramının ne olduğu ve nasıl elde edildiği anlaşılmalıdır. Yüzey fiziğinde isimlerine çok sık rastlanan iki temel kavramı açıklamak gerekirse;

Bulk : Çok sayıda atomik tabakadan oluşan 3 boyutlu bir yapıdır. Bulk yapıda atomlar belirli bir düzen içerisinde. Bulk MBE gibi büyütme teknikleriyle elde edilir.

Yüzey : Birbiriyle sıkı temasta olan iki katıyı birbirinden ayıran ve böylece bütün katıdan farklılaşan az sayıdaki atomik tabakadan oluşmuş iki boyutlu bir yapıdır. Bulk'ın (hkl) indisleri ile belirlenmiş düzleminden kesilerek elde edilir. Bulk'da gözlenen periyodik yapı yüzeyde elektronik düzenin değişmesinden dolayı yok olmaktadır.

Yüzey oluşumu bir katının ikiye bölünmesi olarak da düşünülebilir. Katı yapıların bölünebilmesi için atomlar arasındaki bağların kırılması gerekir. Bağları kırmak için gerekli olan enerjiye "Yüzey Serbest Enerjisi" denir. Bu işlem yüzeyde boş bağların oluşmasına neden olur. Yüzeyde açıkta kalan bu boş bağlara "Kırık Bağ (Dangling Bond)" denir (Gürünlü, 2005).



Şekil 2.24 Kırık (Dangling) bağlar

Kırık bađlar enerji bakımından kararsızdır. Dolayısıyla yüzey, enerjisini minimize etmek için kararsız yüzey atomlarını hareket ettirir. Bu durumda yüzeyler iki türlü hareket sergileyebilir;

- 1- Relaxation (Durulma)
- 2- Reconstruction (Yeniden Yapılanma)

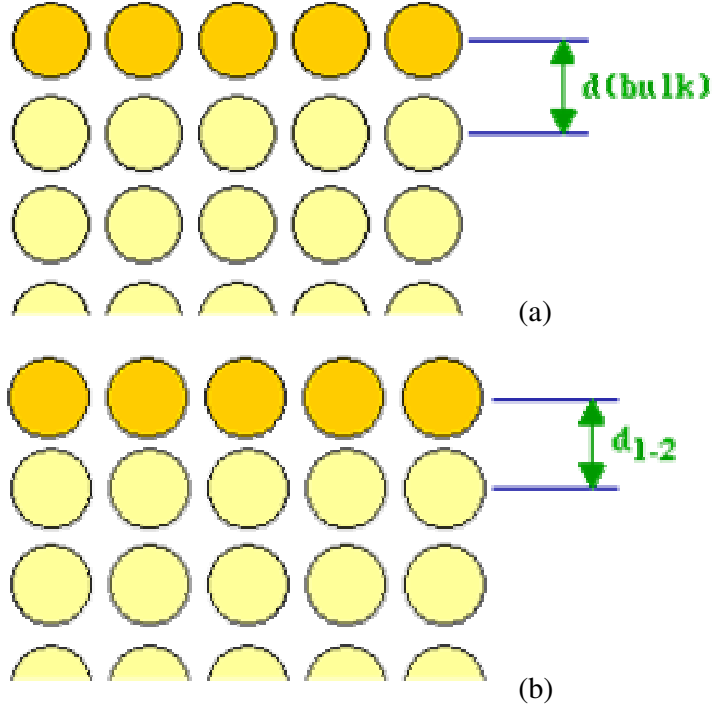
Bu olayların her ikisinde de kararsız yüzey atomları minimum enerjili kararlı konumlara ulaşmaya çalışır. (mxn) bir yüzeyin periyodikliđi olmak üzere, yüzey periyodikliđi durulma olayında deđişmezken, yeniden yapılanmada deđişir.

Bir yüzeyde bu iki mekanizma ayrı ayrı gerçekleşebileceđi gibi, yüzey enerjisini minimize etmek için beraber de işleyebilirler.

2.3.2.1 Relaxation (Durulma)

Bir katının sonlandıđı yüzeyde meydana gelen kararsız durum, serbest enerjisini azaltmak için yüzeyi yeni bir denge konumu belirlemeye zorlar. Yüzeyin yeni denge konumuna ulaşmasını sađlayan hareketlerinden biri olan relax olayında, hareket yüzeyin normali boyuncadır. Yani yüzeyin simetrisinde yada yüzeye paralel periyodiklikte bir deđişme olmaz; (mxn) sabit kalır (Srivastava, 2000).

Şekil 2.25’de bir yüzeyin relax olmadan önceki ve sonraki kesit görüntüsü verilmiştir. Relax olmadan önceki atomik tabakalar arasındaki uzaklıđa d_{Bulk} , relax olduktan sonra tabakalar arası mesafeye d_{1-2} denilsin. Relax olayında birinci tabaka atomları ikinci tabakaya dođru hareket edeceđi için $d_{1-2} < d_{Bulk}$ olur.



Şekil 2.25 a. yüzey relax olmadan önce, b. yüzey relax olduktan sonra

2.3.2.2 Reconstruction (Yeniden Yapılanma)

Atomik yapıların üst katmanlarının yatayda düzenlendiği duruma ya da yüzeyde bulk yapıdan daha farklı bir yapılanma olması durumuna yeniden yapılanma denir. Reconstruction olayında hareket yatay doğrultudadır. $(m \times n)$ yüzey periyodikliği, enerjiyi minimize edecek şekilde değişebilir (Srivastava, 2000).

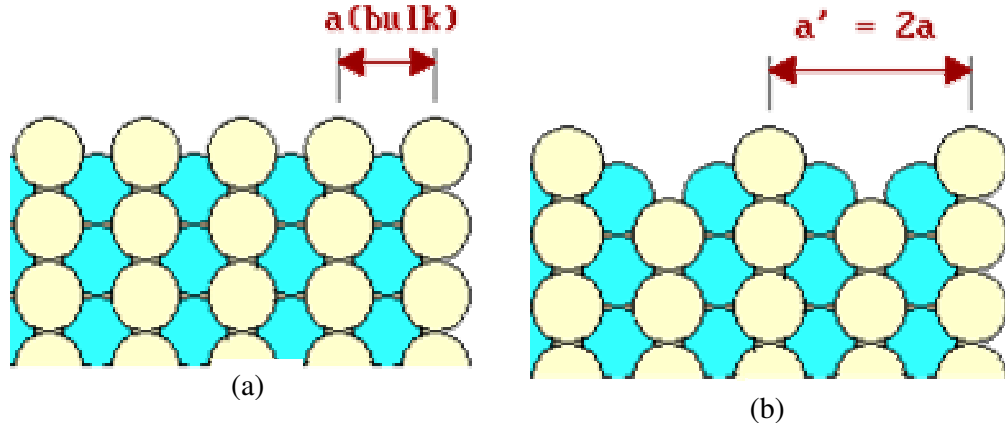
a_1^* ve a_2^* yeni birim hücreyi tanımlayan örgü vektörleri ise, m ve n şu şekilde değişir;

$$m = \mathbf{a}_1^* / \mathbf{a}_1, \quad n = \mathbf{a}_2^* / \mathbf{a}_2 \quad (2.25)$$

m ve n tamsayı olmak zorunda değildir. Yeni birim hücre farklı örgülere karşı gelebilir.

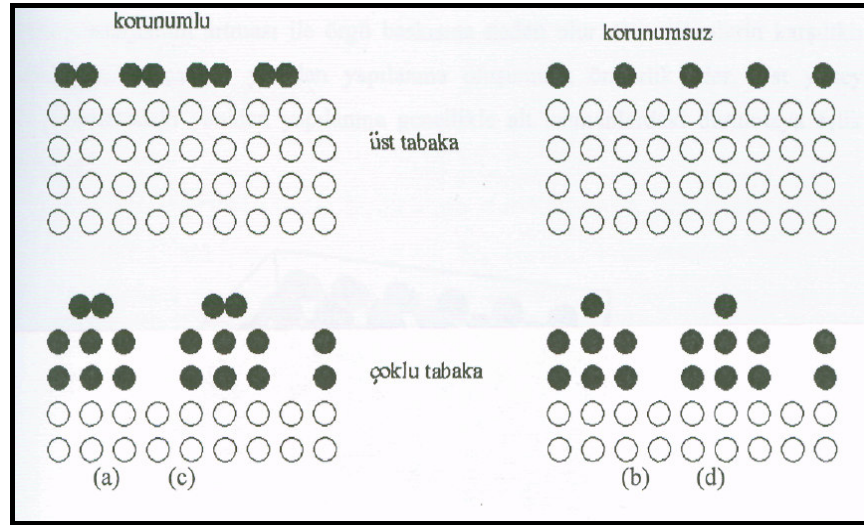
En üst tabaka ya da tabakalardaki atom sayılarının korunup korunmamasına bağlı olarak reconstruction ikiye ayrılır (Aydoğan, 2005);

- Korunumlu reconstruction
- Korunumsuz reconstruction



Şekil 2.26 a. yeniden yapılanmamış yüzey, b. yeniden yapılanmış yüzey

Korunumlu yeniden yapılanmada atom sayısı korunur. Korunumsuz yeniden yapılanmada, yeniden yapılanma katmanındaki atom sayısı bulktaki katmana göre değişmiştir.



Şekil 2.27 Korunumlu ve korunumsuz yeniden yapılanma

Şekil 2.27' ye bakılacak olursa;

(a)ve (c) korunumlu yeniden yapılanmayı gösterir. (Yeniden yapılanmada yüzeydeki atom yoğunluğu korunmuş olur.)

(a) ve (b) de yalnızca yüzeydeki atomlar yapılır.

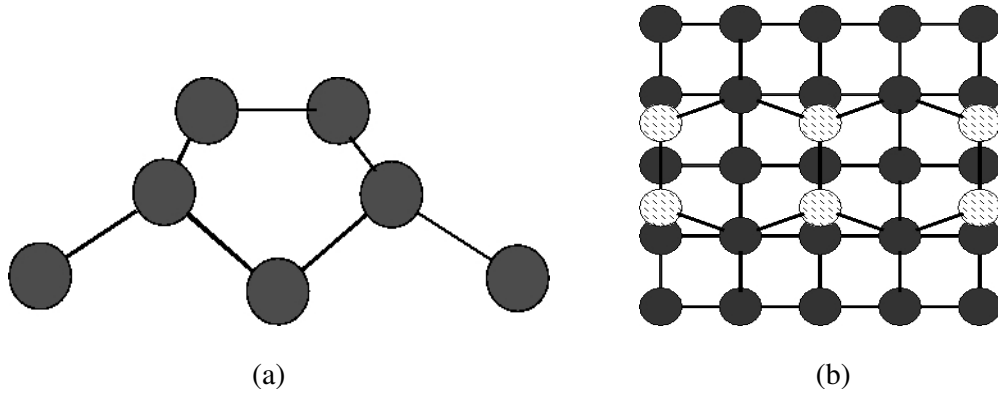
(c) ve (d) de ise birkaç atomik tabaka yeniden yapılır.

Yüzeylerin “durulma” ve “yeniden yapılanma” mekanizmalarını 3 temel ilkeyle açıklayabiliriz (Srivastava, 1997);

İlke 1: Yüzey enerjisi, sistemin yarıiletken özellik kazanmasını sağlayacak şekilde minimize edilebilir. Bunu gerçekleştirmek için atom bulk’a doğru hareket eder ve kırık bağındaki çiftlenmemiş elektronlarını komşu atomun kırık bağına verir. Dolayısıyla elektronlarını çiftleyen bu atom ise bulk’tan dışarı doğru itilir. Buna “Kırık Bağ Orbitallerinin Rehibridizasyonu” denir.

İlke 2: Yüzey enerjisini minimum yapmak için komşu atomların kırık bağları arasında yeni bağlar oluşturulabilir. Bu işgal edilmiş ve edilmemiş yüzey durumlarının oluşmasına ve sistemin yarıiletken olmasına yol açar.

Yüzey atomlarının kendi aralarında yaptıkları ikili bağa “dimer” üçlü bağa “trimer” denir.



Şekil 2.28 a. Simetrik dimer, b. yüzey dimer'larının üstten görünüşü

İlke 3: Durulma ve yeniden yapılanma olayları “Elektron Sayma Kuralı”na uyar. Bu daha çok bileşik yarıiletkenlerde gözlenen bir durumdur. Bu tip yarıiletkenler katyon ve anyonlarla karakterize edilirler.

Elektron Sayma Kuralı: Elektronegatifliği fazla olan anyonlar, elektronegatifliği daha az olan katyonların kırık bağlarındaki çiftlenmemiş elektronları alır. Böylece anyonlar

bağlarını tamamen dolu hale getirirken katyon bağları tamamen boş duruma geçer. Bu işleme “elektron sayma kuralı” adı verilir (Srivastava, 2006).

2.4 Parçacık Etkileşimleri

Çok cisim problemi fiziğin henüz tam olarak çözülmemiş temel problemlerinden biridir. Şu ana kadar iki cisim etkileşimleri çözüldü fakat üç ve daha çok cismin birbiriyle olan etkileşimleri çözümlenebilmiş değildir. Çok elektronlu bir sistemin birbirileri ile olan etkileşimleri düşünülürse, sistemin serbestlik derecesi çok büyük olacaktır. Dolayısı ile Schrödinger denkleminin çözümü de imkansızdır.

Bir kristal sistemi içerisindeki iyonların ve elektronların davranışı ψ çok cisim dalga fonksiyonu tarafından tanımlanır. Dalga fonksiyonunu Schrödinger denkleminde kullanır isek

$$H\psi_i(R, r) = E_i\psi_i(R, r) \quad (2.26)$$

ifadesini elde ederiz. Burada, H hamiltoniyeni, E ise enerji özdeğerlerini temsil eder. R iyonların konumlarını, r de elektronların konumlarını vermektedir. Kristal sisteminde Hamiltoniyenin içereceği terimler önem sırasına göre yazılırsa:

- 1) Noktasal çekirdeğin Coulomb alanında elektronların kinetik ve potansiyel enerjileri,
- 2) Elektronlar arasındaki elektrostatik itmeler,
- 3) Elektron spinlerinin yörüngesel hareketlerle olan magnetik etkileşimleri, (spin-yörünge etkileşimleri)
- 4) Elektronların spin-spin etkileşimleri
- 5) Relativistik etkiler, çekirdek düzeltmeleri şeklinde olacaktır.

1. ve 2. maddedeki etkileşimler göz önüne alınırsa sistemin Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi yazılabilir (Srivastava, 1997).

$$H = T_{iyon} + V_{iyon-iyon} + T_{el} + V_{el-el} + V_{el-iyon} \quad (2.27)$$

Burada T_{iyon} ve $V_{iyon-iyon}$ iyonların kinetik ve potansiyel enerji operatörü, T_{el} elektronların kinetik enerji operatörü, $V_{el-iyon}$ elektron-iyon etkileşme potansiyel enerji operatörü ve V_{el-el} elektron-elektron etkileşme potansiyel enerji operatörüdür.

Bir atom göz önüne alındığında, atomik çekirdek elektronlardan daha ağırdır ($m_{n,p} \approx 2000m_e$). Born-Oppenheimer yaklaşımı bu gerçeği dikkate alarak çekirdeği sabitlenmiş bir parçacık gibi düşünmüştür. Çekirdeğin konumundaki çok küçük değişiklikten elektronlar hemen etkilenmektedir. Burada çekirdeğin kinetik enerjisi ihmal edilebilir ve yaklaşım kullanılarak toplam dalga fonksiyonu elektronik ve iyonik dalga fonksiyonlarının bir çarpımı olarak yazılabilir.

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \chi(\mathbf{R})\eta(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (2.28)$$

Burada \mathbf{R} iyonların pozisyonları, \mathbf{r} ise elektronların koordinatlarını gösterir. Elektronik dalga fonksiyonu $\chi(\mathbf{R})$ iyonik pozisyona, iyonik dalga fonksiyonu $\eta(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ elektronik koordinat ve iyonik pozisyona bağlıdır. (2.26) ve (2.28) denklemleri kullanılarak iyonlar ve elektronlar için iki ayrı Schrödinger denklemi yazılabilir:

İyonlar için

$$[H_{iyon} + E_{el}(\mathbf{R})]\chi(\mathbf{R}) = E \chi(\mathbf{R}) \quad (2.29)$$

elektronlar için

$$[H_{el}]\eta(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_{el}\eta(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (2.30)$$

(2.30) denklemindeki elektronlar için Hamiltoniyen aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$H_{el} = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{\vec{r}_i}^2 + \sum_i V_{ext}(\vec{r}_i) + V_{el-el}(\vec{r}_i) \quad (2.31)$$

V_{el-el} elektron-elektron etkileşme potansiyelidir. V_{ext} ise çekirdeksel konfigürasyon tarafından elektronların üzerine etkiyen dış potansiyeldir.

Yarıiletken yapıda gerçekleşen elektron – elektron ve elektron – iyon etkileşimlerini hesaba katıp en uygun sonuca ulaşmak için çeşitli yaklaşımlar yapılır.

Elektron – Elektron Etkileşimi İçin;

1. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımı: Temel değişken olarak dalga fonksiyonunun kullanıldığı bir yaklaşımdır.
2. Yoğunluk Fonksiyonu Yaklaşımı: Elektronik yük yoğunluğunu temel alan bir yaklaşımdır.

Elektron – İyon Etkileşimi İçin;

1. Tüm Elektron Metodu: Elektron – iyon etkileşmesindeki Coulomb potansiyeli dikkate alınır.
2. Düzlem Dalga Gösterimi: Düzlem dalgalar kullanılarak kinetik enerji dikkate alınır.
3. Pseudo – Potansiyel Metot: İyon - kor yaklaşımı yaparak valans elektronlarını dikkate alan yaklaşımdır.

V_{ext} potansiyelini tanımlamak için iki metot kullanılır. Bunlar Tüm-Elektron (All-Elektron) Metodu ve Pseudo- Potansiyel Metodudur.

2.4.1 Elektron - Elektron etkileşmesi

Çok parçacık probleminin karmaşıklığından dolayı (2.30) denkleminin çözümü zorluğunu hala korumaktadır. Çözüm için yaygın olarak kullanılan iki yaklaşım vardır. Bunlar; dalga fonksiyonu yaklaşımı ve yoğunluk fonksiyonu yaklaşımıdır. İki yaklaşımda da çok parçacık Schrödinger denklemi tek parçacık denklemine indirgenerek çözüme gidilir (Gürünlü, 2005).

2.4.1.1 Dalga fonksiyonu yaklaşımı

Yaklaşımda temel değişken olarak dalga fonksiyonu kullanılmaktadır. İki temel teori vardır. Bunlar Hartree Teorisi ve Hartree-Fock Teorisidir.

2.4.1.1.1 Hartree teorisi

Hartree teorisi, N elektron dalga fonksiyonunu basitçe tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde temsil etmiştir.

$$\eta(r_1, \dots, r_n) = \prod_{i=1}^N \Phi_i(r_i) \quad (2.32)$$

Burada r_i elektronların koordinatlarını belirtir ve dalga fonksiyonu ortonormaldir. Tek parçacık dalga fonksiyonu Φ 'nin sonsuz küçük değişimi Hamiltoniyeinin değişmesine neden olmaz. Φ dalga fonksiyonu ile Hamiltoniyeinin beklenen değeri alınır ve Legendre çarpımlarının Φ_i fonksiyonuna etki ettirilmesi ile fonksiyon aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\langle \Phi_1(r_1), \dots, \Phi_N(r_N) | H | \Phi_1(r_1), \dots, \Phi_N(r_N) \rangle - \sum_i E_i^H \langle \Phi_i | \Phi_i \rangle \quad (2.33)$$

Φ_i fonksiyonuna değişim ilkesi uygulanarak Hartree tek parçacık denklemleri elde edilir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{r_i}^2 + V_{ext}(r_i) + V_H(r_i) \right] \Phi_i(r) = E_i^H \Phi_i(r) \quad (2.34)$$

Her dolu tek elektron düzeyi $\Phi_i(r)$ için bir tek denklem söz konusu olduğundan (2.34) ifadesi bir denklemler takımını göstermektedir ve “Hartree Denklemleri” olarak bilinir. İfadede V_H Hartree potansiyelini, V_{ext} ise dış potansiyeli temsil eder. Denklem (2.35)'de kullanılan Hartree potansiyeli açık olarak aşağıda verilmiştir.

$$V_H(r) = e^2 \sum_j \int dr' \frac{|\Phi_j(r')|^2}{|r - r'|} \quad (2.35)$$

Bu yaklaşımında toplam enerji ifadesi ise aşağıdaki gibi yazılır.

$$E^H = \sum_i \langle \Phi_i | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2 + V_{ext}(r_i) | \Phi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle \Phi_i \Phi_j | \frac{e^2}{|r_i - r_j|} | \Phi_j \Phi_i \rangle \quad (2.36)$$

Hartree denkleminde kullanılan tek elektron ortonormalize dalga fonksiyonu açık olarak yazılır ise

$$\Phi(r_1 S_1, r_2 S_2, \dots, r_N S_N) = \Phi_1(r_1 S_1) \Phi_2(r_2 S_2) \dots \Phi_N(r_N S_N) \quad (2.37)$$

Bu denklemden görüldüğü gibi Hartree denklemi simetrik bir formdadır. Oysa Pauli dışarlama ilkesine göre, uzayın aynı noktasında aynı kuantum sayılarına sahip iki fermiyon bulunamaz. Bu ilke açıkça, aynı kuantum setlerine sahip özdeş fermiyon çiftleri arasındaki etkin itmeyi ifade eder ve matematiksel olarak parçacık çiftlerinin değiş tokuşu sırasında antisimetrik olan dalga fonksiyonlarını sağlamak için kullanılır. Sonuç olarak teori Pauli dışarlama ilkesini ihmal etmektedir. Hartree teorisindeki bu eksiklik Hartree-Fock teorisi ile giderilmiştir (Gürünlü, 2005).

2.4.1.1.2 Hartree - Fock Teorisi

Pauli ilkesine göre dalga fonksiyonu antisimetrik formda olmalıdır. Bu güçlüğü yenmek için Denklem (2.37) ile verilen dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarının slater determinanı ile temsil edilebilir.

$$\Phi(r_1 S_1, r_2 S_2, \dots, r_N S_N) = \begin{vmatrix} \Phi_1(r_1 S_1) & \Phi_1(r_2 S_2) & \dots & \Phi_N(r_N S_N) \\ \Phi_2(r_1 S_1) & \Phi_2(r_2 S_2) & \dots & \Phi_2(r_N S_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Phi_N(r_1 S_1) & \Phi_N(r_2 S_2) & \dots & \Phi_N(r_N S_N) \end{vmatrix} \quad (2.38)$$

Burada iki sütun ya da iki satır yer değiştirirse, determinant işaret değiştirecektir. Böylece antisimetriklik koşulu sağlanmış olur. (2.38) tipindeki bir dalga denkleminin çözümü ile Hartree-Fock denklemini elde edilir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{r_i}^2 + V_{ext}(r_i) + V_H(r_i) + V_{ex}(r_i) \right] \Phi_i(r) = E_i^{HF} \Phi_i(r) \quad (2.39)$$

Burada V_{ex} deęiş-tokuş potansiyelini temsil etmektedir. Denklem bu terim ile Hartree denkleminde farklıdır. V_{ex} potansiyeli açık olarak yazılır ise

$$V_{ex} \Phi_i(r) = -e^2 \sum_j \Phi_j(r) \int \frac{\Phi_j^*(r') \Phi_i(r')}{|r-r'|} dr' \quad (2.40)$$

Antisimetrik dalga fonksiyonu kullanan deęiş-tokuş potansiyel terimi doğrudan Pauli dışarlama ilkesiyle ilişkilidir. Hartree-Fock enerjisi, Hartree enerjisine ilave bir terim ile $E^{HF} = E^H + E^{EX}$ şeklinde yazılabilir (Devreese and Camp 1985).

Hartree-Fock denklemleri atomların temel durum enerji hesaplamalarında kullanılmıştır. Fakat katılar için hesaplamalar çok komplike olmuştur. Bu teori yalıtkanlar ve yarıiletkenlerin elektronik durumlarını ve temel durum enerjilerini hesaplamada yetersiz kalmıştır. Bu yetersizlik, teoride deęiş-tokuş etkileşmesinin perdelemesinin (kolerasyon etkisi) ihmal edilmesinden kaynaklanmaktadır (Gürünlü, 2005).

2.4.1.2 Yoęunluk fonksiyonu yaklaşımı

2.4.1.2.1 Thomas - Fermi Teorisi

Bu teoride Hartree ve Hartree-Fock Teorilerinden farklı bir yaklaşım kullanmıştır. Teori temel deęişken olarak dalga fonksiyonunun yerine elektronik yük yoęunluęunu kullanmayı önermektedir. Teoride $n(\mathbf{r})$, uniform elektron gazının yük yoęunluęunu temsil eder. Enerji $n(\mathbf{r})$ 'nin bir fonksiyonu olarak ifade edilebilir. Bu yaklaşım çok yalın ve nitel atomlar için doğrudur. Fakat moleküller için bağlanma enerjisi iyi sonuçlar vermemiştir ve yaklaşımın formülasyonu tam deęildir (Gürünlü, 2005).

2.4.1.2.2 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)

DFT şu gözleme dayanarak ortaya çıkmıştır; Genel bir dış $V(\mathbf{r})$ potansiyeli içinde etkileşen N-elektron sistemi için taban durum yoğunluğu $n(\mathbf{r})$, $V(\mathbf{r})$ yi belirler.

$$n(\mathbf{r}) \rightarrow V(\mathbf{r}) \quad (2.41)$$

DFT’de temel değişken olarak bir sistemin temel durum elektron yoğunluğu dikkate alınmaktadır. Sistemin taban durum özelliklerini belirleyen en önemli karakteristikler, temel durum elektron yoğunluğu ve E toplam enerjisidir. Böylece, yaklaşımda sistemin diğer bütün taban durum özellikleri, Hartree-Fock Teorisinde kullanılan tek elektron dalga fonksiyonunun yerine temel durum elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olarak ifade edilir. Diğer bir söyleyişle, Hamiltoniyeni $n(\mathbf{r})$ belirlediğine göre Hamiltoniyenden türetilen her özelliği de $n(\mathbf{r})$ belirlemiş olur. Teorinin formülasyonu Hohenberg ve Kohn tarafından geliştirilmiştir. Teoriyi, diğer teorilerden çekici yapan nedenler:

- i) Hesaplama açısından daha kolay,
- ii) 3-boyutlu elektronik yoğunluk dağılımı $n(\mathbf{r})$ ’nin, 3N-boyutlu dalga fonksiyonu ψ ’ye göre daha kolay ele alınabilir olması,
- iii) Sonsuz boyutlu periyodik sistemlerin yanı sıra çok sayıda atom içeren ve periyodik olmayan sistemlerin ele alınabilir olması şeklinde sıralanabilir.

Elektronik sistemin taban durum enerjisi

$$E_{el}[V_{ext}, n(\mathbf{r})] = F[n(\mathbf{r})] + \int V_{ext} n(\mathbf{r}) d^3 r \quad (2.42)$$

şeklinde yazılır. Burada $F[n(\mathbf{r})]$ evrensel fonksiyoneldir. (2.42) denkleminde doğru $n(\mathbf{r})$ kullanılır ise minimum taban durum enerjisi elde edilir.

$$F[n(\mathbf{r})] = T_0[n(\mathbf{r})] + E_H[n(\mathbf{r})] + E_{xc}[n(\mathbf{r})] \quad (2.43)$$

Denklem (2.43)'de, $T_0[n(\mathbf{r})]$ etkileşmeyen elektronlar sisteminin kinetik enerjisini, $E_H[n(\mathbf{r})]$ elektron-elektron etkileşme enerjisini ve son terim $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$ ise $n(\mathbf{r})$ 'nin fonksiyoneli olarak değiş-tokuş korelasyon enerjisini ifade eder. Hertree-Fock teorisinde dikkate alınmayan korelasyon etkisi DFT ile hesaba katılmış olur. Böylece DFT bağımsız parçacık sistemi için tüm etkileri içermektedir. Buna rağmen E_{xc} tam olarak bilinmemekte, temel iki yaklaşım ile verilmektedir.

(2.42) denkleminde verilen bir dış potansiyelde sistemin taban durum enerjisi

$$E_{el}[V_{ext}, \rho(r)] = T_0[n(r)] + E_H[\rho(r)] + \int V_{ext} \rho(r) d^3 r + E_{xc}[\rho(r)] \quad (2.44)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\rho(r)$ taban durum yük yoğunluğudur ve E_{el} 'i minimize eder. (2.42) denklemi ile verilen enerji fonksiyonelinin minimum özellikleri elektronların sabit konumlu durumuna bağlıdır. Toplam elektron sayısı

$$\int n(r) d^3 r = N \quad (2.45)$$

olmak üzere Lagrange çarpanları yöntemini kullanarak

$$E_{el}[V_{ext}, n] - \mu N \quad (2.46)$$

İfadesini elde ederiz. Burada μ Lagrange çarpanıdır. Kohn-Sham teorisinin sistemin taban durumunu belirlemesi gerektiğinden (2.45) ifadesinin varyasyonu sıfıra eşitlenerek

$$\frac{\delta\{E_{el}[V_{ext}, \rho] - \mu N\}}{\delta\rho(\bar{r})} = 0 \quad (2.47)$$

sonucu bulunur. (2.44) denklemini kullanılarak (2.48) denklemini elde ederiz.

$$\frac{\delta T_0[\rho]}{\delta \rho(r)} + V_{KS}[\rho] = \mu \quad (2.48)$$

Burada V_{KS} Kohn-Sham potansiyelini temsil etmektedir. V_{KS} dış potansiyeli, Hartree potansiyelini ve deęiřtokuř - korelasyon potansiyelini içermektedir.

$$V_{KS}[\rho] = V_{ext}(r) + V_H[\rho] + V_{xc}[\rho] \quad (2.49)$$

Burada Hartree potansiyeli ve deęiřtokuř - korelasyon potansiyeli ařaęıdaki gibi verilir.

$$V_H[\rho] = e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \quad (2.50)$$

$$V_{xc}[\rho] = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (2.51)$$

Denklem (2.47)'nin çözümleri etkileřmeyen elektronların varyasyonel dalga fonksiyonları için tek parçacık Schrödinger denklemlerinin çözümlerine eřdeęerdir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}[n(\vec{r})] \right] \Phi_j(r) = E_j \Phi_j(\vec{r}) \quad (2.52)$$

Denklemden $\Phi_j(r)$ ve E_j etkileřmeyen tek parçacığın dalga fonksiyonu ve enerji özfonksiyonudur. $\rho(r)$ taban durum yoğunluęu

$$\rho(r) = \sum_j [\Phi_j(\vec{r})]^2 \quad (2.53)$$

řeklinde verilir. Bu denklem özuyumu gerektirmektedir ve özuyuma ulařıldıęı zaman $T_0[\rho(r)]$ ařaęıdaki gibi türetilebilir.

$$T_0[\rho(\vec{r})] = \sum_j \langle \Phi_j | E_j - V_{KS}[\rho(\vec{r})] | \Phi_j \rangle \quad (2.54)$$

Sistemin taban durumu özelliklerinin taban durum yoğunluğunun fonksiyoneli olarak formüle edilmesine rağmen, değiş-tokuş ve korelasyon enerjisini içeren E_{XC} tam olarak bilinmemektedir. E_{XC} etkin olarak kullanılan iki yaklaşım ile ifade edilmektedir. Bunlar Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı'dır (GGA). (Hohenberg and Kohn 1964, Kohn and Sham 1965)

2.4.1.2.3 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA)

Yaklaşımında değiş-tokuş korelasyon enerjisi $\rho(\mathbf{r})$ yerel yoğunluğuna eşit yoğunluktaki homojen elektron gazının enerjisine eşittir ve aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E_{XC}^{YYY}[\rho] \approx \int \epsilon_{XC}[\rho(\bar{r})]\rho(\bar{r})d^3r \quad (2.55)$$

Burada $\epsilon_{XC}[\rho(\mathbf{r})]$, $\rho(\mathbf{r})$ yoğunluğundaki homojen elektron gazının birim hacminin değiş-tokuş korelasyon enerjisidir. (2.51) denklemini kullanılarak değiş-tokuş korelasyon potansiyeli aşağıdaki gibi verilir.

$$\begin{aligned} V_{XC}^{LDA}(\mathbf{r}) &= \frac{\partial E_{XC}[\rho(\bar{r})]}{\partial \rho} \\ &\approx \frac{\partial}{\partial \rho(\mathbf{r})}(\rho(\bar{r})\epsilon_{XC}[\rho(\bar{r})]) \\ &= \epsilon_{XC}[\rho(\bar{r})] + \rho(\bar{r})\epsilon'_{XC}[\rho(\bar{r})] \end{aligned} \quad (2.56)$$

Yerel Yoğunluk Yaklaşımı bant hesaplamalarında oldukça geniş bir şekilde kullanılır. Temel durum özellikleri bu yaklaşım ile iyi bir şekilde açıklanabilmektedir. En sade biçimde değiş-tokuş enerjisini ve korelasyon enerjisini LDA'yı kullanarak elde ederiz. LDA ile yapılan hesaplamalarda, teorik olarak bulunan örgü parametresi deneysel örgü parametresinden daha küçük çıkar (Gürünlü, 2005).

2.4.1.2.4 Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA)

Bu yaklaşımda homojen olmayan elektron gazı dikkate alınmaktadır. Dolayısı ile $\rho(r)$ durum yoğunluğu her yerde aynı olmayacağından E_{XC} enerjisi, $\rho(r)$ ve gradyanına bağlı olarak göz önüne alınır.

$$E_{XC}^{GGA} = \int f(\rho(r), |\nabla n(r)|) dr \quad (2.57)$$

Burada, diğer bir deyişle yerel yoğunluk fonksiyonunun eğimi alınarak yoğunluğun değişim hızı yavaşlatılmış oldu. Böylece homojensizlik iyi bir şekilde tanımlanmıştır. GGA ile yapılan hesaplamalarda, teorik olarak bulunan örgü parametresi deneysel örgü parametresinden daha büyük çıkar (Gürünlü, 2005).

2.4.2 Elektron - İyon etkileşmesi

Denklem (2.31)'deki V_{ext} terimi değerlik elektronları ve iyon korları arasındaki potansiyeli tanımlamakta idi. V_{ext} 'in çözümü için iki metot tanımlanabilir. Bunlar, Tüm Elektron Metodu ve Pseudo-Potansiyel Metodudur.

2.4.2.1 Tüm Elektron Metodu

Bu metodu, Linearized-Muffin-Tin Orbitals (LMTO) ve Full Potential Linearized Augmented Plane Waves (FLAPW) metotları olarak ikiye ayırabiliriz. Her iki metotta elektron-iyon etkileşmesinde Coulomb potansiyeli dikkate alınır. Buna rağmen metotlar dalga fonksiyonunu farklı verir.

LMTO metodunda, Wigner-Seitz hücresinin hacmiyle aynı hacimdeki küreler yer değiştirir ve dalga fonksiyonu boş küresel bölge içinde ve bölge üzerinde atomik orbital çiftlerinin toplamı olarak yazılır. Kürenin yarıçap değeri $\sum_l S_l^3 = NS_{ws}^3$ şartıyla belirlenir.

Burada hücre içindeki N atom üzerinden toplam alınır. LMTO metodu metaller ve yarıiletkenlerin elektronik ve taban durum özelliklerinin belirlenmesinde iyi sonuçlar vermiştir ve formalizmi basit bir metottur.

FLAPW metodu Wimmer tarafından çok iyi tanımlanmıştır. Metot küresel atomik orbitaller içinde küresel harmonikleri kullanır. Ayrıca atomik orbitaller dışında da çok sayıda küresel düzlem dalgalar kullanır. FLAPW metodu kullanılarak deneysel sonuçlar ile iyi bir uyum elde edilmiştir. Fakat LMTO metodundaki gibi oldukça yanlış kuvvet hesaplamalarından dolayı sıkıntı çekilmiştir. (Wimmer *et al.* 1981, Skriver1984)

2.4.2.2 Düzlem dalga gösterimi

Düzlem dalgalar periyodik katıların hesabı için idealdir ve ab-initio kodlarında düzlem dalgalar baz setleri olarak kullanılır. Elektronik durumların fiziksel bir portresini elde etmek için düzlem dalgalar normal uzaya veya ters uzaya transfer edilmelidir. Bu işlem Fourier dönüşümleri ile oldukça verimli şekilde yapılabilir.

Pseudo-Potansiyel Yaklaşımında, periyodik sınır koşulları altında doğru bir hesaplama yapılabilmektedir. Periyodik bir sistem içinde elektronik dalga fonksiyonu Bloch teoremine göre

$$\psi_{n,k}(r) = \varphi_{n,k}(r)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2.58)$$

şeklinde yazılabilir. Burada k dalga vektörü, n bant indisi ve $\varphi_{n,k}$ kristal örgünün periyodikliğine sahip bir fonksiyondur. Düzlem dalga gösterimi

$$\varphi_{n,k}(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_{n,k,G} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (2.59)$$

şeklinde verilebilir. Burada Ω ilkel birim hücrenin hacmidir. Denklem (2.59) $\varphi_{n,k}$ dalga fonksiyonun farklı karmaşık Fourier setleridir. Katsayılar ters dönüşüm yardımıyla bulunabilir ve bu katsayılar elektronu tanımlamakta kullanılır.

$$C_{n,k,G} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{\Omega} d^3 r \varphi_{n,k}(r) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (2.60)$$

Ters uzayda bir orbitalin kinetik enerjisinin gösterimi

$$\begin{aligned} T_n &= -\frac{1}{2} \langle \varphi_{n,k} | \nabla^2 | \varphi_{n,k} \rangle \\ &= \frac{1}{2\Omega} \sum_{\sigma} |k+G|^2 |C_{n,k}|^2 \end{aligned} \quad (2.61)$$

şeklindedir. Hesapların doğruluğu denklem (2.61) ile belirtilen, kinetik enerjiye olan katkının maksimumu olan E_c (cut-off) enerjisi denilen terim ile yapılır. Baz setlerinin boyutları E_{cut} enerjisi ile tanımlanır ve $\frac{1}{2}|k+G|^2 \leq E_{cut}$ şartını sağlar (Gürünlü, 2005).

2.4.2.3 Pseudo - potansiyel metot

Bir atomu üç parçada dikkate alabiliriz; çekirdek, kor (çekirdek) elektronları, değerlik (valans) elektronları. Kor elektronları orbitalleri doldurmuştur ve çoğunlukla çekirdek etrafında lokalize durumdadırlar. Bu nedenle elektronlar, kor diziliminde yaklaşık olarak donmuş veya hareketsiz olarak alınabilirler. Burada anlaşılacağı üzere pseudo-potansiyel yaklaşımında değerlik elektronları dikkate alınmaktadır. Molekül veya katıların özellikleri belirlenirken iyon korlarının hareket etmediği kabul edilir.

Gerçek dalga fonksiyonu Φ , Ψ ise düzgün bir dalga fonksiyonu olmak üzere, dalga fonksiyonu

$$\Phi = \Psi + \sum_c b_c \Psi_c \quad (2.62)$$

şeklinde verilir. Burada son terim kor parçasıdır ve kor durumlarına genişletilmiştir. b_c , Φ ve Ψ_c 'nin birbirine ortogonal olması durumunda belirlenir. Bu şart (2.63) denklemi ile verilmiştir.

$$\langle \Psi_c | \Phi \rangle = \langle \Psi_c | \Psi \rangle + b_c \quad (2.63)$$

Schrödinger denklemi yazılırsa;

$$H\Psi + \sum_c (\epsilon - E_c) |\Psi_c\rangle \langle \Psi_c | \Psi = \epsilon\Psi \quad (2.64)$$

Burada E_c kor durumlarının özdeğeridir. Bu denklemi aşağıdaki gibi elde edebiliriz.

$$(H + V_R)\Psi = \epsilon\Psi \quad (2.65)$$

veya

$$(T + V_{ps})\Psi = \epsilon\Psi \quad (2.66)$$

Burada V_R itici potansiyel operatörüdür ve (2.64) denkleminde belirlenir.

Denklemin (2.66)'nın çözümünde düzlem dalga baz setleri ve düzgün dalga fonksiyonları kullanılır. Philips ve Kleinman pseudo-potansiyel operatörünü $V_{ps}=V_A+V_R$ şeklinde göstermiştir. V_{ps} zayıf ve düzgün potansiyel operatörü veya pseudo-potansiyel olarak adlandırılır. Bu potansiyel itici potansiyel V_R ve çekici potansiyel V_A arasındadır. Kor bölgesinin dışında elde edilen yük yoğunlukları, doğru yük yoğunluğuna özdeş olmalıdır. Bu şart norm korunumu olarak bilinir. Hesaplamalarda, elementin atomik özellikleri faz kaymalarını içerecek şekilde korunmalıdır. Faz kaymaları kor yönündeki saçılmalardan kaynaklanır ve farklı açısız momentum durumları için farklı olur. Bu sebeple bir pseudo-potansiyelin, farklı açısız bileşenleri için izdüşümleri yerel olmamalıdır (Gürünlü, 2005).

2.5 Teorik Modellemenin Temel Gereksinimleri

Bir yarıiletken yüzeyin teknolojik olarak kullanım alanlarını belirlemek için iki parametre iyi bilinmelidir. Bunlar, yüzeyin atomik ve elektronik yapısıdır. Böyle

sistemlerin atomik ve elektronik yapılarını farklı açılarda incelemek için çok sayıda deneysel teknik gerekmektedir.

Daha önceki bölümlerde bahsedilen bu deneysel teknikler, arařtırmacılara zaman ve maliyet aısından oldukça büyük zorluklar ıkarmaktadır. Ayrıca malzemenin hazırlanması gibi, deneysel olarak yapılacak işlemler apayrı bir düzen gerektirmektedir.

Bu bakış aısıyla, yarıiletken yüzey ve ara yüzeylerin teorik olarak incelenmesi, yüzey fiziğinde çok önemli bir rol oynar.

Bir sistemi teorik olarak modelleyebilmek için, sistemle ilgili iki temel bilgiye ihtiyacımız vardır;

- Yüzeyin / arayüzeyin yapısal gösterimi
- Sistemdeki elektron ve çekirdeklerin birbirleriyle olan etkin etkileşimleri

Bu iki bilgiye sahip olduğumuz takdirde herhangi bir yüzeyin içinde bulunabileceği tüm yapısal ve elektronik durumları deney yapmaya gerek kalmadan özümleyebiliriz.

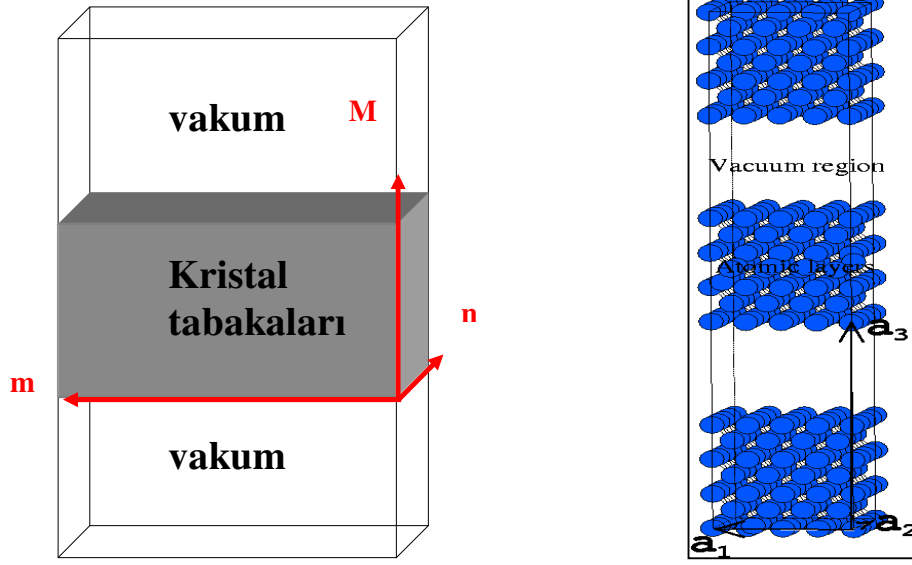
2.5.1 Yüzeyin ve ara yüzeyin yapısal gösterimi

Araştırılmak istenilen yüzey ya da ara yüzey üç şekilde modellenebilir:

1. Sonlu bir topluluk yapısı
2. Yarı – sonsuz katman yapısı
3. Tekrarlanan katman yapısı (SUPERHÜCRE)

Teorik modelleme ile ilgili literatürde görülen çoğu alışmalar supercell geometrisine göre yapılmıştır.

SUPERHÜCRE GEOMETRİSİ: Araştırılan yüzeyin normali boyunca tekrarlanan katmanlar şeklindeki yapıdır. Her katman, uygun iki boyutlu ($m \times n$) yüzey yapılanmasına sahip sonlu sayıda M tane atomik tabakadan oluşmuştur.



Şekil 2.29 Supercell geometrisinin tabakaları

Bu sistem Bloch periyodiklik koşulunu sağlar.

“ p ” ilkel (1x1) birim hücredeki atom sayısı olmak üzere, $p \times m \times n \times M$ tane atom içerir.

2.5.2 Yüzeylerin ab initio metot ve DFT’ye dayalı superhücre tekniği ile modellenmesi

Bu, yüzey çalışmalarında en çok kullanılan metottur. İlk olarak yapılması gereken şey araştırılmak istenen yüzey geometrisinin oluşturulmasıdır.

Bu metot bir önceki bölümde bahsedilen yaklaşımların bazılarının bir kombinasyonu şeklindedir.

Bu modelleme tipinde aşağıdaki yaklaşımlar yapılır (Srivastava, 2000);

- ◆ Adyabatik Yaklaşım
- ◆ Pseudo-potansiyel Yaklaşım (elektron – iyon etkileşimi için)
- ◆ Yoğunluk Fonksiyon Yaklaşımı (elektron – elektron etkileşimi için)

Bu modellemede ortaya çıkan kuantum mekaniksel problemleri çözmek için adyabatik yaklaşım yapılır. Bu yaklaşım açıklanmadan önce iyon – kor kavramı açıklanmalıdır.

İyon – kor : Kimyasal etkiler valans kabuğundaki elektronlardan ortaya çıktığı için merkez (core) elektronları çekirdeğe bağlı bırakılabilir. Bu sayede bir atomu, valans elektronları ile çevrili bir iyon olarak ele alabiliriz. Bu yapısal gösterime iyon – kor denir.

Adyabatik Yaklaşım: İyon – korlar elektronlara göre daha büyük kütlelidir. Dolayısıyla hareketleri, iyon – korları durgun, elektronları hareketli kabul ederek görelilik olarak ayrılabilir. Bu yaklaşım, elektronların hareketini daha ağır iyonların hareketinden ayırmak için kullanılır.

Problemin elektronik kısmı tamamen kuantum mekaniksel olarak çözülür. Schrödinger denklemi $H = T_0 + V_{ps} + V_{scr}$ şeklinde ifade edilen Kohn – Sham denklemine dönüşür.

Burada;

T_0 : Etkileşim olmayan elektron gazının kinetik enerji operatörü

V_{ps} : Elektron ve iyon-kor arasındaki etkileşimi veren pseudo-potansiyel

V_{scr} : İç – elektronik Coulomb itmesi ve kuantum mekaniksel değiş-tokuş etkileşimini içeren perdeleyici bir potansiyel

Perdeleyici potansiyele üç katkı vardır: $V_{scr} = V_H + V_X + V_C$ (2.79)

V_H : Hartee (Coulomb)

V_X : Exchange (Değiş-tokuş)

V_C : Correlation (Korelasyon) (2.80)

Exchange ve correlation potansiyelleri, elektronik yük yoğunluğunun evrensel bir fonksiyonu olarak düşünülür. Bu “Yoğunluk Fonksiyon Teorisi” olarak bilinir.

Yoğunluk Fonksiyon Teorisi’nin esası elektronik yük yoğunluğudur.

Elektronik yük yoğunluğu “ ρ ” olmak üzere;

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_j^{\text{occ}} |\phi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.81)$$

Φ : Kohn-Sham denklemini sağlayan hayali bir parçacığın dalga fonksiyonudur.

Φ , temel atomik orbitaller veya düzlem dalgalar ya da düzlem dalga ve atomik orbitallerin bir kombinasyonu kullanılarak ifade edilebilir. j üzerinden toplam işgal edilmiş tüm elektronik durumları gösterir.

Meydana gelen Kohn – Sham denklemi özuyumlu olarak çözülür. Kohn – Sham denkleminin çözümlerinden;

- Birim hücre başına toplam enerji
- Bütün atomlar üzerindeki kuvvetler bulunabilir.

Toplam enerji ve kuvvet değerleri, atomları denge konfigürasyonuna relax etmek için kullanılır. Yani sistemin hangi yapıyı tercih edeceğini belirlemek için toplam enerji değerine bakabiliriz.

Pratikte, V_{xc} 'nin (yoğunluk fonksiyon teorisi) incelenmesi için iki yaklaşım kullanılır ;

1. LDA (Yerel Yoğunluk Yaklaşımı)
2. GGA (Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı)

Tüm bu yaklaşımlarla geometrisi hazırlanan sistem, istenilen işlemlerden geçirilmek üzere bilgisayar ortamına verilir.

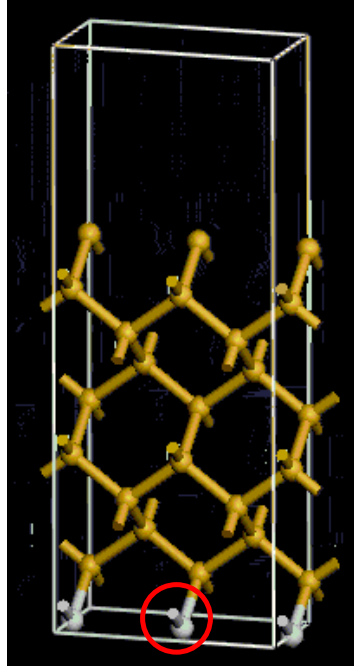
Bu modellemede supercell geometri ele alınır.

İstenilen yüzey, bulk yapı içinde vakum boşlukları (N) oluşturularak sağlanır.

Komşu katmanlardaki atomlar arasında etkileşme olmaması için $N < 4$ olmalıdır.

Modellemenin doğru yapılabilmesi için katman kalınlığı $M > 7$ olmalıdır.

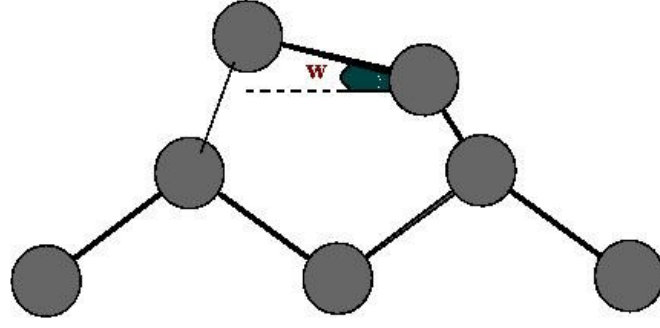
Herhangi başka bir çeşit atomun adsorbe edilmediği yüzeylere “temiz (clean) yüzey” denir.



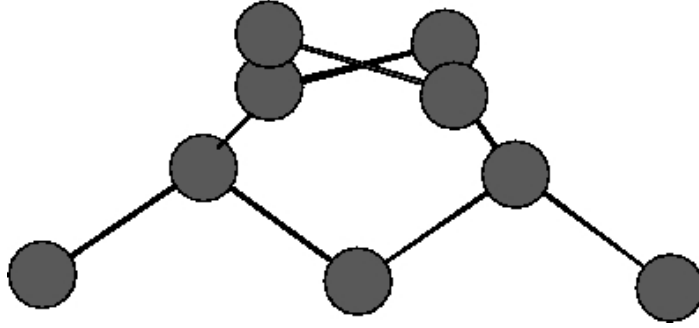
Şekil 2.30 H atomları bağlanmış kristal

Bahsedilen şekilde oluşturulan yüzeyle işlem yapılmadan önce en alt tabakaya H atomları bağlanır. Bu sayede, orada bulunan yüzey atomları “pasivize” edilir ve sisteme olumsuz herhangi bir etki yapmaları engellenmiş olur (Srivastava, 2000).

Sistem relax yapılmadan önce, kristale ait en alt iki tabaka hareketsiz duruma getirilir. Bu tabakaların hareketsiz yapılması durulmadan sonra oluşacak geometrinin bozulmasını engeller. Kırık bağlar arasında dimer bağları oluşturulur. Gerekli durumlarda dimer’a eğim (tilt) açısı verilerek durulma işlemi gerçekleştirilir.



(a)



(b)

Şekil 2.31 a. Asimetrik dimer ve tilt açısı, b. "c" tipi asimetrik dimer modeli

Teorik modelleme sayesinde yüzey relax olduktan sonra elde edilen geometri kullanılarak aşağıdaki sonuçlara ulaşılabilir:

- atomik konumları
- enerji bandını
- durum yoğunluğunu
- bağ uzunluklarını
- elektronik yük yoğunluğu

3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1 Materyal

Bu tez çalışmasında, silisyum elementi temel alınarak yüzey özellikleri araştırılmıştır. Bununla birlikte alt taş olarak kullanılmış ve üzerine çeşitli atomlar adsorbe edilmiştir.

Ancak, yüzey özelliklerini incelemeye geçmeden önce, silisyum elementinin fiziksel ve kimyasal özelliklerinden bir miktar bahsedilmelidir. Bu sayede “Neden silisyum?” sorusunun cevabına daha çok yaklaşmış olacaktır.

Sembol : Si

Atom numarası : 14

Atom ağırlığı : 28.0855 g/mol

Oda koşullarında (25°C 298 K) : Koyu gri renkli katı

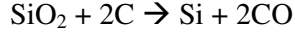
Yarı Metal, p-blok elementi

Silisyumun ilk keşfi 1824 yılında Berzelius tarafından gerçekleştirilmiştir.

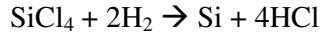
Silisyum doğada siliksat asidi ($m\text{SiO}_2.n\text{H}_2\text{O}$) ve tuzları halinde bulunur. Yerkabuğunun yaklaşık %25,7 si bu elementten oluşur. Oksijenden sonra bileşikleri halinde en fazla bulunan elementtir. Silisyum oksit (SiO_2) doğada kum ve kuartz şeklinde bulunur.

Silisyumun iki tane allotropu vardır. Bunlardan birincisi saf kristal silisyumdur. Saydam olmayan koyu gri renkli, parlak sert ve kırılğan olup örgü yapısı elmasa benzer. Diğeri ise amorf silisyumdur. Koyu kahve renkli olup tane büyüklüğü nedeni ile kristal silisyumdan ayırt edilebilir. Kolay reaksiyon verir.

Saf olarak silisyum eldesi, silisyum oksidin kok kömürü (grafit) ile elektrikli fırında indirgenmesi sonucunda gerçekleşir. Gerekenden daha fazla karbon kullanılırsa silisyum karbür (SiC) oluşur.



Silisyum klorür (SiCl_4) önce fraksiyonlu destilasyon yöntemi ile saflaştırılır. Daha sonra hidrojen ile indirgenir. Bu şekilde çok saf silisyum elde edilir.



Fiziksel Özellikleri

Yoğunluğu : 2,330 g/mL

Erime noktası : 1414 °C (1687K)

Kaynama noktası : 2900 °C (3173K)

Molar hacmi : 12,06 ml/ mol

Mineral Sertliği : 6,5

Özgül ısı : 0,700 J g⁻¹ K⁻¹

Isı iletkenliği : 1,48 W/cmK

Buharlaşma Entalpisi : 359 kJ mol⁻¹

Atomlaşma Entalpisi : 456 kJ mol⁻¹

Kimyasal Özellikleri

Elektronik konfigürasyonu : [Ne].3s².3p²

Elektronegatiflik : 1,90 (Pauling birimine göre)
2,14 (Sanderson elektronegatifliğine göre)

Elektron ilgisi : 133,6 kJ / mol

Atomik yarıçap : 110 pm (hesaplanan 111 pm)

Oksidasyon sayısı : 4, 2, 8

İyonlaşma enerjisi :

I. İyonlaşma Enerjisi	786,5 kJ mol ⁻¹
II. İyonlaşma Enerjisi	1577,1 kJmol ⁻¹
III. İyonlaşma Enerjisi	3231,6 kJmol ⁻¹
IV. İyonlaşma Enerjisi	4355,5 kJmol ⁻¹
V. İyonlaşma Enerjisi	16091 kJmol ⁻¹
VI. İyonlaşma Enerjisi	19805 kJmol ⁻¹
VII. İyonlaşma Enerjisi	23780 kJmol ⁻¹
VIII. İyonlaşma Enerjisi	29287 kJmol ⁻¹
IX. İyonlaşma Enerjisi	33878 kJmol ⁻¹
X. İyonlaşma Enerjisi	38726 kJmol ⁻¹

İzotopları:

İzotop	Yarılanma Süresi
²⁶ Si	2,23 saniye
²⁷ Si	4,14 saniye
²⁸ Si	Kararlı
²⁹ Si	Kararlı
³⁰ Si	Kararlı
³¹ Si	2,62 saat
³² Si	160 yıl
³³ Si	6,1 saniye
³⁴ Si	2,8 saniye

Kullanım Alanları

- Çimento yapımında
- Tıpta silikon yapımında
- Beton ve tuğla yapımında
- Çeliğin bileşimine katılarak
- Kuartz camı denilen cam UV ışığı geçirdiği için spektrofotometrelerde küvet olarak
- Jel halinde oluşmuş kuartza kiselgur denir. Bu madde adsorbsiyonu fazla olduğu için dinamit yapımında ve analitik uygulamalarda kolon dolgu maddesi olarak
- Polimerik bir yapıya sahip oldukları için kaydırıcı yağ olarak
- Silisyum karbit (SiC) zımpara yapımında
- Transistör, diyot ve güneş pilleri gibi elektronik endüstrisinde

Silisyum, 1.12 eV indirekt bant aralığına sahip bir yarıiletkenidir. Bir yarıiletkenin indirekt bant aralığına sahip olması, opto-elektronik özelliklerini belirler. Ayrıca Si, günümüz elektroniğinin ve yarıiletken teknolojisinin temelini oluşturan malzemelerden biridir.

Bulk halinin yanı sıra, (001), (110)ve (111) gibi farklı yüzeyleri de farklı elektronik özellikler sergiler. Yüzey biliminin gelişmesiyle birlikte bu ilginç özellikler teknolojik açıdan kullanılabilir hale gelmiştir. Kuantum çukurları, kuantum telleri ve kuantum noktaları gibi aygıtlar gelişmekte ve bu aletler lazer üretimi gibi alanlarda kullanılmaktadır. Ayrıca silisyumun doğada çok miktarda bulunması, ucuz olması, işlenebilirliğinin kolay olması ve bu elementi baz alan bir sanayinin gelişmiş olmasıyla birlikte üretim tekniklerinin biliniyor olması, bu malzemenin çalışılmasında oldukça etkindir.

3.2 Yöntem

Bu tez çalışmasında S. Baroni ve arkadaşları (Baroni et al. 1987) tarafından geliştirilmiş bir bilgisayar programı olan PWSCF kullanılmıştır. Bu program verilen Bravais örgüsü ve grup simetrisiyle periyodik bir kristalin elektronik bant yapısını, yük yoğunluğunu ve toplam enerjisini hesaplar. Algoritma, DFT'ye dayanan LDA üzerine kurulmuştur. Program periyodik örgü kolları ve diğer valans elektronlarının oluşturduğu potansiyel içindeki bir valans elektronu için özuyum' dan Kohn-Sham denklemlerini çözer. K-S denklemleri, orbitalleri sınırlı bir düzlem dalga baz setiyle genişletilir. Bu işlem iterasyon tekniğiyle çözülen özdeğer problemini kolaylaştırır. Program, katının yapısal (örgü sabitleri, bulk modülü ve elastik sabitleri) ve dinamiksel (fonon frekansları) özelliklerini, yapısal faz geçişlerini ve katı üzerindeki basınç etkilerini hesaplamada etkilidir.

Kohn-Sham denklemleri ile DFT formülasyonu içinde etkileşen bir sistemin toplam enerjisi denklem (2.47)'de verilmiştir. PWSCF kodları toplam enerjiyi hesaplamak için (2.48) eşitliğini kullanarak (2.47) eşitliğini çözer. Programda keyfi bir $V_{gir}(r)$ potansiyeli kullanılarak iterasyon başlatılır. Her iterasyon sonucunda yeni bir $V_{çık}(r)$ potansiyeli elde edilir. En iyi çözüm, giriş ve çıkış potansiyellerinin

$$V_{gir}^{(n+1)} = (1 - \beta)V_{gir}^{(n)} + \beta V_{çık}^{(n)} \quad (3.1)$$

karışımıdır. Burada β , 0 ile 1 arasında bir sayıdır. Bu parametre küçük sistemler için büyük tutulmalıdır. ($\cong 0,7$) Fakat yakınsamanın zor olduğu durumlarda indirgenmelidir. Çizelge 3.1’de programın kod yapısı ve Çizelge 3.2’de programın girdi dosyasında kullanılan temel bazı parametreler verilmiştir.

Çizelge 3.1 PWSCF programının kod yapısı

<u>Adı</u>	<u>Çağırılması</u>	<u>Açıklama</u>
Reodin		Giriş verilerini ve PP ifadesini okur
Setup		Değişkenleri parafize eder
	Latgen	a_1, a_2, a_3 vektörleriyle Ω 'yı hesaplar
	Recips	b_1, b_2, b_3 ' leri üretir
	Ggen	G vektörlerini ve HFG düzlemlerini üretir
	Cubicsym	Simetri işlemlerini üretir
	Sgama	Özel örgü noktaları, atomik pozisyonlar ve nokta grup simetrisi boyunca uyumluluğu kontrol eder
Openfile		Gerekli dosyaları açar
Summary		Giriş değerleri ve iç değişkenler üzerindeki bilgileri yazar
	Setlocal	PP'nin yerel bölümünü hesaplar
	Setab	BHS ve PP için hesap yapar
	Setripot	Hamiltoniyen içine BHS ve PP koyar ve $k+G$ 'leri hesaplar
	Sumatom	Atomik yükler toplanırken yükü hesaplar
Wfcnit		Dalga fonksiyonunu başlangıç pozisyonuna döndürür
	h-fill	Küçük bir matrisle hamiltoniyeni doldurur
	Cdiagd	EISPACK ile köşegenleştirir
Pwscf		Öz-uyum döngüsünü kontrol eder
	c-bands	Dalga fonksiyonlarını hesaplar
	Sum-band	Yük yoğunluğunu hesaplar
	v-of-rho	Yeni potansiyeli hesaplar
	Delta-e	Toplam enerjinin bazı terimlerini hesaplar
	Dmixp	Yeni giriş potansiyelini hesaplar
Punch		Sonuçları diske kaydeder
Closfil		Bütün dosyaları kapatır

Çizelge 3.2 Programın girdi dosyasında kullanılan temel parametreler

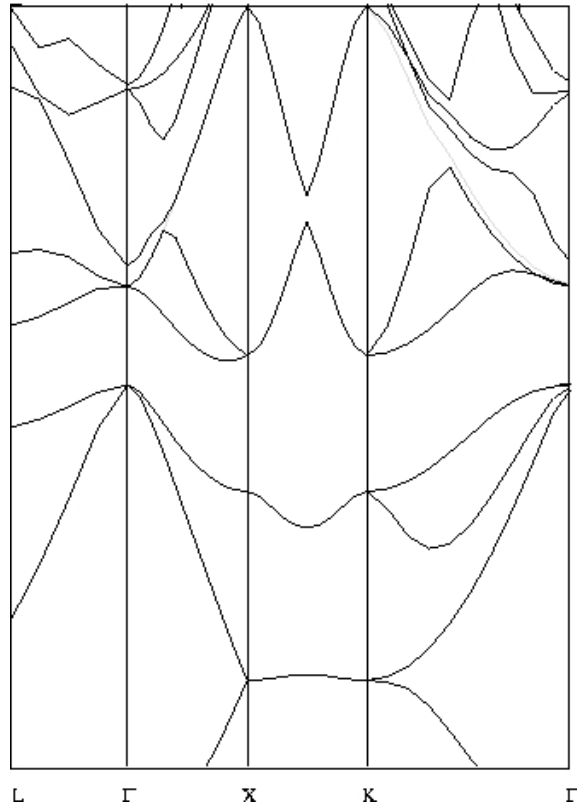
calculation	Yapılacak olan hesaplamanın tipini tanımlar (scf, nscf, phonon, relax, md, vc-relax, vc-md, neb)
restart_mode	'from_scratch' yeni bir hesaplama başlamak için kullanılır, 'restart' bir önceki hesaptan devam etmek için kullanılır
nstep	İterasyonun yakınsamadan gideceği en fazla adım sayısını belirtir
etot_conv_thr	Toplam enerji yakınsamasının virgülden sonra kaçınıcı haneye kadar olacağını belirtir
forc_conv_thr	Kuvvet enerji yakınsamasının virgülden sonra kaçınıcı haneye kadar olacağını belirtir
pseudo_dir	Programın, pseudo-potansiyeli hangi konumdan okuyacağını belirtir
ibrav	Bravais örgünün tipini belirler
celldm(i)	Kristalin örgü parametresini belirtir
nat	Sistemdeki atom sayısını belirtir
ntyp	Sistemde kaç farklı tip atom olduğunu belirtir
ecutwfc	Dalga fonksiyonu için kinetik enerji kesilim değerini belirtir
xqq	Fonon hesabı için q-noktası değerlerini belirtir
mixing_beta	Öz-uyum hesabı için karışım faktörünü belirtir
ecutrho	Yük yoğunluğu için kinetik enerji kesilim değerini belirtir
prefix	Girdi ve çıktı dosyalarının isimlerini belirtir

4. BULGULAR

Modelleme ilkeleri bir önceki bölümde anlatılan ab initio metot ile Si (001) yüzeyi için yapılan çalışmalar ve elde edilen bulgular aşağıda yer almaktadır.

4.1 Bulk Si

Bu tez çalışmasında GGA yaklaşımı içeren bir ultrasoft pseudo-potansiyel kullanılarak, Si için kesilim enerjisi 23 Ryd, örgü parametresi 5,46Å olarak bulunmuştur. Bulk silisyum için literatürde verilen deneysel örgü parametresi 5,43Å'dur. Kullanılan pseudo-potansiyel GGA yaklaşımı içerdiği için, teorik sonuç deneysel sonuçtan daha büyük çıkmıştır. Hesaplanan bu parametreler dikkate alınarak bulk silisyumun elektronik bant yapısı çizilmiştir. Elektronik bant hesabı yapılırken dört yüksek simetri noktası için 26 tane özel k noktası (k-points) kullanılmıştır.



Şekil 4.1 Bulk Si'nin elektronik bant yapısı

Şekil 4.1'deki enerji bandı incelendiğinde, Γ noktasında 0,64 eV indirek bant aralığı gözlenmiştir. Ab-initio hesaplamalarında enerji bant aralığının gerçek değerden daha küçük çıkması, literatürde yaygın olarak bilinen bir durumdur. Bulduğumuz bu değer bir önceki bölümde verilen değerden (1,12 eV) daha küçüktür. Bulk Si için bulunan sonuçlar deneysel çalışmalarla uyum içindedir.

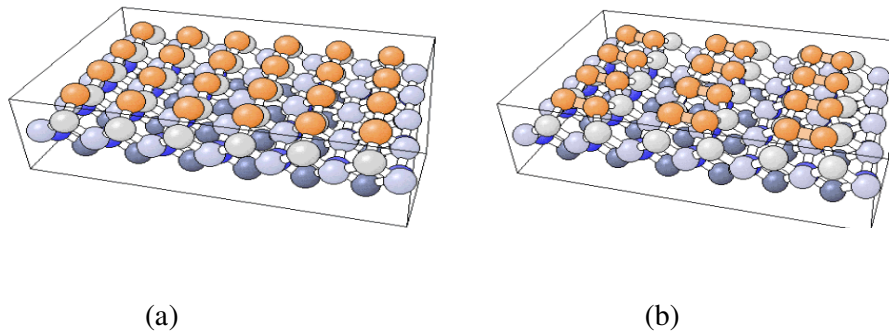
4.2 Temiz Si (001) Yüzeyi

4.2.1 Atomik yapı

MBE büyütülmüş Si (001) yüzeyi deneysel olarak incelendiğinde, düşük sıcaklıklarda $c(4 \times 2)$, oda sıcaklığında ise (2×1) yeniden yapılanma sergilediği görülmüştür. Bu yeniden yapılanmaların yapı bloğu, yüzey dimer formudur.

İdeal (1×1) yapısı gibi sonlanmış bulk geometri için, (001) yüzeyinin her bir atomu, kısmen dolu iki kırık bağ içerir. Durulma ve yeniden yapılanma mekanizmaları, bir araya gelip yüzey enerjisini düşürürken, sistemin yarıiletken özellik göstermesine yol açabilirler.

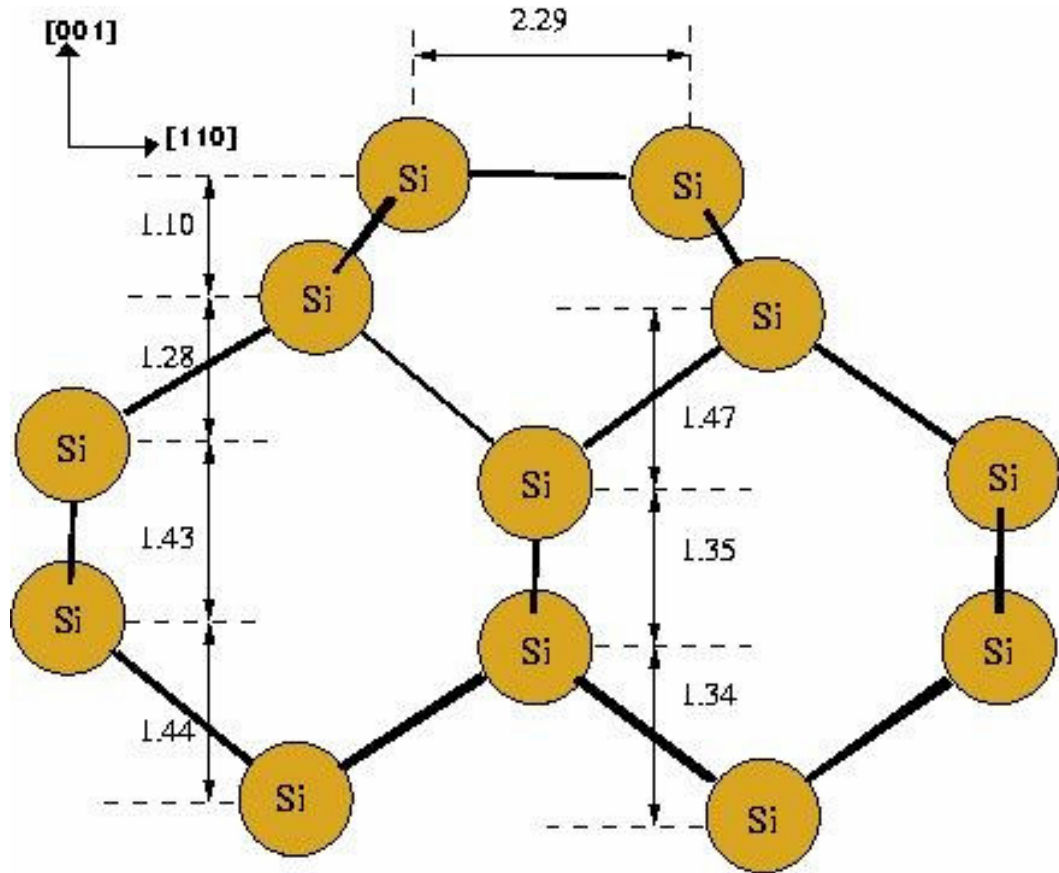
$[110]$ doğrultusu boyunca, komşu iki silisyum atomundan her birinin bir kırık bağındaki elektronların paylaşılmasıyla bir $pp\sigma$ bağı oluşur ve yüzey (2×1) dimer formunda yeniden yapılanır. Atomik durulma, tüm yükün bir dimer bileşeninde kalan kırık bağdan diğerine geçişine yardımcı olur. Kırık bağı tam dolu olan dimer bileşeni bulkten dışarı doğru itilirken, diğer bileşen bulk doğrultusunda “relax” olur (Srivastava 2000).



Şekil 4.2 a. Si (1×1) relax olmadan önce b. relax olduktan sonra (1×2)

Si (001)-(2x1) yüzeyi, simetrik ve asimetrik olmak üzere, iki dimer yapısı gösterir. Teorik hesaplama yapılırken, yüzeyin hangi yapıyı tercih edeceğini anlamak için kristalin toplam enerjisine bakılır.

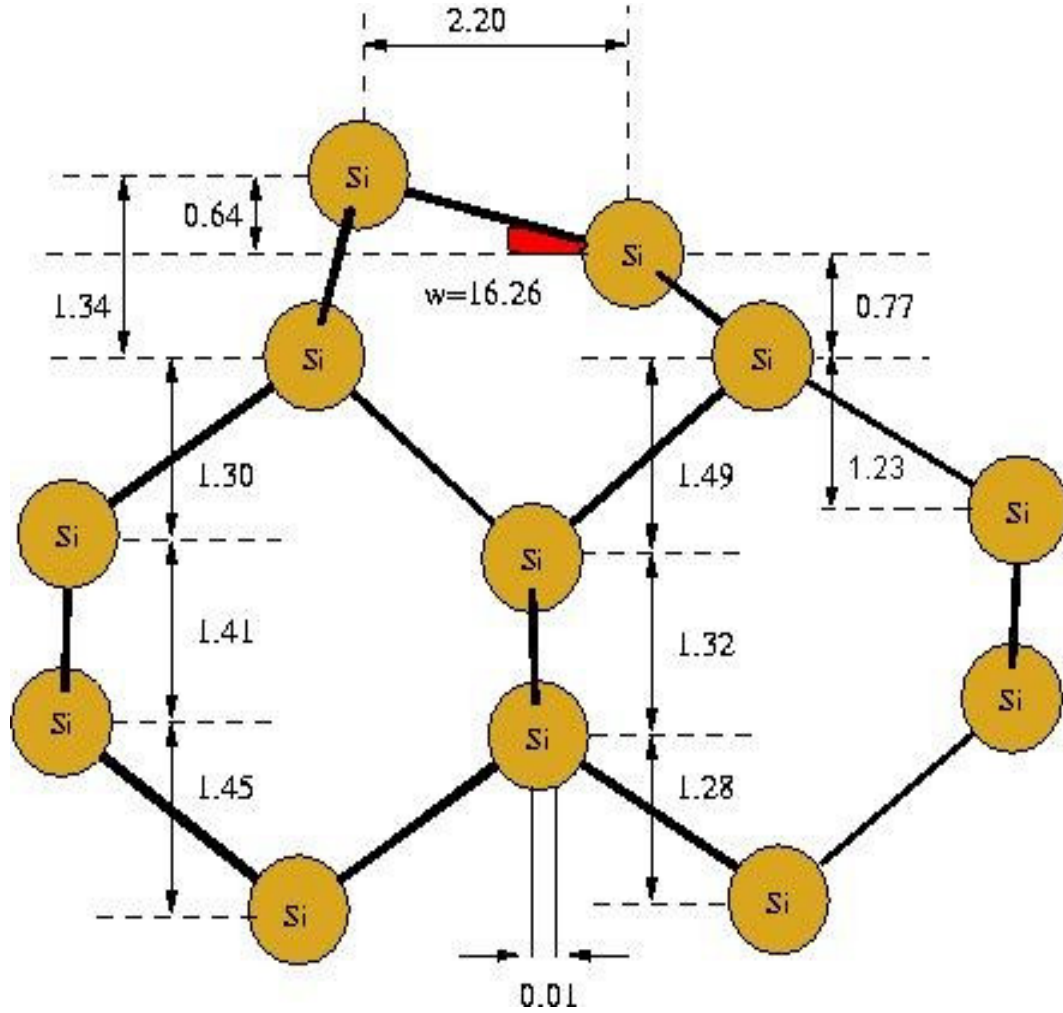
Her iki model için Si kristalinin toplam enerjisi hesaplandığında, asimetrik dimer modelinin daha kararlı olduğu, dolayısıyla Si (001)-(2x1) yüzeyinin, asimetrik dimer formunu tercih ettiği görülür.



Şekil 4.3 Simetrik dimer modeli

Şekil 4.3'te simetrik dimer formundaki yapının relax olmuş yani durulmuş hali görülmektedir. Bu çalışmada atomik yapılar için verilen tüm uzunluk birimleri angström (Å) cinsindedir.

Asimetrik dimer formu, simetrik dimer formuna göre 0.16 eV/dimer kadar daha enerjitiktir. Bu model, yapılan teorik hesaplarla elde edilen anahtar yapı parametreleri ile birlikte şekil 4.4'te verilmiştir.



Şekil 4.4 Asimetrik dimer modeli

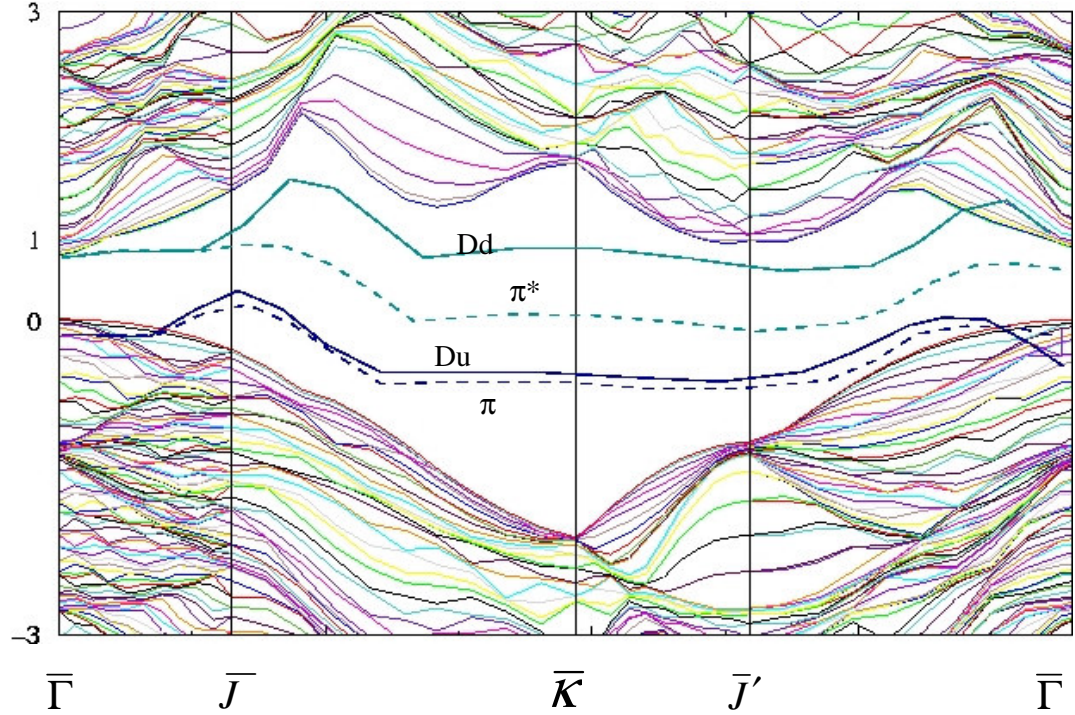
Dimer'ın üst bileşeni $16,26^\circ$ lik bir tilt açısı yaparak, simetri konumundan $0,64$ Å dikey yükseltiye (vertical buckling) çıkmıştır. Dimer bağının uzunluğu $2,30$ Å'dur. Dimer bileşenleri arasındaki dik uzaklık ise $2,20$ Å olarak hesaplanmıştır. Srivastava'nın (2000) çalışmasında ise, tilt açısı $16,1^\circ$, vertical buckling $0,62$ Å ve dimer uzunluğu $2,25$ Å olarak verilmiştir. Daha önce yapılan çalışmalarda elde edilen sonuçlar da çizelge 4.1'de verilmiştir. Sonuçlar literatürle uyum içindedir.

Çizelge 4.1 Temiz yüzeyin asimetrik dimer bileşeni uzunlukları

Referanslar	Si-Si Dimer Uzunluğu (Å)
Pollmann et al. (1995)	2,25
Srivastava (2000)	2,25
Romero et al. (2001)	2,27
Bu çalışma	2,30

4.2.2 Elektronik Yapı

Bu kesimde asimetrik ve simetrik dimer formu için Si (001) (1x2) yüzeyinin enerji bant hesabı gerçekleştirildi. Elde edilen sonuçlar izdüşümü alınmış bulk bantlarıyla birlikte şekil 4.5'te verilmektedir. Bu sayede o yüzeyde bulunan dimer'ların enerji durumlarının hangi aralığa düştüğü görülerek sistemin elektronik durumuna ne gibi etkiler yaptığı ortaya çıkarılır.



Şekil 4.5 Si (001) (1x2) yüzey enerji bandı

Daha önce yüzey durulma mekanizması açıklanırken anlatıldığı üzere, dimer bileşenlerinden tam dolu olan, yüzeyden dışarı doğru itilirken, boş olan dimer bileşeni yapının içine doğru çekilir. Şekil 4.5'te kesikli çizgilerle gösterilen π ve π^* yüzey durumları simetrik dimer modeline, D_u ve D_d ise asimetrik dimer modeline aittir. D_u (up “üst” atom) ile gösterilen durum, dışarı itilmiş üstteki dimer bileşenin elektronik katkısıdır. D_d (down “alt” atom) ile gösterilen ise, yüzeye yakın olan bileşenin katkısıdır. D_u bileşeni tam dolu halde olduğundan valans bandı görevini üstlenirken, D_d bileşeni boş olduğu için iletkenlik bandı gibi davranır (Çakmak, 1999). Bu sayede (001) yüzeyi, enerji bant aralığını küçültür. Bu iki yüzey durumu arasındaki $0,45\text{eV}$ 'luk enerji bant aralığı, sistemin yarıiletken davranış sergilemesine neden olur. Bu yüzeyin bant aralığı, Pollmann *et al.* (1996) tarafından $0,50\text{eV}$, Srivastava (2000) tarafından ise $0,40\text{eV}$ olarak hesaplanmıştır.

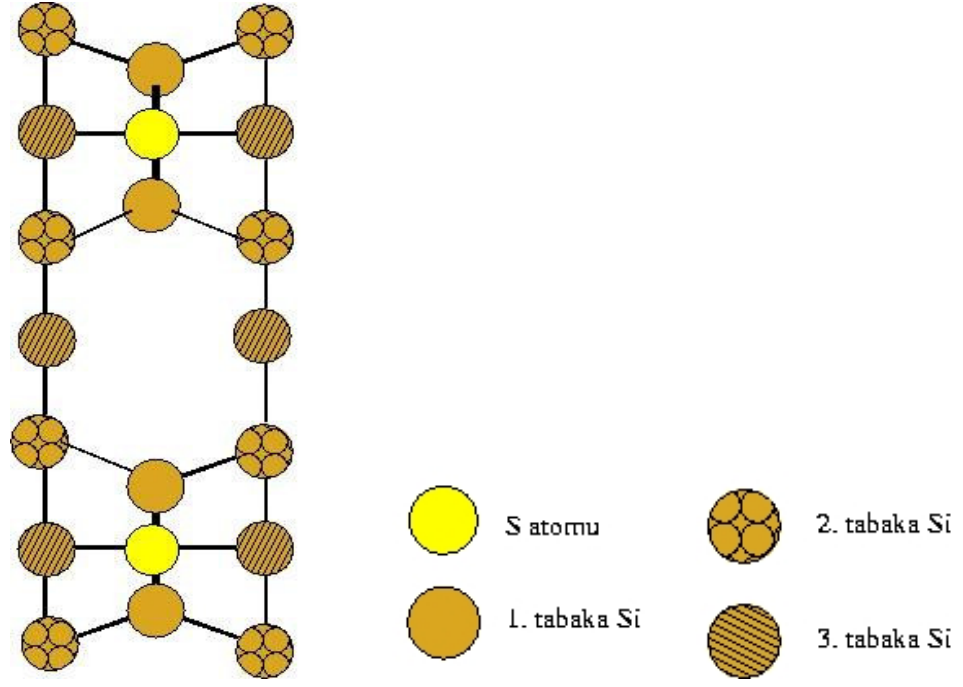
4.3 Si (001) Yüzeyinde S (Kükürt) Adsorplanması

Çalışmanın bu kısmında S atomları, Si (001) (1x2) yüzeyine 0.5 ML (hemisülfit), Si (1x1) (001) yüzeyine 1 ML (monosülfit) ve Si (1x1) (001) yüzeyine 2 ML (disülfit) olmak üzere üç farklı modelde adsorbe edilmiştir.

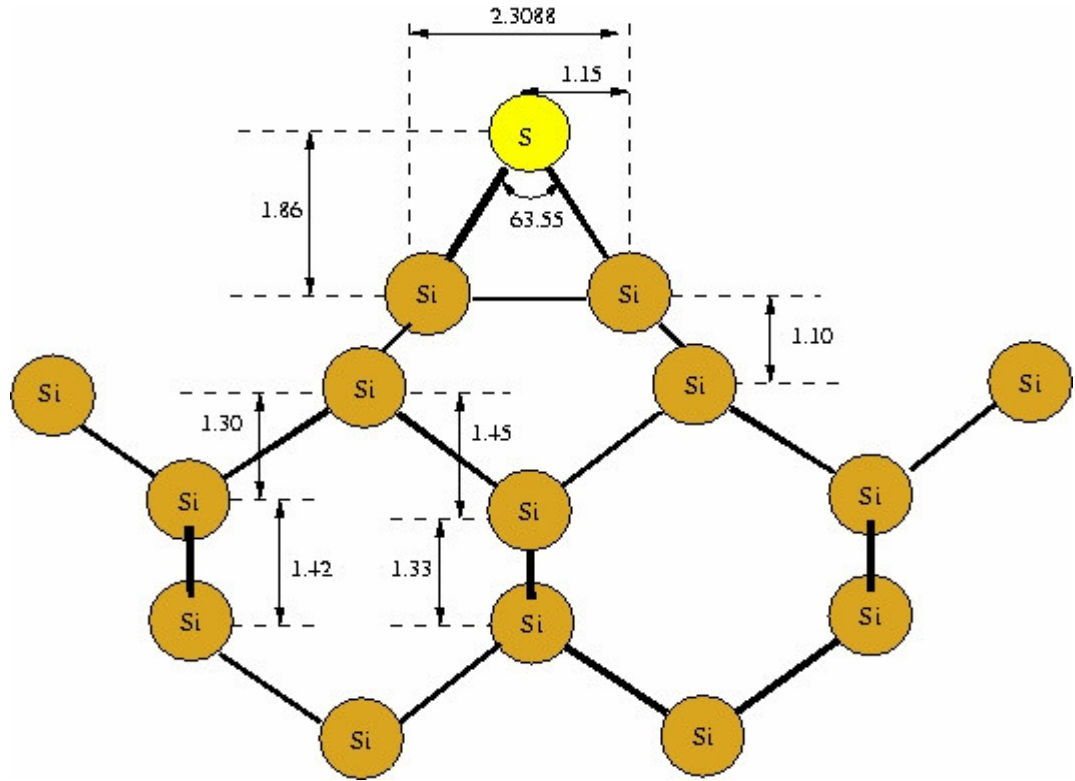
4.3.1 Hemisülfit Model

Hemisülfit yapıda S atomu, Si (001)(1x2) yüzeyinde bulunan Si-Si dimer'inin üzerinde köprü oluşturacak şekilde yerleşmiştir. Burada Si atomları dörder bağ yaparken, S atomlu iki bağ yapmıştır (Çakmak and Srivastava 1998). Her bir dimer bileşeni başına 0,5 S atomu düştüğü için, bu tip bağlanmaya 0,5 monolayer (ML) denilir. Şekil 4.6'da hemisülfit yapının üstten, Şekil 4.7'de ise yandan görünüşü verilmektedir.

Bir önceki bölümde temiz silisyum yüzeyinin asimetrik dimer modelini tercih ettiği belirtilmiştir. Ancak S atomunun, Si (1x2)(001) yüzeyine 0,5ML olacak şekilde yerleşmesi, Si – Si dimer'inin simetrik formda oluşmasına neden olmuştur. Hemisülfit yapıdaki dimer uzunluğu yaklaşık $2,31\text{Å}$ 'dur. Bu değer asimetrik dimer uzunluğundan $0,01\text{Å}$, simetrik dimer uzunluğundan ise sadece $0,02\text{Å}$ daha büyüktür.



Şekil 4.6 Hemisülfite yapının üstten görünüşü



Şekil 4.7 Hemisülfite yapının yandan (side) görünüşü

Hemisülfit modelde S atomu, Si - Si dimer bağının tam ortasına, dimer atomları ile yaklaşık 64°'lik bir açı yapacak şekilde yerleşmiştir. S'nin dimer tabakasından dik yüksekliği 1,86Å'dur. Ayrıca S - Si bağ uzunluğu 2,19 Å olarak bulunmuştur. Bu değerler, çizelge 4.2'de de görülebileceği gibi, daha önce yapılan çalışmalar ile uyumludur.

S'nin yüzeye yerleşmesiyle birlikte, simetrik hale gelen ilk tabakanın, bir altında bulunan silisyum atomlarıyla yaptığı bağın uzunluğu, kararlı temiz yüzeye göre bir miktar değişmiştir. Bu en üst iki tabakanın bağ uzunluğu 2,33Å olarak bulunmuştur. Bu tabakaların dik uzaklıkları ise 1,10 Å'dur. Bu değerlerin her ikisi de, simetrik dimer formundaki yapıyla aynıdır. Kararlı asimetrik durumla karşılaştırma yapıldığında, dimer'ın alt bileşeninin ikinci tabakaya dik mesafesinin (0,77 Å) yaklaşık %42 arttığı, üstteki dimer bileşeninin (1,34 Å) ise yaklaşık %18 azaldığı tespit edilmiştir.

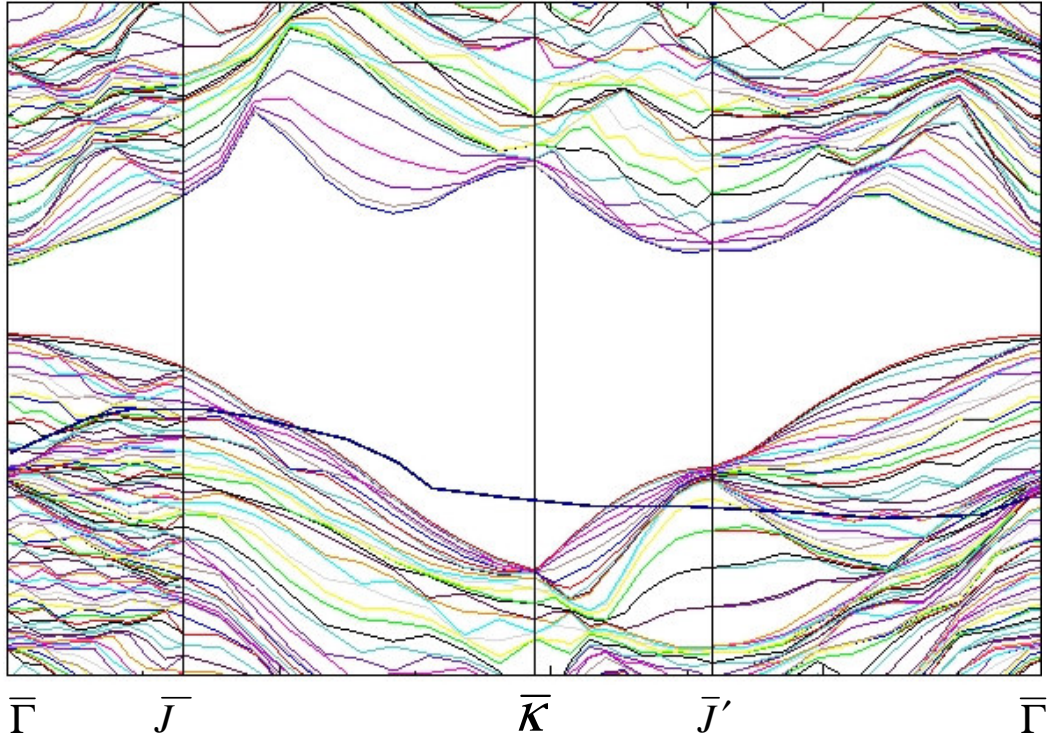
Çizelge 4.2 Hemisülfit bağ uzunlukları

	S - Si (Bağ uzunluğu)	Si - Si (ilk iki tabakanın bağ uzunlukları)	Açı	S atomum dimer'a dik yüksekliği
Çakmak, Srivastava (1998)	2,17 Å	2,32 Å	63,90°	1,84 Å
Papageorgopoulos et al. (1997)	-	-	-	1,87 Å
Bu çalışma	2,19 Å	2,33 Å	63,55°	1,86 Å

Bu yapının elektronik yüzey bant grafiği şekil 4.8'de verilmiştir. Hemisülfit yapıda, Si - Si dimer yapısının simetrik formda olduğundan daha önce bahsetmiştik. S adsorplanmasının Si(001) yüzeyinin elektronik bant yapısı üzerinde ne gibi değişiklik meydana getirdiğinin belirlenebilmesi için, simetrik modelin yüzey bandı ile karşılaştırma yapılması gerekir. Şekil 4.5'te görüldüğü üzere, simetrik dimer modeli için silisyumun temel bant aralığında iki yüzey durumu bulunmaktadır. Ancak yüzeye eklenen 0,5 ML S atomu sayesinde, gözlenen yüzey durumu sayısı bire düşmüştür.

Bu yüzey durumu, temel bant aralığının valans maksimumundan daha aşağıda kaldığı için, işgal edilmiş yüzey durumu olarak düşünülebilir.

Bu yüzey durumu için Çakmak (1999) şu açıklamayı yapmıştır; S atomunun p_z orbitali kendini tam dolu hale getirerek diğer simetrik yüzey durumlarının enerjilerini düşürür. Valans bandı kıyısında görülen yüzey durumu $p_z^S - \pi^{Si}$ karakterine aittir .



Şekil 4.8 Hemisülfit yapının yüzey enerji bandı

Hemisülfit yapı için hesaplanan bant aralığı 0,88 eV'dur. Bu durumda, bu yüzeyin yarıiletken davranış sergilediği görülür.

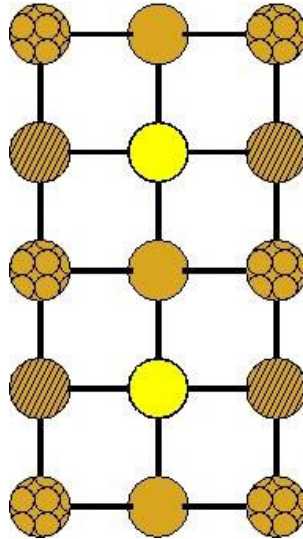
4.3.2 Monosülfit Model

S'nin adsorplanma oranı 0.5 ML'dan 1 ML'a çıktığında, Si (1x2)(001) temiz yüzeyi (1x1) periyodikliğinde yeniden yapılanır. Monosülfit yapıda S atomları, ideal (1x1) geometride Si atomlarının köprü oluşturması gereken yeri almıştır. Bundan dolayı bu

model için ideal bulk durumla karşılaştırma yapılabilir. Şekil 4.9’da monosülfit yapının üstten görünüşü, şekil 4.10’da ise yandan görünüşü verilmiştir.

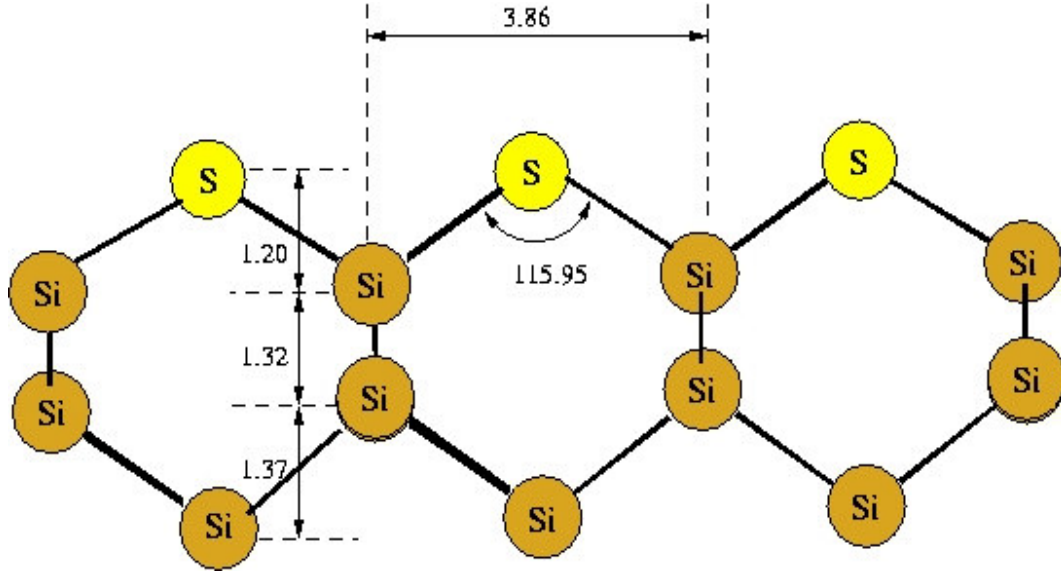
Bu yapıda Si atomları dörder bağ, S atomu iki bağ yapmıştır. En üst tabakadaki silisyum atomları başına düşen S atomu sayısı bir olduğu için bu tür bağlanma 1 ML olarak adlandırılmıştır.

İdeal bulk yapıda, Si atomları arasındaki dik yükseklik $1,37\text{Å}$ ’dur. Buna göre, monosülfit yapının şekil 4.10’deki durulmuş hali incelendiğinde, bu yapıda üstten ilk üç tabakanın durulduğu görülür.



Şekil 4.9 Monosülfit yapının üstten görünüşü

$1,20\text{Å}$ olan S – Si dik uzaklığının, hemisülfit yapıyla karşılaştırıldığında $0,66\text{Å}$, bulk durumla karşılaştırıldığında ise $0,17\text{Å}$ düştüğü görülmektedir. Ayrıca bağ uzunluklarına bakılacak olursa, S - Si atomlarının bağ uzunluğu $2,28\text{Å}$, Si – Si bağ uzunluğu ise $2,34\text{Å}$ olarak hesapladık. S atomunun yerinde Si’nin bulunduğu ideal bulk geometride ise bu uzunluk $2,37\text{Å}$ ’dur. Bağ uzunluğundaki bu kısaltmalar dikkate alındığında, bu yapıdaki S – Si bağının hemisülfit yapıdakinden ve ideal Si – Si bağından daha kuvvetli olduğu düşünülebilir. Ayrıca, S – Si bağının kısaltması, bulktaki 109° ’lik köprü açısının, monosülfit yapıda $115,95^\circ$ ’lik bir açıya dönüşmesine sebep olmuştur.



Şekil 4.10 Monosülfit yapının yandan görünüşü

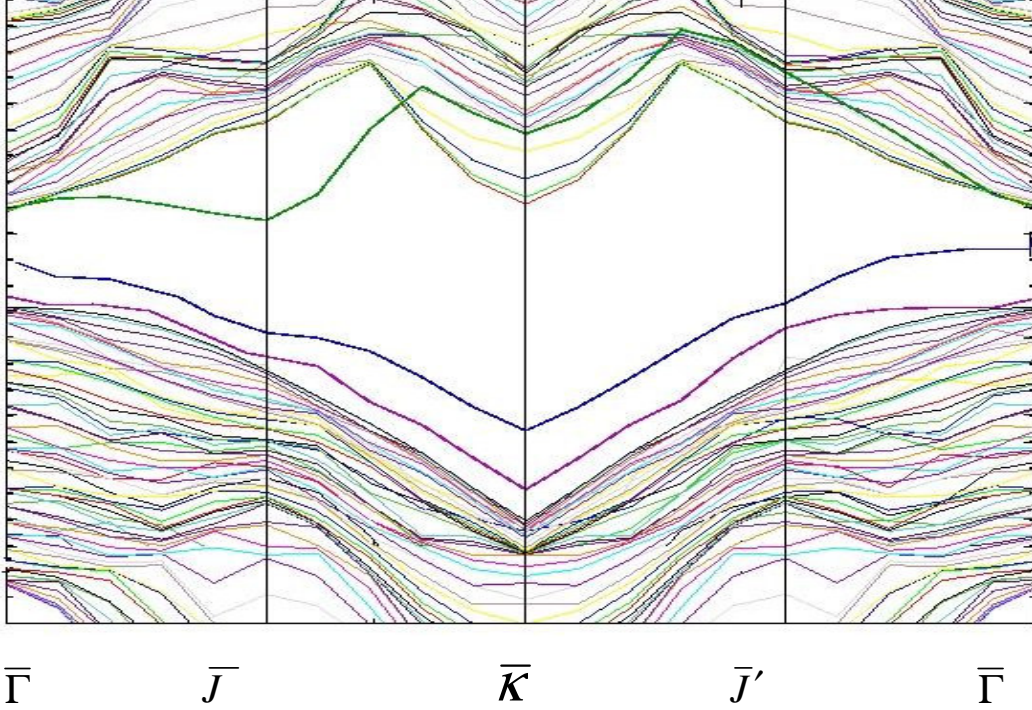
İdeal bulk silisyumda köprü pozisyonunun altındaki ikinci sıra Si tabakasında, [110] doğrultusu boyunca atomların birbirilerine uzaklıkları $3,86\text{Å}$ 'dur. Bu durumun 1 ML kaplamada da değişmediği görülmüştür.

Çizelge 4.3'te görüldüğü gibi, bulunan sonuçlar daha önce yapılmış çalışmalarla uyumludur.

Çizelge 4.3 Monosülfit bağ uzunlukları

	S-Si Bağ uzunluğu (Å)	Açı (°)	S'nin dik yüksekliği (Å)
Papageorgopulos et al.	-	-	1,09
Çakmak, Srivastava	2,26	115,50	1,19
Kaxiras	-	118,40	2,24
Bu çalışma	2,28	115,95	1,20

Şekil 4.11'de monosülfit yapının elektronik yüzey bandı görülmektedir. Buna göre, Si (001) bant aralığında üç tane yüzey durumu gözlenmiştir. Bunlardan ikisi valans bandına, üçüncüsü ise iletkenlik bandına yakın konumdadır.



Şekil 4.11 Monosülfit yapının yüzey enerji bandı

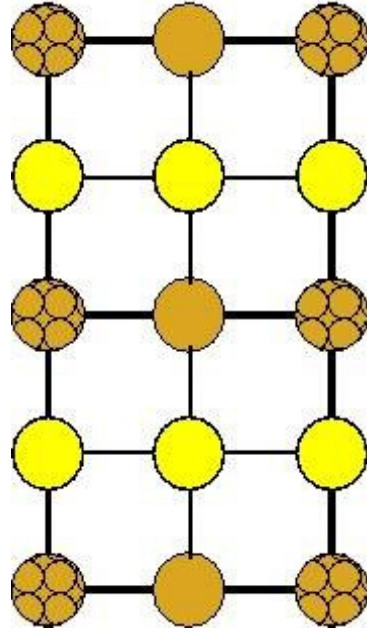
Şekil 4.11 de görüldüğü gibi, yarıiletken özellik gösteren bu yapının bant aralığını, Γ simetri noktasında 0,14 eV olarak belirledik. Aynı parametre, Çakmak ve Srivastava (1998) tarafından 0,45 eV olarak bulunmuştur.

4.3.3 Disülfit Model

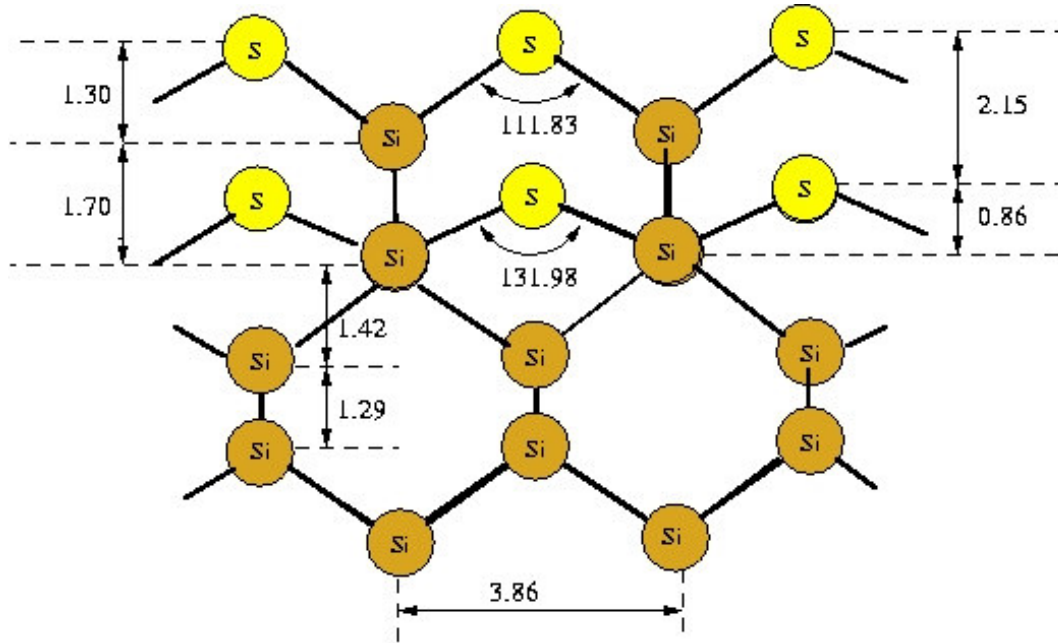
Disülfit yapıda iki tane S atomu, (1x1) geometrinin en üst iki Si tabakasına bağlanarak köprü oluşturur. Si (001) (1x1) yüzeyinde bulunan toplam S atomu sayısı iki olduğu için bu yapı 2 ML olarak adlandırılır. Şekil 4.12 disülfit yapının üstten, şekil 4.13 ise yandan görüntüsünü vermektedir.

Bu yapıda, [110] doğrultusu boyunca uzanan üst tabaka Si atomları arasındaki mesafe 3,86 Å olarak hesaplanmıştır. Bu değer, ideal bulk ve monosülfit yapı için de aynıdır.

S atomları yapıda, tam alt alta gelecek şekilde, [110] boyunca uzanan Si – Si mesafesini ortalayarak yerleşmiştir.



Şekil 4.12 Disülfite yapının üstten görünüşü



Şekil 4.13 Disülfite yapının yandan görünüşü

S atomlarının kendi aralarındaki dikey yükseklik farkı $2,15\text{Å}$ 'dur. Üstte bulunan S atomunun en üst tabaka silisyuma dik uzaklığı monosülfite yapıda $1,20\text{Å}$ 'dur. Ancak yapıya ikinci bir S atomunun girmesiyle birlikte bu mesafe $1,30\text{Å}$ 'a çıkmıştır. Aynı zamanda ikinci tabakadaki S atomunun, bağlı bulunduğu ikinci tabaka Si atomuna dik uzaklığı $0,86\text{Å}$ olarak hesaplanmıştır.

Disülfite modelde üstteki S atomunun yüksekliğinin artması, monosülfite yapıda $115,95^\circ$ olan üst Si – S – Si köprü açısının $111,83^\circ$ 'ye düşmesine yol açmıştır. Alt köprünün açısı ise $131,98^\circ$ 'dir. Çakmak'ın (1999) çalışmasında ise bu değerler $116,41^\circ$ ve $153,53^\circ$ olarak verilmiştir.

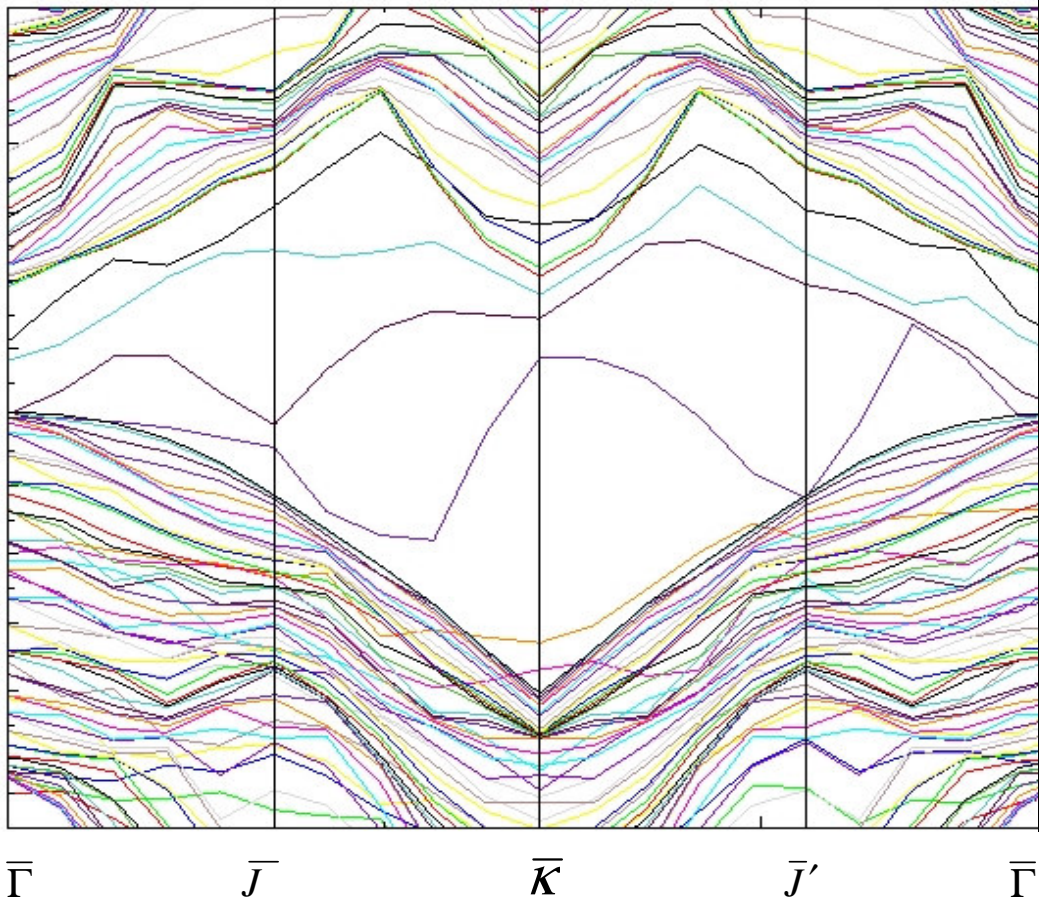
Birinci (üst) tabakada bulunan S atomunun, komşu Si atomları ile yaptığı bağın uzunluğu $2,33\text{Å}$ olarak hesaplanırken, ikinci tabaka S atomunun komşu Si atomlarıyla yaptığı bağın uzunluğu $2,11\text{Å}$ olarak ölçülmüştür. İdeal bulk'ta köprü pozisyonunun bağ uzunluğu $2,37\text{Å}$ 'dur. Bu durumda, her iki bağın da bulk'a göre kuvvetlendiği ancak birinci tabaka S atomlarının ikinci tabakaya oranla daha zayıf bir bağ yaptığı söylenebilir. Şekil 4.10 ve 4.13 birlikte incelenirse, 2ML kaplamanın ikinci ve üçüncü tabakadaki Si - Si bağının zayıflamasına neden olduğu rahatça görülmektedir.

Yine aynı şekilde, ilk iki tabakanın Si – Si uzunluğu $2,58\text{Å}$ hesaplanarak ideal durumdan ve monosülfite yapıdan ayrılır. Şekil 4.13 dikkatlice incelendiğinde disülfite yapının diğer iki modele oranla daha fazla tabakayı relax ettiği görülür.

Çizelge 4.4 Disülfite yapının bağ uzunlukları

	S ₁ -Si ₁ bağı (Å)	S ₁ -Si ₁ dik uzaklık (Å)	S ₂ -Si ₂ bağı (Å)	S ₂ -Si ₂ dik uzaklık (Å)	Si ₁ - Si ₁ -Si ₁ açısı (°)	Si ₂ - Si ₂ -Si ₂ açısı (°)	Si ₁ -Si ₂ bağı (Å)	Si ₁ -Si ₂ dik uzaklık (Å)
Çakmak	2,26	1,19	1,97	0,45	116,41	153,53	2,46	1,54
Bu çalışma	2,33	1,30	2,11	0,86	111,83	131,98	2,58	1,70

Çizelge 4.4'te "1" ve "2" indisleri birinci ve ikinci tabaka atomlarını belirtmektedir.



Şekil 4.14 Disülfit yapının yüzey enerji bandı

Disülfit yapısının elektronik özellikleri incelendiğinde, diğer iki modelden farklı olarak, yüzey durumlarının fermi seviyesini kestiği ve belirgin bir bant aralığı olmadığı görülmüştür. Dolayısıyla, şekil 4.14'deki enerji bant diyagramından da anlaşılacağı gibi, bu yüzey metalik özellik gösterir.

4.4 Si (1x2) (001) Yüzeyine Ge Adsorplanması

Tez çalışmasının bu kısmında, Ge atomunun Si(001)-(1x2) yüzeyi üzerine adsorplanmasını 0.5 ML ve 1 ML için inceleyeceğiz.

0.5 ML kaplama, Ge atomu asimetrik dimer'in yukarı veya aşağı bileşeninde olacak şekilde iki türlü modellenmiştir.

1 ML kaplama, altı farklı model için ele alınmıştır. Bunlardan ikisi tek tip dimer'dan oluşur. Tek tip dimer modelinde Ge atomları ya dimer'ın kendisini oluşturur ya da bir alt tabakaya nüfuz eder ve bu durumda dimer'ı Si atomları oluşturur. Diğer dört model ise karışık yapıda dimer'a sahiptir.

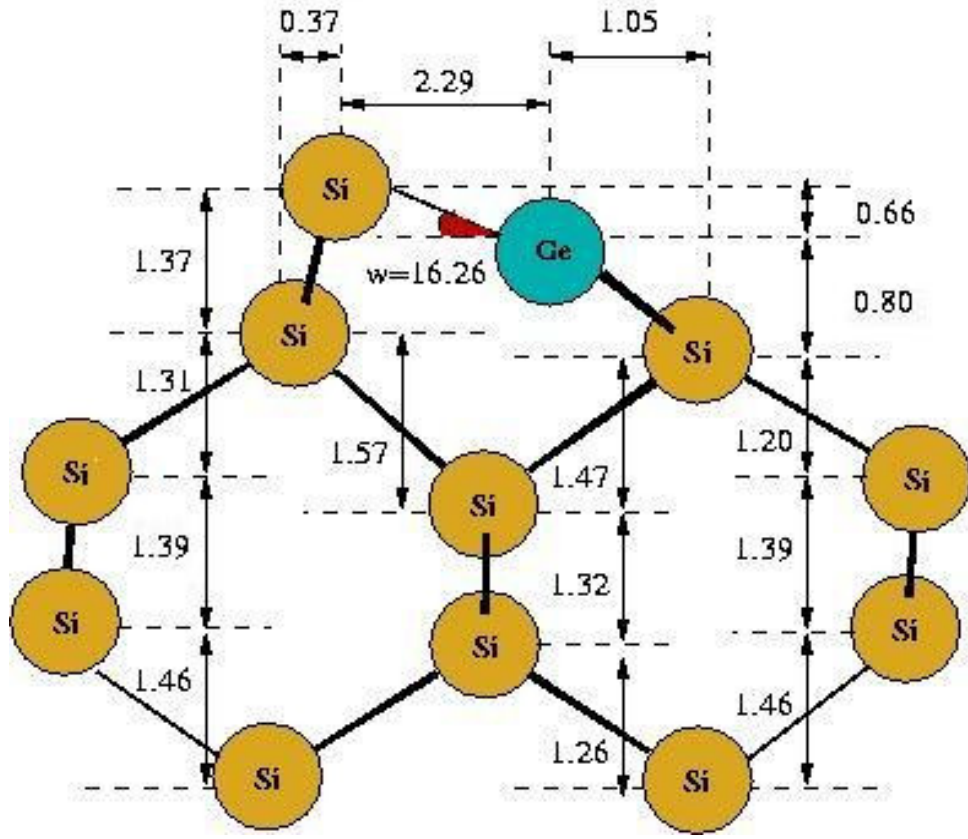
4.4.1 Si (1x2) (001) üzerine 0.5 ML Ge

0.5 ML germanyum kaplamada iki model önerilmiştir. Bunlardan ilkinde Ge atomu, en üst tabakadaki asimetrik dimer'ın alçakta kalan bileşenini oluşturacak şekilde yerleşmiştir. Bu konum "alt atom konumu" olarak adlandırılır. İkinci modelde ise yüksek olan bileşen germanyumdur. Bu ise, "üst atom konumu" olarak adlandırılır. Sonuçta, her iki modelde de dimer, tek tip atomdan oluşmadığı için "karışık dimer (mixed dimer)" olarak bilinir.

Daha önce Cho *et al.* (1994) tarafından yapılan çalışmalarda, Ge atomunun ikinci tabakaya nüfuz etmesinin 0.23 eV kadar enerji farkı yarattığı belirtilmiş ve bunun dikkate değer bir enerji farkı olmadığı ve ikinci tabakaya nüfuz etmenin göz ardı edilebileceği ifade edilmiştir. Jenkins ve Srivastava (1996) kendi çalışmaları sonucunda bu söylemin ancak düşük sıcaklıklar için geçerli olduğunu, yüksek sıcaklıkta (1000 K) ise %10 oranında Ge atomunun ikinci tabakaya nüfuz ettiğini söylemişlerdir. Bu difüzyon oranın küçük olduğunu, fakat bu sıcaklık değeri için tümüyle ihmal edilemeyeceğini belirtmişlerdir.

Sabit sıcaklıkta ikinci tabakaya difüz eden Ge atomu yüzdesi, kaplama oranı 0.5'den 1'e çıkarıldığında aşağı yukarı sabit kalır. Buradan çıkarılacak doğal sonuç ise şudur; kaplama oranı iki kat artarsa, ikinci tabakaya difuz eden Ge konsantrasyonu da iki katına çıkar (Jenkins and Srivastava 1996).

Bu tez kapsamında yapılan hesaplamalarda, "üst atom konumu"ndaki 0.5ML Ge kaplama, "alt atom konumu"na göre yaklaşık 0,17 eV'luk bir enerjiyle daha favori olarak gözlenmiştir. Jenkins ve Srivastava (1996), kendi çalışmalarında bu değeri 0,13 eV olarak belirtmiştir.

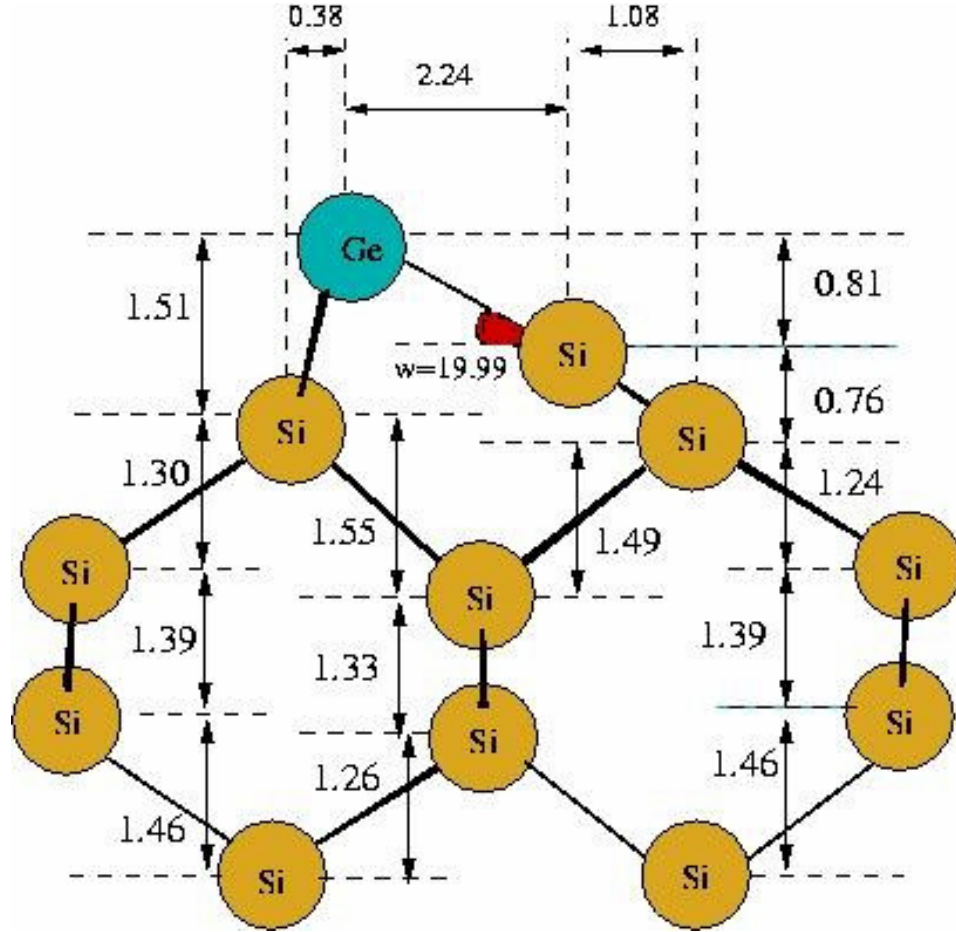


Şekil 4.15 Alt atom konumunda 0.5 ML Ge kaplama

Şekil 4.15 ve 4.16’da, yukarıda bahsedilen her iki modelin bağ uzunlukları ayrıntılı olarak verilmektedir. 0,5 ML kaplamanın tercih ettiği “üst atom konumu” ile temiz Si (001)-(1x2) karşılaştırıldığında, en üst iki tabaka hariç diğer alt tabakalardaki değişikliğin büyük boyutlarda olmadığı görülmüştür. Alt tabakalardaki atomların bağ uzunlukları yaklaşık $\pm 0,02 \text{ \AA}$ aralığında değişmiştir.

Bununla birlikte temiz yüzeyde $16,26^\circ$ olan tilt açısı, alt atom konumunda değişmemiş, üst atom konumunda ise $19,99^\circ$ ’ye çıkmıştır. “Vertical buckling (Dikey eğrilme)” denilen dimer’in simetri konumuna olan dik yüksekliği, temiz yüzeyde $0,64 \text{ \AA}$ iken, alt atom konumunda $0,66 \text{ \AA}$ ve üst atom konumunda $0,81 \text{ \AA}$ ’dur. Dimer bileşenleri arası dik uzaklık, temiz yüzeyde $2,20 \text{ \AA}$ olduğu halde, “alt atom konumu”nda $2,29 \text{ \AA}$ ’a, “üst atom konumu”nda ise $2,24 \text{ \AA}$ ’a yükselmiştir. Dimer’ların uzunlukları, “alt atom”da $2,36 \text{ \AA}$, “üst atom”da ise $2,37 \text{ \AA}$ dur. Her iki model için de bağların, temiz yüzeye göre zayıfladığı söylenebilir. Jenkins ve Srivastava’nın (1996) çalışmalarında ise, kararlı

durum için tilt açısı $19,3^\circ$, dimer uzunluğu $2,34 \text{ \AA}$ ve vertical buckling $0,77 \text{ \AA}$ olarak verilmiştir. Bu değerler bizim elde ettiğimiz sonuçlarla uyum içersindedir. Çizelge 4.5 0.5 ML kaplamanın temiz yüzeyle karşılaştırılmasını göstermektedir.

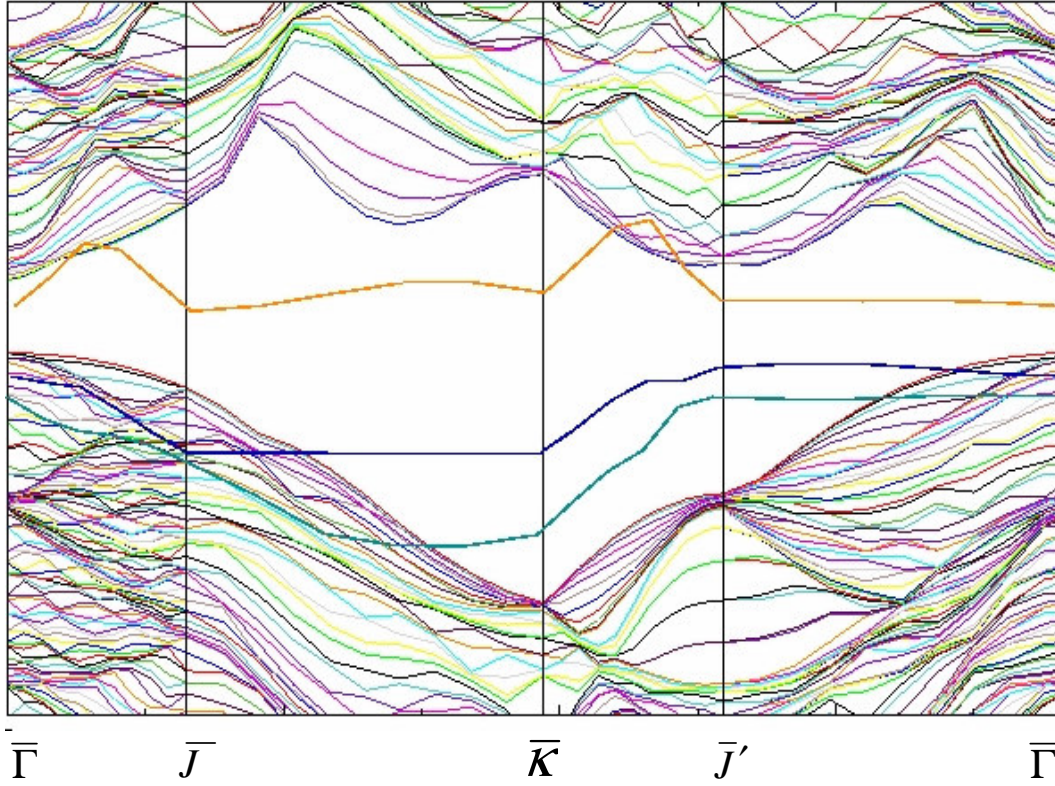


Şekil 4.16 Üst atom konumunda 0.5 ML Ge kaplama

Çizelge 4.5 Temiz yüzey, alt atom ve üst atom konumlarının karşılaştırılması

	Temiz Si (001) (1x2)	0.5 ML Ge Alt Atom Konumu	0.5 ML Ge Üst Atom Konumu
Tilt açısı (w)	$16,26^\circ$	$16,26^\circ$	$19,99^\circ$
Vertical buckling (Dikey eğrilme)	$0,64 \text{ \AA}$	$0,66 \text{ \AA}$	$0,81 \text{ \AA}$
d_{dimer} (dimer dik uzunluğu)	$2,20 \text{ \AA}$	$2,29 \text{ \AA}$	$2,24 \text{ \AA}$

Dimer başına 0,17 eV daha enerjilik olduğu ifade edilen “üst atom konumu” için çizilen yüzey elektronik bant yapısı şekil 4.17’de verilmektedir.



Şekil 4.17 Üst atom konumundaki 0,5ML Ge kaplama için yüzey enerji bantı

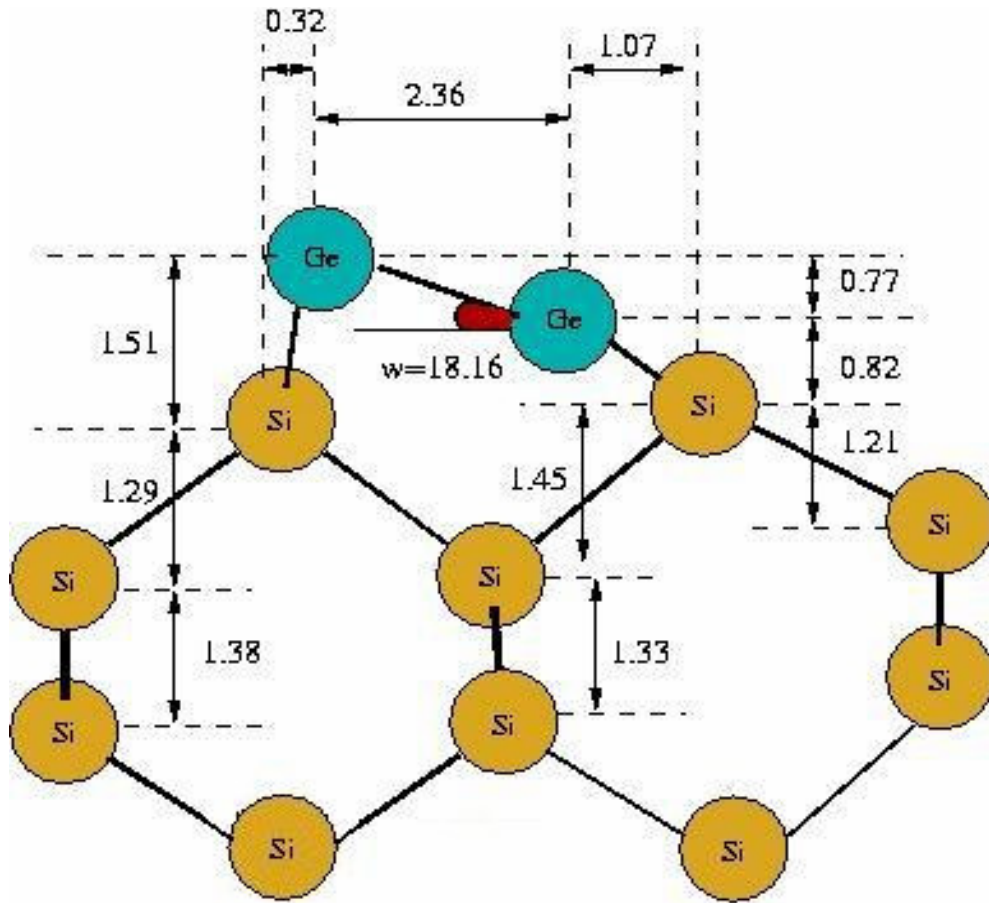
Bu yüzey, 0,43 eV bant aralığı ile yarıiletken özellik göstermiştir. Bu değer, kararlı temiz Si (001)-(1x2) yüzeyinin bant aralığından sadece 0,02 eV daha düşüktür. Bunun nedeni olarak germanyum elementinin, özellikleri bakımından silisyum elementine çok benzer olması gösterilebilir.

Ancak bu grafikte, temiz yüzeyden farklı olarak üç yüzey durumu gözlenmiştir. Daha önce de bahsedildiği gibi, yük geçişi sırasında, işgal edilmiş bileşen bulkten dışarı itilirken, boş olan bileşen bulk içine çekilir. Bu durumda, enerji bant grafiğinde yukarıda bulunan yüzey durumunun, işgal edilmemiş Si atomuna (dimer’in alt bileşeni) ait olduğu söylenebilir. Aynı mantıkla bakılırsa, aşağıda bulunan yüzey durumlarından üstteki de işgal edilmiş Ge atomuna aittir. Gözlenen üçüncü durum ise, germanyum

atomundan sonra ikinci en yüksek işgal edilmiş duruma aittir. Bu yüzey durumunun, ikinci ve üçüncü tabakalardaki atomların bağlarından kaynaklandığı düşünülmektedir.

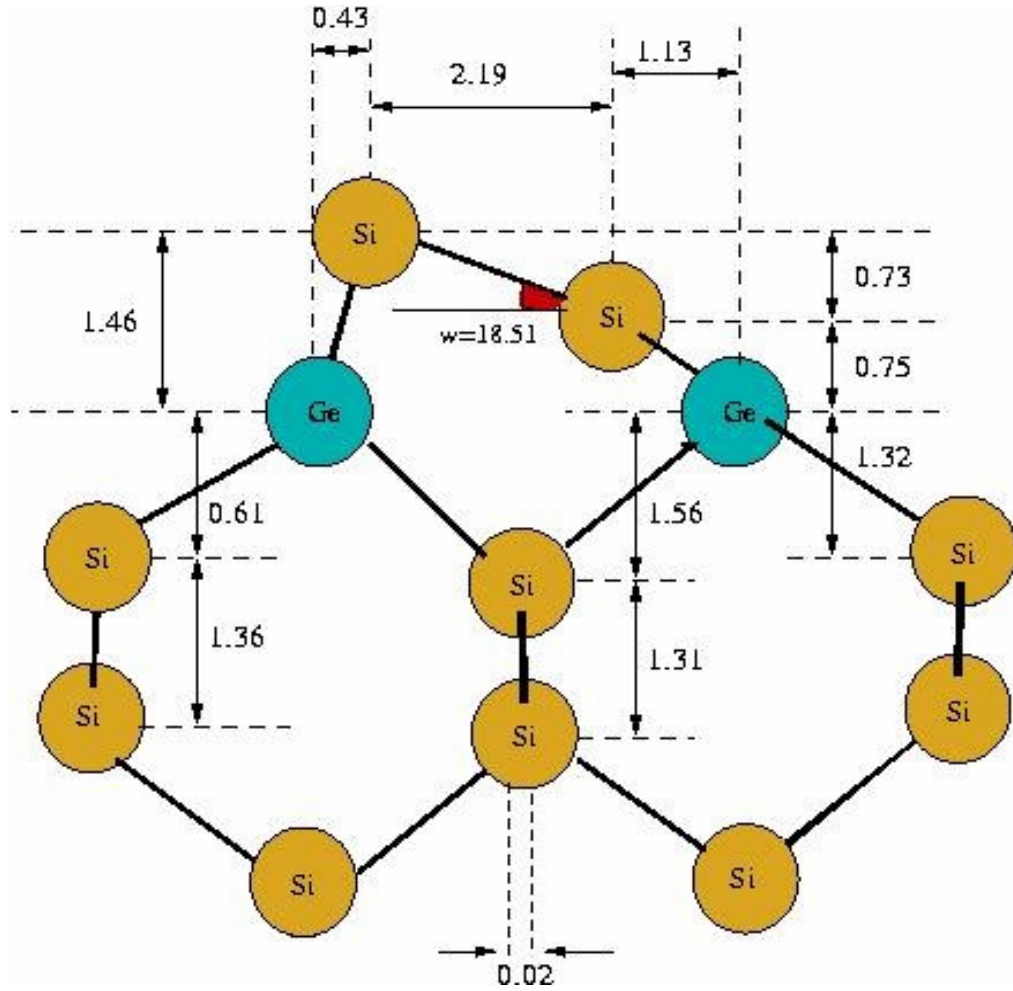
4.4.2 Si (1x2) (001) üzerine 1 ML Ge

1 ML Ge kaplama altı farklı geometri için modellendi. Bunlardan ilkinde Ge atomları, Si (001)-(1x2) yüzeyinde tek tip atomdan oluşan bir dimer yapısı meydana getirir. Bu yapı literatürde “non-diffused, Ge - terminated (difuz etmemiş, Ge - sonlu)” olarak isimlendirilmiştir.



Şekil 4.18 Difuz etmemiş, Ge – sonlu yapının atomik geometrisi

İkinci modelde ise, Ge atomlarının bir alt tabakaya difuz etmesi halinde. Bu modelde yüzey dimer'ını, en üst tabakadaki Si atomları oluşturur ve “diffused, Si - terminated (difuz etmiş, Si - sonlu)” olarak adlandırılabilir.



Şekil 4.19 Difuz etmiş Si – sonlu yapının atomik geometrisi

Çizelge 4.6 incelendiğinde, her iki geometrinin hem tilt açılarının hem de üstteki dimer bileşeninin simetri noktasına dik yüksekliğinin (vertical buckling) temiz yüzeye oranla arttığını söyleyebiliriz.

Ancak, Ge-sonlu difuz etmemiş yüzeyin dimer uzunluğu, temiz ve Si-sonlu yüzeye göre daha büyüktür. Bununla birlikte, bu geometride dimer'ı oluşturan Ge atomlarının ikinci tabakadaki Si atomlarına dik uzaklıkları, hem temiz yüzeydekenden hem de Si-sonlu yapıdakinden daha fazladır. Bu verilere bakarak, difuz etmemiş yapıdaki Ge atomlarının, temiz yüzeye ve difuz etmiş duruma oranla hem birbirleriyle hem de ikinci sıra atomlarla daha zayıf bağlar yaptıklarını söyleyebiliriz.

Çizelge 4.6 Temiz yüzey, Ge-sonlu ve Si-sonlu yüzeylerin karşılaştırılması

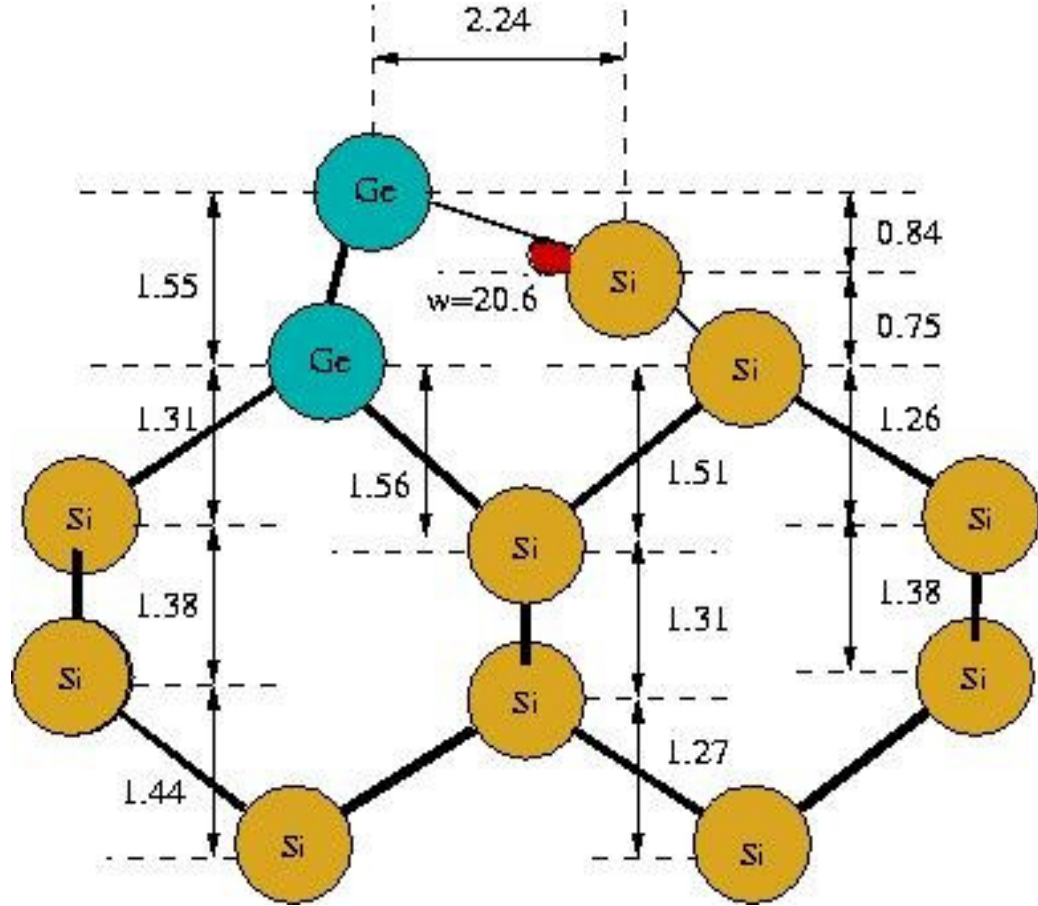
	Dimer dikey uzaklığı	Dimer uzunluğu	Dikey eğrilme (vertical buckling)	Eğim açısı (Tilt angle)	Dimer bileşenleri ve 2. tabaka atomlar arası dik uzaklıklar	
					Si _{üst} – Si ₂ dik mesafe	Si _{alt} – Si ₂ dik mesafe
Temiz yüzey	2,20 Å	2,28 Å	0,64 Å	16,26°	1,34 Å	0,77 Å
					Ge _{üst} – Si ₂ dik mesafe	Ge _{alt} – Si ₂ dik mesafe
Difuz etmemiş, Ge - sonlu	2,36 Å	2,47 Å	0,77 Å	18,16°	1,51 Å	0,82 Å
					Si _{üst} – Ge ₂ dik mesafe	Si _{alt} – Ge ₂ dik mesafe
Difuz etmiş, Si - sonlu	2,19 Å	2,43 Å	0,73 Å	18,51°	1,46 Å	0,75 Å

Ge-sonlu yapının toplam enerjisi, Si-sonlu yapıdan 0.4 eV daha düşüktür. Bu fark, çok küçük gibi görünse de, difuz etmemiş yapının daha kararlı kaldığının göstergesidir.

1 ML kaplama için araştırılan diğer bir model türü, cis-diffused olarak anılan ve adsorplanan Ge atomlarının alt alta iki tabakaya yerleştiği karışık dimer yapısıdır. Dolayısıyla yüzeyde bulunan dimer'lar iki tip atomdan oluşur. Bu model Si (001)-(1x2) yüzeyine iki farklı şekilde uygulanmıştır.

Birinci türde, dimer'ın üst bileşenini Ge atomu, alt bileşenini ise Si atomu oluşturmuştur. Diğer Ge atomu ise ikinci tabakada, üst dimer bileşeninin hemen altına yerleşmiş durumdadır. Bu yapı “cis-diffused / Ge-up” olarak adlandırılır ve Şekil 4.20’de verilmiştir.

İkinci tür cis – diffused kaplama ise, Ge atomlarının dimer'ın alt bileşenine ve ikinci tabakada ki ona komşu olan Si atomunun yerine yerleşmesiyle elde edilir. Burada, dimer'ın üst bileşeni Si atomu tarafından oluşturulur. Şekil 4.21’de görülen bu yapıya da “cis- diffused / Si-up” ismi verilir.



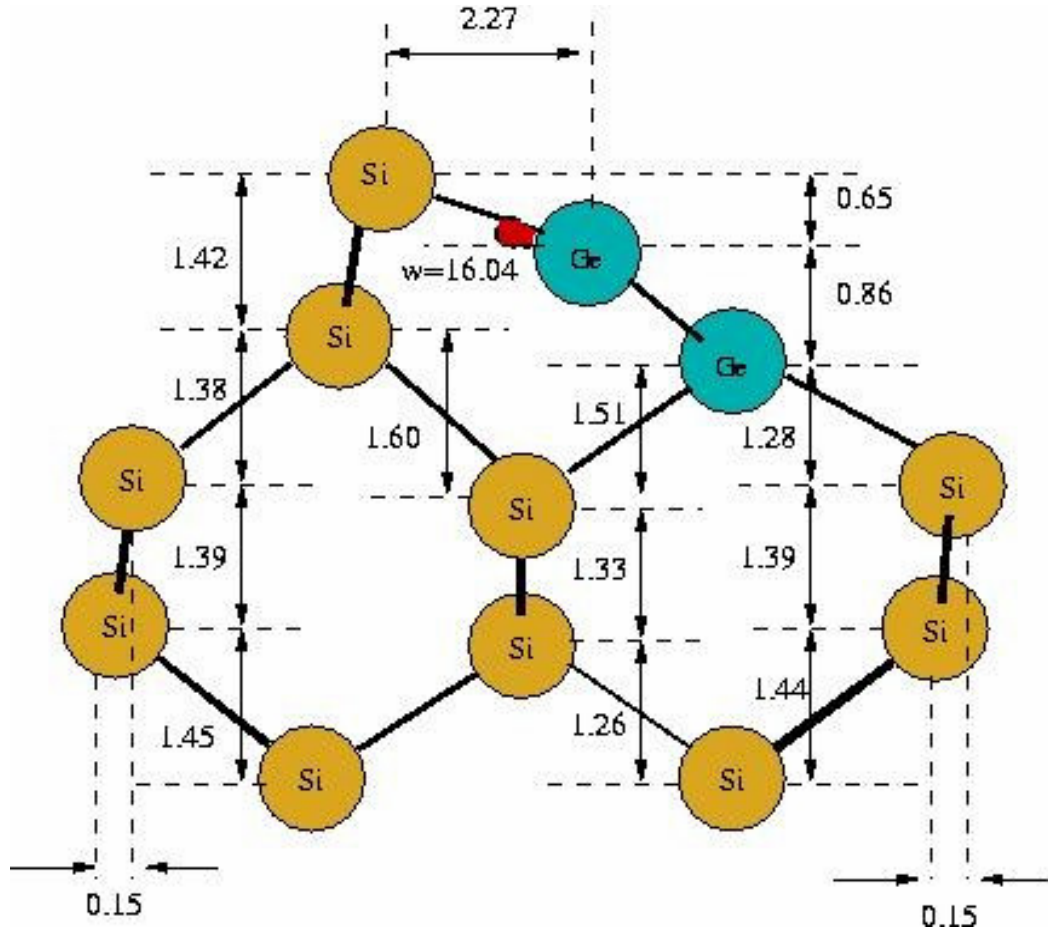
Şekil 4.20 Cis-diffused / Ge-up

Çizelge 4.7’de cis-diffused modellerinin temiz yüzeye karşılaştırılması verilmiştir. Her iki modelde de dimer bileşenlerinin birbirlerine dik uzunlukları, temiz yüzeye oranla artmıştır. Dikey eğilme (vertical buckling) ve tilt açısı, Si – up model için temiz yüzeye mukayese edildiğinde değişmeden kaldığı görülmüştür. Fakat, Ge – up yapıda ise bu değerlerin her ikisi birden daha belirgin bir şekilde artmıştır.

Cis- diffused modellerde, germanyumun dimer’ın üst bileşenini oluşturduğu Ge – up modeli 0,08 eV’luk bir enerji farkıyla daha kararlı bir durum sergiler. Jenkins and Srivastava (1996) yaptıkları çalışmada bu değeri 0,07 eV olarak bulmuşlardır.

Çizelge 4.7 Cis-diffused modellerin temiz yüzeyle karşılaştırılması

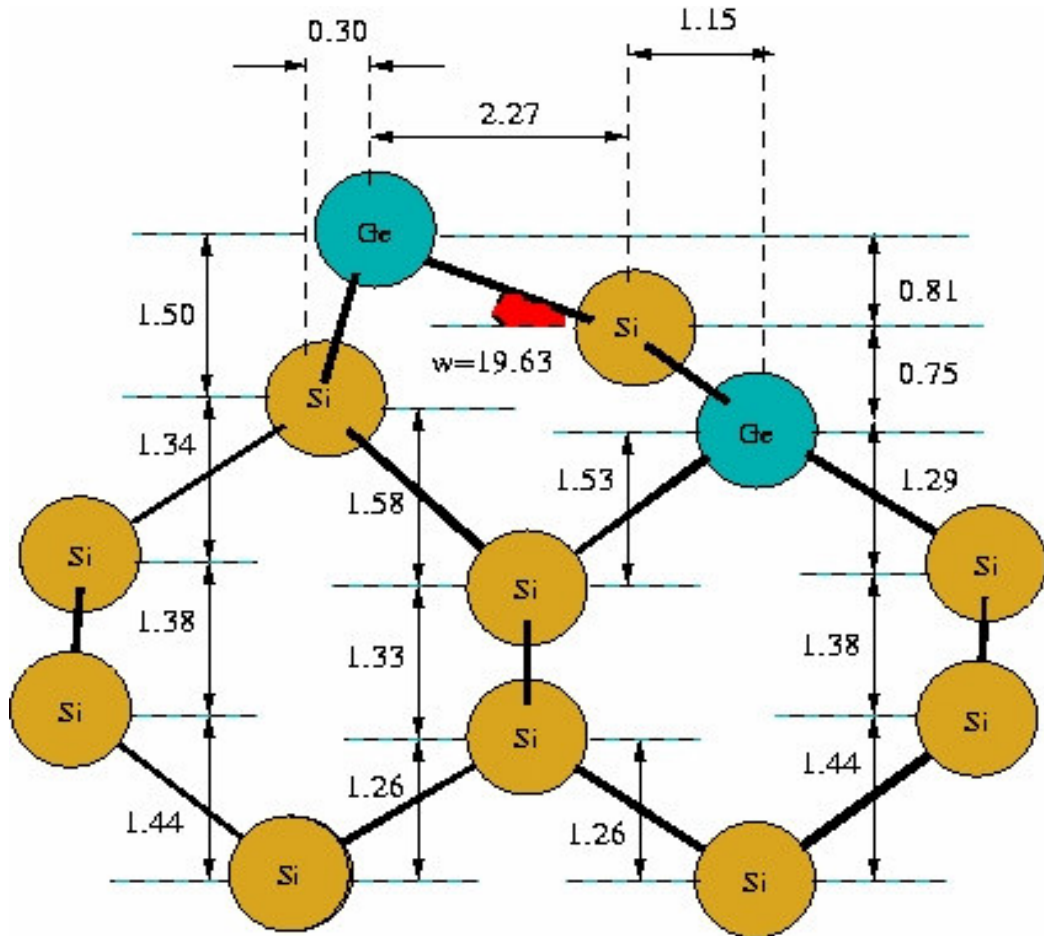
	Dimer dikey uzaklığı	Dikey eğrilme (vertical buckling)	Eğim açısı (Tilt angle)	Dimer bileşenleri ve 2. tabaka atomlar arası dik uzaklıklar	
				Si _{üst} - Si ₂ dik mesafe	Si _{alt} - Si ₂ dik mesafe
Temiz yüzey	2,20 Å	0,64 Å	16,26°	Si _{üst} - Si ₂ dik mesafe	Si _{alt} - Si ₂ dik mesafe
				1,34 Å	0,77 Å
Cis-diffused / Ge-up	2,24 Å	0,84 Å	20,6°	Ge _{üst} - Ge _{alt} dik mesafe	Si _{üst} - Si _{alt} dik mesafe
				1,55 Å	0,75 Å
Cis-diffused / Si-up	2,27 Å	0,65 Å	16,04°	Si _{üst} - Si _{alt} dik mesafe	Ge _{üst} - Ge _{alt} dik mesafe
				1,42 Å	0,86 Å



Şekil 4.21 Cis-diffused / Si-up

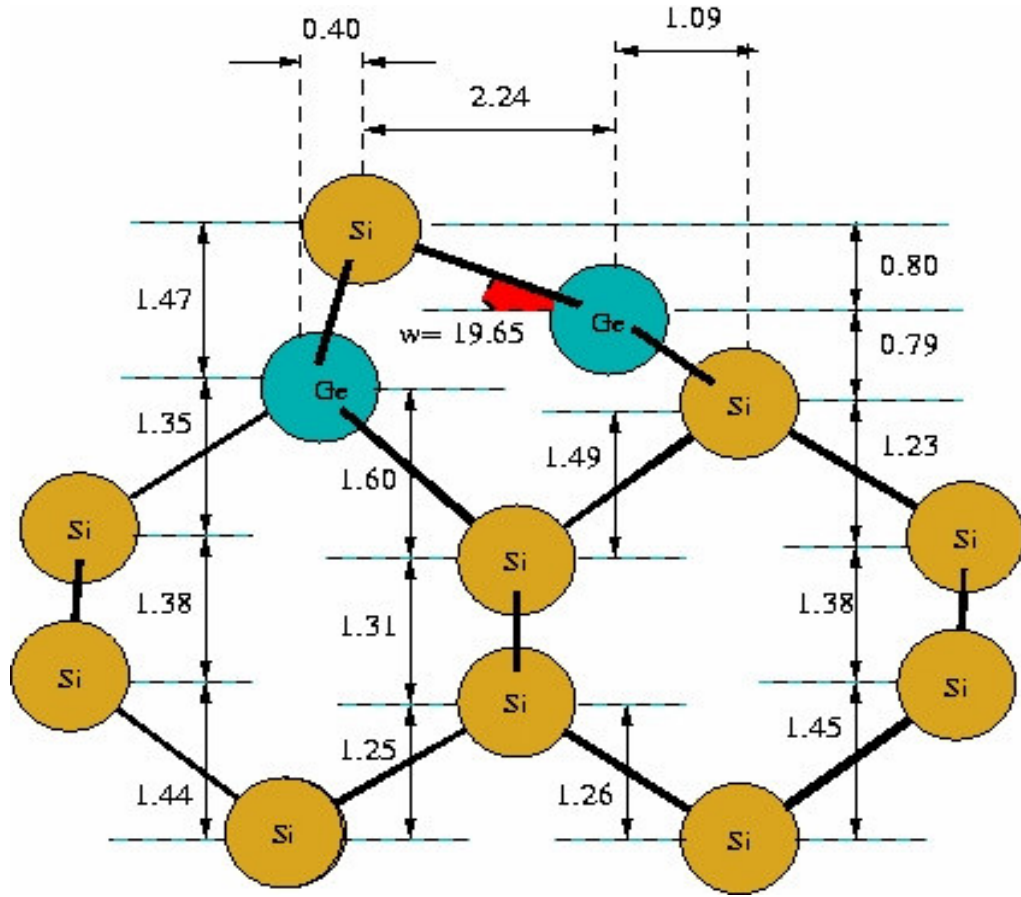
1 ML kaplama için adı geçen diğer iki model ise “trans - diffused / Ge – up” ve “trans – diffused / Si- up”dır. “Trans–Ge–up” modelinde, Ge atomlarından biri dimer’in üst bileşenini oluştururken diğeri, bir alt tabakada onu çaprazına gelecek şekilde yerleşir.

“Trans– Si–up” modelinde ise, Si atomları üst dimer bileşenini ve onun alt çaprazını işgal ederken, Ge atomları alt dimer bileşenine ve onun çaprazına yerleşir. Şekil 4.22 - 4.23 “trans-diffused / Ge–up” ve “trans-diffused / Si–up” modellerini göstermektedir.



Şekil 4.22 Trans - diffused / Ge – up

Şekil 4.22 - 4.23 ve çizelge 4.8 incelendiğinde, trans – diffused geometrilerin atomik parametrelerinin birbirlerine çok yakın olduğu görülür. Çizelge 4.8’de her iki model için verilen tüm parametreler, temiz yüzeyin sahip olduğu değerlerden daha büyüktür.



Şekil 4.23 Trans - diffused / Si - up

Çizelge 4.8 Trans-diffused modellerin temiz yüzeyle karşılaştırılması

	Dimer dikey uzaklığı	Dikey eğilme (vertical buckling)	Eğim açısı (Tilt angle)	Dimer bileşenleri ve 2. tabaka atomlar arası dik uzaklıklar	
				Si _{üst} - Si ₂ dik mesafe	Si _{alt} - Si ₂ dik mesafe
Temiz yüzey	2,20 Å	0,64 Å	16,26°	1,34 Å	0,77 Å
				Ge _{üst} - Si ₂ dik mesafe	Si _{üst} - Ge _{alt} dik mesafe
Trans-diffused / Ge-up	2,27 Å	0,81 Å	19,63°	1,50 Å	0,75 Å
				Si _{üst} - Ge _{alt} dik mesafe	Ge _{alt} - Si ₂ dik mesafe
Trans-diffused / Si-up	2,24 Å	0,80 Å	19,65°	1,47 Å	0,79 Å

Bu iki geometrinin toplam enerjisine bakıldığı zaman, “trans - diffused / Ge – up” modelinin kristal enerjisinin, diğerine nazaran 0,3 eV kadar daha enerjetik olduğu görülür. Dolayısıyla, “trans – Ge – up” modeli daha karardır.

Kararlı temiz yüzeyin tilt açısı 16,26°dir. Karışık dimer yapıları incelendiğinde, tilt açılarının bu dört farklı geometrinin tümünde arttığı görülmüştür. Bununla birlikte çizelge 4.9’a bakılırsa, Ge – up modellerin, kendi içinde dimer’ın asimetrik yapısını korumaya çalıştığı ancak, Si – up modellerin asimetrikliği azaltmaya yönelik olarak açığı küçülttüğü gözlenmiştir. Bunun nedenini Jenkins and Srivastava (1996) şu şekilde açıklamışlardır; karışık dimer’lı yapılarda asimetrikliği, bileşenlerin elektronegatifliği etkiler. Yükün, elektronegatifliği düşük olandan yüksek olana geçişi sırasında elektronegatifliği yüksek olan bileşen dışarı doğru itilir ve “up” pozisyonu oluşturur. Silisyumun elektronegatifliği 1,90 iken, germanyumunki 2,01’dir. Dolayısıyla, karışık dimer yapılarında Ge - up modellerin Si – up modellere göre daha kararlı ve tilt açılarının yüksek olması sürpriz değildir.

Çizelge 4.9 Cis – diffused ve trans – diffused yapıların tilt açılarının karşılaştırılması

	Ge – up (tilt açısı)		Si – up (tilt açısı)	
	Bu çalışma	Jenkins ve Srivastava (1996)	Bu çalışma	Jenkins ve Srivastava (1996)
Cis – diffused	20,6°	20,7°	16,04°	15,3°
Trans – diffused	19,63°	18,7°	19,65°	18,1°

1 ML Ge kaplamada incelenen altı farklı modelin kristal enerjileri, kendi içlerinde karşılaştırıldığında, en kararlı durumu “difuz etmemiş Ge-sonlu” modelin sergilediği ortaya çıkmıştır. Bu modelin enerjisini taban kabul edersek, diğer beş modelin Ge – sonlu modele göre, görel enerji durumları çizelge 4.10’da verilmiştir.

Çizelge 4.10 1 ML modellerin kararlı Ge - sonlu modele göre görelî enerji kıyaslaması

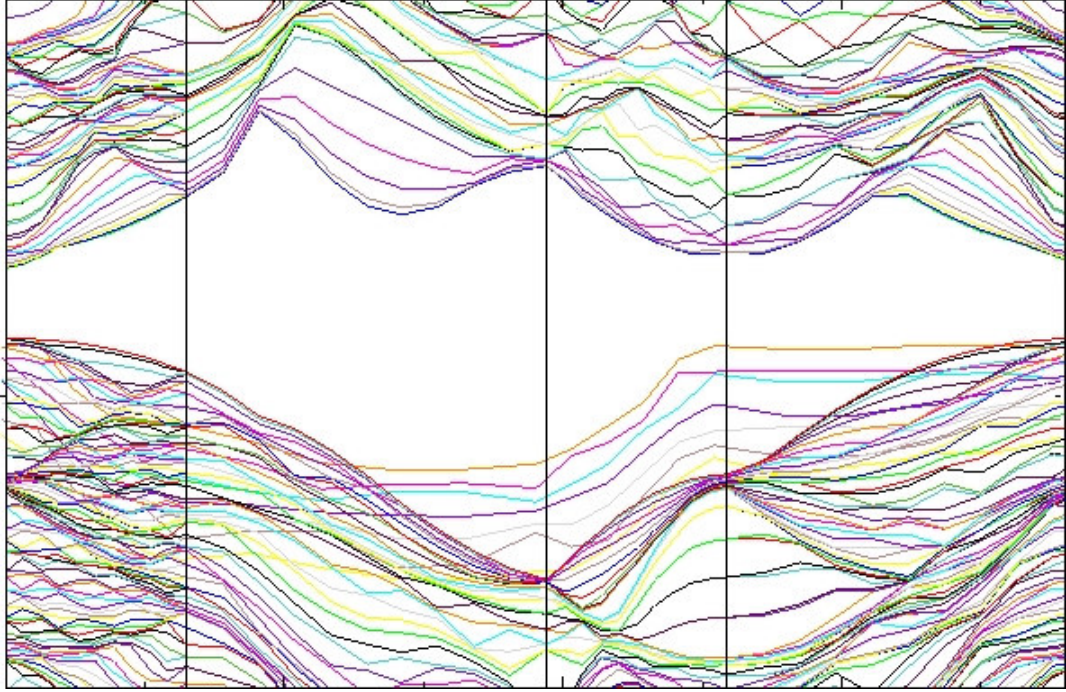
	Bu çalışma	Jenkins ve Srivastava (1996)
Ge – sonlu (difuz etmemiş)	0,00 eV	0,00 eV
Si – sonlu (difuz etmiş)	0,4 eV	-
Cis – diffused / Ge - up	0,07 eV	0,19 eV
Cis – diffused / Si - up	0,18 eV	0,26 eV
Trans – diffused / Ge - up	0,02 eV	0,19 eV
Trans – diffused / Si - up	0,33 eV	0,34 eV

1 ML Ge kaplama için en kararlı durum olan “difuz etmemiş Ge-sonlu” yapının atomik parametreleri, daha önce yapılan çalışmalarla çizelge 4.11’de karşılaştırılmıştır.

Çizelge 4.11 1 ML Ge kaplama için kararlı yapının önceki çalışmalarla karşılaştırılması

	Dimer uzunluğu (Å)	Tilt açısı (°)	Vertical buckling (Å)
Cho et al. (1994) (teorik)	2,39	16	-
Krüger and Pollmann (1994) (teorik)	2,39	17	-
Fontes et all. (1994) (deneysel)	2,55 ±0,04	12,4 ±0,2	0,55 ±0,02
Oyanagi et all. (1995) (deneysel)	2,51 ±0,04	0	0
Jenkins and Srivastava (1996) (teorik)	2,38	18,5	0,76
Bu çalışma	2,47	18,16	0,77

Bu tez çalışması kapsamında, “difuz etmemiş Ge – sonlu” yüzeyin elektronik durumu incelendiğinde, şekil 4.24’deki enerji bant diagramı elde edilmiştir.



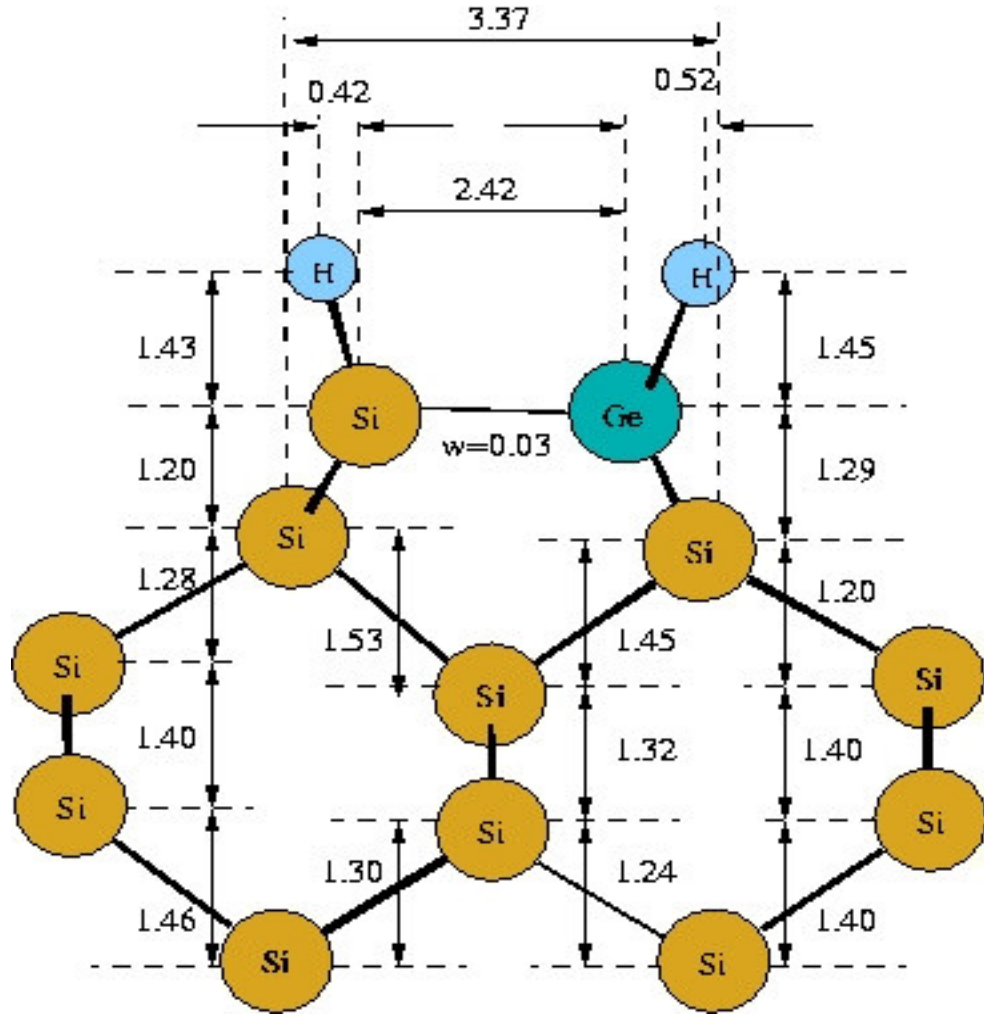
Şekil 4.24 Difuz etmemiş Ge – sonlu modelin yüzey enerji bandı

Temiz Si (001)-(1x2) yüzeyinin ve 0,5 ML yapının yarıiletken özellik gösterdiği daha önceki bölümlerde belirtilmiştir. Ancak yüzeye Ge – sonlu 1 ML kaplama yapıldığında, yüzeyin enerji durumlarında bant aralığı görülmemiş, dolayısıyla diğer ikisinin aksine yüzey, metalik özellik göstermiştir.

4.4.3 0.5 ML ve 1 ML Ge kaplamaların H ile pasivize edilmesi

Tez çalışmasının bu aşamasında, 0,5 ve 1 ML Ge kaplamaların dimer bağları hidrojen ile doyurularak atomik ve elektronik yapının nasıl etkilendiği araştırıldı.

0.5 ML için daha önce incelenen “alt atom” ve “üst atom” konumundaki Ge kaplamaların her ikisi de H ile doyurularak relax yapılmış ve tıpkı hidrojeniz durumda olduğu gibi “üst atom konumu” (“H / üst atom”) daha kararlı çıkmıştır. Hidrojeniz modellerde 0,17 eV olarak hesaplanan enerji farkı, burada 0,02 eV olarak bulunmuştur.



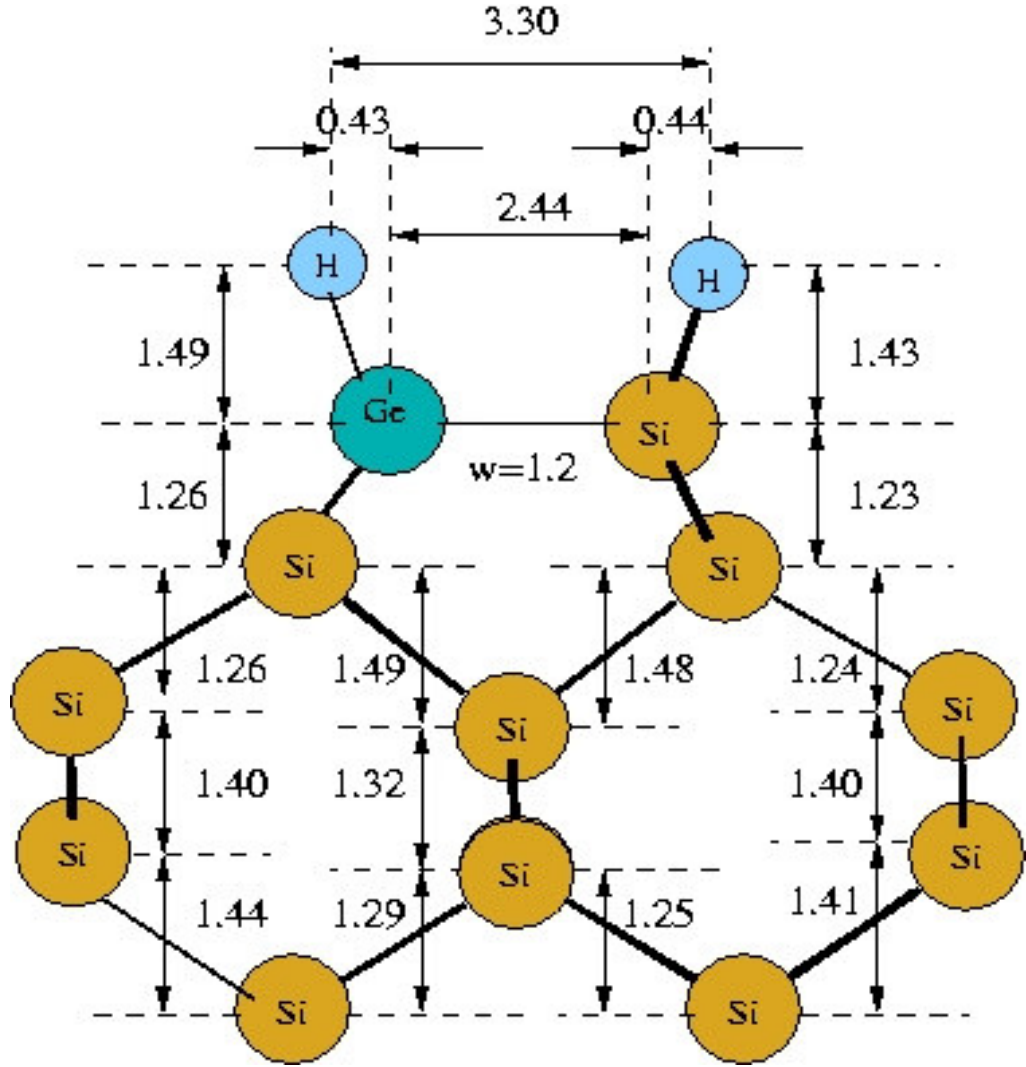
Şekil 4.25 H / Alt atom

0.5 ML hidrojenli modellerin ayrıntılı atomik geometrileri şekil 4.25 ve 4.26'da verilmektedir.

0.5 ML Ge kaplamaya H bağlanması, her iki modelin de asimetrikliğini ortadan kaldırıcı yönde etki yapmıştır. Daha kararlı olduğu belirtilen “H / üst atom” modelinin tilt açısı, “H / alt atom” modelinden sadece $1,17^\circ$ daha büyüktür.

Yukarıdaki açıklamalar dikkate alındığında, 0.5 ML Ge kaplama için önerilen her iki modelin H ile pasivizasyonu, bu yapıların birbirine yakın özellikler göstermesine yol açmıştır.

Her iki modeldeki dimer'lar aşağı yukarı simetrik hale dönüşse de, temiz simetrik yüzeye göre daha zayıf bağlar yapmışlardır. Bu dimer bağları aynı zamanda, hidrojeniz durumlarına göre de zayıflamış bulunmaktadır. Bu sonucun çıkarılmasını sağlayan uzunluk değerleri çizelge 4.12'de verilmektedir.

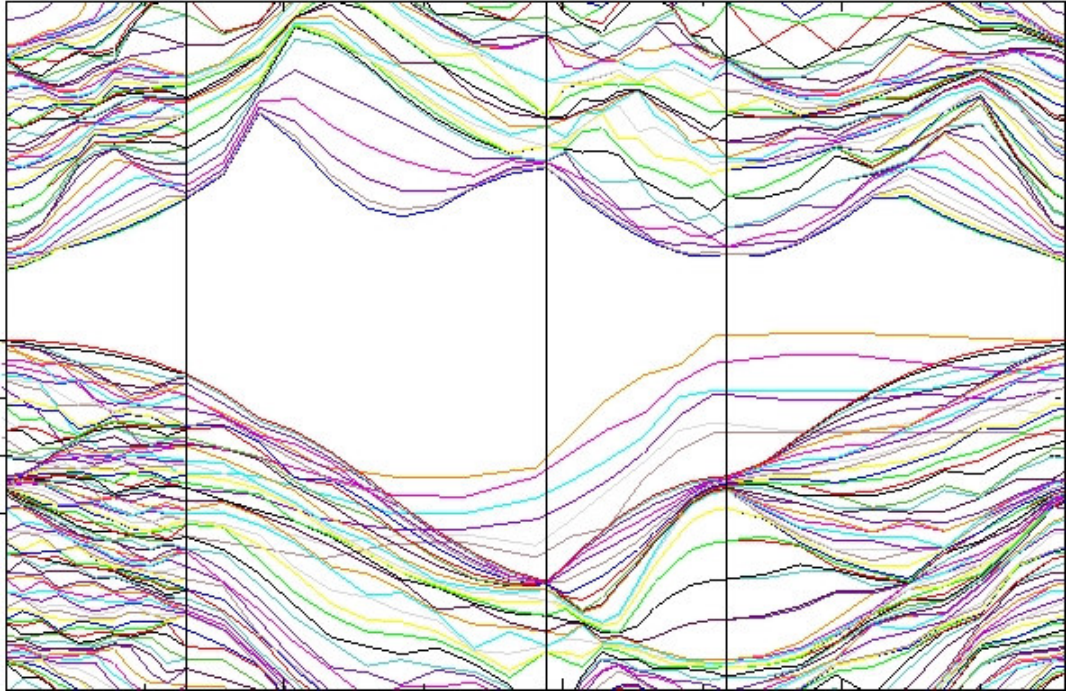


Şekil 4.26 H / Üst atom

Çizelge 4.12 H eklenmiş 0.5 ML Ge durumların karşılaştırılması

	Dimer uzunluğu (Å)	Titlt açısı (°)
Temiz yüzey (kararlı)	2,28	16,26
0.5 ML üst atom	2,36	19,99
0.5 ML alt atom	2,37	16,26
0.5 ML H / Üst atom	2,42	1,2
0.5 ML H / Alt atom	2,44	0,03

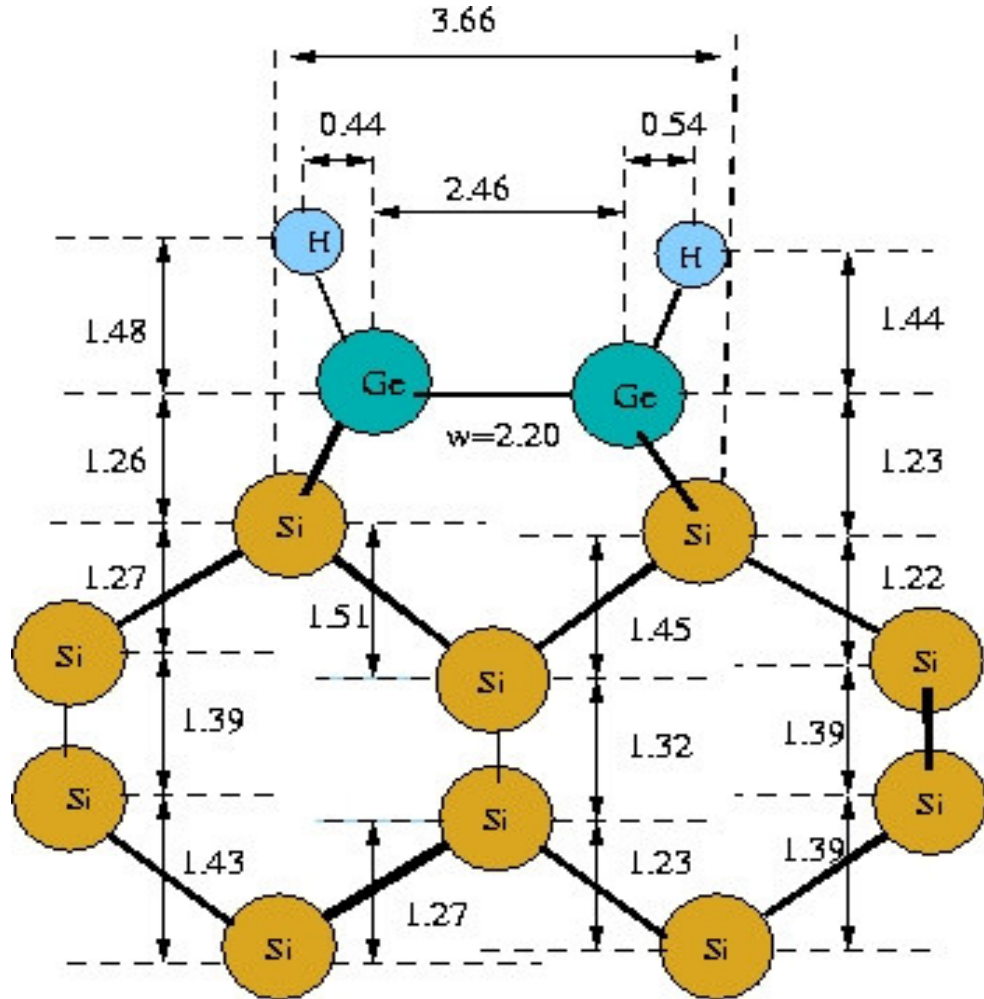
Hidrojeniz 0,5 ML üst atom modeli 0,43 eV bant aralığı ile yarıiletken özellik gösterirken, yapıya hidrojenin girmesi, yüzeyin bant aralığını ortadan kaldırmıştır. Yüzey durumları fermi enerji seviyesini kestiğinden dolayı, bu yüzey metalik davranış sergilemektedir. Şekil 4.27, daha kararlı olan “H / üst atom” modelinin elektronik yapısını gösterir.



Şekil 4.27 H / Üst atom modelinin yüzey enerji bandı

Hidrojenle doyurma işlemi, 1 ML kaplama için en kararlı durum olarak bulunan “difuz etmemiş Ge – sonlu” model ve onun alternatififi olan “Si – sonlu” model için yapılmıştır. Bu işlem sırasında, 0,5 ML kaplamada gözlenen durumun aksine, hidrojenizsizen kararsız olarak nitelenen Si – sonlu modelin, 0,22 eV kadar daha enerjistik olduğu tespit edilmiştir.

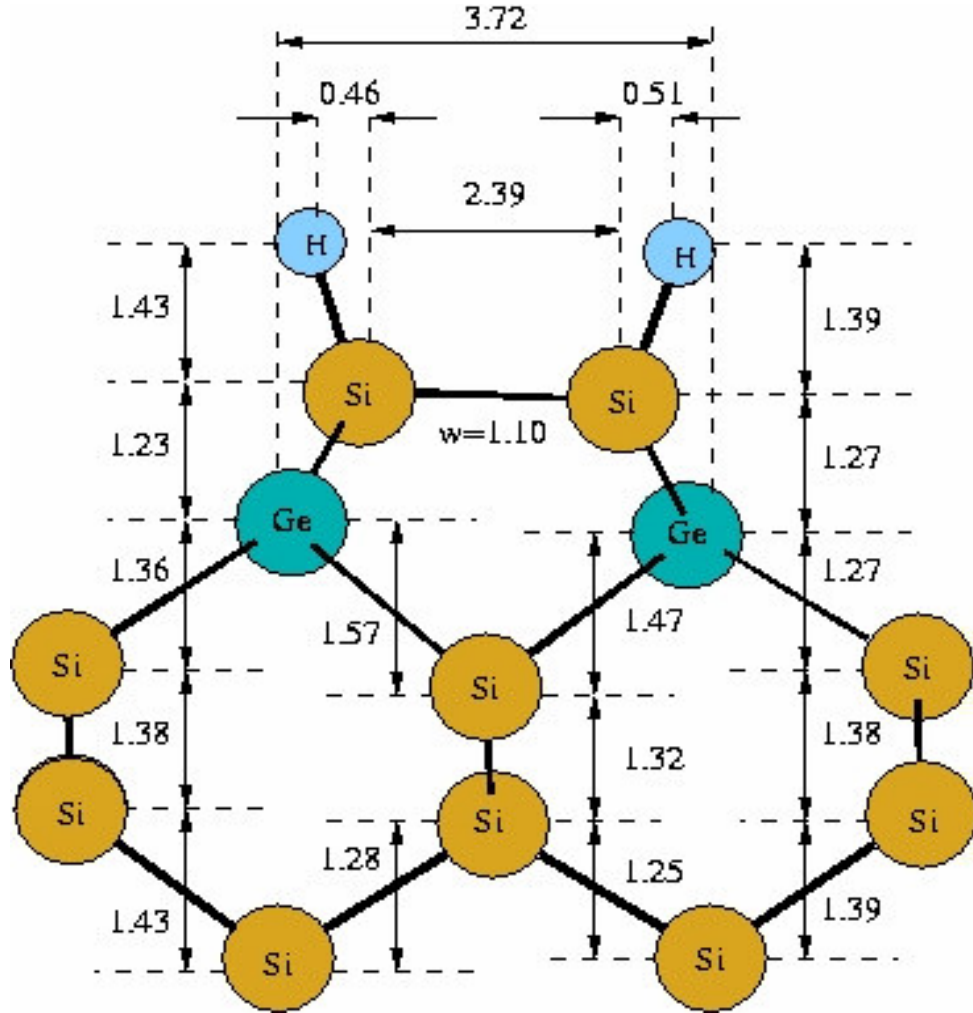
Şekil 4.28 ve 4.29 hidrojen bağlanmış 1 ML modelleri ayrıntılarıyla göstermektedir. Hidrojenli ve hidrojenizsizen modellerle birlikte temiz yüzeye ait parametreleri Çizelge 4.13’te verilmiştir.



Şekil 4.28 1 ML H / Ge –sonlu

Çizelge 4.13 H eklenmiş 1 ML durumların karşılaştırılması

	Dimer uzunluğu (Å)	Tilt açısı (°)
Temiz yüzey (kararlı)	2,28	16,26
1 ML Ge - sonlu	2,47	18,16
1 ML Si - sonlu	2,43	18,51
1 ML H/Ge – sonlu	2,46	2,20
1 ML H/Si - sonlu	2,39	1,10

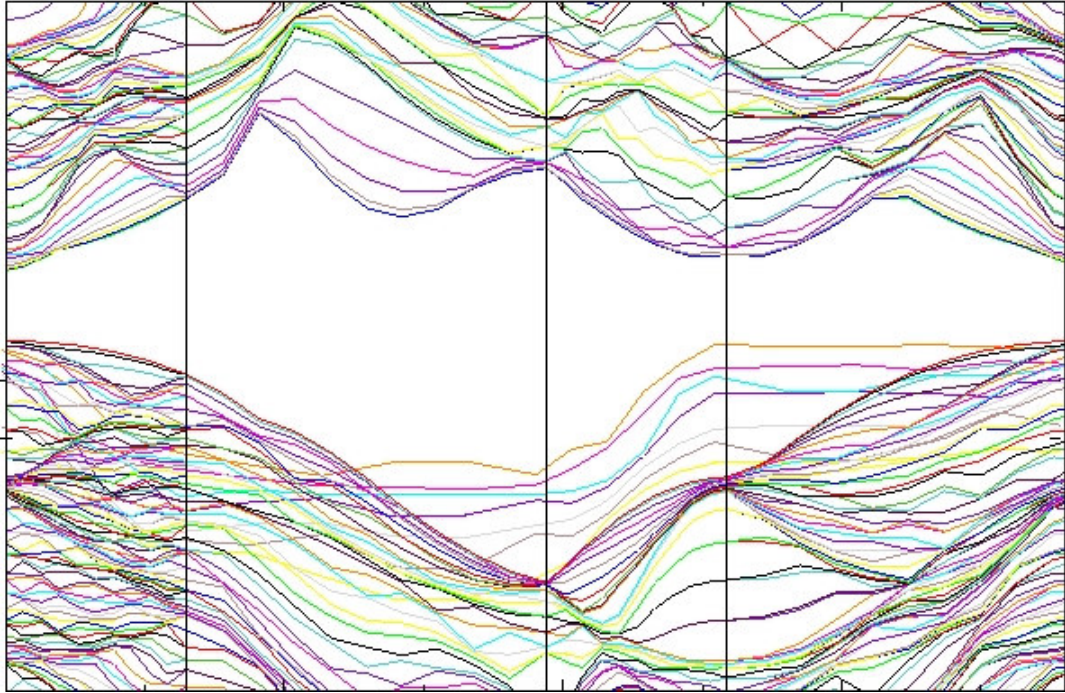


Şekil 4.29 1 ML H / Si –sonlu

“H / Ge – sonlu” ve “H / Si – sonlu” modellerinin tilt açıları sırasıyla $2,20^\circ$ ve $1,10^\circ$ dir. Bu açı değerleri çok küçüktür. Bu düşünceyle, yapıya hidrojen dahil edilmesinin, tıpkı 0,5 ML’da olduğu gibi, bu modellere de simetrik dimer özelliği kazandırdığı söylenebilir.

Dimer bağ uzunlukları, temiz simetrik yüzeye göre artmış, hidrojeniz modellerine göre kısalmıştır. Bu durumda hidrojenize olmuş her iki model için dimer bağlarının temiz yüzeye göre daha zayıf, hidrojeniz modellerine göre ise daha kuvvetli olduğunu söyleyebiliriz.

H eklenmiş yapıların dimer uzunlukları kendi aralarında kıyaslandığında ise, kararlı durumun daha sıkı bir bağ yaptığı açıktır.



Şekil 4.30 Si – sonlu + H modelinin yüzey enerji bandı

Kararlı model olan “Si – sonlu + H”ın yüzey enerji bant grafiği şekil 4.30’da verilmiştir. Şekil 4.30 incelendiğinde, yedi tane yüzey durumunun temel bant aralığına düştüğü görülür. Ancak yüzeyin kendi enerji bandında bant aralığı gözlenmemiştir. En üstteki yüzey durumu temel bant aralığının Fermi seviyesini kestiği için bu yapı, metalik

özelliđ göstermiştir. Yani, hidrojenize edilmiş 1 ML Ge kaplamada atomik özellikler deđişmiş fakat sistemin elektronik davranışı ise deđişmemiştir.

Hidrojen bađlanmış 0,5 ML ve 1 ML yapıların tümünde, atomik parametrelerin birbirine çok yakın olduđu görülmüştür. Bununla birlikte, her iki tür kaplama için daha kararlı oldukları belirtilen “üst atom” ve “Si – sonlu” modellerine ait yüzey enerji bantları da birbirlerine oldukça yakın karakterde çıkmıştır. Germanyum ve silisyumun benzer özellik göstermesinin yanı sıra, yapının eklenen hidrojenin etkisi ile simetrik davranış göstermesi , enerji bantlarındaki bu benzerliđin nedenlerinden biri olabilir.

5. SONUÇ

Teorik modelleme, günümüz teknolojisinde en az deneysel çalışmalar kadar önemlidir. Yüzey biliminde, deneyle birlikte ilerlemesi gereken, kimi zaman deneysel çalışmalara öngörü oluşturabilen, kimi zamansa deneysel çalışmalarla açıklanamayan fiziksel durumları açıklamaya yardımcı olan bir araştırma şeklidir.

Bu tez çalışmasında yapılan hesaplamalarda, temiz Si (001)-(1x2) yüzeyinin asimetrik dimer formunda kararlı hale geldiği görülmüştür. Yüzey bantları çizildiğinde ise temel bant aralığına düşen iki yüzey durumunun varlığı belirtilmiştir. Asimetrik temiz yüzey yarıiletken özelliğe sahiptir.

İlk olarak temiz Si(001)-(1x2) yüzeyi üzerine S atomunun adsorplanmasını ele alarak, bu atomun yüzeyin atomik ve elektronik yapısını ne şekilde etkilediğini inceledik. Bunun için hemisülfit, monosülfit ve disülfit olarak adlandırılan üç farklı modeli ele aldık. Monosülfit ve disülfit için Si(001)-(1x2) yapının Si(001)-(1x1) yapıya dönüştüğünü belirledik. Elektronik açıdan bakıldığında hemisülfit ve monosülfit yapıların yarıiletken, disülfit yapının ise metalik özellik gösterdiğini gördük.

Si (001)-(1x2) yüzeyi üzerine Ge atomu adsorplanmasını 0.5 ML ve 1 ML için ele aldık. 0.5 ML için iki farklı model, 1 ML için ise altı farklı model inceledi. 0.5 ML için “üst atom konumu”, 1ML içinse “Ge - sonlu difuz etmemiş” modellerin kararlı olduğunu bulduk. Ayrıca bu kararlı yapılara karşı gelen elektronik bant yapılarını çizdik. 0.5 ML “üst atom” modeli yarıiletken, 1 ML “Ge-sonlu” modeli ise metalik özellik göstermiştir.

Tezin son aşamasında ise, 0.5 ve 1ML için Ge/Si(001)-(1X2) yüzey üzerine hidrojen atomu bağlanması ile atomik ve elektronik yüzeyde meydana gelen etkiler araştırıldı.

Üst - atom ve Si - sonlu modellerin kararlı olduklarını bulduk. Atomik açıdan asimetrik yapıların simetrik yapılmalara dönüştüğünü gördük. Elektronik olarak 0.5 ML için ele alınan sistem metalik özellik gösterdi. 1 ML için herhangi bir değişiklik olmadı.

Elde edilen sonuçlar, daha önce yapılmış çalışmalarla uyum içerisindedir. Bu tezin, gerek teorik modellemenin genel ilkeleri, gerekse Si (001) yüzeyi üzerine yapılacak diğer çalışmalara katkıda bulunmasını ümit ediyoruz.

KAYNAKLAR

- Ayduđan, Z. 2005. Doktora Semineri, Ankara
- Baroni, S., Gianozzi, P. and Testa, A. 1987. Green's Function approach to linear response in solids. *Physical Review Letters*, 58, 1861 - 1864
- Cho, J.H., Jeong, S. and Knag, M.H. 1994. Final-state pseudopotential theory for the Ge 3d core-level shifts on the Ge/Si(100)-(2x1) surface. *Physical Review B*, 50, 17139
- Çakmak, M. 1999. Theoretical studies of structural and electronic properties of overlayers on semiconductor surfaces. Doctoral Thesis, University of Exeter.
- Çakmak, M., Ayduđan, Z. and Aklan, B. 2007. Effect of hydrogenation on P/Si(001)-(1x2). *Surface Science*, 601, 1489-1493
- Çakmak, M. and Srivastava, G. P. 1998. Adsorption and desorption of S on and off Si(001) studied by ab initio density functional theory. *Journal of Applied Physics*, 84, 6070
- Devreese, J. and Camp. P.V. 1985. *Electronic Structure, Dynamics and Quantum Structural Properties of Condensed Matter*. Plenum Press, 430s., New York
- Fontes, E., Patel, J.R., Comin, F. 1994. Fontes, Patel and Comin reply. *Physical Review Letters*, 72, 1131
- Gürünlü, H. 2005. Y. Lisans Tezi, Ankara
- Hohenberg, P. and Kohn, W. 1964. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136, 864-871
- Jenkins, S.J. and Srivastava, G.P. 1996. Theoretical evidence concerning mixed dimer growth on the Si (001)(2x1) – Ge surface. *J. Phys: Condensed matter*, 8, 6641
1998. Structure and energetics of segregated and nonsegregated Ge(001)/Si(2x1). *Physical Review B*, 57, 8794
- Kaxiras, E. 1991. Semiconductor surface restoration by valence-mending adsorbates: Application to Si(100): S and Si(100): Se. *Physical Review B*, 43, 6824
- Kittel, C. 1990. *Katıhal Fiziđine Giriş*
1996. *Katıhal Fiziđine Giriş*
- Hohn, W. and Sham, L. J. 1965. Self-consistent equations including exchange and

- correlation effects. *Physical Review*, 140, 1133-1138
- Krüger, P. and Pollmann, J. 1994. Bond lengths of Ge dimers of Si(001). *Physical Review Letters*, 72, 1130
- Oyanagi, H., Sakamoto, K., Shioda, R., Kuwahara, Y. and Haga, K. 1995. Ge overlayers on Si(001) studied by surface-extended x-ray adsorption fine structure. *Physical Review B*, 52, 5824
- Papageorgopoulos, A., Corner, A., Kamaratos, M. and Papageorgopoulos, C. 1997. Adsorption of elemental S on Si(110)2x1: Surface restoration. *Physical Review B*, 55, 4435
- Pollmann, J., Krüger, P., Rohlfing, M., Sabisch, M., Vogel D. 1996. Ab initio calculations of structural and electronic properties of prototype surfaces of group IV, III-V and II-VI semiconductors. *Applied Surface Science*, 104 / 105, 1 – 16
- Romero, M.T., Rodriguez, J.A. and Takeuchi, N. 2001. First – principles calculations of the adsorption of s on the Si(001)c(4x2) surface. *Physical Review B*, 64, 75317
- Sarı, H. Optoelektronik Ders Notları. 2005
- Skriver, H. L. 1984. The LMTO Method-Miffin-Tin orbitals and electronic structure. Springer. 346s., Berlin.
- Srivastava, G.P. 1997. Theory of semiconductor surface reconstruction. *Rep. Prog. Phys*, 60, 561
2000. Theoretical modelling of semiconductor surfaces and interfaces. *Vacuum*, 57, 121
2006. The electron counting rule and passivation of compound semiconductor surfaces. *Applies Surface Science*, 252, 7600 - 7607
- Wimmer, E., Krakauer, H., Weinert, M. And Freeman, A. J. 1981. Full-potential self-consistent linearized-augmented-palne-wave method for calculating the electronic structure of molecules and surfaces: O₂ molecule. *Physical Review B*, 24, 864 – 875.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Çağrı KADEROĞLU
Doğum Yeri : Çorlu
Doğum Tarihi : 1982
Medeni Hali : Bekar
Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu

Lise :Burdur Anadolu Lisesi 2000
Lisans : Ankara Üniversitesi 2005
Yüksek Lisans : Ankara Üniversitesi 2007

Çalıştığı Kurumlar ve Yıl

TAEK / ANAEM (Stajyer Mühendis) 2004