

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**III-N TİPİ YARIİLETKENLER İLE BERİLYUM
KALKOJENLERİN YAPISAL ELEKTRONİK VE
TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

DOKTORA TEZİ

Sadık BAĞCI

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Hüseyin Murat TÜTÜNCÜ

Nisan 2008

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

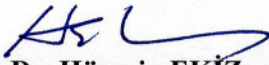
III-N TİPİ YARIİLETKENLER İLE BERİLYUM
KALKOJENLERİN YAPISAL ELEKTRONİK VE
TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

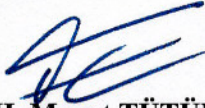
DOKTORA TEZİ

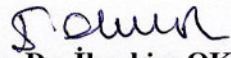
Sadık BAĞCI

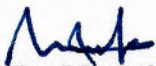
Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 16/04/2008 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.


Prof. Dr. Hüseyin EKİZ
Jüri Başkanı


Prof. Dr. H. Murat TÜTÜNCÜ
Üye


Doç. Dr. İbrahim OKUR
Üye


Doç. Dr. Mustafa KURT
Üye


Doç. Dr. Gökay UĞUR
Üye

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmam boyunca bana gerek bilimsel çalışmalarımda, gerekse sosyal hayatımda hiçbir zaman yardım ve katkılarını esirgemeyen değerli hocam Prof. Dr. Hüseyin Murat TÜTÜNCÜ'ye sonsuz teşekkürlerimi sunuyorum. Ayrıca çalışmalarım süresince manevi desteklerini yakından hissettiğim hocamın eşine, oğluna ve bana her zaman destek olan Yrd. Doç. Dr. Sıtkı DUMAN'a teşekkür ederim.

Tez çalışmasının izlenmesinde değerli katkılarından dolayı üniversitemiz Teknik Eğitim Fakültesi öğretim üyesi Prof. Dr. Hüseyin EKİZ ve bölümümüz öğretim üyesi Doç. Dr. İbrahim OKUR'a teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarımda bölüm imkanlarını kullanmamı sağlayan Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Recep AKKAYA'ya teşekkür ederim. Tezin hazırlanmasında manevi desteklerini her zaman yanımda gördüğüm başta Yrd. Doç. Dr. Yılmaz GÜNEY olmak üzere Fizik Bölümünün değerli öğretim elemanlarına da şükranlarımı sunarım.

Araştırmalarım süresince bilgisayar sistemlerini kullandığım, Exeter Üniversitesi Fizik Bölümü öğretim üyelerinden Prof. Dr. G. P. SRIVASTAVA'ya vermiş olduğu destek ve bilimsel katkılarından dolayı teşekkürlerimi sunarım. Bu tezi hazırlarken kullandığımız PWSCF kodunun hazırlanmasında emeği geçen tüm bilim adamlarına saygılarımı sunarım.

Ayrıca çalışmalarım süresince göstermiş oldukları sabır ve vermiş oldukları manevi destekten dolayı anneme, babama, kardeşime ve özellikle de eşime çok teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	ii
İÇİNDEKİLER	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	vii
ŞEKİLLER LİSTESİ	ix
TABLolar LİSTESİ.....	xv
ÖZET.....	xvii
SUMMARY.....	xviii
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.	
İNCELENEN YARIİLETKENLERİN HACİM VE YÜZEY YAPILARI.....	6
2.1. Yüzey Merkezli Kübik Örgü.....	6
2.2. Çinko Sülfür Kristal Yapı.....	7
2.3. Ters Örgü.....	8
2.4. Yüzey Merkezli Kübik Örgünün Birinci Brillouin Bölgesi.....	9
2.5. ZnS Yapımın (110) Yüzeyleri İçin Yüzey Brillouin Bölgesi.....	10
BÖLÜM 3.	
DENEYSEL TEKNİKLER.....	15
3.1. Fotoelektron Spektroskopisi (PS).....	15
3.2. Nötronların Elastik Olmayan Saçılması.....	16
3.3. Fotonların Elastik Olmayan Saçılması.....	17
3.4. Yüksek Kararlılık Elektronları Enerji Kaybı Spektroskopisi.....	19
3.5. Helyum Atomları Saçılması.....	20

BÖLÜM 4.

TEORİ VE UYGULANIŞI.....	22
4.1. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi.....	22
4.1.1. Giriş.....	22
4.1.2. Temel değişken olarak yoğunluk.....	22
4.1.3. Enerji dönüşümü prensibi.....	23
4.1.4. Elektronik enerji fonksiyonu.....	24
4.1.5. Kendi kendini doğrulayabilen Kohn-Sham eşitlikleri.....	25
4.1.6. Yerel yoğunluk yaklaşımı.....	28
4.1.7. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı.....	30
4.1.8. Yapay (pseudo) potansiyel metodu.....	32
4.1.9. Kohn-Sham eşitliklerinin momentum uzayına taşınması.....	35
4.2. Katıların Örgü Dinamiği.....	37
4.2.1. Giriş.....	37
4.2.2. Örgü dinamiği ve kuvvet sabitleri.....	37
4.2.3. Örgü dinamiğinde lineer bağımlılık.....	40
4.3. Hellman-Feynman Teoremi ve Enerjinin Birinci Türevi.....	42
4.4. Durum Yoğunluğu Hesaplama Metodu (root-sampling method).....	44
4.5. Süper Hücre Metodu.....	44
4.6. Teorinin Uygulanışı.....	46

BÖLÜM 5.

III-N TİPİ YARIİLETKENLERİN HACİM ÖZELLİKLERİ.....	49
5.1. Giriş.....	49
5.2. Yapısal Özellikler.....	49
5.3. Elektronik Özellikler.....	54
5.4. Titreşim Özellikleri.....	58
5.4.1. III-N tipi yarıiletkenlerin atomik titreşim karakterleri	64

BÖLÜM 6.

BERİLYUM KALKOJENLERİN HACİM ÖZELLİKLERİ.....	73
6.1. Giriş.....	73
6.2. Yapısal Özellikler.....	73

6.3. Elektronik Özellikler.....	76
6.4. Titreşim Özellikleri.....	80
6.4.1. Berilyum kalkojenlerin atomik titreşim karakterleri	85
BÖLÜM 7.	
III–N TİPİ YARIİLETKENLERİN YÜZEY ÖZELLİKLERİ.....	93
7.1. Giriş.....	93
7.2. III-N Tipi Yarıiletkenlerin (110) Yüzeylerinin Yapısal Özellikleri.	93
7.3. III-N Tipi Yarıiletkenlerin (110) Yüzeylerinin Elektronik Özellikleri.....	95
7.3.1. BN(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	96
7.3.2. AlN(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	97
7.3.3. GaN(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	98
7.3.4. InN(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	99
7.4. III-N Tipi Yarıiletkenlerin (110) Yüzeylerinin Titreşim Özellikleri.....	100
7.4.1. BN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	100
7.4.2. AlN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	105
7.4.3. GaN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	111
7.4.4. InN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	118
7.5. III-N(110) Yüzeylerinin Benzerlikleri ve Farklılıkları.....	125
BÖLÜM 8.	
BERİLYUM KALKOJENLERİN YÜZEY ÖZELLİKLERİ.....	132
8.1. Giriş.....	132
8.2. Berilyum Kalkojenlerin (110) Yüzeylerinin Yapısal Özellikleri.....	132
8.3. Berilyum Kalkojenlerin (110) Yüzeylerinin Elektronik Özellikleri.....	134
8.3.1. BeS(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	134
8.3.2. BeSe(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	135
8.3.3. BeTe(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	136
8.4. Berilyum Kalkojenlerin (110) Yüzeylerinin Titreşim Özellikleri...	138

8.4.1. BeS(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	138
8.4.2. BeSe(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	147
8.4.3. BeTe(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	156
8.5. Berilyum Kalkojenlerin (110) Yüzeylerinin Karşılaştırılması.....	165
BÖLÜM 9.	
SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	169
KAYNAKLAR.....	175
ÖZGEÇMİŞ.....	186

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

a	: Örgü sabiti
\vec{a}_i (i: tamsayı)	: Örgü öteleme vektörleri
\vec{G}	: Ters örgü vektörü
\vec{g}_j	: Ters örgü için yer değiştirme vektörleri
\vec{b}_j	: Yüzey için ters örgü vektörleri
Ω	: Kristalin ilkel birim hücre hacmi
\vec{q}	: Dalga vektörü
w	: Frekans
Ψ	: Gerçek dalga fonksiyonu
T	: Kinetik enerji
V_{e-e}	: Elektron-elektron etkileşme potansiyeli
$n(\mathbf{r})$: Herhangi bir durum için elektronik yük yoğunluğu
$\rho(\mathbf{r})$: Taban durumu elektronik yük yoğunluğu
$V_{dış}$: Bir sistemde elektronlardan kaynaklanan dış potansiyel
E_{el}	: Toplam elektronik enerji
E_{dt-e}	: Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim enerjisi
ε	: Bir sistemi oluşturan parçalardan birinin enerjisi
ϕ	: Yapay dalga fonksiyonu
V_{den}	: Deneme potansiyeli
V_{KS}	: Kohn-Sham potansiyeli
V_H	: Coulomb potansiyeli
\hat{H}_{KS}	: Kohn-Sham hamiltoniyeni

V_R	: İtici bir potansiyel
V_{ps}	: Yapay potansiyel (pseudopotansiyel)
Φ	: Kristalin potansiyel enerjisi
$\Phi_{\alpha\beta}$: Atomik kuvvet sabiti
E_λ	: Elektronların temel hal enerjisi
$\rho(\omega)$: Hacim fonon modları için durum yoğunluğu
DOS	: Yüzey fonon modları için durum yoğunluğu
B	: Hacim modülü
B'	: Hacim modülünün basınca göre birinci türevi
ϵ_∞	: Dinamik dielektrik sabiti
LA	: Boyuna akustik dalga
TA	: Enine akustik dalga
LO	: Boyuna optik dalga
TO	: Enine optik dalga
au	: Atomik birim
Γ	: Yüzey merkezli kübik örgünün Brillouin bölge merkezi
$\bar{\Gamma}$: Yüzey Brillouin bölgesi için $q=\{0,0\}$ olan simetri noktası
\bar{X}	: Yüzey Brillouin bölgesi için $q=\{1/2,0\}$ olan simetri noktası
\bar{X}'	: Yüzey Brillouin bölgesi için $q=\{0,1/2\}$ olan simetri noktası
\bar{M}	: Yüzey Brillouin bölgesi için $q=\{1/2,1/2\}$ olan simetri noktası
M_C	: Katyon atomunun kütlesi
M_A	: Anyon atomunun kütlesi
μ	: İndirgenmiş kütle

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1.	Yüzey merkezli kübik örgünün geleneksel birim hücresi.....	6
Şekil 2.2.	Yüzey merkezli kübik örgü için ilkel birim hücre.....	7
Şekil 2.3.	Çinko sülfür kristal yapı.....	8
Şekil 2.4.	Yüzey merkezli kübik örgünün indirgenmiş birinci Brillouin bölgesi	9
Şekil 2.5.	Çinko sülfür yapıların (110) yüzeylerinin birim hücresi.....	11
Şekil 2.6.	Çinko sülfür yapıların (110) yüzeyleri için Brillouin bölgesi.....	12
Şekil 2.7.	ZnS yapı için hacim Brillouin bölgesinin (110) yüzeyinin Brillouin bölgesi üzerine izdüşümü.....	13
Şekil 3.1.	Bir atom tarafından foton soğurulması ve elektron yayınlanmasının şematik gösterimi.....	15
Şekil 3.2.	Nötronların elastik olmayan saçılmasının şematik gösterimi.....	17
Şekil 3.3.	Bir kristalden fotonların elastik olmayan saçılmasının şematik gösterimi	18
Şekil 3.4.	Tipik YKEEKS deneyinde yüzeye gelen ve yüzeyden yansıyan ışınların yaptıkları açıların değişimi.....	20
Şekil 3.5.	Bir düzlemden elastik olmayan saçılma yöntemi.....	21
Şekil 4.1.	Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış çizelgesi...	27
Şekil 4.2.	Çekirdek, öz (core) elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş bir atom.....	33
Şekil 4.3.	Yapay potansiyel ve yapay dalga fonksiyonu ile gerçek potansiyel ve gerçek dalga fonksiyonu.....	35
Şekil 4.4.	Tek bir yüzey katmanından sistematik olarak süper hücrenin oluşturulması.....	45

Şekil 4.5.	Süper hücre içinde yüzey atomlarının denge durumundan önceki ve denge durumundaki atomik dizilimleri.....	46
Şekil 5.1.	BN ve AlN yarıiletkenleri için enerji – örgü sabiti grafikleri.....	50
Şekil 5.2.	GaN ve InN yarıiletkenleri için enerji – örgü sabiti grafikleri.....	51
Şekil 5.3.	BN ve AlN yarıiletkenleri için elektronik bant yapısı grafikleri.....	55
Şekil 5.4.	GaN ve InN yarıiletkenleri için elektronik bant yapısı grafikleri.....	56
Şekil 5.5.	BN yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	58
Şekil 5.6.	AlN yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	59
Şekil 5.7.	GaN yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	60
Şekil 5.8.	InN yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	62
Şekil 5.9.	BN ve AlN yarıiletkenleri için Brillouin bölge merkezinde elde edilen fonon modları için atomik titreşim şekilleri.....	65
Şekil 5.10.	GaN ve InN yarıiletkenleri için Brillouin bölge merkezinde elde edilen fonon modları için atomik titreşim şekilleri.....	66
Şekil 5.11.	BN yarıiletkeni için X simetri noktasında hesaplanan fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	68
Şekil 5.12.	BN yarıiletkeni için L simetri noktasında hesaplanan fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	69
Şekil 6.1.	BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için enerji – örgü sabiti grafikleri.....	74
Şekil 6.2.	BeS yarıiletkeni için elektronik bant yapısı grafiği.....	76
Şekil 6.3.	BeSe yarıiletkeni için elektronik bant yapısı grafiği.....	77
Şekil 6.4.	BeTe yarıiletkeni için elektronik bant yapısı grafiği.....	78
Şekil 6.5.	BeS yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	81
Şekil 6.6.	BeSe yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	82

Şekil 6.7.	BeTe yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	83
Şekil 6.8.	BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için Γ noktasında hesaplanan fonon modlarının atomik titreşim karakterleri.....	86
Şekil 6.9.	BeS yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.....	87
Şekil 6.10.	BeS yarıiletkeni için L simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.....	88
Şekil 6.11.	BeSe yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.....	89
Şekil 6.12.	BeSe yarıiletkeni için L simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.....	90
Şekil 6.13.	BeTe yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.....	91
Şekil 6.14.	BeTe yarıiletkeni için L simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.....	92
Şekil 7.1.	III-N(110) yüzeyleri için elde edilen atomik denge geometrisinin yandan görünümü.....	94
Şekil 7.2.	BN(110) yüzeyi için yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	96
Şekil 7.3.	AlN(110) yüzeyi için yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	97
Şekil 7.4.	GaN(110) yüzeyi için yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	98
Şekil 7.5.	InN(110) yüzeyi için yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	99
Şekil 7.6.	BN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri.....	101
Şekil 7.7.	BN(110) için Brillouin Bölgesi merkezinde seçilen bazı A' ve A'' fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	103
Şekil 7.8.	BN(110) için \bar{X} , \bar{X}' ve \bar{M} noktalarındaki enerji aralıklarının içinde yer alan fonon modlarının atomik yer değiştirme şekilleri.	104
Şekil 7.9.	AlN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri.....	105

Şekil 7.10.	AlN(110) yüzeyinin Brillouin Bölgesi merkezinde elde edilen bağ döndürme fonon modları, yüzey boşluk fonon modları ve en yüksek enerjili fonon modu için atomik yer değiştirme şekilleri...	107
Şekil 7.11.	AlN(110) yüzeyi için \bar{X}' noktasında hesaplanan boşluk fonon modlarının atomik yer değiştirme şekilleri.....	110
Şekil 7.12.	GaN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri.....	111
Şekil 7.13.	GaN(110) yüzeyinin Brillouin Bölgesi merkezinde elde edilen A' ve A'' fonon modları.....	113
Şekil 7.14.	GaN(110) yüzeyinin \bar{X} simetri noktasında hesaplanan en düşük ve en yüksek enerjili fonon modları ile boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	115
Şekil 7.15.	GaN(110) yüzeyinin \bar{M} simetri noktasında hesaplanan boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	117
Şekil 7.16.	InN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri.....	118
Şekil 7.17.	InN(110) yüzeyinin $\bar{\Gamma}$ simetri noktasında hacim akustik fononları üzerinde yer alan yüzey fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	120
Şekil 7.18.	InN(110) yüzeyinin \bar{X} simetri noktasında hesaplanan yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	123
Şekil 7.19.	InN(110) yüzeyinin \bar{M} simetri noktasında hesaplanan yüzey akustik fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	125
Şekil 7.20.	Farklı simetri noktaları için en düşük enerjili fonon modunun ve \bar{X}' noktası için hacim fononları arasındaki boşluk bölgesinde bulunan yüzey fonon modlarının toplam kütle ile değişimi.....	127
Şekil 7.21.	III-N(110) yüzeyleri için hesaplanan en yüksek enerjili fonon modunun indirgenmiş kütle ile değişimi.....	128
Şekil 7.22.	III-N(110), III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri için hesaplanan en yüksek enerjili fonon modlarının indirgenmiş kütle ile değişimleri.....	129

Şekil 8.1.	Berilyum kalkojenlerin (110) yüzeyleri için elde edilen atomik denge geometrisinin yandan görünümü.....	132
Şekil 8.2.	BeS(110) yüzeyi için yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	134
Şekil 8.3.	BeSe(110) yüzeyi için yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	136
Şekil 8.4.	BeTe(110) yüzeyi için yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	137
Şekil 8.5.	BeS(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri.....	138
Şekil 8.6.	BeS(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen A' ve A'' karakterli fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	140
Şekil 8.7.	BeS(110) yüzeyi için \bar{X} simetri noktasında hesaplanan boşluk bölgelerinde bulunan yüzey fonon modları ile en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları.....	142
Şekil 8.8.	BeS(110) yüzeyi için \bar{M} simetri noktasında hesaplanan boşluk bölgelerinde bulunan yüzey fonon modları ile en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları.....	144
Şekil 8.9.	BeS(110) yüzeyi için \bar{X}' noktasında hesaplanan yüzey fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	146
Şekil 8.10.	BeSe(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri.....	147
Şekil 8.11.	BeSe(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen A' ve A'' karakterli fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	149
Şekil 8.12.	BeSe(110) yüzeyi için \bar{X} noktasında elde edilen yüzey akustik fonon modları ile en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun atomik titreşim şekilleri.....	150
Şekil 8.13.	BeSe(110) yüzeyi için \bar{X} noktasında elde edilen yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	151
Şekil 8.14.	BeSe(110) yüzeyinin \bar{M} noktasında hacim fonon modlarının altında ve üstünde elde edilen yüzey akustik ve optik fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	152
Şekil 8.15.	BeSe(110) yüzeyi için \bar{M} noktasında elde edilen yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	153

Şekil 8.16.	BeSe(110) yüzeyi için \bar{X}' noktasında hacim fonon modlarından açıkça ayrılan yüzey fonon modlarının atomik titreşim şekilleri...	155
Şekil 8.17.	BeTe(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri.....	156
Şekil 8.18.	BeTe(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen A' ve A'' karakterli fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	158
Şekil 8.19.	BeTe(110) yüzeyinin \bar{X} noktasındaki hacim fonon modlarının altında ve üstünde yer alan yüzey fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	159
Şekil 8.20.	BeTe(110) yüzeyinin \bar{X} noktasında hesaplanan yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	160
Şekil 8.21.	BeTe(110) yüzeyi için \bar{M} simetri noktasında hesaplanan boşluk fonon modları ile en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları.....	162
Şekil 8.22.	BeTe(110) yüzeyi için \bar{X}' noktasında elde edilen A' ve A'' karakterli fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.....	164
Şekil 8.23.	Be-kalkojenler için farklı simetri noktalarında, en düşük enerjili fonon modunun toplam kütle ile değişimi.....	166
Şekil 8.24.	Be-kalkojenler için \bar{X}' simetri noktasında hacim fononları arasındaki boşluk bölgesinde bulunan yüzey boşluk fonon modlarının toplam kütle ile sistematik değişimi.....	167
Şekil 8.25.	Be-kalkojenler için en yüksek enerjili fonon modunun indirgenmiş kütle ile sistematik değişimi.....	168

TABLolar LİSTESİ

Tablo 5.1.	BN, AlN, GaN ve InN yarıiletkenleri için hesaplanan a_0 , B, B' ve ϵ_∞ sabitlerinin daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmalarla karşılaştırılması.....	52
Tablo 5.2.	BN, AlN, GaN ve InN için elde edilen minimum enerji aralığı değerleri ve yüksek simetri yönlerinde hesaplanan enerji aralığı değerlerinin daha önce hesaplanan sonuçlarla karşılaştırılması....	57
Tablo 5.3.	BN, AlN, GaN ve InN için yüksek simetri noktalarında elde edilen fonon modlarının daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılması.....	63
Tablo 5.4.	BN, AlN, GaN ve InN için kütle oranları, Phillips iyonikliği ve Γ noktasında LO – TO fonon modlarının oranı.....	64
Tablo 6.1.	BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için hesaplanan a , B, B' ve ϵ_∞ sabitlerinin daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmalarla karşılaştırılması.....	75
Tablo 6.2.	BeS, BeSe ve BeTe için yüksek simetri yönlerinde hesaplanan doğrudan bant aralığı değerleri ve Γ -X dolaylı bant aralığı değerlerinin daha önce hesaplanan sonuçlarla karşılaştırılması....	79
Tablo 6.3.	BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için yüksek simetri noktalarında elde edilen fonon modlarının daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılması.....	84
Tablo 6.4.	BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için kütle oranları, Phillips iyonikliği ve X noktasında LO – TO fonon modlarının oranı.....	85
Tablo 7.1.	BN(110), AlN(110), GaN(110) ve InN(110) yüzeyleri için hesaplanan yüzey atomik denge geometrisi parametrelerinin daha önceki teorik hesaplamalarla karşılaştırılması.....	95

Tablo 7.2.	InN(110) yüzeyinin \overline{X}' simetri noktasında hesaplanan fonon modlarının daha önceki teorik sonuçlarla karşılaştırılması.....	121
Tablo 7.3.	III-N(110) yüzeylerinin tüm simetri noktalarında elde edilen en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları.....	130
Tablo 7.4.	III-N(110) yüzeyleri için denklem 7.1 kullanılarak bulunan ve hesaplamalar sonucu elde edilen en yüksek enerjili fonon modlarının karşılaştırılması.....	131
Tablo 8.1.	BeS(110), BeSe(110), BeTe(110) yüzeyleri için hesaplanan yüzey atomik denge geometrisi parametreleri.....	133

ÖZET

Anahtar kelimeler: III-N tipi yarıiletkenler, Berilyum-kalkojenler, yüzey fiziği, yoğunluk fonksiyon teorisi, süper hücre yaklaşımı.

Bu tezin amacı III-N materyallerinin (BN, AlN, GaN ve InN), Berilyum-kalkojenlerin (BeS, BeSe ve BeTe) ve onların (110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerini teorik olarak incelemektir. Çinko-sülfür yapıdaki III-N yarıiletkenlerinin, Be-kalkojenlerin ve (110) yüzeylerinin bu özellikleri, düzlem dalga yapay potansiyel metodu, yoğunluk fonksiyon teorisi, lineer tepki metodu ve süper hücre yaklaşımı kullanılarak çalışılmıştır. Bu konunun seçilmesinin nedeni, geniş bant aralıklı ve oldukça sert olan bu materyallerin elektronik, opto-elektronik ve yarıiletken aygıtlarda kullanılmaya çok uygun olmalarıdır. Bu ilginç özellikleri nedeniyle bu yarıiletkenlerin hacim özellikleri üzerine oldukça fazla sayıda çalışma yapılmıştır. Böylece bu materyallerin taban durumu özellikleri çok iyi anlaşılmasına rağmen, onların yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri daha az çalışılmıştır ve henüz tamamlanmamıştır. Özellikle, Be-kalkojenlerin (110) yüzeyleri ile ilgili literatürde teorik veya deneysel hiçbir çalışma yoktur. Bu nedenle, bu yarıiletkenlerin ve (110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerinin çalışılması, teknolojik uygulamalar için çok faydalı olacaktır.

Tez çalışmasının ilk dört bölümünde literatür bilgileri, incelenen yarıiletkenlerin ve (110) yüzeylerinin kristal yapıları, yarıiletkenlerin incelenmesinde kullanılan deneysel teknikler ve yoğunluk fonksiyon teorisi hakkında bilgi verilmiştir. Beşinci ve altıncı bölümlerde sırasıyla III-N yarıiletkenlerinin ve Be-kalkojenlerin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri için elde edilen sonuçlar sunulmuştur. Bir sonraki yedinci bölümde III-N(110) yüzeyleri için aynı özellikler anlatılmış ve geniş bir şekilde tartışılmıştır. Sekizinci bölümde BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için elde edilen sonuçlar literatürde ilk defa bu tezde sunulmuştur. Son bölümde ise elde edilen sonuçlar tartışılmış ve ileride yapılması planlanan çalışmalardan bahsedilmiştir.

INVESTIGATION OF STRUCTURAL ELECTRONIC AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF III-N MATERIALS AND BERYLLIUM CHALCOGENIDES

SUMMARY

Key Words: III-N semiconductors, Beryllium-chalcogenides, surface physics, density functional theory, supercell approach.

The aim of this thesis is to investigate structural, electronic and dynamical properties of III-nitride materials (BN, AlN, GaN and InN), Beryllium-chalcogenides (BeS, BeSe and BeTe) and their (110) surfaces, theoretically. These properties of the zinc-blende bulk phase and the (110) surface of III-nitrides and Be-chalcogenides have been studied by employing the plane-wave pseudopotential method, density functional theory, linear response technique and supercell approach. The reason for choosing this topic is that these materials are very suitable for applications in electronic, opto-electronic and semiconductor devices because of their large band gaps and hardness. Due to these interesting properties, there has been great interest in the study of bulk properties of these semiconductors. Although the ground state properties of these materials are well understood now, studies of structural, electronic and vibrational properties of their surfaces are fewer and incomplete. In particular, theoretical or experimental investigations of Be-chalcogenide (110) surfaces are still lacking from the literature. Thus, it is important to determine structural, electronic and vibrational properties of these semiconductors and their (110) surfaces in order to successfully apply them to technological devices.

In the first four chapters of this thesis, previous studies, crystal structures of these semiconductors and their surfaces, experimental techniques and density functional theory have been explained. In the fifth and sixth chapters, we have presented our structural, electronic and vibrational results for bulk III-N materials and Be-chalcogenides, respectively. The same properties of III-N(110) surfaces are presented and widely discussed in the seventh chapter. In the eighth chapter, investigations of BeS(110), BeSe(110) and BeTe(110) surfaces have been presented firstly in the literature. In the last chapter, our results have been discussed as well as the possible future works.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Geniş bant aralıklı yarıiletkenler, özellikle optoelektronik teknolojisinin gelişmesi ile yoğun bir şekilde çalışılmaya başlanmıştır. Bu materyaller, yüksek sıcaklık ve yüksek frekansta çalışan elektronik aletlerde ve opto-elektronik aletlerin yapımında tercih edilmektedirler. III-N tipi yarıiletkenler (BN, AlN, GaN ve InN) ve Berilyum kalkojenler (BeS, BeSe ve BeTe) de geniş bant aralıkları, sertlikleri ve teknolojik uygulamalara uygunlukları nedeniyle oldukça önemlidirler.

III-N tipi yarıiletkenlerin, geniş bant aralıkları, sertlikleri ve sıcaklığa dayanıklı olmaları nedeniyle teknolojide uygulama alanları oldukça geniştir. Geniş bant aralıkları nedeniyle optoelektronik aygıtların yapımında kullanılmaya elverişli olan bu materyaller, yeşil ve mavi ışık bölgesinde spektrum verdiklerinden kısa dalga boylu aletler için de vazgeçilmez kaynaklardır[1]. Çalışmalar göstermektedir ki bu yarıiletkenlerin hacim modülü diğer III-V tipi yarıiletkenlere göre (GaAs, InP, AlAs vb) daha büyüktür. Bu sonuç III-N tipi yarıiletkenlerin daha dayanıklı olduğunu ve bu yüzden teknoloji için daha uygun olduklarını gösterir. Teknolojik uygulamalar açısından bu derece önemli olan III-N tipi yarıiletkenlerin fiziksel özelliklerinin incelenmesi de önem kazanmıştır. Bu nedenle bu materyallerin hacim özellikleri birçok teorik ve deneysel grup tarafından çalışılmıştır. Hacim özelliklerinin incelenmesi yapısal özelliklerin araştırılmasıyla başlar. BN, AlN, GaN ve InN yarıiletkenlerinin yapısal özellikleri üzerine yapılan gerek teorik[2-6] gerekse deneysel[2,7-14] çalışmalar literatürde geniş bir şekilde yer almaktadır. Ayrıca bu yarıiletkenlerin opto-elektronik teknolojisinde kullanım alanlarının olması nedeniyle, elektronik özellikleri de yoğun bir şekilde çalışılmıştır. Elektronik özelliklerin araştırılmasında deneysel çalışmanın zorlukları nedeniyle bu çalışmalar daha çok teorik olarak yapılmıştır[2,15-18]. Deneysel olarak, literatürde sadece GaN yarıiletkeni için S. A. Ding ve arkadaşlarının 1996 yılında foton yayınlanması tekniğiyle yaptıkları çalışma yer almaktadır[19]. III-N tipi yarıiletkenlerin yapısal ve

elektronik özelliklerinin yanı sıra titreşim özelliklerinin incelenmesi de oldukça önemlidir. Çünkü faz geçişleri, elektron-fonon etkileşimleri, ısıl genleşme ve ısıl iletkenlik doğrudan fonon özellikleriyle ilgilidir. Değişik gruplar bu yarıiletkenlerin titreşim özellikleri üzerine teorik araştırmalar yapmışlardır. Bu araştırmalar hem teorik[20-24] hem de deneysel[25-29] olarak daha çok bu yarıiletkenlerin wurtzite kristal yapısı üzerine yoğunlaşmıştır. Bu nedenle III-N tipi yarıiletkenlerin çinko-sülfür yapılarının titreşim özellikleri üzerine yapılan araştırmalar daha azdır. Yine de literatürde bu alanda yapılmış teorik ve deneysel çalışmalar mevcuttur. Bu araştırmalarda katı iyon modeli[30], bağ-yükü modeli[30,31] ve Keating model[32] kullanılmıştır. Bu çalışmaların zayıf noktası kuvvet sabitlerinin tayini için deneysel verilere (hacim modülü, Brillouin merkezi frekansları gibi) ihtiyaç duymalarıdır. Bunların yanı sıra yoğunluk fonksiyon teorisi ile yapılan hesaplamalar da mevcuttur[3-5]. Deneysel olarak fonon frekansları, nötron saçılması ve Raman saçılması yöntemleriyle hesaplanabilir. III-N tipi yarı iletkenlere şimdiye kadar değişik gruplar tarafından Raman saçılması tekniği uygulanmıştır [33-36].

II-VI yarıiletkenlerinden olan Berilyum kalkojenlerin de III-N tipi yarıiletkenlerine benzer şekilde teknolojik uygulama alanları oldukça geniştir. Özellikle geniş elektronik bant aralığına sahip olmaları, elektronik aletlerin birçoğunda kullanılabilmelerine olanak sağlamaktadır. Bunun yanı sıra bu yarıiletkenler optik özellikleri nedeniyle mavi-yeşil lazer diyotların yapımında da kullanılmaktadırlar[37]. Teknolojide bu kadar geniş bir biçimde faydalanılan Be-kalkojenlerin yapısal özellikleri üzerine çok sayıda teorik[38-42] ve deneysel[43-46] çalışma yapılmıştır. Berilyum kalkojenlerin önemini artıran elektronik özellikleri için yapılan çalışmalar da son on yılda artış göstermiştir. BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin bu özelliklerinin anlaşılabilmesi için yapılan teorik çalışmalar literatürde yerlerini almışlardır[39,40,47-52]. Bununla birlikte yüksek miktarda zehirli yapılarından dolayı deneysel çalışma yapmanın zorlukları nedeniyle, az sayıda deneysel çalışma bulunmaktadır[37,53-56]. Berilyum kalkojenlerin titreşim özelliklerinin incelenmesi, onlar hakkında daha geniş bir bilgi edinebilmek için gereklidir. Fakat bu materyallerin titreşim özellikleri çok az çalışılmıştır. Bununla birlikte bu yarıiletkenlerin titreşim özellikleri üzerine yapılan çalışmaların son on sene giderek artması onların önemini göstermektedir. Wagner ve arkadaşlarının

BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin titreşim özellikleri üzerine 1998 ve 1999 yıllarında yaptıkları teorik ve deneysel çalışmalar oldukça faydalı olmuştur[45,46]. Aynı yarıiletkenler Doyen ve arkadaşları tarafından 2002 yılında da teorik olarak çalışılmıştır[57]. BeS yarıiletkeni üzerine yapılan tek teorik çalışma Srivastava ve arkadaşları tarafından 2004 yılında yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak yapılmıştır[40]. Bu çalışmada BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin titreşim özellikleri de yer almaktadır. Berilyum kalkojenler kullanılarak elde edilen alaşımların araştırılmaya başlanmasıyla onlar üzerine yapılan deneysel çalışmalar da artmıştır[58-62].

Son yıllarda elektronik aletlerin boyutlarının küçülmesi yüzey fiziği çalışmalarında büyük bir artış meydana gelmesini sağlamıştır. Fakat, yüzey fiziği alanında deneysel çalışmalar için oldukça pahalı sistemlere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu nedenle, yoğunluk fonksiyon teorisi gibi hiçbir deneysel parametreye ihtiyaç duyulmadan birçok özelliğin araştırılabildiği bir teorinin yüzey çalışmalarında kullanılması oldukça faydalı olmaktadır. Fakat yüzey fiziği çalışmalarında, özellikle de titreşim özellikleri incelenirken, hesaplamaların sonuçlanabilmesi için güçlü bilgisayar sistemlerine ihtiyaç vardır. Günümüzde bilgisayar teknolojisinin de ilerlemesi ile imkanlar arttığı için yüzey fiziği alanında teorik çalışmaların sayısı artmıştır.

Yüzey fiziği araştırmalarındaki bu gelişme ile yukarıda anlatıldığı gibi teknolojik olarak kullanılmaya oldukça elverişli olan III-N tipi yarıiletkenlerin hacim özelliklerinin yanı sıra yüzey özelliklerinin de incelenmesi büyük önem kazanmıştır. Böylece III-N tipi yarıiletkenlerin (110) yüzeylerinin yapısal özellikleri birçok grup tarafından teorik olarak çalışılmıştır[63-71]. Bu teorik çalışmaların hepsinde de hiçbir deneysel parametreye ihtiyaç duyulmadan hesaplama yapabilme olanağı sağlayan *ab initio* metodları kullanılmıştır. III-N(110) yüzeylerinin elektronik bant yapılarının anlaşılabilmesi için de bazı teorik çalışmalar mevcuttur. Grossner ve arkadaşları 1998 yılında yoğunluk fonksiyon teorisi ve yerel yoğunluk yaklaşımını(Local density approximation-LDA) kullanarak bütün III-N(110) yüzeyleri için elektronik bant spektrumlarını hesaplamışlardır[65]. Buna benzer bir çalışma Leite-Alves ve arkadaşları tarafından 1999 yılında tekrar yapılmış ve bu çalışmada genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı(Generalized gradient approximation-

GGA) kullanılmıştır[67]. Miotto ve arkadaşları ise 1999 ve 2000 yıllarında yine LDA ve GGA yaklaşımlarını kullanarak, AlN, GaN ve InN yarıiletkenlerinin (110) yüzeyleri için atomik yapı hesaplamalarının yanı sıra elektronik hesaplamalar da yapmışlardır[68,69]. Bu çalışmalara ek olarak Ooi ve arkadaşları 2005 yılında *ab initio* tekniğiyle BN(110) yüzeyinin yapısal ve elektronik özelliklerini incelemişlerdir[70]. III-N (110) yüzeylerinin titreşim özellikleri üzerine yapılan çalışmalar yok denecek kadar azdır. Bu yarıiletkenlerin titreşim özellikleri teorik olarak ilk kez 2002 yılında Tütüncü ve arkadaşları tarafından bağ yükü modeli ile incelenmiştir[32]. Bu çalışmada hesaplamalar yüzey Brillouin bölgesinin tümü için yapılmıştır. 2005 yılında ise grubumuz tarafından BN, AlN ve GaN (110) yüzeylerinin titreşim özellikleri bu sefer yoğunluk fonksiyon teorisi ile incelenmiştir[71]. Bu çalışmada sadece ana simetri yönleri boyunca yüzey fonon modları hesaplanmıştır. Bu çalışmadan bir yıl sonra BN(110) yüzeyi için tüm simetri yönleri boyunca titreşim özellikleri incelenmiştir[72]. Burada özellikle yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak InN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri üzerine hiçbir çalışma yapılmamış olması dikkat çekicidir. Ayrıca AlN(110) ve GaN(110) yüzeyleri için de *ab initio* metoduyla tüm simetri yönleri boyunca yüzey fonon modlarının hesaplandığı bir çalışma yoktur.

Teknolojik alanda geniş uygulama alanları olan BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için, hacim özelliklerinin aksine yüzey özellikleri henüz hiç çalışılmamıştır. Bu yarıiletkenlerin (110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerinin anlaşılabilmesi için, bu tez kapsamında yapılan çalışmaların bir kısmı 2007 yılında grubumuz tarafından makale olarak yayınlanmıştır[73-75].

Bu tezin amacı III-N tipi yarıiletkenler olarak bilinen BN, AlN, GaN ve InN materyalleri ile Berilyum-kalkojenler olarak adlandırılan BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin çinko-sülfür kristal yapıları ve (110) yüzeyleri için yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerini incelemektir. Hacim özelliklerinin incelenmesi, yüzey fiziği araştırmalarının temelini oluşturması açısından oldukça önemlidir. Bu nedenle öncelikle yukarıda bahsedilen yarıiletkenlerin hacim özellikleri yoğunluk fonksiyon teorisi ile araştırılarak, elde edilen sonuçlar daha önceki teorik ve deneysel çalışmalarla karşılaştırılacaktır. Daha sonra hacim özellikleri için hesaplanan

sonuçlardan yararlanarak, III-N(110) ve Be-kalkojen(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri sunulacaktır.

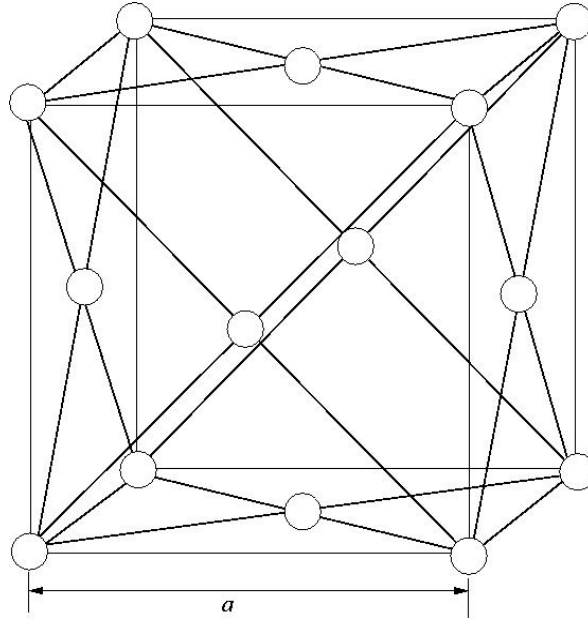
Bu tezde ilk olarak ikinci bölümde, yapılacak çalışmaların daha iyi anlaşılabilmesi için çinko sülfür yapı ile onun (110) yüzeyi hakkında temel bilgiler verilecektir. Tezin üçüncü bölümünde, bazı hacim ve yüzey özelliklerinin incelenmesinde kullanılan deneysel teknikler anlatılacaktır. Bölüm 4'de III-N tipi yarıiletkenler, Be-kalkojenler ve onların (110) yüzeylerinin yapısal ve elektronik özelliklerini incelemek için kullanılacak olan yoğunluk fonksiyon teorisi ve bu teori için gerekli olan bazı yaklaşımlar açıklanacaktır. Bu bölümde ayrıca titreşim özelliklerinin incelenmesinde kullanılan örgü dinamiği hesaplama metodu ve yüzey çalışmalarının temelini oluşturan süper hücre metodu da yer almaktadır. Tezin sonuç kısmını oluşturan ilk iki bölüm olan Bölüm 5 ve Bölüm 6'da sırasıyla, çinko-sülfür kristal yapıda bulunan III-N tipi yarıiletkenler ile Be-kalkojenlerin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri sunulacaktır. Ayrıca bulunan sonuçlar daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmalarla da karşılaştırılacaktır. Bölüm 7'de III-N tipi yarıiletkenlerin (110) yüzeyleri için yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri incelenecektir. Elde edilen sonuçlar daha önce var olan teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılacaktır. AlN(110) ve GaN(110) yüzeyleri için yüzey Brillouin bölgesinin tüm simetri yönleri boyunca yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak hesaplanan fonon dispersiyon grafikleri ve önemli modların titreşim şekilleri ilk olarak bu tezde sunulacaktır. Ayrıca InN(110) yüzeyi için de titreşim özellikleri yine ilk defa bu tezde incelenecektir. Bu bölümün sonunda III-N(110) yüzeylerinin, III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri ile benzer ve farklı yönleri de tartışılacaktır. Berilyum-kalkojenlerin (110) yüzeyleri için yoğunluk fonksiyon teorisi ile hesaplanan yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri daha önce çalışılmamış olup, ilk kez bu tezin sekizinci bölümünde incelenecektir. Bu yüzeyler için elde edilen sonuçlar da bölümün sonunda III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri ile karşılaştırılacaktır. Son bölümde, bu tez çalışması için elde edilen sonuçların genel bir değerlendirmesi sunulacak ve bundan sonra yapılacak olan bilimsel çalışmalarla ilgili kısaca bilgi verilecektir.

BÖLÜM 2. İNCELENEN YARIİLETKENLERİN HACİM VE YÜZEY YAPILARI

Bu çalışmada III-N tipi yarıiletkenlerin (BN, AlN, GaN ve InN) ve Berilyum kalkojenlerin (BeS, BeSe, BeTe) çinko sülfür (ZnS) yapıları ele alınmıştır. Daha sonra hacim için elde edilen parametreler kullanılarak yüzey özellikleri de incelenmiştir. Bu kısımda yüzey merkezli kübik örgü, ZnS kristal yapı ve ZnS yapının (110) yüzeyi hakkında bilgi verilecektir.

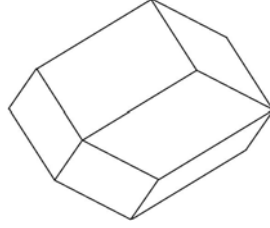
2.1. Yüzey Merkezli Kübik Örgü

Yüzey merkezli kübik örgü, basit kübik örgüden kolaylıkla elde edilebilir. Bir basit kübik örgünün yüzey merkezlerine birer örgü noktası konulursa oluşan yapı yüzey merkezli kübik örgü olarak bilinir[76]. Şekil 2.1'de yüzey merkezli kübik örgünün geleneksel birim hücresi gösterilmiştir. Bu geleneksel birim hücrede toplam 4 örgü noktası bulunur.



Şekil 2.1 Yüzey merkezli kübik örgünün geleneksel birim hücresi.

Tabii ki bu hücre, yüzey merkezli kübik örgü için ilkel birim hücre değildir. Bir örgü noktası içeren ve hacmi $\frac{a^3}{4}$ olan ilkel birim hücre Şekil 2.2’de gösterilmiştir.



Şekil 2.2 Yüzey merkezli kübik örgü için ilkel birim hücre.

Yüzey merkezli kübik örgü için temel örgü vektörleri;

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a\hat{j} + \frac{1}{2}a\hat{k} \quad (2.1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{1}{2}a\hat{k} \quad (2.2)$$

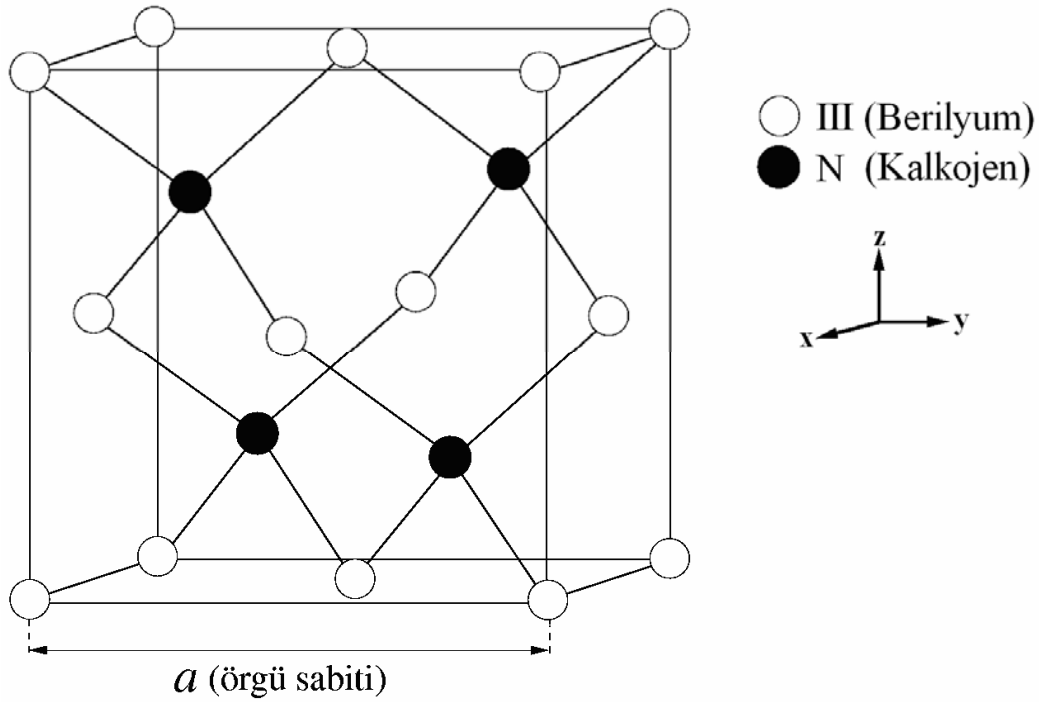
$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{1}{2}a\hat{j} \quad (2.3)$$

olarak verilir. [110] yönündeki örgü atomları en yakın komşu atomlardır. En yakın komşu atom uzaklığı $\frac{a}{\sqrt{2}}$ olarak ifade edilir[76].

2.2. Çinko Sülfür Kristal Yapı

Çinko sülfür kristal yapı, yüzey merkezli kübik yapıya [111] doğrultusunda farklı bir atomdan oluşan ikinci bir yüzey merkezli yapı eklenmesiyle oluşturulabilir. Bu yapı Şekil 2.3’de görülmektedir. Bu kristal yapıda III (B, Al, Ga ve In) ya da Berilyum atomları yüzey merkezli kübik örgünün, örgü noktalarına yerleşmektedirler. Bununla birlikte N veya Kalkojen (S, Se ve Te) atomları ise bu örgü noktalarından

$\frac{1}{4}a\hat{i} + \frac{1}{4}a\hat{j} + \frac{1}{4}a\hat{k}$ uzaklıkta bulunmaktadır[77].



Şekil 2.3. Çinko sülfür kristal yapısı

Bu yapının ilkel birim hücrelerinde bir tane III(Berilyum) ve bir tane de N(Kalkojen) atomu olmak üzere iki atom bulunur. Yüzey merkezli kübik örgü vektörleri cinsinden III(Berilyum) atomunun pozisyonu $\{0, 0, 0\}$ ve N(Kalkojen) atomunun pozisyonu ise $\{1/4, 1/4, 1/4\}$ olarak verilir[77]. Bu kristal yapıda her bir atom kendi cinsinden olmayan 4 atom ile en yakın komşudur. Bu sebeple bu kristal yapıda tetrahedral (dörtlü) bağlanma söz konusudur.

2.3. Ters Örgü

Bir kristalin özelliklerini incelemek için gerekli olan bütün dalga vektörleri kristalin ters örgüsünden belirlenir. Ters örgü vektörü

$$\vec{G}_m = \sum_{j=1,2,3} m_j \vec{g}_j$$

olarak ifade edilir[77]. Burada m_j değerleri pozitif-negatif tamsayılar ve sıfır değerlerini alabilir. \vec{g}_j parametreleri ise ters örgü temel yer değiştirme vektörleri olup düz örgü vektörleri cinsinden

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \quad (2.4)$$

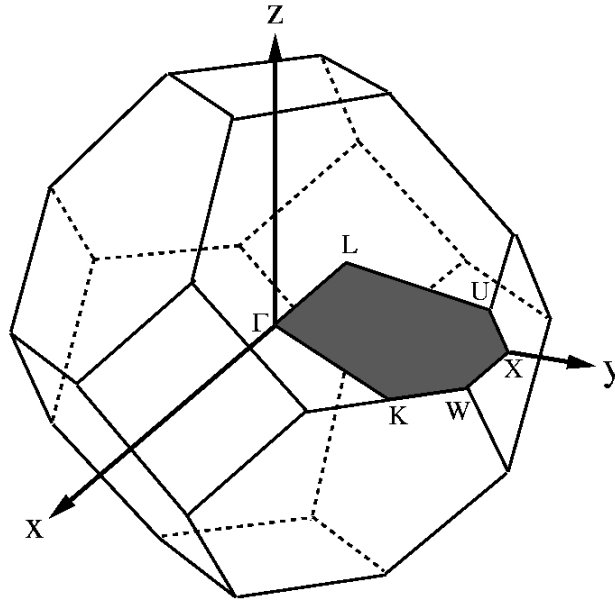
şeklinde yazılabilirler. Burada $\Omega = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ olarak hesaplanabilen kristalin ilkel birim hücre hacmidir.

2.4. Yüzey Merkezli Kübik Örgünün Birinci Brillouin Bölgesi

Yüzey merkezli kübik örgünün temel vektörleri (2.4) eşitliklerinde yerine konularak, ters örgü vektörleri,

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1,1,1) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{a}(1,1,-1)$$

olarak bulunur[77].



Şekil 2.4. Yüzey merkezli kübik örgünün indirgenmiş birinci Brillouin bölgesi

Yüzey merkezli kübik örgü için 1. Brillouin bölgesi Şekil 2.4'te gösterilmiştir. Taralı alan İndirgenmiş Birinci Brillouin bölgesidir ve bu bölge 1. Brillouin bölgesinin

1/48'ine eşittir. Bu bölgedeki dalga vektörlerini kullanarak kristalin tüm özelliklerini incelemek mümkündür. Simetriden dolayı bu bölgenin dışındaki dalga vektörleri farklı sonuçlar vermeyecektir. Şekilde görüldüğü gibi bu bölge, Γ , X, U, L, K ve W olmak üzere altı simetri noktası içermektedir. Bu simetri noktaları kartezyen koordinatlar cinsinden aşağıda verilmiştir:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{a}(0,0,0) \quad X = \frac{2\pi}{a}(0,1,0) \quad U = \frac{2\pi}{a}\left(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$$

$$L = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad K = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right) \quad W = \frac{2\pi}{a}\left(1, \frac{1}{2}, 0\right)$$

İndirgenmiş Brillouin bölgesindeki ana simetri yönleri ise,

$$\Delta = \Gamma - X \quad \Lambda = \Gamma - L \quad \Sigma = \Gamma - K$$

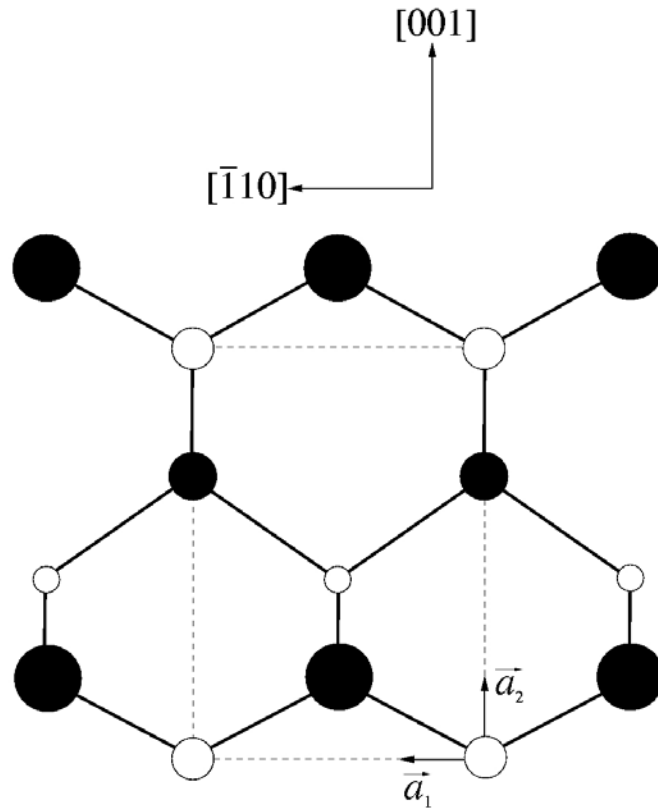
olarak verilir. Bu yönlerde deneysel ölçümlerin yapılması daha kolay olduğundan genellikle araştırmalar bu yönlerde yoğunlaşır.

2.5. Çinko Sülfür Yapının (110) Yüzeyleri İçin Yüzey Brillouin Bölgesi

Yüzey Brillouin Bölgesi yüzey düzleminde ve bu düzleme dik yönde bir periyodiklik tanımlanarak yapılandırılabilir[77]. Yüzey düzlemine dik yönde bir periyodiklik, hesaplamaları kolaylaştırmak için bir kabuldür. Çinko sülfür yapıları için (110) yüzeyinin birim hücresi Şekil 2.5'de görülmektedir. Bu şekilde küçük atomlar yüzeyin altındaki ikinci seviyede bulunan atomlardır. Yüzeyi tanımlamada faydalı olacak birim yer değiştirme vektörleri aşağıdaki gibi tanımlanabilir:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-1,1,0) \quad \vec{a}_2 = a(0,0,1) \quad \vec{a}_3 = c(1,1,0)$$

Burada \vec{a}_1 ve \vec{a}_2 vektörleri yüzey düzlemindeki yer değiştirme vektörleridir. Yüzeye dik olan \vec{a}_3 vektörü ise örgü sabiti a ile keyfi olarak değişen bir c parametresi ile belirlenir.



Şekil 2.5. Çinko sülfür yapıların (110) yüzeyleri için birim hücre kesikli çizgilerle sınırlı alandır. Burada boyut olarak daha küçük olan atomlar ikinci seviye atomlarını göstermektedir.

Bu temel vektörler boyutları $(a/\sqrt{2}) \times a \times c\sqrt{2}$ olan dik bir paralelkenarı tanımlar.

Seçilen ilkel yer değiştirme vektörleri kullanılarak, yüzey ters örgü vektörleri

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{2\pi}{|\vec{a}_1|} \hat{a}_1$$

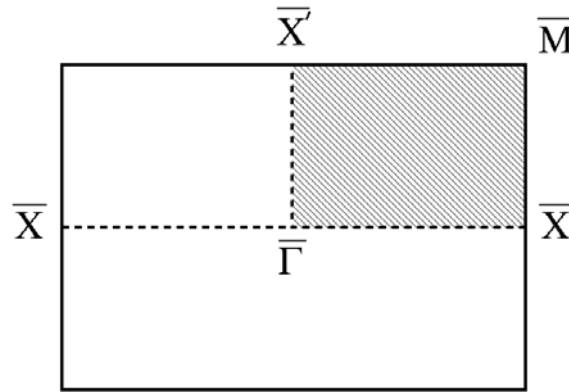
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{2\pi}{|\vec{a}_2|} \hat{a}_2 \quad (2.5)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{2\pi}{|\vec{a}_3|} \hat{a}_3$$

olarak yazılabilir[77]. Burada $\Omega = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ şeklinde kullanılmaktadır. Yüzey için ters örgünün tanımlanmasında kullanılan \vec{a}_3 vektörü sadece Bölüm 2.3'dekine benzer şekilde ters örgünün oluşturulmasını kolaylaştırmak için seçilmiştir. Bu nedenle yüzey ters örgüsü tanımlanırken \vec{b}_3 vektörü sıfır seçilir. Böylece yüzey ters örgünün ilkel birim hücresi \vec{b}_1 ve \vec{b}_2 vektörleri ile belirlenen bir bölgedir. Sonuç olarak yüzey ters örgünün genel bir vektörü

$$\vec{G}_{\parallel} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 = \{m_1, m_2\} \quad (2.6)$$

şeklinde yazılır. Burada m_1 ve m_2 tamsayıdır. Bu durumda tanımlanabilecek en küçük yüzey bölgesi, ilkel yer değiştirme vektörlerinin $\pm \vec{b}_1$ ve $\pm \vec{b}_2$ şeklinde seçilmesi ile oluşturulabilir. Buna uygun şekilde yüzey Brillouin bölgesi bu vektörlere dik çizilecek açortay düzlemler kullanılarak tanımlanabilir. Bu şekilde çinko sülfür yapının (110) yüzeyi için elde edilen yüzey Brillouin bölgesi Şekil 2.6'da görülmektedir.



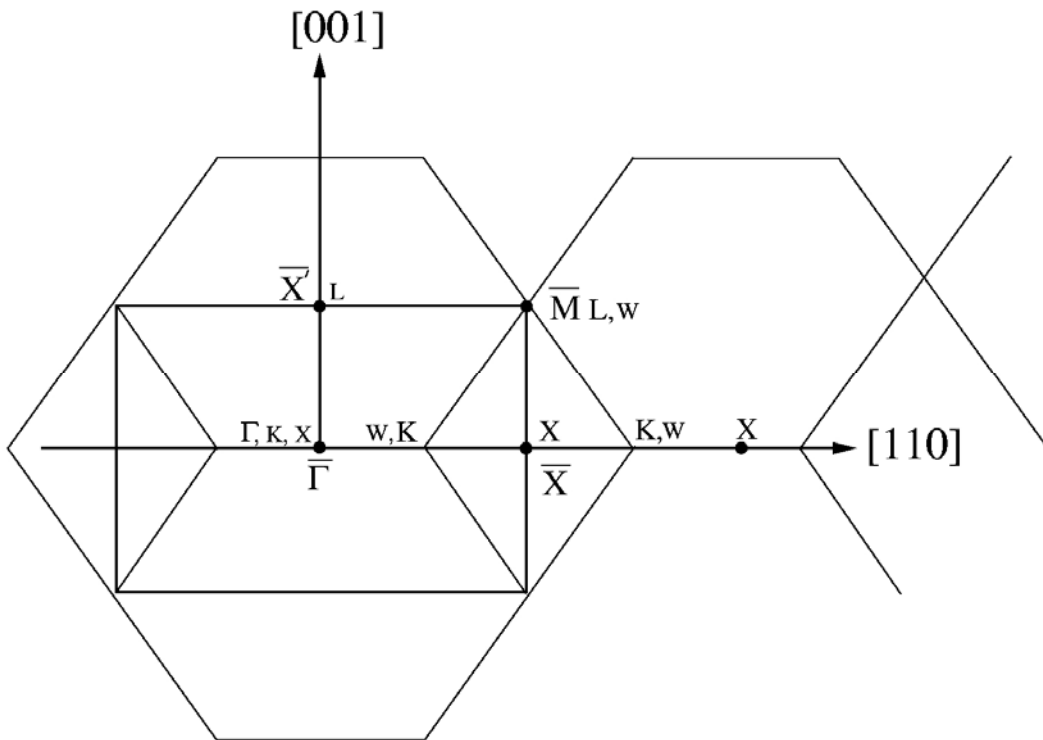
Şekil 2.6. Çinko sülfür yapının (110) yüzeyleri için Brillouin bölgesi. Taralı alan indirgenmiş Brillouin bölgesini göstermektedir.

Bu yüzey Brillouin bölgesi, (110) yüzeyinin C_{2v} nokta grup simetrisini göstermektedir. Bu sebeple yüzey Brillouin bölgesi $\frac{1}{4}$ 'üne kadar indirgenebilir.

Şekil 2.6'da görülen $\Gamma \bar{X} \bar{M} \bar{X}'$ taralı bölgesi (110) yüzeyinin indirgenmiş Brillouin

bölgesidir[77]. Bu bölge, yüzeyin incelenmesi için gerekli olan tüm dalga vektörlerini içerir. Buradaki simetri noktaları aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$\left. \begin{array}{ll} \bar{\Gamma} = \{0,0\} & \bar{X}' = \{0, \frac{1}{2}\} \\ \bar{X} = \{\frac{1}{2}, 0\} & \bar{M} = \{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\} \end{array} \right\} \quad (2.7)$$



Şekil 2.7. Çinko sülfür yapı için hacim Brillouin bölgesinin, (110) yüzeyinin Brillouin bölgesi üzerine izdüşümü görülmektedir. Hacim için simetri noktalarını gösteren küçük puntolu harfler izdüşümleri olan simetri noktalarını gösterirken, büyük puntolu harflerin ise izdüşümleri görülmemektedir.

Geometrik olarak yüzey Brillouin bölgesi, hacim Brillouin bölgesinin yüzeye dik olacak şekilde izdüşümünün alınmasıyla elde edilebilir. Şekil 2.7, (110) yüzeyinin Brillouin Bölgesi üzerine, çinko sülfür hacim Brillouin bölgesinin iz düşümünü göstermektedir. Hacim Brillouin bölgesindeki simetri noktalarının iz düşümleri yüzey Brillouin bölgesinde aşağıdaki şekilde yüzey simetri noktalarına karşılık gelmektedir[77].

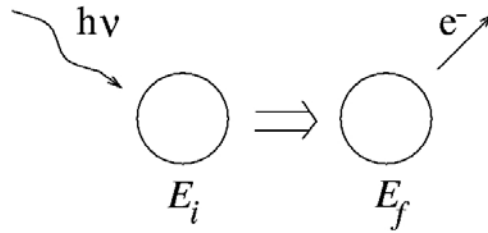
$$\Gamma, K, X \rightarrow \bar{\Gamma}; \quad X \rightarrow \bar{X}; \quad L \rightarrow \bar{X}'; \quad L, w \rightarrow \bar{M}$$

Hacim için simetri noktalarını gösteren küçük puntolu harfler izdüşümleri olan simetri noktalarını gösterirken, büyük puntolu harflerin ise izdüşümleri görülmemektedir. Üstü çizili harfler yüzey Brillouin Bölgesinin simetri noktalarını göstermektedir.

BÖLÜM 3. DENEYSEL TEKNİKLER

3.1. Fotoelektron Spektroskopisi (PS)

Yarıiletkenlerin elektronik yapılarının incelenmesi için en yaygın kullanılan yöntem fotoelektron spektroskopisi yöntemidir[78]. Bu yöntemin birkaç farklı çeşidi vardır. Bunlardan en yaygın olan ikisi Morötesi Fotoelektron Spektroskopisi (UPS) ve X-ışını Fotoelektron Spektroskopisi (XPS)'dir. UPS yönteminde enerjisi 5 eV ile 100 eV arasında değişen mor ışık kullanırken, XPS değeri 100 eV'un üzerinde olan X ışını fotonlarını kullanır.



Şekil 3.1. Bir atom tarafından foton soğurulması ve elektron yayınlanmasının şematik gösterimi

Enerjisi E_i olan bir atoma X ışını fotonu gönderildiğinde toplam enerji $h\nu + E_i$ olur. Burada $h\nu$ fotonun enerjisidir. Bu fotonun soğurulmasından sonra atom E_f uyarılmış durumuna geçerek bir elektron yayınlar. Enerjinin korunumundan,

$$h\nu + E_i = K + E_f$$

olur. Burada K yayınlanan elektronun kinetik enerjisidir. Bu işlem Şekil 3.1'de gösterilmiştir. Bu durumda fotonun enerjisi ile elektronun enerjisi arasındaki fark ölçülebilir. Bu fark elektronun ayrıldığı orbitalin bağlanma enerjisine eşittir.

3.2. Nötronların Elastik Olmayan Saçılması

Deneysel olarak, tek kutuplu ve çok kutuplu yarıiletkenlerin fonon özellikleri, nötronların elastik olmayan saçılmaları kullanılarak incelenir[76]. Bu metotta, bir kristalin içine giren termal nötron demetinin w örgü dalgası ve \vec{q} dalga vektörü ile etkileşimi gözlenir. Nötron bu etkileşim sonucunda örgü dalgasından enerji alır veya örgü dalgasına enerji verir. Bu da nötronun kristalden farklı enerji ve momentum durumunda ayrılması demektir. Nötron ve örgü dalgası arasındaki enerji değişimi $\hbar w$ 'nın katları cinsinden ifade edilmelidir. Çünkü örgü dalgasının enerjisi kuantumludur. Nötron örgü dalgasından enerji almış ise bir fonon soğurmuş ve enerjisi ilk duruma göre $\hbar w$ kadar artmış demektir. Aynı zamanda momentum korunumuna göre nötronun momentumu da ilk momentumuna göre $\hbar \vec{q}$ kadar artmıştır. Böylece, fonon soğurulması durumunda enerji ve momentumdaki değişim

$$E_{ns} = E_{ni} + \hbar w \quad (3.1)$$

$$\vec{P}_{ns} = \vec{P}_{ni} + \hbar \vec{q} \quad (3.2)$$

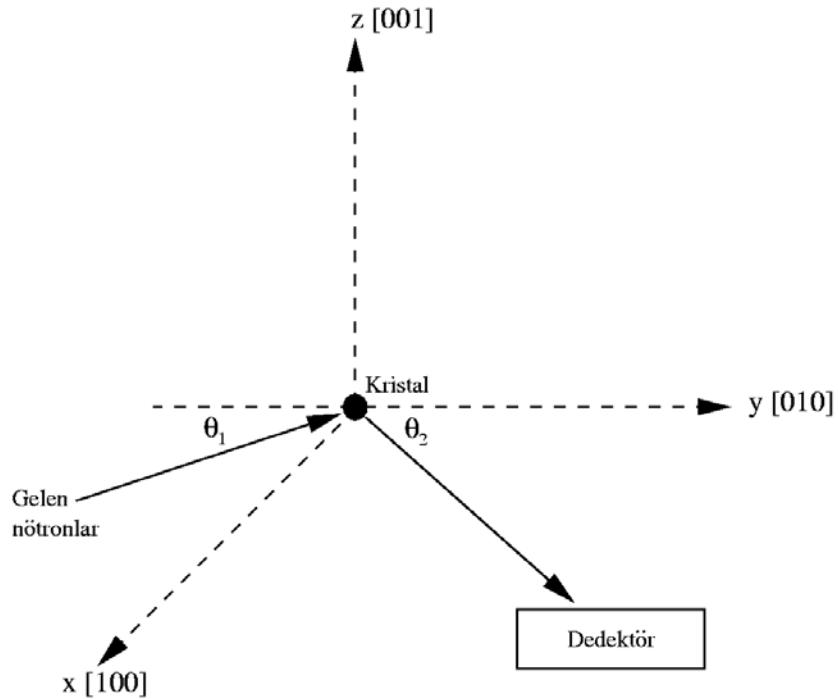
olarak ifade edilir. Burada n_i nötronun ilk halini, n_s nötronun son halini ve P nötronun momentumunu temsil eder. Eğer nötron örgü dalgasına enerji vermiş ise bir fonon açığa çıkarmış demektir. Bu durumda nötronun enerji ve momentumundaki değişim aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$E_{ns} = E_{ni} - \hbar w \quad (3.3)$$

$$\vec{P}_{ns} = \vec{P}_{ni} - \hbar \vec{q} \quad (3.4)$$

Şekil 3.2'de nötronların elastik olmayan saçılması şematik olarak gösterilmiştir. Nötron detektörü şekilde gösterildiği gibi xy düzlemine, y eksenine ile θ_2 açısı yapacak şekilde yerleştirilmiştir. Böylece detektör bu yön boyunca saçılan nötronların enerjilerini ölçer. Detektör xy düzleminde farklı konumlar

alabileceğinden kristalin çok yönlü taranmasına imkan verir. Bu yolla kristalin fonon özelliklerini incelemek mümkün olur.



Şekil 3.2. Nötronların elastik olmayan saçılmasının şematik gösterimi

3.3. Fotonların Elastik Olmayan Saçılması

Işık dalgaları da nötron saçılmasında olduğu gibi, kristalin örgü dalgasından elastik olmayan bir şekilde saçılabilir[76,79]. Bu saçılma sırasında gelen foton ya bir fonon soğurarak saçılır, ya da bir fonon yayınlanmasına sebep olur. Kristalin örgü dalgasıyla etkileşen fotonun, örgü dalgasından bir fonon soğurması durumunda frekansındaki ve dalga vektöründeki değişim,

$$w_f = w_i + w \quad (3.5)$$

$$\vec{q}_f = \vec{q}_i + \vec{q} \quad (3.6)$$

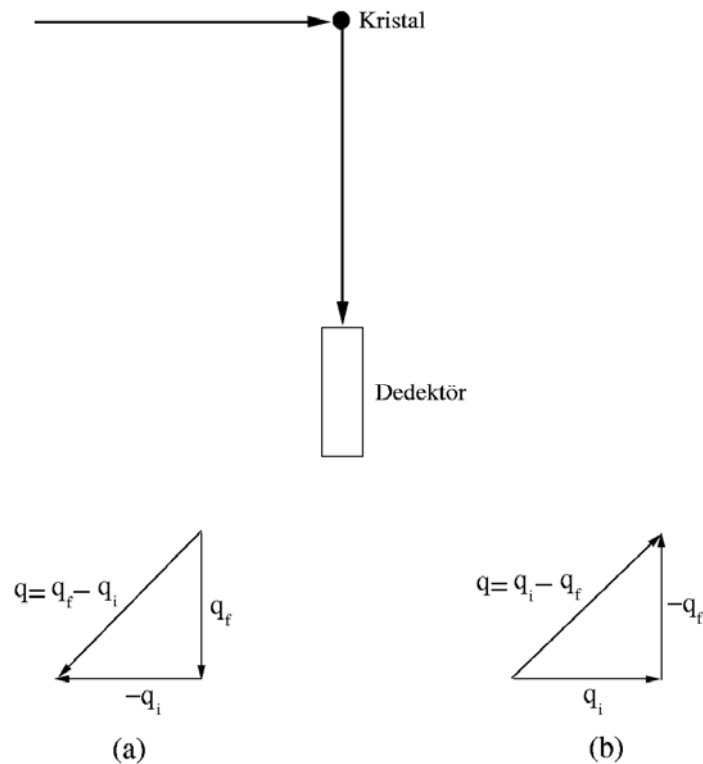
şeklinde yazılabilir. Fotonun örgü dalgasına enerji vererek bir fonon açığa çıkarması durumunda ise frekansındaki ve dalga vektöründeki değişim,

$$w_f = w_i - w \quad (3.7)$$

$$\vec{q}_f = \vec{q}_i - \vec{q} \quad (3.8)$$

olarak verilir. Burada (w_i, \vec{q}_i) gelen fotonun, (w_f, \vec{q}_f) saçılan fotonun ve (w, \vec{q}) ise fononun frekans ve dalga vektörlerini temsil ederler.

Bir kristalde fotonların elastik olmayan saçılması Şekil 3.3'te gösterilmiştir. Burada gelen fotonun frekansı w_i , fonon frekansından çok daha büyüktür. Bundan dolayı gelen fotonun fonon soğurması veya açığa çıkarması enerjisinde büyük bir değişime neden olmaz. Bu da fotonun saçılma frekansında ve dalga vektöründe küçük bir değişime neden olur. Fotonların elastik olmayan saçılması deneylerinde bu küçük değişimi tespit edebilmek için Şekil 3.3'te görüldüğü gibi dedektör gönderilen fotona dik olacak şekilde yerleştirilir.



Şekil 3.3. Bir kristalden fotonların elastik olmayan saçılmasının şematik gösterimi a) fonon soğuran kristalin dalga vektöründeki değişim b) fonon yayımlayan kristalin dalga vektöründeki değişim. (q_f : kristalin son dalga vektörü, q_i : kristalin ilk dalga vektörü, q : kristalin dalga vektörü.)

Görünür ışığın dalga vektörü kristalin birinci Brillouin bölgesi boyutlarından çok küçüktür. Bu durumun bir sonucu olarak gelen fotonun fonon soğurması veya açığa çıkarması olayı Brillouin bölgesi merkezi yakınında gerçekleşir. Burada optik ve akustik olmak üzere iki tip fonon modu mevcuttur. Optik fonon modlarının frekansı daha büyük ve dalga vektöründen bağımsızdır. Bunun yanı sıra akustik fononlar ise çok daha düşük frekans değerlerine sahiptirler ve dalga vektörü sıfıra gittiğinde bu fonon modlarının frekansı da sıfır olur. Foton saçılması optik fononlardan gerçekleştiğinde fotonun frekansındaki değişim son derece belirgindir. Saçılma şayet akustik fononlardan olursa foton frekansındaki değişimi gözlemlemek oldukça zordur. Bu iki saçılma durumu; saçılmanın akustik fononlardan gerçekleşmesi durumunda Brillouin saçılması, optik fononlardan gerçekleşmesi durumunda da Raman saçılması olarak adlandırılır.

3.4. Yüksek Kararlılık Elektronları Enerji Kaybı Spektroskopisi

1887'de Lord Rayleigh elastik yüzey dalgalarını (uzun dalga boylu yüzey fononları) ortaya attı. Rayleigh dalgalarıyla uyum gösteren yüzey fonon modları özellikle Elastikiyet Teorisinin iskeletinin elde edilmesini sağladı[79]. Böylece Rayleigh dalgasının doğasının cisimlerin elastik sabitlerine bağlı olduğu ortaya çıktı. Yüzey Brillouin bölgesi merkezindeki yüzey optik fononları ilk kez 1965'de, Fuchs ve Kliewer tarafından tespit edildi[80]. Fuchs-Kliewer fonon frekansı, aşağıdaki gibi verilir:

$$w_{FK} = w_{To} \left[\frac{(\varepsilon(0) + 1)}{(\varepsilon(\infty) + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.9)$$

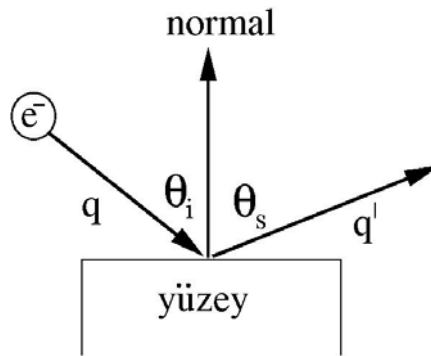
Burada $\varepsilon(0)$ ve $\varepsilon(\infty)$ sırasıyla statik ve optik dielektrik sabitleridir ve w_{To} hacim Brillouin bölgesinin merkezindeki enine optik fononun frekansıdır.

Fuchs-Kliewer yüzey fononları ilk kez Yüksek Kararlılık Elektronları Enerji Kaybı Spektroskopisi (YKEEKS) kullanılarak ZnO (çinko oksit) yüzeyleri üzerinde tespit edilmiştir[81]. Bu deneyde yaklaşık aynı E ($E \approx 10-300$ eV) enerjisine sahip bir

elektron demeti θ_i geliş açısıyla bir yüzeye etki ettirilmiştir (Şekil 3.4). Çıkan demetin θ_s açısı ise sabit tutulmuştur. Bir elektronun bir fonona göre yüzeyde çok daha fazla enerjiye sahip olduğu gözlenmiştir. Böylece dalga vektörleri için $|\vec{q}| \approx |\vec{q}'|$ ve momentumun korunumuna bağlı olarak yüzeyde;

$$q|(\sin\theta_s - \sin\theta_i)| = q_{s\parallel} \quad (3.10)$$

denklemini yazılabilir. Bu eşitlik ve enerjinin korunumu kullanılarak, yüzey fonon dispersiyon eğrilerinin deneysel sonuçları elde edilebilir.



Şekil 3.4. Tipik YKEEKS deneyinde yüzeye gelen (q) ve yüzeyden yansıyan (q') ışınların yaptıkları açıların değişimi görülmektedir. (Dalga vektörü için θ_i : geliş açısı, θ_s : yansıma açısıdır.)

3.5. Helyum Atomları Saçılması

Yüzey çalışmalarında, hacim fononlarının hesaplanması için kullanılan nötron saçılmasına tamamen benzer olan He(helyum) atom demetlerinin saçılması tekniği kullanılabilir[79]. Bir He atomu demeti çalışılan yüzey ile etkileşir ve saçılan atomların enerjileri belirlenir. Gelen He atomları için dalga vektörü \vec{q}_i ile gösterilir

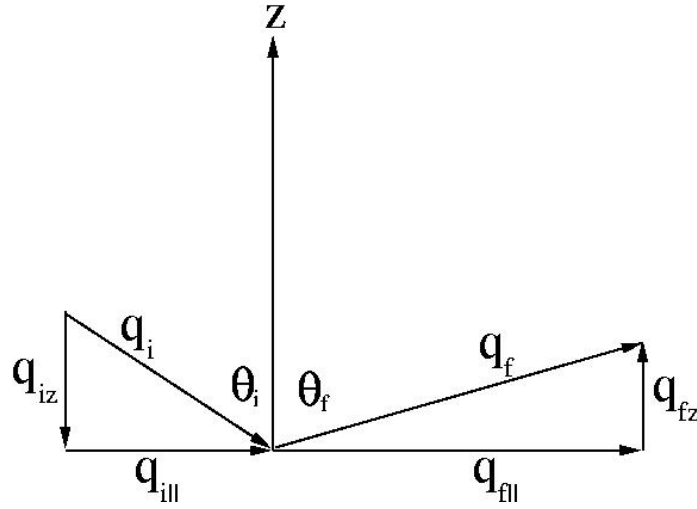
ve buna karşılık gelen enerji; $E_i = \frac{\hbar^2 q_i^2}{2M_{He}}$ olarak ifade edilir, saçılan dalga vektörü

\vec{q}_f ile gösterilir ve buna karşılık gelen enerji; $E_f = \frac{\hbar^2 q_f^2}{2M_{He}}$ olur. Δw enerji farkı ve

atomların saçıldıkları düzleme paralel yöndeki enerji transferi aşağıdaki formüllerle ifade edilir:

$$\hbar\omega = E_f - E_i \quad (3.11)$$

$$\Delta\vec{q}_{\parallel} = \vec{q}_{f\parallel} - \vec{q}_{i\parallel} \quad (3.12)$$



Şekil 3.5. Bir düzlemden elastik olmayan saçılma yöntemi. ($q_{i\parallel}$: gelen düzlem dalga vektörü, $\vec{q}_{f\parallel}$: yansıyan düzlem dalga vektörüdür.)

Şekil 3.5’de bir düzlemden elastik olmayan saçılma yöntemi görülmektedir. Bu şekilden açıkça görülebildiği gibi $\Delta q_{\parallel} = q_f \sin \theta_f - q_i \sin \theta_i$ şeklindedir ve enerjinin korunumu ise:

$$\hbar\Delta\omega = E_i \left[\frac{(\sin \theta_i + \frac{\Delta q_{\parallel}}{q_i})^2}{\sin^2 \theta_f} - 1 \right] \quad (3.13)$$

olarak verilmektedir. YKEEKS’ye kıyasla bu metot daha yüksek enerji çözünürlüğünde daha avantajlıdır. YKEEKS için 1 meV’dekine kıyasla bu metotta enerji yaklaşık 0.3-0.6 meV olur. Diğer yandan, He atomlarının enerjileri çok düşük olduğundan (20-30 meV aralığında) bu teknikle daha yüksek fonon enerjilerine ulaşamaz[82].

BÖLÜM 4. TEORİ

4.1. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

4.1.1. Giriş

Temeli yoğunluk fonksiyon teorisine dayanan *ab initio* teorileri, kristallerin yapısal, elektronik ve dinamik özelliklerini araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilmesidir. Yoğunluk fonksiyon teorisinin temelleri 1960'lı yıllarda Hohenberg-Kohn[83] ve Kohn-Sham[84] tarafından atılmıştır. Bu kısımda yoğunluk fonksiyon teorisinin esas aldığı temel teoremlerden ve elektronik enerji fonksiyonundan bahsedeceğiz.

4.1.2. Temel değişken olarak yoğunluk

N elektronlu bir sistemde dejenere olmamış temel hal dalga fonksiyonları, taban durumu elektronik yük yoğunluğu $n(r)$ 'nin bir fonksiyonu olarak

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) \rightarrow \Psi[n(r)] \quad (4.1)$$

şeklinde yazılabilir[85]. Biz henüz genel yoğunluk $n(r)$ 'yi, dolayısıyla da genel dalga fonksiyonu $\Psi[n(r)]$ 'yi bilmiyoruz. Bunu çözümlmek için Hohenberg ve Kohn aşağıdaki şekilde yeni bir $F[n]$ fonksiyonu tanımladılar[77,83]:

$$F[n] = T + V_{e-e} \quad (4.2)$$

Buradaki T ve V_{e-e} sırasıyla çok cisim sistemi için kinetik enerji ve elektron-elektron etkileşme enerjisidir. $F[n]$, özel bir sisteme ve ya dış potansiyele ait olmayan genel

bir fonksiyondur. Hohenberg ve Kohn bu fonksiyon yardımıyla, verilen bir dış potansiyel için toplam enerjiyi şu şekilde tanımlamışlardır[83]:

$$E_{el}[V_{dış}, n] = \int dr V_{dış}(r)\rho(r) + F[n] \quad (4.3)$$

4.1.3. Enerji dönüşüm prensibi

Yukarıda yazdığımız en son eşitlikte verilen $E_{el}[V_{dış}, n]$ fonksiyonu, yük yoğunluğu n 'ye bağlı olan bir dönüşüm prensibine uyar. Başka bir deyişle $E_{el}[V_{dış}, n]$ fonksiyonunun minimum değeri yani temel hal enerjisi sadece bir tek yoğunluk için $n(r)=\rho(r)$ olduğunda sağlanır[77,86]. Diğer hiçbir $n(r)$ değeri bu duruma karşılık gelmez.

Bu teoremin ispatı oldukça basittir. Ψ dalga fonksiyonunu dejenere olmamış kabul etmiştik. Bu nedenle Ψ , aşağıdaki ifadeden bulunacak olan diğer Ψ' dalga fonksiyonlarına göre daha düşük enerjili, taban durumu dalga fonksiyonudur. Ψ' dalga fonksiyonuna karşılık gelen enerji,

$$E_{el}[\Psi'] \equiv (\Psi', H \Psi') \quad (4.4)$$

olarak yazılabilir[87]. Böylece diğer $n(r)$ değerlerine karşılık gelen Ψ' dalga fonksiyonlarının enerjileri ile, $\rho(r)$ temel hal yoğunluğuna karşılık gelen Ψ dalga fonksiyonunun enerjisi şu şekilde karşılaştırılabilir:

$$\varepsilon_{el}[\Psi'] = \int dr V_{dış}(r)n(r) + F[n] > \varepsilon_{el}[\Psi] = \int dr V_{dış}(r)\rho(r) + F[\rho] \quad (4.5)$$

Bu ifadeden açıkça,

$$E_{el}[V_{dış}, n] > E_{el}[V_{dış}, \rho] \quad (4.6)$$

olduğu görülmektedir. Burada $E_{el}[V_{dış}, \rho]$, $V_{dış}(r)$ potansiyeline sahip ve N elektrondan oluşan bir sistemin taban durumu enerjisidir[77,86].

4.1.4. Elektronik enerji fonksiyonu

Yoğunluk fonksiyon teorisinin temel aldığı iki önemli teoremi bu şekilde açıkladıktan sonra, $F[\rho]$ fonksiyonunu aşağıdaki şekilde açık bir biçimde yazabiliriz:

$$F[\rho] = \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + G[\rho] \quad (4.7)$$

Böylece denklem 4.3 ile verilen temel hal enerji dalga fonksiyonu

$$E_{el}[V_{dış}, \rho] = \int dr V_{dış}(r)\rho(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + G[\rho] \quad (4.8)$$

şeklini alır. Buradaki $G[\rho]$, 1965 yılında Kohn ve Sham tarafından aşağıdaki gibi iki kısım halinde tanımlanan $F[\rho]$ tipinde bir fonksiyondur[84].

$$G[\rho] \equiv T_0[\rho] + E_{dt-e}[\rho] \quad (4.9)$$

Bu denklemdeki $T_0[\rho]$, $\rho(r)$ yoğunluklu birbirleriyle etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistemin kinetik enerjisidir. $E_{dt-e}[\rho]$ ise, hala tam olarak bilinmemekle beraber, bağımsız elektron modeli için klasik olmayan çok cisim değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşimleri ifade eder. Denklem 4.8 ve denklem 4.9 birlikte yazılırsa, bir $V_{dış}$ potansiyeli için enerji,

$$E_{el}[V_{dış}, \rho] = T_0[\rho] + \int dr V_{dış}(r)\rho(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + E_{dt-e}[\rho] \quad (4.10)$$

olarak ifade edilir. Bu eşitlikte verilen enerji değerlerini bulmak için başlıca üç zorluk vardır[77]:

1) E_{el} değerini minimum yapan $\rho(r)$ temel hal elektronik yük yoğunluğunu tanımlamak için bir metot gereklidir.

2) Dalga fonksiyonu ile ilgili bilgi olmadığından sadece verilen $\rho(r)$ yoğunluğu ile $T_0[\rho]$ değeri tam olarak belirlenemez.

3) Birkaç basit sistem dışında hakkında hiçbir bilgiye sahip olmadığımız $E_{dt-e}[\rho]$ fonksiyonu için bazı yaklaşımlar yapmak gerekir.

4.1.5. Kendi kendini doğrulayabilen Kohn-Sham eşitlikleri

Yukarıda sözünü ettiğimiz ilk iki zorluk Kohn ve Sham'ın önerileriyle 1965 yılında aşağıdaki şekilde çözümlenmiştir[84].

Bu kısımda denklem 4.10 ile verilen enerji ifadesini minimum yapan elektronik yük yoğunluğunun $n(r)$ olduğunu kabul edeceğiz. Bu durumda bu denklem,

$$E_{el}[V_{dis}, n] = T_0[n] + \int dr V_{dis}(r)n(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} + E_{dt-e}[n] \quad (4.11)$$

şeklini alır. Öncelikle aşağıdaki gibi tanımlanan bir $n(r)$ elektron yoğunluğuna bağlı bir V_{den} tek parçacık deneme potansiyeli tanımlayalım:

$$n(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (4.12)$$

Buradaki toplam, dolu durumlar ($j=1,2,3,\dots,N$) üzerinden yapılmaktadır. $\phi_j(r)$ ise, aşağıdaki gibi bir Schrödinger eşitliğini sağlayan, birbirleriyle etkileşmediğini kabul ettiğimiz elektronların dalga fonksiyonlarıdır:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{den}(r) \right] \phi_j(r) = \epsilon_j \phi_j(r) \quad (4.13)$$

Bu eşitliğin bir çözümü,

$$\begin{aligned}\sum_j \varepsilon_j &= \sum_j \left[\phi_j, \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{den}}(\mathbf{r}) \right) \phi_j \right] \\ &= T_0[n] + \int d\mathbf{r} V_{\text{den}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (4.14)$$

şeklinde yazılabilir. Böylece denklem 4.11 aşağıdaki şekli alır:

$$E_{\text{el}}[n] = \sum_j \varepsilon_j - \int d\mathbf{r} V_{\text{den}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} V_{\text{dış}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\text{dt-e}}[n]\quad (4.15)$$

Bu ifadeyi, $n(\mathbf{r})$ 'yi V_{den} 'in bir fonksiyonu kabul edip, V_{den} 'e bağlı olarak; ya da V_{den} 'i, $n(\mathbf{r})$ 'nin bir fonksiyonu kabul edip, $n(\mathbf{r})$ 'ye bağlı olarak minimum hale getirmemiz gerekir. Biz $n(\mathbf{r})$ 'ye bağlı bir döngü alarak, $E_{\text{el}}[n]$ 'yi minimum yapacak olan $V_{\text{den}}(\mathbf{r})$ 'yi aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\begin{aligned}V_{\text{den}}(\mathbf{r}) &= V_{\text{dış}}(\mathbf{r}) + e^2 \int d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\partial E_{\text{dt-e}}[n]}{\partial n(\mathbf{r})} + \text{sabit} \\ &= V_{\text{KS}}(\mathbf{r}) + \text{sabit}\end{aligned}\quad (4.16)$$

Denklemdaki V_{KS} , Kohn-Sham potansiyeli olarak bilinen etkin bir potansiyeldir ve şu şekilde verilir[84]:

$$\begin{aligned}V_{\text{KS}}(\mathbf{r}) &= V_{\text{dış}}(\mathbf{r}) + e^2 \int d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\partial E_{\text{dt-e}}[n]}{\partial n(\mathbf{r})} \\ &= V_{\text{dış}}(\mathbf{r}) + V_{\text{H}}(\mathbf{r}) + V_{\text{dt-e}}(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (4.17)$$

Burada V_{H} Coulomb potansiyelidir. Aşağıdaki şekilde tanımlanan

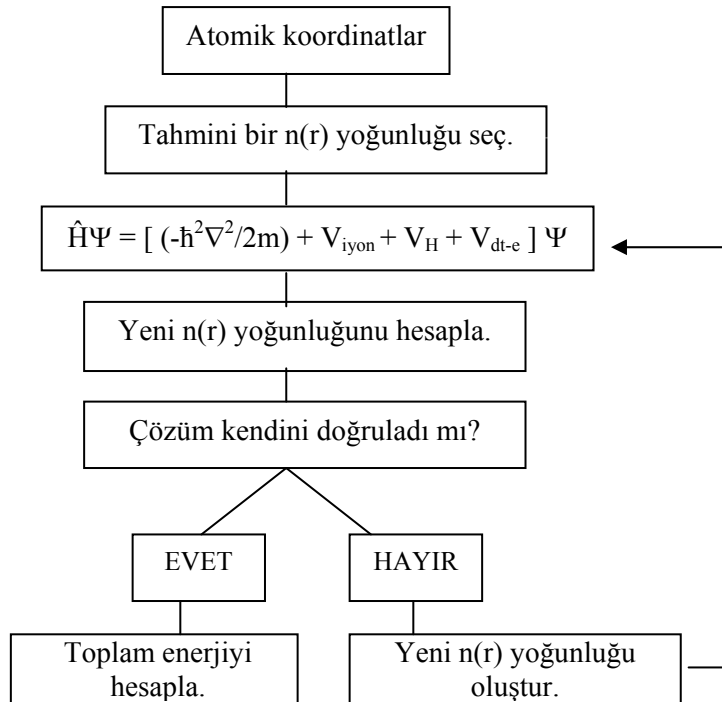
$$V_{dt-e}(r) = \frac{\partial E_{dt-e}[n]}{\partial n(r)} \quad (4.18)$$

ifadesi ise etkin bir tek elektron deęiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim potansiyelidir. Artık denklem 4.12 ve 4.13 sırasıyla, temel hal durumunu temsil edecek şekilde,

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}(r) \right] \phi_j(r) = \varepsilon_j \phi_j(r) \quad (4.19)$$

$$\rho(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (4.20)$$

olarak yazılabilir. Denklem 4.19'daki köşeli parantez içindeki ifade, Kohn-Sham hamiltoniyeni (\hat{H}_{KS}) olarak bilinir. Bu denklemler kendini doğrulayarak çözülebilmektedir. Bu yüzden bunlar kendini doğrulayabilen Kohn-Sham eşitlikleri olarak bilinirler[84]. Bu doğrulama işlemi Şekil 4.1'de verilen algoritma diyagramıyla açıkça gösterilmiştir[88,89].



Şekil 4.1. Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış çizelgesi

4.1.6. Yerel yoğunluk yaklaşımı

Kısım 4.1.4'de bahsedilen üçüncü zorluk, yani $E_{dt-e}[\rho]$ değerinin belirlenmesi yerel yoğunluk yaklaşımı(local density approximation)(LDA) kullanılarak aşılmıştır. Bu yaklaşımda, sistem homojen bir elektron gazı olarak düşünülür ve elektronik yük yoğunluğu bu sisteme göre belirlenir[77,86,90]. Böylece $\rho(r)$ sistem içinde çok az değişir ve aşağıdaki yaklaşımı yapmak mümkün hale gelir:

$$\begin{aligned} E_{dt-e}[\rho] &\cong \int dr \rho(r) \varepsilon_{dt-e}[\rho(r)] \\ &\cong \int dr \rho(r) \{ \varepsilon_{dt}[\rho(r)] + \varepsilon_e[\rho(r)] \} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Buradaki $\varepsilon_{dt-e}[\rho(r)]$, elektron gazındaki her bir elektronun değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme enerjisidir. $\varepsilon_{dt}[\rho(r)]$, değiş-tokuş etkileşimlerini gösterirken; $\varepsilon_e[\rho(r)]$ ise karşılıklı etkileşmeleri ifade eder. Yukarıdaki eşitliğe uygun gelen değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim potansiyeli ise

$$V_{dt-e}(r) = \frac{d}{d\rho} \{ \varepsilon_{dt-e}[\rho(r)] \rho(r) \} \equiv \mu_{dt-e}[\rho(r)] \quad (4.22)$$

şeklinde yazılabilir. $\mu_{dt-e}[\rho]$, bu düzenli sistemin kimyasal potansiyeline değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim katkısıdır. Elektronlar arası ortalama uzaklığı r_s olarak alırsak, ρ 'yu,

$$\rho^{-1} = \frac{4}{3} \pi r_s^3 \quad (4.23)$$

şeklinde tanımlayabiliriz. Böylece denklem 4.22'yi aşağıdaki şekilde yazabiliriz:

$$V_{dt-e} \equiv \mu_{dt-e} = \varepsilon_{dt-e} - \frac{r_s}{3} \frac{d\varepsilon_{dt-e}}{dr_s} \quad (4.24)$$

Sonuç olarak denklem 4.10, 4.17, 4.21 ve 4.22'yi kullanarak toplam taban durumu enerjisi için aşağıdaki eşitliği yazabiliriz:

$$E_{el} = \sum_j \varepsilon_j - \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + \int dr \{\varepsilon_{dt-e}[\rho(r)] - \mu_{dt-e}[\rho(r)]\} \rho(r) \quad (4.25)$$

Bu eşitlikten de açıkça görüleceği gibi enerji ifadesindeki bütün terimler yük yoğunluğuna bağlı olarak yazılabilmektedir. Zaten yoğunluk fonksiyon teorisinin de getirdiği en büyük yenilik, Kohn-Sham eşitliklerinden bulunabilen $\rho(r)$ yük yoğunluğu sayesinde enerji ifadesindeki bütün terimlerin bilinmesi ve böylece toplam enerjinin rahatlıkla belirlenmesini sağlamasıdır.

ε_{dt-e} için uygun olan bazı sonuçlar aşağıdaki gibidir:

Wigner (1938)(Ryd biriminde)[91]

$$\varepsilon_{dt-e} = \frac{-0.9164}{r_s} - \frac{0.88}{(7.8 + r_s)} \quad (4.26)$$

ifadesini önermiştir. Ceperley ve Alder[92], Perdew ve Zunger[93]'in belirledikleri parametreleri kullanarak, polarize olmamış bir elektron gazı için Hartree biriminde aşağıdaki sonucu bulmuşlardır:

$$\varepsilon_{dt-e} = \frac{-0.4582}{r_s} + \begin{cases} -0.1423/(1 + 1.9529\sqrt{r_s}) & r_s \geq 1 \text{ için} \\ -0.0480 + 0.0311 \ln r_s - 0.0116 r_s + 0.0020 r_s \ln r_s & r_s < 1 \text{ için} \end{cases} \quad (4.27)$$

Bu tez çalışmasında, son denklemde verdiğimiz Ceperley ve Alder'in sonuçları kullanılmıştır.

4.1.7. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı

Yerel yoğunluk yaklaşımının başarısı, bir adım daha gidilerek genelleştirilmiş gradyan yaklaşımının (generalized gradient approximation)(GGA) oluşmasına imkan sağlamıştır. Bu yaklaşım yerel yoğunluk yaklaşımına ek olarak, her noktada elektronik yük yoğunluğunun (ρ) yanı sıra bu yoğunluğun $|\nabla\rho|$ olarak ifade edilen gradyanının da hesaplanması gerektiği fikrini temel alır. Bu durumda denklem 4.21 aşağıdaki şekilde yazılabilir[94]:

$$\begin{aligned} E_{\text{dt-e}}^{\text{GGA}}[\rho] &\cong \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{\text{dt-e}}^{\text{GGA}}[\rho(\mathbf{r}), |\nabla\rho(\mathbf{r})|] \\ &\cong \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{\text{dt}}[\rho(\mathbf{r})] F_{\text{dt-e}}[\rho(\mathbf{r}), |\nabla\rho(\mathbf{r})|] \end{aligned}$$

Burada $\varepsilon_{\text{dt}}[\rho(\mathbf{r})]$, homojen bir sistem için sadece değiş-tokuş etkileşmelerini içeren enerjisi ifadesidir. $F_{\text{dt-e}}$ ise elektronik yük yoğunluğunun yanı sıra onun gradyanını da içeren bir düzeltme fonksiyonudur. Bu düzeltme fonksiyonu da değiş-tokuş etkileşimleri ve karşılıklı etkileşmeler için iki kısma ayrılabilir. Değiş-tokuş etkileşmelerini içeren düzeltme fonksiyonu $F_{\text{dt}}(\rho, \nabla\rho)$ şeklinde ifade edilebilir. Bu fonksiyonun anlaşılabilmesi için yük yoğunluğunun m . dereceden gradyanını tanımlamak yararlı olacaktır:

$$s_m = \frac{|\nabla^m \rho|}{(2k_F)^m \rho} = \frac{|\nabla^m \rho|}{2^m (3\pi^2)^{m/3} (\rho)^{(1+m/3)}}$$

Burada $k_F = 3(2\pi/3)^{1/3} r_s^{-1}$ olarak tanımlanır. Bu tanımlamadan anlaşılacağı gibi yoğunluğun m . dereceden değişimini ifade eden s_m , elektronların ortalama uzaklığı r_s ile orantılıdır. Bu durumda birinci dereceden gradyan için aşağıdaki tanımlama yapılabilir:

$$s_1 \equiv s = \frac{|\nabla\rho|}{(2k_F)\rho} = \frac{|\nabla r_s|}{2(2\pi/3)^{1/3} r_s}$$

Sonuç olarak F_{dt} 'in ilk terimleri analitik olarak aşağıdaki şekilde hesaplanabilir[94,95]:

$$F_{dt} = 1 + \frac{10}{81}s_1^2 + \frac{146}{2025}s_2^2 + \dots$$

Buna benzer olarak genelleştirilmiş gradyan yaklaşımının farklı formları için çok sayıda düzeltme fonksiyonu tanımlanabilir[96-98]. Bu çalışmada bu formlardan Perdew, Burke ve Enzerhof'un birlikte geliştirdikleri PBE kullanılmıştır[98]. Bu formda F_{dt} aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$F_{dt}(s) = 1 + \kappa - \frac{\kappa}{1 + (\mu s^2 / \kappa)}$$

Burada $\kappa=0.804$ şeklinde seçilmiş olup Lieb-Oxford sınırlamasını doğrulamaktadır. Diğer $\mu=0.21951$ sabiti ise yerel yoğunluk yaklaşımında karşılıklı etkileşme ihmal edilerek elde edilmiştir.

Karşılıklı etkileşme için düzeltme fonksiyonu ise yüksek yoğunlukta, düşük dereceli gradyanlar için Ma ve Brueckner tarafından aşağıdaki gibi tanımlanmıştır[99]:

$$F_e = \frac{\varepsilon_e^{LDA}(\rho)}{\varepsilon_{dt}^{LDA}(\rho)} (1 - 0.21951s_1^2 + \dots)$$

Büyük dereceli gradyanlar için karşılıklı etkileşme enerjisinin katkısı da azalır.

Sonuç olarak genelleştirilmiş gradyan yaklaşımında değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme enerjisi

$$E_{dt-e}[\rho(r)] = \sum \int dr \left[\varepsilon_{dt-e}^{GGA} + \rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \rho(r)} + \rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \nabla \rho(r)} \nabla \right] \rho(r)$$

olarak verilir. Buna karşılık gelen potansiyel ise köşeli parantez içindeki ifadedir ve aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$V_{dt-e}(\mathbf{r}) = \left[\varepsilon_{dt-e}^{GGA} + \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \rho(\mathbf{r})} - \nabla \left(\rho(\mathbf{r}) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \nabla \rho(\mathbf{r})} \right) \right]$$

Bu yaklaşım çok yaygın olarak kullanılmakla birlikte bazı eksiklikleri bulunmaktadır[100]. White ve Bird'in 1994 yılında tanımladıkları enerji ve potansiyel ifadelerinde bu eksiklikler giderilmiş ve daha doğru sonuçlara ulaşılmasına olanak sağlanmıştır[101]. Bu yaklaşıma göre değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme enerjisi

$$E_{dt-e}[\rho(\mathbf{r})] = \sum \int d\mathbf{r} \left[\varepsilon_{dt-e}^{GGA} + \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \rho(\mathbf{r})} \right] \rho(\mathbf{r}) + \sum \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}) \left[\frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \nabla \rho(\mathbf{r})} \right] \frac{\nabla \rho(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r})} \rho(\mathbf{r})$$

olarak yazılabilir. Burada $\nabla \rho(\mathbf{r}_m) = \sum_{m'} C_{m-m'} \rho(\mathbf{r}_{m'})$ şeklinde tanımlıdır. Bu tanımlamadan yararlanarak potansiyel ifadesi

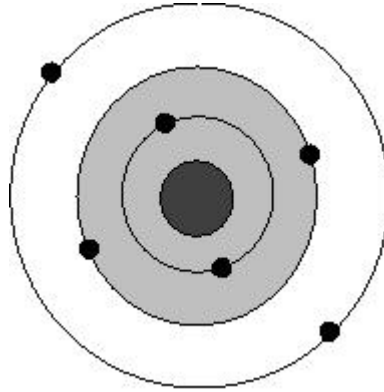
$$V_{dt-e}(\mathbf{r}_m) = \left[\varepsilon_{dt-e}^{GGA} + \rho \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \rho} \right] + \sum_{m'} \left[\rho \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial |\nabla \rho|} \frac{\nabla \rho}{|\nabla \rho|} \right] C_{m'-m}$$

formülüyle verilebilir. Bu şekilde bir tanımlama hesaplamalarda daha doğru sonuçlara ulaşılmasını sağlamaktadır[100].

4.1.8. Yapay(Pseudo) potansiyel metodu

Yapay potansiyel metodunun temel unsurları 1966'da Harrison[102] tarafından yazılan kitapta, ve 1970'de Cohen ve Heine'nin ortak çalışması[103] olan bir araştırma makalesinde ilk olarak ele alınmıştır. Bu kısımda bu metod kısaca açıklanıp bazı önemli noktalarından bahsedilecektir.

Bir atom; çekirdek, kor elektronları ve değerlik elektronları olmak üzere üç parçadan oluşmuş bir sistem olarak düşünülebilir[77]. Kor elektronları dolu orbitalleri temsil etmektedir. Örneğin $1s^2 2s^2 2p^2$ elektronik dizilimine sahip karbon atomunda, $1s^2$ ve $2s^2$ yörüngelerindeki elektronlar kor elektronlarıdır. Bu elektronlar genellikle çekirdeğin çevresinde yerleşirler. Çekirdekle kor elektronlarının oluşturduğu sisteme iyon kuru denir.



Şekil 4.2. Çekirdek, öz (kor) elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş bir atom. Taralı bölge öz bölgesini göstermektedir

Şimdi, kor elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş Şekil 4.2'deki gibi bir kristal düşünelim. Bu sistemdeki değerlik elektronlarının dalga fonksiyonları ile kor elektronlarının dalga fonksiyonları ortogonal olsun. Yapay potansiyel yaklaşımına göre, böyle bir kristalin elektronik özelliklerinin belirlenmesinde değerlik elektronları tamamen etkili olurken, iyon kolları hiçbir rol oynamaz. Böyle bir sistemin elektronik özelliklerini belirlemek için aşağıdaki gibi bir Schrödinger denkleminde yararlanılabilir:

$$H\Psi = \epsilon\Psi \quad (4.28)$$

Burada H Hamiltoniyeni, T kinetik enerjisi ile kor elektronlarından kaynaklanan V_A etkin potansiyelinin toplamıdır. Denkleminde yer alan Ψ dalga fonksiyonu ise, değerlik elektronlarından gelen ve etkisi az olan bir ϕ fonksiyonu ile, iyon kollarından kaynaklanan ϕ_c fonksiyonlarının toplamı şeklinde,

$$\Psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \quad (4.29)$$

olarak yazılabilir[77]. Eşitliğin sağ tarafında görülen b_c katsayıları Ψ ile ϕ_c 'nin,

$$\langle \Psi | \phi_c \rangle = 0 \quad (4.30)$$

şeklinde ortogonal olmalarını sağlayan normalizasyon sabitleridir. Böylece Denklem 4.29 ve 4.30'dan yararlanarak Denklem 4.28'i yeniden yazarsak,

$$H\phi + \sum_c (\epsilon - E_c) \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c = \epsilon \phi \quad (4.31)$$

olur. Son denklemdeki E_c ifadesi, kor bölgesindeki öz değerlerden biridir. Bulunan son eşitlikten aşağıdaki gibi iki denklem yazılabilir[77]:

$$(H + V_R)\phi = \epsilon \phi \quad (4.32)$$

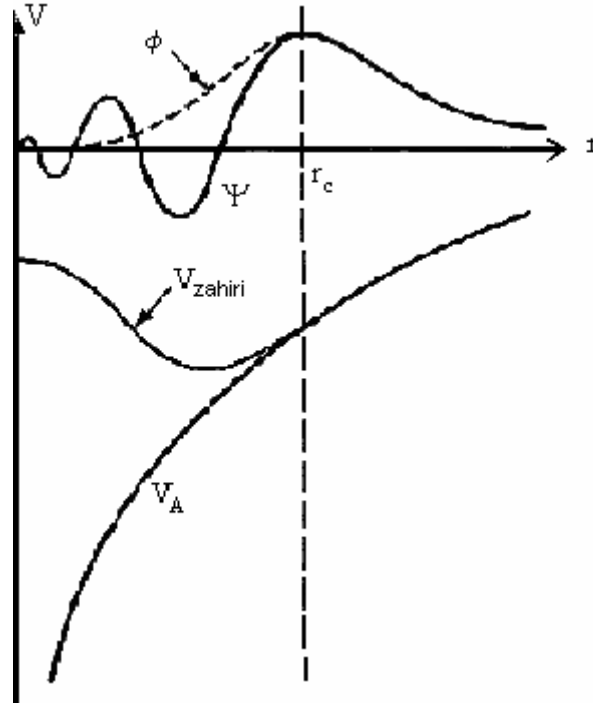
$$(T + V_{ps})\phi = \epsilon \phi \quad (4.33)$$

Yukarıdaki ilk denklemde tanımlanan V_R , itici bir potansiyel operatörüdür. İkinci denklemdeki V_{ps} potansiyeli ise, 1959 yılında Phillips ve Kleinman'ın yaptıkları çalışmalar[104] ile, onlardan bağımsız olarak Antoncik tarafından yapılan çalışmalar[105] sonucunda aşağıdaki gibi tanımlanan bir operatördür[77]:

$$V_{ps} = V_A + V_R \quad (4.34)$$

Bu potansiyel itici bir potansiyel olan V_R ile, etkin bir potansiyel olan V_A 'nın birbirleriyle yaptıkları etkileşmelerden oluşan zayıf etkili bir potansiyeldir. Bu şekilde tanımlanan V_{ps} potansiyeline yapay potansiyel ve ϕ 'ye de yapay dalga fonksiyonu denir. Bu potansiyel Şekil 4.3'te görülmektedir. Şekilden de görüldüğü gibi gerçek potansiyel sonsuzda yakınsarken, bu potansiyel daha çabuk

yakınsamaktadır. Bu sebeple dalga fonksiyonu hesaplamalarında özellikle tercih edilir.



Şekil 4.3. Şekil, yapay potansiyel ve yapay dalga fonksiyonunu göstermektedir. Ayrıca gerçek potansiyel V_R ile gerçek dalga fonksiyonu da görülmektedir. Şekildeki r_c öz bölgesinin yarıçapıdır. Dikkat edilirse özbölge dışında iki potansiyel ve dalga fonksiyonu birbirinin aynıdır

4.1.9. Kohn-Sham eşitliklerinin momentum uzayına taşınması

Momentum uzayında, $(T + V_{ps})\phi = \epsilon\phi$ eşitliği

$$(T + V_{ps})\phi_{q,n}(r) = \epsilon_{q,n}\phi_{q,n}(r) \quad (4.35)$$

şeklinde değişebilir. Buradaki r , elektronların konumunu; q , 1. Brillouin bölgesindeki elektronların dalga vektörlerini ve n ise enerji bantlarını gösterir. Kristal bir katı için V_{ps} yapay potansiyeli, $V_{ps} = V_{ps}(r)$ olacak şekilde yerel bir potansiyel olarak düşünülürse aşağıdaki gibi bir Fourier serisine açılabilir[79,90]:

$$V_{ps}(\mathbf{r}) = \sum_{\vec{G}} V(\vec{G}) e^{i(\vec{G} \cdot \vec{r})} \quad (4.36)$$

Son denklemdaki \vec{G} , ters örgü vektörüdür ve $V(\vec{G})$ ise V_{ps} 'nin Fourier katsayılarını temsil eder. Kohn-Sham eşitliklerini yapay potansiyellerle çözmek, elektron dalga fonksiyonlarını bulmak için standart bir yaklaşımdır. Bu tezde dalga fonksiyonları düzlem dalgaların lineer bir kombinasyonu olarak ele alınmıştır. Zahirî potansiyelde istenen yakınsama, düzlem dalgaların sayısını düzenli bir şekilde artırarak sağlanabilir. n bandındaki, \vec{q} dalga vektörüne sahip bir elektron için düzlem dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\phi_{q,n}(\vec{r}) = \frac{1}{N_0 \Omega} \sum_{\vec{G}} A_{q,n}(\vec{q} + \vec{G}) e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} \quad (4.37)$$

Denklemden görülen $N_0 \Omega$ ifadesi, kristalin hacmidir. Elektronik dalga vektörü \vec{q} , Brillouin bölgesi boyunca aynıdır. Seçtiğimiz düzlem dalgaların sayısı, kinetik enerjinin daha üzerinde bir durdurma enerjisini meydana getirecek şekilde olmalıdır.

$\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{q} + \vec{G})^2 \leq E_{kesme} - A_{q,n}(\vec{q} + \vec{G})$ ifadesi $\phi_{q,n}$ 'nin Fourier uzayındaki bir gösterim şeklidir. 4.36 ve 4.37 eşitlikleri, Denklem 4.35'te yerlerine yazılıp düzenlenirse,

$$\sum_{\vec{c}} A_{q,n}(\vec{q} + \vec{G}) \left\{ \frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G})^2}{2m} + \sum_{\vec{G}'} V(\vec{G}') e^{i(\vec{G}' \cdot \vec{r})} - \epsilon_{q,n} \right\} e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} = 0 \quad (4.38)$$

ifadesi elde edilir. Bu ifade,

$$\sum_{\vec{c}} A_{q,n}(\vec{q} + \vec{G}) \left[\left\{ \frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G})^2}{2m} - \epsilon_{q,n} \right\} \delta_{\vec{G},\vec{G}'} + V_{ps}(\vec{G}' - \vec{G}) \right] = 0 \quad (4.39)$$

olarak da yazılabilir. Bu eşitliğin önemli sonuçları aşağıdaki gibi bir determinantın çözülmesiyle elde edilir[79,90]:

$$\left\{ \frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G})^2}{2m} - \varepsilon_{q,n} \right\} \delta_{G,G'} + V_{ps} (\vec{G}' - \vec{G}) = 0 \quad (4.40)$$

4.2. Katıların Örgü Dinamiği

4.2.1. Giriş

Katıların ısısal genleşmesi, ısı sıçması, elastik sabitlerinin belirlenmesi gibi birçok temel özelliğinde örgü titreşimleri büyük önem taşımaktadır. Bu yüzden bu konuda yıllarca birçok araştırmalar yapılmıştır. Özellikle süperiletkenlik olayının bulunmasından sonra bu çalışmalar çok büyük bir ivme kazanmıştır. Katıların örgü dinamiğinin hesaplanmasında, hiçbir deneysel parametreye ihtiyaç duymayan *ab-initio* metodunun bulunuşuna kadar yarı kuantum mekaniksel ya da yarı deneysel modeller kullanılmıştır.

Her kristal için yeterince deneysel veri bulunmadığı için yıllarca birçok kristalin titreşim özellikleri incelenememiştir. Bu nedenle *ab-initio* metodunun bulunması, çalışmaların hızlanmasını sağlaması açısından büyük önem taşımaktadır. Bu kısımda *ab-initio* metodu yardımıyla katıların örgü dinamiğinin nasıl belirlendiğinden bahsedilecektir.

4.2.2. Örgü dinamiği ve kuvvet sabitleri

Bir örgü, örgü geçiş vektörleri $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ile belirlenir. Genel bir geçiş vektörü,

$$\vec{x}_1 = \ell_1 \vec{a}_1 + \ell_2 \vec{a}_2 + \ell_3 \vec{a}_3 \quad (4.41)$$

şeklinde gösterilir[77]. Buradaki ℓ_1, ℓ_2 ve ℓ_3 katsayıları, sıfır ile, negatif ve pozitif tamsayı değerleri alırlar. Eğer birim hücrede sadece bir atom varsa, bu denklem atomik pozisyonu da belirtir. Eğer birim hücrede p atom varsa, birim hücredeki her atomun konumu $\vec{x}(b)$ vektörleri ile verilir. Burada b birim hücredeki farklı cins

atomları belirtir ve 1,2,.....,p gibi değerler alır. Böylece ℓ . birim hücredeki b. atomun pozisyonu,

$$\mathbf{x}(b)=\mathbf{x}(\ell)+\mathbf{x}(b) \quad (4.42)$$

olarak verilir. Atom denge konumundan $\bar{u}(\ell b)$ kadar uzaklaştığında kristalin potansiyel enerjisi,

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_{lb\alpha} \Phi_{\alpha}(\ell b)u_{\alpha}(\ell b) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell b\alpha \\ \ell' b'\beta}} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b')u_{\alpha}(\ell b)u_{\beta}(\ell' b') \quad (4.43)$$

şeklinde yazılabilir[77]. Burada Φ_0 , atomların hepsi denge durumunda iken kristalin potansiyel enerjisini ifade eder ve bu, örgü dinamiği için önemsizdir. Çünkü, potansiyelin konuma göre türevi kuvveti verir ve denge durumunda kuvvet sıfır olacaktır. $\Phi_{\alpha}(\ell b)$ ve $\Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b')$ ifadeleri,

$$\Phi_{\alpha}(\ell b) = \left. \frac{\partial \Phi}{\partial u_{\alpha}(\ell b)} \right|_0 \quad \text{ve} \quad \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') = \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{\alpha}(\ell b) \partial u_{\beta}(\ell' b')} \right|_0 \quad (4.44)$$

olarak verilir. Bu iki ifade kristalin denge durumunu ifade eder. $\Phi_{\alpha}(\ell b)$, kristalin kararlı olması için denge durumunda sıfır olmalıdır. Kristal için hamiltonyen, harmonik yaklaşımı kullanarak,

$$H = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{lb\alpha} M_b \dot{u}_{\alpha}^2(\ell b) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell b\alpha \\ \ell' b'\beta}} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b')u_{\alpha}(\ell b)u_{\beta}(\ell' b') \quad (4.45)$$

şeklinde yazılabilir. ℓ . birim hücredeki b. atomun hareket denklemi ise,

$$M_b \ddot{u}_{\alpha}(\ell b) = - \frac{\partial \Phi}{\partial u_{\alpha}(\ell b)} = - \sum_{\ell' b'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b')u_{\beta}(\ell' b') \quad (4.46)$$

olarak verilir. $\Phi_{\alpha\beta}(\ell\mathbf{b}; \ell'\mathbf{b}')$ 'ne atomik kuvvet sabiti denir ve bu sabit ($\ell'\mathbf{b}'$) atomu β yönünde yer değiştirdiğinde, ($\ell\mathbf{b}$) atomuna etki eden α yönündeki kuvvetin negatif değerini verir. Kuvvet sabiti matrisi, iki önemli simetri koşulunu sağlar. Bunlar geçiş simetrisinden kaynaklanan koşullardır.

$$\Phi_{\alpha\beta}(\ell\mathbf{b}, \ell'\mathbf{b}') = \Phi_{\alpha\beta}(0\mathbf{b}, (\ell' - \ell)\mathbf{b}') \quad (4.47)$$

Eğer her bir atom eşit miktarda yer değiştirirse, herhangi bir atom üzerindeki kuvvet sıfır olur[77,79]:

$$\left. \begin{aligned} \sum \Phi_{\alpha\beta}(\ell\mathbf{b}, \ell'\mathbf{b}') &= 0 \\ \sum_{\ell'\mathbf{b}' \neq \ell\mathbf{b}} \Phi_{\alpha\beta}(\ell\mathbf{b}, \ell'\mathbf{b}') + \Phi_{\alpha\beta}(\ell\mathbf{b}, \ell\mathbf{b}) &= 0 \\ \Phi_{\alpha\beta}(\ell\mathbf{b}, \ell\mathbf{b}) &= - \sum_{\ell'\mathbf{b}' \neq \ell\mathbf{b}} \Phi_{\alpha\beta}(\ell\mathbf{b}, \ell'\mathbf{b}') \end{aligned} \right\} \quad (4.48)$$

Yukarıdaki denklemlerde yazdığımız $\Phi_{\alpha\beta}(\ell\mathbf{b}; \ell\mathbf{b})$ kuvvet sabitine, öz-terim denir. Ayrıca örgü geçiş simetrisinden hareket denklemi,

$$M_b \ddot{u}_\alpha(\ell\mathbf{b}) = - \sum_{\ell'\mathbf{b}'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(0\mathbf{b}, \ell'\mathbf{b}') u_\beta(\ell'\mathbf{b}') \quad (4.49)$$

şeklinde yazılabilir. Yukarıdaki denkleme,

$$u_\alpha(\ell\mathbf{b}, \mathbf{q}) = \frac{1}{(M_b)^{1/2}} \sum_{\mathbf{q}} u_\alpha(\mathbf{b}, \mathbf{q}) e^{i[\mathbf{q}\mathbf{x}(\ell) - \omega t]} \quad (4.50)$$

şeklinde bir çözüm önerilebilir. Burada $\bar{\mathbf{q}}$ dalga vektörüdür ve $u_\alpha(\mathbf{b}, \mathbf{q})$, ℓ' 'den bağımsızdır. Bu ifadeyi hareket denkleminde yerine yazarsak hareket denklemi,

$$w^2 u_\alpha(q, b) = \sum D_{\alpha\beta}(bb', q) u_\beta(q, b') \quad (4.51)$$

şeklini alır. Burada, $D_{\alpha\beta}(bb', q)$ ifadesine ‘D-tipi’ dinamik matris denir[77]. Bu matris 3x3 lük bir matris olup,

$$D_{\alpha\beta}(bb', q) = \frac{1}{(M_b)^{1/2}} \sum_{\ell'} \Phi_{\alpha\beta}(0b, \ell'b') e^{i[q \cdot x(\ell')]} \quad (4.52)$$

şeklinde yazılır. Sonunda fonon modları,

$$|D_{\alpha\beta}(bb', q) - w^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{bb'}| = 0 \quad (4.53)$$

determinantı çözülerek elde edilir. Bazen de hareket denklemine,

$$u_\alpha(\ell b, q) = \frac{1}{(M_b)^{1/2}} \dot{u}_\alpha(b, q) e^{i[q \cdot x(\ell b) - \omega t]} \quad (4.54)$$

şeklinde bir çözüm önerilebilir. Bu ifade denklem 4.49’da yerine yazılırsa,

$$w^2 \dot{u}_\alpha(q, b) = \sum_{b'\beta} C_{\alpha\beta}(bb', q) \dot{u}_\beta(b', q) \quad (4.55)$$

çözümü elde edilir. Buradaki $C_{\alpha\beta}(bb', q)$ ifadesine ‘C-tipi’ dinamik matris denir ve aşağıdaki gibi ifade edilebilir[77]:

$$C_{\alpha\beta}(bb', q) = \frac{1}{(M_b M_{b'})^{1/2}} \sum_{\ell'} \Phi_{\alpha\beta}(0b, \ell'b') e^{-iq \cdot [x(0b) - x(\ell'b')]} \quad (4.56)$$

4.2.3. Örgü dinamiğinde lineer bağımlılık

Bir kristal yapı içinde elektronlara etki eden dış potansiyel $\lambda = \{\lambda_i\}$ parametrelerinin bir fonksiyonu olarak düşünülürse, bu parametrelere bağlı olarak kuvvet,

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda_i} = \int n_\lambda(r) \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} dr \quad (4.57)$$

olarak yazılabilir[86,90,106]. Burada E_λ , elektronların temel hal enerjisini ve n_λ ise elektron yoğunluk dağılımını ifade etmektedir. Bu denklem Taylor serisine açılırsa,

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda_i} = \int [n_0(r) \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} + \sum_j \lambda_j \frac{\partial n_\lambda(r) \partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_j \partial \lambda_i} + n_0(r) \sum_j \lambda_j \frac{\partial^2 V_\lambda(r)}{\partial \lambda_j \partial \lambda_i}] dr + Q(\lambda^2) \quad (4.58)$$

olur. Bu seride $\lambda = 0$ civarında türevler hesaplanırsa enerji ifadesi,

$$E_\lambda = E_0 + \sum_i \lambda_i \int [n_0(r) \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} dr + \frac{1}{2} \sum_{ij} \lambda_i \lambda_j \int (\frac{\partial n_\lambda(r) \partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} + n_0(r) \frac{\partial^2 V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j}) dr \quad (4.59)$$

olarak yazılabilir. Burada kullanılan λ parametreleri, $u_{ai}(R)$ şeklinde gösterilen iyon yer değiştirmelerini ifade eder. Böylece enerjinin ikinci dereceden türevi, kuvvet sabitleri matrisleri ile ilişkilidir ve bu ilişki,

$$\frac{\partial^2 E}{\partial u_{ai}(R) \partial u_{bj}(R)} = \Phi_{ai,bj}(R - R') = \Phi_{ai,bj}^{iyon}(R - R') + \Phi_{ai,bj}^{elektron}(R - R') \quad (4.60)$$

$$\Phi_{ai,bj}^{iyon}(R - R') = \frac{\partial^2 E_{iyon-iyon}}{\partial u_{ai}(R) \partial u_{bj}(R)} \quad (4.61)$$

denklemleri ile verilir. Son yazdığımız denklemdeki $E_{iyon-iyon}$ terimi,

$$E_{iyon-iyon} = \sum \sum \frac{e^2 Z_i Z_j}{|R + \tau_i - R' - \tau_j|} \quad (4.62)$$

şeklindedir. Bu eşitlikteki toplam sonsuz bir kristalde yakınsamaz, bu nedenle bu toplama işlemi ters örgü uzayında yapılmıştır. Son olarak elektronik kuvvet sabiti de,

$$\Phi_{\alpha_i, \beta_j}^{elektron}(R - R') = \int \left(\frac{\partial n(r)}{\partial u_{\alpha_i}(R)} \frac{\partial V_{iyon}}{\partial u_{\beta_j}(R)} + n_0(r) \frac{\partial^2 V_{iyon}(r)}{\partial u_{\alpha_i}(R) \partial u_{\beta_j}(R)} \right) dr \quad (4.63)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem 4.61 ve 4.63'deki iyonik ve elektronik kuvvet sabitleri, denklem 4.51'de yerine konularak dinamik matrisler elde edilir ve denklem 4.53'ün çözülmesiyle titreşim enerjileri hesaplanabilir.

4.3. Hellman-Feynman Teoremi ve Enerjinin Birinci Türevi

Toplam enerjinin iyonik pozisyonlara göre birinci türevi, seçilen pozisyonlardaki iyonlar üzerine etki eden kuvveti verir.

$$F_i = - \frac{\partial E}{\partial x_i} \quad (4.64)$$

Buradaki x_i , keyfi olarak seçilmiş tek boyutlu konumu gösterir. İfadedeki E toplam enerjisi,

$$E = \langle \Psi | \hat{H}_{KS} | \Psi \rangle \quad (4.65)$$

şeklinde tanımlanabilir. Buradaki \hat{H}_{KS} , daha önce 4.1.5 kısmında tanımlanan Kohn-Sham Hamiltoniyenidir. Ψ ise, etkileşmeyen elektronların normalize olmuş dalga fonksiyonlarıdır. Böylece kuvvet ifadesi,

$$F_i = - \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \Psi | \hat{H}_{KS} | \Psi \rangle$$

$$F_i = - \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} | \hat{H}_{KS} | \Psi \right\rangle - \left\langle \Psi | \frac{\partial \hat{H}_{KS}}{\partial x_i} | \Psi \right\rangle - \left\langle \Psi | \hat{H}_{KS} | \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right\rangle \quad (4.66)$$

şeklini alır[77]. Bununla birlikte, \hat{H}_{KS} bir hamiltoniyen operatörüdür ve elektronlar taban durumunda oldukları zaman, Ψ bu operatörün bir öz fonksiyonudur:

$$\hat{H}_{KS} \Psi = E\Psi \quad (4.67)$$

Bu eşitlikten yararlanarak Denklem 4.66,

$$F_i = -[E \langle \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} | \Psi \rangle + E \langle \Psi | \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{H}_{KS}}{\partial x_i} | \Psi \rangle] \quad (4.68)$$

şeklinde basitleştirilerek yazılabilir. Bu ifadenin ilk iki terimi,

$$E \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (4.69)$$

şeklinde yazılabilir. Son denklemdaki $\langle \Psi | \Psi \rangle$ ifadesi, dalga fonksiyonu normalize olduğu için sabittir ve türevi de sıfırdır. Böylece enerjinin birinci türevi, aşağıdaki gibi yazılabilen, hamiltoniyenin beklenen değerinin birinci türevi olur[86]:

$$F_i = - \langle \Psi | \frac{\partial \hat{H}_{KS}}{\partial x_i} | \Psi \rangle \quad (4.70)$$

Bu sonuç Hellmann-Feynman teoremi olarak bilinir[107,108]. Sonuç olarak, öncelikle kuvvetlerin değerleri bulunarak, temel hal Kohn-Sham dalga fonksiyonu Ψ belirlenir. Buradaki birinci türevleri elde etmek için dalga fonksiyonunun türevini hesaplamaya gerek yoktur. Bununla beraber bu sonucun doğruluğu, Kohn-Sham hamiltoniyeninden belirlenen gerçek dalga fonksiyonlarına bağlıdır.

4.4. Durum Yoğunluğu Hesaplama Metodu (Root-Sampling Method)

Durum yoğunluğu, kristal yapıda indirgenmiş birinci Brillouin bölgesi içindeki seçilen \mathbf{q} dalga vektörlerinin hangi frekans değerlerinde ne kadar yoğunlukta bulunduğunu gösterir. Hesaplamalarda öncelikle mümkün olduğu kadar çok sayıda fonon frekansının belirlenmesi gerekir. Durum yoğunluğu ifadesi,

$$\rho(\omega) = \frac{N_0 \Omega}{8\pi^3} \sum_q \delta(\omega - \omega(q)) \quad (4.71)$$

denklemleri ile verilir[77]. Burada $\rho(\omega)$ durum yoğunluğu, N_0 kristaldeki birim hücre sayısı ve Ω ise birim hücre hacmidir. Yukarıda verilen denklemden elde edilen frekanslarda durum yoğunluğunu hesaplamak için Dirac delta fonksiyonu yerine Kronecker delta fonksiyonu yazılırsa,

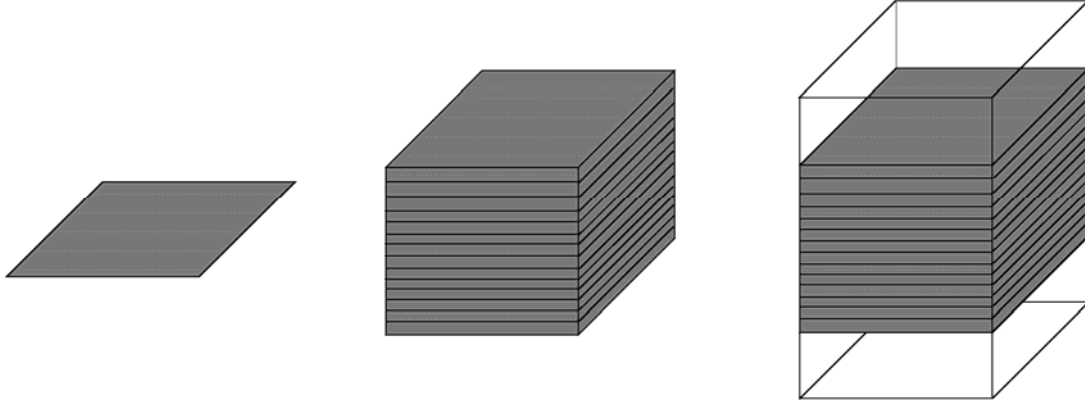
$$\rho(\omega) = \text{sabit} \times \sum_q^{IBB} \Theta(\omega - \omega(q)) \quad (4.72)$$

eşitliği elde edilir. Burada İBB, indirgenmiş Brillouin bölgesini göstermektedir. Eşitlikte frekans farkı $|\omega - \omega(q)| \leq \frac{\Delta\omega}{2}$ ise $\Theta = 1$ olur. Bu ifade diğer durumlarda ise sıfırdır. Burada $\Delta\omega \approx 0.005$ THz olarak alınır. Durum yoğunluğu sonuçlarını daha kesin kılmak için indirgenmiş Brillouin bölgesinde çok sayıda (genellikle 2000 ve daha fazla) \mathbf{q} dalga vektörü almak gerekir. Bu hesaplama her bir frekans değeri için yapıldığından uzun bir zaman alır. Hesaplamalar sonunda frekans farkının sabit kaldığı noktalarda bir pik oluşur.

4.5. Süper Hücre Metodu

Yüzey hesaplamaları yapılırken kullanılan süper hücre yaklaşımı, periyodiklik şartlarını kullanmak amacıyla yüzey normali boyunca yüzeyi hacme genişletmeyi esas alır[77]. Bu genişletme sırasında yüzeyin özelliklerinin bozulmamasına dikkat etmek gerekir. Bu nedenle boşluk-hacim-boşluk şeklinde yüzeyin kendini tekrar

edebileceği bir süper hücre yapısı oluşturulur. Bu yapının sistematik bir şekilde oluşturulması Şekil 4.4’de görülmektedir.

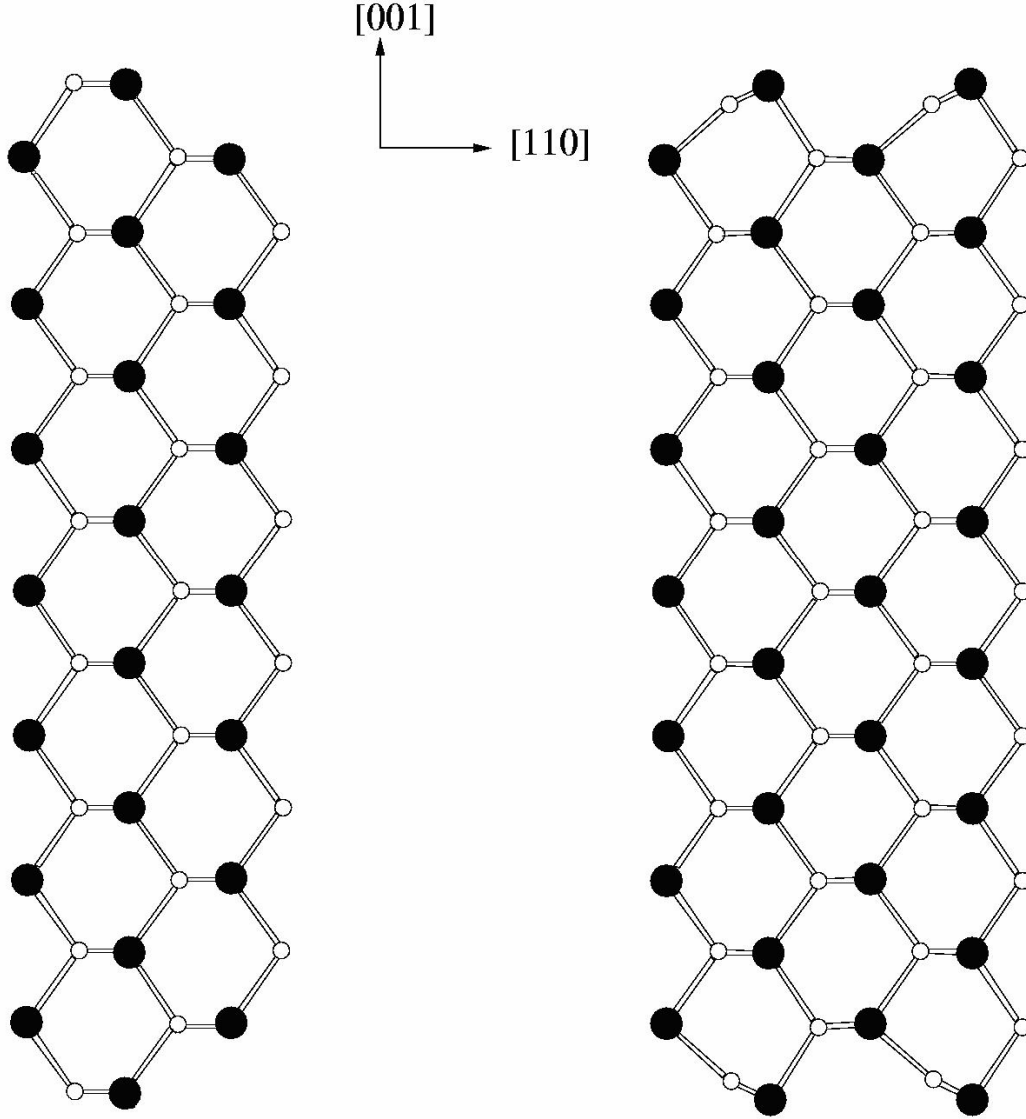


Şekil 4.4. Tek bir yüzey katmanından sistematik olarak süper hücrenin oluşturulması.

Bu teknik, yüzey için özel olarak oluşturulan bir periyodiklikle yüzeyin tüm uzaya genişlemesini sağlar. Böylece oluşturulmak istenen yüzey sistemi için, düzlem dalgalar ve üç boyutta periyodik sınır şartları kullanılabilir. Eğer periyodik sınır şartları bu süper hücreye uygulanırsa, her biri sonlu kalınlığa ve ayrılmış boşluk bölgelerine sahip süper hücrelerin birleşmesiyle oluşmuş yarıiletken katmanlarını içeren bir sistem tanımlanabilir. Böylece tek bir yüzey katmanından yaralanılarak oluşmuş katmanlar bütünü eğer yeterince kalınsa, en üstteki ve en alttaki katmanlar birbirleriyle etkileşmezler. Benzer şekilde, eğer boşluk bölgeleri de yeterince geniş alınırsa, komşu yüzeyler de birbirleriyle etkileşmeyeceklerdir. Bu durumda her yüzey, diğerleriyle etkileşmeyen yalıtılmış bir sistem olarak düşünülebilir[77].

Eğer bir kristal hacim durumundan yüzey durumuna getirilirse, kristalin geometrik yapısı bozulacağı için atomların denge durumları bozulur. Şekil 4.5’in sol tarafındaki süper hücre, yarıiletkenlerin (110) yüzeyleri için yüzey atomlarının dengede olmadığı durumu göstermektedir. Bu süper hücrede 15 düzlemde bulunan 30 atomun denge durumu oluşmadan önceki dizilimleri görülebilir. Bu durumda en üstte bulunan yüzey atomlarının bağlanma şekli hacim içindeki atomlara benzemektedir. Bu atomlar tekrar kararlı hale, yani denge durumuna gelebilmek için sahip oldukları elektronları ortaklaşa kullanarak bağın belli bir açıyla dönmesini sağlarlar. Böylece sistem tekrar denge durumuna ulaşır. III-V ve II-VI yarıiletkenlerinin (110) yüzeyleri

için yüzey denge geometrisi Şekil 4.5'in sağ tarafında görülmektedir. Yüzey hesaplamaları için bu geometri kullanılır.



Şekil 4.5. Süper hücre içinde yüzey atomlarının denge durumundan önceki ve denge durumundaki atomik dizilimleri görülmektedir. Burada siyah atomlar anyon atomunu gösterirken, beyaz atomlar katyonları ifade etmektedir.

4.6. Teorinin Uygulanışı

Bu tezde yoğunluk fonksiyon teorisi PWSCF (Plane Wave Self Consistent Field)[109] kodu kullanılarak III-N tipi yarıiletkenler ve Berilyum kalkojenler ile bu materyallerin (110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri

incelenmiştir[109]. İlk olarak bu teörinin yarıiletkenlerin hacim özelliklerinin araştırılmasına nasıl uygulandığını açıklayalım.

Bu yarıiletkenler çinko sülfür kristal yapıya sahiptirler. Hacim araştırmalarında ilk olarak primitif birim hücredeki atomların konumları veri olarak kullanılan hesaplamalarda yerlerine konulmuştur. Örgü vektörleri cinsinden primitif birim hücredeki atom koordinatları aşağıdaki gibidir:

III (Berilyum) atomu $\{0, 0, 0\}$

N (Kalkojen) atomu $\{1/4, 1/4, 1/4\}$

Bu pozisyonlar kullanılarak her bir yarıiletken için örgü sabitleri hesaplanmıştır. Bu işlemlerde elektronların maksimum kinetik enerjisi BN ve AlN için 40 Ryd, GaN ve InN için 60 Ryd ve Berilyum kalkojenler için ise 40 Ryd olarak alınmıştır. GaN ve InN için yapılan hesaplamalarda 3d ve 4d seviyelerinde bulunan elektronlar da kullanılarak hesaplamaların doğruluğunun artması sağlanmıştır. Be kalkojenler ve InN için yerel yoğunluk yaklaşımı kullanılırken, diğer III-N tipi yarıiletkenlere ait hesaplamalarda genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı esas alınmıştır. Bu hesaplamalar yapılırken düzlem dalgalar için ortalama 12000 \mathbf{G} vektörü kullanılmıştır. Denge durumu tespit edildikten sonra elektronik yapı hesaplaması için yüksek simetri yönlerinde 101 tane dalga vektörü alınarak elektronik enerji değerleri hesaplanmış ve elektronik spektrumlar çizilmiştir. Daha sonra lineer tepki metodu kullanılarak 8 tane \mathbf{q} vektörü kullanılmış ve bu \mathbf{q} vektörleri için elde edilen dinamik matrisler analiz edilerek yüksek simetri yönlerinde fonon spektrumu çizilmiştir. Fonon durum yoğunluğunun hesaplanması için indirgenmiş Brillouin bölgesinde 6000 tane dalga vektörü alınmış ve bu dalga vektörleri için fonon modlarından oluşturulan determinant çözülerek titreşim frekansları tayin edilmiştir. Daha sonra bu veriler ve 4.4 kısmında anlatılan kök örnekleme (root-sampling) metodundan faydalanılarak durum yoğunlukları belirlenmiştir. Çok sayıda dalga vektörü alınmasının nedeni hangi frekanslarda yığılmalar olacağını belirlemektir.

Yüzey hesaplamaları için, birbirini tekrar eden parçalardan oluşan bir yüzey geometrisi ele alınmıştır. Be kalkojen yüzeyleri için yapılan hesaplamalarda, bu

şekilde düzenlenen süper hücrenin 15 seviyesi Be-kalkojen atomları, 5 seviyesi ise boşluk olacak şekilde tasarlanmıştır. Böylece her seviyede iki atom olacağından hesaplamalarda toplam 30 atom kullanılmıştır. Her atom için de 3 mod olacağı düşünülürse toplam 90 mod hesaplanmıştır. InN yüzeyi için de Be-kalkojenlere benzer bir hesaplama yapılmıştır. Diğer III-N yüzeyleri için ise 11 seviyesi III-N atomlarından ve 4 seviyesi de boşluktan oluşan bir süper hücre kullanılmıştır. Yüzey denge geometrisinin belirlenmesinde Kohn-Sham eşitliklerinin çözülmesi yoluyla sonuç veren bir süper hücre metodu kullanılmıştır. Bu metotta süper hücrenin ortasında kalan atomlar hareketsiz kabul edilmekte ve diğer atomların denge durumuna gelmesi sağlanmaktadır. Bütün yarıiletkenler için yüzey denge geometrisi bulunduktan sonra, indirgenmiş yüzey Brillouin bölgesi kullanılarak yüzey elektronik bant yapıları belirlenmiştir. Son olarak yüzey titreşim özelliklerinin elde edilmesi için 9 dinamik matris hesaplanmıştır.

Kullanılan maksimum kinetik enerji değerinin ve \mathbf{G} vektör sayılarının yüksek olması bu çalışmanın işlem olarak ne kadar zaman alıcı olduğunu gösterir. Bunun yanı sıra yüzey hesaplamalarında kullanılan sistemlerin çok atomlu ve daha büyük sistemler olması nedeniyle bunlar için yapılan hesaplamaların hacim hesaplamalarına göre çok daha uzun süreceği açıktır. Bu nedenle çalışmalar esnasında İngiltere'nin Exeter üniversitesinde bulunan IBM paralel bilgisayar sistemleri kullanılmış ve bu zorluklar aşılmıştır.

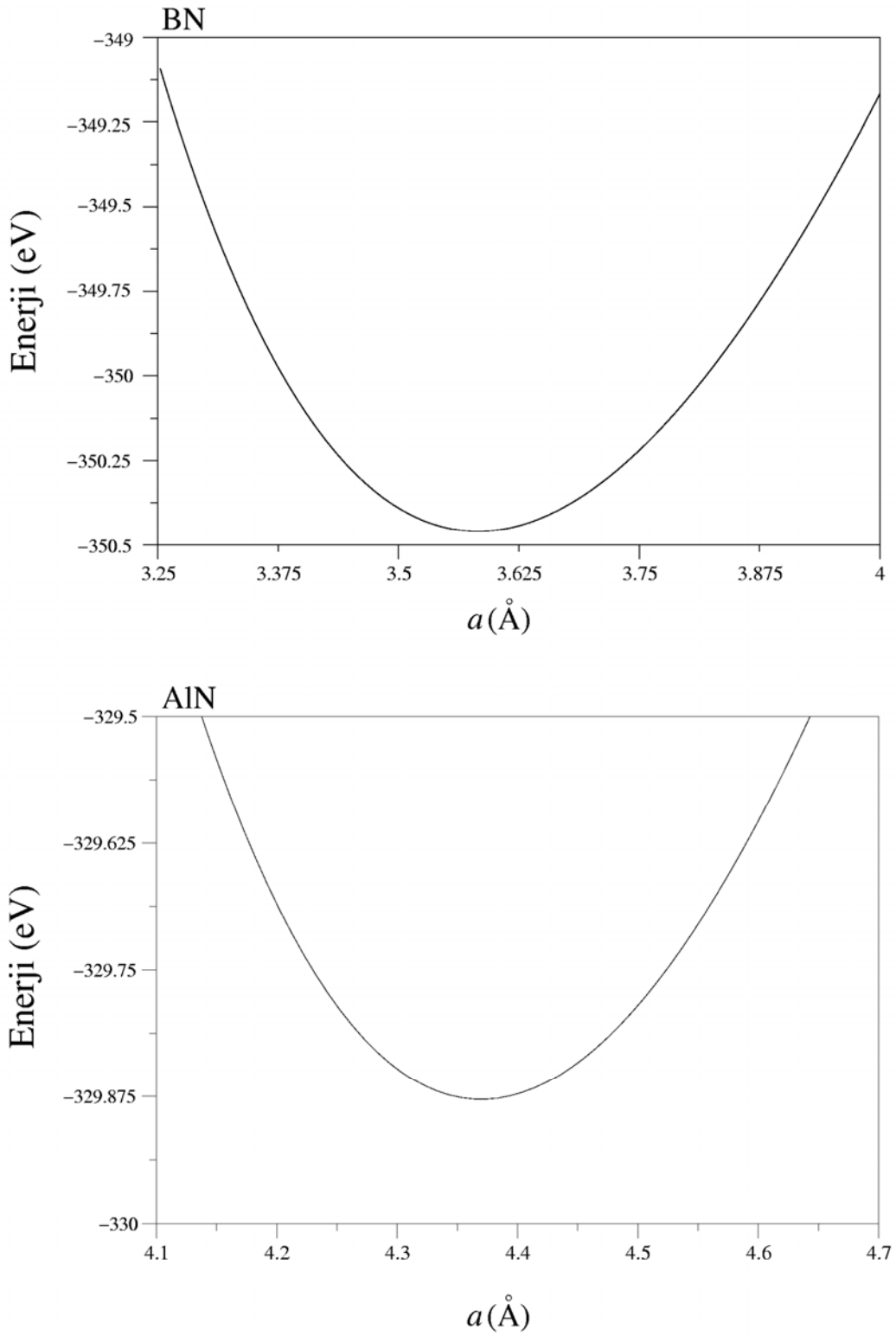
BÖLÜM 5. III–N TİPİ YARIİLETKENLERİN HACİM ÖZELLİKLERİ

5.1. Giriş

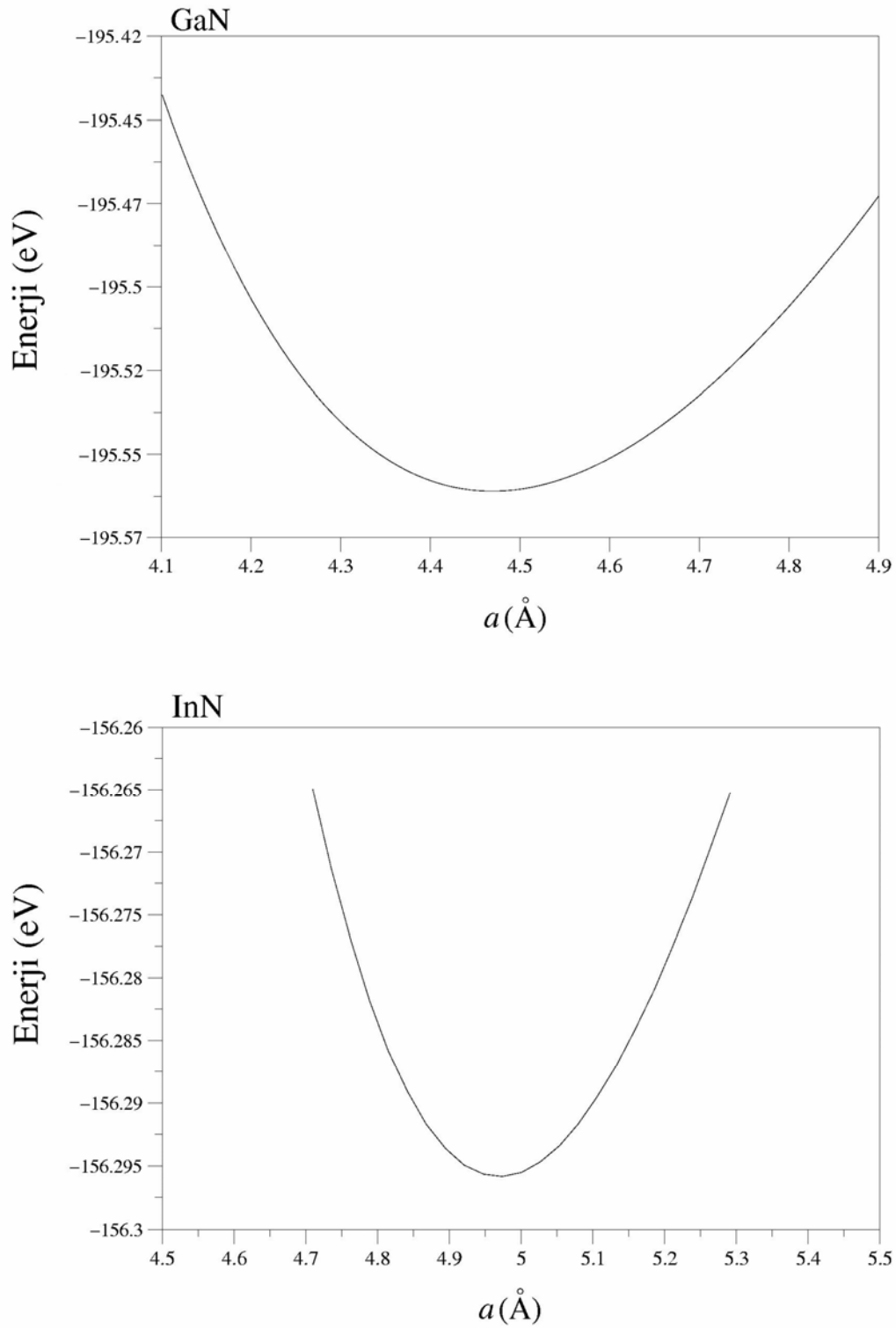
III–N tipi yarıiletkenler (BN, AlN, GaN ve InN) elektronik ve optoelektronik aletlerde kullanılmaya elverişli oldukları için literatürde geniş bir şekilde incelenmişlerdir. Bu materyallerin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri birçok teorik ve deneysel grup tarafından araştırılmıştır. Fakat bu çalışmada bir kez daha bu özellikler araştırılarak elde edilen veriler daha önce hesaplanan teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılacaktır. Çünkü III-N tipi materyallerin hacim özelliklerinin incelenmesi, daha sonra anlatılacak olan yüzey özelliklerinin araştırılması için bir hazırlık niteliğindedir. Bu bölümde BN, AlN, GaN ve InN yarıiletkenlerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri tartışılarak, elde edilen sonuçlar sunulacaktır.

5.2. Yapısal Özellikler

Bu çalışmada ilk olarak, çinko-sülfür kristal yapısındaki BN, AlN, GaN ve InN yarıiletkenleri için örgü sabitleri hesaplanmıştır. Bunu yaparken farklı örgü sabiti değerleri için bağlanma enerjileri bulunmuştur. Hesaplanan enerji–örgü sabiti grafikleri Şekil 5.1 ve Şekil 5.2’de görülmektedir. Şekillerde bulunan grafiklerin hepsinde de bir örgü sabiti değerinde parabol bir minimum değerine ulaşmaktadır. Bu minimum, sistemin ilgili örgü sabiti değerinde dengede olduğunu göstermektedir. Kısacası yarıiletkenin örgü sabiti, parabolün minimum olduğu değerdir. Bu değerler BN, AlN, GaN ve InN için sırasıyla 3.58, 4.36, 4.46 ve 4.97 Å olarak elde edilmiştir. Hesaplanan örgü sabitleri, aynı yarı iletkenler için deneysel veriler olan 3.62[9], 4.38[13], 4.50[11] ve 4.98[14] Å değerleri ile büyük bir uyum içindedir.



Şekil 5.1. BN ve AlN yarıiletkenleri için enerji – örgü sabiti grafikleri.



Şekil 5.2. GaN ve InN yarıiletkenleri için enerji – örgü sabiti grafikleri.

Tablo 5.1. BN, AlN, GaN ve InN yarıiletkenleri için hesaplanan a örgü sabitleri, B hacim modülleri, B' hacim modülünün basınca göre birinci türevleri ve ϵ_{∞} makroskobik dielektrik sabitleri ile daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmaların sonuçları.

III-N	a (Å)	B (Mbar)	B'	ϵ_{∞}
BN (Hesaplanan)	3.58	3.80	3.56	4.51
Teorik[5]	3.60	4.01	-	-
Teorik[3]	3.59	3.97	3.60	4.54
Teorik[2]	3.62	3.78	3.40	4.14
Deneysel[9]	3.62	3.69	4.00	-
Deneysel[2]	-	-	-	4.46
AlN (Hesaplanan)	4.36	2.08	3.83	4.50
Teorik[5]	4.34	2.09	-	-
Teorik[6]	4.30	2.10	3.70	-
Teorik[3]	4.34	2.14	3.30	4.46
Teorik[2]	4.37	2.15	4.00	3.90
Deneysel[10,13]	4.38	2.02	-	-
Deneysel[7]	-	-	-	4.68
GaN (Hesaplanan)	4.46	2.00	4.42	5.95
Teorik[5]	4.46	1.83	-	-
Teorik[6]	4.50	1.96	4.20	-
Teorik[4]	4.45	2.07	3.94	5.41
Teorik[2]	4.46	1.84	4.60	4.78
Deneysel[10,11]	4.50	1.90	-	-
Deneysel[12]	-	-	-	5.70
InN (Hesaplanan)	4.97	1.45	4.76	9.70
Teorik[5]	4.97	1.33	-	-
Teorik[6]	4.97	1.47	4.40	-
Teorik[2]	4.95	1.37	4.3	6.15
Deneysel[10,14]	4.98	1.37	-	-
Deneysel[8]	-	-	-	8.40

Örgü sabiti ile birlikte, yarıiletkenlerin hacim modülleri ve hacim modüllerinin basınca göre türevleri aşağıdaki Murnaghan eşitlikleri[Ref.110] kullanılarak elde edilmiştir:

$$P = \frac{B}{B'} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad (5.1)$$

$$E(V) = E_0 + \frac{BV}{B'} \left(\frac{(V_0/V)^{B'}}{B' - 1} + 1 \right) - \frac{B V_0}{B' - 1} \quad (5.2)$$

Burada V_0 kristalin denge durumundaki hacmini, V ise basınç altındaki hacmi göstermektedir. E_0 ise kristalin basıncın sıfır olduğu denge durumundaki enerjisidir.

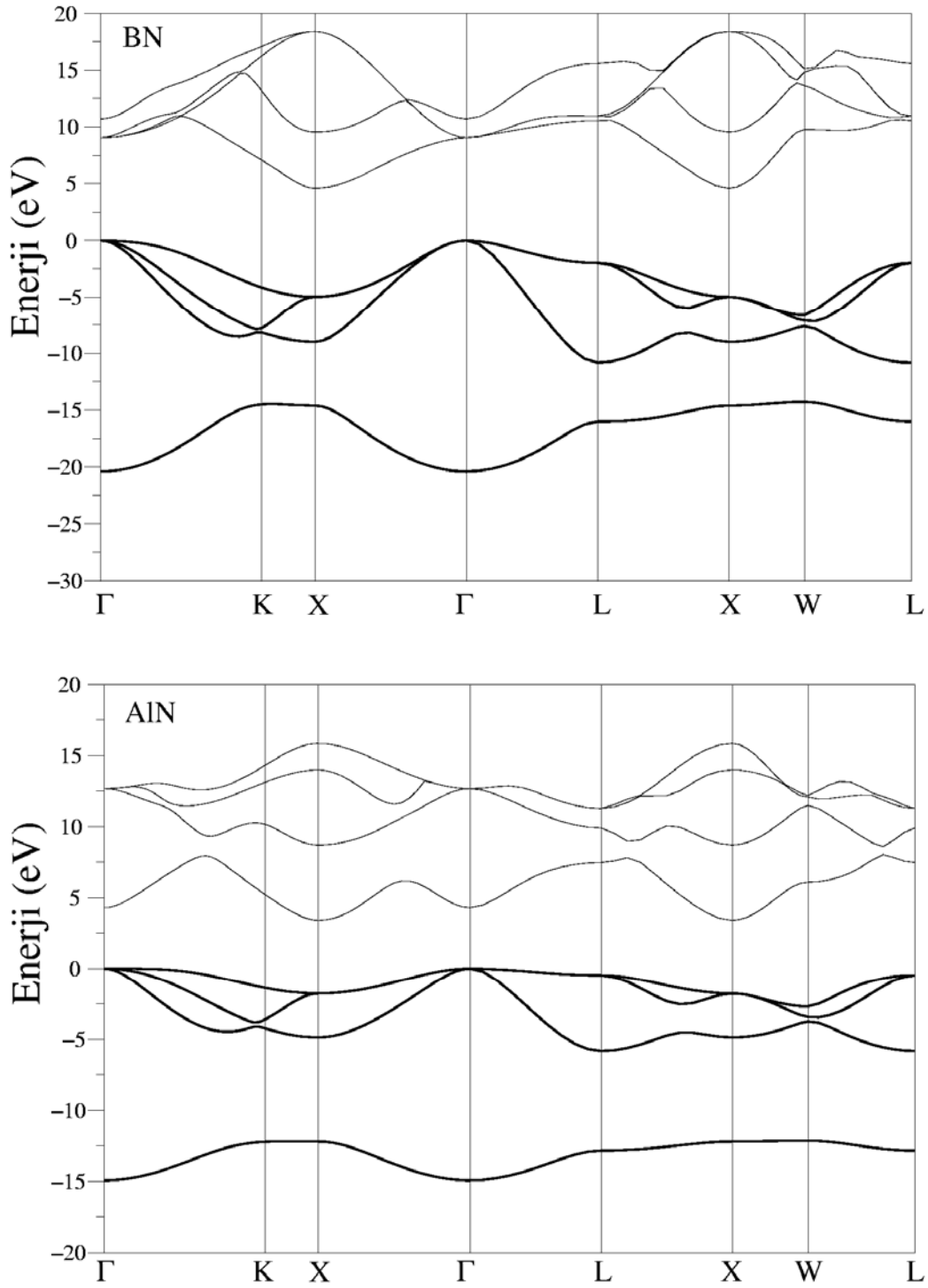
Tablo 5.1’de BN, AlN, GaN ve InN yarıiletkenleri için hesaplanan a örgü sabitleri, B hacim modülleri, B' hacim modülünün basınca göre birinci türevleri ve ϵ_∞ makroskobik dielektrik sabitleri ile daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmaların sonuçları karşılaştırılmıştır. Bu çalışmada hesaplanan yapısal parametrelerin özellikle deneysel verilerle olan uyumu oldukça ilgi çekicidir ve hesaplamalarımızı doğrular niteliktedir. Yarıiletkenlerin örgü sabitlerinin, deneysel verilerle neredeyse aynı çıkması ileride yapılacak olan elektronik ve titreşim özelliklerinin incelenmesi işlemleri için oldukça güven vericidir. Bunun yanı sıra sıkıştırılabilirliğin ve dolayısıyla da sertliğin bir ölçüsü olan hacim modülü hesaplamalarımız da hem teorik hem de deneysel sonuçlarla büyük bir uyum içindedir. III-N tipi yarıiletkenler, diğer III-V yarıiletkenleri ile karşılaştırıldıklarında hacim modüllerinin onlara göre daha büyük olduğu görülebilir. Bu sonuç bu yarıiletkenlerin teknolojik uygulamalarda daha elverişli olduklarını gösterir. Tabloda sunulan bir diğer yapısal parametre olan makroskobik dielektrik sabiti de büyük oranda daha öncekilere benzer olarak elde edilmiştir.

5.3. Elektronik Özellikler

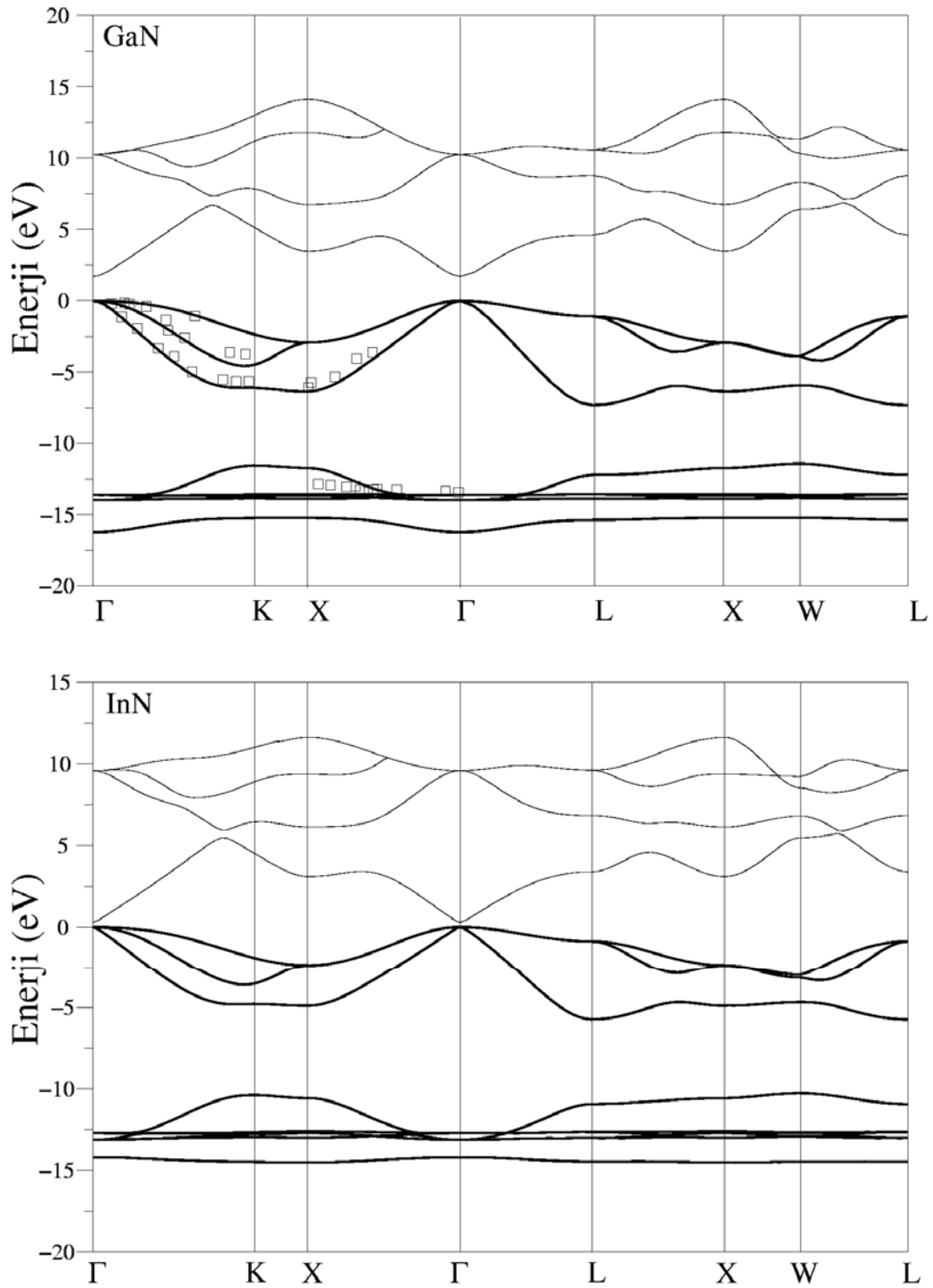
Teknolojik olarak oldukça önemli olan III-N tipi yarı iletkenlerin elektronik özellikleri bu kısımda incelenmiştir. Çinko-sülfür yapıda kristalleşen bu yarıiletkenlerin elektronik özellikleri incelenirken, her birinin elektronik dizilimine göre değerlik elektronları belirlenmiştir. Bu yarıiletkenleri oluşturan elementler için elektronik dizilimler, ${}^5\text{B}:[\text{He}]2s^22p^1$, ${}^{13}\text{Al}:[\text{Ne}]3s^23p^1$, ${}^{31}\text{Ga}:[\text{Ar}+3d]4s^24p^1$, ${}^{49}\text{In}:[\text{Kr}+4d]5s^25p^1$, ${}^7\text{N}:[\text{He}]2s^22p^3$ şeklindedir. BN ve AlN için yapılan hesaplamalarda B(Al) için 3 ve N için 5 değerlik elektronu alınırken; GaN ve InN yarı iletkenleri için ise Ga(In) için 13, N için 5 değerlik elektronu kullanılarak sonuçlar elde edilmiştir. Bunun nedeni Ga(In) için 4s(5s) bandı ile 3d(4d) bandının enerjisinin birbirine son derece yakın olmasıdır.

Şekil 5.3'te BN ve AlN yarıiletkenleri için elektronik bant yapısı grafikleri görülmektedir. Her iki yarıiletken için de primitif birim hücrede 8 elektron vardır ve bu elektronlar 4 değerlik bandını doldururlar. Bu grafiklerde koyu çizgiler değerlik bantlarını, açık çizgiler ise iletkenlik bantlarını göstermektedir. Grafiklere bakıldığında her iki yarıiletken için de değerlik bandının en yüksek enerjili noktasının Brillouin bölge merkezinde (Γ) olduğu görülmektedir. Buna karşın yarıiletkenlerin iletkenlik bantlarının en düşük enerji değerine X simetri noktasında sahip oldukları görülür. Bu sebeple BN ve AlN yarıiletkenlerinin dolaylı bant aralığına sahip oldukları söylenebilir. BN yarıiletkeni için minimum enerji aralığı 4.45 eV değerine sahipken, bu değer AlN için 3.35 eV olarak hesaplanmıştır.

BN ve AlN yarıiletkenleri için Brillouin bölgesindeki yüksek simetri yönleri için elde edilen elektronik enerji aralığı değerleri Tablo 5.2'de sunulmuştur. Bu tablodan görülebileceği gibi bu yarıiletkenler için $\Gamma - \Gamma$, X-X, L-L doğrudan bant aralığı değerleri Christensen ve Gorczyca'nın 1994 yılında elde etmiş oldukları sonuçlarla son derece benzerdir[2].



Şekil 5.3. BN ve AlN yarıiletkenleri için elektronik bant yapısı grafikleri. Koyu çizgiler değerlik bantlarını gösterirken, açık çizgiler iletkenlik bantlarını oluştururlar.



Şekil 5.4. GaN ve InN yarıiletkenleri için elektronik bant yapısı grafikleri. Koyu çizgiler değerlik, açık çizgiler ise iletkenlik bantlarını göstermektedirler. GaN için elde edilen grafikte görülen kareler, deneysel sonuçları göstermektedir[19].

GaN ve InN yarıiletkenleri için elektronik bant yapısı grafikleri ise Şekil 5.4'te verilmiştir. Bu yarıiletkenlerin yukarıda anlatılanlardan farkı primitif birim hücrelerinde 18 elektronun olması ve bu elektronların 9 değerlik bandını doldurmasıdır. Bu grafiklerde de koyu çizgiler değerlik bantlarını, açık çizgiler ise iletkenlik bantlarını göstermektedir. Ayrıca GaN yarıiletkeni için çizilen grafikte bulunan kareler foton yayınlanması deney sonuçlarını göstermektedir[19]. Bu grafikten de açıkça görülebileceği gibi hesaplanan sonuçlar ve deneysel veriler oldukça uyumludurlar. GaN ve InN yarıiletkenleri için değerlik bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu Γ noktasında yer almaktadırlar. Bu da bu yarıiletkenlerin doğrudan bant aralığına sahip olduklarını gösterir.

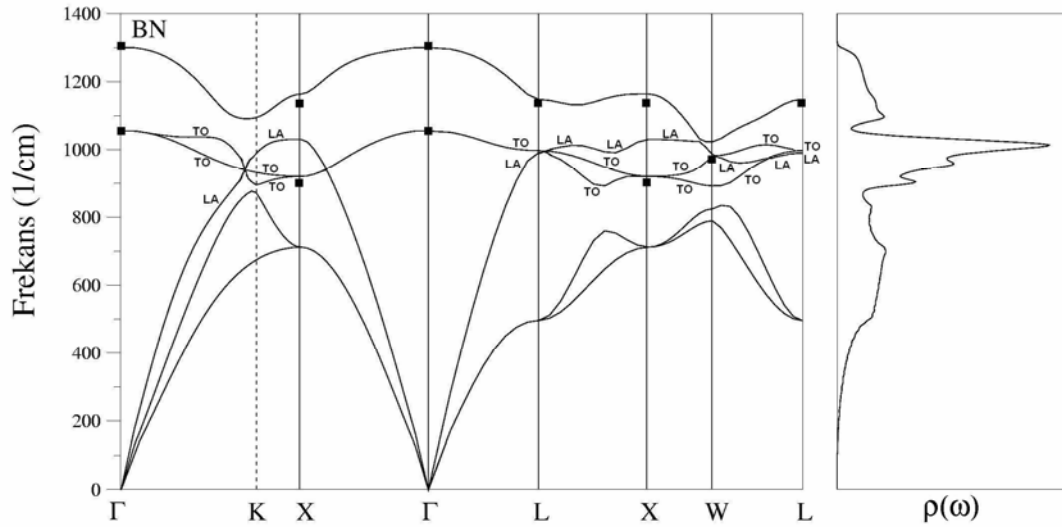
III-N tipi yarıiletkenler için Brillouin bölgesindeki yüksek simetri yönleri için elde edilen elektronik enerji aralığı değerleri Tablo 5.2'de sunulmuştur. Bunun yanı sıra her bir yarıiletken için minimum enerji aralığı değeri de bu tabloda görülmektedir. Hesaplanan tüm değerler daha önce yapılan çalışmalarda bulunan sonuçlarla karşılaştırılmış ve iyi bir uyum elde edilmiştir.

Tablo 5.2. BN, AlN, GaN ve InN için elde edilen minimum enerji aralığı değerleri ile, yüksek simetri yönlerinde hesaplanan enerji aralığı değerleri daha önce hesaplanan sonuçlarla karşılaştırılmıştır[2,15,17]. Tüm veriler eV birimindedir.

III-N	$\Gamma - \Gamma$	X-X	L-L	ΔE_{\min}
BN (Hesaplanan)	8.94	9.83	12.51	4.45
Teorik[2]	8.92	9.50	12.27	4.42
AlN (Hesaplanan)	4.32	5.21	7.94	3.35
Teorik[2]	4.58	5.27	8.45	3.36
GaN (Hesaplanan)	1.68	6.40	5.74	1.68
Teorik[2]	2.18	5.50	5.27	2.18
InN (Hesaplanan)	0.30	5.39	4.23	0.30
Teorik[15]	0.43	4.59	4.39	0.43
Teorik[17]	0.59	6.24	3.67	0.59

5.4. Titreşim Özellikleri

Bu kısımda çinko-sülfür yapıdaki III-N tipi yarıiletkenlerin titreşim özellikleri incelenmiştir. Bu yarıiletkenlerin hepsinin de birim hücrelerinde iki atom bulunmaktadır. Her bir atomun üç serbestlik derecesi olduğundan bir dalga vektörü için altı tane frekans değeri elde edilir. Bu frekansların üç tanesi akustik, üç tanesi ise optik modlardır. Akustik modların ikisi enine, biri ise boyuna olarak adlandırılır. Bu durum optik modlar için de söz konusudur. Fakat [110] ve [111] yönlerinde enine akustik ve optik frekanslar çift dejenere oldukları için bu yönlerde sadece dört tane titreşim modu elde edilir. Şimdi her bir yarıiletken için titreşim özelliklerini tek tek tartışalım.

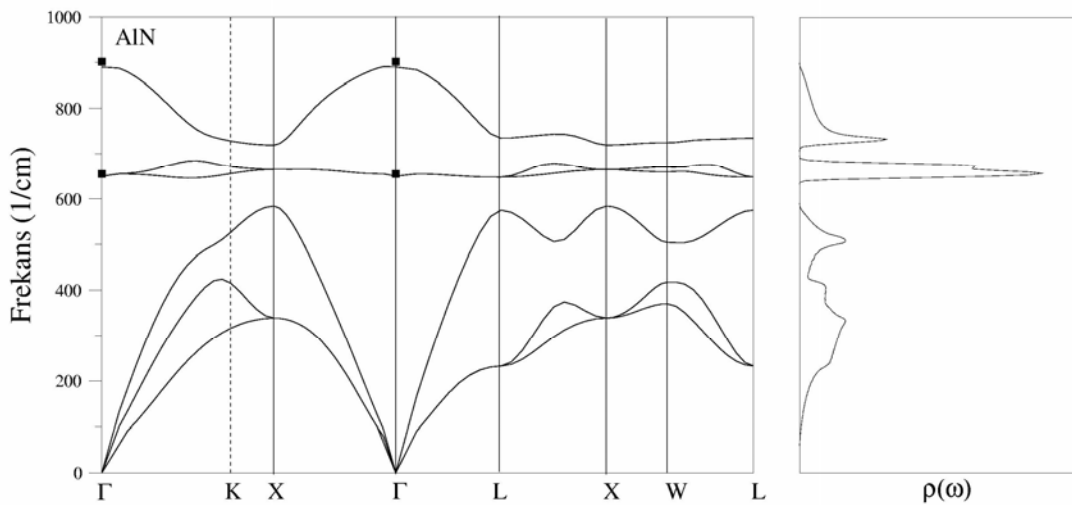


Şekil 5.5. BN yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri. Dolu kareler deneysel sonuçları göstermektedir[36].

İlk olarak BN yarıiletkenini ele alalım. Bu yarıiletken için elde edilen fonon dispersiyon grafiği ve buna bağlı olarak hesaplanan durum yoğunluğu eğrisi Şekil 5.5'te görülmektedir. Bu grafikte ilk göze çarpan, akustik ve optik frekanslar arasında bir boşluk bölgesinin bulunmamasıdır. Bunun nedeni B ve N elementlerinin kütlelerinin birbirine çok yakın olması ve güçlü kovalent bağlanma nedeniyle açılal kuvvetlerin elektrostatik kuvvetlerden daha önemli hale gelmesidir. Şekil 5.5'te Brillouin bölge merkezinde ve bölge sınırlarında görülen dolu kareler Raman

saçılması ile elde edilen deneysel sonuçları göstermektedir[36]. Özellikle Brillouin bölge merkezinde 1055 cm^{-1} ve 1300 cm^{-1} olarak hesaplanan enine optik(TO) ve boyuna optik(LO) fonon modları, deneysel sonuçlar olan 1055 cm^{-1} ve 1305 cm^{-1} değerleriyle mükemmel bir uyum göstermektedir[36]. Ayrıca X noktasında elde edilen TO (920 cm^{-1}) ve LO (1160 cm^{-1}) fonon modları da, yine deneysel sonuçlar olan 900 cm^{-1} ve 1135 cm^{-1} ile uyum içindedir[36]. Fonon dispersiyon şeklinde bir diğer ilgi çekici durum ise $\Gamma - K - X$ yönünde büyük dalga vektörleri için boyuna akustik fonon modunun enerjisinin, enine optik fonon modlarının enerjilerinden daha büyük olmasıdır. LA fonon modu L - X - W yönleri boyunca da Şekil 5.5'de görüldüğü gibi TO fonon modunun üstünde yer almaktadır. BN için elde edilen bu sonuç, 2000 yılında Bechstedt ve arkadaşlarının yaptığı çalışma ile de oldukça uyumludur[5]. Böyle bir durum katyon ve anyon atomlarının kütle oranının çok küçük olması ile açıklanabilir.

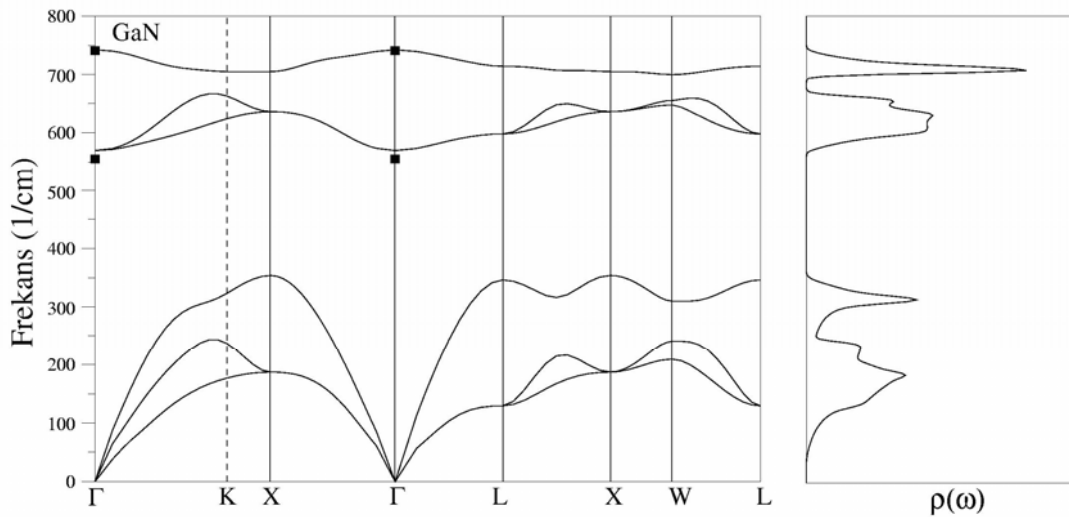
Durum yoğunluğu grafiğinde 1000 cm^{-1} civarında görülen en belirgin pik, açıkça boyuna akustik (LA) fonon modlarından kaynaklanmaktadır. LO fonon modundan kaynaklanan 1100 cm^{-1} civarındaki pik ise oldukça geniş olmakla beraber, şiddeti LA fonon modlarından kaynaklanan pikten oldukça düşüktür. Bunun nedeni LO fonon modunun Brillouin bölge sınırları boyunca LA fonon modlarından daha büyük bir dispersiyon göstermesidir. Durum yoğunluğu grafiğinde 900 ve 950 cm^{-1} enerji değerlerinde görülen pikler ise TO fonon modlarından kaynaklanmaktadır.



Şekil 5.6. AlN yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri. Dolu kareler deneysel sonuçları göstermektedir[35].

AlN yarıiletkeni için hesaplanan fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 5.6'da görülmektedir. Fonon dispersiyon grafiğine bakıldığında BN'den farklı olarak, akustik ve optik fononlar arasında bir boşluk bölgesinin yer aldığı bulunmuştur. Yaklaşık 50 cm^{-1} civarında olan bu akusik-optik boşluk bölgesinin nedeni, Al atomunun kütesinin N atomuna göre yaklaşık 2 kat büyük olmasıdır. Şekil 5.6'da görülen dolu kareler deneysel sonuçları göstermektedir[35]. AlN için Γ noktasında 657 ve 890 cm^{-1} olarak hesaplanan TO ve LO fonon modları, deneysel sonuçlar olan 655 ve 902 cm^{-1} değerleriyle oldukça uyumludur.

AlN için elde edilen durum yoğunluğu grafiği incelendiğinde 650 cm^{-1} civarında bulunan en belirgin pikin açıkça enine optik fonon modlarından meydana geldiği görülmektedir. Bu modlar tüm simetri yönleri boyunca neredeyse hiç değişmedikleri için bu pikin genişliği oldukça küçüktür. Boyuna optik fonon modunun oluşturduğu pik ise 740 cm^{-1} civarında hesaplanmıştır. Bu pikin şiddeti de BN yarıiletkenine benzer şekilde TO fonon modlarından kaynaklanan pikin şiddetine göre daha küçüktür. Ayrıca yine durum yoğunluğu grafiğinde 335 ve 510 cm^{-1} civarında iki pik daha yer almaktadır. Bu piklerin ise AlN için hesaplanan akustik fonon modları nedeniyle oluştuğu görülmektedir.



Şekil 5.7. GaN yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri. Dolu kareler deneysel sonuçları göstermektedir[33].

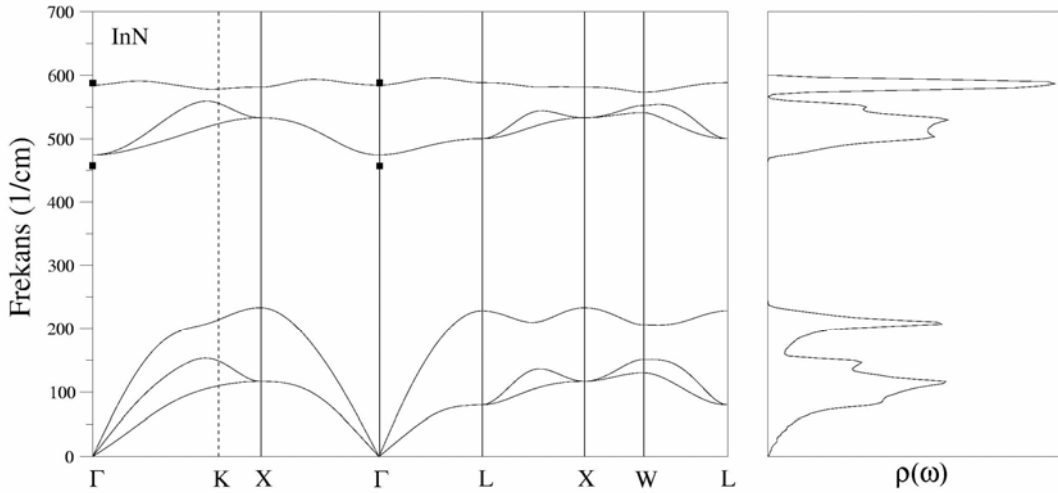
Şekil 5.7, GaN yarıiletkeni için hesaplanan fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafiklerini göstermektedir. Fonon dispersiyon grafiğinde görülen dolu kareler

deneysel sonuçlardan alınmıştır[33]. GaN için 569 ve 742 cm^{-1} değerlerinde hesaplanan TO ve LO fonon modları, 1996 yılında Tabata ve arkadaşlarının yaptığı deneyler sonucunda 555 ve 741 cm^{-1} olarak ölçülmüştür. BN ve AlN yarıiletkenlerinde olduğu gibi GaN için yapılan hesaplamalar da deneysel sonuçlarla çok iyi bir uyum içindedir. Bu grafiklere bakıldığında, her iki grafikten de akustik ve optik fonon modlarının birbirinden açık bir şekilde ayrıldığı görülmektedir. Bu frekans aralığı değeri yaklaşık 200 cm^{-1} civarındadır. Akustik-optik boşluk bölgesi BN ve AlN yarıiletkenlerinden farklı olarak çok daha geniş bulunmuştur. Bunun nedeni Ga'nın kütlelerinin, N'nin kütlelerinden yaklaşık 5 kat daha büyük olmasıdır.

Durum yoğunluğu grafiğine bakıldığında ilk pik 180 cm^{-1} civarında elde edilmiştir ve bu pik fonon dispersiyon eğrisinden de görülebileceği gibi $\Gamma - X$ simetri yönündeki enine akustik (TA) fononlardan ileri gelmektedir. 320 cm^{-1} civarında bulunan ikinci pik ise $\Gamma - X$ ve $\Gamma - L$ simetri yönlerindeki boyuna akustik fononlardan kaynaklanır. 610 cm^{-1} civarındaki pikin kaynağı enine optik fonon modlarıdır. Bu pikin genişliği 76 cm^{-1} iken boyuna optik fononlardan kaynaklanan ve 710 cm^{-1} 'de gözlenen pikin genişliği 35 cm^{-1} civarındadır. Yani enine optik fonon modlarından kaynaklanan pik daha geniş bir aralığa sahiptir. Bu aradaki fark fonon spektrumundan açıklanabilir. Fonon spektrumunda görüldüğü gibi enine optik modların frekansları, boyuna optik fonon frekanslarına göre daha fazla değişmektedir. Bunun yanı sıra yine aynı nedenle, BN ve AlN yarıiletkenlerinden farklı bir şekilde, LO fonon modunun oluşturduğu pikin şiddeti, TO modlarından kaynaklanan pikin şiddetine göre daha fazladır.

InN yarıiletkeni için elde edilen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 5.8'de sunulmuştur. Daha önce Tabata ve arkadaşları tarafından 1999 yılında Raman saçılması yöntemiyle ölçülen TO (457 cm^{-1}) ve LO (588 cm^{-1}) fonon modları, fonon dispersiyon grafiğinde dolu karelerle gösterilmiştir[34]. InN için bu çalışmada hesaplanan aynı modların değerleri ise sırasıyla 475 cm^{-1} ve 584 cm^{-1} olarak elde edilmiştir. Daha önce bahsedilen tüm yarıiletkenlerde olduğu gibi InN yarıiletkeni için yapılan hesaplamalar da deneysel sonuçlarla oldukça uyumludur. InN için elde edilen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri, GaN için hesaplananlarla çok büyük benzerlikler göstermektedir. Fonon dispersiyon grafiğine bakıldığında

GaN'ye benzer olarak akustik ve optik fonon modları arasında çok büyük bir frekans aralığı vardır. Fakat bu aralık değeri yaklaşık 230 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır ve GaN için elde edilenden daha büyüktür. Bunun nedeni ise In ve N atomlarının kütle oranının, Ga ve N atomları arasındaki orandan daha büyük olmasıdır.



Şekil 5.8. InN yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri. Dolu kareler deneysel sonuçları göstermektedir[34].

InN için elde edilen durum yoğunluğu grafiği incelendiğinde akustik-optik boşluk bölgesi yine açıkça görülmektedir. Bu grafikte 110 cm^{-1} civarında görülen ilk pik açıkça enine akustik fonon modlarından kaynaklanmaktadır. 200 cm^{-1} değerinde elde edilen ikinci pik ise boyuna akustik fononlardan ileri gelmektedir. Enine optik fonon modlarının oluşturduğu geniş pik ise akustik-optik boşluk bölgesinin hemen üzerinde 500 cm^{-1} civarında elde edilmiştir. Bu grafikte hesaplanan en belirgin ve dar pik ise 550 cm^{-1} civarında bulunmaktadır. Bu pikin diğer piklere göre oldukça dar ve şiddetinin de fazla olmasının nedeni, boyuna optik fonon modlarının Brillouin bölgesi sınırları boyunca neredeyse hiçbir değişim göstermemesidir. Bu özelliğiyle InN, BN ve AlN yarıiletkenleri ile farklı, GaN ile benzer bir yapıya sahiptir.

Yukarıda BN, AlN, GaN ve InN yarıiletkenleri için elde edilen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri tartışılmıştır. Bu materyallerin fonon dispersiyon grafiklerinde, Brillouin bölgesi sınırlarında elde edilen fonon modları Tablo 5.3'de görülmektedir. Ayrıca bu tabloda, daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmalardan elde edilen sonuçlar da sunulmuştur. Özellikle incelenen bütün yarıiletkenler için elde edilen sonuçların, deneysel değerlerle oldukça uyumlu olması

yapılan hesaplamaların doğruluğunu kanıtlar niteliktedir. Bunun yanı sıra hesaplamalar sonucunda bulunan fonon modlarının teorik çalışmalarla da oldukça uyumlu olduğu bulunmuştur.

Tablo 5.3. BN, AlN, GaN ve InN için yüksek simetri noktalarında elde edilen fonon modları daha önceki teorik [3-5] ve deneysel [33-36] sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Bütün değerler cm^{-1} birimindedir.

Yarıiletken	Γ_{TO}	Γ_{LO}	X_{TA}	X_{LA}	X_{TO}	X_{LO}	L_{TA}	L_{LA}	L_{TO}	L_{LO}
BN	1055	1300	712	1030	920	1160	496	991	997	1148
Teorik[5]	1061	1280	706	1018	939	1154	487	982	1009	1149
Teorik[3]	1040	1285	707	1026	902	1152	489	980	981	1142
Deneysel[36]	1055	1305	-	-	900	1135	-	-	-	1135
AlN	657	890	338	583	664	719	232	575	648	734
Teorik[5]	665	890	341	588	668	716	226	585	655	735
Teorik[3]	662	907	340	590	674	734	230	582	656	750
Deneysel[35]	655	902	-	-	-	-	-	-	-	-
GaN	569	742	186	353	636	704	129	346	598	714
Teorik[5]	567	746	197	351	623	695	138	349	587	708
Teorik[4]	560	750	195	353	628	709	139	345	585	720
Deneysel[33]	555	741	-	-	-	-	-	-	-	-
InN	475	584	117	233	533	581	80	228	500	588
Teorik[5]	467	596	116	231	518	567	78	227	488	573
Deneysel[34]	457	588	-	-	-	-	-	-	-	-

BN, AlN, GaN ve InN yarıiletkenleri için elde edilen fonon dispersiyon grafiklerine bakıldığında TO ve LO fonon modları arasında da bir boşluk bölgesinin bulunduğu görülmektedir. Bu boşluk bölgesinin oluşmasının nedenleri ise atomlar arasındaki kütle farkı ve materyallerin iyonikliğidir. TO – LO fonon modları arasında yer alan bu boşluk bölgesi özellikle Γ noktasında oldukça açık bir şekilde görülmektedir.

Tablo 5.4’de III-N materyallerini oluşturan atomların kütle oranları, Phillips iyoniklik faktörleri[Ref.111] ile Γ noktasında hesaplanan TO ve LO fonon modlarının oranları yer almaktadır. Tablo incelendiğinde kütle oranı ve Phillips iyonikliği arttıkça LO – TO fonon modları arasındaki boşluk bölgesi azalmaktadır. Ayrıca tüm materyaller için TO fonon modlarının LO fonon modlarına oranının da 1’den küçük olması hepsi için de LO fonon modunun TO’ya göre daha büyük bir enerjiye sahip olduğunu göstermektedir.

Tablo 5.4. BN, AlN, GaN ve InN için kütle oranları, Phillips iyonikliği ve Γ noktasında LO – TO fonon modlarının oranı verilmiştir.

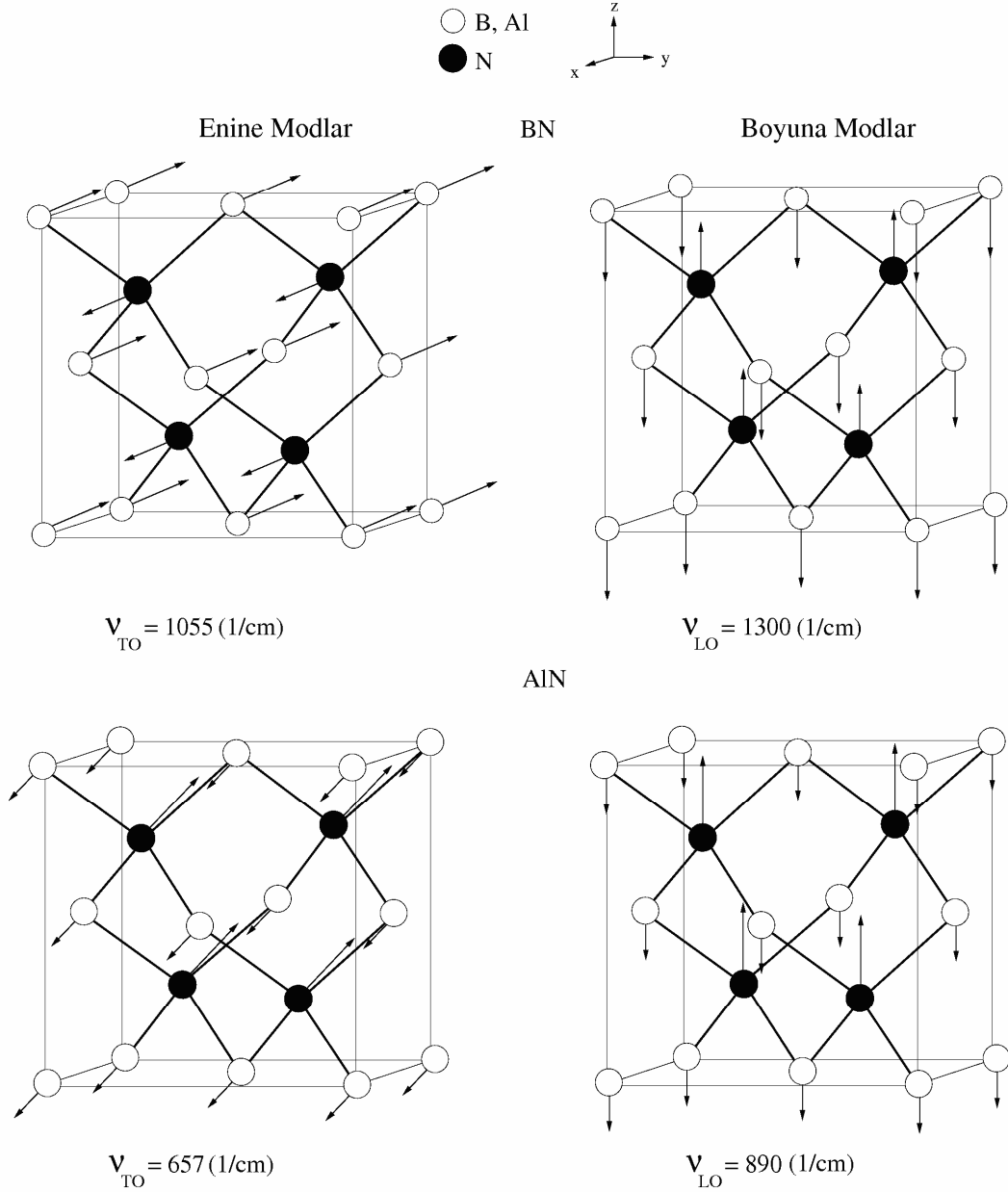
Yarıiletken	Kütle Oranı	Phillips İyonikliği	$\Gamma_{LO} - \Gamma_{TO}$ (cm ⁻¹)	$\Gamma_{TO} / \Gamma_{LO}$
BN	1.3	0.26	245	0.81
AlN	1.93	0.45	203	0.76
GaN	4.98	0.50	172	0.77
InN	8.20	0.58	110	0.82

5.4.1. III-N tipi yarıiletkenlerin atomik titreşim karakterleri

III-N tipi yarıiletkenlerin titreşim özelliklerinin daha iyi anlaşılabilmesi için atomik titreşimlerin de incelenmesi faydalı olacaktır. Şekil 5.9’da BN ve AlN yarıiletkenleri için Brillouin bölge merkezinde elde edilen TO ve LO fonon modları için atomik titreşim şekilleri görülmektedir. Bu noktadaki atomların titreşiminde aynı tip atomlar aynı yönlü titreşirler ve atomlar arasında faz farkı söz konusu değildir. Bu şekiller için seçilen dalga vektörü [001] yönündedir.

BN için elde edilen şekle bakıldığında, hem TO hem de LO modları için, birbirine çok yakın kütlelere sahip olan B ve N atomlarının ikisinin de neredeyse aynı büyüklükte titreştikleri görülür. TO fonon modu incelenirse B ve N atomlarının birbirlerine zıt olarak titreştikleri görülmektedir. Bu atomlar aynı zamanda x-y düzleminde titreştikleri için seçilen dalga vektörüne de dik olarak hareket etmektedirler. Bu sebeple atomik titreşim sonucunda dalga vektörüne dik bir

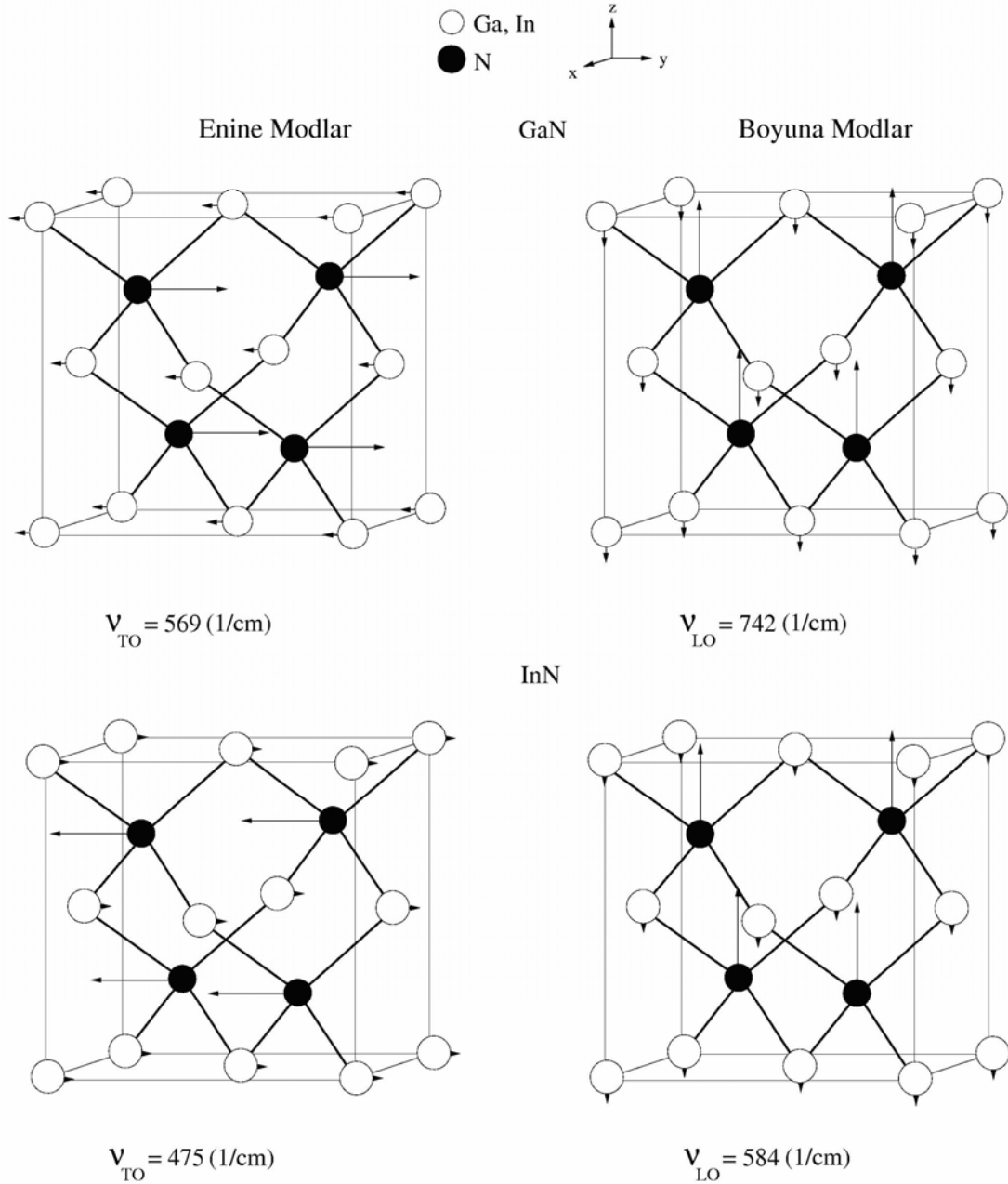
polarizasyon oluşur. LO fonon modunda ise atomlar birbirine zıt yönlerde titreşmekle birlikte dalga vektörü ile aynı yönlü titreşimler ki bu titreşimler dalga vektörüne paralel bir polarizasyona sebep olur.



Şekil 5.9. BN ve AlN yarıiletkenleri için Brillouin bölgesinde elde edilen enine ve boyuna optik fonon modları için atomik titreşim şekilleri.

AlN için elde edilen titreşim şekilleri de BN'ye benzemektedir. Fakat Al atomunun kütlelerinin N atomunkinden yaklaşık iki kat daha büyük olması nedeniyle, TO ve LO fonon modları için N'nin titreşiminin büyüklüğü Al'dan biraz daha fazladır. Bu şekillerde de atomlar TO ve LO fonon modları için birbirine zıt yönlerde

titreşmektedirler. Ayrıca atomlar TO modunu oluştururken yine [001] yönünde alınan dalga vektörüne dik titreşerek dalga vektörüne dik bir polarizasyona sebep olurlarken; LO modu için ise paralel bir titreşim yaparak paralel bir polarizasyon oluştururlar.



Şekil 5.10. GaN ve InN yarıiletkenleri için Γ noktasında elde edilen enine ve boyuna optik fonon modların atomik titreşim şekilleri.

GaN ve InN yarıiletkenleri için Brillouin bölge merkezinde TO ve LO fonon modları için elde edilen atomik titreşimler Şekil 5.10'da görülmektedir. Bu titreşim şekilleri elde edilirken de BN ve AlN'ye benzer şekilde, dalga vektörü [001] yönünde seçilmiştir.

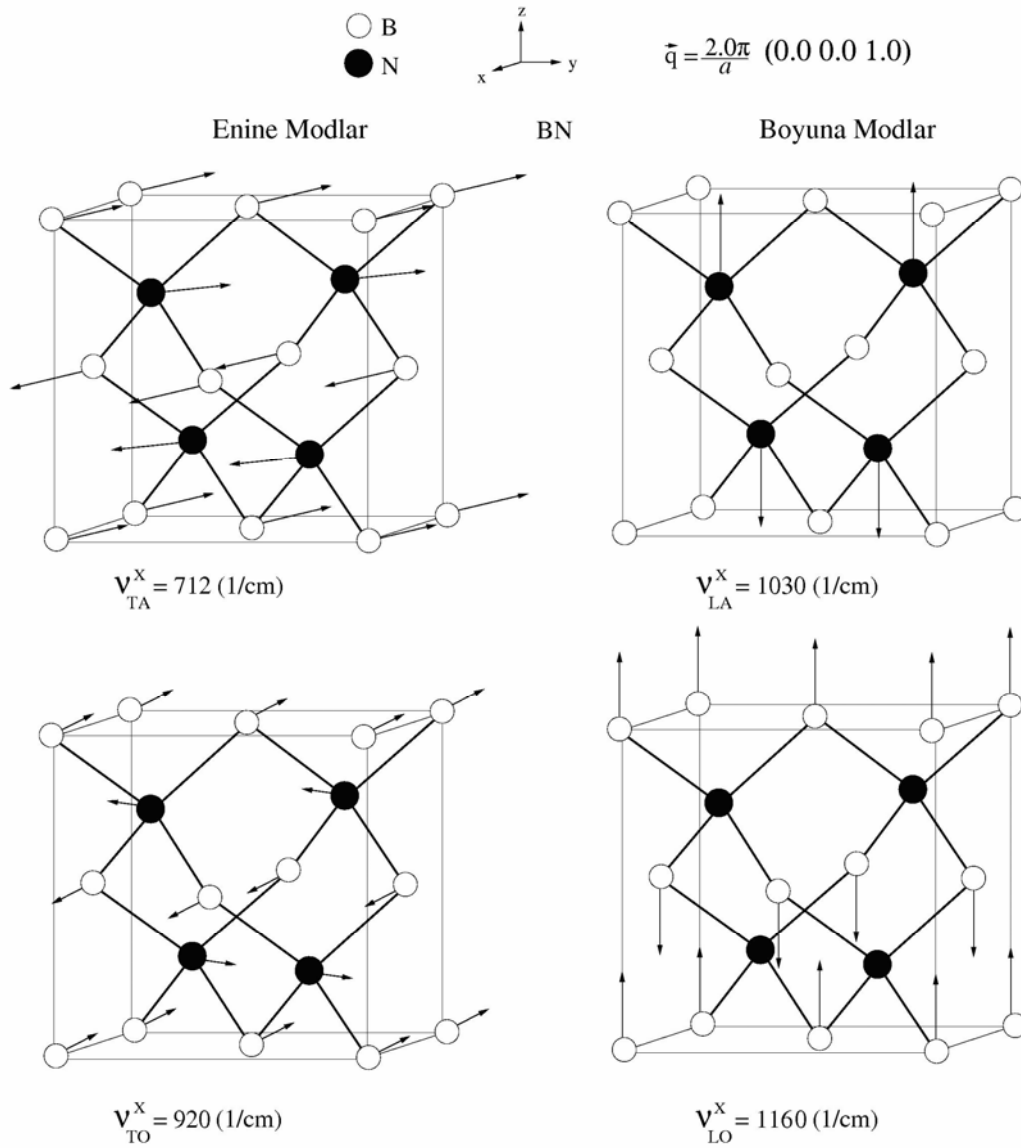
GaN yarıiletkeni için elde edilen TO ve LO fonon modları incelendiğinde N atomunun Ga atomuna göre belirgin bir şekilde daha fazla titreştiği görülmektedir. Bunun nedeni Ga ve N atomları arasındaki kütle farkının çok büyük olmasıdır. GaN için elde edilen TO fonon modu için atomlar y-ekseni boyunca birbirlerine zıt ve dalga vektörüne dik bir titreşim yapmaktadırlar. Bu nedenle BN ve AlN'ye benzer şekilde dalga vektörüne dik bir polarizasyon meydana getirirler. LO fonon modu için ise atomlar [001] yönünde yani dalga vektörüne paralel, fakat yine birbirlerine zıt bir titreşim yaptıkları için, dalga vektörüne paralel bir polarizasyona sebep olurlar.

InN için TO ve LO fonon modlarına bakıldığında, N atomunun çok açık bir şekilde In atomundan daha fazla titreştiği görülmektedir. Atomlar yine GaN'ye benzer şekilde titreştiklerinden TO fonon modu için dalga vektörüne dik ve LO modu için ise dalga vektörüne paralel bir polarizasyon oluştururlar.

III-N tipi yarıiletkenler için Γ noktasında elde edilen bütün titreşim şekilleri incelendiğinde, optik fonon modları için artan katyon / anyon kütle oranıyla birlikte N atomunun diğer atomdan (B, Al, Ga ve In) daha fazla titreştiği bulunmuştur. Ayrıca atomların tüm TO fonon modları için dalga vektörüne dik ve LO modları için ise dalga vektörüne paralel bir polarizasyon meydana getirecek şekilde hareket ettikleri sonucu elde edilmiştir. Bunun yanı sıra LO fonon modu her dört yarı iletken için de TO fonon moduna göre daha büyük bir enerji değerine sahiptir.

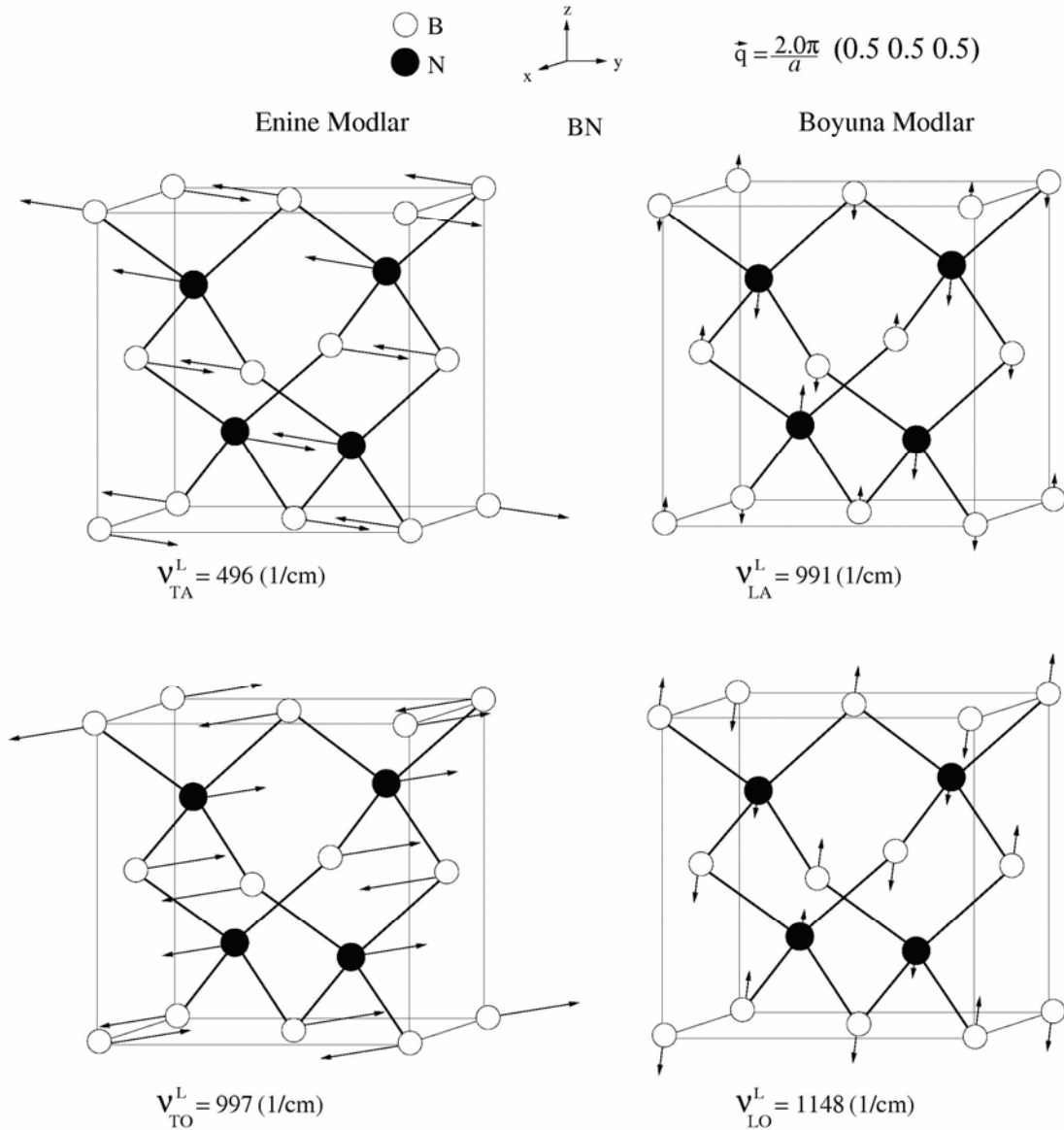
BN yarıiletkeni için Brillouin bölgesinin X simetri noktasında elde edilen atomik titreşimler Şekil 5.11'de görülmektedir. X simetri noktasında Şekil 5.5'ten de açıkça görülebileceği gibi ikisi akustik ve ikisi optik olmak üzere toplam dört adet fonon modu vardır. TA fonon modu, B ve N atomlarının titreşime neredeyse aynı derecede katkı yaptıkları bir mod olarak elde edilmiştir. Bu fonon modunda titreşimlerin hepsinin \mathbf{q} dalga vektörüne dik olduğu belirlenmiştir. Ayrıca bu mod için aynı

atomlardan bazıları birbirine tam olarak zıt olarak titreşmektedir. Bunun nedeni bu simetri noktasında bazı atomlar arasında 180° lik bir faz farkı bulunmasıdır. LA fonon modunun oluşmasında açık bir şekilde N atomları etkili olmaktadır. Bu mod için atomların $\vec{q} = \frac{2\pi}{a}(001)$ olarak seçilen dalga vektörü ile aynı yönde titreştikleri görülmektedir. Faz farkı nedeniyle atomların birbirine zıt titreşimi bu mod için de geçerlidir.



Şekil 5.11. BN yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modların atomik titreşim şekilleri.

B ve N atomlarının ikisinin de katkısıyla oluşan bir diğer mod ise, atomların \mathbf{q} dalga vektörüne dik olarak titreştiği TO fonon modudur. LO fonon modunda atomlar, LA fonon moduna benzer olarak dalga vektörüne paralel titreşmektedir fakat burada katkı sadece B atomlarından gelmektedir. Bunun nedeni B atomunun kütlesinin N atomuna göre daha küçük olmasıdır.



Şekil 5.12. BN yarıiletkeni için L simetri noktasında elde edilen fonon modların atomik titreşim şekilleri.

BN yarıiletkeni için elde edilen son titreşim şekilleri ise Brillouin bölgesinin L simetri noktasında hesaplanmıştır. Bu simetri noktası için bulunan titreşim şekilleri Şekil 5.12'de sunulmuştur. B ve N atomlarının seçilen \mathbf{q} dalga vektörüne dik olarak

titreştiđi TA fonon modu, hem B hem de N atomlarının neredeyse eřit bir řekilde katkı yaptıkları bir mod olarak elde edilmiřtir. X simetri noktasına benzer řekilde bu simetri noktasında da aynı atomlar arasında faz farkı olduđundan, bu atomların birbirlerine zıt olarak titreřtikleri görölmektedir. LA fonon modu için ise, X simetri noktasından farklı bir řekilde, modun oluřmasına N atomlarının yanı sıra B atomları da katkı yapmaktadır. Titreřen atomların hepsi de dalga vektörüyle aynı yönde hareket etmektedirler. TO fonon modunu oluřturan atomların titreřim řekilleri, TA fonon moduyla oldukça benzemektedirler. Seçilen dalga vektörüne paralel titreřimlerden meydana gelen bir diđer fonon modu olan LO için yine B ve N atomlarının ortak katkısı mevcuttur.

AlN, GaN ve InN yarıiletkenleri için X ve L noktalarında yine dörder tane fonon modu elde edilmiřtir. Bu fonon modları da büyük ölçüde BN yarıiletkeni ile benzerlik göstermektedir. Bu modların genel titreřim karakterleri BN ile neredeyse aynı olmakla birlikte fonon modlarının oluřmasına yapılan katkılarda bazı farklılıklar bulunmaktadır. Bu benzerlik ve farklılıkları yarıiletkenleri tek tek ele alarak açıklayalım.

AlN yarıiletkeni için X simetri noktasında TA fonon modu için Al:N kütle oranı, B:N kütle oranından daha fazla olduđu için Al atomlarının katkısının daha fazla olduđu görölmüřtür. LA fonon modunun oluřumunda ise BN'den farklı bir řekilde sadece katyon(Al) atomları rol oynamaktadır. Bunun nedeni Al atomlarının kütlelerinin N atomlarından büyük olmasıdır. TO fonon modunun oluřmasında ise Al atomlarının da katkısı olmakla birlikte N atomları daha büyük bir etki yapmaktadır. LO fonon modu ise sadece küçük kütleli atomların yani N atomlarının dalga vektörü yönündeki titreřiminden kaynaklanmaktadır. AlN yarıiletkeni için L simetri noktasında TA fonon modunun titreřim řekli BN ile neredeyse aynıdır ve Al ve N atomları modun oluřumuna ortak katkı yapmaktadırlar. LA fonon modu Al atomlarının seçilen \mathbf{q} vektörüne paralel titreřimleri nedeniyle oluřmuřtur. TO fonon modunun oluřumunda ise küçük kütleli N atomları daha büyük katkı yaparken Al atomları da etkilidir. LO modu ise sadece N atomlarının titreřimlerinden kaynaklanmaktadır.

GaN yarıiletkeni için X noktasındaki fonon modları incelenecek olursa hem titreşim karakterlerinin hem de bu karakterlerin ortaya çıkmasında etkili olan atomların A1N ile büyük bir benzerlik gösterdiği bulunmuştur. TA fonon modu için Ga atomlarından gelen katkının daha büyük olmasının yanı sıra N atomlarının etkisinin de olduğu sonucu elde edilmiştir. LA modu ise sadece Ga atomlarının büyük titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. TO fonon modunun oluşumunda ise her iki atomun da etkisi olmakla birlikte N atomlarının etkisi daha fazladır. LO modu ise açık bir şekilde N atomlarının \mathbf{q} vektörü yönündeki büyük titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. GaN için L simetri noktasındaki ilk fonon modu olan TA'nın oluşumunda yine her iki atomun da ortak katkısı vardır. LA fonon modunun oluşumunda ise N atomunun çok küçük katkısı yanında, Ga atomu oldukça büyük bir katkı yapmaktadır. TO fonon modunda ise N atomunun katkısı çok büyük olmakla beraber Ga atomu da bir etki yapmaktadır. LO modu için ise sadece N atomunun büyük bir katkısı söz konusudur.

InN yarıiletkeni için X simetri noktasında yine dört fonon modu elde edilmiştir. TA modunun oluşumunda In atomları daha büyük katkı yapmakla beraber N atomlarının da bir etkisi vardır. LA modu ise sadece In atomlarının \mathbf{q} vektörüne paralel titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. TO ve LO fonon modları ise sadece N atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmakta olup, sırasıyla seçilen dalga vektörüne dik ve paralel şekilde yönelmektedirler. InN için L simetri noktasında hesaplanan TA fonon modu her iki atomun da ortak titreşimlerinden oluşmaktadır, ancak In atomunun yaptığı katkı çok daha büyüktür. LA modu ise özellikle In atomlarından kaynaklanmakta olup, çok küçük de olsa N atomlarının etkisi görülmektedir. TO ve LO fonon modları için ise In ve N atomları arasında bulunan çok büyük kütle farkından dolayı, X simetri noktasına benzer şekilde sadece N atomları titreşmektedir.

Bütün III-N tipi yarı iletkenler birlikte ele alındığında Katyon:Anyon kütle oranının artmasıyla birlikte akustik fonon modlarının titreşim karakterlerinin belirlenmesinde büyük kütleli atomlar etkili olurken, optik modların belirlenmesinde ise kütleleri küçük olan atomlar rol oynamaktadır. X ve L simetri noktalarında TA gibi bazı modların titreşim şekillerinin belirlenmesinde hem katyon hem de anyon atomlarının

katkı yaptıđı belirlenmiřtir. Fakat ktle oranı arttıkça titreřim řekillerinin belirlenmesinde katyon ve ya anyon incelenen moda gre daha baskın olmaktadır. rneđin; AlN ve InN yarıiletkenlerinin X noktasındaki TA fonon modu iin katyon (Al, In) atomlarının yaptıđı katkı daha byk olmakla beraber anyon (N) atomları da etkili olmaktadır. Ancak katyon/anyon ktle oranı nedeniyle, In atomlarının modun belirlenmesine yaptıđı katkı, Al atomlarının yaptıđı katkıdan daha byktr.

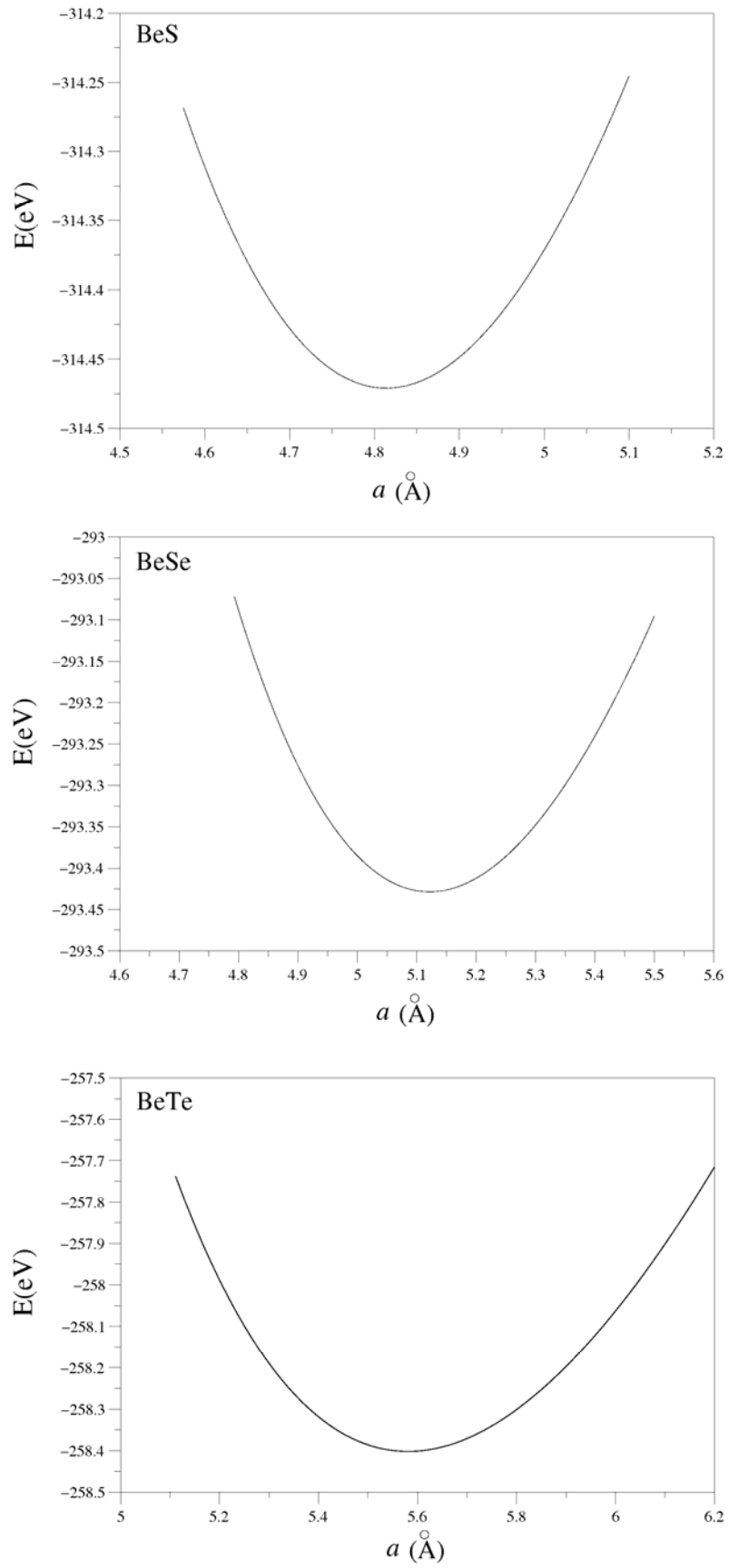
BÖLÜM 6. BERİLYUM KALKOJENLERİN HACİM ÖZELLİKLERİ

6.1. Giriş

Teknolojik uygulamalarda kullanım açısından oldukça elverişli özellikleri olan Berilyum Kalkojenler (BeS, BeSe ve BeTe) üzerine yapılan bilimsel çalışmalar son yıllarda artarak devam etmektedir[39-42,52]. Bu maddelerin geniş elektronik bant aralığına sahip olmaları, elektronik aletlerin birçoğunda kullanılabilmelerine olanak sağlamaktadır. Bunun yanı sıra bu yarıiletkenler optik özellikleri nedeniyle mavi-yeşil lazer diyotların ve lazer yayan diyotların yapımında da kullanılmaktadırlar. Teknolojide bu kadar geniş bir biçimde faydalanılan Be-kalkojenlerin taban durumu (yapısal, elektronik ve titreşim) özellikleri de yoğun bir şekilde araştırılmış ve literatürde yerlerini almışlardır[38-56]. Bu kısımda BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri incelenmiştir. Bu incelemeler sonucu elde edilen sonuçlar, daha sonra yapılacak olan yüzey çalışmalarının da temelini oluşturması açısından oldukça önemlidir.

6.2. Yapısal Özellikler

Çinko-sülfür kristal yapıdaki BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin yapısal özelliklerinin incelenmesine ilk olarak her bir materyal için örgü sabiti hesaplamalarıyla başlanmıştır. Bu hesaplamalarda farklı örgü sabiti değerleri için bağlanma enerjileri hesaplanmış ve bunlardan yararlanarak enerji – örgü sabiti grafikleri çizilmiştir. Be-kalkojenler için hesaplanan bu grafikler Şekil 6.1’de görülmektedir. Grafiklerin her birinde belli bir örgü sabiti değeri için enerjinin minimum olduğu bir nokta bulunmaktadır. Grafiğin minimum noktasında yer alan örgü sabiti değeri, yarıiletkenin hesaplamalar sonucu elde edilen örgü sabitidir.



Şekil 6.1. BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için enerji – örgü sabiti grafikleri.

Şekil 6.1'den de görülebileceği gibi BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için hesaplanan örgü sabiti değerleri sırasıyla 4.81, 5.13 ve 5.58 Å olarak elde edilmiştir. Hesaplanan bu değerler, daha önceki çalışmalarda 4.87[44], 5.14[43] ve 5.62[43] Å olarak ölçülen deneysel sonuçlarla büyük bir uyum göstermektedir. BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için hesaplanan örgü sabitleri ile bunlardan yararlanarak bulunan enerji ve basınç değerleri Murnaghan eşitliklerinde[Ref.110] kullanılarak B hacim modülleri ve B' hacim modülünün basınca göre birinci türevleri elde edilmiştir. Bunun yanı sıra diğer bir yapısal parametre olan makroskobik dielektrik sabiti de incelenen tüm yarıiletkenler için ayrı ayrı hesaplanmıştır. Tablo 6.1'de Be-kalkojenler için hesaplanan yapısal parametreler, daha önceki teorik[38,41,42] ve deneysel[43-46] sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

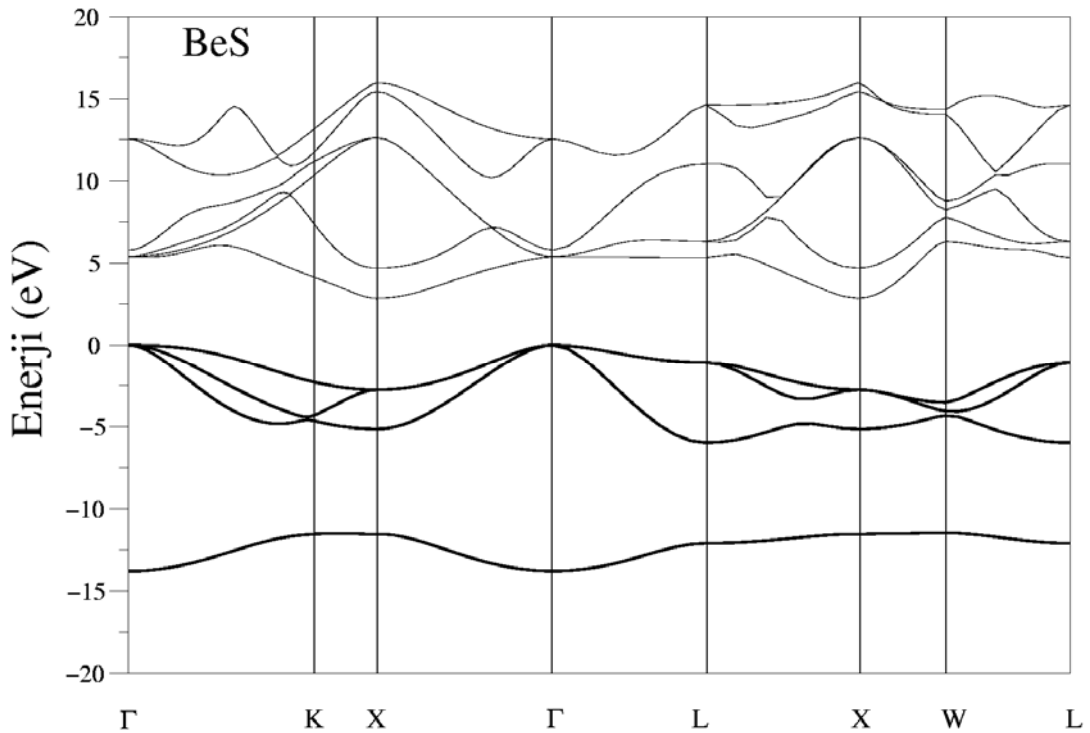
Tablo 6.1. BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için hesaplanan a örgü sabitleri, B hacim modülleri, B' hacim modülünün basınca göre birinci türevleri ve ϵ_{∞} makroskobik dielektrik sabitleri ile daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmaların sonuçları.

Be-Kalkojen	a (Å)	B (Mbar)	B'	ϵ_{∞}
BeS (Hesaplanan)	4.81	0.93	3.34	5.46
Teorik[42]	4.80	1.01	3.63	-
Teorik[41]	4.80	1.04	3.21	-
Teorik[38]	4.75	1.16	3.22	-
Deneysel[44]	4.87	1.05	3.5	-
BeSe (Hesaplanan)	5.13	0.80	3.56	6.09
Teorik[42]	5.09	0.83	3.67	-
Teorik[41]	5.08	0.87	3.29	-
Teorik[38]	5.04	0.98	3.11	-
Deneysel[43]	5.14	0.92	4	-
Deneysel[46]	-	-	-	6.10
BeTe (Hesaplanan)	5.58	0.60	3.72	7.51
Teorik[42]	5.58	0.62	3.69	-
Teorik[41]	5.56	0.65	3.40	-
Teorik[38]	5.53	0.71	3.38	-
Deneysel[43]	5.62	0.67	4	-
Deneysel[45]	-	-	-	7.00

Hesaplanan hacim modülü değerleri incelendiğinde daha önceki çalışmalara benzer şekilde BeS yarıiletkeninin, BeSe ve BeTe'ye göre daha sert olduğu görülmektedir. Bu da BeS'nin bazı teknolojik uygulamalarda kullanımını uygun hale getirmektedir. Hesaplanan diğer yapısal parametreler olan B' ve ϵ_∞ değerleri de daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyum içindedir. Bütün yapısal parametreler için özellikle deneysel parametrelerle elde edilen uyumlu sonuçlar, hesaplamalarımızı doğrulamakta ve ileride yapılacak olan çalışmalar için güven vermektedir.

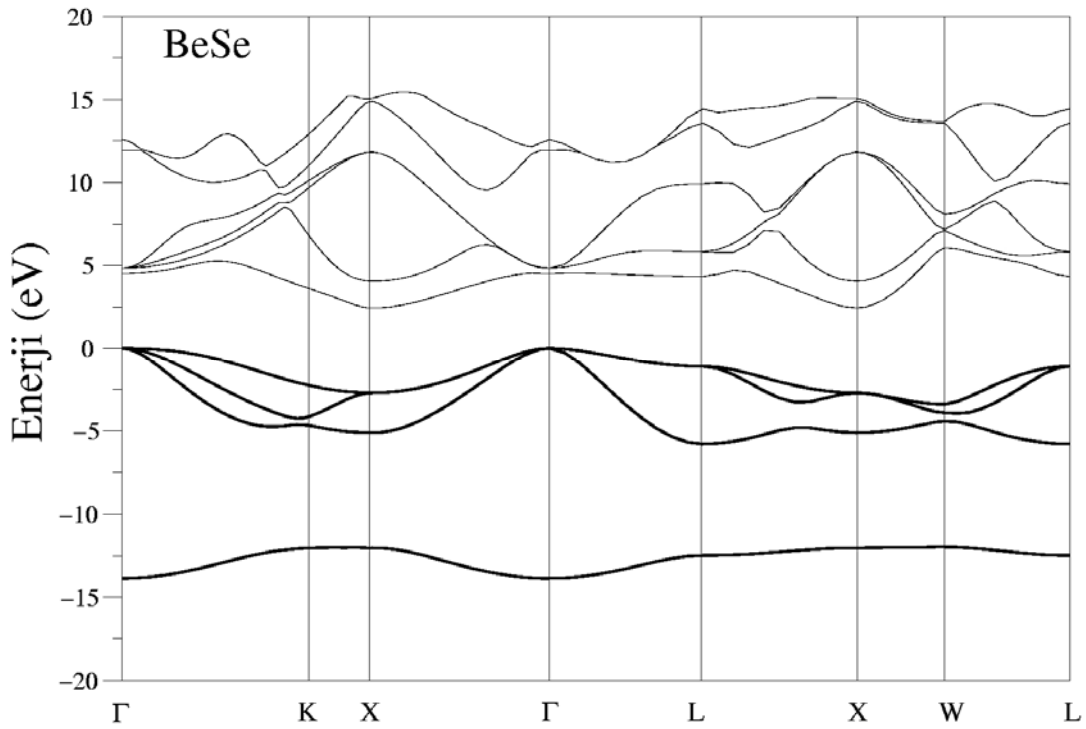
6.3. Elektronik Özellikler

Çinko-sülfür yapıda kristalleşen BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin elektronik özelliklerinin incelenmesi, teknolojiye kullanım alanlarının belirlenmesi için oldukça önemlidir. Elektronik özelliklerin araştırılmasında, değerlik elektronları önemli bir rol oynamaktadır. Berilyum-kalkojenleri oluşturan elementlerin elektronik dizilimleri ${}^4\text{Be}:[\text{He}]2s^2$, ${}^{16}\text{S}:[\text{Ne}]3s^23p^4$, ${}^{34}\text{Se}:[\text{Ar}+3d]4s^24p^4$, ${}^{52}\text{Te}:[\text{Kr}+4d]5s^25p^4$ şeklindedir. Böylece elektronik hesaplamalarda Be için 2 değerlik elektronu alınırken, S, Se ve Te için ise 6 değerlik elektronu alınmıştır.



Şekil 6.2. BeS yarıiletkeni için elektronik bant yapısı grafiği.

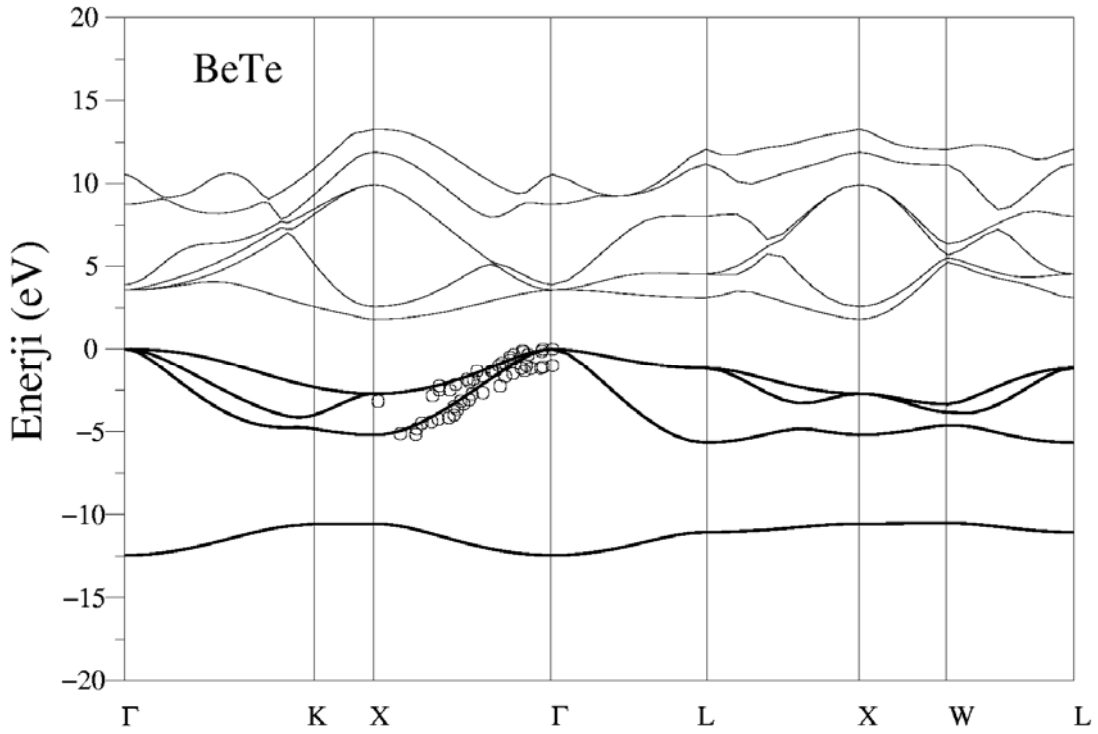
Şekil 6.2, BeS yarıiletkeni için elektronik bant yapısı grafiğini göstermektedir. Bu yarıiletken için primitif birim hücrede 8 elektron vardır ve bu elektronlar 4 değerlik bandını doldururlar. Bu grafikte koyu çizgiler değerlik bantlarını gösterirken, açık çizgiler ise iletkenlik bantlarına karşılık gelir. BeS'nin elektronik bant yapısı grafiğinden de açıkça görülebileceği gibi değerlik bandının maksimumu Γ noktasında bulunurken, iletkenlik bandının minimumu ise X noktasında yer almaktadır. Bu nedenle BeS yarıiletkeni dolaylı bant aralığına sahiptir ve bu bant aralığının değeri 2.83 eV olarak hesaplanmıştır. Bu yarıiletken için Γ noktasında elde edilen doğrudan bant aralığı ise 5.39 eV'dir. Bunun yanı sıra Brillouin bölge merkezi olan Γ noktasındaki değerlik bant aralığı da 13.79 eV olarak hesaplanmıştır. Daha yüksek enerjiye sahip ve sıfıra daha yakın üç değerlik bandının oluşturduğu bant genişliği ise 6.00 eV'dir.



Şekil 6.3. BeSe yarıiletkeni için elektronik bant yapısı grafiği.

BeSe yarıiletkeni için Brillouin bölgesi boyunca hesaplanan elektronik bant yapısı grafiği Şekil 6.3'te görülmektedir. Grafikte görülen koyu çizgiler değerlik bantlarını ve açık çizgiler ise iletkenlik bantlarını temsil etmektedir. BeSe yarıiletkeni için değerlik bantlarının maksimumu Γ noktasında yer alırken, iletkenlik bantlarının

minimum olduğu nokta ise X'de bulunmaktadır. Bu durumda BeSe yarıiletkeni de BeS'ye benzer olarak dolaylı bant aralığına sahiptir. BeSe için dolaylı bant aralığı değeri 2.43 eV olarak elde edilmiştir. Γ noktasında hesaplanan doğrudan bant aralığı ise 4.50 eV bulunmuştur. Daha yüksek enerjili değerlik bantlarının genişliği ise BeSe için 5.80 eV olarak hesaplanmıştır.



Şekil 6.4. BeTe yarıiletkeni için elektronik bant yapısı grafiği. Γ -X yönünde görülen açık daireler ise deneysel sonuçları göstermektedir[55].

BeTe için elde edilen elektronik bant yapısı grafiği Şekil 6.4'de sunulmuştur. Bu grafikte de koyu çizgiler değerlik bantlarını gösterirken, açık çizgiler iletkenlik bantlarını oluştururlar. Γ -X yönünde görülen açık daireler ise BeTe için daha önce "angle-resolved synchrotron-radiation photoemission spectroscopy" yöntemi kullanılarak elde edilen deneysel sonuçlardır[55]. Γ -X yönünde hesaplanan değerlerle, deneysel sonuçlar arasında çok iyi bir uyum elde edilmiştir. Fakat burada yapılan hesaplamalar spin-yörünge etkileşimini içermediği için Brillouin bölgesi merkezine yaklaştıkça uyum bozulmaktadır. BeTe yarıiletkeni için de, diğer Be-kalkojenlere benzer olarak, değerlik bandının maksimumu Γ noktasında yer alırken, iletkenlik bandının minimumu X noktasında bulunmaktadır. Bu nedenle BeTe yarıiletkeni de dolaylı bant aralığına sahiptir ve bu aralık değeri 1.80 eV kadardır. Γ

noktasında hesaplanan doğrudan bant aralığı değeri ise 3.57 eV olarak hesaplanmıştır. Değerlik bant aralığı BeS ve BeSe'den daha düşük bir şekilde 12.45 eV olarak elde edilmiştir. BeTe için hesaplanan daha yüksek enerjiye sahip değerlik bantlarının genişliği yine diğer Be-kalkojenlerden küçük ve 5.68 eV'dir.

Tablo 6.2. BeS, BeSe ve BeTe için yüksek simetri yönlerinde hesaplanan doğrudan bant aralığı değerleri ve Γ -X dolaylı bant aralığı değerleri daha önce hesaplanan sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Tüm veriler eV birimindedir.

Be-Kalkojen	$\Gamma - \Gamma$	$X - X$	$L - L$	$\Gamma - X$
BeS (Hesaplanan)	5.39	5.60	6.42	2.83
Teorik[51]	5.67	5.63	6.43	2.98
Teorik[49]	5.51	-	-	2.75
BeSe (Hesaplanan)	4.49	5.16	5.44	2.43
Teorik[51]	4.04	5.02	5.18	2.31
Teorik[49]	4.72	-	-	2.39
Deneysel[56]	5.70	6.80	-	3.80
BeTe (Hesaplanan)	3.57	4.52	4.27	1.80
Teorik[51]	3.28	4.33	3.97	1.60
Teorik[49]	3.68	-	-	1.80
Deneysel[54]	1.45	-	-	2.89
Deneysel[55]	4.53	-	-	-
Deneysel[56]	4.50	5.40	-	2.60

BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için Brillouin bölgesinin yüksek simetri noktalarında hesaplanan doğrudan bant aralıkları ve Γ -X dolaylı bant aralıkları Tablo 6.2'de görülmektedir. Bu tabloda, hesaplanan değerlerin yanı sıra daha önce elde edilen teorik[49,51] ve deneysel[54-56] sonuçlar da verilerek, karşılaştırma yapılmıştır. Tablo 6.2 incelendiğinde her üç yarıiletken için de teorik çalışmalarla oldukça uyumlu sonuçlar elde edilmiştir. Fakat BeSe ve BeTe için yapılan hesaplamalarla deneysel sonuçlar karşılaştırıldığında, doğrudan ve dolaylı bant aralıkları için hesaplanan enerji değerlerinin, deneysel değerlerden daha küçük olduğu görülmektedir. Bunun nedeni yapılan hesaplamalarda yerel yoğunluk yaklaşımının kullanılmasıdır. Bununla birlikte Şekil 6.4'de Γ -X boyunca deneysel

verilerle olan uyum da hesaplamaların sadece simetri noktalarında bir miktar farklılık gösterdiğini kanıtlamaktadır.

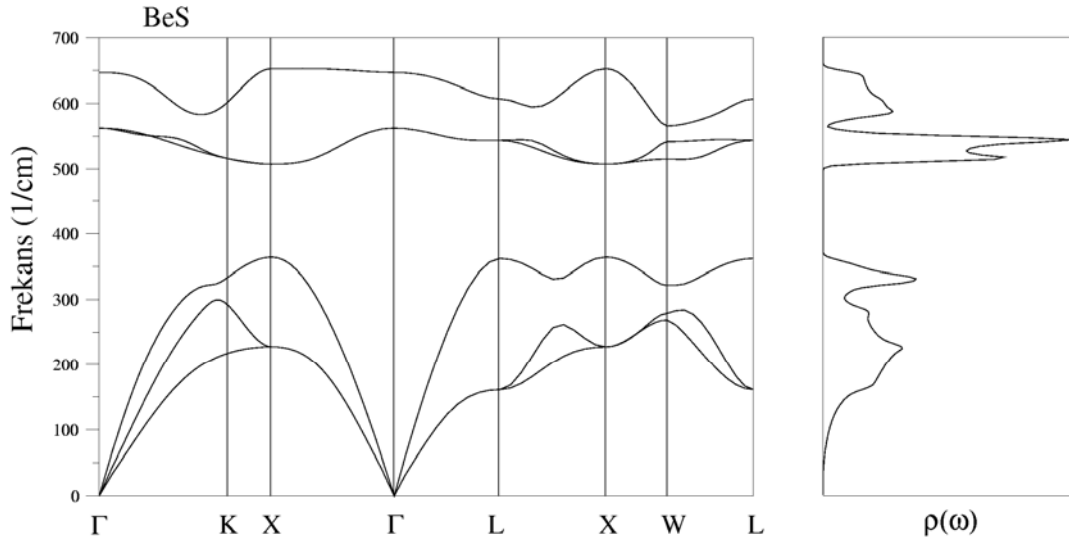
Be-kalkojenler için yapılan hesaplamalar sonucunda her üç yarıiletkenin de dolaylı bant aralığına sahip olduğu bulunmuştur. Bu bant aralıkları BeS'den, BeTe'ye doğru azalan bir eğilim göstermektedir. Burada değişken olan anyon atomları (S, Se ve Te) olduğuna göre bu azalma da onlarla ilgilidir. Anyon atomlarında elektron sayısı arttıkça, dolaylı bant aralığı azalmaktadır[42]. Buna benzer şekilde Γ noktasında hesaplanan doğrudan bant aralığı değerleri de BeS yarıiletkeni için en büyük iken BeTe için en küçüktür. Değerlik bantlarından sıfıra yakın olan üçünün oluşturduğu, daha yüksek enerjili bant genişlikleri de BeS (6.00 eV) için en büyük değerine sahipken BeSe (5.80 eV) ve BeTe (5.68 eV) için giderek azalmaktadır. Bunun nedeni ise anyon atomunun (S, Se ve Te), atom numarası azaldıkça materyal daha az kovalent olur[50], yani iyonikliği artar. Böylece değerlik bantları belirli bir yerde kalırlar[42]. Daha önce Khenata ve arkadaşlarının yaptığı teorik çalışmada bu bant genişlikleri BeS, BeSe ve BeTe için sırasıyla 6.13, 6.07 ve 5.76 eV olarak elde edilmiştir[42]. Yani hesaplanan değerler daha önceki teorik sonuçlarla uyum içindedir.

6.4. Titreşim Özellikleri

Bu kısımda çinko-sülfür yapıdaki BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin titreşim özellikleri incelenmiştir. Bölüm 5'te incelenen III-N tipi yarıiletkenlere benzer olarak, Be-kalkojenlerin de hepsinin birim hücrelerinde iki atom bulunmaktadır. Bu nedenle her bir dalga vektörü için, üçü akustik ve üçü de optik olmak üzere yine altı tane frekans değeri mevcuttur. $\Gamma - X$ ve $\Gamma - L$ yönlerinde enine akustik ve enine optik fonon modları üst üste geldikleri için sadece dört fonon modu elde edilir. Şimdi hesaplamalar sonucunda elde edilen bilgilerden yararlanarak her bir yarıiletken için titreşim özelliklerini ele alalım.

BeS yarıiletkeni için elde edilen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 6.5'te görülmektedir. Grafikte ilk göze çarpan akustik ve optik fonon modları arasında yer alan akustik – optik boşluk bölgesinin oldukça geniş olmasıdır. Be ve S

atomları arasındaki büyük kütle farkından kaynaklanan bu boşluk bölgesinin genişliği X noktasında 143 cm^{-1} , L noktasında 182 cm^{-1} ve W noktasında ise 194 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.

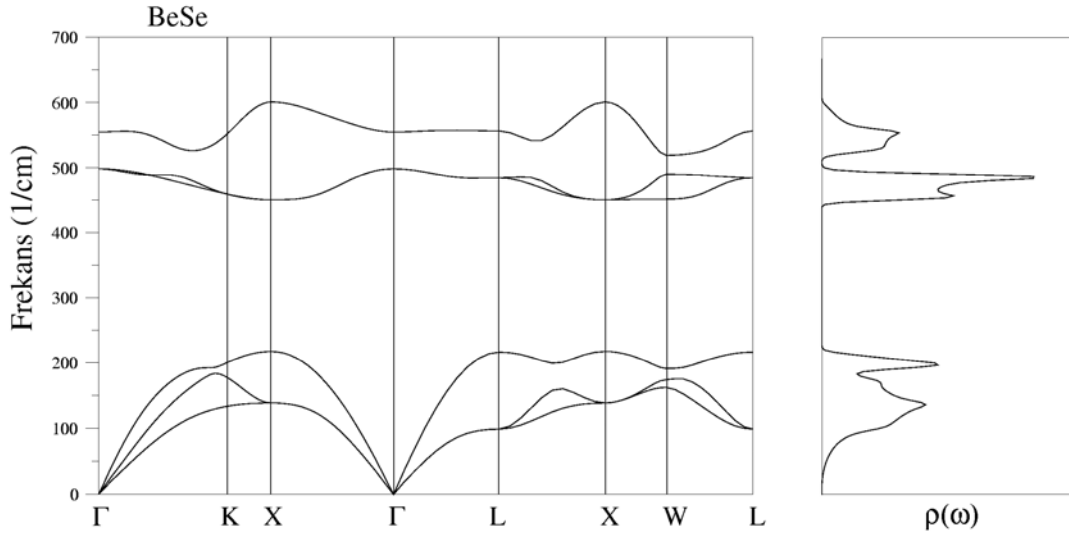


Şekil 6.5. BeS yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.

Şekil 6.5’de daha üstte yer alan diğer boşluk bölgesi ise TO ve LO fonon modları arasında yer almaktadır. Bu boşluk bölgesinin genişliği de Γ , X, L ve W noktaları için sırasıyla 85 , 145 , 62 ve 24 cm^{-1} olarak bulunmuştur. TO ve LO fonon modları arasında böyle bir boşluk olmasının nedeni ise Be-kalkojenleri oluşturan atomlar arasındaki kütle farkı ve Phillips iyonikliğidir.

Şekil 6.5’in sağ tarafında görülen durum yoğunluğu grafiği incelendiğinde en yüksek enerjili pikin yaklaşık 96 cm^{-1} genişliğinde ve en belirgin noktasının da 580 cm^{-1} değerinde olduğu bulunmuştur. Bu pik açıkça LO fonon modlarından kaynaklanmaktadır. Bu pikin hemen aşağısında yer alan ve TO fonon modlarının sebep olduğu ikili ve dar pikin uzun kolu 540 cm^{-1} ve kısa kolu ise 515 cm^{-1} civarında yer almaktadır. Durum yoğunluğu grafiğinde yer alan diğer bir pik ise 330 cm^{-1} değerindedir ve açıkça LA fonon modlarından kaynaklanmaktadır. Son olarak en düşük enerjili (yaklaşık 230 cm^{-1}) pik ise TA fonon modları tarafından oluşturulmaktadır. Ayrıca durum yoğunluğu grafiğinden Be ve S atomlarının kütle farkından kaynaklanan akustik-optik boşluk bölgesi de açıkça görülmektedir.

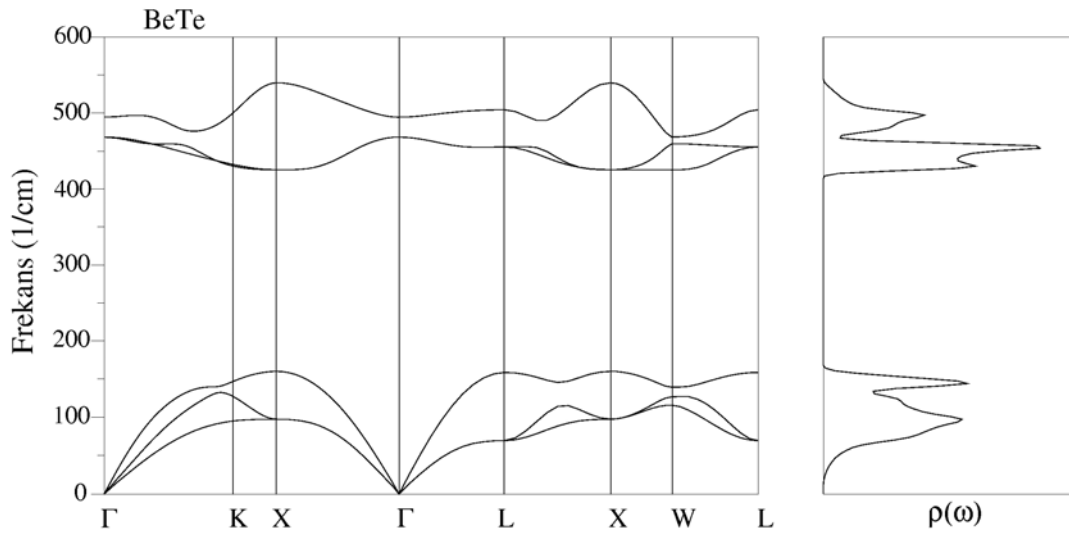
Şekil 6.6, BeSe yarıiletkeni için elde edilen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafiklerini göstermektedir. Bu grafiklerin her ikisinden de BeS yarıiletkenine benzer şekilde bir akustik – optik boşluk bölgesi açıkça görülebilir. Bu boşluk bölgesinin değeri BeS yarıiletkenine göre daha büyüktür, çünkü Be ve Se atomlarının kütle farkı Be ve S atomlarının kütle farkına göre daha fazladır. Bu boşluk bölgesinin genişliği X, L ve W simetri noktaları için sırasıyla 234, 268 ve 260 cm^{-1} olarak elde edilmiştir. Şekilde yer alan bir diğer boşluk bölgesi ise TO ve LO fonon modları arasında bulunmaktadır ve bu boşluk bölgesi de BeS için bulunanla karşılaştırıldığında daha büyüktür. Bu boşluk bölgesinin genişliği ise Γ , X, L ve W değerlerinde 57, 150, 72 ve 29 cm^{-1} olarak elde edilmiştir.



Şekil 6.6. BeSe yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.

Şekil 6.6'nın sağ tarafında yer alan durum yoğunluğu grafiği incelendiğinde yapı olarak BeS ile çok benzer bir şekil elde edilmiştir. BeSe için en yüksek enerjili (560 cm^{-1}) pik açıkça $\Gamma - L$ yönündeki LO fonon modlarından kaynaklanmaktadır. Enerji değeri olarak daha düşük ancak şiddet olarak daha büyük olan ikili pik ise tamamen TO fonon modlarının katkılarıyla oluşmaktadır. Bu piki oluşturan uzun kolun enerji değeri 490 cm^{-1} ve diğer kolun değeri ise 450 cm^{-1} civarındadır. Akustik fonon modlarından kaynaklanan diğer pikler ise akustik – optik boşluk bölgesinin aşağısında yer almaktadır. LA fonon modunun oluşturduğu pik 200 cm^{-1} enerji değerine sahipken, diğer pikin enerji değeri 140 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır ve TA fonon modlarından kaynaklanmaktadır.

Son olarak Şekil 6.7’de görülen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri ise BeTe yarıiletkenine aittir. Fonon dispersiyon grafiğine bakıldığında akustik – optik boşluk bölgesinin BeS ve BeSe yarıiletkenlerine göre daha geniş olduğu görülmektedir. Bunun nedeni daha önce de belirtildiği gibi katyon ve anyon atomları arasındaki büyük kütle farkıdır. Akustik – optik boşluk bölgesinin genişliği X, L ve W noktaları için sırasıyla 266, 297 ve 287 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır. BeTe yarıiletkeni için elde edilen fonon dispersiyon grafiğinde de diğer yarıiletkenlere benzer şekilde bir TO – LO boşluk bölgesi bulunmaktadır. Bu boşluk bölgesinin genişliği ise Γ , X, L ve W simetri noktalarında sırasıyla 27, 114, 49 ve 9 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.



Şekil 6.7. BeTe yarıiletkeni için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.

BeTe için Şekil 6.7’de görülen durum yoğunluğu grafiğine bakıldığında BeS ve BeSe yarıiletkenleri için hesaplanan grafiklere çok benzediği görülür. LO fonon modlarından kaynaklanan pikin değeri 500 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır ve diğer yarıiletkenlere benzer şekilde yine en yüksek enerji değerine sahip piktir. Onun hemen altında yer alan pik ise TO fonon modlarından kaynaklanmaktadır ve enerji değerleri 455 ve 425 cm^{-1} olarak elde edilen iki koldan oluşur. Akustik fonon modlarından kaynaklanan diğer piklerin şiddetleri ise sırasıyla 140 ve 97 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır. Bu piklerin ilki LA fonon modundan kaynaklanırken, ikincisinin oluşma nedeni ise TA fonon modlarıdır.

BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için Brillouin bölgesinin Γ , X ve L simetri noktalarında hesaplanan TA, LA, TO ve LO fonon modlarının enerji değerleri Tablo 6.3’de sunulmuştur. Bu tabloda verilen frekans değerleri karşılaştırıldığında, LA-TA farkının BeS’den BeTe’ye doğru azaldığı açık bir şekilde görülür. Bu azalma anyon kütleindeki artmadan kaynaklanmaktadır. Anyon kütlelerinin artması LA modunun frekansını düşürmekte bunun sonucu olarak LA-TA farkı azalmaktadır. Ayrıca bu tabloda, hesaplanan değerler ile daha önceki teorik ve deneysel sonuçların karşılaştırılması da yapılmıştır.

Tablo 6.3. BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için yüksek simetri noktalarında elde edilen fonon modları daha önceki teorik [45,46,57] ve deneysel [45,46] sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Bütün değerler cm^{-1} birimindedir.

Yarıiletken	Γ_{TO}	Γ_{LO}	X_{TA}	X_{LA}	X_{TO}	X_{LO}	L_{TA}	L_{LA}	L_{TO}	L_{LO}
BeS	563	647	228	364	507	652	161	362	544	606
BeSe	498	555	139	217	451	601	99	217	485	557
Teorik[46]	496	576	-	-	-	-	-	-	-	-
Teorik[57]	501	579	101	252	528	496	72	177	517	538
Deneysel[46]	501	579	-	-	-	-	-	-	-	-
BeTe	468	495	97	160	426	540	70	158	455	504
Teorik[45]	477	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Teorik[57]	461	502	80	140	477	468	67	74	473	481
Deneysel[45]	461	502	-	-	-	-	-	-	-	-

Berilyum kalkojenlerin hepsi için de akustik-optik boşluk bölgesinin yanı sıra bir de optik-optik boşluk bölgesi elde edilmiştir. Bu boşluk bölgesinin belirlenmesinde TO ve LO fonon modları arasında enerji farkları etkili olmaktadır. Be-kalkojenler için LO-TO farkının en belirgin gözlemlendiği yer X noktasıdır. Bu nedenle Tablo 6.4’de BeS, BeSe ve BeTe için kütle oranları, Phillips iyonikliği değerleri[Ref.111] ve X noktasındaki LO-TO modlarının farkı verilmiştir. Bu tablodan da görülebileceği gibi LO-TO fonon modları arasındaki boşluk bölgesi, anyon ve kation atomlarının kütle farkının yanı sıra bileşiklerin iyonikliği ile de ilişkilidir.

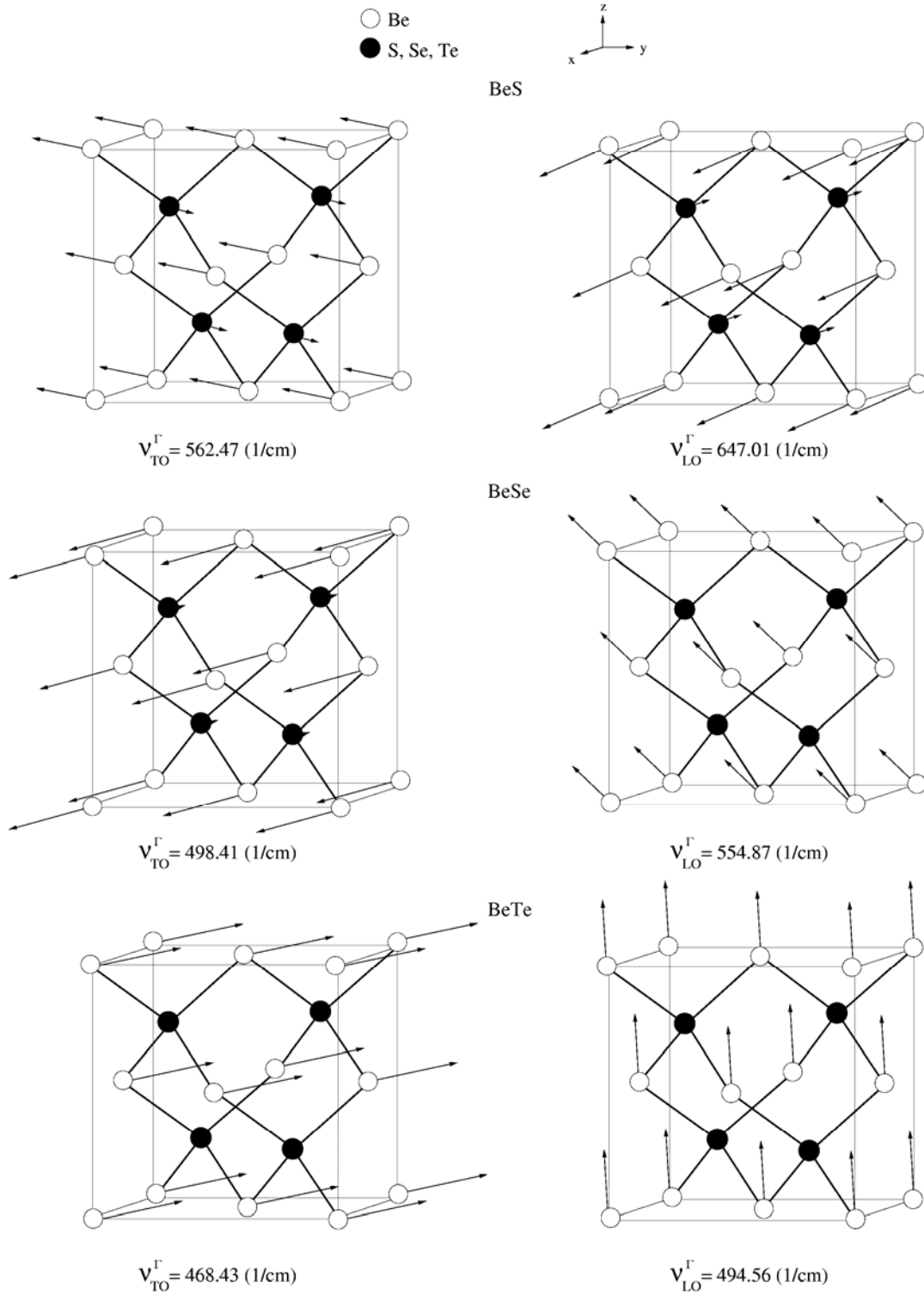
Tablo 6.4. BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için kütle oranları, Phillips iyonikliği ve X noktasında LO – TO fonon modlarının oranı verilmiştir.

Yarıiletken	Kütle Oranı	Phillips İyonikliği	$X_{LO} - X_{TO}$ (cm^{-1})	X_{TO} / X_{LO}
BeS	3.56	0.29	145	0.78
BeSe	8.76	0.26	150	0.75
BeTe	14.16	0.17	114	0.79

Berilyum kalkojenler için Be atomunun kütlesi, S, Se ve Te atomlarına göre çok küçük olduğundan LO fonon modunun enerjisi bütün simetri yönleri boyunca TO fonon modunun enerjisinin üzerinde yer almaktadır.

6.4.1. Berilyum kalkojenlerin atomik titreşim karakterleri

BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin titreşim özelliklerinin daha geniş bir şekilde ele alınması, onların atomik titreşim şekillerini de incelemekle mümkün olur. Bu yarıiletkenlerin her biri için Γ noktasında biri TO ve diğeri LO olmak üzere iki fonon modu mevcuttur. Bu fonon modlarının atomik titreşim karakterleri Şekil 6.8’de sunulmuştur. Bu şekilden açıkça anyon ve katyon atomları arasındaki kütle farkının atomik titreşimlerin karakterinin ortaya çıkmasında önemli bir rol oynadığı görülebilir. Optik fonon modları için küçük kütleli atomun (burada Be atomudur) daha fazla titreşeceği beklenen bir sonuçtur. Ancak atomlar arasındaki kütle farkı çok büyük değilse bileşiği oluşturan diğer atom da modun oluşmasına katkı yapar. BeS için elde edilen TO ve LO fonon modları incelendiğinde, S atomlarının kütlesinin Be atomlarına göre büyük olmasına rağmen titreştikleri ve modların oluşmasına katkı yaptıkları görülmektedir. Fakat Be atomları küçük kütlelerinden dolayı S atomlarına göre çok daha fazla titreşmektedirler. Optik fonon modları için iki atomun beklenen bir şekilde birbirlerine zıt titreştikleri de elde edilmiştir. BeSe yarıiletkeni için hesaplanan TO ve LO fonon modları incelendiğinde Be atomlarının bu modların oluşmasına yaptığı katkının, BeS’de yaptıkları katkıya göre daha büyük olduğu ortaya çıkmıştır. TO fonon modu için elde edilen titreşim şeklinde Se atomlarının çok az da olsa bir titreşim yaptıkları görülürken, enerjisi daha büyük olan LO fonon modu sadece Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.

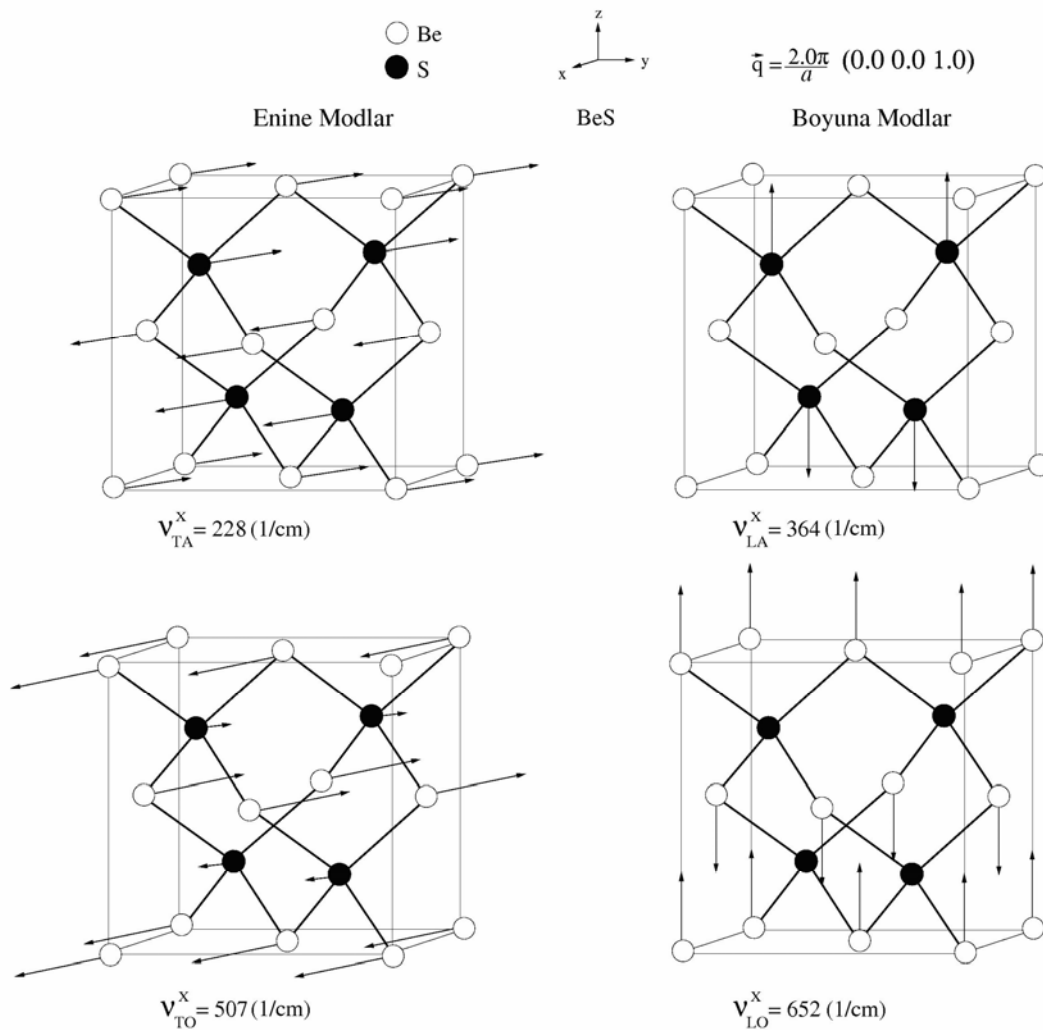


Şekil 6.8. BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için Γ noktasında hesaplanan TO ve LO fonon modlarının atomik titreşim karakterleri.

BeTe yarıiletkeni incelendiğinde ise hem TO hem de LO fonon modlarının her ikisinin de yalnızca Be atomlarının titreşimleriyle oluştuğu görülmektedir. Ayrıca Be atomlarının titreşimlerinin büyüklükleri de BeS ve BeSe için elde edilenlerden

daha fazladır. Bunun nedeni Be ve Te atomları arasındaki kütle farkının çok büyük olmasıdır. Aynı zamanda TO ve LO fonon modlarının enerji değerleri de BeS'den BeTe'ye doğru giderek azalmaktadır.

Diğer simetri noktalarında ise TA ve TO fonon modları çift katlı dejenere oldukları için TA, LA, TO ve LO olmak üzere her simetri noktası için dört fonon modu hesaplanmıştır. Şimdi her bir yarıiletken için X ve L noktalarında elde edilen atomik titreşimleri tek tek ele alalım.

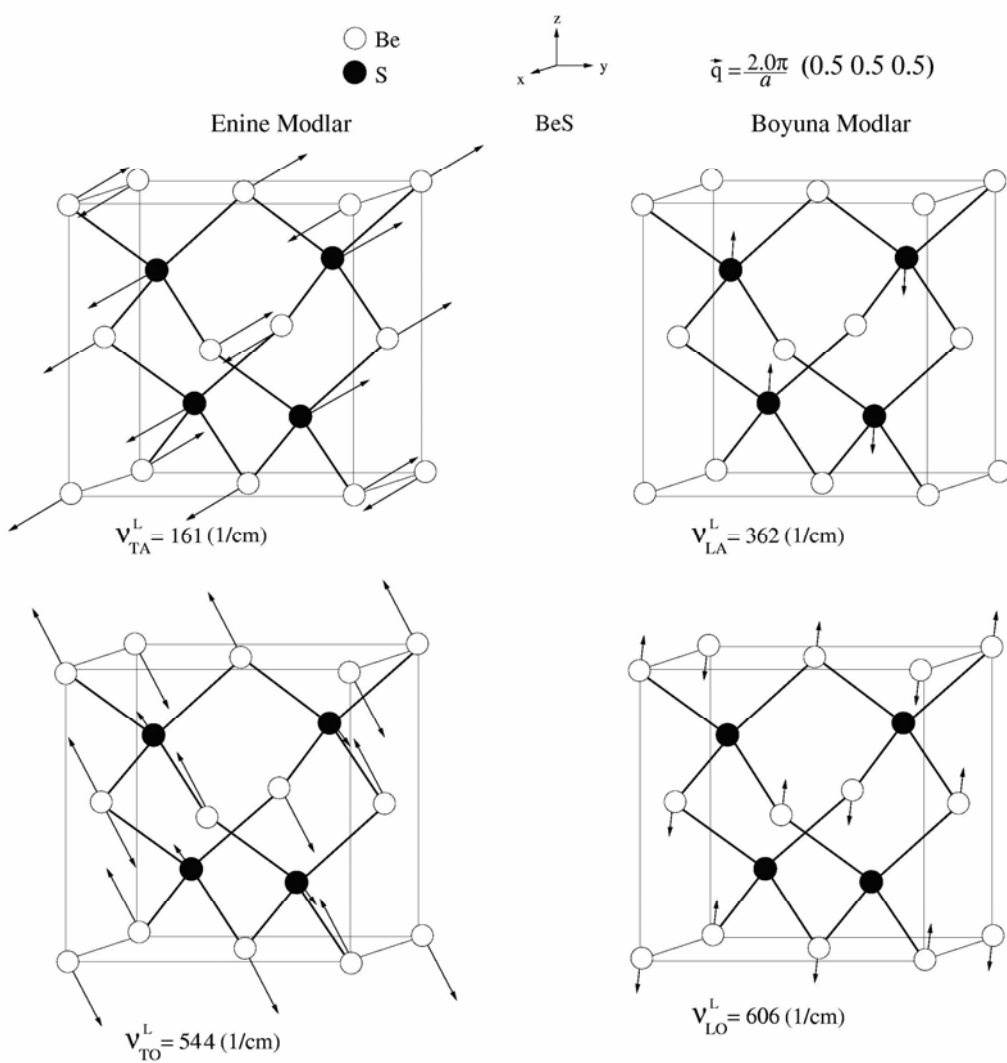


Şekil 6.9. BeS yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.

BeS için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri Şekil 6.9'da görülmektedir. Enine fonon modlarının titreşim karakterlerinin

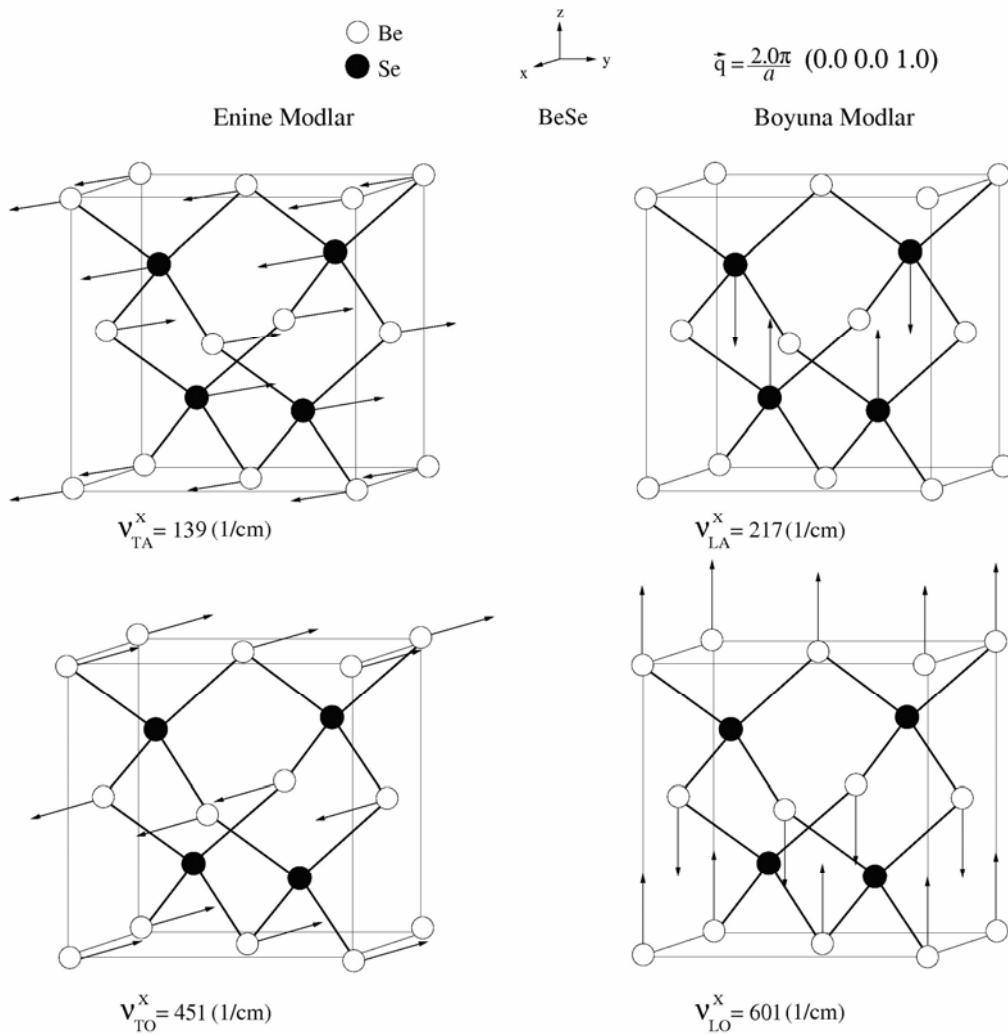
belirlenmesinde hem Be hem de S atomlarının titreşimlerinin etkili olduğu görülmektedir. LA fonon modu için sadece büyük kütleli S atomları hareket ederken, LO fonon modunun oluşumuna daha hafif olan Be atomları neden olmaktadır.

Şekil 6.10 BeS için L simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimlerini göstermektedir. Bu simetri noktasında da X simetri noktasında olduğu gibi TA ve TO fonon modlarının oluşumunda her iki atomun da katkısının olduğu görülmektedir. Boyuna modların belirlenmesinde ise yine benzer şekilde LA için S ve LO için ise Be atomlarının etkili oldukları göze çarpar.



Şekil 6.10. BeS yarıiletkeni için L simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.

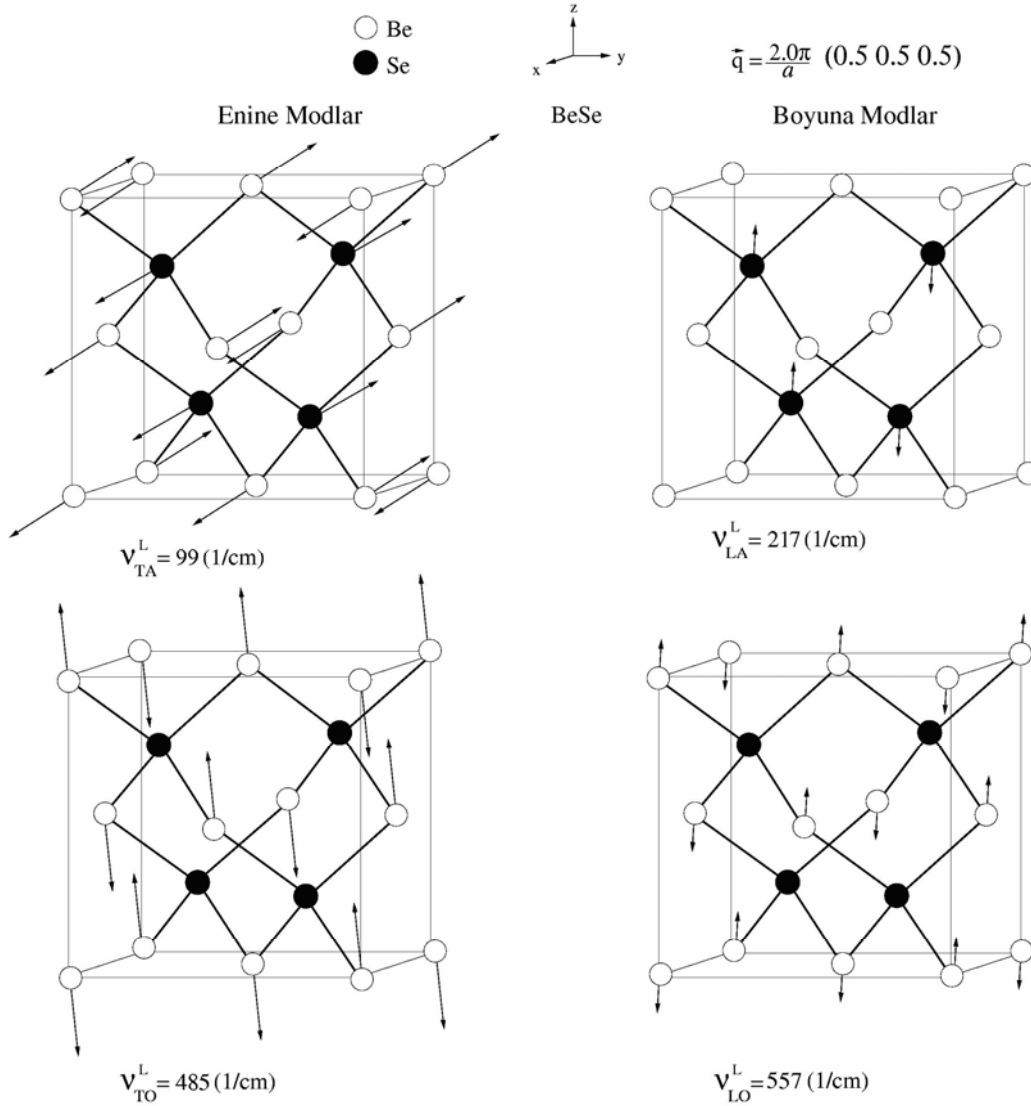
BeSe yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarına ait atomik titreşimler Şekil 6.11’de sunulmuştur. TA fonon modunun oluşumunda Be ve Se atomları ortak bir katkı yapmaktadırlar. LA için ise sadece daha büyük kütleli Se atomu etkili olmaktadır. Optik modların titreşim karakterlerini ise Se atomlarına göre daha hafif olan Be atomları belirlemektedir. X simetri noktasındaki fonon modları incelendiğinde aynı atomların birbirine zıt titreşebildiği görülmektedir. Bunun nedeni bu atomlar arasında 180° faz farkı olmasıdır.



Şekil 6.11. BeSe yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.

BeSe için bir diğer simetri noktası olan L’de hesaplanan atomik titreşimler Şekil 6.12’de görülmektedir. Bu simetri noktasında da TA fonon modunun oluşumuna her iki atomun katkı yaptığı bulunmuştur. LA fonon modu için ise X simetri noktasına

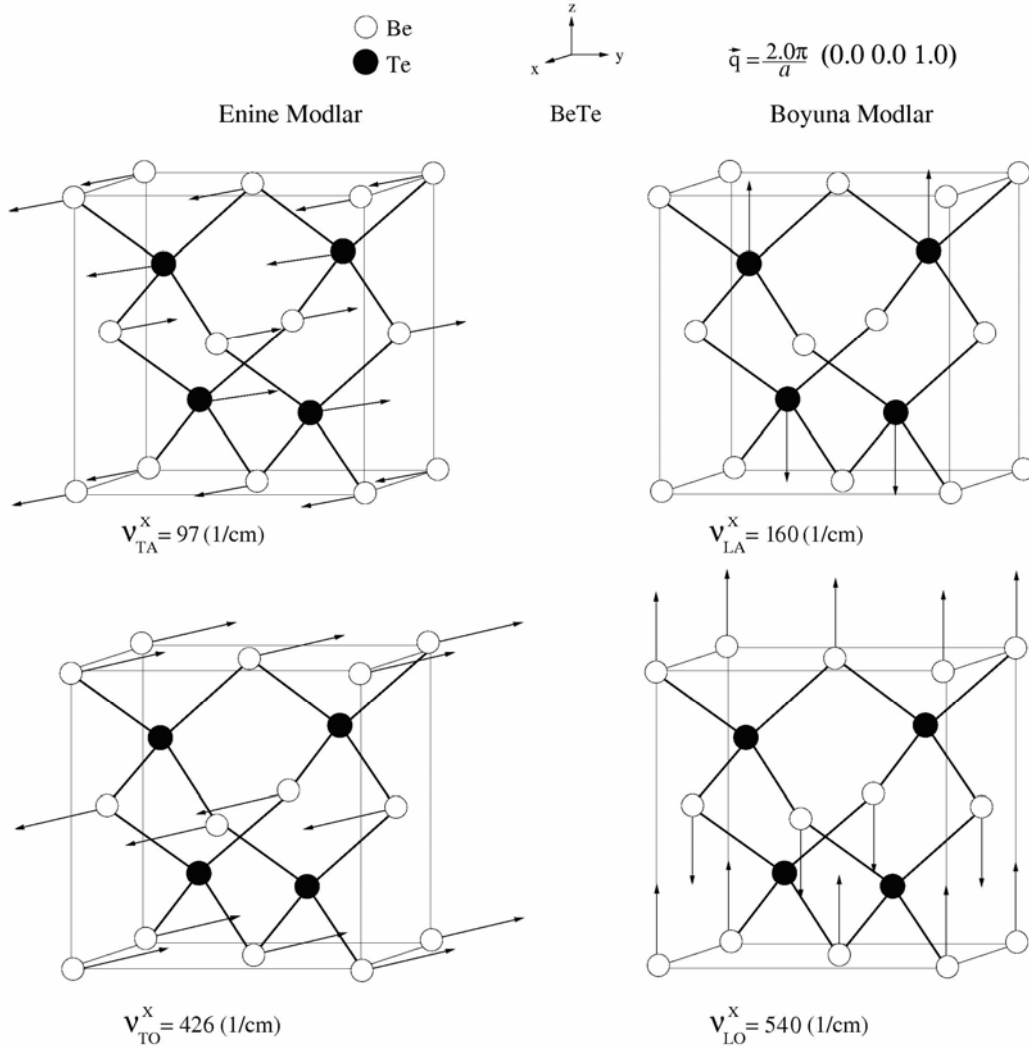
benzer şekilde sadece Se atomları titreşmektedir. TO ve LO fonon modları incelendiğinde yine X simetri noktasında elde edildiği gibi sadece Be atomlarının titreşimleri etkili olmaktadır.



Şekil 6.12. BeSe yarıiletkeni için L simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.

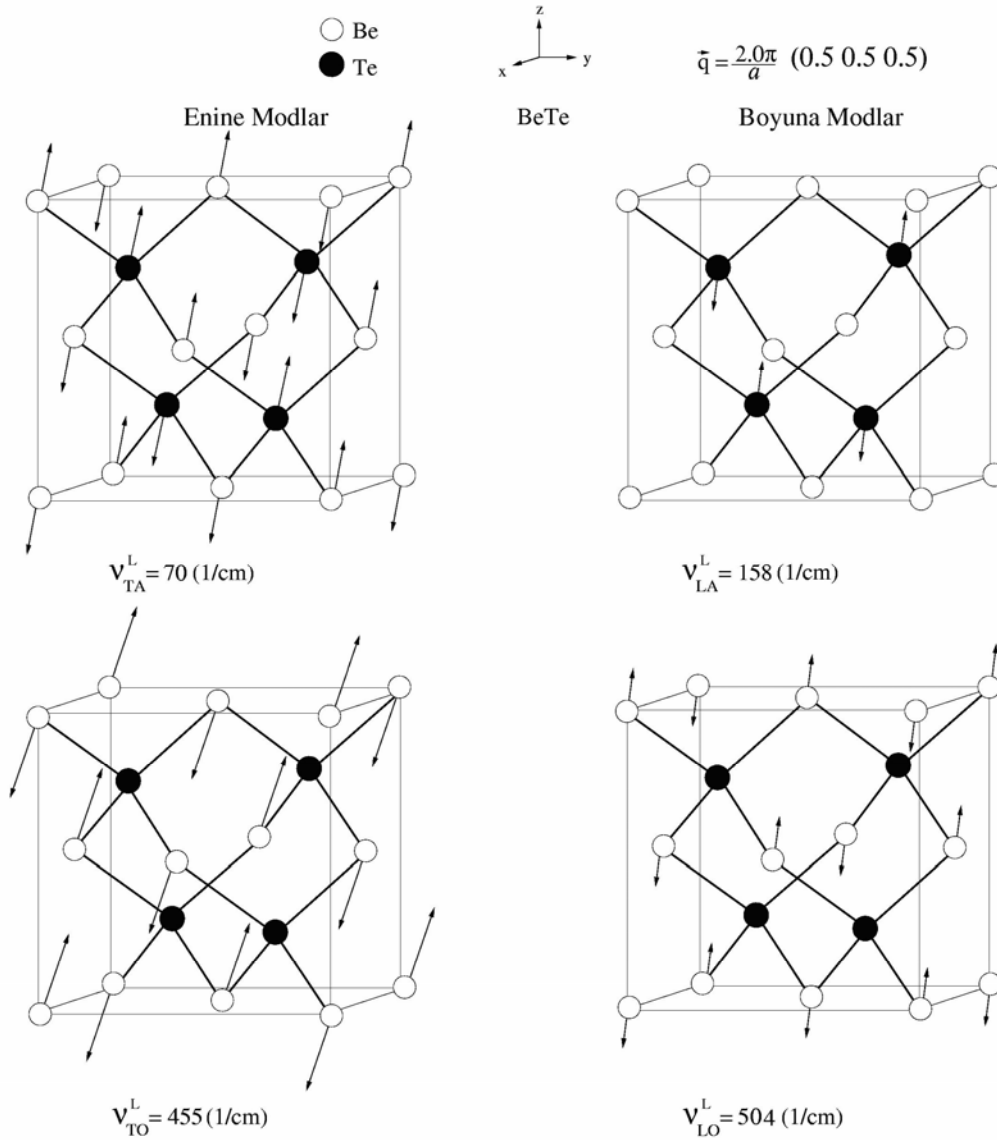
BeTe yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarının titreşim karakterleri Şekil 6.13'te sunulmuştur. Bu simetri noktasındaki fonon modlarının titreşim şekilleri incelendiğinde BeSe yarıiletkeni için aynı simetri noktasında elde edilen titreşim şekilleriyle oldukça benzer oldukları görülebilir. BeTe için X simetri noktasında hesaplanan TA fonon modu için hem Be hem de Te atomlarının katkı yaptıkları görülmektedir. Ancak Be atomlarının bu modun oluşumuna yaptıkları

katkı BeS'den BeTe'ye doğru gittikçe azalmaktadır. Bunun nedeni BeS'den BeTe'ye doğru anyon-kasyon kütle farkının artmasıdır. LA fonon modunun titreşim karakterinin belirlenmesinde yine büyük kütlesi nedeniyle Te atomları etkili olmaktadır. Optik fonon modlarının titreşim karakterlerini ise Be atomlarının titreşimleri belirlemektedir.



Şekil 6.13. BeTe yarıiletkeni için X simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.

Şekil 6.14, BeTe için L simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşim şekillerini göstermektedir. Bu simetri noktasında da TA fonon modu için her iki atomun da titreşimleri etkili olurken, LA fonon modunun titreşim karakterinin belirlenmesinde yalnızca Te atomları rol oynamaktadır. Optik fonon modları ise küçük kütleli Be atomlarının titreşimlerinden oluşmaktadır.



Şekil 6.14. BeTe yarıiletkeni için L simetri noktasında elde edilen fonon modlarının atomik titreşimleri.

III-N tipi yarı iletkenlere benzer şekilde Be-kalkojenler de hep birlikte ele alındığında Anyon:Kasyon kütle oranının artmasıyla birlikte akustik fonon modlarının titreşim karakterlerinin belirlenmesinde büyük kütleli atomlar etkili olurken, optik modların belirlenmesinde ise kütleleri küçük olan atomlar rol oynamaktadır.

BÖLÜM 7. III–N TİPİ YARIİLETKENLERİN YÜZEY ÖZELLİKLERİ

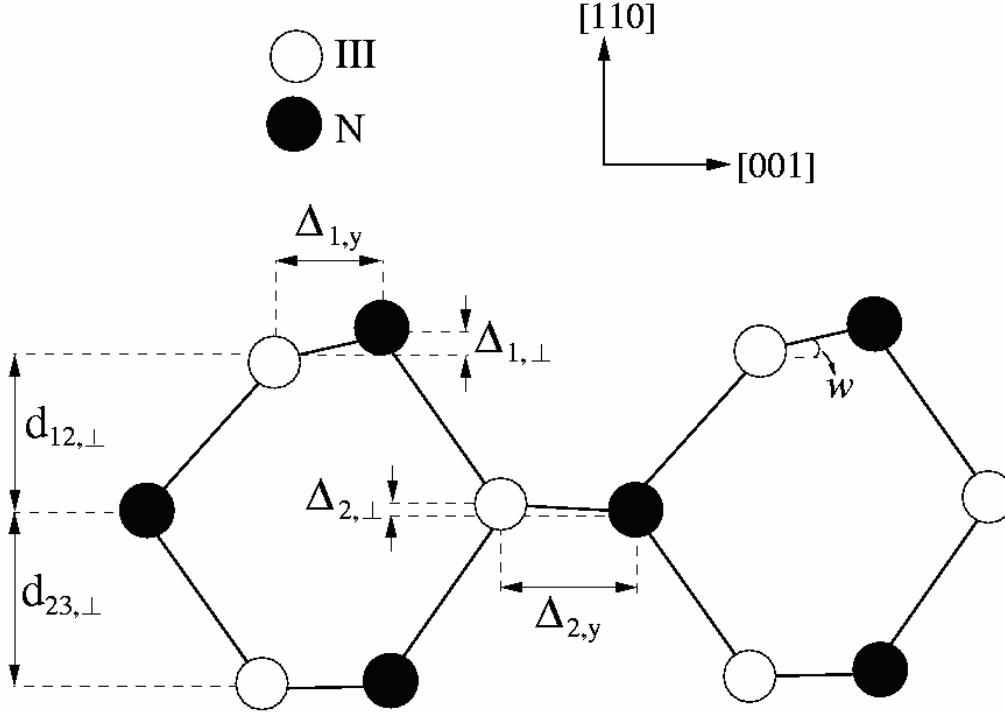
7.1. Giriş

III–N tipi yarıiletkenler Bölüm 5’de anlatılan fiziksel özellikleri nedeniyle teknolojide geniş bir şekilde kullanılmaktadır. Son yıllarda bilgisayar teknolojisinin gelişmesi ve bununla bağlantılı olarak yüzey fiziği çalışmalarının hız kazanması ile BN, AlN, GaN ve InN yüzeylerinin araştırılması oldukça önem kazanmıştır. Bu kısımda yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak III-N tipi yarıiletkenlerin (110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri sunulmaktadır daha önceki çalışmalarla karşılaştırılacaktır.

7.2. III-N Tipi Yarıiletkenlerin (110) Yüzeylerinin Yapısal Özellikleri

III-N(110) yüzeyleri için elde edilen atomik denge geometrisi, çinko sülfür yapıda kristalleşen tüm materyallerin (110) yüzeyleriyle büyük bir benzerlik göstermektedir. Bu yapıda en üst seviyede bulunan grup-III yüzey atomları hacim içine doğru hareket ederken, N atomları ise yüzeyden dışarı doğru hareket ederek dengede kalmaktadırlar. Atomik denge geometrisinin bu şekilde olmasının sebebi katyon atomlarının kendine komşu olan üç grup-V atomuyla sp^2 bağlanmasıyla kovalent bağ yapması ve yüzey anyon atomlarının da komşusu olan grup-III atomlarıyla p-bağlanması yapmayı tercih etmesidir[85]. Bu şekilde oluşan atomik denge geometrisi yüzey zincirinin ω açısı kadar dönmesine neden olur. Şekil 7.1’de III-N (110) yüzeyleri için elde edilen atomik denge geometrisinin yandan görünümü sunulmuştur. BN, AlN, GaN ve InN materyallerinin (110) yüzeyleri için şekilde gösterilen denge parametrelerinin hesaplanan değerleri Tablo 7.1’de görülmektedir. Bu tabloda ayrıca daha önce yapılan çalışmalarla da karşılaştırmalar yer almaktadır. Hesaplamalar sonucu elde edilen veriler daha önce yapılan çalışmalarla[63,65,67,69]

iyi bir uyum içindedir. Yüzey için atomik denge geometrisi hesaplamalarında bağ döndürme açısı ω , karakteristik bir özellik olarak ortaya çıkar.



Şekil 7.1. III-N(110) yüzeyleri için elde edilen atomik denge geometrisinin yandan görünümü. Şekilde gösterilen yüzey denge parametreleri Tablo 7.1’de sunulmuştur.

Tablo 7.1 incelenirse, AlN ve InN için hesaplanan açı değerlerinin BN ve GaN için hesaplanandan daha küçük olduğu görülmektedir. Bunun yanı sıra III-N yarıiletkenleri için ω açısı ortalama $15 \pm 4^\circ$ olarak hesaplanırken, diğer III-V bileşikleri için bu değer $29 \pm 3^\circ$ bulunmuştur[112]. III-N(110) yüzeyleri için hesaplanan ω açısının bu şekilde küçük olmasının nedeni farklı gruplar tarafından bileşiklerin güçlü iyonik karakterleri ile açıklanmaya çalışılmış[66,113,114] fakat yapılan başka hesaplamalarda[115] bunun genel bir açıklama olamayacağı ortaya çıkmıştır. Tablo 7.1’den ve daha önceki çalışmalardan görülebileceği gibi ω açısı, BN göz önüne alınmadan diğer III-N materyalleri için, $\Delta_{1\perp}$ ile ortak şekilde değişmektedir. Bunun sebepleri ise sistemin iyonikliği, katyon ve anyon atomları arasındaki yük geçişi ve bağ uzunluğunu belirleyen kimyasal etkilerdir[68,69]. Bu etkiler aslında sadece bu açıyı belirlemekle kalmamakta, aynı zamanda tüm yüzey atomik yapının şekillenmesine katkıda bulunmaktadır. BN, AlN, GaN ve InN

yarıiletkenlerinin (110) yüzeyleri için yüzey atomları arasındaki bağ uzunlukları ise sırasıyla 1.440, 1.782, 1.860 ve 2.085 Å olarak elde edilmiştir. Daha önceki çalışmalarda $\Delta_{1\perp}$ parametresinin, bağ uzunluğu ile de lineer bir şekilde değiştiği bulunmuştur[68,69].

Tablo 7.1. BN(110), AlN(110), GaN(110) ve InN(110) yüzeyleri için hesaplanan yüzey atomik denge geometrisi parametrelerinin daha önceki teorik hesaplamalarla karşılaştırılması. Bütün uzunluklar Å birimindedir. $\delta d/d$ ifadesi, hacim bağ uzunluğuyla karşılaştırıldığında, yüzey bağ uzunluğundaki kısalmayı göstermektedir.

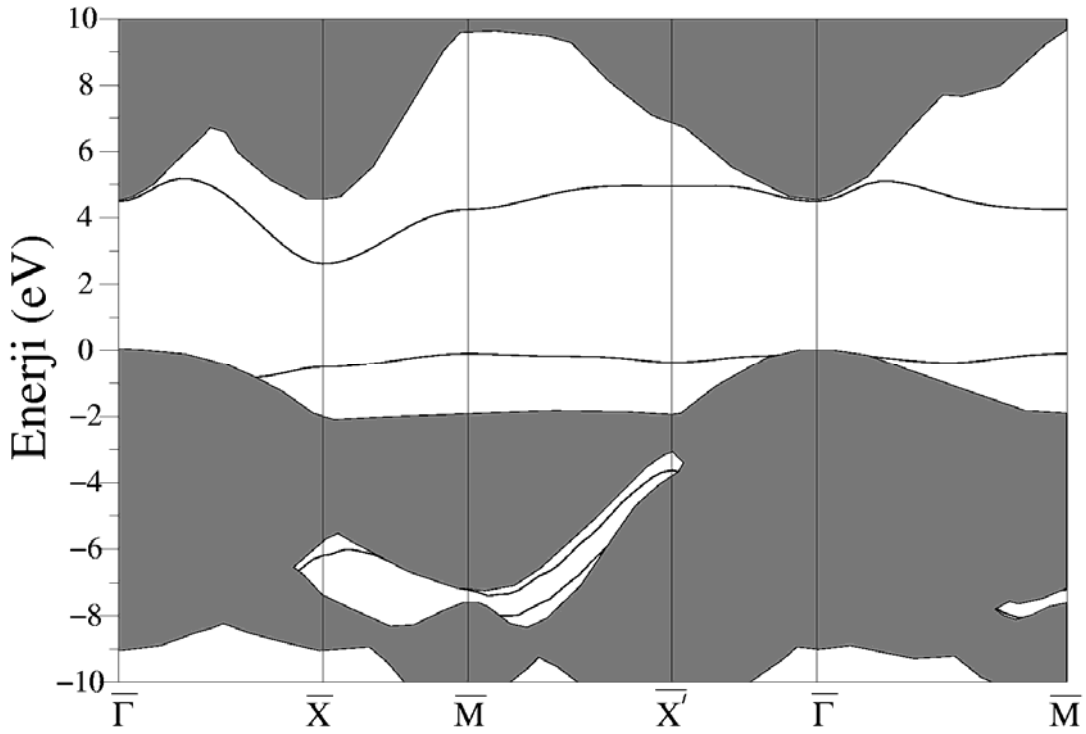
	$\Delta_{1\perp}$	$\Delta_{2\perp}$	$\Delta_{1,y}$	$\Delta_{2,y}$	$d_{12,\perp}$	$d_{23,\perp}$	ω	$\delta d/d$ (%)
BN	0.213	0.029	0.660	0.870	1.124	1.300	17.9 ⁰	7.1
Teori[63]	0.276	-	-	-	-	-	21.7 ⁰	-
Teori[65]	0.187	-	-	-	0.837	-	15.7 ⁰	-
Teori[67]	0.215	0.043	-	-	0.994	-	18.1 ⁰	7.17
Teori[69]	0.203	0.027	-	-	1.149	-	16.6 ⁰	-
AlN	0.185	0.040	0.870	1.080	1.490	1.590	12.0 ⁰	5.7
Teori[63]	0.303	-	-	-	0.891	-	20.8 ⁰	-
Teori[65]	0.131	-	-	-	0.891	-	11.6 ⁰	-
Teori[67]	0.188	0.040	-	-	1.301	-	12.3 ⁰	6.06
Teori[69]	0.182	0.040	-	-	1.485	-	11.9 ⁰	-
GaN	0.270	0.040	0.940	1.100	1.511	1.610	16.0 ⁰	3.6
Teori[63]	0.315	-	-	-	-	-	19.4 ⁰	-
Teori[65]	0.320	-	-	-	1.103	-	14.3 ⁰	-
Teori[67]	0.247	0.039	-	-	1.334	-	15.3 ⁰	5.53
Teori[69]	0.281	0.043	-	-	1.454	-	17.5 ⁰	-
InN	0.216	0.020	1.062	1.240	1.563	1.794	11.5 ⁰	3.0
Teori[65]	0.183	-	0.801	-	-	-	13.1 ⁰	-
Teori[67]	0.250	0.002	-	-	1.550	-	13.0 ⁰	4.34
Teori[69]	0.177	0.040	0.780	-	1.466	-	10.6 ⁰	-

7.3. III-N Tipi Yarıiletkenlerin (110) Yüzeylerinin Elektronik Özellikleri

III-N(110) yüzeylerinin elektronik özellikleri bu kısımda ele alınacaktır. Bu yarıiletkenlerin yüzey elektronik özellikleri daha önce birçok grup tarafından teorik olarak çalışılmıştır[65,67-70] Bu çalışmalardan III-N yarıiletkenleri için elde edilen yüzey elektronik bant yapılarının genel olarak birbirine oldukça benzedikleri bulunmuştur.

7.3.1. BN(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

BN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey elektronik bant yapısı grafiği Şekil 7.2'de görülmektedir. Şekilde taralı bölgeler hacim bant yapısını göstermektedir. Bu taralı kısımlar arasında kalan boşluk bölgeleri ise hiç bir hacim elektronik seviyesinin yer alamayacağı yasak enerji aralıklarıdır. BN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiğinde (-10) – (+10) eV enerji aralığında toplam dört yüzey elektronik enerji seviyesi bulunmaktadır. Bu enerji seviyelerinden hacim bölgesindeki boşlukta yer alan ikisinden daha düşük enerjiye sahip olanı yüzey katyon atomlarından kaynaklanırken daha üstteki enerji bandının oluşumuna anyon atomları neden olmaktadır. Bu iki enerji bandı da $\bar{M} - \bar{X}'$ simetri yönü boyunca oldukça büyük bir dispersiyon göstermektedir.



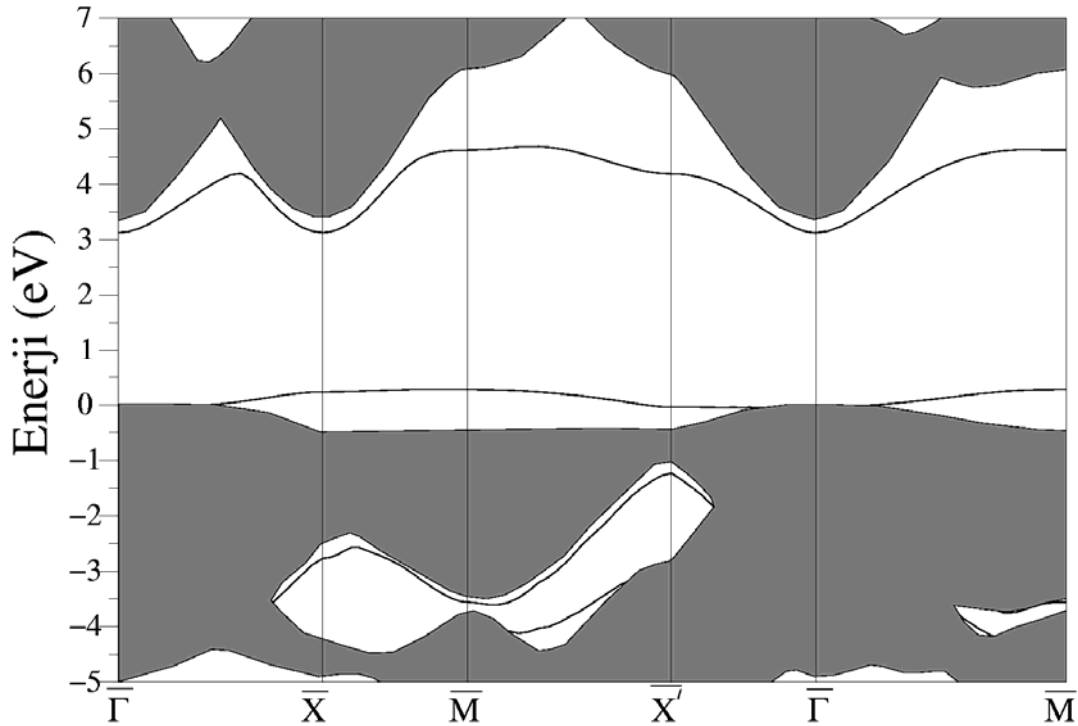
Şekil 7.2. BN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölgeler hacim bant yapısını göstermektedir.

Hacim atomlarının oluşturduğu değerlik bandı ile iletkenlik bandı arasındaki boşluk bölgesinde de iki yüzey elektronik enerji bandı yer almaktadır. Değerlik bandına yakın olan en yüksek dolu yüzey elektronik enerji bandı yüzey anyon atomlarından kaynaklanırken, boş olan ve daha yüksek enerjiye sahip enerji seviyesi ise yüzey

katyon atomları tarafından oluşturulmaktadır. Boş olan yüzey enerji bandı simetri yönleri boyunca bir dispersiyon gösterirken, en yüksek dolu enerji seviyesi ise tüm simetri yönleri boyunca neredeyse hiç değişmeden yer almaktadır. BN(110) yüzeyi için bu iki enerji seviyesi arasındaki enerji aralığı ortalama olarak tüm simetri yönleri boyunca 4.2 eV olarak hesaplanmıştır. Bu yüzey için hesaplanan elektronik bant yapısı grafiği daha önceki teorik hesaplamalardan elde edilen sonuçlarla da uyumludur[65,67].

7.3.2. AlN(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

Şekil 7.3 AlN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiğini göstermektedir. Taralı kısımlar hacim elektronik enerji seviyeleri ile oluşturulmuştur. Bu şekilde de BN(110) için elde edilen grafiğe benzer biçimde dört tane yüzey elektronik enerji seviyesi bulunmaktadır.



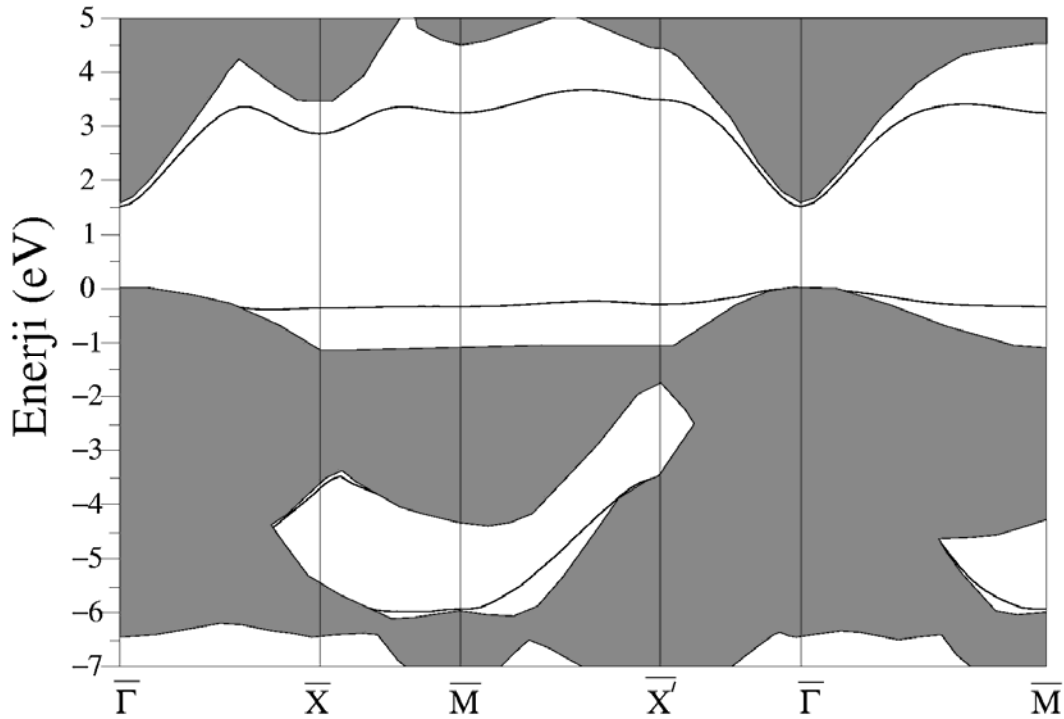
Şekil 7.3. AlN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölgeler hacim bant yapısını göstermektedir.

Bu seviyelerin ilki yüzey katyon atomlarının oluşturduğu bir enerji seviyesidir ve -4 eV civarında başlayıp $\bar{M} - \bar{X}'$ boyunca artmaktadır. Bunun hemen üzerindeki enerji

seviyesi ise $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ boyunca dispersiyon gösteren ve yüzey anyon atomlarından kaynaklanan bir enerji seviyesidir. Daha üstteki en yüksek dolu yüzey enerji bandı BN(110) yüzeyine benzer şekilde yine $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ boyunca hacim enerji seviyelerinin üzerinde, neredeyse hiç dispersiyon göstermeden yer almaktadır. 3 eV enerji seviyesinin üzerinde ve tüm simetri yönleri boyunca oldukça büyük bir dispersiyona sahip olan yüzey iletkenlik enerji seviyesi ise yüzey katyon atomlarından kaynaklanmaktadır. AlN(110) yüzeyi için en yüksek dolu enerji bandı ile yüzey iletkenlik bandı arasındaki ortalama enerji farkı 3.8 eV olarak elde edilmiştir. Bu yüzey için hesaplanan elektronik bant yapısı grafiği daha önceki teorik hesaplamalarla da uyum içindedir[65,67,69]

7.3.3. GaN(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

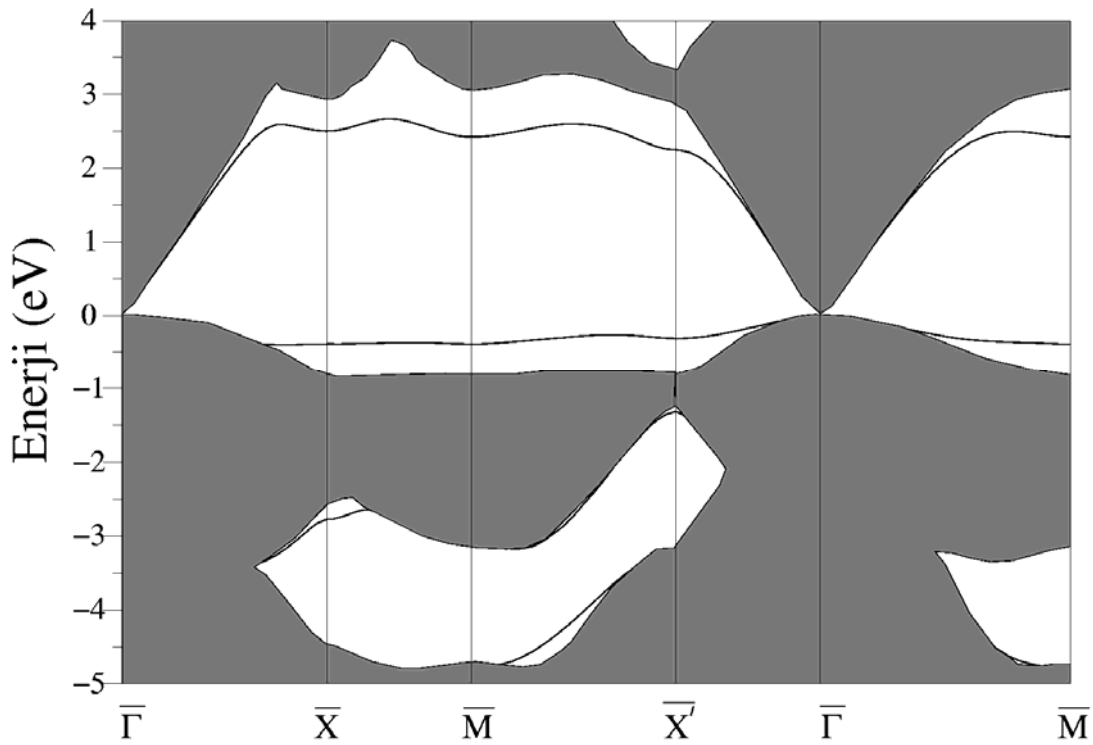
GaN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği Şekil 7.4'de görülmektedir.



Şekil 7.4. GaN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölgeler hacim bant yapısını göstermektedir.

Taralı kısımlar hacim elektronik enerji seviyeleridir. Bu yüzey için hacim enerji bölgesi arasında kalan boşluk bölgesinde yine iki enerji seviyesi yer almaktadır. Bunlardan düşük enerjiye sahip olan ve -6 eV civarından başlayıp artarak ilerleyen enerji seviyesi yüzey katyon atomlarından kaynaklanmaktadır. Bunun hemen üzerinde anyon atomları tarafından oluşturulan enerji seviyesi ise daha önce anlatılan yüzeylerden farklı olarak, çok az bir şekilde hacim enerji seviyelerinden ayrılmaktadır. Dolu yüzey enerji bandı GaN(110) yüzeyi için de anyon atomlarından kaynaklanmaktadır fakat, BN(110) ve AlN(110) yüzeyleriyle karşılaştırıldığında simetri yönleri boyunca çok daha az dispersiyon göstermektedir. En yüksek enerjili boş olan yüzey iletkenlik bandı ise yine oldukça büyük bir dispersiyon göstermektedir. Bu yüzey için hesaplanan en yüksek dolu ve en düşük boş yüzey enerji bantları arasındaki enerji farkı ise ortalama 3.5 eV olarak bulunmuştur. Daha önceki teorik hesaplamalarla, GaN(110) yüzeyi için hesaplanan elektronik bant yapısı grafiğinin oldukça uyumlu olduğu görülmektedir[65,67,68].

7.3.4. InN(110) yüzeyinin elektronik özellikleri



Şekil 7.5. InN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölgeler hacim bant yapısını göstermektedir.

Son olarak InN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği Şekil 7.5’de görülmektedir. Bu grafik özellikle GaN(110) yüzeyi için elde edilen grafiğe oldukça benzemektedir. Şekil 7.5’de katyon atomlarından kaynaklanan en düşük enerjili yüzey enerji seviyesi sadece $\bar{M} - \bar{X}'$ boyunca ortaya çıkmaktadır. Hemen üstte yer alan ve anyon atomlarının oluşturduğu enerji bandı ise GaN(110) yüzeyine benzer şekilde hacim enerji seviyelerinden çok az ayrılmaktadır. Yine anyon atomlarından kaynaklanan bir başka enerji seviyesi ise $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ boyunca düz bir çizgi şeklinde devam eden en yüksek enerjili yüzey değerlik bandıdır. Yüzeyde bulunan katyon atomlarının oluşturduğu yüzey iletkenlik bandı ise daha önce anlatılan üç yüzeye göre hacim enerji seviyeleriyle daha iç içedir fakat yine de $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ simetri yönleri boyunca oldukça belirgindir. En yüksek dolu yüzey enerji bandı ile en düşük enerjili boş iletkenlik bandı arasındaki ortalama enerji farkı ise InN(110) yüzeyi için yaklaşık 2.75 eV’dur. InN(110) yüzeyi için elde edilen elektronik bant yapısı grafiği daha önceki teorik hesaplamalarla da uyum içindedir[65,67,69]

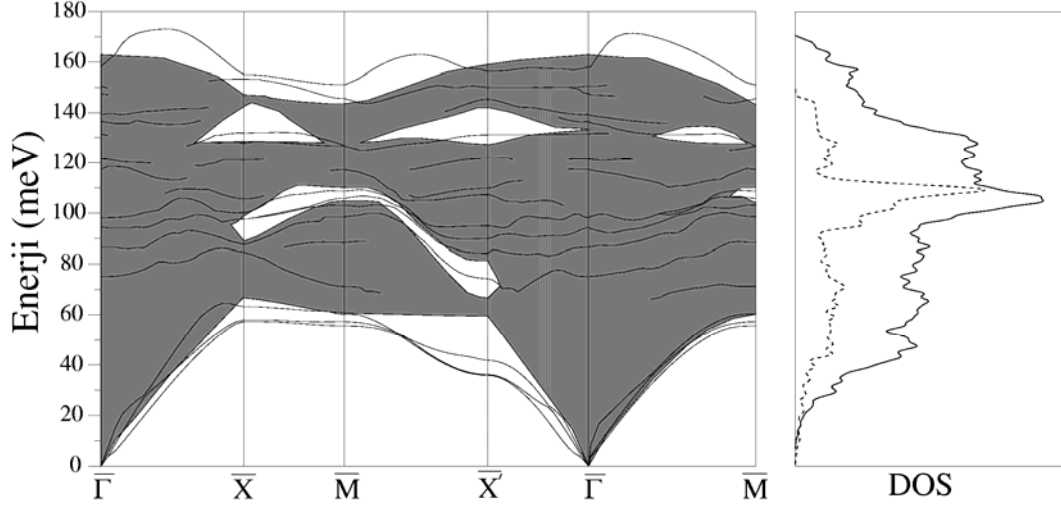
7.4. III-N Tipi Yarıiletkenlerin (110) Yüzeylerinin Titreşim Özellikleri

Bu kısımda BN(110), AlN(110), GaN(110) ve InN(110) yüzeylerinin titreşim özellikleri incelenerek elde edilen sonuçlar daha önceki verilerle karşılaştırılacaktır.

7.4.1. BN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

BN(110) için hesaplanan yüzey fonon dispersiyon grafiği Şekil 7.6’da görülmektedir. Bu grafikte yüzey fonon dispersiyon eğrileri kalın çizgilerle, BN yarıiletkeninin hacim fonon enerjileri ise taralı bölge ile gösterilmiştir. BN için katyon ve anyon atomları arasındaki kütle farkı çok az olduğu için akustik ve optik fonon modları arasında bir enerji aralığı bulunmamaktadır. Şekilde de görüldüğü gibi en yüksek enerjili fonon modu(Fuchs-Kliewer fonon modu) $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ yönü dışında tüm simetri yönleri boyunca hacim bölgesinin üzerinde yer almaktadır. Ayrıca bu fonon modu katkısız III-V(110) yüzeylerinin aksine $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ simetri yönlerinde büyük

bir dispersiyon gösterirken $\bar{X}-\bar{M}$ ve $\bar{\Gamma}-\bar{X}'$ boyunca neredeyse düz bir çizgi şeklinde uzanmaktadır.



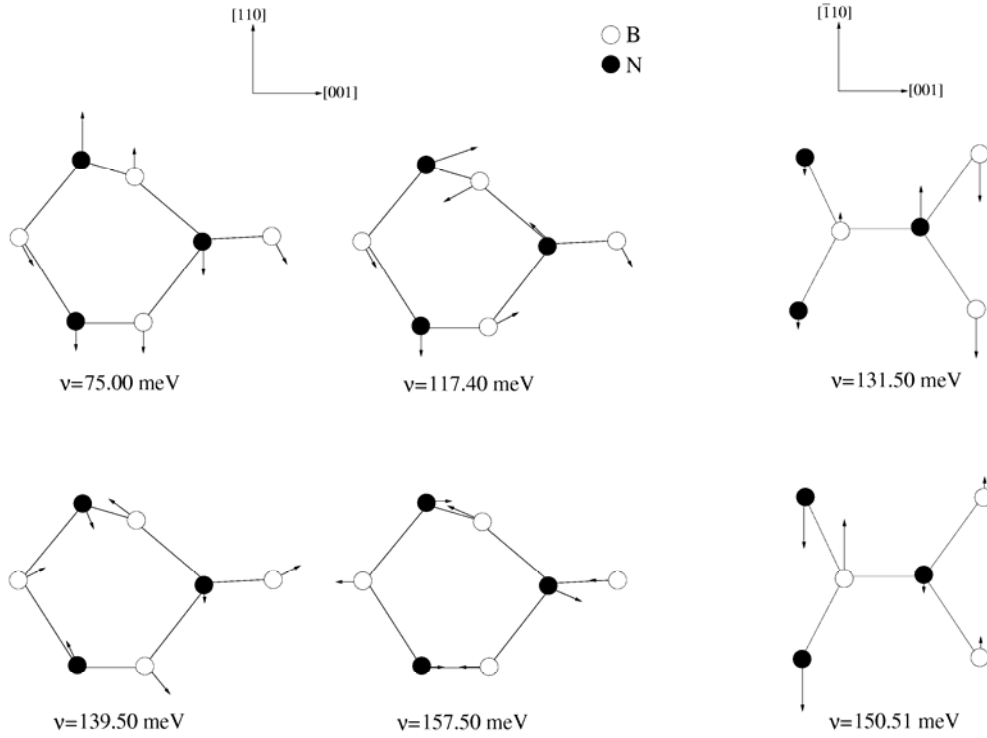
Şekil 7.6. BN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri. Taralı bölge hacim durumundaki kübik BN için fonon enerjilerini gösterirken, kalın çizgiler hesaplanan yüzey fonon eğrileridir. Sağ taraftaki grafikte ise kesikli çizgi hacim fononları için ve düz çizgi ise yüzey fononları için durum yoğunluğu eğrilerini göstermektedir.

Şekil 7.6'da yer alan durum yoğunluğu grafiğinde kesikli çizgi hacim fonon modları kullanılarak hesaplanırken, düz çizgi ise yüzey fononlarından kaynaklanmaktadır. Bu grafikte yer alan DOS, 'Density of States' ifadesinin kısaltmasıdır ve durumların yoğunluğu anlamına gelmektedir. BN(110) yüzeyi için bu grafikten de açıkça akustik-optik boşluk bölgesinin olmadığı görülmektedir. Şekildeki iki çizgi yapı olarak birbirine oldukça benzemektedir. Ancak 160.0 meV enerjisinin üzerinde hacim fononlarından kaynaklanan kesikli çizgi yer almamaktadır. Bu da bunun üzerindeki düz çizgi ile gösterilen durum yoğunluğu piklerinin en yüksek enerjili yüzey optik fonon modundan kaynaklandığını göstermektedir.

Yüzey fonon dispersiyon grafiğindeki hacim bölgelerinin ortalarında bulunan enerji boşluklarının içlerinden geçen fonon modlarının incelenmesi de oldukça önemlidir. Çünkü bu bölgelerde hacim fonon modu bulunamaz ve bu modların yüzey titreşimlerine ait olduğu kesindir. Ayrıca bu fonon modları yüzey boşluk fonon modları olarak adlandırılırlar. Şekilde açıkça yer alan ve yüzey titreşim özellikleri incelenirken önemli bir yere sahip olan en düşük enerjili yüzey fonon modu

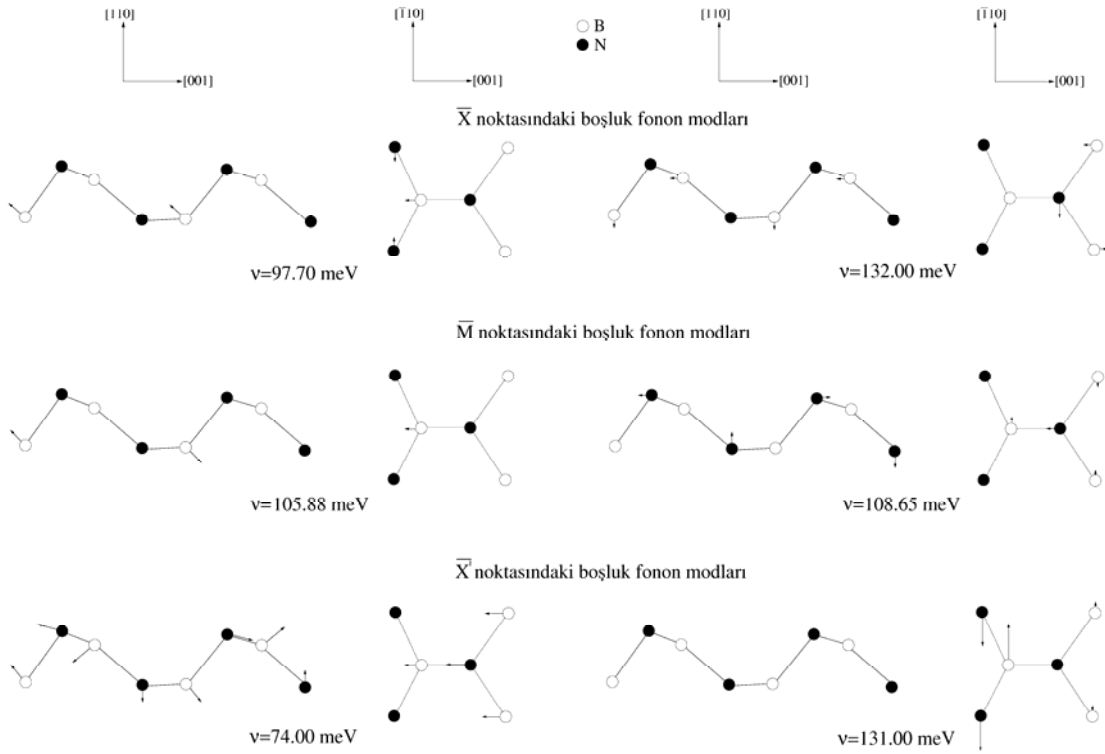
(Rayleigh wave fonon modu) ise $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ simetri yönü dışında tüm simetri yönlerinde hacim fonon modlarının altında yer almaktadır.

III-V(110) yüzeylerinin örgü dinamiği hesaplamalarında $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ yönünde yüzey fonon modları A' ve A'' olmak üzere ikiye ayrılır. Zig-zag zincir yönü olarak ifade edilen $[\bar{1}10]$ yönü boyunca olan atomik titreşimler A'' fonon modları; bu yöne dik doğrultuda olan titreşimler ise A' fonon modları olarak isimlendirilir. Şekil 7.7'de Brillouin Bölgesi merkezinde (Γ noktası) seçilen bazı A' ve A'' fonon modlarının atomik titreşim şekilleri sunulmuştur. Enerjisi 75.0 meV olan ve hacim fononları arasındaki boşluk bölgesinde bulunan fonon modu incelendiğinde, yüzey atomları ile ikinci ve üçüncü tabaka atomlarının yüzey normali doğrultusunda fakat birbirlerine zıt yönde titreştikleri görülmektedir. Şekilde görülen 117.40 meV enerjili ikinci fonon modu III-V(110) yüzey dinamiği hesaplamalarındaki ilginç fonon modlarından biridir. Bu fonon modu yüzey atomlarının $[001]$ doğrultusunda birbirlerine zıt yönde titreşmelerinden meydana gelir ve bağ germe modu olarak adlandırılır. Bu fonon modu enerjisi ve kutuplanma karakteri bakımından ele alındığında daha önceki BCM hesaplamalarından[32] elde edilen 113.0 meV enerjili fonon modu ile çok büyük bir benzerlik göstermektedir. Bağ dönmesiyle oluşan etkin dipol, literatürde bağ döndürme modu olarak bilinen özel bir yüzey titreşimi ile ilgilidir. Daha önceki BCM hesaplamalarına[32] uygun bir şekilde bu fonon modu 139.5 meV olarak bulunmuştur. Enerjisi 157.5 meV olarak bulunan A' fonon modunun titreşim karakterini ise büyük oranda yüzey B ve buna zıt olarak titreşen ikinci tabakadaki N atomları belirlemektedir. BCM hesaplamalarında bu modla karşılaştırılabilecek modun enerjisi 156.0 meV olarak elde edilmiştir[32]. A'' karakterli fonon modlarını gösteren atomik yerleşim şekli, $[\bar{1}10]$ doğrultusunda tam ortadan ikiye ayrılırsa sağ tarafta kalan bir N ve iki B atomu yüzey atomlarını gösterirken, sol taraftaki atomlar ise ikinci seviyede yer almaktadırlar. Şekil 7.7'de görülen A'' karakterli fonon modlarının enerjileri 131.50 meV ve 150.51 meV'dir. Bu fonon modları sırasıyla yüzey ve yüzey-altı zig-zag zincir modları olarak sınıflandırılırlar. Bunun nedeni ise ilk fonon modunun titreşim karakterinin yüzey atomları tarafından ve diğerinin ise yüzeyin bir altında yer alan ikinci seviye atomları tarafından belirlenmesidir.



Şekil 7.7. Brillouin Bölgesi merkezinde seçilen bazı A' ve A'' fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

Brillouin Bölgesi sınırları olan \bar{X} , \bar{X}' ve \bar{M} noktalarında bulunan enerji aralıklarının içinde kalan ikişer tane fonon modunun atomik yer değiştirme şekillerinin yandan ve üstten görünümü Şekil 7.8'de sunulmuştur. \bar{X} noktasındaki enerji aralığında bulunan fonon modlarının enerjileri 97.70 meV ve 132.0 meV olarak hesaplanmıştır. Düşük enerjili olan mod ikinci tabakada bulunan B ve N atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Daha yüksek enerjili mod ise birinci tabaka atomların titreşimiyle meydana gelmektedir. Bu fonon modu daha önceki BCM hesaplamalarında 135.0 meV olarak bulunmuştur[32]. \bar{X}' ve \bar{M} sınır noktalarında elde edilen enerji aralığı fonon modları \bar{X} noktasındakilere benzer olarak ilk iki tabakada bulunan atomların titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. BN(110) yüzeyi için bulunan bütün enerji aralığı fonon modlarında üçüncü tabakadaki atomların titreşimleri ihmal edilebilecek kadar azdır.

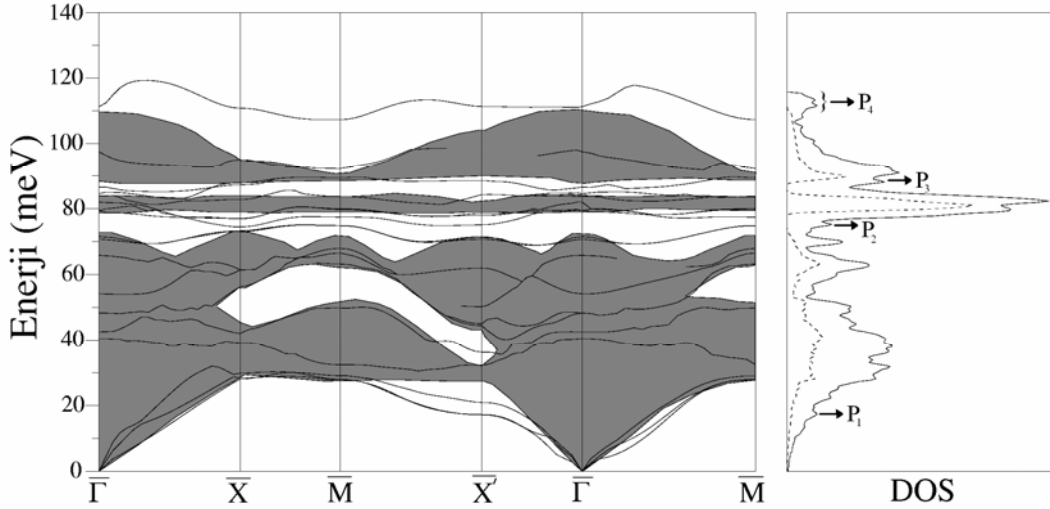


Şekil 7.8. Brillouin Bölgesi sınırları olan \bar{X} , \bar{X}' ve \bar{M} noktalarında bulunan enerji aralıklarının içinde yer alan fonon modlarının atomik yer değiştirme şekillerinin yandan ve üstten görünümüleri.

\bar{X}' noktasında 36.0 meV olarak elde edilen en düşük enerjili akustik fonon modu A' karakterine sahiptir. Bu fonon modu yüzey atomlarının [001] yönündeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. 2002 yılında yapılan BCM hesaplamalarında da en düşük enerjili fonon modu benzer biçimde 38.0 meV değerinde bulunmuştur[32]. Bu simetri noktasında 42.0 meV enerjili ikinci akustik fonon modu ise A'' karakterine sahiptir ve daha önce BCM hesaplamalarında[32] elde edilen 41.8 meV değeriyle uyum içindedir. \bar{X} noktasında elde edilen yüzey akustik fonon modlarının enerji değerleri ise 57.5 meV ve 63.2 meV olarak bulunmuştur. En düşük enerjili fonon modu BCM hesaplamalarında 57.9 meV enerji değerindeki fonon modu ile hem enerji olarak hem de kutuplanma karakteri olarak büyük bir benzerlik göstermektedir. Bu fonon modu birinci seviye N ve ikinci seviye B atomlarının zig-zag zincirine dik yönde titreşimleri ile birinci seviye B atomlarının zig-zag zinciri yönündeki hareketinden kaynaklanmaktadır. \bar{M} noktasında 55.2 meV enerjili olarak elde edilen en düşük enerjili fonon modunun oluşumuna yine yüzeyde ve ikinci seviyede bulunan atomlar neden olmaktadır.

7.4.2. AlN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

AlN(110) yüzeyi için elde edilen yüzey fonon spektrumu Şekil 7.9'da görülmektedir. Bu şekilde taralı kısımlar hacim fononlarını gösterirken düz çizgiler yüzey fonon modlarından elde edilmiştir.

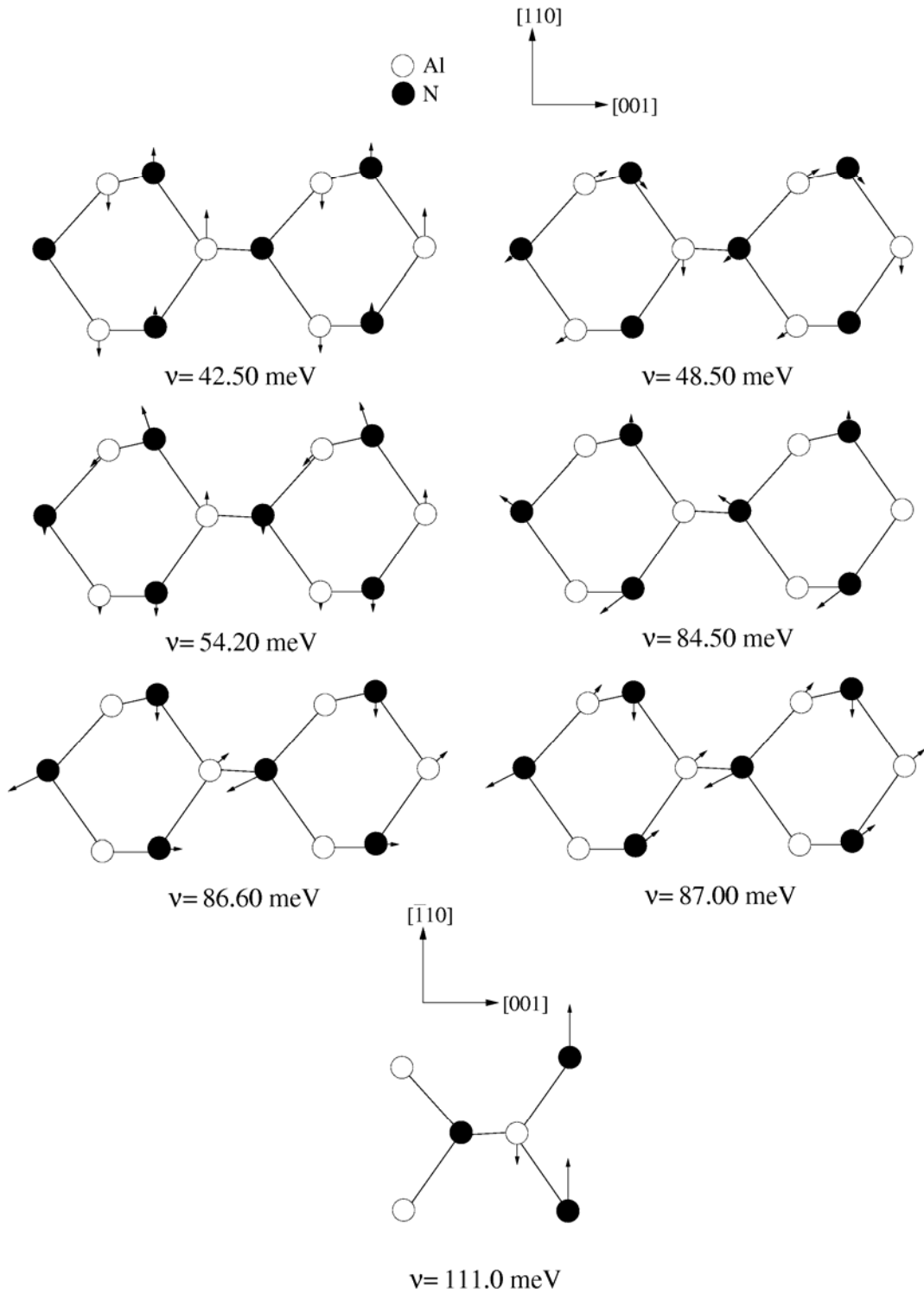


Şekil 7.9. AlN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri. Taralı bölge hacim durumundaki kübik AlN için fonon enerjilerini gösterirken, kalın çizgiler hesaplanan yüzey fonon eğrileridir. Sağ taraftaki grafikte ise kesikli çizgi hacim fononları için ve düz çizgi ise yüzey fononları için durum yoğunluğu eğrilerini göstermektedir.

Şekle bakıldığında BN(110) yüzeyine benzemekle beraber farklı olarak çok dar da olsa bir akustik-optik boşluk bölgesinin olduğu görülmektedir. Bu boşluk bölgesi Al ve N atomları arasındaki kütle farkından kaynaklanmaktadır. Bunun yanı sıra bu yüzey için elde edilen fonon dispersiyon bölgesinde bir de optik-optik boşluk bölgesi yer almaktadır. Hacim fonon modları arasında yer alan boşluk bölgelerinde bulunan fonon modları açıkça yüzey atomlarından kaynaklandığı için önemlidirler. AlN(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ ve \bar{M} noktalarında 2, \bar{X} noktasında 3 ve \bar{X}' noktasında ise 5 yüzey boşluk fonon modu bulunmuştur. Bu yüzeyde elde edilen en düşük enerjili yüzey fonon modu $\bar{\Gamma}-\bar{X}$, $\bar{\Gamma}-\bar{X}'$ ve $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ simetri yönlerinde hacim fonon modlarının altında yer almaktadır. En yüksek enerjili yüzey optik fonon modu ise $\bar{\Gamma}-\bar{X}$ ve $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ yönlerinde gözle görülür bir dispersiyon göstermektedir. Ayrıca bu fonon modu açık bir şekilde tüm simetri yönleri boyunca hacim fonon spektrumunun üzerinde yer almaktadır.

AlN(110) yüzeyi için Şekil 7.9'da hesaplanan bir diğer grafik ise durum yoğunluğu grafiğidir. Bu grafikte kesikli çizgi hacim fononlarından ve düz çizgi ise yüzey fononlarından yararlanılarak elde edilen hacim ve yüzey fonon durum yoğunluğu eğrileridir. Bu grafikte 70.0 meV'in üzerinde yer alan kesikli çizgiler arasındaki yaklaşık 5.0 meV'lik boşluk akustik-optik boşluk bölgesini gösterirken onun hemen üzerinde yer alan 2.5 meV değerindeki boşluk ise optik-optik boşluk bölgesinden kaynaklanmaktadır. Durum yoğunluğu grafiğinde açıkça yüzey fonon modlarından elde edilen pikler işaretlenmiştir. P_1 piki $\bar{M} - \bar{X}'$ boyunca hacim fonon modlarının altında yer alan yüzey akustik fonon modlarından kaynaklanmaktadır. P_2 pikinin nedeni ise akustik-optik boşluk bölgesinde $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ yönlerinde ve $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ yönünde yer alan iki tane yüzey fonon eğrisidir. P_3 pikini oluşturan fonon modu ise optik-optik boşluk bölgesinde $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ yönlerinde yer almaktadır. Son olarak P_4 pikinin oluşumuna ise açıkça en yüksek enerjili yüzey optik fonon modu sebep olmaktadır.

AlN(110) yüzeyi için Şekil 7.9'dan da görülebileceği gibi Brillouin bölgesi merkezinde ($\bar{\Gamma}$ noktası) toplam 14 tane fonon modu bulunmaktadır. Bu modlardan 4 tanesi A'' karakterine sahiptir. Bu modların enerjileri 79.4, 82.0, 83.8 ve 111.0 meV olarak elde edilmiştir. Bu modlardan ilki üçüncü seviye Al ve N atomlarından kaynaklanmaktadır. En yüksek enerjili fonon modunun titreşim karakterini yüzey atomları belirlemektedir. Diğer iki A'' fonon moduna ise ikinci seviye Al ve N atomları sebep olmaktadır. Bütün A'' fonon modları ilgili Al ve N atomlarının zig-zag zinciri yönünde birbirlerine zıt titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Enerjisi 40.0 meV olan ve $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ yönü boyunca hiç değişmeden devam eden fonon modu, birinci ve ikinci seviye Al atomlarının yüzey normaline doğrultusundaki zıt titreşimlerinden oluşan bir A' modudur. Bağ döndürme fonon modu olarak tanımlanan ve enerjileri 42.5, 48.5, 54.2 ve 87.0 meV olan fonon modları da yine A' karakterine sahiptirler. Brillouin Bölgesi merkezinde elde edilen bağ döndürme fonon modları, yüzey boşluk fonon modları ve en yüksek enerjili fonon modu Şekil 7.10'da sunulmaktadır.



Şekil 7.10. AlN(110) yüzeyinin Brillouin Bölgesi merkezinde elde edilen bağ döndürme fonon modları, yüzey boşluk fonon modları ve en yüksek enerjili fonon modu için atomik yer değiştirme şekilleri.

Enerjisi 87.0 meV olan fonon modu ilk üç seviye N atomlarının titreşiminden kaynaklanmaktadır ve daha önce BCM hesaplamalarından[32] elde edilen 90.0 meV enerjili mod ile oldukça uyumludur. Diğer üç bağ döndürme fonon modu ise birinci seviye atomlarının yüzey normali yönündeki zıt hareketlerinden oluşmaktadır. AlN(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen diğer önemli A' karakterli fonon modları akustik-optik boşluk bölgesinde yer almaktadırlar. Bu yüzey boşluk fonon modlarının enerjileri 84.5 ve 86.6 meV olarak elde edilmiştir. Bu iki fonon modunun oluşumuna ise ilk üç seviye N atomlarının [110][001] yönlerindeki titreşimleri neden olmaktadır.

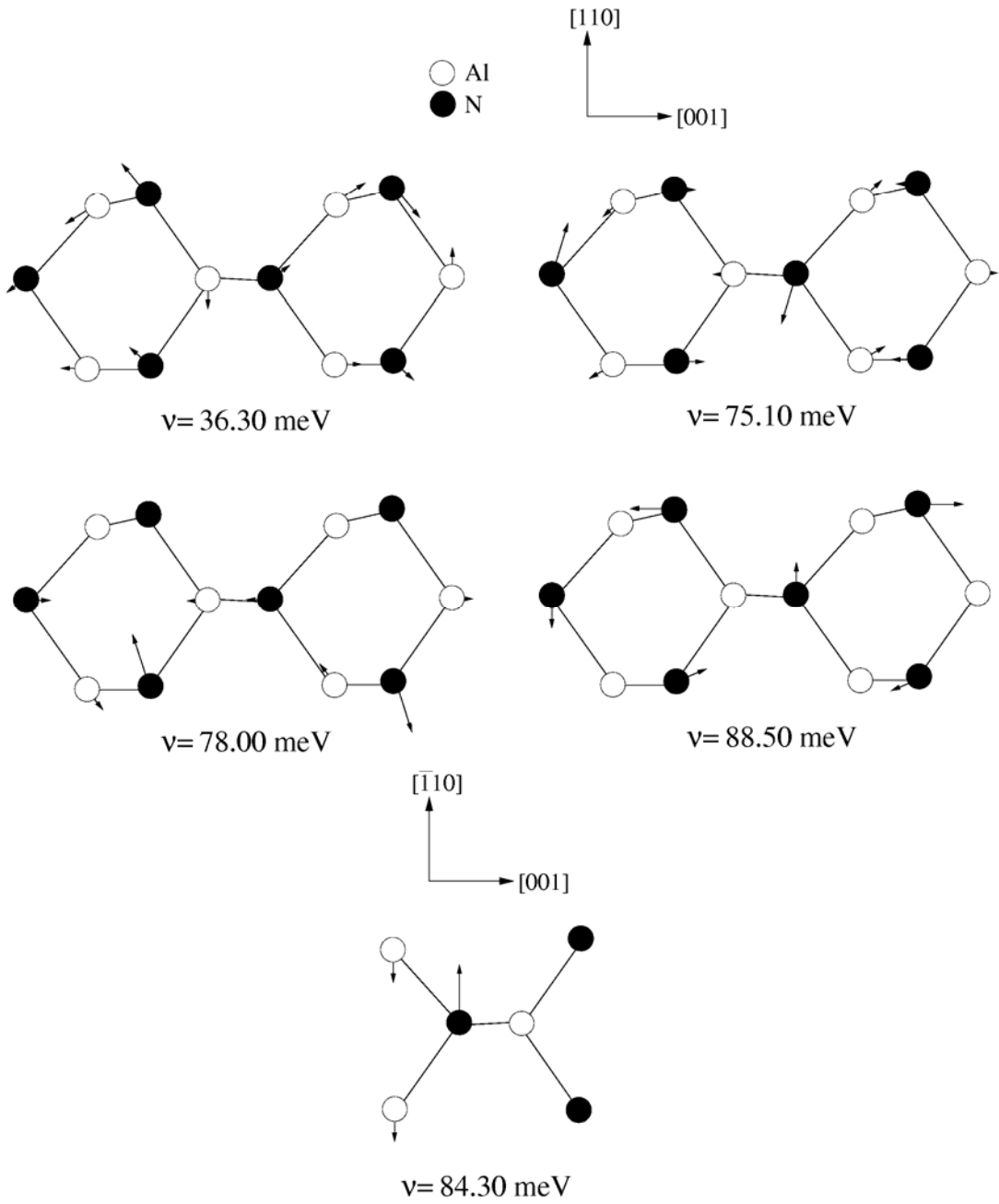
\bar{X} noktasında enerjisi 28.0 meV olarak hesaplanan en düşük enerjili yüzey akustik fonon modu için birinci seviye Al atomları zincir yönünde titreşirken, birinci seviye N ve ikinci seviye Al atomları zincir yönüne dik olarak hareket ederler. Bu fonon modunun bir benzeri BCM hesaplamalarında 27.0 meV enerjili olarak bulunmuştur[32]. Bu simetri noktasında elde edilen 74.4 meV ve 76.9 meV enerjili fonon modları sırasıyla ikinci seviye Al ve N atomları ile üçüncü seviye N atomlarının [110]-[001] yönlerindeki titreşimlerinden oluşur. Son olarak en yüksek enerjili fonon modu ise büyük ölçüde birinci seviye N atomlarının zincir yönünde titreşiminden kaynaklanmaktadır. Ancak bu modun oluşumuna az da olsa birinci seviye Al atomları da [001] yönündeki titreşimleriyle katkıda bulunurlar.

AlN(110) yüzeyindeki diğer bir simetri noktası olan \bar{M} için elde edilen en düşük enerjili fonon modu, birinci ve üçüncü seviye Al atomları ile ikinci seviye N atomlarının [110]-[001] yönlerindeki titreşimleriyle oluşmaktadır. Bu simetri noktasında enerjileri 74.9 ve 77.4 meV olarak hesaplanan ve akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan iki yüzey boşluk fonon modu bulunmaktadır. Bunlardan ilki, birinci seviye Al ve ikinci seviye N atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleri ile birinci seviye N ve ikinci seviye Al atomlarının bu yöne dik hareketlerinden kaynaklanmaktadır. Diğer boşluk fonon modunun nedeni ise ikinci seviye N atomlarının [110]-[001] yönlerindeki titreşimleridir.

\bar{X}' simetri noktasında hesaplanan ve enerjisi 17.3 meV olan en düşük enerjili fonon modu A' karakterine sahiptir. Bu fonon modunun oluşumunda birinci ve üçüncü seviye atomlarının [110] ve ikinci seviyedeki atomların ise [001] yönlerindeki titreşimleri etkili olmaktadır. Bu fonon modu BCM hesaplamalarından[32] elde edilen 19.3 meV enerjili fonon modu ile oldukça uyumludur. Bu fonon modunun hemen üzerinde yer alan diğer akustik fonon modu ise A'' karakteri göstermektedir ve yüzey atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleri ile oluşur.

\bar{X}' simetri noktasında elde edilen boşluk fonon modları Şekil 7.11'de görülmektedir. Bu simetri noktasında hacim fonon modları arasında bulunan boşluk bölgesinde 36.3 meV enerjili boşluk fonon modu bulunmaktadır. Bu fonon modu A' karakterine sahiptir ve ilk üç seviye yüzey atomlarının [110][001] yönlerindeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Bu fonon moduna benzer bir mod daha önceki BCM metodu kullanılan teorik çalışmada 38.0 meV olarak hesaplanmıştır. Bu simetri noktasında akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan boşluk fonon modlarının enerjileri 75.1 ve 78.0 meV bulunmuştur. Birinci mod bağ germe fonon modu olarak adlandırılır ve BCM hesaplamalarından elde edilen 73.4 meV enerjili mod ile uyum içindedir. Diğer modun oluşumunda ise üçüncü seviye N atomları önemli rol oynamaktadır. Son olarak optik-optik boşluk bölgesinde de iki boşluk fonon modu yer almaktadır. Bu fonon modlarının enerjileri 84.3 ve 88.5 meV olarak hesaplanmıştır. İlk mod A'' karakterine sahip olup ikinci seviye Al ve N atomlarının zig-zag zinciri yönünde birbirlerine zıt titreşimlerinden oluşur. Diğer mod ise sadece anyon atomlarının titreşimleriyle oluşan anyonik fonon modudur ve birinci ve ikinci seviye N atomlarının zig-zag zincirine dik titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.

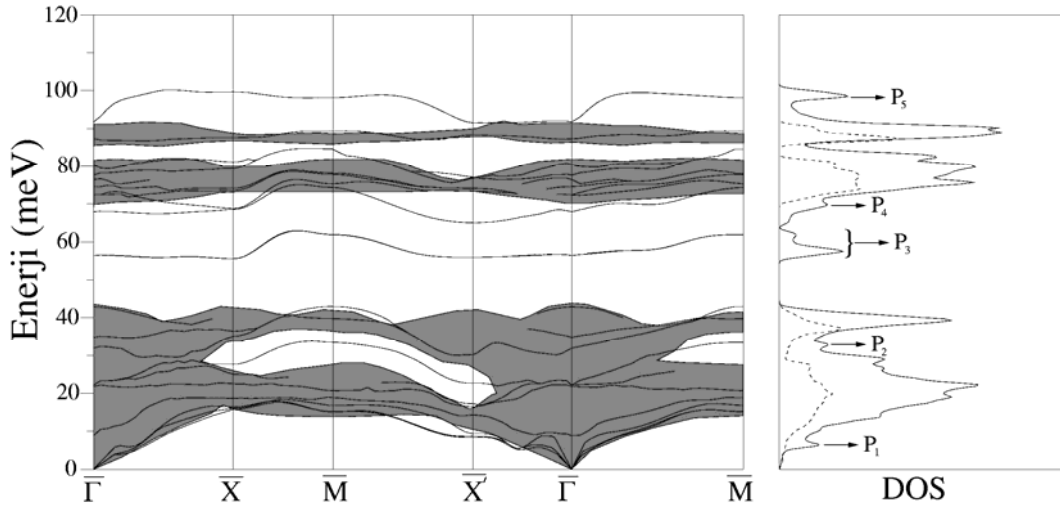
Bu simetri noktasında elde edilen en yüksek enerjili fonon modu $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen mod ile benzer özellikler göstermektedir. A'' karakterine sahip olan bu mod için de yüzey atomlarının [110] doğrultusundaki birbirlerine zıt titreşimleri önemli rol oynamaktadır.



Şekil 7.11. AlN(110) yüzeyi için \bar{X}' noktasında hesaplanan boşluk fonon modlarının atomik yer değiştirme şekilleri.

7.4.3. GaN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

GaN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon dispersiyon grafiği ve durum yoğunluğu grafiği Şekil 7.12’de görülmektedir. Fonon dispersiyon grafiğinde taralı bölgeler hacim fonon modlarını gösterirken, durum yoğunluğu grafiğinde ise kesikli çizgiler hacim fonon modları kullanılarak elde edilmiştir. Şekil incelendiğinde Ga ve N atomlarının büyük kütle farkı nedeniyle hacim fonon modları arasında bir akustik-optik boşluk bölgesinin yer aldığı görülmektedir. Tüm simetri yönleri boyunca bu boşluk bölgesinin içinde bulunan boşluk fonon modu $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ yönlerinde neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir. Yüzey fonon dispersiyon grafiğinde yer alan bir diğer boşluk bölgesi de optik fonon modları arasında yer almaktadır. Bu boşluk bölgesinde de $\bar{X} - \bar{M}$ yönünde bir fonon modu bulunmaktadır.



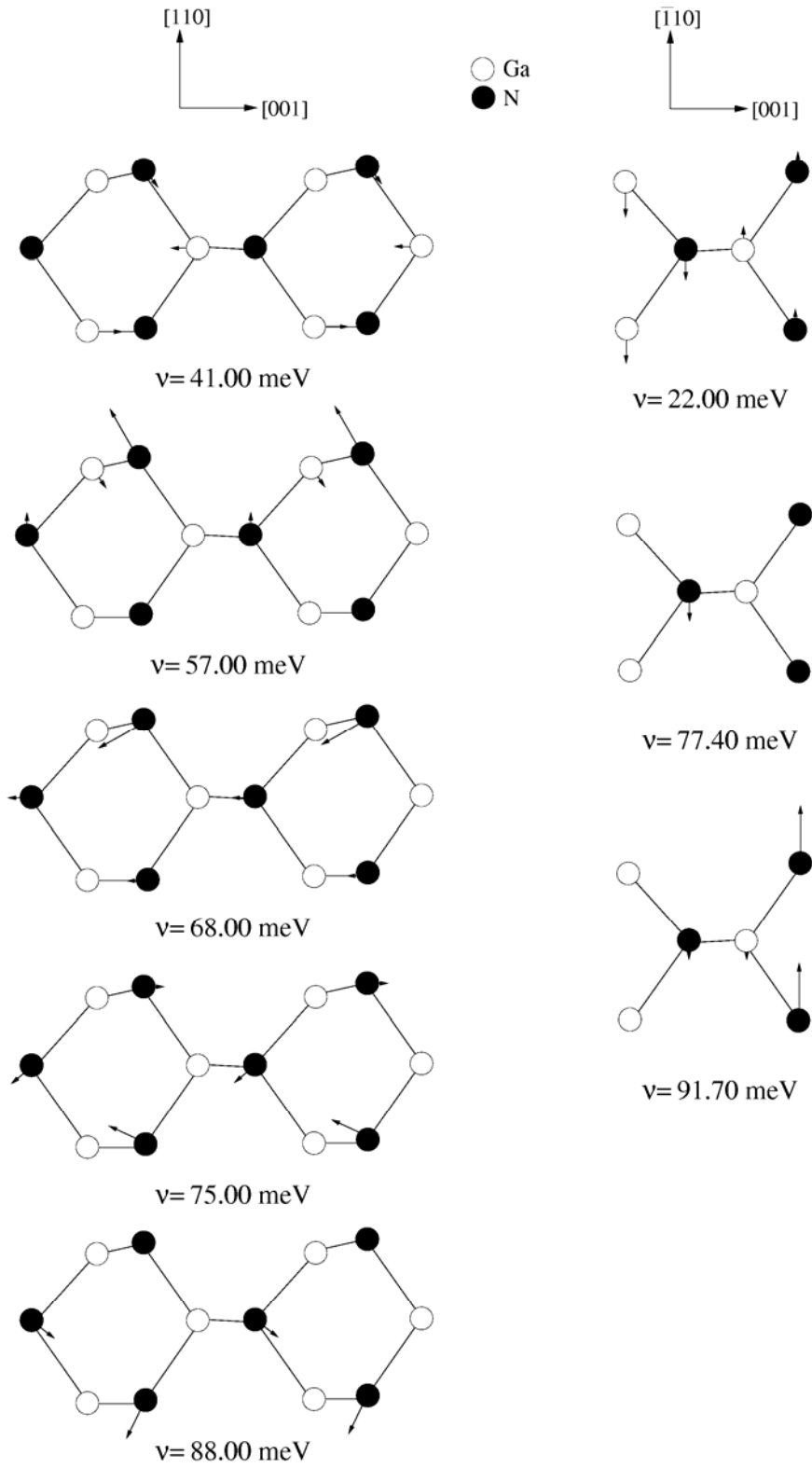
Şekil 7.12. GaN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri. Taralı bölge hacim durumundaki kübik GaN için fonon enerjilerini gösterirken, kalın çizgiler hesaplanan yüzey fonon eğrileridir. Sağ taraftaki grafikte ise kesikli çizgi hacim fononları için ve düz çizgi ise yüzey fononları için durum yoğunluğu eğrilerini göstermektedir.

GaN(110) yüzeyi için elde edilen en düşük enerjili fonon modu ise daha önce anlatılan iki yüzeyin aksine \bar{X}' noktası dışında her simetri yönünde hacim fononlarının içinde yer almaktadır. Şekil 7.12’de hesaplanan bir diğer boşluk fonon modu da $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ yönlerinde hacim fonon modları arasında kalan boşluk bölgesinde bulunmaktadır. Bu yüzey için elde edilen en yüksek enerjili fonon modu neredeyse tüm simetri yönlerinde hacim fonon modlarının üzerinde ilerlemektedir. Bu fonon modu $\bar{X} - \bar{M}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ simetri yönlerinde tüm dalga vektörleri için ve

$\bar{\Gamma} - \bar{X}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ yönlerinde ise artan dalga vektörleri için neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir.

Şekil 7.12'nin sağ tarafında bulunan durum yoğunluğu grafiğinde kesikli çizgilerle gösterilen hacim fonon modları arasında akustik-optik ve optik-optik boşluk bölgeleri açıkça görülmektedir. Bu boşluk bölgelerinden ilkinin genişliği yaklaşık 26.0 meV değerinin ise 2.5 meV civarındadır. Durum yoğunluğu grafiğinde yüzey fononları kullanılarak hesaplanan düz çizgide, kesikli çizgide olmayan bazı pikler elde edilmiştir. Bu nedenle bu pikler açıkça yüzey fonon modlarından kaynaklanmaktadır. P_1 pikinin nedeni $\bar{M} - \bar{X}'$ yönünde hacim fononlarının altında yer alan yüzey akustik fonon modlarıdır. P_2 ise, hacim fonon modları arasında yer alan boşluk bölgesindeki yüzey boşluk fonon modu nedeniyle oluşmuştur. Tüm simetri yönleri boyunca akustik-optik boşluk bölgesinde bulunan yüzey fonon modu ise P_3 pikine neden olmaktadır. P_4 pikinin nedeni ise $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ boyunca akustik-optik boşluk bölgesinde düz bir çizgi şeklinde yer alan fonon modudur. En yüksek enerjili yüzey optik fonon modundan kaynaklanan pik ise durum yoğunluğu grafiğinde P_5 olarak görülmektedir.

GaN(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında enerjileri 22.0, 77.4, 91.7 meV olan üç tane A'' ve enerjileri 41.0, 57.0, 68.0, 75.0 ve 88.0 meV olan beş tane A' fonon modu bulunmaktadır. Şekil 7.13'de atomik yer değiştirme şekilleri gösterilen bu fonon modları daha önceki BCM hesaplamalarından elde edilen 24.0 ve 84.4 meV enerjili A'' ve 40.1, 62.8, 75.8, 91.0 meV enerjili A' fonon modlarıyla oldukça uyumludur[32]. En düşük enerjili fonon modu $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ yönünde neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir ve birinci seviye atomları ile ikinci tabaka atomlarının zig-zag zinciri yönündeki zıt titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Enerjisi 77.4 meV olan fonon modu ise ikinci ve üçüncü seviye atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. En yüksek enerjili fonon modu olan 91.7 meV enerjili mod AlN(110) yüzeyine benzer şekilde yüzey atomlarının zig-zag zinciri yönündeki zıt titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. En düşük enerjili A' fonon modu, yüzey N atomları ile ikinci ve üçüncü seviye Ga atomlarının hareketleriyle oluşmaktadır. Enerjisi 57.0 meV olan ve akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan yüzey boşluk fonon modu ise açıkça bir bağ döndürme fonon modudur.

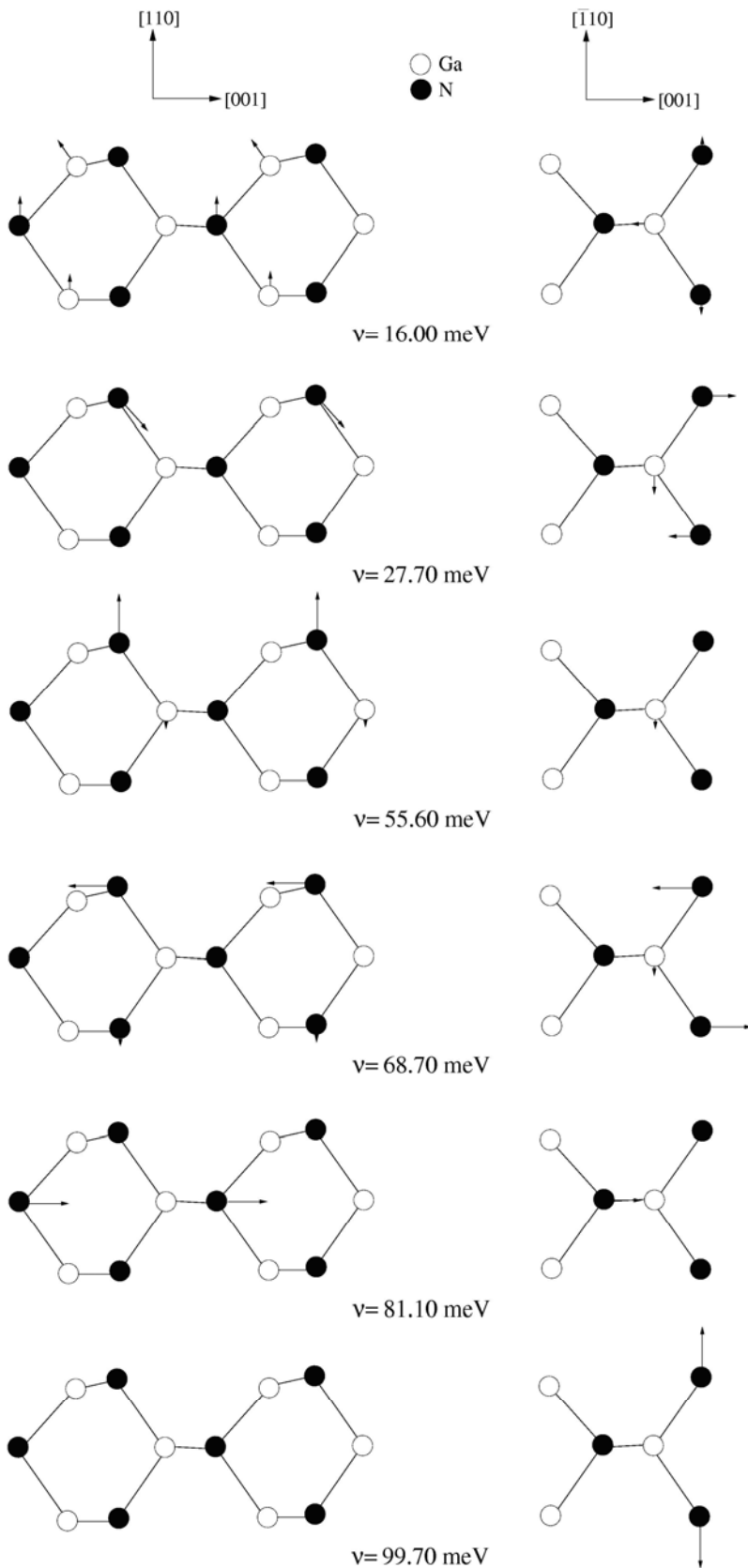


Şekil 7.13. GaN(110) yüzeyinin Brillouin Bölgesi merkezinde elde edilen A' ve A'' fonon modları.

Şekil 7.13’de görülen 68.0 ve 75.0 meV enerjili fonon modları ilk üç seviyede bulunan N atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Bu fonon modları tamamen anyon atomlarının titreşimleriyle oluştuklarından anyonik fonon modları olarak adlandırılabilirler. İkinci ve üçüncü seviye N atomlarının titreşimleriyle oluşan en yüksek enerjili A’ fonon modunun enerjisi ise 88.0 meV olarak elde edilmiştir.

\bar{X} noktasındaki fonon modları A’ ve A’’ karakterlerinin karışımı şeklindedir. Bu simetri noktasında en düşük enerjili fonon modunun enerjisi 16.0 meV olarak bulunmuştur. Bu mod daha önceki BCM hesaplamalarında 16.5 meV değerinde hesaplanmıştır[32]. GaN(110) yüzeyinin \bar{X} simetri noktasında dört tane boşluk fonon modu yer almaktadır. Bunlardan hacim fononları arasında kalan ilki yüzey Ga ve N atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan 55.6 meV enerjili mod, yüzey Ga atomlarının zig-zag zinciri yönünde ve N atomlarının ise [110] yönünde titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Aynı boşluk bölgesinde bulunan ve enerjisi 68.7 meV olan fonon modu ise Ga atomlarının zig-zag zinciri yönünde, N atomlarının ise yüzey normali yönünde titreşimleriyle oluşur. Optik-optik boşluk bölgesindeki 81.1 meV enerjili fonon moduna ise ikinci seviye N atomlarının [001] yönündeki titreşimleri neden olmaktadır. En yüksek enerjili fonon modu ise sadece yüzey N atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleriyle oluşan anyonik bir fonon modudur. Şekil 7.14’de \bar{X} simetri noktasında elde edilen en düşük ve en yüksek enerjili fonon modları ile boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri sunulmaktadır.

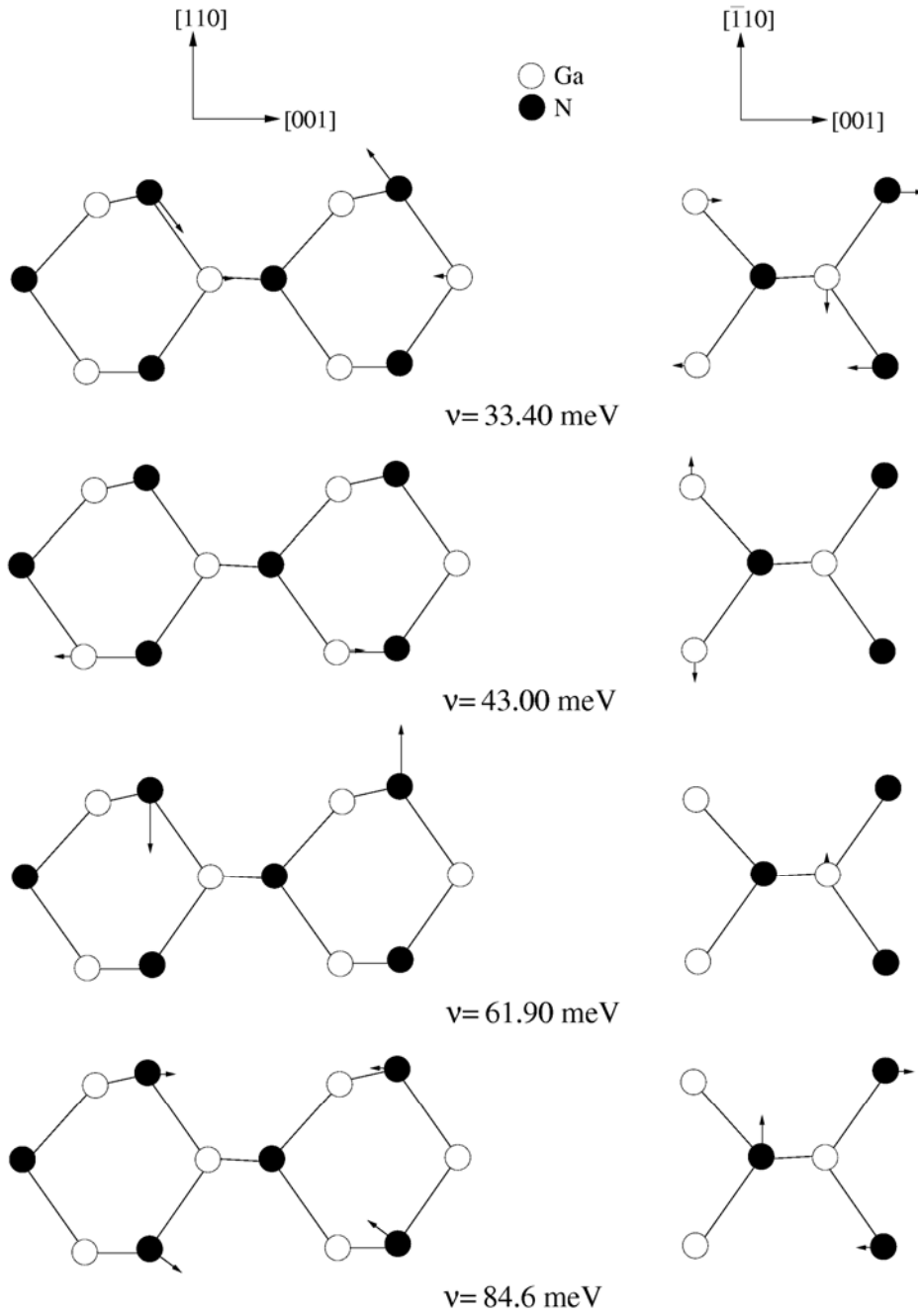
GaN(110) yüzeyinin \bar{X}' simetri noktasında, en düşük enerjili fonon modunun enerjisi 8.5 meV olarak elde edilmiştir ve bu mod hacim fonon modlarının altında yer almaktadır. Bu fonon modunun enerjisi BCM hesaplamalarında 2.5 meV daha fazla elde edilmiştir[32]. Bu mod A’ karakterine sahip olup, birinci seviye atomlarının [110] ve ikinci seviye atomlarının ise [001] yönündeki titreşimleriyle oluşmaktadır. Bu modun hemen üzerinde yer alan 9.4 meV enerjili fonon modu ise yüzey atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinden kaynaklanır ve A’’ karakterine sahiptir.



Şekil 7.14. GaN(110) yüzeyinin \bar{X} simetri noktasında hesaplanan en düşük ve en yüksek enerjili fonon modları ile boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

\bar{X}' simetri noktasında hacim fononları arasında kalan boşluk bölgesinde 16.4, 17.3 ve 23.0 meV enerjili üç fonon modu elde edilmiştir. Bu fonon modlarından ilki A'' karakterine sahiptir ve ikinci seviye atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinden kaynaklanır. 17.3 meV enerjili fonon modunun sebebi ise ikinci ve üçüncü seviye Ga ve N atomlarıdır. Enerjisi 23.0 meV olan A' karakterli boşluk fonon modu $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ boyunca neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir. Bu boşluk modunun oluşumunda ilk üç seviyedeki Ga ve N atomları ortak rol oynamaktadır. BCM hesaplamalarında bu boşluk modu benzer karakterde ve 25.0 meV enerjili olarak elde edilmiştir. Bu simetri noktasında akustik-optik boşluk bölgesinde enerjileri 55.9 ve 65.1 meV olan iki A' karakterli fonon modu bulunmaktadır. Bunlardan ilki yüzey N atomlarından kaynaklanırken, diğerinin oluşumunda ise ilk üç seviye N atomları etkili olmaktadır. Bu nedenle her iki mod da anyonik fonon modudur. En yüksek enerjili fonon modu ise 91.5 meV enerji değerinde olup karakteri $\bar{\Gamma}$ noktasındaki ile benzerdir.

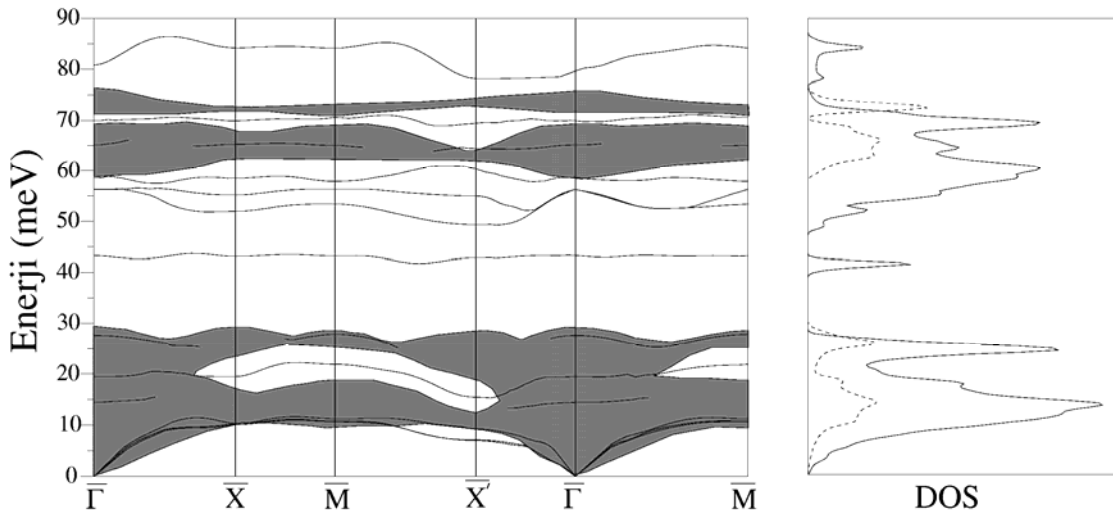
GaN(110) yüzeyi için hesaplanan bir diğer nokta olan \bar{M} 'de dört tane boşluk fonon modu bulunmaktadır. Enerjileri 33.4, 43.0, 61.9 ve 84.6 meV olan bu fonon modlarının atomik yer değiştirme şekilleri Şekil 7.15'de görülmektedir. İlk fonon modu şekilden de görüleceği gibi birinci ve ikinci seviye atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. 43.0 meV enerjili fonon modu ise ikinci ve üçüncü seviye Ga atomlarının titreşimleriyle oluşan katyonik fonon modudur. Enerjisi 61.9 meV olan boşluk fonon moduna ise yüzey N atomlarının [110] ve Ga atomlarının ise zig-zag zinciri yönündeki titreşimleri neden olmaktadır. Optik-optik boşluk bölgesinde yer alan 84.6 meV enerjili fonon modu ise ilk üç seviye N atomlarının oluşturduğu bir anyonik fonon modudur. \bar{M} noktasında elde edilen en düşük enerjili fonon modu 15.0 meV enerji değerine sahiptir. Bu fonon modu ilk üç seviye Ga ve N atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Bu simetri noktasında elde edilen bir diğer önemli mod ise enerjisi 98.2 meV olan en yüksek enerjili yüzey optik fonon modudur. Bu fonon modunun atomik titreşim karakteri GaN(110) yüzeyinin \bar{X} simetri noktasında elde edilen eş değeriyle oldukça benzerdir.



Şekil 7.15. GaN(110) yüzeyinin \bar{M} simetri noktasında hesaplanan boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

7.4.4. InN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

InN(110) yüzeyi için elde edilen fonon dispersiyon grafiği Şekil 7.16'da görülmektedir. Bu grafikte taralı bölgeler hacim fonon modlarını gösterirken, kalın çizgiler ise yüzey fonon modları kullanılarak elde edilmiştir. Şekil 7.16'nın sağ tarafındaki grafik ise hacim ve yüzey fononları için durum yoğunluğu grafiğidir. Bu grafikte kesikli çizgi hacim fonon modları, diğer çizgi ise yüzey fonon modları kullanılarak hesaplanmıştır.



Şekil 7.16. InN(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri. Taralı bölge hacim durumundaki kübik InN için fonon enerjilerini gösterirken, kalın çizgiler hesaplanan yüzey fonon eğrileridir. Sağ taraftaki grafikte ise kesikli çizgi hacim fononları için ve diğer çizgi ise yüzey fononları için durum yoğunluğu eğrilerini göstermektedir.

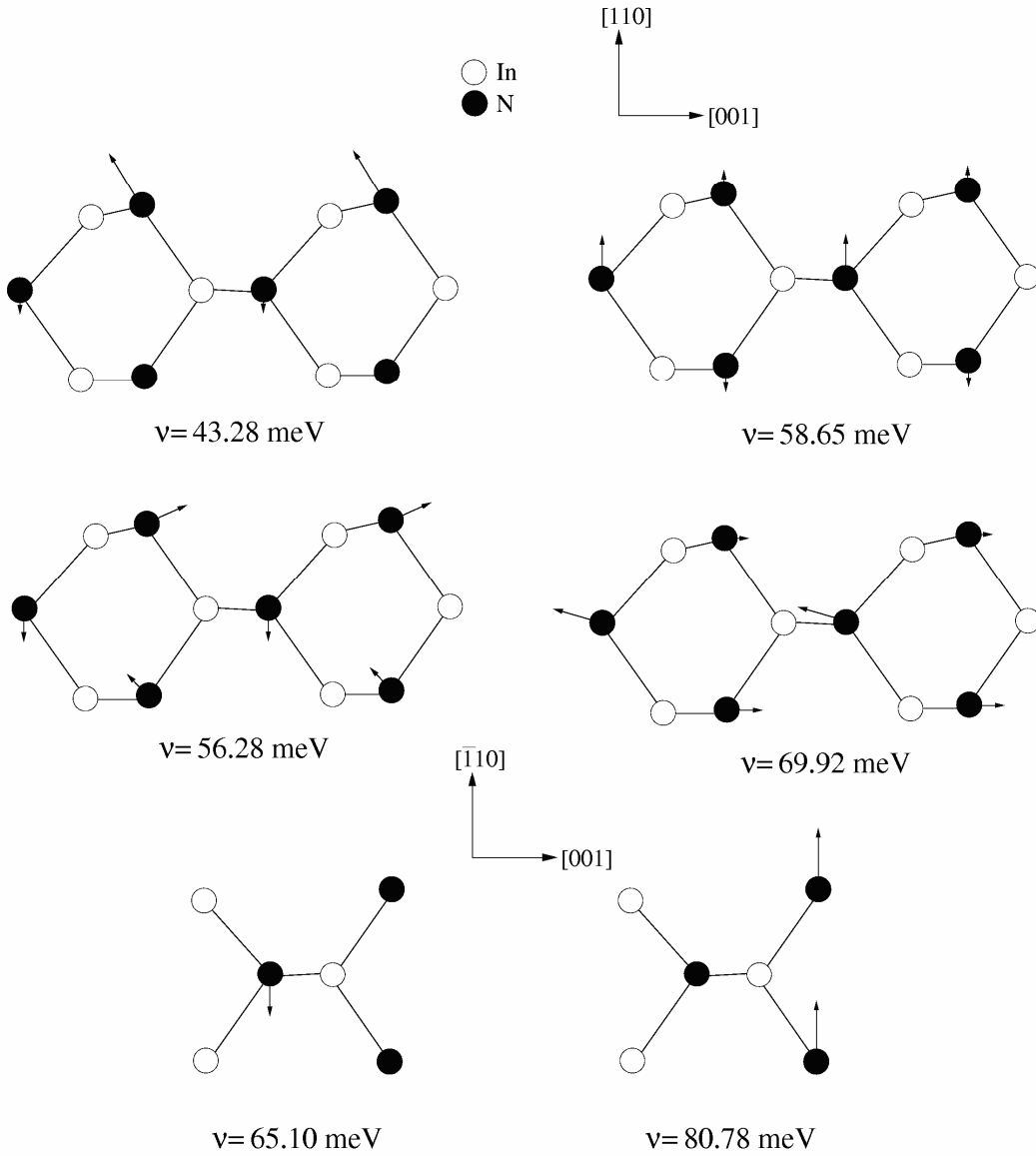
InN(110) yüzeyi için Şekil 7.16'da görülen fonon dispersiyon grafiği genel yapısı bakımından daha önce hesaplanan III-N(110) yüzeylerine benzemektedir. Fakat bu yüzey için hesaplanan fonon dispersiyon grafiğinde bazı farklılıklar da elde edilmiştir. Bu farklılıklardan ilki en yüksek enerjili yüzey optik modunun tüm simetri yönleri boyunca hacim fononları üzerinde yer almasıdır. InN(110) yüzeyinde elde edilen bu özellik daha önce yapılan ve eşdeğer modun hacim sonuçlarıyla benzer enerjilerde hesaplandığı BCM çalışmasından da farklı bulunmuştur[32]. Bu modun BCM hesaplamalarından bir diğer farkı ise $\bar{\Gamma} - \bar{X}$, $\bar{M} - \bar{X}'$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ yönlerinde gözle görülür bir dispersiyon göstermesidir. Fonon dispersiyon grafiğinde görülen bir diğer önemli farklılık ise In ve N atomları arasındaki çok büyük kütle farkından kaynaklanan oldukça geniş akustik-optik boşluk bölgesidir. Bu akustik-optik boşluk

bölgesinde dört tane boşluk fonon modu elde edilmiştir. Bunlardan üçü hacim optik fonon modlarına yakın bir şekilde yer alırken en düşük enerjiye sahip olan boşluk fonon modu ise boşluk bölgesinin neredeyse ortasında bulunmaktadır. Bu yüzey için hesaplanan fonon dispersiyon grafiğinde GaN(110) yüzeyine benzer şekilde hacim fonon modlarının ortasında yer alan boşluk bölgesinde bir yüzey boşluk fonon modu bulunmaktadır. Ayrıca hesaplanan en düşük enerjili fonon modu BCM hesaplamalarıyla uyumlu bir şekilde $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ yönünde \bar{X}' noktasına yakın dalga vektörleri için açıkça hacim fonon modlarının altında yer almaktadır. Bu sonuç da GaN(110) yüzeyi ile benzerlik göstermektedir.

Şekil 7.16'nın sağ tarafında yer alan durum yoğunluğu grafiğinde hacim InN için elde edilen kesikli çizgiden akustik-optik boşluk bölgesinin yaklaşık 30.0 meV olduğu görülmektedir. Bu sonuç diğer III-N materyallerine göre oldukça büyüktür. Bu boşluk bölgesinde bulunan yüzey fonon modlarının oluşturduğu ilk pik yaklaşık 42.0 meV olarak hesaplanmıştır. Akustik-optik boşluk bölgesindeki diğer üç fonon modundan kaynaklanan pikler ise sırasıyla 48.0, 52.0 ve 54.0 meV enerji değerlerinde elde edilmiştir. InN(110) yüzeyi için hesaplanan en yüksek enerjili fonon modu durum yoğunluğu grafiğinin en üst kısmında iki pikin oluşmasına neden olmuştur. Bunlardan ilki yaklaşık 79.0 meV enerjili olup, Fuchs-Kliwer fonon modunun $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ bölgesinde neredeyse hiç dispersiyon göstermemesinden kaynaklanmaktadır. 84.0 meV civarında oluşan pikin nedeni ise yine aynı fonon modunun $\bar{X} - \bar{M}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ yönlerinde düz bir çizgi şeklinde devam etmesidir.

InN(110) yüzeyinin $\bar{\Gamma}$ noktasında hacim fononları içinde kalan bölgede enerjileri 14.8, 19.5 ve 27.0 meV olan üç yüzey fonon modu elde edilmiştir. Bunlardan en düşük enerjili olanı A'' karakterine sahip olup ilk iki seviyede bulunan In atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleriyle oluşmaktadır. Bu fonon modu BCM hesaplamalarında[32] elde edilen 14.6 meV enerjili fonon modu ile uyum içindedir. Diğer iki fonon modu ise A' karakterine sahiptir ve ilk üç seviye In atomlarının zig-zag zinciri yönüne dik titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Enerjisi 27.0 meV olan fonon modu BCM metoduyla[32] yapılan hesaplamalar sonucu bulunan 26.9 meV enerjili katyonik fonon moduyla oldukça uyumludur. $\bar{\Gamma}$ noktasında hacim akustik fononlarının üzerinde bulunan enerji bölgesinde altı tane

yüzey fonon modu bulunmaktadır. Bu fonon modlarının atomik yerdeğiştirme şekilleri Şekil 7.17’de görülmektedir. Bunlardan enerjileri 43.28, 56.28, 58.65 ve 69.92 meV olan dört tanesi A' karakterine sahipken; 65.10 ve 80.78 meV enerjili fonon modları ise A'' karakteri göstermektedir.



Şekil 7.17. InN(110) yüzeyinin $\bar{\Gamma}$ simetri noktasında hacim akustik fononları üzerinde yer alan yüzey fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

Akustik-optik boşluk bölgesinin ortasında yer alan ve enerjisi 43.28 meV olan fonon modu InN(110) yüzeyi için en önemli yüzey fonon modudur. Bu fonon modu açıkça yüzey N atomlarının [110]-[001] yönlerindeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. ve daha önce yapılan BCM hesaplamalarında yer almamaktadır[32].

Enerjisi 56.28 meV olan ikinci yüzey boşluk fonon modu ilk üç seviyede bulunan N atomlarının titreşimlerinden kaynaklandığından anyonik fonon modu olarak adlandırılır. Bu fonon modu hem enerji değeri hem de titreşim karakteri olarak daha önce BCM hesaplamalarından elde edilen 56.0 meV enerjili modla uyum içindedir[32]. Hacim fonon modlarının sınırında yer alan 58.65 meV enerjili fonon modunun oluşumuna daha çok ikinci ve üçüncü seviye N atomları sebep olmaktadır. En yüksek enerjili A' fonon modunun karakterini ise özellikle ikinci ve üçüncü seviyede bulunan N atomlarının [001] yönündeki zıt titreşimleri belirlemektedir. Enerjisi 65.1 meV olan A'' fonon modu ikinci seviye N atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleriyle oluşmaktadır. Bu fonon moduna benzer bir mod BCM hesaplamalarında 63.8 meV enerjili olarak elde edilmiştir. En yüksek enerjili yüzey optik fonon modu ise AlN(110) ve GaN(110) yüzeylerine benzer şekilde A'' karakterinde bulunmuştur. Bu modun oluşumunda yüzey N atomlarının etkili olduğu görülmektedir.

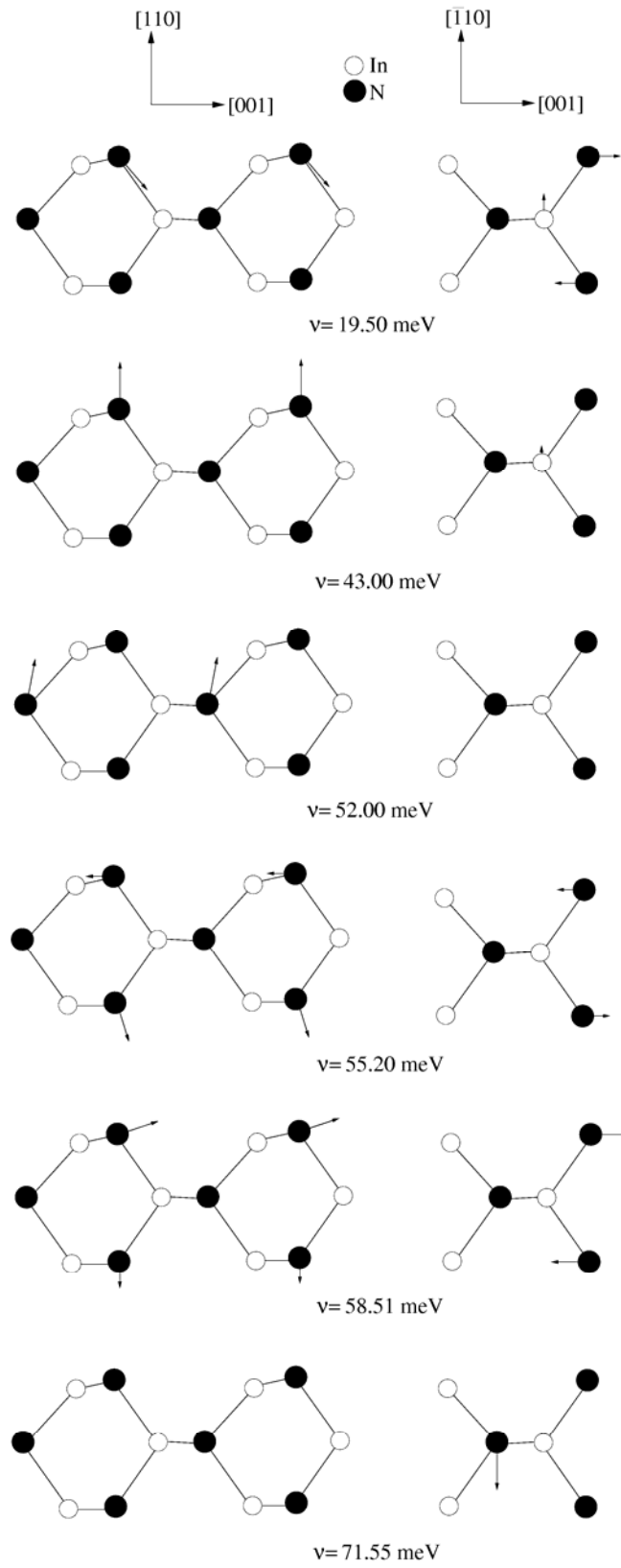
Tablo 7.2. InN(110) yüzeyinin \bar{X}' simetri noktasında hesaplanan fonon modlarının daha önceki BCM sonuçlarıyla[32] karşılaştırılması.

	A'' fonon modları					A' fonon modları				
InN(110)	9.25	64.37	78.13	7.13	15.45	42.83	49.36	54.68	61.86	69.40
BCM[32]	9.72	64.00	-	7.30	14.65	-	51.20	55.90	-	-

\bar{X}' simetri noktasında elde edilen bazı yüzey fonon modları Tablo 7.2'de daha önce hesaplanan BCM sonuçlarıyla[32] karşılaştırılmıştır. Tablodan da açıkça görülebileceği gibi tüm sonuçlar karşılaştırılan BCM değerleriyle uyum içindedir[32]. Bu simetri noktasında görülen en düşük enerjili fonon modu 7.13 meV değerindedir ve A' karakterine sahiptir. Bu fonon modunun oluşumunda birinci ve ikinci seviye In atomları etkili olmaktadır. Bu fonon modunun hemen üzerinde yer alan ve enerjisi 9.25 meV olan diğer yüzey akustik fonon modu ise yüzey atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinin oluşturduğu bir A'' fonon modudur. Bu simetri noktasında hacim bölgesinin arasında kalan boşluk bölgesinde bulunan 15.45 meV enerjili fonon modu A' karakterine sahip olup, her üç seviyedeki In ve N atomlarının katkıları ile meydana gelmiştir. Akustik-optik boşluk bölgesinde dört tane yüzey boşluk fonon modu elde edilmiştir. Bunlardan 42.83 meV

ile en düşük enerjili olanı sadece birinci seviye N atomlarının [110]-[001] yönlerindeki titreşimleriyle oluşmuştur ve A' karakterli anyonik bir fonon modudur. Enerjisi 49.36 meV olan A' karakterli diğer boşluk fonon modu da ilk üç seviye N atomlarının titreşimleriyle oluşan bir anyonik moddur. A' karakterli 54.68 ve 61.86 meV enerjili boşluk fonon modlarının ilki ikinci ve üçüncü seviye N atomlarından kaynaklanırken, ikincisi her üç seviyedeki N atomlarının titreşimlerini içermektedir. Enerjisi 64.37 meV olan fonon modu ile 78.13 meV enerjili en yüksek enerjili fonon modu A'' karakterine sahiptirler. Bunlardan ilki ikinci seviye, ikincisi ise birinci seviye N atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleriyle oluşmaktadır. Optik-optik boşluk bölgesinde yer alan ve enerjisi 69.4 meV olan fonon modu ise A' karakterine sahiptir ve ikinci seviye N atomlarının [001] yönündeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.

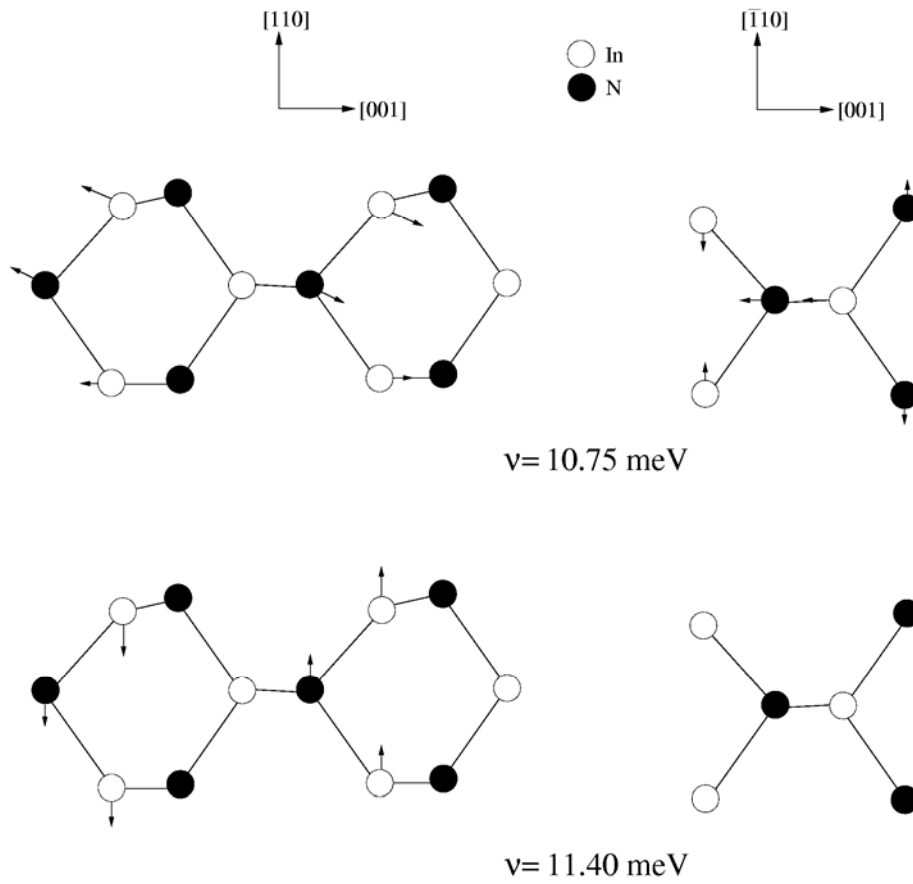
InN(110) yüzeyinin $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ yönünde gözlenen en düşük enerjili fonon modu hacim fonon spektrumunun üzerinde yer almaktadır. \bar{X} simetri noktasında enerjisi 10.1 meV olan bu fonon modu birinci seviye In atomlarının [110]-[001] yönünde titreşmeleriyle oluşmaktadır. Ayrıca bu fonon modu için üçüncü tabaka atomları yüzey normali yönünde titreşirken, yüzey N atomları da zig-zag zinciri yönünde hareket etmektedirler. Bu simetri noktasında enerjileri 19.5, 43.0, 52.0, 55.2, 58.51 ve 71.55 meV olan altı tane boşluk fonon modu elde edilmiştir. Bu fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 7.18'de sunulmaktadır. Hacim fononları arasında bulunan boşluk bölgesinde yer alan 19.5 meV enerjili fonon modu şekilde görüldüğü gibi birinci seviye In ve N atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Bu fonon modu BCM hesaplamalarından[32] elde edilen 20.68 meV enerjili fonon moduyla uyum içindedir. Enerjisi 43.0 meV olan ve akustik-optik boşluk bölgesinin ortasında bulunan fonon modu ise ağırlıklı olarak N atomlarının [110] yönünde titreşmeleri sonucu ortaya çıkmaktadır. 52.0 meV enerjili fonon modunun karakterinin belirlenmesinde tamamen ikinci seviye N atomları etkili olmaktadır. Bu fonon modu daha önce yapılan BCM çalışmasında[32] 49.0 meV enerjili olarak elde edilmiştir.



Şekil 7.18. InN(110) yüzeyinin \bar{X} simetri noktasında hesaplanan yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

Akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan diğer iki mod ise birinci ve üçüncü seviye N atomlarının [110]-[001] yönlerindeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Bunlardan enerjisi yüksek olan BCM hesaplamalarından elde edilen 56.0 meV enerjili modla oldukça uyumludur. Akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan boşluk fonon modlarının hepsi de anyonik fonon modlarıdır. Optik-optik boşluk bölgesinde yer alan ve enerjisi 71.55 meV olan fonon modu da ikinci seviye N atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleriyle oluşmaktadır. \bar{X} simetri noktasında elde edilen en yüksek enerjili yüzey optik fonon modu 84.17 meV enerjisine sahiptir. Bu fonon modunun atomik titreşim karakteri $\bar{\Gamma}$ ve \bar{X}' simetri noktalarında elde edilenle oldukça büyük bir benzerlik göstermektedir.

InN(110) yüzeyinin \bar{M} simetri noktasında en düşük enerjili fonon modunun enerjisi 10.75 meV olarak belirlenmiştir. Bu modun hemen üzerinde yer alan akustik fonon modunun enerjisi ise 11.4 meV bulunmuştur. Bu yüzey akustik fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 7.19'da görülmektedir. BCM hesaplamalarında[32] bu iki fonon modunun enerjileri 9.80 ve 10.95 meV olarak bulunmuştur. Hacim fonon modları arasındaki boşluk bölgesinde yer alan 21.89 meV enerjili fonon modu, \bar{X} simetri noktasındaki 19.5 meV enerjili fonon moduyla benzer titreşim karakterine sahiptir. Akustik-optik boşluk bölgesinde $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ simetri yönü boyunca toplam dört yüzey boşluk fonon modu elde edilmiştir. Bu fonon modlarının \bar{M} noktasındaki enerji değerleri 43.2, 53.36, 56.33 ve 57.84 meV olarak bulunmuştur. Bu fonon modlarının da titreşim karakterleri \bar{X} simetri noktasındaki eşdeğerleriyle oldukça benzerdir. Bu fonon modları $\bar{X} - \bar{M}$ yönünde de neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedirler. Son olarak optik-optik boşluk bölgesinde bulunan fonon modu ile en yüksek enerjili fonon modu da $\bar{X} - \bar{M}$ yönü boyunca neredeyse düz bir çizgi şeklinde olup titreşim karakterleri \bar{X} simetri noktasındakilerle aynıdır. Bu fonon modlarının enerjileri \bar{M} noktasında 71.43 ve 84.14 meV olarak bulunmuştur.



Şekil 7.19. InN(110) yüzeyinin \bar{M} simetri noktasında hesaplanan yüzey akustik fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

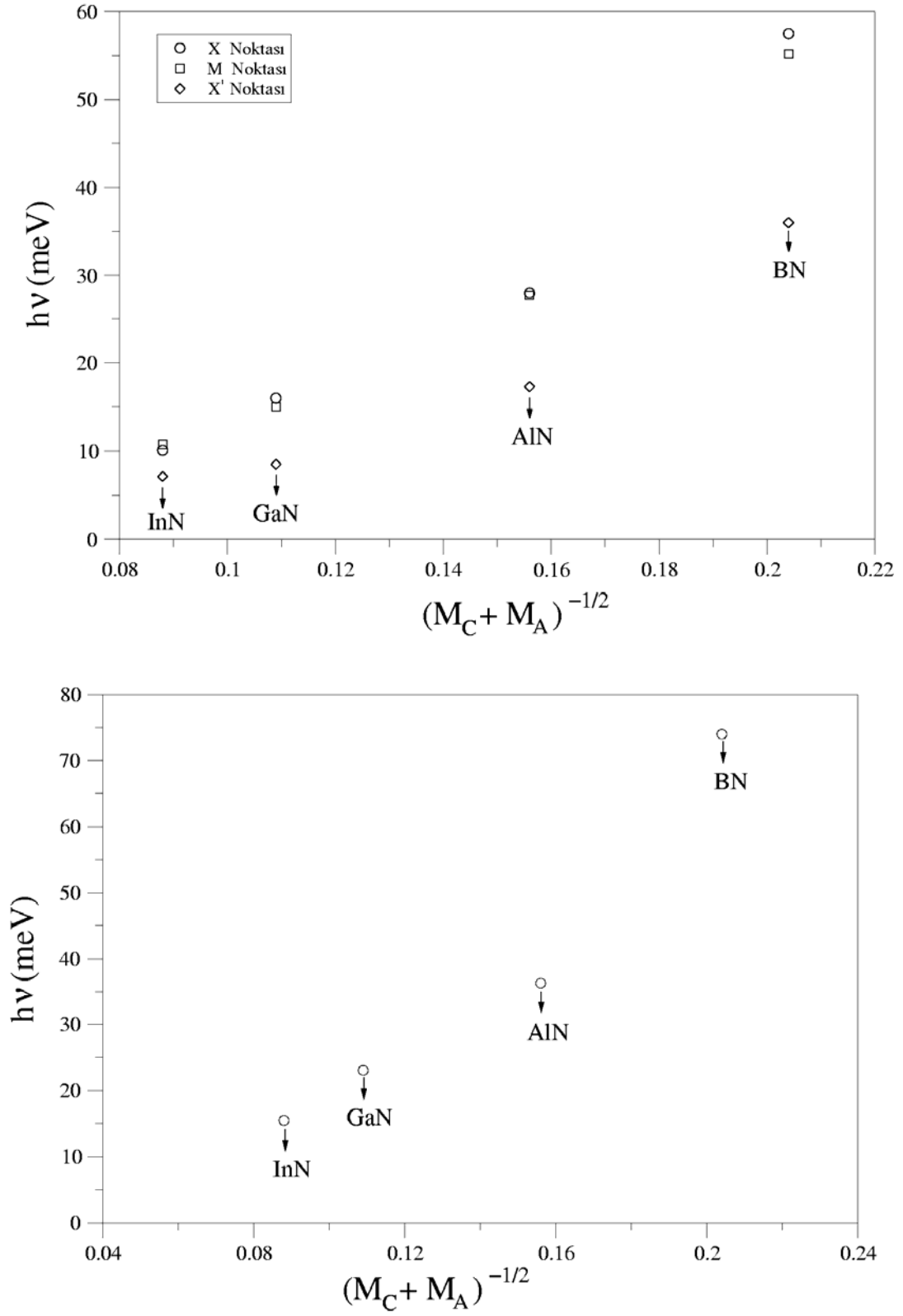
7.5. III-N(110) Yüzeylerinin Benzerlikleri ve Farklılıkları

III-N(110) yüzeyleri için yüzey atomik denge geometrisi birbirlerine tamamen benzerdir. Bununla birlikte yüzey atomik denge geometrisini kesin olarak belirleyen yüzey denge parametreleridir. Bu parametrelerin daha önce yapılan çalışmalardan elde edilen sonuçlarla uyum içinde olduğu görülmüştür[63,65,67,69]. Bu yüzeyler için ω açı değerleri ortalama $15 \pm 4^\circ$ olarak hesaplanırken, diğer III-V bileşikleri için bu değer $29 \pm 3^\circ$ olarak elde edilmiştir[112]. Ayrıca elde edilen açı değerlerinin $\Delta_{1\perp}$ parametresine bağlı olarak azaldığı ve ya arttığı bulunmuştur.

III-N(110) yüzeyleri için hesaplanan yüzey elektronik bant yapısı grafikleri de yapısal olarak birbirlerine benzemektedirler. Hepsinin için de hacim elektronik spektrumu ortasında bir boşluk bölgesi bulunmaktadır. Bunun yanı sıra tüm yüzeyler için hacim elektronik spektrumuna bakıldığında değerlik bantları ile iletkenlik

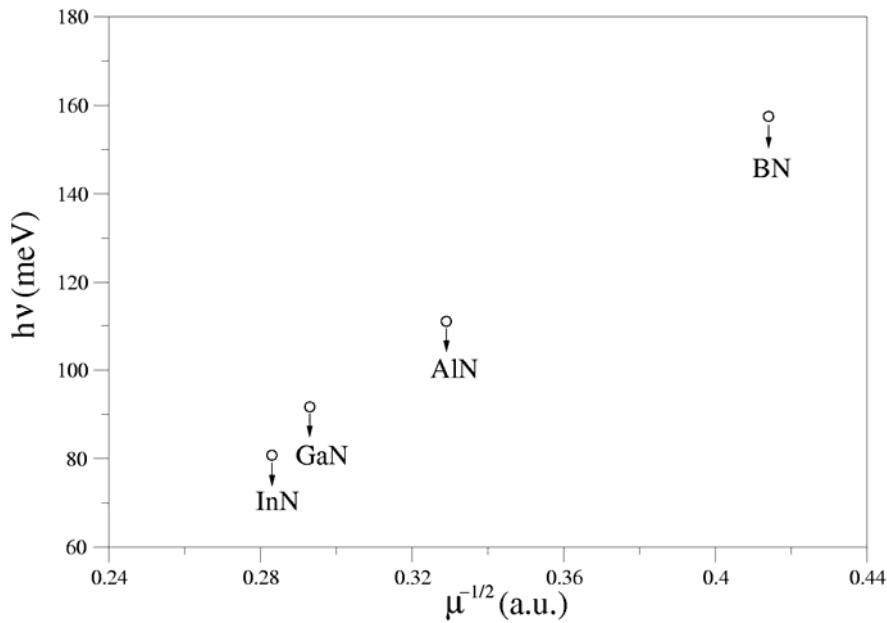
bantlarının oluşturduğu taralı kısımlar arasında da bir yasak enerji aralığının bulunduğu saptanmıştır. Yüzey elektronik bant yapısını anlatan düz çizgiler incelendiğinde tüm yüzeylerde simetri yönleri boyunca en yüksek enerjili dolu yüzey enerji bandı ile en düşük enerjili boş yüzey enerji bandı arasında bir enerji farkı bulunmaktadır. Bu enerji farkı BN(110) yüzeyi için en büyük iken, InN(110) yüzeyi için en küçük değerine ulaşmaktadır. Ayrıca hacim için elde edilen değerlik bandı bölgesinde bulunan boşluk bölgesinde her bir yüzey için biri anyon ve diğeri katyon atomlarından kaynaklanan iki tane yüzey enerji bandı elde edilmiştir. III-N(110) yüzeyleri için elde edilen atomik denge geometrisi ve elektronik bant yapısı diğer III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleriyle de benzer bir yapıda bulunmuştur[63,66,85,112,113,114,116-120].

III-N(110) yüzeyleri için elde edilen fonon dispersiyon grafiklerine bakıldığında birbirlerine oldukça benzedikleri görülmektedir. III-N(110) yüzeyleri için elde edilen fonon dispersiyon grafikleri genel yapıları bakımından III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri için elde edilen sonuçlarla da benzemektedirler[119-123]. BN(110) yüzeyi için hesaplanan grafikte akustik-optik ve optik-optik boşluk bölgeleri bulunmamaktadır. Bu özelliğiyle BN(110) yüzeyi diğer III-N(110) yüzeylerinden ayrılmaktadır. GaN(110) ve InN(110) yüzeylerinin dinamik özellikleri ise birbirlerine çok benzemektedir. Bunun nedeni katyon-anyon kütle farkının her iki yarıiletken için de oldukça büyük olmasıdır. Tüm III-N(110) yüzeyleri için en düşük enerjili fonon modu \bar{X}' noktasında ve ona yakın dalga vektörlerinde hacim fononlarının altında yer almaktadır. Ayrıca bu fonon modu \bar{X}' noktasında tüm yüzeyler için A' karakteri göstermektedir. Bu sonuç daha önceki III-V(110) yüzeylerine de benzemektedir. III-N(110) yüzeyleri için en düşük enerjili fonon modunun farklı enerji değerlerinde bulunması katyon-anyon kütle toplamına bağlıdır. Şekil 7.20'de bu fonon modlarının $(M_C + M_A)^{-1/2}$ ile değişiminin lineerliği açıkça görülmektedir. Burada M_C katyon atomunun, M_A ise anyon atomunun kütlesidir. Tüm III-N yüzeyleri için hacim fonon modları arasında yer alan boşluk bölgesinin \bar{X}' noktasında A' karakterine sahip bir boşluk fonon modu yer almaktadır. Fonon modlarının karakterlerinin belirlenmesinde her iki atomun da titreşime katkısı vardır.



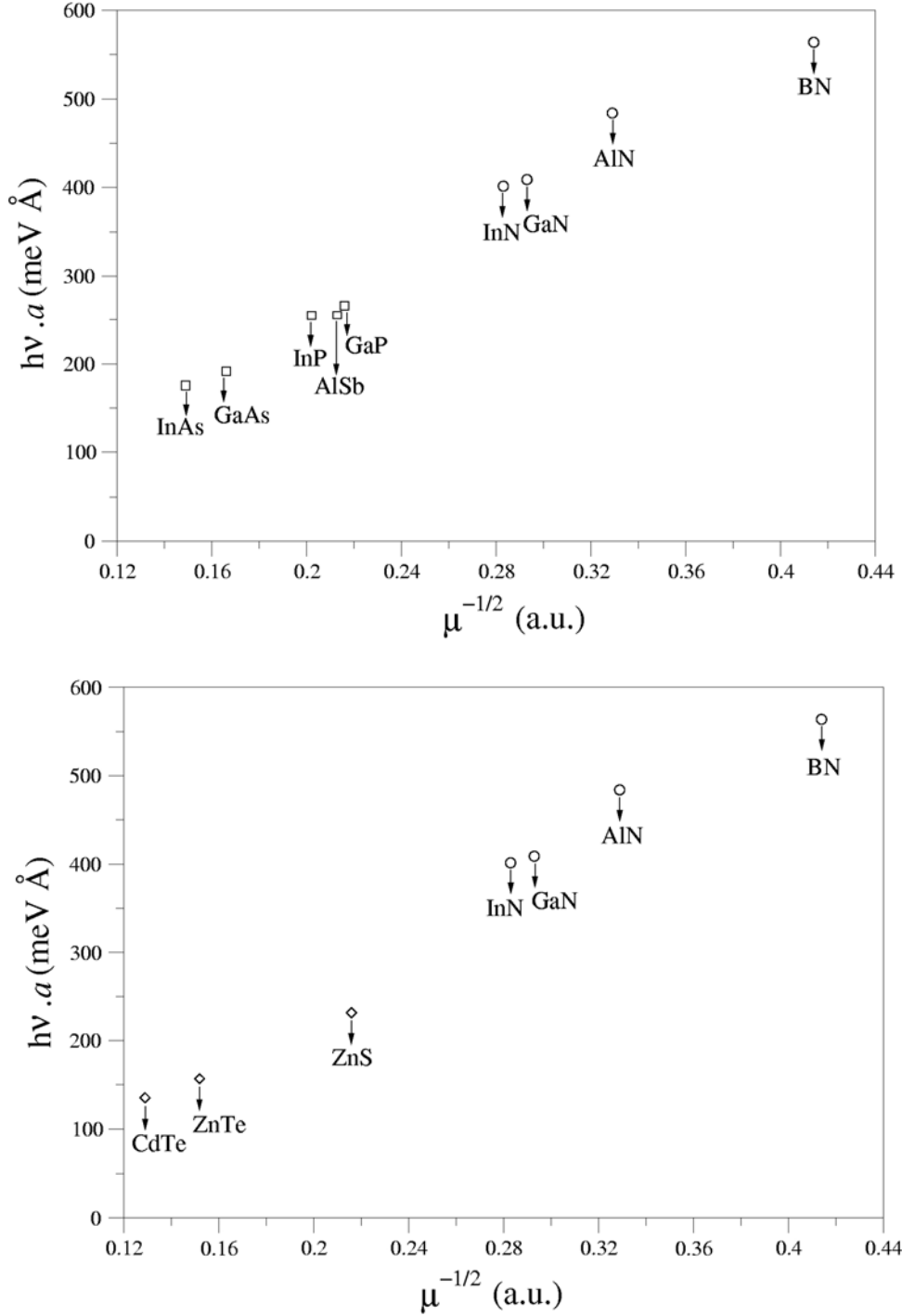
Şekil 7.20. Farklı simetri noktaları için en düşük enerjili fonon modunun(Rayleigh-Wave) ve \bar{X}' noktası için hacim fononları arasındaki boşluk bölgesinde(Stomach gap) bulunan yüzey fonon modlarının toplam kütle ile sistematik değişimi.

Bu fonon modları da hacim akustik spektrumunun içinde bulunduğu Şekil 7.20’de görüldüğü gibi $(M_C + M_A)^{-1/2}$ ile lineer bir değişim göstermektedirler. III-N(110) yüzeyleri için akustik-optik boşluk bölgesi incelendiğinde GaN(110) ve InN(110) yüzeyleri için tüm simetri yönleri boyunca tam ortada devam eden bir yüzey fonon modu bulunmuştur. Buna benzer bir mod GaP, InP ve InAs yüzeyleri için de elde edilmiştir[119]. Böylece bu fonon modunun katyon atomunun kütesinin anyon atomuna göre çok büyük olduğunda ortaya çıktığı söylenebilir. Bunun yanı sıra AlN(110) yüzeyi için elde edilen benzer modun ise $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ boyunca boşluk içinde yer aldığı görülmektedir. $\bar{\Gamma}$ noktasında InN(110) yüzeyi için bağ döndürme fonon modunun hesaplanamamış olması, bu yüzeyi diğerlerinden ayıran bir özellik olarak ortaya çıkmıştır. Yüzey dinamik özelliklerinin incelenmesinde en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun(Fuchs-Kliewer) da ele alınması faydalı olmaktadır. Bu fonon modu BN(110) yüzeyi dışındaki tüm III-N(110) yüzeyleri için hacim fonon modlarının üzerinde yer almaktadır ve $\bar{\Gamma}$ noktasında A'' titreşim karakterine sahiptir. III-V(110) yüzeyleri için bu fonon modunun titreşim karakteri, III-N(110) yüzeylerinden farklı bir şekilde A' olarak bulunmuştur. Fuchs-Kliewer fonon modunun Şekil 7.21’de görüldüğü gibi III-N(110) yüzeyleri için $1/\sqrt{\mu}$ ile lineer olarak değiştiği sonucu elde edilmiştir.



Şekil 7.21. III-N(110) yüzeyleri için hesaplanan en yüksek enerjili fonon modunun(Fuchs-Kliewer) indirgenmiş kütle ile sistematik değişimi.

Fakat bu mod III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleriyle birlikte ele alınırsa, Şekil 7.22'deki gibi $1/a\sqrt{\mu}$ ile değişimi lineerlik kazanmaktadır. Burada a örgü sabiti ve μ ise indirgenmiş kütedir.



Şekil 7.22. En yüksek enerjili fonon modunun(Fuchs-Kliewer) indirgenmiş kütle ile sistematik değişimi. İlk şekilde III-N(110) ve III-V(110) yüzeyleri için bir karşılaştırma yapılırken, diğer şekil ise III-N(110) ve II-VI(110) yüzeyleri kullanılarak elde edilmiştir.

Örgü sabitinin bu frekans değerinin değişiminde etkili olması, III-N(110) yüzeylerindeki yüzey optik fonon modu için hesaplanan kuvvet sabitlerinin, III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri için elde edilenlerden çok farklı olduğu anlamına gelmektedir. III-N(110) yüzeylerinin tüm simetri noktalarında bulunan en düşük ve en yüksek enerjili fonon modları için enerji değerleri Tablo 7.3'te verilmiştir.

Tablo 7.3. III-N(110) yüzeylerinin tüm simetri noktalarında elde edilen en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları. Fonon modları meV birimindedir.

III-N(110)	Rayleigh Wave			Fuchs-Kliewer				Kütle	
	\bar{X}	\bar{M}	\bar{X}'	$\bar{\Gamma}$	\bar{X}	\bar{M}	\bar{X}'	$M^{-1/2}$	$\mu^{-1/2}$
BN(110)	57.5	55.2	36.0	157.5	155.7	151.9	156.9	0.204	0.414
AlN(110)	28.0	27.8	17.3	111.0	110.5	107.0	111.0	0.156	0.329
GaN(110)	16.0	15.0	8.5	91.7	99.7	98.2	91.5	0.109	0.293
InN(110)	10.1	10.8	7.1	80.8	84.2	84.1	78.1	0.088	0.283

En yüksek enerjili yüzey optik fonon modu aşağıdaki formül yardımıyla da hesaplanabilmektedir[124]:

$$\omega_{FK} = \omega_{TO} [(\epsilon_0 + 1)/(\epsilon_\infty + 1)]^{1/2} \quad (7.1)$$

Burada ω_{TO} hacim fononları için Brillouin bölge merkezinde hesaplanan enine optik fonon modudur.

ϵ_0 ve ϵ_∞ ise sırasıyla durgun ve optik dielektrik sabitleridir. Burada görülen ϵ_0 değeri Lyddane-Sachs-Teller adıyla bilinen aşağıdaki formül yardımıyla elde edilmiştir:

$$\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} = \frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2} \quad (7.2)$$

Denklem 7.1 kullanılarak elde edilen sonuçlarla, hesaplamalar sonucu bulunan Fuchs-Kliewer fonon modları Tablo 7.4'te karşılaştırılmıştır.

Tablo 7.4. III-N(110) yüzeyleri için denklem 7.1 kullanılarak bulunan ve hesaplamalar sonucu elde edilen en yüksek enerjili fonon modlarının karşılaştırılması. Fonon modları meV birimindedir.

III-N-(110)	Fuchs-Kliewer (Denklemden)	Fuchs-Kliewer (Hesaplanan)	ω_{LO}	ω_{TO}	ϵ_{∞}	ϵ_0
BN(110)	156.1	157.5	161.2	130.8	4.51	6.85
AlN(110)	106.0	111.0	110.4	81.5	4.50	8.25
GaN(110)	89.3	91.7	92.0	70.7	5.95	10.08
InN(110)	72.0	80.8	72.5	58.9	9.70	14.71

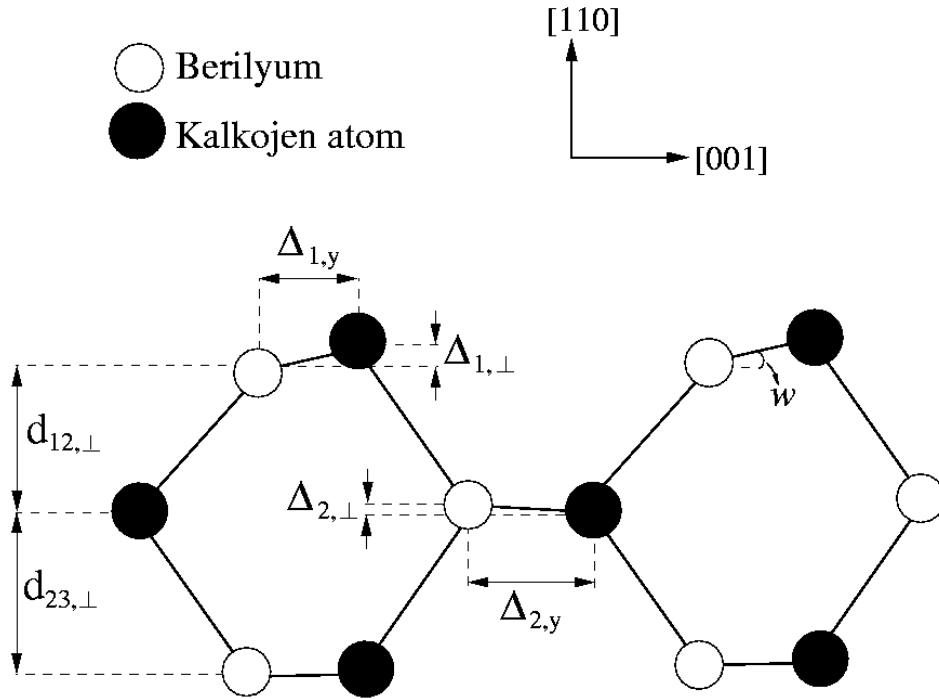
Yapılan hesaplamalar sonucunda en büyük farkın AlN(110) ve InN(110) yüzeyleri için elde edildiği görülmektedir. Bununla birlikte BN(110) ve GaN(110) yüzeyleri için yapılan hesaplamalarda ise birbirine oldukça benzer sonuçlar bulunmuştur. Yapılan işlemler bir yaklaşım olduğu için, her materyal için iyi sonuç vermeyebilir.

BÖLÜM 8. BERİLYUM KALKOJENLERİN YÜZEY ÖZELLİKLERİ

8.1. Giriş

II-VI grubu yarı iletkenlerin içinde yer alan Berilyum kalkojenlerin hacim özellikleri Bölüm 6'da geniş bir şekilde anlatılmıştır. Yapılan literatür araştırmalarına göre II-VI yüzeylerinin aksine BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin yüzey çalışmaları henüz tamamlanmamıştır. Bu bölümde Berilyum kalkojenlerin (110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri anlatılacaktır.

8.2. Berilyum Kalkojenlerin (110) Yüzeylerinin Yapısal Özellikleri



Şekil 8.1. Berilyum kalkojenlerin (110) yüzeyleri için elde edilen atomik denge geometrisinin yandan görünümü. Şekilde gösterilen yüzey denge parametreleri Tablo 8.1'de sunulmuştur.

BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin atomik denge geometrisinin yandan görünümü Şekil 8.1’de görülmektedir. Bu yüzeylerin yapısal özellikleri genel yapıları bakımından III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri ile oldukça büyük bir benzerlik göstermektedir[69,71,112,116,120,125,126]. Bu yapıya göre yüzey anyon(S,Se,Te) atomları yüzeyden dışarı doğru üstte yer alırken, katyon(Be) atomları ise hacim içine doğru hareket etmektedirler. Bunun nedeni anyon atomlarının komşu üç katyon atomuyla s^2p^3 bağlanması yapması ve katyon atomlarının da kendilerine yakın üç anyon atomuyla daha düzlemsel olan sp^2 tipi bağlanmayı tercih etmeleridir. İlk kez bu çalışmada hesaplanan ve Şekil 8.1’de görülen yapısal parametrelerin sayısal değerleri Tablo 8.1’de sunulmuştur.

Tablo 8.1. BeS(110), BeSe(110), BeTe(110) yüzeyleri için hesaplanan yüzey atomik denge geometrisi parametreleri. Bütün uzunluklar Å birimindedir. $\delta d/d$ ifadesi, hacim bağ uzunluğuyla karşılaştırıldığında, yüzey bağ uzunluğundaki kısalmayı göstermektedir.

	$\Delta_{1,\perp}$	$\Delta_{2,\perp}$	$\Delta_{1,y}$	$\Delta_{2,y}$	$d_{12,\perp}$	$d_{23,\perp}$	ω	$\delta d/d$ (%)
BeS(110)	0.466	0.062	0.942	1.997	1.332	1.717	26.3^0	4.03
BeSe(110)	0.543	0.065	1.007	1.280	1.395	1.822	28.3^0	3.50
BeTe(110)	0.614	0.065	1.118	1.391	1.515	1.977	28.8^0	2.70

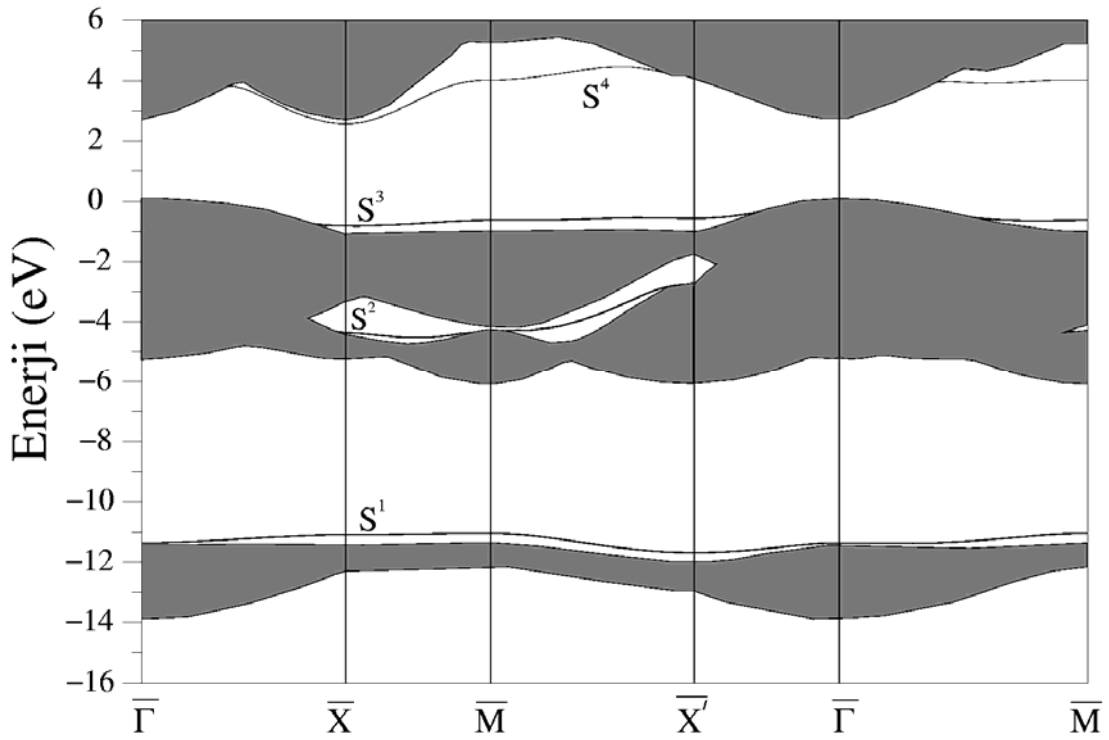
Daha önce farklı II-VI(110) yüzeyleri için yapılan hesaplamalarda $\Delta_{1,\perp}$ (ω) parametreleri CdSe, CdTe, ZnS ve ZnTe yarıiletkenleri için sırasıyla 0.590 (27.1^0), 0.752 (30.4^0), 0.524 (27.1^0) ve 0.675 (29.6^0) Å olarak belirlenmiştir[120,126]. Bu sonuçlar Tablo 8.1’de Berilyum kalkojenler için verilen parametrelere oldukça benzemektedir. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için yüzey atomları arasındaki bağ uzunlukları da sırasıyla 1.999 , 2.143 ve 2.350 Å olarak bulunmuştur. Bu bağ uzunlukları yine tablodan görülebileceği gibi hacim bağ uzunluklarına göre % 4.03, % 3.50 ve % 2.70 daha kısadır. Bununla birlikte BeS’den, BeTe’ye doğru $\Delta_{1,\perp}$ parametresi artarken, ω açısı değerinin de arttığı görülmektedir. Böylece Berilyum kalkojenler için elde edilen yüzey atomik denge geometrisinin şekillenmesinde de III-N(110) yüzeylerine benzer şekilde sistemin iyonikliğinin, katyon ve anyon atomları arasındaki yük geçişinin ve bağ uzunluğunu belirleyen kimyasal olayların etkili olduğu söylenebilir.

8.3. Berilyum Kalkojenlerin (110) Yüzeylerinin Elektronik Özellikleri

Bu kısımda BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin elektronik özellikleri ele alınacaktır.

8.3.1. BeS(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

BeS(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği Şekil 8.2'de görülmektedir.



Şekil 8.2. BeS(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölgeler hacim bant yapısını göstermektedir.

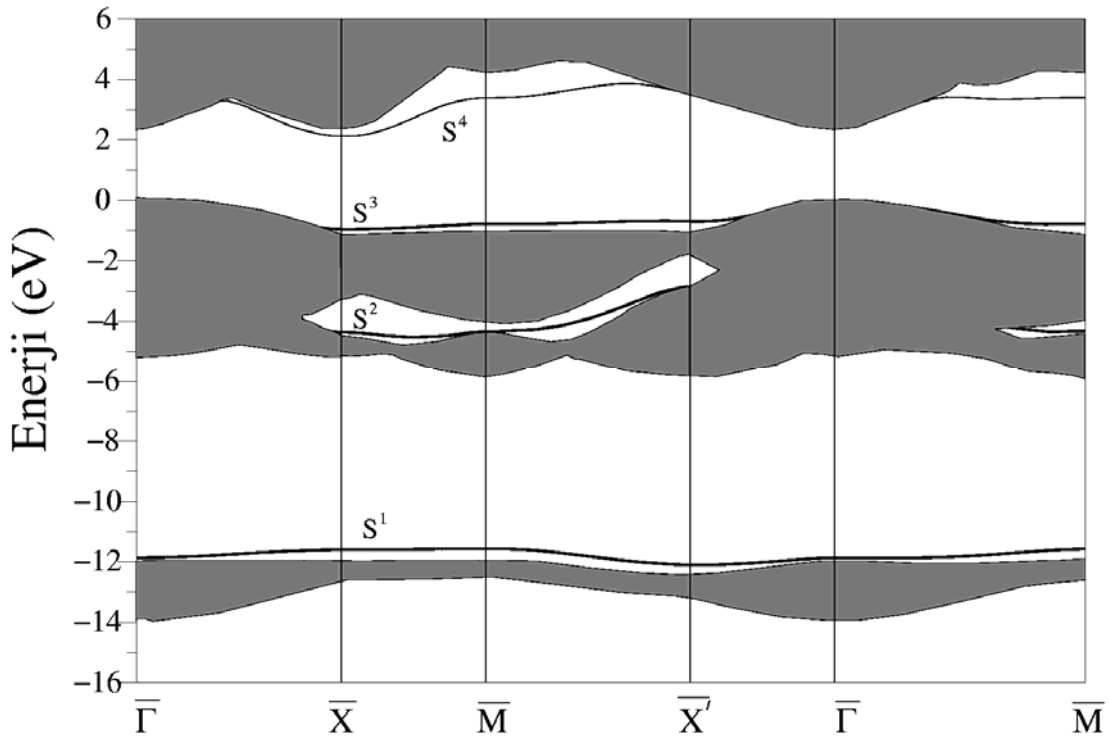
Şekilde taralı bölgeler hacim bant yapısını gösterir ve bunlar arasında kalan boşluklar ise hiç bir hacim elektronik seviyesinin yer alamayacağı yasak enerji aralıklarıdır. Şekil 8.2'nin alt kısmında yer alan geniş boşluk bölgesinde $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{M} ve \bar{X}' noktalarında hesaplanan enerji aralığı değerleri sırasıyla 6.23, 6.15, 5.23 ve 5.95 eV olarak elde edilmiştir. Üstte yer alan boşlukta ise yine aynı noktalar için enerji aralıkları 2.62, 3.85, 6.31 ve 5.08 eV olarak bulunmuştur. BeS(110) yüzey elektronik bant yapısı grafiğindeki boşluk bölgelerinde bulunan ve tamamen yüzey

atomlarından kaynaklanan dört tane yüzey elektronik enerji bandı hesaplanmıştır. Bu enerji bantları S^1 , S^2 , S^3 ve S^4 olarak isimlendirilmiştir. Bu enerji bantlarından S^1 , S^2 ve S^3 dolu yüzey enerji bantları olup koyu çizgilerle gösterilmişlerdir. S^4 ise boş yüzey iletkenlik bandını göstermektedir. Tüm simetri yönleri boyunca -11.5 eV civarında, neredeyse düz bir çizgi şeklinde bulunan en düşük enerjili S^1 bandı anyon atomlarının s elektronlarından kaynaklanmaktadır. Hacim elektronik spektrumu içerisinde yer alan boşluk bölgesinde bulunan S^2 bandı \bar{X} noktasında ortaya çıkmakta ve $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ boyunca enerjisini artıracak şekilde bir dispersiyon göstererek devam etmektedir. Bu bandın oluşumunda daha çok yüzey katyon atomları etkili olmaktadır. Şekil 8.2'nin üst kısmında yer alan boşluk bölgesinde ise iki yüzey elektronik enerji bandı bulunmuştur. Bunlardan S^3 ile gösterilen en yüksek dolu yüzey elektronik enerji bandı olup anyon (Sülfür) atomlarından kaynaklanmaktadır. Bu enerji bandı şekilden de görüldüğü gibi $\bar{M} - \bar{X}'$ boyunca neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir ve bu özelliğiyle diğer III-V(110) yüzeylerine benzemektedir[116]. S^4 bandı ise en düşük enerjili boş yüzey iletkenlik bandıdır ve oluşumuna katyon (Berilyum) atomları neden olmaktadır. Bu enerji bandı \bar{X} noktasında minimum değerine sahiptir ve $\bar{\Gamma}$ ile \bar{M} noktalarına doğru artmaktadır. Bu şekilde bir davranış diğer III-V(110) ve II-VI(110) yüzeylerindeki oldukça benzemektedir[116,120].

8.3.2. BeSe(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

BeSe(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği Şekil 8.3'de görülmektedir. Bu bant yapısı da BeS(110) yüzeyi ile çok büyük bir benzerlik göstermektedir. Yine boşluk bölgelerinde yer alan yüzey elektronik enerji bantları S^1 , S^2 , S^3 ve S^4 olarak adlandırılmıştır. Burada S^1 , S^2 ve S^3 dolu yüzey enerji bantlarını gösterirken, boş yüzey iletkenlik bandı ise S^4 ile belirtilmiştir. Şekilde hacim elektronik spektrumu arasında yer alan geniş boşluklardan alt kısımdaki için enerji aralığı değerleri $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{M} ve \bar{X}' simetri noktalarında sırasıyla 6.77, 6.28, 6.12 ve 6.62 eV olarak hesaplanmıştır. Aynı simetri noktaları için üst kısımdaki boşluk bölgesinde ise enerji aralıkları 2.28, 3.54, 5.35 ve 4.62 eV şeklinde belirlenmiştir. Şekil 8.3'ün alt kısmındaki boşluk bölgesinde bulunan S^1 bandı -12 eV civarında neredeyse düz bir çizgi şeklinde ilerlemektedir ve anyon atomlarından

kaynaklanmaktadır. Hacim bölgesinde bulunan boşluk bölgesinde $\bar{X}-\bar{M}-\bar{X}'$ yönleri boyunca artarak ilerleyen S^2 bandı bulunmaktadır. Bu bandın oluşumuna yüzey Be atomları katkı yapmaktadır. Daha çok yüzey Se atomlarının katkılarıyla meydana gelen ve en yüksek enerjili dolu yüzey enerji bandı olan S^3 , BeS(110) yüzeyine benzer şekilde $\bar{X}-\bar{M}-\bar{X}'$ yönleri boyunca neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir.



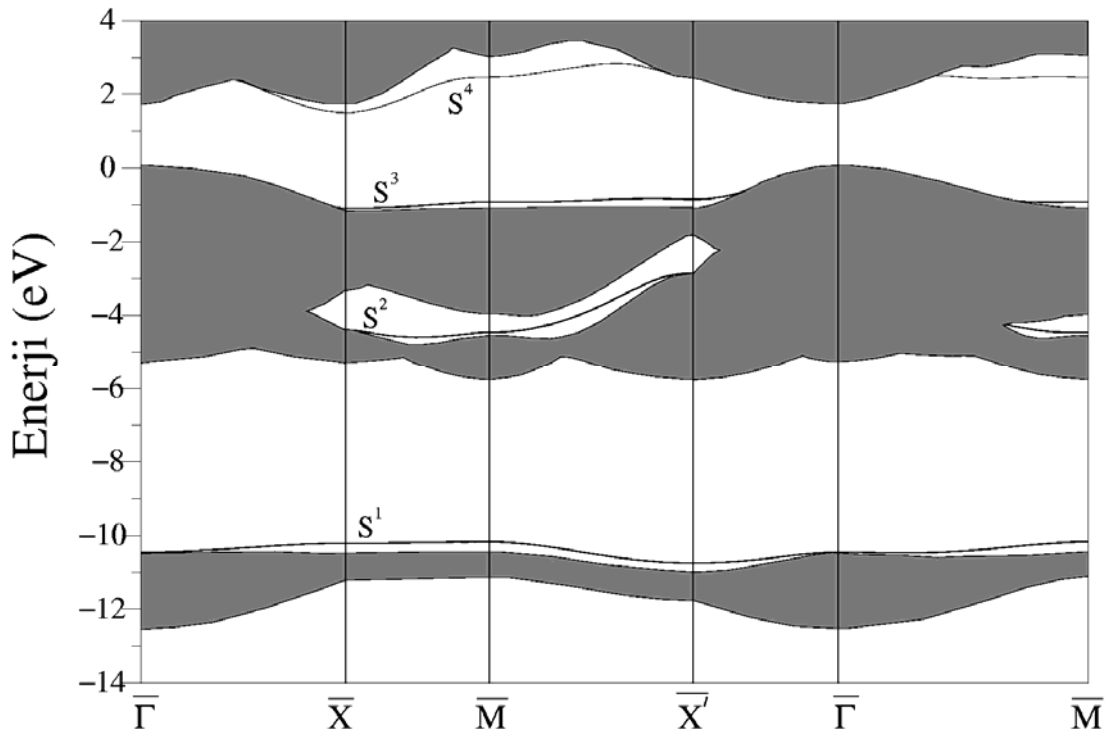
Şekil 8.3. BeSe(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölgeler hacim bant yapısını göstermektedir.

BeSe(110) yüzeyi için S^4 bandı incelendiğinde \bar{X} 'de bir minimuma sahip olduğu ve $\bar{X}-\bar{\Gamma}$ ile $\bar{X}-\bar{M}-\bar{X}'$ yönlerinde arttığı görülmektedir. Bu bandın oluşumuna daha çok yüzey Be atomları katkı yapmaktadır. Yüzey Brillouin Bölgesi sınırlarında S^3 ve S^4 enerji bantları arasındaki ayrılmanın yaklaşık 3.5 eV olduğu bulunmuştur.

8.3.3. BeTe(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

Şekil 8.4 BeTe(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiğini göstermektedir. Bu grafikte taralı kısımlar hacim elektronik spektrumunu gösterirken, çizgiler ise yüzey enerji bantlarıdır. Hacim elektronik yapısı ele

alındığında BeS(110) ve BeSe(110) yüzeylerine benzer şekilde iki geniş boşluk bölgesi göze çarpmaktadır. Şeklin alt kısmında bulunan ve daha geniş olan boşluk bölgesinde $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{M} ve \bar{X}' simetri noktaları için enerji aralığı değerleri sırasıyla 5.13, 5.13, 4.63 ve 5.17 eV olarak elde edilmiştir. Üst kısımdaki boşluk bölgesinde ise yine aynı simetri noktalarında enerji aralıkları 1.64, 2.89, 4.1 ve 3.5 eV bulunmuştur.



Şekil 8.4. BeTe(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölgeler hacim bant yapısını göstermektedir.

BeTe(110) yüzeyi için daha önce anlatılan diğer iki yüzeye benzer şekilde yine dört tane yüzey elektronik enerji bandı elde edilmiştir. S^1 , S^2 , S^3 ve S^4 olarak isimlendirilen bu enerji bantlarından koyu çizgilerle gösterilen ilk üçü dolu değerlik bantlarını, S^4 ise boş iletkenlik bandını temsil etmektedir. S^1 ile gösterilen ve tüm simetri yönleri boyunca -10.5 eV civarında bir enerjiye sahip olan enerji bandının oluşumuna yine yüzey anyon atomları neden olmaktadır. Ortadaki boşluk bölgesinde yer alan S^2 bandı ise yüzey Be atomlarından kaynaklanmakta olup $\bar{X}-\bar{M}-\bar{X}'$ boyunca artmaktadır. En yüksek enerjili dolu yüzey enerji bandı S^3 , \bar{X} simetri noktasında bir minimuma sahiptir ve simetri yönleri boyunca neredeyse hiç

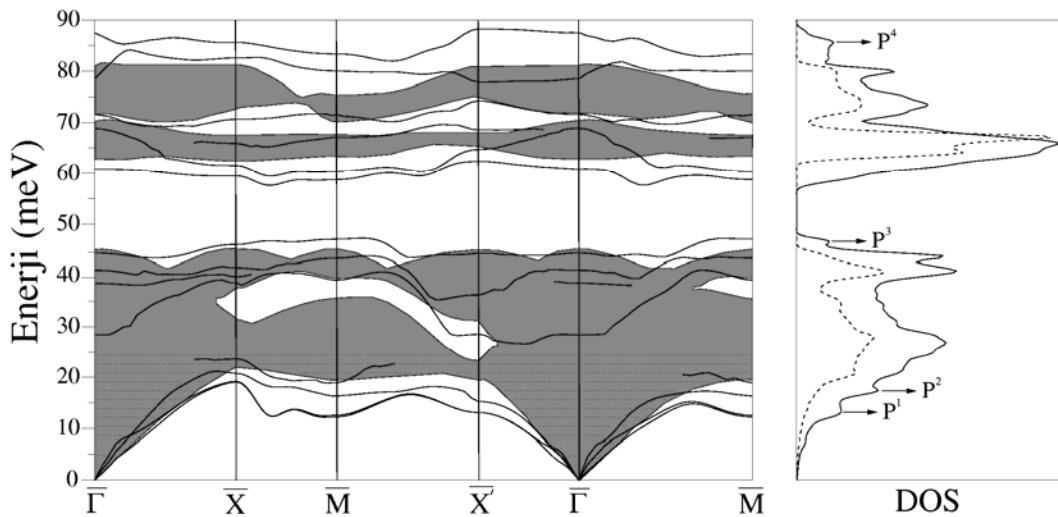
dispersiyon göstermemektedir. Bu enerji bandının oluşumuna en büyük katkıyı yüzey Te atomları yapmaktadır. En düşük enerjili boş yüzey iletkenlik bandı ise daha çok Be atomlarından kaynaklanmakta olup, \bar{X} simetri noktasında bir minimuma sahiptir. BeS(110) ve BeSe(110) yüzeylerine benzer şekilde oluşan bu enerji bandı yine $\bar{X} - \bar{\Gamma}$ ve $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ yönlerinde artmaktadır.

8.4. Berilyum Kalkojenlerin (110) Yüzeylerinin Titreşim Özellikleri

Bu kısımda BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin titreşim özellikleri incelenecektir.

8.4.1. BeS(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

BeS(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon dispersiyon grafiği Şekil 8.5'de görülmektedir. Bu grafikte taralı kısımlar hacim fonon spektrumunu gösterirken koyu çizgiler de yüzey fononlarına aittir. Grafiğe bakıldığında ilk göze çarpan hacim fononları arasında yer alan akustik-optik boşluk bölgesidir. Tüm simetri yönleri boyunca ortalama 18.3 meV genişliğinde olan bu boşluk bölgesi Be ve S atomları arasındaki kütle farkından kaynaklanmaktadır.

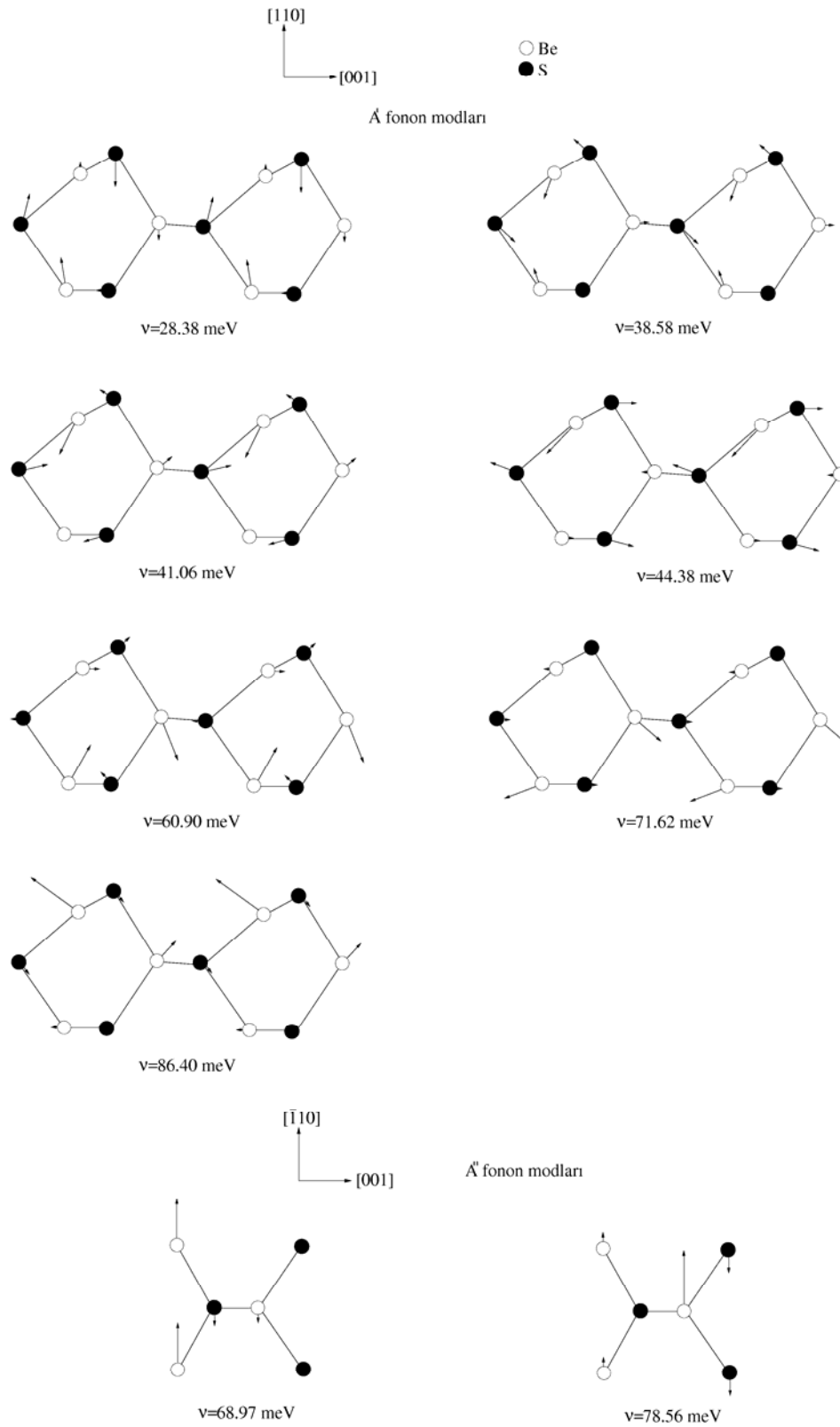


Şekil 8.5. BeS(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri. Taralı bölge hacim durumundaki kübik BeS için fonon enerjilerini gösterirken, kalın çizgiler hesaplanan yüzey fonon eğrileridir. Sağ taraftaki grafikte ise kesikli çizgi hacim fononları için ve düz çizgi ise yüzey fononları için durum yoğunluğu eğrilerini göstermektedir.

En düşük enerjili fonon modu $\bar{X}-\bar{M}$ ve $\bar{M}-\bar{X}'$ yönleri boyunca açıkça hacim akustik fonon modlarının altında bulunmaktadır. Akustik-optik boşluk bölgesine bakıldığında tüm simetri yönleri boyunca 60.0 meV civarında neredeyse hiç dispersiyon göstermeyen bir yüzey boşluk fonon modu görülmektedir. En yüksek enerjili yüzey optik fonon modu hacim optik fonon modlarının tamamen üzerinde yer almakta ve $\bar{\Gamma}-\bar{X}'$ boyunca neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir.

Şekil 8.5'in sağ tarafında yer alan grafik ise hacim ve yüzey fononları kullanılarak hesaplanan fonon durum yoğunluğu grafiğidir. Bu grafikte kesikli çizgi hacim fononları kullanılarak hesaplanırken, düz çizgi ise yüzey fononlarından yararlanılarak elde edilmiştir. Grafikte görülen P^1 piki en düşük enerjili ve onun bir üstünde yer alan yüzey akustik fonon modlarından kaynaklanmaktadır. P^2 pikinin oluşma nedeni ise $\bar{X}-\bar{M}-\bar{X}'$ yönleri boyunca hacim akustik fononlarının altında ilerleyen üçüncü akustik fonon modudur. 47.0 meV civarında ortaya çıkan P^3 piki, $\bar{X}-\bar{M}$ yönünde neredeyse düz bir çizgi şeklinde yerleşen yüzey boşluk fonon modundan kaynaklanmaktadır. Fonon durum yoğunluğu grafiğinin en üstünde yer alan P^4 pikinin nedeni ise açıkça, özellikle $\bar{\Gamma}-\bar{X}'$ boyunca düz bir çizgi şeklinde devam eden en yüksek enerjili yüzey optik fonon modudur.

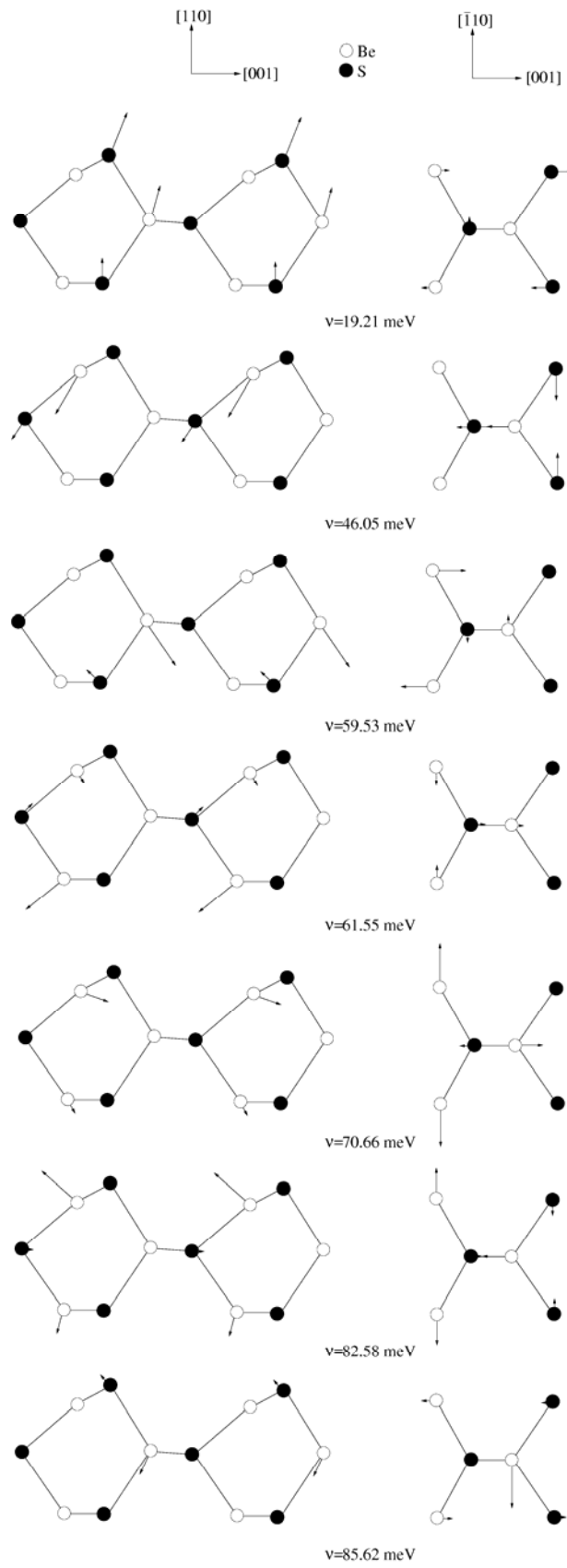
Yüzey fonon dispersiyon grafiğinin Brillouin Bölge merkezinde hesaplanan fonon modlarından 7 tanesi A' , diğer 2 tanesi ise A'' karakterine sahiptir. Enerjileri 28.38, 38.58, 41.06, 44.38, 60.90, 71.62, 86.40 meV olan A' ve 68.97, 78.56 meV olan A'' fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 8.6'da görülmektedir. İlk A' karakterli fonon modunun titreşim karakterinin belirlenmesinde ilk iki seviye S atomları ile üçüncü seviye Be atomları önemli katkı yapmaktadır. Enerjileri 38.58 ve 41.06 meV olan fonon modları yüzey fiziği çalışmalarında önemli bir yeri olan bağ döndürme fonon modlarıdır. Enerjisi 44.38 meV olan fonon modu ise bağ germe modu olarak tanımlanabilir. Akustik-optik boşluk bölgesinde bulunan ve enerjisi 60.90 meV olan fonon modu ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmakta olup, bağ döndürme modu olarak ifade edilebilir.



Şekil 8.6. BeS(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen \bar{A}' ve \bar{A}'' karakterli fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

İkinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanan diğer bir A' karakterli fonon modunun enerjisi 71.62 meV değerindedir. Bu fonon modu özellikle Be atomlarının titreşimleriyle oluştuğu için katyonik fonon modu olarak tanımlanır. BeS(110) yüzeyinin $\bar{\Gamma}$ noktasında hesaplanan ve ilk iki seviye Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanan en yüksek enerjili fonon modunun enerjisi 86.40 meV olarak belirlenmiştir. Enerjileri 68.97 ve 78.56 meV olan A'' fonon modlarının titreşim karakterleri sırasıyla ikinci ve birinci seviye yüzey atomlarının zig-zag zinciri yönündeki zıt titreşimleri ile belirlenmektedir.

Brillouin Bölgesi'nin \bar{X} simetri noktasında hesaplanan fonon modları için titreşim karakterini belirlemek daha zordur. Çünkü bu modların her birinin titreşim karakterleri, atomların [110], [001] ve $[\bar{1}10]$ olmak üzere her üç yönde de titreşimlerini içerir. BeS(110) yüzeyi için bu simetri noktasında elde edilen en önemli fonon modları, boşluk bölgelerinde bulunan yüzey fonon modları ile en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modlarıdır. Bu fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 8.7'de görülmektedir. En düşük enerjili yüzey akustik fonon modunun enerjisi 19.21 meV olup, birinci ve üçüncü seviye S atomları ile ikinci seviye Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Akustik-optik boşluk bölgesinde elde edilen fonon modlarının enerjileri ise 46.05, 59.53 ve 61.55 meV olarak bulunmuştur. Bu fonon modlarının titreşim karakterlerinin belirlenmesinde sırasıyla birinci, ikinci ve üçüncü seviye Be atomları önemli rol oynamaktadır. Bunun yanı sıra şekilde görüldüğü gibi S atomları da bu titreşimlere katkıda bulunmaktadır. Optik-optik enerji aralığında bulunan 70.66 meV enerjili fonon modu katyonik fonon modu olup, her üç seviyedeki Be atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Hacim optik fonon modlarının hemen üzerinde yer alan 82.58 meV enerjili fonon modu da açık bir yüzey optik fonon modudur. Bu fonon modunun titreşim karakteri de Şekil 8.7'de görülmektedir. Şekilde görülen ve enerjisi 85.62 meV olan en yüksek enerjili fonon modu özellikle yüzey Be atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleriyle ikinci seviye Be atomlarının [110][001] yönlerindeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.



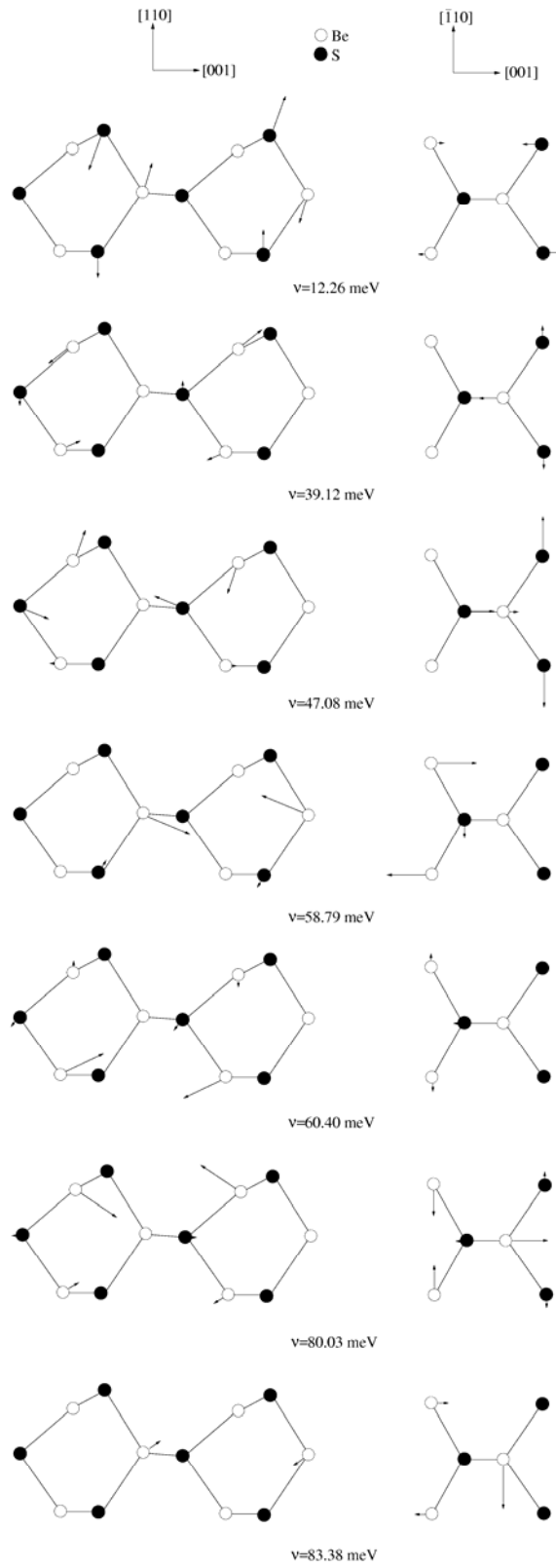
Şekil 8.7. BeS(110) yüzeyi için \bar{X} simetri noktasında hesaplanan boşluk bölgelerinde bulunan yüzey fonon modları ile en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları.

Şekil 8.5’de görülen \bar{M} simetri noktasındaki fonon modlarına ait atomik titreşim şekilleri de, \bar{X} simetri noktasına benzer şekilde her üç yönde birlikte ele alınmalıdır. BeS(110) yüzeyi için \bar{M} simetri noktasında hesaplanan boşluk bölgelerinde bulunan yüzey fonon modları ile en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları Şekil 8.8’de görülmektedir. En düşük enerjili yüzey akustik fonon modunun enerjisi 12.26 meV olarak hesaplanmıştır. Bu fonon modunun atomik titreşim karakteri birinci ve üçüncü seviye S atomları ile ikinci seviye Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.

Diğer yüzey akustik fonon modlarının atomik titreşim şekilleri de genel yapıları bakımından Rayleigh Wave fonon moduna benzemektedir. Hacim fonon modları arasında yer alan boşluk bölgesinde bulunan 39.12 meV enerjili fonon modu birinci ve üçüncü seviye Be atomlarının yüzey normal yönündeki titreşimleri ile yüzey S atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinden oluşmaktadır.

Bu simetri noktasında da \bar{X} simetri noktasında olduğu gibi akustik-optik boşluk bölgesinde üç yüzey boşluk fonon modu bulunmuştur. Enerjileri 47.08, 58.79 ve 60.40 meV olan bu fonon modları Şekil 8.8’den de açıkça görüleceği gibi \bar{X} noktasındaki eşdeğerleriyle benzer titreşim karakterine sahiptirler.

En yüksek enerjili fonon modunun enerjisi 83.38 meV olup, özellikle birinci seviye Be atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinden kaynaklanan bir katyonik fonon modu olarak elde edilmiştir. Bu fonon modunun hemen altında bulunan yüzey optik fonon modunun enerjisi 80.03 meV’dir ve titreşim karakteri Şekil 8.8’de görülmektedir.



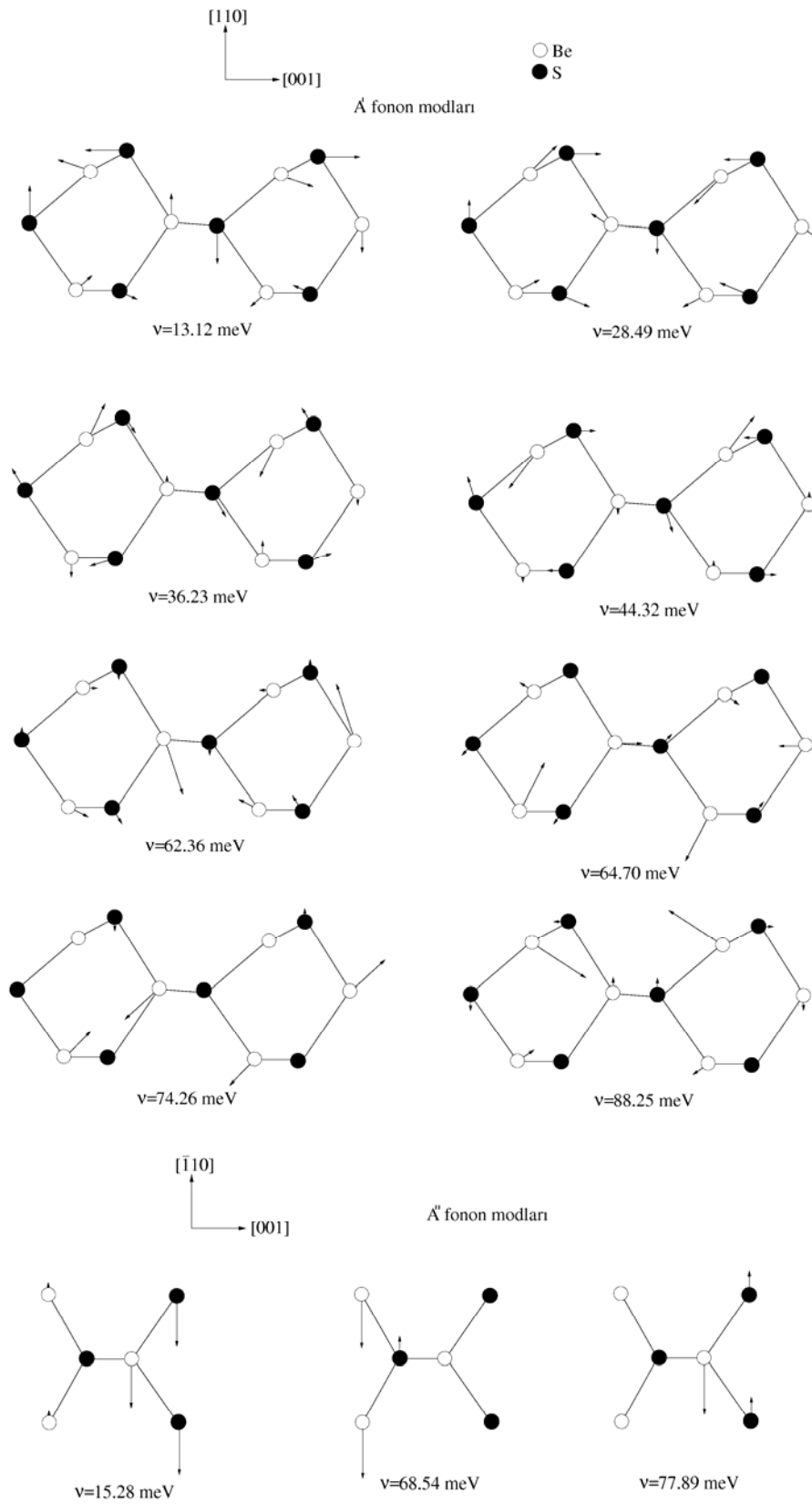
Şekil 8.8. BeS(110) yüzeyi için \bar{M} simetri noktasında hesaplanan boşluk bölgelerinde bulunan yüzey fonon modları ile en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları.

BeS(110) yüzeyinin \bar{X}' noktasında elde edilen yüzey fonon modlarını da $\bar{\Gamma}$ noktasına benzer şekilde A' ve A'' olarak iki grupta toplamak mümkündür. Bu simetri noktasında 8 tanesi A' ve 3 tanesi de A'' olmak üzere toplam 11 fonon modu elde edilmiştir. Bu fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 8.9'da görülmektedir.

En düşük enerjili yüzey akustik fonon modunun enerjisi 13.12 meV olarak elde edilmiştir. Bu fonon modu her üç seviyedeki Be ve S atomlarının [110]-[001] yönlerindeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Bu fonon modunun hemen üstünde yer alan yüzey akustik fonon modu ise A'' karakterine sahip olup, yüzey Be ve S atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleriyle oluşmaktadır. Enerjisi 28.49 meV olan fonon modu hacim fononları arasında yer alan boşluk bölgesinde yer almaktadır ve bir bağ döndürme fonon modu olarak tanımlanabilir.

Akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan fonon modlarının enerjileri 62.36 ve 64.70 meV olarak bulunmuştur. Bu fonon modlarının atomik titreşim karakterlerini sırasıyla ikinci ve üçüncü seviyede bulunan Be atomları belirlemektedir. BeS(110) yüzeyi için optik-optik boşluk bölgesinde enerjileri 68.54 ve 74.26 meV olan iki yüzey boşluk fonon modu elde edilmiştir. Bu modlardan ilki ikinci seviye Be ve S atomlarının zig-zag zinciri yönünde birbirlerine zıt titreşimlerinden kaynaklanan bir A'' fonon modudur. Optik-optik boşluk bölgesinde bulunan ikinci mod ise A' karakterinde olup, daha çok ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimleri ile oluşmaktadır.

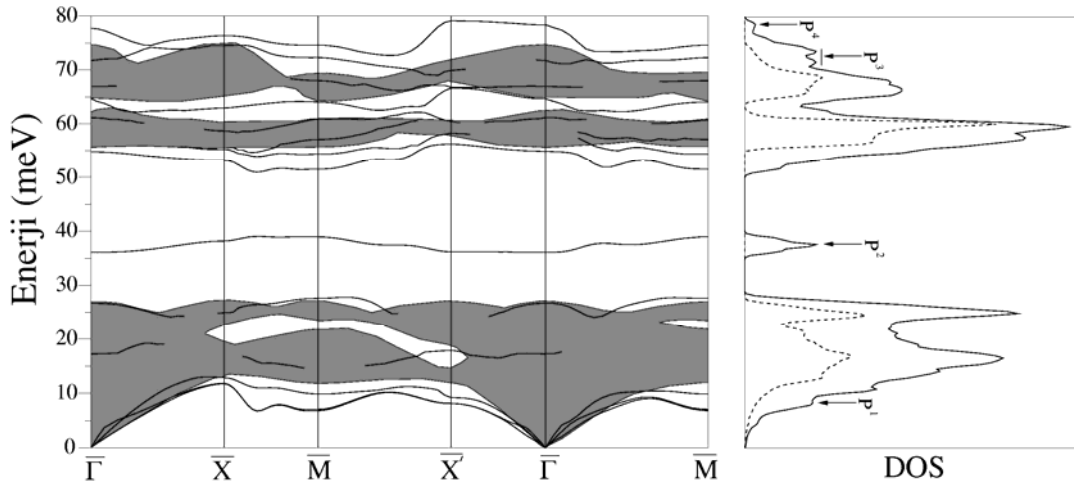
Enerjisi 88.25 meV olan en yüksek enerjili fonon modu ise A' karakterine sahiptir ve bu modun oluşumuna en büyük katkı yüzey Be atomlarından gelmektedir.



Şekil 8.9. BeS(110) yüzeyi için \bar{X}' noktasında hesaplanan yüzey fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

8.4.2. BeSe(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

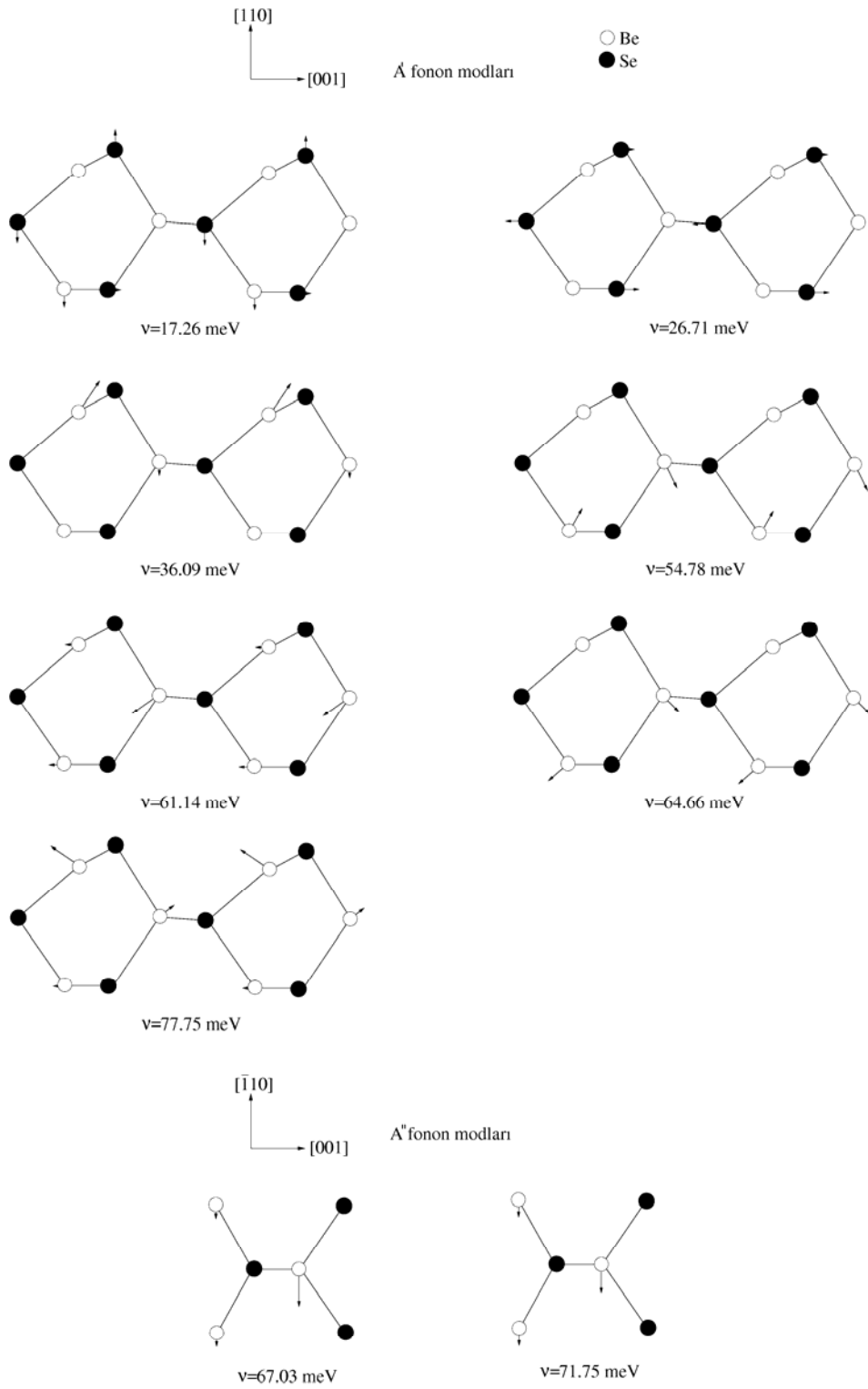
BeSe(110) yüzeyi için hesaplanan fonon dispersiyon grafiği Şekil 8.10'da sunulmuştur. Bu grafikte taralı bölgeler hacim fonon modlarını gösterirken kalın çizgiler yüzey fonon modlarıdır. BeSe(110) yüzeyi için elde edilen yüzey fonon dispersiyon grafiğinde BeS(110) yüzeyine benzer şekilde hacim fononları arasında geniş bir akustik-optik boşluk bölgesi yer almaktadır. Bu boşluk bölgesi tüm simetri yönleri boyunca ortalama 29.0 meV enerji aralığına sahiptir. Akustik-optik boşluk bölgesinde iki yüzey boşluk fonon modu elde edilmiştir. Bunlardan daha düşük enerjiye sahip olan mod tüm simetri yönleri boyunca neredeyse düz bir çizgi şeklinde ilerlemektedir. Diğeri ise $\bar{\Gamma}-\bar{X}$ ve $\bar{\Gamma}-\bar{X}'$ yönleri dışında gözle görülür bir dispersiyon göstermektedir. $\bar{\Gamma}-\bar{X}$ ve $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ simetri yönlerinin küçük dalga vektörleri dışında, tüm simetri yönlerinde açıkça hacim fononlarının altında yer alan en düşük enerjili yüzey akustik fonon modu, BeS(110) yüzeyine oldukça benzemektedir. En yüksek enerjili yüzey optik fonon modu Şekil 8.10'dan da görüldüğü gibi tüm simetri yönlerinde hacim fononlarının üzerinde yer almaktadır ve $\bar{\Gamma}-\bar{X}'$ yönünde neredeyse düz bir çizgi şeklinde ilerlemektedir.



Şekil 8.10. BeSe(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri. Taralı bölge hacim durumundaki kübik BeSe için fonon enerjilerini gösterirken, kalın çizgiler hesaplanan yüzey fonon eğrileridir. Sağ taraftaki grafikte ise kesikli çizgi hacim fononları için ve düz çizgi ise yüzey fononları için durum yoğunluğu eğrilerini göstermektedir.

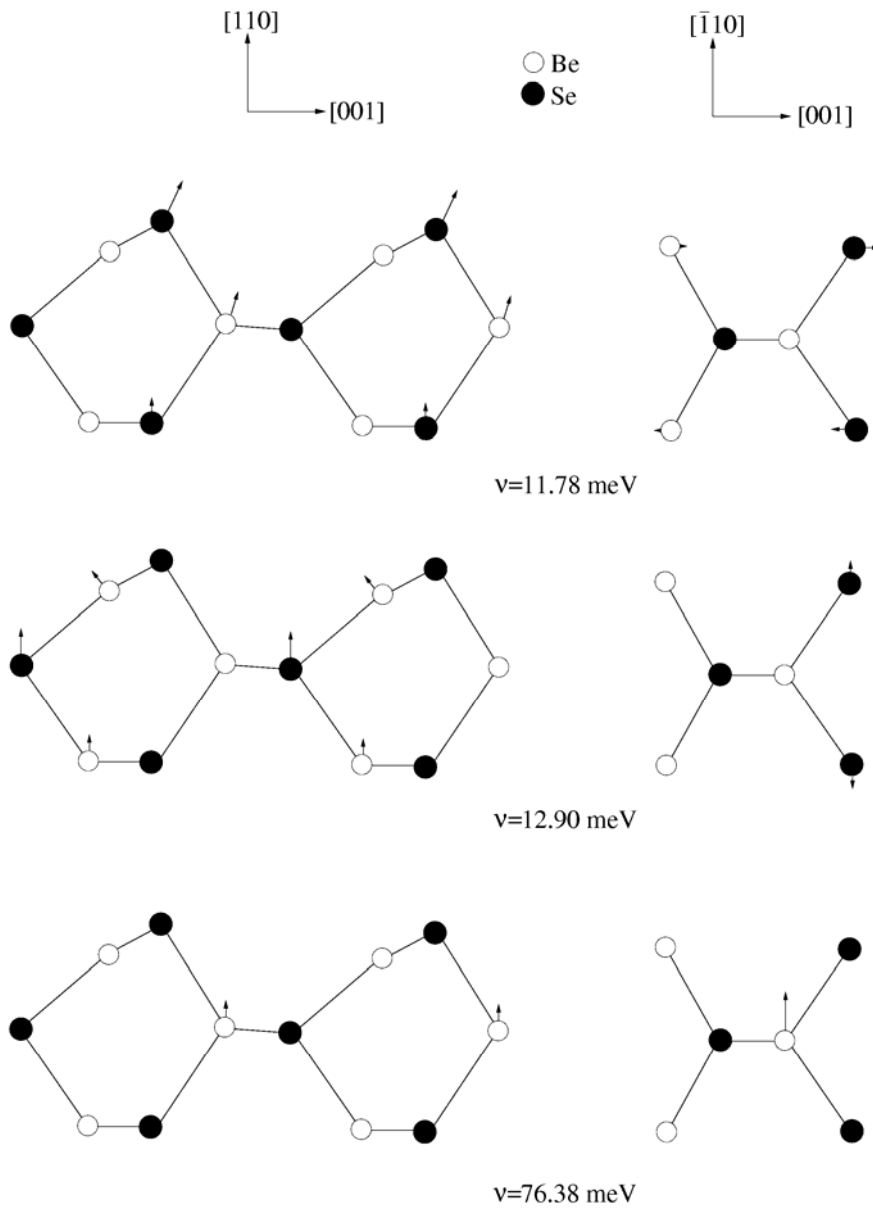
Şekil 8.10'un sağ tarafında yer alan fonon durum yoğunluğu grafiğinde kesikli çizgi hacim fononları kullanılarak hesaplanırken, düz çizgi ise yüzey fononlarından elde edilmiştir. Bu grafikte belirgin bir şekilde yüzey fononlarına ait olduğu görülen 4 pik bulunmaktadır. P^1 piki yüzey fonon dispersiyon grafiğinden de görülebileceği gibi açıkça yüzey akustik fonon modlarından kaynaklanmaktadır. Akustik-optik boşluk bölgesinin ortasında yer alan yüzey boşluk fonon modundan meydana gelen pik P^2 ile gösterilmiştir ve enerji değeri yaklaşık 36.0 meV'dir. İki pikin birlikte gösterildiği P^3 pikinin nedeni, $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ yönünde hacim fononlarının üzerinde yer alan yüzey optik fonon modlarıdır. P^4 pikinin oluşma nedeni ise en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun özellikle $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ yönünde düz bir çizgi şeklinde devam etmesidir.

$\bar{\Gamma}$ noktasında fonon modları kutuplanma karakterlerine göre A' ve A'' olmak üzere iki gruba ayrılırlar. BeSe(110) yüzeyi için bu simetri noktasında 2 tane A'' ve 7 tane de A' yüzey fonon modu elde edilmiştir. Bu fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 8.11'de görülmektedir. Enerjileri 67.03 ve 71.75 meV olan A'' fonon modları birinci ve ikinci seviye Be atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinden kaynaklanmakta olup katyonik modlardır. Genelde Be ve Se atomları arasındaki büyük kütle farkından dolayı, yüzey optik fonon modlarının oluşumuna küçük kütleli Be atomları sebep olmaktadır. Yüzey akustik fonon modları ise Be ve Se atomlarının ortak katkılarıyla meydana gelmektedirler. Özellikle akustik-optik boşluk bölgesinin altında kalan 17.26 ve 26.71 meV enerjili fonon modları ağırlıklı olarak ilk üç seviye Se atomlarından kaynaklanan anyonik modlardır. Bu modların oluşumunda ilk iki seviye Se atomlarının sırasıyla [110] ve [001] yönlerindeki titreşimleri etkili olmaktadır. Akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan iki yüzey boşluk modundan enerjisi 36.09 meV olan, yüzey Be atomlarından kaynaklanmaktadır. Enerjisi 54.78 meV olan diğer modun oluşma nedeni ise ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarıdır. Özellikle ikinci seviye Be atomlarının titreştiği 61.14 meV enerjili fonon modunun oluşumuna üçüncü seviye Be atomları da katkı yapmaktadır. 64.66 meV enerjili fonon modu ise ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimlerinden oluşmaktadır. En yüksek enerjili yüzey optik fonon modu A' karakterine sahip olup, baskın bir şekilde yüzey Be atomlarından kaynaklanmaktadır. Bu fonon modu, titreşim karakteri olarak BeS(110) yüzeyinde elde edilen moda oldukça benzemektedir.



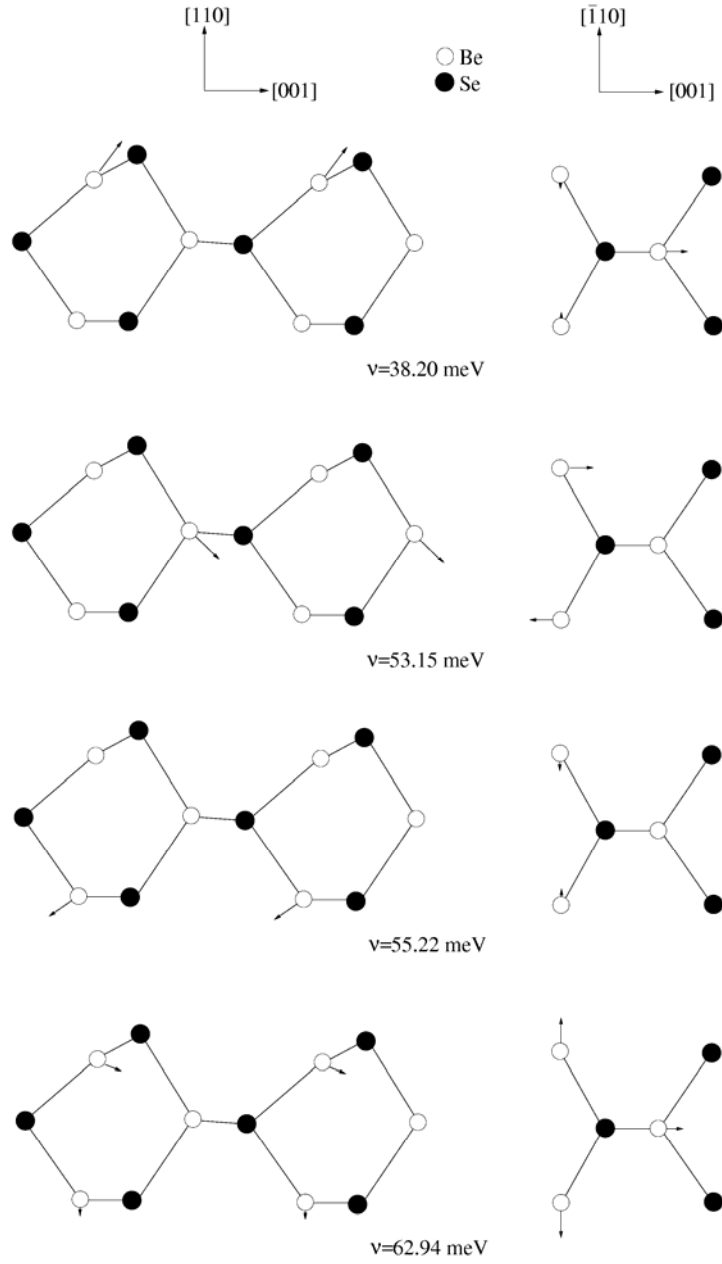
Şekil 8.11. BeSe(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen A' ve A'' karakterli fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

BeSe(110) yüzey fonon dispersiyon grafiğinin \bar{X} simetri noktasında yüzey akustik fonon modları açıkça hacim fonon modlarının altında yer almaktadır. Enerjisi 11.78 meV olan modun oluşumunda yüzey Se atomları ile ikinci seviye Be atomları etkili olurken, 12.90 meV enerjili fonon modu birinci ve üçüncü seviye Be atomları ile birinci ve ikinci seviye Se atomlarından kaynaklanmaktadır. Bu iki modun atomik titreşim şekilleri Şekil 8.12’de görülmektedir. Bu şekilde ayrıca en yüksek enerjili yüzey optik fonon modu da bulunmaktadır. Enerjisi 76.38 meV olan bu mod birinci ve ikinci seviye Be atomlarından kaynaklanmaktadır.



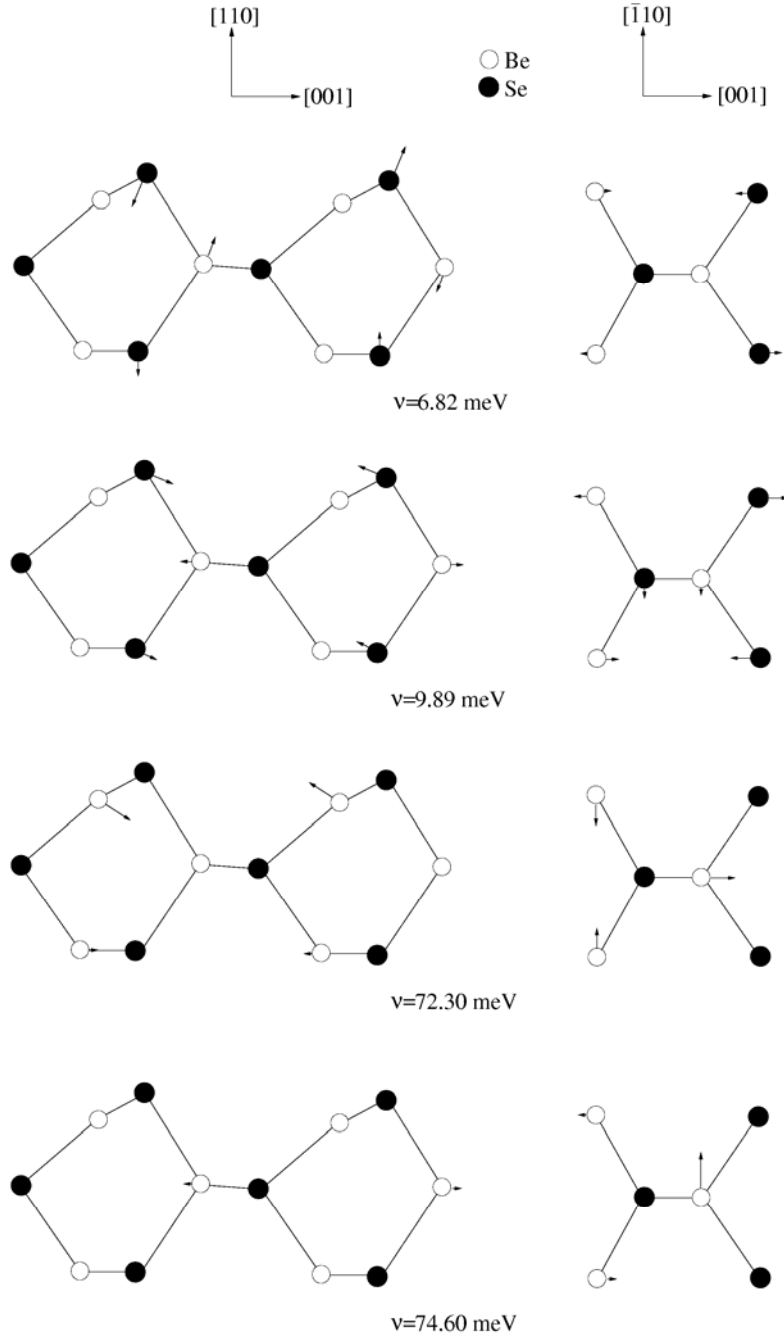
Şekil 8.12. BeSe(110) yüzeyi için \bar{X} noktasında elde edilen yüzey akustik fonon modları ile en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun atomik titreşim şekilleri.

\bar{X} simetri noktasında elde edilen akustik-optik ve optik-optik boşluk bölgelerinde bulunan yüzey boşluk fonon modları Şekil 8.13'te görülmektedir. Akustik-optik boşluk bölgesinde yer alan ve enerjisi 38.20 meV olan ilk modun oluşumuna baskın bir şekilde yüzey Be atomları neden olmaktadır. Bu boşluk bölgesinde bulunan ikinci mod ise 53.15 meV enerjili olup, sadece ikinci seviye Be atomlarından kaynaklanmaktadır.



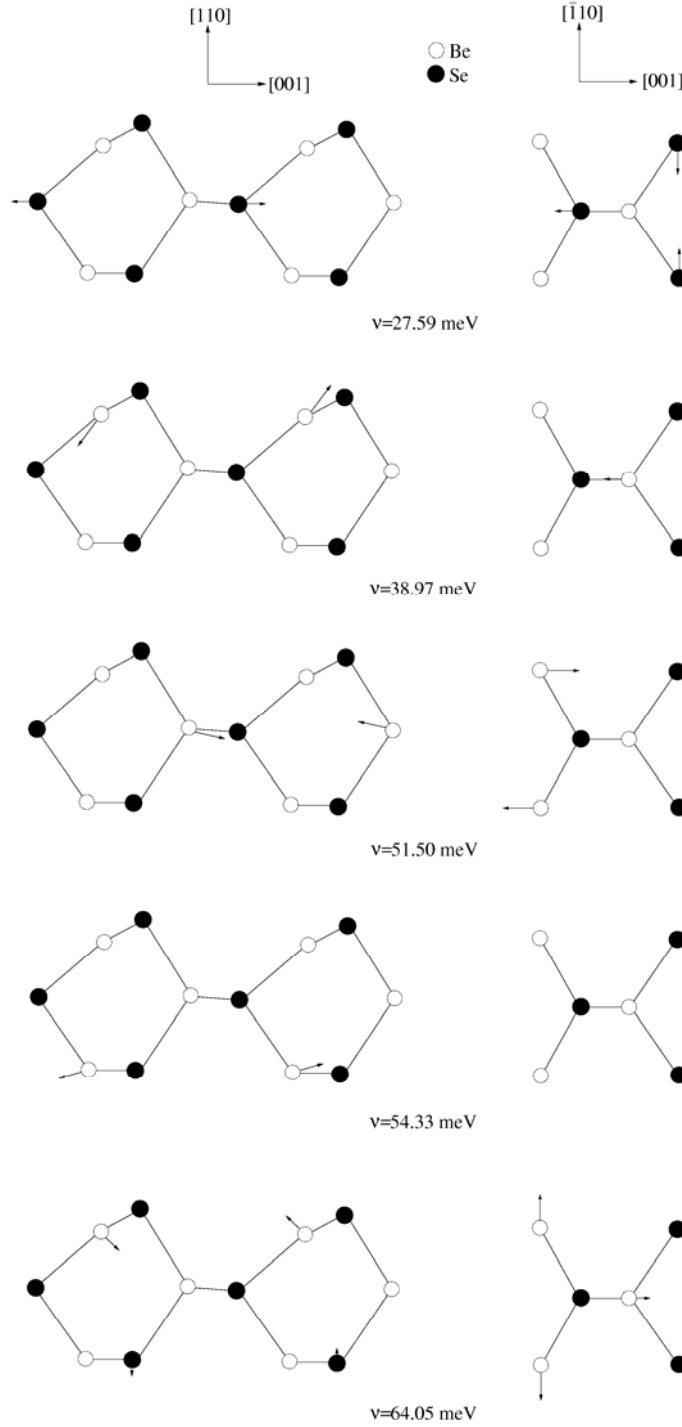
Şekil 8.13. BeSe(110) yüzeyi için \bar{X} noktasında elde edilen yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

Akustik-optik boşluk bölgesinde elde edilen en yüksek enerjili modun oluşumunda ise ikinci ve üçüncü seviye Be atomları etkili olmaktadır. \bar{X} simetri noktasının optik-optik boşluk bölgesinde hesaplanan 62.94 meV enerjili fonon modu tüm boşluk fonon modları gibi anyonik karakterdedir ve ilk üç seviye Be atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır.



Şekil 8.14. BeSe(110) yüzeyinin \bar{M} noktasında hacim fonon modlarının altında ve üstünde elde edilen yüzey akustik ve optik fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

BeSe(110) yüzeyinin \bar{M} simetri noktasında bulunan ve hacim fononlarından açıkça ayrılan yüzey akustik ve optik fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 8.14'te yer almaktadır.

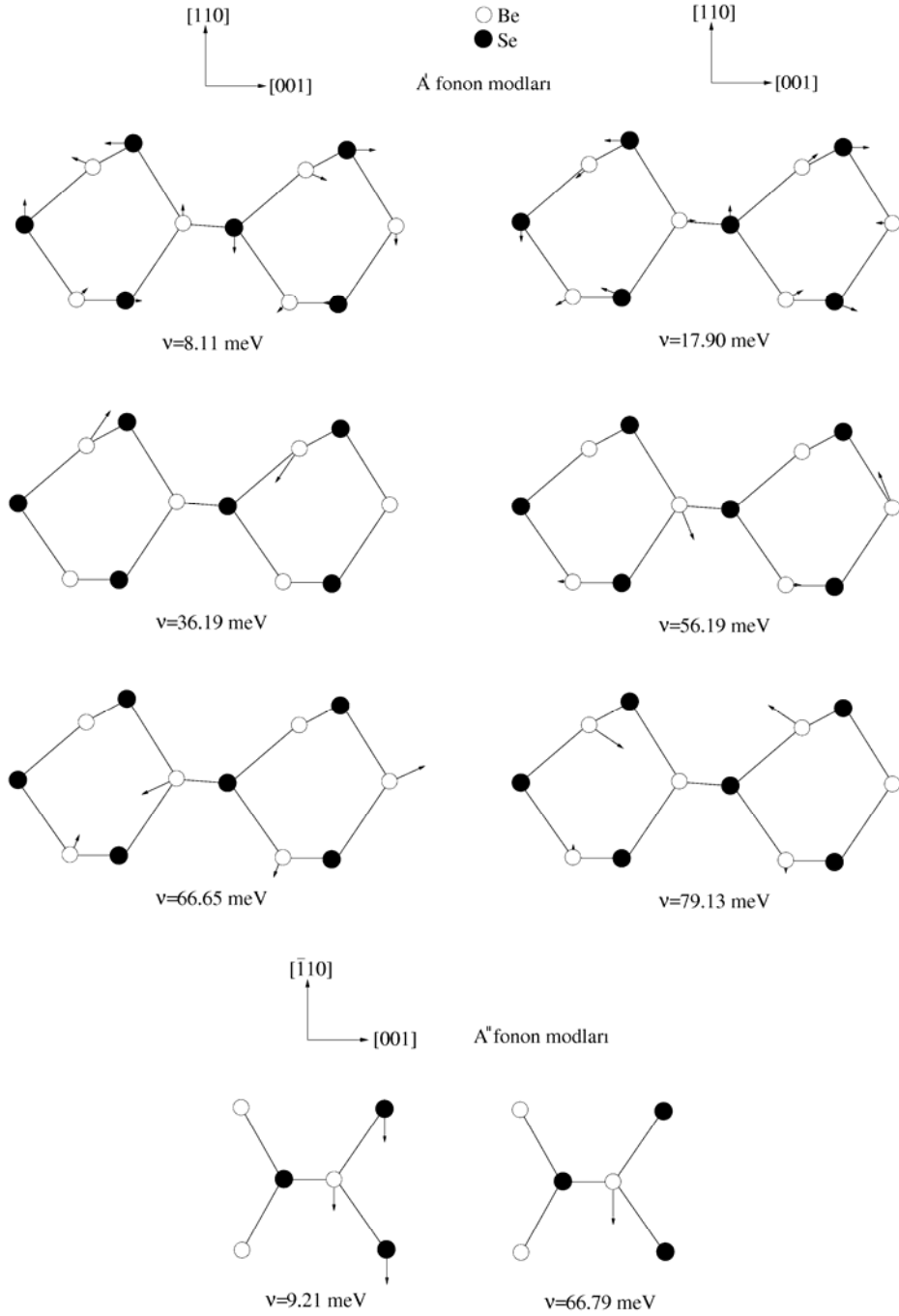


Şekil 8.15. BeSe(110) yüzeyi için \bar{M} noktasında elde edilen yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

Enerjisi 6.82 meV olan Rayleigh wave fonon modu özellikle yüzey Se atomları ile ikinci seviye Be atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Bu modun hemen üzerinde yer alan 9.89 meV enerjili mod ise her üç seviyede bulunan Be ve Se atomlarından kaynaklanmaktadır. Şekil 8.14'te görülen ve enerjileri 72.30 ve 74.60 meV olan fonon modlarının titreşim şekillerinin belirlenmesinde birinci ve ikinci seviye Be atomları etkili olmaktadır. \bar{M} simetri noktasında bulunan boşluk bölgelerinde toplam 5 tane yüzey boşluk fonon modu bulunmaktadır. Bu fonon modların atomik titreşim şekilleri Şekil 8.15'te görülmektedir. Akustik-optik boşluk bölgesinin en altında yer alan 27.59 meV enerjili fonon modu birinci ve ikinci seviye Se atomlarının titreşimleriyle oluşan anyonik bir fonon modudur. Bu boşluk bölgesinde bulunan 38.97, 51.50 ve 54.33 meV enerjili fonon modları ise sırasıyla birinci, ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Son olarak optik-optik boşluk bölgesinde bulunan 64.05 meV enerjili fonon modunun titreşim karakterini ise birinci ve ikinci seviye Be atomları ile üçüncü seviye Se atomları belirlemektedir.

BeSe(110) yüzeyinin \bar{X}' simetri noktasında hacim fononlarından açıkça ayrılan A' ve A'' fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 8.16'da sunulmuştur. A' karakterine sahip olan en düşük enerjili yüzey akustik fonon modunun enerjisi 8.11 meV olarak elde edilmiştir. Hacim fonon modlarının tamamen altında yer alan bu mod, ilk üç seviye Be ve Se atomlarının ortak katkılarıyla meydana gelmiştir. Onun hemen üstünde yer alan yüzey akustik fonon modu ise enerjisi 9.21 meV olan ve yüzey atomlarının zig-zag zinciri doğrultusundaki titreşimleriyle oluşan bir A'' fonon modudur. Hacim fonon modlarının arasında kalan boşluk bölgesinde yer alan 17.90 meV enerjili yüzey boşluk fonon modu her üç seviyede bulunan Be ve Se atomlarının titreşimleriyle oluşmuş bir bağ döndürme fonon modudur. Akustik-optik boşluk bölgesinde elde edilen 36.19 ve 56.19 meV enerjili A' karakterli fonon modları sırasıyla birinci ve ikinci seviye Be atomlarının titreşimleriyle meydana gelmişlerdir. Enerjisi 58.26 meV enerjili fonon modu üçüncü seviye Be atomlarının zig-zag zinciri yönünde titreştiği bir A'' fonon modudur. Optik-optik boşluk bölgesinde birbirlerine çok yakın enerjilerde fakat farklı karakterlerde iki yüzey boşluk fonon modu bulunmaktadır. Bu fonon modlarından A' karakterine sahip olan 66.65 meV enerjili fonon modu ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimlerinden oluşan katyonik bir fonon modudur. Enerjisi 66.79 meV olan diğer

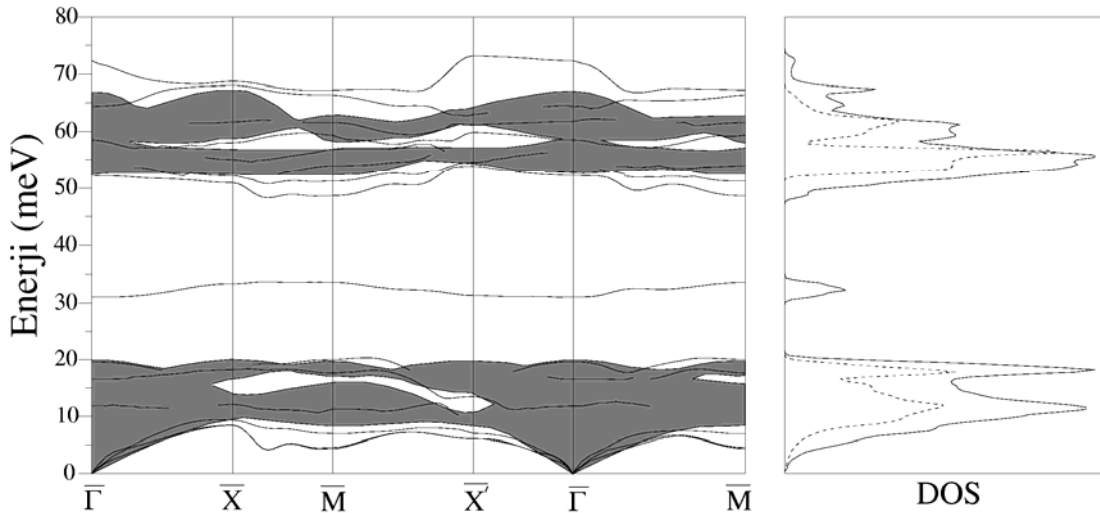
mod ise A'' karakterine sahiptir ve yüzey Be atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinden meydana gelmektedir. Enerjisi 69.94 meV olan A' karakterli fonon modu üçüncü seviye Be atomlarının titreşimlerinden oluşmaktadır. \bar{X}' noktasında hesaplanan en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun enerjisi 79.13 meV olup, yüzey Be atomlarının titreşimlerinden oluşan bir A' fonon modudur.



Şekil 8.16. BeSe(110) yüzeyi için \bar{X}' noktasında hacim fonon modlarından açıkça ayrılan yüzey fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

8.4.3. BeTe(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

BeTe(110) yüzeyi için hesaplanan fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 8.17'de görülmektedir. Şeklin sol tarafında görülen grafikte taralı kısımlar hacim fononlarını gösterirken, çizgiler ise yüzey fonon modları kullanılarak elde edilmiştir. BeS(110) ve BeSe(110) yüzeylerine benzer şekilde bu grafikte de akustik ve optik hacim fonon modları arasında geniş bir boşluk bulunmaktadır. Bu enerji aralığı değeri tüm simetri yönleri boyunca ortalama 33.0 meV civarında hesaplanmıştır. Bu enerji aralığı, daha önce hesaplanan Berilyum kalkojen (110) yüzeylerine göre daha büyüktür. Bunun nedeni BeTe bileşiği için anyon/kasyon kütle oranının BeS ve BeSe bileşiklerine göre çok daha büyük olmasıdır. Şekil 8.17'de görülen yüzey fonon dispersiyon grafiğine BeS ve BeSe için hesaplanan grafiklerden farklı olarak optik-optik boşluk bölgesi de tüm simetri yönleri boyunca devam etmemektedir. En düşük enerjili fonon modu incelendiğinde daha önce hesaplanan yüzeylere benzer şekilde $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ simetri yönlerinin küçük dalga vektörleri dışında, tüm simetri yönlerinde açıkça hacim fononlarının altında yer almaktadır. En yüksek enerjili fonon modu ise tüm simetri yönleri boyunca hacim fononlarının üzerinde yer almaktadır.

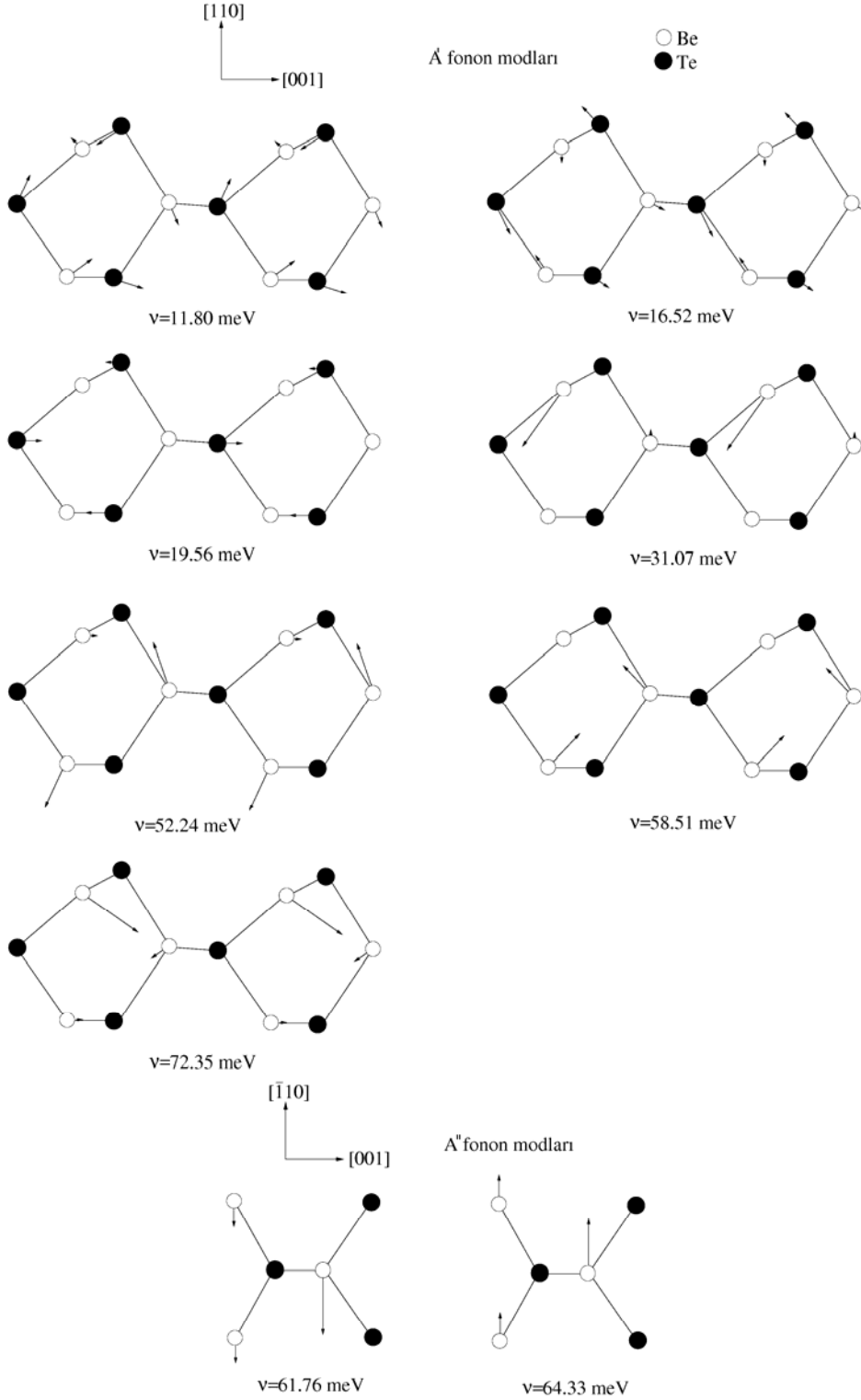


Şekil 8.17. BeTe(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri. Taralı bölge hacim durumundaki kübik BeTe için fonon enerjilerini gösterirken, kalın çizgiler hesaplanan yüzey fonon eğrileridir. Sağ taraftaki grafikte ise kesikli çizgi hacim fononları için ve düz çizgi ise yüzey fononları için durum yoğunluğu eğrilerini göstermektedir.

Şekil 8.17'nin sağ tarafında görülen grafik ise hacim ve yüzey fonon modları için hesaplanan durum yoğunluğu eğrilerini göstermektedir. Bu grafikte kesikli çizgi hacim fononlarından yararlanılarak elde edilirken, düz çizgi ise yüzey fonon modları kullanılarak hesaplanmıştır. Genel yapısı bakımından bu grafik BeSe(110) yüzeyi için elde edilen grafikle oldukça benzemektedir. Grafikte yüzey fononları için 7.0 meV civarında elde edilen pik açıkça yüzey akustik fonon modlarından kaynaklanmaktadır. BeSe(110) yüzeyine benzer şekilde akustik-optik boşluk bölgesinin neredeyse tam ortasında yer alan yüzey boşluk fonon modu nedeniyle 31.0 meV civarında bir pik oluşmuştur. BeTe(110) yüzeyi için hesaplanan durum yoğunluğu grafiğinde 65.0-70.0 meV aralığında görülen ikili pikin nedeni ise $\bar{X} - \bar{M}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ yönleri boyunca hacim fononlarının üzerinde ilerleyen yüzey optik fonon modlarıdır. Son olarak 73.0 meV civarında görülen pik ise açıkça en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$ boyunca neredeyse düz bir çizgi şeklinde devam etmesinden kaynaklanmaktadır.

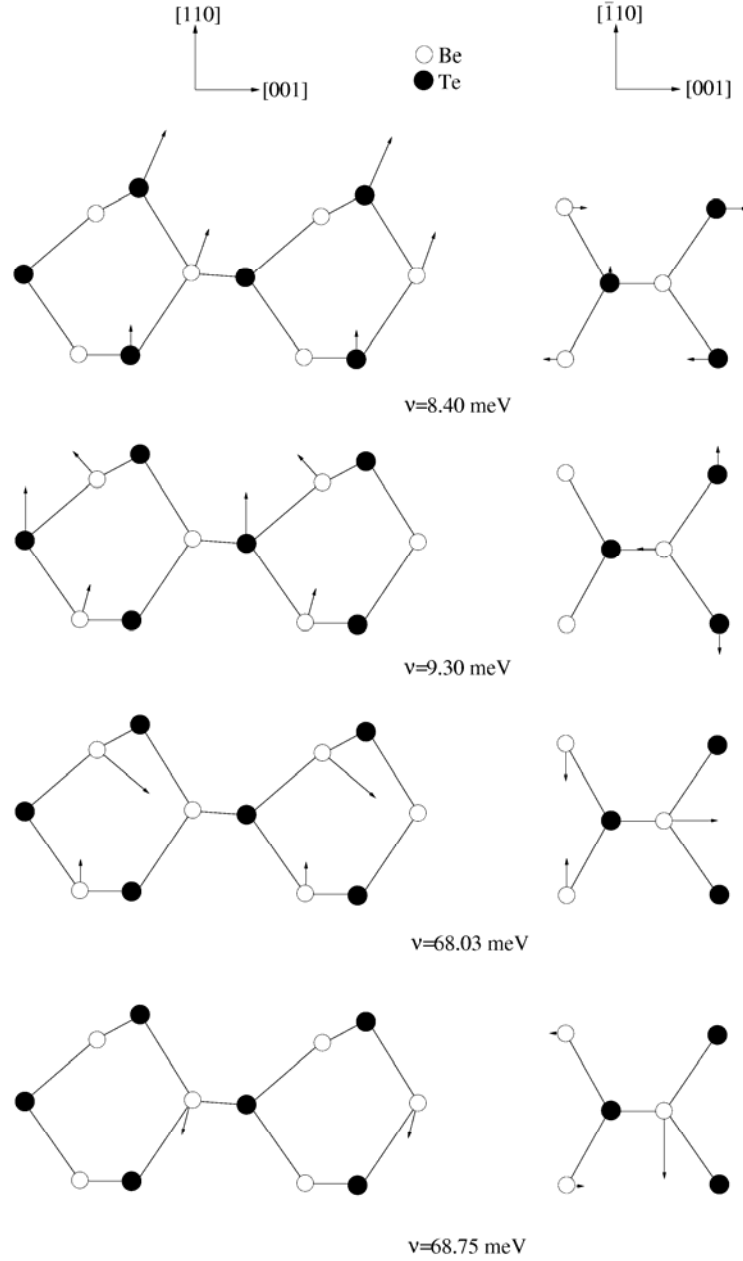
BeTe(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen yüzey fonon modlarının atomik titreşim şekilleri Şekil 8.18'de görülmektedir. Bu simetri noktasında 7 tane A' ve 2 tane de A'' fonon modu elde edilmiştir. İlk A'' fonon modunun enerjisi 61.76 meV olarak bulunmuştur. Bu modun titreşim karakterinin belirlenmesinde birinci ve ikinci seviye Be atomlarının zig-zag zinciri doğrultusundaki titreşimleri önemli rol oynamaktadır. Enerjisi 64.33 meV olarak bulunan ikinci A'' fonon modu birinci ve ikinci seviye Be atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Enerjileri 11.80 ve 16.52 meV olan A' karakterli fonon modları her üç seviyedeki atomların titreşimleriyle oluşmuştur. Diğer bir A' fonon modunun enerjisi 19.56 meV olarak elde edilmiştir. Bu mod ilk üç seviye Te atomlarının titreşimlerinden kaynaklanan anyonik bir fonon modudur. BeTe(110) yüzeyi için akustik-optik boşluk bölgesinde bulunan 31.07 meV enerjili fonon modu, yüzey Be atomlarının titreşimleriyle ortaya çıkmıştır. Bu boşluk bölgesinde yer alan diğer modun enerjisi ise 52.24 meV olup, ilk üç seviye Be atomlarının titreşimleriyle oluşan katyonik bir fonon modudur. Enerjisi 58.51 meV olan fonon modu ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarından kaynaklanmaktadır. $\bar{\Gamma}$ noktasında hesaplanan ve yüzey Be atomlarının oluşturduğu en yüksek enerjili yüzey optik fonon modu da A'

karakterine sahiptir. Şekil 8.18’de bu modun oluşumuna ikinci seviye Be atomlarının da katkı yaptığı görülmektedir.



Şekil 8.18. BeTe(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında elde edilen A' ve A'' karakterli fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

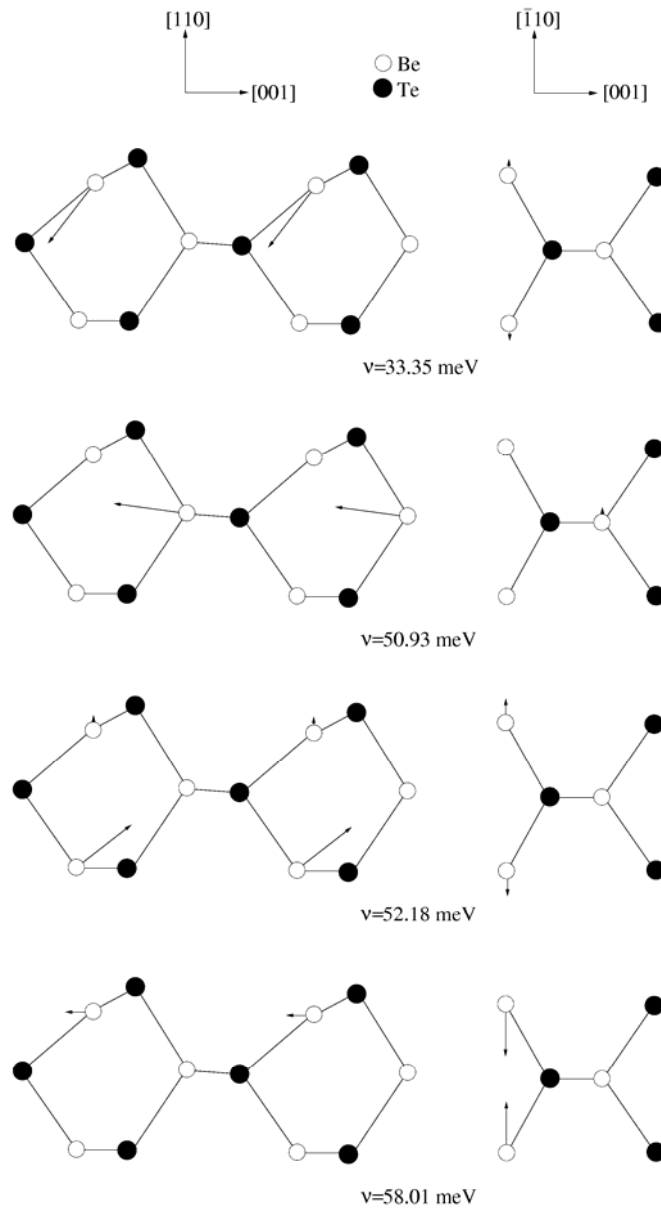
BeTe(110) yüzeyi için \bar{X} noktasında, hacim fonon modlarının altında bulunan yüzey akustik fonon modları ve hacim fonon modlarının üstünde yer alan yüzey optik fonon modları Şekil 8.19'da sunulmuştur.



Şekil 8.19. BeTe(110) yüzeyinin \bar{X} noktasındaki hacim fonon modlarının altında bulunan yüzey akustik fonon modları ile hacim fonon modlarının üstünde yer alan yüzey optik fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

Enerjisi 8.40 meV olan en düşük enerjili yüzey akustik fonon modu özellikle ilk üç seviye Te atomlarının titreşimleriyle oluşmakla beraber ikinci seviye Be atomlarının

katkılarını da içermektedir. Bu modun hemen üstünde bulunan diğer bir yüzey akustik fonon modunun enerjisi de 9.30 meV olarak hesaplanmıştır. Bu mod birinci ve üçüncü seviye Be atomlarıyla birinci ve ikinci seviye Te atomlarının titreşimlerinden oluşmaktadır. Şekilde görülen ve enerjisi 68.03 meV olan yüzey optik fonon modu ilk üç seviye Be atomlarının titreşimleriyle oluşan katyonik bir fonon modudur. \bar{X} simetri noktasında elde edilen en yüksek enerjili fonon modunun enerjisi 68.75 meV olarak bulunmuştur ve ilk iki seviye Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.

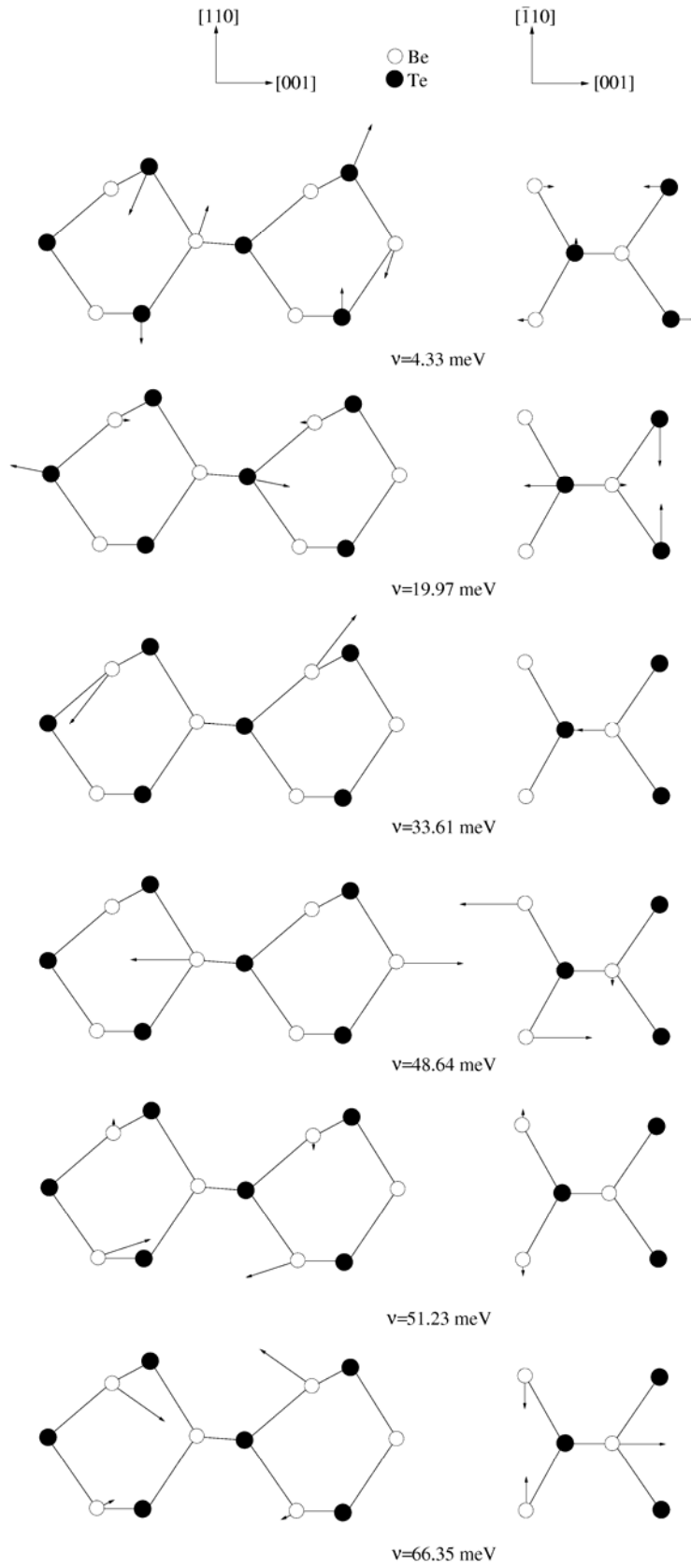


Şekil 8.20. BeTe(110) yüzeyinin \bar{X} noktasında hesaplanan yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

Bu simetri noktasında bulunan boşluk bölgelerinde hesaplanan yüzey boşluk fonon modları Şekil 8.20'de görülmektedir. Akustik-optik boşluk bölgesinde bulunan 33.35 meV enerjili ilk mod yüzey Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Enerjileri 50.93 ve 52.18 meV olan modlar ise sırasıyla ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Optik-optik boşluk bölgesindeki 58.01 meV enerjili boşluk fonon modu yüzey Be atomlarının [110][001] yönlerindeki titreşimleri ile ikinci seviye Be atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerini içermektedir.

BeTe(110) yüzeyinin Birinci Brillouin Bölgesinde yer alan bir diğer simetri noktası olan \bar{M} noktasında hesaplanan en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları ile yüzey boşluk fonon modları Şekil 8.21'de görülmektedir. Hacim fononlarından çok açık bir şekilde ayrılan en düşük enerjili yüzey akustik fonon modunun enerjisi 4.33 meV olarak bulunmuştur. Bu fonon modu özellikle birinci ve üçüncü seviye Te atomları ile ikinci seviye Be atomlarının titreşimlerinden oluşmaktadır. \bar{M} noktasında bulunan yüzey boşluk fonon modlarının hepsi de akustik-optik boşluk bölgesinde yer almaktadır. Bunlardan ilkinin enerjisi 19.97 meV olarak hesaplanmıştır ve birinci ve ikinci seviye Te atomlarının titreşimleriyle oluşan anyonik bir fonon modudur. Enerjisi 33.61 meV olan mod ise yüzey Be atomlarından kaynaklanmaktadır. Akustik-optik boşluk bölgesinde bulunan diğer modların enerjileri 48.64 ve 51.23 meV olarak elde edilmiştir. Bu fonon modları baskın olarak sırasıyla ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadırlar.

Bu simetri noktasında hesaplanan en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun enerjisi 66.35 meV bulunmuştur. Bu mod özellikle yüzey Be atomlarından kaynaklanmakla birlikte ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının da katkılarını içermektedir.



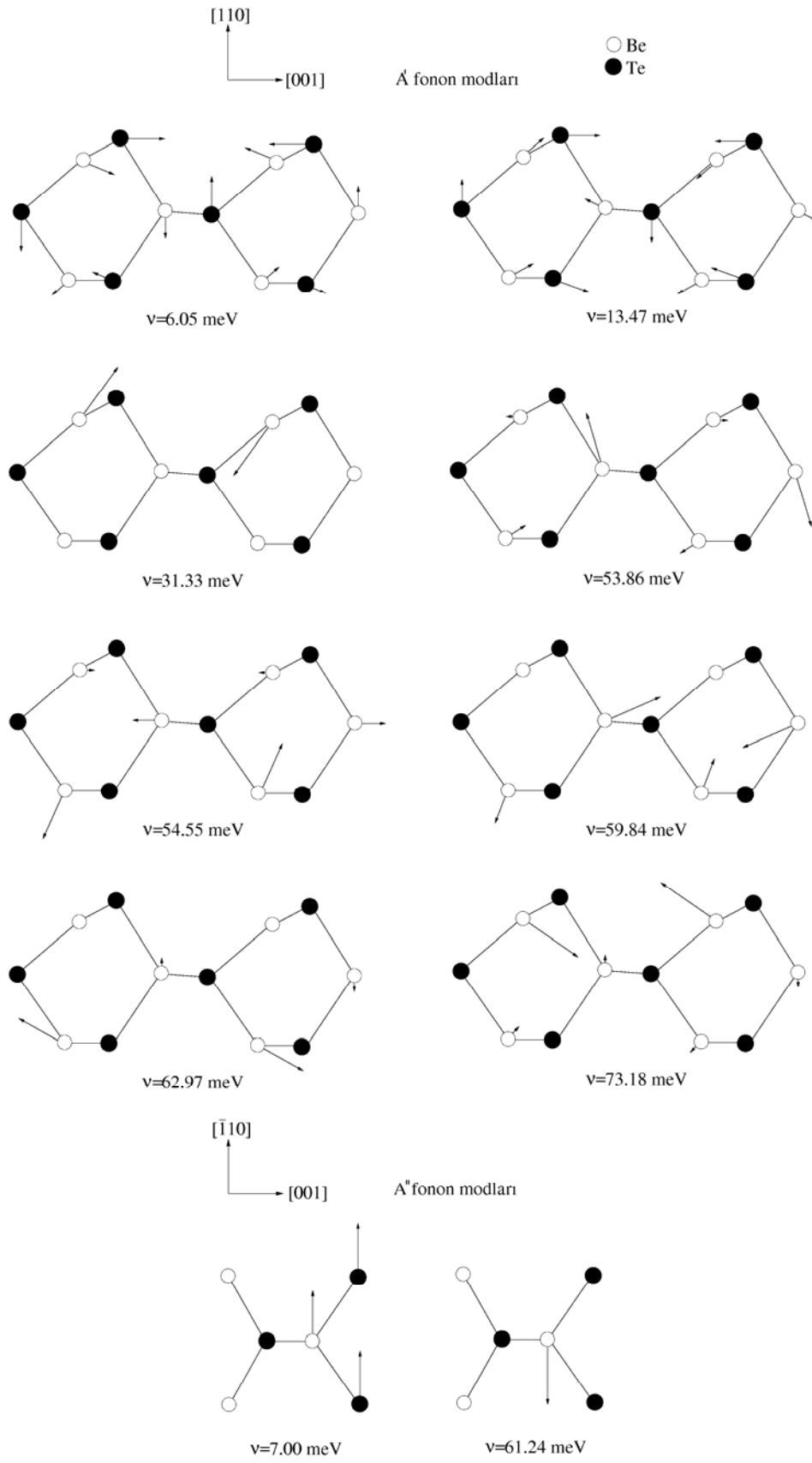
Şekil 8.21. BeTe(110) yüzeyi için \bar{M} simetri noktasında hesaplanan yüzey boşluk fonon modları ile en düşük ve en yüksek enerjili yüzey fonon modları.

BeTe(110) yüzeyinin \overline{X}' simetri noktasında elde edilen A' ve A'' fonon modları Şekil 8.22'de görülmektedir. Bu simetri noktasında hesaplanan en düşük enerjili fonon modunun enerjisi 6.05 meV olup A' karakterine sahiptir. Bu fonon modu ilk üç seviye Be ve Te atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Hacim fononlarının altında kalan ikinci yüzey akustik fonon modu yüzey atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimlerinden kaynaklanan bir A'' fonon modudur.

Hacim fononları arasındaki boşluk bölgesinde bulunan 13.47 meV enerjili fonon modu A' karakterine sahiptir ve bu modun oluşumunda Te atomlarının titreşimleri daha baskındır. Bu simetri noktasında akustik-optik boşluk bölgesinde A' karakterine sahip iki yüzey boşluk fonon modu bulunmaktadır. Bu modlardan 31.33 meV enerjiye sahip olan ilk modun oluşumuna tamamen yüzey Be atomları neden olmaktadır. Enerjisi 53.86 meV olan ikinci mod ise daha çok ikinci seviye Be atomlarının titreşimleriyle meydana gelen katyonik bir fonon modudur. Bu modun hemen üstünde bulunan 54.55 meV enerjili fonon modu da katyonik bir fonon modu olup, bu mod için üçüncü seviye Be atomları daha büyük rol oynamaktadır.

Optik-optik boşluk bölgesinde yer alan 59.84 meV enerjili fonon modu ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimleriyle oluşmuştur ve A' karakterine sahiptir. \overline{X}' simetri noktasında hesaplanan ve yüzey Be atomlarının titreşimleriyle oluşan ikinci A'' fonon modunun enerjisi 61.24 meV olarak elde edilmiştir. Enerjisi 62.97 meV olan A' karakterli fonon modu üçüncü seviye Be atomlarından kaynaklanmaktadır.

Diğer simetri noktalarında olduğu gibi \overline{X}' için de en yüksek enerjili yüzey optik fonon modu yüzey Be atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır ve A' karakterine sahiptir.



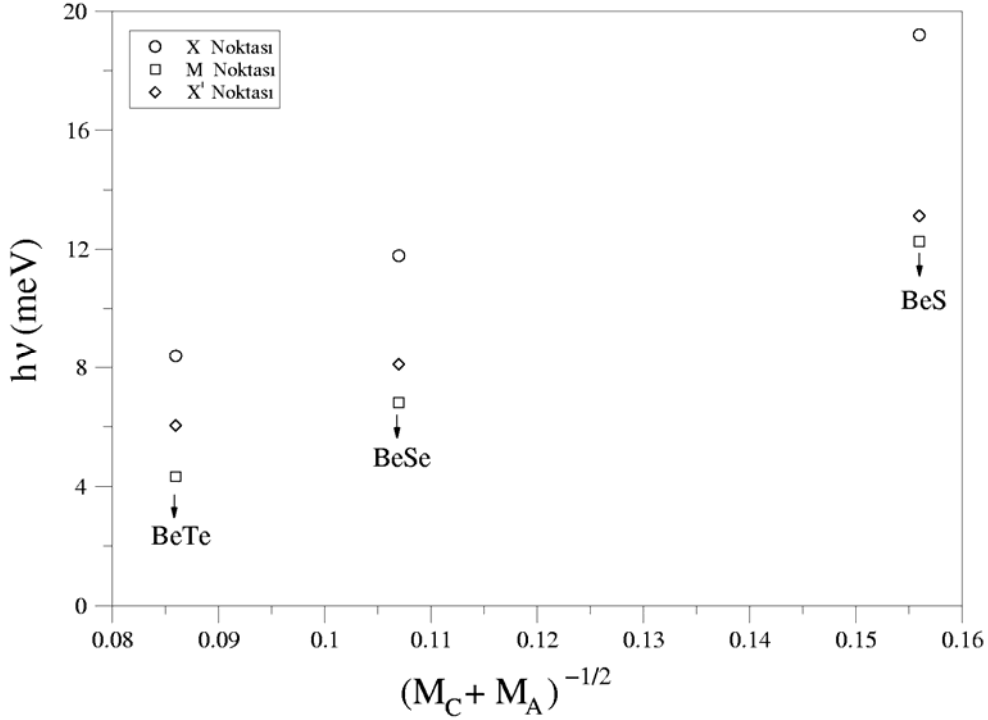
Şekil 8.22. BeTe(110) yüzeyi için \bar{X}' noktasında elde edilen A' ve A'' karakterli fonon modlarının atomik titreşim şekilleri.

8.5. Berilyum Kalkojenlerin (110) Yüzeylerinin Karşılaştırılması

Bu bölümde ilk olarak BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin yapısal özellikleri incelenmiştir. Bu yüzeylerin yüzey atomik denge geometrisinin birbirleriyle oldukça benzer olduğu görülmektedir. Yüzey geometrik yapısının önemli bir parametresi olan ω açısının BeS(110)'dan BeTe(110)'a doğru arttığı bulunmuştur. Bunun yanı sıra III-N(110) yüzeylerine benzer şekilde elde edilen açı değerlerinin Δ_{\perp} parametresi ile ortak bir şekilde değiştiği sonucu elde edilmiştir. Berilyum kalkojenlerin (110) yüzeyleri için hesaplanan elektronik bant yapısı grafikleri incelendiğinde genel yapıları bakımından birbirleriyle son derece benzer özellikler içerdiği görülmektedir. Elde edilen tüm yüzey elektronik yapılarında hacim elektronik spektrumları arasında enerji aralıkları yer almaktadır. Bu enerji aralığı değerleri BeS'den, BeTe'ye doğru giderek azalmaktadır. Her üç yüzey için de bu enerji aralıklarında dört adet yüzey elektronik enerji bandı elde edilmiştir. S^1 , S^2 , S^3 ve S^4 olarak gösterilen bu enerji bantları, davranışları bakımından her üç yüzey için de oldukça benzerdirler. En yüksek dolu yüzey enerji bandı olan S^3 ile en düşük boş yüzey enerji bandı S^4 arasındaki enerji farkının da BeS'den, BeTe'ye doğru azaldığı bulunmuştur. Berilyum kalkojenlerin (110) yüzeyi için elde edilen yüzey atomik denge geometrisinin ve yüzey elektronik bant yapılarının daha önce hesaplanan III-V(110) ve II-VI(110) yüzeylerinden elde edilenlerle de büyük bir benzerlik gösterdiği bulunmuştur.

Bu bölümde BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin atomik ve elektronik özelliklerine ek olarak titreşim özellikleri de araştırılmıştır. Bu yüzeyler için elde edilen yüzey fonon dispersiyon grafikleri birbirleriyle oldukça benzemektedirler. Her üç yüzey için de hacim fononlarının ortasında bir boşluk bölgesi yer almaktadır. Ayrıca tüm yüzeylerde, genişliği BeS'den BeTe'ye doğru giderek artan bir akustik-optik boşluk bölgesi yer almaktadır. Bunun yanı sıra optik-optik boşluk bölgesi ise sadece BeS(110) ve BeSe(110) yüzeyleri için elde edilmiştir. En düşük enerjili yüzey akustik fonon modu her üç yüzey için de $\bar{\Gamma} - \bar{X}$ ve $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ simetri yönlerinin küçük dalga vektörleri dışında, tüm simetri yönlerinde açıkça hacim fononlarının altında yer almaktadır. Bu fonon modunun \bar{X} , \bar{M} ve \bar{X}' simetri noktaları için toplam kütle ile

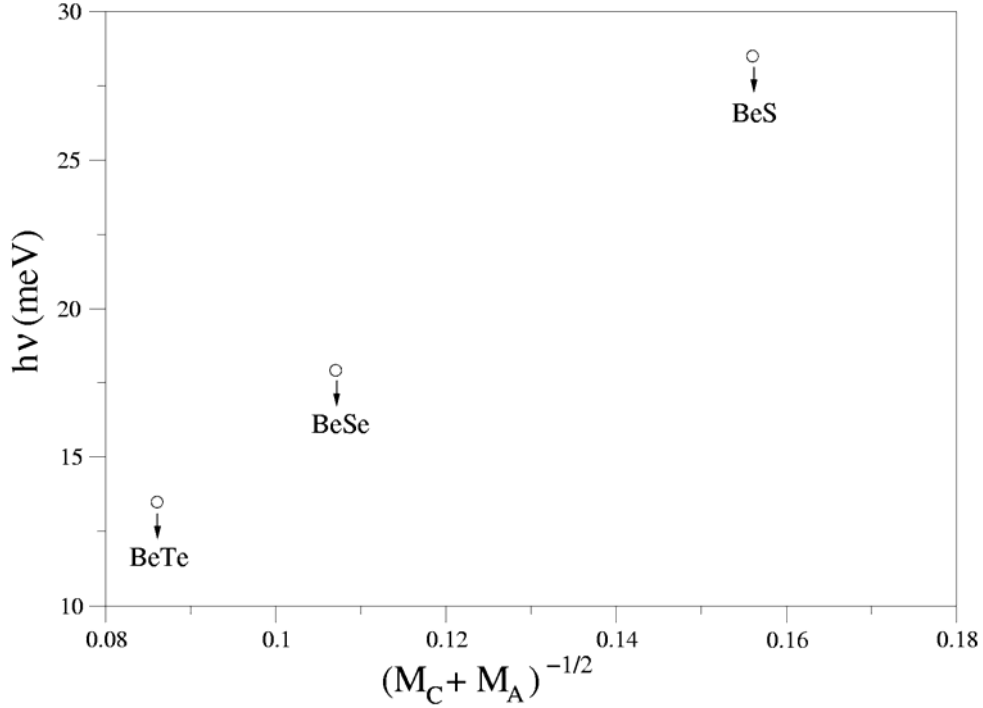
değişimi Şekil 8.23'te görülmektedir. Bu şekilden de açıkça görüldüğü gibi en düşük enerjili yüzey akustik fonon modu toplam kütle ile orantılı olarak değişmektedir.



Şekil 8.23. Farklı simetri noktaları için en düşük enerjili fonon modunun (Rayleigh-Wave) toplam kütle ile sistematik değişimi.

Hacim fononları arasında kalan boşluk bölgesinin \bar{X}' simetri noktasında, III-N(110) yüzeylerine benzer şekilde bir yüzey boşluk fonon modu elde edilmiştir. Her üç berilyum kalkojen yüzeyi için de birbirine benzer şekilde A' karakterine sahip olan bu fonon modunun \bar{X}' noktasında toplam kütleyle değişimi Şekil 8.24'te görülmektedir. BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için tüm simetri yönleri boyunca, akustik-optik boşluk bölgesinin neredeyse tam ortasında düz bir çizgi şeklinde ilerleyen bir yüzey boşluk fonon modu yer almaktadır. BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için elde edilen bu yüzey boşluk fonon modlarının titreşim karakterleri de birbirine oldukça benzemektedir. III-V(110) yüzeylerinde anyon atomunun kütlesi katyon atomuna göre büyük olduğunda buna benzer bir boşluk fonon modu gözlenmemektedir. Bu sonuç daha önceki çalışmalarda teorik[79,119] ve deneysel[121,122] olarak da gösterilmiştir. Sonuç olarak BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için III-V(110) yüzeylerinden farklı bir durum söz konusudur. Bunun yanı

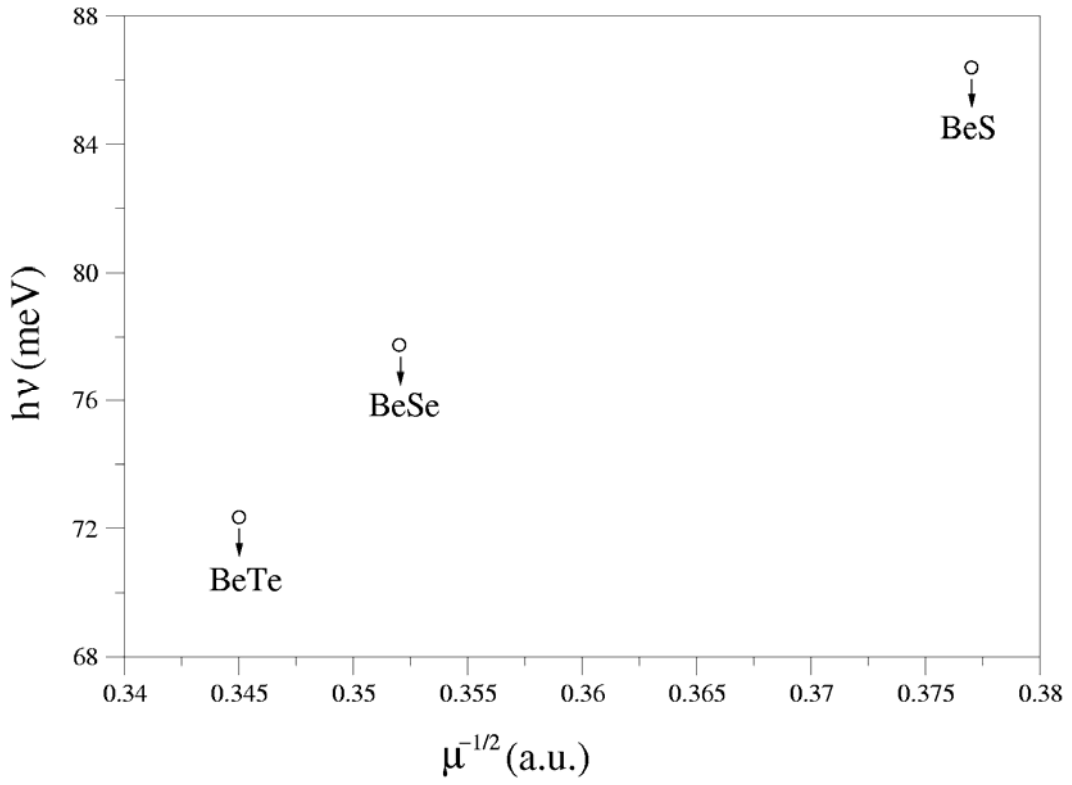
sıra her üç yüzey fonon dispersiyon grafiğinde de akustik-optik boşluk bölgesinin hacim fononlarına yakın üst bölgesinde bir yüzey boşluk fonon modu hesaplanmıştır.



Şekil 8.24. \bar{X}' simetri noktası için hacim fononları arasındaki boşluk bölgesinde (Stomach gap) bulunan yüzey boşluk fonon modlarının toplam kütle ile sistematik değişimi.

Berilyum kalkojenler hep birlikte ele alındığında $\bar{\Gamma}$ noktasında III-V(110) yüzeyleri için elde edilen bağ döndürme fonon modunun sadece BeS(110) yüzeyi için bulunduğu görülür. Yapısal ve elektronik özellikleri çok benzeyen Berilyum kalkojenler için BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinde bu karakterde bir modun olmayışı, anyon/kasyon kütle oranının çok büyük olmasıyla açıklanabilir.

BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için hesaplanan en yüksek enerjili fonon modu tüm simetri yönleri boyunca hacim fononlarının üzerinde yer almaktadır. Bu fonon modu için Brillouin bölgesi merkezinde elde edilen sonuçların indirgenmiş kütle ile değişimi Şekil 8.25'te görülmektedir.



Şekil 8.25. En yüksek enerjili fonon modunun (Fuchs-Kliewer) indirgenmiş kütle ile sistematik değişimi.

Bu şekilden de görüldüğü gibi en yüksek enerjili fonon modu indirgenmiş kütle ile orantılı olarak değişmektedir. Buna benzer bir sonuç Bölüm 7’de III-N(110) yüzeyleri için yapılan hesaplamalar sonucunda da bulunmuştur. Sonuç olarak tüm yarıiletken (110) yüzeyleri için en yüksek enerjili fonon modunun indirgenmiş kütleyle bağlı olarak değiştiği söylenebilir.

BÖLÜM 9. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tezde III-N tipi yarıiletkenler olarak bilinen BN, AlN, GaN ve InN materyalleri ile Berilyum-kalkojenler olarak adlandırılan BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin çinko-sülfür kristal yapıları ve (110) yüzeyleri için yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak incelenmiştir. İlk olarak III-N tipi yarı iletkenler ve Berilyum kalkojenlerin yapısal özellikleri araştırılmıştır. Hesaplamalar sonucu elde edilen örgü sabitleri (a), hacim modülleri (B), hacim modüllerinin basınca göre birinci türevleri (B') ve makroskobik dielektrik sabitleri (ϵ_{∞}) için daha önceki teorik ve özellikle de deneysel çalışmalarla iyi bir uyum olduğu bulunmuştur. Tezde incelenen tüm yarıiletkenler için hesaplanan örgü sabitlerinin, deneysel sonuçlardan % 1 civarında farklı bulunması ileride yapılacak hesaplamaların güvenilirliğini artırmaktadır. Yapısal parametrelerin hesaplanmasının ardından, tüm materyaller için hacim elektronik bant yapıları incelenmiştir. Hesaplanan sonuçlar, daha önceki teorik çalışmalardan bulunan enerji aralığı değerleriyle karşılaştırılmış ve aradaki farkın 1 eV'dan az olduğu görülmüştür. BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için simetri noktalarında hesaplanan sonuçların deneysel değerlerden daha küçük olduğu bulunmuştur. Bunun nedeni yapılan hesaplamalarda yerel yoğunluk yaklaşımının kullanılmasıdır. Fakat özellikle GaN için $\Gamma - K - X$ ve $\Gamma - X$ yönlerinde ölçülen deneysel sonuçlarla elde edilen uyum hesaplamalarımızın doğruluğunu kanıtlar niteliktedir. Buna ek olarak BeTe yarıiletkenininin $\Gamma - X$ yönünde var olan deneysel sonuçlarla da oldukça iyi bir uyum elde edilmiştir. Daha sonra III-N tipi yarıiletkenlerin titreşim özellikleri incelemiştir. BN için hesaplanan fonon dispersiyon grafiğinde, $\Gamma - K - X$ yönünde büyük dalga vektörleri için boyuna akustik fonon modunun enerjisinin, enine optik fonon modlarının enerjilerinden daha büyük olması ilgi çekici bir özelliktir. Bu sonuç 2000 yılında yapılan teorik çalışmayla da oldukça uyumludur. Ayrıca yine bu grafikte akustik ve optik fonon modları arasında bir enerji aralığının bulunmaması B ve N atomları arasındaki kütle farkının çok küçük olması ile açıklanabilir. Bu enerji aralığı değerinin artan

katyon/anyon kütle oranıyla AlN'den, InN'e doğru giderek arttığı bulunmuştur. BN dışında diğer III-N yarıiletkenlerinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafiklerinin de genel olarak birbirine oldukça benzediği görülmüştür. Brillouin merkezinde hesaplanan enine ve boyuna optik fonon frekanslarının, deneysel değerlerle son derece uyumlu olması, daha sonra yapılacak yüzey çalışmalarının doğruluğuna da önemli katkı yapmaktadır. Bu fonon frekansları için deneysel değerlerden en büyük sapma InN yarıiletkeninin TO fonon modu için 18 cm^{-1} olarak elde edilmiştir. Bu da deneysel değerlerle oldukça iyi bir uyum olduğunun göstergesidir. Ayrıca fonon dispersiyon grafikleri incelendiğinde, tüm III-N tipi yarıiletkenler için TO ve LO fononları arasında da bir boşluk bölgesinin olduğu bulunmuştur. Bu boşluk bölgesinin bu yarıiletkenlerin katyon/anyon kütle oranlarının yanı sıra iyoniklikleri ile de ilgili olduğu sonucuna ulaşılmıştır. III-N tipi yarıiletkenler için atomik titreşim şekilleri de önemli simetri noktalarında tek tek ele alınmıştır. Bütün III-N tipi yarı iletkenler birlikte ele alındığında katyon/anyon kütle oranının artmasıyla birlikte akustik fonon modlarının titreşim karakterlerinin belirlenmesinde büyük kütleli atomların etkili olduğu, optik modların belirlenmesinde ise kütleleri küçük olan atomların rol oynadığı sonucuna ulaşılmıştır. Hacim özellikleri üzerine yapılan çalışmalar, Berilyum-kalkojenlerin titreşim özelliklerinin incelenmesiyle tamamlanmıştır. Bu inceleme sonucunda BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenleri için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri elde edilmiştir. Bu yarıiletkenler için hesaplanan fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafiklerinin birbirlerine oldukça benzer yapıda oldukları bulunmuştur. Fonon dispersiyon grafiklerinin hepsinde de akustik-optik boşluk bölgesi ve optik-optik boşluk bölgesinin bulunduğu görülmektedir. Akustik-optik boşluk bölgesinin BeS'den, BeTe'ye doğru artan anyon/katyon kütle oranı ile arttığı sonucuna ulaşılmıştır. BeSe ve BeTe için Γ , X ve L simetri noktalarında hesaplanan fonon frekansları daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmalarla karşılaştırılmış ve oldukça iyi bir uyum elde edilmiştir. Özellikle deneysel sonuçlarla olan en büyük farkın, BeSe yarıiletkeninin LO fonon modu için bulunan 24 cm^{-1} değeri olması Be-kalkojenlerin (110) yüzey özelliklerinin doğruluğunu artırmaktadır. Berilyum kalkojenler için elde edilen TO-LO boşluk bölgesinin de III-N tipi yarıiletkenlere benzer şekilde, anyon ve katyon atomlarının kütle farkının yanı sıra bileşiklerin iyonikliği ile de ilişkili olduğu bulunmuştur. BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin

titreşim özellikleri üzerine literatürde çok az çalışma olması nedeniyle, onların atomik titreşim şekilleri en geniş biçimde bu tezde ele alınmıştır. III-N tipi yarı iletkenlere benzer şekilde Be-kalkojenler atomik titreşim şekilleri için de Anyon:Katyon kütle oranının artmasıyla birlikte akustik fonon modlarının titreşim karakterlerinin belirlenmesinde büyük kütleli atomlar etkili olurken, optik modların belirlenmesinde ise kütleleri küçük olan atomlar rol oynamaktadır.

III-N tipi yarıiletkenler ve Berilyum-kalkojenlerin hacim özellikleri incelendikten sonra onların (110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri araştırılmıştır. Bu materyallerin yüzey özelliklerinin incelenmesi, bu tezin özgünlüğünü ve önemini daha da artırmıştır. Çünkü özellikle BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için literatürde hiçbir teorik ve deneysel çalışma bulunmamaktadır. Buna ek olarak InN(110) yüzeyinin titreşim özellikleri de yoğunluk fonksiyon teorisiyle ilk olarak bu tezde incelenmiştir. Ayrıca AlN(110) ve GaN(110) yüzeyleri için, yüzey Brillouin bölgesinin tüm simetri yönleri boyunca sunulan yüzey fonon dispersiyon grafikleri daha önce herhangi bir *ab initio* metodu ile hiç hesaplanmamıştır.

Yüzey çalışmalarına ilk olarak III-N(110) yüzeylerinin yapısal özelliklerinin incelenmesiyle başlanmıştır. Bunun için yüzey denge geometrisi elde edilmiş ve hesaplanan yapısal parametreler daha önceki teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır. III-N yarıiletkenleri için yüzey denge geometrisinin karakteristik bir özelliği olan ω açısı III-V bileşikleri için elde edilen $29 \pm 3^\circ$ değerinden farklı şekilde, ortalama $15 \pm 4^\circ$ olarak hesaplanmıştır. Bunun sebepleri ise sistemin iyonikliği, katyon ve anyon atomları arasındaki yük geçişi ve bağ uzunluğunu belirleyen kimyasal etkilerdir. Yapısal özelliklerden sonra, III-N(110) yüzeyleri için yüzey elektronik bant yapısı grafikleri hesaplanmıştır. Hesaplamalar sonucu elde edilen bilgiler daha önceki teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Yüzey elektronik bant yapısı grafiklerinde her dört III-N(110) yüzeyi için de; değerlik bandına yakın olan en yüksek dolu yüzey elektronik enerji bandının yüzey anyon atomlarından kaynaklandığı, boş olan ve daha yüksek enerjiye sahip enerji seviyesinin ise yüzey katyon atomları tarafından oluşturulduğu bulunmuştur. Ayrıca bu yüzey enerji bantları arasındaki ortalama enerji aralıklarının da BN(110) yüzeyinden InN(110) yüzeyine doğru giderek

azaldığı görülmüştür. III-N(110) yüzeyleri için elde edilen atomik denge geometrisi ve elektronik bant yapısının diğer III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleriyle de benzer bir yapıda olduğu bulunmuştur. III-N(110) yüzeyleri için son olarak titreşim özellikleri incelenmiştir. Bu kapsamda BN(110), AlN(110), GaN(110) ve InN(110) yarıiletken yüzeylerinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri hesaplanmıştır. Yüzey fonon dispersiyon grafikleri incelendiğinde, GaN(110) ve InN(110) yüzeylerinin dinamik özelliklerinin birbirlerine çok benzediği görülmektedir. Bunun nedeni katyon-anyon kütle farkının her iki yarıiletken için de oldukça büyük olmasıdır. Bu yarıiletken yüzeyleri için tüm simetri yönleri boyunca tam ortada devam eden bir yüzey fonon modu bulunmuştur. Buna benzer bir mod GaP, InP ve InAs yüzeyleri için de elde edilmiştir. Böylece bu fonon modunun katyon atomunun kütesinin anyon atomuna göre çok büyük olduğunda ortaya çıktığı söylenebilir. Bütün III-N(110) yüzeyleri için \bar{X}' noktasında en düşük enerjili yüzey akustik fonon modu hacim fonon modlarının altında yer almaktadır ve A' karakteri göstermektedir. Ayrıca yine tüm III-N yüzeyleri için hacim fonon modları arasında yer alan boşluk bölgesinin \bar{X}' noktasında A' karakterine sahip bir boşluk fonon modu yer almaktadır. III-N(110) yüzeyleri için birbirine oldukça benzeyen bu fonon modlarının $(M_C + M_A)^{-1/2}$ şeklinde toplam kütleyle lineer bir şekilde değiştiği bulunmuştur. Yüzey dinamik özelliklerinin incelenmesinde en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun da ele alınması faydalı olmaktadır. Bu fonon modu BN(110) yüzeyi dışındaki tüm III-N(110) yüzeyleri için hacim fonon modlarının üzerinde yer almaktadır ve $\bar{\Gamma}$ noktasında A'' titreşim karakterine sahiptir. Bu modun III-N(110) yüzeyleri için $1/\sqrt{\mu}$ ile lineer olarak değiştiği sonucu elde edilmiştir. Fakat bu mod III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleriyle birlikte ele alındığında $1/a\sqrt{\mu}$ ile değişiminin lineerlik kazandığı bulunmuştur.

Tezin son kısmında BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri incelenmiştir. II-VI(110) yüzeylerinden farklı olarak bu yarıiletkenlerin yüzeyleri daha önce hiç çalışılmamıştır. Be-kalkojenlerin (110) yüzeylerinin incelenmesine her bir yüzey için yüzey denge geometrisinin tayin edilmesi ve ilgili parametrelerin bulunması ile başlanmıştır. Bu çalışmada yüzey geometrisinin karakteristik bir parametresi olan ω açısı BeS(110), BeSe(110) ve

BeTe(110) yüzeyleri için sırasıyla, 26.3° , 28.3° ve 28.8° olarak belirlenmiştir. Bu değerler diğer II-VI(110) yüzeylerinden elde edilen sonuçlarla oldukça benzemektedir. Yapısal özellikler incelendikten sonra, Be-kalkojenlerin (110) yüzeyleri için elektronik bant yapısı grafikleri hesaplanmıştır. Genel yapısı bakımından her üç grafik de birbirine oldukça benzemektedir. Bu yüzeyler için en yüksek dolu yüzey elektronik enerji bandı anyon atomlarından, en düşük enerjili boş yüzey iletkenlik bandı ise katyon atomlarından kaynaklanmaktadır. Bu yüzey enerji bantları arasındaki tüm simetri yönleri boyunca elde edilen ortalama enerji farkları, BeS'den BeTe'ye doğru giderek azalmaktadır. Berilyum kalkojenlerin (110) yüzeyleri için elde edilen yüzey atomik denge geometrisinin ve yüzey elektronik bant yapılarının daha önce hesaplanan III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleriyle oldukça benzer bir yapıya sahip oldukları bulunmuştur. Son olarak BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için titreşim özellikleri incelenmiştir. Bu yüzeyler için elde edilen yüzey fonon dispersiyon grafikleri birbirleriyle oldukça benzemektedirler. Her üç yüzey için de hacim fononlarının ortasında bir boşluk bölgesi ile genişliği BeS'den, BeTe'ye doğru giderek artan bir akustik-optik boşluk bölgesi elde edilmiştir. En düşük enerjili yüzey akustik fonon modu her üç yüzey için de $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$ yönü boyunca hacim fononlarının altında yer almaktadır. Bütün Berilyum kalkojen yüzeyleri için hacim fononları arasında kalan boşluk bölgesinin \bar{X}' simetri noktasında A' karakterine sahip bir yüzey boşluk fonon modu hesaplanmıştır. Bu iki fonon modunun da III-N(110) yüzeylerine benzer şekilde $(M_C + M_A)^{-1/2}$ ile orantılı olarak değiştiği görülmüştür. BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için tüm simetri yönleri boyunca, akustik-optik boşluk bölgesinin neredeyse tam ortasında düz bir çizgi şeklinde ilerleyen bir yüzey boşluk fonon modu hesaplanmıştır. Bu yüzey boşluk fonon modlarının atomik titreşim şekilleri incelendiğinde, titreşim karakterlerinin de birbirine oldukça benzedikleri sonucuna ulaşılmıştır. Berilyum kalkojenler hep birlikte ele alındığında $\bar{\Gamma}$ noktasında III-V(110) yüzeyleri için elde edilen bağ döndürme fonon modunun sadece BeS(110) yüzeyi için bulunduğu görülmüştür. Yapısal ve elektronik özellikleri çok benzeyen Berilyum kalkojenler için BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinde bu karakterde bir modun olmayışı, anyon/katyon kütle oranının çok büyük olmasıyla açıklanabilir. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için en yüksek enerjili fonon modu

tüm simetri yönleri boyunca hacim fononlarının üzerinde hesaplanmıştır. Bu fonon modu için Brillouin bölgesi merkezinde elde edilen sonuçların $1/\sqrt{\mu}$ şeklinde indirgenmiş kütle ile orantılı olarak değiştiği bulunmuştur.

Gelecekteki çalışmalarımız literatürde eksik kalan bazı III-V ve II-VI grubu yarıiletkenler ile onların (110) yüzeyleri üzerine yoğunlaşacaktır. Bunun yanı sıra süperiletkenlik özelliği gösteren CdCNi₃ materyalinin taban durumu özellikleri incelenecek, elde edilen sonuçlar bu materyalde elektron-fonon etkileşimini araştırmakta kullanılacaktır. Bunun yanı sıra bu maddenin süperiletkenlik sıcaklığı da elektron-fonon etkileşimi sonuçlarından elde edilecektir.

KAYNAKLAR

- [1] NAKAMURA S., The Blue Laser Diode-GaN based Light Emitters and Lasers. Springer: Berlin, 1997.
- [2] CHRISTENSEN N. E., GORCZYCA I., Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure. Phys. Rev. B 1994; 50:4397–4415.
- [3] KARCH K., BECHSTEDT F., Ab initio lattice dynamics of BN and AlN: Covalent versus ionic forces. Phys. Rev. B 1997; 56:7404-7415.
- [4] KARCH K., WAGNER J. M., BECHSTEDT F., Ab initio study of structural, dielectric and dynamical properties of GaN. Phys. Rev. B 1998; 57:7043-7049.
- [5] BECHSTEDT F., GROSSNER U., FURTHMULLER J., Dynamics and polarization of group-III nitride lattices: A first-principles study. Phys. Rev. B 2000; 62:8003-8011.
- [6] SERRANO J., RUBIO A., HERNANDEZ E., MUNOZ A., MUJICA A., Theoretical study of the relative stability of structural phases in group-III nitrides at high pressures. Phys. Rev. B 2000; 62:16612-16623.
- [7] AKASAKI L., HASHIMOTO M., Infrared lattice vibration of vapour-grown AlN, Solid State Commun. 1967; 5: 851-853.
- [8] HELLWEGE K. H., MADELUNG O., Semiconductors impurities and defects in group IV elements and III-V compounds. Springer: New York, 1987; BOER K. W., Survey of semiconductor physics. Van Nostrand-Reynold: New York, 1990.
- [9] KNITTLE E., WENTZCOVITSCH R. M., JEANLOZ R., COHEN M. L., Experimental and theoretical equation of state of cubic boron nitride. Nature (London) 1989; 337:349-352.
- [10] SHERWIN M. E., DRUMMOND T. J., Predicted elastic constants and critical layer thicknesses for cubic phase AlN, GaN and InN on beta-SiC. J. Appl. Phys. 1991; 69:8423-8425.
- [11] STRITE S., RUAN J., LI Z., SALVADOR A., CHEN H., SMITH D. J., CHOYKE W. J., MORKOC H., An investigation of the properties of cubic GaN grown on GaAs by plasma-assisted molecular-beam epitaxy. J. Vac. Sci. Technol. B 1991; 9:1924-1929.

- [12] PERLIN P., GORCZYCA I., CHRISTENSEN N. E., GRZEGORY I., TEISSEYRE H., SUSKI T., Pressure studies of gallium nitride: Crystal growth and fundamental electronic properties. *Phys. Rev. B* 1992; 45:13307-13313.
- [13] PETROV I., MOJAB E., POWELL R. C., GREENE J. E., Synthesis of metastable epitaxial zinc-blende structure AlN by solid state reaction. *Appl. Phys. Lett.* 1992; 60:2491-2493.
- [14] STRITE S., CHANDRASEKHAR D., SMITH D. J., SARIEL J., CHEN H., TERAGUCHI N., MORKOC H., Structural properties of InN films grown on GaAs substrates: observation of the zincblende polytype. *J. Cryst. Growth* 1993; 127:204-208.
- [15] BECHSTEDT F., FURTHMULLER J., Do we know the fundamental energy gap of InN?. *J. Cryst. Growth* 2002; 246:315-319.
- [16] BECHSTEDT F., FURTHMULLER J., WAGNER J. M., Electronic and vibrational properties of group-III nitrides: Ab initio studies. *Phys. Stat. Sol (c)* 2003; 0:1732-1749.
- [17] FRITSCH D., SCHMIDT H., GRUNDMANN M., Band dispersion relations of zinc-blende and wurtzite InN. *Phys. Rev. B* 2004; 69:165204-1-165204-5.
- [18] SEGEV D., JANOTTI A., VAN DE WALLE C. G., Self-consistent band-gap corrections in density functional theory using modified pseudopotentials. *Phys. Rev. B* 2007; 75:35201-1 – 35201-9.
- [19] DING S. A., NEUHOLD G., WEAVER J. H., HABERLE P., HORN K., BRANDT O., YANG H., PLOOG K., Electronic structure of cubic gallium nitride films grown on GaAs. *J. Vac. Sci. Technol. A* 1996; 14:819-824.
- [20] MIWA K., FUKUMOTO A., First-principles calculation of the structural, electronic, and vibrational properties of gallium nitride and aluminum nitride. *Phys. Rev. B* 1993; 48:7897 – 7902.
- [21] GORCZYCA I., CHRISTENSEN N. E., PELTZER E. L. B., RODRIGUEZ C. O., Optical phonon modes in GaN and AlN. *Phys. Rev. B* 1995; 51:11936–11939.
- [22] KIM K., LAMBRECHT W. R. L., SEGALL B., Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN. *Phys. Rev. B* 1996; 53:16310 – 16326.

- [23] DAVYDOV V. YU., KITAEV YU. E., GONCHARUK I. N., SMIRNOV A. N., GRAUL J., SEMCHINOVA O., UFFMANN D., SMIRNOV M. B., MIRGORODSKY A. P., EVARESTOV R. A., Phonon dispersion and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN. *Phys. Rev. B* 1998; 58:12899 – 12907 .
- [24] PARLINSKI K., KAWAZOE Y., Ab initio study of phonons in hexagonal GaN. *Phys. Rev. B* 1999; 60:15511 – 15514.
- [25] CINGOLANI A., FERRARA M., LUGARA M., SCAMARIO G., First order Raman scattering in GaN. *Solid State Commun.* 1986; 58:823-824.
- [26] PERLIN P., POLIAN A., SUSKI T., Raman-scattering studies of aluminum nitride at high pressure. *Phys. Rev. B* 1993; 47:2874 – 2877.
- [27] GIEHLER M., RAMSTEINER M., BRANDT O., YANG H., PLOOG K. H., Optical phonons of hexagonal and cubic GaN studied by infrared transmission and Raman spectroscopy. *Appl. Phys. Lett.* 1995; 67:733-738.
- [28] FILIPPIDIS L., SIEGLE H., HOFFMANN A., THOMSEN C., KARCH K., BECHSTEDT F., Raman frequencies and angular dispersion of polar modes in Aluminum Nitride and Gallium Nitride. *Phys. Status Solidi (b)* 1996; 198:621-627.
- [29] CROS A., DIMITROV R., ANGERER H., AMBACHER O., STUTZMANN M., CHRISTIANSEN S., ALBRECHT M., STRUNK H. P., Influence of magnesium doping on the structural properties of GaN layers. *J. Cryst. Growth* 1997; 181:197-203.
- [30] TÜTÜNCÜ H. M., SRIVASTAVA G. P., Phonons in zinc-blende and wurtzite phases of GaN, AlN, and BN with the adiabatic bond-charge model. *Phys. Rev. B* 2000; 62:5028 – 5035.
- [31] DUMAN S., III-N Tipi Yarıiletkenlerin Örgü Dinamiğinin Adyabatik Bağ Yükü Modeli İle İncelenmesi. Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi Fen-Bilimleri Enstitüsü, 2002.
- [32] TÜTÜNCÜ H. M., MIOTTO R., SRIVASTAVA G. P., TSE J. S., Phonons on group III-nitride (110) surfaces. *Phys. Rev. B* 2002; 66:115304-1 – 15304-11.
- [33] TABATA A., ENDERLEIN R., LEITE J. R., DA SILVA S. W., GALZERANI J. C., SCHIKORA D., KLOIDT M., LISCHKA K., Comparative Raman studies of cubic and hexagonal GaN epitaxial layers. *J. Appl. Phys.* 1996; 79:4137-4140.

- [34] TABATA A., LIMA A. P., TELES L. K., SCOLFARO L. M. R., LEITE J. R., LEMOS V., SCHUTTKER B., FREY T., SCHIKORA D., LISCHKA K., Structural properties and Raman modes of zinc blende InN epitaxial layers. *Appl. Phys. Lett.* 1999; 74(3):362-364.
- [35] HARIMA H., INOUE T., NAKASHIMA S., OKUMURA H., ISHIDA Y., YOSHIDA S., KOIZUMI T., GRILLE H., BECHSTEDT F., Raman studies on phonon modes in cubic AlGaN alloy. *Appl. Phys. Lett.* 1999; 74(2):191-193.
- [36] REICH S., FERRARI A. C., ARENAL R., LOISEAU A., BELLO I., ROBERTSON J., Resonant Raman scattering in cubic and hexagonal boron nitride. *Phys. Rev. B* 2005; 71:205201-1–205201-12.
- [37] WAAG A., FISCHER F., LUGAUER H. J., LITZ TH., LAUBENDER J., LUNZ U., ZEHNDER U., OSSAU W., GERHARDT T., MOLLER M., LANDWEHR G., Molecular-beam epitaxy of beryllium-chalcogenide-based thin films and quantum-well structures. *J. Appl. Phys.* 1996; 80:792-796.
- [38] MUNOZ A., RODRIGUEZ-HERNANDEZ P., MUJICA A., Electronic and structural properties of BeSe, BeTe, and BeS: comparison between ab-initio theory and experiments. *Phys. Status Solidi (b)* 1996; 198:439 – 446.
- [39] BENOSMAN N., AMRANE N., MECABIH S., AOURAG H., Structural and electronic properties of bulk BeS. *Physica B* 2001; 304:214-220.
- [40] SRIVASTAVA G. P., TÜTÜNCÜ H. M., GUNHAN N., First-principles studies of structural, electronic, and dynamical properties of Be chalcogenides. *Phys. Rev. B* 2004; 70:085206-085211.
- [41] EL HAJ HASSAN F., First principles calculations on the origins of the gap bowing in $\text{BeS}_x\text{Se}_{1-x}$, $\text{BeS}_x\text{Te}_{1-x}$ and $\text{BeSe}_x\text{Te}_{1-x}$ alloys. *Phys. Status Solidi (b)* 2005; 242:909 – 915.
- [42] KHENATA R., BOUHEMADOU A., HICHOIR M., BALTACHE H., RACHED D., RERAT M., Elastic and optical properties of BeS, BeSe and BeTe under pressure. *Solid State Electronics* 2006; 50:1382 – 1388.
- [43] LUO H., GHANDEHARI K., GREENE R. G., RUOFF A. L., TRAIL S. S., DISALVO F. J., Phase transformation of BeSe and BeTe to the NiAs structure at high pressure. *Phys. Rev. B* 1995; 52:7058 – 7064.
- [44] NARAYANA C., NESAMONY V. J., RUOFF A. L., Phase transformation of BeS and equation-of-state studies to 96 GPa. *Phys. Rev. B* 1997; 56:14338 – 14343.

- [45] WAGNER V., GUNDEL S., GEURTS J., GERHARD T., LITZ TH., LUGAUER H. -J., FISCHER F., WAAG A., LANDWEHR G., KRUSE R., BECKER CH., KUSTER U., Optical and acoustical phonon properties of BeTe. *J. Cryst. Growth* 1998; 184/185:1067-1071.
- [46] WAGNER V., LIANG J. J., KRUSE R., GUNDEL S., KEIM M., WAAG A., GEURTS J., Lattice dynamics and bond polarity of Be-chalcogenides - A new class of II-VI materials. *Phys. Status Solidi (b)* 1999; 215:87-91.
- [47] STUCKEL D. J., Energy-Band Structure of BeS, BeSe, and BeTe. *Phys. Rev. B* 1970; 2:1852 – 1858.
- [48] SARKAR R. L., CHATTERJEE S., Electronic energy bands of BeS, BeSe and BeTe. *J. of Phys. C:Solid State Phys.* 1977; 10:57 – 62.
- [49] GONZALEZ-DIAZ M., RODRIGUEZ-HERNANDEZ P., MUNOZ A., Elastic constants and electronic structure of beryllium chalcogenides BeS, BeSe, and BeTe from first-principles calculations. *Phys. Rev. B* 1997; 55:14043-14046.
- [50] VERIE C., Beryllium substitution-mediated covalency engineering of II-VI alloys for lattice elastic rigidity reinforcement. *J. Cryst. Growth* 1998; 184-185:1061-1066.
- [51] FLESZAR A., HANKE W., Electronic excitations in beryllium chalcogenides from the ab-initio GW approach. *Phys. Rev. B* 2000; 62:2466-2474.
- [52] HECIRI D., BELDI L., DRABLIA S., MERADJI H., DERRADJI N. E., BELKHIR H., BOUHAFS B., First-principles elastic constants and electronic structure of beryllium chalcogenides BeS, BeSe and BeTe. *Comput. Mater. Sci.* 2007; 38:609-617.
- [53] YIM W. M., DISMAKES J. B., STOFKO E. J., PAFF R. J., Synthesis and some properties of BeTe, BeSe and BeS. *J. Phys. Chem. Solids* 1972; 33:501-505.
- [54] MADELUNG O., Semiconductors others than group IV elements and III-V compounds, *Data in Science and Technology Series, Vol VIII.* Springer-Verlag: Berlin, 1992.
- [55] NAGELSTRAßER M., DROGE H., STEINRUCK H. P., FISHER F., LITZ T., WAAG A., LANDWEHR G., FLESZAR A., HANKE W., Band structure of BeTe:A combined experimental and theoretical study. *Phys. Rev. B* 1998; 58:10394-10400.

- [56] EICH D., FUCHS O., GROH U., WEINHARDT L., FINK R., UMBACH E., HESKE C., FLESZAR A., HANKE W., GROSS E. K. U., BOSTEDT C., BUUREN T. V., FRANCO N., TERMINELLO L. J., KEIM M., REUSCHER G., LUGAUER H., WAAG A., Resonant inelastic soft x-ray scattering of Be chalcogenides. *Phys. Rev. B* 2006; 73:115212-1 – 115212-6.
- [57] DOYEN-LANG S., PAGES O., LANG L., HUGEL J., Phonon dispersion curves of BeSe and BeTe. *Phys. Status Solidi (b)* 2002; 229:563-566.
- [58] WAGNER V., GEURTS J., GERHARD T., LITZ TH., LUGAUER H. – J., FISCHER F., WAAG A., LANDWEHR G., WALTER TH., GERTHSEN D., Determination of BeTe phonon dispersion by Raman spectroscopy on BeTe/ZnSe-superlattices. *Appl. Surf. Sci.* 1998; 123/124:580-584.
- [59] PAGES O., AJJOUN M., BORMANN D., CHAUVET C., TOURNIE E., FAURIE J. P., Vibrational evidence for a percolative behaviour in $Zn_{1-x}Be_xSe$. *Phys. Rev. B* 2001; 65:035213-1 – 035213-6.
- [60] PAGES O., AJJOUN M., TITE T., BORMANN D., TOURNIE E., RUSTAGI K. C., Long wave phonons in ZnSe-BeSe mixed crystals: Raman scattering and percolation model. *Phys. Rev. B* 2004; 70:155319-1 – 155319-10.
- [61] MUCK T., WAGNER J. W., HANSEN L., WAGNER V., GEURTS J., IVANOV S. V., Vibration dynamics and interfacial chemistry of the CdSe/BeTe interface. *Phys. Rev. B* 2004; 69:245314-1 – 245314-9.
- [62] WRONKOWSKA A. A., WRONKOWSKI A., FIRSZT F., LEGOWSKI S., Investigation of II-VI alloy lattice dynamics by IR spectroscopic ellipsometry. *Cryst. Res. Technol.* 2006; 41:580-587.
- [63] SWARTS C. A., MCGILL T. C., GODDARD W. A., Reconstruction of the (110) surface of III-V semiconductor compounds. *Surf. Sci.* 1981; 110:400-414.
- [64] JAFFE J. E., PANDEY R., ZAPOL P., Ab initio prediction of GaN (1010) and (110) anomalous surface relaxation. *Phys. Rev. B* 1996; 53:R4209-R4212.
- [65] GROSSNER U., FURTHMULLER J., BECHSTEDT F., Bond-rotation versus bond-contraction relaxation of (110) surfaces of group-III nitrides. *Phys. Rev. B* 1998; 58:R1722-R1725.
- [66] FILIPPETTI A., FIORENTINI V., CAPPELLINI G., BOSIN A., Anomalous relaxations and chemical trends at III-V semiconductor nitride nonpolar surfaces. *Phys. Rev. B* 1999; 59:8026-8031.

- [67] ALVES H. W. L., ALVES J. L. A., NOGUEIRA R. A., LEITE J. R., Ab initio theoretical studies of atomic and electronic structures of III-Nitride (110) surfaces. *Brazilian Journal of Physics* 1999; 29:817-822.
- [68] MIOTTO R., SRIVASTAVA G. P., FERRAZ A. C., First principles pseudopotential study of GaN and BN (110) surfaces. *Surf. Sci.* 1999; 426:75 – 82.
- [69] MIOTTO R., FERRAZ A. C., SRIVASTAVA G. P., III-N(110) surface relaxation and its dependence on the chemical bonding. *Solid State Commun.* 2000; 115:67-71.
- [70] OOI N., ADAMS J. B., Ab initio studies of the cubic boron nitride (110) surface. *Surf. Sci.* 2005; 574:269-286.
- [71] TÛTÛNCÛ H. M., BAĐCI S., SRIVASTAVA G. P., ALBUDAK A. T., UĐUR G., Structural and dynamical properties of zinc-blende GaN, AlN, BN and their (110) surfaces. *Phys. Rev. B* 2005; 71:195309-1 – 195309-10.
- [72] BAĐCI S., DUMAN S., TÛTÛNCÛ H. M., SRIVASTAVA G. P., UĐUR G., Ab initio calculation of the structural and dynamical properties of the zinc-blende BN and its (110) surface. *Diamond and Related Materials* 2005; 15:1161-1165.
- [73] BAĐCI S., DUMAN S., TÛTÛNCÛ H. M., SRIVASTAVA G. P., Structural and electronic properties of zinc blende BeTe and its (110) surface. *Phys. Stat. Sol. (c)* 2007; 4:595-597.
- [74] BAĐCI S., TÛTÛNCÛ H. M., DUMAN S., SRIVASTAVA G. P., Structure electronic properties and zone-centre phonon modes on the BeS(110) surface. *AIP Conf. Proc.* 2007; 899:237-238.
- [75] BAĐCI S., TÛTÛNCÛ H. M., SRIVASTAVA G. P., Ab initio calculations of structural, electronic and dynamical properties of BeSe(110) surface. *Surf. Sci.* 2007; 601:4087-4091.
- [76] STOKES H. T., *Solid state physics*. Allyn & Bacon Inc.: Massachusetts, 1987.
- [77] SRIVASTAVA G. P., *The physics of phonons*. Adam Hilger: Bristol, 1990.
- [78] WILLIAMS R. H., SRIVASTAVA G. P., McGOVERN I. T., Photoelectron spectroscopy of solids and their surfaces. *Rep. Prog. Phys.* 1980; 43:1357-1414.
- [79] TÛTÛNCÛ H. M. Lattice dynamics of semiconductors and their surfaces., PhD. Thesis, University of Exeter, 1998.

- [80] FUCHS R., KLIEWER K. L., Optical modes of vibration in an ionic crystal slab. *Phys. Rev. B* 1965; 140:A2076-A2088.
- [81] IBACH H., Optical surface phonons in zinc oxide detected by slow-electron spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.* 1970; 24:1416-1418.
- [82] HARTEN U., TOENNIES J. P., Surface phonons on GaAs(110) measured by inelastic helium atom scattering. *Europhys. Lett.* 1987; 4:833-838.
- [83] HOHENBERG P., KOHN W., Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.* 1964; 136:B864-B867.
- [84] KOHN W., SHAM L. J., Self-Consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.* 1965; 140:A1133-A1138.
- [85] SRIVASTAVA G. P., Theoretical modelling of semiconductor surface, microscopic studies of electrons and phonons. World Scientific: Singapore, 1999.
- [86] BARONI S., DE GIRONCOLI S., DAL CARSO A., GIANNOZZI P., Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Rev. Mod. Phys.* 2001; 73:515-562.
- [87] KOHN W., Improvement of rayleigh-ritz eigenfunctions. *SIAM Reviews*, 1972; 14:399-419.
- [88] MING-FU LI, Modern semiconductor quantum physics. Chih-Tang S (ed); World Scientific: New York, 1995.
- [89] PAYNE M. C., TETER M. P., ALLAN D. C., ARIAS T. A., JOANNOPOULOS J. D., 'Iterative minimization techniques for ab-initio total energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients', *Rev. of Mod. Phys.*, 1992; 64:1045-1097.
- [90] GIANNOZZI P., DE GIRONCOLI S., PAVONE P., BARONI S., Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors, *Phys. Rev. B* 1991; 43:7231-7242.
- [91] WIGNER E. P., Effects of the electron interaction on the energy levels of electrons in metals. *Trans. Faraday Soc.* 1938; 34:678 – 685.
- [92] CEPERLEY D. M., ALDER B., Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Phys. Rev. Lett.* 1980; 45:566-569.
- [93] PERDEW J., ZUNGER A., Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. *Phys. Rev. B* 1981; 23:5048-5079.

- [94] PERDEW J. P., BURKE K., Comparison shopping for a gradient-corrected density functional. *Int. J. Quant. Chem.* 1996; 57:309-319.
- [95] SVENDSEN P. S., VON BARTH U., Gradient expansion of the exchange energy from second-order density response theory. *Phys. Rev. B* 1996; 54:17402-17413.
- [96] BECKE A. D., Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Phys. Rev. A* 1988; 38:3098-3100.
- [97] PERDEW J. P., WANG Y., Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Phys. Rev. B* 1992; 45:13224-13249.
- [98] PERDEW J. P., BURKE K., ERNZERHOF M., Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.* 1996; 77:3865-3868.
- [99] MA S. K., BRUECKNER K. A., Correlation energy of an electron gas with slowly varying high density. *Phys. Rev.* 1968; 165:18-31.
- [100] MARTIN R. M., *Electronic Structure*. Cambridge University Press: Cambridge, 2004.
- [101] WHITE J. A., BIRD D. M., Implementation of gradient-corrected exchange-correlation potentials in Car-Parrinello total energy calculations. *Phys. Rev. B* 1994; 50:4954-4957.
- [102] HARRISON, W. A., *Pseudopotentials in the theory of metals*, Benjamin Press.: New York, 1966.
- [103] COHEN M. L., HEINE V., *Solid state physics*. Seitz F, Turnbull D (ed); Vol: 24 Academic Press: New York, 1970.
- [104] PHILLIPS J. C. KLEINMAN L., New method for calculating wave functions in crystals and molecules. *Phys. Rev.* 1959; 116:287-294.
- [105] ANTONCIK E., Approximate formulation of the orthogonalized plane-wave method. *J. Phys. Chem. Solids* 1959; 10:314-320.
- [106] BARONI S., GIANNOZZI P., TESTA A., Green's-function approach to linear response in solids. *Phys. Rev. Lett.* 1987; 58:1861-1864.
- [107] HELLMANN H., *Einführung in die quantenchemie*, Deuticke: Leipzig, 1937.
- [108] FEYNMAN R. P., Forces in molecules. *Phys. Rev.* 1939; 56:340-343.
- [109] BARONI S., DAL CARSO A., DE GIRONCOLI S., GIANNOZZI P., <http://www.pwscf.org>.

- [110] MURNAGHAN F. D., The compressibility of media under extreme pressure. Proc. Nat. Acad. Sci. 1944; 30:244-247.
- [111] PHILLIPS J. C., Ionicity of the chemical bond in crystals. Rev. Mod. Phys. 1970; 42:317-356.
- [112] SRIVASTAVA G. P., Theory of semiconductor surface reconstruction. Rep. Prog. Phys. 1997; 60:561-613.
- [113] TSAI M. H., KASOWSKI R. V., DOW J. D., Relaxation of the non-polar (10 $\bar{1}$ 0) surfaces of wurtzite AlN and ZnS. Solid State Commun. 1987; 64:231-233.
- [114] TSAI M. H., DOW J. D., WANG R. P., KASOWSKI R. V., Relaxation of zinc-blende (110) surfaces. Phys. Rev. B 1989; 40:9818-9823.
- [115] KAHN A., AHSAN S., CHEN W., DUMAS M., DUKE C. B., PATON A., Determinants of surface atomic geometry: The CuCl(110) test case. Phys. Rev. Lett. 1992; 68:3200-3203.
- [116] ALVES J. L. A., HEBENSTREIT J., SCHEFFLER M., Calculated atomic structures and electronic properties of GaP, InP, GaAs and InAs (110) surfaces. Phys. Rev. B 1991; 44:6188-6198.
- [117] WOICIK J. C., KENDELEWICZ T., MIYANO K. E., COWAN P. L., BOULDIN C. E., KARLIN B. A., PIANETTA P., SPICER W. E., X-ray standing-wave determination of the clean InP(110) surface reconstruction. Phys. Rev. Lett. 1992; 68:341-344.
- [118] UMERSKI A., SRIVASTAVA G. P., Geometry and electronic band structure of an ordered monolayer deposition of Bi on III-V(110) semiconductor surfaces. Phys. Rev. B 1995; 51:2334-2346.
- [119] TUTUNCU H. M., SRIVASTAVA G. P., Theory of localized phonons on III-V(110) surfaces. J. of Phys. and Chem. of Solids 1997; 58:685-694.
- [120] TÛTÛNCÛ H. M., MIOTTO R., SRIVASTAVA G. P., Phonons on II-VI (110) semiconductor surfaces. Phys. Rev. B 2000; 62:15797-15805.
- [121] NIENHAUS H., MONCH W., Surface phonons in InP(110). Surf. Sci. 1995; 328:L561-L565.
- [122] NIENHAUS H., Phonons in {110} surfaces of III-V compound semiconductors. Phys. Rev. B 1997; 56:13194-13201.
- [123] HINRICHS K., SCHIERHORN A., HAIER P., ESSER N., RICHTER W., SAHM J., Surface phonons of InP(110) studied by Raman spectroscopy. Phys. Rev. B 1997; 79:1094-1097.

- [124] ZANGWILL A., *Physics at surfaces*, Cambridge University Press: England, 1992.
- [125] CHELIKOWSKY J. R., COHEN M. L., (110) surface states in III-V and II-VI zinc-blende semiconductors. *Phys. Rev. B* 1976; 13:826 – 834.
- [126] WATARI K., ALVES J. L. A., FERRAZ A. C., Atomic structures of CdTe and CdSe (110) surfaces. *Brazilian Journal of Physics* 1996; 26:271-273.

ÖZGEÇMİŞ

Sadık Bağcı, 09.10.1980'de Aydın'da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Aydın'da tamamladı. 1998 yılında başladığı Sakarya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü 2002 yılında bitirdi. Yine bu bölümde aynı yıl başladığı yüksek lisans eğitimi sırasında, Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünde Araştırma Görevlisi kadrosuna atandı. 2004 yılında 'Kristal Elmas Yapının ve C(001)(2x1) Yüzeyinin Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özelliklerinin İncelenmesi' konulu tezi ile yüksek lisans eğitimini tamamladı. Aynı yıl Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nde doktora eğitimine başladı. Halen Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümünde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaktadır.