

**Geniř Bant Aralıklı Yarıiletkenlerin ve Yüzeylerinin  
Atomik, Elektronik ve Dinamik Özelliklerinin  
İncelenmesi**

**Proje No: 105T087**

Prof.Dr. Hüseyin Murat TÖTÖNCÜ  
Yrd.Doç.Dr. Sıtkı DUMAN  
Yrd.Doç.Dr. Sadık BAĞCI

KASIM 2008  
SAKARYA

## ÖNSÖZ

Proje kapsamında, optoelektronik teknolojisinde kullanılmaya elverişli geniş bant aralıklı yarıiletkenler ve yüzeylerinin atomik yapıları, elektronik enerji seviyeleri ve dinamik özellikleri yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak incelenmiştir. Projenin ilk kısmında Magnezyum kalkojenlerin (MgS, MgSe ve MgTe) dört farklı kristal yapısı (NaCl, ZnS, WZ ve NiAs) için yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri araştırılmıştır. Daha sonra yarıiletkenlerin yüzeyleri için yapılan çalışmalara geçilmiştir. Bu kapsamda ilk olarak Ge(001)(2x1)/As, Se:InP(110) ve Te:InP(110) gibi katkılı yüzeylerin atomik geometrileri belirlenerek, elektronik ve titreşim özellikleri sunulmuştur. Daha sonra II-VI yarıiletkenlerinden BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin (110) yüzeyleri için yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri incelenmiştir. Son olarak BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için yüzey atomik denge parametreleri belirlenerek, elektronik ve dinamik özellikleri araştırılmıştır.

Yukarıdaki çalışmaları içeren ve 'Geniş Bant Aralıklı Yarıiletkenlerin ve Yüzeylerinin Atomik, Elektronik ve Dinamik Özelliklerinin İncelenmesi' konulu projemiz Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) tarafından 105T087 proje numarasıyla üç yıl süre ile desteklenmiştir.

Proje Yürütücüsü : Prof. Dr. Hüseyin Murat TÛTÛNCÛ

Araştırmacı : Yrd. Doç. Dr. Sıtkı DUMAN

Araştırmacı : Yrd. Doç. Dr. Sadık BAĞCI

## İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ .....	i
İÇİNDEKİLER .....	ii
ŞEKİLLER LİSTESİ .....	v
TABLolar LİSTESİ.....	viii
ÖZET.....	ix
SUMMARY.....	x
<b>BÖLÜM 1.</b>	
<b>GİRİŞ.....</b>	<b>1</b>
<b>BÖLÜM 2.</b>	
<b>GENEL BİLGİLER.....</b>	<b>3</b>
<b>BÖLÜM 3.</b>	
<b>GEREÇ ve YÖNTEM.....</b>	<b>4</b>
<b>3.1. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi .....</b>	<b>4</b>
3.1.1. Kristalin toplam enerjisinin hesaplanması.....	4
3.1.2. Örgü sabiti ve hacim modülünün tayinleri.....	4
<b>3.2. Elektronik Bant Yapı Teorisi.....</b>	<b>6</b>
3.2.1. Elektronik bant yapısının hesaplanması.....	6
<b>3.3. <i>Ab initio</i> Örgü Dinamiği Teorisi.....</b>	<b>7</b>
3.3.1. Foton spektrumu ve durum yoğunluğunun hesaplanması.....	8
<b>3.4. Yüzey Yapısının Hesaplanması.....</b>	<b>8</b>
3.4.1. (110)(1x1) yüzeyinin atomik yapı tayini.....	9
3.4.2. (110)(1x1) elektronik yapı tayini.....	10
3.4.3. Yüzey fononlarının hesaplanması.....	11
<b>BÖLÜM 4.</b>	
<b>BULGULAR .....</b>	<b>12</b>
<b>4.1. Giriş.....</b>	<b>12</b>
<b>4.2. Magnezyum Kalkojenlerin Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özellikleri .....</b>	<b>12</b>
4.2.1. Taban durumu fazları.....	12
4.2.2. Magnezyum kalkojenlerin kayatuzu fazının yapısal özellikleri.....	14
4.2.3. Çinko sülfür fazının yapısal özellikleri.....	17
4.2.4. Wurtzite fazının yapısal özellikleri.....	20
4.2.5. Nikel arsenik fazının yapısal özellikleri.....	23
4.2.6. Yapısal özelliklerin karşılaştırılması.....	26

4.2.7. Magnezyum kalkojenlerin elektronik özellikleri.....	28
4.2.8. Magnezyum kalkojenlerin kayatuzu fazının elektronik özellikleri.....	28
4.2.9. Çinko sülfür fazının elektronik özellikleri.....	31
4.2.10. Wurtzite fazının elektronik özellikleri.....	34
4.2.11. Nikel Arsenik Fazının Elektronik Özellikleri.....	36
4.2.12. Magnezyum kalkojenlerin titreşim özellikleri.....	38
4.2.13. MgS kristalinin kayatuzu yapısının titreşim özellikleri.....	39
4.2.14. MgS kristalinin çinko sülfür yapısının titreşim özellikleri.....	40
4.2.15. MgS kristalinin wurtzite yapısının titreşim özellikleri.....	42
4.2.16. MgS kristalinin nikel arsenik yapısının titreşim özellikleri.....	46
4.2.17. MgSe kristalinin kayatuzu yapısının titreşim özellikleri.....	47
4.2.18. MgSe kristalinin çinko sülfür yapısının titreşim özellikleri.....	48
4.2.19. MgSe kristalinin wurtzite yapısının titreşim özellikleri.....	48
4.2.20. MgSe kristalinin nikel arsenik yapısının titreşim özellikleri.....	49
4.2.21. MgTe kristalinin kayatuzu yapısının titreşim özellikleri.....	50
4.2.22. MgTe kristalinin çinko sülfür yapısının titreşim özellikleri.....	51
4.2.23. MgTe kristalinin wurtzite yapısının titreşim özellikleri.....	52
4.2.24. MgTe kristalinin nikel arsenik yapısının titreşim özellikleri.....	53
4.3. Ge(001)(2x1)/As yüzeyinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerin incelenmesi.	54
4.3.1. Giriş .....	54
4.3.2. Ge(001)/As(2x1) yüzeyinin yapısal özellikleri.....	54
4.3.3. Ge(001)/As(2x1) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	55
4.3.4. Ge(001)/As(2x1) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	56
4.4. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin atomik, elektronik ve dinamik özelliklerinin incelenmesi.....	60
4.4.1. Giriş .....	60
4.4.2. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin atomik özellikleri.....	60
4.4.3. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin elektronik özellikleri.....	61
4.4.4. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin titreşim özellikleri.....	63
4.4.5. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin titreşim özelliklerinin karşılaştırılması.....	69
4.5. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) Yüzeylerinin Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özellikleri.....	70
4.5.1. Giriş.....	70
4.5.2. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin yapısal özellikleri.....	70
4.5.3. BeS(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	72
4.5.4. BeSe(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	73
4.5.5. BeTe(110) yüzeyinin elektronik özellikleri.....	74
4.5.6. BeS(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	75

4.5.7. BeSe(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	77
4.5.8. BeTe(110) yüzeyinin titreşim özellikleri.....	80
<b>4.6. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) Yüzeylerinin Yapısal, Elektronik ve Titreşim</b>	
<b>Özellikleri.....</b>	<b>83</b>
4.6.1. Giriş.....	83
4.6.2. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) Yüzeylerinin Yapısal Özellikleri.....	83
4.6.3. BP(110) Yüzeyinin Elektronik Özellikleri.....	85
4.6.4. BAs(110) Yüzeyinin Elektronik Özellikleri.....	86
4.6.5. BSb(110) Yüzeyinin Elektronik Özellikleri.....	87
4.6.6. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) Yüzeylerinin Titreşim Özellikleri.....	88
<b>BÖLÜM 5.</b>	
<b>TARTIŞMA / SONUÇ.....</b>	<b>94</b>
<b>KAYNAKLAR.....</b>	<b>97</b>
<b>EK-1 Proje Kapsamında Yayınlanan Makaleler .....</b>	<b>103</b>
<b>EK-2 Proje Kapsamında Uluslar arası Konferanslarda Sunulan Bildiriler.....</b>	<b>104</b>
<b>EK-3 Proje Kapsamında Tamamlanan Doktora Tezleri.....</b>	<b>105</b>
<b>Proje Özet Bilgi Formu</b>	

## ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 3.1.	ZnS kristali için enerji-örgü sabiti grafiği.....	5
Şekil 3.2.	ZnS kristali için elektronik bant yapısı.....	6
Şekil 3.3.	AlN yarı iletkeni için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri. ....	8
Şekil 3.4.	ZnS kristal yapının (110)(1x1) yüzeyinin, (110) yönünde büyütülmüş süper hücresi. ....	9
Şekil 3.5.	GaAs:Si(110) yüzeyinin elektronik yapısı.....	10
Şekil 3.6.	AlN(110) yüzeyinin fonon spektrumu.....	11
Şekil 4.1.	Magnezyum kalkojenlerin dört fazına ait molekül başına enerji grafiği. ...	13
Şekil 4.2.	Kayatuzu MgS, MgSe, MgTe'nin enerji-örgü sabiti grafiği.....	15
Şekil 4.3.	Çinko sülfür MgS, MgSe, MgTe'nin enerji-örgü sabiti grafiği.....	18
Şekil 4.4.	Wurtzite MgS, MgSe, MgTe'nin enerji-örgü sabiti grafiği.....	21
Şekil 4.5.	Nikel arsenik MgS, MgSe, MgTe'nin enerji-örgü sabiti grafiği.....	25
Şekil 4.6.	Kayatuzu MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik bant yapısı grafikleri.....	29
Şekil 4.7.	Çinko sülfür MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik bant yapısı grafikleri.....	32
Şekil 4.8.	Wurtzite MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik bant yapısı grafikleri.....	35
Şekil 4.9.	Nikel arsenik MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik bant yapısı grafikleri....	37
Şekil 4.10.	MgS yarıiletkeninin NaCl yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	39
Şekil 4.11.	Kayatuzu MgS'de $\Gamma$ noktası fononlarının atomik titreşimleri.....	40
Şekil 4.12.	MgS yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	41
Şekil 4.13.	Çinko sülfür MgS'de $\Gamma$ noktası fononlarının atomik titreşimleri.....	42
Şekil 4.14.	MgS yarıiletkeninin wurtzite yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	42
Şekil 4.15.	Wurtzite MgS'nin $\Gamma$ noktası açısall dispersiyon göstermeyen fonon modlarının atomik titreşimleri.....	44
Şekil 4.16.	Wurtzite MgS'nin $\Gamma$ noktası açısall dispersiyon gösteren fonon modlarının atomik titreşimleri.....	45
Şekil 4.17.	MgS yarıiletkeninin NiAs yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	46
Şekil 4.18.	MgSe yarıiletkeninin NaCl yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	47
Şekil 4.19.	MgSe yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	48
Şekil 4.20.	MgSe yarıiletkeninin Wurtzite yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	49

Şekil 4.21.	MgSe yarıiletkeninin NiAs yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	50
Şekil 4.22.	MgTe yarıiletkeninin NaCl yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	50
Şekil 4.23.	MgTe yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	51
Şekil 4.24.	MgTe yarıiletkeninin Wurtzite yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	52
Şekil 4.25.	MgTe yarıiletkeninin NiAs yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.....	53
Şekil 4.26.	Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için hesaplanan atomik denge geometrisinin yandan görünüşü.....	54
Şekil 4.27.	Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için hesaplanan yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	55
Şekil 4.28.	Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon dispersiyon grafiği.	56
Şekil 4.29.	Ge(001)/As(2×1) için yüzey Brillouin bölgesi merkezindeki seçilmiş bazı yüzey fonon modlarının yer değiştirme şekilleri.....	58
Şekil 4.30.	Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için As katkılanmasından oluşan boşluk fonon modlarının $\bar{K}$ simetri noktasındaki yer değiştirme şekilleri.....	59
Şekil 4.31.	Se ve Te katkılanmış InP(110) yüzeyinin denge geometrisi.....	61
Şekil 4.32.	Se:InP(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği.....	62
Şekil 4.33.	Te:InP(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği.....	63
Şekil 4.34.	Se:InP(110) yüzeyi için fonon dispersiyon grafiği.....	64
Şekil 4.35.	Yüzey Brillouin Bölgesi merkezinde seçilen bazı $A'$ fonon modlarının titreşim şekilleri.....	65
Şekil 4.36.	Se:InP(110) yüzeyi için Yüzey Brillouin Bölgesi merkezinde seçilen $A''$ karakterine sahip fonon modlarının titreşim şekilleri.....	66
Şekil 4.37.	Te:InP(110) yüzeyi için hesaplanan fonon dispersiyon grafiği.....	67
Şekil 4.38.	Te:InP(110) yüzeyi için $\bar{\Gamma}$ noktasında seçilen $A'$ karakterine sahip bazı fonon modlarının titreşim şekilleri.....	68
Şekil 4.39.	BeX(X=S,Se,Te)(110) yüzey denge geometrisinin yandan görünüşü.....	71
Şekil 4.40.	BeS(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği.....	72
Şekil 4.41.	BeSe(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği.....	73
Şekil 4.42.	BeTe(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği.....	74
Şekil 4.43.	BeS(110) yüzeyinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	75
Şekil 4.44.	BeSe(110) yüzeyinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri...	78
Şekil 4.45.	BeSe(110) yüzeyi için boşluk fonon modlarının yüzey Brillouin bölge merkezinde elde edilen titreşim şekilleri.....	79

Şekil 4.46.	BeTe(110) yüzeyinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri...	80
Şekil 4.47.	BeTe(110) yüzeyi için $\Gamma$ noktasında hesaplanan boşluk fonon modlarının ve en üst yüzey optik fonon modunun titreşim şekilleri.....	81
Şekil 4.48.	BX(X=P,As,Sb)(110) yüzey denge geometrisinin yandan görünüşü.....	84
Şekil 4.49.	BP(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	85
Şekil 4.50.	BAs(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	87
Şekil 4.51.	BSb(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği.....	88
Şekil 4.52.	BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri.....	90
Şekil 4.53.	BSb(110) yüzeyinin $\bar{X}$ simetri noktasındaki bazı fonon modlarının titreşim şekilleri.....	93



## TABLULAR LİSTESİ

Tablo 4.1	Magnezyum kalkojenlerin dört fazının atom başına toplam enerji farkları (meV/atom).....	14
Tablo 4.2.	Kayatzu magnezyum kalkojenlerin yapısal parametreleri.....	16
Tablo 4.3.	Çinko sülfür magnezyum kalkojenlerin çinko sülfür fazlarının yapısal parametreleri.....	19
Tablo 4.4.	Wurtzite magnezyum kalkojenlerin yapısal parametreleri.....	22
Tablo 4.5.	Nikel arsenik magnezyum kalkojenlerin yapısal parametreleri. ....	24
Tablo 4.6.	Wurtzite yapıdaki MgS, MgSe ve MgTe'nin hesaplanan $c/a$ , $u$ ve bağ uzunlukları.....	28
Tablo 4.7.	Kayatzu magnezyum kalkojenlerin elektronik bant aralıkları.....	30
Tablo 4.8.	Kayatzu magnezyum kalkojenlerin değerlik bant genişlikleri. ....	31
Tablo 4.9.	Çinko sülfür magnezyum kalkojenlerin elektronik bant aralıkları.....	33
Tablo 4.10.	Çinko sülfür magnezyum kalkojenlerin değerlik bant genişlikleri.....	34
Tablo 4.11.	Wurtzite magnezyum kalkojenlerin enerji aralığı değerleri. ....	36
Tablo 4.12.	Wurtzite magnezyum kalkojenlerin değerlik bant genişlikleri.....	36
Tablo 4.13.	Nikel arsenik magnezyum kalkojenlerin enerji aralıkları.....	38
Tablo 4.14.	Nikel arsenik magnezyum kalkojenlerin değerlik bant genişlikleri. ....	38
Tablo 4.15.	Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin denge geometrilerine ait parametreler ve teorik değerlerle karşılaştırılması.....	61
Tablo 4.16	Se:InP(110) yüzeyinin simetri noktaları enerji aralığı değerleri.....	62
Tablo 4.17	Te:InP(110) yüzeyinin simetri noktaları enerji aralığı değerleri.....	63
Tablo 4.18	InP(110), Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeyleri için yüzey Brillouin bölgesi merkezinde hesaplanan yüzey tabakası, yüzey altı tabakası, bağ döndürme, ve bağ germe fonon modlarının titreşim karakterlerine göre karşılaştırılması.....	69
Tablo 4.19	BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için elde edilen önemli yapısal parametreler.....	71
Tablo 4.20.	BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için elde edilen bağ uzunlukları.....	72
Tablo 4.21	BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için elde edilen önemli yüzey denge geometrisi parametreleri.....	84
Tablo 4.22	BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için elde edilen bağ uzunlukları.....	85
Tablo 4.23	BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için $\bar{\Gamma}$ noktasında hesaplanan fonon frekanları.....	91

## ÖZET

Son yıllar geniş bant aralıklı yarıiletkenler üzerine yapılan birçok çalışmaya sahne olmuştur. Çalışmalar özellikle III – V ve II – VI tipi yarıiletkenler üzerine yoğunlaşmıştır. II – VI tipi yarıiletkenler mavi ve yeşil ışık bölgesinde spektrum verdiklerinden yüksek hızlı cihazlar için önemli bir kaynak olarak görülmektedir. Mavi – yeşil ışığın frekansı kırmızı ışığa göre büyük olduğundan bu yarıiletkenler lazer teknolojisine de uygun bir spektrum göstermektedirler. Bu yarıiletkenlerin teknolojide sağlıklı bir şekilde kullanılabilmesi onların taban durumu özelliklerinin (yapısal, elektronik ve titreşim) detaylı bir şekilde incelenebilmesi ile mümkündür. Bu projede ilk olarak, yoğunluk fonksiyon teorisi, düzlem dalga sözde potansiyel metodu ve lineer tepki metodu kullanılarak, II-VI yarıiletkenlerinden olan ve dört farklı kristal yapıda (NaCl, ZnS, Wurtzite ve NiAs) bulunabilen MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkenlerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri incelenmiştir.

Günümüzde elektronik cihazların boyutlarının gittikçe küçülmesiyle yüzey etkileşimleri daha önemli hale gelmiştir. Yarıiletken yüzeylerin teknolojide sağlıklı bir şekilde kullanılmaları onların taban durumu özelliklerinin tayini ile mümkündür. Bu kapsamda projede süper hücre metodu ile bazı yarıiletken yüzeylerin atomik, elektronik ve titreşim özellikleri araştırılmıştır. Projenin yüzey çalışmalarının ilk aşamasında Ge(001)(2x1)/As, Se:InP(110) ve Te:InP(110) gibi katkılı yüzeyler incelenmiştir. Daha sonra II-VI grubundan olan Be-kalkojenlerin (BeS, BeSe ve BeTe) (110) yüzeyleri ele alınmıştır. Projenin son aşamasında ise BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin atomik, elektronik ve titreşim özellikleri çalışılmıştır.

**Anahtar kelimeler:** Yoğunluk fonksiyon teorisi, yarıiletkenler, yüzey fiziği, yapısal özellikler, elektronik özellikler, dinamik özellikler.

## **SUMMARY**

There has been a great interest in the wide-gap semiconductors stimulated by the fundamental interests and various applications. Among them III-V and II-VI semiconductors have been studied intensively. They can be used in blue and ultraviolet wavelength optics and high temperature electronics. Moreover, these semiconductors are also potentially very good choice for protective coatings due to their hardness, high melting point, high thermal conductivity and large bulk modulus. In order to use them in technological applications healthily, it can be useful to investigate their ground state properties (Structural, electronic and vibrational) in detail. The first aim of this project is to investigate structural, electronic, and dynamical properties of the rocksalt, zincblende, wurtzite and nickel arsenide phases of Mg-chalcogenides (MgS, MgSe and MgTe) by employing the plane-wave pseudopotential method, density functional theory, and a linear response technique.

Nowadays, the size of electronic devices get smaller day after day. Because of this change, studies on semiconductor surfaces become very important and popular. Thus, we make theoretical investigations of the atomic geometry, electronic structure, and lattice dynamics of several semiconductor surfaces. In order to design electronic devices properly, the ground-state properties of semiconductor surfaces should be studied also. Thus, the ground-state properties of semiconductor surfaces are investigated by applying a first-principles pseudopotential technique within a repeated slab scheme. In first part of the surface studies, we have investigated Ge(001)(2x1)/As, Se:InP(110) ve Te:InP(110) surfaces. Then, (110) surfaces of Be-chalcogenides (BeS, BeSe and BeTe) have been presented and discussed. At the end of this project, structural, electronic and vibrational properties of BP(110), BAs(110) and BSb(110) surfaces have been studied.

**Keywords:** Density functional theory, semiconductors, surface physics, structural properties, electronic properties, dynamical properties.

## BÖLÜM 1 GİRİŞ

Son yıllarda optoelektronik teknolojisinin gelişmesiyle, geniş bant aralıklı yarıiletkenler üzerine yapılan çalışmalar büyük bir artış göstermiştir. Özellikle III-V ve II-VI grubu yarıiletkenler üzerine yapılan çalışmalar bilim dünyasında geniş bir yer tutmaktadır. Bu projede ilk olarak II-VI grubu yarıiletkenlerinin literatürde eksik kalmış bir kolu olan Magnezyum kalkojenler araştırılmıştır. Bu yarıiletkenlerin kayatuzu, çinko sülfür, wurtzite ve nikel arsenik olmak üzere dört farklı fazda bulunabilmeleri, onlar üzerine yapılacak çalışmalarını daha da ilginç hale getirmiştir. Bu nedenle projenin ilk kısmında MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkenlerinin dört fazı için de yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri incelenmiştir. Bulunan sonuçlar daha önceki çalışmalardan(OKUYAMA, 1992, LI, 1995, CAMP, 1997, CHAKRABARTI, 2000, LEE, 1995, KALPANA, 1996, DRIEF, 2004, WOLVERSON, 2001, HUANG, 1995, HOFMEISTER, 2003) elde edilen sonuçlarla karşılaştırılarak tartışılmıştır. Ancak Mg-kalkojenler bu kadar kapsamlı bir incelemesi ilk kez bu projede yapılmıştır.

Gün geçtikçe elektronik aletlerin boyutlarının küçülmesi düşük boyutlu sistemlerin incelenmesini zorunlu hale getirmektedir. Buradan hareketle projenin bundan sonraki kısımlarında yüzey çalışmalarına ağırlık verilmiştir. As, Sb ve Bi gibi V. Grup elementlerinin Ge(001) ve Si(001) yüzeyleri ile etkileşmelerinin incelenmesi, farklı eksenler boyunca bir yüzeyin büyütülmesi (heteroepitaxial growth) işlemi için büyük önem taşımaktadır. Bu nedenle projenin ikinci kısmında As katkılanmış Ge(001)(2x1) yüzeyinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri yoğunluk fonksiyon teorisiyle ele alınmıştır. Elde edilen sonuçlar katkısız Ge(001)(2x1) yüzeyiyle(STIGLER, 1998, TÛTÛNCÛ, 1998) ve daha önceden yapılmış katkılı yüzeylerden bulunan sonuçlarla(GAY, 1998, MANKEFORS, 1999, TÛTÛNCÛ, 2004) karşılaştırılmıştır. Özellikle bu katkılı yüzeyin titreşim özelliklerinin ilk kez bu projede ele alınması, çalışmanın önemini artırmaktadır.

Kalkojen katkılanmış III-V(110) yüzeyleri, yüksek hızlı elektronik aygıtlarda ve uzun dalga boylu optik devrelerde kullanılmaları nedeniyle yaygın bir şekilde çalışılmışlardır(SCHROTER, 1994, UMERSKI, 1995, SCHMIDT, 1995). Ancak bu yüzeylerin titreşim özellikleri literatürde ihmal edilmiştir. Bu nedenle projenin üçüncü kısmında Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin atomik, elektronik ve dinamik özellikleri sunulmuştur. Bu yüzeylerin titreşim özellikleri ilk kez bu proje kapsamında çalışılmış ve literatüre kazandırılmıştır.

II-VI yarıiletkenlerinden olan Berilyum kalkojenlerin (BeS, BeSe ve BeTe) 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(WAAG, 1996). Teknolojide bu kadar geniş bir biçimde faydalanılan Be-kalkojenlerin hacim özellikleri üzerine çok sayıda teorik ve deneysel çalışma(MUNOZ, 1996,

SRIVASTAVA, 2004, a KHENATA, 2006, b KHENATA, 2006, LUO, 1995, WAGNER, 1998, HECIRI, 2007, YIM, 1972, DOYEN, 2002, PAGES, 2004) olmasına rağmen yüzey özellikleri daha önce hiç çalışılmamıştır. Projenin dördüncü kısmında literatürde ilk kez BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri yoğunluk fonksiyon teorisi ile incelenmiştir.

Geçen yıllardan günümüze III-V yarıiletkenleri üzerine yapılan çalışmalar artarak devam etmektedir. III-V yarıiletkenlerinden olan Bor bileşikleri (BP, BAs ve BSb) sertlikleri, termal iletkenlikleri ve yüksek erime sıcaklıkları ile teknolojik uygulamalara oldukça elverişlidirler. Bunun yanı sıra geniş bant aralıkları ve düşük dielektrik sabitleri, mavi ve morötesi bölgede çalışan optik aletlerde ve yüksek sıcaklık elektroniğinde kullanılmalarını sağlamaktadır. Bu nedenle literatürde onların hacim özelliklerinin incelendiği çok sayıda teorik ve deneysel makale bulunmaktadır[RODRIGUEZ, 1995, BOUHAFS, 2000, GONZALEZ, 1997, BENOSMAN, 2001, ZAOUI, 2005, FERHAT, 1998, MADELUNG, 1982, WETTLING, 1983, WANG, 1964, FOMICHEV, 1968, LYAKHOVSKAYA, 1970, SANJURJO, 1983, TALWAR, 1997, TOUAT, 2006, PASSLER, 2007, BOUAMAMA, 2007]. Bor bileşiklerinin hacim özelliklerinin bu kadar çok çalışılmasına rağmen yüzey özellikleri literatürde eksik kalmıştır. Ancak elektronik ve optik aygıtlarda kullanılacak malzemelerin belirlenmesinde yarıiletken yüzeylerinin atomik geometrileri, elektronik enerji seviyeleri ve fonon modlarının incelenmesi faydalı olmaktadır. Bu nedenle projenin son kısmında BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri sunulacaktır.

## BÖLÜM 2 GENEL BİLGİLER

Günümüzde teknolojik alanda meydana gelen gelişmelere paralel olarak III-V ve II-VI yarıiletkenlerinin fiziksel özellikleri hala yoğun bir şekilde çalışılmaktadır. Son yıllarda teknolojik aletlerin boyutlarının küçülmesi ile yüzey fiziği çalışmaları da hız kazanmıştır. Bu gelişmeler ışığında projenin ilk bir yıllık döneminde II-VI yarıiletkenlerinden olan Magnezyum kalkojenlerin dört farklı kristal yapısı için yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri çalışılmıştır. Bu araştırma MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkenleri üzerine yapılan literatürdeki en kapsamlı çalışma olması yönüyle oldukça önemlidir. Projenin üçüncü altı aylık periyodunda Ge(001)(2x1)/As katkılı yüzeyi incelenmiştir. Bu yüzeyin fonon dispersiyon grafiği ilk kez bu proje kapsamında hazırlanarak literatüre kazandırılmıştır. Proje kapsamında ele alınan diğer katkılı yarıiletken yüzeyleri olan Se:InP(110) ve Te:InP(110) ise dördüncü altı aylık dönemde ele alınmıştır. Yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri çalışılan bu yüzeyler yüksek hızlı elektronik aygıtlarda ve uzun dalga boylu optik devrelerde kullanıma olanakları olduğu için oldukça önemlidirler. Bu yüzeylerin fonon dispersiyon grafikleri de ilk kez bu projede çalışılmış ve geniş bir şekilde tartışılmıştır. Projenin üçüncü yılının ilk altı aylık döneminde optoelektronik teknolojisinde geniş uygulama alanları olan Be-kalkojenlerin, literatürde eksik kalan yüzey özellikleri incelenmiştir. Bu proje kapsamında BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin (110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri ilk kez yoğunluk fonksiyon teorisiyle çalışılmıştır. Projenin son altı aylık döneminde ise III-V yarıiletkenlerinden olan Bor bileşiklerinin yüzey özellikleri araştırılmıştır. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerinin incelendiği ilk çalışma olması nedeniyle, bu yüzeyler üzerine yapılan araştırmalar projenin özgünlüğüne de önemli katkılar yapmaktadır.

01.11.2005 ile 01.11.2008 tarihleri arasında üç yıl boyunca devam eden bu proje kapsamında yapılan araştırmalar, yurt dışında prestijli dergilerde yayınlanmıştır. Bu yayınlar EK-1 de açık bir şekilde sunulmuştur. Bu da projede yapılan çalışmaların dünya çapında kabul gördüğünü ve literatüre önemli katkılar yaptığını göstermektedir. Ayrıca EK-2'de bu proje kapsamında hazırlanarak uluslar arası konferanslarda sunulan bildirimlerin bir listesi de verilmiştir. Bu listeden de görüleceği gibi proje kapsamında üç yılda toplam yedi tane uluslar arası konferansta dokuz adet bildiri sunulmuştur. Son olarak EK-3 kısmında proje kapsamında biten doktora tezleri verilmiştir.

## BÖLÜM 3 GEREÇ ve YÖNTEM

### 3.1. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

Temeli yoğunluk fonksiyon teorisine dayanan *ab initio* teorileri, kristallerin ve yüzeylerinin yapısal, elektronik ve dinamik özelliklerini araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilirlerdir. Günümüzde bilgisayar sistemlerinin gelişmesi, bu metotların önemini iyice artırmıştır. Şimdiye kadar bu metotlarla yapılan araştırmalar, deneysel sonuçlarla mükemmel uyumlar vermiştir. Bununla birlikte deneysel çalışma yapmanın çok zor olduğu kristallerin taban durumu özellikleri bu metotlarla belirlenerek, katıhal fiziğinin ve elektronun kullanımına sunulabilir. Şimdi yoğunluk fonksiyon teorisinin uygulanışından kısaca bahsedelim.

#### 3.1.1. Kristalin toplam enerjisinin hesaplanması

Bu teoride taban durumu dalga fonksiyonu  $\Psi$ , elektronik yük yoğunluğuna bağlı olarak ifade edilir. Aynı şekilde sistemin toplam enerjisi  $E_{top}(R_\alpha)$  de elektronik yük yoğunluğunun  $n(r, R_\alpha)$  bir fonksiyonu olur. Bu teoride kristalin toplam enerjisi

$$E_{top}(R_\alpha) = \sum_i^{val.el.} \Psi_i^*(r, R_\alpha) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \Psi_i(r, R_\alpha) + \sum_i^{val.el.} \Psi_i^*(r, R_\alpha) V^{PS} \Psi_i(r, R_\alpha) dr + \frac{e^2}{2} \int \frac{n(r, R_\alpha) n(r', R_\alpha)}{|r - r'|} dr dr' + E_{XC}[n(r, R_\alpha)] + \frac{e^2}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|}$$

şeklinde ifade edilir. Buradaki toplamlar valans (değerlik) elektronları üzerindedir. Çünkü kimyasal ve fiziksel özelliklerin belirlenmesine katkıda bulunan elektronlar bunlardır.  $r$  ve  $R_\alpha$  sırasıyla elektron ve iyon korlarının pozisyonlarını ifade eder.  $n(r, R_\alpha)$  ise temel hal elektronik yük yoğunluğudur.

#### 3.1.2. Örgü sabiti ve hacim modülünün tayinleri

Bir kristalin toplam enerjisinin bulunması oldukça önemlidir. Çünkü toplam enerjinin bulunması ile, onunla ilgili fiziksel özelliklerin de tayini mümkün olur. Toplam enerjiyi hesaplamak için denge durumundaki örgü sabitinin tayin edilmesi gerekir. Bunun için yukarıdaki enerji formülü kullanılarak farklı örgü sabiti değerlerinde enerji hesaplanacaktır. Daha sonra enerji-örgü sabiti grafiği çizilecektir. Enerjinin minimum olduğu yerdeki örgü sabiti

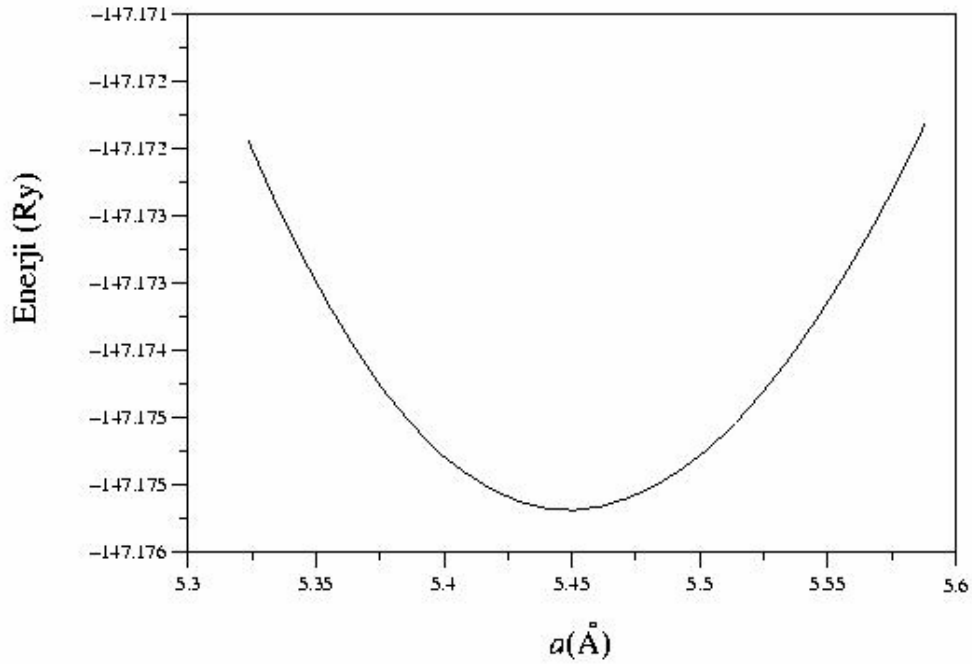
denge durumunu gösterir. Şekil 3.1'de ZnS kristali için minimum enerjiyi gösteren grafik sunulmuştur.

Toplam enerji ve denge durumundaki örgü sabiti bulunduktan sonra aşağıda verilen Murnaghan eşitliklerinden (MURNAGHAN, 1944);

$$P = \frac{B_0}{B'_0} \left[ \left( \frac{\Omega_0}{\Omega} \right)^{B'_0} - 1 \right]$$

$$E = \frac{\Omega_0 B_0}{B'_0} \left[ \frac{1}{B'_0 - 1} \left( \frac{\Omega}{\Omega_0} \right)^{B'_0 - 1} + \frac{\Omega}{\Omega_0} \right] - \frac{B_0 \Omega_0}{B'_0 - 1} + E(\Omega_0)$$

hacim modülü ve onun basınca göre türevi hesaplanacaktır. Unutmayalım ki hacim modülü bir kristalin dayanıklılığının bir ölçüsüdür. Hacim modülü hesaplanmadan hiçbir kristal teknolojik uygulamalarda verimli bir şekilde kullanılamaz.



Şekil 3.1. ZnS kristali için enerji-örgü sabiti grafiği.



### 3.2. Elektronik Bant Yapı Teorisi

Yoğunluk fonksiyon teorisine göre bir kristalin elektronik enerjisi:

$$E_{el}[V_{iyon-el}, n] = \int V_{iyon-el}(r)n(r)dr + \frac{e^2}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} drdr' + G[n]$$

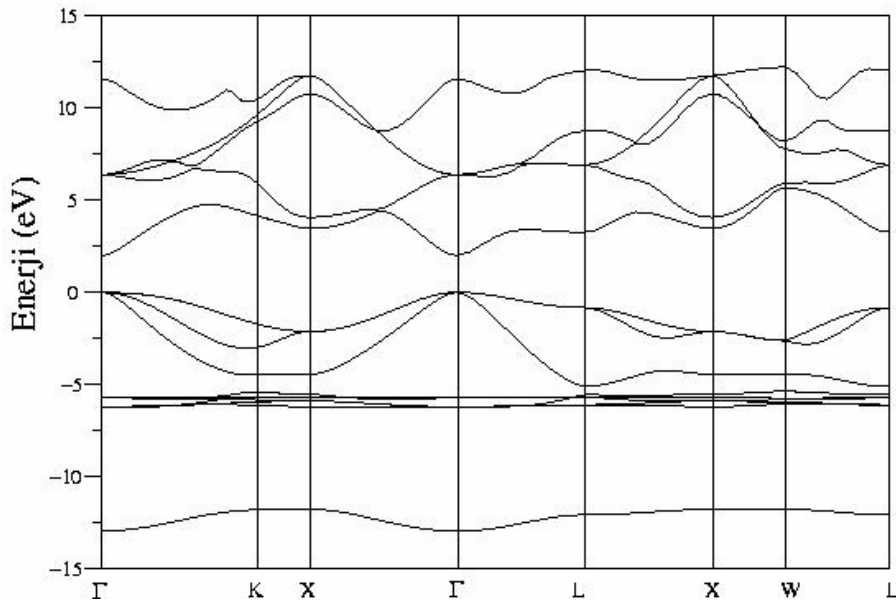
şeklindedir. Buradaki  $G[n]$ , 1965 yılında Kohn-Sham tarafından aşağıdaki gibi iki kısım halinde tanımlanan bir fonksiyondur.

$$G[n] \equiv T_0[n] + E_{dt}[n]$$

Bu denklemdaki  $T_0[n]$ ,  $n(r)$  yoğunluklu birbirleriyle etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistemin kinetik enerjisidir.  $E_{dt}[n]$  ise, bağımsız elektron modeli için klasik olmayan çok cisim değiş tokuş etkileşimlerini ifade eder.

#### 3.2.1. Elektronik bant yapısının hesaplanması

Denge durumundaki örgü sabiti kullanılarak yukarıdaki enerji ( $E_{el}$ ) bağıntısı çözülecektir. Toplam enerjide olduğu gibi elektronların maksimum kinetik enerjileri 40 Ry alınacak ve ters örgü uzayındaki toplamalar için 60 özel k değeri kullanılacaktır.



Şekil 3.2. ZnS kristali için elektronik bant yapısı.

Tüm çözümler yerel yoğunluk yaklaşımı altında yapılacak ve değiş-tokuş etkileşimi için Perdew-Zunger parametreleri hesaba katılacaktır. Şekil 3.2'de ZnS için hesaplanan elektronik bant yapısı gösterilmiştir. Koyu çizgiler valans bantları, açık çizgiler ise iletkenlik bantlarıdır.

### 3.3. *Ab initio* Örgü Dinamiği Teorisi

Bu metotta kristaldeki elektron-iyon potansiyeli atomik yerdeğiştirmelere bağlı olan bir  $\lambda = (\lambda_i)$  parametresi cinsinden ifade edilebilir. Böylece elektronların temel hal enerjisinin bu parametreye göre türevi;

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

şeklinde ifade edilebilir. Burada  $n_\lambda$  elektron yoğunluk dağılımını ifade eder. Kullandığımız  $\lambda$  parametreleri,  $u_{\alpha i}(R)$  ile ifade edilirse, sistemin kuvvet sabiti, atomik ve elektronik kuvvet sabitlerinin toplamı şeklinde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{\partial^2 E}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} = \Phi_{\alpha i, \beta j}^{iyon}(R - R') + \Phi_{\alpha i, \beta j}^{elektron}(R - R')$$

İyonik kuvvet sabitleri aşağıda belirtilen iyonik enerjinin, yerdeğiştirmeye göre ikinci türevinden hesaplanabilir.

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

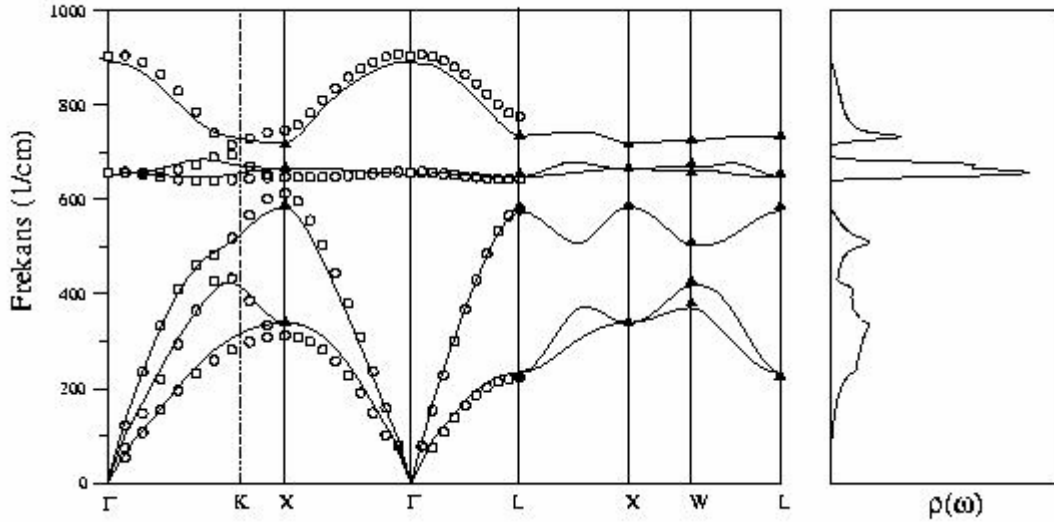
Elektronik kuvvet sabitleri ise iyon-elektron etkileşiminden oluşan potansiyellerle kısaca aşağıdaki şekilde ifade edilebilir.

$$\Phi_{\alpha i, \beta j}^{elektron}(R - R') = \int \left( \frac{\partial n(r)}{\partial u_{\alpha i}(R)} \frac{\partial V_{iyon}}{\partial u_{\beta j}(R)} + n_0(r) \frac{\partial^2 V_{iyon}(r)}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} \right) dr$$

Toplam kuvvet sabiti aşağıdaki gibi bir hareket denkleminde yerine konularak, hem iyonların titreşim vektörleri hem de titreşim enerjileri hesaplanır.

$$M_i \ddot{u}_i(R) = - \sum_{R',j} \Phi_{\alpha\beta}^{iyon+elek} u_{\beta}(R')$$

### 3.3.1. Fonon spektrumu ve durum yoğunluğunun hesaplanması



Şekil 3.3. AlN yarı iletkeni için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri. Koyu eğriler yoğunluk fonksiyon teorisi sonuçları, boş kareler deneysel verileri, boş daireler bağ yükü modeli sonuçlarını ve dolu üçgenler ise önceki teorik sonuçları gösterir.

Hacim fonon spektrumlarını hesaplamak için sekiz  $q$  noktası için dinamik matrisler hesaplanacaktır. Daha sonra ters örgü uzayında olan bu matrisler Fourier dönüşümleri ile normal uzaya taşınacaktır. Daha sonra hareket denklemleri çözülerek yüksek simetri yönlerinde fonon eğrileri çizilecektir. Durum yoğunluğunun hesaplanması ise indirgenmiş birinci Brillouin bölgesinin içinde alınan  $q$  vektörleri ile yapılacaktır. Şekil 3.3'de AlN için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu grafikleri gösterilmiştir.

### 3.4. Yüzey Yapısının Hesaplanması

Yüzeydeki atomlar enerjilerini minimum yapmak için denge durumuna gelinceye kadar hareket ederler. Yüzeydeki atomların yeni pozisyonlarının hesaplanması, yüzeyin elektronik ve titreşim yapısının incelenmesi için gereklidir. Çünkü yüzeydeki atomların yeniden düzenlenmesi toplam enerjiyi değiştirecek ve bu da doğrudan elektronik ve dinamik yapıya yansıtacaktır. Şimdi atomlar üzerindeki kuvvetlerin nasıl hesaplandığına kısaca değinelim.

Toplam enerjinin iyonik konumlara göre birinci türevi kuvveti verir,

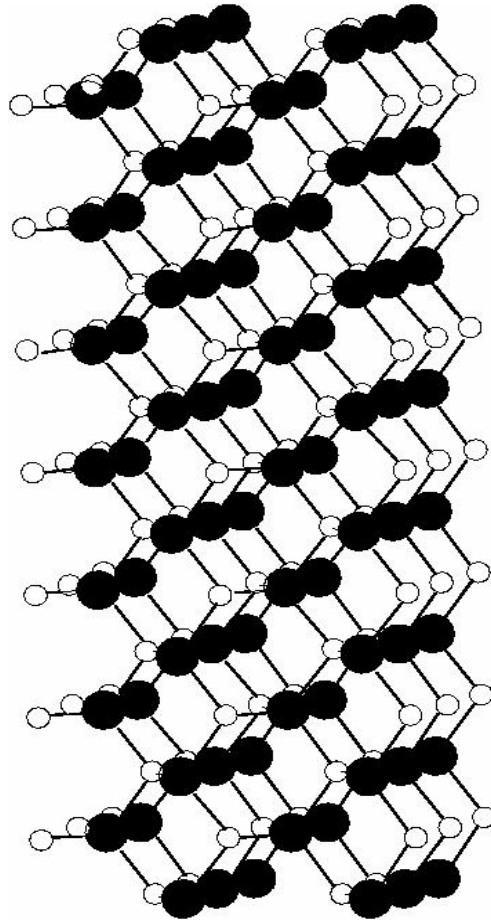
$$F_i = -\frac{\partial E}{\partial x_i}$$

Hellmann-Feynman teorisinde bu kuvvet, hamiltoniyen cinsinden,

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

olarak yazılabilir. Bu formül kullanılarak her bir atom üzerine etki eden kuvvet hesaplanabilir.

### 3.4.1. (110)(1x1) yüzeyinin atomik yapı tayini



Şekil 3.4. ZnS kristal yapısının (110)(1x1) yüzeyinin, (110) yönünde büyütülmüş süper hücresi.

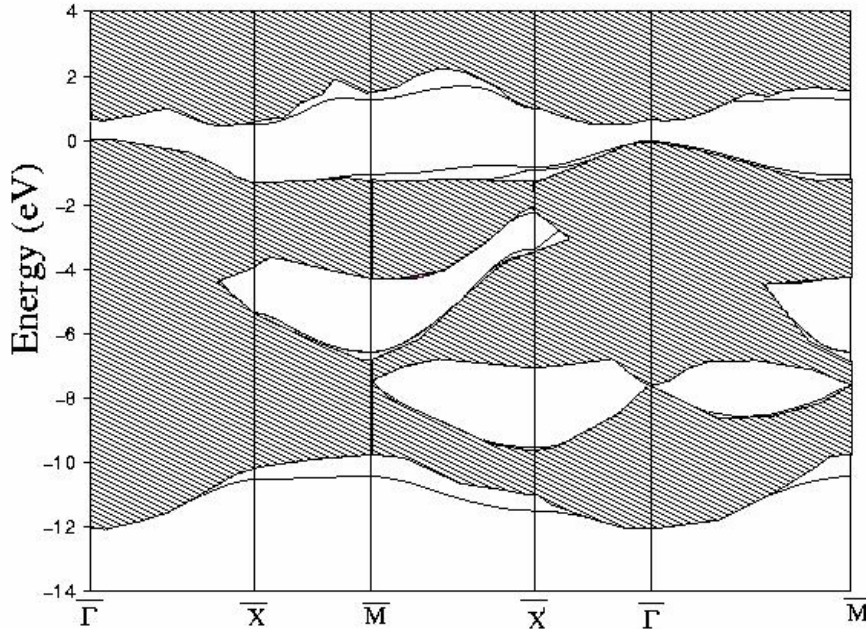
Küçük atomlar Zn atomları büyük atomlar ise S atomlarıdır.

Yarıiletken yüzeylerinin atomik yapıları bu çalışmada yukarıda kısaca anlatılan Hellmann-Feynman teorisi ve yerel yoğunluk fonksiyon teorisi ile tayin edilecektir. Biz yüzey atomik yapı tayini için üç boyuttaki simetri şartlarından faydalanmak amacı ile süper-hücre metodunu

kullanacağız. Şekil 3.4'de gösterildiği gibi yüzey (110) yönünde büyütülecek ve 15 tabakadan (30 atom) oluşacaktır. Orta tabakadaki atomlar sabit tutularak diğer tüm atomlar denge konumuna (Atomlar üzerindeki kuvvetler 0.1mRy/a.u.'dan az) gelinceye kadar Hellmann-Feynman kuvvetlerine göre hareket ettirilecektir. Elektron-iyon etkileşimi pseudopotansiyel metodu ile hesaplanacak ve elektronların maksimum kinetik enerjileri 40 Ry olarak alınacaktır. Ters örgü uzayında yapılacak bütün toplamlar için 6 tane özel k değeri kullanılacaktır. Daha önceki çalışmalar, seçilen bu değerlerin yarı iletkenler için fazlası ile uygun olduğunu göstermiştir.

### 3.4.2. (110)(1x1) elektronik yapı tayini

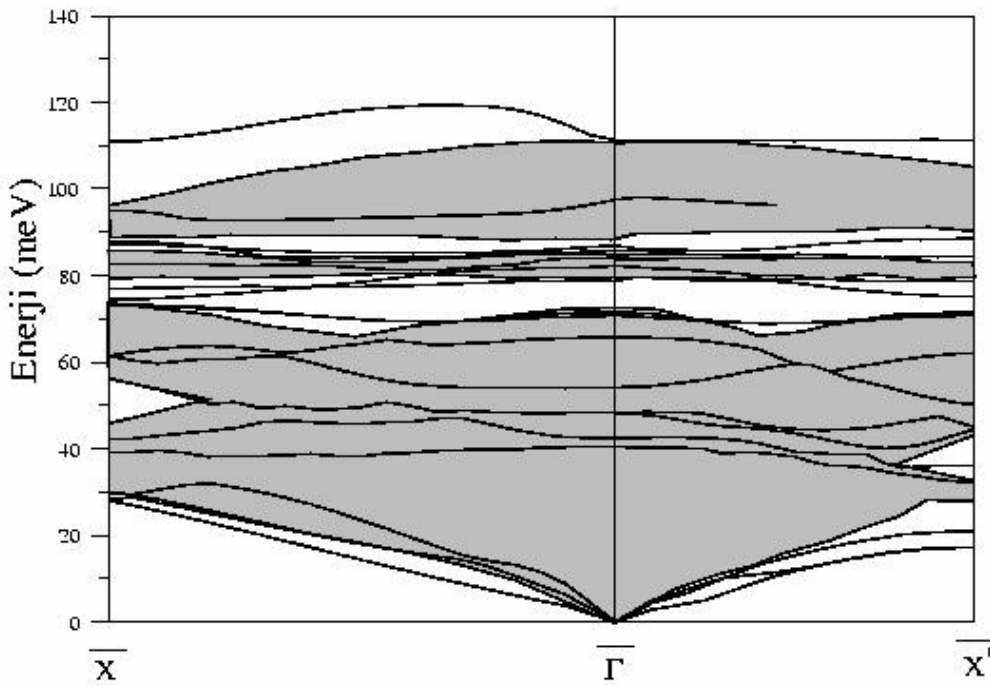
Denge durumundaki atomik yapı tayin edildikten sonra Kohn-Sham denklemleri için çözümlenerek elektronik enerji seviyeleri elde edilecektir. Şekil 3.5'de daha önce GaAs:Si(110) yüzeyi için hesaplanan elektronik yapı gösterilmiştir. Kullandığımız süper hücre metodundan dolayı hem yüzeyden kaynaklanan hem de hacimden kaynaklanan elektronik enerjiler birlikte hesaplanırlar. Karşılaştırma yapmak için şekilde görüldüğü gibi hacim elektronik yapısı taralı bölge ile işaretlenmiştir. Koyu çizgiler yüzey için dolu bantları, açık çizgiler ise iletkenlik bantlarını göstermektedir.



Şekil 3.5. GaAs:Si(110) yüzeyinin elektronik yapısı. Taralı bölgeler hacim elektronik spektrumunu gösterir.

### 3.4.3. Yüzey fononlarının hesaplanması

Yüzey fononlarının hesaplanması aynen yüzey elektronik yapı tayininde olduğu gibi süper hücre metodu ile yapılacaktır. 30 atomlu süper hücre için yüksek simetri yönlerinde hareket denklemleri çözülerek, her  $q$  vektörü için 90 tane frekans değeri bulunacaktır. Bunlardan ilk 18 tanesi ilk üç tabakada bulunan atomların titreşimlerinden kaynaklanan yüzey fononları, diğerleri ise hacim fononlarıdır. Bu ayırım yüzeydeki atomların titreşim vektörleri karşılaştırılarak yapılacaktır. Bunun yanısıra Şekil 6'ya benzer şekilde yüzey ve hacim fononları beraber gösterilecektir. Bu şekil, bizim daha önce AlN(110) yüzeyi için yaptığımız çalışmadır.



Şekil 3.6. AlN(110) yüzeyinin fonon spektrumu. Taralı bölgeler hacim fonon spektrumunu gösterir.

Bu şekilde görüldüğü gibi, hacim fononları için yasaklı olan boşluk bölgelerinde yüzey fononları bulunmuştur. Bunlar bağ dönmesi ve bağ gerilmesi gibi ilgi çekici özellikler göstermektedirler. Be ve B atomlarının diğer atomlara göre daha küçük olan kütlelerinden dolayı BeS(110), BeSe(110), BeTe(110), BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için daha fazla yoğunlaşmış ve boşluk bölgelerinde yer alan yüzey fononları bulmak mümkün olacaktır.

## BÖLÜM 4. BULGULAR

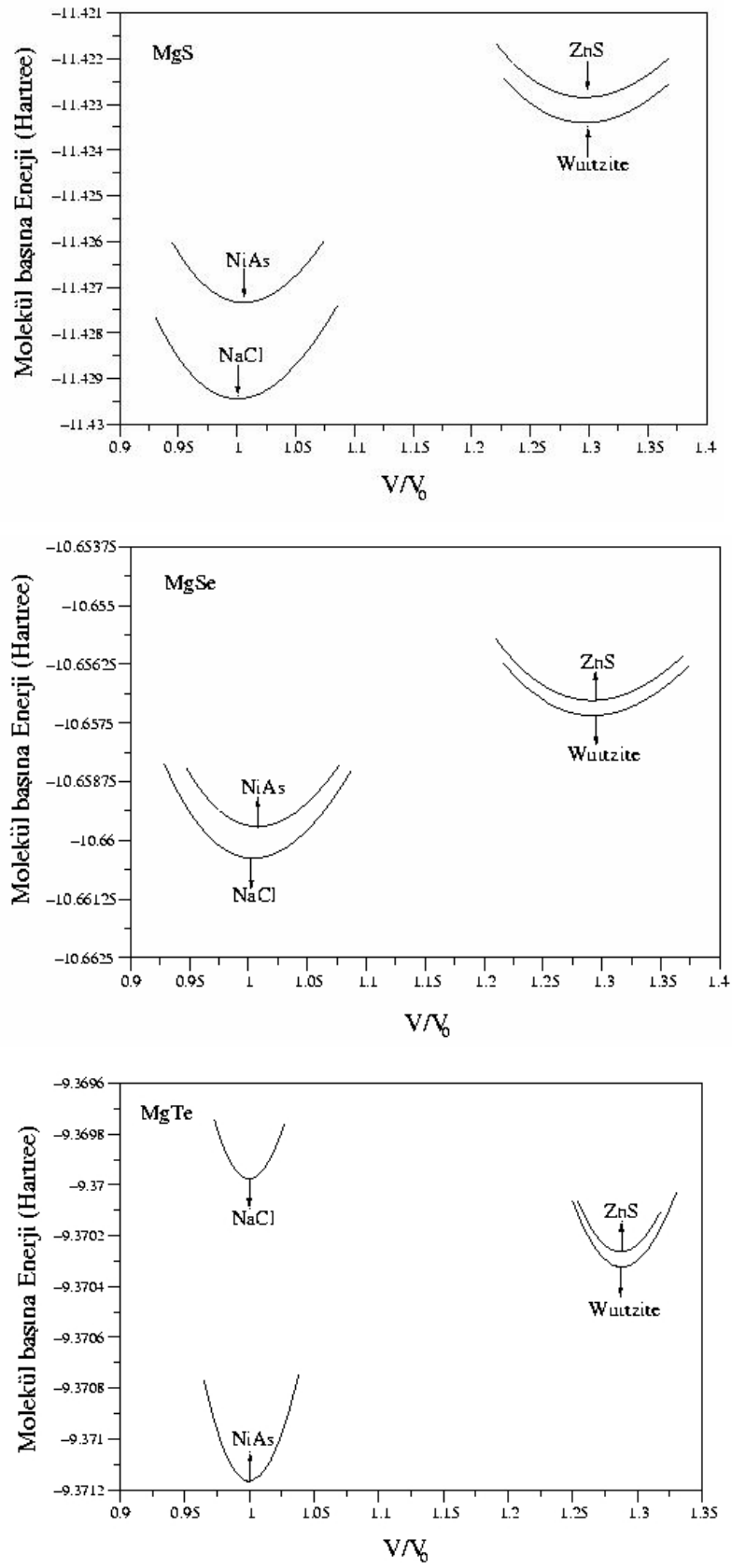
### 4.1. Giriş

İlk olarak MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkenlerinin (magnezyum kalkojenler) taban durumunda hangi fazda kristalleştiği tesbit edilmiş ve kayatuzu, çinko sülfür, wurtzite ve nikel arsenik fazlarının yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri sırasıyla incelenmiştir. İkinci olarak Ge(001)(2x1)/As, Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin atomik, elektronik ve dinamik özellikleri sunulmuştur. Üçüncü olarak BeS, BeSe ve BeTe yarı iletkenlerinin (110) yüzeyleri ve son olarak da BP, BAs ve BSb yarı iletkenlerinin (110) yüzeylerinin atomik yapısı, elektronik ve titreşim özellikleri araştırılmıştır.

### 4.2. Magnezyum Kalkojenlerin Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özellikleri

#### 4.2.1. Taban durumu fazları

MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkenleri kayatuzu, çinko sülfür, wurtzite ve nikel arsenik yapılarda kristalleşebilir. Yarıiletkenlerin öncelikle taban durumunda hangi fazda kristalleştiğini belirlemek amacıyla, her bir yarıiletkenin tüm fazlarına ait molekül başına enerjiler hesaplandı. Elde edilen sonuçlar en düşük enerjili fazın hacmi baz alınarak Şekil 4.1'de görüldüğü gibi grafiğe aktarıldı. Şekilden MgS ve MgSe yarıiletkenlerinin kayatuzu fazında en düşük enerjiye sahip oldukları görülmektedir. Böylece bu iki yarıiletkenin taban durumunda kayatuzu fazda kristalleştikleri söylenebilir. Bu sonuç daha önce bu yarıiletkenler üzerine yapılan deneysel(DONNAY,1972, WYCKOFF,1963) ve teorik(CAMP, 1995, CAMP, 1997, CHACRABARTI, 2000, LEE, 1995, RACHED, 2003) çalışmalarla uyumludur. Bu iki yarıiletkenin taban durumu fazından farklı olarak MgTe'nin en düşük enerjili fazının nikel arsenik olduğu Şekil 4.1'den açıkça görülmektedir. Böylece MgTe taban durumunda nikel arsenik fazda kristalleşir. Elde edilen bu sonuç da daha önceki deneysel(LI, 1995) ve teorik(CAMP, 1995, CAMP, 1997, CHACRABARTI, 2000, DRIEF, 2004) bulgularla uyum içerisindedir. MgTe yarıiletkeninin diğer iki yarıiletkenden farklı olarak nikel arsenik yapıda kristalleşmesinin, yapısındaki Te atomlarından ileri geldiği söylenebilir çünkü yapısında Te atomu içeren MnTe materyalinin de denge durumunda nikel arsenik yapıda kristalleştiği bulunmuştur(YOU, 2004).



**Şekil 4.1.** Magnezyum kalkojenlerin dört fazına ait molekül başına enerji grafiği.  $V_0$  kristalin taban durumu fazının birim hücre hacmidir.



İncelenen yarıiletkenlerin her bir fazı için, taban durumu fazının atom başına toplam enerjileri baz alınarak enerji farkları hesaplandı. Bu enerji farkları Tablo 4.1’de görülmektedir. Buradaki sonuçlar dikkatle incelenecek olursa üç önemli çıkarım yapılabilir. İlk olarak, yarıiletkenlerin taban durumu fazının enerjisi ile diğer fazlarının enerjisi arasındaki fark, MgS’den MgTe’ye doğru giderek azalmaktadır. İkinci olarak her bir materyal için çinko sülfür ve wurtzite yapıların enerji farklarının MgTe, MgSe ve MgS için sırasıyla, 1 meV/atom, 5 meV/atom ve 8 meV/atom gibi son derece küçük olduğu görülür. Üçüncü olarak ise MgTe’nin denge durumu ile diğer fazları arasındaki enerji farkı 16 meV/atom’dan daha küçüktür. Bu durum daha önceki teorik sonuçlarla(YEH, 1992) son derece uyumludur.

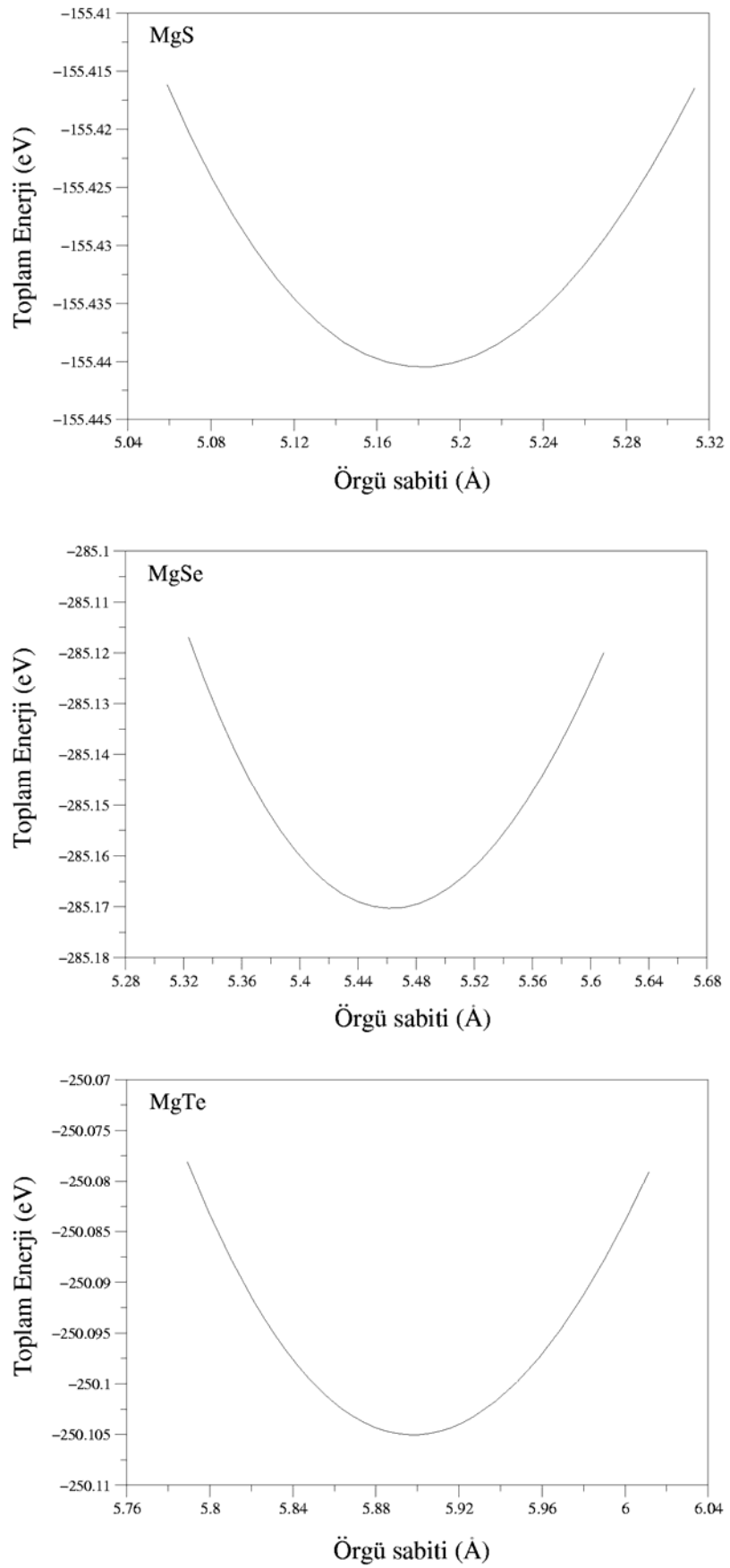
Tablo 4.1’den açıkça görülebileceği gibi MgTe’nin çinko sülfür ve wurtzite fazlarının enerjileri farkı 1 meV/atom’dur. Bu sonuç, daha önce bu yarıiletkenin enerji farkları üzerine yapılan teorik çalışmadaki sonuçla aynıdır(YEH, 1992).

Tablo 4.1. Magnezyum kalkojenlerin dört fazının atom başına toplam enerji farkları (meV/atom). Burada taban durumu enerjileri baz alınmıştır

	MgS		MgSe		MgTe		
	Bu çalışma	CHACRAB ARTI, 2000	Bu çalışma	CHACRA BARTI, 2000	Bu çalışma	CHACRA BARTI, 2000	YEH, 1992
NaCl	0.0	0.0	0.0	0.0	16	22	13.7
ZnS	90		46		13		15
Wurtzite	82		41		12		14
NiAs	29	68	9	14	0.0	0.0	0.0

#### 4.2.2. Magnezyum kalkojenlerin kayatuzu fazının yapısal özellikleri

Bir kristalin toplam enerjisinin bulunması oldukça önemlidir. Çünkü toplam enerjinin bulunması ile, onunla ilgili fiziksel özelliklerin de tayini mümkün olur. Yapısal parametrelerin belirlenmesi amacıyla her bir yarıiletkenin kayatuzu fazları için, farklı örgü sabiti değerlerinde toplam enerjiler hesaplandı. Kristallerin farklı örgü sabiti değerlerinde sahip olduğu enerjiler Şekil 4.2’de görüldüğü gibi grafiğe aktarıldı.



Şekil 4.2. Kayatuzu MgS, MgSe, MgTe'nin enerji-örgü sabiti grafiği

Şekilden görüldüğü gibi her bir yarıiletken için toplam enerjinin minimum olduğu örgü sabiti değerleri o yarıiletkenin denge durumu örgü parametresi olarak alındı. Bu örgü sabitlerinin MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkenleri için sırasıyla 5.18 Å , 5.46 Å ve 5.90 Å olduğu görülmektedir. Belirlenen bu örgü sabitleri Tablo 4.2'de listelenmiştir. Tablodan görüldüğü gibi yarıiletkenler için hesaplanan örgü sabitleri önceki deneysel ve teorik örgü sabitleri ile son derece uyumludur.

Tablo 4.2. Kayatuzu magnezyum kalkojenlerin yapısal parametreleri. Tabloda örgü sabiti (Å), hacim modülü (Mbar) ve bağlanma enerjisi (eV/atom) birimindedir

Referanslar	a	B	B'	$\epsilon_{\infty}$	Z <sup>B</sup>	E <sub>c</sub>
MgS	5.18	0.81	4.15	5.66	2.35	-4.737
Teorik(DRİEF, 2004)	5.14	0.82	3.98	5.81		
Teorik(RACHED, 2003)	5.14	0.92	4.44			
Deneysel(PEIRIS, 1994)	5.20	0.79				
Deneysel(WYCKOFF, 1963)	5.19					
MgSe	5.46	0.65	3.90	6.83	2.48	-4.192
Teorik(CAMP, 1997)	5.50	0.65	4.14			-4.083
Teorik(DRİEF, 2004)	5.40	0.68	4.15	6.85		
Teorik(RACHED, 2003)	5.40	0.74	3.52			
Deneysel(DONNAY, 1972)	5.46					
MgTe	5.90	0.51	4.35	9.20	2.76	-3.314
Teorik(CAMP, 1997)	5.92	0.54	4.04			-3.496
Teorik(DRİEF, 2004)	5.86	0.52	4.10	9.26		
Deneysel(VILLARS, 1985)	6.02					

Örgü sabiti parametresine ek olarak yarıiletkenlerin hacim modülleri ve hacim modüllerinin basınca göre türevleri aşağıdaki Murnaghan eşitlikleri(MURNAGHAN, 1944) kullanılarak elde edilmiştir:

$$P = \frac{B}{B'} \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad (4.1)$$

$$E(V) = E_0 + \frac{B V}{B'} \left( \frac{(V_0 / V)^{B'}}{B' - 1} + 1 \right) - \frac{B V_0}{B' - 1} \quad (4.2)$$

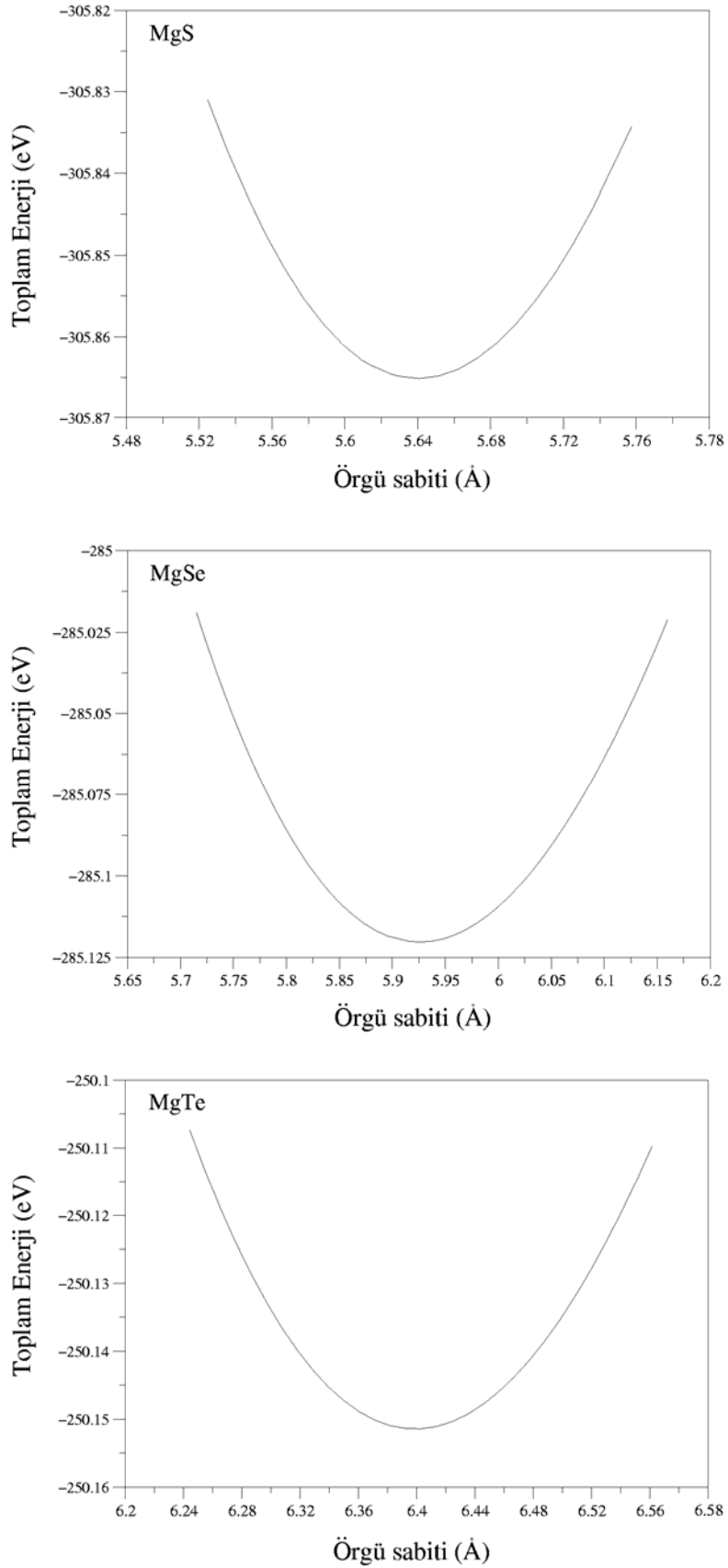
Burada  $V_0$  kristalin denge durumundaki hacmini,  $V$  ise basınç altındaki hacmi göstermektedir.  $E_0$  ise kristalin basıncın sıfır olduğu denge durumundaki enerjisidir.

Tablo 4.2'den görüldüğü gibi elde edilen  $B$  ve  $B'$  değerleri önceki teorik sonuçlarla iyi bir uyum içerisindedir. Tabloda yarıiletkenler için hesaplanan örgü sabitlerinin MgS'den MgTe'ye doğru giderek arttığı görülür. Örgü sabitinin artması yarıiletkenin hacmini de büyüteceğinden yarıiletkenlerin hacim modüllerinin de giderek azalması beklenmektedir. Tabloya bakıldığında bu duruma uygun olarak örgü sabiti en küçük olan yarıiletken MgS'nin diğerlerinden daha büyük hacim modülüne sahip olduğu görülür. Böylece MgS'nin kayatuzu fazının diğer iki yarıiletkenin kayatuzu fazlarından daha sert olduğu söylenebilir.

Tablo 4.2'de dielektrik sabiti hesaplama sonuçları da verilmiştir. Dielektrik sabiti sonuçlarının diğer teorik sonuçlarla uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Tabloda MgTe'nin dielektrik sabitinin diğer iki yarıiletkenin dielektrik sabitlerine göre daha büyük olduğu görülmektedir. Bu durumda MgTe'nin kayatuzu fazının MgS ve MgSe'nin aynı fazlarına göre daha yalıtkan olduğu söylenebilir. Tabloda her bir yarıiletken için hesaplanan Born etkin yükü değerleri ve bağlanma enerjileri de verilmiştir. Tabloya bakıldığında hesaplanan bağlanma enerjilerinin daha önceki teorik sonuçlarla son derece uyumlu oldukları görülmektedir. Yarıiletkenlerin bağlanma enerjileri karşılaştırıldığında ise MgS yarıiletkeninin bağlanma enerjisi, diğer iki yarıiletkene göre daha büyüktür. Yarıiletkenlerin bağlanma enerjileri örgü sabitleri ilişkisine bakıldığında örgü sabitinin artmasına karşın yarıiletkene ait bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir.

#### 4.2.3. Çinko sülfür fazının yapısal özellikleri

MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkenlerinin çinko sülfür yapılarına ait enerji-örgü sabiti grafikleri Şekil 4.3'te verilmiştir. Şekilden MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkenleri için enerjinin minimum olduğu örgü sabiti değerlerinin sırasıyla  $5.64 \text{ \AA}$ ,  $5.92 \text{ \AA}$  ve  $6.39 \text{ \AA}$  olduğu görülmektedir. Hesaplanan bu örgü sabiti parametreleri Tablo 4.3'te verilmiştir. Tabloda, hesaplanan örgü sabiti parametrelerinin deneysel sonuçlarla son derece uyumlu olduğu görülmektedir. Yarıiletkenlerin sertliklerinin bir ölçüsü olan hacim modülü ve hacim modülünün basınca göre türevi de (4.1) ve (4.2) denklemlerinden yararlanılarak hesaplandı. Hesaplanan  $B$  ve  $B'$  değerleri Tablo 4.3'te verilmiştir. Tablodan görüldüğü gibi yarıiletkenlerin  $B$  ve  $B'$  değerleri daha önce hesaplanan teorik sonuçlarla iyi bir uyum göstermektedir. Tabloda örgü sabiti değerlerinin MgS'den MgTe'ye doğru giderek artmasına karşın hacim modüllerinin giderek azaldığı görülmektedir. Bu durumda çinko sülfür fazdaki MgS'nin aynı fazda kristalleşen MgSe ve MgTe'ye göre daha sert olduğu söylenebilir.



Şekil 4.3. Çinko sülfür MgS, MgSe, MgTe'nin enerji-örgü sabiti grafiği

Yarıiletkenler için hesaplanan dielektrik sabitleri ve born etkin yükü sonuçları da Tablo 4.3'te verilmiştir. Materyallerin çinko sülfür fazları için elde edilen dielektrik sabitlerinin, önceki teorik hesaplama sonuçları ile uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Yarıiletkenler için hesaplanan born etkin yükü değerleri ve bağlanma enerjileri de Tablo 4.3.'te verilmiştir. Elde edilen bağlanma enerjilerinin teorik sonuçlarla iyi bir uyum gösterdiği görülmektedir. Şekil 4.3'e bakıldığında toplam enerjilerin MgS'den MgTe'ye doğru giderek azaldığı görülür. Bu duruma uygun olarak her bir yarıiletkenin bağlanma enerjileri de tablodan görüldüğü gibi büyükten küçüğe MgS, MgSe ve MgTe olarak sıralanmaktadır.

Tablo 4.3. Çinko sülfür magnezyum kalkojenlerin çinko sülfür fazlarının yapısal parametreleri. Tabloda örgü sabiti ( $\text{\AA}$ ), hacim modülü(Mbar) ve bağlanma enerjisi (eV/atom) birimindedir

Referanslar	$a$	$B$	$B'$	$\epsilon_{\infty}$	$Z^B$	$E_c$
<b>MgS</b>	<b>5.64</b>	<b>0.60</b>	<b>4.06</b>	<b>4.24</b>	<b>1.91</b>	<b>-4.647</b>
Teorik(DRIEF, 2004)	5.61	0.61	4.06	4.50		
Teorik(LEE,1995)	5.58	0.57	3.70			-4.490
Teorik(RABAH, 2003)	5.60	0.67	3.99			
Teorik(RACHED, 2003)	5.61	0.60	3.89			
Deneysel(KONCZENWICZ, 1996)	5.66					
Deneysel(OKUYAMA, 1992)	5.62					
<b>MgSe</b>	<b>5.92</b>	<b>0.49</b>	<b>3.75</b>	<b>4.87</b>	<b>1.91</b>	<b>-4.146</b>
Teorik(RACHED, 2003)	5.89	0.54	4.27			
Teorik(DRIEF, 2004)	5.88	0.50	4.02	5.16		
Teorik(CAMP, 1995)	5.97	0.48	4.04			-4.041
Teorik(LEE,1995)	5.87	0.47	4.00			-3.990
Deneysel(OKUYAMA, 1992)	5.89					
<b>MgTe</b>	<b>6.39</b>	<b>0.38</b>	<b>3.79</b>	<b>5.72</b>	<b>1.93</b>	<b>-3.613</b>
Teorik(CAMP, 1995)	6.44	0.38	3.96			-3.502
Teorik(DRIEF, 2004)	6.38	0.38	3.89	6.09		
Deneysel(WAAG, 1993)	6.36					

Yarıiletkenlerin kayatuzu ve çinko sülfür yapılarının yapısal özelliklerini içeren Tablo 4.2 ile Tablo 4.3 karşılaştırılırsa, aynı yarıiletkenler için kayatuzu fazında sahip olduğu örgü sabitinin, çinko sülfür fazındakinden daha küçük olduğu görülür. Bu durum yarıiletkenlerin kayatuzu fazlarının hacim modüllerinin, çinko sülfür fazına göre daha fazla olması sonucunu

doğurmaktadır. Böylece yarıiletkenlerin kayatuzu fazları, çinko sülfür fazlarına göre daha sert olmaktadır.

Yarıiletkenler için Born etkin yükleri iyonikliklerinin bir ölçüsüdür[60]. Bu durumda yarıiletkenlerin kayatuzu ve çinko sülfür fazlarının Born etkin yükü değerleri karşılaştırılırsa, kayatuzu fazındaki yarıiletkenlerin, çinko sülfür fazında kristalleşenlere göre daha iyonik oldukları söylenebilir. Bu durumda çinko sülfür fazındaki yarıiletkenlerin Born etkin yüklerinin birbirine yakın ve kayatuzu fazındakilere göre daha küçük olması, bu fazdaki yarıiletkenlerin güçlü bir kovalent bağlanmaya sahip olduğunu gösterir.

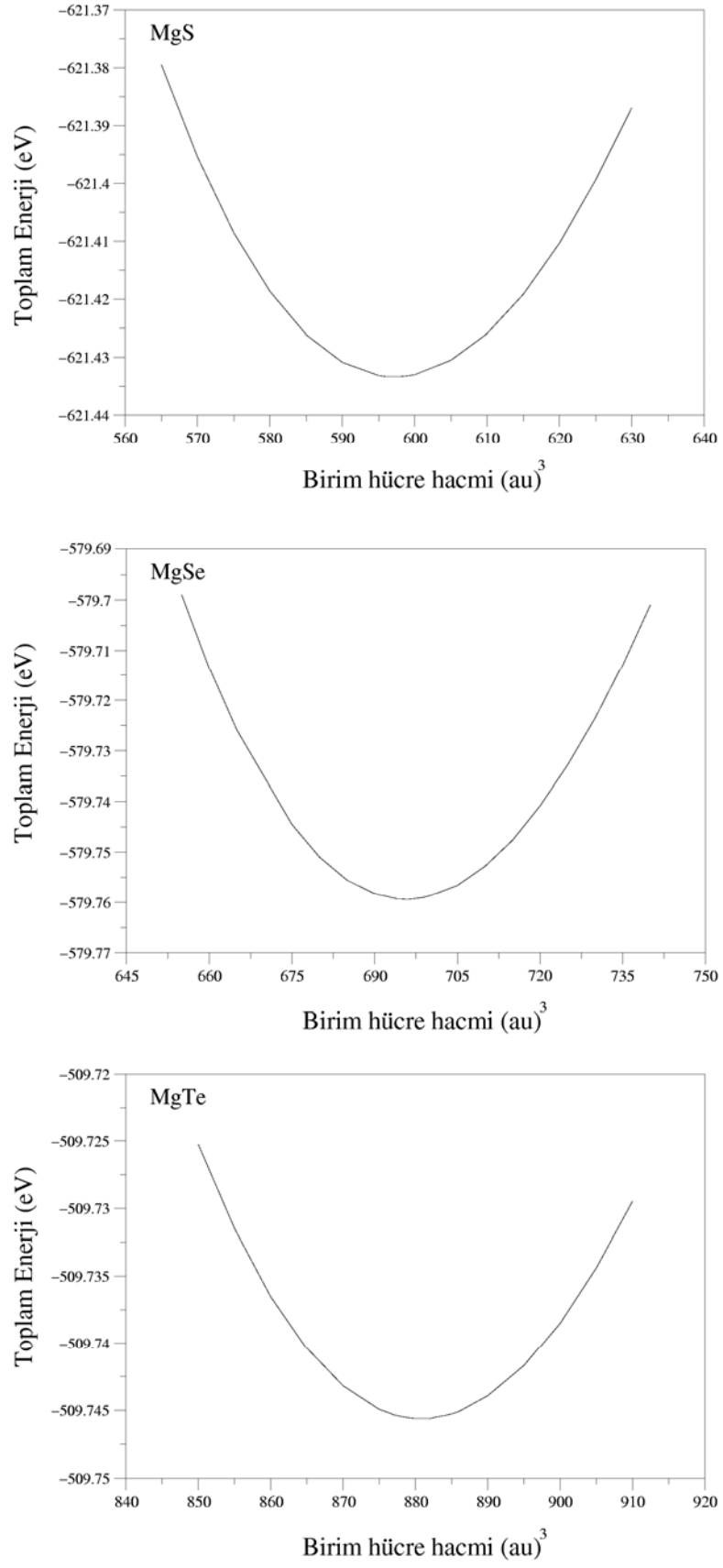
#### 4.2.4. Wurtzite fazının yapısal özellikleri

Wurtzite yapının örgüsü hegzagonal örgüdür. Bu örgünün birim hücre hacmi,

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

ile verilir. Formülden de açıkça görüldüğü gibi hacim hesabı için a ve c gibi iki farklı parametrenin belirlenmesi gerekir. Burada, öncelikle aynı hacmin farklı a ve c/a oranı değerleri için toplam enerjiler hesaplandı. Bu enerjiler karşılaştırılarak o hacmin minimum enerjisi bulundu ve bu işlem her bir hacim için ayrı ayrı yapılarak o hacme ait minimum enerjiler belirlendi. Farklı hacimler için hesaplanan minimum enerjiler Şekil 4.4'te görüldüğü gibi enerji-hacim grafiğine aktarıldı.

Enerjinin minimum olduğu hacme ait a ve c değerleri o yarıiletken için yapısal parametreler olarak alındı. Bu parametrelere bağlı olarak yapının iç yerdeğiştirme parametresi olan u'nun farklı değerleri için toplam enerjiler hesaplandı ve enerjinin minimum olduğu u değeri alındı. Yarıiletkenlerin wurtzite yapıları için belirlenen a, c ve u değerleri Tablo 4.4'te verilmiştir. Tablodan görüldüğü gibi hesaplanan a ve c değerleri deneysel ve teorik sonuçlarla iyi bir uyum göstermektedir.



Şekil 4.4. Wurtzite MgS, MgSe, MgTe'nin enerji-örgü sabiti grafiği



Tablo 4.4. Wurtzite magnezyum kalkojenlerin yapısal parametreleri. Tabloda örgü parametreleri  $a$  ve  $c$ , ( $\text{Å}$ ), hacim modülü (Mbar) ve bağlanma enerjisi (eV/atom) birimindedir

Referanslar	$a$	$c$	$B$	$B'$	$u$	$\varepsilon_{\perp}(\infty)$	$\varepsilon_{\parallel}(\infty)$	$Z_{\perp}^B$	$Z_{\parallel}^B$	$E_c$
<b>MgS</b>	<b>3.996</b>	<b>6.492</b>	<b>0.63</b>	<b>4.18</b>	<b>0.37</b>	<b>4.20</b>	<b>4.31</b>	<b>1.89</b>	<b>1.97</b>	<b>-4.655</b>
Teorik(LEE, 1995)	3.945	6.443	0.57	4.10						
Teorik(RACHED, 2003)	3.969	6.487	0.64	2.96						
Deneysel(VILLARS, 1985)	3.972	6.443								
<b>MgSe</b>	<b>4.196</b>	<b>6.825</b>	<b>0.50</b>	<b>3.78</b>	<b>0.37</b>	<b>4.82</b>	<b>4.94</b>	<b>1.88</b>	<b>1.97</b>	<b>-4.151</b>
Teorik(CAMP, 1997)	4.237	6.836	0.50	3.94	0.37					-4.046
Teorik(RACHED, 2003)	4.165	6.799	0.52	4.31						
Deneysel(MITTENDORF,1965)	4.145	6.723								
<b>MgTe</b>	<b>4.531</b>	<b>7.381</b>	<b>0.38</b>	<b>4.04</b>	<b>0.37</b>	<b>5.67</b>	<b>5.78</b>	<b>1.89</b>	<b>1.98</b>	<b>-3.614</b>
Teorik(CAMP, 1997)	4.530	7.405	0.43	3.82	0.37					-3.490
Teorik(CHAKRABARTI, 2000)	4.498	7.318	0.48	3.47	0.37					
Teorik(CHAUDHURI, 1999)	4.503	7.355	0.42	4.31						
Deneysel(LI, 1995)	4.548	7.394								
Deneysel(WAAG, 1993)	4.540	7.386								

Yarıiletkenlerin wurtzite fazları için hacim modülü ve hacim modülünün basınca göre türevi (4.1) ve (4.2) denklemlerinden yararlanılarak hesaplandı. Her bir yarıiletken için elde edilen hacim modülü ve hacim modülünün basınca göre türevi değerleri Tablo 4.4'te görülmektedir. Tabloya bakıldığında hesaplanan  $B$  ve  $B'$  değerlerinin diğer teorik sonuçlarla iyi bir uyum içerisinde olduğu görülür. Yarıiletkenlerin hesaplanan hacim modülleri birbirleri ile karşılaştırıldığında, MgS yarıiletkeni için elde edilen hacim modülünün, MgSe ve MgTe'nin hacim modülünden daha büyük olduğu görülür. Bu durumda MgS'nin wurtzite fazının diğer iki yarıiletkenin aynı fazına göre daha sert olduğu söylenebilir. Tablo 4.4'te yarıiletkenlerin wurtzite fazının iç yerdeğiştirme parametreleri de verilmiştir. Tablodan MgSe ve MgTe için elde edilen  $u$  parametrelerinin önceki teorik sonuçlarla uyum içerisinde olduğu görülmektedir.

Tabloda yarıiletkenlerin wurtzite fazları için hesaplanan dielektrik sabitleri ve Born etkin yükleri de verilmiştir. Bu yapıda fonon titreşimlerinin c-eksenine (optik eksen) dik ve paralel olması dolayısıyla kayatuzu ve çinko sülfürden farklı olarak iki farklı dielektrik sabiti ve Born etkin yükü ortaya çıkmaktadır. Bu durumun ortaya çıkmasına neden olan fonon titreşimleri yarıiletkenlerin dinamik özelliklerinin incelenmesi sırasında ayrıntılarıyla tartışılacaktır. Elde edilen dielektrik sabitleri ve Born etkin yükü değerleri Tablo 4.4'te verilmiştir. Bu yapısal parametrelere ilaveten her bir yarıiletkenin wurtzite fazına ait bağlanma enerjileri de daha önceki teorik hesaplama sonuçları ile birlikte tabloda görülmektedir. MgSe ve MgTe için elde edilen sonuçların önceki teorik hesaplamalarla iyi bir uyum gösterdiği görülmektedir. Yarıiletkenlerin toplam enerjilerinin minimum olduğu hacimlerin büyükten küçüğe MgTe, MgSe ve MgS olarak sıralandığı Şekil 4.4'te görülmektedir. Buna karşın Tablo 4.4'e bakıldığında hacmi en küçük olan yarıiletken olan MgS'nin en büyük bağlanma enerjisine sahip olduğu görülür.

Wurtzite ve çinko sülfür yapıların birim hücrelerindeki bağ yapıları birbirine benzemektedir. Bu benzerliğin bir sonucu olarak çinko sülfür ve wurtzite yapıların yapısal özellikleri karşılaştırıldığında, Şekil 4.1'de görüldüğü gibi her bir yarıiletkenin çinko sülfür ve wurtzite fazlarının birim hücre hacimleri birbirine son derece yakındır. Bu durum, Tablo 4.3 ve Tablo 4.4'ten görüldüğü gibi yarıiletkenlerin bu fazlarına ait hacim modüllerinin de birbirine yakın olmasına neden olmaktadır. Çinko sülfür yapıdaki yarıiletkenlerin dielektrik sabitleri ve etkin yükleri, wurtzite yapının c eksenine dik bileşenleri ile karşılaştırılırsa bunlar arasında da bir benzerlik olduğu dikkati çeker. Bu benzerlik her iki yapının da tetrahedral bağ yapısına sahip olması ile açıklanabilir.

#### 4.2.5. Nikel arsenik fazının yapısal özellikleri

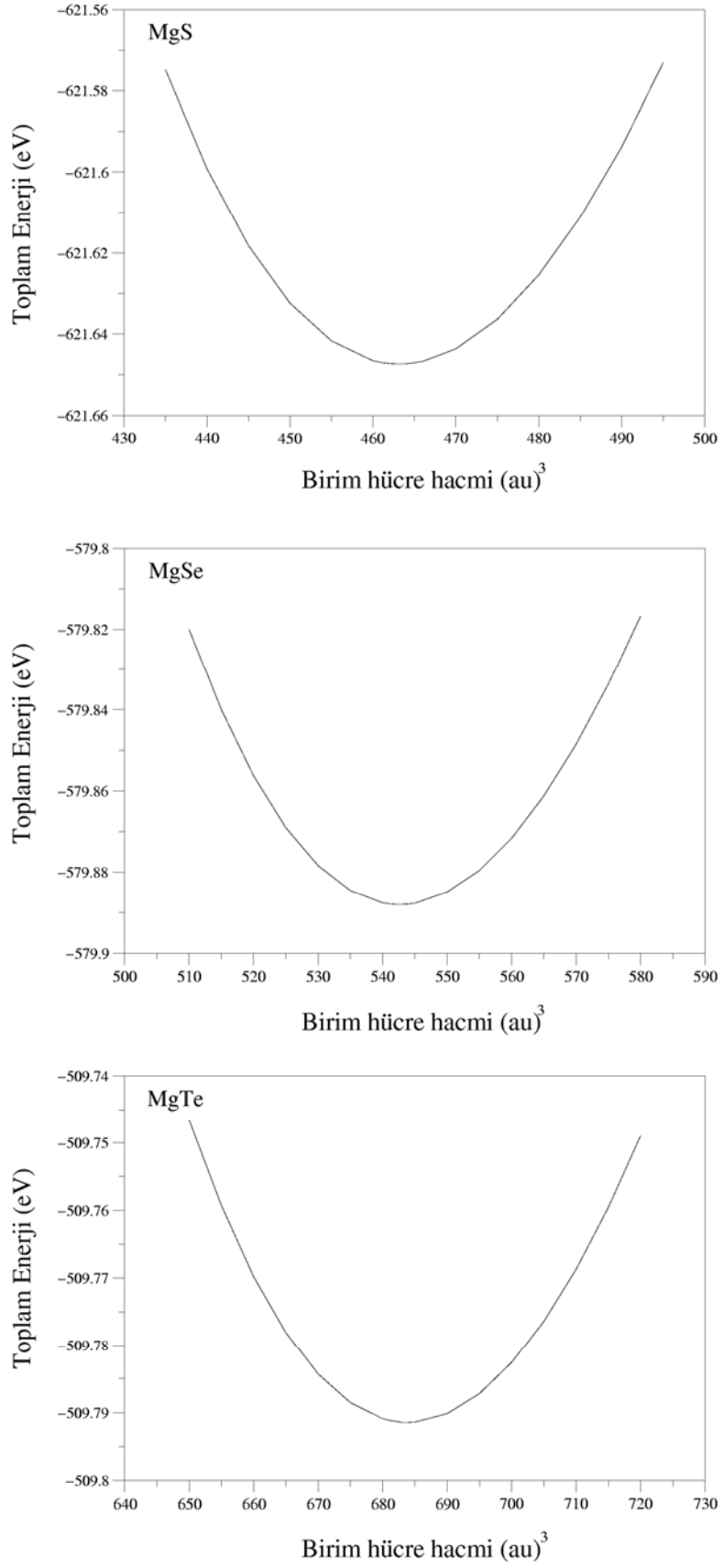
Nikel arsenik yapı da hegzagonal örgüye sahip olduğundan bu yapıda da, wurtzite yapıda olduğu gibi, minimum enerjiye sahip hacmi bulabilmek için a ve c gibi iki farklı parametrenin belirlenmesi gerekir. Bu parametrelerin belirlenmesi amacıyla wurtzite yapıdakine benzer şekilde Şekil 4.5'te görülen toplam enerji-hacim grafiği çizildi. Grafikte her bir yarıiletkenin enerjisinin minimum olduğu hacmin elde edildiği a ve c değerleri alınarak Tablo 4.5 oluşturuldu. Tablodan görüldüğü gibi MgTe için hesaplanan a ve c değerleri deneysel ve teorik sonuçlarla iyi bir uyum göstermektedir. MgS ve MgSe için ise hesaplanan a ve c değerleri de teorik sonuçlarla uyumludur.

Yarıiletkenlerin nikel arsenik fazları için hacim modülü ve hacim modülünün basınca göre türevi (4.1) ve (4.2) denklemlerinden yararlanarak ele edildi. Hesaplanan B ve B' değerleri Tablo 4.5'te görülmektedir. Tabloya bakıldığında MgSe için hesaplanan hacim modülü teorik sonuçlarla, MgTe için hesaplanan hacim modülü de daha önceki deneysel ve teorik sonuçlarla uyumludur.

Tablo 4.5. Nikel arsenik magnezyum kalkojenlerin yapısal parametreleri. Tabloda örgü parametreleri a ve c ( $\text{\AA}$ ), hacim modülü (Mbar) ve bağlanma enerjisi (eV/atom) birimindedir

Referanslar	a	c	B	B'	u	$\epsilon_{\perp}(\infty)$	$\epsilon_{\parallel}(\infty)$	$Z_{\perp}^B$	$Z_{\parallel}^B$	$E_c$
MgS	3.60	6.092	0.82	4.15	0.25	5.59	5.63	2.22	2.28	-4.708
Teorik(CHAKRABARTI, 2000)	3.59	5.995								
MgSe	3.81	6.367	0.67	4.15	0.25	6.78	6.79	2.34	2.39	-4.183
Teorik(CAMP, 1997)	3.86	6.471	0.65	4.11						-4.067
Teorik(CHAKRABARTI, 2000)	3.80	6.248	0.63	3.96						
MgTe	4.15	6.768	0.53	4.28	0.25	9.16	9.35	2.57	2.60	-3.630
Teorik(CAMP, 1997)	4.18	6.841	0.58	3.89						-3.510
Teorik(CHAKRABARTI, 2000)	4.12	6.723	0.48	3.47						
Deneysel(LI, 1995)	4.02	6.563	0.61	4.13						

Yarıiletkenlerin kristal yapısı, wurtzite yapıda olduğu gibi hegzagonal örgüye sahip olduğundan burada da c eksenini boyunca ve c eksenine dik olmak üzere iki farklı makroskobik dielektrik sabiti ve Born etkin yükü ortaya çıkmaktadır. Yarıiletkenlerin nikel arsenik fazları için hesaplanan dielektrik sabitleri ve Born etkin yükü değerleri Tablo 4.5'te verilmiştir.



Şekil 4.5. Nikel arsenik MgS, MgSe, MgTe'nin enerji-örgü sabiti grafiği

#### 4.2.6. Yapısal özelliklerin karşılaştırılması

Her bir yarıiletkenin çinko sülfür ve wurtzite fazlarına ait bağlanma enerjileri Tablo 4.3 ve Tablo 4.4'te görülmektedir. MgSe ve MgTe için elde edilen bağlanma enerjileri daha önceki teorik sonuçlarla iyi bir uyum göstermektedir. Bağlanma enerjilerine bakıldığında MgS'den MgTe'ye doğru giderek azaldığı ve Şekil 4.4'te verilen denge durumu hacimleri ile karşılaştırılırsa hacmin artmasına karşın bağlanma enerjisinin azaldığı görülür. Birbirine benzer yapılar olan kayatuzu ve nikel arsenik yapıların yapısal özellikleri karşılaştırıldığında, benzer pek çok yön olduğu görülür. Bu benzerliklerden birincisi, Şekil 4.1'de görüldüğü gibi her bir yarıiletkenin kayatuzu ve nikel arsenik fazlarının birim hücre hacimlerinin birbirine yakın olmasıdır. Bu durum, Tablo 4.2 ve Tablo 4.5'ten görüldüğü gibi yarıiletkenlerin bu fazlarına ait hacim modüllerinin de birbirine yakın olmasına neden olmaktadır. İkinci bir benzerlik ise dielektrik sabitleri ve etkin yükler Tablo 4.2 ve Tablo 4.5'ten görüldüğü gibi birbirine yakınlığıdır.

Her bir yarıiletkenin sahip olduğu dört faza ait bağlanma enerjileri karşılaştırılırsa, MgS ve MgSe taban durumunda kayatuzu yapıda kristalleştiklerinden bu yapıdaki bağlanma enerjileri diğer yapıdakine göre daha yüksektir. MgTe ise taban durumunda nikel arsenik kristalleştikten en büyük bağlanma enerjisine bu fazda sahiptir.

İncelenen yarıiletkenlerin taban durumunda hangi fazda oldukları Şekil 4.1'de açıkça görülmektedir. Maddelerin hangi fazlarının taban durumuna daha yakın olduğu farklı bir yöntemle de belirlenebilir.  $A^N B^{3-N}$  bileşiklerinde (N=2,3) yapıların benzerliği göz önüne alınarak, hangi fazın denge durumuna daha yakın olduğunu belirlemek için kritik parametre olan;

$$\Delta(c/a) = c/a - \sqrt{8/3} \quad (4.3)$$

ifadesi kullanılır(LAWAETZ, 1972). Yalnız karşılaştırmalar aynı bağ düzenine sahip kristaller için yapılmalıdır. Eğer  $\Delta(c/a)$  oranı negatif çıkıyorsa wurtzite kristal yapı, çinko sülfür kristal yapıya göre daha karardır.  $\Delta(c/a)$  oranı hesaplandığında MgS, MgSe ve MgTe için sırasıyla -0.0837, -0.0064, -0.0039 değerleri bulunmuştur. Bu değerlerin negatif çıkması incelenen yarıiletkenler için wurtzite yapının çinko sülfür yapıya göre daha kararlı olduğunu gösterir. Bu durum Şekil 4.1'de de açıkça görülmektedir. Bu yarıiletkenlerin nikel arsenik yapıları için  $\Delta(c/a)$  değerleri sırasıyla MgS, MgSe ve MgTe için 0.0568, 0.0341, -0.0052'dir.  $\Delta(c/a)$  değerlerinin MgS ve MgSe için pozitif çıkması bu yarıiletkenlerde kayatuzu yapının nikel arseniğe göre daha kararlı olduğuna işaret eder. Fakat MgTe için çok küçük de olsa bu oran negatif çıkmıştır. Daha önce de belirtildiği gibi bu yarıiletkenin taban durumu fazı diğer iki yarıiletkenden farklı olarak nikel arseniktir.

$\Delta(c/a)$  kritik parametresi maddenin iyonikliliği ile de ilişkilidir.  $A^N B^{8-N}$  wurtzite bileşiklerde kritik parametrenin negatif değeri ne kadar büyük olursa maddenin o kadar güçlü iyonik bağlanma gösterdiği söylenebilir(LAWAETZ, 1972). Buradan hareketle MgS yarıiletkeninin wurtzite fazı kritik parametresi negatif olarak daha büyük olduğundan diğer iki maddenin wurtzite fazlarına göre daha iyoniktir.

Wurtzite yapıda kristalleşen maddelerde iyoniklilik  $u$  iç parametresi ile de ilişkilidir. Bu maddelerde  $u$  parametresi arttıkça iyoniklilik de artar(BECHSTEDT, 2000). Bu çerçevede incelenen maddelerin wurtzite fazları için yapısal parametrelerin verildiği Tablo 4.4'e bakılacak olursa MgS den MgTe'ye doğru  $u$  parametresinin giderek azaldığı görülür. Bu durumda  $u$  parametresi en büyük olan MgS'nin diğer iki yarıiletkenden daha iyonik olduğu söylenebilir. Bu sonuç daha önce kritik parametreden elde edilen sonuçla da uyumludur.

Çinko sülfür yapıdan farklı olarak wurtzite yapıda en yakın komşu atomlar arası mesafe aynı değildir. Wurtzite yapıda [001] yönünde ( $c$  yönü) olan iki komşu atom arası bağ uzunluğu, diğer üç bağın uzunluğundan farklıdır. Bu bağın uzunluğu,

$$R^{(1)} = uc$$

ile verilir. Diğer üç bağın uzunluğu ise,

$$R^{(2)} = a\sqrt{1/3 + (1/2 - u)^2} (c/a)$$

bağıntısı ile verilir(KARCH, 1997). Wurtzite fazının çinko sülfür fazına göre, denge durumuna daha yakın olduğu maddelerin  $c/a$  oranları ile  $u$  iç parametresi arasında güçlü bir ilişki mevcuttur. Bu maddelerden  $c/a$  oranı az olanın  $u$  parametresinin daha büyük olması beklenir. Bu durum tetrahedral bağ açılarının değişmesine yol açar.  $R^{(1)}$  ve  $R^{(2)}$  bağ uzunluklarının birbirine eşit olduğu durumda  $u$  parametresi,

$$u = a^2 / 3c^2 + 1/4$$

bağıntısı ile hesaplanır(KARCH, 1997). İncelenen yarıiletkenlerin wurtzite yapıları için  $c/a$ ,  $u$  ve bağ uzunlukları Tablo 4.6'da verilmiştir.

Tablo 4.6. Wurtzite yapıdaki MgS, MgSe ve MgTe'nin hesaplanan  $c/a$ ,  $u$  ve bağ uzunlukları

	$c/a$	$u$	$R^{(1)} (\text{Å})$	$R^{(2)} (\text{Å})$
MgS	1.624624	0.3777	2.4520284	2.439889
MgSe	1.626591	0.3770	2.573025	2.563888
MgTe	1.639000	0.3762	2.776732	2.770972

Tabloya bakıldığında MgS'den MgTe'ye doğru gidildikçe  $c/a$  değerlerin arttığı, buna karşın  $u$  değerlerinin azaldığı görülmektedir. Bu durumda,  $u$  değeri ideal değere (0.375) daha yakın olan MgTe'nin bağ uzunluklarının birbirine yakın olması beklenir. Tablodan da MgTe için hesaplanan  $R^{(1)}$  ve  $R^{(2)}$  bağ uzunluklarının birbirine son derece yakın olduğu görülür. Bu durumda tetrahedral bozulmanın en az MgTe yarıiletkeninde olduğu söylenebilir. Tabloda MgS için hesaplanan  $R^{(1)}$  ve  $R^{(2)}$  bağ uzunluklarının birbirinden farkı, diğer yarıiletkenlere göre daha fazladır. Bu durumda tetrahedral bozulmanın en fazla olduğu yarıiletken de MgS'dir. Yarıiletkenlerin wurtzite fazlarındaki anizotropiye ait bir karşılaştırma da maddelerin wurtzite fazlarının dinamik özelliklerin incelenmesi sırasında yapılacaktır.

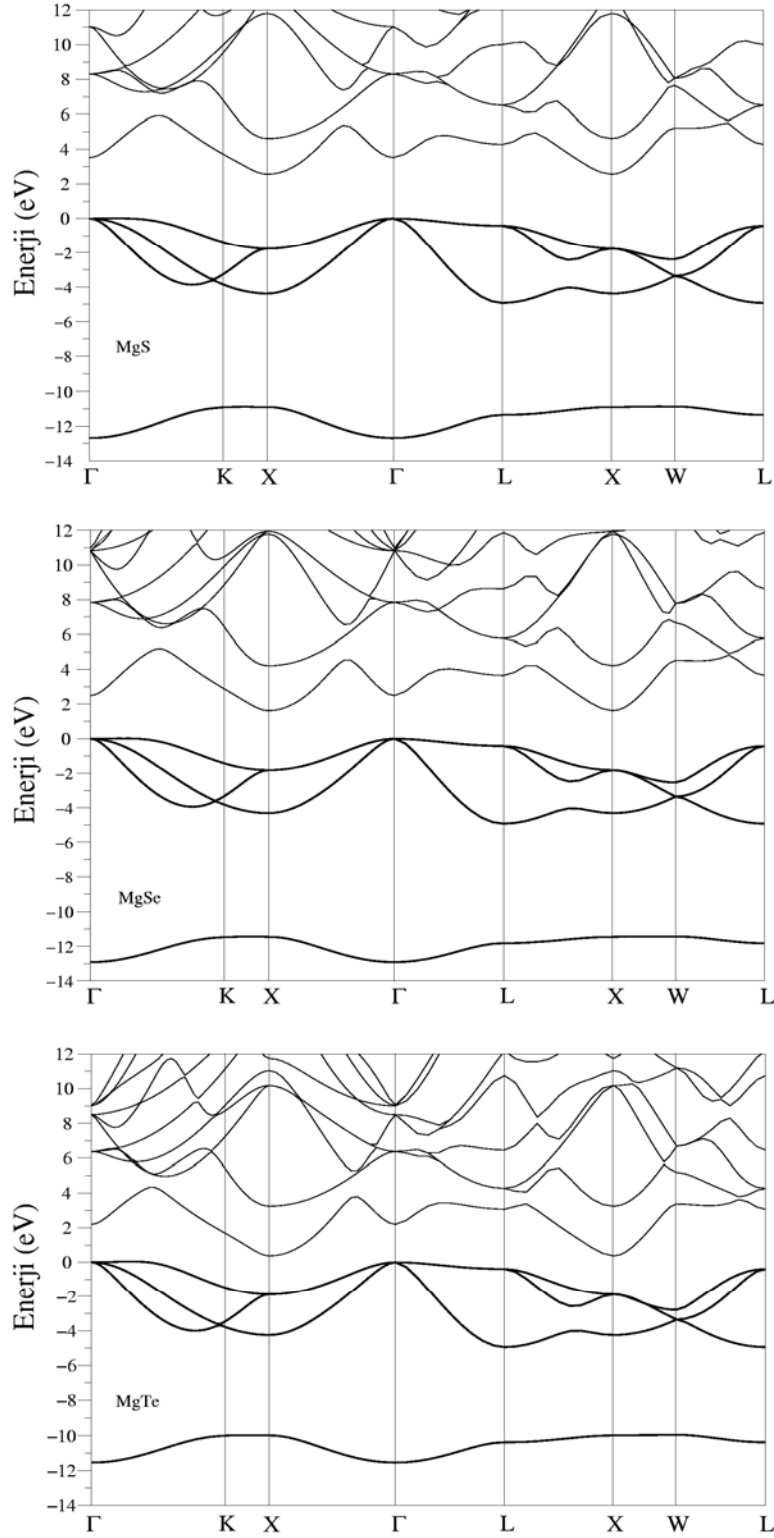
#### 4.2.7. Magnezyum kalkojenlerin elektronik özellikleri

Magnezyum kalkojenlerin elektronik yapıları hesaplanırken Mg atomu için ( $1s^2, 2s^2, 2p^6$ ) orbitallerindeki elektronlar kapalı bir kabuk, ( $3s^2$ )'dekiler ise değerlik elektronları olarak alındı. S atomu için ise ( $1s^2, 2s^2, 2p^6$ ) elektronları öz bölgesi olarak alınırken, ( $3s^2, 3p^4$ ) değerlik elektronları kabul edildi. Se atomunda ( $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}$ ) elektronları kapalı kabuğu oluştururken, ( $4s^2, 4p^4$ ) elektronları ise etkileşimlere katılan elektronlar olarak alındı. Te atomunda ise öz bölge olarak ( $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}$ ) orbitallerindeki elektronlar alınırken ( $5s^2, 5p^4$ ) kabuklarındaki elektronların kimyasal etkileşimlere neden oldukları kabul edildi. Böylece bu duruma uygun olarak tanımlanan yapay potansiyellerle elektronik hesaplamalar gerçekleştirildi. Materyallerin bant yapıları her birinin denge durumu örgü parametreleri baz alınarak belirlendi. Mg-kalkojenlerin elektronik özellikleri her bir faz için ayrı ayrı incelendi.

#### 4.2.8. Magnezyum kalkojenlerin kayatuzu fazının elektronik özellikleri

Magnezyum kalkojenlerin kayatuzu fazlarının elektronik bant yapısı grafikleri Şekil 4.6'da verilmiştir. Grafiklere bakıldığında her bir yarıiletkenin değerlik bandının en yüksek enerjili noktasının Brillouin bölge merkezinde ( $\Gamma$ ) olduğu görülmektedir. Buna karşın yarıiletkenlerin iletkenlik bantlarının en düşük enerji değerine X simetri noktasında sahip oldukları görülür. Bu sebeple Mg-kalkojenlerin kayatuzu fazlarının dolaylı bant aralığına sahip olduğu söylenebilir.

Şekil 4.6'daki her üç grafik incelendiğinde  $\Gamma$  noktasında üç değerlik bandının dejenere olduğu, X noktasında ise ikili dejenerelik olduğu görülür. Benzer bir durum diğer II-VI grubu yarıiletkenlerin elektronik bant yapılarında da görülmektedir(SRIVASTAVA, 2004, a KHENATA, 2006).



Şekil 4.6. Kayatuzu MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik bant yapısı grafikleri



Yarıiletkenler için yüksek simetri noktalarında elde edilen enerji farkları Tablo 4.7'de verilmiştir. Tabloya bakıldığında, elde edilen sonuçların daha önceki teorik sonuçlarla iyi bir uyum gösterdiği görülmektedir.

Tablo 4.7. Kayatuzu magnezyum kalkojenlerin elektronik bant aralıkları. Tabloda sonuçlar (eV) olarak verilmiştir

Referanslar	$\Gamma - \Gamma$	X - X	L - L	$\Gamma - X$	$\Gamma - L$
<b>MgS</b>	<b>3.52</b>	<b>4.33</b>	<b>4.70</b>	<b>2.56</b>	<b>4.27</b>
Teorik(KALPANA, 1996)	3.60	4.60	5.50	2.70	4.70
Teorik(DRIEF, 2004)				2.21	
Teorik(STEPANYUK, 1992)				2.09	
Teorik(RACHED, 2003)				2.65	
<b>MgSe</b>	<b>2.50</b>	<b>3.44</b>	<b>4.10</b>	<b>1.62</b>	<b>3.65</b>
Teorik(KALPANA, 1996)	2.50	3.50	4.70	1.50	3.90
Teorik(CAMP, 1997)	2.20			1.605	3.65
Teorik(DRIEF, 2004)				1.95	
Teorik(RACHED, 2003)				1.75	
<b>MgTe</b>	<b>2.20</b>	<b>2.27</b>	<b>3.46</b>	<b>0.38</b>	<b>3.07</b>
Teorik(DRIEF, 2004)				0.41	

Yarıiletkenlerin bant yapısı grafiklerinde kalın çizgilerle gösterilen değerlik bantlarının alt ve üst bölgelerinin genişlikleri ile toplam genişliği ( $\Delta E_d^{alt}$ , elektronik spektrumdaki minimum enerjili bandın genişliğini gösterirken,  $\Delta E_d^{üst}$  elektronik spektrumdaki ilk üç değerlik bandının genişliğini ve  $\Delta E$  ise değerlik bantlarının maksimumu ile minimumu arasındaki enerji farkını ifade eder.) Tablo 4.8'de verilmiştir. Tabloya bakıldığında, her bir yarıiletken için hesaplanan değerlik bant genişliklerinin daha önceki teorik hesaplamalarla uyum içerisinde olduğu görülür. Tabloda değerlik bant genişliğinin MgS'den MgTe'ye doğru düzgün bir şekilde artmadığı MgSe'de en yüksek değerine ulaştıktan sonra MgTe'de daha da düştüğü görülmektedir. Bunun nedeni MgSe'nin kayatuzu fazının diğer yarıiletkenlerin aynı fazına göre daha iyonik olmasıdır. Benzer bir durum grup II-VI yarıiletkenlerinden olan CaSe ve CaTe'nin kayatuzu fazlarının elektronik yapılarında da görülmektedir(a KHENATA, 2006). Burada diğer II-VI grubu

yarıiletkenler olan Be-kalkojenlerden farklı olarak, MgSe'nin Phillips iyoniklik faktörleri diğer MgS ve MgSe'den daha büyüktür(GARCIA, 1993, OKEYE, 2004).

Tablo 4.8. Kayatuzu magnezyum kalkojenlerin değerlik bant genişlikleri. Değerler (eV) birimindedir

Referanslar	$\Delta E_d^{alt}$	$\Delta E_d^{üst}$	$\Delta E$
MgS	1.80	4.926	12.70
Teorik(KALPANA, 1996)	2.00	5.30	
Teorik(RACHED, 2003)		5.47	12.91
MgSe	1.468	4.924	12.91
Teorik(KALPANA, 1996)	1.60	5.20	
Teorik(RACHED, 2003)		5.18	13.16
MgTe	1.564	4.943	11.54

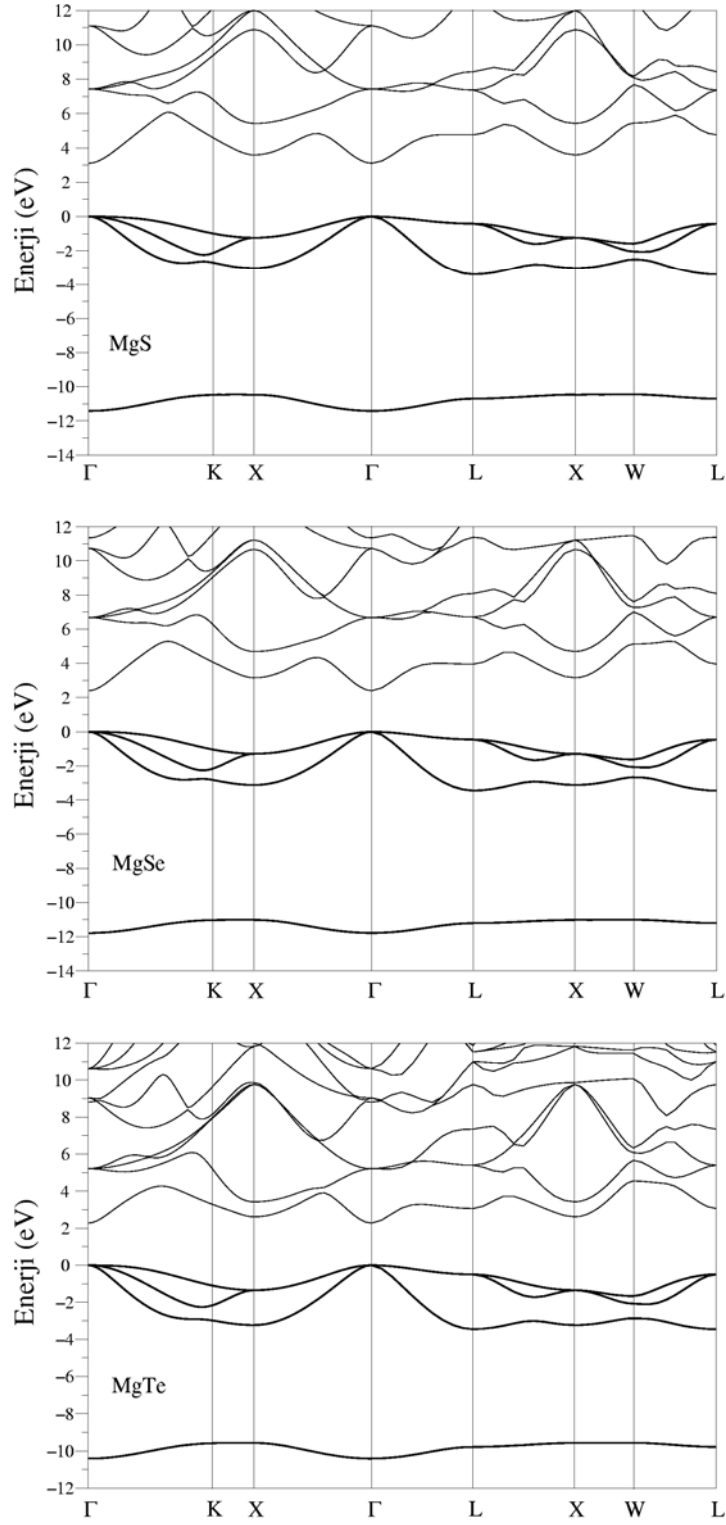
#### 4.2.9. Çinko sülfür fazının elektronik özellikleri

Çinko sülfür yapıda kristalleşen MgS, MgSe ve MgTe için elektronik bant yapısı grafikleri Şekil 4.7'de verilmiştir. Şekle bakıldığında her bir yarıiletken için değerlik bandının en üst noktasının ve iletkenlik bandının en düşük enerjiye sahip olduğu noktanın bölge merkezinde olduğu görülür ki bu sebeple doğrudan bant aralığına sahiptirler. Şekil 4.7'de yarıiletkenlerin anyonlarının elektron sayıları arttıkça yasak enerji aralığı değerinin azaldığı görülmektedir. Bu durum II-VI yarıiletkenleri için genel bir durumdur(GARCIA, 1993).

Simetri noktalarında hesaplanan enerji farkları değerleri Tablo 4.9'da verilmiştir. Elde edilen sonuçların daha önceki deneysel ve teorik verilerle uyum içerisinde olduğu tablodan açıkça görülmektedir. Brillouin bölge merkezinde belirlenen değerlik-iletkenlik bant aralığının ise deneysel değerden daha düşük olduğu görülür. Bu yerel yoğunluk yaklaşımı hesaplamalarında beklenen bir durum olarak karşımıza çıkar.

Çinko sülfür faz için elde edilen  $\Delta E_d^{alt}$ ,  $\Delta E_d^{üst}$  ve  $\Delta E$  değerleri Tablo 4.10'da verilmiştir. Hesaplanan değerlik bant genişliklerinin daha önceki teorik verilerle uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Kayatuzu faza benzer şekilde değerlik bant genişliğinin anyonun kütesinin artması ile düzgün bir şekilde artmadığı, MgSe'de en yüksek değerine ulaştığı bulunmuştur. Bu

durum grup II-VI yarıiletkenlerinden olan BeS, BeSe ve BeTe'nin değerlik bant genişlikleri için de benzer bir şekilde elde edilmiştir(SRIVASTAVA, 2004).



Şekil 4.7. Çinko sülfür MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik bant yapısı grafikleri

**Tablo 4.9. Çinko sülfür magnezyum kalkojenlerin elektronik bant aralıkları. Tabloda sonuçlar (eV) olarak verilmiştir**

Referanslar	$\Gamma - \Gamma$	X - X	L - L	$\Gamma - X$	$\Gamma - L$
<b>MgS</b>	<b>3.10</b>	<b>4.82</b>	<b>5.18</b>	<b>3.59</b>	<b>4.76</b>
Teorik(RABAH, 2003)	3.42			3.64	5.03
Teorik(DRIEF, 2004)	3.37				
Teorik(CHARIFI, 2005)	3.32				
Deneysel(OKUYAMA, 1992)	4.45				
<b>MgSe</b>	<b>2.40</b>	<b>4.45</b>	<b>4.41</b>	<b>3.16</b>	<b>3.97</b>
Teorik(FLESZAR, 2001)	2.47	4.31	4.43	3.11	4.03
Teorik(RABAH, 2003)	2.82			3.27	
Teorik(DRIEF, 2004)	2.82				
Teorik(KALPANA, 1996)	2.51			3.30	
Deneysel(OKUYAMA, 1992)	3.59				
<b>MgTe</b>	<b>2.27</b>	<b>3.96</b>	<b>3.56</b>	<b>2.61</b>	<b>3.10</b>
Teorik(FLESZAR, 2001)	2.29	3.73	3.47	2.38	2.99
Teorik(DRIEF, 2004)	2.61				
Teorik(CHARIFI, 2005)	2.29				
Deneysel(PARKER, 1971)	3.47				
Deneysel(LIU, 2004)	3.13				

**Tablo 4.10. Çinko sülfür magnezyum kalkojenlerin değerlik bant genişlikleri. Değerler (eV) birimindedir**

	$\Delta E_d^{alt}$	$\Delta E_d^{üst}$	$\Delta E$
<b>MgS</b>	<b>0.954</b>	<b>3.409</b>	<b>11.417</b>
Teorik(RACHED, 2003)		3.95	11.50
Teorik(RABAH, 2003)	1.01		11.26
<b>MgSe</b>	<b>0.767</b>	<b>3.438</b>	<b>11.780</b>
Teorik(RABAH, 2003)	0.88		11.29
Teorik(FLESZAR, 2001)	0.78	3.46	11.80
<b>MgTe</b>	<b>0.841</b>	<b>3.460</b>	<b>10.410</b>
Teorik(FLESZAR, 2001)	0.88	3.72	10.56

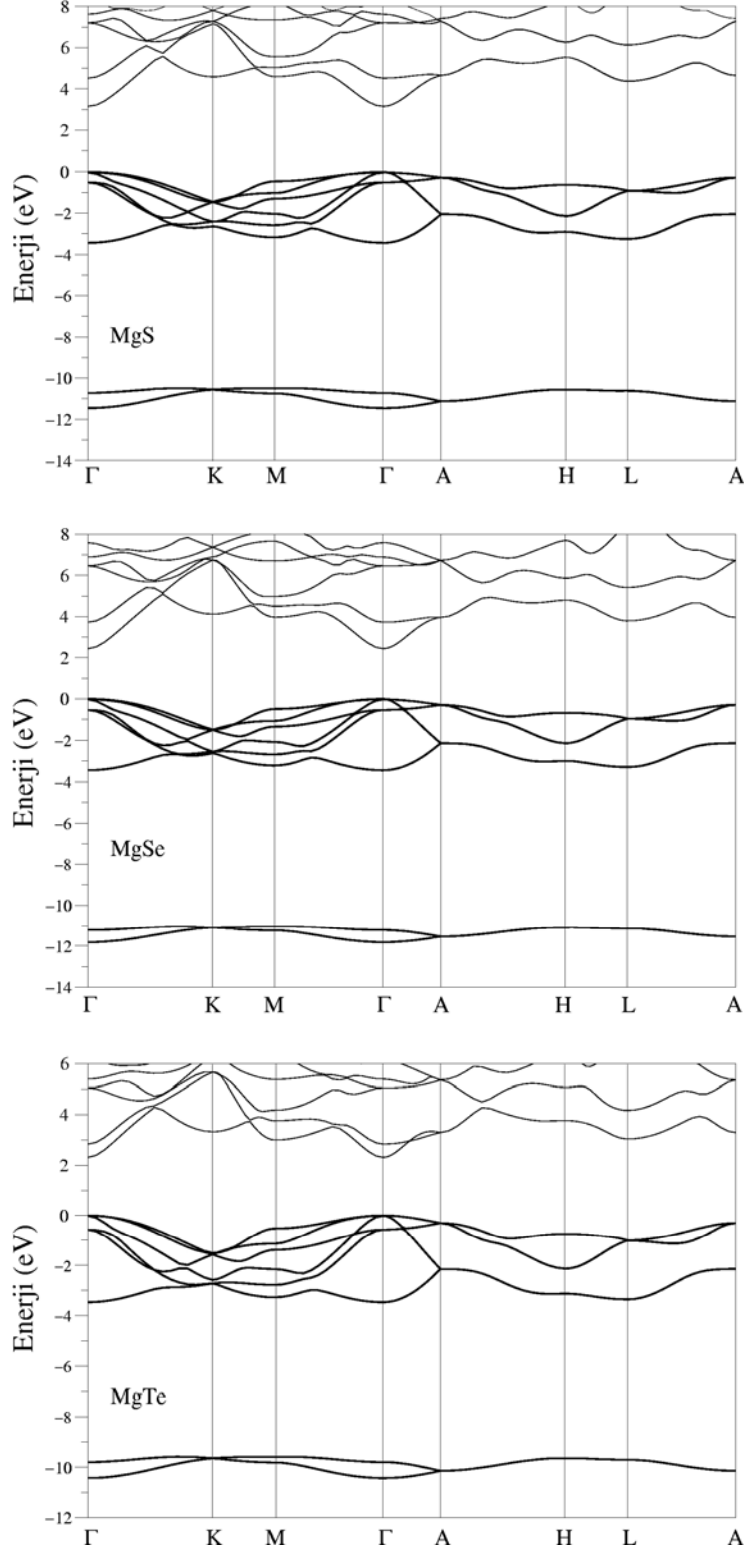
#### 4.2.10. Wurtzite fazının elektronik özellikleri

Şekil 4.8, Magnezyum kalkojenlerin wurtzite fazlarına ait elektronik bant yapısı grafiklerini göstermektedir. Şekle bakıldığında yarıiletkenlerin wurtzite fazlarının doğrudan bant aralığına sahip oldukları görülmektedir. Bant yapısı grafiklerinde, wurtzite yapının birim hücresinde dört atom olduğu için değerlik bant bölgesindeki bant sayısı kayatuzu ve çinko sülfür yapılarına göre daha fazladır.

Tablo 4.11’de simetri noktalarındaki enerji fark değerleri verilmiştir. MgS ve MgSe yarıiletkenleri için elde edilen sonuçların daha önceki teorik hesaplamalarla uyum içerisinde olduğu tablodan açıkça görülmektedir.

Yarıiletkenlerin wurtzite yapısı için hesaplanan  $\Delta E_d^{alt}$ ,  $\Delta E_d^{üst}$  ve  $\Delta E$  değerleri Tablo 4.12’de verilmiştir. Tabloya bakıldığında, MgS ve MgSe için elde edilen bant genişliği değerlerinin daha önceki teorik değerlerle uyumlu olduğu görülmektedir. Tabloda değerlik bant genişliğinin anyonun kütlesinin artması ile düzgün bir şekilde artmadığı, MgSe’de en yüksek değerine ulaştıktan sonra MgTe’de daha da düştüğü görülmektedir. Bu faz için de daha önceki iki faz için elde edilen sonuçlara benzer olarak MgSe’nin Phillips iyoniklik faktörünün daha büyük olması nedeniyle(PHILLIPS, 1970)  $\Delta E$  değerinin diğer iki yarıiletkenden daha büyük olduğu bulunmuştur.

Kristal yapı olarak birbirine yakın olan çinko sülfür ve wurtzite yapılarda kristalleşen yarıiletkenlerin Tablo 4.9 ve Tablo 4.11’de verilen değerlik bant genişliği değerleri de birbirine son derece yakındır.



Şekil 4.8. Wurtzite MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik bant yapısı grafikleri

Tablo. 4.11. Wurtzite magnezyum kalkojenlerin enerji aralığı değerleri. Değerler (eV) birimindedir

Referanslar	$\Gamma - \Gamma$	K - K	$\Gamma - K$	$\Gamma - M$	$\Gamma - L$
MgS	3.15	6.04	4.58	4.59	4.36
Teorik(RACHED, 2003)	3.50				
MgSe	2.44	5.61	4.11	3.96	3.78
Teorik(RACHED, 2003)	2.61				
MgTe	2.31	4.83	3.32	3.00	3.04

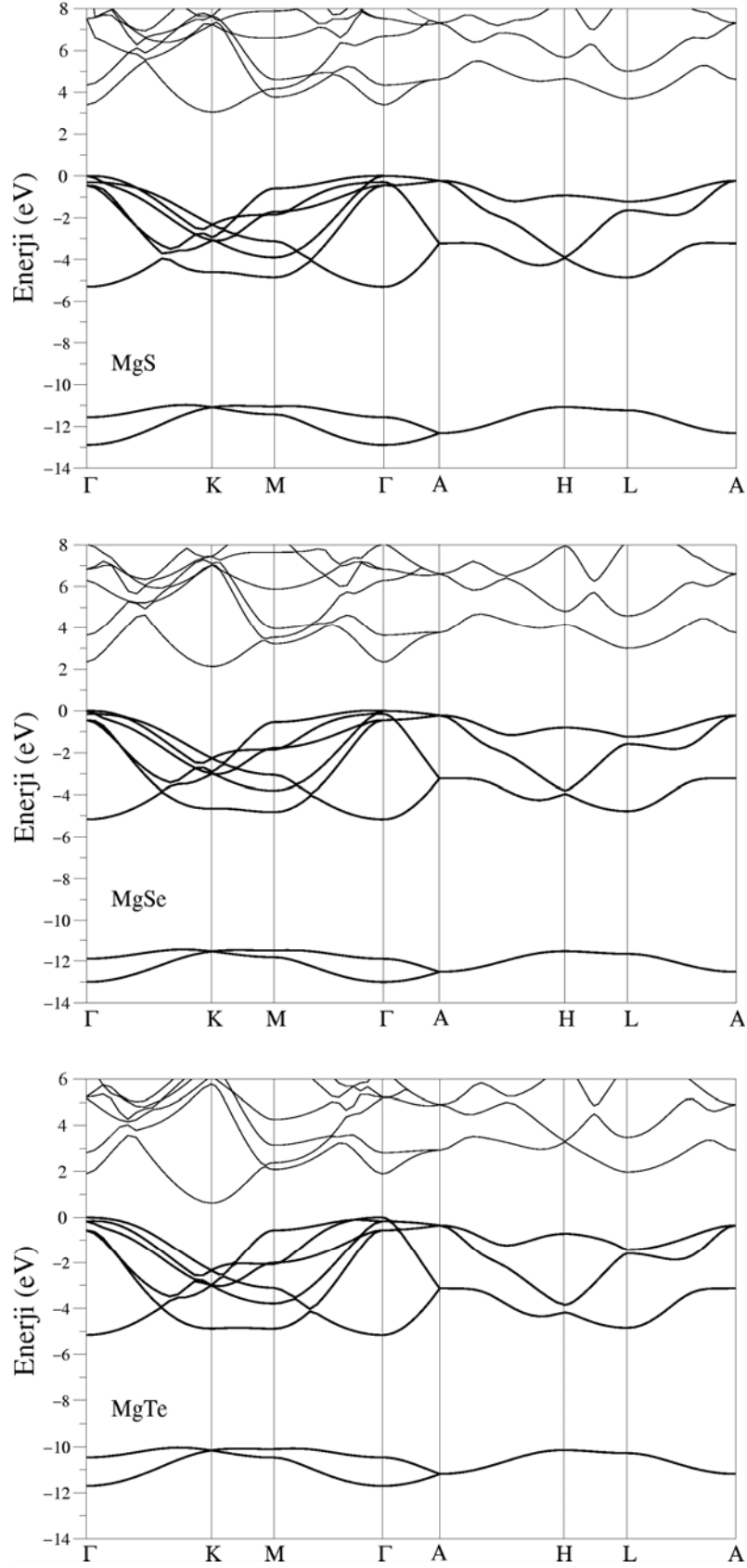
Tablo 4.12. Wurtzite magnezyum kalkojenlerin değerlik bant genişlikleri. Tüm değerler (eV) birimindedir

Referanslar	$\Delta E_d^{alt}$	$\Delta E_d^{üst}$	$\Delta E$
MgS	0.957	3.441	11.456
Teorik(RACHED, 2003)		3.96	11.53
MgSe	0.770	3.464	11.817
Teorik(RACHED, 2003)		3.71	12.75
MgTe	0.840	3.470	10.426

#### 4.2.11. Nikel Arsenik Fazının Elektronik Özellikleri

Şekil 4.9, MgS, MgSe ve MgTe'nin nikel arsenik fazlarına ait elektronik bant yapısı grafiklerini göstermektedir. Bu grafiklerden yarıiletkenlerin dolaylı bant aralığına sahip oldukları açık bir şekilde görülmektedir. Bu durum kayatuzu fazından elde edilen sonuçla benzerdir. Ancak bu faz için farklı bir şekilde iletkenlik bandının en alt noktası K simetri noktasında bulunmuştur.

Yarıiletkenler için simetri noktalarındaki enerji fark değerleri Tablo 4.13'de verilmiştir. MgS ve MgSe'nin nikel arsenik fazlarının elektronik yapısı üzerine deneysel ve teorik olarak herhangi bir çalışma yapılmamıştır. MgTe yarıiletkenin bant yapısı sonuçlarının daha önceki teorik çalışma ile uyumlu olduğu tabloda görülmektedir.



Şekil 4.9. Nikel arsenik MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik bant yapısı grafikleri



Nikel arsenik faz için hesaplanan  $\Delta E_d^{alt}$ ,  $\Delta E_d^{üst}$  ve  $\Delta E$  değerleri Tablo 4.14'de verilmiştir. Tabloya bakıldığında MgSe'nin değerlik bant genişliğinin daha önce hesaplanan tüm fazlarda olduğu gibi diğer yarıiletkenlere göre daha büyük olduğu görülür. Bu durum MgSe'nin daha iyonik olması ile ilişkilidir.

Tablo 4.8 ile Tablo 4.14 karşılaştırılırsa, yarıiletkenlerin kayatuzu fazlarının değerlik bant genişlikleri ile nikel arsenik fazlarının değerlik bant genişliklerinin birbirine son derece yakın oldukları görülür. Bunun nedeni bu iki faz için atomik bağlanmaların birbirine son derece benzer olmasıdır.

Tablo 4.13. Nikel arsenik magnezyum kalkojenlerin enerji aralıkları. Sonuçlar (eV) birimindedir

Referanslar	$\Gamma - \Gamma$	K - K	$\Gamma - K$	$\Gamma - M$	$\Gamma - L$
MgS	3.40	5.38	3.05	3.76	3.69
MgSe	2.34	4.39	2.12	3.22	3.00
MgTe	1.90	2.97	0.63	2.09	1.98
Teorik(CAMP, 1997)	2.35		0.81	2.41	2.05

Tablo 4.14. Nikel arsenik magnezyum kalkojenlerin değerlik bant genişlikleri. Sonuçlar (eV) birimindedir.

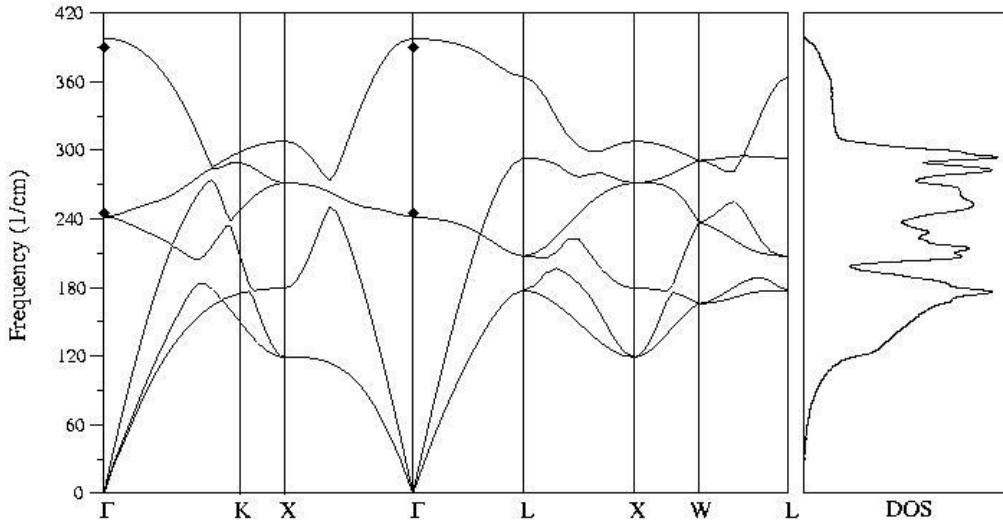
Materyal	$\Delta E_d^{alt}$	$\Delta E_d^{üst}$	$\Delta E$
MgS	1.8484	5.3110	12.8937
MgSe	1.5093	5.1741	13.0065
MgTe	1.6042	5.1624	11.7019

#### 4.2.12. Magnezyum kalkojenlerin titreşim özellikleri

Bu kısımda MgS, MgSe ve MgTe yarıiletkeninin dört farklı kristal formunun (kayatuzu, çinko sülfür, wurtzite ve nikel arsenik) titreşim özelliklerinin inceleme sonuçları sırasıyla sunulmuştur.

#### 4.2.13. MgS kristalinin kayatuzu yapısının titreşim özellikleri

MgS kristalinin NaCl yapısına ait fonon dağıtım ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4.10'da görülmektedir. NaCl yapıda birim hücrede iki iyon olduğu için tüm dalga vektörleri değerlerinde 3 akustik ve 3 optik olmak üzere toplam 6 titreşim modu elde edilmiştir. Yalnız  $\Gamma$  - X [001] ve  $\Gamma$  - L [111] yönlerinde enine optik ve enine akustik modların dejenere olması sonucu iki akustik ve iki optik mod vardır.

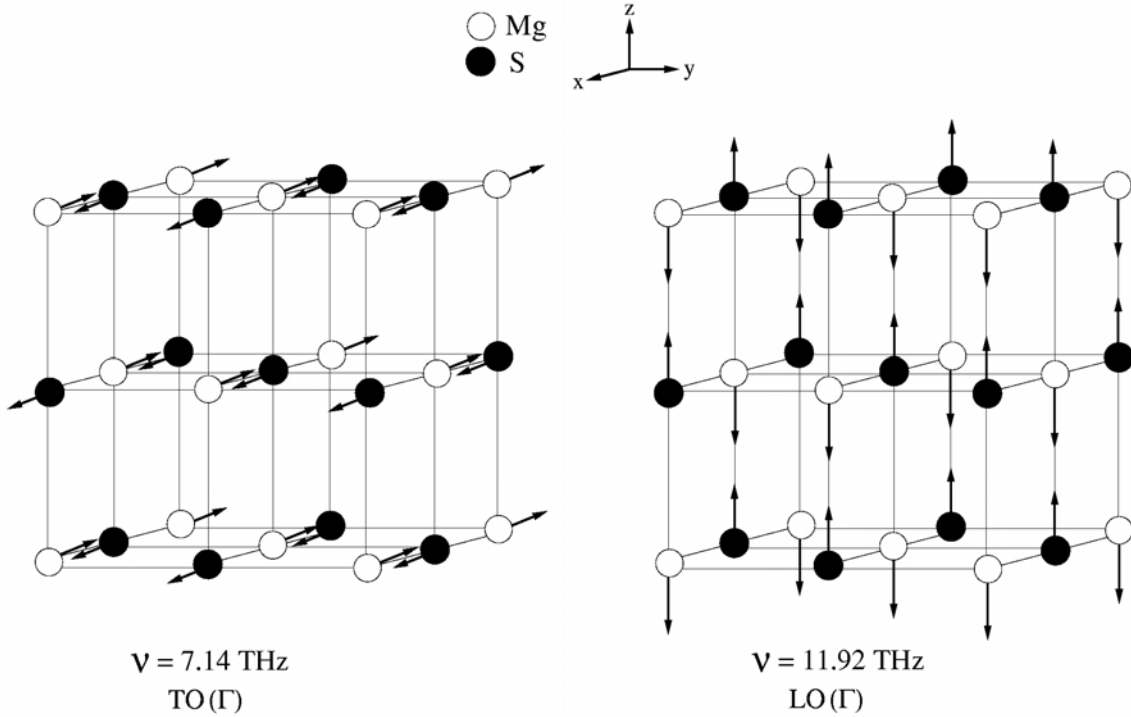


Şekil 4.10. MgS yarıiletkeninin NaCl yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri. Koyu eğriler hesaplanan *ab initio* sonuçlarını, dolu elmaslar ise deneysel sonuçları gösterir(HOFMEISTER, 2003).

Şekil 4.10'da görüldüğü gibi  $\Gamma$  noktasında enine optik mod ile boyuna optik mod ayrılmıştır. Bu durum iyonik kristallerin önemli bir özelliğidir. Şekilde  $\Gamma$  noktasında deneysel sonuçlar ( $245 \text{ cm}^{-1}$  (TO) ve  $390 \text{ cm}^{-1}$  (LO)) (HOFMEISTER, 2003) ile hesapladığımız sonuçlar ( $241 \text{ cm}^{-1}$  (TO) ve  $397 \text{ cm}^{-1}$  (LO)) karşılaştırılmıştır. Buradan da görüleceği gibi elde ettiğimiz sonuçlar deneysel verilerle son derece uyumludur.

Fonon dispersiyon grafiğinde LO fonon modunun [100] ve [110] simetri yönlerinde büyük bir dağıtım gösterdiği görülmektedir. Bu durum yarıiletkenlerin kayatuzu yapısındaki atomik diziliş ve atomların bağlanmaları ile ilgilidir. Benzer bir durum aynı fazda kristalleşen PbS'nin örgü dinamiğinde de gözlenmiştir(UPADHYAYA, 2002). Söz konusu titreşim yönlerinde NaCl kristalinin LO fonon modu da büyük bir dispersiyon göstermektedir(RAUNIO, 1969). Fonon dispersiyon eğrisinde optik ve akustik modlar arasında bir boşluk olmadığı görülür. Bunun sebebi Mg ile S atomları arasında kütle farkının küçük olmasıdır. Benzer bir durum NaCl'nin fonon dispersiyonunda da görülmektedir(RAUNIO, 1969).

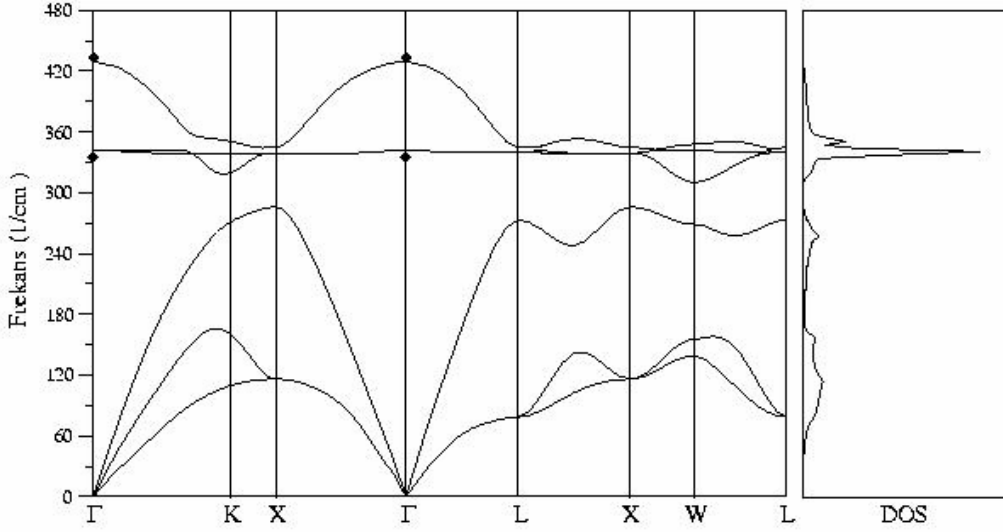
MgS'nin kayatuzu fazına ait bölge merkezi fonon titreşimleri Şekil 4.11'de verilmiştir. TO fonon modunda, Mg ve S atomlarının birbirine karşı ve  $[001]$  yönünde alınan dalga vektörüne dik titreştikleri görülür. Böylece TO fonon modu dalga vektörüne dik bir polarizasyona neden olur. LO fonon modunda ise atomlar birbirine zıt yönlerde titreşirler. Bu durumda atomik titreşimler dalga vektörüne paralel olduğu için z yönünde bir polarizasyon oluşur.



Şekil 4.11. Kayatuzu MgS'de  $\Gamma$  noktası fononlarının atomik titreşimleri

#### 4.2.14. MgS kristalinin çinko sülfür yapısının titreşim özellikleri

Şekil 4.12'de MgS yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon dağılımı ve durum yoğunluğu eğrileri verilmiştir. Şekilde dolu elmaslar olarak gösterilen deneysel fonon sonuçlarının ( $327 \pm 6$   $\text{cm}^{-1}$  (TO) ve  $425 \pm 1$  (LO))(WOLVERSON, 2001), hesaplamalarımız sonucu elde ettiğimiz fonon frekanslarıyla ( $341$   $\text{cm}^{-1}$  (TO) ve  $429$   $\text{cm}^{-1}$  (LO)) uyum içinde olduğu görülür.

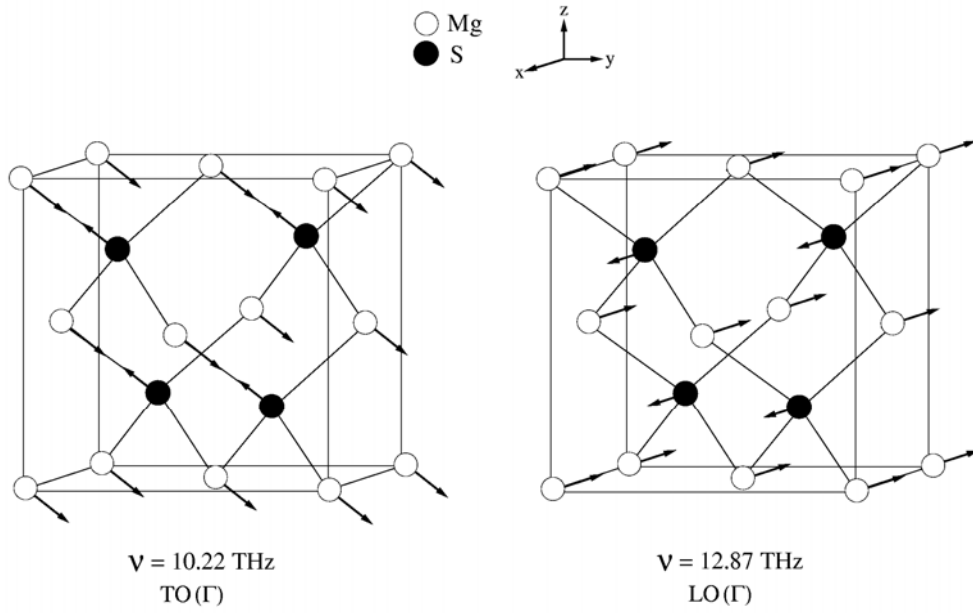


Şekil 4.12. MgS yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri. Koyu eğriler hesaplanan *ab initio* sonuçlarını, dolu elmaslar ise deneysel sonuçları gösterir(WOLVERSON, 2001).

MgS'nin bu yapısının fonon dispersiyonunda, kayatuzu yapısından (Şekil 4.10) farklı olarak optik-akustik fonon modları arasında bir boşluk bulunmaktadır. Bu optik-akustik boşluğun oluşmasında çinko sülfür yapının dörtlü (tetrahedral) bağ yapısının etkin olduğu söylenebilir. Yarıiletkenin kayatuzu ve çinko sülfür fazları arasındaki bir diğer fark ise TO fonon modunun [100] ve [111] yüksek simetri yönlerindeki dispersiyonudur. Bu fonon kolunun dağılımı çinko sülfür yapıda, kayatuzu yapıya göre daha azdır. Bu durum yarıiletkenin durum yoğunluğu eğrisinde 10.22 THz frekans değerinde keskin bir pik oluşmasına sebep olmuştur.

Durum yoğunluğu eğrisinde akustik bölgede keskin olmayan üç adet pik göze çarpmaktadır. Bu piklerden ilk ikisi enine akustik fononlardan ileri gelirken, optik akustik boşluğa yakın olan üçüncü pik ise, boyuna akustik fononlardan kaynaklanmaktadır. Optik akustik boşluk bölgesinin üstünde ise biri son derece keskin olmak üzere iki adet pik görülmektedir. Bunlardan ilki daha önce açıklandığı gibi enine optik fononlardan, ikincisi ise boyuna optik fononların dağılımından kaynaklanmaktadır.

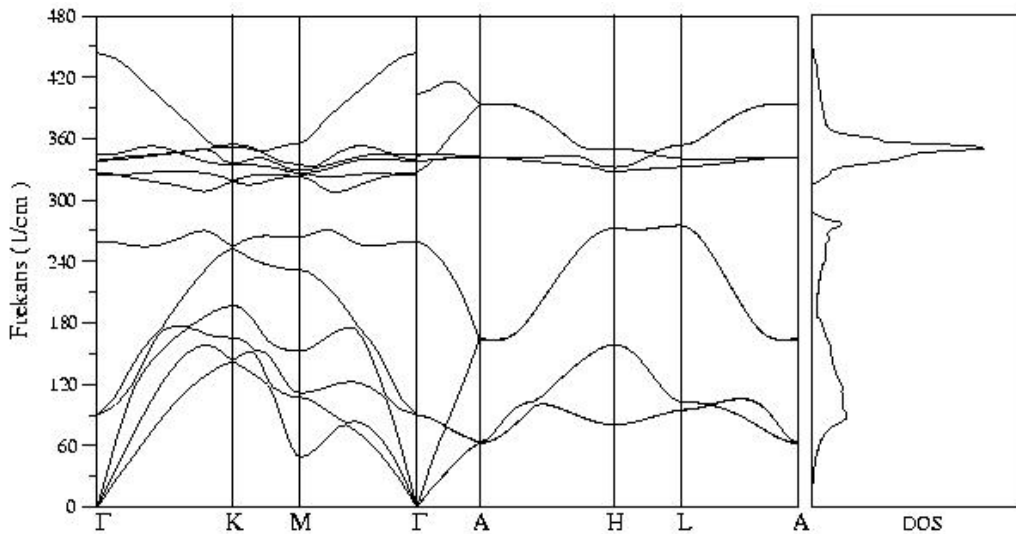
MgS'nin  $\Gamma$  noktası fonon titreşimleri Şekil 4.13'te verilmiştir. Bu noktadaki atomların titreşiminde aynı tip atomların aynı yönlü titreştikleri ve faz farkının olmadığı açıkça görülmektedir. TO fonon modunun atomik titreşimlerine bakılırsa, katyon ve anyon atomlarının birbirine zıt yönlerde ve [100] yönünde alınan dalga vektörüne dik titreştikleri görülür. 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 titreşirler ki bu titreşimler dalga vektörüne paralel bir polarizasyona sebep olur.



Şekil 4.13. Çinko sülfür MgS'de  $\Gamma$  noktası fononlarının atomik titreşimleri

#### 4.2.15. MgS kristalinin wurtzite yapısının titreşim özellikleri

MgS yarıiletkeninin wurtzite yapısı için elde edilen fonon dispersiyonu ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4.14'de verilmiştir. Wurtzite yapıda birim hücrede 4 atom olduğundan her bir dalga vektörü için 12 adet fonon modu mevcuttur.  $\Gamma - K$  ve  $\Gamma - M$  yönleri için bu modlar açık bir şekilde görülmektedir. Diğer yönlerde ise dejenere modlardan dolayı toplam mod sayısı 12'den azdır.  $\Gamma - A$  yönünde 8 fonon modu var iken  $A - H$ ,  $H - L$  ve  $L - A$  yönlerinde 6 fonon modu mevcuttur.



Şekil 4.14. MgS yarıiletkeninin wurtzite yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

Tek optik eksene sahip bir yapı olan wurtzite yapının Brillouin bölge merkezinde optik fonon frekansları  $A_1(\text{LO})$ ,  $A_1(\text{TO})$ ,  $E_1(\text{LO})$ ,  $E_1(\text{TO})$ ,  $E_2^1$ ,  $E_2^2$ ,  $B_1^1$  ve  $B_1^2$  olarak ayrışır. MgS yarıiletkeni için bu fonon modları sırasıyla 12.08 THz, 9.72 THz, 13.30 THz, 10.31 THz, 2.69 THz, 10.15 THz, 7.78 THz ve 9.80 THz olarak hesaplanmıştır. Bu fonon modlarından  $A_1(\text{LO})$ ,  $A_1(\text{TO})$ ,  $E_1(\text{LO})$ ,  $E_1(\text{TO})$  Raman ve Infrared aktiftir.  $E_2^1$  ve  $E_2^2$  ise sadece Raman aktiftir.  $B_1^1$  ve  $B_1^2$  fonon modları ise Raman ve Infrared aktif değildirler.

Şekil 4.14'deki fonon dispersiyon grafiğinde en yüksek frekanslı fonon modu  $\Gamma$ -K yönünde 2.69 THz ve  $\Gamma$ -M yönünde 2.65 THz gibi büyük bir dispersiyon göstermektedir. Bu nedenle durum yoğunluğu eğrisinde bir pik oluşmamaktadır. Daha düşük enerjili optik fononların dispersiyonunun son derece az olması durum yoğunluğu eğrisinde 10 THz civarında keskin bir pik oluşmasına neden olur. 8 THz civarındaki küçük pik ise boyuna optik fononların dağılımından kaynaklanmaktadır. Enine optik fononların dispersiyonu ise 2.6 THz civarında küçük bir pik oluşturur.

Şekil 4.15'de  $\Gamma$  noktasında açılal dispersiyon göstermeyen fonon modlarının atomik titreşimleri verilmiştir. Şekilde  $E_2^1$  ve  $E_2^2$  fonon modlarında,  $\{0, 0, 0\}$  konumunda bulunan Mg

atomu ile  $\left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}$  konumunda bulunan diğer bir Mg atomu birbirine zıt yönde

titreşmektedirler.  $\{0, 0, u\}$  konumunda bulunan S atomu ile  $\left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} + u\right\}$  konumunda bulunan S

atomunun da titreşimlerinin birbirine zıt yönlerde olduğu açıkça görülmektedir. Bu titreşimler c

eksenine dik bir polarizasyonun oluşmasına neden olmaktadır. Şekilde  $B_1^1$  fonon modunda S

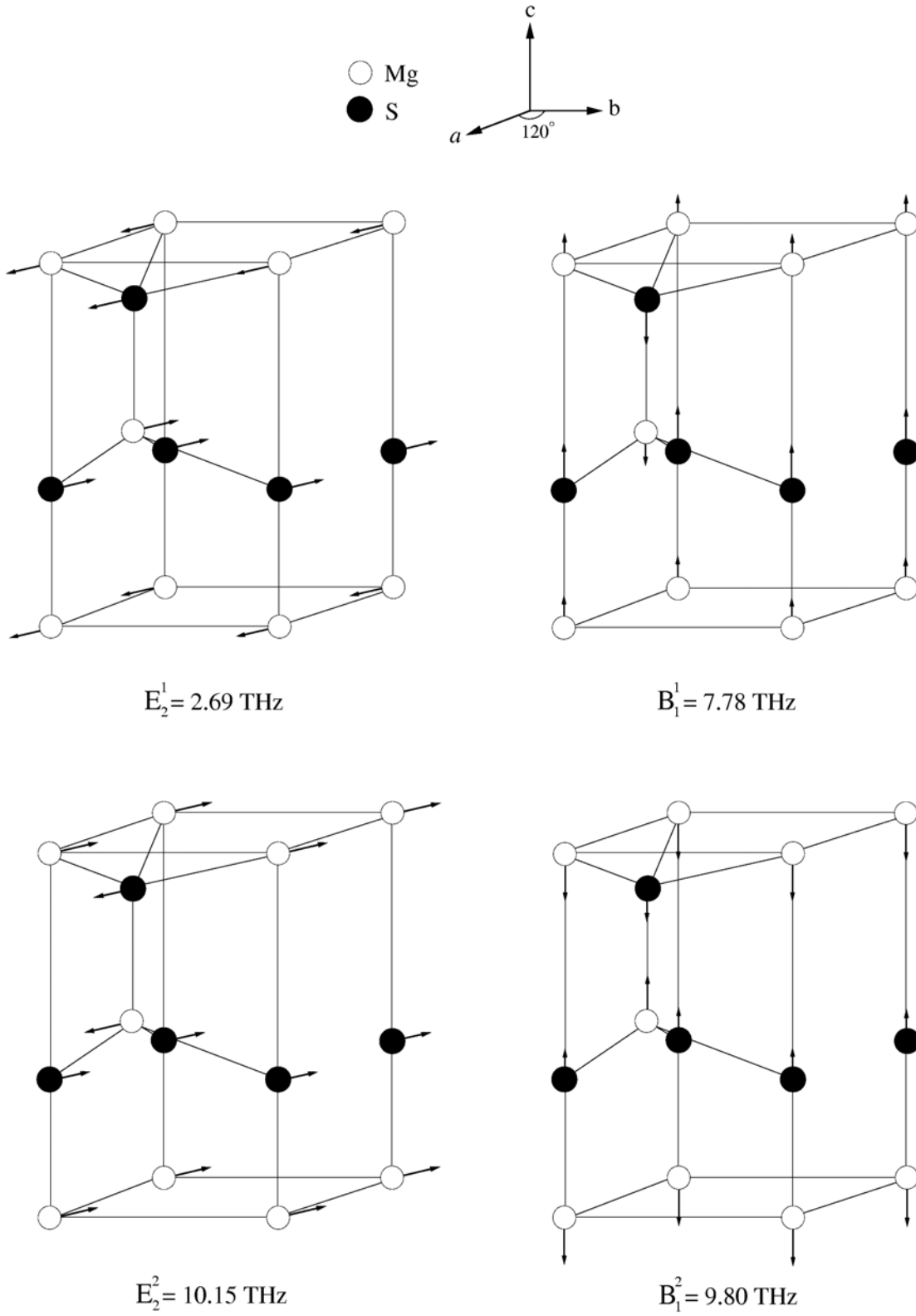
atomlarının,  $B_1^2$  fonon modunda ise Mg atomlarının titreşimlerinin etkin olduğu açıkça

görülmektedir.  $\Gamma$  noktasında açılal dispersiyon gösteren fonon modlarının atomik titreşimleri

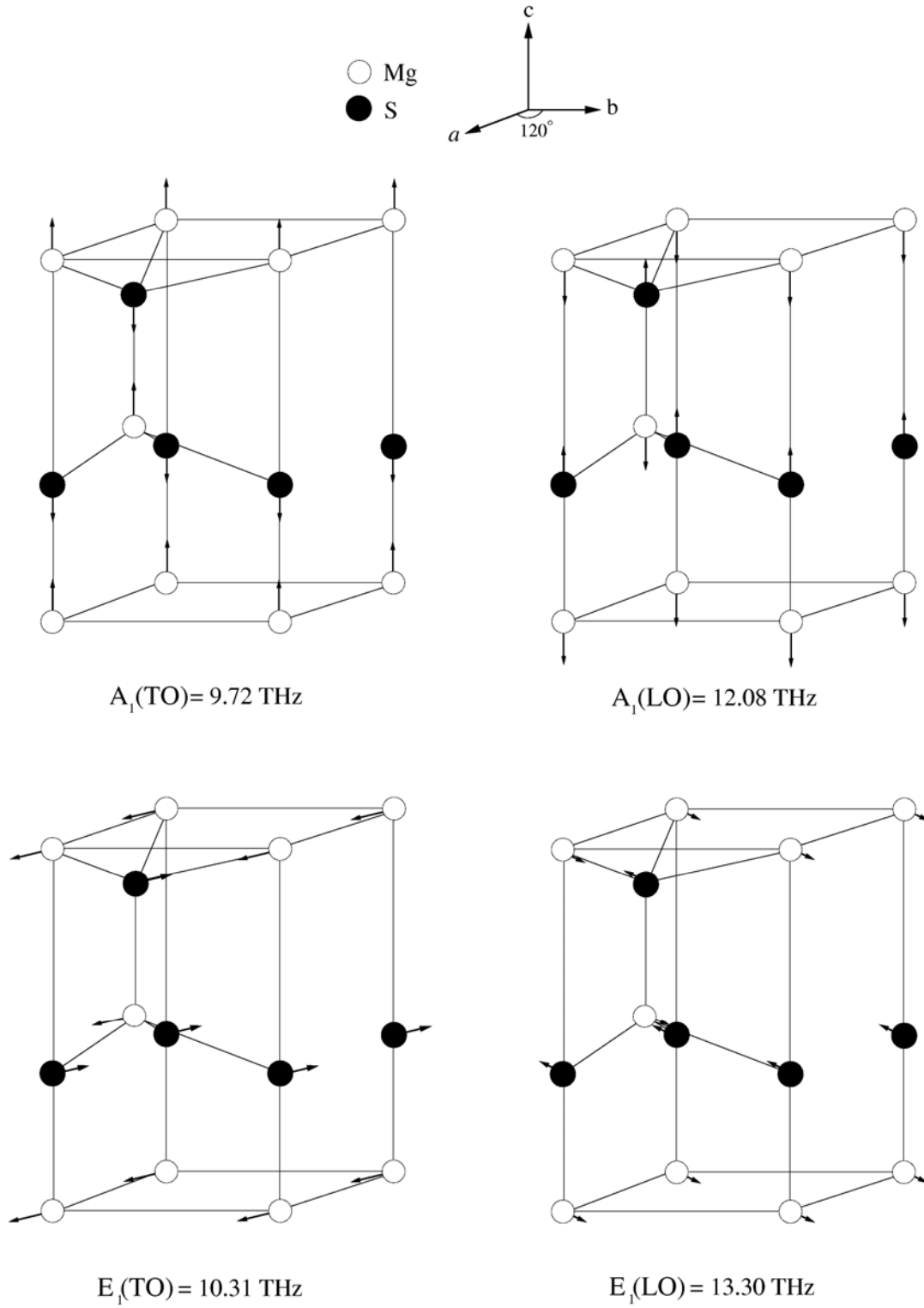
Şekil 4.16'da verilmiştir. Şekilde  $A_1(\text{TO})$  ve  $A_1(\text{LO})$  fonon modlarında,  $\{0, 0, 0\}$  ve  $\left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}$

konumlarında bulunan Mg atomları aynı yönde titreşmektedirler.

$\{0, 0, u\}$  ve  $\left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} + u\right\}$  konumlarında bulunan S atomlarının da Mg atomlarına zıt yönde olacak şekilde titreşmeleri sonucunda, fonon modunda c eksenini boyunca büyük bir polarizasyon oluşur.  $E_1(\text{TO})$  ve  $E_1(\text{LO})$  fonon modlarında da katyon ve anyonlar birbirine zıt yönlerde ve c eksenine dik titreştikleri için bu doğrultuda büyük bir polarizasyona neden olurlar.



**Şekil 4.15.** Wurtzite MgS'nin  $\Gamma$  noktası açılal dispersiyon göstermeyen fonon modlarının atomik titreşimleri

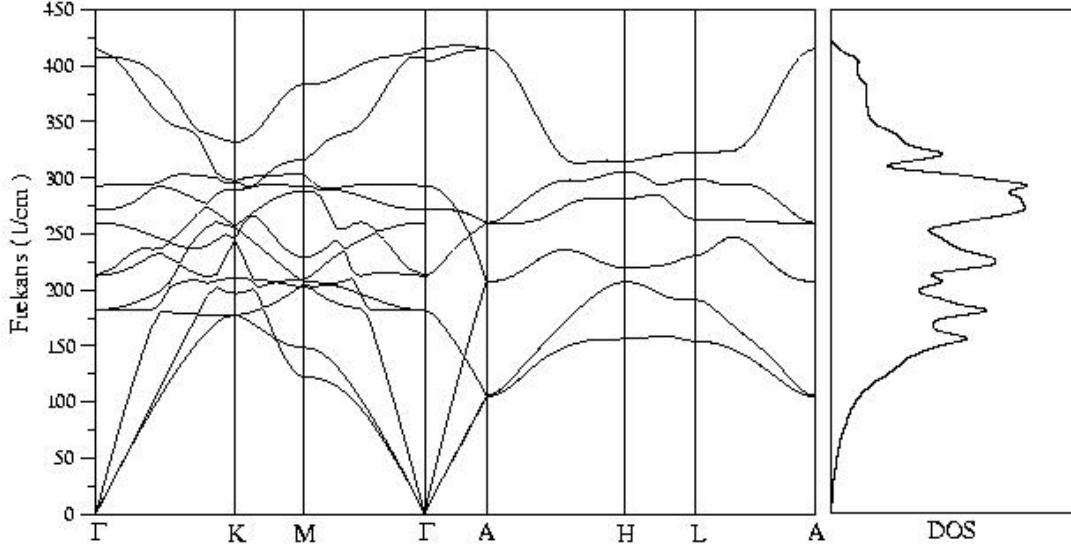


**Şekil 4.16.** Wurtzite MgS'nin  $\Gamma$  noktası açılal dispersiyon gösteren fonon modlarının atomik titreşimleri



#### 4.2.16. MgS kristalinin nikel arsenik yapısının titreşim özellikleri

MgS'nin nikel arsenik yapısı için elde edilen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4.17'de verilmiştir. Nikel arsenik yapıda birim hücrede 4 atom olduğundan her bir dalga vektörü için 12 adet fonon modu mevcuttur.



Şekil 4.17. MgS yarıiletkeninin NiAs yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

Simetri yönlerinde fonon modlarının sayısı wurtzite yapıdaki ile aynıdır. Bu sebeple nikel arsenik yapının  $\Gamma$  noktası fonon modlarının titreşim karakterleri tıpkı wurtzite yapıda olduğu gibi belirlenmiştir. Bu modların frekansları küçükten büyüğe,  $E_2^1$  5.45 THz,  $E_2^2$  6.36 THz,  $A_1(\text{TO})$  7.79 THz,  $E_1(\text{TO})$  8.13 THz,  $B_1^1$  8.78 THz,  $A_1(\text{LO})$  12.10 THz,  $E_1(\text{LO})$  12.24 THz, ve  $B_1^2$  12.45 THz olarak belirlenmiştir. Grafikten açıkça görüldüğü gibi  $E_1(\text{LO})$  ve  $A_1(\text{TO})$  yalnızca  $\Gamma - K$  simetri yönünde mevcutken,  $E_1(\text{TO})$  ve  $A_1(\text{LO})$  ise yalnızca  $\Gamma - A$  yönünde görülmektedir.  $\Gamma - A$  yönünde ikili dejenere olan TA ve  $E_2^1$  fonon modları A simetri noktasında 3.15 THz değerinde dörtlü dejenere olmaktadır.

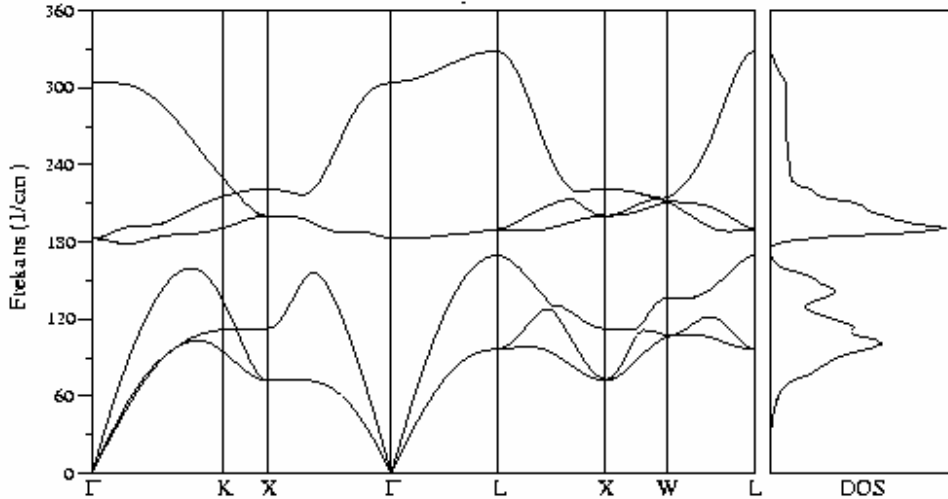
$B_1^1$  fonon modu da  $\Gamma - A$  yönünde aşırı bir azalma göstererek 6.21 THz frekansında A simetri noktasında LA fonon modu ile dejenere olur.  $\Gamma$  noktasında birbirlerinden 2 THz farklı olan  $E_2^2$  ve  $E_1(\text{TO})$  fonon modları dispersiyon göstererek A noktasında dejenere olmaktadır. Bu yöndeki en yüksek frekanslı  $B_1^2$  ve  $A_1(\text{LO})$  fonon modları da A noktasında aynı frekans değerine sahiptirler.

Wurtzite MgS'nin fonon dispersiyon grafiğinde (Şekil 4.14) optik fononlar arasında bir boşluk olmasına rağmen burada görülmektedir. Bunun nedeni katyon ve anyon kütlelerinin yakınlığından daha çok yarıiletkenin bağ yapısının her iki faz için farklı olmasıdır.

Fonon dağılımı grafiğinde yüksek frekanslı boyuna fonon modunun büyük bir dispersiyon gösterdiği görülmektedir. Bu sebeple durum yoğunluğu eğrisinin bu bölgesinde keskin bir pik görülmektedir. Yalnızca fonon modunun H – L yönündeki dağılımının az olması dolayısıyla durum yoğunluğu eğrisinde 9.70 THz civarında bir pik bulunmuştur.

#### 4.2.17. MgSe kristalinin kayatuzu yapısının titreşim özellikleri

Şekil 4.18'de MgSe kristalinin NaCl yapısına ait fonon dağılımı görülmektedir. NaCl yapıda birim hücrede iki iyon olduğu için tüm dalga vektörü değerlerinde 3 akustik ve 3 optik olmak üzere toplam 6 titreşim modu vardır. Yalnız  $\Gamma - X$  [001] ve  $\Gamma - L$  [111] yönlerinde enine optik ve enine akustik modların dejenere olması sonucu iki akustik ve iki optik mod vardır.

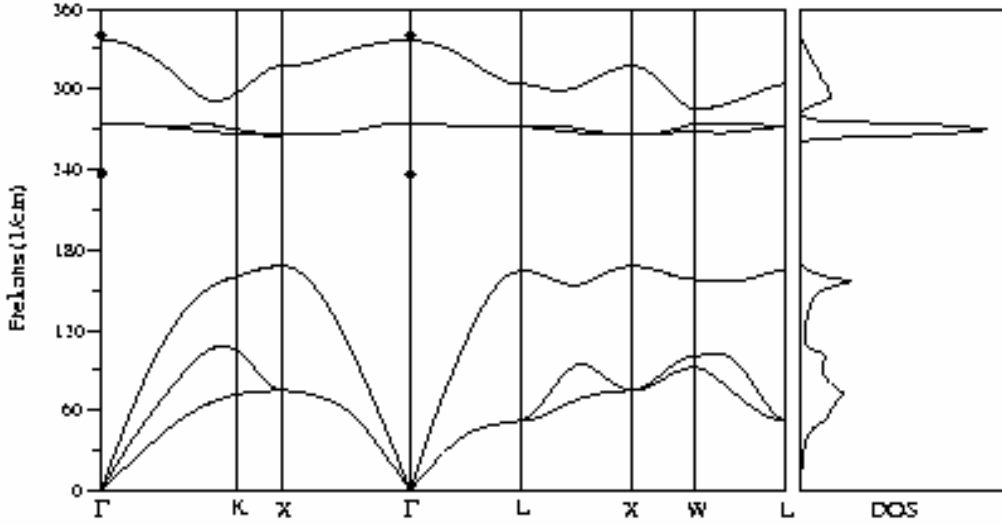


Şekil 4.18. MgSe yarıiletkeninin NaCl yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

Şekil 4.18'de görüldüğü gibi  $\Gamma$  noktasında enine optik mod ile boyuna optik mod ayrılmıştır. Bu durum iyonik kristallerin önemli bir özelliğidir. Ayrıca fonon dispersiyon eğrisinde [100] ve [110] yönlerinde LO fonon kolunun büyük bir dispersiyon gösterdiği görülür. Bu durum NaCl yapıdaki atom dizilişleri ve atomik bağlanma ile ilişkilidir. Burada fonon dispersiyonunda akustik ve optik fonon dalları arasında bir boşluk olduğu görülür. Bunun sebebi Mg ve Se atomları arasındaki kütle farkındandır. Bu durum MgS'nin NaCl yapısında görülmektedir. Fonon dispersiyon eğrisinde TO fonon modunun MgS'ye göre çok daha az dispersiyon gösterdiği görülmektedir. Bu durum fonon durum yoğunluğu eğrisinde belirgin bir pik olarak kendisini gösterir.

#### 4.2.18. MgSe kristalinin çinko sülfür yapısının titreşim özellikleri

Şekil 4.19'da MgSe yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon dağılımı ve durum yoğunluğu eğrileri verilmiştir. Şekilde dolu elmaslar olarak gösterilen deneysel fonon sonuçlarının (  $237 \text{ cm}^{-1}$  (TO) ve  $340 \text{ cm}^{-1}$  (LO))(HUANG, 1995), teorik sonuçlarla (  $274 \text{ cm}^{-1}$  (TO) ve  $337 \text{ cm}^{-1}$  (LO)) uyum içinde olduğu görülür. NaCl yapıdan farklı olarak burada optik ve akustik fonon kolları arasında daha büyük bir boşluk vardır. Bu ZnS yapının dörmlü (tetrahedral) bağ yapısı ile ilişkilidir.



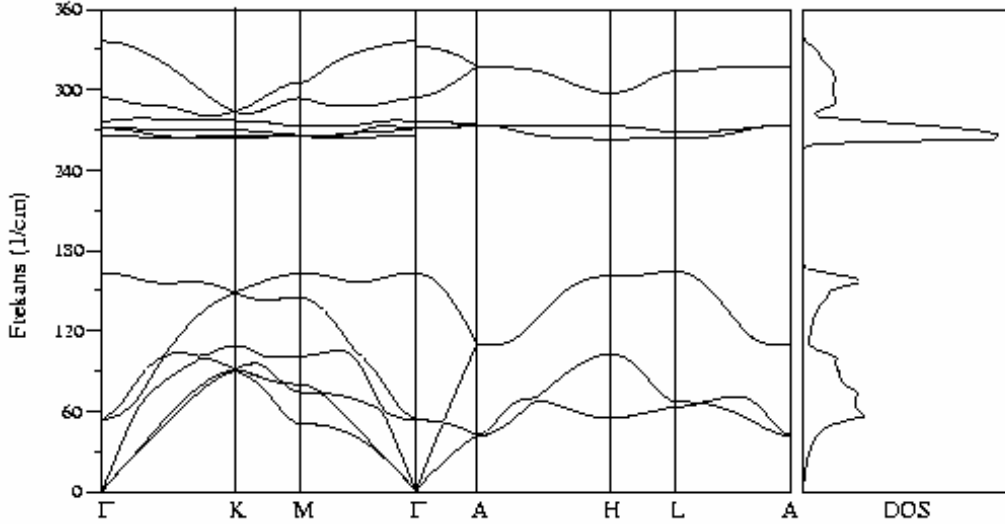
Şekil 4.19. MgSe yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri. Koyu eğriler hesaplanan *ab initio* sonuçlarını, dolu elmaslar ise deneysel sonuçları gösterir(HUANG, 1995),

MgSe yarıiletkeninin NaCl ve ZnS yapılarının fonon frekansları arasındaki bir diğer fark ise enine optik fonon kolunun ZnS yapıda [100] ve [111] yönlerinde bir dağılım göstermemesidir. Böylece durum yoğunluğu eğrisinde belirgin bir pik oluşur.

#### 4.2.19. MgSe kristalinin wurtzite yapısının titreşim özellikleri

MgSe kristalinin wurtzite yapısının titreşim özellikleri daha önce deneysel ve teorik olarak incelenmemiştir. Şekil 4.20'de MgSe yarıiletkeninin wurtzite yapısı için fonon dağılımı ve durum yoğunluğu eğrileri verilmiştir. Wurtzite yapıda birim hücrede 4 atom olduğundan her bir dalga vektörü için 12 adet fonon kolu mevcuttur.  $\Gamma$  - A yönünde dejenere olmuş dört adet boyuna ve dört adet de enine olmak üzere 8 fonon kolu mevcuttur. A noktasında enine fonon modlarının dörmlü, boyuna fonon modlarının da ikili dejenere olması sonucu 4 fonon modu vardır. A-H, H-L ve L-A yönlerinde 6 fonon kolu,  $\Gamma$  - K ve  $\Gamma$  - M yönlerinde dejenere olmadığı için 12 fonon kolu görülmektedir.

Buradaki en üst fonon kolunun MgS'nin wurtzite yapısına göre daha az dispersiyon gösterdiği görülür. Bu durum Mg ile Se arasındaki kütle farkının daha büyük olmasından ve Mg atomunun tetrahedral kuvvetlerin izotropik alanında hareketinden kaynaklanmaktadır.



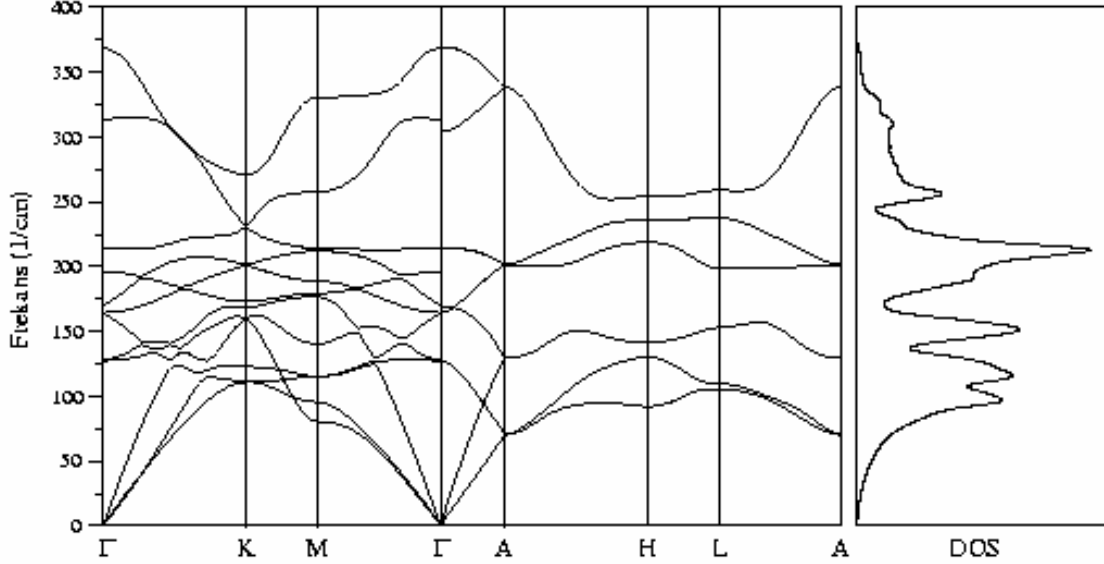
Şekil 4.20. MgSe yarıiletkeninin Wurtzite yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

Fonon dağılımının son derece az olduğu L-A yönünde,  $310 \text{ cm}^{-1}$  frekansı değerinde durum yoğunluğu eğrisinin bir pik oluşturduğu görülmektedir. Bu pik MgS'de en üst optik modun her yönde büyük bir dispersiyon göstermesi dolayısıyla görülmemektedir. A-H ve L-A yönlerinde boşluk bölgesinin üstündeki ilk ve ikinci fonon modlarının küçük dispersiyonu dolayısıyla  $265 \text{ cm}^{-1}$ 'de durum yoğunluğu eğrisinde bir pik görülmektedir. Boşluk bölgesinin altındaki iki pik H-L yönündeki akustik fonon modunun dispersiyonunun son derece az olmasından kaynaklanmaktadır.

#### 4.2.20. MgSe kristalinin nikel arsenik yapısının titreşim özellikleri

MgSe kristalinin NiAs yapısının titreşim özellikleri de daha önce deneysel ve teorik olarak incelenmemiştir. Şekil 4.21'de MgSe yarıiletkeninin NiAs yapısı için fonon dağılımı ve durum yoğunluğu eğrileri verilmiştir. NiAs yapıda birim hücrede 4 atom olduğundan her bir dalga vektörü için 12 adet fonon kolu mevcuttur.  $\Gamma - K$  ve  $\Gamma - M$  yönlerinde dejenerelik olmadığı için bu yönlerde fonon modu sayısı 12'dir.  $\Gamma - A$  yönünde dejenere olmuş dört adet boyuna ve dört adet de enine olmak üzere 8 fonon kolu mevcuttur. Burada dikkati çeken bir nokta ise boyuna akustik (LA) fonon kolunun frekans değerinin, enine optik (TO) fonon kolunun frekans değerinden daha yüksek olmasıdır. NiAs yapı için bu durum altılı (oktahedral) bağ yapısı ile açıklanabilir. Aynı durum NaCl yapıda da görülmektedir. A-H, H-L ve L-A yönlerinde dejenerelikten dolayı 6 fonon kolu mevcuttur. NiAs fazının fonon dağılımı eğrisinde akustik ve

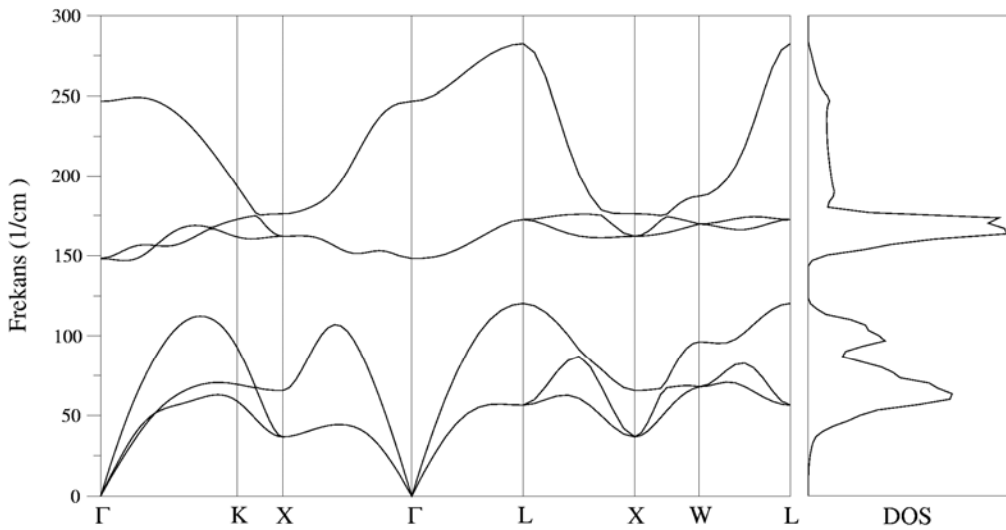
optik frekanslar arasında bir boşluk bulunmamaktadır. Bu durum MgS ve MgSe yarıiletkenlerinin her ikisinde de mevcuttur. Aynı durum bu materyallerin wurtzite yapısı için söz konusu değildir.



Şekil 4.21. MgSe yarıiletkeninin NiAs yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

#### 4.2.21. MgTe kristalinin kayatzu yapısının titreşim özellikleri

Şekil 4.22'de MgTe kristalinin NaCl yapısına ait fonon dağılımı görülmektedir. NaCl yapıda birim hücrede iki iyon olduğu için tüm dalga vektörleri değerlerinde 3 akustik ve 3 optik olmak üzere toplam 6 titreşim modu vardır. Yalnız  $\Gamma - X$  [001] ve  $\Gamma - L$  [111] yönlerinde enine optik ve enine akustik modların dejenere olması sonucu iki akustik ve iki optik mod vardır.

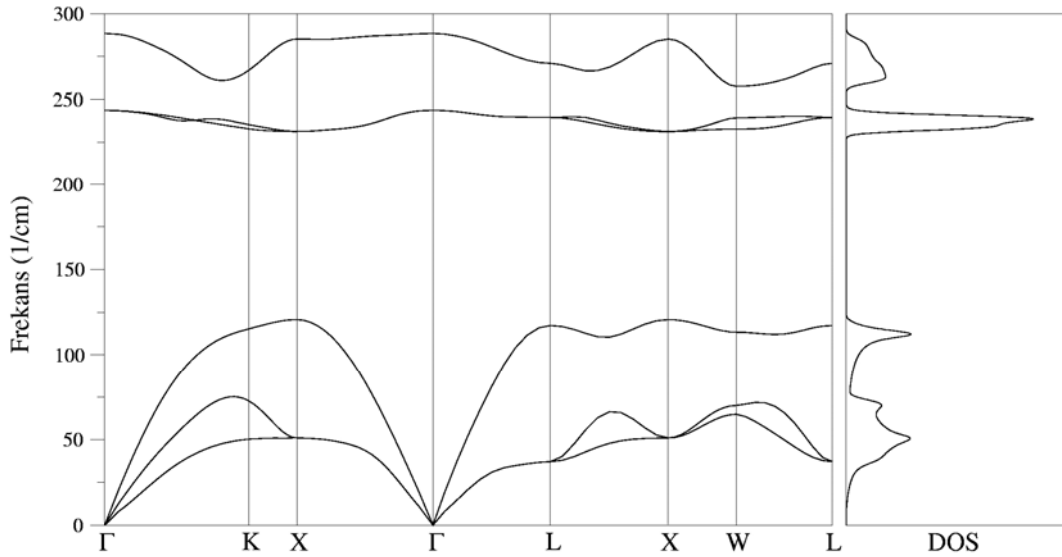


Şekil 4.22. MgTe yarıiletkeninin NaCl yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

Şekil 4.22'de görüldüğü gibi  $\Gamma$  noktasında enine optik mod ile boyuna optik mod ayrılmıştır. Bu durum iyonik kristallerin önemli bir özelliğidir. Ayrıca fonon dispersiyon eğrisinde [100] ve [110] yönlerinde LO fonon kolunun büyük bir dispersiyon gösterdiği görülür. Bu durum NaCl yapıdaki atom dizilişleri ve atomik bağlanma ile ilişkilidir. Fonon dispersiyonunda akustik ve optik fonon dalları arasındaki boşluğun MgSe'nin aynı fazındaki boşluktan daha büyük olduğu görülür. Bu durum Mg ile Te iyonları arasındaki kütle farkının çok daha büyük (5,24 kat) olması ile açıklanabilir. Aynı durum MgS'de Mg ve S iyonlarının kütlelerinin birbirine yakın olması dolayısıyla görülmemektedir. Fonon durum yoğunluğu eğrisinde açıkça 3 pik görülmektedir. Bunlar sırasıyla enine akustik, boyuna akustik ve enine optik fonon modlarından kaynaklanmaktadır. Boyuna optik fonon modu büyük bir dispersiyon gösterdiği için durum yoğunluğu eğrisinde bir pik oluşmamaktadır.

#### 4.2.22. MgTe kristalinin çinko sülfür yapısının titreşim özellikleri

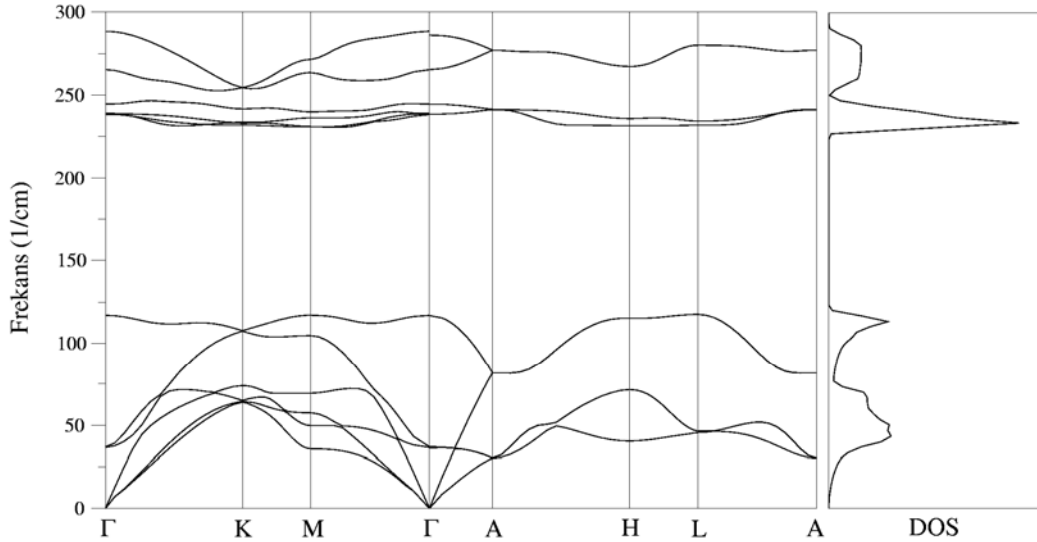
Şekil 4.23'de MgTe yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon dağılımı ve durum yoğunluğu eğrileri verilmiştir. NaCl yapıdan farklı olarak burada optik ve akustik fonon kolları arasında büyük bir boşluk vardır. Bu ZnS yapının dörmlü (tetrahedral) bağ yapısı ile ilişkilidir. Bu iki yapının fonon frekansları arasındaki bir diğer fark ise enine optik fonon kolunun ZnS yapıda [100] ve [111] yönlerinde bir dağılım göstermemesidir. Böylece durum yoğunluğu eğrisinde belirgin bir pik oluşur.



Şekil 4.23. MgTe yarıiletkeninin ZnS yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

#### 4.2.23. MgTe kristalinin wurtzite yapısının titreşim özellikleri

MgTe kristalinin wurtzite yapısının titreşim özellikleri daha önce deneysel ve teorik olarak incelenmemiştir. Şekil 4.24'te MgTe yarıiletkeninin wurtzite yapısı için fonon dağılımı ve durum yoğunluğu eğrileri verilmiştir. Wurtzite yapıda birim hücrede 4 atom olduğundan her bir dalga vektörü için 12 adet fonon kolu mevcuttur.



Şekil 4.24. MgTe yarıiletkeninin Wurtzite yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

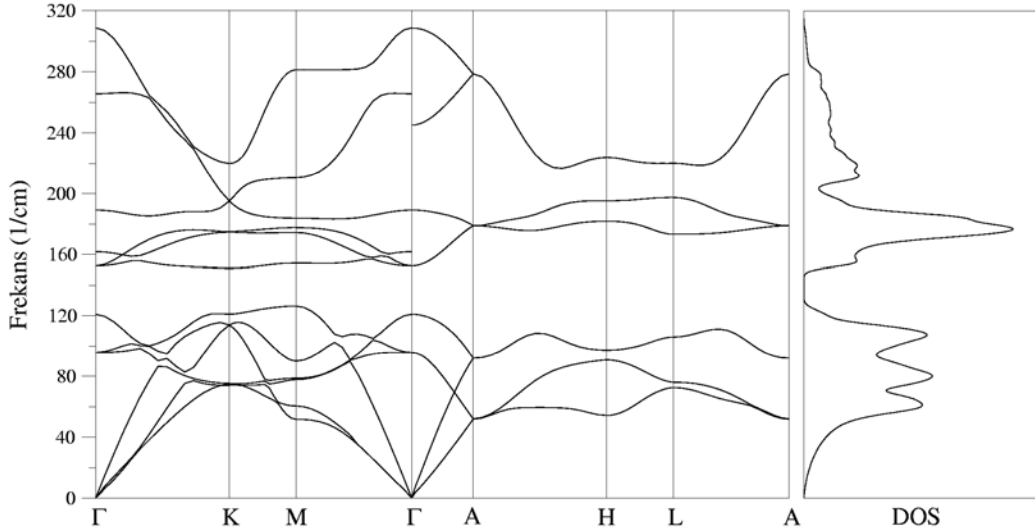
$\Gamma$  - A yönünde dejenere olmuş dört adet boyuna ve dört adet de enine olmak üzere 8 fonon kolu mevcuttur. A noktasında enine fonon modlarının dördü, boyuna fonon modlarının da ikili dejenere olması sonucu 4 fonon modu vardır. A-H, H-L ve L-A yönlerinde 6 fonon kolu,  $\Gamma$  - K- M ve  $\Gamma$  - M yönlerinde dejenerelik olmadığı için 12 fonon kolu görülmektedir.

Burada en üstteki optik fonon modu Mg ve Te atomları arasındaki büyük kütle farkı etkisiyle Mg atomunun iç tetrahedral kuvvetlerin izotropik alanında hareketinden kaynaklanmaktadır. Bu sebeple en üst optik fonon modu MgS ve MgSe'dekine göre daha az dispersiyon gösterir.

Fonon dispersiyon eğrisinde en üstteki optik fonon modunun daha az dispersiyona sahip olmasıyla görülen pik MgS'de dispersiyonun fazla olması dolayısıyla görülmemektedir. Bunun yanı sıra durum yoğunluğu eğrisinde, boşluk bölgesinin hemen üstündeki birinci ve ikinci fonon modlarının A-H ve L-A yönlerinde daha az dispersiyon göstermelerinin bir sonucu olarak  $230 \text{ cm}^{-1}$  frekansında son derece keskin bir pik görülmektedir. Buna ilaveten boşluk bölgesinin altında açıkça iki pik daha görülmektedir. Bu pikler sırasıyla boyuna akustik fonon modlarının  $\Gamma$  - K ve H-L yönlerinde ve düşük enerjili akustik fonon modlarının da H-L yönünde son derece az dispersiyon göstermesinden kaynaklanır.

#### 4.2.24. MgTe kristalinin nikel arsenik yapısının titreşim özellikleri

MgTe kristalinin NiAs yapısının titreşim özellikleri de daha önce deneysel ve teorik olarak incelenmemiştir. Şekil 4.25'te MgTe yarıiletkeninin NiAs yapısı için fonon dağılımı ve durum yoğunluğu eğrileri verilmiştir. NiAs yapıda birim hücrede 4 atom olduğundan herbir dalga vektörü için 12 adet fonon kolu mevcuttur.



Şekil 4.25. MgTe yarıiletkeninin NiAs yapısı için fonon spektrumu ve durum yoğunluğu eğrileri.

$\Gamma$  - K - M ve  $\Gamma$  - M yönlerinde dejenerelik olmadığı için bu yönlerde fonon modu sayısı 12'dir.  $\Gamma$  - A yönünde dejenere olmuş dört adet boyuna ve dört adet de enine olmak üzere 8 fonon kolu mevcuttur. A-H, H-L ve L-A yönlerinde dejenerelikten dolayı 6 fonon kolu mevcuttur.

Fonon dispersiyon eğrisinde optik ve akustik fonon kolları arasında bir boşluk görülmektedir. Bu durum MgS ve MgSe yarıiletkenlerinin NiAs fazında görülmemektedir. Bu boşluk MgTe'nin wurtzite yapısı ile karşılaştırıldığında son derece küçüktür. Bu durum bu yapıdaki atomik bağlanmanın farklılığından kaynaklanmaktadır.

Burada dikkati çeken bir diğer nokta ise boyuna akustik (LA) fonon kolunun frekans değerinin, enine optik (TO) fonon kolunun frekans değerinden daha yüksek olmasıdır. NiAs yapı için bu durum altılı (oktahedral) bağ yapısı ile açıklanabilir. Aynı durum NaCl yapıda da görülmektedir. Fonon dispersiyon eğrisindeki en üst fonon modunun frekans değerinin, aynı maddenin NaCl yapısındaki en üst fonon modunun frekans değerine yakın olduğu görülür.



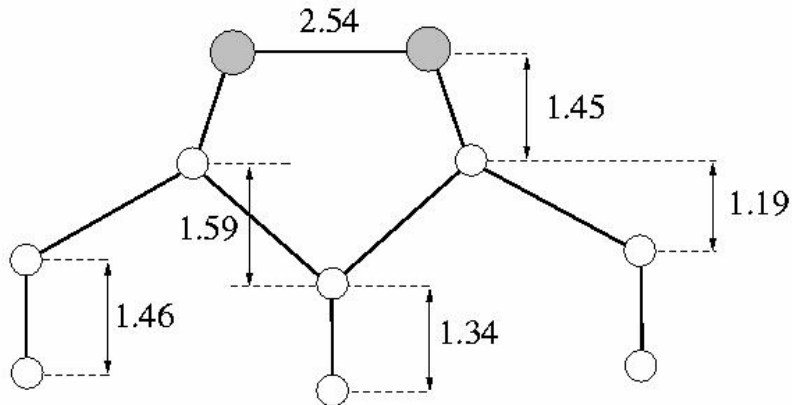
### 4.3. Ge(001)(2x1)/As yüzeyinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerin incelenmesi

#### 4.3.1. Giriş

As, Sb, Bi gibi grup V elementlerinin Ge(001) ve Si(001) yüzeyleriyle etkileşimleri, farklı maddeler kullanılarak yapılan kristal büyütme işleminde önemli rol oynar. Bu etkileşimleri anlamak için bazı deneysel ve teorik çalışan araştırmacılar, katkılı yüzeylerin taban durumu özellikleri üzerinde çalışmaktadırlar. Bu katkılı yüzeylerin yapısal ve elektronik özellikleri çeşitli deneysel ve teorik gruplar tarafından açıklanmıştır(LOHEIMEIER, 1992, JENKINS, 1997, GAY, 1998, MANKEFORS, 1999-a, MANKEFORS, 1999-b). Bununla birlikte bu tür maddelerin titreşim özellikleri neredeyse hiç bilinmemektedir. Bu tür bir araştırmanın yapılması, yüzey yapılandırmasının, faz geçişlerinin ve uyarılmış titreşim seviyelerinin dengeye nasıl geldiğinin anlaşılması konularında çok faydalı olacaktır. Bu nedenle bu çalışmada arsenik katkılanmış Ge(001)(2x1) yüzeyinin yapısal ve elektronik özelliklerinin yanı sıra titreşim özellikleri de sunulmuştur. Elde edilen sonuçlar daha önceki katkısız Ge(001)(2x1) için bulunan sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

#### 4.3.2. Ge(001)/As(2x1) yüzeyinin yapısal özellikleri

Ge(001) yüzeyine As katkılı olduğunda oluşan yüzey atomik denge geometrisi, bir çift As atomunun yüzeyin birinci seviyesinde paralel bir şekilde yer almalarıyla oluşur. Bunun sebebi (2x1) periyodikliğidir. Bu yapı, As katkılanmış Ge(001)(2x1) yüzeyinin en üst dört seviyesi için atomik denge geometrisini gösteren Şekil 4.26'da açıkça bellidir.

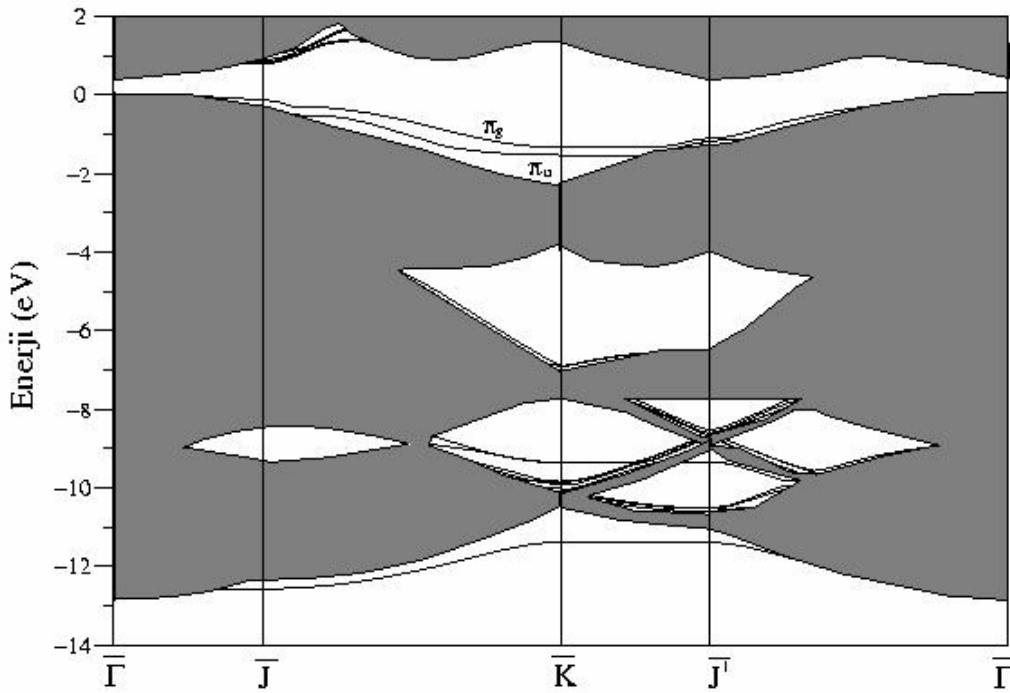


Şekil 4.26. Ge(001)/As(2x1) yüzeyi için hesaplanan atomik denge geometrisinin yandan görünüşü.

Bu çalışmada en üstteki As atomları arasındaki bağın uzunluğu 2.54 Å bulunmuştur. Bu sonuç, daha önce bulunan 2.50 Å teorik değeri ile çok iyi bir uyum göstermektedir(MANKEFORS, 1999-a). Ayrıca elde edilen bu değer, As katkılanmış Si(001) yüzeyi için bulunan bağ uzunluğu ile aynı olması sebebiyle de ilginçtir (GAY, 1998).

#### 4.3.3. Ge(001)/As(2×1) yüzeyinin elektronik özellikleri

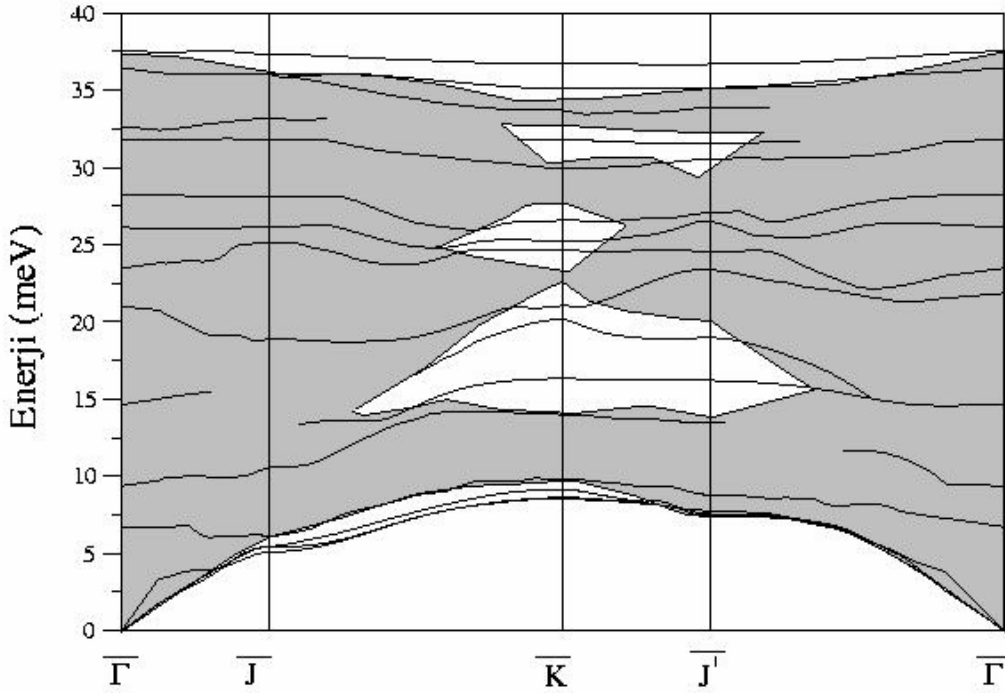
Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için hesaplanan yüzey elektronik yapısı Şekil 4.27'de sunulmuştur. Bu elektronik yapı, katkılanan her bir As atomundan gelen fazlalık elektronlar nedeniyle katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyi için elde edilen yapıdan farklıdır. Böylece yeniden bağ oluşturması gereken bir boş bağ yoktur ve en üst seviye As atomlarının simetrik yapısı, tamamen dolu olarak bulunan  $\pi_u$  (bonding: bağ yapmaya elverişli) ve  $\pi_g$  (anti-bonding:bağ yapmaya müsait olmayan) seviyeleri nedeniyle çok daha kalıcıdır.  $\pi_g$  ve  $\pi_u$  seviyelerinin arasındaki maksimum ayrılma, daha önceki teorik çalışmalarla(MANKEFORS, 1999-a, MANKEFORS, 1999-b) çok uyumlu bir şekilde 0.36 eV olarak hesaplanmıştır. Bu seviyelerin düzeni Si(001)/As(2×1) yüzeyi için elde edilen sonuçla aynıdır(GAY, 1998).



Şekil 4.27. Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için hesaplanan yüzey elektronik bant yapısı.  $\pi_g$  ve  $\pi_u$  seviyeleri sırasıyla en yüksek ve ikinci en yüksek dolu yüzey enerji bantlarını gösterir.

#### 4.3.4. Ge(001)/As(2×1) yüzeyinin titreşim özellikleri

Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için lineer tepki metodu kullanılarak yüksek simetri yönlerinde hesaplanan yüzey fonon dağılım grafiği Şekil 4.28'de görülmektedir. Bu şekilde taralı bölgeler hacim durumundaki Ge için fonon enerjilerini gösterirken, kalın çizgiler ise Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için elde edilen sonuçlardır. Öncelikle bu fonon dağılım grafiği daha önce sunulan bir ab-initio çalışması olan katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyinden elde edilen sonuçlarla(STIGLER, 1998) karşılaştırılacaktır. Böylece bu yüzeye As katkılanmasının yüzey fonon dağılım grafiğinde ne gibi değişikliklere sebep olduğu bulunabilir. Şekil 11'den de görüldüğü gibi bu yüzey için hesaplanan en yüksek yüzey optik fonon modu, yüzey Brillouin Bölgesi boyunca neredeyse düz bir çizgi şeklindedir. Bu mod katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyi için bulunan fonon dağılım grafiğinde ise fark edilir bir şekilde dağılım göstermektedir(STIGLER, 1998). Fonon dağılım grafiğinde göze çarpan ikinci farklılık ise Ge(001)(2×1) yüzeyine As katkılanmasının, grafiğin en aşağısında bulunan ara boşluk bölgesinde iki yeni fonon modunun oluşmasına neden olmasıdır. Üçüncü olarak  $\bar{\Gamma} - \bar{J}$  yönünde As atomunun neden olduğu yeni ve düz bir şekilde yer alan yeni fonon modları elde edilmiştir. Katkılı ve katkısız Ge(001)(2×1) yüzeylerinin fonon dağılım grafiklerindeki bu farklar, Ge ve As atomlarının kütlelerinin aynı olması nedeniyle, bu yüzeylerin yapısal ve elektronik özelliklerinin farklı olmasından kaynaklanmaktadır.



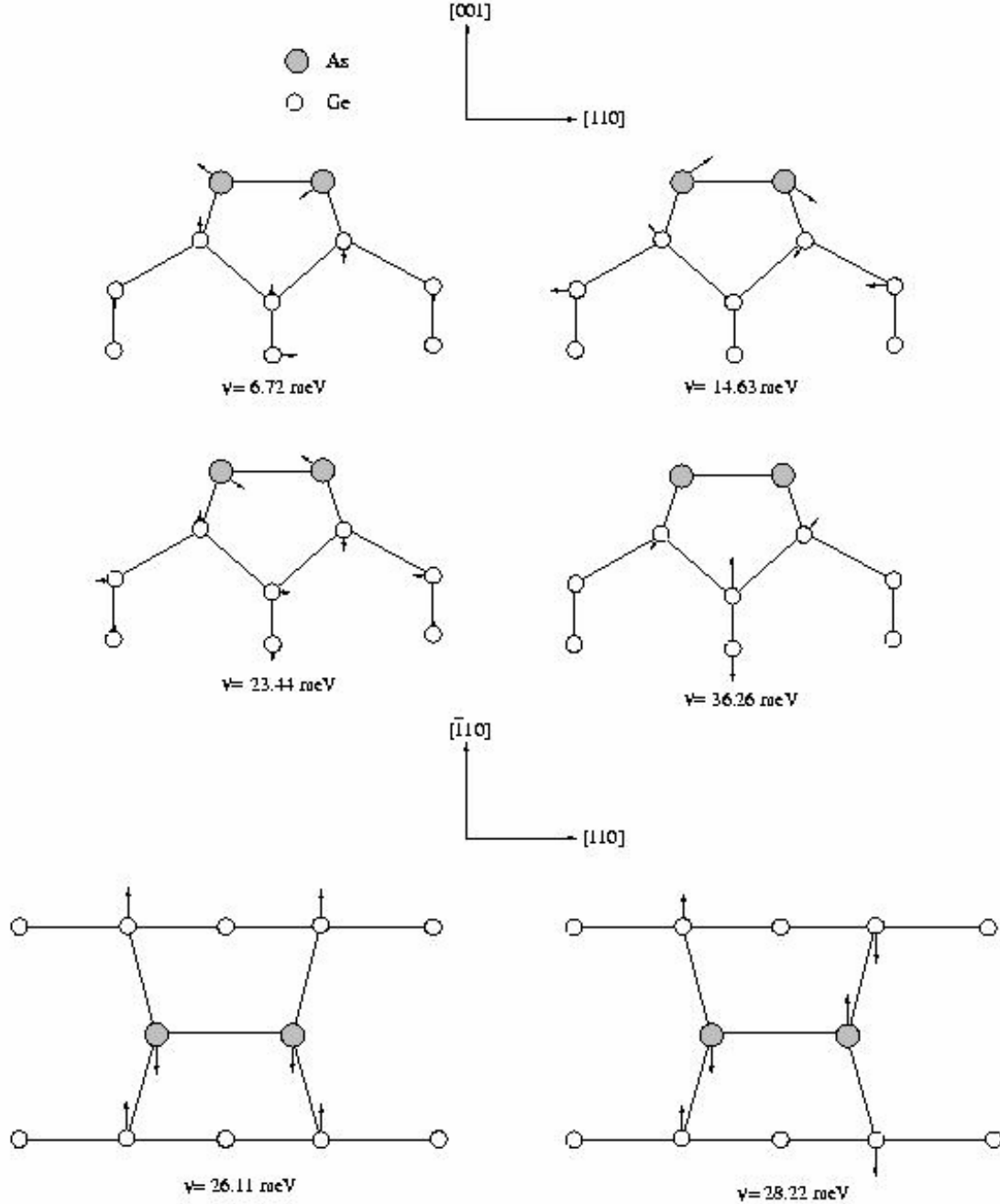
Şekil 4.28. Kalın çizgiler Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için hesaplanan yüzey fonon spektrumunu gösterirken taralı bölgeler hacim fonon spektrumunu gösterir.

Yüzey Brillouin Bölgesi merkezinde hesaplanan en önemli fonon modlarının enerjileri ve yer değiştirme şekilleri Şekil 4.29'da sunulmuştur. Enerjisi 6.72 meV olan en düşük enerjili yüzey optik fonon modu için katkı atomları (As) yüzey normali boyunca zıt yönlerde hareket etmektedirler. Şekildeki ikinci fonon modu 14.63 meV enerjiye sahiptir ve birinci seviyedeki As atomlarının yüzey normali boyunca zıt titreşimlerinden kaynaklanan bir eğilme oluştururlar. Bu mod literatürde birinci seviye As-As sallanma modu (dimer rocking mode) olarak bilinir. Bu modun enerjisi katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyindeki Ge-Ge sallanma modunun enerjisiyle karşılaştırıldığında biraz farklıdır. Bunun nedeni As ve Ge atomlarının kütlelerinin biraz farklı olması ve birinci seviyedeki bağın katkılı yüzey için düz iken katkısız yüzey için eğimli olmasıdır. Bu modu Sb katkılı Ge(001)(2×1) yüzeyinden elde edilen Sb-Sb sallanma moduyla da kıyaslamak faydalı olacaktır. Daha önceki hesaplamalarda Sb-Sb sallanma modunun enerjisi 5.83 meV bulunmuştur(TÜTÜNCÜ, 2004). İki modun enerjileri arasındaki bu fark, As ve Sb atomlarının kütle farkları ve iki katkılı sistemin geometrik yapılarının farklı olması ile açıklanabilir. Şekilde görülen diğer bir mod ise enerjisi 23.44 meV olan ve yüzey As atomlarının hem [001] hem de [110] yönlerinde titreşimlerinden oluşan bir moddur. Daha önceki katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyi için yapılan hesaplamalarda(STIGLER, 1998) bu enerjiye sahip bir mod olmadığından, bu modun katkılanan As atomlarından kaynaklandığı söylenebilir.

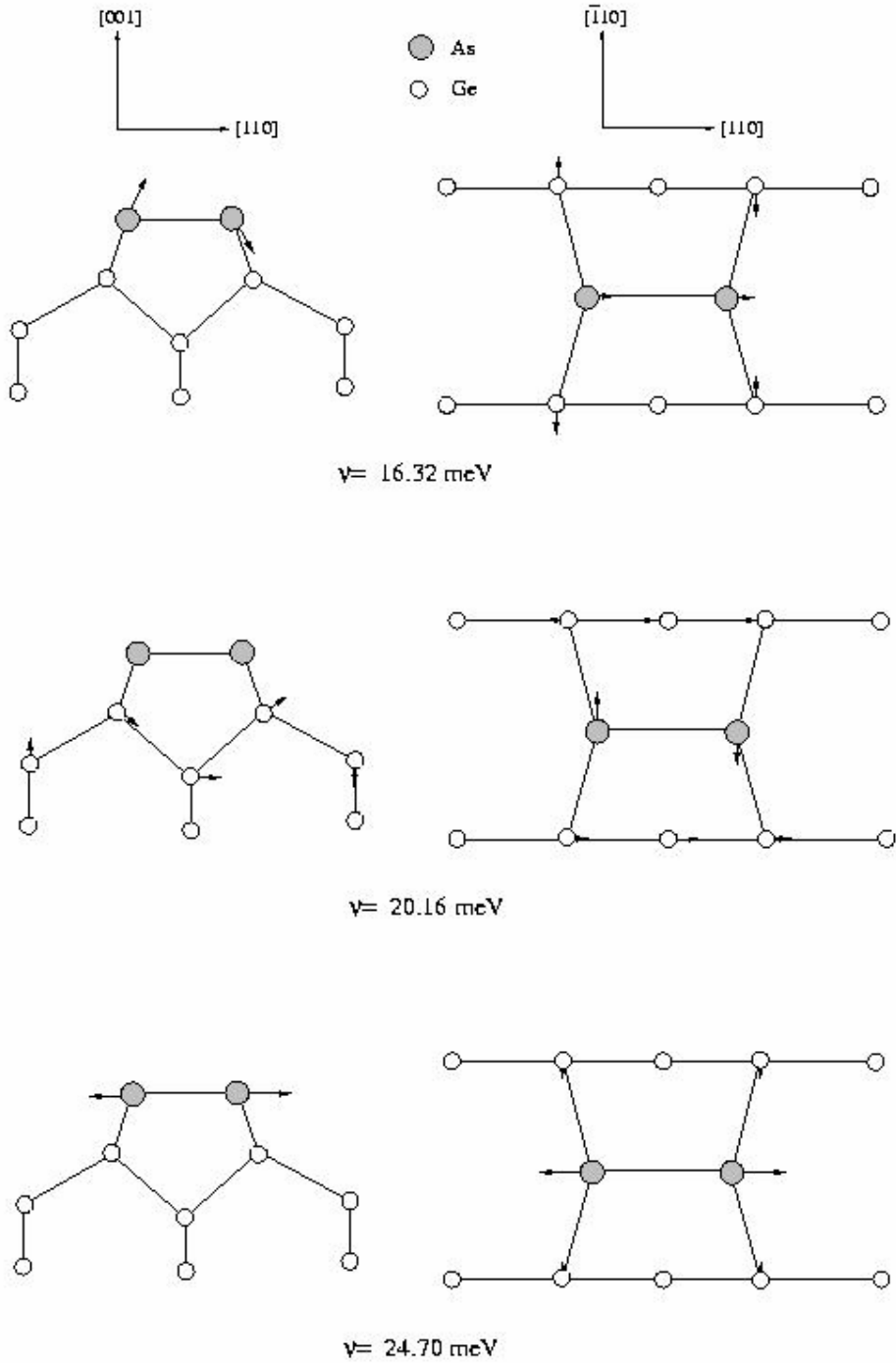
Enerjileri 26.11 meV ve 28.22 meV olan iki mod  $\bar{\Gamma} - \bar{J}$  yönü boyunca hiçbir dağılım göstermemektedirler. Bu modlar katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyi için bulunamamıştır(STIGLER, 1998). Bu modlardan ilki As atomlarının  $[\bar{1}10]$  yönünde fakat birbirlerine zıt olarak titreşmelerinden kaynaklanan bir bağ döndürme modudur. Enerjisi 36.26 meV olan en yüksek yüzey optik fonon modu ise katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyiyle çok uyumlu bir şekilde üçüncü ve dördüncü seviye Ge atomlarının titreşimleriyle meydana gelmektedir. Böylece Ge(001)/As(2×1) için yüzey Brillouin bölgesi merkezindeki seçilmiş bazı yüzey fonon modlarının daha önceki çalışmalardan elde edilen katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyinden elde edilen sonuçlarla bazı yönlerden benzemekle birlikte farklılıklarının olduğu bulunmuştur.

Ge(001)/As(2×1) ve Ge(001)(2×1) yüzeyleri arasındaki en ilginç farklılıklar hacim fonon modlarının arasında bulunan boşluklarda yer alan boşluk fonon modlarında görülmektedir. Bu nedenle  $\bar{K}$  noktasındaki boşluk fonon modlarını incelemek gerekir. Bu simetri noktasında As katkılanmasından meydana gelen üç yeni boşluk fonon modu vardır. Enerjileri 16.32, 20.16 ve 24.70 meV olan bu modların titreşim şekilleri Şekil 4.30'da görülmektedir. Bu modlardan ilk ikisi en düşük enerjili boşluk bölgesinde bulunurken, üçüncü mod ise ikinci boşluk bölgesinde yer almaktadır. 16.32 meV enerjili mod, yüzey As atomlarının yüzey normali yönündeki sallanma hareketlerinden oluşmaktadır. Bu mod çok açık bir şekilde katkılanan As atomlarından kaynaklanmaktadır. Enerjisi 20.16 meV olan diğer mod yüzey atomlarının  $[\bar{1}10]$  yönünde birbirlerine zıt olarak titreşmelerinden kaynaklanan bir bağ döndürme modudur. En yüksek

enerjili boşluk fonon modu ise As atomlarının  $[110]$  doğrultusunda bağı gerecek şekilde hareket etmeleriyle oluşan bir moddur. Bu mod katkısız  $\text{Ge}(001)(2 \times 1)$  için aynı simetri noktasında ve 24.5 meV enerjili olarak bulunmuştur. Bu modun katkılı ve katkısız  $\text{Ge}(001)(2 \times 1)$  yüzeylerinde benzerlik göstermesinin nedeni, Ge ve As atomlarının birbirine yakın kütlelere sahip olmalarıdır.



Şekil 4.29.  $\text{Ge}(001)/\text{As}(2 \times 1)$  için yüzey Brillouin bölgesi merkezindeki seçilmiş bazı yüzey fonon modlarının yer değiştirme şekilleri.



Şekil 4.30. Ge(001)/As(2x1) yüzeyi için As katkılanmasından oluşan boşluk fonon modlarının  $\bar{K}$  simetri noktasındaki yer değiştirme şekilleri.

#### 4.4. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin atomik, elektronik ve dinamik özelliklerinin incelenmesi

##### 4.4.1. Giriş

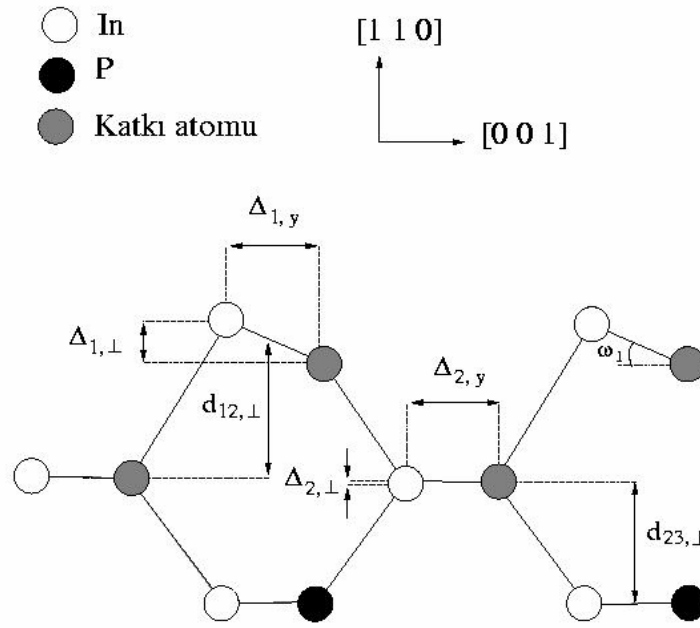
Son yıllarda, III-V(110) yüzeylerinin oluşturdukları bileşikler yüksek hızlı elektronik aletler ve uzun dalga boylu optik devrelerdeki potansiyel uygulamalarından dolayı önemli düzeyde araştırılmaya başlanmıştır. Böylece, günlük hayatta kullanılan yüksek hızlı elektronik aletler III-V(110) yüzeyleri ile kaplanmış bileşiklerin yapısal ve elektronik özelliklerine yoğun bir ilginin oluşmasını sağlamıştır. Oda sıcaklığında bileşik atomlarının III-V(110) yüzeylerindeki yer değiştirmeleri, düzenli büyütülmüş katkılama geometrisi (1x1) periyodikliği ile bulunabilir(WOODRUFF, 1987). Bu katkılama bileşik atomları ve P atomu arasında bir değişim reaksiyonunun meydana gelmesine neden olabilir(SCHRÖTER, 1994). Atomik geometri ve elektronik yapı için teorik hesaplamalar yoğunluk fonksiyon teorisini esas alan yerel yoğunluk yaklaşımı ve sözde potansiyel yöntemi kullanılarak yapılmıştır.

Son yıllarda katkısız III-V(110) yüzeyleri teorik(TÜTÜNCÜ, 1997, FRITSCH, 1995) ve deneysel olarak(NIENHAUS, 1995) incelenmiştir. Fakat Se ve Te katkılanmış III-V(110) yüzeylerinin örgü dinamiği hesaplamaları şimdiye kadar hiç kimse tarafından incelenmemiştir. Bununla birlikte dinamik özelliklerin incelenmesi, yüzey yapısının belirlenmesinde, faz geçişinde ve elektronik veya titreşim yoluyla uyarılmış seviyelerin denge durumlarının elde edilmesinde çok faydalı olacaktır.

##### 4.4.2. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin atomik özellikleri

Katkılanmış III-V(110) yüzeyinin denge durumundaki geometrik yapısı Şekil 4.31'de gösterilmiştir. InP(110) yüzeyine Se ve Te katkılı olduğunda bir yer değiştirme reaksiyonu olur ve katkı maddeleri ilk iki atomik tabakada P ile yer değiştirirler.

Şekil 4.31'den de açıkça görülebileceği gibi ilk iki tabakada katkı atomları, In atomlarına göre biraz daha aşağıda yer almaktadırlar. Bunun nedeni, elektronik yükün yüzey katkı atomundan, yüzey In atomuna doğru geçmesidir. En üst tabakadaki In-katkı atomu arasındaki bağ açısı yaklaşık  $18^{\circ}$ - $19^{\circ}$  civarında değişmektedir. Şekil 4.31'de hesaplanan yüzey denge geometrisine ait parametreler Tablo 4.15'te sunulmuştur. Bu tabloda ayrıca Se:InP(110) için daha önce hesaplanan teorik değerlerle bir karşılaştırma da yapılmıştır.



Şekil 4.31. Se ve Te katkılanmış InP(110) yüzeyinin denge geometrisi

Tablo 4.15. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzey denge geometrilerine ait parametreler ve teorik değerlerle karşılaştırılması. Tüm uzunluklar ( $\text{\AA}$ ) birimindedir.

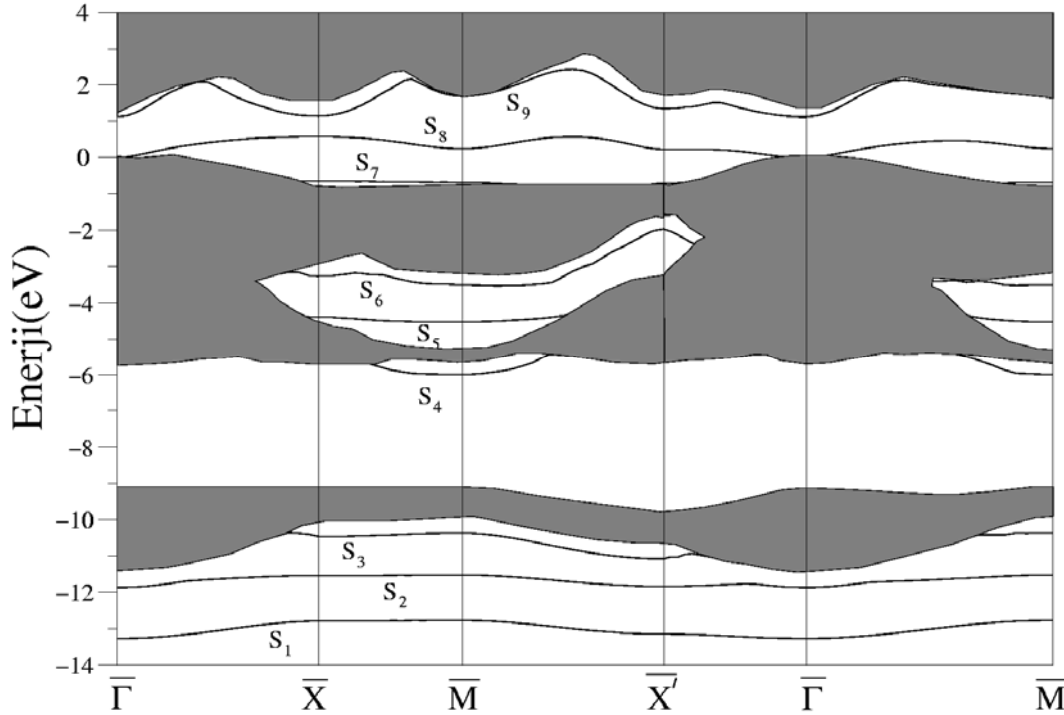
	$\Delta_{1,\perp}$	$\Delta_{2,\perp}$	$\Delta_{1,y}$	$\Delta_{2,y}$	$d_{12,\perp}$	$d_{23,\perp}$	$\omega_1$
Se:InP(110)	0.58	0.01	1.69	1.60	2.36	2.08	18.9°
<i>ab initio</i> (UMERSKI, 1995)	0.49	0.09	1.73		2.34		15.8°
Te:InP(110)	0.64	0.13	1.94	1.85	2.59	2.24	18.3°

#### 4.4.3. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin elektronik özellikleri

Se:InP(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği Şekil 4.32'de verilmiştir. Şekilde en üstteki boşluk bölgesinde üç yüzey elektronik enerji seviyesi görülmektedir. Bu enerji seviyelerinden  $S_7$  ve  $S_8$  dolu iken  $S_9$  boştur. En yüksek dolu yüzey enerji seviyesi  $S_8$ 'e In atomunun  $sp_z$  orbitali katkıda bulunurken, ikinci tabakadaki Se atomlarının  $sp_z$  orbitallerinin katkısı son derece azdır. InP(110) yüzeyinde In  $sp_z$  orbitali boştur. Fakat burada InP(110)'dan farklı olarak bu orbital dolu durumdadır. Şekilde  $S_7$ 'nin yalnızca  $\bar{X}-\bar{M}$  ve  $\Gamma-\bar{M}$  yönünde mevcut olduğu görülmektedir.



Bu dolu durumun,  $S_8$  durumunun aksine dispersiyonu son derece azdır. Şekilde içteki boşluk bölgesinde iki adet yerleşmiş yüzey elektronik enerji seviyesi bulunmuştur. Simetri yönleri boyunca  $S_5$  enerji bandı hemen hemen hiç dispersiyon göstermezken,  $S_6$  enerji bandı gözle görülebilir bir dispersiyon göstermektedir.



Şekil 4.32. Se:InP(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölge hacim elektronik spektrumunu göstermektedir.

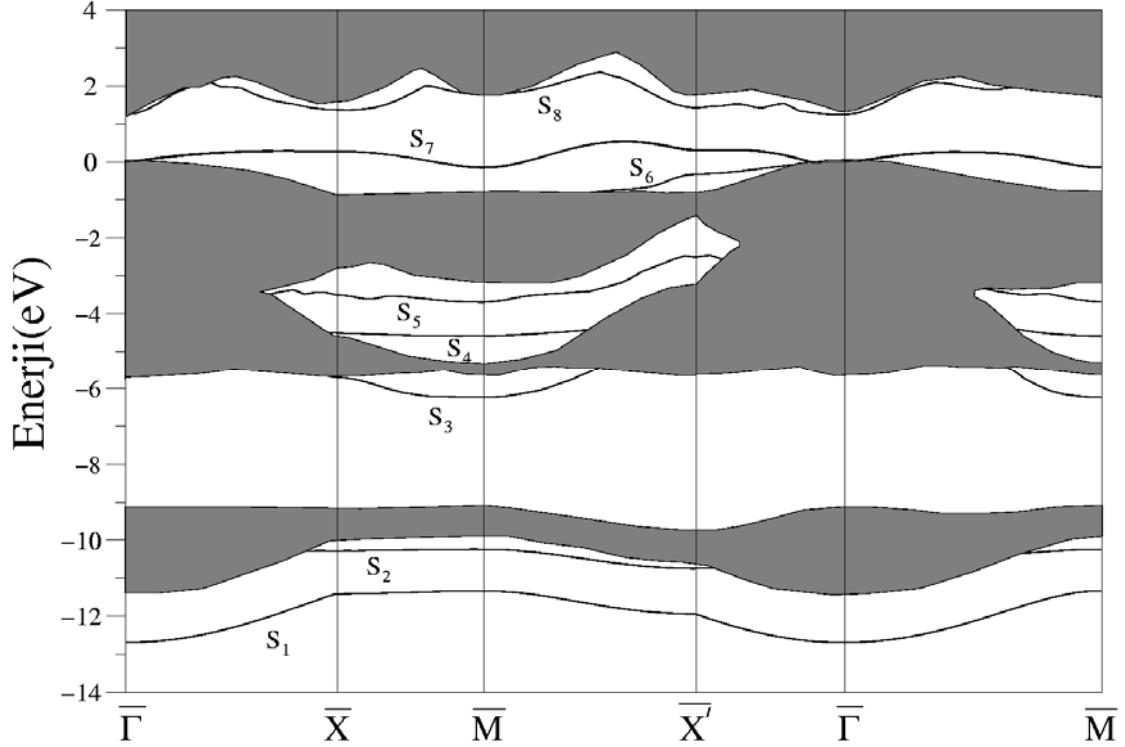
Şekilde en yüksek dolu enerji bandı ( $S_8$ ) ile boş enerji bandı ( $S_9$ ) arasındaki enerji aralığı değerleri tüm simetri yönlerinde farklılık göstermektedir. Simetri noktalarında hesaplanan enerji aralığı değerleri Tablo 4.16'da görülmektedir.

Tablo 4.16. Se:InP(110) yüzeyinin simetri noktaları enerji aralığı değerleri

Simetri noktası	$\bar{\Gamma}$	$\bar{X}$	$\bar{X}'$	$\bar{M}$
Enerji aralığı(eV)	1.12	0.56	1.12	1.45

Şekil 4.33'de Te:InP(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı görülmektedir. Grafikte en üstteki boşluk bölgesinde biri boş ikisi dolu olmak üzere üç elektronik enerji bandı bulunmaktadır. Burada en yüksek dolu enerji bandı( $S_7$ ) Se:InP(110) yüzeyine benzer şekilde neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir. Bu bölgedeki daha düşük enerjili dolu durum ise Se:InP(110) yüzeyinden farklı olarak bir dispersiyona sahiptir. Şekilde içteki boşluk bölgesinde  $S_4$  ve

$S_5$  olmak üzere iki farklı enerji bandı görülmektedir. Bunlardan  $S_4$  Se:InP(110) yüzeyine benzer şekilde hemen hemen hiç dispersiyon göstermemektedir.



Şekil 4.33. Te:InP(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölge hacim elektronik spektrumunu göstermektedir.

Şekilde en yüksek dolu enerji bandı ( $S_7$ ) ile boş enerji bandı ( $S_8$ ) arasındaki enerji aralığı değerleri tüm simetri yönlerinde farklılık göstermektedir. Simetri noktalarında hesaplanan enerji aralığı değerleri Tablo 4.17'de görülmektedir.

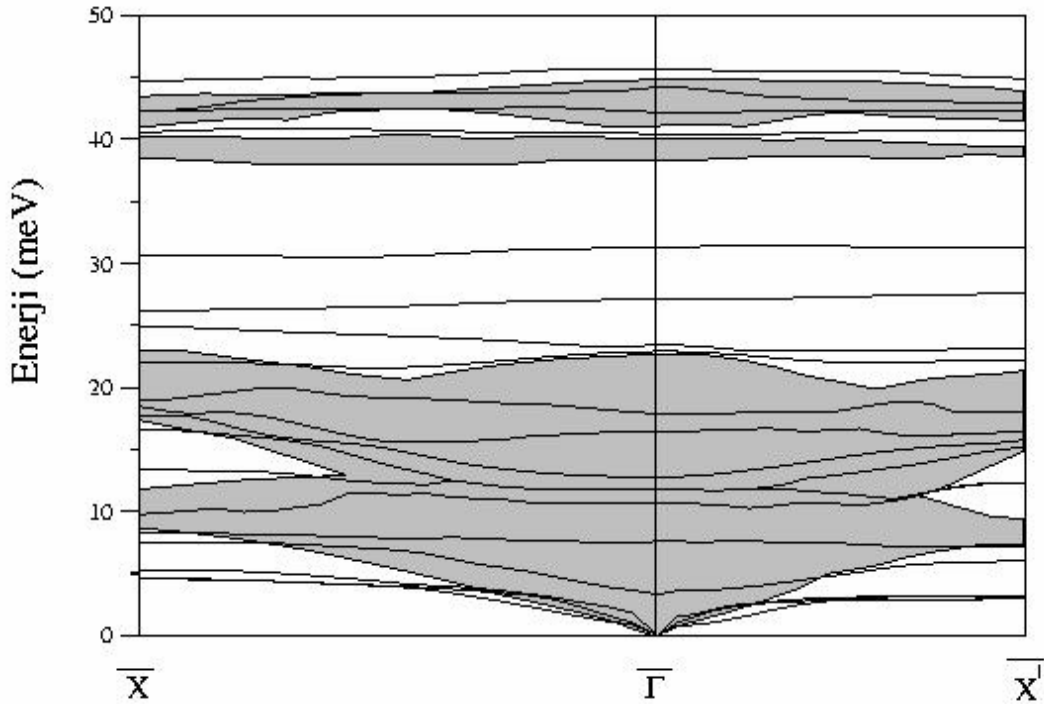
Tablo 4.17. Te:InP(110) yüzeyinin simetri noktaları enerji aralığı değerleri

Simetri noktası	$\bar{\Gamma}$	$\bar{X}$	$\bar{X}'$	$\bar{M}$
Enerji aralığı(eV)	0.95	0.83	0.80	1.53

#### 4.4.4. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin titreşim özellikleri

Se:InP(110) yüzeyi için yüksek simetri yönleri boyunca hesaplanmış fonon dispersiyon grafiği Şekil 4.34'te sunulmuştur. Taralı bölgeler InP hacim halinde ele alındığında elde edilen fonon modlarını gösterirken, yüzey fononları koyu çizgilerle gösterilmiştir. Şekil incelendiğinde, ilk göze çarpan akustik ve optik fonon modları arasında oluşan geniş bant aralığıdır. Bu enerji

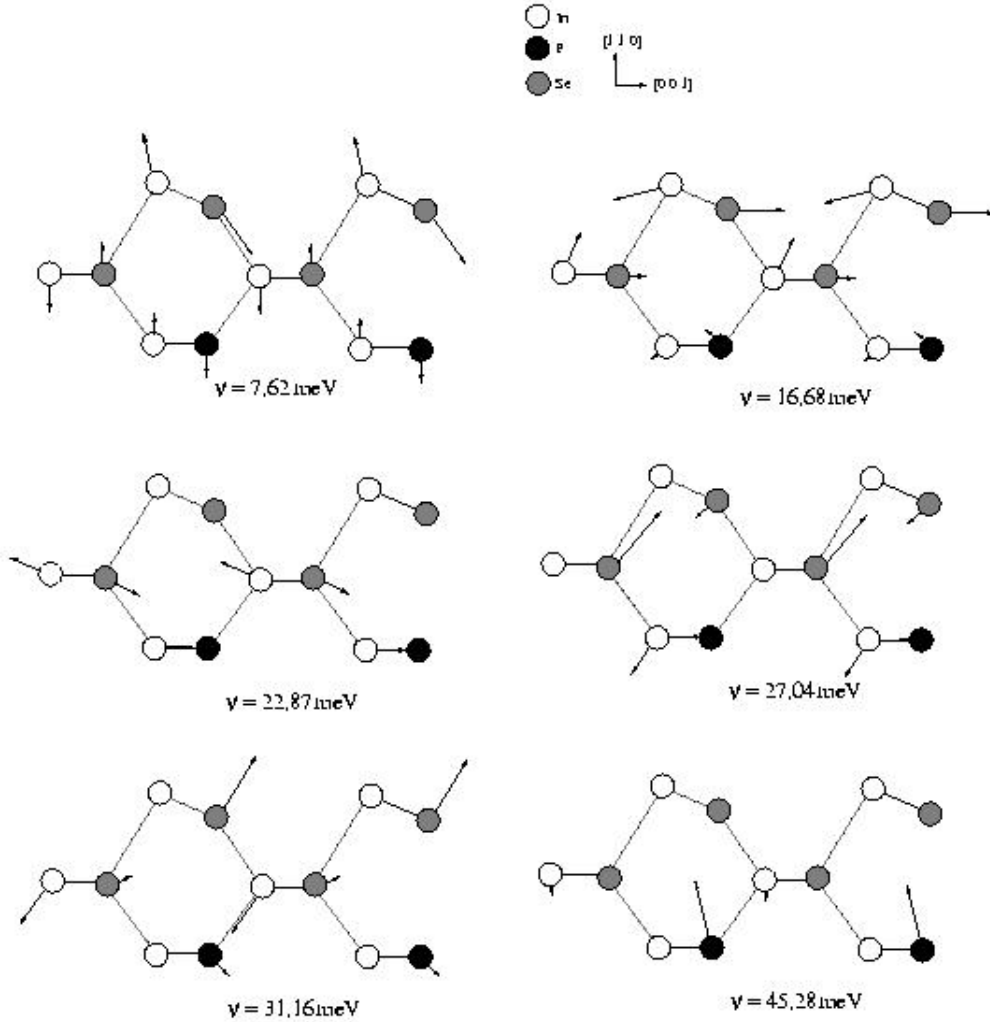
aralığının nedeni, In ve P atomlarının kütlelerinin birbirinden oldukça farklı olmasıdır. Enerji aralığı bölgelerinde hacim fonon modu bulunamaz. Bu nedenle şekilde açıkça görülen geniş enerji aralığında yer alan üç yerleşik fonon modunun yüzey titreşimlerine ait olduğu kesindir ve bu yönleriyle büyük önem taşırlar. Ayrıca daha üst bölgede bulunan daha dar olan enerji aralığında bulunan fonon frekansı da yine aynı sebepten gösterilmeye değerdir. Son olarak en yüksek yüzey optik fonon modunun 45 meV civarında ve tüm simetri yönleri boyunca neredeyse hiçbir dağılım göstermeden düz bir çizgi boyunca meydana geldiği görülmektedir.



Şekil 4.34. Se:InP(110) yüzeyi için fonon dispersiyon grafiği. Taralı bölgeler InP hacmine ait fonon modlarını gösterirken, koyu çizgiler yüzey titreşimlerinden elde edilmiştir.

Şekil 4.34'te  $\bar{\Gamma}$  ile gösterilen simetri noktası yüzey Brillouin merkezini ifade ederken,  $\bar{X}$  ve  $\bar{X}'$  noktaları yüzey Brillouin bölgesinin sınırlarını göstermektedir. Brillouin merkezi fonon modları titreşim karakterlerine göre farklı şekillerde isimlendirilirler.  $[\bar{1}10]$  yönü boyunca olan atomik titreşimler  $A''$  fonon modları olarak ifade edilirken; bu yöne dik doğrultuda ( $[110]$  veya  $[001]$ ) olan titreşimler ise  $A'$  fonon modları olarak isimlendirilir. Şekil 4.35'te  $\bar{\Gamma}$  noktasında seçilen bazı  $A'$  fonon modlarının titreşim şekilleri görülmektedir. Bu modlardan enerjisi en düşük olan mod III-V(110) yüzeylerinin örgü dinamiği hesaplamalarında sıkça rastlanan ilginç modlardan biridir. Enerjisi 7.62 meV olarak bulunan bu mod, yüzey tabakasında bulunan atomların yüzey normali doğrultusunda birbirlerine zıt yönde titreşmeleri ile meydana gelmiştir ve bağ döndürme modu olarak adlandırılır. Enerjisi 16.68 meV olan titreşim modu ise bağ germe fonon modu olarak belirlenmiştir. Şekil 4'de yer alan ve enerjileri sırasıyla 22.87 meV, 27.04 meV ve

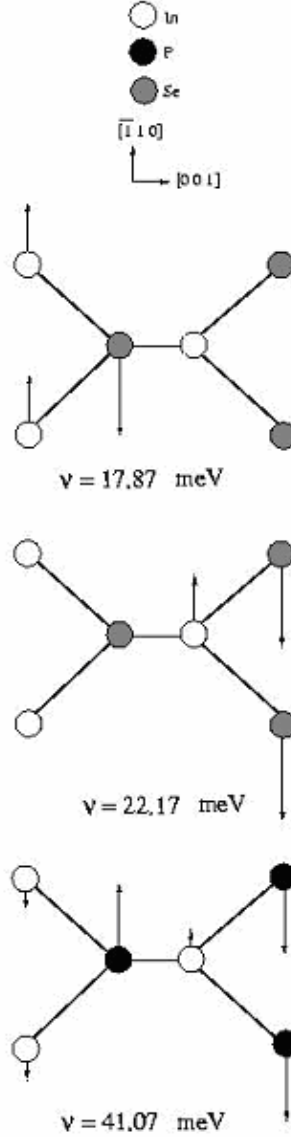
31.16 meV olan fonon modları ise daha önce de belirtildiği gibi akustik-optik fonon modlarını ayıran enerji aralığında bulunmaları dolayısıyla büyük önem taşımaktadırlar.



Şekil 4.35 Yüzey Brillouin Bölgesi merkezinde seçilen bazı  $A'$  fonon modlarının titreşimleri

Enerji aralığında yer alan ilk iki fonon modunun titreşim karakterlerinin belirlenmesinde ikinci tabaka atomlarının titreşimleri rol oynamaktadır. Enerjisi 31.16 meV olan mod ise birinci tabaka Se atomu ve ikinci tabaka In atomunun titreşimleri ile oluşmaktadır. Katılanmamış InP(110) yüzeyi için daha önceki çalışmalardan elde edilmiş sonuçlar incelendiğinde, bu çalışmada hesaplanan enerji aralığı fonon modlarının enerjilerinin daha düşük olduğu bulunmuştur[4]. Bunun nedenleri ise yüzeylerin yapısal parametrelerinin farklı olması ile Se ve P atomlarının kütle farkıdır. Yüzey dispersiyon grafiğinde görülen en yüksek enerjili yüzey optik fonon modunun enerjisi ise 45.28 meV olup, titreşim karakteri  $A'$  olarak bulunmuştur. Şekil 4.35'ten açıkça görülebileceği gibi bu modun oluşmasında üçüncü tabaka P atomu oldukça etkindir. Se:InP(110) yüzeyinin titreşim özellikleri incelenirken yüzey Brillouin Bölgesi merkezinde  $A''$  karakterine sahip üç yerleşik fonon modu daha bulunmuştur. Bu fonon modlarının enerjileri

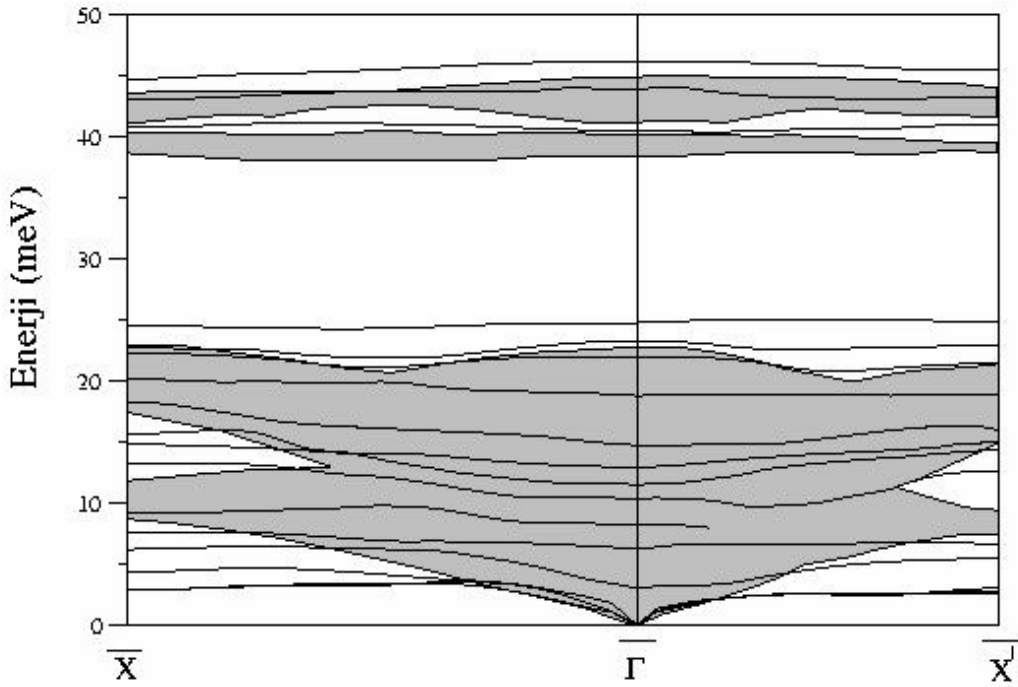
sırasıyla 17.87 meV, 22.87 meV ve 41.07 meV olarak hesaplanmış olup, titreşim şekilleri Şekil 4.36'da görülmektedir.



Şekil 4.36. Se:InP(110) yüzeyi için Yüzey Brillouin Bölgesi merkezinde seçilen A'' karakterine sahip fonon modları

Bulunan bu modlardan enerjisi en düşük olanı yüzey tabakasındaki atomların titreşiminden kaynaklanmaktadır. Enerjisi 22.17 meV olan modun ise ikinci tabaka atomlarının  $[\bar{1}10]$  yönünde titreşmeleri ile oluştuğu görülmektedir. A'' karakterine sahip en büyük enerjili fonon modunun meydana gelmesinde ise üçüncü tabaka P atomlarının etkili olduğu görülmektedir.

InP(110) yüzeyine Te atomu katılması ile elde edilmiş olan bu yüzey için hesaplanan fonon dispersiyon grafiği Şekil 4.37'de sunulmuştur. Şekilde, elde edilen hacim spektrumu sonuçları taralı bölge ile gösterilirken, yüzey fonon titreşimleri koyu eğrilerle belirtilmiştir.

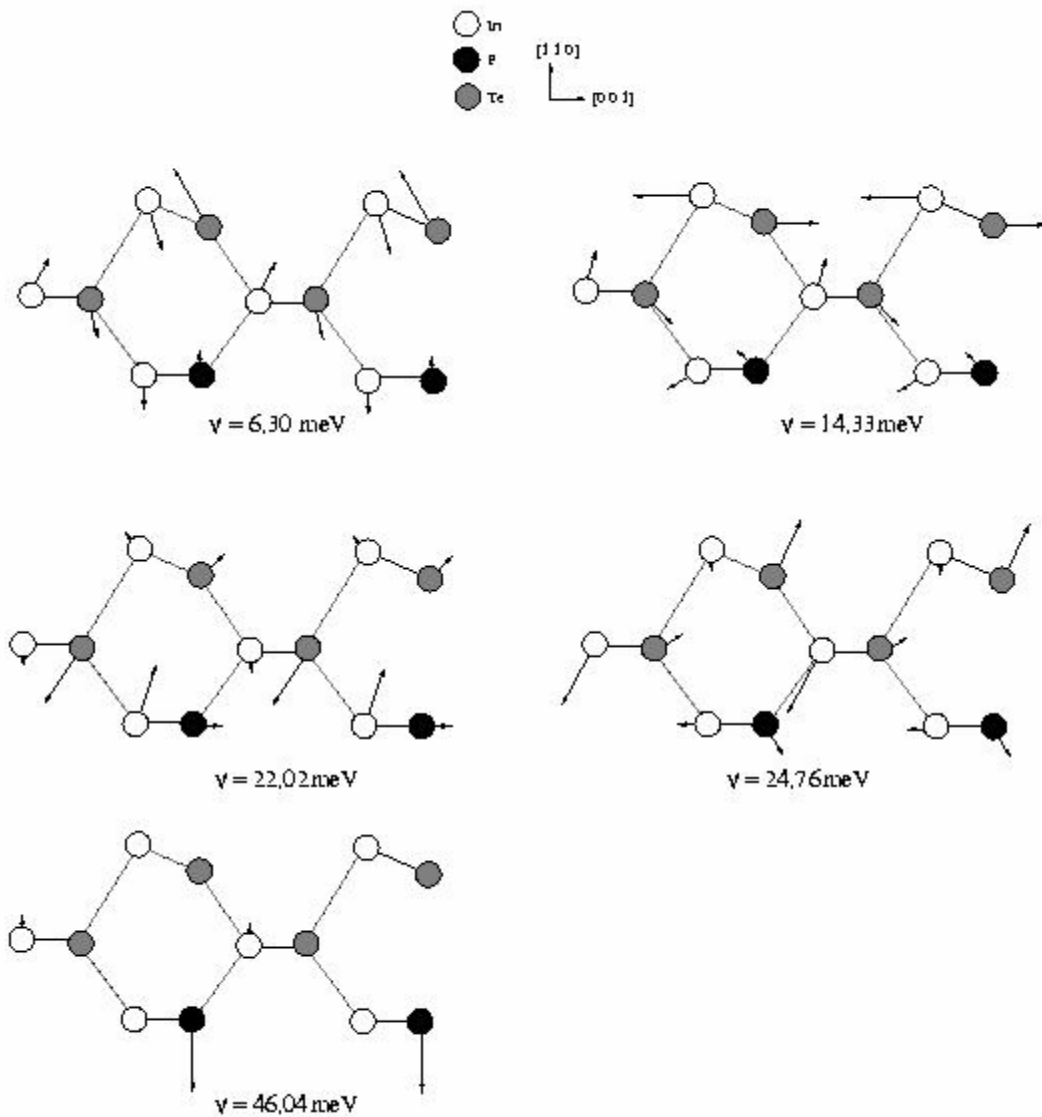


Şekil 4.37. Te:InP(110) yüzeyi için hesaplanan fonon dispersiyon grafiği

Fonon dispersiyon grafiğinden görüldüğü gibi, bu yüzey için elde edilen akustik fonon modlarının enerjileri, Se:InP(110) yüzeyi için hesaplanan değerlerle karşılaştırıldıklarında daha düşük seviyededirler. Bunun nedeni Te atomunun kütesinin Se atomuna göre daha büyük olmasıdır. Şekil incelendiğinde iki yüzey arasında göze çarpan başka bir büyük fark ise, grafiğin ortasında yer alan geniş akustik-optik enerji aralığında Te:InP(110) yüzeyi için 25 meV civarında sadece bir yüzey fonon modu bulunmasıdır. Optik fonon modları ise Se:InP(110) yüzeyi için yapılan hesaplamalarla oldukça büyük bir benzerlik göstermektedir. Örneğin grafiğin üst kısmında bulunan daha dar enerji aralığında yine 41 meV civarında bir yüzey fonon modu bulunmuştur. Ayrıca en yüksek optik fonon modunun, Se:InP(110) yüzeyine benzer olarak her iki simetri yönünde de hemen hemen hiç dağılım göstermediği görülmektedir.

Te:InP(110) yüzeyi için yüzey Brillouin merkezinde yer alan  $A'$  karakterine sahip bazı fonon modlarının titreşim şekilleri Şekil 4.38'de görülmektedir. En düşük enerjili fonon modunun enerjisi 6.30 meV olup, bağ döndürme fonon modu olduğu görülmektedir. Enerjisi 14.33 meV olan ikinci  $A'$  fonon modu ise yüzey tabakasındaki atomların birbirlerine zıt yönde titreşmeleri sonucu oluşan bir bağ germe modudur. Bu mod Se:InP(110) yüzeyinde hesaplanan ve enerjisi 16.68 meV olan bağ germe modu ile büyük bir benzerlik göstermektedir. Ayrıca  $\bar{\Gamma}$  noktasında akustik fononların 0.5 meV ve 2 meV üstünde akustik-optik enerji aralığına gelen bir bölgede iki adet  $A'$  karakterli fonon modu bulunmuştur. Bu modların enerjileri sırasıyla 22.02 meV ve 24.76 meV'dur. Bunlardan ilki, birinci ve ikinci tabakalarda bulunan Te atomlarının birbirlerine zıt yönde titreşmeleri ile üçüncü tabaka In atomunun büyük titreşiminden meydana gelmiştir.

Diğer enerji aralığı modu ise, birinci tabaka Te atomları ile ikinci tabaka In atomlarının birbirlerine zıt yönde titreşmeleri sonucu oluşmuştur. Enerjisi 46.04 meV olan en yüksek enerjili fonon modunun titreşim şekli, baskın bir şekilde üçüncü tabaka P atomlarının büyük titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Te:InP(110) yüzeyi için yüzey Brillouin bölgesinde  $A'$  karakterine sahip üç fonon modu bulunmuştur. Enerjileri 15.00 meV, 18.00 meV ve 41.02 meV olan bu fonon modlarının titreşim şekilleri, Se:InP(110) yüzeyi için hesaplanan ve enerjileri 17.87 meV, 22.17 meV ve 41.07 meV olan  $A'$  karakterli fonon modlarıyla çok büyük bir benzerlik göstermektedir.



Şekil 4.38. Te:InP(110) yüzeyi için  $\bar{\Gamma}$  noktasında seçilen  $A'$  karakterine sahip bazı fonon modlarının titreşimleri

#### 4.4.5. Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin titreşim özelliklerinin karşılaştırılması

Bu tartışmada vurgulanması gereken ilk nokta, her iki yüzey için de katkısız III-V(110) yüzeylerinde daha önceki hesaplamalarla elde edilen bağ döndürme, bağ germe, yüzey tabakası ve yüzey altı tabakası fonon modlarının bulunmuş olmasıdır. Bu tezde katkılı InP(110) yüzeyi için hesaplanan yukarıda belirttiğimiz fonon modları, Tablo 4.18'de de görüldüğü gibi katkısız InP(110) yüzeyi için hesaplanarlardan daha düşük enerji değerlerinde elde edilmiştir[3]. Bu enerji farklılıkları, yüzeylerin geometrik yapılarının hesaplanması sonucu bulunan bağ uzunluklarının farklı olmasından ve Te(veya Se) ile P atomlarının kütlelerinin aynı olmamasından kaynaklanmaktadır.

Tablo 4.18. InP(110), Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeyleri için yüzey Brillouin bölgesi merkezinde hesaplanan yüzey tabakası, yüzey altı tabakası, bağ döndürme, ve bağ germe fonon modlarının titreşim karakterlerine göre karşılaştırılması

Yüzey	A'' modları (meV)		A' modları (meV)	
	Yüzey tabakası	Yüzey altı tabakası	Bağ döndürme	Bağ germe
InP(110)	31.03	36.68	9.10	28.13
Se:InP(110)	17.87	22.17	7.62	16.58
Te:InP(110)	15.00	18.80	6.30	14.33

Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeylerinin her ikisi için de bulunan akustik fonon modlarının en üstteki iki tabakada bulunan atomların titreşimleri sonucu meydana geldiği tespit edilmiştir. Bunun sonucu olarak, yüzey akustik fonon modları yüzeyler için hesaplanmış fonon dispersiyon grafiklerinden de görülebileceği gibi, her iki simetri yönünde de hacim bölgesinin altında yer almaktadır.



#### 4.5. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) Yüzeylerinin Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özellikleri

Proje raporunun bu kısmında BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerinin inceleme sonuçları sunulmuştur.

##### 4.5.1. Giriş

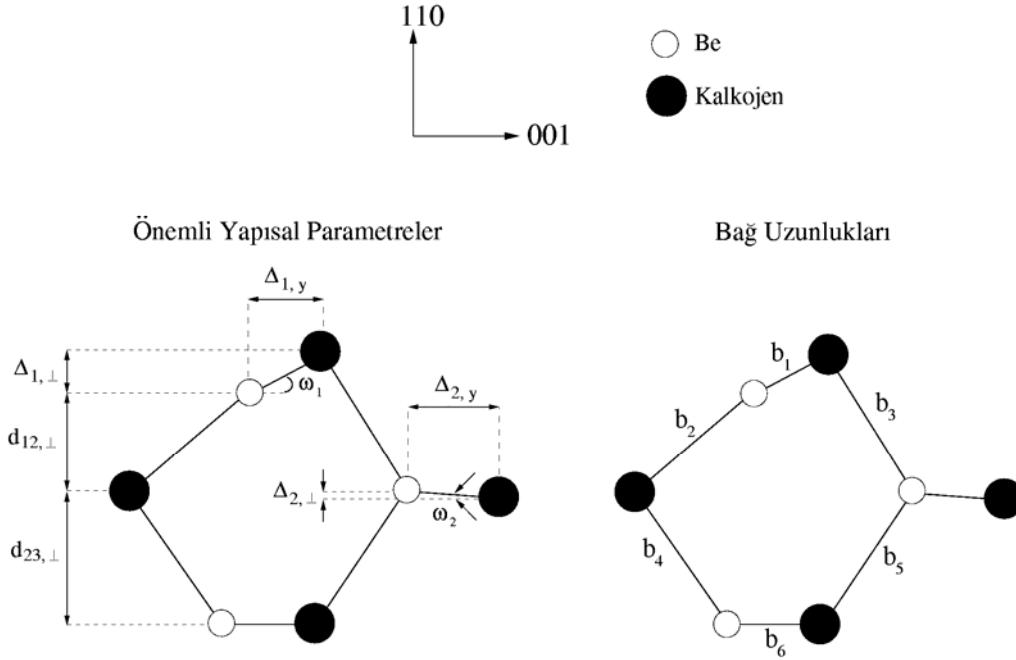
Teknolojik uygulamalarda kullanım açısından oldukça elverişli özellikleri olan Berilyum Kalkojenler (BeS, BeSe ve BeTe) üzerine yapılan bilimsel çalışmalar son yıllarda artarak devam etmektedir(LUO, 1995, NAGELSTRAßER, 1998, OKEYE, 2004, SRİVASTAVA, 2004, RACHED, 2006, HECIRI, 2007). Bu maddelerin geniş 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(LUO, 1995, NAGELSTRAßER, 1998, OKEYE, 2004, SRİVASTAVA, 2004, RACHED, 2006, HECIRI, 2007).

Son yıllarda elektronik aletlerin gün geçtikçe boyutlarının küçülmesi yüzey fiziği çalışmalarında büyük bir artış meydana gelmesini sağlamıştır. Bu nedenle, yukarıda anlatıldığı gibi teknolojik olarak kullanılmaya oldukça elverişli olan BeS, BeSe ve BeTe'nin hacim özelliklerinin yanı sıra yüzey özelliklerinin de incelenmesi gerekliliği ortaya çıkmıştır. Bu nedenle bu proje kapsamında daha önce hiç araştırılmamış olan BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerinin inceleme sonuçları sunulmuştur.

##### 4.5.2. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin yapısal özellikleri

Projenin bu kısmında bulunan sonuçlar yoğunluk fonksiyon teorisini temel alan yerel yoğunluk yaklaşımı ve sözde potansiyel metoduyla elde edilmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucunda Be-kalkojenlerin (110) yüzeyleri için denge geometrisinin yandan görünümü Şekil 4.39'daki gibi elde edilmiştir. Elde edilen önemli yapısal parametreler ve bağ uzunlukları ise sayısal olarak sırasıyla Tablo 4.19. ve 4.20'de verilmiştir. Şekil 4.39'da elde edilen önemli yapısal parametreler ve bağ uzunlukları, diğer II-VI(110) yüzeylerinin denge geometrileriyle büyük bir benzerlik göstermektedirler(TÜTÜNCÜ, 2000). Hepsinde olduğu gibi bu şekilde de, en üst yüzey seviyesindeki anyon olarak bilinen kalkojen atomu(S,Se,Te) yukarı doğru çıkarak bağı kıvrmıştır. Bunun sebebi, katyon atomu olan Berilyumun etrafındaki üç komşu anyon atomuyla daha düzlem bir bağ yapısı olan  $sp^2$  tipini tercih etmesi ve anyon atomunun ise üç komşu katyonla bağ yaparken p tipi bağlanmayı kullanmasıdır. Bağın Şekil 4.39'daki gibi kıvrılması da yüzey Be ve X(X=S,Se,Te) atomları arasında bir bağ açısının oluşmasına sebep olur. Bu bağ açısı BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin (110) yüzeyleri için Tablo 4.19'da görüldüğü gibi

sırasıyla  $26.3^\circ$ ,  $28.3^\circ$  ve  $28.8^\circ$  olarak belirlenmiştir. Bu açı değerleri daha önceki çalışmalarda yukarıdaki değerlere yakın biçimde CdTe(110), ZnTe(110) ve ZnS(110) yüzeyleri için  $29.6^\circ$ ,  $27.1^\circ$  ve  $29.6^\circ$  olarak elde edilmiştir(TÜTÜNCÜ, 2000).



Şekil 4.39. BeX(X=S,Se,Te)(110) yüzey denge geometrisinin yandan görünüşü. Şekilde önemli yapısal parametreler ve bağ uzunlukları gösterilmiştir.

(110) yüzeylerinin diğer bir karakteristik özelliği olan en üst seviyedeki yüzey atomları arasındaki Be-X(X=S,Se,Te) bağ uzunluğunun( $b_1$ ) hacim bağ uzunluğuna göre kısalması da yaptığımız hesaplamalar sonucunda, bu özelliği destekler bir biçimde elde edilmiştir. Bu bağ kısalması BeS, BeSe ve BeTe (110) yüzeyleri için sırasıyla %4.0, %3.5 ve %2.73 oranlarında olup Tablo 4.20'deki sonuçlar bulunmuştur.

Tablo 4.19. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için elde edilen önemli yapısal parametreler. Tüm uzunluklar ( $\text{\AA}$ ) birimindedir.

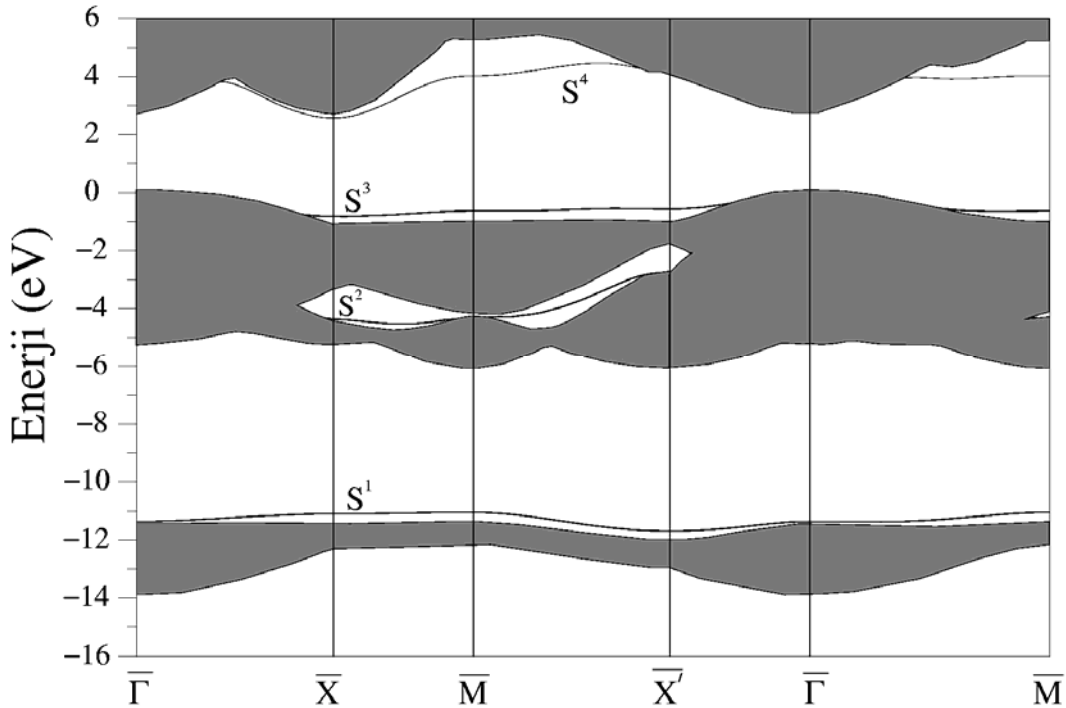
	$\Delta_{1,\perp}$	$\Delta_{2,\perp}$	$\Delta_{1,y}$	$\Delta_{2,y}$	$d_{12,\perp}$	$d_{23,\perp}$	$\omega_1$	$\omega_2$
BeS(110)	0.466	0.062	0.942	1.997	1.332	1.717	$26.3^\circ$	$1.778^\circ$
BeSe(110)	0.543	0.065	1.007	1.280	1.395	1.822	$28.3^\circ$	$2.907^\circ$
BeTe(110)	0.614	0.065	1.118	1.391	1.515	1.977	$28.8^\circ$	$2.675^\circ$

Tablo 4.20. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için elde edilen bağ uzunlukları. Tüm uzunluklar ( $\text{\AA}$ ) birimindedir.

	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$b_5$	$b_6$
BeS(110)	1.999	2.020	2.082	2.108	2.114	2.086
BeSe(110)	2.143	2.152	2.222	2.239	2.247	2.221
BeTe(110)	2.350	2.347	2.430	2.436	2.436	2.418

#### 4.5.3. BeS(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

BeS(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği Şekil 4.40'da verilmiştir. Şekilde taralı bölgeler hacim elektronik bant yapısını göstermektedir. BeS(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği genel olarak diğer II-VI(110) yüzeylerinin elektronik bant yapılarına benzemektedir. Bu yüzey elektronik şekillerinin en ilginç özellikleri hacim bölgeleri arasında kalan boşluk bölgeleridir. Bu boşluk bölgelerinde hiç hacim enerji seviyesi bulunamaz.

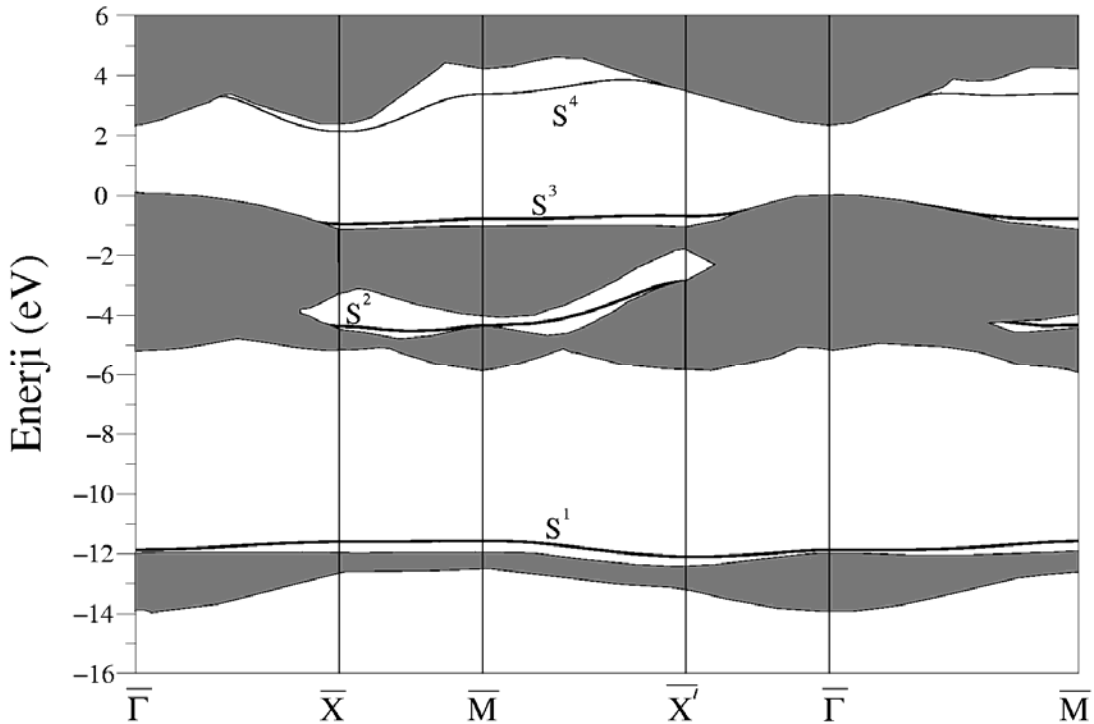


Şekil 4.40. BeS(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölge hacim elektronik spektrumunu göstermektedir.  $S^1$ ,  $S^2$  ve  $S^3$  dolu yüzey enerji bantlarını gösterirken,  $S^4$  ise en düşük boş yüzey enerji bandıdır.

Şekil 4.40'da açıkça görüldüğü gibi BeS(110) yüzeyi için bu boşluk bölgelerinde dört yüzey elektronik enerji seviyesi bulunmuştur. Bu seviyeler şekilde  $S^1$ ,  $S^2$ ,  $S^3$  ve  $S^4$  olarak isimlendirilmişlerdir. İlk üç seviye dolu enerji bantlarını gösterirken,  $S^4$  ile gösterilen en üstteki seviye ise en düşük boş enerji bandıdır. En yüksek dolu enerji bandı  $S^3$ , anyona(S atomu) bağlı olarak ortaya çıkarken, en düşük boş enerji bandı olan  $S^4$  ise katyonla(Be atomu) ilişkilidir. Bu yüzey enerji seviyeleri arasındaki ayrılma ise yüzey Brillouin Bölgesi sınırlarında yaklaşık olarak 4 eV olarak hesaplanmıştır. Bunun yanı sıra şekilde  $S^1$  ve  $S^3$  dolu enerji seviyelerinin neredeyse hiç dispersiyon göstermedikleri ve bunların aksine  $S^2$ 'nin ise  $\bar{M} - \bar{X}'$  boyunca bir dispersiyon gösterdiği görülmektedir.

#### 4.5.4. BeSe(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

Şekil 4.41, BeSe(110) için yüzey elektronik spektrumunu göstermektedir. Şekilde taralı bölgeler BeSe için hacim elektronik bant yapısını gösterirken, bu bölgeler arasında yer alan boşluklarda tespit edilen çizgiler ise yüzey elektronik enerji seviyeleridir. BeSe(110) için yüzey elektronik enerji seviyeleri, Şekil 4.41'de  $S^1$ ,  $S^2$ ,  $S^3$  ve  $S^4$  olarak gösterilmişlerdir. Bunlardan  $S^1$ ,  $S^2$ ,  $S^3$  dolu yüzey enerji bantları,  $S^4$  ise en düşük boş yüzey enerji bandıdır.

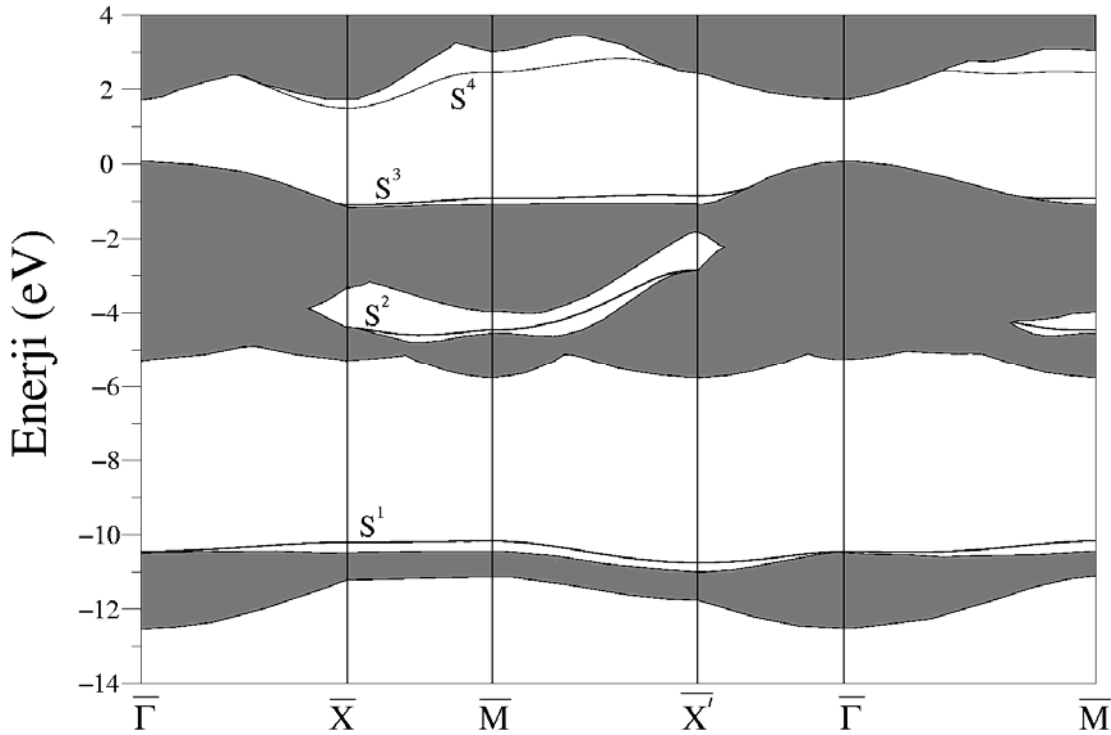


Şekil 4.41. BeSe(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölge hacim elektronik spektrumunu göstermektedir.  $S^1$ ,  $S^2$  ve  $S^3$  dolu yüzey enerji bantlarını gösterirken,  $S^4$  ise en düşük boş yüzey enerji bandıdır.

En yüksek dolu enerji seviyesi olan  $S^3$ , yüzeydeki Se atomunun boşta kalan bağının  $s^2p^3$  tipi orbitallerinden kaynaklanmaktadır.  $S^4$  enerji seviyesi ise yüzeydeki katyon(Be atomu) tarafından üretilen bağla ilişkili olarak oluşur. Bu yüzey enerji seviyeleri arasındaki ayrılma ise yüzey Brillouin Bölgesi sınırlarında yaklaşık olarak 3.5 eV olarak hesaplanmıştır. BeSe(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey elektronik spektrumunda da BeS(110) a benzer şekilde sadece  $S^2$  yüzey enerji seviyesi gözle görülür bir dispersiyon göstermektedir.

#### 4.5.5. BeTe(110) yüzeyinin elektronik özellikleri

BeTe(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey elektronik yapısı Şekil 4.42'de görülmektedir. Bu şekil de daha önce anlatılan BeS(110) ve BeSe(110) yüzeylerinin elektronik şekillerine oldukça benzemektedir. Ayrıca daha önce yapılan çalışmalarda diğer II-VI(110) yüzeyleri için hesaplanan elektronik yapı grafikleri ile de büyük bir benzerlik bulunmaktadır(TÜTÜNCÜ, 2000).

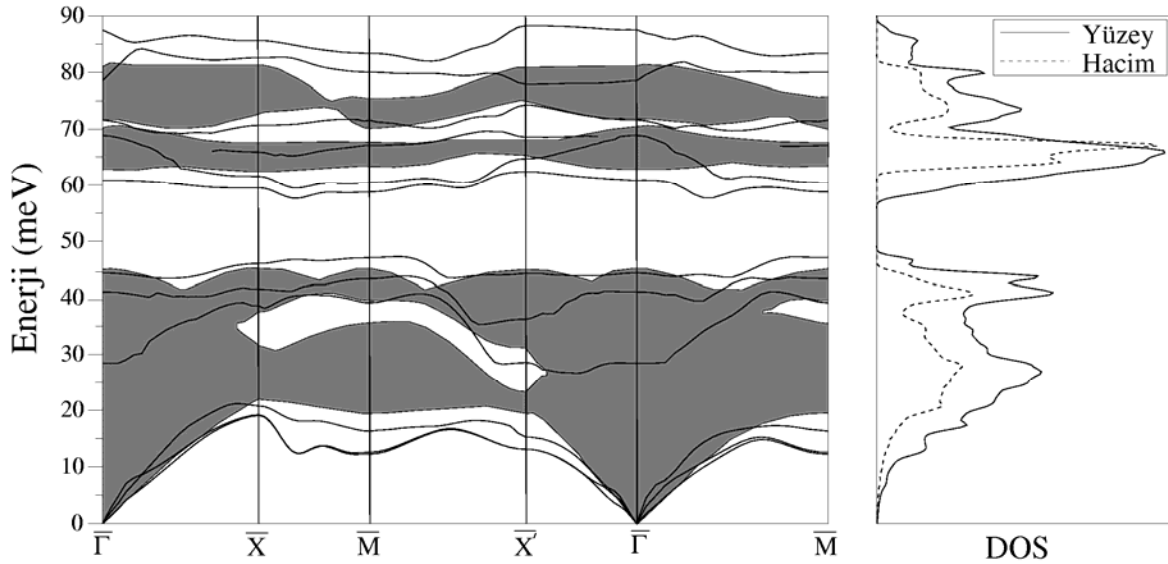


Şekil 4.42. BeTe(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölge hacim elektronik spektrumunu göstermektedir.  $S^1$ ,  $S^2$  ve  $S^3$  dolu yüzey enerji bantlarını gösterirken,  $S^4$  ise en düşük boş yüzey enerji bantıdır.

Şekil 4.42'de taralı bölgeler hacim elektronik spektrumunu gösterirken, hacim spektrumu arasında bulunan boşluklarda elde edilen  $S^1$ ,  $S^2$ ,  $S^3$  ve  $S^4$  ise yüzey enerji seviyelerini göstermektedir. BeS ve BeSe yüzeylerinin elektronik şekillerine benzer şekilde burada da  $S^1$ ,  $S^2$  ve  $S^3$  dolu yüzey enerji bantlarını,  $S^4$  ise en düşük boş yüzey enerji bandını göstermektedir. Şekilde  $S^1$  seviyesinin diğer yüzeylerle karşılaştırıldığında Brillouin Bölgesi boyunca daha fazla dispersiyon gösterdiği bulunmuştur. Fakat hesaplanan diğer yüzeylere benzer şekilde bu yüzey elektronik spektrumunda da  $S^2$  yüzey enerji bandı  $\bar{M} - \bar{X}'$  boyunca  $S^1$  ve  $S^3$ 'e göre daha büyük bir dispersiyon göstermektedir.

En yüksek dolu enerji bandı olan  $S^3$  ile en düşük boş enerji bandı olan  $S^4$  arasındaki ayrılma ise yüzey Brillouin Bölgesi sınırlarında yaklaşık olarak 3 eV olarak hesaplanmıştır. Şekilde  $S^4$  enerji bandı  $\bar{X}$  simetri noktasından,  $\bar{X}'$ 'a doğru artarak bir dispersiyon göstermektedir. Bu enerji bandı  $\bar{X}'$  de 1.5 eV enerjisinde bir minimuma sahipken, diğer simetri noktalarına doğru artan bir çizgide hareket etmektedir. Bu yapıyla  $S^4$  enerji bandının dispersiyon özelliği III-V(110) yüzeyleri ile oldukça benzerdir. Bununla birlikte  $S^3$  bandı da  $\bar{X}'$  de -1.1 eV enerjisinde bir minimuma sahiptir. Bu enerji bandı  $\bar{M}$  ve  $\bar{X}'$  simetri noktalarına doğru ilerlerken neredeyse hiç değişmemekte ve düz bir çizgi şeklinde ilerlemektedir.  $S^3$  yüzey enerji bandının bu davranışı diğer II-VI(110) ve III-V(110) yüzeyleriyle de benzerdir(TÜTÜNCÜ, 2000, ALVES, 1991).

#### 4.5.6. BeS(110) yüzeyinin titreşim özellikleri



Şekil 4.43. BeS(110) yüzeyinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri. Fonon dispersiyon grafiğinde taralı bölgeler ve durum yoğunluğu grafiğinde ise kesikli çizgiler hacim sonuçlarını göstermektedir.

BeS(110) yüzeyi için elde edilen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4.43'de görülmektedir. Fonon dispersiyon grafiğindeki taralı bölgeler ve durum yoğunluğu grafiğindeki kesikli çizgiler BeS için hacim fononları ele alınarak elde edilmiştir. Şekilde ilk göze çarpan ve hacim fononları arasında yer alan akustik – optik boşluk bölgesinin oldukça geniş olmasıdır. Bu boşluk bölgesinin nedeni katyon ve anyon atomları arasındaki kütle farkıdır.

En düşük yüzey akustik fonon modu olan Rayleigh modu,  $\bar{X}-\bar{M}$  ve  $\bar{M}-\bar{X}'$  yönlerinde açıkça hacim akustik bölgesinin altında yer almaktadır. BeS(110) yüzeyi için akustik – optik boşluk bölgesinde sadece bir tane boşluk fonon modu bulunmaktadır. Bu mod tüm simetri yönleri boyunca çok az dispersiyon göstermektedir. En yüksek yüzey optik fonon modu ise bütün simetri yönleri boyunca, hacim fonon spektrumunun üzerinde yer almaktadır.

BeS(110) yüzeyi için Brillouin Bölge merkezinde( $\bar{\Gamma}$ ) hesaplanan fonon modları kutuplanma şekillerine göre iki gruba ayrılırlar. A'' fonon modlarında atomlar atomik zig-zag zincir yönü( $[\bar{1},1,0]$ ) boyunca titreşirlerken, A' fonon modları için ise bu yöne dik( $[110] - [001]$  düzlemi) titreşirler. A' fonon modlarının enerji değerleri sırasıyla 28.38, 41.06, 44.38, 60.90, 71.62 ve 86.40 meV olarak bulunmuştur. Bunlardan ilki en üst iki seviyedeki S atomlarının titreşimlerini içermektedir ve bu nedenle anyonik mod olarak adlandırılır. 41.06 meV enerjili ikinci mod ise yüzey atomlarının yüzey normali yönündeki birbirlerine zıt hareketlerinden meydana gelen bir bağ döndürme modudur. Akustik – optik bölgesinde bulunan 60.90 meV enerjili mod, yüzey atomlarının  $[110]$  yönündeki zıt titreşimlerinden kaynaklanan bir bağ germe modudur. Bu boşluk bölgesinde, yüzeydeki ve hacimdeki iyonik çevreler ve dolayısıyla hacimde ve yüzeyde bulunan atomlara etki eden kuvvetler farklı olduğundan sadece yüzey fonon modları bulunabilir. Fonon enerjileri arttıkça, Be atomunun küçük kütlesi nedeniyle, atomik titreşimler ağırlıklı olarak Be atomundan kaynaklanır. Bu nedenle, 71.62 meV enerjili mod bir katyonik mod olarak elde edilmiştir. Enerjisi 86.40 meV olan en yüksek A' fonon modu ise birinci seviyede bulunan Be atomlarının titreşimlerinden ortaya çıkmıştır. A'' fonon modlarının enerji değerleri ise 68.97 ve 78.56 meV olarak bulunmuştur.

Önemli yüzey fonon modlarından biri olan ve en düşük akustik fonon frekansına karşılık gelen Rayleigh modu, Şekil 4.43'den de açıkça görüleceği gibi bütün simetri yönleri boyunca artan dalga boyları için hacim akustik fononlarının altında hesaplanmıştır. Bu fonon modu ilk iki seviye yüzey atomlarının fonon dalga vektörü ve yüzey normali yönünde titreşimlerinden kaynaklanan boyuna ve enine karakterlerin karışımı olarak ortaya çıkmıştır. Benzer bir duruma daha önce III-V(110) yüzeylerinde de rastlanmıştır(TÜTÜNCÜ, 1997). Bu fonon modunun frekanları  $\bar{X}'$ ,  $\bar{M}$  ve  $\bar{X}$  simetri noktalarında sırasıyla 13.11, 12.25 ve 19.10 meV olarak bulunmuştur.

BeS(110) yüzeyi için incelenmesi gereken diğer önemli fonon modları ise akustik – optik hacim fonon modları arasında bulunan boşluk bölgesinde yer almaktadır. Brillouin bölge merkezinde, bu boşluk bölgesinde 60.90 meV enerjiye sahip olan sadece bir tane boşluk fonon modu vardır. Bu fonon modu ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının [110] ve yüzey normali yönündeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.  $\bar{\Gamma} - \bar{X}$  yönü boyunca büyüyen dalga vektörleri için birinci ve üçüncü tabaka Be atomlarının zig-zag zincir yönündeki hareketleri bu fonon modunun karakterini belirlemede önem kazanır.  $\bar{X}$  noktasında bu modun enerjisi 59.53 meV olmaktadır.  $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$  yönü boyunca zig-zag zinciri yönünde bu mod hiç titreşim göstermez.  $\bar{X}'$  noktasında enerjisi 62.40 meV olan bu modun atomik yer değiştirme şekli bölge merkezine oldukça benzerdir.

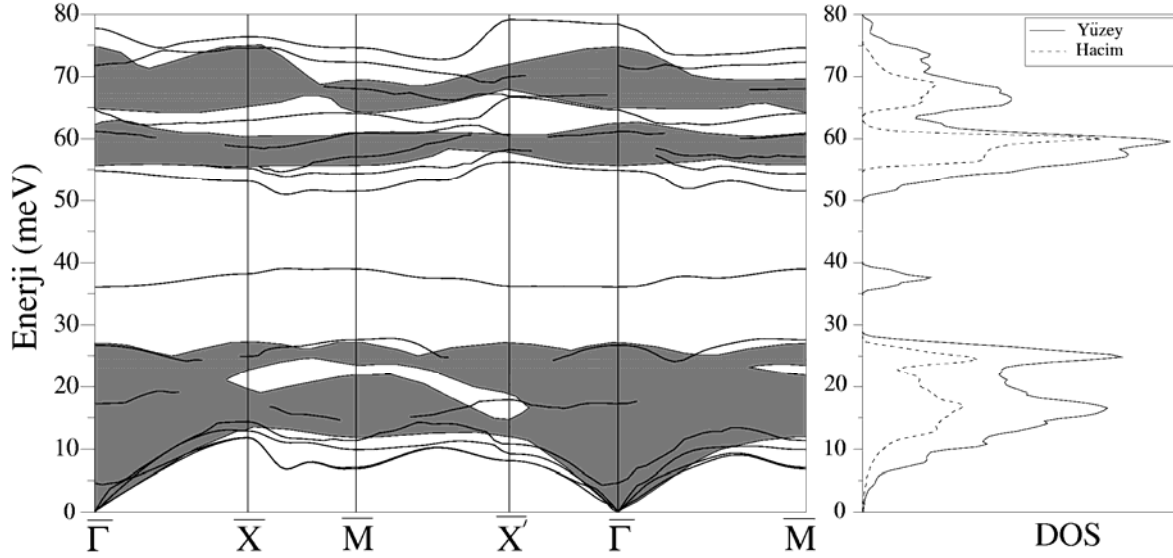
Optik hacim fononlarının üzerinde yer alan en yüksek yüzey optik fonon modu, BeS(110) yüzeyinin bir diğer önemli modudur. Bölge merkezinde bu modun enerjisi 86.40 meV'dur. III-V(110) ve II-VI(110) yüzeylerinden farklı olarak bu fonon modu birinci tabaka Be atomlarının [110] ve yüzey normali yönlerinde titreşimlerinden oluşmaktadır. III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri için ise bu fonon moduna karşılık gelen modlar, üçüncü tabaka atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır (TÜTÜNCÜ, 2000, ALVES, 1991, TÜTÜNCÜ, 1997) Bu fark, Be atomlarının çok küçük kütleli olmalarının bir sonucu olabilir. Çünkü BN(110) yüzeyinde bu fonon modunun karşılığı için de benzer şekilde çok küçük kütleyle sahip olan birinci seviye katyon(B) atomlarının titreştikleri bulunmuştur.  $\bar{\Gamma} - \bar{X}$  ve  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$  yönleri boyunca bölge merkezinden ilerledikçe birinci tabaka Be atomları zig-zag zincir yönünde titreşirler.  $\bar{X}'$  noktasında, bu fonon modu enerji ve yer değiştirme şekli olarak bölge merkezindeki karşılığıyla benzerdir. Bu fonon kolu, tüm simetri yönleri boyunca ilk iki seviye Be atomlarının büyük titreşimlerinden kaynaklandığı için katyonik fonon modu olarak belirlenmiştir.

#### 4.5.7. BeSe(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

BeSe(110) yüzeyi için elde edilen fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4.44'te sunulmuştur. Fonon dispersiyon grafiğindeki taralı bölgeler ve durum yoğunluğu grafiğindeki kesikli çizgiler BeSe için hacim fononları kullanılarak hesaplanmıştır. Şekilde katyon – anyon kütle farkının bir sonucu olarak, akustik ve optik hacim fononları arasında geniş bir boşluk bulunmaktadır. En yüksek yüzey optik fonon kolu, BeS(110) yüzeyine benzer şekilde yine tüm simetri yönleri boyunca hacim fonon spektrumunun üzerinde yer almaktadır. Bu fonon kolu III-V(110) yüzeylerine benzer biçimde  $\bar{\Gamma} - \bar{X}'$  yönünde neredeyse düz bir çizgi şeklindedir (TÜTÜNCÜ, 1997, TÜTÜNCÜ, 1999). Ayrıca bu mod Be atomlarının [110] ve [001] yönlerindeki atomik titreşimlerinden oluşmaktadır. Şekil 4.44'e bakıldığında bir diğer ilgi çekici özellik ise BeS(110) yüzeyinden farklı olarak, akustik – optik boşluk bölgesinde iki yüzey boşluk fonon modunun bulunmasıdır. Bunlardan düşük enerjili olan tüm simetri yönlerinde neredeyse düz bir çizgi gibi ilerlerken, daha yüksek enerjili diğer modun dispersiyon gösterdiği görülmektedir.



Bu yüzey için hesaplanan Rayleigh fonon modu ise hacim fononlarının tam olarak altında yer almaktadır.

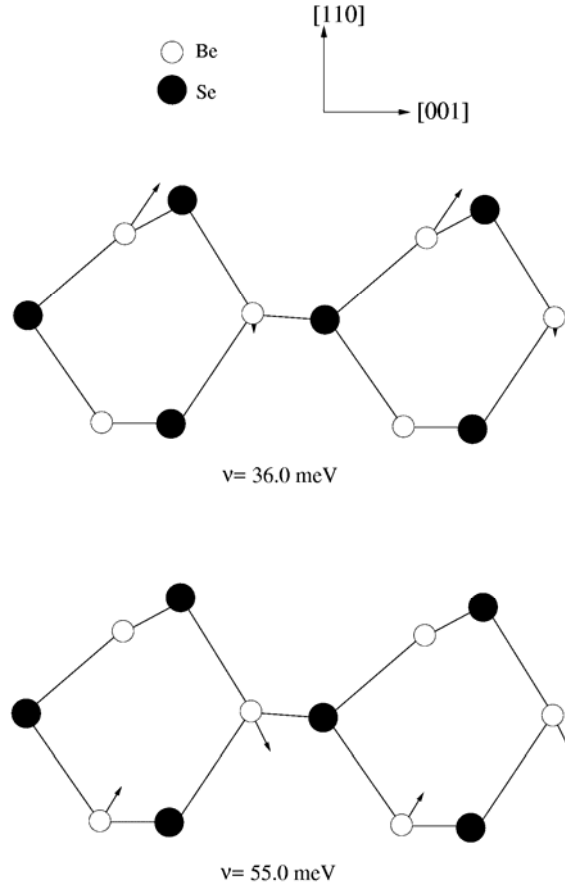


Şekil 4.44. BeSe(110) yüzeyinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri. Fonon dispersiyon grafiğinde taralı bölgeler ve durum yoğunluğu grafiğinde ise kesikli çizgiler hacim sonuçlarını göstermektedir.

Fonon dispersiyon grafiğinin yanı sıra BeSe(110) yüzeyi için hesaplanan durum yoğunluğu grafiği de Şekil 4.44'te sunulmuştur. Hacim ve yüzey fononlarını karşılaştırmak için bu grafikte hacim fononları kesikli çizgiler şeklinde gösterilmiştir. Bu grafiğe bakıldığında tamamen yüzey fononlarından kaynaklandığı görülen dört pik bulunmaktadır. Bunlardan ilki ve en düşük enerjili olanı 7 meV civarında elde edilmiştir. Bu pik  $\bar{X}-\bar{M}$  ve  $\bar{M}-\bar{X}'$  yönlerinde hacim fononlarının altında yer alan yüzey akustik fonon modlarından kaynaklanmaktadır. İkinci pik ise çok açık bir şekilde 36 meV civarında görülmektedir ve yüzey boşluk fonon modu nedeniyle oluşmuştur. Üçüncü pik, 70-75 meV enerjileri arasında yer alan ikili piktir. Bu pikin oluşma nedeni ise  $\bar{\Gamma}-\bar{M}$  yönü boyunca uzanan ve hacim fononlarının üzerinde yer alan yüzey optik fonon modlarıdır. Son pik ise durum yoğunluğu grafiğinin en üstünde yer almaktadır ve nedeni ise  $\bar{\Gamma}-\bar{X}'$  yönü boyunca düz bir çizgi şeklinde uzanan yüzey optik fonon modudur. Bölge merkezi yüzey fonon modları BeS(110) yüzeyindekilere benzer şekilde, bu yüzey için de  $A''$  ve  $A'$  olarak sınıflandırılabilir. BeSe(110) yüzeyi için 67 ve 72 meV enerjili iki  $A''$  modu elde edilmiştir.

Bununla birlikte enerjileri 17, 26, 36, 55, 61, 65 ve 78 meV olan yedi  $A'$  fonon modu bulunmuştur. Düşük enerjili  $A''$  modu ilk iki seviye Be atomlarının titreşiminden kaynaklanırken, daha yüksek enerjili olan ise üçüncü seviye Be atomlarının katkısını içerir.  $A'$  modları ise iki gruba ayrılabilir. Boşluk bölgesinin altında kalan modlara ilk üç seviye Se atomları sebep olurken, boşluk bölgesinin üzerinde kalan modlar ise ilk iki seviyede bulunan

Be atomlarının titreşimlerinden oluşmaktadır. Enerjileri 17 ve 26 meV olan anyonik modlar, ilk iki seviye Se atomlarının sırasıyla [110] ve [001] yönlerinde birbirlerine zıt titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Bu fonon modları ayrıca üçüncü seviye Se atomlarının da katkısını içermektedir. BeSe(110) yüzeyi için elde edilen en ilginç fonon modları akustik – optik hacim fononları arasında yer alan boşluk bölgesinde bulunmuştur. Enerjileri 36 ve 55 meV olan bu fonon modlarının Brillouin bölge merkezindeki titreşim karakterleri Şekil 4.45'te görülmektedir.



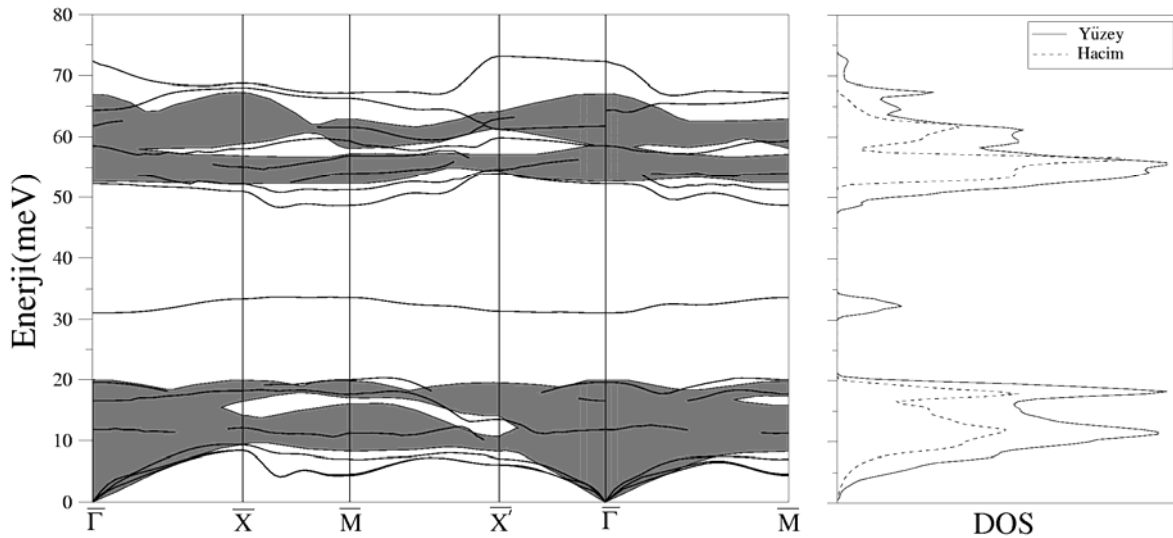
Şekil 4.45. BeSe(110) yüzeyi için boşluk fonon modlarının yüzey Brillouin bölge merkezinde elde edilen titreşim şekilleri.

Şekilden görüldüğü gibi bu modlar Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanan katyonik modlardır. Düşük enerjili mod, birinci seviye Be atomlarının büyük titreşimleri ile ikinci tabaka Be atomlarının [110] yönüne zıt şekilde titreşimlerinden oluşmaktadır. Daha büyük enerjili moda ise ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının yüzey normal yönündeki zıt titreşimleri neden olmaktadır. Diğer 61 ve 65 meV enerjili  $A'$  fonon modları ilk üç seviyede bulunan Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. En yüksek enerjili optik mod ise birinci seviye Be atomlarının [110] ve [001] yönlerindeki titreşimlerinden oluşmaktadır.

BeSe(110) yüzeyi için elde edilen boşluk fonon modlarını daha önce III-V(110) için elde edilen sonuçlarla karşılaştırmak ilgi çekici olabilir(TÜTÜNCÜ,1997, TÜTÜNCÜ, 1999). III-V(110) yüzeyleri için yapılan hesaplamalarda anyon kütlesi katyon kütlesinden oldukça büyük olduğu zaman akustik – optik boşluk bölgesinin ortasında boşluk fonon modu bulunmamıştır. Bu sonuç hem deneysel(NIENHAUS, 1995, NIENHAUS, 1997) hem de teorik(TÜTÜNCÜ,1997, TÜTÜNCÜ, 1999) olarak elde edilmiştir. Fakat BeSe(110) yüzeyi için elde edilen düşük enerjili boşluk fonon modu, anyon kütlesi katyon kütlesinden oldukça büyük olmasına rağmen, akustik – optik boşluk bölgesinin neredeyse tam ortasında bulunmuştur. Bu sonuç BeTe(110) yüzeyi için de elde edilmiştir. BeSe(110) yüzeyinin aksine, III-V(110) yüzeyleri için en yüksek optik fonon modu ikinci ve üçüncü seviye atomlarının titreşimlerinden oluşurken, birinci seviye atomları katkı yapmaz. III-V(110) yüzeyleri ile BeSe(110) yüzeyinin bir diğer farkı ise bağ döndürme modudur. BeS(110) yüzeyi için yapılan hesaplamalarda bağ döndürme modu bulunurken, BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için bağ döndürme modu bulunamamıştır. Yapısal ve elektronik açıdan birbirine son derece benzeyen bu yapılar için böyle bir sonuç elde edilmesi BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeylerinin anyon/katyon kütle oranının çok fazla olmasıdır.

#### 4.5.8. BeTe(110) yüzeyinin titreşim özellikleri

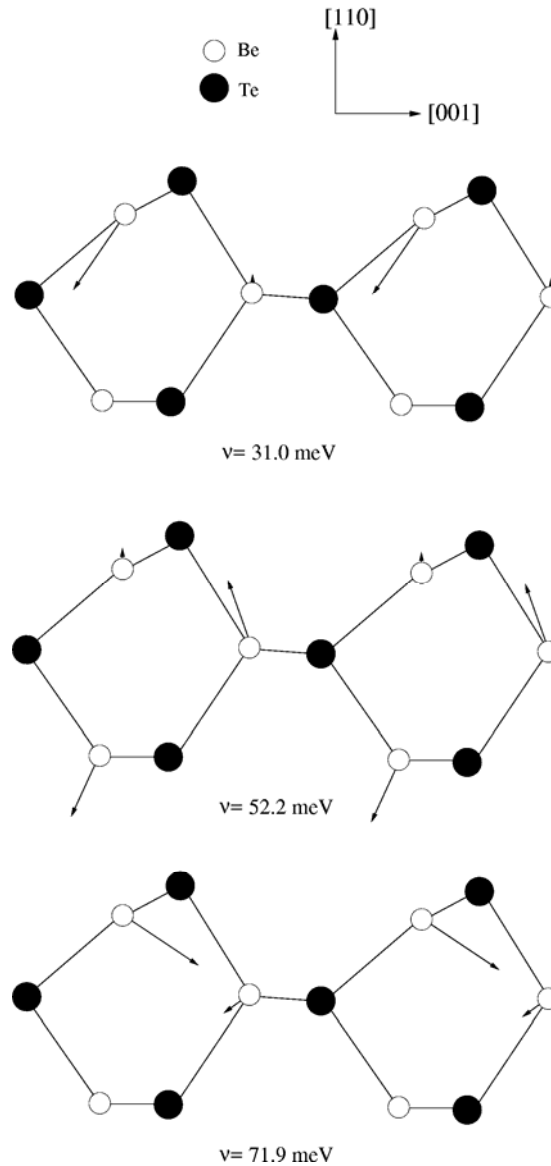
BeTe(110) yüzeyinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4.46'da sunulmuştur.



Şekil 4.46. BeTe(110) yüzeyinin fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri. Fonon dispersiyon grafiğinde taralı bölgeler ve durum yoğunluğu grafiğinde ise kesikli çizgiler hacim sonuçlarını göstermektedir.

Fonon dispersiyon grafiğinde taralı bölgeler ve durum yoğunluğu grafiğinde ise kesikli çizgiler hacim sonuçlarını göstermektedir. Şekle bakıldığında BeS(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için elde

edilen fonon dispersiyon grafikleriyle büyük benzerlikler içerdiği görülmektedir. Hacim fonon modları arasında yer alan akustik – optik boşluk bölgesi daha önce anlatılan yüzeylere göre daha geniş bulunmuştur. Bu boşluk bölgesi BeS(110)'dan BeTe(110)'a doğru giderek artmaktadır. Bu beklenen sonucun nedeni ise anyon – katyon kütle farkının git gide artmasıdır. Bu boşluk bölgesinde bir tane yüzey boşluk fonon modu elde edilmiştir. Rayleigh fonon modu da diğer yüzeylerdeki benzer şekilde  $\bar{X} - \bar{M}$  ve  $\bar{M} - \bar{X}'$  yönlerinde açıkça hacim fononlarının altında yer almaktadır. En yüksek yüzey optik fonon modu ise yine hacim fononlarının üzerinde yer almaktadır.



Şekil 4.47. BeTe(110) yüzeyi için yüzey Brillouin bölge merkezinde hesaplanan boşluk fonon modlarının ve en üst yüzey optik fonon modunun titreşim şekilleri.

BeTe(110) yüzeyi için yüzey Brillouin bölge merkezinde hesaplanan dokuz yüzey fonon modundan ikisi  $A''$  ve yedi tanesi de  $A'$  karakterine sahiptir.  $A''$  karakterine sahip fonon

modlarının enerjileri 61.8 ve 64.3 meV iken;  $A'$  karakterine sahip modların enerjileri ise 11.8, 16.5, 19.6, 31.0, 52.2, 58.5 ve 71.9 meV olarak elde edilmiştir. Düşük enerjili  $A''$  modu ilk iki seviye Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanırken, diğer modun belirlenmesinde her üç seviyedeki Be atomları da etkili olmaktadır.  $A'$  karakterine sahip 11.8 ve 16.5 meV enerjili fonon modlarının ortaya çıkmasında ağırlıklı olarak ilk üç seviye Te atomları rol oynamaktadır. Fakat yine ilk üç seviye Be atomları da bu modların belirlenmesine katkıda bulunurlar. 19.5 meV enerjili fonon modu ise özellikle ikinci ve üçüncü seviye Te atomlarının etkili olduğu bir anyonik fonon modudur. Enerjisi 58.5 meV olan  $A'$  karakterine sahip fonon modu ise ikinci ve üçüncü seviye Be atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.

Enerjileri 31.0 ve 52.2 meV olan ve yüzey Brillouin bölgesinde bulunan boşluklarda yer alan  $A'$  fonon modlarının titreşim şekilleri Şekil 4.47'de görülmektedir. Ayrıca en üst seviye yüzey optik fonon modunun titreşimi de bu şekilde bulunmaktadır. Her üç fonon modu da şekilde görüldüğü gibi tamamen Be atomlarından kaynaklanmaktadır. Yukarıda anlatılanlar ışığında, yüzey fononlarının titreşim karakterlerinin belirlenmesinde büyük enerji değerlerine doğru gidildikçe küçük kütleli atomlar etkili olmaktadır.

#### 4.6. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) Yüzeylerinin Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özellikleri

Proje raporunun bu kısmında BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerinin inceleme sonuçları sunulmuştur.

##### 4.6.1. Giriş

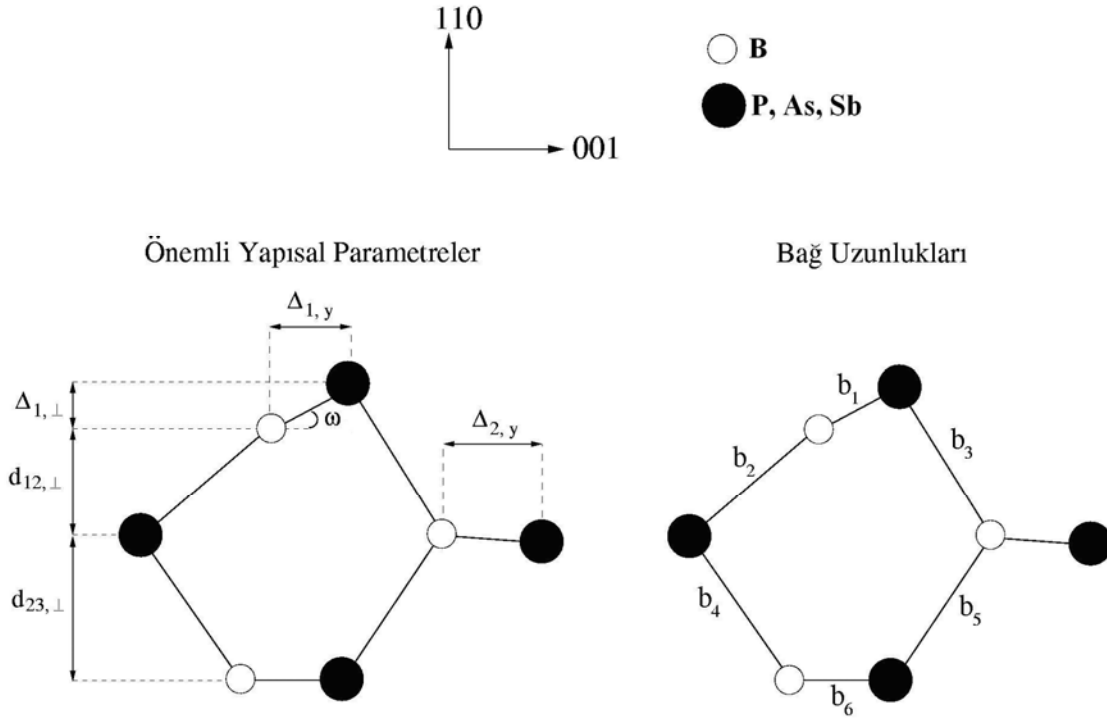
Geçen yıllardan günümüze III-V yarıiletkenleri üzerine yapılan çalışmalar artarak devam etmektedir. Bununla birlikte Bor bileşikleri (BP, BAs ve BSb) diğer III-V materyallerine göre daha az çalışılmıştır. Fakat bu yarıiletkenlerin bazı önemli özellikleri, onların çalışılmasını gerekli hale getirmiştir. İlk olarak sertlikleri, termal iletkenlikleri ve yüksek erime sıcaklıkları Bor bileşiklerini koruyucu malzeme olarak kullanılmaya elverişli kılmaktadır. Bunun yanı sıra geniş bant aralıkları ve düşük dielektrik sabitleri mavi ve morötesi bölgede çalışan optik aletlerde ve yüksek sıcaklık elektroniğinde kullanılmalarını sağlamaktadır. Bu yarıiletkenlerin teknolojiye uygun şekilde kullanılabilmesi onların yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerinin incelenmesiyle mümkün olacaktır. Bu nedenle literatürde onların hacim özelliklerinin incelendiği çok sayıda teorik ve deneysel makale bulunmaktadır.

Bor bileşiklerinin hacim özelliklerinin bu kadar çok çalışılmasına rağmen yüzey özellikleri literatürde eksik kalmıştır. Ancak elektronik ve optik aygıtlarda kullanılacak malzemelerin belirlenmesinde yarıiletken yüzeylerinin atomik geometrileri, elektronik enerji seviyeleri ve fonon modları önemli bir yere sahiptir. Bu nedenle bu kısımda Bor bileşiklerinin (110) yüzeyleri anlatılarak önemli özellikleri ortaya konulacaktır.

##### 4.6.2. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) Yüzeylerinin Yapısal Özellikleri

Projenin bu kısmında bulunan sonuçlar yoğunluk fonksiyon teorisini temel alan yerel yoğunluk yaklaşımı ile elde edilmiştir. İlk olarak BP, BAs ve BSb'nin (110) yüzeyleri için denge geometrisi Şekil 22'deki gibi elde edilmiştir. Şekil incelendiğinde yüzey anyon atomu yüzeyden dışarı doğru hareket ederken, yüzey katyon atomu ise hacim içine doğru gitmektedir. 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. Şekil 4.48'de görülen önemli yapısal parametreler ve bağ uzunlukları ise sayısal olarak sırasıyla Tablo 4.21'de ve Tablo 4.22'de verilmiştir. Bu tablolar incelendiğinde artan Anyon / Katyon kütle oranıyla birlikte yüzey denge geometrisi parametrelerinin ve bağ uzunluklarının da orantılı bir şekilde arttığı bulunmuştur. Bu sonuç diğer III-V(110) yüzeylerine oldukça benzemektedir. Ancak yüzey denge parametrelerini belirlemede sadece kütle farkı etkili olmaz. Bunun yanı sıra sistemin iyonikliği ve bağ oluşumunu düzenleyen kimyasal etkiler de önemli rol oynar. Bu şekilde oluşan atomik denge geometrisi yüzey zincirinin  $\omega$  açısı kadar dönmesine neden olur. Bu açı bütün yüzeyler

için farklı değerler aldığı için önemli bir parametredir. Bu açı değeri diğer III-V(110) yüzeyleri için yaklaşık  $29\pm 3^\circ$  ve II-VI(110) yüzeyleri için ise  $28\pm 3^\circ$  bulunmuştur(SRIVASTAVA, 1997, TÛTÛNCÛ, 2000, WATARI, 1996). BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için  $\omega$  açısı sırasıyla  $24.4^\circ$ ,  $26.1^\circ$  ve  $26.5^\circ$  olarak elde edilmiştir. Elde edilen bu sonuçlar III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri ile oldukça yakındır.



Şekil 4.48. BX(X=P,As,Sb)(110) yüzey denge geometrisinin yandan görünüşü. Şekilde önemli yapısal parametreler ve bağ uzunlukları gösterilmiştir.

Tablo 4.21. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için elde edilen önemli yüzey denge geometrisi parametreleri. Tüm uzunluklar ( $\text{\AA}$ ) birimindedir.

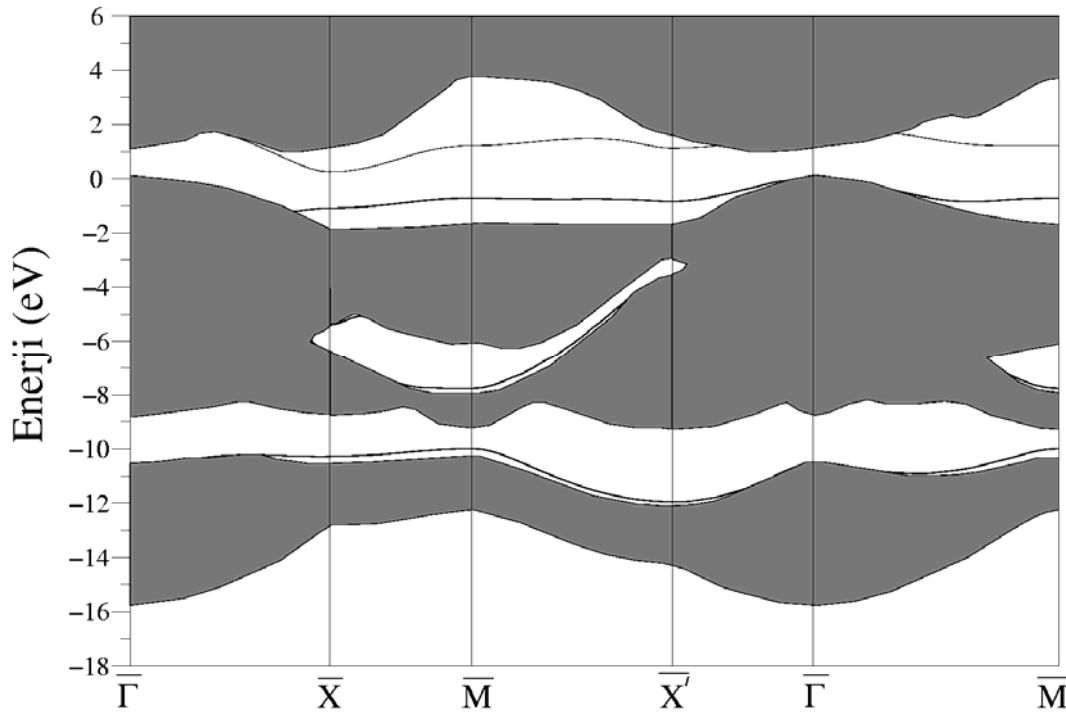
	$\Delta_{1,\perp}$	$\Delta_{1,y}$	$\Delta_{2,y}$	$d_{12,\perp}$	$d_{23,\perp}$	$\omega$
BP(110)	0.4248	0.9368	1.0909	1.1192	1.4412	$24.4^\circ$
BAs(110)	0.4852	0.9921	1.1605	1.1774	1.5237	$26.1^\circ$
BSb(110)	0.5490	1.1020	1.4210	1.2840	1.6740	$26.5^\circ$

Tablo 4.22. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için elde edilen bağ uzunlukları. Tüm uzunluklar ( $\text{\AA}$ ) birimindedir.

	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$b_5$	$b_6$
BP(110)	1.8946	1.7999	1.8710	1.8519	1.8217	1.9450
BAs(110)	2.0070	1.9027	1.9832	1.9505	1.9200	2.0498
BSb(110)	2.2240	2.1060	2.1760	2.1450	2.1150	2.2640

#### 4.6.3. BP(110) Yüzeyinin Elektronik Özellikleri

BP(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği Şekil 4.49'da görülmektedir. Şekil genel yapısı bakımından daha önce hesaplanan III-V(110) yüzeylerinin yüzey elektronik spektrumuna oldukça benzemektedir (SWARTS, 1981, FİLİPETTİ, 1999, SRIVASTAVA, 1999). Bu yüzey elektronik şekillerinin en ilginç özellikleri hacim elektronik spektrumu arasında yer alan boşluk bölgeleridir. Bu boşluk bölgelerinde hiç hacim enerji seviyesi bulunamaz.



Şekil 4.49. BP(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölge hacim elektronik spektrumunu göstermektedir.

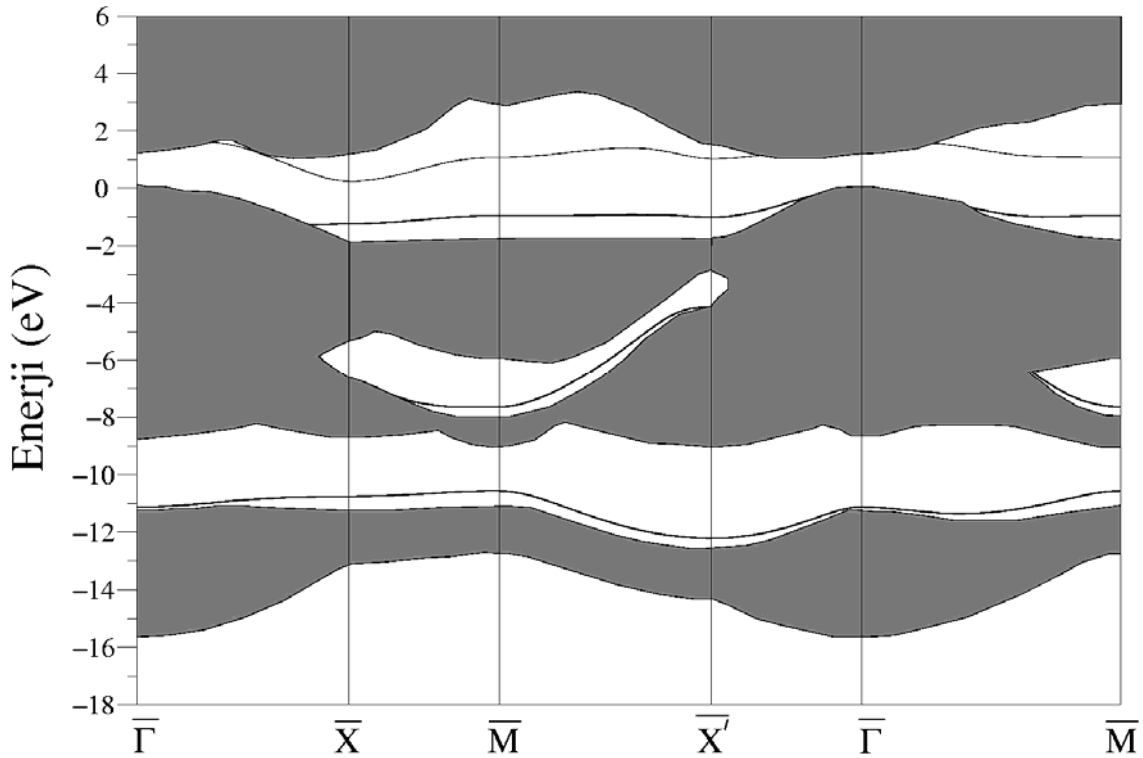


Şekil 4.49'da açıkça görüldüğü gibi BP(110) yüzeyi için bu boşluk bölgelerinde dört yüzey elektronik enerji seviyesi bulunmuştur. Bu seviyeler şekilde açıkça görülmektedir. Bu yüzey enerji seviyelerinden daha koyu olarak gösterilen ilk üçü dolu yüzey elektronik enerji bantlarını gösterirken enerjisi 1 eV civarında olan enerji bandı ise en düşük boş enerji bandıdır. Enerjisi -10 eV civarında olan enerji bandının oluşumuna özellikle yüzey anyon atomları katkı yapmaktadır. Bu yüzey enerji bandının  $\bar{M} - \bar{X}'$  boyunca büyük bir dispersiyon gösterdiği göze çarpmaktadır. Hacim elektronik spektrumunun -3 eV - -8 eV aralığında bulunan boşluk bölgesinde de bir yüzey enerji bandı elde edilmiştir. Bu enerji bandı yüzey katyon atomlarından kaynaklanmaktadır. Yüzey anyon atomlarının katkılarıyla oluşan en yüksek enerjili dolu yüzey elektronik enerji bandı,  $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$  boyunca neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir. En düşük enerjili boş yüzey iletkenlik bandı ise yüzey katyon atomlarının katkılarıyla meydana gelmektedir.

Hacim elektronik bant yapılarını birbirinden ayıran ve -8 eV - -12 eV aralığında yer alan bir boşluk bölgesi bulunmaktadır. Bu boşluk bölgesinin  $\bar{\Gamma}$ ,  $\bar{X}$ ,  $\bar{M}$  ve  $\bar{X}'$  simetri noktalarındaki genişliği sırasıyla 1.71, 1.78, 1.10 ve 2.79 eV olarak bulunmuştur. Hacim elektronik spektrumu için değerlik bantlarıyla iletkenlik bantlarını ayıran boşluk bölgesinin yine aynı simetri noktaları için genişliği ise sırasıyla 0.99, 1.4, 5.4 ve 1.52 eV olarak elde edilmiştir. BP(110) yüzeyinin elektronik spektrumunda ilgi çekici bir diğer nokta ise en yüksek enerjili dolu enerji bandı ile en düşük enerjili boş iletkenlik bandı arasındaki enerji farkıdır. Bu enerji farkı değeri simetri noktaları boyunca ortalama olarak 1.75 eV olarak hesaplanmıştır.

#### 4.6.4. BAs(110) Yüzeyinin Elektronik Özellikleri

Şekil 4.50'de BAs(110) yüzeyinin elektronik bant yapısı grafiği görülmektedir. Genel yapısı bakımından BP(110) yüzeyi ile oldukça benzer yapıda olan bu yüzey için de dört yüzey enerji bandı elde edilmiştir. Bu enerji bantlarından koyu olarak gösterilen üç tanesi dolu, en yüksek enerjili olan ise boş yüzey enerji bandını ifade etmektedir. Enerji olarak en aşağıda bulunan ve BP(110) yüzeyine göre  $\bar{M} - \bar{X}'$  boyunca daha az dispersiyon gösteren enerji bandı yine yüzey anyon atomlarından kaynaklanmaktadır. Hacim elektronik spektrumunun ortasında kalan ve -2 eV ile -8 eV arasında kalan boşluk bölgesinde BP(110) yüzeyinden farklı olarak sadece bir tane yüzey enerji bandı elde edilmiştir. Bu enerji bandı yüzey katyon atomlarının katkılarıyla oluşmuştur. En yüksek enerjili dolu yüzey enerji bandı ise anyon atomlarının katkılarıyla meydana gelmektedir. Bu enerji bandı ile en düşük enerjili boş iletkenlik bandı arasındaki enerji aralığı ise ortalama olarak 1.85 eV elde edilmiştir. BAs(110) için hesaplanan yüzey iletkenlik bandı da BP(110) yüzeyine benzer şekilde yüzey katyon atomlarından kaynaklanmaktadır.



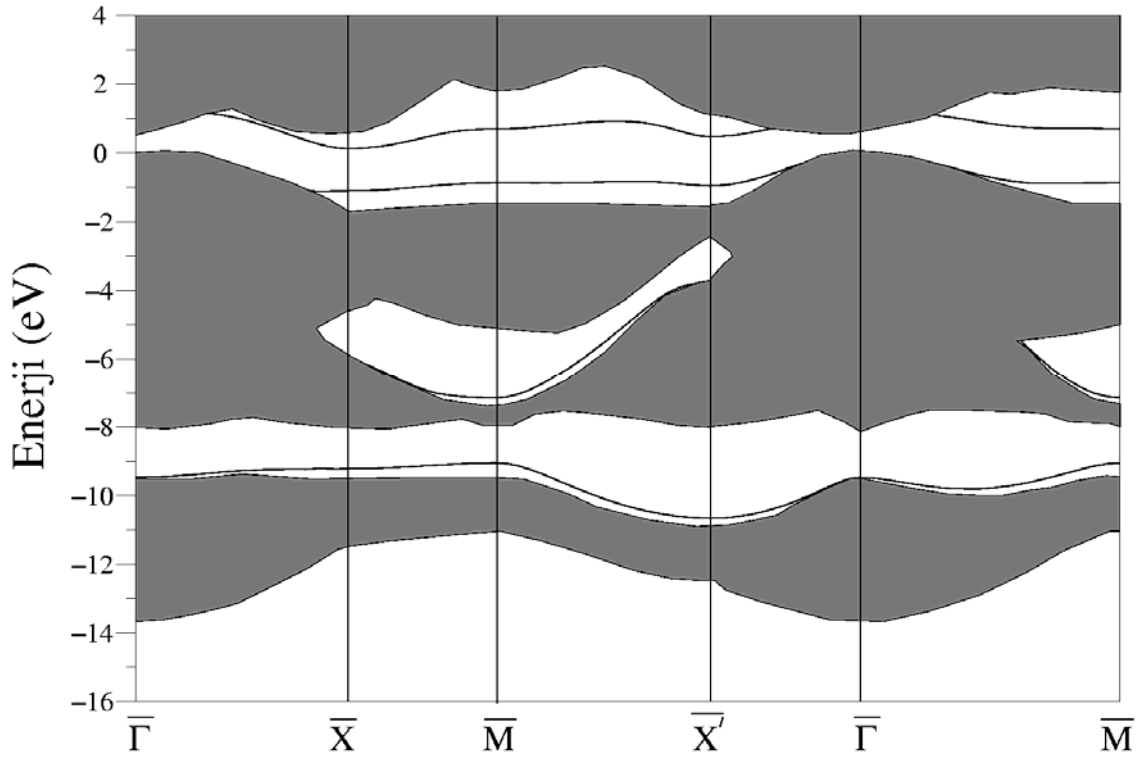
Şekil 4.50. BAs(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölge hacim elektronik spektrumunu göstermektedir.

BAs(110) yüzeyi için taralı olarak gösterilen hacim elektronik spektrumu arasında tüm simetri yönleri boyunca devam eden iki boşluk bölgesi elde edilmiştir. Bunlardan yüzey elektronik spektrumunun enerji olarak daha aşağıda olanı için  $\bar{\Gamma}$ ,  $\bar{X}$ ,  $\bar{M}$  ve  $\bar{X}'$  simetri noktalarında enerji aralığı değerleri sırasıyla 2.48, 2.09, 2.11 ve 3.54 eV olarak elde edilmiştir. Bu değerler BP(110) yüzeyinden elde edilenlerle karşılaştırıldığında daha büyüktür. Üstte yer alan boşluk bölgesinde yine aynı simetri noktaları için enerji aralıkları 1.1, 3.05, 4.63 ve 3.2 eV olarak hesaplanmıştır. Bu değerler BP(110) yüzeyine daha yakındır.

#### 4.6.5. BSb(110) Yüzeyinin Elektronik Özellikleri

BSb(110) yüzeyi için hesaplanan yüzey elektronik bant yapısı grafiği Şekil 4.51'de görülmektedir. Bu grafik de daha önce elde edilen BP(110) ve BAs(110) yüzeylerinin elektronik bant yapısı grafiklerine benzemektedir. BSb(110) yüzeyi için taralı olarak gösterilen hacim elektronik spektrumu arasındaki boşluk bölgelerinde toplam dört tane yüzey enerji bandı elde edilmiştir. Bunlardan üçü dolu enerji bantlarını gösterirken, en yüksek enerjili olanı boş yüzey iletkenlik bandıdır. Enerji en düşük olan dolu yüzey enerji bandı hem BP hem de BAs (110) yüzeyleriyle karşılaştırıldığında  $\bar{M} - \bar{X}'$  boyunca daha az dispersiyon göstermektedir. Bunun sebebi bu bandın yüzey anyon atomlarının katkılarıyla oluşmasıdır. Bu bandın yer aldığı boşluk bölgesinin genişliği  $\bar{\Gamma}$ ,  $\bar{X}$ ,  $\bar{M}$  ve  $\bar{X}'$  simetri noktalarında sırasıyla 1.43, 1.39, 1.44 ve 2.78 eV

olarak elde edilmiştir. Bu boşluk bölgesinin hemen üzerinde yer alan ve tamamen hacim spektrumu arasında kalan boşluk bölgesinde de bir yüzey enerji bandı hesaplanmıştır. Katyon atomlarının katkılarıyla oluşan bu enerji bandı daha önce anlatılan yüzeylere benzer şekilde  $\bar{M} - \bar{X}'$  boyunca artarak devam etmektedir. En yüksek enerjili dolu yüzey enerji bandı  $\bar{X} - \bar{M} - \bar{X}'$  boyunca hacim spektrumunun üzerinde, neredeyse düz bir çizgi şeklinde ilerlemektedir.



Şekil 4.51. BSb(110) yüzeyi için elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafiği. Taralı bölge hacim elektronik spektrumunu göstermektedir.

Yüzey anyon atomlarının katkılarıyla oluşan bu enerji bandı ile en düşük enerjili boş yüzey iletkenlik bandı arasındaki enerji farkı da tüm simetri yönleri boyunca ortalama olarak 1.35 eV olarak hesaplanmıştır. Bu iki yüzey enerji bandının yer aldığı boşluk bölgesinin genişliği  $\bar{\Gamma}$ ,  $\bar{X}$ ,  $\bar{M}$  ve  $\bar{X}'$  simetri noktalarında sırasıyla 0.5, 2.23, 3.13 ve 2.56 eV olarak bulunmuştur.

#### 4.6.6. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) Yüzeylerinin Titreşim Özellikleri

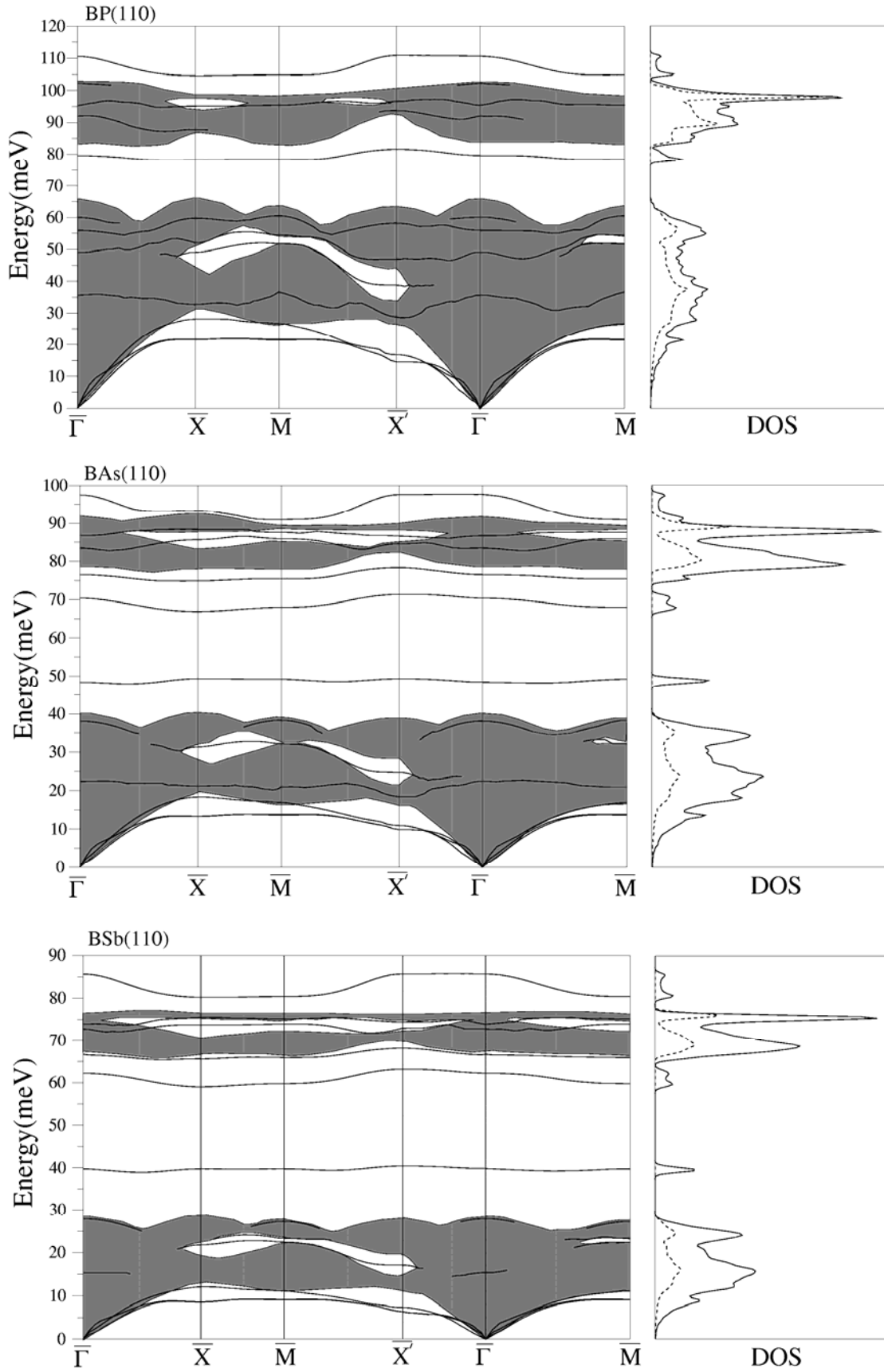
BP, BAs ve BSb yarıiletkenlerinin (110) yüzeyleri için fonon dispersiyon grafikleri Şekil 4.52'de görülmektedir. Taralı bölgeler hacim fononlarından kaynaklanan fonon enerjilerini göstermektedir. Şekil 4.52'de ayrıca yüzey ve hacim fononları için durum yoğunluğu grafikleri verilmiştir. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için beklendiği gibi ilk iki seviye atomlarının titreşimlerinden kaynaklanan 12 tane yüzey fonon modu belirlenmiştir. Bunlardan üçü yüzey akustik modu iken diğerleri yüzey optik modlarıdır. Yüzeyde atomik koordinatların

indirgenmesinden dolayı BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin en düşük enerjili yüzey akustik modu (Rayleigh modu), yüzey Brillouin bölgelerinin sınırlarında hacim fononlarının altında yer almaktadır. Rayleigh modunun bölge sınırlarına yaklaştıkça dispersiyon göstermemesi BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin durum yoğunluğu grafiğinde bir pik meydana gelmesini sağlamıştır. Bu pikin enerjisi BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için sırasıyla 21 meV, 13 meV ve 9 meV olarak hesaplanmıştır. Yüzey optik fonon modları akustik – optik boşluk bölgelerinde ve hacim fononlarının üzerinde açıkça görülebilmektedir. Akustik fonon modları arasında kalan boşluk bölgesinde her üç yüzey için de sadece bir fonon modu bulunmuştur. Bu fonon modu özellikle  $\bar{X}$  ve  $\bar{X}'$  noktalarında açıkça boşluk bölgesinde yer almaktadır.

Akustik – optik boşluk bölgesinde ise BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için üç boşluk fonon modu bulunurken, BP(110) yüzeyi için sadece bir fonon modu hesaplanmıştır. BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için bu boşluk bölgesinde hesaplanan en düşük enerjili boşluk fonon modu, yüzey Brillouin bölgesinin tüm simetri yönlerinde neredeyse düz bir çizgi şeklinde ilerlemektedir. Bu modun neredeyse hiç dispersiyon göstermemesinin nedeni katyon – anyon kütle farkının büyük olmasıyla açıklanabilir. Çünkü, InP(110) ve AlSb(110) yüzeyleri için de daha önceki çalışmalarda benzer bir duruma rastlanmıştır (TUTUNCU, 1996, TUTUNCU, 1999, FRITSCH, 1999). Bu boşluk fonon modları BA(110) ve BSb(110) yüzeylerinin durum yoğunluğu grafiklerinde de sırasıyla 48 ve 40 meV enerji değerlerinde küçük ama çok açık bir pikin oluşmasına neden olmuştur. Optik fonon modlarının doğası gereği bu pikler arasındaki enerji farkı, ilgili materyallerin indirgenmiş kütleleri ve örgü sabitleri arasındaki farkla açıklanabilir. Böylece, BAs(110) yüzeyi için elde edilen fonon gibi, BSb(110) da ona karşılık gelen pik kullanılarak aşağıdaki bağıntıdan elde edilebilir:

$$v_{\text{gap}}(\text{BAs}) = \sqrt{\frac{\mu^{\text{BSb}}}{\mu^{\text{BAs}}} \frac{a^{\text{BSb}}}{a^{\text{BAs}}}} v_{\text{gap}}(\text{BSb})$$

Bu eşitlikten BSb(110) yüzeyinin daha düşük enerjili boşluk fonon modu kullanılarak elde edilen değer 48 meV bulunmuştur.



**Şekil 4.52.** BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için fonon dispersiyon ve durum yoğunluğu grafikleri. Taralı bölgeler ve kesikli çizgiler hacim fononlarını göstermektedir.

Bu sonuç hesaplamalar sonucunda elde edilen 48 meV değeriyle iyi bir uyum göstermektedir. Bu uyum BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin boşluk fonon modlarını oluşturan kuvvet sabitlerinin benzer olduğunu gösterir. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için elde edilen en yüksek enerjili optik fonon modu, III – V (110) yüzeylerinden farklı olarak hacim fononlarının açıkça üzerinde yer almaktadır. Bu fonon modundan kaynaklanan bir pik BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin durum yoğunluğu grafiğinde görülebilir.  $\bar{\Gamma}$  -  $\bar{X}'$  boyunca titreşimler düzlemde titreşimler (saggital – plane (SP)) ve düzleme dik titreşimler (shear – horizontal (SH)) olarak ikiye ayrılır. Özel olarak  $\bar{\Gamma}$  -  $\bar{X}'$  simetri noktalarında ise zig – zag zinciri yönündeki titreşimler  $A''$  modlarını ve bu yöne dik titreşimler ise  $A'$  modlarını oluşturur. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için  $\bar{\Gamma}$  noktasında hesaplanan fonon modları Tablo 4.23' de sunulmuştur.

Tablo 4.23. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için  $\bar{\Gamma}$  noktasında hesaplanan fonon frekanları. Tüm enerjiler meV birimindedir.

	$A''$		$A'$					
BP(110)	92.06	102.39	35.65	49.03	55.94	79.59	95.05	110.62
BAs(110)	7651	86.73	22.45	38.09	48.38	70.40	83.49	97.53
BSb(110)	66.70	74.00	15.37	27.90	39.77	62.21	72.75	85.71

Bu tabloda yer alan karşılaştırma yüzey fonon modlarının enerji değerleri ve titreşim karakterleri göz önünde bulundurularak yapılmıştır. Tabloda listelenen fonon modlarının, benzer titreşim karakterine sahip olmakla birlikte farklı enerji değerlerinde bulunmalarının nedeni, üç materyal için indirgenmiş kütle ve örgü sabitlerinin farklı olmasıyla açıklanabilir. Brillouin bölge merkezindeki en düşük enerjili optik fonon modu BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için sırasıyla 35.65, 22.45 ve 15.37 meV olarak belirlenmiştir. Bu fonon modu ilk iki seviye katyon atomlarının [110] ve [001] yönlerinde birbirlerine zıt titreşimlerinden meydana gelmiştir. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) için 55.94, 48.38 ve 39.77 meV değerlerinde yüzey bor atomlarının titreşimleriyle oluşan anyonik bir fonon modu bulunmuştur. Bu mod BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için akustik – optik boşluk bölgesinde yer almaktadır. Enerjileri 79.59 (BP(110)), 70.40 (BAs(110)) ve 62.21 (BSb(110)) meV olan  $A'$  boşluk fonon modları ikinci seviye B atomlarından kaynaklanmaktadır. İkinci seviye B atomları aynı zamanda 95.05, 83.49 ve 72.75 meV enerjili fonon modlarının oluşumunda da rol oynamaktadır. En yüksek enerjili yüzey optik fonon modu ise birinci seviye B atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır.

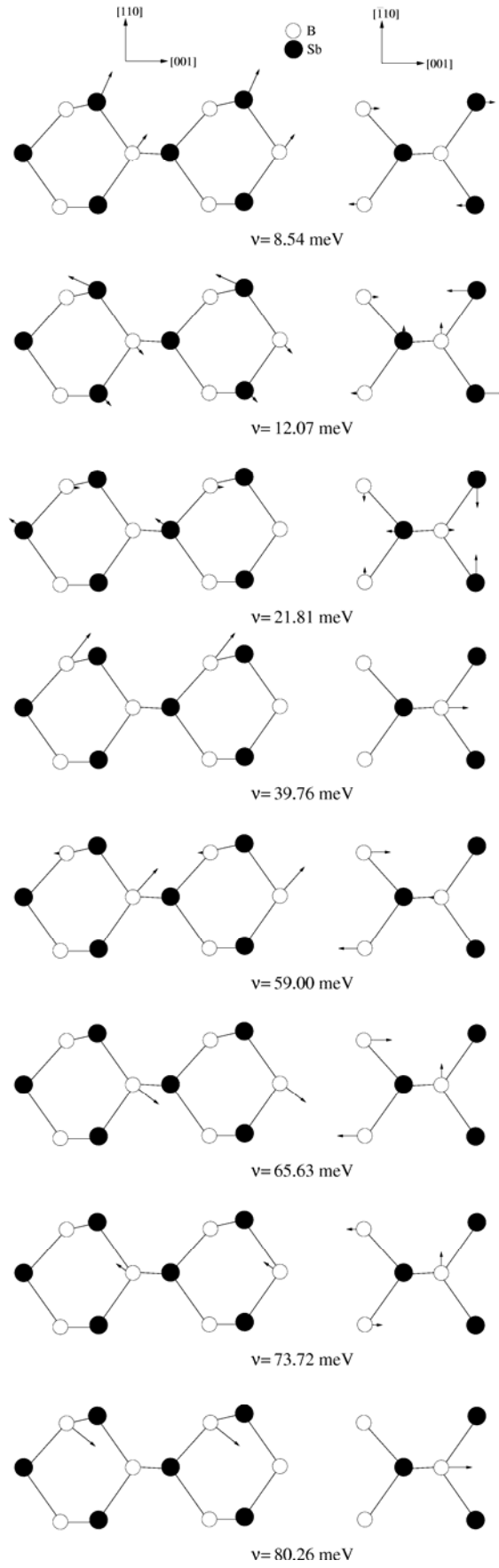
$\bar{X}'$  simetri noktasında BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için iki yüzey akustik fonon modu belirlenmiştir. Bunlardan ilki  $A''$  karakterine sahip iken, ikincisi  $A'$  karakterindedir. Hacim fononları arasındaki boşluk bölgesinde sadece bir fonon modu yer almaktadır. Bu fonon modu BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için sırasıyla 38.81, 24.73 ve 17.08 meV olarak bulunmuştur. Her üç yüzey için de bu fonon modu, yüzey atomlarından kaynaklanmaktadır. Bu

simetri noktasındaki bütün boşluk fonon modları ile en yüksek enerjili yüzey optik fonon modu  $\bar{\Gamma}$  noktasındaki eşdeğerlerine benzemektedir.

BSb(110) yüzeyi için  $\bar{X}$  noktasında seçilen bazı yüzey fonon modlarının titreşim şekilleri Şekil 4.53'de görülmektedir. En düşük enerjili (8.54 meV) fonon modu birinci seviye Sb ve ikinci seviye B atomlarının [110] ve [001] yönlerindeki titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. BP ve BAs(110) yüzeyleri için de bu fonon modunun titreşimi benzerlik göstermektedir. BSb(110) yüzeyi için ikinci akustik fonon modu 12.07 meV enerjisine sahiptir. Bu fonon modu yüzey Sb atomlarından kaynaklanmaktadır ve % 56 SH karakterine sahiptir. Aynı mod BAs(110) için % 57 ve BP(110) için % 56 SH karakteri göstermektedir.

BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin hacim fononları arasında kalan mide şeklindeki boşluk bölgesinde sadece bir fonon modu tespit edilmiştir. Bu fonon modunun enerjisi bu yüzeyler için sırasıyla 49.11, 31.36 ve 21.81 meV bulunmuştur. Bu fonon modu yüzey anyon atomlarının zig-zag zinciri yönündeki titreşimleriyle oluşur. Şekil 4.53'de 39.76 meV enerjili fonon modu çok açık bir yüzey fonon modudur ve % 62 SP karakteri göstermektedir. Buna benzer bir mod BAs(110) yüzeyi için 49.31 meV enerjisinde elde edilmiştir. BSb(110) yüzeyi için ikinci boşluk fonon modu ikinci seviye katyon atomlarından kaynaklanır ve 59.00 meV enerjisine sahiptir. BAs(110) yüzeyinde bu fonon moduna 66.88 meV enerjili fonon modu karşılık gelir.  $\bar{X}$  noktasında BSb(110) yüzeyi için üçüncü boşluk fonon modu 65.63 meV enerjisine ve % 67 SP karakterine sahiptir. Buna benzer bir mod BAs(110) için 74.91 meV ve BP(110) için 78.10 meV değerlerinde elde edilmiştir. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için optik – optik boşluk bölgesinde sadece bir fonon modu elde edilmiştir. Bu fonon modunun enerjisi bu yüzeyler için sırasıyla 95.10, 85.69 ve 73.72 meV olarak belirlenmiştir.

En yüksek enerjili yüzey optik fonon modu BSb(110) yüzeyi için  $\bar{X}$  noktasında 80.26 meV enerjisinde elde edilmiştir. Bu fonon modu BAs(110) ve BP(110) yüzeyleri için 92.08 ve 104.57 meV olarak hesaplanmıştır. Bütün bu yüzeyler için bu mod % 60 SP karakteri göstermektedir.



Şekil 4.53. BSb(110) yüzeyinin  $\bar{X}$  simetri noktasındaki bazı fonon modlarının titreşim şekilleri.



## BÖLÜM 5 TARTIŞMA/SONUÇ

Bu proje kapsamında ilk olarak Magnezyum kalkojenlerin (MgS, MgSe ve MgTe) dört farklı kristal yapısı (NaCl, ZnS, Wurtzite ve NiAs) için yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri incelenmiştir. Bu incelemeler sonucunda taban durumunda MgS ve MgSe yarıiletkenlerinin kayatuzu fazında, MgTe'nin ise nikel-arsenik fazda kristalleştiği bulunmuştur. Bununla birlikte bu yarıiletkenlerin dört faz için de yapısal özellikleri araştırılmış ve daha önce yapılan çalışmalarla karşılaştırılmıştır. MgS, MgSe ve MgTe'nin elektronik özellikleri incelendiğinde bu yarıiletkenleri, NaCl ve NiAs kristal yapılarının dolaylı, ZnS ve WZ fazlarının ise doğrudan bant aralığına sahip oldukları sonucu elde edilmiştir. Özellikle çinko sülfür kristal yapıdaki MgS'nin 3.10 eV civarında olan enerji aralığı dalgaboyu olarak 4000 Å'a yani tam mavi ışık bölgesine düşmektedir. MgSe ve MgTe'nin spektrumları ise yeşil ışık bölgesine kaymaktadır. Bu yarıiletkenlerin mavi-yeşil ışık bölgesinde spektrum vermesi onların optoelektronik teknolojisi için ne kadar uygun olduklarının kanıtıdır. Bu sonuçların daha önce yapılan çalışmalarla da uyumlu olduğu bulunmuştur. Bu projede elektronik özelliklerin yanı sıra her dört fazın da titreşim özellikleri detaylı bir şekilde incelenmiştir. İlk olarak kayatuzu MgS için elde edilen  $\Gamma$  noktası fononlarının deneysel veriler ile mükemmel bir uyum gösterdiği gözlenmiştir. Kayatuzu yapılar için elde edilen fonon spektrumları karşılaştırıldığında MgTe'nin fonon frekanslarının daha düşük olduğu tespit edilmiştir. Bu sonuç MgTe'nin büyük örgü sabitine ve tellür atomunun büyük kütlesine bağlanabilir. Bu yarıiletkenlerin çinko sülfür yapıları için örgü titreşimleri incelendiğinde, MgS için  $\Gamma$  noktası fononlarında deneysel sonuçlarla son derece iyi bir uyum gözlenmiştir. MgS'nin kayatuzu fazından farklı olarak, çinko sülfür fazının fonon dispersiyonunda optik ve akustik fononlar arasında bir boşluk tespit edilmiştir. Bu farklılık çinko sülfür kristal yapının kayatuzu kristal yapıya göre daha az iyonik olmasından kaynaklanır. Bu yarıiletkenlerin wurtzite fazları için de fonon spektrumları ve durum yoğunlukları ilk olarak bu tezde sunulmuştur. Wurtzite yapı primitif birim hücresinde 4 atom içermesinden dolayı 12 adet  $\Gamma$  noktası fononları tespit edilmiş ve bunlar simetrilerine göre adlandırılmıştır. Bu kristal yapıdaki fonon frekanslarının, çinko sülfür yapıdaki fonon frekanslarıyla ilişkisi gösterilmiştir. Her iki yapı da aynı bağ düzenine sahip olmasından dolayı bu sonuç şaşırtıcı değildir. Son olarak nikel arsenik faz için titreşim özellikleri detaylı bir şekilde tartışılmış ve  $\Gamma$  noktası fononları şekillendirilmiştir.

As, Sb, Bi gibi grup V elementlerinin Ge(001) ve Si(001) yüzeyleriyle etkileşmeleri, farklı maddeler kullanılarak yapılan kristal büyütme işleminde önemli rol oynar. Bu nedenle bu projenin ikinci kısmında arsenik katkılanmış Ge(001)(2×1) yüzeyi incelenmiştir. Bu katkılı yüzeyin elde edilen yüzey denge geometrisi daha önce yapılan çalışmayla oldukça uyumlu bulunmuştur. Ge(001)/As(2×1) yüzeyi için hesaplanan yüzey elektronik yapısı, katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyi için elde edilen yapıdan farklıdır. Bu yapıda yeniden bağ oluşturması gereken bir boş bağ yoktur ve en üst seviye As atomlarının simetrik yapısı, tamamen dolu olarak bulunan  $\pi_u$  (bonding: bağ yapmaya elverişli) ve  $\pi_g$  (anti-bonding: bağ yapmaya müsait

olmayan) seviyeleri nedeniyle çok daha kalıcıdır.  $\pi_g$  ve  $\pi_u$  seviyelerinin arasındaki maksimum ayrılma, daha önceki teorik çalışmalarla çok uyumlu bir şekilde 0.36 eV olarak hesaplanmıştır. Bu yüzey için hesaplanan yüzey fonon dispersiyon grafiği ise katkısız Ge(001)(2×1) yüzeyinden bazı farklılıklar göstermektedir. Katkılı ve katkısız Ge(001)(2×1) yüzeylerinin fonon dağıtım grafiklerindeki bu farklar, Ge ve As atomlarının kütlelerinin aynı olması nedeniyle, bu yüzeylerin yapısal ve elektronik özelliklerinin farklı olmasından kaynaklanmaktadır.

Projenin üçüncü kısmında ilk olarak Se:InP(110) ve Te:InP(110) katkılı yüzeylerinin denge durumundaki geometrik yapısı belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar daha önce hesaplanan teorik değerlerle uyumlu bir şekilde elde edilmiştir. Daha sonra bu yüzeyler için yüzey elektronik bant yapısı grafikleri hesaplanmış ve sonuçlar tartışılmıştır. Son olarak Se:InP(110) ve Te:InP(110) yüzeyleri için hesaplanan fonon dispersiyon grafikleri sunulmuştur. Her iki yüzey için de katkısız III-V(110) yüzeylerinde daha önceki hesaplamalarla elde edilen bağ döndürme, bağ germe, yüzey tabakası ve yüzey altı tabakası fonon modlarının bulunmuş olması oldukça önemlidir. Bu projede katkılı InP(110) yüzeyi için hesaplanan yukarıda belirttiğimiz fonon modları katkısız InP(110) yüzeyi için hesaplanarlardan daha düşük enerji değerlerinde elde edilmiştir. Bu enerji farklılıkları, yüzeylerin geometrik yapılarının hesaplanması sonucu bulunan bağ uzunluklarının farklı olmasından ve Te (veya Se) ile P atomlarının kütlelerinin aynı olmamasından kaynaklanmaktadır.

Teknolojik uygulamalarda kullanım açısından oldukça elverişli özellikleri olan Berilyum Kalkojenler (BeS, BeSe ve BeTe) üzerine yapılan bilimsel çalışmalar son yıllarda artarak devam etmektedir. Bu projenin dördüncü kısmında BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin (110) yüzeyleri için yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri çalışılmıştır. Be-kalkojenlerin (110) yüzeylerinin incelenmesine her bir yüzey için yüzey denge geometrisinin tayin edilmesi ile başlanmıştır. Bu çalışmada yüzey geometrisinin karakteristik bir parametresi olan  $\omega$  açısı BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için sırasıyla,  $26.3^\circ$ ,  $28.3^\circ$  ve  $28.8^\circ$  olarak belirlenmiştir. 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. 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. BeS(110), BeSe(110) ve BeTe(110) yüzeyleri için en yüksek enerjili fonon modu tüm simetri yönleri boyunca hacim fononlarının üzerinde hesaplanmıştır.

Projenin son kısmında III-V yarıiletkenlerinden olan Bor-bileşiklerinin (BP, BAs ve BSb) (110) yüzeyleri incelenmiştir. İlk olarak BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için denge geometrisi elde edilmiştir. Bu yüzeyler için  $\omega$  açısı sırasıyla 24.4°, 26.1° ve 26.5° olarak elde edilmiştir. Elde edilen bu sonuçlar III-V(110) ve II-VI(110) yüzeyleri ile oldukça yakındır. Yapısal özelliklerden yararlanılarak elde edilen yüzey elektronik bant yapısı grafikleri, her üç yüzey için de oldukça benzer yapıdadır. Hesaplanan elektronik bant yapısı grafiklerinde taralı olarak gösterilen hacim elektronik spektrumu arasındaki boşluk bölgelerinde toplam dört tane yüzey enerji bandı elde edilmiştir. Bunlardan üçü dolu enerji bantlarını gösterirken, en yüksek enerjili olanı boş yüzey iletkenlik bandıdır. Her üç yüzey için de en yüksek enerjili dolu yüzey enerji bandı neredeyse hiç dispersiyon göstermemektedir. Son olarak BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin titreşim özellikleri sunulmuştur. Her üç yüzey için beklendiği gibi ilk iki seviye atomlarının titreşimlerinden kaynaklanan 12 tane yüzey fonon modu belirlenmiştir. Bunlardan üçü yüzey akustik modu iken diğerleri yüzey optik modlarıdır. En düşük enerjili yüzey akustik modu (Rayleigh modu), yüzey Brillouin bölgelerinin sınırlarında hacim fononlarının altında yer almaktadır. Akustik fonon modları arasında kalan boşluk bölgesinde her üç yüzey için de sadece bir fonon modu bulunmuştur. Akustik – optik boşluk bölgesinde ise BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için üç boşluk fonon modu bulunurken, BP(110) yüzeyi için sadece bir fonon modu hesaplanmıştır. BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeyleri için elde edilen en yüksek enerjili optik fonon modu, III – V (110) yüzeylerinden farklı olarak hacim fononlarının açıkça üzerinde yer almaktadır. Bunun yanı sıra proje kapsamında her üç yüzey için simetri noktalarında elde edilen fonon modları karşılaştırılarak benzer ve farklı yanları ortaya konulmuştur.

Proje kapsamında uluslar arası dergilerde basılan yayınlar EK-1'de, uluslar arası konferanslarda sunulan bildiriler EK-2'de ve tamamlanan doktora tezleri de EK-3'de sunulmuştur.

Gelecekteki çalışmalarımız literatürde eksik kalan ve teknolojik önemi olan farklı yüzeyler üzerine yoğunlaşacaktır. Ayrıca uygun yüzeyler için elektron – fonon etkileşimi araştırılarak, günümüzün önemli araştırma konularından biri olan süperiletkenlik özellikleri incelenecektir.

## KAYNAKLAR

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* 44, 6188-6198, (1991).

BECHSTEDT F., Grossner U., Furtmuller J., Dynamics and polarization of group-III nitride lattices: A first-principles study, *Phys. Rev. B*, 62, 8003-8011, (2000).

BENOSMAN N., Amrane N., Mecabih S., Aourag H., Structural and electronic properties of bulk BeS, *Physica B*, 304, 214-220, (2001).

BOUAMAMA K., Djemia P., Lebga D., Kassali K., *Ab initio* calculation of the lattice dynamics of the Boron group-V compounds under high pressure, *High Pressure Research*, 27, 269-277, (2007).

BOUHAFS B., Aourag H., Ferhat M. and Certier M., Trends in band-gap pressure coefficients in boron compounds BP, BAs, and BSb, *J. Phys.: Condens. Matter* 12, 5655-5668, (2000).

CAMP P. E. V., Doren V. E. V., Total energy calculations in the DFT on binary compounds, *Int. J. Quantum Chem.* 55, 339-345, (1995).

CAMP P. E. V., Doren V. E. V., Martins J. L., High-pressure phase of magnesium selenide and magnesium telluride, *Phys. Rev. B*, 55, 775-779, (1997).

CHAKRABARTI A., Role of NiAs phase in pressure-induced structural phase transitions in IIA-VI chalcogenides, *Phys. Rev. B*, 62, 1806-1814, (2000).

CHARIFI Z., Hassan F. E. H., Baaziz H., Khosrivazadeh Sh., Hashemifar S. J., Akbarzadeh H., Structural and electronic properties of the wide-gap  $Zn_{1-x}Mg_xS$ ,  $Zn_{1-x}Mg_xSe$  and  $Zn_{1-x}Mg_xTe$  ternary alloys, *J. Phys. Condens. Matter.*, 17, 7077-7088, (2005).

CHAUDHURI C. B., Pari G., Mokkerjee A., Bhattacharyya A. K., High-pressure studies of MgTe using first-principle electronic-structure calculations, *Phys. Rev. B*, 60, 11846-11847, (1999).

DONNAY J. H., Ondik H. M., Crystal Data Vol-II: Inorganic Compounds, Dept. of Commerce, Washington DC, (1972).

DOYEN-LANG S., Pages O., Lang L., Hugel J., Phonon dispersion curves of BeSe and BeTe, *Phys. Status Solidi (b)*, 229, 563-566, (2002).

DRIEF F., Tadjer A., Mesri D., Aourag H., First principles study of structural, electronic, elastic and optical properties of MgS, MgSe and MgTe, *Catalys. Tod.*, 89, 343-355, (2004).

FERHAT M., Bouhafs B., Zaoui A., Aourag H., First-principles study of structural and electronic properties of BSb, *J. Phys.:Condens. Matter*, 7995-8006 (1998).

FILIPPETTI A., Fiorentini V., Cappellini G., Bosin A., Anomalous relaxations and chemical trends at III-V semiconductor nitride nonpolar surfaces, *Phys. Rev. B* 59, 8026-8031, (1999).

FLESZAR A., LDA, GW, and exact-exchange Kohn-Sham scheme calculations of the electronic structure of *sp* semiconductors, *Phys. Rev. B*, 64, 245204-245215, (2001).

FOMICHEV A., Zhukova I. I., Polushina I. K., Investigation of the energy band structure of boron phosphide by ultra-soft X-ray spectroscopy, *J. Phys. Chem. Solids*, 1025-1032, (1968).

FRITSCH J., Pavone P., Schröder U., *Ab initio* calculation of the phonon dispersion in bulk InP and in the InP(110) surface, *Phys. Rev. B* 52, 11326-11334, (1995).

FRITSCH J., Schroder U., Density functional calculation of semiconductor surface phonons, *Physics Reports*, 309, 209-331, (1999).

GARCIA A., Cohen M. L., First-principles ionicity scales I. Charge asymmetry in the solid state, *Phys. Rev. B*, 47, 4215-4220, (1993).

GAY S. C. A., Jenkins S. J., Srivastava G. P., Comparative *ab initio* pseudopotential studies of (2x1) group V overlayers on Si(001), *J. Phys. Condens. Matter*, 10, 7751-7768, (1998).

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*, 55, 14043-14046, (1997).

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.* 38, 609-617 (2007).

HOFMEISTER A. M., Keppler E., Speck A. K., Absorption and reflection infrared spectra of MgO and other diatomic compounds, *Mon. Not. R. Aston. Soc.*, 345, 16-38, (2003).

HUANG D., Jin C., Wang D., Liu X., Wang J., Wang X., Crystal structure and Raman scattering in  $Zn_{1-x}Mg_xSe$  alloys, *Appl. Phys. Lett.*, 67, 3611-3613, (1995).

JENKINS S. J., Srivastava G. P., Comparative study of Sb bonding on group-IV semiconductor (001) substrates, *Phys. Rev. B*, 56, 9221-9223, (1997).

KALPANA G., Palanivel B., Thomas R. M., Rajagopalan M., Electronic and structural properties of MgS and MgSe, *Physica B*, 222, 223-228, (1996).

KARCH K., Bechstedt F., *Ab initio* lattice dynamics of BN and AlN: covalent versus ionic forces, *Phys. Rev. B*, 56, 7404-7415, (1997).

a KHENATA R., Sahnoun M., Baltache H., Rerat M., Rached D., Driz M., Bouhafs B., Structural, electronic, elastic and high-pressure properties of some alkaline-earth chalcogenides: An *ab initio* study, *Physica B*, 371, 12-19, (2006).

b KHENATA R., Bouhemadou A., Hichour M., Baltache H., Rached D., Rerat M., Elastic and optical properties of BeS, BeSe and BeTe under pressure, *Solid State Electronics*, 50, 1382 – 1388, (2006).

KONCZENWICZ L., Bigenwal P., Cloitre T., Chibane M., Ricou R., Testuo P., Briot O., Aulombard R. L., MOVPE growth of zincblende magnesium sulphide, *J. Cryst. Growth*, 159, 117-120, (1996).

LAWAETZ P., Stability of the Wurtzite Structure. *Phys. Rev. B*, 5, 4039-4045, (1972).

LEE S., Chang K. J., First-principles study of the structural properties of MgS-, MgSe-, ZnS-, and ZnSe-based superlattices, *Phys. Rev. B*, 52, 1918-1925, (1995).

LI T., Luo H., Greene R. G., Ruoff A. L., Trail S. S., DiSalvo F. J., High Pressure Phase of MgTe: Stable Structure at STP?, *Phys. Rev. Lett.* 74, 5232-5235, (1995).

LIU X., Furdyana J. K., Optical dispersion of ternary II-VI semiconductor alloys, *J. Appl. Phys.*, 95, 7754-7764, (2004).

LOHEIMEIER M., Van der vegt H. A., Van der silfhout R. G., Vlieg E., Thornton J. M., Macdonald L. E., Scholte P. M. L. O., Asymmetrical dimers on the Ge(001)-2 × 1-Sb surface observed using X-ray diffraction, *Surf. Sci.*, 275, 190-200, (1992).

LUO H., Ghandehari K., Grene 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*, 52, 7058-7064, (1995).

LYAKHOVSKAYA I., Zimkina T. M., Fomichev V. A., *Fiz. Tverd. Tela* (Leningrad), 174 (1970).

MADELUNG O. Landolt Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Physics of Group IV Elements and III-V Compounds, New Series, Group III, Vol. 17, Springer Verlag, Berlin, (1982).

a MANKEFORS S., Nilsson P. O., Kanski J., *Ab initio* calculations of the geometry and electronic structure of hydrogenated As/Ge(100), *Phys. Rev. B*, 60, 1933-1938, (1999).

b MANKEFORS S., Nilsson P. O., Kanski J., Hydrogenation of As/Ge(100) 2×1: a theoretical study of the surface electronic structure, *Surf. Sci.*, 433-435, 342-346, (1999).

MITTENDORF H., Röntgenographische und optische untersuchungen aufgedampfter schichten aus erdalkalichalkogeniden, *Z. Phys.*, 183, 113-129, (1965).

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)*, 98, 439 – 446, (1996).

MURNAGHAN F. D., The compressibility of media under extreme pressure, *Proc. Nat. cad. Sci.*, 30, 244–247, (1944).

NIENHAUS H., Mönch W., Surface phonons in InP(110), *Surf. Sci.*, 328, L561-L565, (1995).

NIENHAUS H., Phonons in {110} surfaces of III-V compound semiconductors, *Phys. Rev. B* 56, 13194-13201, (1997).

NAGELSTRAßER M., Dröge H., Steinrück 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*, 58, 10394-10400, (1998).

OKEYE C. M. I., Structural, electronic, and optical properties of beryllium monochalcogenides, *Eur. Phys. J. B*, 39, 5-19, (2004).

OKUYAMA H., Nakano K., Miyajima T., Akimoto K., Epitaxial growth of ZnMgSSe on GaAs substrate by molecular beam epitaxy, *J. Cryst. Growth*, 117, 139-143, (1992).

- 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*, 70, 155319-1 – 155319-10 (2004).
- PARKER S. G., Reinberg A. R., Pinnell J. E., Holton W. C., Preparation and Properties of  $Mg_xZn_{1-x}Te$ , *J. Electrochem. Soc.*, 118, 979-983, (1971).
- PASSLER R., Basic moments of phonon density of states spectra and characteristic phonon temperatures of group IV, III-V, and II-VI materials, *J. Appl. Phys.* 101, 093513 (2007).
- PEIRIS S. M., Campbell A. J., Heinz D. L., Compression of MgS to 54 GPa, *J. Phys. Chem. Solids*, 55, 413-419, (1994).
- PHILLIPS J. C., Ionicity of the chemical bond in crystals, *Rev. Mod. Phys.*, 42, 317-356, (1970).
- RABAH M., Abbar B., Al-douri Y., Bouhafs B., Sahraoui B., Calculation of structural, optical and electronic properties of ZnS, ZnSe, MgS, MgSe and their quaternary alloy  $Mg_{1-x}Zn_xS_ySe_{1-y}$ , *Material Sci. Eng. B*, 100, 163-171, (2003).
- RACHED D., Benkhattou N., Soudini B., Abbar B., Sekkal N., Driz M., Electronic structure calculations of magnesium chalcogenides MgS and MgSe, *Phys. Stat. Sol. b*, 240, 565-573, (2003).
- RACHED D., RABAH M., Benkhattou N., Khenata R., Soudini B., Al-Douri Y., Baltache H., First-principle study of structural, electronic and elastic properties of beryllium chalcogenides BeS, BeSe and BeTe, *Comput. Mater. Sci.* 37, 292-299 (2006).
- RAUNIO G., Almqvist L., Stedman R., Phonon Dispersion Relations in NaCl, *Phys. Rev.* 178, 1496-1501, (1969).
- RODRIGUEZ-HERNANDEZ P., Gonzalez-Diaz M., and Munoz A., Electronic and structural properties of cubic BN and BP, *Phys. Rev. B*, 51, 14705-14708 (1995).
- SANJURJO J. A., López-Cruz E., Vogl P., and Cardona M., Dependence on volume of the phonon frequencies and the ir effective charges of several III-V semiconductors, *Phys. Rev. B*, 28, 4579-4584 (1983).
- SCHMIDT W. G., Bechstedt F., Se/GaAs(110): energetics and structure, *Surf. Sci.*, 331–333, 557-563, (1995).
- SCHRÖTER T., Chasse A., Eckardt I., Tiedtke K., Wagner N., Zahn D. R. T., Nowak C. Hempelmann A., Richeter W., Selenium treated (110) surfaces of GaAs and InP: valence band and geometric structure, *Surf. Sci.* 307, 650-655, (1994).
- SRIVASTAVA G. P., Theory of semiconductor surface reconstruction, *Rep. Prog. Phys.* 60, 561-613, (1997).
- SRIVASTAVA G. P., Theoretical modelling of semiconductor surface, microscopic studies of electrons and phonons, World Scientific: Singapore, (1999).
- SRIVASTAVA G. P., Tütüncü H. M., Günhan N., First-principles studies of structural, electronic, and dynamical properties of Be chalcogenides, *Phys. Rev. B* 70, 085206-085212, (2004).

STEPANYUK V. S., Grigorenko A. A., Katnelson A. A., Farberovich O. V., Szasz A., Mikhailin V. V., Electronic structure and optical properties of MgS, *Phys. Stat. Sol. b*, 174, 289-294, (1992).

STIGLER W., Pavone P., Fritsch J., Structural and dynamical properties of Ge(001) in comparison with Si(001) and C(001), *Phys. Rev. B*, 58, 13686-13697, (1998).

SWARTS C. A., McGill T. C., Doddard W. A., Reconstruction of the (110) surface of III-V semiconductor compounds, *Surf. Sci.* 110, 400-414, (1981).

TALWAR D. N., Thaler G., Zaranek S., Peterson K., Linger S., Walker D., Holliday H., Lattice dynamical theory of thermal expansion and mode Grüneisen parameters in cubic BP, *Phys. Rev. B*, 55, 11293-11299 (1997).

TOUAT D., Ferhat M., Zaoui A., Dynamical behaviour in the boron III-V group: A first-principles study, *J. Phys.:Condens. Matter* 18, 3647-3654 (2006).

TÜTÜNCÜ H. M., Srivastava G. P., Surface phonons on InP(110) with the adiabatic bond-charge model, *Phys. Rev. B*, 53, 15675-15681 (1996).

TÜTÜNCÜ H. M., Srivastava G. P., Theory of localized phonons on III-V(110), *J. Phys. Chem. Solids* 58, 685, (1997).

TÜTÜNCÜ H. M., Jenkins S. J., Srivastava G. P., Atomic geometry, electronic structure, and vibrational properties of the Ge(001)(2×1) surface, *Phys. Rev. B*, 57, 4649 – 4655, (1998).

TÜTÜNCÜ H. M., Srivastava G. P., Atomic geometry, electronic structure, and vibrational properties of the AlSb(110) and GaSb(110) surfaces, *Phys. Rev. B* 59, 4925-4932, (1999).

TÜTÜNCÜ H. M., Miotto R., Srivastava G. P., Phonons on II-VI (110) semiconductor surfaces, *Phys. Rev. B* 62, 15797-15805, (2000).

TÜTÜNCÜ H. M., Srivastava G. P., Duman S., Guliyev E., Structural and dynamical properties of the Ge(001)/Sb(2×1) Surface, *Phys. Status Solidi (c)* 1, 3031 – 3034, (2004).

UMERSKI A., Srivastava G. P., Geometry and electronic structure of Se treated InP(110), *Surf. Sci.* 331, 590-593, (1995).

UPADHYAYA K. S., Yadav M., Upadhyaya G. K., Lattice dynamics of IV-VI ionic semiconductors: An application to lead chalcogenides, *Phys. Stat. Sol. b*, 229, 1129-1138. (2002).

VILLARS P., Calvert L. D., Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases, American Society of Metals: Metals Park, OH, (1985).

WAAG A., Heienke H., Scholl S., Becker C. R., Landwehr G., Growth of MgTe and Cd<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>Te thin films by molecular beam epitaxy, *J. Cryst. Growth*, 131, 607-611, (1993).

WAAG A., Fisher 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.*, 80, 792-796, (1996)



WAGNER V., Gundel S., Gerhard T., Litz TH., Lugauer H.-J., Fischer F., Waag A., Landwehr G., Kruse R., Becker Ch., Küster U., Optical and acoustical phonon properties of BeTe, *J. Cryst. Growth*, 184/185, 1067-1071, (1998).

WANG C. C., Cardona M., Fisher A. G., Preparation and optical properties of boron monophosphide, *RCA Rev.*, 25, 159 (1964).

WATARI J. L., Alves A., Ferraz A. C., Atomic structures of CdTe and CdSe (110) surfaces, *Brazilian Journal of Physics* 26, 271-273 (1996).

WETTLING W. and Windscheif J., Elastic constants and refractive index of boron phosphide, *Solid State Commun.*, 50, 33-34 (1983).

WOLVERSON D. Bird D. M., Bradford C., Prior K. A., Cavenett B. C., Lattice dynamics and elastic properties of zinc-blende MgS, *Phys. Rev. B*, 64, 113203-113207, (2001).

WOODRUFF D. P., Seymour D. L., McConville C. F., Riley C. E., Crapper M. D., Prince N. P., Jones R.G., Simple x-ray standing-wave technique and its application to the investigation of the Cu(111) ( $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ ) R30°-C1 structure, *Phys. Rev. Lett.* 58, 1460-1462, (1987).

WYCKOFF R. W. G., Crystal structures. John Wiley & Sons: New York, (1963).

YEH C. Y., Lu Z. W., Froyen S., Zunger A., Zinc-blende–wurtzite polytypism in semiconductors, *Phys. Rev. B* 46, 10086-10097, (1992).

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*, 33, 501-505, (1972).

YOU S. J., Min B. I., Freeman A. J., Crossroads electronic structure of MnS, MnSe, and MnTe, *Phys. Stat. Sol. b*, 241, 1411-1414, (2004).

ZAOUI A., Kacimi S., Yakoubi A., Abbar B., Bouhafs B., Optical properties of BP, BAs and BSb compounds under hydrostatic pressure, *Physica B-Condensed Matter*, 367, 195-204, (2005).

EK-1

**TÜBİTAK 105T087 NUMARALI PROJE KAPSAMINDA YAYINLANAN MAKALELER**

- 1) S. Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava, “First principles studies of ground state and dynamical properties of MgS, MgSe and MgTe in the rocksalt, zinc blende, wurtzite and nickel arsenide phases”, *Phys. Rev. B*, 73, 205201, 2006.
- 2) S. Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava, “Ground state properties of arsenic deposited on the Ge(001)(2x1) surface”, *Surf. Sci.*, 600, 3531, 2006.
- 3) M. Cangözen, H. M. Tütüncü, Y. Güney and G. P. Srivastava, “Ab initio calculations and dynamical properties of the Se:InP(1 1 0) and Te:InP(1 1 0)”, *Surf. Sci.* 600, 3526, (2006).
- 4) S. Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava, “Ground state properties of zinc-blende and wurtzite phases of MgS”, *Phys. Stat. Sol.(c)*, 4, 598, 2007.
- 5) S. Bağcı, H. M. Tütüncü, , G.P. Srivastava, “*Ab initio* calculations of structural, electronic and dynamical properties of BeSe(110) surface”, *Surf. Sci.*, 601, 4087, 2007.
- 6) S. Bağcı, H. M. Tütüncü, S. Duman, G.P. Srivastava, “Structural, electronic and lattice dynamical properties of the BeS(110) surface”, *J.Phys. Conf. Series*, 92, 012138, 2007.
- 7) S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava, “Structural and electronic properties of zinc blende BeTe and its (110) surface”, *Phys. Stat. Sol.(c)*, 4, 595, 2007.
- 8) S. Bağcı, H. M. Tütüncü, S. Duman, G.P. Srivastava, “Structure electronic properties and zone-centre phonon modes on the BeS(110) surface”, *AIP Conf. Proc.*, 899, 237, 2007.
- 9) S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü, G.P. Srivastava, “Ab initio calculations of the structure, electronic states and phonon dispersion of the BSb(110) surface”, *J.Phys. Conf. Series*, 100, 072013, 2008.
- 10) S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü, G.P. Srivastava, “Electronic and phonon properties of BX(110)(X=P,As and Sb) and BeY(110)(Y=S, Se and Te)” surfaces, Basılmak üzere uluslar arası bir dergiye gönderildi.

EK-2

**TÜBİTAK 105T087 NUMARALI PROJE KAPSAMINDA  
ULUSLAR ARASI KONFERANSLARDA SUNULAN BİLDİRİLER**

1) 23rd European Conference on Surface Science, September 4–9, 2005, Berlin, Germany. 'Ground state properties of arsenic deposited on the Ge(001)(2x1) surface', S. Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

2) Condensed Matter and Materials Physics(CMMP 2006), April 20-21, 2006, University of Exeter, Exeter, UK. ' Ab initio investigations of surface phonons on the Se:InP(110) surface', H. M. Tütüncü, G. P. Srivastava, M. Cangözen and Y. Güney.

3) Condensed Matter and Materials Physics(CMMP 2006), April 20-21, 2006, University of Exeter, Exeter, UK. 'Electronic and phonon structures of zinc blende Mg chalcogenides', S. Duman, H. M. Tütüncü, S. Bağcı and G. P. Srivastava.

4) International Conference on Superlattices, Nano-Structures and Nano-Devices (ICSNN 2006), July 30–August 4, 2006, İstanbul, Türkiye. 'Ground-state properties of zinc-blende and wurtzite phases of MgS', S.Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

5) International Conference on Superlattices, Nano-Structures and Nano-Devices (ICSNN 2006), July 30–August 4, 2006, İstanbul, Türkiye. 'Structural and electronic properties of zinc-blende BeTe and its (110) surface', S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

6) 6th International Conference of the Balkan Physical Union (BPU6), August 22–26, 2006, İstanbul, Türkiye. 'Structure, electronic properties and zone centre phonon modes on the BeS(110) surface', S. Bağcı, H. M. Tütüncü, S. Duman and G. P. Srivastava.

7) 24th European Conference on Surface Science(ECOSS24), September 4–8, 2006, Paris, France. 'Ab initio calculations of structural, electronic and dynamical properties of BeSe(110) surface', S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

8) 12th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter (Phonons 2007) July 15-20, 2007, Paris, France. 'Structural, electronic and lattice dynamical properties of BeS(110) surface', S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

9) 13th International Conference on Surface Science (ICSS-13) July 2-6 2007, Stockholm, Sweden. 'Ab initio calculation of structure electronic states and the phonon dispersion of the BSb(110) surface ', S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

**EK-3**

**TÜBİTAK 105T087 NUMARALI PROJE KAPSAMINDA  
TAMAMLANAN DOKTORA TEZLERİ**

**1) S. Duman, “Magnezyum Kalkojenlerin Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özellikleri”, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Mart 2007.**

**2) S. Bağcı, “III-N Tipi Yarıiletkenler ile Berilyum Kalkojenlerin Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özelliklerinin İncelenmesi”, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Nisan 2008.**

**TÜBİTAK**  
**PROJE ÖZET BİLGİ FORMU**

<b>Proje No: 105T087</b>
<b>Proje Başlığı: Geniş Bant Aralıklı Yarıiletkenlerin ve Yüzeylerinin Atomik, Elektronik ve Dinamik Özelliklerinin İncelenmesi</b>
<b>Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar: Prof. Dr. Hüseyin Murat TÜTÜNCÜ (Yürütücü), Yrd. Doç. Dr. Sıtkı DUMAN (Araştırmacı), Yrd. Doç. Dr. Sadık BAĞCI (Araştırmacı)</b>
<b>Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi: Sakarya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü</b> <b>Sakarya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Esentepe Kampüsü, 54187 Serdivan / SAKARYA</b>
<b>Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:</b>
<b>Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 01.11.2005 – 01.11.2008</b>
<b>Öz (en çok 70 kelime)</b> <b>Bu projenin ilk kısmında MgS, MgSe ve MgTe'nin dört farklı fazı(NaCl, ZnS, WZ ve NiAs) için yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri yoğunluk fonksiyon teorisi ile incelenmiştir. Projenin ikinci ve üçüncü aşamalarında katkılı yüzeyler Ge(001)(2x1)/As, Se:InP(110) ve Te:InP(110) ile ilgili bilgiler sunulmuştur. Projenin bundan sonraki bölümünde BeS, BeSe ve BeTe yarıiletkenlerinin (110) yüzeyleri araştırılmıştır. Son olarak BP(110), BAs(110) ve BSb(110) yüzeylerinin yapısal, elektronik ve titreşim özellikleri incelenmiştir.</b>
<b>Anahtar Kelimeler: Yoğunluk fonksiyon teorisi, yarıiletkenler, yüzey fiziği, yapısal özellikler, elektronik özellikler, dinamik özellikler</b>

#### **Projeden Yapılan Yayınlar:**

1. "Ab initio calculations of structural, electronic and dynamical properties of BeSe(1 1 0) surface", S. Bağcı, H.M. Tütüncü and G.P. Srivastava Surf. Sci., 601, 4087 (2007).
2. "First-principles studies of ground-state and dynamical properties of MgS, MgSe and MgTe in rocksalt, zinc blende, wurtzite and nickel arsenide phases", S. Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü, and G.P. Srivastava, Phys. Rev. B, 72, 205201 (2006).
3. "Ground state properties of arsenic deposited on Ge (001)(2x1) surface", S.Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G.P. Srivastava, Surf. Sci., 600, 3531 (2006).
4. "Ab initio calculations and dynamical properties of the Se:InP(110) and Te:InP(110)", M. Cangözen, H. M. Tütüncü, Y. Güney and G.P. Srivastava, Surf. Sci., 600, 3526 (2006).
5. "Ground state properties of zinc-blende and wurtzite phases of MgS", S. Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava, Phys. Stat. Sol.(c), 4, 598, 2007.
6. "Structural and electronic properties of zinc blende BeTe and its (110) surface", S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava, Phys. Stat. Sol.(c), 4, 595, 2007.
7. "Structural, electronic and lattice dynamical properties of the BeS(110) surface", S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava, J. Phys.: Conf. Series, 92, 012138, 2007.
8. "Structure, electronic properties and zone centre phonon modes on the BeS(110) surface", S.Bağcı, H. M. Tütüncü, S. Duman, G. P. Srivastava, AIP Conf. Proc. 899, 237, 2007
9. "Ab initio calculation of structure electronic states and the phonon dispersion of the BSb(110) surface", S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava. J. Phys.: Conf. Series, 100, 072013, 2008.

#### **Özeti basılmış uluslar arası kongre tebliğleri**

1. 12th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter (Phonons 2007) July 15-20, 2007, Paris, France
  - a) "Structural, electronic and lattice dynamical properties of BeS(110) surface", S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.
2. 13th International Conference on Surface Science (ICSS-13) July 2-6 2007, Stockholm, Sweden
  - a) "Ab initio calculation of structure electronic states and the phonon dispersion of the BSb(110) surface", S. Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.
3. 24th European Conference on Surface Science, September 4–8, 2006, Paris, France.
  - a) "Ab initio calculations of structural, electronic and dynamical properties of BeSe(110) surface", S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

**4. 6th International Conference of the Balkan Physical Union, August 22–26, 2006, İstanbul, Türkiye.**

a) “Structure, electronic properties and zone centre phonon modes on the BeS(110) surface”, S. Bağcı, H. M. Tütüncü, S. Duman and G. P. Srivastava.

**5. International Conference on Superlattices, Nano-Structures and Nano-Devices (ICSNN), July 30–August 4, 2006, İstanbul, Türkiye.**

a) “Ground-state properties of zinc-blende and wurtzite phases of MgS”, S.Duman, S. Bağcı, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

b) “Structural and electronic properties of zinc blende BeTe and its (110) surface”, S.Bağcı, S. Duman, H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava.

**6. Condensed Matter and Materials Physics(CMMP 2006), April 20-21, 2006, University of Exeter, Exeter, UK.**

a) “Electronic and phonon structures of zinc blende Mg chalcogenides”, S. Duman, H.M. Tütüncü, S. Bağcı and G. P. Srivastava.

b) “Ab initio investigations of surface phonons on the Se:InP(110) surface”, H. M. Tütüncü, G. P. Srivastava, M. Cangözen and Y. Güney.