

**T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**BİZMUT VE AZOT İÇEREN III-V GRUBU
YARIİLETKEN ALAŞIMLARIN FİZİKSEL
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

DOKTORA TEZİ

Battal Gazi YALÇIN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Metin ASLAN

Mart 2014

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

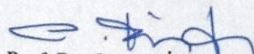
BİZMUT VE AZOT İÇEREN III-V GRUBU
YARIİLETKEN ALAŞIMLARIN FİZİKSEL
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

DOKTORA TEZİ

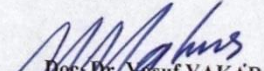
Battal Gazi YALÇIN

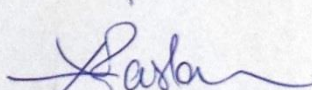
Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 07/03/2014 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği ile kabul edilmiştir.



Prof. Dr. Cuma BİNDAL

Jüri Başkanı

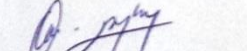

Doç. Dr. Yusuf YAKAR
Üye


Yrd. Doç. Dr. Metin
ASLAN

Üye


Yrd. Doç. Dr. Erdoğan
ŞENTÜRK

Üye


Doç. Dr. Osman CANKO
Üye

TEŞEKKÜR

Akademi hayatının önemli bir basamağı olan doktora eğitimim süresince hem akademik hem de sivil hayata bakışlarıyla, deneyim, tecrübe, bilgi ve birikimlerini şahsımla paylaşan sayın Yrd. Doç. Dr. Metin ASLAN'a, tez inceleme kurulunda yapıcı ve geliştirici katkılar sağlayan sayın Prof. Dr. Cuma BİNDAL'a, lisans, yüksek lisans ve doktora süresince birikimlerini genç nesillere aktarma düşüncesiyle daha fazla öğretmek için çalışan ve akademik hayatı seçmeme rehber olan sayın Doç. Dr. Sıtkı DUMAN ve sayın Doç. Dr. Sadık BAĞCI'ya, sonradan aramıza katıldığı halde çalışma disiplini ve düzeniyle çalışma ekibimize ivme kazandıran sayın Arş. Gör. Mehmet ÜSTÜNDAĞ'a, bölümümüzün değerleri öğretim üyeleri ve görevlilerine en içten teşekkürleri sunarım.

İyi ve kötü günümde, zor ve sıkıntılı zamanlarımda manevi desteğiyle her zaman yanımda olan eşime, anneme, babama ve tüm aile fertlerime ayrı ayrı teşekkür ederim.

Bu tez çalışması Sakarya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü (BAPK) (Proje No: 2012-50-02-045) tarafından desteklenmiştir. Desteğinden dolayı BAPK yönetici ve çalışanlarına teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca 2211-Yurtiçi Lisansüstü Burs Programı kapsamında tez çalışmalarım için sağlamış olduğu maddi destekten ötürü Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu'na (TÜBİTAK) teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	ii
İÇİNDEKİLER	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	vi
ŞEKİLLER LİSTESİ	viii
TABLolar LİSTESİ	xii
ÖZET	xiii
SUMMARY	xiv

BÖLÜM 1.

GİRİŞ	1
-------------	---

BÖLÜM 2.

TEORİ VE UYGULANIŞI.....	5
2.1. Giriş.....	5
2.2. Çok Cisim Problemi.....	5
2.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı	6
2.4. Hartree-Fock Yaklaşımı.....	8
2.5. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi.....	8
2.5.1. Thomas-Fermi modeli.....	9
2.5.2. Hohenberg-Kohn modeli.....	9
2.5.3. Kohn-Sham denklemleri	10
2.5.4. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)	13
2.5.5. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA)	14
2.5.6. LDA ve GGA sınırlamaları	14
2.6. Teorinin Uygulanışı: WIEN2k programı	16

BÖLÜM 3.

İNCELENEN MALZEMELERİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ.....	19
3.1. Giriş.....	19
3.2. İncelenen Malzemelerin Yapısal Özellikleri	20
3.2.1. İncelenen malzemelerin taban durumu kristal yapısı: ZnS kristal fazı.....	21
3.2.2. Basit kübik örgü (SC)	21
3.2.3. Yüzey merkezli kübik örgü (FCC).....	22
3.2.4. ZnS (çinko-sülfür) kristal fazı.....	24
3.2.5. Ters örgü	25
3.2.6. Basit kübik örgünün birinci Brillouin bölgesi.....	26
3.2.7. Yüzey merkezli kübik örgünün birinci Brillouin bölgesi	27
3.2.8. Kritik noktalar	29
3.2.9. Yapısal sonuçlar ve tartışmalar	30
3.2.10. Yapısal özellikler	31
3.2.11. İkili bileşiklerin yapısal özellikleri.....	32
3.2.12. Üçlü alaşımların yapısal özellikleri.....	34
3.2.13. GaInAsN dörtlü alaşımının yapısal özellikleri.....	38
3.3. İncelenen Malzemelerin Elektronik Özellikleri.....	39
3.3.1. Bloch fonksiyonları.....	43
3.3.2. Katıların bant teorisi.....	45
3.3.3. Katıların bant yapısı	49
3.3.4. Elektronik sonuçlar ve tartışmalar	50
3.3.5. İkili bileşiklerin elektronik özellikleri.....	51
3.3.6. Üçlü ve dörtlü alaşımların elektronik özellikleri	58
3.3.7. GaAsN ve GaAsBi üçlü alaşımlarının bükülme parametreleri...	69
3.4. İncelenen Malzemelerin Optiksel Özellikleri	74
3.4.1. Optiksel olayların sınıflandırılması.....	74
3.4.2. Kompleks dielektrik sabiti ($\tilde{\epsilon}$)	79
3.4.3. Kompleks kırılma indisi (\tilde{n}) ve soğurma katsayısı (α).....	80
3.4.4. Yansıma katsayısı (R)	82
3.4.5. Enerji kayıp fonksiyonu (L).....	83
3.4.6. İkili bileşiklerin optiksel özellikleri	83

3.4.7. Üçlü ve dörtdü alařımların optiksel özellikleri	97
--------------------------------------------------------------	----

BÖLÜM 4.

SONUÇLAR VE ÖNERİLER	115
----------------------------	-----

KAYNAKLAR.....	120
----------------	-----

ÖZGEÇMİŐ	126
----------------	-----

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

a	: Örgü parametresi
au	: Atomik kütle birimi
α	: Soğurma katsayısı
B	: Hacim modülü
DFT	: Yoğunluk fonksiyonel teorisi
δ	: Türev işlemcisi
E_{HF}	: Toplam Hartree-Fock enerjisi
$E_{Vdış}$: Bir sistemde dış potansiyelden kaynaklanan enerji
E_e	: Elektronik toplam enerji
e	: Elektron yükü
e_0	: Başlangıç boşluk oranı
ϵ_0	: Serbest uzayın dielektrik sabiti
$\tilde{\epsilon}(\omega)$: Kompleks dielektrik fonksiyonu
$\epsilon_1(\omega)$: Kompleks dielektrik fonksiyonun reel kısmı
$\epsilon_2(\omega)$: Kompleks dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı
ϵ	: Kompleks dielektrik sabiti
ϵ_r	: Bağlı dielektrik sabiti
$f_{(kn)}$: Kristalin n 'inci öz değerine karşılık gelen fermi dağılım fonksiyonu
F_{HK}	: Hohenberg ve Kohn yoğunluk fonksiyonu
Φ_i	: Tek parçaçığın dalga fonksiyonları
GGA	: Genelleştirilmiş gradient yaklaşımı
H	: Hamilton işlemcisi
H_{KS}	: Kohn-Sham Hamiltonu
h	: Planck sabiti

k_n	: Kristalin n'inci öz deęerine karřılık gelen dalga vektörü
k_β	: Boltzman sabiti
κ	: Sönüm katsayısı
LDA	: Yerel yoğunluk yaklaşımı
$L(\omega)$: Enerji kayıp fonksiyonu
M	: Çekirdeğin kütlesi
m_e	: Elektron kütlesi
μ_r	: Ortamın manyetik geçirgenlięi
$n(\omega)$: Kırılma indisi fonksiyonu
\tilde{n}	: Kompleks kırılma indisi
$n(r)$: Taban durumu elektronik yük yoğunluęu
\hat{O}	: Durum yoğunluęu işlemcisi
P	: Momentum matris elemanı
Ψ	: Dalga fonksiyonu
\vec{R}	: Çekirdeğin konum vektörü
R	: Yansıma katsayısı
Ry	: Rydberg enerji birimi (13.6 eV=0.5 Hartree)
\vec{r}	: Elektronun konum vektörü
\hat{T}	: Kinetik enerji işlemcisi
TSS	: Temel soęurma sınırı
ω	: Işıęın frekansı
\hat{V}	: Potansiyel enerji işlemcisi
V_H	: Hartree potansiyel enerjisi
V_x	: Deęiş tokuş potansiyel enerjisi
V_c	: Karřılıklı iliřki potansiyel enerjisi
V_{xc}	: Deęiş tokuş ve karřılıklı etkileřim potansiyel enerjisi
Z	: Atom sayısı

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1. Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış diyagramı.....	12
Şekil 2.2. Bir kristalin toplam enerjisini WIEN2k programı kullanılarak bilgisayarla yapılan hesaplamalardaki akış diyagramı.....	18
Şekil 3.1. Basit kübik örgünün geleneksel birim hücresi.....	21
Şekil 3.2. Yüzey merkezli kübik örgünün geleneksel birim hücresi.....	22
Şekil 3.3. Yüzey merkezli kübik örgü için ilkel birim hücre (Wigner-Seitz hücresi)	23
Şekil 3.4. ZnS kristal yapının geleneksel birim hücresi.....	25
Şekil 3.5. Basit kübik örgünün indirgenmiş birinci Brillouin bölgesi	27
Şekil 3.6. Yüzey merkezli kübik örgünün indirgenmiş birinci Brillouin bölgesi	29
Şekil 3.7. $Ga_{1-x}In_xAs$ ve $GaAs_{1-y}N_y$ materyallerinin örgü sabiti-konsantrasyon değişimi grafiği	37
Şekil 3.8. $GaAs_{1-y}N_y$ ve $GaAs_{1-x}Bi_x$ materyallerinin örgü sabiti-konsantrasyon değişimi grafiği	37
Şekil 3.9. $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ dörtlü yarıiletken alaşımın örgü parametresinin alaşımlanan atomla değişiminin gösterimi	38
Şekil 3.10. Serbest elektronun enerjisi	40
Şekil 3.11. Ψ_1 ve Ψ_2 fonksiyonlarının olasılıkları. Siyah noktalar pozitif iyonların konumlarını göstermektedir, Stokes (1987).....	42
Şekil 3.12. Bir boyutlu metalde bir elektronun enerjisi	43
Şekil 3.13. Brillouin bölgesindeki elektronların enerjileri, Stokes (1987)	44
Şekil 3.14. Enerji bantları ve enerji bölgeleri, Stokes (1987).....	45
Şekil 3.15. Çok sayıda atom bir araya getirildiğinde elektron enerji seviyelerinin atomlar arasındaki r uzaklığına göre değişimi. (a) İki atomlu sistemde her seviye ikiye ayrılır. (b) Üç atomlu sistemde her seviye üçe ayrılır. (c) N sayıda atomlu sistemde enerji seviyeleri bant şeklinde genişler. Her bant içindeki N sayıda seviye birbirine o kadar yakındır ki sürekli dağılmış gibi bakılabilir, Taylor (2003).....	46

Şekil 3.16. Birbirinden uzakta N atom bir araya getirilerek oluşturulan katıda atomik enerji seviyeleri bantlar halinde genişler. Sol tarafta gösterilen katı enerji bantları sağdaki grafikte atomların r_0 denge konumundaki kesit alınarak bulunur	47
Şekil 3.17. GaAs ikili yarıiletken bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği.....	52
Şekil 3.18. InAs ikili yarıiletken bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği.....	53
Şekil 3.19. GaN ikili yarıiletken bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği.....	55
Şekil 3.20. InN ikili yarıiletken bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği.....	56
Şekil 3.21. GaBi ikili bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği	57
Şekil 3.22. $Ga_{0.5}In_{0.5}As$ yarıiletken alaşımı için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği.....	59
Şekil 3.23. $Ga_{1-x}In_xAs$ üçlü yarıiletken alaşımı için yüksek simetri noktalarındaki enerjinin konsantrasyonla değişimi	60
Şekil 3.24. $GaAs_{0.5}N_{0.5}$ yarıiletken alaşımı için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği.....	61
Şekil 3.25. $GaAs_{1-x}N_x$ üçlü yarıiletken alaşımı için yüksek simetri noktalarındaki enerjinin konsantrasyonla değişimi	63
Şekil 3.26. $GaAs_{0.5}Bi_{0.5}$ yarıiletken alaşımı için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği.....	64
Şekil 3.27. $GaAs_{1-x}Bi_x$ üçlü alaşımı için yüksek simetri noktalarındaki enerjinin konsantrasyonla değişimi	66
Şekil 3.28. $Ga_{0.5}In_{0.5}As_{0.5}N_{0.5}$ yarıiletken alaşımı için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği	67
Şekil 3.29. $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ dördü yarıiletken alaşımı için yüksek simetri noktalarındaki enerjinin konsantrasyonla değişimi	69
Şekil 3.30. GaAsBi ve GaAsN üçlü alaşımların bükülme parametrelerinin konsantrasyon yüzdesine göre değişimi	71

Şekil 3.31. (a) GaAsN ve GaInAs, (b) GaAsN ve GaAsBi için örgü parametrelerinin yasak bant aralığı enerjilerine göre değişimi.....	72
Şekil 3.32. (a) GaAsN, (b) GaAsBi için farklı Bi ve N konsantrasyonlarına karşılık gelen iletkenlik bandının minimum, valans bandının maksimum enerji değişimi	73
Şekil 3.33. Işığın optik bir ortamda yansıma, yayılma ve iletimi	74
Şekil 3.34. Optik ortam içerisinde meydana gelen olaylar; kırılma, soğurma, lüminesans ve saçılma	75
Şekil 3.35. N sayıda atomlu sistemde enerji seviyeleri. Her bant içindeki N sayıda seviye birbirine o kadar yakındır ki sürekli dağılmış gibi bakılabilir	76
Şekil 3.36. GaAs yarıiletkeni için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu.....	84
Şekil 3.37. (a) GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu.....	86
Şekil 3.38. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonu.....	87
Şekil 3.39. GaAs yarıiletkeni için hesaplanan soğurma spektrumu.....	89
Şekil 3.40. (a) GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan soğurma spektrumu	91
Şekil 3.41. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan yansıma spektrumu.....	92
Şekil 3.42. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan kırılma indisi spektrumu.....	94
Şekil 3.43. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu	95
Şekil 3.44. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu	96
Şekil 3.45. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu	98
Şekil 3.46. GaInAsN dördü yarıiletken alaşımı için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu.....	99
Şekil 3.47. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonu.....	100

Şekil 3.48. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonu	102
Şekil 3.49. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan soğurma spektrumları	103
Şekil 3.50. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan soğurma spektrumu	104
Şekil 3.51. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan yansıma spektrumları	106
Şekil 3.52. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan yansıma spektrumu	107
Şekil 3.53. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan kırılma indisi spektrumları	108
Şekil 3.54. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan kırılma indisi spektrumu	110
Şekil 3.55. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumları.....	111
Şekil 3.56. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu	112
Şekil 3.57. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumları.....	113
Şekil 3.58. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu	114

TABLolar LİSTESİ

Tablo 3.1. İkili yapıların LDA ve GGA kullanılarak elde edilen yapısal sonuçları ..	33
Tablo 3.2. Hesaplanan üçlü yarıiletken alaşımların yapısal sonuçları	35
Tablo 3.3. Hesaplanan dörtlü yarıiletken alaşımın yapısal sonuçları.....	39
Tablo 3.4. Çalışılan ikili bileşiklerin yasak bant enerjileri	58
Tablo 3.5. GaInAs üçlü yarıiletkeninin yasak bant enerjileri	60
Tablo 3.6. GaAsN üçlü yarıiletkeninin yasak bant enerjileri	62
Tablo 3.7. GaAsBi üçlü alaşımının yarıiletken özellik gösteren konsantrasyonlarına ait yasak bant enerjileri	65
Tablo 3.8. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımının yasak bant enerji değerleri	68
Tablo 3.9. GaAsN ve GaAsBi üçlü bileşiklerinin bükülme parametreleri	70

ÖZET

Anahtar kelimeler: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, WIEN2k, III-V Grubu Alaşım, Fiziksel Özellikler, Bükülme Parametresi

Bu çalışmanın amacı teknolojiye büyük öneme sahip 1x1x1 süper-hücre kullanılarak III-V grubu GaAs, InAs, GaN, InN ve GaBi ikili bileşiklerinin, GaInAs, GaAsN ve GaAsBi üçlü ve GaInAsN dördü alaşımlarının fiziksel özelliklerinin çinko-sülfür (ZnS) yapıda araştırılmasıdır. Fiziksel özellikler kapsamında bu malzemelerin yapısal, elektronik ve optiksel özellikleri incelendi. Elektronların değiş-tokuş korelasyon enerjileri için yerel yoğunluk ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımları kullanıldı. Yapılan hesaplamalar yoğunluk fonksiyonel teorisini esas alan WIEN2k koduyla elde edildi.

Öncelikle çalışılan malzemelerin taban durumu örgü parametresi hesaplandı. Elde edilen örgü parametreleri deneysel ve teorik çalışmalar uyumlu bulunması yapılacak olan elektronik ve optiksel çalışmaların doğruluğunu arttıracakı tespit edildi. Üçlü alaşımlar için elde edilen örgü parametrelerinin Vegard kanunuyla uyduğu görüldü. Daha sonra elektronik özellikler kapsamında incelenen ikili bileşiklerden GaBi metalik özellik gösterirken, diğer ikili bileşikler ise açık şekilde doğrudan bant aralığına sahip yarıiletken davranış gösterdiği tespit edildi. Üçlü ve dördü alaşımlar ise, GaAsBi üçlü alaşımı hariç, tüm konsantrasyonlarda doğrudan bant aralığına sahip yarıiletken oldukları görüldü. GaAsBi ise %44.2 Bi konsantrasyonuna kadar yarıiletken bu orandan büyük (>%44.2) konsantrasyonlarda ise metalik özellik gösterdiği elde edildi. GaAsBi alaşımının sahip olduğu geniş bant aralığı yakın kızıl ötesi ve kızıl ötesinde yer alması bu malzemenin özellikle Tera-Hertz uygulamaları ve fiber-optik alanlarda kullanılabileceği tespit edildi. Elektronik özellikler kapsamında GaAsN ve GaAsBi üçlü alaşımlarının elektronik bant yapılarında meydana gelen bükülme parametreleri incelenerek bizmutun valans bandını azotun ise iletkenlik bandını etkilediği tespit edildi. Son olarak tez kapsamında incelenen tüm malzemeler için kompleks dielektrik fonksiyonu hesaplandı. İmajiner dielektrik fonksiyonunda meydana gelen temel soğurma sınırı malzemelerin yasak bant enerjilerine karşılık geldiği tespit edildi. Reel ve imajiner dielektrik fonksiyonlar kullanılarak diğer optiksel sabitler olan soğurma katsayısı, yansıma spektrumu, kırılma indisi, sönüm katsayısı ve enerji kayıp fonksiyon spektrumları elde edildi.

EXAMINATION OF PHYSICAL PROPERTIES OF III-V SEMICONDUCTOR ALLOYS INCLUDING BISMUTH AND NITROGEN

SUMMARY

Key Words: Density Functional Theory, WIEN2k, III-V Group Alloys, Physical Properties, Bowing Parameter

The aim of this work is investigation of physical properties of GaAs, InAs, GaN, InN and GaBi binary compounds, GaInAs, GaAsN and GaAsBi ternary and GaInAsN quaternary alloys of III-V group using 1x1x1 supercell at zinc-blende (ZnS) structure. As part of physical properties, the structural, electronic and optical properties have been investigated. The local density and generalized gradient approximation are used for exchange and correlation energy. The calculations are obtained by WIEN2k code based on density functional theory.

Firstly, ground state lattice parameter is calculated for studied materials. The obtained lattice parameters are in good agreement with experimental and theoretical studies. That result increases reliability of electronic and optical results. The calculated lattice parameters of ternary alloys are coincidence with Vegard's law. Within the scope of electronic properties, GaBi compound behaves metallic, but other binary compounds behaves semiconductor with direct band gap. With the exception of GaAsBi alloy, all of ternary and quaternary alloys have direct band gap for all concentration. Reach up to % 44.2 Bi concentration, GaAsBi ternary alloy behaves semiconductor, but bigger than that concentration it becomes metal material. So, GaAsBi alloy has a large infra-red spectrum which is important for tera-hertz and fiber-optic applications. And, the bowing parameter of GaAsN and GaAsBi is obtained. Also, it is found that bismuth effects valance bands, while nitrogen effects conduction band. Finally, complex dielectric function is calculated for all studied materials. It is determined that, fundamental absorption limit is correspond to forbidden band energy of materials. Using the real and imaginer dielectric function, the other optical constants, such as absorption coefficient, reflectivity, refractive index, extinct coefficient and energy loss function, are obtained.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

III-V yarıiletken bileşikler ve alaşımlar üzerine yapılan çalışmalar son yarım yüzyıldır hem teorik hem de deneysel olarak devam etmektedir. Epitaksiyel büyütme tekniklerinin (MOVPE, MBE) gelişmesiyle bu bileşiklerin araştırılmasına yeni yollar açılmıştır. Yarıiletkenler, hem teknolojik hem de ekonomik bakımdan büyük öneme sahiptirler. Yarıiletkenlerin güvenilir elektronik özelliklerinin incelenmesi seri üretimde de çok önemli yer tutmaktadır. Ayrıca, bileşik yarıiletkenler elektrikten ışık üretiminde ve ışıktan da tekrar elektrik üretiminde çok verimli olmaları, yarıiletken lazerler, dedektörler ve LED yapımında anahtar malzeme olmalarına olanak sağlamaktadır. Sonuç olarak, teknolojiye çok önemli yer tutan bu materyallerin temel özelliklerini incelemek, onlar üzerine yapılacak olan uygulamalara büyük katkı sağlayacaktır.

İkili ($A^{III}B^V$) III-V grubu bileşiklerinin bilimdeki hetero-yapı fabrikasyon uygulamaları, görünür bölgede ayarlanabilir aygıt tasarımlarındaki uygulanabilirlikleri, optoelektronik alandaki kullanılabilirlikleri ve yüksek frekans bölgelerinde çalışabilir özelliğe sahip olmaları, Gupta (2009), bu malzemelere büyük önem kazandırmaktadır. Bu ikililerden biri olan GaAs, bir çok yüksek hızlı elektronik ve opto-elektronik aletler için hem fiziksel özellikleri bakımından hem de teknolojik öneminden dolayı çok özel bir yere sahiptir, Adachi (1990). Diğer taraftan, hem GaAs hem de InAs yarıiletken bileşikleri mikrodalga, opto-elektronik ve elektronik aletlerin üretiminde önemli yere sahiptirler, Vurgaftman (2003). GaAs ve InAs malzemelerinin sahip oldukları bu özellik ışık yayan diyotlar (LED), lazerler, entegre devreler, modülatörler ve foto-dedektör aygıtları için hem ticari hem de yeni teknolojik uygulamalara sağlam bir temel oluşturur, Vurgaftman (2003). Ayrıca, GaAs, InAs alttaşları ve bu ikililerden elde edilen InGaAs üçlü yarıiletken alttaşları silisyum (Si) elementine kıyasen daha yüksek mobilitelere sahip olduklarından yüksek performansa sahip malzemeler olma potansiyeline sahiptirler, Kim (2008).

III-V yarıiletken bileşiklerinden olan GaN ve InN büyük yasak enerji aralığına sahip olmaları bu malzemelerin yüksek frekansa duyarlı elektronik cihazların tasarımında, geniş bir elektronik alanda, optiksel veri depolamada, optoelektronik aygıtlarda, Talwar (2002), yeşil spektrumdan yakın mor-ötesi (N-UV) spektrumuna kadar kısa dalgaboylu emitörler ve dedektörler için, Takeuchi (2010), kullanılabilmelerine imkan sağlamaktadır. Ayrıca, son on yılda bu nitritlerin teknolojideki gelişmelerinin artması özellikle ışık yayan diyotların (LED) ve lazer diyotların (LD) ticari olarak geliştirilmelerine olanak sağlamıştır, Talwar (2002).

Günümüzde ikili bileşikler kullanılarak elde edilen üçlü ve dördü alaşımlar hem teknolojik hem de ticari açıdan çok büyük önem kazanmıştır. Alaşımlama, yasak bant enerjisi, örgü sabiti, kırılma indisi gibi parametrelerin kontrol edilebilirliği nedeniyle bant yapı mühendisliğinde önemli bir daldır. Yarıiletken alaşımlama, yarıiletken bant aralığı ve diğer parametre değerlerini ayarlayarak geniş uygulama alanlarına yönelik yarıiletken cihazların üretilebilmesini sağlar. Çok geniş bir uygulama alanını kapsadığı ve gelecekte yeni uygulama alanları açılması beklendiği için özellikle III-V grubu yarıiletken alaşımlar günümüzde esaslı bir şekilde araştırılmaya devam etmektedir. Genellikle alaşımlar, kuantum kuyuları gibi düşük boyutlu elektronik sistemlerde yaygın olarak kullanılırlar.

III-V grubu yarıiletken alaşımlarından biri olan Galyum nitrür arsenür (GaNAs) 1992'de elde edildi, Weyers, (1992), ve 1994'de de lazer diyotlarda kullanıldı, Kondow (1994). Seyreltilmiş N içeren GaAsN, küçük ve doğrudan bant aralığına sahip bir materyaldir. Bu özelliklerinden dolayı bu materyaller, telekomünikasyon uygulamaları için önemli olan 1.3 -1.55 μm aralığında dalga boyu yaymaları için uygun şartlara sahiptirler. Nitrojen (N) içeren III-V grubu yarıiletken alaşımlar elektronik ve opto-elektronik uygulamalarında da çok önemli bir pozisyona sahiptirler. Diyot lazerler, foto-detektörler, çok eklemlili yüksek verimli güneş pilleri, Mitomo (2005); Heroux (1999); Geisz (2002), bunlara örnek oluşturabilecek birkaç uygulama aygıtlarıdır.

Diğer bir III-V grubu olan III-Bi ailesi küçük bant aralığına sahip olmaları bu malzemeleri son zamanlarda önem sahibi yapmıştır. III-V bileşiklerinin Bi ile

birleştirilmesiyle yarıiletken ve yarımetal bileşikler içeren yeni III-V grubu yarıiletken alaşımların oluşmasına olanak sağlar. Bu yüzden III-(V-Bi) alaşımları diyot lazerlerin aktif bölgesi ve foto-detektörlerin kızıl-ötesi ve yakın kızıl-ötesi civarında çalışabilecek güçlü potansiyele sahip malzemelerdir, Ferhat (2006). GaAsBi malzemesi gibi Bizmut içeren üçlü yarıiletken alaşımı, güneş pilleri, optoelektronik, yarıiletken lazerler ve optiksel detektörler gibi uygulama alanlarına sahip olmasından dolayı yoğun ilgi görmektedir, Reshak (2011). Ayrıca hem yarımetal hem de yarıiletken malzemeler içeren GaAsBi üçlü alaşımının MBE ve MOVPE gibi deneysel yöntemlerle büyütülebilmesi, Abdiche (2010), bu alaşımın hem spintronik ile ilgili aygıtlarda hem de uzun dalgaboylu emitörler ve detektörlerde kullanım potansiyeli yüksek malzemeler arasında yer almasına olanak sağlar.

90'lı yılların ortalarında Kondow'un, Kondow (1996), dördü yarıiletken alaşım olan GaInAsN'nin GaAs ile 1 eV'da örgü parametresinin uyuşumu ile ilgili yayınladığı çalışmadan sonra III-V grubu alaşımlar ve bu yarıiletken grubu ile ilgili çalışmalar artmıştır. Günümüzde de yarıiletken alaşımlar elektronik ve optoelektronik cihaz teknolojisinde oldukça yaygın olarak kullanılmaktadırlar.

Bu çalışmanın amacı, birçok uygulama alanına sahip olması nedeniyle teknolojik ve ticari önemi olan III – V grubu ikili (GaAs, GaBi, GaN, InAs, InN), üçlü (GaAsN, InAsN, GaAsBi) ve dördü (GaInAsN) yarıiletken alaşımların, yapısal, elektronik ve optiksel özelliklerinin teorik olarak incelenmesidir. Yapılacak olan teorik hesaplamalar sonucunda pratik olarak üretilmesi oldukça güç olan çok geniş konsantrasyon aralığındaki yarıiletken alaşımların incelenmesi sağlanacaktır. Bu çalışma sonucunda elde edilen bulguların, bu materyallerin teknolojiye aktarılması aşamasında yapılacak olan deneysel çalışmalara öncülük etmesi hedeflenmektedir.

Bu çalışmada varılması planan bir diğer hedef ise deneysel olarak elde edilmesi zor olan çok düşük konsantrasyonlarda (1/10000), materyallerin elektronik ve buna bağlı olarak da optiksel özelliklerinin değişimini incelemek ve akademik literatüre kazandırmaktır. Bu sayede deneysel çalışmalarda çok daha hızlı yol alınmasının önü açılacaktır. Çalışmanın önemini ve özgün değerini arttıran diğer bir önemli faktör ise

çalışma kapsamında incelenecek olan malzemelerin çok düşük konsantrasyonlarda daha önce incelenmemiş olmalarıdır.

Bu veriler ışığında, bu çalışmanın ilk aşamasında, tezin omurgasını oluşturacak olan Bizmut (Bi) ve Nitrojen (N) içeren III – V grubu ikili (GaAs, GaBi, GaN, InAs, InN), üçlü (GaAsN, InAsN, GaAsBi) ve dördü (GaInAsN) yarıiletken alaşımların taban durumu enerjileri hesaplanacaktır. Bu enerjiler yardımıyla incelenecek materyallerin yapısal özellikleri (örgü parametreleri, sertlikleri) araştırılacaktır.

İkinci aşamada ise taban durumu enerjilerine karşılık gelen örgü sabitleri yardımıyla, ikili, üçlü ve dördü yarıiletken alaşımların elektronik bant yapıları incelenerek bu materyallerin yasak enerji aralıkları belirlenecektir. Ayrıca, bu aşamada değerlik elektronlarının hem parçalı hem de toplam durum yoğunlukları da elde edilecektir.

Son aşamada da, bu malzemelerin kompleks dielektrik fonksiyonunu elde edilerek optiksel özellikleri araştırılacaktır.

BÖLÜM 2. TEORİ VE UYGULANIŞI

2.1. Giriş

Alaşımların elektronik yapıları oldukça karmaşıktır. Bu karmaşık yapıyı belirlemeye yönelik birçok deneysel teknik ve teorik model geliştirilmiştir. Teorik modellemeler özellikle kristal yapı halindeki katı cisimlerin yapısal, elektronik ve optiksel özelliklerinin analizinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu teorik modellerden biri de Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisine “Density Functional Theory” (DFT) dayalı modellemedir. Bu teorik modelleme özellikle kristal yapı halindeki katı cisimlerin yapısal ve elektronik analizinde yaygın olarak kullanılmaktadır. DFT, diğer çok cisim teorilerine göre hem daha basit, hem de nicel olarak doğru sonuçlar veren güçlü bir tekniktir. Bu modelleme ile yapılan hesaplamalar deneysel yöntemlerle yapılan hesaplamalar ile uyum içinde olmaktadır. Bu bölümde öncelikle DFT'nin dayandığı temellerden biri olan çok cisim problemi ve Born-Oppenheimer yaklaşımı anlatılacaktır. Daha sonra yoğunluk fonksiyon teorisinin dayandığı temel esaslar hakkında bilgi verilecektir.

2.2. Çok Cisim Problemi

Katı bir cismi oluşturan atomlar pozitif yüklü protonlar ve negatif yüklü elektronları ihtiva etmektedir. Pozitif yüklü parçacıklar (çekirdek), negatif yüklü parçacıklara (elektronlar) göre daha ağırdır. Eğer bir katıda N tane çekirdek varsa, $N+ZN$ kadar parçacık birbirleriyle elektromanyetik etkileşim halindedir. Böyle çok sayıda parçacığın birbiriyle etkileştiği duruma kuantum çok cisim problemi denir ve DFT'nin dayandığı temellerden biridir. Etkileşen çekirdek ve elektronlardan oluşan bir sistemin Hamilton denklemi aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{R}_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (2.1)$$

Burada M ve \vec{R} sırasıyla çekirdeğin kütlelerini ve konum vektörünü, m_e ve \vec{r} ise elektronun kütlelerini ve konum vektörünü göstermektedir. Denklem 2.1'in ilk iki terimi sırasıyla çekirdeğin ve elektronun kinetik enerjilerini, son üç terimi ise elektron-çekirdek, elektron-diğer elektronlar ve çekirdek-diğer çekirdekler arasındaki coulomb etkileşimini göstermektedir. Eş. 2.1 ile gösterilen denklem çok-cisim problemidir. Bu denklem zamandan bağımsız Shrödinger denkleminin çözümüyle belirlenir:

$$H\Psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_j\}) = E\Psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_j\}) \quad (2.2)$$

Burada, E sistemin enerjisi ve $\Psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_j\})$ çok cisimli sistemin dalga fonksiyonudur. Bu denklemin çözümü oldukça zor olduğundan denklemin çözümü ile ilgili bazı yaklaşımlara ihtiyaç duyulur. Bu yaklaşımlardan bir tanesi Born-Oppenheimer (adyabatik yaklaşım olarak da adlandırılır) yaklaşımıdır. Bu yaklaşım elektron ve çekirdeklerin hareketlerinin ayrı ayrı incelenmesi ilkesine dayanır.

2.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Born-Oppenheimer yaklaşımı, Born (1927), 1927 yılında yeni keşfedilmeye başlanan kuantum kimyasının ilk yıllarında Born ve Oppenheimer tarafından önerilmiştir ve bu yaklaşımda elektron ve çekirdeklerin hareketleri ayrı ayrı incelenir.

Born-Oppenheimer yaklaşımı temelde elektron ve çekirdeğin kütleleri karşılaştırıldığında çekirdeğin kütlelerinin elektronun külesinden çok daha ağır olduğunu ($\frac{M}{m} = 1836.1$) ve bu yüzden çekirdeğin hareketinin, elektronun hareketinden çok daha yavaş olduğunu ifade etmektedir. Bu nedenle bu yaklaşımda çekirdeği bir bölgede hareketsiz varsayıp, elektronlar hareket halinde düşünülebilir.

Bu yaklaşımı dikkate aldığımızda denklem 2.1’de çekirdeğin kinetik enerjisini temsil eden 1. terim de $1/M_i$ oranı çok küçük olacağından ihmal edilerek sistemin toplam hamiltoniyeninden çıkarılır. Bunun yanında elektron-çekirdek etkileşimleri kaldırılmaz ve elektronlar çekirdekler arasındaki Coulomb potansiyelini hissederler (son terim). Elektronik enerji özdeğeri E_e , çekirdeğin seçilen konumları olan \vec{R} ’ye bağlıdır. Bu konumları küçük basamaklarda değiştirerek ve Schrödinger denklemini çözerek, elektronik enerji özdeğeri, \vec{R} ’nin bir fonksiyonu olarak bulunur. Bu durumda elektron gazının kinetik enerjisi, elektron–elektron etkileşiminden kaynaklanan potansiyel enerji ve dış çekirdekten kaynaklanan potansiyel enerjiler dikkate alınarak Eş. 2.1 ifadesi Eş. 2.3’e indirgenmektedir. Hartree atomik birimlerinin $e=\hbar=m_e=4\pi/\epsilon_0=1$ olarak kabul edilmesi durumunda sistemin hamiltoniyeni

$$H_e = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_{i,j} \frac{Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.3)$$

şeklini alır. Burada elektronik hamiltoniyeni de içine alan Schrödinger denkleminin çözümü

$$H_e \psi_e(\{\vec{r}_j\}, \{\vec{R}_j\}) = E_e(\{\vec{R}_j\}) \psi_e(\{\vec{r}_j\}, \{\vec{R}_j\}) \quad (2.4)$$

şeklinde olup, son eşitlikteki $\psi_e(\{\vec{r}_j\}, \{\vec{R}_j\})$ ifadesi elektronik dalga fonksiyonudur. Born-Oppenheimer yaklaşımı yaygın bir şekilde kullanılmasına rağmen, her zaman geçerli olmayabilir. Bu yaklaşım, elektron ile çekirdeğin hareketi birbirinden ayrılmadığında geçersizdir. Örneğin uyarılmış moleküllerde çekirdek o kadar hızlı hareket eder ki, elektron bu hareketi aynı anda fark edemez, Szabo (1989). Eş. 2.4 ile belirtilen denklemin çözümünde birçok yaklaşım kullanılmaktadır. Bu yaklaşımlardan biri de Hartree-Fock yaklaşımıdır. Bu yaklaşım da sistemin dalga fonksiyonu tek elektron dalga fonksiyonlarından oluşan bir Slater determinantıyla ifade edilir. Fakat bu yaklaşım elektronlar arası etkileşim konusunda yetersizdir. Diğer bir deyişle tek elektron spin yörüngemsilerinin antisimetrik bir çarpımı olduğu varsayılır.

2.4. Hartree–Fock Yaklaşımı

Hartree 1928 yılında, Hartree (1928), atomların taban durumu enerjisini dalga fonksiyonlarına bağlı olarak elde ederek, bu alanda çok başarılı bir adım atmıştır. Bu yaklaşımda çok sayıda elektronun dalga fonksiyonu, tek elektron fonksiyonlarının çarpımı olarak ifade edilmiştir. Hartree–Fock yaklaşımı elektronların birbirinden bağımsız hareket ettiğini kabul eder. Fakat Coulomb etkileşmesi elektronların birbirine bağlı olduğunu ifade eder. Ayrıca bu yaklaşım elektronların antisimetri özelliğinin olmadığını kabul etmektedir. Bu durum ise Pauli dışarlama ilkesiyle çelişmektedir. Hartree-Fock yaklaşımının sahip olduğu bu olumsuzluklar bu yaklaşımın sadece tek elektrona sahip sistemler de başarılı olduğunu ortaya koyar. 1930 yılında antisimetri problemini ortadan kaldırmak için Fock ve Slater, Fock (1930), antisimetri özelliğine sahip dalga fonksiyonunu Slater determinantının kullanılmasıyla çözülebileceğini öngördüler. Bu dalga fonksiyonunun kullanılmasıyla da toplam enerji minimize edilebilecektir. Fakat kullanılan dalga fonksiyonunun elektronlar arasındaki etkileşimi ihmal etmesi önemli bir sorun olmaktadır. Bu yüzden son yıllarda elektron sistemlerinin incelenmesinde dalga fonksiyonlarından ziyade elektron yoğunluğu tercih sebebi olmuştur. Günümüzde elektron yoğunluğunu kullanarak taban durumu enerjisini elde eden en yaygın kullanımlardan biri yoğunluk fonksiyonel teorisidir.

2.5. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

Temeli yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan *ab initio* teorileri, kristallerin yapısal, elektronik ve dinamik özelliklerini araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilmeleri ve bu metotların hesaplanmasında sadece atom numarası ve kristal yapıya ihtiyaç duyulmasıdır. DFT, elektron yük yoğunluğunu $n(\vec{r})$ temel değişken kabul ederek çok elektrona sahip sistemlerin taban durumu özelliklerini belirler. Ayrıca, katıların elektronik yapılarını başarılı şekilde hesaplayabilen çok önemli bir yaklaşımdır. DFT temel değişken olarak elektron yoğunluğunu kullandığından dolayı, çok büyük sistemleri bile hesaplama olanağına sahiptir. Yoğunluk fonksiyonel teorisinin temelleri, 1920’lerde Thomas ve

Fermi'nin, Fermi (1927); Thomas (1927); Fermi (1928); Lundqvist (1983), yaptığı çalışmaları temel alan Hohenberg-Kohn, Hohenberg (1964), ve Kohn-Sham, Kohn (1965), tarafından atılmıştır.

2.5.1. Thomas-Fermi modeli

DFT'de karmaşık N-elektron dalga fonksiyonu $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$ yerine çok daha basit olan elektron yoğunluğu $n(\vec{r})$ göz önüne alınır. Bununla ilgili ilk çalışmalar Thomas – Fermi (TF), Fermi (1927); Thomas (1927), tarafından 1927'de yarı-klasik bir yaklaşım kullanılarak yapılmıştır. Bu modelde temel varsayım, çok-parçacık sistemindeki elektronik dağılımın istatistiksel olarak ele alınabileceğidir. Bu modelde kinetik enerji ifadesi,

$$E_{\text{TF}}(n) = \frac{3}{10} (6\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int n^{\frac{5}{3}}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.5)$$

eşitliğiyle verilmektedir. (2.5) denklemi TF kinetik enerji fonksiyoneli olarak adlandırılır. TF teoremi önemli bir adım olmasına rağmen bir atomun değiş-tokuş enerjisini dikkate almamasından dolayı sınırlıdır.

2.5.2. Hohenberg–Kohn modeli

Hohenberg ve Kohn, Hohenberg (1964), 1964 yılında çok cisim problemini yoğunluk fonksiyonel teorisini geliştirerek çözmüşlerdir. Hohenberg ve Kohn yoğunluk fonksiyonel teorisini iki teorem ile açıklamışlardır.

Birinci Hohenberg–Kohn (HK) teoremi, N-elektron sistemi ve $v(\vec{r})$ dış potansiyeli yerine, temel değişken olarak $n(\vec{r})$ elektron yoğunluğunu kabul eder. Küçük bir sabit eklenmesiyle $v(\vec{r})$ dış potansiyelini, $n(\vec{r})$ elektron yoğunluğu belirler, Hohenberg (1964). “Dış potansiyel elektron yoğunluğu ile belirlenir” şeklinde ifade edilir.

İkinci HK teoremi elektron yoğunluğuna bağlı enerji fonksiyonelinin, $E(n)$, taban durumu enerjisini ve yoğunluğunu belirlemek için yeterli olduğunu söyler. İkinci HK teoremi enerji varyasyon ilkesine dayanır, Hohenberg (1964). Bu teorem, TF modelindeki varyasyon ilkesini doğrulamaktadır, yani $E_{TF}(n)$ ifadesi DFT’de yer alan $E(n)$ ’nin yaklaşık bir ifadesidir.

2.5.3. Kohn–Sham denklemleri

Kohn–Sham 1965 yılında elde ettikleri eşitliklerle, hem taban durumu enerjisini minimum yapan $n(r)$ temel hal elektronik yük yoğunluğunu tanımlamışlardır hem de dalga fonksiyonu ile ilgili bilgi olmadığından $n(\vec{r})$ yoğunluklu birbirleriyle etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistemin kinetik enerjisi hakkında bilgi edinmişlerdir, Kohn (1965).

Çok elektronlu bir sistemin taban durumu enerjisini aşağıdaki enerji fonksiyoneli yardımıyla minimize edebiliriz:

$$E[n] = \int n(\vec{r})v(\vec{r})d\vec{r} + F[n] \quad (2.6)$$

Burada $F[n] = T[n] + V_{ee}(n)$ olup, birinci terim kinetik enerji ile ikinci terim elektron-elektron etkileşim enerjisinin toplamından oluşmaktadır. $F[n]$, dış $v(\vec{r})$ potansiyelinden bağımsız olarak tanımlanır ve evrensel bir fonksiyondur. Hesaplamaları kolaylaştırmak için Kohn ve Sham, Kohn (1965), kinetik enerji fonksiyonu $T[n]$ için bir yaklaşım önerdiler. Burada $F[n]$ fonksiyoneli için daha genel bir ifade yazabiliriz:

$$F[n] = T_s[n] + J[n] + E_{xc}[n] \quad (2.7)$$

Eş. 2.7’deki $T_s[n]$ ifadesi bir sistemdeki etkileşmeyen elektronların kinetik enerjisi, $J[n]$ ifadesi klasik elektrostatik itme terimi ve son olarak $E_{xc}[n]$ ifadesi ise değiş-tokuş korelasyon enerjisi olarak tanımlanmaktadır. Sonuç olarak, Eş. 2.6’nın minimum olabilmesi için:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} \Psi_i = \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{\text{eff}}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \sum_j^N \varepsilon_{ij} \Psi_j(\vec{r}) \quad (2.8)$$

şartını sağlaması gerekmektedir. Burada, ε_{ij} Lagrange çarpanıdır. $v_{\text{eff}}(\vec{r})$ ifadesi de elektron yoğunluğu tarafından belirlenen etkin potansiyel olarak tanımlanmaktadır. Eş.(2.8)'deki $v_{\text{eff}}(\vec{r})$ ifadesini aşağıdaki gibi daha genel olarak ifade edebiliriz:

$$\begin{aligned} v_{\text{eff}}(\vec{r}) &= v(\vec{r}) + \frac{\delta J[\mathbf{n}]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta E_{\text{xc}}[\mathbf{n}]}{\delta n(\vec{r})} \\ &= v(\vec{r}) + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + v_{\text{xc}}(\vec{r}) = v(\vec{r}) + v_{\text{H}}(\vec{r}) + v_{\text{xc}}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Burada $v_{\text{xc}}(\vec{r})$ 'ye değiş-tokuş korelasyon potansiyeli ve $v_{\text{H}}(\vec{r})$ ifadesine de klasik elektrostatik itme terimi denir. Dolayısıyla verilen bir $v_{\text{xc}}(\vec{r})$ için aşağıdaki tek elektron denklemlerini (N tane) çözersek

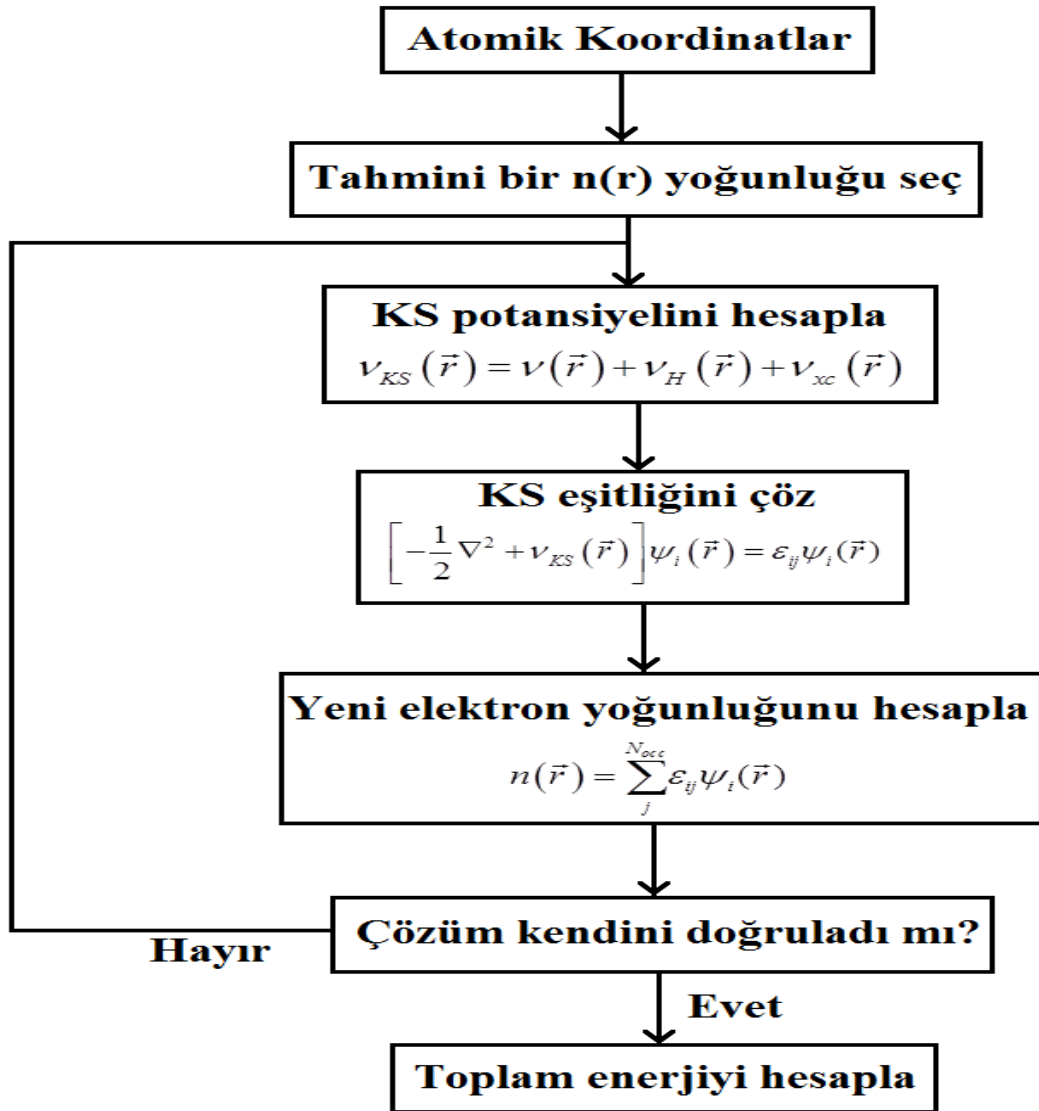
$$n(\vec{r}) = \sum_j^N \varepsilon_{ij} \Psi_j(\vec{r}) \quad (2.10)$$

niceliğini hesaplayabiliriz.

Yukarıdaki Eş. 2.8, Eş. 2.9 ve Eş. 2.10 denklemlerine Kohn-Sham denklemleri denir, Kohn (1965). Bu denklemler kendini doğrulayarak çözülebilmektedir. Bu yüzden bunlar kendini doğrulayabilen Kohn-Sham eşitlikleri olarak bilinirler. Bu doğrulama işlemi Şekil 2.1'de verilen algoritma diyagramıyla açık şekilde gösterilmiştir, Ming (1995); Payne (1992). Eş. 2.8'de yer alan $v_{\text{eff}}(\vec{r})$ etkin potansiyel ifadesi değiş-tokuş korelasyon enerjisi $E_{\text{xc}}[n]$ cinsinden Eş. 2.9'da gösterilmiştir. $E_{\text{xc}}[n]$ ifadesini daha açık olarak aşağıdaki ifadeyle belirtilebilir:

$$E_{\text{xc}}[n] = E[n] - T_s[n] - V_{\text{dış}}[n] - H[n] \quad (2.11)$$

Eş.2.11 ile verilen deęiş-tokuş korelasyon enerjisinin elde edebilmenin bir çok yolu vardır. Burada sadece en yaygın olarak kullanılan yerel yoğunluk yaklaşımı ‘‘Local Density Approximation’’ (LDA) ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı ‘‘Generilized Gradian Approximation’’ (GGA) açıklanacaktır.



Şekil 2.1. Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış diyagramı

2.5.4. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)

Yukarıda ifade edilen KS denklemleri incelendiğinde $E_{xc}[n]$ değiş-tokuş korelasyon enerjisi için bir belirsizlik olduğu görülmektedir. $E_{xc}[n]$ niceliğinin hesaplanması büyük güçlükler içerir ve halen DFT'nin geliştirilmesinde temel rol oynar.

$E_{xc}[\rho]$ ifadesi için en basit yaklaşım, yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) olup bu yaklaşımda uzayın her noktasında değiş-tokuş korelasyon enerjisi homojen elektron gazı (sabit yoğunluk) ile yer değiştirilir. LDA yaklaşımında, katıdaki her bir noktanın belirli bir elektron yoğunluğuna sahip olduğu kabul edilir. Bu durumda LDA'da katının toplam değiş-tokuş korelasyon enerjisi:

$$E_{xc}^{LDA}[n] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}(n) d\vec{r} \quad (2.12)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\varepsilon_{xc}(n)$ niceliği, $n(\vec{r})$ yoğunluklu homojen bir elektron gazı için parçacık başına değiş-tokuş korelasyon enerjisidir. Bu enerjiye karşılık gelen değiş-tokuş korelasyon potansiyeli:

$$v_{xc}^{LDA}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}^{LDA}}{\delta n(\vec{r})} = \varepsilon_{xc}(n(\vec{r})) + n(\vec{r}) \frac{\partial \varepsilon_{xc}(n)}{\partial n} \quad (2.13)$$

eşitliğiyle ifade edilir. Böylece KS denklemleri LDA altında:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v(\vec{r}) + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + v_{xc}^{LDA}(\vec{r}) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (2.14)$$

halini alır. Bu ifadenin kendi içinde tutarlı olarak çözülmesi, literatürde Kohn-Sham yerel yoğunluk yaklaşımı (KS-LDA) veya kısaca LDA yöntemi olarak adlandırılır.

2.5.5. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA)

Yerel yoğunluk yaklaşımının başarısı, bir adım daha ileri gidilerek genelleştirilmiş gradyan yaklaşımının (GGA) oluşmasına imkân sağlamıştır. Bu yaklaşım yerel yoğunluk yaklaşımına ek olarak, her noktada elektronik yük yoğunluğunun $n(\vec{r})$ yanı sıra bu yoğunluğun $|\nabla n|$ olarak ifade edilen gradyentinin de hesaplanması gerektiği fikrini temel alır. GGA birçok sistem için LDA'ya göre bağ uzunlukları ve toplam enerjiyi daha iyi tahmin eder, Sprick (1996). Bu yaklaşımın genel ifadesi:

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int F_{xc}[n(\vec{r}), |\nabla n(\vec{r})|] d\vec{r} \quad (2.15)$$

şeklindedir. Eş.(2.15)'daki F_{xc} fonksiyonelinin çeşitli formları birçok bilim adamı tarafından önerildi. Bunlar arasında Perdew-Burke-Wang, Perdew (1996a), Lee-Yang-Parr, Lee (1988), Perdew-Wang, Perdew (1992a), Perdew-Shewey, Perdew (1992b), ve Perdew-Burke-Ernzerhof, Perdew (1996b), örnek olarak gösterilebilir. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımında, değiş-tokuş korelasyon enerjisi bir F_{xc} faktörü LDA üzerine eklenerek aşağıdaki şekilde genişletildi:

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc} F_{xc}(r_s, s) d\vec{r} \quad (2.16)$$

2.5.6. LDA ve GGA sınırlamaları

DFT hesaplamaları taban durumu özelliklerini (örgü parametresi) hesaplamada çok başarılı sonuçlar elde etmektedir. DFT özellikle katıların elektronik özelliklerini elde etmede çok kullanışlı bir yöntemdir. Günümüzde DFT, süper bilgisayarlar sayesinde binlerce atomlu sistemlere de başarılı şekilde uygulanabilmektedir.

Değiş-tokuş korelasyon enerjisini elde edebilmenin bir yolu LDA'dır. LDA yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Bunun temel sebebi birçok sistemin deneye yakın taban durum özelliklerini (bağ uzunlukları, kohesif enerjileri) belirleyebilmesindedir. Yapılan hesaplamalarda bağ enerji değerleri ve sertlik modülü deneysel değerlerden büyük; örgü sabiti değerleri ise deneysel değerlerden küçük sonuçlar vermektedir.

LDA, yüzey, ara yüzey ve dinamik hesaplamalar için fonon dispersiyon bağıntısı hesaplamalarında iyi sonuçlar vermektedir, Giannozzi (1991); Gonze (1992); Wang (1985). Bunun yanında dielektrik sabitleri ve buna bağlı büyüklüklerin hesaplamalarında, ayrıca zayıf bağlarda ve özellikle Hidrojen bağlarında, Laasonen (1992), çok iyi sonuçlar vermemektedir. Ayrıca LDA hesaplamaları 4d ve 5d gibi güçlü korelasyonlarda GGA'ya göre daha başarılıdır, Khein (1995). LDA'da elde edilen metalik bağlanma enerjileri deneysel verilerden ortalama %20-30 daha büyük sonuçlar vermektedir, Kumar (1994).

Son yıllarda gradyent-düzeltilmeli fonksiyoneller kullanılmaya başlandı. Özellikle hidrojen bağlarının tanımlanmasında Becke-Lee-Yang-Parr (BLYP), Ceperley (1980); Becke (1992), iyi sonuçlar vermiştir, Sprik (1996). Katılarda ve moleküllerde GGA hesaplarında bağ uzunlukları ve örgü sabitleri deneysel sonuçlardan büyük, sertlik modülü ise küçük çıkmaktadır. GGA yaklaşımında LDA'ya göre daha ideal bir yoğunluk düşünülerek hesaplar yapılır. Ayrıca GGA hesaplamaları bağ uzunlukları ve H-bağına sahip sistemlerin enerji ve geometrilerinin tanımlanmasında da başarılı sonuçlar vermiştir, Sprik (1996). Yüzey enerji hesaplamalarında ise LDA hesaplamalarına göre daha düşük sonuçlar vermektedir. Bunun sebebi muhtemelen GGA'nın zayıf bağlar öngörmesinden kaynaklanmaktadır. Ayrıca GGA kullanılarak elde edilen kohesif enerji hesaplamalarındaki doğruluk LDA'dan daha başarılı sonuçlar vermektedir. Reaksiyon bariyerleri hesaplarında GGA daha iyi sonuç verir, Hammer (1994); Johnson (1994). GGA hesaplamaları, 3d ve daha hafif metaller için LDA'ya göre daha başarılıdır, Fritsche (1993).

LDA veya GGA hesaplamaları yarıiletkenlerde uygulandığında bant aralığı düşük hesaplanmaktadır. Bunun sebebi, DFT'ye dayalı LDA ve GGA potansiyellerinin yetersiz olmasıdır. Diğer bir deyişle, değiş-tokuş korelasyon enerjisinin incelenen sistem için en doğru şekilde elde edilmesi DFT'nin başarısını arttıracaktır. Günümüzde hala uygun korelasyon potansiyellerinin elde edilmesi için çalışmalar devam etmektedir. Bant aralığı hesaplamalarında, zamana bağlı DFT (ZB-DFT), Gross (1985); Bartolotti (1986), ve hem LDA hem de GGA korelasyonunu içeren hibrid fonksiyonları daha iyi sonuçlar vermektedir. Bu metotlar standart LDA veya

GGA'ya göre daha kompleks potansiyeller içerdiğinden uygulama aşamasında güçlü bilgisayar sistemlerini gerektirir.

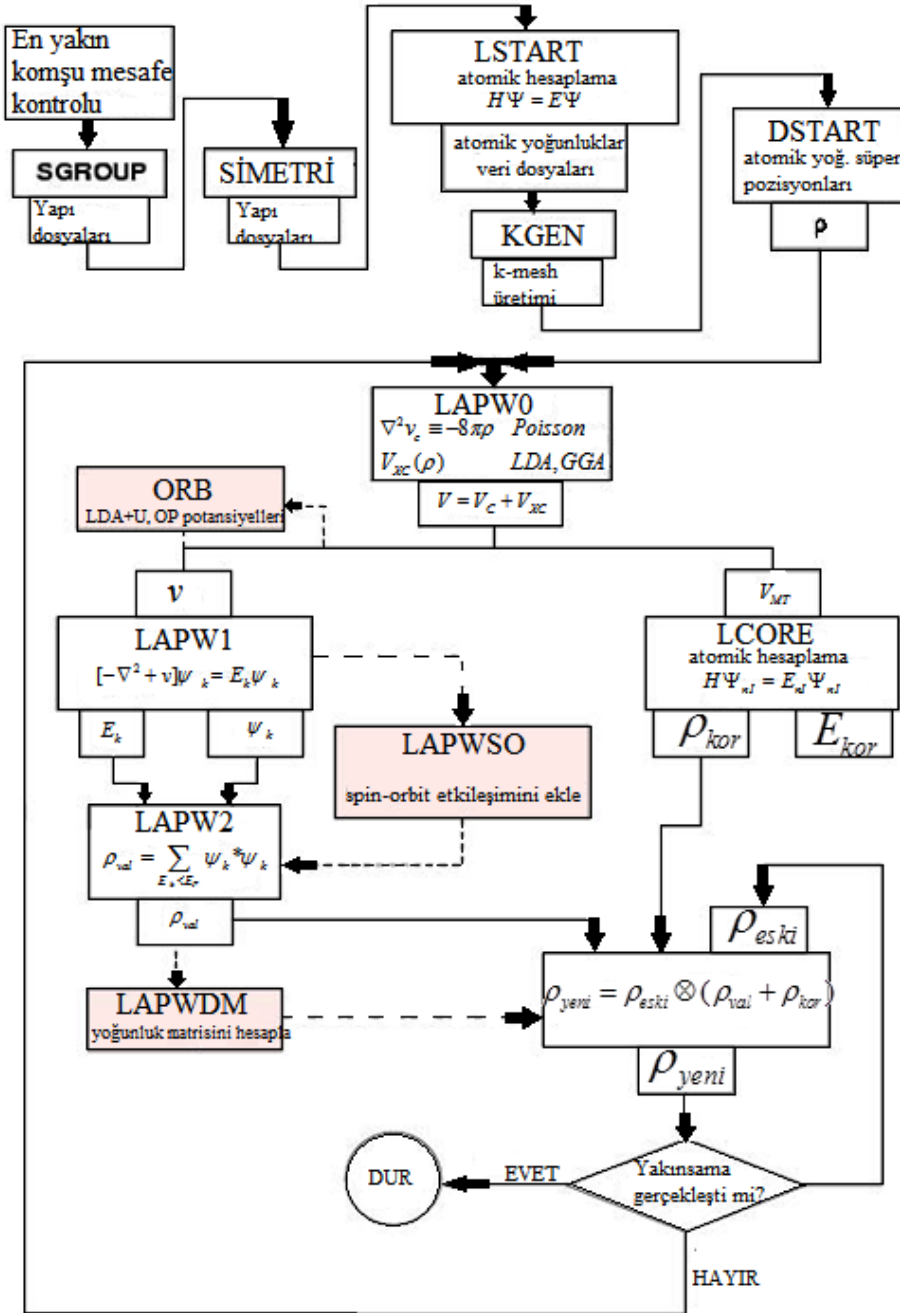
2.6. Teorinin Uygulanışı: WIEN2k programı

Bu çalışmada yoğunluk fonksiyonel teorisi tabanlı WIEN2k, Blaha (2012), simülasyon programı kullanılarak III–V grubu ikili (GaAs, GaBi, GaN, InAs, InN) bileşiklerin, üçlü (GaAsN, InAsN, GaAsBi) ve dörtlü (GaInAsN) yarıiletken alaşımların yapısal, elektronik ve optiksel özellikleri incelendi. Yapılan birçok deneysel ve teorik çalışma bu malzemelerin ZnS yapıda kristalleştiklerini göstermektedir, Kanoun (2004); Ferhat (2006); Reshak (2011); Li (2012); Aslan (2012). Dolayısıyla, tez kapsamında incelenen malzemeler için tüm hesaplamalar çinko sülfür (ZnS) fazında yapıldı.

Bu çalışmada WIEN2k simülasyon programı kullanılarak bilgisayarla yapılan hesaplamalarda Şekil 2.2'de görülen algoritma diyagramı kullanıldı, Blaha (2012). Kullanılan program, tahmini bir elektron yoğunluğunu kullanarak enerjinin minimum değerini bulmaya çalışmaktadır. Enerjinin minimum değerini veren elektron yoğunluğu fonksiyonu aranılan doğru taban durumu yoğunluk fonksiyonu olur ve bundan sonraki işlemler bu değer esas alınarak yapılır. Bu denklemlerin öz-uyumlu olarak çözülmesi gerekir.

Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim etkileri hem LDA hem de GGA kullanılarak ele alındı. Toplam enerjii elde etmek için, Khon-Sham dalga fonksiyonlarını $R_{mt}K_{max}=7$ 'ye genişletildi (Burada, R_{mt} düzlem dalga yarıçapı, K_{max} ise maksimum ters örgü vektörünü temsil etmektedir). Atomik küreler içinde kullanılan parçalı dalgalar $l_{max}=10$ 'a genişletildi. Yük yoğunluğu Fourier genişlemesi için en büyük G vektörünün büyüklüğü $12 Ry^{1/2}$ olarak tanımlandı. Kor seviyelerini değerlik seviyelerinden ayırmak için kesilme (cut-off) enerji değeri $-6 Ry$ olarak belirlendi. Brillouin bölgesini tanımlamak için Monkhorst ve Pack'ın (MP) standart özel k-noktaları tekniği kullanıldı, Monkhorst (1996).

Bu çalışmada, ters uzayda I. Brillouin bölgesinin tanımlanmasında ikili bileşikler için $12 \times 12 \times 12$, üçlü ve dörtlü alaşımlar için ise $4 \times 4 \times 4$ MP örgüsü (mesh) kullanılmasının yeterli olduğu hesaplandı. Daha fazla k-noktasının seçimi sonuçları önemli derecede değiştirmemekle birlikte CPU zamanını olumsuz etkilemektedir. Alaşımlar için mevcut bilgisayar altyapısının yetersiz olmasından dolayı geometri optimizasyonu tercih edilemedi. Çalışılan malzemeler için yapısal optimizasyon hesaplanarak denge durumundaki örgü parametresi (a_0), denge durumundaki hacim (V_0), sertlik modülü (B_0) ve sertlik modülünün basınca göre birinci türevi (B') Murnaghan, Murnaghan (1944), eşitliklerinin minimum eğrileri yardımıyla sıfır basınç altında elde edildi. Denge durumunda elde edilen örgü parametresi kullanılarak malzemelerin elektronik ve optiksel özellikleri hesaplandı.



Şekil 2.2. Bir kristalin toplam enerjisini WIEN2k programı kullanılarak bilgisayarla yapılan hesaplamalardaki akış diyagramı

BÖLÜM 3. İNCELENEN MALZEMELERİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ

3.1. Giriş

III-V grubu yarı iletken bileşikler ve alaşımlar elektronik ve optoelektronik gibi teknolojik alanlarda kullanılmaya elverişli oldukları için literatürde geniş bir şekilde incelenmişlerdir. Özellikle alaşımlar, yasak bant aralığı, örgü sabiti, kırılma indisi gibi parametrelerin kontrol edilebilirliği nedeniyle bant yapısı mühendisliğinde önemli bir yere sahiptirler. Yarıiletken alaşımlama, yarıiletken bant aralığı ve diğer parametre değerlerini ayarlayarak geniş uygulama alanlarına yönelik yarıiletken cihazların üretilebilmesini sağlar. Çok geniş bir uygulama alanını kapsadığı ve gelecekte yeni uygulama alanları açılması beklendiği için özellikle III-V grubu yarıiletken alaşımlar günümüzde yoğun bir şekilde araştırılmaya devam etmektedir. Dolayısıyla III-V grubu malzemelerin fiziksel özelliklerinin (yapısal, elektronik ve optik) araştırılması güncelliğini korumaktadır.

Alaşımlama yapılırken en önemli kriterlerden biri yer değiştirecek atomların aynı bağ sayısına sahip olmalarıdır. Bu durum keyfi atom değişimlerinin önüne geçer. Alaşımların yapısına bakılırsa günümüzde en fazla üçlü ($A_{1-x}B_xC$ veya AB_xC_{1-x}) ve dördü ($A_{1-x}B_xC_{1-y}D_y$ veya $AB_xC_yD_{1-x-y}$) alaşım tiplerine rastlanmaktadır. Dördü alaşımların elde edilebilmesi için hem üçlü alaşımlara hem de ikili bileşiklere ihtiyaç duyulur. Örneğin, $A_{1-x}B_xC_{1-y}D_y$ dördü alaşımı için $A_{1-x}B_xC$, $A_{1-x}B_xD$, $AC_{1-y}D_y$, $BC_{1-y}D_y, \dots$ vb. gibi üçlü alaşımlara ve AC , AD , BC , BD gibi ikili bileşiklere ihtiyaç vardır. Diğer taraftan üçlü alaşımlar için ise ikili bileşiklere ihtiyaç vardır. $A_{1-x}B_xC$ üçlü alaşımı için AC ve BC ikili bileşiklerine ihtiyaç duyulur. Bu alaşımlarda alt indis olarak gösterilen x ile $1-x$ veya y ile $1-y$ konsantrasyon değişimleri uygun bağ sayısına sahip yer değiştirebilecek atomları göstermektedir. Örneğin, $A_{1-x}B_xC$ üçlü alaşımı için A ve B atomları yer değiştirmeye uygun atomlar olmaktadır.

Yukarıdaki açıklama baz alınarak, tez kapsamında GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımının fiziksel özelliklerini araştırabilmek için hem GaInAs hem de GaAsN üçlü alaşımlarına, bu üçlü ve dörtlü alaşımlar için de GaAs, InAs, InN ve GaN ikili bileşiklerinin incelenmesine gerek duyulur. Diğer taraftan tez kapsamında incelenen diğer bir üçlü yarıiletken olan GaAsBi alaşımı için GaAs ve GaBi bileşiklerine ihtiyaç duyulur. Dolayısıyla, incelenen malzemelerin fiziksel özelliklerini (yapısal, elektronik ve optiksel) elde etmek için öncelikle ikili bileşiklerin, GaAs, InAs, GaN, InN ve GaBi, daha sonra üçlü alaşımların, GaAsN, GaInAs ve GaAsBi, en sonunda da dörtlü alaşımın, GaInAsN, özellikleri incelenecektir.

Tez kapsamında güncelliğini koruyan GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımının, GaAsN, GaInAs ve GaAsBi üçlü alaşımlarının ve bu üçlü-dörtlü alaşımları oluşturan GaAs, InAs, GaN, InN ve GaBi ikili bileşiklerinin öncelikle yapısal özellikleri araştırılacaktır. Yapısal özelliklerin araştırılmasıyla bu malzemelerin sahip oldukları taban durumu enerjileri ve bu enerji yardımıyla hesaplamalarda çok önemli rol sahibi olan denge durumu örgü sabiti (a_0), malzemenin sertliği ile ilgili bilgiyi veren bulk modülü (B_0) ve bulk modülünün basınca göre birinci türevi (B') hesaplanacaktır. Hesaplanan denge durumu örgü sabiti kullanılarak tüm malzemelerin elektronik özellikleri (elektronik bant grafikleri ve durum yoğunlukları) araştırılacaktır. Son aşamada ise denge durumu örgü parametresi kullanılarak optiksel sabitler (reel ve imajiner dielektrik fonksiyonu, soğurma katsayısı, kırılma indisi...) hesaplanacaktır.

3.2. İncelenen Malzemelerin Yapısal Özellikleri

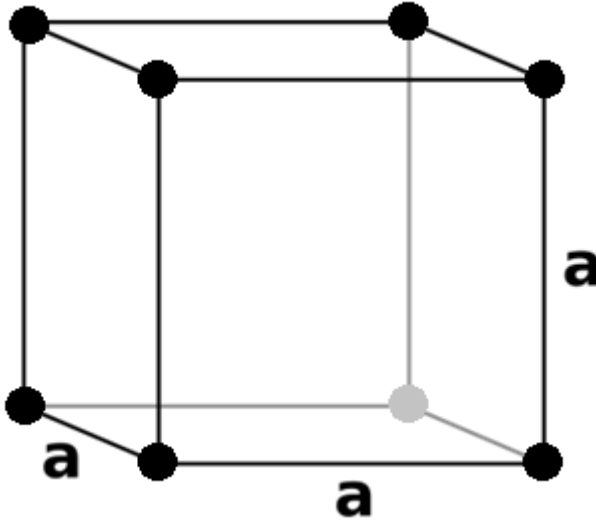
Bu bölümde incelenen malzemelerin öncelikle taban durumu kristal yapısı olan Çinko-Sülfür (ZnS), diğer bir kullanımı Zinc-blende (ZB), hakkında bilgi verilecektir. Daha sonra tez kapsamında incelenen ikili bileşiklerin ve üçlü-dörtlü alaşımların ZnS yapıda denge durumu örgü sabitleri, sertlik parametreleri gibi yapısal özellikleri incelenecektir.

3.2.1. İncelenen malzemelerin taban durumu kristal yapısı: ZnS kristal fazı

Yapılan birçok deneysel ve teorik çalışma bu malzemelerin ZnS yapıda kristalleştiklerini göstermektedir, Aslan (2012); Kanoun (2004); Li (2012); Ferhat (2006); Reshak (2011). Bu nedenle, tez kapsamında incelenen tüm ikili bileşiklerin ve üçlü-dörtlü alaşımların ZnS kristal yapıları ele alınmıştır. Bu kısımda öncelikle basit kübik örgü sonra da yüzey merkezli örgü hakkında bilgi verilecektir. Daha sonra bu örgüler yardımıyla oluşturulabilen ZnS kristal yapı incelenecektir.

3.2.2. Basit kübik örgü (SC)

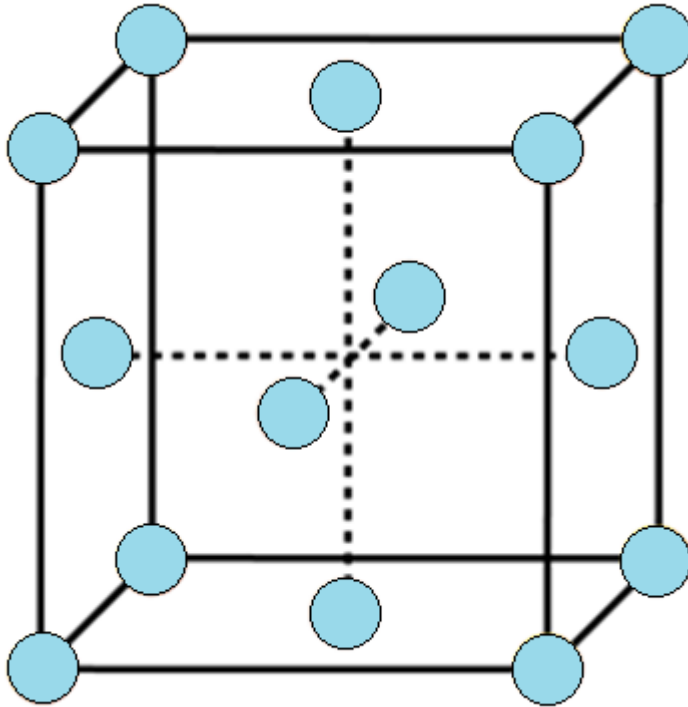
Basit kübik örgü 'Simple Cubic' (SC), en basit kristal yapıdır. Kenar uzunlukları birbirine eşit ve aralarındaki açılar doksan derecedir. Şekil 3.1'de basit kübik örgünün geleneksel birim hücresi gösterilmiştir. Köşelerindeki örgü noktaları sekiz kübik yapı tarafından paylaşıldığından ve kübik yapının sekiz köşesinde sekiz örgü noktası bulunduğundan bu yapı bir örgü noktasına sahiptir. Basit kübik örgünün geleneksel birim hücresi ile ilkel (primitif) birim hücreleri aynıdır.



Şekil 3.1. Basit kübik örgünün geleneksel birim hücresi

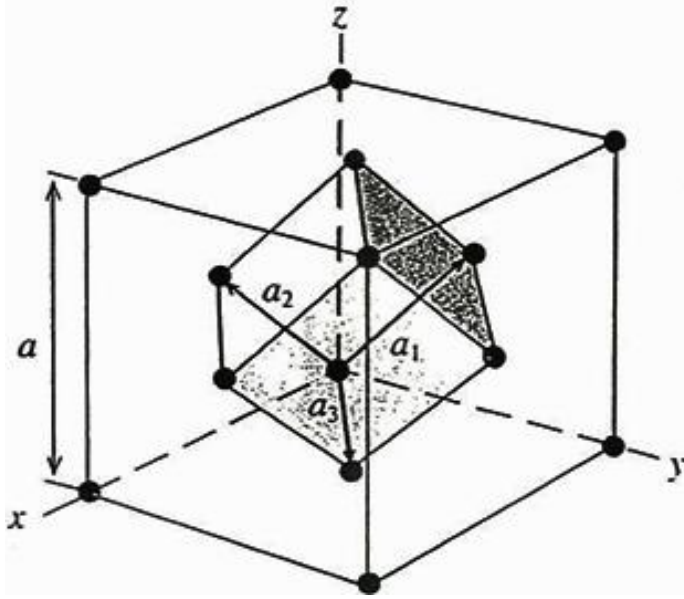
3.2.3. Yüzey merkezli kübik örgü (FCC)

Yüzey merkezli kübik örgü 'Face Centered Cubic' (FCC), basit kübik örgüden kolaylıkla elde edilebilir. Bir basit kübik örgünün yüzey merkezlerine birer örgü noktası konulursa oluşan yapı yüzey merkezli kübik örgü olarak bilinir, Stokes (1987). Şekil 3.2'de yüzey merkezli kübik örgünün geleneksel birim hücresi gösterilmiştir. Bu geleneksel birim hücrede toplam dört örgü noktası bulunur.



Şekil 3.2. Yüzey merkezli kübik örgünün geleneksel birim hücresi

Tabii ki bu hücre, yüzey merkezli kübik örgü için ilkel birim hücre değildir. Bir örgü noktası içeren ve hacmi $\frac{a^3}{4}$ olan ilkel birim hücre Şekil 3.3'te gösterilmiştir.



Şekil 3.3. Yüzey merkezli kübik örgü için ilkel birim hücre (Wigner-Seitz hücresi)

Yüzey merkezli kübik örgü için temel örgü vektörleri;

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a\hat{j} + \frac{1}{2}a\hat{k} \quad (3.1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{1}{2}a\hat{k} \quad (3.2)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{1}{2}a\hat{j} \quad (3.3)$$

olarak verilir. [110] yönündeki örgü atomları en yakın komşu atomlardır. En yakın komşu atom uzaklığı $\frac{a}{\sqrt{2}}$ olarak ifade edilir, Stokes (1987).

3.2.4. ZnS (çinko-sülfür) kristal fazı

ZnS yapı iki türlü elde edilebilir:

i) İki yüzey merkezli kübik örgünün (fcc) birbirlerinden [111] doğrultusunda $\frac{1}{4}$ oranında ötelenerek iç içe geçmesiyle oluşur. Bu durumda iki farklı fcc örgü noktasına oturan Zn ve S atomlarının pozisyonları aşağıdaki gibi tanımlanır.

Zn: 0.00 0.00 0.00

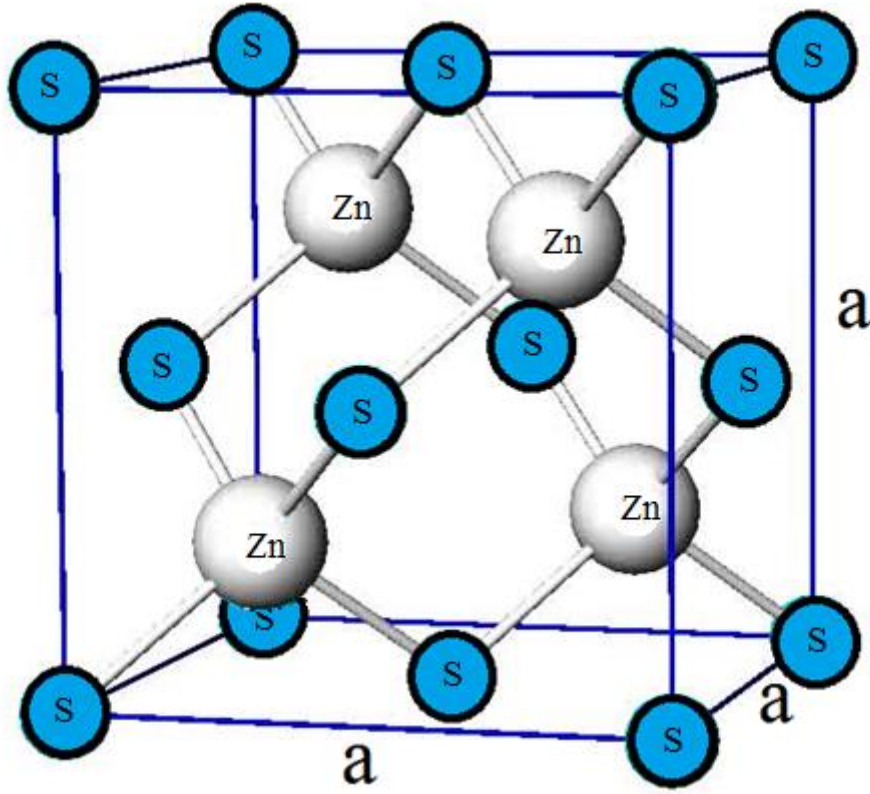
S: 0.25 0.25 0.25

ii) Sekiz basit kübik örgünün (sc) örgünün belli mesafelerde iç içe geçmesi ile oluşur. Bu durumda sekiz farklı sc örgü noktasına oturan Zn ve S atomlarının pozisyonları aşağıdaki gibi tanımlanır.

Zn: 000, $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$

S: $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}$, $\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$, $\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$

Bu yapının ilkel birim hücrelerinde bir tane Zn ve bir tane de S atomu olmak üzere iki atom bulunur. Yüzey merkezli kübik örgü vektörleri cinsinden Zn atomunun pozisyonu $\{0, 0, 0\}$ ve S atomunun pozisyonu ise $\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\}$ olarak verilir Srivastava (1990). Şekil 3.4'de gösterilen ZnS yapının geleneksel birim hücrelerinde dört tane Zn dört tane de S atomu olmak üzere toplam sekiz tane atom bulunmaktadır. Bu kristal yapıda her bir atom kendi cinsinden olmayan dört atom ile en yakın komşudur. Bu sebeple bu kristal yapıda tetrahedral (dörtlü) bağlanma söz konusudur.



Şekil 3.4. ZnS kristal yapının geleneksel birim hücresi

3.2.5. Ters örgü

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

$$\vec{G}_m = \sum_{j=1,2,3} m_j \vec{g}_j \quad (3.4)$$

olarak ifade edilir, Srivastava (1990). Burada m_j değerleri pozitif-negatif tamsayılar ve sıfır değerlerini alabilir. \vec{g}_j parametreleri ise ters örgü temel yer değiştirme vektörleri olup örgü vektörleri cinsinden

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \quad (3.5)$$

şeklinde yazılabilirler. Burada $\Omega = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ olarak hesaplanabilen kristalin ilkel birim hücre hacmidir. İkel hücre, istenilen bütün bilgiyi içeren minimum hacimli hücredir, bu hücre daha açık şekilde Wigner-Seitz (WS) hücresi olarak tanımlanır. WS hücresi çok fazla özelliğe sahiptir. Ters örgüdeki WS hücresinin oluşturduğu bölgeye de özel olarak Brillouin bölgesi adı verilir.

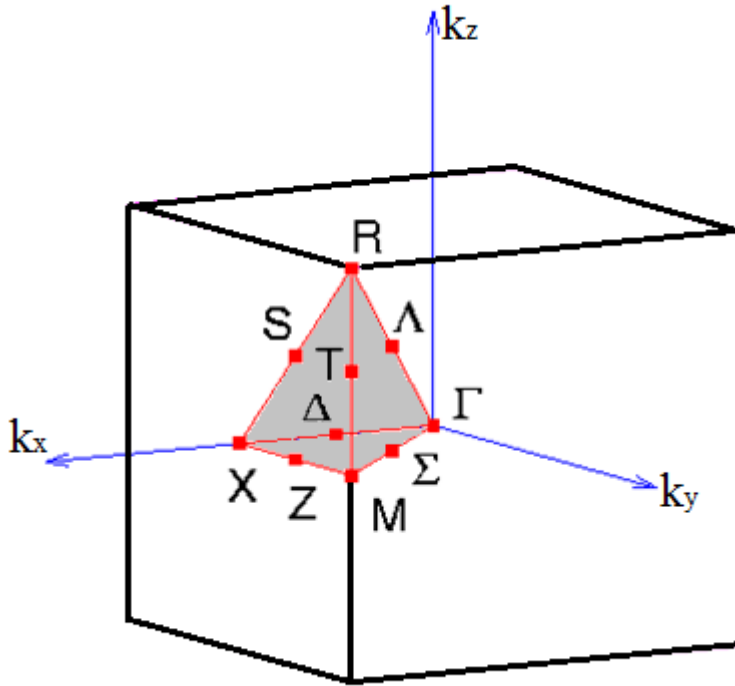
3.2.6. Basit kübik örgünün birinci Brillouin bölgesi

Basit kübik örgünün temel vektörleri (3.5) eşitliklerinde yerine konularak, ters örgü vektörleri;

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{i}, 0, 0) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, \hat{j}, 0) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, \hat{k}) \quad (3.6)$$

olarak bulunur, Srivastava (1990).

Basit kübik örgü için birinci Brillouin bölgesi Şekil 3.5'te gösterilmiştir. Taralı alan indirgenmiş birinci Brillouin bölgesini temsil etmektedir. Bu bölgedeki dalga vektörlerini kullanarak kristalin tüm özelliklerini incelemek mümkündür. Simetriden dolayı bu bölgenin dışındaki dalga vektörleri farklı sonuçlar vermeyecektir. Şekilde görüldüğü gibi bu bölge, Γ , X, M ve R olmak üzere dört ana simetri noktası içermektedir.



Şekil 3.5. Basit kübik örgünün indirgenmiş birinci Brillouin bölgesi

Bu simetri noktaları kartezyen koordinatlar cinsinden aşağıda verilmiştir:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{a}(0,0,0) ; X = \frac{2\pi}{a}(1,0,0) ; M = \frac{2\pi}{a}(1,1,0) ; R = \frac{2\pi}{a}(1,1,1) \quad (3.7)$$

İndirgenmiş Brillouin bölgesindeki ana simetri yönleri ise,

$$\Lambda = \Gamma - X \quad \Lambda = \Gamma - R \quad \Sigma = \Gamma - M \quad (3.8)$$

olarak verilir. T'nin (T=M-R) ana simetri noktası değildir. Çünkü merkez noktası olan Γ ile kesişim noktası yoktur. Bu yönlerde deneysel ölçümlerin yapılması daha kolay olduğundan genellikle araştırmalar bu yönlerde yoğunlaşır.

3.2.7. Yüzey merkezli kübik örgünün birinci Brillouin bölgesi

Yüzey merkezli kübik örgünün temel vektörleri (3.5) eşitliklerinde yerine konularak, ters örgü vektörleri,

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1,1,1) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{a}(1,1,-1) \quad (3.9)$$

olarak bulunur, Srivastava (1990).

Yüzey merkezli kübik örgü için birinci Brillouin bölgesi Şekil 3.6'da gösterilmiştir. Taralı alan indirgenmiş birinci Brillouin bölgesini temsil etmektedir ve bu bölge birinci Brillouin bölgesinin 1/48'ine eşittir. Bu bölgedeki dalga vektörlerini kullanarak kristalin tüm özelliklerini incelemek mümkündür. Simetriden dolayı bu bölgenin dışındaki dalga vektörleri farklı sonuçlar vermeyecektir. Şekilde görüldüğü gibi bu bölge, Γ , X, U, L, K ve W olmak üzere altı simetri noktası içermektedir. Bu simetri noktaları kartezyen koordinatlar cinsinden aşağıda verilmiştir:

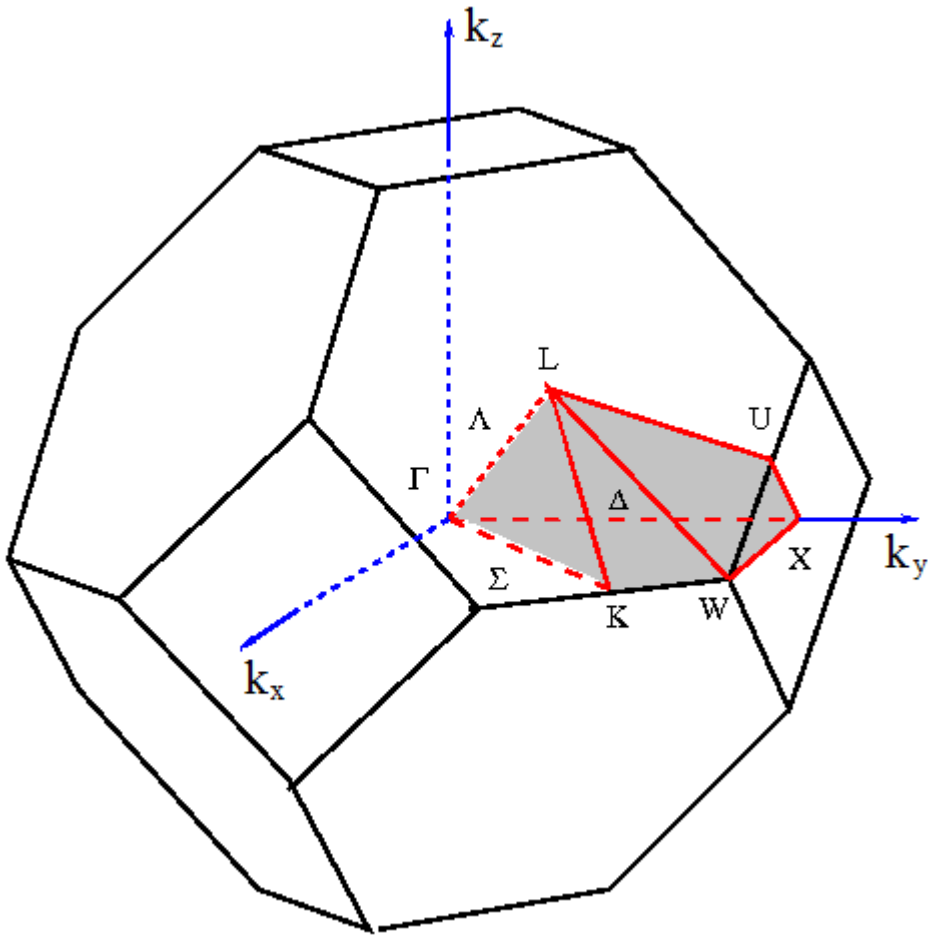
$$\Gamma = \frac{2\pi}{a}(0,0,0) ; \quad X = \frac{2\pi}{a}(0,1,0) ; \quad U = \frac{2\pi}{a}(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \quad (3.10)$$

$$L = \frac{2\pi}{a}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) ; \quad K = \frac{2\pi}{a}(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0) ; \quad W = \frac{2\pi}{a}(1, \frac{1}{2}, 0) \quad (3.11)$$

İndirgenmiş Brillouin bölgesindeki ana simetri yönleri ise,

$$\Delta = \Gamma - X \quad \Lambda = \Gamma - L \quad \Sigma = \Gamma - K \quad (3.12)$$

olarak verilir.



Şekil 3.6. Yüzey merkezli kübik örgünün indirgenmiş birinci Brillouin bölgesi

3.2.8. Kritik noktalar

Yüksek simetri noktalarının bazıları farklı özelliklere sahiptirler. Bu noktalar kritik noktalar olarak isimlendirilir.

Γ : Brillouin bölge merkezi

Basit kübik örgü için kritik noktalar:

M : Bir kenarın merkezi

R : Köşe noktası

X : Yüzey merkezi

Yüzey merkezli kübik örgü için kritik noktalar:

K: Komşu iki hekzagonal yüzey sınırının ortası

L: Hekzagonal yüzeyin merkezi

U: Birleşik bir hekzagonal ve bir karenin yüzey sınırının ortası

W: Köşe noktası

X: Kare yüzeyin merkezi

3.2.9. Yapısal sonuçlar ve tartışmalar

Günümüzde ikili bileşikler kullanılarak elde edilen üçlü ve dördü alaşımlar hem teknolojik hem de ticari açıdan çok büyük önem kazanmıştır. Alaşım oluşturma; yasak bant enerjisi, örgü sabiti, kırılma indisi gibi parametrelerin kontrol edilebilirliği nedeniyle bant yapı mühendisliğinde önemli bir daldır. Yarıiletken alaşımlama, yarıiletken bant aralığı ve diğer parametre değerlerini ayarlayarak geniş uygulama alanlarına yönelik yarıiletken cihazların üretilebilmesini sağlar. Çok geniş bir uygulama alanını kapsadığı ve gelecekte yeni uygulama alanları açılması beklendiği için özellikle III-V grubu yarıiletken alaşımlar günümüzde esaslı bir şekilde araştırılmaya devam etmektedir. Genellikle alaşımlar, kuantum kuyuları gibi düşük boyutlu elektronik sistemlerde yaygın olarak kullanılırlar.

Bizmut (Bi) ve azot (N) içeren III-V grubu yarıiletken alaşımlar mühendislik uygulamaları için bu malzemelerin birçok özelliklerinin araştırılmasına imkan sağlamakla birlikte elektronik ve optoelektronik uygulamalarında da çok uygun bir pozisyona sahiptirler. Diyot lazerler, foto-detektörler, çok eklemlili yüksek verimli güneş pilleri, Geisz (2002); Mitomo (2005); Heroux (2006), bunlara örnek oluşturabilecek birkaç uygulama aygıtlarıdır. III-V grubu bileşiklere Bi karıştırılması yeni yarıiletken, yarı-metal ve metal alaşımların oluşmasını sağlamaktadır. Bu yüzden bu malzemeler kızıl ötesi (IR) ve yakın kızıl ötesi bölgesi civarlarında (NIR) diyot lazerler, terahertz (THz) uygulamaları, fiber optik teknolojisi ve foto-detektörler için uygun şartları sağlamaktadırlar.

Bu materyallerin teknolojide sağlıklı bir şekilde kullanılmaları onların öncelikle yapısal özelliklerinin detaylı bir şekilde bilinmesi ile mümkün olur. Bu bölümde çalışılan materyallerin yapısal özellikleri verilecek, elde edilen bulgular daha önceki deneysel ve teorik sonuçlar ile detaylı bir şekilde karşılaştırılacaktır.

3.2.10. Yapısal özellikler

ZnS kristal yapıya sahip Bi ve N içeren III – V grubu ikili yarıiletken bileşiklerin, üçlü ve dörtlü alaşımların yapısal özelliklerinin incelenmesinde ilk olarak her materyalin örgü sabitlerinin tayini yapıldı. Bu hesaplamalar yapılırken denge durumu civarında farklı örgü sabitleri için enerji değerleri hesaplandı ve bulunan enerji değerleri örgü sabitine göre grafiğe aktarıldı. Grafiklerin her birinde belli bir örgü sabiti değeri için enerjinin minimum olduğu görüldü. Enerjinin minimum olduğu değere karşılık gelen örgü sabiti, denge durumu örgü sabiti olarak bulundu.

Örgü sabiti parametresine ek olarak hacim (bulk) modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri hesaplandı. Bulk modülü, bir malzemenin hidrostatik basınç altında sıkıştırılması halinde onun hacminde oluşacak değişime karşı gösterdiği direnci tanımlayan bir özelliktir. Diğer bir deyişle, bir deformasyon oluşturmak için gerekli enerjinin bir ölçüsüdür. Bu nedenle hem teorik hem de deneysel açıdan, bir malzemenin (özellikle kübik kristallerin) sertliğini temsil eden yegane malzeme özelliği sayılır.

Bulk modülü katıların durum-denklemleri (EOS-Equation of State) için de önemli bir parametredir. Bunun için incelenen yapı optimize edilir ve farklı hacimlere karşı gelen toplam enerji değerleri hesaplanır. Hesaplanan toplam enerji ve hacim değerleri Murnaghan hal denklemlerine fit edilir, Murnaghan (1944). Elde edilen hacim-enerji eğrisinin minimumu teorik örgü sabitini verir. Ayrıca bu grafikten bulk modülü ve bulk modülünün birinci türevi de hesaplanabilir. Murnaghan hal denkleminin analitik bir ifadesi:

$$P = \frac{3B(1-X)}{X^2} \exp\left[\left(\frac{3}{2}B' - 1\right) (1-X)\right] \quad (3.13)$$

şeklindedir. Burada B bulk modülü, B' bulk modülünün basınca göre birinci türevi, X ise $\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1/3}$ şeklindedir. Murnaghan hal denkleminin basınç cinsinden ifadesi:

$$P = \frac{B}{B'} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad (3.14)$$

şeklinde gösterilmektedir.

Bu veriler ışığında, bu çalışmanın ilk aşamasında, Bi ve N içeren III – V grubu ikili bileşiklerin, üçlü ve dördü yarıiletken alaşımların taban durumu enerjileri bulundu. Bu enerjiler yardımıyla inceleyeceğimiz materyallerin yapısal özellikleri elde edildi.

3.2.11. İkili bileşiklerin yapısal özellikleri

Bi ve N içeren III-V grubu yarıiletkenler için incelediğimiz ikili yapılar GaAs, InAs, GaN, InN ve GaBi yarıiletkenleridir. GaBi haricindeki diğer dört tane ikili yapı için 8-atomlu 1x1x1 basit kübik süper hücre kullanıldı (Bkz. 3.2.2). Yapılan hesaplamalarda hem LDA hem de GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı ve elde edilen sonuçlar Tablo 3.1’de ayrıntılı olarak gösterildi.

Sonuçlarımıza göre ikili bileşiklerin örgü parametrelerinin diğer teorik, Stier (1999); Mehnane (2008); Feng (2009), ve deneysel, Hellwege (1982); Kim (2010); Madelung (1996), çalışmalarla uyumlu olduğu görülmektedir. Yapılan hesaplamalardan elde edilen sonuçların önceki çalışmalardan %0.2-6 aralığında bir sapma gösterdiği Tablo 3.1’den açıkça görülmektedir. Yapılan LDA çalışmaları incelendiğinde örgü parametresinin (a_0) atom numaralarıyla doğru orantılı olduğu gözükmemektedir. GaX (X=N, As, Bi) ve InY (Y=N, As) kristal yapılarının örgü parametreleri X ve Y elementlerinin atom numaraları arttıkça a ’nın da arttığı gözlenmiştir. Bu artış aşağıda belirtilen ifadeden açıkça görülmektedir.

$$a_{\text{GaBi}} > a_{\text{InAs}} > a_{\text{GaAs}} > a_{\text{InN}} > a_{\text{GaN}} \quad (3.15)$$

Eş. 3.15 yardımıyla örgü parametresinin büyümesi yapının hacminin artmasına sebep olacaktır. Bir sistemin yoğunluğu hacimle ters orantılı olduğundan $\left(\rho = \frac{m}{V}\right)$ hacmi büyük olanın daha küçük yoğunluğa sahip olacağı anlamına gelmektedir. Yoğunluğun azalması ise yapının sahip olduğu sertlik parametresiyle açıklanabilir. İncelenen malzemelerin sertliği, bulk modülü hesaplanarak elde edilebilir. İkili bileşiklerin bulk modülü incelendiğinde elde edilen sonuçların literatürle, Stier (1999); Mehnane (2008), çok iyi bir uyum içinde olduğu gözlenmektedir. Bu sonuçlara göre en yüksek sertliğe yani en düşük hacme en yüksek yoğunluğa sahip kristalin GaN ve en düşük sertliğe yani en yüksek hacme en düşük yoğunluğa sahip kristalinde GaBi olduğu söylenebilir. Bulk modülünün GaN'dan GaBi'ya doğru gidildikçe küçüldüğü Tablo 3.1'den açıkça görülmektedir.

Tablo 3.1. İkili yapıların LDA ve GGA kullanılarak elde edilen yapısal sonuçları

İkili Materyaller	a_0 (Å)	B (GPa)	B'	Ref.
GaAs	5.53	67.5	3.58	Bu çalışma (GGA)
	5.55	73.70	4.04	Bu çalışma (LDA)
	5.54	77.10		Teori, Stier (1995)
	5.64	77.00		Deney, Hellwege (1982)
GaN	4.55	170.6	4.30	Bu çalışma (GGA)
	4.43	207.4	4.59	Bu çalışma (LDA)
	4.48	192.6		Teori, Mehnane (2008)
	4.50	-		Teori, Rinke (2008)
InAs	5.968	67.50	4.13	Bu çalışma (LDA)
	6.191	48.68	-	Teori, Feng (2009)
	5.921	61.7	4.55	Teori (GGA), Wang (2002)
	6.058	-	-	Deney, Kim (2010)
InN	4.957	183.3	5.71	Bu çalışma (LDA)
	4.801	147.6	4.06	Teori (GGA), Wang (2002)
GaBi	5.94	45.7	5.12	Bu çalışma (GGA)
	6.17	46.1	4.58	Teori (GGA), Wang (2002)
	6.32			Deney, Madelung (1996)

GaX (X=N,As,Bi) ve InY (Y=N,As) yapılarının sertliği X ve Y elementlerinin atom numaraları arttıkça azalmaktadır (Eş.3.16).

$$B_{\text{GaN}} > B_{\text{InN}} > B_{\text{GaAs}} > B_{\text{InAs}} > B_{\text{GaBi}} \quad (3.16)$$

Elde edilen Eş. 3.15 ve Eş. 3.16 kendi aralarında uyumlu oldukları açıktır. Diğer bir yapısal parametre olan bulk modülünün basınca göre birinci türevi, B' , ikili bileşikler için Tablo 3.1'de gösterilmektedir. B' parametresi, uygulanan basınca karşılık malzemedeki sertlik değişiminin bir ölçüsü, yani malzemenin sıkışabilirliği hakkında bilgi içerir. B' için elde edilen sonuçların literatürle, Wang (2002), çok iyi bir uyum içinde olduğu gözlenmektedir.

3.2.12. Üçlü alaşımların yapısal özellikleri

Bu kısımda Bi ve N içeren III-V grubu yarıiletkenler için incelediğimiz yapılar $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ ve $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ üçlü yarıiletken alaşımlardır. N veya Bi içermeyen $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ materyali ise dördü (quaternary) yarıiletken alaşım $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ yapısının analiz edilmesine yardımcı olacağı için incelenmiştir. $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ üçlü yapısı için yapılan hesaplamalarda LDA değiş-tokuş korelasyon enerjisi ve 8-atomlu $1 \times 1 \times 1$ basit kübik süper hücreli P1 simetrisi kullanıldı (Bkz. 3.2.3). $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ üçlü yarıiletken alaşımı için hem LDA hem de GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. Bu yapı için basit kübik ve F-43m simetrisi de ayrı ayrı incelendi. $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ üçlü yarıiletken alaşımı için GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi ve 16-atomlu $2 \times 2 \times 2$ yüzey merkezli kübik süper hücreli F-43m simetrisi kullanıldı (Bkz. 3.2.3).

$\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ yarıiletken alaşımının basit kübik simetrisinde incelenmemesinin nedeni Bi elementinden kaynaklanmaktadır. Bilindiği gibi GaAs yarıiletken ($E_g=1.3799$ eV), GaBi ise yarı-metalik doğaya sahiptir. Basit kübik simetrisiyle alaşımlamada kullanılan konsantrasyonlar 0.00, 0.25, 0.50, 0.75 ve 1.00 olduğundan $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ materyalinin yarıiletkenlik-metalik değişimini gözlemlemek oldukça zor olmaktadır. Bu materyali daha ayrıntılı incelemek için konsantrasyon değişiminin daha fazla olması gerekmektedir. Bu nedenle $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ yarıiletkeni için 16-atomlu $2 \times 2 \times 2$ yüzey merkezli kübik süper hücreli F-43m simetrisi kullanıldı.

Tablo 3.2’de çalışılan üçlü yarıiletken alaşımlar için yapısal sonuçlar gösterilmektedir. $Ga_{1-x}In_xAs$ üçlü yapısı için elde edilen yapısal sonuçların teorik değerlerle, Othman (2010), uyumlu olduğu görülmekte ve a_0 için %0.5 ve B için %2 civarında bir sapma olduğu gözlenmektedir.

Tablo 3.2. Hesaplanan üçlü yarıiletken alaşımların yapısal sonuçları

Üçlü Materyaller $Ga_{1-x}In_xAs$, $GaAs_{1-y}N_y$, $GaAs_{1-x}Bi_x$		a_0 (Å)	B (GPa)	B'	Ref.
$Ga_{0.25}In_{0.75}As$	LDA	5.89	67.2	3.19	Bu çalışma
$Ga_{0.50}In_{0.50}As$	LDA	5.79	68.30	4.73	Bu çalışma
		5.82	66.45	-	Teori, Othman (2010)
$Ga_{0.75}In_{0.25}As$	LDA	5.68	70.3	3.75	Bu çalışma
$GaAs_{0.125}N_{0.875}$	GGA	5.13	143.1	5.18	Bu çalışma
$GaAs_{0.250}N_{0.750}$	LDA	4.78	137.7	4.55	Bu çalışma
	GGA	5.14	149.95	5.13	Bu çalışma
$GaAs_{0.375}N_{0.625}$	GGA	5.24	120.1	3.41	Bu çalışma
$GaAs_{0.500}N_{0.500}$	LDA	5.09	103.5	4.48	Bu çalışma
		5.17	106.6	-	Teori, Mehnane (2008)
	GGA	5.29	116.7	3.4	Bu çalışma
$GaAs_{0.625}N_{0.875}$	GGA	5.37	99.15	4.25	Bu çalışma
$GaAs_{0.750}N_{0.250}$	LDA	5.34	87.7	3.77	Bu çalışma
	GGA	5.40	96.2	4.73	Bu çalışma
$GaAs_{0.875}N_{0.125}$	GGA	5.49	91.7	3.88	Bu çalışma
$GaAs_{0.875}Bi_{0.125}$	GGA	5.57	78.2	4.99	Bu çalışma
$GaAs_{0.750}Bi_{0.250}$	GGA	5.58	77.1	5.01	Bu çalışma
		6.19	37.94	5.15	Teori, Reshak (2012)
		5.81	62.22	4.04	Teori, Achoura (2008)
$GaAs_{0.625}Bi_{0.375}$	GGA	5.65	59.55	3.49	Bu çalışma
$GaAs_{0.500}Bi_{0.500}$	GGA	5.68	59.15	4.12	Bu çalışma
		6.34	35.67	3.75	Teori, Reshak (2012)
		5.99	53.98	4.63	Teori, Achoura (2008)
$GaAs_{0.375}Bi_{0.625}$	GGA	5.75	48.4	7.2	Bu çalışma
$GaAs_{0.250}Bi_{0.750}$	GGA	5.78	44.5	6.8	Bu çalışma
		6.40	35.21	4.86	Teori, Reshak (2012)
		6.15	46.63	4.57	Teori, Achoura (2008)
$GaAs_{0.125}Bi_{0.875}$	GGA	5.86	29.8	7.5	Bu çalışma

Diğer taraftan, GaAs_{0.5}N_{0.5} yapısı incelendiğinde, yapılan LDA ve GGA hesaplamalarının diğer çalışmayla, Mehnane (2008), uyumlu olduğu söylenebilir.

LDA hesaplamalarından elde edilen örgü parametrelerinin GGA'den daha küçük çıkmasının sebebi korelasyon enerjilerinden kaynaklanmaktadır. Son olarak, GaAs_{1-x}Bi_x yarıiletkeni için elde edilen a_0 , B ve B' değerlerinin literatürle, Reshak (2012); Achoura (2008), çok iyi uyduğu görülmektedir.

Çalışılan üçlü materyallerin yapısal sonuçlarının virtual kristal yaklaşımı (VCA) kullanılarak Vegard kanunu, Vegard (1921), ile uyuşup uyuşmadığı incelenmiştir. Vegard kanununa göre örgü sabiti değişen konsantrasyonla lineer olarak değişmelidir. Yani,

$$a(A_xB_{1-x}C) = xa_{AC} + (1-x)a_{BC} \quad (3.17)$$

eşitliğinin üçlü yapılar için geçerli olması gerekmektedir.

Burada, a_{AC} ve a_{BC} sırasıyla ikili AC ve BC yapılarının örgü parametreleridir ve $a(A_xB_{1-x}C)$ de $A_xB_{1-x}C$ alaşımının örgü parametresidir. Ga_{1-x}In_xAs, GaAs_{1-y}N_y, GaAs_{1-x}Bi_x üçlü yarıiletken alaşımlarının örgü parametreleri Eş.3.17 yardımıyla aşağıdaki gibi elde edilir.

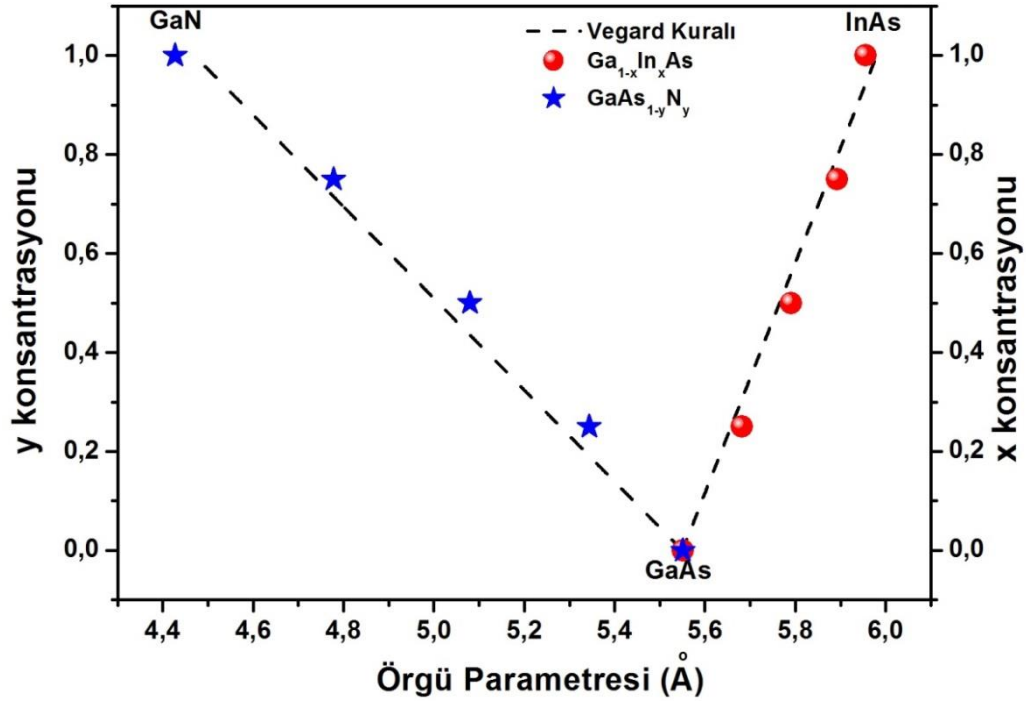
$$a(Ga_{1-x}In_xAs) = xa_{InAs} + (1-x)a_{GaAs} \quad (3.18)$$

$$a(GaAs_{1-y}N_y) = ya_{GaN} + (1-y)a_{GaAs} \quad (3.19)$$

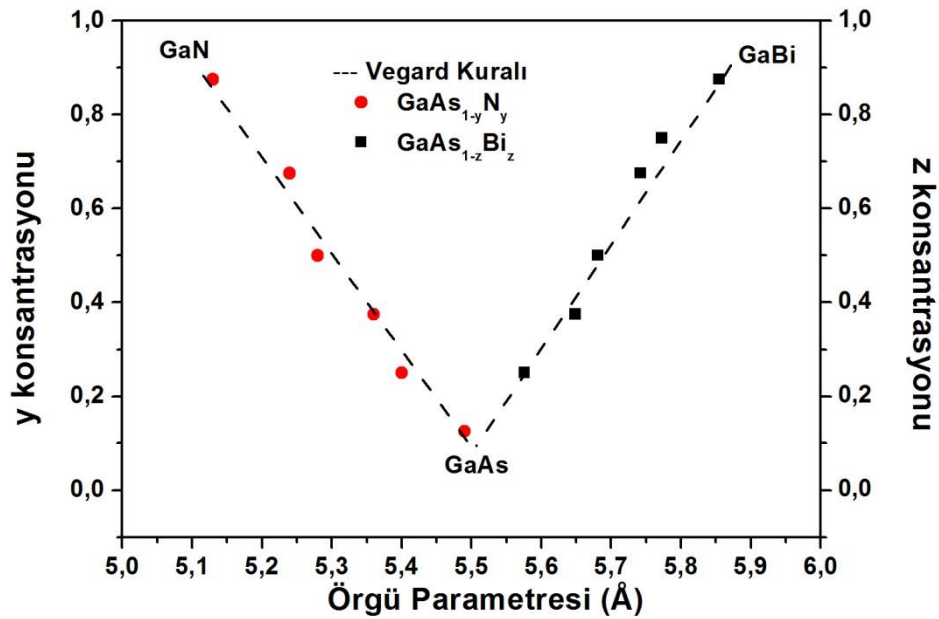
$$a(GaAs_{1-x}Bi_x) = xa_{GaBi} + (1-x)a_{GaAs} \quad (3.20)$$

Şekil 3.7 ve Şekil 3.8 yardımıyla hesaplanan örgü parametrelerinin değişen konsantrasyonla lineer olarak değiştiği, dolayısıyla elde edilen sonuçların Vegard kanunu ile uyduğu söylenebilir.

Şekil 3.7 ve Şekil 3.8 yardımıyla, GaAs materyaline In ve Bi alaşımlama sonucunda örgü parametresinin arttığı, N alaşımlama sonucunda ise örgü parametresinin azaldığı ve bu değişimlerin lineer olduğu görülmektedir.



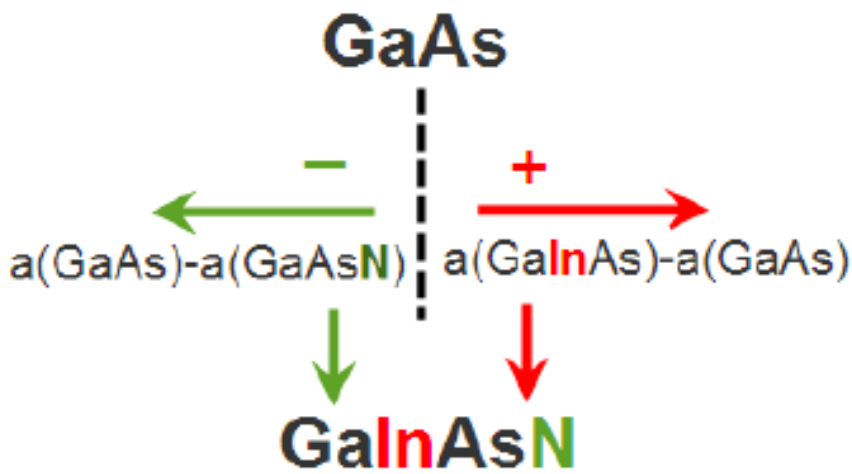
Şekil 3.7. Ga_{1-x}In_xAs ve GaAs_{1-y}N_y materyallerinin örgü sabiti-konsantrasyon değişimi grafiği



Şekil 3.8. GaAs_{1-y}N_y ve GaAs_{1-z}Bi_z materyallerinin örgü sabiti-konsantrasyon değişimi grafiği

3.2.13. GaInAsN dörtlü alaşımının yapısal özellikleri

$Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ dörtlü yarıiletken alaşımının yapısal özellikleri incenirken $Ga_{1-x}In_xAs$ ve $GaAs_{1-y}N_y$ üçlü yapılarından yararlanılacaktır. Şekil 3.7 incelendiğinde örgü parametresindeki azalmalar ve artmalar $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ dörtlü yarıiletken alaşımın örgü parametresinin GaAs'den ne kadar değiştiğini verir, bu değişim Şekil 3.9'da görülmektedir.



Şekil 3.9. $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ dörtlü yarıiletken alaşımın örgü parametresinin alaşımlanan atomla değişiminin gösterimi

Şekil 3.9'dan görüldüğü gibi N konsantrasyonu $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ materyalinin örgü parametresinde sıkışmaya sebep olurken, In konsantrasyonu genişlemeye sebep olmaktadır.

Dörtlü materyallerin örgü parametresi Vegard kanununa bağlı olarak aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$a_{ABCD}(x,y) = xy a_{BD} + (1-x)ya_{AD} + x(1-y)a_{BC} + (1-x)(1-y)a_{AC} \quad (3.21)$$

$Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ materyalinin örgü parametresi Eş. 3.21 yardımıyla:

$$a_{GaInAsN}(x,y) = xy a_{InN} + (1-x)ya_{GaN} + x(1-y)a_{InAs} + (1-x)(1-y)a_{GaAs} \quad (3.22)$$

şeklinde yazılır.

Eş.3.22'ye göre $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{N}_{0.5}$ materyalinin örgü parametresi hesaplandığında bulunan sonucun Tablo 3.3'teki sonuçlara göre %2 oranında küçük bir sapma gösterdiği görülmektedir.

Tablo 3.3. Hesaplanan dörtlü yarıiletken alaşımın, $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_{1-y}\text{N}_y$, elde edilen yapısal sonuçları

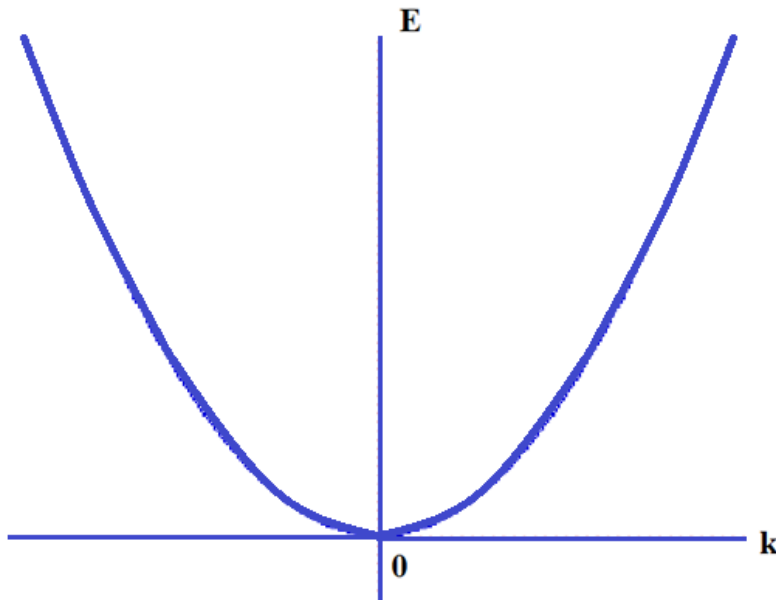
Dörtlü Materyal $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_{1-y}\text{N}_y$		a (Å)	B (GPa)	B'
$\text{Ga}_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{As}_{0.25}\text{N}_{0.75}$	LDA	5.14	122.2	4.99
$\text{Ga}_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{As}_{0.50}\text{N}_{0.50}$	LDA	5.43	94.7	3.95
$\text{Ga}_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{As}_{0.75}\text{N}_{0.25}$	LDA	5.66	86.6	3.46
$\text{Ga}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{As}_{0.25}\text{N}_{0.75}$	LDA	5.05	121.1	4.61
$\text{Ga}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{As}_{0.50}\text{N}_{0.50}$	LDA	5.32	102.3	3.85
$\text{Ga}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{As}_{0.75}\text{N}_{0.25}$	LDA	5.58	83.4	3.52
$\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25}\text{As}_{0.25}\text{N}_{0.75}$	LDA	4.93	129.0	5.44
$\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25}\text{As}_{0.50}\text{N}_{0.50}$	LDA	5.21	92.9	4.55
$\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25}\text{As}_{0.75}\text{N}_{0.25}$	LDA	5.48	82.2	3.72

3.3. İncelenen Malzemelerin Elektronik Özellikleri

Serbest elektron modelinde, \vec{k} dalga vektörüne sahip bir iletim elektronunun enerjisi

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.23)$$

ile verilir. \vec{k} fonksiyonuna göre E'nin değişimi Şekil 3.10'da gösterildiği gibi bir parabol olur.



Şekil 3.10. Serbest elektronun enerjisi

Pozitif iyonlarla etkileşim E ve \vec{k} arasındaki bu ilişkiyi etkilemektedir. Bu durumu, I. Brillouin bölgesi ($k = \pm \pi/a$) sınırında görmek çok kolaydır. Sınırdaki iki serbest elektron dalga fonksiyonları:

$$\Psi = A \exp\left(\pm i \frac{\pi x}{a} - i \omega t\right) \quad (3.24)$$

şekindedir. Bu dalga fonksiyonlarından biri, bir elektronun $+x$ doğrultusunda hareket ettiğini gösterirken, diğer dalga fonksiyonu ise bir elektronun $-x$ doğrultusunda hareket ettiğini gösterir. $k = \pm \pi/a$ 'da elektronun de Broglie dalga boyu kırınım için Bragg yasasını ($2d \sin \theta = n\lambda$) sağlamaktadır.

Bragg yasasını sağlayan bir elektron örgü tarafından yansıtılır. Sonuç olarak, elektron sürekli yansıtıldığından örgü boyunca hareket edemez, önce bir yönde sonra diğer yönde hareket eder. Bu nedenle Eş. 3.24'teki dalga fonksiyonları I. Brillouin bölge sınırlarındaki elektron seviyelerini tarif etmek için uygun değildir, çünkü bu dalga fonksiyonları hareketli elektronları tanımlar. I. Brillouin bölgesi sınırındaki elektronların seviyelerini tarif etmek için Eş. 3.24'teki iki dalga fonksiyonlarının lineer kombinasyonları kullanılarak uygun dalga fonksiyonları (Ψ_1 ve Ψ_2) oluşturabiliriz.

Bu dalga fonksiyonlarının toplamı Ψ_1 ve farkı Ψ_2 olmak üzere:

$$\Psi_1 = 2A \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \exp(-i\omega t) \quad (3.25)$$

ve

$$\Psi_2 = 2iA \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \exp(-i\omega t) \quad (3.26)$$

denklemleri elde edilir. Bu iki elektron durumunun olasılık fonksiyonları:

$$|\Psi_1|^2 = 4A^2 \cos^2(\pi x / a) \quad (3.27)$$

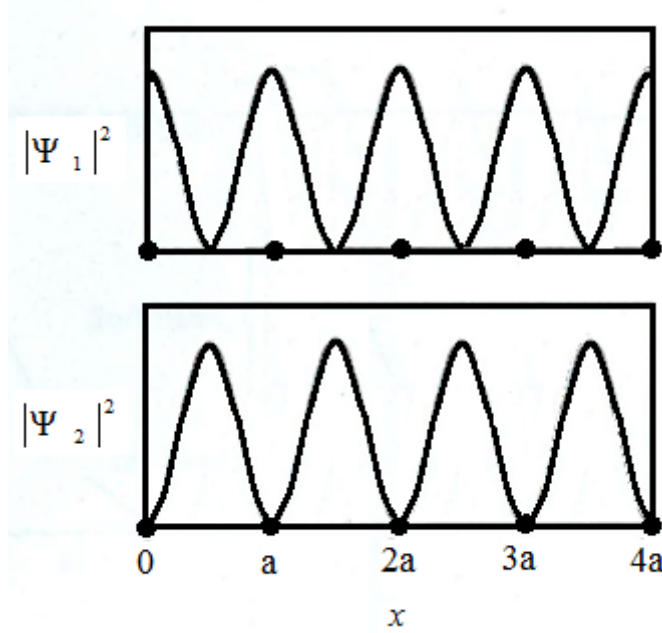
ve

$$|\Psi_2|^2 = 4A^2 \sin^2(\pi x / a) \quad (3.28)$$

olarak yazılır.

Bu iki dalga fonksiyonunu incelediğimizde (Şekil 3.11), pozitif iyonlara göre konumları hariç aynı oldukları görülür. $|\Psi_1|^2$ fonksiyonu iyonlarda maksimum, $|\Psi_2|^2$ fonksiyonu ise iyonlarda sıfırdır. Ψ_1 dalga fonksiyonuna sahip bir elektron pozitif iyonlar civarında Ψ_2 dalga fonksiyonuna sahip bir elektrondan daha fazla zaman harcar. Elektron ve pozitif iyon arasındaki potansiyel enerji (birbirlerini çekme enerjileri, U) negatiftir ve birbirlerine yaklaştıkça büyüklüğü artar. Ψ_1 dalga fonksiyonuna sahip bir elektron iyonların çevresinde daha fazla zaman harcadığından potansiyel enerjisi daha küçüktür. Bu yüzden, Ψ_1 dalga fonksiyonuna sahip elektronun toplam enerjisi (kinetik ve potansiyel enerjinin toplamı), Ψ_2 dalga fonksiyonuna sahip elektronun toplam enerjisinden daha düşüktür. Ψ_1 seviyesi, Ψ_2 seviyesinden daha düşük enerjiye sahiptir. Serbest elektron modelinde iki seviye aynı

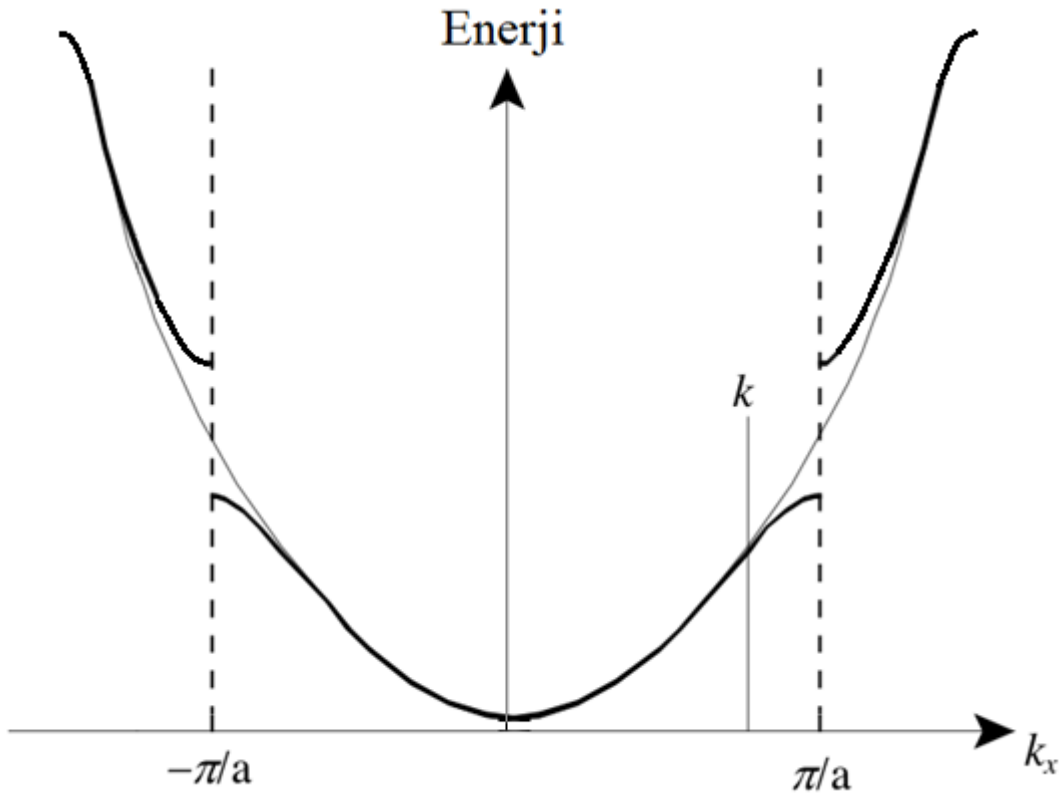
enerjiye sahiptir. Pozitif iyonların varlığı nedeniyle iki seviyenin enerjisi bölünmüştür.



Şekil 3.11 Ψ_1 ve Ψ_2 fonksiyonlarının olasılıkları. Siyah noktalar pozitif iyonların konumlarını göstermektedir, Stokes (1987)

Bir boyutlu metaldeki bir elektronun uygun bir potansiyel enerjisi (U) kullanılarak Schrödinger denklemi çözülmüş Şekil 3.12'de gösterildiği gibi E ve \vec{k} arasında bir ilişki elde edilir. $k = \pm\pi/a, \pm 2\pi/a, \dots$ daki enerji bölünmeler hariç tutulursa Şekil 3.10'da verilen serbest elektron modeline çok benzediği görülür, Stokes (1987).

Bragg yansıması ($n\lambda=2d\sin\theta$), bir kristalde dalga ilerlemesinin karakteristik bir özelliğidir. Bragg yansımalarının meydana gelmesi durumunda Schrödinger denkleminin çözümleri olmayacağından Şekil 3.12'deki enerji aralıklarının oluşmasının nedeni kristaldeki elektron dalgalarının Bragg yansımalarıdır. Bu enerji aralıkları bir materyalin yalıtkan, yarıiletken ya da iletken olmasının en temel sebebidir. Kronig-Penney modelinde sinüs ve cosinüs fonksiyonları ± 1 aralığında değerler alabileceğinden ilerleyen dalga çözümü sıfırda yoktur. Bu yüzden Şekil 3.12'de enerji değerleri sıfır noktasının üzerinde bir enerji değerinden başlar.



Şekil 3.12. Bir boyutlu metalde bir elektronun enerjisi

3.3.1. Bloch fonksiyonları

Shrödinger denklemi çözülerek dalga fonksiyonu Ψ 'nin pozitif iyonlarla etkileşiminden etkilendiği bulunur. Genel olarak herhangi bir kristal içindeki elektronlar için Shrödinger denkleminin çözümünün aşağıdaki formda yazılabileceği gösterilebilir:

$$\Psi = u_k(x) \exp(ikx - i\omega t) \quad (3.29)$$

Burada $u_k(x)$ periyodik bir fonksiyondur ve örgünün tüm periyodikliğini gösterebilir (örgünün her bir birim hücresi kendini tekrar eder). Potansiyel, örgünün periyodikliğine sahip olacağından herhangi bir x için,

$$u_k(x+a) = u_k(x) \quad (3.30)$$

olacaktır.

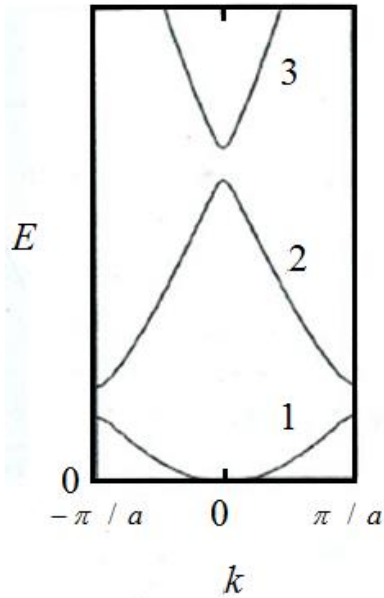
Periyodik bir kristal örgü yapısı için Shrödinger denkleminin Eş. 3.29'daki gibi bir çözümü olması gerektiğini ileri süren teoreme Bloch teoremi ve bu fonksiyonlar da Bloch fonksiyonları olarak isimlendirilir.

Bir boyutlu örgüde ters örgü vektörlerinin $\vec{G} = 2n\pi/a$ ile verildiği hatırlanırsa, bazı ters örgü vektörleri için I. Brillouin bölgesi içindeki bir dalga vektörü $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{G}$ olarak bulunur. k' eşitliği Ψ dalga fonksiyonunda yerine yazılırsa:

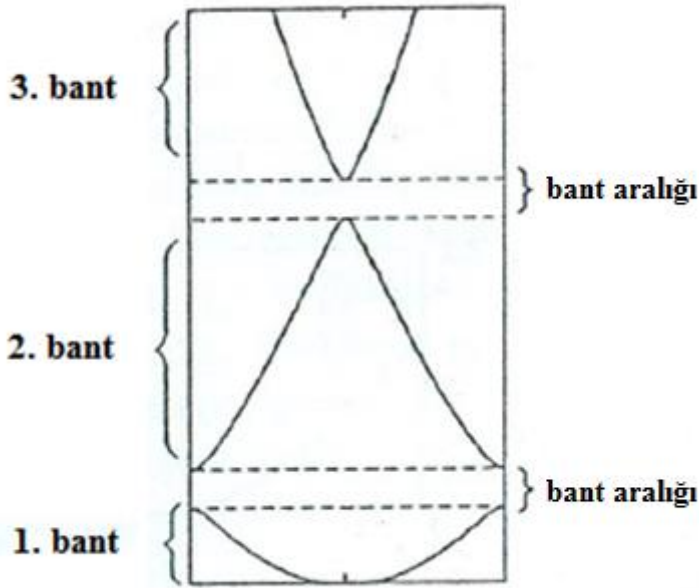
$$\Psi = u_k'(x) \exp(-i2n\pi x/a) \exp(ikx - i\omega t) \quad (3.31)$$

ifadesi elde edilir.

Tüm elektron durumları I. Brillouin bölgesi içinde \vec{k} dalga vektörleriyle adlandırıldığı için Şekil 3.13 ve Şekil 3.14'te gösterildiği gibi yeniden çizilebilir. Verilen bir \vec{k} için farklı enerjili farklı elektron seviyeleri Şekil 3.13'te gösterildiği gibi $n = 1, 2, 3, \dots$ ifadeleriyle ayrılırlar. Bu şekilde belirli enerjilerde elektron seviyelerinin olmadığı görülür. Şekil 3.14'te görüldüğü gibi yasak enerji aralıklarıyla bölünmüş izinli enerji bantları elde edilir.



Şekil 3.13. I. Brillouin bölgesindeki elektronların enerjileri, Stokes (1987)



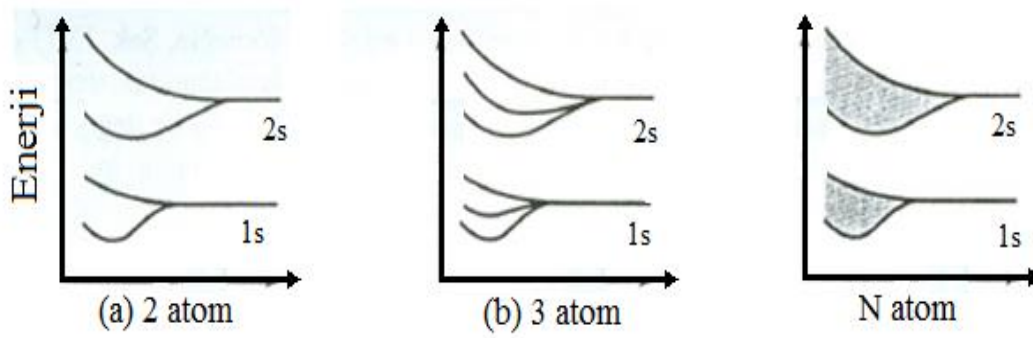
Şekil 3.14. Enerji bantları ve enerji bölgeleri, Stokes (1987)

3.3.2. Katıların bant teorisi

Bir katıyı oluşturan atomlar birbirlerinden uzaktayken, elektron (1s, 2s, ...) seviyelerinden sadece birinde olabilir. Elektron her iki atomda da bu seviyeye yerleşebileceği için, bu düzey iki kez katlı, yani aynı enerjiye sahip iki dalga fonksiyonu olur. Atomlar birbirlerine yaklaşp elektron dağılımları örtüşmeye başladığında, bu katlılığın ortadan kalktığı ve enerjileri farklı iki seviye oluştuğu görülür (Şekil 3.15.a).

Birbirinden uzak üç atom düşünüldüğünde, bu durumda her atomik seviye üç kez katlı, yani elektronun üç farklı atoma ait oluşunu temsil eden aynı enerjili üç dalga fonksiyonu olur.

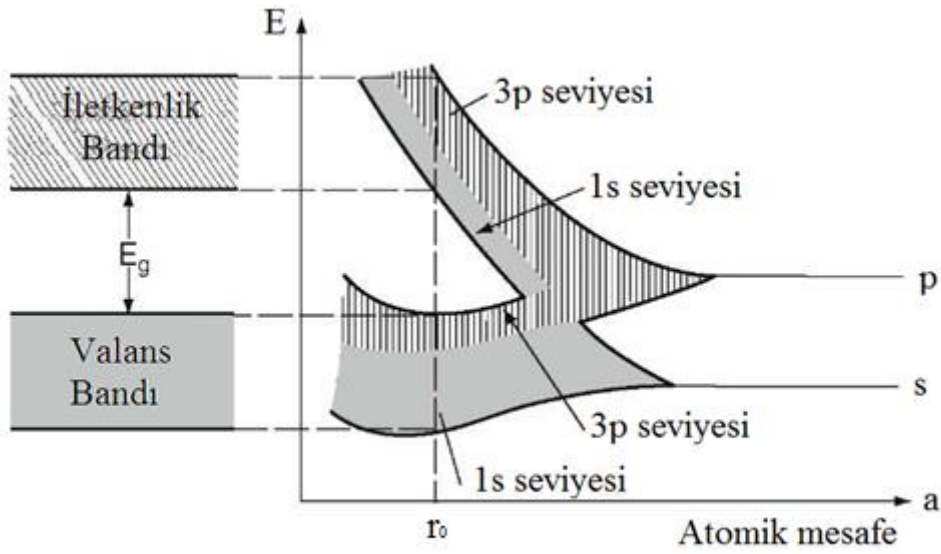
Atomlar birbirlerine yaklaştığında bu üç kez katlı seviyeler ayrışır ve Şekil 3.15b'de görüldüğü gibi, enerjileri farklı üç durum elde edilir. Bu durum genelleştirildiğinde, birbirinden uzakta N sayıda atomlu sistemin her elektron düzeyi N kez katlı olur; atomlar birbirine yaklaştığında katlı enerjiler birbirinden ayrılarak, sonlu bir enerji aralığında yayılırlar.



Şekil 3.15. Çok sayıda atom bir araya getirildiğinde elektron enerji seviyelerinin atomlar arasındaki r uzaklığına göre değişimi. (a) İki atomlu sistemde her seviye ikiye ayrılır. (b) Üç atomlu sistemde her seviye üçe ayrılır. (c) N sayıda atomlu sistemde enerji seviyeleri bant şeklinde genişler. Her bant içindeki N sayıda seviye birbirine o kadar yakındır ki sürekli dağılmış gibi bakılabilir, Taylor (2003)

Bir katıyı bu şekilde birbirinden uzakta N atomdan başlayarak oluşturulduğu düşünülün. Atomlar birbirinden uzaktayken katı içinde yerleşecekleri konumlara göre dizilmiş olsunlar ve bu yapının boyutları son denge konumuna kadar yavaşça kısaltılıyor olsun. En yakın komşu uzaklığı r azalırken elektronların enerji seviyeleri de Şekil 3.15c'de gösterildiği gibi değişecektir. Bu durum daha ayrıntılı olarak Şekil 3.16'da gösterilmektedir. r büyükken N kez katlı olan her atomik seviye, enerjileri farklı N sayıda seviyeye ayrışacaktır. Sık aralıklarla dizilmiş bu N sayıda enerji seviye kümesine enerji bandı denir. Bantların genişliği ve iki bant arasındaki uzaklık r 'ye bağlı olacaktır; fakat r değeri katıdaki r_0 denge uzaklığına eşit alındığında o katının bant genişlikleri ve aralıkları bulunmuş olur (Şekil 3.16).

Şekil 3.16'da bir katıdaki elektron enerji bantları incelenirken kullanılan terimler de gösterilmiştir. 1s atomik seviyelerinin ayrışmasından kaynaklanan banda 1s bandı, diğerlerine de 2s, 2p, ... adı verilir. Bir bant içindeki enerjinin değiştiği aralığa bant genişliği denir ve tipik olarak birkaç eV mertebesinde olur. r_0 atomların denge durumu konumlarını temsil eder. Yasak bant aralığını daha iyi gözlemlemek için r_0 1s seviyesinin minimum enerjisini değil 3p seviyesinin minimum enerjisini baz almıştır. Şekil 3.16'da gösterilen diyagram da valans bandının maksimumunda 1s orbitalleri, iletkenlik bandının minimumunda ise 3p orbitalleri baskın olduğu görülmektedir.



Şekil 3.16. Birbirinden uzakta N atom bir araya getirilerek oluşturulan katıda atomik enerji düzeyleri bantlar halinde genişler. Sol tarafta gösterilen katı enerji bantları sağdaki grafikte atomların r_0 denge konumundaki kesit alınarak bulunur

Bir bantta N sayıda enerji düzeyi varsa, bant içindeki δE ortalama enerji aralığı

$$\delta E \approx \frac{\text{birkaç eV}}{N} \quad (3.32)$$

şeklinde olacaktır.

Küçük kristallerde bile N sayısı çok büyüktür; örneğin $1\mu\text{m}$ boyundaki kristalde 10^{10} atom bulunur ve bant içindeki enerji aralığı $\delta E \approx 10^{-10}$ eV olur. Dolayısıyla, bir katıdaki elektron enerji düzeylerinin her bant içinde sürekli dağıldığı kabul edilebilir (Şekil 3.16'da taralı alan).

Bazı durumlarda bir bantın üst kenarı bir sonraki bantın alt kenarından daha yukarıda olabilir. Bu durumda iki bantın örtüştüğü söylenebilir. Fakat genellikle bu iki komşu bant örtüşmez ve bantlar arasında bant aralığı denilen yasak enerjili bölgeler oluşur. Bu bant aralıklarının genişliği katıların iletkenlik özelliğini belirleyici faktörlerden biridir, Taylor (2003), Karaoğlu (2008).

Bloch teoremi bir kristaldeki elektronun dalga fonksiyonunun oldukça basit formda olduğunu söyler fakat gerçekte potansiyel ve dalga fonksiyonu bu kadar basit değildir. Fakat kristal malzemelerin periyodik bir formda olması problemi oldukça basitleştirir.

Katıların bant yapılarını hesaplamak amacı ile çok sayıda sayısal hesaplama yöntemleri geliştirilerek problem çözülmeye çalışılmıştır. Bunların bazıları

Düzlem dalga metodu

Genişletilmiş düzlem dalga (APW) metodu

Lineer genişletilmiş düzlem dalga (LAPW) metodu

Ortogonalize düzlem dalgalar (OPW) metodu

Yapay-potansiyel metodu

Atomik orbitallerin lineer bileşimi (LCAO) metodu

Lineerleştirilmiş muffin tin orbital (LMTO) metodu

Green fonksiyonuna dayalı metodlar

Sıkı bağ metodu

Hubbard modeli

şeklindedir.

3.3.3. Katıların bant yapısı

Durgun bir serbest-atomun elektronları atomik orbitalleri doldurur ve bu orbitaller kesikli enerji seviyelerini oluştururlar. Birçok atom bir araya gelirse, bunların atomik orbitalleri yarılarak atomların sayıları ile orantılı olacak şekilde moleküler orbitaller oluştururlar. Bu durumda üst üste örtüşen dalga fonksiyonu oluşur. Çok sayıdaki atom (10^{20} mertebesinde veya daha fazla) bir katı oluşturmak üzere bir araya geldiğinde ise orbitallerin sayısı çok çok büyük değerlere ulaşır ve bunların enerjileri arasındaki fark çok çok küçülür. Fakat bazı enerji aralıkları, atom sayısı ne olursa olsun orbitaller içermez. Bu enerji seviyeleri, ayırt edilemeyecek kadar çok olur. Bir katının enerji seviyeleri arasındaki aralık, atomik titreşimlerin (fononların) enerjileri düzeyinde olan elektronların enerjileri mertebesinde olur. Ayrıca bu aralık, uzun bir

zaman sürecinde, Heisenberg ilkesi nedeni ile enerjideki belirsizlikle de kıyaslanabilir değerde olur. Bir katı, aynen bir atomun sonsuz sayıda enerji seviyelerine sahip olması gibi çok sayıda bantlara sahip olur. Bir katının elektronik bant yapısı bir takım “yasak “ ve “izinli “ enerji bantları ihtiva eder. Bir kristalin bant yapısı, o malzemenin, elektronik iletkenlik, optik özellikler (renkler dahil), elektronik özelliklerden kaynaklanan yapısal bozulmalar mekanik ve manyetik özellikler gibi elektronik, optik ve başka bir çok özelliğinin belirlenmesine yardımcı olur, Deligöz (2007).

Yalıtkan maddelerde; atomlarından kolayca ayrılarak elektrik yükü ve kinetik enerji taşıma işlevini yerine getirecek değerlik elektronları bulunmuyor. Üzerinden geçen elektrik akımına karşı maddelerin gösterdiği kolaylık iletkenliktir. Bir madde elektrik akımına karşı ne kadar az direnç gösterirse o kadar iyi iletkenidir. Maddelerdeki elektrik akımı iletkenliği elektronların hareketi ve iyonların hareketi ile ilgilidir. Elementlerden metaller elektrik akımını iletir, ametaller iletmezler. İyonik bağlı katı kristaller elektrik akımını iletmezler. Bunlar sıvı hâlde ve sulu çözelti hâlinde elektrik akımını iletirler, Bilgiyuvası (2011).

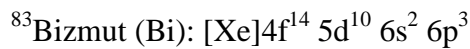
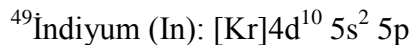
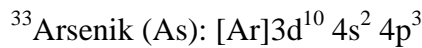
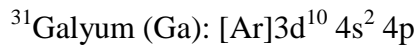
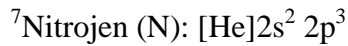
İletken malzemeler; en dış yörünge kabuğunda, bağlı bulunduğu atomdan kolayca ayrılarak serbestçe dolaşabilen en az bir ‘değerlik’ (valans) elektronu olan atomlardan oluşur. Malzemeye iletkenlik özelliğini, bu; serbestçe dolaşarak yük taşıyıcı görevi yapabilen elektronlar verir. Benzer şekilde, malzemenin bir tarafı ısıtıldığında, bu hareketli elektronlar kinetik enerjilerindeki artışı, malzemenin diğer bölgelerine taşıyıp, uğradıkları çarpışmalar sonucunda oralara aktarırlar. Metallerin ısı ve elektrik iletkenliği, bu yüzden yüksektir. Değerlik elektronlarının sayısı ne kadar fazla, iyonlaşma enerjileri ne kadar düşükse; metalin yapısı o kadar iletken olur.

Yarıiletken maddeler; saf halde iken düşük sıcaklıkta yalıtkan olmakla beraber, yapılarına başka bir elementin atomlarından az miktarda safsızlık katılması halinde yük taşıyıcıları oluşturulabilen maddelerdir. Örneğin n tipi yarıiletkenler, silikon gibi dört tane değerlik elektronuna sahip bir elementin kristal halinin, fosfor ya da arsenik gibi beş tane değerlik elektronuna sahip elementlerle katkılanması sonucunda elde

edilir. Katkı atomunun değerlik elektronlarından dördü, civardaki dört silikon atomuyla paylaşılırken, boşta kalan beşincisi, eksi yük taşıyıcısı haline gelerek, yalıtkan olan silikon kristale bir miktar iletkenlik kazandırır. Eğer katkılamada, boron ya da galyum gibi üç değerlik elektronuna sahip bir element kullanılırsa, p tipi yarıiletken elde edilir. Çünkü katkı atomundaki üç değerlik elektronu, civardaki dört silikon atomundan üçüyle bağ oluştururken, dördüncü silikon atomu, bir elektron eksikliğiyle karşı karşıya kalmıştır. Deşik de denilen bu elektron eksikliği, artı yüklü bir bölge gibi davranır ve komşu bağları oluşturan elektronlardan birisi bu deşiğe düştüğünde, deşik, elektronun geldiği konuma kaymış gibi görüldüğünden, yer değiştirmiş olur. Dolayısıyla, deşikler de artı yük taşıyıcıları gibi davranarak, aksi halde yalıtkan olan silikon kristaline bir miktar iletkenlik kazandırır.

3.3.4. Elektronik sonuçlar ve tartışmalar

Teknolojik olarak oldukça önemli olan yarıiletken materyallerin elektronik özellikleri bu kısımda incelenmiştir. ZnS yapıda kristalleşen bu materyallerin elektronik özellikleri incelenirken, ikili bileşikleri, üçlü ve dörtlü alaşımları oluşturan elementler için elektronik dizilimler:



olarak alınmıştır. Tüm elektronik bant yapısı grafiklerinde düşey eksen enerjiyi, yatay eksen yüksek simetri noktalarını (Γ , K, X, L) ve durum yoğunluğunu temsil etmektedir. Fermi enerji düzeyi sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir. Fermi enerji düzeyinin alt kısmındaki bantlar valans bantlarını temsil ederken, üst kısım ise iletkenlik bantlarını temsil etmektedir. Anlatımın kolay bir dile sahip olması için valans bantlarını V1 ve V2 olarak, iletkenlik bandı da C olarak simgelenmiştir. Yarıiletken malzemeler için valans bandının maksimum noktası ile iletkenlik bandının minimum noktası arasında hiçbir bandın olmadığı boş bir bölge bulunur. Bu

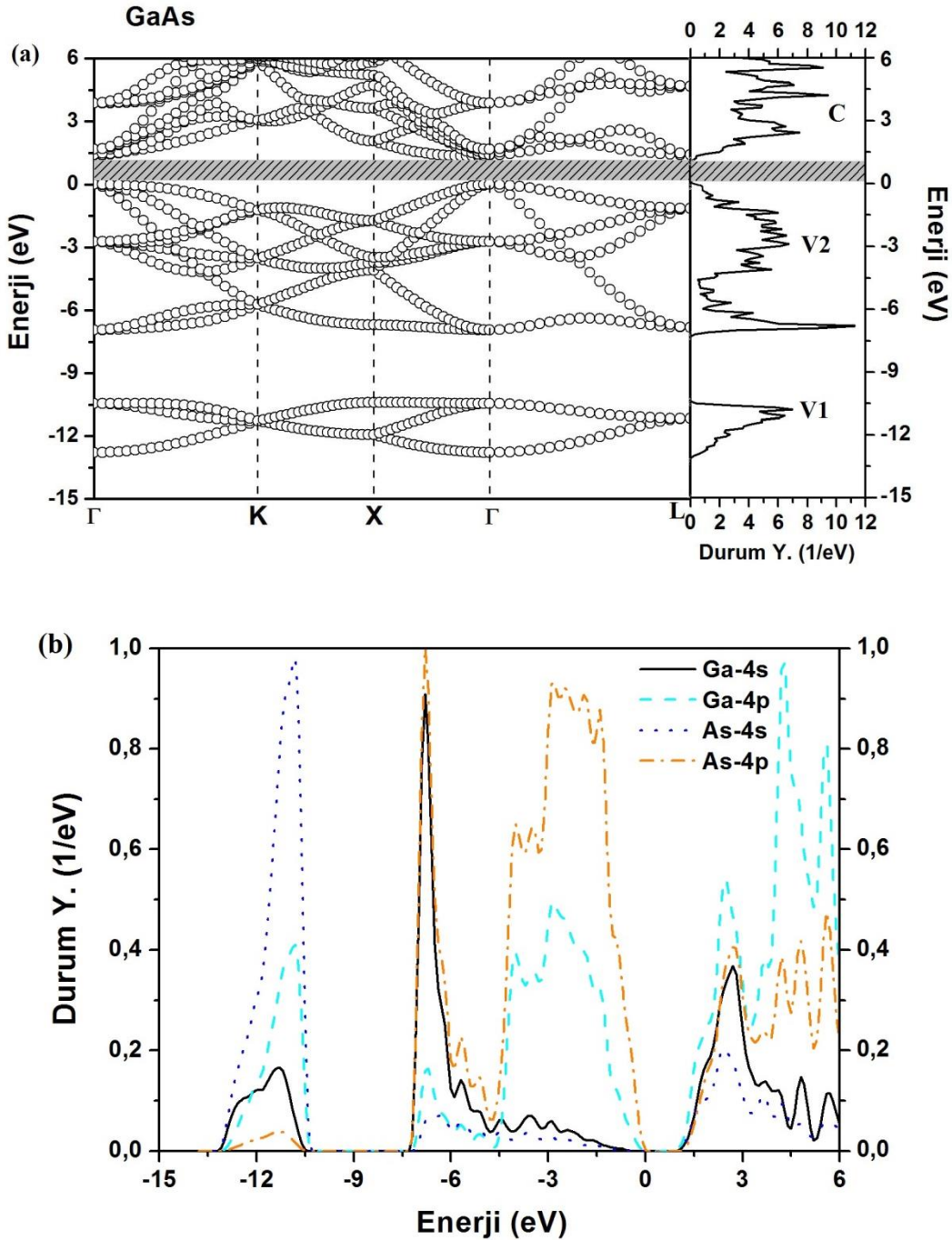
bölge yasak bant aralığı olarak ifade edilir ve E_g simgesiyle gösterilir. Maddeleri iletken, yalıtkan ya da yarı iletken olarak sınıflandırırken bu E_g değeri dikkate alınır. E_g değeri 0.5 eV den küçük maddeler genellikle iletken, 5 eV'den büyük maddeler ise genellikle yalıtkan olarak sınıflandırılır. 0.5-5 eV aralığı ise genellikle yarı iletken sınıfına aittir. Ayrıca, valans bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu aynı k-dalga vektörüne sahip yarıiletkenler doğrudan bant aralığına sahip yarıiletkenler olarak adlandırılırlar. Bu durumda k değişmediğinden elektronun sahip olduğu momentum kristal örgüsüne verilmez. Valans bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu farklı dalga vektörü değerlerindeyse yani iletim bandı en düşük enerjiye $k \neq 0$ 'da sahip ise bu tip yarıiletkenlere dolaylı bant aralıklı yarıiletkenler denir. Bir yarıiletken malzemenin doğrudan veya dolaylı bant aralığına sahip olması bu malzemelerin optoelektronik uygulamalar için uygun bir malzeme olup-olmadığının en büyük kriterlerinden biridir. Bu bilgiler ışığında ikili bileşiklerin ve üçlü dörütlü alaşımların elektronik özelliklerini inceleyelim.

3.3.5. İkili bileşiklerin elektronik özellikleri

Tez kapsamında incelenen III-V grubu yarıiletken malzemeler GaAs, InAs, GaN, InN ve GaBi bileşikleridir. Bu bileşiklerin elektronik özelliklerini incelemek için elektronik bant enerjileri hesaplandı. Bu enerjiler yardımıyla elektronik bant grafikleri ve hem toplam hem de parçalı durum yoğunluğu grafikleri çizildi.

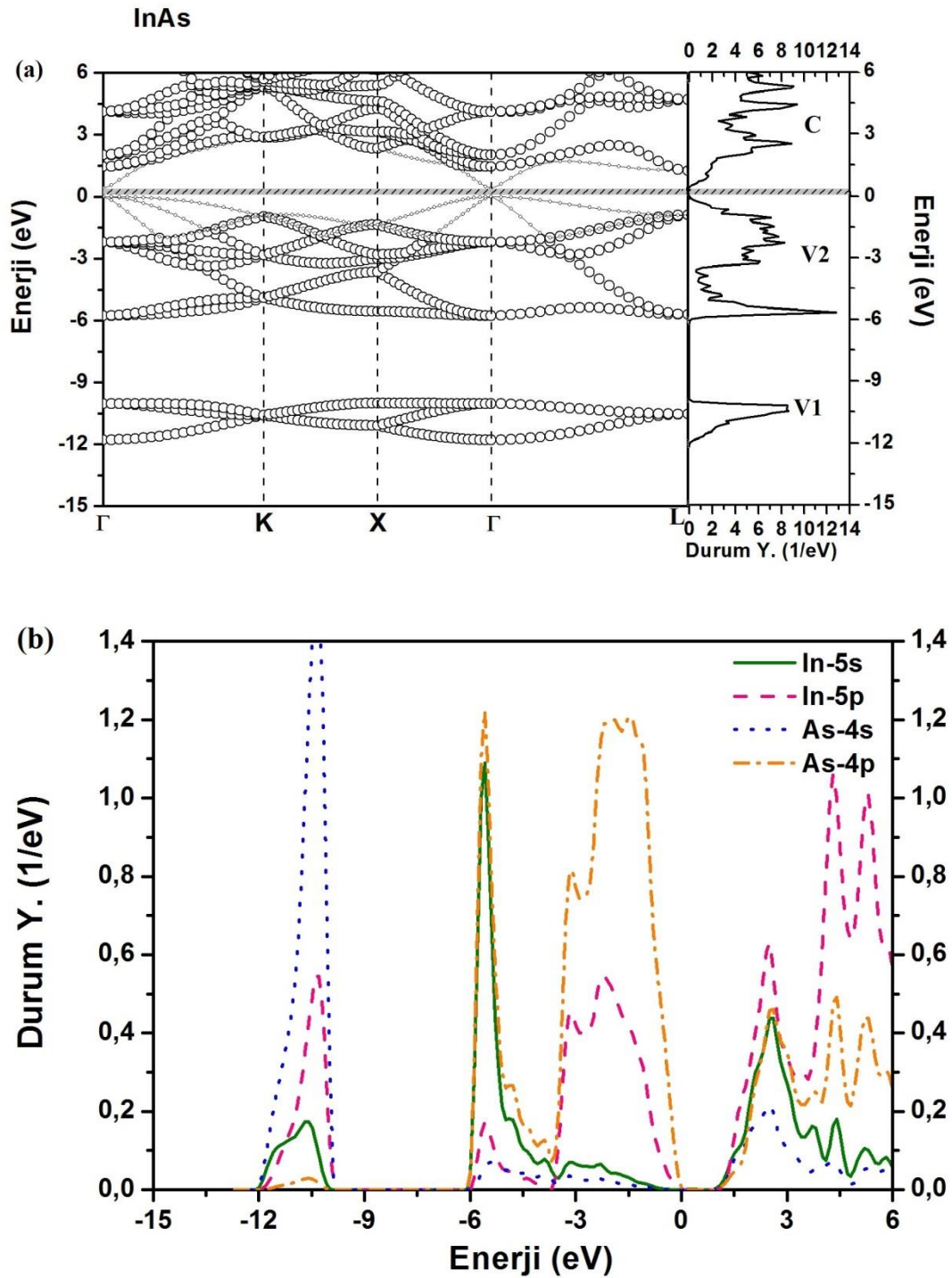
Şekil 3.17(a)'da GaAs bileşiği için elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu gösterilmektedir. Şekil 3.17(a)'da açıkça görüldüğü gibi GaAs bileşiğinin hem valans bandının maksimumu hem de iletkenlik bandının minimumu Γ noktasındadır. Dolayısıyla GaAs bileşiği doğrudan bant aralığına sahip bir yarıiletkendir. Bu yasak bant aralığının, E_g , değeri 1.3799 eV olarak hesaplanmıştır. Bulunan bu sonuç Feng'in 2009, Feng (2009), yılında yaptığı deneysel çalışmayla (1.42 eV) uyum içindedir. Şekil 3.17(a)'da toplam durum yoğunluğu grafiğinde meydana gelen pikler sırayla -10.5 eV ve -6 eV civarlarında enerji bantlarının düz olmasından kaynaklanmaktadır.

Hesaplanan parçalı durum yoğunlukları grafiklerinde dikkat edilmesi gereken önemli bir nokta orbitallerin (s, p, d) sahip oldukları enerjiler sadece bir galyum bir arsenik atomunu temsil etmektedir. Parçalı durum yoğunluğu ile toplam durum yoğunlukları kıyaslanmak istenirse bu durumda parçalı durum enerjisinin dört katının alınması gerektiği unutulmamalıdır.



Şekil 3.17. GaAs ikili yarıiletken bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği

Şekil 3.18.'de InAs ikili bileşiği için elektronik bant grafiği, toplam ve parçalı durum yoğunlukları görülmektedir. InAs bileşiği Şekil 3.18(a)'dan görüldüğü gibi doğrudan bant aralığına sahiptir ve E_g değeri 0.4114 eV olarak bulunmuştur. Elde edilen sonuç



Şekil 3.18. InAs ikili yarıiletken bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği

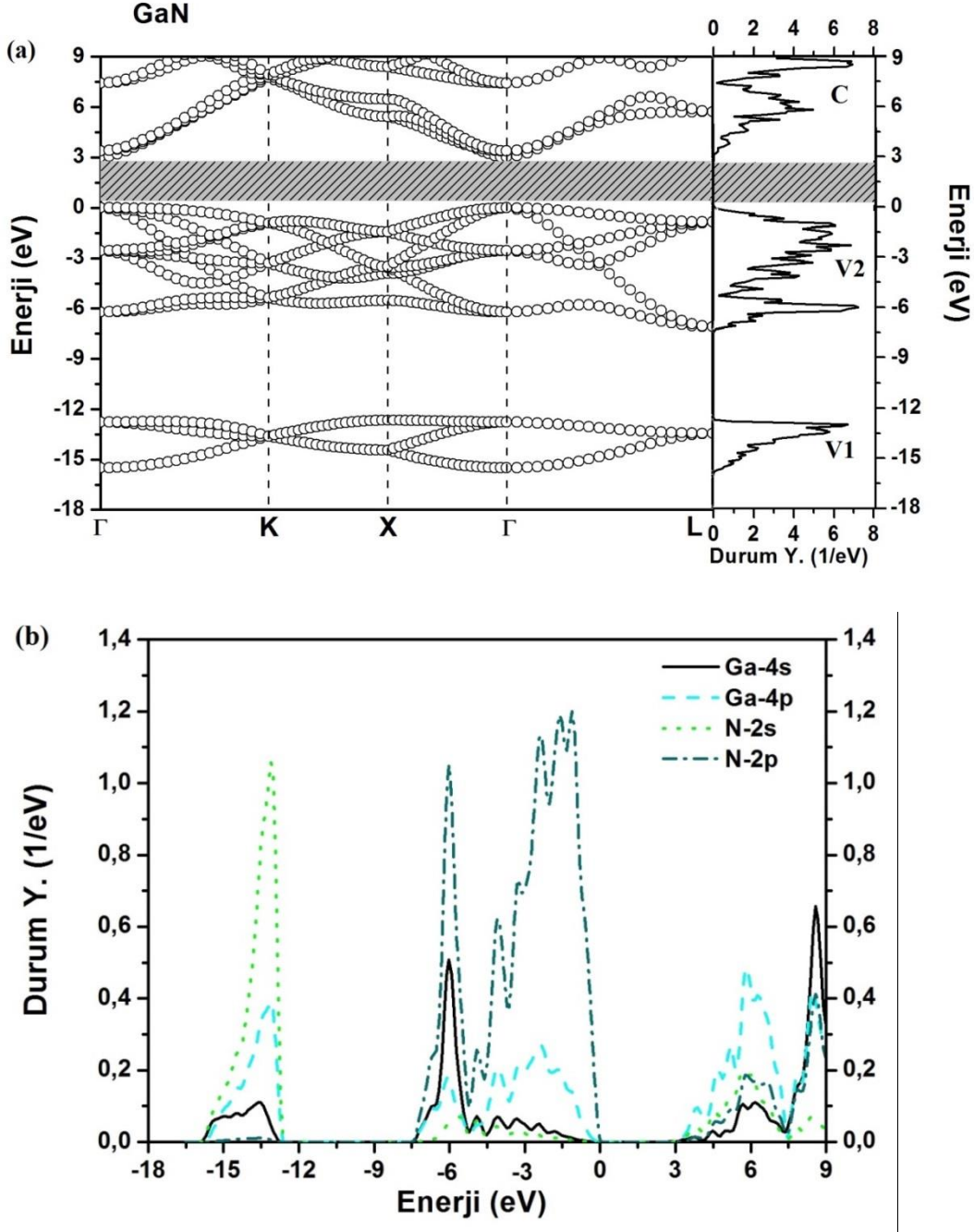
2010 yılında Kim ve arkadaşları, Kim (2010), tarafından yapılan deneysel çalışmayla (0.416 eV) iyi bir uyum göstermektedir. Toplam durum yoğunluğunda gösterilen V1, V2 ve C'yi domine eden orbitaller sırayla As 4s tipi, As 4p-In 5s tipi ve In 5p tipi orbitalleridir. V1'de -10.5 eV, V2'de ise -6 eV civarında meydana gelen pik K- Γ doğrultusunda meydana gelen hemen hemen düz bantlardan kaynaklanmaktadır. Valans bandının maksimumu ve iletkenlik bandının minimumu ise sırayla As 4p ve In 5p tipi orbitalleri tarafından domine edilmektedir.

Şekil 3.19.'da GaN ikili bileşiği için elektronik bant grafiği, toplam ve parçalı durum yoğunlukları görülmektedir. GaN bileşiği Şekil 3.19(a)'dan görüldüğü gibi doğrudan bant aralığına sahiptir ve E_g değeri 3.0267 eV olarak bulunmuştur. Elde edilen sonuç deneysel (3.3 eV), Flores (1994), ve teorik (3.2 eV), Adachi (1985), çalışmayla iyi bir uyum göstermektedir. Toplam durum yoğunluğunda gösterilen V1, V2 ve C'nin oluşmasına en büyük katkıyı veren orbitaller sırayla N 2s tipi, N 2p-Ga 4s tipi ve Ga 4p tipi orbitalleridir. V1'de -12 eV, V2'de ise -6 eV civarında meydana gelen pik K- Γ doğrultusunda meydana gelen düz bantlardan kaynaklanmaktadır. Valans bandının maksimumu ve iletkenlik bandının minimumu ise sırayla N 2p ve Ga 4p tipi orbitallerinin büyük rol oynadığı görülmektedir.

Şekil 3.20.'de InN ikili bileşiği için elektronik bant grafiği, toplam ve parçalı durum yoğunlukları görülmektedir. InN bileşiği Şekil 3.20(a)'dan görüldüğü gibi doğrudan bant aralığına sahiptir ve E_g değeri 1.71 eV olarak bulunmuştur. Elde edilen sonuç 1982 yılında Börntein, Börnstein (1982), yapmış olduğu deneysel çalışmayla (1.91 eV) iyi bir uyum göstermektedir. Toplam durum yoğunluğunda gösterilen V1, V2 ve C'yi domine eden orbitaller sırayla N 2s tipi, N 2p-In 5s tipi ve In 5p tipi orbitalleridir. V1'de -12 eV, V2'de ise -5 eV civarında meydana gelen pik K- Γ doğrultusunda meydana gelen düz bantlardan kaynaklanmaktadır. Valans bandının maksimumu ve iletkenlik bandının minimumu ise sırayla N 2p ve In 5p tipi orbitalleri baskın olarak görülmektedir.

Şekil 3.21'de ise diğer dört bileşikten farklı GaBi bileşiğinin elektronik bant grafiği, toplam ve parçalı durum yoğunluğu grafiği görülmektedir. Şekil 3.21(a)'da valans ve iletkenlik bantlarının fermi seviyesini kestikleri görülmektedir. Bu durum özellikle Γ

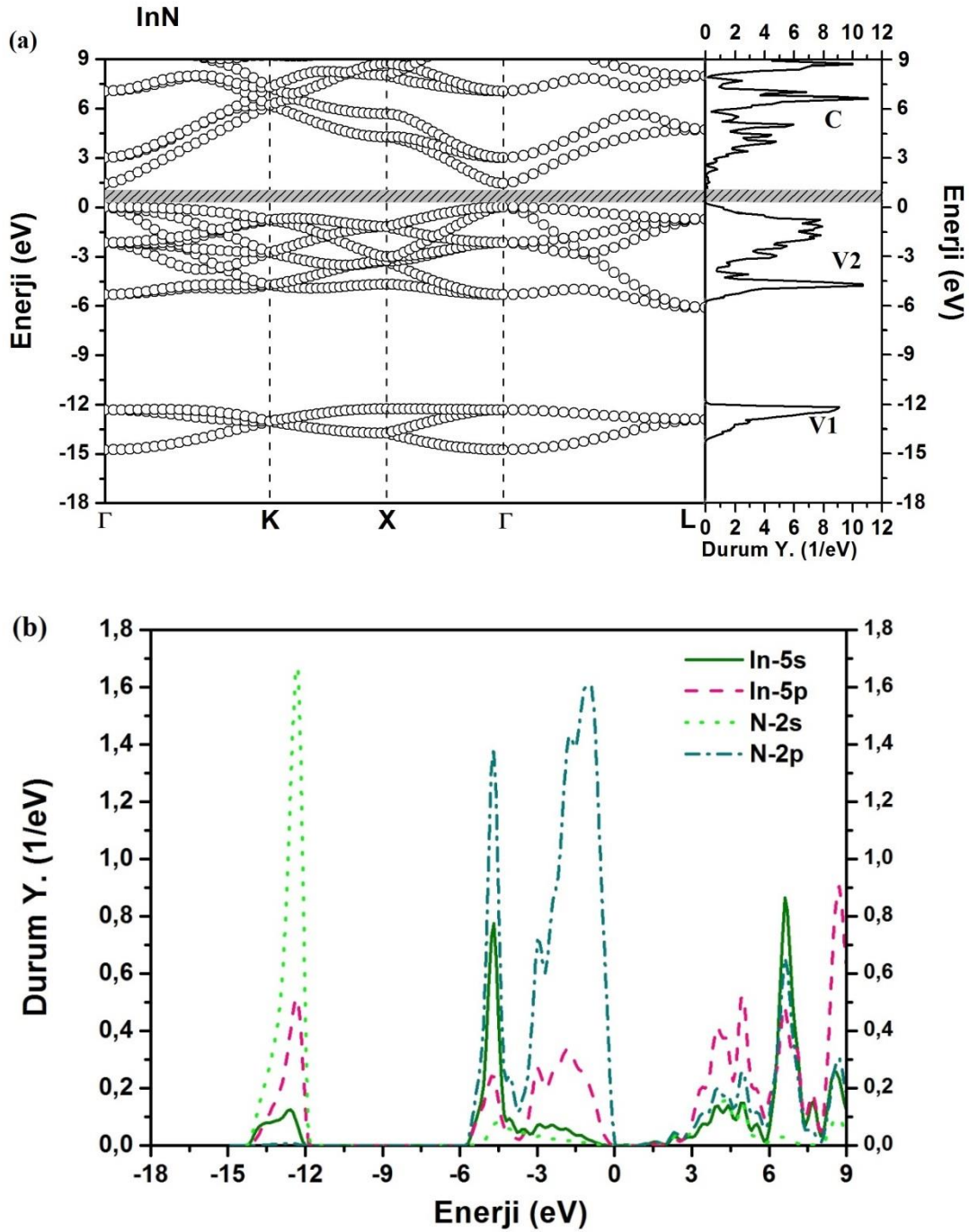
noktasında çok belirgin bir şekilde görülmektedir. Dolayısıyla GaBi bileşiğinin metalik özellik gösterdiği anlaşılır.



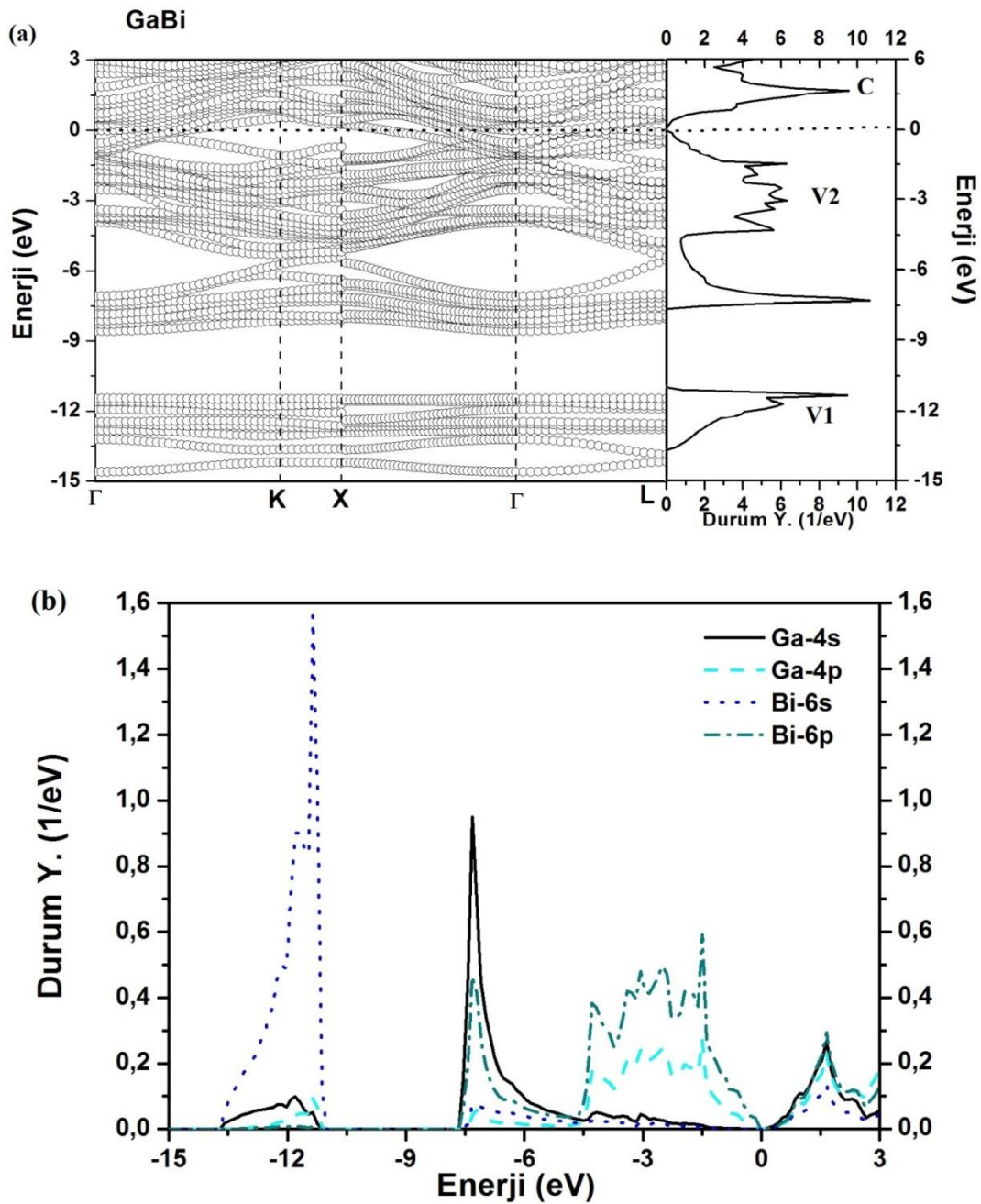
Şekil 3.19. GaN ikili yarıiletken bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği

Toplam durum yoğunluğunda gösterilen V1, V2 ve C'yi domine eden orbitaller sırayla Bi 6s tipi, Ga 4s-Bi 6p tipi ve Ga 4s-Bi 4p tipi orbitalleridir. V1'de -11 eV, V2'de ise -7.5 eV civarında meydana gelen pik K- Γ doğrultusunda meydana

gelen düz bantlardan kaynaklanmaktadır. Valans bandının maksimumu ve iletkenlik bandının minimumu ise sırayla Bi 6p ve Ga 4s tipi orbitalleri tarafından domine edilmektedir.



Şekil 3.20. InN ikili yarıiletken bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği



Şekil 3.21. GaBi ikili bileşiği için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği

Bu materyaller için elde edilen yasak bant aralığı enerjileri Tablo 3.4'te gösterilmiştir. Tablo 3.4 incelendiğinde elde edilen yasak bant enerjilerinin deneysel sonuçlarla çok iyi uyum içinde olduğu görülmektedir. Diğer taraftan InAs ve GaN için teorik değerlerde küçük sapmalar gözlenmektedir. Bunun nedeni ise, kullanılan değiş-tokuş korelasyon enerjilerinden kaynaklanmaktadır. Çalışılan ikili

yarıiletkenlerin yasak bant aralığı diğer teoik ve deneysel çalışmalarla kıyaslandığında %1-%2.5 arasında deęişim olduęu gözlenmektedir. Bu durum, elde edilen sonuçların literatürle iyi bir uyum içinde olduęunu göstermektedir.

Tablo 3.4. Çalışılan ikili bileşiklerin yasak bant enerjileri

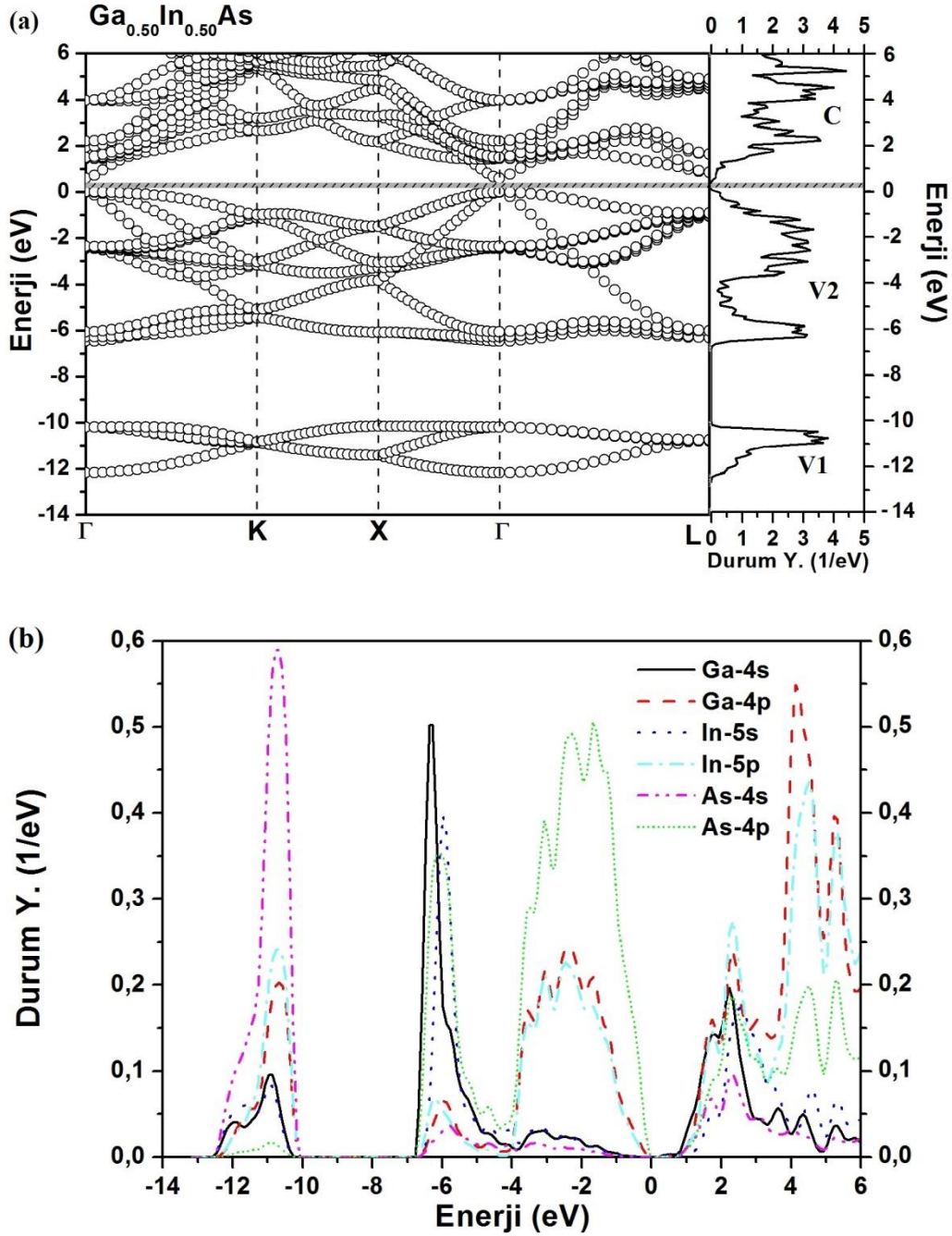
Materyal	E_g (eV)	Referans
GaAs	1.3799	Bu çalışma
	1.4240	Deney, Feng (2009)
InAs	0.4114	Bu çalışma
	0.3400	Teori, Wei (1996)
	0.4160	Deney, Kim (2010)
GaN	3.0267	Bu çalışma
	3.2 - 3.3	Teori, Adachi (1985)
	3.3000	Deney, Sitar (1992); Okumura (1994); Flores (1994)
InN	1.7100	Bu çalışma
	1.91	Deney, Börnstein (1982)

3.3.6. Üçlü ve dörtlü alaşımların elektronik özellikleri

Tez kapsamında incelenen ikili bileşiklerden elde edilen üçlü (GaInAs, GaAsN, ve GaAsBi) ve dörtlü (GaInAsN) alaşımlar için denge konumunda hesaplanan örgü sabitleri kullanılarak, yüksek simetri yönlerine karşılık gelen elektronik bant yapıları ve toplam durum yoğunlukları elde edildi.

Şekil 3.22’de %50 Ga ve %50 In içeren GaInAs üçlü yarıiletken alaşımlarının elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu grafikleri gösterilmektedir. Bu alaşımların Γ noktasında doğrudan bant aralığına sahip olduęu görülmektedir. Yasak bant aralığı E_g deęeri 0.5966 eV olarak bulunmuştur. İkili bileşiklere benzer olarak, Şekil 3.22(a)’da gösterilen toplam durum yoğunluęunda meydana gelen pikler, bu piklere karşılık gelen enerji deęerlerinde bantların düz olmasından kaynaklanmaktadır. Dięer taraftan, Şekil 3.22(b)’nin yardımıyla valans bandının maksimumunun As 4p tipi

orbitallerinden, iletkenlik bandının minimumunun ise Ga 4s ve In 5p tipi orbitallerinden kaynaklandığı söylenebilir.



Şekil 3.22. $Ga_{0.5}In_{0.5}As$ yarıiletken alaşımı için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği

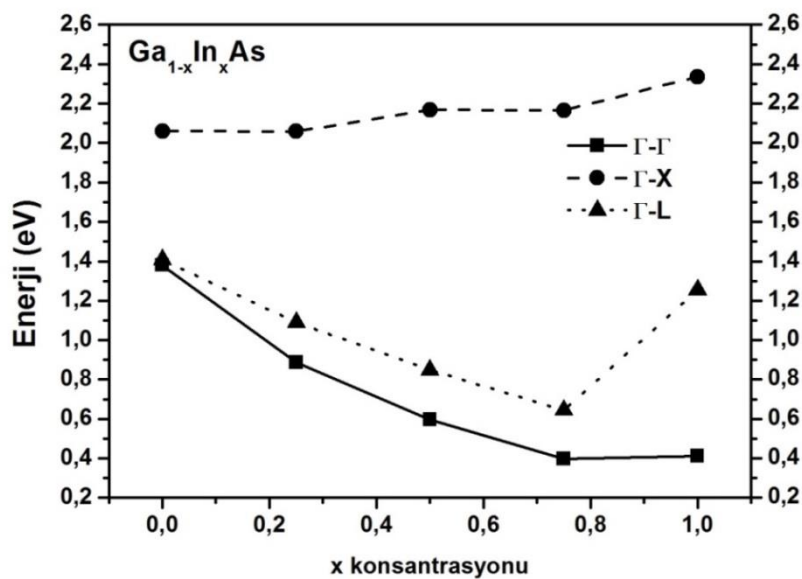
Tablo3.5’de ise $GaInAs$ alaşımının yasak bant aralığı değerleri gösterilmiştir. Literatürde bu malzeme için teorik ve deneysel çalışma bulunmamaktadır. Fakat

yapılan çalışmalar örgü sabiti ile yasak bant aralığı arasındaki ilişki kullanılarak doğrulanabilir. Bilindiği üzere yarıiletken alaşımlarda örgü parametresi arttıkça bant aralığının azalması beklenir. Bu durum elde edilen sonuçlarla paralellik taşımaktadır. GaAs ve InAs için yapısal sonuçlarda elde edilen örgü parametreleri kıyaslandığında $a_{\text{InAs}} > a_{\text{GaAs}}$ sonucuna varılır. Yukarıdaki açıklamaya göre GaAs'den InAs'e doğru gidildiğinde yasak bant aralığının azalması beklenir. Tablo 3.5 bu sonucu doğrulamaktadır.

Tablo 3.5. GaInAs üçlü yarıiletkeninin yasak bant enerjileri

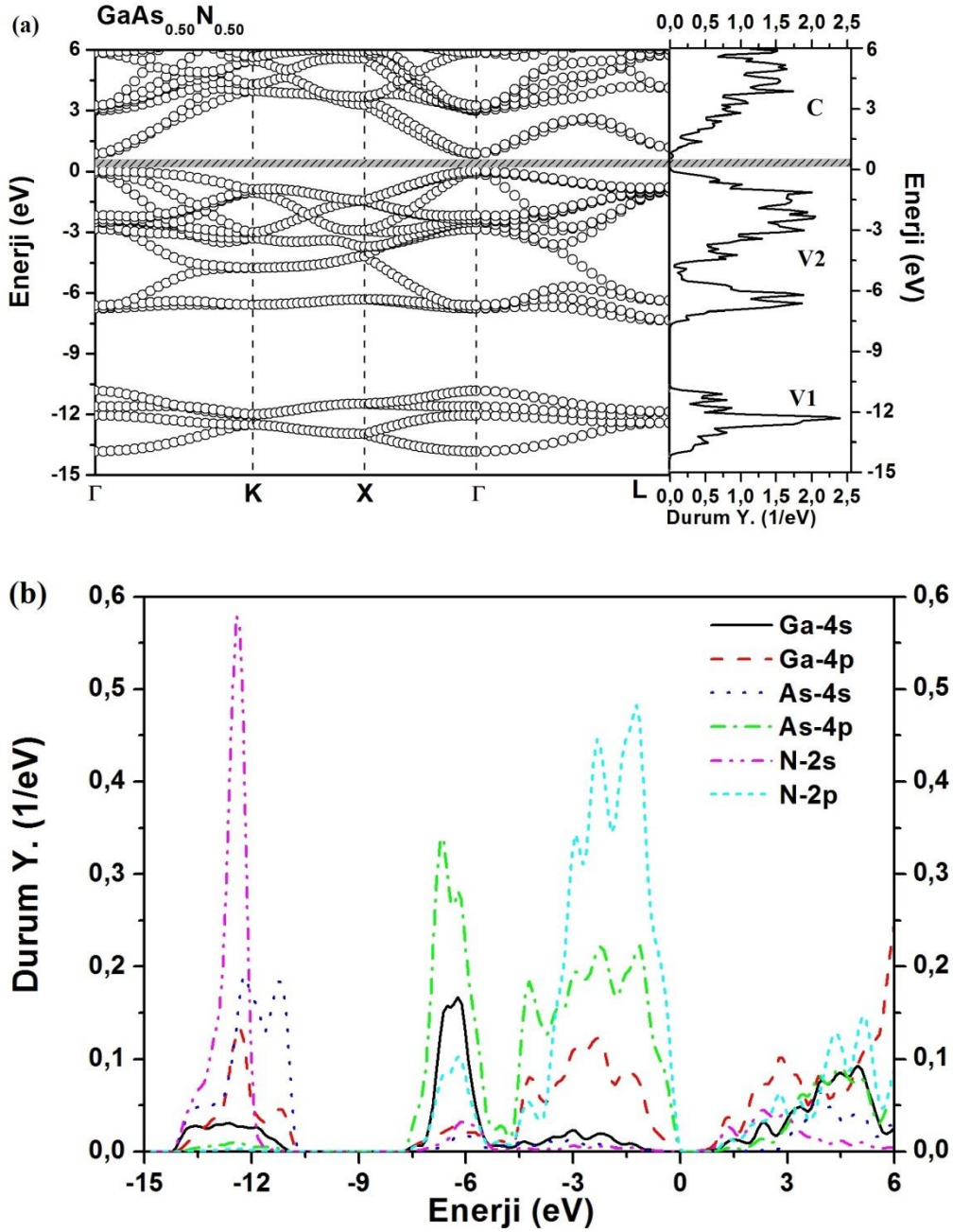
Materyal	E_g (eV)	Referans
$\text{Ga}_{0,75}\text{In}_{0,25}\text{As}$	0.8859	Bu çalışma
$\text{Ga}_{0,50}\text{In}_{0,50}\text{As}$	0.5966	Bu çalışma
$\text{Ga}_{0,25}\text{In}_{0,75}\text{As}$	0.3978	Bu çalışma

Şekil 3.23'te GaInAs üçlü yarıiletken alaşımı için yüksek simetri noktalarına karşılık gelen enerji değerlerinin tüm konsantrasyonlardaki değişimi gösterilmektedir. Şekil 3.23, Γ noktası merkez alınarak diğer yüksek simetri noktaları olan Γ , X ve L noktaları arasındaki enerji farkları hesaplanarak elde edilmiştir.



Şekil 3.23. $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ üçlü yarıiletken alaşımı için yüksek simetri noktalarındaki enerji aralığı değerlerinin konsantrasyonla değişimi

Şekil 3.23'ten açıkça görülmektedir ki en düşük enerji aralığı değerleri her konsantrasyon için Γ - Γ geçişine karşılık gelmektedir. Bu nedenle bu alaşım tüm konsantrasyonlarda doğrudan bant aralıklı yarıiletken davranışı göstermektedir.



Şekil 3.24. GaAs_{0.5}N_{0.5} yarıiletken alaşımı için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği

Şekil 3.24'te %50 Ga ve %50 In içeren GaAsN üçlü yarıiletken alaşımının elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu grafikleri gösterilmektedir. Bu alaşımın Γ

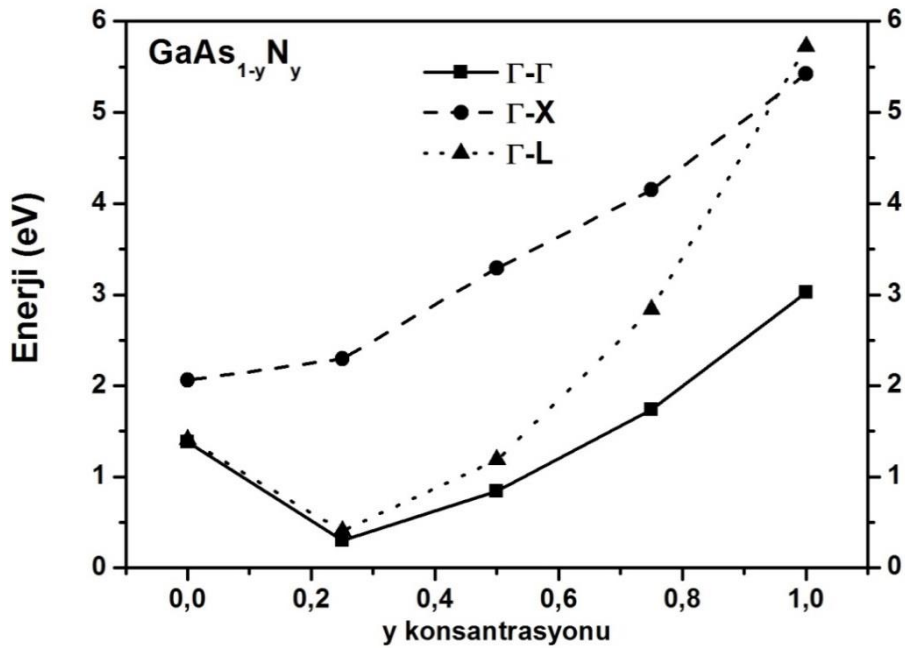
noktasında doğrudan bant aralığına sahip olduğu görülmektedir. Yasak bant aralığı E_g değeri 0.8414 eV olarak bulunmuştur. İkili bileşiklere benzer olarak, Şekil 3.24(a)'da ki toplam durum yoğunluğunda gösterilen V1, V2 ve C'yi domine eden orbitaller sırayla N 2s tipi, N 2p-As 4p tipi ve Ga 4p tipi orbitalleridir. V1'de -12 eV, V2'de ise -6 eV civarında meydana gelen pik K- Γ doğrultusunda meydana gelen hemen hemen düz bantlardan kaynaklanmaktadır. Diğer taraftan, Şekil 3.24(b)'nin yardımıyla valans bandının maksimumunun N 2p tipi orbitallerinden, iletkenlik bandının minimumunun ise Ga 4p tipi orbitalleri tarafından baskın edildiği görülmektedir.

Tablo 3.6'da GaAsN alaşımının yasak bant aralığı değerleri gösterilmiştir. Literatürde bu malzeme için teorik ve deneysel çalışma bulunmamaktadır. Burada da GaInAs üçlü yarıiletken alaşım için uygulanan metodu uygulayabiliriz. GaAs ve GaN için yapısal sonuçlarda elde edilen örgü parametreleri kıyaslandığında $a_{\text{GaAs}} > a_{\text{GaN}}$ sonucuna varılır. Yukarıdaki açıklamaya göre GaN'dan GaAs'e doğru gidildiğinde yasak bant aralığının küçülmesi beklenir. Tablo 3.6 bu sonucu doğrulamaktadır.

Tablo 3.6. GaAsN üçlü yarıiletkeninin yasak bant enerjileri

Materyal	E_g (eV)	Referans
GaAs _{0.75} N _{0.25}	0.2986	Bu çalışma
GaAs _{0.50} N _{0.50}	0.8414	Bu çalışma
GaAs _{0.25} N _{0.75}	1.7409	Bu çalışma

Şekil 3.25'te GaAsN üçlü yarıiletken alaşımı için yüksek simetri noktalarına karşılık gelen enerji değerlerinin tüm konsantrasyonlardaki değişimi gösterilmektedir. GaInAs üçlü yarıiletken alaşımına benzer olarak en düşük enerji değerleri her konsantrasyon için Γ - Γ geçişine karşılık geldiğinden bu alaşım tüm konsantrasyonlarda doğrudan bant aralığına sahip bir yarıiletken davranışı göstermektedir.

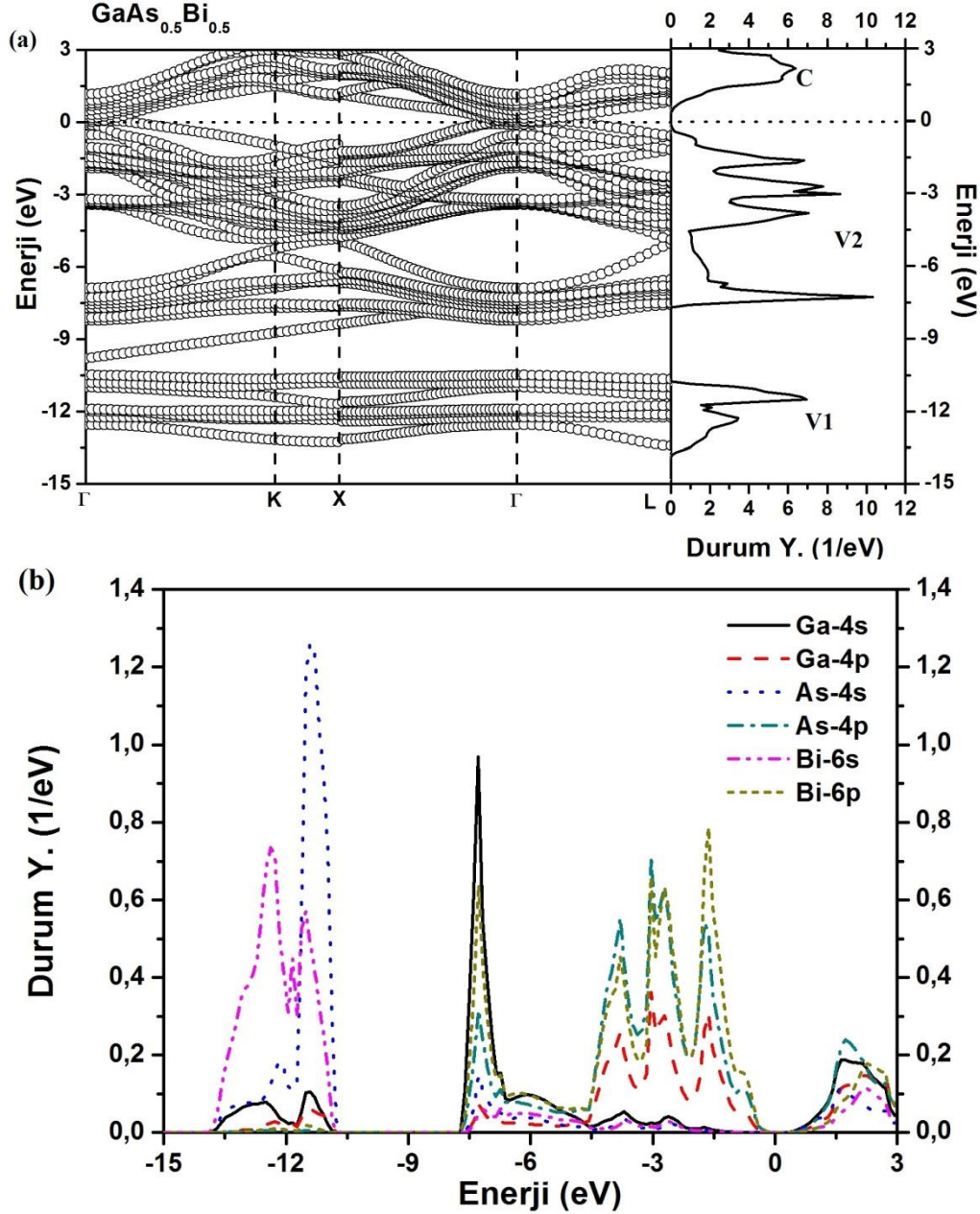


Şekil 3.25. GaAs_{1-y}N_y üçlü yarıiletken alaşımı için yüksek simetri noktalarındaki enerji aralığının konsantrasyonla değişimi

Tez kapsamında incelenen son üçlü alaşım GaAsBi materyalidir. Şekil 3.26'da %50 As ve %50 Bi içeren GaAsBi üçlü yarıiletken alaşımının elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu grafikleri gösterilmektedir. İletkenlik ve valans bantlarının fermi seviyesini kestiği özellikle Γ noktasında çok açık görülmektedir. Bu durum GaAsBi alaşımı için bu konsantrasyonda metalik özellik gösterdiğini ifade eder. Şekil 3.26(a)'da toplam durum yoğunluğunda gösterilen V1, V2 ve C'yi baskın eden orbitaller sırayla As 4s-Bi 6s tipi, Ga 4s-As 4p-Bi 6p tipi ve Ga 4s-As 4p- tipi orbitalleridir. V1'de -10.85 eV, V2'de ise -7.4 eV civarında meydana gelen pik K-X ve K- Γ doğrultusunda meydana gelen dispersif bantlardan kaynaklanmaktadır. Valans bandının maksimumu ve iletkenlik bandının minimumu ise sırayla Bi 6p ve Ga 4s tipi orbitalleri tarafından domine edilmektedir.

GaAsBi üçlü alaşımını oluşturan ikililer GaAs ve GaBi bileşikleridir. Bu bileşiklerden GaAs'ın yarıiletken, GaBi'nin metalik davranış gösterdiği açıklanmıştı (Bkz. 3.3.5). Dolayısıyla, GaAsBi alaşımının yarıiletken özellikten metalik özelliğe geçen bir konsantrasyona sahip olması gerekir. Peki bu konsantrasyonun yüzdesi nedir? Bu konsantrasyonun yüzdesinin bulunması için GaAsBi alaşımı için diğer üçlü alaşımlardan farklı olarak 16 atom içeren 2x2x2 süper-hücre üzerinden

hesaplama yapıldı. Daha fazla atomlu süper-hücre seçimi konsantrasyon yüzdesinin daha da küçük oranlarda değiştirilmesine olanak verir.



Şekil 3.26. GaAs_{0.5}Bi_{0.5} yarıiletken alaşımı için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği

Örneğin, III-V grubu bir ikili bileşik için 8-atomlu süper-hücre de en düşük konsantrasyon yüzdesi %25 olurken, 16-atomlu süper-hücre için bu oran %12.5 olmaktadır. Daha fazla atom seçimi daha düşük konsantrasyonların elde edilmesine olanak sağlar. Fakat konsantrasyon oranının düşürülmesinin aynı oranda hesaplama

süresini arttırdığı da göz ardı edilmemelidir. Bu açıklamalar kapsamında Tablo 3.7’de GaAsBi üçlü alaşımının yarıiletken özellik gösteren konsantrasyonları için yasak bant enerji değerleri gösterilmektedir.

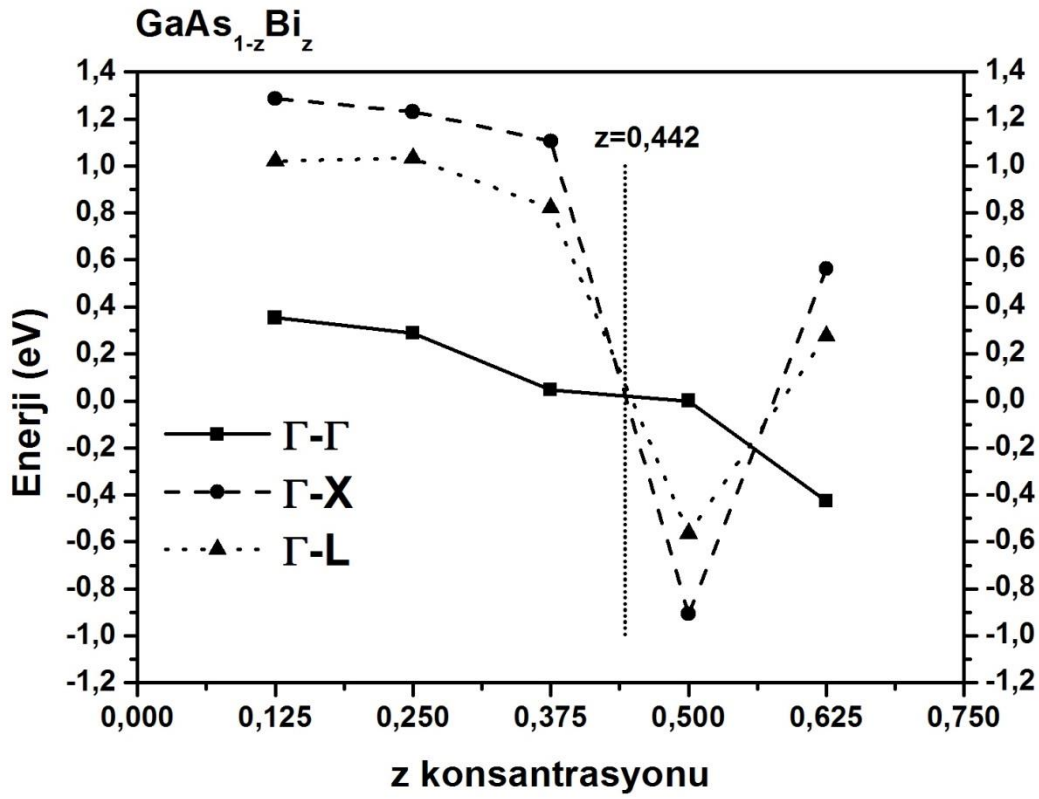
Tablo 3.7. GaAsBi üçlü alaşımının yarıiletken özellik gösteren konsantrasyonlarına ait yasak bant enerjileri

Materyal	E_g (eV)	Referans
$\text{GaAs}_{0.875}\text{Bi}_{0.125}$	0.3831	Bu çalışma
$\text{GaAs}_{0.75}\text{Bi}_{0.25}$	0.2874 0.37	Bu çalışma Teori, Abdiche (2010)
$\text{GaAs}_{0.625}\text{Bi}_{0.375}$	0.0478	Bu çalışma

Diğer üçlü yarıiletken alaşımlara benzer olarak Tablo 3.7’de verilen değerlerin doğruluğu test edilebilir. $a_{\text{GaAs}} > a_{\text{GaBi}}$ olduğu için GaAs’dan GaBi’ye doğru gidildikçe yasak bant aralığının azalması beklenir. Tablo 3.7’deki veriler bu sonucu doğrulamaktadır. Literatüre bakıldığında, 2010 yılında Abdiche ve arkadaşları, Abdiche (2010), GaAsBi üçlü materyalini 8 atomlu basit kübik örgüde incelemişlerdir. Bu çalışmalarında GaAs yarıiletkenine %25 oranında Bi alaşımlanması durumunda ortaya çıkan üçlü bileşiğin ($\text{GaAs}_{0.75}\text{Bi}_{0.25}$) yasak bant enerji değerlerini 0.37 bulmuşlardır. Bu değer hesaplanan değerden yaklaşık %24 civarında bir sapma göstermektedir. Bunun nedeni ise Abdiche’nin almış olduğu süper hücreden ve kullanılan korelasyon enerjilerinin farklı olmasından kaynaklanmaktadır. Abdiche 8 atomlu $1 \times 1 \times 1$ basit kübik örgüye sahip bir süper hücre kullanmaktadır, oysa bu çalışmada ise 16 atomlu $2 \times 2 \times 2$ yüzey merkezli kübik örgüye sahip bir süper hücre kullanılmaktadır. Bu konuda yapılacak farklı çalışmaların bu problemi ortadan kaldıracağı düşünülmektedir.

Şekil 3.27’de GaAsBi üçlü alaşımı için yüksek simetri noktalarına karşılık gelen enerji değerlerinin değişimi gösterilmektedir. Bu alaşım için %44.2 Bi konsantrasyonuna kadar en düşük enerji değerleri Γ - Γ geçişine karşılık geldiğinden bu alaşım %44.2 Bi konsantrasyonlarına kadar yarıiletken davranış sergilemektedir. Şekil 3.27’den açıkça görülmektedir ki %44.2 Bi konsantrasyonundan sonra yüksek simetri noktaları birbirleriyle kesişmektedirler. Ayrıca, enerjinin negatif değerler alması bu konsantrasyon değerinden sonra iletkenlik bandının valans bantlarıyla iç-

içe girmesi anlamı taşımaktadır. Bu durum, GaAsBi üçlü alaşımının %44.2 Bi konsantrasyonundan sonra metalik özellik gösterdiği anlamına gelmektedir.

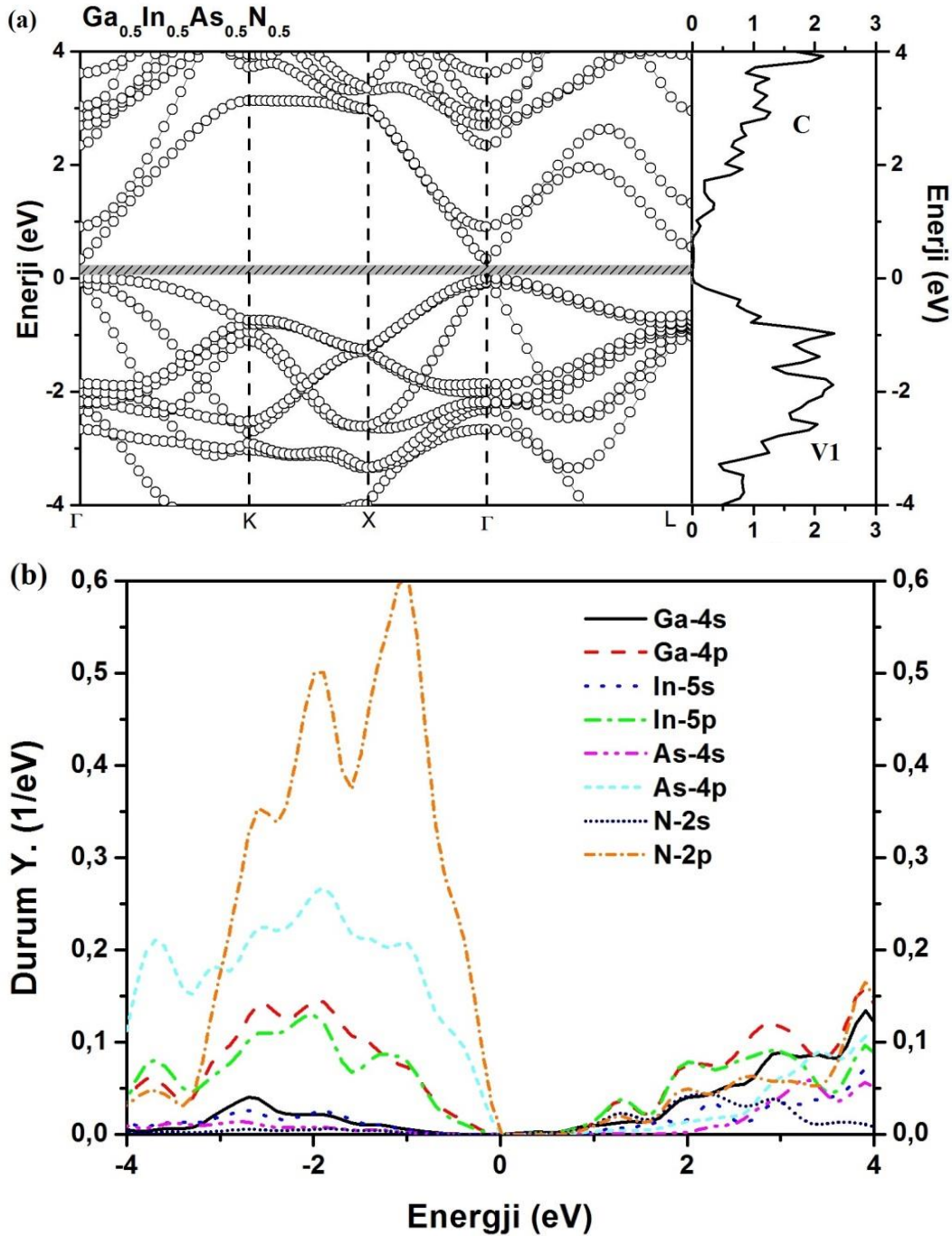


Şekil 3.27. GaAs_{1-x}Bi_x üçlü alaşımı için yüksek simetri noktalarındaki enerji aralığının konsantrasyonla değişimi

Şimdi de GaAs, InAs, GaN ve InN ikili yarıiletken bileşiklerinin kullanılmasıyla elde edilen dördütlü GaInAsN yarıiletken alaşımının elektronik özelliklerini inceleyelim. Bu dördütlü alaşımın en önemli özelliklerinden biri uygun In ve N konsantrasyonlarının elde edilmesiyle GaAs üzerine büyütülebilme potansiyeline sahip olması ve fiber optik kablolarda en yüksek verimin elde edilebileceği 1 eV'luk yasak bant enerji değerinin elde edilebiliyor olmasıdır.

Şekil 3.28'de %50 Ga, %50 In, %50 As ve %50 N içeren GaInAsN üçlü yarıiletken alaşımının elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu grafikleri gösterilmektedir. Bu alaşımın Γ noktasında doğrudan bant aralığına sahip olduğu görülmektedir. Yasak bant aralığı E_g değeri 0.3387 eV olarak bulunmuştur. İkili bileşiklere ve üçlü alaşımlara benzer olarak, Şekil 3.28(a)'da gösterilen toplam durum yoğunluğunda meydana gelen pikler, bu piklere karşılık gelen enerji değerlerinde bantların dispersif

olmamasından kaynaklanmaktadır. Diğer taraftan, Şekil 3.28(b)'den görüldüğü gibi valans bandının maksimumunu N 2p tipi orbitalleri, iletkenlik bandının minimumunu ise Ga 4p ve In 5p tipi orbitalleri tarafından domine edilmektedir.



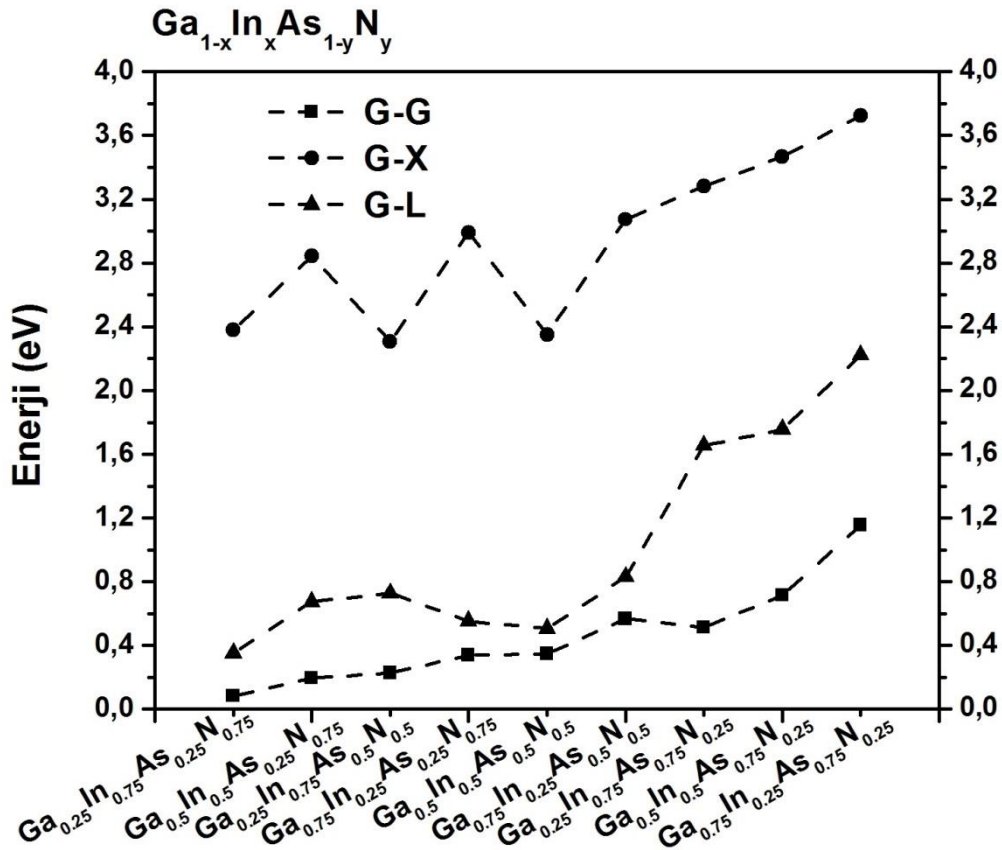
Şekil 3.28. $Ga_{0.5}In_{0.5}As_{0.5}N_{0.5}$ yarıiletken alaşımı için (a) elektronik bant grafiği ve toplam durum yoğunluğu (b) parçalı durum yoğunluğu grafiği

Tablo3.8’de GaInAsN alařımının yasak bant enerji deęerleri gsterilmiřtir. Literatürde bu malzeme için teorik ve deneysel alıřma bulunmamaktadır. Tablo 3.8’de ikili bileřiklerde büyük yasak bant aralıęına sahip GaN yarıiletkenine en yakın alařım olan $Ga_{0.75}In_{0.25}N_{0.75}As_{0.25}$ materyalinin en büyük yasak bant aralıęına, en küçük yasak bant aralıęına sahip InAs yarıiletkenine en yakın alařım olan $Ga_{0.25}In_{0.75}N_{0.25}As_{0.75}$ materyalinin en küçük yasak bant aralıęına sahip olduęu gsterilmektedir. İkili yarıiletken bileřikler olan GaN ve InAs ile kıyaslandığında bu durumun beklenen bir sonu olduęu aıktır. Ayrıca, bu sonu hesaplanan sonuların doęruluęunu gstermektedir.

Tablo 3.8. GaInAsN drtl yarıiletken alařımının yasak bant enerji deęerleri

Materyal	E_g (eV)	Referans
$Ga_{0.75}In_{0.25}N_{0.25}As_{0.75}$	0.2277	Bu alıřma
$Ga_{0.75}In_{0.25}N_{0.50}As_{0.50}$	0.5669	Bu alıřma
$Ga_{0.75}In_{0.25}N_{0.75}As_{0.25}$	1.1547	Bu alıřma
$Ga_{0.50}In_{0.50}N_{0.25}As_{0.75}$	0.1347	Bu alıřma
$Ga_{0.50}In_{0.50}N_{0.50}As_{0.50}$	0.3387	Bu alıřma
$Ga_{0.50}In_{0.50}N_{0.75}As_{0.25}$	0.7141	Bu alıřma
$Ga_{0.25}In_{0.75}N_{0.25}As_{0.75}$	0.0814	Bu alıřma
$Ga_{0.25}In_{0.75}N_{0.50}As_{0.50}$	0.1955	Bu alıřma
$Ga_{0.25}In_{0.75}N_{0.75}As_{0.25}$	0.5124	Bu alıřma

řekil 3.29’da GaInAsN drtl yarıiletken alařımı için yksek simetri noktalarına karřılık gelen enerji deęerlerinin tm konsantrasyonlardaki deęiřimi gsterilmektedir. GaInAs veya GaAsN l yarıiletken alařımlarına benzer olarak en dřk enerji deęerleri her konsantrasyon için Γ - Γ geiřine karřılık geldięinden bu alařım tm konsantrasyonlarda doęrudan bant aralıęına sahip yarıiletken davranıř gstermektedir.



Şekil 3.29. Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y dörtlü yarıiletken alaşımı için yüksek simetri noktalarındaki enerji aralığının konsantrasyonla değişimi

3.3.7. GaAsN ve GaAsBi üçlü alaşımlarının bükülme parametreleri

GaAsN üçlü yarıiletken alaşımının bant aralığı enerji değişimi incelendiğinde, düşük N alaşımlı bölgelerde N konsantrasyonu arttıkça şiddetli bir azalma gözlenmektedir. Bu değişim bant enerjisinde lineer olmayan (non-lineer) bir davranışa sebep olmaktadır. Bu non-lineer davranışa bükülme denir. Bu bükülme alaşımlarda meydana gelen yasak enerji değerleriyle ilişkilidir. Üçlü bileşiklerde meydana gelen bu bükülmeleri yasak bant enerjilerine bağlı olarak aşağıdaki formülle hesaplayabiliriz:

$$E_g(AB_{1-x}C_x) = xE_gAC + (1-x)E_gAB - x(1-x)b \quad (3.33)$$

Eş. 3.33'te yer alan 'b' değerine bükülme parametresi denir. Eş. 3.33'den b'yi çekersek:

$$b = \frac{|E_g(AB_{1-x}C_x) - xE_{g,AC} - (1-x)E_{g,AB}|}{x(1-x)} \quad (3.34)$$

eşitliği elde edilir.

GaAsN ve GaAsBi için hesaplanan bükülme parametreleri Tablo 3.9'da görülmektedir. GaAsBi materyalinin farklı konsantrasyonlarda meydana gelen bükülme parametreleri için daha önce yapılan bir çalışma yoktur. GaAsN üçlü yarıiletken alaşımının %25 ve %50 N alaşımli bükülme parametrelerinin Wei ve arkadaşlarının 1996 yılında yapmış olduğu çalışmanın sonuçlarıyla, Wei (1996), uyum içinde olduğu gözükmemektedir.

Tablo 3.9. GaAsN ve GaAsBi üçlü bileşiklerinin bükülme parametreleri

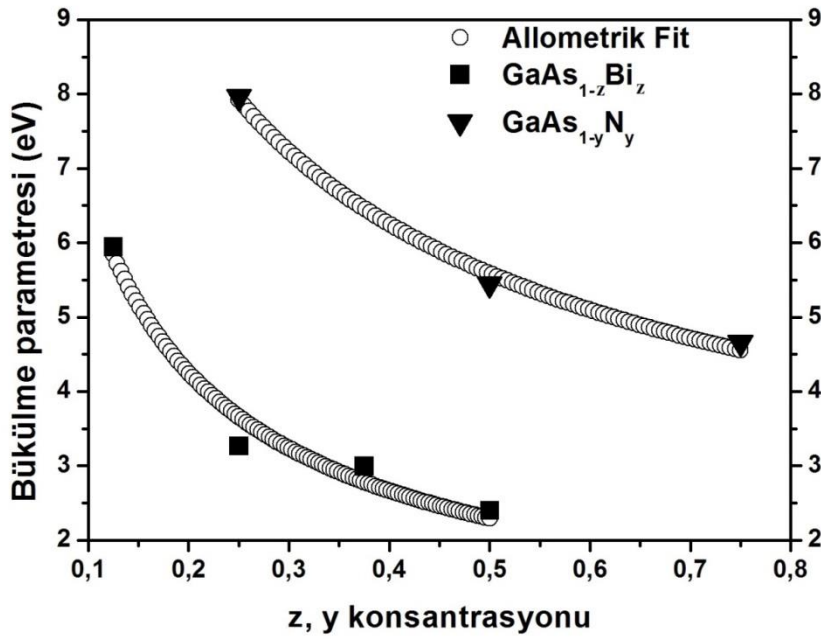
Materyal	Bükülme Parametresi (eV)	Referans
GaAs _{0.75} N _{0.25}	7.9 7.6	Bu Çalışma Teori, Wei (1996)
GaAs _{0.50} N _{0.50}	5.5 6.8	Bu Çalışma Teori, Wei (1996)
GaAs _{0.25} N _{0.75}	4.7	Bu Çalışma
GaAs _{0.875} Bi _{0.125}	5.9	Bu Çalışma
GaAs _{0.75} Bi _{0.25}	3.3	Bu Çalışma
GaAs _{0.625} Bi _{0.375}	3.0	Bu Çalışma
GaAs _{0.50} Bi _{0.50}	2.4	Bu Çalışma

Eş. 3.34 yardımıyla elde edilen bu bükülme parametrelerinin değerleri N ve Bi konsantrasyonuna bağlı olarak Şekil 3.30'da gösterilmektedir.

Bükülme parametrelerinin değerleri aşağıda belirtilen non-lineer eşitlik kullanılarak fit edilmiştir:

$$b = C \cdot y^D \quad (3.35)$$

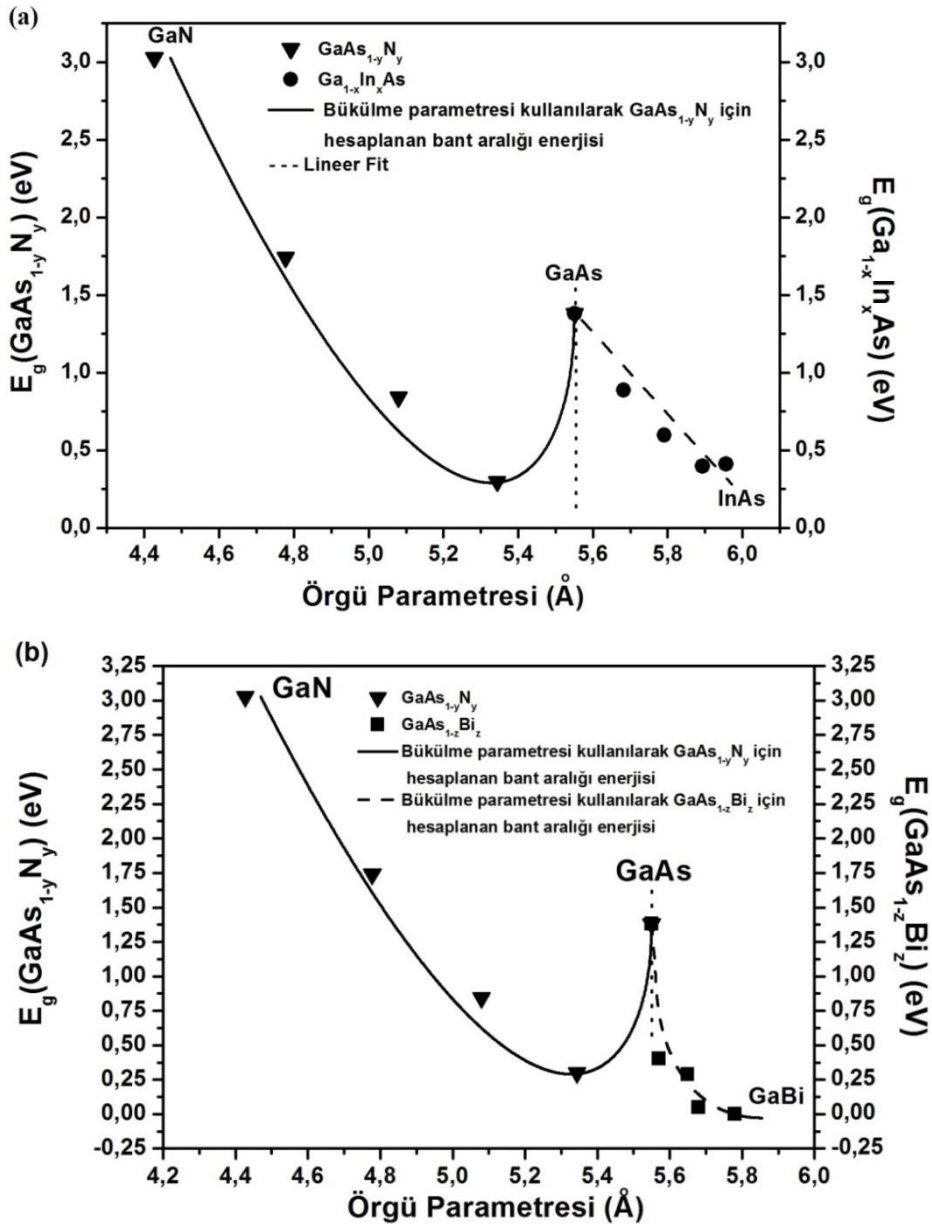
GaAsBi için C ve D sabitleri sırayla 1.43581 ve -0.6748, GaAsN için ise 3.93853 ve -0.5045 olarak elde edilmiştir. Bu sonuçlar GaAsN bileşiğinin GaAsBi bileşiğine kıyasen daha büyük bükülme parametresine sahip olduğunu göstermektedir.



Şekil 3.30. GaAsBi ve GaAsN üçlü alaşımlarının bükülme parametrelerinin konsantrasyon yüzdesine göre değişimi

Eş. 3.34 yardımıyla, GaAs yarıiletkeni baz alınarak elde edilen GaAsBi (As/Bi değişimi), GaInAs (Ga/In değişimi) ve GaAsN (As/N değişimi) üçlü materyallerinin yasak enerji aralıklarının örgü parametreleriyle değişimi Şekil 3.31'de gösterilmektedir. Şekil 3.31 incelendiğinde GaAs yarıiletkenine N alaşımlanmasının In ve Bi elementlerine kıyasen çok daha büyük bükülme oranına sahip olduğu görülmektedir. Bu durumun temel nedeni N sahip olduğu yüksek elektronegatiflik ve yarıçap farklılıklarıdır. Şekil 3.31(a)'dan açıkça görülmektedir ki GaInAs alaşımının sahip olduğu bükülme, GaAsN alaşımının sahip olduğu bükülme değişimine göre çok küçük bir değere sahiptir. Dolayısıyla, GaInAs üçlü yarıiletken alaşımının bükülmesi lineer olarak kabul edilebilir. Ayrıca, GaInAs üçlü yarıiletken alaşımındaki değişim incelendiğinde GaAs materyaline In alaşımlanması örgü parametresinde sürekli bir artmaya sebep olurken, yasak bant aralığı enerjilerinde ise sürekli bir azalmaya gitmektedir. Diğer taraftan, GaAsN alaşımında ise N konsantrasyonunun artması örgü parametresinde sürekli bir küçülmeye sebep olurken, yasak bant aralığı ise yaklaşık %20 N konsantrasyonuna kadar azalmaya sonrasında ise yasak bant enerji değerinin artmasına sebep olmaktadır. Bu durumun en büyük sebeplerinden biri N elementinin sahip olduğu yüksek elektronegatiflik ve yarıçapının yer değiştirdiği atoma göre çok küçük olmasıdır. GaAsBi üçlü bileşiği GaInAs ile benzer davranışı göstermesine rağmen, GaAsBi bileşiğinde meydana

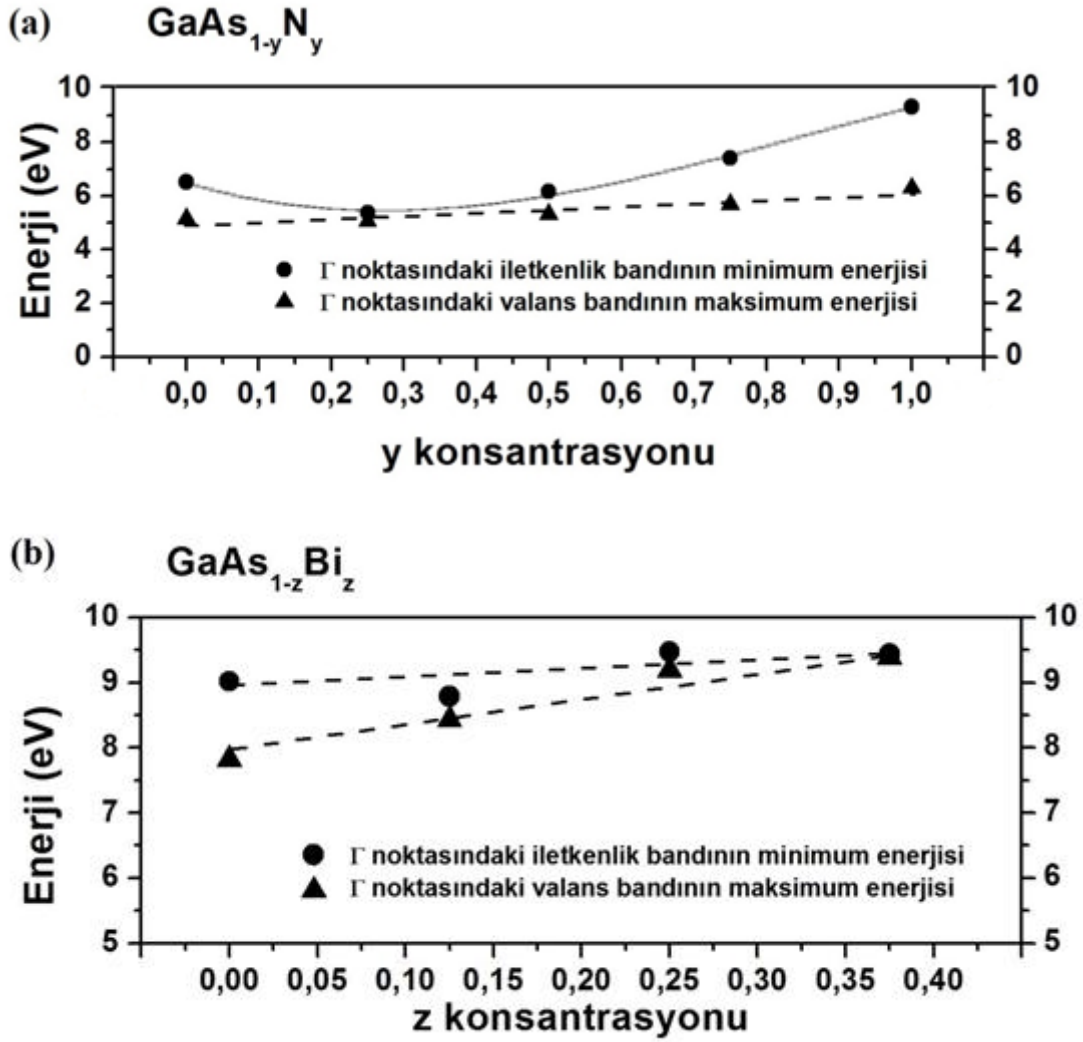
gelen artış (örgü parametresi) ve azalışların (yasak bant enerjisi) daha yavaş olduğu Şekil 3.31(b)'deki üstel değişimden kolaylıkla görülmektedir.



Şekil 3.31. (a) GaAsN ve GaInAs, (b) GaAsN ve GaAsBi için örgü parametrelerinin yasak bant aralığı enerjilerine göre değişimi

Son olarak, GaAsBi ve GaAsN üçlü bileşiklerinin değişen Bi ve N konsantrasyonuna bağlı olarak Γ simetri noktası referans alınarak iletkenlik ve valans bantlarındaki değişimler Şekil 3.32'de gösterilmektedir. Şekil 3.32(a)'da GaAsN üçlü yarıiletkeni için N konsantrasyonlarına karşılık gelen Γ simetri noktasında iletkenlik bandının

minimum, valans bandının maksimum enerji değişimi gösterilmektedir. Şekil 3.32(a)'nın yardımıyla, N konsantrasyonunun valans bandını neredeyse hiç etkilemediği görülmektedir.



Şekil 3.32. (a) GaAsN, (b) GaAsBi için farklı Bi ve N konsantrasyonlarına karşılık gelen iletkenlik bandının minimum, valans bandının maksimum enerji değişimi

Diğer bir deyişle, GaAs yarıiletkenine N alaşımlanması valans bandı için hemen hemen sabit bir değişim göstermektedir. Fakat iletkenlik bandı için aynı durum sözkonusu değildir. Bu durum sisteme N ilavesinin iletkenlik bandının minimum enerji seviyesinde bulunan bandı ikiye yararak valans bandına yaklaştırmasından kaynaklanmaktadır. GaAs yarıiletkenine N alaşımlanması %25 N konsantrasyonuna kadar iletkenlik bandı enerji değerini azaltmakta %25 N içeren daha büyük konsantrasyonlarda iletkenlik bandı enerji değerini arttırmaktadır. Bu değişimler

(azalış ve artışlar) N konsantrasyonunun iletkenlik bandını açık şekilde etkilediğini ortaya koyar. İletkenlik bandının değişimi ise elektronların mobilitelerini değiştirir. Elektronların sahip olduğu mobilite ise alet tasarımında çok büyük öneme sahiptir.

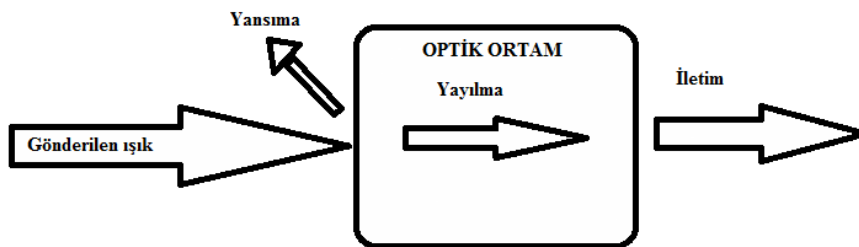
Diğer taraftan, Şekil 3.32(b)'de GaAsBi üçlü yarıiletkeni için Bi konsantrasyonlarına karşılık gelen Γ simetri noktasında iletkenlik bandının minimum, valans bandının maksimum enerji değişimi gösterilmektedir. GaAs yarıiletkenine Bi alaşımlanması Şekil 3.32(a)'da ki durumun aksine Bi konsantrasyonu iletkenlik bandının değerini hemen hemen hiç etkilemezken, valans bandı enerji değerinin lineer olarak artmasına sebep olmaktadır. Bu durum sisteme Bi ilavesinin valans bandının maksimum enerji seviyesinde bulunan bandı ikiye yararak iletkenlik bandına yaklaştırmasından kaynaklanmaktadır. Dolayısıyla, iletkenlik bandında bulunan elektronları ve elektronların sahip olduğu mobilitayı etkilemeyeceği için aygıt tasarımlarında daha uygun şartlara sahip olduğu söylenebilir.

3.4. İncelenen Malzemelerin Optiksel Özellikleri

Bu kısımda katıların optiksel özellikleri araştırılacaktır. Bu kapsamda, optiksel olayların sınıflandırılması yapılarak ve gerekli sabitler tanımlanarak, tez kapsamında çalışılan ikili bileşiklerin ve üçlü-dörtlü alaşımların optiksel özellikleri incelenecektir.

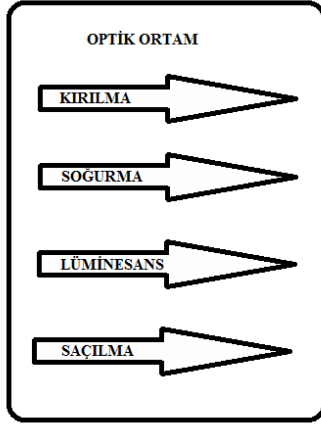
3.4.1. Optiksel olayların sınıflandırılması

Optiksel olayların sınıflandırılması en genel şekilde yansıma, yayılma ve iletim olarak Şekil 3.33'te gösterilmektedir. Ortama gönderilen ışığın bir kısmı ön yüzeyden yansımaktayken, diğer kısmı ortama girer ve ortam boyunca yayılır.



Şekil 3.33. Işığın optik bir ortamda yansıma, yayılma ve iletimi

Eğer ışık arka yüzeye ulaşırsa tekrar yansiyabilir veya ortamın diğer tarafına geçebilir. Işığın optik ortam boyunca yayılması daha ayrıntılı olarak Şekil 3.34'te gösterilmektedir.



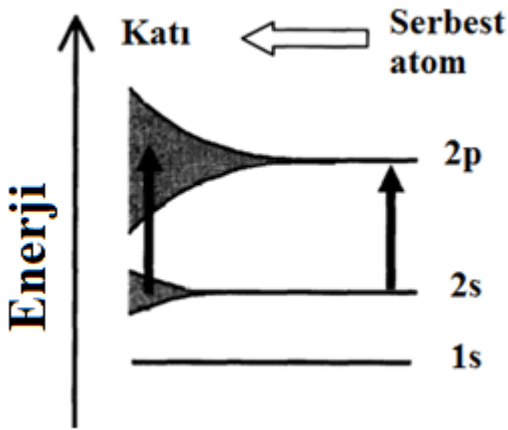
Şekil 3.34. Optik ortam içerisinde meydana gelen olaylar; kırılma, soğurma, lüminesans ve saçılma

Kendi kendine gerçekleşen kırılma, yayılma gerçekleşirken ışığın şiddetini etkilemez. Soğurma, ışığın frekansı ortamdaki atomların geçiş frekanslarıyla uyumlu iseler yayılma boyunca soğurma meydana gelir. Bu durumda, ışın ilerlerken zayıflayacaktır. Ortamın geçirgenliği açık şekilde soğurma ile ilişkilidir, çünkü sadece soğurulmayan ışık geçirilecektir. Lüminesans (ışım), genel olarak katı materyallerde uyarılmış atomlar tarafından ışığın kendi kendine yayılma işlemine verilen isimdir. Işımanın gerçekleşebileceği yollardan biri kendiliğinden meydana gelen emisyonun önce uyarılmış seviyelere geçen atomlarda meydana gelen ışığın soğurulmasıdır. Böylece, ışım soğurucu bir ortamda ışığın yayılımına eşlik eder. Işık her yönde yayılır ve gelen ışından farklı bir frekansa sahiptir. Saçılma, ortamla etkileşim sonrasında ışıkta meydana gelen yön ve olası frekansında meydana gelen değişimdir. Toplam foton sayısı değişmez, fakat ileri yönde gidenlerin sayısı azalır, çünkü ışık farklı yönlerde yeniden yönlendiriliyor olacaktır. Dolayısıyla, saçılma soğurmada olduğu gibi benzer azaltıcı etkiye sahiptir. Eğer saçılan ışığın frekansı değişmiyorsa saçılma esnek, süreç sırasında frekans değişiyorsa esnek olmayan saçılma olarak adlandırılır. Esnek olmayan bir saçılma işlemi foton enerjisindeki fark, frekansın azalmasıyla ortamdan alması veya frekans azalırsa ortama vermesinden kaynaklanır.

Bu çalışmada incelenen malzemeler kristal yapıya sahiptirler. Kristaller uzun mesafeli öteleme düzenine sahiptirler ve nokta grup simetrisine göre 32 sınıfta kategorize edilebilirler. Nokta grup simetrisi, kristali deęişmez bırakan simetri işlemlerini kapsar. Bir kristalin ölçülebilir özellikleri ve nokta grup simetrisi arasındaki bağlantı Neumann ilkesiyle gerçekleştirilebilir. Bu ilke şunu açıklar: herhangi bir makroskobik fiziksel özellik kristal yapının en az bir simetrisine sahip olmak zorundadır.

Bir kristal eđer tüm yönlerde özellikleri aynı deęilse anizotropiktir denir. Anizotropi sadece katılarda görülür, çünkü gazlar ve sıvılar da herhangi bir yön seçimi yoktur. Örneğin kübik kristallerde optik özellikler x, y ve z doğrultularında aynı olmak zorundadır çünkü fiziksel olarak ayırt edilemezler.

Bir katıdaki atomlar, yaklaşık atom boyutuna eşit atomlar arası mesafe kadar birbirlerine çok sıkı bir şekilde paketlenmişlerdir. Bu yüzden, atomların dış taraftaki orbitalleri üst üste binerler ve birbirleriyle güçlü bir şekilde etkileşirler. Bu durum, Şekil 3.35’de şematik olarak gösterildiği gibi bantlar içindeki serbest atomların ayrık seviyelerini genişletir.



Şekil 3.35. N sayıda atomlu sistemde enerji düzeyleri. Her bant içindeki N sayıda düzey birbirine o kadar yakındır ki sürekli dağılmış gibi bakılabilir

Optiksel geçişler, elektronik bantlar arasında meydana gelir. Bantlar arası soğurma, bantların daha düşük ve daha yüksek enerji sınırları tarafından belirlenen belirli bir aralığın üzerindeki foton enerjileriyle mümkün olur. Bu durum, kesikli çizgilerden

oluşan serbest atomların soğurma spektrumuna ters düşmektedir. Kesikli çizgilerden ziyade geniş bantların soğurmalarının gözlenmesi katı halin karakteristik özelliklerinden biridir.

Katıdaki soğurma atomlarının yoğunluğu çok büyük olduğundan dolayı soğurma şiddeti genellikle çok yüksektir. Bu durum çok ince örneklerden oldukça büyük optiksel etkiler üretebiliriz anlamına gelmektedir ve bizlere modern opto-elektronik sanayinin temelini oluşturan kompakt/yoğunlaştırılmış optik aletler yapmamıza izin verecektir, Fox (2001).

Diğer taraftan, bir katıdaki atomların veya moleküllerin elektronik seviyeleri titreşim etkilerinden dolayı kristalin titreşimsel modlarıyla kuvvetli bir şekilde bağlanmış olabilir. Bu etkinin meydana geleceği tipik bir örnek katkılı yalıtkan kristallerdir. Titreşimsel çiftlenme bantlardaki izole katkılı atomların kesikli elektronik seviyelerini genişletir. Bu durum, sürekli bantlardaki atomların kesikli soğurma ve yayma çizgilerini genişletme etkisine sahiptir.

Titreşimsel bantların oluşum sebebinin yukarıda anlatılan elektronik bantlarındaki farklı olduğuna dikkat edilmelidir. Titreşim bantları olayında, seviyelerin sürekliliği kesikli elektronik seviyelerle titreşim modlarının sürekli bir spektrumunun çiftlenmesinden kaynaklanır. Bu durum, komşu atomların elektronik seviyeleri arasındaki etkileşimlerden meydana gelen elektronik bantlara ters düşmektedir.

Titreşimsel etkiler ayrıca moleküler malzemelerde de gözlenir. Bu durum katı hal ve sıvı veya gaz fazları arasındaki fark açısından ilginç bir olaydır. Basit serbest moleküllerin soğurma spektrumu titreşimsel elektronik bantları da gösterir fakat geçiş frekansları kesiklidir çünkü elektronik ve titreşim enerjileri kesiklidir. Tersine moleküler katılarda titreşim frekansları süreklidir ve bu durum sürekli bir soğurma ve yayma spektrumuna neden olur.

Katıhal'de gözlemlenen optik olayların açıklanması için bazı mikroskobik modelleri tanımlamamız gerekecek. Bu modelleri üç kategoride sınıflandırabiliriz:

- a. Klasik
- b. Yarı klasik
- c. Kuantum modeli

Bu yaklaşımlar derece derece zorlaşırlar ve bu yüzden bu yaklaşımları yukarıdaki listeye göre uygularız.

Klasik yaklaşımda, klasik fiziğe göre hem ortamı hem de ışığı işleme alırız. Dipol salınıcı modeli tipik bir örnektir. Bu model, bir ortamın genel optik özelliklerinin anlaşılması, özellikle serbest elektron ve fononlardan kaynaklanan ana etkilerin tanımlanması ve non-lineer optik tartışması için bir başlangıç noktası olarak kullanılabilir. Bu modern çağ ve zamanda klasik yaklaşımı küçümsemek bir hata olacaktır. Daha gelişmiş modellerin sonucu, klasik fizik tam olarak anlaşıldıktan sonra tamamen değer kazanacaktır.

Yarı klasik modellerde, atomlara kuantum mekaniği uygulanır, fakat ışık bir klasik elektromanyetik dalga gibi davranır. Soğurma katsayısı atomların kuantize/kesikli seviyelerinin dalga fonksiyonlarının bilgisini gerektiren Fermi'nin altın kuralı kullanılarak hesaplanır, fakat kuantize bir atom ve klasik bir elektrik alan dalgası arasındaymış gibi madde-ışık etkileşimini ele alır.

Son yaklaşım kuantum işlemdir. Bu, hem atomun hem de ışığın kuantum mekaniksel davrandığı kuantum optiğinin alanıdır. Bu yaklaşım dolaylı olarak, fotonun bir ışını olarak ışıktan her bahsettiğimizde ve meydana gelen etkileşim süreçlerini göstermek için Feynman diyagramlarının çiziminde kullanılacaktır. Bu durum açıklamalara şöyle bir izlenim katabilir: tam kuantum mekaniğini veriyoruz. Çünkü atomlarla etkileşen fotonlardan bahsediyoruz. Fakat süreçlerde nicel olarak tarif etmek için kullanılan eşitliklerde, ışık klasik olarak davranır ve sadece atomlar kuantizedir. Bu yüzden nicel tanımlama sadece yarı-klasiktir, Fox (2001).

Yukarıdaki açıklamalar kapsamında bir malzemede gerçekleşen optiksel olayların daha iyi anlaşılabilmesi için bazı sabitlerin araştırılmasına ihtiyaç vardır. Bunlardan en önemlisi kompleks dielektrik sabitidir ($\tilde{\epsilon}$). Kompleks dielektrik sabiti kullanılarak

diğer sabitler yansıma katsayıları (R), soğurma katsayıları (α), kırılma indisi (n), sönüm katsayısı (κ) ve enerji kayıp fonksiyonu (L) kolaylıkla elde edilebilir.

3.4.2. Kompleks dielektrik sabiti ($\tilde{\epsilon}$)

Kristal yapıya sahip malzemelerin bant yapılarının daha iyi anlaşılabilmesi için optiksel dielektrik spektrumunun incelenmesi gerekir. Dielektrik fonksiyonu, fotonlarla elektronların birbiri arasındaki etkileşimi gösteren elektromanyetik radyasyona (ışınım, ışıma) karşı sistemin tepkisini tanımlamak için kullanılır.

Bir malzemenin optiksel özellikleri frekansa bağlı olan kompleks dielektrik fonksiyonuyla $\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ tanımlanır. Burada $\epsilon_1(\omega)$ ve $\epsilon_2(\omega)$ kompleks dielektrik fonksiyonun sırayla reel ve imajiner kısımlarını oluştururlar.

Dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı, $\epsilon_2(\omega)$, dolu ve boş dalga fonksiyonları arasındaki momentum matris elemanlarıyla aşağıda verilen denklemlerle hesaplanır, Kronig (1926):

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi m^2 \omega^2} \times \int d^3k \sum_{mn} |k_n \langle p | k_n' \rangle|^2 f(k_n) \times [1 - f(k_n')] \delta(E_{k_n} - E_{k_n'} - \omega) \quad (3.36)$$

Burada p, n ve n' seviyeleri arasındaki momentum matris elemanı, e; elektron yükü, m; elektronun kütlesi; V; kristalin hacmi, f(kn); Fermi dağılım fonksiyonu, kn ise k dalga fonksiyonuna sahip n. özdeğere karşılık gelen kristal dalga fonksiyonudur.

Dielektrik fonksiyonun reel kısmı, $\epsilon_1(\omega)$, Kramer-Kronig bağıntıları, Kronig (1926); Kramers (1927), kullanılarak imajiner kısımdan elde edilir:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_2(\omega') \omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (3.37)$$

3.4.3. Kompleks kırılma indisi (\tilde{n}) ve soğurma katsayısı (α)

Bir ortamın soğurma, kırılma ve sönüm parametreleri basit bir nicelik olan kompleks kırılma indisi ile tanımlanabilir. Bu ifade \tilde{n} ile gösterilir ve aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\tilde{n} = n + i\kappa \quad (3.38)$$

Burada n , reel kırılma indisi olarak isimlendirilir ve aşağıdaki eşitlikle tanımlanır:

$$n = \frac{c}{v} \quad (3.39)$$

Ortam boyunca ışığın yayılması n 'ye bağlıdır. Eş. 3.39, reel kırılma indisi n 'nin boş uzayda ışık hızı c 'nin ortamdaki hızı v 'ye oranı olarak tanımlanacağını söyler. Kırılma indisi ışığın frekansına bağlıdır ve bu etki dispersiyon olarak adlandırılır. Gökkuşağının oluşması veya bir prizmadan kırılan beyaz ışığın renklere ayrılması dispersiyon olayından kaynaklanmaktadır. Diğer taraftan, κ ise \tilde{n} 'nin imajiner kısmı olarak bilinir ve sönüm katsayısı olarak isimlendirilir. Soğurma katsayısı (α) ve sönüm katsayısı (κ) arasındaki ilişki aşağıdaki eşitlikte görülmektedir.

$$\alpha = \frac{2\kappa\omega}{c} = \frac{4\pi\kappa}{\lambda} \quad (3.40)$$

Burada λ ışığın boş uzaydaki dalga boyudur. Son eşitlik sönüm katsayısı κ 'nın doğrudan soğurma katsayısıyla orantılı olduğunu söyler. Bir ortamın kırılma indisi ile bağlı dielektrik sabiti ϵ_r arasındaki bağıntı, Maxwell denklemlerinden elde edilen standart sonuçlar kullanılarak bulunabilir. Maxwell denklemlerinde, ışığın ortamdaki hızının (v) ışık hızı (c) ile olan bağıntısı:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r}} c \quad (3.41)$$

şeklinde. Çalışılan malzemeler manyetik özellik göstermediklerinden dolayı Eş. 3.39'u ve boş uzayda $\mu_r=1$ eşitliği kullanılırsa:

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (3.42)$$

bağıntısı elde edilir.

Bu eşitlik n kompleks ise ϵ_r 'nin de kompleks olacağını söyler. Dolayısıyla, kompleks dielektrik sabiti $\tilde{\epsilon}_r$ ile aşağıdaki şekilde tanımlanır:

$$\tilde{\epsilon}_r = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (3.43)$$

Eş. 3.42 yardımıyla n kompleks düşünüldüğünde ϵ_r 'nin de kompleks olacağından, \tilde{n} ile $\tilde{\epsilon}_r$ 'nin birbiriyle aşağıdaki şekilde ilişkili olduğu görülür.

$$\tilde{n}^2 = \tilde{\epsilon}_r \quad (3.44)$$

Şimdi de, Eş. 3.38, Eş. 3.43 ve Eş. 3.44 denklemlerini birleştirerek, \tilde{n} ile $\tilde{\epsilon}_r$ 'nin reel ve imajiner kısımları arasındaki ilişkiyi:

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \quad (3.45)$$

$$\epsilon_2 = 2n\kappa \quad (3.46)$$

ve

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} (\epsilon_1 + (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}} \quad (3.47)$$

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\epsilon_1 + (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}} \quad (3.48)$$

$$\alpha = \frac{\omega\sqrt{2}}{c} (-\varepsilon_1 + (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}} = \frac{2\pi\sqrt{2}}{\lambda} (-\varepsilon_1 + (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}} \quad (3.49)$$

Bu analizler \tilde{n} ile $\tilde{\mathcal{E}}_r$ 'nin bağımsız değişkenler olmadığını gösterir. Eğer ε_1 ve ε_2 bilinirse n ve κ bulunabilir. Eğer ortam zayıf soğurucu ise Eş. 3.47 ve Eş. 3.48'i daha basitleştirmek için κ 'nın çok küçük olduğu durumlarda aşağıdaki bağıntı yazılabilir:

$$n = \sqrt{\varepsilon_1} \quad (3.50)$$

$$\kappa = \frac{\varepsilon_2}{2n} = \frac{c}{2\omega} \alpha \quad (3.51)$$

Bu eşitlikler kırılma indisinin temelde dielektrik sabitinin reel kısmıyla, soğurmanın ise ağırlıklı olarak imajiner kısım ile tanımlanabileceğini gösterir. Bu genelleme, ortamın çok büyük bir soğurma katsayısına sahip olduğu durumda geçerli değildir.

3.4.4. Yansıma katsayısı (R)

Maxwell denklemlerinden yararlanarak yansımanın (R) hem n hem de κ 'ya aşağıdaki ifadeyle bağlı olduğu gösterilebilir:

$$R = \left| \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + \kappa^2}{(n + 1)^2 + \kappa^2} \quad (3.52)$$

Bu eşitlik bize ortam ve hava (veya boşluk) arasındaki yansıma katsayısını verir. Görünür bölge spektrumunda cam gibi saydam bir maddenin soğurma katsayısı çok düşüktür. Bu durumda Eş. 3.40 ve Eş. 3.46 ifadeleri κ ve ε_2 'nin ihmal edilebileceğini anlatır, bu nedenle hem \tilde{n} hem de $\tilde{\mathcal{E}}_r$ reel sayılar olarak alınabilir. Diğer taraftan, dikkate değer büyüklükte soğurma varsa, bu durumda \tilde{n} ve $\tilde{\mathcal{E}}_r$ 'nin hem reel hem de imajiner kısımlarının bilinmesi gerekecektir.

3.4.5. Enerji kayıp fonksiyonu (L)

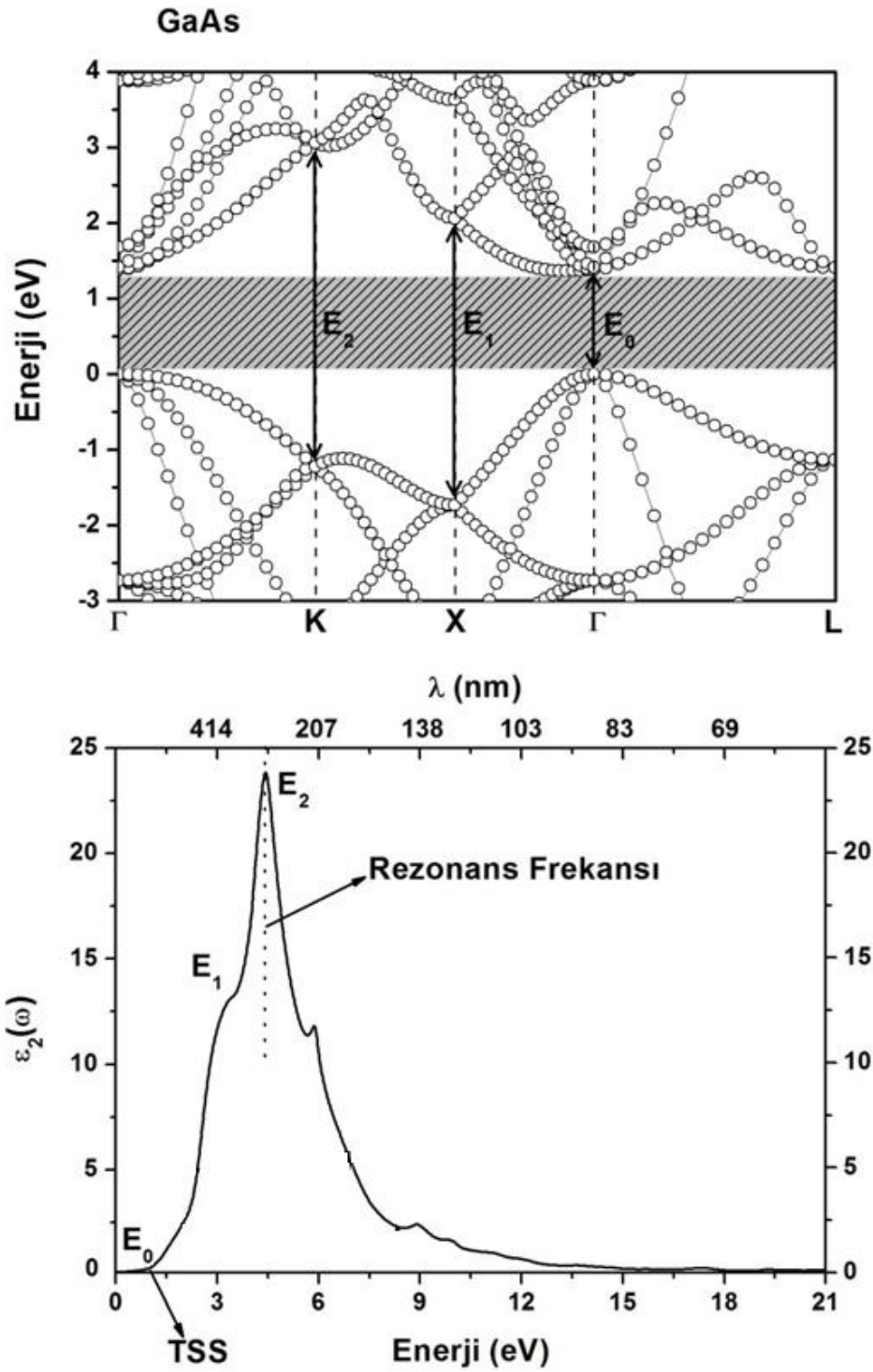
Bir elektronun yapı içerisinde hareket ederken kaybettiği enerji önemli bir optiksel parametre olan enerji kayıp fonksiyonu (L) ile tanımlanır. Enerji kayıp fonksiyonu, reel ve imajiner dielektrik sabitlerine bağlı olarak aşağıdaki eşitlik yardımıyla hesaplanır:

$$L(\omega) = -\text{Im}(1/\epsilon) = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} \quad (3.53)$$

3.4.6. İkili bileşiklerin optiksel özellikleri

Tez kapsamında incelenen GaAs, InAs, GaN, InN ve GaBi ikili bileşiklerinin denge durumu örgü parametresi kullanılarak reel ($\epsilon_1(\omega)$) ve imajiner ($\epsilon_2(\omega)$) dielektrik fonksiyonları, yansımaya katsayıları (R), soğurma katsayıları (α), kırılma indisi (n), sönüm katsayısı (κ) ve enerji kayıp fonksiyonu (L) hesaplandı.

GaAs yarıiletken bileşiği için elde edilen imajiner dielektrik fonksiyonuna ait grafik Şekil 3.36'da görülmektedir. Şekil 3.36'da ortaya çıkan pikler elektronik bant grafiklerinde gözlemlenen kritik noktalarındaki geçişlere karşılık gelmektedir. Dispersiyonun ilk başladığı nokta temel soğurma sınırı (TSS) olarak bilinir. GaAs yarıiletkeni için temel soğurma sınırı elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık gelmektedir (E_0 noktası, 1.36 eV). Yasak bant aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırı bu bileşik için teknolojik uygulamalarda iletişim araçlarında büyük bir öneme sahip olan kızıl-ötesi spektrum bölgesinde elde edilmiştir. Ortaya çıkan diğer piklerde, yüksek simetri noktalarındaki bantlar arası geçişleri temsil etmektedir. Elektronik bant yapısından da açıkça görüldüğü gibi E_1 (3.45 eV), Γ - Γ ve L-L geçişlerini temsil ederken, E_2 (4.45 eV) ise K-K geçişlerini temsil etmektedir. Şekil 3.36'da meydana gelen maksimum pik (E_2) rezonans frekansı olarak bilinir. Rezonans frekansı, malzemenin en fazla duyarlı olduğu frekans olarak adlandırılır. Şekil 3.36'da GaAs için elde edilen rezonans frekansının K-K geçişlerine karşılık geldiği görülmektedir. Dolayısıyla, GaAs yarıiletkeni için maksimum soğurmanın meydana geldiği frekans K-K geçişlerinde ortaya çıkmaktadır.



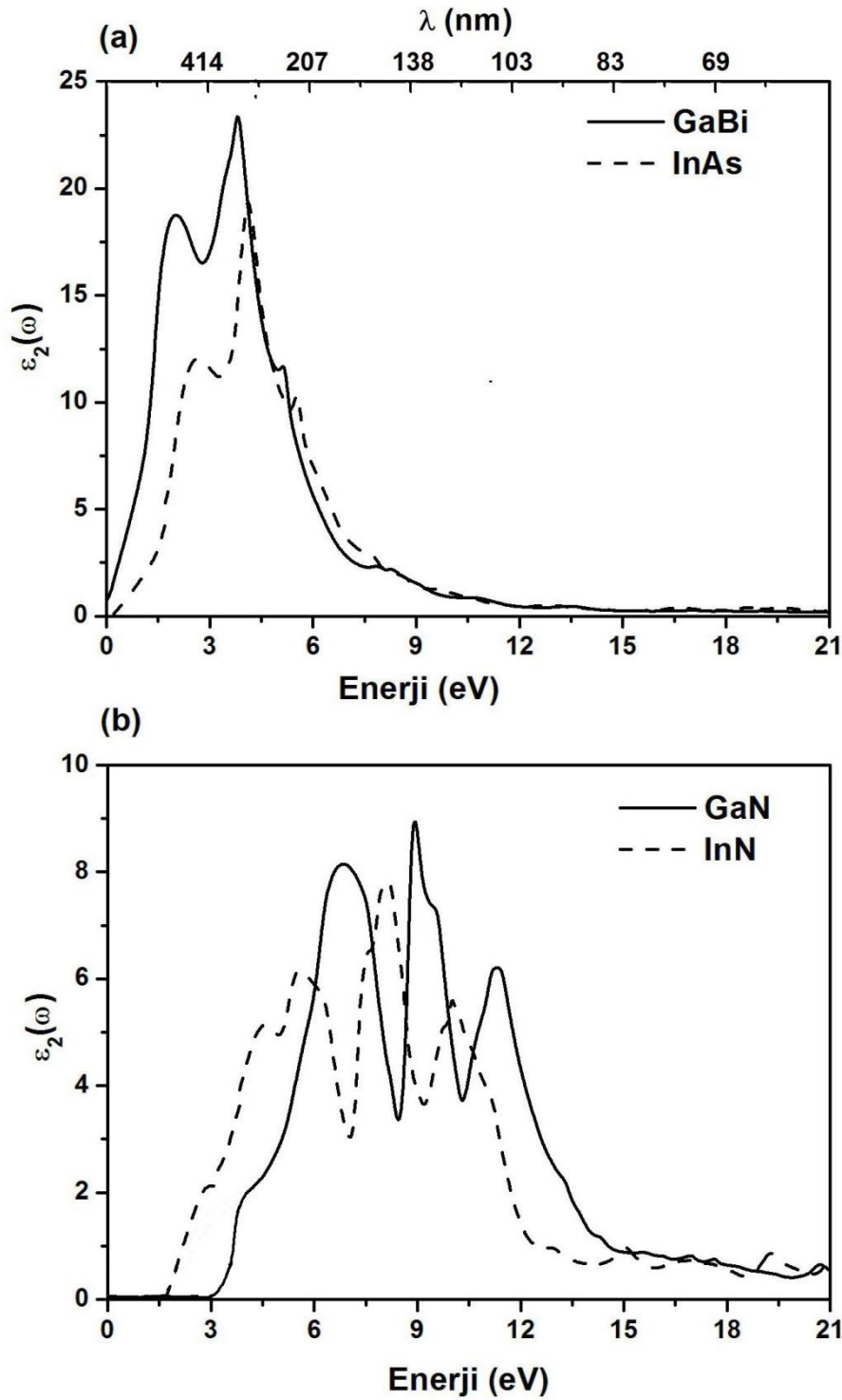
Şekil 3.36. GaAs yarıiletkeni için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu

GaBi bileşiği hariç, diğer ikili yarıiletkenler için temel soğurma sınırı elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık gelmektedir. Dolayısıyla bu bileşikler doğrudan bant aralığına sahip yarıiletkenlerdir. Yasak bant aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırı bu bileşik için teknolojik uygulamalarda iletişim araçlarında büyük bir

öneme sahip olan kızıl-ötesi spektrum bölgesinde elde edilmiştir. Ortaya çıkan diğer piklerde, yüksek simetri noktalarındaki bantlar arası geçişleri temsil etmektedir.

Şekil 3.37(a)'da diğer ikili bileşikler olan InAs, GaBi, Şekil 3.37(b) ise InN ve GaN bileşiklerine ait imajiner dielektrik fonksiyonu gösterilmektedir. InAs, GaN ve InN bileşikleri GaAs bileşiği gibi yarıiletken olduklarından, GaAs için yapılan yorumlar bu yarıiletkenler için de yapılabilir. İkili bileşiklerin elektronik özellikleri incelenirken GaBi bileşiğinin metalik özellik gösterdiği yani valans veya iletkenlik bantlarının fermi seviyesini kestiği bulunmuştu.

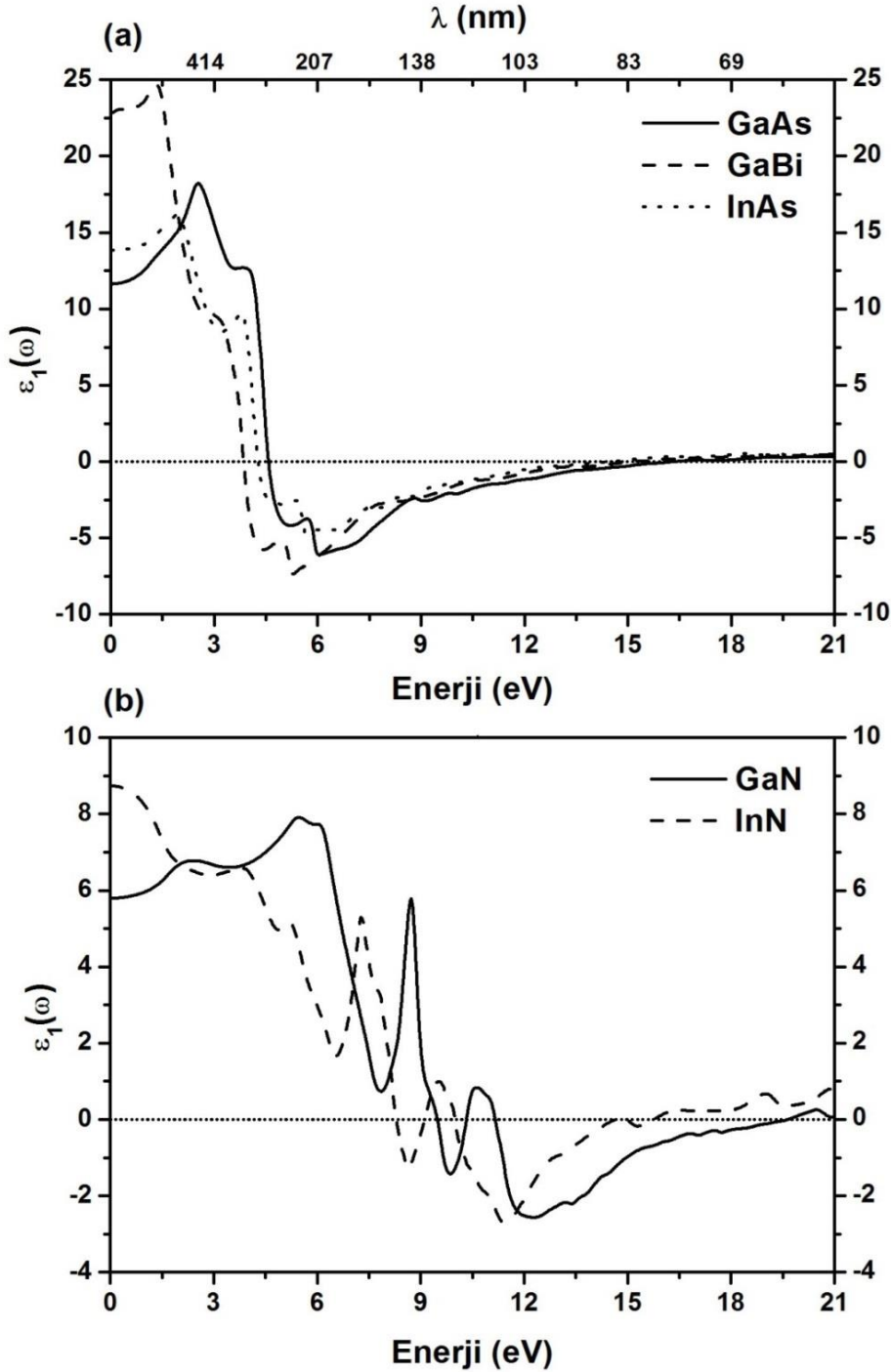
Şekil 3.37(a)'da GaBi için gösterilem imajiner dielektrik fonksiyonu incelendiğinde TSS'nin sıfır enerji değerinden başlaması GaBi'un metalik olmasından kaynaklanmaktadır. Diğer bir deyişle, GaBi bileşiği metalik davranış gösterdiğinden, yasak bant aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırı GaBi için bu sınır değerinin sıfır enerji değerinden başlaması anlamına gelmektedir. Çünkü metaller yarıiletkenler gibi yasak bant aralığına sahip değildirler.



Şekil 3.37. (a) GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu

Şekil 3.38’de ikili bileşiklere ait reel dielektrik fonksiyonlarının değişimleri görülmektedir. Bileşikler arasındaki davranış benzerlikleri anyon:kasyon oranından kaynaklanmaktadır. GaAs, GaBi ve InAs ikili bileşikleri kendi aralarında benzer davranış gösterirken, GaN ve InN yarıiletken bileşikleri de kendi aralarında benzer

davranışlar göstermektedirler. Bu sebepten dolayı Şekil 3.38(a)'da GaAs, GaBi ve InAs bileşiklerinin, Şekil 3.38(b)'de ise GaN ve InN yarıiletken bileşiklerinin reel dielektrik fonksiyonları gösterilmektedir. InN yarıiletkeni dışında diğer ikili bileşikler için yakın kızıl ötesi (NIR) ve görünür bölgede reel dielektrik fonksiyonunda bir artış görülmektedir.



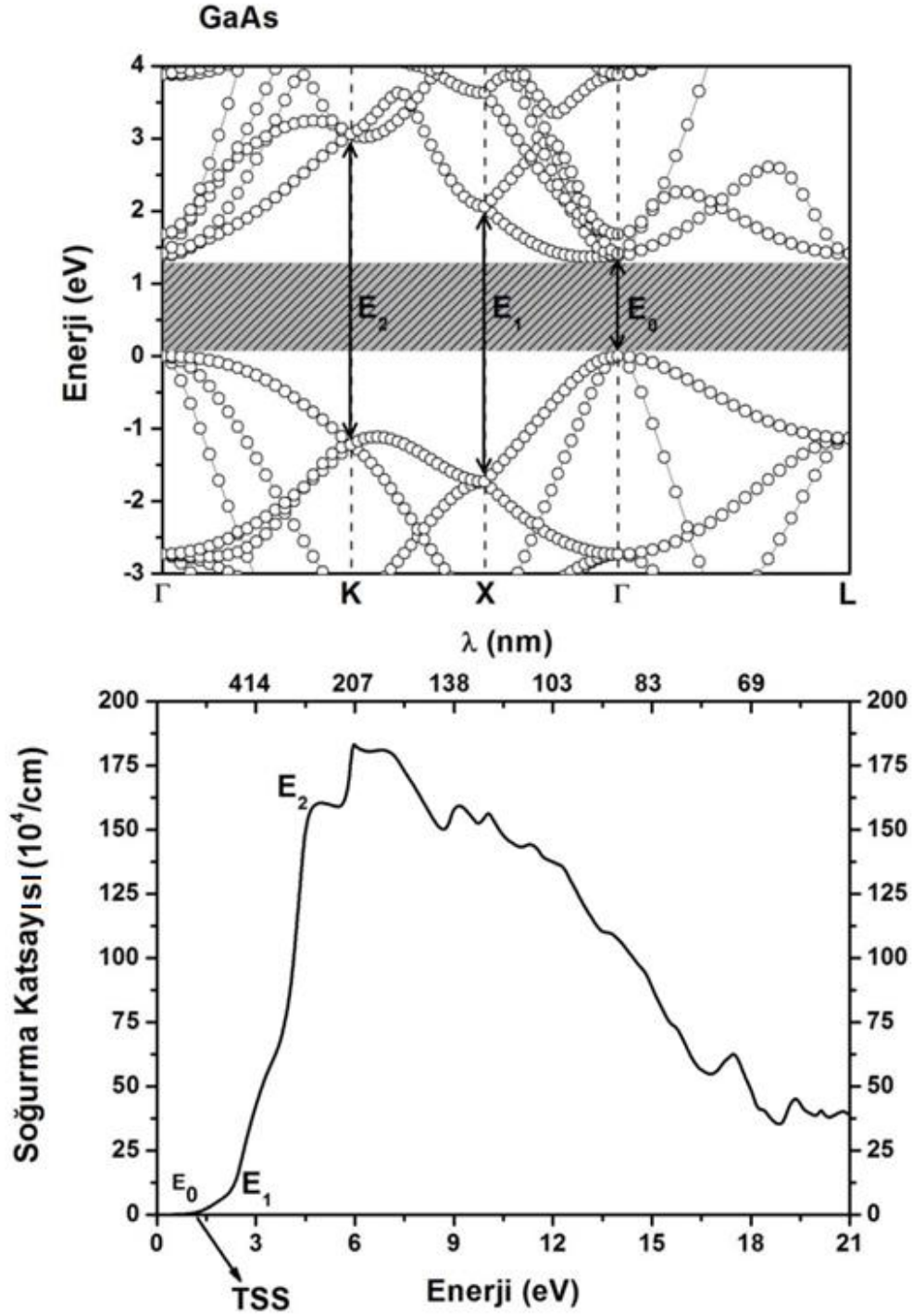
Şekil 3.38. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonu

Yakın ve orta mor-ötesi (UV) bölgede ise tüm bileşikler için bir azalma ortaya çıkmaktadır. Reel dielektrik fonksiyonunda meydana gelen bu artış ve azalışlar rezonans frekansı ve sönüm parametresiyle ilişkilidir. Reel dielektrik fonksiyonunun sıfır olduğu nokta rezonans frekansına, yani maksimum soğurmaya, karşılık geldiği tespit edildi. Malzemeler için çok önemli olan fiziksel bir nicelik statik dielektrik fonksiyonudur, $\epsilon_1(0)$. İkili bileşikler için elde edilen $\epsilon_1(0)$ değerleri, 11.64^{GaAs} , 22.83^{GaBi} , 5.79^{GaN} , 13.84^{InAs} ve 8.74^{InN} olarak bulunmuştur.

Diğer bir optiksel parametre soğurma katsayısıdır. Soğurma katsayısı, ortamda yayılan ışığın şiddetinde meydana gelen azalma olarak tanımlanır. Soğurma katsayısı belli bir dalga boyundaki ışığın soğurulmadan önce malzemenin içine ne kadar girebileceğinin bir ölçüsüdür. Düşük soğurma katsayısına sahip malzemelerde ışık zayıf soğurulur ve malzeme yeterli inceliğe sahipse gönderilen dalga boyunda saydam görünür. Soğurma katsayısı malzemeye ve soğurulacak ışığın dalgaboyuna bağlıdır. Soğurmanın başladığı minimum enerji noktası (ya da dispersiyonun başladığı nokta) temel soğurma sınırı olarak tanımlanmıştır. Eş. 3.49 ve Eş. 3.51 soğurma spektrumunun imajiner dielektrik fonksiyonuyla yakından ilişkili olduğunu ortaya koymaktadır. Dolayısıyla, elde edilen soğurma spektrumlarının imajiner dielektrik fonksiyonuna benzer yorumlar içermesi şaşırtıcı değildir. Eş. 3.49 kullanılarak GaAs yarıiletken bileşiği için elde edilen soğurma spektrumu Şekil 3.39'da görülmektedir. Şekil 3.39'dan açıkça anlaşılabilceği gibi yarıiletkenler malzemeler için soğurma katsayısı keskin bir sınıra sahiptir. Çünkü yasak enerji değerinden küçük enerjilerde gönderilen ışık bir elektronu valans bandından iletkenlik bandına uyarabileceği yeterli enerjiye sahip değildir. Sonuç olarak gönderilen bu ışık soğurulmayacaktır. GaAs yarıiletkeni için temel soğurma sınırı elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık gelmektedir (E_0 noktası, 1.36 eV). Diğer bir deyişle, soğurmanın sifira gittiği enerji değeri yasak bant enerjisi değerine karşılık gelmektedir.

Yasak bant aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırı bu bileşik için teknolojik uygulamalarda iletişim araçlarında büyük bir öneme sahip kızıl-ötesi spektrum bölgesinde meydana gelmektedir. Ortaya çıkan diğer piklerde, yüksek simetri noktalarındaki bantlar arası geçişleri temsil etmektedir. Elektronik bant yapısından

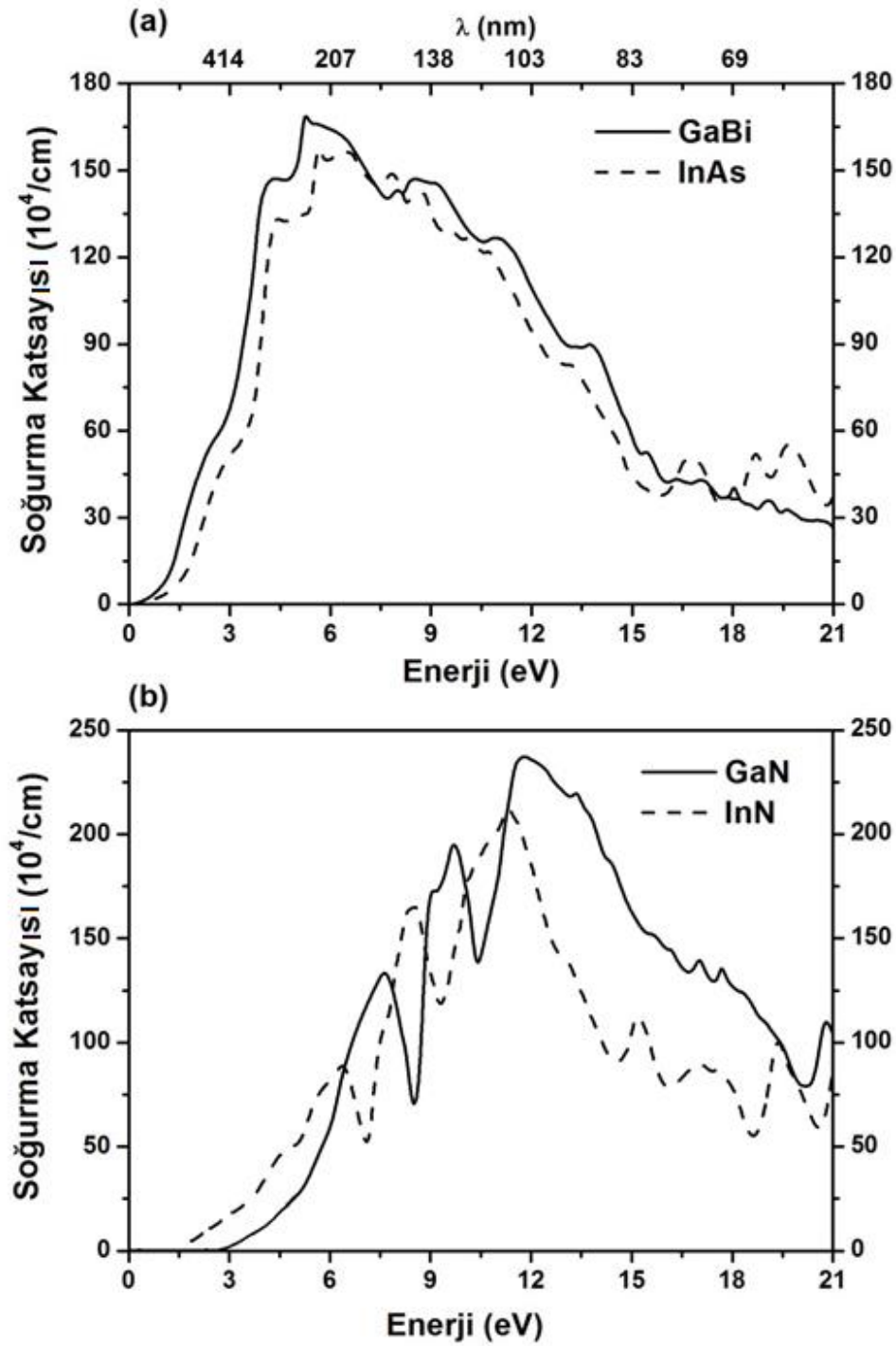
da açıkça görüldüğü gibi E_1 (3.45 eV), Γ - Γ ve L-L geçişlerini temsil ederken, E_2 (4.45 eV) ise K-K geçişlerini temsil etmektedir.



Şekil 3.39. GaAs yarıiletkeni için hesaplanan soğurma spektrumu

GaAs yarıiletkeni dışındaki diğer ikili bileşikler olan GaBi ve InAs materyallerine ait soğurma spektrumu Şekil 3.40(a)'da, GaN ve InN yarıiletken bileşiklerine ait soğurma spektrumu ise Şekil 3.40(b)'de gösterilmektedir. İkili yarıiletken bileşikler için soğurma spektrumlarından elde edilen temel soğurma sınırları 1.35^{GaAs} eV, 0.28^{InAs} eV, 2.98^{GaN} eV, 1.5^{InN} eV olarak hesaplanmıştır. Elde edilen soğurma sınırları ile Tablo 3.4'te gösterilen yasak bant enerji değerleri arasındaki uyumsuzluk elektronlar ve boşluklar arasındaki Coulomb etkileşimi, eksitonik etkiler, safsızlıklar ve kusur seviyelerinden kaynaklanmaktadır. İncelenen ikili bileşiklerin soğurma spektrumları yakın-IR'den yakın UV dalga boylarına kadar soğurmanın açık olarak arttığı gözlenmektedir. Bileşikler arasındaki anyon:kasyon oranından dolayı GaAs, GaBi ve InAs kendi aralarında, GaN ve InN ise kendi aralarında benzer eğilimler göstermektedirler.

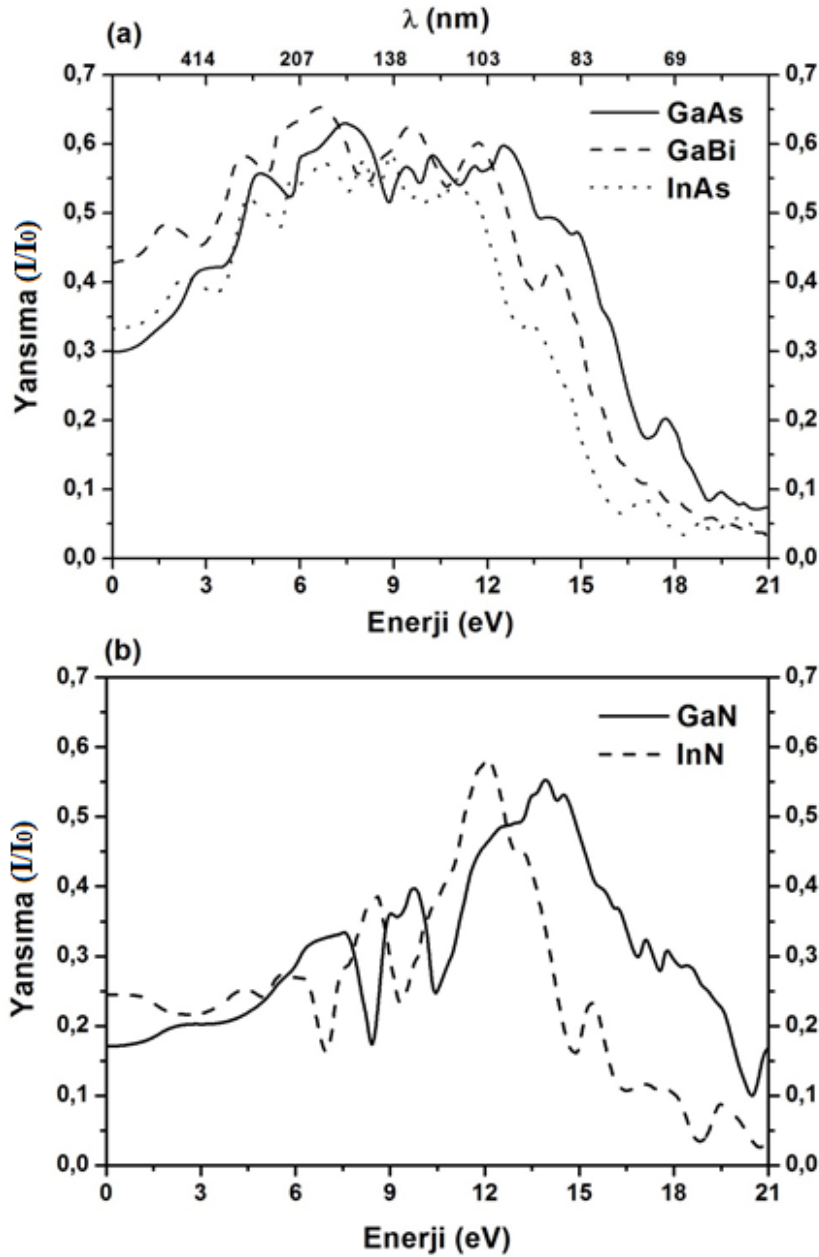
Soğurma spektrumunda ortaya çıkan pikler imajiner dielektrik fonksiyonunda olduğu gibi yüksek simetri noktalarında meydana gelen bantlar arası geçişlerden kaynaklanmaktadır. E_g 'den büyük enerjilerde soğurma katsayısı sabit kalmayıp enerjiye şiddetli şekilde bağımlılık göstermektedir. E_g 'ye çok yakın enerjiye sahip fotonlar için soğurma nispeten küçüktür. Çünkü elektronlar sadece valans bandının maksimumu sınırındaki soğurmaya sebep olan fotonlarla doğrudan etkileşmektedirler. Foton enerjisinin artması, E_g 'ye yakın enerjiye sahip elektronların yanı sıra diğer elektronların da fotonlarla etkileşmesini sağlar. Bu yüzden, çok sayıda elektron fotonlarla etkileşir ve fotonların soğurulmasına yol açar. İkili bileşikler için maksimum soğurma UV bölgede görülmektedir. Ayrıca, yüksek enerjilere doğru gidildikçe soğurma da meydana gelen azalma bu bileşiklerin yüksek enerjilerde saydam olacağını göstermektedir. Yüksek soğurma katsayısına sahip yarıiletken bileşikler için elektronları iletkenlik bandına uyaran fotonları kolaylıkla soğurulur. Son olarak malzemelerin soğurma katsayılarının bilinmesi, güneş pillerinin tasarımında kullanılabilir olabileceklerinin belirlenmesine yardımcı olur.



Şekil 3.40. (a) GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan soğurma spektrumu

İkili bileşikler için elde edilen yansımaya spektrumu Şekil 3.41’de gösterilmektedir. Yansımaya spektrumundaki yüksek enerjilerde meydana gelen dispersiyonlar elektronik etkilerden, düşük enerjideki dispersiyonlarda titreşimsel etkilerden kaynaklanmaktadır. Yansımaya başlangıç değerleri %15 ile %45 arasında

değişmektedir. İkili bileşikler için elde edilen yansıtma başlangıç değerleri, %30^{GaAs}, %43^{GaBi}, %17^{GaN}, %33^{InAs} ve %24^{InN} olarak bulunmuştur. Elde edilen yansıtma başlangıç değerlerinin malzemelerin sahip olduğu yasak bant aralığıyla ters orantılı olması beklenen sonuçtur. Çünkü yasak bant aralığı küçüldükçe malzemenin metalik özelliğe doğru geçmesi beklenir. Metaller yüksek yansıtıcı özelliğe sahip olduklarından, yasak bant aralığı küçüldükçe yansıtma katsayısının artması beklenen sonuçtur.



Şekil 3.41. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan yansıtma spektrumu

Şekil 3.41 yardımıyla UV bölgede ikili bileşikler için yansımının %65'lere kadar ulaştığı anlaşılmaktadır. Yansıma oranlarının özellikle mor-ötesi spektrum bölgesinde maksimum değerlere ulaşması bu malzemelerin mor-ötesi perdeleme (screening) uygulamaları için kullanılabilir olduğunu göstermektedir.

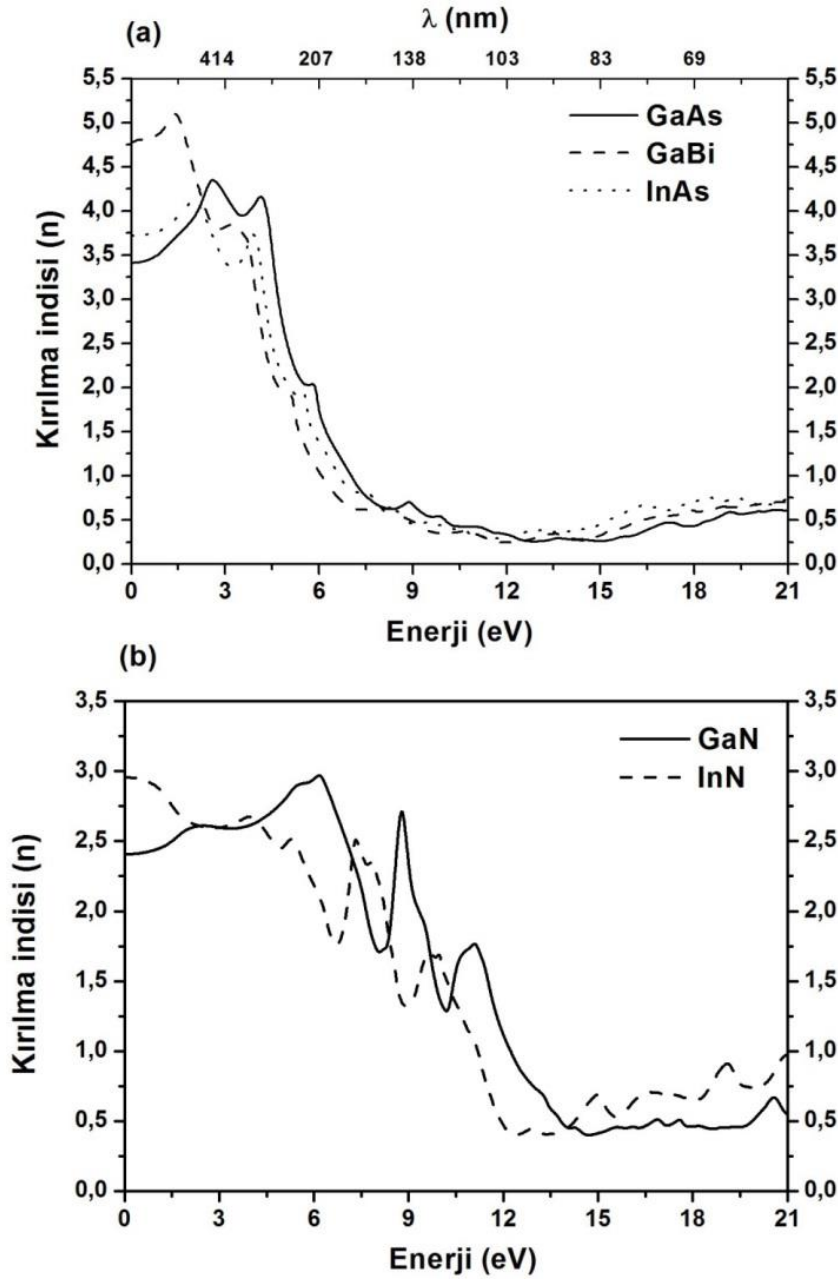
Eş. 3.47 kullanılarak ikili bileşikler için elde edilen kırılma indisi spektrumları Şekil 3.42'de görülmektedir. Kırılma indisinin enerjile değişimine bakıldığında frekansla arttığı ve azaldığı durumlar görülür. Kırılma indisinin frekansla arttığı bölgeler normal dispersiyon, azaldığı yerler anormal dispersiyon ortamı olarak bilinir. Kırılma indisi için $n < 1$ olduğu enerji değerlerinde madde ortamındaki hız ışık hızından büyük görünmektedir ($n = c/\nu$). Fakat bu hız faz hızı

$$\nu_f = \frac{c}{n} \quad (3.54)$$

olup fiziksel bir anlam içermemektedir. Asıl bilgi iletme hızı olan grup hızı

$$\nu_g = \nu_f \left(1 - \frac{k}{n} \frac{dn}{dk} \right) \quad (3.55)$$

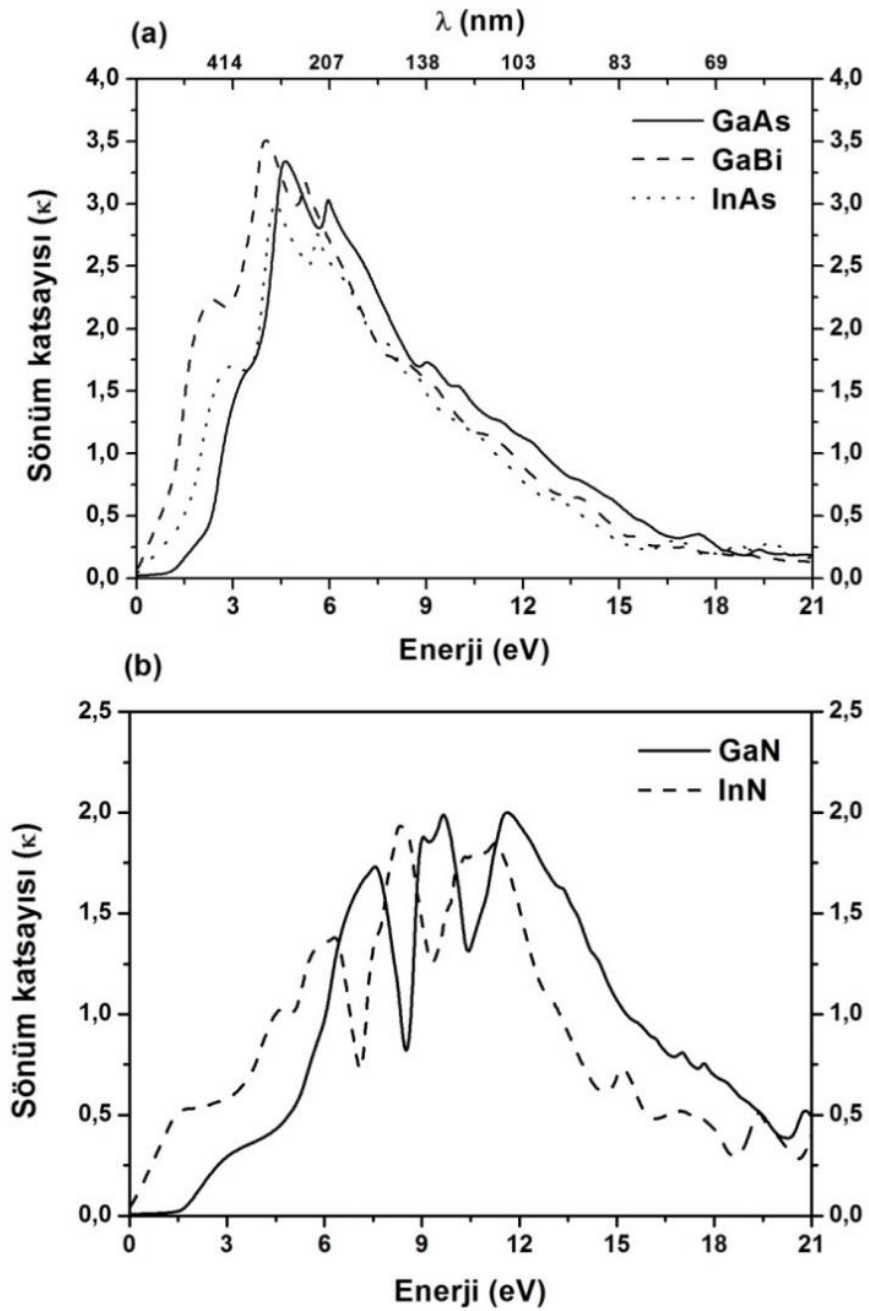
ifadesi her zaman için ışığın boşluktaki hızından küçüktür. GaN bileşiği dışındaki diğer ikili bileşikler maksimum kırılma indisine görünür bölgede sahip oldukları bulunmuştur. GaN ise mor-ötesi bölgede maksimum kırılma indisine sahip olmaktadır.



Şekil 3.42. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan kırılma indisi spektrumu

Çalışılan ikili bileşikler için Şekil 3.42'den elde edilen statik kırılma indisi, $n(0)$, değerleri 3.41^{GaAs} , 3.72^{InAs} , 4.78^{GaBi} , 2.41^{GaN} ve 2.96^{InN} olarak bulunmuştur. Kırılma indisi spektrumunda ortaya çıkan dispersiyonlar bantlar arası (yüksek enerji) ve titreşimsel (düşük enerji) soğurmaktan kaynaklanmaktadır. Kırılma indisi, IR'den UV'ye kadar artış, UV'den sonra şiddetli azalma göstermektedir. Görünür bölge aralığında genel olarak kırılma indisinde azalma meydana gelmiştir.

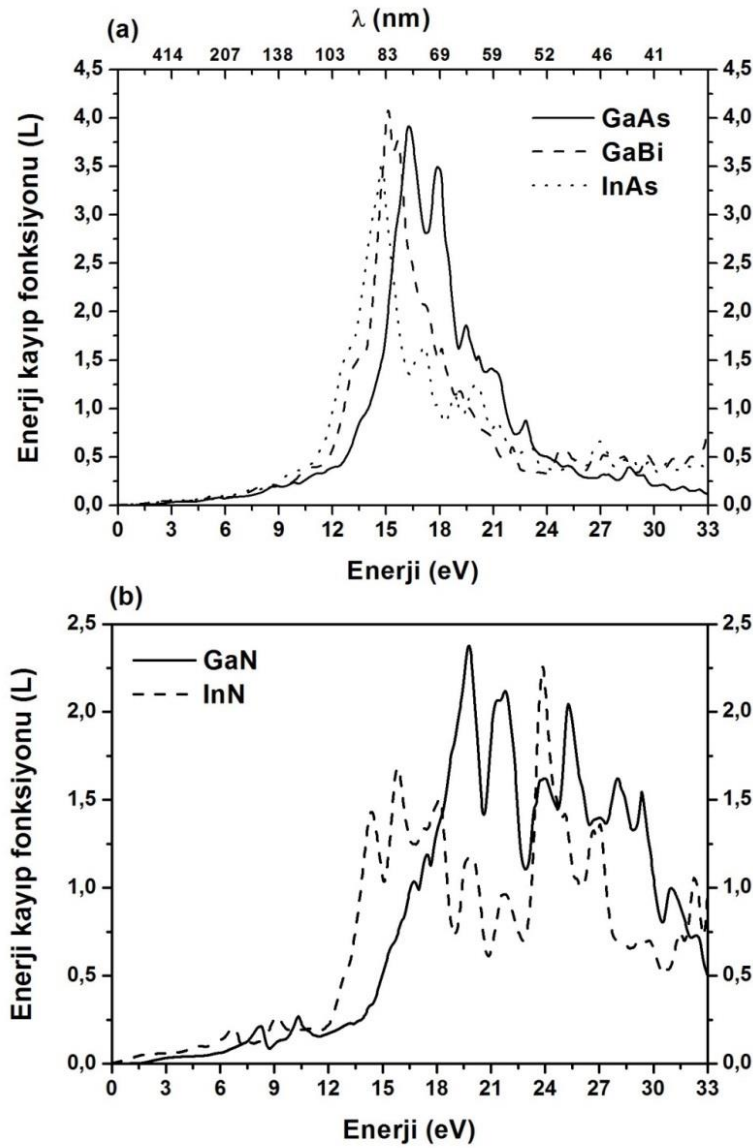
Kompleks kırılma indisinin (\tilde{n}) imajiner kısmını ifade eden sönüm katsayısı (κ) spektrumu ikili bileşikler için Şekil 3.43'te gösterilmektedir. Eş. 3.46, Eş. 3.48 ve Eş. 3.51 denklemleri sönüm katsayısının imajiner dielektrik fonksiyonuyla yakından ilişkili olduğunu göstermektedir. Rezonans frekansına yakın enerjilerde sönüm parametresi yüksek olacağından soğurmanın da çok büyük olması beklenmektedir. IR'de görülen pikler titreşimsel modlardan kaynaklanmaktadır. UV'de görülen soğurma bantları arası geçişlerden kaynaklanmaktadır.



Şekil 3.43. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu

Sönüm spektrumunda meydana gelen yerel (lokal) maksimumlar reel dielektrik fonksiyonunun sıfır olduğu değerlere karşılık gelmektedir. Şekil 3.43(a)'da meydana gelen maksimum piklerin rezonans frekansına yakın enerji değerlerinde meydana geldiği görülmektedir. Şekil 3.43(b)'de ortaya çıkan 6-12 eV arasındaki sert düşüşlerin GaN ve InN yarıiletken bileşiklerinin iç kor elektronlarının geçişlerinden kaynaklandığı tahmin edilmektedir.

Bir elektronun yapı içerisinde hareket ederken kaybettiği enerjinin ölçüsü enerji kayıp fonksiyonu (L) ile belirlenir. İkili bileşiklere ait enerji kayıp fonksiyonu spektrumu Eş. 3.53 kullanılarak Şekil 3.44'te gösterilmektedir.



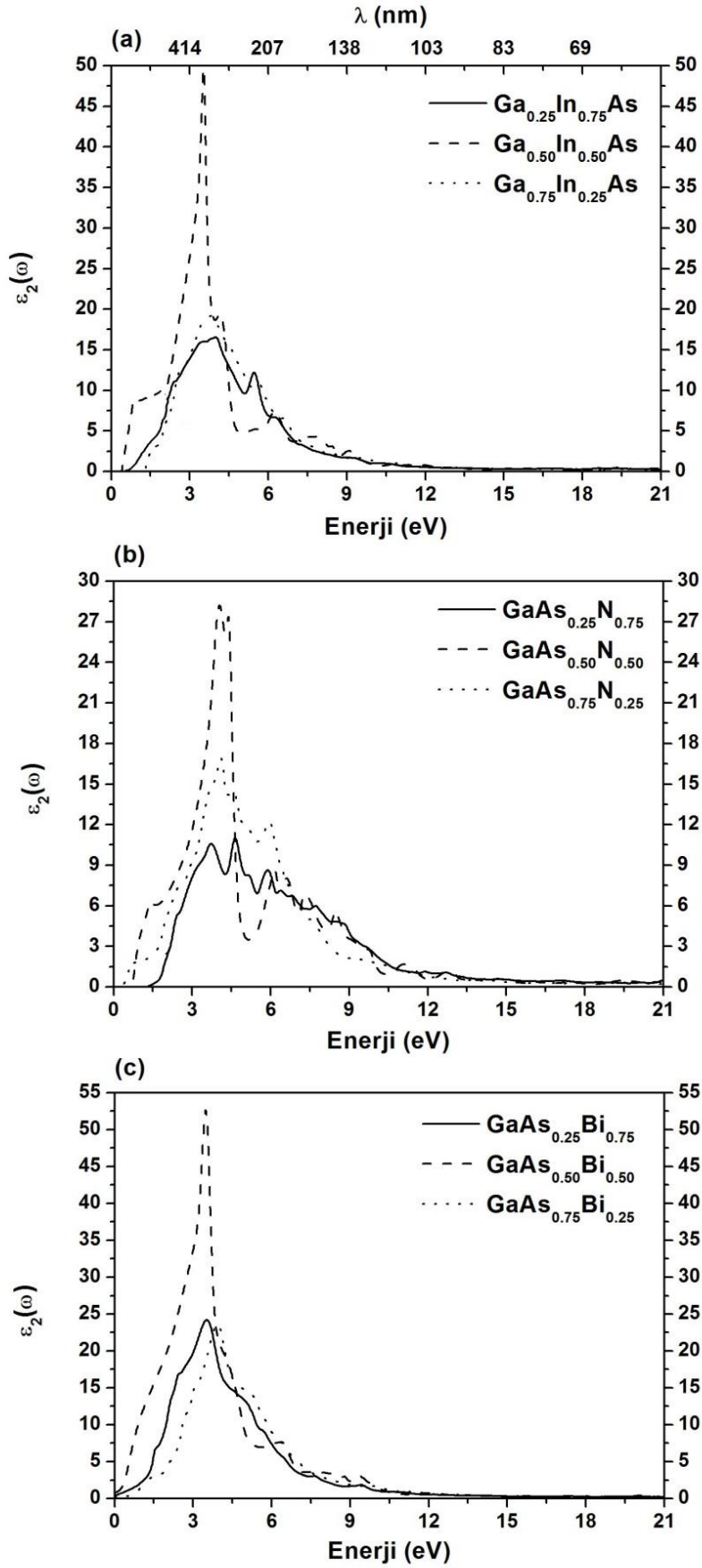
Şekil 3.44. (a) GaAs, GaBi ve InAs (b) GaN ve InN bileşikleri için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu

0-10 eV enerji aralığında göze çarpan pikler, bu enerji aralığında $\epsilon_2(\omega)$ büyük değerlere sahip olmasından, yani soğurmanın yüksek olmasından kaynaklanmaktadır. Maksimum piklerin ortaya çıkması ise, yansımanın azalmasına karşılık gelmektedir. Şekil 3.37’de yüksek enerji değerlerinde $L(\omega)$ sıfıra doğru azalması bu değerlerde L spektrumunun genliğinin artması anlamına gelmektedir.

3.4.7. Üçlü ve dördü alaşımların optiksel özellikleri

İkili bileşikler kullanılarak elde edilen GaInAs, GaAsN ve GaAsBi üçlü alaşımları ile GaInAsN dördü yarıiletken alaşımının denge durumu örgü parametresi kullanılarak ikili bileşiklerde olduğu gibi reel ($\epsilon_1(\omega)$) ve imajiner ($\epsilon_2(\omega)$) dielektrik fonksiyonları, yansıma katsayıları (R), soğurma katsayıları (α), kırılma indisi (n), sönüm katsayısı (κ) ve enerji kayıp fonksiyonu (L) hesaplandı.

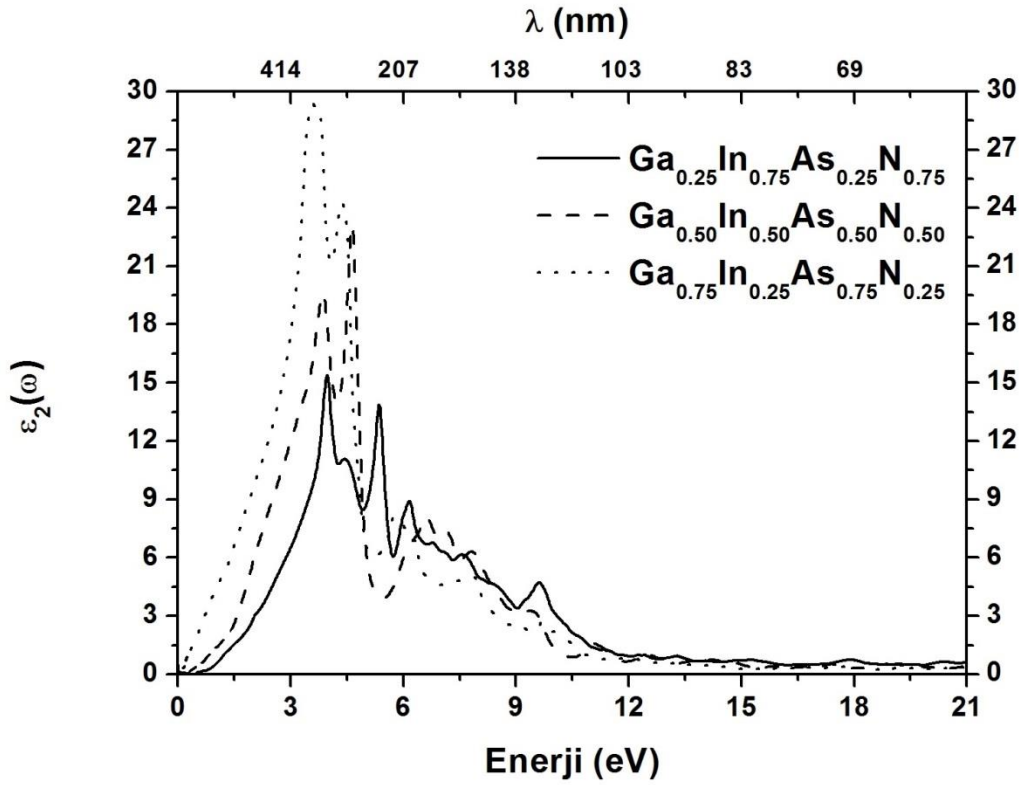
Şekil 3.45’te çalışılan üçlü alaşımlar için imajiner dielektrik fonksiyonlarının değişimi gösterilmektedir. Şekil 3.45(a)’da $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$, Şekil 3.45(b)’de $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ ve Şekil 3.45(c)’de $\text{GaAs}_{1-z}\text{Bi}_z$ üçlü alaşımı için üç farklı konsantrasyonda (%25, %50 ve %75) elde edilen imajiner dielektrik fonksiyonu görülmektedir. Elde edilen imajiner dielektrik fonksiyonlarının davranışı ikili bileşiklere oldukça benzemektedir. Metalik özellik gösteren GaBi bileşiğine benzer olarak Şekil 3.45(c)’den açıkça görülmektedir ki %50 ve %75 Bi konsantrasyonlarında metalik özellik gösteren GaAsBi alaşımı için temel soğurma sınırı sıfır enerjisinden başlamaktadır. Şekil 3.45’de ortaya çıkan pikler elektronik bant grafiklerinde gözlemlenen kritik noktadaki geçişlere karşılık gelmektedir.



Şekil 3.45. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu

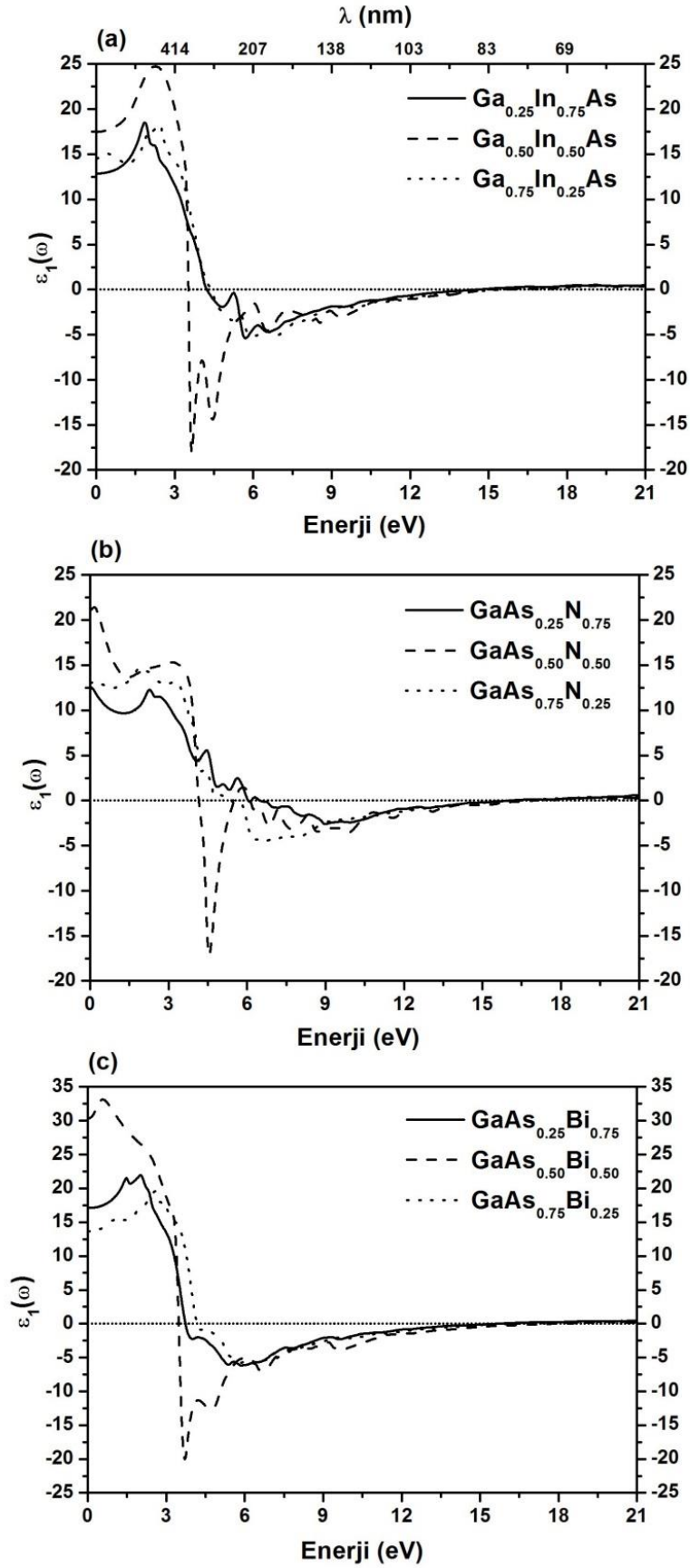
Yarıiletken özellik gösteren GaInAs, GaAsN ve $\text{GaAs}_{0.25}\text{Bi}_{0.75}$ alaşımları için temel soğurma sınırı elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık gelmektedir. Yasak bant aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırı bu bileşikler için teknolojik uygulamalarda iletişim araçlarında büyük bir öneme sahip kızıl-ötesi spektrum bölgesinde meydana gelmektedir.

Şekil 3.46'da ise tüm x ve y konstantrasyonlarında yarıiletken özellik gösteren GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımının imajiner dielektrik fonksiyonu gösterilmektedir. Bu alaşım için de ikili ve üçlü yarıiletken malzemeler için yapılan yorumlar tekrarlanabilir.



Şekil 3.46. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu

Şekil 3.47'de GaInAs, GaAsN ve GaAsBi üçlü bileşiklerinin ve Şekil 3.48'de ise GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımının reel dielektrik fonksiyonları gösterilmektedir. GaAsN üçlü yarıiletkeni dışında diğer üçlü bileşikler için yakın kızıl ötesi (NIR) ve görünür bölgede reel dielektrik fonksiyonunda bir artış görülmektedir.



Şekil 3.47. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonu

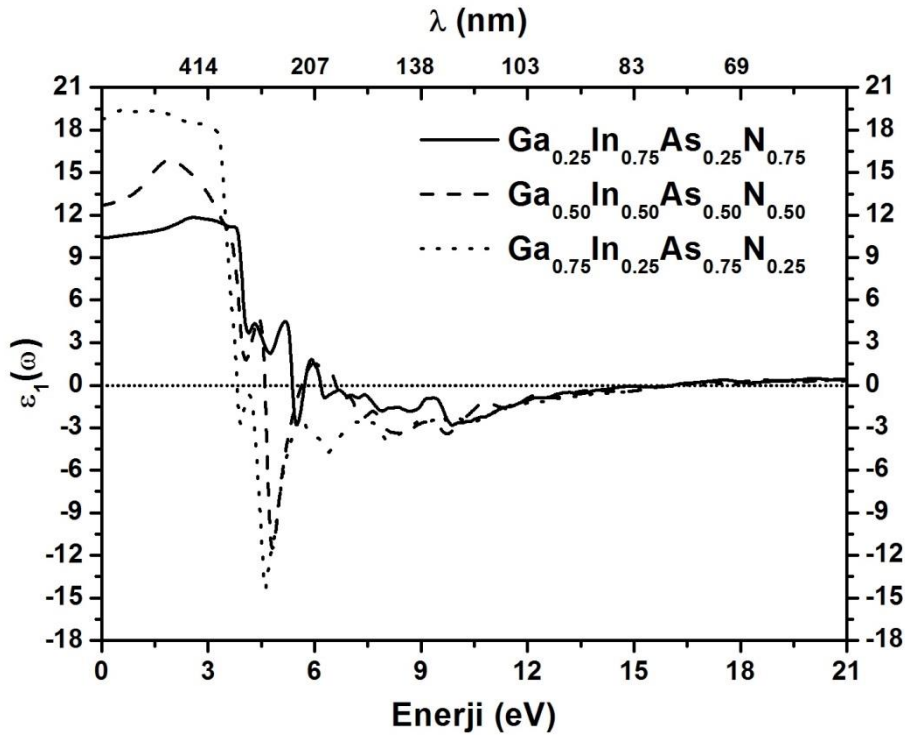
Mor-ötesi (UV) bölgede ise tüm bileşikler için bir azalma ortaya çıkmaktadır. Reel dielektrik fonksiyonunda meydana gelen bu artış ve azalışlar rezonans frekansı ve sönüm parametresiyle ilişkilidir.

GaInAs üçlü yarıiletken alaşımı için elde edilen reel dielektrik fonksiyonları Şekil 3.47(a)'da görülmektedir. $Ga_{1-x}In_xAs$ üçlü bileşiği için elde edilen $\epsilon_1(0)$ değerleri, $12.84^{Ga_{0.25}In_{0.75}As}$, $17.47^{Ga_{0.50}In_{0.50}As}$ ve $14.54^{Ga_{0.75}In_{0.25}As}$ olarak bulunmuştur.

GaAsN üçlü yarıiletken alaşımı için elde edilen reel dielektrik fonksiyonları Şekil 3.47(b)'de görülmektedir. $GaAs_{1-x}N_x$ üçlü bileşiği için elde edilen $\epsilon_1(0)$ değerleri, $12.53^{GaAs_{0.25}N_{0.75}}$, $21.14^{GaAs_{0.50}N_{0.50}}$ ve $13.03^{GaAs_{0.75}N_{0.25}}$ olarak bulunmuştur.

GaAsBi üçlü alaşımı için elde edilen reel dielektrik fonksiyonları Şekil 3.47(c)'de görülmektedir. $GaAs_{1-z}Bi_z$ üçlü bileşiği için elde edilen $\epsilon_1(0)$ değerleri, $17.12^{GaAs_{0.25}Bi_{0.75}}$, $30.31^{GaAs_{0.50}Bi_{0.50}}$ ve $13.63^{GaAs_{0.75}Bi_{0.25}}$ olarak bulunmuştur.

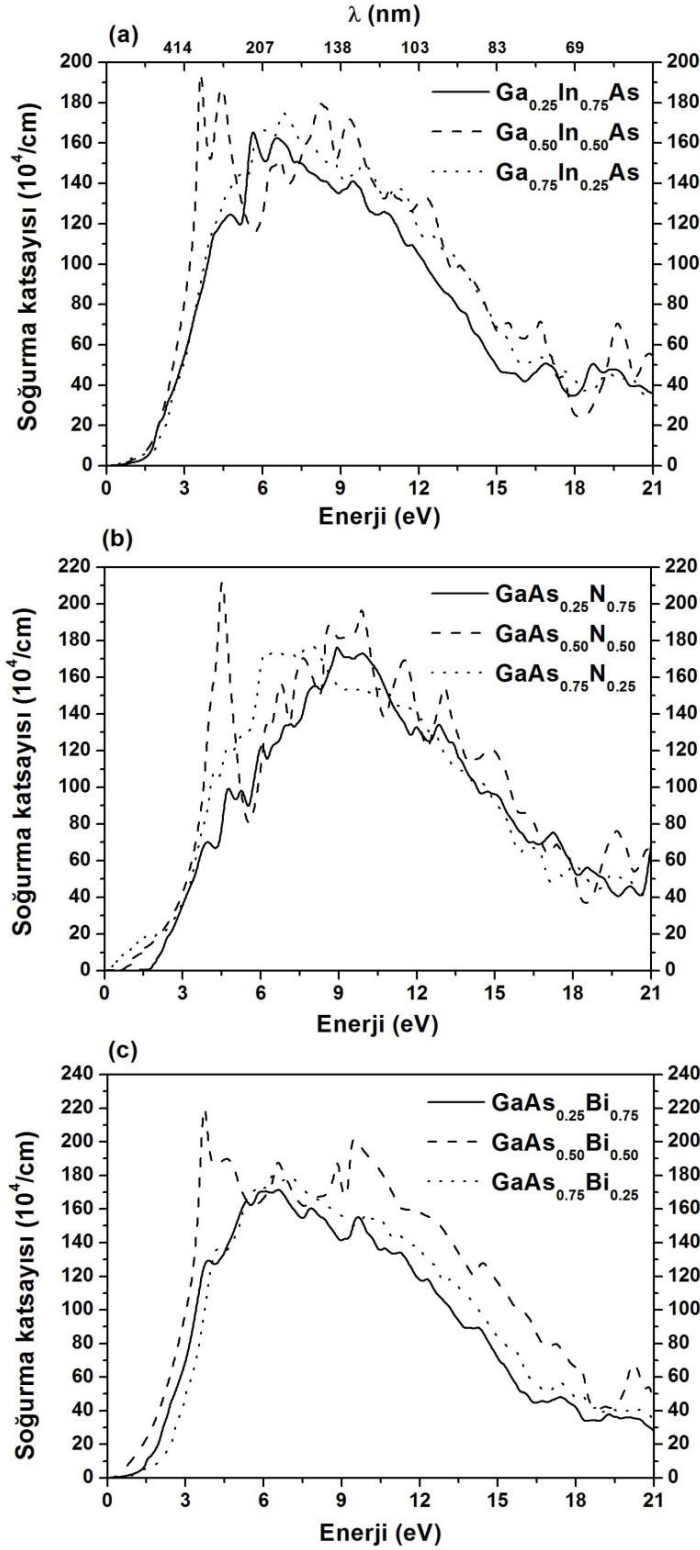
Son olarak GaInAsN dördü yarıiletken alaşımı için elde edilen reel dielektrik fonksiyonları Şekil 3.48'de görülmektedir. $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_x$ alaşımı için elde edilen $\epsilon_1(0)$ değerleri, $9.48^{Ga_{0.25}In_{0.75}As_{0.25}N_{0.75}}$, $12.78^{Ga_{0.50}In_{0.50}As_{0.50}N_{0.50}}$ ve $18.82^{Ga_{0.75}In_{0.25}As_{0.75}N_{0.25}}$ olarak bulunmuştur.



Şekil 3.48. GaInAsN dörütlü yarıiletken alaşıımı için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonu

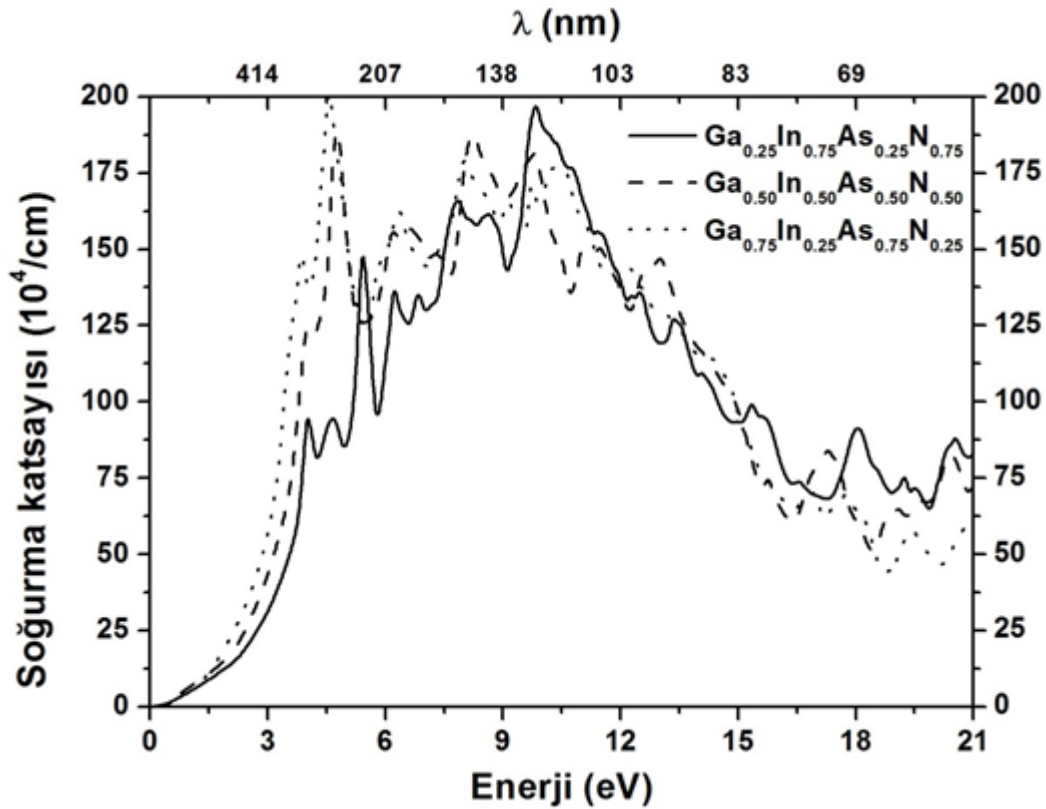
Şekil 3.49’da üçlü alaşımlar için Şekil 3.50’de ise GaInAsN dörütlü yarıiletken alaşıımına ait soğurma spektrumları gösterilmektedir. Üçlü ve dörütlü alaşıımların soğurma spektrumları ikili bileşiklere benzer olarak yorumlanabilir. Ortamda yayılan ışığın şiddetinde meydana gelen azalma olarak tanımlanan soğurmanın Eş. 3.49 ve Eş. 3.51 denklemleri yardımıyla imajiner dielektrik fonksiyonuyla yakından ilişkili olduđu söylenebilir. Yarıiletken özellik gösteren üçlü ve dörütlü alaşıımlar temel soğurma sınırı elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık geldiğinden dolayı bu alaşıımlar doğrudan bant aralığına sahip yarıiletkendirler. GaInAs üçlü yarıiletken alaşıımı için elde edilen TSS deęerleri $0.35^{\text{Ga}_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{As}}$ eV, $0.52^{\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}}$ eV ve $0.84^{\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25}\text{As}}$ eV olarak hesaplandı. Diđer bir üçlü alaşıım olan GaAsN yarıiletken materyali için TSS deęerleri $1.64^{\text{GaAs}_{0.25}\text{N}_{0.75}}$ eV, $0.83^{\text{GaAs}_{0.5}\text{N}_{0.5}}$ eV ve $0.23^{\text{GaAs}_{0.75}\text{N}_{0.25}}$ eV olarak hesaplandı. GaAs_{0.75}Bi_{0.25} üçlü yarıiletken alaşıımı için ise bu deęer 0.25 eV olarak bulundu. GaInAsN dörütlü yarıiletken alaşıımı için ise TSS deęerleri $0.48^{\text{Ga}_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{As}_{0.25}\text{N}_{0.75}}$ eV, $0.30^{\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{N}_{0.5}}$ eV ve $0.10^{\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25}\text{As}_{0.75}\text{N}_{0.25}}$ eV olarak elde edildi. Hesaplanan TSS deęerlerinin 3.3.6 bařlığında incelenen yasak bant enerji deęerlerinden küçük bir miktar sapsmasının nedenleri elektronlar ve

boşluklar arasındaki Coulomb etkileşimi, eksitonik etkiler, safsızlıklar ve kusur seviyelerinden kaynaklanmaktadır.



Şekil 3.49. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan soğurma spektrumları

Soğurma spektrumlarından temel soğurma sınırının IR ve NIR bölgesinde meydana geldiği açıkça görülmektedir. Bu durum bu malzemelerin iletişim araçlarında uygulanabileceğini gösterir. Soğurma spektrumlarında ortaya çıkan pikler ise yüksek simetri noktalarındaki bantlar arası geçişleri temsil etmektedir. Tüm alaşımlar için soğurma katsayısı IR'den UV'ye kadar artış göstermektedir. Hem üçlü hem de dördü alaşımlar için maksimum soğurma UV bölgede görülmektedir. Ayrıca, yüksek enerjilere doğru gidildikçe soğurmada meydana gelen azalma bu bileşiklerin yüksek enerjilerde saydam olacağını göstermektedir.



Şekil 3.50. GaInAsN dördü yarıiletken alaşımı için hesaplanan soğurma spektrumu

İkili bileşiklerin soğurma spektrumlarına benzer olarak hem üçlü hem de dördü alaşımlar için E_g 'den büyük enerjilerde soğurma katsayısı sabit kalmayıp enerjiye şiddetli şekilde bağımlılık göstermektedir. E_g 'ye çok yakın enerjiye sahip fotonlar için soğurma nispeten küçüktür. Çünkü elektronlar sadece valans bandının maksimumu sınırındaki soğurmaya sebep olan fotonlarla doğrudan etkileşmektedirler. Foton enerjisinin artması, E_g 'ye yakın enerjiye sahip

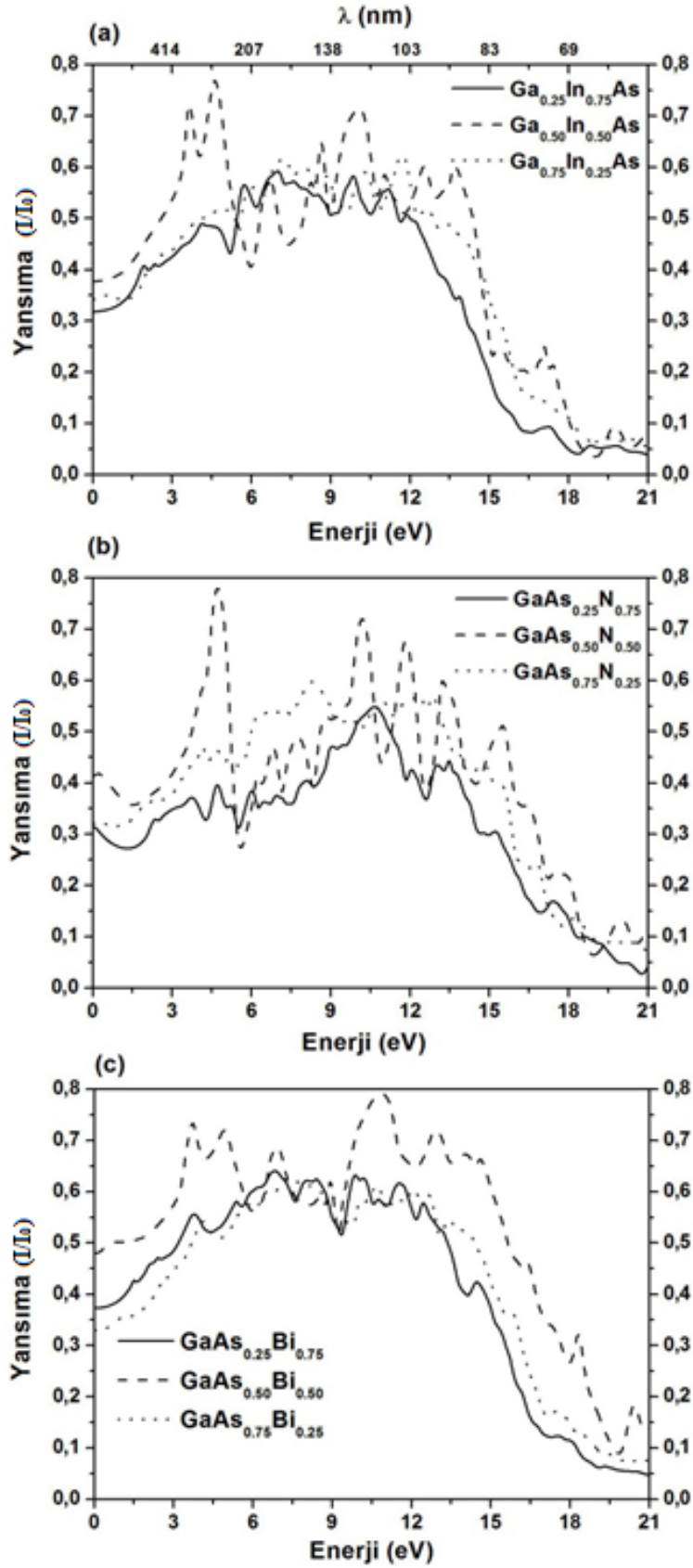
elektronların yanı sıra diğer elektronların da fotonlarla etkileşmesini sağlar. Bu yüzden, çok sayıda elektron fotonlarla etkileşir ve fotonların soğurulmasına yol açar.

Üçlü alaşımlar için yansımaya spektrumları Şekil 3.51’de, dördü yarıiletken GaInAsN materyaline ait yansımaya spektrumu Şekil 3.52’de gösterilmektedir. Yansımaya spektrumundaki yüksek enerjilerde meydana gelen dispersiyonlar elektronik etkilerden, düşük enerjideki dispersiyonlarda titreşimsel etkilerden kaynaklanmaktadır. Yansımaya başlangıç değerleri %30 ile %48 arasında değişmektedir.

$Ga_{1-x}In_xAs$ üçlü yarıiletken alaşımı için elde edilen yansımaya spektrumu Şekil 3.51(a)’da gösterilmektedir. $Ga_{1-x}In_xAs$ üçlü yarıiletken alaşımı için elde edilen yansımaya başlangıç değerleri, Şekil 3.51(a) yardımıyla %32 ^{$Ga_{0.25}In_{0.75}As$} , %38 ^{$Ga_{0.50}In_{0.50}As$} ve %34 ^{$Ga_{0.75}In_{0.25}As$} olarak bulunmuştur. Özellikle %50 In konsantrasyonuna sahip $Ga_{0.50}In_{0.50}As$ alaşımının mor-ötesi bölgede maksimum yansımaya sahip olduğu görülmüştür.

$GaAs_{1-x}N_x$ üçlü yarıiletken alaşımı için elde edilen yansımaya spektrumu Şekil 3.51(b)’de gösterilmektedir. $GaAs_{1-x}N_x$ üçlü yarıiletken alaşımı için elde edilen yansımaya başlangıç değerleri, Şekil 3.51(b) yardımıyla %31 ^{$GaAs_{0.25}N_{0.75}$} , %41 ^{$GaAs_{0.50}N_{0.50}$} ve %32 ^{$GaAs_{0.75}N_{0.25}$} olarak bulunmuştur. Özellikle %50 N konsantrasyonuna sahip $GaAs_{0.50}N_{0.50}$ alaşımının mor-ötesi bölgede maksimum yansımaya sahip olduğu görülmüştür.

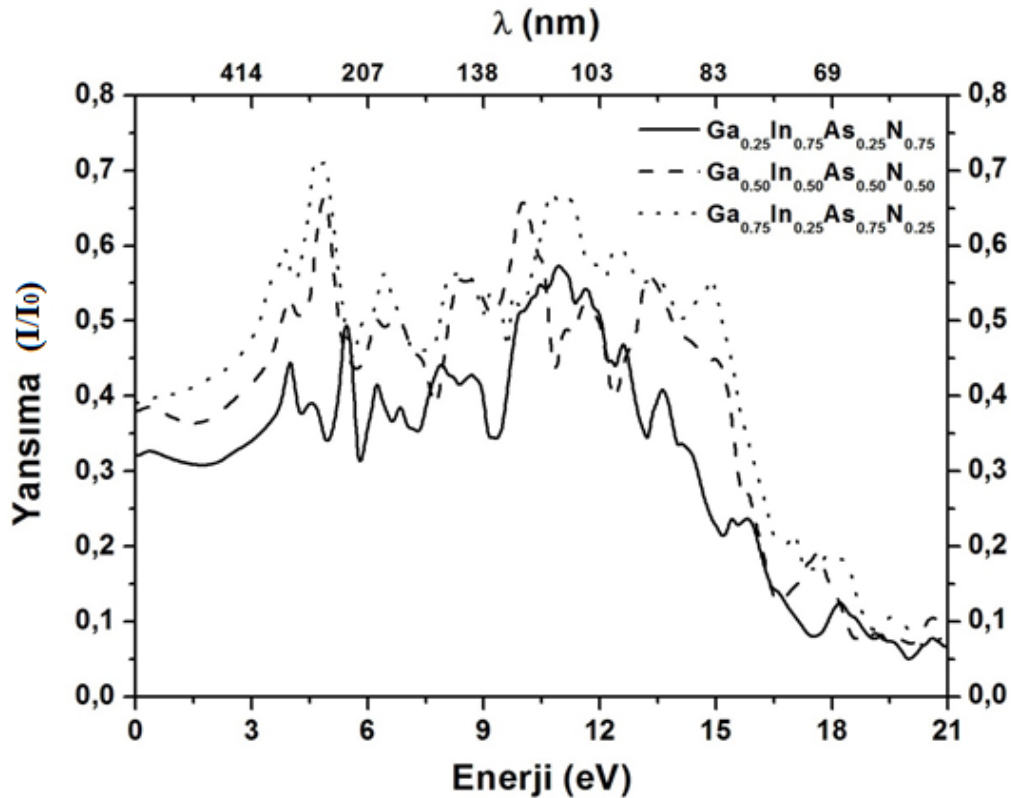
$GaAs_{1-x}Bi_x$ üçlü alaşımı için elde edilen yansımaya spektrumu Şekil 3.51(c)’de gösterilmektedir. $GaAs_{1-x}Bi_x$ üçlü alaşımı için elde edilen yansımaya başlangıç değerleri, Şekil 3.51(c) yardımıyla %37 ^{$GaAs_{0.25}Bi_{0.75}$} , %48 ^{$GaAs_{0.50}Bi_{0.50}$} ve %33 ^{$GaAs_{0.75}Bi_{0.25}$} olarak bulunmuştur. Özellikle %50 Bi konsantrasyonuna sahip $GaAs_{0.50}Bi_{0.50}$ alaşımının görünür bölgede maksimum yansımaya sahip olduğu görülmüştür.



Şekil 3.51. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan yansima spektrumları

Son olarak, Şekil 3.52’de GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için elde edilen yansımaya başlangıç değerleri $\%33^{\text{Ga}_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{As}_{0.25}\text{N}_{0.75}}$, $\%37^{\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{N}_{0.5}}$ ve $\%39^{\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25}\text{As}_{0.75}\text{N}_{0.25}}$ olarak bulunmuştur.

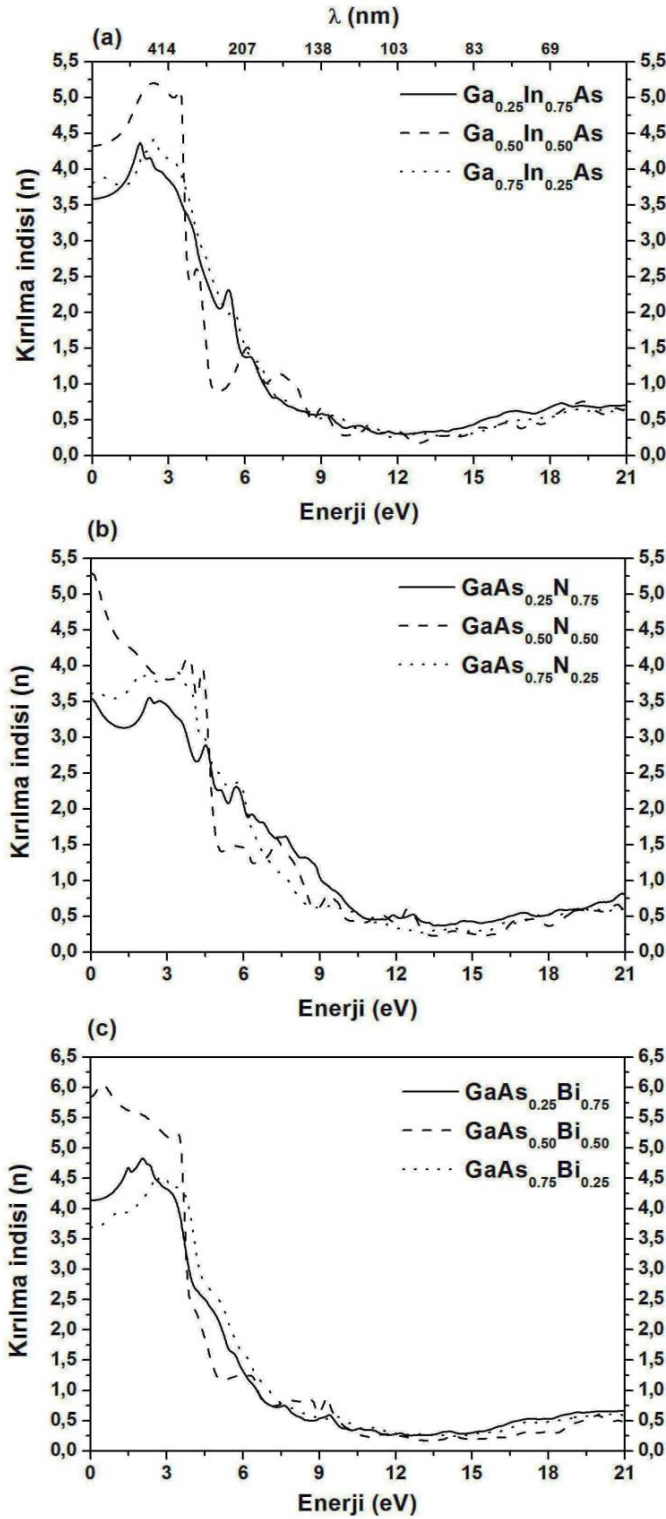
Elde edilen yansımaya başlangıç değerlerinin malzemelerin sahip olduğu yasak bant aralığıyla ters orantılı olması beklenen sonuçtur. Çünkü yasak bant aralığı küçüldükçe malzemenin metalik özelliğe doğru geçmesi beklenir. Metaller yüksek yansıtıcı özelliğe sahip olduklarından, yasak bant aralığı küçüldükçe yansıtma katsayısının artması beklenen sonuçtur.



Şekil 3.52. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan yansımaya spektrumu

Elde edilen üçlü ve dörtlü yansımaya spektrumları yardımıyla UV bölgede yansımaya katsayısının $\%80$ 'lere kadar ulaştığı anlaşılmaktadır. Yansımaya oranlarının özellikle mor-ötesi spektrum bölgesinde maksimum değerlere ulaşması bu malzemelerin mor-ötesi perdeleme (screening) uygulamaları için kullanılabilir olduğunu göstermektedir.

Eş. 3.47 kullanılarak üçlü alaşımlar için elde edilen kırılma indisi spektrumları Şekil 3.53'te, dördülyarıiletken GaInAsN materyaline ait yansıma spektrumu Şekil 3.54'te gösterilmektedir.



Şekil 3.53. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan kırılma indisi spektrumları

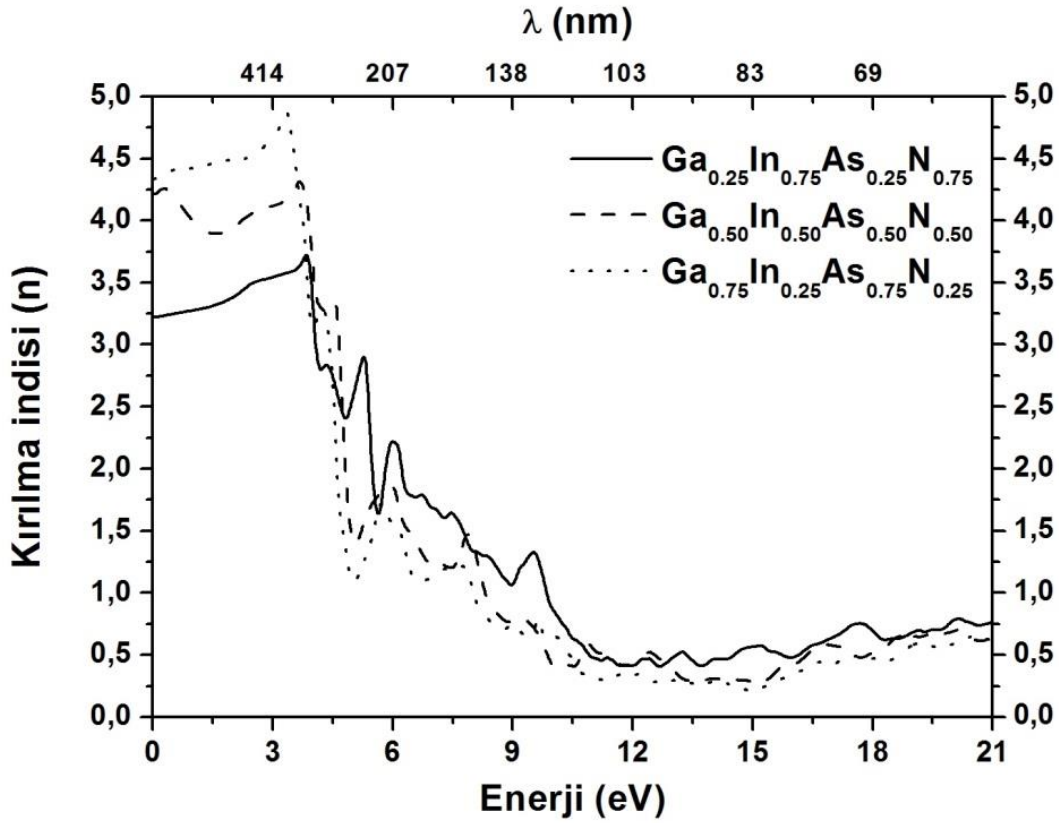
Üçlü ve dördlü alaşımların maksimum kırılma indisine görünür bölgede sahip oldukları görülmektedir. Eş. 3.47 kullanılarak $Ga_{1-x}In_xAs$ üçlü yarıiletken alaşımı için elde edilen kırılma indisi grafikleri Şekil 3.53(a)'da gösterilmektedir. Görünür bölgeden itibaren mor ötesine doğru kırılma indisinde azalma meydana gelmektedir. Çalışılan $Ga_{1-x}In_xAs$ üçlü yarıiletken alaşımı için Şekil 3.53(a)'dan elde edilen statik kırılma indisi, $n(0)$, değerleri $3.58^{Ga_{0.25}In_{0.75}As}$, $4.32^{Ga_{0.50}In_{0.50}As}$ ve $3.81^{Ga_{0.75}In_{0.25}As}$ olarak bulunmuştur.

Eş. 3.47 kullanılarak $GaAs_{1-x}N_x$ üçlü yarıiletken alaşımı için elde edilen kırılma indisi grafikleri Şekil 3.53 (b)'de gösterilmektedir. Görünür bölgeden itibaren mor ötesine doğru kırılma indisinde azalma meydana gelmektedir. Çalışılan bileşikler için Şekil 3.53(b)'den elde edilen statik kırılma indisi, $n(0)$, değerleri $3.54^{GaAs_{0.25}N_{0.75}}$, $5.28^{GaAs_{0.50}N_{0.50}}$ ve $3.61^{GaAs_{0.75}N_{0.25}}$ olarak bulunmuştur.

Eş. 3.47 kullanılarak $GaAs_{1-x}Bi_x$ üçlü alaşımı için elde edilen kırılma indisi grafikleri Şekil 3.53(c)'de gösterilmektedir. Görünür bölgeden itibaren mor ötesine doğru kırılma indisinde azalma meydana gelmektedir. Çalışılan bileşikler için Şekil 3.53(c)'den elde edilen statik kırılma indisi, $n(0)$, değerleri $4.14^{GaAs_{0.25}Bi_{0.75}}$, $5.84^{GaAs_{0.50}Bi_{0.50}}$ ve $3.69^{GaAs_{0.75}Bi_{0.25}}$ olarak bulunmuştur.

Son olarak, Şekil 3.54'de $GaInAsN$ dördlü yarıiletken alaşımı için elde edilen kırılma indisi değerleri $3.24^{Ga_{0.25}In_{0.75}As_{0.25}N_{0.75}}$, $4.23^{Ga_{0.5}In_{0.5}As_{0.5}N_{0.5}}$ ve $4.32^{Ga_{0.75}In_{0.25}As_{0.75}N_{0.25}}$ olarak bulunmuştur.

Kırılma indisi spektrumunda ortaya çıkan dispersiyonlar bantlar arası (yüksek enerji) ve titreşimsel (düşük enerji) soğurmada kaynaklanmaktadır. Kırılma indisi, IR'den UV'ye kadar artış, UV'den sonra şiddetli azalma göstermektedir.

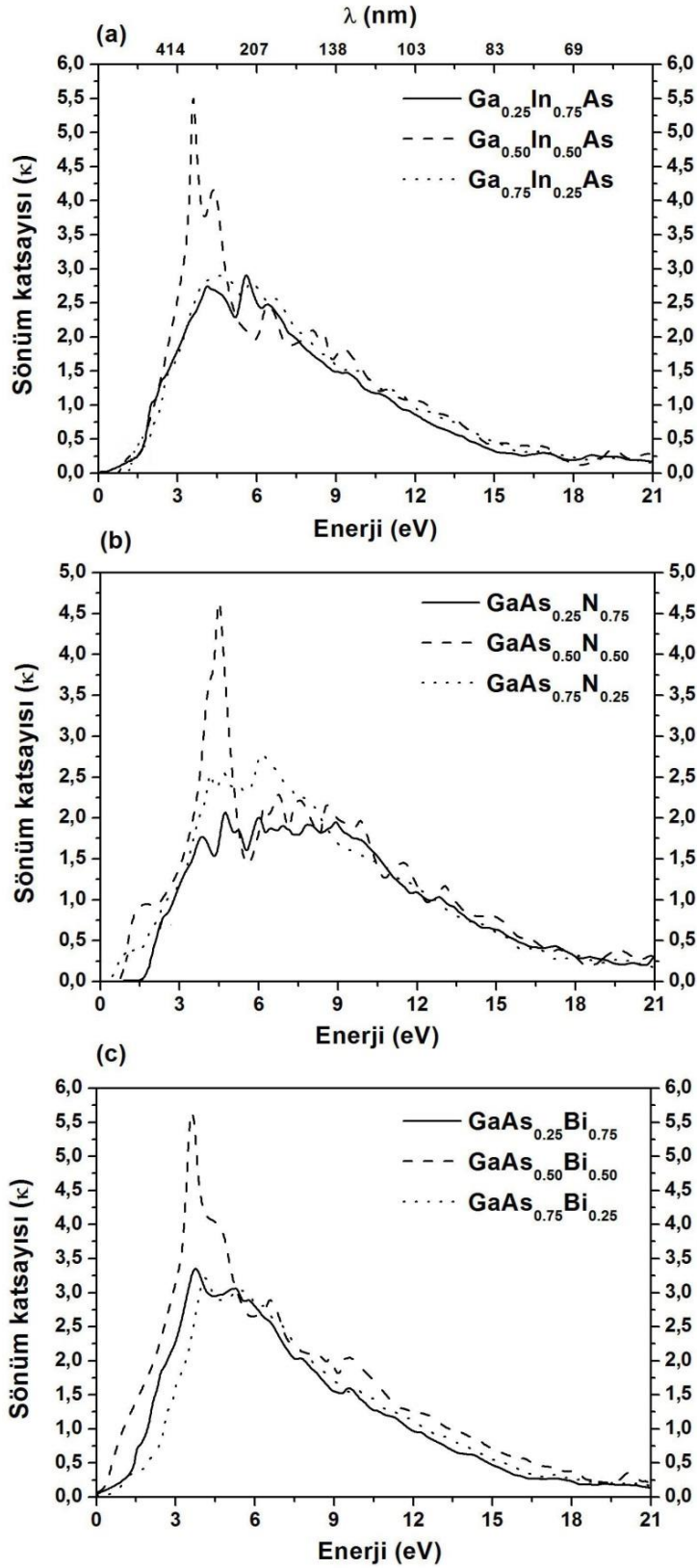


Şekil 3.54. GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan kırılma indisi spektrumu

Kompleks kırılma indisinin (\tilde{n}) imajiner kısmını ifade eden sönüm katsayısı (κ) spektrumu üçlü alaşımlar için elde edilen kırılma indisi spektrumları Şekil 3.55'te, dörtlü yarıiletken GaInAsN materyaline ait yansıma spektrumu Şekil 3.56'da gösterilmektedir.

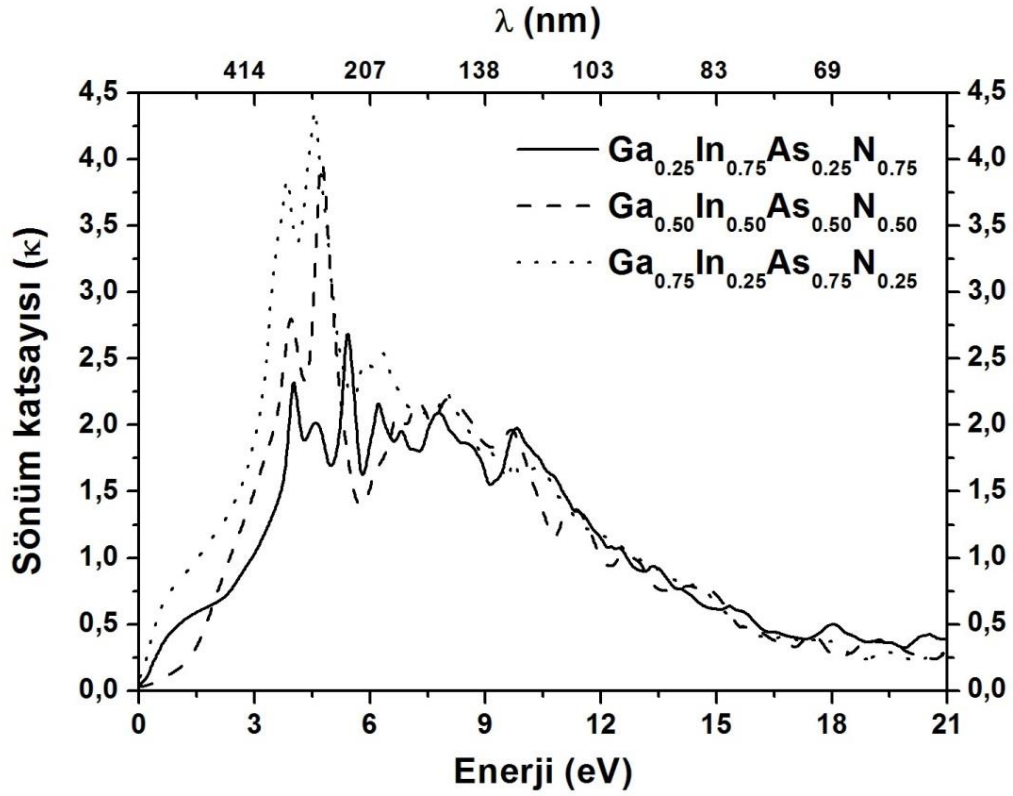
Eş. 3.46, Eş. 3.48 ve Eş. 3.51 denklemleri sönüm katsayısının imajiner dielektrik fonksiyonuyla yakından ilişkili olduğunu göstermektedir. IR'de görülen pikler titreşimsel modlardan kaynaklanmaktadır. UV'de görülen soğurma, bantlar arası geçişlerden kaynaklanmaktadır.

Sönüm spektrumunda meydana gelen yerel (lokal) maksimumlar reel dielektrik fonksiyonunun sıfır olduğu değerlere karşılık gelmektedir. Sönüm parametresi spektrumunda meydana gelen maksimum piklerin rezonans frekansına yakın enerji değerlerinde meydana geldiği görülmektedir.



Şekil 3.55. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumları

Şekil 3.56'da gösterilen GaInAsN materyalinin sönüm spektrumunda meydana gelen 3-7 eV arasındaki sert düşüşler iç kor elektronlarının geçişlerinden kaynaklanmaktadır.

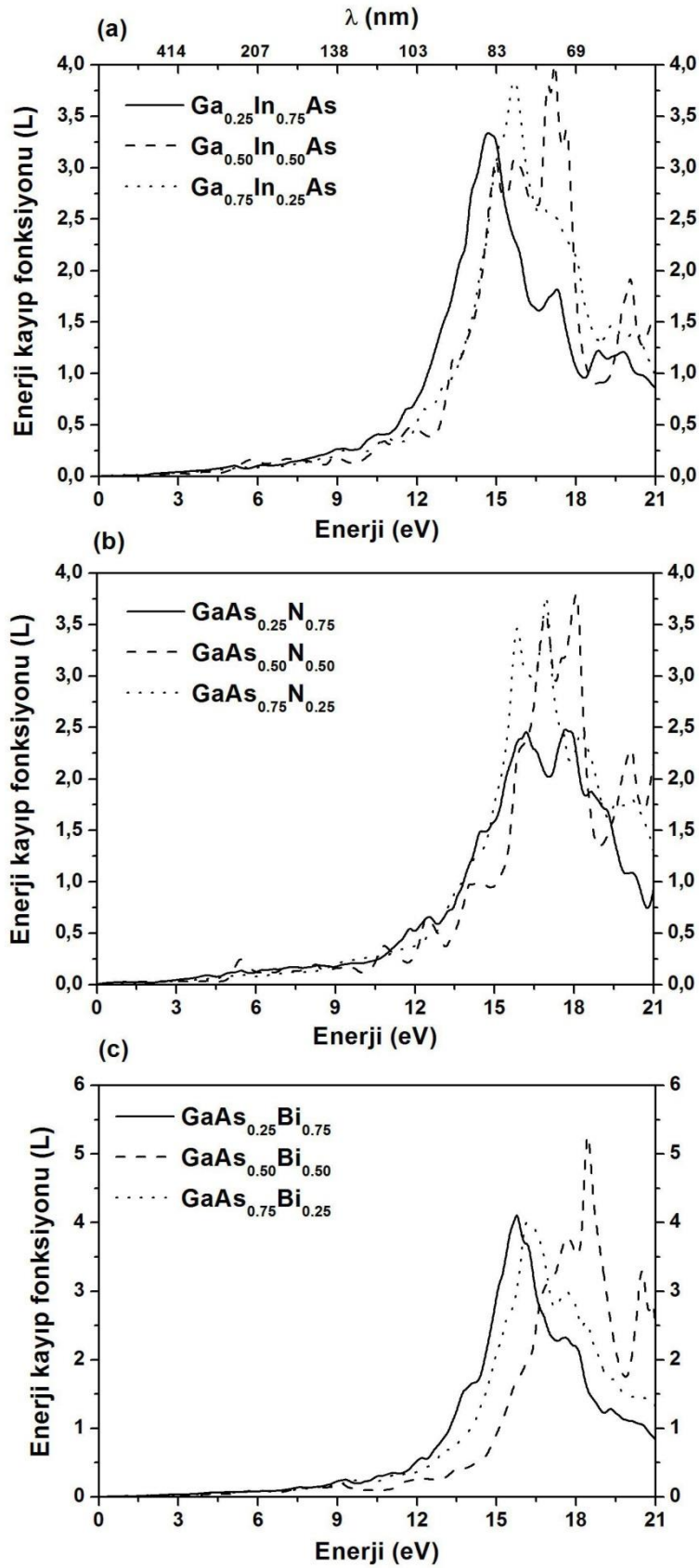


Şekil 3.56. GaInAsN dörütlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu

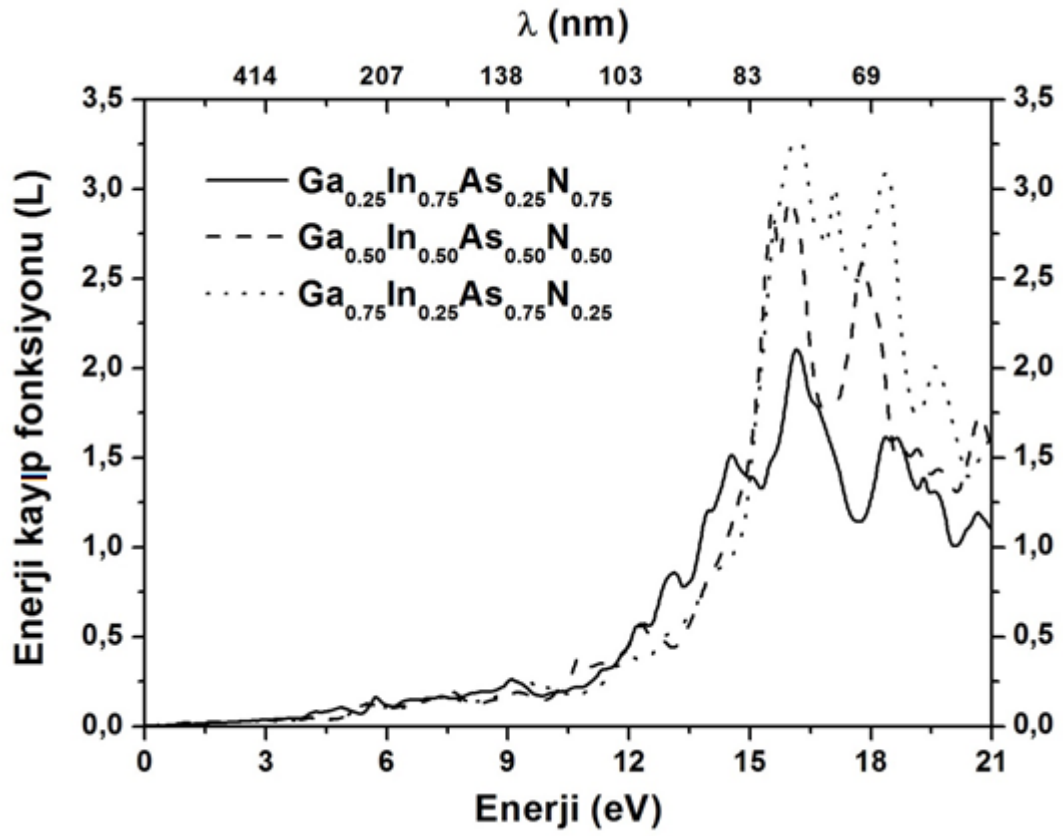
Bir elektronun yapı içerisinde hareket ederken kaybettiği enerjinin ölçüsü enerji kayıp fonksiyonu (L) ile belirlenir. Eş. 3.53 kullanılarak hesaplanan üçlü alaşımların enerji kayıp spektrumları Şekil 3.57'de, dörütlü yarıiletken GaInAsN materyaline ait enerji kayıp fonksiyonu Şekil 3.58'de gösterilmektedir.

0-6 eV enerji aralığında göze çarpan pikler, bu enerji aralığında $\epsilon_2(\omega)$ 'nin büyük değerlere sahip olmasından, yani soğurmanın yüksek olmasından kaynaklanmaktadır. Maksimum piklerin ortaya çıkması ise, yansımanın azalmasına karşılık gelmektedir.

Üçlü ve dörütlü alaşımların enerji kayıp spektrumunda meydana gelen yüksek enerji değerlerinde $\epsilon_2(\omega)$ 'nin sıfıra doğru azalması bu değerlerde L spektrumunun genliği artması anlamına gelmektedir.



Şekil 3.57. (a) GaInAs (b) GaAsN (c) GaAsBi üçlü alaşımları için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumları



Şekil 3.58. GaInAsN dörütlü yarıiletken alaşımı için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu

BÖLÜM 4. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tezde III-V grubu elementlerden oluşan GaInAsN dörtlü yarıiletken alaşımının, GaAsN, GaInAs ve GaAsBi üçlü alaşımlarının ve bu üçlü-dörtlü alaşımları oluşturan GaAs, InAs, GaN, InN ve GaBi ikili bileşiklerinin fiziksel özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı WIEN2k simülasyon programı kullanılarak incelendi. III-V grubu bileşikler ve alaşımlar için yapılan birçok çalışma bu malzemelerin ZnS kristal yapıya sahip olduklarını göstermektedir. Bu nedenle, incelenen tüm ikili bileşiklerin, üçlü ve dörtlü alaşımların fiziksel özellikleri ZnS fazda araştırıldı. İlk olarak bu malzemelerin yapısal özellikleri incelendi. Hesaplamalar sonucu elde edilen taban durumu örgü sabitleri (a_0), hacim modülleri (B) ve hacim modüllerinin basınca göre birinci türevleri (B') için daha önceki teorik ve özellikle de deneysel çalışmalarla iyi bir uyum olduğu bulundu. Hesaplanan taban durumu örgü sabitinin deneysel ve teorik sonuçlarla iyi uyum göstermesi, tez kapsamında incelenen malzemelerin elektronik ve optiksel özelliklerinde kullanılıyor olması hesaplamaların güvenilirliğini arttırmaktadır. Ayrıca, üçlü ve dörtlü alaşımlar için taban durumu örgü parametrelerinin konsantrasyonla değişiminin Vegard kanunuyla uyumlu olduğu bulundu.

İkinci adımda ise çalışılan malzemelerin elektronik özellikleri kapsamında elektronik bant yapıları, toplam ve parçalı durum yoğunlukları elde edildi. Çalışılan ikili yarıiletkenlerin yasak bant aralığı diğer teorik ve deneysel çalışmalarla kıyaslandığında %1-%2.5 arasında hata verdiği gözlenmektedir. Bu durum, elde edilen sonuçların literatürle iyi bir uyum içinde olduğunu göstermektedir. Üçlü alaşımlar için yüksek simetri noktalarında sahip oldukları enerji değerlerinin konsantrasyonla değişimi incelendi. Bu sayede GaInAs ve GaAsN üçlü alaşımlarının her konsantrasyonda yarıiletken özellik gösterdiği tespit edildi. Fakat aynı durum GaAsBi üçlü alaşımı için geçerli değildir. GaAsBi üçlü alaşımı için yüksek simetri noktalarına karşılık gelen enerji değerlerinin değişimi %44.2 Bi konsantrasyonuna

kadar en düşük enerji değerleri Γ - Γ geçişine karşılık geldiğinden bu alaşım %44.2 Bi konsantrasyonlarına kadar yarıiletken davranış sergilemektedir. %44.2 Bi konsantrasyonundan sonra yüksek simetri noktaları birbirleriyle kesişmektedirler. Bu durum, GaAsBi üçlü alaşımının % 44.2 Bi konsantrasyonundan sonra metalik özellik gösterdiği anlamına gelmektedir. Son olarak GaAs, InAs, GaN ve InN ikili yarıiletken bileşiklerinin kullanılmasıyla elde edilen dörtlü GaInAsN yarıiletken alaşımının elektronik özellikleri araştırıldı. Bu dörtlü alaşımın en önemli özelliklerinden biri uygun In ve N konsantrasyonlarının elde edilmesiyle GaAs üzerine büyütülebilme potansiyeline sahip olması ve fiber optik kablolarda en yüksek verimin elde edilebileceği 1 eV'luk yasak bant enerji değerinin elde edilebiliyor olmasıdır. Bu kapsamda GaInAsN dörtlü alaşımını değişen In ve N konsantrasyonları için yarıiletken özellik gösterdiği bulundu. Elektronik özellikler kapsamında üçlü alaşımlar için önemli bir nicelik olan bükülme parametresi incelendi. GaAs yarıiletkenine N alaşımlanmasının In ve Bi elementlerine kıyasen çok daha büyük bükülme oranına sahip olduğu görüldü. Bu durumun temel nedeni N sahip olduğu yüksek elektronegatiflik ve yarıçap farklılıklarından kaynaklanmaktadır. GaInAs alaşımının sahip olduğu bükülme, GaAsN alaşımının sahip olduğu bükülme değişimine göre çok küçük bir değere sahip olduğu hesaplandı. Dolayısıyla, GaInAs üçlü yarıiletken alaşımının bükülmesi lineer olarak kabul edildi. Ayrıca, GaInAs üçlü yarıiletken alaşımındaki değişim incelendiğinde GaAs materyaline In alaşımlanması örgü parametresinde sürekli bir artmaya sebep olurken, yasak bant aralığı enerjilerinde ise sürekli bir azalmaya gittiği tespit edildi. Diğer taraftan, GaAsN alaşımında ise N konsantrasyonunun artması örgü parametresinde sürekli bir küçülmeye sebep olurken, yasak bant aralığı ise yaklaşık %20 N konsantrasyonuna kadar azalmaya sonrasında ise yasak bant enerji değerinin artmasına sebep olduğu bulundu. GaAsBi üçlü bileşiği GaAsN ile benzer davranışı göstermesine rağmen, GaAsBi bileşiğinde meydana gelen artış (örgü parametresi) ve azalışların (yasak bant enerjisi) daha yavaş olduğu üstel (exponential) değişimle kolaylıkla tespit edildi. Son olarak, GaAsBi ve GaAsN üçlü bileşiklerinin değişen Bi ve N konsantrasyonuna bağlı olarak Γ simetri noktası referans alınarak iletkenlik ve valans bantlarındaki değişimler incelendi. GaAsN üçlü yarıiletkeni için N konsantrasyonlarına karşılık gelen Γ simetri noktasında iletkenlik bandının minimum, valans bandının maksimum enerji değişimi gösterildi. N konsantrasyonu

valans bandını hemen hemen etkilemediği gözlemlendi. Yani, GaAs yarıiletkenine N alaşımlanması valans bandı için hemen hemen sabit bir değişim görüldü. Fakat iletkenlik bandı için aynı durum söz konusu değildir. GaAs yarıiletkenine N alaşımlanması %25 N konsantrasyonuna kadar iletkenlik bandı enerji değerini azaltmakta %25 N içeren daha büyük konsantrasyonlarda iletkenlik bandı enerji değerini arttırmaktadır. Bu azalış ve artışlar N konsantrasyonunun iletkenlik bandını açık şekilde etkilediğini ortaya koyar. İletkenlik bandının değişimi ise elektronların sahip olduğu mobilitiyi değiştirir. Elektronların sahip olduğu mobilite ise alet tasarımında çok büyük öneme sahiptir. Diğer taraftan, GaAsBi üçlü yarıiletkeni için Bi konsantrasyonlarına karşılık gelen Γ simetri noktasında iletkenlik bandının minimum, valans bandının maksimum enerji değişimi incelendi. GaAs yarıiletkenine Bi alaşımlanması sonucu Bi konsantrasyonu valans bandının değişimini hemen hemen lineer olarak etkilerken, iletkenlik bandı enerji değerinin lineer olarak artmasına sebep olduğu görüldü. Bu durum ise iletkenlik bandında bulunan elektronları ve elektronların sahip olduğu mobilitiyi etkilemeyeceği için aygıt tasarımlarında daha uygun şartlara sahip olduğu söylenebilir.

Tezin üçüncü adımında ise ikili bileşiklerin, üçlü ve dörtlü alaşımların optiksel özellikleri incelendi. Bu kapsamda ise öncelikle kristal yapıya sahip malzemelerin bant yapılarının daha iyi anlaşılabilmesi için optiksel dielektrik spektrumunun incelendi. İmajiner dielektrik fonksiyonu kullanılarak çalışılan malzemelerin yüksek simetri noktalarında meydana gelen geçişler incelendi. Tez kapsamında incelenen tüm materyaller için reel dielektrik fonksiyonunun enerjisiyle değişimi hesaplandı. Çalışılan malzemeler arasında davranış benzerlikleri anyon:kasyon oranından kaynaklandığı tespit edildi. Ayrıca, reel dielektrik fonksiyonunda meydana gelen bu artış ve azalışlar rezonans frekansı ve sönüm parametresiyle ilişkili olduğu söylenebilir. Diğer bir optiksel parametre olarak soğurma katsayısı incelendi. Soğurma katsayısı, ortamda yayılan ışığın şiddetinde meydana gelen azalma olarak tanımlanır. Soğurmanın başladığı minimum enerji noktası (ya da dispersiyonun başladığı nokta) temel soğurma sınırı olarak tanımlanmıştı. Eş. 3.49 ve Eş. 3.51 soğurma spektrumunun imajiner dielektrik fonksiyonuyla yakından ilişkili olduğunu sonucuna varıldı. Yansıma spektrumundaki yüksek enerjilerde meydana gelen dispersiyonlar elektronik etkilerden, düşük enerjideki dispersiyonlarda titreşimsel

etkilerden kaynaklanmaktadır. Yansıma başlangıç değerleri %15 ile %80 arasında değişmektedir. UV bölgede yansımanın maksimuma ulaştığı görüldü. Yansıma oranlarının özellikle mor-ötesi spektrum bölgesinde maksimum değerlere ulaşması bu malzemelerin mor-ötesi perdeleme (screening) ışına uygulamaları için kullanılabilir olduğunu göstermektedir. Çalışılan malzemeler için maksimum kırılma indisinin görünür bölge civarında olduğu görüldü. Ayrıca, tez kapsamındaki tüm materyaller için statik kırılma indisi, $n(0)$, bulundu. Kırılma indisi spektrumunda ortaya çıkan dispersiyonlar bantlar arası (yüksek enerji) ve titreşimsel (düşük enerji) soğurmadan kaynaklanmaktadır. Genel olarak kırılma indisi spektrumu, IR'den UV'ye kadar artış, UV'den sonra şiddetli azalma göstermektedir. Görünür bölge aralığında genel olarak kırılma indisinde azalma meydana gelmektedir. Kompleks kırılma indisinin (\tilde{n}) imajiner kısmını ifade eden sönüm katsayısı (κ) spektrumu ikili bileşikler, üçlü ve dördü alaşımlar için hesaplandı. Eş. 3.46, Eş. 3.48 ve Eş. 3.51 denklemleri sönüm katsayısının imajiner dielektrik fonksiyonuyla yakından ilişkili olduğunu göstermektedir. IR'de görülen pikler titreşimsel modlardan kaynaklanmaktadır. UV'de görülen soğurma bantlar arası geçişlerden kaynaklanmaktadır. Sönüm spektrumunda meydana gelen yerel (lokal) maksimumlar reel dielektrik fonksiyonunun sıfır olduğu değerlere karşılık gelmektedir. Ayrıca sönüm spektrumunda meydana gelen maksimum pikler rezonans frekansına yakın enerji değerlerinde meydana geldiği görülmektedir. Bu spektrumda ortaya çıkan sert düşüşler iç kor elektronlarının geçişlerinden kaynaklandığı tahmin edilmektedir. Son olarak, bir elektronun yapı içerisinde hareket ederken kaybettiği enerjinin ölçüsü enerji kayıp fonksiyonu (L) hesaplandı. 0-10 eV enerji aralığında göze çarpan pikler, bu enerji aralığında $\epsilon_2(\omega)$ büyük değerlere sahip olmasından, yani soğurmanın yüksek olmasından kaynaklanmaktadır. Maksimum piklerin ortaya çıkması ise, yansımanın azalmasına karşılık gelmektedir. Yüksek enerji değerlerinde $\epsilon_2(\omega)$ sıfıra doğru azalması bu değerlerde L spektrumunun genliğinin artması anlamına gelmektedir.

Bu çalışmanın eksik olan tarafı daha düşük konsantrasyonlarda hesaplama yapılamamış olması, farklı korelasyon potansiyellerinin araştırılamaması ve uygun yakınsama kriterlerinin belirlenememesidir. Bu problemlerin çözülememelerinin temel kaynağı güçlü bilgisayar kaynaklarına sahip olunmamasıdır. Özellikle deneysel

çalışmalarla karşılaştırılacak çalışmaların düşük konsantrasyonda olması çok önem arz etmektedir. Diğer taraftan güçlü sistemlerin temini ile özellikle alaşımların hangi yapıda daha kararlı oldukları incelenebilecek ve bu yapıda deneysel çalışmalara uygun konsantrasyonlarda malzemelerin fiziksel özellikleri araştırılabilecektir. Ayrıca, hem ikili bileşiklerin hem de özellikle alaşımların titreşimsel özelliklerinin, titreşimsel hesaplamalar yardımıyla da termodinamik özelliklerinin de araştırılması literatürde büyük bir boşluğu dolduracaktır. Ayrıca, yapılan bu çalışmadan elde edilen izlenimler $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{N}_x\text{Bi}_y$ dörütlü alaşımının GaAs üzerine büyültülebileceği tespit edilmiştir. Gelecek çalışmalarda tanımlanan bu eksiklikler ve tespitler üzerine olması planlanmaktadır.

KAYNAKLAR

ABDICHE, A., ABID, A., RIANE, R., BOUAZA, A., Structural and electronic properties of zinc blend GaAs_{1-x}Bi_x solid solutions, *Physica B*, 405:2311–2316, 2010.

ACHOUR, H., LOUHIBI, S., AMRANI, B., TEBBOUNE, A., SEKKAL, N., Structural and electronic properties of GaAsBi, *Superlattices Microstruct.*, 44:223-229, 2008.

ADACHI, S., Excitonic effects in the optical spectrum of GaAs, *Phys. Rev. B*, 41:1003-1013, 1990.

ADACHI, S., GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As: Material parameters for use in research and device applications, *J. Appl. Phys.*, 54:R1-R29, 1985.

ASLAN, M., YALCIN, BG, USTUNDAG, M, Structural and electronic properties of Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y quaternary alloy on GaAs substrate, *J. Alloys Comp*, 519:55-59, 2012.

BARTOLOTTI, LJ., The hydro dynamic formulation of time-dependent Kohn-Sham orbital density functional theory, *J. Chem. Phys.*, 90:5518-5523, 1986.

BECKE, AD., Density-functional thermo chemistry. I. The effect of the exchange-only gradient correction, *J. Chem. Phys.*, 96:2155-2160, 1992.

BİLGİYUVASI, <http://www.bilgiyuvasi.org/yalitkan-yari-iletken-ve-iletken-addeler#ixzz2I8j56w00>, Erişim Tarihi: 2011.

BLAHA, P., SCHWARZ, K., MADSEN, G., KVASNICKA, D., LUITZ, J., An Augmented Plane Wave plus Local orbital program for Calculating the Crystal Properties. 12th ed. WIEN 2012.

BORN, M., OPPENHEIMER, R., Zur Quantentheorie der Molekeln. *Ann. Phys.*, 84: 457-460 1927.

CEPERLEY, DM., ALDER, BI., Ground state of the electron gas by a stochastic method, *Phys. Rev. Lett.*, 45:566-569, 1980.

DELIGOZ, E., Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, 2007.

FENG, ZB., HU, HQ., CUI, SX., WANG, WJ., LU, CY., First principles study of electronic and optical properties of InAs, *Cent. Eur. J. Phys.* 7:786-790, 2009.

FERHAT, M., ZAOUI, A., Structural and electronic properties of III-V bismuth compounds, *Phys. Rev. B*, 73:115107-7, 2006.

FERMI, E., A statistical method for determining some properties of the atom. I, *Rend. Accad.*, 6:602-7, 1927.

FERMI, E., A statistical method for the determination of some properties of atoms. II. Application to the periodic system of the elements, *Z. Phys.* 48:73-79 1928.

FLORES, GR., CONTRERAS, HN., MARTÍNEZ, AL., POWELL, RC., GREENE, JE., Temperature-dependent optical band gap of the metastable zinc-blende structure β -GaN, *Phys. Rev. B*, 50:8433-8438, 1994.

FOCK, V., Näherungs methode zur Lösung des quanten-mechanischen Mehrkörper probleme, *Z. Phys.*, 61:126-148, 1930.

FOX, M., *Optical properties of solids*, Oxford University Press, 2001.

FRITSCHÉ, L., GU, YM., Binding properties of 3d transition metals in a generalized density-functional theory, *Phys. Rev. B*, 48:4259-4264, 1993.

GEISZ, JF., FRIEDMAN, DJ., III-N-V semiconductors for solar photovoltaic applications, *Semicond. Sci. Technol.* 17:769-777, 2002.

GIANNOZZI, P., GIRONCOLI, S., PAVONE, P., BARONI, S., Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors, *Phys. Rev. B*, 43:7231-7242, 1991.

GONZE, X., ALLAN, DC., TETER, MP., Dielectric tensor, effective charges, and phonons in α -quartz by variational density-functional perturbation theory, *Phys. Rev. Lett.*, 68:3603-3606, 1992.

GROSS, EKV., DREIZLER, K., *Density Functional Methods in Physics*, Plenum, New York, 81-97, 1985.

GUPTA, DC., KULSHRESTHA, S., Effect of high pressure on polymorphic phase transition and electronic structure of XAs X=Al, Ga, In, *Phase Transitions*, 82:850-865, 2009.

HAMMER, B., SCHEFFLER, M., JACOBSEN, KW., NORSKOV, JK., Multi-dimensional Potential Energy Surface for H₂ Dissociation over Cu(111), *Phys. Rev. Lett.*, 73:1400-1403, 1994.

HARTREE, DR., The wave mechanics of an atom with non-coulombic central field: parts I, II, III, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 24:89-111, 1928.

HELLWEGE, KH., MADELUNG, O., LANDOLT-BORNSTEIN, *Semiconductors Physics of Group IV Elements and III-V Alloys, New Series, Group III*, p. 17, 1982.

HEROUX, JP., YANG, X., WANG, WI., GaInNAs resonant-cavity-enhanced photodetector operating at 1.3 μm , Appl. Phys. Lett. 75:2716–2718, 2006.

HOHENBERG, P., KOHN, W., Inhomogeneous electron gas. Phys. Rev. 136:B864-B867, 1964.

JOHNSON, BG., GONZALEZ, CA., GILL, PMW., POPLE, JA., A density functional study of the simplest hydrogen abstract ion reaction - effect of self-interaction correction, Chem. Phys. Lett., 221:100-108, 1994.

KANOUN, MB, MERAD, AE, MERAD, G, CIBERT, J, AOURAG, H, Perfection study of elastic under pressure effect for zincblende BN, AlN, GaN and InN, Solid-State Elec., 48:1601-1606, 2004.

KARAOĞLU, B., Çeviri:TAYLOR, JJ., ZAFIRATOS, CD, DUBSON, MA, Modern Physics For Scientists and Engineers, ISBN-10: 013805715X • ISBN-13: 9780138057152, Addison-Wesley, 2nd edition, 2003, Okutman Yayıncılık, 2008.

KHEIN A., SINGH DJ., UMRIGAR CJ., All electron study of gradient corrections to the local-density functional in metallic systems, Phys. Rev. B, 51:4105-4109, 1995.

KIM, HS., OK, I., ZHANG, M., ZHU, F., PARK, S., YUM, J., ZHAO, H., LEE, JC., MAJHI, P., GOEL, N., TSAI, W., GASPE, CK., SANTOS, MB., A study of metal-oxide-semiconductor capacitors on GaAs, In_{0.53}Ga_{0.47}As, InAs, and InSb substrates using a germanium interfacial passivation layer, Appl. Phys. Lett. 93:062111-3, 2008.

KIM, J., FISCHETTI, MV., Electronic band structure calculations for biaxially strained Si, Ge, and III–V Semiconductors, J. Appl. Phys., 108:013710-15, 2010.

KOHN, W., SHAM, L. J., Self-Consistent equations including exchange and correlation effects. Phys. Rev. 140:A1133-A1138, 1965.

KONDOW, M., UOMI, K., HOSOMI, K., MOZUME, T., Gas-Source Molecular Beam Epitaxy of $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ Using a N Radical as the N Source, Jpn. J. Appl. Phys., 33:L1056-L1058, 1994.

KONDOW, M., UOMI, K., NIWA, A., KITATANI, T., WATAHIKI, S., YAZAWA, Y., Room-Temperature Pulsed Operation of GaInNAs Laser Diodes with Excellent High-Temperature Performance, Japan J. Appl. Phys., 35:5711-5713 1996.

KRAMRES, HA., Atti. Congr. Int. Fis Transactions of Volta Centenary Congress, 2:545, 1927.

KRONIG, R. de L., On the theory of the dispersion of X-rays, J. Opt. Soc. Am., 12:547-557, 1926.

KUMAR, V., ANDERSEN, O.K. AND MOOKERJEE, A., Lectures on methods of electronic structure calculations, World Scientific, Singapore, 1994.

LAASONEN, K., CSAJKA, F., PARRINELLO M., Water dimer properties in the gradient-corrected density functional theory, Chem. Phys. Lett., 194:172-174, 1992.

LANDOLT-BÖRNSTEIN, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series, Group III, Vol. 17, Part A, Springer, Berlin, 1982.

LEE C., YANG W., PARR RG., Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density, Phys. Rev. B, 37:785-789, 1988.

LI X., TAO X., LI R., CHEN H., OUYANG Y., DU Y., Lattice Dynamics properties of XAs X=Al, Ga and In with zinc-blende structure from first-principle calculations, J. Phys. Chem. Solids, 73:1034-1039, 2012.

LUNDQVIST, S., MARCH, NH., Theory of the Inhomogeneous Electron Gas, Plenum Press, New York, 115-142, 1983.

MADLUNG, O., SCHULZ M., WEISS, H., Landolt-Bornstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Springer, 2nd ed., New York 1996.

MEHNANE N., BADI, F., ACED, MR., ABID, H., SEKKAL, N., Evidence of the correlation between a strong 4d-As/2p-N orbitals coupling and the bowing effect in GaAsN, Physica B, 403:4281-4287, 2008.

MING – FU L., Modern semiconductor quantum physics. Chih-Tang S ed; World Scientific: New York, 1995.

MITOMO JO., YOKOZEKI M., SATO Y., HIRANO Y., HINO T., NARUI H., IEEE J. Selected Topics Quant. Electron., 11:1099-1102, 2005.

MONKHORST, HJ., PARK, JD., Special points for Brillouin-zone integrations, Phys. Rev. B, 13:5188-5192 1976.

MURNAGHAN, FD., The compressibility of media under Extreme pressures. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 30:244-247 1944.

OKUMURA, H., YOSHIDA, S., OKAHISA, T., Optical properties near the band gap on hexagonal and cubic GaN, Appl. Phys. Lett., 64:2997-2999, 1994.

OTHMAN, M., KASAP, E., KOROZLU, N., Ab-initio investigation of structural, electronic and optical properties of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{Py}$ ternary and $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Py}$ quaternary semiconductor alloys, J. All. Comp. 496:226-233, 2010.

PAYNE, MC., TETER, MP., ALLAN, DC., ARIAS, T.A., JOANNOPOULOS, JD., Iterative minimization techniques for abinitio total energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients, *Rev. of Mod. Phys.*, 64:1045-1097, 1992.

PERDEW, JP., BURKE, K., ERNZENHOF, M., Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett.*, 77:3865-3868, 1996b.

PERDEW, JP., SHEVAY, JA., VOSKO, SH., JACKSON, KA., PEDERSON, MR., SINGH, DJ., FIOLETTI, C., Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation, *Phys. Rev. B*, 46:6671-6687, 1992b.

PERDEW, JP., WANG, Y., Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy, *Phys. Rev. B*, 45:13244-13249, 1992a.

PERDEW, JP., BURKE K., WANG Y., Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system, *Phys. Rev. B*, 54:16533-16539, 1996a.

RESHAK, AH., KAMARUDIN, H., AULUCK, S., Bismuth-containing semiconductors: Linear and nonlinear optical susceptibilities of GaAs_xBi_{1-x} alloys, *J. All. Comp.*, 509:9685-9691, 2011.

RESHAK, AH., KAMARUDDIN, H., AULUCK, S., KITYK, IV., Bismuth in gallium arsenide: Structural and electronic properties of GaAs_{1-x}Bi_x alloys, *J. Sol. Sta. Che.*, 186:47-53, 2012.

RINKE, P., WINKELNKEMPER, M., QTEISH, A., BIMBERG, D., Neugebauer, J., Scheffler, M., Consistent set of band parameters for the group-III nitrides AlN, GaN, and InN, *Phys. Rev. B* 77:075202-15, 2008.

SITAR, Z., PAISLEY, MJ., RUAN, J., CHOYKE, JW., DAVIS, RF., Luminescence and lattice parameter of cubic gallium nitride, *J. Mater. Sci. Lett.*, 11:261-262, 1992.

SPRIK, M., HUTTER J., PARRINELLO M., Ab initio molecular dynamics simulation of liquid water: Comparison of three gradient-corrected density functionals, *J. Chem. Phys.*, 105:1142-115, 1996.

SRIVASTAVA, G. P., *The physics of phonons*. Adam Hilger: Bristol, 1990.

STIER, O., GRUNDMANN, M., BIMBERG, D., Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k·p theory, *Phys. Rev. B*, 59:5688-5701, 1999.

STOKES, HT., *Solid state physics*. Allyn & Bacon Inc.: Massachusetts, 1987.

SZABO, A., OSTLUND, NS., *Modern Quantum Chemistry* 1st ed, McGraw-Hill, New York, 43-44, 1989.

TAKEUCHI, K., ADACHI, S., OHTSUKA, K., Optical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloy, *J. Appl. Phys.*, 107:023306-11, 2010.

TALWAR, DN., SOFRANKO, D., MOONEY, C., TALLO, S., Elastic, structural, bonding, and defect properties of zinc-blende, *Mater. Sci. Eng B*, 90:269-277, 2002.

TAYLOR, JJ., ZAFIRATOS, CD, DUBSON, MA, *Modern Physics For Scientists and Engineers*, ISBN-10: 013805715X • ISBN-13: 9780138057152, Addison-Wesley, 2nd edition, 2003.

THOMAS, L. H., The calculation of atomic fields, *Proc. Cam. Phil. Soc.*, 23:542-550, 1927.

VEGARD, L., *Z. Phys.*, 5:17, 1921.

VURGAFTMAN, I., MEYER, JR, Band gap for III-V semiconductors, *J. Appl. Phys.*, 94:3675-3696, 2003.

WANG, CS., KLEIN, BM., KRAKAUER, H., Theory Of Magnetic And Structural Ordering In Iron, *Phys. Rev. Lett.*, 54:1852-1855, 1985.

WANG, SQ., YE, HQ., Plane-wave pseudopotential study on mechanical and electronic properties for IV and III-V crystalline phases with zinc-blende structure, *Phys. Rev. B*, 66:235111-7 2002.

WEI, SH., ZUNGER, A., Giant and Composition-Dependent Optical Bowing Coefficient in GaAsN Alloys, *Phys. Rev. Lett.*, 76:664-667, 1996.

WEYERS M., SATO M., Red Shift of Photoluminescence and Absorption in Dilute GaAsN Alloy Layers, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 31:L853-L855, 1992.

ÖZGEÇMİŞ

02.11.1985'te Diyarbakır'ın Çüngüş ilçesinde doğan Battal Gazi YALÇIN ilk, orta ve lise eğitimlerini İstanbul Güngören'de tamamladı. 2004'te Sakarya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nü kazandı. 2005'te çift anadal programıyla (ÇAP) aynı üniversite ve fakültede matematik bölümünü okumaya hak kazandı. 2008'de hem fizik hem de matematik bölümlerinden mezun oldu. 2008'de Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik anabilim dalında yüksek lisans eğitimine başladı. 06 Ocak 2009 tarihiyle Fizik anabilim dalında Araştırma Görevlisi oldu. 2010 Temmuz ayında evlendi. 2010 Eylül ayında aynı anabilim dalında doktora başladı. 2013 tarihinde üç ay Viyana Teknik Üniversitesi Malzeme Kimya Enstitüsü Hesaplamalı Kuantum Kimyası grubunda araştırmacı olarak bulundu. Halen Fizik bölümünde araştırma görevlisi olarak devam etmektedir.