

Si(001)-(1×2) YÜZEYİ ÜZERİNDE BOR OKSİT NANOTELLERİ

Nigar ALATA

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**EYLÜL 2009
ANKARA**

Nigar ALATA tarafından hazırlanan Si(001)-(1×2) YÜZEYİ ÜZERİNDE BOR OKSİT NANOTELLERİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Bora ALKAN

Fizik, Ankara Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

Fizik, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet ÇAKMAK

Fizik, Gazi Üniversitesi

Tarih: 02 / 09 / 2009

Bu tez ile G.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini onamıştır.

Prof. Dr. Nail ÜNSAL

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Nigar ALATA

Si(001)-(1×2) YÜZEYİ ÜZERİNDE BOR OKSİT NANOTELLERİ**(Yüksek Lisans Tezi)****Nigar ALATA****GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ****Eylül 2009****ÖZET**

Bu tez çalışmasında Si(001)-(1×2) yüzeyi üzerinde B₂O₃ nanotellerinin oluşumu yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) kullanılarak Castep bilgisayar programı ile araştırıldı. Oluşturulan 8 katmanlı temiz Si yüzeyi üzerine farklı sayıda B₂O₃ molekülü bırakılarak hesaplamalar tekrarlandı. Yüzey üzerine konulan B₂O₃ molekülünün, yüzey topolojisini etkilediği ve sonuç olarak yüzeydeki ve yüzeye yakın Si atomlarının arasındaki bağ uzunluklarını değiştirdiği tespit edildi. Yüzeye eklenen iki (B₂O₃) ve üç (B₂O₃) molekülünün yüzeyi bir (B₂O₃) moleküle göre daha fazla değiştirdiği görüldü. Yüzeye bir molekül tutunduğunda, temiz yüzeyde oluşan Si – Si bağlarının kırılmamasına rağmen iki ve üç molekül tutunduğunda, Si – Si bağlarının kırıldığı gözlemlendi. Ayrıca, bir moleküle yüzeyde B₂O₃ nanoteli oluşmazken, iki ve üç molekül eklendiğinde nanotellerinin oluştuğu görüldü.

Bilim Kodu : 202.1.075
Anahtar Kelimeler : Si yüzeyleri, bor, nanoteller, yoğunluk fonksiyon teorisi
Sayfa Adedi : 50
Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

BORON OXIDE NANOWIRES ON THE Si (001)-(1×2) SURFACE**(M. Sc. Thesis)****Nigar ALATA****GAZİ UNIVERSITY****INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY****September 2009****ABSTRACT**

Using the local density approximation (LDA), Boron oxide (B_2O_3) nanowires on Si (001)-(1×2) surface are investigated with Castep program. The Si surface with 8 layers was constructed and then B_2O_3 was left on this surface in different numbers. Adding B_2O_3 on the surface affects the topology of the surface and the bonds of surface atoms, and also those of near the surface atoms, so changed locations of Si atoms and bond lengths. We showed that adding two B_2O_3 and three B_2O_3 have changed the surface more than that one B_2O_3 . When the single B_2O_3 molecule absorbed on the surface, Si-Si bonds on the clean surface do not break, they break in the case of two or three B_2O_3 molecules are absorbed. Additionally, while the single B_2O_3 molecule does not form a nanowire on the surface, two or tree B_2O_3 molecules are forming shape of the nanowires.

Science Code : 202.1.075**Key Words : Si surfaces, boron, nanowires, density functional theory****Page Number: 50****Adviser : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK**

TEŐEKKÜR

Tez alıőmam süresince beni engin bilgileriyle yönlendiren, maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen kıymetli danışman hocam Prof. Dr. Mehmet ŐİMŐEK' e teőekkürlerimi sunarım. Ayrıca her konuda ilgi ve desteęini eksik etmeyen, benimle bilgisini paylaşan sayın hocam Sezgin AYDIN' a teőekkür ederim.

Yüksek lisans eęitimim süresince bana her türlü desteęi saęlayan, her zaman inanan, güvenen aileme ve eőim Osman ALATA' ya sonsuz teőekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xiii
1. GİRİŞ	1
2. NANOTEKNOLOJİNİN ÖNEMİ VE UYGULAMA ALANLARI.....	3
2.1. Nanoteknoloji Açısından Bor Atomu ve Önemi	5
3. YARIİLETKEN YÜZEY-MOLEKÜL ETKİLEŞMESİ.....	8
3.1. Silisyum Yüzeyleri	10
3.2. Si(001)-(1×2) Yüzeyi	13
3.3. Bor Oksidin Yapısal Özellikleri	14
4. YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ.....	15
4.1. Castep Paket Programı	19
5. TEORİK HESAPLAMALAR.....	22
5.1. 8 Katmanlı Si(001)-(1×2) Yüzeyi	22
5.2. Si(001)-(1×2) Yüzeyinde Bir B ₂ O ₃ Durumu.....	27
5.3. Si(001)-(1×2) Yüzeyinde İki B ₂ O ₃ Durumu	34
5.4. Si(001)-(1×2) Yüzeyinde Üç B ₂ O ₃ Durumu	39

	Sayfa
6. SONUÇ VE TARTIŞMA	47
KAYNAKLAR	48
ÖZGEÇMİŞ	50

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Bor elementinin atomik özellikleri	6
Çizelge 2.2. Bor elementinin fiziksel özellikleri.....	6
Çizelge 2.3. Bor elementinin kimyasal özellikleri.....	7
Çizelge 5.1. Si birim hücrenin birim örgü parametreleri	23
Çizelge 5.2. Si birim hücreinde optimizasyon öncesi ve optimizasyon sonrası atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı.....	23
Çizelge 5.3. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinde optimizasyon öncesi ve optimizasyon sonrası atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı.....	25
Çizelge 5.4. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin birim örgü parametreleri	26
Çizelge 5.5. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin yasak enerji aralığı	26
Çizelge 5.6. B ₂ O ₃ molekülünün optimizasyondan önce ve sonra bazı atomları arası uzaklıkları ve açıları.....	27
Çizelge 5.7. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B ₂ O ₃ bırakıldığında bazı atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı	30
Çizelge 5.8. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B ₂ O ₃ katkısında yapının toplam enerjisi ve bağlanma enerjisi ile yasak enerji aralığı	30
Çizelge 5.9. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B ₂ O ₃ katkısında Mulliken popülasyonları.....	33
Çizelge 5.10. Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B ₂ O ₃ bırakıldığında bazı atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı	35
Çizelge 5.11. Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B ₂ O ₃ katkısında yapının toplam enerjisi ve bağlanma enerjisi ile yasak enerji aralığı	35
Çizelge 5.12. Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B ₂ O ₃ katkısında Mulliken popülasyonları.....	37
Çizelge 5.13. Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B ₂ O ₃ bırakıldığında bazı atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı	40

Çizelge	Sayfa
Çizelge 5.14. Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B ₂ O ₃ katkısında yapının toplam enerjisi ve bağlanma enerjisi ile yasak enerji aralığı	40
Çizelge 5.15. Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B ₂ O ₃ katkısında Mulliken popülasyonları	42
Çizelge 5.16. B ₂ O ₃ -I, B ₂ O ₃ -II, B ₂ O ₃ -III yüzeylerindeki Si-Si ve molekül atomları arasındaki bağ uzunlukları(Å).....	45
Çizelge 5.17. B ₂ O ₃ -I, B ₂ O ₃ -II, B ₂ O ₃ -III yüzeylerindeki bazı açılar(°).....	45
Çizelge 5.18. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir, iki, üç B ₂ O ₃ durumları için Mulliken popülasyonlarının karşılaştırılması.....	46

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Bor'un kristal yapısı.....	5
Şekil 3.1. İletken, yarıiletken, yalıtkan maddeler için bant enerji seviyeleri a) İletken, b) Yarıiletken, c) Yalıtkan	8
Şekil 3.2. Si(001) yüzeyi.....	11
Şekil 3.3. Si(111) yüzeyi.....	11
Şekil 3.4. Si(113) yüzeyi.....	12
Şekil 3.5. Si(331) yüzeyi.....	13
Şekil 3.6. Si(001)-(1×2) yüzeyinin yandan ve üstten görünüşü.....	13
Şekil 5.1. Si kristalinin birim hücresi.....	22
Şekil 5.2. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyi	23
Şekil 5.3. Atomları etiketlenmiş 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyi	24
Şekil 5.4. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı, a) Durum yoğunluğu, b) Bant yapısı	26
Şekil 5.5. Vakum ortamında bor oksit molekülü	27
Şekil 5.6. B ₂ O ₃ molekülünün durum yoğunluğu.....	28
Şekil 5.7. Atomları etiketlenmiş B ₂ O ₃ -I yüzeyi. 1(B ₂ O ₃) molekülü ve tutunduğu Si(1×2) yüzeyi.....	29
Şekil 5.8. Si(001)-(1×2) yüzeyine bir B ₂ O ₃ molekülü göndermeden önce ve gönderdikten sonra yapıda meydana gelen değişiklikler, a) Bir B ₂ O ₃ molekülünün durum yoğunluğu, b) 8 katmanlı Si yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı, c) Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir durum B ₂ O ₃ için yoğunluğu ve bant yapısı.....	31
Şekil 5.9. B ₂ O ₃ -I yüzeyi için elektron yoğunluk haritası	33
Şekil 5.10. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B ₂ O ₃ durumu	34
Şekil 5.11. Atomları etiketlenmiş B ₂ O ₃ -II yüzeyi. 2(B ₂ O ₃) molekülü ve tutunduğu Si(1×2) yüzeyi.....	34

Şekil	Sayfa
Şekil 5.12. Si(001)-(1×2) yüzeyine iki B ₂ O ₃ molekülü göndermeden önce ve gönderdikten sonra yapıda meydana gelen değişiklikler, a) İki B ₂ O ₃ molekülünün durum yoğunluğu, b) 8 katmanlı Si yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı, c) Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B ₂ O ₃ için durum yoğunluğu ve bant yapısı	36
Şekil 5.13. B ₂ O ₃ -II yüzeyi için elektron yoğunluk haritası	38
Şekil 5.14. Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B ₂ O ₃ durumu	38
Şekil 5.15. Atomları etiketlenmiş B ₂ O ₃ -III yüzeyi. 3(B ₂ O ₃) molekülü ve tutunduğu Si(1×2) yüzeyi.....	39
Şekil 5.16. Si(001)-(1×2) yüzeyine üç B ₂ O ₃ molekülü göndermeden önce ve gönderdikten sonra yapıda meydana gelen değişiklikler, a) Üç B ₂ O ₃ molekülünün durum yoğunluğu, b) 8 katmanlı Si yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı, c) Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B ₂ O ₃ için durum yoğunluğu ve bant yapısı	41
Şekil 5.17. B ₂ O ₃ -III yüzeyi için elektron yoğunluk haritası	43
Şekil 5.18. Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B ₂ O ₃ durumu	43
Şekil 5.19. Temiz Si(001)-(1×2) yüzeyi ve Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir, iki, üç B ₂ O ₃ durumu karşılaştırması, a) Temiz Si(001)-(1×2) yüzeyi, b) Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B ₂ O ₃ durumu, c) Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B ₂ O ₃ durumu, d) Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B ₂ O ₃ durumu.....	44

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler

Açıklama

Å	Angstrom
E_g	Yasak enerji aralığı
eV	Elektron volt
B	Bor
B_2O_3	Bor oksit
GPa	Giga Pascal
Si	Silisyum

Kısaltmalar

Açıklama

CASTEP	Cambridge Serial Total Energy Package
CVD	Chemical Vapor Deposition
DFT	Yoğunluk Fonksiyon Teorisi
E_t	Molekülün toplam enerjisi
E_{xc}	Değiş tokuş ve korelasyon enerjisi
FTIR	Fourier Transform Infrared
GGA	Genelleştirilmiş Eğim Yaklaşımı
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
SEM	Scanning Electron Microscope
TEM	Tunneling Electron Microscope
XRD	X-Ray Diffraction
V	Potansiyel enerji

1. GİRİŞ

Çeşitli malzemelerin ve yapıların moleküler düzeyde oluşturulması ve şekillendirilmesi biçiminde tanımlayabileceğimiz nanoteknoloji her geçen yıl daha fazla uygulama alanı bulmakta ve daha fazla ilgi görmektedir. Feynman'ın tanımına göre nanoteknoloji, katı ortam içinde atomları tek tek, istenen bir düzene göre yerleştirme sanatıdır [1].

Nanoteknoloji aygıt fiziği, malzeme bilimi, elektronik, kimya, biyoloji, tıp gibi birçok alanı kapsayan disiplinler arası bir bilim dalıdır. Maddeler nano boyutta farklı özellikler gösterdikleri için, günümüzde bilim adamları değişik malzemelerin nano boyuttaki özelliklerini teorik ve deneysel olarak araştırıp insanlık yararına sunmaya çalışmaktadır [1].

Ümit ediyoruz ki önümüzdeki yıllarda nanoteknoloji sayesinde insan vücudunda hastalıklı dokuyu bulup iyileştiren, ameliyat yapabilen nano robotlar geliştirilecek, insan beyninin kapasitesi nano hafızalarla güçlendirilebilecektir. Ayrıca daha hafif ve işlevselliği yüksek malzeme oluşturma çalışmalarında, birim ağırlık başına şu andakinden 50 kat daha hafif ve dayanıklı malzemeler üretilebilecektir [2].

Günümüzde kullanılan elektronik aletlerin boyutlarının küçülmesiyle birlikte nanoteknolojinin bir uygulama alanı olan yüzey fiziği de büyük önem kazanmıştır [3]. Yüzey özelliklerinin incelenmesi ile yüzeylerin yapısal ve pürüzlülük gibi temel özellikleri belirlenebilmekte, böylece yüzey fiziğinin teknolojideki kullanım sahasının belirlenmesinde büyük fayda sağlanmaktadır. Bu bağlamda yabancı atomların kontrollü bir şekilde yüzeyde biriktirilmesiyle yarıiletken yüzeylerin yapısal ve elektronik karakteristiklerini değiştirmek mümkündür. Yüzeyde biriken veya yüzeye tutunan tek tek atomlar veya atom grupları (moleküller), yüzeyin elektronik durumlarının karakterini değiştirebilir ve temiz yüzeyden farklı özelliklere sahip yeni fazlar oluşturabilirler [4].

Yang ve ark.(2005)' nin yapmış olduđu deneysel çalışmada Si üzerinde bor oksit nanotellerinin oluşumu CVD metodu ile araştırılmış, nanotellerin XRD, Raman, FTIR spektrumu ve oluşan nanotellerin SEM, TEM görünümleri verilmiştir [5].

Bu çalışmada da bor oksidin farklı sayılarda Si(001)-(1×2) yüzeyine nasıl tutunduđu teorik yöntemlerle çalışıldı. Bor oksit nanotellerinin Si(001)-(1×2) yüzeyinde nasıl şekillendiği gösterildi. Yüzey geometrisi tanımlanıp, bağ uzunlukları ve atomlar arası açılar gibi yapısal parametreler tayin edildi. Yüzeyin elektronik karakteristiklerini tanımlamak için durum yoğunlukları ve bant yapıları araştırıldı. Si yüzeyi ve bor oksit arasındaki kimyasal bağların türünü belirlemek için de elektron yoğunluk haritaları çizildi ve mulliken popülasyonları hesaplandı.

Çalışmanın 2. bölümünde nanoteknolojinin önemi ve uygulama alanları ile nanoteknoloji açısından bor atomu ve öneminden bahsedildi. Bor oksidin Si yüzeyi üzerinde şekillenmesi incelendiği için 3. bölümde yarıiletken yüzey-molekül etkileşiminden söz edildi, Si yüzey yapılarına değinildi. Ayrıca çalışmada kullandığımız Si(001)-(1×2) yüzeyi ve bor oksidin yapısal özellikleri açıklandı. 4. bölümde, yoğunluk fonksiyon teorisi ve bu çalışmaları yaparken kullandığımız teorik yöntemden bahsedilerek 5. bölümde hesaplamalara geçildi. Son olarak elde ettiğimiz sonuçlar yorumlandı.

2. NANOTEKNOLOJİNİN ÖNEMİ VE UYGULAMA ALANLARI

Çok çeşitli alanlarda hızla hayatımıza giren nanoteknoloji, maddeyi atomik ve moleküler seviyede kontrol etme bilimidir. Nano boyutta elementlerin davranışı değişmektedir. Alüminyum gibi kararlı maddeler nano boyutta kararsız hale geçerken, iletken olmayan elementler iletken olmakta, altın gibi oda sıcaklığında katı olan maddeler sıvı hale geçmektedir. Yine normal şartlarda kararlı bir element olan altın nano boyutta güçlü bir kimyasal katalizör olarak görev yapmaktadır [1].

Nano boyuttaki elementler güneş pili olarak kullanılmakta (silikon güneş pilleri), ayrıca yüzey uygulamalarında da kullanılabilir. Nanoteknolojide kullanılan karbon nanotüpleri ve çeşitli nano parçacıklar gibi materyallerin çoğu arayüz ve koloit biliminin ilerlemesine fırsat vermiştir [1].

Nanobilim ve nanoteknoloji çok çeşitli alanlarda hızla yaşamımıza girmektedir. Bu etki bilişim ve haberleşmeden başlayıp, savunma sanayi, uzay ve uçak teknolojileri, moleküler biyoloji ve gen mühendisliğine kadar uzanmaktadır [6].

Nanoteknolojinin uygulama alanlarını şöyle sıralayabiliriz [6] :

- Moleküler elektronik ve nano elektronik,
- Nanorobotlar,
- Süperplastik malzemeler,
- Kaplamalar,
- Manyetik uygulamalar,
- Katalizör ve hidrojen depolama malzemeleri (Suryanarayana ve Koch, 1999).

Son yıllarda en önemli tıbbi problemlerden birisi de vücuttaki kanserli hücrelerin sağlıklı dokulara zarar vermeden yok edilemeyiştir. Kemoterapi, kanserli hücreleri yok ederken sağlıklı dokulara da zarar vermekte, uygulanan yöntemlerin yan etkilerden dolayı çok büyük rahatsızlıklar duyulmaktadır. Ulusal Nanoteknoloji

Araştırma Merkezi (UNAM) nanobiyoteknoloji grubundan Yrd. Dç. Dr. İhsan Gürsel ve meslektaşları tarafından geliştirilen bir yöntemle hem kanserli dokular tamamen öldürülmekte hem de bağışıklık sistemi uzun süre alarında kalabilmektedir. Nanometre boyutlarındaki kesecikler içerisine yerleştirilen bazı nükleik asitler, bağışıklık sistemini alarma geçirip kanserli dokuları ortadan kaldırmaktadır [7].

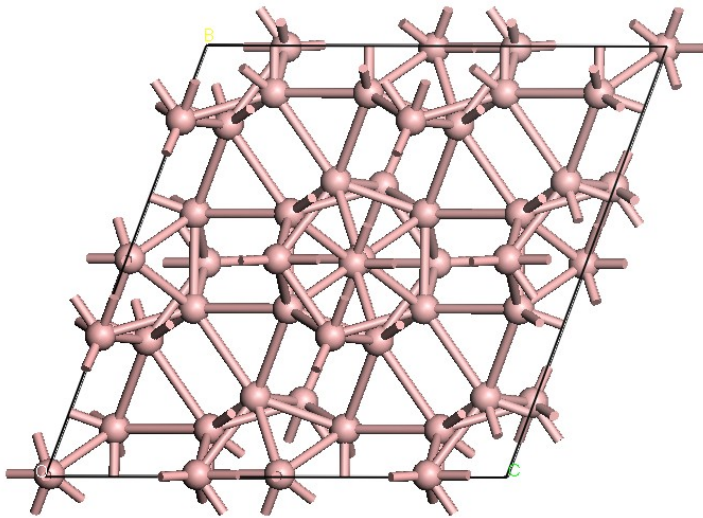
Yine savunma sanayisinde asker kayıplarının azaltılabilmesi için akıllı üniformaların üretilmesi düşünülmektedir. ABD' nin Boston şehrinde 2000 yılında hayata geçirilen MIT Askeri Nanoteknoloji Enstitüsü, 15 yıl içerisinde askeri üniformaları nanoteknoloji sayesinde akıllı hale getirmeyi planlamaktadır. Esnek ve yıkanabilen nanosensörlerin ve aygıtların kumaş içerisine yerleştirilmesiyle üniformalar artık görece, duyacak, hissedecek, komut verecek enerji üretecek hale gelecektir. Buradaki önemli nokta nanoaygıtların boyutlarının çok küçük olması sebebiyle elbiseyi giyene herhangi bir zorluk getirmemesidir. Başka önemli bir konu da nanoteknoloji tabanlı sensörlerdir. Bir şarbon mikrobu askerin vücuduna girdiğinde kısa süre içerisinde tedavi edilmezse ölüme neden olabilir. Ortamda çok az sayıda bulunan şarbon mikrobunun tespit edilmesi son derece zor olmasına rağmen bu ultra duyarlı nanosensörler tek molekülü bile algılayabilmekte ve tehlike karşısında önlem alınabilmektedir [7].

Günümüzün en önemli küresel sorunlarından birisi hiç kuşkusuz hızla artan enerji-yakıt tüketimidir. Kısa sürede çözüm bulunamazsa, 50 yıl içerisinde yeryüzündeki doğal kaynakların tükenmesi beklenmektedir. Bu nedenle gelişmiş ülkelerde yeni enerji kaynakları üzerine yapılan araştırmalara ciddi destekler verilmektedir. Bu çalışmalar içerisinde en önemlisi hidrojen enerjisidir; hidrojenin yüksek yoğunlukta ve güvenli bir şekilde depolanmasıdır. Prof. Dr. Salim Çıracı ve araştırma grubunun ABD' de Dr. Taner Yıldırım(NIST) ile birlikte yaptıkları çalışmalarda geçiş elementleri (Pt, Pd, Ti, V, ...) ile işlevleştirilen nanotüpler ve moleküllere çok yüksek kapasitede hidrojen depolanabileceğini göstermeleri geleceğin yeni enerji kaynakları ve katalizörleri için büyük ümit vermiştir [7].

2.1. Nanoteknoloji Açısından Bor Atomu ve Önemi

Periyodik sistemin III A grubunda yer alan bor, bu grubun diğer üyeleri metal olmasına rağmen metalle ametal arası yarı iletken özelliklere sahip bir elementtir. “B” simgesi ile gösterilen, atom numarası 5, atom ağırlığı 10,81 g/mol olan bor genellikle doğada tek başına değil, başka elementlerle bileşikler halinde bulunur [8]. Tabiatta yaklaşık 230 çeşit bor minerali vardır ve bunlardan biri de bor oksittir. Bor madenlerinin değeri genellikle içindeki B_2O_3 (bor oksit) ile ölçülmekte, yüksek oranda B_2O_3 içeriğine sahip olanlar daha değerli kabul edilmektedir [8].

Çeşitli metal ve ametal elementlerle yaptığı bileşiklerin gösterdiği farklı özellikler, endüstride birçok bor bileşiğinin kullanılmasına olanak sağlamaktadır. Bor, bileşiklerinde metal dışı bileşikler gibi davranır, ancak saf bor, karbon gibi elektrik iletkenidir. Kristalize bor görünüm ve optik özellikleri açısından elmasa benzer. Bor elmastan sonra en sert elementtir (Mohs ölçeğine göre 9,3) ve yine elmastan sonra ametaller arasında elektropozitifliği en yüksek olan elementtir. Borun oda sıcaklığında elektrik iletkenliği zayıftır, fakat yüksek sıcaklıklarda elektrik iletkenliği oldukça yüksektir [9]. Bor, karbon ve silisyum elementlerine benzerliği en fazla olan ve oksijene karşı duyarlılığı çok yüksek olan bir elementtir. Şekil 2.1’ de borun kristal yapısı verilmektedir [10].



Şekil 2.1. Borun kristal yapısı [10]

Bor elementinin atomik özellikleri Çizelge 2.1’ de, fiziksel özellikleri Çizelge 2.2’ de, kimyasal özellikleri Çizelge 2.3’ de verilmektedir [9].

Çizelge 2.1. Bor elementinin atomik özellikleri [9]

Atom çapı	1,17 Å
Atomik hacmi	4,6 cm ³ /mol
Kristal yapısı	Rhombohedral
Elektron konfigürasyonu	1s ² 2s ² p ¹
İyonik çapı	0,23 Å
Elektron sayısı (yüksüz)	5
Nötron sayısı	6
Proton sayısı	5
Valans elektronları	2s ² p ¹

Çizelge 2.2. Bor elementinin fiziksel özellikleri [9]

Atomik kütlesi	10,811	
Kaynama noktası	4275 K; 4002 °C	
Termal genleşme katsayısı	0,0000083 cm/°C (0°C’de)	
Kondüktivite	Elektriksel	1,0 E ⁻¹² 10 ⁶ /cm Ω
	Termal	0,274 W/cmK
Yoğunluk	2,34 g/cc (300K’ de)	
Görünüş	Sarı-Kahverengi ametal kristal	
Elastik modülü	Bulk: 220/GPa	
Sertlik	Mohs	9,3
	Vickers	49000 MN m ⁻²
Buharlaşma ısısı	489,7 kJ/mol	
Ergime noktası	2573 K; 2300 °C	
Molar hacmi	4,68 cm ³ /mole	
Fiziksel durumu	Katı (20 °C ve 1atm’ de)	

Çizelge 2.3. Bor elementinin kimyasal özellikleri [9]

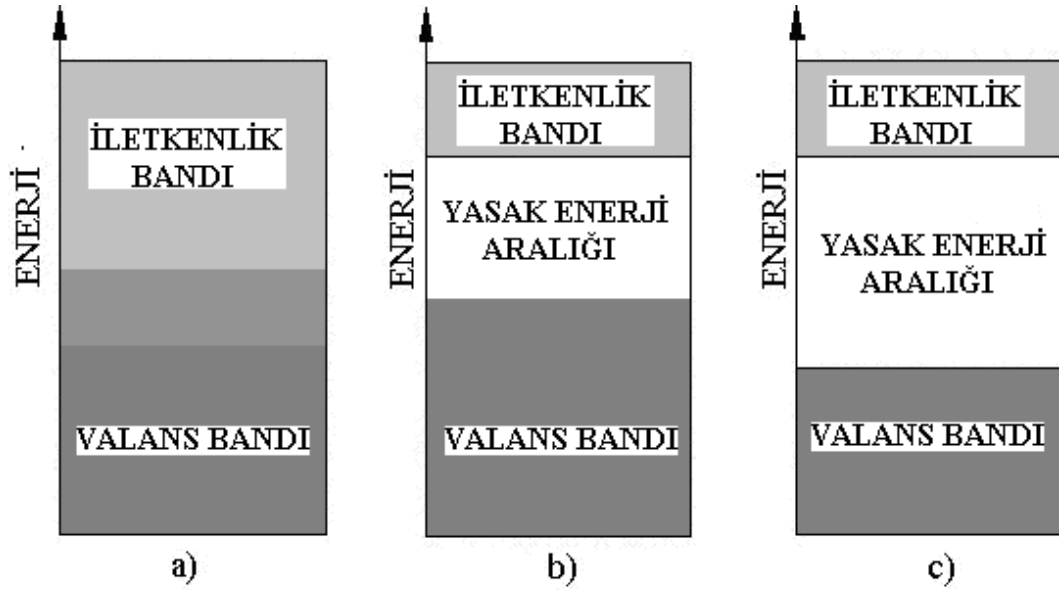
Elektronegativite (Pauling)		2,04
İyonizasyon potansiyeli	Birinci	8,298
	İkinci	25,154
	Üçüncü	37,93
Valans elektron potansiyeli (-eV)		190

Borun kullanım alanları oldukça fazladır. Başlıklar halinde değinecek olursak cam sanayi, seramik sanayi, nükleer sanayi, askeri ve zırhlı araçlar, elektrik-elektronik ve bilgisayar sanayi, iletişim araçları, enerji sektörü, otomobil sanayi, tekstil sektörü, ilaç ve kozmetik sanayi, tıp, kimya sanayi, temizleme ve beyazlatma sanayi, tarım sektörü, kağıt sanayi, koruyucu, mıknatıslar, fotoğrafçılık, kompozit malzemeler, spor malzemeleri, manyetik cihazlar, mumyalama vs. [9].

Bor yaygın olarak silikon merkezli p-tipi dopant yarıiletken teknolojisinde kullanılır, araştırmacılar yeni silikon merkezli aygıtların dizaynında bu elementin silikon kristali içerisindeki olağandışı özelliklerine odaklanmaktadırlar [11]. Silikon (Si); çok çalışılmış, elektronik yetenekleri sayesinde günlük yaşantıda karşımıza çıkan, her alanda kullanılan yarı iletken bir malzemedir. Silikon yapılar içerisindeki bor ve bor bileşikleri malzeme bilimi ve yarıiletken teknolojisinde önemli bir yer teşkil etmektedir [12]. Bu tür teorik araştırmaların sonuçları deneysel çalışmalar için oldukça faydalı olacaktır.

3. YARIİLETKEN YÜZEY-MOLEKÜL ETKİLEŞMESİ

Teknolojide yaygın olarak kullanılan yarıiletkenler iletkenlik bakımından iletkenler ile yalıtkanlar arasında yer almakta olup, normal halde yalıtkanlardır. Ancak ısı, ışık ve magnetik etki altında bırakıldığında veya gerilim uygulandığında bir miktar değerlik elektronu serbest hale geçer, yani iletkenlik özelliği kazanırlar. Yarıiletken katılarda dolu olan enerji bandına, valans bandı (değerlik bandı) ve değerlik bandının üzerindeki boş olan banda da iletkenlik bandı denir. Metallerde valans bandı ile iletkenlik bandı kısmen üst üste binmiştir. Yarıiletkenlerde ise bu bantlar yasak enerji aralığı denilen bir enerji aralığı ile birbirinden ayrılır. Yalıtkanlarda bu aralık daha da fazladır. Yasak enerji aralığı E_g ile gösterilir.



Şekil 3.1. İletken, yarıiletken, yalıtkan maddeler için bant enerji seviyeleri, a) İletken, b) Yarıiletken, c) Yalıtkan maddeler için bant enerji seviyeleri

Yarıiletkenlerde E_g değerleri genel olarak 1eV ile 4eV arasında değişir [13]. Elektronlar, yasak enerji bölgesini geçecek şekilde uyarıldığında, valans bandının tepesi civarında boşluklar bırakarak iletkenlik bandının tabanına geçerler. Boşluk ve elektronun her ikisi de elektrik alandan etkilendiği için elektriksel iletkenliğe katkıda bulunurlar. Sıcaklığın yükselmesiyle elektron ve boşlukların sayısı hızla artar ve bu, yarıiletkenlerin önemli bir özelliği olan iletkenliğin sıcaklıkla büyümesini açıklar

[13]. Mutlak sıfır sıcaklığında (0 K), yarıiletkenlerin değerlik bandı tamamen dolu veya boştur. Elektronik bant yapısı tamamen dolu veya boş olduğunda elektrik akımı oluşturamaz ve yalıtkan olurlar [13].

Farklı türde yarıiletkenler vardır; elementsel yarıiletkenler, bileşik yarıiletkenler, alaşım yarıiletkenler vs. Si gibi aynı atomdan oluşan yarıiletkenler “elementsel yarıiletkenler” dir. Bu atomlar kovalent bağlarla birbirine bağlanmışlardır [13]. Kovalent bağda her bir atom bir elektronu en yakın bir komşuyla paylaşarak kuvvetli bir bağ oluşturur.

Modern yüzey biliminin başlangıcı “yüzey bilimi” olarak kullanılması 1960’ ların başlarına uzanmaktadır. Bugüne kadar yüzey olayları ile ilgili birçok çalışma yapılmış ve birçok teorik kavram gelişmiştir. Vakum teknolojisindeki ilerleme, yüzey analitik tekniklerinin gelişmesi, yüksek hızda çalışan dijital bilgisayarların görünümündeki gelişme bu bilim dalına bağlı gelişmelerdir. Modern yüzey bilimi ile ilgili en belirgin özellik kristal yüzeyleri ile ilgilenmesidir [3].

Yüzey bilimi deneyleri ultra yüksek vakum ortamında yürütülür. Vakum altında bir kristalin yüzeyinin, hacim içindeki yapıdan oldukça farklı olduğu bilinmektedir. Katı-vakum ve katı-buhar arayüzleri vardır. Katı yüzeylerden bahsederken genel olarak kristal tabakalarının en tepesindeki birkaç atomdan bahsedilir. Bu 10 Å’ luk bir bölgedir ve kristal hacminden oldukça farklı yapısal ve elektronik dizilimi vardır. Bununla birlikte yüzey daha dipteki tabakalardan etkilenir [3].

Yüzey biliminin çalışmaları atomik yapı temiz yüzeyi ile başlar. Temiz yüzeylerin atomik yapı bilgisi çok önemlidir. Yüzeylerin çoğunda, özellikle de yarıiletkenlerde hacim içindeki atomik yönelimler değişebilir. Yarıiletkenlerde dangling bağların yüksek yüzey yoğunluğuna sahip oluşundan dolayı kristalin son hali durgun değildir. Bu sebeple yüzeylerdeki yeniden yapılanma çoğu kez yarıiletkenlerde olur [3].

Yarıiletken yüzeylerin yeniden yapılanması yıllardır aktif olarak araştırılmaktadır ve yarıiletken nanoyapıların ortaya çıkmasıyla muazzam bir önem kazanmıştır [14].

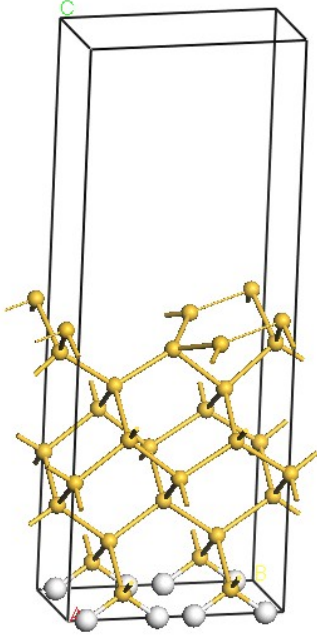
Yeniden yapılanmada yüzeyde kırılan bağlar yeniden oluşur ve dangling bağlar ile bağlanırlar. Dangling bağlar yüzey atomlarının yeniden düzenlenmesine ve yeniden yapılanmasına neden olurlar. Bu genellikle çok karışık atomik yapılarda olur. Bilinen yüzey yeniden yapılanmalarına rağmen çoğu kez elementel yapı blokları karşımıza çıkar. Bu yapı blokları yalnızca yüzeyi daha iyi anlamamızı sağlamakla kalmaz, yeni yapısal modellerin dikkatle hazırlanmasına kılavuzluk eder [15].

3.1. Silisyum Yüzeyleri

Silisyum yeryüzünde en çok bulunan ve kullanım alanı en geniş olan elementlerden bir tanesidir. Silisyumun keşfi 1824 yılında Berzelius tarafından gerçekleştirilmiştir. Atom numarası 14, atom ağırlığı 28,0855 g/mol olan element “Si” simgesiyle gösterilmektedir. Erime noktası 1410,0°C (1683,15K), kaynama noktası 2355,0°C (2628,15K)’ dir. 4A grubunda yer almakta olup oda sıcaklığında katı haldedir [16]. Yüksek sıcaklıklarda çalışma koşullarına çok dayanıklı bir elementtir. Camın hammaddesi kumdur ve kumda da yüksek oranda silisyum bulunmaktadır. Aşırı saf silisyum, bor, galyum, fosfor veya arsenik ile güçlendirilerek; transistörler ve mikroçipler gibi elektronik endüstrisinde büyük önem taşıyan aygıtların yapımında kullanılmaktadır [17]. Yarıiletken özelliğe sahip oluşu ve doğada çok bulunması, kullanım alanının genişlemesini sağlamıştır.

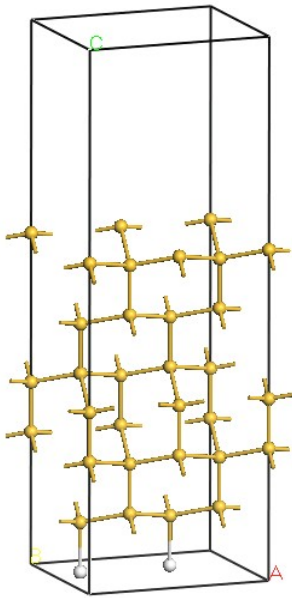
Yüzey yapısı genellikle iki boyutta periyodik olur. Bu, tüm atomların bir düzlemde yer aldığı anlamına gelmez. Si(001), Si(111), Si(100), Si(113), Si(331) gibi Si yüzeyleri vardır.

Temiz Si(001) yüzeyinin düşük sıcaklıklarda $c(4 \times 2)$ ve $p(2 \times 2)$, oda sıcaklığında (1×2) yeniden yapılandığı bilinmektedir. (1×2) yeniden yapılanmış yüzey Si-Si bağlarının düzenlenmesiyle oluşur. Her bir yüzey atomu bir tane dangling bağ ile doyurulmuştur, bu (1×1) yüzeyinde enerji artışına yol açar. Si(001) yüzeyinde daha üst sıradaki yeniden yapılanma yüzey yük transferinden etkilenir, yüzey dimerleri bükülür ve (1×2) yüzeyi oluşur [18].



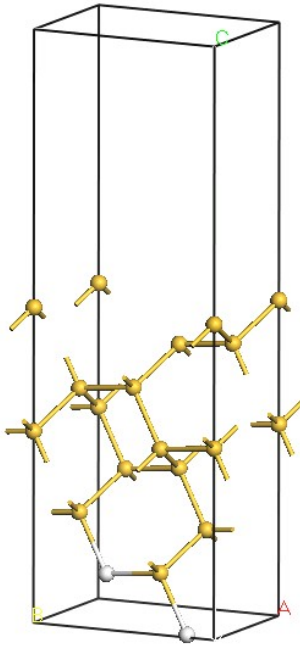
Şekil 3.2. Si(001) yüzeyi

Atomik yapıda temiz Si(111) yüzeyi iki türlü yeniden yapılanabilir: (2×1) ve (7×7) . (2×1) yüzeyinin yapısı (111) düzlemi boyunca uzanan Si kristalinin bölünmesiyle oluşur. (2×1) yüzeyi yarı kararlıdır, 400°C civarında (7×7) olarak yeniden yapılanır, bu yapılanma 850°C civarında durur [3].



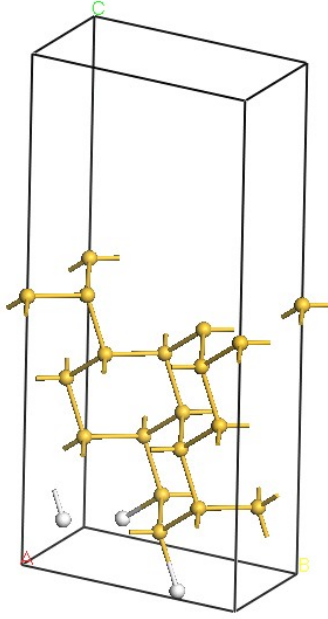
Şekil 3.3. Si(111) yüzeyi

Si yapıları üzerine ince nanoyapıların hazırlanması çalışması, Si yüksek-indisli yüzeylerinin çok ilginç anizotropik (eşyönsüzlük) özelliklerini ortaya çıkardı. Bir yüksek-indisli yüzey olarak, Si(113) yüzeyi yüksek sıcaklıkta sertleştirme süresi boyunca çok kararlıdır ve ince plastik kaplama oluşturmak için oldukça uygun bir yapıdır. Si(100) ve Si(113) yüzeylerini kıyaslarsak, Si(113) yüzeyi Ge nanotellerinin oluşması ve ultra ince filmlerin hazırlanması için daha uygundur. Si(113) yüzeyinin atomik özelliklerine gelince, Si yapıları arasında Si(113) kendine özgü ara yüz atomları içermesiyle oldukça tuhaftır ve bu özel yüzey yapıları uyarılabilir. Ge(113) ve Ge/Si(113) yüzeylerinde gözlenen yapısal özellik, (113) yüzeyinin özel yönelimine dayandırılır. Bulk-truncated (113) yüzeyi, (100) ve (111) yüzey atomları gibi bitmiş atom dizisinden meydana gelir, bir Si(113) yüzeyi üç blok şeklinde yeniden yapılanabilir: adatoms, tetramers ve interstitial pentamers. Oda sıcaklığında bu bloklar yüzeyde (3×2) periyodisitede düzenlenir, belirli sıcaklıkta her tetramer bir interstitial atomla birleşebilir ve yüzey (3×1) periyodisitede görünür. Bu ilave self-interstitial atomlar (3×1) yeniden yapılanma sırasında yüzey enerjisini artırır çünkü bu atomlar ekstra gerilmeye sebep olur. Bu nedenle self-interstitial yerleşimler Si'den daha kısa bağlı yabancı atomların dope edilmesi için avantajlı olabilir [19].



Şekil 3.4. Si(113) yüzeyi

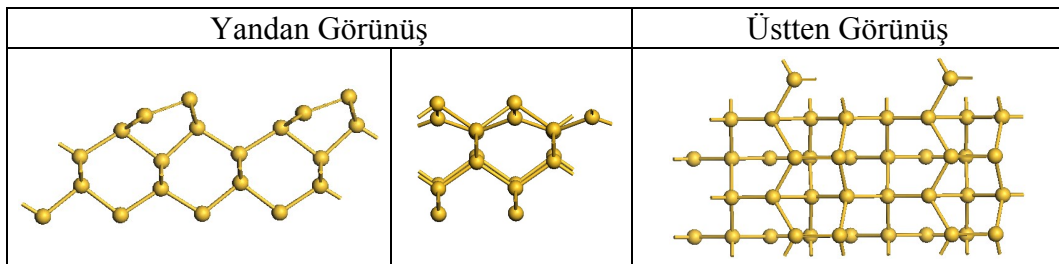
Si(331), (111) den (110) yönüne doğru 22^0 açı ile yerleşir, önemli bir yüzeydir, (111) ve (110) arasında kararlı bir yeniden yapılanma ile düzlemsel silikon yüzeyine yerleşmiştir [20].



Şekil 3.5. Si(331) yüzeyi

3.2. Si(001)-(1×2) Yüzeyi

İdeal Si(001)-(1×1) yüzeyinde en üstteki atomlar bir kare örgü şeklindedir, her atom 2 tane yardımcı yüzey atomu ile bağlanır ve her atom yardımcı yüzey atomlarına iki tane bağ ile tutunmuştur. Yeniden yapılanmış Si yüzeyinde ise, yani Si(001)-(1×2) yüzeyinde, yüzey atomları çiftli bağlanırlar, böylece dangling bağların sayısı yarıya iner. Dimerler düzenli bir şekilde sıralanır ve yüzey 1×2 yapıya sahip olur [3].



Şekil 3.6. Si(001)-(1×2) yüzeyinin yandan ve üstten görünüşü

3.3. Bor Oksidin Yapısal Özellikleri

Yaygın uygulama alanı bulunan kristal formdaki bor oksit değişik kaynaklarda ametal olarak geçmektedir; bizim metodumuzda da bor oksidin metal özelliklere sahip olmadığı görülmektedir. Bor madenlerinin değeri genellikle içerdikleri B_2O_3 (bor oksit) ile ölçülmektedir. Bor oksit'in erime noktası $450\text{ }^{\circ}C$, kaynama noktası $2250\text{ }^{\circ}C$ ' dir. Genellikle borik asidin (H_3BO_3) sudan arındırılmasıyla hazırlanır. Borik asidin yaklaşık %43' ünün su olmasından dolayı susuz gerçekleştirilen üretimlerde borik asit, bor oksit kaynağı olarak kullanılır. Zaten, bor oksit de yaygın olarak susuz borik asit olarak adlandırılmaktadır. Ayrıca, borik asidin orto, meta gibi formları mevcut olup kararsız bir yapıya sahiptir. Bu yüzden içerdiği sudan arındırılarak yani bor oksit olarak kullanımı tercih edilmektedir [21]. Susuz borik asidin B_2O_3 oranı %100, H_2O oranı %0,0 iken borik asit (H_3BO_3)' in B_2O_3 oranı %56,4, H_2O oranı %43,6' dır [21].

Bor oksit seramik ve cam endüstrisinde önemli bir yer teşkil etmektedir. Camın ısıyla genişmesini önemli ölçüde indirmediği, camın asitle etkileşmesine ve çizilmeye karşı koruduğu titreşim, yüksek ısı ve ısı şoklarına karşı dayanıklılığı sağladığı için ısıya dayanıklı cam gereçleri ile elektronik ve uzay araştırmalarında kullanılacak üstün nitelikli camların üretiminde önemli bir yeri vardır [22]. Emayede bor oksit, emayelerin deforme olmaya karşı gösterdiği direnci(viskozitesini) ve doyunlaşma ısını azaltması sebebiyle %20' ye kadar kullanılabilir. Emaye asite karşı dayanıklılığı artırdığı için mutfak aletlerinin çoğu, banyolar, kimya sanayi teçhizatı, su tankları, silahlar v.b. emaye ile kaplanmaktadır [23].

4. YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ

Hohenberg ve Kohn tarafından sunulan bir teoremlle başlayan (1964) ve daha sonra Levy tarafından genelleştirilen (1979) yoğunluk fonksiyonu teorisi, bütün taban durum özelliklerinin yük yoğunluğunun (ρ) fonksiyonelleri olduğu ifade eder [24]. Özel olarak, toplam enerji E_t

$$E_t[\rho] = T[\rho] + U[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (4.1)$$

olarak yazılabilir. Burada $T[\rho]$, ρ yoğunluklu etkileşmeyen parçacıkların kinetik enerjisidir, $U[\rho]$ Coulomb etkileşmelerinden kaynaklanan klasik elektrostatik enerjidir ve $E_{xc}[\rho]$, özellikle değiş-tokuş ve korelasyon enerjileri olmak üzere toplam enerjiye yapılan bütün çok-parçacık katkılarını içerir [24].

Yük yoğunluğunu dalga fonksiyonu Ψ ' den yapılandırırız, diğer moleküler orbital metodlarında olduğu gibi (Roothaan, 1951; Slater, 1972; Dewar, 1983), dalga fonksiyonu tek-parçacık orbitallerinin (moleküler orbitallerin, MO) anti-simetrikleştirilmiş çarpımı (Slater determinanı) olarak alınır [24]:

$$\Psi = A(n) |\phi_1(1)\phi_2(2)\dots\phi_n(n)| \quad (4.2)$$

Moleküler orbitaller ortonormal olduğunda,

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (4.3)$$

dır. Yük yoğunluğu şu şekilde basit bir toplamla verilir:

$$\rho(r) = \sum_i |\phi_i(r)|^2 \quad (4.4)$$

Burada toplam bütün işgal edilen ϕ_i moleküler orbitalleri üzerinden alınır. Bu ifadeden elde edilen yoğunluk yük yoğunluğu olarak da bilinir. Moleküler orbitaller spin-yukarı (alfa) veya spin-aşağı (beta) elektronlarla işgal edilebilirler. Alfa ve beta elektronların her ikisi için aynı ϕ_i ' nin kullanılması spin-sınırlamalı; farklı ϕ_i ' lerin kullanılması spin-sınırlamasız veya spin polarize hesaplama olarak bilinir. Sınırlamasız durumda, iki farklı yük yoğunluğu oluşturmak mümkündür: alfa moleküler orbitaller için bir tane ve beta moleküler orbitaller için bir tane. Bunların toplamı toplam yük yoğunluğunu verir ve aralarındaki fark spin yoğunluğunu verir. Bu sınırlamalı ve sınırlamasız Hartree-Fock hesaplamalarına benzer (Pople ve Nesbet, 1954) [24].

Toplam enerjinin Bileşenleri

Dalga fonksiyonlarından ve yük yoğunluğundan, enerjinin bileşenleri atomik birimler cinsinden aşağıdaki gibi yazılabilir [24]:

$$T = \left\langle \sum_i \phi_i \left| -\frac{\nabla^2}{2} \right| \phi_i \right\rangle \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} U &= \sum_i^n \sum_\alpha^N \langle \phi_i(r) | -\frac{Z}{R_\alpha - r} | \phi_i(r) \rangle + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \langle \phi_i(r_1) \phi_j(r_2) | \frac{1}{r_1 - r_2} | \phi_i(r_1) \phi_j(r_2) \rangle \\ &\quad + \sum_\alpha^N \sum_{\beta < \alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \\ &= -\sum_\alpha^N \left\langle \rho(r_1) \frac{Z_\alpha}{|R_\alpha - r_1|} \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle \rho(r_1) \rho(r_2) \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right\rangle + \sum_\alpha^N \sum_{\beta < \alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \\ &= \langle -\rho(r_1) V_N \rangle + \left\langle \rho(r_1) \frac{V_e(r_1)}{2} \right\rangle + V_{NN} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Burada Z_α , N-atomlu sistemde α -çekirdeği üzerindeki yüküdür. İlk terim ρV_N , elektron-çekirdek çekimini temsil eder. İkinci terim $\rho V_e / 2$, elektron-elektron itmesini temsil eder. Son terim V_{NN} , çekirdek-çekirdek itmesidir [24].

Değiş-tokuş korelasyon enerjisinin yaklaştırılması

Değiş-tokuş korelasyon enerjisi (Eş. 4.1'deki son terim) bu metodun hesapsal olarak çözülebilmesi için bazı yaklaşımlar gerektirir. Basit ve şaşırtıcı derecede iyi bir yaklaşım yerel yoğunluk yaklaşımıdır, bu yaklaşım düzgün elektron gazının değiş-tokuş korelasyon enerjisini baz alır (Hedin ve Lundqvist, 1971; Ceperley ve Alder, 1980; Lundqvist ve March, 1983). Analitik temsiller çeşitli araştırmacılar tarafından yapılmıştır: (Hedin ve Lundqvist, 1971; Ceperley ve Alder, 1980; von Barth ve Hedin, 1972; Vosko ve ark. 1980; Perdew ve Wang, 1992). Yerel yoğunluk yaklaşımı, bir molekülün her bir bölgesinde, yük yoğunluğunun atomik ölçekte yavaşça değiştiğini varsayar. Toplam değiş-tokuş korelasyon enerjisi düzgün elektron gazının integre edilmesiyle elde edilebilir:

$$\varepsilon_{xc}[\rho] \cong \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] dr \quad (4.7)$$

burada $\varepsilon_{xc}[\rho]$, düzgün elektron gazında parçacık başına değiş-tokuş korelasyon enerjisidir ve ρ parçacık sayısıdır [24].

Yaygın spin-yoğunluk fonksiyonelleri

Değiş-tokuş korelasyon potansiyelinin en basit formu Slater (1951) tarafından türetilen formdur, $\varepsilon_{xc}[\rho] = \rho^{1/3}$. Bu yaklaşımda korelasyon yoktur. Daha gelişmiş yaklaşımlar Vosko ve arkadaşları (1980), (VWN); Von Barth ve Hedin (BH); Janak, Morruzi ve Williams (JMW); Perdew ve Wang (PW) tarafından türetilen formları kullanırlar [24].

Yoğunluğun gradyent açılımı

Yerel spin-yoğunluğu (LSD) modelini geliştirmedeki bir sonraki adım elektron gazının homojen olmadığını dikkate almaktır, elektron gazının homojen olmaması herhangi bir moleküler sistemde doğal olarak meydana gelebilir. Bu, yoğunluk

gradyent açılımı ile başarılabilir, bazen yerel-olmayan spin-yoğunluk yaklaşımı (NLSD) olarak anılır. Son birkaç yıldan beri, moleküler süreçlerin termokimyasını araştırmak için gradyent düzeltmeli değiş-tokuş korelasyon enerjisinin $E_{xc}[\rho, d(\rho)/dr]$ gerekli olduğu belgelendi (Ziegler, 1991; Labanowski ve Andzelm, 1991; Politzer ve Seminario, 1995) [24].

Yaygın olarak kullanılan NLSD fonksiyonelleri, korelasyon fonksiyoneli için Perdew ve Wang' ın (PW) genelleştirilmiş gradyent yaklaşımını; Becke' nin (B) gradyent düzeltmeli değiş-tokuş fonksiyoneli içerirler; ve Lee, Yang, Parr' ın (LYP) gradyent düzeltmeli korelasyon fonksiyoneli kullanılabilir [24].

Toplam enerji ifadesi

Toplam enerji aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$E_t[\rho] = \left\langle \sum_i \phi_i \left| -\frac{\nabla^2}{2} \right| \phi_i \right\rangle + \left\langle \rho(r_1) \left[\varepsilon_{xc}[\rho(r_1)] + \frac{V_e(r_1)}{2} - V_N \right] \right\rangle + V_{NN} \quad (4.8)$$

Asıl enerjiyi belirlemek için, E_t ' deki değişimler ρ ' daki değişimlere göre optimize edilmek zorundadır ve Eş. 4.2' deki ortonormallik sınırlamalarına maruz kalır (Kohn ve Sham, 1965) [24].

$$\frac{\delta E_t}{\delta \rho} - \sum_i \sum_j \varepsilon_{ij} \langle \phi_i | \phi_j \rangle = 0 \quad (4.9)$$

burada ε_{ij} Lagrange çarpanlarıdır [24].

4.1. Castep Paket Programı

Castep materyal biliminde kuantum mekaniksel temel ilkelerden hareketle hesap yapan, yoğunluk fonksiyon teorisine dayanan önemli yazılımlardan biridir. Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramı (Density Functional Theory - DFT) elektronların uzaydaki konumuna bağlı yoğunluğunun oluşturduğu yapıdır. 80' lerin sonu ile 90' larda oldukça yoğun kullanılmaya başlamıştır. Castep; Cambridge Sequential Total Energy Package' ın kısaltılmasıdır ve Cambridge Üniversitesi teorik yoğun madde grubu tarafından geliştirilmiştir. Castep ilgili sistemin elektronik durumları için kuantum mekanik denklemleri kullanarak, toplam enerji (pseudo potansiyel) hesaplamaları yapar. Bu hesaplamalar ilgili sistem için taban durum enerjisini, yük yoğunluğu ve toplam enerjiyle ilgili büyüklükleri (örgü sabitleri, elastik sabitler, geometrik yapı, bağlanma enerjisi vb.) verir. Castep programının materyal biliminde, moleküller, katıhal ve yüzey problemleri ile ilgili hesaplamalarda geniş bir kullanım alanı vardır [24].

Bu alanda yapılan çalışmalar şöyle sıralanabilir;

- Yarı-iletkenler; yüzey özellikleri ve bulk özellikleri
- Metaller; yüzey özellikleri ve bulk özellikleri
- Genel yüzey özellikleri
- Elektronik yapı (bant yapıları ve durum yoğunluğu)
- Malzemelerin optik özellikleri
- Malzemelerin nokta kusurlarının özellikleri (boşluklar, interstitials and substitutional impurities)
- Sıcaklığa bağımlı çalışmalar
- Moleküller ve moleküler kristaller
- Sistemin dalga fonksiyonunun ve yük yoğunluğunun 3 boyutlu gösterimi

Castep, süper hücre denilen periyodik olarak tekrarlı birim hücrelerden hesap yapar. Programa giriş verileri sadece ilgili atomların numarası ve başlangıç geometrisidir. Bu metotta pseudo potansiyelleri kullanılmaktadır ki bu potansiyel sadece valans elektronlarında etkin olan bir potansiyeldir. Elektronik dalga fonksiyonu düzlem dalga temel setleri cinsinden yazılmıştır ve elektron-elektron etkileşmeleri, yoğunluk fonksiyonu teorisi kullanılarak pseudo potansiyellerinin ve düzlem dalganın birlikte kullanımı, sistemdeki atomlar üzerinde etkin olan atomların hesabında oldukça kolaylık sağlar [24].

Elektronik yapısındaki karışıklık nedeniyle toplam enerji hesaplamalarını metallere uygulamak, yarıiletken ve yalıtkanlara uygulamaktan daha zordur. Ancak Castep' te kullanılan metotlar ile metaller üzerindeki hesaplamalar kolaylaştırılmıştır.

Bu çalışmadaki bütün hesaplamalar *ab initio* yöntemi ile, CASTEP [25] paket programı kullanılarak ve Ultrasoft Sözdde Potansiyelleri kullanılarak yerel yoğunluk yaklaşımı(LDA) ile gerçekleştirilmiştir.

LDA yaklaşımında bir sistemde elektron yoğunluğu sabit kabul edilir. Elektron yoğunluğu yerel olarak değişmekte ise nonlocal ya da yerel olmayan yoğunluk yaklaşımı (Nonlocal Gradient Approximation, NLGA) veya genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (Genaralized Dradient Approximation, GGA) denir [24].

Castep' te yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak; bir molekülün ve malzemenin fiziksel büyüklükleri hesaplanmaktadır. Toplam enerji;

$$E_t(\rho) = \sum_i \langle \Phi_i + \left| \frac{\nabla^2}{2} \right| \Phi_i \rangle + \langle \rho(r_1) \left[E_{xc}[\rho(r_1)] + \frac{V_e(r_1)}{2} - V_N \right] \rangle + V_{NN} \quad (4.10)$$

ifadesi ile hesaplanır. Enerjinin koordinata göre birinci türevi bize sisteme etki eden kuvveti verir ($F = -dE / dR$). Tüm kuvvetler sıfır olduğunda bu bize sistemin dengede olduğunu gösterir. Dolayısıyla enerjinin birinci türevinden sistem geometrisi elde edilir. Buna geometrik optimizasyonu denir [24].

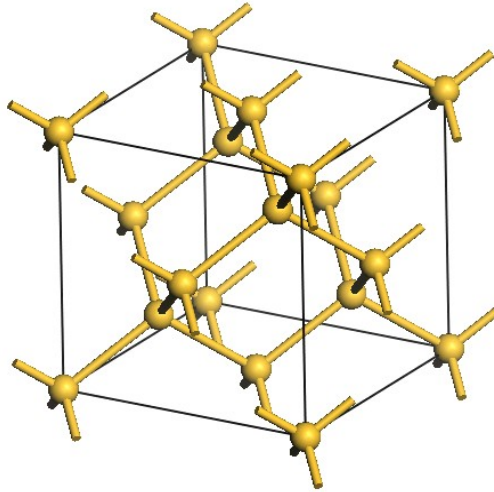
Optimize edilmiş geometride sistemin elektronik, yapısal ve titreşimsel özellikleri hesaplanabilir. Bunlar bant yapıları, durum yoğunluğu, optik özellikleri, fonon dispersiyonu, fonon durum yoğunluğu, nüfuslama analizi, gerilim tensörü olarak sıralanabilir [24].

5. TEORİK HESAPLAMALAR

Hesaplamalarımız Castep paket programı ile gerçekleştirildi. Çalışmamızda Ultrasoft Vanderbilt pseudopotansiyelleri kullanıldı ve değiş tokuş korelasyon terimleri LDA (Local Density Approximation) yaklaşımı ile temsil edildi. Si(001)-(1×2) yüzeyi üzerine B₂O₃ nanotelleri oluşturulması hesaplamaları yapılırken düzlem dalga kesilim enerji değeri 340 eV seçildi. Si kristali için Brillouin bölge örnekleme 6×6×6 Monkhorst Pack şeması kullanılarak gerçekleştirildi, burada ilgilenilen (001) yüzeyi için 7×3×1' dir. Geometri optimizasyonunda Brodyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) minimizasyon şeması kullanıldı. Geometri optimizasyonu için tolerans değerleri şu şekilde ayarlandı; 5×10⁻⁶ eV/atom toplam enerji değişimi, 5×10⁻⁴ Å maksimum iyonik yer değiştirme ve 0,02 GPa maksimum basınç değişimi.

5.1. 8 Katmanlı Si(001)-(1×2) Yüzeyi

Çalışmamızda ilk olarak 8 katmanlı Si yüzeyi oluşturmak için Si elmas yapısının birim hücresi alındı ve optimize edildi. Si birim hücresi Şekil 5.1' de verilmektedir. Uzay grubu (227) FD-3M, kristal sistemi kübiktir. Optimizasyon öncesinde ve sonrasında birim hücrenin birim örgü parametreleri Çizelge 5.1' de, Si atomları arasındaki açılar ve uzaklıklar ise Çizelge 5.2' de verildi (Tüm Si atomları arasındaki açılar aynı olduğu için çizelgede yalnızca bir tanesi verildi).



Şekil 5.1. Si kristalinin birim hücresi

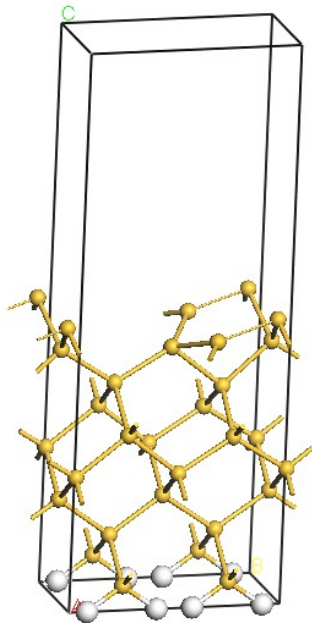
Çizelge 5.1. Si birim hücresinin birim örgü parametreleri

Si birim hücresi	a (Å)	A
Optimizasyon öncesi	5,43	90,0
Optimizasyon sonrası	5,37	90,0

Çizelge 5.2. Si birim hücresinde optimizasyon öncesi ve optimizasyon sonrası atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı

Si birim hücresi	Si ₁ -Si ₂ (Å)	Si ₂ -Si ₃ (Å)	Si ₃ -Si ₄ (Å)	Si ₄ -Si ₅ (Å)	Si ₅ -Si ₆ (Å)	Bükülme açısı(°)
Optimizasyon öncesi	2,35	2,35	2,35	2,35	2,35	109,47
Optimizasyon sonrası	2,32	2,32	2,32	2,32	2,32	109,47

Si birim hücresinin optimizasyonundan sonra bu yapı ile 10 Å' luk vakum ortamında 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyi kuruldu ve yüzey optimize edildi. Şekil 5.2' de gösterildi. Uzay grubu (1) P1, kristal sistemi triklinikdir.

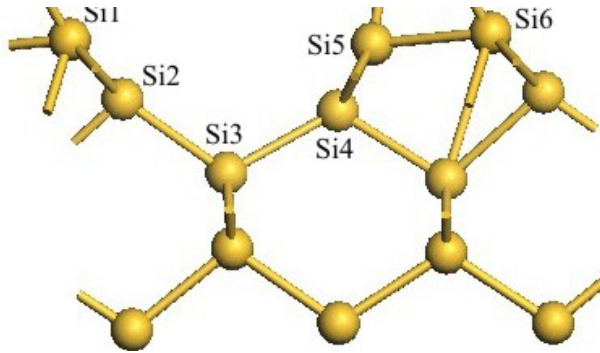


Şekil 5.2. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyi

Optimizasyondan sonra 8 katmanlı Si(001) yüzeyindeki Si atom çiftlerinin(Si₅-Si₆) bükülme açısı 18,81 derece ve aralarındaki bağ uzunluğu (Si₅-Si₆ arasındaki uzaklık) ise 2,26 Å olarak ölçüldü (Söz konusu açı dimer tilt açısı olarak ta adlandırılır).

(1×2) yeniden yapılanmış yüzey Si-Si bağlarının düzenlenmesiyle oluşur. Her bir yüzey atomu bir tane dangling bağ ile doyurulmuştur, bu (1×1) yüzeyinde enerji artışına yol açar. Si(001) yüzeyinde daha üst sıradaki yeniden yapılanma yüzey yük transferinden etkilenir, yüzey dimerleri bükülür ve (1×2) yüzeyi oluşur. Yani bir dimerden diğerine karakteristik yük transferinden dolayı dimer bükülür ve yüzey yeniden yapılanır [18].

Şekil 5.3' te atomları etiketlenmiş 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinden bir kesit verildi.



Şekil 5.3. Atomları etiketlenmiş 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin en üst üç katmanı

Optimizasyon öncesi ve sonrası atomlar arası mesafeler ve yüzey açıları Çizelge 5.3' te verildi.

Çizelge 5.3. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinde optimizasyon öncesi, optimizasyon sonrası atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı

8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyi	Si ₁ -Si ₂ (Å)	Si ₂ -Si ₃ (Å)	Si ₃ -Si ₄ (Å)	Si ₄ -Si ₅ (Å)	Si ₅ -Si ₆ (Å)	Bükülme açısı(°)
Optimizasyon öncesi	2,49	2,32	2,32	2,56	2,20	7,52
Optimizasyon sonrası	2,35	2,35	2,35	2,29	2,26; 2,33 ¹	18,81; 18,9 ¹

Bütün bunlar yapılırken en dipteki Si atomları sabitlendi ve bütün yüzey hidrojen atomları ile etkisiz hale getirildi. Hidrojen çoğu zaman silikon türü yüzeyleri pasifize etmekte kullanılır ve yüzeyin yeniden yapılanmasında etkilidir [26].

10 Å' luk vakum bölgesi, periyodik sınır şartından dolayı yapının üst katmanı ile alt katmanı arasında olan etkileşmenin azalmasını sağlayacak kadar büyüktür. Ayrıca yapının en alt silikon katmanının hesaplama sırasında koordinatlarının sabitlenmesi ile bu alt yüzeyin yapılanmasının elektronik yapıya getireceği etkinin azaltılması amaçlanmaktadır.

8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin birim örgü parametreleri Çizelge 5.4' te verildi (Optimizasyondan önce ve optimizasyondan sonra aynıdır).

¹ [27] no'lu referansta verilen değerleri göstermektedir.

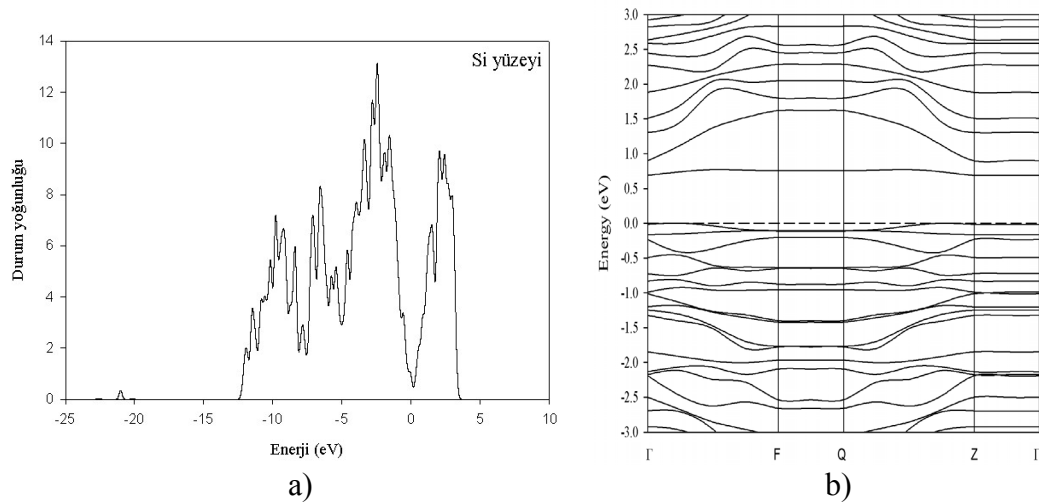
Çizelge 5.4. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin birim örgü parametreleri

8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyi	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
Si(001)-(1×2)	3,80	7,60	20,29	90,0	90,0	90,0

Çizelge 5.5. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin yasak enerji aralığı

8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyi	Yasak enerji aralığı(eV)
Si(001)-(1×2)	0,69

Optimizasyon sonucunda Si kristalinin bant genişliğinin(enerji aralığının) yaklaşık 0,69 eV civarında olduğu bulundu. Bu sonuç bize Si' un bir yarıiletken olduğunu göstermektedir. Şekil 5.4' te 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı verilmiştir.

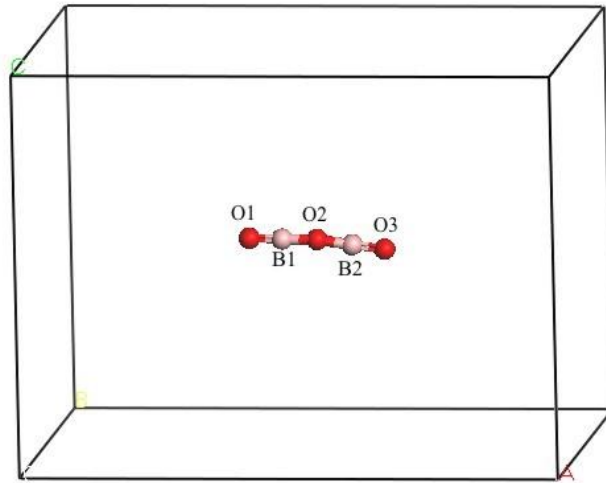


Şekil 5.4. 8 katmanlı Si(001)-(1×2) yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı, a) Durum yoğunluğu, b) Bant yapısı

5.2. Si(001)-(1×2) Yüzeyinde Bir B₂O₃ Durumu

Si(001)-(1×2) yüzeyine göndereceğimiz B₂O₃ molekülü ilk olarak vakum ortamında optimize edildi. 20×15×15 Å' luk bir vakum ortamı oluşturuldu. k-point set 1×1×1 kullanıldı. Çizelge 5.6' da B₂O₃ molekülünün yapısal parametreleri verildi.

Şekil 5.5' te vakum ortamında B₂O₃ molekülü gösterilmektedir. Optimizasyondan önce en soldaki O atomu(O₁) ile en sağdaki O atomu(O₃) arasındaki uzaklık 6,69 Å iken optimizasyondan sonra bu uzaklık 5,01 Å' dur. Neredeyse çizgisel bir yapıda oluşuma sahip olan molekülün optimizasyondan önce O₁-O₂-O₃ atomları arasındaki açı 174,40° iken optimizasyondan sonra 171,11° olarak ölçülmüştür.

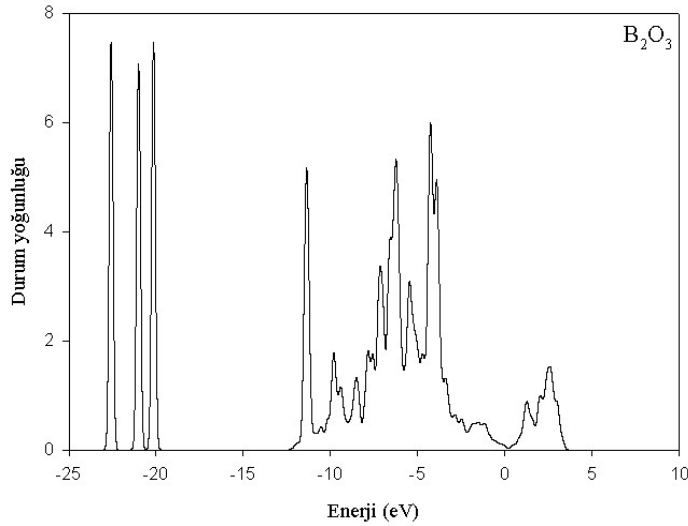


Şekil 5.5. Vakum ortamında bor oksit molekülü

Çizelge 5.6. B₂O₃ molekülünün optimizasyondan önce ve sonra bazı atomları arası uzaklıkları ve açıları

B ₂ O ₃ molekülü	O ₁ -B ₁ (Å)	B ₁ -O ₂ (Å)	O ₂ -B ₂ (Å)	B ₂ -O ₃ (Å)	O ₁ -O ₂ -O ₃ açısı(°)
Optimizasyon öncesi	1,61	1,73	1,73	1,61	174,40
Optimizasyon sonrası	1,21	1,30	1,30	1,21	171,11

Vakum ortamında optimize edilen B_2O_3 molekülünün bant yapısı ve durum yoğunluğu hesaplandı. Şekil 5.6' da B_2O_3 molekülünün durum yoğunluğu verildi ve bant genişliği 6,6 eV civarında bulundu. Bu sonuç bize B_2O_3 ' in iletken olmadığını göstermektedir.



Şekil 5.6. B_2O_3 molekülünün durum yoğunluğu

B_2O_3 molekülünün optimizasyonundan sonra Mulliken popülasyonu hesaplandı ve atomlar arası bağların türü hakkında yorum yapıldı. Pozitif ve negatif Mulliken bağ değerleri iki atom arasında bağlanmanın olduğunu veya olmadığını gösterir. Değer sıfıra yaklaştıkça iki atom arasında dikkate değer bir etkileşme yoktur. Bununla birlikte popülasyon değerleri pozitif yönde arttıkça kovalent bağlanma artar, sıfıra yaklaştıkça iyonik karakter ön plana çıkar [28]. B_2O_3 molekülünde hesaplamalar sonucunda O_1-B_1 atomları arası Mulliken popülasyonu ve B_2-O_3 atomları arası Mulliken popülasyonu 1,24; B_1-O_2 atomları arası Mulliken popülasyonu ve O_2-B_2 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,70 bulunmuştur. Bu değerlerden anlaşılacağı gibi B_1-O_2 ile O_2-B_2 atomları arası bağlar kovalentliğini korurken diğerlerine göre iyonik karakterleri artan bağlardır diyebiliriz. O_1-B_1 ve B_2-O_3 atomları arası bağlarda ise kovalentliğin arttığını söyleyebiliriz.

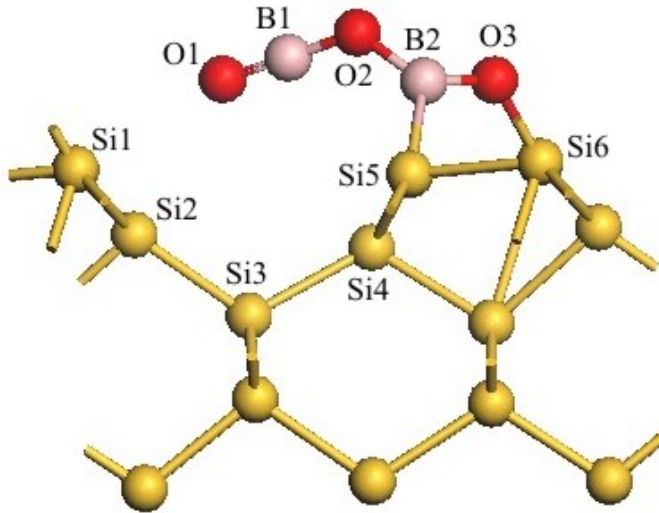
B_2O_3 molekülünün optimizasyonundan sonra Si yüzeyine bir B_2O_3 yüzeye paralel şekilde bırakılıp optimize edildi; bükülme açısı $4,06^\circ$ ve yüzeydeki 2 Si atomu

arasındaki uzaklık ($\text{Si}_5\text{-Si}_6$ arasındaki uzaklık) 2,34 Å olarak ölçüldü. Atomlar arası uzaklıklar ve özel olarak tanımlı yüzey açısı optimizasyondan önce ve optimizasyondan sonra ölçülerek, orijinal yapının ne kadar değiştiği belirlendi. Şekil 5.7' de atomları etiketlenmiş $\text{B}_2\text{O}_3\text{-I}$ yüzeyi verildi. Çizelge 5.7' de bazı atomlar arası uzaklıklar ve açılar verildi.

Ayrıca B_2O_3 molekülünün $\text{Si}(001)\text{-}(1 \times 2)$ yüzeyine tutunma (bağlanma) enerjisi şu formül ile hesaplandı:

$$E_B = E_T - (E_s + N E_{\text{molekül}}) \quad (1)$$

Burada E_B bağlanma enerjisini, E_T toplam enerjiyi, N molekül sayısını ve $E_{\text{molekül}}$ molekül enerjisini ifade etmektedir.



Şekil 5.7. Atomları etiketlenmiş $\text{B}_2\text{O}_3\text{-I}$ yüzeyi. 1(B_2O_3) molekülü ve tutunduğu $\text{Si}(1 \times 2)$ yüzeyi

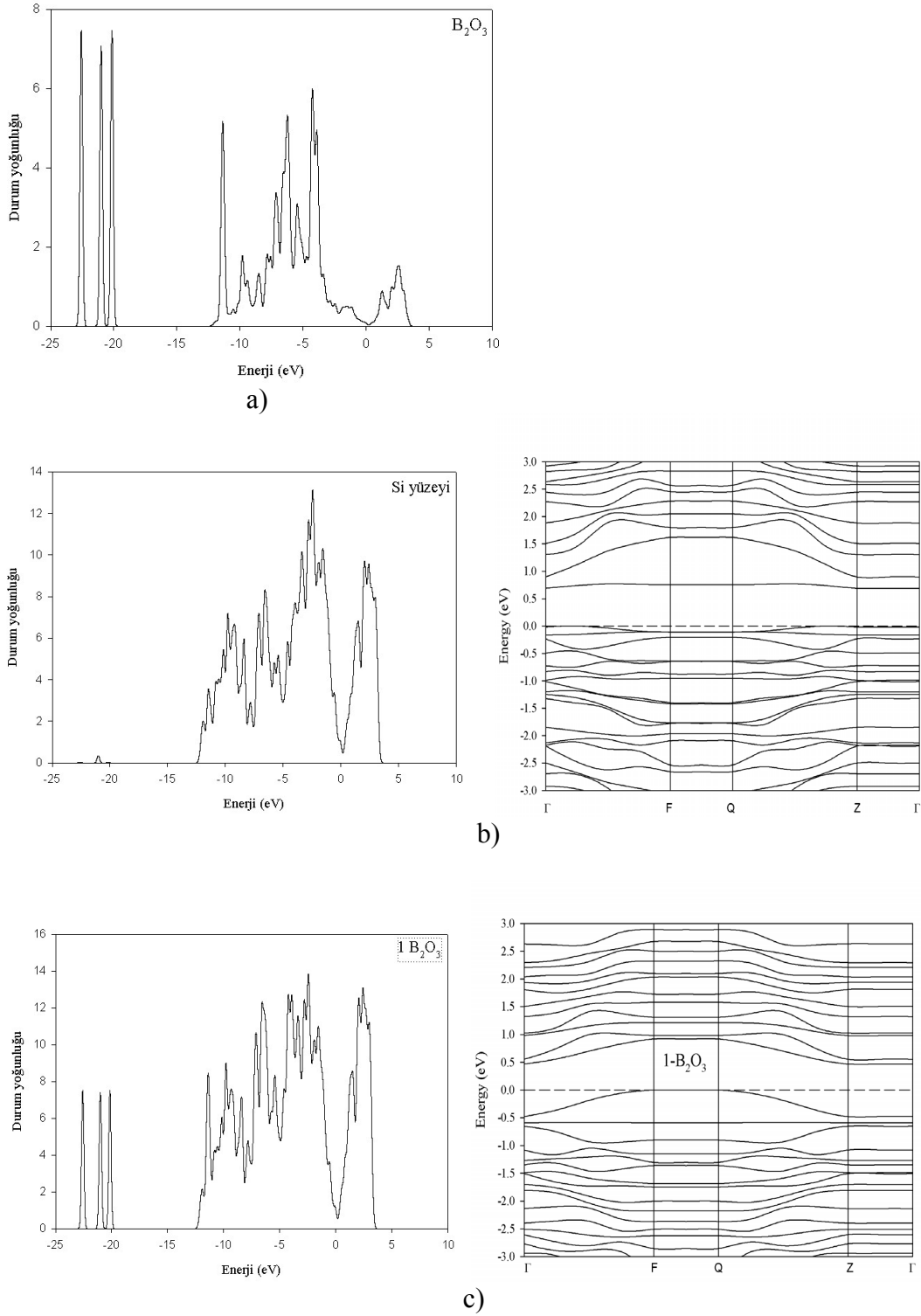
Çizelge 5.7. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B₂O₃ bırakıldığında bazı atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı

Yüzeyde bir B ₂ O ₃	Si ₁ -Si ₂ (Å)	Si ₃ -Si ₄ (Å)	Si ₅ -Si ₆ (Å)	B ₂ -Si ₅ (Å)	Si ₆ -O ₃ (Å)	B ₂ -O ₃ (Å)	Bükülme açısı(°)
Optimizasyon öncesi	2,35	2,35	2,26	2,28	2,10	1,35	18,81
Optimizasyon sonrası	2,49	2,31	2,33; 2,36 ¹	2,03	1,74	1,35	4,06; 18,1 ¹

Çizelge 5.8. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B₂O₃ katkısında yapının toplam enerjisi ve bağlanma enerjisi ile yasak enerji aralığı

Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B ₂ O ₃	E _n (eV)	E _b (eV)	Yasak enerji aralığı(eV)
	-3257,6	-1,8056	0,46

Yüzeye bırakılan tek B₂O₃ katkısında yapının bant genişliğinin 0,46 eV civarında olduğu görüldü. Yani tek B₂O₃ Si yüzeyinin bant genişliğini azalttı (daha önceki temiz yüzeyin 0,69 eV idi).



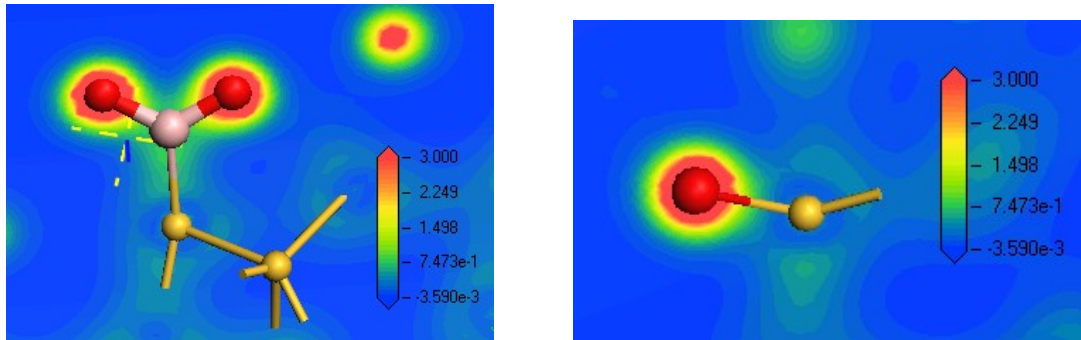
Şekil 5.8. Si(001)-(1x2) yüzeyine bir B_2O_3 molekülü göndermeden önce ve gönderdikten sonra yapıda meydana gelen değişiklikler, a) Bir B_2O_3 molekülünün durum yoğunluğu, b) 8 katmanlı Si yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı, c) Si(001)-(1x2) yüzeyinde bir B_2O_3 için durum yoğunluğu ve bant yapısı

Her birini diğeri ile karşılaştırmak için tüm yüzeylerin elektron durum yoğunlukları verildi. Kimyasal bağlarının türünü belirleyebilmek için elektron yoğunluk haritaları çıkarıldı. Şekil 5.9' da B_2O_3 -I yüzeyi için elektron yoğunluk haritası verilmiştir. Kimyasal bağlar ve bu bağların karakteristik özelliğinin araştırılmasında önemlidir. Eğer biz materyaldeki kimyasal bağların türünü biliyorsak, materyalin mekanik özelliği için bir şeyler söyleyebiliriz. Örneğin, materyal kovalent bağlar içeriyorsa (bunlar diğeri bağlara göre kuvvetlidirler), madde potansiyel sert bir yapıdadır. Fakat materyal iyonik veya metalik bağlar içeriyorsa potansiyel yumuşaktır, yani bağlar kuvvetli değildir [10]. Genellikle kovalent bağlar, iyonik ve/veya metalik bağlardan daha kuvvetlidir. Bu nedenle, B_2O_3 ve Si yüzeyi arasındaki kimyasal bağların türünü saptamak için B_2O_3 'in yüzeye tutunma enerjisi hakkında biraz bilgi verebiliriz. Bunun için teorik yöntem kullanılarak elektron yoğunluk haritaları elde edildi. Şekil 5.9' da görüldüğü gibi B_2O_3 -I yüzeyinde 2 bağ oluşmaktadır, Si-B ve Si-O bağları. B_2O_3 ile yüzey arasındaki bağlar baskın olarak kovalent karakterli, zayıf olarak da iyonik karakterlidir, özellikle de Si-O bağı zayıf kovalent karakterdedir.

Ayrıca bağların türüne daha kesin bir şekilde karar verebilmek için atomik popülasyonları da hesaplandı. Burada bir B_2O_3 molekülünü Si(001)-(1×2) yüzeyine bıraktıktan sonra B_2O_3 molekülünün atomları arası Mulliken popülasyonu, Si(001)-(1×2) yüzeyinin Mulliken popülasyonu ve B_2O_3 molekülü ile Si(001)-(1×2) yüzeyi arasındaki bağların Mulliken popülasyonu incelendi. O_1 - B_1 atomları arası Mulliken popülasyonu 1,22 ve B_2 - O_3 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,86; B_1 - O_2 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,82 ve O_2 - B_2 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,58 ise olarak ölçülmüştür. Görüldüğü gibi optimizasyon sonucunda baskın kovalent karakterli bağlar oluşmuştur. Bir B_2O_3 'in yüzeye bağlanması çok iyi değildir.

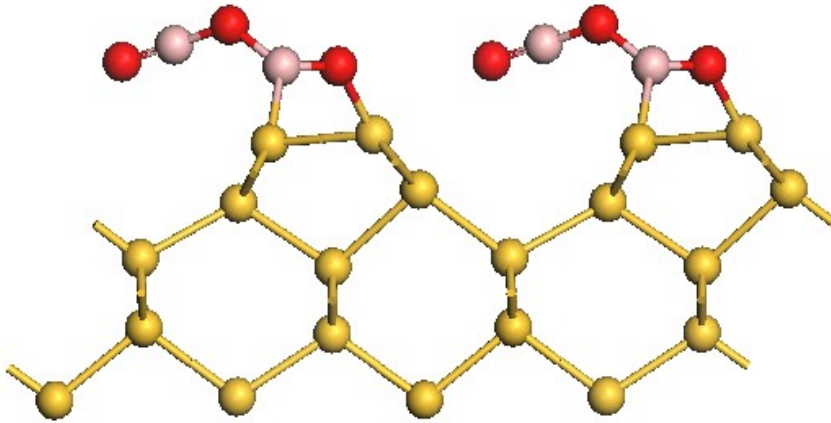
Çizelge 5.9. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B₂O₃ katkısında Mulliken popülasyonları

Bağlar (uzaklıklar)	Mulliken popülasyonları
O ₁ -B ₁ (1,23)	1,22
B ₂ -O ₃ (1,36)	0,86
B ₁ -O ₂ (1,30)	0,82
O ₂ -B ₂ (1,41)	0,58
Si ₁ -Si ₂ (2,50)	1,36
Si ₃ -Si ₄ (2,31)	0,67
Si ₅ -Si ₆ (2,34)	0,70
B ₂ -Si ₅ (2,04)	0,84
Si ₆ -O ₃ (1,75)	0,29



Şekil 5.9. B₂O₃-I yüzeyi için elektron yoğunluk haritası. Kırmızı bölgeler, yüksek elektron yoğunluğunu göstermektedir, mavi bölgeler ise düşük elektron yoğunluğunu göstermektedir veya elektron yoğunluğu olmayan bölgelerdir

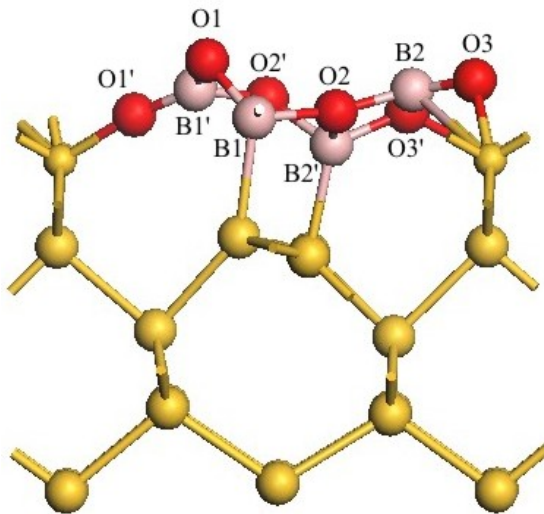
Sonuç olarak Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B₂O₃ in nanotel oluşturup oluşturmadığını Şekil 5.10' dan görebiliriz. Şekilde görüldüğü gibi B₂O₃ kristalleri Si yüzeyinde kesik kesik devam etmektedir, bu durumda bir B₂O₃' in Si yüzeyinde nanotel oluşturmadığını söyleyebiliriz.



Şekil 5.10. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B₂O₃ durumu

5.3. Si(001)-(1×2) Yüzeyinde İki B₂O₃ Durumu

Yüzeğe iki B₂O₃ gönderilip nanotel oluşumu araştırılırken de bir B₂O₃ durumundaki gibi yapı optimize edildikten sonra sonuçlar incelendi. (İki B₂O₃ yüzeğe paralel olarak bırakıldı). Bükülme açısı 26,85⁰ ve yüzeğdeki 2 Si atomu arasındaki uzaklık (Si₅-Si₆ arasındaki uzaklık) ise 3,71 Å olarak ölçüldü(bağ koıtu). Atomlar arası uzaklıklar ve özel olarak tanımlı yüzeğ açısı optimizasyondan önce ve optimizasyondan sonra ölçülerek, orijinal yapının ne kadar değıştiğı belirlendi. Şekil 5.11' de atomları etiketlenmiş B₂O₃-II yüzeği verildi. Çizelge 5.9' da bazı atomlar arası uzaklıklar ve açılar verildi.



Şekil 5.11. Atomları etiketlenmiş B₂O₃-II yüzeği. 2(B₂O₃) molekülü ve tutunduğı Si(1×2) yüzeği

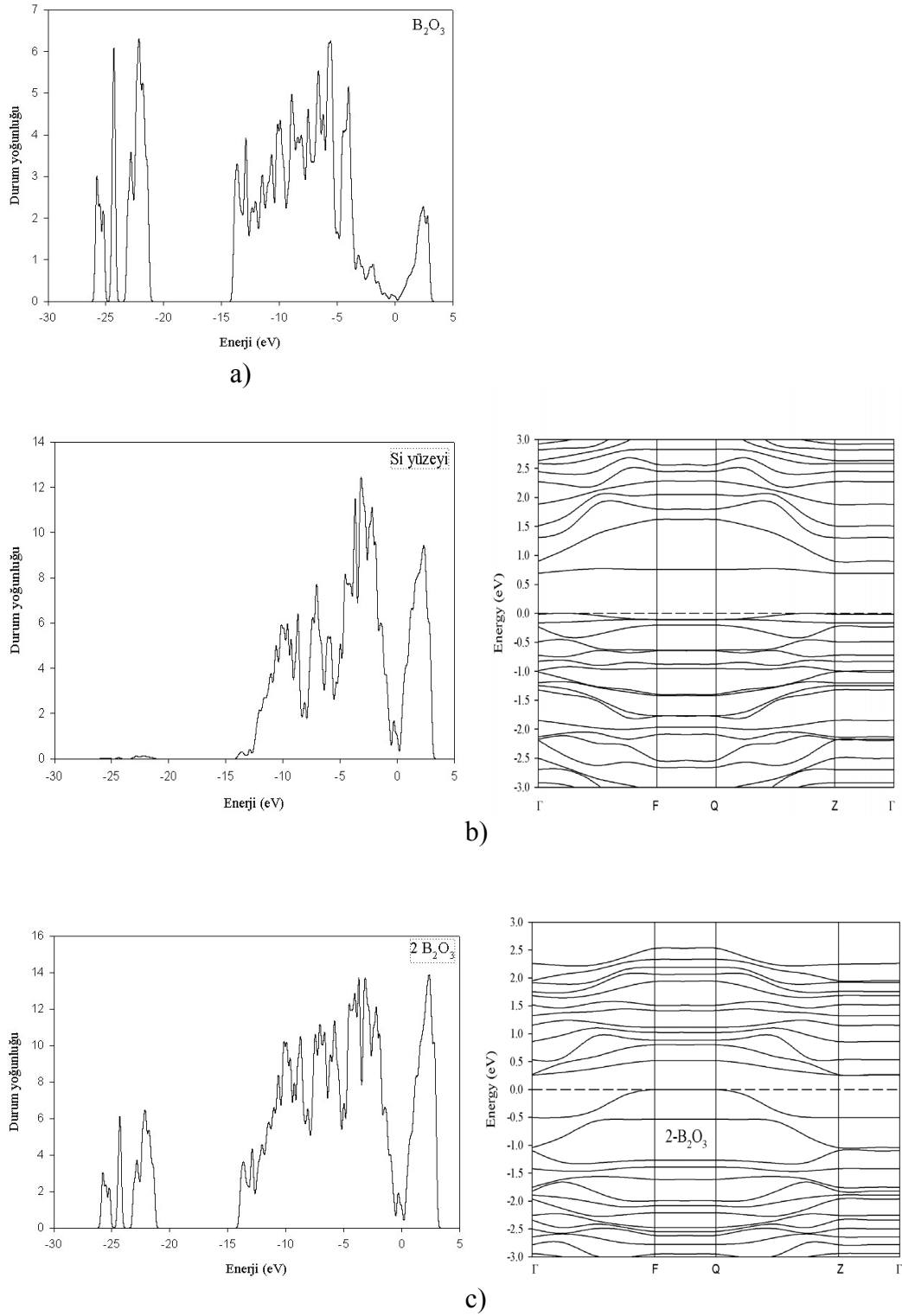
Çizelge 5.10. Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B₂O₃ bırakıldığında bazı atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı

Yüzeyde iki B ₂ O ₃	Si ₁ -Si ₂ (Å)	Si ₃ -Si ₄ (Å)	Si ₅ -Si ₆ (Å)	B ₂ -Si ₅ (Å)	Si ₆ -O ₃ (Å)	B ₂ -O ₃ (Å)	Bükülme açısı(°)
Optimizasyon öncesi	2,35	2,35	2,26	2,58	2,12	1,08	18,80
Optimizasyon sonrası	2,43	2,27	3,71	4,27	1,78	1,29	26,85

Çizelge 5.11. Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B₂O₃ katkısında yapının toplam enerjisi ve bağlanma enerjisi ile yasak enerji aralığı

Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B ₂ O ₃	E _n (eV)	E _b (eV)	Yasak enerji aralığı(eV)
	-4727,7	-6,2816	0,26

Yüzeye bırakılan iki B₂O₃ katkısında yapının bant genişliğinin 0,26 eV civarında olduğu görüldü. Yani iki B₂O₃ katkısı Si yüzeyinin bant genişliğini azalttı(daha önce 0,69 eV idi). Bir B₂O₃ katkısında da bant genişliği azalmıştı. Sonuç olarak B₂O₃ katkısının artması ile Si yüzeyinin bant genişliği azaldı. Üç B₂O₃ katkısında neler olacağına da baktıktan sonra bu teorinin doğruluğuna karar vereceğiz. Her birini diğeri ile karşılaştırmak için tüm yüzeylerin elektron durum yoğunlukları verildi.



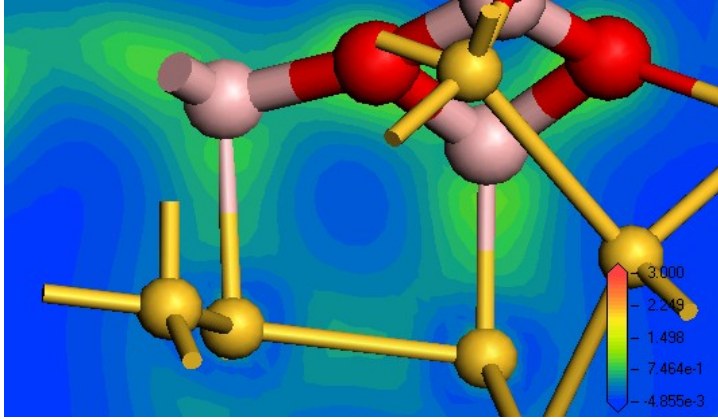
Şekil 5.12. Si(001)-(1×2) yüzeyine bir B_2O_3 molekülü göndermeden önce ve gönderdikten sonra yapıda meydana gelen değişiklikler, a) İki B_2O_3 molekülünün durum yoğunluğu, b) 8 katmanlı Si yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı, c) Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B_2O_3 için durum yoğunluğu ve bant yapısı

Kimyasal bağlarının türünü belirleyebilmek için elektron yoğunluk haritaları çıkarıldı. Şekil 5.13' te B_2O_3 -II yüzeyi için elektron yoğunluk haritası verilmiştir. B_2O_3 -II yüzeyi için, Şekil 5.13' te görüldüğü üzere, yüzeyde B_2O_3 -I yüzeyine benzer bağlar oluşmakta ve moleküllerin şekilleri değişmektedir. Baskın olarak iyonik karakterli bağlar ve kısmen kovalent bağlarla moleküller yüzeye tutunmaktadır.

Ayrıca bağların türüne daha kesin bir şekilde karar verebilmek için atomik popülasyonları da hesaplandı. Burada iki B_2O_3 molekülünü Si(001)-(1×2) yüzeyine bıraktıktan sonra B_2O_3 molekülünün atomları arası Mulliken popülasyonu, Si(001)-(1×2) yüzeyinin Mulliken popülasyonu ve B_2O_3 molekülü ile Si(001)-(1×2) yüzeyi arasındaki bağların Mulliken popülasyonu incelendi. O_1 - B_1 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,69 ve B_2 - O_3 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,97; B_1 - O_2 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,5 ve O_2 - B_2 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,62 ise olarak ölçülmüştür. Görüldüğü gibi optimizasyon sonucunda baskın kovalent karakterli bağlar oluşmuştur.

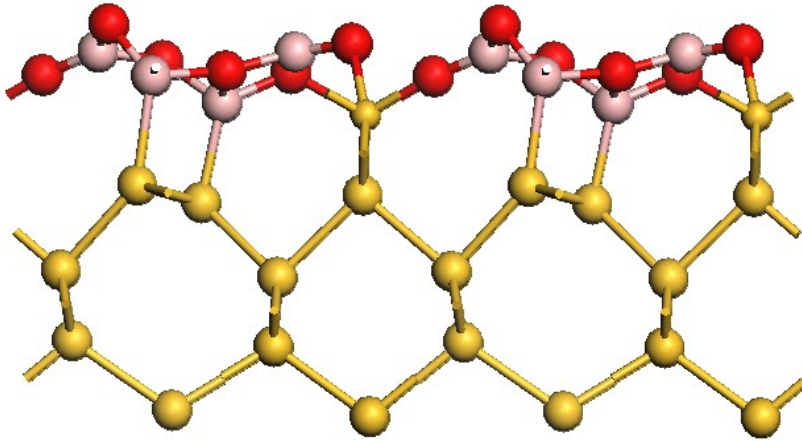
Çizelge 5.12. Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B_2O_3 katkısında Mulliken popülasyonları

Bağlar(uzaklıklar)	Mulliken popülasyonları
O_1 - B_1 (1,41)	0,69
B_2 - O_3 (1,29)	0,97
B_1 - O_2 (1,54)	0,5
O_2 - B_2 (1,43)	0,62
Si_1 - Si_2 (2,43)	1,5
Si_3 - Si_4 (2,27)	0,61
Si_5 - Si_6 (3,71)	-
B_2 - Si_5 (4,27)	0,88
Si_6 - O_3 (1,79)	0,23
B_2 - Si_6 (2,53)	1,00
Si_1 - O_1' (1,63)	0,43
O_1' - B_1' (1,30)	0,94



Şekil 5.13. B_2O_3 -II yüzeyi için elektron yoğunluk haritası

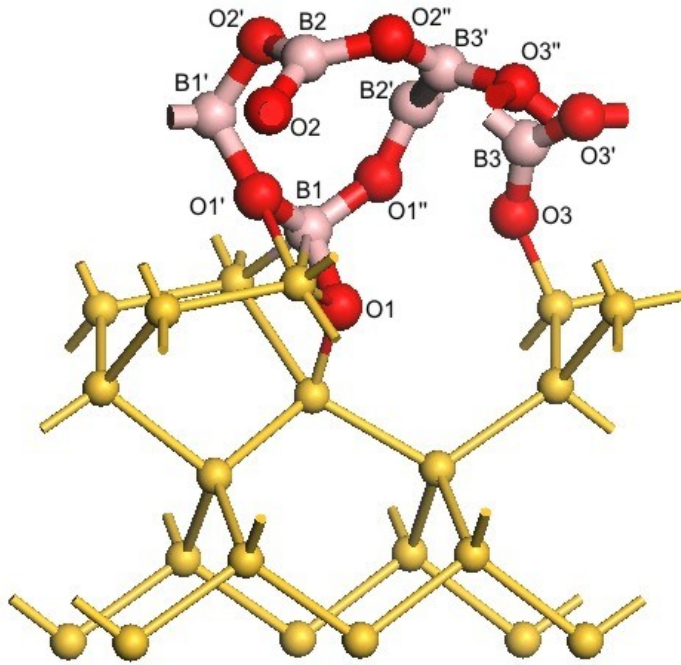
Sonuç olarak $Si(001)-(1 \times 2)$ yüzeyinde iki B_2O_3 ' in nanotel oluşturup oluşturmadığını Şekil 5.14' ten görebiliriz. Şekilde görüldüğü gibi B_2O_3 kristalleri Si yüzeyinde kesik kesik değil sürekli devam etmektedir, bu durumda iki B_2O_3 ' in Si yüzeyinde nanotel oluşturduğunu söyleyebiliriz.



Şekil 5.14. $Si(001)-(1 \times 2)$ yüzeyinde iki B_2O_3 durumu

5.4. Si(001)-(1×2) Yüzeyinde Üç B₂O₃ Durumu

Yüzeğe üç B₂O₃ paralel bir şekilde bırakılıp yapı optimize edildikten sonra bükülme açısı 11,16° ve yüzeydeki 2 Si atomu arasındaki uzaklık (Si₅-Si₆ arasındaki uzaklık) ise 2,35 Å olarak ölçüldü. Atomlar arası uzaklıklar ve özel olarak tanımlı yüzey açısı optimizasyondan önce ve optimizasyondan sonra ölçülerek, orijinal yapının ne kadar değiştiği belirlendi. Şekil 5.15' te atomları etiketlenmiş B₂O₃-III yüzeyi verildi. Çizelge 5.11' de bazı atomlar arası uzaklıklar ve açılar verildi.



Şekil 5.15. Atomları etiketlenmiş B₂O₃-III yüzeyi. 3(B₂O₃) molekülü ve tutunduğu Si(1×2) yüzeyi

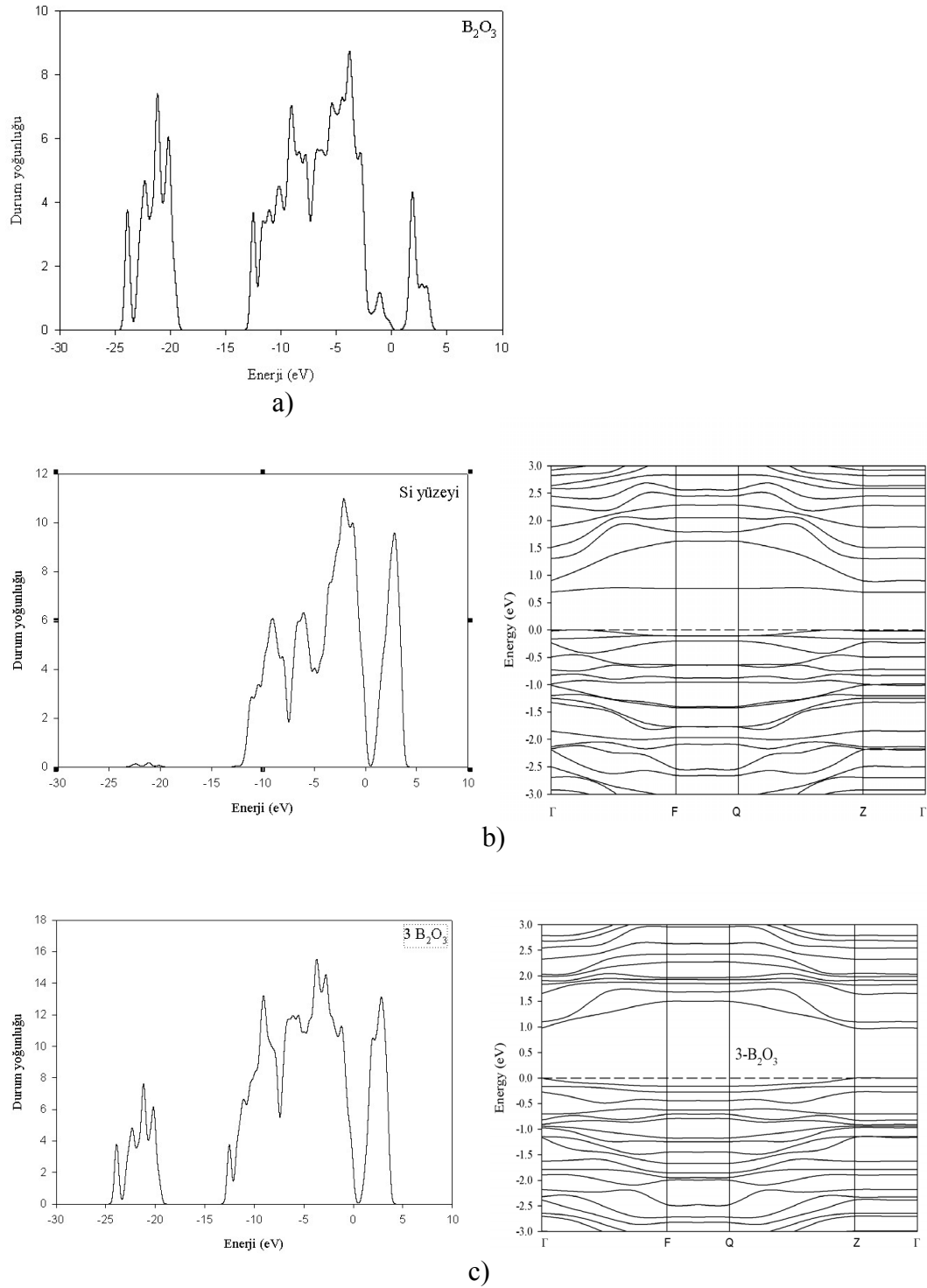
Çizelge 5.13. Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B₂O₃ bırakıldığında bazı atomlar arası uzaklıklar ve bükülme açısı

Yüzeyde üç B ₂ O ₃	Si ₁ -Si ₂ (Å)	Si ₃ -Si ₄ (Å)	Si ₅ -Si ₆ (Å)	B ₂ -Si ₅ (Å)	Si ₆ -O ₃ (Å)	B ₂ -O ₃ (Å)	Bükülme açısı(°)
Optimizasyon öncesi	2,35	2,35	2,26	2,39	6,88	1,08	18,81
Optimizasyon sonrası	2,32	2,34	2,34	2,44	6,78	5,10	11,16

Çizelge 5.14. Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B₂O₃ katkısında yapının toplam enerjisi ve bağlanma enerjisi ile yasak enerji aralığı

Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B ₂ O ₃	E _n (eV)	E _b (eV)	Yasak enerji aralığı(eV)
	-6199,1	-12,0536	0,97

Yüzeye bırakılan üç B₂O₃ katkısında yapının bant genişliğinin 0,97 eV civarında olduğu görüldü. Yani iki B₂O₃ katkısı bir B₂O₃ katkısına göre bant genişliğini azaltırken üç B₂O₃ katkısında bant genişliği artmış oldu. Her birini diğeri ile karşılaştırmak için tüm yüzeylerin elektron durum yoğunlukları verildi.



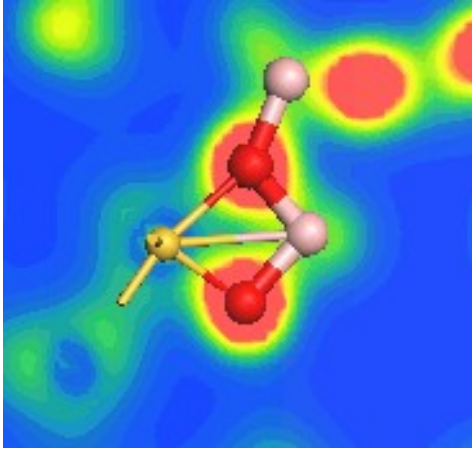
Şekil 5.16. Si(001)-(1×2) yüzeyine üç B_2O_3 molekülü göndermeden önce ve gönderdikten sonra yapıda meydana gelen değişiklikler, a) Üç B_2O_3 molekülünün durum yoğunluğu, b) 8 katmanlı Si yüzeyinin durum yoğunluğu ve bant yapısı, c) Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B_2O_3 için durum yoğunluğu ve bant yapısı

Kimyasal bağlarının türünü belirleyebilmek için elektron yoğunluk haritaları çıkarıldı. Şekil 5.17' de B_2O_3 -III yüzeyi için elektron yoğunluk haritası verilmiştir. B_2O_3 -III yüzeyinde de, Şekil 5.17' de görüldüğü üzere, B_2O_3 -I yüzeyine benzer bağlar oluşmaktadır, baskın olarak kovalent karakterli bağlar ve kısmen iyonik bağlar.

Ayrıca bağların türüne daha kesin bir şekilde karar verebilmek için atomik popülasyonları da hesaplandı. Burada üç B_2O_3 molekülünü Si(001)-(1×2) yüzeyine yüzeye paralel olarak bıraktıktan sonra B_2O_3 molekülünün atomları arası Mulliken popülasyonu, Si(001)-(1×2) yüzeyinin Mulliken popülasyonu ve B_2O_3 molekülü ile Si(001)-(1×2) yüzeyi arasındaki bağların Mulliken popülasyonu incelendi. O_1 - B_1 atomları arası Mulliken popülasyonu 0,42 ve B_2 - O_3 atomları arası bağ yok; B_1 - O_2 atomları arası Mulliken popülasyonu bağ yok ve O_2 - B_2 atomları arası Mulliken popülasyonu ise 0,91 olarak ölçülmüştür. Görüldüğü gibi optimizasyon sonucunda baskın kovalent karakterli bağlar oluşmuştur.

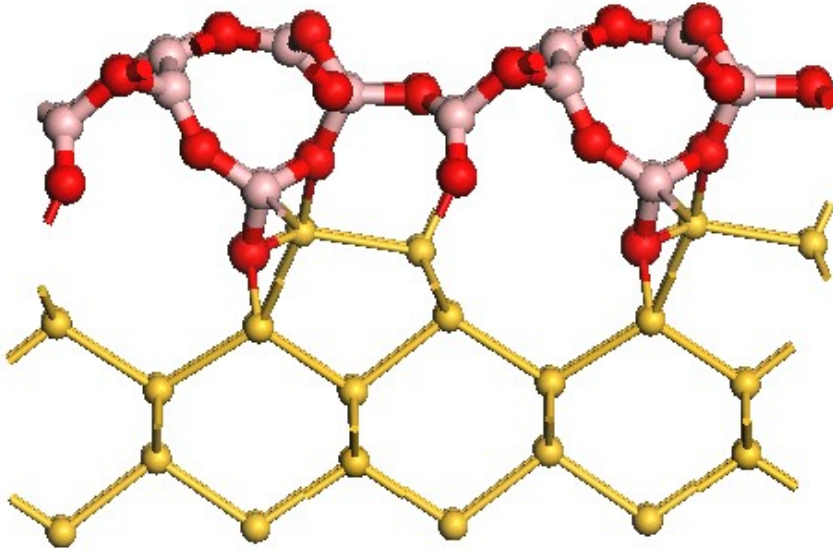
Çizelge 5.15. Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B_2O_3 katkısında Mulliken popülasyonları

Bağlar(uzaklıklar)	Mulliken popülasyonları
O_1 - B_1 (1,52)	0,42
B_2 - O_3 (1,44)	-
B_1 - O_2 (2,78)	-
O_2 - B_2 (1,42)	0,91
Si_1 - Si_2 (2,33)	1,54
Si_3 - Si_4 (2,35)	0,75
Si_5 - Si_6 (2,35)	0,80
B_2 - Si_5 (2,00)	-
Si_6 - O_3 (3,63)	-
B_2 - Si_6 (4,05)	-
Si_5 - O_1' (2,84)	0,11
B_1 - Si_5 (5,18)	0,50



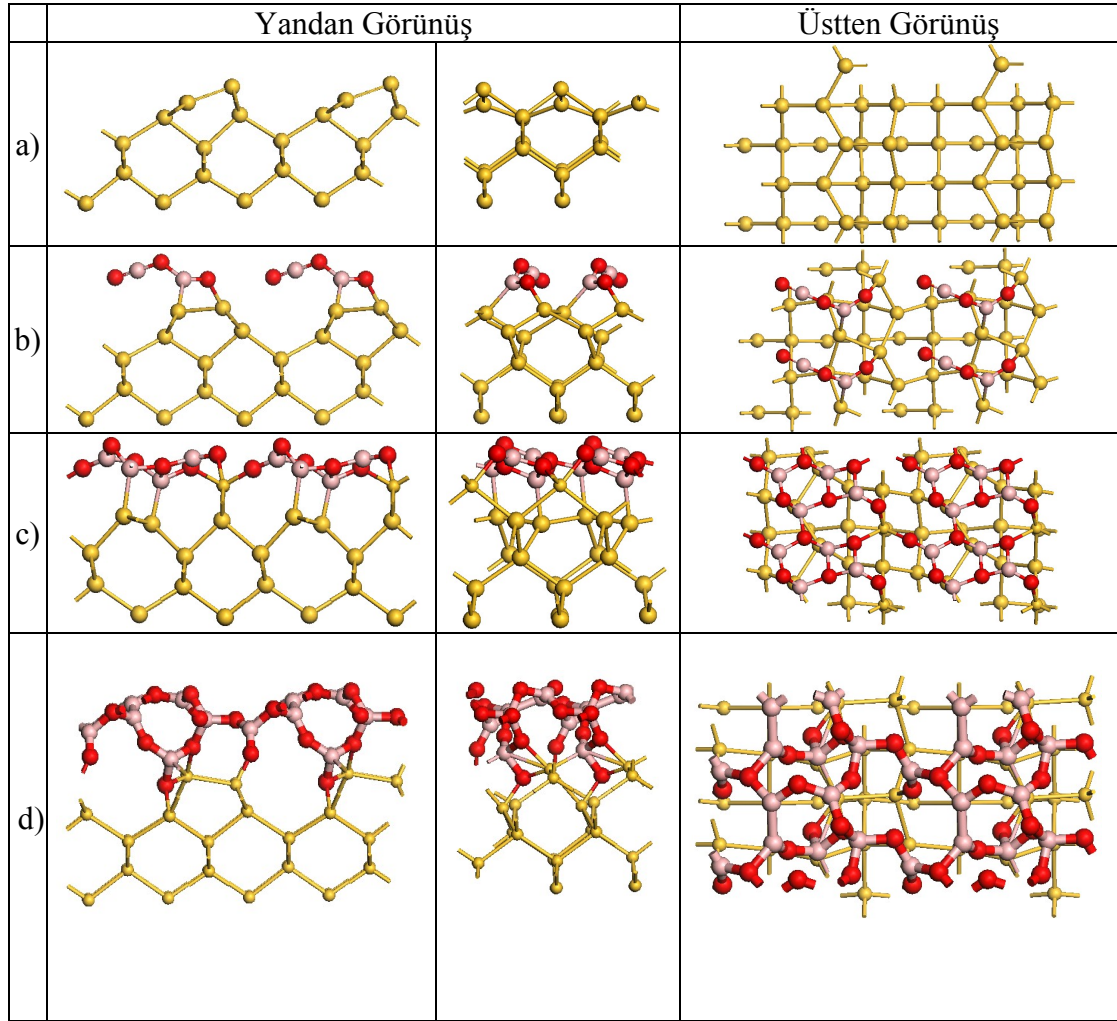
Şekil 5.17. B_2O_3 -III yüzeyi için elektron yoğunluk haritası

Sonuç olarak Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B_2O_3 in nanotel oluşturup oluşturmadığını Şekil 5.18' den görebiliriz. Şekilde görüldüğü gibi B_2O_3 kristalleri Si yüzeyinde sürekli devam etmektedir, bu durumda üç B_2O_3 ' in Si yüzeyinde nanotel oluşturduğunu söyleyebiliriz.



Şekil 5.18. Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B_2O_3 durumu

Tüm yüzeyleri daha kolay karşılaştırmak için Şekil 5.19’ da hepsi birlikte verildi. Ayrıca Çizelge 5.16 ve 5.17’ de bazı atomlar arası uzaklıklar ve açılar karşılaştırmak amacıyla verildi.



Şekil 5.19. Temiz Si(001)-(1×2) yüzeyi ve Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir, iki, üç B₂O₃ durumu karşılaştırması, a) Temiz Si(001)-(1×2) yüzeyi, b) Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir B₂O₃ durumu, c) Si(001)-(1×2) yüzeyinde iki B₂O₃ Durumu, d) Si(001)-(1×2) yüzeyinde üç B₂O₃ durumu

Çizelge 5.16. B_2O_3 -I, B_2O_3 -II, B_2O_3 -III yüzeylerindeki Si-Si ve molekül atomları arasındaki bağ uzunlukları(Å)

Bağlar	Yüzeylerdeki atomlar arası uzaklıklar		
	B_2O_3 -I	B_2O_3 -II	B_2O_3 -III
Si ₅ -Si ₆	2,34	3,71	2,35
O ₁ -B ₁	1,23	1,41	1,5
B ₁ -O ₂	1,30	1,54	-
O ₂ -B ₂	1,41	1,43	1,41
B ₂ -O ₃	1,36	1,29	-
O ₁ '-B ₁ '	-	1,31	1,37
B ₁ '-O ₂ '	-	1,45	1,46
O ₂ '-B ₂ '	-	1,50	-
B ₂ '-O ₃ '	-	1,48	-

Çizelge 5.17. B_2O_3 -I, B_2O_3 -II, B_2O_3 -III yüzeylerindeki bazı açılar(°)

Bağlar	Yüzeylerdeki atomlar arası açılar		
	B_2O_3 -I	B_2O_3 -II	B_2O_3 -III
Bükülme Açısı	4,06	26,85	11,16
O ₂ -B ₂ -O ₃	119,89	136,71	123,12
B ₁ -O ₂ -B ₂	127,34	167,01	-
O ₁ -B ₁ -O ₂	178,34	112,16	96,78
O ₂ '-B ₂ '-O ₃ '	-	114,17	83,18
B ₁ '-O ₂ '-B ₂ '	-	123,71	-
O ₁ '-B ₁ '-O ₂ '	-	118,31	130,64

Tablolardan ve şekillerden anlaşıldığı üzere temiz Si yüzeyine eklenen tek bor oksit nanotel oluşturmazken, iki ve üç bor oksit nanotel oluşturmaktadır. Tek (B_2O_3) katkısında yapının enerji aralığı 0,46 eV, $2(B_2O_3)$ katkısında ise yapının enerji aralığı 0,26 eV civarındadır. Bu sonuç bize yüzeye bıraktığımız $2(B_2O_3)$ ' in enerji aralığını $1(B_2O_3)$ ' e göre daha fazla azalttığını göstermektedir. Fakat $3(B_2O_3)$ koyduğumuz yüzeyin bant genişliği ise 0,97 eV civarındadır. Yani $2(B_2O_3)$ katkısı yapının iletkenliğini artırırken, $3(B_2O_3)$ katkısı yapının iletkenliğini azaltmıştır.

Sonuç olarak B_2O_3 -I, B_2O_3 -II ve B_2O_3 -III yüzeyleri yarıiletkenidir. Diğer taraftan temiz Si yüzeyine farklı sayılarda B_2O_3 bırakılması yüzeyin elektriksel karakterini değiştirmemektedir, fakat 2 veya daha fazla sayıda B_2O_3 bırakılması bant genişliğini değiştirmektedir. Şöyle ki yüzeye bırakılan B_2O_3 sayısının artışı bant genişliğini önce düşürmektedir daha sonra artırmaktadır. Sırasıyla B_2O_3 -I, B_2O_3 -II, B_2O_3 -III için bant genişlikleri ise; 0,46 eV, 0,26 eV ve 0,97 eV' dir.

Çizelge 5.18. Si(001)-(1×2) yüzeyinde bir, iki, üç B_2O_3 durumları için Mulliken popülasyonlarının karşılaştırması

Bağlar	Mulliken popülasyonları		
	B_2O_3 -I	B_2O_3 -II	B_2O_3 -III
O_1 - B_1	1,22	0,69	0,42
B_2 - O_3	0,86	0,97	-
B_1 - O_2	0,82	0,50	-
O_2 - B_2	0,58	0,62	0,91
Si_1 - Si_2	1,36	1,50	1,54
Si_3 - Si_4	0,67	0,61	0,75
Si_5 - Si_6	0,70	-	0,80
Si_2 - Si_3	0,65	0,70	0,70
Si_4 - Si_5	1,34	1,42	0,37
O_3 - Si_6	0,29	0,23	-
O_3' - Si_6	-	0,24	-
O_3'' - Si_6	-	-	-

6. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada Si yarıiletkenin (001) yüzeyi üzerinde B_2O_3 nanotelleri oluşturulması CASTEP paket programı kullanılarak araştırıldı. Teorik olarak Si' un yarıiletken ve B_2O_3 ' in ise yalıtkan bir yapıya sahip olduğu bulundu. Temiz Si yarıiletkeni üzerine sırasıyla bir (B_2O_3), iki (B_2O_3), üç (B_2O_3) molekülü gönderilerek nanotel oluşup oluşmadığına bakıldı ve şu sonuçlar elde edildi:

Si yarıiletken yüzeyi üzerine konulan B_2O_3 yalıtkanın Si yüzeyinin yapısını ve yüzeydeki atomların bağlanma karakterizasyonunu değiştirdiği gözlemlendi. Tek B_2O_3 katkısının yüzeyde nanotel oluşturmadığı gözlemlendi. Yüzeye bırakılan $2(B_2O_3)$ ' in yüzeyin yapısını $1(B_2O_3)$ ' e göre, $3(B_2O_3)$ ' in ise $1(B_2O_3)$ ve $2(B_2O_3)$ ' e göre daha fazla değiştirdiği görüldü, öyle ki $2(B_2O_3)$ ve $3(B_2O_3)$ katkısının yüzeydeki Si atomları arasındaki bağları kopardığı ve yüzeyde B_2O_3 nanotelleri oluşturduğu gözlemlendi. Castep analizi ile bant yapıları, durum yoğunlukları ve elektron yoğunlukları hesaplandı. Temiz Si yüzeyine bırakılan farklı sayı ve şekildeki B_2O_3 katkısının yüzeyin elektriksel karakterini değiştirmediği, yarıiletken yapıda kaldığı gözlemlendi. Fakat yüzeydeki B_2O_3 sayısı bant genişliğini değiştirdi. İki B_2O_3 katkısı bir B_2O_3 katkısına göre bant genişliğini azaltırken üç B_2O_3 katkısında bant genişliğinin arttığı görüldü. Bunun sebebi bağlanmada borların Si yüzeyine oksijenlerden daha yakın olmasıdır. Yani bağlanmada borlar oksijenlerden daha aktiftir. Borlar kovalent bağ yapmaya meyillidir, yani elektronlar daha sıkı bağlı olduğu için valans bandından iletkenlik bandına elektron geçişi zordur ve bant genişliği (yasak enerji aralığı) fazladır. Elektron yoğunluk haritalarından ve Mulliken popülasyonlardan çıkardığımız sonuca göre Si yüzeyinde oluşan bor oksit bağlarının B_2O_3 -I, B_2O_3 -II ve B_2O_3 -III için de baskın kovalent bağlar olduğunu gördük.

KAYNAKLAR

1. İnternet: “Nanotechnology”, <http://en.wikipedia.org/wiki/Nanotechnology> (2009).
2. İnternet: “Ulusal Bilim ve Teknoloji Politikaları(2003-2023 Strateji Belgesi)”, http://www.tubitak.gov.tr/tubitak_content_files/vizyon2023/Vizyon2023_Strateji_Belgesi.pdf (2004).
3. Ouara, K., Lifshits, V.G., Saranin, A.A., Zotov, A.V., Katayama, M., “An Introduction”, *Surf. Sci.*, 1, 171, 181 (2003).
4. Lyo, I.W., Kaxiras, E., Avouris, Ph., “Adsorption of Boron on Si(111): Its Effect on Surface Electronic States and Reconstruction”, *Phys.Rev.Lett.*, 1261-1264 (1989).
5. Yang, Q., Sha, J., Wang, L., Zou, Y., Niu, J., Cui, C., Yang, D., “Crystalline Boron Oxide Nanowires on Silicon Substrate”, *Science Direct*, 319-324 (2005).
6. Özkan, İ., “Nanoteknolojik Yöntemler İle Malzemenin Yüzey Özelliklerinin İyileştirilmesi”, Yüksek Lisans Tezi, *Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, İzmir, 4-5 (2006).
7. İnternet: “Türkiye’ de Nanoteknoloji”, <http://www.biltek.tubitak.gov.tr> (2005).
8. İnternet: “Boron”, <http://en.wikipedia.org/wiki/Boron> (2009).
9. İnternet: Ulusal Bor Arastırma Enstitüsü (BOREN), “Bor ve Özellikleri”, www.boren.gov.tr/borhk.htm (2007).
10. Xiaoju, G., Julong, H., Zhongyuan, L., Yonjgjun, T., “Bond Ionicities and Hardness of B₁₃C₂-like Structured B_yX Crystals (X=C,N,O,P,As)”, *Phys.Rev.Lett.*, 73: 104115 (2006).
11. Zhenghui, L., Zhaohui, Z., Xing, Z., “Atomic Structures of Boron-Induced Protrusion Features on Si(110) Surfaces”, *Phys.Rev.Lett. B*, 77: 035322 (2008).
12. Luo, X., Zhang, S.B., Wei, S.H., “Understanding Ultrahigh Doping: The Case of Boron in Silicon”, *Phys.Rev.Lett.*, 90: 026103 (2003).
13. Kittel C., “Introduction to Solid State Physics”, *John Wiley&Sons Inc.*, 1-39,139-163, 381-385 (1986).
14. Ross, F.M., Tromp, R.M., Reuter, M.C., “Transition States Between Pyramids and Domes During Si/Ge Island Growth”, *Science Direct*, 286: 1931-1934 (1999).

15. Battaglia, C., Gaal-Nagy, K., Money, C., Didiot, C., Schwier, E.F., Garnier, M.G., Onida, G., Aebi, P., “New Structural Model for the Si(331)-(12×1) Surface Reconstruction”, *Phys.Rev.Lett.*, 102: 066102 (2009).
16. İnternet: “Silisyum”, <http://tr.wikipedia.org/wiki/Silisyum> (2009).
17. İnternet: “Silicon”, <http://en.wikipedia.org/wiki/Silicon> (2009).
18. Çakmak, M., Mete, E., Ellialtıođlu, Ő., “Effect of Hydrogenation on B/Si(001)-(1×2)”, *Surf. Sci.*, 601: 3711-3716 (2007).
19. Zhang, Z., Sumitomo, K., “Boronizing Structures of Si(113) Surfaces”, *Surf. Sci.*, 576: 83-88 (2005).
20. Corsin, B., Katalin, G., Claude, M., Clement, D., Schwier, E.F., Onida, M.G., Aebi, P., “New Structural Model for the Si(331)-(12×1) Surface Reconstruction”, *Phys.Rev.Lett.*, 102: 066102 (2009).
21. İnternet: Eti Maden İ̇letmeleri Genel M¼d¼rl¼đ¼, “Bor ve Bor Rezervleri”, <http://www.etimaden.gov.tr> (2007).
22. İnternet: “Boron compounds fact sheet”, <http://www.npi.gov.au/database/substance-info/profiles/15.html> (2009).
23. İnternet: “Bor Ürünleri Hakkında Genel Bilgi”, <http://www.etimaden.gov.tr> (2009).
24. Öge, U., “Tek Duvarlı (8,0) Zig-Zag Karbon Nanot¼pten Bor Nitr¼r Nanot¼p Sentezlenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstit¼s¼*, Ankara, 2-24 (2006).
25. Segall, M.D., Lindan P.J.D., Probert M.J., Pickard C.J., Hasnip P.J., Clark S.J., Payne M.C., “First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code”, *J. Phys.: Cond. Matt.*, 14(11) : 2717-2743 (2002).
26. Gong, B., Brown, D.E., Kang, J.H., Jo, S.K., Sun, Y.M., Ekerdt, J.G., “Boron-Induced Stabilization of the Si(100)-(2×1) Surface Reconstruction”, *Phys. Rev. B*, 59: 15225 (1999).
27. Kaderođlu, Ç., Kutlu, B., Çakmak, M., “Atomic and Electronic Properties of Furan on the Si(001)-(2×2) Surface”, *Surf. Sci.*, 602: 2845-2848 (2008).
28. Segall, M.D., Shah R., Pickard C.J., Payne M.C., “Population analysis of plane-wave electronic structure calculations of bulk materials”, *Phys. Rev. B*, 54: 16317-16320 (1996).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, Adı : ALATA Nigar
Uyruđu : T.C.
Dođum Tarihi ve Yeri : 27.07.1982-Beyşehir
Medeni Hali : Evli
Telefon : 05059379775
e-mail : nigarerkok@mynet.com

Eđitim

Derece	Eđitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik	2009
Lisans	Gazi Üniversitesi	2006
Lise	Konya Meram Lisesi	2001

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Kitap okumak, yüzmek, ders çalışmak ☺☺