

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

**KATKILANMIŞ YARIİLETKEN NANOYAPILARIN GEOMETRİK VE  
ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ**

**HARUN ÖZKİŞİ**

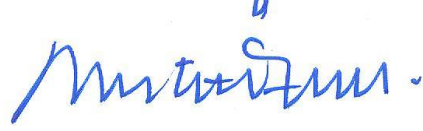
**DOKTORA TEZİ**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**Tez Danışmanı: Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ**

**EDİRNE-2016**

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü onayı



Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Bu tezin Doktora tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.



Prof. Dr. Serap ŞENTÜRK DALGIÇ  
Anabilim Dalı Başkanı

Bu tez tarafımda okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.



Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ  
Tez Danışmanı

Bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından Fizik Anabilim Dalında bir Doktora tezi olarak oy birliği ile kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ



Prof. Dr. Handan GÜRBÜZ



Prof. Dr. Merih SERİN



Prof. Dr. Aydın ULUBEY



Yrd. Doc. Dr. Sedat ŞENGÜL



Tarih: 12/02/2016

**T.Ü. FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**FİZİK DOKTORA PROGRAMI**  
**DOĞRULUK BEYANI**

İlgili tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını beyan ederim.



12/02/2016

Harun ÖZKİŞİ

Doktora Tezi  
Katkılanmış Yarıiletken Nanoyapıların Geometrik ve Elektronik Özellikleri  
T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü  
Fizik Anabilim Dalı

## ÖZET

Son yıllarda nanoyapılar ve nanoyapı tabanlı teknolojilerin bilimsel etkisi gün geçtikçe artmaktadır. Özellikle yarıiletken nanoyapıların elektronik özelliklerinde, farklı boyutlarda modelleme ve katkılama ile değişiklikler yapma düşüncesi önemli bir araştırma konusudur. Teknolojik aletlerin üretilmesinde ve geliştirilmesinde yarıiletken nanoyapıların kullanılması araştırmanın önemini arttırmaktadır. Bu tezde, farklı geometrik yapılar üzerinde modelleme, heteroyapı oluşturma ve farklı konumlarda katkılama gibi yöntemlerin yarıiletken nanoyapıların elektronik özellikleri üzerindeki etkisi incelenmiştir. Bu incelemedeki amaç, teknolojik açıdan avantajlı ve kullanışlı yarıiletken malzemeler elde etmektir. Yapılan toplam enerji hesaplarında yoğunluk fonksiyonel teorisi tabanlı düzlem dalga öz uyum alan programı kullanılmıştır. Ayrıca elektronik özellikleri belirlemek için bant yapı ve düzlemsel potansiyel hesaplamaları yapılmıştır. Bu hesaplamalar sonucunda nanoyapılarla ilgili ortaya konan geometrik ve elektronik özelliklerin yarıiletken teknolojisine katkıda bulunması amaçlanmaktadır.

Yıl : 2016  
Sayfa Sayısı : 88  
Anahtar Kelimeler : Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, Katkılanmış Yarıiletken Nanoyapılar, Elektronik Özellikler, Geometrik Özellikler.

Doctoral Thesis

Geometric and Electronic Properties of Doped Semiconductor Nanostructures

Trakya University Institute of Natural Sciences

Department of Physics.

## **ABSTRACT**

In recent years, the scientific impact of nanostructures and nanostructure based technologies is increasing day by day. Especially, in the electronic properties of semiconductor nanostructures, the idea to make changes with modelling of different sizes and doping is an important research topic. The use of semiconductor nanostructures is increasing the important of the research for development and production of technological devices. In this thesis, impact on electronic properties of semiconductor nanostructures has been examined with heterostructure creation, different radius geometric modeling and doping methods at different locations. The aim of this study is to obtain technologically advantageous and useful semiconductor materials. The plane wave self consistent field program based on density functional theory was used in the total energy calculations. In addition, band structure and planar potential calculations has been made to determine the electronic properties. The calculations results in the nanostructures as set forth concerning geometric and electronic properties is intended to contribute to the development of semiconductor technology.

Year : 2016

Number of Pages : 88

Keywords : Density Functional Theory, Doped Semiconductor Nanostructures, Electronic Properties, Geometric Properties.

## TEŞEKKÜR

Çalışmamın danışmanlığını üstlenen, her zaman bilgilerinden ve tecrübelerinden yararlandığım sayın hocam Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmanın gerçekleştirilmesinde Trakya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi laboratuvar imkânlarını bana sunan ve yardımcı olan Fen Fakültesi Dekanı Prof. Dr. Ömer ZAIM ve Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Serap DALGIÇ'a teşekkür ederim.

Bu çalışmanın hesaplamalarında kullanılan bilgisayar programları ile ilgili yardımlarını esirgemeyen ve engin bilgilerini paylaşan sayın hocam Doç. Dr. Hande TOFFOLI'ye teşekkür ederim.

Altı aylık çalışmalarımı dinleyen değerli görüş ve desteklerini esirgemeyen sayın hocalarım Prof. Dr. Mümin ŞAHİN ve Yrd. Doç. Dr. Sedat ŞENGÜL'e teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmamın her aşamasında yanımda olan ve bana her türlü yardımda bulunan değerli arkadaşlarım Yrd. Doç. Dr. Barış ÖZKAPI ve Öğr. Gör. Sena GÜLER ÖZKAPI'ya sonsuz teşekkür ederim.

Bu çalışmada bana yardımları ve destekleri için değerli arkadaşlarım Yrd. Doç. Dr. Ali İhsan MEŞE, Arş. Gör. Dr. Mutlu ÇOLAKOĞULLARI, Arş. Gör. Dr. Ünal DÖMEKELİ ve Arş. Gör. Dr. Cem CANAN'a teşekkür ederim.

Çalışmam ve tüm eğitim hayatım boyunca maddi manevi desteğini üzerimden eksik etmeyen ve her zaman varlıklarını yanımda hissettiğim annem Fatma ÖZKİŞİ ve babam Salih ÖZKİŞİ'ye sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmam boyunca her zaman yanımda olan ve sevgileri ile bana güç veren değerli eşim Türkan ÖZKİŞİ ve oğlum Salih Emir ÖZKİŞİ'ye çok teşekkür ederim.

Çalışmam süresince bana olan desteğinden dolayı sevgili ablam Hülya DEMİR ve ailesine çok teşekkür ederim.

Yoğun çalışma sırasında bana olan desteklerini esirgemeyen Keşan Yusuf Çapraz Uygulamalı Bilimler Yüksekokulundaki çalışma arkadaşlarıma sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

# İÇİNDEKİLER

<b>İÇİNDEKİLER</b> .....	<b>İV</b>
<b>SİMGELER VE KISALTMALAR</b> .....	<b>VI</b>
<b>TABLoların LİSTESİ</b> .....	<b>viii</b>
<b>ŞEKİLLERİN LİSTESİ</b> .....	<b>İX</b>
<b>BÖLÜM 1</b> .....	<b>1</b>
<b>GİRİŞ</b> .....	<b>1</b>
<b>BÖLÜM 2</b> .....	<b>5</b>
<b>TEORİ</b> .....	<b>5</b>
2.1. Çok Cisim Problemi .....	5
2.1.1. Born-Oppenheimer Yaklaşımı .....	6
2.1.2. Hartree Yaklaşımı .....	7
2.1.3. Hartree Fock Yaklaşımı .....	8
2.1.4. Yoğunluk Fonksiyonu Yaklaşımı .....	9
2.2. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi.....	9
2.2.1. Hohenberg Kohn Teoremleri .....	13
2.2.2. Kohn Sham Denklemleri.....	16
2.2.3. Genel Gradyent Yaklaşımı .....	19
2.2.4. Pseudopotansiyel Formalizmi .....	19
2.3. Yarıiletken Nanoyapıların Sayısal Hesaplamaları .....	21
2.3.1. Yarıiletken Nanoyapıların Örgü Yapısı .....	22
2.3.2. Öz Uyum Alan Hesaplamaları .....	23
2.3.3. Sistem Parametreleri .....	24
2.3.4. Bant Yapı Hesaplamaları .....	26
2.3.5. Düzlemsel Potansiyel Eğri Hesaplamaları .....	28
<b>BÖLÜM 3</b> .....	<b>30</b>
<b>SONUÇLAR VE TARTIŞMA</b> .....	<b>30</b>

3.1. Yarıiletken Bulk Yapısı.....	31
3.1.1. GaN Bulk Yapısının Yapısal Özellikleri.....	32
3.1.2. BP Bulk Yapısının Yapısal Özellikleri .....	35
3.1.3. Yarıiletken Bulkların Bant Yapıları .....	38
3.2. Farklı Yarıçap Değerinde Katkılanmamış GaN Nanotel Yapılar .....	40
3.2.1. 0.57nm Yarıçaplı GaN Nanotel.....	42
3.2.2. 0.76nm Yarıçaplı GaN Nanotel.....	43
3.2.3. 0.94nm Yarıçaplı GaN Nanotel.....	44
3.2.4. Katkılanmamış GaN Nanotellerin Bant Yapısı.....	45
3.3. Farklı Yarıçap Değerinde Tekli Te Atomu Katkılanmış GaN Nanotel Yapılar	46
3.3.1. 0.57 nm Yarıçaplı Te Katkılanmış GaN Nanotel.....	47
3.3.2. 0.76 nm Yarıçaplı Te Katkılanmış GaN Nanotel.....	48
3.3.3. 0.94 nm Yarıçaplı Te Katkılanmış GaN Nanotel.....	49
3.3.4. Tekli Te Atomu Katkılanmış GaN Nanotellerin Bant Yapısı.....	50
3.4. Birden Fazla Te Atomu Katkılanmış GaN Nanotel Yapılar .....	51
3.4.1. Tekli Te Katkılanmış GaN Nanoteller .....	52
3.4.2. Çiftli Te Katkılanmış GaN Nanoteller .....	54
3.4.3. Üçlü Te Katkılanmış GaN Nanoteller.....	56
3.4.4. Birden Fazla Te Atomu Katkılanmış GaN Nanotellerin Bant Yapısı.....	58
3.5. BP/GaN Heteroyapılar .....	60
3.5.1. BP/GaN Bulk Heteroyapı Sistemler.....	61
3.5.2. BP/GaN Nanotel Heteroyapı Sistemler.....	67
3.6. Katkılanmış Yarıiletken Nanoyapıların Geometrik ve Elektronik Özellikleri ....	73
3.7. Sonuç.....	78
<b>KAYNAKLAR .....</b>	<b>80</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>	<b>88</b>



# SİMGELER VE KISALTMALAR

## SİMGELER DİZİNİ

$a$	: Örgü Sabiti
a.u.	: Atomik Birim
$a_{den}$	: Denaysel Örgü Sabiti
B	: Bor
$E_f$	: Fermi Enerjisi
$E_g$	: Bant Aralığı Enerjisi
$E_{kesim}$	: Kinetik Enerji Kesim Değeri
eV	: Elektron Volt
Ga	: Galyum
$k_{nokta}$	: k Nokta Sayısı
N	: Azot
$N_k$	: Katkılanan Atom Sayısı
nm	: Nono Metre
P	: Fosfor
Ryd	: Raydberg
Te	: Tellür
$V_{averaj}$	: Makroskobik Averaj Potansiyel
$V_{pot}$	: Düzlemsel Potansiyle
$\Delta V$	: Potansiyel Fark
$\theta$	: Tek Boyutlu Basamak Fonksiyonu

## KISALTMALAR

AlN	: Alüminyum Nitür
BLYP	: Becke Lee Yang ve Parr
BP	: Bor Fosfat
BPNT	: Bor Fosfat Nanotel
BPW	: Bunlardan Perdew ve Wang
DFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
GaN	: Galyum Nitür
GaNNT	: Galyum Nitür Nanotel
LED	: Işık Yayan Diyot
OPW	: Ortogonalize Düzlem Dalga
PBE	: Perdew Burke ve Enzerhof
PWSCF	: Düzlem Dalga Öz Uyum Alan
SCF	: Öz Uyumlu Alan
UV	: Ultraviyole
VBM	: Valans Bant Maksimum

## TABLULARIN LİSTESİ

Tablo 3.1. Yarıiletken bulk yapıların örgü sabiti, $E_{kesim}$ , $k_{nokta}$ , $a$ , $a_{den}$ ve fark değerleri.	39
Tablo 3.2. Yarıiletken bulk yapıların $N$ , VBM, $E_f$ ve $E_g$ değerleri .....	39
Tablo 3.3. Katkılanmamış nanotel yapıların yarıçap, atom sayısı, örgü sabiti, fermi enerji düzeyi ve bant aralığı değerleri. ....	73
Tablo 3.4. Katkılanmış nanotel yapıların yarıçap, atom sayısı, örgü sabiti, fermi enerji düzeyi ve bant aralığı değerleri. ....	73
Tablo 3.5. Birden fazla Te atomu ile katkılanmış GaNNT yapıların katkılanan atom sayısı, örgü sabiti, fermi enerji düzeyi ve bant aralığı değerleri.....	75
Tablo 3.6. Katkılanmamış ve katkılanmış olarak elde edilen bulk ve nanotel heteroyapıların örgü sabiti ve potansiyel fark değerleri. ....	77

## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil 2.1. Kohn-Sham denklemi kullanılarak kendini doğrulama yöntemi ile yapılan toplam enerji hesabının şeması. ....	18
Şekil 2.2. B atomunun kabuk ve valans bölgesini gösteren basit atom modeli. ....	20
Şekil 2.3. Gerçek dalga ve pseudopotansiyel dalga fonksiyonlarının gösterimi.....	21
Şekil 2.4. Zinc Blende örgülü GaN bulk yapısı ve tetra hedral geometrisi. ....	22
Şekil 2.5. Katıların yasak enerji aralığına göre sınıflandırılması.....	26
Şekil 2.6. n-tipi ve p-tipi olarak katkılanmış yarıiletken bant yapı modelleri.....	27
Şekil 3.1. Zinc blende örgüdeki a) GaN ve b) BP bulk yapıları. ....	31
Şekil 3.2. GaN bulk yapı için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi. ....	32
Şekil 3.3. GaN bulk için toplam enerjinin kinetik enerji kesim değerine göre değişimi. ...	33
Şekil 3.4. GaN bulk yapısı için toplam enerjinin $k_{nokta}$ değerlerine göre değişimi. ....	34
Şekil 3.5. BP bulk yapı için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.....	35
Şekil 3.6. BP bulk için toplam enerjinin kinetik enerji kesim değerine göre değişimi. .	36
Şekil 3.7. BP bulk yapı için toplam enerjinin $k_{nokta}$ değerlerine göre değişimi. ....	37
Şekil 3.8. Denge durumundaki a) GaN ve b) BP bulk yapılarının $\Gamma$ ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.....	38
Şekil 3.9. 11x11x1 boyutlu GaN yapı üzerinde 0.57nm, 0.76nm ve 0.94nm'lik üç farklı yarıçap değerinde oluşturulmuş nanotellerin kesit görünümü. ....	40
Şekil 3.10. (001) yönünde üç farklı yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotellerin a) ideal komfigürasyonu ve b) denge durum komfigürasyonu. ....	41
Şekil 3.11. 0.57nm yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi. ....	42
Şekil 3.12. 0.76nm yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi. ....	43
Şekil 3.13. 0.94nm yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi. ....	44
Şekil 3.14. Üç farklı yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotellerin $\Gamma$ ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.....	45
Şekil 3.15. (001) yönünde üç farklı yarıçaplı Te atomu katkılanmış GaN nanotellerin a) ideal komfigürasyonu ve b) denge durum komfigürasyonu. ....	46

Şekil 3.16. 0.57nm yarıçaplı Te atomu katkılanmış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi. ....	47
Şekil 3.17. 0.76nm yarıçaplı Te atomu ile katkılanmış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi. ....	48
Şekil 3.18. 0.94nm yarıçaplı Te atomu ile katkılanmış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi. ....	49
Şekil 3.19. Üç farklı yarıçaplı Te atomu katkılanmış GaN nanotellerin $\Gamma$ ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.....	50
Şekil 3.20. Yarıçap değeri 0.57 nm olan GaNNT(37) yapıdaki katkılama yapılacak Ga atomlarının pozisyonları.....	51
Şekil 3.21. Ga <sub>1</sub> ve Ga <sub>4</sub> pozisyonlarında tekli Te katkılanmış GaN nanotellerin a) ideal konfigürasyonları ve b) denge durum konfigürasyonları. ....	52
Şekil 3.22. a) Ga <sub>1</sub> ve b) Ga <sub>4</sub> pozisyonlarında tekli Te katkılanmış GaN nanotellerin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi. ....	53
Şekil 3.23. Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> ve Ga <sub>4</sub> -Ga <sub>1</sub> pozisyonlarında çiftli Te katkılanmış GaN nanotellerin a) ideal konfigürasyonları ve b) denge durum konfigürasyonları. ....	54
Şekil 3.24. a) Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> ve b) Ga <sub>4</sub> -Ga <sub>1</sub> pozisyonlarında çiftli Te katkılanmış GaN nanotellerin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi. ....	55
Şekil 3.25. Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> -Ga <sub>3</sub> ve Ga <sub>4</sub> -Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> pozisyonlarında üçlü Te katkılanmış GaN nanotellerin a) ideal konfigürasyonları ve b) denge durum konfigürasyonları. ....	56
Şekil 3.26. a) Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> -Ga <sub>3</sub> ve b) Ga <sub>4</sub> -Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> pozisyonlarında üçlü Te katkılanmış GaN nanotellerin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi. ....	57
Şekil 3.27. Ga <sub>1</sub> , Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> , Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> -Ga <sub>3</sub> şeklinde tekli, çiftli ve üçlü Te atomu katkılanmış GaN nanotellerin $\Gamma$ ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.....	58
Şekil 3.28. Ga <sub>4</sub> , Ga <sub>4</sub> -Ga <sub>1</sub> , Ga <sub>4</sub> -Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> şeklinde tekli, çiftli ve üçlü Te atomu katkılanmış GaN nanotellerin $\Gamma$ ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.....	59
Şekil 3.29. (001) doğrultusunda modellenmiş BP/GaN bulk ve nanotel heteroyapılarının sırasıyla a)katkılanmamış ve b) katkılanmış modelleri.....	60
Şekil 3.30. (001) doğrultusundaki BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü.....	61

Şekil 3.31. BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının minimum toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi. ....	62
Şekil 3.32. BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrilerinin z yönüne göre değişimi. ....	63
Şekil 3.33. (001) doğrultusundaki Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü. ....	64
Şekil 3.34. Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının minimum toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi. ....	65
Şekil 3.35. Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrisinin z yönüne göre değişimi. ....	66
Şekil 3.36. (001) doğrultusundaki BPGaNNT(74) heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü. ....	67
Şekil 3.37. BPGaNNT(74) heteroyapının minimum toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi. ....	68
Şekil 3.38. BPGaNNT(74) nanotel heteroyapının düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrisinin z yönüne göre değişimi. ....	69
Şekil 3.39. (001) doğrultusundaki Te-BPGaNNT(74) heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü. ....	70
Şekil 3.40. Te-BPGaNNT(74) heteroyapının minimum toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi. ....	71
Şekil 3.41. Te-BPGaNNT(74) heteroyapının düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrisinin z yönüne göre değişimi. ....	72
Şekil 3.42. Katılanmamış ve katılanmış GaNNT yapıların a) örgü sabiti ve b) bant aralığının üç farklı yarıçap değerine göre değişimi. ....	74
Şekil 3.43. $(Ga_1, Ga_1-Ga_2, Ga_1-Ga_2-Ga_3)$ ve $(Ga_4, Ga_4-Ga_1, Ga_4-Ga_1-Ga_2)$ iki farklı şekilde katılanmış tekli, çiftli ve üçlü Te-GaNNT yapıların a) örgü sabitleri ve b) bant aralıklarının atom sayısına göre değişimi. ....	76

# BÖLÜM 1

## GİRİŞ

Bir maddenin atomik ve moleküler seviyedeki nanoyapılarının kontrolü olarak bilinen nanoteknoloji günümüzde disiplinler arası bir yapıya dönüşmüştür. Özellikle son yıllarda nanobilim ve nanoteknoloji önemli bir gelişim göstermiş ve bu gelişimin etkisi dünya üzerindeki her alanda kabul edilmiştir [1]. Bu nedenle birçok bilim dalı açısından araştırma konuları içeren ve önemli ölçüde araştırmaların yapıldığı bir teknoloji alanı olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu teknolojinin temel amacı, makro ölçekteki ürünlerinin imalatında atomların ve moleküllerin kontrol edilmesi olarak bilinmektedir. Bu amaca bağlı olarak nanometre boyutundaki meteryalların ifadesi olan nanoyapılar kavramı ortaya çıkmıştır. Nanoyapılar büyüklüğüne bağlı müthiş ilgiden kaynaklanan eşsiz mekaniksel, fiziksel ve kimyasal özellikleriyle ön plana çıkmaktadırlar [2]. Bu ilginin büyüklük odaklı olması organik kimya, moleküler biyoloji, yarıiletken fiziği ve mikro fabrikasyon gibi birçok alana yayılmasına neden olmuştur. Karbon nanotüplerin 1991 yılında keşif edilmesinin ardından [3], özellikle bir boyutlu nanoyapılı sistemler araştırmacıların bir odağı olarak dikkat çekmiştir [4-6]. Teorik olarak nanotüp, nanobant, nanoçubuk ve nanotel olarak bilinen yarıiletken nanoyapıların potansiyel uygulamaları giderek artan bir ilgi uyandırmaktadır [7-9]. Buna bağlı olarak bir boyutlu yarıiletken nanoyapılar nanoboyutlu elektronik teknolojisi, optoelektronik ve fotonlu uygulamaların gelişimi için kullanılmaktadır [10-12]. Bu durum yarıiletken fiziği alanında nanoyapılarla ilgili birçok akademik çalışma yapılmasına yol açmıştır. Çalışmaların genellikle bulk yapılar, bulk heteroyapılar ve bu yapılardan elde edilen nanoteller ile ilgili olduğu görülmektedir. Fakat son yıllarda yabancı atom ile katkılanmış nanoyapılar çalışma alanı olarak sıklıkla tercih edilir duruma gelmiştir. Bir nanoyapıya yapılacak olan yabancı atom katkılanmasının geometrik ve elektronik özelliklerinde değişiklikler meydana getireceği

düşüncesi yarıiletken teknolojisindeki çalışmalar açısından oldukça hakim bir düşünce olarak karşımıza çıkmaktadır. Özellikle bu değişikliklerin teknolojinin lehine olacak şekilde gerçekleştirilme çabasının elektronik ve optik aletler açısından yeni buluşlara yol açacağı düşünülmektedir. Yarıiletkenlerin günümüz teknolojisinde kullanılan aletlerin yapımında ve geliştirilmesinde önemli bir yere sahip olduğu düşünüldüğünde problemin önemi daha da artmaktadır.

Günümüzde, bu problem göz önünde bulundurularak yapılan çalışmalar incelendiğinde III-V bileşik yarıiletkenlerinden olan Galyum Nitrür (GaN) ve GaN'in katkılanmış hallerinin önemli bir yeri olduğu görülmektedir. GaN elektronik açıdan bakıldığında direkt bant genişliğine sahip bir yarıiletken olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu özelliği sayesinde ışık yayan diyotlar [13,14], lazer diyotlar, ultraviyole (UV) detektörler, mikrodalga güç ve ultra yüksek enerji anahtarları [15] gibi elektronik aletlerin üretiminde önemli bir yere sahip olduğu bilinmektedir. Son zamanlarda özellikle GaN'in nanotel yapıların ışık yayan diyotların fabrikasyonunda düzlemsel yapılara alternatif olarak kullanılmaya başlanması sık rastlanan bir durum haline gelmiştir [16-21]. Buna bağlı olarak GaN mavi ışık yayan diyotlar (LED), lazer ve düz panel ekran gibi elektronik aletlerin üretiminde daha güçlü bir etkiye sahip olmuştur [22]. Bu tezde katkılanmış nanoyapıların elde edilmesinde yabancı atom olarak hem galyum (Ga) hem de azot (N) atomu yerine geçebilen ve 6A grubunda olan tellür (Te) atomu kullanılmıştır [23]. Ayrıca GaN ile bulk ve nanotel heteroyapı oluşturmak için ikinci bir yarıiletken olarak Bor Fosfat (BP) kullanılmıştır. BP'de III-V bileşik yarıiletkenlerden olup direkt olmayan ve geniş bant aralığına sahip bir yarıiletken olarak bilinir. Bu özelliğinden dolayı BP elektronik ve optik uygulamalar için önemli bir role sahip olmuştur [24-26]. Zinc Blende (ZB) GaN oda sıcaklığında silikon üzerinde elde edilmiş BP'in üzerinde elde edildiğinin örgü sabitleri sırasıyla 8.578 a.u ve 8.524 a.u olarak ölçülmüş ve bu değerler incelendiğinde, iki yarıiletken arasındaki örgü uyumsuzluğunun 0.6%'dan az olduğu görülmüştür [27]. Bu ölçüme bağlı olarak örgüsü uyuşan yarıiletkenler olarak nitelendirilmektedirler. Bu uyuşma durumundan yola çıkarak, BP'in GaN ile örgüsü uyuşan ve heteroeklem olarak GaN üzerine elde edilebilen bir yarıiletken olduğu söylenilebilir [28]. Aynı zamanda BP kendisiyle yüksek bir uyuma sahip olan GaN'in bazı alt katmanlar üzerinde elde edilmesinde kullanılmaktadır [27]. Örneğin BP yarıiletkenlerin deneysel olarak GaN ve Si arasında bir tampon malzeme olarak kullanıldığı bilinmektedir [29].



Yarıiletken teknolojisi açısından son derece önemli bir yeri olan katkılanmış GaN yarıiletkenlerin hem nanotel hem de heteroyapısı ile ilgili son yıllarda birçok deneysel ve teorik çalışma yapılmıştır. Sb ve P atomlarının ortak bir şekilde katkılanarak sentezlendiği [30], ferromanyetik özellikte Cu katkılı pasifleştirilmiş yapısının elde edildiği [31], Cr katkılı olarak elde edilip ferromanyetik karakterizasyonun ortaya konduğu [32] ve bulk yapıda taşıyıcı konsantrasyon ile sentezlenmiş yapısına Hg atomunun katkılandığı [33] GaN nanoteller bu alandaki bazı deneysel çalışmalar olarak karşımıza çıkmaktadır. Yapısal elektronik ve manyetik özelliklerin incelendiği Fe, Co, Mn katkılı [34], elektronik özelliklerinin incelendiği P atomu ile katkılı [35] ve ferromanyetik olarak ele alınan Cr atomu ile katkılı [36] olarak modellenmiş GaN nanotel çalışmaları ise teorik olarak gerçekleştirilmiştir. Ayrıca GaN ile ilgili yapılan optielektronik entegre bağlı devreler için GaN/BP/Si olarak elde edilen [27], anizotropik elektron devinimliğinin ortaya konduğu AlGaN/GaN olarak modellenen [37], ilk ilke hesaplamaları ile elektronik özelliklerinin ortaya konduğu Cr katkılı AlN/GaN olarak modellenen [38] ve hem wurtzite hemde ZB örgü yapılarında bant enerjilerinin elde edildiği GaN/AlN olarak modellenen [39] deneysel ve teorik heteroyapı çalışmaları örnek olarak verilebilir. Bu çalışmalardan yola çıkılarak GaN yarıiletkeninin bulk yapısı, nanotel yapıları, BP ile oluşturduğu heteroyapıları ve bu yapıların Te atomu ile katkılanmış hallerinin incelenmesi yapılmıştır. Bu incelemeler atomların, moleküllerin ve bunlardan oluşmuş olan kristallerin birbirleri ile etkileşimlerinin birçok özelliğinin ortaya konduğu yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) temelli 'ab initio' hesaplamaları ile yapılmıştır [40]. DFT moleküller ve yoğun madde sistemlerin özelliklerinin önceden tahmin edilmesi ve tanımlanmasına yönelik ilk ilke hesaplamalarında önemli bir teoridir [41]. Ayrıca bu hesaplamalarda değişim korelasyon potansiyeli olarak DFT'nin temel durum özelliklerinin iyi bir şekilde ifade etmeye yarayan Genel Gradyent Yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır.

Bu tezde yarıiletken olarak seçilmiş olan GaN nanoyapıların geometrik ve elektronik özellikleri yoğun bilgisayar simülasyon hesaplamaları kullanılarak detaylı bir şekilde incelenmiştir. Bu incelemede GaN yarıiletkenin bulk yapısı, üç farklı yarıçap değerindeki nanotel yapıları, üç farklı yarıçap değerinde Te atomu katkılanmış nanotel yapıları, belli bir yarıçapta birden fazla Te atomu katkılanmış nanotel yapıları, BP yarıiletkenle oluşturduğu bulk ve nanotel heteroyapısı ve bu heteroyapıların Te atomu ile

katkılanmış halleri ele alınmıştır. Ayrıca belli bir yarıçap değeri için birden fazla Te atomu katkısı ve bu katkıların farklı pozisyonlarda yapılmasının elektronik özellikler üzerine olan etkisi incelenmiştir. Bulk ve nanotel yapıların elektronik özelliklerini belirlemek için bant yapıları hesaplanmıştır. Bulk heteroyapı ve nanotel heteroyapıları oluşturan iki farklı yarıiletken yapının arasındaki bölgenin arayüzey özelliğini belirlemek için düzlemsel potansiyel hesaplamaları yapılmıştır. Bu hesaplamalarda GaN yarıiletken nanoyapıların modellenmesi z yönünde periyodik olma koşulu göz önünde bulundurularak yapılmıştır. Son olarak katkılanmış ve katkılanmamış GaN nanoyapıların temel durum hallerinin elde edilmesi için yapılan geometrik optimizasyon hesaplamalarının elektronik özellikleri üzerindeki etkisi ortaya konmuştur.

Bu tez, aşağıdaki şekilde oluşturulmuştur. Nanoteknolojiye kısa bir giriş yapıp nanoyapılar ile ilgili gerçekleştirilen çalışmalardan birinci bölümde bahsedilmiştir. Bununla birlikte GaN yarıiletkeninin bu teknolojiye önemi ortaya konularak yapılan çalışmalar özetlenmiştir. İkinci bölümde teori üzerinde yoğunlaşarak, hesaplamalarda kullanılan DFT hakkında ayrıntılı bilgi verilmiştir. Üçüncü bölümde ise yapılan hesaplamaların detayları ele alınarak, yarıiletken nanoyapıların geometrik ve elektronik özellikleri incelenerek sonuçlar tartışılmıştır.

## BÖLÜM 2

### TEORİ

#### 2.1. Çok Cisim Problemi

Atomlar, moleküller ve bunlardan oluşan katı yapılar gibi çok parçacıklı sistemlerin tanımlanabilmesi ve bu yapıların fiziksel özelliklerinin belirlenmesi fizik alanındaki bilim dünyasının en önemli problemlerinden olmuştur. Bu problemin çözümü kuantum etkilerinin ortaya çıkması ve madde içindeki elektronları tanımlamak için kuantum mekaniğinin yasalarının kullanıldığı oldukça karmaşık bir iştir. Ayrıca farklı sistemler gözetildiğinde elektronların sayısı artmakta ve birbirleriyle olan etkileşimleri hızla karmaşık bir hal almaktadır. Bu sistemlerin özelliklerinin belirlemesi için sistemlere ait Schrödinger denkleminin çözülmesini gerektirmektedir. Çok parçacıklı sistemlerde fiziksel özelliklerin sahip oldukları elektronların dağılımları ile belirlenmesi ve serbestlik dereceleri büyük olduğundan dolayı sistemler için Schrödinger denkleminin çözümü son derece zordur. Bu denklem bir kristal sistem, bir molekül veya katıdaki elektronlar davranışlarını tanımlayan çok cisim dalga fonksiyonlarını içerir. Elektronlar ve çekirdek tarafından oluşturulan bir sistemin Schrödinger denklemi temel olarak,

$$\hat{H}\psi(\vec{R}_l, \vec{r}_i) = E\psi(\vec{R}_l, \vec{r}_i) \quad (2.1)$$

formunda verilir. Burada  $\psi$ , çekirdek koordinatlarının  $\vec{R}_l$  ve elektron koordinatlarının  $\vec{r}_i$  konumlarına bağlı olduğu çok parçacık dalga fonksiyonu göstermektedir. Diğer taraftan  $E$  sistemin toplam enerjisi ve  $\hat{H}$  ise sistemin hamiltonyen operatörüdür. Çok parçacıklı bir sistem için hamiltonyen yapısını açacak olursak,

$$\hat{H} = \hat{T}_n + \hat{T}_e + \hat{V}_{nn} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{dış} \quad (2.2)$$

formunda olduğunu görürüz. Bu yapı incelendiğinde kinetik enerjiyi ifade eden  $T_n$  ve  $T_e$  terimleri sırasıyla sistemin çekirdek ve elektronlarının kinetik enerjilerini göstermektedir. Potansiyel ifadeler  $V_{nn}$ ,  $V_{ee}$ ,  $V_{en}$  ve  $V_{dış}$  ise sırasıyla çekirdeklerin birbirinden etkileşiminden kaynaklanan potansiyel enerjisi, elektronların kendi aralarındaki etkileşiminden doğan potansiyel enerji, elektronlarla çekirdekler arasındaki etkileşimden doğan potansiyel enerji ve tüm parçacıkların dış alanla olan etkileşim terimlerini göstermektedir. Atomik birimler ( $\hbar = e = m_e = 4\pi\epsilon_0 = 1$ ) göz önüne alınarak bu hamiltonyen,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_n} \frac{1}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_n} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \\ & \sum_{I=1}^{N_n} \sum_{j>I}^{N_n} \frac{Z_I Z_j}{|\vec{R}_I - \vec{R}_j|} + \hat{V}_{dış}(r_1, r_2, \dots; R_1, R_2, \dots) \end{aligned} \quad (2.3)$$

formunda ayrıntılı bir şekilde ifade edilebilir. Bu hamiltonyen kullanılarak Schrödinger denklemi için çözüm yapıldığında sistem için enerji öz değerleri elde edilmiş olur. Bu değerlerin elde edilmesi için denklemin çözülmesi gerekmektedir. Schrödinger denklemindeki çok elektron problemini çözmek için geçmişten bu yana “*çok-elektron dalga fonksiyonunun bulmayı amaçlayan dalga fonksiyonları yöntemi, green fonksiyonları yöntemi ve elektron yoğunluğunu bulma temeline dayanan elektronik yoğunluk yöntemi*” olmak üzere üç farklı yöntem üzerinde durulmuştur [42]. Araştırmacılar bu yöntemler doğrultusunda yukarıda tanımlanmış olan çok cisim probleminin çözümünü kolaylaştırmak amacıyla çeşitli yaklaşımlarda bulunmuşlardır.

### 2.1.1. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Çok cisim problemi kolaylaştırıcı ilk yaklaşım 1927 yılında Born ve Oppenheimer tarafından yapılmıştır. Born-Oppenheimer veya adyabatik yaklaşım olarak bilinen bu yaklaşıma göre elektronların çekirdeklere göre hafif olduğu, çekirdeklerin hareketleriyle karşılaştırıldığında da çok daha hızlı parçacıklar oldukları ve çekirdeklerin elektronların anlık pozisyonlarından etkilenmediği ortaya konmuştur [43]. Fakat çekirdekler sadece

elektronların oluşturduğu ortalama alanda hareket edebilir ve elektronların tek tek ani hareketleri pozisyonlarını deęiřtirmes. Bu yaklařım altında eřitlik (2.2)'deki hamiltonyenin yapısı oldukça basitleřtirmektedir. Bu yaklařıma gre ekirdekler kararlı olacaklardır ve kinetik enerjileri sıfır alınabilir. Bunun yanında ekirdek-ekirdek etkileřiminden kaynaklanan enerji deęeri de sabit olacaęından uygun bir referans deęeri ile sıfır olarak alınır. Kristalin bulunduęu dıř alan da sıfır alınırsa hamiltonyen sadece  terimden oluřacak olan

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} \quad (2.4)$$

elektronik hamiltonyenine dnřr ve bu hamiltonyenin aık formu

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_n} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} \quad (2.5)$$

řeklinde yazılır. Hamiltonyen oldukça sade bir hale gelmiř olmasına karřın Schrdinger denkleminin zm hala ok karıřıktır. Burada meydana gelen karıřıklıęın sebebi ok-elektron dalga fonksiyonu ( $N \approx 10^{26}$ ) olmak zere  $3N$  tane deęiřkene sahip olmasdır.

### 2.1.2. Hartree Yaklařımı

zm hala ok zor olan problem iin Hartree, dalga fonksiyonu yntemine dayanan bir yaklařım yapmıřtır. Hartree ok elektron Schrdinger denklemini tek elektron Schrdinger denklemine dnřtrerek problemin zmne kolaylık saęlayacak bir yntem ileri srmřtr [44]. z uyum alan (SCF) yntemi olarak ta bilinen bu yntem ile bir ortalama alan tanımlanarak ok elektron Schrdinger denklemi, tek elektron Schrdinger denklemine dnřtrlmektedir. Bu yntemde denklem (2.4)'teki elektron-elektron etkileřiminden kaynaklanan  $V_{ee}$  terimi sıfır olarak kabul edilir. Bunun yerine etkileřimi temsil etmek iin bir z uyum alanı ortaya konulmuřtur.

ok-elektronlu sistemde seilmiř herhangi bir  $i$ 'inci elektron kendisi dıřındaki tm elektron ve ekirdekler tarafından etkilenecektir. Herhangi bir zaman anında bu elektronun bulunduęu pozisyonda, dięer tm elektronların oluřturacaęı alanla aynı alanı oluřturan bir dıř kaynak  $V_{dış}$  oluřmaktadır. Bu alan iindeki  $i$ 'inci elektronun potansiyel enerjisi her bir elektron iin  $V_i$  olarak tanımlanırsa [45], elektron-elektron etkileřim

enerjisi potansiyeller cinsinden oluşturabilir. Burada tanımlanmış olan dış potansiyel teriminin eklenmesi ile denklem (2.5)'daki hamiltonyen

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_i \hat{V}_{du}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1} \sum_{j>i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.6)$$

formunu alarak daha da basit hale gelmiştir. Burada çok elektron Schrödinger denkleminde tek elektron Schrödinger denklemine yapılan dönüşüm SCF olarak adlandırılan bir ortalama alan tanımlanarak gerçekleştirilmiştir. Fakat Hartree yöntemi Pauli ilkesi ile uyum sağlamamaktadır. Çünkü bu yaklaşımda elektronik dalga fonksiyonu

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \Psi_1(\vec{r}_1) \cdot \Psi_2(\vec{r}_2) \dots \Psi_N(\vec{r}_N) \quad (2.7)$$

şeklinde tek tek elektronların dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazılmakta ve herhangi iki elektronun yer değiştirmesi durumunda simetrik kalmaktadır. Fakat Pauli ilkesine göre aynı durumda elektronik dalga fonksiyonun antisimetrik olması gerekmektedir [46]. Bu durumda Hartree yaklaşımının elektronların anti-simetrik dalga fonksiyonlarına sahip olduklarını hesaba katmadığı görülmektedir [47]. Ortaya çıkan bu durum Hartree yönteminin kusuru olarak bilinir.

### 2.1.3. Hartree Fock Yaklaşımı

Hartree yaklaşımında elektronik dalga fonksiyonun Pauli ilkesini sağlamaması sorun Hartree ve Fock tarafından 1930 yılında ortaya konmuş olan yaklaşımla aşılmıştır [48]. Bu yaklaşım anti simetrik dalga fonksiyonlarını kullanarak tek elektron dalga fonksiyonlarından, çok elektron dalga fonksiyonunu Hartree yaklaşımına göre daha iyi ifade etmektedir [49]. Bu yaklaşımda elektronik dalga fonksiyonu, elektronik orbitallerin anti simetrik çarpımı

$$\Psi(\vec{r}_1) = \Psi_1(\vec{r}_1) \cdot \Psi_2(\vec{r}_2) \cdot \Psi_3(\vec{r}_3) \dots \Psi_N(\vec{r}_N) \quad (2.8)$$

olarak yazılır [50]. Daha sonra bu anti simetrik çarpım 1951 yılında Slater tarafından ortaya konmuş olan Slater determinantı ile,

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.9)$$

formunda verilir [51]. Burada determinant elektronik dalga fonksiyonunun anti simetrik olma şartını sağlamaktadır. Yukarıdaki eşitlikle tanımlanmış olan dalga fonksiyonu kullanılarak problem için Hartree-Fock yaklaşımına bağlı olarak Schrödinger denklemi

$$\left[ -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + V_{dış}(\vec{r}_i) + V_H(\vec{r}_i) + V_{exc}(\vec{r}_i) \right] \Psi_i(\vec{r}_i) = E_i^{HF} \Psi_i(\vec{r}_i) \quad (2.10)$$

formunda ifade edilir. Bu yaklaşımdan kaynaklanan bir değişim (exchange) potansiyeli için  $V_{exc}$  terimi hamiltonyene eklenmektedir. Bu yaklaşımın en önemli avantajları tek elektron dalga fonksiyonlu bir Slater determinantı kullanması, varyasyonel olması ve toplam enerjiyi minimize eden bir deneme dalga fonksiyonu kullanması şeklinde sıralanabilir. Fakat elektronlar arasındaki korelasyonun dikkate alınmaması dezavantaj olarak görülmektedir. Aynı zamanda değişim teriminin yerel olmaması Hartree-Fock denkleminin çözümünü zorlaştırmaktadır. Bu yaklaşım çok cisim problemini çözmede başarılı olmasa da değişim potansiyel enerji terimini ve etkileşim enerjisini temsil eden korelasyon enerjisi kavramını açıklamaktadır [52,53].

#### 2.1.4. Yoğunluk Fonksiyonu Yaklaşımı

Schrödinger denkleminin çözümü için kritik bir yer tutan elektron-elektron etkileşme potansiyelinden gelen katkının belirlenmesi ve problemin çözümünü sağlamak için kullanılan yaklaşımlardan bir diğeri yoğunluk fonksiyonu yaklaşımıdır. Bu yaklaşımda denklemin temel değişkeni olarak dalga fonksiyonu yerine elektron yük yoğunluğu kullanılmaktadır. Bu düşünce yoğunluk fonksiyonel teorisinin temelini oluşturmaktadır.

#### 2.2. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

Temel değişken olarak dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu kullanımı fikri ilk olarak Thomas ve Fermi tarafından ortaya atılmıştır [54,55]. Daha sonra 1960'ların ortalarında çok elektronlu sistemlerin yapısal, elektronik ve titreşim olarak

isimlendirilen temel hal özelliklerinin belirlenmesi amacıyla ortaya atılmıştır. Zaman içerisinde Hohenberg ve Kohn 1964 [56] ve onun devamı olan Kohn ve Sham 1965 [57] teoremi ile yerel yoğunluk yaklaşımı ve pseudopotansiyel metodu kullanılarak birbirinden farklı birçok değişik sistem için, kesin ve beklenen sonuçların elde edilmesinde basit bir taslak oluşturulmuştur [58].

Bu taslağa göre çok parçacıklı sistemler için çözümü zor olan dalga tabanlı Schrödinger eşitliğinin yoğunluk fonksiyonu  $n(\vec{r})$  cinsinden ifade edilmesi problemin çözümüne kolaylık sağlayacağı düşüncesi vardır. Çok parçacıklı bir sistemi tanımlayan denklemi yoğunluk cinsinden ifade etmek için, çok-cisim dalga fonksiyonu için tek-parçacık yoğunluk operatörünün beklenen değerini hesaplamak gerekir. Bu durumda sistemin yoğunluk fonksiyonu sırasıyla,

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.11)$$

$$n(\vec{r}) = \langle \psi | \hat{n}(\vec{r}) | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \int \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) |\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \quad (2.12)$$

$$n(\vec{r}) = N \int |\psi(\vec{r} \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (2.13)$$

formlarında ifade edilir. Buradaki son eşitliğin her iki tarafının  $\vec{r}$  üzerinden integrali alınır,

$$\int n(\vec{r}) d\vec{r} = N \iint |\psi(\vec{r} \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r} d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = N \quad (2.14)$$

sistemin parçacık sayısına ulaşılmış olur.

DFT kapsamında çok-elektronlu bir sistem için Hamiltonyen denklem (2.5)'te küçük bir değişiklik yapılarak

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{dış} + \hat{V}_{ee} \quad (2.15)$$

şeklinde yazılmaktadır. Bu hamiltonyenin birinci terimi elektronların kinetik enerjisini, ikinci terimi dış potansiyel enerjiyi ve üçüncü terimi ise elektron-elektron



etkileşmesinden kaynaklanan potansiyel enerji terimini temsil etmektedir. Sistemin enerji terimlerinin yoğunluk cinsinden yazılabilir olmasının sağlanması için hamiltonyendeki her terimin daha yakından incelemesi gerekmektedir.

İlk olarak kinetik enerji terimini göz önüne alındığında yoğunluk cinsinden tam olarak yazılmasının mümkün olmadığı görülmektedir. Bu olumsuzluğu ortadan kaldırmak için terim, kendi ile aynı yoğunluğa sahip yardımcı bir sistem ile tanımlanır. Yapılan tanıma göre sistem için N tane etkileşmeyen parçacığın yoğunluk ifadesi,

$$n(\vec{r}) = \sum_i^{N_e} |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.16)$$

formundadır. Burada yoğunluk ifadesi tek parçacık orbitallerinin mutlak değerlerinin karelerinin toplanması şeklinde verilir. Bu ifadedeki orbitaller aynı zamanda Kohn-Sham orbitalleri olarak da bilinir. Sistemin kinetik enerjisinin tam olarak ifadesi Kohn-Sham orbitallerinin kinetik enerjilerinin toplamı ve ek bir  $\Delta T$  terimi kullanılarak

$$T_s = -\frac{1}{2} \sum_i \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_i^2 \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} + \Delta T \quad (2.17)$$

şeklinde yapılmaktadır.

Dış potansiyel enerji terimi sistemin Hamiltonyeni dikkate alındığında potansiyeli temsil eden teriminin beklenen değerinin,

$$E_{du} = \langle \psi | \sum_i \hat{V}_{du}(\vec{r}_i) | \psi \rangle \quad (2.18)$$

şeklinde yazılması ile bulunur. İşlem N tane parçacık üzerinden gerçekleştirildiğini düşündüğümüzde dış potansiyel enerjisi,

$$E_{du} = \int \dots \int \sum_i V_{du}(\vec{r}_i) |\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \quad (2.19)$$

şeklinde hesaplanır. Denklem (2.12) bu eşitlikte yerine koyulduğunda sistemin dış potansiyel biriminden gelen enerji değeri yoğunluk cinsinden

$$E_{du} = \int V_{du}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.20)$$

formunda yazılmış olur.

Elektron-elektron etkileşmesinden oluşan potansiyel enerji katkısının hamiltonyendeki terimi  $V_{ee}$ 'nin N tane parçacık üzerinden beklenen değeri

$$E_{ee} = \frac{1}{2} \int \dots \int \sum_{i=1} \sum_{j>i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} |\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \quad (2.21)$$

$$E_{ee} = \frac{1}{2} \int \dots \int \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \int |\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N \quad (2.22)$$

formlarında ifade edilir. Burada iki parçacıklı bir sistem olan elektron-elektron etkileşmesinden bahsedildiğinden parçacık yoğunluğu,

$$n^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') = n(\vec{r}) n(\vec{r}') + \Delta n^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (2.23)$$

şeklinde yazılmaktadır. Yoğunluğun  $\vec{r}$  ve  $\vec{r}'$  konumları sırasıyla bir elektronu ve ikinci bir elektronu temsil etmektedir. Yukarıda iki parçacık için yazılmış olan yoğunluk ifadesi denklem (2.22)'e yerleştirildiğinde enerji değeri,

$$E_{ee} = \frac{1}{2} \int \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \Delta E_{ee} \quad (2.24)$$

şeklini alır. Burada  $\Delta E_{ee}$  katkısı denklem (2.23)'ten gelmektedir. Elektronların kinetik enerjisi, dış potansiyel enerji ve elektron-elektron etkileşiminden kaynaklanan potansiyel enerji için elde edilmiş olan terimlerin toplamı alınarak çok parçacıklı bir sistem için yoğunluk cinsinden toplam enerji ifadesi,

$$E = -\frac{1}{2} \sum_i \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_{\vec{r}}^2 \phi_i^*(\vec{r}) d\vec{r} + \int V_{du}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \Delta T + \Delta E_{ee} \quad (2.25)$$

şeklindedir. Toplam enerji için yazılan bu ifadenin iki terimi,

$$E_{XC} = \Delta T + \Delta E_{ee} \quad (2.26)$$

şeklinde yazılır ve bu terim yapılan teorik çalışmalarda kullanılan meteryalin özelliği dikkate alınarak değişik yaklaşımlarla ifade edilmektedir. Bu tez çalışmasındaki sistemler için GGA yapılmıştır. Burada  $E_{xc}$  sistemin değişim korelasyon ifadesi olup GGA yaklaşımına göre,

$$E_{xc}^{GGA} = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{ec}(n(\vec{r})) d\vec{r} \quad (2.27)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifade yerine yazıldığında sistemin toplam enerjisi,

$$E = -\frac{1}{2} \sum_i \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_{\vec{r}}^2 \phi_i^*(\vec{r}) d\vec{r} + \int V_{du}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \int n(\vec{r}) \varepsilon_{ec}(n(\vec{r})) d\vec{r} \quad (2.28)$$

şeklindeki son halini alır. Bu eşitlik sistem için yoğunluğunun bir fonksiyoneli olarak yazılmış olan toplam enerjisinin ifadesini vermektedir.

### 2.2.1. Hohenberg Kohn Teoremleri

Hohenberg ve Kohn, Thomas-Fermi modeli üzerinde çalışırken  $n(\vec{r})$  elektron yoğunluğunun değişken fonksiyon olduğu varyasyonel bir yöntem geliştirmişlerdir. Bu yöntemle bağlı olarak iki önemli teorem ortaya koymuşlar ve bu teoremlerin ispatlarını yapmışlardır. Bu yöntemle göre, dış potansiyel ne olursa olsun temel durumdaki tüm elektronik sistemlere uygulanan bir  $F[n(\vec{r})]$  evrensel fonksiyoneli vardır ve esas iş bu fonksiyoneli tanımlayabilmektir [56]. Bu fonksiyonelin tanımlanabilmesi verilen bir dış potansiyelde temel durum enerjisinin belirlenmesini kolaylaştırmaktadır.

### Teorem 1

Bir dış potansiyel  $V_{dış}(\vec{r})$  altında parçacıkları etkileşen herhangi bir sistem bir sabit ile  $n(\vec{r})$  temel durum elektron yoğunluğu tarafından benzersiz bir şekilde belirlenir.

### Teorem 1'in Sonucu

Sistemin Hamiltonyeni, enerjii sadece kaydıracak bir sabit dışında tamamen belirlenmiş olacağından, sistemin çok elektron dalga fonksiyonu ve diğer özellikleri tamamen belirlenebilir.

Bu teoremi göz önüne alarak Sistemin Hamiltonyenin,

$$\hat{H} = \hat{F} + \hat{V}_{dış} \quad (2.29)$$

şeklinde yazıldığını düşünelim. Buradaki  $\hat{F}$  terimi,

$$\hat{F} = \hat{T} + \hat{V}_{ee} \quad (2.30)$$

formunda ilki sistemin kinetik enerjisini ikincisi ise elektron-elektron etkileşmesinden kaynaklanan Hamiltonyen terimini içeren bir yapıda verilmiştir. Bu durumda  $n_0(\vec{r})$  temel durum yoğunluklu sistem için yazılmış  $\psi_{dış}^{(1)}(\vec{r})$  ve  $\psi_{dış}^{(2)}(\vec{r})$  dalga fonksiyonlarına bağlı olarak elde edilmiş iki farklı  $\hat{H}_{dış}^{(1)}(\vec{r})$  ve  $\hat{H}_{dış}^{(2)}(\vec{r})$  Hamiltonyenin ve eşit olmayan  $\hat{V}_{dış}^{(1)}$  ve  $\hat{V}_{dış}^{(2)}$  şeklindeki dış potansiyellerinin olduğunu varsayalım. Varyasyonel prensibe göre enerji değeri,

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle < \langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle \quad (2.31)$$

şeklindedir ve bu temel durumun dejenere olmadığını düşünülürse eşitsizlik tamamıyla kaldırılabilir [59-61]. Çünkü iki Hamiltonyende aynı  $n_0(\vec{r})$  temel durum yoğunluğuna sahiptir. Bu durumda (2.31) eşitliğini yeniden,

$$\langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle = \langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(2)} | \psi^{(2)} \rangle + \int [\hat{V}_{dış}^{(1)} - \hat{V}_{dış}^{(2)}] n_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.32)$$

şeklinde yazılır. Bu durumun tersi düşünülürse aynı ifade,

$$\langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(2)} | \psi^{(1)} \rangle = \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle + \int [\hat{V}_{di}^{(2)} - \hat{V}_{di}^{(1)}] n_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.33)$$

şeklinde de ifade edilebilir. Denklem (2.31) dan yola çıkılarak  $E^{(1)}$  ve  $E^{(2)}$ ,

$$E^{(1)} < \langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle \quad (2.34)$$

$$E^{(2)} < \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(2)} | \psi^{(1)} \rangle \quad (2.35)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki  $E^{(1)}$  ve  $E^{(2)}$  ifadelerine sırsıyla denklem (2.32) ve (2.33) yerleştirilirse ve eşitlikler taraf tarafa toplanırsa,

$$E^{(1)} + E^{(2)} < E^{(1)} + E^{(2)} \quad (2.36)$$

şeklinde ifade edilen çelişkili bir durum ortaya çıkacaktır. Bu nedenle önemsiz bir katkı sabitiyle ayrılmadıkça, taban durum için aynı elektronik yoğunluğa karşılık gelen iki farklı potansiyel elde etmek mümkün değildir [62,47]. Dış potansiyel sabit içindeki yoğunluk tarafından eşsiz bir şekilde belirlenir. Bu da bizim teoremi *olmayana ergi yöntemi* ile ispatlamamızı sağlamaktadır.

## **Teorem 2**

Tüm elektron sistemleri için,  $n(\vec{r})$  elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olarak enerji  $E[n(\vec{r})]$  evrensel fonksiyoneli şeklinde tanımlanabilir. Bu tanım aynı zamanda  $V_{dış}(\vec{r})$  içinde geçerlidir. Sistemin temel durum enerjisi, verilen bir  $V_{dış}(\vec{r})$  dış potansiyeli için global minimum değerine sahiptir ve fonksiyoneli minimize eden  $n(\vec{r})$  yoğunluğu, temel durum yoğunluğu  $n_0(\vec{r})$ 'dir.

## **Teoremin 2'nin Sonucu**

$E[n(\vec{r})]$  fonksiyoneli tek başına temel durum enerjisini ve yoğunluğunu belirlemek için yeterlidir. Genel olarak uyarılmış elektron durumları başka yöntemlerle belirlenmelidir.

Sistemin toplam enerji ifadesini  $n(\vec{r})$ 'nin bir fonksiyoneli olarak,

$$E_{HK}[n] = T[n] + E_{i\check{c}}[n] + \int V_{du}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + E_{II} \quad (2.37)$$

şeklinde ifade edilir. Bu enerji ifadesinin son bölümündeki  $E_{II}$  karşılıklı etkileşen çekirdeklerin enerjisini ifade etmektedir. Enerjinin birinci terimi kinetik enerjiyi ikinci terimi ise iç potansiyel enerjiyi ifade etmekte ve bu terimlere bağlı olarak  $F[n]$  ifadesi,

$$F_{HK}[n] = T[n] + E_{i\check{c}}[n] \quad (2.38)$$

şeklinde yazılmaktadır. Bütün sistemleri ifade edebilen bu yapı (2.37) eşitliğine yerleştirilirse sistemin toplam enerji ifadesi,

$$E_{HK}[n] \equiv F_{HK}[n] + \int V_{du}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + E_{II} \quad (2.39)$$

formunu alır. Tek bir temel durum yoğunluğu  $n^{(1)}(\vec{r})$ 'ye bağlı olarak temel durumdaki bir sistemin Hamiltonyenin beklenen değeri,

$$E^{(1)} = E_{HK}[n^{(1)}] = \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle \quad (2.40)$$

şeklinde ifade edilir. Varyasyonel prensibe göre sistem için tanımlanmış ikinci bir  $n^{(2)}(\vec{r})$  yoğunluğu için daha büyük bir enerji değeri elde edilecek ve ilk enerjiyle karşılaştırıldığında,

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle < \langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle = E^{(2)} \quad (2.41)$$

İfadesi ortaya çıkmaktadır. Bu yapı göz önünde bulundurularak yapılan hesaplamalar sonucunda sistemin toplam enerjisinin minimum olduğu zaman ki yoğunluğu, sistemin temel durum yoğunluğu olarak kabul edilir.

### 2.2.2. Kohn Sham Denklemleri

Çok-elektronlu sistemleri için Kohn ve Sham 1965 yılında değişim ve korelasyon etkilerini de içeren Hartree Fock denklemlerine benzeyen öz uyumlu denklemler için bir formülasyon ifade ettiler. Bu formülasyona göre gerçek ve etkileşen elektronların olduğu

bir sistem, etkileşmenin olmadığı hayali bir sisteme dönüştürülüp elektronlar etkin bir potansiyel etkisinde hareket ettirilmektedir [57]. Elektronların hayali bir sistemde hareket ettiği fikrini ortaya koyan bu potansiyel Kohn-Sham tek parçacık potansiyeli olarak bilinmektedir.

DFT temel prensibine göre dalga fonksiyonlarını kullanmadan sadece temel durum elektron yoğunluğunu ile çok elektron sistemlerinin özellikleri belirlenmektedir. Çok parçacıklı bir sistemin toplam enerji ifadesinin türevini alalım

$$\frac{\partial E_{XC}^{GGA}}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial \phi_k^*} = \varepsilon_k \phi_k(\vec{r}) \quad (2.42)$$

N tane elektrondan oluşan bir sistem için relativistik olmayan Schrödinger denkleminin elde edilen yoğunluğa bağlı toplam enerji ifadesi denklem (2.27)'teki gibi olduğu düşünülürse toplam enerjinin her bir teriminin türevi alınacaktır. Bu durum göz önünde bulundurulduğunda dış potansiyel enerji  $E_{dış}$ , kinetik enerji  $T_s$ , ve Hartree enerjisi  $E_H$  ve değişim korelesyon enerji  $E_{exc}$  terimlerinin ayrı ayrı kısmi türevlerinin alınmasıyla sistem için yazılmış olan denklem,

$$\frac{\partial E_{XC}^{GGA}}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial \phi_k^*} = \left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{dış}(\vec{r}) + V_{XC} \right] \phi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k \phi_k(\vec{r}) \quad (2.43)$$

formunu alır. Bu denklemdeki potansiyel ifadeleri temsil eden terimlerin toplamı etkin potansiyel olarak isimlendirilir ve bu etkin potansiyel ifadesi

$$\hat{V}_{et} = \hat{V}_{dış}(\hat{r}) + \hat{V}_{XC} \quad (2.44)$$

şeklinde yazılır. Aynı zamanda sistemin tüm terimlerini temsil eden kısım Kohn-Sham denklemleri ya da orbitalleri olarak bilinir. Yukarıda ifade edilen  $\hat{V}_{et}$  potansiyel ifadesi denklem (2.43)'da yerine yazıldığında sistem için genel olarak,

$$(\hat{T} + \hat{V}_{et})\phi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k \phi_k(\vec{r}) \quad (2.45)$$

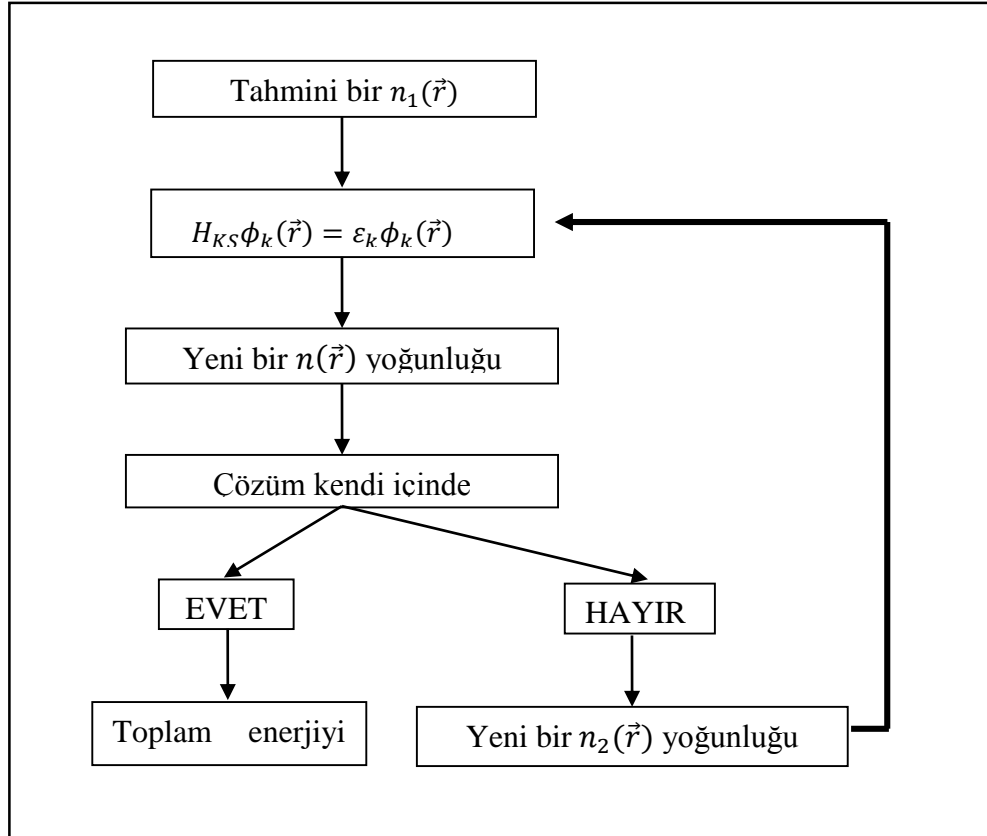
ifadesi elde edilmiş olur. Eşitlikte kinetik enerji ve etkin potansiyel enerji için belirtilmiş olan terimlerin toplamı,

$$H_{KS} = \hat{T} + \hat{V}_{et} \quad (2.46)$$

Kohn-Sham hamiltonyenini oluşturur. Tanımlanmış olan bu hamiltonyene bağlı olarak olarak sistemin Schrödinger denklemi,

$$H_{KS}\phi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k\phi_k(\vec{r}) \quad (2.47)$$

şeklinde yazılır. Bu eşitlik N elektronlu bir sistemin Kohn-Sham denklemlerine göre yazılmış Schrödinger denklemini göstermektedir. Bu denklem DFT kapsamında yapılan toplam enerji hesaplamalarının temelini oluşturmaktadır. Toplam enerji hesapları için kendini doğrulama yöntemi kullanılmaktadır. Bu yöntemin yapısı şekil 2.1 de verilmiştir.



Şekil 2.1. Kohn-Sham denklemi kullanılarak kendini doğrulama yöntemi ile yapılan toplam enerji hesabının şeması.



Şekil DFT'ni kullanarak yapılan öz yinelemeli alan yönteminin akış diyagramını vermektedir. Bu şemadaki akış sistem kendi kendini doğruladığı ana kadar devam edecektir. Minimum enerji için gerekli olan şart sağlandığında enerjinin toplam değeri hesaplanır.

### 2.2.3. Genel Gradyent Yaklaşımı

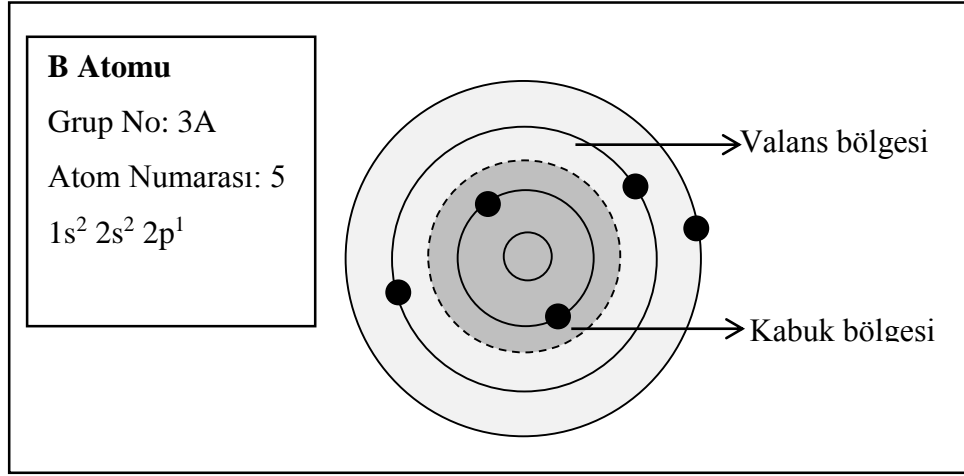
Elektron yoğunluğundaki homojen olmama sorununu çözmek için gradyent ve daha yüksek dereceli türevler cinsinden yoğunluğun bir açılımı yapılır [62]. Soyut olarak tanımlanmış olan bu yaklaşım genel olarak değişim korelasyon enerjisinin bir parçasının yoğunluk  $n(r)$  ve gradyentin karesi ( $s^2$ )'ye bağlı olarak

$$E_{EXC}^{GGA} = \int n(r) \varepsilon_{EXC}^{GGA}(n(r), s^2) dr \quad (2.48)$$

formunda tanımlanır [63]. Bu denklem asimtotik olarak, uzayda yavaş bir şekilde değişen yoğunluklar için geçerlidir. Burada ayrı ayrı normalizasyon koşullarını sağlayan boşluk değişim korelasyonuna ek olarak izotropi koşulu da hesaba katılmaktadır. Bu yaklaşım göz önünde bulundurulup teorik olarak birçok potansiyel fonksiyonu üretilmiştir. Bunlardan Perdew ve Wang (PW) tarafından ileri sürülen PW86 ve PW91 [64,66], Becke, Lee, Yang ve Parr (BLYP) tarafından ileri sürülen BLYP [67,68] ve Perdew, Burke ve Enzerhof (PBE) tarafından ileri sürülen PBE [69,70] fonksiyonelleridir. Bu tezde yapılan toplam enerji hesaplarında GGA baz alınarak üretilmiş PBE pseudopotansiyelleri kullanılmıştır.

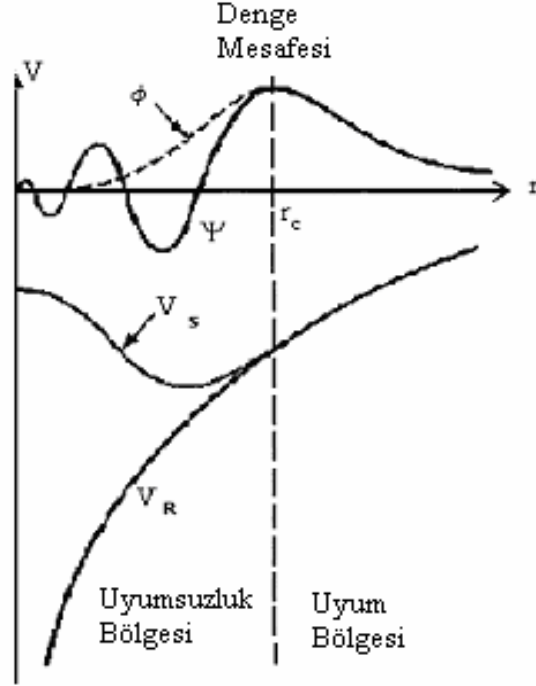
### 2.2.4. Pseudopotansiyel Formalizmi

Elektronik dalga fonksiyonları Bloch teoremi kullanılarak düzlem dalga setlerine göre yazmak her zaman iyi bir yöntem değildir. Bu yöntem ile sıkı bağlı durumda olan kabuk orbitallerini açmak ve kabuk bölgesindeki valans elektronlarının dalga fonksiyonlarının çok hızlı salınımlarını tanımlamak için çok fazla sayıda düzlem dalgaya gerek vardır. Bu durum elektronik dalga fonksiyonlarının hesaplanması için çok kolay bir iş değildir. Ortogonalize düzlem dalga (OPW) metoduna [71] dayanan pseudo-potansiyel yöntemi, çok az sayıda düzlem dalga setleri kullanılarak elektronik dalga fonksiyonlarının yazılmasına olanak sağlamaktadır [72-74]. Bu yöntem göz önünde bulundurularak şekil 2.2'de Bor (B) atomu için kabuk ve valans bölgesini gösteren basit bir model verilmiştir.



Şekil 2.2. B atomunun kabuk ve valans bölgesini gösteren basit atom modeli.

Şekilde kabuk bölgesinde sıkı bağlı elektronlar ve çekirdek bulunmaktadır. Valans bölgesinde ise atomun elektronik özelliklerini belirlemede önemli bir rol oynayan değerlik elektronları bulunmaktadır. Kabuk bölgesindeki toplam enerji seviyeleri, valans bölgesine göre daha büyüktür. Her iki bölgenin de aynı büyüklükteki bir negatif potansiyele maruz kaldıkları düşünüldüğünde valans elektronları daha yüksek kinetik enerjiye sahip olacaklardır. Bant yapısı hesaplamalarında önemli bir soruna neden olan bu durum pseudopotansiyel yöntemi ile ortadan kaldırılmıştır. Bu yöntemde valans elektronlarını etkileyen ve kabuk elektronlarının kısmen perdelenen iyonik potansiyel yerine bir pseudopotansiyel tanımlanır [75,77]. Bu potansiyel Şekil 2.3 verilmiş olan kabuk bölgesindeki düzensiz bir yapıdaki dalga fonksiyonu yerine daha düzgün ve yumuşak bir yapıdaki fonksiyon olarak tanımlanır.



Şekil 2.3. Gerçek dalga ve pseudopotansiyel dalga fonksiyonlarının gösterimi.

Şekil incelendiğinde potansiyelin  $r_c$  kesme değerinden sonra valans bölgesi için değişmez kaldığı görülmektedir. Fakat kabuk bölgesi için ise daha düzgün ve yumuşak pseudofonksiyonlarla yer değiştirmektedir. Aynı zamanda şekilde bir sistem için tanımlanmış olan  $V_s$  pseudopotansiyel,  $\phi$  dalga fonksiyonu,  $V_R$  gerçek potansiyeli,  $\psi$  gerçek dalga fonksiyonu ve  $r_c$  kabuk bölgesinin yarıçapı kavramlarını göstermektedir. Kabuk bölgesi dışında gerçek potansiyelle pseudopotansiyelin yapıları aynıdır. Pseudopotansiyel kabuk bölgesindeki elektronları hareketsiz kabul ederek yok sayar ve sadece valans elektronlarını dikkate alır. Bu sayede sistemin elektron sayısı azalmakta ve hesaplama yapılması açısından önemli bir kolaylık getirmektedir. DFT çerçevesinde bir pseudopotansiyel, küresel perdeleme yaklaşımı ve radyal Kohn-Sham denklemi özuyumlu çözümü elde edilir [78].

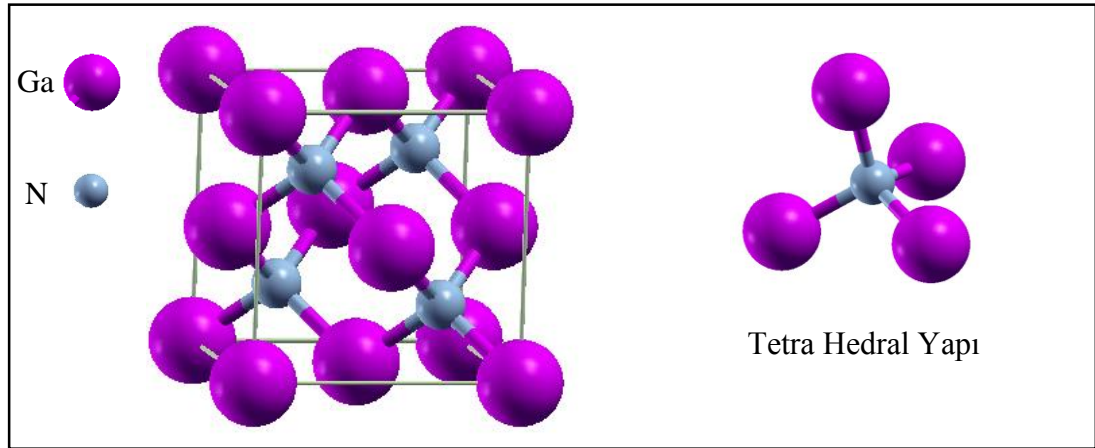
### 2.3. Yarıiletken Nanoyapıların Sayısal Hesaplamaları

Yarıiletken malzemelerin hem iletken hem de yalıtkan özellik gösterecek şekilde elde edilmesi elektronik teknolojisi açısından son derece önemlidir. Yarıiletkenlerin özellikle nanoyapılar olarak modellenmesi ve katkılama yoluyla bant yapılarında değişiklikler meydana getirilebilir olması bu maddelerin önemini çok daha fazla

arttırmıştır. Katkılama işlemi iletkenlik özelliğinin artırılması veya azaltılması olarak sağlamaktadır. Bu özelliklerin bir sonucu olarak katkılanmış yarıiletken nanoyapılar ile iki uçlu diyot ve üç uçlu transistör gibi elektronik teknolojisinde kontrol işlevi olan mantık devre elemanları elde etmek mümkündür. Bu devre elemanları günümüz teknolojisinin temelini oluşturmaktadır. Bu bölümde tez çalışmasında ele alınan nanoyapıların yapısal özellikleri, SCF hesaplaması, sistem parametreleri, bant yapı hesaplaması ve düzlemsel potansiyel hesaplamaları ile ilgili temel bilgiler verilmiştir.

### 2.3.1. Yarıiletken Nanoyapıların Örgü Yapısı

Bu tezde GaN yarıiletkenin ZB örgülü yapısı kullanılmıştır. Buradaki örgü yapısı tetra hedral bir geometrik yapıdan oluşmaktadır. Metanın ( $\text{CH}_4$ ) bağ yapısı örnek alındığında merkeze yerleşmiş bir N atomunun etrafına her biri ile  $109.5^\circ$  'lık bağ açısı bulunan dört adet Ga atomu gelmektedir [79]. Şekil 2.4'te GaN bulk yapısı ve Ga ve N atomlarında oluşmuş tetra hedral geometrik yapısı verilmiştir. Bu tezde GaN bulku tetra hedral koordinasyon geometrisine sahip zinc blende yapılı olarak modellenmiştir. Bu yapı her bir N atomuna bağlı 4 adet Ga atomu ile (Ga-N-Ga) üçlüsü şeklinde oluşmuş olan birbirine eşit dört adet açıdan oluşmaktadır. Geometrik optimizasyon sırasında bu değerler değişime uğramaktadır.



Şekil 2.4. Zinc Blende örgülü GaN bulk yapısı ve tetra hedral geometrisi.

Özellikle nanotellerle ilgili yapılmış olan geometrik optimizasyon çalışmalarda bulk yapılar için yapılanlara göre açı değerlerinin değişiminin daha fazla olduğu gözlenmektedir. Bu durum maddenin elektronik özelliklerinde önemli değişimlere yol açmaktadır. Optimizasyon sonrası denge durumuna ulaşmış olan sistemin elektronik özelliklerindeki değişimini gözleyebilmek için yarıiletken sistemlerin bant yapılarını incelemesi gerekmektedir. Bant yapıları sistemin Brillouin hücresi üzerinde tanımlı olan temel simetri yönelimleri ile belirlenen özel k noktaları dikkate alınarak elde edilmektedir. Bu tezde incelenen sistemlerin bant yapıları ZB kristal yapının Brillouin hücresine göre belirlenmiş  $\Gamma (\pi/a)(0,0,0)$  ve  $Z (2\pi/a)(0,0,1)$  özel simetri noktalarını kullanılarak elde edilmiştir. Bu özel noktaların seçilmesinin sebebi tezde incelenen nanoyapıların (001) doğrultusunda modellenmiş olmasıdır. Bu doğrultuda yapılacak incelemenin elektronik özelliklerin belirlenmesi açısından önemli fikirler vereceği düşünülmektedir.

### 2.3.2. Öz Uyum Alan Hesaplamaları

Bu tezde çok elektronlu sistemlerin enerjik ve elektronik yapısı ile ilgili çalışmaların gerçekleştirildiği ampirik parametrelerin kullanılmadığı kuantum mekanik eşitliğinin çözümü temeline dayanan ab-initio hesaplamaları kullanılmıştır. Bu hesaplamalar sayesinde deneysel çalışmalar ile anlamlı bir karşılaştırma yapabilmek ve henüz denemesi yapılmamış kesin tahminler elde etmek mümkündür. Bu amaç doğrultusunda yapılan moleküler simülasyon çalışmalarla henüz denenmemiş çalışmalara ışık tutmak hatalı deneylerden doğan maddi kayıpların minimize edilmesi amaçlanmaktadır.

Ab-initio tabanlı Quantum Espresso programının GGA altındaki DFT uygulanması güvenilir sonuçlar vermektedir. Bu güvenilirlik sayesinde kristal yapıdaki sistemlerin elektronik taban durum özellikleri ile ilgili geçerli sonuçlar elde edilmektedir [80]. DFT kendi aralarında etkileşim içinde olan elektronların çok cisim problemini SCF hesaplaması yoluyla çözümlenmiş tek parçacıklı Schrödinger sistemi eşitliğine indirgemektedir [81]. Bunun yanında hesaplamalar da bir maddenin kimyasal bağ olayından sorumlu olan ve ilgili fiziksel özellikleri belirleyen valans elektronlarıyla ilgili olan hesaplamalarda pseudopotansiyel uygulamasını kullanmaktadır [82]. Bu tez için kullanılan sistemlerin en kararlı hali olan denge durumunu elde etmek için Kinetik Enerji Kesim ( $E_{kesim}$ ) değeri, sistemi temsil eden özek k noktaları  $k_{nokta}$  ve örgü sabiti gibi

parametrelerin yakınsama çalışması yapılmıştır. Bir sistemin denge durumunu minimum enerjiye sahip olduğu zamanda oluşur. Bu işlemler nanoyapıdaki sistemlerin belirsizlik durumlarını ortadan kaldırılmaktadır. Bir sistem için belirsizlik kavramı ne kadar az olursa, o sistemin tanımlaması da gerçeğe o kadar yakın bir şekilde yapılmış olmaktadır.

### 2.3.3. Sistem Parametreleri

Pseudopotansiyeli metodu kullanılarak yapılan ilk-ilkeler hesaplamaları Quantum Espresso programı temel bileşenlerinden biri olan Düzlem Dalga Öz-Uyumlu Alan (PWSCF) paket programı kullanılmıştır [2]. Espresso, nano boyuttaki yapıların gerçeğe uygun bir şekilde modellenmesi ve elektronik yapısının hesaplamalarının yapılması için kullanılan bir programdır. Araştırmacıların son zamanlarda ilgi odağı olan ve hesaplamalarında sıkça kullanılan bir program olarak bilinir. Bu program düzlem dalga ve pseudopotansiyeller yardımı ile DFT temeline göre çalışmaktadır. Bu tezde programın relaxion ve scf yapı hesaplamaları kullanılmıştır. Bu parametreler çalışılmakta olan sisteme göre değişen önemli parametreler olarak bilinir. Sistemin tanımı için önemli olan diğer parametreler ise  $E_{kesim}$  ve  $K_{nokta}$  olarak bilinmektedir. Bu parametreler sistemin minimum kararlı halini belirlemeye yarayan fiziksel kavramları temsil etmektedirler.

#### i. Kinetik Enerji Kesim Değeri

Düzlem Dalga Baz Setleri Bloch teoremine göre elektronik dalga fonksiyonu her bir noktasında bir kesikli düzlem dalga setine göre,

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{n,\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} \quad (2.49)$$

formunda verilir [83]. Buradaki dalga fonksiyonunu açmak için sonsuz bir düzlem dalga setine ihtiyaç duyulur. Ancak hesaplama açısından bu durum çok mümkün değildir ve bu sonsuz düzlem dalga setine bir sınırlama getirilir. Bu sınırlama sistemin kinetik enerjilerinin belirli bir kesme enerjisinden küçük düzlem dalgaların

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2 \leq E_{kesim} \quad (2.50)$$

dahil edilmesi ile gerçekleştirilir. Fakat düzlem dalgaların bu şekilde sınırlandırılması toplam enerji hesaplarında hataya yol açar. Bu hatayı minimize etmek için kesme enerjisinin

değeri azaltılabilir. Fakat sistem için toplam enerji değeri belli bir minimum değere ulaştığında kesme enerjisinin artırmasının bir anlamı yoktur. Bu gibi bir durum için elde edilen kinetik enerji değeri sistem için en uygun kesme enerji değeri olarak bilinir ve  $E_{kesim}$  olarak isimlendirilir.

## ii. Ters Uzaydaki k Nokta Sayısı ( $k_{nokta}$ )

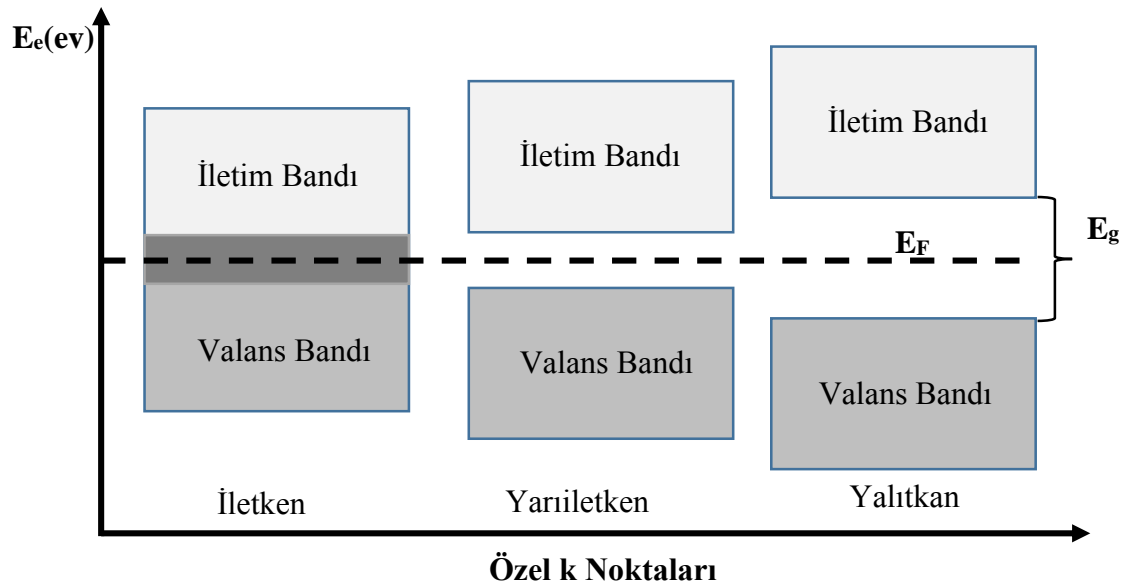
Sonsuz sayıda elektrondan oluşan bir kristal için yapılan hesaplamalarda dalga vektörünün periyodik fonksiyonunun Brillouin bölgesi üzerinden integralinin alınması çok zor bir iştir. Çünkü sonsuz sayıdaki her elektron için tanımlanmış fonksiyonların değerinin bilinmesi gerekir ve bunun için sonsuz sayıda da k noktası belirlenmesi gerekmektedir. Bu durumda elektronik dalga fonksiyonu değeri bir birine yakın olan k noktaları için ortalama bir k noktası seçimi yapılır. Bu seçim bize çok sayıda k noktası yerine biri birine yakın olanları temsil eden tek bir k noktası için integral alma kolaylığını sağlamaktadır. Bu durumda Brillouin Zone (BZ) daki integraller bir takım özel k noktaların ayırık toplamı şeklinde hesaplanmaktadır [84]. Bunun için sistemin Brillouin bölgesini temsil etmek için  $k_x k_y k_z$  şeklinde ifade edilen, düzlem dalga baz setleri oluşturmak gerekmektedir. Buradaki baz setleri oluşturmak için gerekli olan özel k noktalarının üretimi çeşitli yöntemlerle geliştirilmektedir [85,86].

Fakat sistemi yukarıda ifade edildiği gibi düzlem dalga baz setlerini kullanarak tanımladığımızda baz durumlarının sayısının kesme enerjisine göre süresiz olma sorunu ile karşılaşırız. Bu süresizlik farklı k nokta sayılarında farklı kesme enerjilerinin oluşması şeklinde olacaktır. Ortaya çıkan bu sorun daha yoğun  $k_x k_y k_z$  düzlem dalga baz seti seçimi ile hafifletilmektedir. Bu şekilde yapılmış bir seçim elverişli bir ters uzay formülasyonuna ve sistemin toplam enerjisinin basit bir tespitine olanak sağlar [80]. Aynı zamanda bu durum atomik yapının relax olmasını sağlamaktadır. Böylece kompleks bir süperhücrede optimize olmuş bulk kristali, yüzey kristali veya yüzey geometrisi için yapısal parametrelerin dengesine izin verilmiş olur [87]. Bu durum sistemlerinin ideal minimum enerji seviyesinin tanımlanması için de geçerlidir [88]. Ayrıca hesaplardaki pseudopotansiyel seçimi ve kullanılan örgü parametre değerleri de bu tanımlamaları etkilemektedir [89].

### 2.3.4. Bant Yapı Hesaplamaları

Yarıiletken teknolojisi için en önemli özelliklerden birisi bant düzensizliklerinin ana bileşenlerinin bulk özellikleri tarafından belirlenip belirlenmediğidir. Bir başka önemli özellik ise alaşım ve katkıyla yoluyla elektrik özelliklerinin içsel olarak değiştirilebilmesidir. Günümüzde gerek deneysel teknikler gerekse teorik modeller kullanılarak yarıiletkenlerin bu özellikleri ile ilgili çalışmalar odak noktası haline gelmiştir. Son yıllarda yapılan çalışmalarda deneysel teknikler, yarıiletkenlerin elektronik özellikleri ile ilgili çalışmalarda başarılı sonuçlar vermiştir. Aynı zamanda bu teknikler kullanılarak elde edilen değerlerin, teorik olarak elde edilen değerlerle uyum içinde olduğu görülmüştür.

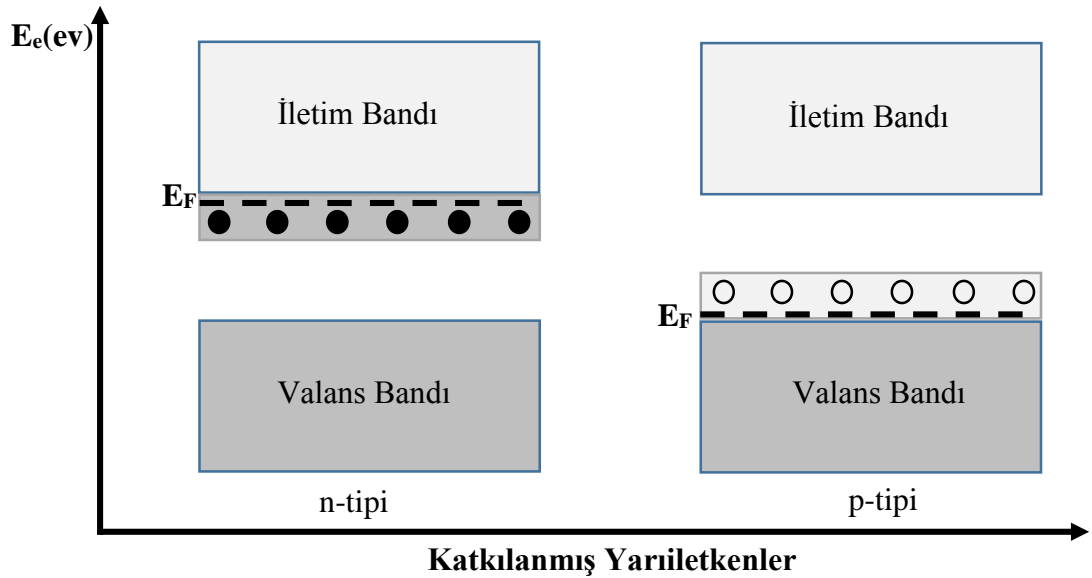
Son yıllarda yarıiletkenlerle ilgili yapılan teorik çalışmaların birçoğunda enerji bant teorisi kullanılmıştır. İlk olarak Bloch tarafından çalışılmış bu teori kuantum mekaniği kullanımı ile araştırmacılara kristal için kusursuz bir enerji bant yapısı vermektedir. Fakat bu teori tek elektron yaklaşımı üzerine kurulmuş olduğundan elektron-elektron etkileşiminin yok sayıldığı ideal olmayan bir ortamı ifade eder [90]. Bu sebeple en güvenilir yaklaşım, SCF teorisini kullanan Kohn-Sham ve Hohenberg' in DFT üzerine temellendirilir[56,57]. Bir yarıiletkenin iletkenlik özelliği ile ilgili iyi bir analiz yapabilmek için şekil 2.5'te iletken, yalıtkan ve yarıiletken için verilmiş olan bant yapılarını incelemek gerekir [91].



Şekil 2.5. Katıların yasak enerji aralığına göre sınıflandırılması.



Şekilde yasak enerji aralığının altında valans bandı, üstünde ise iletim bandı bulunmaktadır. İletim bandının minimum noktası iletim bant kıyısı, valans bandının maksimum noktası ise valans bant kıyısı olarak adlandırılır [90]. Bu iki kıyı arasında kalan aralıkta bant aralığı ( $E_g$ ) olarak bilinir. Bant aralığı kavramı bir maddenin iletkenliği açısından önemli bir yer tutmaktadır. Bir maddenin iletim yapabilmesi için valans bandındaki elektronların dışarıdan gelen bir etki ile uyarılıp iletim bandına geçmesi gerekmektedir. Bu durum göz önünde bulundurulduğunda bant aralığının kısa olması iletim özelliğini arttırmakta, tersi durum da ise azaltmaktadır. İletkenlerin iletim bandı ile valans bandı arasında hiç boşluk yoktur ve bundan dolayı iletkenlik özelliği gösterirler. Yalıtkanların ise bant aralığı çok büyük olduğundan elektronlar iletim bandına geçemezler ve bu yüzden iletkenlik özelliği göstermezler. Yarıiletkenlerdeki bant aralığı ise yalıtkanlara göre daha küçüktür. Bu özellikten dolayı yarıiletkenler hem iletken hem de yalıtkan özellik gösterirler. Bu özelliği kullanabilmek için yabancı atom katkılama işlemi yapılmaktadır. Buradaki amaç katkılama sayesinde bant aralığı değerini istenilen şekilde elde edip iletkenlik özelliğini kontrol etmektir. Yarıiletkenlerde yabancı atom katkılama işlemi ile elde edilen n-tipi ve p-tipi katkılanmış bant yapı modelleri şekil 2.6'da verilmiştir.



Şekil 2.6. n-tipi ve p-tipi olarak katkılanmış yarıiletken bant yapı modelleri

Kovalent bağlarla oluşmuş yarıiletken kristal yapısını n-tipi katkılanmış olarak elde etmek için kendini oluşturan atomlardan daha büyük değerlikte bir yabancı atom kullanılmaktadır. Katkılanan atomun fazla olan elektronları iletim bandına geçer ve iletim elektronlarla olur. Aynı kristal yapıyı p-tipi katkılanmış olarak elde etmek için ise daha düşük değerlikte bir yabancı atom kullanılmaktadır. Burada katkılanan atomun eksik olan elektron sayısını kristalin yapısından tamamlaması sonucunda valans bandında boşluklar oluşur. İletim işlemi bu boşluklar sayesinde gerçekleşir. Burada yabancı atom cinsi, sayısı ve değerlik elektron sayısı kristale göre farklı farklı seçilerek yarıiletken nanoyapıların bant yapısı ve buna bağlı olarak iletkenlik özelliği teknolojinin lehine olacak şekilde elde edilmektedir.

### 2.3.5. Düzlemsel Potansiyel Eğri Hesaplamaları

Heteroyapı olarak modellenmiş bir sistem için elde edilmiş düzlemsel potansiyel eğri belli bir düzlem boyunca enerjiye bağlı olarak sistemin yapısal özelliği gösteren önemli bir kavramdır. Bu kavram özellikle yarıiletken heteroyapılar şeklinde modellenmiş olan sistemler için sıkça kullanılmaktadır. Heteroyapıların oluşumunda iki farklı yarıiletken kullanılması ve bu yarıiletkenlerin bulk karakterinin farklı olması bu yapılarla arayüzey meydana getirmektedir. Bu arayüzeylerin etkisinin ortaya konması için sistemin makul derecede küçük atom değerlerinde ve ters uzay formülasyonuna uygun süper hücrelerin periyodik tekrarı şeklinde çalışılması gerekir [90]. Bu etkiyi gözleyebilmek için heteroyapıların arayüzeyleri ile ilgili yapılan öz-uyum alan hesapları ile elektronik yük yoğunluğu dağılımı ve buna bağlı olarak elektrostatik potansiyel bulunmaktadır. Arayüzeylerin x ve y düzlemleri boyunca periyodik oldukları düşünüldüğünde yalnızca z'nin fonksiyonu olacak bir şekilde düzlemsel averaj ifadesi,

$$\bar{f}(z) = \frac{1}{S} \int_S f(x, y, z) dx dy \quad (2.51)$$

formunda verilir. Bu eşitlikten yararlanılarak üç boyutlu elektronik yük yoğunluğundan tek boyutlu yük yoğunluğu  $\bar{n}(z)$  ve buna bağlı olarak düzlemsel potansiyel eğrisi  $\bar{V}(z)$  elde edilir. Periyodik fonksiyonlar arasındaki fark arayüzeydeki etkiyi ortaya koymaktadır. Buradaki farklılık daha belirgin bir şekilde bulk yapıdaki salınımlar olmaksızın makroskobik averaj tekniği yardımı elde edilebilir [92,93]. Bu makroskobik

averaj klasik elektro magnetizasyonu ifade eden temel bir kavram olarak bilinir [94]. Bir sistem için tanımlı mikroskobik ve makroskobik averaj değerlerinin konuma bağlı olarak sırasıyla  $f^{(mikro)}(r)$  ve  $f^{(makro)}(r)$  fonksiyonları ile ifade edildiği düşünülürse bu değerler birbirlerine bağlı bir şekilde

$$f^{(makro)}(r) = \int w(r - r') f^{(mikro)}(r') dr' \quad (2.52)$$

formunda yazılabilirler. Buradaki  $w(r)$  fonksiyonu problemin geometrik yapısı ve karakteristik uzunluk değerine bağlı olarak yazılmış bir filtre fonksiyonudur. Bu tez çalışmasında kullanılan  $w(r)$  aynı yapıya örgüsü uyuşan yarıiletkenlerin arayüzeyi için tanımlı her iki yarıiletkenin bağımsız bir fonksiyondur. Yukarıda verilmiş olan düzlemsel averaja uygun bir şekilde bu fonksiyonun açılımı,

$$w(z) = \frac{1}{a} \theta \left( \frac{a}{2} - |z| \right) \quad (2.53)$$

formundadır. Eşitlik içerisinde yer alan  $\theta$  tek boyutlu basamak fonksiyonu olarak bilinir ve z eksenine bağlı olarak

$$\theta = \bar{f}(z) = \frac{1}{a} \int_{z-a/2}^{z+a/2} \bar{f}(z') dz' \quad (2.54)$$

formunda ifade edilir. Heteroyapılı bir sistemin potansiyel eğrileri üzerinden elde edilen makroskobik averaj ara yüzeyin her iki tarafındaki mikroskobik salınımları sergilememektedir. Fakat iki bulk boyunca sürekli değer olarak iyileştirilmiş makroskobik bir limit olarak görülür. Makroskobik değerdeki sapma arayüzey bölgesindedir ve bulk yapılar arasındaki potansiyel farkı gösterir.

Heteroyapıların yarıiletkenlerden oluşmasının en önemli sebebi elektronik ve optik elektronik özellikler gösteriyor olmalarıdır [87]. Heteroyapı oluşturmak için yarıiletkenlerin seçiminde örgü sabiti kriteri kullanılır ve bu kriterle bağlı olarak örgüsü uyuşan ve uyuşmayan olmak üzere iki farklı heteroyapı oluşur. Bu tezde heteroyapı oluşturmak için örgü uyumsuzluk değeri %0.6 olan BP ve GaN kullanılmıştır. Bu iki yarıiletken dikkate alınarak örgüsü uyuşan BP/GaN heteroyapılar elde edilmiştir.

## BÖLÜM 3

### SONUÇLAR VE TARTIŞMA

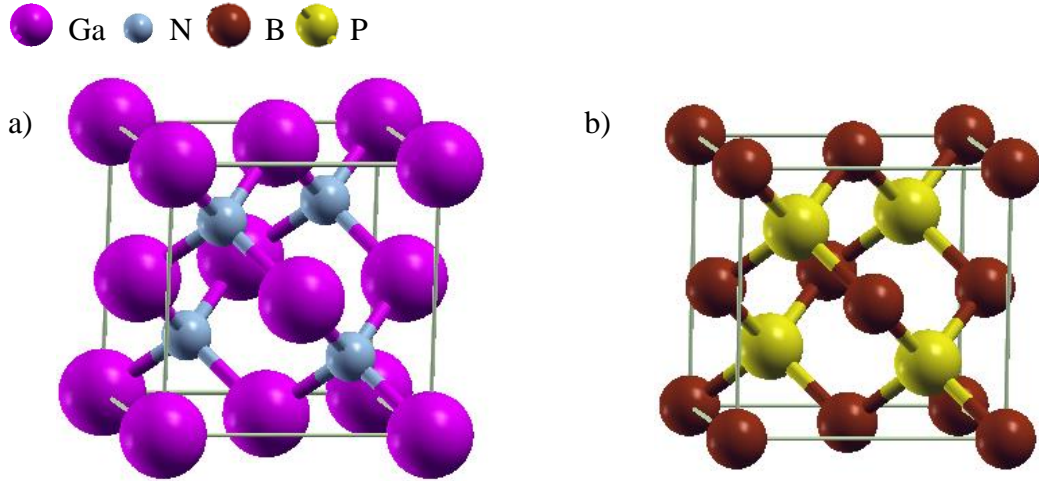
Günümüzde yarıiletken teknolojisi elektronik ve optik aletlerin yapımında sıkça kullanılmaktadır. Bu durum yarıiletken malzemelerin teknolojik gelişim açısından önemli bir unsur haline gelmesini sağlamaktadır. Özellikle, bu malzemelerin nano boyutlarda farklı geometrik yapılarda modellenmesi yarıiletkenlerin elektronik özelliklerinde önemli değişimlere yol açmaktadır. Bu tezde yarıiletken nanoyapıların geometrik ve elektronik özellikleri araştırılmıştır. Ayrıca son zamanlarda önemli bir araştırma konusu olan nanoyapılara yabancı atom katkılama işlemi ele alınıp modellenen nanoyapıların özellikleri incelenmiştir.

Yarıiletken malzemelerin bulk yapısı, nanotel yapısı, bulk heteroyapısı, nanotel heteroyapısı ve bunların katkılanmış hallerinin incelemesinin yapıldığı bu tezde III-V bileşik yarıiletken olarak bilinen GaN ve bununla heteroyapıyı oluşturan BP malzemeleri ele alınmıştır. İlk olarak bu malzemelerin birim hücre kübik yapısı olarak bilinen bulk yapılarının temel parametreleri belirlenmiştir. Bu işlemde sonra parametreleri belirlenmiş olan GaN malzeme için üç farklı yarıçap değerinde nanotel yapı, bulk heteroyapı, belli bir yarıçap değerinde nanotel heteroyapı ve bu yapıların Te atomu ile katkılanmış hallerinin modellenmesi yapılmıştır. Te atomu 6A grubundadır ve hem Ga hem de N atomu yerine katkılama yapılabilir özelliğe sahiptir [23]. Ayrıca belli bir yarıçap değeri için birden fazla Te atomu katkılama işlemi iki farklı şekilde yapılarak katkılanmış atomun pozisyonunun elektronik özelliklere olan etkisi incelenmiştir. Modellemesi yapılan, bulk yapı, nanotel yapı ve heteroyapıların her birinin denge

durumlarını elde etmek amacıyla geometrik optimizasyon çalışması yapılmıştır. Bu çalışmadan sonra bulk, nanotel ve katkılanmış nanotel yapı olarak modellenmiş GaN yarıiletkenlerin her biri için bant yapı hesaplaması yapılmıştır. Ayrıca heteroyapıların arayüzelerindeki potansiyel farkı belirlemek için elektronik potansiyel eğrileri elde edilmiştir. Bu eğriler üzerinden arayüzeyde oluşan potansiyel farklar hesaplanmıştır. Son olarak modellemeleri yapılmış ve denge durumları elde edilmiş tüm nanoyapıların geometrik ve elektronik özellikleri incelenmiştir.

### 3.1. Yarıiletken Bulk Yapısı

Bu bölümde, GaN ve BP malzemelerin  $1 \times 1 \times 1$  boyutlarındaki birim hücrelerini temsil eden bulk yapılarının yapısal özellikleri incelenmiştir. Her iki malzemenin kafes yapısı ZB örgü yapısına sahip olacak şekilde modellenmiştir. Bulk yapı bir maddenin kafes yapısının her türlü özelliğini içinde barındıran en küçük yapısı olarak bilinmektedir. Kafes, bulk yapılar üst üste veya yan yana olacak şekilde her üç boyutta istiflenmesi sonucunda meydana gelmektedir. Bulk yapı bir maddenin her özelliğini içinde barındırması nedeniyle periyodiklik koşulu kullanılarak incelenmesi teorik hesaplamalar açısından büyük avantaj sağlamaktadır. Modellenen GaN ve BP bulk yapılar şekil 3.1' de gösterilmiştir.



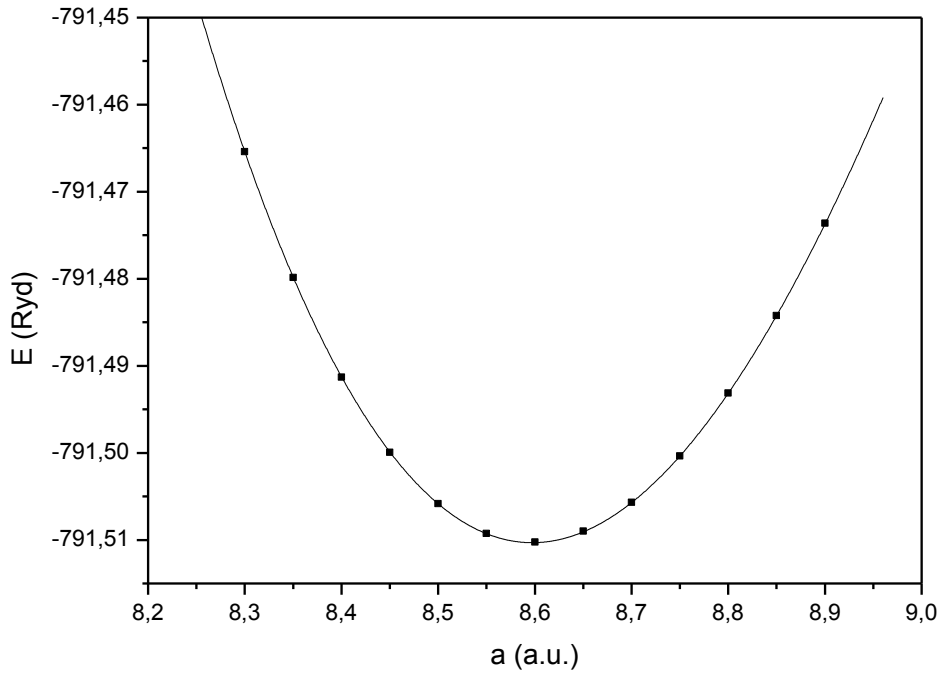
Şekil 3.1. Zinc blende örgüdeki a) GaN ve b) BP bulk yapıları.

Şekildeki yapıların, yapısal özelliklerini belirlemek amacıyla örgü sabiti, sistemin temel durum hesaplamalarında elektronik dalga fonksiyonunu oluşturan düzlem dalga

baz setlerini sınırlamak için kinetik enerji kesim değeri ( $E_{kesim}$ ) ve ters uzayda  $k$  noktalarını temsil eden düzlem dalga baz setindeki notaların sayısı ( $k_{nokta}$ ) optimize edilmiştir. Optimizasyon işlemi ile yarıiletkenin bulk yapısındaki bu malzemelerin minimum toplam enerji düzeyindeki temel durumları hesaplanmıştır.

### 3.1.1. GaN Bulk Yapısının Yapısal Özellikleri

ZB örgüdeki bir GaN yarıiletken yapının birim yapısını temsil eden bir adet bulk'ının içerisinde 4 adet Ga ve 4 adet N atomu vardır. GaN yapısını optimize etmek için değişik örgü sabiti değerlerine karşılık gelen toplam enerji değerleri hesaplanmıştır. Bu şekilde elde edilen verilerle oluşturulan enerjinin örgü sabitine göre değişimi şekil 3.2'de verilmiştir.

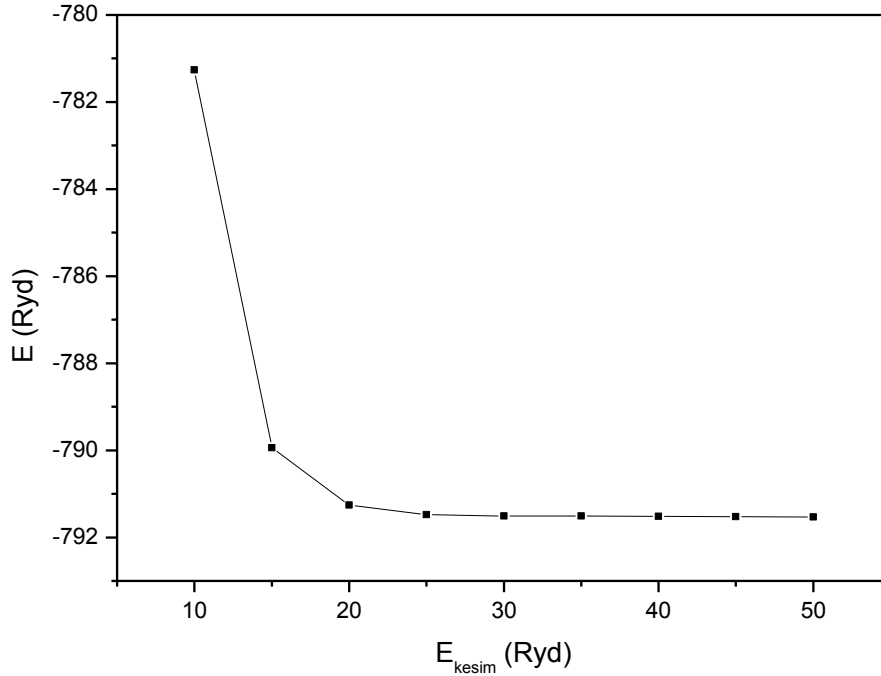


Şekil 3.2. GaN bulk yapı için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi minimum toplam enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti 8.597a.u. (1a.u. = 0.0529nm) olarak belirlenmiştir. Bazı bilimsel çalışmalarda ZB örgü yapısında GGA yaklaşımı kullanılarak 8.630au [95], 8.677au [96] ve 8.579au [97] olarak hesaplanmıştır. GaN bulk yapısının örgü sabiti yakınsama işleminde elektronik dalga

fonksiyonunu oluşturan düzlem dalga baz setlerini sınırlamak için kullanılan  $E_{kesim}=30$  Ryd seçilmiştir. Bununla beraber ters uzaydaki  $k_{nokta}$  değeri 6 ve bu değere bağlı olarak da noktaları temsil eden düzlem dalga baz seti ise  $6 \times 6 \times 6$  olarak alınmıştır.

Bulk yapının denge durumunun elde edilmesi ve sistemin tanımlanması için önemli bir yeri olan  $E_{kesim}$  parametresidir. Bu parametrenin yakınsama işlemi için değişik  $E_{kesim}$  değerleri için toplam enerji değerleri hesaplanmıştır. Hesaplama sonucunda elde edilen verilerden oluşturulan toplam enerjinin, kinetik enerji kesim değerlerine göre değişimi Şekil 3.3’de verilmiştir.

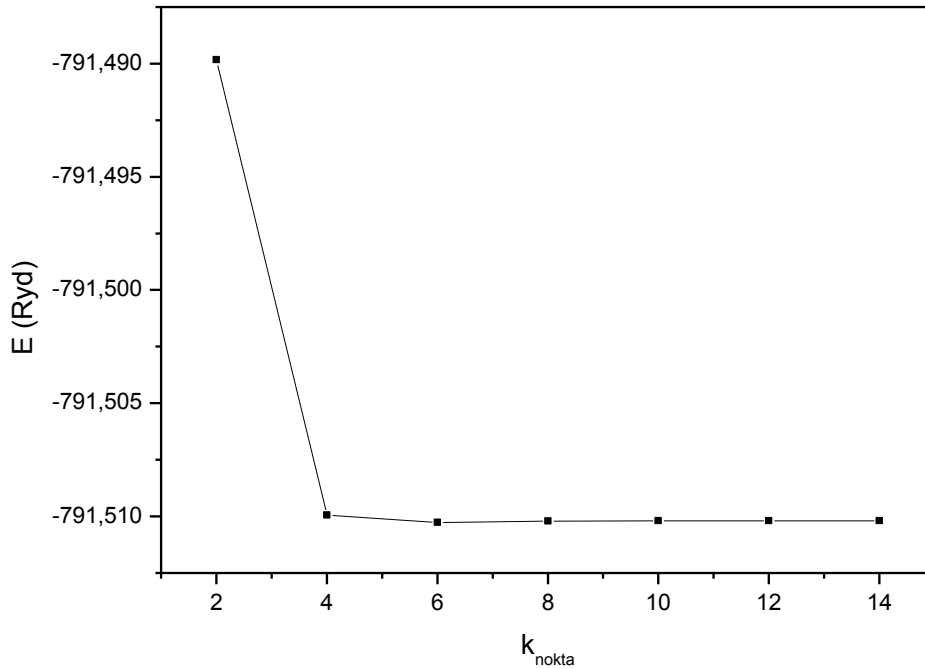


Şekil 3.3. GaN bulkün toplam enerjinin kinetik enerji kesim değerine göre değişimi.

Şekilde bulk yapının toplam enerji değerlerinin 25Ryd ve sonrasındaki  $E_{kesim}$  değerlerinde bir limit durumuna vardığı görülmektedir. Diğer bir deyişle, sistem bu değerlerde minimum toplam enerjiye sahiptir. GaN bulk yapısı için yapılan bu yakınsama çalışmasında sistem için örgü sabiti ve  $k_{nokta}$  değerleri sabit tutulmuştur. Sistemin toplam enerji ve temel durum hesaplamalarında elektronik dalga fonksiyonunu oluşturan düzlem dalga baz setlerini sınırlamak için  $E_{kesim}$  değerleri değiştirilmiştir. Şekilden de görüldüğü

gibi  $E_{\text{kesim}}$ 'in 25Ryd, 30Ryd ve sonraki deęerler minimum toplam enerjiye en yakın durumdadır. Bu deęerler için hesaplanan toplam enerji deęerleri arasında çok küçük bir fark olduęundan dolayı iki enerji deęerinden biri sistem için uygun bir parametre olarak kabul edilebilir. Hesaplar yapılırken kolaylık olması ve zaman kazanmak açısından  $E_{\text{kesim}}$  deęeri 30 Ryd olarak seęilmiřtir.

Sistemi tanımlamak açısından önemli olan bir dięer parametre ters uzayda  $k$  noktalarını temsil eden  $k_{\text{nokta}}$  deęerleridir. Deęişik  $k_{\text{nokta}}$  deęerleri için toplam enerji hesabı yapılmıřtır. Yapılan hesaplamalar sonucunda toplam enerjinin  $k$  noktalarının oluřturduęu düzlem dalga baz seti deęerine göre deęişimi řekil 3.4'te gösterilmiřtir.



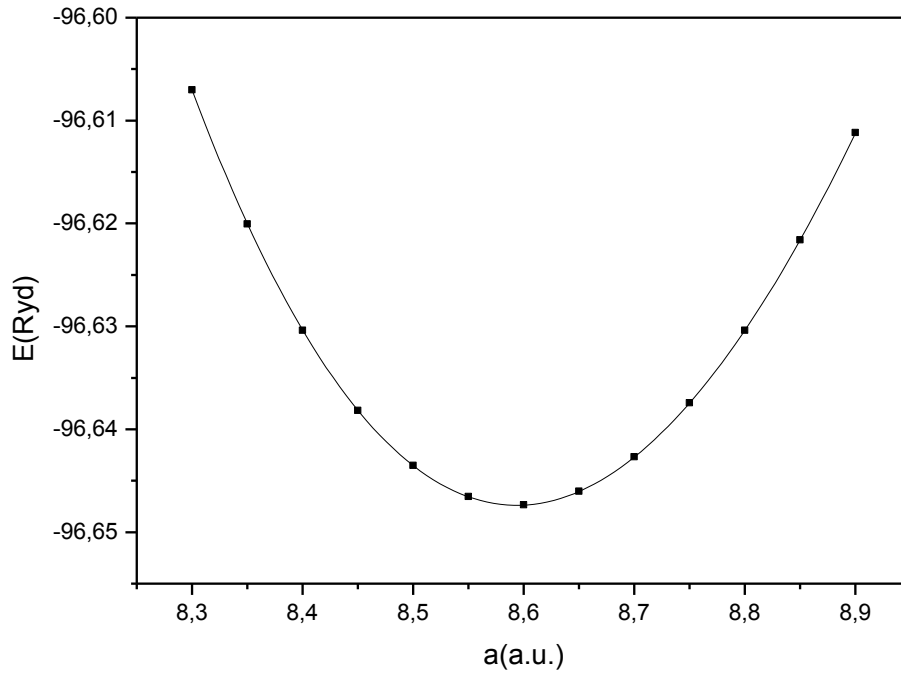
řekil 3.4. GaN bulk yapısı için toplam enerjinin  $k_{\text{nokta}}$  deęerlerine göre deęişimi.

GaN bulk yapı için yapılan bu yakınsama çalışmasında örgü sabiti ve kinetik enerji kesim deęerleri sırası ile 8.597a.u. ve 30 Ryd alınmıřtır. Bununla beraber ters uzayda  $k$  noktalarını temsil eden düzlem dalga baz setlerinin deęerleri deęiřtirilmiřtir. řekilden görüldüęü gibi toplam enerji deęeri 6 ve 8 deęerlerinde bir limit minimum enerji durumu vardır. Sistem bu deęerlerden sonra minimum enerji deęerlerine sahiptir. Bu durum göz önünde bulundurularak sonraki hesaplamalarda zaman kazanmak için  $k$  nokta sayısı 6 seęilmiřtir.



### 3.1.2. BP Bulk Yapısının Yapısal Özellikleri

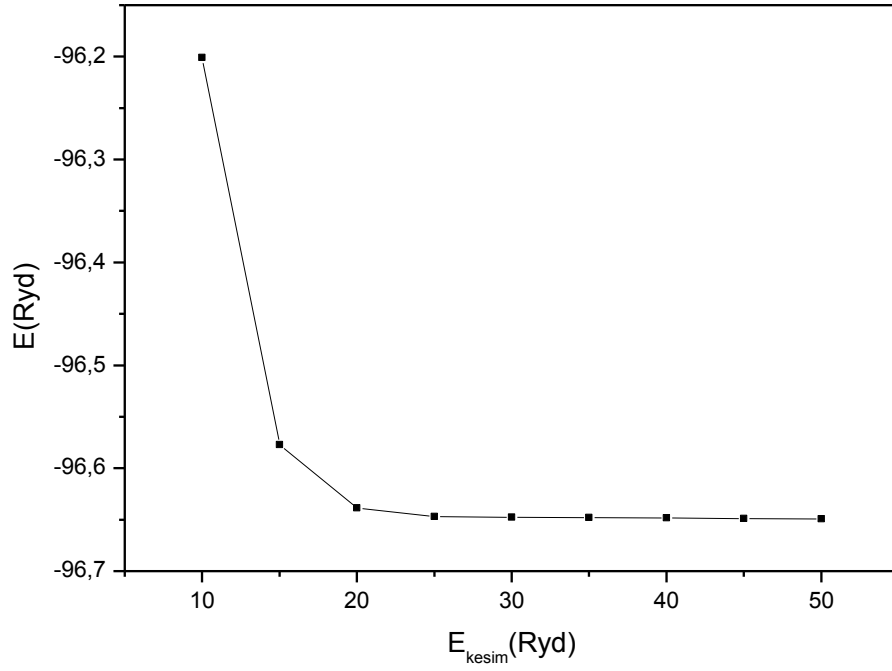
Hesaplamalarda kullanılmış olan bir diğer yarıiletken BP bulk yapısı da GaN bulk yapıda olduğu gibi zinc blende örgü yapısında modellenmiştir. Modellenen bulk yapı içerisinde 4 adet B ve 4 adet P atomu vardır. BP bulk yapıyı optimize etmek için değişik örgü sabiti değerlerine karşılık gelen toplam enerji değerleri hesaplanmıştır. Bu şekilde elde edilen verilerle oluşturulan enerjinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.5’de verilmiştir.



Şekil 3.5. BP bulk yapısı için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi minimum toplam enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti 8.592a.u. olarak belirlenmiştir. Başlangıç olarak BP bulk yapısının örgü sabiti yakınsama işlemi sırasında, elektronik dalga fonksiyonunu oluşturan düzlem dalga baz setlerini sınırlamak için  $E_{kesim}$  değeri 30 Ryd seçilmiştir. Bununla beraber ters uzaydaki  $k_{nokta}$  değeri 6 ve bu değere bağlı olarak düzlem dalga baz setleri ise  $6 \times 6 \times 6$  olarak alınmıştır.

Bulk yapının denge durumunun elde edilmesi için düzlem dalga baz setlerini sınırlamak açısından  $E_{kesim}$  parametresinin yakınsama işlemi önemlidir. Bu parametrenin belirlenmesi için  $E_{kesim}$ 'in değişik değerleri için toplam enerji değerleri hesaplanmıştır. Hesaplama sonucunda elde edilen verilerden oluşturulan toplam enerjinin, kinetik enerji kesim değerlerine göre değişimi Şekil 3.6'da verilmiştir.

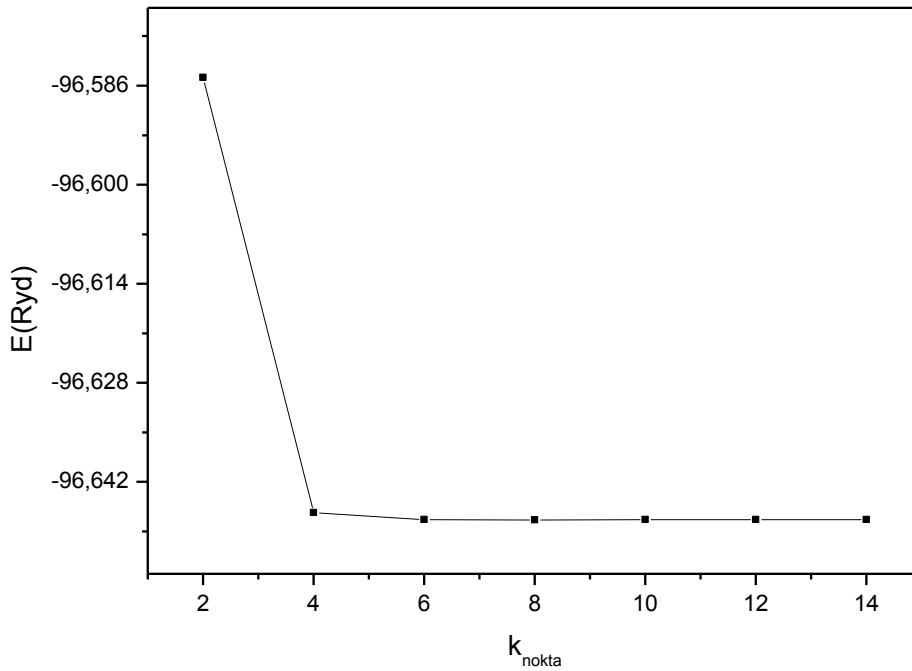


Şekil 3.6. BP bulk için toplam enerjinin kinetik enerji kesim değerine göre değişimi.

Şekilde toplam enerji değerlerinin 25Ryd ve sonrasında bir limit durumuna ulaştığı görülmektedir. Diğer bir deyişle, sistem bu değerlerde minimum toplam enerji değerlerine sahiptir. BP bulk yapısı için yapılan bu yakınsama çalışmasında sistem için örgü sabiti 8.592a.u. ve ters uzayda  $k_{nokta}$  6 değerleri sabit tutulmuştur. Sistemin toplam enerji ve düzlem dalga baz setlerini sınırlamak için kullanılan  $E_{kesim}$  değerleri değiştirilmiştir.  $E_{kesim}$ 'in 25Ryd, 30Ryd ve 35Ryd değerleri için hesaplanan toplam enerji değerleri arasında çok küçük farklar olduğundan 25Ryd ve sonrasındaki enerji değerlerinin sistem için uygun birer parametre olabileceği görülmektedir. Hesaplar

sırasında zamandan ve iş tasarrufu sağlamak açısından  $E_{kesim}$ 'in 30Ryd olarak seçilmesinin sistem için uygun olacağı kararlaştırılmıştır.

Sistemi için önemli olan bir diğer parametre ters uzayda düzlem dalga baz setlerini oluşturmak için kullanılan  $k_{nokta}$  değerleridir. Bu parametreyi belirlemek için değişik  $k_{nokta}$  değerleri için toplam enerji hesabı yapılmıştır. Yapılan hesaplamalar sonucu toplam enerjinin  $k$  noktalarının oluşturduğu düzlem dalga baz seti değerine göre değişimi Şekil 3.7'de gösterilmiştir.



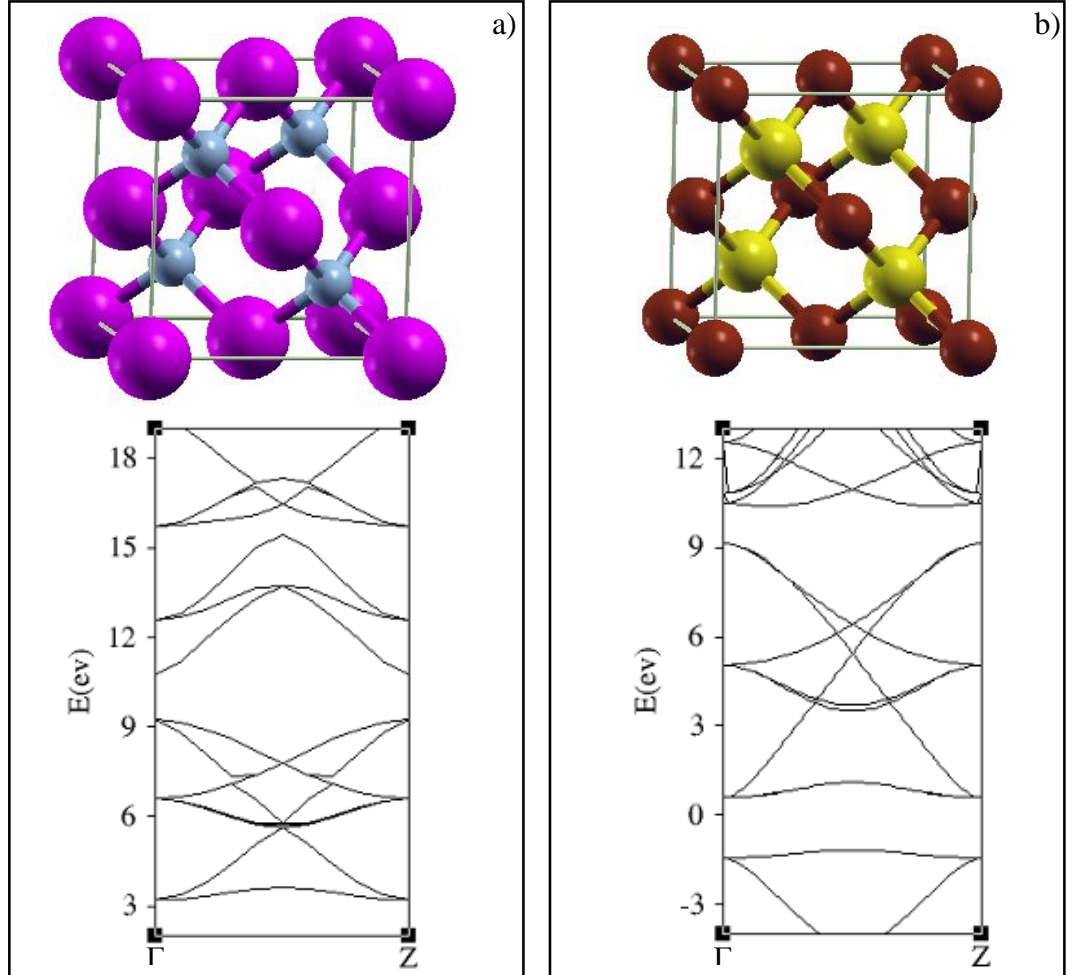
Şekil 3.7. BP bulk yapı için toplam enerjinin  $k_{nokta}$  değerlerine göre değişimi.

Şekilden görüldüğü gibi toplam enerji değeri 6 ve 8 değerlerinden sonra bir limit durumu vardır. BP bulk yapı için yapılan bu yakınsama çalışmasında örgü sabiti ve  $E_{kesim}$  değerleri sırası ile 8.592 a.u. ve 30 Ryd olarak alınmıştır. Bununla birlikte ters uzayda düzlem dalga baz setlerini oluşturmak için kullanılan  $k_{nokta}$  değerleri değiştirilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi  $k$  noktalarının 6 ve sonraki değerleri minimum enerjiye en yakın durumdadır. Bu değerlerden sonra toplam enerji değerleri arasında çok küçük bir değişim olduğundan 6'dan sonraki herhangi bir değer için uygun olabileceği

görülmektedir. Bundan sonraki yapılacak olan hesaplamalarda zamandan ve iş gücünden tasarruf sağlamak için  $k_{\text{nokta}}$  değeri 6 olarak belirlenmiştir.

### 3.1.3. Yarıiletken Bulkların Bant Yapıları

BP ve GaN yarıiletken bulk yapıların yapısal özelliklerini temsil eden sistem parametreleri  $E_{\text{kesim}}$ ,  $k_{\text{nokta}}$  ve örgü sabiti değerleri belirlendi. Bu değerler optimizasyon çalışmalarının yapılması bulk yapılar için denge durumunu oluşturmaktadır. Denge durumu elde edilmiş olan BP ve GaN bulk yapıların elektronik özelliklerini gözlemek amacıyla bant yapıları çizilmiştir. Yarıiletken bulk yapıların Fermi enerji düzeyleri ( $E_f$ ) dikkate alınarak çizilmiş elektronik bant yapıları şekil 3.8’de verilmiştir



Şekil 3.8. Denge durumundaki a) GaN ve b) BP bulk yapılarının  $\Gamma$  ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.

Şekildeki bulk yapıların elektronik bant çizimleri ters uzaydaki  $\Gamma$  ve Z özel noktalarına göre elde edilmiştir. Elektronik bant çizimler herbir bulk yapının Fermi enerji düzeyleri  $E_f$  dikkate alınarak yapılmıştır. GaN ve BP bulk yapılarının valans ve iletkenlik bantları arasındaki farkı temsil eden bant aralık değerleri ( $E_g$ ) sırasıyla 1.551ev ve 1.360ev olarak bulunmuştur.

Yapılan yakınsama çalışmaları sonucunda GaN ve BP bulk yapıları için elde edilen minimum örgü sabiti,  $E_{kesim}$  değeri ve  $k_{nokta}$  değerleri tablo 3.1’de verilmiştir. Tabloda ayrıca deneysel örgü sabitleri ve bu sabitlerin hesaplanan örgü sabiti değerleri arasındaki fark değeri verilmektedir.

Tablo 3.1. Yarıiletken bulk yapıların  $E_{kesim}$ ,  $k_{nokta}$ ,  $a$ ,  $a_{den}$  ve Fark değerleri.

	$E_{kesim}(Ryd)$	$k_{nokta}$	$a(a.u.)$	$a_{deneysel}(a.u.)$	Fark
GaN	30	6	8.597	8.504 <sup>a</sup>	1,1%
BP	25	6	8.592	8.576 <sup>b</sup>	0.2%

<sup>a</sup>[98,99], <sup>b</sup>[27,100]

Tablo incelendiğinde yarıiletken bulk yapıların minimum  $k_{nokta}$  değerleri aynı çıkmıştır. Buna karşı örgü sabiti ve  $E_{kesim}$  değerleri arasındaki farklılık çok az bir farklılık vardır. Ayrıca örgü sabitlerinin deneysel ve bu çalışma da elde edilmiş olan değerleri arasındaki farklarında küçük olukları görülmektedir. GaN ve BP bulk yapıların elektronik özelliklerini belirlemek için hesaplanan Valans Bant Maximum (VBM),  $E_f$ ,  $E_g$  ve toplam atom sayısı (N) değerleri tablo 3.2’de verilmiştir.

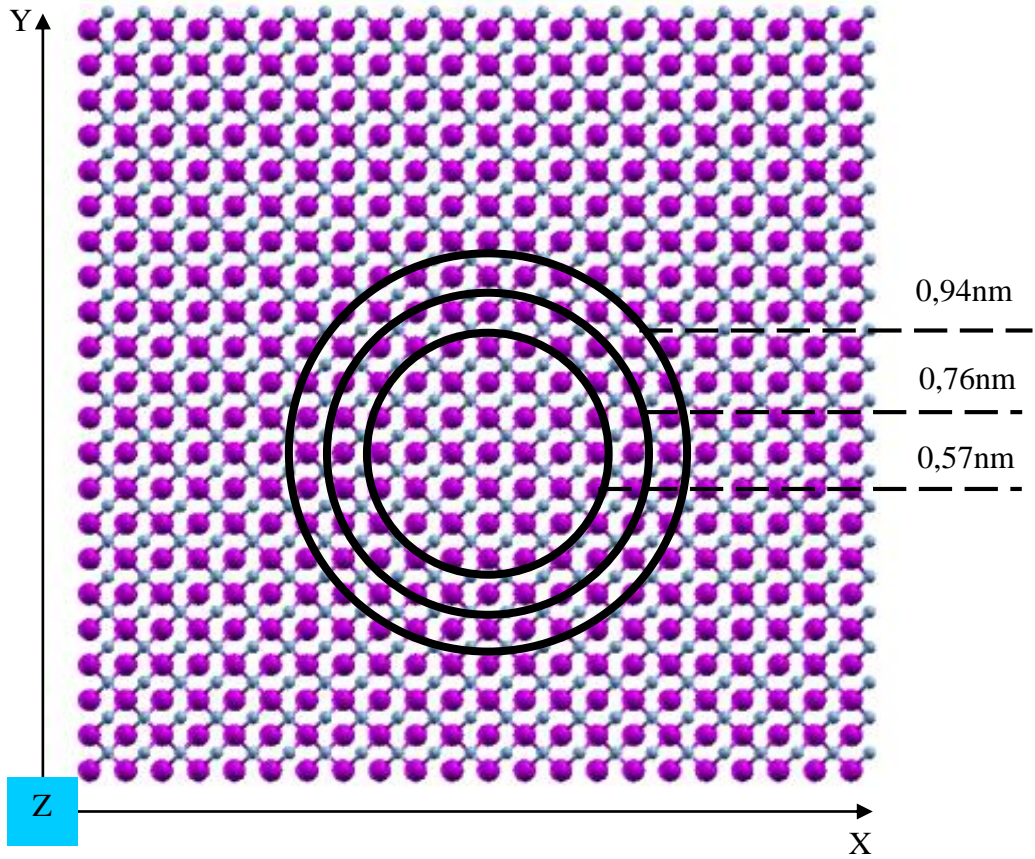
Tablo 3.2. Yarıiletken bulk yapıların N, VBM,  $E_f$  ve  $E_g$  değerleri

	N	VBM(ev)	$E_f(ev)$	$E_g(ev)$
GaN	8	9.210	9.253	1.551
BP	8	9.127	9.258	1.360

Tabloda VBM değerinde 0.083ev,  $E_f$  değerlerde 0,005ev ve  $E_g$  değerlerde ise 0,191ev’luk bir fark gözlenmektedir. GaN bulk’ı için VBM ve  $E_g$  büyük  $E_f$  değeri ise küçük çıkmıştır. Bu karşı her iki yarı iletken için de değerlerin birbirlerine çok yakın olarak hesaplandığı görülmektedir.

### 3.2. Farklı Yarıçap Değerinde Katkılanmamış GaN Nanotel Yapılar

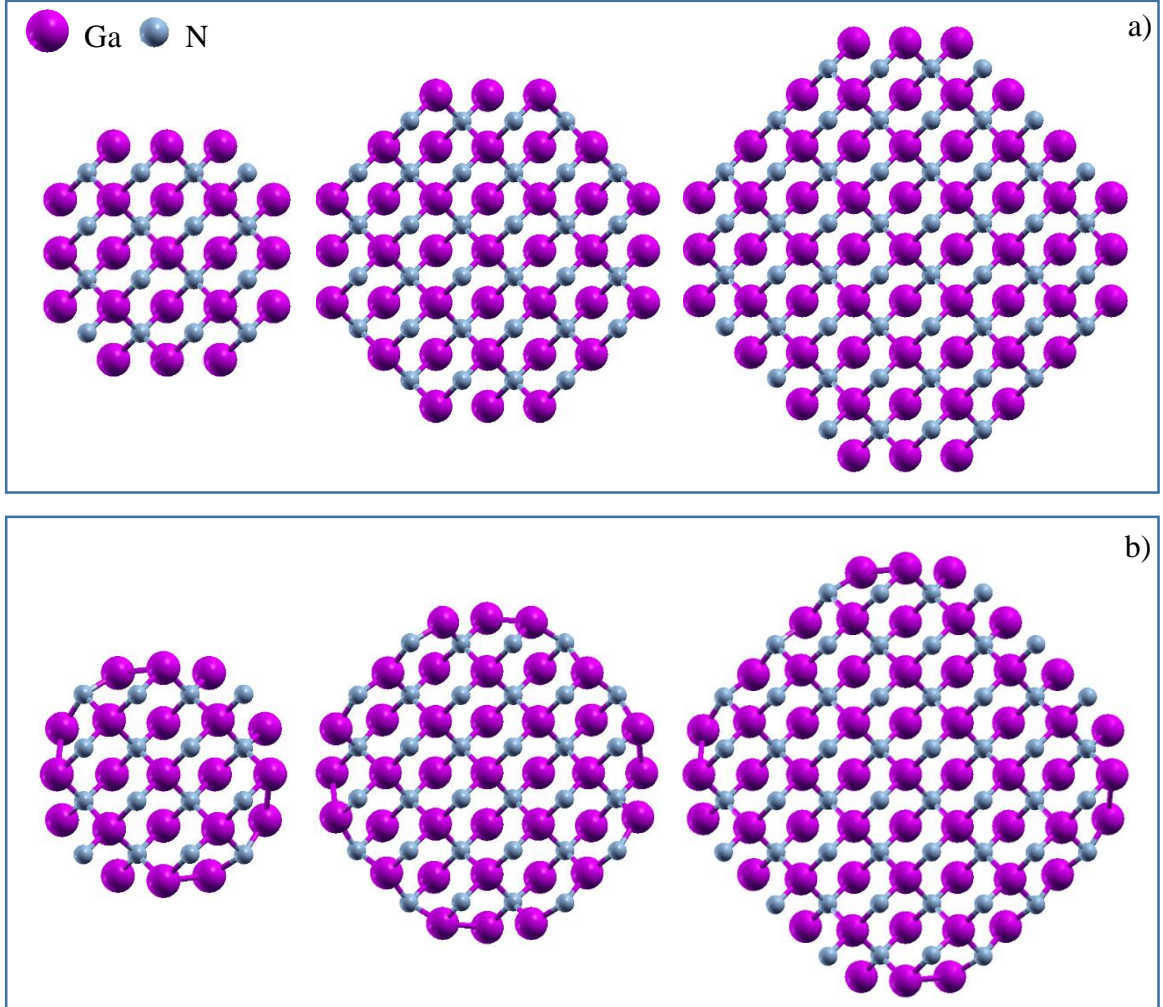
Katkılanmamış nanotellerin modellenmesi için GaN bulk yapısı x, y ve z yönlerinde sırasıyla 11x11x1 boyutlarında büyütülmüştür. Bu yapının merkezine yakın bir bölgede bir adet Ga atomu referans olarak belirlenmiştir. Belirlenmiş olan referans atomu nanotelleri oluşturacak olan çemberlerin merkezi olarak kabul edilmiştir. Referans alınan atomun çevresinde bir çember çizilmiş ve tamamı bu çember içerisinde kalan Ga ve N atomları nanotel yapıyı oluşturmuştur. Bu şekilde oluşturulmuş üç farklı yarıçaptaki nanotellerin kesit görünümü şekil 3.9’de verilmektedir.



Şekil 3.9. 11x11x1 boyutlu GaN yapı üzerinde 0.57nm, 0.76nm ve 0.94nm’lik üç farklı yarıçap değerinde oluşturulmuş nanotellerin kesit görünümü.

Şekilden de görüldüğü gibi 0.57nm, 0.76nm ve 0.94nm yarıçap değerlerinde üç farklı çember çizilmiştir. Tamamı bu çemberlerin içerisinde kalan Ga ve N atomları her yarıçap karşılık bir adet nanotel yapı oluşturmaktadır. Bu şekilde elde edilmiş olan GaN nanotel

(GaNNT) yapıların denge durumlarının elde edilmesi için geometrik optimizasyon işlemleri gerçekleştirilmiştir. Bu işlemler sırasında  $E_{kesim}$  ve  $k_{nokta}$  değerleri sırasıyla 30Ryd ve 6 olarak ele alınmıştır. Üç farklı yarıçap değeri için elde edilmiş GaNNT'lerin ideal konfigürasyonları ve denge durumundaki konfigürasyonları şekil 3.10 'da gösterilmiştir.



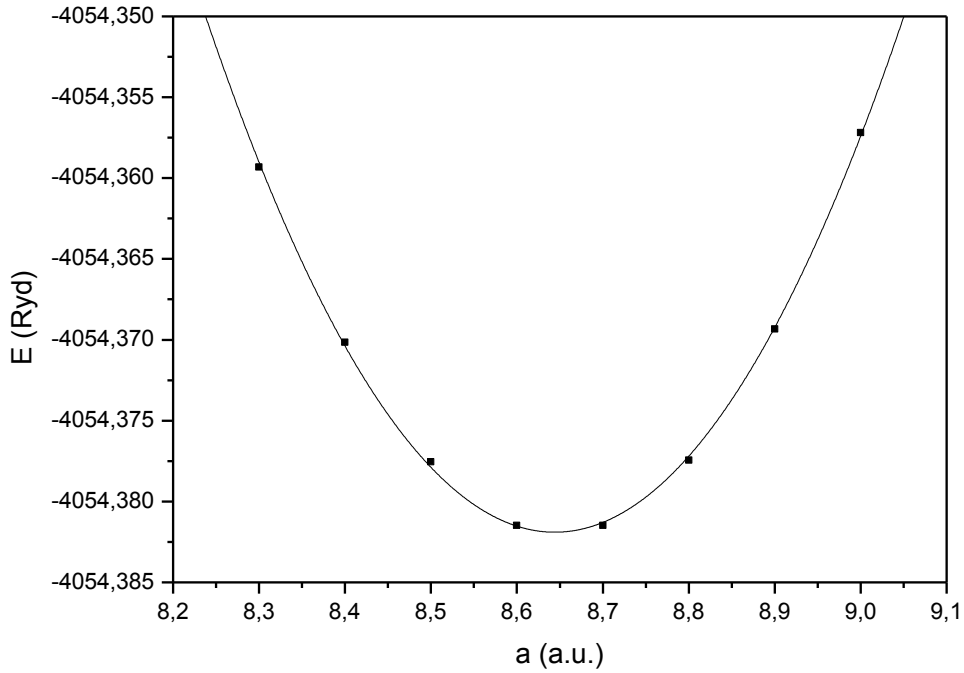
Şekil 3.10. (001) yönünde üç farklı yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotellerin a) ideal konfigürasyonu ve b) denge durum konfigürasyonu.

Şeklin 3.10 a)'da üç farklı yarıçaptaki nanotellerin ideal konfigürasyonları verilmiştir. Şekil 3.10 b)'de ise bu nanotel yapıları için denge durumundaki konfigürasyonları gösterilmiştir. Bu denge durumunda nanoyapıların minimum enerji düzeyinde olduğu

bilinmektedir. Denge durumunu elde etmek için yapılan işleme geometrik optimizasyon adı verilmektedir.

### 3.2.1. 0.57nm Yarıçaplı GaN Nanotel

Yarıçap değeri 0.57nm olan çember içerisinde kalan ZB örgü yapısındaki nanotel yapı 21 adet Ga ve 16 adet N atomlarından oluşmaktadır. Toplamda 37 adet atom içeren bu GaN nanotel yapı GaNNT(37) şeklinde gösterilmiştir. Daha sonra modellemesi yapılmış olan yapının örgü sabitinin yakınsaması yapılmıştır. Minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri belirlenerek temel durum konfigürasyonları elde edilmiştir. Sistemin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.11’da verilmiştir



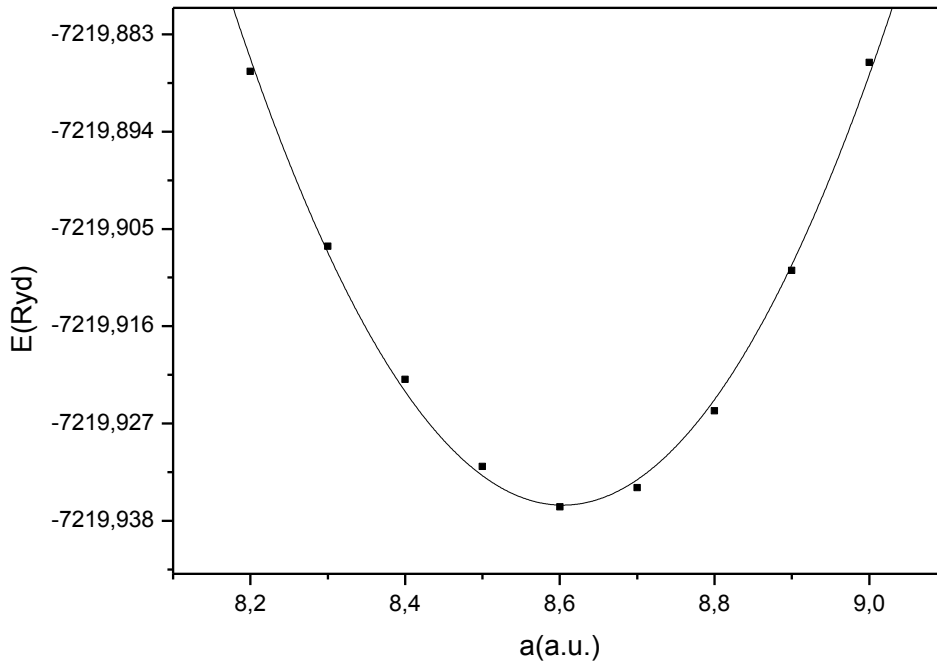
Şekil 3.11. 0.57nm yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotel yapısının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi.

Şekilde minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri 8.644a.u. olarak belirlenmiştir. Yapılan toplam enerji hesaplamalarında elde edilen  $E_{kesim}$  ve  $k_{nokta}$  değerine bağlı olarak  $1 \times 1 \times 6$  düzlem dalga baz seti kullanılmıştır.



### 3.2.2. 0.76nm Yarıçaplı GaN Nanotel

Yarıçap değeri 0.76nm olan çember içerisinde kalan nanotel yapı 37 adet Ga ve 32 adet N atomlarından oluşmaktadır. Toplamda 69 adet atomu bulunan GaN nanotel yapı GaNNT(69) şeklinde gösterilmiştir. Nanotel yapının örgü sabitinin yakınsaması minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri belirlenerek yapılmıştır. Bu işlem sonucunda nanotel yapının temel durum konfigürasyonları elde edilmiştir. Sistemin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.12’de verilmiştir.

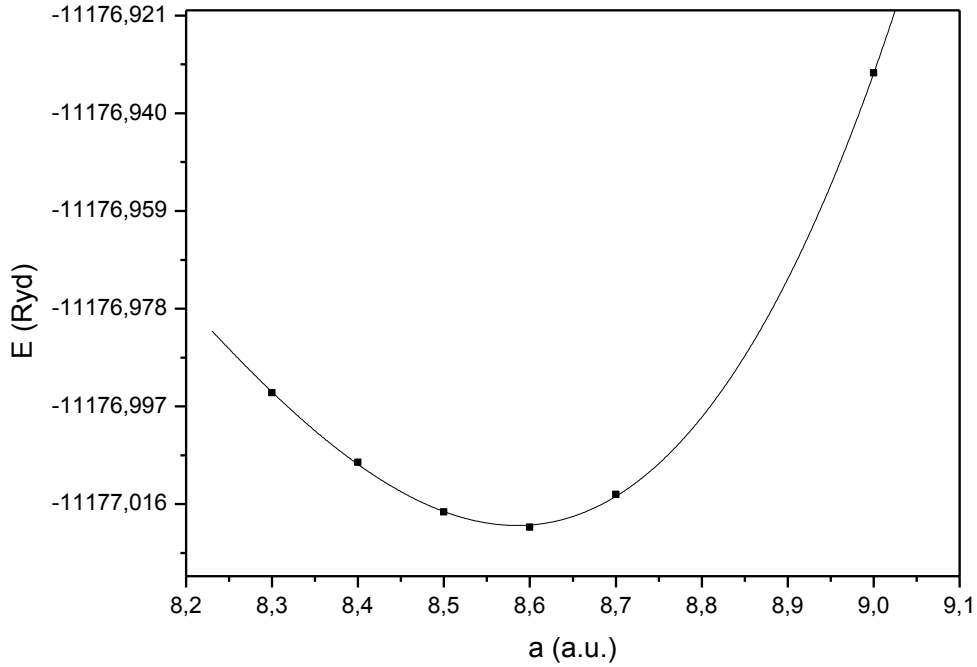


Şekil 3.12. 0.76nm yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi minimum enerji değeri karşılık gelen örgü sabiti değeri 8.605a.u. olarak belirlenmiştir. Toplam enerji hesaplamaları sonucunda elde edilmiş olan örgü sabiti değeri 0.57nm yarıçaplı nanotel yapıdaki örgü sabitinden daha küçük çıkmıştır. Yapılan toplam enerji hesaplamalarında daha önce elde edilmiş olan  $E_{kesim}$  ve  $K_{nokta}$  değerine bağlı olarak  $1 \times 1 \times 6$  düzlem dalga baz seti kullanılmıştır.

### 3.2.3. 0.94nm Yarıçaplı GaN Nanotel

Yarıçap değeri 0.94nm olan çemberin sınırları içerisinde kalan atomların oluşturduğu nanotel yapıda 57 adet Ga ve 52 adet N atomu bulunmaktadır. Toplam atom sayısının 109 adet olduğu GaN nanotel yapı GaNNT(109) şeklinde gösterilmiştir. Bu yapının örgü sabitinin yakınsama çalışması minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri belirlenerek yapılmıştır. Bu işlem sonucunda nanotel yapının temel durum konfigürasyonları elde edilmiştir. Sistemin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.13’de verilmiştir.

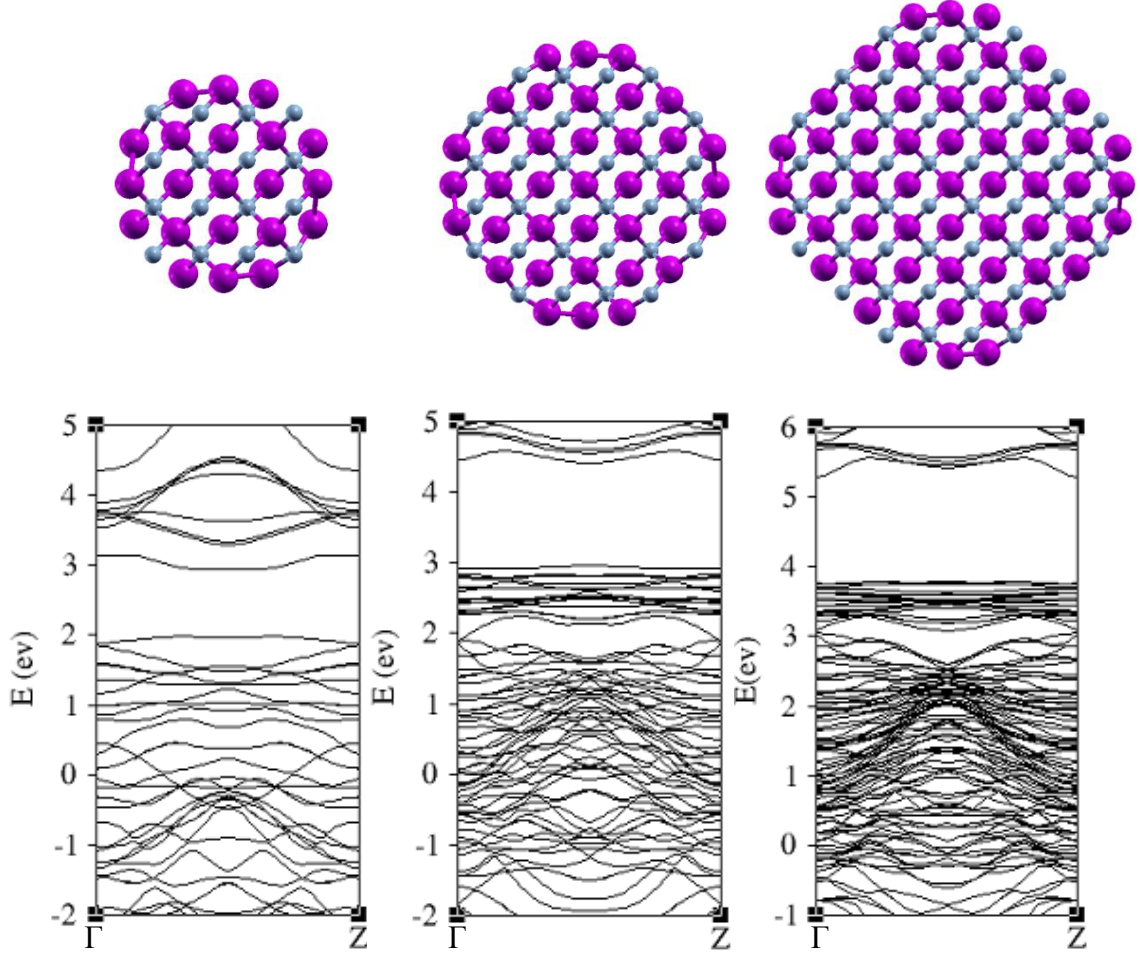


Şekil 3.13. 0.94nm yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri 8.586 a.u. olarak belirlenmiştir. Belirlenmiş olan örgü sabiti değeri 0.57nm ve 0.76nm değerlerindeki değerlere göre daha küçük çıkmıştır. Sistem için yapılan toplam enerji hesaplamalarında elde edilen olan  $E_{kesim}$  ve  $k_{nokta}$  değerine bağlı olarak  $1 \times 1 \times 6$ 'lık düzlem dalga baz seti kullanılmıştır.

### 3.2.4. Katkılanmamış GaN Nanotellerin Bant Yapısı

Denge durum konfigürasyonları elde edilmiş üç farklı yarıçap değerindeki GaNNT yapıların elektronik bant yapıları çizilmiştir. Elektronik bant yapısı özellikle yarıiletken nanoyapıların iletkenlik durumları hakkında bilgi veren önemli bir özellik olarak bilinir. Üç farklı yarıçaplı GaNNT yapının Fermi enerji seviyeleri dikkate alınarak çizilmiş elektronik bant yapıları şekil 3.14’de verilmiştir

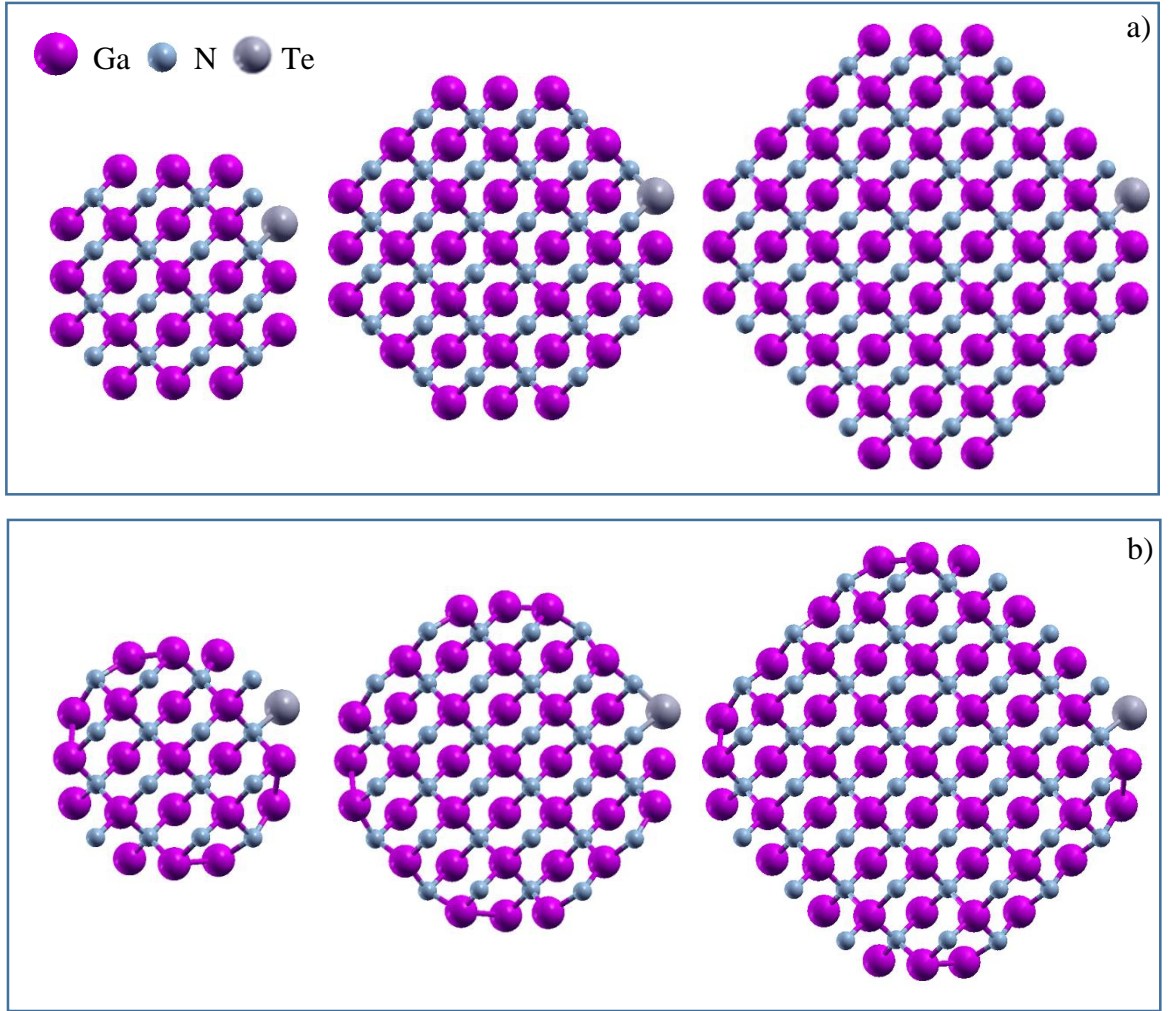


Şekil 3.14. Üç farklı yarıçaplı katkılanmamış GaN nanotellerin  $\Gamma$  ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.

Elektronik bant yapılarının çizimleri ters uzaydaki  $\Gamma$  ve Z noktalarına göre elde edilmiştir. GaNNT(37), GaNNT(69) ve GaNNT(109) yapılarının Fermi enerji düzeyi dikkate alınarak hesaplanmış bant aralık değerleri sırasıyla 0.956eV, 1.455eV ve 1.534eV olarak bulunmuştur. GaNNT yapının yarıçap değeri ve atom sayısı arttıkça bant aralık değerlerinin de arttığı gözlenmektedir.

### 3.3. Farklı Yarıçap Değerinde Tekli Te Atomu Katkılanmış GaN Nanotel Yapılar

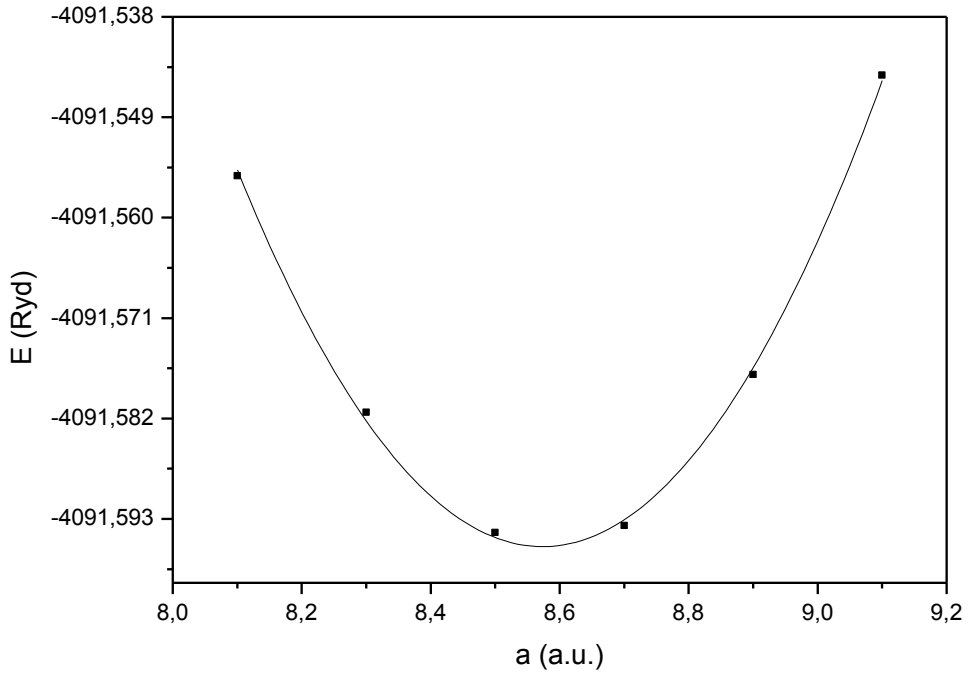
Üç farklı yarıçap değerinde modellenmiş GaNNT yapıların her birine bir adet Te atomu katkılanmıştır. Bu şekilde elde edilen nanotel yapılar Te atomu ile katkılanmış GaNNT yapılar (Te-GaNNT) olarak gösterilmiştir. Katkılama işlemi nanotel yapılarının çevre bölgesindeki Ga atomlarının yerine Te atomları yerleştirilerek yapılmıştır. Modellenen nanotel yapıların geometrik optimizasyon hesaplaması sırasında  $E_{kesim}$  ve  $k_{nokta}$  değerleri sırasıyla 30Ryd ve 6 olarak ele alınmıştır. Bu işlem sonucunda elde edilen 0.57nm, 0.76nm ve 0.94nm yarıçaplı üç farklı Te-GaNNT yapıların ideal komfigürasyonları ve denge durum komfigürasyonları şekil 3.15'de gösterilmiştir.



Şekil 3.15. (001) yönünde üç farklı yarıçaplı Te atomu katkılanmış GaN nanotellerin a) ideal komfigürasyonu ve b) denge durum komfigürasyonu.

### 3.3.1. 0.57 nm Yarıçaplı Te Katkılanmış GaN Nanotel

Katkılanmış 0.57nm yarıçaplı nanotel yapı 1 adet Te atomu, 20 adet Ga atomu ve 16 adet N atomundan oluşmaktadır. Toplamda 37 adet atom içeren Te atomu katkılanmış GaN nanotel yapı Te-GaNNT(37) şeklinde gösterilmiştir. Modellemesi yapılmış olan bu nanotel yapının örgü sabitinin yakınsaması yapılmıştır. Minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri belirlenerek temel durum konfigürasyonları elde edilmiştir. Sistemin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.16’te gösterilmektedir.

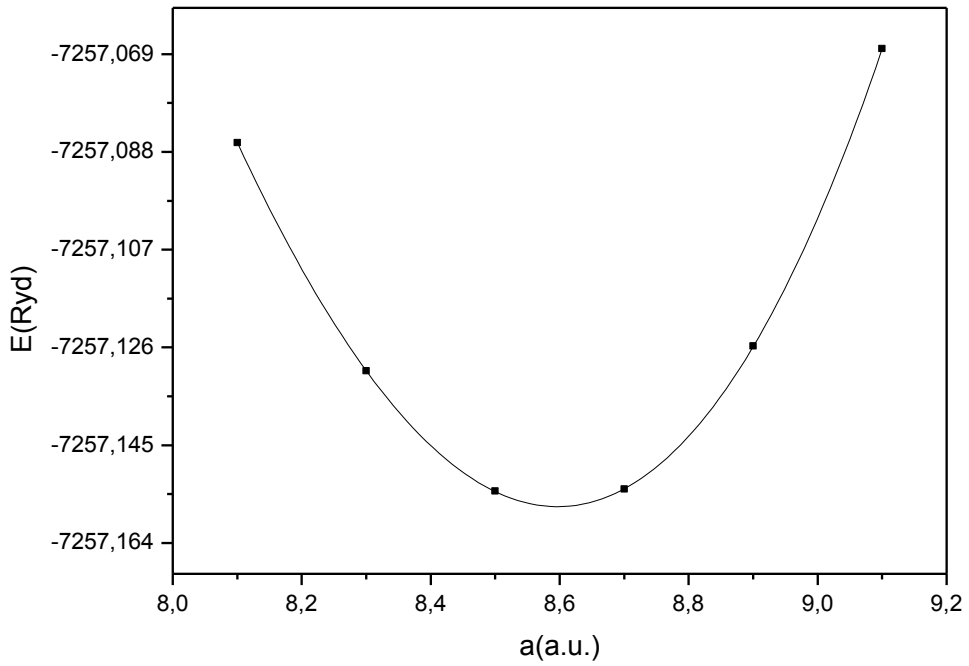


Şekil 3.16. 0.57nm yarıçaplı Te atomu katkılanmış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi.

Şekilde minimum enerji değerine karşılık gelen Te-GaNNT(37) yapının örgü sabiti değeri 8.575a.u. olarak belirlenmiştir. Yapılan toplam enerji hesaplamalarında daha önceden elde edilmiş olan  $E_{kesim}$  ve  $k_{nokta}$  değerlerine bağlı olarak 1x1x6 düzlem dalga baz seti kullanılmıştır.

### 3.3.2. 0.76 nm Yarıçaplı Te Katkılanmış GaN Nanotel

Katkılanmış 0.76nm yarıçaplı nanotel yapı 1 adet Te atomu, 36 adet Ga atomu ve 32 adet N atomundan oluşmaktadır. Toplamda 69 adet atomu bulunan GaN nanotel yapı Te-GaNNT(69) şeklinde gösterilmiştir. Nanotel yapının örgü sabitinin yakınsaması minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri belirlenerek yapılmıştır. Bu işlem sonucunda nanotel yapının temel durum konfigürasyonları elde edilmiştir. Sistemin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.17’de verilmiştir.

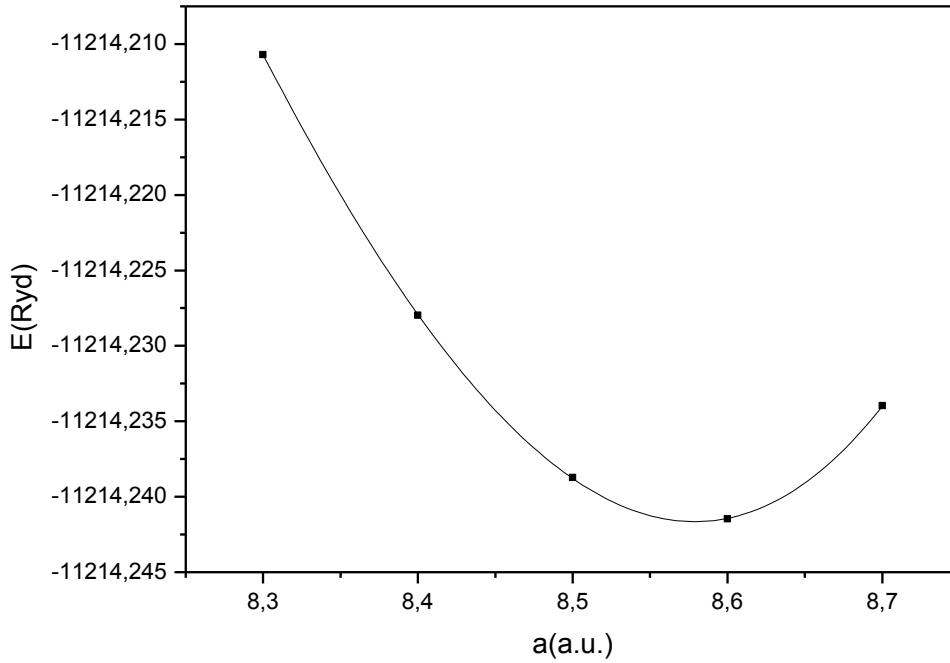


Şekil 3.17. 0.76nm yarıçaplı Te atomu ile katkılanmış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi Te-GaNNT(69) yapı için elde edilen minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri 8.596a.u. olarak belirlenmiştir. Katkılanmış nanotel yapı için belirlenmiş bu değer 0.57nm yarıçaplıdaki değere göre daha büyük çıkmıştır. Yapılan toplam enerji hesaplamalarında elde edilen  $E_{kesim}$  ve  $k_{nokta}$  değerine bağlı olarak  $1 \times 1 \times 6$  düzlem dalga baz seti kullanılmıştır.

### 3.3.3. 0.94 nm Yarıçaplı Te Katkılanmış GaN Nanotel

Katkılanmış 0.94nm yarıçaplı nanotel yapı içerisinde 1 adet Te atomu, 56 adet Ga atomu ve 52 adet N atomu bulunmaktadır. Toplam atom sayısının 69 adet olduğu GaN nanotel yapı Te-GaNNT(109) şeklinde gösterilmiştir. Bu yapının örgü sabitinin yakınsama çalışması minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri belirlenerek yapılmıştır. Bu işlem sonucunda nanotel yapının temel durum konfigürasyonları elde edilmiştir. Sistemin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.18’de verilmiştir.

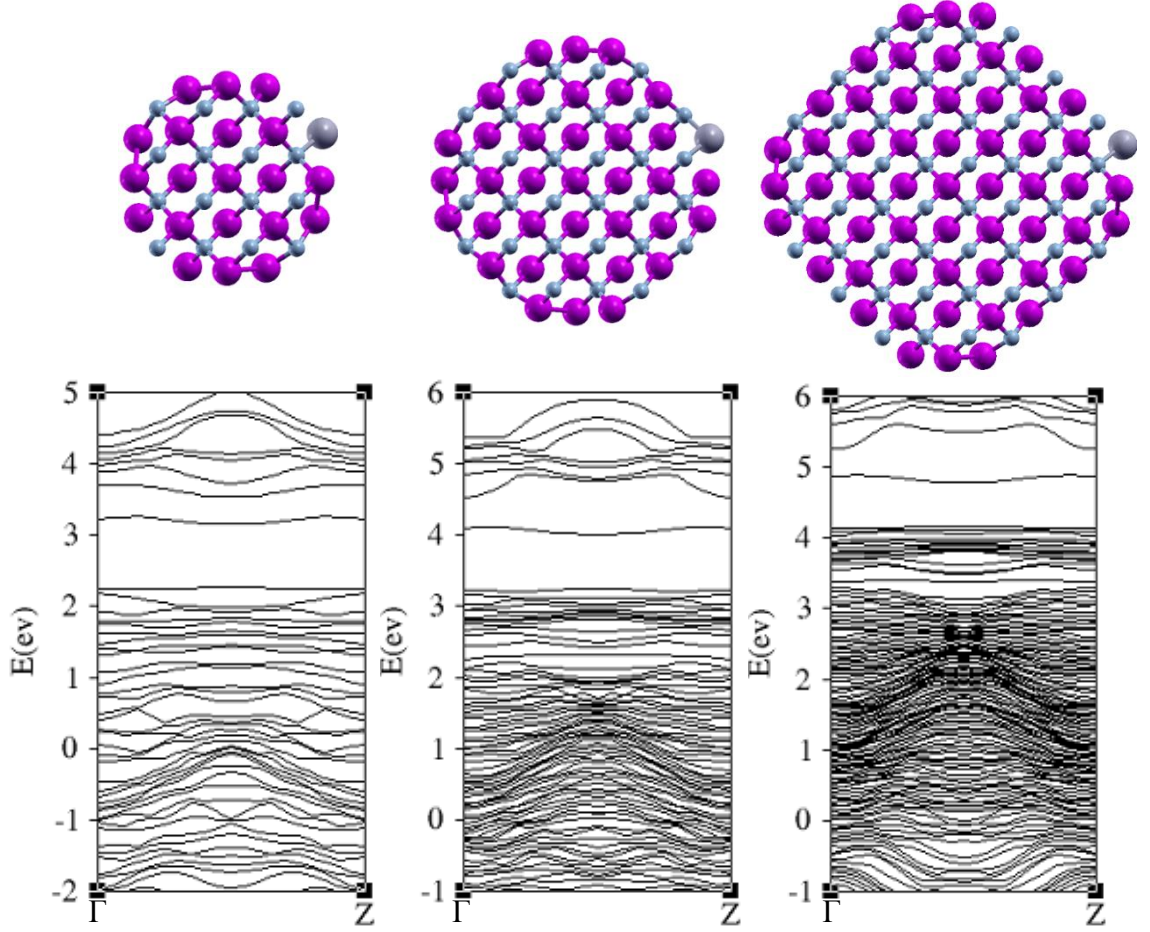


Şekil 3.18. 0.94nm yarıçaplı Te atomu ile katkılanmış GaN nanotel yapının toplam enerjisinin örgüsabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi Te-GaNNT(69) yapı için elde edilen minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri 8.575a.u. olarak belirlenmiştir. Katkılanmış nanotel yapı için belirlenmiş bu değer 0.57nm’lik yarıçaplıdaki değere göre artma ve 0.76nm yarıçaplı değere göre ise azalma göstermiştir. Yapılan toplam enerji hesaplamalarından elde edilen  $E_{kesim}$  ve  $k_{nokta}$  değerlerine bağlı olarak  $1 \times 1 \times 6$  düzlem dalga baz seti kullanılmıştır.

### 3.3.4. Tekli Te Atomu Katkılanmış GaN Nanotellerin Bant Yapısı

Denge durum konfigürasyonları elde edilmiş farklı yarıçaplardaki Te-GaNNT yapıların elektronik bant yapıları çizilmiştir. Burada amaç yarıiletken nanotel yapılarında katkılama işlemi ve yarıçap değişiminin bant yapılarında ve iletkenlik özelliklerinde değişikliği gözlemektir. Üç farklı yarıçaptaki Te-GaNNT yapıların Fermi enerji seviyeleri dikkate alınarak çizilmiş elektronik bant yapıları şekil 3.19’da verilmiştir



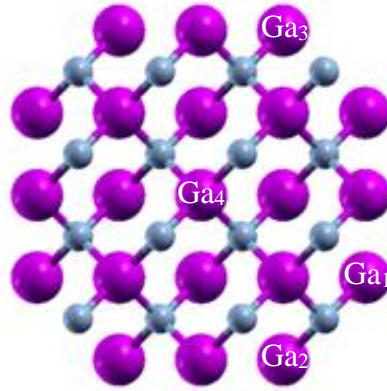
Şekil 3.19. Üç farklı yarıçaplı Te atomu katkılanmış GaN nanotellerin  $\Gamma$  ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.

Elektronik bant yapılarının çizimleri ters uzaydaki  $\Gamma$  ve Z noktalarına göre yapılmıştır. Te-GaNNT(37), Te-GaNNT(69) ve Te-GaNNT(109) yapılarının Fermi enerji düzeylerine göre bant aralık değerleri sırasıyla 0.899eV, 0.756eV ve 0,621eV olarak bulunmuştur. Te-GaNNT yapının yarıçap değeri ve atom sayısı arttıkça bant aralık değerlerinin de azaldığı gözlenmektedir.



### 3.4. Birden Fazla Te Atomu Katkılanmış GaN Nanotel Yapılar

Önceki bölümde ele alınmış olan yarıiletken nanoyapılardan 0.57nm yarıçap değerindeki katkılanmamış GaNNT(37) yapısına bu bölümde birden fazla Te atomu katkılama işlemi yapılmıştır. Bu işlemle katkılanmış atom sayısının değişiminin elektronik özellikler üzerindeki etkisi incelenmiştir. Birden fazla katkılanmış nanotel yapılar GaNNT(37) yapıya tekli, çiftli ve üçlü Te atomu katkılanarak elde edilmiştir. Katkılama yapılacak pozisyonlarla ilgili literatür taraması yapılmış ve buna bağlı olarak 4 adet pozisyon belirlenmiştir. Pozisyonları belirlenmiş olan atomlar sırası ile Ga<sub>1</sub>, Ga<sub>2</sub>, Ga<sub>3</sub> ve Ga<sub>4</sub> şeklinde numaralandırılmış olup GaNNT(37) yapısı üzerinde şekil 3.20’de gösterilmektedir. Şekilde Ga<sub>1</sub>, Ga<sub>2</sub> ve Ga<sub>3</sub> atomları çevre bölgesine Ga<sub>4</sub> atomu ise merkez bölgesinde olduğu görülmektedir.

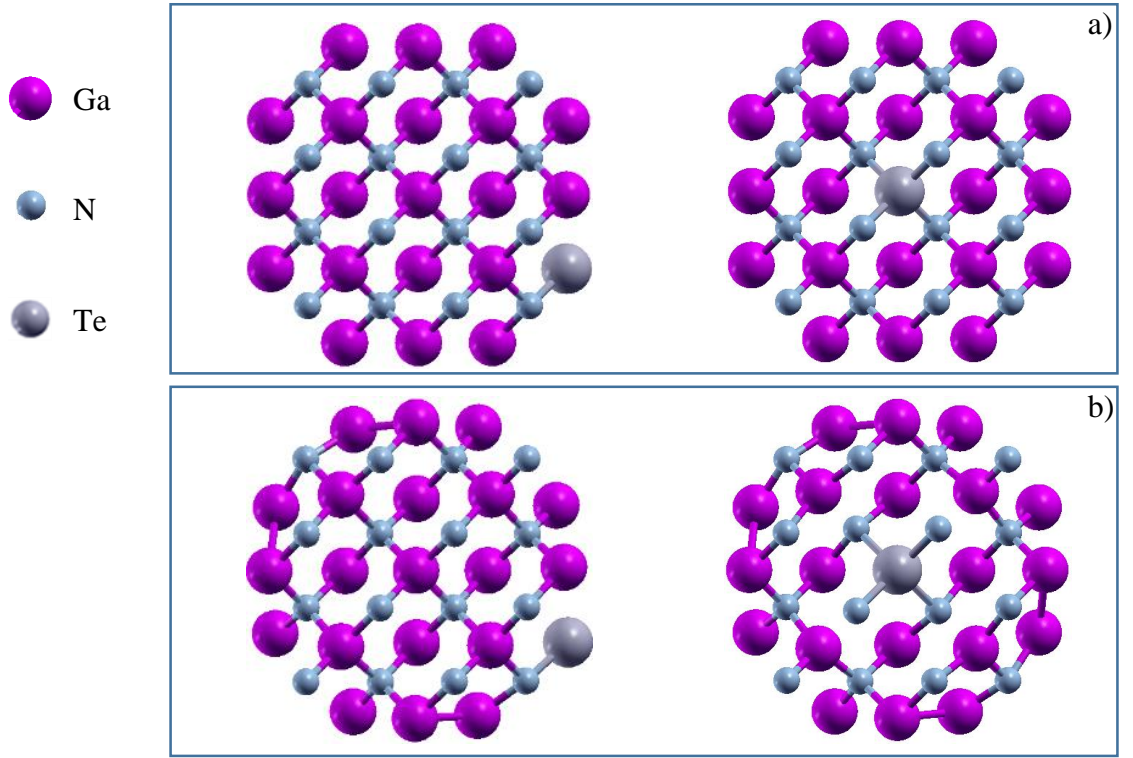


Şekil 3.20. Yarıçap değeri 0.57 nm olan GaNNT(37) yapıdaki katkılama yapılacak Ga atomlarının pozisyonları.

Şekilden de görüldüğü gibi 4 farklı Ga atomunun pozisyonu belirlenmiştir. Birden fazla Te atomu katkılanmış GaNNT yapılar bu pozisyonlar dikkate alınarak oluşturulmuştur. Katkılanan Te atomları farklı pozisyonlarda olan ve numaralandırılmış Ga atomları ile yer değiştirilmiştir. Ayrıca farklı pozisyonda katkılamanın etkisini görmek için tekli, ikili ve üçlü katkılanmış her nanotel için iki farklı şekilde modelleme yapılmıştır. Bu modelleme sayesinde Te atomunun farklı pozisyon katkılarının elektronik özellikleri üzerindeki etkisi incelenmiştir. Bu duruma bağlı olarak iki farklı şekilde katkılama stratejisi elde edilmiş olacaktır.

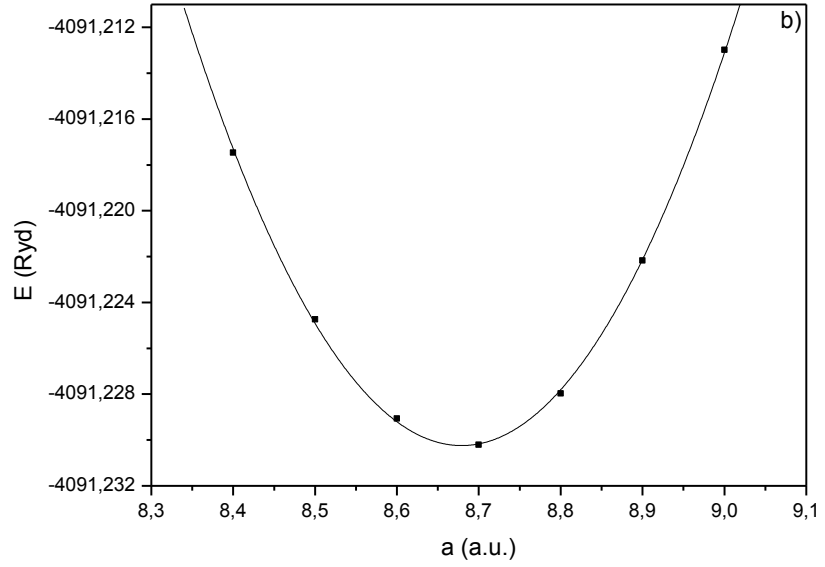
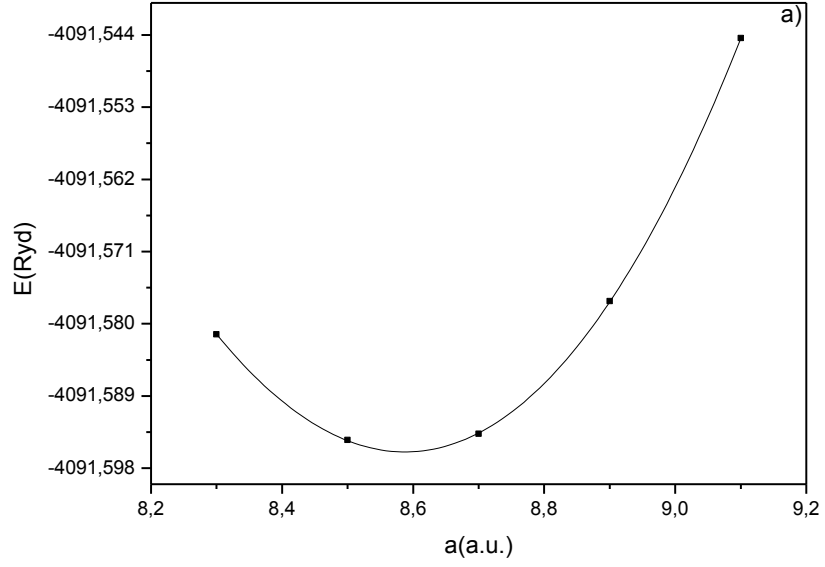
### 3.4.1. Tekli Te Katkılanmış GaN Nanoteller

Tekli Te atomu katkılanmış GaNNT yapıları elde etmek için şekil 3.19'da gösterilmiş olan Ga<sub>1</sub> ve Ga<sub>4</sub> atomlarının pozisyonları kullanılmıştır. Ga<sub>1</sub> pozisyonu kullanılarak çevre katkı ve Ga<sub>4</sub> pozisyonunu kullanarak ise merkez katkı GaNNT yapıları modellenmiştir. Bu amaçla 0.57 nm yarıçaplı farklı şekilde katkılanmış iki adet Te-GaNNT (37) yapı elde edilmiştir. İki farklı pozisyon için Te atomu ile katkılanmış bu nanotel modelleri şekil 3.21'de gösterilmiştir.



Şekil 3.21. Ga<sub>1</sub> ve Ga<sub>4</sub> pozisyonlarında tekli Te katkılanmış GaN nanotellerin a) ideal konfigürasyonları ve b) denge durum konfigürasyonları.

Şekilden de görüldüğü gibi her iki pozisyon kullanılarak modellenmiş olan tekli Te katkılanmış nanotellerin ideal konfigürasyonu ve denge durumları gösterilmektedir. Ayrıca her iki nanotellerin denge durumuna ulaşmak için yapılan geometrik optimizasyon hesaplamaları sonucunda elde edilen toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimleri şekil 3.22' de verilmektedir.

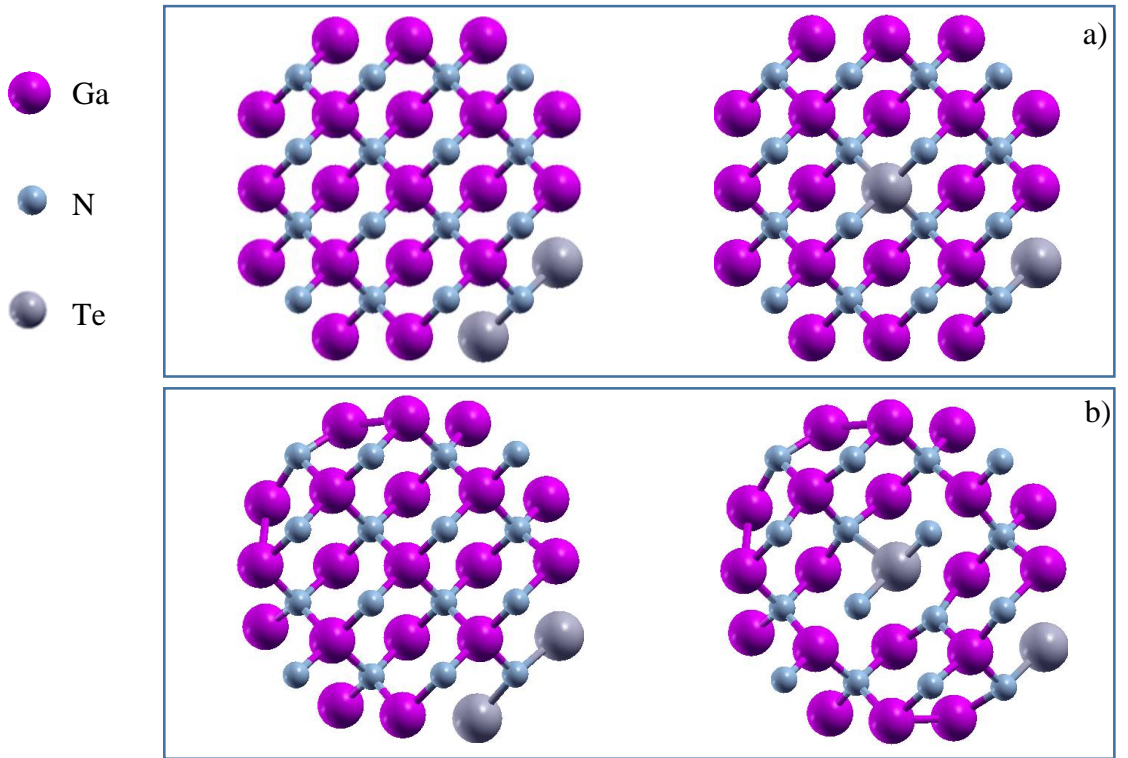


Şekil 3.22. a) Ga<sub>1</sub> ve b) Ga<sub>4</sub> pozisyonlarında tekli Te katkılanmış GaN nanotellerin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilde Ga<sub>1</sub> ve Ga<sub>4</sub> katkılı olan Te-GaNNT(37)'lerin minimum toplam enerji değerlerine karşılık elde edilen örgü sabiti değerleri ise sırasıyla  $a(\text{Ga}_1)=8,587\text{a.u.}$  ve  $a(\text{Ga}_4)=8,681\text{ a.u.}$  olarak belirlenmiştir.

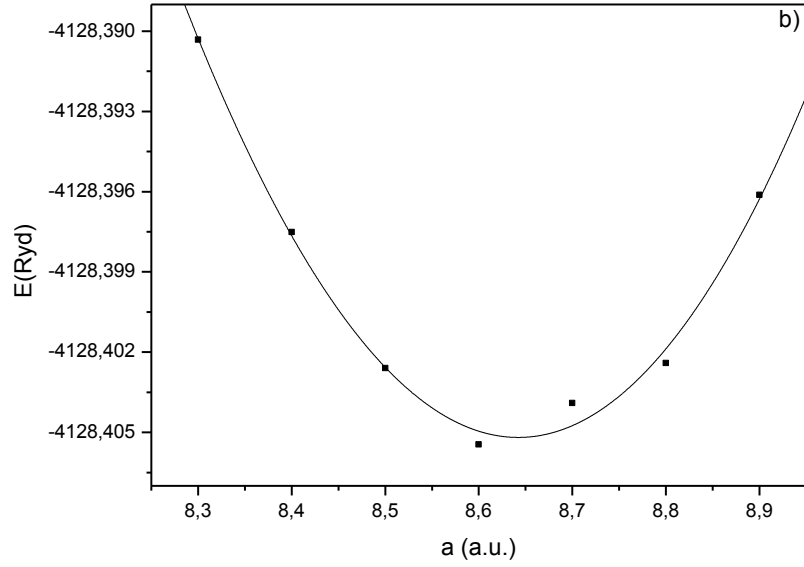
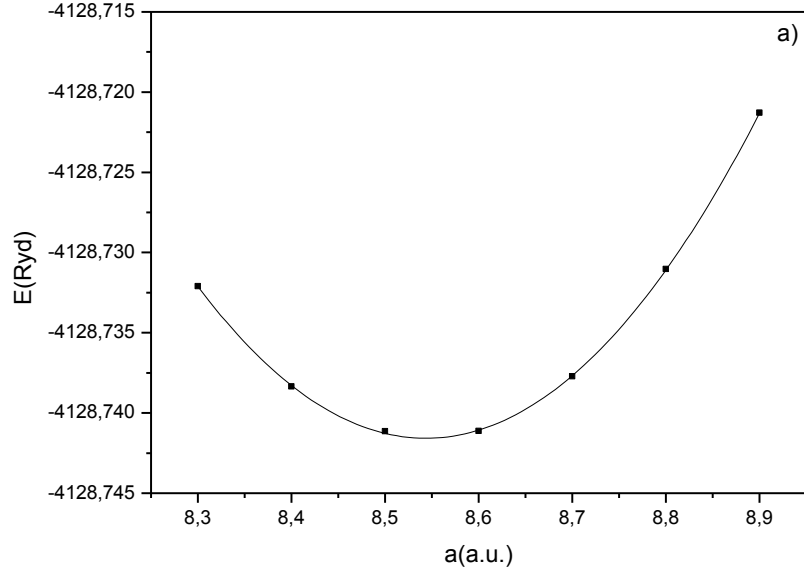
### 3.4.2. Çiftli Te Katkılanmış GaN Nanoteller

Çiftli Te atomu katkılanmış GaNNT yapıları elde etmek için şekil 3.19’da gösterilmiş olan Ga<sub>1</sub>, Ga<sub>2</sub> ve Ga<sub>4</sub> atomlarının pozisyonları kullanılmıştır. Ga<sub>1</sub> ve Ga<sub>2</sub> atomlarının pozisyonları kullanılarak çevre-çevre şeklinde, Ga<sub>4</sub> ve Ga<sub>1</sub> pozisyonunu kullanarak ise merkez-çevre şeklinde katkılanmış Te-GaNNT yapıları modellenmiştir. Bu amaçla 0.57 nm yarıçap değerinde farklı şekilde katkılanmış iki adet Te-GaNNT (37) yapı elde edilmiştir. Elde edilen bu yapıların iki farklı pozisyon için Te atomları ile katkılanmış modellemeleri şekil 3.23’te gösterilmiştir.



Şekil 3.23. Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub> ve Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub> pozisyonlarında çiftli Te katkılanmış GaN nanotellerin a) ideal konfigürasyonları ve b) denge durum konfigürasyonları.

Şekilde iki farklı şekilde modellenmiş olan çiftli Te katkılanmış nanotellerin ideal konfigürasyonu ve denge durumları konfigürasyonları gösterilmektedir. Buna bağlı olarak denge duruma ulaşmak için yapılan geometrik optimizasyon hesaplamaları sonucunda elde edilen toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimleri şekil 3.24’te verilmektedir.

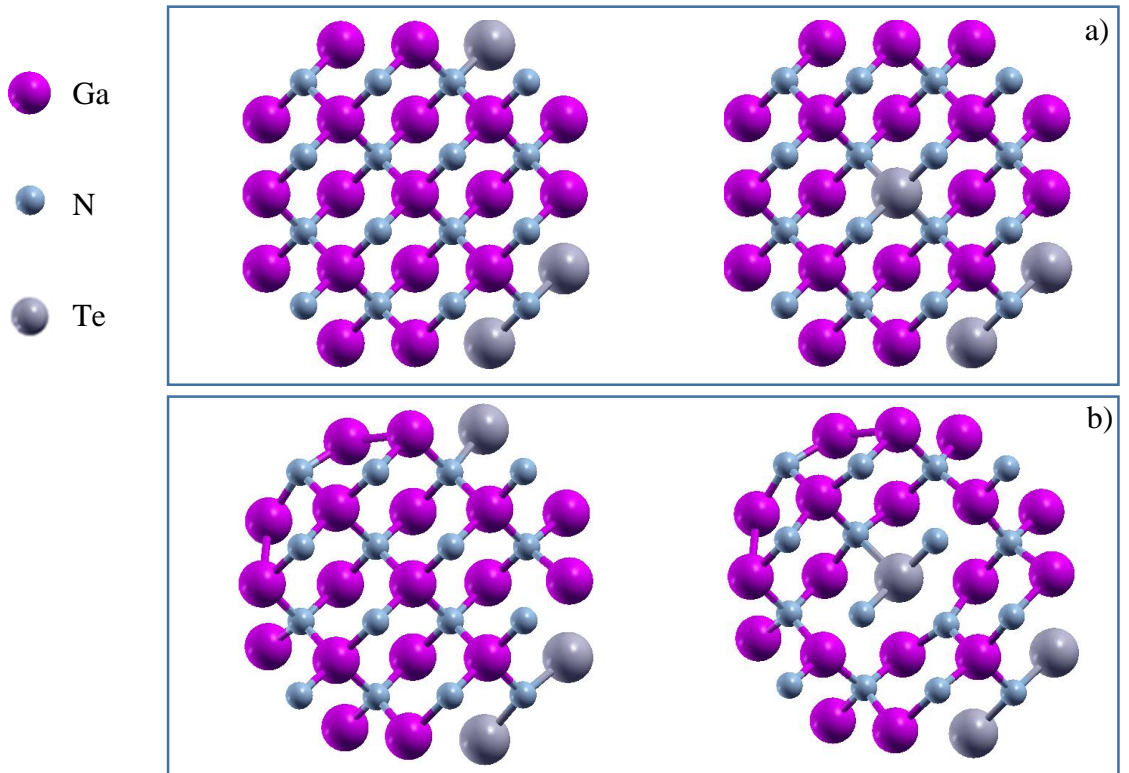


Şekil 3.24. a) Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub> ve b) Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub> pozisyonlarında çiftli Te katkılanmış GaN nanotellerin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilde Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub> ve Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub> katkılı iki adet, ikili Te-GaNNT(37)'lerin minimum toplam enerji değerlerine karşılık örgü sabiti değerleri ise sırasıyla a(Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub>)=8,544a.u. ve a(Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub>)=8,642a.u. olarak belirlenmiştir.

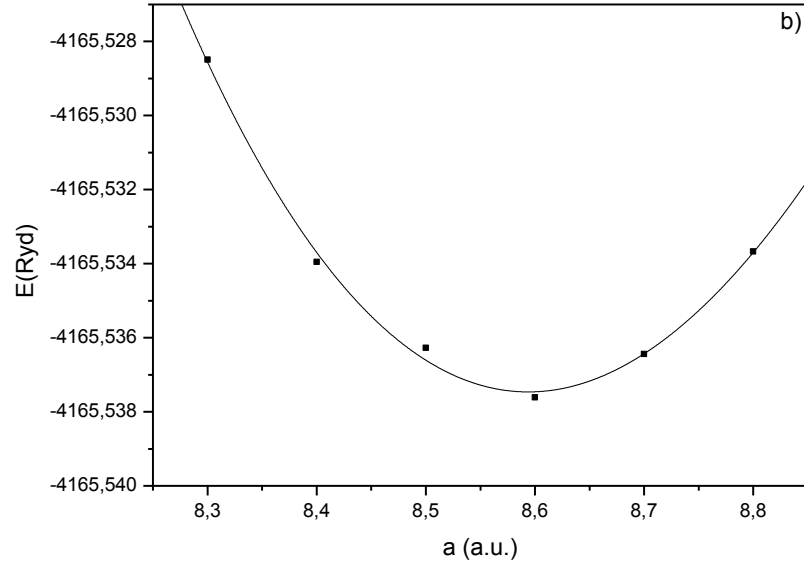
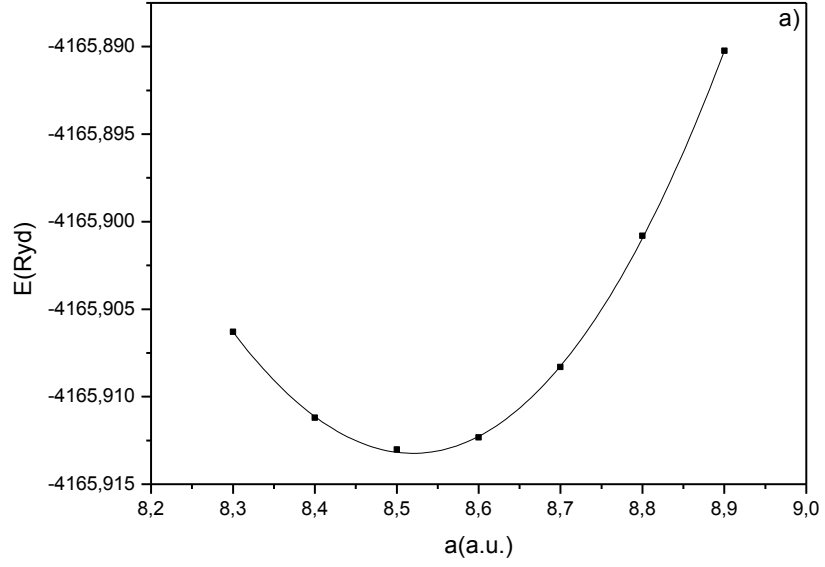
### 3.4.3. Üçlü Te Katkılanmış GaN Nanoteller

Üçlü Te atomu katkılanmış GaNNT yapıları elde etmek için şekil 3.20’de gösterilmiş olan Ga<sub>1</sub>, Ga<sub>2</sub>, Ga<sub>3</sub> ve Ga<sub>4</sub> atomlarının pozisyonları kullanılmıştır. Ga<sub>1</sub>, Ga<sub>2</sub> ve Ga<sub>3</sub> atomlarının pozisyonları kullanılarak Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub>-Ga<sub>3</sub> şeklinde, Ga<sub>4</sub>, Ga<sub>1</sub> ve Ga<sub>2</sub> pozisyonları kullanılarak Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub> şeklinde katkılanmış Te-GaNNT yapıları modellenmiştir. Bu amaçla 0.57 nm yarıçap değerinde farklı şekilde katkılanmış iki adet üçlü Te-GaNNT(37) yapı elde edilmiştir. Elde edilen bu yapıların iki farklı pozisyonda Te atomları ile katkılanmış modelleri şekil 3.25’te gösterilmiştir.



Şekil 3.25. Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub>-Ga<sub>3</sub> ve Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub> pozisyonlarında üçlü Te katkılanmış GaN nanotellerin a) ideal konfigürasyonları ve b) denge durum konfigürasyonları.

Şekilden de görüldüğü gibi iki farklı şekilde modellenmiş olan üçlü Te katkılanmış nanotellerin ideal konfigürasyonu ve denge durumları gösterilmektedir. Buna bağlı olarak denge duruma ulaşmak için yapılan geometrik optimizasyon hesaplamaları sonucunda elde edilen toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimleri şekil 3.26’da verilmektedir.

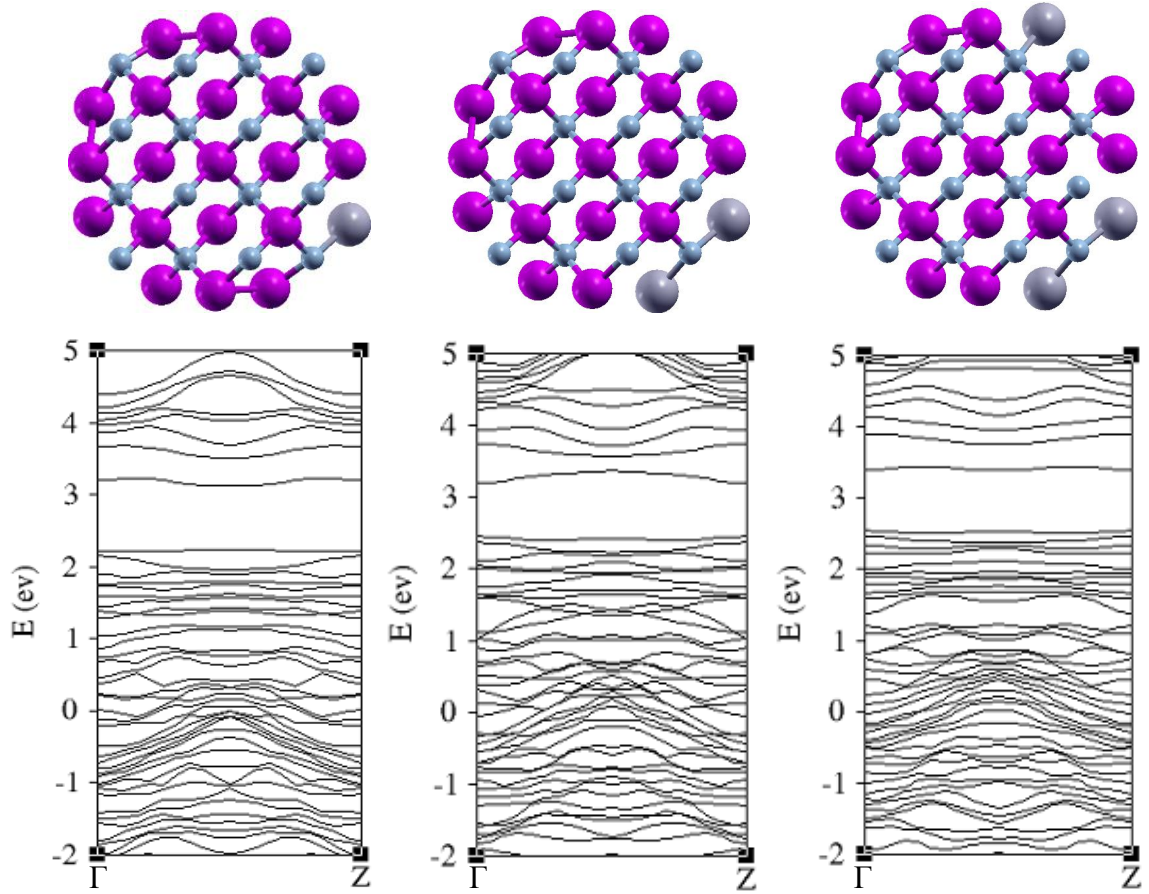


Şekil 3.26. a) Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub>-Ga<sub>3</sub> ve b) Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub> pozisyonlarında üçlü Te katkılanmış GaN nanotellerin toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilde Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub>-Ga<sub>3</sub> ve Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub> katkılı üçlü Te-GaNNT(69)'lerin minimum toplam enerji değerlerine karşılık örgü sabiti değerleri sırasıyla  $a(\text{Ga}_1\text{-Ga}_2\text{-Ga}_3) = 8.517$  a.u. ve  $a(\text{Ga}_4\text{-Ga}_1\text{-Ga}_2) = 8.594$  a.u. olarak belirlenmiştir.

### 3.4.4. Birden Fazla Te Atomu Katkılanmış GaN Nanotellerin Bant Yapısı

Bu bölümde Te-GaNNT yapıların elektronik özelliklerinin Te atom sayısına göre değişimi incelenmiştir. Ayrıca ikişer adet modellenmiş olan tekli, çiftli ve üçlü Te-GaNNT yapılar kullanılarak iki farklı şekilde katkılama strateji gerçekleştirilmiştir. Bu stratejilerden ilki Yulong Zang ve arkadaşlarının kullanmış olduğu  $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$  pozisyonlarına [23] ikincisi ise  $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$  pozisyonlarına yapılmıştır. Burada amaç katkılanmış atomların farklı pozisyonlarının elektronik özellikler üzerindeki etkisini gözlemektir.  $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$  pozisyonlarında gerçekleştirilmiş sırasıyla tekli, çiftli ve üçlü katkılanmış Te-GaNNT'ler ve bant yapıları şekil 3.27'de gösterilmiştir.

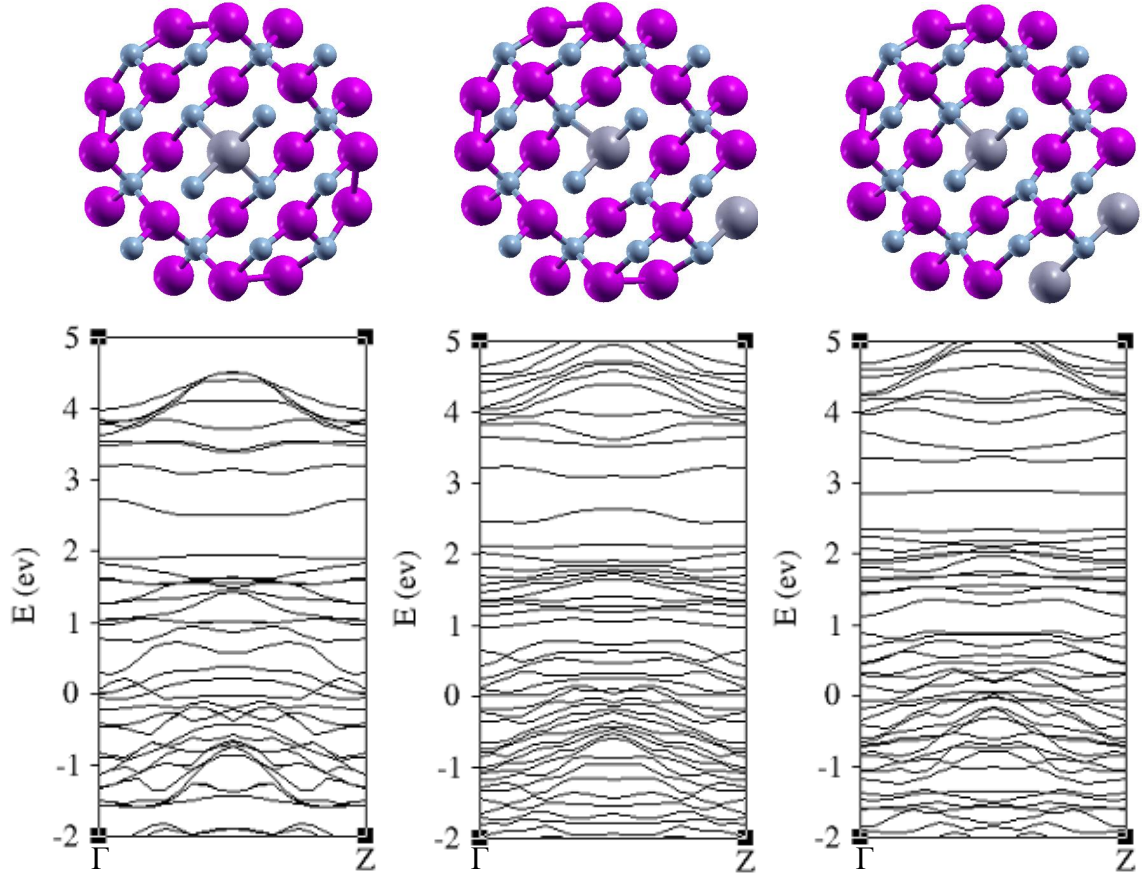


Şekil 3.27.  $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$  şeklinde tekli, çiftli ve üçlü Te atomu katkılanmış GaN nanotellerin  $\Gamma$  ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.

Bant yapı çizimleri her üç nanotel yapı için Fermi düzeyleri dikkate alınarak yapılmıştır.  $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$  şeklinde tekli, çiftli ve üçlü olarak modellenmiş nanotellerin



valans ve iletkenlik bant arasındaki farkı temsil eden bant aralık değerleri sırasıyla 0.896ev, 0.549ev ve 0.371ev olarak hesaplanmıştır.  $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$  pozisyonlarında gerçekleştirilmiş sırasıyla tekli, çiftli ve üçlü katkılanmış Te-GaNNT'ler ve bant yapıları şekil 3.28'de gösterilmiştir.

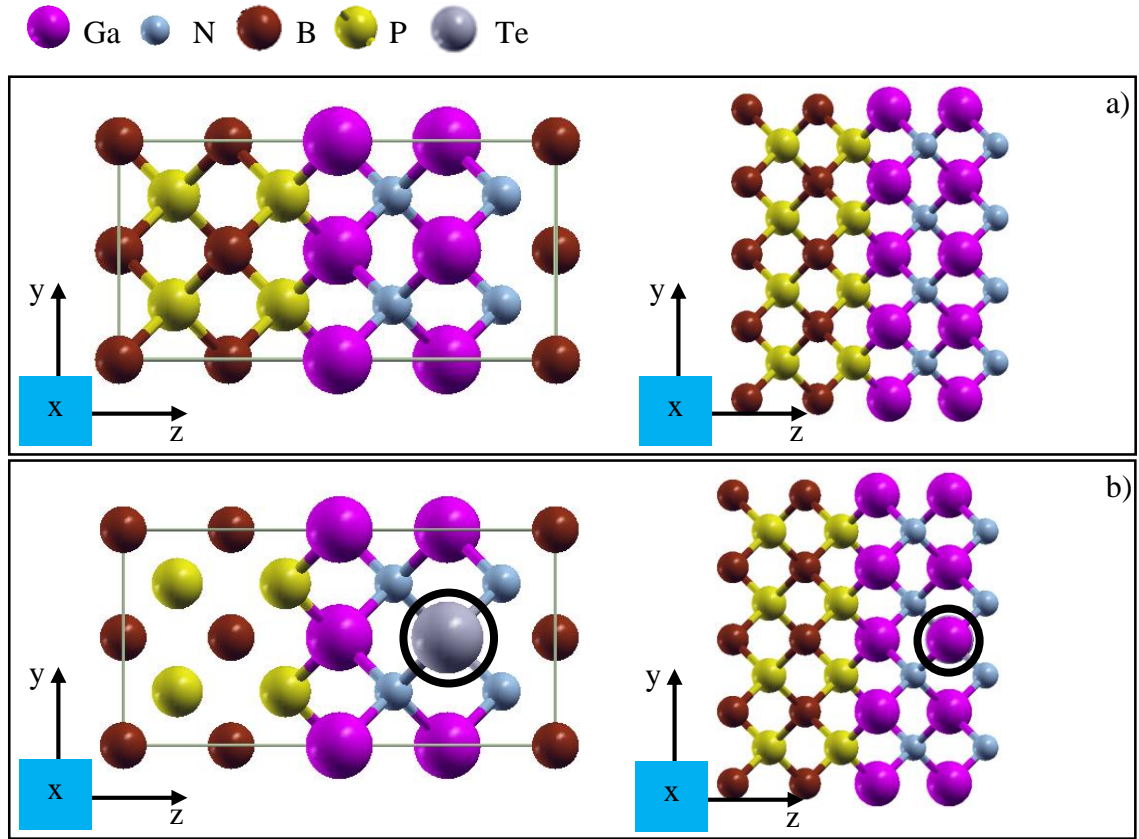


Şekil 3.28.  $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$  şeklinde tekli, çiftli ve üçlü Te atomu katkılanmış GaN nanotellerin  $\Gamma$  ve Z özel noktalarına göre bant yapıları.

Bant yapı çizimleri her üç nanotel yapı için Fermi düzeyleri dikkate alınarak yapılmıştır.  $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$  şeklinde tekli, çiftli ve üçlü olarak modellenmiş nanotellerin valans ve iletkenlik bantları arasındaki farkı temsil eden bant aralık değerleri sırasıyla 0.483ev, 0.424ev ve 0.097ev olarak hesaplanmıştır.

### 3.5. BP/GaN Heteroyapılar

Bulk veya nanotel yapı olarak modellenmiş III-V bileşik yarıiletken yapı olan GaN, diğer bir bileşik yarı iletken olan BP ile ard arda gelecek şekilde modellenerek heteroyapılar oluşturulmuştur. Bu şekilde meydana getirilen yapılarda birleşmenin yapıldığı arayüz bölgesinde iki ayrı yarıiletkenin potansiyel eğrilerinden kaynaklanan bir fark gözlenmektedir. Bu farkın oluşmasından faydalanılarak yapılan nano boyutlardaki modellemeler optik ve elektronik malzemelerin üretiminde kullanılmaktadır [87]. Ayrıca bu potansiyel fark kuantum kuyuları oluşturmaktadır. Bu bölümde BP ve GaN yarıiletkenleri kullanılarak bulk heteroyapı, katkılanmış bulk heteroyapı, nanotel heteroyapı ve katkılanmış nanotel heteroyapı olmak üzere 4 farklı heteroyapı modellenmesi yapılmıştır. (001) yönünde büyütülmüş olan bu yapılar (100) yönünden görüntüsü şekil 3.29'da verilmektedir.



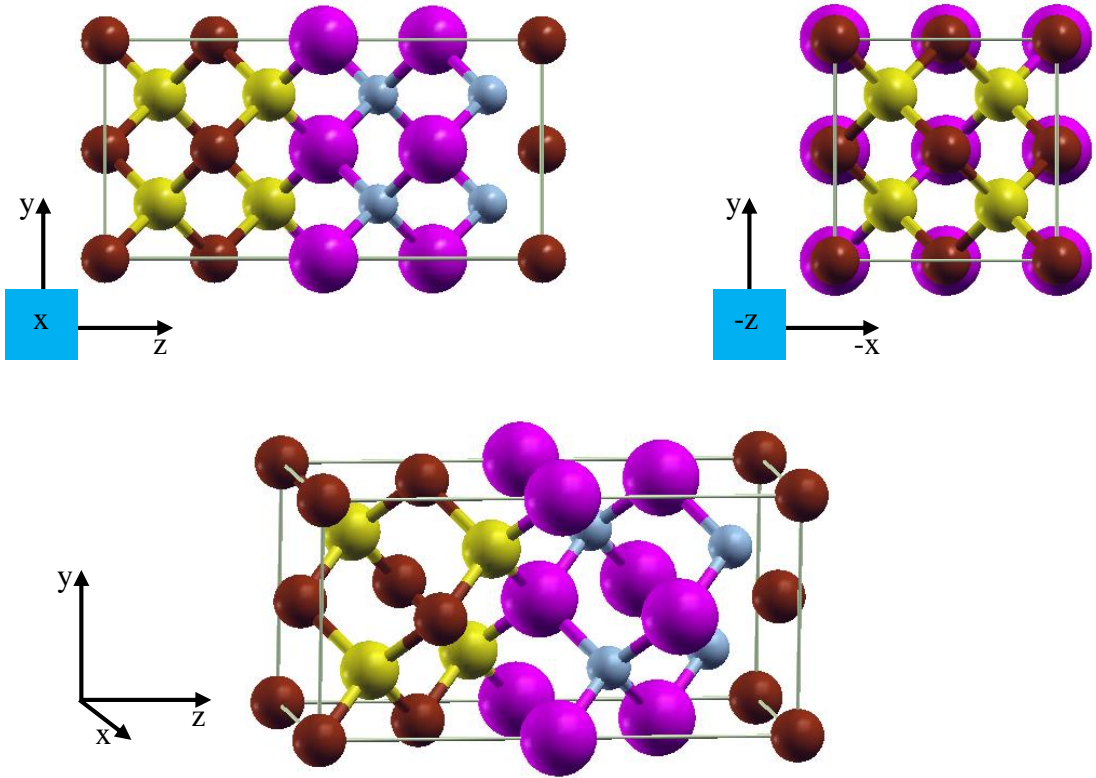
Şekil 3.29. (001) doğrultusunda modellenmiş BP/GaN bulk ve nanotel heteroyapılarının sırasıyla a) katkılanmamış ve b) katkılanmış modelleri.

### 3.5.1. BP/GaN Bulk Heteroyapı Sistemler

BP/GaN bulk heteroyapılar her iki yarıiletken bulk yapının (001) yönünde ard arda getirilmesi ile oluşturulmuştur. Bu bölümde BP/GaN bulk yapılar için katkılanmamış ve Te atomu ile katkılanmış olmak üzere iki farklı sistem incelenmiştir.

#### i. Katkılanmamış Bulk Heteroyapı

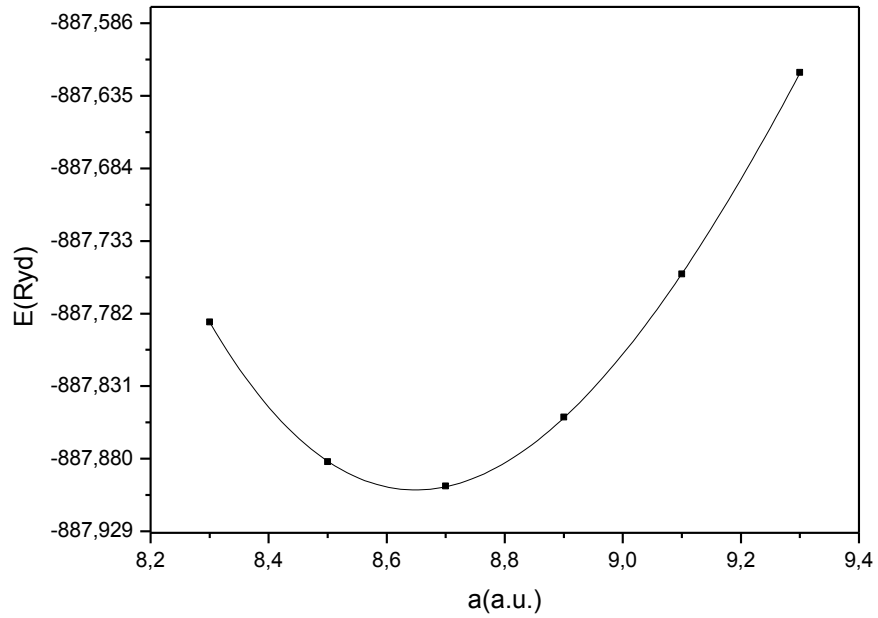
BP bulk yapı ile GaN bulk yapısı kullanılarak BP/GaN birer katmanlı bulk oluşturulmuştur. Bulk heteroyapı olarak bilinen bu yapı (1+1) şeklinde bir katman BP bulk yapısı ile bir katman GaN bulk yapısı (001) yönünde art arda gelecek şekilde dizilerek elde edilmiştir. Birer katmanlı şeklinde olan bu bulk heteroyapının üç farklı yönden gösterimi Şekil 3.30'da verilmiştir.



Şekil 3.30. (001) doğrultusundaki BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü.

Şekilde BP ve GaN' in zincblende olarak modellenmiş bulk yapılarından oluşturulmuş olan BP/GaN (1+1) bulk heteroyapısının üç farklı yönden görüntüsü

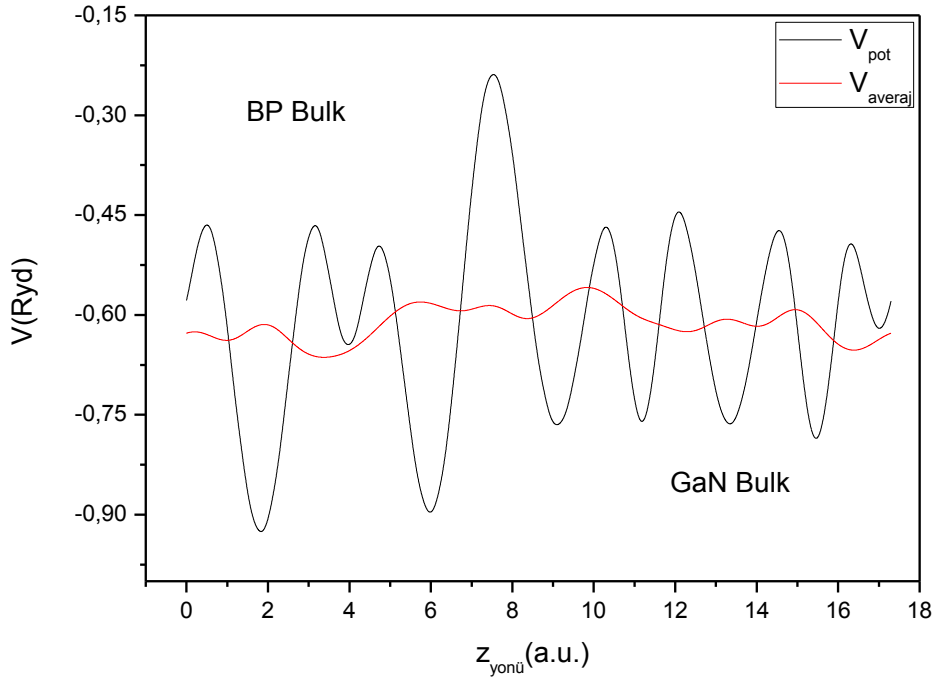
bulunmaktadır. Bunun yanı sıra BP ve GaN daha önce belirlenmiş olan örgü sabitleri sırasıyla 8.592a.u. ve 8.597a.u. değerlerindedir. Bu değerler karşılaştırıldığında birbirlerine çok yakın oldukları görülmektedir. Yapılan karşılaştırma sonucu hesaplamalar sonucunda belirlenmiş olan örgü sabiti değerlerinin arasındaki uyumsuzluğun 0.6%'dan daha az olduğu görülmüştür. Bu uyumsuzluk çok küçük bir değer olduğundan iki yarıiletken malzeme için örgü sabiti uyuşan malzemeler denilebilir. BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının minimum toplam enerjisinin farklı örgü sabitlerine göre değişimi şekil 2.31'de verilmiştir.



Şekil 3.31. BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının minimum toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekil dikkatlice incelendiğinde, minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri 8.647a.u. [101] değerine yakın olarak 8.651a.u. bulunmuştur. Hesaplamalarda sistemin  $E_{kesim}$  değeri 30 Ryd ve sistemi ters uzayda temsil eden düzlem dalga baz seti ise 6x6x3 olarak alınmıştır. Belirlenen sonuç BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının minimum enerji seviyesindeki en son örgü sabiti değerini verir.

Sistemin denge durumundaki örgü sabiti değeri belirlendikten sonra elektronik özellikleri hakkında önemli bilgiler veren düzlemsel potansiyel eğrisi hesaplanmıştır. Sistemin potansiyel eğrisine z eksenine boyunca bakıldığında iki farklı yarıiletken yapıdan oluşması nedeniyle arayüzey bölgesinde bir potansiyel fark gözlenmektedir. Burada meydana gelen potansiyel farkı daha iyi görebilmek için düzlemsel potansiyel eğrileri üzerinden makroskobik averaj eğrisi elde edilmiştir. BP/GaN (1+1) bulk heteroyapı için elde edilmiş olan düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrilerinin z yönüne göre değişimleri şekil 3.32’de verilmiştir.

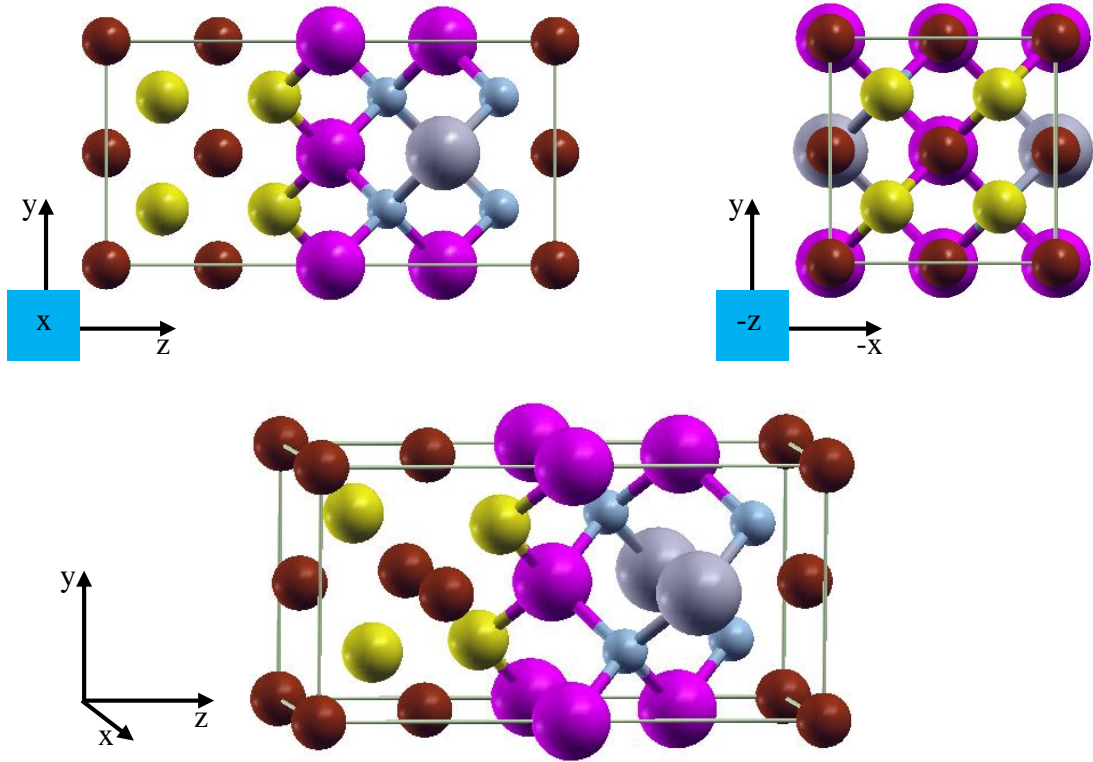


Şekil 3.32. BP/GaN (1+1) bulk heteroyapısının düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrilerinin z yönüne göre değişimi.

Şekil incelendiğinde, sistemin arayüzeyinden kaynaklanan minimum bir potansiyel fark görülmektedir. Denge durumu elde edilmiş olan sistem için potansiyel fark yaklaşık olarak 0.0023Ryd olarak belirlenmiştir. Buradaki makroskobik averaj değerindeki fark, arayüzeyin her iki tarafındaki bulk karakteri ve örgü sabitlerinin uyumu gibi faktörlerden dolayı BP bileşiğinin tampon malzeme olarak kullanılabilme özelliğine sahip olduğunu göstermektedir [27].

## ii. Katkılanmış Bulk Heteroyapı

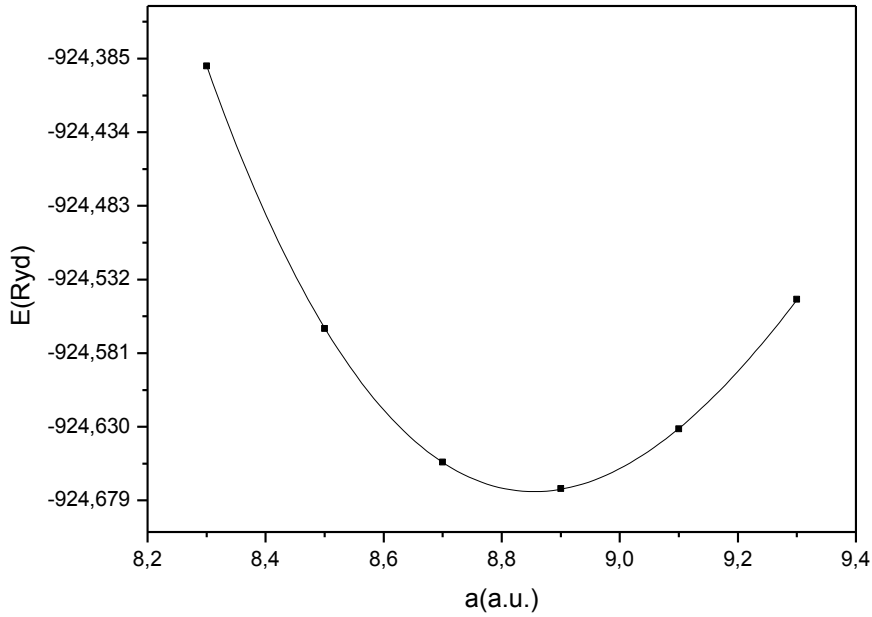
BP/GaN bulk heteroyapısının katkılanmış modellemesi için GaN bulk tarafındaki Ga atomu yerine Te katkılanarak yapılmıştır. Katkılama işlemi ile amaçlanan arayüzey bölgesinde düzlemsel potansiyel eğrisi ve makroskobik averaj eğrisi üzerindeki potansiyel farkta değişiklik meydana getirmektir. Potansiyel eğri üzerinde meydana gelen değişiklikler dikkate alınarak elde edilen yarıiletken heteroyapıların elektrik ve elektronik teknoloji açısından kullanılabilirliği araştırılmaktadır. Te atomu ile katkılanmış BP/GaN (1+1) bulk heteroyapı bir katman BP bulk yapı ve bir katman Te-GaN yapının z eksenine boyunca art arda gelmesiyle sonucunda oluşturulmuştur. Bu şekilde oluşturulmuş katkılanmış bulk heteroyapısı Te-BP/GaN (1+1) olarak gösterilmiştir. Te atomu ile katkılanmış birer katmanlı bulk heteroyapının üç farklı yönden gösterimi Şekil 3.33'de verilmiştir.



Şekil 3.33. (001) doğrultusundaki Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü.

Şekilde Te-BP/GaN (1+1) katkılanmış bulk heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü bulunmaktadır. Modellemesi yapılmış olan katkılanmış bulk heteroyapının

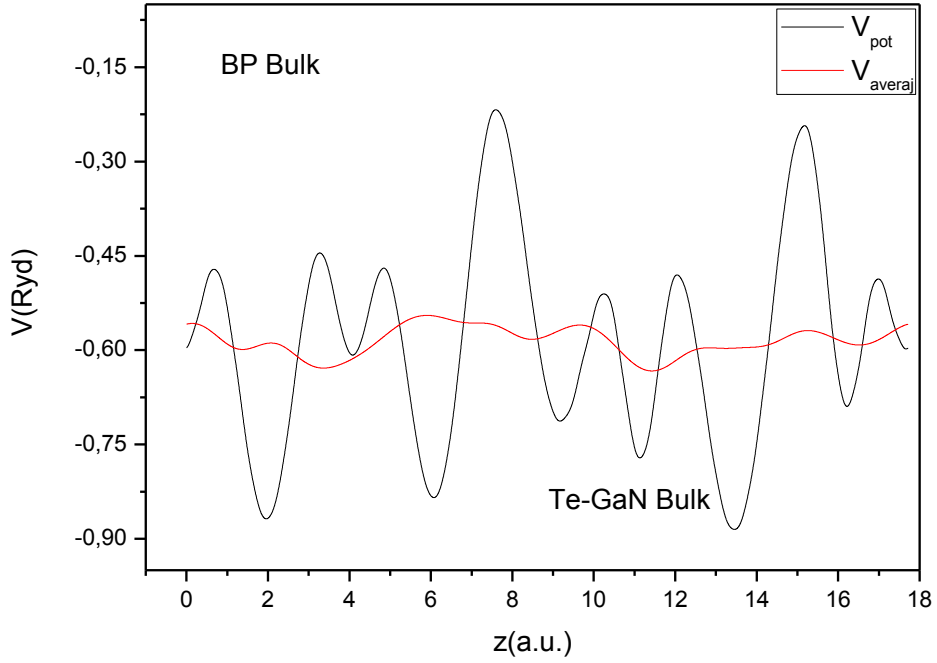
denge durumunu elde etmek için toplam enerji hesapları yapılmıştır. Bu hesaplar yapılırken sistem parametreleri olarak  $E_{kesim}$  değeri 30 Ryd, sistemi ters uzayda temsil eden düzlem dalga baz seti ise  $6 \times 6 \times 3$  olarak alınmıştır. Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının minimum toplam enerjisinin farklı örgü sabitlerine göre değişimi şekil 3.34’de verilmiştir.



Şekil 3.34. Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının minimum toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilde Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapısının minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri 8.656a.u. olarak belirlenmiştir. Heteroyapı için belirlenmiş olan bu sonuç sistemin denge durumunu temsil eden minimum enerji seviyesindeki en son örgü sabiti değeridir. Elde edilen bu değer katkılanmamış bulk heteroyapının örgü sabiti değerine göre daha büyüktür. Bulk heteroyapılarda katkılama işlemi örgü sabiti değerini arttırmaktadır.

Sistemin denge durumundaki örgü sabiti değeri belirlendikten sonra elektronik özellikleri hakkında önemli bilgiler veren düzlemsel potansiyel eğrisi z eksenini boyunca hesaplanmıştır. Bu eğriye bakıldığında iki farklı yarıiletken ve katkılanma işlemi sayesinde arayüzey bölgesinde bir potansiyel fark gözlenmektedir. Burada meydana gelen potansiyel farkı daha iyi görebilmek bu değerler üzerinden makroskobik ortalama eğrisi elde edilmiştir. Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapı için elde edilmiş olan düzlemsel potansiyel ve makroskobik ortalama eğrilerinin z yönüne göre değişimleri Şekil 3.35'te verilmiştir.



Şekil 3.35. Te-BP/GaN (1+1) bulk heteroyapının düzlemsel potansiyel ve makroskobik ortalama eğrisinin z yönüne göre değişimi.

Şekil incelendiğinde, sistemin arayüzeyinden kaynaklanan bir potansiyel fark görülmektedir. Denge durumu elde edilmiş Te-BP/GaN (1+1) sistem için potansiyel fark yaklaşık olarak 0.0012Ryd olarak belirlenmiştir. Buradaki makroskobik ortalama değerindeki farka dikkat edildiğinde katkılanmamış yapıya göre bir azalma meydana gelmiştir. Bulk heteroyapılar için yapılan katkılama işlemi potansiyel fark değerinde azalmaya yol açmıştır.

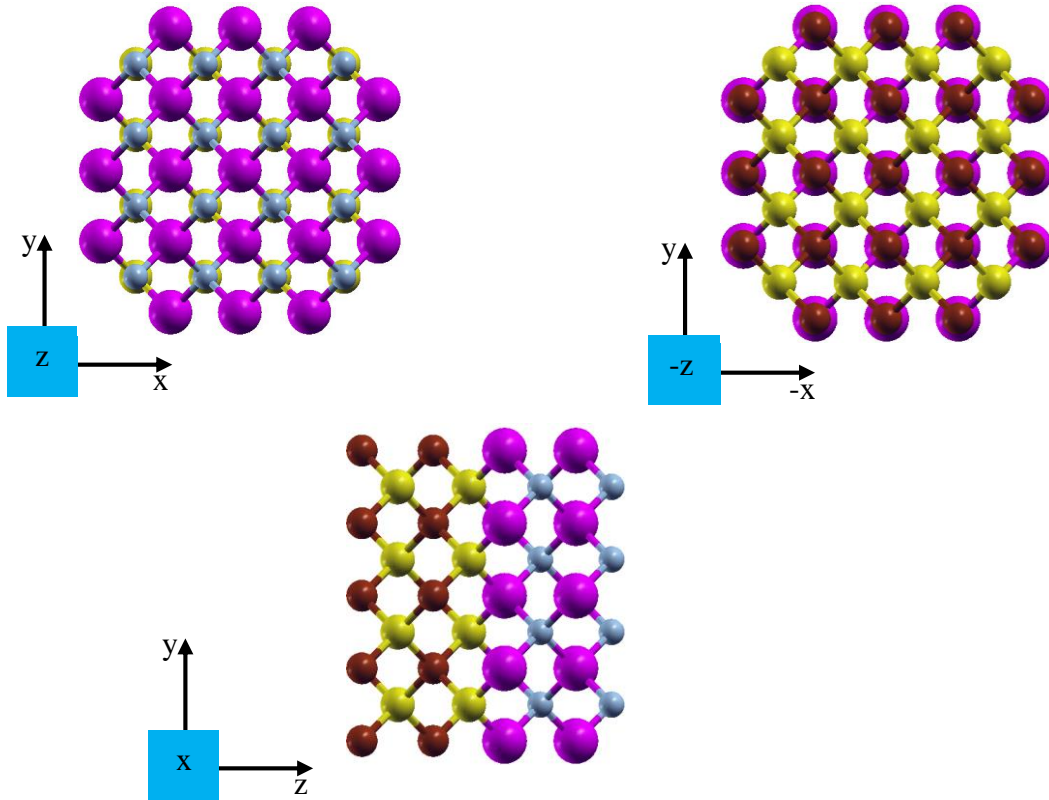


### 3.5.2. BP/GaN Nanotel Heteroyapı Sistemler

BP/GaN heteroyapılar her iki yarıiletken nanotel yapının (001) doğrultusunda art arda getirilmesi sonucunda oluşturulmuştur. Bu bölümde BP/GaN nanotel yapıların katkılanmamış ve Te atomu ile katkılanmış olmak üzere iki farklı sistemi incelenmiştir.

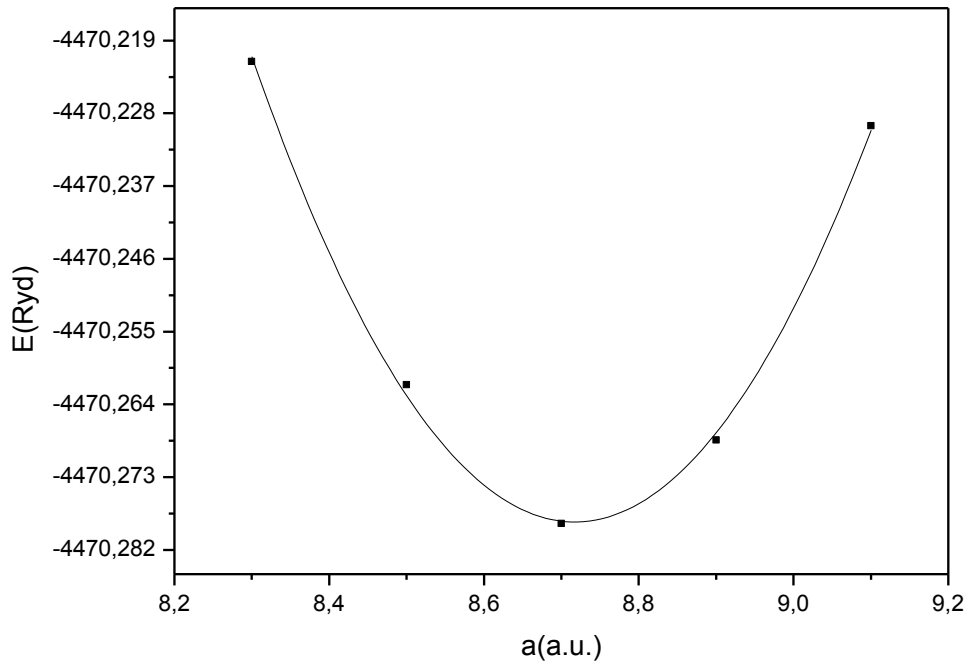
#### i. Katkılanmamış Nanotel Heteroyapı

Katkılanmamış nanotel heteroyapıyı oluşturmak için 0.57nm yarıçaplı BP nanotel (BPNT(37)) ve GaNNT(37) yapısında ZB örgüsüne sahip yarıiletkenler kullanılmıştır. Bu yarıiletken nanotel yapılar önce bir adet BPNT(37) ve ardından bir adet GaNNT(37) gelecek şekilde (001) doğrultusunda dizilmiştir. Bu şekilde meydana getirilmiş olan nanotel heteroyapı BPGaNNT(74) olarak gösterilmiştir. Birer katman iki nanotelden oluşan nanotel heteroyapının üç farklı yönden gösterimi şekil 3.36'da verilmiştir.



Şekil 3.36. (001) doğrultusundaki BPGaNNT(74) heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü.

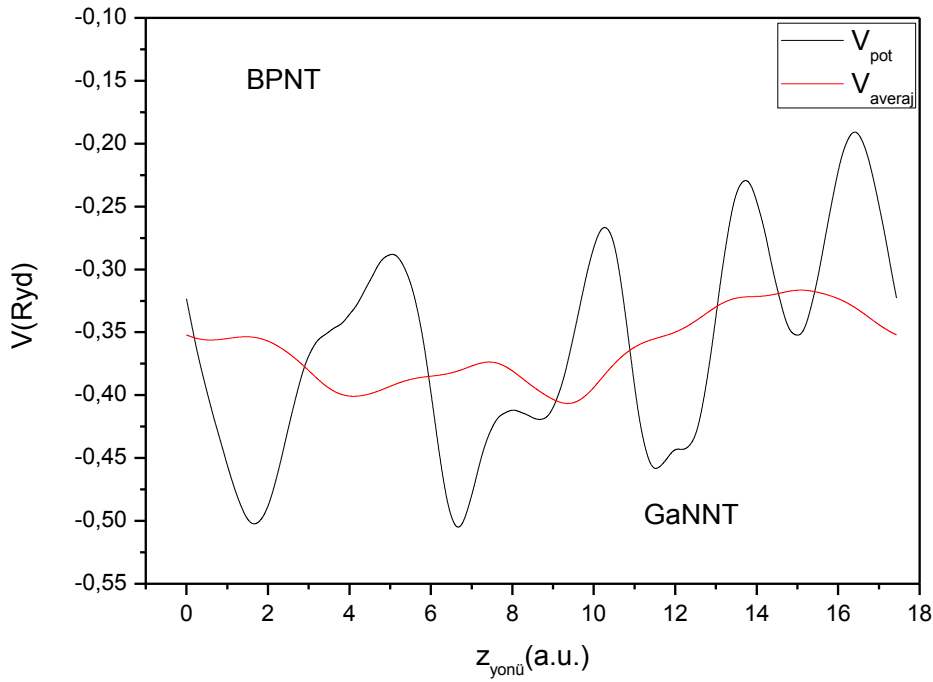
Şekilde 0.57nm yarıçap değerinde modellenmiş BPNT ve GaNNT yapılarından oluşturulmuş olan BPGaNNT(74) heteroyapısının üç farklı yönden görüntüsü bulunmaktadır. Örgü sabitleri çok yakın değerlere sahip olan iki yarıiletken yapıdan oluşturulmuş nanotel heteroyapının denge durumunu elde edilmiştir. Sistemi denge durumuna getirebilmek için toplam enerji hesapları yapılmıştır. BPGaNNT(74) heteroyapının minimum toplam enerji değerlerinin farklı örgü sabitlerine göre değişimi şekil 3.37’de verilmiştir.



Şekil 3.37. BPGaNNT(74) heteroyapısının minimum toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi.

Toplam enerji hesaplamalarında sistemin  $E_{kesim}$  değeri 30 Ryd ve sistemi ters uzayda temsil eden düzlem dalga baz seti ise  $1 \times 1 \times 6$  olarak alınmıştır. Şekil dikkatlice incelendiğinde, minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değerinin 8.718a.u. olarak belirlenmiştir. Bu belirlenen sonuç BPGaNNT (74) heteroyapısının minimum enerji seviyesindeki en son örgü sabiti değerini verir. Katkılanmamış bulk heteroyapıya göre örgü sabiti değerinin artışı gözlenmektedir. Sistemin denge durumundaki örgü sabiti değeri belirlendikten sonra elektronik özellikleri hakkında bilgi elde etmek için düzlemsel

potansiyel eğrisi hesaplanmıştır. Nanotel heteroyapı olarak modellenmiş olan sistemin düzlemsel potansiyel eğrisine z eksenini boyunca bakıldığında arayüzey bölgesinde bir potansiyel fark gözlenmektedir. Burada meydana gelen potansiyel farkı daha iyi görebilmek için düzlemsel potansiyel eğriler üzerinden makroskobik averaj eğrisi elde edilmiştir. BPGaNNT(74) bulk heteroyapı için elde edilmiş olan düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrilerinin z yönüne göre değişimleri Şekil 3.38’de verilmiştir.

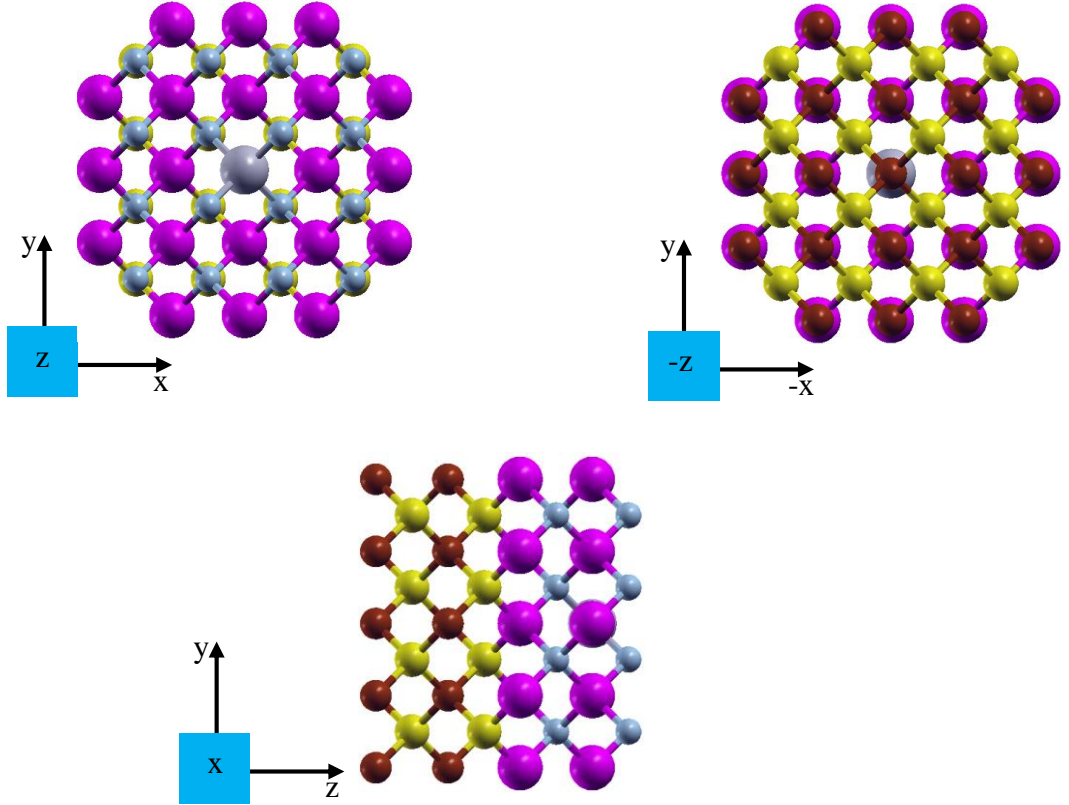


Şekil 3.38. BPGaNNT(74) nanotel heteroyapısının düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrisinin z yönüne göre değişimi.

Şekil incelendiğinde, sistemin arayüzeyinden kaynaklanan bir potansiyel fark görülmektedir. Sistem için temel durumdaki potansiyel hesaplamalar sonucunda elde edilen potansiyel fark değeri yaklaşık olarak 0.0149Ryd olarak belirlenmiştir. Bu makroskobik averaj fark değeri, katkılanmamış bulk heteroyapıya göre daha büyük çıkmıştır.

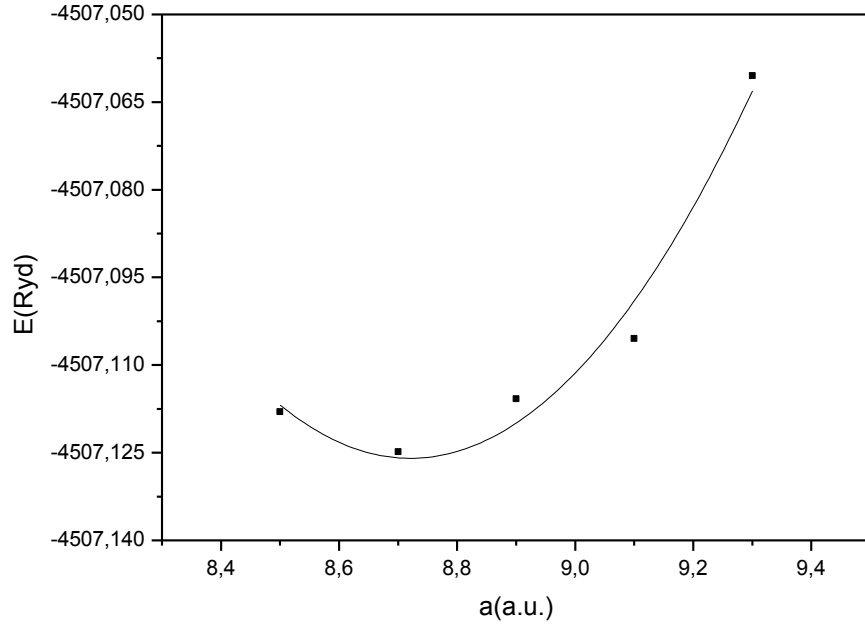
## ii. Katkılanmış Nanotel Heteroyapı

0.57nm yarıçaplı BPGaNNT heteroyapısının katkılanmış modellemesinin elde edilmesi için GaNNT(37) tarafındaki Ga atomu yerine Te katkısı yapılmıştır. Katkılama işlemi ile amaçlanan katkılanmamış nanotel heteroyapı ile katkılanmış nanotel heteroyapıların arayüzey bölgesindeki düzlemsel potansiyel eğrisi ve makroskobik averaj eğrisi üzerindeki potansiyel farkta değişiklik meydana getirmektir. Te atomu ile katkılanmış BPGaNNT(74) heteroyapı bir katman BPNT yapı ve bir katman Te-GaNNT yapının z eksenini boyunca art arda gelmesiyle sonucunda oluşturulmuştur. Bu şekilde oluşturulmuş katkılanmış nanotel heteroyapı Te-BPGaNNT(74) olarak gösterilmiştir. Te atomu ile katkılanmış nanotel heteroyapının üç farklı yönden gösterimi Şekil 3.39'da verilmiştir.



Şekil 3.39. (001) doğrultusundaki Te-BPGaNNT(74) heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü.

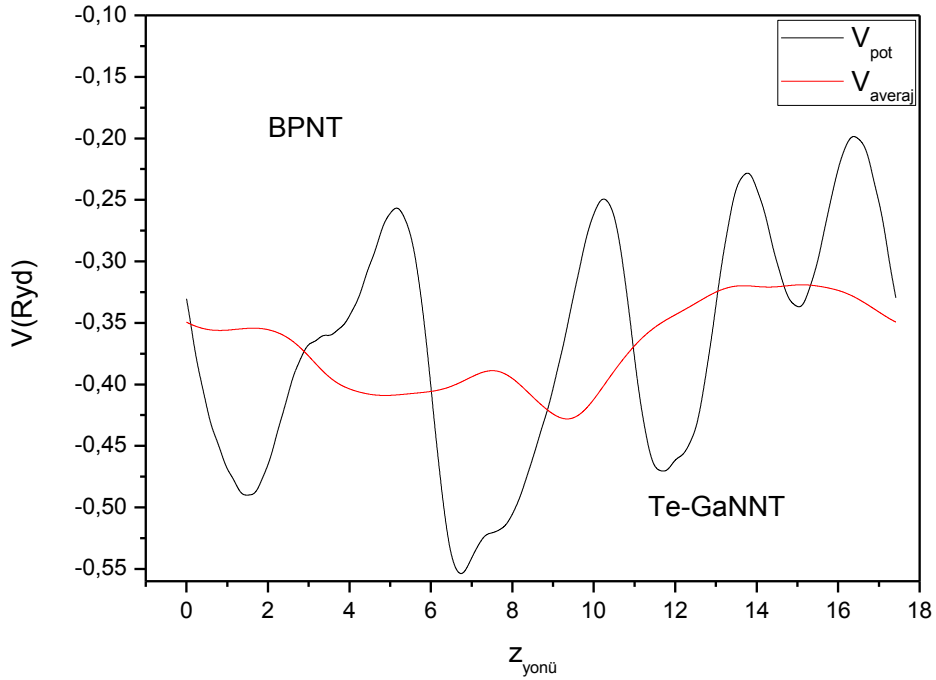
Şekilde 0.57nm yarıçaplı BPNT(37) ve Te-GaNNT(37) yapıdan oluşturulmuş Te-BPGaNNT(74) heteroyapının üç farklı yönden görüntüsü bulunmaktadır. Modellemesi yapılmış olan katkılanmış nanotel heteroyapı sistemi denge durumuna getirilmiştir. Sistemi denge durumuna getirebilmek için toplam enerji hesapları yapılmıştır. Te-BPGaNNT(74) heteroyapının minimum toplam enerji değerlerinin farklı örgü sabitlerine göre değişimi şekil 3.40'ta verilmiştir.



Şekil 3.40. Te-BPGaNNT(74) heteroyapının minimum toplam enerjisinin örgü sabitine göre değişimi.

Toplam enerji hesaplamalarında sistemin  $E_{kesim}$  değeri 30 Ryd ve sistemi ters uzayda temsil eden düzlem dalga baz seti ise  $1 \times 1 \times 6$  olarak alınmıştır. Şekil dikkatlice incelendiğinde, minimum enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri 8.722a.u. olarak belirlenmiştir. Bu belirlenen sonuç Te-BPGaNNT (74) heteroyapının minimum enerji seviyesindeki en son örgü sabiti değerini verir. Bu sonuç bize katkılanmamış nanotel heteroyapıya göre örgü sabiti değerinin arttığı göstermektedir.

Sistemin denge durumundaki örgü sabiti değeri belirlendikten sonra elektronik özellikleri için düzlemsel potansiyel eğrisi hesaplanmıştır. Katkılanmış nanotel heteroyapı olarak modellenmiş olan sistemin düzlemsel potansiyel eğrisine z eksenini boyunca bakıldığında arayüzey bölgesinde bir potansiyel fark gözlenmektedir. Burada meydana gelen potansiyel farkı daha iyi görebilmek için düzlemsel potansiyel eğriler üzerinden makroskobik averaj eğrisi elde edilmiştir. Te-BPGaNNT(74) bulk heteroyapı için elde edilmiş olan düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrilerinin z yönüne göre değişimleri şekil 3.41’de verilmiştir.



Şekil 3.41. Te-BPGaNNT(74) heteroyapısının düzlemsel potansiyel ve makroskobik averaj eğrisinin z yönüne göre değişimi.

Şekilde sistemin arayüzeyinden ve katkılanma işleminden kaynaklanan bir potansiyel fark görülmektedir. Denge durumu elde edilmiş sistem için bu potansiyel fark yaklaşık olarak 0.0105Ryd olarak belirlenmiştir. Bu yapı için makroskobik averaj değerindeki fark değerinde katkılanmamış yapıya göre bir azalma meydana gelmiştir. Bundan dolayı nanotel heteroyapılar için yapılan katkılama işlemi potansiyel fark değerinde azalmaya yol açmıştır.

### 3.6. Katkılanmış Yarıiletken Nanoyapıların Geometrik ve Elektronik Özellikleri

Geometrik optimizasyon sonucunda denge durumu elde edilmiş, katkılanmamış ve katkılanmış yarıiletken nanoyapıların örgü sabiti ve bant yapıları elde edilmiştir. Hesaplamalar sonucunda katkılanmamış GaN yarıiletken nanoyapılar için elde edilen örgü sabiti, fermi enerji düzeyi ve bant aralığı değerler tablo 3.3'te gösterilmiştir.

Tablo 3.3. Katkılanmamış nanotel yapıların yarıçap, atom sayısı, örgü sabiti, fermi enerji düzeyi ve bant aralığı değerleri.

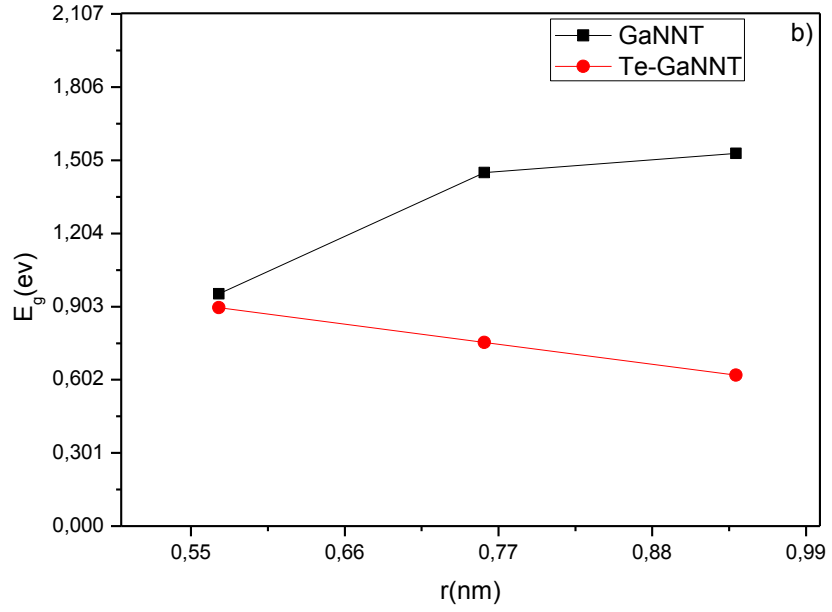
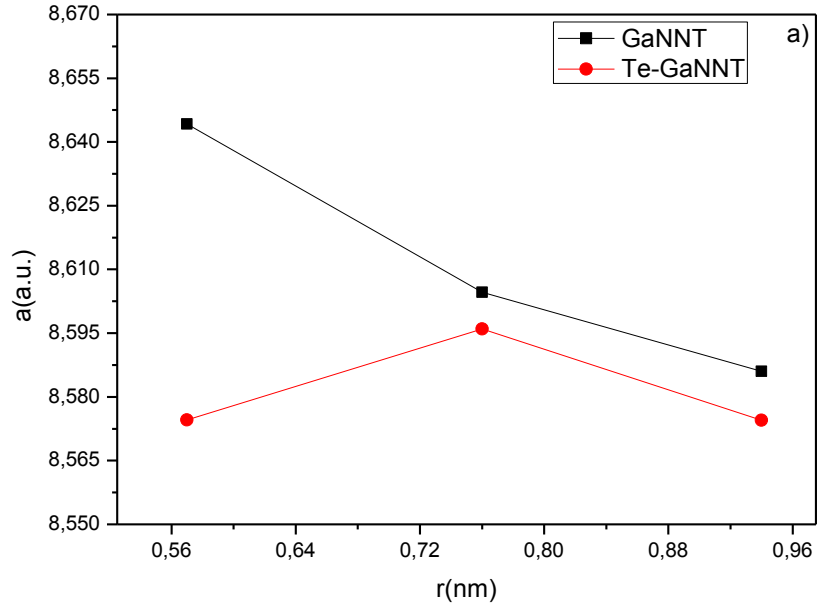
r(nm)	N	a(a.u.)	$E_f$ (ev)	$E_g$ (ev)
0.57	37	8.644	1.191	0.967
0.76	69	8.605	2.955	1.437
0.94	109	8.586	3.844	1.548

Tablo incelendiğinde yarıiletken nanoyapılar da r, N ve  $E_f$  değerleri artıkça  $E_g$  bant aralığı da artmaktadır. Buna karşılık olarak a değeri azalmaktadır. Farklı yarıçap değerlerinde katkılanmış olan yarıiletken nanoyapılar için ise örgü sabiti, fermi enerji düzeyleri ve bant aralıkları dikkate alınarak elde edilen veriler tablo 3.4'te verilmiştir.

Tablo 3.4. Katkılanmış nanotel yapıların yarıçap, atom sayısı, örgü sabiti, fermi enerji düzeyi ve bant aralığı değerleri.

r(nm)	N	a(a.u.)	$E_f$ (ev)	$E_g$ (ev)
0.57	37	8.575	2.423	0.899
0.76	69	8.596	3.330	0.756
0.94	109	8.576	4.262	0.621

Tablo incelendiğinde katkılanmış olarak farklı yarıçap değerlerinde modellenmiş yarıiletken nanotel yapıların r, N ve  $E_f$  değerleri artmasına karşı  $E_g$  değerleri azalmaktadır. Yapılan incelemeler sonucunda 0.57nm yarıçaplı olan nanotel yapının örgü sabiti değerinin düzeni bozduğu düşünülmektedir. Yukarıda verilmiş olan değerler kullanılarak GaNNT yapıların katkılanmamış ve katkılanmış yapılarının a ve  $E_g$  değerlerinin üç farklı yarıçap değerine göre değişimi şekil 3.42'de verilmiştir.



Şekil 3.42. Katılanmamış ve katılanmış GaNNT yapıların a) örgü sabiti ve b) bant aralığının üç farklı yarıçap değerine göre değişimi.

Şekilde 3.42.a)'da GaNNT yapıların geometrik olarak yarıçap değerinin artmasına karşılık örgü sabiti değerlerinin azaldığı gözlenmiştir. Bunun yanında Te-GaNNT



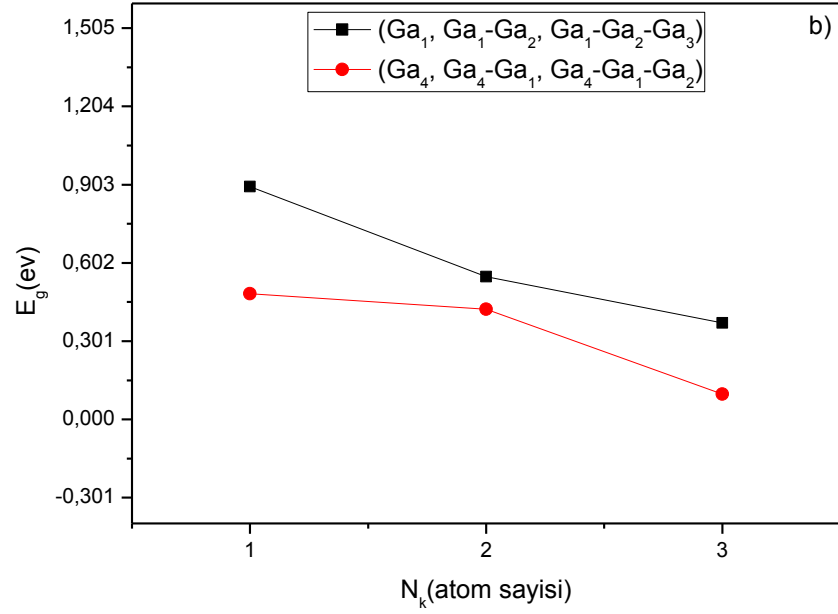
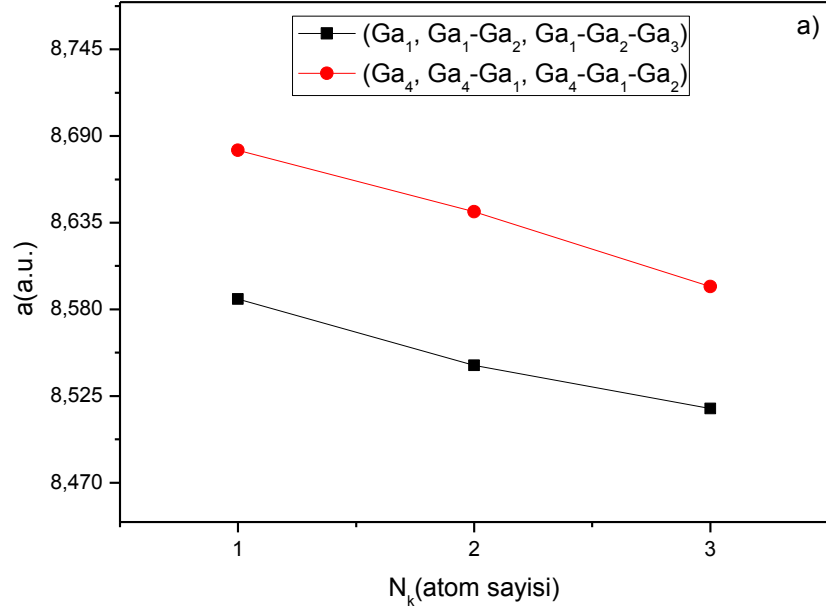
yapıların örgü sabiti değerlerinden 0.57nm'lik olan nanotel dışındaki yapılarında azalma eğilimi gösterdiği görülmektedir. Şekil 3.42.b)'de ise bant aralığı için yapılan hesaplamalar sonucunda GaNNT yapıların yarıçap değerinin artması ile bant aralığının genişlediği, Te-GaNNT yapılar içinde yarıçap değerinin artmasına karşılık bant aralığının daraldığı gözlenmektedir. Bu sonuçlardan yola çıkarak GaNNT'ler için yarıçap değeri arttıkça iletkenlik azalmakta, Te-GaNNT için ise yarıçap değeri arttıkça iletkenlik özelliği artmaktadır. Bu durumda farklı yarıçaplardaki GaNNT yapılar için Te atomu katkılama işleminin iletkenlik özelliğini arttırdığı sonucuna varılmaktadır.

Birden fazla Te atomu ile katkılanmış nanotellerin elektronik özelliklerini incelemek için modellenen yapıların örgü sabiti ve bant aralığı hesaplamaları yapılmıştır. Ayrıca Te katkılanmış bölgelerin pozisyonları değiştirilerek iki farklı şekilde katkılama yapılmış ve bu geometrik değişimin elektronik özellikler üzerindeki etkisi gözlenmiştir. 0.57nm yarıçaplı GaNNT(37) için tekli, çiftli ve üçlü olarak iki farklı şekilde katkılanmış yapıların örgü sabiti, fermi enerji düzeyi ve bant aralığı değerleri tablo 3.5'te verilmiştir.

Tablo 3.5. Birden fazla Te atomu ile katkılanmış GaNNT yapıların katkılanan atom sayısı, örgü sabiti, fermi enerji düzeyi ve bant aralığı değerleri.

Pozisyon	$N_k$	a(a.u.)	$E_f$ (ev)	$E_g$ (ev)
(Ga <sub>1</sub> )	1	8.587	2.396	0.896
(Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> )	2	8.544	3.324	0.549
(Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> -Ga <sub>3</sub> )	3	8.517	3.627	0.371
(Ga <sub>4</sub> )	1	8.681	2.851	0.483
(Ga <sub>4</sub> -Ga <sub>1</sub> )	2	8.642	3.184	0.424
(Ga <sub>4</sub> -Ga <sub>1</sub> -Ga <sub>2</sub> )	3	8.594	3.466	0.097

Tablo incelendiğinde her iki bölümde seçilmiş olan pozisyonlarda yapılmış olan katkılamada katkılanmış atom sayısı arttıkça a ve  $E_g$  değerlerinin azaldığı gözlenmiştir. Buna artışa karşılık her iki pozisyonda da yapılan katkılama içinde  $E_f$  değerlerini arttırdığı görülmektedir. Bu sonuçlar bize katkılanmış atom sayısı artışının nanotel yapıların iletkenlik özelliğini arttırdığını göstermektedir. Tablodaki değerler dikkate alınarak her iki şekilde yapılan katkılama işlemi için örgü sabiti ve bant aralığının katkılanmış atom sayısına göre değişimleri şekil 3.43'te verilmiştir.



Şekil 3.43. (Ga<sub>1</sub>, Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub>, Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub>-Ga<sub>3</sub>) ve (Ga<sub>4</sub>, Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub>, Ga<sub>4</sub>-Ga<sub>1</sub>-Ga<sub>2</sub>) iki farklı şekilde katkılanmış tekli, çiftli ve üçlü Te-GaNNT yapıların a) örgü sabitleri ve b) bant aralıklarının atom sayısına göre değişimi.

Şekiller dikkatlice incelendiğinde her iki katkılama stratejisi ile ilgili birden fazla yapılan katkılama işleminde örgü sabiti değerlerinde paralel bir şekilde azalma olduğu görülmüştür. Bunun yanında ( $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$ ) şeklinde yapılan katkılamanın örgü sabiti değerleri ( $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$ ) şeklinde yapılarına göre daha küçük değerlere sahiptir. Aynı pozisyonlar için bant aralığı ile ilgili değişim incelendiğinde hem ( $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$ ) hem de ( $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$ ) şeklinde yapılan katkılamada, katkılanmış atom sayısı arttığında bant aralığı azalmakta ve buna göre iletkenlik özelliği artmaktadır. Elde edilen sonuçlara bağlı olarak 0.57nm yarıçaplı birden fazla Te atomu katkılanmış Te-GaNNT yapılar için ( $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$ ) şeklinde yapılan katkılamanın ( $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$ )'e göre daha büyük bant aralığı değerlerine sahip olduğu görülmektedir.

GaN ve BP yarıiletkenleri kullanılarak bulk ve nanotel olarak oluşturulan heteroyapılarının katkılanmamış ve katkılanmış yapılarının örgü sabiti ve averaj potansiyel fark değerleri tablo 3.6'da verilmiştir.

Tablo 3.6. Katkılanmamış ve katkılanmış olarak elde edilen bulk ve nanotel heteroyapıların örgü sabiti ve potansiyel fark değerleri.

Heteroyapı	a(a.u.)	$\Delta V$ (Ryd)
BP/GaN (1+1)	8.651	0.0023
Te-BP/GaN (1+1)	8.656	0.0012
BPGaNNT (74)	8.718	0.0149
Te-BPGaNNT (74)	8.722	0.0105

Tabloda verilmiş olan değerler incelendiğinde bulk ve nanotel yapı olarak modellenmiş her iki heteroyapı içinde katkılama işlemi örgü sabiti değerini arttırmıştır. Bu sonuca bakılarak katkılama işleminin heteroyapılarda örgü sabiti değerlerini arttırdığı sonucuna varılmaktadır. Katkılanmamış bulk ve nanotel heteroyapıların her ikisi içinde elde edilen averaj potansiyel fark değerinin katkılanmış yapılarına göre daha büyük olduğu görülmektedir. Bu durum bize bulk ve nanotel olarak modellenmiş olan her iki yapı içinde katkılama işleminin arayüzeydeki potansiyel farkı azaltan özellikte olduğu sonucuna ulaştırmıştır. Diğer taraftan bulk heteroyapı için averaj eğrileri üzerinden elde edilen potansiyel fark değerlerinin nanotele göre daha küçük olduğu görülmektedir. Sistemin nanotel olarak modellenmesi potansiyel fark üzerinde artış etkisi yapmaktadır.

### 3.7. Sonuç

Bu çalışmada temeli DFT'ye dayanan ilk ilke toplam enerji hesaplamalarını kullanarak GaN yarıiletken malzemesinin katkılanmış ve katkılanmamış nanoyapıları incelenmiştir. Günümüzde nano boyutta oluşturulan yarıiletken malzemeler elektrik ve elektronik teknolojisi açısından çok önemli bir yere sahiptir. Özellikle bu yapılar üzerinde farklı yarıçaplarda modelleme, katkılama ve heteroyapı oluşturma gibi yöntemler elektronik özellikler açısından önemli değişikliklere yol açmaktadır. Buradaki amaç bu yöntemler sayesinde teknolojik açıdan avantajlı ve kullanışlı yarıiletken malzeme elde etmektir. Bu tezde yapılan incelemede GaN yarıiletken malzemenin bulk yapısı, farklı yarıçap değerlerindeki nanotel yapıları ve BP ile yapmış oldukları heteroyapıları ele alınmıştır. GaN yarıiletken için bulk, nanotel ve heteroyapı olarak oluşturulan tüm sistemlerin modelleme işlemi sırasında ZB örgüsü kullanılmıştır. Nano boyutlarda modellenmiş bir sistemin en kararlı halinin denge durumu olduğu bilinmektedir. Buna bağlı olarak hesaplamalarda ilk olarak modelleme işlemi yapılmış sistemlerin nano boyutlarındaki yapılarının minimum toplam enerji değerleri ele alınarak, bunlara karşılık gelen denge durumundaki örgü sabiti değerleri bulunmuştur. Bundan sonra her sistem için bant yapısı hesaplanmış ve buna bağlı olarak elektronik özellikleri elde edilmiştir. Ayrıca, farklı yarıçap değerleri için modellenmiş olan nanotel yapılarında geometrik özelliklerin elektronik yapıya olan etkisi incelenmiştir. Bununla beraber belli bir yarıçapta nanotel yapıya iki farklı konumda birden fazla Te atomu katkılanmış nanotel modellemesi yapılmıştır. Bu şekilde elde edilmiş nanoteller üzerinde katkılanmış atom sayısının artması ve değişik konumlardaki katkılanmanın elektronik özelliklerine olan etkisi incelenmiştir. Buna ek olarak GaN yarıiletken malzemelerin BP ile oluşturduğu bulk ve nanotel heteroyapıları incelenerek, bu malzemelerin katkılanmamış ve katkılanmış durumlarda arayüzey potansiyel farkları hesaplanmıştır.

Yapılan hesaplamalar sonucunda nano boyutta farklı geometrik şekillerde modellenmiş olan yarıiletken malzemelerin elektronik özelliklerinin farklılık gösterdiği görülmektedir. Özellikle bulk ve nanotel yapılar arasında iletkenlik özellikleri açısından önemli farklılıkların olduğu gözlenmiştir. Farklı yarıçap değerleri için yapılan incelemede GaNNT yarıiletkenler için yarıçap değerinin artması örgü sabiti değerinin azalmasına, bant aralığının artmasına ve buna karşılık iletkenliğin azalmasına yol açmaktadır. Te-GaNNT yapılarında ise yarıçap değerinin artması bant aralığı değerini azaltmaktadır.

Bu durum bize Te-GaNNT'lerde yarıçap değeri artışının iletkenliği arttırdığını göstermektedir. Belli bir yarıçap değerinde Te-GaNNT için yapılan birden fazla Te atomu katkılanması incelendiğinde ( $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$ ) ve ( $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$ ) şeklinde yapılan katkılama işlemlerinin her ikisinde de katkılanmış atom sayısının artması örgü sabiti ve bant aralığı değerlerini azaltmaktadır. Ayrıca ( $Ga_1$ ,  $Ga_1-Ga_2$ ,  $Ga_1-Ga_2-Ga_3$ ) şeklinde yapılan katkılama işleminde ( $Ga_4$ ,  $Ga_4-Ga_1$ ,  $Ga_4-Ga_1-Ga_2$ ) şekilde yapılan göre örgü sabiti değerlerinin küçük ve bant aralığı değerlerinin ise daha büyük çıktığı görülmektedir. Bu bilgilerden yola çıkarak birden fazla Te atomu ile katkılanmış GaNNT yapılarında katkılanan atom sayısının artması iletkenlik özelliğini arttırmaktadır. GaN'in BP ile bulk ve nanotel olarak oluşturduğu heteroyapıların her ikisinde de katkılama işlemi örgü sabiti değerlerini arttırmıştır. Örgü sabiti değerleri artarken potansiyel fark değerlerinin katkılama ile azaldığı görülmektedir. Ayrıca heteroyapı sistemlerin nanotel olarak modellenmesi potansiyel fark üzerinde artış etkisi gösterdiği belirlenmiştir. Bu tezde farklı geometrik şekillerde elde edilen yarıiletken malzemeler için önemli sonuçlar elde edilmiştir. Bu sonuçlar göz önünde bulundurularak elde edilen yarıiletken nanoyapılar, güneş pillerinin, sayısal devre tasarımında kullanılan mantık devrelerinin ve bu devrelerden elde edilen elektronik ve optik malzemelerin yapımı ve geliştirilmesine olanak sağlanmaktadır.

Gelecekte nanoyapılar ile yapılacak olan çalışmalardaki sistemlerin toplam atom sayıları oldukça fazla tutulması gerekli görüldüğü düşünülmektedir. Özellikle nanoteller için yapılan hesaplamalarda büyük yarıçaplı yapılar elektronik özellikleri daha iyi göstermektedir. Bununla beraber yarıçapın büyümesi sistemin denge durumu için yapılan toplam enerji hesaplamalarında bilgisayar kullanımı, enerji tüketimi ve zaman açısından dezavantaj yaratacaktır. Ayrıca GaN ve BP ile bulk ve nanotel olarak oluşturulan heteroyapıların ara yüzeylerindeki potansiyel farkların birden çok katman kullanılarak incelenmesinin daha faydalı olacağı düşünülmektedir.

## KAYNAKLAR

- [1] L. Zhang, X. Fang, C. Ye, *Controlled Growth of Nanomaterials*, World Scientific Publishing, Singapore, (2007).
- [2] S. Faraji, A. Mokhtari, *Ab initio study of the stability and electronic properties of wurtzite and zinc-blende BeS nanowires*, 374, 3348-3353, (2010).
- [3] S. Iijima, *Helical microtubules of graphitic carbon*, Nature, 354, 56, (1991).
- [4] M.M.J. Treacy, T.W. Ebbesen, J.M. Gibson, *Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes*, Nature, 381, 678, (1996).
- [5] M.R. Falvo, G.J. Clary, R.M. Taylor, V. Chi, F.P. Brooks, S. Washburn, R. Superfine, *Bending and buckling of carbon nanotubes under large strain*, Nature, 389, 582, (1997).
- [6] E.W. Wong, P.E. Sheehan, C.M. Lieber, *Nanobeam Mechanics: Elasticity, Strength, and Toughness of Nanorods and Nanotubes*, Science, 277, 1971, (1997).
- [7] H. A. Nilsson, C. Thelander, L. E. Fröberg, J. B. Wagner, L. Samuelson, *High-power InGaN/GaN double-heterostructure violet light emitting diodes*, Appl. Phys. Lett., 89, 163101, (2006).
- [8] Y. X. Duan, R. A. Huang, C. M. Lieber, *Single-nanowire electrically driven lasers*, Nature, 421, 241-245, (2003).
- [9] W. U. Wang, C. Chen, K. H. Lin, Y. Fang, C. M. Lieber, *Label-Free Detection Of Small-Molecule-Protein Interactions By Using Nanowire Nanosensors*, P.Natl. Acad. Sci. U.S.A., 102, 3208-3212, (2005).
- [10] Y. Im, R.P. Vasques, C. Lee, N. Myung, R. Penner, M. Yum, *Single metal and conducting polymer nanowire sensors for chemical and DNA detections*, J. Phys., 38, 61, (2006).
- [11] M.H. Huang, S. Mao, H. Feick, H.Q. Yan, Y.Y. Yu, H. Kind, E. Weber, R. Russo, P.D. Yang, *Room-temperature ultraviolet nanowire nanolasers*, Science, 292, 1897, (2001).
- [12] R. Agrawal, C.M. Lieber, *Semiconductor nanowires: optics and optoelectronics*, Appl. Phys. A, 85, 209, (2006).
- [13] S. Nakamura ve G. Fasal, *The blue laser diodes Springer*, Berlin, (1997).

- [14] A. Dagar, J. Christen, T. Riemann, S. Richler, J. Blassing, A. Diez, A. Krost, A. Alam ve M. Heuken, *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 2211, (2001).
- [15] S. O. Kucheyev, J. S. Williams, S. J. Pearton, *Ion implantation into GaN*, *Material Science ve Engineering* **33**, 51-107, (2001).
- [16] A. Kikuchi, M. Tada, K. Miwa and K. Kishino, *Growth and characterization of InGaN/GaN nanocolumn LED*, *Proc. SPIE* 6129, 612905-8, (2006).
- [17] W. Guo, M. Zhang, A. Banerjee and P. Bhattacharya, *Catalyst-free InGaN/GaN nanowire light emitting diodes grown on (001) silicon by molecular beam epitaxy*, *Nano Lett.*, 10 (9), 3355–3359, (2010).
- [18] A. L. Bavecove, G. Tourbot, E. Pougeoise, J. Garcia, P. Gilet, F. Levy, B. André, G. Feuillet, B. Gayral, B. Daudin, Le Si Dang, *GaN-based nanowires: From nanometric-scale characterization to light emitting diodes*, *Phys. Stat. Sol. A*, 6, 207, 1425, (2010).
- [19] R. Armitage and Tsubaki, *Multicolour luminescence from InGaN quantum wells grown over GaN nanowire arrays by molecular-beam epitaxy*, *K Nanotechnology*, 21, 195202, (2010).
- [20] H. W. Lin, Y. J. Lu, H. Y. Chen, H. M. Lee, S. Gwo, *InGaN/GaN nanorod array white light-emitting diode*, *Appl. Phys. Lett.*, 7, 97, 073101, (2010).
- [21] H. P. T. Nguyen, K. Cui, S. Zhang, S. Fatholouloumi and Z. Mi., *Full-color InGaN/GaN dot-in-a-wire light emitting diodes on silicon*, *Nanotechnology*, 22, 445202, (2011).
- [22] S. Nakamura, M. Senoh, T. Mukai, *High-Brightness InGaN Blue, Green and Yellow Light-Emitting Diodes with Quantum Well Structures*, *Appl. Phys. Lett.*, 62, 2390-2392, (1993).
- [23] Y. Zhang, E. Li, D. Ma, W. Wang, S. Song, N. Fu and J. Lin, *Field emission properties of the Te-doped pseudohydrogen passivated GaN nanowires: A first principle density functional study*, *Computational Materials Science*, 83, 277-281, (2014).
- [24] H. Meradji, S. Labidi, S. Ghemid, S. Drablia and B. Bouhafs, *First principles calculations of structural, electronic and optical properties of BAs''1''-'xP''x alloy*, *Physics Procedia*, **2, 3**, 933- 940, (2009).

- [25] R. M. Wentzcovitch, K. J. Chang ve M. L. Cohen, *Electronic and structural properties of BN and BP*, Phys. Rev. B, **34**, 1071, (1986).
- [26] A. Zaoui, S. Kacimi, A. Yakoubi, B. Abbar ve B. Bouhafs, *Optical properties of BP, BAs and BSb compounds under hydrostatic pressure*, Physica B,1-4, **367**, 195-204, (2005).
- [27] S. Nishimura, S. Matsumoto and K. Terashima, *Growth of GaN on Si substrates - Roles of BP thin layer*, Optical Materials, 19, 223-228, (2002).
- [28] T. Udagawa, M. Odawara ve G. Shimaoka, *Lattice-matched boronphosphide (BP)/hexagonal GaN heterostructure for inhibition of dislocation penetration*, Phys. Stat. Sol. (c), **0**, **7**, 2027–2030, (2003).
- [29] M. Agrawal, A. Jain, D.V. S. Rao, A. Pandey, A. Goyal, A. Kumar, S. Lamba, B.R. Mehta, K. Muraleedharan, R. Muralidharan, *Nanoharvesting of GaN nanowires on Si (211) substrates by plasma-assisted molecular beam epitaxy*, Journal of Crystal Growth, 402, 37–4, (2014).
- [30] Z. Wang, B. Liu, F. Yuan, T. Hu, G. Zhang, B. Dierre, N. Hirosaki, T. Sekiguchi, X. Jiang, *Synthesis and cathodoluminescence of Sb/P co-doped GaN nanowires*, Journal of Luminescence, 145, 208–212, (2014).
- [31] H. J. Xiang and S. H. Wei, *Enhanced Ferromagnetic Stability in Cu Doped Passivated GaN Nanowires*, Nano Lett., 8, (7), 1825–1829, (2008).
- [32] J. H. Chum and D. E. Kim, *Growth and Structural characterization of ferromagnetic Cr-doped GaN nanowires*, Phys. Status Solidi A, 208, 691-694, (2011).
- [33] S. M. Zhou, *Near UV photoluminescence of Hg-doped GaN nanowires*, Physica E, 33, 394-397, (2006).
- [34] A. Alsaad, *Structural, electronic and magnetic properties of Fe, Co, Mn-doped GaN and ZnO diluted magnetic semiconductors*, Physica B, 440, 1-9, (2014).
- [35] N. Fu, E. Li, Z. Cui, D. Ma, W. Wang, Y. Zhang, S. Song ve J. Lin, *The electronic properties of phosphorus-doped GaN nanowires from first-principle calculations*, Journal of Alloys and Compounds, 596, 92–97, (2014).
- [36] Q. Wang, Q. Sun, and P. Jena, *Ferromagnetic GaN–Cr Nanowires*, Nano Letters,5, 8, 1587-1590, (2005).



- [37] H. Li, G. Liu, G. Zhao, H. Wei, L. Wang, S. Yang, Z. Chen ve Z. Wang, *Theoretical study of the anisotropic electron scattering by steps in vicinal AlGaN/GaN heterostructures*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 66, 116–119, (2015).
- [38] J. E. Medvedeva, A. J. Freeman, X.Y Cui, C. Stampfl , and N. Newman, *Half-metallicity and Efficient Spin-injection in AlN/GaN:Cr(0001) Heterostructures*, Phys. Rev. Lett., 94, 146602, (2005).
- [39] X. Y. Cui, B. Delley and C. Stampfl, *Bandgap engineering of polar and non-polar GaN/AlN superlattices from first principles*, J. Appl. Phys., 108, 103701, (2010).
- [40] R. G. Parr and W. Yang, *Density Functional Theory of Atoms and Molecules* Oxford University Press, (1989).
- [41] A. A. Katsnelson and V. S. Stepanyuk, *Computational methods in Condensed matter: electronic structure*, American Institute of Physics, New York, (1992).
- [42] H. Akkuş, *SbSI Kristalinin Elektronik Ve Optik Özellikleri: Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisinin Uygulaması*, Doktora Tezi, Fizik Anabilim Dalı. Adana, (2007).
- [43] M. Born ve R. Oppenheimer, *Zur Quantentheorie der Molekeln*, Ann. Physik, 84: 457-484, (1927).
- [44] D. R. Hartree, Proc. Cambridge. Philos. Soc., 24, 89 (1928).
- [45] P. S. Kireev, *Semiconductor Physics*, Mir Publishers, Moskova, (1978).
- [46] T. Dereli ve A. Verçin, *Kuantum Mekanığı 2*, METU Press, Ankara, (2000).
- [47] R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press, 119-159, (2004).
- [48] V. Fock, *Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems.*, Z. Phys., 61, 126-148, (1930).
- [49] A. Haug, *Theoretical Solid State Physics*, Pergamon, New York, 20, (1972).
- [50] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Harcourt College Publishers, ABD, (1976).
- [51] J.C. Slater, *A Simplification of the Hartree-Fock Method*, Phys. Rev., 81, 385, (1951).
- [52] H. Altuntas, *AuAl2 Bileşiğinin Elektronik Yapısının ve Titreşim Özelliklerinin YFT ile İncelenmesi*, Gazi Üniversitesi Fizik Yüksek Lisans tezi, , Ankara, (2004).

- [53] P. O. Löwdin, *Correlation Problem in Many-Electronic Quantum Mechanics. I. Review of Different Approaches and Discussion of Some Current Ideas.*, Adv. Chem. Phys., 2, 207-322, (1959).
- [54] L. H. Thomas., *The calculation of atomic fields*, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 23, 542-548, (1927)
- [55] E. Fermi, *A statistical method for the determination of some properties of atoms. II. Application to the periodic system of the elements*, Z. Phys., 48, 7379, (1928).
- [56] P. Hohenberg and W. Kohn, *Inhomogeneous Elektron Gas*, Phys. Rev. Lett B, 136, 864, (1964).
- [57] W. Kohn and L. J. Sham, *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys. Rev., 140, A1133-1138, (1965).
- [58] G.P. Srivastava, *The Physics of Phonons*, Adam Hilger, Bristol, (1990).
- [59] W. Koh, *in Highlights of Condensed Matter Theory*, edited by Bassani F., Fumi F. ve M. P. Tosi (North-Holland, Amsterdam), p.11, (1985).
- [60] M. Levy, *Electron Densities in Search of Hamiltonians*, Phys. Rev. A., 26, 1200 (1982).
- [61] M. Levy ve J. P. Perdew, *in Density Functional Methods in Physics*, edited by R. M. Dreizler ve J. da Providencia (Plenum, New York). p.11 (1985).
- [62] J. Kohannoff, *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules, Theory and Computational Methods*, Cambridge University Press, (2006).
- [63] R. Armiento, *The Many-Elektron Energy In Density Functional Theory*, KTH School of Engineering Sciences Stockholm, Sweden, (2005).
- [64] J. P. Perdew and W. Yue, *Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy: Generalized gradient approximation*, Phys. Rev. B, **40**, 3399, (1989).
- [65] J.P. Perdew, *Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas*, Phys. Rev. B, 33, 8822, (1986).
- [66] Y. Wang and J.P. Perdew, *Correlation hole of the spin-polarized electron-gas, with exact small-wave-vector and high density scaling*, Phys. Rev. B, 44, 13298, (1991).
- [67] A. D. Becke, *Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior*, Phys. Rev. A, 38, 3098, (1988).
- [68] C. Lee, W. Yang and R.G. Parr, *Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density*, Phys. Rev. B, 37, 785, (1988).

- [69] J.P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, “*Generalized Gradient Approximation Made Simple*”, Phys. Rev. Lett., 77, 3865-3868, (1996).
- [70] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, *Generalized Gradient Approximation Made Simple*, Phys. Rev. Lett., **78**, 1396, (1997).
- [71] C. Herring, *A New Method for Calculating Wave Functions* in, Crystals Phys. Rev., 57, 1169-1177, (1940).
- [72] J. C. Phillips, *Energy-Band Interpolation Scheme Based on a Pseudopotential*, Phys. Rev., 112, 685-695, (1958).
- [73] M. L. Cohen and V. Heine, *The fitting of pseudopotentials to experimental data and their subsequent application*, Solid State Physics, 24, 37-248, (1970).
- [74] M. T. Yin and M. L. Cohen, *Theory of ab initio pseudopotential calculations*, Phys. Rev. B, 25, 7403-7412, (1982).
- [75] E. Antoncik, *Approximate formulation of the orthogonalized plane-wave method*, J. Phys. Chem. Solids, 10, 314-320, (1959).
- [76] J. C. Phillips ve L. Kleinman, *New Method for Calculating Wave Functions in Crystals and Molecules*, Phys. Rev., 116, 287-294. (1959).
- [77] J. C. Phillips ve L. Kleinman, *Crystal Potential and Energy Bands of Semiconductors. I. Self-Consistent Calculations for Diamond*, Phys. Rev., 116, 880-884, (1959).
- [78] N. Troullier ve J. L. Martins, *Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations*, Phys. Rev B, 43, 1993-2006, (1991).
- [79] W. E. Brittin ve J. C. Educ., *Valence angle of the tetrahedral carbon atom*, 22, (3), 145, (1945).
- [80] O. H. Nielsen and R. M. Martin, *Quantum-mechanical theory of stress and force*, Phys. Rev. B, **35**, 9308, (1987).
- [81] D. M. Ceperley ve B. J. Alder, *Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method*, Phys. Rev. Lett., 45, 566, (1980).
- [82] W. E. Pickett., *Pseudopotential methods in condensed matter applications*, Computer Physics Reports., 9, 115-197, (1989).
- [83] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias ve J. D. Joannopoulos, *Iterative Minimization Techniques for ab initio Total-Energy Calculations: Molecular Dynamics and Conjugate Gradients*, Rev. Mod. Phys., 64, 1045-1097, (1992).

- [84] A. Baldereschi, *Mean-Value Point in the Brillouin Zone*, Phys. Rev. B, 7, 5212, (1973).
- [85] D. J. Chadi ve M. L. Cohen, *Special Points in the Brillouin Zone*, Phys. Rev. B, 8, 5747, (1973).
- [86] H. J. Monkhorst ve J. D. Pack, *Special Points for Brillouin-zone Integrations*, Phys. Rev. B, 13, 5188-5192, (1976).
- [87] M. Peresi, N. Binggeli and A. Baldereschi, *Band engineering at interfaces: theory and numerical experiments*, J. Phys. D: Appl. Phys., 31, 1273, (1998).
- [88] S. Baroni, M. Peressi, R. Resta and A. Baldereschi, *Theory of Band Offsets at Semiconductor Heterojunctions, in Proceedings of the 21 International Conference on the Physics of Semiconductors*, edited by Ping Jiang and Hou-Zhi Zheng, World Scientific, Singapore, p. 689, (1993).
- [89] E. Fermi, *Semiconductor Superlattices and Interfaces*, edit L. Miglio and A. Stella, New York: Academic, (1993).
- [90] K. Charles, *Kathal Fiziğine Giriş*, Güven Yayın, İstanbul. (1996)
- [91] E. Asker, *Xrh (X=Mg, Sc, Y) Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik Ve Titreşimsel Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi İle İncelenmesi*, Gazi Üniversitesi, Ankara, (2010).
- [92] S. Baroni, R. Resta, A. Baldereschi and M. Peressi, Proc. NATO Advanced Research Workshop on Spectroscopy of Semiconductor Microstructures ed G Fasol et al (New York: Plenum) p 251, (1989).
- [93] A. Baldereschi, S. Baroni ve R. Resta, *Band offsets in lattice-matched heterojunctions: A model and first-principles calculations for GaAs/AlAs*, Phys. Rev. Lett., 8, 61, 734-737, (1988).
- [94] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, New York, Wiley, (1975).
- [95] X. Y. Cui, B. Delley, and C. Stampfl, *Band gap engineering of wurtzite and zinc-blende GaN/AlN superlattices from first principles*, J. Appl. Phys., 108, 103701, (2010).
- [96] C. Stampfl and C. G. V. de Walle, *Density-functional calculations for III-V nitrides using the local-density approximation and the generalized gradient approximation*, Phys. Rev. B, 59, 5521, (1999).
- [97] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone, and V. Fiorentini, *First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization,*

*and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory*, Phys. Rev. B, 64, 045208, (2001).

[98] K. Kim, W. R. L. Lambrecht and B. Segall, *Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN*, Phys. Rev. B, **56**, 7018, (1997).

[99] M. P. Thompson, G. W. Auner, T. S. Zheleva, K. A. Jones, S. J. Simko, and J. N. Hilfiker, *Deposition factors and band gap of zinc-blende AlN*, J. Appl. Phys., 89, 3331, (2001).

[100] L. I. Berger, *Semiconductor Materials*, CRC Press, Boca Rotan New York London Tokyo, (1997).

[101] H. Ozkısı, A. Kırçası, S. Dalgıç, *An Interface Study of c-BP/c-GaN Heterostructure*, Journal Of Optoelectronics And Advanced Materials, Vol. 13, No. 11-12, p. 1507- 1509, (2011).

## ÖZGEÇMİŞ

Harun ÖzkıŖi, 1979 yılında Tekirdađ'ın Malkara ilçesinde doğdu. İlköğrenimini Malkara Fevzi Çakmak İlkokulu ve Atatürk Ortaokullarında tamamladı. Lise öğrenimini Kırklareli Lüleburgaz Kezirtepe Anadolu Öğretmen Lisesinde tamamladı. 1998 yılında Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümünde başladığı lisans eğitiminden 1999 yılında yatay geçişle geldiği Trakya Üniversitesi Fizik Bölümünde devam ederek 2002 yılında mezun oldu. 2003-2004 yılları arasında İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Ortaöğretim Alan Öğretmenliği Anabilim Dalı Fizik Öğretmenliği Programını bitirdi. Ardından 2007 yılında Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik anabilim dalında Yüksek Lisans eğitime başladı ve 2010 yılında mezun oldu. Daha sonra aynı bölümde 2010 yılında doktora eğitime başladı. 2013-2014 yılları arasında Ahmet Yesevi Üniversitesi Bilişim Teknolojileri ve Mühendislik Fakültesi Bilgisayar Mühendisliği yüksek lisans programını bitirdi. 2014 yılında başladığı Trakya Üniversitesi Keşan Yusuf Çapraz Uygulamalı Bilimler Yüksekokulu Bilgisayar Teknolojisi ve Bilişim Sistemleri bölümünde öğretim görevlisi olarak görevine devam etmektedir.