

**MUĞLA ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**AMORF GERMANYUMUN BÜYÜTÜLMESİNİN**  
**MONTE CARLO SİMÜLASYONU**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**GÖRKEM OYLUMLOĞLU**

**I. Tez Danışmanı : Prof. Dr. ŞENER OKTİK**

**II. Tez Danışmanı: Prof. Dr. ŞİNASI ELLİALTIOĞLU**

**Haziran, 1999**

**MUĞLA**

**T.C. YÜKSEK ÖĞRETİM KURULU**  
**DIŞ İLİŞKİLER MERKEZİ**

85920

MUĞLA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI

AMORF GERMANİYUMUN BÜYÜTÜLMESİNİN  
MONTE CARLO SİMÜLASYONU

YÜKSEK LİSANS TEZİ

GÖRKEM OYLUMLUOĞLU


Fen Bilimleri Enstitüsü'nce

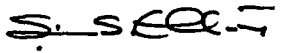
“Yüksek Lisans”

Diploması Verilmesi İçin Kabul Edilen Tezdir

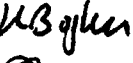
Tezin Enstitü'ye Verildiği Tarih : 13.07.1999


Tezin Sözlü Savunma Tarihi : 28.07.1999

I. Tez Danışmanı : Prof. Dr. Şener OKTİK 

II. Tez Danışmanı : Prof. Dr. Şinasi ELLİALTIOĞLU 

Jüri Üyesi : Doç. Dr. Bülent G. AKINOĞLU 

Jüri Üyesi : Yrd. Doç. Dr. Habibe BAYHAN 

Jüri Üyesi : Yrd. Doç. Dr. Tayfun BÜKE 

Enstitü Müdürü : Doç. Dr. Mustafa İŞİLOĞLU

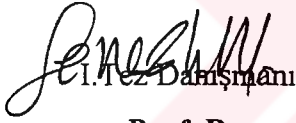
Haziran, 1999

MUĞLA

## TUTANAK

Muğla Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nün **15/07/1999** tarih ve **.89**...sayılı toplantısında oluşturulan jüri, Lisansüstü Eğitim - Öğretim Yönetmeliği'nin 21. maddesine göre, Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi **Görkem OYLUMLUOĞLU**'nun "**Amorf Germanyumun Büyütülmesinin Monte Carlo Simülasyonu**" adlı tezini incelemiş ve aday **28./07./1999** tarihinde saat **...14<sup>00</sup>**...da jüri önünde tez savunmasına alınmıştır.

Adayın kişisel çalışmaya dayanan tezini savunmasından sonra **.60**..dakikalık süre içinde gerek tez konusu, gerekse tezin dayanağı olan anabilim dallarından sorulan sorulara verdiği cevaplar değerlendirilerek tezin **.başarılı**..... olduğuna **oy birliği**..... ile karar verildi.



I. Tez Danışmanı

Prof. Dr.

Şener OKTİK



II. Tez Danışmanı

Prof. Dr.

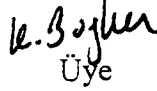
Şinasi ELLİALTIOĞLU



Üye

Doç. Dr.


Bülent G. AKINOĞLU



Üye

Yrd. Doç. Dr.

Habibe BAYHAN



Üye

Yrd. Doç. Dr.

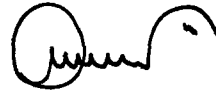
Tayfun BÜKE

## YEMİN

Yüksek Lisans tezi olarak sunduğum "**Amorf Germanyumun Büyütülmesinin Monte Carlo Simülasyonu**" adlı çalışmanın, tarafımdan bilimsel ahlak ve geleneklere aykırı düşecek bir yardıma başvurmaksızın yazıldığını ve yararlandığım eserlerin kaynaklarda gösterilenlerden oluştuğunu, bunlara atıf yapılarak yararlanmış olduğumu belirtir ve bunu onurumla doğrularım.

28.07.1999

Görkem OYLUMLUOĞLU



**YÜKSEK ÖĞRETİM KURULU DÖKÜMANTASYON MERKEZİ**  
**TEZ VERİ GİRİŞ FORMU**

**YAZARIN**

**Soyadı :** OYLUMLUOĞLU

**Adı :** Görkem

**Kayıt No :**

**TEZİN ADI**

**Türkçe :** Amorf Germanyumun Büyütülmesinin Monte Carlo Simülasyonu

**Y. Dil :** Growth of the Amorphous Germanium by Using Monte Carlo Simulation

**TEZİN TÜRÜ:**

Yüksek Lisans

Doktora

Sanatta Yeterlik

●

○

○

**TEZİN KABUL EDİLDİĞİ**

**Üniversite :** Muğla Üniversitesi

**Fakülte :** Fen Edebiyat Fakültesi

**Enstitü :** Fen Bilimleri Enstitüsü

**Diğer Kuruluşlar :**

**Tarih :** 1999

**TEZ YAYINLANMIŞSA**

**Yayınlanan :**

**Basım Yeri :**

**Basım Tarihi:**

**ISBN :**

**TEZ YÖNETİCİSİNİN**

**Soyadı Adı :** Oktik Şener

**Ünvanı :** Prof. Dr

**Soyadı Adı :** Ellialtıoğlu Şinasi

**Ünvanı :** Prof. Dr.

**TEZİN YAZILDIĞI DİL:** Türkçe

**TEZİN SAYFA SAYISI:** 65

**TEZİN KONUSU (KONULARI):**

- 1) Amorf Germanyumun Büyütülmesinin Monte Carlo Simülasyonu.
- 2)
- 3)

**TÜRKÇE ANAHTAR KELİMELER**

- 1) Amorf Madde
- 2) Radyal Dağılım Fonksiyonu
- 3) Monte Carlo
- 4) Kısa Mesafeli Düzen

**İNGİLİZCE ANAHTAR KELİMELER**

- 1) Amorphous Solid
- 2) Radial Distribution Function
- 3) Monte Carlo Method
- 4) Short Range Order

- 1) Tezimden fotokopi yapılmasına izin vermiyorum.
- 2) Tezimden dipnot gösterilmek şartıyla bir bölümünün fotokopisi alınabilir.
- 3) Kaynak gösterilmek şartıyla tezimin tamamının fotokopisi alınabilir.

Görkem Oylumluoğlu

Yazarın İmzası:

Tarih: 28.07.1999

## ÖNSÖZ

Yoğun mesai temposu içinde dahi çalışmalarında yardımcı ve yol gösterici olan, fizikçi kimliği kazanmamda etkili bir rol oynayan ve kendisini daima örnek alacağım, danışman hocam Sayın Prof. Dr. Şener Oktik'e en derin saygı ve şükranlarımı sunarım.

Çalışma konusunu veren ve beni böyle bir çalışma için cesaretlendiren, çalışmalarım esnasında karşılaştığım bütün güçlüklerin aşılmasında ilgi ve yardımlarını esirgemeyen, engin bilgilerinden her zaman için yararlandığım ve yararlanacağım danışman hocam Sayın Prof. Dr. Şinasi Ellialtıoğlu'na saygı ve şükranlarımı sunmayı bir borç bilirim.

Tez ile ilgili çalışmalarım sırasında, değerli bilgilerinden yararlandığım Fizik bölümü öğretim üyelerine, zaman zaman bilgi, fikir ve yardımlarını esirgemeyen değerli Araştırma Görevlisi arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Tez ile ilgili çalışmalarım sırasında kendi işlerini ve sorumluluklarını bir kenara bırakıp, manevi desteklerini esirgemeyen anne ve babama saygı ve şükranlarımı sunarım.

Tez çalışmam sırasında yeterince ilgi göstermememe karşın, beni anlayışla karşılayan ve her tür problemime çözüm yolları arayan eşim Handan'a teşekkürü bir borç bilirim.

## ÖZET

### AMORF GERMANİYUM BÜYÜTÜLMESİNİN MONTE CARLO SİMÜLASYONU

OYLUMLUOĞLU GÖRKEM

Yüksek Lisans Tezi, Fizik

Haziran, 1999

Bu çalışmada öncelikle ince filmin büyüdüğü taban kristalinin yüzey tipi, taban kristalinin yüzey sıcaklığı ve büyüme hızı gibi parametreler, büyümeyi etkileyen değişkenler olarak ele alınıp, amorf germanyum büyütülmesi modellendi. 'Monte Carlo' yöntemi kullanılarak ilk atomların yüzeye yaklaşarak taban atomlarıyla bağ yapmalarından başlanarak ince bir filmin oluşumunun bilgisayar simülasyonu yapıldı. İnce filmi oluşturan atomların büyüme yüzeyi ve birbirleri ile yaptıkları bağlar yapıya uygun seçilen potansiyeller altında ele alınıp yeni bir atomun bağ yapma koşulları ile birlikte büyütülmüş bir ince filmin amorf karakteri ve özellikleri değerlendirildi. Bu bağlamda Radyal Dağılım hesaplanarak, değişik sıcaklıklar, kristal yönelmeleri, ve büyüme hızları için çizildi. Bulgular literatürde belirli koşullar için sunulan deneysel verilerle karşılaştırıldı.



**ABSTRACT****MODELLING OF GROWTH OF AMORPHOUS GERMANIUM  
USING  
MONTE CARLO SIMULATION****OYLUMLUOĞLU GÖRKEM****M.Sc. in Physics****June, 1999**

In this study, we are particularly interested in parameters effecting thin film growth such as orientation of substrate and substrate temperature. Computer simulation of growth, starting from the initial bonding between substrate atoms and the atoms of the growing film, is carried out by using a Monte Carlo technique. Furthermore, the conditions of forming new bonds between substrate atoms and atoms of the film, and among atoms of growing films are investigated by using phenomenological potentials that are appropriately selected for the tetrahedral structure. The radial distribution function is plotted for different substrate temperatures and various orientations of the substrate crystal. The results are compared with the experimental data found in the literature for certain conditions.

## İÇİNDEKİLER

	SAYFA
ÖNSÖZ .....	I
ÖZET .....	II
ABSTRACT .....	III
TABLolar LİSTESİ .....	VI
ŞEKİLLER LİSTESİ .....	VIII
<b>BÖLÜM 1: GİRİŞ .....</b>	<b>1</b>
<b>BÖLÜM 2: KATILAR.....</b>	<b>3</b>
2.1 KRİSTAL YAPI .....	3
2.2 KRİSTAL KUSURLARI .....	5
2.3 AMORF YAPI .....	6
2.4 KOORDİNASYON SAYISI .....	8
2.5 RADYAL DAĞILIM FONKSİYONU (RDF) .....	9
2.6 ELMAS YAPI .....	11
2.7 KOVALENT BAĞ .....	12
<b>BÖLÜM 3: ELEKTRONİKSEL ÖZELLİKLER VE YAPISAL</b>	
<b>MODELLER .....</b>	<b>14</b>
3.1 ELEKTRONİK ÖZELLİK .....	14
3.2 BAND YAPISI .....	16
3.2.1 CFO (Cohen-Fritzsche-Ovshinski) MODELİ .....	16
3.2.2 DAVIS-MOTT MODELİ .....	17
3.3 ELEMENTEL YARI-İLETKENLER .....	18
3.4 YAPISAL ÖZELLİKLER .....	20
3.5 YAPISAL MODELLER .....	21
3.5.1 MİKROKRİSTALİT MODEL .....	21
3.5.2 SÜNGERSİ YAPI (SWISS-CHEESE) MODELİ.....	21
3.5.3 GELİŞİ GÜZEL AĞ MODELİ .....	22

<b>BÖLÜM 4: MONTE CARLO SİMÜLASYONU .....</b>	<b>23</b>
4.1 MONTE CARLO METODU .....	23
4.2 RASTGELE SAYI ÜRETECİ .....	25
4.3 AMORF GERMANİYUMUN BÜYÜTÜLMESİNİN BİLGİSAYAR MODELLEMESİ .....	26
<b>BÖLÜM 5: ATOMLAR ARASI POTANSİYELLER .....</b>	<b>36</b>
5.1 LENNARD-JONES POTANSİYELİ .....	36
5.2 AXILORD-TELLER POTANSİYELİ.....	38
5.3 STILLINGER-WEBER POTANSİYELİ .....	39
<b>BÖLÜM 6: HESAPLAMALAR VE SONUÇLARIN TARTIŞILMASI .....</b>	<b>43</b>
<b>KAYNAKÇA .....</b>	<b>62</b>

## TABLOLAR LİSTESİ

	SAYFA
Tablo 3.3.1 Elementel yarı-iletkenler .....	18
Tablo 4.1.1 Monte Carlo metodunun bazı uygulama alanları .....	25
Tablo 5.3.1 Stillinger-Weber potansiyelinin Germanyum için parametreleri .....	41
Tablo 6.1.1. Ge(100) üzerine değişik sıcaklıklarda büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (NMCS=100, $\epsilon = 0.1$ ). .....	59
Tablo 6.1.2. Değişik yüzey tipli kristal germanyum taban (alttaşları) üzerine 300K'de büyütülen amorf germanyuma ait istatistikler (NMCS=100, $\epsilon = 0.1$ ). .....	59
Tablo 6.1.3. Ge(110) üzerine Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (NMCS=1000, T=300K). .....	59
Tablo 6.1.4. Ge(100) üzerine değişik sayıda $\epsilon = 0.1\text{Å}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K). .....	60
Tablo 6.1.5. Ge(100) üzerine değişik sayıda $\epsilon = 0.1\text{Å}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=100K). .....	60
Tablo 6.1.6. Ge(111) üzerine değişik sayıda $\epsilon = 0.1\text{Å}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K). .....	60
Tablo 6.1.7. Ge(110) üzerine değişik sayıda $\epsilon = 0.1\text{Å}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K). .....	60
Tablo 6.1.8. Ge(110) üzerine değişik sayıda $\epsilon = 0.15\text{Å}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K). .....	61
Tablo 6.1.9. Ge(110) üzerine değişik sayıda $\epsilon = 0.2\text{Å}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K). .....	61

Tablo 6.1.10. Ge(100) üzerine deęişik sayıda $\epsilon = 0.2\text{\AA}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=600K). .....	61
Tablo 6.1.11. Ge(100) üzerine deęişik sayıda $\epsilon = 0.2\text{\AA}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K). .....	61



## ŞEKİLLER LİSTESİ

	SAYFA
Şekil 2.1.1 Bir kristalde yapı taşlarının kristalin dış görünüşüyle ilişkisi. ....	4
Şekil 2.1.2 Kristal örgü örneği. ....	4
Şekil 2.3.1 Amorf katılarda, band ortasında yerleşmemiş durumlar olduğunda, meydana geldiği sanılan elektron durum yoğunluğu. ....	8
Şekil 2.4.1 Elmasın kristal yapısı ve dörtlü bağ düzeni. ....	9
Şekil 2.7.1 Germanyum kristalinde, en dış katmandaki elektronların komşu atomlarla ortaklaşa kullanımları sonucunda, atomlar arası kurulan kovalent bağlar. ....	13
Şekil 3.1.1 Kristal Germanyum ve amorf Germanyum için iki boyutlu, basitleştirilmiş yapı ve enerji seviye yoğunluğu. ....	15
Şekil 3.2.1.1 Cohen-Fritzsche-Ovshinski Modelinde enerjiye karşın seviye yoğunluğu ve mobilite. ....	16
Şekil 3.2.2.1 Davis-Mott Modelinde enerjiye karşın seviye yoğunluğu ve mobilite. ....	17
Şekil 3.3.1 Yarı-iletkenlerin enerji bantlarının yapısı. ....	19
Şekil 3.4.1 Kristal Germanyumdaki altılı halka ve amorf yapıda bulunabilecek eşkenar beşgen halka gösterimi. ....	20
Şekil 4.1.1 Fiziksel sistemde Monte Carlo metodu. ....	24
Şekil 4.3.1 Kristal germanyumun (100), (110), (111) simetri yüzeyleri üzerindeki atomların pozisyonları (üç yönden görünüş). ....	29
Şekil 4.3.2 Taban kristal yüzeye eklenen atom sayısının 8 olduğunda taban yüzeye yerleştirilen atomların hareketleri. ....	31
Şekil 4.3.3 Taban kristal yüzeye eklenen atom sayısının 3 ve 9 olduğunda atomların taban yüzeye yaptıkları bağlar. ....	34
Şekil 4.3.4 Büyütmeye başladıktan sonra, taban kristal yüzeye eklenen atom sayısının 90 olduğu andaki bu atomların taban yüzeye yaptığı bağlarla oluşan konfigürasyon. ....	35
Şekil 5.1.1 Lennard-Jones potansiyeli. ....	37
Şekil 5.3.1 Stillinger-Weber potansiyeli. ....	40
Şekil 6.1.1 Büyütülen ince filmin iki farklı görünüşü. ....	49

Çizim 6.1.4 0.1Å ve taban kristal germanyumun (100) yönlenmesi alınarak büyütülen filmin her iki Monte Carlo adım sayısı için çizilen

radyal dağılım fonksiyonunun bir arada görünümü. .... 51

Şekil 6.1.5 Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanılarak,300K sıcaklıkta, Monte Carlo adımı 0.05Å ve taban kristal germanyumun (100) yönlenmesi alınarak büyütülen filmin belirlenen iki Monte Carlo adım sayısı için çizilen radyal dağılım fonksiyonunun bir arada görünümü. .... 52

Şekil 6.1.6 Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanılarak, Monte Carlo adım sayısı 100, Monte Carlo adımı 0.1Å taban kristal germanyumun (100) yönlenmesi alınarak büyütülen filmin belirlenen dört sıcaklık değeri için çizilen radyal dağılım fonksiyonunun bir arada görünümü. .... 53

Şekil 6.1.7 Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanılarak, Monte Carlo adım sayısı 100, Monte Carlo adımı 0.1Å taban kristal germanyumun (110) yönlenmesi alınarak büyütülen filmin belirlenen dört sıcaklık değeri için çizilen radyal dağılım fonksiyonunun bir arada görünümü. .... 54

Şekil 6.1.8 Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanılarak, Monte Carlo adım sayısı 100, Monte Carlo adımı 0.1Å taban kristal germanyumun (111) yönlenmesi alınarak büyütülen filmin belirlenen dört sıcaklık değeri için çizilen radyal dağılım fonksiyonunun bir arada görünümü. .... 55

Şekil 6.1.9 Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanılarak, Monte Carlo adım sayısı 5000, taban kristal germanyumun (100) yönlenmesi alınarak büyütülen filmin belirlenen iki Monte Carlo adım değeri için çizilen radyal dağılım fonksiyonunun bir arada görünümü. .... 56

- Şekil 6.1.10 Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanılarak, Monte Carlo adım sayısı 100, Monte Carlo adımını  $0.1\text{\AA}$  taban kristal germanyumun (100) yönlenmesi alınarak büyütülen filmin belirlenen dört sıcaklık değeri için çizilen dihedral açıdaki değişme. .... 57
- Şekil 6.1.11 Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanılarak, Monte Carlo adım sayısı 100, Monte Carlo adımını  $0.1\text{\AA}$  taban kristal germanyumun (111) yönlenmesi alınarak büyütülen filmin belirlenen dört sıcaklık değeri için çizilen dihedral açıdaki değişme. .... 58





## BÖLÜM 1

### GİRİŞ

Yarı-iletken kristallerin ince film biçiminde büyütülmesinin teknolojik ve endüstriyel potansiyeli gün geçtikçe artmaktadır. İnce film büyütme yüksek teknolojiler gerektiren yöntemlerle yapılmaktadır.

Büyütülen filmin özellikleri ve büyüme parametreleri arasındaki ilişkilerin deneysel olarak belirlenmesi oldukça zor ve zor olduğu kadar da pahalı bir yaklaşımdır. Bu nedenle ince filmlerin büyümesinin modellenmesi, cazip bir alternatif olarak geniş bir alanda uygulanmaktadır. İnce filmin büyümesi sırasında çok sayıda parametre büyüyen filmin özelliklerini etkilemektedir ve modellemeler ancak sınırlı sayıda değişkeni içine alacak şekilde yapılmaktadır.

Büyütme teknolojisinin önemi, kristal ve amorf meteryallerin elektronik ve yapısal özellikleri üzerindeki çalışmalardan dolayı, son on yıldır büyük ilgi çekmiştir. 1960'lı yıllarda moda olan amorf silisyumun ince film biçiminde büyütülmesi, günümüzde hala önemini yitirmemekle birlikte, 1980'li yıllardan itibaren gerek akademik gerekse yeni teknolojik nedenlerle, daha az popüler olan amorf germanyumun büyütülmesi de güncel konular arasına girmiştir.

Bu çalışmada öncelikle ince filmin büyüdüğü taban kristalinin yönlenmesi büyüme yüzeyinin sıcaklığı ve büyüme hızı, büyümeyi etkileyen değişkenler olarak kabul edildi ve 'Monte Carlo' yöntemi kullanılarak amorf film büyütülmesinin benzetimi (simülasyon) yapıldı. İnce filmi oluşturan atomların büyüme yüzeyi ve birbirleri ile yaptıkları bağlar yapıya uygun seçilen potansiyeller altında ele alınıp, yeni bir atomun bağ yapma koşulları değerlendirildi. Büyüme işlemi, merkez olarak seçilecek bir atom civarında oluşturulan  $r$  yarıçaplı küre içerisinde kalan atom sayısını veren radyal dağılımı ile ifade edilerek, Radyal Dağılım Fonksiyonları değişik sıcaklıklar, kristal yönlenmeleri ve kristal yapının büyüme hızına bağlı olarak çizdirildi. Bulgular literatürde verilmiş deneysel verilerle karşılaştırıldı.

Bu çalışmanın giriş bölümünde, büyütülen filmin özellikleri ve büyüme parametrelerinin neler olduğu, ince filmin büyümesinin modellenme biçimi ve teknolojiadaki yeri üzerinde durulmuştur. İkinci bölümde, kristal ve amorf katılar incelenirken, kristalin yapısını bozan kristal kusurlarının neler olduğuna bakılmış ve adları sıkça geçen temel kavramlar üzerinde durulmuştur. Üçüncü bölümde, amorf germanyumun yapısal özellikleri araştırılarak tetrahedral amorf materyallerin yapısını modellemek için öne sürülen görüşler üzerinde durulmuştur. Dördüncü bölümde, Monte Carlo metodununun genel anlamda bir tanımı yapıldıktan sonra ince filmin büyütülmesinde kullandığımız bilgisayar modellemesi üzerinde durulmuştur. Beşinci bölümde, tarihsel oluşumuna bağlı olarak potansiyelleri ele alarak, büyütmede kullandığımız Stillinger-Weber tipi potansiyelin özellikleri üzerinde durulmuştur. Çalışmanın altıncı bölümünde, değişik koşullarda büyütülen amorf filmlerin özellikleri anlatılmıştır. Bu koşulların etkileri ve simülasyondaki önemleri incelenmiştir.

## BÖLÜM 2

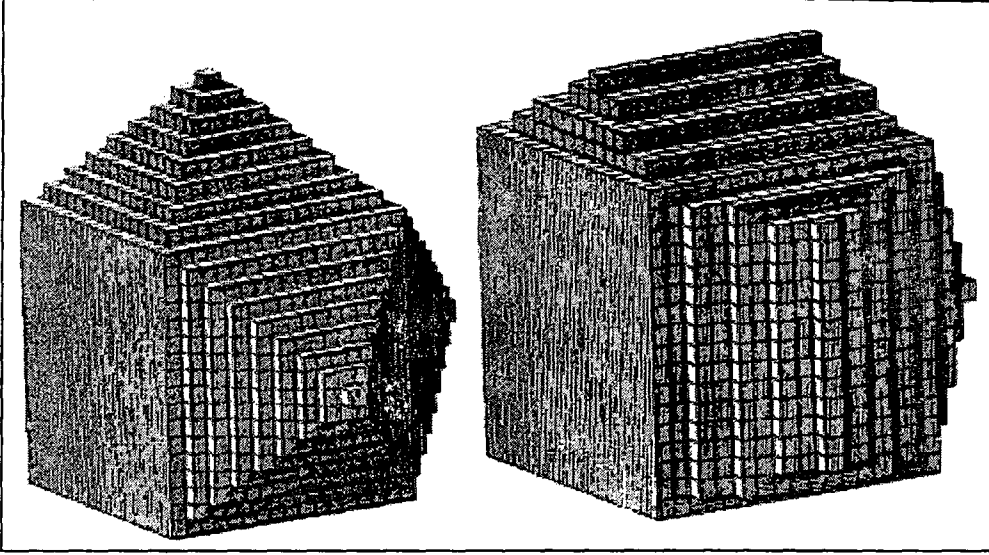
### KATILAR

Katılarla ilgili çalışmalar tarihin ilk çağlarından beri yapılmış olmakla birlikte katıların, atom ve moleküllerin düzgün sıralanmış dizilerden oluştuğu düşüncesi ilk defa gazların atomik ve kinetik teorilerinin geliştirilmesi sırasında ortaya konulmuştur.

Katıların özelliklerini incelerken, katı maddeyi sanki birbirlerine sabit yaylarla bağlanmış atomlardan oluşmuş bir yapı gibi düşünürüz. Katıyı oluşturan birimlerin, zaman içinde, konumlarının ve komşuluklarının değişmeden kalmasını sağlayan çeşitli bağ kuvvetleri vardır. Denge halindeki bir kristal yapıya etki eden net kuvvet sıfırdır. Kristal yapı eğer minimum enerji durumunda ise sistem için kararlı haldedir denir [1]. Bu bölümde konuyla ilgili olarak, kristal yapı, kristal kusurları, amorf yapı, koordinasyon sayısı, radyal dağılım fonksiyonu ve kovalent bağ gibi genel tanımlar üzerinde duracağız.

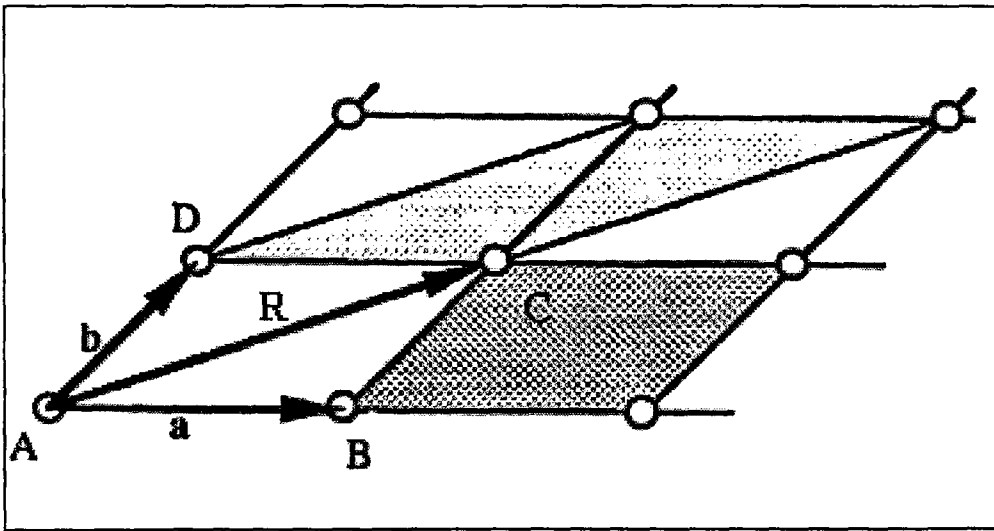
#### 2.1 KRİSTAL YAPI

Atom veya atom gruplarından meydana gelen temel birimlerin üç boyutta periyodik tekrarı ile oluşan yapılara kristal denir. Bir kristal, kararlı bir ortamda büyümeye başladığında meydana gelen yapı, birbirine özdeş yapı taşlarının ard arda eklenmesiyle oluşur ve bu durum Şekil 2.1.1'de gösterilmektedir [2]. Bu yapı taşları tek atomlar veya atom grupları olabilirler. O halde kristal, atom gruplarından oluşan üç boyutlu bir örgüdür. İşte kristali hayalimizde canlandırmaya yardım edecek olan bu şekle bir kristal örgüsü yada yalnızca örgü diyeceğiz (Şekil 2.1.2). Örgüyü oluşturan herbir noktanın çevresinde aynı düzenin bulunduğu unutulmamalıdır.



Şekil 2.1.1 Bir kristalde yapıtaşlarının kristalin dış görünüşüyle ilişkisi.

Kristal yapıya sahip katları sınıflandırmanın en kolay ve basit yolu onları metaller ve metal olmayanlar diye hemen ikiye ayırmaktır. Metaller yüksek elektriksel iletkenliğe sahiptirler ve serbest elektronları vardır. Buna karşılık, metal olmayan katılar yalıtkan özellik gösterirler ve yalnızca yörünge elektronları bulunur [3].



Şekil 2.1.2 Bir kristal örgü örneği.

Kristal örgü, katının fiziksel özelliklerini doğrudan etkiler. Elektriksel iletkenlik, ısı iletkenliği, genleşme katsayısı, ısı sığası, esneklik gibi fiziksel özellikler katının kristal örgüsünün cinsine, yani simetrisine bağlıdır [3].

Periyodiklik yüzünden Şekil 2.1.2 deki A, B, C,.. v.s. konumları eşdeğerdir. Bu konumların herhangi birine yerleşecek bir gözlemciye kristal kesin olarak aynı görünür. Eğer kristal herhangi iki atomu birleştiren bir  $R$  vektörü kadar ötelenirse, kristal yine ötelemeden önceki ile aynı yapıya sahip olur. Bir başka deyişle, kristal böyle bir öteleme altında değişmez kalır.

İdeal bir kristal, özdeş yapı birimlerinin (baz) örgü uzayında sonsuz tekrarı ile elde edilir. Bu durum kristalde uzun mesafe düzeninin varlığının bir göstergesi ve kristalin ayırd edici bir özelliğidir. En basit elemental kristallerde yapı birimi tek bir atomdur. Yapı birimi, inorganik kristallerde 100 ve organik kristallerinde 10000 atomun üstüne çıkabilir. Doğada ideal kristal yapıya rastlamak hemen hemen mümkün değildir. Kristalin periyodik yapısını bozan birçok neden vardır ve bunlara kristal yapı kusurları denir [2].

## 2.2 KRİSTAL KUSURLARI

Kristal kusurlarının yapısını anlamak için ilk önce kristalin yüzeyi incelenmelidir. Örgü titreşimleri ihmal edilirse, bir kristal yapı içerisindeki atomların periyodik diziliş düzeni; noktasal, çizgisel ve hacimsel gibi değişik boyutlu kusurların varlığı ile ideal yapıdan sapar.

Homojen maddelerde termal veya mekanik etki ile oluşan noktasal yapı bozuklukları, kristal yapı içerisinde bir atomun bulunması gereken konumda bulunmaması (*boşluk*), örgü noktasında başka cins atomun bulunması (*örgü-yeri safsızlığı*), ve örgü noktaları arasındaki boş bölgelerde atomların bulunması (*arayer safsızlığı*) şeklinde ortaya çıkar.

Kristal yapılarda ayrıca '*dislokasyon*' denilen çizgisel kusurlar da bulunabilir. Bunlar kristali boydan boya katedebildikleri gibi, kapalı bir ilmek de oluşturabilirler.

Metal kristalleri plastik olarak deforme edildiğinde, atom düzlemlerinden biri, diğeri üzerine kayarak yeni bir şekillenim alır, ve bu durumda da deformasyon ve dolayısıyla da dislokasyon ortaya çıkar.

### 2.3 AMORF YAPI

Atom yada atom gruplarının belli bir düzen içinde yerleşmediği maddelere amorf madde denir. Amorf katıları meydana getiren atomlar uzun mesafe düzenine sahip olmamalarına rağmen küçük ölçekte tamamen düzensiz değillerdir [2]. Amorf maddeler için de yapı birimleri arasında bir kısa mesafe düzeninden söz etmek mümkündür.

Amorf germanyum gibi periyodik olmayan sistemlerde dalga-vektörü uzayı (ters-uzay) kavramı geçerli değildir. Bu yüzden periyodik olmayan sistemlerin çalışılabilmesi için daha başka temel kavramlara gereksinim vardır [4].

Son kırk yılda gerçekleşen pek çok teknolojik gelişmeye rağmen, periyodik olmayan sistemlere çok iyi bir örnek oluşturan amorf yarı-iletkenler konusu, henüz göreceli olarak son yıllarda incelemeye başlanmış ve amorf yarı-iletkenlerin fiziğini anlamamız konusundaki gelişmeler, henüz kristaller düzeyine ulaşmamıştır [4]. Bunun en büyük nedeni, kristallerdeki periyodik yapı üzerine kurulmuş matematiksel modellerin, amorf malzemeler için benzerlerinin bulunmayışıdır.

Kristallerde elektronların dalga fonksiyonları Bloch formundadır;

$$\Psi(\vec{k}, \vec{r}) = u(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (2.3.1)$$

Burada  $u(r)=u(r+R)$ , sistemin simetrisini tanımlayan  $V(r)=V(r+R)$  potansiyelindeki periyoda sahip bir fonksiyon olup, kristal momentumu faz olarak dalga fonksiyonuna

girer. Bloch formunun kristalin periyodik olmasından kaynaklandığı göz önüne alınır, kristal olmayan maddeler için dalga fonksiyonu bu formda olmak zorunda değildir, ancak periyodik olmayan malzemeler için de Schrödinger eşitliğinin çözümleri olması gerekir. Bu nedenle, kristalde enerjiye bağlı elektronik seviye yoğunluğu  $N(E)$  ise,  $E$  enerjisi etrafında  $dE$  enerji aralığındaki elektron sayısı  $N(E)f(E)dE$  ile ifade edilir. Burada  $f(E)$  Fermi dağılım fonksiyonunu göstermektedir.  $N(E)$  ve ilgili dalga fonksiyonlarının hesaplanmasında en basit yaklaşım metaller için geçerli olan serbest elektron yaklaşımıdır:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad , \quad (2.3.2)$$

$\mathbf{k}$  dalga vektörü,  $m$  etkin kütle,  $\hbar$  ise Planck sabitidir, ve tek bir spin yönündeki elektronlar için elektronik seviye yoğunluğu,

$$N(E) = \frac{4\pi k^2}{dE} = \frac{km}{2\pi^2 \hbar^2} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} \quad (2.3.3)$$

eşitliği ile verilir.

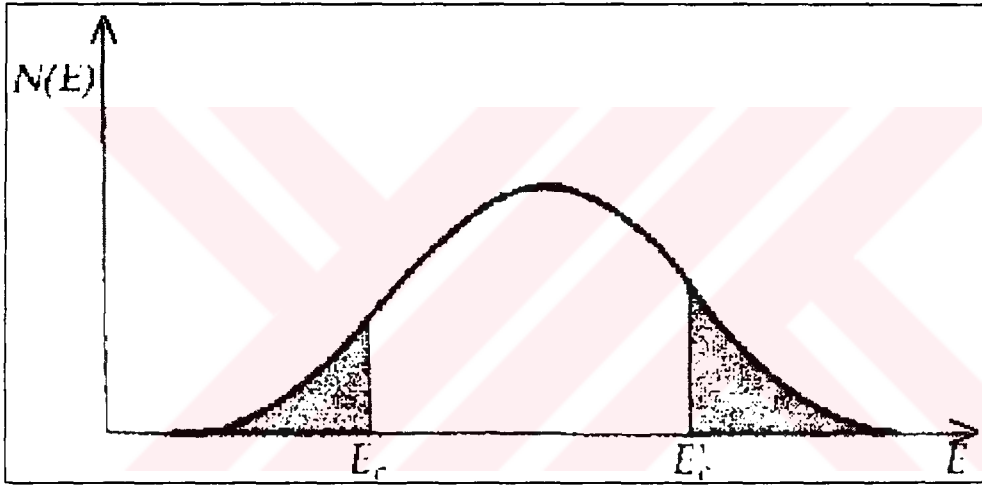
Kristallerde kristal örgünün yarattığı elektrik alan ile etkileşimler, eşitlik (2.3.2)'den önemli farklılaşmalara neden olur. Çünkü elektron enerjisi,  $\mathbf{k}$  vektörünün yönüne ve bandların oluşumuna bağlıdır. Yabancı atomlar, fononlar veya kusurlar nedeniyle, mükemmel bir örgüden sapmalar gösterir ve ortalama serbest yol  $\Lambda$  sonlu olabilir. Eğer  $\Lambda$  çok küçük değilse ( $k\Lambda \approx 1$ ) enerji seviye yoğunluğundaki değişiklikler çok büyük olmaz.

Burada şunu belirtmek gerekir ki; kristal olmayan yapılarda, yerleşmiş ve sürekli seviyeler aynı enerjide bulunmazlar. Bu deneysel olarak da gösterilmiştir [4].

Amorf maddeler, Fermi düzeyi enerji aralığının orta bölgesinde oluşuyla yarı-iletkenlere benzerler. Ancak bu özelliğin kırık bağlar gibi örgü kusurlarından ileri

geldiği bilinmektedir [2]. En çok incelenen amorf yarı-iletken türleri silisyum ve germanyum gibi dörtyüzlü (tetrahedral) yapıdaki amorf katılardır.

Amorf yarı-iletkenlerde hem elektronlar hem de boşluklar akım taşıyabilirler. Yük taşıyıcıları düzensiz yapıda daha çok saçılır ve dolayısıyla ortalama serbest yol düzensizlik ölçeğinde olur [5]. D. Adler'e göre bant kıyılarındaki elektron durumları yerleşmiş olup tüm katı içine uzanmaz [5]. Bu durum Şekil 2.3.1'de gösterilmektedir.



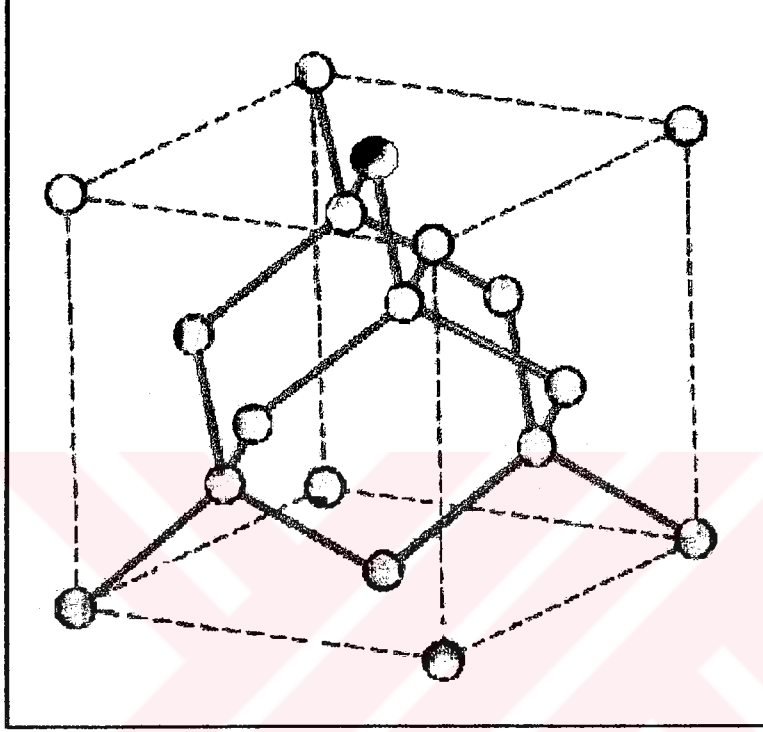
Şekil 2.3.1 Amorf katılarda, band ortasında yerleşmemiş durumlar olduğunda, meydana geldiği sanılan elektron durum yoğunluğu. Taralı bölgeler yerleşmiş durumları gösterir.

## 2.4 KOORDİNASYON SAYISI

Koordinasyon sayısı, referans bir atomun en yakın komşularının sayısını verir. Kristal germanyum bilinen elmas yapıya sahiptir ve koordinasyon sayısı 4'tür. Kristal maddelerde yapı birimlerinin periyodik tekrarından dolayı koordinasyon sayısı kristal için ayırt edici bir özellik iken, amorf maddelerin yapılarında uzun mesafe düzeninin olmayışı, bu tip maddelerde koordinasyon sayısının kristal değeri



etrafında deęişik deęerler almasına neden olmaktadır. Çünkü amorf yapıda iřin iine en yakın komřu řekillenimlerinde az da olsa sapmalar girmektedir [6].



řekil 2.4.1 Elmasın kristal yapısı ve drtl baę dzeni.

řekilde elmas yapısının drtl baę (tetrahedral) zellięi gsterilmiřtir. Her atomun en yakın komřu sayısı 4, ikinci en yakın komřu sayısı 12'dir.

## 2.5 RADYAL DAęILIM FONKSİYONU

Radyal Daęılım Fonksiyonu (RDF) herhangi bir referans atomdan olan uzaklıęa baęlı olarak, ortalama atom yoęunluęu olarak ifade edilir [7]. Eęer  $\rho(r)$  orijindeki bir atomun  $r$  noktasındaki komřu atom bulunmasının olasılık yoęunluęu ise,  $\rho(r) dr$ , orijindeki rastgele bir atomun  $r$  ile  $r+dr$  aralıęında bulunan, komřu atom sayısını verir.

Yapı fonksiyonu

$$S(K) = 1 + 4\pi \int_0^R dr r^2 [\rho(r) - \rho_0] \frac{\sin Kr}{Kr} + 4\pi\rho_0 \int_0^R dr r^2 \frac{\sin Kr}{Kr} \quad (2.5.1)$$

ifadesi ile verilmektedir. Bu ifadedeki çıkartılıp eklenen son terim

$$\left( \frac{\rho_0}{K} \right) \int_0^R dr 4\pi r \sin Kr \quad (2.5.2)$$

düzdün bir madde dağılımından olan saçılmayı temsil eder. Burada  $R$ , numunenin boyutlarına oranla çok büyük bir uzaklık,  $\rho_0$  ise ortalama yoğunluktur. Bu terim çok küçük açılı ileri yöndeki saçılmalar dışında ihmal edilebilir, ve  $R \rightarrow \infty$  olduğunda orijinde bir delta fonksiyonuna gider. Bu delta fonksiyonunun katkısı ihmal edilebilecek kadar küçük olması nedeniyle bir kenara bırakılırsa,

$$S(K) = 1 + \int_0^\infty dr 4\pi r^2 [\rho(r) - \rho_0] \frac{\sin Kr}{Kr} \quad (2.5.3)$$

olur. Orijinde seçilen herhangi bir atomdan  $r$  uzaklıktaki atomların sayısal yoğunluğu  $\rho(r)$  olarak gösterilirse, radyal dağılım fonksiyonu  $g(r)$  şöyle tanımlanır:

$$\rho(r) = \rho_0 g(r) \quad (2.5.4)$$

Buna göre, denklem (2.5.3) şöyle yazılabilir:

$$S(K) - 1 = 4\pi\rho_0 \int_0^\infty dr [g(r) - 1] r^2 \frac{\sin Kr}{Kr} \quad (2.5.5)$$

Bu ifadenin ters-Fourier dönüşümü alınır;

$$g(r) - 1 = \frac{1}{2\pi^2 \rho_0} \int_0^{\infty} dK [S(K) - 1] K^2 \frac{\sin Kr}{Kr} . \quad (2.5.6)$$

Bu formül deneysel olarak ölçülen  $S(K)$  yapı faktöründen giderek  $g(r)$  radyal dağılım fonksiyonunu elde etmeye yarar [8].

Merkez olarak seçilecek bir atom sayısını veren radyal dağılım fonksiyonunu hesapladıktan sonra radyal dağılım fonksiyonlarını merkez atomdan olan uzaklığa ( $r$ ) bağlı olarak çizdiğimizde yoğunluğun bulunduğu yerlerde pikler görülecektir. Bu piklerin anlamı belirtilen mesafelerde bir yoğunluğun yada atomun bulunduğuudur.

Buna bağlı olarak amorf katılardaki kısa mesafe düzenine doğrudan kanıt radyal dağılım fonksiyonundaki ilk ve ikinci piklerdir. Radyal dağılım fonksiyonundaki ilk pikin genişliği en yakın komşu yerleşimini, yani bağ uzunluğundaki sapmaları gösterir, ikinci pikin genişliği ise dihedral bağ açılarındaki değişimler ile artar. Amorf katıdaki koordinasyon sayısını bulmak için ilk pikin altındaki alanı hesaplamamız gerekecektir.

Amorf katıların karakterizasyonunda kullanılan radyal dağılım fonksiyonu amorf yapıda kısa mesafe düzeninin incelenmesini sağlarken yapıyı oluşturan kimyasal bağın oluşumu hakkında da bilgiler verir.

## 2.6 ELMAS YAPI

Karbon atomlarının oluşturduğu iki ayrı yüzey merkezli kübik örgü, birinin başlangıcı [000] ve ötekinin başlangıcı [ $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ ] konumunda olacak şekilde iç içe geçirilerek Şekil 2.2.1'de görülen elmas yapı elde edilir.

Böylece, yüzey merkezli kübik örgülerden birindeki her karbon atomu öteki örgünün atomları tarafından oluşturulan bir düzgün dörtyüzlünün (tetrahedronun) merkezinde bulunur. İç içe giren iki yüzey merkezli kübik örgünün oluşturduğu yeni örgü, sonuçta yine iki atom bazlı bir yüzey merkezli kübik örgüdür. Bu yapıda birim

küp başına sekiz atom düşer. Bunlardan dördü yüzey merkezli kübün örgü noktalarından, öteki dördü ise dört ayrı tetrahedronun merkezlerindeki atomlardan gelir. Örgü sabiti, bir konvansiyonel kristal yapıda iki atom arasındaki uzaklığa denir ve kristal için örgü sabiti ayırt edici bir özelliktir. Elmas yapıda örgü sabiti olarak, kartezyen koordinat sistemine uygun olması bakımından, üçüncü komşu uzaklığına denk gelen, yüzey merkezli kübik yapının kenarı kabul edilir.

Elmas yapı, elementlerin periyodik tablosundaki IV. sütunda karşılaşılan yönlenmiş kovalent bağın bir örneğidir. Kristal germanyumun örgü sabiti  $a = 5.65 \text{ \AA}$  dur. Germanyum amorf halde ise rastgele tetrahedral ağa sahiptir [9].

Germanyum grup IVA elementleri içinde, yer kabuğunun yaklaşık %10'nu oluşturur. Germanyum gri beyaz renkte olup kırılma bir özellik taşır. Çünkü yapısındaki Ge-Ge bağının bağlanma kuvveti zayıftır. Bunun nedeni atom numarası arttıkça bağlanmada kullanılan elektronların daha zayıf kuvvetle çekilmeleridir. Germanyum, silisyuma birçok yönüyle benzer, ancak ondan daha aktif bir elementtir. Germanyum bazı elementlerin çok az miktarı ile katkılanırıldığında elektrik akımını bir yönde geçirmek gibi bir önemli özellik kazanır. Bu özellik nedeniyle de alternatif akımı doğru akıma çevirme gibi ayırt edici bir özelliğe sahiptir.

## 2.7 KOVALENT BAĞ

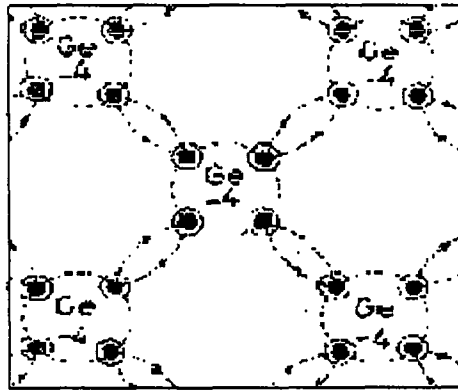
Kovalent bağ özellikle organik kimyada elektron bağı veya eş kutuplu bağ olarak bilinir. Bir karşılaştırma yapmak istersek, iki karbon atomu arasındaki bağ, iyonik kristaldeki bağ kadar kuvvetlidir.

Kovalent bağın en önemli özelliği yöne çok bağlı olmasıdır. Bu nedenle karbon, silisyum ve germanyum gibi elementlerin elmas yapısında bulunurlar; bu yapıda atomlar en yakın dört komşuya düzgün dörtyüzlünün açılarıyla bağlanırlar. Oluşan bu yapı 12 en yakın komşulu altıgen sıkı yapı kadar kararlıdır. Kovalent bağ iki atomun iki elektronuna ortak olmasıyla sağlanır. Bağı oluşturan elektronlar

kısmen bu iki atom arasındaki bölgede yer alırlar. Kovalent bağı oluşturan iki elektronun spinleri antiparaleldir.

Kovalent bağ, komşu atomların valans elektronlarının paylaşılmasıyla oluşan bir bağ olduğu için genellikle periyodik cetvelin III., IV. ve V. gruplarını teşkil eden elementlerde görülür. Germanyum, silisyum, ve karbon gibi periyodik cetvelin IV. grubunu oluşturan kristallerin, 4 değerlikli atomlarının bir araya gelmesinde dış yörüngelerdeki 4 elektronu ortaklaşarak kovalent bağ şeklinde bağlanırlar ve böylece saf kristalleri oluştururlar. Kovalent bağlanmada molekül başına bağlanma enerjisi yaklaşık olarak 10 eV civarındadır. Moleküler bağları molekül başına düşen bağ enerjisine göre sıraladığımızda kovalent bağ, iyonik bağdan hemen sonra ikinci sırada yer almaktadır.

Germanyum ( $Z=32$ ) atomunun elektron yapısına baktığımız zaman, iç kabukların 28 elektronla dolu olduğunu, geriye kalan dört elektrondan ikisinin  $l=0$  ve  $l=1$  alt gruplarında yer alacak biçimde dış kabuklara yerleştiğini görürüz. Germanyum atomunun  $l=0$  ve  $l=1$  alt gruplarındaki elektron eksikliğini kapatabilmesi için dört elektrona daha gereksinimi vardır. Germanyum kristalindeki her atom bu dört elektronun komşu germanyum atomlarıyla elektron ortaklığı yapmak suretiyle Şekil 2.7.1'de görüldüğü gibi, aralarında kovalent (eşdeğerlikli) bağlar yaparlar [2]. Böylece ortamda herhangi bir serbest elektronun mevcut olmayışı sonucu, germanyum kristali saf durumda iken ve  $T = 0K$  sıcaklıkta iyi bir yalıtkan özellik taşır.



Şekil 2.7.1 Germanyum kristalinde, atomlararası kurulan kovalent bağlar.

## BÖLÜM 3

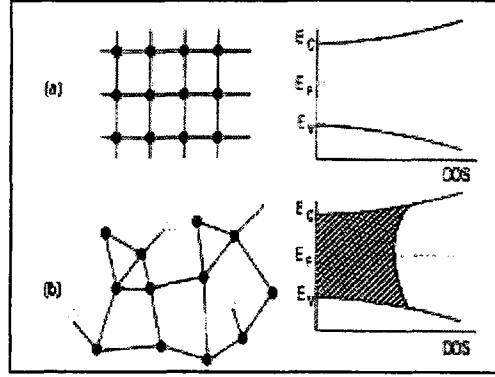
### ELEKTRONİKSEL ÖZELLİKLER VE YAPISAL MODELLER

Germanyum katı halde gösterdiği elektriksel ve yapısal özelliklerden dolayı bilimsel bir çekiciliğe sahiptir. Germanyumun kristal halindeki yapısının iyi bilinmesine karşın, sıvı ve amorf halinin anlaşılması daha zordur. Germanyum, silisyum ve karbon elmas yapıda kristalleşir.

#### 3.1 ELEKTRONİK ÖZELLİKLER

Kristal yapıdaki katıların yarı-iletken olma özelliklerini, klasik enerji band teorisi başarıyla açıklamaktadır. Katı içinde bulunan atom sayısının çok yüksek olmasından dolayı, seviyeler birbirine çok yakın olarak yerleşirler. Bu sözü edilen seviyeler madde içerisinde sürekli bir dağılım gösterirler. Bu yüzden belli bir seviyedeki enerji yerine, belli bir enerji aralığına dağılmış seviyelerden, yani enerji bandlarından söz etmek daha doğru olur. Bu, belli bir enerji aralığına dağılmış toplam enerji seviyesi sayısına, seviye (durum) yoğunluğu (DOS) denir. Şekil 3.1.1'de gerçekte 3 boyutlu yapılar olan kristal germanyum ile amorf germanyumun bağ yapıları ve bu yapılara karşılık gelen seviye yoğunlukları yasak enerji aralığı civarında şematik olarak çizilmiştir.

İdeal kristalde enerji seviye yoğunluğu, yasak enerji aralığı dışında  $E^{1/2}$ 'ye bağlı olarak değişir (Şekil 3.1.1-a). Enerjinin  $E = E_v$  olduğu noktada enerji seviye yoğunluğu  $(E_v - E)^{1/2}$  biçiminde sıfıra gider. Sonra yasak band aralığı başlar. Klasik band teorisine göre, madde içerisinde enerjisi band aralığı içine düşen hiçbir elektron veya deşik bulunamaz. Daha sonra enerji seviye yoğunluğu,  $E = E_c$  de yeniden  $(E - E_c)^{1/2}$  bağıntısıyla yükselir.



Şekil 3.1.1 Kristal Germanyum ve Amorf Germanyum için iki boyutlu, basitleştirilmiş yapı ve enerji seviye yoğunluğu.

$E_v$ 'nin altında hemen hemen tüm seviyeler doludur. Bu seviyelere valans (değerlik) seviyeleri denir.  $E_v$  en yüksek dolu seviyedir.  $E_c$ 'nin üzerindeki hemen hemen tüm seviyeler ise boştur. Bu seviyeler iletkenlik seviyeleri olarak adlandırılır. Çünkü ancak bu seviyelerdeki nispeten düşük sayıdaki elektronlar serbest olarak hareket eder ve iletkenliğe katkıda bulunurlar.

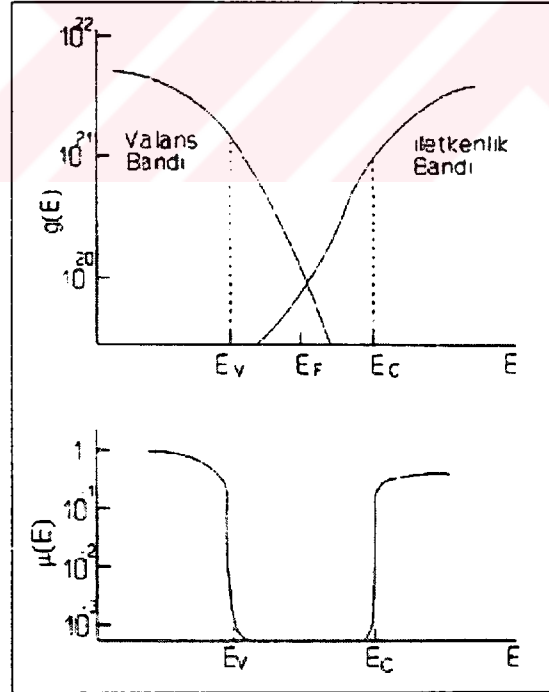
Bilindiği gibi bağ yapan iki elektronun enerjileri bağ yapmadan önceki enerjilerine göre artan ve azalan iki banda dönüşür. Buna karşılık başka elektronlarla bağ yapmayan ve yalnız kalarak kopuk bağları oluşturan elektronların enerjileri değişmeden valans ve iletkenlik bandlarının arasında kalır. Bu enerjinin tam olarak ne değer alacağı, bağlı bulunduğu atomun diğer üç elektronuna ve elektronun etrafındaki diğer atomların oluşturduğu potansiyele bağlıdır. Bu nedenle amorf germanyumda kopuk bağlar iletkenlik ve valans bandları arasında enerji seviye yoğunluğunu büyük ölçüde artırır ve kristallerdeki belirli tuzakların aksine, çok çeşitli enerji değerleri alarak, yasak band aralığı içinde belirli bir dağılım gösterirler. Bu dağılım, madde içerisinde elektronların hareketini olanaksız kılar. (Şekil 3.1.1-b).

### 3.2 BAND YAPISI

Amorf yarı-iletkenlerin band yapılarıyla ilgili değişik modeller öne sürülmüştür. Bütün bu değişik modellerde lokalize seviyeler olmakla birlikte, modeller birbirlerinden kuyruk enerji konumlarının yasak band aralığı içine ne kadar girdiği ve nasıl bir dağılım gösterdiği konularında farklılıklar gösterir.

#### 3.2.1 CFO (Cohen-Fritzsche-Ovshinski) MODELİ

Bu model, atomların çok büyük bir kısmının kendi örgü noktalarında olduğunu ve valans gereksinimlerinin de sağlandığını kabul eder. Valans ve iletkenlik band kuyrukları yasak enerji aralığı içinde üst üste gelir [5]. Bu maddenin herhangi bir noktasında valans bandındaki bir elektronun, maddenin başka bir noktasındaki iletkenlik bandındaki bir elektronundan daha yüksek enerjiye sahip olabilmesi demektir.



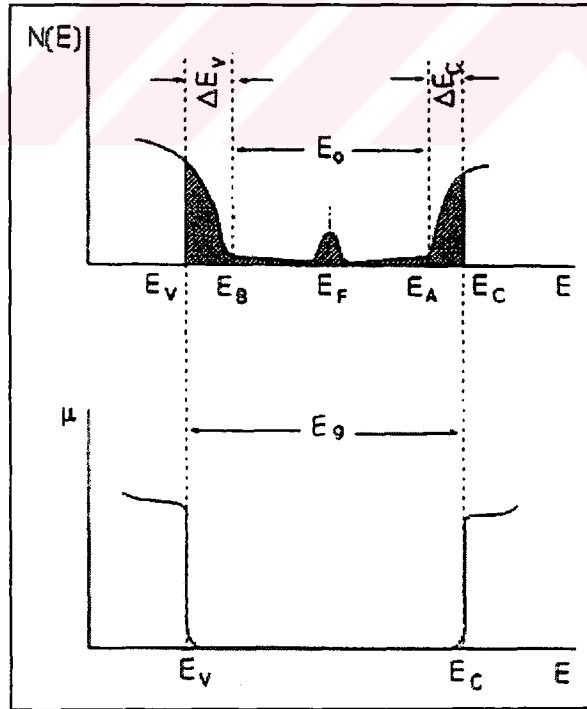
Şekil 3.2.1.1 Cohen-Fritzsche-Ovshinski Modelinde enerjiye karşın enerji seviye yoğunluğu  $N(E)$  ve mobilite ( $\mu$ ).



Böyle elektronlar valans band kuyruğunun üst seviyelerinden yarı-iletkenin farklı bir noktasındaki, iletkenlik band seviyelerine geçebilirler [10]. Cohen-Fritzsche-Ovshinski modelinde Fermi seviyesi, elektronik seviye yoğunluğunun minimum olduğu band aralığının ortalarındadır. Sürekli seviyelerden lokal seviyelere geçiş, valans bandı için  $E_v$ , iletkenlik bandı için  $E_c$ 'de olur.  $E_v$  ve  $E_c$  enerjilerinde mobilite keskin bir şekilde düşer ve iletkenlik mekanizması, yüklerin  $T=0K$ 'de sonlu bir mobilite veren, düşük mobiliteli, band taşınmasından, lokal seviyeler arasında, termal olarak uyarılan ve  $T=0K$ 'de kaybolan termal uyarımlı sıçrama yoluyla olur.

### 3.2.2 DAVIS-MOTT MODELİ

Bu modelde, Şekil 3.2.2.1'de görüldüğü gibi  $E_c$  ile  $E_A$  arasında  $\Delta E_c$ , ve  $E_v$  ile  $E_B$  arasında  $\Delta E_v$  gibi uzun mesafe düzeninin yokluğundan kaynaklanan lokalize enerji seviyeleri vardır [11]. Bu seviyeler, maddenin yapısındaki kusurlardan kaynaklanan band kuyruklarından farklı olarak ele alınır.



Şekil 3.2.2.1 Davis-Mott Modelinde enerjiye karşı enerji seviye yoğunluğu  $N(E)$  ve mobilite  $\mu$ .

Davis-Mott Modelinde de localize seviyeleri sürekli seviyelerden mobilite eşiği de denilen  $E_c$  ve  $E_v$  enerjileri ayırır. Bu enerjilerde mobilitenin en az 100 kez değişmesi söz konusudur. Üstelik Davis-Mott'a göre yasak band aralığının ortalarında dengeleyici enerji seviyeleri vardır. Bu seviyeler, amorf yarı-iletkenlerde a.c iletkenliği ve Fermi seviyesinin mihlanmasını açıklamak için önerilmektedir.

### 3.3 ELEMENTEL YARI-İLETKENLER

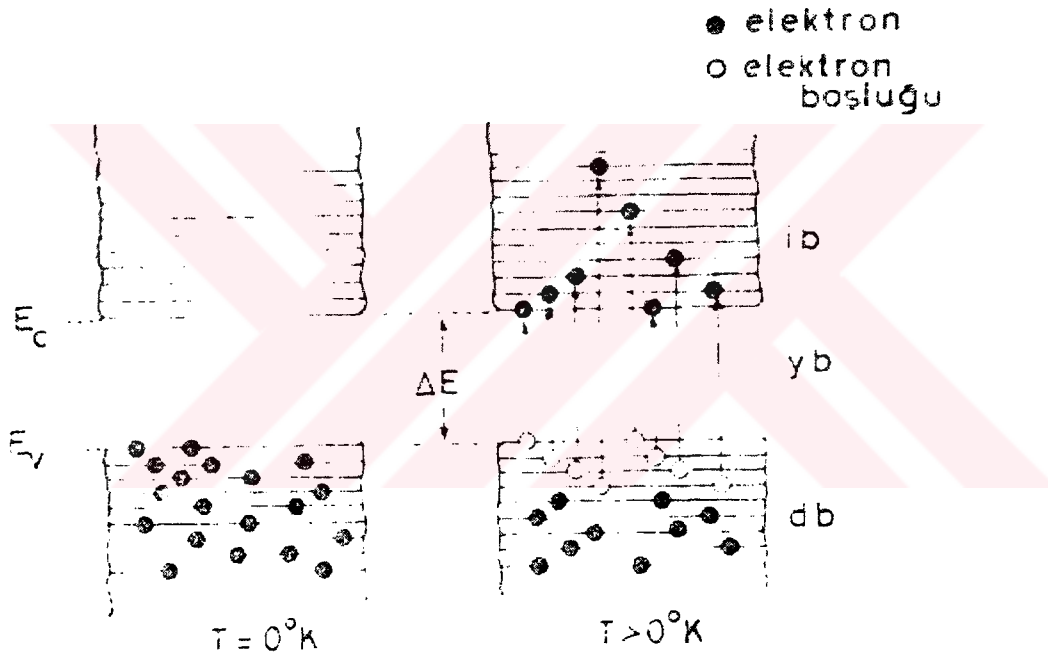
Doğal halde, içinde önemli oranda kimyasal veya kristolografik kusurlar içeren maddelere '*elementel yarı-iletkenler*' denir. Kimyasal bakımdan saf germanyum (Ge), silisyum (Si), selenyum (Se) gibi elementler elementel yarı-iletkenlerdir. Bu sözü edilen elementler periyodik cetvelde ve Tablo 3.3.1'de görüldüğü gibi bir grup oluşturur. Tablo 3.3.1'e dikkatli bir şekilde bakıldığında sol alt kısımdakilerin metal, sağ üsttekilerin ise katı halde yalıtkan olduğu görülür.

B (Z=5)	C (Z=6)			
	Si (Z=14)	P (Z=15)	S (Z=16)	
	Ge (Z=32)	As (Z=33)	Se (Z=34)	
	Sn (Z=50)	Sb (Z=51)	Te (Z=52)	I (Z=53)

Tablo 3.3.1 Elementel yarı-iletkenler.

Elementel yarı-iletkenlerin enerji bandlarının basitleştirilmiş yapısı Şekil 3.3.1'de görülmektedir. Enerji band yapısı şekildeki gibi olan bir yarı-iletken madde  $T = 0K$  de yalıtkan durumda olmasına karşın, sıcaklığın yükselmesi ( $T > 0K$ ) ile termik enerjileri soğuran bir kısım elektronların, iletkenlik bandına (*ib*) geçmeleri sonucunda iletken duruma gelir.  $E_v$  değerlik bandının (*db*) en üst,  $E_c$  ise iletkenlik

bandının (*ib*) en alt enerji düzeylerini,  $\Delta E$  yasak band (*yb*) genişliğini gösterir [3].  $T = 0 K$  de 'değerlik veya valans bandı' tamamen dolu, bundan  $\Delta E$  kadar uzaktaki 'iletkenlik bandı' ise boştur. Bunun sonucu olarak da mutlak sıfır sıcaklığında yalıtkandırlar. Ancak oda sıcaklığında termal olarak uyarılan bir miktar değerlik elektronları iletkenlik bandına çıkacaklardır. Kristale bir elektrik alan uygulanması halinde, iletkenlik bandındaki bu elektronların alan doğrultusunda hareket etmeleri sonucunda da, madde az da olsa iletken duruma gelecektir [3].

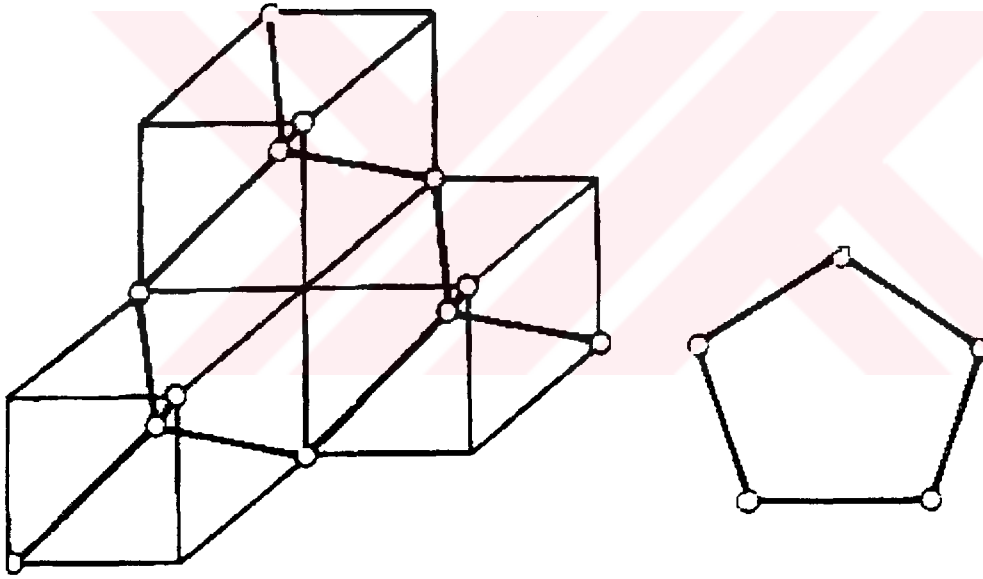


Şekil 3.3.1 Yarı-iletkenlerin enerji bantlarının yapısı.

Yarı-iletkenlerin ortak özelliği, değerlik ve iletkenlik bantlarını birbirinden ayıran yasak enerji bantı aralığının dar oluşudur. Bizim burada materyal olarak kullandığımız germanyum elementi için ( $T = 0K$ ) deki yasak enerji bant genişliği  $\Delta E \approx 0.66 eV$  'tur. Sıcaklık arttıkça, elektronlar değerlik bandından, iletim bandına ısısal olarak uyarılırlar [3].

### 3.4 YAPISISAL ÖZELLİKLER

Amorf Germanyum kısa mesafe düzeninde tetrahedral yapıya sahiptir. Şekil 3.4.1'de en yakın komşu uzaklığı değişmemek koşulu ile germanyumun değişik iki tetrahedral bağlantısı görülmektedir. Şeklin ilk kısmında kristal yapıyı yani elmas yapısını, ikinci kısımda ise düzgün beşken tipi bağlanma görülmektedirki, burada bağlarda  $60^\circ$  lik bir dönme söz konusu olup en yakın komşu ve ikinci komşu uzaklıkları değişmemiş, fakat kristal yapı olan elmastaki altılı halka yerine beşli halka oluşmuştur [6]. Bu beşli halka hemen hemen düzlemsel olup bağlar arası açılar tetrahedral yapıdaki değer olan  $109.5^\circ$ 'ye çok yakındır.



Şekil 3.4.1 Kristal germanyumdaki altılı halka ve amorf yapıda bulunabilecek eşkenar beşken halka

Böylece beşli bir halka oluşturan germanyum atomlarına özgü dalga fonksiyonu çözümleri yerleşmiş durumlara karşılık gelecektir. Değişik boyutlu halkaların doğuracağı yerleşmiş durumlar değişik enerji değerlerine geliş güzel dağılmıştır [2]. Bu yüzden öngörülen amorf yapı modelinde halka istatistiklerinin de göz önüne alınması gereken ölçütlerden biri sayılmalıdır [6].

### 3.5 YAPISAL MODELLER

Tetrahedral amorf meteryalleri ve onların eriyiklerinin yapısını modellemek üzere çok çeşitli görüşler öne sürülmüştür [12].

#### 3.5.1 MİKROKRİSTALİT MODEL

Mikrokristalit modeline göre amorf meteryaller 15–20 Å boyutlarındaki kristal öbeklerinin bol kusurlu bir zar bölgesi ile birbirlerine bağlanmalarından oluşmuştur. Kristal öbekleri kimine göre elmas, kimine göre ‘wurtzite’ yapıda, kimine göre de bu her iki yapının karışımı olan bir yapıda olduğu varsayılmaktadır. Bu modelde amorf meteryaller hidrojenle katkılandırıldığında yapısal bir rahatlama sonucu mikrokristalitler oluşmaktadır. Bu modelin olumsuz yönü ise Radyal Dağılım Fonksiyonundaki üçüncü tepenin amorf yapıda görülmemesi ve diğer tepelerin birinci tepeye göre daha geniş olmasıdır [6].

#### 3.5.2 SÜNGERSİ YAPI (SWISS-CHEESE) MODELİ

Süngersi yapı modeline göre amorf materyal homojen ve sürekli bir yapı olup, içinde ortalama 20Å aralıklarla serpiştirilmiş en az 5Å çapında boşluklar (voidler) olduğu varsayılmaktadır. Böylelikle, kristalin yoğunluğuna oranla amorf yapıda ölçülen % 5–30’luk azalma kolayca açıklanabilmektedir [6].

Atomların düzenli bir yapıya sahip olmaması, atomik bağ uzunluk ve açılarının değişikliklere uğramasına neden olur. Ancak atomların elektronik yapısı bu değişikliklerin gelişigüzel olmasını önler. Eğer komşu atomların birbirine göre geometrik konumu kuantum fiziğinin kabul edebileceği toleranslarda (atomik bağ uzunluğu ve açısı yönünden) bağ yapılmasını olanaksız kılarsa, istenen bağ oluşamaz ve bu atomun bağ sayısı eksik olacaktır. Buna kopuk bağ denir. Boşlukların duvarlarında bulunan kopuk bağlar, bant aralığında yerleşmiş durum oluşturmaktadırlar. Bu kopuk bağların sayısı Elektron Spin Rezonans sinyalinde elde edilen çiftlenmemiş spin yoğunluğuna eşittir. Kopuk bağların sayısına oranla

çok fazla hidrojenin amorf meteryalin ağında barınabilmesi, bu boşluklarla ve kopuk bağ sayısı ile açıklanabilmektedir [13].

### 3.5.3 GELİŞİGÜZEL AĞ MODELİ

İlk olarak Polk [14] tarafından önerilmiş bu modele göre koordinasyon sayısı 4 değerinde, en yakın komşu uzaklığı yada bağ uzunluğu kristaldeki değerinde, bağlar arası açı ideal tetrahedral açı olan  $109^0$ 'den en fazla  $\mp 20^0$  sapabilecek şekilde ve fazla sayıda kopuk bağ olmadan gerçekleştirilebilmiştir. Bu modelde çok miktarda beşli halka bulunduğu, amorf III-V yarı-iletkenlerini açıklayamamakla birlikte tetrahedral bağ yapılı, elemental, kovalent yarı-iletkenleri (germanyum) oldukça iyi modellemektedir. Radyal Dağılım Fonksiyonundaki üçüncü tepenin yokluğu ve ikinci tepenin daha geniş olması Polk modelindeki halka istatistiğinden ve bağlar arasındaki açılardaki küçük değişmelerden kaynaklanmaktadır.

Polk modeli daha sonra geliştirilerek daha büyük yapılar için büyütülmüştür. Buna göre önce her atom dört bağ yapacak biçimde, bağ uzunlukları değişmeyecek ve dihedral açılardaki değişme  $20^0$ 'den büyük olmayacak biçimde atom koordinatları belirlenmekte, daha sonra bu koordinatlar bilgisayara verilerek bir Keating tipi esneklik potansiyeli ile yerel minimuma rahatlatılmaktadır [6].

Gözden geçirilen modeller kullanılarak elektronik özellikler hesaplandığında, bu özelliklerin bir kısmı tatminkar şekilde hesaplanabilmekle beraber hazırlanma koşullarının etkisi kolaylıkla modellere konulamamaktadır [6].

## BÖLÜM 4

### MONTE CARLO SİMÜLASYONU

Monte Carlo tekniği çok büyük sayı setlerinin rasgele örnekleme temeline dayalı bir yöntemdir. Bu yöntemde kullanılan 'Monte Carlo' entegrasyonunun prensibi ele alınan fonksiyonu, noktaların gelişigüzel bir örneklemeinde değerlendirip, bu gelişigüzel örneklemeyle dayanarak integrali tahmin etmektir.

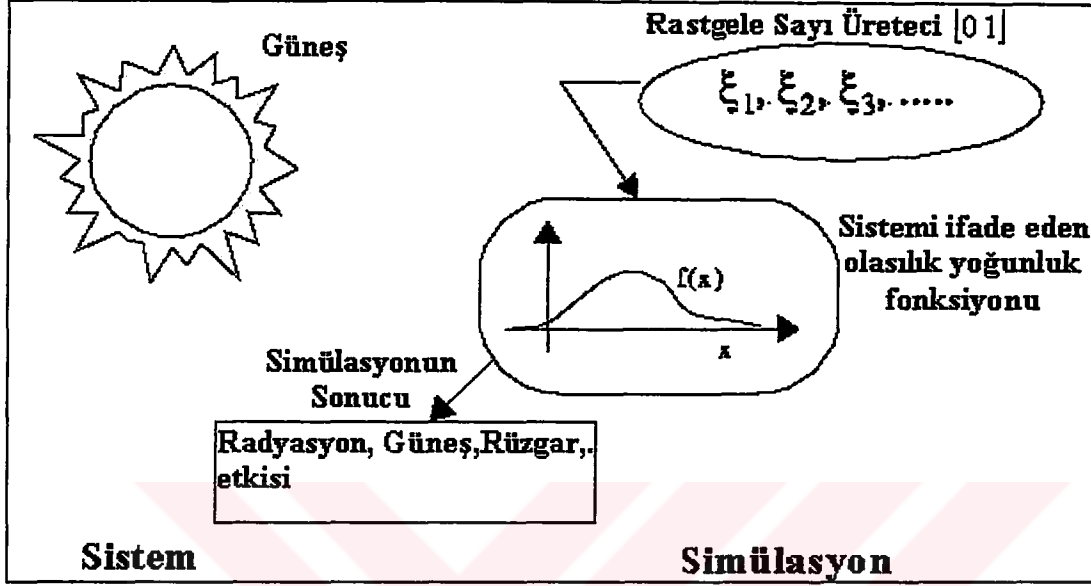
#### 4.1 MONTE CARLO METODU

Monte Carlo metodu herhangi bir sorunu çözmek için gelişigüzel sayılar kullanan bir tekniktir. Monte Carlo metodu olarak bilinen sayısal metodlar istatistiksel benzetme metodları olarak bilinir [15]. Monte Carlo metodu asırlardır bilinmesine ve kullanılmasına karşın, son on yıldan bu yana geliştirilerek, çok daha kompleks problemlere ve uygulamalara yeterli yaklaşıklıkta çözümler üretebilecek düzeye getirilmiştir. Monte Carlo ismi, Monaco'nun başkentinin bir kumar merkezi olmasından ve bu şans oyunlarının sayıların istatistiksel dağılımının benzetiminden dolaydır.

Bugün Monte Carlo metodu, dünya atmosferindeki radyasyon geçişi gibi kompleks fiziksel sınırların ve yüksek enerji fiziği deneylerindeki gizemli alt nükleer işleyişlerin simülasyonunda veya şans oyunlarının simülasyonu gibi eğlendirmeye kadar varan birçok değişik alanlarda sürekli olarak kullanılmaktadır.

İstatistiksel simülasyon metodları, bazı matematiksel ve fiziksel sistemleri tarif eden genel veya kısmi diferansiyel denklemlere uygulanan sayısal mantık metodları olarak tarif edilir. Monte Carlo metodunun bir çok uygulamasında, fiziksel işleyiş doğrudan simüle edilebilir ve sistemin hareketini ifade eden diferansiyel denklemleri yazmaya ihtiyaç duyulmaz. Yalnızca gerekli olan sistemi tarif eden olasılık yoğunluğu fonksiyonunun bilinmesidir. Şekil 4.1.1, Monte Carlo metodunun

bir fiziksel sisteme uygulandığı istatistiksel simülasyonu şematik olarak göstermektedir.



Şekil 4.1.1 Fiziksel Sistemdeki Monte Carlo Metodu.

Bir fiziksel sistemin gelişiminin olasılık yoğunlukları ile tarif edilebileceği düşünülürse, Monte Carlo simülasyonun işleyişi bunlardan örnekleme yoluyla çözüme ulaşmaktır. Problem üzerine bütün olarak dağıtılan rastgele sayıları üretmek için, hızlı ve etkili bir yöntem gerekmektedir. Bu rastgele örneklemlerin ve kararların sonuçları istenen problemin sonucunu üretmek için uygun bir yöntem ve kararlılıkta artırılarak birbirleriyle ilişkilendirilmelidir [16]. Monte Carlo metodunun önemli karakteristiği, fiziksel problemin bir çözümüne ulaşmak için rastgele örnekleme tekniğini de kullanmasıdır. Diğer yandan uygun bir sayısal çözümün elde edilmesi fiziksel sistemin bilinmeyen durumları için diferansiyel denklemlerin çözümünün yapılarak sistemin matematiksel modeli ile başlar.

Monte Carlo metodu rastgele veya stokastik işlemleri simüle ederken bu durum gerçekte sınırlıdır. Çünkü birçok Monte Carlo uygulaması lineer denklemler sisteminin tersi veya sınırlı bir integralin sonucu gibi stokastik içerik görünümüne sahip değildir. Tablo 4.1.1, Monte Carlo metodunun kullanıldığı istatistiksel



simülasyon tekniklerinin değişik uygulama alanlarının bazılarını göstermektedir. Görüldüğü gibi uygulamaların genişliği evrensel yapılanmanın simülasyonundan, lineer denklem sistemlerinin çözümüne kadar geniş bir alanı oluşturur. [15].

<b><i>Nükleer reaktör dizaynı</i></b>
<b><i>Radyasyonla kanser tedavisi</i></b>
<b><i>Trafik akışı</i></b>
<b><i>Yıldızların gelişimi</i></b>
<b><i>Ekonometri</i></b>
<b><i>Borsa tahminleri</i></b>
<b><i>Petrol aramaları</i></b>
<b><i>VLSI dizaynı, ve diğerleri.</i></b>

Tablo 4.1.1 Monte Carlo Metodunun Bazı Uygulama Alanları.

#### 4.2 RASTGELE-SAYI ÜRETECİ

Monte Carlo metodunda kullanılan rastgele sayıların sıralanması torbadan numara çekme veya zar atma gibi bazı rastgele işlemlerle üretilebilir. Pratikte Monte Carlo hesaplaması için bilgisayar kullandığımız zaman genellikle rastgele sayıların üretilmesini bilgisayara yaptırırız. İyi tanımlanmış bir aritmetik prosedüre göre üretilen sayıların gerçek rastgele gibi düşünülemediği açıktır. Bu nedenle bilgisayarın ürettiği bu sayıları rastgelemsi (pseudorandom) olarak isimlendirebiliriz.

Bir çok methodla rastgele sayıların bir sıralamasını elde etmek mümkündür. Sıralamadaki herbir numara kendisinden sonra gelecek numarayı bulmak için bazı aritmetik prosedürler kullanır. Böylelikle bütün sıralama ilk numarayı vermekle tayin edilir. Bilgisayar üzerindeki rastgele sayıları üreten aritmetik prosedürün, bazı

numaralardan sonra kendini tekrar eden bir sıralama da oluşturabilir. En yaygın aritmetik işlemlerden biri olan ve bu çalışmada da kullanılan yöntem şöyledir:

$$X_n = C \bmod(X_{n-1}, N),$$

Burada tekrarlanma periyodunun mümkün olduğu kadar büyük olması tercih edilir. Periyodu artıran koşullar ise, (i)  $N$  değerinin büyük olması (kullandığımız 32 bitlik makineye bağlı olarak maksimum değer olan  $2^{32-1}$  seçildi), (ii) başlangıç değerinin büyükçe ve tek sayı olması (periyodu iki katı artırmaktadır,  $x_0=123457$  değeri kullanıldı), (iii)  $C=8m\pm 3$ ,  $m$ =pozitif tamsayı olmasıdır ( $C=16803$  değeri kullanıldı).

#### 4.3 AMORF GERMANYUMUN BÜYÜTÜLMESİNİN BİLGİSAYAR MODELLENMESİ

Amorf maddelerin yapısal özelliklerini anlamak için geliştirilen birçok model vardır. Bunlardan bazıları, atomlar arası potansiyelleri Monte Carlo veya Moleküler Dinamik metodlarıyla beraberce kullanırken, bazıları enerji minimizasyonu tekniklerini kullanır. Bazı modeller ise kısa mesafe düzeninin belirli özelliklerine dayandırılmıştır [17]. Kolaylık açısından bu yaklaşımları yapısal ve potansiyel modeller olmak üzere iki ayrı grupta düşünmek mümkündür.

Bu çalışmada, germanyum atomlarının amorf yapıyı oluşturmak için teker teker bir taban kristal yüzeye yerleştirilmesini simüle eden ve Monte Carlo metodunu kullanan bir bilgisayar modellemesi oluşturuldu. Buna bağlı olarak büyüyen film atomlarının oluşturduğu kümeler istatistiksel analiz yapılabilecek kadar büyük olduğunda radyal dağılım fonksiyonları hesaplandı.

Monte Carlo Simülasyonu, termal dengedeki bir atomik sistemin en olası konfigürasyonunu elde etmek için düzenlenmiş rastgele sayı setlerini kullanan bir metodudur. Bu denge koşulları [18] herbir basamakta sağlanarak atomların rastgele hareket ettirilmeleriyle elde edilmiştir [6]. Büyütmenin modellenmesinde kullandığımız Monte Carlo metodunun uygulanması sonucu elde edilen yapıdaki

atomların konumlarının kesinliđi yada inandırıcılıđı atomların hareket etme (Monte Carlo adımı) sayılarına bađlıdır. Taban yüzeyine yeni bir atom yerleřtirilmeden bařka bir atom gönderilmemelidir. Buna bađlı olarak kullanılan Monte Carlo Simülasyon modelinde, büyüyen kristal yüzeye tutunmuř atomların ve bunlara bađlanan yeni gelen atomların denge konumlarına ulařıncaya kadarki hareket ettirme sayısı, büyüyen filmin yapısının oluřturulmasında oldukça etkili bir deđiřken olarak kullanılmıřtır.

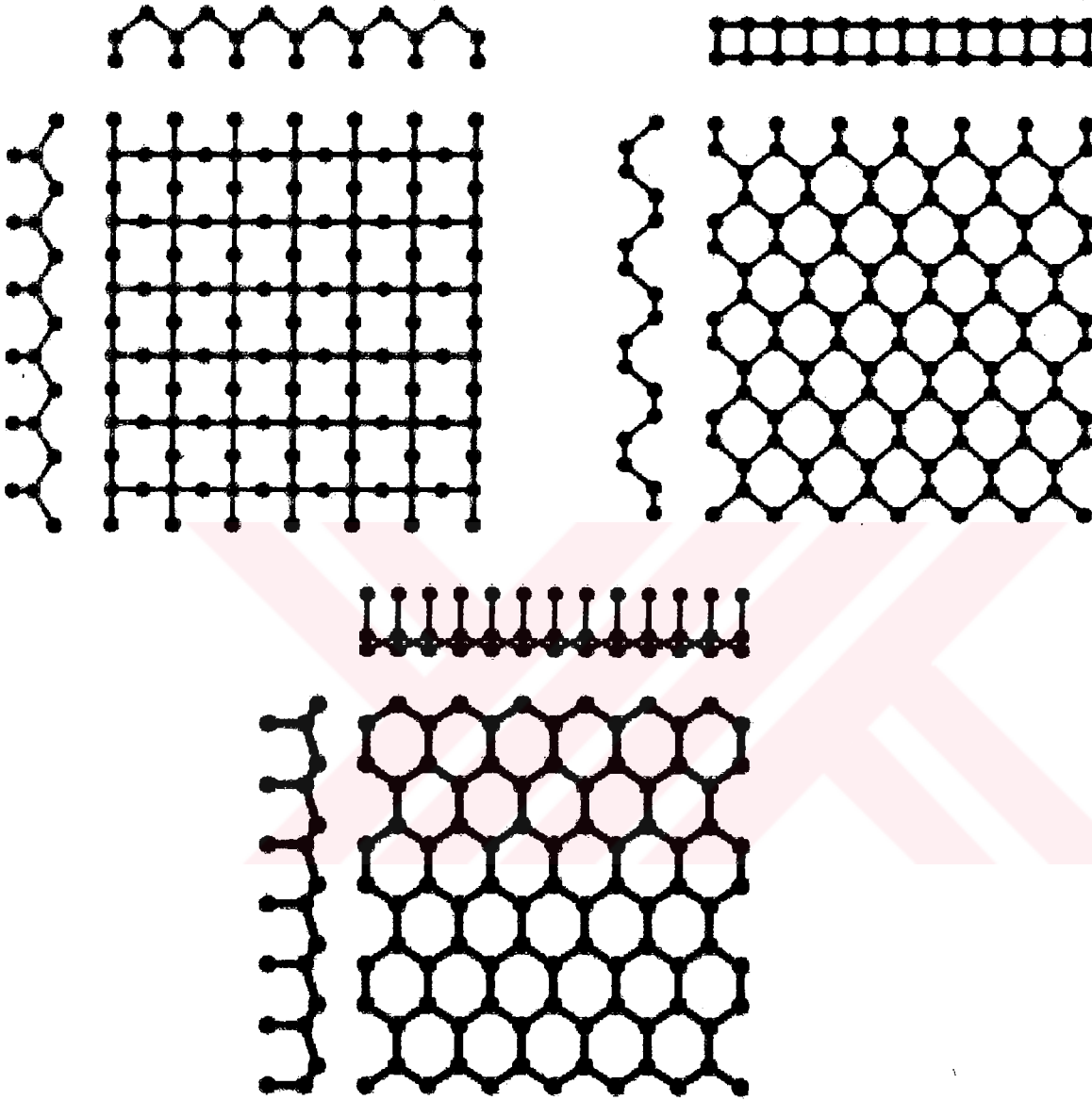
Amorf filmin büyüdüđü taban kristalinin atomları ve bu atomlar arasındaki bađ iliřkileri ile ilgili bilgiler bir veri tabanında bulunmaktadır. Büyüme modeli yapılırken bařlangıçta, bir dizi taban (alttař) atomunun koordinatları veri tabanından alınır, ardından yeni bir atom rastgele sečililen bir noktaya yaklařtırılır. Atomun oturabileceđi koordinatlar, çevresindeki diđer atomların potansiyellerinin etkisi ile belirlenmektedir. Dolayısı ile atomun yüzey üzerindeki denge konumuna yaklařana kadar yaptıđı Monte Carlo adımı, bulunduđu nokta civarındaki potansiyellerce yönlendirilir. Bu řekilde arka arkaya yüzeye ve birbirleri ile bađ yapan atomlar filmi oluřtururlar.

Yapılan simülasyon iřlemlerinin sırası ařađıdaki gibi özetlenebilir:

1. Taban kristalinin yüzey tipine karar verilir. Bunlar 108 atomdan oluřan 3 katmanlı (100) ve (111) yüzeyli tabanlarla (alttařlarla), 96 atomdan oluřan 2 katmanlı (110) yüzeyli taban olup, yandan, önden ve yukarıdan görünüřleri řekil 4.3.1'de verilmiřtir.
2. Yeni bir atomun x ve y koordinatları rastgele seçilir.
3. Bu atomun merkezinde bulunduđu ve bađ uzunluđundan daha büyükçe yarıçaplı bir silindirin içinde bulunabilecek, yüzeydeki veya diđer atomların en yukarıda olanı bulunur. Yeni atomun z-koordinatı buna bađ yapacak řekilde seçilir.

4. Seçilen atomun bulunduğu noktadaki kristalin yarattığı potansiyel dolayısıyla atoma etki eden toplam kuvvet hesaplanır. (Eşitlik 5.3.1)
5. Herbir yönde hareket miktarı, net kuvvetin bileşkesi ile seçilen rastgele sayıya bağlı olarak hesaplanır. (Eşitlik 4.3.1)
6. Seçilen atom yeni konumuna göre aynı şekilde defalarca (Monte Carlo adımı sayısı) hareket ettirilerek denge durumuna yaklaşması sağlanır.
7. Filmde daha önce bağ yapmış 'eski' atomlardan biri rastgele seçilir. 4, 5 ve 6 ıncı adımdaki işlemler yapılır.
8. Adım 7, varolan film atomları sayısının Monte Carlo adımı sayısı ile çarpımı kadar tekrar edilir.
9. Adım 1'e dönülerek yeni bir atom seçilir.

Bu çalışmada taban kristalleri üzerine 108 atomdan oluşan 3 katmanlı (100) ve (111) yüzeyli tabanlarla (alttaşlarla), 96 atomdan oluşan 2 katmanlı (110) yüzeyli bölgeler üzerine, her deney için aynı olmak üzere 300 atom biriktirildi. Taban atomları donmuş kabul edildi, taban atomların radyal dağılım fonksiyonları referans olarak çizilerek büyüyen germanyumun radyal dağılım fonksiyonları taban atomlarından bağımsız olarak aynı grafik üzerine çizildi. Dolayısı ile taban atomları bu çalışmalarda sadece yüzey simetrisini dikte ettirmiş oldu. Ayrıca  $x$  ve  $y$  yönlerinde periyodik sınır koşulları kullanılarak, sonlu küçük bir örnek yerine, süperhücre anlayışı içinde sonsuz bir yapı büyütülmüş oldu. Periyodik sınır koşulları radyal dağılım fonksiyonu hesaplarına da katıldı.



Şekil 4.3.1 Kiristal Germanyumun (100), (110) ve (111) simetri yüzeyleri üzerindeki atomların pozisyonu.

Büyüme simülasyonunun 5'inci basamakta anlatılan, rastgele sayıya bağlı olarak herbir yönde hareket ettirme miktarı için seçilen  $i$ 'inci atomun yeni konum vektörü aşağıdaki gibi olsun:

$$\vec{r}_i' = \vec{r}_i + \vec{\delta}$$

Yerdeğiştirme vektörü  $\vec{\delta}$ 'nin  $\nu$ 'üncü bileşeni aşağıdaki formülle ifade edilir [6]:

$$\delta_\nu = -\frac{2k_B T}{F_\nu} \ln \left[ \frac{1}{x} + \left( x - \frac{1}{x} \right) R \right] \quad (4.3.1)$$

Burada,

$$x = e^{|\gamma|} \quad \text{ve} \quad \gamma = \frac{\varepsilon F_\nu}{2k_B T}$$

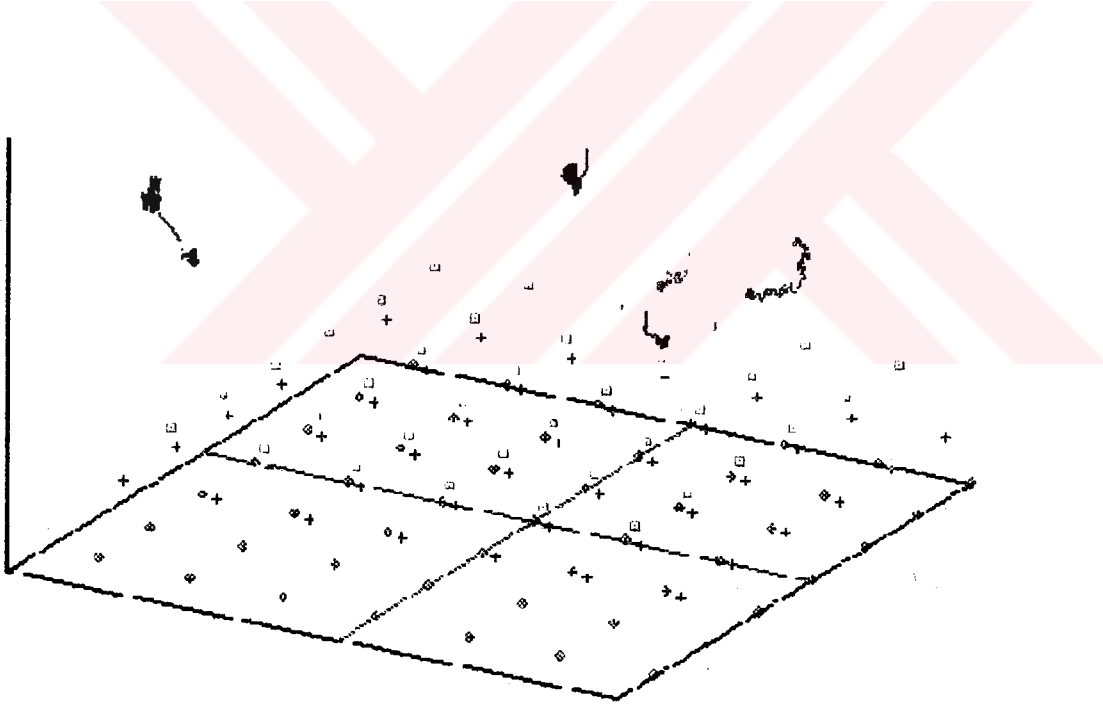
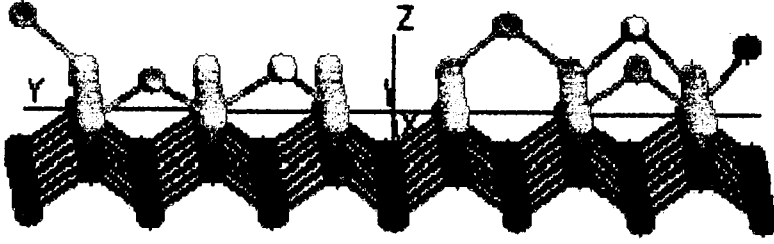
olup,  $F_\nu$ ,  $i$ 'inci atoma etkiyen kuvvetin  $\nu$ 'üncü bileşeni,  $k_B$  Boltzman sabiti, T, Kelvin cinsinden sıcaklık, R, 0 ile 1 arasında üretilen rastgele sayılar, ve  $\varepsilon$  ise Monte Carlo adımının miktarıdır.  $i$ 'inci atomun seçilen herhangi bir yönde ilerleyebileceği maksimum mesafeyi verir.

Eşitlik (4.3.1)'den de kolayca görülebileceği gibi yerdeğiştirme vektörü  $\delta_\nu$ 'nün değeri, R=1 için  $-\varepsilon$  sonucunu, R=0 değeri için ise  $+\varepsilon$  sonucunu verecektir.

Diğer taraftan R'nin rastgele değerleri için

$$|\delta_\nu| \leq \varepsilon$$

olup,  $i$ 'inci atom, seçilen herhangi bir yönde en fazla  $\varepsilon$  kadar ilerleyebilecektir.



Şekil 4.3.2 Taban kristal yüzeye eklenen atom sayısının 8 olduğunda taban yüzeye yerleştirilen atomların hareketleri.

Dolayısıyla  $\delta_v$ ;

$$\delta_v = -\frac{\varepsilon}{\gamma} \ln \left[ e^{-|\gamma|} + \left( e^{|\gamma|} - e^{-|\gamma|} \right) R \right] \quad (4.3.2)$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \delta_v = (1 - 2R)\varepsilon$$

Bu durumda, yani yüksek sıcaklıklarda veya zayıf kuvvetler altında  $i$ 'inci atomun hareketi rastgeledir. Diğer limitte:

$$\lim_{|\gamma| \rightarrow \infty} \delta_v = \pm \varepsilon$$

olması durumunda, yani düşük sıcaklıklarda veya büyük kuvvetlerde ise hareket, net kuvvet yönündedir ve maksimum yerdeğiştirme olan  $\varepsilon$ 'a yaklaşır.

$\delta_v$ 'nin, olasılık yoğunluk fonksiyonu  $[-\varepsilon, \varepsilon]$  aralığında exponansiyel olarak tanımlanmıştır, seçilen küçük  $\varepsilon$  değeri için  $F_v$  kuvveti  $\varepsilon$  uzaklığı içinde farkedilebilir bir şekilde değişmeyecektir.  $\varepsilon$ 'dan küçük mesafeler için iki atomun konumları arasındaki karşılıklı geçiş olasılıkları  $e^{-\frac{\Delta\phi}{kT}}$  dir. Burada  $\Delta\phi$  iki konum arasındaki geçişten kaynaklanan enerjideki değişimdir. Böylece bu geçiş olasılıkları detaylı denge şartlarını sağlar. Bütün bunlar eşitlik (4.3.4)'te açıkça ifade edilmiştir.

$$\delta_v = -\varepsilon \frac{\ln \left[ \frac{1}{x} + \left( x - \frac{1}{x} \right) R_\delta \right]}{\ln x} \quad (4.3.3)$$

Bu denklemin  $R_\delta$  için çözümü;



$$R_{\delta} = \frac{1}{\left(x - \frac{1}{x}\right)} \left( e^{-\frac{\ln x}{\varepsilon} \delta_v} - \frac{1}{x} \right) = \frac{x^{1+\delta/\varepsilon} - 1}{x^2 - 1} \quad (4.3.4)$$

$\vec{r}'_i \rightarrow \vec{r}_i + \vec{\delta}$  hareketi için geçiş olasılığı,

$$\Delta R_{\delta} = -\frac{x \ln x}{(x^2 - 1)} e^{-\frac{\delta_v}{\varepsilon} \ln x} \frac{\Delta \delta_v}{\varepsilon}. \quad (4.3.5)$$

Diğer taraftan  $\vec{r}'_i \rightarrow \vec{r}_i - \vec{\delta}$  hareketi için geçiş olasılığı,

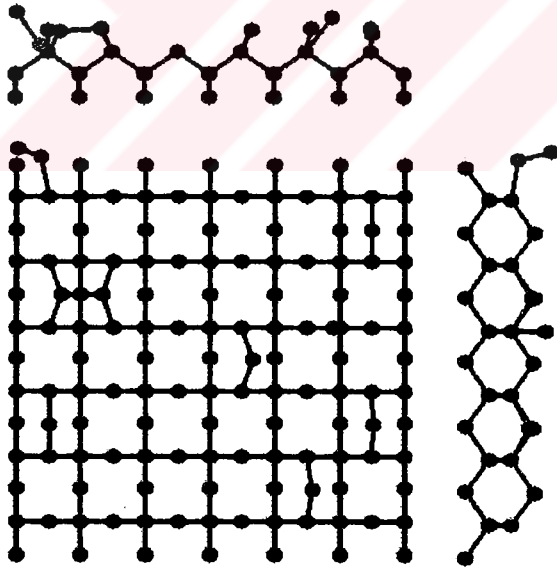
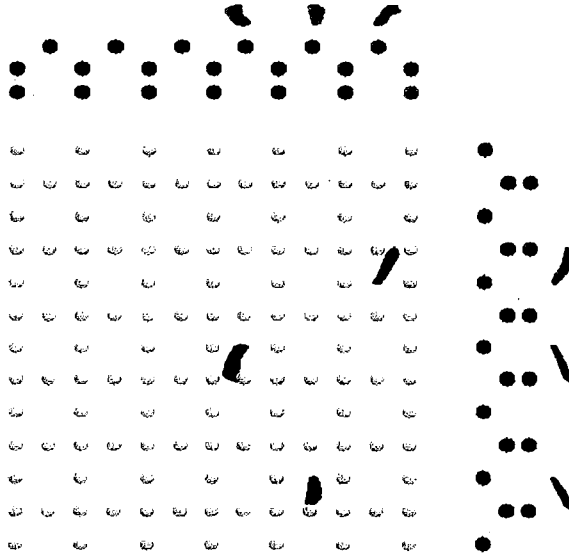
$$\Delta R_{-\delta} = -\frac{x \ln x}{(x^2 - 1)} e^{+\frac{\delta_v}{\varepsilon} \ln x} \frac{\Delta \delta_v}{\varepsilon} \quad (4.3.6)$$

biçiminde verilir. Böylece iki konum arası geçiş olasılıklarının oranı,

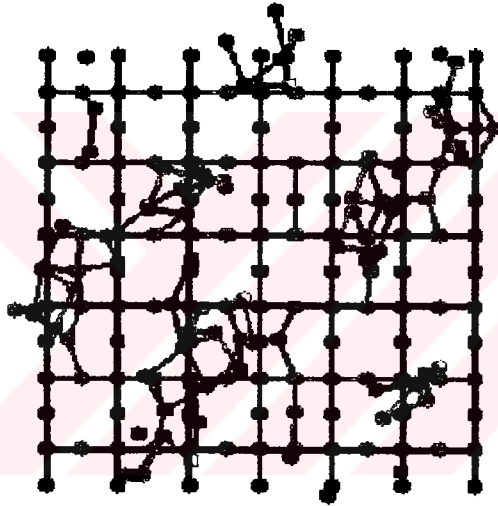
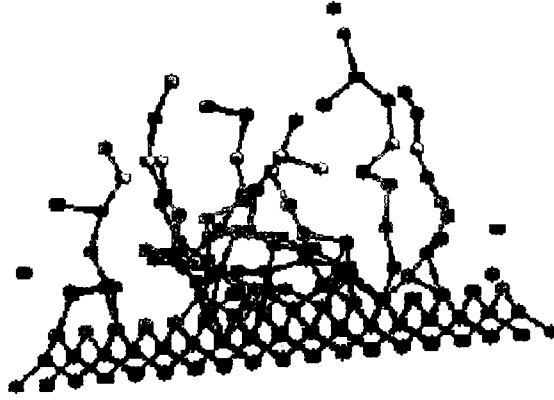
$$\frac{\Delta R_{\delta}}{\Delta R_{-\delta}} = e^{-\frac{F_v \delta_v}{k_B T}} = e^{-\frac{\Delta \phi}{k_B T}}. \quad (4.3.7)$$

Yukarıdaki süreç seçilen bir sayı kadar enerjileri  $e^{-\frac{\Delta \phi}{k_B T}}$  dağılımına uygun atom grupları oluşturmak için tekrarlanır. Kullanılan bu Monte Carlo yöntemi klasik Metropolis tekniğinden önemli ölçüde farklılık göstermektedir. Metropolis tekniğinde pozisyon rastgele değiştirildiğinde sistemin enerjisi azalmışsa yeni pozisyon 1/1 olasılıkla kabul edilir, eğer enerji artmışsa olasılık  $e^{-\frac{\Delta \phi}{k_B T}}$  fonksiyonu ile hesaplanır. Dolayısı ile kullandığımız yöntem [6], hem daha simetriktir, hem de bir sonraki alacağı pozisyonu sadece rastgele değil, kuvvetlerin de etkisini katarak önermektedir.

Şekil 4.3.3 taban kristal yüzeye eklenen atom sayısının 3 ve 9 olması durumunda ki oluşan konfigürasyonu göstermektedir.



Şekil 4.3.3 Taban kristal yüzeye eklenen atom sayısının 3 ve 9 olduğunda atomların taban yüzeye yaptıkları bağlar.



Şekil 4.3.4 Büyütmeye başladıktan sonra, taban kristal yüzeye eklenen atom sayısının 90 olduğu andaki bu atomların taban yüzeye yaptığı bağlarla oluşan konfigürasyon.

Atomlar genellikle düşük enerjili, dolayısı ile daha kararlı yapı oluşturma eğilimi gösterirler. Mutlak sıfır sıcaklığında atomlar durgun haldedir, kinetik enerjileri sıfır ve potansiyel enerjileri minimumdur. Isıl enerji verilerek sıcaklık artırılırsa atomlar denge konumları civarında titreşmeye başlarlar, dolayısıyla atomlar arası uzaklık değişeceğinden tabanın potansiyel fonksiyonu da değişecektir. Buna bağlı olarak, kullanılan Monte Carlo Simülasyon modelinde, taban sıcaklığında yapının oluşmasında önemli etkisi olan bir değişken olarak kullanılmıştır.

## BÖLÜM 5

### ATOMLAR ARASI POTANSİYELLER

Amorf germanyumun ince film biçiminde büyütülmesi sırasında, filmi oluşturan atom ve moleküllerin büyüme yüzeyi ve birbirleriyle yaptıkları bağlar, yapıya uygun seçilen potansiyellere bağlı olarak değişmektedir. Bunun sonucu olarak büyütmede kullanılan potansiyel fonksiyonlarının önemi büyüktür. Bu potansiyel fonksiyonlarından bazıları aşağıda tanımlanmıştır.

#### 5.1 LENNARD-JONES POTANSİYELİ

N atomlu bir sistemin toplam potansiyel enerjisinin en genelleştirilmiş hali;

$$\phi = \sum_{i=1}^N U_1(\vec{r}_i) + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \frac{1}{3!} \sum_{\substack{i,j,k \\ i \neq j \neq k}} U_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots \quad (5.1.1)$$

biçimindedir. Burada  $\vec{r}_i$   $i$ 'inci atomun konum vektörünü gösterir.  $U_1$  fonksiyonu tek cisim etkileşmelerini verir ve genellikle sistemin etkisi altında olduğu yüzey etkileri ve dış kuvvetleri tarif eder.  $U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ ,  $U_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$ , ... fonksiyonları sırasıyla iki ve üç cisim etkileşimleri tarif eder. Bizim kullandığımız bu modelde iki ve üç cisim etkileşimlerini ele aldık ve toplam potansiyel enerji için yazdığımız fonksiyondaki daha yüksek terimleri ihmal ettik.

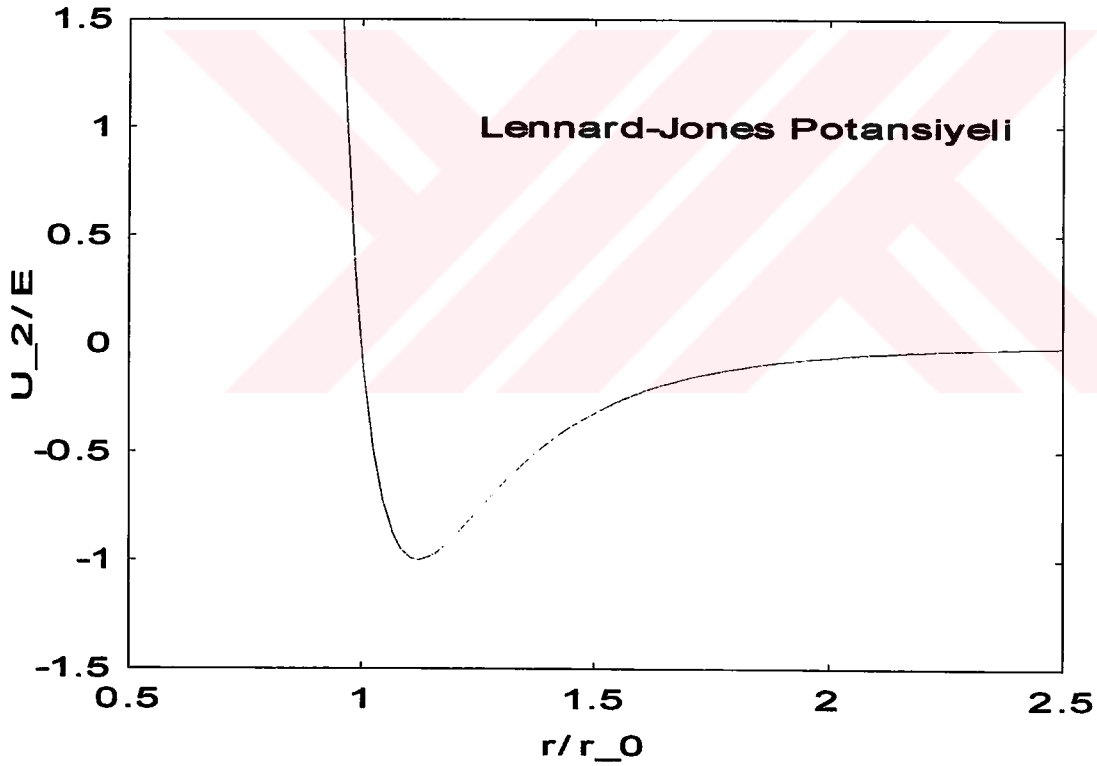
Matematiksel olarak iki cisim etkileşmesini en basit ve genel bir biçimde, Mie tipi [19] bir potansiyel ile ifade edebiliriz:

$$U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = E_0 \left[ \frac{n}{m-n} \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^m - \frac{m}{m-n} \left( \frac{r_0}{r_{ji}} \right)^n \right] \quad m > n \quad (5.1.2)$$

Burada  $|\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ ; i'inci atomdan j'inci atoma giden yer vektörünü gösterir. Denklem 5.1.2'deki ikinci terim kısa mesafelerde potansiyele fazla etkili olacak bir katkıda bulunmaz iken, ilk terim daha baskın olacak ve kısa mesafede uzaklaştırıcı etki sağlayacaktır. İki cisim potansiyeline en bilinen örnek, Mie potansiyelinin  $m=12$  ve  $n=6$  değerlerine karşılık gelen Lennard-Jones potansiyelidir:

$$U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = 4 E_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (5.1.3)$$

Ancak burada,  $r_0$  parametresi  $2^{1/6} \approx 1.122462$  ile ölçeklenmiştir. Şekil 5.1.1'de Lennard-Jones potansiyeli görülmektedir.



Şekil 5.1.1 Lennard-Jones potansiyeli.

Lennard-Jones potansiyeli için enerji parametresini  $E_0 = 2.817 \text{ eV}$ , ve iki cisim yapı parametresini de  $r_0 = 2.2951 \text{ \AA}$  alırız. Bu parametreler, Pearson, v.d.

tarafından katı silisyum bulk ve silisyum atom öbekleri için deneysel verilerle uyum içinde bulunmuştur [19].

## 5.2 AXILORD-TELLER POTANSİYELİ

Silisyum ve germanyum gibi kovalent materyaller için iki cisim etkileşmesini içeren potansiyel ifadesi tek başına yeterli değildir. Bu durum sadece kristal değil amorf yapıda da bulunduğu bilinen tetrahedral yapıyı elde etmekte önemli bir rol oynayan üç cisim etkileşmelerini gerektirmektedir [20]. Axilrod-Teller potansiyeli en genel şekilde ifade edilirse:

$$\Phi = \Phi_2 + \Phi_3 \quad (5.2.1)$$

$$\Phi = \sum_{i < j} U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i < j < k} U_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$$

biçiminde olacaktır. Burada iki cisim etkileşmesi için gerekli olan terimin açık ifadesi,

$$U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = E_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (5.2.2)$$

ile verilir. Bu ise Eşitlik (5.1.1) ile verilen Mie potansiyelinin  $m=12$  ve  $n=6$  durumuna karşılık gelir. Ancak,  $r' = r / 2^{1/6}$  koordinat dönüşümü yapılmış hali ile,  $U_{AT}(r') = U_{LJ}(r)$ , Lennard-Jones potansiyelinden farkı yoktur.

Üç cisim etkileşmesini içeren potansiyel Pearson [19] tarafından verildiği gibi Axilrod-Teller'in önerdiği üç kat, iki kutuplu bir potansiyel etkileşimi, denklem (5.2.3)'deki gibidir [19].

$$U_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = Z \frac{1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k}{(r_{ij} r_{jk} r_{ki})^3} \quad (5.2.3)$$

Burada üç cisim etkileşmesinin yoğunluk parametresi silisyum için  $Z=3484.0$  eV  $\text{\AA}^9$  dur.  $\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik}, \vec{r}_{ki}$ ; i, j, k ile adlandırılmış ve atomlar tarafından oluşturulmuş üçgenin kenarlarıdır.  $\theta_i, \theta_j, \theta_k$  ise bu kenarlar arasında kalan açıları gösterir. Yukarıdaki üç cisim potansiyeli basit bir analitik forma sahiptir.

### 5.3 STILLINGER-WEBER POTANSİYELİ

Stillinger-Weber potansiyeli germanyum için atomlar arası iki cisim ve üç cisim potansiyellerinin bir kombinasyonudur. İki cisim potansiyeli iki atom arasındaki kimyasal bağların oluşumunu tanımlarken, üç cisim potansiyeli aynı tipte iki atomun oluşturduğu iki bağ arasındaki açının yapısıyla ilgilidir.

Germanyumun ve silisyum'un yapısal benzerliklerinden dolayı germanyum atomları arasındaki karşılıklı etkileşmelerin silisyumunkine benzer olduğunu beklemek mümkündür [21].

Stillinger-Weber tipi potansiyelin en genel biçimi aşağıdaki gibi verilir:

$$\Phi(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = E_0 \sum_y f_2\left(\frac{\vec{r}_{ij}}{\sigma}\right) + E_0 \sum_{ijk} f_3\left(\frac{\vec{r}_{ij}}{\sigma}, \frac{\vec{r}_{jk}}{\sigma}, \frac{\vec{r}_{ki}}{\sigma}\right) \quad (5.3.1)$$

Burada iki cisim etkileşmeleri aşağıdaki forma sahiptir:

$$f_2(r) = \begin{cases} A e^{\sigma \cdot (r-a)} [B r^{-p} - r^{-q}] & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases} \quad (5.3.3)$$

Burada  $\vec{r}_{ij}$  ile tanımlanan vektörel nicelik  $|\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ 'dir. Kristalin bağlanma (cohesive) enerjisinde minimuma ulaşan  $f_2$ 'nin  $-1$  değerini alması için  $\varepsilon$  parametresi uygun biçimde seçilir.

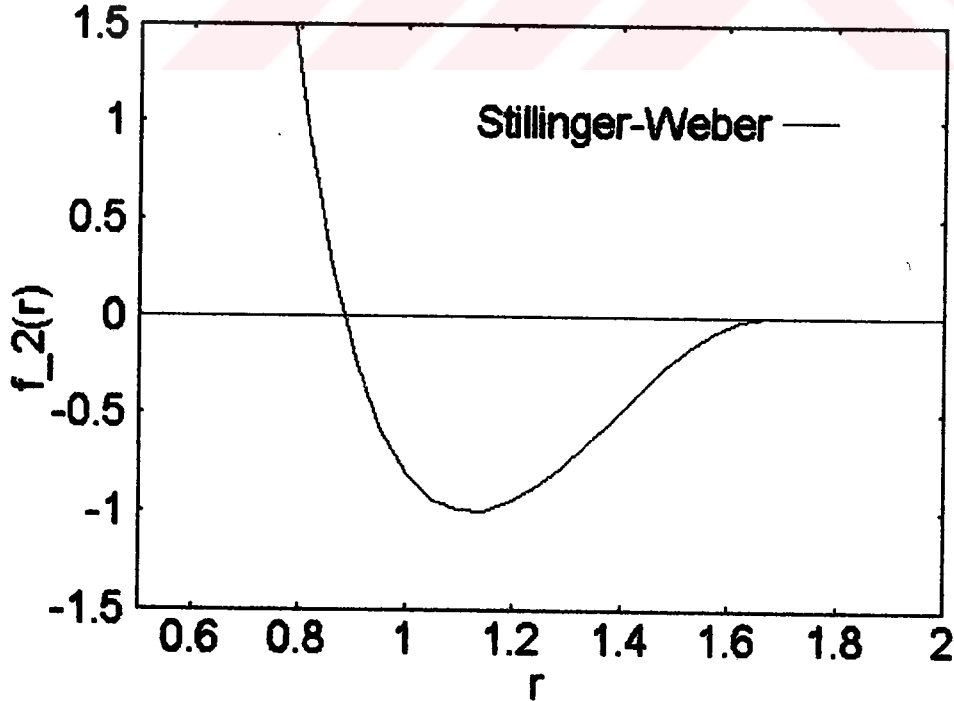
Diğer taraftan üç cisim etkileşiminin açık formu ise aşağıdaki gibidir:

$$f_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj}) \quad (5.3.5)$$

biçiminde yazıldığında herbir terim

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \lambda e^{\gamma(r_{ij}-a)} e^{\gamma(r_{ik}-a)} \left( \cos \theta_{jik} + \frac{1}{3} \right)^2, \quad \lambda > 0 \quad (5.3.6)$$

ifadesi ile tanımlanır. Burada,  $\theta_{jik}$ ,  $i$  atomunun  $j$  ve  $k$  atomları ile yapmış olduğu bağlar arasındaki açıdır. Üç cisim etkileşimindeki son çarpan  $\cos \theta$ 'yu  $-1/3$  değerine yani tetrahedral açı  $\theta = 109.5^\circ$  değerini almasına zorlayacaktır. Stillinger-Weber tipi potansiyelde  $a$  parametresi, birinci en yakın komşu ile ikinci en yakın komşu atomlar arasındaki mesafede kesilsin diye seçilir. Şekil 5.3.1'de Stillinger-Weber potansiyelinde iki cisim etkileşiminin atomlar arası uzaklıkla nasıl değiştiği gösterilmektedir.



Şekil 5.3.1 Stillinger-Weber potansiyeli.



$\varepsilon, \sigma, \lambda, A, B, p, q, \gamma, \delta, b, a$ , Stillinger-Weber potansiyelinin parametreleridir. Bu potansiyel parametrelerinin deęerleri, Ding ve Andersen'nin germanyum için yaptığı Moleküler Dinamik çalışmasından alınmıştır [22]. Bu parametrelerin deęerleri Tablo 5.3.1'de gösterilmektedir.

Germanyum	
Parametreler	Referans [22]
A	7.049556277
B	0.6022245584
$\varepsilon$ (e V)	1.9300
$\sigma$ (Å)	2.1810
$\lambda$	31.0
$a$	1.80
p	4
q	0
$\gamma$	1.20

Tablo 5.3.1 Stillinger-Weber potansiyelinin germanyum için parametreleri.

Germanyumun üç fazını da iyi bir şekilde tanımlayacak potansiyel parametrelerinin bulunamadığı bildirilen çalışmada elde edilen bu parametrelerin, kristal ve amorf germanyum için iyi sonuç verdiği görülmüştür. Ding ve Andersen'un parametreleri bu çalışmada aynen kullanılmakla birlikte, iki önemli konuda farklı yaklaşmıştır. Bunlardan birisi yöntem farkı olup, Moleküler Dinamik simülasyonu yerine Monte Carlo simülasyonu yapılmasıdır. İkincisi ise amorf germanyum büyütme koşullarının seçimindedir: Ding ve Andersen küp şeklinde bir

kristal örneđi ile bařlayıp, atomları deney kořullarına uygun sıcaklık ve benzeri deđerlerde titreřmeye bırakarak amorf yapı elde etmiřlerdir. Diđer taraftan bu alıřmada ise, gerek amorf yapı bytme deneylerinde olduđu gibi, sođuk bir tabana (alttařa) buhardan biriktirme yolu ile amorf yapıya ulařmak amalanmıřtır.

Germanyum iin kullanılan iki cisim potansiyel parametreleri, enerji ve uzunluk ölekleri dıřında, silisyum iin kullanılan Stillinger-Weber potansiyelinin parametreleriyle aynıdır.  cisim etkileřmesinin indirgenmiř gerilimi  $\lambda$  ile gsterilir [23]. Germanyum iin kullanılan bu model parametre silisyum iin kullanılan Stillinger-Weber parametre deđerinden daha byktr.



## BÖLÜM 6

### HESAPLAMALAR VE SONUÇLARIN TARTIŞILMASI

Bu çalışmada sırasıyla ince filmin büyüdüğü taban kristalin yönlenmesi, büyütülen ince filmdeki atomları hareket ettirme sayıları, büyüme yüzeyinin sıcaklığı ve Monte Carlo adımı büyümeyi etkileyen değişkenler olarak ele alındı. Aynı zamanda ince filmin büyütülmesi sırasında, filmi oluşturan atom ve moleküllerin büyüme yüzeyi ve birbirleriyle yaptıkları bağlar, kullanılan potansiyel fonksiyonuna da bağlı olduğundan, seçilen özel potansiyel fonksiyonu ile bilgisayar ortamında büyütme işlemi yapıldı.

Taban kristal germanyum atomlarının (100), (110) ve (111) düzlemleri üzerinde büyütme işlemi yapılmıştır. Büyütülen kristal yüzeye yerleşmiş atomların ve yeni gelen atomların denge konumlarına ulaşmaya kadarki hareket ettirme sayıları (Monte Carlo adım sayısı) 10, 50, 100, 1000 ve 5000 adım olarak seçilerek büyüyen filmin yapısının oluşturulmasında değişken olarak kullanılmıştır. Büyüme esnasında sıcaklık parametresi için 100K, 300K, 600K, 900K ve 1300K alındı. Monte Carlo adımı olarak 0.05, 0.10, 0.15 ve 0.20 Å değerleri için büyütme yapıldı.

Programaya eklenen periyodik sınır şartları kullanılarak büyütülen her bir ince film için radyal dağılım fonksiyonları değişik parametre kombinasyonları için çizdirildi.

Şekil 6.1.1’de taban yüzeyi 3 tabakadan oluşan ve 108 atomdan oluşan kristal germanyumun (100) düzlemi üzerine Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanılarak 300 atomdan oluşan bir amorf yapı büyütüldü. Büyütme esnasında sıcaklık parametresini 300K, Monte Carlo adım sayısı 100 ve Monte Carlo adımı 0.1 Å olarak seçildi. Bu parametrelere uygun olarak büyütülen ince filmin radyal dağılım fonksiyonu çizildi (Şekil 6.1.2). Ana pikler, yani ilk üç pik, 2.35 Å, 3.9 Å, 6.1 Å

değerlerinde oluştu. Elmas yapıya sahip germanyum için bu değerler 2.35 Å, 4.0 Å, 4.7 Å ve 6.1 Å'dur. Amorf germanyum için elde edilen deneysel [22] RDF eğrisinden de görüldüğü gibi, kristal için 3.ncü komşuya karşılık gelen pik amorfte kaybolmuştur. Büyütülen amorf yapıda da bu pik yoktur. Diğer pikler de pozisyon itibarı ile doğru yerlerde çıkmışlardır. Örneğin, birinci maksimumun, kristal ve amorf germanyumda aynı noktada olduğu görülür. Birinci maksimum en yakın komşu uzaklığını verdiğinden, birinci koordinasyon sayısının, kristal germanyumda olduğu gibi amorf germanyum için de 4 olduğu ve en yakın komşu atomlarının, kristal germanyumda olduğu gibi  $\sim 4.0\text{Å}$  ebatlı bir tetrahedron oluşturduğu görülür. Pik yüksekliklerinin çok az bir farklılık gösterdiği, fakat temelde radyal dağılım fonksiyonlarının aynı olduğu görülmüştür. Eğer 300 atom yerine daha büyük sayıda atom biriktirerek simülasyon yapılırsa, RDF eğrisinin uzaktaki değerlerinin yükselmesi ve deneysel eğriye yaklaşması doğal olarak beklenir.

İnce filmin büyütülmesi sırasında araştırılan parametrelerden birisi atomların yerleştiği taban kristalin yönlenmesinin büyümeye etkisinin nasıl olacağı idi. Bunun için, Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanarak, sıcaklık parametresi 300K'de, Monte Carlo adım sayısı 100, Monte Carlo adımı 0.1Å değeri alınarak taban kristal yönlenmelerinin (100), (110), (111) tiplerinin herbirine 300 atom eklendi. Bu parametrelere uygun olarak büyütülen ince filmlerin radyal dağılım fonksiyonu, karşılaştırma yapılabilmesi bakımından her bir taban kristal yönlenmesi için çizildi (Şekil 6.1.3). Detayda ufak tefek farklılıklar olmasına karşın, 300 atomluk bir örnekte taban (alttaş) yüzeyinden uzaklaşılması nedeni ile, taban (alttaş) yüzey yönlenmesinin etkisi hemen hemen kalmamakta ve bu da, Şekil 6.1.3'teki RDF karşılaştırmasında fazlaca bir fark görülmemesine yansımaktadır. Ancak, yüzey tipinin ilk tek-katmanın oluşumunda değişik sonuçlar doğurması beklenir ve bilinmektedir.

İnce filmin büyütülmesi sırasında araştırılan parametrelerden bir diğeri ise kristal yüzeye yerleşmiş atomların ve yeni gelen atomların denge konumlarına ulaşınca kadarki hareket ettirme sayısının, yani Monte Carlo adım sayısının büyümeyi nasıl etkilediği bulmak idi. Bu da büyüme hızına karşılık gelir. Büyütme esnasında Monte Carlo adım sayıları, genelde, 10, 50 ve 100 olarak alındı. Bu

parametrelere uygun olarak büyütülen ince filmlerin radyal dağılım fonksiyonları her bir adım sayısı için çizildi, ve aralarındaki farkı göstermek için ilgili radyal dağılım fonksiyonları benzer iki grafikte, Şekil 6.1.4 ve Şekil 6.1.5’de gösterildi. Hızlı büyütmede ikinci pikin yarıldığı ve küçük değerlere kaydığı görülmüştür.

İkinci pikin daha dar olmasının sebebi, amorf yapıdaki, özellikle yüzeyde oluşabilecek öbeklerin sonlu büyüklükte olmasındandır. Öbekleri oluşturan atomlar daha az komşuluklara sahip olduklarından, gözlenen piklere katkıları daha azdır.

Pik konumlarının ve pik yüksekliklerinin birbirinden farklılıklar göstermesi tabana ilk yerleştirme esnasında yerleşecek atomun doğru yere oturmasına yani hareket ettirme sayısına bağlı olduğu görülmüştür.

İnce filmin büyütülmesi sırasında, sıcaklık parametreleri 100K, 300K, 600K, 900K ve taban kristal germanyumun (100), (110), (111) yönlenmeleri için büyütme işlemi yapıldı. Büyütme esnasında diğer parametreler ise, potansiyel olarak Stillinger-Weber kullanıldı, Monte Carlo adım sayısı 100 ve Monte Carlo adımı 0.1Å değerlerinde sabit tutuldu. Şekil 6.1.6’da (100), Şekil 6.1.7’de (110) ve Şekil 6.1.8’de (111) taban kristal yönlenmeleri için verilen sıcaklık değerlerinde büyütülen filmin radyal dağılım fonksiyonları görülmektedir.

Pik konumlarının ve pik yüksekliklerinin çok az bir farklılık gösterdiği, fakat temelde radyal dağılım fonksiyonlarının aynı olduğu görülmüştür. Kullandığımız sıcaklık değerlerinden elde ettiğimiz sonuçlara göre içerisinde boşlukların ve kopuk bağların bulunduğu mikrokristal model tahminleriyle uyum içindedir. Üçüncü pikin oluşumu kristal özelliklerin baskın bir rol oynadığının bir göstergesidir.

İnce filmin büyütülmesinde incelediğimiz parametrelerden sonuncusu Monte Carlo adımıdır. Bunun için, kristal germanyum (100) tabanının üzerine Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanarak 300 atom eklendi. Sıcaklık parametresi 100K, Monte Carlo adım sayısı 5000 için büyütme işlemi yapıldı. Monte Carlo adımının 0.1Å ve 0.2Å değerlerine uygun olarak büyütülen ince filmin radyal dağılım fonksiyonu her bir Monte Carlo adımı için çizildi. Şekil 6.1.9’a bakıldığında oluşan

piklerin daha keskin ve ikinci komşu pikin daha dar olduğu görüldü. İkinci pikin dar olmasının sebebi olarak oluşan öbeklerin sonlu büyüklükte olmasıdır. Öbeklerin yüzeyde oluşturdukları atomlar daha az komşuluklara sahip olduklarından gözlenen piklere fazla bir katkısı olmaz. Büyütülen yapıda altıgenler oluşmasına rağmen, meydana gelen *dimer*'ler nedeniyle monolayer oluşamamakta ve dolayısıyla da yapı yükselerek aralarda boşluklar bırakmaktadır. Bu da yapının oluşumunu olumsuz yönde etkilemektedir.

Şekil 6.1.10 ve 11'de Stillinger-Weber tipi potansiyel kullanarak Monte Carlo adım sayısı 100 ve Monte Carlo adımını  $0.1\text{\AA}$  değerlerinde tutulan iki büyütme yapıldı. Kristal germanyumun (100) ve (111) yüzeyli tabanlarında, sıcaklığın 100K, 300K, 600K ve 900K alındığı durumlar için dihedral açıdaki değişimler çizildi. Bu parametrelere uygun radyal dağılım fonksiyonlarına bakıldığında ikinci maksimum aynı uzaklıkta, fakat daha geniş olduğu görülür. Bunun nedeni Şekil 6.1.10 ve Şekil 6.1.11'de görüldüğü gibi amorf germanyumda bağlanma açılarının kristal germanyumda olduğu gibi  $109.5^\circ$  olmayıp,  $\pm 10$  derecelik bir bozulmaya uğramış olmasıdır.

Kristal germanyum için deneysel radyal dağılım fonksiyonları ile bu çalışmada elde edilen şekiller karşılaştırıldığında, bağ uzunlukları ve kristalde bulunan bağ açılarında sapmalar olduğu Şekil 6.1.10 ve Şekil 6.1.11'den de görülmektedir. Dikkat çeken bir nokta da, Şekil 6.1.11'deki dihedral açıdaki sapmaların daha fazla olmasıdır.

Özetlersek, germanyumun amorf halinin, kristal halinden kısa erimde çok farklı olmadığı beklenmelidir. O yüzden radyal dağılım fonksiyonunda ilk maksimumun kristal ve amorf da aynı olması şaşırtıcı değildir. Amorf yapı ile kristal yapı arasındaki en belirgin fark üçüncü tepede görülmektedir. Amorf yapıda üçüncü tepe hemen hemen yok gibidir. Yani uzun mesafe düzeninden söz etmek zordur. Çünkü üçüncü komşu atomlar, kristal yapıdaki uzaklıklarda değildir. Ayrıca, değişmeyen bir diğer ölçüt de germanyum atomlarının amorf yapıda da az bir sapma ile tetrahedral bağ yapmalarıdır.

Büyütülen amorf germanyum ince filmde, atomların düzenli bir yapıya sahip olmaması; atomik bağ uzunluğu ve açılarda değişmelere neden olmuştur. Ancak germanyum atomlarının yapısal özelliklerinden dolayı bu değişikliklerin gelişigüzel olmasını önlemiştir. Bilgisayar ortamında büyütülen amorf germanyuma ait istatistiklerden de görülebileceği gibi ortalama bağ uzunluğu; 2.50 Å ile 2.60 Å arasında değerler almıştır. Benzer biçimde ortalama açı sapması ise;  $-0.76^\circ$  ile  $-0.16^\circ$  arasındadır. Komşu atomların birbirine göre geometrik konumu yani atomik bağ uzunluğu ve açısı yönünden bağ yapılmasını olanaksız kıldığında, istenen bağ oluşmamıştır.

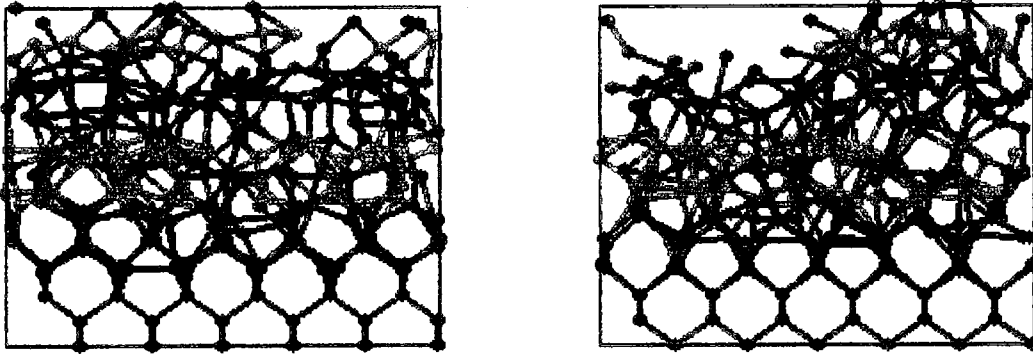
Buna karşılık başka elektronlarla bağ yapmayan ve yalnız kalarak kopuk bağ oluşturan elektronların enerjileri değişmeden valans ve iletkenlik bantlarının arasında kalmıştır. Bu enerjinin tam olarak ne değer alacağı, bağlı bulunduğu atomun diğer üç elektronuna ve elektronun etrafındaki diğer atomların oluşturduğu potansiyele bağlı olarak değişmektedir. Büyütülen amorf germanyuma ait istatistiklerden de görülebileceği gibi ortalama enerji  $-2.48$  eV ile  $-3.13$  eV aralığındadır ki bu da bilinen ve beklenen enerji ile uyum içindedir.

Amorf germanyumdaki kopuk bağlar; kimyasal buhar biriktirme, argon atmosferinden püskürtme ve elektrik boşalması gibi teknikler kullanılarak hidrojen ile doyurulduğunda, belirli bir miktar hidrojen yapıya girer ve hidrojenin büyük bir kısmı kırık bağlardaki tek elektronlara bağlanır. Ge-H bağları aynen Ge-Ge bağları gibi enerji açısından ikiye ayrılarak valans ve iletkenlik bantlarının içine düşerler. Doğal olarak kopuk bağlarla birleşen her hidrojen atomu, yasak band aralığındaki bir seviyeyi yok ederek, valans ve iletkenlik bandına birer seviye eklerler. Hidrojenlenmiş amorf germanyumdan elde edilen bilgiler ışığında da ön görülen mikrokristalik, süngersi yapı, gelişigüzel ağ modelleriyle tutarlı olması gerekmektedir. Büyütülen amorf germanyum ince filmde elde edilen istatistik sonuçlara göre %15 ile %30 oranında bulunan kopuk bağlar hidrojenle katkılandırılmak suretiyle;

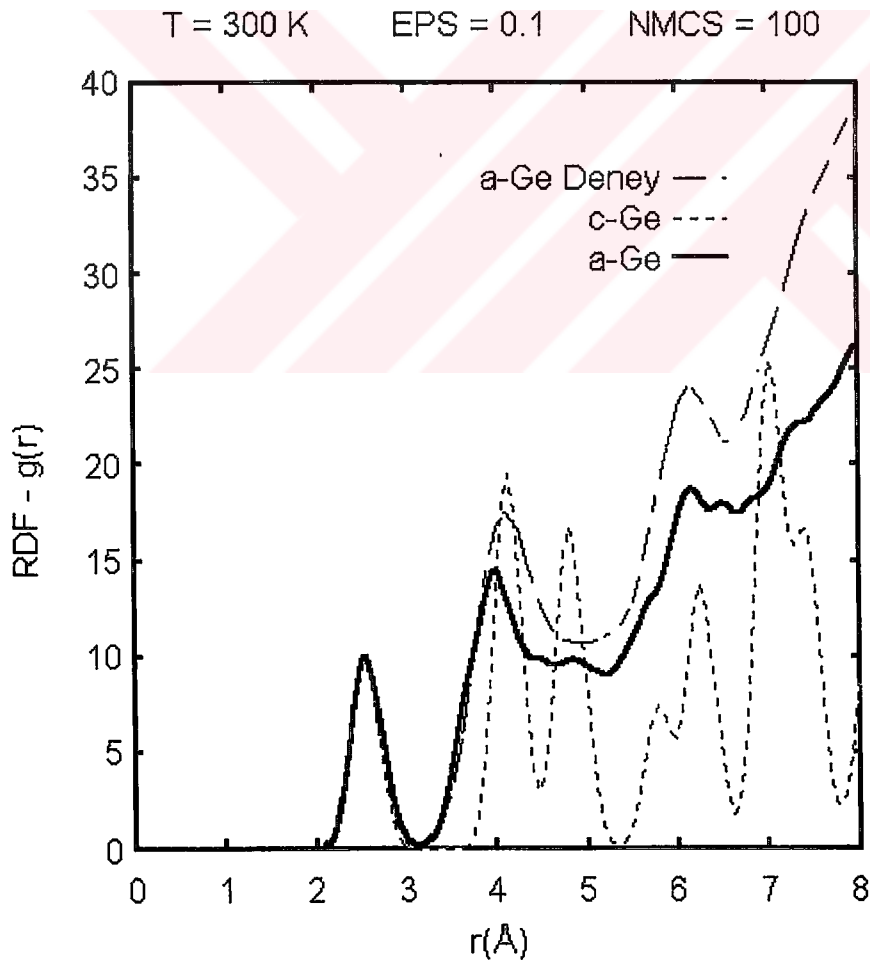
1. Kopuk bağlar doyurulmuş olacak ve böylelikle yapıdaki kopuk bağ sayısı, dolayısıyla da bant aralığındaki yerleşmiş durum yoğunluğu büyük ölçüde azaltılmış olacaktır.
2. Amorf germanyumun yapısı rahatlatılarak Ge-Ge bağlarının daha kararlı olmaları sağlanacaktır.
3. Hidrojenlenmiş amorf germanyum böylelikle III ve V grubu elementler ile katkılanabilecektir.

Büyütme sırasında, atomlar x ve y yönlerinde periyodik sınır koşulları kullanılarak, sonlu küçük bir örnek yerine, süperhücre anlayışı içinde sonsuz bir yapı büyütüldü. Büyütülen amorf germanyuma ait istatistikler de göze çarpan en önemli özellik [yüzey sıcaklığının 300K olduğu, taban kristal germanyumun atomlarının (100) ve (110) yüzey yönlenmelerinde] kopuk bağ oranının %14-19 gibi küçük bir yüzdede olması, ortalama bağ boyunun 2.54 Å yani kristaldeki değere çok yakın, ortalama açı sapmasının  $-0.53^\circ$  gibi küçük bir değer alması ve ortalama enerjinin  $-2.94$  eV gibi gerçek değerine yakın olması, bu sıcaklık ve yüzey yönlenmelerinde büyütmenin ne derece başarılı olduğunu göstermektedir. Eğer 300 atom yerine daha büyük sayıda atom biriktirerek büyütme yapılırsa, radyal dağılım fonksiyonu eğrisinin uzaktaki değerlerinin yükselmesi ve mikrokristalit modeline uygun bir yapının oluşması doğal olarak beklenecektir.

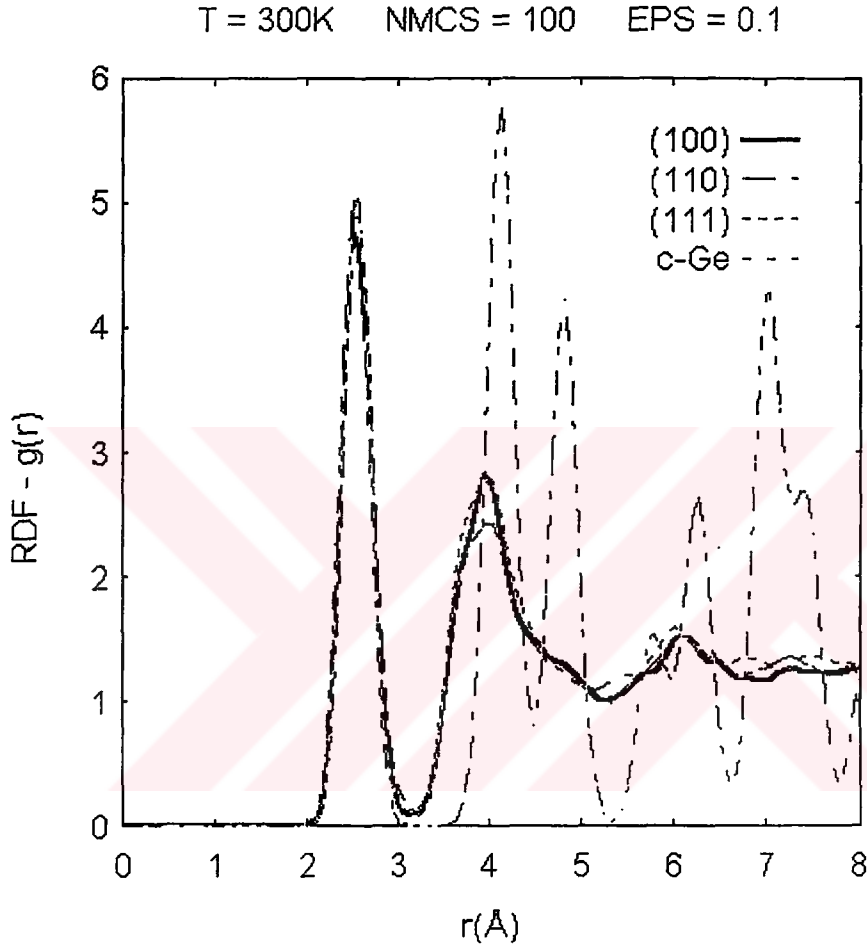




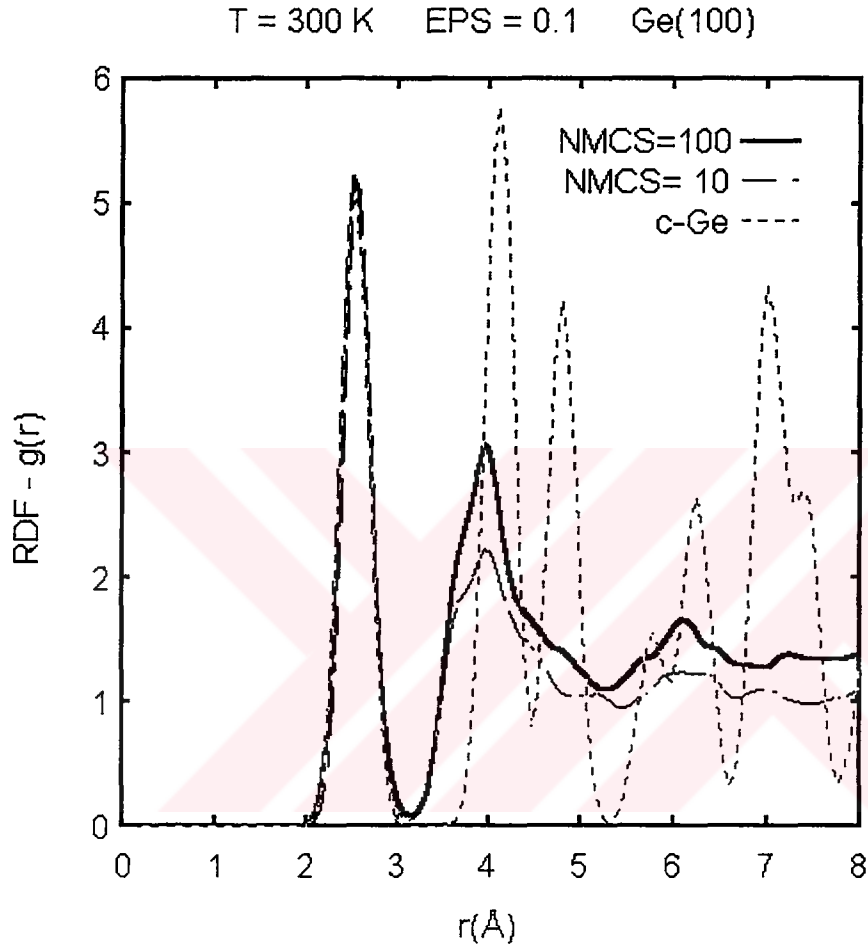
Şekil 6.1.1 Büyütülen ince filmin iki farklı bakış açısından görüntüsü.



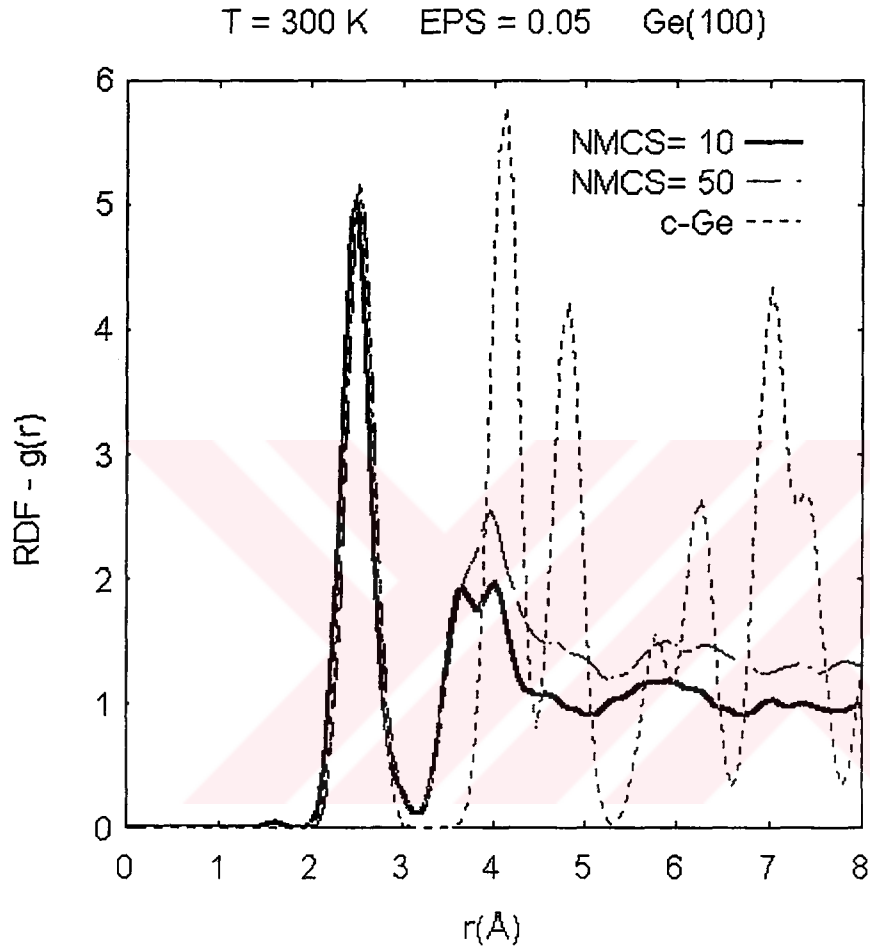
Şekil 6.1.2 Büyütülen amorf germanyum, deneysel amorf germanyum [22] ve kristal germanyumun radyal dağılım fonksiyonlarının karşılaştırılması.



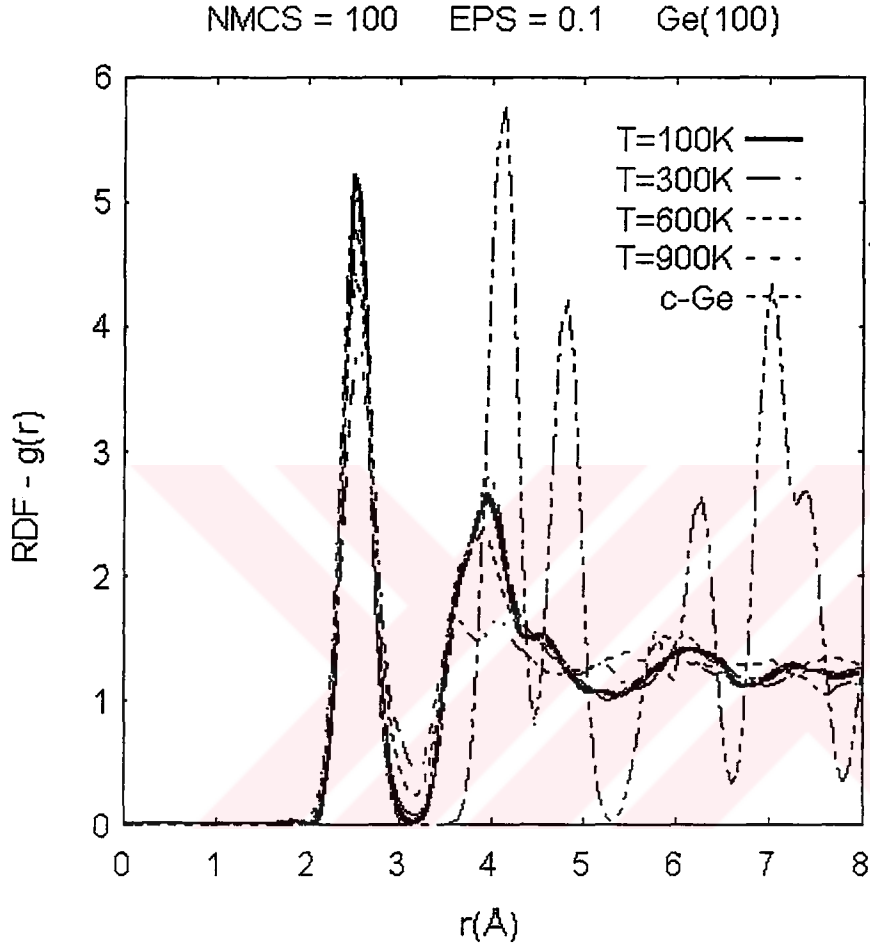
Şekil 6.1.3 Büyütülen amorf germanyumun taban yüzeyin yönlenimlerine göre radyal dağılım fonksiyonlarının karşılaştırılması.



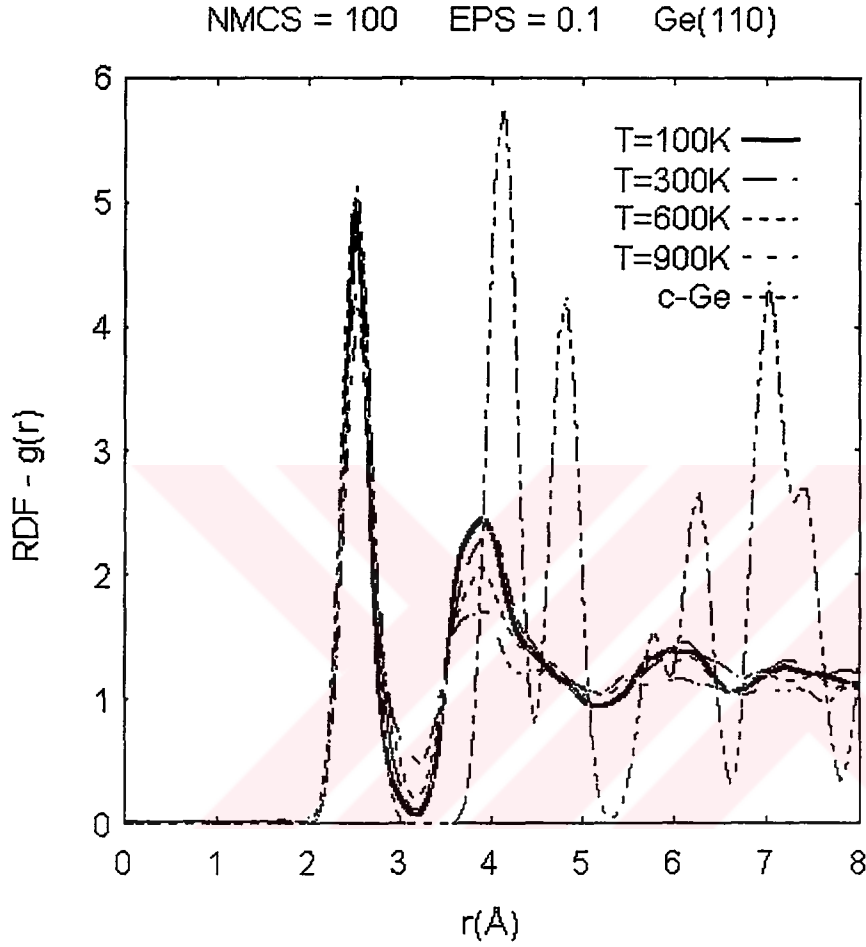
Şekil 6.1.4 Büyütülen amorf germanyumun Monte Carlo adım sayısına göre radyal dağılım fonksiyonlarının karşılaştırılması.



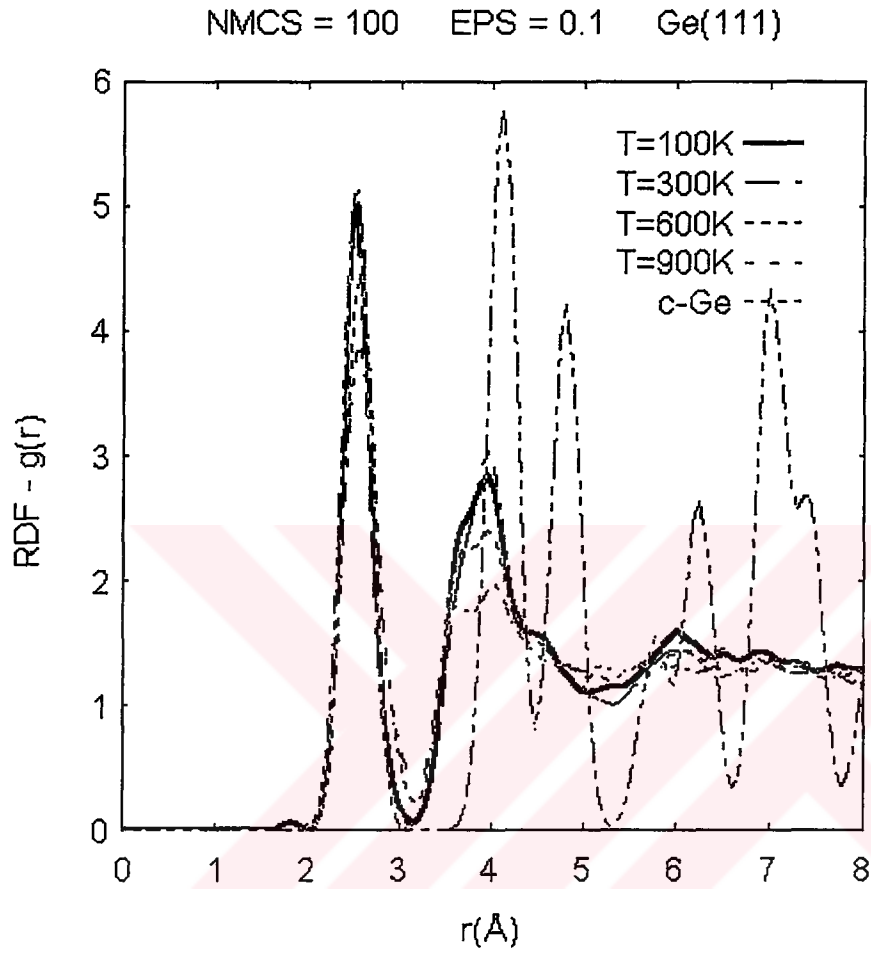
Şekil 6.1.5 Büyütülen amorf germanyumun Monte Carlo adım sayısına göre radyal dağılım fonksiyonlarının karşılaştırılması.



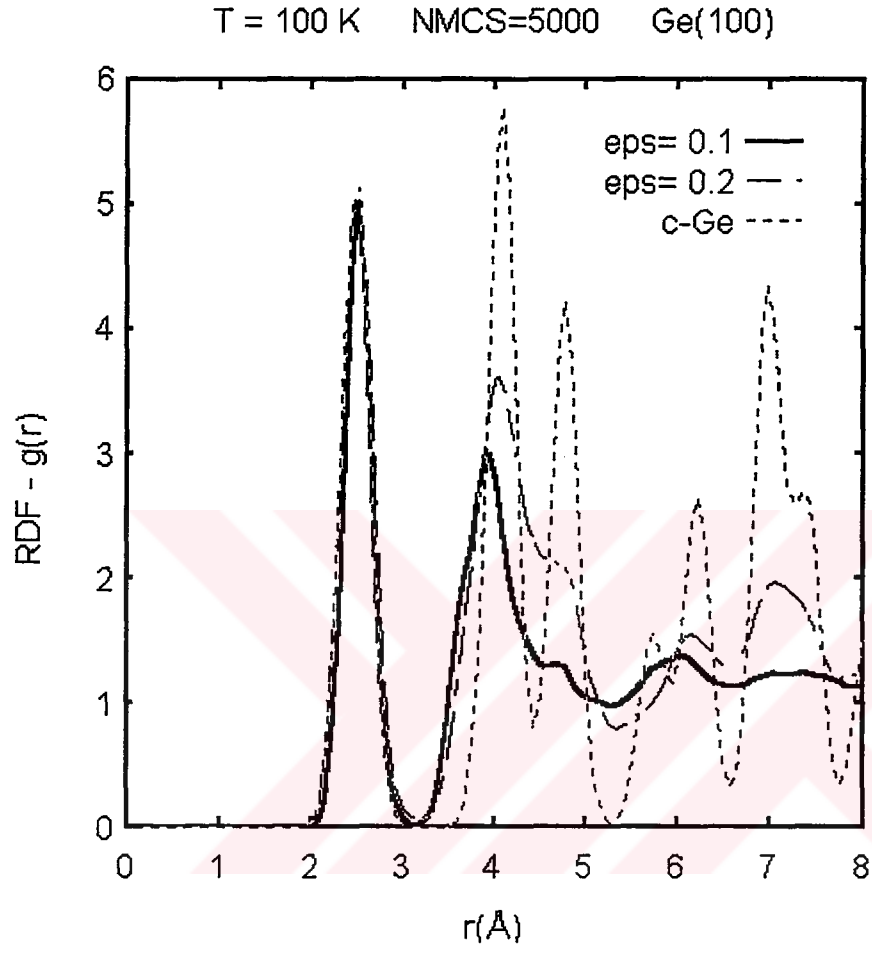
Şekil 6.1.6 Büyütülen amorf germanyumun değişik sıcaklık değerlerine göre radyal dağılım fonksiyonlarının karşılaştırılması.



Şekil 6.1.7 Büyütülen amorf germanyumun değişik sıcaklık değerlerine göre radyal dağılım fonksiyonlarının karşılaştırılması.

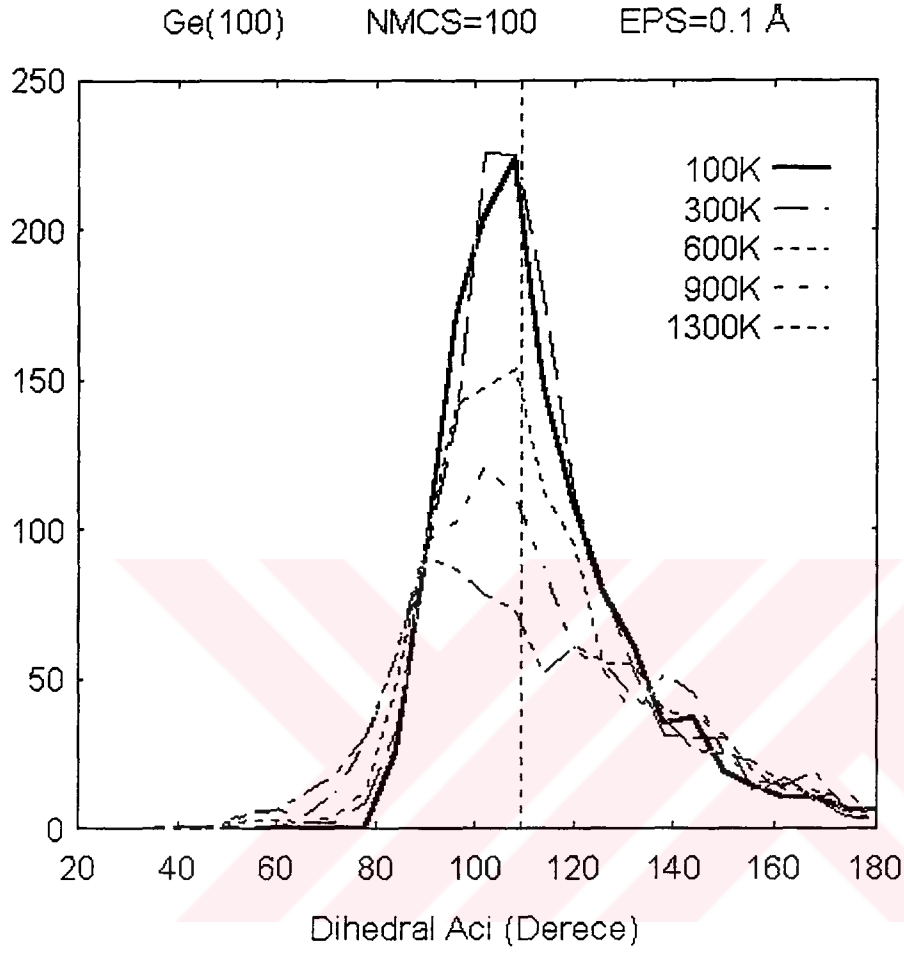


Şekil 6.1.8 Büyütülen amorf germanyumun değişik sıcaklık değerlerine göre radyal dağılım fonksiyonlarının karşılaştırılması.

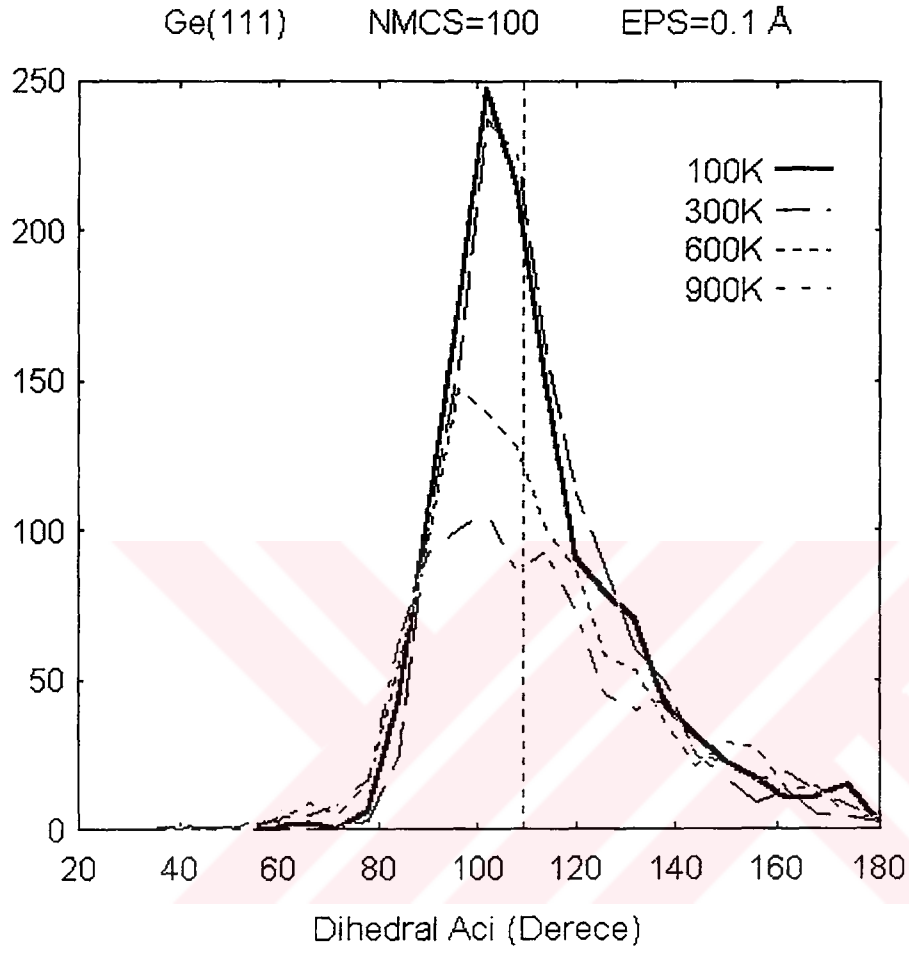


Şekil 6.1.9 Büyütülen amorf germanyumun değişik Monte Carlo adımına göre radyal dağılım fonksiyonlarının karşılaştırılması.





Şekil 6.1.10 Dihedral Açındaki deęişme.



Şekil 6.1.11 Dihedral Açıldaki değişme.

Ge(100) yüzey sıcaklığı (K)	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
100	19	2.54	-0.21 °	-2.94
300	18	2.54	-0.53 °	-2.94
600	23	2.56	-0.31 °	-2.71
900	28	2.58	-0.69 °	-2.48
1300	32	2.60	-0.69 °	-2.24

Tablo 6.1.1. Ge(100) üzerine değişik sıcaklıklarda büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (NMCS=100,  $\epsilon = 0.1\text{Å}$ ).

c-Ge tabanının (alttaşın) yüzey tipi	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
(100)	19	2.54	-0.21 °	-2.94
(110)	19	2.56	-0.57 °	-2.91
(111)	17	2.54	-0.76 °	-3.00

Tablo 6.1.2. Değişik yüzey tipli kristal germanyum tabanları (alttaşları) üzerine 300K'de büyütülen amorf germanyuma ait istatistikler (NMCS=100,  $\epsilon = 0.1$ ).

Monte Carlo adımı $\epsilon$ (Å)	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
0.10	18	2.53	-0.43 °	-2.98
0.15	16	2.50	-0.30 °	-3.13
0.20	20	2.55	-0.87 °	-2.81

Tablo 6.1.3. Ge(110) üzerine Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (NMCS=1000, T=300K).

Monte Carlo adım sayısı, NMCS	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
10	24	2.54	-0.16 °	-2.77
100	18	2.54	-0.53 °	-2.94

Tablo 6.1.4. Ge(100) üzerine değişik sayıda  $\epsilon = 0.1 \text{ \AA}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K).

Monte Carlo adım sayısı, NMCS	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
100	19	2.54	-0.21 °	-2.94
5000	17	2.52	-0.56 °	-3.07

Tablo 6.1.5. Ge(100) üzerine değişik sayıda  $\epsilon = 0.1 \text{ \AA}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=100K).

Monte Carlo adım sayısı, NMCS	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
100	17	2.54	-0.76 °	-3.00
1000	16	2.51	-0.67 °	-3.09

Tablo 6.1.6. Ge(111) üzerine değişik sayıda  $\epsilon = 0.1 \text{ \AA}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K).

Monte Carlo adım sayısı, NMCS	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
50	19	2.56	-0.57 °	-2.91
1000	18	2.53	-0.43 °	-2.98

Tablo 6.1.7. Ge(110) üzerine değişik sayıda  $\epsilon = 0.1 \text{ \AA}$ 'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K).

Monte Carlo adım sayısı, NMCS	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
50	28	2.58	-0.69 °	-2.48
1000	16	2.50	-0.30 °	-3.13

Tablo 6.1.8. Ge(110) üzerine değişik sayıda  $\epsilon = 0.15$  Å'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K).

Monte Carlo adım sayısı, NMCS	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
50	23	2.54	-0.59 °	-2.75
1000	20	2.55	-0.87 °	-2.81

Tablo 6.1.9. Ge(110) üzerine değişik sayıda  $\epsilon = 0.2$  Å'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K).

Monte Carlo adım sayısı, NMCS	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
100	22	2.54	-0.41 °	-2.79
5000	22	2.55	-0.37 °	-2.82

Tablo 6.1.10. Ge(100) üzerine değişik sayıda  $\epsilon = 0.2$  Å'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=600K).

Monte Carlo adım sayısı, NMCS	Kopuk bağ % oranı	Ortalama bağ boyu (Å)	Ortalama açı sapması	Ortalama Enerji (eV)
10	19	2.54	-0.55 °	-2.88
50	21	2.53	-0.23 °	-2.89
100	20	2.52	-0.38 °	-2.92
5000	18	2.51	-0.36 °	-3.04

Tablo 6.1.11. Ge(100) üzerine değişik sayıda  $\epsilon = 0.2$  Å'luk Monte Carlo adımları ile büyütülen 300 atomluk amorf germanyuma ait istatistikler (T=300K).

## KAYNAKLAR

- [1] M. A. Omar, *Elementary Solid State Physics: Principle and Applications*, (Addison-Wesley, NY, 1975).
- [2] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, (John Wiley, NY, 1996).
- [3] M. S. Tyagi, *Introduction to Semiconductor Materials and Devices*, (John Wiley, NY, 1991).
- [4] Davis, E. A. and Mott, N. F., *Conduction in Non-Crystalline Systems: Conductivity, Optical Absorption and Photoconductivity in Amorphous Semiconductors*, *Phil. Mag.* **22**, 903 (1970).
- [5] D. Adler, *Theory of Amorphous Semiconductors, Solar Cell 2*, (John Wiley, NY, 1980).
- [6] M. Cemal Yalabık ve Şinasi Ellialtıođlu, *Amorf Silisyum Yapısı Üzerine Çalışmalar*, *Turkish J. Phys. (Dođa)*, **8**, 214 (1984).
- [7] S. C. Moss and J. F. Graczyk, *Evidence of voids within the as-deposited structure of glassy silicon*, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 1167 (1969).
- [8] G. Etherington, A. C. Wright, J. T. Wenzel, J. C. Dore, J. H. Clarke and R. N. Sinclair, *A Neutron Diffraction study of the Structure of Evaporated Amorphous Germanium*, *J. Non-Crys. Solids*, **48**, 265 (1982).
- [9] E. A. Davis, *States in the Gap and Defects in Amorphous Semiconductors*, in *Topics in Applied Physics, Volume 36, Amorphous Semiconductors*, Ed. M. H. Brodsky, (Springer-Verlag, Berlin, 1987) p41.

- [10] Cohen, M. H., Fritzsche, H. and Ovshinsky, S. R., *Simple Band Model for a Semiconducting Alloy*, Phys. Rev. Lett. **22**, 1065 (1969).
- [11] Mott, N. F. and Davis, E. A., *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, (Clarendon Press, Oxford, 1979), p323.
- [12] G. Dereli, M. C. Yalabık, Ş. Ellialtıođlu, *A Computer Simulation of Amorphous Silicon*, Phys. Scr., **40**, 117 (1989).
- [13] Orsolya Gereben and Laszlo Pusztai, *Structure of Amorphous Semiconductors: Reverse Monte Carlo Studies on a-C, a-Si, and a-Ge*, Phys. Rev. **B50**, 14136 (1994).
- [14] Polk, D. E. *The Structure of Gassy Metallic Alloys*, J.Non-Crys. Solids, **5**, 365 (1971).
- [15] Paul L. Devries, *A First Course in Computational Physics*, (John Wiley, NY, 1994).
- [16] K. Binder, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, (Springer-Verlag, Heidelberg, 1986).
- [17] B. R. Djordjevic, M. F. Thorpe and F. Wooten. *Computer Model of Tetrahedral Amorphous Diamond*, Phys. Rev. **B52**, 5685 (1995).
- [18] Dieter W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, (Springer-Verlag, Heidelberg, 1990).
- [19] E. Pearson, T. Takai, T. Haliciođlu and W. A. Tiller, *PTHT potentials*, J. Crystal Growth, **70**, 33 (1984).

- [20] R. Biswass and D. R. Hamann, *Interatomic Potentials for Silicon Structural Energies*, Phys. Rev. **B55**, 2001 (1985).
- [21] Zi Jian, Zhang Kaiming and Xie Xide, *Modification of Stillinger-Weber Potentials for Si and Ge*, Phys. Rev. **B41**, 12915 (1990).
- [22] Kejian Ding and Hans C. Andersen, *Molecular Dynamics Simulation of Amorphous Germanium*, Phys. Rev. **B34**, 6987 (1986).
- [23] F. H. Stillinger and T. A. Weber, *Computer Simulation of local order in condensed phases of silicon*, Phys. Rev. **B31**, 5262 (1985).





## KİŞİSEL BİLGİLER

**Adı Soyadı** : Görkem OYLUMLUOĞLU

**Doğum Yeri** : Muğla

**Doğum Yılı** : 12.12.1973

**Medeni Hali** : Evli

## EĞİTİM VE AKADEMİK BİLGİLER

**Lise** : 1985-1991, Turgut Reis Lisesi, Muğla.

**Lisans** : 1992-1996, Fizik Bölümü, Ondokuz Mayıs Üniversitesi.

**Yabancı Dil** : İngilizce.

## MESLEKİ BİLGİLER

1996- Araştırma Görevlisi, Fizik Bölümü, Muğla Üniversitesi.