

**III-V YARIİLETKENLERİNDEN OLUŞAN
HETEROYAPILARIN ELEKTRONİK
ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONELİ
TEORİSİ İLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Harun ÖZKİŞİ

Danışman: Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ

2010-EDİRNE

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**III-V YARIİLETKENLERİNDEN OLUŞAN HETEROYAPILARIN
ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONELİ
TEORİSİ İLE İNCELENMESİ**

HARUN ÖZKİŞİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 12 / 01 /2010 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

Doç.Dr. Seyfettin DALGIÇ Doç.Dr. Mesut KAÇAN Yrd. Doç. Dr. Gülsen TEZGÖR

Danışman

Üye

Üye

ÖZET

Bu çalışmada (001) yönünde tek, ikişer ve üçer katmanlı olarak modellenmiş AlAs/GaAs bulk hetero yapıların, taban durumundaki örgü sabiti, toplam enerjisi ve ortalama etkin potansiyeli, yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak incelenmiştir. Sistem z eksenine boyunca optimize edilerek bu bulk yapının en kararlı durumu elde edilmiştir. Hesaplamalar, temeli yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan düzlem dalga öz uyum alan programı kullanılarak yapılmıştır. Ayrıca AlAs/GaAs hetero bulk yapısındaki arayüzde etkin potansiyel farkı olduğu gözlenmiştir. Bundan dolayı bu sistemler elektronik ve opto-elektronik aletlerin yapımında önemlidir.

Anahtar Kelimeler: Yoğunluk fonksiyonel teorisi, Örgü sabiti uyuşmayan yarıiletkenler, Bulk hetero yapılar, Etkin potansiyel.

ABSTRACT

In this study, ground state of lattice constant, total energy and average effective potential of AlAs/GaAs bulk heterostructures which are modeled as monolayer, bilayer and triple-layered in the direction of (001) have been investigated by using Density Functional Theory. Equilibrium state of this bulk structure has been obtained by optimizing the system along z axis. The calculations have been done by using Plane Wave Self Consistent Field Program which is based on Density Functional Theory. It has been observed that there is an effective potential difference at the interface which is in AlAs/GaAs bulk heterostructure. Therefore, it has an important role in invent of electronic and opto-electronic devices.

Keywords: Density functional theory, Lattice-matched semiconductor, Bulk heterostructures, Effective potential.

TEŞEKKÜR

Bana bu çalışma ortamını sağlayan, danışmanlığımı üstlenen ve çalışmamın her adımında bilgilerinden yararlandığım sayın hocam Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmanın yapıldığı T.Ü. Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Başkanı Prof. Dr. Hasan AKBAŞ'a ve yardımlarından dolayı Prof. Dr. Serap DALGIÇ'a teşekkür ederim.

Bilgisayar Programlarını kullanmamda bana yardımcı olan ve engin bilgilerini benim ile paylaşan sayın hocam Yrd. Doç. Dr. Hande TOFFOLİ'ye teşekkür ederim.

T. Ü. Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi tarafından desteklenen çalışmalarımın dolayı TÜBAP Başkanlığı'na teşekkür ederim.

Bu çalışma boyunca maddi ve manevi desteğini üzerimden eksik etmeyen değerli AİLEM'e ve değerli arkadaşlarım Barış ÖZKAPI, Sena GÜLER ve Araş. Gör. Mutlu ÇOLAKOĞLU'na teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	vi
TABLolarIN LİSTESİ	viii
1. GİRİŞ	1
2. TEORİ	4
2.1. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi	4
2.1.1. Yük Yoğunluğu Tabanlı Enerji İfadesi	6
2.1.2. Hohenberg-Kohn Teoremleri	10
2.1.3. Kohn-Sham Denklemleri	13
2.1.4. Kohn-Sham Denklemlerinin Matris Gösterimi	17
2.1.5. Pseudopotansiyel Formalizmi	18
2.1.6. Sistem Parametreleri	21
i. E_{cut}	21
ii. K_{point}	22
2.2. Heteroyapılar	23
2.2.1. Band Yapıları	23
2.2.2. Öz Uyum Hesaplamaları	25
2.2.3. Süperhücre ve Mikroskobik Averaj Tekniği	27
2.2.4. Potansiyel Bant Kıyı Kaymaları	28
2.2.5. Bant Ayarlaması ve Schottky Barriers	30
2.2.6. Örgüsü Uyuşan Yarımetal Arayüzeyler	31
3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	33
3.1. AlAs Bulk Oluşturulması ve Yakınsaması	33
3.1.1. AlAs İçin Örgü Sabitinin Yakınsaması	34

3.1.2. AlAs İçin E_{cut} Yakınsaması	35
3.1.3. AlAs İçin K_{point} Yakınsaması	37
3.2. GaAs Bulk Oluşturulması ve Yakınsaması	39
3.2.1. GaAs İçin Örgü Sabitinin Yakınsaması	40
3.2.2. GaAs İçin E_{cut} Yakınsaması	41
3.2.3. GaAs İçin K_{point} Yakınsaması	43
3.3. AlAs/GaAs Katmanlı Bulk Yapısı	45
3.3.1. AlAs/GaAs Arayüzeyinin z Yönünde Örgü Sabiti Optimizasyonu	47
3.3.2. AlAs/GaAs Arayüzeyinin Efektif Potansiyel Eğrisi	51
3.4. Sonuç	55
KAYNAKLAR	56

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil 2.1. Kohn-Sham denklemi kullanılarak kendini doğrulama yöntemi ile yapılan toplam enerji hesabının şeması.	16
Şekil 2.2. Basit bir atom modelinde kabuk bölgesi ve valans bant bölgesi.	18
Şekil 2.3 V_s bir sistemin pseudopotansiyelini, ϕ dalga fonksiyonunu, V_R gerçek potansiyelini, ψ gerçek dalga fonksiyonunu ve r_c ise kabuk bölgesinin yarıçapı temsil eder.	19
Şekil 2.4. İletkenlik derecesine göre değişen bant enerjilerinin basit bir gösterimi (a) İletken, (b) Yarıiletken, (c) Yalıtkan	24
Şekil 3.1. Yüzey merkezli kübik yapıdaki AlAs bulk yapısı.	34
Şekil 3.2. AlAs bulk yapısı için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.	35
Şekil 3.3. AlAs bulk yapısı için toplam enerjinin E_{cut} 'a göre değişimi.	36
Şekil 3.4. AlAs bulk yapısı için 20, 30, 40 Ryd. E_{cut} değerlerindeki Toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.	37
Şekil 3.5. AlAs bulk yapısı için toplam enerjinin k_{point} 'e göre değişimi.	38
Şekil 3.6. AlAs bulk yapısı için farklı k_{point} değerlerindeki Toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.	39
Şekil 3.7. Yüzey merkezli kübik yapıdaki GaAs bulk yapısı.	40
Şekil 3.8. GaAs bulk yapısı için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.	41

- Şekil 3.9. GaAs bulk yapısı için toplam enerjinin E_{cut} ' a göre değişimi. 42
- Şekil 3.10. GaAs bulk yapısı için farklı 20, 30, 40 Ryd. E_{cut} değerlerindeki Toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi. 43
- Şekil 3.11. GaAs bulk yapısı için toplam enerjinin k_{point} değerine göre değişimi 44
- Şekil 3.12. GaAs bulk yapısı için farklı k_{point} değerlerindeki Toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi. 45
- Şekil 3.13. a) Tek katmanlı yapı ((1+1) bir katman AlAs bir katman GaAs), b) İkişer katmanlı yapı ((2+2) iki katman AlAs iki katman GaAs), c) Üçer katmanlı yapı ((3+3) üç katman AlAs üç katman GaAs) hetero bulk yapıları. 46
- Şekil3.14. AlAs/GaAs (1+1) tekli bulk yapısının Toplam enerjisinin z konum değerinin sıkıştırma ve çekme durumlarına göre değişimi. 48
- Şekil 3.15. AlAs/GaAs (2+2) ikişerli bulk yapısının Toplam enerjisinin z sıkıştırma ve çekme durumlarına göre değişimi. 50
- Şekil 3.16. AlAs/GaAs (3+3) Üçerli bulk yapısının Toplam enerjisinin z konumunun sıkıştırma ve çekme durumlarına göre değişimi. 51
- Şekil 3.17. AlAs/GaAs (1+1) Tekli bulk yapısının potansiyeli üzerinden elde edilen averaj eğrisi. 52
- Şekil 3.18. AlAs/GaAs (2+2) İkişerli bulk yapısının potansiyeli üzerinden elde edilen averaj eğrisi. 53
- Şekil 3.19. AlAs/GaAs (3+3) Üçerli bulk yapısının potansiyeli üzerinden elde edilen averaj eğrisi. 54

TALOLARIN LİSTESİ

Tablo 3.1. AlAs/GaAs için tekli bulk heteroyapının z konumu, örgü sabiti ve buna karşılık toplam enerji değerleri.	47
Tablo 3.2. AlAs/GaAs için ikişerli bulk heteroyapının z konumu, örgü sabiti ve buna karşılık toplam enerji değerleri.	49
Tablo3.3. AlAs/GaAs için üçerli bulk heteroyapının z konumu, örgü sabiti ve buna karşılık toplam enerji değerleri.	50

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Günümüzde yapılan bilimsel çalışmalarda maddelerin nanometre düzeyinde incelenebilmesi konusunda önemli adımların atılması ile birlikte, teknolojiye çok hızlı ilerlemeler kaydedilmiş ve bilim dünyasında nanoteknoloji çağı yaşanmaya başlanmıştır. Çalışılan parçacıkların atomik boyutlarda, yani nanometre mertebesinde (nanometre = 10^{-9} m) oluşundan dolayı bu yeni teknoloji nanoteknoloji ismini almıştır. Bir başka tanım ise, üretilmek istenen maddenin, atomlarından başlayarak elde edilmesidir. Bu kavramı ilk defa dile getiren Amerika Birleşik Devletleri'nden Eric Drexler'dir. Nanoteknoloji üzerine yoğunlaşan Foresight Enstitüsü'nün kurucusu Drexler K.E. (1986), ünlü MIT laboratuvarındaki eğitimi sırasında, biyolojik sistemlerden esinlenerek, moleküler makineler yapılabileceğini önermiştir ve nanoteknoloji kavramını ortaya atan kişi olmuştur. Nanoteknoloji, fizik, kimya, biyoloji, matematik, bilişim teknolojileri ve malzeme bilimi gibi bilim dalları arasında disiplinler arası gelişen bir alan olup içerisinde birçok bilim dalını barındırmaktadır. Elektronikten tekstile, enerji üretiminden inşaat sektörüne, tıptan uzaya kadar hemen hemen tüm alana girmiş olan nanoteknoloji, insan yaşamında olumlu etkilere neden olmuştur ve olmaya devam etmektedir.

Bu bilim dalları arasından fizik dalının araştırma konusu olan nanoyapılar; nanoteller, nanonoktalar, nanofilmler, nanotüp ve heteroyapılar olarak isimlendirilebilir. Doğada bulunan veya suni olarak laboratuvarlarda üretilen maddelerden mümkün olduğunca yararlanmak için, tasarlanacak veya tasarlama yapmak için kullanılacak malzemelerin fiziksel ve kuantum kimyasal özelliklerinin tespit edilmesi çok önemlidir. Bu özelliklerin tespiti için de maddenin elektronik yapısını belirlemek şarttır. Kristal yapıdaki maddelerin, özellikle de karmaşık kristallerin elektronik yapılarını belirleme işlemi her zaman zor ve uzun zaman alan bir işlem olarak bilinmektedir. Ancak son yıllarda kullanılmakta olan ve sürekli olarak da geliştirilen bilgisayar destekli ve temel

ilkelere dayanan *ab-initio* yöntemlerin gelişmesiyle oldukça karmaşık yapılarda bile elektronik yapı hesaplarını yapmak oldukça kolay hale gelmiş ve bu tür hesaplamaların zamanı daha da kısalmıştır. Malzemelerin fiziksel ve kuantum kimyasal özelliklerini belirlemede kolaylık sağlayan bu yöntemin temelinde Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) bulunmaktadır. Bu teorinin temelleri 1960'ların ortalarında çok elektronlu sistemlerin temel hal özelliklerinin (yapısal, elektronik ve titreşimin) belirlenmesi için ortaya atılmıştır. Bu metot Hohenberg – Kohn (1964) ve onun devamı olan Kohn – Sham teoremi ile yerel yoğunluk yaklaşımı ve pseudopotansiyel metodu kullanılarak birbirinden farklı birçok değişik sistem için, kesin ve beklenen sonuçların elde edilmesinde basit bir taslak oluşturmayı sağlar (Srivastava, G.P, 1990). DFT; atom, molekül ve katıların elektronik yapılarını hesaplayabilen bir teoridir. Bu teori bulk hacimli malzemelerin yanı sıra protein ve karbon nanotüpler gibi kompleks materyallere de uygulanabilmektedir. Temel kuantum mekanik yasalarından yararlanarak malzeme özelliklerini nicel olarak anlamayı amaçlamaktadır. Geleneksel elektronik yapı metotları, atom çekirdeklerince oluşturulan elektrostatik potansiyel gibi bir dış potansiyel alanında hareket eden N tane elektronun Schrödinger denklemini yaklaşık olarak çözmeye çalışır. Böylece sistemin fiziksel özellikleri belirlenebilmektedir.

Kısaca artık günümüzde elektronik bant yapısı hesabı sıradan bir iş haline gelmiş ve maddelerin elektronik özellikleri kolaylıkla incelenmeye başlanmıştır. Bir taraftan bu hesaplara yönelik yeni teoriler geliştirilmiş, diğer taraftan geliştirilen bu teorilere dayanan bilgisayar programları yazılmaya başlanmış ve her geçen gün bu yazılımların daha da mükemmel olması için yeni gelişmeler sağlanmıştır. Bu geliştirme süreci halen hızlı hareketli bir şekilde devam etmektedir.

Nanoyapılar olarak adlandırılan, yarıiletkenlerden oluşan heteroyapılar üzerinde son yıllarda önemli çalışmalar yapılmaktadır. Heteroyapı kavramı ilk olarak ABD'de (Kroemer, 1963) ve Sovyetler Birliğinde (Alferov, USSR Patent 181737) aynı zamanlarda teklif edilmiştir. Genel olarak heteroyapıları oluşturan yarı iletkenler iki gruba ayrılmaktadır. Bunlardan birincisi, periyodik tablonun 4A Grubunda yer alan elementel yarıiletkenlerdir. C, Si, Ge, Sn, Pb bunlara örnek verilebilir. İkinci grup ise periyodik tablonun 3A (Al, Ga, In) ve 5A (N, P, As, Sb) grubunda bulunan elementlerin oluşturduğu bileşikler (GaAs, InP, GaN) ile 2B (Zn, Cd) ve 6A (O, S, Se) grubunda bulunan elementlerin bileşiğinden (ZnO, ZnSe) oluşan yarıiletkenlerdir (Neaman 1992).

Bu yarı iletkenlerden ametal/ametal ve metal/ametal şeklinde oluşan heteroyapıların ara yüzey özellikleri modern elektronik ve opto-elektronik aletler açısından önemli bir rol oynamaktadır. Özellikle III-V yarı iletkenlerin bileşiklerinden oluşan heteroyapılar (AlAs/GaAs) bu çalışma alanında önemli bir yere sahiptir. Bu materyaller üzerinde DFT yardımıyla yapılan çalışmalar sonucunda elektronik ve opto-elektronik alanlarında önemli gelişmeler kaydedilmiştir. Heteroyapıların ara yüzey özelliklerinin yanı sıra yarıiletken teknolojisindeki en önemli ve sıkça kullanılan özelliklerden birisi de alaşım ve katkıya yoluyla elektronik özelliklerin içsel olarak değiştirilebilme olasılığıdır.

Yapılacak yeni araştırmalar sonucunda heteroyapıların daha iyi anlaşılmasına, eski verilerin iyileştirilmesine katkı sağlayacak ve belki yeni kullanım alanlarının ortaya çıkmasına olanak sağlayacaktır. Hatta önceden yapılmış çalışmaların yeni ve farklı yöntemler kullanılarak tekrarlanması, seçilen heteroyapılı malzemenin fiziksel özellikleri belirlenmesi için en iyi yöntemin bulunmasına uygun düşünceler verecektir.

Sunulan bu tez çalışmasında, örgü sabitleri uyuşan (001) yönünde modellenen AlAs/GaAs yarı iletkenlerin oluşturduğu bulk heteroyapılarının elektronik ve yapısal özellikleri teorik olarak hesaplanmıştır. Hesaplamalarda, temeli Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi' ne (DFT), düzlem dalgalara ve pseudopotansiyellere dayanan, Espresso Programı'nın temel bileşenlerinden biri olan Düzlem Dalga Öz-Uyumlu Alan program seti Plane-Wave Self-Consistent Field (PWscf) kullanılmıştır. Tezin birinci bölümde yarıiletken ve heteroyapılar hakkında kısa bir giriş yapılmış, bu yapıların genel özelliklerinden bahsedilmiştir. İkinci bölümde ise hesaplamalarda kullanılan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ele alınmış ve heteroyapıların genel teorisi ayrıntılı bir şekilde anlatılmıştır. Son bölümde AlAs ve GaAs için örgü sabiti belirleme hesaplamaları yapılarak bu hesaplamalar için grafikler elde edilmiştir. Ayrıca bu bölümde, sırasıyla tek, ikişer ve üçer katmanlı AlAs/GaAs yarıiletken bulk heteroyapı modellenmesi, bu yapıların örgü sabitleri, z yönündeki optimizasyonu ve ortalama etkin potansiyelleri hesaplanmıştır.

BÖLÜM 2

TEORİ

2.1. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

Bu teorinin temelleri 1960'ların ortalarında çok elektronlu sistemlerin temel hal özelliklerinin (yapısal, elektronik ve titreşim) belirlenmesi için ortaya atılmıştır. Bu metot Hohenberg – Kohn (1964) ve onun devamı olan Kohn – Sham teoremi ile yerel yoğunluk yaklaşımı ve pseudopotansiyel metodu kullanılarak birbirinden farklı birçok değişik sistem için, kesin ve beklenen sonuçların elde edilmesinde basit bir taslak oluşturmayı sağlar (Srivastava, 1990).

Çok parçacıklı bir sistem göz önüne alındığında Schrödinger denklemi,

$$\hat{H}_i \psi_i(\vec{R}, \vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{R}, \vec{r}) \quad (2.1)$$

formundadır. Burada \hat{H} sistemin Hamiltoniyeni, $\psi_i(\vec{R}, \vec{r})$ konumları sırasıyla \vec{r} ve \vec{R} ile ifade edilen sistemin elektron ve nükleonlarını temsil eden toplam dalga fonksiyonunu ve E ise sistemin toplam enerjisini göstermektedir. N_e tane elektron ve N_n tane nükleonun (çekirdek) kendi aralarında etkileşmelerini içeren bir sistem için Hamiltoniyen,

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

şeklinde yazılabilir.

Burada \hat{T}_n çekirdeğin kinetik enerjisi, \hat{V}_{nn} çekirdeklerin birbirinden etkileşiminden kaynaklanan potansiyel enerji, \hat{T}_e elektronların kinetik enerjisi, \hat{V}_{ee} elektronların kendi aralarındaki etkileşiminden doğan potansiyel enerji ve \hat{V}_{en} ise elektronlarla çekirdekler arasındaki etkileşimden doğan potansiyel enerji terimini göstermektedir. Atomik birimler göz önüne alındığında bu Hamiltoniyen,

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_n} \frac{1}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_n} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{I=1}^{N_n} \sum_{j>I}^{N_n} \frac{Z_I Z_j}{|\vec{R}_I - \vec{R}_j|} \quad (2.3)$$

şeklinde yazılabilir. Çok parçacıklı bir sistemde nükleonlar elektronlara göre çok daha yavaş hareket ettiği kabul edilir (Born ve Oppenheimer, 1927). Bu durumda sistem için şu yorumlar yapılabilir.

i) E_{nn} Nükleon-nükleon (çekirdek-çekirdek) etkileşmesinden doğan enerji bir sabit değer olarak kabul edilir.

ii) T_n nükleonun kinetik enerji operatörü sıfır olacaktır.

buradan Hamiltoniyen,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_n} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.4)$$

formunda olur. Bu eşitlikteki birinci kısım kinetik enerji terimi, ikinci kısım dış potansiyel terimini, üçüncü kısım ise elektron-elektron etkileşmesinden kaynaklanan dış potansiyel terimini temsil etmektedir ve bu ifade daha basit bir şekilde,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_i \hat{V}_{du}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1} \sum_{j>i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.5)$$

yazılabilir. Yoğunluk fonksiyon teorisi bu eşitlikten yola çıkarak, bir elektron sistemi için toplam enerji ifadesindeki her bir terimin elektron yük yoğunluğu $n(\vec{r})$ 'nin fonksiyonu olarak yazılmasını amaçlamaktadır. Daha sonra yük yoğunluğu cinsinden yazılan Hamiltoniyenin kullanılmasıyla enerji özdeğerleri,

$$E_i = \langle \psi | \hat{H}_i | \psi \rangle \quad (2.6)$$

formunda verilir ve öz fonksiyonlarını bulmak için kullanılır.

2.1.1. Yük Yoğunluğu Tabanlı Enerji İfadesi

Bilindiği gibi çok parçacıklı sistemler için temel durum dalga fonksiyonları ile yazılmış Schrödinger eşitliğinin çözümü tek parçacıklı sistemlere göre çok zordur. Bu yüzden dalga tabanlı Schrödinger eşitliği yoğunluk fonksiyonu $n(\vec{r})$ cinsinden ifade edilebilirse problemin çözümü kolaylaşacaktır. Çok parçacıklı bir sistemin yoğunluğunu bulmak için, çok-cisim dalga fonksiyonu için tek-parçacık yoğunluk operatörünün beklenen değerini hesaplamak gerekir. Bu durumda sistemin yoğunluk operatörü ve buna bağlı fonksiyon ifadesi sırasıyla,

$$\hat{n}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.7)$$

$$n(\vec{r}) = \langle \psi | \hat{n}(\vec{r}) | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \int \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) |\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \quad (2.8)$$

$$n(\vec{r}) = N \int |\psi(\vec{r} \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (2.9)$$

formunda olur. Bu eşitliğin her iki tarafının \vec{r} üzerinden integrali alınır,

$$\int n(\vec{r})d\vec{r} = N \iiint |\psi(\vec{r}... \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}d\vec{r}_2...d\vec{r}_N = N \quad (2.10)$$

sistemin parçacık sayısı elde edilir. Buradan sistemin Hamiltoniyeni,

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{V}_{du} + \hat{V}_{ee} \quad (2.11)$$

şeklinde yazılabilir. Burada birinci terim kinetik enerji, ikinci terim dış potansiyel ve üçüncü terim elektron-elektron etkileşmesinden kaynaklanan potansiyel enerji terimi temsil etmektedir. Bu enerji terimlerini biraz daha açmak faydalı olacaktır.

Kinetik enerji terimini yoğunluk cinsinden tam olarak yazılması mümkün değildir. Bu yüzden terim aynı yoğunluğa sahip yardımcı bir sistem ile tanımlanmalıdır. Bu sistemin N tane etkileşmeyen parçacık için yoğunluk ifadesi,

$$n(\vec{r}) = \sum_i^{N_e} |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.12)$$

formundadır. Kinetik enerjinin yalnızca bir kısmını temsil eden ifade ise,

$$T_s = -\frac{1}{2} \sum_i \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_{\vec{r}}^2 \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.13)$$

şeklinde ifade edilir. Kinetik enerjiyi tem olarak ifade edebilmek için bu terime ek bir kinetik enerji terimi ΔT eklenmelidir. Son olarak gerçek kinetik enerjin tamamı,

$$T = -\frac{1}{2} \sum_i \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_{\vec{r}}^2 \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} + \Delta T \quad (2.14)$$

şeklinde yazılabilir.

Dış potansiyel enerji terimi sistemin Hamiltoniyenindeki dış potansiyel teriminin beklenen değeri,

$$E_{du} = \langle \psi | \sum_i \hat{V}_{du}(\vec{r}_i) | \psi \rangle \quad (2.15)$$

şeklinde ifade edilir. Buradaki işlem N tane parçacık için yapılırsa dış potansiyel enerji,

$$E_{du} = \int \dots \int \sum_i V_{du}(\vec{r}_i) |\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (2.16)$$

şeklinde yazılır. Denklem (2.8) bu eşitlikte yerine koyulursa enerji değeri

$$E_{du} = \int V_{du}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.17)$$

olarak yoğunluk cinsinden yazılmış olur.

Elektron-elektron etkileşmesinden oluşan potansiyel enerji terimi Hamiltoniyendeki elektron-elektron etkileşmesini temsil eden,

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i=1} \sum_{j>i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.18)$$

teriminin N parçacık için beklenen değeri hesaplanarak,

$$E_{ee} = \frac{1}{2} \int \dots \int \sum_{i=1} \sum_{j>i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} |\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \quad (2.19)$$

$$E_{ee} = \frac{1}{2} \int \dots \int \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \int |\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N \quad (2.20)$$

eşitlikleriyle ifade edilir. Bu terim elektron-elektron etkileşmesini ifade ettiği için sistem iki parçacık yoğunluğu,

$$n^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') = n(\vec{r})n(\vec{r}') + \Delta n^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (2.21)$$

şeklinde yazılır. Burada \vec{r} bir elektronu ve \vec{r}' de ikinci bir elektronun konumunu temsil etmektedir. Bu yoğunluk (2.20)'de yerleştirildiğinde enerji değeri,

$$E_{ee} = \frac{1}{2} \int \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \Delta E_{ee} \quad (2.22)$$

şeklinde olur. Bu terimlerin toplamı alınarak çok parçacıklı bir sistem için yoğunluk cinsinden toplam enerji ifadesi,

$$E = -\frac{1}{2} \sum_i \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_{\vec{r}}^2 \phi_i^*(\vec{r}) d\vec{r} + \int V_{du}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \Delta T + \Delta E_{ee} \quad (2.23)$$

şeklinde ifade edilir. Bu eşitlikteki son iki terim,

$$E_{xc} = \Delta T + \Delta E_{ee} \quad (2.24)$$

şeklinde yazılır ve bu terim çalışılmakta olan maddeye göre değişik yaklaşımlarla ifade edilmektedir. Bu tez çalışmasında sistem için LDA yaklaşımı yapılmıştır. Burada E_{xc} sistemin değişim korelasyon ifadesi olup LDA yaklaşımına göre,

$$E_{xc}^{LDA} = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}(n(\vec{r})) d\vec{r} \quad (2.25)$$

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

$$E = -\frac{1}{2} \sum_i \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_{\vec{r}}^2 \phi_i^*(\vec{r}) d\vec{r} + \int V_{du}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}(n(\vec{r})) d\vec{r} \quad (2.26)$$

şeklinde olur. Bu eşitlik sistemin toplam enerjisinin yoğunluğunun bir fonksiyoneli olarak ifadesini vermektedir.

2.1.2. Hohenberg-Kohn Teoremleri

Hohenberg ve Kohn (1964), Thomas-Fermi modelini araştırırken $n(\vec{r})$ elektron yoğunluğunun değişken fonksiyon olduğu varyasyonel bir yöntem geliştirdiler ve iki önemli teoremin ispatını verdiler. Bu yöntemde, dış potansiyel ne olursa olsun temel durumdaki tüm elektronik sistemlere uygulanan bir $F[n(\vec{r})]$ evrensel fonksiyoneli vardı ve esas iş bu fonksiyoneli tanımlayabilmektir. Bu fonksiyonel bilindiğinde verilen bir dış potansiyelde temel durum enerjisini belirlemek kolaylaşıyordu.

Teorem 1

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

Teoremin 1'in Sonucu

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

Sistemin Hamiltoniyenini,

$$\hat{H} = \hat{F} + \hat{V}_{du} \quad (2.27)$$

şeklinde yazalım. Buradaki \hat{F} değeri,

$$\hat{F} = \hat{T} + \hat{V}_{ee} \quad (2.28)$$

kinetik enerji ve elektron-elektron etkileşmesi teriminin toplamını ifade eden Hamiltoniyen terimini göstermektedir. Bu durumda $n_0(\vec{r})$ temel durum yoğunluğundaki sistem için iki farklı $\psi_{du}^{(1)}(\vec{r})$ ve $\psi_{du}^{(2)}(\vec{r})$ dalga fonksiyonundan elde edilmiş iki farklı

$\hat{H}_{du}^{(1)}(\vec{r})$ ve $\hat{H}_{du}^{(2)}(\vec{r})$ Hamiltoniyenin eşit olmayan iki tane dış potansiyel $\hat{V}_{du}^{(1)}$ ve $\hat{V}_{du}^{(2)}$ olduğunu varsayalım. Varyasyonel prensibe göre enerji değeri,

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle < \langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle \quad (2.29)$$

şeklindedir. Bu temel durumun dejenere olmadığını düşünürsek, eşitsizlik tamamıyla kaldırılabilir (Koh, 1985, Levy, 1982, Levy and Perdew, 1985). Çünkü iki Hamiltoniyende aynı $n_0(\vec{r})$ temel durum yoğunluğuna sahiptir. Bu durumda (2.29) eşitliğini yeniden,

$$\langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle = \langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(2)} | \psi^{(2)} \rangle + \int [\hat{V}_{du}^{(1)} - \hat{V}_{du}^{(2)}] n_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.30)$$

şeklinde yazılır. Bu durumun tersi düşünülürse aynı ifade,

$$\langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(2)} | \psi^{(1)} \rangle = \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle + \int [\hat{V}_{du}^{(2)} - \hat{V}_{du}^{(1)}] n_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.31)$$

şeklinde de ifade edilebilir. Denklem (2.29) dan yola çıkılarak $E^{(1)}$ ve $E^{(2)}$,

$$E^{(1)} < \langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle \quad (2.32)$$

$$E^{(2)} < \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(2)} | \psi^{(1)} \rangle \quad (2.33)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki $E^{(1)}$ ve $E^{(2)}$ ifadelerine sırsıyla denklem (2.30) ve (2.31) yerleştirilirse ve eşitlikler taraf tarafa toplanırsa,

$$E^{(1)} + E^{(2)} < E^{(1)} + E^{(2)} \quad (2.34)$$

şeklinde ifade edilen çelişkili bir durum ortaya çıkacaktır. Bu da bizim teoremi *olmayana ergi yöntemi* ile ispatlamamızı sağlamaktadır.

Teorem 2

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

Teoremin 2'nin Sonucu

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

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

$$E_{HK}[n] = T[n] + E_{iç}[n] + \int V_{du}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + E_{II} \quad (2.35)$$

şeklinde ifade edilir. Buradaki E_{II} karşılıklı etkileşen çekirdeklerin enerji ifadesini göstermektedir. Bu denklemdaki $F[n]$ sistemin kinetik ve iç potansiyel enerjisini temsil etmekte ve

$$F_{HK}[n] = T[n] + E_{iç}[n] \quad (2.36)$$

şeklinde yazılmaktadır. Bu ifade bütün sistemler için aynı şekilde ifade edilmektedir. (2.36) ifadesi (2.35)'te yerleştirilirse sistemin toplam enerji ifadesi,

$$E_{HK}[n] \equiv F_{HK}[n] + \int V_{du}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + E_{II} \quad (2.37)$$

formunda yazılır. Temel durumdaki bir sistemin enerjisi tek bir temel durum yoğunluğu $n^{(1)}(\vec{r})$ kullanılıp Hamiltoniyenin beklenen değeri hesaplaması,

$$E^{(1)} = E_{HK}[n^{(1)}] = \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle \quad (2.38)$$

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

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle < \langle \psi^{(2)} | \hat{H}^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle = E^{(2)} \quad (2.39)$$

şeklinde ifade edilir. Bu şekilde yapılan hesaplamalar sonucunda sistemin toplam enerjisinin minimum olduğu zaman ki yoğunluğu, sistemin temel durum yoğunluğu olarak kabul edilir.

2.1.3 Kohn-Sham Denklemleri

Çok-elektronlu sistemleri için Kohn ve Sham (1965), değişim ve korelasyon etkilerini de içeren, Hartree-Fock denklemlerine benzeyen öz-uyumlu denklemler için bir formülasyon ifade ettiler. Bu formülasyona göre gerçek ve etkileşen elektronların olduğu bir sistem, etkileşimin olmadığı hayali bir sisteme dönüştürülüp elektronlar etkin bir potansiyel etkisinde hareket ettirilmektedir. İşte elektronların hayali bir sistemde hareketini sağlayan bu potansiyele Kohn-Sham tek-parçacık potansiyeli denmektedir.

Diğer bir taraftan Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, dalga fonksiyonlarını kullanmadan sadece temel durum elektron yoğunluğunu kullanarak çok elektron sistemlerinin özelliklerini belirlemeyi amaçlamaktadır.

Çok parçacıklı bir sistemin toplam enerji ifadesinin türevini alalım

$$\frac{\delta E}{\delta n} \frac{\delta n}{\delta \phi_k^*} = \varepsilon_k \phi_k(\vec{r}) \quad (2.40)$$

N elektronlu bir sistem için relativistik olmayan Schrödinger denkleminin elde edilen yoğunluğa bağlı toplam enerji ifadesi Denklem (2.25)'teki gibi olduğu düşünülürse toplam enerjinin her bir teriminin türevi alınacaktır.

Denklem (2.25)'e göre dış potansiyel enerji terimi,

$$E_{du} = \int V_{du}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} \quad (2.41)$$

şeklindedir ve bu ifadenin türevi,

$$\frac{\delta E_{du}}{\delta n} \frac{\delta n}{\delta \phi_k^*} = V_{du}(\vec{r})\phi_k(\vec{r}) \quad (2.42)$$

olarak hesaplanmaktadır. Kinetik enerji terimi,

$$T_s = -\frac{1}{2} \sum_i \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_{\vec{r}}^2 \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.43)$$

şeklindedir ve bu ifadenin türevi ise,

$$\frac{\partial T_s}{\partial n} = -\frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}}^2 \phi_k(\vec{r}) \quad (2.44)$$

şeklinde olur. Aynı şekil Hertre enerjisi terimi,

$$E_H = \frac{1}{2} \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' \quad (2.45)$$

şeklindedir ve bu ifadenin türevi ise,

$$V_H \phi_k(\vec{r}) = \frac{\partial E_H}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial \phi_k^*} = \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \phi_k(\vec{r}) \quad (2.46)$$

olarak hesaplanır. Son olarak değişim korelasyon enerji terimi (XC),

$$E_{xc}^{LDA} = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{ec}(n(\vec{r})) d\vec{r} \quad (2.47)$$

şekindedir ve bu ifadenin türevi ise,

$$V_{xc} \phi_k(\vec{r}) = \frac{\partial E_{xc}^{LDA}}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial \phi_k^*} = \left(\varepsilon_{xc}^{\text{hom}}(n(\vec{r})) + n(\vec{r}) \frac{\partial \varepsilon_{xc}^{\text{hom}}}{\partial n} \right) \phi_k(\vec{r}) \quad (2.48)$$

olarak hesaplanır. Bütün enerji terimleri bir arada yazılırsa toplam ifade,

$$\frac{\partial E_{xc}^{LDA}}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial \phi_k^*} = \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + \int \frac{n(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{du}(\vec{r}) + V_{xc} \right] \phi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k \phi_k(\vec{r}) \quad (2.49)$$

şekilde olacaktır. Buradaki eşitlikte potansiyel ifadelerin toplamı etkin potansiyel olarak isimlendirilir ve

$$V_{et} = V_{du}(\vec{r}) + V_{xc} \quad (2.50)$$

şeklinde yazılır. Toplam ifadeyi oluşturan tüm terimler Kohn-Sham denklemleri ya da Kohn-Sham orbitalleri olarak bilinir. \hat{V}_{et} potansiyel ifadesi denklem (2.49)'da yerine konulursa ile ifade,

$$\left(\hat{T} + V_{et} \right) \phi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k \phi_k(\vec{r}) \quad (2.51)$$

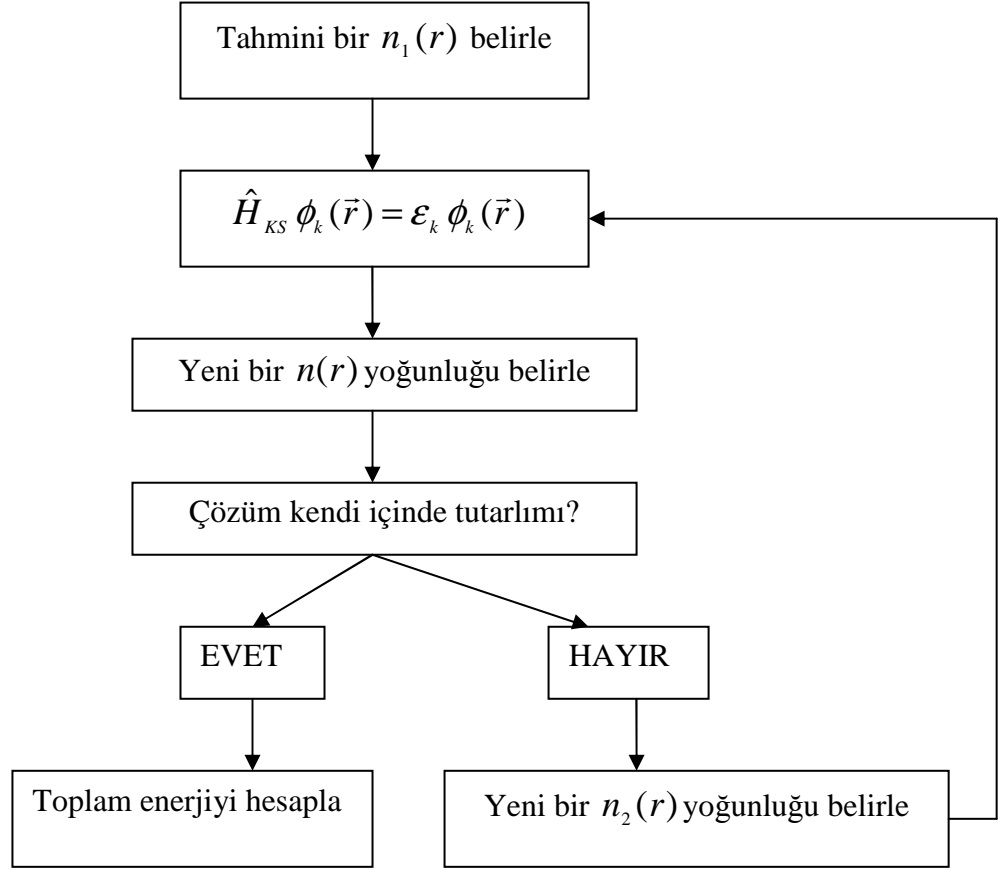
şeklinde olur. Bu eşitlikteki kinetik enerji ve etkin potansiyel Kohn-Sham Hamiltoniyenini oluşturur ve

$$\hat{H}_{KS} = \hat{T} + V_{et} \quad (2.52)$$

formunda ifade edilmektedir. Son olarak sistemin Schrödinger denklemi,

$$\hat{H}_{KS} \phi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k \phi_k(\vec{r}) \quad (2.53)$$

şeklinde yazılabilir. N elektronlu bir sistem için Schrödinger denklemi Kohn-Sham eşitliklerine göre yazılmış olur. Bu denklem yapılan hesaplamaların temelini oluşturmaktadır.



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

2.1.4. Kohn-Sham Denklemlerinin Matris Gösterimi

Kohn-Sham denklemlerini matris formunda gösterebilmek için düzlem dalga fonksiyonundan yararlanmak gerekir. Bir sistemin düzlem dalga fonksiyonu yoğunluğa bağlı bir şekilde,

$$\phi_k(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_b} C_{kn} X_n(\vec{r}) \quad (2.54)$$

olarak ifade edilir. Bu Düzlem dalga fonksiyonunu Kohn-Sham Hamiltoniyenine uygularsak ifade,

$$\hat{H}_{KS} |\phi_k\rangle = \epsilon_k |\phi_k\rangle \quad (2.55)$$

$$\hat{H}_{KS} \sum_n C_{kn} |X_n\rangle = \epsilon_k \sum_n C_{kn} |X_n\rangle \quad (2.56)$$

formlarında olur. Daha sonra eşitliğin diğer tarafına da aynı fonksiyon uygulanıp enerjinin beklenen değeri,

$$\sum_n C_{kn} \langle X_m | \hat{H}_{KS} | X_n \rangle = \epsilon_k \sum_n C_{kn} \langle X_m || X_n \rangle \quad (2.57)$$

Şeklinde yazılmış olacaktır. Burada,

$$\delta_{mn} = \langle X_m || X_n \rangle = 1 \quad (2.58)$$

olduğu bilindiğine göre Kohn-Sham denklemi son olarak

$$\sum_n H_{KS,mn} C_{kn} = \epsilon_k C_{kn} \quad (2.59)$$

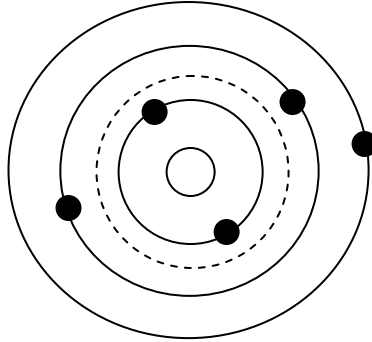
$$\bar{H}_{KS} \bar{C}_k = \epsilon_k \bar{C}_k \quad (2.60)$$

şeklinde yazılır ve bu da Kohn-Sham eşitliğinin matris gösterimi olarak bilinmektedir.

2.1.5. Pseudopotansiyel Formalizmi

Elektronik dalga fonksiyonları Bloch teoremi kullanılarak düzlem dalga setlerine göre yazılabilirler. Fakat elektronik dalga fonksiyonlarını düzlem dalga baz setlerine göre yazmak her zaman iyi bir yöntem değildir. Çünkü bu yöntem ile sıkı bağlı durumda olan kabuk orbitallerini açmak ve kabuk bölgesindeki valans elektronlarının dalga fonksiyonlarının çok hızlı salınımlarını tanımlamak çok kolay bir iş değildir. Bu tanımlamayı yapabilmek için çok fazla sayıda düzlem dalgaya gerek vardır. Bu da elektronik dalga fonksiyonlarının hesaplanmasını çok zorlaştırmakta ve hesaplamaların uzun zaman almasına yol açmaktadır. Ortogonalize düzlem dalga (OPW) metoduna (Herring, 1940) dayanan pseudo-potansiyel yöntemi (Phillips, 1958, Cohen ve Heine, 1970; Yin ve Cohen, 1982), çok az sayıda düzlem dalga setleri kullanılarak elektronik dalga fonksiyonlarının yazılmasına olanak sağlamaktadır.

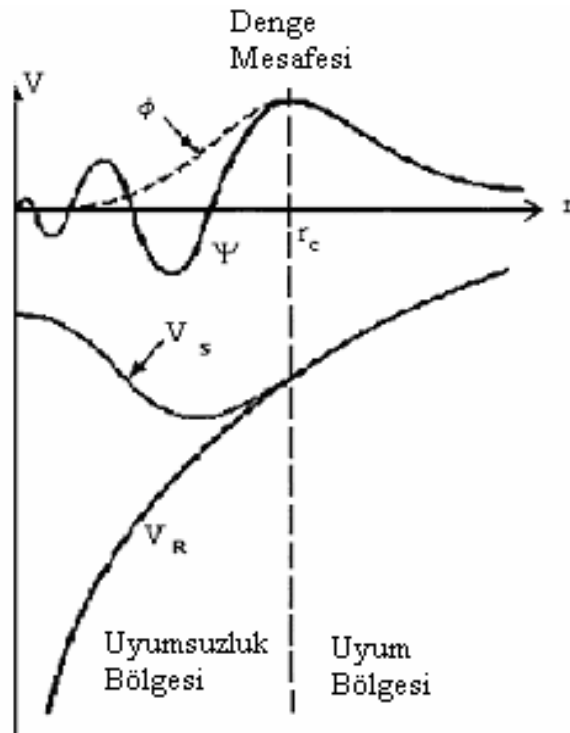
Bu yönteme göre bir atomun enerji seviyeleri Şekil 2.2'deki basit atom modelinde gösterildiği gibi iki kısma ayrılmaktadır. Bunlar sıkı bağlı elektronların ve çekirdeğin oluşturduğu dipteki kabuk seviyeleri ve bu seviyelerden daha yukarıda olan ve genellikle atomun elektronik özelliklerini belirleyen valans bant enerji seviyeleri olarak bilinmektedir.



Şekil 2.2. Basit bir atom modelinde kabuk bölgesi ve valans bant bölgesi.

Kabuk bölgesinde valans seviyeleri, kabuk seviyelerinden daha yüksek toplam enerjilere sahip olduğundan ve kabuk elektronlarındaki aynı büyük ve negatif

potansiyeye maruz kaldıklarından, valans elektronları daha yüksek kinetik enerjide olmalıdırlar. Bu durum bant yapısı hesaplamalarında önemli bir soruna neden olmaktadır. Pseudopotansiyel yöntemi bu sorunu ortadan kaldırmaktadır. Bu yöntemle valans elektronlarını etkileyen ve kabuk elektronlarının kısmen perdelenen iyonik potansiyel yerine bir pseudo-potansiyel (Antoncik, 1959; Phillips ve Kleinman, 1959a,b) tanımlanır. Bu şekilde tanımlanmış olan pseudopotansiyel Şekil 2.3'te görüldüğü gibi kabuk bölgesinde düzensiz bir görüntüde olan dalga fonksiyonu yerine daha düzgün ve yumuşak bir fonksiyon özelliği göstermektedir. Bu potansiyel belirli bir r_c kesme mesafesinden sonra valans dalga fonksiyonları için değişmez aynı kalır ama kabuk bölgesi için ise daha düzgün ve yumuşak pseudo-fonksiyonlarla yer değiştirmektedir.



Şekil 2.3. V_s bir sistemin pseudopotansiyelini, ϕ dalga fonksiyonunu, V_R gerçek potansiyelini, ψ gerçek dalga fonksiyonunu ve r_c ise kabuk bölgesinin yarıçapı temsil eder.

Şekilden de görüldüğü gibi toplam enerji ifadesi,

$$(T + V_s)\phi = \varepsilon\phi \quad (2.61)$$

olarak yazılabilir. Buradaki itici bir potansiyel V_R ile etkin bir potansiyel olan V_A 'nın birbirleriyle yaptıkları etkileşmesinden meydana gelen potansiyel,

$$V_s = V_A + V_R \quad (2.62)$$

şeklinde yazılır. Burada ifade edilen potansiyel zayıf etkilidir.

Şekle dikkat edilirse kabuk bölgesi dışında iki potansiyel ve dalga fonksiyonu birbirinin aynıdır. Bu yöntem bize sistemi tanımlamamızı sağlamakta ve işlem açısından büyük kolaylıklar getirmektedir. Temel ilkelere dayanan yöntemlerle elde edilen pseudopotansiyeller, bir sistemin tüm elektronlarını içeren atomik hesaplamalar yapılarak üretilirler. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) çerçevesinde bu iş, küresel perdeleme yaklaşımı yapılarak ve radyal Kohn-Sham denklemi öz-uyumlu çözümlenerek yapılır (Troullier ve Martins, 1991). Bu çözüm,

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(n(r)) \right] rR_{nl}(r) = \mathcal{E}_{nl}(r) R_{nl}(r) \quad (2.63)$$

eşitliği göz önüne alınarak yapılır. Burada $V(n(r))$ öz uyumlu tek elektron potansiyelini göstermektedir ve

$$V(n(r)) = -\frac{Z}{r} + V_H(n(r)) + V_{XC}^{LDA}(n(r)) \quad (2.64)$$

şeklinde yazılır. Burada $n(r)$, $R_{nl}(r)$ dalga fonksiyonları için toplam elektron yoğunluğunu, $V_H(n(r))$ Hartree potansiyelini ve $V_{XC}^{LDA}(n(r))$ 'de yerel yoğunluk yaklaşımına göre değişim korelasyon fonksiyonunu göstermektedir.

2.1.6. Sistem Parametreleri

Bu çalışmada ab-initio alt yapılı Quantum Espresso Programı'nın temel bileşenlerinden biri olan Düzlem Dalga Öz-Uyumlu Alan programı kullanılmıştır. Espresso, nano boyuttaki yapıların gerçeğe uygun bir şekilde modellenmesi ve elektronik yapısının hesaplamalarının yapılması için kullanılan bir programdır. Araştırmacıların son zamanlarda ilgi odağı olan ve hesaplamalarında sıkça kullanılan bir program olarak bilinir. Bu program düzlem dalga ve pseudo potansiyeller yardımı ile Yoğunluk Fonsiyonel Teorisi temeline göre çalışmaktadır. Bu çalışmada programın relaxion ve scf yapı hesaplamaları kullanılmıştır. Program için önemli olan input dosyasındaki bazı önemli parametreler aşağıdaki gibidir.

- **Calculation:** Yapılacak olan hesaplamanın tipini tanımlar (scf, nscf, relax, bant)
- **pseudo_dir:** Programın, pseudo-potansiyeli hangi konumdan okuyacağını belirtir.
- **ibrav:** Bravais örgünün tipini belirler
- **celldm(i):** Kristalin örgü parametresini belirtir.
- **Prefix:** Girdi ve çıktı dosyalarının isimlerini belirtir
- **E_{cutwfc}:** Dalga fonksiyonu için kinetik enerji kesilim değerini belirtir
- **E_{cutrho}:** Yük yoğunluğu için kinetik enerji kesilim değerini belirtir

Bu parametreler çalışılmakta olan sistemine göre değişen önemli parametreler olarak bilinir. Bu parametreler dışında E_{cut} ve K_{point} olarak bilinen ve sistemin minimum kararlı halini belirlemeye yarayan kavramlarda bulunmaktadır. Bu kavramların fiziksel anlamları vardır.

i) E_{cut}

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

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{n,\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} \quad (2.65)$$

formunda verilir (Payne ve vd. 1992). Bu ifadeden görüldüğü gibi elektronik dalga fonksiyonunu açmak için sonsuz bir düzlem dalga setine gereksinim vardır. Ancak hesaplamalarda bu sonsuz düzlem dalga setine bir sınırlama getirilir. Bu sete sadece kinetik enerjileri belirli bir kesme enerjisinden küçük düzlem dalgalar dâhil edilir.

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2 \leq E_{cut} \quad (2.66)$$

Fakat düzlem dalgaları bu şekilde kesmek, toplam enerjinin hesaplanmasında hataya yol açmaktadır. Ancak kesme enerjisinin değerinin artırılmasıyla hatanın büyüklüğü azaltılabilir. Sistemde toplam enerji değeri belli bir minimuma yakınsadığında kesme enerjisini artırmanın artık bir anlamı yoktur. Buda E_{cut} olarak isimlendirilen, bir sistem için en uygun kesme enerji değeri olarak bilinir.

ii) \mathbf{k}_{point}

Kristallerde birçok hesaplamada dalga vektörünün periyodik bir fonksiyonunun Brillouin bölgesi üzerinden integralinin alınması gerekir. Bu işlem oldukça zor bir iştir. Çünkü bu fonksiyonun her bir noktasındaki değerini bilmek gerekmektedir ve gerçek kristallerde neredeyse sonsuz sayıda elektron olduğu bilindiğine göre, sistem için sonsuz sayıda da k noktası olacaktır.

Ancak elektronik dalga fonksiyonunun değeri birbirlerine yakın k noktalarında hemen hemen aynı olduğundan çok sayıda k noktasının yerine sadece bir tek k noktası için integral almak doğru olacaktır. Dolayısıyla tüm Brillouin bölgesi üzerinden integral almak yerine belirli bir sayıda k noktaları üzerinden integral almak yeterli olacaktır. Bu işlem bize büyük kolaylık kazandırmaktadır. Bunun için Brillouin bölgesinde bazı özel nokta setleri oluşturmak gerekmektedir. Bu özel noktaların üretimi için çeşitli yöntemler geliştirilmiştir (Chadi-Cohen, 1973, Monkhorst-Pack, 1976).

Bunun yanında düzlem dalga baz setlerini kullanmanın getirdiği sorunlardan biri de baz durumlarının sayısının kesme enerjisine göre süreksiz olmasıdır. Bu süreksizlikler farklı noktaları için farklı kesme enerjilerinde olacaktır. Bu sorun daha yoğun kxkx nokta setleri kullanılarak hafifletilebilir.

2.2. Heteroyapılar

Heteroyapılar AlAs, GaAs, Si, Ge gibi yarı iletken malzemelerden oluşmuş yapılardır. Bu yapıların yarıiletkenlerden oluşmasının sebebi yarı iletkenlerin göstermiş olduğu önemli elektronik ve optik elektronik özelliklere sahip olmasından kaynaklanmaktadır(Peressi ve Binggeli, vd. 1998). Bu özellikler şöyle sıralanabilir.

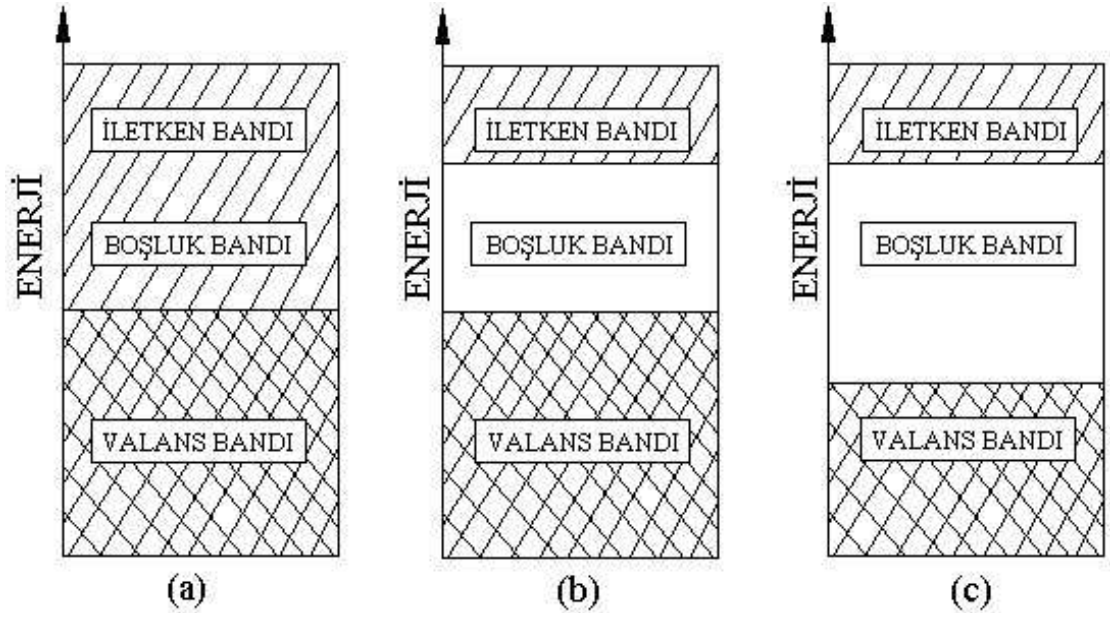
Aynı yarıiletken malzemedan hem iletken hem de yalıtkan özellik gösteren malzeme elde etmek mümkün. İletkenler her zaman tümüyle iletken, yalıtkanlarda her zaman tümüyle yalıtkanlardır. Buna karşı yarıiletkenler iki özelliği de gösterebilir. yarıiletkenlerin diğer bir özelliği ise aynı yarıiletken malzemeye farklı katkı atomları eklenerek bu maddelerin elektronlarla veya deşiklerle yük taşınması mümkün olacaktır. Bu özelliklerin bir sonucu olarak heteroyapılardan: Diyot (iki uçlu) ve transistör (üç uçlu) gibi kontrol işlevli devre elemanları yapmak mümkün olmaktadır. Bu üç uçlu devre elemanları (**VE, VEYA**) mantık sistemine göre çalışan mantık elemanları yapımını olanaklı kılmaktadır. Günümüz teknolojisi bu seviyeye elektronik mantık elemanlarının üretimi sayesinde ulaşmıştır.

2.2.1. Bant Yapıları

Bir materyalin yüzey atomik yapısının belirlenmesi ve yüzey atomik yapısının materyalin elektronik özellikleri ile ilişkisi modern yüzey biliminde ve teknolojide önemli bir rol oynamaktadır. Günümüzün çok kuvvetli deneysel teknikleri ve teorik modelleri özellikle yarıiletken yüzeylerine odaklanmıştır. Son yirmi yılda elektronik özellikler, geometrik yapı, titreşimler ve optik özellikler üzerine binlerce çalışma yapılmıştır. Yapılan bu çalışmalarda deneysel teknikler, yarıiletken yüzeylerin çalışılmasında başarılı bir şekilde kullanılmıştır. Bu teknikler ile ölçülen değerler, teorik metotlar kullanılarak hesaplanan değerlerle iyi bir uyum sağlamaktadır.

Yarıiletken çalışmalarında kullanılan son teorik yaklaşımların hemen hemen hepsi enerji bant teorisi üzerine kurulmuştur. Bu teori ilk defa Bloch tarafından

çalışılmıştır. Bloch, kusursuz bir kristalde enerji bant yapı hesabı için kuantum mekaniğini kullanmıştır. Teori tek elektron yaklaşımı üzerine kurulmuştur. Fakat elektron-elektron etkileşmesini yok saydığından ideal değildir. Bu sebeple en güvenilir yaklaşım, öz-uyum alan teorisini kullanan Kohn-Sham ve Hohenberg' in Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi üzerine temellendirilir.



Şekil 2.4. İletkenlik derecesine göre değişen bant enerjilerinin basit bir gösterimi (a) İletken, (b) Yarı iletken, (c) Yalıtkan

Şekil 2.4 iletken, yarıiletken ve yalıtkan maddelerin temel bir şekilde enerji bant yapısını göstermektedir. Şekilde de görüldüğü gibi iletken maddelerin iletim bantı ile valans bantı arasında hiç boşluk yoktur ve bu yüzden iletken özellik gösterirler. Yalıtkanların ise iletim ve valans bantı arasındaki mesafe çok büyük olduğundan elektronlar iletim bantına geçememekte ve bu yüzden iletim gerçekleşmemektedir. Yarı iletkenlerde de boşluk bantı vardır. Bu bant aralığı yarı iletkenin duruma göre hem iletken hem yalıtkan özellik göstermesini sağlar. Bunun yanında yarı iletkenler direk ve indirek olmak üzere iki çeşit bant aralığına sahiptir. Yarı iletkenlerin bu karakteri optik

özelliklerini belirler ve opto-elektronik uygulamalar için kullanılıp kullanılmayacağı konusunda önemli bir rol oynamaktadır.

Yukarıda da görüldüğü gibi bant aralığı bir maddenin iletkenliği için çok önemli bir unsurdur. Çünkü bir maddenin iletim yapabilmesi için valans bantındaki elektronların uyarılıp iletim bantına geçmesi gerekmektedir. Buna bağlı olarak bant aralığı ne kadar kısa ise iletim özelliği o kadar çok olacaktır. Örneğin Ge'un bant aralığı 0,6 eV (yarıiletken) iken C'un bant aralığı 5,4eV (yalıtkan) olarak bilinmektedir.

Yarı iletkenler genelde komşu atomları ile kovalent bağ oluşturur. Her ne kadar komşu atomlar elektronlarını ortaklaşa kullanarak kovalent bağ oluştursalar da, bazı elektronlar gerekli ısı enerjisine sahiplerse, buldukları bağı terk edebilirler. Bu olayın olması için ısı enerjisi miktarının en az E_g olarak adlandırılan bant aralığına eşit olması gerekir. Eğer elektronların enerjileri E_g 'den büyük ise elektronlar kristal içerisinde serbest olarak dolaşırlar. Böylece elektronların terk ettiği bağlarda boşluklar oluşur. Dolayısıyla bu durumda iletkenlik bantında elektronlar, değerlik bantında ise boşluklar iletkenliği sağlarlar.

2.2.2. Öz Uyum Hesaplamaları

Yarıiletken teknolojisinde en önemli ve sıkça kullanılan özelliklerden birisi bant düzensizliklerinin temelde ana bileşenlerinin bulk özellikleri tarafından belirlenip belirlenmediği durumudur. Diğer önemli bir özellik ise yarı iletkenlerin alaşım ve katkıyla yoluyla elektrik özelliklerinin içsel olarak değiştirilebilme olasılığıdır. Potansiyel bant kıyı kayması problemi ile ilgili teorik araştırmaları iki kısma ayrılabilir(Peressi ve Binggeli, vd. 1998).

- i) Arayüzeydeki elektronik yük dağılımını sağlayan ve uyumlandırma, tutarsızlık ve kusur gibi önemli arayüzey detaylarının çalışmasını sağlayan öz-uyum ab-initio hesaplamaları.
- ii) ab-initio hesabının yanı sıra 'model' teoriler olarak adlandırılan arayüzey tanımlamasında basitleştirilmiş ve etkili uygulamaların yapılabildiği teorilerdir.

Bu tez çalışmasında son zamanlarda çok elektronlu sistemlerin enerjik ve elektronik yapısının çalışılabilirdiği ab-initio hesaplaması kullanılmıştır. Bu hesaplama ampirik parametre kullanmadan kuantum mekanik eşitliğinin çözümü temeline dayanmaktadır. Bu çözüm sayesinde deneylerle anlamlı bir karşılaştırma yapmak ve henüz denenmemiş kesin tahminler elde etmek mümkündür. Bu şekilde yapılan çözümlerle, deneysel çalışmalarla bir karşılaştırma yapmak ya da henüz hiç denenmemiş çalışmalara da ışık tutmak amaçlanmaktadır.

Ab-initio programlarında yerel yoğunluk yaklaşımının (LDA), yoğunluk fonksiyonel teorisine (DFT) (Hohenberg and Kohn, 1964, Kohn and Sham, 1965) uygulanması güvenilir sonuçlar vermektedir. Bu, güvenilirlik kristal sistemlerin elektronik taban durum özellikleri için geçerli sonuçlar sağlamaktadır (Lundqvist and March, 1983, Martin, 1985, Jones and Gunnarson, 1989, Cohen, 1985). DFT birbirleriyle etkileşen elektronların çok cisim problemini öz-uyumla çözümlenmiş (SCF) ile tek parçacıklı Schrödinger sistemi eşitliğine indirgemektedir (Kohn and Sham 1965, Ceperley and Alder 1980). Bu hesaplamalar da aynı zamanda bir maddenin kimyasal bağ olayından sorumlu olan ve ilgili fiziksel özellikleri belirleyen valans elektronlarıyla ilgili olan (Pickett ,1989) pseudopotansiyel uygulaması yapılmaktadır.

Sistemin önemli parametrelerinden olan, periyodik katılar için kullanılan düzlem dalga baz setleri genellikle tek parçacıklı elektron orbitallerine yayılır. Bu yüzden sistem belli bir kinetik enerji kesim değerine uyarlanan düzlem dalga baz setleri içermektedir. Düzlem dalgaların değerleri sistemin tanımlanması ve hesaplamaların hassasiyeti için çok önemlidir.

Düzlem dalga baz set seçimi elverişli bir ters uzay formülasyonuna ve sistemin toplam enerjisinin basit bir tespitine olanak sağlamaktadır (Nielsen and Martin, 1985). Bu özellik aynı zamanda atomik yapının relax olması için kullanılır. Bunun yanında bir kopleks süper hücrede bulk kristali veya optimize olmuş bir yüzey kristali veya optimize olmuş bir yüzey geometrisi için yapısal parametrelerin dengesine izin vermektedir (Peressi ve Binggeli, vd. 1998). Elektron yoğunluğundaki gibi miktarı belirlemede önemli bir yeri olan Brillouin Zone (BZ) daki integraller bir takım özel k noktalarının ayırık toplamı tarafından hesaplanır (Baldereschi, 1973). Bu setlerin

yoğunluğu aynı zamanda hesaplamaların doğruluğunu belirleyen bir maddedir. Küçük değerlerdeki belirsizlik k noktaları ve buna benzer bazı parametrelerin yakınsama hesapları ile tahmin edilmeye çalışılır. Aynı kural süper hücre sistemlerinin ideal minimum enerji seviye durumunun tanımlanması için de geçerlidir (Baroni ve Peresi, vd. 1993). Bu belirsizlik üzerine bir başka araştırma ise hesaplardaki pseudopotansiyel seçimi ve kullanılan örgü parametre sonuçlarıdır (Baldereschi ve Peresi, vd. 1993).

Bu çalışmada kullanılan sistemlerin atomik yapısı relax olarak hesaplanmış ve E_{cut} , k_{point} ve örgü sabiti gibi parametrelerin yakınsama çalışması yapılmış sistemin minimum enerjideki yapısı tanımlanmıştır. Bu işlemlerin yapılmasıyla sistemdeki belirsizlik durumlarının ortadan kaldırılması amaçlanmaktadır. Belirsizlik ne kadar az olursa, sistem de o kadar gerçeğe yakın bir şekilde tanımlanmış olacaktır.

2.2.3. Süperhücre ve Mikroskobik Averaj Tekniği

Arayüzeyler, makul derecede küçük atom değerlerinde ve problemdeki ters uzay formülasyonuna uygunluğuna izin veren süper hücrelerin periyodik tekrarı şeklinde çalışılmaktadır. Genel anlamda süper hücreler sitekometri ve geometri bakımından eş değer olan düzensiz etkiler yüzünden elektrik alandan kaçınmak amacıyla iki ara yüzeyi içermektedir. Eğer bitişik ara yüzeyler birbirlerini etkilemeyecek şekilde yeteri kadar ayrı olurlarsa bu izole edilmiş arayüzey komfügrasyonu iyi temsil edilmiş olacaktır. Aynı zamanda süperhücrelerde oluşan arayüzeylerin öz-uyum hesapları bize elektronik yük yoğunluğu dağılımlı ve buna bağlı olarak ta elektrostatik potansiyeli bulmaktadır.

Arayüzeyler geometrik olarak x,y düzlemlerinde periyodik olduklarından, yalnızca z 'nin fonksiyonu olacak bir şekilde,

$$\bar{f}(z) = \frac{1}{S} \int_s f(x, y, z) dx dy \quad (2.67)$$

formunda verilir ve buna ifade düzlemsel averaj olarak bilinir. Bu eşitlikten üç boyutlu elektronik yük yoğunluğundan tek boyutlu yük yoğunlu $\bar{n}(z)$ 'i ve buna bağlı olan

bağlı olarak $\bar{V}(z)$ elde etmek mümkündür. Arayüzeydeki etki buradaki periyodik fonksiyonlar arasındaki farkla ilişkilidir. Bunun gibi bir farklılık makroskobik averaj tekniği yardımı bulk yapıdaki salınımdan kurtulularak geliştirilebilir (Baroni ve Resta, vd.1989, Baldereschi ve Baroni, vd. 1988). Bu makroskobik averaj klasik elektromagnetizmanın temel bir kavramıdır (Jackson, 1975). Mikroskobik değer $f^{(micro)}(r)$ ve makroskobik averajda $f^{(macro)}(r)$ gösterildiği düşünülürse bu iki ifade,

$$f^{(macro)}(r) = \int w(r-r') f^{(micro)}(r') dr' \quad (2.68)$$

olarak birbirine bağlı bir şekilde yazılabilir. Burada $w(r)$ problemin geometrisine ve karakteristik uzunluk ölçüsüne bağlı özenle seçilmiş filtre fonksiyonudur. Bu uygulama iki eş yapılu örgüsü uyuşan materyaller arasındaki arayüzeyler için $w(r)$ 'nin materyallerden bağımsız bir değer olduğu bilinen açık bir uygulamadır. Burada düzlem averaja uygun olarak hareket eden filtre fonksiyon,

$$w(z) = \frac{1}{a} \Theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right) \quad (2.69)$$

şeklindedir. Buradaki Θ tek boyutlu basamak fonksiyonunu temsil eder ve

$$\bar{f}(z) = \frac{1}{a} \int_{z-a/2}^{z+a/2} \bar{f}(z') dz' \quad (2.70)$$

eşitliği ile ifade edilir. Makroskobik olarak averaj edilen sistemde ara yüzeyin her iki tarafında mikroskobik salınım sergilenmez ve bu karşı sabit bir sürekli değer olarak iyileştirilmiş iki hacim yapıda makroskobik bir limit olarak görüldüğü bilinmektedir. Bu makroskobik değerdeki sapmalar arayüzey bölgesini gösterir ve keyfi 'ideal' referans komfigürasyonlarından bahsetmeksizin 'ara yüzey dipolü' olarak adlandırılabilir.

2.2.4. Potansiyel Bant Kıyı Kaymaları

Coulomb etkileşiminin uzun menzilli karakteri genel kötü tanımlanmış bir sonsuz sistemin ortalama elektrostatik potansiyelini $\langle V \rangle$ yapar (Baroni ve Resta, vd. 1989, Baroni ve Peresi, vd. 1993). Buna bağlı olarak, potansiyel bant kıyı kaymaları arayüzey üzerinden iki yarı-sonsuz katı arasında sadece bulk değerleri arasındaki fark olarak basit bir şekilde hesaplanmamaktadır. Bunun yanında ilke olarak arayüzeyin ayrıntılı yapısına bağlıdır. Bu durum arayüzeylerdeki bant hizalanmasını zor kılar ve ilke olarak arayüzey yük dağılımını ve ortak elektrostatik potansiyeli tam olarak hesaplamayı gerektirmektedir (Peressi ve Binggeli, vd. 1998). Buna göre iki bulk bölgesinde elektrostatik potansiyeli makroskopik ortalamaları arasındaki fark tam olarak elektrostatik potansiyel bant kıyı kayması ΔV olarak isimlendirilir ve

$$\nabla V = 4\pi e^2 \int z \bar{\rho}(z) dz \quad (2.71)$$

şeklinde ifade edilir. Burada ρ hacimsi bölgelerde sıfıra eşit olan dipol anındaki toplam yük yoğunluğu olarak bilinir. Denklem (2.71) herhangi bir yüzey ve ara yüzey için ‘arayüzey dipol’ kavramını açık bir şekilde tanımlamaktadır. Genellikle sınırlı bir sistemdeki ortalama potansiyel,

$$\langle V \rangle = \lim_{q \rightarrow 0} \tilde{V}(q) = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2}{q^2} \tilde{\rho}(q) \quad (2.72)$$

şeklinde yük dağılımının ortalama dalga boyu limitine bağlı olarak gösterilir. Burada ρ yük yoğunluğu,

$$\rho(r) = \sum_R \rho_{loc}(r - R) \quad (2.73)$$

şeklinde yazılan kafesteki yük dağılımını nötr olan ve dipol veya quadrapol terim içermeyen bir ifadedir. Bu değer bölgesel atomsu dağılımlara ayrıştırılabilen sistemler için, denklem (2.72) ‘de bir sınırı vardır ve bu durumda ortalama potansiyel sınırsız kristallerde tanımlanabilir bir süreklilik durumun olur. Sert nötr yapılardan oluşan bir kristal için potansiyel ne yarı sınırsız bir örnek yüzeyin altına düşer, ne de bir

arayüzeydeki bant kıyı kaymaları yüzey veya arayüzey yapısının detaylarına bağlıdır. Böyle sistemler için potansiyel bant kıyı kaymaları basitçe, denklem (2.72)'den hesaplanan iki sınırsız katının ortalama potansiyelleri arasındaki farktır ve aynı zamanda bulk özellikleri tarafından kontrol edilen bant kıyı kaymalarını karakterize eden geçişlilik ilişkisini kanıtlamaktadır.

2.2.5 Bant Ayarlaması ve Schottky Barriers

Valans Bant Ayarlaması (Schottky Barriers) olarak bilinen ϕ_p 'yi teoriye uygun bir şekilde cebirsel bir ifadeyle,

$$\phi_p = \Delta E_p + \Delta V \quad (2.74)$$

şeklinde yazılmaktadır. Burada ΔE_p bant yapı terimi olarak ifade edilmiştir. Tek parçacık öz değerleri ortak bulk kristalindeki ortalama elektrostatik potansiyelle ilgili olarak ölçüldüğünde, bant yapısı terimi iki materyaldeki ilgili valanstaki bant uçları arasındaki farktır. Bu durum metalin Fermi seviyesi ve bir metal-yarımetal kontağı için yarı iletken valans bant ucu olarak da bilinmektedir. Bu terim her kristal için standart bulk bant yapısı hesaplamalarında elde edilebilir. Fakat ilke olarak ara yüzeyin yapısal ve kimyasal özellikleriyle ilgili olan elektrostatik potansiyel bant kıyı kaymaları için durum böyle değildir. Bu tanıma göre quasiparticle spectra üzerindeki çok parçacık etkisi gibi (Hybertsen ve Louie, 1986, Zhang ve Tom'ane, vd. 1988, Zhu ve Louie, 1991), mikroskobik quantum etkilerinin hepsinin bant yapısı terimini ΔE_p 'de saklıdır.

Şunu vurgulamak gerekir ki ϕ_p 'nin bir potansiyel bant kıyı kayması bölümü ve tek bir bant terimi değildir. ΔV , elektronik ve iyonik yük dağılımları tarafından üretilen uzun erim elektrostatik potansiyelin bant kıyı kaymalarını kapsamalıdır. Potansiyelin kısa erim bölgesel bileşenleriyle ilgili bütün miktarlar bulk miktarlarıdır ve isteğe göre iki terimden birine dahil edilebilir. Kısa süreli bölgesel potansiyel bileşenleriyle ilgili bütün nicelikler, diğer bir deyişle değişim korelasyonu, pseudo

potansiyelin bir kısmı ve iyonik noktasal yük arasındaki farklar hacimsel niceliklerdir ve isteğe bağlı olarak iki terimden birinde bulunabilir.

Süper hücre hesaplarında Bant Ayarı veya Schottky Barriers Bölgesel Durum Yoğunluğu (LDOS), $N(\mathcal{E}, z)$ olarak adlandırılan ifade,

$$N(\mathcal{E}, z) = \sum_{k,n} \bar{\rho}_{k,n}(z) \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_k) \quad (2.75)$$

eşitliği ile doğrudan değerlendirilebilir. Burada $\rho_{k,n}(r)$ yoğunluğu temsil eder ve elektronik dalga fonksiyonuna bağlı olarak,

$$\rho_{k,n}(r) = |\psi_{k,n}(r)|^2 \quad (2.76)$$

şeklinde yazılır. LDOS, arayüzeylerden yani hetero-eklemlerden uzak olan her iki taraftaki LDOS, bant uçları arasındaki farktan elde edilir. Buna rağmen, LDOS, potansiyel bant kıyı kaymaları yük yoğunluğu sağlamak için ihtiyaç duyulanlarla karşılaştırıldığında, çok sayıda k noktalı süperhücre hesaplaması ve enerji kesintisi gerekmektedir. Bunun yanında daha büyük süperhücre kullanılması gerekmektedir. Çünkü LDOS yük yoğunluğundan daha yavaş olan bulk özellikleriyle boyutsal bir birleşime sahiptir.

2.2.6 Örgüsü Uyuşan Yarımetal Arayüzeyler

GaAs/AlAs bulk heteroyapılar örgüsü uyuşan heteroyapılar arasına girmektedir. Bu konuda çok önemli çalışmalar yapılmakta ve yapılmaya da devam edilmektedir. Bir referans kristali $\langle Ga_{1/2}Al_{1/2} \rangle As$ seçildiğini düşünelim. Bu durumda bir elektronik yük yoğunluğu olan $n_c(r)$ 'ye bağlı olarak arayüzeyde oluşan potansiyel fark,

$$\Delta V = \frac{8\pi e^2 A_c}{\Omega} = \frac{4\pi e^2}{3\Omega} \int r^2 \Delta n_c(r) dr \quad (2.77)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki potansiyel fark iki bağımsız süperhücrenin $\Delta n_c(r)$ olarak ifade edilen öz-uyumlu hesaplamalar sonucu belirlenen yoğunluk yardımı ile hesaplanmaktadır. Bu eşitlik (001) yönünde çoğaltılmış bir sisteme uygulandığında AlAs/GaAs arayüzeyi için potansiyel bant kıyı kaymaları,

$$\nabla V = \frac{4\pi e^2}{a} \int z^2 \Delta \bar{n}_c(z) dz \quad (2.78)$$

formunda yazılabilir. Buradaki a değeri ardışık katyon düzeyleri arasındaki mesafedir. AlAs/GaAs (001) arayüzeyi için yapılmış olan bu hesaplama tutarlı bir hesaplama olan yine arayüzeyle uygulanan LDA-SCF hesaplamaları ile doğrulanmaktadır.

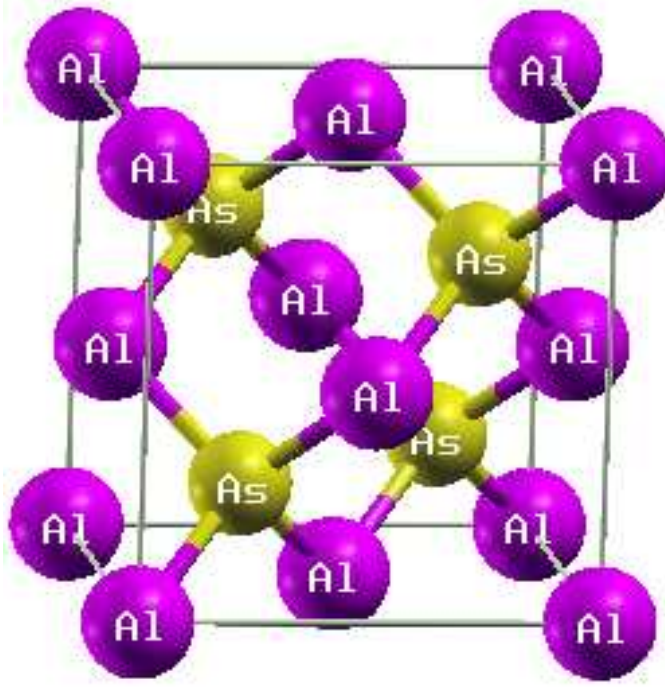
BÖLÜM 3

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, AlAs ve GaAs yarı iletkenleri ele alınarak her bir yarıiletkenin birim hücreleri seçilmiştir. Bu birim hücreler art arda dizilerek AlAs/GaAs bulk heteroyapısı oluşturuldu. Bulk yapıyı oluşturan bu malzemelerin seçilme nedeni bant yapıları ve elektronik özellikleri, elektronik ve optik aletlerin yapılması için uygunluk göstermesidir. Bu çalışmada GaAs ve AlAs için toplam enerji ve temel durum hesaplamalarında bir sistem tanımlamak için çok önemli bir yere sahip olan k_{point} , E_{cut} ve örgü sabitinin yakınsama hesapları yapıldı. Bu hesaplamalardan sonra sistemlerin z yönündeki optimizasyon hesabı ele alındı. Daha sonra toplam enerjinin minimum durumunda elde edilen, iyi tanımlanan sistemlerin sırasıyla potansiyel eğrisi hesaplamaları yapılmıştır.

3.1. AlAs Bulk Oluşturulması ve Yakınsaması

Birim hücresi yüzey merkezli kübik yapı şeklinde olan AlAs yarımetal madde olarak bilinmektedir. AlAs yarıiletkeninin bulk yapıdaki birim hücresi Şekil 3.1'de gösterilmiştir.

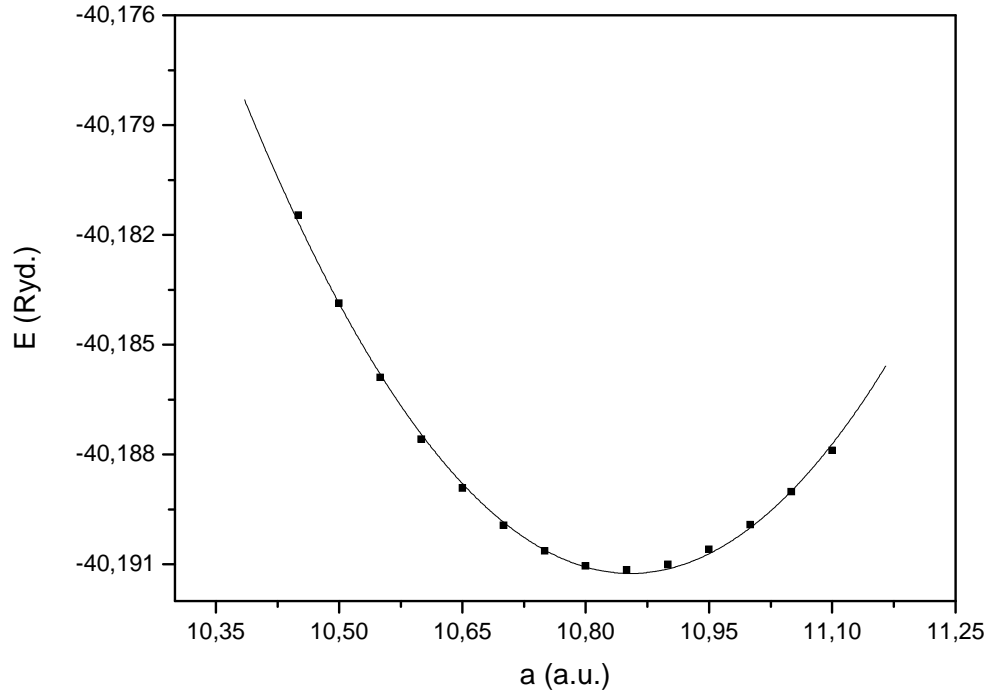


Şekil 3.1. Yüzey merkezli kübik yapıdaki AlAs bulk yapısı.

Şekilde gösterilen bu bulk yapı AlAs maddesinin bir birim hücrelerini temsil etmektedir. Bu birim hücre x, y ve z yönlerinde periyodik olarak sıralanarak maddenin bütünü oluşturur. Her yönde bir birim alınan bu madde bulk yapı olarak isimlendirilir.

3.1.1. AlAs İçin Örgü Sabitinin Yakınsaması

Değişik örgü sabitlerine karşılık gelen örgü enerji değerleri hesaplandı. Enerjinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.2’de verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi minimum toplam enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti 10.835 a.u. olarak belirlendi.

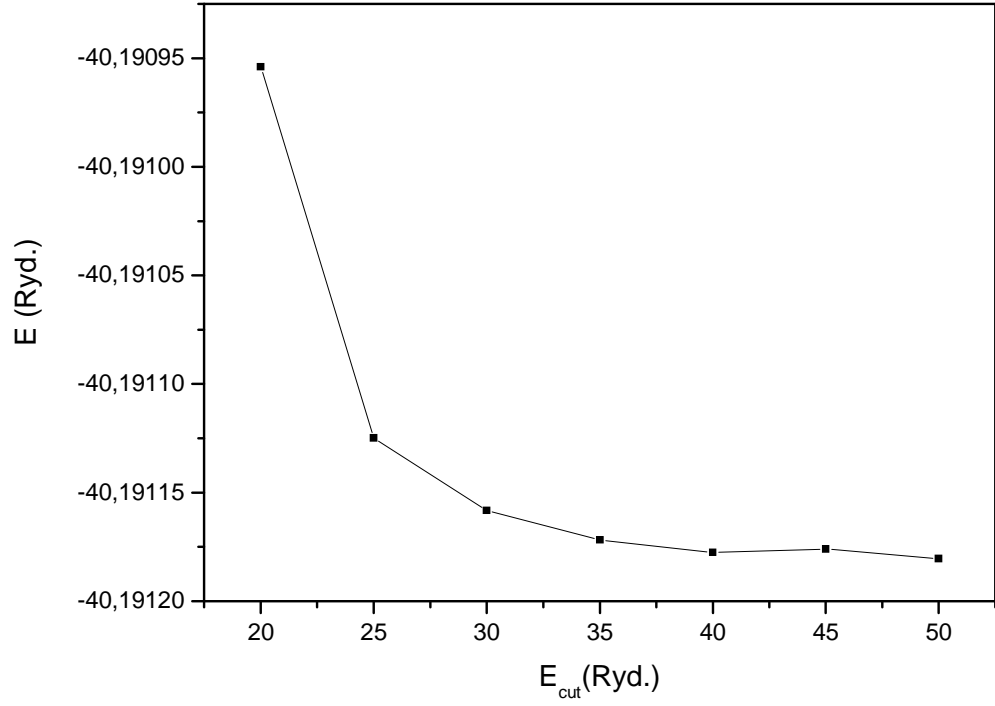


Şekil 3.2. AlAs bulk yapısı için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.

AlAs' in örgü sabitinin yakınsaması, elektronik dalga fonksiyonunu oluşturan düzlem dalga baz setlerini sınırlamak için E_{cut} değeri 30 Ryd. seçilmiştir. Ters uzayda k noktalarını temsil eden düzlem dalga baz setleri ise $6 \times 6 \times 6$ olarak alınmıştır.

3.1.2. AlAs İçin E_{cut} Yakınsaması

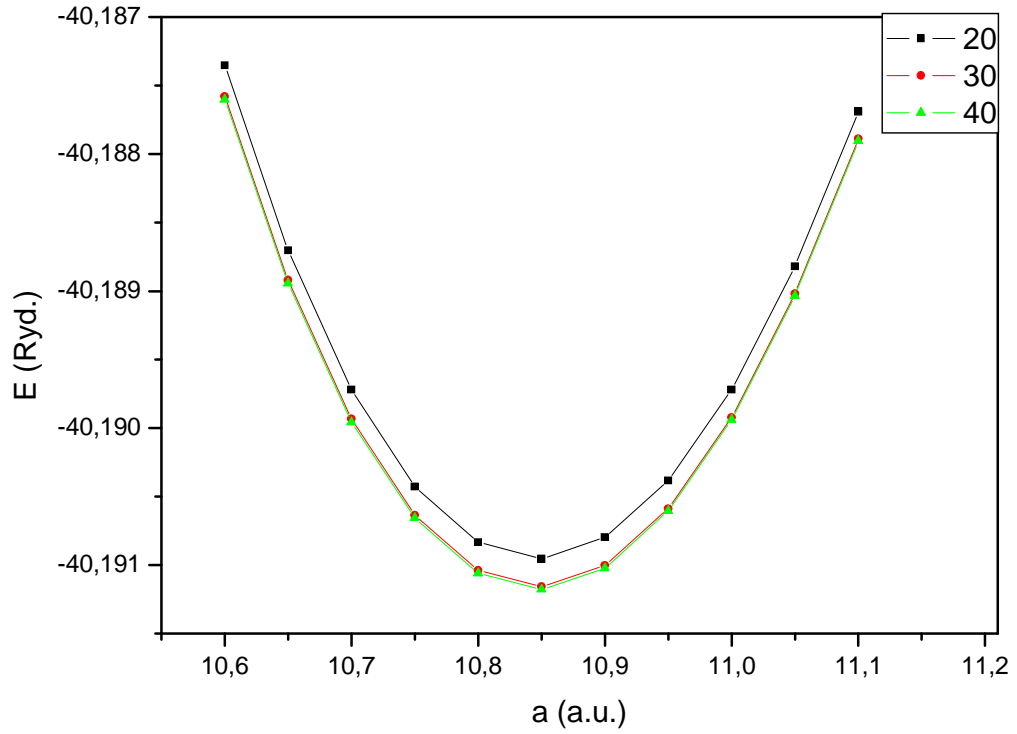
Düzlem dalga öz uyum alan programında çalışılan sistemi tanılamak açısından önemli parametrelerden biri olan kinetik enerji kesim değeri E_{cut} ' ın değişik değerleri için toplam enerji değerleri hesaplandı. Bu durumda toplam enerjinin, kinetik enerji kesim değerlerine göre değişimi Şekil 3.3'de verilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi minimum toplam enerji değeri 30, 35 ve 40 Ryd. değerlerinde bir limit durumuna ulaşmıştır. Diğer bir deyişle, sistem bu değerlerde minimum toplam enerjiye sahiptir.



Şekil 3.3. AlAs bulk yapısı için toplam enerjinin E_{cut} 'a göre değişimi.

AlAs için yapılan bu yakınsama çalışmasında sistem için örgü sabiti ve ters uzayda k nokta değerleri sabit tutulmuştur. Sistemin toplam enerji ve temel durum hesaplamalarında elektronik dalga fonksiyonunu oluşturan düzlem dalga baz setlerini sınırlamak için kinetik enerji kesim değerleri değiştirilmiştir.

Bu yakınsama göz önünde bulundurularak E_{cut} 20, 30 ve 40 Ryd. değerlerine karşılık gelen örgü sabiti yakınsaması elde edilerek Şekil 3.4'de verilmiştir.



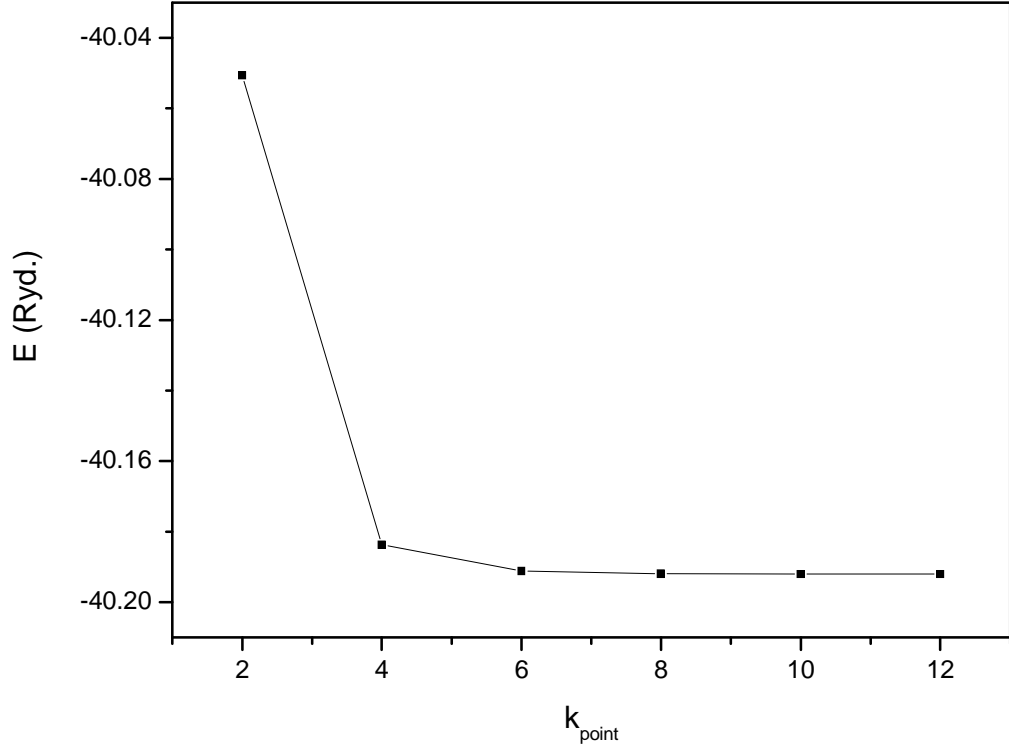
Şekil 3.4. AIAs bulk yapısı için 20, 30, 40 Ryd. E_{cut} değerlerindeki toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi E_{cut} ' in 30 ve 40 Ryd. değerleri minimum enerjiye en yakın durumdadır. 30 ve 40 Ryd. değerleri için hesaplanan örgü sabitleri arasında çok küçük bir fark olduğundan ikisinden biri sistem için uygun bir parametre olarak kabul edilebilir. Hesapların kolay olması ve zaman kazanmak açısından E_{cut} ' in 30 Ryd. olan değeri sistemin en uygun E_{cut} parametresi olarak kabul edilebilir.

3.1.3. AIAs İçin k_{point} Yakınsaması

Sistemi tanımlamak açısından önemli olan bir diğer parametre ters uzayda k_{point} noktalarını temsil eden düzlem dalga baz setleridir. Değişik k_{point} değerleri için toplam enerji hesabı yapılmıştır. Yapılan hesaplamalar sonucu toplam enerjinin k_{point} düzlem dalga baz seti değerine göre değişimi Şekil 3.5'de gösterilmiştir. Şekilden de görüldüğü

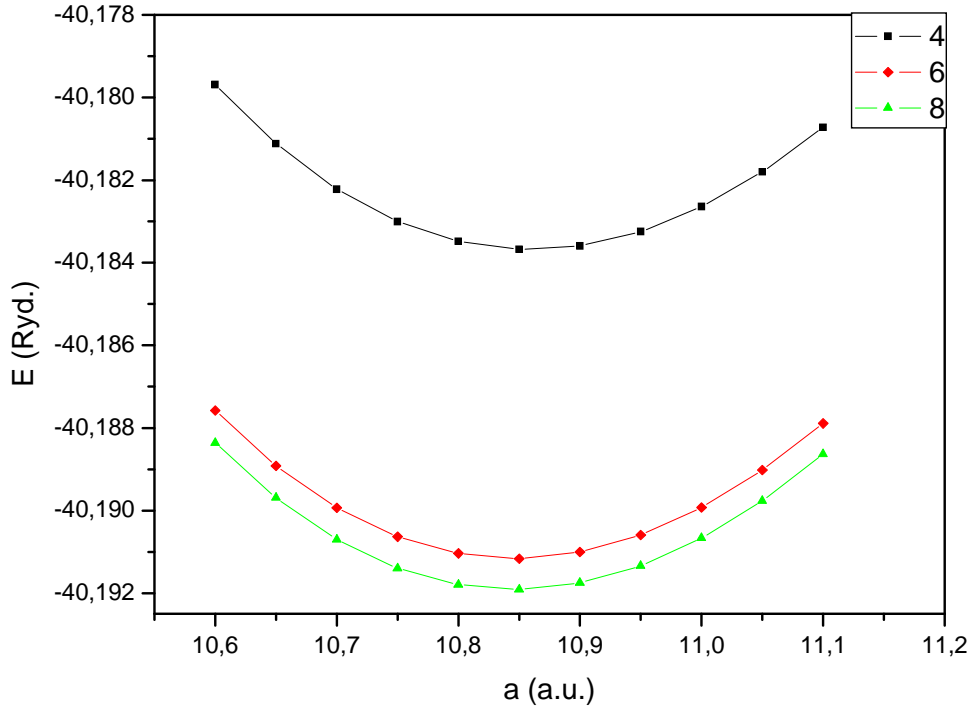
gibi toplam enerji değeri 4, 6 ve 8 değerlerinde bir limit minimum enerji durumuna yaklaşmaktadır. Yani sistem bu değerlerde minimum enerji değerine sahiptir.



Şekil 3.5. AlAs bulk yapısı için toplam enerjinin k_{point} 'e göre değişimi.

AlAs için yapılan bu yakınsama çalışmasında örgü sabiti ve kinetik enerji kesim değerleri sırası ile 10.835 a.u. ve 30 Ryd. alınmıştır. Bunun yanında ters uzayda k noktalarını temsil eden düzlem dalga baz setlerinin değerleri değişmiştir.

Şekil 3.5 incelendiğinde, k_{point} 6 ile 8 değeri yakınlarında enerji değerleri belli bir minimum limitine yakınsamaktadır. Buradan yola çıkarak sistem minimum k_{point} değerini belirlemek için 4, 6 ve 8 değerlerindeki örgü sabiti yakınsama çalışması yapılmış ve bu Şekil 3.6'da verilmiştir.

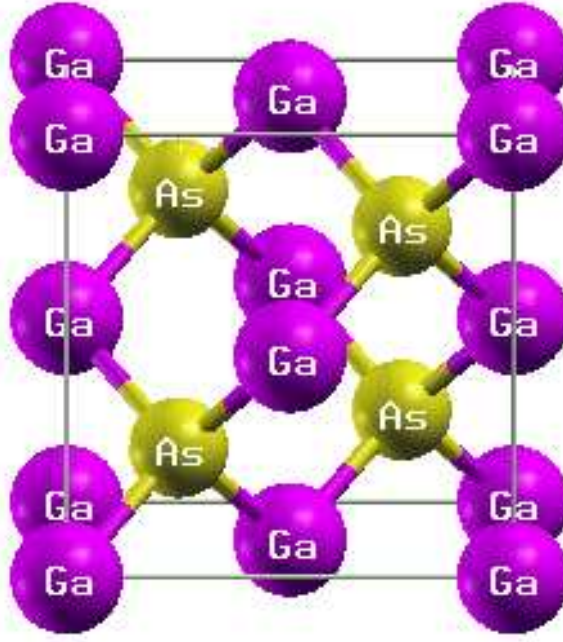


Şekil 3.6. AlAs bulk yapısı için farklı k_{point} değerlerindeki toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi k_{point} 'in 6 ve 8 değerleri minimum enerjiye en yakın durumdadır. 6 ve 8 değerleri için hesaplanan örgü sabitleri arasında çok küçük bir fark olduğundan ikisinden biri sistem için uygun bir parametre olarak kabul edilebilir. Hesaplamaların kolay olması ve zaman ekonomik kullanmak açısından k_{point} 'in 6 olan değeri sistemin en uygun k_{point} parametresi olarak kabul edilmesi uygun görülmüştür.

3.2. GaAs Bulk Oluşturulması ve Yakınsaması

Birim hücresi yüzey merkezli kübik yapı şeklinde olan GaAs yarımetal madde olarak bilinmektedir. GaAs yarıiletkeninin bulk yapıdaki birim hücresi Şekil 3.7'de gösterilmiştir.

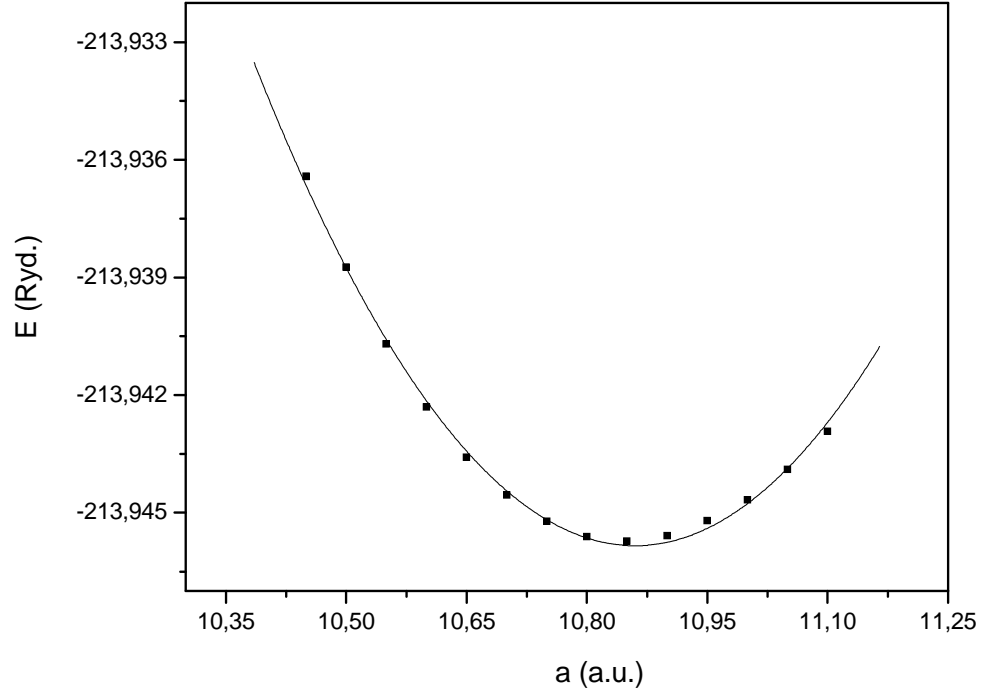


Şekil 3.7. Yüzey merkezli kübik yapıdaki GaAs bulk yapısı.

Şekilde gösterilen bu bulk yapı GaAs maddesinin bir birim hücrelerini temsil etmektedir. Bu birim hücre x, y ve z yönlerinde periyodik olarak sıralanarak maddenin bütünü oluşturur. Her yönde bir birim alınan bu madde bulk yapı olarak isimlendirilir.

3.2.1. GaAs İçin Örgü Sabitinin Yakınsaması

Değişik örgü sabitlerine karşılık gelen örgü enerji değerleri hesaplandı. Enerjinin örgü sabitine göre değişimi Şekil 3.8'de verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi minimum toplam enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti 10.836 a.u. olarak belirlendi.

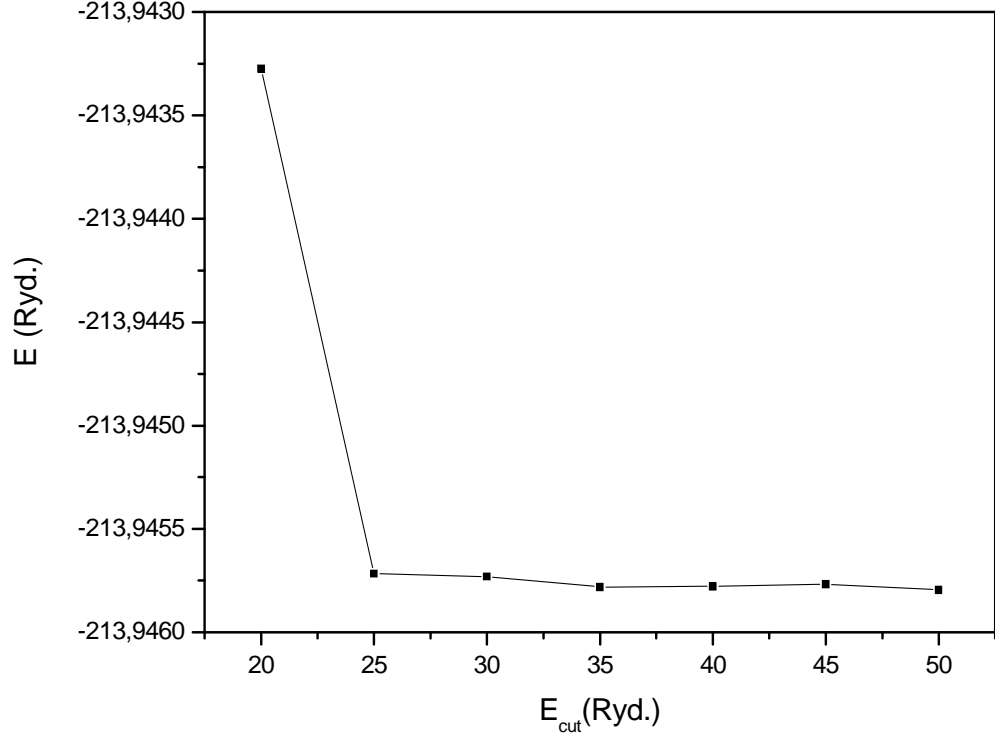


Şekil 3.8. GaAs bulk yapısı için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.

GaAs' in örgü sabitinin yakınsaması, elektronik dalga fonksiyonunu oluşturan düzlem dalga baz setlerini sınırlamak için E_{cut} değeri 30 Ryd. seçilmiştir. Ters uzayda k noktalarını temsil eden düzlem dalga baz setleri ise 6x6x6 olarak alınmıştır.

3.2.2. GaAs İçin E_{cut} Yakınsaması

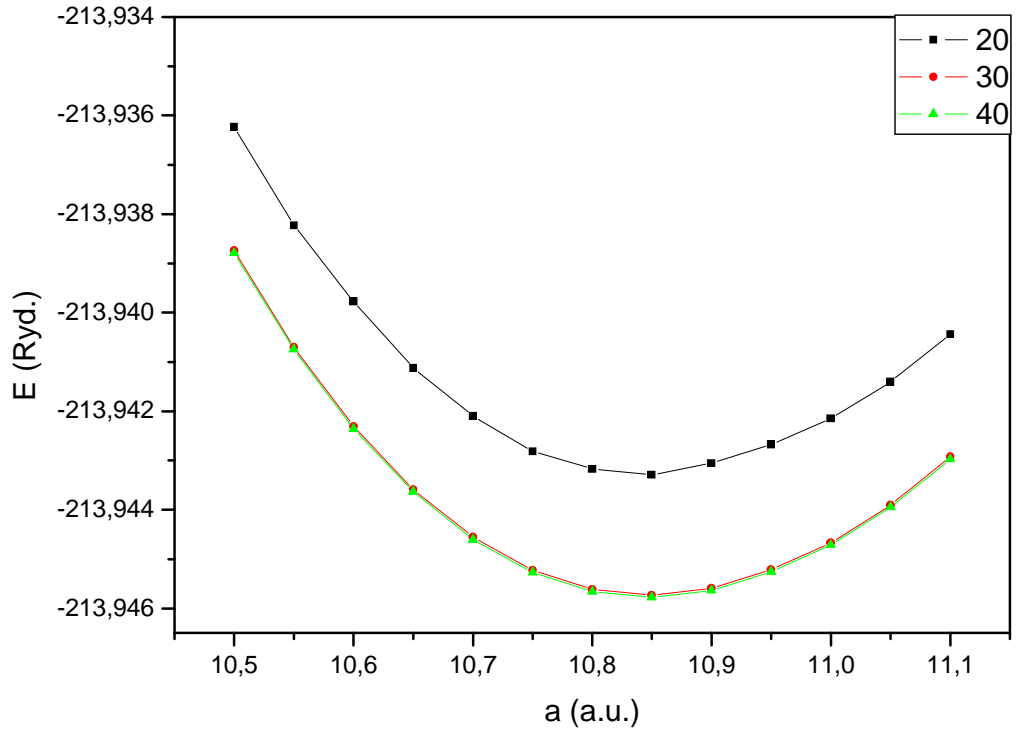
Düzlem dalga öz uyum alan programında çalışılan sistemi tanılamak açısından önemli parametrelerden biri olan kinetik enerji kesim değeri E_{cut} ' ın değişik değerleri için toplam enerji değerleri hesaplandı. Bu durumda toplam enerjinin, kinetik enerji kesim değerlerine göre değişimi Şekil 3.9'da verilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi minimum toplam enerji değeri 30, 35 ve 40 Ryd. değerlerinde bir limit durumuna ulaşmıştır. Diğer bir deyişle, sistem bu değerlerde minimum toplam enerjiye sahiptir.



Şekil 3.9. GaAs bulk yapısı için toplam enerjinin E_{cut} ' a göre değişimi.

AlAs için yapılan bu yakınsama çalışmasında sistem için örgü sabiti ve ters uzayda k nokta değerleri sabit tutulmuştur. Sistemin toplam enerji ve temel durum hesaplamalarında elektronik dalga fonksiyonunu oluşturan düzlem dalga baz setlerini sınırlamak için kinetik enerji kesim değerleri değiştirilmiştir.

Bu yakınsama göz önünde bulundurularak E_{cut} 20, 30 ve 40 Ryd. değerlerine karşılık gelen örgü sabiti yakınsaması elde edilerek Şekil 3.10'da verilmiştir.



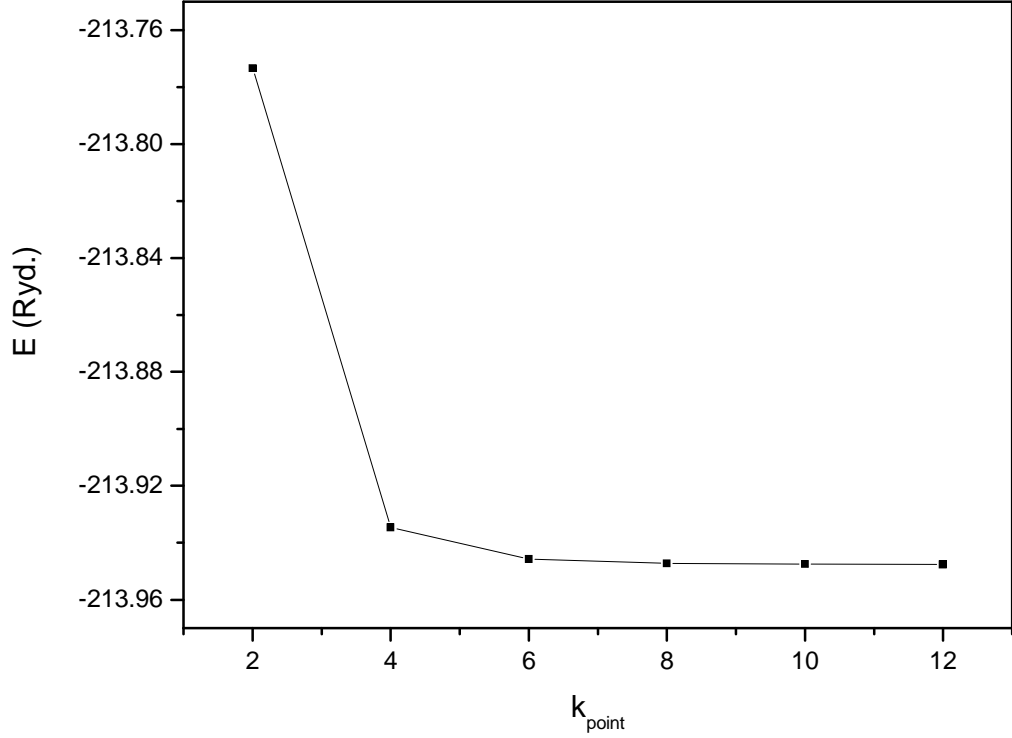
Şekil 3.10. GaAs bulk yapısı için 20, 30, 40 Ryd. E_{cut} değerlerindeki toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi E_{cut} ' in 30 ve 40 Ryd. değerleri minimum enerjiye en yakın durumdadır. 30 ve 40 değerleri için hesaplanan örgü sabitleri arasında çok küçük bir fark olduğundan ikisinden biri sistem için uygun bir parametre olarak kabul edilebilir. Hesapların kolay olması ve zaman kazanmak açısından E_{cut} ' in 30 Ryd. olan değeri sistemin en uygun E_{cut} parametresi olarak kabul edilebilir.

3.2.3. GaAs İçin k_{point} Yakınsaması

Sistemi tanımlamak açısından önemli olan bir diğer parametre ters uzayda k noktalarını temsil eden k_{point} düzlem dalga baz setleridir. Değişik k_{point} değerleri için toplam enerji hesabı yapılmıştır. Yapılan hesaplamalar sonucu toplam enerjinin k_{point} düzlem dalga baz seti değerine göre değişimi Şekil 3.11'de gösterilmiştir. Şekilden de

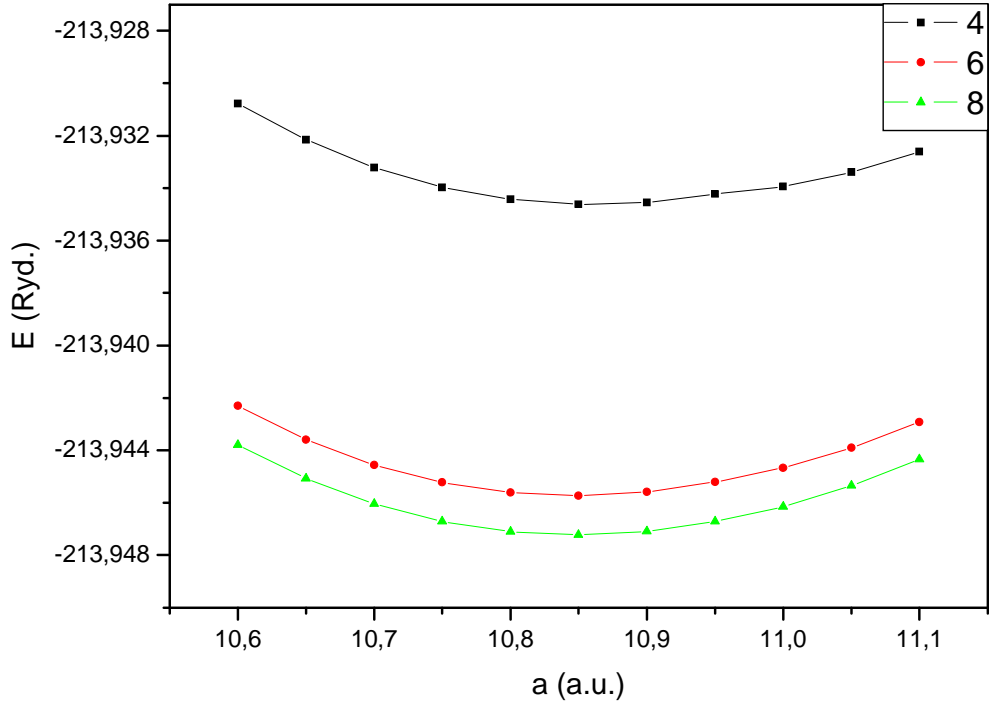
görüldüğü gibi toplam enerji değeri 4, 6 ve 8 değerlerinde bir limit minimum enerji durumuna yaklaşmaktadır. Yani sistem bu değerlerde minimum enerji değerine sahiptir.



Şekil 3.11. GaAs bulk yapısı için toplam enerjinin k_{point} değerlerine göre değişimi.

GaAs için yapılan bu yakınsama çalışmasında örgü sabiti ve kinetik enerji kesim değerleri sırası ile 10.836 a.u. ve 30 alınmıştır. Bunun yanında ters uzayda k noktalarını temsil eden düzlem dalga baz setlerinin değerleri değişmiştir.

Şekil 3.11 incelendiğinde, k_{point} 6 ile 8 değeri yakınlarında enerji değerleri belli bir minimum limitine yakınsamaktadır. Buradan yola çıkarak sistem minimum k_{point} değerini belirlemek için 4, 6 ve 8 değerlerindeki örgü sabiti yakınsama çalışması yapılmış ve bu Şekil 3.12'de verilmiştir.



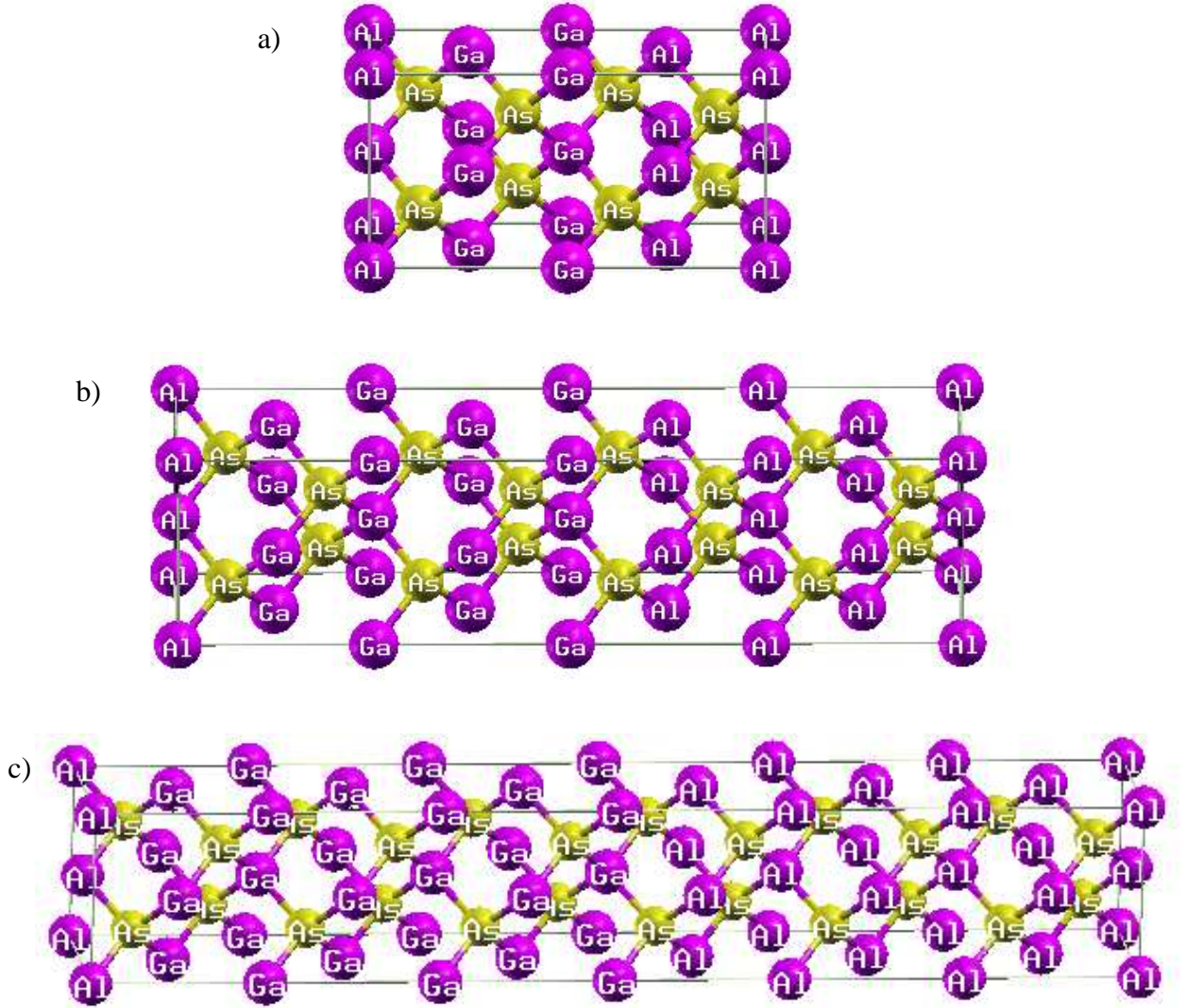
Şekil 3.12. GaAs bulk yapısı için farklı k_{point} değerlerindeki toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi k_{point} 'in 6 ve 8 değerleri minimum enerjiye en yakın durumdadır. 6 ve 8 değerleri için hesaplanan örgü sabitleri arasında çok küçük bir fark olduğundan ikisinden biri sistem için uygun bir parametre olarak kabul edilebilir. Hesaplamaların kolay olması ve zaman ekonomik kullanmak açısından k_{point} 'in 6 olan değeri sistemin en uygun k_{point} parametresi olarak kabul edilmesi uygun görülmüştür.

3.3. AlAs/GaAs Katmanlı Bulk Heteroyapısı

Bu bölümde, AlAs/GaAs için tek, ikişer ve üçer katmanlı bulk yapıları oluşturulmuştur. Tekli yapı (1+1) bir katman AlAs bir katman GaAs, ikişerli yapı (2+2) iki katman AlAs iki katman GaAs ve üçerli yapı (3+3) üç katman AlAs üç katman GaAs bulk katmanlarının (001) yönünde ard arda gelmesi şeklinde dizilerek, katmanlı bulk heteroyapıları oluşturulmuştur. Bu AlAs/GaAs katmanlı bulk heteroyapılarında iki

farklı katman arasında ara yüzey oluşmaktadır. Bu ara yüzeyden dolayı katmanlar arasında bir potansiyel fark meydana gelir. Hetero-yapılardaki bu özellik optik ve elektronik açıdan önemli bir durum oluşturmaktadır. Tek, ikişer ve üçer katmanlı şeklinde olan bu bulk heteroyapılar Şekil 3.13'de gösterilmektedir.



Şekil 3.13. a) Tek katmanlı yapı ((1+1) bir katman AlAs bir katman GaAs), b) İkişer katmanlı yapı ((2+2) iki katman AlAs iki katman GaAs), c) Üçer katmanlı yapı ((3+3) üç katman AlAs üç katman GaAs) bulk heteroyapıları.

Şekilden de görüldüğü gibi AlAs ve GaAs' in bulkların örgü yapıları yüzey merkezli kübik yapı şeklindedir. Bunun yanı sıra örgü sabitleri daha önce belirlendiği gibi AlAs için 10.835 a.u.ve GaAs 10.836 a.u. değerlerindedir. Bu değerlerin çok yakın olduğu görülmektedir. Yapılan bu hesaplamalarda da görüldüğü gibi örgü sabitleri arasında yaklaşık olarak 0.001a.u.'lik bir fark olduğu saptanmıştır. Bu fark çok küçük bir değer olduğundan bu iki yarıiletken malzeme için örgü sabiti uyuşan malzemeler denilebilir.

3.3.1. AlAs/GaAs Arayüzeyinin z Yönünde Örgü Sabiti Optimizasyonu

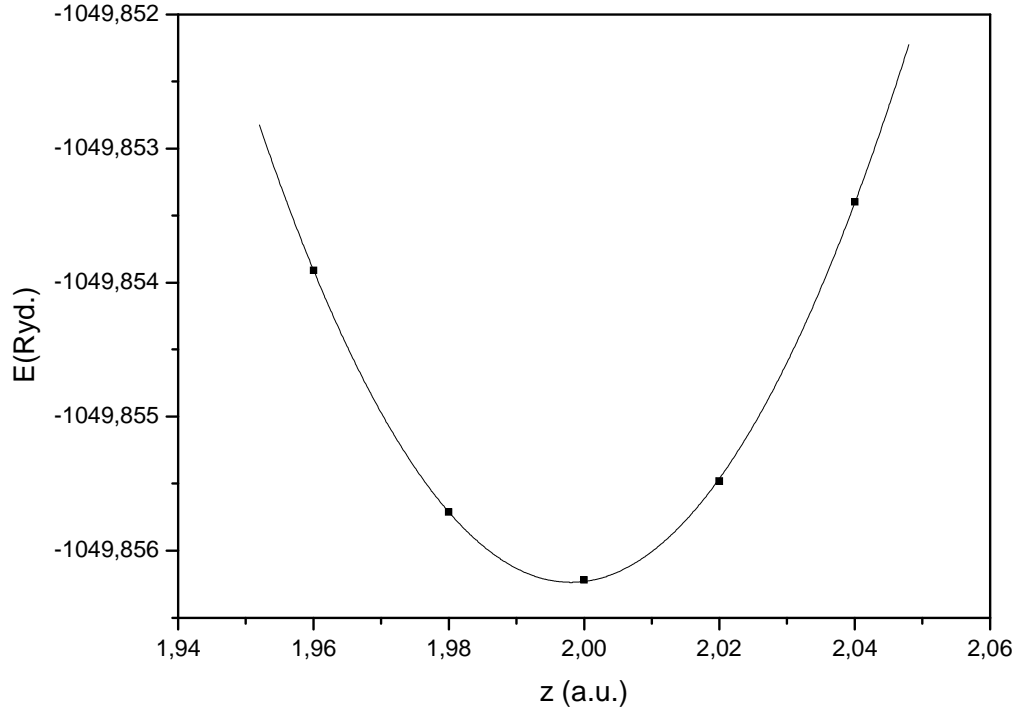
Tekli AlAs/GaAs bulk heteroyapıdaki hücrenin z yönünde bir kuvvet etkisinde çekilmesi sonucu bu yönde uzama ve diğer yönlerde de buna bağlı olarak kısılma olur. Bunun tersi yani bu yapının z yönünde bir kuvvet etkisinde sıkıştırılması sonucu bu yönde kısılması ve diğer yönlerde de buna bağlı olarak genişleme olacaktır. Bu olay Poisson etkisi olarak bilinir. Bu etki sistemin çekilme miktarının Poisson oranı ile çarpımının x, y boyutlarına uyarlanması ile sisteme yansıtılmıştır. Genel olarak bir yapının Poisson oranı -0.1 ile 0.5 arasında değişmektedir. Bu sabit her katı yapı için farklı bir değere sahip olduğundan bu özellik katılar için ayırt edici bir özellik olarak ifade edilebilir. Esnek olan malzemeler için daha belirgin bir özellik olarak bilinir. Tekli yapıdaki AlAs/GaAs bulk yapı için bu özellik göz önüne alınarak, sistemin z yönünde sıkıştırması ve çekilmesi işlemine z yönündeki optimizasyonu denir.

Poisson etkisi dikkate alınarak yapılan hesaplamalar, z yönünde optimizasyon çalışması, hesaplanan örgü sabiti ve enerji değerleri Tablo 3.1'de listelenmiştir.

Tablo 3.1. AlAs/GaAs için tekli bulk heteroyapının z konumu, örgü sabiti ve buna karşılık toplam enerji değerleri.

a (a.u.)	z(a.u.)	E (Ryd.)
10.896	1.96	-1049.8539
10.866	1.98	-1049.8557
10.835	2.00	-1049.8562
10.799	2.02	-1049.8554
10.763	2.04	-1049.8534

Tablodaki bu değerlere göre sistemin toplam enerjisinin z yönü konumuna göre değişimi Şekil 3.14'te gösterilmiştir. Bu hesaplarda sistemin örgü sabiti 10.835 a.u. enerji kesim değeri 30 Ryd. ve sistemi ters uzayda temsil eden düzlem dalga baz seti ise $6 \times 6 \times 6$ olarak alınmıştır. Bu parametre değerleri ikişer ve üçer katmanlı AlAs/GaAs bulk heteroyapılar için de aynı alınacaktır.



Şekil 3.14. AlAs/GaAs (1+1) tekli bulk yapısının toplam enerjisinin z konum değerinin sıkıştırma ve çekme durumlarına göre değişimi.

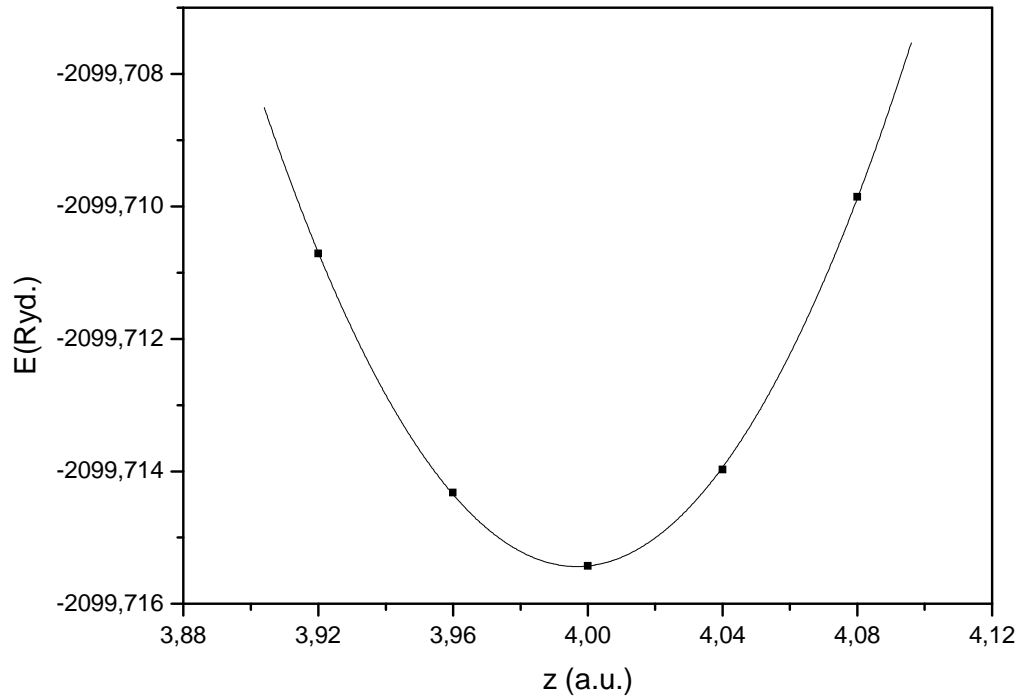
Şekil dikkatlice incelendiğinde, minimum enerji değerine karşılık gelen z değeri 1.9981 a.u. olarak belirlenmiştir. Buna karşılık gelen minimum örgü sabiti değeri 10.825 a.u. olarak belirlenmiştir. Bu ise AlAs/GaAs tekli heteroyapının minimum enerji seviyesindeki en son örgü sabiti değerini verir.

Benzer şekilde, AlAs/GaAs ikişerli bulk heteroyapı için Poisson etkisi dikkate alınarak yapılan hesaplamalar, z yönünde optimizasyon çalışması, hesaplanan örgü sabiti ve enerji değerleri Tablo 3.2'de listelenmiştir.

Tablo 3.2. AlAs/GaAs için ikişerli bulk heteroyapının z konumu, örgü sabiti ve buna karşılık toplam enerji değerleri.

a (a.u.)	z (a.u.)	E (Ryd.)
10.618	3.92	-2099.7107
10.727	3.96	-2099.7143
10.835	4.00	-2099.7154
10.943	4.04	-2099.7139
11.051	4.08	-2099.7098

Tablodaki bu değerlere göre sistemin toplam enerjisinin z yönü konumuna göre değişimi Şekil 3.15’de gösterilmiştir.



Şekil 3.15. AlAs/GaAs (2+2) ikişerli bulk heteroyapısının toplam enerjisinin z sıkıştırma ve çekme durumlarına göre değişimi.

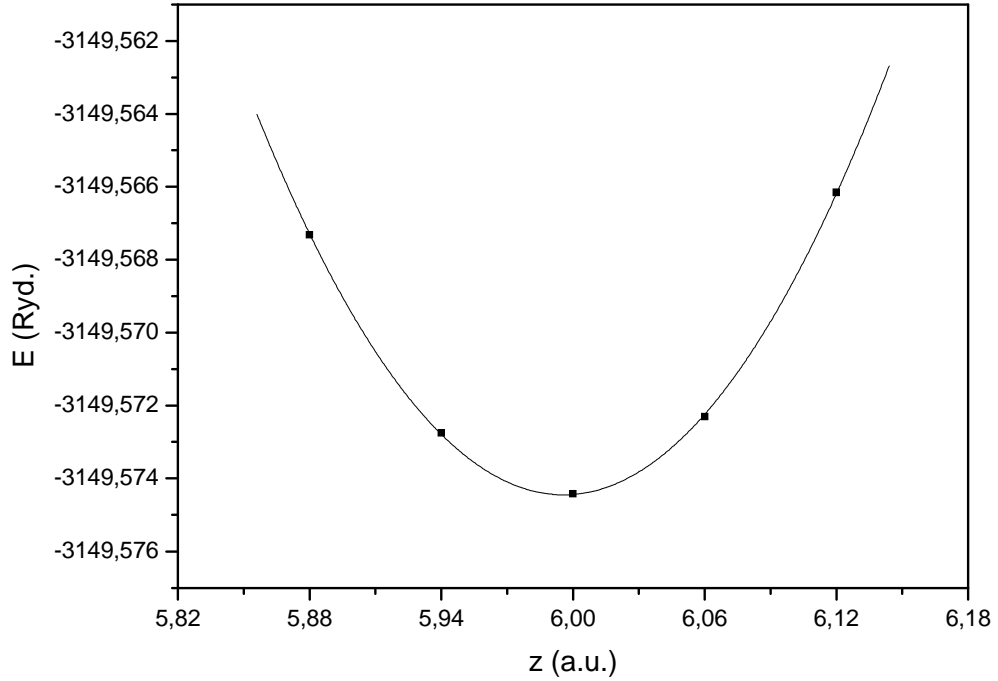
Şekil incelendiğinde, minimum enerji değerine karşılık gelen z değeri 3.9968 a.u olduğu belirlenir. Buna karşılık gelen minimum örgü sabiti değeri 10.826 a.u. olarak belirlenmiştir. Bu da bize AlAs/GaAs ikiyeşerli bulk heteroyapının en son minimum enerji seviyesindeki örgü sabiti değerini verir.

İkiyeşerli yapı için yapılan hesaplamalar benzer şekilde, AlAs/GaAs üçerli bulk heteroyapı için Poisson etkisi dikkate alınarak, z yönünde optimizasyon çalışması ile, örgü sabiti ve enerji değerleri hesaplanarak Tablo 3.3’de listelenmiştir.

Tablo 3.3. AlAs/GaAs için üçerli bulk heteroyapının z konumu, örgü sabiti ve buna karşılık toplam enerji değerleri.

a (a.u.)	z (a.u.)	E (Ryd.)
10.618	5.88	-3149.5673
10.726	5.94	-3149.5727
10.835	6.00	-3149.5744
10.943	6.06	-3149.5723
11.051	6.12	-3149.5661

Tablodaki bu değerlere göre sistemin toplam enerjisinin z yönü konumuna göre değişimi Şekil 3.16’da verilmiştir. Şekille dikkatlice bakıldığında, minimum enerji değerine karşılık gelen z değeri 5.9957 a.u. ve örgü sabiti değeri 10.827 a.u. olarak belirlenmiştir.

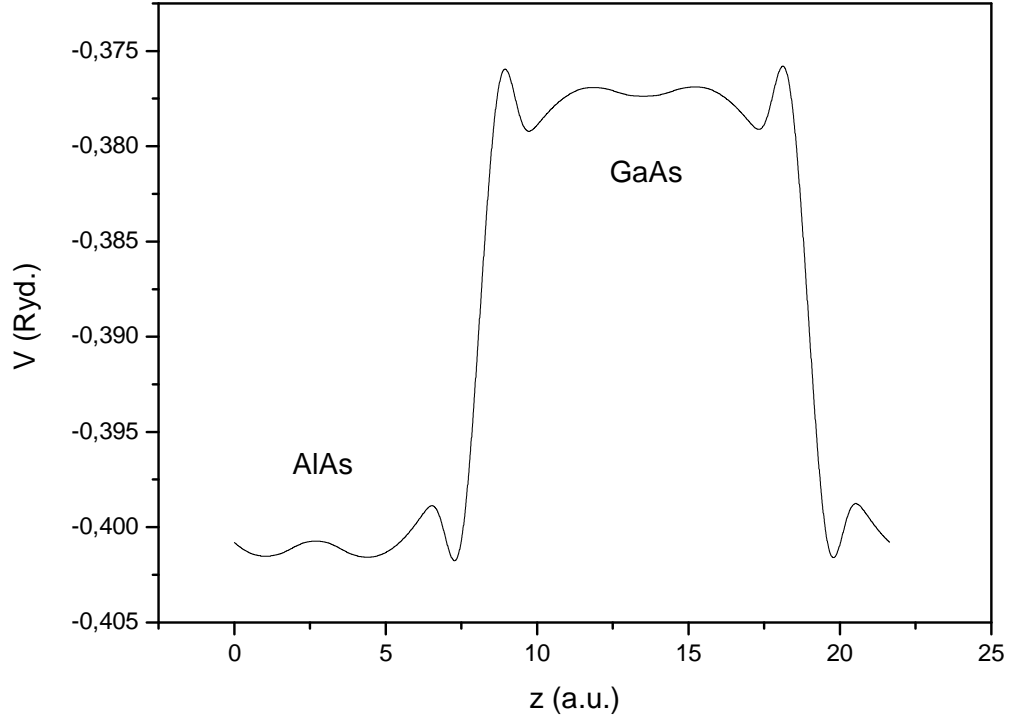


Şekil 3.16. AlAs/GaAs (3+3) Üçerli bulk heteroyapısının toplam enerjisinin z konumunun sıkıştırma ve çekme durumlarına göre değişimi.

Bu durumda AlAs/GaAs üçerli bulk heteroyapısının minimum enerji seviyesindeki en son örgü sabiti değerini vermektedir. Tekli, ikişerli ve üçerli yapılarda, yapılan hesaplamalar sonucun da materyalin Poisson oranı sabittir ve yaklaşık 0.281 ± 0.06 değerindedir.

3.3.2. AlAs/GaAs Arayüzeyinin Etkin Potansiyel Eğrisi

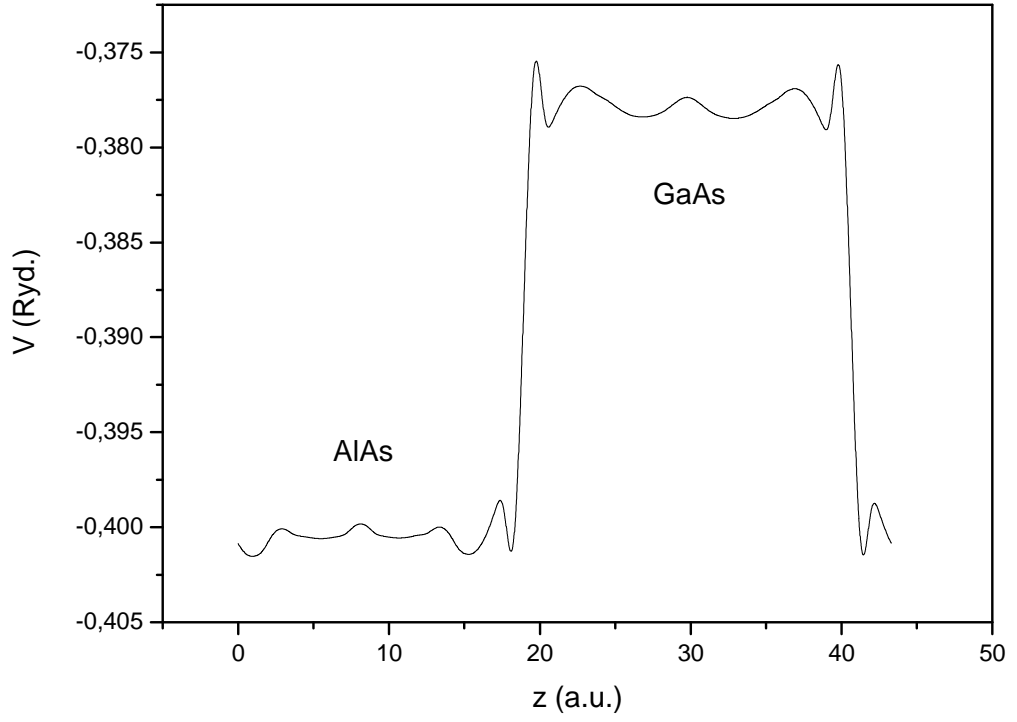
Tekli yapıdaki AlAs/GaAs arayüzeylerde yapılan hesaplamalar sonucunda potansiyel değerleri elde edilmiştir. Bu değerler üzerinden makroskobik averaj tekniği kullanılarak yapılan 2. ortalama hesapları sonucunda elde edilen etkin potansiyelin z yönüne göre değişimleri Şekil 3.17’de verilmiştir.



Şekil 3.17. AlAs/GaAs (1+1) tekli bulk heteroyapısı için etkin potansiyelin z yönüne göre değişimi.

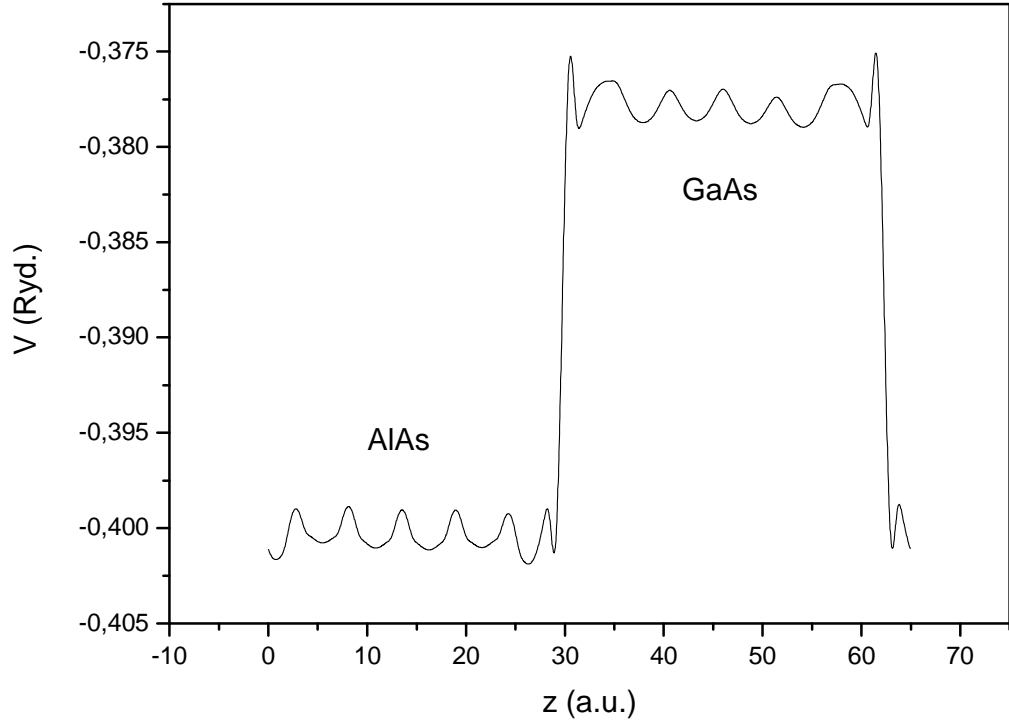
Şekil incelendiğinde, sistemin arayüzeyinden kaynaklanan bir potansiyel farkı görülmektedir. Bundan dolayı bu sistemlerde düşük boyutta kuantum kuyuları oluşmaktadır. Heteroyapıların bu özelliğinden dolayı elektronik ve opto-elektronik aletlerin yapımında kullanılması oldukça önemlidir.

Benzer şekilde ikişerli ve üçerli yapılarıdaki AlAs/GaAs arayüzeylerde yapılan hesaplamalar sonucunda potansiyel değerleri elde edilmiştir. Bu değerler üzerinden makroskobik averaj tekniği kullanılarak yapılan 2. ortalama hesapları sonucunda elde edilen etkin potansiyelin z yönüne göre değişimleri sırasıyla Şekil 3.18 ve Şekil 3.19'da verilmişlerdir.



Şekil 3.18. AlAs/GaAs (2+2) ikiyeşerli bulk heteroyapısı için etkin potansiyelin z yönüne göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi, sistemin arayüzeyinden kaynaklanan bir potansiyel farkı tekli yapıdaki gibi mevcuttur. Fakat arayüzeydeki etkin potansiyel daha keskin bir şekil almıştır. Ayrıca arayüzeyin her iki tarafında da etkin potansiyelde daha fazla dalgalanmalar görülmektedir.



Şekil 3.19. AlAs/GaAs (3+3) üçerli bulk heteroyapısı için etkin potansiyelin z yönüne göre değişimi.

Şekilden de görüldüğü gibi, sistemin arayüzeyinden kaynaklanan bir potansiyel farkı diğer yapılarıdaki gibidir. Fakat arayüzeydeki etkin potansiyel çok keskin bir şekil almıştır. Ayrıca arayüzeyin her iki tarafında da etkin potansiyelde çok daha fazla dalgalanmalar görülmektedir.

3.4. Sonuç

Bu çalışmada (001) yönünde tekli, ikişer ve üçer katmanlı olarak modellenmiş AlAs/GaAs bulk hetero yapıların, taban durumundaki örgü sabiti, toplam enerjisi ve ortalama etkin potansiyeli, yoğunluk fonksiyonel teorisine kullanılarak incelenmiştir. Sistem z eksenine boyunca optimize edilerek bu bulk yapının en kararlı durumu elde edilmiştir. Hesaplamalar, temel yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan düzlem dalga öz uyum alan programı kullanılarak yapılmıştır. Nano ölçek mertebesinde yapılan bu hesaplamalar her geçen gün önemini artırmaktadır. Bundan dolayı, bu sistemlerin özelliklerinin bilinmesi elektronik ve opto-elektronik aletlerin yapımında çok önemlidir. Ayrıca AlAs/GaAs bulk yapısındaki arayüzde etkin potansiyel fark olduğu gözlemlenmiştir. Fakat arayüzün her iki yanında da oluşan istenmeyen dalgalanmaların nedeni tarafımızdan henüz anlaşılamamıştır. Bundan sonraki çalışmalarımızda bu dalgalanmaların giderilmesi sağlanacak ve bu sistemin elektronik bant yapısı hesaplanacaktır.

KAYNAKLAR

Akkuş H., 'SbSI Kristalinin Elektronik Ve Optik Özellikleri: Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisinin Uygulaması' Doktora Tezi, Fizik Anabilim Dalı. Adana, (2007).

Alferov I. ve Kazarinov R.F., "Semiconductor laser with electrical pumping", U.S.S.R. Patent 181737 (1963).

Antoncik E., Approximate formulation of the orthogonalized plane-wave method. J. Phys. Chem. Solids, 10: 314-320 (1959).

Baldereschi A., Phys. Rev. B 12 5212 (1973).

Baldereschi A., Baroni S. ve Resta R., Phys. Rev. Lett. 61 734 (1988).

Baldereschi A., Peressi M., Baroni S. ve Resta R., Proc. Int. School of Physics 'Enrico Fermi' (Course CXVII, Varenna, 1991): Semiconductor Superlattices and Interfaces ed L Miglio and A Stella (New York: Academic) p 59 (1993).

Baroni S, Resta R, Baldereschi A. ve Peressi M., Proc. NATO Advanced Research Workshop on Spectroscopy of Semiconductor Microstructures ed G Fasol et al (New York: Plenum) p 251 (1989).

Baroni S., Peressi M., Resta R. ve Baldereschi A., Proc. 21th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors ed Ping Jiang ve Hou-Zhi Zheng (Singapore: World Scientific) p 689 (1993).

Baroni S., Resta R., Baldereschi A. ve Peressi M., Proc. NATO Advanced Research Workshop on Spectroscopy of Semiconductor Microstructures ed G Fasol et al (New York: Plenum) p 251 (1989).

Born M. ve Oppenheimer R., Zur Quantentheorie der Molekeln. Ann. Physik, 84: 457-484 (1927).

Ceperley D. M. ve Alder B. J., Phys. Rev. Lett. 45 566 (1980).

Chadi D. J. ve Cohen M. L., Special Points in the Brillouin Zone. Phys. Rev. B, 8: 5747-5753. hi A, Baroni S and Resta R 1988 Phys. Rev. Lett.61 734 (1973).

Chadi D. J. ve Cohen M. L., Phys. Rev. B 8 4547 (1973).

Cohen M. L. ve Heine V., The fitting of pseudopotentials to experimental data and their subsequent application. *Solid State Physics*, 24: 37-248 (1970).

Drexler K. E., *Engines of Creation: The Coming Era of Nanotechnology* New York: Anchor Press/Doubleday (1986).

Froyen S., *Phys. Rev. B* 39 3168 (1989).

Herring C., A New Method for Calculating Wave Functions in Crystals *Phys. Rev.*, 57: 1169-1177 (1940).

Hohenberg P. ve Kohn W., 'Inhomogeneous elektron gas', *Phys. Rev. Lett* 136, B864 (1964).

Hybertsen M. S. ve Louie S G., *Phys. Rev. B* 355585 (1987).

Hybertsen M. S. ve Louie S. G., *Phys. Rev. B* 345390 (1986).

Hybertsen M. S. ve Louie S. G., *Phys. Rev. B* 345602 (1987).

Jackson J. D., *Classical Electrodynamics* (New York:Wiley) (1975).

Koh W. in *Highlights of Condensed Matter Theory*, edited by Bassani F., Fumi F. ve M. P. Tosi (North-Holland, Amsterdam), p.11 (1985).

Kohn W. ve Sham L. J., *Phys. Rev.* 140A 1133 (1965).

Kohn W. ve Sham L. J., *Phys. Rev.*, 140 (1965).

Kroemer H., "A proposed class of heterojunction lasers", *Proc. IEEE*, 51,1782 (1963).

Levy M. ve Perdew J. P., in *Density Functional Methods in Physics*, edited by R. M. Dreizler ve J. da Providencia (Plenum, New York). p.11 (1985).

Levy M., "Electron Densities in Search of Hamiltonians", *Phys. Rev. A.*, 26, 1200 (1982).

Monkhorst H. J. ve Pack J. D., Special Points for Brillouin-zone Integrations. *Phys. Rev. B*, 13: 5188-5192 (1976).

Neamen, Donald A., *Semiconductor Physics and Devices, Basic Principles*. Universty of New Mexico. D. IRWIN. INC. (1992).

Nielsen O. H. ve Martin R. M., *Phys. Rev. B* 32 3780 (1985).

Nielsen O. H. ve Martin R. M., *Phys. Rev. B* 32 3792 (1985).

Nielsen O. H. ve Martin R. M., *Phys. Rev. Lett.* 50 697 (1983).

Payne M. C., Teter M. P., Allan D. C., Arias T. A. ve Joannopoulos J. D., Iterative Minimization Techniques for ab initio Total-Energy Calculations: Molecular Dynamics and Conjugate Gradients. *Rev. Mod. Phys.*, 64: 1045-1097 (1992).

Perdew J. ve Zunger A., *Phys. Rev. B* 23 5048 (1981).

Peresi M., Binggeli N., ve Baldereschi A., Band engineering at interfaces: theory and numerical experiments, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 31, 1273 (1998).

Phillips J. C. ve Kleinman, Crystal Potential and Energy Bands of Semiconductors. I. Self-Consistent Calculations for Diamond. *Phys. Rev.*, 116: 880-884 (1959b).

Phillips J. C., Energy-Band Interpolation Scheme Based on a Pseudopotential. *Phys. Rev.*, 112: 685-695 (1958).

Phillips J. C. ve Kleinman L., New Method for Calculating Wave Functions in Crystals and Molecules. *Phys. Rev.*, 116: 287-294 (1959a).

Pickett W. E., *Computer Phys. Rep.* 9 115 (1989).

Richard M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press, (2004).

Robert G. Parr and Weitao Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press (1989).

Srivastava G.P., 'The Physics of Phonons', Adam Hilger, Bristol (1990).

Troullier N. ve Martins J. L., Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. *Phys. Rev B*, 43: 1993-2006 (1991).

Yin M. T. ve Cohen M. L., Theory of ab initio pseudopotential calculations. *Phys. Rev. B*, 25: 7403-7412 (1982).

Zhang S. B., Tománek D., Louie S. G., Cohen M. L. ve Hybertsen M. S., *Solid State Commun.* 66 585 (1988).

Zhu X. ve Louie S. G., *Phys. Rev. B* 43 14 142 (1991).