



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

FİZİK ANABİLİM DALI

**BaO/Si(001)-(2×1) ARAYÜZEYİNİN TEORİK OLARAK
İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Berrin Sultan EŞME

DANIŞMAN

Doç. Dr. Sibel ÖZCAN

AKSARAY, 2019

Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 122310409 numaralı Yüksek Lisans öğrencisi, "Berrin Sultan EŞME" tarafından hazırlanan "BaO/Si(001)-(2×1) ARAYÜZEYİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ" adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Doç. Dr. Sibel ÖZCAN

Aksaray Üniversitesi

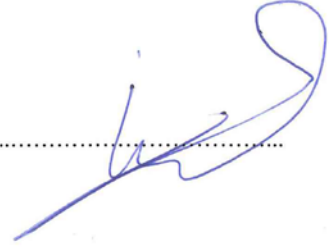
Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.....



Üye: Doç. Dr. Hacı ÖZİŞİK

Aksaray Üniversitesi

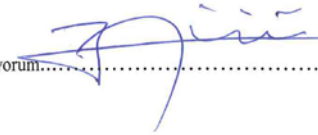
Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.....



Üye: Doç. Dr. Gökhan SÜRÜCÜ

Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.....



Tez Savunma Tarihi: 21/08/2019

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

.....

Doç. Dr. Mehmet Ali HINIS
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

DOĞRULUK BEYANI

Yüksek lisans tezi olarak sunduğum bu çalışmayı, akademik kurallara ve bilimsel etik, ahlak ve geleneklere aykırı düşecek bir yol ve yardıma başvurmaksızın yazdığımı, yararlandığım eserlerin kaynakçada gösterilenlerden oluştuğunu, çalışmamda kullandığım verilerin orijinalliğini ve her türlü intihalden uzak olduğunu beyan ederim.

Enstitü tarafından belli bir zamana bağlı olmaksızın, tezimle ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması durumunda, ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçlara katlanacağımı bildiririm.

Berrin Sultan EŞME



TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, karşılaştığım tüm zorlukların çözümlenmesinde ilgisini esirgemeyen değerli hocam Doç. Dr. Sibel ÖZCAN'a tüm hoşgörü ve iyi niyeti için teşekkürü borç bilirim.

Bugüne kadar bana maddi ve manevi her konuda destek vererek sabırlarını esirgemeyen eşim Onur EŞME, kıymetli zamanlarını çaldığım çocuklarımdan canım kızım Zeynep Sultan EŞME ile oğlum Hasan Çağrı EŞME ve canım aileme sonsuz teşekkürlerimi borç bilirim.

Berrin Sultan EŞME
AKSARAY, 2019

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	vi
ÇİZELGELER DİZİNİ	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	viii
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ	4
2.1 Bulk (Hacimsel) Yapılar	4
2.1.1 Kristal yapı.....	4
2.1.2 Örgü yapıları.....	6
2.1.3 Katı yüzeylerin yapıları	7
2.1.4 Ters örgü vektörleri	9
2.1.5 Bragg kırınımı.....	9
2.1.6 Brillouin bölgesi	10
2.1.7 (001) Yüzeyinin brillouin bölgesi.....	10
2.1.8 Miller indisleri	12
2.2 Yarı İletkenler.....	13
2.2.1 Yarı iletkenlerin genel karakteri	13
2.2.2 Yarı iletkenlerin çeşitleri	14
2.2.3 Enerji aralığı	15
2.2.4 Yarı iletkenlerde enerji bantlarının oluşumu	16
2.2.5 Yarı iletken yüzeyler.....	18
2.2.6 Yüzeye atom tutunması	19
2.2.7 Yeniden yapılanma	20
2.2.8 Korunumlu ve korunumsuz yeniden yapılanma	22
2.3 Yarı İletken Yüzeylerin İncelenmesinde Kullanılan Yöntemler.....	22
2.3.1 Deneysel metotlar.....	22
2.3.1.1 Düşük enerjili elektron kırınımı (Low energy electron diffraction; LEED)	23
2.3.1.2 Taramalı tünelleme mikroskobu (Scanning Tunneling Microscope; STM)	23
2.3.1.3 Atomik kuvvet mikroskobu (Atomic force microscope; AFM).....	24
2.3.1.4 Taramalı elektron mikroskobu (Scanning electron microscope; SEM)	24
2.3.1.5 Taramalı tünelleme spektroskopisi (Scanning tunneling spectroscopy; STS)	25
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	26
3.1 Teorik Metotlar.....	26
3.2 Çok Cisim Problemi	26
3.2.1 Born-Oppenheimer yaklaşımı.....	28
3.3 Elektron–Elektron Etkileşmesi.....	29
3.3.1 Dalga fonksiyonu yaklaşımı	29
3.3.2 Yoğunluk fonksiyoneli yaklaşımı.....	30
3.3.3 LDA ve GGA yaklaşımlarının sınırlılıkları.....	33

3.4 Elektron–İyon Etkileşmesi	34
3.4.1 Potansiyelimsi (pseudopotansiyel) metot	34
3.5 Teorik Modellemenin Temel Gereksinimleri.....	36
3.5.1 Yüzeyin ve ara yüzeyin yapısal gösterimi.....	36
3.6 VASP Paket Programı	38
4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA.....	39
4.1 Bulk Si İçin Yapısal ve Elektronik Hesaplamalar	39
4.2 BaO/Si(001)-(2x1) Ara Yüzeyinin Teorik İncelemesi.....	44
4.2.1 Giriş	44
4.2.2 BaO/Si(001)-(2x1) ara yüzeyinin atomik ve elektronik yapısı	44
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	50
KAYNAKLAR	51
ÖZGEÇMİŞ.....	57



YÜKSEK LİSANS TEZİ

BaO/Si(001)-(2×1) ARAYÜZEYİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ

Berrin Sultan EŞME

Aksaray Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Sibel ÖZCAN

ÖZET

Bu çalışmada, BaO/Si(001) ara yüzeyinin kaplamaya bağlı olarak yapısal ve elektronik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisine dayanan ab initio yöntemlerle hesaplandı. İki olası ara yüzey geometrisi düşünüldü: (i) ½ ML Sr (Model-1), (ii) 1 ML Sr ve 1ML Oksijen (Model-2). Si(001) tabakası üzerindeki her bir BaO tabakası için atomik ve elektronik yapı araştırıldı. Model-1 ve Model-2 ara yüzey geometrilerinde dört ve daha fazla tabakalı BaO için bant aralığının doğrudan bant aralığından dolayı bant aralığına geçiş yaptığı görüldü.

Anahtar Kelimeler: Ab initio yöntem, Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, Si yüzeyi, BaO.

Ağustos, 2019; 57 sayfa

M.Sc. THESIS

THEORETICAL INVESTIGATION OF THE BaO/Si(001)-(2×1) INTERFACE

Berrin Sultan EŞME

**Aksaray University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics**

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Sibel ÖZCAN

ABSTRACT

In this study, the structural and electronic properties of the BaO/Si (001) interface depending on the coating were calculated by ab initio methods based on density functional theory. Two possible interface geometries were considered: (i) $\frac{1}{2}$ ML Sr (Model-1), (ii) 1 ML Sr and 1ML Oxygen (Model-2). The atomic and electronic structure was investigated for each BaO layer on the Si (001) layer. In the Model-1 and Model-2 interface geometries, it was observed that the band gap for four and more stratified BaO shifted from direct band gap to indirect band gap.

Keywords: Ab Initio Method, Density Functional Theory, Si Surface, BaO.

August, 2019; 57 pages

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Kristal yapı	5
Şekil 2.2. W-S hücresinin yapısı.....	6
Şekil 2.3. (a) Gerçek uzayda fcc yapıdaki bir kristalin şekli (b) fcc kristalin ters uzaydaki yapısı (bcc).....	8
Şekil 2.4. Bragg kırınımı.....	10
Şekil 2.5. fcc yapının (1x1) yüzey birim hücresi için (a) (110), (b) (001) yüzeyleri ve (c) (1x2) yeniden yapılanma için (001) yüzey Brillouin bölgeleri	11
Şekil 2.6. Kübik bir kristalde bazı önemli düzlemlerin indisleri	13
Şekil 2.7. Katkılı yarı iletkenler.....	15
Şekil 2.8. Yalıtkan, metal, yarı metal ve yarı iletkenlerde izinli enerji bandlarındaki elektron doluluk seviyelerinin şema ile gösterimi.....	16
Şekil 2.9. Yarı iletkenlerde enerji bantlarının oluşumu	17
Şekil 2.10. Yarı iletken bir kristal için bant yapısı	18
Şekil 2.11. Dolaylı bant aralıklı ve doğrudan bant aralıklı yarı iletkenler.....	18
Şekil 2.12. Bulk, yüzey, vakum bölgeleri ve kopuk bağların şematik gösterimi	19
Şekil 2.13. Yeniden yapılanmamış ideal yüzey (üstten).....	21
Şekil 2.14. Yeniden yapılanmış yüzey (üstten)	22
Şekil 3.1. Yüzey süperhücre modeli	38
Şekil 4.1. Si'un örgü parametresi hesabı	39
Şekil 4.2. Si'un Pseudo-Potansiyel Yöntemi kullanılarak a) PAW-GGA elde edilen bant yapısını b) Si'un durum yoğunluğu grafiği..	41
Şekil 4.3. a) Si'un PAW-PBE yöntemi kullanılarak elde edilen bant yapısı b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.....	41
Şekil 4.4. a) Si'un USPP-CA yöntemi kullanılarak elde edilen bant yapısı. b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.....	42
Şekil 4.5. a) Si'un USPP-GGA yöntemi kullanılarak elde edilen bant yapısı. b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.....	42
Şekil 4.6. a) Si'un PAW-CA yöntemi kullanılarak elde edilen bant yapısı. b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.....	43
Şekil 4.7. Şematik olarak Si(001) yüzeyi üzerinde BaO'nun (a) üstten ve yandan görünümü. (b) Si üzerine 1/2 ML Sr (Model – 1) (c) Si üzerine 1/2 ML Sr ve 1 ML Oksijen (Model -2)	46
Şekil 4.8. Si(001)-(2x1) yüzeyi üzerindeki, tek tabakadan altı tabakaya kadar olan BaO tabakalarının elektronik bant yapıları.....	48
Şekil 4.9. Ara yüzey düzleminde dik uzaklığın bir fonksiyonu olarak düzlemsel ortalama lokal potansiyel (a) Model-1 için (b) Model-2 için.....	49

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. İki boyutta beş örgü türü.....	6
Çizelge 2.2. Üç boyutta 14 örgü türü.....	7
Çizelge 4.1. Bu çalışma ve literatürdeki Si'un örgü parametresi için bulunan değerlerin kıyaslanması.	40
Çizelge 4.2. Bulk Si için farklı potansiyelimsiler kullanılarak hesaplanan bant aralığı değerleri.	43
Çizelge 4.3. Şekil 4.7.'de gösterilen modellere dayanarak hesaplanan atomik anahtar parametreler (Å cinsinden).....	45
Çizelge 4.4. Hesaplanan valans bant ve iletim bant kaymaları (eV birimindedir). ...	47



SİMGELER VE KISALTMALAR

$\vec{a}$	Birim Hücresinin Örgü Vektörü
AFM	Atomik Kuvvet Mikroskobu
$\vec{b}$	Birim Hücresinin Örgü Vektörü
bcc	Cisim Merkezli Kübik Örgü
$\vec{c}$	Birim Hücresinin Örgü Vektörü
DFT	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
E_F	Fermi Enerjisi
E_g	Yasak Enerji Aralığı
fcc	Yüzey Merkezli Kübik Örgü
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
HF	Hartree–Fock Teorisi
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
LEED	Düşük Enerjili Elektron Kırınımı
MBE	Moleküler Demet Epitaksi
PAW	İzdüşümsel Birleştirilmiş Dalga
sc	Basit Kübik Örgü
SEM	Taramalı Elektron Mikroskobu
STM	Taramalı Tünelleme Mikroskobu
STS	Taramalı Tünelleme Spektroskopisi
Si	Silisyum
TDDFT	Zamana Bağlı Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
USPP	Ultra Soft Pseudopotential
VASP	Viana Ab Initio Simulation Package
W-S	Wigner–Seitz Hücresi

1. GİRİŞ

Elektronik cihazlarda kullanılan malzemelerin, optik ve elektronik özelliklerindeki iyileşmeler, 1960'lı yıllarda yüzey fiziğinin doğmasına ve yeni bir araştırma konusu haline gelmesine neden olmuştur. Teknolojik uygulama alanlarındaki artış ile birlikte düşük indeksli sistemlerin özelliklerinin mikroskobik düzeyde anlaşılması oldukça önemli hale gelmiştir ve günümüze kadar olan süreçte de yarı iletken yüzey ve ara yüzeylerin araştırılmasıyla ilgili çalışmalarda büyük bir artış olmuştur.

Yarı iletken yüzeyler farklı koşullarda büyütülebilir, farklı yeniden yapılanma durumları gösterebilir ve bulk'dan farklı bir periyodikliğe sahip olabilirler. Yarı iletken yüzeyler bu özelliklerinden dolayı farklı elektronik ve optik özellikler sergilerler (Srivastava, 2002). Yarı iletken yüzeylerin özellikleri, deneysel tekniklerle ölçülebilmekte ve teorik olarak da hesaplanabilmektedir. Bazı deneysel parametreleri açıklamak için teorik hesaplamalara ihtiyaç duyulduğu gibi, kimi atomik ya da elektronik özellik, deneysel olarak dolaylı yollardan ölçülebilmekte ancak teorik olarak doğrudan hesaplanabilmektedir. Teorik modelleme hem maliyeti azaltmakta hem de deneysel çalışmalar için bir öngörü sağlayarak zamandan da büyük ölçüde tasarruf yapılmasına neden olmaktadır. Teorik yaklaşımlar kullanılarak, teorik hesaplamalar ile deneysel ölçümler arasında ilişki kurulması sağlanmaktadır. Teorik yaklaşımlar ile ilgili ayrıntılı bilgi üçüncü bölümde yer almaktadır.

Yarı iletken teknolojisinde, maliyetinin düşük olması ve kolay elde edilebilir olması nedeniyle en çok kullanılan yarı iletkenlerden bir tanesi Silisyumdur. Silisyum (Si), elmas yapıda kristalleşir ve en yakın dört komşu atomla bağ yapar. Si yüzeyler Moleküler Demet Epitaksi (Molecular Beam Epitaxy: MBE) veya laboratuvarında iyon bombardımanı kullanılarak istenen yönde alttaş üzerinde yapay olarak büyütülerek elde edilebilir. Si (001), (110) ve (111) yüzeyleri en çok kullanılan alttaş yüzeyleridir. Si(001) yüzeyi ise diğer Si yüzeylerine göre, yeniden yapılanmadaki kolaylığı ve aygıt teknolojisindeki kullanılabilirliğinden dolayı daha ilgi çekici hale gelmektedir (Shaltaf, 2004).

Elektronik teknolojisinde potansiyel uygulamaları nedeniyle 1960'lardan beri Silikon dioksit (SiO_2) çalışmaları büyük ilgi görmektedir (McKee vd., 1998). Yarı iletken cihaz üretimlerinde silikon temelli alan etkili transistörlerin boyutları küçülmeye başladıkça SiO_2 gibi kapı dielektriğinin de kalınlığı çok önemli bir parametre haline gelmiştir. Ancak SiO_2 tabakasının kalınlığının küçülmesiyle metal oksit yarı iletkenlerin alan etkili transistörlerde performansı düşer. SiO_2 tabakasının kalınlığı 20 Å'un altına düştüğünde, metaloksit yarı iletken alan etkili transistörlerin performansı azalır. Bu nedenle pek çok araştırmacı SiO_2 dielektrik bileşeni yerine yeni alternatif yüksek iletkenliğe sahip başka malzeme bileşenleri bulmaya çalışmaktadır.

Ta_2O_5 , TiO_2 , Al_2O_3 , ZrO_2 , HfO_2 , ve SrTiO_3 , SiO_2 yerine kullanılan kapı dielektrik malzemeleridir. 1998 yılında Kizilyalli ve arkadaşları SiO_2 - Ta_2O_5 - SiO_2 kapı dielektrik malzemesi kullanarak transistörler üretmiştir (Kizilyalli vd., 1998). Bu üretilen transistörlerin tünelleme voltajının iyileştiği gözlemlenmiştir. Ayrıca bu çalışma taşıyıcı mobilitesinin ara yüzeyde daha iyi olduğunu ve düşük etkili dielektrik kalınlığının etkisinin daha az olduğunu göstermektedir. Aynı yıl Park ve arkadaşları ise Ta_2O_5 için SiO_2 den daha düşük kapı sızıntı akımı gözlemeyi başarmıştır (Park vd., 1998). Silikon yüzeyi üzerine büyütülen yüksek dielektrik sabitli SrTi_2O_3 , SiO_2 'ye bir alternatif olarak düşünülmüştür. Ancak Zhang ve arkadaşları SrTi_2O_3 'ün kapı dielektriği olarak geniş iletim bant ofseti sebebiyle SiO_2 'in yerine kullanılmasının muhtemel olmadığını gösteren sonuçlar elde etmiştir (Zhang vd., 2003).

İlk kez McKee ve arkadaşları Silikon ve kristal oksit ara yüzeyleri arasında Sr tabakasının kullanımını incelemiştir (McKee vd., 1998). Bu çalışma birçok teorik ve deneysel çalışmaya konu olmuştur (Ashman vd., 2004; Norga vd., 2005; Norton vd., 2002; Zachariae vd., 2005). Bu çalışmalar, silikon ve kristal oksit tabakası arasında en kararlı yapının $\text{Si}(001)$ yüzeyi üzerindeki (1 ML) stronsiyum oksit olduğunu ve bu katmanlar arasında termodinamik olarak kararlı geçişler meydana geldiğini göstermektedir (Herrera-Gómez vd., 2001; Lettieri vd., 2002). Bu sebepten, SrO 'nun buffer (tampon) tabaka materyali olarak kullanılabileceği gösterilmiştir. Kristal

oksit-Si sistemleri için BaO-Si yapısı önerilen yapılardan bir tanesidir. Segal ve arkadaşları BaO/Si arayüzeyini X-ışını kırınımı (XRD) ve ilk ilkeler Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini (DFT) kullanarak incelemişlerdir (Segal vd., 2009). BaO/Si ara yüzünde dimerize olmuş Si yüzey atomlarına bağlı 1/2 ML Sr ve 1 ML Oksijen'in varlığını araştırmışlardır. Buna ek olarak deneysel verilerin, doğru fiziksel yapıyı elde edebilmek için teorik bulgularla desteklenmesi gerektiğini de ifade etmişlerdir. Bu amaçla literatürdeki bu eksiği gidermek için, bu tez çalışmasında BaO/Si arayüzeyi teorik olarak ayrıntılı bir biçimde incelenmiştir.



2. TEMEL TEORİK BİLGİLER

İkinci bölümde bulk, kristal yapılar, yarı iletkenlerin genel karakteri, yarı iletken yüzeyler, yarı iletkenlerin bant yapısı ve yüzeye atom tutunması hakkında kısa bilgiler verilmiştir.

2.1 Bulk (Hacimsel) Yapılar

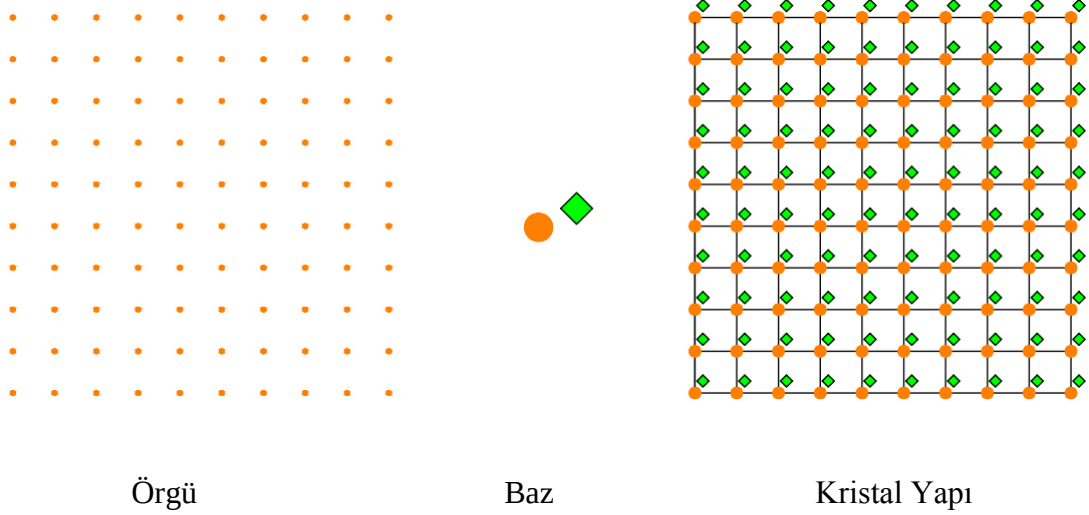
2.1.1 Kristal yapı

Katılar, sürekli ve sert bir malzeme olarak görünse de, katıların aslında atom veya atom gruplarının meydana getirdiği temel birimlerin periyodik tekrarı ile oluştuğunu deneyler sayesinde görmekteyiz. Bu temel birimler, katının içinde gelişigüzel değil, birbirlerine göre düzenli olarak yapılırlar (Dikici, 1993). Kristal yapıda en başta dikkati çeken özellik simetridir. Bir kristali gözlemlediğimizde gerek dış görünüşünde, gerekse atomların iç yerleşiminde çok açık bir simetri özelliği vardır. Bu yüzden gazlarda; gazın içerisindeki atom ve moleküller gelişigüzel dağılım gösterdiklerinden dolayı kesinlikle kristal özellik bulunmaz. Yine aynı şekilde, sıvılar ve amorf yapılarda kristal özellikte değildirler. Çünkü bu tür maddelerde atomlar birbirlerinden oldukça kısa uzaklıklarda bulunsalar bile boyutlarına göre büyük sayılacak bir uzunlukta periyodik tekrar göstermezler (Durlu, 1992).

Kristalleri iki ayrı yapıdan oluşmuş gibi düşünürsek bunlar örgü ve bazdır. Bütün kristaller bir örgü ile tanımlanabilir. Uzayda periyodik olarak sıralanmış noktalar dizisine *örgü* denir. Örgünün her düğüm noktasında bulunan atom yada atom grupları *baz* olarak tanımlanabilir. Bazın uzayda periyodik olarak tekrar etmesiyle *kristal* meydana gelir. Sembolik şekilde yazmak istersek;

$$\text{Kristal Yapı} = \text{Örgü} + \text{Baz} \quad (2.1)$$

olarak ifade edilebilir ve aşağıdaki şekilde kristal yapının oluşum hali gösterilmektedir.



$$\text{Örgü} + \text{Baz} = \text{Kristal Yapı}$$

Şekil 2.1 Kristal yapı.

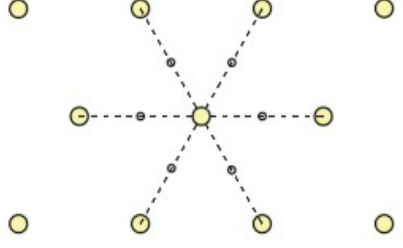
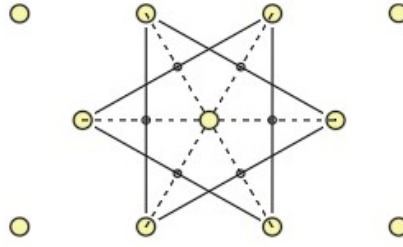
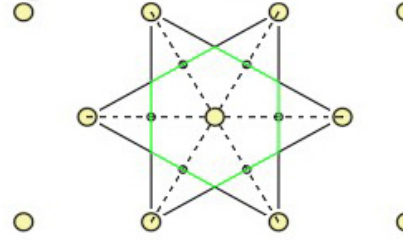
Üç boyutlu kristal (Bulk) için örgü, üç temel öteleme vektörü olan $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ vektörleriyle gösterilir ve kristalin atomik düzenlemesi bir $\vec{r}$ konumlu yerde nasılsa, bir

$$\vec{r}' = \vec{r} + n\vec{a} + m\vec{b} + k\vec{c} \quad (2.2)$$

konumlu yerden bakıldığında da yine aynı olacaktır. Buradaki n, m ve k bütün değerleri alabilen tamsayılardır. Gelişigüzel iki $\vec{r}$ ve $\vec{r}'$ noktalarından baktığımızda, atomların dizilişi aynı olacak şekilde n, m ve k tamsayı üçlüsü bulunabiliyorsa $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ vektörlerine *ilkel öteleme vektörleri* denir (Kittel, 1996). Bu duruma göre kristalin yapı taşı olabilecektüm özelliklerini gösterebilecek en küçük hücre, bu ilkel örgü vektörleri ile oluşturulur. İlkel örgü vektörlerinin oluşturduğu en küçük hacimli hücreye *ilkel hücre* denir. İlkel hücre kristali dolduran, hacmi en küçük olan ve yalnız köşelerinde örgü noktası bulunan bir yapıdır. İlkel olmayan bir hücre, *birim hücre* olarak belirlenir. Bu durumda kristal, hepsi aynı dağılımda atomlar barındıran, birbirinin aynısı olan, birim hücreler birikintisi olarak düşünülebilir.

Wigner–Seitz (W–S) hücrelerini de ilkel hücre seçimi için kullanılan bir yol olarak gösterilebiliriz.

Şekil 2.2’de görüldüğü gibi W–S hücresi belirlerken öncelikle bir örgü noktası seçilir ve buna en yakın komşularını birleştiren çizgiler çizilir. Daha sonra bu çizgilere dik olan ve ortalarından geçen doğrular çizilir. Bu şekilde oluşturulan en küçük kapalı alan W–S hücresi olarak tanımlanır.

	Bir örgü noktası seçilir ve buna örgü noktasına en yakın olan komşuları birleştiren çizgiler çizilir.
	Çizgilere dik olan ve bu çizgilerin ortalarından geçen dikmeler çizilir.
	En küçük kapalı alan WINGER-SEITZ HÜCRESİDİR.

Şekil 2.2. W-S hücresinin yapısı.

2.1.2 Örgü yapıları

Öteleme vektörlerinin büyüklükleri ile aralarındaki açının değerinde kısıtlama olmadığı durumlarda oluşabilecek örgü sayısı sınırsızdır. Bravais örgüleri, belli kısıtlamalar sonucunda oluşan örgü türleridir. Çizelge 2.1’de, İki boyutta oluşan beş Bravais örgüsü türü verilmiştir (Kittel, 1996).

Üç boyutta yedi kristal sisteminde 14 adet Bravais örgüsü tanımlanmaktadır. Burada a_1 , a_2 , a_3 ve α , β , γ ’ lar birim hücre parametrelerini ifade etmektedir. Çizelge 2.2’de yedi kristal sisteminde tanımlanan bu örgülerin birim hücre eksenleri ile açılarının özellikleri verilmiştir.

Çizelge 2.1. İki boyutta beş örgü türü (Kittel, 1996).

Sistem	Örgü Sayısı	Birim hücre eksenleri ile açıların özellikleri
Kare örgü	1	$a_1=a_2$ $\alpha=90^\circ$
Altıgen örgü	1	$a_1=a_2$ $\alpha=120^\circ$
Dikdörtgen örgü	1	$a_1 \neq a_2$ $\alpha=90^\circ$
Merkezlenmiş dikdörtgen örgü	2	$a_1 \neq a_2$ $\alpha \neq 90^\circ$

Çizelge 2.2. Üç boyutta 14 örgü türü (Kittel, 1996).

Sistem	Örgü sayısı	Birim hücre eksenleri ile açıların özellikleri
Kübik	3	$a_1=a_2=a_3$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
Tetragonal	2	$a_1=a_2 \neq a_3$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
Ortorombik	4	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
Hegzagonal	1	$a_1=a_2 \neq a_3$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$
Trigonal	1	$a_1=a_2=a_3$ $\alpha=\beta=\gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
Monoklinik	2	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$
Triklinik	1	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$

2.1.3 Katı yüzeylerin yapıları

Teknolojik uygulamaların çoğunda, metaller ya ince bölünmüş bir biçimde ya da büyük, çok kristalli bir biçimde kullanılır. Mikroskobik seviyede, birkaç gerçek amorf numunenin kayda değer istisnası hariç çoğu materyal, tek kristalli kristalitlerin bir toplanması veya bir araya gelmesi olarak gözlemlenir. Bu nedenle malzemenin bir bütün olarak yüzey kimyası, bu kristallitlere maruz kalan yüzeylerin doğasına ve türüne büyük ölçüde bağlıdır. Prensip olarak eğer öyleyse herhangi bir malzemenin

1. Maruz kalan her yüzey tipinin miktarını bilirsek ve
2. Her yüzey düzleminin özellikleri hakkında detaylı bilgiye sahip olursak

yüzey özelliklerini anlayabiliriz.

Bu yaklaşım, kristal kusurlarının ve katıhal arayüzeylerinin yüzey kimyası üzerindeki muhtemel etkisini göz ardı edebileceğimizi varsaymaktadır. Bu nedenle, farklı ve iyi tanımlanmış yüzeyleri bağımsız olarak inceleyebilmemiz büyük önem taşımaktadır.

Kübik sistemde bulunan örgüler şunlardır:

sc: basit kübik örgü

bcc: cisim merkezli kübik örgü

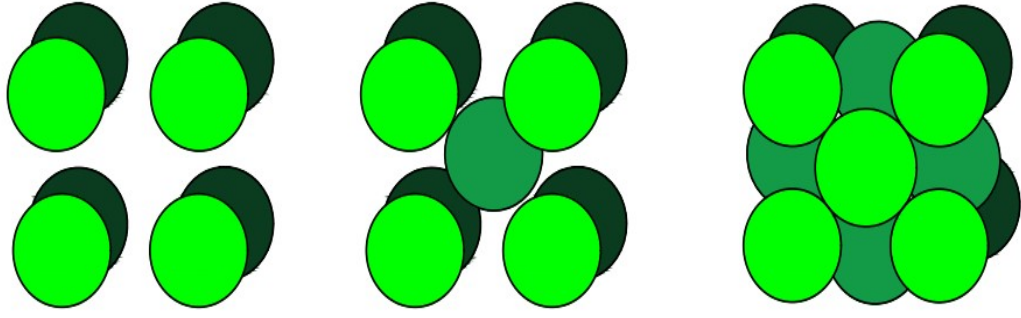
fcc: yüzey merkezli kübik örgü

Şekil 2.3'te sc, bcc, fcc yapılar gösterilmiştir.

(a)

(b)

(c)



Şekil 2.3. (a) Gerçek uzayda sc yapıdaki bir kristalin şekli (b) bcc kristalin şekli (c) fcc kristalin şekli.

2.1.4 Ters örgü vektörleri

Ters örgünün rolü, periyodik yapıların analitik olarak incelenmesinde çok önemlidir. Buna ters örgü denmesinin nedeni, bu örgüye ait temel örgü vektörlerinin biriminin, gerçek uzaydaki vektörlerin biriminin tersi olmasından kaynaklanır. Bir kristaldeki elektronların hareketi çoğu zaman hem gerçek uzayda hem de $\vec{k}$ uzayında (ters örgüde) tanımlanır. Çalışmalarımızı kolaylaştırmak için tanımlanmış olan ters örgü, çok sık kullanılan bir ifadedir. Kristallerde meydana gelen kırınımın yani Bragg koşulunun anlaşılmasına olanak sağlar. Ters örgü sayesinde yarı iletkenlerin ve metallerin fiziksel, elektriksel ve optik özelliklerinin birçoğu açıklanabilmektedir.

Ters örgünün önemli olan özelliklerinden bazılarını açıklayalım;

- Gerçek uzayın birim vektörleri olan $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ile tanımlanan her örgünün $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ vektörleriyle verilen bir karşıt örgüsü bulunmaktadır.
- Eğer $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vektörleri birbirine dik ise $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ vektörleri de birbirine diktir.

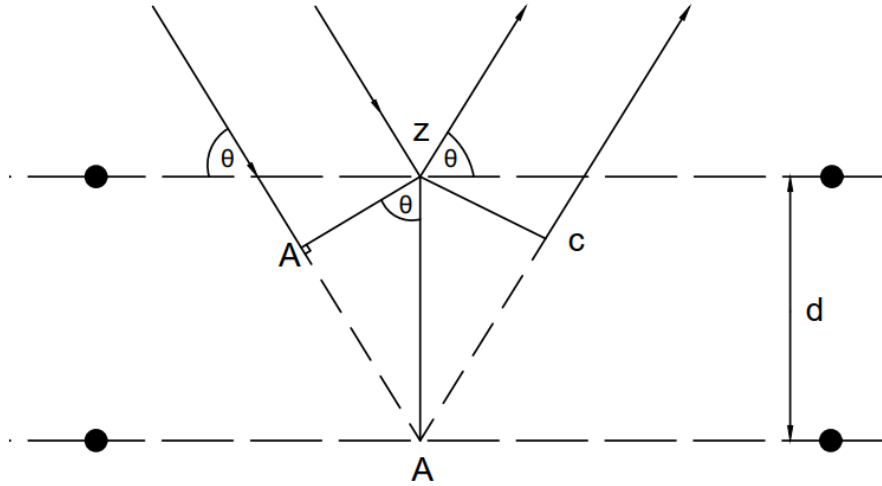
- Ters örgüde bulunan örgü vektörleri gerçek örgü düzlemine diktir.
- Ters örgüde bulunan bir birim hücrenin hacmi ile gerçek örgüdeki birim hücrenin hacmi birbirleriyle ters orantılıdır.
- Gerçek örgü, kendi ters örgüsünün tersidir (Sarıkurt, 2007).

2.1.5 Bragg kırınımı

Kristallerde bulunan atomları, kırınım olayı vasıtasıyla gözleyebiliriz. Kırınım olayı, W. L. Bragg tarafından, ilerleyen dalga, dalga boyu farklı bir engelden geçerken, geldiği doğrultudan sapması şeklinde açıklanmıştır. Şekil 2.4’de Bragg kırınımı gösterilmiştir.

Paralel düzlemler arasındaki mesafeyi d olarak tanımlarsak, birbirine komşu iki düzlemden yansıyan ışınlar arasındaki yol farkı $2d\sin\theta$ dır. Ardışık düzlemlerden yansıyan ışınlar arasındaki yol farkı, dalga boyunun tam katları şeklinde olduğunda yapıcı bir girişim meydana gelir ve bu Bragg kırınım yasası olarak adlandırılmaktadır.

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad (2.3)$$



Şekil 2.4. Bragg kırınımı.

Denklem 2.3 Bragg yasasını tanımlamaktadır. Bu yasa, örgünün belli aralıklarla tekrarlanması bir sonucudur. Bragg kırınımının oluşabilmesi için $\lambda < 2d$ şartı

sağlanmalıdır. Yani Bragg kırınımı dalga boyuna ve kristalin yapısına bağlıdır denilebilir (Kittel, 1996).

2.1.6 Brillouin bölgesi

Ters örgü vektörlerinin oluşturduğu hacim *Brillouin bölgesi* olarak adlandırılır. Ters örgünün orijininin çizilen ve ters örgü vektörlerini ortadan kesen düzlemlerin oluşturduğu en küçük hacim Brillouin bölgesidir. Bu bölgenin bir kristalin tüm fiziksel ve kimyasal özelliklerini yansıttığı bilinmektedir. Brillouin bölgesi ters örgüde Wigner-Seitz ilkel hücresi olarak tanımlanır (Durlu, 1992).

2.1.7 (001) Yüzeyinin Brillouin bölgesi

(1x1) birim hücre için ilkel vektörler

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-1,1,0) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1,1,0) \quad (2.4)$$

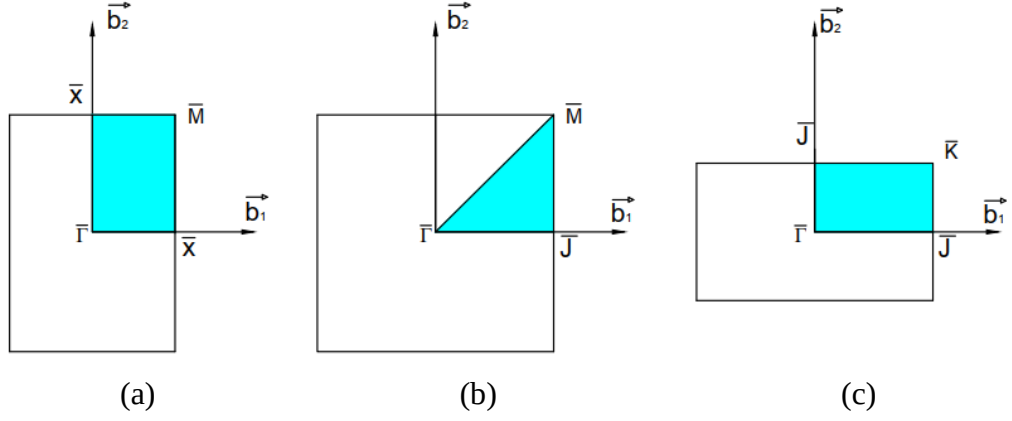
şeklindedir. Burada a örgü sabitidir ve ters örgü ilkel dönüşüm vektörleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1,1,0) \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1,1,0) \quad (2.5)$$

(001) yüzeyinin (1x1) birim hücresi Şekil 2.5.a'da gösterilmiştir. Burada taranan simetri noktaları

$$\vec{\Gamma} = (0,0) \quad \vec{J} = \left(\frac{1}{2}, 0\right) \quad \vec{M} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad (2.6)$$

şeklinde verilir.



Şekil 2.5. fcc yapı için (1x1) yüzey birim hücresi (a) (110) yüzeyi, (b) (001) yüzeyi ve (c) (1x2) yeniden yapılanması için (001) yüzeyinin Brillouin bölgeleri.

(1x2) yapısı için aynı şekilde işlem yapacak olursak, yüzeyin gerçek uzay örgüsünü

$$\vec{a}_1 = a(-1,1,0), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1,1,0) \quad (2.7)$$

olarak yazabiliriz. Ters örgünün ilkel dönüşüm vektörleri ise

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1,1,0), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) \quad (2.8)$$

olarak bulunur. (1x2) yeniden yapılanması için yüzeyin ilkel birim hücresi Şekil 2.5.c'de verilmiştir. Aynı zamanda bu yapının taranan simetri noktaları aşağıdaki gibidir (Srivastava, 1997).

$$\bar{\Gamma} = (0,0) \quad \bar{J} = \left(\frac{1}{2}, 0\right) \quad \bar{M} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right) \quad \bar{J}' = \left(0, \frac{1}{4}\right) \quad (2.9)$$

2.1.8 Miller indisleri

Uzayda bir kristal düzlemini belirlemek için aynı doğru üzerinde olmayan üç tane nokta seçeriz. Bu noktalar farklı kristal eksenleri üzerinde yer alıyorsa, düzlemi belirten noktaların koordinatlarını $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ örgü sabitleri cinsinden verebiliriz.

Kristaller tüm düzlemde ve doğrultuda farklı özellikler gösterirler. Bu yüzden, kristal yapı analizleri için kullanılan yöntemlerin en kullanışlısı her bir düzlem için indisler tanımlamaktır. Bu indisler Miller indisleri olarak adlandırılır ve h, k, l ile gösterilir. Miller indislerini kullanarak ters örgü uzayındaki bir $\vec{K}$ vektörü;

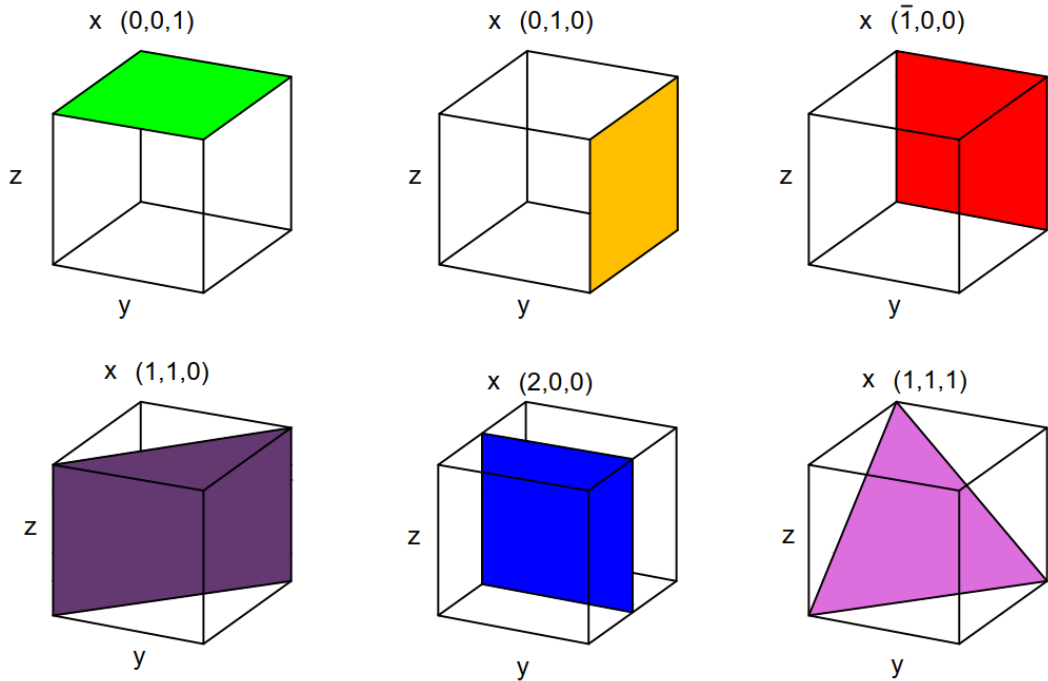
$$\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (2.10)$$

şeklinde yazılabilir.

Miller indislerini belirlerken aşağıdaki kurallar uygulanır.

- Belirtmek istenen düzlemlerin, kristal eksenlerini kestiği noktalar örgü sabitleri $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ cinsinden bulunur.
- Bu sayıların tersleri alınarak, aynı oranda en küçük üç tam sayı elde edecek şekilde indirgenir. Böylelikle (hkl) ile gösterilen bu sayı dizini o düzlemin indisi olmuş olur (Kittel, 1996).

Kübik kristallerde önemli görülen bazı düzlemlerin indisleri Şekil 2.6'da gösterilmiştir. Bu kristaller içinde matematik çözümün en kolay olduğu durumlar Şekil 2.6'da verilen [110], [111] ve [001] ilerleme yönleridir.



Şekil 2.6. Kübik kristallerde önemli bazı düzlemlerin Miller indisleri.

2.2 Yarı İletkenler

2.2.1 Yarı iletkenlerin genel özellikleri

Yarı iletkenlerin elektronik alanda kullanımını çok yaygın olarak görmekteyiz. Bunun nedeni ise dış kaynaklı etkilerin maddenin iletkenlik ve yalıtkanlık arasında geçiş yapmasına neden olmasıdır. Başka bir şekilde ifade edecek olursak yarı iletkenler; normal şartlar altında yalıtkan halde bulunurlarken ısı, ışık, manyetik etki veya elektriksel gerilim gibi etkilerle değerlik elektronlarından bazıları serbest duruma geçer ve madde iletken hale gelmiş olur.

Yarı iletken maddelerin oda sıcaklığındaki öz dirençleri 10^{-2} ile 10^9 Ωcm arasında, iletken maddelerin 10^{-6} Ωcm ve yalıtkan maddelerin ise 10^{14} ile 10^{20} Ωcm arasında değerler almaktadır. Yarı iletkenlerin elektriksel iletkenliklerinin, sıcaklıkla değiştiği bilinmektedir ve sıcaklık arttıkça yarı iletken maddelerin öz dirençleri küçülür. Maddenin çeşitli şekillerde uyarılması, örgü kusurları ya da kimyasal düzeninde oluşan değişiklikler maddenin yarı iletken olmasına neden olabilir (Burns, 1990).

2.2.2 Yarı iletkenlerin çeşitleri

Yarı iletkenler yapılarına göre iki grupta toplanırlar (Sarı, 2005).

1. Tek atomlu yarı iletkenler:

Bunlar tek bir tane elementten meydana gelen yarı iletkenlerdir. Periyodik cetvelde IV B grubunda bulunurlar. En çok bilinen ve günümüz teknolojisinde en sık kullanılanlar Silisyum (Si) ve Germanyum (Ge) dir.

2. Bileşik yarı iletkenler:

İki ya da ikiden fazla elementin bir araya gelmesiyle oluşan yarı iletken malzemelere ise bileşik yarı iletken malzemeler denir. Periyodik cetvelde III ve V B grubunda bulunan yarı iletkenlere III-V bileşik yarı iletkenleri denir. GaAs, AlAs, InP ve InAs

bu grubun ikilisine, $Ga_xAl_{(1-x)}As$ ve $In_xAl_{(1-x)}As$ ise bu grubun üçlüsüne örnek verilebilir. Periyodik cetvelde II ve VI B grubunda bulunan yarı iletkenlere II-VI bileşik yarı iletkenleri denir. $CdTe$ ve $HgTe$ bu grubun ikilisine, $Cd_xHg_{(1-x)}Te$ ise üçlüsüne örnek olarak gösterilmektedir.

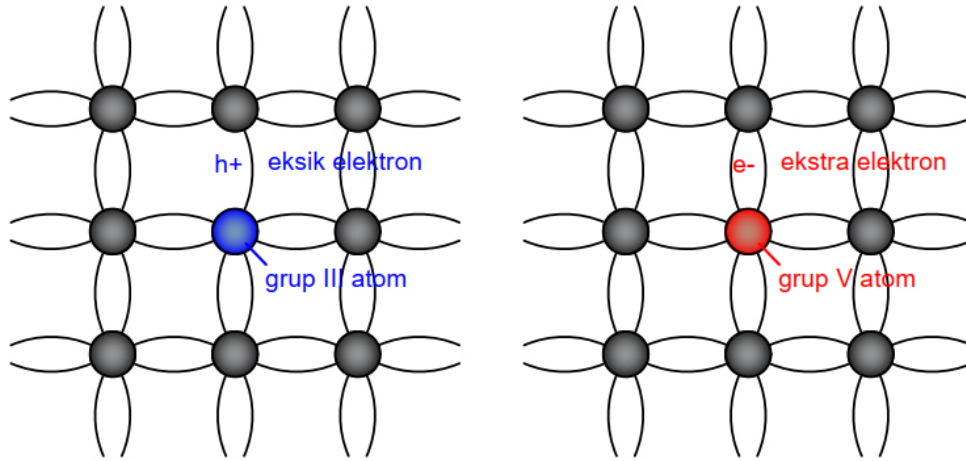
Yarı iletkenler saflıklarına göre iki grupta incelenirler (Sarı, 2005).

1. Özgün yarı iletkenler:

İçinde hiç safsızlık atomu bulunmayan yarı iletkenlere özgün yarı iletken denir. Temel enerji seviyesinde bulunan özgün yarı iletkenlerin değerlik bantları tamamen dolu iken iletim bantları ise tamamen boştur. Yasak enerji aralıkları küçük olduğu için herhangi bir uyarılma ile değerlik bandındaki elektronlar iletim bandına kolayca geçebilirler. Değerlik bandındaki elektronlar iletim bandına geçtikleri zaman değerlik bandındaki yerleri boş kalır. Bu boşluklara deşik (hole) denir. Özgün bir yarı iletkende $n=p$ olmalıdır. “n” elektron sayısı ve “p” deşik sayısıdır.

2. Katkılı yarı iletkenler:

Katkılı yarı iletkenler, kristal içine safsızlık atomları yerleştirilerek elde edilir. Bu yarı iletkenler n- tipi ve p- tipi olarak adlandırılırlar. Periyodik cetvelde IV. gruptaki bir yarı iletken III. gruptaki başka bir elementle katkılандığı zaman III. gruptaki elementin sahip olduğu üç değerlik elektronunun, IV. grup elementin sahip olduğu dört elektronu çiftleyememesinden dolayı, bir deşik oluşur. Bu sistemlerde deşikler yük taşıyıcısı olarak kullanılırlar. Deşik üreten bu katkı maddelerine akseptör denir. Akım taşıyıcılarının büyük kısmı deşiklerden oluştuğundan bunlara p – tipi yarı iletken denir. IV. gruptaki bir yarı iletken, V. gruptaki bir elementle katkılандığında V. gruptaki elementin sahip olduğu beş değerlik elektronunun IV. gruptaki elementin sahip olduğu dört elektronu çiftlemesi ve bir elektronunu serbest bırakması nedeniyle bir elektron fazlası oluşur. Bu sistemlerde yük taşıyıcısı elektronlardır. Malzeme içerisinde elektron fazlalığı oluşturan, bu katkı maddelerine ise donör denir. Akım, genellikle elektronlar tarafından taşındığı için bunlara n- tipi yarı iletken denir. Aşağıdaki şekilde katkılı yarı iletkenler gösterilmiştir (Sarı, 2005).

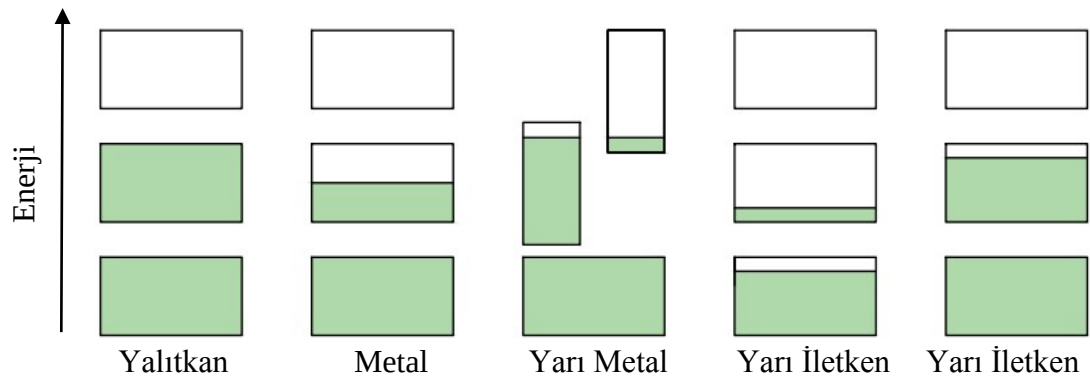


Şekil 2.7. Katkılı yarı iletkenler.

2.2.3 Enerji aralığı

İki atom arasındaki etkileşme aralarındaki uzaklığa bağlıdır. Uzaklık fazla olduğunda elektronik enerji seviyeleri yalıtılmış atomların enerji seviyeleri gibi kabul edilir. Eğer bu iki atom arasındaki mesafe çok az olursa yani birbirlerine yakın konumdalarsa dalga fonksiyonları üst üste gelir ve etkileşme yeterli kuvvette gerçekleşirse iki farklı seviye oluşur. Buna benzerlik gösteren bir olayı çok sayıda atomun (10^{23} atom/cm³ seviyesinde) bir katıyı oluşturmak için bir araya geldiğinde görebiliriz. Birbirlerine yaklaşan atomların atomik enerji seviyeleri yarılr ve genellikle kristal katılar bu değişik atom seviyelerinden kaynaklı birçok izinli enerji bantlarına sahiptir. Bu izinli bantlar arasında oluşan yasak enerji aralıkları yarı iletken maddelerden elektronik aygıtların yapılmasını mümkün kılar. Şekil 2.8'de verilen maddelerin (metal, yarı metal, yalıtkan, yarı iletken) bant yapıları gösterilmektedir. Dikdörtgenlerin dikey uzunlukları izinli enerji bölgelerini gösterir. Taralı alanlar elektronların doldurduğu kısımlardır. Yarı metalde mutlak sıfır sıcaklıkta bir bant tamamına yakın doluyken bir sonraki bant çok az doludur. Saf bir yarı iletken (Silisyum) mutlak sıfırda yalıtkan olur. Şekilde görülen iki yarı iletken sol taraftaki sonlu bir sıcaklıkta ısısal olarak uyarılmış yük taşıyıcıları içerir. Sağ taraftaki yarı iletken ise içindeki katkı maddelerinden dolayı elektron boşlukları içerir (Kittel, 1996). Eğer tamamen dolu bir bant ile boş bant arasında geniş bir enerji aralığı mevcutsa bu madde yalıtandır. Maddenin yarı iletken olması da enerji bandının düşük oranda dolu ya da düşük oranda boş olduğu anlamına

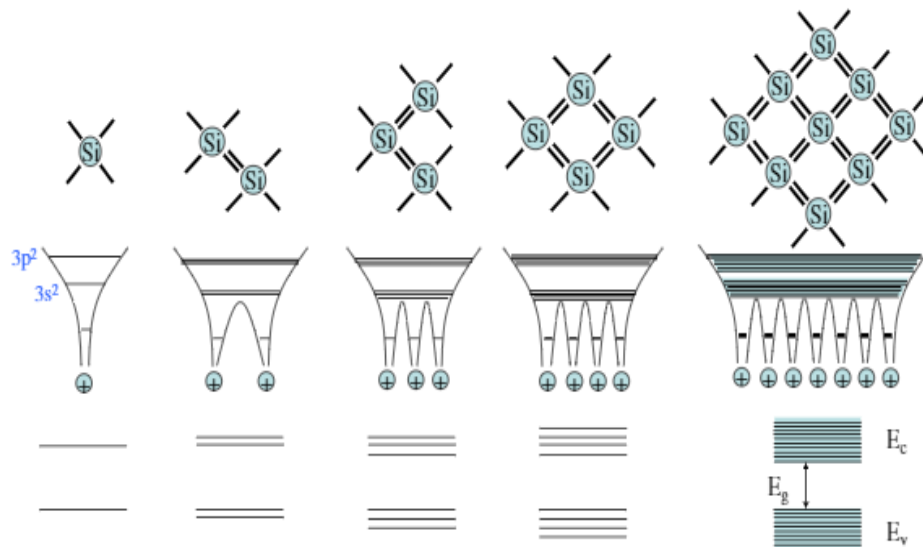
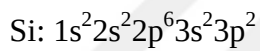
gelmektedir. Enerji aralığı düşük olduğu için iletim bandına elektron geçişi olabilir ve elektron düzeyleri değişiklik gösterebilir.



Şekil 2.8. Yalıtkan, metal, yarı metal ve yarı iletkenlerde izinli enerji bantlarındaki elektron doluluk seviyelerinin şema ile gösterimi.

2.2.4 Yarı iletkenlerde enerji bantlarının oluşumu

Yarı iletkenlerde bant yapısının oluşumunu Silisyum atomlarını kristal yapı oluşturmak için bir araya getirerek aşağıdaki şekilde açıklayabiliriz.



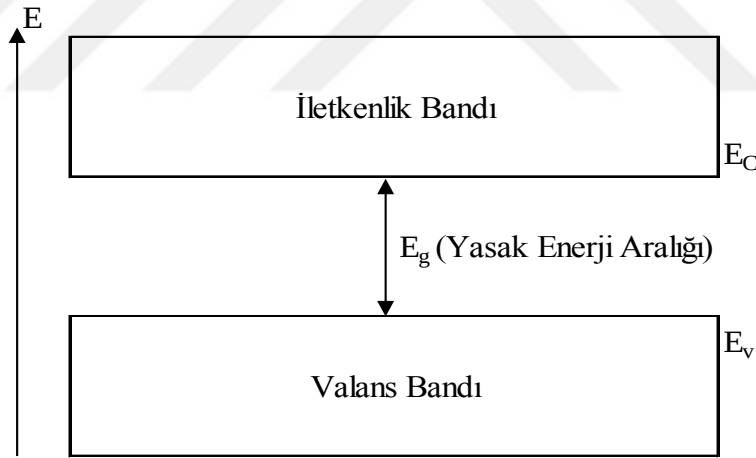
Şekil 2.9. Yarı iletkenlerde enerji bantlarının oluşumu.

Bir Si atomunun yanına bir başka Si atomu geldiği zaman 3s ve 3p yörüngesinin enerjileri ikiye bölünerek enerji seviyelerinde yarılmalar oluşur.

Si atomlarının sayısındaki artışla birlikte 3s ve 3p yörüngelerinin enerjileri de Si atomlarının sayısı kadar bölünür. Atom sayısı arttıkça s ve p yörüngeleri Avagadro sayısı kadar yarılr ve sürekli bir enerji aralığı (bant) oluşur. Enerji bantlarının arasında kalan ve elektronların bulunamayacağı bölgeye yasak enerji aralığı denir.

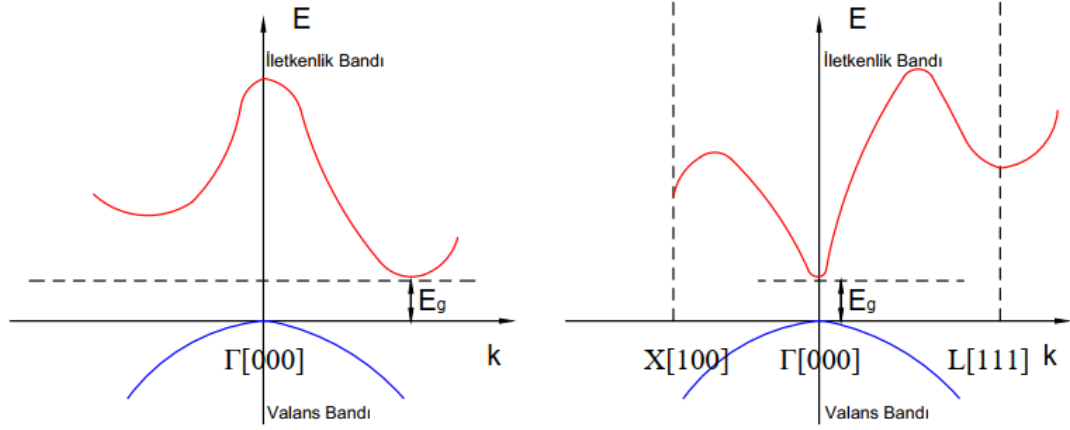
Fermi enerjisi (E_F), N elektronlu bir sistemde taban durumunda dolu halde bulunan en yüksek yörüngenin enerjisidir. Valans bandında bulunan elektronlar termal olarak iletim bandına uyarılabilirler. Bunun sebebi, E_F seviyesinin yarı iletkenler için enerji aralığının neredeyse ortasında olması ve yalıtkanlara kıyasla enerji aralığının daha küçük olmasıdır. Yarı iletkenler için temel bant aralığı çok önemli bir rol oynar çünkü materyalin elektronik özelliklerinin denetimi temel bant aralığı sayesinde yapılır.

T=0 K'de en yüksek enerjiye sahip dolu seviyeye valans bandı, valans bandının üstünde yer alan ilk boş ya da kısmen dolu seviyeye iletim bandı denir. İletim bandı ve valans bandının şematik gösterimi Şekil 2.10'da verilmiştir.



Şekil 2.10. Yarı iletken bir kristal için bant yapısı.

Doğrudan bant aralıklı malzemeler valans bandı maksimumuyla iletim bandı minimumunun üst üste geldiği malzemelerdir. Valans bandının maksimumuyla iletim bandının minimumunun üst üste bulunmadığı malzemeler ise dolaylı bant aralıklı olarak adlandırılırlar. Bu durum Şekil 2.11'de gösterilmiştir.



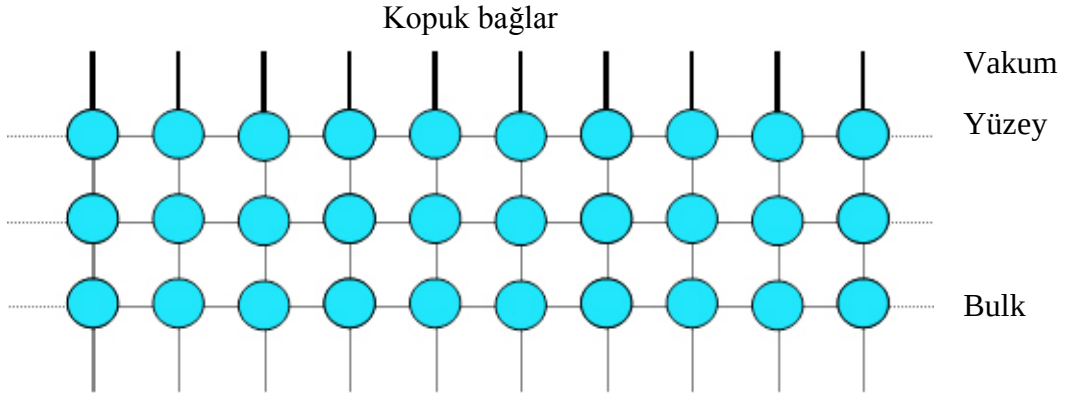
Şekil 2.11. Dolaylı bant aralıklı ve doğrudan bant aralıklı yarı iletkenler.

2.2.5 Yarı iletken yüzeyler

Çok sayıda atomik tabakanın üç boyutta tekrarlanmasıyla Bulk yapının oluştuğundan Bölüm 2.1.1. de bahsedilmişti. Yüzey ise Bulk'dan farklı olarak iki boyutlu bir yapıdır. Yüzeyi elde etmek için üç boyutlu kristal kesilebilir veya büyütme teknikleri kullanılabilir. Yüzey oluştuğunda, atomlar arasındaki bağlardan bazıları kopar ve yüzey üzerinde bağ yapmamış orbitaller oluşur. Bu orbitaller kopuk (dangling) orbitaller veya kopuk bağlar olarak adlandırılır ve kararsızdırlar (Duke, 1996).

Şekil 2.12 de kopuk bağların şematik gösterimi sunulmuştur. Yüzey üzerindeki atomlar yüzey serbest enerjisini azaltmak için konumlarını yeniden düzenlerler. Bu duruma *durulma* adı verilir (Oura, 2003). Eğer en üst katmanın atomik yapısı çok fazla değişmişse ve yüzeyin simetrisi, bulk'tan farklı ise, bu durum *yeniden yapılanma* olarak adlandırılır.

Yüzeyler yeniden yapılanırken simetri yapıları değişir ve bunu ifade etmek için standart bir gösterim biçimi mevcuttur. Örnek verecek olursak, $Ge(hkl)$ örgü düzlemine paralel bir yapı, $Ge(hkl) - (n \times m)$ ifadesindeki (hkl) ile gösterilirken $(n \times m)$ ise birim hücrenin boyutlarının, bulk örgü vektörlerinin x eksenı boyunca n kez, y eksenı boyunca m kez büyütülmesiyle elde edildiğini göstermektedir (Duke, 1996).



Şekil 2.12. Bulk, yüzey, vakum bölgeleri ve kopuk bağların şematik olarak gösterimi.

2.2.6 Yüzeye atom tutunması

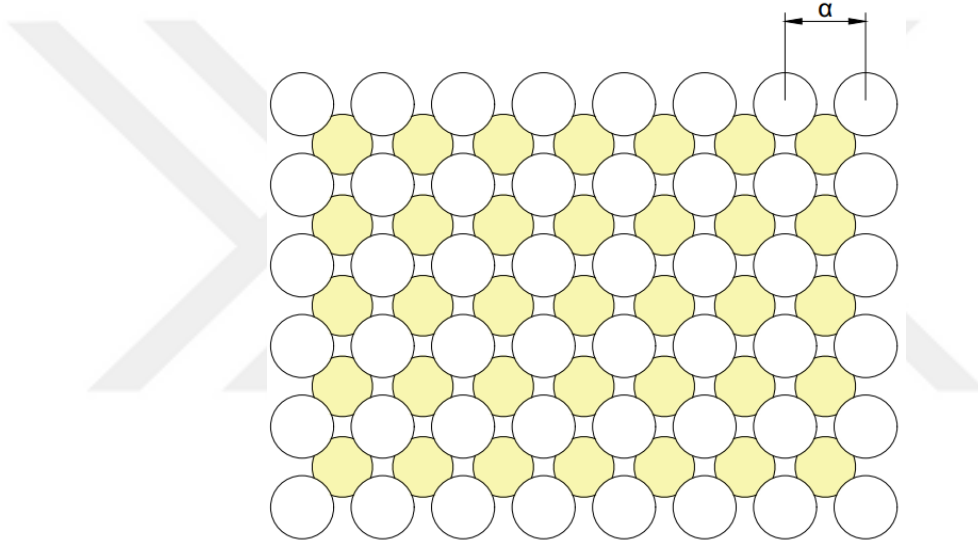
Malzemenin yüzeyine çarpan atom veya molekül enerji kaybetmeden yüzeyden yansıtılabilir ya da yüzeydeki atomlar ile etkileşerek enerji kaybedebilir. Böyle bir durumda, molekül yeterli enerji kaybederek yüzeye etkin olarak bağlanır veya enerjisinin az bir miktarını kaybederek yüzeye bağlı duruma gelemmez ve yüzeyden inelastik olarak yansıtılır. Atom veya molekülün yüzeye bağlanması durumunda, katı-sıvı veya katı-gaz ara yüzeyindeki konsantrasyon değişimine bağlı olarak yüzeye tutunma (adsorpsiyon) meydana gelir. Madde katı yüzeyde tutunmuş ve konsantrasyonu artmış ise bu maddeye tutunan (adsorplanan/adsorben), atom veya molekülü tutan katıya tutucu (adsorplayıcı/adsorbent) ve yüzeye tutunan taneciklerin yüzeyden ayrılmasına salınım (desorpsiyon) denir (Groß, 2002).

Tutunma olayının nedenleri Van der Waals kuvvetleri ve maddenin ara yüzeyinde bulunan moleküller arasındaki dengelenmemiş kuvvetlerdir. Bu olay, adsorplayıcı kuvvetlere göre fiziksel ve kimyasal tutunma olarak sınıflandırılır (Atkins, 2006). Fiziksel tutunmada yüzeye tutunan atom veya molekül, katı yüzeye uzun ve zayıf Van der Waals kuvvetleri ile bağlanır. Ayrıca bu tutunma tipi tersinirdir ve süreç çok hızlı gerçekleşir. Asıl gazların ve metanın tutunması fiziksel tutunmaya örnek olarak gösterilebilir. Sıcaklık ile fiziksel tutunma genellikle ters orantılıdır. Bunun yanında fiziksel tutunmanın gerçekleşmesi için ΔH entalpi değerinin 35 kJ/mol'den küçük olması gerekmektedir (Demirbaş, 2006). Kimyasal tutunmada ise tanecikler ve tutundukları yüzeyler arasında, bir yük transferi olması halinde, kuvvetli kimyasal bağlar oluşur. Birçok elektronun yüzeye tutunan taneciklerden ayrılıp en yakın alt taş

atomda kalması bu tip tutunmada görülebilecek en aşırı durumdur ve bunun tersini görmek de mümkündür. Bu esnada yüzey ile tanecik arasında saf iyonik bağ oluşur. Bu tutunmalarda oluşan bağlar çok kuvvetli olduğu için tutunma olayı tersine çevrilmez ve sıcaklık ile doğru orantılıdır (Demirbaş, 2006).

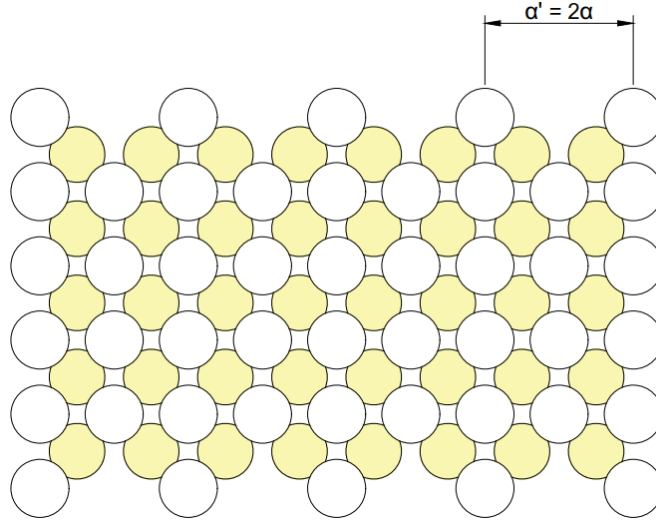
2.2.7 Yeniden yapılanma

Bir yüzey oluşturulurken büyütme sonlandırıldığı zaman ortaya çıkan bozulma yani yüzeydeki atomların yüzey tarafında bağ yapmayan elektronların kalması, yüzeyde ve yüzey yakınında bulunan atomların yeni denge durumları oluşturmalarına neden olur. Şekil 2.13 bulk yapının yeniden yapılanmamış yüzeyini göstermektedir.



Şekil 2.13. Yeniden yapılanmamış yüzey (üstten).

Yarı iletkenlerde kristallerin ideal bulk bitimi kararsız olduğu için serbest yüzey enerjisini minimum seviyeye indirmek için kopuk bağlar doyurulur ve yeni bağlar kendi aralarında şekillendirilir. Yüzeyde bulunan kopuk bağlar yüzeyi çok kararsızlaştırır ve kararlı hale gelebilmek için sağa sola hareket ederken birbirleri ile bağ yaparlar. Böylece yeniden yapılanma gerçekleşmiş olur (Gürünlü, 2005). Şekil 2.14 yeniden yapılanmış bir yüzeyi göstermektedir. Şekilde ki beyaz renkteki atomlar yüzey atomlarını gösterir. Yeniden yapılanma en üstteki tabakanın atomik yapısında bir değişme olmasıdır. Yeniden yapılanmış yüzeylerin simetrisi ve periyodikliği bulkten farklıdır (Srivastava, 1997).



Şekil 2.14. Yeniden yapılanmış yüzeyin şematik olarak üstten görünüşü.

Eğer yüzeyde yeniden yapılanma durumu oluştuysa a_1^* ve a_2^* yeni oluşan birim hücrenin temel örgü vektörleri olmak üzere, en genel gösterimde yüzeyi tanımlayan indislerin kümesi $m \times n$ ifadesi ile verilir. Burada $m = a_1^* / a_1$ ve $n = a_2^* / a_2$ dir. m ve n tam sayı olmak zorunda değildir. Oluşan yeni birim hücre dönebilir ve farklı örgülere karşı gelebilir (Srivastava, 1997).

Yeniden yapılanma metal yüzeylerde sınırlı sayıda oluşurken, yarı iletken yüzeylerde oldukça yaygındır.

Aynı zamanda, en üstteki tabaka ya da tabakalarda atom sayısının korunup korunmadığına bakılarak korunumlu ve korunumsuz yeniden yapılanma olmak üzere 2 çeşit yeniden yapılanma vardır:

2.2.8 Korunumlu ve korunumsuz yeniden yapılanma

Yüzeydeki en üst tabakada bulunan atom sayısının korunduğu ve atomların ideal durumlarından yer değiştirmesi şeklinde olan yapılanmaya korunumlu yeniden yapılanma denir.

Korunumsuz yeniden yapılanma da yüzeydeki atom sayısı bulkteki katmana göre farklı olmaktadır. Bu tür yeniden yapılanmada ki değişen atomik yoğunluktur.

2.3 Yarı İletken Yüzeylerin İncelenmesinde Kullanılan Yöntemler

Teknolojik uygulamalar açısından bakıldığında yarı iletkenlerin oldukça yaygın bir kullanım alanı olduğunu söyleyebiliriz. Dolayısıyla, yüzey bilimi ve uygulamaları açısından ön şart, bu yüzeylerin doğru şekilde ayırt edilmiş olmasıdır.

Yarı iletken yüzeyler deneysel metotlar ve teorik modelleme olarak iki şekilde incelenir. Teorik modelleme hakkındaki bilgiler üçüncü bölümde ayrıntılı olarak verilmiştir.

2.3.1 Deneysel metotlar

Deneysel metotlar kullanılarak, incelediğimiz yüzeyin geometrisi gerçek uzaydaki analizi ile doğrudan görülebilir. Deneysel metotlarla yüzeylerin, çeşitli özelliklerini farklı parametrelere bağlı olarak grafiksel olarak da inceleyebiliriz.

Yüzeylerin incelenmesi için kullanılan deneysel metotlar;

- Kırınım Metotları
- Elektron Spektroskopisi Metotları
- İyonlarla Yüzey Araştırması
- Mikroskoplar

gibi başlıklar altında toplanabilir. Bu başlıklardan bazılarını esas alan deneysel cihazlardan en çok kullanılanları ise:

- Düşük Enerjili Elektron Kırınımı (LEED)
- Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM)
- Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM)
- Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM)
- Taramalı Tünelleme Spektroskopisi (STS)

2.3.1.1 Düşük enerjili elektron kırınımı (Low energy electron diffraction; LEED)

Düşük enerjili elektron kırınımı tekniği, tek kristalli bir malzemenin düşük enerjili elektronlarla (20-200 eV) bombardıman edilmesiyle saçılan elektronların bir floresan ekran üzerinde benekler halinde görünmesi yardımıyla yüzey yapısının incelenmesidir.

2.3.1.2 Taramalı tünelleme mikroskobu (Scanning Tunneling Microscope; STM)

Taramalı tünelleme mikroskobu atomik seviyede yüzey özelliklerinin incelenmesinde kullanılan bir cihazdır. İyi çözünürlüklü bir STM görüntüsü için yanal çözünürlüğün 0.1 nm derinliksel çözünürlüğün 0.01 nm olması gerekmektedir. Bu çözünürlük yüzey üzerinde var olan atomların şekillendirilmesi için yeterlidir. STM hava ortamında, ultra yüksek vakum ortamında, suda ve diğer çeşitli sıvı ve gaz ortamlarda, 0 °K den 1000 °C ye değişik sıcaklıklarda kullanılabilir.

STM kuantum tünelleme olayını temel alır. Yüzeyin incelenmesi için tip adı verilen ince bir uç yüzeye yaklaştırıldığında, yüzey ve uç arasında elektronlar tünellenir. Oluşan tünel akımı tip pozisyonunun, uygulanan voltajın ve numunenin lokal yoğunluk durumlarının bir fonksiyonudur. STM, temiz ve kararlı bir yüzey, keskin bir tip, mükemmel titreşim kontrolü gerektirir.

2.3.1.3 Atomik kuvvet mikroskobu (Atomic force microscope; AFM)

Atomik Kuvvet Mikroskobu, Angstrom mertebesinde ölçüm yaptığı için yüksek çözünürlüklü bir Taramalı Probe (Uç) Mikroskobu'dur ve optiksel mikroskoplara kıyasla 1000 kat daha iyi bir görüntü alınmasına olanak sağlar.

AFM'nin çalışma prensibi cantilever'deki sapmanın ölçülmesiyle ilgilidir. Bir lazer ışını cantilever üzerine düşürüp daha sonra bu ışını bir fotodiyot yardımıyla denetleriz. Cantileverin ucundaki tip yüzey atomlarıyla etkileşir ve bu etkileşim ile bükülen cantileverden sapan lazer ışını, fotodiyotta algılanır. Yüzey analizi de bu sapmaya bağlı olarak yapılır.

Atomik kuvvet mikroskopları üç modda çalışır bunlar:

- Kontak Mod
- Non – Kontak Mod
- Tapping Mod'dur.

AFM ile, taramalı tünelleme mikroskopundan farklı olarak yalıtkan malzemelerin de görüntüleri araştırılabilir. Bunun nedeni olarak AFM'de tünelleme akımı olmaması diyebiliriz..

2.3.1.4 Taramalı elektron mikroskobu (Scanning electron microscope; SEM)

Taramalı elektron mikroskopunda, araştırma yapacağımız yüzey üzerine 30 keV'a kadar hızlandırılmış elektronlar gönderilir. Elektron tabancası ile hızlandırılan bu elektronlar manyetik lensler aracılığıyla ince bir demet halinde örnek yüzeyine gönderilir. Yüzeye çarpan bu elektronlar yüzey atomları ile etkileşirler.

SEM'de görüntü üç tip analiz ile elde edilir:

Geri Saçılan Elektronlar: Enerjileri yüksek olan yüzeye çarpan elektronlar, yüzey atomundaki çekirdek ile etkileşerek geri saçılır. Saçılan bu elektronları inceleyerek yüzey hakkında bilgi sahibi olabiliriz.

İkincil Elektronlar: Bazen de yüzeye çarpan enerjisi yüksek elektronlar yüzey atomunun çekirdeğiyle etkileşmek yerine yüzey atomunda bulunan elektronlarla etkileşirler. İkisinin yükü de negatif olması durumunda ise, gelen elektronlar yüzeyin kendi elektronlarını koparıp dışarı fırlatır. Bu durumda ortaya çıkan bu ikincil elektronlar incelenerek yüzey hakkında bilgiye ulaşmış oluruz.

Işımlar: Yüzeyde meydana gelen bu etkileşimler sırasında yukarıda bahsettiğimiz durumların dışında bazı ışımlar gözlemlenebilir. Yüzeyden çıkan bu ışımları inceleyerek de yüzey hakkında bir takım bilgilere ulaşabiliriz.

2.3.1.5 Taramalı tünelleme spektroskopisi (Scanning tunneling spectroscopy; STS)

Taramalı Tünelleme Spektroskopisi elektronik durumların yerel yoğunluklarını, atomik ya da moleküler düzeyde incelememize olanak sağlar. Bu ölçümler taramalı tünelleme mikroskobu ile yapılır.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1 Teorik Metotlar

Yoğun madde fiziğinde ve malzeme kimyasındaki gelişmeler bilişim araçları ve metotlarının yenilenmesine ve ilerlemesine bağlıdır. Bu sayede araştırmacılar malzemelerin değişik özelliklerini temel ve teknolojik uygulamalar için araştırabilirler. Örneğin basitten karmaşığa malzemelerin elektronik, yapısal, manyetik, mekanik, optiksel ve termoelektrik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kullanılarak çeşitli kodlarla, kısa sürede çalışabilmektedir (Siddique vd., 2017). DFT çok parçacıklı bir kuantum teorisidir (Kohn ve Sham, 1965). Malzemelerin özelliklerini dalga fonksiyonu yerine elektronun yük yoğunluğunu dikkate alarak hesaplar. Elektronun yük yoğunluğu sadece üç özel koordinatın fonksiyonu olduğundan çok fazla değişkene bağlı olan çok parçacıklı dalga fonksiyonu ile karşılaştırıldığında kolayca hesaplanabilmektedir. Bu nedenle çok parçacıklı Schrödinger denkleminin analitik çözümü çok parçacık korelasyonlarının varlığında daha ilgi çekici hale gelmektedir.

DFT, çok parçacıklı Schrödinger denklemini Kohn – Sham denklemleri olarak da bilinen ve nümerik olarak kolayca çözülebilen birleştirilmiş tek elektron denklemlerinin bir seti haline dönüştürdüğü için malzemelerin nümerik özelliklerini hesaplamakta mükemmel bir alternatif sunar (Jones ve Gannarsson, 1989).

DFT yi temel alan ab initio yaklaşımında birkaç parametreyle hesaplamayı başlatarak, yarı iletken yüzeyin yapısı araştırılır. Bu bölümde, bu tez çalışmasında kullandığımız, ab initio pseudopotansiyel (potensiyelimsi) metot hakkında kısa bilgiler yer almaktadır.

3.2 Çok Cisim Problemi

Çok cisim problemi fizikte henüz tam çözülememiş temel problemlerden birisidir. Bu problemin çözümündeki engel, çok elektronlu bir sistem için elektron-iyon ve elektron-elektron etkileşimleri düşünüldüğünde, bu sistemin serbestlik derecesinin büyük olmasından dolayı Schrödinger denkleminin çözümünün zor olmasıdır. Bu yüzden, Schrödinger denklemini çözmek için farklı yaklaşımlar geliştirilmiştir.

Bir kristal sistemi içerisindeki elektron - iyon davranışını tanımlarken ψ çok cisim dalga fonksiyonunu kullanırız. Schrödinger denkleminde dalga fonksiyonunu kullandığımızda

$$H\psi_i(\vec{R},\vec{r}) = E_i\psi_i(\vec{R},\vec{r}) \quad (3.1)$$

ifadesini buluruz.

Burada, H hamiltonyeni, E ise enerji özdeğerlerini ifade eder. $\vec{R}$ iyonların $\vec{r}$ ise elektronların konumlarını ifade etmektedir. Kristal sisteminde hamiltonyenin içereceği terimleri önem sırasına göre yazacak olursak:

- 1) Noktasal çekirdeğin cloumb alanındaki elektronların kinetik ve potansiyel enerjileri,
- 2) Elektronların kendi aralarındaki elektrostatik itmeler,
- 3) Elektronların, spinlerinin yörüngesel hareketlerden doğan magnetik etkileşmesi, yani kısaca spin - yörünge etkileşmeleri
- 4) Elektronların spin-spin etkileşmeleri

5) Relativistik etkiler, çekirdek düzeltmeleri

şeklinde sıralayabiliriz.

1. ve 2. maddedeki etkileşmeleri hesaba kattığımızda sistemin hamiltonyenini aşağıdaki gibi yazılabiliriz.

$$H = T_{iyon} + V_{iyon-iyon} + T_{el} + V_{el-el} + V_{el-iyon} \quad (3.2)$$

Burada T_{iyon} ve $V_{iyon-iyon}$ iyonlara ait kinetik ve potansiyel enerji operatörlerini, T_{el} elektronların kinetik enerji operatörünü, $V_{el-iyon}$ elektron-iyon etkileşmesinden doğan potansiyel enerji operatörünü ve V_{el-el} ise elektron-elektron etkileşmesinden oluşan potansiyel enerji operatörünü ifade etmektedir (Gürünlü, 2005).

3.2.1 Born-Oppenheimer yaklaşımı

Bir sistemin içerisindeki elektronlardan meydana gelen çok parçalı sisteminin Schrödinger denkleminin çözümü için çeşitli yaklaşımlara ihtiyaç duyulmaktadır. Bir veya iki elektronlu sistemlerden daha karmaşık olan yapılardan oluşan sistemlerin Schrödinger denklemini çözmeye çalışan yaklaşımlardan bir tanesi de Born- Oppenheimer yaklaşımıdır. Bu yaklaşıma göre, iyonların elektronlardan daha ağır olması nedeniyle, iyonların sabit kalacağı, elektronun hareketinin ise sadece diğer elektronların hareketine bağlı olacağı ve dolayısıyla iyon ve elektronun hareketinin ayrı ayrı incelenebileceği kabul edilmiştir (Mutlugeldi, 2009). Elektronlar çekirdeğin konumundaki değişikliklerden ani olarak etkilenirler. Bir moleküler sistem için tam Hamiltonyen denklemi aşağıdaki şekilde gösterilir.

$$H = T^{elek}(r) + T^{çekirdek}(R) + V^{çekirdek-elek}(R, r) + V^{elek}(r) + V^{çekirdek}(R) \quad (3.3)$$

Burada gösterilen ilk iki terim sırasıyla elektron ve çekirdeğin kinetik enerji operatörünü, üçüncü terim çekirdek-elektron etkileşmesinden doğan potansiyel enerji operatörünü, dördüncü terim elektron-elektron etkileşme potansiyel enerji operatörünü ve son terim ise çekirdek-çekirdek etkileşmesinden oluşan potansiyel enerji operatörünü ifade etmektedir.

Elektronik Hamiltonyen için,

$$H^{elek} = -\frac{1}{2} \sum_i^{elek} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) - \sum_i^{elek} \sum_j^{\check{ek}} \left(\frac{Z_j}{|R_j - r_i|} \right) + \sum_i^{elek} \sum_{j \neq i}^{elek} \left(\frac{1}{|r_i - r_j|} \right) + \sum_i^{\check{ek}} \sum_{j \neq i}^{\check{ek}} \left(\frac{Z_j Z_i}{|r_i - r_j|} \right) \quad (3.4)$$

eşitliği kullanılır.

Çekirdek sabit olduğu için kinetik enerjisi ihmal edilir. Sabit olan çekirdeğin etki alanı içerisinde bulunan elektronların hareketlerini açıklamak istediğimizde ise Schrödinger denkleminde kullanılan Hamiltonyen aşağıdaki şekilde gösterilebilir.

$$H^{elek} \Psi^{elek}(r, R) = E^{eff}(R) \Psi^{elek}(r, R) \quad (3.5)$$

Elektronik dalga fonksiyonu için bu denklemin çözümü etkin nükleer potansiyel fonksiyonu olarak aşağıdaki gibi bulunacaktır.

$$H^{\check{ek}} = T^{\check{ek}}(R) + E^{eff}(R) \quad (3.6)$$

3.3 Elektron–Elektron Etkileşmesi

Tek parçacıklı sistemlerde Schrödinger denklemlerinin çözümü kolaydır ancak çok parçacık sistemlerde analitik bir çözüm bulmak mümkün değildir. Bu yüzden çok parçacık Schrödinger denklemini tek parçacık Schrödinger denklemine indirgeyen ve bu şekilde çözüme ulaşılabilen iki yaklaşım bulunmaktadır: dalga fonksiyonu yaklaşımı ve yoğunluk fonksiyoneli yaklaşımı.

3.3.1 Dalga fonksiyonu yaklaşımı

Hartree ve Hartree–Fock teorisi: Hartree yaklaşımı, tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımlarının, çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonunu temsil edeceğini ileri sürmüştür (Hartree, 1928). Fakat Hartree yaklaşımı Pauli dışarlama ilkesini sağlamaz yani Hartree dalga fonksiyonu elektron değişimi durumunda antisimetrik kalmaz. Çünkü elektronlardan (fermion) oluşan bir sistemin herhangi iki elektronun değiş tokuşunda işaret değiştirmesi gerekir. Fock, Pauli dışarlama ilkesini hesaba katarak Hartree yaklaşımının bir uzantısı olan Hartree–Fock (HF)

Teorisi'ni ortaya attı (Fock, 1930). HF yaklaşımıyla elde edilen denklemlerde, antisimetri kısıtlamasının sonucu değiş tokuş enerjisi terimi yer alır. Aslında değiş tokuş enerjisi elektronik sistemin Coulomb enerjisinin azalmasıdır (Tang, 2005).

HF yaklaşımı toplam enerji ve elektron yoğunluklarını oldukça doğru tahmin etmekle birlikte, elektronlar arası korelasyonu (bir elektronun diğer elektronlar üzerindeki etkisi) göz önüne almadığı için temel durum enerji hesabında yetersizdir (Özkaya, 2009).

Bu yaklaşım kısaca özetlenirse;

- 1) Sistemdeki bütün elektronlar, yaklaşık yörüngelerin bir setiyle tanımlanır.
- 2) Bir elektron seçilerek potansiyel hesabı yaparken diğer elektronların dağılımının sabit olarak alınmasıyla yapılır.
- 3) Schrödinger denklemi bu potansiyel için çözülür, bu da onun için yeni bir yörünge verir.
- 4) Daha sonra yapılan bu işlem sistemdeki diğer elektronlar için tekrar edilir. Potansiyel kaynağı olarak da sabitlenmiş yörüngelerdeki elektronların hareketini kullanırız.
- 5) Bir döngüden sonra baktığımızda başlangıç setinden yeni yörüngeler olduğunu görürüz.
- 6) Bu işlemler yörüngelerin içinde değişme olmadığı ya da değişmenin çok küçük olduğu duruma kadar tekrar edilir (Mutlugeldi, 2009).

3.3.2 Yoğunluk fonksiyoneli yaklaşımı

Thomas–Fermi teorisi: Thomas–Fermi teorisinde ana değişken elektron yoğunluğudur. Bu teori, elektronların homojen bir elektron gazı oluşturduğunu ve kinetik enerjinin yoğunluğa bağlı olduğunu varsayar (Fermi, 1928). Thomas – Fermi teorisinde elektron–elektron etkileşimi basite indirgenerek Hartree–Fock teorisince öngörülen değiş–tokuş enerjisi dikkate alınmamış, ayrıca elektron korelasyonu ihmal edilmiştir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi: Yoğunluk fonksiyonel teorisi metallerin, yarı iletkenlerin ve yalıtkanların taban durum özelliklerini tanımlamamız açısından oldukça başarılı ve çok kullanılan bir yaklaşımdır. Sadece bulk materyallerde değil,

proteinlerde ve karbon nano tüpler gibi kompleks materyallere de uygulanabiliyor olması Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin üstünlüklerindendir. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi'nin mantığı, çok parçacık dalga fonksiyonu tanımlanmadan, yoğunlukların da yardımı ile fermiyonların etkileştiği bir sistemi tanımlamaktır.

1964'te yayınladıkları makaleyle Hohenberg ve Kohn yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temelini oluşturdular. Bahsettiğimiz bu temel, $3N$ değişken içeren (N elektronların sayısı), karmaşık ve dolayısıyla hesaplanması zor olan çok elektronlu dalga fonksiyonu yerine 3 boyutlu elektronik yoğunluk dağılımının kullanılmasına dayanır. Hohenberg ve Kohn'un temel durum enerjisinin özellikle elektron yoğunluğuna bağlı olduğuna işaret eden ilk teoremleri elektron yoğunluğunun fonksiyoneli teoremidir. İkinci teoremleri, sistemin enerjisini elektron yoğunluğuna göre en aza indirerek temel durum enerjisinin elde edilebileceğini gösterir (Hohenberg ve Kohn, 1964).

Hohenberg ve Kohn teoremine göre, bir kuantum sisteminin temel durum özellikleri sistemin tüm fiziksel özelliklerini içeren elektronların yük yoğunluğu kullanılarak belirlenebilir. N elektronlu bir sistem için Kohn – Sham denklemi aşağıdaki şekilde verilmektedir (Hohenberg ve Kohn, 1964; Mattsson ve Wills, 2016).

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) + \int dr \frac{n(r)}{|r-r'|} + V_{xc}(r) \right] \Psi_i(r_i) = \varepsilon_i \Psi_i(r_i); \quad (3.7)$$

$$i = 1, 2, \dots, N$$

Burada parantez içinde verilen terimlerden ilki elektronların kinetik enerjisine, $V_{ext}(r)$ diğer elektronlar tarafından oluşan dış potansiyeli (harici potansiyel), $n(r) = \sum_i^N |\psi_i(r)|^2$ ise elektron yoğunluğudur. Değiş tokuş korelasyon enerji fonksiyonelinin fonksiyonel türevi olan değiş tokuş potansiyeli:

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[n(r)]}{\delta n(r)} \quad (3.8)$$

Böylece toplam enerji fonksiyoneli

$$E[n] = T_0[n] + \int d^3 r. n(r) \left(V_{ext}(r) + \frac{1}{2} \Phi(r) \right) + E_{xc}[n] \quad (3.9)$$

Burada $T_0[n]$ elektron elektron etkileşimini içermeyen, yük yoğunluğu n olan elektronların kinetik enerjisi, Φ etkileşen elektronların coulomb potansiyelidir. Denklem (3.9) daki değiş tokuş korelasyon enerji fonksiyoneli $E_{xc}[n]$ haricindeki bütün terimler tam olarak belirlenebilir. $E_{xc}[n]$ ise problemin doğasına göre yaklaşık olarak bulunabilir. Bu fonksiyonelin tam formu çok parçalı Schrödinger denklemi ile elde edilen temel durum enerjisiyle aynı olan Kohn – Sham denklemlerinin çözümüyle elde edilir. En çok kullanılan değiş tokuş korelasyon fonksiyonelleri Lokal Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) dır. LDA da değiş tokuş korelasyon enerji yoğunluğu değişmez olarak kabul edilirken, GGA da bu durum elektron yük yoğunluğunun lokal gradyentine $|\nabla n(r)|$ bağlıdır (Hafner vd., 2006).

Kohn – Sham metodu, sistemin enerji fonksiyoneli minimum yapan yoğunluğun bulunabileceği denklemleri ortaya koyar. Kohn ve Sham (1965) yayınladıkları makaleyle çoklu elektron problemini etkileşimli olmayan elektron problemine indirgemişlerdir(Kohn ve Sham, 1965). Bu problem, elektronlar arasında Coulomb etkileşimlerini, örneğin değiş tokuş ve korelasyon etkileşimlerini içerir. Ancak bu metod için değiş tokuş ve korelasyon etkileşimleri ile uğraşmak zordur.

Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA): Yerel yoğunluk yaklaşımı, yoğunluğu lokal olarak tek tip elektron gazı gibi kabul edileceğini varsayar, yani değiş tokuş ve korelasyon enerjileri, sistemdeki her noktada, aynı yoğunluktaki tek tip elektron gazının yoğunluğu ile aynıdır (Cheung, 2002). Bu yaklaşım bulk metaller gibi elektronik yoğunluğun oldukça düzenli olduğu sistemlerde başarılı sonuçlar verirken, metalik yüzeyler için çok iyi sonuçlar vermez.

Bu yaklaşımda değiş-tokuş korelasyon enerjisi $p(\vec{r})$ yerel yoğunluğuna eşit yoğunluktaki homojen elektron gazının enerjisine eşittir ve aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$E_{xc}^{YYY}[\rho] \approx \int \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})]\rho(r)d^3r \quad (3.10)$$

Burada $\varepsilon_{xc}[p(\vec{r})]$, $p(r)$ yoğunluğundaki homojen elektron gazının birim hacminin değiş-tokuş korelasyon enerjisini göstermektedir.

$$V_{xc}[p] = \frac{\delta E_{xc}[p]}{\delta(\vec{r})} \quad (3.11)$$

denklemini kullanılarak deęiş-tokuş korelasyon potansiyeli aşığıdaki gibi verilir.

$$V_{xc}^{LDA}(\vec{r}) = \frac{\partial E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho} \approx \frac{\partial}{\partial \rho(\vec{r})} \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] \approx \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] + \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}'[\rho(\vec{r})] \quad (3.12)$$

Bant hesaplamaları yaparken Yerel Yoęunluk Yaklaşımını oldukça fazla bir şekilde kullanmaktayız. Temel durum özellikleri LDA ile iyi bir şekilde açıklanabildiğinden deęiş-tokuş enerjisini ve korelasyon enerjisini bu yaklaşımı kullanarak elde ederiz (Gürünlü, 2005).

Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA): GGA yöntemi, yoęunluk gradyentini dikkate alarak, homojen olmayan sistemler için LDA'nın yetersiz kaldığı düşünülerek geliştirilmiştir. Bu yöntem, LDA'da kullanılan deęiş tokuş ve korelasyon enerjisine ek olarak elektron yoęunluğu gradyentlerini de hesaplamalara dahil eder.

Yoęunluk gradyenti bazı malzemeler için büyük deęerlere sahiptir ve bunun sonucu olarak da yerel yaklaşımların yanı sıra, GGA gibi yerel olmayan yaklaşımlar kullanılmaktadır. Bunun için literatürde Perdew – Wang (PW91) ve Perdew – Burke – Enzerhof (PBE) gibi örnekler bulmak mümkündür (Perdew vd., 1981; Perdew, 1986).

GGA'nın da her zaman doğru sonuçlar ürettiğini söylemek doğru olmaz. Baę uzunluğu ve toplam enerjiyi LDA'ya kıyasla daha iyi hesaplamasına rağmen, katılar için yapılan baę uzunlukları ve örgü sabiti hesaplamalarında deneysel sonuçlara göre yetersiz kalmaktadır.

Ayrıca LDA ve GGA'nın her ikisinin de doğru sonuçlar vermediği durumlar gözlemlenmiştir. Metaller için hesaplanan bant yapıları deneysel sonuçlarla örtüşürken, yarı iletkenler için hesaplanan bant aralığı ise deneysel sonuçlara göre daha küçük sonuçlar vermektedir. Ancak bu yoęunluk fonksiyoneli teorisinin taban durumlar için kullanılan bir metot olmasından kaynaklanmaktadır (Çakmak, 1999).

Sonuç olarak, yoğunluk fonksiyoneli teorisinin daha başarılı sonuçlar vermesi için, değiş tokuş ve korelasyon enerjilerinin en doğru şekilde belirlenmesi gerekmektedir.

3.3.3 LDA ve GGA yaklaşımlarının sınırlılıkları

DFT, elektronik yapı hesaplamalarında kullanmak üzere gelişmiş bir teori haline gelmiştir. DFT'nin iyi sonuç verebilmesi için deęiřtokuş-korelasyon enerjisinin doğru seřilmesi gerekmektedir. Bununla beraber daha doğru sonuçlar elde etmek için alıřmalar devam etmektedir. Katıhal fizięi aēısından bakmak gerekirse DFT, “ilk-prensipier” ilkesinden yola ıkarak malzemelerin zelliklerini hesaplamak için kullanılan bir yntemdir. Geleneksel statik DFT hesaplamaları, rg parametreleri gibi yapısal taban-durumu zellikleri zerine yoğunlařmış olamkla birlikte zamana baęlı yoğunluk fonksiyoneli teorisi (TDDFT) ve soęurma spektrumları gibi uyarılmış durum zelliklerini de hesaplamamıza yardımcı olmaktadır. Teknolojideki ilerlemeler ile birlikte DFT, binlerce atomlu biyolojik sistemlere de gelişmiş bilgisayarlar sayesinde başarı ile uygulanabilmektedir.

LDA yaklaşımına baktığımızda rg sabiti deęerlerinin deneysel deęerlerden kk, baę enerji deęerleri ile bulk modlnn ise deneysel deęerlerden byk sonuçlar verdięini grmekteyiz. Aynı zamanda LDA'nın, arayzey ve yzey hesaplamaları ile dinamik hesaplamalar için fonon dispersiyon baęıntısı hesaplamalarında da iyi sonuçlar vermektedir (Giannozzi vd., 1991; Gonze vd., 1992).

Bunun yanında dielektrik sabitleri ve buna baęlı byklklerin hesaplamaları ile zayıf baęlarda ve zellikle Hidrojen baęlarında LDA'nın ok doğru sonuçlar vermedięini syleyebiliriz. Ayrıca LDA'nın, sabit elektron yoğunluęuna sahip olan saf metaller iēin kesin-doęru sonuçlar verdięi ancak deęiřen elektron yoğunluęuna sahip olan sistemlerde ise doğru sonuç verme ihtimalinin azaldığı grlmektedir (Laasonen, 1992).

3.4 Elektron–İyon Etkileřmesi

Elektron – İyon Etkileřimi İēin;

1. Tm Elektron Metodu: Elektronlarla iyonlar arasındaki etkileřmeden doęan Coulomb potansiyeli dikkate alınır.

2. Düzlem Dalga Gösterimi: Düzlem dalgalar periyodik katılardaki hesaplamalar için kullanılır. Düzlem dalgalar normal uzaya veya ters uzaya transfer edildiği takdirde elektronik durumların fiziksel bir portresini elde edebiliriz.

3.4.1 Potansiyelimsi (pseudopotansiyel) metot

Potansiyelimsi metot, iyon-kor yaklaşımı yaparak valans elektronlarını dikkate alan yaklaşımdır. Katıların pek çok fiziksel özelliği, kor elektronlarından (tamamen dolu yörüngelerdeki elektronlar, Si için $1s^2, 2s^2, 2p^6$ elektronları) ziyade valans elektronlarına (çekirdeğe uzak, tabakaları tamamen doldurmamış elektronlar Si için $3s^2, 3p^2$ elektronları) bağlıdır. Bu nedenle potansiyelimsi metot geliştirilmiştir. Bu yaklaşımda, kor elektronlarının ve güçlü iyonik potansiyelin yerine, zayıf bir potansiyelimsi dikkate alınır. Ancak bu potansiyelimsi hem kor elektronlarının hem de iyonik potansiyelin etkisinin birleşimini içerir. Potansiyelimsi fikri, 1930'larda Fermi ve Hellmann'ın Schrödinger denklemini valans elektronları için çözmeyi önerdiği tarihlere dayanır. Bu görüş daha sonra gelişmiş, ultra yumuşak potansiyelimsi (Ultra Soft Pseudopotential (US-PP)) ve Projector Augmented Wave (PAW) gibi metotların oluşmasına sebep olmuştur.

Gerçek dalga fonksiyonu Φ , Ψ 'yi ise düzgün bir dalga fonksiyonu olarak kabul edersek, dalga fonksiyonu

$$\Phi = \Psi + \sum_c b_c \Psi_c \quad (3.13)$$

şeklinde ifade edebiliriz. Burada son terim bize kor parçasını verir ve kor durumlarına genişletilmiştir ve ancak b_c , Φ ve Ψ_c 'nin birbirine ortogonal olması durumunda belirlenir. Bu şart (3.14) denklemi ile verilmiştir.

$$\langle \Psi_c | \Phi \rangle = 0 = \langle \Psi_c | \Psi \rangle + b_c \quad (3.14)$$

Schrödinger denklemi aşağıdaki şekilde yazılırsa;

$$H\Psi = \sum_c (\varepsilon - E_c) |\Psi_c\rangle \langle \Psi_c | \Psi = \varepsilon \Psi \quad (3.15)$$

Burada E_c kor durumlarının özdeğeridir. Bu denklemi aşağıdaki gibi elde edebiliriz.

$$(H + V_R)\Psi = \varepsilon\Psi \quad (3.16)$$

veya

$$(T + V_{ps})\Psi = \varepsilon\Psi \quad (3.17)$$

Burada V_R itici potansiyel operatörüdür.

Denklem (3.17)'nin çözümünde düzlem dalga baz setleri ile düzgün dalga fonksiyonları kullanılır. Philips ve Kleinman pseudo-potansiyel operatörünü $V_{ps}=V_A+V_R$ şeklinde göstermiştir. V_{ps} zayıf ve düzgün potansiyel veya pseudo-potansiyel olarak adlandırılır. Bu potansiyel itici potansiyel V_R ve çekici potansiyel V_A arasında bir değerdir. Yaptığımız hesaplamalarda, elementin atomik özellikleri faz kaymalarını içerecek şekilde korunmalıdır. Faz kaymalarının nedeni kor yönündeki saçılmalar ve farklı açısız momentum durumlarında farklı bir değer olur. Bu sebeple bir pseudo-potansiyelin, farklı açısız bileşenleri için izdüşümleri yerel olmamalıdır (Çakmak, 1999; Hamman vd., 1979; Kerker, 1980).

3.5 Teorik Modellemenin Temel Gereksinimleri

Yarı iletken yüzeylerin teknolojik olarak kullanım alanlarını belirlemek için iki parametre iyi bilmemiz gerekir. Bunlar; yüzeyin atomik ve elektronik yapısıdır. Bu gibi sistemlerin atomik ve elektronik yapılarını değişik açılarda incelememiz için çok sayıda deneysel tekniklere ihtiyaç duyarız.

Deneysel teknikler, zaman ve maliyet açısından oldukça büyük zorluklar çıkarmaktadır. Ayrıca malzemenin hazırlanması gibi, deneysel açıdan yapılması gereken işlemler apayrı bir düzen gerektirmektedir. Bu çerçeveden baktığımız zaman yüzey fiziğinde, yarı iletken yüzey ve ara yüzeylerin teorik olarak incelenmesi çok önemli bir rol oynar (Srivastava, 2000).

Bir sistemi teorik olarak modelleyebilmemiz için, öncelikle sistemle hakkında iki önemli bilgiye ihtiyaç duymaktayız;

- Yüzeyin ya da ara yüzeyin yapısal gösterimi

- Sistem içinde bulunan elektron ve çekirdeklerin etkileşimleri

Bu bilgilere ulaştığımız takdirde, herhangi bir yüzeyin içinde bulunabileceği tüm yapısal ve elektronik durumlarını deney yapmaksızın çözümleyebiliriz (Srivastava, 2000).

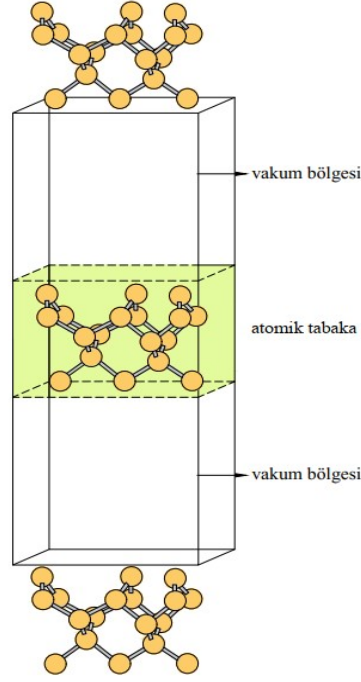
3.5.1 Yüzeyin ve ara yüzeyin yapısal gösterimi

İncelemek istediğimiz yüzey ya da ara yüzey aşağıda belirtilen üç şekilde karşımıza çıkabilir (Srivastava, 2000):

1. Sonlu bir topluluk yapısı
2. Yarı – sonsuz tabaka yapısı
3. Tekrarlanan tabaka yapısı (Süper hücre geometrisi)

Teorik modelleme hakkında daha önce yapılan çalışmalardan çoğu süper hücre (supercell) geometrisine göre yapılmıştır.

Şekilsel olarak Şekil 3.1’de de görüldüğü gibi süper hücre, araştırılan yüzeyin normali boyunca kendini tekrar eden katmanlar şeklindeki yapıdır (Schlüter vd., 1975). Bu modelde yüzey; boşluk(vakum)-materyal-boşluk sandviçini içeren süper hücre iskeleti ile oluşturulabilir. Her tabakada, iki boyutlu ($m \times n$) yüzey yapılanmasına sahip sonlu sayıda M tane atomik katman bulunmaktadır. Ayrıca süper hücre tekniği, düzlem dalgalar ve üç-boyutlu periyodik sınır koşullarının uygulanabileceği yüzeye dik yönde yapay bir periyodikliğe izin verir.



Şekil 3.1 Yüzey süper hücre modeli.

Bu hücreye periyodik sınır şartları uygulanırsa; her biri sonlu kalınlıkta olan yarı iletken tabakalarından ve bu tabakaları birbirinden ayıran sonlu kalınlıkta vakum bölgelerinden oluşan, sonsuz bir yığın tarafından meydana gelen bir sistem tanımlanabilir. Böylelikle, bu dilimler yeterince kalınsa eğer aynı dilimin iki yüzeyi arasında etkileşme olmaz. Aynı şekilde, boşluk tabakaları yeterince genişse eğer, komşu dilimlerin yüzeyleri birbiri ile etkileşmez. Bu durumda, her bir yüzeyin izole edilmiş yüzey gibi davrandığını söylemek doğru olmaz.

3.6 VASP Paket Programı

VASP, yoğunluk fonksiyoneli teorisi kapsamında PAW metodunu, sözde potansiyeller (pseudopotansiyeller) ve düzlem dalga bazını kullanarak kuantum mekaniksel ve moleküler dinamiği simülasyonlarını yapabilen karmaşık bir pakettir. VASP'da uygulanan yaklaşım, değişken enerji olarak serbest enerjiyle (sonlu sıcaklık) LDA ve her bir moleküler dinamiği zaman adımıyla anlık elektronik zemin durumunun tam bir değerlendirmesine dayanmaktadır.

İyonlar ve elektronlar arasındaki etkileşim, ultra yumuşak USPP veya PAW yöntemi ile tanımlanmaktadır. USPP ve PAW metodları geçiş metalleri ve birinci sıra

elemanlar için atom başına düzlem-dalga sayısının önemli ölçüde azaltılmasını sağlar.

VASP ile elektronik bant yapısı, toplam enerji, elastik sabitler ve mekanik özellikler, durum yoğunluğu, atomik kuvvetler, yük yoğunluğu, manyetik moment, fonon dağılım eğrileri, termodinamik özellikler, optik özellikler, Born etkin yük tensörü, durgun dielektrik tensörü, iç zorlanma tensörü gibi temel fiziksel özellikleri başarılı bir şekilde hesaplayabiliriz (URL-1).

Bu tezde yer alan hesaplamalar “VASP 5.2” versiyonu ile yapıldı.



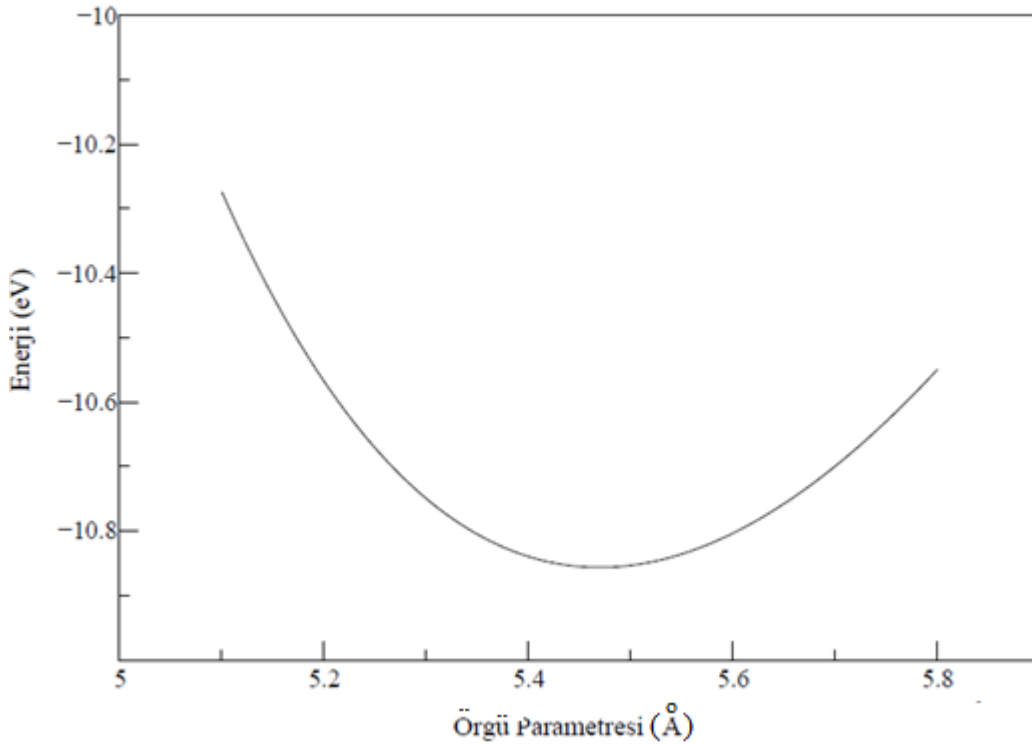
4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA

4.1 Bulk Si İçin Yapısal ve Elektronik Hesaplamalar

Bu bölümde, bulk Silisyumun farklı potansiyelimsiler için örgü parametreleri ve bu örgü parametrelere karşılık gelen bant aralıkları hesaplanmıştır.

Bu çalışmada Si'un örgü parametresi, PAW-GGA potansiyelimsi yaklaşımı kullanılarak, 5.47 Å olarak hesaplandı. Bulk Silisyum'un deneysel örgü parametresi ise 5.43 Å'dur (Kittel, 1996). Kullanılan potansiyelimsi GGA yaklaşımı içerdiği için, teorik sonuç deneysel sonuçtan daha büyük çıkmıştır. Çalışmamızda hesapladığımız Si'un örgü parametresi, Miotto vd., (2001) tarafından GGA yaklaşımını kullanılarak hesaplanan 5.50 Å değeri ile uyumludur. Bu çalışmada gerçekleştirilen tüm hesaplamalarda Si için teorik olarak elde edilen 5.47 Å örgü parametresi kullanılmıştır.

Ayrıca Çizelge 4.1 de görüldüğü gibi, PAW-GGA, PAW-PBE, PAW-CA, USPP-GGA, USPP-CA yöntemlerini kullanılarak hesapladığımız örgü parametreleri sırasıyla, 5.47 Å, 5.47 Å, 5.40 Å, 5.45 Å, 5.40 Å dur.



Şekil 4.1. Si'un örgü parametresi (a) (Å) hesabı.

GGA hesaplamaları kullanılarak katılar için yapılan, örgü sabiti hesaplamaları, deneysel sonuçlara göre büyük değerler vermektedir. CA hesaplamalarında olduğu

gibi GGA'da da, metaller için deneyle uyumlu bant yapıları elde edilmesine rağmen, yarı iletkenler için bant aralığı deneysel değerlerden küçük olarak elde edilmektedir. Bunun sebebi de, DFT'nin, taban durumlar için kullanılan bir hesaplama olmasıdır.

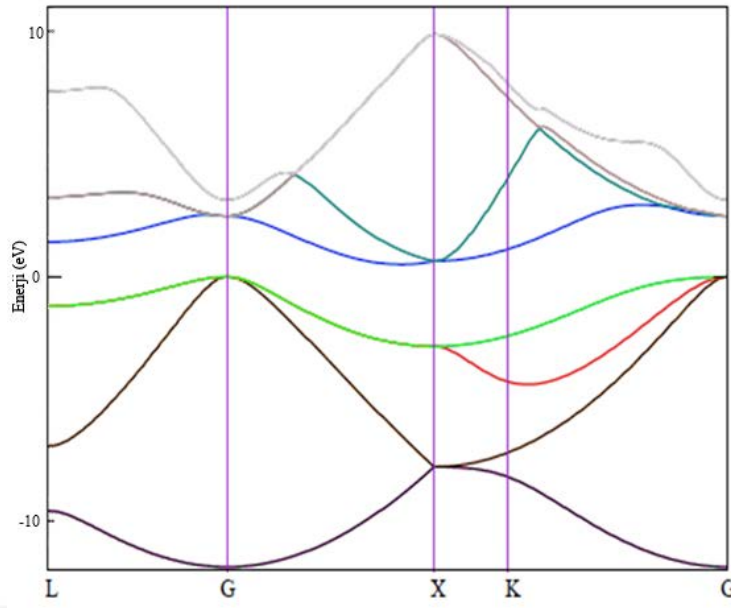
Şekil 4.2., 4.3., 4.4., 4.5., 4.6.'da Si için, farklı potansiyelimsi teknikleri için hesaplanan bant yapıları ve durum yoğunlukları şematik olarak verilmiştir. PAW-GGA, PAW-PBE, PAW-CA, USPP-GGA, USPP-CA yöntemleri kullanılarak elde edilen bant aralıkları, Çizelge 4.2 de görüldüğü gibi, 0.50 eV, 0.49 eV, 0.59 eV, 0.51 eV, 0.26 eV olarak hesaplandı. Bant yapılarında görülen kalın çizgiler dolu, ince çizgiler ise boş enerji seviyelerini göstermektedir. Bant grafiklerinden de anlaşılaacağı gibi, Si'un valans bandı maksimumu ile iletim bandı minimumu farklı k noktalarına karşılık geldiği için, Si dolaylı bant aralıklı bir yarıiletkendir.

Durum yoğunluğu elektronlarla dolu olan durumların yoğunluğunu ifade etmektedir. Her bir farklı potansiyelimsi için hesaplanan durum yoğunluklarının enerji bant yapılarıyla uyumlu olduğu görülmektedir.

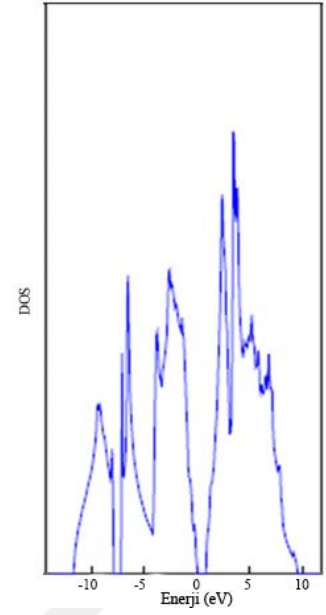
Çizelge 4.1. Si'un farklı yöntemlerle elde edilen örgü parametresi değerleri.

Potansiyel	Örgü Parametresi (Å) Bu çalışma	Örgü Parametresi (Å) Literatür
PAW-GGA	5.47	5.50 (Miotto vd., 2001)
PAW-PBE	5.47	5.47(Brazdova, 2010)
PAW-CA	5.40	5.40 (AlZahrani ve Srivastava, 2008)
USPP-GGA	5.45	5.43 (Liang vd., 2011)
USPP-CA	5.40	5.39 (Ogata vd., 2004)
Deneysel	---	5.43 (Kittel, 1996)

Çizelge 4.1'de Silisyumun örgü parametresinin farklı yöntemler kullanılarak elde edilen değerleri görülmektedir.

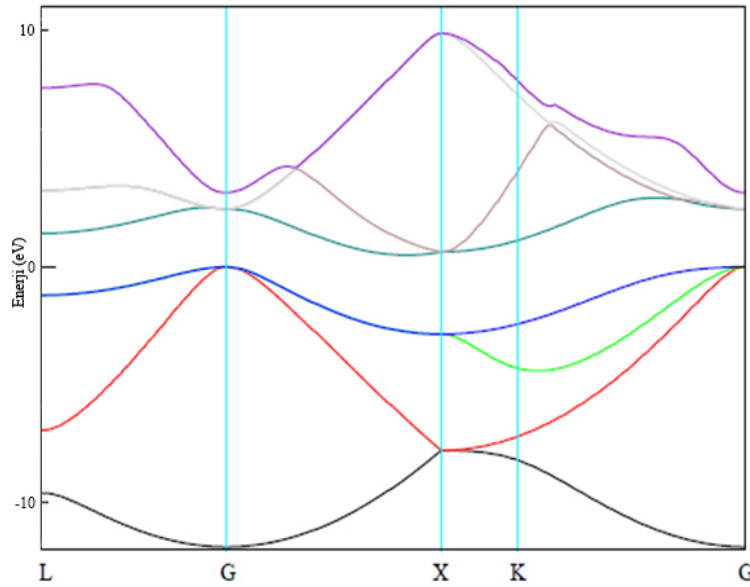


(a)

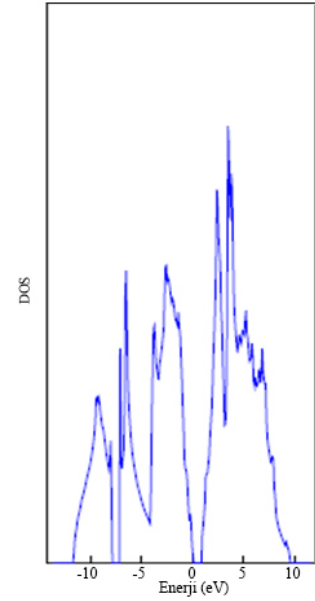


(b)

Şekil 4.2. Si'un Pseudo-Potansiyel Yöntemi kullanılarak (a) PAW-GGA elde edilen bant yapısını (b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.

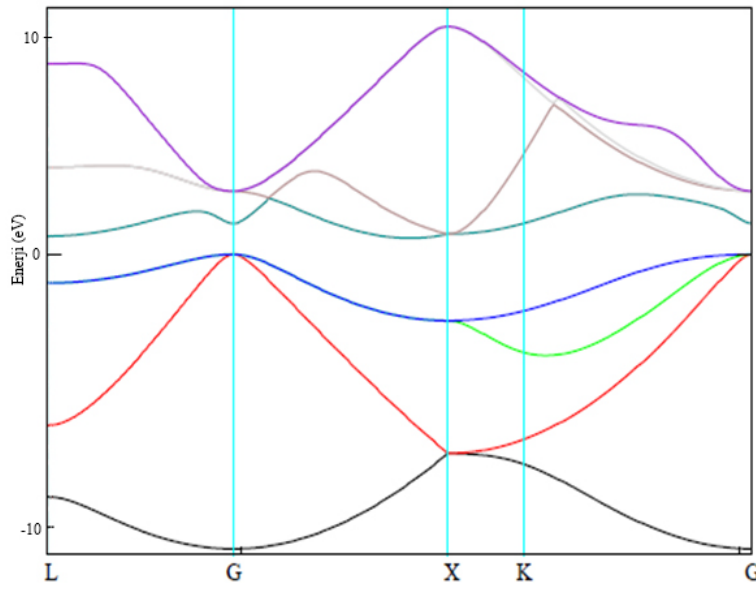


(a)

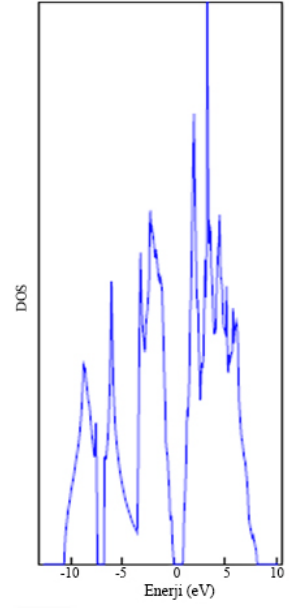


(b)

Şekil 4.3. (a) Si'un PAW-PBE yöntemi kullanılarak elde edilen bant yapısı (b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.

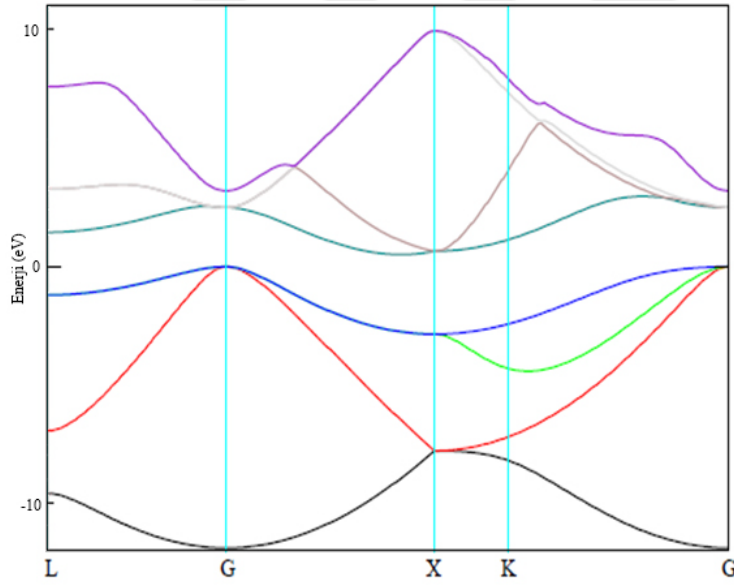


(a)

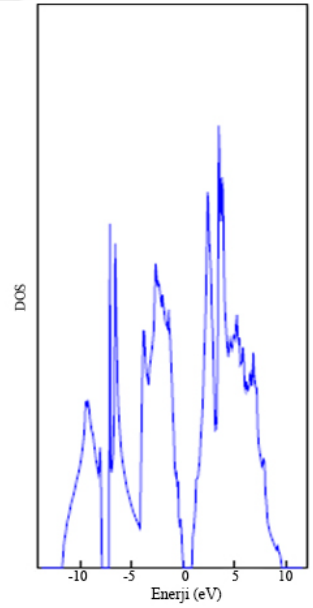


(b)

Şekil 4.4. (a) Si'un PAW-CA yöntemi kullanılarak elde edilen bant yapısı. (b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.

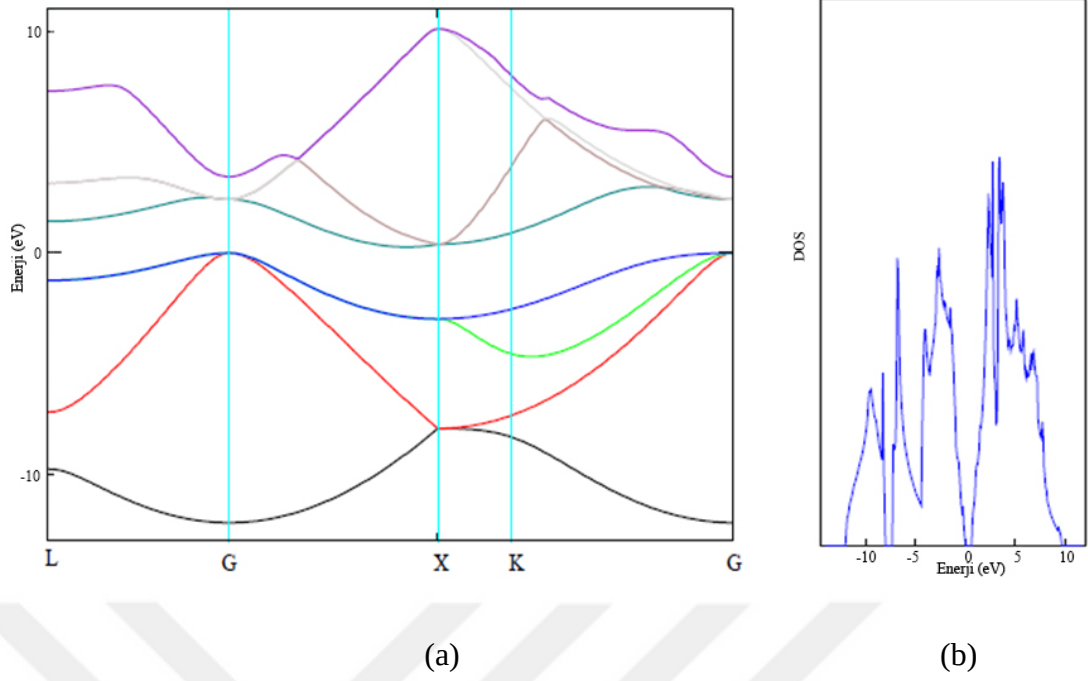


(a)



(b)

Şekil 4.5. (a) Si'un USPP-GGA yöntemi kullanılarak elde edilen bant yapısı. (b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.



Şekil 4.6. (a) Si'un USPP-CA yöntemi kullanılarak elde edilen bant yapısı. (b) Si'un durum yoğunluğu grafiği.

Çizelge 4.2. Bulk Si için farklı potansiyelimsiler kullanılarak hesaplanan bant aralığı değerleri.

Potansiyel	Bant Aralığı (eV)	Bant Aralığı (eV)
	Bu çalışma	Literatür
PAW-GGA	0.50	0.62 (Umeno vd., 2005)
PAW-PBE	0.49	0.65
PAW-CA	0.59	0.64
USPP-GGA	0.51	1.11 (Lopez-Lozano vd., 2005)
USPP-CA	0.26	0.49
Deneysel	---	1.12 (Sze, 1969)

4.2 BaO/Si(001)-(2x1) Ara Yüzeyinin Teorik İncelemesi

4.2.1 Giriş

Bu bölümde BaO/Si ara yüzeyi teorik olarak ayrıntılı bir biçimde incelenmiştir. Bütün hesaplamalar DFT'yi temel alan VASP kullanılarak yapıldı (Kresse vd., 1994; Kresse vd., 1996; Kresse vd., 1996). Bu metot kullanılarak, Kohn – Sham tek parçacık fonksiyonları, 30 Ry kesme enerjisine kadar düzlemsel dalgalar şeklinde genişletildi. Bu kesilim enerjisinin, hem elektronik yapı hem de yapısal çalışmalar için yeterli olduğu bulundu. Elektron değiş tokuş ve korelasyon terimleri için, GGA Blochl (1994) dahilinde lineer olmayan çekirdek düzeltmesi göz önüne alınarak Perdew ve Zunger tipi fonksiyonel kullanıldı (Perdew vd., 1981; Perdew vd., 1992). Öz uyumlu çözümler (2x1) yüzey yeniden yapılanması için Brillouin bölgesi üzerinde k noktalarının (3x6x1) Monkhorst–Pack ızgarası Monkhorst (1976) kullanılarak elde edildi.

Yüzey, tekrar eden kalın tabaka geometrisi ile modellendi. Her kalın tabaka on tane Si tabakası içermektedir ve komşu kalın tabakalar da 10 atomik tabaka genişliğinde boşlukla birbirlerinden ayrılır. En alttaki iki alttaş tabakası bulk pozisyonlarına dondurulmuş ve alt yüzeydeki her bir Si atomu bir hidrojen ile doyurulmuştur. Geriye kalan bütün alttaş atomları, yüzey üzerindeki atomlar ve H atomları minimum enerji pozisyonlarına getirilmesi için relax edilmiştir. Yüzey hesaplamalarında Si için teorik bulk örgü sabiti 5.47 Å kullanılmıştır. Bu değer, potensiyelimsi metot kullanılarak elde edilen ve Çizelge 4.1’de verilen, diğer teorik sonuçlarla uyum göstermektedir.

4.2.2 BaO/Si(001)-(2x1) ara yüzeyinin atomik ve elektronik yapısı

Silikon alt katman üzerinde kristal oksidin epitaksiyal olarak büyütülmesi ara yüzeylerdeki kusurların giderilmesinde büyük avantaj sağlamasına rağmen uygulanmalarda büyük problemlerle karşılaşılır. Bu büyüme tekniğinde karşılaşılan en büyük zorluklardan biri, oksitlenmiş ara yüzeyin kararlılığıdır ve böyle bir durumda izlenecek en doğru yol uygun bir ara tabaka yaratmaktır. Bunu oluşturabilmek için literatürde en uygun olan ara tabakalardan bir tanesi Si yüzeyi üzerinde meydana gelebilecek oksitlenmeyi önleyebilmesi açısından Stronsiyum (Sr)

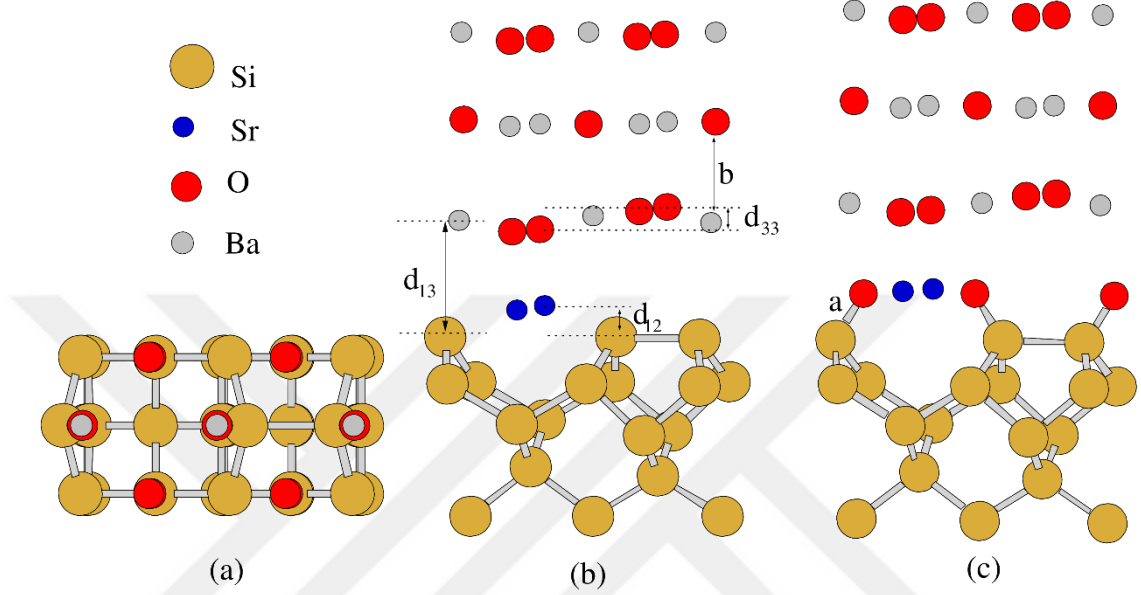
dur. Bu konu hakkında var olan genel görüş 1/2 ML Sr ve 1 ML Oksijen kullanmak yönündedir (Lettieri vd., 2002; Mckee vd., 1998; Norga vd., 2005; Reiner vd., 2008). Bu nedenle bu çalışmada, Şekil 4.7'de gösterilen Model-1 ve Model-2 olarak adlandırılan iki tane ara yüzey yapısı düşünülmüştür. Model-1 yalnızca 1/2 ML Sr içerir ve Model-2 ise 1/2 ML Sr ile 1 ML Oksijen içerir. BaO/Si(001)-(2x1) ara yüzeyinin atomik ve elektronik özelliklerinin, BaO tabaka sayısına bağlı olarak nasıl değiştiğini görebilmek adına öz uyumlu toplam enerji hesaplamaları, Model-1 ve Model-2 için gerçekleştirildi.

Çizelge 4.3. Şekil 4.7.'de gösterilen modellere dayanarak hesaplanan atomik anahtar parametreler (Å biriminde). (b uzaklığının alt indisleri BaO katmanlarının sayısını belirtir).

Model	a	b	d ₁₂	d ₁₃	d ₃₃
Model 1	-	2.66 ₂ 3.10 ₃ 2.80 ₄ 2.88 ₅ 2.84 ₆	0.91	3.58	0.66
Model 2	1.65	2.66 ₂ 3.05 ₃ 2.80 ₄ 2.88 ₅ 2.80 ₆	1.49	4.12	0.55
BaO	-	2.80	-	-	

Çizelge 4.3'de atomik yapıyla ilgili bazı sonuçlar verilmiştir. Çizelge 4.3' de görüldüğü üzere, en üstteki Silikon atomları ile ilk tabakadaki BaO tabakası arasındaki dik uzaklıklar (d₁₃) sırasıyla Model-1 ve Model-2 için 3.58 Å ve 4.12 Å olarak bulunmuştur. Bu parametreler daha önceki çalışmalarda elde edilen 3.55 Å Yakovkin, (2004) ve 4.00 Å Segal vd., (2009) sonuçlarıyla uyumludur. Yaptığımız hesaplamalarda, Si (001) yüzeyi üzerindeki ilk BaO tabakası için, Ba atomları orijinal pozisyonlarında kalırken Silisyum dimer üzerindeki BaO tabakasındaki Oksijen atomlarının Si yüzeyinden yukarıya doğru itildiği, Sr atomu üzerindeki BaO tabakasının Oksijen atomlarının ise Silisyum yüzeyine doğru çekildiği bulundu. Oksijen atomlarının bu davranışı Segal ve arkadaşlarının Segal vd., (2009) yaptığı X-ışınları kırınımı deneyinin sonuçları ile uyumludur. Bu çalışmada, Si(001) yüzeyi üzerindeki ilk BaO tabakasında bulunan farklı seviyelerdeki bu Oksijen atomları arasındaki mesafe (d₃₃), Model-1 için 0.66 Å, Model-2 için ise 0.55 Å olarak hesaplandı. Atomik yapı ile ilgili diğer bir sonuç ise, tabaka sayısına bağlı olarak aynı tabakadaki Ba atomları arasındaki mesafe ve BaO tabakaları arasındaki mesafe

sırasıyla 3.65 Å dan 3.36 Å ye ve 5.68 Å dan 5.72 Å ye değişkenlik göstermektedir. Bu durum keskin bir ara yüzey elde edildiğinin bir göstergesidir. BaO için Ba ve O atomları arasındaki uzaklık, 2.80 Å iken, Si yüzeyi üzerindeki Ba ve O atomları arasındaki mesafenin (Çizelge 4.3 de verilen b uzaklığı) tabaka sayısına bağlı olarak 2.66 Å ile 3.10 Å arasında değiştiği bulunmuştur.



Şekil 4.7. Si(001) yüzeyi üzerinde BaO'nin (a) üstten ve yandan şematik olarak görünümü. (b) Si üzerine 1/2 ML Sr (Model-1) (c) Si üzerine 1/2 ML Sr ve 1 ML Oksijen (Model-2).

Aygıt uygulamalarında bant aralığındaki yüzey durumlarının pasive olması gerekir. BaO tabakalarının sayısına bağlı olarak ara yüzey özelliklerini anlayabilmek adına Model-1 (Şekil 4.8'in üst paneli) ve Model-2 (Şekil 4.8'in alt paneli) için bir tabakalı BaO'den altı tabakalı BaO'e kadar elektronik bant yapıları Şekil 4.8 de ayrı ayrı verilmiştir. Şekil 4.8'in üst panelinde görüldüğü gibi, Model-1₁ (Model-1 için, Si(001) yüzeyi üzerindeki tek tabakalı BaO) ile Model-1₄ (Model-1 için, Si(001) yüzeyi üzerindeki dört tabakalı BaO) karşılaştırıldığında, Γ -J-K yönü boyunca bant durumlarının dağılımı için anlamlı bir farklılık görülmemektedir. Model-1₃ ve Model-1₄'deki elektronik bant yapısı yarı iletken karakterdedir ve bant durumlarının dağılımı Model-1₁'e çok benzemektedir. Hesaplamalarımızdan elde edilen çarpıcı bir sonuç; Model-1₁, Model-1₂ ve Model-1₃ ün doğrudan bant aralıklı özellik gösterirken, Model-1₄ ün dolaylı bant aralıklı yapıya sahip olmasıdır. Bunun yanında hesaplamalarımız 1/2 ML Sr ile pasive olmuş Si(001)-(1x2) yüzeyi

üzerindeki BaO'li yapının yarı iletken özellikte olduğunu ve bant aralığının dört tabaka BaO'den sonra azaldığını göstermiştir.

Şekil 4.8 in alt paneli; Model-2 için BaO'nun elektronik bant yapılarını (bir BaO tabakasından altı BaO tabakasına kadar) göstermektedir. Model-2₁ (Model-2 için, Si(001) yüzeyi üzerindeki tek tabakalı BaO) bant aralığında bazı dispersiyonlu durumlara sahipken, Model-2₂ (Model-2 için, Si(001) yüzeyi üzerindeki iki tabakalı BaO) için bant durumlarında alt enerji durumlarına doğru kayma görülmektedir. Hesaplamalarımız Model-2'de dört BaO katmanından sonra doğrudan bant aralığından, dolaylı bant aralığına dönüştüklerini göstermiştir.

İdeal bir ara yüzey için diğer bir önemli nokta bant kayması (ofset) değeridir. BaO/Si ara yüzeyinin elektronik yapısını araştırmak için Si ve BaO arasındaki valans bant kaymasını (VBK) hesapladık. Van de Walle and Martin yaklaşımını kullandık (Van de Walle ve Martin, 1987).

Valans bant kayması,

$$VBK = \Delta E_{VBM}(Si) - \Delta V_{lok}^{ort} - \Delta E_{VBM}(BaO) \quad (4.1)$$

Burada ΔV_{lok}^{ort} ara yüzey boyunca ortalama lokal potansiyeldeki değişim,

$\Delta V_{lok}^{ort} = \Delta V_{lok}^{ort}(BaO) - \Delta V_{lok}^{ort}(Si)$, ve ΔE_{VBM} bulk valans bant maksimumu (VBM) ile ΔV_{lok}^{ort} arasındaki farkı ifade etmektedir. Sonuçlar Şekil 4.9'da çizilmiş ve Çizelge 4.4'de verilmiştir.

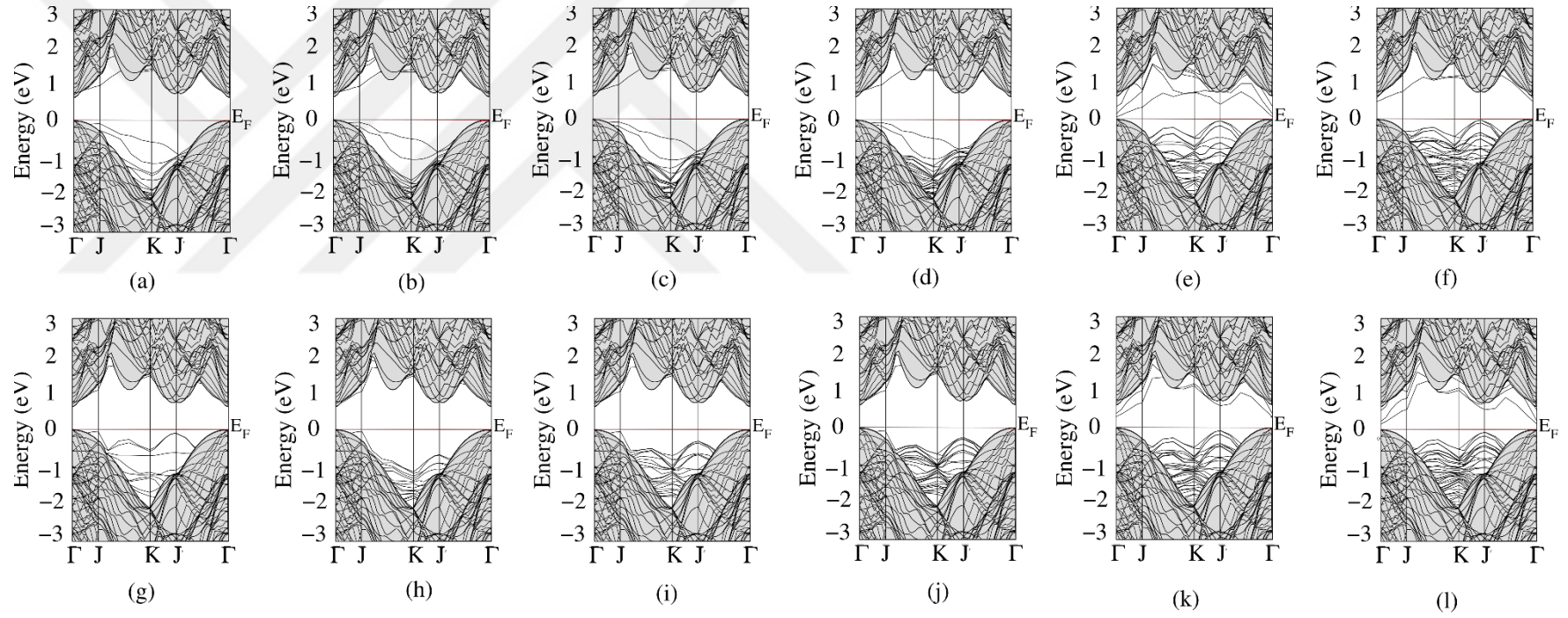
Çizelge 4.4. Hesaplanan valans bant ve iletim bant kaymaları (eV birimindedir).

Model	ΔV_{lok}^{ort}	VBK	İBK
Model-1 ₆	1.61	2.44	0.56
Model-2 ₆	2.63	1.42	1.56

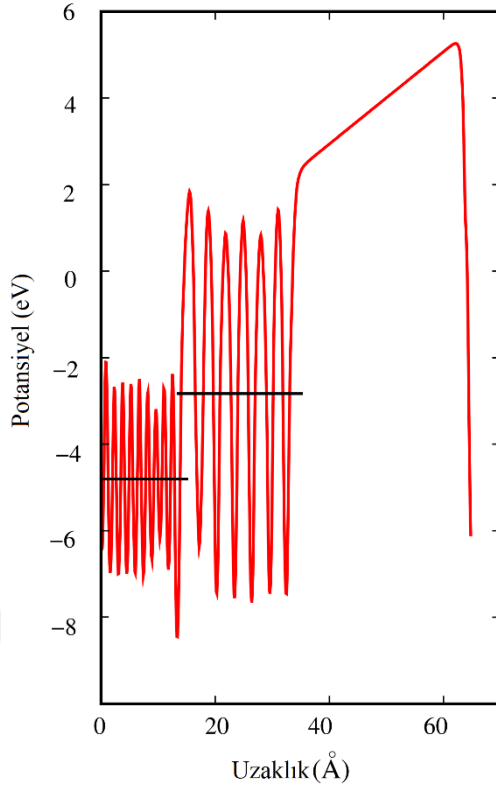
Çizelge 4.4'ten görüldüğü gibi iletim bant kayması (İBK) ara yüzeydeki Oksijenin varlığında artmıştır. Bu durum aygıt uygulamaları için Model-2'nin daha uygun

olduğunu göstermektedir. Elde ettiğimiz sonuç Si yüzeyi üzerindeki SrTiO_3 için yapılan çalışmayla uyumludur (Först vd., 2004).

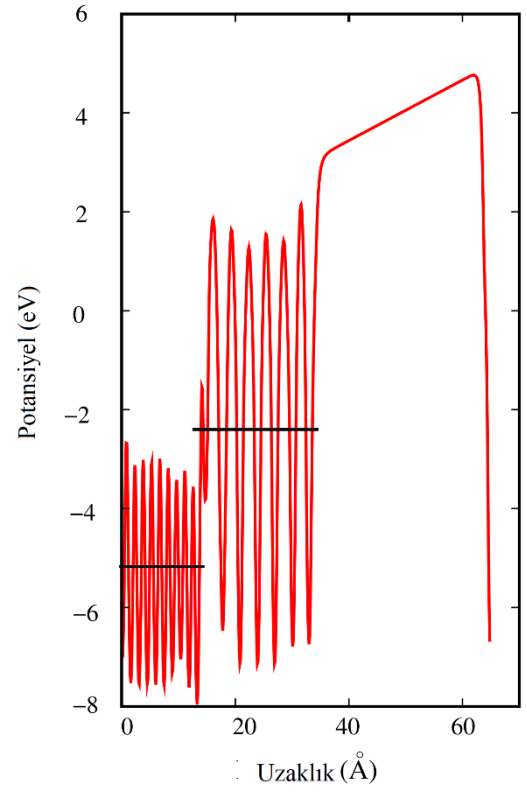




Şekil 4.8. Si(001)-(2x1) yüzeyi üzerindeki, tek tabakadan altı tabakaya kadar olan BaO tabakalarının elektronik bant yapıları. Şeklin üst paneli Model-1, alt paneli ise Model-2 için hesaplanmıştır.



(a)



(b)

Şekil 4.9. Ara yüzey düzleminde dik uzaklığın bir fonksiyonu olarak düzlemsel ortalama lokal potansiyel (a) Model-1 için (b) Model-2 için.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada BaO/Si(001)-(2x1) arayüzeyinin elektronik yapısı ve atomik geometrisi ab initio potansiyelimsi hesaplamaları kullanılarak incelendi. İki olası ara yüzey geometrisi dikkate alındı:

- (i) 1/2 ML Sr (Model-1)
- (ii) 1 ML Sr ve 1 ML Oksijen (Model-2)

Si(001)-(2x1) yüzeyi üzerindeki BaO tabakalarının atomik ve elektronik etkisi, her bir BaO tabakası için, altı tabakaya kadar incelendi. BaO/Si(001)-(2x1) için yapılan hesaplamalardan sonra 1/2 ML Sr (Model-1) ve 1/2 ML Sr ve 1 ML Oksijenin (Model-2), Si(001)-(2x1) yüzeyi üzerine BaO büyütülmesi için uygun birer ara yüzey olduğu bulundu. Elektronik bant yapısı sonuçlarına göre, ilk üç tabakaya kadar BaO'in, BaO/Si(001)-(2x1) ara yüzey stokiyometrisi için kritik bir rol sergilemediğini söyleyebiliriz. Model-1 ve Model-2 için 4 tabakalı BaO tabakasından sonra bant aralıkları incelendiğinde doğrudan bant aralığından dolayı bant aralığına geçiş olduğu görülmüştür.

İdeal bir ara yüzey araştırması için yaptığımız bant kayması hesaplamaları sonucunda, ara yüzeydeki Oksijen varlığında (Model-2), İBK'nın arttığı görülmüştür. Bu sonuç, aygıt uygulamaları için Model-2'nin daha uygun olduğunu göstermektedir.

KAYNAKLAR

- AlZahrani, A.Z. ve Srivastava G.P., 2008. Electronic and geometric investigations of the Ca/Si(1 1 1)-(5 2) surface, Applied Surface Science, 254, 8083–8088
- Ashman, C.R., Först, C.J., Schwarz, K. ve Blöchl, P.E., 2004. First-principles calculations of strontium on Si (001), Physical Review B, 69, 7, 075309.
- Atkins, P.W., 2006. Physical Chemistry, Oxford University Press, İngiltere, 1000s.
- Ayduğan, Z., 2005. Doktora Semineri, Ankara.
- Ayduğan, Z., 2009. Silisyum Yüzeyinde Toplanan Atom veya Molekülün Atomik ve Elektronik Özellikleri, Doktora Tezi, Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Brázdová, V. ve David, R. B., 2010. Si atom adsorption and diffusion on Si(110) - (1×1) and (2×1), Physical Review B, 81, 165320.
- Blöchl, P., 1994. Projector augmented-wave method, Physical Review, B, 50: 17953-17979.
- Burns, G., 1986. Solid state physics, International Edition, Academic Press, 755.
- Burns, G., 1990. Solid State Physics, International Edition, Academic Press, 163-164.
- Cheung, D. L. G., 2002. Structures and properties of liquid crystals and related molecules from computer simulation, Doktora Tezi, Durham University, İngiltere.
- Çakmak, M., 1999. Theoretical studies of structural and electronic properties of overlayer on semiconductor surfaces, Doktora Tezi, Exeter Üniversitesi, Exeter.
- Çakmak, M. ve Srivastava, G.P., 2000. Dissociative adsorption of Si₂H₆ on the Si (001) surface, Physical Review B, 61, 15, 10216.
- Deligöz, E., 2007, Bazı İkili (CdS, CdSe, CdTe, CdF₂, AlBi, BBi) Bileşiklerin Yapısal, Elektronik, Elastik, Termodinamik, ve Titreşimsel Özelliklerinin Ab Initio Yöntemle İncelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Demirbas, O., 2006. Kil Mineralleri Yüzeyine Bazı Biyomoleküllerin İmmobilizasyonu ve Elektrokinetik Özellikleri, Doktora Tezi, Balıkesir Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Balıkesir.
- Duke, C., 1996. Semiconductor Surface Reconstruction: The structural chemistry of two-dimensional surface compounds, Chemical Review, 96, 1237-1259.

- Durlu, T. N., 1992. Katıhal Fiziğine Giriş, Candan Yayın, Ankara, 311.
- Fock, V., 1930. Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems, Zeitschrift für Physik, 61, 126-148.
- Först, C. J., Ashman, C.R., Schwarz, K. ve Blöchl, P.E., 2004. The interface between silicon and a high-k oxide, Nature, 427, 6969, 53.
- Giannozzi P., Gironcoli S.D, Pavone P. and Baroni S., 1991. Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors, Physical Review B, 43, 7231-7242.
- Gonze, X., Allan, D.C. ve Teter, M.P., 1992. Dielectric tensor, effective charges, and phonons in α -quartz by variational density-functional perturbation theory, Physical Review Letters, 68, 3603-3606.
- Grossman, J.C., Mitas, L. ve Raghavachari, K., 1995. Structure and stability of molecular carbon: importance of electron correlation, Physical review letters, 75, 21, 3870.
- Groß, A., 2002. Theoretical Surface Science A Microscopic Perspective, Springer, Berlin, Almanya, 274.
- Gürünlü, H., 2005. Kübik GaN (001) yüzeyinin elektronik yapısı, Yüksek Lisans Tezi, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı, Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Hafner, J., Wolverton C., ve Ceder, G., 2006. Toward Computational Materials Design: The Impact of Density Functional Theory on Materials Research, MRS Bull. 31, 659.
- Hamman, D. R., Schlüter, M. ve Chaing, C., 1979. Norm conserving pseudo potentials. Physical Review Letter, 43, 1494-1497.
- Hartree, D. R., 1928. The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, Cambridge University Press, 24, 1, 89-110.
- Herrera-Gómez, A., Aguirre-Tostado, F. S., Sun, Y., Pianetta, P., Yu, Z., Marshall, D., Droopad, R. ve Spicer, W. E., 2001. Photoemission from the Sr/Si (001) interface, Journal of Applied Physics, 90,12, 6070-6072.
- Hohenberg, P. ve Kohn, W., 1964. Inhomogeneous electron gas. Physical review, 136, 3B, B864.
- Jones, R.O. ve Gunnarsson, O., 1989. The density functional formalism, its applications and prospects, Reviews Of Modern Physics, 61, 689.
- Kaderoğlu, Ç., 2007. Si (001) yüzeyinin atomik ve elektronik yapısı, Yüksek Lisans Tezi, Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.

- Kangawa, Y., Akiyama, T., Ito, T., Shiraishi, K., ve Nakayama, T., 2013. Surface stability and growth kinetics of compound semiconductors: an ab initio-based approach, *Materials*, 6, 8, 3309-3360.
- Kerker, G., 1980. Non-singular atomic pseudopotentials for solid state applications, *Journal of Physics C*, 13, 189-194.
- Kittel, C., 1996. *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley And Sons, New York, 1-19.
- Kizilyalli, I.C., Huang, R.Y.S. ve Roy, R.K., 1998. MOS transistors with stacked SiO₂-Ta₂O₅-SiO₂ gate dielectrics for giga-scale integration of CMOS technologies, *IEEE Electron Device Letters*, 19, 11, 423-425.
- Kohn, W. ve Sham, L.J., 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Physical Review*, 140, 1133-1138.
- Kresse, G., Furthmüller, J. ve Hafner, J., 1994. Theory of the crystal structures of selenium and tellurium: the effect of generalized-gradient corrections to the local-density approximation, *Physical Review B*, 50, 18, 13181.
- Kresse, G. ve Furthmüller, J., 1996. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set, *Computational materials science*, 15-50, 32547.
- Krüger P., ve Pollmann J., 1995. Dimer reconstruction of diamond, Si, and Ge (001) surfaces, *Physical Review Letters*, 74, 1155-1158
- Laasonen K., Csajka F. ve Parrinello M., 1992. Water dimer properties in the gradient-corrected density functional theory, *Chemical Physics Letters*, 194, 172-174.
- Lettieri, J., Haeni, J.H. ve Schlom, D.G., 2002. Critical issues in the heteroepitaxial growth of alkaline-earth oxides on silicon. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 20, 4, 1332-1340.
- Liang, Y.F., Shang, S.L., Wang, J., Wang, Y., Ye, F., Lin, J.P., Chen, G.L. ve Liu Z.K., 2011. First-principles calculations of phonon and thermodynamic properties of Fe-Si compounds, *Intermetallics*, 19, 1374-1384.
- López-Lozanoab, X., Stekolnikova, A.A., Furthmüllera, J. ve Bechstedta, F., 2005. Band structure and electron gas of In chains on Si(1 1 1), *Surface Science*, 77-90, 589.
- Mattsson A.E. ve Wills, J.M., 2016. Density functional theory for d - and f- electron materials and compounds, *International Journal of Quantum Chemistry*, 116, 834-846.
- McKee, R.A., Walker, F.J. ve Chisholm, M.F., 1998. Crystalline oxides on silicon: the first five monolayers. *Physical Review Letters*, 81,14, 3014.

- Miotto, K., Darakjian, J., Basch J, Murray, S., Zogg, J. ve Rawson, R., 2001. Gamma-hydroxybutyric acid: patterns of use, effects and withdrawal, *Am J Addict*, Summer, 10,3, 232-41.
- Monkhorst, H.J. ve Pack, J.D., 1976. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical review B*, 13, 12, 5188.
- Mutlugeldi, C., 2009. Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile Be ve Ti bazlı sistemlerin elektronik yapılarının incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Norga, G.J., Marchiori, C., Guiller, A., Locquet, J.P., Rossel, C., Siegwart, H., Caimi, D., Fompeyrine, J. ve Conard, T., 2005. Phase of reflection high-energy electron diffraction oscillations during (Ba, Sr) O epitaxy on Si (100): A marker of Sr barrier integrity, *Applied Physics Letters*, 87, 26, 262905.
- Norton, D.P., Park, C., Lee, Y.E. ve Budai, J.D., 2002. Strontium silicide termination and silicate epitaxy on (001) Si. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 20, 1, 257-262.
- Oura, K., Lifshits, V.G., Saranin, A.A., Zotov, A.V. ve Katayama, M., 2003. *Surface science*, Springer, 1-440.
- Özkaya, S., 2009. Si ve Ge (111) Yüzeylerine Atom Tutunmasının Atomik Ve Elektronik Özellikleri, Doktora Tezi. Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Park, D., King, Y.C., Lu, Q., King, T.J., Hu, C., Kalnitsky, A., Tay, S-P. ve Cheng, C.C., 1998. Transistor characteristics with Ta/sub 2/O/sub 5/gate dielectric. *IEEE Electron Device Letters*, 19, 11, 441-443.
- Perdew, J.P., McMullen, E.R. ve Zunger, A., 1981. Density-functional theory of the correlation energy in atoms and ions: a simple analytic model and a challenge. *Physical Review A*, 23, 6, 2785.
- Perdew, J.P., 1986. Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas, *Physical Review B*, 33, 12 , 8822.
- Perdew, J.P., Chevary, J.A., Vosko, S.H., Jackson, K.A., Pederson, M.R., Singh, D.J. ve Fiolhais, C., 1992. Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation, *Physical Review B*, 46, 11, 6671.
- Reiner, J.W., Garrity, K F., Walker, F J., Ismail-Beigi, S. ve Ahn, C.H., 2008. Role of strontium in oxide epitaxy on silicon (001), *Physical review letters*, 101, 10, 105503.
- Sarı, H., 2005. Optoelektronik Ders Notları, Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, Ankara.

- Sarikurt, S., 2007. Üçlü alařım wurtzite $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ malzemenin band yapısı hesabı, Yüksek Lisans Tezi, Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İzmir.
- Segal, Y., Reiner, J. W., Kolpak, A. M., Zhang, Z., Ismail-Beigi, S., Ahn, C. H. ve Walker, F. J., 2009. Atomic structure of the epitaxial BaO/Si (001) interface, Physical Review Letters, 102, 11, 116101.
- Schlüter, M., Chelikowsky, M.J.R., Louie, S.G. ve Cohen M.L. 1975. Self consistent pseudopotential calculations for Si(111) surfaces: Unreconstructed (1x1) and reconstructed (2x1) model structures, Physical Review B, 12, 4200-4214, 102, 11, 116101.
- Srivastava, G. P., 1997. Theory of semiconductor surface reconstruction, Reports on Progress in Physics, 60, 561-613.
- Srivastava, G. P., 1997. Vacuum Surface Engineering, Surface Instrumenttion & Vacuum Technology, 57, 121-129.
- Srivastava, G.P., 2000. Theoretical modelling of semiconductor surfaces and interfaces. Vacuum, 57, 121.
- Srivastava, G.P., 2002. Surface passivation by dissociative molecular adsorption, Vacuum Surface Engineering, Surface Instrumenttion & Vacuum Technology, 67, 11-20.
- Shaltaf, R., 2004. Adsorption and Growth on Si(001) Surface, Doktora Tezi, Orta Doęu Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Thomas, L.H., 1927. The calculation of atomic fields, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 23, 542-550.
- Tang, H., 2005. A design strategy applied to sulfur resistant lean NO_x automotive catalysts, Doktora Tezi, Massachusetts Teknoloji Enstitüsü, Massachusetts.
- Umeno Y., Kushim A., Kitamura T., Gumbsch P. ve Li J., 2005. Ab initio study of the surface properties and ideal strength of (100)silicon thin films, Physical Review B, 1-7, 165431.
- Van de Walle, C.G. ve Martin, R.M., 1987. Theoretical study of band offsets at semiconductor interfaces, Physical Review B, 35, 15, 8154.
- Yakovkin, I. N. ve Gutowski, M., 2004. SrTiO₃/Si (001) epitaxial interface: A density functional theory study, Physical Review B, 70, 16, 165319.
- Zachariae, J. ve Pfnür, H., 2005. Growth conditions, stoichiometry, and electronic structure of lattice-matched Sr O/Ba O mixtures on Si (100), Physical Review B, 72, 7, 075410.

Zhang, X., Demkov, A.A., Li, H., Hu, X., Wei, Y. ve Kulik, J., 2003. Atomic and electronic structure of the Si/SrTiO₃ interface, Physical Review B, 68, 12, 125323.

Zupan, A., Blaha, P., Schwarz, K., ve Perdew, J.P., 1998. Pressure-induced phase transitions in solid Si, SiO₂, and Fe: Performance of local-spin-density and generalized-gradient-approximation density functionals, Physical Review B, 58, 17, 11266.

URL-1 < [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/PhysicalandTheoreticalChemistryTextbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Surface_Science/1%3A_Structure_of_Solid_Surfaces/1.1%3A_Introduction](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/PhysicalandTheoreticalChemistryTextbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Surface_Science/1%3A_Structure_of_Solid_Surfaces/1.1%3A_Introduction) > , Eriřim Tarihi: 20.08.2019.

URL-2 < https://en.wikipedia.org/wiki/Low-energy_electron_diffraction > , Eriřim Tarihi: 20.08.2019.

URL-3 < https://en.wikipedia.org/wiki/Scanning_tunneling_microscope > Eriřim Tarihi: 20.08.2019.

URL-4 < <https://hpcuit.readthedocs.io/en/latest/applications/chemistry/VASP/VASP.html> > , Eriřim Tarihi: 07.08.2019.

ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı :Berrin Sultan EŞME
Adres :Kurtuluş mah. 64011 sok. Gazioğlu Apt. 3/14
Seyhan/ADANA
E-posta adresi :bsesme@atu.edu.tr

EĞİTİM BİLGİLERİ (Kurum ve Yıl)

Lisans : Çukurova Üniversitesi, Fizik Bölümü 1997-2001
Yüksek Lisans : Aksaray Üniversitesi, Fizik Bölümü 2012-

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLERİ

1. Çukurova Üniversitesi Balcalı Hastanesi Onkoloji Bölümü/Yaz Stajı
2. Avcılar Lisesi/Ücretli Fizik Öğretmeni
3. Aksaray Üniversitesi Rektörlüğü Personel Daire Başkanlığı/Şef