

**Si(100) YÜZEYİNİN 2- BOYUTLU ISING MODEL İLE  
İNCELENMESİ**

**Ali Emre GENÇ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**EYLÜL 2011  
ANKARA**

Ali Emre GENÇ tarafından hazırlanan “Sİ(100) YÜZEYİNİN 2-BOYUTLU ISING MODEL İLE İNCELENMESİ” adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Bülent KUTLU

.....

Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

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

Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

.....

Fizik Anabilim Dalı, G.Ü.

Prof. Dr. Bülent KUTLU

.....

Fizik Anabilim Dalı, G.Ü.

Prof. Dr. Bora ALKAN

.....

Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı, A.Ü.

Tarih: 23/09/2011

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

Prof. Dr. Bilal TOKLU

.....

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

## **TEZ BİLDİRİMİ**

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

Ali Emre GENÇ

**Si(100) YÜZEYİNİN 2-BOYUTLU ISING MODEL İLE İNCELENMESİ****(Yüksek Lisans Tezi)****Ali Emre GENÇ****GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ****Eylül 2011****ÖZET**

Bu çalışmada, Si(100) yüzeyinin kritik davranışı Ising modeli temel alan Creutz Cellular Automaton soğutma algoritması ile incelenmiştir. Hesaplamalar, periyodik sınır koşulları göz önüne alınarak,  $L_x=30, 60, 90, 120$  ve  $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$  kenar uzunluklu dikdörtgen örgüler kullanılarak yapılmıştır. İncelemeler, Si(100) yüzeyindeki dimerlerin anizotropik etkileşimlerinden dolayı düzen durumunu elde etmek için gerekli en büyük  $L_x/L_y$  oranının  $1/7$  olması gerektiğini göstermiştir. Ayrıca yüksek sıcaklıkta STM gözlemleriyle uyumlu yüzey resimleri elde edebilmek için spin ortalamalarının belirli bir  $\Omega$  ayırma oranıyla ayrılması gerektiği sonucuna varılmıştır. Farklı parametre setlerine ait sonsuz örgü kritik sıcaklıkları elde edilmiş, deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Son olarak, diagonal parametre değişiminin kritik davranışa etkisi gösterilmiştir.

**Bilim Kodu : 202.1.167****Anahtar Kelimeler : Si(100) yüzeyi, Cellular Automaton, Ising Model, Yüzey yapılanmaları,  $c(4 \times 2) \leftrightarrow 2 \times 1$  faz geçişi,  $c(4 \times 2)$  yüzey yapılanması,  $2 \times 1$  yüzey yapılanması,  $p(2 \times 2)$  yüzey yapılanması, kritik davranış.****Sayfa Adedi : 84****Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Bülent Kutlu**

**INVESTIGATION Si(100) SURFACE USING 2-DIMENSIONAL ISING  
MODEL**

**(M.Sc. Thesis)**

**Ali Emre GENC**

**GAZI UNIVERSITY  
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

**September 2011**

**ABSTRACT**

In this study, critical behaviour of Si(100) surface is investigated by using cooling algorithm which is improved from Creutz Cellular Automaton based on Ising Model. The simulation are carried on rectangular lattice with linear dimensions  $L_x=30, 60, 90, 120$  and  $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$  using periodic boundary conditions. The investigations showed that maximum  $L_x/L_y$  proportion due to dimer-dimer anisotropic interactions must be  $1/7$  to obtain ordered phase. Furthermore, in order to get compatible surface reconstructions with STM results at high temperatures, spin average must be separated with “separation proportion”,  $\Omega$ . Infinite lattice critical temperatures corresponding to different parameter sets are obtained and compared with experimental and theoretical results. Finally, we show that variation of diagonal interaction parameter is effective on critical behaviour.

**Science Code : 202.1.167**

**Key Words : Si(100) surface, Cellular Automaton, Ising Model, Surface reconstruction,  $c(4 \times 2) \leftrightarrow 2 \times 1$  phase transition,  $c(4 \times 2)$  reconstruction,  $p(2 \times 2)$  reconstruction,  $2 \times 1$  reconstruction, critical behaviour.**

**Page Number : 84**

**Adviser : Prof. Dr. Bülent KUTLU**

## TEŞEKKÜR

Çalışmalarım süresince beni yönlendiren, hiçbir konuda bilgisini ve görüşünü benden esirgemeyen değerli tez danışmanım Prof. Dr. Bülent KUTLU' ya ve çalışma arkadaşım, hocam, Dr. Aycan ÖZKAN' a sonsuz teşekkürlerimi sunuyorum.

Öğrenim hayatım boyunca beni her zaman destekleyen çok değerli aileme derin sevgi ve şükranlarımı sunuyorum.

Bu tezin hesaplamaları, Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Biriminin (BAP:05/2010- 89) sağladığı imkanlarla ve Tübitak' ın sağladığı GRİD hizmeti kullanılarak yapılmıştır.

## İÇİNDEKİLER

|                                                                                        | Sayfa |
|----------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| ÖZET .....                                                                             | iv    |
| ABSTRACT .....                                                                         | v     |
| TEŞEKKÜR .....                                                                         | vi    |
| İÇİNDEKİLER .....                                                                      | vii   |
| ÇİZELGELERİN LİSTESİ .....                                                             | ix    |
| ŞEKİLLERİN LİSTESİ .....                                                               | x     |
| SİMGELER VE KISALTMALAR .....                                                          | vi    |
| 1. GİRİŞ .....                                                                         | 1     |
| 2. Si(100) YÜZEYİ .....                                                                | 4     |
| 2.1. Si(100) Yüzey Yapısı .....                                                        | 5     |
| 2.2. Yarıiletken Yüzeylerin Yeniden Yapılanmaları .....                                | 7     |
| 2.3. Yarıiletken Yüzeyler Neden Yeniden Yapılanırlar .....                             | 7     |
| 2.4. Si(100) Yüzey Yapılanmaları .....                                                 | 10    |
| 2.1. Si(100) Yüzey Faz Geçişleri.....                                                  | 13    |
| 2.5.1. Si(100) yüzeyinin $(2 \times 1) \leftrightarrow 1 \times 1$ faz geçişi .....    | 13    |
| 2.5.2. Si(100) yüzeyinin $(2 \times 1) \leftrightarrow c(4 \times 2)$ faz geçişi ..... | 13    |
| 3. ISING MODEL .....                                                                   | 15    |
| 3.1. Si(100) Yüzeyi ve Ising Model Benzeşimi.....                                      | 17    |
| 3.2. Si(100) Yüzeyi ve Anizotropik Ising Model .....                                   | 21    |
| 3.3. Etkileşim ParametrelerininTespiti .....                                           | 22    |
| 3.4. İkinci Derece En Yakın Komşu Etkileşmeli Ising Model .....                        | 26    |
| 4. CELLULAR AUTOMATA .....                                                             | 27    |
| 4.1. İki Boyutlu Cellular Automaton Kuralları.....                                     | 29    |
| 4.2. Cellular Automaton Ising Model Algoritması .....                                  | 30    |
| 4.3. Creutz Cellular Automatonda Termodinamik<br>Niceliklerin Hesabı.....              | 35    |
| 4.4. Soğutma Algoritması.....                                                          | 36    |
| 5. BULGULAR VE TARTIŞMA.....                                                           | 37    |

|                                                                                             | <b>Sayfa</b> |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 5.1. Parametre-Örgü ilişkisi.....                                                           | 38           |
| 5.2. Yüzeyin STM Modellemesi.....                                                           | 44           |
| 5.3. $(2 \times 1) \leftrightarrow c(4 \times 2)$ Yüzey Faz Geçişinin Kritik Davranışı..... | 48           |
| 5.4. Kritik Sıcaklık Tespiti .....                                                          | 55           |
| 5.4.1. Diagonal parametre değişiminin kritik<br>davranışa etkisi .....                      | 58           |
| 6. SONUÇLAR.....                                                                            | 62           |
| KAYNAKLAR.....                                                                              | 64           |
| ÖZGEÇMİŞ.....                                                                               | 68           |

## ÇİZELGELERİN LİSTESİ

| Çizelge                                                                                                                                     | Sayfa |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Çizelge 3.1. Si(100) yüzeyi için yapılan teorik çalışmalar için elde edilen etkileşme parametreleri .....                                   | 22    |
| Çizelge 4.1. 4 farklı parametre seti için, c(4×2) yapılanmasında merkezi spinin bozulması sonucu meydana gelen iç enerji değişimi .....     | 33    |
| Çizelge 4.2. 4 farklı parametre seti için, p(2×2) yapılanmasında merkezi spinin bozulması sonucu meydana gelen toplam enerji değişimi ..... | 33    |
| Çizelge 4.3. 4 farklı parametre seti için, 2×1 yapılanmasında merkezi spinin bozulması sonucu meydana gelen toplam enerji değişimi .....    | 34    |
| Çizelge 4.4. 4 farklı parametre seti için, 4×1 yapılanmasında merkezi spinin bozulması sonucu meydana gelen toplam enerji değişimi .....    | 34    |
| Çizelge 5.1. Etkileşme parametrelerinin, CA' da kullanmak üzere değiştirilmiş tamsayı değerleri .....                                       | 38    |
| Çizelge 5.2. Etkileşme parametrelerinin, CA' da kullanmak üzere değiştirilmiş tamsayı değerleri .....                                       | 58    |

## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

| Şekil                                                                                                                                                                                                                  | Sayfa |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Şekil 2.1. Si(100)-2×1 yüzeyindeki simetrik ve asimetrik dimerler için top ve çubuk modeli.....                                                                                                                        | 7     |
| Şekil 2.2. a) Tetrahedral bağlantılı yarıiletkenlerin bulk yapısı, b) Tetrahedral bağlantılı yarıiletkenlerin farklı doğrultularda yüzeyleri. İçi dolu yuvarlaklar atomları, çizgiler ise bağları göstermektedir. .... | 8     |
| Şekil 2.3. Si(100) yüzeyinin farklı yüzey yapılanmaları için yüzeyin bant yapısı .....                                                                                                                                 | 10    |
| Şekil 2.4. Si(100) yüzeyi için, a) c(4×2), b) 2×1, c) p(2×2), d) 4×1 yüzey yapılanmaları. ....                                                                                                                         | 12    |
| Şekil 2.5. Si(100) yüzeyi için 2×1, c(4×2) ve p(2×2) yapılanmaları için STM fotoğrafları ile top-çubuk model birim hücre gösterimi.....                                                                                | 14    |
| Şekil 3.1. İki-boyutlu kare örgüler için en yakın komşu spinler .....                                                                                                                                                  | 16    |
| Şekil 3.2. Dimer yönelimi ve Ising spini arasındaki ilişki .....                                                                                                                                                       | 17    |
| Şekil 3.3. Si(100) yüzeyindeki etkileşmeleri tanımlayan temel etkileşme parametreleri .....                                                                                                                            | 18    |
| Şekil 3.4. 2x1 ve c(4x2) durumunu tanımlayan antisimetrik dimer düzeni .....                                                                                                                                           | 19    |
| Şekil 3.5. İkinci en yakın komşu Anizotropik etkileşmeli kare örgü için komşu spinler .....                                                                                                                            | 20    |
| Şekil 3.6. Si(100) yüzeyi temel yapılanmalarının top-çubuk model ile gösterimi.....                                                                                                                                    | 23    |
| Şekil 3.7. Si(100) yüzeyinin toplam enerji hesaplamaları yapılan 4 temel yapılanmasının Ising Spin modeli gösterimi .....                                                                                              | 24    |
| Şekil 3.8. Kare örgüde bir spinin birinci ve ikinci derece en yakın komşuları .....                                                                                                                                    | 26    |
| Şekil 4.1. İki-boyutlu Cellular Automatada, a) Von Neumann, b) Moore ve c) Hegzagonal komşuluklar .....                                                                                                                | 29    |
| Şekil 4.2. c(4×2) yapılanmasında merkezi spinin bozulması.....                                                                                                                                                         | 33    |

| Şekil                                                                                                                                                                                                                                          | Sayfa |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Şekil 4.3. $p(2 \times 2)$ yapılanmasında merkezi spinin bozulması.....                                                                                                                                                                        | 33    |
| Şekil 4.4. $2 \times 1$ yapılanmasında merkezi spinin bozulması .....                                                                                                                                                                          | 34    |
| Şekil 4.5. $4 \times 1$ yapılanmasında merkezi spinin bozulması .....                                                                                                                                                                          | 34    |
| Şekil 5.1. Inoue parametre seti kullanılarak $L_x=60$ $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ örgüleri için hesaplanan düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi .....                                                                                    | 39    |
| Şekil 5.2. Inoue parametre seti kullanılarak $L_x=60$ için a) $L_y=60$ , b) $L_y=120$ örgüleri için $T=240$ K civarında elde edilen yüzey yapılanmaları.....                                                                                   | 40    |
| Şekil 5.3. a) 203 K b) 311 K c) 400 K için Inoue parametreleri kullanılarak elde edilmiş yüzey yapılanmaları .....                                                                                                                             | 43    |
| Şekil 5.4. Yüksek sıcaklık bölgesi için Inoue parametreleri kullanılarak a) % 1 b) % 7 oranları için elde edilmiş yüzey yapılanmaları. Gri bölgeler simetrik dimerlerin oluşturduğu bölgelere karşılık gelmektedir.....                        | 46    |
| Şekil 5.5. Pillay-GGA parametre seti $L_x=120$ $L_y=7L_x, \dots, 10L_x$ örgüleri için hesaplanmış a) düzen parametresi b) staggered alınganlık niceliklerinin sıcaklığa bağlı değişimleri.....                                                 | 49    |
| Şekil 5.6. Pillay-GGA parametre seti $L_x=120$ $L_y=7L_x, \dots, 10L_x$ örgüleri için hesaplanmış a) iç enerji b) öz ısı niceliklerinin sıcaklığa bağlı değişimleri .....                                                                      | 50    |
| Şekil 5.7. Inoue parametre seti kullanılarak elde edilmiş, Si(100) yüzeyinin a) Düşük (243 K) b) Yüksek sıcaklık (400 K) yapılanmaları. Düşük sıcaklıkta yüzey tamamen $c(4 \times 2)$ yapılanmasından oluşmaktadır.....                       | 51    |
| Şekil 5.8. Ihm parametre seti kullanılarak elde edilmiş, Si(100) yüzeyinin a) Düşük (221 K) b) yüksek sıcaklık (313 K) yapılanmaları. Düşük sıcaklıkta yüzey tamamen $p(2 \times 2)$ yapılanmasından oluşmaktadır .....                        | 52    |
| Şekil 5.9. Ihm tarafından elde edilen parametre seti için $L_x=120$ ve $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ kenar uzunluklu örgüler kullanılarak Hesaplanmış a) Düzen parametresi b) Staggered alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri ..... | 53    |

| Şekil                                                                                                                                                                                                                   | Sayfa |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Şekil 5.10. Ihm tarafından elde edilen parametre seti için $L_x=120$ ve $L_y=L_x, 2L_x, \dots 10L_x$ kenar uzunluklu örgüler kullanılarak Hesaplanmış a) İç enerji b) Öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri..... | 54    |
| Şekil 5.11. a) Pillay-GGA ve b) Pillay-LDA parametre setleri için staggered alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_x$ ’ e karşı değişimleri grafikleri.....                                                            | 55    |
| Şekil 5.12. a) Inoue ve b) Ihm parametre setleri için için staggered alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_x$ ’ e karşı değişimleri grafikleri.....                                                                   | 56    |
| Şekil 5.13. Pillay-GGA parametre seti, farklı D parametreleri için elde edilen a) düzen parametresi ve b) Staggered alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimi.....                                                  | 60    |
| Şekil 5.14. Pillay-GGA parametre seti, farklı D parametreleri için elde edilen a) İç enerji ve b) Öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimi.....                                                                        | 61    |

## SİMGELER VE KISALTMALAR

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

| Simgeler    | Açıklama                                                  |
|-------------|-----------------------------------------------------------|
| $T$         | Sıcaklık                                                  |
| $T_c$       | Kritik Sıcaklık                                           |
| $L_x$       | x-doğrultusundaki Örgü Kenar Uzunluğu                     |
| $L_y$       | y-doğrultusundaki Örgü Kenar Uzunluğu                     |
| $M$         | Manyetizasyon                                             |
| $\chi$      | Staggered Alınganlık                                      |
| $C$         | Özısı                                                     |
| $H_I$       | İç Enerji                                                 |
| $P_{ij}(M)$ | Mıknatıslanmanın Örgü Noktası İçin Zaman Adımı Ortalaması |
| $\Omega$    | Göz Başına Spin Ortalamalarının Ayrılma Oranı             |
| $V$         | Dimerler Arası Dikey Etkileşme Parametresi                |
| $H$         | Dimerler Arası Yatay Etkileşme Parametresi                |
| $D$         | Dimerler Arası Diagonal Etkileşme Parametresi             |
| Kısaltmalar | Açıklama                                                  |
| LEED        | Düşük enerjili elektron kırınımı                          |
| STM         | Taramalı Tünelleme Mikroskopi                             |
| AF          | Antiferromanyetik                                         |
| SAF         | Süperantiferromanyetik                                    |
| LDA         | Yerel yoğunluk yaklaşımı                                  |
| GGA         | Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı                       |
| CA          | Cellular Automaton                                        |

**Kısaltmalar****Açıklama****MCRG**

Monte Carlo Renormalizasyon Grup Teorisi

## 1. GİRİŞ

Atomların yüzeydeki pozisyonlarının ve oluşturdıkları geometrilerin özellikleri ve bu geometrilerin sıcaklığa bağlı değişimleri yüzey fiziğinin yanıtlaması gereken ilk sorulardan birisidir. Yüzey yapılanmalarındaki sıcaklığa bağlı değişimler; kimyasal reaktivlik, yüzey enerjisi, yüzey iş fonksiyonu, yüzey titreşimleri ve elektronik yapısı gibi birçok fiziksel özellik üzerine etkin, önemli bir faktördür. Son yıllarda yapılan araştırmalar, yüzey yapılanmalarının bu gibi fiziksel özelliklerin değişimine sebep olduğunu göstermiştir. Bu bakımdan günümüz teknolojisinde, yüzey yapılanmaları ile yüzey yapılanmalarının tetiklediği değişimler oldukça önemlidir ve teknolojik cihaz geliştirilmesi aşamasında göz önünde bulundurulması gereken bir durumdur.

Yapılan araştırmalar, malzeme yüzeylerindeki yapısal değişimlerin sanıldığından aksine oldukça karmaşık olduğunu ortaya koymuştur. Bu karmaşık yüzey yapılanmalarının sürücü kuvveti, yüzeydeki boş kalan bağların yine yüzeyde yeni bir düzenlenime sebep olma isteğidir.

Yarıiletken yüzey yapılanmaları ve sıcaklığa bağlı yapısal faz geçiş olayları teorik olarak Ising modeli temel alan Monte Carlo yöntemi ile [1-3], deneysel olarak da STM [4, 5], LEED [6] gibi deneysel yöntemlerle incelenmiştir. Teorik yapılanmalar iki kısımdan oluşmaktadır. İlk olarak tanımlanan yüzey için Ising model Hamiltonyeni yazılmakta ve etkileşim parametreleri mutlak sıfırda ab-initio olarak yapılan enerji hesaplamalarıyla elde edilmektedir. Daha sonra simülasyon teknikleri ile bu yüzeyin sıcaklığa bağlı yapısal değişimleri incelenmektedir. Si(100) yüzeyinde oluşan  $c(4 \times 2) - (2 \times 1)$  yapısal faz geçişi sıcaklığı deneysel olarak 200 K olarak tespit edilirken farklı ab-initio hesaplama sonuçlarına dayalı Monte Carlo simülasyonlarında 160- 340 K sıcaklık aralığında değiştiği görülmektedir. Bu çalışmalar incelendiğinde, teorik çalışmalar arasındaki farkın yüzey için yapılan tanımlamalar (kusursuz, kusurlu) ve ab-initio hesaplamalarda kullanılan yaklaşımlardan (LDA, GGA) kaynaklandığı görülmektedir.

Sıcaklığa bağlı değişimlerin incelendiği Monte Carlo yöntemine alternatif bir yöntem, 1986 yılında Creutz tarafından oluşturulmuştur. Creutz algoritması Ising modelin deterministik “cellular automaton” ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır.

Cellular Automaton ilk olarak 1952 yılında Neumann tarafından önerilmiştir. Cellular automatonda uzay ve zaman kesikli bir yapıya sahiptir. Uzay, sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden meydana gelir. Model için ilk teoriler Wolfram tarafından sunulmuştur [7, 8]. Bazı fiziksel problemlerin yanı sıra Ising modelin CA ile simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir [9]. Pomeau ve Herrmann, Vichniac’ın Ising Model için önerdiği kuralı Q2R Ising model olarak geliştirmiştir [10,11]. Q2R Ising modelde toplam enerji, spin-spin etkileşme enerjisine karşılık gelmektedir. Bu bakımdan iç enerji tüm simülasyon süresince korunmaktadır. İç enerji simülasyon boyunca değişmediğinden, öz ısı niceliği hesaplanamamaktadır. Bu durum 1986 yılında Creutz tarafından önerilen mikrokronik cellular automata algoritması ile bu kısıtlama ortadan kaldırılmıştır [12]. Creutz algoritmasında, iç enerji ve kinetik enerji toplam enerji değişecek şekilde değişmektedir. Rastgele sayı üreticinin kullanılmadığı, tamsayılarla işlem yapan bu algoritma, Monte Carlo gibi yöntemlerden 10 kat daha hızlı çalışmaktadır [12].

Silisyum, doğada oldukça fazla bulunan, günümüzde teknolojik cihazların yapımında temel teşkil eden bir elementtir. Bu bakımdan bu maddenin bulk ve yüzey özelliklerinin bilinmesi, etkin bir şekilde kullanılmasına olanak sağlamaktadır. Teknolojik cihazların boyutlarındaki küçülme, bulk yanında yüzey özelliklerinin de önemini artırmaktadır. Bu bakımdan yüzey geometrisinin çeşitli etkiler tarafından tetiklenen değişimlere maruz kalması ve bu değişimlerin tespiti oldukça önemlidir.

Si(100) yüzeyi, doğasının basitliği yüzünden geçmişten günümüze birçok deneysel ve teorik çalışmanın konusu olmuştur. Yapılan araştırmalar bu yüzeyde sıcaklığa bağlı olarak  $2 \times 1 \leftrightarrow c(4 \times 2)$  faz değişiminin varlığını ortaya koymuştur. Ancak, teorik ve deneysel çalışmalar çalışmalar arasında faz geçiş sıcaklığı oldukça farklılık

göstermektedir. Bu durum, Si(100) yüzeyindeki yapısal faz değişiminin alternatif bir simülasyon tekniğiyle incelenmesini gerekli hale getirmektedir.

Bu tez çalışmasında, Si(100) yüzeyinin sıcaklığa bağlı yapısal faz değişimleri Ising modeli temel alan Creutz Cellular Automaton soğutma algoritması ile incelenmiştir. Çalışmada, yüzeyin kritik davranışını ortaya koyacak örgü geometrisi araştırılmış, oda sıcaklığında teorik çalışmalarla STM fotoğrafları arasındaki uyumsuzluğun sebepleri incelenmiştir. Farklı parametre setlerinin taban durumları elde edilerek, sonsuz örgü kritik sıcaklık tespiti yapılmıştır. Hesaplamalar,  $L_x=30, 60, 90, 120$  ve  $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$  kenar uzunluklu  $L_x \times L_y$  dikdörtgen örgüler kullanılarak, periyodik sınır şartlarında, 500 000 zaman adımı üzerinden yapılmıştır. Kritik davranış, termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı değişimlerinden anlaşılmış, kritik sıcaklık tespiti staggered alınganlık ve öz ısı niceliklerinin kritik sıcaklıktaki piklerinden yapılmıştır.

## 2. Sİ(100) YÜZEYİ

Katı yüzeylerin fiziksel özelliklerini anlamak için yapılan çalışmaların sayısı ve bu çalışmaları yapmak için gereken deneysel sistemlerin çeşitliliği 1960' lardan beri ciddi biçimde artış göstermiştir. Bunun için ilk olarak yüzey özelliklerini anlamamanın öneminin kavranmış olması ve reel dünyadaki uygulamalar için gerçekten önemli bir yer teşkil ediyor olması gösterilebilir. Yüzeyin önemli olmasının bir diğer sebebi ise bulk yapısından ayrı özellikler göstermesidir. Katılar hakkındaki bilinç düzeyimizin çoğu kusursuz bir 3-boyutlu periyodikliğe sahip oluşu bilgisine dayanır; bu simetriye uygun metodlar kullanılarak yüzeyin titreşimsel ve elektronik özellikleri detaylı olarak tanımlanabilir. Yüzey söz konusu olduğunda, bir doğrultuda bu periyodiklik bozulur; elektronik ve titreşimsel özelliklerinin değişmesinin yanı sıra yapısal özellikleri de değişir [13].

Yarıiletken yüzeyler incelenirken yüzeydeki kimyasal bağların kuvvetliliğine göre uygun enerji skalası 0 ile birkaç eV arasında değişiklik gösterir. Burada temel amaç, katıların elastisite, özısı, manyetizasyon, elektriksel iletkenlik ve optik özellikleri gibi makroskobik özelliklerinin atomik tanımlamasını yapmaktır. Bu durumda, karşımıza katıhal fiziği yerine yüzey fiziği kavramı çıkar. Yüzey fiziğinin katıhal fiziği ile arasındaki karakteristik fark, katı maddelerde  $1 \text{ cm}^3$ ' te tanımlanması gereken  $10^{23}$  sayıda atom yerine yüzey sisteminde  $1 \text{ cm}^2$ 'de yaklaşık  $10^8$  atomun tanımlanması kolaylığıdır. Bu kadar çok sayıda atom için sistemlerin teorik olarak tanımlanması için katıhal fiziği çerçevesinde yeni fikirler geliştirilmek zorunluluktur. İdeal kristal katılarda dönüşüm simetrisi elektronik bant yapısına veya etkin elektron kütlelerine sebep olur. Bunun sebebi, sistemin çok sayıda atom içermesinden ve atomik sistemle makroskobik sistem arasında uzunluk skalasında varolan farktan dolayı, klasik katıhal teorisindeki, kuramsal yöntemlerin çoğu katının sonsuza gittiği varsayımını temel almasıdır. Bu bakımdan bu tür modellerde atomların sonlu sayıda bulunduğu yüzeyler ve yüzey etkileri ihmal edilir. Bu durum matematiksel zorlukları büyük ölçüde azaltır. İdealize edilmiş kristal katıların sonsuz dönüşüm simetrileri simetri operasyonlarının yapılmasını mümkün kılar ve böylelikle matematiksel

olarak kolaylık sağlanmış olur. Ancak bunun için yüzeydeki atomik katmanların etkilerinin ihmal etmek gereklidir.

Ancak klasik katıhal teorisinde sonsuza uzatılmış katı yaklaşımı doğru değildir, çünkü sistemi incelemek için deneysel sistemlerde kullanılan uç (prob), madde ile oldukça güçlü biçimde etkileşir ve düşük enerjili elektronlar veya atomik-moleküler ışınlar gibi birkaç angström maddenin içine girer. Burada, bulk atomlarından farklı özellik gösteren yüzey atomlarının özellikleri devreye girer [14].

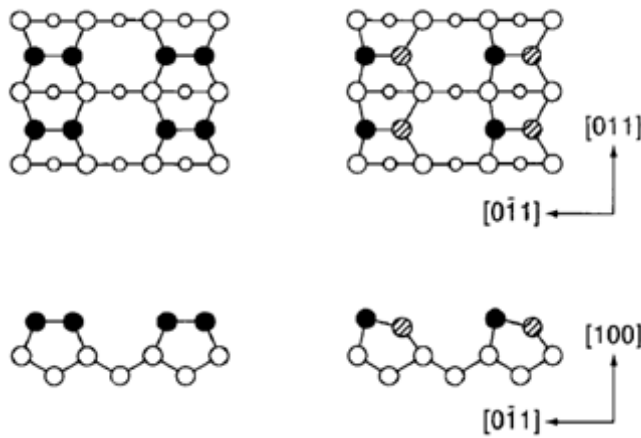
Silikon, insanoğlu için en kullanışlı elementlerden birisidir. Yüksek sıcaklıkta bile yarıiletken yapısını koruması dolayısıyla geniş bir kullanım alanına sahiptir. Silikat formunda, seramik, cam ve çimento yapımında kullanılabilir. Yüksek saflıkta silikon; bor, galyum ya da arsenik ile katkılılandırıldığında elektronik ve uzay çağı endüstrisinde oldukça yoğun olarak kullanılan transistörler, güneş pilleri, doğrultucular, entegre devreler, mikroçipler ve diğer elektronik cihazların yapımında önemli yer tutan silikon bileşikler elde edilebilir. Silikonun birçok yapısal formda bulunabilmesi teknolojik uygulama alanlarını artırmaktadır.

Yarıiletkenler, kuantumsal hapsolme etkilerinin belirgin olduğu kritik büyüklüğe sahiptirler. Bu koşulun ölçütü ise uyarılmış bohr yarıçapıdır. Bu büyüklük tekli kristal Silikon için 5 nm' nin altındadır. Bu aralık birçok yarıiletkene göre daha düşüktür. Bu özellik Silikon' u mikroelektronik endüstrisinde avantajlı konuma getirmektedir. Bu sayede üretilen çip, harddisk gibi elektronik aygıtların boyutlarında gerektiği kadar küçülme sağlanabilir. Ayrıca, tekli kristal silikonun elektriksel iletkenliği, piezoözdirenç etkisinden dolayı mekanik stres uygulandığında önemli ölçüde değişmektedir.

## **2.1. Si(100) Yüzey Yapısı**

İdeal Si(100) yüzeyi, her atomun iki altyüzey atomuna iki adet sarkık bağla bağlandığı en üstteki Si atomlarının oluşturduğu kare örgüden oluşur. Yeniden

yapılanmış Si(100) yüzeyinde, yüzey atomları dimerler oluşturmak üzere çiftlenirler ve sarkık bağları aralarında paylaşırlar. Dimerler sıralar halinde dizilirler ve yüzey  $2 \times 1$  yapılanmasını gösterir. Dimer yapısı 1959 yılında Schlier ve Fransworth' ün Si(100) yüzeyinin  $2 \times 1$  yapılanmasının ilk olarak LEED ile gözlemlendiği çalışmasıyla ortaya koyulmuştur [15]. 1979 yılında Chadi, enerji minimizasyon hesaplamaları vasıtasıyla minimal enerjili geometrinin asimetrik dimer geometrisi olduğunu ve yüzeydeki asimetrik dimer varlığının yarıiletken bant yapısına sebebiyet verdiğini göstermiştir [16]. Dimer sıraları STM gözlemleri ile de açıkça görülebilir. Tromp ve arkadaşları yüzey dimerlerin açık şekilde görüldüğü STM görüntüleri elde etmişlerdir [5]. Dimerler, dolu durumlarda dikdörtgen şeklinde çıkıntı şeklinde gözlemlenirler. Dimerlerin çoğu oda sıcaklığında simetrik görünüm verirler fakat  $18^\circ$  civarında bükülme gösterirler. Bunun yanı sıra, geometrik olarak bükülme bir dimerde alttaki atomdan üstteki atoma yük transferi sonucunda gerçekleşir. Oda sıcaklığında dimerler, mümkün iki konfigürasyon arasında dinamik olarak flip-flop hareketi yaparlar. Bükük dimerlerin flip-flop hareketleri rastgeledir ve STM' nin ölçüm zamanından daha kısa zaman eriminde gerçekleşir. Bunun sonucunda, STM şekilleri dimerlerin zaman üzerinden alınan ortalama görünümüne karşılık gelir ve asimetrik dimerler simetrik olarak görünürler.



Şekil 2.1. Si(100)- $2 \times 1$  yüzeyindeki simetrik ve asimetrik dimerler için top ve çubuk modeli.

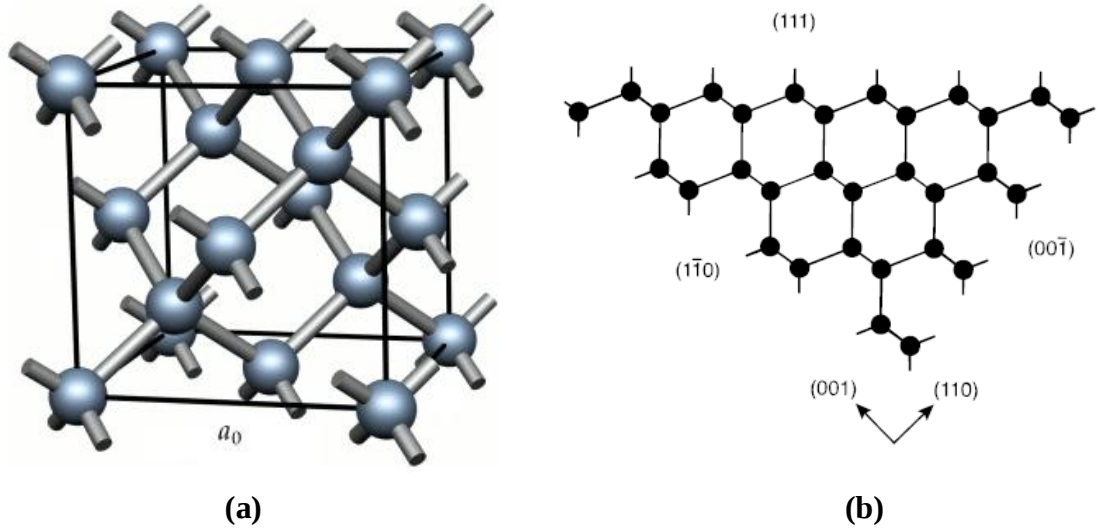
Si(100) yüzeyi 200 K' in altına soğutulduğunda dimerlerin flip-flop hareketi azalır, bunun sonucunda STM deneyleri sonucu gözlemlenen antisimetrik dimer sayısı ciddi olarak artar. Bir dimer sırası üzerindeki dimerlerin etkileşimi antisimetrik yapılanmaya sebep olurken, dimer sıralarının birbirleriyle etkileşimleri, büyük dimerlerin birbirlerine zıt yönde yerleşmesini sağlar. Bu yapılanma  $c(4 \times 2)$  yapısı olarak bilinir ve kusursuz Si(100) yüzeyinin taban durumudur.

## 2.2. Yarıiletken Yüzeylerin Yeniden Yapılanmaları

Yüzey bilimindeki çoğu çalışma atomik olarak temiz bir malzeme yüzeyini incelemekle başlar. Bu yüzden atomik sistemlerin yüzeyleri hakkındaki bilgi düzeyi oldukça önemlidir. Özellikle yarıiletkenlerde yüzeylerin çoğu, bulk pozisyonuna göre yeniden yapılanmış farklı yüzey fazlarına sahiptir [17]. Yarıiletken yüzeylere, eğer simetrisi bulkten daha küçük ise yeniden yapılanmış denir. Standart notasyon yeniden yapılanmış düşük simetrikli yüzeyleri tanımlamak için kullanılır. Örneğin Si(hkl)-(n×m) Silisyumun hkl düzlemine paralel yapısını sembolize eder. Burada n, x yönündeki bulk uzunluğun katı, m ise y yönünde bulk uzunluğunun katıdır. Yüzeyin birim hücre simetrisi bulk ile aynı olsa bile, atomlar bulk pozisyonlarına göre yüzeyde daha fazla hareket serbestliğine sahiptirler [18].

## 2.3. Yarıiletken Yüzeyler Neden Yeniden Yapılanırlar?

Bu durumda örnek olarak Si ve Ge gibi tetrahedral yapılı yarıiletkenler gösterilebilir. Tetrahedral bağlantılı yarıiletkenlerde her atom 4 komşuya sahiptir (Şekil 2.2.a). Elmas yapılı yarıiletkenlerde saf kovalent bağlar yer almaktadır. Her bağ iki adet çiftlenmiş spinli elektrona sahiptir. Yüzey oluştuğunda, bu bağlardan en az atom başına bir bağ kesilir. Kesik bağ, sarkık bağ olarak adlandırılır (Şekil 2.2.b), çiftlenmiş spinli iki elektrondan daha azını içerir. Oda sıcaklığında silisyumun örgü sabiti 5.431 Angstrom, bant aralığı 1.12 eV' dur.



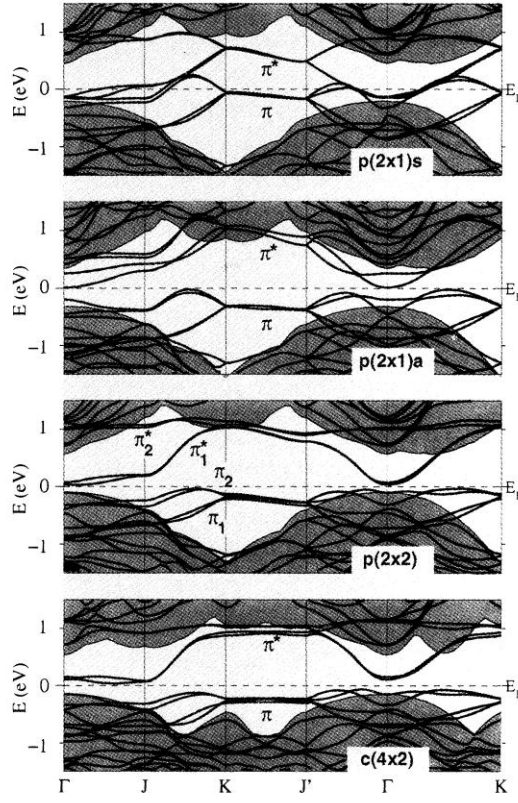
Şekil 2.2. a) Tetrahedral bağlantılı yarıiletkenlerin bulk yapısı,  
 b) Tetrahedral bağlantılı yarıiletkenlerin farklı doğrultularda yüzeyleri. İçi dolu yuvarlaklar atomları, çizgiler ise bağları göstermektedir.

Elektronların çiftlenim eksikliği sarkık bağları kararsız hale getirir. Bu durum, yüzey atomlarının, sistemin serbest enerjisini minimum hale getirecek yeni koordinatlar aramalarına neden olur. Bu olay meydana geldiğinde, yüzey durulur (relaxation) ve atomların yeni koordinatlarını nasıl aradıklarına bağlı olarak yüzey yeniden yapılanır (Reconstruction). Durulma, yüzey atomlarının bulk pozisyonlarından ayrılması anlamına gelir fakat yüzey periyodikliğini değiştirmez. Diğer yandan yüzeyin yeniden yapılanması, hem durulma hem de yüzey periyodikliğinin değişmesine sebep olan atomik yerdeğiştirmelere karşılık gelir. Böylelikle ideal yüzey simetrisi azalır. Buna ek olarak yüzeylerde bulkten ayrı olmak üzere farklı kimyasal bileşimi olan yapılanmalar bulunabilir. Yüzeyin kimyasal yapısındaki değişimi sistemin yük nötralitesinin değişmesi gerekliliğinden kaynaklanır [19].

Büyütme veya kesme işlemi düşünüldüğünde, elde edilen yüzey geometrisi serbest enerjide bir minimuma sahip olabilir. Elektriksel olarak yüksüz sistemler için, serbest enerjideki minimuma bağlı olarak, durulma ve yeniden yapılanma 3 prensipte ortaya koyulabilir [19].

1. Prensip; Yüzey enerjisi, sistemin yarıiletken elektronik karakter göstermesine sebep olacak şekilde atomik durulmalar vasıtasıyla düşürülebilir. Sarkık bağlardaki çiftlenmemiş elektronlar, atomik durulmalar tarafından çiftlenmiş duruma getirilebilir. Bu anda atom bulka doğru hareket ederek çiftlenmemiş elektronunu bulkten dışarı doğru hareket eden komşu atoma verir. Bu durum, sarkık bağ orbitallerinin rehibridizasyonunu içerebilir.
2. Prensip; Yüzey yeniden yapılanmaları, yarıiletken karaktere sebep olan bağların yeniden düzenlenmesiyle yüzey enerjisinin düşürülebilir. Atomik durulmadan farklı olarak, komşu yüzey atomlarının sarkık bağları yeni bağlar oluşturmak üzere çiftlenirler, bu durum da sonuç itibarıyla tamamen dolu ve tamamen boş elektronik durumlara sebep olur.
3. Prensip; yüzey yeniden yapılanması veya durulması elektron sayma kuralına uyar. Bu prensip, III-V ve II-VI yarıiletkenleri gibi, anyon ve katyonların varlığı tarafından karakterize edilebilen bileşik yarıiletkenlerin yeniden yapılanma mekanizmasını anlamak için oldukça önemlidir. Yüzeyin elektronik enerjisi, anyonların sarkık bağları tamamen çiftlendiğinde ve katyonların sarkık bağları tamamen boş kaldığında düşer. Bu, elektron sayma kuralıdır [20, 21].

Si(100) yüzeyinde, “relaxation” (durulma) sonucunda, oda sıcaklığında simetrik Si(100)-2x1 yapılanması oluşur. Bu durumda yüzey metalik bant yapısına sahiptir. En üst katmandaki Si atomlarının aralarında yaptığı yük transferi sonucu antisimetrik dimerler meydana gelir. Antisimetrik dimerler oluşurken bant aralığı gittikçe açılır ve yüzeyde bant yapısının yarıiletkenine doğru değişir [22] (Şekil 2.3).



Şekil 2.3. Si(100) yüzeyinin farklı yüzey yapılanmaları için yüzeyin bant yapısı [22].

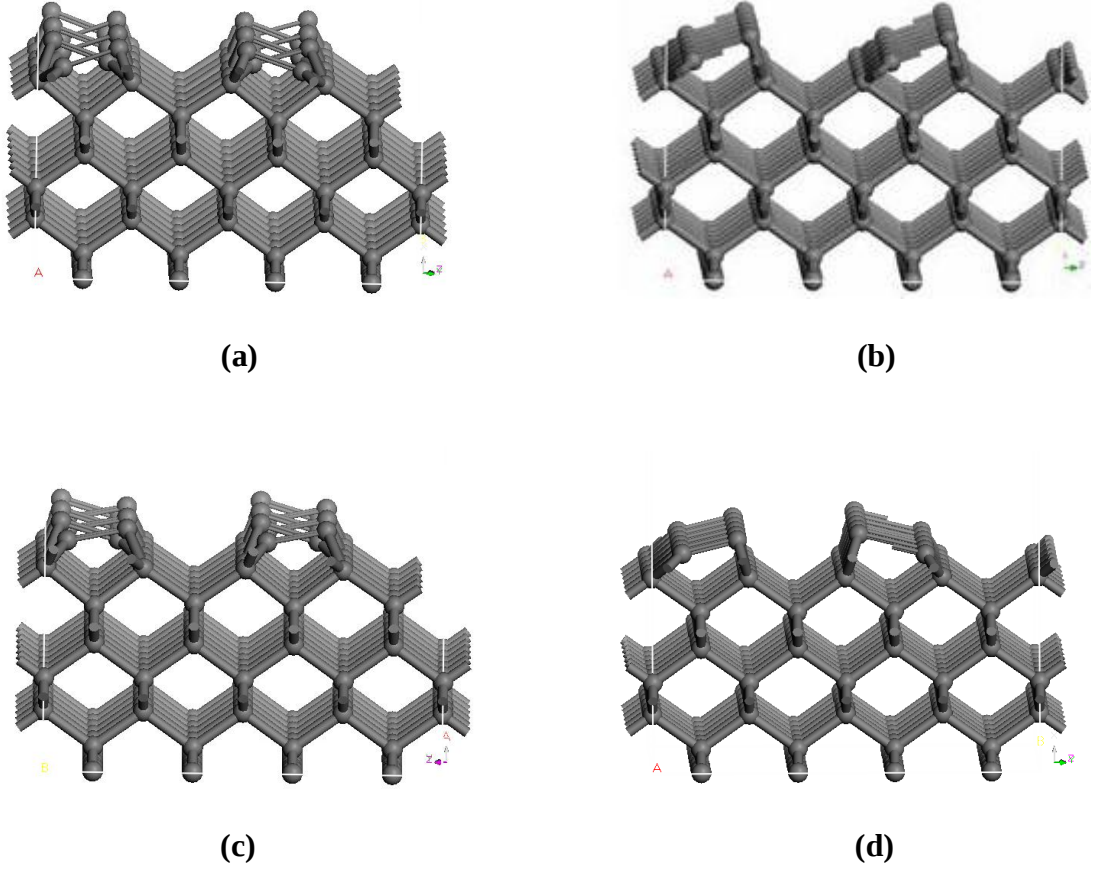
#### 2.4. Si(100) Yüzey Yapılanmaları

Yeniden yapılanma doğasının bu kadar basit olmasına rağmen, (001) yüzeyindeki dimer yapısının doğası ve kökeni, yarıiletken yüzey fiziğinde en çok araştırılan konulardan biridir. Oda sıcaklığında iki model, asimetrik ve simetrik dimer modelleri, 1993' e kadar enerjileri konusunda tartışma konusu olmuşlardır asimetrik modelin daha düşük enerjili olduğu anlaşılmıştır [5, 23-26]. En kararlı yapı konusundaki tartışma deneysel olarak kusursuz bir yüzey oluşturulma zorluğunun yanında, deneysel ve teorik çalışmaların uyumsuzluğundan ileri gelmektedir. Oda sıcaklığında taramalı tünelleme mikroskobunun (STM) topoğrafik resimleri asimetrik dimerler kusurlarla ilişkili olmak üzere, kusursuz Si (001) yüzeyinde simetrik dimerler tespit edilmiştir [4,5]. Oda sıcaklığında toplam enerji hesaplamaları, simetrik ve asimetrik dimer modellerinin yaklaşık olarak aynı enerjiye sahip olduğunu göstermiştir [27]. Ihm ve arkadaşları [3], toplam enerji hesaplamalarıyla

birlikte yaptığı renormalize grup hesaplamaları ile Si(100) yüzeyinin yapısal faz geçişinin sıcaklığın fonksiyonu olduğunu önermiştir. Ihm ve arkadaşları,  $(2 \times 1)$  (Şekil 2.4.b) yeniden yapılanmasının sistemin taban durumu olmadığını, düşük sıcaklıklarda daha yüksek düzeyde düzen durumlarının  $c(4 \times 2)$  ya da  $p(2 \times 2)$  (Şekil 2.4.a ve c)) gözlenebileceğini önermişlerdir. Yine Si(100) yüzeyindeki düzen-düzensizlik faz geçişlerinin Si ve Ge yüzeyleri için 200K de LEED desenlerinin yüksek dereceden saçılma piklerinin kaybolması temelinde değerlendirmişlerdir. Bu geçişin düzensizlik durumu, dimerlerin sıcaklıkla yaptığı flip-flop hareketlerinden kaynaklanabileceği düşünülmüştür.

Si(001) yüzeyindeki  $(2 \times 1) \leftrightarrow c(4 \times 2)$  faz geçişi deneysel yöntemlerden ilk olarak LEED vasıtasıyla gözlemlenmiş ve bu faz geçişi geniş bir sıcaklık eriminde gerçekleşen, ikinci dereceden tersinir bir faz geçişi olarak tanımlanmıştır [6].  $(2 \times 1) \leftrightarrow c(4 \times 2)$  faz geçişinin varlığı yüzey yeniden yapılanmasının asimetric dimerler tarafından gerçekleştirildiğini ve herhangi simetric dimer düzeninin  $c(4 \times 2)$  yapısını tanımlayamayacağını göstermektedir.

Bazı deneyler Si(001) yapısının sanıldığından daha karmaşık olduğunu göstermiştir. Düşük sıcaklıkta STM ölçümleri  $\sim 20$  K' de Si(001) yüzeyinde simetric dimerler tespit etmiştir. Asimetric dimerler sadece kusurlar civarında gözlenmiştir [28]. İlk prensipler hesaplamaları ile 0 K' de Si(001) yüzeyinin  $p(2 \times 2)$  yapısının da diğer kararlı durum olduğunu göstermiştir[29].  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapıları basit bir dimer terslenmesiyle birbirleri arasında değiştirilebilirken,  $c(2 \times 2)$  yapısına benzer diğer fazlar bağ kırılması gerçekleştirilmeden elde edilememektedirler [3]. Hem  $c(4 \times 2)$  hem de  $p(2 \times 2)$  yapıları STM tarafından geniş bir sıcaklık yelpazesinde gözlemlenebilir ve bu yapılar platoların, kusurların veya kristal boşluklarının varlıklarına bağlıdır.  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapılarının hesaplanmış toplam enerjileri birbirlerine çok yakındır ( $\sim 12$ meV/dimer) [1, 22, 27].



Şekil 2.4. Si(100) yüzeyi için, a) c(4×2), b) 2×1, c) p(2×2), d) 4×1 yüzey yapılanmaları.

Si(001) yüzeyi için mümkün yeniden yapılanma durumu şöyledir: dimerler arasındaki antiferromanyetik çiftlenimden dolayı antisimetrik dimerler düşük sıcaklıkta kararlı hale gelir. Artan sıcaklıkla birlikte AF çiftlenim zayıflar ve asimetrik dimerler, simetrik dimerlerden daha kararlı hale gelir. Sıcaklık daha da yükselerek ( $\sim 100$  K) faz kusurlarının hareketini de kapsayacak şekilde termal uyarılmalara sebep olur [30]. Bu durum faz asimetrisini değiştirir. Oda sıcaklığında simetrik dimerler tekrar yüzeyi domine ederler.

## 2.5. Si(100) Faz Geçiřleri

### 2.5.1. Si(100) yüzeyinin $(2\times 1)\leftrightarrow(1\times 1)$ faz geçiři

Si ve Ge (001) yüzeyleri benzer yüzey ve bulk yapılarına sahip olup, yüksek sıcaklıkta tersinir  $(2\times 1)\leftrightarrow(1\times 1)$  faz geçiři gösterirler. Ge yüzeyinde, yüzeyden x-ray saçılma deneyleri sonucunda faz geçiři sıcaklığı,  $T_c=955\pm 7$  K olarak elde edilmiştir [31].

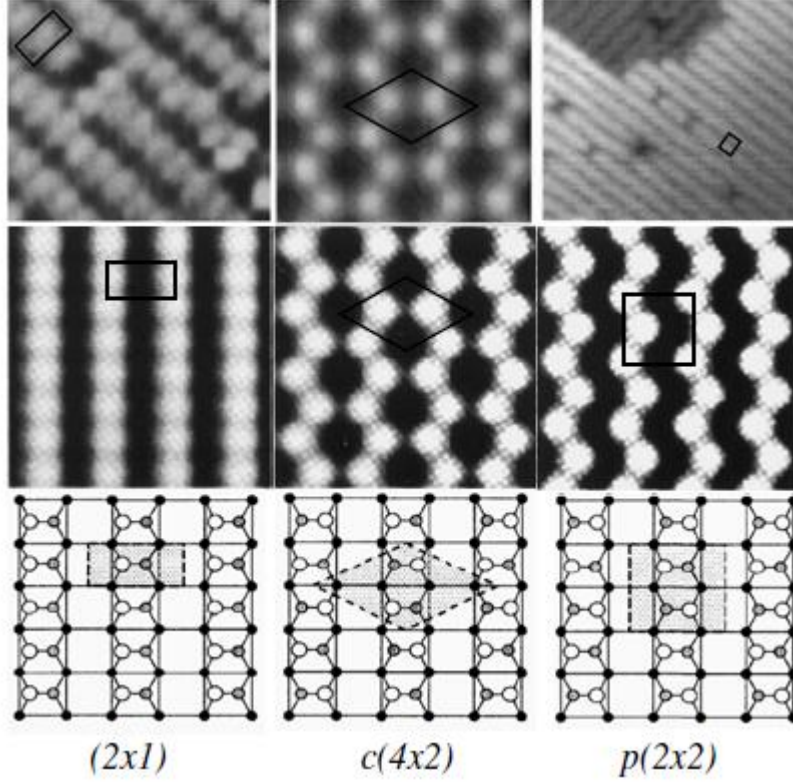
### 2.5.2. Si(100) yüzeyinin $c(4\times 2)\rightarrow(2\times 1)$ faz geçiři

Si(100) gibi düşük indeksli yüzeylerin faz diyagramları bazı çalışmaların temel kısmını oluştururlar. Bu düşük indeksli yüzeyler, yüzey metalizasyonu [32,33], rehibridizasyon [34,35] ve bağ kırılması [36] gibi önemli elektronik etkiler tarafından tetiklenen yapısal deęişimlerin gerekleřtięi eřitli faz geçiřleri gösterir.

Bu tür yarıiletkenlerin (001) yüzeyleri, en dıř katmandaki atomların iftler haline gelerek [001] doęrultusunda dimerler oluřturduęu  $(2\times 1)$  yüzeyleri tarafından karakterize edilirler. Bu tür yeniden yapılanma iin src kuvvet, ideal 3 boyutlu hacim-kesilmiş yüzeyin, yüzey atomu bařı iki sarkık baęın doldurulması iin baę oluřumudur.

İlk yeniden yapılanmada ierilen enerji ok yksektir ( $\sim 1,7$  eV). Yeniden yapılanma durumunda baę uzunlukları 3-boyutlu hacim (bulk) baę uzunluklarına gre ok deęiřmedięi iin bu yeniden yapılanma olduka kararlıdır [37]. Buna ek olarak, enerji azalması dimer bklmesi vasıtasıyla olur, bylece en st katmandaki 2 atom birbirine gre yksek ve dřk konumlara yerleřirler. Dřk sıcaklıkta, bitiřik dimerler birbirlerine gre zıt dimer ynelimlerine sahip olur ve birbirlerine paralel dimer sıraları ierisinde dzen alırlar. Bu yapı  $c(4\times 2)$  simetrisidir [38]. Dimerler uzaysal olarak birbirlerinden ayrı oldukları iini uzun erimli dzen biimindeki etkileřimler zayıftır ( $\sim 100$  meV). Bahsedilen enerji durumları gz nne alındıęında

gözlenen süperyapılar, sıcaklık ve yüzey hazırlama metotlarından kaynaklanan küçük enerji değişimlerine karşı hassastır.



Şekil 2.5. Si(100) yüzeyi için  $2 \times 1$ ,  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapılanmaları için STM fotoğrafları ile top-çubuk model birim hücre gösterimi [39].

Şekil 2.5. de Si(100) yüzeyindeki  $2 \times 1$ ,  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapılanması için STM görüntüleri ile top-çubuk model birim hücre görünüşleri yer almaktadır. STM görüntüleri simetrik ve antisimetrik dimerleri açık bir şekilde ayırt etmektedir.

### 3. ISING MODEL

Fizikteki en ilgi çekici olaylardan birisi manyetik sistemlerdeki faz geçişleridir. Fe ve Ni gibi bazı ferromanyetik malzemelerde atomların spinlerinin sonlu bir kısmı kendiliğinden aynı doğrultuda polarize olurlar ve bu durum makroskobik bir manyetik alan oluşmasına sebep olur. Ancak bu durum, Curie sıcaklığı adı verine karakteristik sıcaklıktan daha küçük sıcaklık değerleri için geçerlidir. Curie sıcaklığından daha yüksek sıcaklıklarda spinler rastgele yönelim gösterirler ve bu durumda net bir manyetik alan oluşmaz. Curie sıcaklığına her iki taraftan yaklaşıldığında metalin özısı ve manyetik alınganlığı ıraksar.

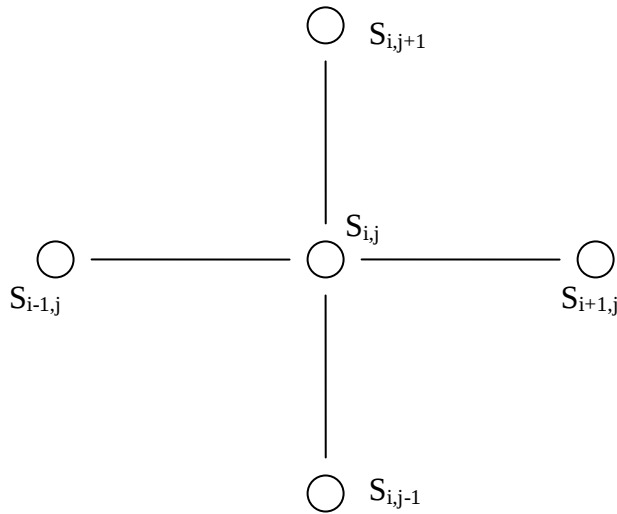
Ising Model, ferromanyetik malzemelerin fiziksel özelliklerini simüle etmede kullanılan basit bir modeldir. Bu varsayımın temel kaynağı, 2-boyutlu Ising modelin istatistik mekanikte tam olarak uygulanabilir olmasından kaynaklanmaktadır. Bu durum sadece faz geçişlerinin doğasını anlamada önemli olmayıp, aynı zamanda matematiksel kesinlikle uygulanabilir olması açısından önemlidir.

Ising modelde incelenen sistem örgü konumları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan n-boyutlu periyodik bir örgüdür. Eğer N adet spin varsa,  $2^N$  konfigürasyon elde edilir. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen, üç boyutta kübik veya hegzagonal olabilir. Her bir örgü konumuna +1 veya -1 değerlerinden birisini alabilen  $S_i$  ( $i=0, 1, 2, 3, \dots, N$ ) spin değişkeni yerleştirilmiştir. Sistemde bundan başka değişken yoktur. Eğer  $S_i +1$  ise i. konumdaki spinin yukarı durumda olduğu, -1 ise aşağı durumda olduğu söylenir. Verilen bir  $\{S_i\}$  kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirtmekte ve  $\{S_i\}$  ile belirtilen konfigürasyona sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$E_I = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.1)$$

Burada  $I$  alt indisi Ising enerjisi, spin-1/2 Ising model için, ilk toplamdaki  $\langle i,j \rangle$  en yakın komşu spin çiftleri üzerinden alınmaktadır. İki boyutta kare örgü için şekil-7' de gösterildiği gibi bir spin kendisine en yakın 4 komşu spine sahiptir.  $\langle i,j \rangle$  üzerinden alınan toplamda  $2N$  adet spin vardır.  $J_{ij}$  etkileşim enerjisi ve  $H$  dış manyetik alan sabitlerdir. İzotropik etkileşmelerin olduğu durumda  $J_{ij}=J$  alınmakta,  $J>0$  olduğu durum ferromanyetizmaya ve  $J<0$  durumu antiferromanyetizmaya karşılık gelmektedir.

Ising modelde, örgü noktalarında bulunan atom veya moleküllerin komşuları üzerine kısa erimli kuvvetler uyguladıkları ve özellikle, etkileşim enerjisinin sadece komşu gözlerin durumuna bağlı olduğu varsayılmaktadır. Örneğin, komşu spinler aynı olduğunda (dördü de +1 veya dördü de -1 ) enerji  $-J$ , komşu gözler farklı olduğunda enerji  $+J$  olmaktadır. Diğer bir deyişle, etkileşim komşu spinleri aynı duruma getirme eğilimindedir [40].

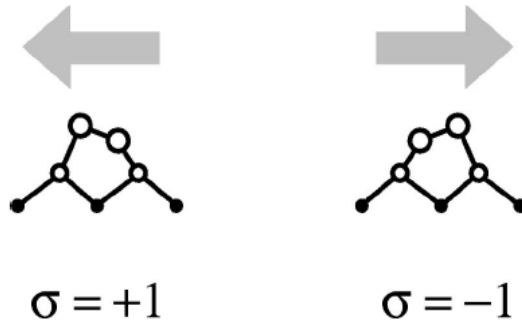


Şekil 3.1. İki-boyutlu kare örgüler için en yakın komşu spinler

### 3.1. Si(100) ve Ising Model Benzeşimi

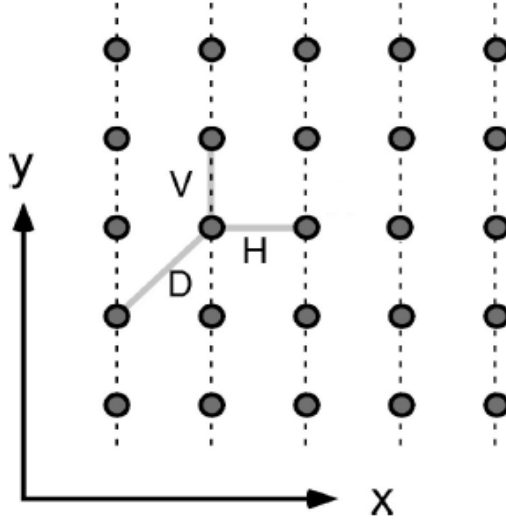
Günümüze kadar yapılan verimli teorik ve deneysel çalışmalar Silisyum ve Germanyum (001) yüzeyleri zayıf uzun erimli düzen ile birlikte oldukça güçlü kısa erimli yeniden yapılanma ile karakterize edildiğini göstermişlerdir. Deneysel ve

teorik çalışmalar, temel yeniden yapılanma mekanizmasının bükük yani antisimetrik dimerlerin düzeninde meydana geldiği ve bükük dimerlerin mümkün iki durumunda sıcaklıkla aktive olan “flip-flop” hareketleri sonucu oda sıcaklığında ( $2 \times 1$ ) yapısında olduğunu göstermiştir. Yüksek sıcaklıklarda yüzeye hakim  $2 \times 1$  yapısı 200 K altında  $c(4 \times 2)$  yapısına dönüşmektedir. Düşük sıcaklık yapısı antisimetrik dimerlerin fazdışı yapılanması sonucu oluşmaktadır. Bu dönüşüm dimer bükülmelerine göre düzen/düzensizlik faz geçişi olarak adlandırılır ve faz geçiş doğasını Ising spin model vasıtasıyla karakterize etmek mümkündür. Bu yaklaşımda kusur yoğunluğu ve bağ sağlamlığı vb. gibi bazı kimyasal özellikleri ihmal edilerek, faz geçiş doğası incelenebilir [38].



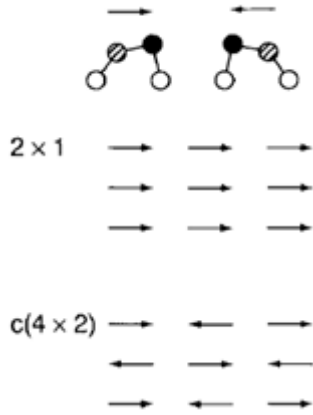
Şekil 3.2. Dimer yönelimi ve Ising spini arasındaki ilişki [29].

Si(100) yüzeyinin dinamik özellikleri, antisimetrik dimerlerin Ising spini olarak varsayıldığı Ising model ile başarılı bir şekilde incelenmektedir. Şekil-3 de görüldüğü gibi antisimetrik dimerlerin üzerindeki oklar spin yönelimlerini göstermektedir ( $S = \pm 1$ ). Spinler kare örgü üzerinde bulunmaktadır ve aralarındaki V, H ve D temel etkileşim parametreleri Şekil 3.2’ de gösterilmiştir. Spinlerin etkileşimleri spin-1/2 Ising Hamiltonyeni ile gösterilebilir. Farklı yapılanmaların yüzey toplam enerjileri kullanılarak, spin Hamiltonyenindeki etkileşim parametreleri elde edilir.



Şekil 3.3. Si(100) yüzeyindeki etkileşimleri tanımlayan temel etkileşme parametreleri [29].

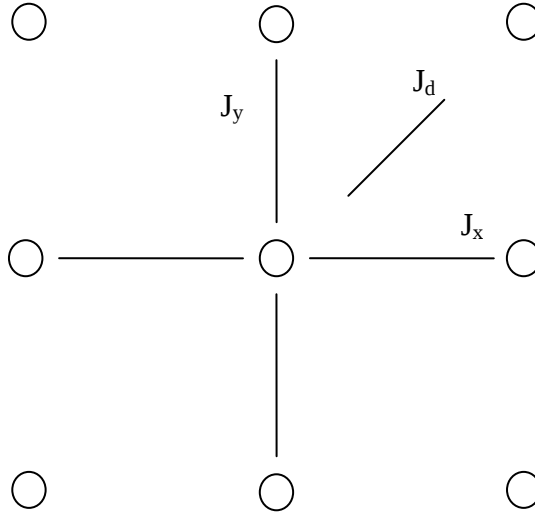
Si(100) yüzeyi Ihm ve arkadaşları tarafından [3], sonlu sıcaklıklarda asimetric düzeni toplam enerji ve renormalizasyon grup yaklaşımını kullanarak incelenmiştir. Asimetric dimerlerin mümkün iki yönelimi spin olarak gösterilmiş ve enerji farkları etkileşme parametreleri setleri olarak ifade edilmiştir. Sonuç olarak  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapılanmalarının,  $2 \times 1$  yapılanmasından düşük ve birbirleriyle yaklaşık enerjilere sahip oldukları bulunmuştur. Bunun yanı sıra, ikinci dereceden faz geçişinin 250 K civarında gerçekleştiği ve düzensiz “paramanyetik” düzenin yüksek sıcaklık fazı olduğu gösterilmiştir. Daha sonraki çalışmada Saxena [41] ve arkadaşları antiferromagnetik  $p(2 \times 2)$  ve paramanyetik  $2 \times 1$  yapıları arasında yapısal faz geçişinin 250 K sıcaklığında gerçekleştiğini Monte Carlo simülasyonunu kullanarak göstermişlerdir. 1994 yılında Inoue ve arkadaşları  $c(4 \times 2)$  yapısının Si(100) yüzeyinin taban durumu olduğunu göstermiş ve Monte Carlo simülasyonları ile elde edilen 320 K’lik faz geçiş sıcaklığının deneysel gözlemlerden farklılığının yüzey ( $\sim 1\%$ ) kusurlarına bağlı olabileceğini önermişlerdir [1].



Şekil 3.4.  $2 \times 1$  ve  $c(4 \times 2)$  durumunu tanımlayan antisimetrik dimer düzeni.

Pillay (2004), tarafından teorik çalışmalar sonucu elde edilen faz geçiş sıcaklıklarının birbirlerinden oldukça farklı çıkma sebebinin, Hamiltonyendeki eksikliklerden kaynaklanabileceğini öne sürmüşlerdir [2]. Bu çalışmada alt yüzey katmanlarındaki stresin, dimer sütunu üzerindeki ardışık dimerlerin aynı yönde yöneliminden kaynaklandığı düşünülmüş ve bu durum, Hamiltonyende dikey doğrultuda ek terimler tanımlanarak giderilmiştir. LDA ve GGA hesaplamalarından elde edilen parametre setleri için faz geçiş sıcaklıkları, Monte Carlo simülasyonları vasıtasıyla  $T_c(\text{LDA})=340$  K ve  $T_c(\text{GGA})=300$  K olarak elde edilmiştir. Hamiltonyene ek terimler ilave edildikten sonra yapılan hesaplamalar sonucu ise faz geçiş sıcaklıkları  $T_c(\text{LDA})=200$  K ve  $T_c(\text{GGA})=170$  K olarak belirlenmiştir.

Ising modelde, etkileşmelerin izotropik olmayıp, yönetime bağlı olduğu durum da mevcuttur. Bu durum anizotropik Ising model çerçevesinde incelenir. Anizotropik Ising modelde, bir spin kendisine en yakın yatay, dikey ve diagonal doğrultudaki spinlerle farklı miktarlarda etkileşir.



Şekil 3.5. İkinci en yakın komşu Anizotropik etkileşmeli kare örgü için komşu spinler.

Anizotropi, malzemelerin sahip oldukları fiziksel özelliklerin yönelime bağlı olma durumudur. İzotropik durumda olduğu gibi her doğrultuda benzer özellikler görülmez. En çok karşılaşılan anizotropi türleri arasında yapısal ve manyetik anizotropi bulunur. Kristal yapı malzemelerde, mıknatıslanmanın dış manyetik alan altında gösterdiği davranış uzaysal bağımlılık gösterir. Manyetik davranış, yüzey ve bulk için farklı yapıdadır. Yüzeyin varlığı, manyetik domain varlığını ve spin yönelimleri gibi manyetik özellikleri etkiler. Bu durum yüzeyde simetrinin düşük oluşundan ve yüzey atomlarının bulk' a göre daha az bağ yapmasından kaynaklanır. Örnek olarak demirde,  $\{100\}$  yönelimi boyunca mıknatıslanmayı yönlendirmek için,  $\{110\}$  ve  $\{111\}$  yönelimleri için gerekenden daha düşük manyetik alan gereklidir. Bu yüzden  $\{100\}$  yönelimine, manyetizasyonun “temel eksen (easy axis)” denir. Yüzey yönelimlerine bağlı olarak anizotropi, yüzeye paralel veya dik olabilir. Manyetik materyallerin çoğunda, anizotropinin ana kaynağı rölativistik spin-yörünge çiftlenimi elektrostatik kristal alan etkileşmesi içeren manyetokristal anizotropisidir (Bloch ve Gentile, 1931). Manyetizasyon vektörünün anizotropik davranışı, bulk ve yüzey manyetizasyonunun temel konusudur. Bunun sebebi, manyetik anizotropinin, teknolojik uygulamalarda oldukça önemli bir yer tutmasıdır. Manyetizasyonun anizotropik özelliği, manyetik veri saklama teknolojisi için oldukça önemli bir yer tutmaktadır.

### 3.2. Si(100) Yüzeyi ve Anizotropik Ising Model

Nanoyapılarda ve manyetik ince filmlerde anizotropik katkı yüzey ve arayüzey anizotropisidir. Yüzey ve arayüzeylerde ortaya çıkan en önemli koşullardan birisi düşük simetridir. Ancak bu koşul tek başına yeterli değildir; bu konuda sahip olunan genel kanının aksine yüzeyde kendiliğinden ortaya çıkan normal anizotropi gibi bir durum söz konusu değildir. Diğer anizotropiler gibi, bu durum da kristal alan teorisi kurallarına uyar; anizotropinin simetrisi ve kuvvetliliği, kristal alan etkileşmesi ile spin-yörünge etkileşmesi arasındaki etkileşim tarafından belirlenir. Kristal alan teorisinin temelleri 1930' larda Bethe ve Van Vleck tarafından atılmıştır. Kristal alan teorisi, geçiş metallerinin ve bunların birbirleriyle oluşturdukları bileşik komplekslerin manyetik özelliklerini, renklerinin oluşum sebeplerini ve spin yapılarını incelemekte, fakat bağlanmalarını incelememektedir. Anizotropinin kuvvetliliği hem de yönelimi yüzeylerin periyodikliğine bağlıdır. Burada oldukça önemli nokta, kübik malzemelerde yüzey anizotropisinin, bulk anizotropisine kolaylıkla baskın gelmesidir.

Si(100) yüzeyi incelendiğinde, dimerlerin kendilerine en yakın yatay, dikey ve diagonal doğrultudaki dimerler ile farklı miktarlarda etkileştikleri, etkileşimlerinin anizotropik olduğu yapılan yoğunluk fonksiyonu hesaplamalarıyla gösterilmiştir (Şekil 3.3).

Si(100) yüzeyinin antisimetrik dimer yapısı, dimerlerin  $S_{i,j} = \pm 1$  olmak üzere iki mümkün yönelime sahip olduğu spin-1/2 Ising model çerçevesinde incelenebilir. Si(100) yüzeyindeki dimerler arası etkileşmeyi tanımlayabilecek en basit Ising Hamiltonyen aşağıda verilmektedir (Denklem 3.2).

$$H = V \sum_{ij} s_{i,j} s_{i,j+1} + H \sum_{ij} s_i s_{i+1,j} + D \sum_{ij} s_{i,j} (s_{i+1} s_{j+1} + s_{i+1} s_{j-1}) \quad (3.2)$$

Burada  $S_{i,j}$ , i. dimer sütunundaki j. dimerdir. Hamiltonyendeki V ve H parametresi dikey ve yatay en yakın komşu etkileşmeleri, D parametresi ise ardışık iki dimer

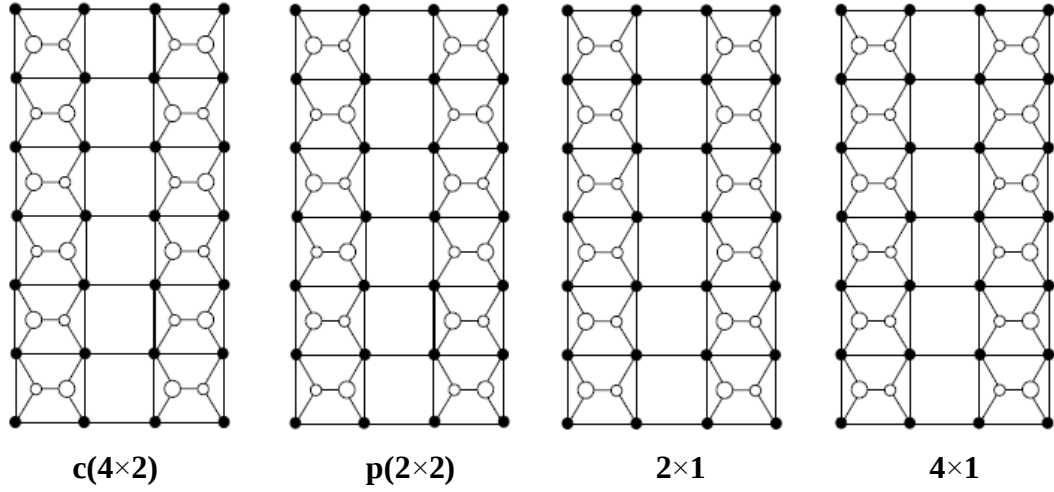
sütunu arasındaki diagonal etkileşimleri kontrol eder. Büyük V değerleri bir dimer sütunu boyunca antisimetrik dimerlerin birbirlerine alternatif olarak yönelmelerini kontrol eder. Si(100) yüzeyinin temel etkileşim parametreleri, 4 farklı yüzey yapılanmasının ( $2\times 1$ ,  $c(4\times 2)$ ,  $p(2\times 2)$  ve  $4\times 1$ ) toplam enerji hesaplamalarından elde edilmektedir. Çizelge 3.1’ de yapılan teorik çalışmalar sonucu elde edilen parametre setleri görülmektedir. Aşağıda, yüzeydeki etkileşimleri belirleyen parametrelerin elde edilme yöntemi anlatılmaktadır.

Çizelge 3.1. Si(100) yüzeyi için yapılan teorik çalışmalar için elde edilen etkileşim parametreleri.

|   | Inoue [1]<br>(meV) | Ihm [3]<br>(meV) | Pillay [2]<br>(LDA)<br>(meV) | Pillay [2]<br>(GGA)<br>(meV) |
|---|--------------------|------------------|------------------------------|------------------------------|
| V | 51.9               | 26               | 37.2                         | 44.5                         |
| H | -6.6               | -10              | -6.4                         | -7.5                         |
| D | -3.6               | -4               | -4.2                         | -4.1                         |

### 3.3. Etkileşim Parametrelerinin Tespiti

Si(100) yüzeyinin dinamik özellikleri, antisimetrik dimerlerin Ising spin olarak varsayıldığı Ising model ile başarılı bir şekilde incelenmektedir. Şekil-3.4 de görüldüğü gibi antisimetrik dimerlerin üzerindeki oklar spin yönelimlerini göstermektedir ( $S = \pm 1$ ) [8]. Buna göre Si(100) yüzeyinin temel yapılanmaları Ising spin model çerçevesinde Şekil 3.6’ daki gibi gösterilebilir.

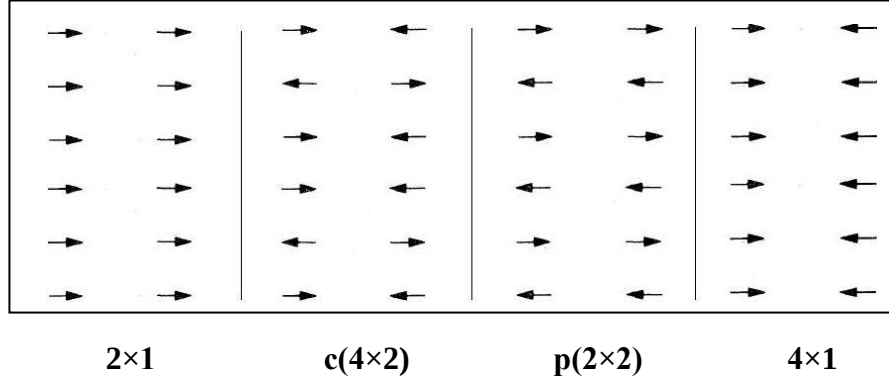


Şekil 3.6. Si(100) yüzeyi temel yapılanmalarının top-çubuk model ile gösterimi [2].

Kusursuz yüzey için V, H ve D etkileşmelerini içeren Ising spin Hamiltonian 'nini, aşağıdaki gibi yazmak mümkündür [29].

$$H = V \sum_{\langle i,j \rangle} s_{i,j} s_{i,j+1} + H \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_{i+1,j} + D \sum_{\langle i,j \rangle} s_{i,j} (s_{i+1} s_{j+1} + s_{i+1} s_{j-1}) \quad (3.3)$$

Bu ifadedeki V, H ve D etkileşim parametrelerini, Si(100) yüzeyinin 4 temel yapılanması için ab-initio olarak yapılan toplam enerji hesaplamaları ile elde etmek mümkündür. Bu hesaplamalarda genel olarak yoğunluk fonksiyon teorisini temel alan CASTEP, VASP ve GAUSSIAN gibi paket programlar kullanılmaktadır. Şekil 3.6' da 4 temel yapılanmanın [100] düzlemleri görülmektedir [8]. Bu 4 farklı yüzey yapılanmaları için hesaplanan toplam enerji değerleri ( $E_{c(4 \times 2)}$ ,  $E_{p(2 \times 2)}$ ,  $E_{(2 \times 1)}$  ve  $E_{(4 \times 1)}$ ), bu yüzeyler için Ising spin Hamiltonian'ından oluşturulan parametre denklemlerinde (Eş. 3.4-3.7) yerine yazılarak, V, H ve D etkileşim parametrelerini bulmak için kullanılmaktadırlar [2]. (4×6) süper örgüsü için Eşitlik 3.3 kullanılarak elde edilen, V, H ve D parametrelerine bağlı yüzey toplam enerji ifadeleri ile verilmektedir.



Şekil 3.7. Si(100) yüzeyinin toplam enerji hesaplamaları yapılan 4 temel yapılanmasının Ising Spin modeli gösterimi [3].

$$E_{c(4 \times 2)} = -12C_V - 12C_H + 24C_D \quad (3.4)$$

$$E_{p(2 \times 2)} = -12C_V + 12C_H - 24C_D \quad (3.5)$$

$$E_{(2 \times 1)} = +12C_V + 12C_H + 24C_D \quad (3.6)$$

$$E_{(4 \times 1)} = +12C_V - 12C_H - 24C_D \quad (3.7)$$

Etkileşim parametreleri elde edildikten sonra, yüzey yapılanmalarının sıcaklığa bağlı değişimlerini Ising model temel alınarak oluşturulan algoritmalar ile incelemek mümkündür. Bu amaçla yapılan simülasyonlar sonlu  $L_x \times L_y$  dikdörtgen örgülerde ve sonlu zaman adımları için gerçekleştirilmektedir. Diğer taraftan, yüzey yapılanmaları arası faz geçiş sıcaklıkları düzen parametresi, alınganlık, öz ısı ve iç enerji gibi termodinamik niceliklerinin kritik sıcaklık gösterdikleri süreksizliklerden tespit edilebilmektedir.

Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar,  $E_I$  enerjili mümkün konfigürasyonlar üzerinden hesaplanmaktadır.  $E_I$  enerjili bir sistemin ağırlık fonksiyonu aşağıdaki gibidir (Eşitlik 3.8).

$$Z_I(H, T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \cdots \sum_{s_N} e^{-\beta E_I(s_I)} \quad (3.8)$$

Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir (Eşitlik 3.9).

$$f(H, T) = -kTN^{-1} \log Z_I(H, T) \quad (3.9)$$

Bu serbest enerjiye bağlı olarak termodinamik nicelikler aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$U_I(H, T) = -kT^2 \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left( \frac{f}{kT} \right) \quad (3.10)$$

$$C_I(H, T) = \frac{\partial U_I}{\partial T} \quad (3.11)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left( \frac{f}{kT} \right) \quad (3.12)$$

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (3.13)$$

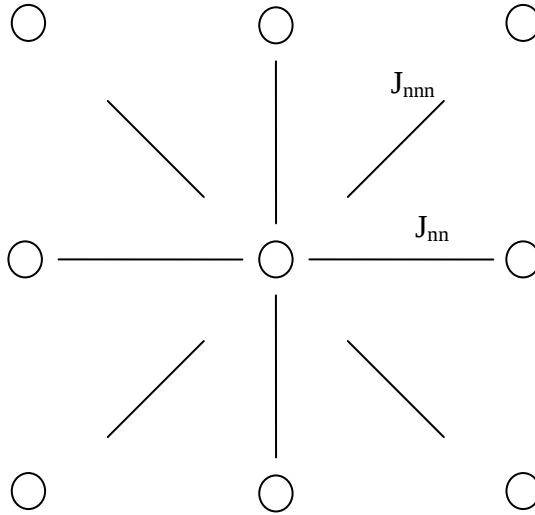
Burada  $U_I$  içenerji,  $C_I$  özısı,  $M$  düzen parametresi ve  $\chi$  manyetik alınganlıktır. Dış alan  $H=0$  olduğu durumda  $M(0, T)$  niceliği kendiliğinden mıknatıslanma veya düzen parametresi olarak adlandırılmaktadır. Aynı zamanda manyetizasyon, yukarı yönde yönelmiş spinlerin sayısının aşağı yönde yönelmiş spin sayısının farkının spin başına aldığı değerdir. Ferromanyetik sistemlerde  $T < T_c$  bölgesinde  $M(0, T)$  sıfırdan farklıdır. Kendiliğinden magnetizasyon  $T \rightarrow T_c$  durumunda azalır ve kritik sıcaklık  $T = T_c \approx 2,69$  J [42] durumunda ortadan kalkar. Yüksek sıcaklıklarda spinler küçük bölgeler içerisinde kısa-erimli düzen durumunda bulunurlar. Bu durumda kendiliğinden manyetizasyon gözlenmez.

### 3.4.İkinci Derece En Yakın Komşu Etkileşmeli Ising Model

Si(100) yüzeyi üzerine yapılan deneysel ve teorik çalışmalar, diagonal etkileşmelerin varlığını ortaya koymaktadır. Bu nedenle yüzeyi tanımlayan Hamiltonyen, ikinci derece en yakın komşu etkileşmeli Ising model çerçevesinde incelenmelidir. İkinci derece en yakın komşu etkileşmeli Ising model Hamiltonyeni [43],  $S = \pm 1$  olmak üzere;

$$H = J_{nn} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J_{nnn} \sum_{\langle i,k \rangle} S_i S_k \quad (3.14)$$

Burada ilk toplam en yakın komşu çiftler üzerinden, ikinci toplam ise en yakın ikinci derece komşu çiftler üzerinden alınmaktadır. İkinci en yakın komşu etkileşme, seçilen spinin kendisine en yakın ikinci komşu spinle, yani diagonal doğrultusundaki spinlere karşılık gelmektedir (Şekil 3.6).



Şekil 3.8. Kare örgüde bir spinin birinci ve ikinci derece en yakın komşuları

#### 4. CELLULAR AUTOMATA

Fizikte, niceliklerin zamanla gelişimleri, lineer olmayan kısmi diferensiyel denklemler tarafından kontrol edilir. Bu lineer olmayan davranıştan dolayı, bu tarz dinamik sistemlerin çözümleri oldukça zordur. Özellikle, bu denklemlerin çözümleri kaotik davranışa sebep olan başlangıç koşullarına ciddi şekilde bağlıdır. Benzer kompleks durumlar ayrık dinamik sistemlerde gerçekleşebilir. Cellular Automata temelli modeller dinamik sistemlerin özelliklerinin anlaşılması amacıyla geliştirilmiş alternatif bir yöntemdir. Basitliğinden dolayı, potansiyel olarak sürekli sistemlerden daha kolay analiz edilirler.

Cellular Automata fiziksel sistemler için oluşturulmuş matematiksel bir modeldir. Cellular Automata, uzay ve zamanın kesikli olduğu, fiziksel niceliklerin sonlu değerler setine sahip olduğu bir idealizasyon yöntemidir. Bu durum, CA' yı geleneksel modellerden farklı bir yapıya sokmaktadır. CA' da uzay düzenli hücrelerden meydana gelir ve sonsuza kadar uzanır. Bu hücreler birkaç bitlik bilgi içerir. Zaman, kesikli adımlarda gelişir. Bir hücrenin bir zaman gelişimi sonundaki durumu, bir önceki zaman adımında kendisi ve komşuları tarafından belirlenir. Bu bakımdan, sistemin kuralları bölgesel ve düzgündür.

Cellular Automata ilk olarak 1950 yılında Neumann tarafından biyolojik sistemlerin kendiliğinden çoğalmasının basit bir modeli olarak sunulmuştur. Bu model, oldukça basit bölgesel etkileşimleri içermekteydi. Matematik ve bilgisayar bilimlerine adapte edilmiş bol miktarda oldukça fazla teorik çalışma yapılmış olsa da, başta fizik olmak üzere biyoloji, kimya, jeoloji ve biyokimya gibi araştırma alanlarında oldukça fazla uygulamaya sahiptir. CA ile modellenen birçok sistem içerisinde “dendritik” kristallerin büyümeleri [44], HIV virüsünün dinamiği [45], DNA [46] gelişimi gibi birçok spesifik örnek yer alır. Herhangi bir fiziksel sistem CA ile modellenirken;

- i. Sistemin yapısına uygun düzenli örgü seçilmelidir. Bu iki boyutta kare veya üçgen, üç boyutta kübik örgü olabilir.

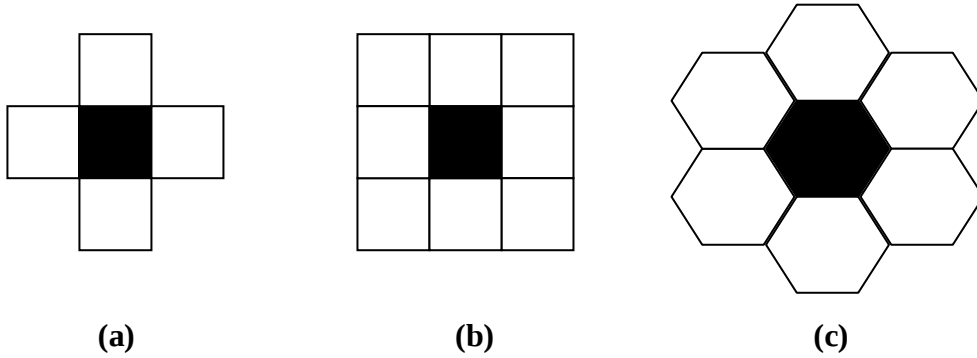
- ii. Örgüyü oluşturan hücrelerin sahip olabileceği hallere karşılık gelen değişken veya değişkenler belirlenir.
- iii. Hücrelerin birbirleriyle etkileşmelerini ve gelişimini sağlayan bölgesel kural belirlenir. Her birim zamanda, her hücrenin durumu, belirlenen kurala bağlı olarak kendisi ve komşularının etkileşmeleriyle belirlenir.

CA fiziksel sistemler için oluşturulmuş matematiksel bir modeldir. Bu model için ilk temel teoriler Wolfram tarafından verilmiştir [7,8]. Bölgesel iç etkileşmeye sahip çok sayıda farklı eleman içeren fiziksel sistemler sık sık “cellular automaton (CA)” olarak modellenmiştir. Bir diferensiyel denklemi sağlayan herhangi bir fiziksel sisteme, kesikli değişkenler ve sonlu farklar kullanılarak bir cellular automaton olarak yaklaşılabilmektedir. En belirgin durumlarda “CA” örgüsü konum uzayındadır. Mikroskobik seviyede her bir konum kristal örgüdeki kuantize ölçülebilirler (spin gibi) veya atom tiplerine karşılık gelen noktaları temsil edebilir. Bu yüzden dinamik Ising model ve diğer örgü spin sistemleri basit bir “cellular automaton” dur. Daha genel olarak makroskobik seviyede bir “cellular automaton” da her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri mümkün birkaç farklı faza karşılık gelebilir. Ising modelin ve çeşitli fiziksel problemlerin bir cellular automaton olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiş ve iki boyutlu kare örgüler için komşuluktaki hücrelerin sayısına ve konumuna bağlı olarak birçok “cellular automaton” kuralı olarak isimlendirilmiştir [9]. Vichniac’ın Ising model için önerdiği kural Pomeau ve Herrman tarafından “Q2R” cellular automaton olarak geliştirilmiştir [10,11]. Q2R algoritmasında spin-spin etkileşme enerjisi (Ising enerji veya iç enerji) sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Q2R algoritması ile toplam enerjinin korunduğu mikrokantonik bir küme oluşmakta, yani simülasyon süresince herhangi bir spin değişiminde iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. İç enerji simülasyon süresince sabit kaldığından iç enerjinin dalgalanmalarından özısı hesaplanamamaktadır [48]. Bu kısıtlama, iç enerji ve spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamının korunduğu “Creutz cellular automaton” ile ortadan kalkmıştır [12].

Creutz algoritmasında herhangi bir spin değişimi sonunda Ising enerji ve kinetik enerji birlikte değişmekte, ancak toplam enerji sabit kalmaktadır. Bunun sonucu olarak, Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlardan iç enerjiye bağlı olarak termodinamik nicelikleri hesaplamak mümkün olabilmektedir. Diğer taraftan, değişkenler tamsayı değerler aldığından ve rastgele sayı üretici kullanılmadığından, hesaplama hızı yaygın olarak kullanılan Monte Carlo yöntemlerinden 10 kat daha yüksektir [12].

#### 4.1. İki-Boyutlu Cellular Automata Kuralları

İki boyutlu “cellular automaton” lar için kurallar, göz önüne alınan hücrenin bir önceki zaman adımındaki komşu hücrelerinin etkileşme şekline ve etkileşmeye giren hücrelerin pozisyonlarına bağlı olarak değişmektedir. İki boyutlu basit kare örgülerde iki farklı komşuluk cinsi vardır.



Şekil 4.1. İki-boyutlu Cellular Automata'da, a) Von Neumann, b) Moore ve c) Hegzagonal komşuluklar.

Şekilde iki-boyutlu cellular automata için komşuluklar görülmektedir. (a)' da görülen von Neumann komşuluğudur. Merkezî hücre, yatay ve dikey olarak 4 adet kendisine en yakın komşuya sahiptir. (b)' de görülen ise Moore komşuluğudur. Von Neumann komşuluğundaki durumun yanında, diagonal doğrultuda kendisine en yakın 2. komşulukları da içerir. Yani toplam 8 komşuluğu bulunmaktadır. (c)' de görülen hegzagonal (altıgen) komşuluk ise, altıgen bütün kenarlarında komşulara sahiptir.

İki boyutlu “cellular automaton” kurallarında, bir boyutlu “cellular automaton” lar da olduğu gibi herhangi bir merkezî  $a_{ij}$  hücresinin bir sonraki zaman adımındaki değeri,

ona en yakın komşu hücrelerinin değerlerinin fonksiyonu olarak ifade edilmektedir [48]. Örneğin Moore komşuluklu cellular automaton' da kurallar aşağıdaki gibi en yakın komşuların fonksiyonu olarak yazılmaktadır.

$$a_{i,j}^{t+1} = f(a_{i,j}^t, a_{i,j-1}^t, a_{i,j+1}^t, a_{i-1,j}^t, a_{i+1,j}^t) \quad (4.1)$$

Eğer iki boyutlu cellular automaton' larda hücreler iki hale sahipse (0,1) gibi von Neumann komşuluğuna sahip cellular automatonlar için genel olarak  $2^{32} \approx 4 \times 10^9$  ve Moore komşuluklu cellular automatonlar için  $2^{512} \approx 10^{154}$  farklı kural mümkün olmaktadır. İki boyutlu cellular automaton kuralları komşuluktaki hücre sayısına bağlı olarak Wolfram tarafından sınırlandırılmış [48], ve komşuluktaki hücrelerin pozisyonuna bağlı olarak Vichniac tarafından isimlendirilmiştir [9]. Bu kurallara basit örnek olarak, merkezi hücre değişkeninin (t+1). Zaman adımıdaki değerinin, t. zaman adımıdaki birinci derece en yakın 4 komşu hücre değerinin mod 2 toplamıyla elde edildiği bir kural yazmak mümkündür.

$$a_{i,j}^{t+1} = a_{i,j}^t + a_{i,j-1}^t + a_{i,j+1}^t + a_{i-1,j}^t + a_{i+1,j}^t \pmod{2} \quad (4.2)$$

#### 4.2. Cellular Automaton Ising Algoritması

Bu modelde, ( $L_x \times L_y$ ) dikdörtgen örgüdeki her bir hücreye üç adet değişken karşılık getirilmekte ve bir hücredeki değişkenlerin alacağı değer bir önceki zaman adımıdaki kendi değeri ile ona en yakın komşularındaki değişkenlerin değerlerinden aşağıda verilen kurala göre tayin edilmektedir. Bu modeldeki üç adet değişkenden ilki,  $B_i$  Ising spinidir. "0" veya "1" değerlerini alabilir.  $S_i = 2B_i - 1$  olmak üzere,  $S_i(100)$  yüzeyi için Ising spin enerjisi  $H_I$  aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır[49-54].

$$H = V \sum_{ij} s_{i,j} s_{i,j+1} + H \sum_{ij} s_i s_{i+1,j} + D \sum_{ij} s_{i,j} (s_{i+1,j+1} + s_{i+1,j-1}) \quad (4.3)$$

Burada,  $ij$  bütün en yakın komşu hücre çiftleri üzerinden alınan toplamı göstermektedir. Burada  $V$ ,  $H$  ve  $D$ , Si(100) yüzeyindeki sırasıyla dikey, yatay ve diagonal doğrultularda dimerlerin birbirleriyle etkileşmelerini kontrol eden etkileşme parametreleridir. Her bir hücredeki ikinci değişken spine eşlik eden momentuma (demon) karşılık gelmektedir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji  $H_K$ ,  $(0,m)$  aralığında herhenagi bir spin değişimi için Ising enerjideki değişime eşit olan bir tamsayı değer almalıdır. Kinetik enerji bu değerleri aldığı anda, bir spin değişiminde Ising enerjide oluşan maksimum enerji değişimi hesaplanabilmektedir. Bu sebepten dolayı, sistemin toplam enerjisi  $H$ ;

$$H = H_I + H_K \quad (4.4)$$

Tüm simülasyon süresince korunmaktadır. Üçüncü değişken ise “cellular automaton” un zamanla dama tahtası üzerinde gelişimini sağlamakta ve böylece Ising modelin “CA” ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Diagonal etkileşmeler göz önüne alındığından 9 zaman adımında örgü tam olarak taranmaktadır.

İlk adımda konfigürasyon belirlenerek, yüksek enerjili durum oluşturulduktan sonra spin değişimine karar verilecektir. Bu aşamada spin konfigürasyonunun  $t$  zamanındaki  $H_I^t$  Ising enerjisi hesaplanır. Daha sonra Ising enerjisindeki değişimi,  $dH_I$ , hesaplanır. Ising enerjideki değişim bu hücrelerin momentum değişkenine akatarılabilecek veya momentum değişkeninde alınabilecek değere sahip ise spin dönüşümü sağlanır. Bunun spin çevrilmesi sonucunda değişime bağlı olarak momentum da değişir. Eğer bu koşul sağlanmıyorsa konfigürasyon reddedilir ve yeni konfigürasyon denenir. Gelişim süresince dama tahtasının siyah ( $= 1$ ) hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza ( $= 0$ ) çevrilir; beyaz hücrelerin ise sadece rengi siyaha çevrilip bir sonraki zaman adımında kural uygulanacak duruma getirilir. Yani parite, değişimin sağlandığı göz için tersine çevrilmiş olur. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımında uygulanmaktadır ve gelişim süresince periyodik sınır

şartı uygulanmıştır [53]. Aşağıdaki eşitliklerde Ising enerji değişiminin hesaplanması görülmektedir [54].

$$H^t = H^{t+1} \quad (4.5)$$

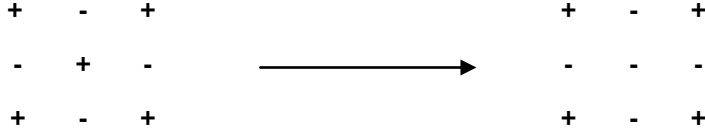
$$H_I^t + H_K^t = H_I^{t+1} + H_K^{t+1} \quad (4.6)$$

$$H_K^{t+1} = H_I^t - H_I^{t+1} + H_K^t \quad (4.7)$$

$$H_K^{t+1} = dH_I + H_K^t \quad (4.8)$$

Yapılan araştırmalar, Si(100) yüzeyinin  $2 \times 1$  simetri ailesinin 4 temel geometriye sahip olduğunu göstermektedir [3]. Bu yapılar yüksek sıcaklıkta  $4 \times 1$ , oda sıcaklığında  $2 \times 1$  ve düşük sıcaklıkta  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapılarıdır. Aynı zamanda  $c(4 \times 2)$  yapılanması birçok teorik ve deneysel çalışma tarafından Si(100) yüzeyinin taban durumu olarak belirlenmiştir. Buna karşılık  $c(4 \times 2)$  ile  $p(2 \times 2)$  yapılarının enerjileri birbirlerine oldukça yakındır. Aşağıda, bu yapılarda merkezi bir spinin ters-düz olması için gerekli kinetik enerji miktarları, taban durum şekillenimleri ile birlikte verilmiştir.

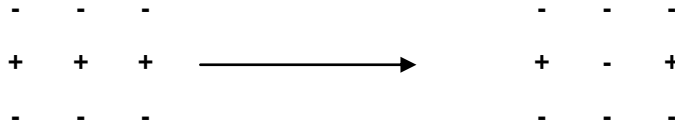
Aşağıda,  $c(4 \times 2)$ ,  $p(2 \times 2)$ ,  $2 \times 1$  ve  $4 \times 1$  yüzey yapılanmaları için Ising enerjideki değişim 4 parametre seti kullanılarak ve denklem 4.3' e göre hesaplanarak gösterilmiştir. Buna göre Si(100) yüzeyinin oda sıcaklığındaki fazı  $2 \times 1$  ve yüksek sıcaklıktaki fazı olan  $4 \times 1$  yapılanmaları kararlı değildir ve kendiliğinden bozulmaktadır. Buna karşılık düşük sıcaklık fazları olan  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yüzey yapılanmalarının kararlı durum sergiledikleri görülmektedir. Daha önce Si(100) yüzeyi için yapılan teorik ve deneysel çalışmalar da düşük sıcaklık fazlarını  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  olarak belirlenmiş ve  $c(4 \times 2)$  yapısının taban durum olduğu gözlemlenmiştir. Burada da,  $c(4 \times 2)$  durumu taban durum olarak belirlenmiştir.



Şekil 4.2.  $c(4 \times 2)$  yapılanmasında merkezi spinin bozulması

Çizelge 4.1. 4 farklı parametre seti için,  $c(4 \times 2)$  yapılanmasında merkezi spinin bozulması sonucu meydana gelen toplam enerji değişimi.

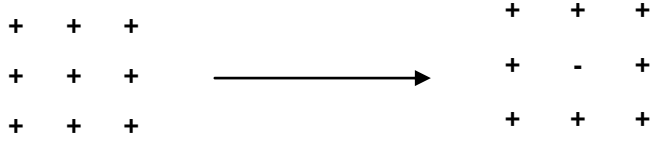
| Parametre Seti | $H_I$ | $H_I'$ | $dH_I$ |
|----------------|-------|--------|--------|
| Pillay-GGA     | -202  | 202    | -404   |
| Pillay-LDA     | -210  | 210    | -420   |
| Inoue          | -202  | 202    | -404   |
| İhm            | -184  | 184    | -368   |



Şekil 4.3.  $p(2 \times 2)$  yapılanmasında merkezi spinin bozulması

Çizelge 4.2. 4 farklı parametre seti için,  $p(2 \times 2)$  yapılanmasında merkezi spinin bozulması sonucu meydana gelen iç enerji değişimi.

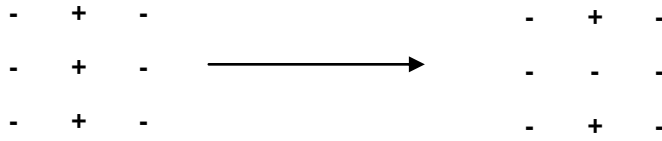
| Parametre Seti | $H_I$ | $H_I'$ | $dH_I$ |
|----------------|-------|--------|--------|
| Pillay-GGA     | -198  | 198    | -396   |
| Pillay-LDA     | -190  | 190    | -380   |
| Inoue          | -198  | 198    | -396   |
| İhm            | -216  | 216    | -432   |



Şekil 4.3. 2x1 yapılanmasında merkezi spinin bozulması

Çizelge 4.3. 4 farklı parametre seti için, (2×1) yapılanmasında merkezi spinin bozulması sonucu meydana gelen iç enerji değişimi.

| Parametre Seti | $H_I$ | $H_I'$ | $dH_I$ |
|----------------|-------|--------|--------|
| Pillay-GGA     | 130   | 130    | 260    |
| Pillay-LDA     | 122   | -122   | 244    |
| Inoue          | 146   | 146    | 292    |
| İhm            | 64    | -64    | 128    |



Şekil 4.4. 4x1 yapılanmasında merkezi spinin bozulması

Çizelge 4.4. 4 farklı parametre seti için, (4×1) yapılanmasında merkezi spinin bozulması sonucu meydana gelen iç enerji değişimi.

| Parametre Seti | $H_I$ | $H_I'$ | $dH_I$ |
|----------------|-------|--------|--------|
| Pillay-GGA     | 270   | -270   | 540    |
| Pillay-LDA     | 278   | -278   | 556    |
| Inoue          | 254   | -254   | 508    |
| İhm            | 336   | -336   | 672    |

Yukarıdaki çizelgeler incelendiğinde bir dimer için hesaplanan etkileşme enerjileri  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yüzey yapılanmaları için negatif,  $2 \times 1$  ve  $4 \times 1$  yüzey yapılanmaları için pozitif olduğu görülmektedir. Aynı zamanda bu durum,  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapılanmalarının taban durum olabileceğine işaret etmektedir. 4 parametre seti ele alındığında, 1hm parametre seti hariç diğer parametre setlerinde taban durum  $c(4 \times 2)$ ,  $p(2 \times 2)$  yapılanmasında daha düşük enerjili çıkmıştır.

#### 4.3. Creutz Cellular Automatonda Termodinamik Niceliklerin Hesabı

Cellular Automata toplam enerjinin korunumu altında mikrokanoniktir. Ancak kinetik enerji ve iç enerji açısından kanonik bir davranış sergilemektedir. Yani simülasyon süresince enerjiler dalgalanmaktadır. Sistemin toplam enerjisini elde etmek için, sistemin sıcaklığı kinetik enerji ortalama değerlerinden elde edilmektedir.

$$\langle E_i \rangle = \frac{\sum_{n=0}^m n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^m e^{-4n\beta}} \quad (4.9)$$

Bu formülde toplam, kinetik enerjinin değişim değerleri arasında alınmaktadır ve bu değer (m) bütün parametre değerleri için farklılık göstermektedir. Bu çalışmada  $E_i$ 'nin beklenen değeri, birim yüzey başına ve zaman adımı başına hesaplanıp, sıcaklık ise yukarıdaki ifade kullanılarak (birimsiz olarak)  $T=1/\beta$  eşitliğinden elde edilmiştir.

Termodinamik niceliklerin birim yüzey ve zaman adımı başına ortalama değerleri aşağıdaki gibidir (Eşitlik 4.10-13). Burada M yüzeyin antiferromagnetik düzen parametresi,  $\chi$  staggered alınganlık,  $H_I$  iç enerji ve C öz ısıdır. Taban durumunda yüzey antiferromagnetik yani  $c(4 \times 2)$  dir. Siyah hücreler S(+) beyaz hücreler S(-) dir. Staggered alınganlık (Eşitlik 4.11) ve öz ısı (Denklem 4.12), manyetizasyon ve içenerjideki dalgalanmalardan elde edilmektedirler.

$$M = \frac{1}{L_x \times L_y} \left[ \sum_{i=1}^N S_i(+) - \sum_{i=1}^N S_i(-) \right] \quad (4.10)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = L_x \times L_y \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (4.11)$$

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_I}{\partial T} = L_x \times L_y \frac{\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2}{(kT)^2} \quad (4.12)$$

$$H_I = -\frac{1}{L_x \times L_y} \left( V \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,j} S_{i,j+1} + H \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,j} S_{i+1,j} + D \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,j} (S_{i+1,j-1} + S_{i+1,j+1}) \right) \quad (4.13)$$

#### 4.4. Soğutma Algoritması:

Soğutma algoritması, başlangıç konfigürasyonu oluşturma ve sistemin zamanla gelişimi olmak üzere iki farklı adımdan oluşmaktadır [50-52]. Başlangıçta, kuralla uygun olarak örgü üzerindeki spinler mutlak sıfırda taban durumda sahip olduğu durumda alınır. İkinci adımda göz başına düzen kinetik enerji, taban durumun bozulmasına yetecek miktarda Ising enerjideki değişim miktarına eşit alınarak, ikinci değişken (demonlar) vasıtasıyla, sisteme verilir. Bu konfigürasyon 50.000 CA (Cellular Automaton) adımı için gerçekleştirilir. Böylece başlangıç konfigürasyonu oluşturulmuş olur. Soğutma işleminin ilk adımında, düzensiz yapıdaki son konfigürasyon başlangıç konfigürasyonu olarak alınır. Soğutma işlemi boyunca spin sisteminin enerjisi, ikinci değişken (demonlar) yardımıyla alınır ve bütün zaman adımı boyunca çalıştırılır. Demon tarafından  $H_K$  kinetik enerjili hücreden alınan enerji miktarı (soğutma hızı  $\times H_K$ ) kadardır. Yani bir zaman adımında sistemden toplam kinetik enerjinin  $1/40$ ' ı kadar kinetik enerji azaltılmıştır.

## 5. BULGULAR VE TARTIŞMA

Si(100) yüzeyindeki dimerlerin sıcaklığa bağlı davranışları şimdiye kadar birçok teorik ve deneysel çalışma ile incelenmiştir. Teorik olarak Monte Carlo [1-3], deneysel olarak STM [4,5] ve LEED [6] gibi tekniklerle yapılan gözlemler, Si(100) yüzeyinde oluşan yapısal faz geçiş için farklı değerler vermektedir. Deneysel olarak çalışmalar faz geçiş sıcaklığı 200 K civarında tespit edilirken, farklı parametre setleri ve MCRG ile Metropolis algoritmaları kullanılarak yapılan Monte Carlo simülasyonları sonucunda  $(2 \times 1) \rightarrow c(4 \times 2)$  yapısal faz geçişi için elde edilen kritik sıcaklık değerleri ise 250 - 340 K aralığında değişmektedir.. Bu sonuçlardan, parametre farklılığının kritik davranışı etkilediği anlaşılmaktadır. Deneysel ve Teorik sonuçlar arasındaki farkın yanı sıra, teorik sonuçlar arasında da ortaya çıkan farklar, faz geçişinin alternatif simülasyon teknikleri kullanılarak incelenmesi gerekliliğini ortaya koymaktadır. Bu nedenle bu tez kapsamında Si(100) yüzeyinde oluşan tersinir  $2 \times 1 \leftrightarrow c(4 \times 2)$  faz geçişi için daha önce elde edilmiş parametre setleri kullanılarak, Monte Carlo simülasyon yöntemine alternatif bir teknik olan Cellular Automaton ile incelenmiştir. Çalışmada ilk olarak, sonlu örgülerin geometri etkisinin kritik davranışa etkisi tespit edilmiştir. Ayrıca, deneysel yöntemlerin  $2 \times 1$  için ortaya koyduğu simetrik görünüş, dimerlerin ters-düz olma oranlarıyla ilişkilendirilerek STM görüntüleri elde edilmiştir.

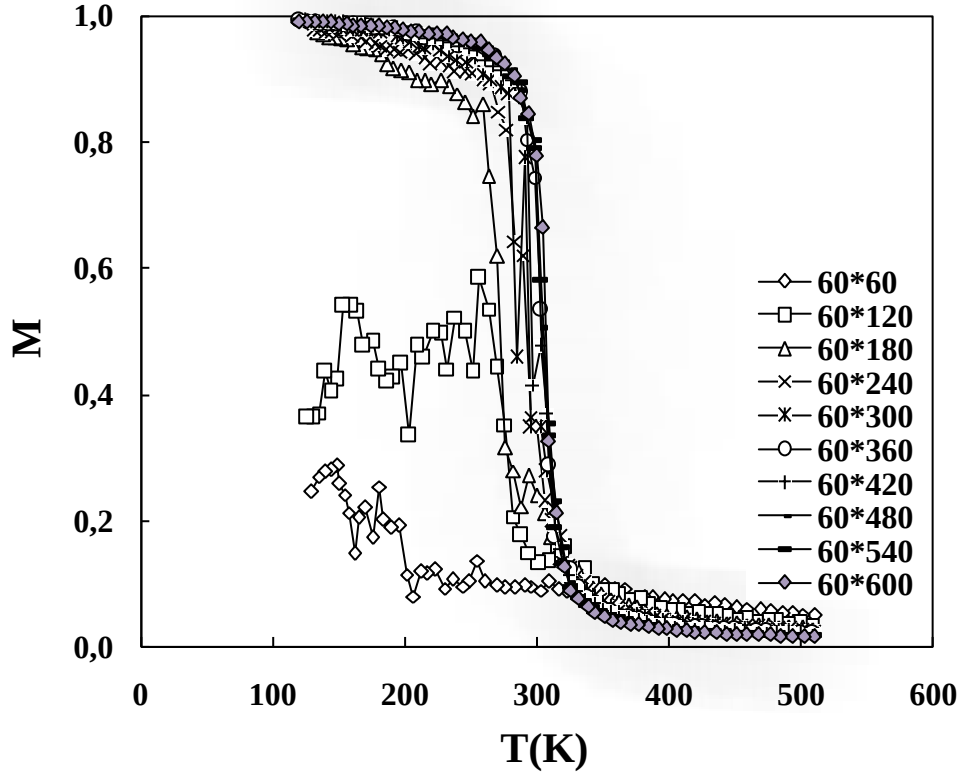
Çizelge 5.1. Etkileşme parametrelerinin, CA' da kullanmak üzere değiştirilmiş tamsayı değerleri

|   | Inoue<br>(meV) |     | Ihm<br>(meV) |     | Pillay<br>(LDA)<br>(meV) |     | Pillay<br>(GGA)<br>(meV) |     |
|---|----------------|-----|--------------|-----|--------------------------|-----|--------------------------|-----|
| V | 51.9           | 100 | 26           | 100 | 37.2                     | 100 | 44.5                     | 100 |
| H | -6.6           | -13 | -10          | -38 | -6.4                     | -17 | -7.5                     | -17 |
| D | -3.6           | -7  | -4           | -15 | -4.2                     | -11 | -4.1                     | -9  |

Son olarak, hesaplamalarda kullanılan parametrelerin taban durumları ele alınmış, sonsuz örgü kritik sıcaklıkları elde edilmiştir. Hesaplamalarda etkileşim parametreleri 100' e normalize edilerek kullanılmıştır. Normalize edilmiş değerler Çizelge 5.1' de görülmektedir.

### 5.1. Parametre-Örgü İlişkisi

Bu çalışmada, Si(100) yüzeyinde meydana gelen  $c(4 \times 2) \leftrightarrow 2 \times 1$  yapısal faz geçişi için Creutz “cellular automaton” algoritması kullanarak termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık civarındaki davranışlarını incelemek amacıyla kenar uzunlukları  $L_x=30, 60, 90, 120$  ve  $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$  kenar uzunluklarına sahip  $(L_x, L_y)$  dikdörtgen örgüler kullanılmıştır. Simülasyonlarda dikdörtgen örgü kullanılmasının sebebi, dimer-dimer etkileşimlerinin yönelime (doğrultuya) bağlı olarak değişmesinden kaynaklanmaktadır. Bu hesaplamalarda temel amaç yüzeyin tanımlanabileceği uygun geometriyi tespit etmektir. Kritik davranış, termodinamik niceliklerin, sonlu örgüler kullanılarak elde edilen davranışlarından anlaşılabilir. Hesaplamalar periyodik sınır şartları kullanılarak, yüzey başına ve 500.000 zaman adımı üzerinden ortalamalar alınarak yapılmıştır. Soğutma işlemi, 500.000 adımda bir örgüdeki hücrelerin  $1/40$ ' nin kinetik enerji değişkeni sıfırlanarak yapılmıştır. Sonlu örgüler için manyetizasyon  $M$ , manyetik alınganlık  $\chi$ , öz ısı  $C$  ve iç enerji  $H_1$  termodinamik niceliklerinin değerleri örgü ve zaman adımı başına ortalamalara karşılık gelmektedir.



Şekil 5.1. Inoue parametre seti kullanılarak  $L_x=60$   $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$  örgüleri için hesaplanan düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi.

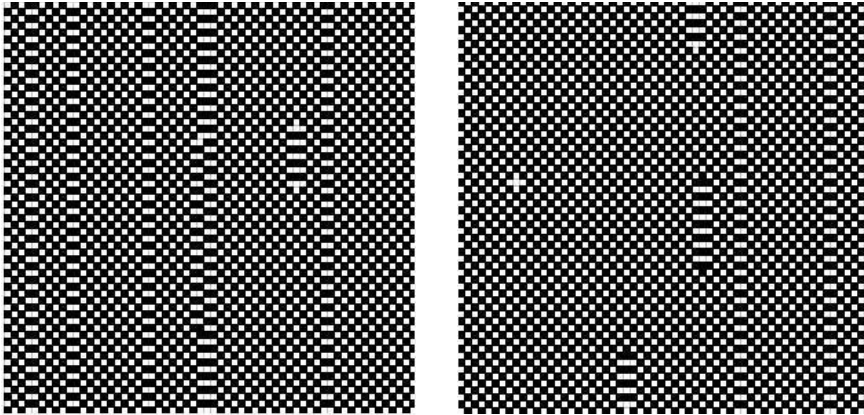
Si(100) yüzeyinde etkileşmeler anizotropik olduğu için, yatay, dikey ve diagonal doğrultularda etkileşim parametreleriyle orantılı olacak şekilde dimerlerin yeteri kadar etkileşebilecekleri uzunluklar tanımlanmalıdır. Bu, hesaplamalarda kullanılan örgü kenar uzunluk değerlerinin seçiminde göz önüne alınması gereken önemli bir durumdur. Bu yüzden göz önüne alınan bütün parametre setleri için kenar uzunluk oranları  $L_x/L_y$ , 1' den 0,1' e kadar değişen dikdörtgen örgülerde düzen parametresi hesaplanmıştır. Şekil 5.1' de Inoue tarafından verilen parametre seti kullanılarak hesaplanmış  $L_x=60$  için  $L_y= L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$  örgü kenar uzunluğuna sahip dikdörtgen örgüler için düzen parametresinin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir.

Denklem 4.10 ile hesaplanan antiferromanyetik düzen parametresinin sıcaklıkla değişim eğrileri incelendiğinde  $L_x/L_y=1$  ve 0,5 örgüleri için düzen parametresinin düşük sıcaklık bölgesinde düzeni temsil edecek şekilde 1 değerine yaklaşmadığı, 0,5 civarında kaldığı görülmektedir. Düzen parametresinin 1 olduğu düşük sıcaklıkta

görülen düzen durumu Si(100) yüzeyinin  $c(4 \times 2)$  yapılanmasını, 0 olduğu yüksek sıcaklıkta görülen düzensiz durumu ise  $2 \times 1$  yapılanmasını işaret etmektedir. Düşük sıcaklıkta düzen parametre değerleri,  $L_x/L_y$  oranı azaldıkça ortadan artarak, 1/7 oranından itibaren 1 civarında bir değerde çakışmaktadır.

Aynı durum, oluşturulan yüzey resimlerinde de görülmektedir. Burada gösterilen yüzey resimleri, i. satırda j. sütunda bulunan dimerlere karşılık gelen her bir spinin, zaman adımı başına hesaplanan düzen parametresi ortalama değerleri olan  $P_{ij}(M)$  belirli aralıkta değerlendirilmesiyle elde edilmiştir. Ortalama değer sıfır ve sıfırdan büyükse, o gözdeki spinin değeri +1 (beyaz göz), sıfırdan küçük ise -1 (siyah göz) olarak alınmaktadır (Denklem 5.1). Bu şekilde oluşturulan yüzey resimleri Şekil 5.2’ de görülmektedir. Bu durum deneysel olarak, dimerlerin ters-düz olma frekansına eşit frekansa sahip STM ucu mevcut olduğunda gerçekleşir.

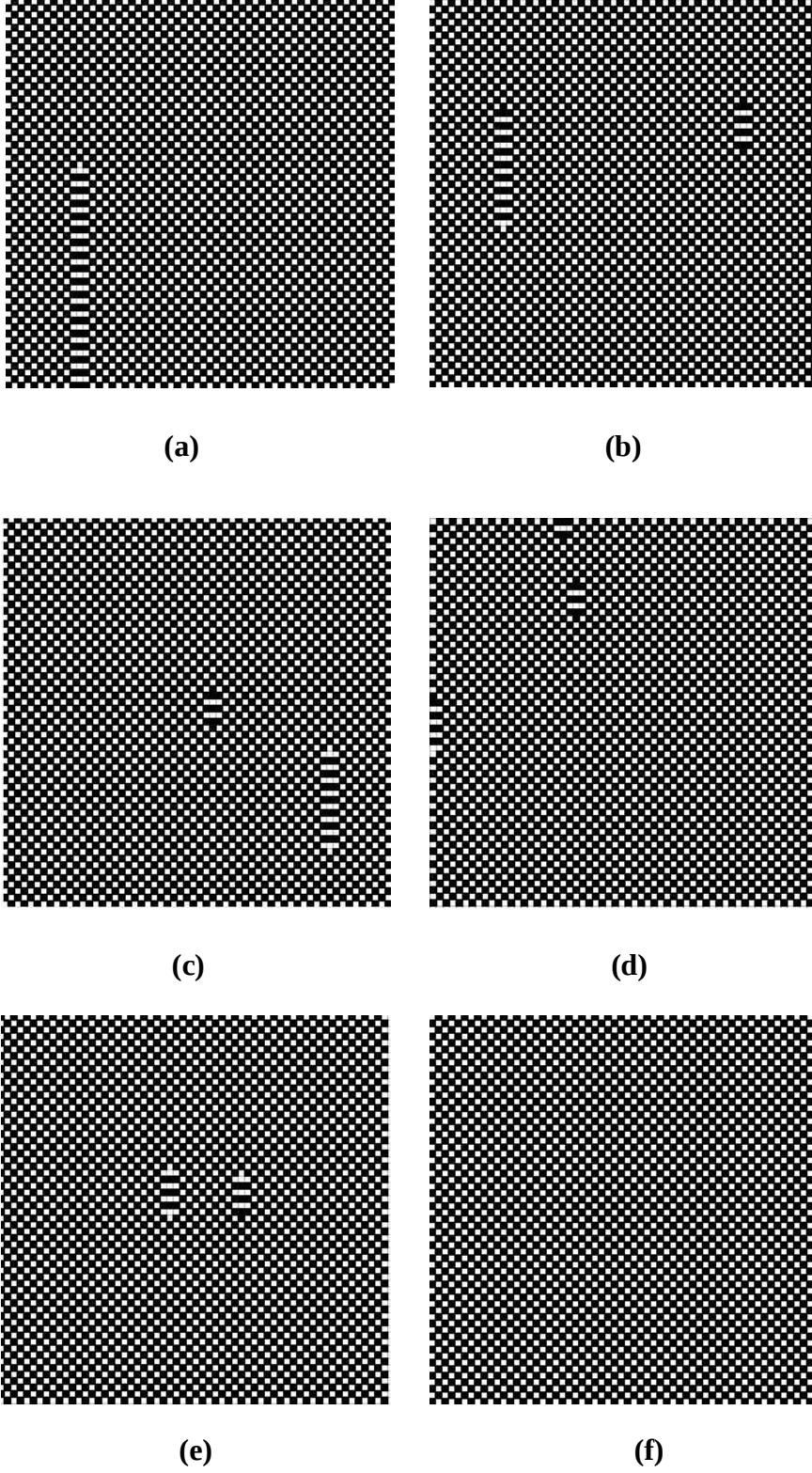
$$S_{ij} = \begin{cases} 1 ; P_{ij}(M) \geq 0, \square \\ -1 ; P_{ij}(M) < 0, \blacksquare \end{cases} \quad (5.1)$$



(a)

(b)

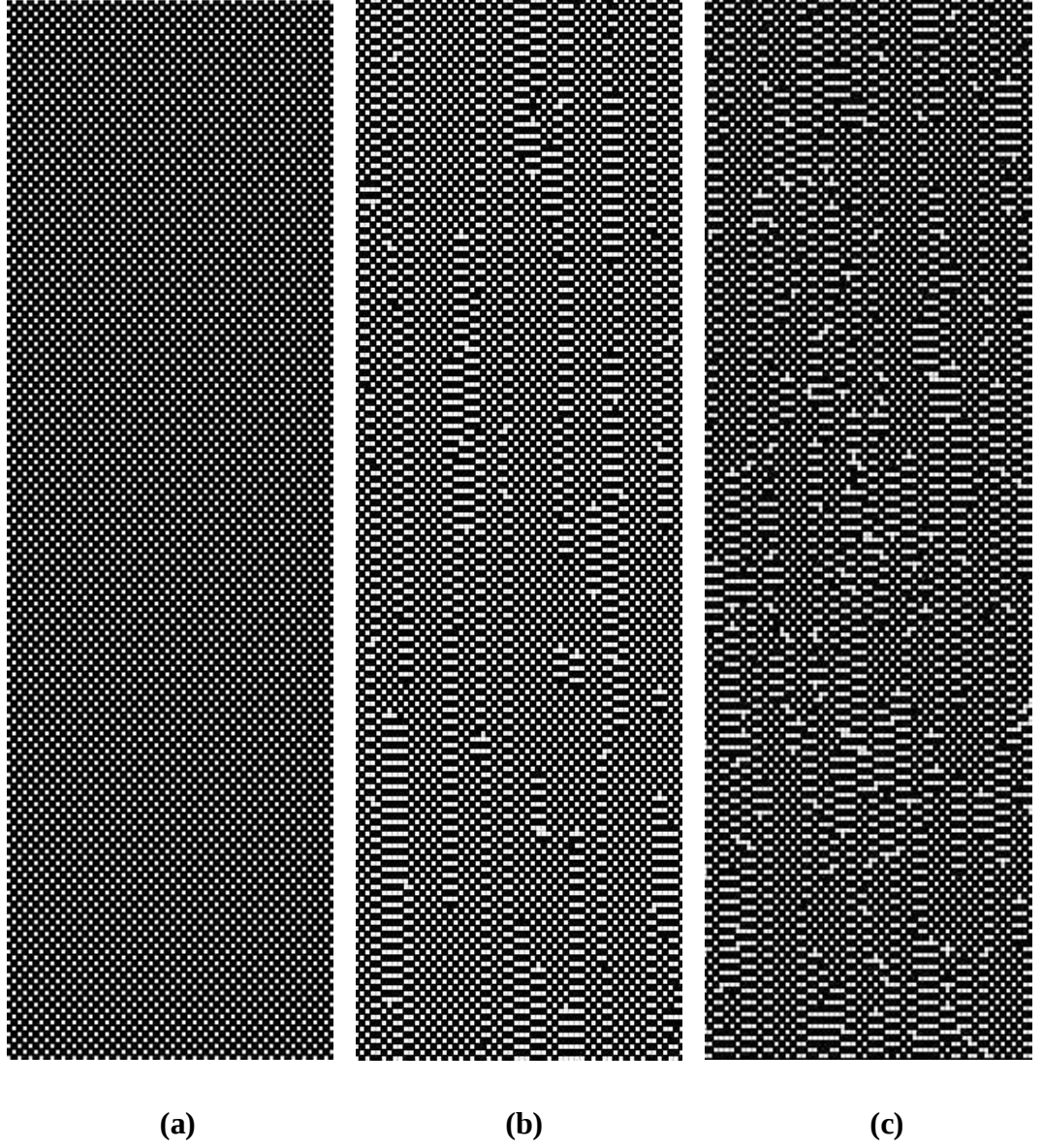
Şekil 5.2. Inoue parametre seti kullanılarak  $L_x=60$  için a)  $L_y=60$ , b)  $L_y=120$  örgüleri için  $T=240$  K civarında elde edilen yüzey yapılanmaları.



Şekil 5.2. (Devam) Inoue parametre seti kullanılarak  $L_x=60$  için a)  $L_y=240$ , b)  $L_y=300$ , c)  $L_y=360$ , d)  $L_y=420$ , e)  $L_y=480$ , f)  $L_y=600$  örgüleri için  $T=240$  K civarında elde edilen yüzey yapılanmaları.

Bu resimler,  $T = 240$  K civarında bir sıcaklık değerinde  $L_x=60$ ,  $L_y=60, \dots, 600$  kenar uzunluğuna sahip örgüler kullanılarak elde edilen yüzeylerin  $60 \times 60$ ' lık bir bölgesi görülmektedir. Düzene gitmeyen, yani  $L_x/L_y$  oranı 1 ve 0,5 olan ilk iki örgüde Si(100) yüzeyinin taban durum yapılanması olan  $c(4 \times 2)$ ' nin yanı sıra, daha yüksek enerjili süperantiferromanyetik  $p(2 \times 2)$  yapılanmasının oluşturduğu bölgeler göze çarpmaktadır. Ancak  $L_x/L_y$  oranı küçüldükçe yüzeydeki  $p(2 \times 2)$  bölgelerin miktarı gittikçe azalmakta,  $1/7$  oranına sahip örgüden itibaren  $c(4 \times 2)$  yapılanması yüzeyde baskın hale gelmekte, en büyük  $L_x/L_y$  oranına sahip örgüde ise tamamen  $c(4 \times 2)$  yapılanması görülmektedir. Benzer durum, Pillay-LDA ve GGA parametre setleri kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda da görülmektedir.

Şekil 5.4' de, Inoue parametre setleri kullanılarak  $60 \times 180$  kenar uzunluklu dikdörtgen örgü için hesaplanmış,  $T < T_c$ ,  $T \approx T_c$  ve  $T > T_c$  sıcaklık bölgesine ait yüzey fotoğrafları görülmektedir. Bu yüzey fotoğrafları incelendiğinde yüzeyde düşük sıcaklık fazında hakim olan yapının  $c(4 \times 2)$ , kritik civarında  $p(2 \times 2)$  ve  $c(4 \times 2)$  karışımı, yüksek sıcaklıkta ise bu yapıların daha fazla karışmış hali olduğu görülmektedir. Elde edilen bu fotoğraflar  $T \leq T_c$  bölgesinde deneysel beklentiyle büyük uyum sergilerken,  $T > T_c$  bölgesinde beklenen  $2 \times 1$  yüzey yapılanması deseni ile uyuşmamaktadır. Ancak,  $T > T_c$  için elde edilen bu desen tanımlanan düzen parametre değeri ile uyuşmamaktadır. Düzen parametre değeri  $c(4 \times 2) \rightarrow (2 \times 1)$  faz geçişi için beklenen davranışı ortaya koyarken,  $T > T_c$  için yüzey deseninin bunu doğrulamaması yüzey deseni oluşturulurken seçilen kriterin uygun olmadığı sonucunu ortaya çıkarmaktadır.



Şekil 5.3. a) 203 K b) 311 K c) 400 K için Inoue parametreleri kullanılarak elde edilmiş yüzey yapılanmaları.

Dolayısıyla spinlerin zaman adımı üzerinden alınan ortalamaları değerlendirilirken değerlendirilmesinde eksiklik olduğunu, bu ortalama değerlerin keskin bir şekilde ayrılarak yüzey resmi elde etme yönteminin yüzeyi temsil etmediği sonucu ortaya çıkmaktadır. Öyleyse doğru yüzey STM modellemesi nasıl olmalıdır?

## 5.2. Yüzeyin STM Modellemesi

Günümüzde yüzey bilim araştırmaları, teknolojik gelişim açısından oldukça önemlidir. Özellikle yarı iletken malzemelerin yüzey özelliklerinin aydınlatılması(elektronik, geometrik, optik vb.), bu malzemelerin teknolojik uygulamalarda etkin bir şekilde kullanılabilmesine olanak sağlamaktadır. Yarıiletkenlerin yüzey özelliklerini araştırmak amacıyla günümüzde birçok deneysel ve teorik yöntem kullanılmaktadır. STM (scanning tunneling microscopy/ taramalı tünelleme mikroskobu), bu yöntemlerden en etkin olanıdır.

STM, yüzeyleri atomik düzeyde resmetmek için kullanılan, kuantum tünelleme prensibine göre çalışan oldukça etkin bir deneysel cihazdır. Piezoelektrik malzemeden yapılmış oldukça ince uç, incelenen yüzeye oldukça fazla yaklaştığında, uygulanan çok küçük potansiyel fark (bias) ile elektronlar, uç atomu ile yüzey atomu arasında küçük bir akım oluşturacak şekilde hareket ederler. Yüzey geometrisine ait bilgiler, tarama ucunun yüzeyden yüksekliğinin bir fonksiyonu olan akım yardımıyla, yüzey resimleri oluşturularak elde edilirler [55].

STM' nin ilk uygulaması, Si(111) yüzeyinin kompleks yapılanması olan  $7 \times 7$  yapılanmasının anlaşılması için yapılmıştır [55]. Si yüzeyinin ve diğer yarıiletken malzemelerin en temel ve teknolojik uygulamalar açısından oldukça önemli olan (100) yüzeyi STM tarafından birçok kez incelenmiştir [56]. Si(100) yüzeyi için elde edilen STM fotoğrafları, teorik çalışmalar ile elde edilen yüzey resimleri ile düşük sıcaklık bölgesinde uyum göstermektedir. Fakat oda sıcaklığındaki  $2 \times 1$  yapılanması için aynı durum geçerli değildir.

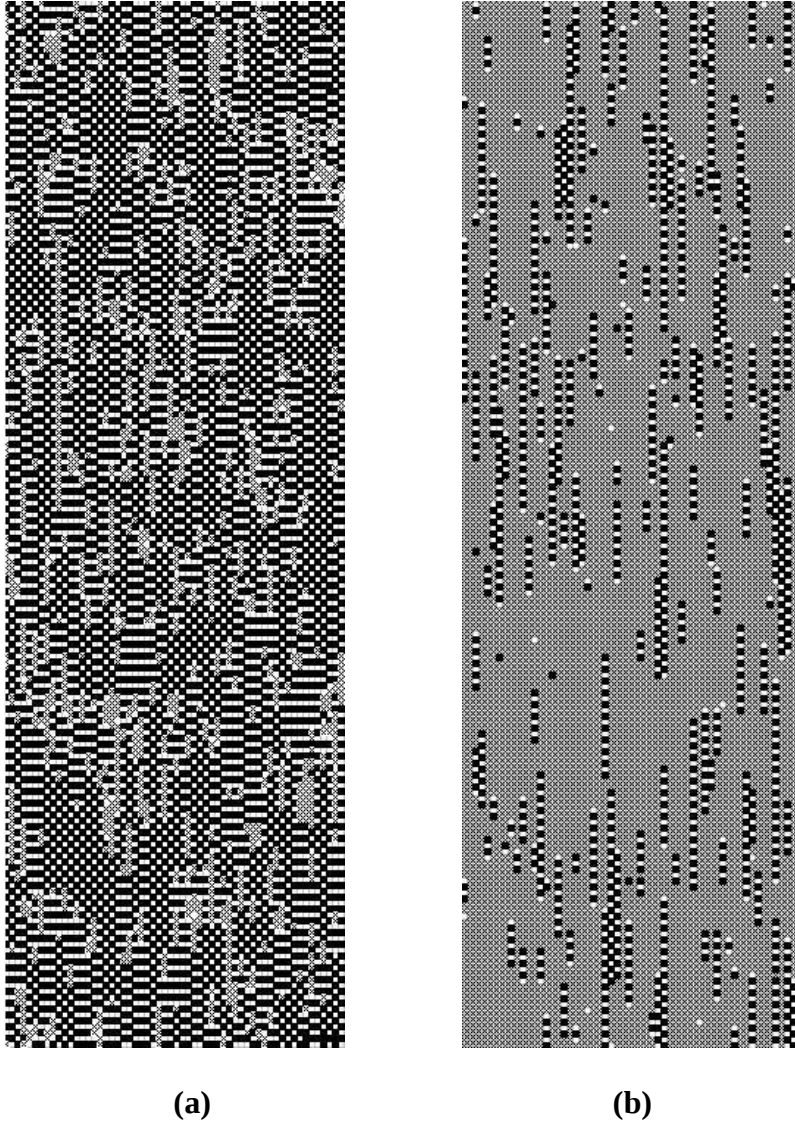
Yapılan deneysel çalışmalar sonucunda elde edilen Si(100) yüzey resimleri, oda sıcaklığında yüzeyde, az miktarda  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapılarının yanı sıra büyük oranda simetrik dimerlerin varlığını ortaya koymuştur [57]. Büyük dimerlerin flip-flop hareketleri rastgele ve oda sıcaklığında dimerlerin ters-düz olma periyodunun STM ucunun tarama periyodundan yaklaşık 1000 kez daha küçük olmasından dolayı,

STM şekilleri dimerlerin zaman üzerinden alınan ortalama görünümüne karşılık gelmekte ve asimetric dimerler simetric olarak görünmektedirler [5].

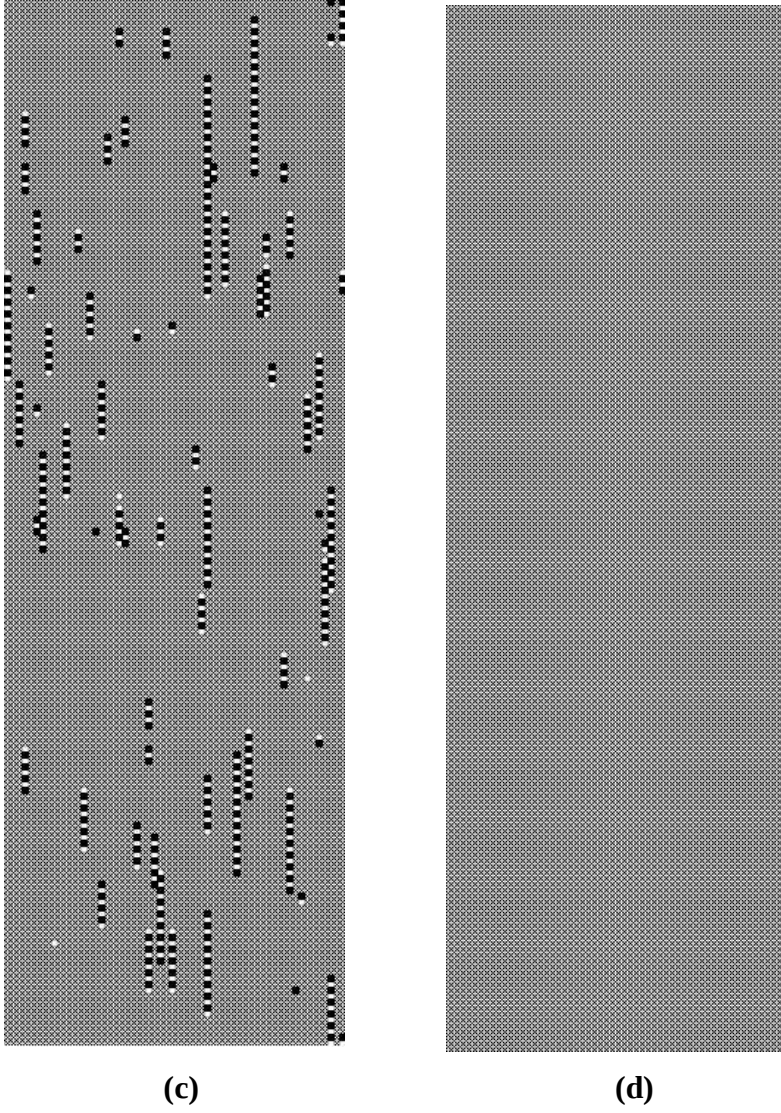
Bu aşamada, dimerlere karşılık gelen spinlerin zaman adımı üzerinden alınan ortalamaları değişen aralıklarda ele alınarak elde edilen sonuçlarda, deneysel gözlemlerle uyum gözlenmiştir. Spinlerin zaman adımı üzerinden alınan ortalamaları daha önce 0 ve pozitif değerlerin +1, negatif değerlerin -1 alınması durumunda farklı olarak, değişen 3 farklı aralıkta ele alınmış, bu da oda sıcaklığındaki yüzey yapılanmalarındaki simetric dimer miktarında değişikliğe sebep olmuştur. Buna göre  $P_{ij}(M)$  değerleri için verilen oranlar uyarınca, 0 değerinin sağında ve solundaki negatif ve pozitif değerli spinler herhangi yönelime sahip olmayan simetric dimerler olarak kabul edilmiş, geriye kalan spinlerin ise  $P_{ij}(M)$  olasılığına uygun bir yönelime sahip oldukları kabul edilmiştir. Dimer yönelimlerinin bir hücrenin  $P_{ij}(M)$  olasılığına bağlı olarak seçimi Eşitlik 5.2.' de verilmektedir. Burada 0 değerli spin, simetric dimere karşılık gelmektedir.

$$S_{ij} = \begin{cases} 1 ; P_{ij}(M) > \Omega \\ 0 ; -\Omega \leq P_{ij}(M) \leq \Omega \\ -1 ; P_{ij}(M) < -\Omega \end{cases} \quad (5.2)$$

Şekil 5.4' de, 460 K sıcaklığında  $L_x \times L_y = 60 \times 180$  kenar uzunluklu dikdörtgen örgü için değişen  $\Omega$  oranlarında yüzey resimleri görülmektedir.



Şekil 5.4. Yüksek sıcaklık bölgesi için Inoue parametreleri kullanılarak a) % 1 b) % 7 oranları için elde edilmiş yüzey yapılanmaları. Gri bölgeler simetrik dimerlerin oluşturduğu bölgelere karşılık gelmektedir.



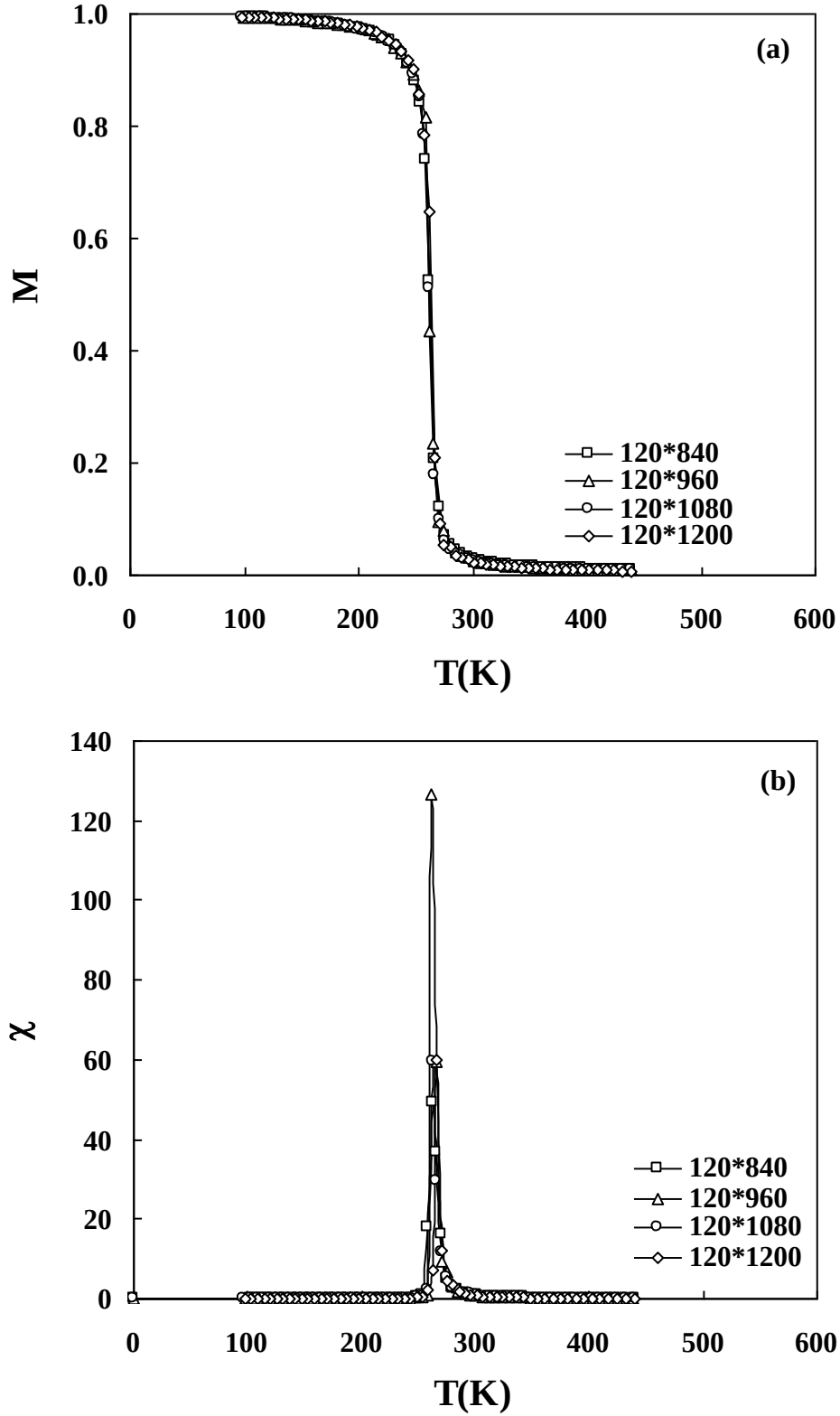
Şekil 5.4. (Devam) Yüksek sıcaklık bölgesi için Inoue parametreleri kullanılarak c) % 1 d) % 2 oranları için elde edilmiş yüzey resimleri. Gri bölgeler simetrik dimerlerin oluşturduğu bölgelere karşılık gelmektedir.

$\Omega$  oranına bağlı olarak, yüzeyde simetrik dimer miktarında değişiklik gözlenmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen yüzey resimleri, deneysel çalışmalar ile uyumlu, yüzeyi oda sıcaklığında temsil edebilecek en iyi  $\Omega$  oranının % 7 olduğunu göstermektedir (Şekil 5.4). Bu sonuç STM yüzey fotoğraflarının elde edilmesinde kullanılan STM ucunun tarama frekansındaki değişimle, yüzey desenlerinin değişimi ile büyük uyum göstermektedir.

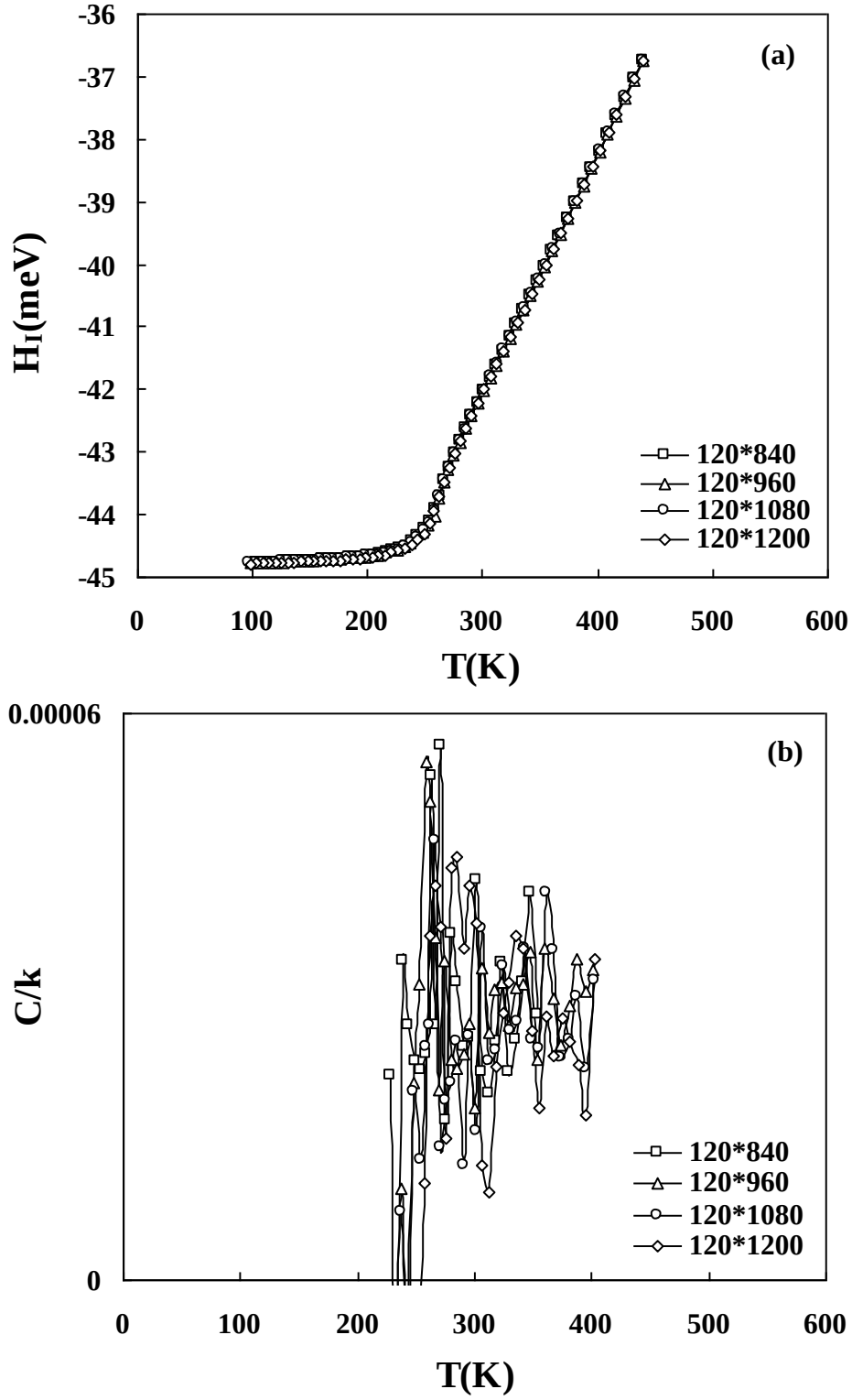
### 5.3. $c(4 \times 2) \leftrightarrow 2 \times 1$ Yüzey Faz Geçişi' nin Kritik Davranışı

Pillay-GGA parametreleri kullanılarak  $L_x=120$   $L_y=7L_x$ ,  $8L_x$ ,  $9L_x$ ,  $10L_x$  sonlu örgüleri için, sonlu örgüler için denklem 4.10-4.13 ifadeleri kullanılarak hesaplanmış düzen parametresi  $M$ , staggered alınganlık  $\chi$ , iç enerji  $H_1$  ve öz ısı  $C$  niceliklerinin sıcaklığa karşı değişimleri Şekil 5.5 ve 5.6' de görülmektedir.

Düzen parametresi eğrileri incelendiğinde, daha önce vurgulanan kritik  $L_x/L_y=1/7$  oranından itibaren örgü etkisinin azaldığı görülmektedir (Şekil 5.1). Bu kritik orandan itibaren bütün örgüler düzen parametresinin 1 olduğu ve  $c(4 \times 2)$  yapılanmasını gösteren düzen durumu sergilemektedir. Bilindiği gibi sonsuz örgüler için düzen parametresi kritik sıcaklık ve daha yüksek sıcaklıklarda sıfır olmaktadır. Bu durumda düzen parametresi sıfıra gitmekte, yüzey  $2 \times 1$  yapılanmasını sergilemektedir. Benzer durum iç enerjinin sıcaklığa bağlı değişiminde göze çarpmaktadır (Şekil 5.6.a). Kritik orandan itibaren, örgüler benzer kritik davranış sergilemişlerdir. Düşük sıcaklıklarda, örgülerin en kararlı durumlarında bulundukları göze çarpmaktadır. Ayrıca düzen parametresinin dalgalanmalarından elde edilen staggered alınganlık ile iç enerjinin dalgalanmalarından elde edilen öz ısı niceliğinin sıcaklıkla değişimi incelendiğinde (Şekil 5.5.b ve Şekil 5.6.b), belirli bir kritik sıcaklık değerinde belirgin bir pik ortaya çıkmaktadır. Bilindiği gibi Staggered alınganlık ve öz ısı niceliğinin maksimumları kritik sıcaklığa karşılık gelmektedir. Sonsuz örgü kritik sıcaklık tespiti bu piklerden belirlenen sıcaklık değerlerinin ekstrapolasyonları yapılarak elde edilmiştir. Pillay-LDA ve Inoue parametreleri için yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen kritik davranışlar da, bu parametre setiyle elde edilen kritik davranışa benzer durum sergilemektedir.

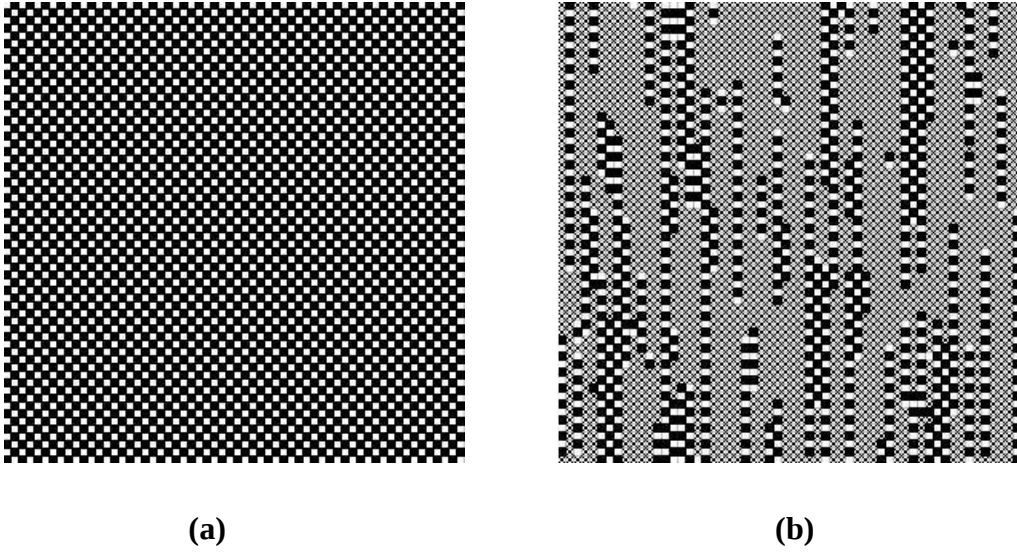


Şekil 5.5. Pillay-GGA parametre seti  $L_x=120$   $L_y=7L_x, \dots, 10L_x$  örgüleri için hesaplanmış a) Düzen parametresi b) Staggered alingnity niceliklerinin sıcaklığa bağlı değişimleri



Şekil 5.6. Pillay-GGA parametre seti  $L_x=120$   $L_y=7L_x, \dots, 10L_x$  örgüleri için hesaplanmış a) İç enerji b) Öz ısı niceliklerinin sıcaklığa bağlı değişimleri.

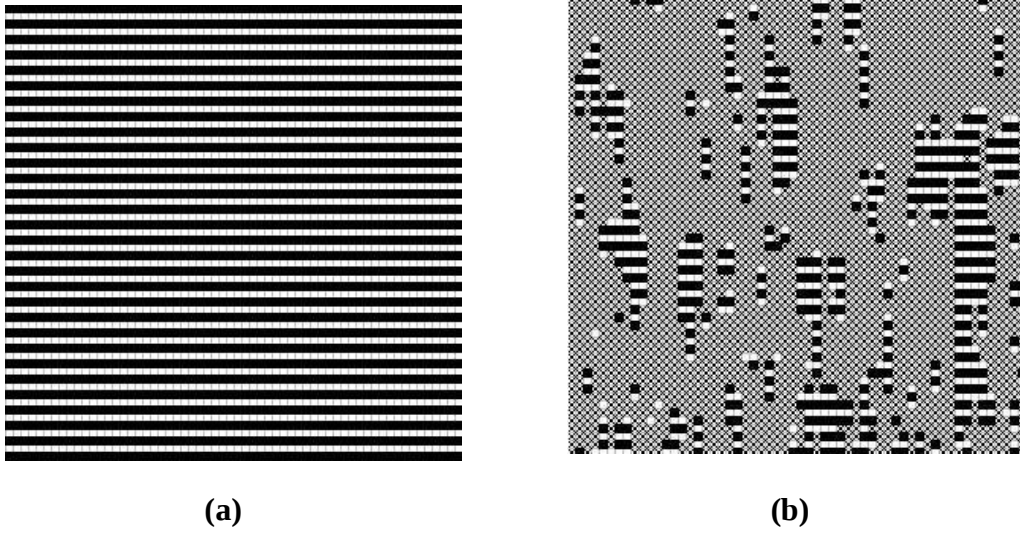
4 farklı parametre seti kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda, düşük sıcaklık yapılanmaları hakkında bilgi edinilmiş ve daha önce yapılan deneysel ve teorik çalışmalar ile karşılaştırılmıştır. Yapılan birçok deneysel [6,18-20] ve teorik çalışma [8,42,43], Si(100) yüzeyinde  $2\times 1 \rightarrow c(4\times 2)$  faz geçişi sonucunda düşük sıcaklık yapılanmasının  $c(4\times 2)$  olduğunu göstermiştir. Inoue, Pillay-LDA ve Pillay-GGA parametre setleri kullanılarak hesaplanan düzen parametresi eğrileri ve oluşturulan STM yüzey fotoğrafları belirli bir  $L_x/L_y$  oranından itibaren yüzeyin, çok yüksek oranda  $c(4\times 2)$  yapılanmasından oluştuğunu göstermiştir. 3 farklı parametre seti ile yapılan hesaplamalar, belirli bir  $L_x/L_y$  oranına sahip örgülerin düşük sıcaklık bölgesinde  $c(4\times 2)$  yapılanması sergilediklerini göstermektedir. Bu sonuç, daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmalar ile uyum içerisindedir. Şekil 9'da Inoue parametre seti kullanılarak hesaplanan  $60\times 600$  kenar uzunluklu örgünün kritik sıcaklık altındaki yüzey durumunu temsilen  $c(4\times 2)$  yapılanmasını gösteren,  $60\times 60$ 'lık kenar uzunluklu bir kısmı görülmektedir.



Şekil 5.7. Inoue parametre seti kullanılarak elde edilmiş, Si(100) yüzeyinin a) Düşük (243 K) b) Yüksek sıcaklık (400 K) yapılanmaları. Düşük sıcaklıkta yüzey tamamen  $c(4\times 2)$  yapılanmasından oluşmaktadır.

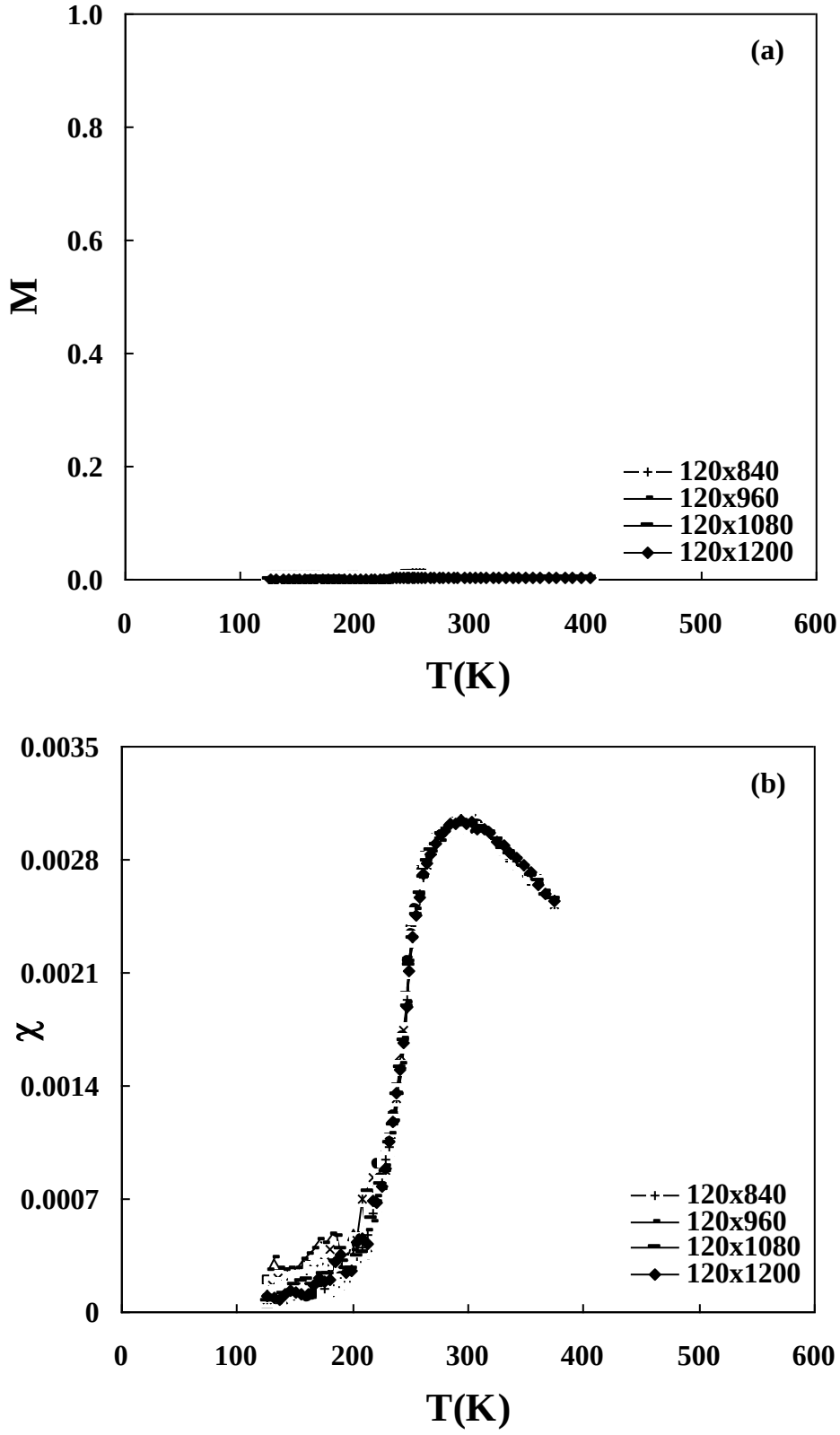
Ancak, Ihm tarafından verilen parametre seti için hesaplanan düzen parametresi eğrilerinde, diğer parametre setlerine göre farklı bir durum görülmektedir (Şekil 5.8). Ihm parametre setinde, dimer sütunu boyunca etkileşimleri sağlayan  $V$  (26 meV)

parametresinin değeri ile bitişik iki dimer sütunu arasındaki etkileşmeyi sağlayan  $H(=-10 \text{ meV})$  değerinden büyüklük miktarı, dimerlerin, dimer sütunu boyunca birbirlerine alternatif yönelmelerine yeterli değildir. Bu parametre seti kullanılarak elde edilen taban durumlarda, diğer parametre setlerinden elde edilen taban durumlara göre farklılık görülmektedir. Diğer parametrelerin aksine bu parametre setinde taban durum,  $c(4 \times 2)$  yapılanmasına oranla daha yüksek enerjili olan  $p(2 \times 2)$  yapılanmasıdır (Şekil 11). Bu durum, bu parametre seti kullanılarak daha önce yapılmış teorik çalışma, ayrıca deneysel çalışmalar ile uyuşmamaktadır [8].

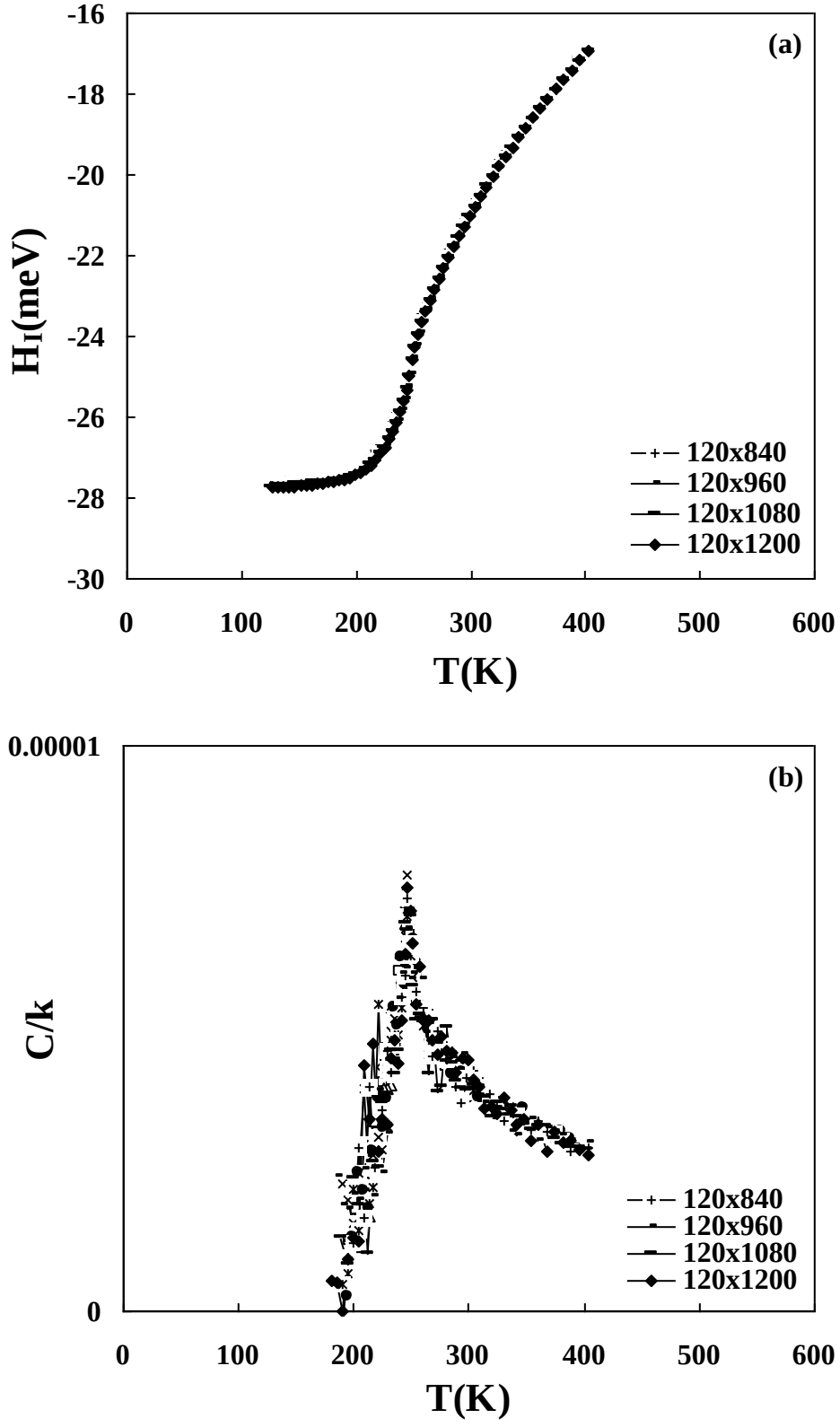


Şekil 5.8. Ihm parametre seti kullanılarak elde edilmiş, Si(100) yüzeyinin a) Düşük (221 K) b) yüksek sıcaklık (313 K) yapılanmaları. Düşük sıcaklıkta yüzey tamamen  $p(2 \times 2)$  yapılanmasından oluşmaktadır.

Ihm parametreleri kullanılarak  $L_x=120$   $L_y=L_x$ ,  $2L_x, \dots, 10L_x$  örgüleri için, sonlu örgüler için denklem 4.10-4.13 ifadeleri kullanılarak hesaplanmış düzen parametresi  $M$ , staggered alınganlık  $\chi$ , iç enerji  $H_I$  ve öz ısı  $C$  niceliklerinin sıcaklığa karşı değişimleri şekil 5.12 ve 5.13' de görülmektedir.

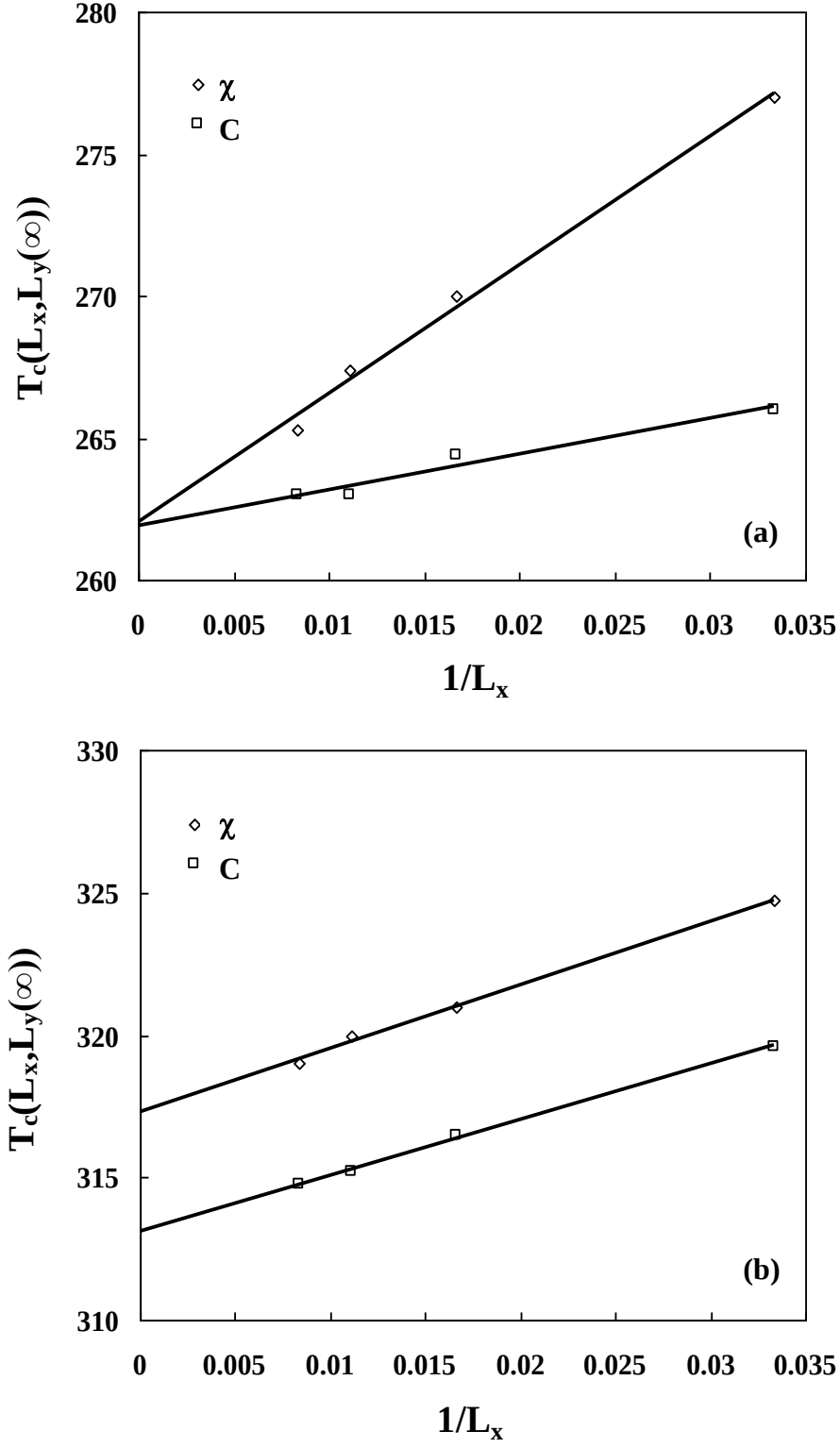


Şekil 5.9. İhm tarafından elde edilen parametre seti için  $L_x=120$  ve  $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$  kenar uzunluklu örgüler kullanılarak hesaplanmış a) Düzen parametresi b) Staggered alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.

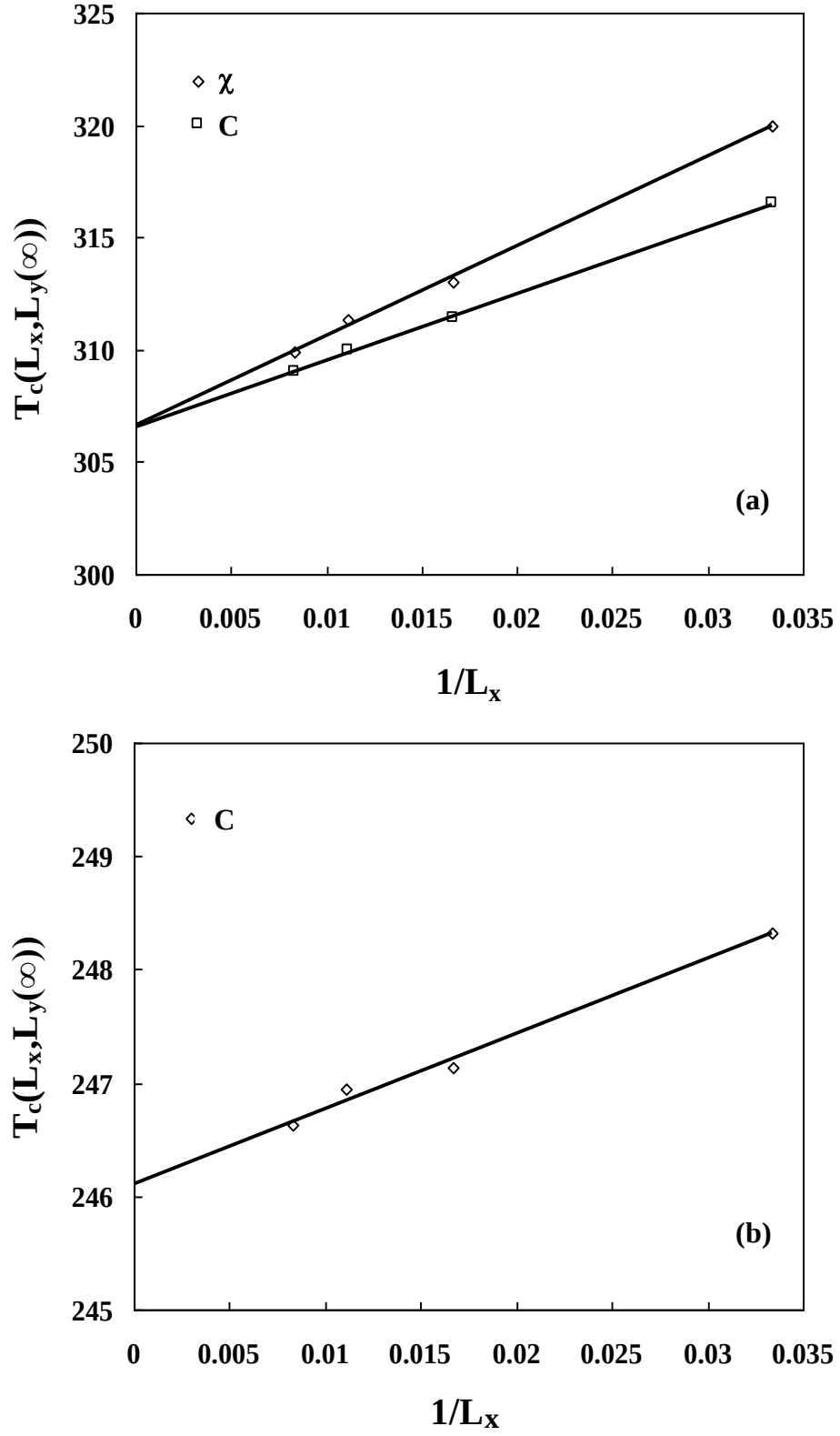


Şekil 5.10. İhm tarafından elde edilen parametre seti için  $L_x=120$  ve  $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$  kenar uzunluklu örgüler kullanılarak hesaplanmışa) İç enerji b) Öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.

### 5.4.2. Kritik Sıcaklık Tespiti



Şekil 5.11. a) Pillay-GGA ve b) Pillay-LDA parametre setleri için staggered alınganlık ve özısı niceliklerinin  $1/L_x$ ' e karşı değişimleri grafikleri.



Şekil 5.12. a) Inoue b) Ihm parametre setleri için için staggered alınganlık ve özısı niceliklerinin  $1/L_x$ ' e karşı değişimleri grafikleri.

Her bir parametre seti için kritik sıcaklık tespit etmek amacıyla, öncelikle kritik  $L_x/L_y$  oranından itibaren  $L_y$  kenar uzunlukları, her bir  $L_x$  değeri için kendi arasında sonsuza uzatımı(ekstrapolasyon) yapılmış, daha sonra elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklıkları  $L_x$  kenar uzunlukları kullanılarak tekrar sonsuza uzatımı yapılarak sonsuz örgü kritik sıcaklık tespiti yapılmıştır. Bilindiği gibi düzen parametresinin dalgalanmalarından elde edilen staggered alınganlık ve içenerjinin dalgalanmalarından elde edilen öz ısı denge ortalama değerleri her örgü için belirli bir sıcaklıkta maksimum vermektedir. Kritik sıcaklık tespitleri Inoue, Pillay-GGA ve Pillay-LDA parametreleri için bu iki niceliğin pik değerlerinden tespit edilen sıcaklık değerleri kullanılarak yapılmış ancak Ihm parametre seti kullanılarak elde edilen düzen parametresi, düşük sıcaklıkta düzene gitmediğinden staggered alınganlık niceliği kritik sıcaklık civarında pik vermemiştir. Bu parametre için sonsuz örgü kritik sıcaklığı yalnızca öz ısı pik değerlerinden elde edilen sıcaklıklar yardımıyla yapılan sonsuza uzatım ile belirlenmiştir (Şekil 5.14 ve 5.15).

4 farklı parametre seti kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda, staggered alınganlık ve öz ısı piklerinden belirlenen sıcaklıklar yardımıyla elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklıkları Çizelge 5.2’ de görülmektedir. Elde edilen bu sıcaklıklar daha önce yapılan Pillay-GGA (300 K), Pillay-LDA (340 K), Inoue (320 K) ve Ihm (250 K) parametre setleri kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen kritik sıcaklık değerlerinden, daha düşük, deneysel çalışma sonuçlarıyla ( $T_c \approx 200$  K) daha uyumludur. Çizelge 5.2’ den de kolayca görülebileceği gibi kritik sıcaklıklar parametre setine göre farklılık sergilemektedir. Ayrıca bu sıcaklıkların birbirleriyle aralarındaki büyük fark mevcut parametre setlerinin Si(100) yüzeyini iyi tanımlamadığını yani yüzey Hamiltonyeninin eksik olduğunu göstermektedir.

Çizelge 5.2. 4 farklı parametre seti için sonsuza uzatma ile elde edilmiş sonsuz örgü kritik sıcaklıkları

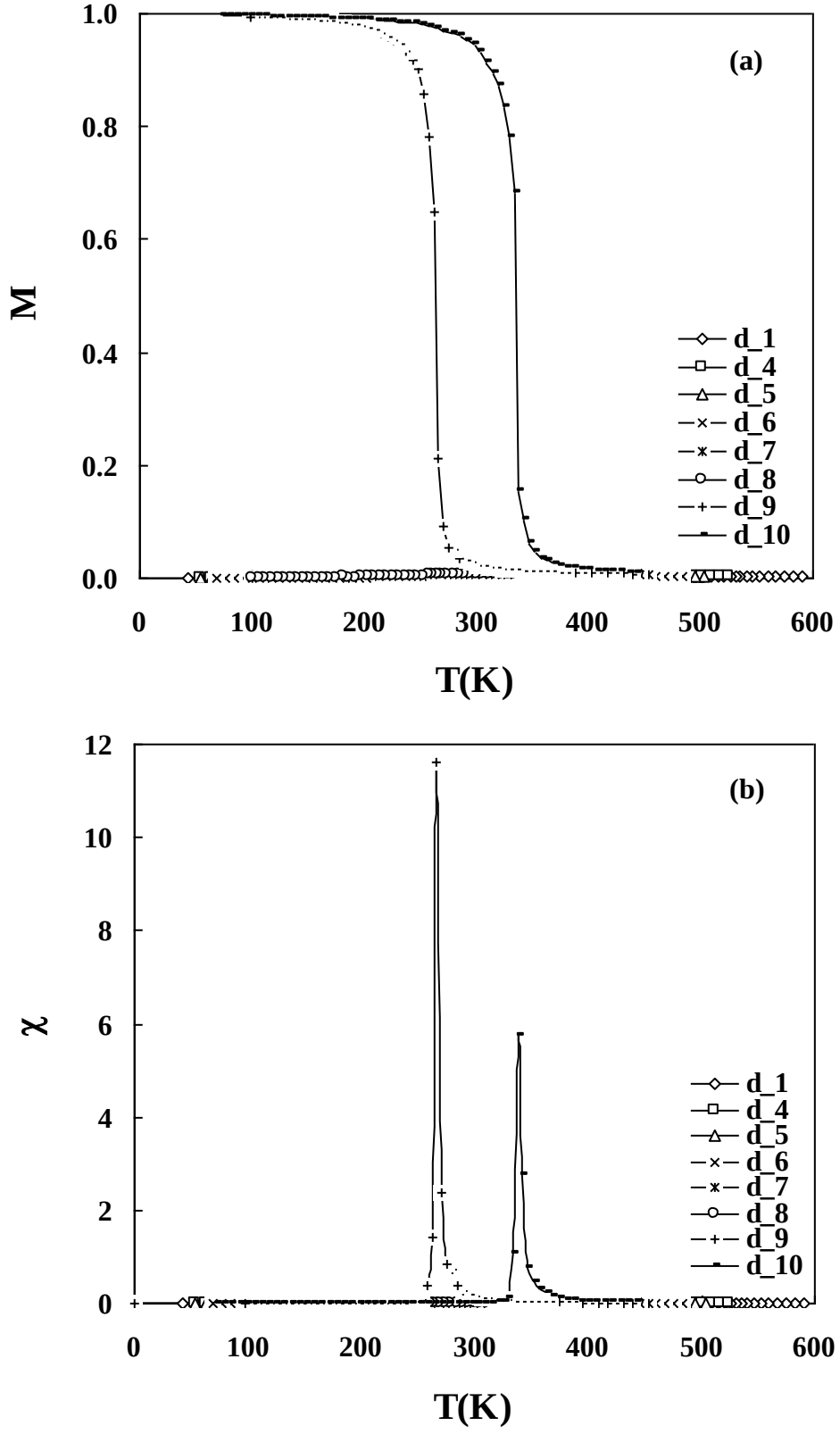
| Parametre Setleri | $T_c^z(\infty)$ | $T_c^c(\infty)$ | $T_c[Kay]$ |
|-------------------|-----------------|-----------------|------------|
| Pillay-GGA        | 262 K           | 262 K           | 300 K      |
| Pillay-LDA        | 317 K           | 313 K           | 340 K      |
| Inoue             | 307 K           | 307 K           | 320 K      |
| Ihm               | ---             | 246 K           | 250 K      |

#### 5.4.1. Parametre değişiminin kritik sıcaklığa etkisi

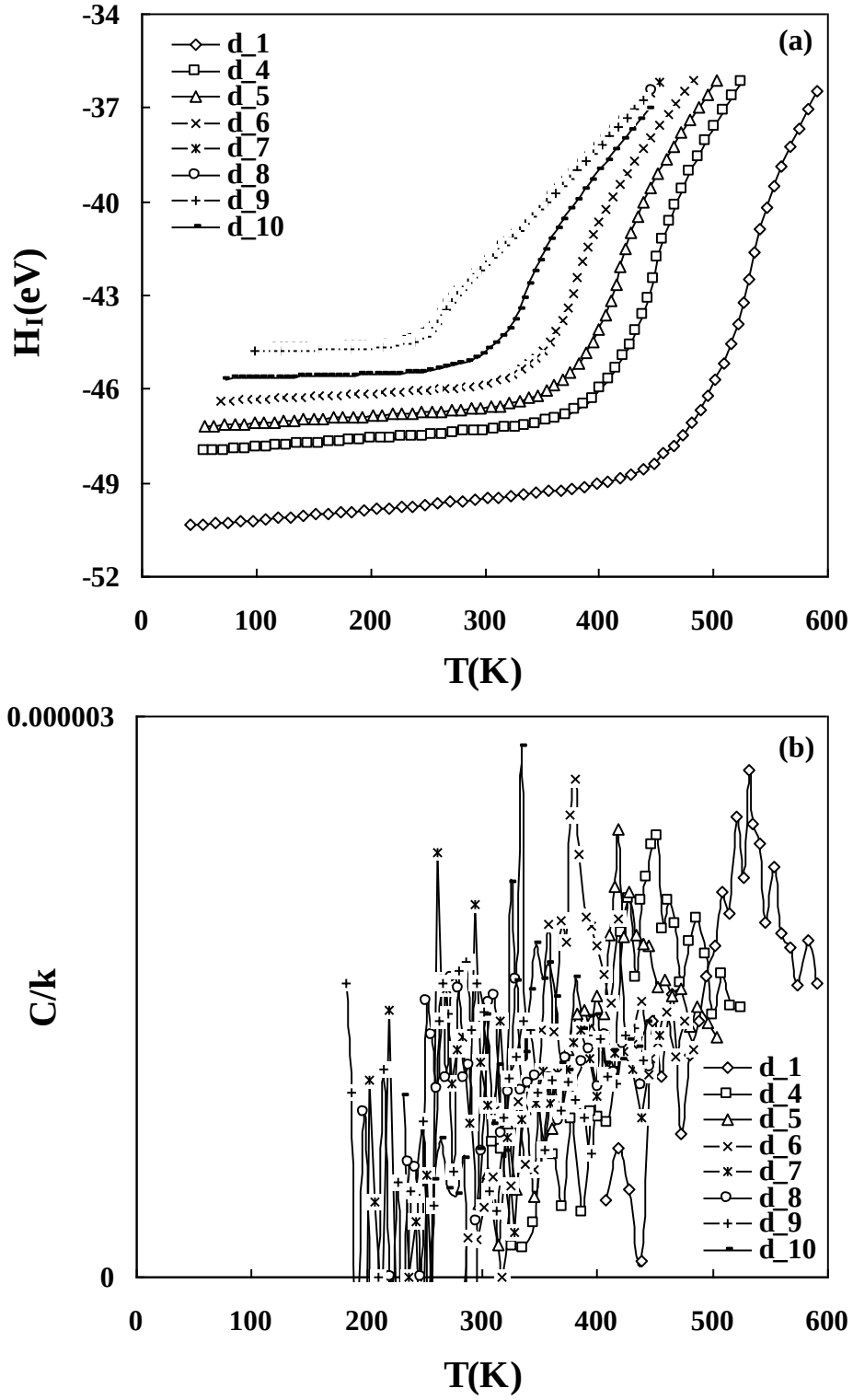
Si(100) yüzeyinde kritik davranışa parametre etkisini görmek amacıyla, D etkileşme parametresi değiştirilerek termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri elde edilmiştir. Pillay-GGA parametre seti için elde edilen sonuçlar Şekil 5.13 ve 14’ de görülmektedir.

Düzen parametresi eğrisi incelendiğinde, D parametresinin -8 değerinden daha büyük değerlerinde düzen durumu oluşmadığı görülmüş ve kritik sıcaklıkta yükselme tespit edilmiştir (Şekil 13.a). Düzen parametresi dalgalanmalarından elde edilen staggered alınganlık ise, düzen durumunun gözlenmediği parametre değerlerinde pik vermemiştir. Daha küçük D değerinde ise düzen durumu gözlenmiş, kritik sıcaklıkta staggered alınganlık ve öz ısı nicelikleri pik vermiş, kritik sıcaklıkta yükselme görülmüştür. Bu durum, kritik davranışın parametre değişimlerine oldukça hassas olduğunu göstermektedir.

Bu eğriler incelendiğinde seçilen her bir  $D$  parametresi için iç enerji sıcaklık değişimleri bir faz geçişinin olduğunu göstermekle birlikte AF düzen parametresi bu durumu teyid etmemektedir. Bu sonuçlar göstermektedir ki,  $D > -7$  değerleri için taban durum yapılanmasının  $c(4 \times 2)$  olmadığı görülmektedir. Parametrenin bu değerleri için taban durum  $p(2 \times 2)$  yapılanmasıdır. Bu yüzden  $D$  parametresinin  $c(4 \times 2)$  ve  $p(2 \times 2)$  yapılanmalarını ayırdığı, aynı zamanda sıcaklık eriminde de önemli bir etkiye sahip olduğu görülmektedir.



Şekil 5.13. Pillay-GGA parametre seti, farklı D parametreleri için elde edilen a) Düzen parametresi b) Staggered alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 5.14. Pillay-GGA parametre seti, farklı D parametreleri için elde edilen a) iç enerji b) öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimi.

## 6. SONUÇLAR

Bu çalışmada, Si(100) yüzeyi için oluşturulmuş iki-boyutlu Creutz Cellular Automata Ising Model algoritması kullanılarak termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri incelenmiştir. İlk olarak, deneysel yöntemlerle ve teorik hesaplamalar ile elde edilmiş, Si(100) yüzeyinin düşük sıcaklıktaki düzen durumunu elde edebilmek için gereken kritik  $L_x/L_y$  oranı saptanmıştır. Si(100) yüzeyinde dimerler arası etkileşmeler anizotropik olduğu için, bu etkileşmelerin yeterli bir şekilde sağlanacağı mesafeler tanımlanmalıdır. Bu bakımdan hesaplamalarda kullanılan, etkileşmelerin yeterli ölçüde gerçekleşmesini sağlayacak  $L_x/L_y$  oranı oldukça önemlidir. Buna göre Si(100) yüzeyini tanımlamak için kullanılacak örgü  $L_x/L_y=1/7$  veya daha küçük oranlara sahip olmalıdır.

Spinlerin tüm zaman adımı üzerinden alınan ortalamalarını kullanarak elde edilen yüzey resimlerinden ise kritik altı, kritik civarı ve kritik üstü yüzey yapılanmaları incelenmiştir. Ancak elde edilen bu yüzey görüntüleri, STM gözlemleri sonucu yüksek sıcaklık bölgesi için elde edilen görüntülerle uyuşmamaktadır. Buna göre, alınan ortalamalar daha önce olduğu gibi keskin bir şekilde ayrılmak yerine,  $\Omega$ , 0 spin değerinden her iki yönde sapma oranı olmak üzere, çeşitli  $\Omega$  değerleri için yüzey durumları incelenmiştir. Yapılan incelemeler sonucunda STM gözlemleriyle uyum elde edilmiş ve bunun için gerekli  $\Omega$  oranının % 7 olması gerektiği sonucuna varılmıştır. Bu oran sonucunda elde edilen yüzey fotoğraflarında, STM fotoğraflarında olduğu gibi yüksek sıcaklıkta 2x1-simetrik ve daha az miktarda olmakla birlikte c(4x2) ve p(2x2) bölgeleri gözlenmiştir.

4 farklı parametre seti kullanarak yapılan hesaplamalar, bu parametre değerlerine bağlı olarak Si(100) yüzeyinin taban durumu hakkında aydınlatıcı bilgiler vermiştir. Buna göre Inoue, Pillay-GGA ve Pillay-LDA parametre setleri kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen düşük sıcaklık yapılanmaları literatür ile uygunluk göstermiş ve taban durum c(4x2) AF yapılanma olarak elde edilmiştir. Ancak aynı durum Ihm parametre setinin düşük sıcaklık yapılanması için geçerli

olmadığı tespit edilmiştir. Bu parametre seti kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen düşük sıcaklık yapılanmasının  $p(2 \times 2)$  olduğu görülmüştür.

CA soğutma algoritması kullanılarak, farklı 4 parametre seti için sonlu örgülerde yapılan simülasyonlardan elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerlerinin Monte Carlo simülasyon tekniği kullanılarak elde edilen değerlere göre deneysel değerlerle daha büyük bir uyum sergilediği görülmektedir. Hesaplama sonuçları arasında ortaya çıkan bu farkın algoritmadan kaynaklandığı düşünülmektedir. Soğutma algoritmalarının “metastable” durumları daha iyi ortaya koymasından dolayı, elde edilen kritik sıcaklık değerlerinin, deneysel değerlerle daha uyumlu olması beklenen bir durumdur.

Her ne kadar bu çalışmada elde edilen kritik sıcaklık değerlerinin deneysel değerlere 4 parametre seti için de daha yakın olsa da, deneysel sonuçlarla tam olarak uyuşmaması, tanımlanan yüzeyin oldukça önemli olduğunu göstermektedir. Yarıiletken yüzeyleri tanımlamanın yolu doğru parametreleri tespit etmektir. Kritik sıcaklık değerlerinin, tanımlı her bir yüzey için farklı değerler vermesi yüzey tanımlamasının oldukça önemli olduğunu göstermektedir. Parametre etkisini görmek amacıyla D parametresi değiştirilerek yapılan hesaplamalar, yüzey kritik davranışının parametre değişimine hassas olduğunu göstermiştir.

Bütün bu sonuçlar, yüzey tanımlamasının çok önemli olduğunu, bu yapılırken de;

- i. Örgü parametresi-sıcaklık ilişkisinin,
- ii. Etkileşme eriminin ve
- iii. Dimer kusurları (boşluk, faz)

gibi etkilerin modele ilave edilmesi gereklidir.

## KAYNAKLAR

1. Inoue, K., Morikawa, Y., Terakura, K. And Nakayama, M., "Order-disorder phase transition on the Si(001) surface: Critical role of dimer defects", **Phys. Rev. B**, 49: 14774-14777 (1994).
2. Pillay, D., Stewart, B., Shin, C. B. And Hwang, G. S., "Revisit to the Ising model for order-disorder phase transition on Si(001)", **Surface Science**, 554: 150-158 (2004).
3. Ihm, J., Lee, D. H., Joannopoulos, J. D. And Xiong, J.J., "Structural Phase Diagrams for the Surface of a Solid: A Total-Energy, Renormalization-Group Approach", **Physics Rev. Lett.**, 52: 1872-1875 (1983).
4. Wiesendanger, R., Bürgler, D., Tarrach, G. And Güntherodt, H. J., "Local structure of the Si(100) surface studied by scanning tunneling microscopy", **Surf. Sci.**, 232: 1-5 (1990).
5. Hammers, R. J., Tromp, R. M. And Demuth, J. E., "Scanning tunneling microscopy of Si (001)", **Phys. Rev. B**, 34: 5343-5357 (1986).
6. Tabata, T., Aruga, T. And Murata, Y., "Order-disorder transition on Si(001): c(4x2) to (2x1)", **Surf. Sci. Lett.**, 179: L63-L70 (1987).
7. Wolfram, S., "Statistical Mechanics of Cellular Automata", **Rev. Mod. Physics**, 55: 601-644 (1983).
8. Wolfram, S., "Universality and Complexity in Cellular Automata", **Physica D**, 10: 1-35 (1984).
9. Vichniac, G. Y., "Simulating Physics with Cellular Automata", **Physica D**, 10: 96-116 (1984).
10. Pomeau, Y., "Invariant in Cellular Automata", **J. Phys. A; Math. Gen.**, 17: L415-L418 (1984).
11. Hermann, H. J., "Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model", **J. Stat. Phys.**, 45: 145-151 (1986).
12. Creutz, M., "Deterministic Ising Dynamics", **Ann. Phys**, 167: 62-72 (1986).
13. Woodruff, D.P. And Delchar, T. A., "Modern Techniques of Surface Science", **Cambridge Uni. Press**, Cambridge, 1 (1994).
14. Lüth, H., "Solid Surfaces, Interfaces and Thin Films", **Springer**, Heidelberg, 1-3 (2001).

15. Schlier, R. E. And Farnsworth, H. E., "Structure and adsorption characteristics of clean surfaces of germanium and silicon", *Journal of Chemical Physics*, 30: 917-927 (1959).
16. Chadi, D. J., "Atomic and electronic structures of reconstructed Si (100) surfaces", *Phys. Rev. Lett.*, 43: 43-47 (1979).
17. Oura, K., Lifshits, V. G., Saranin, A. A., Zotov, A. V. And Katayama M., "An Introduction to Surface Science", *Springer*, Heidelberg, 181-182 (2003).
18. Duke, C. B., "Atomic geometry of cleavage surfaces of tetrahedrally coordinated compound semiconductors", *Chem. Rev.*, 96: 1237-1259 (1996).
19. Srivastava, G. P., "Theory of semiconductor surface reconstruction", *Rep. Prog. Phys.*, 60: 561-613, (1997).
20. Chadi, D. J., "Stabilities of single-layer and bilayer steps on Si(001) surfaces", *Chem. Rev. B*, 40: 1691-1694 (1987).
21. Pashley, M. D., "Electron counting model and its application to island structures on molecular-beam epitaxy grown GaAs(001) and ZnSe(001)", *Phys. Rev. B*, 40: 10481-10487 (1989).
22. Ramstad, A., Brocks, G. And Kelly, P. J., "Theoretical study of the Si(100) surface reconstruction", *Phys. Rev. B*, 51: 14504-14523 (1995).
23. Wolkow, R. A., "Direct observation of an increase in buckled dimers on Si(001) at low temperature", *Phys. Rev. Lett.*, 68: 2636-2639 (1992).
24. Landemark, E., Karlsson, C. J., Chao, Y. C. And Uhrberg, R. I. G., "Core-level spectroscopy of the clean Si(001) surface: Charge transfer within asymmetric dimers of the  $2\times 1$  and  $c(4\times 2)$  reconstructions", *Phys. Rev. Lett.*, 69: 1588-1591 (1992).
25. Shkrebitii, A. And Del Sole, R., "Microscopic calculation of the optical properties of Si(100) $2\times 1$ : Symmetric versus asymmetric dimers", *Phys Rev. Lett.*, 70: 2645-2648 (1993).
26. Fontes, E., Patel, J. R. And Comin, F., "Direct measurement of the asymmetric dimer buckling of Ge on Si(001)", *Phys. Rev. Lett.*, 70: 2790-2793 (1993).
27. Roberts, N. And Needs, R.J., "Total energy calculations of dimer reconstructions on the silicon (001) surface", *Surf. Sci.*, 239, 112-121 (1990).
28. Kondo, Y., Amakusa, T., Iwatsuki, M. And Tokumoto, H., "Phase transition of the Si(001) surface below 100 K", *Surf. Sci.*, 453: L318-L322 (2000).

29. Yokoyama, T. And Takayanagi, K., "Anomalous flipping motions of buckled dimers on the Si(001) surface at 5 K", *Phys. Rev. B*, 61: R5078-R5081, (2000).
30. Shigekawa, H., Hata, K., Miyake, K., Ishida, M. and Ozawa, S., "Origin of the symmetric dimers in the Si(100) surface", *Phys. Rev. B*, 55: 15448-15451 (1997).
31. Johnson A.D., et all, "Combined  $(1\times 2)\rightarrow(1\times 1)$  transition and atomic roughening of Ge(001) studied with surface x-ray diffraction", *Phys. Rev. B*, 44: 1134-1138 (1991).
32. Kevan, S. D. And Stoffel, N G. "Metal-Insulator Transition on the Ge(001) Surface", *Phys. Rev. Lett.* 53: 702-705 (1984).
33. Takeuchi, N., Selloni, A. And Tosatti, E., "Metallization and incomplete melting of a semiconductor surface at high temperature", *Phys. Rev. Lett.*, 72: 2227-2230 (1994).
34. Stumpf, R. And Marcus, P. M., "Relaxation of the clean and H-covered C(111) and the clean Si(111)- $1\times 1$  surfaces", *Phys. Rev. B*, 47: 16016-16019 (1993).
35. Meli, C. A., Greene, E. F., Lange G. And Toennies, J. P., "Evidence for an Order-Order Transition on the Ge(111) Surface near 1050 K from High-Resolution Helium Atom Scattering Experiments", *Phys. Rev. Lett.*, 74: 2054-2057 (1995).
36. Johnson, A. D., Norris, C., Frenken, J. W. M., MacDonald, J. E., Van Silfhout, R. G. And Van Der Veen, J. F., "Combined  $(1\times 2)\rightarrow(1\times 1)$  transition and atomic roughening of Ge(001) studied with surface x-ray diffraction", *Phys. Rev. B*, 44: 1134-1138 (1991).
37. Horn, K., Scheffler, M., Richardson, N. V. And Holloway, S., "Electronic Structure", *Elsevier*, London, 387 (2000).
38. Kevan, S. D., "Surface states and reconstruction on Ge(001)", *Phys. Rev. B*. 32: 2344-2350 (1985).
39. Mascaraque, A. And Michel, E. G., "Reversible structural phase transitions in semiconductor and metal/semiconductor surfaces", *J. Phys.: Condens. Matter*, 14: 6005-6035 (2002).
40. Brush, S. G., "History of the Lenz-Ising Model", *Reviews of Modern Physics*, 39: 883-893 (1967).
41. Saxena, A., Gawlinski, E.T. And Gunton, J.D., "Structural phase transitions of the Si(100) surface", *Surface Science*, 160: 618-640 (1985).

42. Onsager, L., "Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition", **Phys. Rev.**, 65: 117 (1944).
43. Kutlu B., "Critical behavior of the two-dimensional Ising model with next-nearest-neighbor antiferromagnetic interaction on the Creutz cellular automaton", **Physica A**, 234: 807-818 (1997).
44. Langer, J. S., "Instabilities and the pattern formation in Crystal Growth", **Rev. Mod. Phys.**, 52: 1-28 (1980).
45. Santos, R. M. Z. And Coutinho, S., "Dynamics of HIV Infection: Cellular Automata Approach", **Phys. Rev. Lett.**, 87(16): 168102-160106 (2001).
46. Burks, C. And Farmer D., "Toward modelling DNA sequences as automata", **Physica D: Nonlinear Phenomena**, 10(1-2), 157-167 (1984).
47. Parodi, O., And Ottavi, H., "Cellular Automata and Modelling of Complex Physical Systems", Springer Proceeding in Physic, Vol 46, Ed.: Manneville, P., Baccara, N., Vichniac, G.Y., Bidaux, R., **Springer-Verlag Berlin Heidelberg**, 21-25 (1990).
48. Packard, N. H., And Wolfram, S., "Two-Dimensional Cellular Automata", **J. Stat. Phys.**, 38: 901-946 (1985).
49. Kutlu, B., "Critical exponents of the two-dimensional Ising model with next-nearest neighbour and four-spin interactions on the Creutz Cellular Automaton", **Physica A**, 243: 199-212 (1997).
50. Kutlu, B., Özkan, A., Seferoğlu, N. And Binal, B., "The tricritical behaviour 3-d Blume-Capel model on Creutz Cellular Automaton", **Int. J. Mod. Phys. C**, 16: 933-950 (2005).
51. Özkan, A., Seferoğlu, N. And Kutlu, B., "Critical exponents of the 3-dimensional Blume-Capel model on a Creutz Cellular Automaton", **Physica A**, 362: 327-337 (2006).
52. Seferoğlu, N., Özkan, A. And Kutlu, B., "Finite size effect of the first order phase transition in the 3-dimensional Blume-Capel model on Creutz Cellular Automaton", **Chin. Phys. Lett.**, 23: 2526-2529 (2006).
53. Kutlu, B., "İki-boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi", Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 8 (1995)
54. Özkan, A., "FCC Blume-Emery-Griffiths modelin faz uzayı üzerinde dipol-kuadrupol etkileşim etkisi", Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 44 (2007).

55. Hudson, J. B., "An Introduction to surface science", *John Wiley&sons*, New York, 18-19 (1998).
56. Bai, C., "Scanning tunneling microscopy and its applications.", *Springer Verlag*, New York, 3-5 (2000).
57. Fu, C. C., Weissmann, M., Saul, A., "Molecular Dynamics Study of dimer flipping on perfect and defective Si(001) surfaces, *Surface science*, 494: 119-130 (2001).

## ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : GENÇ, Ali Emre  
 Uyuğu : T.C.  
 Doğum tarihi ve yeri : 03.10.1985 Ankara  
 Medeni hali : Bekar  
 Telefon : 0 (312) 202 12 67  
 e-mail : aegenc@gmail.com, aegenc@gazi.edu.tr

### Eğitim

| Derece        | Eğitim Birimi                   | Mezuniyet tarihi |
|---------------|---------------------------------|------------------|
| Yüksek lisans | Gazi Üniversitesi / F.B.E.      | 2011             |
| Lisans        | Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü | 2008             |
| Lise          | Batıkent Y.D.A. Lisesi          | 2003             |

### İş Deneyimi

| Yıl     | Yer               | Görev               |
|---------|-------------------|---------------------|
| 2009- - | Gazi Üniversitesi | Araştırma Görevlisi |

### Yabancı Dil

İngilizce

### Sunumlar

1. KUTLU, B., GENÇ A.E., “İki-boyutlu Ising modelde kusurların kritik davranışa etkisi” Türk Fizik Derneği 27. Uluslararası Fizik Kongresi 24-27 Eylül 2009, Bodrum, Türkiye. Poster sunumu.
2. KUTLU, B., GENÇ A.E., “ Si(100) yüzeyinin ising model ile incelenmesi” Türk Fizik Derneği 28. Uluslararası Fizik Kongresi 16 - 19 Eylül 2010, İstanbul, Türkiye. Sözlü sunum.

3. KUTLU, B., GENÇ A.E. “ **Simulation of the two-dimensional Ising Model on a microcanonical algorithm**” Türk Fizik Derneği 29. Uluslararası Fizik Kongresi 6 - 9 Eylül 2010, Bodrum, Türkiye, Poster sunumu.
4. GENÇ A.E., KUTLU, B., “ **Investigation Si(100) surface using 2-dimensional Ising model**” Türk Fizik Derneği 29. Uluslararası Fizik Kongresi 6 - 9 Eylül 2010, Bodrum, Türkiye, Poster sunumu.

### **Proje**

1. “Si(100) Yüzeyinin Ising Model ile İncelenmesi” (BAP:05/2010-89). Araştırmacı.
2. “ Kusur içeren 2-boyutlu Ising Modelin Cellular Automaton ile İncelenmesi” (BAP:05/2010-08). Araştırmacı.
3. “3-Boyutlu Ising Modelin Arayüzey kritik davranışının incelenesi”, (BAP:05/2010-12). Araştırmacı.

### **Hobiler**

Gitar çalmak, kitap okumak, belgesel izlemek.