

**BAZI YARI İLETKENLERİN ELEKTRONİK, ELASTİK VE OPTİK
ÖZELLİKLERİNİN AB İNİTİO METODU İLE İNCELENMESİ**

Mazin SH. OTHMAN

**DOKTORA TEZİ
FİZİK**

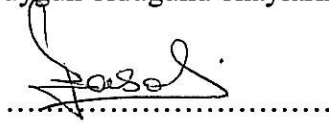
**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**EKİM 2009
ANKARA**

Mazin SH. OTHMAN tarafından hazırlanan BAZI YARI İLETKENLERİN ELEKTRONİK, ELASTİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİNİN AB İNİTİO METODU İLE İNCELENMESİ adlı bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Ergün KASAP

Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı



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

Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK (Başkan)

Fizik, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Ergün KASAP (Danışman)

Fizik, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet KASAP

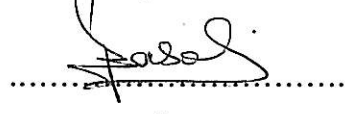
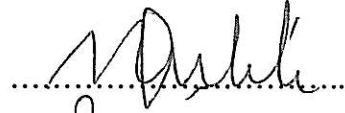
Fizik, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Ömer YAVAŞ

Fizik Mühendisliği, Ankara Üniversitesi

Prof. Dr. Bora ALKAN

Fizik Mühendisliği, Ankara Üniversitesi



Tarih : 23 / 10 / 2009

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

Prof. Dr. Nail ÜNSAL

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.

Mazin SH. OTHMAN

BAZI YARI İLETKENLERİN ELEKTRONİK, ELASTİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİNİN AB İNİTİO METODU İLE İNCELENMESİ

(Doktora Tezi)

Mazin SH. OTHMAN

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ekim 2009

ÖZET

Bu çalışmada GaAs, GaP, InAs ve InP ikili bileşikler ile bu bileşiklerin üçlü ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, $\text{InAs}_y\text{P}_{1-y}$, $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ ve $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$) ve dörtlü ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$) yarı iletken alaşımlarının x ve y kompozisyonuna bağlı olarak elektronik, elastik ve optik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisine dayanan ab initio metotla çalışıldı. Alaşımların örgü parametreleri, bant yapıları, toplam durum yoğunluğu, elastik sabiti ve bulk modülü hesaplandı. Ayrıca foton enerjisine bağlı lineer dielektrik fonksiyonları, soğurma katsayısı, sönüm katsayısı, kırılma indisi, enerji-kayıp fonksiyonu ve yansıtıcılık gibi bazı optik özelliklerin scissors yaklaşımı altında hesaplandı. GaAs yapının In ve P eklenme oranlarına bağlı olarak oluşan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$) dörtlü alaşımlarının x ve $y = 0,5$ değerinde optik özellikleri karşılaştırılarak incelendi. Yapıların ($\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ $y \geq 0,5$ dışında) Γ simetri noktasında doğrudan yasak enerji aralığına sahip olduğu görüldü. Elde edilen sonuçlar, deneysel ve teorik çalışmalarla uyumlu olduğu tespit edildi.

Bilim Kodu	: 202.1.147
Anahtar Kelimeler	: Ab initio, yarı iletken, elektronik, elastik, optik
Sayfa adedi	: 138
Tez Yöneticisi	: Prof. Dr. Ergün KASAP

AB INITIO CALCULATION OF ELECTRONIC, ELASTIC AND OPTICAL PROPERTIES OF SOME SEMICONDUCTOR STRUCTURES

(Ph.D. Thesis)

Mazin SH. OTHMAN

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

October 2009

ABSTRACT

In this work, the electronic, elastic and optical properties of GaAs, GaP, InAs and InP binary compounds of these compounds with the ternary ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, $\text{InAs}_{1-y}\text{Py}$ and $\text{GaAs}_{1-y}\text{Py}$) and ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Py}$) quaternary alloys are investigated as a function of x and y composition by using ab initio calculations within density functional theory. For these alloys, the lattice parameters, band structures, density of state, elastic constants and bulk module are calculated. The linear photon-energy dependent dielectric functions and some optical properties curves are calculated. The results of calculations of the GaAs structure of In and P proportion $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{Py}$ ternary and ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Py}$) of quaternary x and $y = 0,5$ values were compared the optical features. These structures as a result of symmetry points Γ has a direct band gap energy range is seen. The obtained results are compared with the available experimental and theoretical data.

Science Code	: 202.1.147
Key Words	: Ab initio, semiconductor, electronic, elasticity, optical
Page Number	: 138
Adviser	: Prof. Dr. Ergün KASAP

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, karşılaştığım tüm zorlukların çözümlenmesinde yakın ilgisini esirgemeyen değerli hocam Prof. Dr. Ergün KASAP'a teşekkürü borç bilirim.

Çalışmalarım sırasında yardımlarını esirgemeyen, çalışmalarımı daha verimli bir şekilde tamamlamamı sağlayan. Bora Lisesivdin ve Nurettin KÖRÖZLÜ 'ye teşekkür ederim.

Bugüne kadar bana maddi ve manevi her konuda destek vererek sabırlarını esirgemeyen sevgili aileme sonsuz teşekkürlerimi borç bilirim.

Bu tez çalışması, DPT tarafından 2001K120590 numaralı proje ile desteklenmiştir.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR	xiv
1. GİRİŞ	1
2. TEMEL TEORİK BİLGİLER	6
2.1. Kristal Yapılar	6
2.2. Basit Kristal Yapılar (Zinc-Blende)	11
2.3. Ters Örgü Vektörleri	13
2.4. Brillouin Bölgesi ve İndirgenemeyen Brillouin Bölgesi	16
2.5. Yüksek Simetri Noktaları	17
3. YARI İLETKENLER	19
3.1. Yarıiletkenlerin Genel Yapısı	19
3.2. III-V Grubu Alaşımlarının Özellikleri	20
4. TEMEL ÖZELLİKLER	22
4.1. Geometrik Optimizasyon	22
4.1.1. Minimizasyon yöntemleri	22

Sayfa

4.2. Bant Yapısı	23
4.3. Toplam Durum Yoğunluğu	26
4.4. Elastik Sabitler.....	26
4.5. Bulk Modülü.....	31
4.6. Optik Özellikler	33
4.6.1. Optik sabitler	34
5. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ	37
5.1. Çok Cisim Problemi.....	37
5.2. Born-Oppenheimer Yaklaşımı	38
5.3. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları	39
5.3.1. Hartree yaklaşımı.....	39
5.3.2. Hartree-Fock yaklaşımı	41
5.4. Yoğunluk Fonksiyoneli Yaklaşımları	42
5.4.1. Thomas Fermi teorisi	43
5.4.2. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi.....	44
5.4.3. Hohenberg-Kohn teoremleri	47
5.4.4. Kohn-Sham eşitlikleri	51
5.4.5. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA).....	56
5.4.6. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımları (GGA)	56
5.4.7. LDA ve GGA yaklaşımlarının sınırlılıkları	58
5.5. Pseudopotansiyel Metot.....	60
5.5.1. Pseudopotansiyellerin oluşturulması.....	61

Sayfa

5.6. Ortogonalize Düzlem Dalgalar (OPW) Metodu	65
5.7. Scissors Yaklaşımı	67
6. BULGULAR VE TARTIŞMA	71
6.1. Yapısal Özellikler	72
6.1.1. Örgü sabiti değerlerinin hesaplanması	72
6.2. Elektronik Özellikler	76
6.2.1. Bant Yapıların ve toplam durum yoğunluğun hesaplanması	77
6.3. Elastik Sabiti ve Bulk Modülün Hesaplanması	81
6.4. Optik Özellikler	86
6.4.1. Dielektrik fonksiyonun reel ve sanal Kısımları	86
6.4.2. Enerji kayıp fonksiyonu	90
6.4.3. Kırılma indisi ve sönüm katsayısı	91
6.4.4. Soğurma katsayısı	92
6.4.5. Yansıtıcılık	94
7. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	95
KAYNAKLAR	98
EKLER	104
EK-1 Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği.	105
EK-2 Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerinin değişim grafiği	115
ÖZGEÇMİŞ	137

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. $c_{\alpha\beta}$ ve c_{ijkl} 'nin indisleri arasındaki Voig bağıntıları	28
Çizelge 6.1. (GaAs, GaP, InAs ve InP) kristallerinin örgü sabiti değerleri, diğer teorik ve deneysel çalışmalar	74
Çizelge 6.2. x kompozisyonu değerine göre $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri ve diğer teorik çalışmalar	75
Çizelge 6.3. x kompozisyonu değerine göre $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri	75
Çizelge 6.4. y kompozisyonu değerine göre $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri	75
Çizelge 6.5. y kompozisyonu değerine göre $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri	76
Çizelge 6.6. x ve y kompozisyonu değerine göre $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri	76
Çizelge 6.7. GaAs, GaP, InAs ve InP yapıların yasak enerji aralığı değerleri ile diğer teorik ve deneysel çalışmalar	79
Çizelge 6.8. x kompozisyonu değerine göre hesaplanan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alaşımının yasak enerji aralığı ile diğer teorik ve deneysel çalışmalar	79
Çizelge 6.9. x kompozisyonu değerine göre hesaplanan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ alaşımının yasak enerji aralığı değerleri ile diğer teorik ve deneysel çalışmalar	80
Çizelge 6.10. y kompozisyonu değerine göre hesaplanan $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının yasak enerji aralığı değerleri ile diğer teorik ve deneysel çalışmalar	80
Çizelge 6.11. y kompozisyonu değerine göre hesaplanan $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının yasak enerji aralığı değerleri ve deneysel çalışmalar	80

Çizelge	Sayfa
Çizelge 6.12. x, y değerine göre hesaplanan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının yasak enerji aralığı değerleri ve deneysel çalışmalar	81
Çizelge 6.13. GaAs. GaP. InAs. InP yapıları için elastik sabiti ve bulk modülü değerleri, deneysel değerler, teorik değerler ve bu çalışma değerleri	84
Çizelge 6.14. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için x kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri, deneysel değerler, teorik değerler ve bu çalışma değerleri	84
Çizelge 6.15. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ için x kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri, deneysel değerler, teorik değerler ve bu çalışma değerleri	85
Çizelge 6.16. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ için y kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri	85
Çizelge 6.17. $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ için y kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri	85
Çizelge 6.18. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ için x ve y kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti, bulk modülü ve teorik çalışma değerleri.....	85
Çizelge 6.19. Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının statik dielektrik sabiti değerleri ile diğer teorik ve deneysel çalışmalar.	87
Çizelge 6.20. Alaşımların dielektrik fonksiyonunun sanal kısımlarının pik değerleri.....	89

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Wigner-Seitz ilkel hücresi	7
Şekil 2.2. İki boyutlu kristalin örgü noktaları.....	8
Şekil 2.3. (a) Basit kübik ve (b) hexagonal Bravais Örgüleri.....	9
Şekil 2.4. Cisim merkezli kübik örgü	10
Şekil 2.5. Merkezi bir konuma göre sıkı-paket yapılı 12 komşunun yüzey merkezli kübik (fcc) örgü.....	11
Şekil 2.6. Zinc-Blende yapı	11
Şekil 2.7. GaAs'nin çinko-sülfür yapısı	12
Şekil 2.8. Basit kübik için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi	17
Şekil 2.9. Cisim merkezli kübik için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi.....	17
Şekil 2.10. Yüzey merkezli kübik için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi.....	17
Şekil 4.1. III-V grubu yarıiletkenlere ait enerji bant diyagramı	18
Şekil 4.2. K Uzayında Brillouin bölgesindeki bant aralığının şematik gösterimi	24
Şekil 5.1. Pseudopotansiyel ve dalga fonksiyonu.....	62
Şekil 5.2. Gümüşün 5s, 5p ve 5d seviyelerine ait “gerçek” ve pseudo dalga Fonksiyonları	63
Şekil 5.3. Gümüşün 5s, 5p ve 4d seviyelerinin pseudopotansiyelleri	65
Şekil 6.1. $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ alaşımının enerji bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu.....	77

Şekil	Sayfa
Şekil 6.2. x ve y 'in bir fonksiyonu olarak üçlü alaşımların yasak enerji aralığının değişimi	78
Şekil 6.3. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$; $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için dielektrik fonksiyonun fonksiyonun (a) reel ve (b) sanal bileşenleri	88
Şekil 6.3. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$; $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için dielektrik fonksiyonun fonksiyonun (a) reel ve (b) sanal bileşenleri	89
Şekil 6.4. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$; $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ enerji kayıp fonksiyonu	90
Şekil 6.5. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$; $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için Kırılma indisleri	91
Şekil 6.6. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$; $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için sönüm katsayıları.....	92
Şekil 6.7. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$; $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için soğurma katsayıları.....	93
Şekil 6.8. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için yansıma katsayıları	94

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
$\text{\AA}$	Angstrom
a_0	Örgü Sabiti
B	Bulk Modülü
C	Elastik Sabiti
E_g	Yasak enerji aralığı
E_{xc}	Değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi

Kısaltmalar	Açıklama
Ab-initio	Temel ilkelere dayanan
ABİNİT	Yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı olarak pseudo potansiyel yöntem kullanan ab-initio metodu
BZ	Brillouin Bölgesi
Bcc	Cisim Merkezli Kübik Örgü
CG	konjuge-gradyent
DOS	Durum Yoğunluğu
DFT	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
EOS	Equation of State
fcc	Yüzey Merkezli Kübik Örgü
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
GaAs	Galyum Arsenik
GaP	Galyum fosfor
HF	Hartree-Fock Teorisi

Kısaltmalar	Açıklama
InAs	İndiyum Arsenik
IBZ	İndirgenemeyen Brillouin Bölgesi
InP	İndiyum fosfor
LCAO	Atomik Orbitallerin Lineer Bileşimi
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
MO	Moleküller Orbital
OPW	Ortogonalize Düzlem Dalgalar
Sc	Basit Kübik
ZB	Zinc-Blende

1. GİRİŞ

Teknolojide ki hızlı gelişme ve buna paralel olarak bilgisayar simülasyonunun teorik çalışmalarda kullanılmaya başlaması, bilime yeni boyutlar kazandırmıştır. Son zamanlarda simülasyon teknikleri kullanılarak mikro yapıdaki olayların ve özelliklerin incelenmesi önemli bir bilgi odağı olmuştur. Ayrıca, deney ve teorinin yeterli olmadığı durumlarda bilgisayar simülasyonundan faydalanmak mümkün olabilmektedir. Bu alana bilgisayarda deney yapmak da denebilir. Mikro dünyanın bilgisayarda incelenmesi, gerçek olayların bilgisayar ortamında teorik olarak modellenmesine ve bu modellerin sayısal çözümlerini elde etmek ilkesine dayanmaktadır. Moleküler modelleme, bir molekülü veya moleküler sistemi inceler. Bu inceleme de iki temel yöntem vardır:

- Deneysel Yöntemler
- Teorik Yöntemler

Teorik yöntemler ana hatları ile iki gruba ayrılabilir:

- Analitik Yöntemler
- Modelleme veya simülasyon

Moleküler modellemede hesaplama yapılırken genellikle.

- ✓ Problem
- ✓ Metot
- ✓ Yazılım
- ✓ Bilgisayar gereklidir.

Başka bir ifade ile öncelikle inceleyeceğimiz bir problemin, yani molekülün veya moleküler sistemin olması gerekir. Amaç molekülün özelliklerini hesaplamaktır. Bu özellikler fiziksel, kimyasal, biyolojik olabilir. Molekülün bu özelliklerini

hesaplarken fizik yasalarına göre bir metot kullanmalıyız. Matematiksel olarak ifade edilmiş olan bu yöntemler analitik olarak doğrudan moleküle uygulanamazlar veya uygulanması çok zor ve zaman alıcıdır. Bu nedenle, problemi çözecek yöntemler bilgisayar programı olarak kodlanmıştır. Dolayısıyla araştırmacı, çözeceği sistem için bir metot seçer ve bu metodun kodlandığı programı bilgisayarda çalıştırarak, sistemini inceler ve molekülün özelliklerini hesaplar.

Moleküler modelleme, fizik yasalarından hareketle bir molekülün özelliklerinin bilgisayar yardımı ile hesaplanmasıdır. Bu alanda çalışanlar genellikle bir metot geliştirmezler, daha önce geliştirilmiş olan metotları kullanırlar. Moleküler modelleme en fazla kısıtlama (akronim) kavramları kullanan bilim dalıdır. Örneğin Hartree-Fock Teorisi (HF). Yoğunluk Fonksiyonel teorisi (DFT) olarak isimlendirilir.

Moleküler modelleme ile 1-10 atomlu küçük moleküller. 20-40 atomlu orta büyüklüklü moleküller. 40'dan fazla atomlu büyük moleküller incelenmektedir. Bu moleküllerin incelenmesinde atom sayıları, programın yazıldığı yıllara ve gelişen teknolojiye göre değişmektedir.

Molekülde elektron sayısı arttıkça aynı fiziksel büyüklük daha kalitesiz bir metotla hesaplanmak zorunda kalınır. Moleküllerde hesaplanmak istenen özellikler,

- Geometrik Yapısı
- Enerjisi
- Dipol Momenti
- Polarizabilitesi
- Spektrumları
- Fonon-Dispersiyonu

dır. Tüm bu özelliklerin hesabı sistemin enerjisinin analitik olarak bilinmesine bağlıdır. Enerji hesabı yapıldığında, enerji değeri ve enerjinin analitik formu bulunur.

Enerjinin analitik formu, sayısal değerinin yanında daha önemlidir. Çünkü analitik ifade, molekülün fiziksel büyüklüğü ile doğrudan ilişkilidir. Bu yüzden en dikkate değer özellik enerjidir. Son yıllarda geliştirilen bilgisayar programları ile yarı iletken malzemelerin bilgisayar simülasyonları yaygın bir şekilde yapılmaktadır. Bu yarı iletken malzemeler modern bilgi ve iletişim araçlarının temelini teşkil ederler. Diyotlar, iki-kutuplu eklem transistörler ve alan etkili transistörler gibi elektronik araçlar modern bir elektronik teknoloji sağlar. Laser diyotlar, modülatörler ve dedektörler gibi elektro-optik araçlar ise optiksel çalışma ağı imkânını verir. Bu araçlara ek olarak yarı iletken yapılar; temel fizikte bazı soruların açıklamasında aşama kaydedilmesini sağlamıştır. Kuantum Hall Etkisi, çoklu-cisim etkisi ve düşük boyutlar ile ilgili birçok olgu yarı iletken yapılarında çalışılmıştır [1].

1948 yılında J.Thomson ve ekibinin Bell laboratuvarında geliştirdiği ilk yarı iletken devre teknolojisinde yeni bir çağ açmıştır. İlk yıllarda silisyum ve germanyum elementleri bu yeni teknolojisinde kullanılmıştır. 1950'li yıllarda elektronik cihazlarda elektron tüplerinin yerlerini silisyum ve germanyum transistörlerin almasıyla bilim adamlarının dikkati yarı iletkenler üzerine çekilmiş ve bu konudaki çalışmalar yoğunlaşmıştır. Saf yarı iletkenler olan silisyum ve germanyumun, gelişen elektronik teknolojisine cevap veremez duruma gelmesi araştırmaları bileşik yarıiletken materyaller üzerine yönlendirmiştir. Özellikle III-V grup yarı iletkenler; galyum. İndiyum, alüminyum gibi III. Grup elementleri ile arsenik. Fosfor, antimon gibi V. grup elementleri arasında yapılan bileşiklerdir ve yarı iletkenlerin önemli bir alt grubunu oluştururlar. Grubun en iyi bilinen bileşik yarı iletkenleri InAs. GaAs. InSb. GaP, GaSb olup ve grubun InGaAs, AlGaAs, InGaN, GaAsP gibi üçlü ve InGaAsP gibi dördü alaşımlardır.

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ gibi III-V grubu üçlü alaşım yarı iletkenler yüksek hızlı elektronik ve optoelektronik devrelerde üstün performans gösterir. III-V grubu yarı iletkenlerden olan GaAs kızıl-ötesi bölgede aktif olduğundan dolayı optoelektronik sistemlerde geniş uygulama alanı bulmuştur. Özellikle yarıiletken teknolojisinde $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ gibi alaşımlar, dedektör yapılarında kullanılmaktadır. Ayrıca, MBE (Molecular Beam

Epitaxy) ve MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) gibi metotlarla elde edilen III-V yarı iletkenlerinin ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ gibi) manyetik hassasiyetlerinin yüksek olması, manyetik mikrosensör üretiminde de kullanılmasını sağlamıştır [2, 3]. Günümüzde teknolojik önemini gittikçe artan GaAs, InAs ve GaP tabanlı In, P eklenmiş yarıiletkenlerin üretimi ve teknolojik cihazlarla kullanımı gittikçe artmaktadır. Üretilen bu tür yarıiletken alaşımlarla ilgili deneysel çalışmalar yoğun olarak yapılmaktadır.

Bu çalışma, yarı iletken alaşımları deneysel olarak laboratuarda hazırlayan ve test eden bilim insanlarına, yapacakları çalışmalarda ışık tutmak, alaşımlara yapacakları katkı miktarlarının değişimini belirlemelerine yardımcı olmak ve teorik çalışmaların deneylerle ve diğer teorik çalışmalarla uyumunun belirlenmesi için yapılmıştır. Bu amaçla. GaAs, GaP ve InAs ikili yapılarına değişik oranlarda In ve P eklenmesi ile elde edilebilecek yeni yarı iletken alaşımlarının özellikleri incelenmiştir.

Bu çalışmada, (GaAs, GaP, InAs ve InP) ikili, ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ ve $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$) üçlü ve ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$) dörtlü yarı iletken alaşımları teorik olarak incelenmiştir. Hesaplamalar, CASTEP bilgisayar simülasyonu paket programı kullanılarak yapılmıştır. Hesaplamalar da ilk olarak yapıların geometrik optimizasyon yapılmış, yapıların x ve $y = 0; 0,5; 0,50; 0,75$ ve 1 kompozisyon değerine bağlı olarak örgü sabiti değerleri bulunmuştur. Daha sonra optimize edilmiş molekülün elektronik özellikleri, elastik sabitleri ve optik özellikleri hesaplanmıştır. Ayrıca GaAs yapının In ve P katılmasına bağlı olarak oluşan ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ve $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$) üçlü ve ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$) dörtlü alaşımlarının optik özellikleri x ve $y = 0,50$ değeri için hesaplanarak birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlar, deneysel ve teorik çalışmalarla karşılaştırılarak yorumlanmıştır.

Bu çalışma; birinci bölümde çalışmanın girişi, ikinci bölümde kristal yapılar ile ilgili temel ve teorik bilgiler, üçüncü bölümde yarı iletkenlerin genel yapısı, dördüncü bölümde bant yapısı, elastik sabitleri, bulk modülü ve optik özelliklerin tanımı,

beşinci bölümde hesaplamalar ile ilgili teorik bilgiler, altıncı bölümde yapılan çalışmaların tartışılması şeklinde hazırlanmıştır.

2. TEMEL TEORİK BİLGİLER

Bu bölümde kristal yapılar, ters örgü ve brillouin bölgesi hakkında kısa bilgiler verilmiştir.

2.1. Kristal Yapılar

Bir katı, dışarıdan bakıldığında sürekli ve sert bir cisim olarak görünse de, deneyler katıların atomlar veya atom gruplarının oluşturduğu temel birimlerin düzenli tekrarı ile oluştuğunu göstermektedir. Bu temel birimler, katının içerisinde rastgele değil, birbirlerine göre oldukça düzenli konumlarda bulunurlar. Atom veya atom gruplarının böyle bir düzen içinde yerleştiği katı cisimlere *kristal* denir. Kısaca kristal, atomların üç boyutlu ve periyodik dizilişidir [4]. Bir kristal yapıda atomların denge konumları, kristal boyunca aynı desen tekrar edecek şekilde düzenlenir. Bu düzende atomların yerleri kolay bir şekilde belirlenebilir. Pek çok kristalin atomik yapısı yüksek bir simetriye sahip olması ile karakterize edilebilir ve çoğu zaman kristal yapılar gösterdikleri simetriye göre sınıflandırılır.

Üç boyutlu bir kristalde bir örgü, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ gibi üç temel öteleme vektörü ile tanımlanır. Buna göre $\vec{r}$ konumlu bir yerdeki atomdan baktığımızda kristalin görünümü nasıl ise, $\vec{r}'$ konumlu bir yerde de aynı olur ve konum vektörü.

$$\vec{r}' = \vec{r} + n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (2.1)$$

şeklinde verilir. Buradaki n_1, n_2 ve n_3 her değeri alabilen üç tamsayıdır. Herhangi iki $\vec{r}$ ve $\vec{r}'$ noktalarından bakıldığında, atomların dizilişi aynı olacak şekilde $\{n_1, n_2, n_3\}$ tamsayı üçlüsü bulunabiliyorsa $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vektörlerine *ilkel öteleme vektörleri* denir [5]. Buna göre kristalin yapı taşı olabilecek en küçük hücre, bu ilkel örgü vektörleri ile oluşturulur.

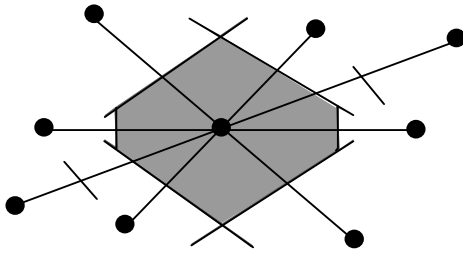
Öteleme, kristallerin önemli bir özelliğidir. Tüm öteleme seti (takımı) uzayda bir örgü oluşturur ve bu uzaydaki herhangi bir ötelenme, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ilkel vektörlerin tam-katları olarak,

$$T = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (2.2)$$

ile gösterilen bir kristal öteleme vektörü ile tanımlanır. Örgü üzerindeki herhangi iki nokta bu tür vektörlerle birbirine ötelenebilir. İlkel eksenleriyle tanımlanan prizmaya ilkel hücre adı verilir. İlkel hücre, kristal öteleme işlemini tekrarlamak suretiyle tüm uzayı doldurur [5]. Bu hücre aynı zamanda en-küçük hacimli hücredir ve bu hacim

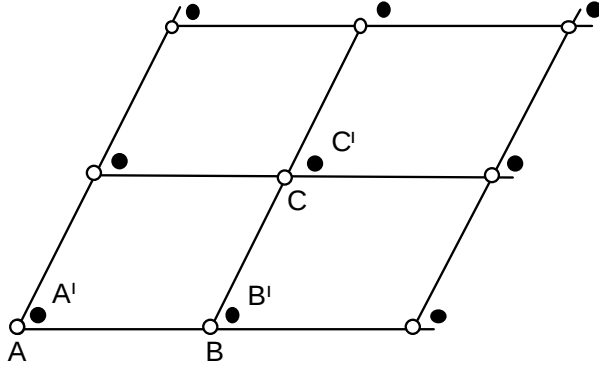
$$v = \left| \vec{a}_1 \bullet (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \right| \quad (2.3)$$

şeklinde ifade edilir. Başka bir ilkel hücre türü de Wigner-Seitz hücresidir. Bu hücre orijine göre simetriktir ve mümkün olan en küçük alanlı hücredir. Düzlemde böyle bir hücreyi kurmak için. Merkez olarak bir örgü noktası seçilir ve bu noktadan öteki en yakın diğer örgü noktalarına bir çizgi çizilir. Buna takiben her çizginin orta dikmeleri çizilir. Bu doğruların kapattığı bölge Wigner-Seitz hücresi olarak bilinir.



Şekil 2.1. Wigner-Seitz ilkel hücresi

İlkel birim hücredeki atomların konumlarına ve tiplerine *temel (motif)* denir. Motifi tekrarlayarak periyodik kristali tümü ile oluşturan ötelenme (translations) işlemlerinin cümlesi(seti). Bravais örgüsü denilen bir noktalar dizisi oluşturur.



Şekil 2.2. İki boyutlu kristalin örgü noktaları

Bir Bravais örgüde bütün örgü noktaları eşdeğerdir ve bunun sonucu olarak da kristaldeki bütün atomların aynı cins olması gerekir. Bravais olmayan örgüde, örgü noktalarının bazıları eşdeğer, bazıları da eşdeğer değildir. Bu durum şekil 2.2’ de gösterilmektedir. Şekildeki A. B. C. örgü noktaları birbirine eşdeğerdir. Aynı şekilde A’. B’C’, örgü noktaları da kendi aralarında eşdeğerdir. Bunun yanında A ve A’. B ve B’ gibi noktalar eşdeğer değildirler. A dan A’ ne giden bir öteleme altında örgü değişmez kalmaz (invariant değildir). Bu durum A ve A’ atomları ister aynı cins ister farklı cins olsun hep aynıdır [6]. Bir kristal için.

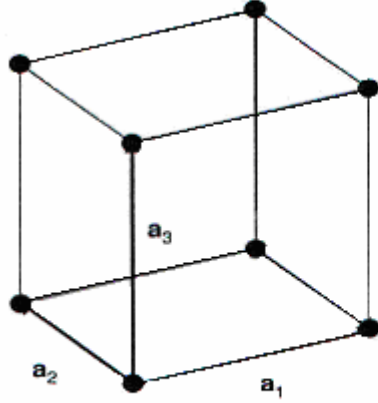
Kristal yapı = Bravais örgü+temel

şeklinde belirtilir.

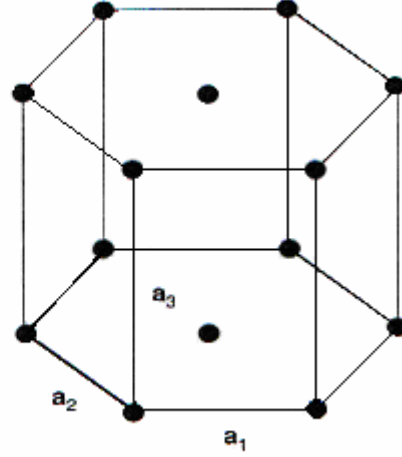
“Dönme”. “yansıma” ve “inversiyon” gibi, kristali değişmemiş (invariant) bırakabilecek başka nokta işlemleri de bulunabilir. Bunlar da. Uzak grubu= ötelenme grubu+nokta grubu olarak özetlenebilir. Bir simetri işlemi sonunda her örgü noktası, aynı görünüm ve komşuluklara sahip olmalıdır [7].

Her iki-boyutta ilkel vektörler arasındaki açılar 90° ya da 60° olduğunda, örgü ilave simetrilere sahip olur ve örgünün seçimi daha da özel olur. A uzunluk boyutunda olmak üzere, öteleme vektörleri aşağıdaki gibi olur:

$$\begin{aligned}
 a_1 &= (1, 0) & (1, 0) & (1, 0) \\
 a_2 &= (1, 0) & (0, \frac{b}{a}) & (\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})
 \end{aligned} \tag{2.4}$$



(a)



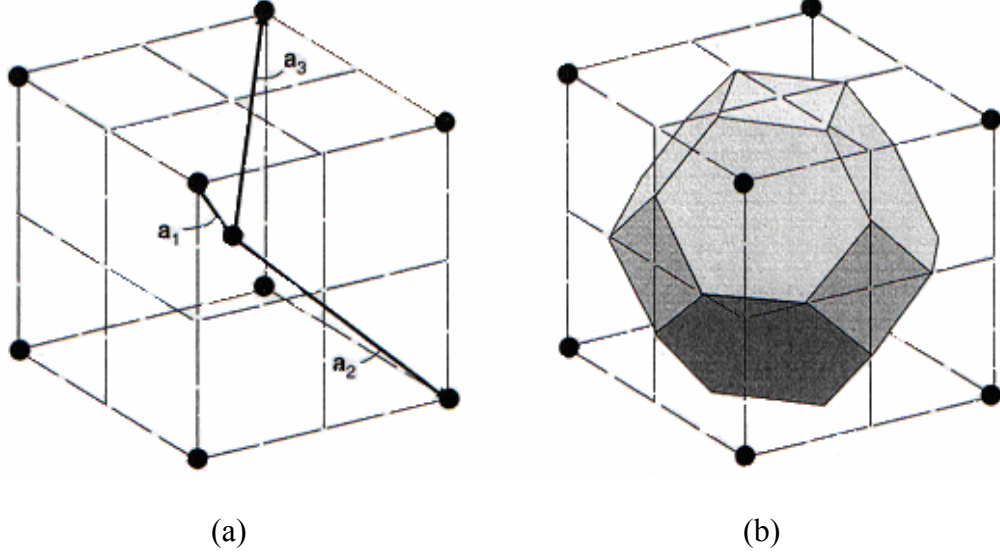
(b)

Şekil 2.3. (a) Basit kübik (b) hexagonal Bravais Örgüleri. Basit kübik halde çizilen hücre bir Wigner-Seitz hücresidir ve Brillouin bölgesi de aynı şekilde sahip olur. Hexagonal durumda, gösterilen hacimde üç atom bulunur; Wigner-Seitz hücresi de hexagonaldır, fakat 90° dönmüş ve hacmi de $1/3$ 'e düşmüştür. Ters örgüsü de 90° dönmüş bir hexagonaldır [7]

Şekil 2.3 (a) Basit kübik (b) hexagonal Bravais, bir çok kristalde meydana gelen üç-boyutlu örgü örneklerini göstermektedir. Yüzey merkezli kübik (fcc) ve cisim merkezli kübik (bcc) örgüleri için ilkel vektörler sırası ile aşağıdaki şekilde seçilebilir (a biriminde):

Basit kübik	Basit Hex.	fcc	Bcc
$a_1 = (1, 0, 0)$	$(1, 0, 0)$	$\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$	$\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$
$a_2 = (0, 1, 0)$	$\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)$	$\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$	$\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$
$a_3 = (0, 0, 1)$	$\left(0, 0, \frac{c}{a}\right)$	$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$	$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$

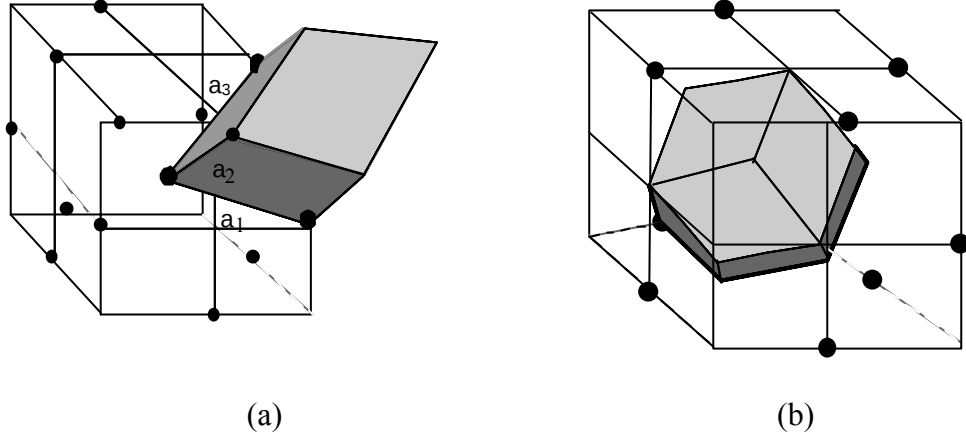
(2.5)



Şekil 2.4. (a) Cisim merkezli kübik örgü, örgü vektörlerinin çeşitli seçimlerinden biri. Klasik kübik hücrenin merkezi atomunun en-yakın sekiz komşu atomu ve bunların $\sqrt{3}/2$ a mesafeleri (a mesafesine 6 tane ikinci en-yakın komşuları bulunmaktadır). (b) örgü vektörlerinin orta dikmeleri yolu ile oluşturulan Wigner-Seitz hücresi görülmektedir (bu ayrıca fcc örgünün Brillouin bölgesidir).

Şekil 2.4’de cisim merkezli kübik ve Şekil 2.5’te ise yüzey merkezli kübik örgüler gösterilmiştir. Klasik kübik hücreler, merkezleri ile birlikte kesikli çizgilerle gösterilmiştir. Merkeze en-yakın komşu sayısı bcc için sekiz, fcc örgü için 12 tanedir. Her biri için ilkel vektörlerin bir seçimi göstermektedir. Bu oluşturulması en kolay hücredir; fakat bu hücre kübik simetriye sahip değildir ve ilkel vektörlerin farklı seçili farklı hücreler oluşturur.

Her bir Bravais örgünün Wigner-Seitz hücresi. Şekil 2.4 ve Şekil 2.5’te gösterilmiştir ve bu hücre, merkezi noktadan itibaren çizilen öteleme vektörlerinin orta dikme düzlemlerinin kapattığı bölgedir. Bu hücre hesaplamalarda çok yararlı olur. Çünkü bu hücre, bir merkezi örgü noktasına en yakın noktaların oluşturduğu çok özel ve tek hücredir ve ilkel ötelemelerin seçiminden bağımsız olup Bravais örgünün tüm simetri özelliklerine sahiptir.



Şekil 2.5. (a) Merkezi bir konuma göre sıkı-paket yapılı 12 komşunun yüzey merkezli kübik (fcc) örgü. Sağdaki şekil, ilkel örgü vektörleri ve paralel yüzlü ilkel birim hücresinin çeşitli seçilişlerinden sadece biridir; bunun simetrisi örgünün simetrisinden daha azdır. (b), aynı yapının Wigner Seitz hücresidir ki bu aynı zamanda bcc örgünün Brillouin bölgesidir [7]

Özellikle bilgisayar programları için düzgün bağıntılar türetmek açısından, ilkel vektörlerin setini “ $a_{ij} = (a_i)_j$ ” şeklinde bir kare matrisle ifade etmek yararlıdır; burada j Kartezyen bileşeni, i ilkel vektörü gösterir.

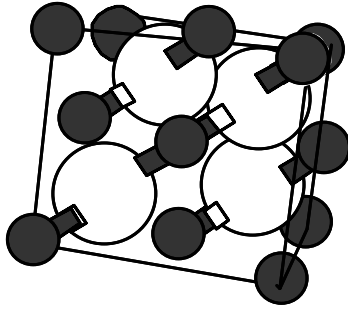
2.2. Basit Kristal Yapılar (Zinc-Blende)

Uzay grubu $F43m(216)$ olup; ZnS, BeS, BeSe, BeTe, BN, BP, GaAs, InAs ve InP bu yapıya örnek bileşiklerdir. Uzay örgüsü yüzey merkezli kübik olup, atomik koordinatlar

Zn 0.00 0.00 0.00

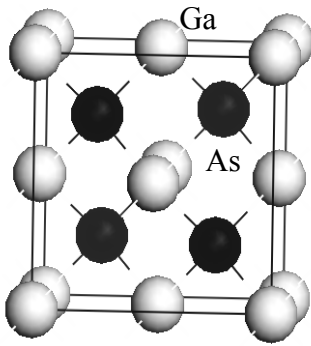
S 0.25 0.25 0.25

şeklindedir.



Şekil 2.6. Zinc-Blende yapı

Çeşitli teknolojik ve elektronik aygıtların yapımında kullanılan III-V yarıiletkenler genellikle çinko-sülfür (Zinc-Blende) kristal yapısına sahiptir.



Şekil 2.7. GaAs'nin çinko-sülfür yapısı

Şekil 2.7 'de gösterildiği gibi çinko-sülfür kristal yapısında her bir grup III atomu en yakın komşu olarak dört tane grup V atomuna sahiptir. III-V yarı iletken grubunun farklı üyeleri göz önüne alındığında komşu atomlar arasındaki uzaklık 0.236 nm'den 0.280 nm'e kadar yaklaşık %20 oranında değişir. III-V yarı iletkenlerde, iki elementin farklı elektronegatifliklerinden dolayı hem iyonik hem de kovalent bağlanma görülür. Kovalent bağlanma diğerine göre daha baskındır. Bileşik farklı iki element içerdiğinden, bağ boyunca elektronların dağılımı simetrik değildir ve yük dağılımı büyük atoma doğru kaymıştır. Atomlardan biri net bir elektrik yükü fazlalığına sahip olduğundan, bağdaki elektron dağılımı elektronegatifliği fazla olan atoma doğru kayar. Bu kayma süreci bağa iyonik bir karakter kazandırır [8].

2.3. Ters Örgü Vektörleri

Her birim hücreindeki elektron yoğunluğu aynı olan bir kristali tanımlayan herhangi bir fonksiyon $f(r)$ olsun. $f(r)$ fonksiyonu,

$$f(r+T(n_1.n_2.....))=f(r) \quad (2.6)$$

Şeklinde yazılır ve ilginç özelliklere sahiptir. Burada T bir ötelenmeyi tanımlar. Böyle bir periyodik fonksiyon, ters uzayda tanımlanan q dalga vektörlü Fourier bileşenleri yardımı ile Fourier dönüşümü ile temsil edilebilir. Fourier bileşenleri, periyodik Ω_{kristal} kristali $N_{\text{hücre}} = N_1 X N_2 X \dots$ şeklinde hücrelerinden oluşacak şekilde sınırlanırsa formüller çok basitleşir. O zaman her bir bileşen Born-Von Karmen periyodik sınır şartlarını sağlaması gerekir:

$$\exp(iq \cdot N_1 a_1) = \exp(iq \cdot N_2 a_2) \dots = 1 \quad (2.7)$$

Böylece q, her bir ilkel a_i vektörü için $q \cdot a_i = 2\pi \frac{\text{tam}}{N_i} i$ sağlayan vektörler setine sınırlanmış olur. Kristal hacmi (V_{kristal}) çok büyükse, son ifade sınır şartlarının seçiminden bağımsız olur.

Fourier dönüşümü.

$$f(q) = \frac{1}{\Omega_{\text{kristal}}} \int_{\Omega_{\text{kristal}}} dr f(r) \exp(iq \cdot r) \quad (2.8)$$

şeklinde ifade edilirse periyodik bir fonksiyon için şu şekilde yazılabilir.

$$f(q) = \frac{1}{\Omega_{\text{kristal}}} \sum_{n_1, n_2 \dots} \int_{\Omega_{\text{hücre}}} dr f(r) e^{iq \cdot (r+T(n_1, n_2 \dots))} \quad (2.9)$$

$$= \frac{1}{N_{\text{hücre}}} \sum_{n_1, n_2, \dots} e^{iq \cdot T(n_1, n_2, \dots)} \frac{1}{\Omega_{\text{hücre}}} \chi \int_{\Omega_{\text{hücre}}} d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{ip \cdot \mathbf{r}}$$

Orta sıradaki tüm örgü noktaları üzerinden alınan toplam, bütün T ötelemeleri için, $q \cdot T(n_1, n_2, \dots) = 2\pi \times \text{tam}$ dışındaki tüm q'lar için sıfır olur. $T(n_1, n_2, \dots)$. a_i ilkel ötelemelerinin tam katları olduğundan. $q \cdot a_i = 2\pi \times \text{tam}$ yazılabilir, q'nün bu şartı sağlayan Fourier bileşenleri seti “ters örgü” oluşturur. İlkel öteleme vektörleri (a_i) nin ters vektörleri b_i olarak alındığında ($i = 1, \dots, d$)

$$b_i \cdot a_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (2.10)$$

şartını sağlar. Ancak $f(\mathbf{r})$ 'nin sıfırdan farklı bir Fourier bileşeni yani $q = G$ sağlar. Burada G ters örgü uzayının “örgü vektörüdür”:

$$G(m_1, m_2, \dots) = m_1 b_1 + m_2 b_2 + \dots \quad (2.11)$$

burada m_i $i = 1, d$ tamsayılardır. Her bir G için, periyodik fonksiyonunu Fourier dönüşümü

$$f(G) = \frac{1}{\Omega_{\text{hücre}}} \int_{\Omega_{\text{hücre}}} d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \exp(iG \cdot \mathbf{r}) \quad (2.12)$$

Olarak yazılabilir. Bir kare matris $b_{ij} = (b_i)_j$ şeklinde tanımlanırsa (aynen α_{ij} matrisinde olduğu gibi), ilkel vektörler birbirine aşağıdaki gibi bağlı olur:

$$b^T \alpha = 2\pi 1 \rightarrow b = 2\pi (a^T)^{-1} \text{ veya } \alpha = 2\pi (b^T)^{-1} \quad (2.13)$$

a_i ve b_i vektörlerinin birbiri arasında daha yaygın olarak kullanılan bağıntılar da vardır. Bu bağıntılar b_1 , b_2 ve b_3 için

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1), \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2), \quad (2.14)$$

Şeklinde ifade edilir. Burada V_c ,

$$V_c = \left| \vec{a}_1 \bullet (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \right|$$

şeklinde ifade edilen hacim ifadesidir. $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ ve $\vec{b}_3$ ters örgünün temel yer değiştirme vektörleridir. Ters örgünün hacmi ise

$$V'_c = \left| \vec{b}_1 \bullet (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) \right| \quad (2.15)$$

Şeklinde verilir. Bir kare örgünün (basit kübik) ters örgüsü de, bir kenarı $2\pi/\alpha$ olan basit kübik bir kare örgü olur. bcc ve fcc örgüleri biri diğerine gör birbirinin ters örgüsüdür. Eş. 2.5'deki üç boyutlu örgülerin her biri için ters örgülerinin ilkel vektörleri, $2\pi/\alpha$ birimleri ile

Basit kübik	b.hex.	fcc	bcc
$b_1 = (1, 0, 0)$	$\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$	$(1, 1, -1)$	$(0, 1, 1)$
$b_2 = (0, 1, 0)$	$\left(1, \frac{2}{\sqrt{3}}, 0\right)$	$(1, -1, 1)$	$(1, 0, 1)$
$b_3 = (0, 0, 1)$	$\left(0, 0, \frac{a}{c}\right)$	$(-1, 1, 1)$	$(1, 1, 0)$

şeklinde verilir. (2.16)

2.4. Brillouin Bölgesi ve İndirgenemeyen Brillouin Bölgesi

Birinci Brillouin bölgesi (BZ) ters örgünün Wigner-Seitz hücresidir. Merkezden karşılıklı örgü noktalarına vektörlerin dikey ikili vektörleri olan düzlemler tarafından tanımlanır.

BZ üzerinden alınan integraller, sadece İndirgenemeyen Brillouin bölgesi (IBZ) üzerinden alınan integrallerle yer değiştirebilir. Örneğin, toplam enerjide gerekli olan toplamalar;

$$\bar{f}_i = \frac{1}{N_k} \sum_k f_i(k) \quad (2.17)$$

$$\bar{f}_i = \sum_k^{IBZ} W_k f_i(k) \quad (2.18)$$

formuna sahiptir. Yoğunluk ise;

$$n(r) = \frac{1}{N_k} \sum_k n_k(r) = \frac{1}{N_{\text{grup}}} \sum_{R_n} \sum_k^{IBZ} W_k n_k(R_n r + t_n) \quad (2.19)$$

biçiminde yazılabilir. Simetri işlemleri kullanılarak hesaplamalar basitleştirile bilmektedir. İyi bir örnek, kübik kristallere uygulanan Monkhorst-Pack “mesh”leridir; burada 48 simetri işlemi vardır, öyle ki IBZ, toplam BZ’un 1/48’i olur. $N_i=2$ ile tanımlanan bir setin BZ’u içinde $2^3=8$ tane nokta vardır. Bu IBZ’u içinde 1 tek noktaya indirgenir. Benzer şekilde BZ içinde $N_i=4$ için $4^3=64$ nokta olur. Bu da IBZ içinde 2’ye inecektir. $N_i = 6^3 = 216$ ve BZ’undaki nokta sayısı IBZ’unda 10 olacaktır. Örnek olarak, fcc için 2-nokta seti

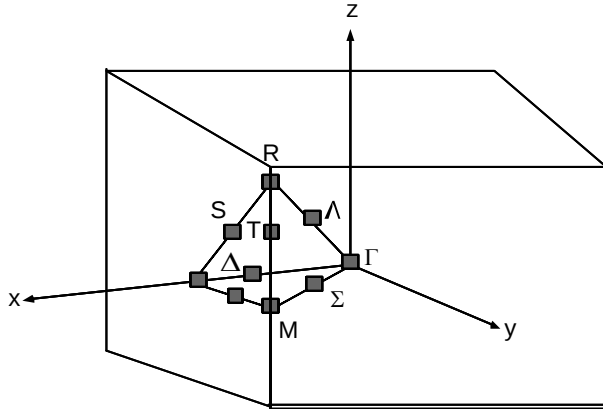
$(2\pi/\alpha)(1/4, 1/4, 1/4)$ olarak alındığında özellikle yarı iletkenlerin enerjilerini doğru olarak verdiği görülmüştür. 10-nokta setinin pek çok malzeme özelliğinin hesaplanmasında yeterli olduğu görülmüştür [7, 8].

2.5. Yüksek Simetri Noktaları

Şekil 2.8'deki basit küp için yüksek simetri noktaları gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde

$$\Gamma(0,0,0) \quad X(1/2,0,0) \quad M(1/2,1/2,0) \quad R(1/2,1/2,1/2) \quad \Delta(1/4,0,0) \quad \Sigma(1/4,1/4,0)$$

şeklindedir [9].

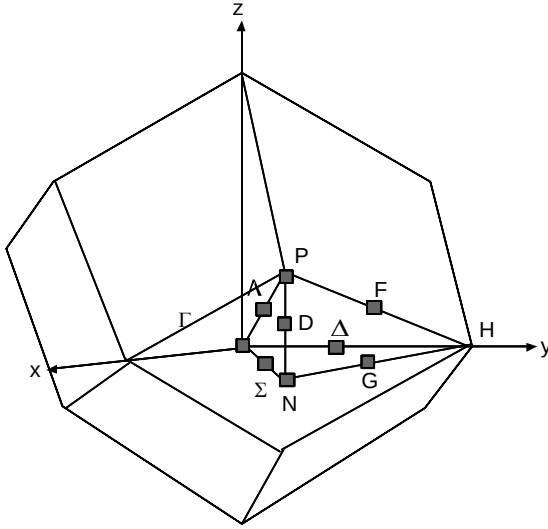


Şekil 2.8. Basit küp için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi

Şekil 2.9'de cisim merkezli kübik örgü için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde

$$\Gamma(0,0,0) \quad X(1/2,0,0) \quad M(1/2,1/2,0) \quad R(1/2,1/2,1/2) \quad \Delta(1/4,0,0) \quad \Sigma(1/4,1/4,0)$$

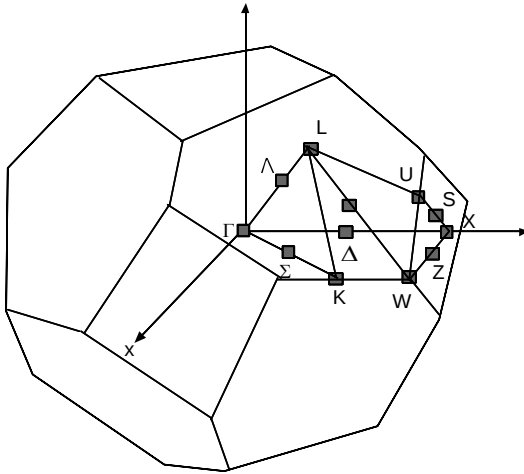
şeklindedir.



Şekil 2.9. Cisim merkezli kübik için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi

Şekil 2.10'de yüzey merkezli kübik örgü için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde

$\Gamma (0,0,0)$ X $(1/2,0,0)$ L $(1/2,1/2,1/2)$ W $(3/4,1/2,1/4)$ $\Delta (1/4,1/4,0)$ $\Sigma (1/4,1/4,0)$ şeklindedir.



Şekil 2.10. Yüzey merkezli kübik için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi. Bu aynı zamanda cisim merkezli kübik örgünün Wigner-Seitz hücresidir.

3. YARI İLETKENLER

3.1. Yarı iletkenlerin Genel Yapısı

Yarı iletken adından da anlaşılacağı gibi yalıtkan ile iletken arasında olan malzemedir. Bu malzemeler, katıların en ilginç ve en önemli sınıfını oluşturur. Yarı iletkenler, metallere yalıtkanlara uzanan geniş bir bölgeyi kapsar ve çok çeşitli uygulama alanları vardır. Yarı iletkenlerin özdirençleri oda sıcaklığında 10^{-2} - 10^9 Ωcm aralığındadır. Bu aralık iyi iletkenler için 10^{-6} Ωcm ve yalıtkanlar için 10^{14} - 10^{20} Ωcm dır. Mutlak sıfırda yarı iletken maddelerin saf kristalleri yalıtkan özelliği gösterir. Yarı iletken olma özelliği ise malzemenin çeşitli şekillerde uyarılması, örgü kusurları veya kimyasal düzende meydana gelen değişiklikler sonucu ortaya çıkar. Bu tür malzemelerin elektriksel iletkenliği, sıcaklığa sıkıca bağlıdır. Sıcaklık yükseldiğinde, yarı iletken malzemelerin özdirençlerinin küçülmesi karakteristik bir özellikleridir [10]. Yarı iletken tipleri çok çeşitli olmakla beraber önemli olanları aşağıdaki gibi sıralayabiliriz:

i) *Elementsel Yarı iletkenler*: Ge ve Si gibi aynı atomdan oluşan yarı iletkenlerdir. Atomlar kovalent bağlarla birbirlerine bağlanmışlardır.

ii) *Bileşik Yarı iletkenler*: İki veya daha çok elementten meydana gelen yarı iletkenlerdir. Bileşik yarı iletkenlerde, elektronegatiflikteki farklılıktan dolayı kristal bağlanma iyonik ve kovalent bağlanmanın bir kombinasyonudur.

iii) *Alaşım Yarı iletkenler*: Bileşiğe belirli miktarda farklı bir elementin katılmasıyla oluşturulan üçlü yada dörtlü yarı iletkenlerdir. Bunlarda bant yapısı, örgü sabiti gibi fiziksel özellikler kendisini meydana getiren ikili yarı iletkenlerden farklıdır. Örneğin $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ gibi. Burada indisler alaşımı meydana getiren element oranlarını gösterir.

3.2.1. III-V Grubu Alaşımlarının Özellikleri

III-V grubu alaşımlar bilimsel ve teknolojik özelliklerinden dolayı son yıllarda kapsamlı bir şekilde araştırılmaktadırlar [11]. Bu alaşımlarının Yasak enerji aralıkları yapılarının wurtzite bileşimlerini elde etmek mümkündür [12-14]. Bu bileşimlerden yeşilden morötesi bölgeye kadar dalga boyu aralığında aktif olan optik cihazlar üretilebilmektedir [15]. Son on yılın ortalarına kadar sadece hegzagonal wurtzite fazdaki GaN için yapılmış hesaplamalar vardı [16]. Fakat son zamanlarda yapılan çalışmalarla Zinc-Blende tipli GaAs, InAs ve GaN için de başarılı sonuçlar elde edildi. III-V bileşikli yarıiletkenlerin genel özelliklerine göre, Zinc-Blende yapıda, kontrol edilebilen n-tipi ve p-tipi katkılılar için wurtzite'dan daha iyi sonuçlar vermiştir. Ayrıca kübik InAs, yüksek sürüklenme hızına ve wurtzite yapıdan daha düşük bant aralığına sahiptir [17].

Doğrudan ve dolaylı enerji yapıları, elektron ve hole etkin kütleleri III-V alaşımlarının bant yapı hesaplamalarının yapılabilmesi için gereken oldukça kritik parametrelerden bazılarıdır. Bununla beraber alaşımlar için bu parametrelerin tam olarak bilinmesi de çok büyük bir önem taşımaktadır.

Günümüzde literatürdeki teorik ve deneysel bilgiler, Zinc-Blende $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ için elektronik bant parametre hesabı yapılması konusunda çalışmalar yapılmasını gerektirmiştir. Bu amaç doğrultusunda virtual kristal yaklaşımı (VCA) altında deneysel sözde potansiyel metodu (EPM) kullanılmıştır. Bant ofset hesaplamalarında katı teorisinin temeli kullanılmaktadır [18]. Bu teoriye göre iki asıl durum mevcuttur. Birincisi özel bulk yarı iletkenleri üzerinde uygulanan yoğunluk fonksiyonu hesaplamalarıyla tam bant yapısının genelleştirilmesine dayanır. İkincisi ise kullanılacak olan referans seviyesinin belirlenmesidir. Bu referans $E_{v,av}$ 'yi belirtir ve Brillouin bölgesinin Γ noktasındaki en üst üç valans bant üzerindeki ortalama değeri tanımlamaktadır. Yasak enerji aralığı E_g alaşımların temel karakteristiğidir. Birçok uygulama için materyal oluşum üzerindeki bant-aralığı bağımlılığının bilinmesi çok önemlidir. Çoğu materyal sistemlerde bu bağımlılık lineer değildir.

Bununla beraber parabolik yaklaşımı, bowing parametresi [19] kullanılarak hesaplayabiliriz.

$$E_g (A_x B_{1-x} C) = x E_g (AC) + (1-x) E_g (BC) - bx (1-x) \quad (3.1)$$

şeklinde ifade edilir.

Burada x , A miktarını. $E_g (AC)$. AC 'nın bant-aralığı enerjisini ve $E_g (BC)$ ise BC bileşiğin bant-aralığı enerjisini gösterir.

4. TEMEL ÖZELLİKLER

Bu bölümde çalışmada incelenen özellikler hakkında kısa bilgiler verilmiştir.

4.1. Geometrik Optimizasyon

Geometrik optimizasyon, en düşük enerjili moleküler yapıyı yani molekülün en kararlı durum geometrisini bulmayı hedefler. Geometrik optimizasyonlar, temelde enerjinin gradyentine yani enerjinin atomik koordinatlara göre birinci türevine dayanır. Bununla birlikte, birkaç çeşit minimizasyon yöntemi bulunmaktadır.

4.1.2. Minimizasyon yöntemleri

Moleküllerde minimum enerji durumunu ve molekülün geometrisini belirlemek için iyi bir başlangıç geometrisinin elde edilmesi gerekir. Başlangıç geometrisini doğru tahmin edebilmek için dört temel metot vardır. Bunlar,

1. x-ray veri tabanlarını kullanmak.
2. Literatürde bulunan standart geometrileri kullanmak.
3. İskelet olarak adlandırılan iki boyutlu basit bir yapı çizmek.
4. Bu iki boyutlu yapıyı üç boyutlu yapıya dönüştürmek.

Bu şekilde oluşturulan bir başlangıç geometrisi için bir f fonksiyonu tanımlanır. Bu f fonksiyonu $x_1, x_2, x_3, \dots, x_i$ değişkenlerine bağlıdır. Ancak bu değişkenler birbirinden bağımsızdır. f fonksiyonunun alabileceği minimum değer $\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0$ veya $\frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_i} > 0$ şartını sağladığı noktalardır.

Minimum enerji değerlerini hesaplamak için iki temel yöntem kullanılır. Bunlar:

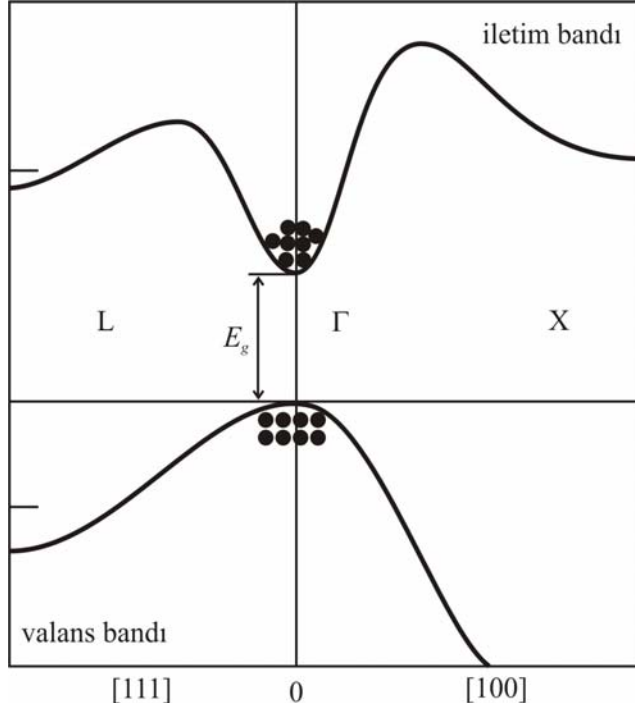
- a) Steepest Descent, Gradyent ve Powel yöntemi: Bu metotlar $\frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_i} = 0$ bağıntısını kullandığı için birinci türev metodu olarak bilinir.
- b) Newton-Raphson yöntemi: Bu metot $\frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_i} > 0$ bağıntısını kullandığı için ikinci türev metodu olarak bilinir [20].

4.2. Bant Yapısı

Katıların bant yapısı genelde Schrödinger denkleminin çözümüyle elde edilir. Enerji bant yapısı, birinci Brillouin bölgesinde elektron enerjisi E 'nin dalga vektörü $\vec{k}$ 'ye göre grafiği ile verilir. Katıların enerji bantları çeşitli nümerik metotlarla hesaplanır. Yarıiletkenler için en çok kullanılan metotlar; Ortogonalize düzlem dalga metodu (OPW) [21] Pseudo-potansiyel metodu. [22] $\vec{k} \bullet \vec{p}$ metodu. [23]'dur.

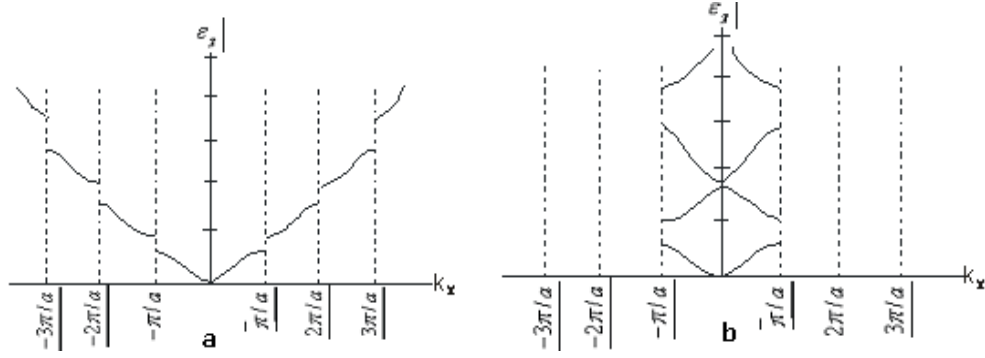
Kristal örgünün periyodikliği nedeniyle bir yarıiletken, izinli ve yasaklanmış enerji bölgelerine sahiptir. Yasak enerji aralığı, yarıiletkenlerin birçok özelliklerini tanımlamakta kullanılan önemli bir parametredir. İzinli enerji bölgeleri yasak bandılar altında ve üstünde yerleşir. Yasak bandın altında kalan ve bağı elektronların oluşturduğu enerji bölgesi valans bandı ve üstünde kalan serbest elektronların oluşturduğu enerji bölgesi iletkenlik bandı olarak adlandırılır.

Bant yapısı, kristal simetrisinin temel bir fonksiyonudur. Bütün III-V grubu yarıiletkenler benzer bant yapılarına sahiptir [23]. III-V grubu yarıiletkenlerin bant yapısı Şekil 4.1 'de gösterilmiştir.



Şekil 4.1. III-V grubu yarıiletkenlere ait enerji bant diyagramı

Valans ve iletkenlik bantları arasındaki enerji farkına *yasak enerji aralığı* denir ve E_g ile temsil edilir. Enerji bantlarının şekline göre yarıiletkenleri iki sınıfa ayırabiliriz; Eğer iletim bandı ile değerlik bandı arasındaki enerji en düşük değere $k=0$ da sahip ise bu yarıiletkenlere doğrudan aralıklı (direk bant aralığına sahip) yarıiletkenler denir. Eğer iletim bandı en düşük enerjiye $k \neq 0$ de sahip ise bu yarıiletkenlere (indirek bant aralıklı) denir. Şekil 4.2’deki Bragg yansımasının elektron dalgaları grafiğinde görüldüğü gibi. $k = \pm \frac{\pi}{\alpha}$ ‘deki aralığında, genişlikli bir enerji aralığı elde edilir.



Şekil 4.2. K uzayında Brillouin bölgesindeki yasak enerji aralığının şematik gösterimi
a) uzatılmış bölge, b) indirgenmiş bölge

Bu yasak enerji aralığı, bir katının iletken veya yalıtkan olmasına göre farklılık gösterir. Örgü sabiti a olan tek atomlu bir lineer örgüdeki bir elektron için, enerji dalga vektörü grafiğini incelendiğinde, $k = \pm \frac{\pi}{a}$ sınırında Bragg yansımasına eşlik eden bir E_g yasak enerji aralığı bulunur, n tane atom için, bulunan diğer enerji aralıkları $k = \pm \frac{\pi}{a}$ değerlerinde olmaktadır. Bu enerji aralıkları, bir katının yalıtkan veya iletken olarak tanımlanmasını sağlayan önemli bir özelliktir.

Bir kristalin bant yapısı, o malzemenin

- Elektronik iletkenlik
- Optik özellikler (renkler dahil)
- Elektronik özelliklerden kaynaklanan yapısal distorsiyonlar (bozulmalar)
- Mekanik ve manyetik özellikler

gibi elektronik, optik ve başka birçok özelliğinin belirlenmesine yardımcı olur.

4.3. Durum Yoğunluğu

Bir kristal yapıda, birinci Brillouin bölgesinde seçilen $\vec{k}$ dalga vektörleri içinde frekans değerlerinden ne kadar bulunduğunu durum yoğunluğu eğrisi (DOS) gösterir. Durum yoğunluğu

$$g(\omega) = \frac{1}{n d \Delta\omega} \sum_{kj} \delta\Delta\omega(\omega - \omega(k, j)) \quad (4.1)$$

eşitliğinden elde edilir. Burada

$$\delta_{\Delta\omega}(\chi) = \begin{cases} 1 & \frac{\Delta\omega}{2} < \chi \leq \frac{\Delta\omega}{2} \text{ ise} \\ 0 & \text{diğer durumlarda} \end{cases} \quad (4.2)$$

şeklindedir. $\omega(k, j)$, k dalga vektörleri için fonon frekansları, j fonon modu, d dinamik matrisin boyutu, ne ise dalga vektörlerinin sayısıdır. Toplama işlemi tüm k dalga vektörleri üzerinden yapılır. Hesaplamalar sonunda frekans farkının sabit kaldığı noktalarda pikler oluşur. Oluşan bu pikler hesaplanan bütün frekans değerlerinin birinci Brillouin bölgesindeki durum yoğunluklarını gösterir.

4.4. Elastik Sabitler

Esneklik uygulanan bir dış zorlanmaya karşı kristalin gösterdiği tepkiye temsil eder ve en yakın komşu atomlar arasındaki bağ şiddetleri hakkında çok önemli bilgiler verir. Bu yüzden, elastik sabitlerinin doğru bir şekilde hesaplanmasından elde edilen bilgiler, katıların makroskopik mekaniksel özelliklerinin anlaşılmasında ve sert malzeme tasarımında çok önemli rol oynar. Küçük atomik yer değiştirmeler için atom içi kuvvetlerin harmonik tabiatı, katıların makroskopik davranışına da bir anlam kazandırır.

Bir katının sıkışması veya gerilmesi, esneklik sınırı aşılmadıkça katının yüzeyine uygulanan kuvvetle orantılıdır. Birim alan başına uygulanan kuvvet zor (stres) tensörü ile katının şeklinde oluşan değişme zorlanma (strain) tensörü ile ifade edilir. Bu iki matris birbiri ile orantılıdır ve orantı katsayısına *elastik sabiti* denir. Katının önemli mekanik özellikleri bu sabitlere bağlıdır.

Tersinir bir deformasyon olayında, uygulanan bir zorun yaptığı iş, iç enerji artışını artışına eşit olmalıdır. Einstein'ın "toplam kuralı" na göre bu ifadenin matematik ifadesi aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$dW = \sigma_{ij} d\epsilon_{ij} = dU \equiv \frac{\partial U}{\partial \epsilon_{ij}} d\epsilon_{ij} \quad (4.3)$$

buradan da

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial U}{\partial \epsilon_{ij}} \quad (4.4)$$

olacağı anlaşılır. Esnekliğin lineer (doğrusal) olduğu varsayılırsa, zor tensörü (σ) ile zorlanma tensörü (ϵ) arasındaki ilişki

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (4.5)$$

şeklinde ifade edilir. Zor tensöründeki σ_{ij} 'de ilk indis kuvvetin yönünü, ikinci indis ise uygulandığı yüzeyi gösterir. Zorun büyüklüğü kuvvetin yüzey alanına oranıdır. Zor tensörünün diyagonal elemanları numuneyi germe eğiliminde ise pozitif, sıkıştırma eğiliminde ise negatif olur. Negatif bir diyagonal elaman basıncı temsil eder. Katıdaki deformasyonlar zorlanma matrisi ile tasvir edilir. Numune zorlandığında madde $r' = r + u$ kadar hareket eder. Eş. 4.5 verilen ifadeyi ϵ_{kl} 'ye göre diferansiyelleyip Eş. 4.4'den elde edilen σ_{ij} yerine konursa

$$c_{ijkl} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{ij}} \quad (4.6)$$

elde edilir. Eşitlikte yer alan c esneklik tensörü olup 81 elemanlıdır. Fakat zor ve zorlanma tensörleri simetrik olduğundan $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk}$ yazılabilir. Bu durumda c 'nin bağımsız eleman sayısı 36'ya düşer.

Dahası, elastik deformasyon sırasında yapılan iş, sadece strain'in fonksiyonu olduğundan.

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{ij}} \quad (4.7)$$

yazılabilir. Bu sonuç Eş. 4.6 ile birlikte düşünüldüğünde $c_{ijkl} = c_{klij}$ olacağı anlamına gelir. Bu da c 'nin bağımsız eleman sayısını 21'e düşürür. Bu elemanlarda çoğu kez kısaca 6x6'lık $c_{\alpha\beta}$ ile c_{ijkl} arasındaki ilişkiler Çizelge 4.1'de özetlenmiştir:

Çizelge 4.1. $c_{\alpha\beta}$ ve c_{ijkl} 'nin indisleri arasındaki Voig bağıntıları

Tensör notasyon (ij veya kl)	11	22	33	23 veya 32	13 veya 31	12 veya 21
Matris notasyon (α veya β)	1	2	3	4	5	6

Örneğin C_{1112} yerine C_{16} alınabilir. Bu ilişkiler kullanıldığında Eş. 4.5;

$$\sigma_a = \sum_{\beta=1}^6 c_{a\beta} \varepsilon_\beta \quad (4.8)$$

şeklinde yazılabilir. Burada.

$$\sigma_{\alpha} = \sigma_{ij} \quad (4.9)$$

$$\varepsilon_{\beta} = \begin{cases} \varepsilon_{kl}, & \beta \in \{1,2,3\}; \\ 2\varepsilon_{kl} & \beta \in \times\{4,5,6\}. \end{cases} \quad (4.10)$$

bağıntıları geçerlidir. Sistemin simetrisine bağlı olarak, $c_{\alpha\beta}$ 'nin bağımsız eleman sayısı azalır. Mesela kübik kristaller için sadece üç tane bağımsız elastik sabiti olabilir [24].

$$\begin{aligned} c_{11} &\equiv c_{22} \equiv c_{33}, \\ c_{12} &\equiv c_{13} \equiv c_{23}, \\ c_{44} &\equiv c_{55} \equiv c_{66}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

diğerleri için $c_{\alpha\beta} = 0$

Bu nedenle kübik kristaller için üç elastik sabiti (c_{11} , c_{12} , c_{44}), onların esneklik özelliklerini belirlemede yeterli olur. Bu simetriye göre $c_{\alpha\beta}$ matrisinin özdeğerleri

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= c_{11} + 2c_{12}, \\ \lambda_2 &= c_{11} + 2c_{12}, \\ \lambda_3 &= c_{44} \end{aligned} \quad (4.12)$$

özvektörleri de;

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= (\varepsilon_1, \varepsilon_1, \varepsilon_1, 0, 0, 0), \\ \varepsilon_2 &= (\varepsilon_2, \varepsilon_3, -\varepsilon_2, -\varepsilon_3, 0, 0), \\ \varepsilon_3 &= (0, 0, 0, 2\varepsilon_4, 2\varepsilon_5, 2\varepsilon_6), \end{aligned} \quad (4.13)$$

şeklinde olur. Bir kristalin mekaniksel olarak kararlı olabilmesi için ikinci mertebeden elastik sabitlerinin pozitif olması gerekir. Born kararlılık kriteri olarak bilinen bu tanıma göre,

$$C_{11}>0, C_{12}>0, C_{44}>0, C_{12}>C_{44} \quad (4.14)$$

olmalıdır. Ayrıca

$$C_{11} - 2C_{12}>0, C_{44}>0 \text{ ve } C_{11}-C_{12}>0. \quad (4.15)$$

Olmalıdır [25].

Günümüzde, bir katının elastik özelliklerini ab-initio kuantum mekaniksel yöntemlerle çeşitli basınç ve sıcaklıklarda hesaplamak mümkün olabilmektedir. Bir malzemenin, bilinen kristal yapılarından yola çıkarak ab-initio toplam enerji yöntemi kullanılarak, elastik sabitlerini hesaplamak amacı ile yaygın olarak kullanılan metotlar geliştirilmiştir. Bunlardan biri, kristalin birim hücrenin hacmini koruyacak şekilde belirli ve küçük bir deformasyon uygulamak, diğeri de elastik sabitlerini, zor-zorlanma (Hooke Yasası) ilişkisinin orantı katsayısı olarak almaktadır.

Çalışmada yapıların elastik sabitlerinin hesaplanmasında kristalin birim hücrenin hacmini koruyacak şekilde belirli ve küçük bir deformasyon uygulanmış ve enerjideki değişimden yararlanarak elastik sabitler hesaplanmıştır. Aşağıda bu yöntem kısaca özetlenmiştir.

Bir strain altındaki katının elastik enerjisi

$$\Delta E = E_{top} - E_0 = \frac{V}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=6}^6 C_{ij} e_i e_j \quad (4.16)$$

şeklinde ifade edilir [24, 25]. Burada V birim hücrenin deformasyona uğramamış durumdaki hacmi. C elastik sabitleri matrisi. ΔE ise $e = (e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6)$ strainden kaynaklanan enerji değişimidir. Kübik sistemler C_{11} . C_{12} . C_{44} olmak üzere üç tane bağımsız elastik sabit vardır. Eğer yapı hexagonal ise bunlara C_{13} ve C_{33} ilave edilir. Örneğin fcc yapı için ilkel hücre vektörleri.

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha/2 & \alpha/2 \\ \alpha/2 & 0 & \alpha/2 \\ \alpha/2 & \alpha/2 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

matrisi ile tanımlanır. Burada α örgü sabitini ifade eder. İlkel hücre vektörleri $\alpha_i (1, \dots, 3)$ bir strain altında

$$\begin{pmatrix} \alpha'_1 \\ \alpha'_2 \\ \alpha'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} * (I + \varepsilon) \quad (4.18)$$

şeklinde olan $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ vektörleri ile yer değiştirir. Burada I birim matrisi, ε ise

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} e_1 & e/2 & e_5/2 \\ e_6/2 & e_2 & e_4/2 \\ e_5/2 & e_4/2 & e_3 \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

şeklinde ifade edilen strain matrisini gösterir. Shear modülü $C' = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$

olmak üzere, ortorombik bir strain $e = (\delta, \delta, (1 + \delta)^{-2} - 1, 0, 0, 0)$ uygulandığı zaman

$$\frac{\Delta E}{V} = 6C'\delta^2 + O(\delta^3) \quad (4.20)$$

şeklinde ifade edilir. Bu eşitlik ile beraber $B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$ eşitliği de kullanılarak C_{11} ve C_{12} hesaplanır. Benzer şekilde bir tri-axial shear straini $e = (0,0,0,\delta,\delta,\delta)$ uygulandığı zaman

$$\frac{\Delta E}{V} = \frac{9}{2} B \delta^2 \quad (4.21)$$

eşitliğinde elde edilir. Aynı zamanda C_{11} ve C_{12}

$$C_{11} = \frac{3B - 4C'}{3} \quad (4.22)$$

$$C_{12} = \frac{3B - 2C'}{3} \quad (4.23)$$

eşitliklerinde de hesaplanabilir. Literatürde [26, 27] hacmi koruyan farklı strain matrislerini görmek mümkündür.

Elastik sabitleri hesaplamak için, farklı zorlamalara (δ)(0.01, 0.02, 0.03,...) karşılık gelen $\frac{\Delta E}{V}$ değişimi hesaplanır. Bu değişimin δ^2 göre grafiği çizilir. Elde edilen doğrunun eğimi ve yukarıda verilen eşitlikler kullanılarak elastik sabitler hesaplanır.

4.5. Bulk Modülü

Bulk modülü, bir malzemenin hidrostatik basınç altında sıkıştırılması halinde onun hacminde oluşacak değişime karşı gösterdiği direnci tanımlayan bir özelliktir. Başka bir deyişle bir deformasyon oluşturmak için gerekli enerjinin bir ölçüsüdür. Bu nedenle hem teorik hem de deneysel açıdan, bir malzemenin (özellikle kübik kristallerin) sertliğini temsil eden yegâne (biricik) malzeme özelliği sayılır. Bir katı maddenin bulk modülü,

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \frac{1}{X} \quad (4.24)$$

ifadesi ile tanımlanır. Burada X sıkıştırılabilirliktir. Mutlak sıfırda entropi sabit olduğundan ve

$$\partial \phi = -P \partial V \quad (4.25)$$

termodinamik eşitliğinden yararlanarak

$$\frac{\partial P}{\partial V} = - \frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2} \quad (4.26)$$

$$B = V \frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2} \quad (4.27)$$

elde edilir. Bulk modülü, kristal yapının sertliği ile doğrudan ilişkili olduğu için basınç ile değişimi önemlidir. Bulk modülünün basınç ile değişimi hacme (V) bağlı olarak,

$$\left(\frac{\partial B}{\partial P} \right)_T = \frac{\partial V}{\partial P} \frac{\partial B}{\partial V} \quad (4.28)$$

şeklinde yazılabilir.

Bulk modülü katıların hal-denklemleri (EOS) için de önemli bir parametredir. Bunun için incelenen yapı optimize edilir ve farklı hacimlere karşı gelen toplam enerji değerleri hesaplanır. Hesaplanan toplam enerji ve hacim değerleri Murnaghan hal denkleminin [27] fit edilir. Elde edilen hacmin-enerji eğrisinin minimumu teorik örgü sabitini verir. Ayrıca Bulk modülü ve Bulk modülünün birinci türevi hesaplanır. Murnaghan hal denkleminin analitik bir ifadesi

$$P = \frac{3B(1-X)}{X^2} \exp \left[\left(\frac{3}{2} B' - 1 \right) (1-X) \right] \quad (4.29)$$

Şeklindedir. Burada B bulk modülü, B' bulk modülünün birinci türevi. X ise $\left(\frac{V}{V_o} \right)^{1/3}$ şeklindedir. Literatürde farklı şekilde ifade edilen Murnaghan hal denklemlerini görmek mümkündür. Örneğin Eş. 4.29.

$$P = \frac{B_o}{B'_o} \left[\left(\frac{V_o}{V} \right)^{B'_o} - 1 \right] \quad (4.30)$$

Şeklinde de ifade edilmektedir.

4.6. Optik Özellikler

Bir yarı iletken üzerine foton gönderildiğinde; atomların elektronları ile fotonların etkileşmesi sonucu soğurma, geçirgenlik, yansıma ve kırılma gibi bazı optik olaylar meydana gelir. Malzeme üzerine gönderilen fotonlar, bir elektronu daha yüksek bir enerji seviyesine uyarmak için yeterli enerjiye sahip değillerse, soğurulma yerine geçirilirler ve malzeme saydam olarak davranır. Bu yüzden yarıiletkenler kısa dalga boylu fotonlar için soğurucu, çok uzun dalga boylu fotonlar için ise saydamdırlar [28]. Bir fotonun soğurulması veya geçirilmesi, fotonun enerjisine, yarıiletkenin yasak enerji aralığına ve atomların dizilişine bağlıdır [29].

Yarıiletkenler, görünür bölge veya kızılötesi spektrum bölgelerinde temel soğurma sınırına sahiptirler. Soğurma sınırının nedeni, malzemenin temel bant aralıklarında optik geçişlerin olmasıdır. Bantlar arası soğurma, katı bir maddenin bantları arasında ki elektronların optik geçiş yaparak uyarılmasıdır. Bantlar arası geçiş bütün katılarda gözlenir. Bir malzemenin soğurma spektrumu, o malzemenin bant yapısı ve geçiş

durumlarındaki yoğunlukla ilgilidir. Bantlar arası soğurma, kuantum mekaniğindeki ışık-madde etkileşiminin, katılarda bant geçiş durumlarına uygulanmasıyla anlaşılır. Bir maddenin elektronik uyarılma spektrumu genellikle frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonuna göre tanımlanır:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega). \quad (4.31)$$

Frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonunun hem reel kısmı (ε_1) hem de sanal kısmı (ε_2) istenilen tüm tepki bilgisini içerirler. Çünkü reel ve sanal kısımlar. Kramers-Kronig [30 -32] bağıntılarıyla birbirleriyle ilişkilidirler:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(\omega) - 1 &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \\ \varepsilon_2(\omega) &= -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \end{aligned} \quad (4.32)$$

Bir katının optik özellikleri, üzerine gelen ışıktan kaynaklanan zamana bağlı elektromanyetik pertürbasyona elektronların verdiği tepki olduğundan. katının optik özelliklerini hesaplamak demek optik tepki fonksiyonunu yani kompleks dielektrik fonksiyonunu hesaplamak demektir.

4.6.1. Optik sabitler

Dielektrik tensörü yardımıyla bir katının bazı optik sabitleri de hesaplanabilir. dielektrik tensörünün reel ve sanal bileşenleri yardımıyla elde edilebilir:

Enerji kayıp fonksiyonu ise şu şekilde tanımlanır:

$$L(\omega) = \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right] = \varepsilon_2(\omega) / [\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)] \quad (4.33)$$

Kırılma indisi n ve sönüm katsayısı k da dielektrik tensörünün bileşenleri ile belirlenir:

$$n(\omega) = \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} / \sqrt{2} \quad (4.34)$$

$$\kappa(\omega) = c \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} / \sqrt{2} \quad (4.35)$$

yansıtıcılık R ve soğurma katsayısı α aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

$$R(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + j\varepsilon_2^2(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + j\varepsilon_2^2(\omega)} + 1} \right]^2, \quad (4.36)$$

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2\omega} \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (4.37)$$

5. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT)'nin temeli. 1927 yılında Thomas ve Fermi [33, 34] tarafından yapılan çalışmaları temel alan Hohenberg ve Kohn teoremleri [35] ve onun devamı olan Kohn-Sham teoremlerine dayanmaktadır [36]. Teorem çok elektronlu sistemlerin taban durum özelliklerini belirlemek için elektron yük yoğunluğu olan $\rho(\vec{r})$ 'yi temel değişken kabul eder. Bu bölümde öncelikle çok cisim problemi ve Born-Oppenheimer yaklaşımı açıklanmış ve daha sonra dalga fonksiyonu ve yoğunluk fonksiyoneli yaklaşımları farklı kaynaklardan [34- 36] yararlanarak özetlenmiştir.

5.1. Çok Cisim Problemi

Elektronlardan ve çekirdekten oluşan bir sistem için Schrödinger denklemi

$$H\Psi = E\Psi \quad (5.1)$$

şeklinindedir. Buraya Ψ dalga fonksiyonu, E ise sistemin toplam enerjisidir. H ise Hamiltonyen operatörü olup, atomik birim sisteminde

$$H = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_i} \frac{1}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_i} \frac{Z_I}{\left| \vec{r}_i - \vec{R}_I \right|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_i} \frac{1}{\left| \vec{r}_i - \vec{r}_{j1} \right|} + \sum_{I=1}^{N_e} \sum_{j>I}^{N_i} \frac{Z_I Z_J}{\left| \vec{R}_I - \vec{R}_{J1} \right|} \quad (5.2)$$

şeklinde ifade edilir. Burada M_I kütle, Z_I atom sayısı $\vec{r}_i$ ve $\vec{R}_I$ ise elektron ve çekirdeğin koordinatlarıdır. Eş. 5.2'de verilen birinci terim elektronun ikinci terim ise çekirdeğin kinetik enerjisidir. Üçüncü terim çekirdek ve elektronlar arasındaki

Coulomb çekim alanıdır. Dördüncü terim elektronlar arasında meydana gelen, beşinci terim çekirdekler arasında meydana gelen Coulomb itme etkileşimidir.

Bu sistemin taban durumu özellikleri zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümüyle belirlenir.

$$H\Psi\left(\left\{\vec{r}_i\right\},\left\{\vec{R}_1\right\}\right)=E\Psi\left(\left\{\vec{r}_i\right\},\left\{\vec{R}_1\right\}\right). \quad (5.3)$$

Burada $\Psi\left(\left\{\vec{r}_i\right\},\left\{\vec{R}_1\right\}\right)$, çok cisimli sistemin dalga fonksiyonu ve E sistemin toplam enerjisidir. Eş. 5.2'in karmaşıklığından dolayı çözümü kolaylaştırmak için bazı yaklaşımlar yapmak gerekir. Bu yaklaşımlardan bir tanesi katı hal fiziği ve atom ve molekül fiziğinde sık kullanılan Born-Oppenheimer yaklaşımıdır.

5.2. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Born-Oppenheimer yaklaşımında elektron ve çekirdeklerin hareketleri ayrı ayrı incelenir. Elektron ve çekirdeğin kütlelerini karşılaştırdığımızda elektronun kütlesi çekirdeğin kütlesine göre çok daha hafiftir $\left(\frac{M}{m}=1836,1\right)$. Bu nedenle çekirdeğin sabit olduğu bir alanda elektronları hareket halinde düşünebiliriz. Bu yaklaşımı dikkate aldığımızda Eş. 5.2'de verilen çekirdeğin kinetik enerjisi (2. terim) ihmal edilebilir. Ayrıca çekirdekler arasındaki Coulomb itme etkileşmesi sabit düşünülebilir (son terim). Bu durumda.

$$H_e = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{l=1}^{N_i} \frac{Z_l}{|\vec{r}_i - \vec{R}_l|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{l>1}^{N_i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_l|} \quad (5.4)$$

eşitliği elde edilir. Bu eşitlik N_e tane elektronun, N_i tane çekirdeğin alanında hareketini tanımlayan elektronik Hamiltonyen ifadesidir.

$$\Psi_e = \Psi_e(r, R) \quad (5.5)$$

$$\varepsilon_e = \varepsilon_e(R) \quad (5.6)$$

Eş. 5.5 elektronların hareketini. Eş. 5.6 ise elektronların enerjisini gösterir. Buradan toplam enerji, nükleer itme ile beraber

$$\varepsilon_{tot}(R) = \varepsilon_e(R) + \sum_{\alpha=1}^{N_i} \sum_{\beta>\alpha}^{N_i} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad (5.7)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifade potansiyel enerji yüzeyini oluşturur. Çekirdek Born-Oppenheimer yaklaşımında elektronik problemin çözülmesi ile bulunan bir potansiyel enerji yüzeyinde hareket eder.

Born-Oppenheimer yaklaşımı yaygın bir şekilde kullanılmasına rağmen, her zaman geçerli olmayabilir. Bu yaklaşım elektron ile çekirdeğin hareketi birbirinden ayrılmadığında geçersizdir.

5.3. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları

5.3.1. Hartree yaklaşımı

Hartree yaklaşımında [37, 38] çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazılır. Bu durumda dalga fonksiyonu,

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod \quad (5.8)$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \quad (5.9)$$

şeklinde ifade edilir. Burada i. elektrona etki eden potansiyel

$$V_i(\vec{r}) = V_{iyon}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \quad (5.10)$$

eşitliği ile verilir. Potansiyel, iyon ve Hartree potansiyelinin toplamıdır. Eş. 5.8'den yararlanarak V_{iyon} ve $V_{Hartree}$ potansiyelleri.

$$V_{iyon}(\vec{r}) = -\sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{|\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}|}, V_H(\vec{r}) = -\int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (5.11)$$

şeklinde elde edilir, i. elektrona etkiyen Hartree potansiyelindeki yoğunluk terimi

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i \neq j} \left| \Psi_j(\vec{r}) \right|^2 \quad (5.12)$$

şeklinde verilir.

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i(\vec{r}) \quad (5.13)$$

şeklinde ifade edilen hamiltoniye'nin Eş. 5.9 ile alınan beklenen değerini (toplam enerjiyi) en küçük yapan tek elektron dalga fonksiyonları Hartree denklemi ile verilir. Bu denklem

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{iyon}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) + \sum_{j \neq i} \int d\vec{r}' \frac{\left| \Psi_j(\vec{r}') \right|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (5.14)$$

şeklinde ifade edilir. (Eş. 5.14) orbitaller için öz uyumlu çözüldüğünde (Eş. 5.9) ile sistemin dalga fonksiyonu elde edilmiş olacaktır. Hartree yaklaşımında değiş tokuş ve korelasyon etkileri hesaba katılmadığı için günümüzde oldukça az kullanılmaktadır.

5.3.2. Hartree-Fock yaklaşımı

Hartree-Fock yaklaşımı [37- 39] etkileşmeyen elektron orbitallerine karşı gelen dalga fonksiyonlarını temsil etmek için kullanılan bir yaklaşımdır. Sistemin dalga fonksiyonu, antisimetri özelliğini sağlayacak şekilde seçilir. Elektronlardan oluşan sistemin dalga fonksiyonu, Pauli dışlama ilkesi gereği, sistemdeki iki elektronun yer değiştirmesi altında

$$\Psi(\dots \vec{r}_i, \dots \vec{r}_j, \dots) = -\Psi(\dots, \vec{r}_j, \dots \vec{r}_i \dots) \quad (5.15)$$

antisimetrik olmalıdır. Eş.5.15'i sağlayan en basit dalga fonksiyonu Slater determinantı ile verilir ve

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots \vec{r}_N) = \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1) & \Psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_1(\vec{r}_N) \\ \Psi_2(\vec{r}_1) & \Psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \Psi_N(\vec{r}_1) & \Psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (5.16)$$

şeklinde ifade edilir. Eş. 5.14'e benzer olan Hartree-Fock denklemi de enerji beklenen değerini en küçük yapan Eş. 5.16'daki tek elektron dalga fonksiyonlarını verir [40] ve

$$\left[\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{iyon}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) + \sum_j \int d\vec{r}' \frac{|\Psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_i(\vec{r}) - \sum_j \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \int d\vec{r}' \frac{\Psi_j^*(\vec{r}') \Psi_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_j(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (5.17)$$

şeklinde ifade edilir. Burada son terim değiş tokuş terimidir ve σ_i ile σ_j spinleri aynı olduğunda sıfırdan farklıdır.

Bu yaklaşımın avantajı tek elektron dalga fonksiyonunu içeren bir Slater determinantı kullanması, varyasyonel olması ve toplam enerjiyi minimize eden bir deneme dalga fonksiyonunu kullanmasıdır. Fakat Hartree-Fock metodu elektronlar arasındaki korelasyonu (ilişkiyi) göz önüne almaz. Ayrıca değiş tokuş terimi yerel olmadığından Hartree-Fock denkleminin çözümü oldukça zordur ve hesaplanması da yoğunluk fonksiyonel teorisine göre oldukça uzundur.

5.4 Yoğunluk Fonksiyoneli Yaklaşımları

5.4.1. Thomas Fermi teorisi

L. Thomas ve E. Fermi tarafından 1927'de öne sürülen yarı klasik bir yaklaşımdır [33, 34]. Thomas ve Fermi atomun kinetik enerjisini elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olarak temsil etmek sureti ile bir atomun enerjisini hesaplamıştır ve bunu çekirdek-elektron ve elektron-elektron etkileşmelerine ait klasik ifadelerle birleştirilmişlerdir. Bu iki etkileşmede elektron yoğunluğu cinsinden ifade edilebilir ve sistemin enerjisi.

$$E[n] = A_s \int d^3r n^{5/3}(r) + \int d^3r V_{dış}(r) n(r) + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(r) n(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (5.18)$$

şeklinde ifade edilir. Eşitlikte yer alan A_s katsayı olup

$A_s = \left(\frac{3}{10}\right)(3\pi^2)^{2/3}$ şeklindedir. Thomas-Fermi teorisi önemli bir ilk adım olmasına rağmen, doğruluğu sınırlıdır. Çünkü Hartree-Fock teorisince öngörülen bir atomun değiş-tokuş enerjisi dikkate alınmamıştır. Değiş-tokuş enerjisi 1928'de *Dirac* tarafından eklenmiş ama yine de teori pek çok uygulamada tam doğru sonuçlar vermiştir. Bunun en önemli nedeni kinetik enerjinin temsilden kaynaklanmakta olup, ayrıca değiş-tokuş enerjisinden ve elektron korelasyonu'nun tümünden ihmal edilişi bunun nedenleri arasındadır.

5.4.2. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi

Yoğunluk fonksiyoneli Teorisi (DFT) atom, molekül ve katıların elektronik yapılarını hesaplayabilen başarılı bir teoridir. Temel kuantum mekanik yasalarından yararlanarak malzeme özelliklerini nicel olarak anlamayı amaçlar. Geleneksel elektronik yapı metodları, atom çekirdeklerince oluşturulan elektrostatik potansiyel gibi bir dış potansiyel alanında hareket eden N tane elektronun Schrödinger denklemini yaklaşık olarak çözmeye çalışır. Fakat bu yaklaşımların çok ciddi sınırlamaları vardır. Örneğin N sayısı çok küçük olsa bile problem hala açık seçik olmaz, bileşke dalga fonksiyonları da karma karışık olur. Ya da hesaplama süresi N arttıkça çok hızlı bir şekilde artar, dolayısı ile büyük bir N 'ye sahip sistemlerin çözümü iyice zorlaşır.

DFT'nin kullandığı yaklaşımda temel değişken olarak, çok-cisim dalga fonksiyonu yerine, tek cisim yoğunluğu kullanılır $\rho(\vec{r})$ yoğunluğu sadece üç tane uzaysal koordinatın (dalga fonksiyonunu ya da N tane koordinatının değil) fonksiyonu olduğundan. DFT çok büyük sistemleri bile hesaplama kolaylığı getirir. Çekirdek ve sistemdeki tüm diğer elektronlarla etkileşim halinde olan bireysel elektronların etkileşimlerini ele alarak başlayan Hartree-Fock teorisinin tersine, yoğunluk fonksiyoneli teorisinde bütün elektron sistemi göz önüne alınır.

Çok cisimli bir sisteme sahip olduğumuzu düşünelim. Bu sistemde r noktasına yerleşmiş $V_{dış}(r)$ olarak tanımlanan bir potansiyele sahip N tane elektron olsun. Schrödinger denklemi kullanılarak bu sistemin özellikleri hesaplanabilir. N elektronlu sistem için Hamiltonyen

$$H = \sum_i \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) + \sum_i V_{dış}(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (5.19)$$

şeklinde verilir. Hamiltonyeni Eş. 5.19 ile verilen N elektronlu sistem için yazılan Schrodinger denklemi. N tane tek elektron Schrodinger denkleminde indirgenildiğinde

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \epsilon \Psi_i(\vec{r}) \quad (5.20)$$

eşitliği elde edilir. Buradaki $\Psi_i(\vec{r})$ 'ler tek elektron dalga fonksiyonları ve $V(\vec{r})$ tek elektronunu tüm etkileşimlerini içeren potansiyel terimidir. Potansiyel terimidir. Potansiyel terimi

$$V(\vec{r}) = V_{dış}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \quad (5.21)$$

şeklinde ifade edilir ve buradaki ilk terim iyonlarla olan etkileşimi, ikinci terim diğer elektronlarla olan etkileşimi. üçüncü terim ise değiş tokuş ve korelasyon etkileşimini gösterir.

Hohenberg ve Kohn homojen olmayan elektron gazının taban durumunu bulmak için DFT 'yi geliştirmişlerdir. Böyle bir sistem için parçacık yoğunluğu

$$\rho(\vec{r}) = N \int |\Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (5.22)$$

ile verilir. Burada Ψ_0 sisteminin taban durumu dalga fonksiyonudur. Hohenberg ve Kohn sistemin taban durum enerjisinin yoğunluğun fonksiyoneli olarak verilebileceği ve enerji fonksiyonelinin, iyonlarla etkileşim ile ilgili olan terimi dışındaki kısmının ($F[\rho]$) evrensel olduğu gösterilmiştir.

Verilen $V_{dış}(\vec{r})$ ile belirlenen yoğunluk sistemi tek olarak betimlenir; yani yoğunluğun sistemi betimlemek için dalga fonksiyonu yerine kullanılabilir. Ayrıca $F[\rho]$ minimum değerini ancak ve ancak taban durumu yoğunluğunda alır.

Kohn ve Sham [35]. Hohenberg ve Kohn [36] teoremlerini kullanarak bu gün Kohn Sham denklemleri olarak bilinen ve enerji fonksiyonelinin minimum yapan yoğunluğun bulunabileceği denklemleri

$$E[\rho(\vec{r})] = T[\rho(\vec{r})] + \int d\vec{r} \frac{\rho(\vec{r}')\rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{xc}[\rho(\vec{r})] + \int d\vec{r} V_{dış}(\vec{r})\rho(\vec{r}) \quad (5.23)$$

şeklinde ifade etmişlerdir. Yoğunluk fonksiyonelinin

$$V_{etk} = \int d\vec{r} \frac{\rho(\vec{r}')\rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{xc}[\rho(\vec{r})] + V_{dış}(\vec{r}) \quad (5.24)$$

şeklinde tanımlanması ve

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \left| \Psi_i(\vec{r}) \right|^2 \quad (5.25)$$

ile verilen yoğunluğa göre minimize edilmesiyle

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_{\text{etk}}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \epsilon \Psi_i(\vec{r}) \quad (5.26)$$

denklemini elde edilir. Bu denklem öz uyumlu çözümlenmelidir. Bunun için verilen başlangıç yoğunluğundan (Eş. 5.24 ile) V_{etk} hesaplanır.

V_{etk} 5.26'da yazılarak Ψ_i 'ler elde edilir. Bulunan Ψ_i 'ler Eş. 5.24'den yeni yoğunluk elde edilir. Hesaplamalar tamamlandığında elde edilen yoğunluk Eş. 5.22'de yazılarak sistemin taban durumu enerjisi elde edilmiş olacaktır.

Eş. 5.23'de verilen E_{xc} teriminin formu bilinmediğinden, yoğunluğun fonksiyoneli olarak yazmak zordur. Bunun için iki yaklaşım kullanılmaktadır. Bir tanesi yerel yoğunluk yaklaşımı (*local density approximation*. LDA) diğeri ise genelleştirilmiş gradyent yaklaşımıdır (*generalized gradient approximation*. GGA).

DFT için aşağıdaki özellikler söylenebilir:

- ✓ Orijinal DFT, bir *taban durum* teorisidir.
- ✓ DFT, uyarılmış durumlara ve zamana-bağlı potansiyellere uygulanabilmektedir.
- ✓ DFT, açık-kabuklu sistemlere ve manyetik katılara uygulanabilmektedir.
- ✓ Hybrid DFT / Hartree-Fock metotları bulunmaktadır.
- ✓ DFT, lokalize ve delokalize fonksiyonlarının her ikisini de kullanabilmektedir.

DFT ile Hartree-Fock metodunun ortak bir noktası da vardır. DFT'de, toplam elektron yoğunluğu, her biri bir-elektron yoğunluğuna sahip olan tek-elektron

yoğunluklarına ayrıştırılabilir. Bu durumda tek elektron dalga fonksiyonları, Hartree-Fock teorisindekilere benzer. Moleküler sistemler için DFT, bizi Hartree-Fock yaklaşımındakine benzer moleküller orbital (MO) tasvire götürür. Hartree-Fock veya LDA yaklaşımlarından hangisinin daha iyi sonuçlar verdiği çok da açık değildir. Aslında. Hartree-Fock yaklaşımının LDA'ya göre uygulanabilirliği, elektronlar arasındaki çok-cisim etkileşmelerinin etkin mesafesine bağlı olur. Bu etkileşmeler, atomlar arası mesafenin birçok katı kadarsa, o zaman Hartree-Fock tasviri daha iyi sonuçlar vermektedir.

Çok cisim veya elektron korelasyon etkilerini tasvir etmek için Hartree-Fock tabanlı yaklaşımlarda kullanılan matematik objeler moleküler orbitallerdir ki bu orbitaller, oldukça büyük ve atomlar arası uzaklıkların birkaç katı kadar olabilmektedir. Fakat bu çok-cisim etkileri daha kısa-erişimli (belki atomlar arası mesafeden daha küçük) karakterde ise, o zaman LDA yaklaşımı çok daha uygun olmaktadır. Bu durumda da, moleküler orbitaller gibi böyle kısa-erişimli olayların tasvirinde yakınsama süreci çok yavaş olmaktadır.

Deneyimler, metaller, geçiş metallerinin bileşikleri ve hatta inorganik bileşikler için LDA yönteminin, özellikle yapısal özelliklerin incelenmesine çok uygun olduğunu göstermiştir.

5.4.3. Hohenberg-Kohn teoremleri

Öncelikle, bir fonksiyonla fonksiyonel arasındaki fark iyi bilinmelidir. Bir fonksiyonel, bir fonksiyonu, reel veya karmaşık sayılara dönüştürebilen bağıntılardır ve genellikle köşeli parantezlerle yazılır. Yani;

$$F[f] = \int g(f(r)) dr \quad (5.27)$$

İfadesinde, $g(x)$ fonksiyonu çok iyi tanımlanmış bir fonksiyondur. Bir fonksiyonel için en basit örnek, bir $f^2(r)$ fonksiyonuna ait erinin altında kalan alan (a 'dan b 'ye) olabilir:

$$F[f(r)] = \int_a^b f^2(r) dr \quad (5.28)$$

Bir fonksiyonelin diferansiyeli, df 'ye lineer olarak bağlı olan $F[f + df] = F[f] + df F'[f]$ farkının bir parçasıdır:

$$\delta F = \int \frac{\partial F[f]}{\partial f(x)} \delta f(x) dx \quad (5.29)$$

Buradaki $\frac{\delta F[f]}{\delta f(x)}$ niceliği. x noktasında f 'ye göre F 'nin fonksiyonel türevidir. Pratikte fonksiyonelin türevi aşağıdaki formülle hesaplanır:

$$\frac{\delta F[f]}{\delta f(x)} = \int \frac{\delta g(f(x'))}{\delta f} \delta(x - x') dx' \quad (5.30)$$

Örneğin, eğer $T[f] = \int^n (x') dx'$ ise, o zaman

$$\frac{\delta T[f]}{\delta f(x)} = f^{n-1}(x) \quad (5.31)$$

olur. Başka bir örnek,

$$J[\rho] = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r_1) \rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2 \quad \text{ise} \quad \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho(r)} = \int \frac{\rho(r_1)}{|r_1 - r_2|} dr_1 \quad (5.32)$$

Kuantum mekaniksel bir sistemin tüm temel özellikleri bir dış potansiyel ile belirlenir. İlk defa Hohenberg-Kohn [35], bir sistemin temel fonksiyonlar ile tanımlanmasının yetersiz olduğunu ve bir potansiyel ya da dalga fonksiyonları yerine yoğunluğun kullanılabileceğini göstermiştir. Bir başka deyişle DFT'nin temelleri atılmıştır.

Temelde iki teorem vardır. Bu teoremleri açıklamadan önce elektronik sistemin (sabit iyon alanında) Hamiltonyen'in

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\nabla_i^2}{2} \right) + \sum_{i=1}^N V_{dış}(r_i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (5.33)$$

şeklinde olduğu hatırlanmalıdır. Burada

$$V_{dış}(r_i) = -\sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{r_{i\alpha}} \quad (5.34)$$

i , elektrona etkiyen dış potansiyeldir. Potansiyel, çekirdeğin Z_{α} yükünden kaynaklanır. Taban durum enerjisi ve dalga fonksiyonu, enerji fonksiyoneli $E(\Psi)$ minimize ederek belirlenir:

$$E(\Psi) = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (5.35)$$

N elektronlu bir sistemi için dışsal potansiyel $V_{dış}(r)$, Hamiltonyeni tamamen sabit hale getirir; o zaman N ve $V_{dış}(r)$ taban-durumlarının bütün özelliklerini belirleyebilmektedir. $\rho(r)$ ve N birbirine

$$N = \int \rho(r) d r \quad (5.36)$$

şeklinde ifade edilen normalizasyon şartı ile bağlıdır. Birinci Hohenberg-Kohn teoremi, bu ifade yerine N ve $V_{dış}(r)$ yerine elektron yoğunluğu $\rho(r)$ ’yi temel değişken olarak kullanır.

“Dışsal potansiyel $V_{dış}(r)$, küçük bir sabitle toplanan elektron yoğunluğu $\rho(r)$ vasıtası ile belirlenir.”

şeklinde ifade edilir [35]. Bu sabit hiçbir şeyi değiştirmemektedir. Çünkü Hamiltoniyeni H olan Schrödinger denklemi ile Hamiltoniyeni “ $H + sabit$ ” olan denklem tam olarak aynı öz fonksiyonları verir ve bütün enerji özdeğerleri sadece bir sabit kadar kaymış olurlar. Bu teorem başka bir değişle;

“Kararlı bir kuantum mekanik sisteminin her bir gözlenebilir (enerji dahil), ilke olarak taban-durum yoğunluğundan hesaplanabilir; yani her gözlenebilir, taban durumu yoğunluğunun fonksiyoneli olarak yazılabilir”

şeklinde ifade edilebilir [35]. O halde; $\rho(r)$, N ve $V_{dış}(r)$ tayin edilebilmektedir. Dolayısı ile de taban durumun kinetik enerjisi $T[\rho(r)]$, potansiyel enerjisi $V[\rho(r)] = U_{ee}[\rho(r)] + V_{dış}[\rho(r)]$ ’dır. Burada U_{ee} elektron-elektron etkileşmesi anlamındadır ve toplam enerji $E[\rho(r)]$;

$$E[\rho(r)] = V_{dış}[T(\rho)] + U_{ee}[\rho] \quad (5.37)$$

ile belirlenebilmektedir. Buna göre fonksiyoneller gruplandırıldığında toplam enerji için kısaca.

$$E[\rho(r)] = V_{dış}[\rho] + F_{HK}[\rho] = \int \rho(r) V_{dış}(r) dr + F_{HK}[\rho] \quad (5.38)$$

yazılabilir. Hohenberg-Kohn fonksiyoneli F_{HK} sadece yoğunluk üzerine etkimektedir ve evrenselidir; yani. F_{HK} 'nin biçimi (formu), incelenen belirli bir sisteme bağlı değildir. Elektronların sayısı. Eş. 5.36'dan, yoğunluğun kendisinden kolaylıkla elde edilebilir.

İkinci Hohenberg-Kohn teoremi, enerjinin varyasyonel prensibini verir ve “ $\tilde{\rho}(r) \geq 0$ ve $\int \tilde{\rho}(r) d r = N$ olmak üzere bir $\rho(r)$ deneme yoğunluğu için;

$$E_0 \leq E[\tilde{\rho}] \text{ dir”}$$

şeklinde ifade edilir. Burada $E[\tilde{\rho}]$, enerji fonksiyoneli. Başka bir deyişle, eğer bir yoğunluk elektron sayısını (N) doğru olarak temsil edilebiliyorsa, bu yoğunluktan hesaplanan toplam enerji, temel-seviyenin (taban-durum) gerçek enerjisinden daha az olamaz; ve taban duruma ait yoğunluk ilke olarak sadece yoğunluk içeren varyasyonel metot kullanılarak hesaplanabilir. Yani temel seviyenin enerjisi önceki nicelikler cinsinden

$$\langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle = \int \tilde{\rho}(r) V_{dış}(r) dr + F_{HK}[\tilde{\rho}] = E[\tilde{\rho}] \geq E[\rho] = E_0 \quad (5.39)$$

olmaktadır.

5.4.4. Kohn-Sham eşitlikleri

Birbiri ile etkileşmeyen parçacıklar için Hamiltonyen ifadesi

$$H_s = T + V_{dış} = \sum_i \left(\frac{h^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{dış}(r_i) \right) \quad (5.40)$$

şeklinde yazılabilir. Eş. 5.40'da yer alan dalga fonksiyonunu

$$\Psi_s(r_1, r_2, r_3 \dots r_N) = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \Psi_3(r_3) \dots \Psi_N(r_N) \quad (5.41)$$

şeklindedir. Bir parçacık için Schrödinger denklemi ise

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_i(r) + V_{du}(r) \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (5.42)$$

şeklinde ifade edilir. Fermiyon dalga fonksiyonlarının simetri özelliklerini düşünürsek, sistem için kesin sonuçlar Ψ dalga fonksiyonundan oluşan Slater determinanı ile belirlenecektir. Bu durumda elektron yoğunluğu

$$n(r) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(r)|^2 \quad (5.43)$$

şeklinde yazılabilir. Burada N en düşük enerji seviyesi üzerinden toplamdır. Kohn-Sham denklemlerini elde etmek için

$$T_s[n] = \langle \Psi_s | T | \Psi_s \rangle \quad (5.44)$$

gösterimi yazılabilir. Burada $T_s[n]$ etkileşen parçacıkların dikkate alınmadığı sistemin kinetik enerjisidir. $T_s[n]$ fonksiyonu bir sistemin toplam enerjisini tanımlamak için kullanılabilir. Bu durumda enerji

$$E[n] = T_s[n] + \int V_{du}(r) n(r) dr \quad (5.45)$$

şeklinde ifade edilir. Bu eşitlik Euler denklemi kullanılarak yeniden yazıldığında

$$\frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + V_{du}(r) = \mu \quad (5.46)$$

eşitliği elde edilir. Burada μ maddenin elektrokimyasal potansiyelini temsil eder. Bu denklem taban durum yoğunluğu elde etmek için kullanıldığında, tüm taban durum özellikleri hesaplanabilir. Yukarıda bahsettiğimiz sistem için Schrödinger denklemini

$$H = T + U + V_{dış} \quad (5.47)$$

$$E = E[n] = T_s[n] + V[n] \quad (5.48)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $V[n]$ zamana bağlı bilinmeyen bir fonksiyon, $T_s[n]$ fonksiyonu ise etkileşmeyen sistem için kinetik enerjidir. Notasyon kullanıldığında

$$V_{etkin}(r) = \frac{\delta V[n]}{\delta n(r)} \quad (5.49)$$

şeklinde ifade edilir. Yukarıdaki Euler denklemi

$$\frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + V_{etkin}(r) = \mu \quad (5.50)$$

şeklinde yazılabilir. Eş. 5.48 ve Eş. 5.50 karşılaştırılabilir ve Eş. 5.50'in sonuçları

$$n(r) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(r)|^2 \quad (5.51)$$

Şeklinde ifade edilebilir. Burada $\Psi_i(\vec{r})$ diferansiyel denklemini sağlamalıdır. Bu durumda

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_i(r) + V_{etk}(r) \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (5.52)$$

Şeklinde ifade edilebilir. Burada $\Psi_i(r)$ diferansiyel denklemini sağlamalıdır. Bu durumda $\Psi_i(r)$ şeklinde yazılır. Eş. 5.49, 5.51 ve 5.52 Kohn-Sham eşitlikleri olarak isimlendirilir. Bu eşitliklerden yararlanarak taban durumundaki etkileşen çok cisim sistemi için taban durum yoğunluğunu çözülebilir. Eş. 5.52’de yer alan V_{etk} etkin potansiyel olarak isimlendirilir. Bu potansiyel *Değiş-tokuş* ve *Korelasyon* enerjisi E_{xc} cinsinden

$$V_{\text{etk}}(r) = e\phi(r) + \frac{\delta E[n]}{\delta n(r)} \quad (5.53)$$

şeklinde yazılır. Burada E_{xc}

$$E[n] = E[n] - T_s[n] - V_{\text{dış}}[n] - H[n] \quad (5.54)$$

şeklinde dir. Eşitlikte sadece $V_{\text{dış}}[n]$ fonksiyonu bilinmez. Değiş-tokuş ve Korelasyon enerjisini çözmenin birçok yolu vardır. Yerel yoğunluk (LDA) ve Genleştirilmiş Gradyent yaklaşımı (GGA) bunların en önemlileridir.

5.4.5. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)

Yerel yoğunluk yaklaşımı (*Local Density Approximation* (LDA)) değiş-tokuş korelasyon enerjisi (E_{xc}) sabit yoğunluklu (“homojen elektron gazı”) elektron sistemindeki çok-elektron etkileşmelerine ait bilinen sonuçları kullanır.

Yaklaşımın hem hesaplama kolaylığı hem de şaşırtıcı derece doğru sonuçlar verdiği görülmüştür. LDA yaklaşımında, bir molekül veya katıdaki her bir noktanın belirli bir elektron yoğunluğuna sahip olduğu kabul edilir ve her noktadaki elektronun, çevresindeki aynı yoğunluklu öteki elektronlarla aynı çok cisim etkileşmeye maruz kaldığı varsayılır. O zaman tüm moleküllerin veya bir katı maddenin toplam *değiş-*

tokuş korelasyon enerjisi, bütün hacim elemanları üzerinden alınacak katkıların integrali olarak verilir. LDA’da değiş-tokuş korelasyon enerjisi.

$$E_{xc}^{LDA}[n] = \int d_3 \, rn(r) \, e_{xc}^{unif}(n(r)) \quad (5.55)$$

Şekilde verilir. Buradaki $e_{xc}^{unif}(n)$, uzaysal olarak düzgün bir n yoğunluğuna sahip olan elektron gazındaki parçacık başına düşen değiş-tokuş korelasyon enerjisidir. Bu enerji Monte-Carlo hesaplamalarından elde edilebilir ve basit parametrizasyonları literatürde mevcuttur. Bu enerjinin pek çok defa kuruluşu ile uzaysal olarak yavaşça değişen yoğunluklar için LDA’nın iyi bir yaklaşım (approximation) olması beklenir. Bu şart, gerçek elektronik sistemlerle hiçbir zaman tıpatıp uyuşmamasına rağmen, LDA’nın pek çok sistemler için dikkate değer derecede doğru sonuçlar verdiği görülmüştür.

Her bir hacim elemanından gelen katkı, yerel elektron yoğunluğuna bağlı olarak farklı olabilir. Eş. 5.55’te yer alan E_{xc} ’yi hesaplamak için literatürde farklı yöntemler mevcuttur. Bunlar arasında en çok kullanılan yaklaşım Ceperley-Alder [41] yaklaşımıdır. E_{xc} İkiye ayrıldığında

$$E_{xc} = E_x + E_c \quad (5.56)$$

şeklinde yazılabilir. Burada E_x ve E_c Hartree biriminde

$$E_x = -\frac{0,4582}{\tau_s} \quad (5.57)$$

$$E_c = \begin{cases} -0,0480 + 0,0311n \tau_s & \text{for } \tau_s \geq 1, \\ -0,0116\tau_s + 0,0020\tau_s \ln \tau_s & \text{for } \tau_s < 1, \end{cases} \quad (5.58)$$

şeklindedir. Eşitliklerde yer alan τ_s yoğunlukla ilişkili olup, bu ilişki $\rho^{-1} = \frac{4\pi}{3} \tau_s^3$

şeklindedir. Değiş-tokuş Korelasyon potansiyeli ise

$$V_{xc} = E_{xc} - \frac{\tau_s}{3} \frac{dE_{xc}}{d\tau_s} \quad (5.59)$$

şeklinde ifade edilir.

5.4.6. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımları (GGA)

Yerel yaklaşımların yanı sıra, çok sayıda yerel-olmayan yaklaşımlar da önerilmiştir. Bunun nedeni, bazı malzemelerde yoğunluk gradyentinin büyük değerleri sahip olmasıdır. Fakat gradyent çok küçük olmasa bile LDA çoğu zaman iyi sonuçlar vermektedir. Yoğunluğun uzaysal değişimini hesaba katan yaklaşımlara genellikle *Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımları* (GGA) denilmektedir.

GGA, her tür sistemlerde LDA'dan daha iyi sonuçlar üretmez, fakat pek çok sistem için özellikle bağ uzunlukları ve toplam enerjiyi daha iyi tahmin ettiği gösterilmiştir. Daha da geliştirilmiş fonksiyoneller araştırmalarında önemli bir ilerleme, genelleştirilmiş gradyent yaklaştırması sayesinde olabilmektedir. GGA'da spin polarizesiz sistemler için değiş-tokuş korelasyon enerjisi:

$$E_{XC}^{GGA} n = \int^3 r f(n(r), \nabla n(r)) \quad (5.60)$$

şeklinde verilir. LDA'da e_{xc}^{unif} inputu “tek/unique” olmasına rağmen. GGA'da f fonksiyonu ‘tek’ değildir ve pek çok farklı form önerilmiştir. GGA'yı kurarken, tam fonksiyonelin bilinen bir çok özelliği, yaklaştırmanın tahditli fonksiyoneline katmaya, ona dahil etmeye çalışır.

Son yıllarda GGA doğrultusundaki gelişmeler devam etmektedir; hatta yeni bir sınıf olan “meta-GGA” fonksiyonelleri önerilmiştir, meta-GGA fonksiyonelleri, yoğunluk ve birinci mertebeden gradyente bağıllılığın yanında.

$$\tau(r) = \frac{1}{2} \sum_i^{occ} |\nabla \varphi_i(r)|^2 \quad (5.61)$$

şeklinde ifade edilen Kohn-Sham orbitallerinin kinetik enerji yoğunluğuna da bağlıdır. Bu durumda meta-GGA fonksiyoneli.

$$E_{XC}^{MGA}[n] = \int d^3 r g(n(r), \tau(r)) \quad (5.62)$$

şeklinde olmaktadır. Yeni bir değişkenin tanımlanması ile fonksiyonel formda kazınılan ilave esneklik, yaklaştırmaya daha fazla özelliğin dahil edilmesine olanak verir. Bu yolla, diğer sonuçları kötüleştirmeksizin, bazı fiziksel özellikler için GGA’nın doğruluğunu artırmak mümkün olabilmektedir.

LDA ve GGA açıkça yoğunluğun fonksiyoneli olmasına karşın, meta-GGA’lar açıkça Kohn-Sham orbitallerine de bağlı olur. Bu hali ile hala DFT bölgesi içinde bulunduğumuzu belirtmek önemlidir; çünkü Kohn-Sham denkleminde orbitaller Kohn-Sham potansiyelinin fonksiyonelleridir ve Hohenberg-Kohn teoremi nedeni ile de ayrıca yoğunluğun fonksiyonelleridir.

Bu tür orbital fonksiyonelleri veya gerçek yoğunluk fonksiyonelleri aktif ve yoğun araştırma alanlarıdır. Belki de en iyi bilinen orbital fonksiyoneli aşağıdaki “tam değiş-tokuş enerji” fonksiyonelidir.

$$E_X^{EXX} n = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d^3 r \int d^3 r' \chi \sum_{ij}^{occ} \frac{\varphi_{i\sigma}(r) \varphi_{i\sigma}^*(r') \varphi_{j\sigma}^*(r) \varphi_{j\sigma}(r')}{|r - r'|} \quad (5.63)$$

Burada, Hartree-Fock teorisi ile olan benzerlik ve farklılıklardan bahsetmenin sırasıdır. Değiş-tokuş fonksiyoneli kullanılıp korelasyon ihmal edilirse, oluşacak toplam enerji fonksiyoneli tam olarak Hartree-Fock fonksiyoneli olmuş olur. Fakat tam değiş-tokuş, Hartree-Fock orbitallerinden ziyade Kohn-Sham denklemi ile hesaplanır. Dahası, Hartree-Fock orbitalleri, bir sınırlama olmaksızın (ortonormalite hariç) minimizasyondan elde edilir. Bu orbitaller bizi yerel olmayan Hartree-Fock potansiyeline götürür. Öte yandan tam-değiş-tokuş Kohn-Sham orbitalleri, ek sınırlamalara tabi tutarak aynı fonksiyoneli minimize ederek elde edilir ve bu durumda tek-parçacık orbitalleri yerel potansiyelden gelir. Bu nedenle, toplam Hartree-Fock enerjisi daima, tam değiş-tokuş toplam enerjisinden daha azdır fakat bu fark çok azdır. Ancak orbitalleri ve orbital özdeğerleri gibi tek-parçacık özellikleri her iki yaklaşımda da oldukça farklıdır. Örneğin, Kohn-Sham tam enerji spektrumları, deneye Hartree-Fock spektrumlarından daha yakındır. Bu da tam değiş-tokuş DFT'nin korelasyonu dahil etmek açısından Hartree-Fock spektrumundan daha iyi bir çıkış noktası olduğu anlamındadır.

5.4.7. LDA ve GGA yaklaşımlarının sınırlılıkları

DFT, elektronik yapı hesaplamaları için olgun bir teori haline gelmiştir. DFT'nin başarısı, değiş-tokuş korelasyon enerjisinin doğruluk derecesine bağlıdır. Daha doğru yaklaştırma elde etme çalışmaları aralıksız sürmektedir. Katıhal fiziği açısından DFT, “ilk-prensipier/first-principles” den yola çıkarak malzeme özelliklerini hesaplamak için seçilen bir yöntemdir. Geleneksel statik DFT hesaplamaları, örgü parametreleri gibi yapısal taban-durumu özellikleri üzerine yoğunlaşmışken, zamana bağlı yoğunluk-fonksiyoneli teorisi (TDDFT), soğurma spektrumları gibi uyarılmış durum özelliklerini de hesaplama olanağı verir. Şimdilerde DFT, gelişmiş bilgisayarlar sayesinde binlerce atomlu biyolojik sistemlere de başarı ile uygulanabilmektedir.

LDA yaklaşımında bağ enerji değerleri ve bulk modülü deneysel değerlerden büyük: örgü sabiti değerleri ise deneysel değerlerden küçük sonuçlar vermektedir. Ayrıca

LDA yüzey ve ara yüzey hesaplamalarında ve dinamik hesaplamalar için fonon dispersiyon bağıntısı hesaplamalarında iyi sonuçlar vermektedir [42, 43] Bunun yanında dielektrik sabitleri ve buna bağlı büyüklüklerin hesaplamalarında, ayrıca zayıf bağlarda ve özellikle Hidrojen bağlarında [44] çok iyi sonuçlar vermemektedir. Ayrıca, sabit elektron yoğunluğuna sahip olduklarından saf metaller için kesin-doğru sonuçlar verdiği halde, değişen elektron yoğunluğuna sahip olan sistemlerde daha az doğru sonuçlar vermektedir.

Katılarda ve moleküllerde GGA hesaplarında bağ uzunlukları ve örgü sabitleri deneysel sonuçlardan büyük, bulk modülü ise küçük çıkmaktadır. GGA'nın en iyi başarısı demirin manyetik momenti üzerinde olmuştur. GGA, bcc demirin taban durumunu ferromanyetik olarak önerdiği halde. LDA taban-durumu fcc ve nonmanyetik olarak önerir. Ayrıca GGA yaklaşımı özellikle hidrojen bağlarının tanımlanmasında iyi sonuçlar vermiştir. Yüzey enerji hesaplamalarında ise LDA'dan daha düşük sonuçlar vermektedir. Bunun sebebi muhtemelen GGA'nın zayıf bağlar öngörmesinden kaynaklanmaktadır. Ayrıca kohesif enerji hesaplamalarındaki doğruluk GGA'da LDA'dan biraz daha iyidir.

LDA ve GGA basit metallerin bant yapılarını deneylere çok yakın bulmasına rağmen, yarıiletkenlerde hem LDA, hem de GGA uygulandığında bant aralığı deneysel değerden düşük hesaplanmaktadır. Bunun sebebinin DFT'nin kendisinde olduğu iddia edilmesine rağmen DFT'nin tam çözümünün yapıp yapılamayacağı da açık bir sorudur. Eğer tam çözüm yapılabilirse daha doğru sonuçlar verecektir. Bant aralığı hesaplamalarında, tam değişim ve zamana bağlı DFT (ZB-DFT) ve Green Fonksiyonu (GW) metotları daha iyi sonuçlar vermektedir. Bu metotlar uygulama aşamasında pahalı bilgisayar sistemlerini gerektirmektedir. Bu eksiklik, meta-GGA veya hibrid fonksiyoneller gibi “tam-değiş-tokuş fonksiyoneli” kullanarak iyileştirilebilir.

Unutulmamalıdır ki literatürde, birçok GGA, meta-GGA veya hibrid fonksiyonel önerilmiştir.

5.5. Pseudopotansiyel Metot

Bir atomda yer alan elektronlar değerlik ve kor elektronları olmak üzere ikiye ayrılır. Örneğin. Silisyumun atom numarası 14'dür ve elektron dağılımı $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ şeklindedir. Burada $1s^2 2s^2 2p^6$ yörüngelerinde bulunan elektronlar kor elektronları olup genellikle çekirdeğin çevresinde yerleşirler ve tüm tabakaları doldururlar. Çekirdekle kor elektronlarının oluşturduğu sisteme iyon koru denir. $3s^2 3p^2$ yörüngelerinde bulunan elektronlar ise değerlik elektronlarıdır. Bu elektronlar çekirdeğe uzak olup tabakaları tam olarak doldurmamışlardır. Katıda kor elektronları atomun içerisine lokalize olmuşlardır. Değerlik elektronları ise bağa katılırlar. Bu nedenle bir materyalin özellikleri değerlik elektronları tarafından belirlenir ve yapılan hesaplamalarda kor elektronları açıkça düşünülmez. Bunu yapmak için Coulomb iyonik potansiyelin yerine geçen pseudopotansiyel olarak bilinen bir potansiyel kullanılır. Bu potansiyel iyonik potansiyelin ve kor elektronların etkisinin birleşimini temsil eder. Pseudopotansiyel yaklaşımına göre, bir kristalin elektronik özelliklerinin belirlenmesinde değerlik elektronları tamamen etkili olurken, iyon korları hiçbir rol oynamaz. Pseudopotansiyel hesaplamalarında kor elektronları çekirdeğin potansiyeli içerisine dahi edilir. Pseudopotansiyel adının verilmesi, kendisinden çok şeyler beklenmesindendir. Çünkü bunların türetilişlerinden birçok değer “yaklaşık olarak doğru” kabul edilir, fakat arkalarındaki temel düşünce çok sağlamdır [45].

Eş. 4.3'te verilen Schrödinger denkleminde yer alan Ψ dalga fonksiyonu, değerlik elektronlarından gelen etkisi az olan bir ϕ fonksiyonu ile iyon korlarından kaynaklı ϕ_c fonksiyonlarının toplamı şeklinde yazıldığında

$$\Psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \quad (5.64)$$

eşitliği elde edilir Eşitliğin sağ tarafında görülen b_c katsayısı Ψ ile ϕ_c 'nin ortogonal olmalarını sağlayan ve

$$\langle \Psi | \phi_c \rangle = 0 \quad (5.65)$$

şeklinde ifade edilen normalizasyon sabitidir. Böylece Eş. 5.64 ve Eş. 5.65'den yararlanarak Eş. 5.3 yeniden yazılırsa.

$$H\phi + \sum_c (\varepsilon - E_c) |\phi_c\rangle \langle \phi_c| = \varepsilon \phi \quad (5.66)$$

eşitliği elde edilir. Eş. 5.66'da yer alan E_c ifadesi, kor bölgesindeki öz değerlerden biridir. Bu eşitlikten yararlanarak

$$(H + V_R)\phi = \varepsilon \phi \quad (5.67)$$

$$(T + V_{PS})\phi = \varepsilon \phi \quad (5.68)$$

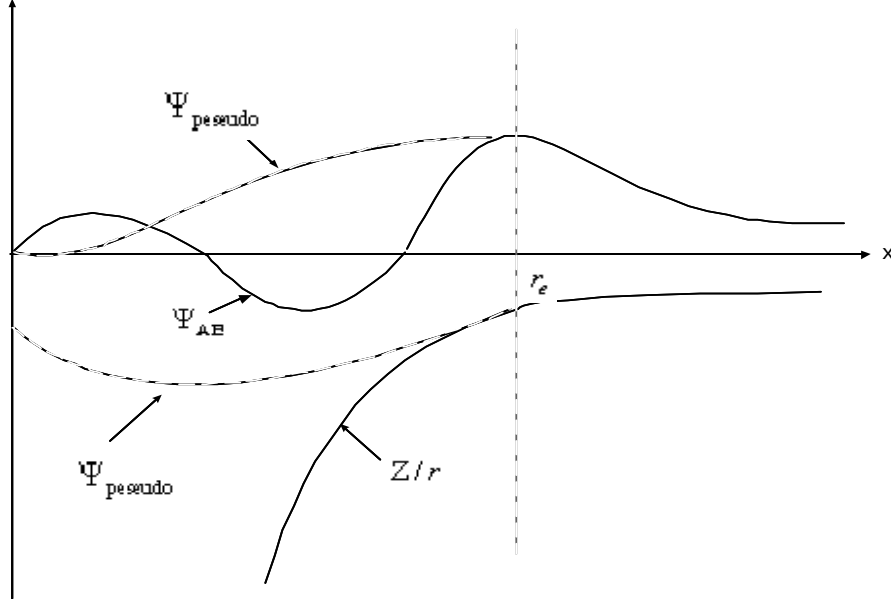
eşitlikleri yazılabilir.

Eş. 5.67'de yer alan (V_R) , itici bir potansiyel operatörüdür. Bu operatör Phillips ve Kleinman tarafından

$$V_{ps} = V_A + V_R \quad (5.69)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Eş. 5.68'de yer alan V_{ps} , itici bir potansiyel olan V_R ile etkin bir potansiyel olan V_A 'nın birbirleriyle yaptıkları etkileşmelerden oluşan zayıf etkili bir potansiyeldir. Bu şekilde tanımlanan V_{ps} potansiyeline pseudopotansiyel ve ϕ 'ye pseudo dalga fonksiyonu denir.

Bu potansiyel kısa menzilli bir potansiyeldir ve Şekil 5.1'den de görüleceği gibi çabuk yakınsadığı için, dalga fonksiyonu hesaplamalarında özellikle tercih edilir. Şekildeki r_c kor bölgesinin yarıçapıdır.



Şekil 5.1. Pseudopotansiyel ve dalga fonksiyonu

5.5.1. Pseudopotansiyellerin oluşturulması

Pseudopotansiyeller aşağıda verilen üç aşamada ilerlerler.

1. Önce bir atom seçilir, sonra ona ait Kohn-Sham denklemleri yazılır.

$n(\vec{r}) = \sum |\Psi_i(\vec{r})|^2$ elektron yoğunluğunun çekirdek çevresinde küresel simetrik olduğu yaklaşıklığı yapılır.

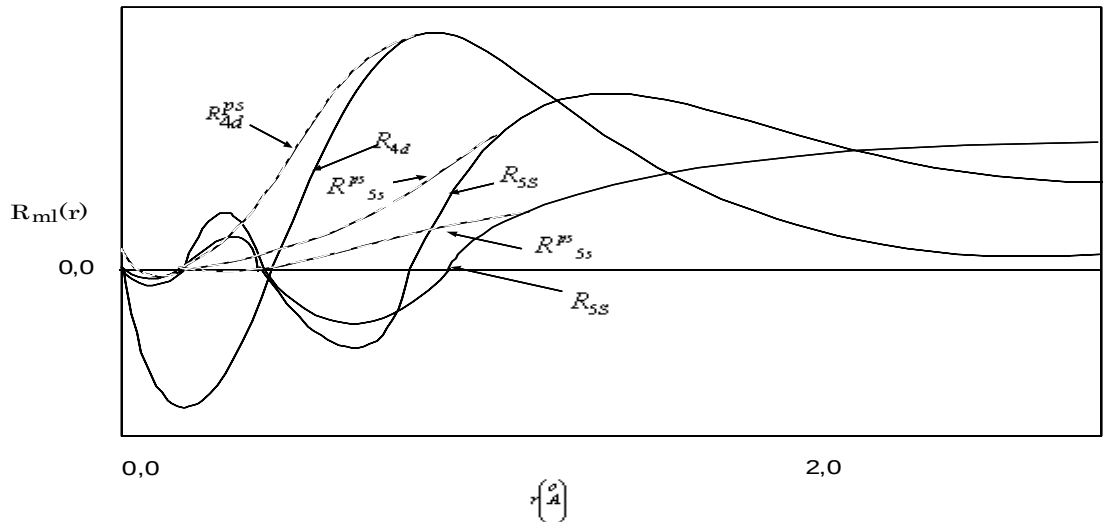
$$\frac{h^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \left[U(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \frac{e^2 n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \left(\frac{3}{\pi} n(\vec{r}) \right)^{1/3} \right] \Psi(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \quad (5.70)$$

denklemleri küresel simetrik olmaya zorlanınca, tüm çözümler $R_{nl}(r)Y_{lm}$ biçiminde olur. Burada Y_{lm} küresel harmonik, R_{nl} radyal dalga fonksiyonudur. Radyal fonksiyonun denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{nl} + \left[\int \frac{e^2 n\left(\frac{\vec{r}'}{r-r'}\right)}{\left|\frac{\vec{r}}{r}-\frac{\vec{r}'}{r'}\right|} d\vec{r}' - \frac{e^2 Z}{\delta n} + \frac{\delta \varepsilon_{XC}}{\delta n} - \varepsilon_{nl}\right]R_{nl}(r) = 0 \quad (5.71)$$

şeklinde olur. Bu denklem atomun bütün elektroları için çözülür ve seviyelerin enerjileri ε_{nl} ile gösterilir.

2. Kısmen dolu olan bütün en dış s, p, d ve g seviyeleri ele alınır. Bunlar, molekül ve katılardaki atomlar arasındaki bağlanmalara katkıda bulunan seviyelerdir. Gerçek ve Pseudo dalga fonksiyonlarının biçimi Gümüş için Şekil 5.2’de gösterilmiştir. Şekildeki özellikleri gösteren herhangi bir fonksiyon, gümüşünki gibi uygun bir pseudo dalga fonksiyonu üretebilir.



Şekil 5.2. Gümüşün 5s, 5p ve 5d seviyelerine ait “gerçek” ve pseudo dalga fonksiyonları. Taban-durumunda gümüşün 5p seviyesi tam olarak dolu değildir, fakat yine de pseudoptansiyeye dahil edilebilir.

3. Son olarak orijinal Coulomb potansiyeli $(\hat{U})$ pseudopotansiyelle $(\hat{U}^{ps})$ değiştirilip Kohn-Sham denklemleri R^{ps} bulunacak şekilde (R değil) çözülür. Bu da doğrudan Eş. 5.71'den elde edilir. Buna göre radyal dalga fonksiyonlarına ait denklem aşağıdaki gibi olur:

$$U_l^{ps}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{l}{rR_{nl}^{ps}} \frac{\partial^2 r R_{nl}^{ps}}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \left[\int \frac{e^2 n^{ps}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + \frac{\delta \varepsilon_{xc}}{\delta n^{ps}} - \varepsilon_{nl} \right] \quad (5.72)$$

Başka bir deyişle, çözüm olarak istenen R_{nl} zorlayarak da olsa $U_l^{ps}(r)$ 'den elde edilebilir. Gümüş için bu yolla oluşturulan potansiyeller Şekil 5.3'ta gösterilmiştir. Her bir açısall momentum seviyesi için farklı pseudopotansiyeller var olabileceğinden. Pseudopotansiyel, keyfî bir $\Psi(r)$ fonksiyonuna uygulanarak, açısall momentumun.

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \Psi_{lm}(r) \quad \Psi_{ml}(r) = \int d\theta d\phi Y_{lm}^*(\theta, \phi) \Psi(\vec{r}) \quad (5.73)$$

gibi iki bileşenine ayrılabilir. Sonra. Hamiltoniyeni oluşturmak üzere $\Psi_{lm}(r)$. $U_l^{ps}(r)$ ile çarpılır. Bu integrallere ihtiyaç duyulması, pseudopotansiyelin “yerel olmayan” olduğu anlamına gelir.

Pseudopotansiyelin biçimi daha iyileştirmek üzere analitik sonuçlar da kullanılabilir. Hartree-Fock yaklaşımı, çok-elektronlu perdeleme olayına hesaba katmaz, dolayısı ile Fermi yüzeyi civarındaki elektronlar için doğru sonuçlar üretmez. Her bir çekirdeği çevreleyen elektronlar. Coulomb potansiyelini perdelemelidir, fakat Hartree-Fock ve ondan türeyen yaklaşımlar bu olayı tam doğru olarak vermezler. Perdelenmemiş Coulomb potansiyeli (Ze^2/r) 'nin Fourier dönüşümü $4\pi Ze^2/q^2$ 'dir

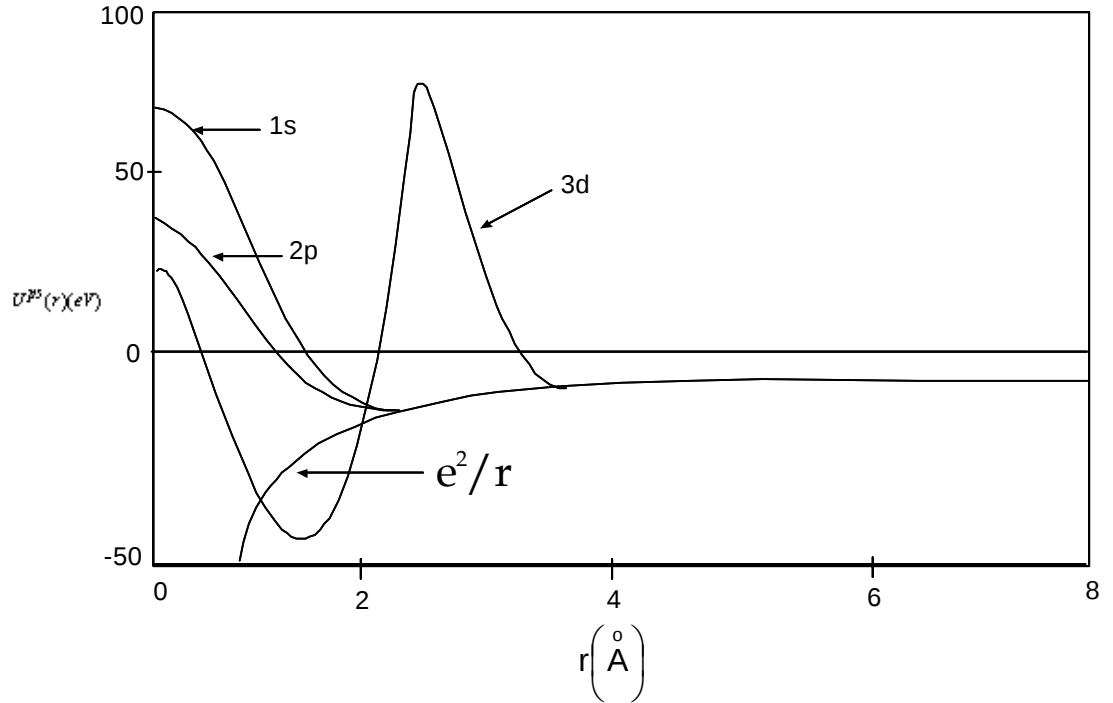
ve perdelemenin ana etkisi $q = 0$ 'deki singüleriteyi yok ederek aşağıdaki pseudopotansiyeli oluşturmaktır:

$$U^{ps} = \frac{4\pi Z e^2}{q^2 + \kappa^2} \quad (5.74)$$

Buradaki κ perdeleme mesafesidir. Bir elektron bulutu yalın (bare) bir çekirdeği sardığında pseudopotansiyel için

$$\frac{1}{\Omega} U_{ps}(g=0) - \frac{2}{3} \varepsilon_F \quad (5.75)$$

eşitliği türetilenmektedir. Bu eşitlik, pseudopotansiyeller üzerinde bir sınırlama olarak kullanılabilir.



Şekil 5.3. Gümüşün 5s, 5p ve 4d seviyelerinin pseudopotansiyelleri

5.6. Ortogonalize Düzlem Dalgalar (OPW) Metodu

Bant yapısı hesaplamalarının hemen hemen tamamı “tek-elektron sistemi” kavramı üzerine kurulur, Yani katıların pek çok özelliği, bir periyodik potansiyel seçilerek, bu periyodik potansiyel içinde hareket eden bir tek elektronun davranışını incelenerek anlaşılabilceği varsayımına dayanır. Hemen hemen her zaman potansiyel, bu potansiyel içindeki elektron seviyelerinin çözümlerine “öz-uyumlu” olarak bağlı alınır ve sonuçta problem tek bir elektron için çözülür. Hesaplamaların boyutu parçacık sayısının kuvveti (üssü) şeklinde oluşur. Yani N tane parçacık ihtiva eden M tane örgü konumlarına sahipsek. Schrödinger denklemi tek-parçacık problemi olarak ele alındığında M^N tane değişkenli değil. $M \times N$ değişkenli olmaktadır. Konu, periyodik tek-elektron problemine indirgendikten sonra bile Schrödinger denkleminin çözümü o kadar kolay olmaz. Mesela atom numarası 79 olan altın, atom başına bir elektron düşmek üzere boş bir kutuya konduğu düşünülürse, bir bakıma çekirdeğin çevresindeki diğer 78 elektron tarafından “*perdelenecek*”tir. Bu etki hesaplamalara ‘*pseudopotansiyel*’ kavramı yolu ile dahil edilmektedir.

Aslında pseudopotansiyeller, aynı anda iki farklı amaca hizmet ederler. Bir taraftan katıların “Hemen hemen serbest elektron modeli’nin doğrulanmasını sağlar ve iyonik Coulomb potansiyelinin dalga fonksiyonlarının bulunma sorununa açıklık getirerek daha zayıf potansiyelli benzer problemlerin çözümünü mümkün kılar. Öte yandan, bir katıhal probleminin boyut ve çeşitliliğini önemli ölçüde artıran bir araç görevi yapar.

Bir fikrin en iyi temsili, pratiği çok kolay olmamakla birlikte *ortogonalize (dikleştirilmiş) düzlem Dalga* (OPW) yapılabilir. Burada, periyodik bir katı içindeki elektronların, kor seviyeleri ve iletkenlik seviyeleri olmak üzere iki gruba ayrılabilceği kabul edilir. Kor seviyeleri, belirli bir atomik konumda lokalize olurlar. Bunlar bilinenler olarak alınır ve $|\Psi_c\rangle$ şeklinde gösterilir $\vec{k}$ indisi ile belirlenen bir ortogonalize düzlem dalga

$$\left| \vec{k}_{ps} \right\rangle = \left| \vec{k} \right\rangle - \sum_c \left| \Psi_c \right\rangle \left\langle \Psi_c \right| \vec{k} \right\rangle \quad (5.76)$$

olarak tanımlanır. “ps” alt indisi, bunun bir pseudo $\vec{k}$ seviyesi (durumu) olduğunu gösterir. Buradaki toplam, dolu kor seviyeleri üzerindendir. Bu seviyeler üzerine değeriği (valans) Z olan bir atomun Coulomb potansiyeli $\hat{U} = Z / \hat{R}$ nin etkisi

$$\hat{U} \left| \vec{k}_{ps} \right\rangle = \hat{U} \left| \vec{k} \right\rangle - \sum_c \hat{U} \left\langle \Psi_c \right| \vec{k} \right\rangle \left| \Psi_c \right\rangle \quad (5.77)$$

olarak alınabilir. $\left| \Psi_c \right\rangle$, seviyelerin komple bir seti olsaydı, o zaman $\hat{U} \left| \vec{k}_{ps} \right\rangle$ bulunmayacaktı. $\hat{U} \left| \vec{k}_{ps} \right\rangle$.in bütün matris elemanları çok küçük olacaktı. $\vec{k}_{ps}$ seviyeleri için Schrödinger denklemi;

$$(\hat{H} - \varepsilon) \left| \vec{k}_{ps} \right\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} - \varepsilon \right) \left| \vec{k}_{ps} \right\rangle \quad (5.78)$$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} - \varepsilon \right) \left\{ \left| \vec{k} \right\rangle - \sum_c \left\langle \Psi_c \right| \vec{k} \right\rangle \left| \Psi_c \right\rangle \right\} \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left| \vec{k} \right\rangle + (\hat{U} - \varepsilon) \left| \vec{k} \right\rangle - \sum_c (\varepsilon_c - \varepsilon) \left| \Psi_c \right\rangle \left\langle \Psi_c \right| \vec{k} \right\rangle \\ &= \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}_{ps} - \varepsilon \right) \left| \vec{k} \right\rangle = (\hat{H}_{ps} - \varepsilon) \left| \vec{k} \right\rangle \end{aligned} \quad (5.79)$$

biçimlerinde olabilirdi. Burada,

$$U_{ps} = U - \sum_c (\varepsilon_c - \varepsilon) |\Psi_c\rangle \langle \Psi_c| \quad (5.80)$$

dir. Eş. 5.3- Eş. 5.7'nin kısa bir yazılışı;

$$(\hat{H} - \varepsilon) \left| \vec{k}_{ps} \right\rangle = (\hat{H}_{ps} - \varepsilon) \left| \vec{k} \right\rangle \quad (5.81)$$

şeklindedir. O halde Schrödinger denklemi $\vec{k}_{ps}$ seviyeleri vasıtası ile tasvir edildiğinde, $\hat{U}$ potansiyeli problem, daha az singüleritesi olan $\hat{U}_{ps}$ pseudopotansiyelli özdeş bir probleme dönüşmektedir. Bu basitleştirmenin bedeli, $\hat{U}_{ps}$ pseudopotansiyelinin yerel olmayışıdır; yani bunun genel bir Ψ seviyesi (durumu) üzerindeki etkisini hesaplamak için integraller alınmalıdır. Ayrıca, U_{ps} bilinmeyen bir enerji özdeğerine (ε) bağlı olur; dolayısı ile ciddi bir *özdeğer problemi* çözme sorunu ortaya çıkar [46].

5.7. Scissors Operatörü

Kohn-Sham denklemleri sistemin temel durum özelliklerini belirlemek içindir ve hesaplamalara katılan işgal edilmemiş iletim bantlarının hiçbir fiziksel anlamı yoktur. Bu bantlar tek-parçacık durumları olarak optik özellik hesaplamalarında kullanıldığında bir bant aralığı problemi ortaya çıkar: optik soğurma çok düşük enerjilerde başlar. Bu nedenle öz uyumlu temel durum enerjilerinin uyarılmış spektruma uygulanması öz-enerji düzeltmesi gerektirir [47]. Öz-enerji etkilerini hesaba katmak için geliştirilen yaklaşımlardan biri scissors yaklaşımıdır.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) - e\vec{r} \cdot \vec{E} \quad (5.82)$$

Burada $V(\vec{r})$ etkin periyodik potansiyel, $\vec{r}$ konum vektörü ve $\vec{E} = -\vec{A}/c$ elektrik alandır. Scissors yaklaşımıyla bant aralığına gelecek düzeltme (Eş. 5.84) denkleminde bir ek ile gösterilebilir.

$$\tilde{H} = H + V_s \quad (5.83)$$

$$V_s = \Delta \sum_{\vec{ck}} \left| c\vec{k} \right\rangle \left\langle c\vec{k} \right| \quad (5.84)$$

Burada toplam tüm $\vec{k}'$ lar ve c iletim bantları üzerindedir ve Δ bant aralığı düzeltmesiyle ilgili sabit enerji kaymasıdır. $\left| c\vec{k} \right\rangle$ ise, uyarılmamış $H_0 = p^2 / 2m + V(\vec{r})$ Hamiltonyeninin tek parçacık öz-fonksiyonudur.

$$X_{ij}^{(1)}(-w, w) = \frac{e^2}{\hbar\Omega} \sum_{nmk} f_{nm}(\vec{k}) \frac{v_{nm}^i(\vec{k}) v_{nm}^j(\vec{k})}{w_{nm}^2(w_{nm}(\vec{k}) - w)} \quad (5.85)$$

Burada v_{nm} şu şekilde tanımlıdır:

$$\vec{v} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{r}, H] \quad (5.86)$$

Scissors operatörü de hesaba katıldığında hız. Eş. 5.85'deki Hamiltonyen ile belirlenecektir.

$$\tilde{\vec{v}} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{r}, \tilde{H}] = \frac{i}{\hbar} \{ [\vec{r}, H] + [\vec{r}, V_s] \} \quad (5.87)$$

Dolayısıyla buradan elde edilecek yeni lineer tepki aşağıdaki gibi olacaktır.

$$\tilde{\chi}_{\bar{u}}^{(1)}(-w, w) = \frac{e^2}{\hbar\Omega} \sum_{nm\vec{k}} f_{nm}(\vec{k}) \frac{v_{nm}^i(\vec{k})v_{nm}^j(\vec{k})}{w_{nm}^2 \left[w_{nm}(\vec{k}) + (\Delta/\hbar)(\delta_{mc} - \delta_{nc}) - w \right]} \quad (5.88)$$

Burada Kronecker deltalar iletim durumlarını gösterir. Eş. 5.87 ve Eş. 5.88 karşılaştırıldığında scissors yaklaşımı yapılırken gereken tek şeyin şu dönüşümü gerçekleştirmek olduğu görülür:

$$w_{nm} \rightarrow w_{nm} + \frac{\Delta}{\hbar}(\delta_{mc} - \delta_{nc}) \quad (5.89)$$

Aynı yöntemle scissors yaklaşımı daha yüksek mertebeden tepkilere de rahatlıkla uygulanabilir [47].

6. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, GaAs, GaP, InAs ve InP ikili bileşikleri ile bu bileşiklerin üçlü ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, $\text{InAs}_y\text{P}_{1-y}$, $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ ve $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$) ve dörtlü ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$) yarı iletken alaşımlarının x ve y ($x=0-1$, $y=0-1$) kompozisyonuna bağlı olarak elektronik, elastik ve optik özellikleri Gazi Üniversitesi Fizik Bölümünde bulunan CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) simülasyon programı (versiyon 3.1) kullanılarak çalışıldı.

Kullanılan bu simülasyon programı, yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) esas alan ve Kohn-Sham'ın oluşturduğu sistemi kullanarak hesaplama yapar. Bu çalışmada yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) elektronik değiş-tokuş potansiyel enerjisi seçildi.

Hesaplamalarda ilk olarak geometrik optimizasyon P1 simetrisi oluşturuldu. daha sonra atomik yapının denge konumundaki özdeğer minimizasyonu için konjuge-gradyent (CG) metodu kullanılarak, bir density mixing planlamasıyla, yapı optimize edildi. Optimizasyon esnasında molekülün hücresel olarak tamamının optimize hesabına katılması amacıyla optimize cell seçimi yapıldı.

GaAs, GaP, InGaAs, InGaP ve InGaAsP için enerji kesilim değeri olarak 880 eV ve $4 \times 4 \times 4$ k-point. InAs, InP, InAsP ve GaAsP için 330 eV ve $6 \times 6 \times 6$ k-point değerleri seçildi. Tüm alaşımlar için x ve $y = 0.5$ değerlerinde $4 \times 4 \times 6$ k-point seçimi yapıldı. Optimize işlemi başarılı bir şekilde tamamlandıktan sonra, örgü sabiti değerleri elde edildi.

İkinci adımda denge konumunda bulunan örgü sabiti değerleri kullanılarak, yapıların elektronik özellikleri hesaplandı. Yüksek simetri yönlerine karşılık gelen elektronik bant yapıları ve toplam durum yoğunluğu elde edildi. Bütün elektronik yapı hesaplamaları Bachelet tarafından tanımlanan norm-conserving sözde potansiyeli kullanılarak yapıldı. Çalışmada Ga ($3d^{10} 4s^2 4p^1$), In ($4d^{10} 5s^2 5p^1$), As ($4s^2 4p^3$) ve P'nin ($3s^2 3p^3$) orbitallerinin valans elektronları gibi davrandığı kabul edildi.

Üçüncü adımda geometrik optimizasyonu yapılmış alaşımların her bir yapısı için yukarıda verilen enerji kesilim ve k-point değerlerini kullanılarak, elastik özellikleri hesaplandı. Bu hesaplama sonucunda bulk modülü ve elastik sabiti değerleri elde edildi. Yapıların foton enerjisine bağlı optik özellikleri (dielektrik fonksiyonun reel ve sanal bileşenleri) hesaplandı. Bulunan bu fonksiyonlar yardımıyla, alaşımların enerji kayıp fonksiyon katsayısı $L(w)$, kırılma indisi $n(w)$, sönüm katsayısı $k(w)$, soğurma katsayısı $\alpha(w)$ ve yansımaya $R(w)$ katsayıları hesaplandı.

Hesaplanan örgü sabiti değerleri kullanılarak tüm yapıların elektronik bant yapıları, elastik sabitleri ve optik özellikleri hesaplandı. GaAs yapıya In ve P eklenme oranlarına bağlı olarak oluşan $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}, \text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y)$ üçlü ve $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y)$ dörtlü alaşımların x ve $y = 0,5$ değerinde optik özellikleri karşılaştırılarak incelendi.

6.1. Yapısal Özellikler

Çalışmada (GaAs, GaP, InAs ve InP) ikili, $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}, \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}, \text{InAs}_y\text{P}_{1-y})$ ve $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$ üçlü ve $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y})$ dörtlü alaşımlarının yapısal özellikleri ($x = 0 - 1$, $y = 0 - 1$) kompozisyona bağlı olarak hesaplandı.

6.1.1. Örgü sabiti değerlerinin hesaplanması

Hesaplamalarda ilk olarak kristalin toplam enerjisinin kristalin hacmine oranı minimize edilerek, yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların Zinc Blende yapısında kararlı olduğu görüldü. Alaşımların x ve $y = 0,5$ değerinde ise Tetragonal yapıda kararlı olduğu görüldü. Yapıların denge durumundaki örgü sabiti değerleri hesaplandı. Örgü sabiti değerleri sırasıyla Çizelge 6.1 - 6.5 ve 6.6'da daha önce yapılan çalışmalarda elde edilen deneysel ve teorik örgü sabiti değerleri ile karşılaştırılarak verildi.

Çizelge 6.1'de (GaAs, GaP, InAs ve InP) yapılar için verilen örgü sabiti değerleri, diğer teorik ve deneysel çalışmalarla karşılaştırıldı. Çalışmada elde edilen örgü sabiti

değerlerinin diğer teorik çalışmalardan yüksek olduğu görüldü [48–52]. Elde ettiğimiz değerlerle diğer teorik çalışmalar arasında gözlenen bu farklılığın nedeni, kullandığımız yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) elektronik değiş-tokuş enerjisinden kaynaklanmaktadır. Diğer teorik çalışmalarda Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır. Bu çalışmada elde edilen örgü sabiti değerleri, daha önceki teorik çalışmalara göre deneysel değerlere daha yakın olduğu görüldü. LDA yaklaşımı deneysel değerlere daha yakın sonuçlar vermesi nedeni ile hesaplamalarda kullanıldı.

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ ve $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının x ve y kompozisyon değerine göre hesaplanan örgü sabiti değerleri sırasıyla Çizelge 6.2 – 6.4 ve 6.5’te verildi.

Çizelge 6.2’de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alaşımının kompozisyon oranına bağlı olarak örgü sabiti değerlerinin arttığı görüldü. İndiyum eklenme oranı arttıkça örgü sabiti değerlerinin arttığı görüldü. En yüksek örgü sabiti değeri $\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}$ alaşımı için 5,90 (Å) olarak bulundu. Aynı durum $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ alaşımı içinde belirlendi. Elde edilen değerler teorik çalışma değerleri ile uyum içerisindedir.

Çizelge 6.3 ve 6.4’te $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ ve $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımlarının örgü sabiti değerleri kompozisyon oranına bağlı olarak azalmaktadır. Eklenme oranı arttıkça örgü sabiti değerinin azaldığı görüldü. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörtlü alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri kompozisyon oranlarına bağlı olarak değişmektedir (Bkz. Çizelge 6.6) Kompozisyon oranları arttıkça örgü sabiti değerleri azalmaktadır.

Çizelge 6.1. (GaAs, GaP, InAs ve InP) kristallerinin örgü parametreleri, diğer teorik ve deneysel çalışmalar

Bileşik	Referans	$a_0(\text{\AA})$
GaAs	Bu çalışma	5,58
	Teori [48]	5,53
	Teori [49]	5,50
	Deney[50]	5,64
GaP	Bu çalışma	5,50
	Teori [48]	5,32
	Teori [49]	5,35
	Deney [51]	5,45
InAs	Bu çalışma	5,93
	Teori [48]	5,92
	Teori [49]	5,90
	Deney [50]	6,05
InP	Bu çalışma	5,72
	Teori [48]	5,72
	Teori [49]	5,70
	Deney [50]	5,86

Çizelge 6.2. x kompozisyonu değerine göre $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri ve diğer teorik çalışmalar değerleri

Alaşım	Referans	$a_0(\text{\AA})$	$c_0(\text{\AA})$
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}$	Bu çalışma Teori [52]	5,65 5,62	5,65 5,62
$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$	Bu çalışma Teori[52]	4,09 4,12	5,82 5,84
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}$	Bu çalışma Teori[52]	5,90 5,91	5,90 5,91

Çizelge 6.3. x kompozisyonu değerine göre $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri

Alaşım	Referans	$a_0(\text{\AA})$	$c_0(\text{\AA})$
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{P}$	Bu çalışma	5,49	5,49
$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P}$	Bu çalışma	3,91	5,58
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{P}$	Bu çalışma	5,63	5,63

Çizelge 6.4. y kompozisyonu değerine göre $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri

Alaşım	Referans	$a_0(\text{\AA})$	$c_0(\text{\AA})$
$\text{InAs}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu çalışma	5,85	5,85
$\text{InAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$	Bu çalışma	4,10	5,81
$\text{InAs}_{0,25}\text{P}_{0,75}$	Bu çalışma	5,75	5,75

Çizelge 6.5. y kompozisyonu değerine göre $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri

Alaşım	Referans	$a_0(\text{\AA})$	$c_0(\text{\AA})$
$\text{GaAs}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu çalışma	5,54	5,54
$\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$	Bu çalışma	3,87	5,50
$\text{GaAs}_{0,25}\text{P}_{0,75}$	Bu çalışma	5,44	5,44

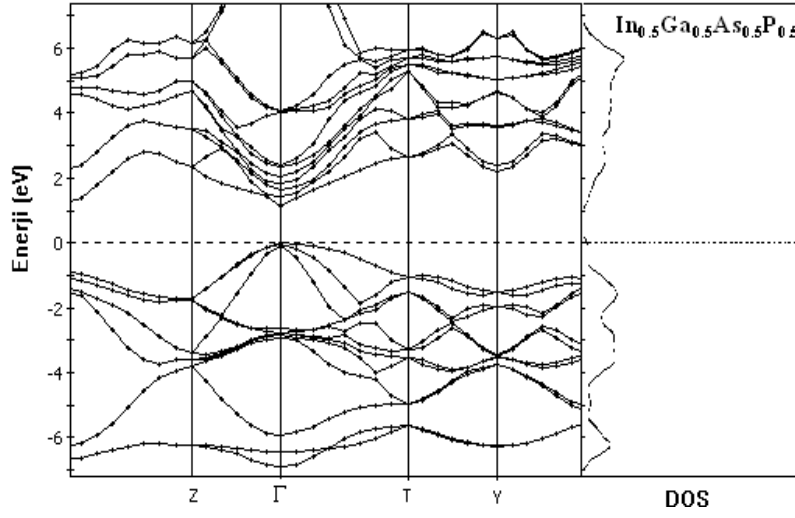
Çizelge 6.6. x ve y kompozisyonu değerlerine göre $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti değerleri

Alaşım	Referans	$a_0(\text{\AA})$	$c_0(\text{\AA})$
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu çalışma	5,77	5,77
$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$	Bu çalışma	5,64	5,64
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}_{0,25}\text{P}_{0,75}$	Bu çalışma	5,52	5,52

6.2. Elektronik Özellikler

6.2.1. Bant yapıların ve durum yoğunluğun hesaplanması

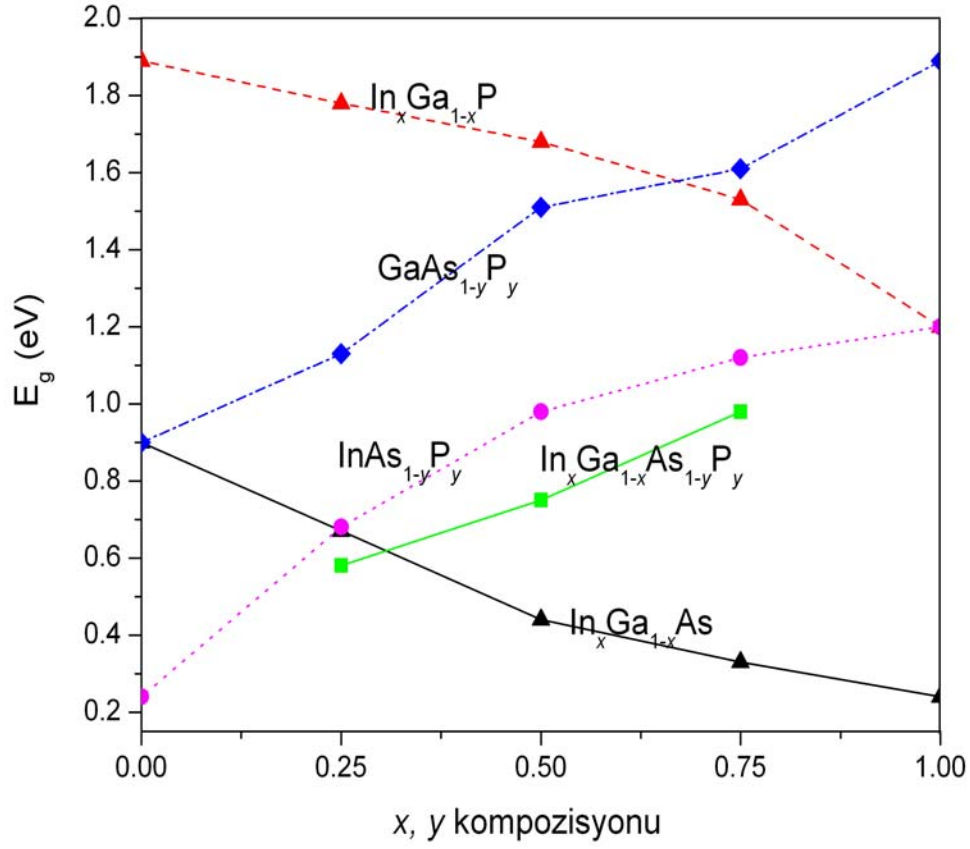
Çalışılan yarı iletken alaşımları için denge konumunda hesaplanan örgü sabiti değerleri kullanılarak, yüksek simetri yönlerine karşılık gelen elektronik bant yapıları elde edildi. Fermi seviyesi sıfır enerji seviyesi olarak seçildi. Aynı zamanda bu alaşımlarının toplam durum yoğunluğu x ve y kompozisyon değerine bağlı olarak hesaplandı. $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ alaşımının enerji bant yapısı toplam durum yoğunluğu ile beraber şekil 6.1’de verildi. Diğer Alaşımlarının bant yapıları ve toplam durum yoğunluğu grafikleri EK-1’de verildi. Bant yapıları ve toplam durum yoğunluğu değişimi grafiğinin uyumlu olduğu görüldü.



Şekil 6.1. $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ alaşımının enerji bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu

Yapıların Brillouin bölgesinin merkezindeki Γ simetri noktasında doğrudan (direkt) bant aralığına sahip olduğu görüldü. Ancak $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının $y \geq 0,50$ için dolaylı (İndirekt) bant aralığına sahip olduğu görüldü. Elde edilen enerji bant yapısı grafiklerinden her bir yapı için yasak enerji aralığı değerlerinin ölçümleri alınarak Şekil 6.2 'de grafik halinde verildi. Ayrıca karşılaştırmalı olarak teorik ve deneysel değerler ile birlikte sırasıyla çizelgeler 6.7- 6.11 ve 6.12 'de verildi. Elde edilen değerlerin teorik sonuçları ile uyumlu, deneysel sonuçlardan daha küçük olduğu görüldü [48, 52-59]. Bunun sebebi yoğunluk fonksiyonel teorisinin hesaplamalarında değiş-tokuş enerjisinin süreksizliğinden kaynaklandığı olarak yorumlandı.

Yasak enerji aralığın deneysel sonuçlarla uyumlu hale getirmek için scissors operatör işlemine gereksinim vardır. Biz bu scissors işlemini optik özelliklerin hesaplanmasında dikkate aldık.



Şekil 6.2. x ve y 'in bir fonksiyonu olarak üçlü ve dördü alaşımların yasak enerji aralığının değişimi

Alaşımlarının x ve y kompozisyon değerlerine bağlı olarak, elektronik bant yapısı grafiklerinde yer alan Γ noktalarından yasak enerji aralığının ölçümleri yapıldı. Şekil 6.2 'de gösterilen yasak enerji aralığı değerlerinde $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ yapısı için GaAs 'den InAs 'e doğru azalma olduğu görüldü. Yani In kompozisyon oranı arttıkça yasak enerji aralığının değeri azalmaktadır. Ayrıca, yasak enerji aralığı değişimi açıkça yay etkisi göstermektedir. Burada görülüyor ki, InGaAs alaşımının elektronik özellikleri, kompozisyonundaki lineerliliğe bağlı değildir. Bu lineersizlik GaAs ve InAs'ın örgü sabitlerindeki farklılığa kolayca yorumlanabilir. Zunger ve Jaffe, örgü düzensizliğinin, temel yarıiletken bileşik alaşımlarındaki bant aralığı iç örgü bozulmasıyla indirgendiğini göstermişlerdir [60]. Benzer şekilde $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ yapıları için GaP 'ten InP'e doğru azalma olduğu görüldü. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ ve $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$ yapılarda ise P kompozisyon oranı arttıkça yasak enerji aralığı değeri artmaktadır. Yani InAs

ten GaP 'ta doğru gidildikçe yasak enerji aralığı değerinde bir artış söz konusudur. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörütlü alaşımlının In ve P kompozisyonu değlerleri arttıkça yasak enerji aralığının yükseldiğı görüldü.

Sonuç olarak, elde edilen değlerlerin teorik sonuçları ile uyumlu, deneysel sonuçlardan ise daha küçük olduğı görüldü. Bunun sebebi yoğunluk fonksiyonel teorisinin hesaplamalarında değış-tokuş enerjisinin (iletim bandını hesaba katılmaması) süreksizliğinden kaynaklanmaktadır.

Çizelge 6.7. GaAs, GaP, InAs ve InP yapıların yasak enerji aralığı değlerleri ile diğler teorik ve deneysel çalışmlar

Bileşik	Referans	Yasak enerji aralığı (eV)
GaAs	Bu çalışma	0,90
	Teori [48]	1,00
	Teori [52]	0,93
	Teori [53]	0,90
	Deney [54]	1,42
GaP (İndirekt)	Bu çalışma	1,89
	Teori [48]	2,23
	Teori [55]	2,78
InAs	Bu çalışma	0,24
	Teori [48]	0,19
	Teori [52]	0,30
	Deney[56]	0,35
InP	Bu çalışma	1,20
	Teori [48]	1,23
	Teori [55]	1,34

Çizelge 6.8. x kompozisyonu değerine göre hesaplanan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alaşımlarının yasak enerji aralığı değerleri ile diğer teorik çalışmalar

Alaşım	Referans	Yasak enerji aralığı (eV)
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}$	Bu çalışma Teori [52]	0,67 0,70
$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$	Bu çalışma Teori [53]	0,44 0,50
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}$	Bu çalışma Teori [52]	0,33 0,40

Çizelge 6.9. x kompozisyonu değerine göre hesaplanan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ alaşımlarının yasak enerji aralığı değerleri ile diğer teorik çalışmalar

Alaşım	Referans	Yasak enerji aralığı (eV)
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{P}$	Bu çalışma Teori [57]	1,78 2,55
$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P}$	Bu çalışma Deney[58]	1,68 1,93
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{P}$	Bu çalışma	1,53

Çizelge 6.10. y kompozisyonuna değerine göre hesaplanan $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımlarının yasak enerji aralığı değerleri ile diğer deneysel çalışmalar

Alaşım	Referans	Yasak enerji aralığı (eV)
$\text{InAs}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu çalışma Deney [59]	0,68 0,77
$\text{InAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$	Bu çalışma Deney [60]	0,98 1,24
$\text{InAs}_{0,25}\text{P}_{0,75}$	Bu çalışma Deney [59]	1,12 1,31

Çizelge 6.11. y kompozisyonu değerine göre hesaplanan $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının yasak enerji aralığı değerleri ve teorik çalışmalar

Alaşım	Referans	Yasak enerji aralığı (eV)
$\text{GaAs}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu çalışma Teori [57]	1,13 1,60
$\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ (İndirekt)	Bu çalışma Teori [57]	1,51 1,80
$\text{GaAs}_{0,25}\text{P}_{0,75}$ (İndirekt)	Bu çalışma Teori [57]	1,61 2,02

Çizelge 6.12, x ve y kompozisyonu değerine göre hesaplanan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımının yasak enerji aralığı değerleri

Madde	Referans	Yasak enerji aralığı (eV)
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu çalışma	0,58
$\text{In}_{0,50}\text{Ga}_{0,50}\text{As}_{0,50}\text{P}_{0,50}$	Bu çalışma Deney [72]	0,75 1,48
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}_{0,25}\text{P}_{0,27}$	Bu çalışma	0,98

6.3. Elastik Sabiti ve Bulk Modülün Hesaplanması

Katıların elastik sabitleri, kristalin mekaniksel ve dinamiksel davranışları arasında bağlantı kurar. Ayrıca katıdaki doğal kuvvetler ve malzemenin sertlik ve kararlılığı hakkında önemli bilgiler verir. Elastik sabitlerinin teorik ve deneysel değerlerinin karşılaştırılması, kullanılan potansiyelin güvenilirliğinin testi için önemlidir. Bu yüzden hesaplanan elastik sabitlerinin doğruluğu mevcut metodun doğruluğu için de bir ölçüdür.

Hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri her bir yapı için x ve y kompozisyonun değerine göre Çizelge 6.13 – 6.17 ve 6.18’de verildi. Elde edilen bu sonuçlar teorik ve deneysel çalışmalar ile karşılaştırıldı, hesaplanan elastik sabitleri $C_{11}-C_{12}>0$, $C_{11}>0$, $C_{44}>0$ ve $C_{11}+2C_{12}>0$ şeklinde ifade edilen mekanik denge koşullarını sağlamaktadır.

Materyalin, bilinen kristal yapılarından ve ab initio toplam enerji değerlerinden yararlanarak elastik sabitlerini hesaplamak için kullanılan popüler iki yöntem vardır. Bunlardan ilki, kristalin birim hücrenin hacmini koruyacak şekilde belirli ve küçük bir deformasyon uygulamak, diğeri de elastik sabitlerini, zor-zorlanma (Hooke Yasası) ilişkisinin orantı katsayısı olarak almaktır. Bu çalışmada birinci yöntem kullanılmıştır. Birim hücrenin hacmini koruyacak şekilde seçilen kübik ve tetragonal strain matrislerine çok küçük deformasyonlar uygulayarak elastik sabiti değerleri hesaplandı. Yöntemin ayrıntıları Bölüm 4'te verilmiştir.

GaAs, GaP, InAs ve InP için hesaplanan elastik sabiti değerleri, ilgili deneysel ve teorik çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak çizelge 6.13'te verildi. GaAs ve InAs yapıların hesaplanan C_{11} değerleri deneysel değerden yüksek. GaP ve InP değerleri ise deneysel değerden düşük, C_{12} ve C_{44} değerleri ise yüksektir, hesaplanan elastik sabiti değerleri mekaniksel kararlılık ilkesini sağlamaktadır.

(GaAs, GaP, InAs ve InP) yapıların bulk modülü değerleri hesaplanarak daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmalarla karşılaştırıldı. sonuçların uyumlu olduğu görüldü (Bkz. Çizelge 6.13). GaAs ve GaP yapılar için hesaplanan bulk modülü değerleri, diğer teorik ve deneysel çalışmalardan [52, 61- 63] daha küçük değerler elde edildi. InAs ve InP yapılar için elde edilen değerlerin ise teorik ve deneysel değerlerle uyum içerisinde olduğu görüldü.

$In_xGa_{1-x}As$ için hesaplanan elastik sabiti değerleri, ilgili deneysel ve teorik çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak çizelge 6.14'te verildi. Elde edilen değerlere bakıldığında, GaAs için verilen C_{11} bu çalışma ile örtüşmektedir. Deneysel değerler incelendiğinde bütün teorik değerlerle deneysel değerler arasında bir fark olduğu gözlemlendi (Bkz. Çizelge 6.14). $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ ve GaAs moleküllerinin C_{11} ve C_{12} değerlerinde verilen referanslarla daha uyumluluk gözlenmektedir. C_{11} ve C_{12} değerleri molekülün doğru bir şekilde optimize edildiğini göstermekte önemli etken olduğu için, elde edilen sonuçların yüksek uyumluluk içerdiği söylenebilir. Hesapladığımız C_{44} değerlerinde

referanslara göre farkın biraz daha fazla olduğu görüldü. C_{11} ve C_{12} değerlerinin kompozisyon oranına bağlı olarak azaldığı görüldü.

Bulk modülü değerlerinin In kompozisyonu oranına bağlı olarak azaldığı görüldü. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ ve GaP yapılarının Bulk modülü değerleri daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyushmaktadır (Bkz. Çizelge 6.15). $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P}$ alaşımının C_{11} ve C_{12} değerlerinin verilen referanslara göre büyük. C_{44} değerlerinin ise uyumlu olduğunu söyleyebiliriz. Bulk modülü değerlerinde ise düzensiz bir değişim görüldü. Kompozisyon oranın bağlı olarak oluşan değişiklik; $\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{P} < \text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P}$; $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P} > \text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{P}$ şeklinde ifade edildi.

$\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımın kompozisyon oranına bağlı olarak C_{11} değerlerinin yükseldiği (Bkz. Çizelge 6.16), ancak C_{12} ve C_{44} değerlerinin azaldığı görülmektedir. Bulk modülü değerlerinde ise düzensiz bir değişim görüldü. Kompozisyon oranına bağlı olarak bulk modülü değerleri yükseldi. Oluşan değişiklik; $\text{InAs}_{0,75}\text{P}_{0,25} < \text{InAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; $\text{InAs}_{0,5}\text{P}_{0,5} < \text{InAs}_{0,25}\text{P}_{0,75}$ şeklinde ifade edildi.

$\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ yapılarının elastik sabiti değerlerinin düzensiz bir şekilde değiştiği görüldü. Bulk modülü değerlerinin değişimi ise; $\text{GaAs}_{0,75}\text{P}_{0,25} < \text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; $\text{GaAs}_{0,75}\text{P}_{0,25} > \text{GaAs}_{0,25}\text{P}_{0,75}$ şeklinde ifade edildi.

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörütlü alaşımının kompozisyon oranına bağlı olarak C_{11} değerlerinin düzensiz bir şekilde değiştiği görüldü (Bkz. Çizelge 6.18). Ancak C_{12} ve C_{44} değerlerinin yükseldiği görüldü. Elde edilen değerlerin mevcut teorik çalışma değerleri ile kıyaslandığında bazı farklılıklar gözlemlendi. Gözlenen bu farklılıkların kullanılan yöntemlerden kaynaklandığı yorumlandı. Bulk modülü değerleri ise kompozisyon oranlarına bağlı olarak düzensiz bir şekilde değişmektedir. Oluşan değişiklik; $\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}_{0,75}\text{P}_{0,25} > \text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$; $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5} < \text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}_{0,25}\text{P}_{0,75}$ şeklinde ifade edildi.

Elde ettiğimiz sonuçların mevcut deneysel ve teorik değerlere yakın olduğu, hesaplanan elastik sabitlerin tüm yapılar için mekanik denge koşullarını sağladığı belirlendi.

Çizelge 6.13. GaAs, GaP, InAs ve InP yapıları için elastik sabiti ve bulk modülü değerleri, deneysel değerler, teorik değerler ve bu çalışma değerleri

Bileşik	Referans	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	B (GPa)
GaAs	Bu çalışma	116,7	53,43	66,96	74,53
	Teori [52]	121,7	54,24	67,54	75,70
	Teori [61]	118,0	54,00	59,00	77,10
	Teori [62]	118,8	53,80	59,40	77,00
	Deney[63]	114,0	52,00	57,00	
GaP	Bu çalışma	123,00	56,00	68,10	78,42
	Teori [8]	140,53	62,30	70,30	92,10
	Teori [9]	140,60	62,90	81,66	97,80
	Deney [10]	135,10	60,00	67,00	88,00
InAs	Bu çalışma	83,32	56,87	45,76	62,70
	Teori [52]	83,66	45,29	35,96	61,70
	Teori [61]	83,00	45,00	40,00	61,90
	Teori [62]	83,30	45,30	39,60	58,00
	Deney [63]	81,00	44,00	39,00	
InP	Bu çalışma	118,0	63,31	57,67	81,77
	Teori [8]	101,10	56,10	45,60	73,60
	Teori [9]	94,87	54,02	54,60	76,10
	Deney [63]	97,00	54,01	45,00	72,00

Çizelge 6.14. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için x kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri, deneysel değerler, teorik değerler ve bu çalışma değerleri

Alařım	Referans	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	B (GPa)
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}$	Bu alıřma	107,7	50,25	50,92	69,42
$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$	Bu alıřma	100,2	49,01	60,09	66,45
	Teori [52]	98,70	59,20	61,75	
	Teori [61]	97,80	49,00	47,90	
	Deney[63]	95,00	48,30	45,00	
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}$	Bu alıřma	90,76	48,67	49,39	62,70

Çizelge 6.15. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ için x kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri, deneysel değerler ve bu alıřma değerleri

Alařım	Referans	C_{11} (Gpa)	C_{12} (Gpa)	C_{44} (Gpa)	B (GPa)
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{P}$	Bu alıřma	128,07	60,65	63,49	83,12
$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P}$	Bu alıřma	132,60	60,9	59,15	87,48
	Deney [63]	124,00	62,00	59,00	
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{P}$	Bu alıřma	122,74	66,29	54,52	85,11

Çizelge 6.16. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ için y kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri

Alařım	Referans	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	B (GPa)
$\text{InAs}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu alıřma	106,0	59,55	46,98	75,06
$\text{InAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$	Bu alıřma	109,4	61,91	48,00	77,82
$\text{InAs}_{0,25}\text{P}_{0,75}$	Bu alıřma	113,7	64,46	51,09	80,90

Çizelge 6.17. $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ için y kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti ve bulk modülü değerleri

Alařım	Referans	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	B (GPa)
$\text{GaAs}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu alıřma	107,63	37,62	58,80	88,61
$\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$	Bu alıřma	135,00	60,10	67,12	85,30
$\text{GaAs}_{0,25}\text{P}_{0,75}$	Bu alıřma	140,90	62,45	69,70	60,50

Çizelge 6.18. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ için x ve y kompozisyonu değerine göre hesaplanan elastik sabiti, bulk modülü ve teorik çalışma değerleri

Alaşım	Referans	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	B (GPa)
$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}_{0,75}\text{P}_{0,25}$	Bu çalışma	130,20	62,75	63,14	101,16
$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,50}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$	Bu çalışma	118,00	55,00	59,90	80,35
	Teori [51]	110,20	61,74	45,60	
$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}_{0,25}\text{P}_{0,75}$	Bu çalışma	133,35	85,05	51,92	85,20

6.4. Optik Özellikler

Yoğunluk fonksiyoneli yöntemiyle üretilen Pseudo potansiyeller kullanılarak alaşımlarının kübik ve tetragonal fazdaki optik özellikleri hesaplandı. Hesaplamalarda deneysel ve teorik yasak enerji aralığını aynı yapmak için gerekli olan Eş. 5.91'deki *scissors* operatörü kullanıldı. Hesaplama sonucunda GaAs yapının In ve P kompozisyon oranını bağlı olarak oluşan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörtlü alaşımlarının x ve $y = 0,5$ değerinde optik özellikleri karşılaştırıldı. Bu karşılaştırma sonucunda aşağıdaki sonuçlar elde edildi.

6.4.1. Dielektrik fonksiyonun hesaplanması

Alaşımlarının foton enerjisine bağlı lineer dielektrik fonksiyonun reel ve sanal bileşenleri her bir yapı için hesaplanarak EK-2'de grafik halinde verildi. Bulunan bu fonksiyonlar yardımıyla. (Eş. 4.32 - 4.36) denklemleri ile tanımlanan, enerji kayıp fonksiyonu $L(w)$, kırılma indisi $n(w)$, sönüm katsayısı $k(w)$, soğurma katsayısı $\alpha(w)$ ve yansıma $R(w)$ katsayısı hesaplandı. Hesaplanan bu optik sabitlerin sonuçları, EK-2'de her bir yapı için x ve y kompozisyon değerine bağlı olarak grafik halinde verildi. Hesaplamalar mevcut teorik ve deneysel çalışmalar [64,72] ile karşılaştırıldı, genel olarak sonuçların uyum içerisinde olduğu görüldü.

Çalışmada yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların dielektrik fonksiyonun reel kısmından her bir yapı için statik dielektrik sabiti değerleri belirendi. Hesaplanan bu değerler mevcut teorik ve deneysel çalışmalar ile karşılaştırıldı.

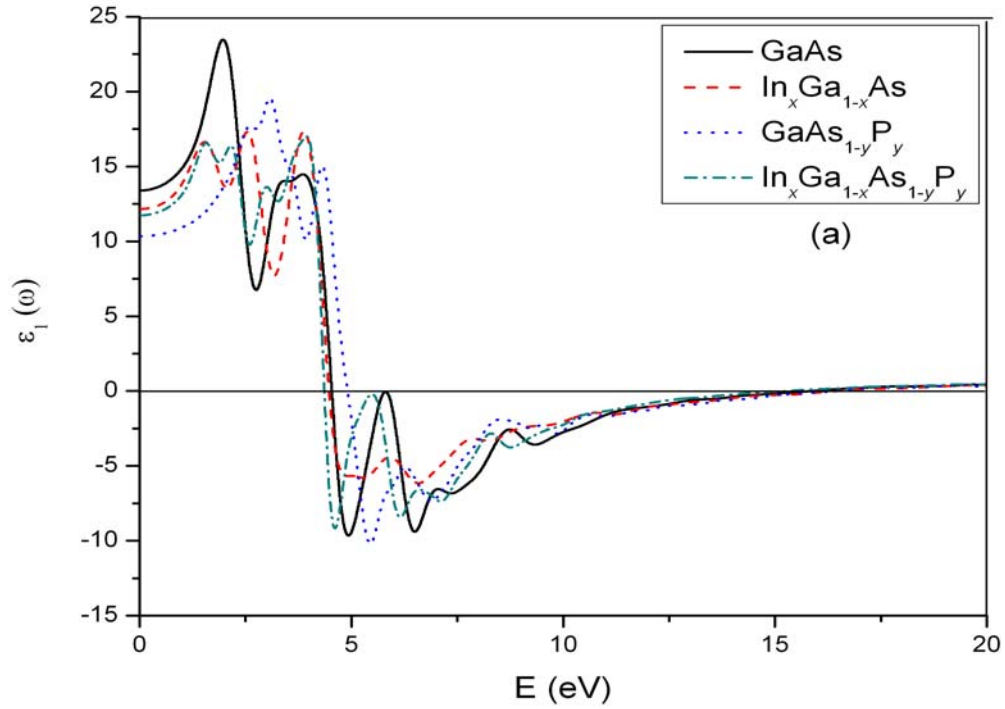
Çizelge 6.19. Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların statik dielektrik sabiti değerleri, diğer teorik ve deneysel değerler

Bileşik	Referans	Statik dielektrik sabiti $\epsilon_1(0)$	Alaşım	Statik dielektrik sabiti $\epsilon_1(0)$
GaAs	Bu çalışma	13,10		
	Teori [66]	15,10	<u>In_xGa_{1-x}As</u>	
	Teori [71]	13,85	In _{0,25} Ga _{0,75} As	13,5
	Deney[65]	10,90	In _{0,50} Ga _{0,50} As In _{0,27} Ga _{0,25} As	14,1 13,3
GaP	Bu çalışma	10,20		
	Teori [64]	9,43	<u>In_xGa_{1-x}P</u>	
	Teori [70]	9,10	In _{0,25} Ga _{0,75} P	12,4
	Teori [69]	9,60	In _{0,50} Ga _{0,50} P In _{0,27} Ga _{0,25} P	10,9 10,3
InAs	Bu çalışma	16,40	<u>InAs_{1-y}P_y</u>	
	Teori [69]	12,30	InAs _{0,25} P _{0,75}	12,8
	Teori [71]	13,73	InAs _{0,50} P _{0,50} InAs _{0,75} P _{0,25}	9,70 10,2
InP	Bu çalışma	10,90	<u>GaAs_{1-y}P_y</u>	
	Teori [71]	10,40	GaAs _{0,75} P _{0,25} GaAs _{0,50} P _{0,50} GaAs _{0,25} P _{0,75}	13,2 10,6 12,8
			<u>In_xGa_{1-x}As_{1-y}P_y</u>	
			In _{0,25} Ga _{0,75} As _{0,75} P _{0,25} In _{0,50} Ga _{0,50} As _{0,50} P _{0,50} In _{0,75} Ga _{0,25} As _{0,25} P _{0,75}	12,3 11,9 12,0

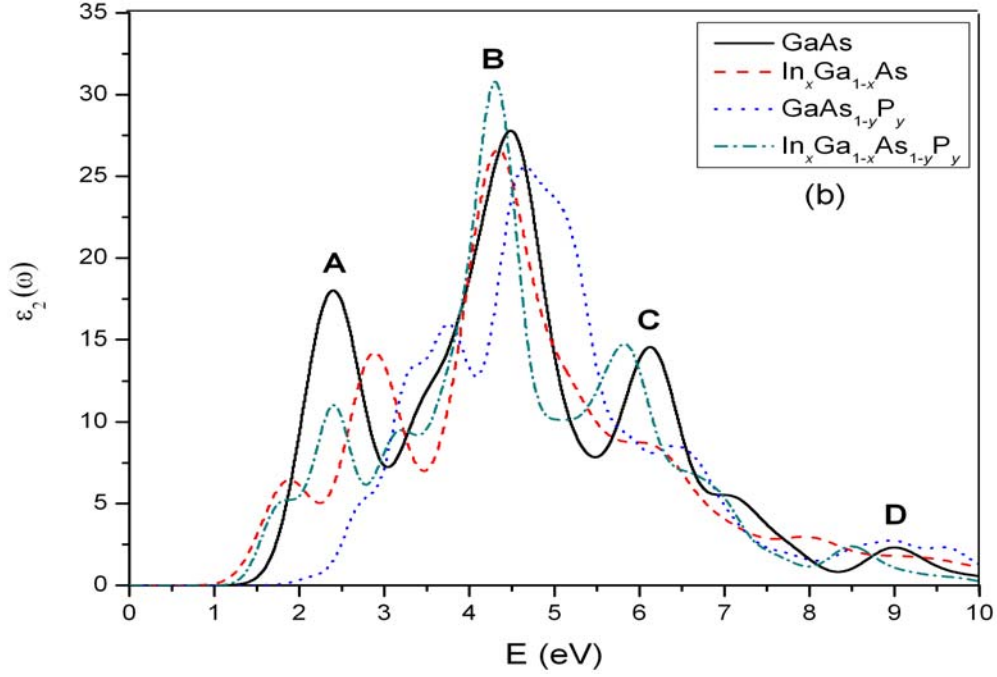
Elde edilen statik dielektrik sabiti değerleri. her bir yapı için kompozisyon değerine bağlı olarak dielektrik fonksiyonun reel kısmından hesaplandı. Elde edilen bazı değerlerde teorik ve deneysel[69- 71] çalışma değerlerinden farklı olduğu gözlemlendi

(Bkz. Çizelge 6.19). Gözlenen bu farklılığın, kullanılan hesaplama yöntemlerine bağlı olduğu tespit edildi. Alaşımların statik dielektrik sabiti değerleri kompozisyon değerine bağlı olarak değişmektedir. Özellikle x ve $y = 0,50$ değerinde dielektrik sabiti düzensiz bir şekilde değiştiği görüldü. Genel olarak elde edilen değerler daha önceki çalışmalarla uyumludur.

Şekil 6.3’da GaAs yapının x ve y kompozisyon oranlarına bağlı olarak oluşan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörtlü alaşımlarının x ve $y = 0,5$ değerinde dielektrik fonksiyonun reel ve sanal kısmı karşılaştırılarak grafik halinde verildi.



Şekil 6.3. GaAs, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ ve $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ için dielektrik fonksiyonun (a) reel ve (b) sanal bileşenleri



Şekil 6.3. (Devam) GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için dielektrik fonksiyonun (a) reel ve (b) sanal bileşenleri

GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ yapıları için hesaplanan, foton enerjisine bağlı lineer dielektrik fonksiyonun reel ve sanal bileşenleri sırasıyla Şekil 6.3 (a, b)'de verildi. Dielektrik fonksiyonunun reel kısmı yaklaşık olarak 2 eV ile 7 eV arasındaki bölge dışında foton enerjisinin artmasıyla artış göstermektedir ki bu normal dispersiyondur. 2 eV ile 7 eV arasındaki bölgede ise foton enerjisinin artmasıyla azalmaktadır. Bu ise anormal dispersiyon karakteristiğidir. Ayrıca şekilden görüldüğü gibi (0 – 0,9) eV foton-enerji aralığı her iki fazda da yüksek geçirgenlik karakterine sahiptir. Ancak GaAs→InGaAsP doğru gidildikçe bu aralığın yapıdan yapıya değiştiği görüldü. GaAs için (2,0 – 4,0) eV foton-enerji aralığında güçlü soğurma artışı vardır. $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ yapılarında ise bu artışın yaklaşık olarak sırasıyla 3,9; 4,3 ve 4,7 eV değerine kadar kaydığı görüldü. Bu durum verilen soğurma ve yansıtıcılık eğrilerinde daha ayrıntılı olarak görülebilir.

Şekil 6.4 (b) 'da gösterilen foton enerjisine bağlı dielektrik fonksiyonunun sanal kısımlarının pik değerleri Çizelge 6.20'de verildi. Bu pikler valans bandından iletim bandına (elektronik geçişler) geçişlere karşılık gelir.

Çizelge 6.20. Alaşımlarının dielektrik fonksiyonunun sanal kısımlarının pik değerleri

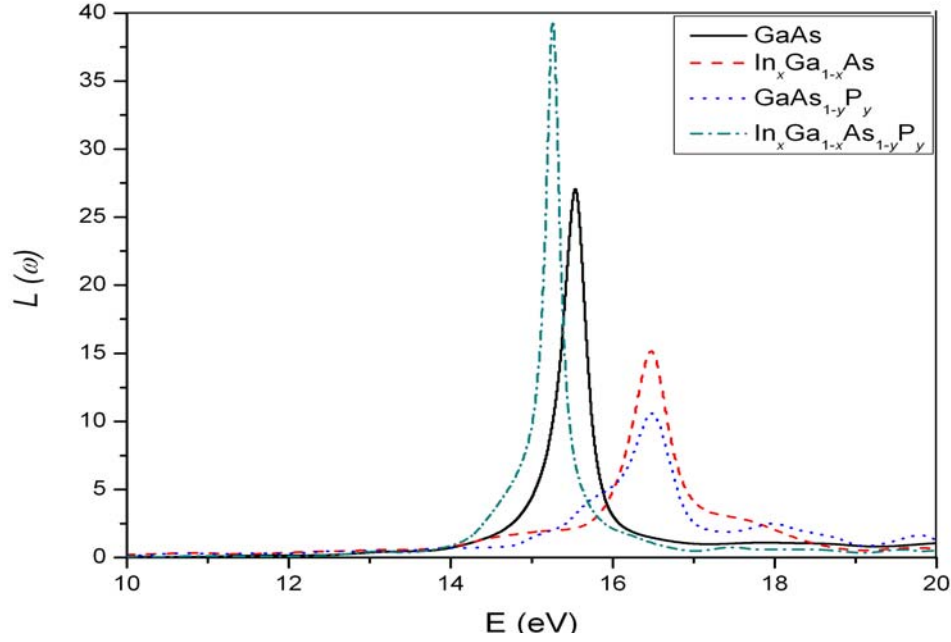
Alaşım	A (eV)	B (eV)	C (eV)	D (eV)
GaAs	2,31	4,42	6,11	8,9
In _{0,5} Ga _{0,5} As	2,94	4,40	6,24	...
GaAs _{0,5} P _{0,5}	3,74	4,65	6,40	8,81
In _{0,5} Ga _{0,5} As _{0,5} P _{0,5}	2,39	4,27	5,82	8,53

Alaşımların kompozisyon değerine bağlı olarak pik değerlerinde ki kayma Şekil 6.3 (b) 'den görülebilir. GaAs yapıya In 'un eklenmesiyle pik değerlerinde değişim görüldü. A değerleri sırasıyla 2,31 değerinden 2,94 değerine yükselmektedir (Bkz. Çizelge 6.20). D pik değerlerinin yok olduğu görüldü. P eklenme oranına bağlı olarak oluşan pik değerlerinin B noktasında sırasıyla 4,42 eV değerlerinden 4,65 eV değerlerine yükseldiği görüldü. Ancak D noktasında bu değer 8,81 kaydı olduğu görüldü. In_{0,5}Ga_{0,5}As_{0,5}P_{0,5} dörtlü alaşımların pik değerleri de değişmektedir.. Bandlar arası elektronik geçişlere karşılık gelen pik değerleri kompozisyon oranlarına bağlı olarak değişmektedir.

6.4.2. Enerji kayıp fonksiyonu

Enerji kayıp fonksiyonu materyali geçen hızlı elektronların enerji kaybını tanımlar. Eş. 4.33 kullanılarak alaşımlarının x ve y değerine göre enerji kayıp fonksiyonları hesaplandı ve EK-2'de grafik halinde verildi. Enerji kayıp fonksiyonundaki keskin maksimumlar valans elektronlarının kolektif titreşimleri ile ilişkilidir. Şekil 6.4 'ten görüldüğü gibi GaAs yapının kompozisyon oranlarına bağlı olarak oluşan In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y} üçlü ve (In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}) dörtlü alaşımlarının x ve $y = 0,5$ değerinde enerji kayıp fonksiyonunun maksimumu sırasıyla yaklaşık 16,8; 15,1; 16,6 ve 15,0

eV değerindedir. Bu değerler Şekil 6.3 (a)'deki noktaların ϵ_1 'in sıfır olduğu noktalara karşılık gelmektedir. Bu pik değerleri materyaller için metalik özellik den dielektrik özelliğe geçişleri gösteriyor.



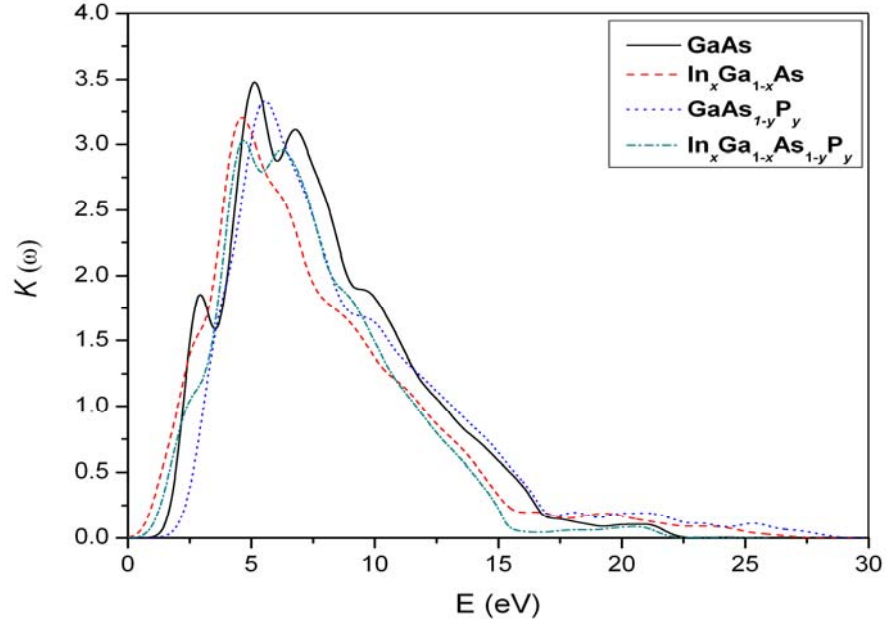
Şekil 6.4. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için enerji kayıp fonksiyonu

6.4.3. Kırılma indisi ve sönüm katsayısı

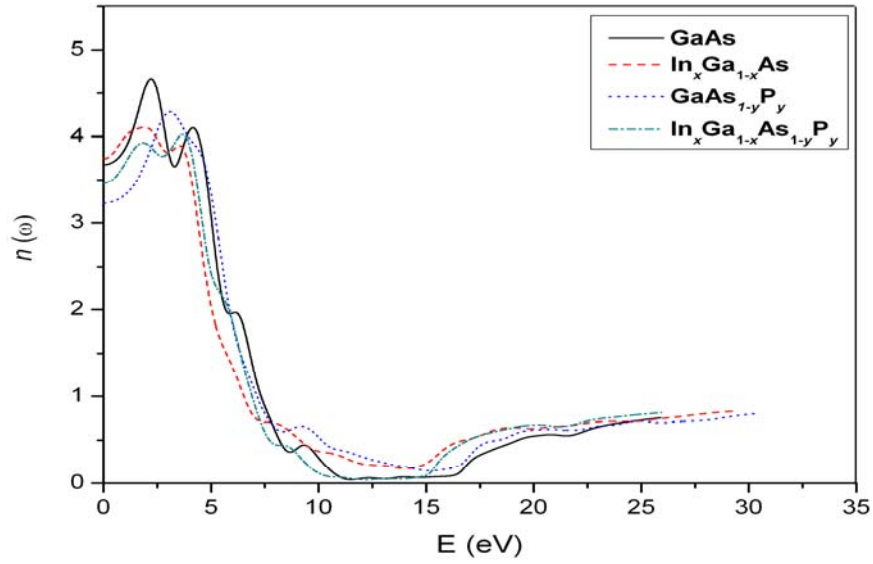
Eş. 4.34 kullanılarak alaşımlarının foton enerjisine bağlı olarak hesaplanan kırılma indisleri ve sönüm katsayıları her bir yapı için EK-2'de grafik halinde verildi. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ yapılarının kırılma indisleri. şekil 6.5'ta verildi. Yapıların kırılma indisi değerleri sırasıyla 4,1; 3,8; 3,2 ve 3,4 elde edildi.

Eş. 4.35 kullanılarak x ve y kompozisyon değerine bağlı olarak hesaplanan sönüm katsayıları EK-2'de yine grafik halinde verildi, şekil 6.6'da GaAs yapısının kompozisyon oranlarına bağlı olarak oluşan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}$

$x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörütlü alaşımlarının x ve $y = 0,5$ değeriindeki sönüm katsayıları karşılaştırmalı olarak verildi.



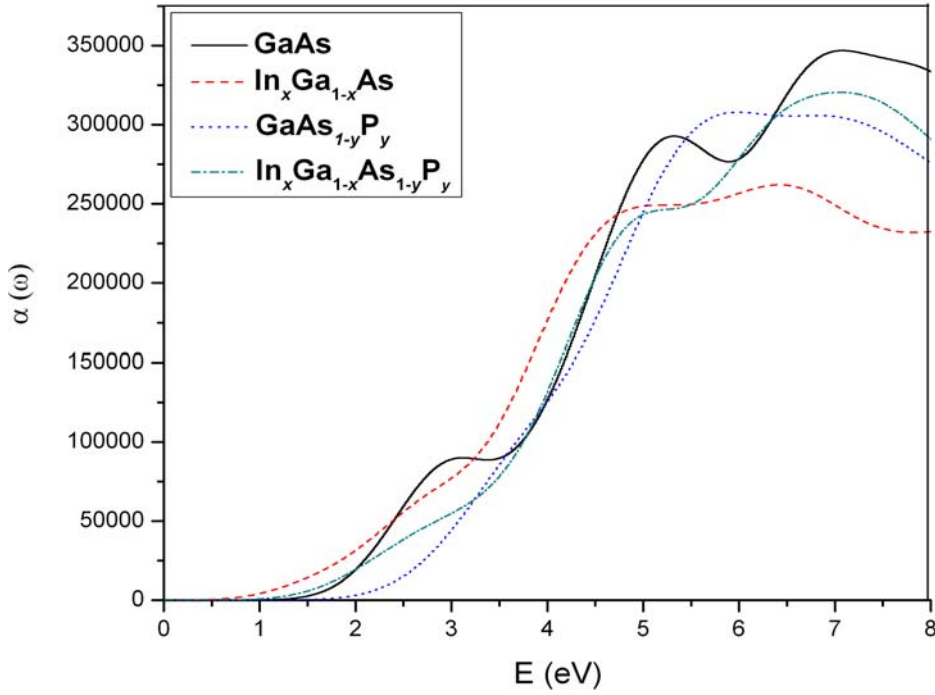
Şekil 6.5. $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için kırılma indisleri



Şekil 6.6. GaAs , $\text{GaIn}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için sönüm katsayıları

6.4.4. Soğurma katsayısı

Eş. 4.36 kullanılarak alaşımlarının soğurma katsayıları hesaplanarak EK-2’de grafikler halinde verildi. Şekil 6.7 ’de GaAs yapının kompozisyon oranlarına bağlı olarak oluşan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörtlü alaşımlarının x ve $y=0,5$ değerinde soğurma katsayıları karşılaştırmalı olarak verildi.



Şekil 6.7. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için soğurma katsayıları

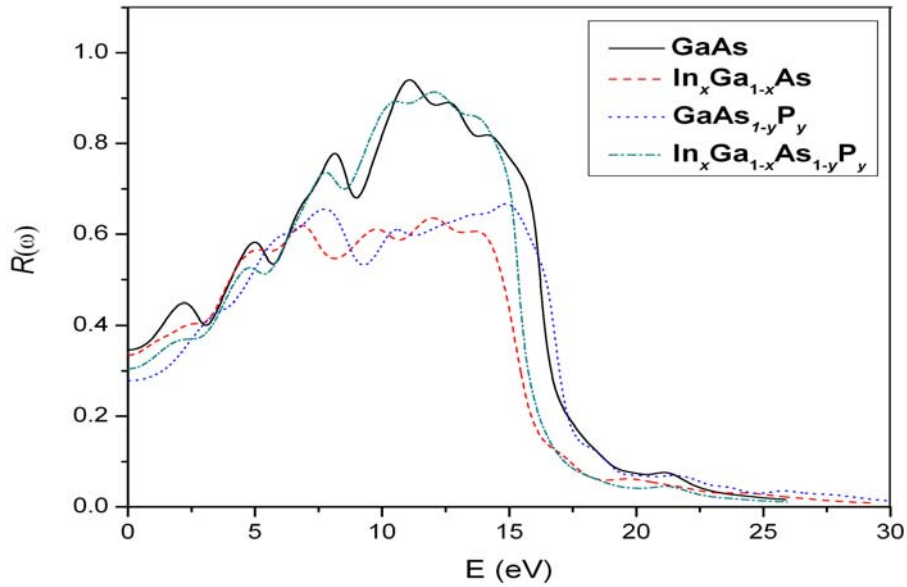
GaAs yapısı için 1,42 eV yüksek simetri noktasındaki soğurma kenarı başlangıcıdır. $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$ yapısı için ise 0,50 eV'deki soğurma başlangıcıdır. $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ yapısında ise soğurma başlangıcı 2,2 eV değerine kaymıştır. $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ içinde 1,3 eV değerinde soğurma kenarı başlangıcına sahiptir. Bu değerlerinin elektronik bant yapılarına bağlı olarak değiştiği görülmüştür. Yapıların soğurma başlangıç enerji değerleri görünür ve kızılötesi bölgeye karşılık gelmektedir. Yapıların yaklaşık olarak (1,7 – 4,5) eV enerji değerleri arasındaki bölgede soğurması çok hızlı olarak artmaktadır. (5,0 – 7,0) eV enerji aralığı güçlü bir soğurma bölgesine karşılık gelmektedir. Bu

bölgenin yapıdan yapıya değiştiği, özellikle $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ alaşımında güçlü soğurma bölgesinin diğer yapılardan biraz daha büyük aralığa kaydığı görüldü. Yapıların soğurma spektrumlarının doğrudan elektronik bant yapılarına bağlı olduğu görüldü.

6.4.5. Yansıtıcılık

Eş. 4.37 kullanılarak alaşımlarının hesaplanan yansıtıcılıkları x ve y kompozisyon değerine göre EK-2’de grafik halinde verildi. Ayrıca Şekil 6.8 ’da GaAs yapının kompozisyon oranlarına bağlı olarak oluşan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörtlü alaşımlarının x ve $y = 0,5$ değerinde yansıtıcılık katsayıları karşılaştırmalı olarak verildi.

Yapıların (2,0 – 10) eV arasındaki bölgede yansıtıcılıkları hızla artmaktadır. Bu enerji aralığı yansıtıcılık bölgesi olarak bilinir. Bu durumun dielektrik fonksiyonun bileşenleri ile uyumlu olduğu görüldü.



Şekil 6.8. GaAs, $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ ve $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{P}_{0,5}$ için yansıtıcılık

7. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında yoğunluk fonksiyoneli yöntemi ile (GaAs, GaP ve InAs) ikili, $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}, \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}, \text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ ve $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y)$ üçlü ve $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y)$ dörtlü yarı iletken alaşımlarının x ve y kompozisyon oranına bağlı olarak elektronik, elastik ve optik özellikleri, temel prensiplere dayanan CASTEP programı kullanılarak hesaplandı., elde edilen sonuçlar aşağıda özetlendi:

1. Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının örgü parametreleri değerleri hesaplandı. Yapıların hesaplanan örgü parametreleri değerleri teorik ve deneysel sonuçlar ile uyumludur. Elde edilen örgü sabiti değerlerinin daha önce hesaplanan teorik değerlerden daha çok deneysel değerlere yakın olduğu tespit edildi.
2. Alaşımların enerji bant yapısı hesaplandı. Birinci Brillouin bölgesinin Γ simetri yönlerindeki elektronik bant yapısı belirlendi. Hesaplama sonucunda, bu yapıların $(\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y)$ alaşımının $y \geq 0,50$ dışında) Brillouin bölgesinin merkezindeki Γ simetri noktasında doğrudan bant aralığına sahip olduğu görüldü.
3. Brillouin bölgesinin merkezindeki Γ simetri noktasında hesaplanan yasak enerji aralığı değerleri grafik halinde verilip yorumlandı. Elde edilen değerler deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırıldı. Teorik değerler ile uyumlu deneysel değerlerden ise daha küçük olduğu görüldü. Bu sonuç LDA çalışmalarında beklenen bir durumdur.
4. Bütün yapıların toplam durum yoğunlukları (DOS) hesaplandı ve grafik halinde verildi. DOS 'un enerjiye göre değişimi incelendi ve elektronik bant değişimi ile uyum içinde olduğu görüldü.
5. (GaAs, GaP ve InAs) ikili, $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}, \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}, \text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ ve $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y)$ üçlü ve $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y)$ dörtlü yarı iletken yapıların elastik sabitleri hesaplandı. Elastik sabiti değerleri hesabı için literatürde “hacmini koruyan” (volume-conserving) olarak bilinen yöntem kullanıldı. Yöntemde uygulanan deformasyon ve strain (zorlanma)

matrisleri ile kristalin birim hücresinin hacmi korunmaktadır. Uygulanan deformasyon %1-2 civarındadır.

6. (GaAs, GaP, InP ve InAs) için hesaplanan elastik sabiti değerleri diğer teorik çalışmalardan %5-10 kadar yüksektir. Hesaplanan elastik sabitleri ile deneysel değerler arasında da bazı farklılıklar gözlemlendi. Farklılığın nedeni kullanılan hesaplama yöntemi olarak yorumlandı. C_{44} için hesaplanan değerler teorik çalışmalar ile uyumludur, bu nedenle hesaplama sonuçlarının kabul edilebilir olduğu sonucuna varıldı.

7. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ve $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ yapıların hesaplanan elastik sabiti değerlerinin deneysel çalışmalar ile uyumlu olduğu görüldü. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y)$ dörtlü alaşımların kompozisyon oranlarına bağlı olarak elastik sabitleri ilk defa elde edildi.

8. Yapıların bulk modülü değerleri hesaplandı. Hesaplanan bu değerler mevcut teorik ve deneysel değerlerle kıyaslanarak uyumlu olduğu görüldü.

9. Yar iletken alaşımlarının tüm optik fonksiyonları, foton enerjisine bağlı lineer dielektrik tensörünün reel (ϵ_1) ve sanal (ϵ_2) bileşenleri, enerji kayıp fonksiyonu, kırılma indisi, sönüm katsayısı, yansımaya katsayısı ve soğurma katsayısı hesaplanarak grafik halinde verildi. Alaşımlar için yapılan hesaplamaların genel olarak teorik ve deneysel çalışmalarla uyumlu olduğu tespit edildi.

10. GaAs yapının kompozisyon oranlarına bağlı olarak oluşan $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ dörtlü alaşımlarının x ve $y = 0,5$ değerinde optik özellikleri karşılaştırılarak incelendi. Karşılaştırma sonucunda, bu yapıların In ve P eklenme oranlarına bağlı olarak sırasıyla 1,42; 0,5; 2,2 ve 1,3 eV soğurma başlangıç değerine sahip oldukları belirlendi.

Sonuç olarak çalışmada elde ettiğimiz değerlerin daha önce yapılan teorik ve deneysel çalışmalarla uyumlu olduğu belirlendi. Bu çalışmada $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ üçlü ve

($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$) drtl alařımların ilk defa hesaplanan dielektrik fonksiyonlarından statik dielektrik sabiti, elastik sabiti ve bulk modl deęerleri kompozisyon oranlarına baęlı olarak bulundu. (GaAs, GaP ve InAs) ikili bileřiklerinin In ve P katılarak farklı kompozisyon oranlarında elde edilen alařımlar iin yapılan hesaplama sonucunda, bu yapılarda, deneysel alıřanlara katkı miktarına gre alařımların zellięini gsteren grafikler snunmuřtur.

Bu alıřmada incelenen zelliklerin gelecekte yapılacak arařtırmalar iin gvenilebilir veriler oluřturması beklenir. Bizden sonraki arařtırmacılara, sıcaklık ya da basın deęiřimlerinin veya her ikisi birlikte oluřan deęiřimine baęlı yapılar iin hesaplama yapılması nerilebilir. Bunların dıřında yarı iletken alařımlarının lineer olmayan optik zellikleri de arařtırılabilir.

KAYNAKLAR

1. Singh, J., "Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures", **Cambridge University**, Cambridge, 1-3 (2003).
2. Bolshakova, I., "Influence of the neutron caused defects on the parametres of magnetic microsensors and methods for improvement of their radiation hardness", **World Scientific**, 1-2 (2001).
3. Gop1, V., Souw, V., Chen. E.H, Woodall, J. M., "Temperature depend transport properties of InAs film grown on lattice mismatched GaP", **J. Appl. Phys.**, 87: 3-11 (2000).
4. Dikici, M., "Kristal yapılar", Katihal Fizigine Geri, **Ondokuz Mayıs Unit.**, Samsun, 1-21 (1993).
5. Kittel, C., "Introduction to Solid State Physics", **John Wiley and Sons.**, New York, 1-19 (1996).
6. Gezci, S., "Kristal Yapı", Katihal Fiziği, **İTÜ**, İstanbul, 1-25 (1991).
7. Martin, R.M., "Electronic Structure", **Cambridge University Press**, Cambridge 73-85 (2004).
8. Rodriguez, J.A., "First-principles calculations of the adsorption of a single monolayer of GaAs on Si (110)", **Phys. Rev. B**, 66:205315 (2001).
9. Srivastava, G. P., "The physics of phonons", **Adam Hilger**, Bristol, 5-6 (1990).
10. Burns, G., "Solid State Physics", **Academi Pres.**, London, 712 (1990).
11. Razeghi, M., Rogalski, A., "Journal Research Nitride Semiconductor", **J. Appl. Phys.**, 79: 7433-7473 (1996).
12. Monemar, B., "Fundamental Energy Gap of GaN", **Phys. Rev. B**, 10: 676-681 (1974).
13. Yeo, Y C., Chong, T. C., "Electronic Band Structure and Effective Mass of GaN", **J. Appl. Phys.**, 83: 1429 (1998).
14. Perry, P.B., Rutz, R.F., "The Rate of Radiative Recombination in the Nitride Semiconductors and Alloys", **Appl. Phys. Lett.**, 33: 319 (1978).

15. Shan, W., Ager, J.W., Yu K.M., Walukiewicz, W. Haller, E.E., Martin, M.C., McKinney, W.R., Yang, W. "Effect of Nitrogen on The Electronic Band Structure of group III-N-V Alloys" , '*J. Appl. Phys.*, 85: 8505 (1999).
16. Rodrigues, S.C.P., Rosa A.L., Scolfaro, L.M.R., Beliaev, D., Leite, J.R., Enderlein R., Alves J.L.A., "Miniband structures and effective masses of naatype delta-doping superlattices in GaN", '*Semicond. Sci. Technol.*, 13: 981 (1998).
17. Albanesi, E.A, Lambrecht, W.R.L., Segall B., "Ab-initio Calculation of Electronic Properties of GaAlN Alloys", '*Phys. Rev. B*, 48: 17841-17847 (1993).
18. Walle, V.C., Martin, G., "Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system", '*Phys. Rev. B*, 34: 5621-5634 (1986).
19. Katz, O., Meyler, B. Tisch, U., Salzman, J., "Determination of Band Gap Bowing Parameter of AlGaIn", '*Phys. Stat. Sol.*, 188 (2): 789-792 (2001).
20. Höhje, H., Ragman, W., S., D., Folkers, G., "Molecular Modelling", Basic principle and aplications", '*2. Edition Willey-VCH*, 10-20 (2003).
21. Allen, L.C., "Interpolation Schema For Energy Band In Solids", '*Phys. Rev.*, 98 4: 993-996 (1955).
22. Philips, J.C., "Dielectric Definition of Electronegativity", '*Phys. Rev. Lett.*, 20: 550-582 (1976).
23. Chelikowsky, J.R., Cohen, M.L., "Non local pseudopotential calculations for the electronic structure eleven diamond and Zinc-Blende semiconductors", '*Phys. Rev. B*, 14: 556-580 (1976).
24. Grimvall, G., "Thermophysical Properties of Materials", '*North-Holland, Amesterdam*, 28: 15-34 (1986).
25. Wang, J., Yip, S., Phillpot, S.R., Wolf, D., "Crystal instabilities at finite strain", '*Phys. Rev. Lett.*, 71: 4182-4185 (1993).
26. Mehl, M. J., "Pressure dependence of the elastic moduli in aluminum-rich Al-Li compounds", '*Phys. Rev. B*, 47: 2493-2500 (1993).
27. Gülseren, O. And Cohen, R.E., "High-pressure thermoelasticity of body centered cubic tantalum", '*Phys. Rev. B*, 65: 064103-64103-5 (2002).
28. Bandeaux, D., Vlieger, J., "Optical properties of Surfaces", '*World Scientific Publishing*, USA, 444 (2001).

29. Dirac, P.A.M. "Note on exchange phenomena in the Thomas-Fermi atom", **Proc. Cambridge Phil. Roy. Soc.**, 26: 376-385 (1930).
30. Akkuş, H., Mamedov, A.M., "SbSI Kristalinin Elektronik Optik Özellikleri" Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin Uygulanması, Doktora Tezi, **Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Adana, 76-113 (2007).
31. Wooten, F. "Optical Properties of Solids", **New York: Academic** 29-43 (1972).
22. NYE, J. F., "Physical Properties of Crystals", Clarendon Press, **Oxford**, 297-315 (1957).
33. Fermi, E., "A statistical method for the determination of some properties of atoms. Application to the periodic system of the elements", **Z. Phys.**, 48:73-79 (1928).
34. Fermi, E., "A statistical method for determining some properties of the atom", **Rend. Accad.**, 6: 602-7 (1927).
35. Hohenberg, P., Kohn, W., "Inhomogeneous Electron Gas", **Phys. Rev. B**, 136: 864-871 (1964).
36. Kohn, W., Sham, L. J. "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects", **Phys. Rev.**, 140: A1133-A1138 (1965).
37. Internet: Dokuz Eylül Üniversitesi, "Yoğunluk fonksiyoneli teorisi" <http://kisi.deu.edu.tr/umit.akinci/kmc/node1.html> (2007).
38. Hartree, D.R. "The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb centralfield part I. Theory and methods", **Proc. Cambridge Philos. Soc.**, 24: 89-110 (1928).
39. Lieb, M.H., Simon, B., "Hartree-Fock Theory for Coulomb Systems", **Commun. math. Phys.**, 53: 185-194 (1977).
40. Slater, J. C., "Note on Hartree's Method", **Phys. Rev.**, 35: 210-211 (1930).
41. Beverley, D.M., Alder, M. J., "Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method", **Phys. Rev. Lett.**, 45: 566-569 (1980).
42. Giannozzi, P., Gironcoli, S.D., Pavone, P., Baroni, S., "Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors", **Phys. Rev. B**, 43:7231-7242 (1991).
43. Charges, "phonons in quartz by variational density-functional perturbation theory", **Phys. Rev. Lett.**, 68: 3603-3606 (1992).

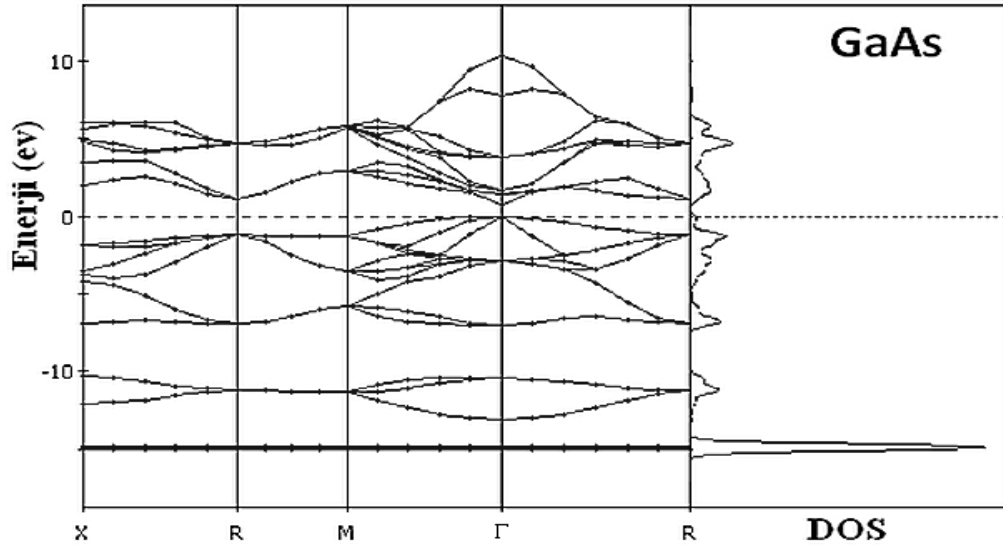
44. Laasonen, K., Csajka, F., Parrinello, M., “Water dimer properties in the gradient-corrected density functional theory”, **Chemical Physics Letters**, 194:172-174 (1992).
45. Bachelet, G., Hamann, D., R., Schhiter, M., “Pseudo potentials that work: From H to Pu”, **Phys. Rev. B**, 26: 4199-4228 (1982).
46. Deligöz, E., “Bazı ikili (CdS, CdSe, CdTe, CdF₂, AlBi ve BBi) bileşiklerinin yapısal, elektronik, elastik, termodinamik ve titreşimsel özelliklerinin ab initio yöntemle incelenmesi”, Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 65-68 (1993).
47. Hughes, J.L.P., Sipe J. E., “Calculation of Second-Order Optical Response in Semiconductors”, **Phys. Rev. B**, 53: 10751–10763 (1996).
48. Wang, S.Q., Yes, H.Q., “Plane-w pseudopotential study on mechanical and electronic properties for IV and III-V crystalline phases with zinc-Blende structure”, **Phys. Rev. B**, 66: 235111-235115 (2002).
49. Kalvoda, S., Paulus, H., Fulde, P., “Light-induced defects in hydrogenated amorphous silicon studied by the constant-photocurrent method”, **Phys. Rev. B**, 55: 4027- 4029 (1997).
50. Hellwege, K.H., Madelung O., Landolt- Boörnstein “Semiconductors: Physics of Group IV Elements and III-V Compounds”, New Series, Group III, 17, Pt. **a Springer- Verlag, Berlin**,16-79 (1982).
51. Levinstein, M., Rumyantsev, S., Shur, M., “Handbook Series on Semiconductor Parameters”, **World Scientific, Singapore**, (1, 2): 11-32 (1996).
52. Durmuş, P., “Structural and Electronic Properties of In_xGa_{1-x}As Alloys”, **Balkan Phys. Lett.**, 1301- 8329 (2007).
53. Zhou Jing, Ren Xiao-Min, Huang Yong-Qing “First-Principles Calculations of Electronic Structures of New III–V Semiconductors: B_xGa_{1-x}As and T_xGa_{1-x}As alloys” , **Chin. Phys. Lett.**, 25 (9): 3353-3354 (2008).
54. Hyong-Sub Kim, “study of metal-oxide-semiconductor capacitors on GaAs, InAs, and InSb substrates using a germanium interfacial passivation layer”, **Appl. Phys. Lett.**, 93: 062111-062116, (2008).
55. Ben Fred, A., Debbi chi, M., Said, M., “Influence of the composition fluctuation and the disorder on the bowing band gap in semiconductor materials”, **Microelectronics Journal**, 38: 860–870 (2007).

56. Ming-Zhuhuang, Chin, W.Y., “Calculation of optical excitations in cubic semiconductor”, **Phys. Rev. B**, 47 (15): 9449-9454 (1993).
57. Abdulaziz, A., Nadir, B., Ali, K., “Band structure and lattice vibration properties of III-P ternary alloys”, **Physica B**, 403: 1990–1995 (2008).
58. Gary, Y.R., “Strain-Induced Modifications of the Band Structure of In GaP In_{0.5}Al_{0.5}P Multiple Quantum Wells”, **IEEE J of Quantum elect.**, 34: 93-98 (1998).
69. Tragardh, N.J., Persson, A.I., “Measurements of the band gap of wurtzite InAs_{1-x}P_x nanowires using photocurrent spectroscopy”, **J. Appl. Phys.**, 101: 123701-123701 (2007).
60. Zunger, A., Jaffe, J. E., “Structural Origin of Optical Bowing in Semiconductor Alloys”, **Phys. Rev. Lett.**, 51: 662-665 (1983).
61. Kirjn, M. P. C. M., “Semicond Heterojunction band offsets and effective masses in Ill-V quaternary alloys”, **Sci. Technol.**, 6: 27-31(1991).
62. Rodrigues, S.C.P., Sipahi, G.M, Schofar,o L. M.R., Leite, J.R., “ Hole charge localization and band structures of p-doped GaN/InGaN and GaAs/InGaAs semiconductor heterostructures”, **J. Phys. Condens Matter**, 14: 5813-5827 (2002).
63. Bernab, A., “Elastic constants of In_xGa_{1-x}As and In_xGa_{1-x}P determined using surface acoustic waves”, **J. Phys. Condens. Matter**, 11: L323–L327 (1999).
64. Wang, C.S., Klein B.M ., “First principles Electronic structure of Si, Ge, GaP, GaAs, ZnS, and ZnSe” , **Phys. Rev. B**, 24: 3418-3428 (1981).
65. Hass, M., Henvies, B.W., “Crystal Dynamics of lead. I. Dispersion Curves at 100 K”, **J. Phys. Chem. Solids**, 23: 1099-1111 (1962).
66. Kim, T. J., “Dielectric functions of In_xGa_{1-x}As alloys”,**Phys. Rev. B**, 68: 115323 (2003).
67. Shang, X.Z., “Optical properties of highly disordered InGaP by solid-source molecular beam Epitaxy with a GaP decomposition source”, **J. of Cryst. Growth**, 262: 14–18 (2004).
68. Yen-Kuang Kuo, “Numerical study on gain and optical properties of AlGaInAs, InGaAs, and InGaAsP material systems for 1.3μm semiconductor lasers”, **Optics Communic.**, 275: 156–164 (2007).

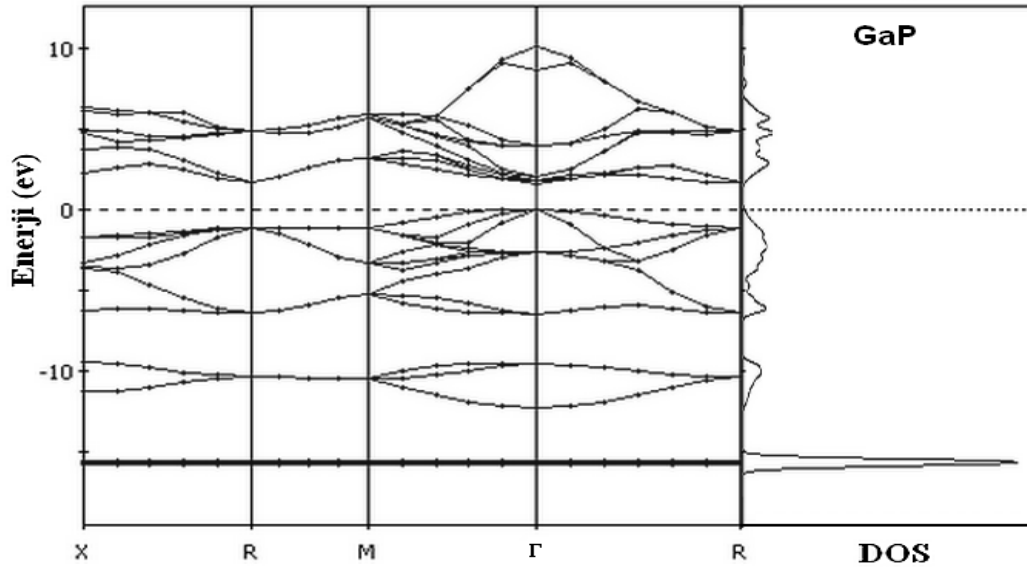
69. VanVechten, J.A., "Quantum Dielectric Theory of Electronegativity in Covalent systems", *Phys. Rev.*, 182: 892-901(1969).
70. Czyza, S.J., Baker, W.M., Crane, R.C., Howe, J.B., "The determination of the refractivity index of CdS single crystals", *J opt. Soc. Am*, 240 (1957).
71. Adachi, S., "Model dielectric constants of GaP, GaAs, InAs and InSb", *Phys. Rev. B.*, 35:14 (1987).
72. Ryuzo, I., Takeshi, Y., Hideo S., "Lateral band-gap control of InGaAsP multiple quantum wells by laser-assisted metalorganic molecular beam epitaxy for a multiwavelength laser array", *Appl. Phys. Lett.* 64, 983-985 (1994).

EKLER

Ek-1 Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

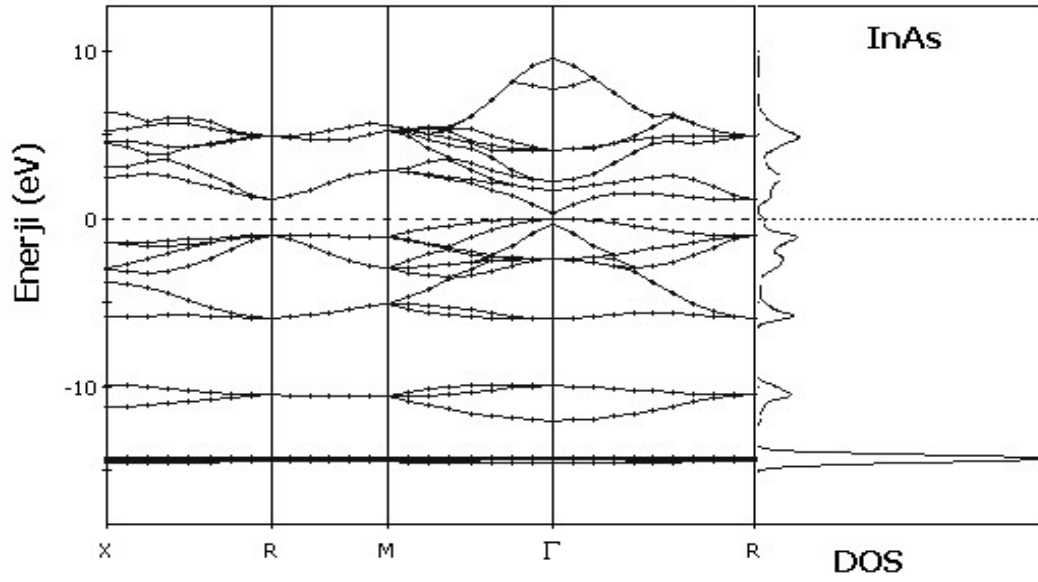


Şekil 1.1. GaAs yapının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

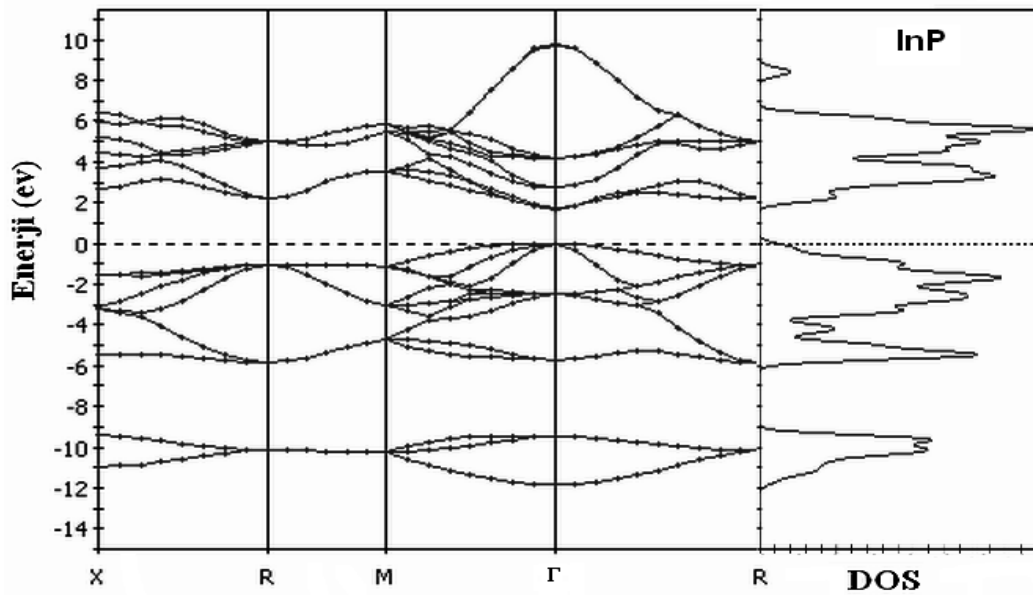


Şekil 1.2. GaP yapının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

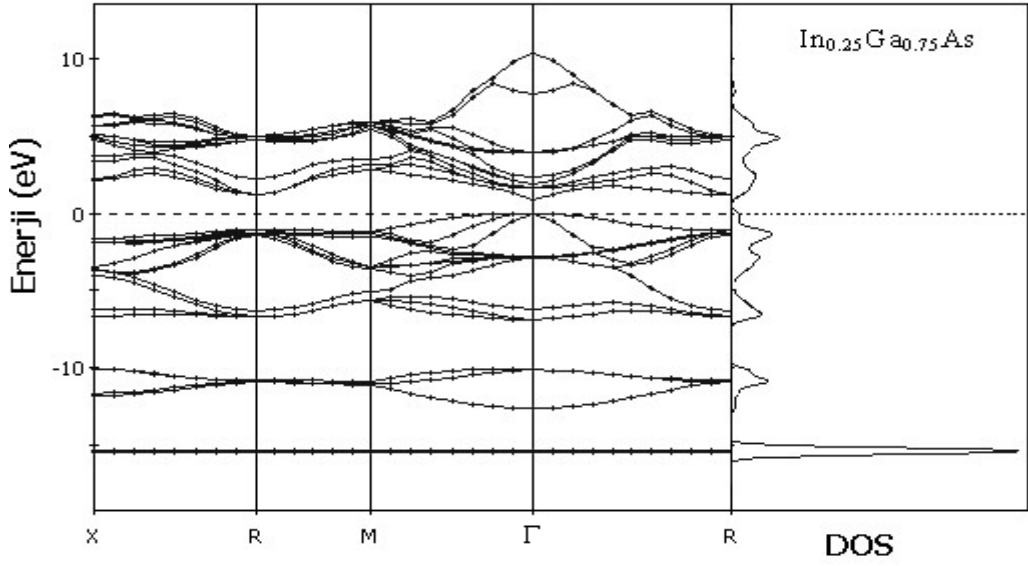


Şekil 1.3. InAs yapının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

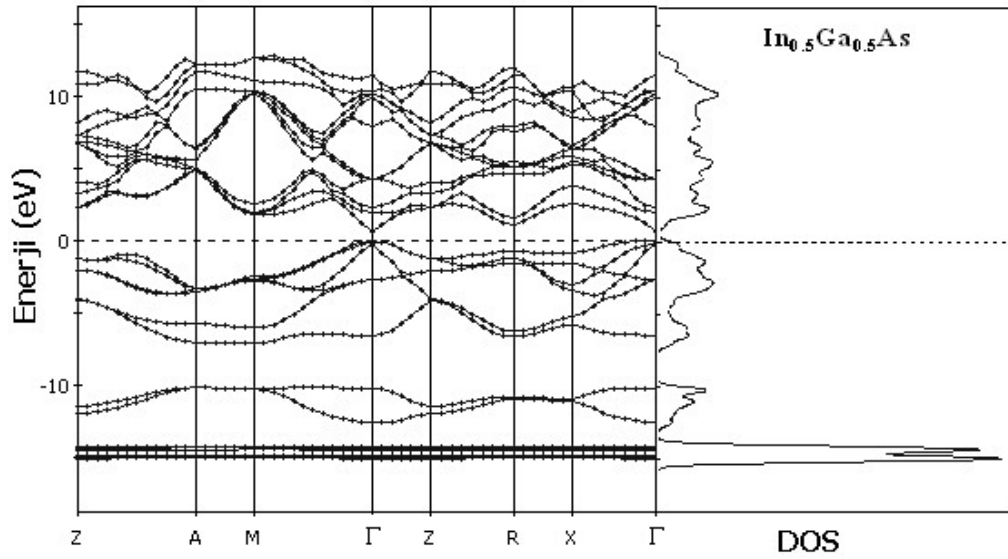


Şekil 1.4. InP yapının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

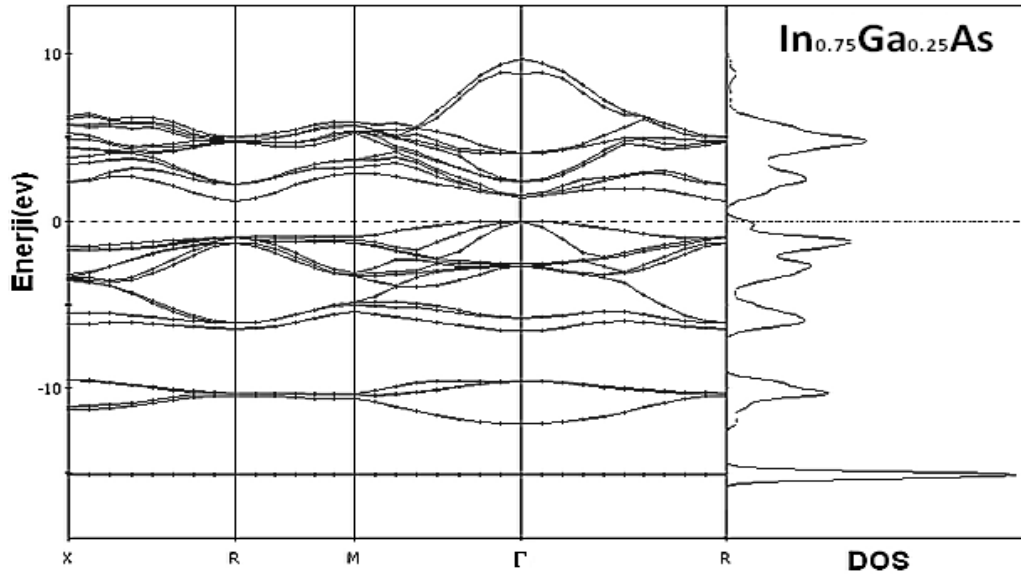


Şekil 1.5. InGaAs alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

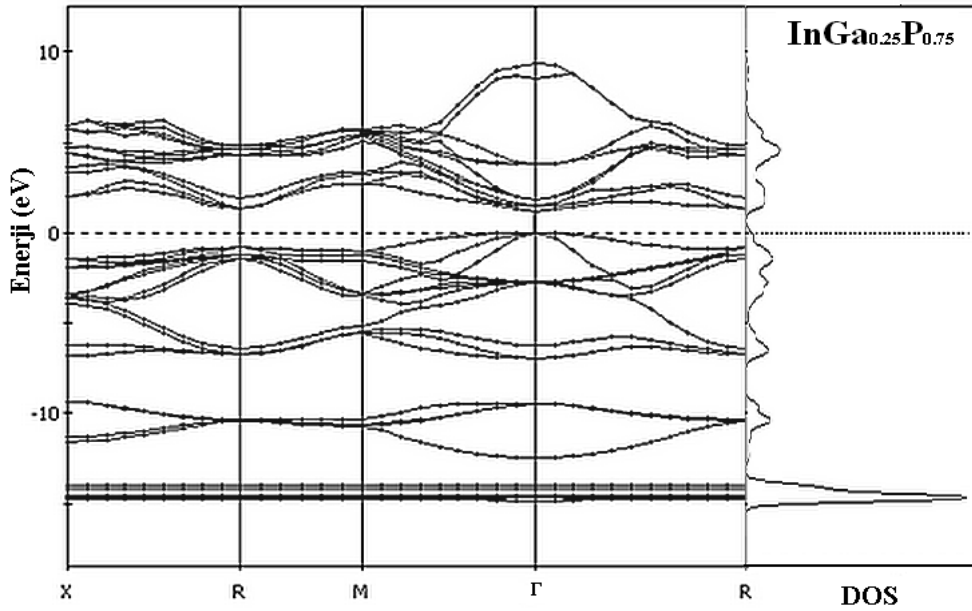


Şekil 1.6. InGaAs alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

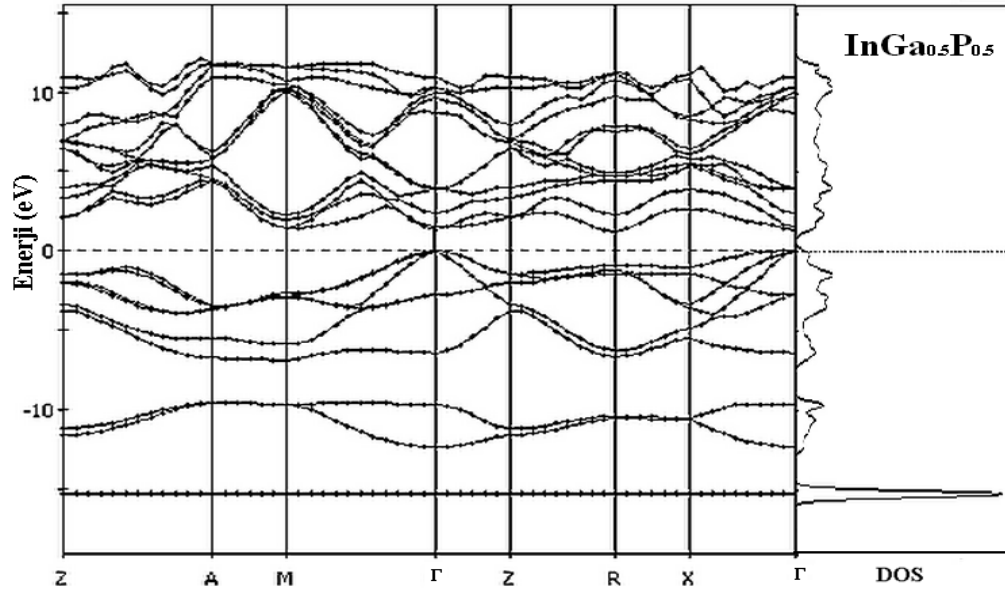


Şekil 1.7. InGaAs alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

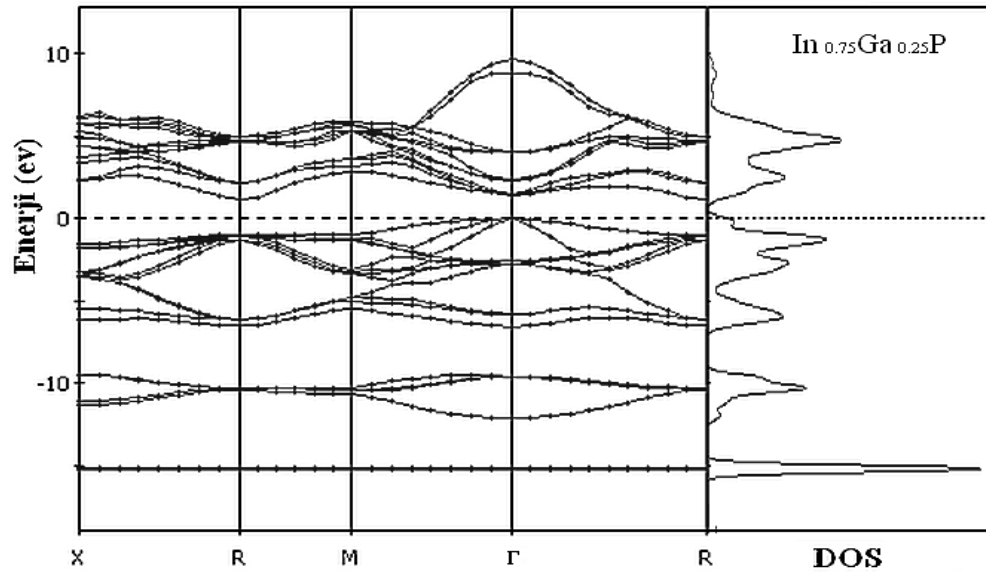


Şekil 1.8. InGaP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

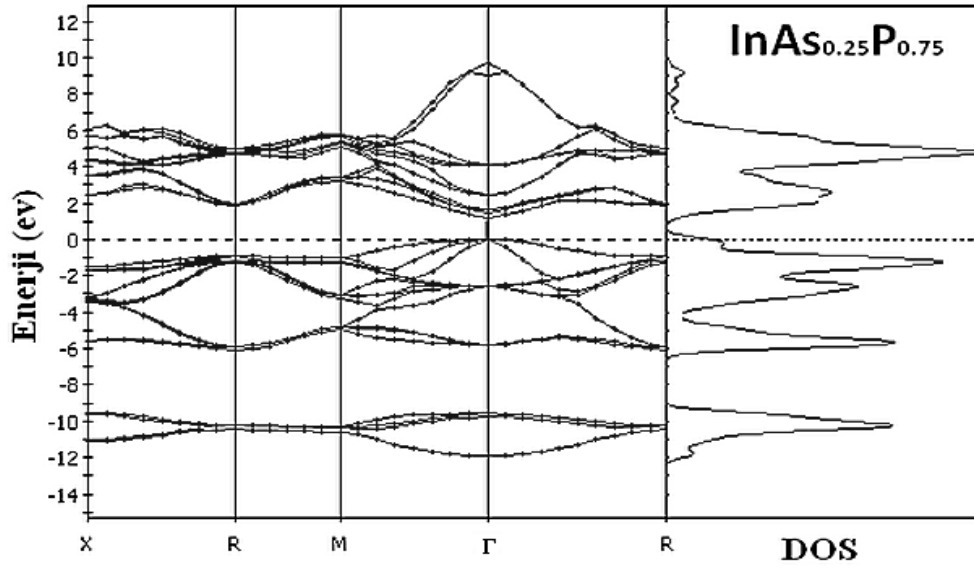


Şekil 1.9. InGaP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

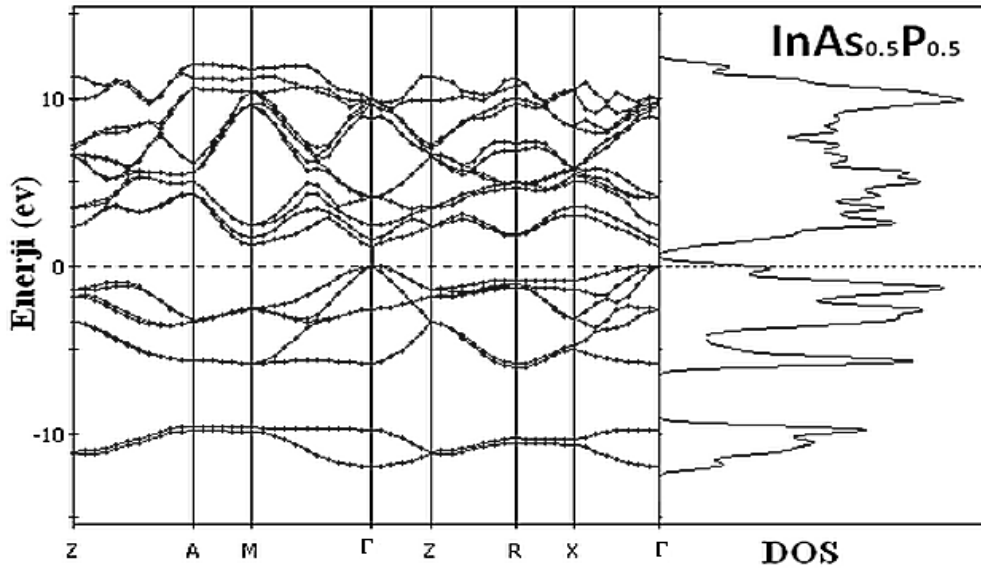


Şekil 1.10. InGaP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

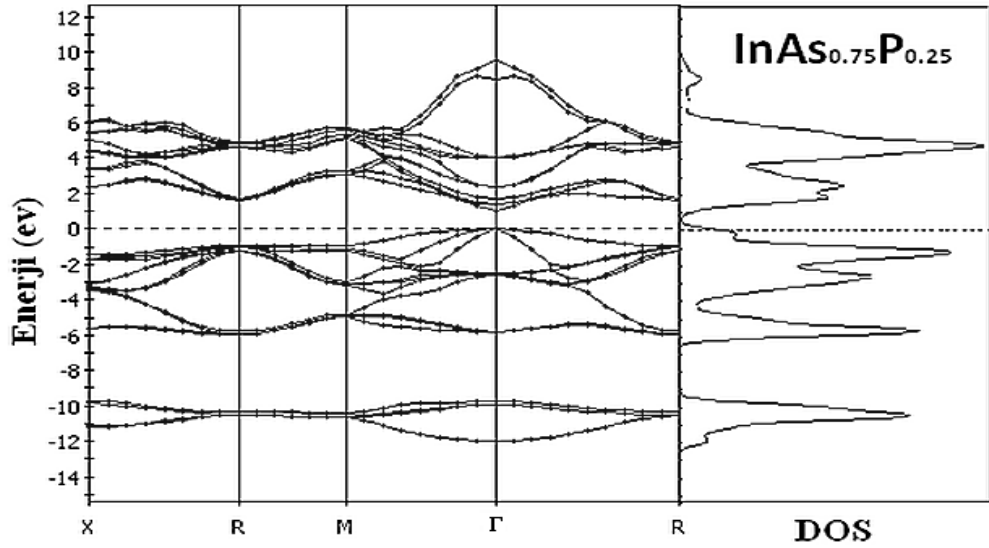


Şekil 1.11. InAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

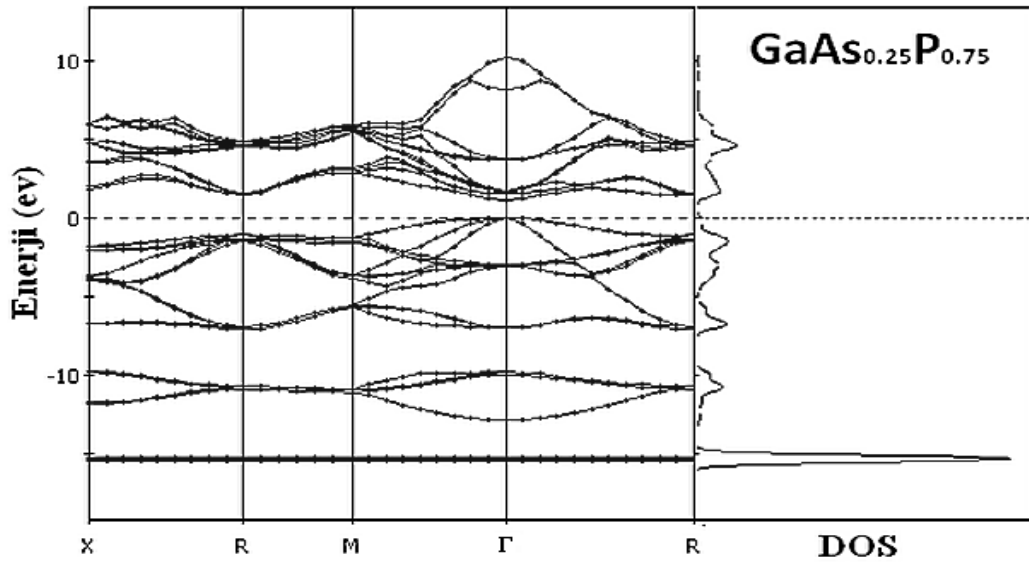


Şekil 1.12. InAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

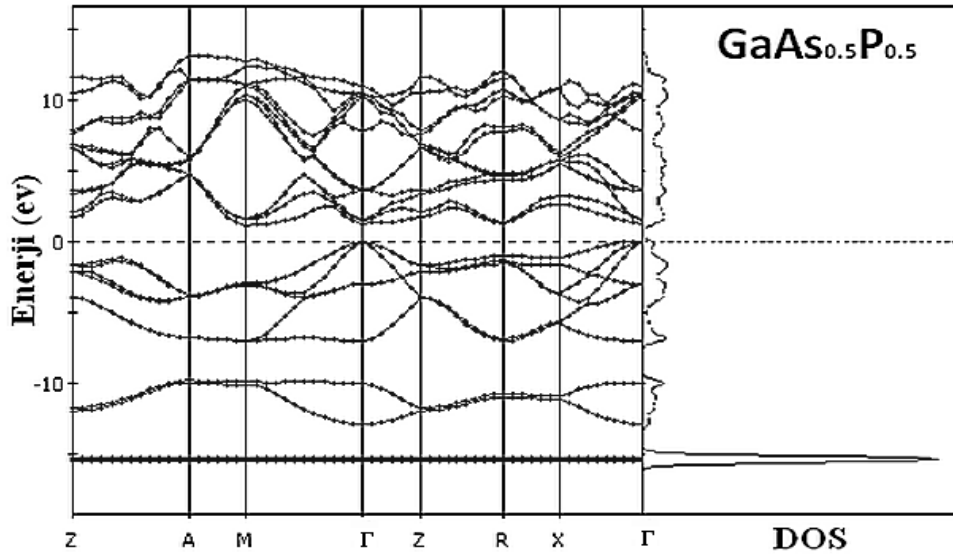


Şekil 1.13. InAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

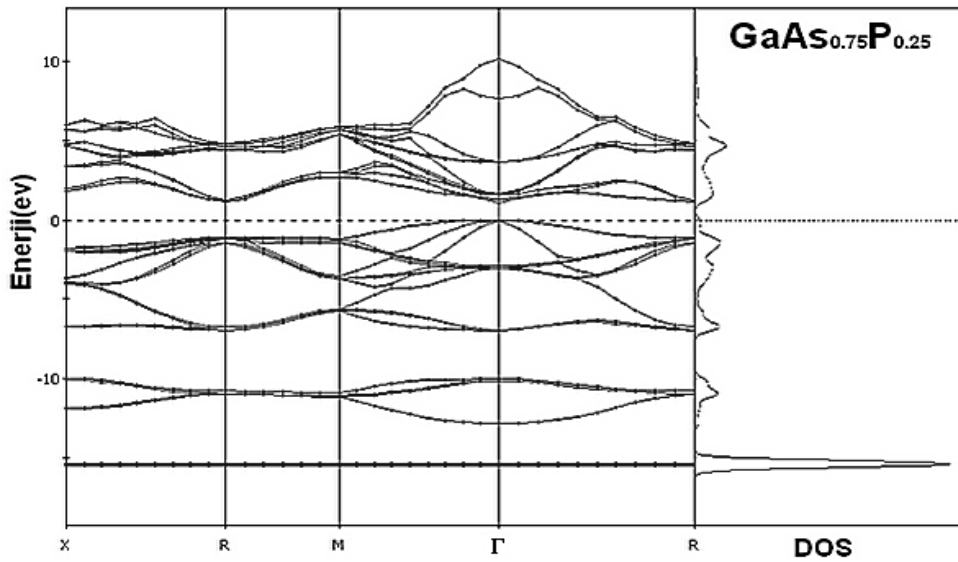


Şekil 1.14 GaAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

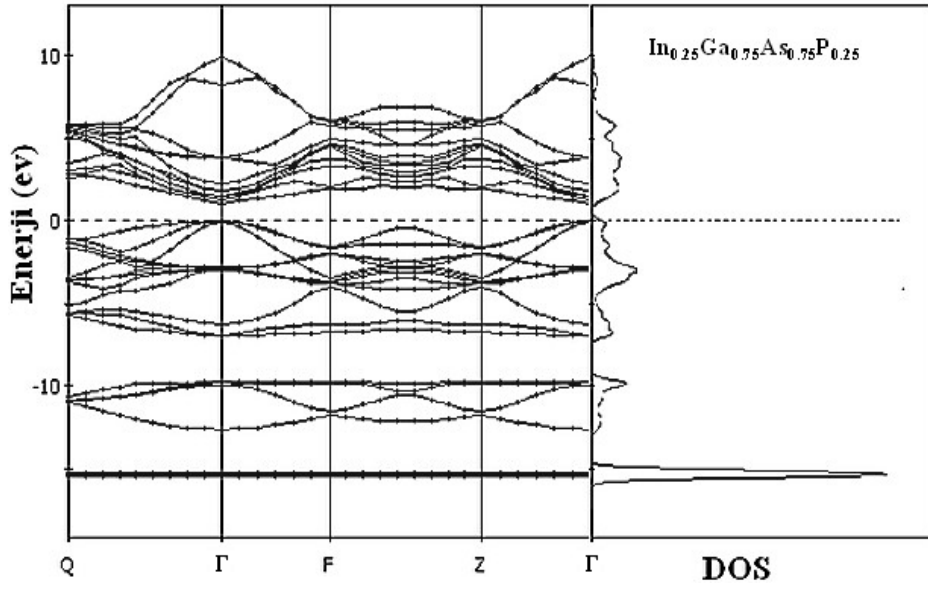


Şekil 1.15. GaAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

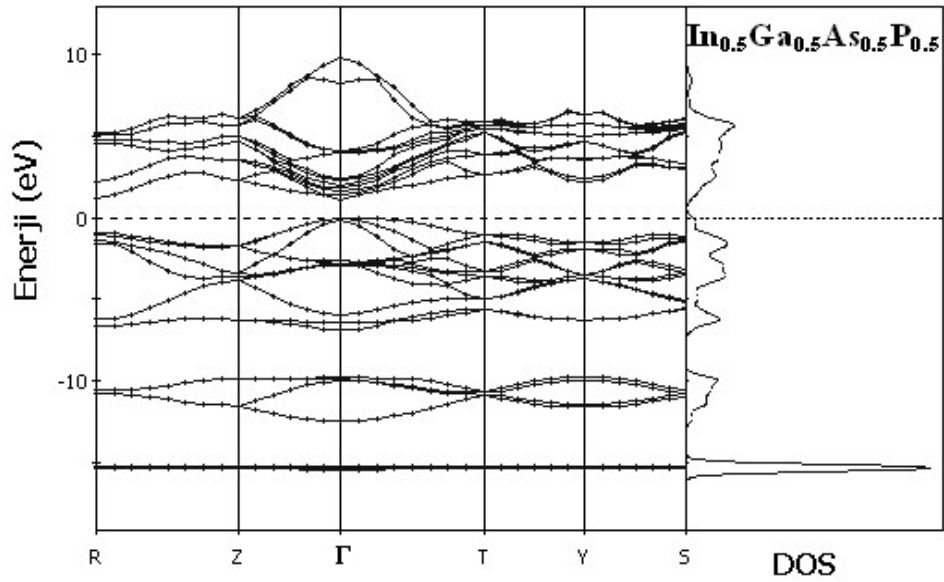


Şekil 1.16. GaAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

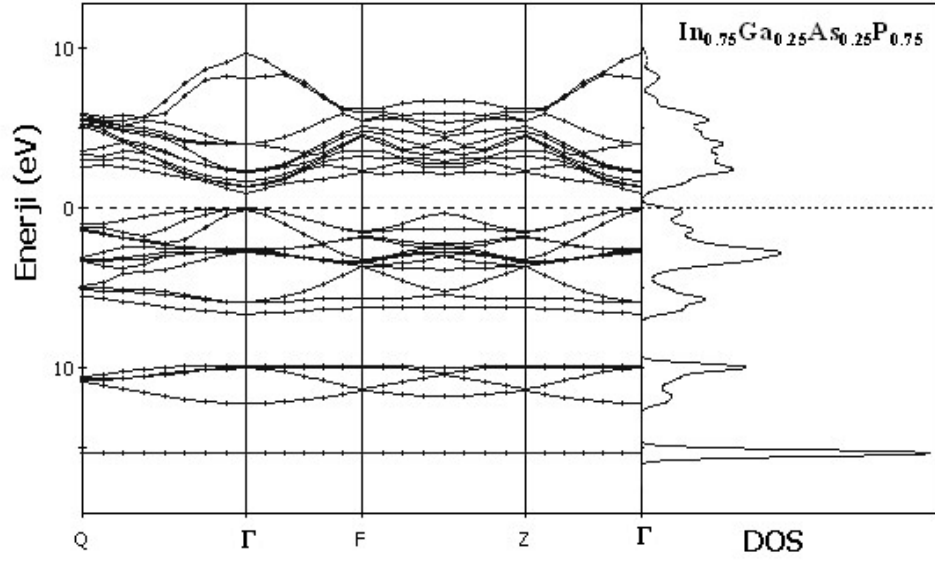


Şekil 1.17. InGaAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa



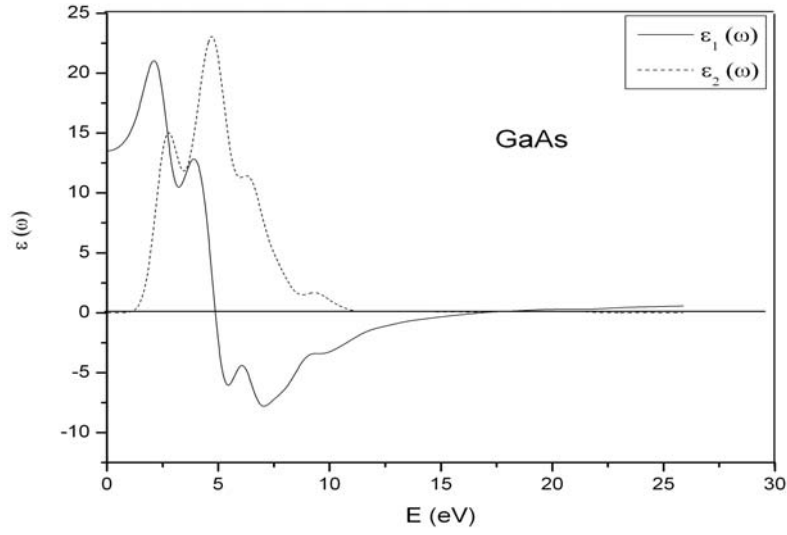
Şekil 1.18. InGaAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-1 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımlarının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa bağlı değişim grafiği

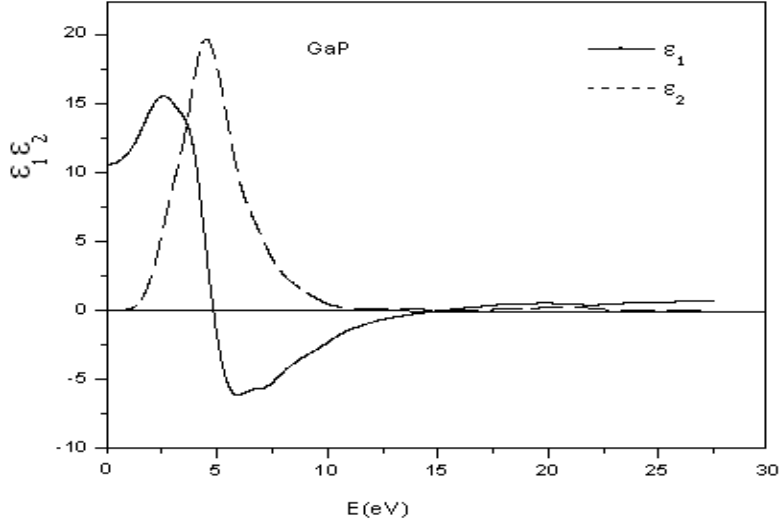


Şekil 1.19. InGaAsP alaışmının enerji-bant diyagramı ve toplam durum yoğunluğa

Ek-2 Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

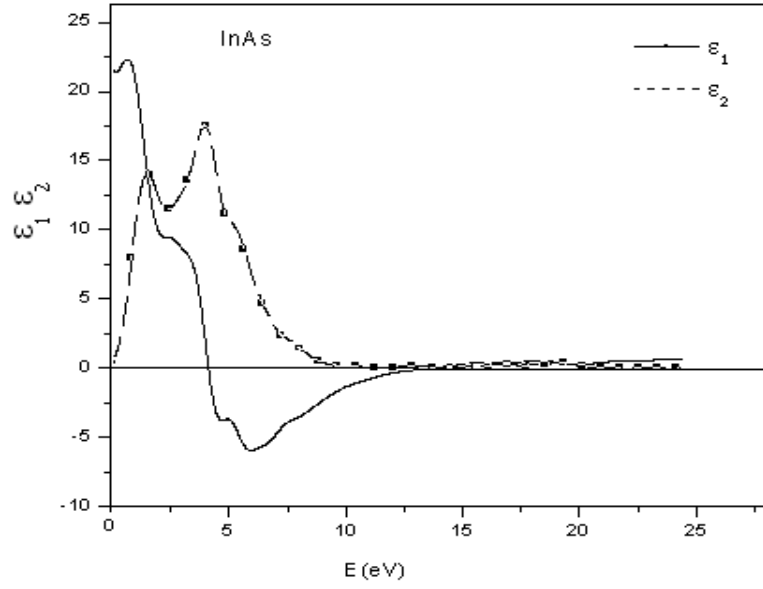


Şekil 2.1. GaAs için dielektrik fonksiyonun reel ve sanal bileşenleri

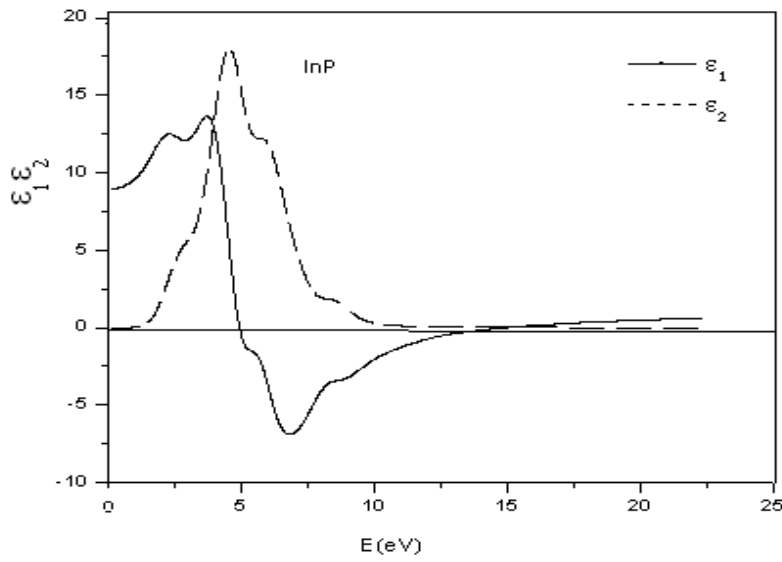


Şekil 2.2. GaP için dielektrik fonksiyonun reel ve sanal bileşenleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

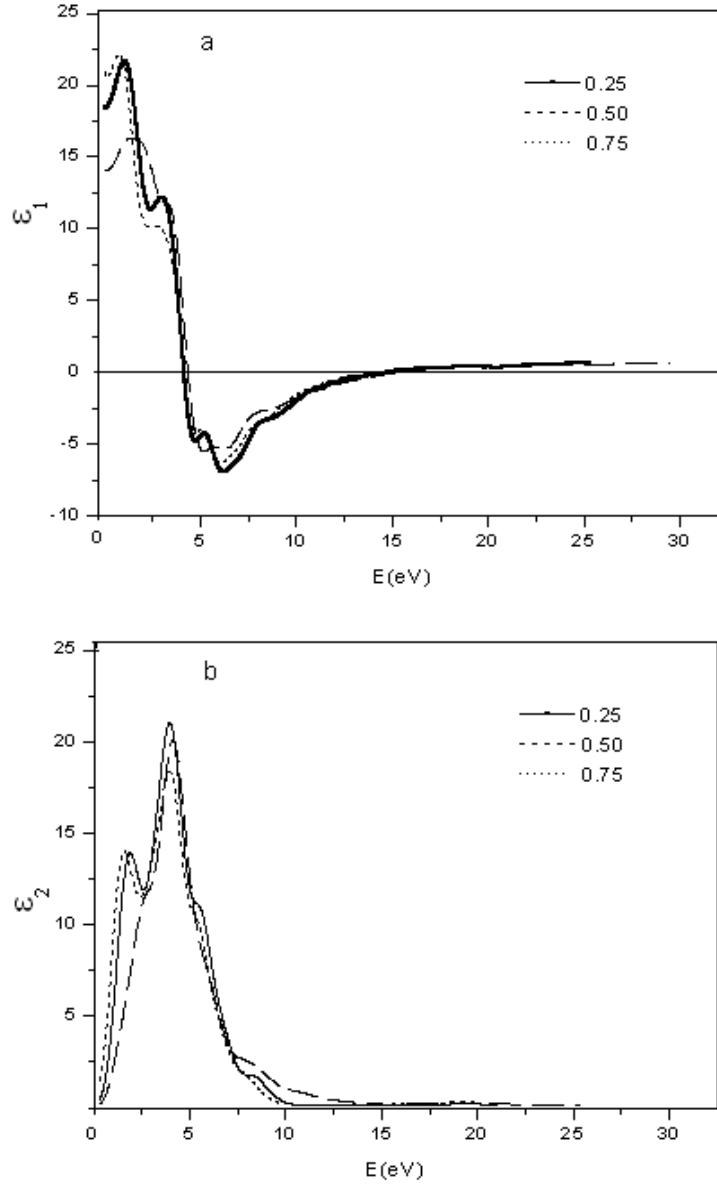


Şekil 2.3. InAs için dielektrik fonksiyonun reel ve sanal bileşenleri



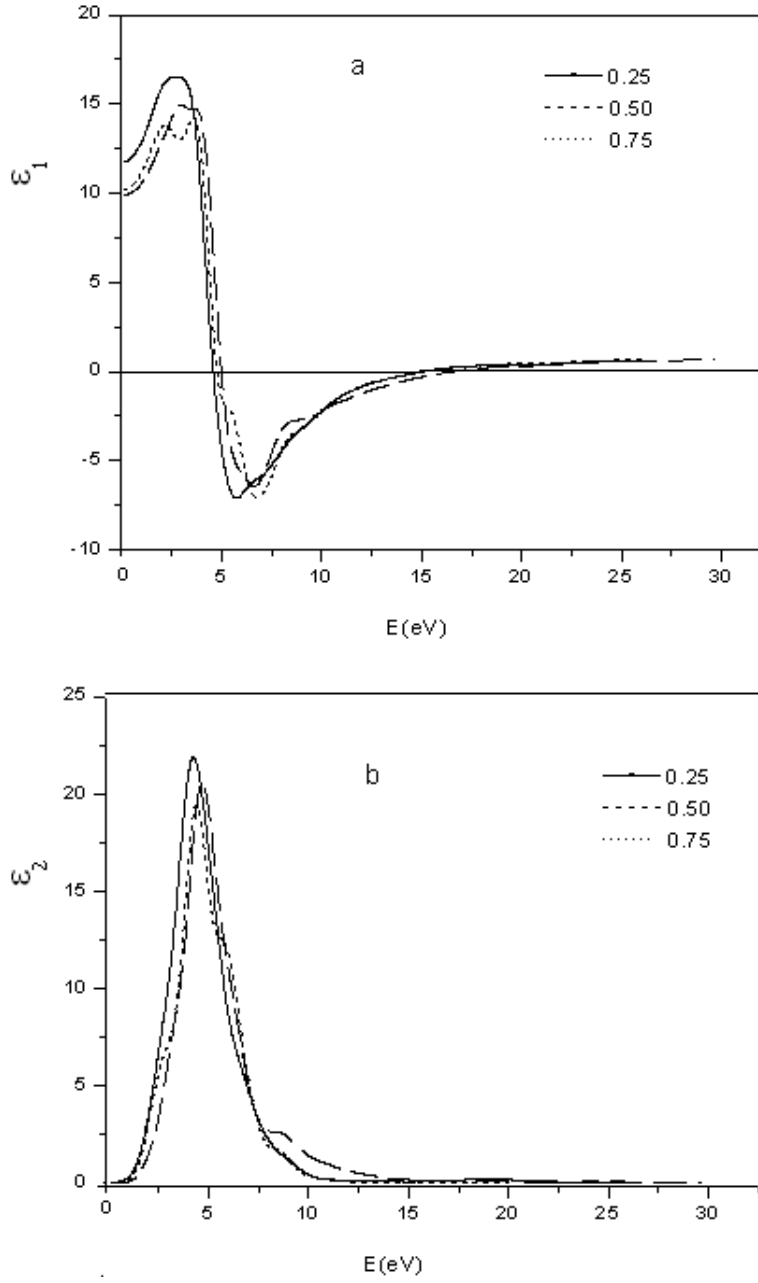
Şekil 2.4. GaP için dielektrik fonksiyonun reel ve sanal bileşenleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği



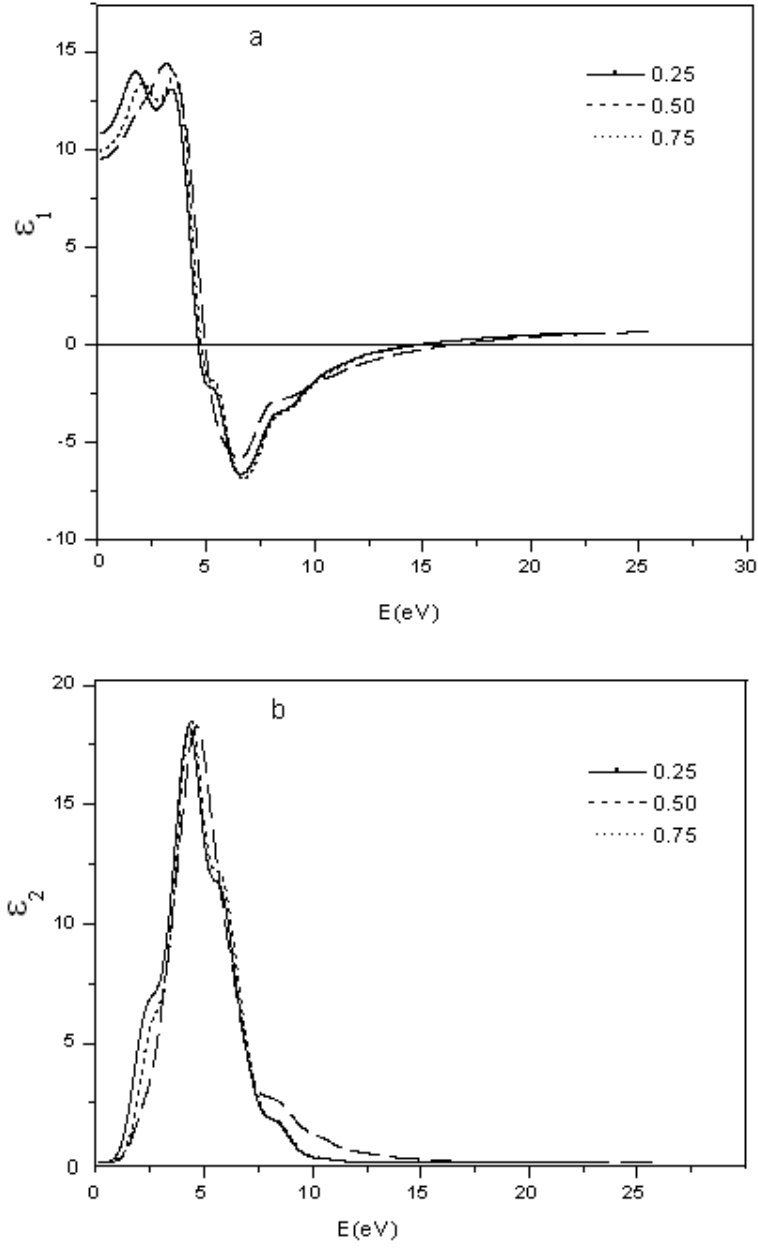
Şekil 2.5. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için dielektrik fonksiyonun reel (a) ve sanal (b) bileşenleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği



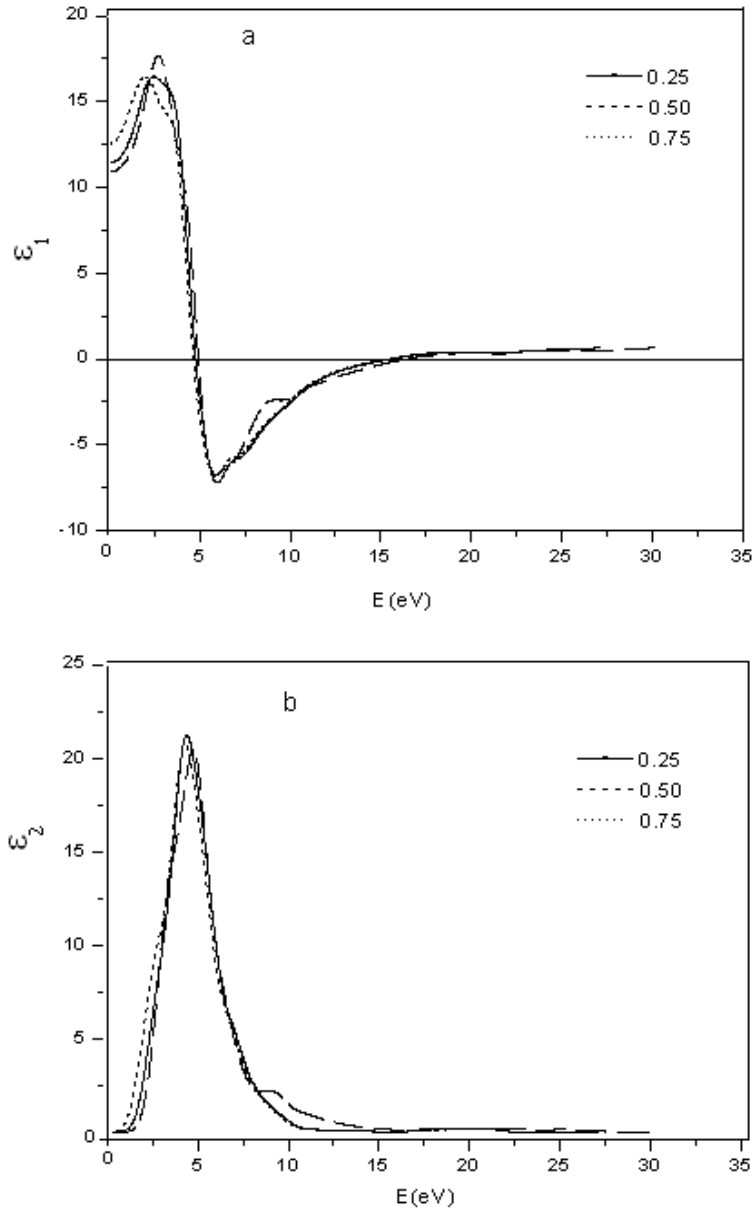
Şekil 2.6. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ için dielektrik fonksiyonun reel (a) ve sanal (b) bileşenleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği



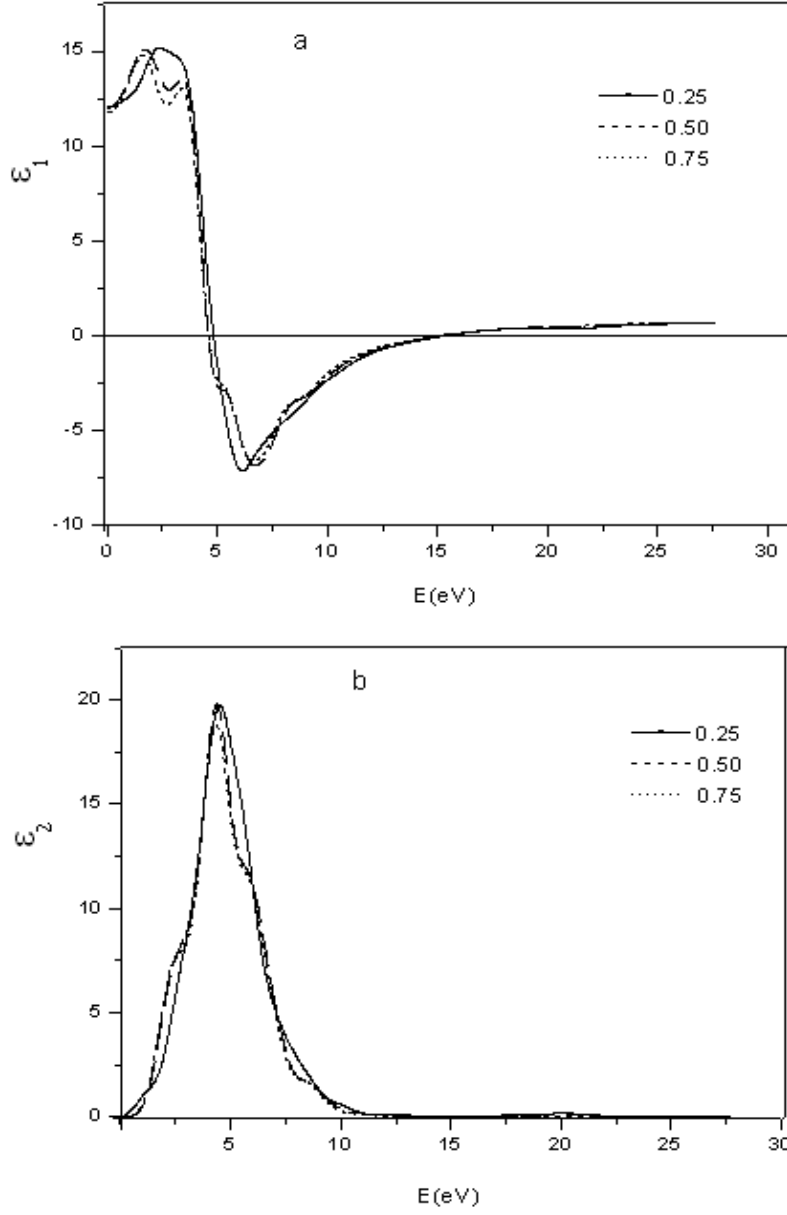
Şekil 2.7. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ için dielektrik fonksiyonun reel (a) ve sanal (b) bileşenleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği



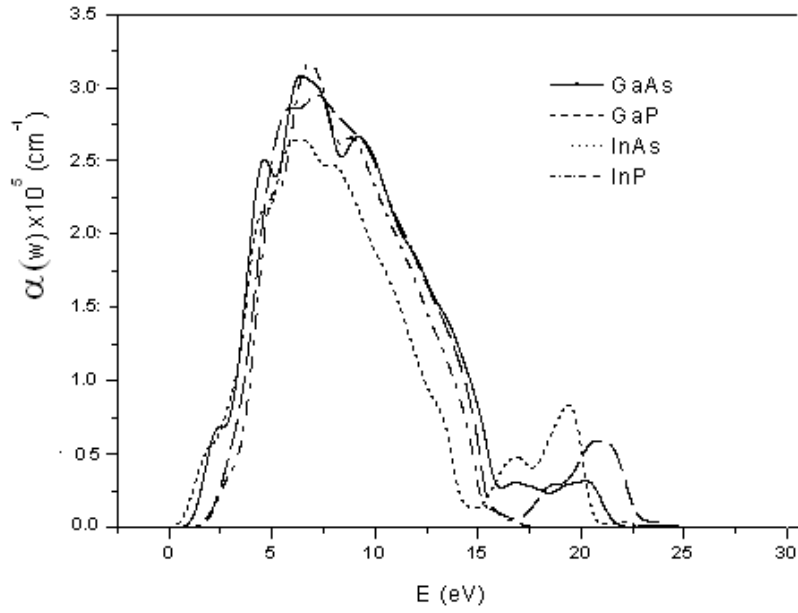
Şekil 2.8. $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ için dielektrik fonksiyonun reel (a) ve sanal (b) bileşenleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

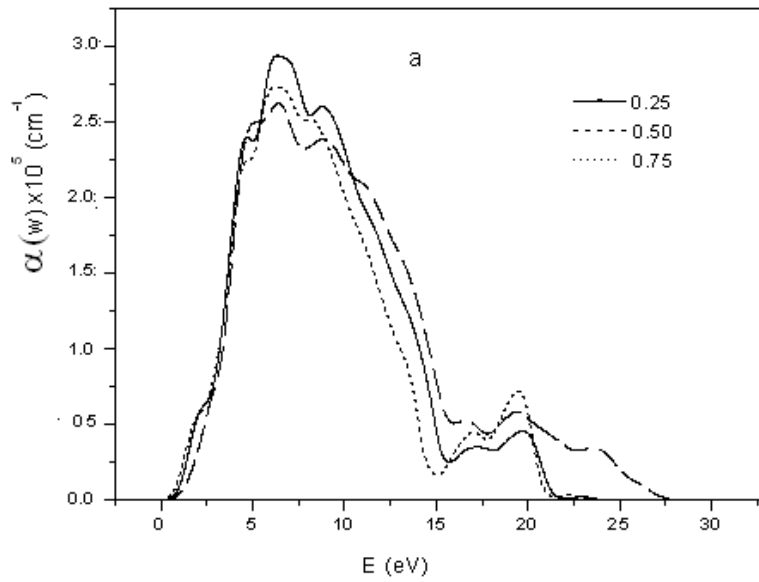


Şekil 2.9. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ için dielektrik fonksiyonun reel (a) ve sanal (b) bileşenleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

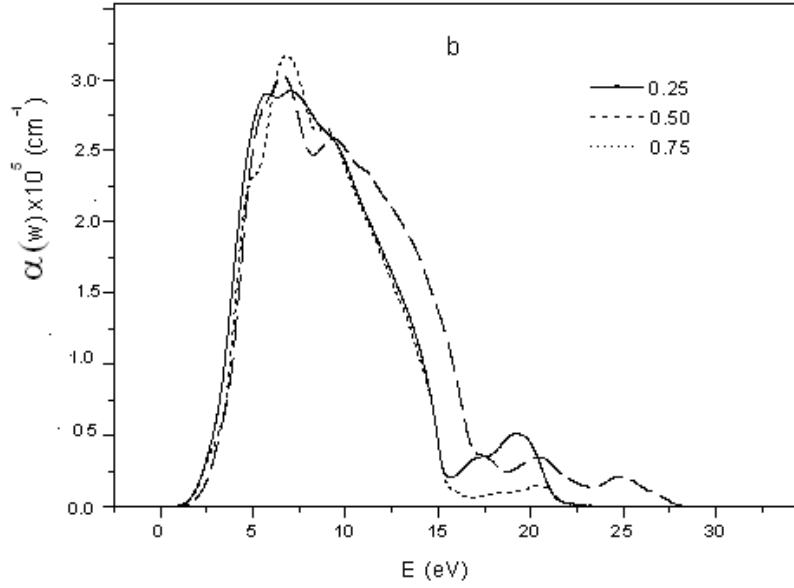


Şekil 2.10. GaAs, GaP, InAs ve InP için soğurma katsayısı

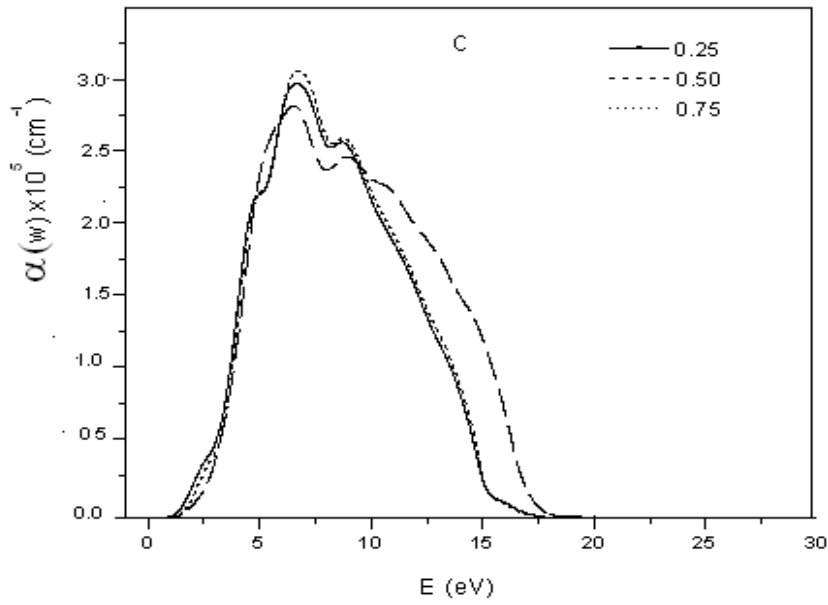


Şekil 2.11. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için soğurma katsayıları

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

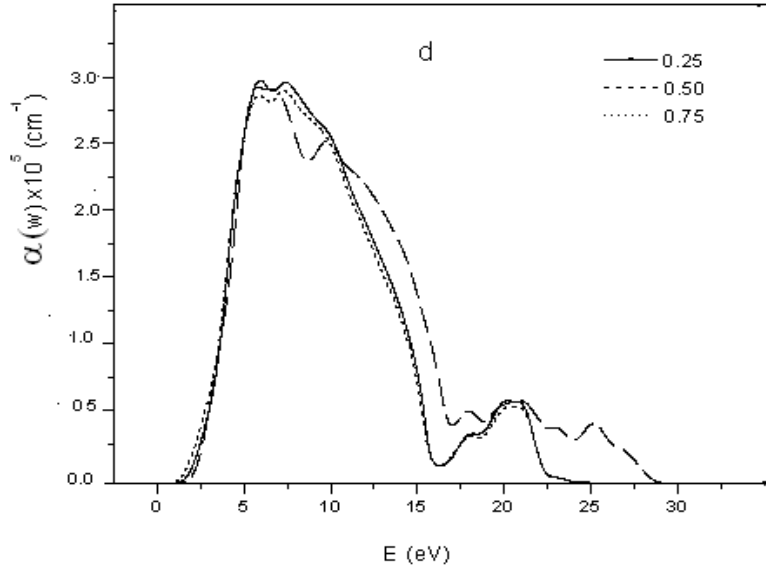


Şekil 2.12 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ için soğurma katsayıları

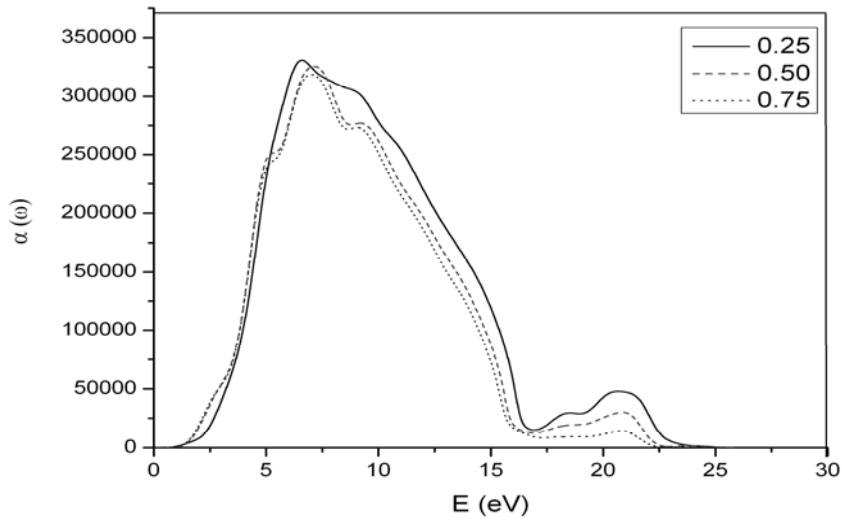


Şekil 2.13. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ için soğurma katsayıları

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

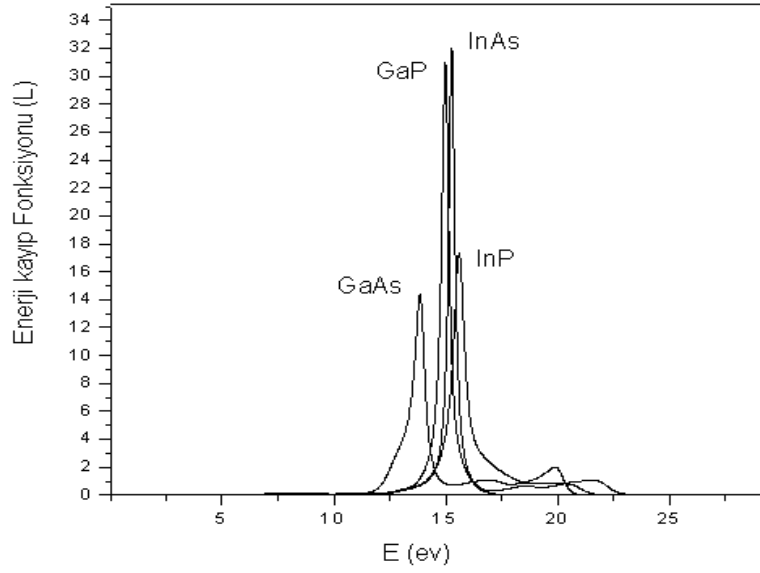


Şekil 2.14. $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ için soğurma katsayıları

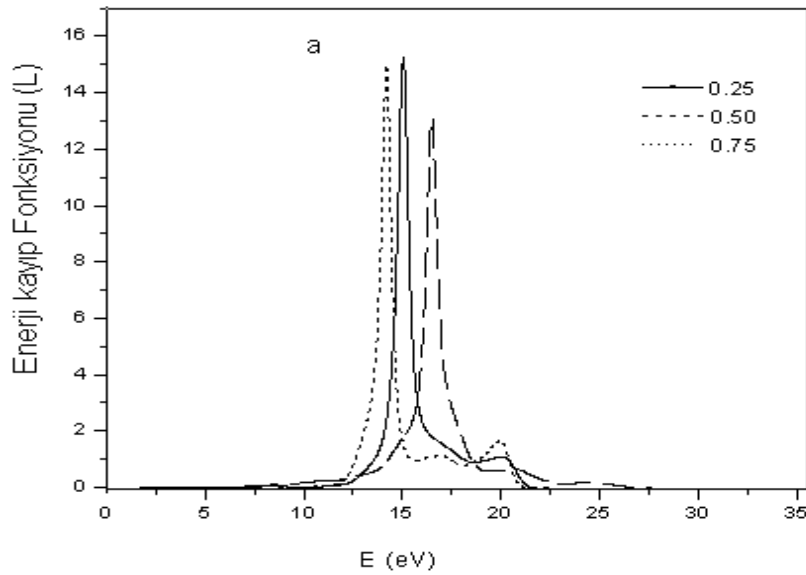


Şekil 2.15. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ için soğurma katsayıları

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

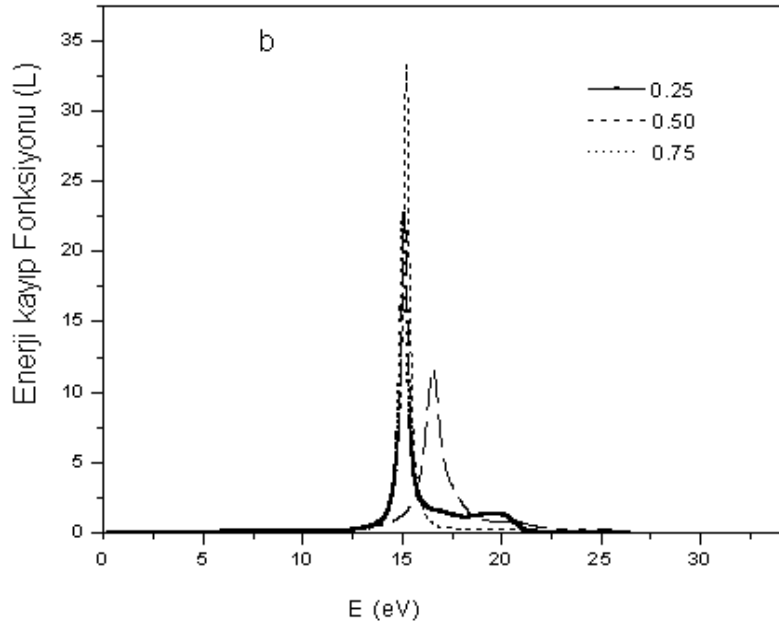


Şekil 2.16. GaAs, GaP, InAs ve InP için enerji kayıp fonksiyonu

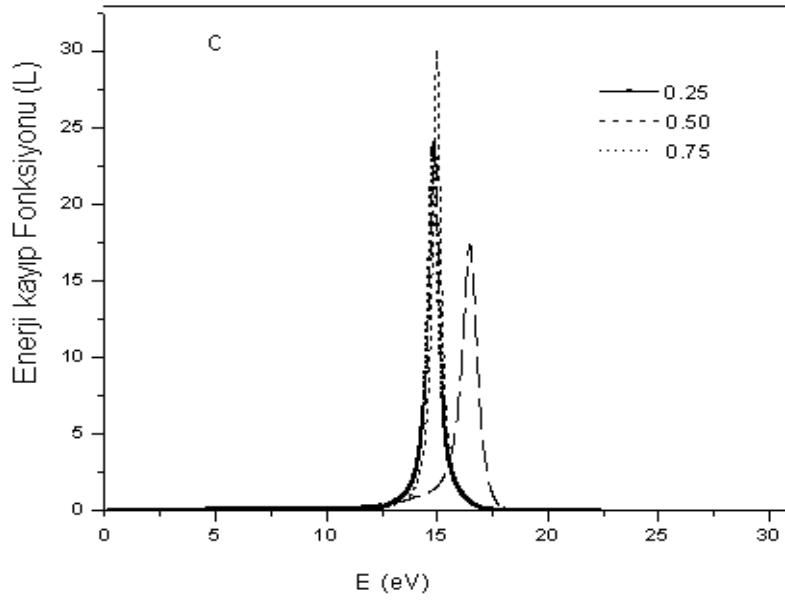


Şekli 2.17. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için enerji kayıp fonksiyonu

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

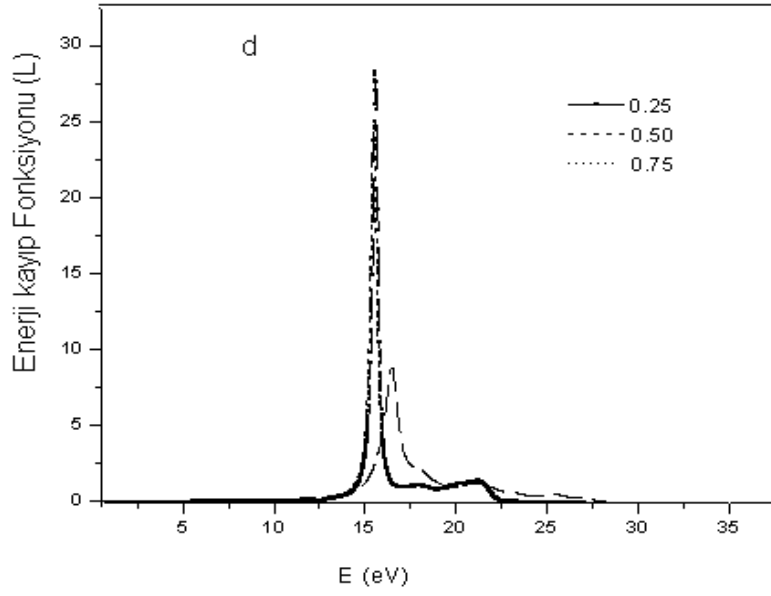


Şekli 2.18. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ için enerji kayıp fonksiyonu

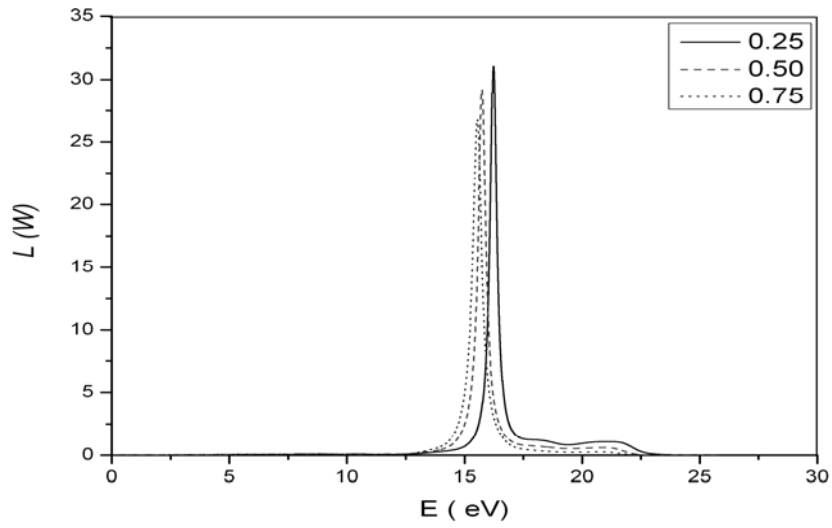


Şekli 2.19. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ için enerji kayıp fonksiyonu

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

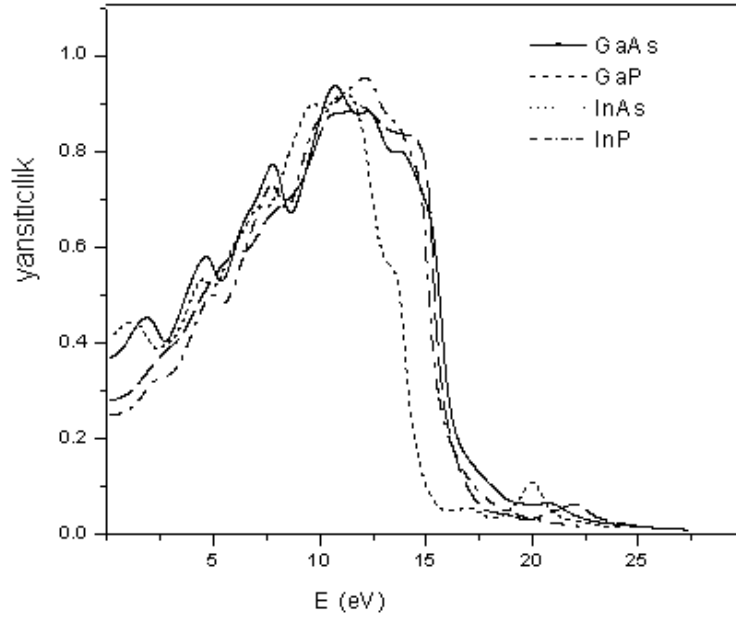


Şekli 2.20. $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ için enerji kayıp fonksiyonu

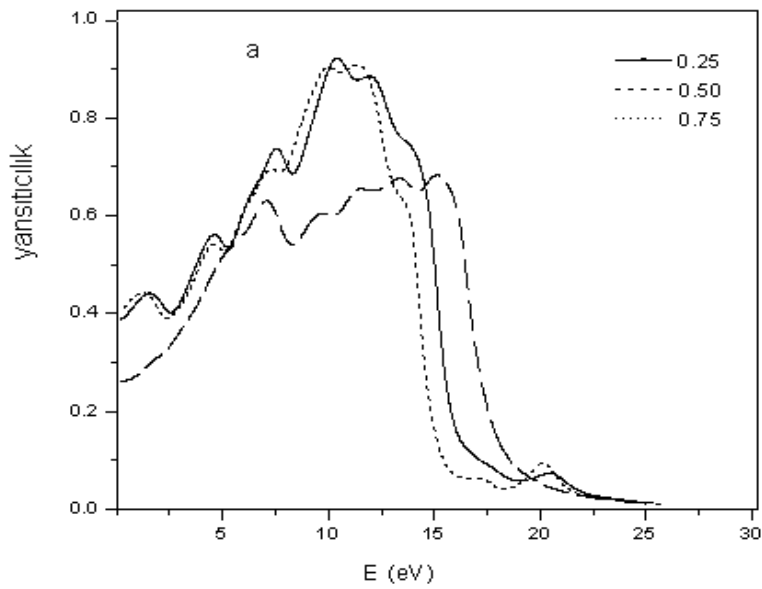


Şekli 2.21. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ için enerji kayıp fonksiyonu

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

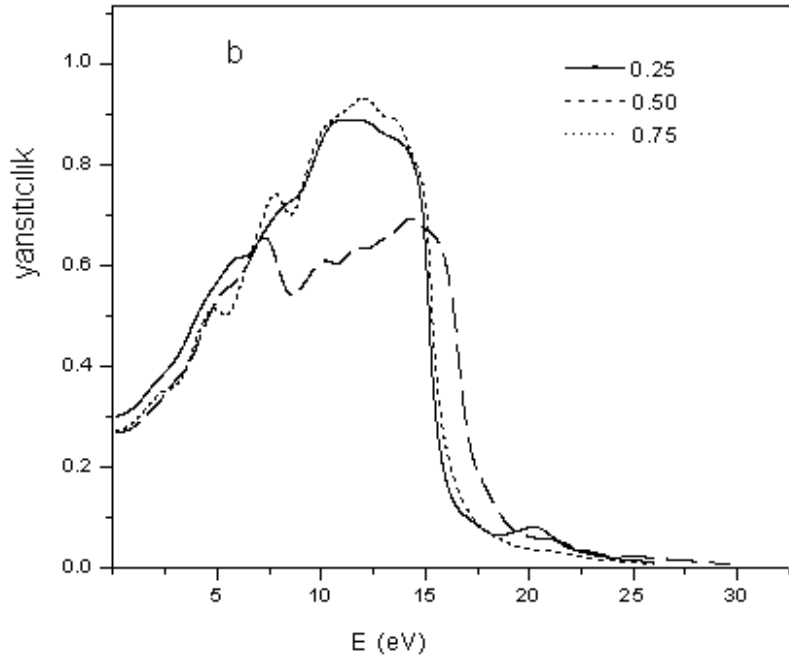


Şekil 2.22. GaAs, GaP, InAs ve InP için yansıticılık katsayısı

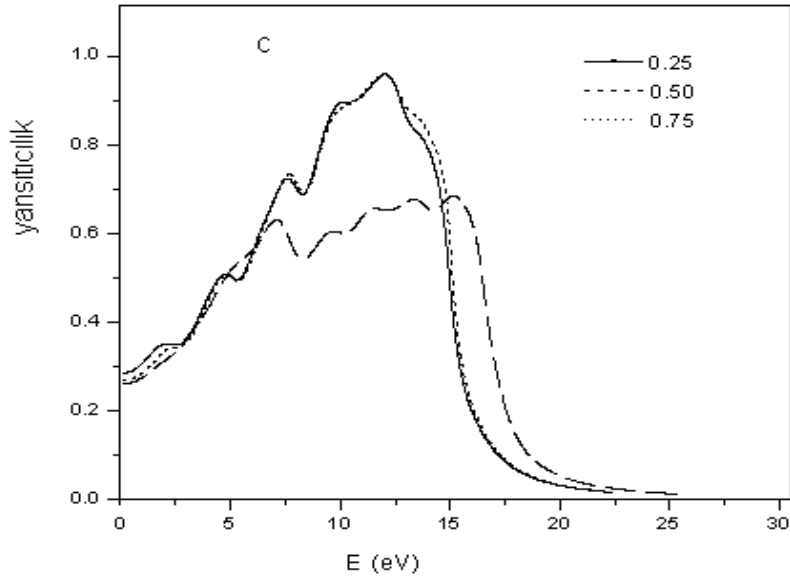


Şekil 2.23. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için yansıticılık katsayıları

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

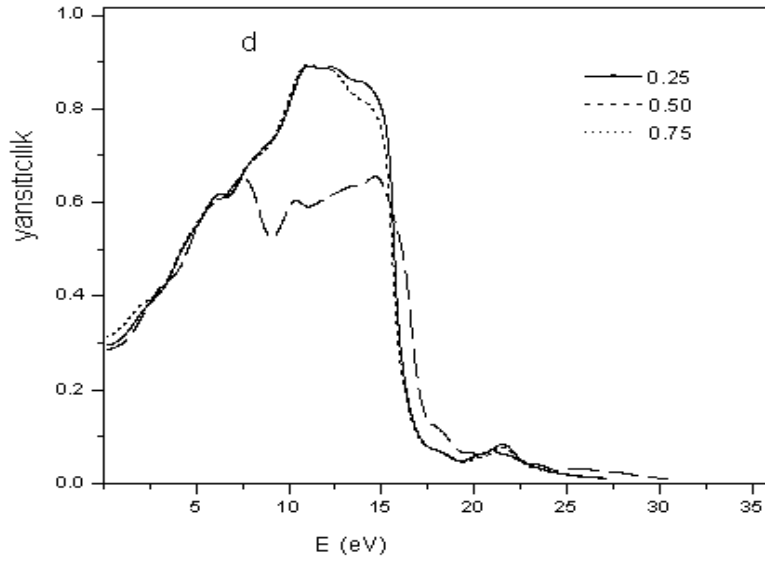


Şekil 2.24. In_xGa_{1-x}P için yansıtıcılık katsayıları

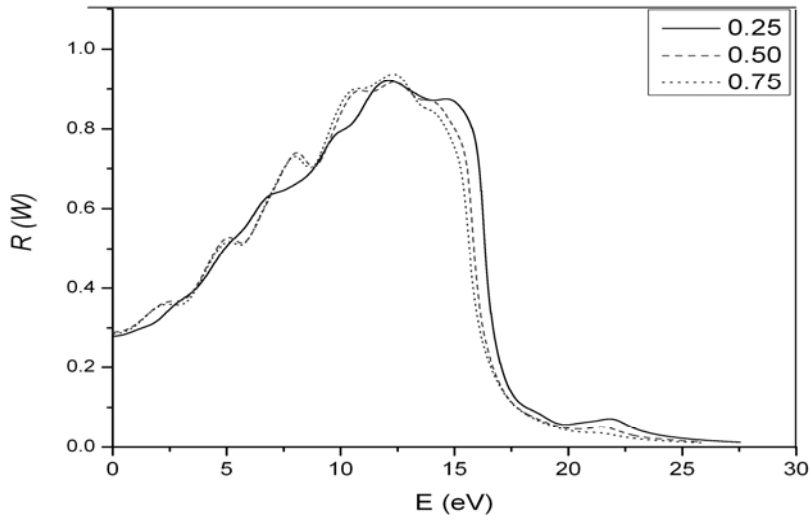


Şekil 2.25. InAs_{1-y}P_y için yansıtıcılık katsayıları

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

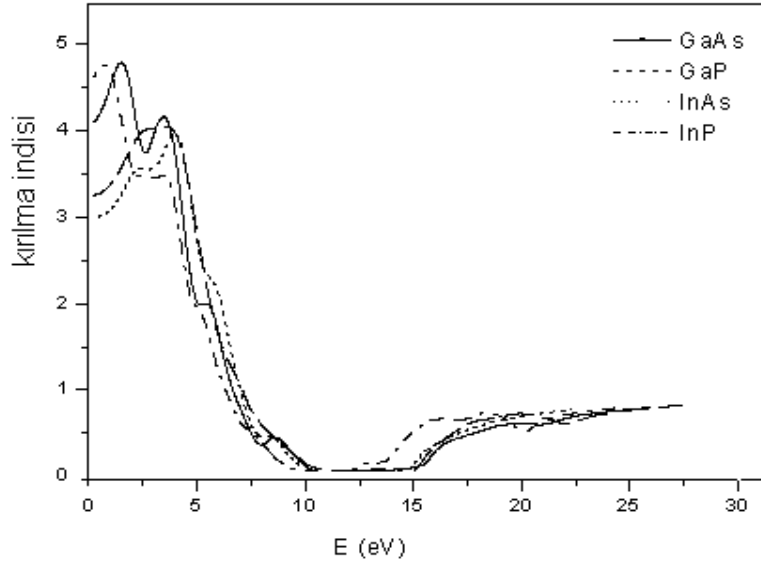


Şekil 2.26. GaAs_{1-y}P_y için yansıtıcılık katsayıları

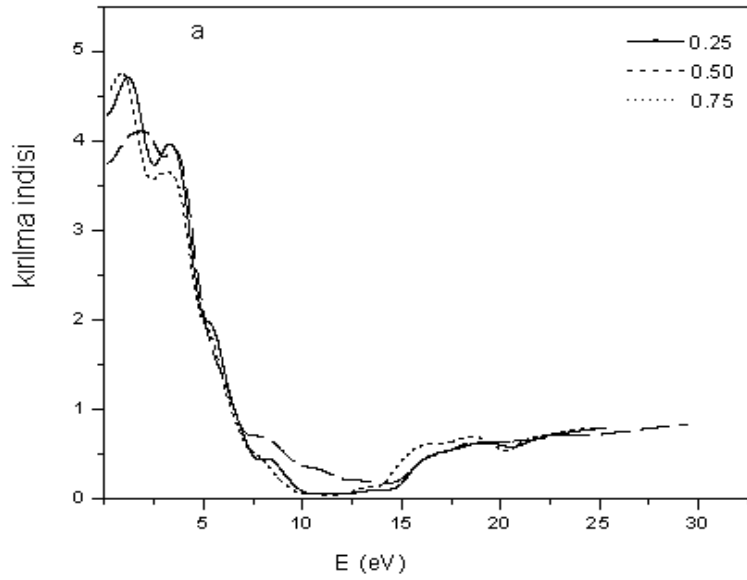


Şekil 2.27. In_xGa_{1-x}As_{1-y}P_y için yansıtıcılık katsayıları

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

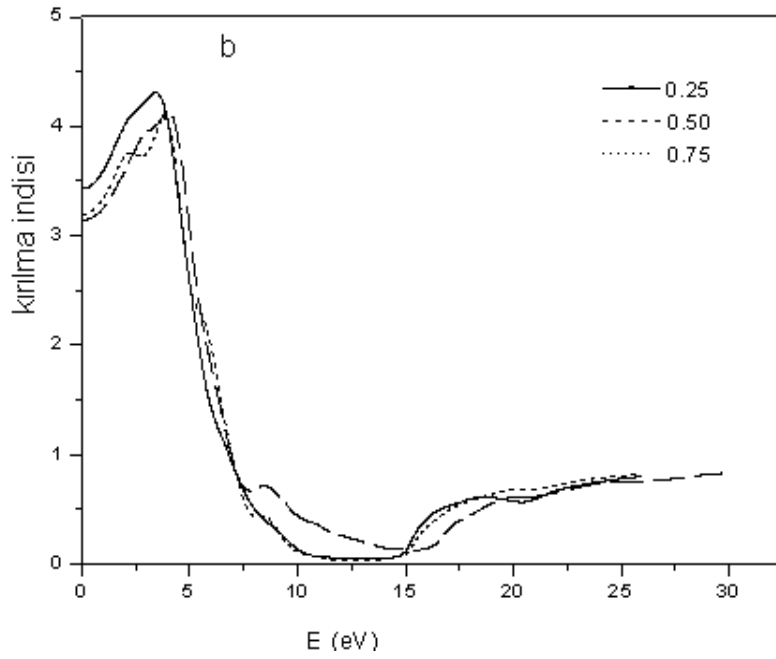


Şekil 2.28. GaAs, GaP, InAs ve InP için Kırılma indisleri

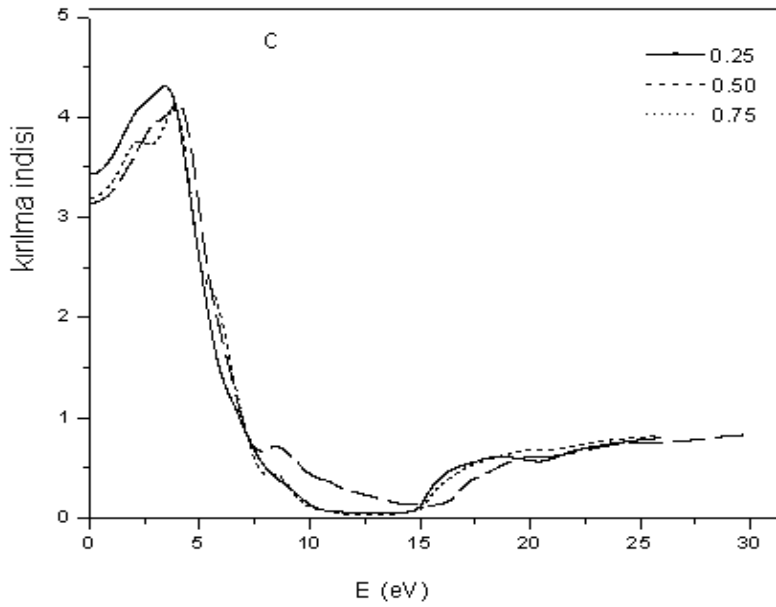


Şekil 2.29. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için kırılma indisleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

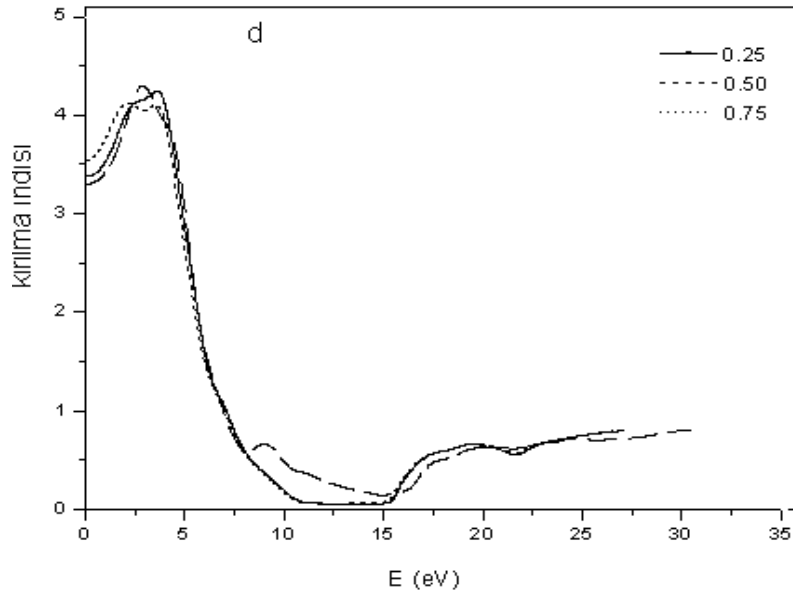


Şekil 2.30. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ için kırılma indisleri

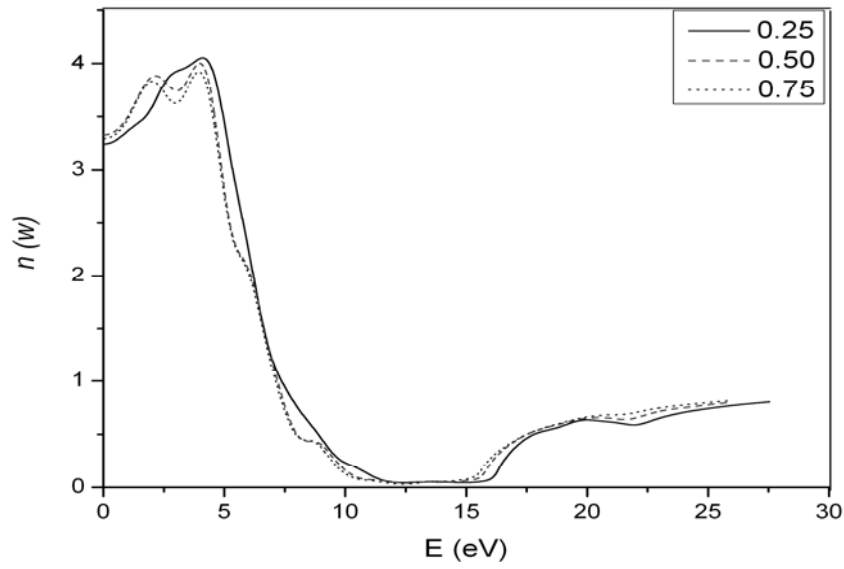


Şekil 2.31. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ için kırılma indisleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

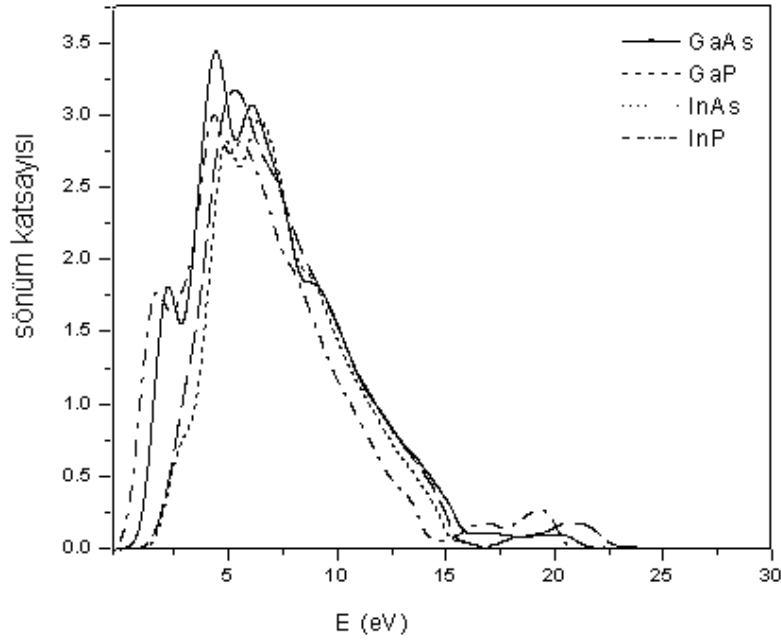


Şekil 2.32. GaAs_{1-y}P_y için kırılma indisleri

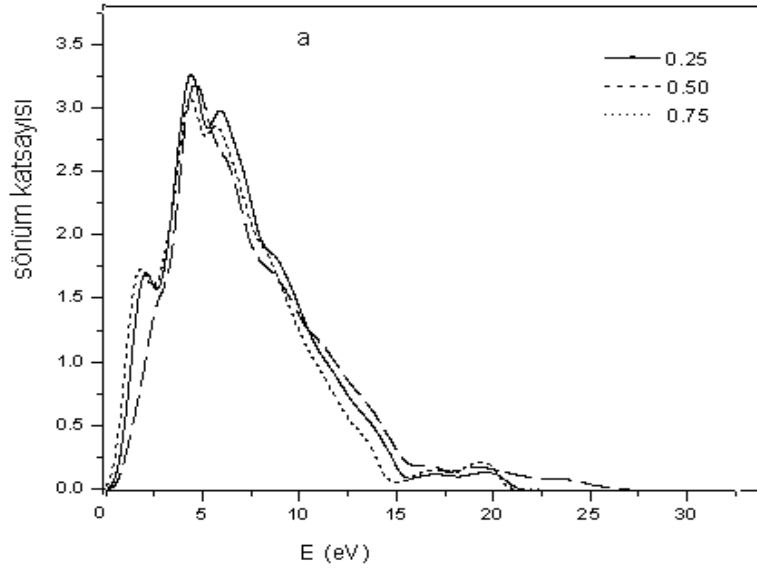


Şekil 2.33. In_xGa_{1-x}As_{1-y}P_y için kırılma indisleri

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

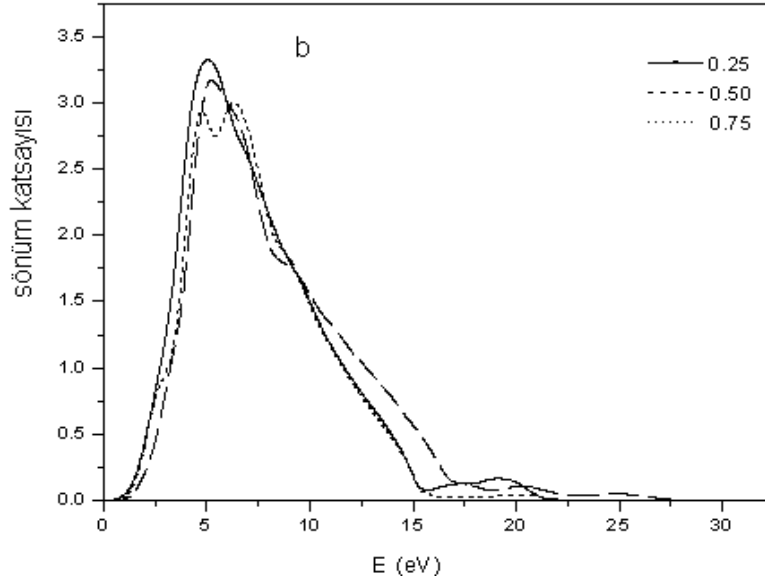


Şekil 2.34. GaAs, GaP, InAs ve InP için sönüm katsayıları

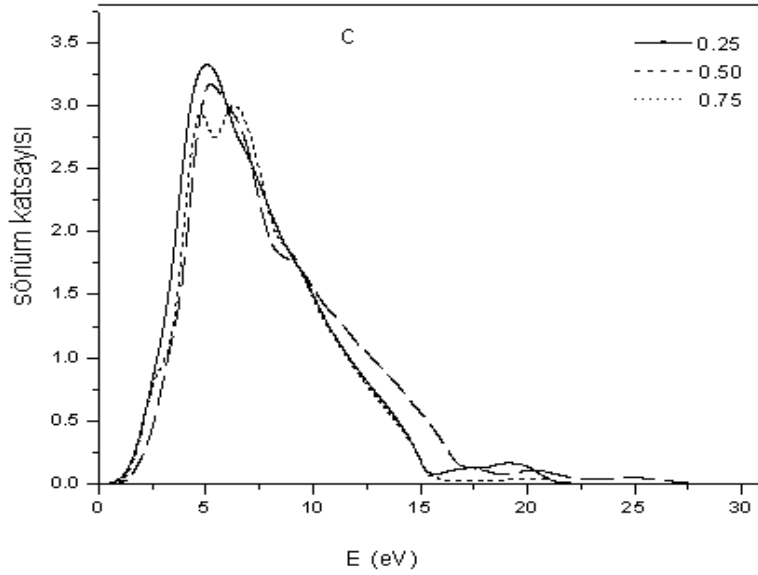


Şekil 2.35. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ için sönüm katsayıları

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği

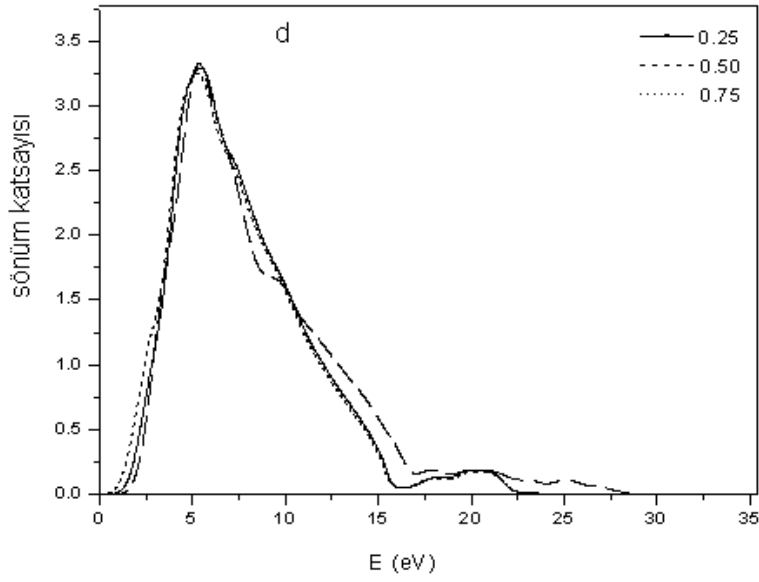


Şekil 2.36. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ için sönüm katsayıları

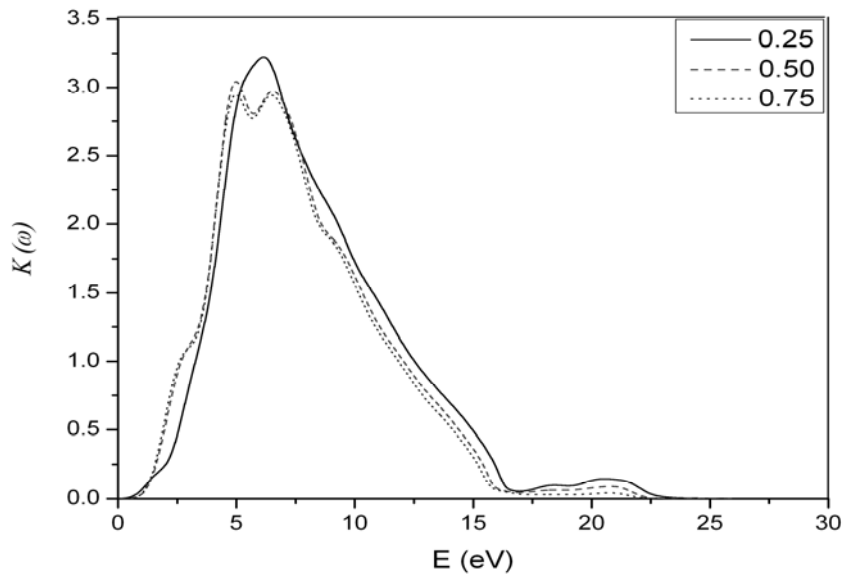


Şekil 2.37. $\text{InAs}_{1-y}\text{P}_y$ için sönüm katsayıları

Ek-2 (Devam) Yarı iletken bileşiklerin ve alaşımların hesaplanan optik özelliklerin değişim grafiği



Şekil 2.38. $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$ için sönüm katsayıları



Şekil 2.38. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ için sönüm katsayıları

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : Mazin OTHMAN
 Uyruğu : Irak
 Doğum tarihi ve yeri : 08.04.1978 Erbil
 Medeni hali : Bekar
 e-mail : mazin Osman@hotmail.com

Eğitim	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik Bölümü	2004
Lisans	Selahaddin Üniversitesi / Fizik Bölümü	2001
Lise	Tahrir Lisesi	1997

İş Deneyimi	Yer	Görev
Yıl		
2007	Türk Hızlandırıcı Merkezi Projesi	Üye
2001	Oğuzhan Lisesi / Erbil	Öğretmen

Yabancı Dil

İngilizce, Arapça

Ulusal ve Uluslararası kongre sunumlar / katılımlar

1. M. Othman*, E. Kasap, N. Korozlu, “ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ alaşımasının elektronik ve optik özelliklerin incelenmesi”, Türk Fizik Derneği Uluslararası Fizik Kongresi 24-27 Eylül 2009 Bodrum.
2. M. Othman*, E. Kasap, “ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alaşımasının elektronik ve optik özelliklerin incelenmesi”, XI. Ulusal Spektroskopi Kongresi 23 – 26 Haziran 2009 Ankara.
3. IV. Ulusal parçacık hızlandırıcıları ve dedektörleri yaz okulu 2-5 Eylül 2008 Bodrum.
4. M. Othman*, E. Kasap “TAC IR FEL Deney İstasyonları”. V.YUUP Çalıştayı 05-08 Temmuz 2008 İstanbul
5. Ergün kasap*, M. Othman. “IR FEL ile Mikroskopi ve Spektroskopi Uygulamaları”, II-Ulusal parçacık hızlandırıcıları ve Uygulamaları kongresi. 17-19 Eylül 2007 Bodrum.