T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YARIİLETKENLER İÇİN YEREL OLMAYAN KİNETİK ENERJİ YOĞUNLUK FONKSİYONELİNİN İNCELENMESİ

ALEV SAKARYA

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ

EDİRNE-[2019]

ALEV SAKARYA' nın hazırladığı "YARIİLETKENLER İÇİN YEREL OLMAYAN KİNETİK ENERJİ YOĞUNLUK FONKSİYONELİNİN İNCELENMESİ" başlıklı bu tez, tarafımızca okunmuş kapsam ve niteliği açısından Fizik Anabilim Dalında bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri	İmza
Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ	
Prof. Dr. Şaban AKTAŞ	
Doç. Dr. Hüseyin Birtan KAVANOZ	

Tez Savunma Tarihi: 30/07/2019

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

İmza

Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ
Tez Danışmanı

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

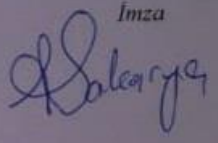
Prof.Dr. Murat YURTCAN
Enstitü Müdürü

ii

T.Ü. FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI YÜKSEK LİSANS PROGRAMI
DOĞRULUK BEYANI

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında, tüm verilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini, kullanılan verilerde tahrifat yapılmadığını, tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını, kullanılan tüm literatür bilgilerinin bilimsel normlara uygun bir şekilde kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını ve bu tezin tamamı ya da herhangi bir bölümünün daha önceden Trakya Üniversitesi ya da farklı bir üniversitede tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

30.07.2019
Alev SAKARYA
İmza



Yüksek Lisans Tezi

Yarıiletkenler İçin Yerel Olmayan Kinetik Enerji Yoğunluk Fonksiyonelinin İncelenmesi

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu tezde silisyum, germanyum ve ikili yarıiletken bileşiklerin taban durumunda örgü sabiti, bant aralığı, hacim modülü farklı pseudopotansiyeller kullanılarak hesaplanmış ve çıkan sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Literatür değerlerine en yakın sonucu veren pseudopotansiyel seçilerek bant yapısı ve durum yoğunluğu hem silisyum ve germanyum için hem de ikili yarıiletken bileşikler ($Si_{1-x}Ge_x$, InAs, GaAs, GaP) için çizilmiştir. Hesaplamalar Quantum Espresso adlı bir modelleme programında Düzlem Dalga Öz Uyumlu Alan bileşeni kullanılarak yapılmıştır. Program sonucundan elde edilen değerler literatür değerleriyle karşılaştırılmıştır. Seçilen parametrelerin hesaplanan sonuçlar üzerinde etkisi olduğu görülmüştür.

Yıl : 2019

Sayfa Sayısı : 75

Anahtar Kelimeler : Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, Yarıiletkenler, Elektronik Özellikler

Master Thesis

The Study of Non-Local Kinetic Energy Density Functional for Semiconductors

Trakya University Institute of Natural Sciences

The Department of Physics

ABSTRACT

In this thesis, the lattice constant, band gap and bulk modulus of the semiconductor materials like silicon, germanium and binary semiconductors ($Si_{1-x}Ge_x$, InAs, GaAs, GaP) are calculated by using different pseudopotentials and and the results are compared to the calculated. In addition to that by choosing the best fit pseudopotential given nearest value the band structure and the density of state are plotted both for semiconductors silicon and germanium as well as for semiconductor binary alloys ($Si_{1-x}Ge_x$, InAs, GaAs). The calculations were made using the Plane-Wave Self Consistent Field component in a modeling program called Quantum Espresso. The results obtained from the program were compared with the literature values and it was observed that the parameters used had an effect on the calculated results.

Year : 2019

Number of pages : 75

Keywords : Density Functional Theory, Semiconductors, Electronic properties

ÖNSÖZ

Tüm çalışma sürecim boyunca bilgi ve yardımlarını esirgemeyen danışman hocam Sayın Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ' a ve yardımlarını esirgemeyen Sayın Prof. Dr. Serap DALGIÇ' a teşekkürlerimi sunarım.

Bu süreç zarfında bana her zaman destek olan aileme, arkadaşlarıma teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ vi
İÇİNDEKİLER vii
SİMGELER VE KISALTMALAR ix
ŞEKİLLER DİZİNİ x
ÇİZELGELER DİZİNİ xii
BÖLÜM 1 1
BÖLÜM 2 3
2.1. Born-Oppenheimer Yaklaşımı 3
2.2. Hartree Yaklaşımı ve Hartree-Fock Yaklaşımı 4
2.3. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi 6
2.3.1. Thomas-Fermi Teoremi-Thomas Fermi Dirac Teoremi 6
2.3.2. Yoğunluk Fonksiyonel Yaklaşımı 7
2.3.2.a. Hohenberg-Kohn Teoremleri 9
2.3.2.b. Kohn-Sham Denklemleri 10
2.3.3. Değiş-Tokuş Korelasyon Enerjisi 10
2.3.3.a. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı 11
2.3.3.b. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı 12
2.4. Düzlem Dalga Metodu 12
2.5. Pseudopotensiyel Yaklaşımı 13
2.6. Sistem Parametreleri 14
2.6.1. Kesme Enerjisi ($\boldsymbol{Ekesme}$) 15
2.6.2. $\boldsymbol{knokta}$ 15
2.6.3. Band yapısı ve Durum Yoğunluğu (DoS) 16
BÖLÜM 3 18
3.1. Silisyum Bulk Yapısı 18

3.1.1. Örgü Sabiti Yakınsaması 20
3.1.2. Kesme Enerjisi Yakınsaması 22
3.1.3. ***knokta*** Yakınsaması 23
3.1.4. MT Potansiyeli için Farklı Kesme Değerlerinde Örgü Sabiti Yakınsaması 24
3.1.5. Bant Yapısı ve Durum Yoğunluğu 27
3.2. Germayum Bulk Yapısı 29
3.2.1. Örgü Sabiti Yakınsaması 30
3.2.2. Kesme Enerjisi Yakınsaması 32
3.2.3. ***knokta*** Yakınsaması 32
3.2.4. MT Potansiyeli için Farklı Kesme Değerlerinde Örgü Sabiti Yakınsaması 33
3.2.5. Band Yapısı ve Durum Yoğunluğu 36
3.3. $\boldsymbol{Si1-xGex}$ Alaşımı 38
3.3.1. Kesme Enerjisi ve Örgü Sabiti Yakınsaması 40
3.3.2. Band Yapısı ve Durum Yoğunluğu 41
3.4. İkili Yarıiletken Bileşikleri 44
3.4.1. GaAs Yarıiletken Bileşiği 44
3.4.2. InAs Yarıiletken Bileşiği 49
3.4.3. GaP Yarıiletken Bileşiği 54
3.5. Sonuçlar 58
KAYNAKLAR 59
ÖZGEÇMİŞ 63

SİMGELER VE KISALTMALAR

DoS	: Durum Yoğunluğu
Plane-Wave Self Consistent Field	: Pwscf
GaAs	: Galyum Arsenik
GaP	: Galyum Fosfür
GGA	: Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
InAs	: Indiyum Arsenik
LDA	: Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
MT	: Martins-Troullier
PBE	: Perdew-Burke-Enzerhof
PW91	: Perdew-Wang 91
PZ	: Perdew-Zunger
YFT	:Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3. 1. Silisyum kristal yapısı 19
Şekil 3. 2. PBE pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması 20
Şekil 3. 3. PW91 pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması 21
Şekil 3. 4. MT pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması 21
Şekil 3. 5. PZ pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması 22
Şekil 3. 6.Toplam enerjinin kesme enerjisine göre değişimi 23
Şekil 3. 7. Toplam enerjnin $knokta$ değerlerine göre değişimi 24
Şekil 3. 8. $Ekesme = 30\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi 25
Şekil 3. 9. $Ekesme = 35\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi 25
Şekil 3. 10. $Ekesme = 40\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi 26
Şekil 3. 11. Örgü sabiti değişimine göre 3 farklı kesme enerjisinde toplam enerjinin değişimi 26
Şekil 3. 12. Silisyum bant yapısı 27
Şekil 3. 13. Silisyum durum yoğunluğu 28
Şekil 3. 14. Germanyum kristal yapısı 29
Şekil 3. 15. PBE pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması 30
Şekil 3. 16. MT pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması 31
Şekil 3. 17. PZ pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması 31
Şekil 3. 18. Toplam enerjinin kesme enerjisine göre değişimi 32
Şekil 3. 19. Toplam enerjinin $knokta$ değerlerine göre değişimi 33
Şekil 3. 20. $Ekesme = 35\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişim 34
Şekil 3. 21. $Ekesme = 40\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişim 34
Şekil 3. 22. $Ekesme = 45\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişim 35
Şekil 3. 23. Örgü sabiti değişimine göre 3 farklı kesme enerjisinde toplam enerjinin değişimi 35
Şekil 3. 24. Germanyum bant yapısı 36

Şekil 3. 25. Germanyum durum yoğunluğu 37
Şekil 3. 26. Toplam enerjinin kesme enerjisine göre değişimi 40
Şekil 3. 27. Toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi 41
Şekil 3. 28. $Si0.5Ge0.5$ ikili alaşımının bant yapısı 42
Şekil 3. 29. $Si0.5Ge0.5$ ikili alaşımın durum yoğunluğu 43
Şekil 3. 30. GaAs kristal yapısı 44
Şekil 3. 31. GaAs için örgü sabiti yakınsaması 45
Şekil 3. 32. GaAs bant yapısı 46
Şekil 3. 33. GaAs durum yoğunluğu 47
Şekil 3. 34. InAs kristal yapısı 49
Şekil 3. 35. InAs için örgü sabiti yakınsaması 50
Şekil 3. 36. InAs için bant yapısı 51
Şekil 3. 37. InAs durum yoğunluğu 52
Şekil 3. 38. GaP kristal yapısı 54
Şekil 3. 39. GaP için örgü sabiti yakınsaması 55
Şekil 3. 40. GaP bant yapısı 55
Şekil 3. 41. GaP durum yoğunluğu 56

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3. 1. Farklı pseudopotansiyeller kullanılarak hesaplanan toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülleri 19
Çizelge 3. 2. Farklı pseudopotansiyeller kullanılarak hesaplanan toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülleri 29
Çizelge 3. 3. x=0.5 değeri için $Si1-xGex$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti, bant aralığı ve hacim modülü değerleri..... 39
Çizelge 3. 4. Farklı pseudopotansiyeller kullanılarak hesaplanan toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülleri 39
Çizelge 3. 5. GaAs için hesaplanan bant aralığı ve hacim modülünün literatür değeri ile karşılaştırılması 45
Çizelge 3. 6. InAs için hesaplanan bant aralığı ve hacim modülünün literatür değeri ile karşılaştırılması 49
Çizelge 3. 7. GaP için hesaplanan bant aralığı ve hacim modülünün literatür değeri ile karşılaştırılması 54

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Maddenin ve ışığın doğasını açıklamaya çalışan Thomas Young (1803) tarafından gerçekleştirilen kırınım ve girişim deneyleri, Albert Einstein tarafından ışığın enerji paketlerinden (1905) oluşması ve de Broglie (1924) tarafından maddenin dalga özelliğinin olduğunun bulunması maddenin hem dalga hem de parçacık özelliğine sahip olduğu ispatlanmıştır. Fizikteki bu devrimler modern kuantum teorisinin doğmasına neden olmuştur. Maddenin dalga özelliğini tanımlayan Schrödinger denklemi, maddenin içyapısı ve özellikleri hakkında yeni bilgiler sağlamıştır. Sistemin tüm serbestlik derecelerine bağlı olan dalga fonksiyonu, serbestlik derecesi arttıkça çözüm karmaşık ve zor bir hal alır. Bilgisayarlar yardımıyla kısa sürelerde çok sayıda hesapları yapabilme olanağı olmasına rağmen çok parçacıklı sistemlerde birçok etkileşimi göz önünde bulundurmak gerekmektedir. Bu yüzden yaklaşımlar yapılarak denklem çözülebilir hale getirmek gerekmektedir.

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (YFT), hem fizikte hem de kimyada metallerin, yarıiletkenlerin ve yalıtkanların özelliklerini açıklamakta kullanılan dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğuna bağlı yaygın ve başarılı bir modelleme metodudur. Klasik metotlarla karşılaştırıldığında YFT çok parçacıklı sistemler için hesaplama süresini önemli ölçüde kısaltmaktadır. Elektronik devre elemanlarında yaygın olarak kullanılan yarıiletken malzemelerin atomik yapısı, elektronik yapısı ve kimyasal özelliklerinin deneysel sonuçlarla uyumlu bir şekilde bilinmesi hem zaman hem de maddi açıdan çok önemlidir.

Yarıiletkenler elektrik iletimine karşı dirençli olmalarına karşın katkılama denilen bir yöntem ile iletkenlikleri değiştirilebilir. İletkenlikleri değişen yarıiletken bileşiklerin davranışları diyotların, transistörlerin ve diğer elektronik parçaların temelini oluşturur ve kuantum fiziğinin gelişmesiyle yarıiletkenlerin özelliklerinin açıklanması transistörlerin ve entegre devrelerin gelişimini sağlamıştır (Shockley, 1950).

Tez çalışmasında yarıiletken malzeme olan silisyum (Si), germanyum (Ge) ve ikili yarıiletken bileşiklerin elektronik özelliklerini hesaplamak için Baroni ve arkadaşları tarafından geliştirilen açık kaynak kodlu bir hesaplama programı olan Quantum Espresso kullanılmıştır (Giannozzi, 2009).

Bu tez çalışmasının ikinci bölümünde YFT' nin dayandığı matematiksel zemini ve temel kavramlar hakkında bilgi verilmiştir. Üçüncü bölümde silisyum ve germanyum için farklı pseudopotansiyeller kullanılarak toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülü hesaplanmış ve literatür değerleriyle karşılaştırma yapılmıştır. Bulunan sonuçlar karşılaştırılarak en uygun pseudopotansiyel seçilmiş ve bu pseudopotansiyel için yakınsama hesaplamaları yapılarak bant yapısı ve durum yoğunluğu çizilmiştir. Ayrıca $Si_{1-x}Ge_x$, Galyum Arsenik (GaAs), Indiyum Arsenik (InAs) ve Galyum Fosfür (GaP) gibi ikili yarıiletken bileşikleri içinde toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülü gibi parametreler hesaplanmış ve literatür değerleriyle karşılaştırılmış, bant yapısı ve durum yoğunluğu çizilmiştir. Son bölümde de elde edilen sonuçların yorumlanması yapılmıştır.

BÖLÜM 2

KURAMSAL BİLGİLER

Bilim dünyasının en önemli olaylarından biri olan ve kuantum kimyasının mihenk taşlarından olan bir sistemin özellikleri hakkında bilgi veren Schrödinger denklemi ile modern fizikte açıklanamayan durumların çözümü için yeni teorilerin doğmasına neden olmuştur.

Tezin bu bölümünde YFT' nin dayandığı yaklaşımlar, hesaplamaların temelini oluşturan teoremler hakkında kısaca bilgi verildi.

2.1. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Tek elektrona sahip hidrojen atomu dışında daha fazla elektrona sahip sistemlerde Schrödinger denklemi daha karmaşık hal almasından dolayı çözümü oldukça zordur. Bu yüzden çok-elektronlu sistemlerin Schrödinger denklemini çözmek için ortaya atılan yaklaşımlardan ilki Born-Oppenheimer yaklaşımıdır.

Bilindiği gibi çekirdeğin kütlesi elektronun kütlesinden çok daha büyük ve hızı elektronun hızından daha azdır. Born ve Oppenheimer bu durumu göz öne alarak çekirdeğin hareketsiz olduğu bir yaklaşım öne sürdüler (Born ve Oppenheimer, 1927). Bu yaklaşıma göre elektron çekirdeğe göre çok daha hafif ve çok daha hızlı olmasından dolayı çekirdek elektronun bireysel hareketinden etkilenmez fakat elektronların oluşturduğu hareketlerinin ortalamasından etkilenebilirler. Bu durumda çekirdek elektronların oluşturduğu alanda hareket eder. (Yapıörer, 2010).

Buna göre toplam enerji terimi, çekirdeğin hareketinin olmadığının varsayımı altında sadece elektronların kinetik enerjisi, çekirdek-çekirdek ve elektron-elektron enerjisinden oluşmaktadır.

2.2. Hartree Yaklaşımı ve Hartree-Fock Yaklaşımı

Çok-elektronlu sistemler için Schrödinger denkleminin çözümü için yaygın olarak kullanılan yaklaşım dalga yaklaşımıdır (Ashcroft-Mermin, 1976). 1928 yılında Hartree çok-elektronlu sistemin dalga fonksiyonunu tek-elektron dalga fonksiyonlarının çarpımına indirgemiştir. Hartree yaklaşımına göre atom içerisindeki elektronlar çiftler halinde değil birbirinden bağımsız bir şekilde hareket etmektedir. Bir elektron diğer elektronun ve çekirdeğin oluşturduğu bir ortalama alan ile etkileşim içindedir.

Dalga fonksiyonları, değişmeyen homojen bir sistem içinde basit düzlem dalgalar olarak alınabilir.

Hartree yaklaşımının temeli çok-elektron dalga fonksiyonu N tek-elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazılmasına dayanır. Buna göre; N-elektronlu bir sistemin N tane denklemi vardır. Bu durumda çok-elektronlu sistemin dalga fonksiyonu,

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^{N} \Psi_i(\vec{r}_i) \tag{2.1}$$

şeklinde ifade edilir. Burada *i.* elektrona etki eden potansiyel

$$V_i(\vec{r}) = V_{ç-e}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \tag{2.2}$$

eşitliği ile ifade edilir. Potansiyel enerjideki ilk terim çekirdek ve elektronlar arasındaki potansiyel enerjiyi,

$$V_{ç-e}(\vec{r}) = -\sum_i \frac{Z_i}{|\vec{r}-\vec{r}_i|} \tag{2.3}$$

ve ikinci terim ise Hartree enerjisi olarak ifade edilen elektronlar arası potansiyel enerjiyi

$$V_{e-e}(\vec{r}) = -e \int d\overrightarrow{r'} \frac{n(\overrightarrow{r'})}{\left|\vec{r}-\overrightarrow{r'}\right|} \tag{2.4}$$

ifade eder.

Sistemin Hamiltonyenini,

$$\mathrm{H} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}\nabla_i^2 + V_i(\vec{r}) \tag{2.5}$$

ve *i.* elektrona etkiyen yoğunluk terimini,

$$n(\overrightarrow{r'}) = \sum_{i\neq j} \left|\Psi_j(\vec{r})\right|^2 \tag{2.6}$$

tek elektron dalga fonksiyonlarını denkleme eklersek,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{ç-e}(\vec{r})\right]\Psi_i(\vec{r}) + \sum_{i\neq j} d\overrightarrow{r'}\frac{\left|\Psi_j(\vec{r})\right|^2}{\left|\vec{r}-\overrightarrow{r'}\right|}\Psi_i(\overrightarrow{r'}) = \varepsilon_i \frac{\left|\Psi_j(\vec{r})\right|^2}{\left|\vec{r}-\overrightarrow{r'}\right|}\Psi_i(\overrightarrow{r'}) \tag{2.7}$$

Hartree denklemi ile verilir.

Pauli dışarlama ilkesini hesaba katmayan Hartree fonksiyonununun geliştirilmesi 1930 yılında Fock ve Slater tarafından yapılmıştır. Hartree-Fock yaklaşımında bu ilke kullanılır. Bu ilke gereğince iki elektronun yer değiştirmesi asimetrik olmalıdır ve yer değiştirmeden dolayı dalga fonksiyonu işaret değiştirmelidir.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots \vec{r}_N) = -\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots \vec{r}_N) \tag{2.8}$$

Buna göre çok-elektronlu dalga fonksiyonu, tek-elektronlu dalga fonksiyonlarının çarpımları yerine Slater determinantı denilen çarpımlarının toplamları şeklinde ifade etmişlerdir.

$$\Psi_{HF} = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{bmatrix} \Psi_1(\overrightarrow{x_1}) & \cdots & \Psi_N(\overrightarrow{x_1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_N(\overrightarrow{x_N}) & \cdots & \Psi_N(\overrightarrow{x_N}) \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N!}} det|\Psi_1\Psi_2 \dots \Psi_N| \tag{2.9}$$

Sistemin Hamiltonyeni,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{ç-e}(\vec{r})\right]\Psi_i(\vec{r}) +$$
$$\sum_j d\overrightarrow{r'}\frac{|\Psi_j(\vec{r})|^2}{\left|\vec{r}-\overrightarrow{r'}\right|}\Psi_i(\overrightarrow{r'}) - \sum_j \int d\overrightarrow{r'}\frac{\Psi_i^*(\overrightarrow{r'})\Psi_i(\overrightarrow{r'})}{\left|\vec{r}-\overrightarrow{r'}\right|}\Psi_j(\vec{r}) = \varepsilon_i\,\Psi_i(\overrightarrow{r'}) \quad (2.10)$$

ile ifade edilir. Elde edilen denklemdeki son terim "değiş-tokuş korelasyon" terimidir ve Hartree yaklaşımından çok daha karmaşıktır.

Elektron-elektron etkileşimin sonucu olan değiş-tokuş korelasyon teriminin sisteme katkısını bulmak için önerilen "yoğunluk fonksiyonel teorisi"ne göre sistemin çözümü dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğuna bağlıdır.

2.3. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

Malzeme modellemesinin başarılı bir şekilde yapabilmesi, deneylerden elde edilen sonuçlarla tutarlı olması ve farklı bakış açıları geliştirmesi YFT' nin başarılı ve popüler bir yaklaşım olmasını sağlamıştır.

2.3.1. Thomas-Fermi Teoremi-Thomas Fermi Dirac Teoremi

Atomlar ve moleküller gibi çok-elektronlu sistemlerin fiziksel özelliklerinin belirlenmesi için Schrödinger denkleminin çözümü oldukça zordur. Bu durumda dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu üzerine odaklanan bir yaklaşım kullanmanın birçok avantajı vardır. Maddelerin fiziksel özellikleri çoğunlukla elektronların dağılımları ile belirlenir. Dalga fonksiyonu yerine temel değişken olarak elektron yük yoğunluğunun kullanılmasını öne süren ilk yaklaşım olan YFT'nin temellerini oluşturan Thomas-Fermi yaklaşımıdır (Thomas, 1926; Fermi, 1928).

Bu modele göre $n(\vec{r})$ elektron yük yoğunluğu, Thomas-Fermi toplam enerjisini verir.

$$E = T + V_{ç-e} + V_{e-e} \quad (2.11)$$

Yük yoğunluğu kinetik enerjinin bir fonksiyoneli olarak verilir (Jones ve Gunnarsson, 1989) ve ilk terim sistemin toplam kinetik enerjisini,

$$T = C_1 \int n(\vec{r})^{\frac{5}{3}} d\vec{r} \tag{2.12}$$

İkinci terim çekirdek-elektron etkileşme enerjisi,

$$V_{\text{Ç}-e} = \int n(\vec{r}) V_{\text{Ç}}(\vec{r})\, d\vec{r} \tag{2.13}$$

Son terim ise elektron-elektron etkileşme enerjisini veren terimidir.

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} e^2 \int \frac{n(\vec{r}) n(\overrightarrow{r'})}{\left|\vec{r} - \overrightarrow{r'}\right|} d\vec{r} d\overrightarrow{r'} \tag{2.14}$$

Thomas-Fermi teoremi atılan önemli bir adım olmasına rağmen elektronlar arasındaki değiş-tokuş enerjisini dikkate almamıştır (Oganov, 2002). Bu yüzden teoremin kesinliği sınırlıdır. Dirac elektronlar arasındaki etkileşim için değiş-tokuş korelasyon enerji terimi teoriyi genişletmesine rağmen elektronların davranışlarını açıklamakta yetersiz kalmaktadır (Dirac, 1930).

$$E^{TFD} = E^{TF} + C_2 \int n^{\frac{4}{3}}(\vec{r})\, d\vec{r} \tag{2.15}$$

2.3.2. Yoğunluk Fonksiyonel Yaklaşımı

Yoğunluk fonksiyonel teorisi 1964 yılında Hohenberg ve Kohn tarafından çok-elektronlu sistemlerin taban durum özelliklerini açıklamak için ortaya atılan bir yaklaşımdır.

Çok-elektronlu sistemin taban enerjisini hesaplarken temel değişken olarak dalga fonksiyonu yerine yer ve zamanın fonksiyonu olan elektron yoğunluğunu $n(\vec{r})$

almak sistemin çözümünü daha kolay hale getirir (Yapıörer, 2010). N tane elektrona sahip bir sistemin Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\Psi_i(\vec{r}) \tag{2.16}$$

şeklindedir. Buradaki $\Psi_i(\vec{r})$ tek dalga fonksiyonunu ve $V(\vec{r})$ tek elektronun tüm etkileşimlerini içeren potansiyel enerji terimidir.

$$V(\vec{r}) = V_{e-ç}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \tag{2.17}$$

Potansiyeldeki ilk terim çekirdek-elektron etkileşimi, ikinci terim diğer elektron-elektron etkileşimi, üçüncü terim ise değiş-tokuş korelasyon etkileşimidir.
Toplam enerji terimi ise;

$$E[n(\vec{r})] = T[n(\vec{r})] + \int d\vec{r}d\overrightarrow{r'}\frac{n(\vec{r})n(\overrightarrow{r'})}{\left|\vec{r}-\overrightarrow{r'}\right|} + E_{XC}[n(\vec{r})] + \int n(\vec{r})V_{e-ç}(\vec{r})d\vec{r} \tag{2.18}$$

şeklinde ifade edilmiştir.

$$V_{etkin}(\vec{r}) = \int d\vec{r}d\overrightarrow{r'}\frac{n(\vec{r})n(\overrightarrow{r'})}{\left|\vec{r}-\overrightarrow{r'}\right|} + E_{XC}[n(\vec{r})] + \int n(\vec{r})V_{e-ç}(\vec{r})d\vec{r} \tag{2.19}$$

terimi etkin potansiyel enerji olarak tanımlanırsa

$$\left[\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V_{etkin}(\vec{r})\right]\Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon\Psi_i(\vec{r}) \tag{2.20}$$

N elektrona sahip sistemin Schrödinger denklemine döneriz. Toplam enerjiyi hesaplamak için sistemin tüm serbestlik derecelerinin fonksiyonuna bağlı dalga fonksiyonlarının çözümünü bulmak gerekir. Fakat iki parçacık arasındaki olasılık yoğunluğunu bilmemiz denklemin çözümü için yeterlidir.

i. durumdaki elektron yük yoğunluğu,

$$n_i(\vec{r}) = -e|\Psi_i(\vec{r})|^2 \tag{2.21}$$

şeklinde verilirken toplam elektron yük yoğunluğu ise,

$$n_i(\vec{r}) = -e\sum_i|\Psi_i(\vec{r})|^2 \tag{2.22}$$

şeklinde verilir.

Tüm sistemin parçacık yoğunluğu,

$$n(\vec{r}) = N\int|\Psi_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\dots,\vec{r}_N)|d\vec{r}_1\dots\ d\vec{r}_N \tag{2.23}$$

ve Ψ_0 sistemin taban durumu dalga fonksiyonudur.

2.3.2.a. Hohenberg-Kohn Teoremleri

1964 yılında Hohenberg ve Kohn çok-elektronlu dalga fonksiyonunun çözümü için YFT'nin temelini iki önemli teoreme dayandırmaktadır. Temel değişken olarak dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunu kullandılar. Sistemin taban durumu, toplam enerjiyi en düşük değere sahip elektron yoğunluk dağılımıyla tanımlanabilir.

Teorem 1: Elektron yoğunluğu $n(\vec{r})$, elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olan $E[n(\vec{r})]$ toplam enerjiyi belirler.

Bir $F[n(\vec{r})]$ evrensel bir fonksiyonel ile $V_{dış}(\vec{r})$ dış potansiyel altında toplam enerji,

$$E[n(\vec{r})\ ] = \int V_{dış}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + F[n(\vec{r})] \tag{2.24}$$

şeklinde ifade edilir.

Teorem 2: Toplam enerjiyi minimize eden elektron yoğunluğu taban durumdaki elektron yoğunluğudur.

$F[n(\vec{r})]$ evrensel fonksiyoneli biliniyorsa $n(\vec{r})$ ile verilmiş bir dış potansiyel altında temel durum enerjisi ve yoğunluğu bulunabilir.

2.3.2.b. Kohn-Sham Denklemleri

Hohenberg-Khon teoremi çok-elektronlu bir sistemin toplam enerjisini hesaplamak için yeterli değildir. Bunun için 1965 yılında Khon-Sham, kinetik enerji terimi, dış potansiyel altında etkileşim terimi ve elektron-elektron etkileşim terimi olmak üzere üç terimden oluşan yeni bir toplam enerji fonksiyoneli tanımladılar.

$$E[n(\vec{r})] = T[n(\vec{r})] + V_{dış}[n(\vec{r})] + V_{e-e}[n(\vec{r})] \quad (2.25)$$

Uygun yaklaşımlarla kinetik enerji ve elektron-elektron potansiyel enerji fonksiyonellerini hesaplamak için enerjinin en düşük değere getiren bir değer bulunabilir. Khon-Sham bu fonksiyonelleri bulmak için etkileşen elektronlardan oluşan sistem yerine etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistem tanımladılar ve bu sistemi bir dış potansiyel altında hareket ettirdiler.

Khon-Sham potansiyeli olarak tanımlanan potansiyel,

$$V_{KS}(\vec{r}) = V_{dış}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \quad (2.26)$$

bir dış potansiyel, Hartree potansiyeli ve değiş-tokuş korelasyon enerjisinden oluşmaktadır.

2.3.3. Değiş-Tokuş Korelasyon Enerjisi

E_{XC} değiş-tokuş korelasyon enerjisi, etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistemi elektron-elektron etkileşimi varmış gibi kabul edilmesi sonucu çıkmıştır.

Değiş-tokuş korelasyon enerjisini,

$$E_{xc}[n(\vec{r})] = (T[n(\vec{r})] - T_s[n(\vec{r})]) + V_{e-e}[n(\vec{r})] - V_H[n(\vec{r})] \quad (2.27)$$

olarak ifade edebiliriz. Burada $(T - T_s)$ ilk terim kinetik enerjiyi, V_{e-e} elektron-elektron etkileşme enerjisini ve V_H Hartree enerjisini ifade eder.

Sistemin taban enerjisini bulmak için E_{XC} değiş-tokuş korelasyon enerjisinin bilinmesi gerekmektedir. Bu bilinmezlikten kurtulmak ve sistemin elektron dağılımı için genel olarak iki yaklaşım kullanılmaktadır. Bu yaklaşımlardan birincisi yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) diğer bir yaklaşım ise genelleştirilmiş gradyent yaklaşımıdır (GGA).

2.3.3.a. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

Değiş-tokuş korelasyon enerjisini hesaplamak için fonksiyonel yerel yoğunluk $n(\vec{r})$'ye bağlı bir fonksiyonele yaklaştırılır. Değiş-tokuş korelasyon enerjisinin yoğunluğa bağlı ifadesi,

$$\epsilon_{xc}(\vec{r}) = \epsilon_{xc}^{hom}[n(\vec{r})] \tag{2.28}$$

şeklindedir ve herhangi bir $\vec{r}$ noktasındaki aynı yoğunluğa sahip homojen elektron gazının değerine eşit olduğunu kabul eder.

Yerel yoğunluk yaklaşımında enerji terimi, elektron yoğunluğu ile varsayılan değerde hesaplanan enerji yoğunluğunun integrasyonu ile elde edilir (Kohanoff J., 2006).

$$E_{xc}^{LDA}[n(\vec{r})] = \int \epsilon_{xc}(\vec{r})\, n(\vec{r}) d\vec{r} \tag{2.29}$$

Değiş-tokuş korelasyon potansiyeli, değiş-tokuş korelasyon enerjisinin elektron yoğunluğuna göre türevi olup, elektron yoğunluğunun bağlıdır. Buna göre değiş-tokuş korelasyon potansiyeli,

$$V_{xc}^{LDA}[n(\vec{r})] = \frac{\delta E_{xc}^{LDA}}{\delta n(\vec{r})} = \frac{\partial[n(\vec{r})\epsilon_{xc}(\vec{r})]}{\partial n(\vec{r})} = \epsilon_{xc}(\vec{r}) + n(\vec{r})\frac{\partial \epsilon_{xc}(\vec{r})}{\partial n(\vec{r})} \tag{2.30}$$

şeklindedir.

Yerel yoğunluk yaklaşımı homojen sistemler bant yapısı ve toplam enerji gibi hesaplamaları için yaygın olarak kullanılmaktadır. Homojen olmayan sistemlerde de çalışan yeni yaklaşım ile sistem içerisindeki değişimler de hesaba katılmıştır.

2.3.3.b. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı

Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı, hem elektron yoğunluğunu hem de elektron yoğunluğundaki değişimleri hesaba katar. (Perdew, 1992; Perdew, Burke ve Ernzerhof, 1996; Kohanoff, 2006).

Buna göre toplam enerji terimi $E_{xc}^{GGA}[n(\vec{r}), \nabla n(\vec{r})]$, her iki terimine bağlıdır.

$$E_{xc}^{GGA}[n(\vec{r}), \nabla n(\vec{r})] = \int \epsilon_{xc}\big(n(\vec{r}), \nabla n(\vec{r})\big)\, n(\vec{r}) d\vec{r} \tag{2.31}$$

Elektron yoğunluğundaki değişimleri de hesaba katan genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı, bağ uzunluğu ve toplam enerji hesaplamalarında yerel yoğunluk yaklaşımına göre daha iyi sonuçlar verir.

2.4. Düzlem Dalga Metodu

Örgünün periyodikliği ile düzlem dalgaların bir seti kullanılarak Khon-Sham denklemleri çözülebilir. Bloch teoremine göre elektron dalga fonksiyonu düzlem dalgaların toplamı olarak yazılabilir.

$$\Psi_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{i,\vec{k}+\vec{G}}\, e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} \tag{2.32}$$

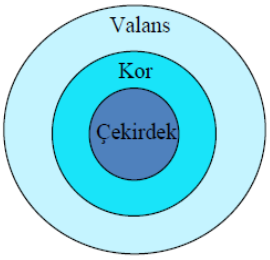
Bloch teoremi, her bir $\vec{k}$ noktasındaki elektron dalga fonksiyonlarının ayrık bir düzlem dalga baz seti tarafından açılabileceğini ifade eder(Özer, 2010). Bu sete sadece kinetik enerjileri belirli bir kesme enerjisinden küçük düzlem dalgalar dahil edilir (Yılmaz, 2012).

$$\frac{\hbar}{m^2}\left|\vec{k} + \vec{G}\right| \leq E_{kesme} \tag{2.33}$$

Böylelikle kesme enerjisi tarafından düzlem dalga seti sınırlandırılır. Bununla birlikte kor ve valans elektronlarını tanımlamak için kullanılan dalga fonksiyonlarından kaynaklı hatalar pseudopotansiyel yaklaşımı çözecektir.

2.5. Pseudopotensiyel Yaklaşımı

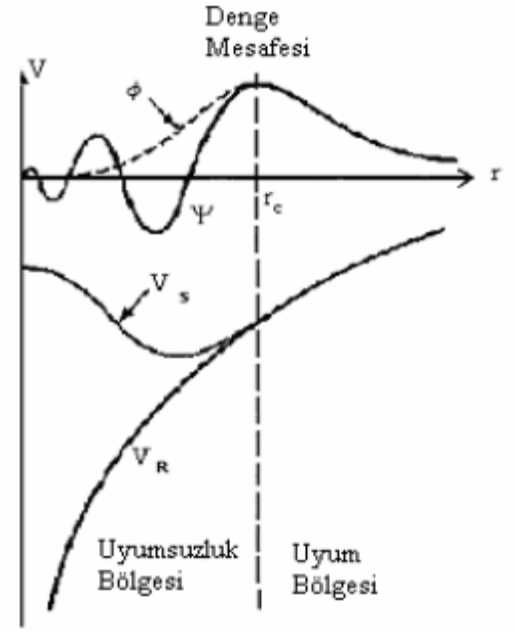
Malzemenin özelliklerini belirleyen elektronlar, çekirdek etrafında kor ve valans elektronları olmak üzere iki gruba ayrılır. Kor elektronları çekirdeğe yakın yörüngelerde çekirdeğe sıkı şekilde bağlıdır ve kimyasal etkileşmelerden etkilenmezler. Valans elektronları ise son yörüngede kimyasal bağların oluşmasında ve malzemenin elektronik özelliklerinin belirlenmesinde büyük bir rol oynayan değerlik elektronlarıdır (Cohen, 1988).



Şekil 2. 1. Basit bir atom modeli

Kor elektronları valans elektronlarına oranla daha büyük bir potansiyele maruz kalmaları ve valans elektronlarının yüksek kinetik enerjiye sahip olmaları bant hesaplamalarında büyük bir soruna neden olmaktadır. Pseudopotansiyel metodu valans elektronlarını etkileyen ve kor elektronlarını kısmen perdeleyen bir pseudopotansiyel tanımlar (Antoncik, 1959; Phillips ve Kleinman, 1959).

Bloch teoresine göre elektronik dalga fonksiyonları düzlem dalga setlerine göre yazılabilir. Elektronik dalga fonksiyonlarının düzlem dalgalar kullanılarak açıklanması, sıkı bir şekilde bağlanmış olan kor orbitallerinin açılması ve kor bölgesindeki valans elektronlarının dalga fonksiyonlarının salınımlarını takip etmesi açısından fazla sayıda düzlem dalga baz setine ihtiyaç duyar ve genellikle elektronik dalga fonksiyonlarının genişletilmesi için kullanılmaya pek de elverişli değildir. Pseudopotansiyel metot çok daha az sayıda düzlem-dalga baz seti kullanılarak elektron dalga fonksiyonlarının genişletilmesine imkan sağlamaktadır (Payne, 1992; Yin, 1982).



Şekil 2. 2. Elektron dalga fonksiyonu ve pseudopotansiyel fonksiyonunun şematik gösterimi

Temel ilkelere dayanan yöntemlerle elde edilen pseudopotansiyeller, bir sistemin tüm elektronlarını içeren atomik hesaplamalar yapılarak üretilirler. YFT çerçevesinde bu is, küresel perdeleme yaklasımı yapılarak ve radyal Kohn-Sham denklemi öz-uyumlu çözülerek yapılır (Troullier ve Martins, 1991).

2.6. Sistem Parametreleri

Bu tezde hesaplamalar açık kaynak kodlu elektronik yapı ve enerji hesaplamalarında sıkça kullanılan ve modelleme yapabilme olanağı sağlayan Quantum Espresso adlı bir hesaplama programıyla yapılmıştır. Hesaplamalar programın Plane-Wave Self Consistent Field (PWscf) olarak bilinen Düzlem Dalga Öz Uyumlu Alan bileşeni kullanılmıştır. Program yoğunluk fonksiyonel teorisi, düzlem dalga baz seti ve pseudopotansiyele dayanmaktadır. Bu programın seçilmesinin amacı sistemin büyüklüğüne göre hem tek bilgisayar hem de çoklu bilgisayar sistemlerinde kullanıma olanak sağlamasıdır. Program sistemin taban durumunu belirleyen parametrelere ek olarak E_{kesme}, k_{point} ve örgü sabiti gibi parametreleri değiştirme imkanı sunmaktadır.

2.6.1. Kesme Enerjisi (E_{kesme})

Denklem 2.32'de belirtilen düzlem dalgaların toplamı şeklinde yazılabilen sonsuz sayıda elektron dalga fonksiyonunun çözümü sadece belli bir değerden daha küçük kinetik enerjiye sahip çözümlerin toplamı şeklinde hesaplanabilir.

$$\Psi_i(\vec{r}) = \sum_{\overrightarrow{|\vec{k}+\vec{G}| \leq \vec{G}_{kesme}}} c_{i,\vec{k}+\vec{G}}\, e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} \tag{2.34}$$

Periyodik sistemler için $\vec{G}$ ters örgü vektörleri ve $\vec{k}$ ilk Brillouin bölgesini tanımlar. Düzlem dalga bileşenleri,

$$\frac{(\vec{G}+\vec{k})}{2} \leq E_{kesme} \tag{2.35}$$

ile sınırlandırılır.

2.6.2. k_{nokta}

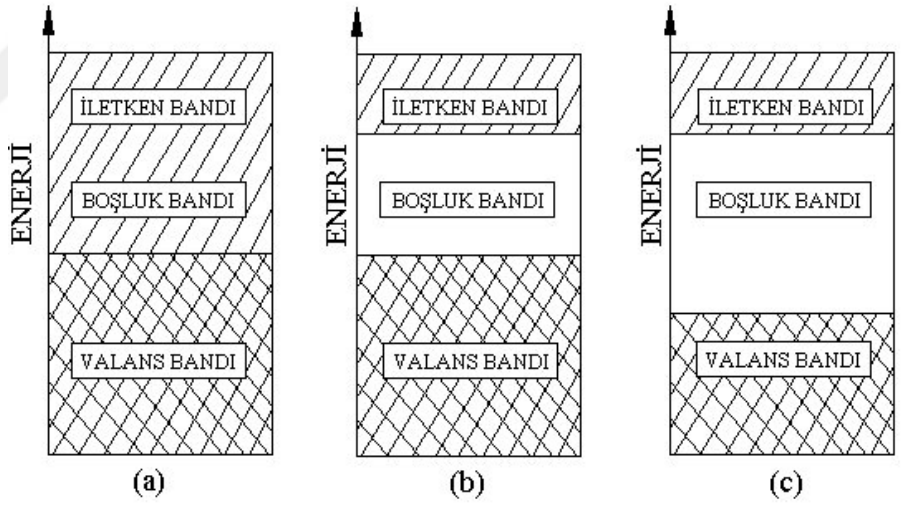
Gerçek uzayda periyodik birim hücrenin tekrarlanması ters uzayda Bravais örgüsünü üretir. Denklem 2.34' de belirtilen elektronun dalga fonksiyonunun özelliklerini ters uzayında veya k-uzayında tanımlamak gerçek uzayda olduğundan daha kolaydır.

Elektronik taban durumunu bulmak için yapılan öz uyumlu dalga hesaplamasında Brillouin bölgesinin örnekleyeceği k noktaları, k noktaları listesinde veya Monkhorst-Pack örgüsünde belirtilerek tanımlanabilir. Monkhorst ve Pack örgüsünde k noktaları Brillouin bölgesinde homojen olarak dağılmaktadır. (Monkhorst, 1976).

Enerji bandı veya yük yoğunluğu gibi parametreleri hesaplamak için k noktalarının üzerinden toplamın yapılması gerekmektedir. Bu nedenle etkili toplam seçmek sonuçların yakınsaması için çok önemlidir.

2.6.3. Band yapısı ve Durum Yoğunluğu (DoS)

Şekil 2.1' de gösterilen bir atomun elektronları yörüngede belli enerji seviyelerinde bulunmaktadır. En yüksek enerji seviyesine sahip son yörüngedeki elektronlara değerlik elektronu veya valans elektronu denmektir. Bu valans elektronları bir elementin fiziksel, kimyasal özelliklerini tanımlarken ayrıca kimyasal bağ yapıp yapamayacağını da belirler. Bir maddede valans bandı ve iletkenlik bandı olmak üzere 2 enerji bandı bulunmaktadır. Valans bandında bulunan valans elektronları iletkenlik bandına geçmesi o maddenin iletkenlik kazanması demektir. Valans elektronları serbest hale geçiren enerji seviyesinin aralığı maddenin iletken, yalıtkan veya yarıiletken olduğunu gösterir. Şekil 2.3' de bant aralıkları gösterilmektedir. Bir katının elektronik bant yapısı, onun elektrik, manyetik ve optik özelliklerini tanımlamasından dolayı elektronik cihazlarda kullanılacak olan malzemelerin ve bileşiklerin enerji bant aralığını bilmek önemli bir kriterdir.



Şekil 2. 3. (a) iletken, (b) yarıiletken, (c) yalıtkan enerji bant aralıkları

Durum yoğunluğu, enerji aralığında bir sistemdeki elektronların birim hacimdeki sayıları veya her enerji seviyesinde sistem tarafından dolu olabilecek durumlarının sayısıdır. Birim enerji başına durumların sayısı olarak tanımlanan durum yoğunluğu hem elektronik hem de optik özellikler için önemli bir parametredir. Ayrıca durum

yoğunluğu yarı iletkenlerde enerji bandı aralığının belirlenmesinde ve dağılım fonksiyonunu enerjinin bir fonksiyonu belirlemede yardımcı olur.

BÖLÜM 3

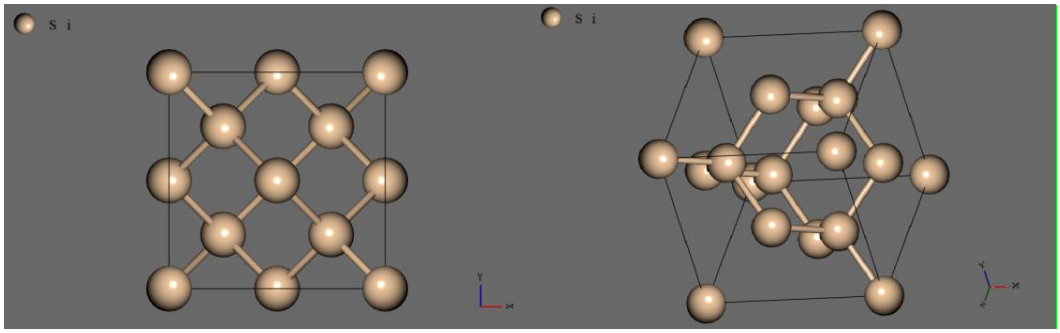
SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Entegre devrelerin yapıtaşı olan yarıiletkenler bilgisayar, cep telefonu, mikroçip ve güneş panelleri gibi birçok günümüz teknolojik aletlerde yaygın olarak kullanılmaktadır. İletkenlikleri ayarlanarak iyi bir iletken veya iyi bir yalıtkan yapılabilen yarıiletkenler birçok farklı sektörlerde geniş bir uygulama alanı vardır. Özellikle uzay görevleri için yarıiletken teknolojisi büyük bir öneme sahiptir. Çünkü kullanılacak olan sistemlerin yüksek performanslı, dayanıklı ve güvenilir olması beklenmektedir. Bu yüzden elektronik aletlerin yapılmasında en çok kullanılan iki elementin yani silisyumun ve germanyumun elektronik özellikleri hakkında bilgi edinmek büyük önem kazanmaktadır.

3.1. Silisyum Bulk Yapısı

Periyodik tablonun IV-A grubunda 14 elektrona sahip silisyum dünyanın üst tabakasında yer alan en yaygın ikinci elementtir. Yer kabuğunun %25'i silisyum elementinden oluşur. $1.3 - 6.7\ \mu m$ aralığındaki kızılötesi dalga boylarının %95'ini iletmesinden dolayı silisyum yarıiletken cihazların %95'inin yapıtaşı niteliğindedir (Meindl,1984; Sze,1990).

Silisyum kristali yüzey merkezli kübik yapıdan oluşmaktadır. Si için yapılan literatür çalışması sonucunda örgü sabiti $a = 5.430\text{Å} = 10.266\ a.u.$ 'dir.



Şekil 3. 1. Silisyum kristal yapısı

Silisyumun hacim modülü, bant yapısı ve durum yoğunluğu hesaplamalarında kullanılacak en uygun pseudopotansiyeli bulmak için farklı pseudopotansiyeller için toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülü hesaplanmıştır. Literatürdeki bant aralığı değerine en yakın sonucu veren pseudopotansiyel ile k_{nokta}, E_{kesme} ve örgü sabiti yakınsama çalışması yapılmıştır.

Çizelge 3. 1. Farklı pseudopotansiyeller kullanılarak hesaplanan toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülleri

Pseudopotansiyel	Toplam enerji (Ryd)	Bant aralığı (eV)	Hacim Modülü (GPa)
Perdew-Burke-Enzerhof (PBE)	-93.45363579	0.9309	91.0
Perdew-Wang 91(PW91)	-22.90041451	0.9390	96.5
Perdew-Zunger (PZ)	-89.28866706	0.8163	96.8
Martins-Troullier (MT)	-15.87530966	0.8571	96.7

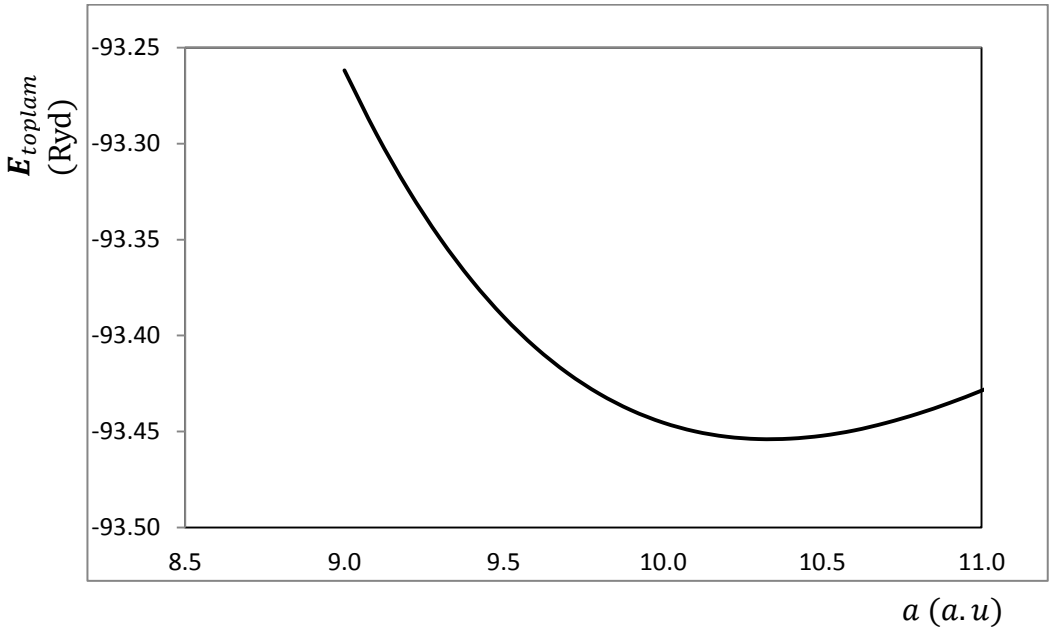
PW91 pseudopotansiyeli için yapılan hesaplamada bant aralığı 0.939 eV olarak bulunmuş ve literatürdeki silisyum bant aralığı 1.12 eV değerine en yakın çıkan sonuçtur. Ayrıca PW91 pseupotansiyeli düzeltilmiş gradyant değiş-tokuş korelasyon

enerjisini hesaba katarken diğer 3 pseudopotansiyel yerel yoğunluk yaklaşımına göre bant aralığı hesaplaması yapmıştır. PBE, PZ ve MT pseudopotansiyelleri için bant aralığı sırasıyla 0.9309, 08163 ve 0.8571 eV'dur. Yerel yoğunluk yaklaşımına göre hesaplama yapan pseudopotansiyeller arasında 1.12 eV değerine en yakın sonucu veren PBE pseudopotansiyelidir.

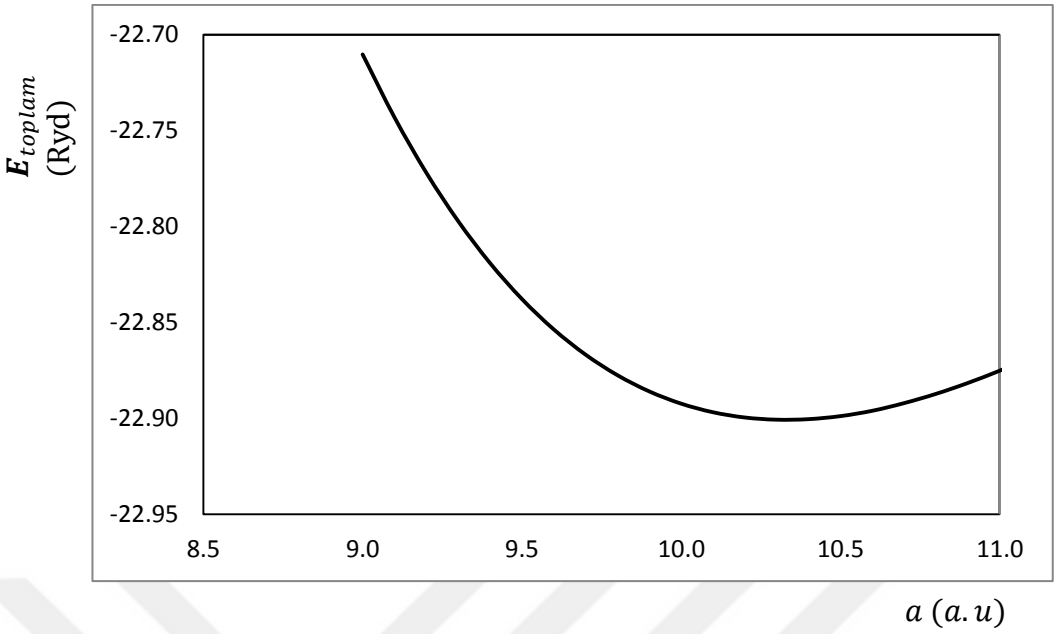
Hacim modülü hesaplamasında 101.97 GPa olan literatür değerine en yakın değerler 96.8 GPa değeriyle PZ ve 96.7 GPa değeriyle MT pseudopotansiyeli iken en uzak değer 91.0 GPa değeriyle PBE pseudopotansiyelidir.

3.1.1. Örgü Sabiti Yakınsaması

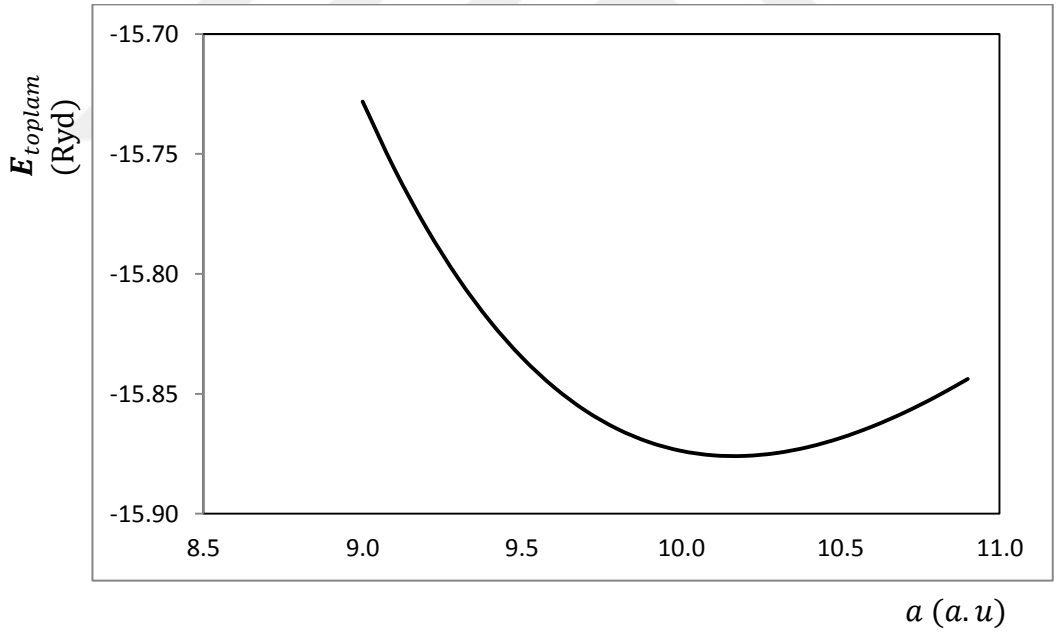
PBE, PW91, MT ve PZ pseudopotansiyelleri için örgü sabiti yakınsaması yapılmış ve literatürde bulunan $a = 10.266\ a.u$ örgü sabiti değerine en yakınlıkları kontrol edilmiştir. Hesaplama yapılırken E_{kesme} değeri bütün hepsi için 25 Ryd ve örgü sabiti $a = 10.266\ a.u$ olarak alınmıştır. Örgü sabiti değeri değiştirilerek toplam enerji değerindeki değişimler gözlemlenerek elde edilen sonuçlar aşağıdaki şekillerde gösterilmiştir.



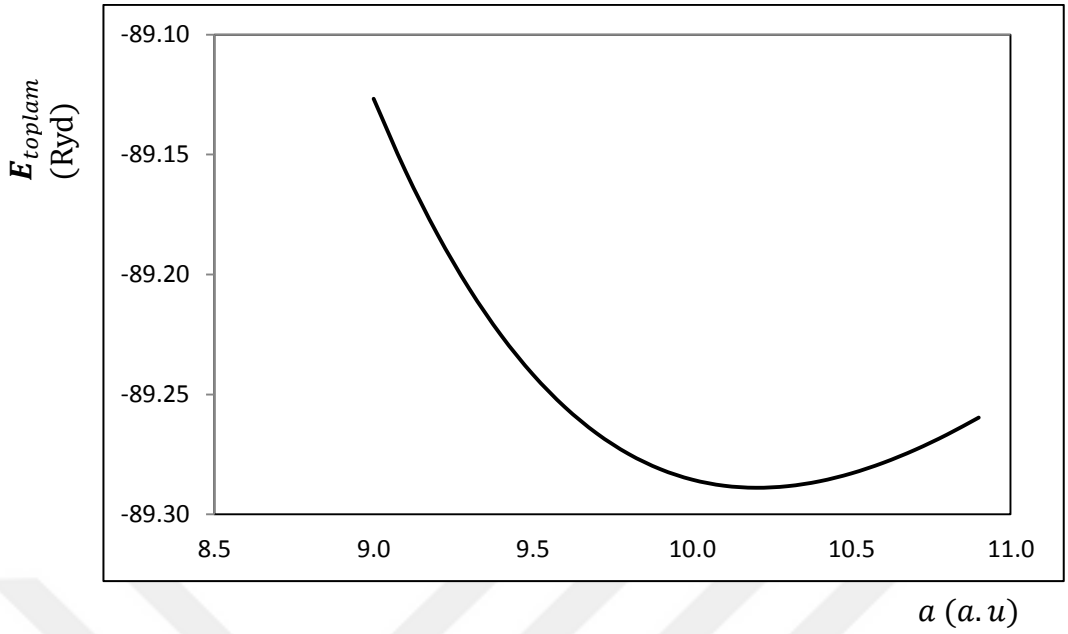
Şekil 3. 2. PBE pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması



Şekil 3. 3. PW91 pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması



Şekil 3. 4. MT pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması



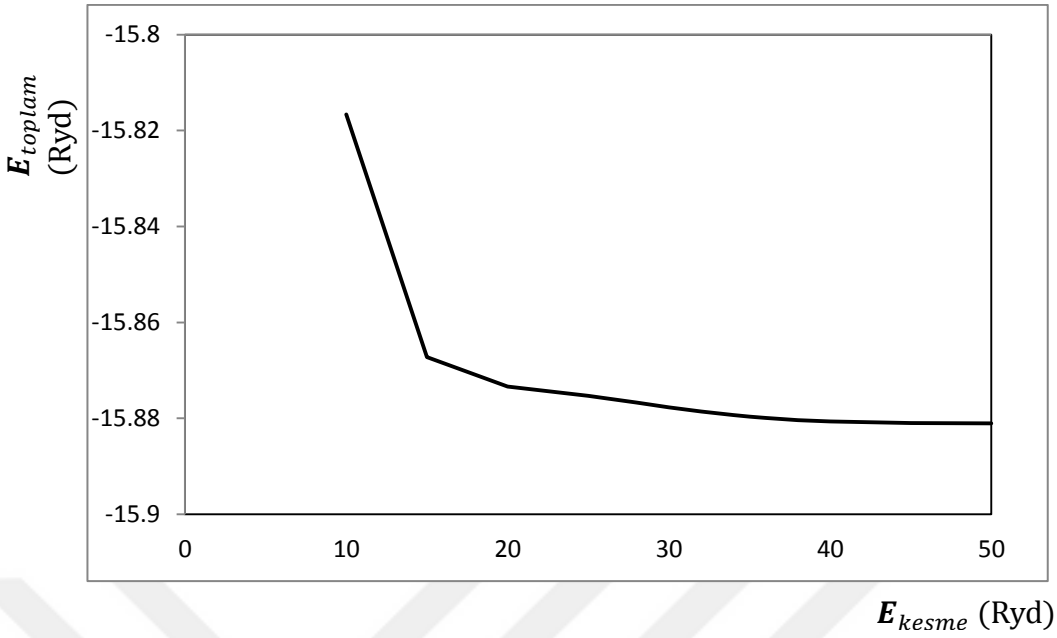
Şekil 3. 5. PZ pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması

Örgü sabitinin değişimine bağlı olarak değişen toplam enerjinin en düşük olduğu örgü sabiti değeri bütün potansiyeller için literatür değeri olan 10.266 değeri ile uyumlu olduğu gözlenmiştir.

3.1.2. Kesme Enerjisi Yakınsaması

MT pseudopotansiyeli popüler bir metot olmasından dolayı diğer hesaplamaların hepsi bu pseudopotansiyeli kullanılarak yapılmıştır.

Silisyum bulk yapı için en uygun kesme enerjisini belirlemek için deneysel örgü sabiti olan $a = 10.266\, a.u.$ kullanılmış ve k_{nokta} seti (6x6x6) değerinde tutulmuştur. Kesme enerjisi 10 Ryd değeri ile başlanıp belli aralıklarla arttırılarak, en düşük toplam enerji değerini veren kesme enerji değeri bulunmuştur. Bu işlem için her bir kesme enerjisi değeri için toplam enerji hesaplanmış, toplam enerjinin kesme enerjisine göre değişimi şekilde verilmiştir.

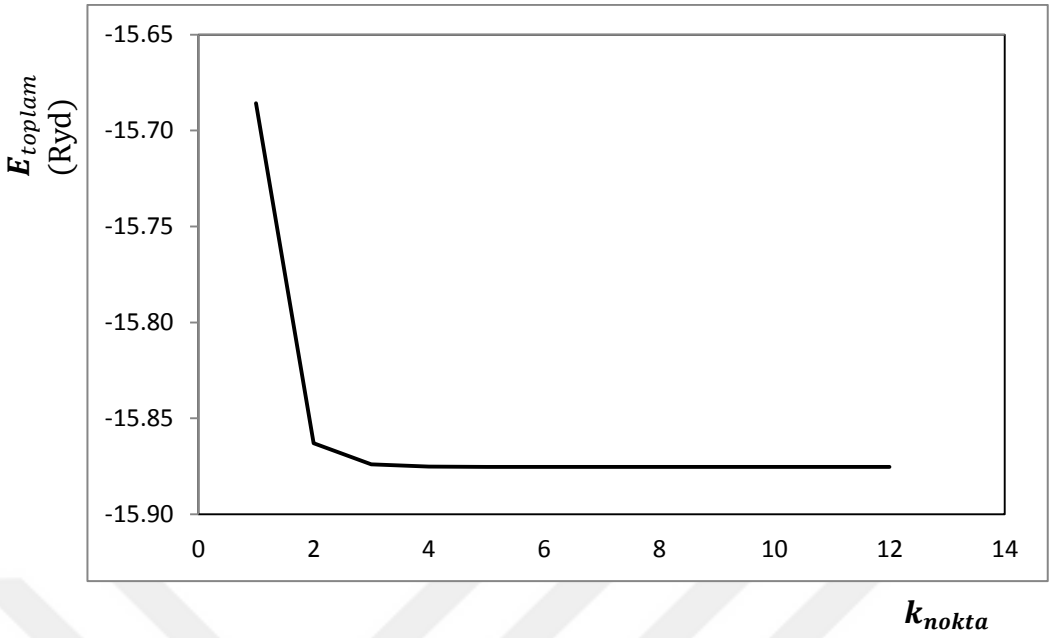


Şekil 3. 6.Toplam enerjinin kesme enerjisine göre değişimi

Şekil 3.6’ da görüldüğü gibi kesme enerjisi 35 Ryd'den sonraki değerler için elde edilen toplam enerji değerleri birbirine yakınsamıştır. Toplam enerji değerinin artan kesme enerjisiyle birlikte azalması varyasyon prensibinden kaynaklanmaktadır.

3.1.3. k_{nokta} Yakınsaması

k_{nokta} en uygun değerini belirlemek için yapılacak olan yakınsama çalışmasında örgü sabiti $a = 10.266\, a.u$ ve kesme enerjisi bir önceki hesaplamada sonucunda çıkan $E_{cut} = 35\, Ryd$ olarak alınmıştır. Farklı k_{nokta} değerlerinde ki toplam enerji değerleri hesaplanmış ve k_{nokta} değerlerindeki değişimi çizilmiş Şekil 3. 7’de gösterilmiştir.

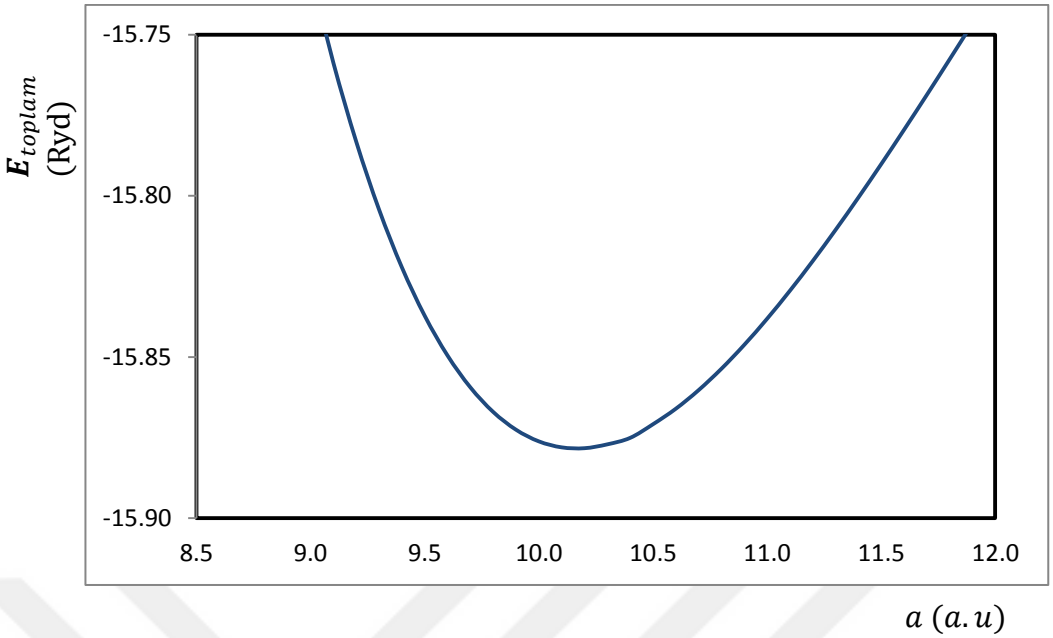


Şekil 3. 7. Toplam enerjnin k_{nokta} değerlerine göre değişimi

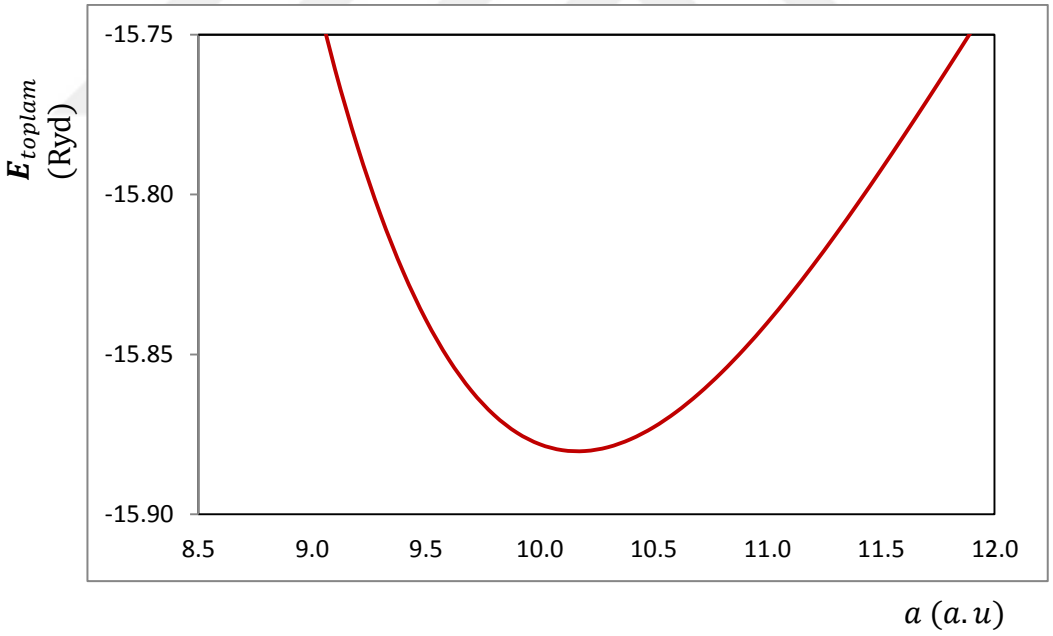
Toplam enerjinin k nokta sayısına göre değişimine bakıldığında k_{point} 2x2x2 değerinden sonra toplam enerjide ani bir düşüş gözlenmiştir. 3x3x3 değerinden sonra k_{nokta} değerleri için elde edilen toplam enerji değerleri birbirlerine çok yakın olduğu gözlenmiştir**.**

3.1.4. MT Potansiyeli için Farklı Kesme Değerlerinde Örgü Sabiti Yakınsaması

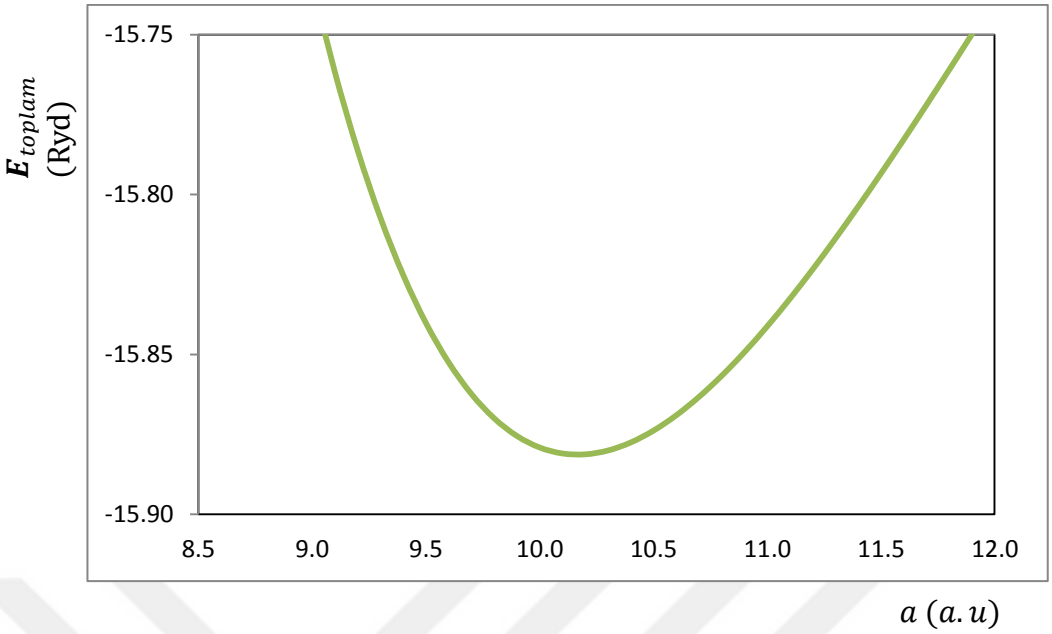
Bölüm 3.1.1'de farklı pseudopotansiyelleri için yapılan örgü sabiti yakınsama çalışması 30, 35 ve 40 Ryd üç farklı kesme enerjisi değeri ile tekrarlanmıştır. Örgü sabiti $0.1\ a.u.$ arttırılarak, en düşük toplam enerjisini veren örgü sabiti değeri bulunmuştur. Bu işlem için her bir örgü sabiti değeri için toplam enerji hesaplanmış, toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi verilmiştir.



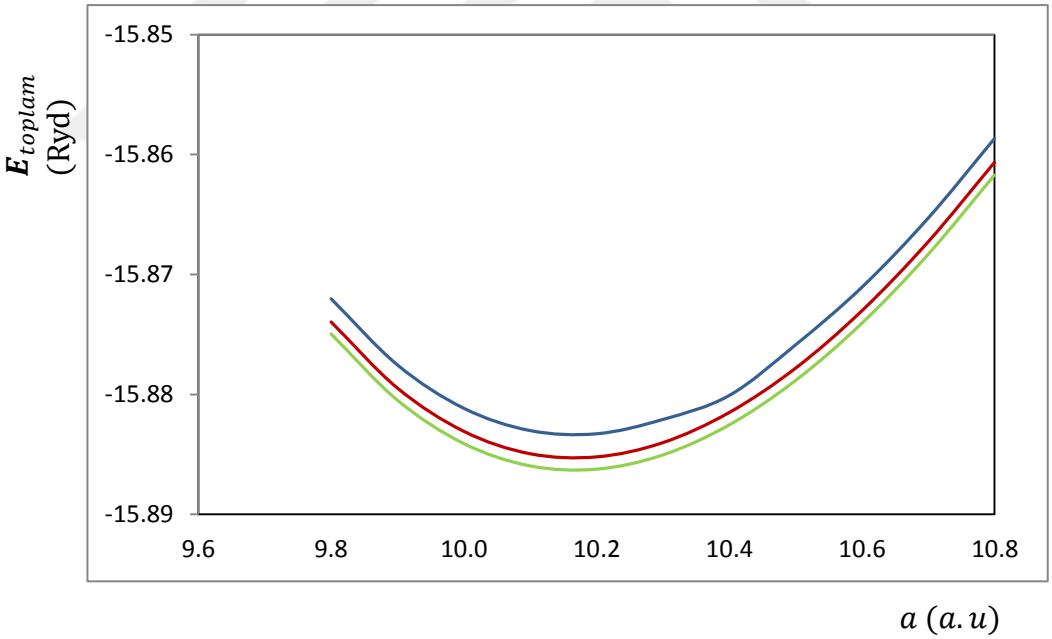
Şekil 3. 8. $E_{kesme} = 30\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi



Şekil 3. 9. $E_{kesme} = 35\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi



Şekil 3. 10. $E_{kesme} = 40\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi



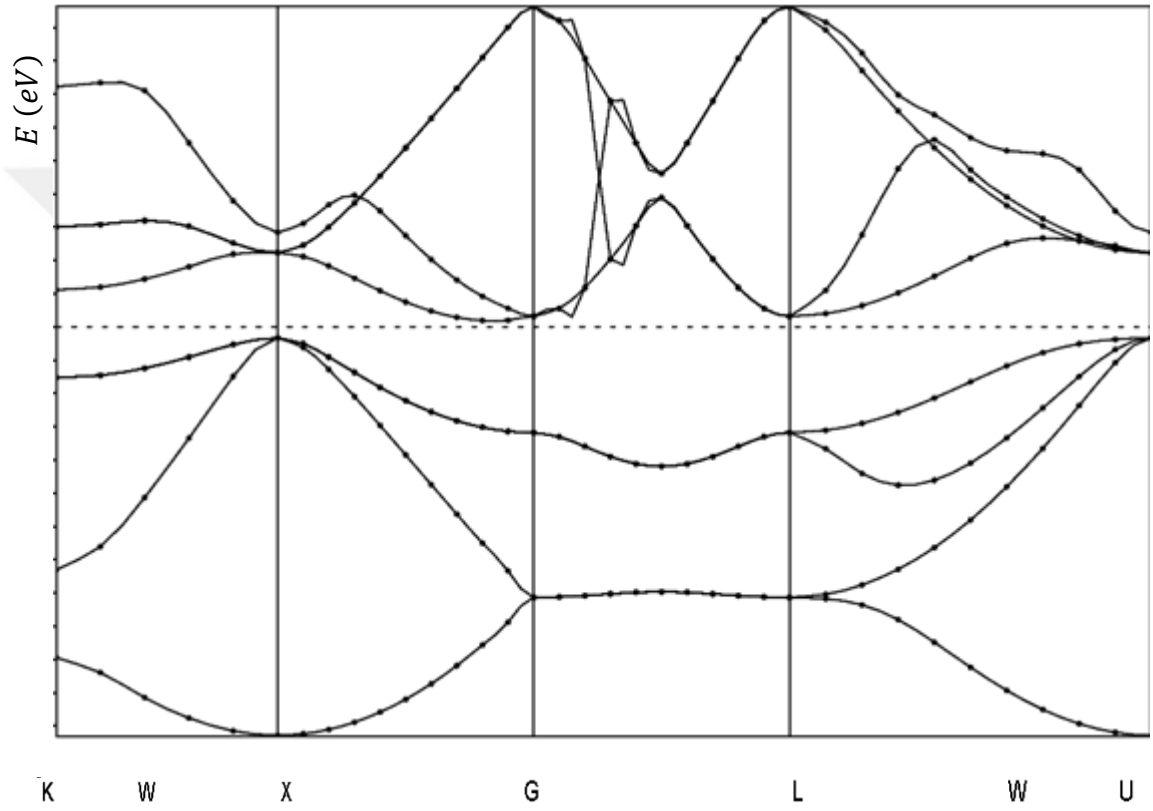
Şekil 3. 11. Örgü sabiti değişimine göre 3 farklı kesme enerjisinde toplam enerjinin değişimi

Şekil 3.11' de görüldüğü gibi kesme enerjisi 35 ve 40 Ryd için toplam enerjideki değişimler birbirine çok yakın olduğu gözlemlenmiştir. 3 farklı kesme enerjisine göre toplam enerjinin örgü sabitindeki değişimine bakılmış ve polinomik

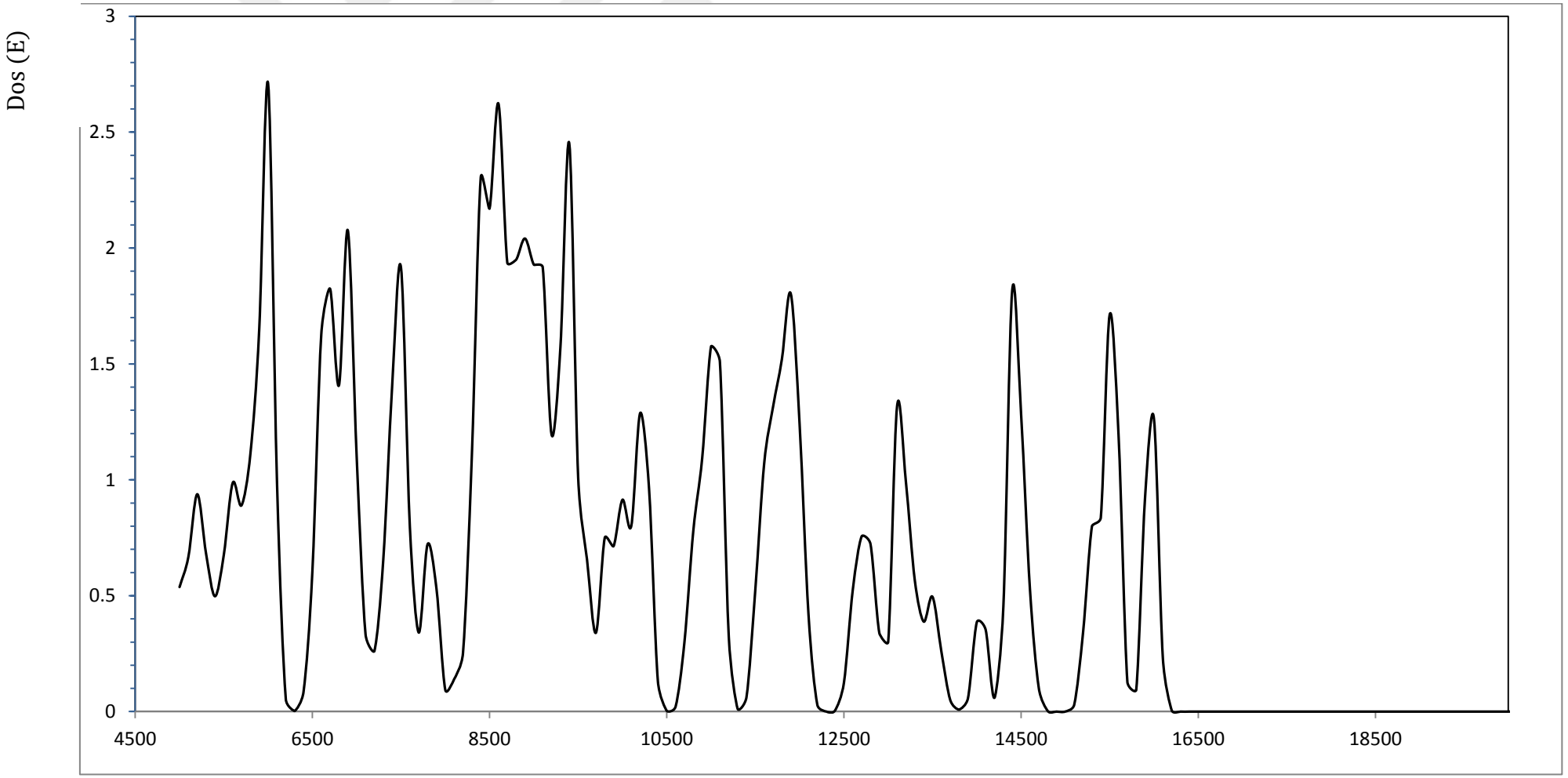
olarak değiştiği görülmüştür. Her üç değerin minimum enerjisine karşılık gelen örgü sabiti 10.2 a.u.ve deneysel sonuç değerine çok yakındır.

3.1.5. Bant Yapısı ve Durum Yoğunluğu

Silisyum kristali için bant yapısı ve durum yoğunluğu çizilmiş ve silisyumun hacim modulü 96.7 GPa ve bant aralığı 0.8571 eV olarak hesaplanmıştır.



Şekil 3. 12. Silisyum bant yapısı

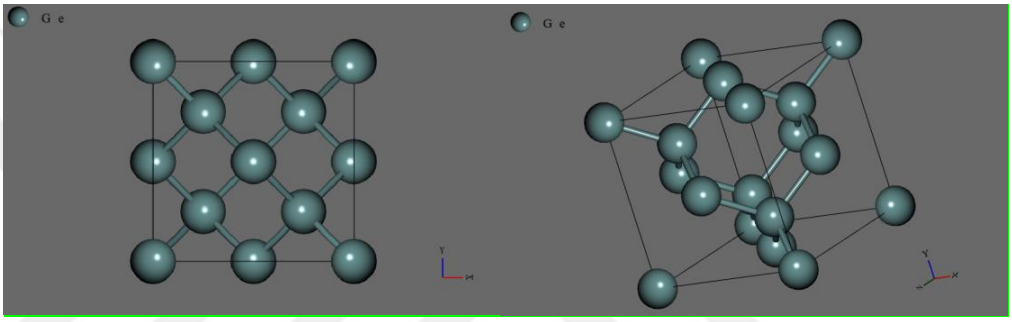


Şekil 3. 13. Silisyum durum yoğunluğu

3.2. Germayum Bulk Yapısı

Germanyum da silisyum gibi yarıiletken bir malzeme olup periyodik tablonun IV-A grubunda 4. periyodunda 32 elektrona sahip bir yarıiletkendir. Kristal yapısı yüzey merkezli kübiktir.

Germanyum transistör elemanı ve optoelektronik cihazlar için önemli bir yarıiletken malzemedir. Optik özellikleri bakımından kızılötesi detektörlerde, geniş açılı kamera merceklerinde ve ayrıca elektronik endüstrisine ek olarak belirli bakteri türlerine verdiği tepkiler nedeniyle kimyasal tedavi yöntemlerinde kullanılmaktadır.



Şekil 3. 14. Germanyum kristal yapısı

Silisyum için yapılan çalışma germanyum için tekrarlanmış ve elde edilen sonuçlar aşağıdaki Çizelge 3.2' de gösterilmiştir.

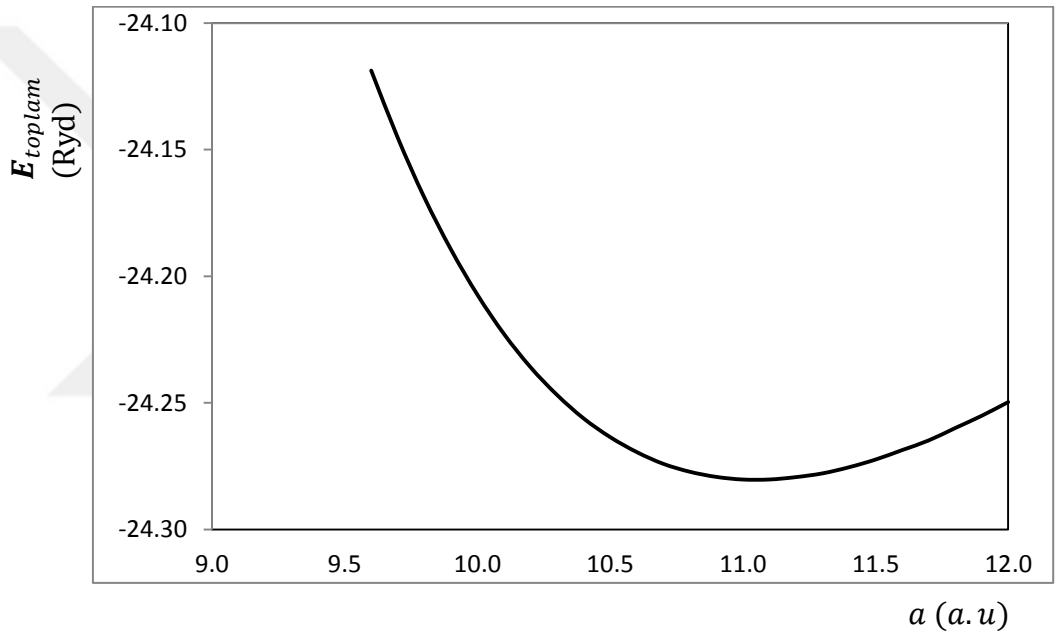
Çizelge 3. 2. Farklı pseudopotansiyeller kullanılarak hesaplanan toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülleri

Pseudopotansiyel	Toplam enerji (Ryd)	Bant aralığı (eV)	Hacim modülü (GPa)
PBE	-24.27921966	0.3642	59.0
MT	-16.00428604	0.5973	75.9
PZ	-16.01433759	0.5943	68.9

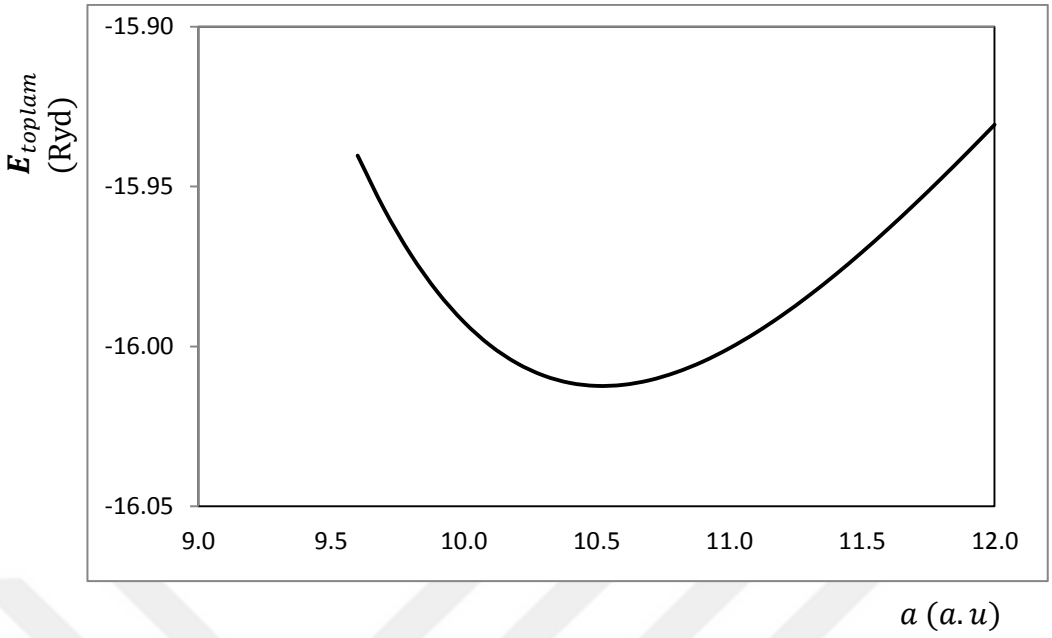
Germanyum için deneysel bant aralığı 0.66 eV değerine en yakın MT pseudopotansiyeli ile en uzak değerin ise PBE ile hesaplanan değer olduğu gözlemlenmiştir. Aynı şekilde hacim modülü hesaplamasında MT' nin bulduğu 75.9 GPa deneysel değer olan 76.8 GPa değerine çok yakın olduğu görülmüştür.

3.2.1. Örgü Sabiti Yakınsaması

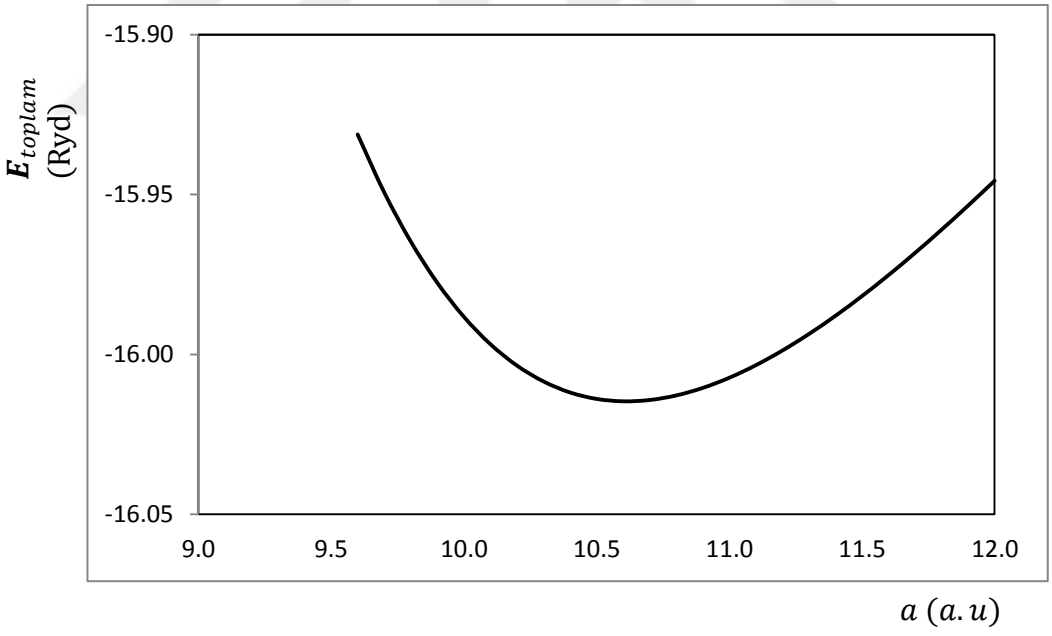
PBE, MT VE PZ pseudopotansiyelleri için örgü sabiti yakınsaması yapılmış olup en düşük enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti değeri bulunmuştur.



Şekil 3. 15. PBE pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması



Şekil 3. 16. MT pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması

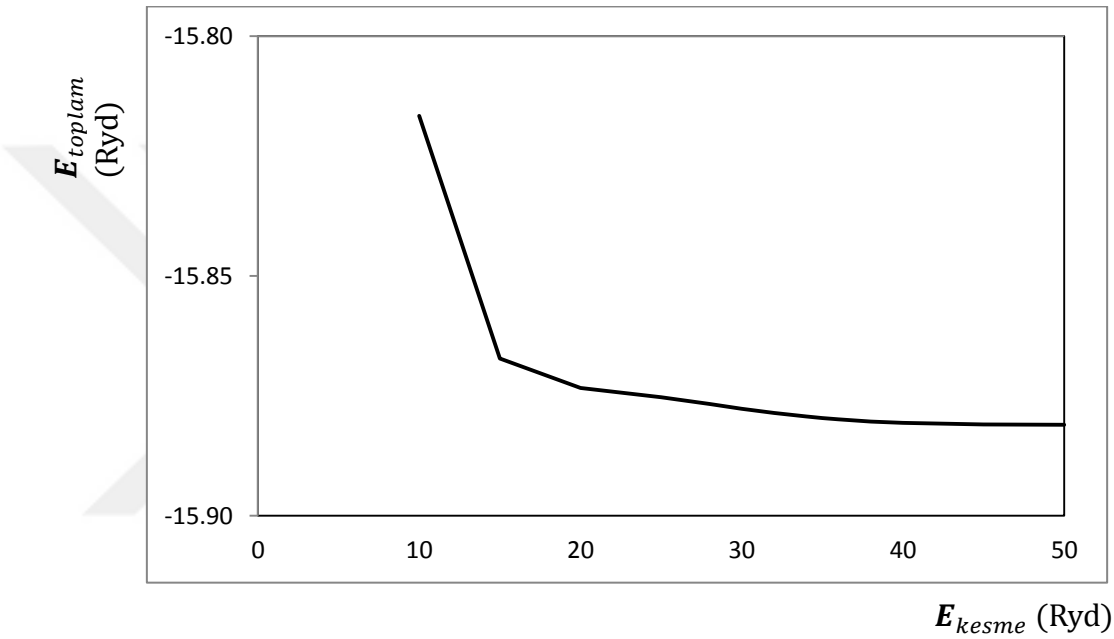


Şekil 3. 17. PZ pseudopotansiyeli için örgü sabiti yakınsaması

Literatür örgü sabiti değerine 10.692 $a.u.$ en yakın sonucu 10.6 a.u. değeri ile PZ pseudopotansiyeli ve 10.5 a.u. ile MT pseudopotansiyeli ile ulaşılırken 11.0 a.u. değeri ile PBE pseudopotansiyeli en uzak değeri vermiştir.

3.2.2. Kesme Enerjisi Yakınsaması

Bölüm 3.2.1'de elde edilen hem enerji aralığı hem de hacim modülü değerlerine göre deneysel sonuçlara en yakın MT pseudopotansiyeli vermesinden toplam enerjinin kesme enerjisine göre değişimi bu pseudopotansiyel ile hesaplanmıştır. Kesme enerjisi 10 Ryd değerinden başlayarak belli artış oranlarında 50 Ryd değerine göre artırılarak toplam enerjideki değişim gözlemlenmiştir.

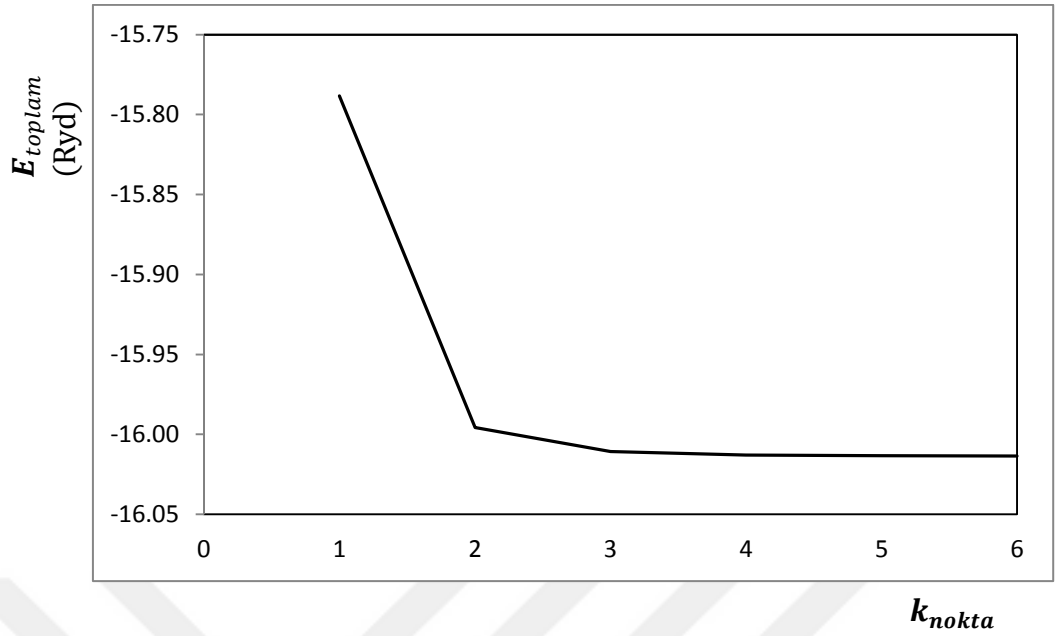


Şekil 3. 18. Toplam enerjinin kesme enerjisine göre değişimi

Şekil 3.18'de görüldüğü gibi 35 Ryd kesme enerjisinden sonraki değerler birbirlerine yakınsamıştır ve bundan sonra kullanılacak kesme enerjisi değeri 35 Ryd ile sabitlenecektir.

3.2.3. k_{nokta} Yakınsaması

Deneysel örgü sabiti $a = 10.692\ a.u.$ve kesme enerjisi için yakınsama değeri 35 Ryd alınarak k_{nokta} setleri için toplam enerjiler hesaplanmıştır. Toplam enerjinin k_{nokta}'ya göre değişimi Şekil 3.19' de gösterilmiştir.

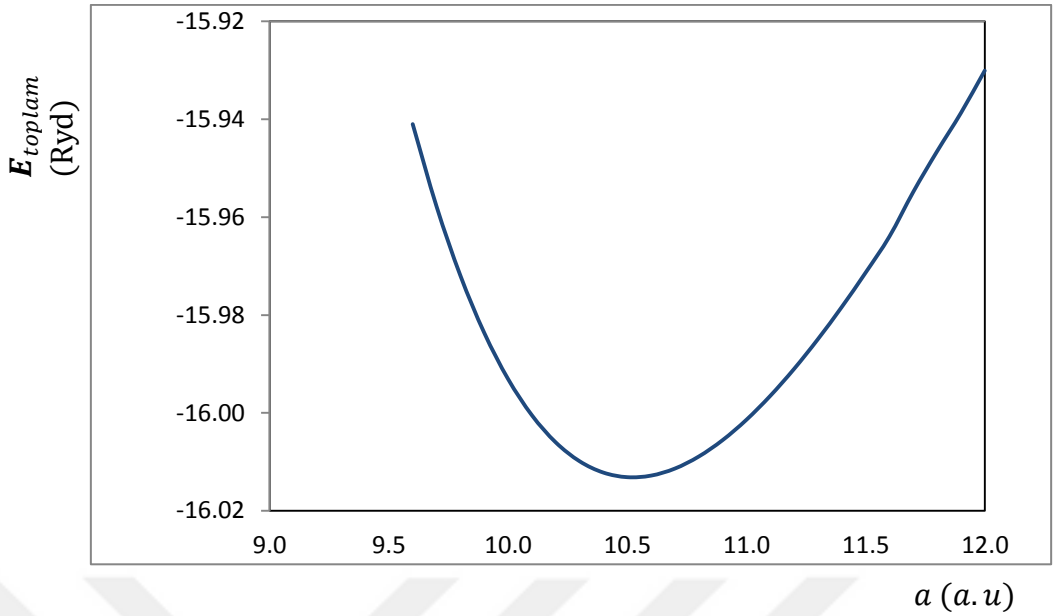


Şekil 3. 19. Toplam enerjinin k_{nokta} değerlerine göre değişimi

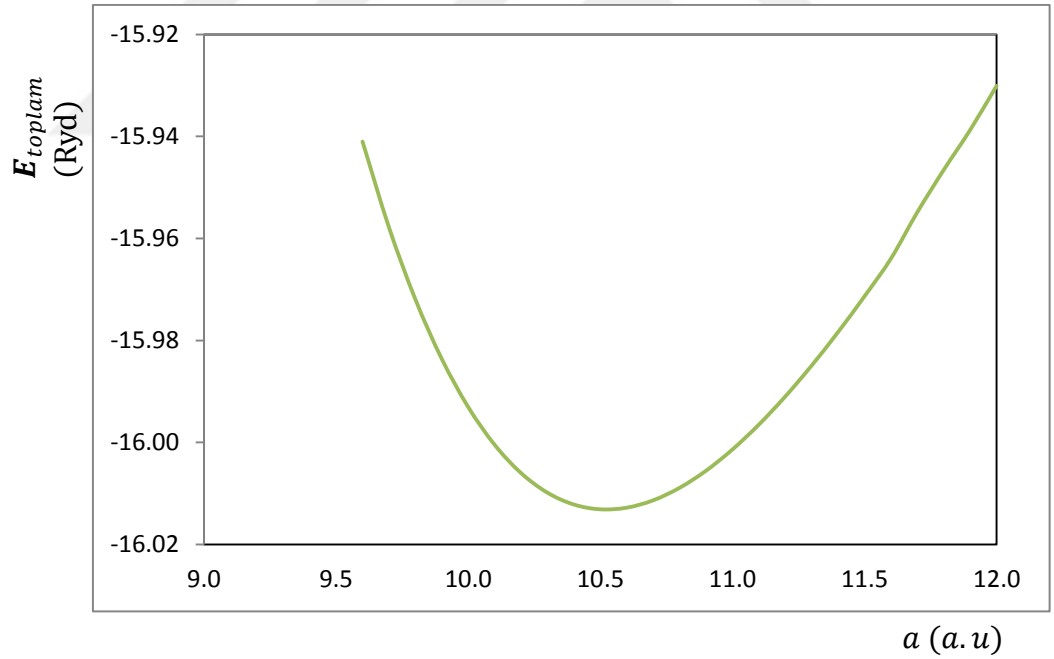
(3x3x3) k_{nokta} değerinden sonra toplam enerji değerindeki değişimler çok az olduğundan (3x3x3) k_{nokta} değerinden sonra yakınsamıştır.

3.2.4. MT Potansiyeli için Farklı Kesme Değerlerinde Örgü Sabiti Yakınsaması

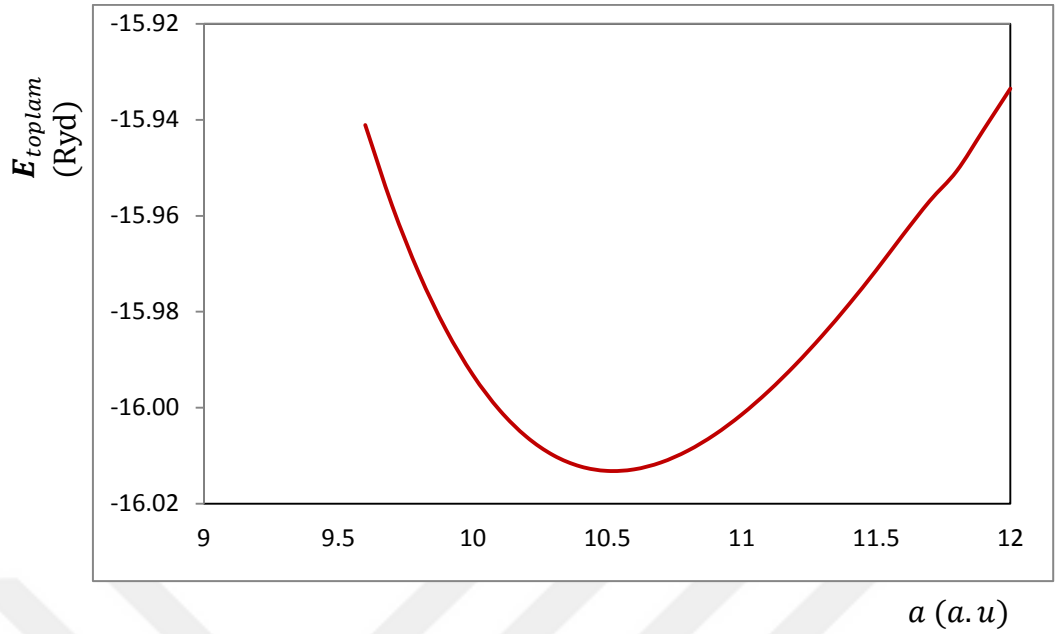
Farklı kesme enerjileri altında k_{nokta}= 3x3x3 değeri ile örgü sabiti $0.1\ a.u.$ aralıklarıyla artırılarak sistemin taban durumundaki minimum toplam enerjisini veren örgü sabiti değeri bulunmuştur. Bu işlem için her bir örgü sabiti için toplam enerjisi hesaplanmış, toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi verilmiştir.



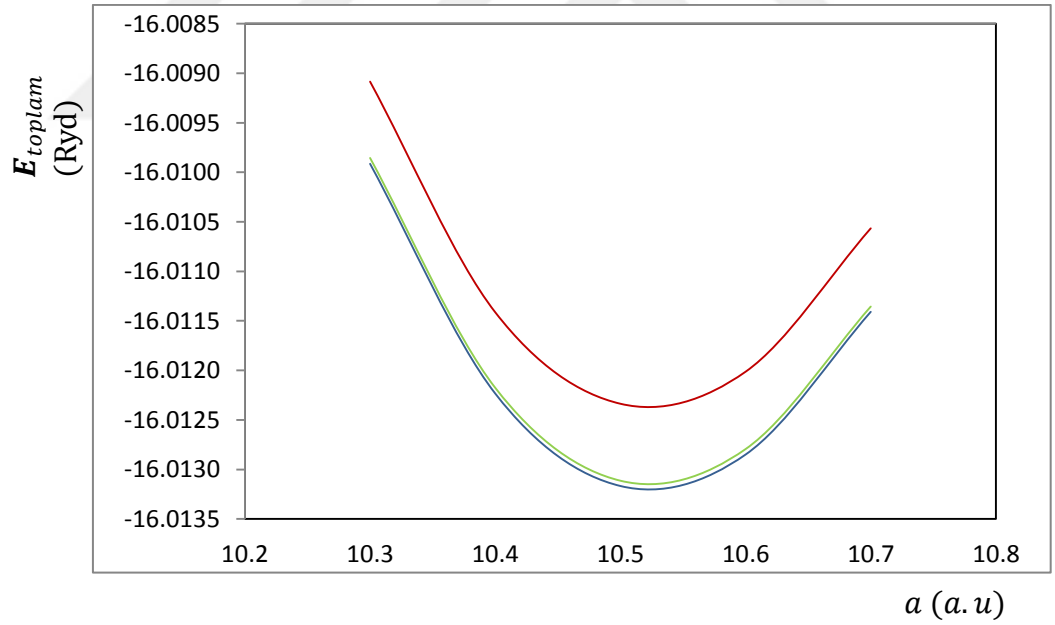
Şekil 3. 20. $E_{kesme} = 35\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişim



Şekil 3. 21. $E_{kesme} = 40\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişim



Şekil 3. 22. $E_{kesme} = 45\ Ryd$ için toplam enerjinin örgü sabitine göre değişim

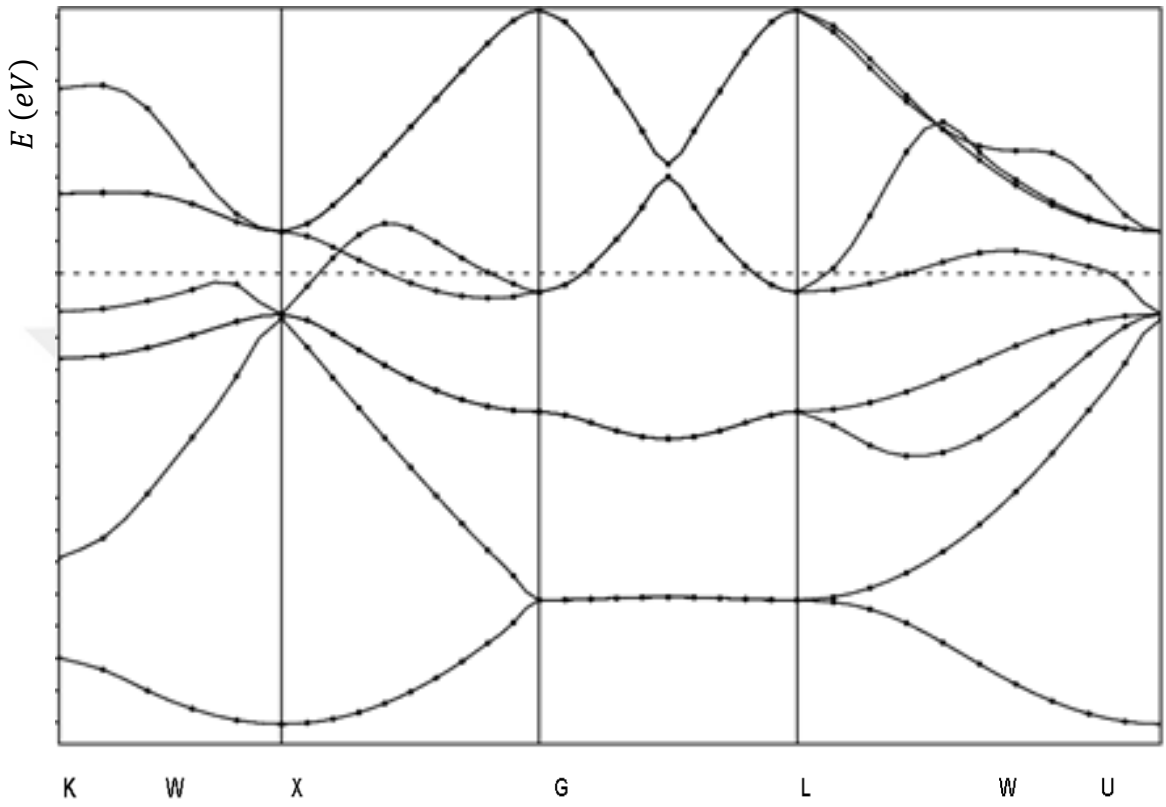


Şekil 3. 23. Örgü sabiti değişimine göre 3 farklı kesme enerjisinde toplam enerjinin değişimi

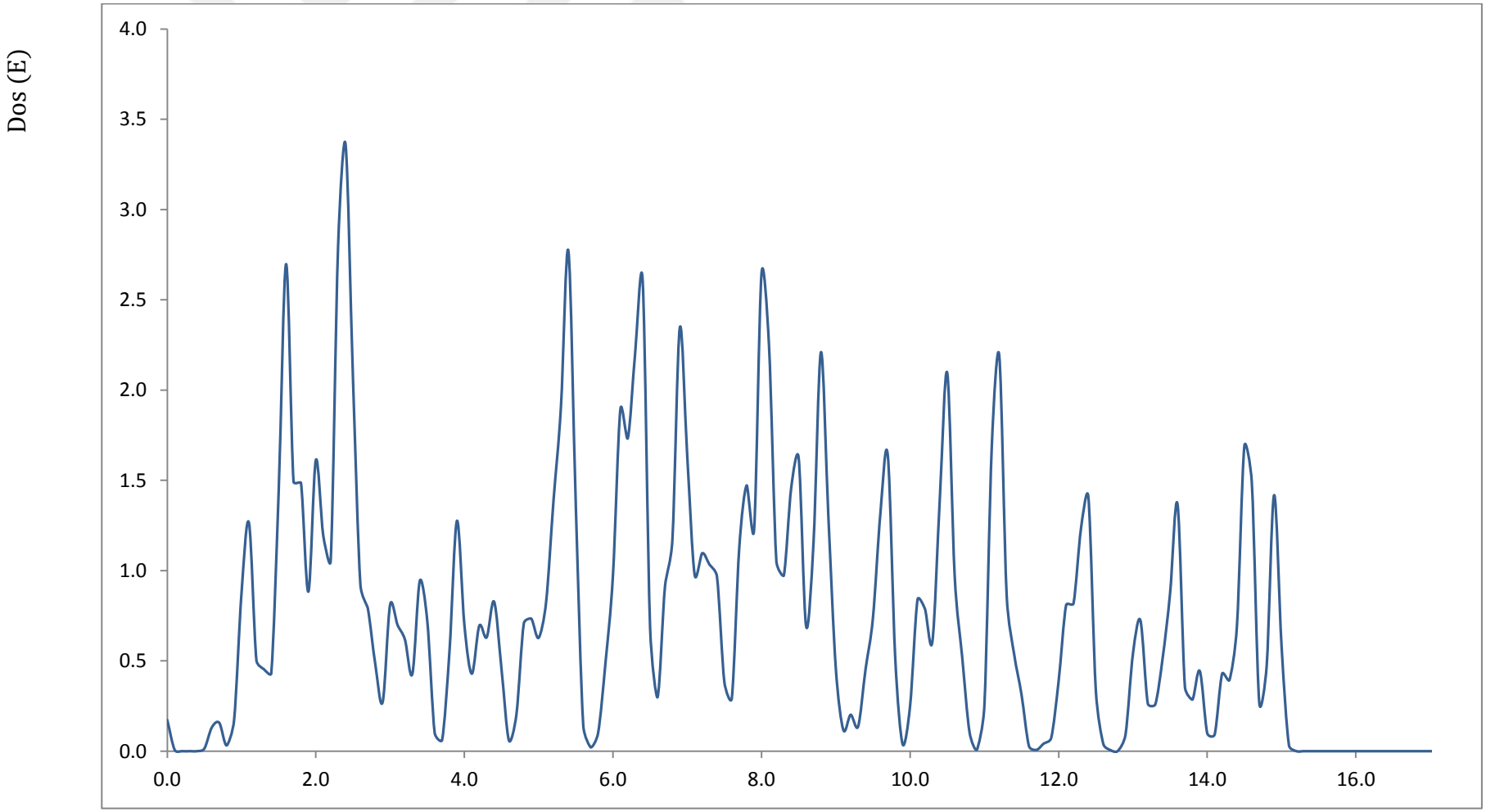
Şekil 3.23'de 3 farklı kesme enerjisi karşılaştırıldığında $E_{kesme} = 35\ Ryd$ değeri bize en düşük enerji değerlerini vermektedir ve bulk yapının taban durumuna en yakın değerdir.

3.2.5. Band Yapısı ve Durum Yoğunluğu

Germanyum kristali için bant yapısı çizilmiş ve MT pseudopotansiyeli için bant aralığı 0.5973 eV iken hacim modülü 75.9 GPa olarak hesaplanmıştır.



Şekil 3. 24. Germanyum bant yapısı



Şekil 3. 25. Germanyum durum yoğunluğu

3.3. $Si_{1-x}Ge_x$ Alaşımı

Termoelektrik ve optoelektronik cihazların yapıtaşı olan silisyum ve germanyumun birleşmesinden oluşan Si-Ge alaşımı mevcut teknolojilere sağladığı avantajlar sayesinde bant aralığı, efektif kütle gibi parametrelerin hesaplanması malzeme mühendisliği için önemli bir gerekliliktir (Schaffler, 2001).

Silisyum ve germanyum birbiriyle karışmasıyla oluşan alaşım kübik kristal yapısındadır. Oda sıcaklığında örgü sabiti, Vegard Kanunu'na göre alaşımdaki germanyumun oranına göre hesaplanır (K. Brunner, 1998).

Vegard Kanunu'na göre örgü sabiti;

$$a_{Si_xGe_{1-x}}(x) = (1-x)a_{Si} + xa_{Ge} \tag{3.1}$$

veya

$$a_{Si_xGe_{1-x}}(x) = 5.6579 - 0.2269x \tag{3.2}$$

şeklindedir.

a_{Si} ve a_{Ge}; silisyum ve germanyum için örgü sabiti, x katsayısı ise ikili alaşımda ki germanyumun oranını vermektedir. Ayrıca Vegard Kanunu'na göre bant aralığı ve hacim modülü de germanyumun oranına bağlı olarak değişmektedir.
Bant aralığı;

$x < 0.85$ için $E_{bant\ aralığı}(x) = 1.12 - 0.41x - 0.008x^2$ (3.3)

$x > 0.85$ için $E_{bant\ aralığı}(x) = 1.86 - 1.12x$ (3.4)

Hacim modülü;

$$B_{Si_{1-x}Ge_x}(x) = 97.9 - 22.8\,x \tag{3.5}$$

formüllerinden hesaplanabilir.

Örgü sabiti, bant aralığı ve hacim modülü germanyumun oranına bağlı birer parametredir. Örneğin bu tez çalışmasında hesaplaması yapılmış olan parametreler için kullanılan oran *x=0.5*'dir. Buna göre; *x=0.5* değeri Vegard Kanunu'na göre hesaplanan değerler Çizelge 3.3'de gösterilmiştir.

Çizelge 3. 3. *x=0.5* değeri için $Si_{1-x}Ge_x$ alaşımının hesaplanan örgü sabiti, bant aralığı ve hacim modülü değerleri

	Örgü sabiti (a.u.) $a_{Si_{0.5}Ge_{0.5}}$	Bant aralığı (eV) $E_{bant\ aralığı}$	Hacim modülü (GPa) B
x=0.5	10.477	0.917	86.5

8 atomlu kübik yapılı $Si_{1-x}Ge_x$ alaşımı için farklı iki pseudopotansiyel ile örgü sabiti değeri, taban enerji değeri, bant aralığı ve hacim modülü hesaplanmış ve Çizelge 3.4'de elde edilen sonuçlar gösterilmiştir.

Çizelge 3. 4. Farklı pseudopotansiyeller kullanılarak hesaplanan toplam enerji, bant aralığı ve hacim modülleri

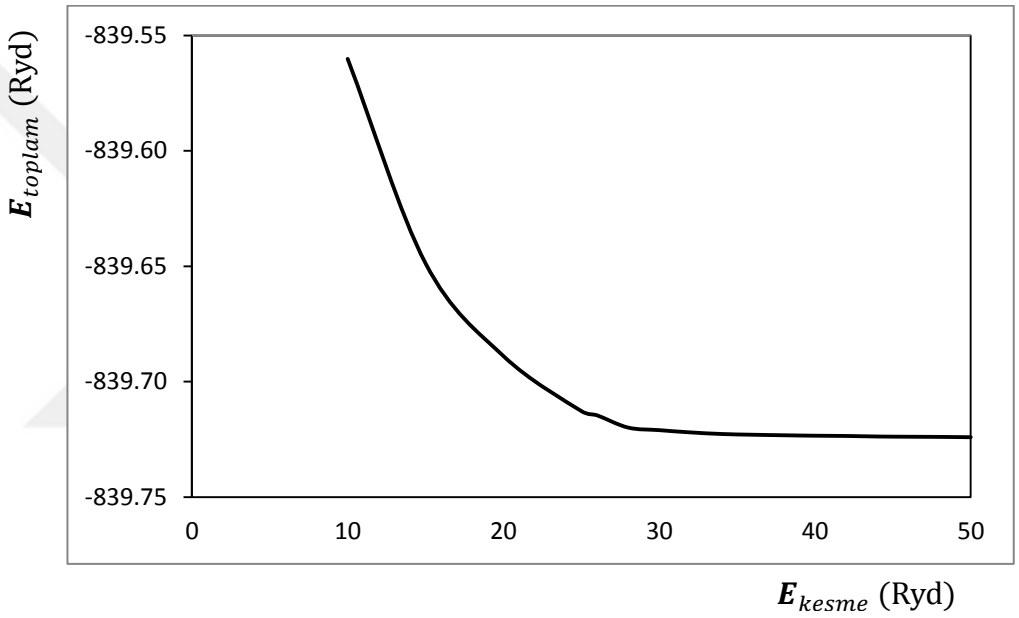
Pseudopotansiyel	Taban enerji (Ryd)	Bant aralığı (eV)	Hacim modülü (GPa)
Martins- Troullier	-63.75104597	0.8871	63.0
Perdew-Burke- Enzerhof	-843.35443423	0.9227	99.4

Çizelge 3.4' de gösterilen bant aralığı ve hacim modülü değerleri ile Çizelge 3.3.'de teorik olarak hesaplanan değerler karşılaştırıldığında PBE pseudopotansiyeli ile yapılan hesaplamadan elde edilen sonuçlar teorik sonuçlara daha yakın çıkmıştır. PBE pseudopotansiyei için elde edilen bant aralığı değeri 0.9227 eV iken MT pseudopotansiyeli için elde edilen bant aralığı değeri 0.8871 eV'dur. Hacim modüllerine bakıldığında PBE ve MT pseudopotansiyeli için sırasıyla hesaplanan

değerler 99.4 GPa ve 63.0 GPa'dır. PBE pseudopotansiyeli için kesme enerjisi ve örgü sabiti yakınsaması yapılmış, bant yapısı ve durum yoğunluğu incelenmiştir.

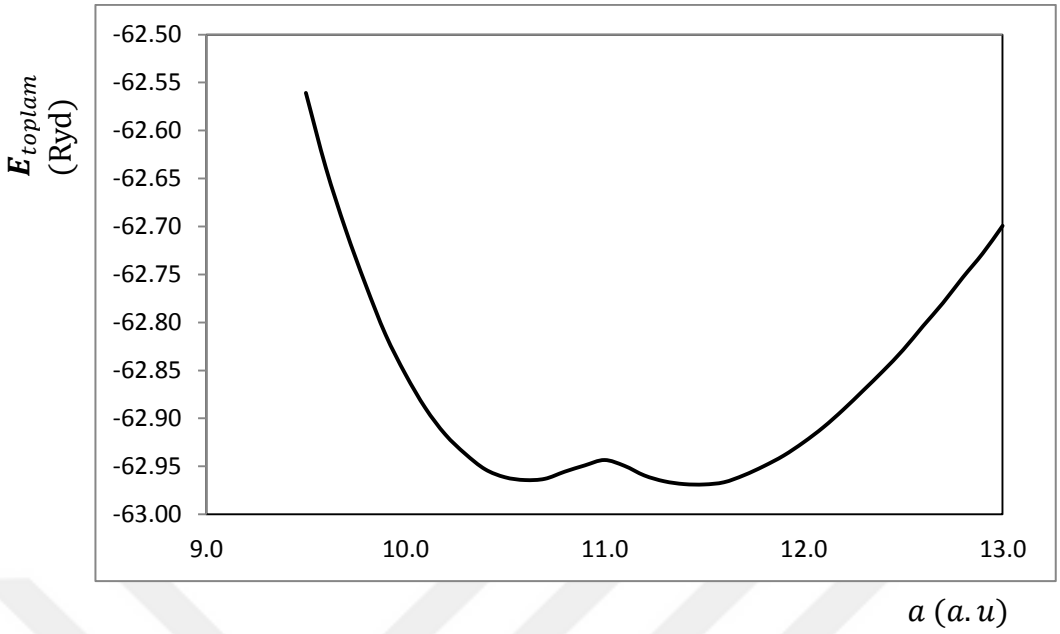
3.3.1. Kesme Enerjisi ve Örgü Sabiti Yakınsaması

Kesme enerjisi 10 Ryd değerinden başlayarak 5 Ryd oranında arttırılmış ve toplam enerjideki değişim gözlemlenmiştir. Şekil 3.26'da görüldüğü gibi 30 Ryd değerinden sonra toplam enerjideki değişimler azalmış ve değerler birbirlerine yakınsamıştır.



Şekil 3. 26. Toplam enerjinin kesme enerjisine göre değişimi

30 Ryd kesme enerjisinden sonra toplam enerjideki değerler arasındaki fark azalmış ve birbirine yakınsamıştır.

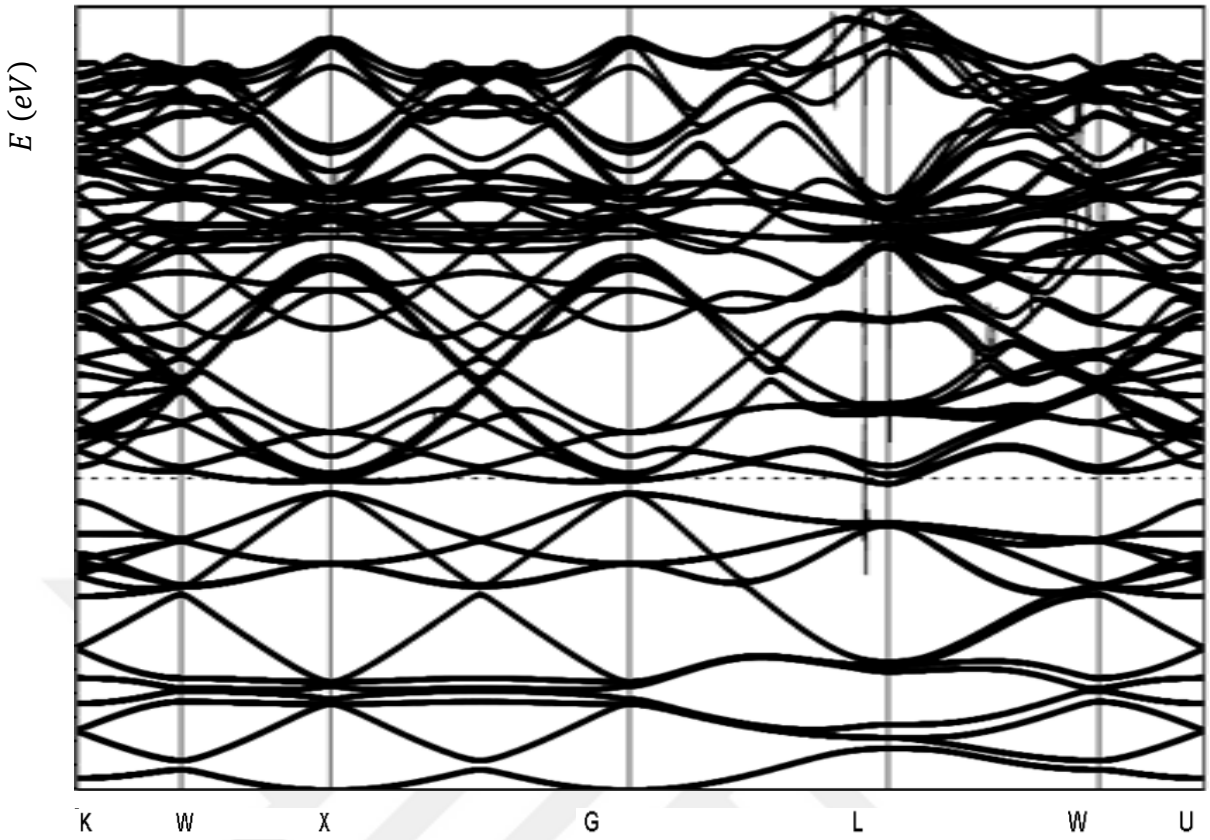


Şekil 3. 27. Toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimi

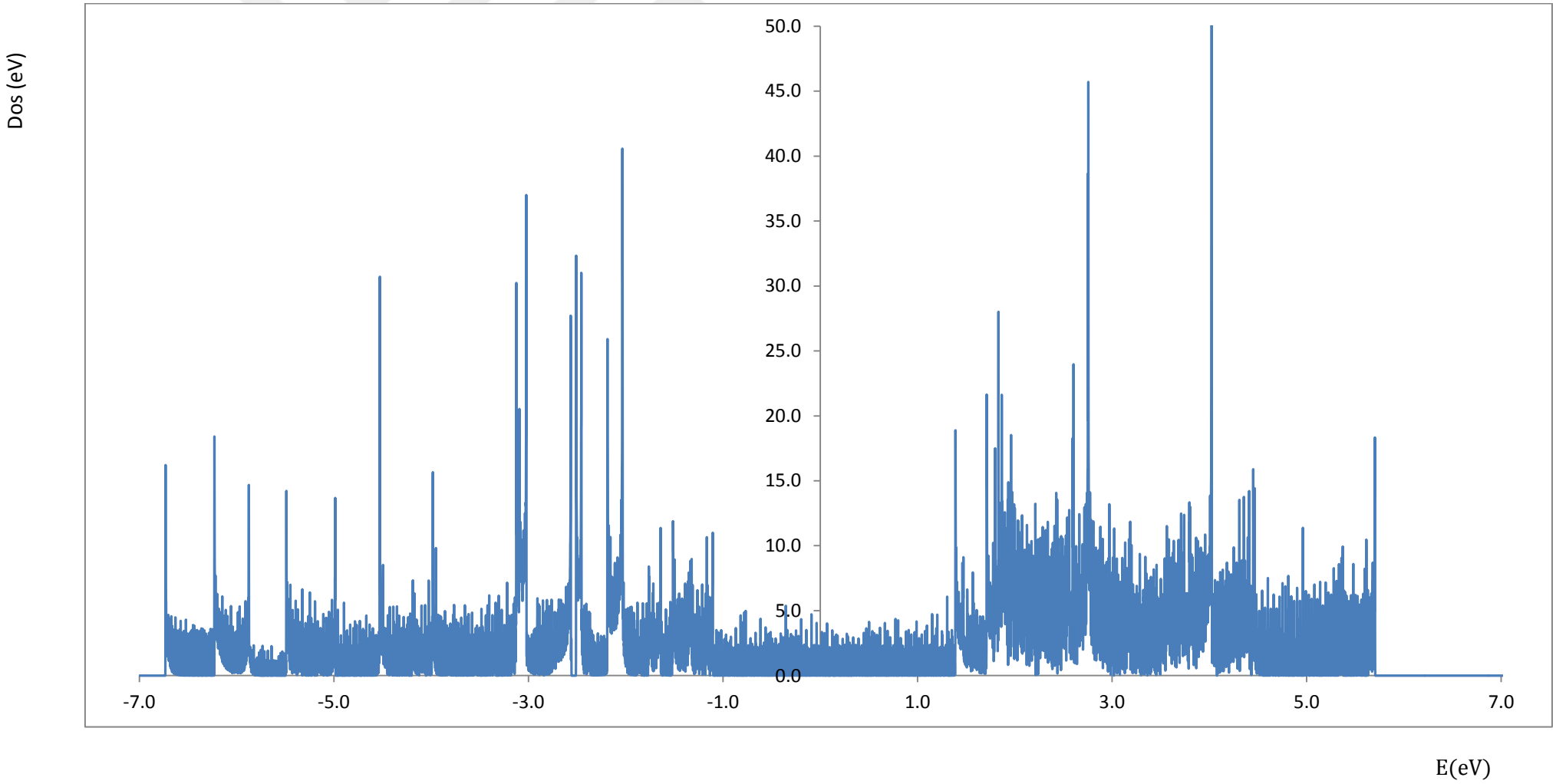
Şekil 3.27' deki toplam enerjinin örgü sabitine göre değişimine 10.5 a.u. ve 11.5 a.u.'de toplam enerji en düşük değerlerine sahipken 11.0 a.u. değerinde dalgalanma gözükmektedir.

3.3.2. Band Yapısı ve Durum Yoğunluğu

Bir alaşımın elektronik özellikleri bant yapısına bağlıdır. Bant yapısı ve bant aralığı hakkında bilgi sahibi olmak kullanım alanına ve amacına uygun olarak istenilen oranlarda alaşım oluşturmak malzeme biliminde önemlidir. Çizelge 3.4'de görüldüğü gibi PBE pseudopotansiyeli için $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ ikili alaşımının bant aralığı 0.9227 eV ve hacim modülü 99.4 GPa olarak hesaplanmıştır. Şekil 3.27' de bant yapısı ve Şekil 3.28' de durum yoğunluğu görülmektedir.



Şekil 3. 28. $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ ikili alaşımının bant yapısı

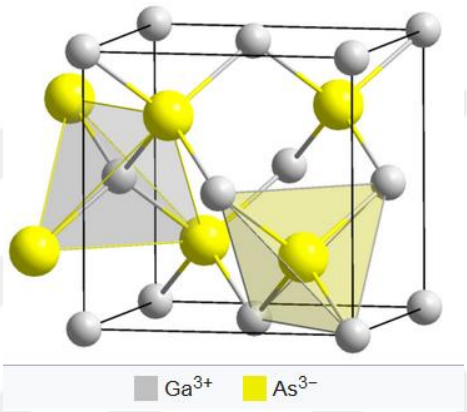


Şekil 3. 29. $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ ikili alaşımın durum yoğunluğu

3.4. İkili Yarıiletken Bileşikleri

3.4.1. GaAs Yarıiletken Bileşiği

GaAs, atom numarası 31 olan periyodik tabloda III-A grubunda yer alan galyum ve atom numarası 33 olan V-A grubunda yer alan arsenik ile birleşmesinden oluşan ikili yarıiletken bileşiktir. Şekil 3.30'da gösterilen zincblende kristal yapısına sahiptir. Galyum elementinin son yörüngesinde 3 valans elektronu vardır ve bu elektronlarını arsenik elementine vererek bileşik oluşturur.



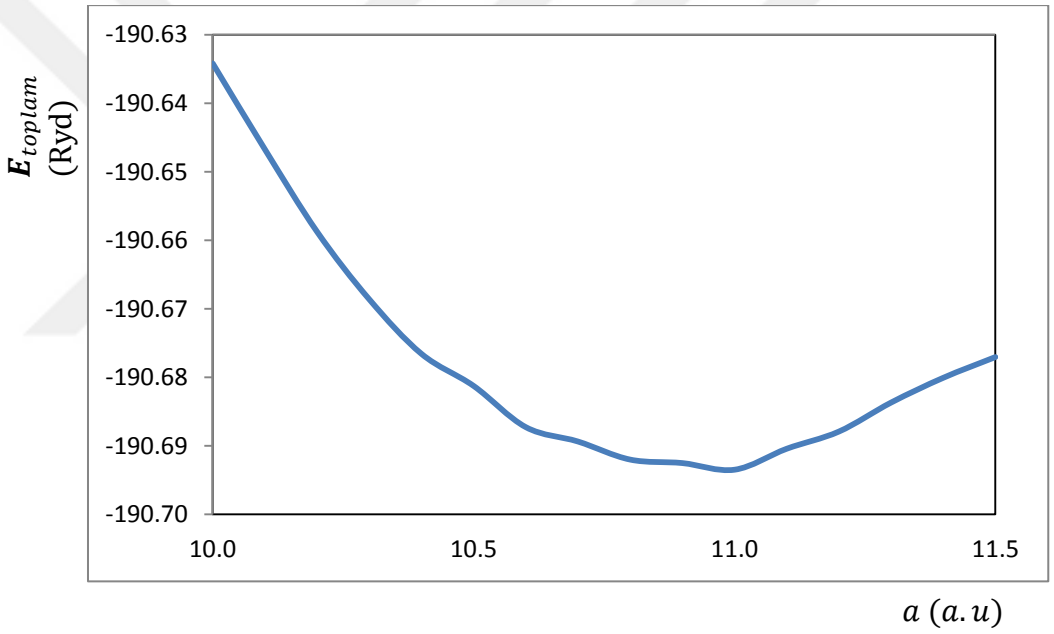
Şekil 3. 30. GaAs kristal yapısı

Yüksek taşıyıcı mobilitisine sahip GaAs optoelektronik cihazlar arasında kullanımı silisyumdan sonra en çok kullanılan III-V grubu yarıiletken bileşiğidir. Yüksek verimliliğe sahip bir yarıiletken malzemedir. Bu özelliğinden dolayı güneş pillerinde kullanım için en uygun yarıiletken bileşiktir. Özellikle radyasyona karşı dirençli olmasından dolayı uzay araçlarında silisyum güneş pilleri yerine alan bir malzemedir. Ayrıca monolitik mikrodalga entegre devre, kızılötesi ışık yayan diyot, lazer diyot, güneş pili gibi mikrodalga frekansına sahip cihazların yapımında kullanılmaktadır. GaAs cihazları yüksek frekanslarda çalışma özelliğinden dolayı cep telefonlarında, uydu iletişiminde ve radar sistemlerinde kullanılmaktadır.

GaAs için örgü sabiti yakınsaması yapılmış Şekil 3.31' de gösterilmiştir. Hacim modülü ve bant aralığı hesaplanmıştır. Çizelge 3.5'de literatür değerleri ile karşılaştırılmıştır.

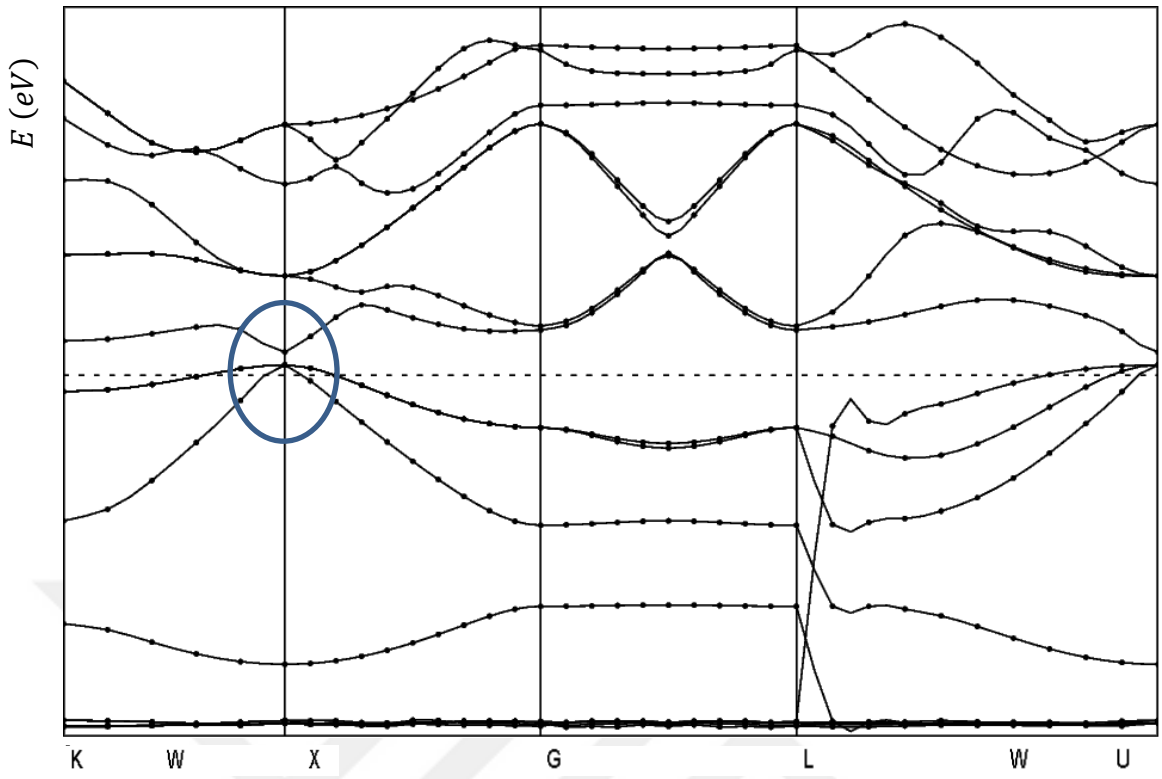
Çizelge 3. 5. GaAs için hesaplanan bant aralığı ve hacim modülünün literatür değeri ile karşılaştırılması

	Hesaplanan değer	Literatür değeri
Bant aralığı (eV)	1.186	1.424
Hacim modülü (GPa)	63.5	75.3
Örgü sabiti (a.u.)	10.90	10.68



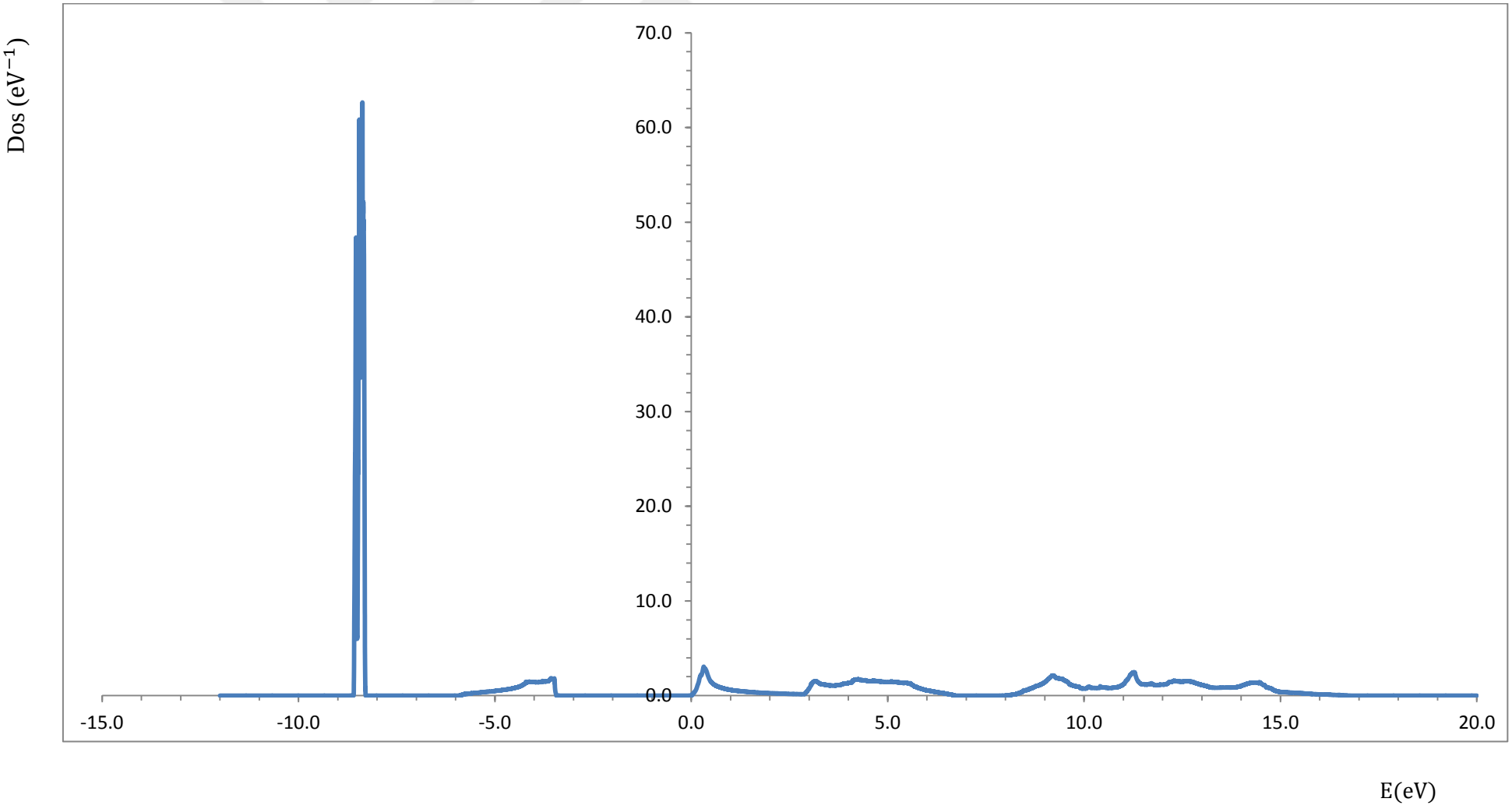
Şekil 3. 31. GaAs için örgü sabiti yakınsaması

Yapılan örgü sabiti çalışması sonucunda ise hacim modülü 75.3 GPa literatür değerine karşılık 63.5 GPa olarak hesaplanırken, örgü sabiti değeri 10.9 a.u. olarak hesaplanmıştır. Valans ve iletkenlik bantları arasındaki bant aralığı Şekil 3.32'de gösterilmiş ve literatür değeri 1.424 eV olan bant aralığı 1.186 eV olarak hesaplanmıştır.

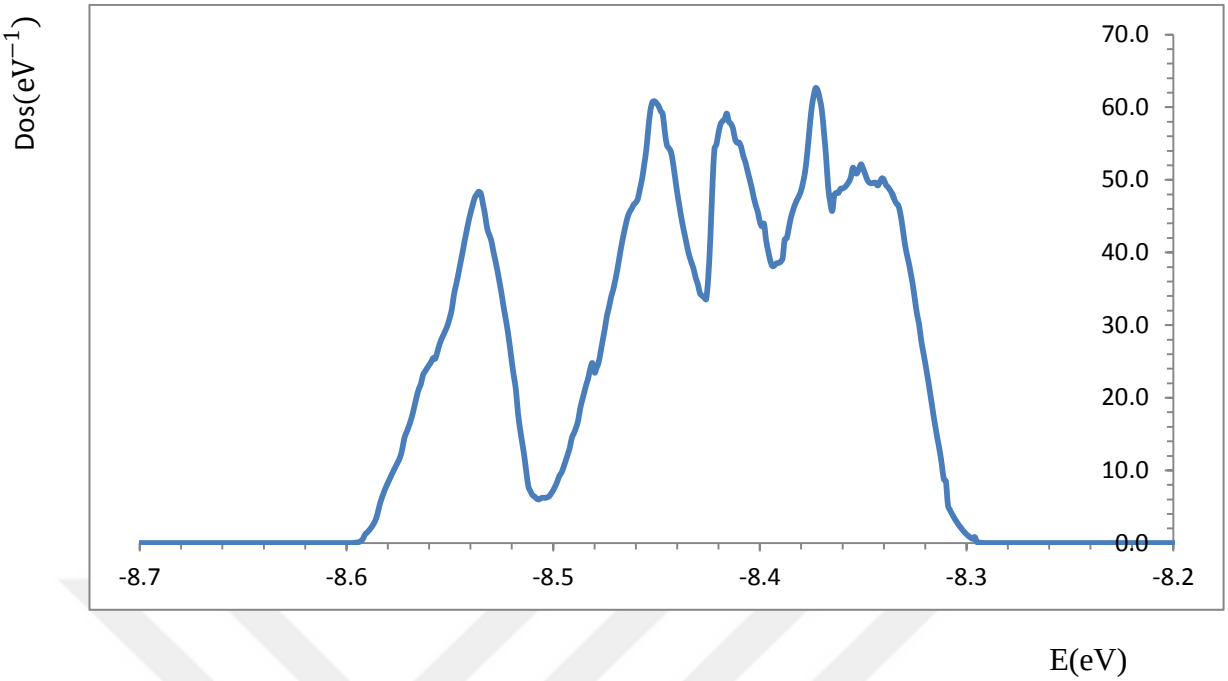


Şekil 3. 32. GaAs bant yapısı

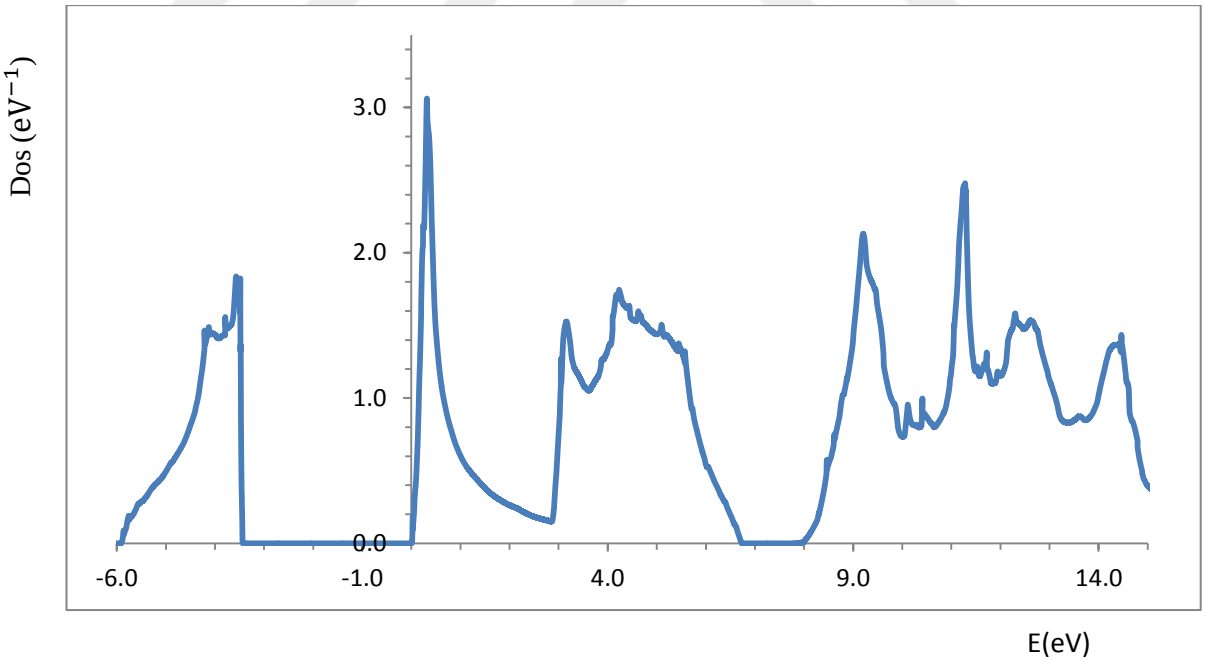
Bant yapısından elde edilen sonuçlar kullanılarak Şekil 3.33'de gösterilen GaAs yarıiletken bileşiğinin elektron durum yoğunluğu çizilmiştir. Şekil 3.33.a ve 3.33.b' de elektron durum yoğunluğunda gözlenen değişimlerin olduğu belli bölgelerin daha net görülmesi açısından ayrı ayrı çizilmiştir.



Şekil 3. 33. GaAs durum yoğunluğu



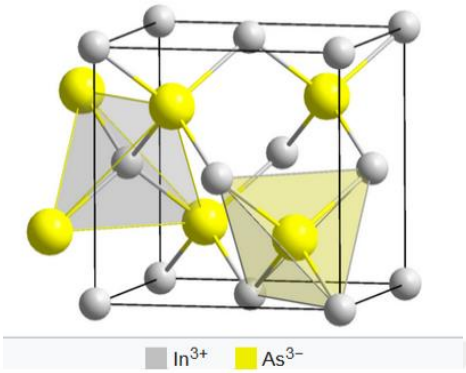
Şekil 3. 33.a. GaAs durum yoğunluğu



Şekil 3. 33.b GaAs durum yoğunluğu

3.4.2. InAs Yarıiletken Bileşiği

Atom numarası 49 olan periyodik tabloda III A grubunda zayıf metaller arasında yer alan indiyum başka elementlerle birleşerek bileşik oluşturabilir.



Şekil 3. 34. InAs kristal yapısı

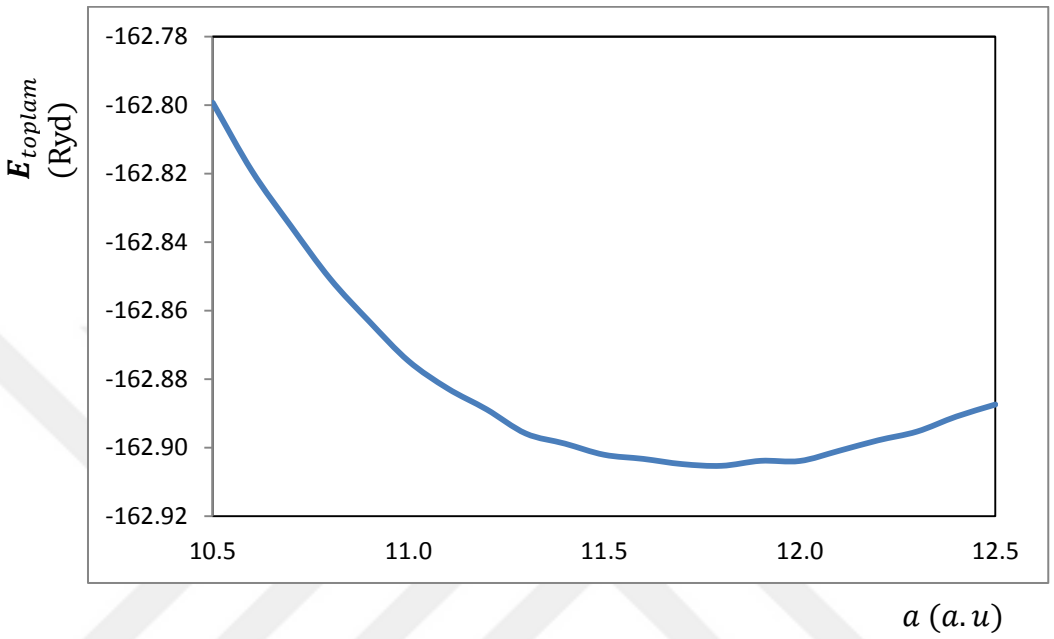
III-V grubu yarıiletken ailesinden olan diğer bir bileşik olan InAs, yüksek elektron mobilitesi ve hızından dolayı yüksek hızlı-düşük enerjili elektronik cihazlar için yakın gelecekte kullanım alanı genişleyecek bir malzemedir. Dar enerji aralığına sahip InAs, Hall-Effect cihazlarda, diyot lazerlerde ve 1-3.8 μm dalgaboyu aralığına sahip kızılötesi dedektörlerin yapımında kullanılmaktadır. InAs dedektörleri oda sıcaklığında yüksek güçlü uygulamalarda da kullanılabilir (*Reade*,2018).

Indiyum arsenik için hesaplanan bant aralığı, hacim modülü ve örgü sabiti değeri Çizelge 3.6'da gösterilmiştir.

Çizelge 3. 6. InAs için hesaplanan bant aralığı ve hacim modülünün literatür değeri ile karşılaştırılması

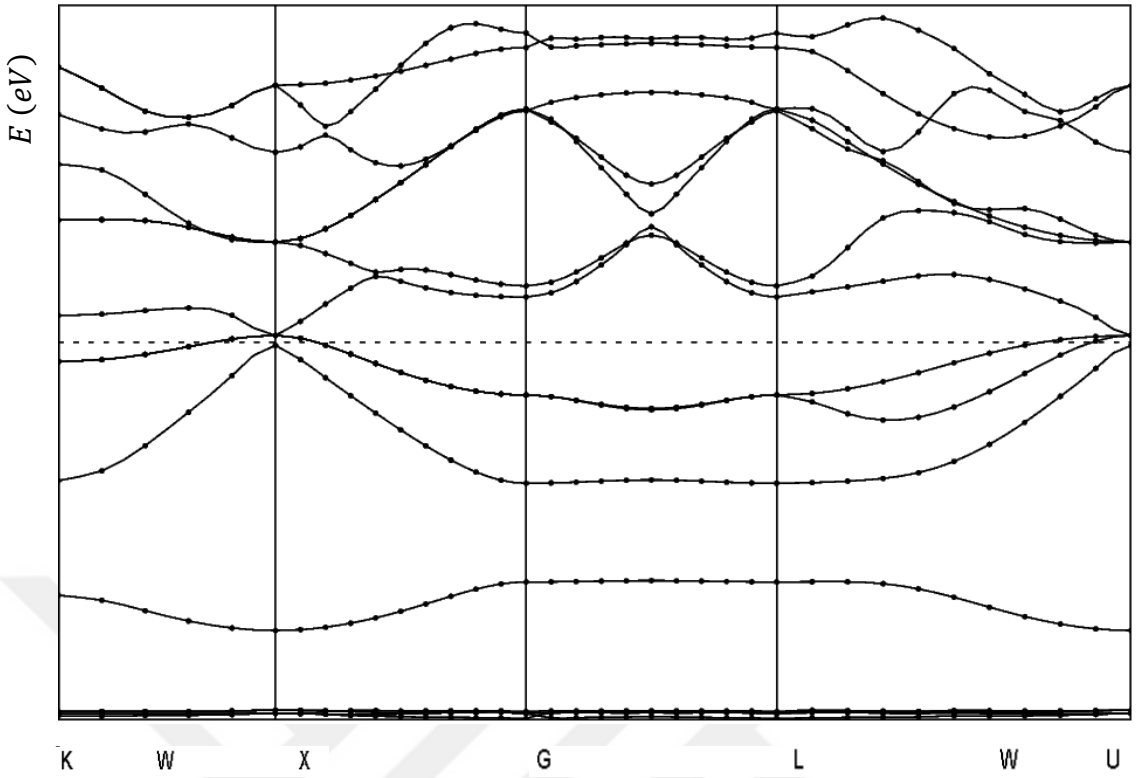
	Hesaplanan değer	Literatür değeri
Bant aralığı (eV)	0.801	0.354
Hacim modülü (GPa)	45.8	58.0
Örgü sabiti (a.u.)	11.70	11.44

Örgü sabitine göre toplam enerjideki değişimlere bakılarak grafik çizilmiş ve en düşük enerji değerine karşılık gelen örgü sabiti 11.70 a.u. olarak hesaplanmıştır. Hacim modülü ise 45.8 GPa olarak hesaplanmıştır.



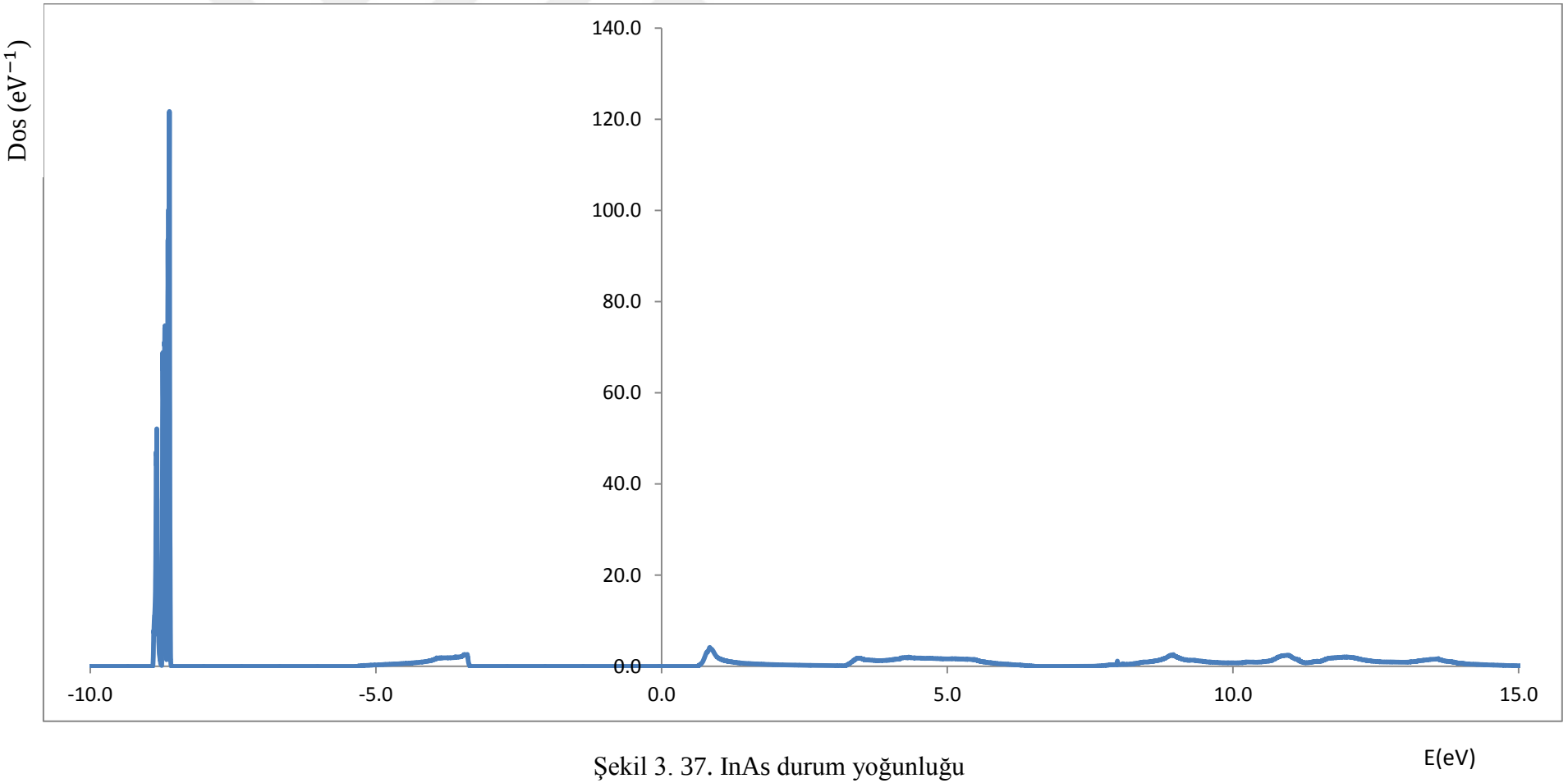
Şekil 3. 35. InAs için örgü sabiti yakınsaması

Bant yapısı Şekil 3.36'da gösterilmiş ve hesaplanan 0.801 eV bant aralığı literatür değerinden farklı bir sonuç elde edilmiştir.

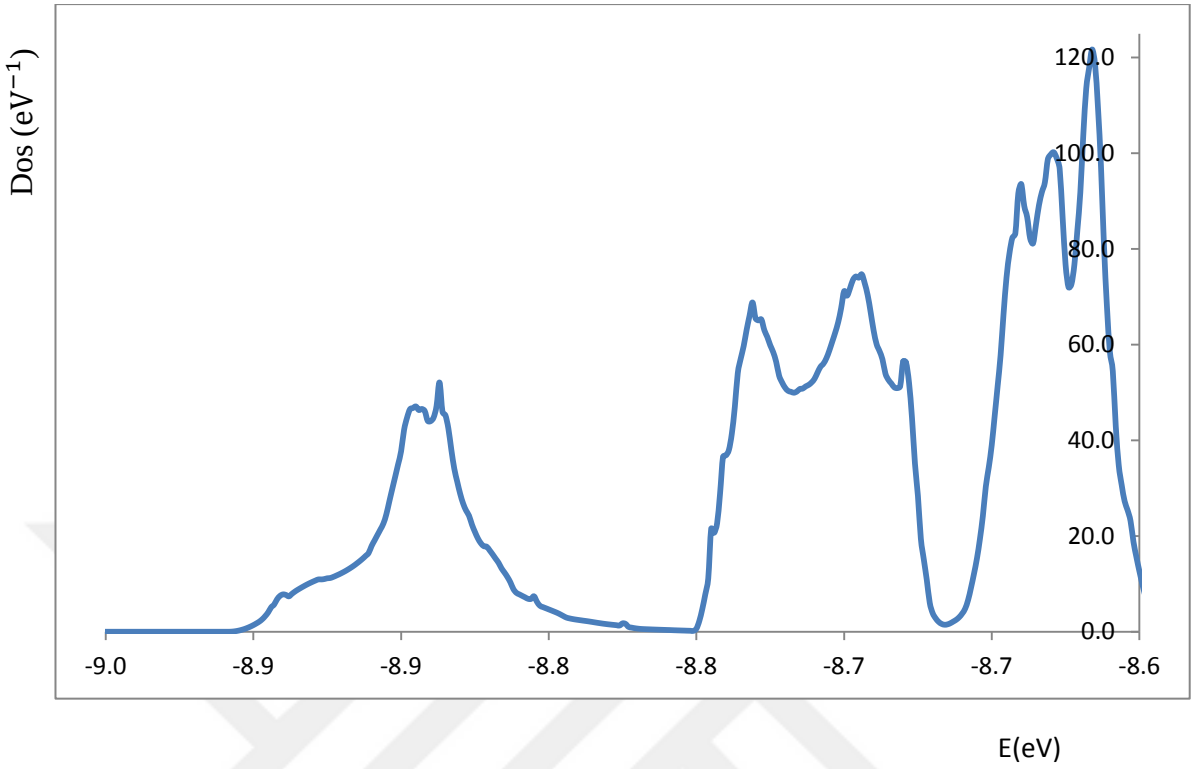


Şekil 3. 36. InAs için bant yapısı

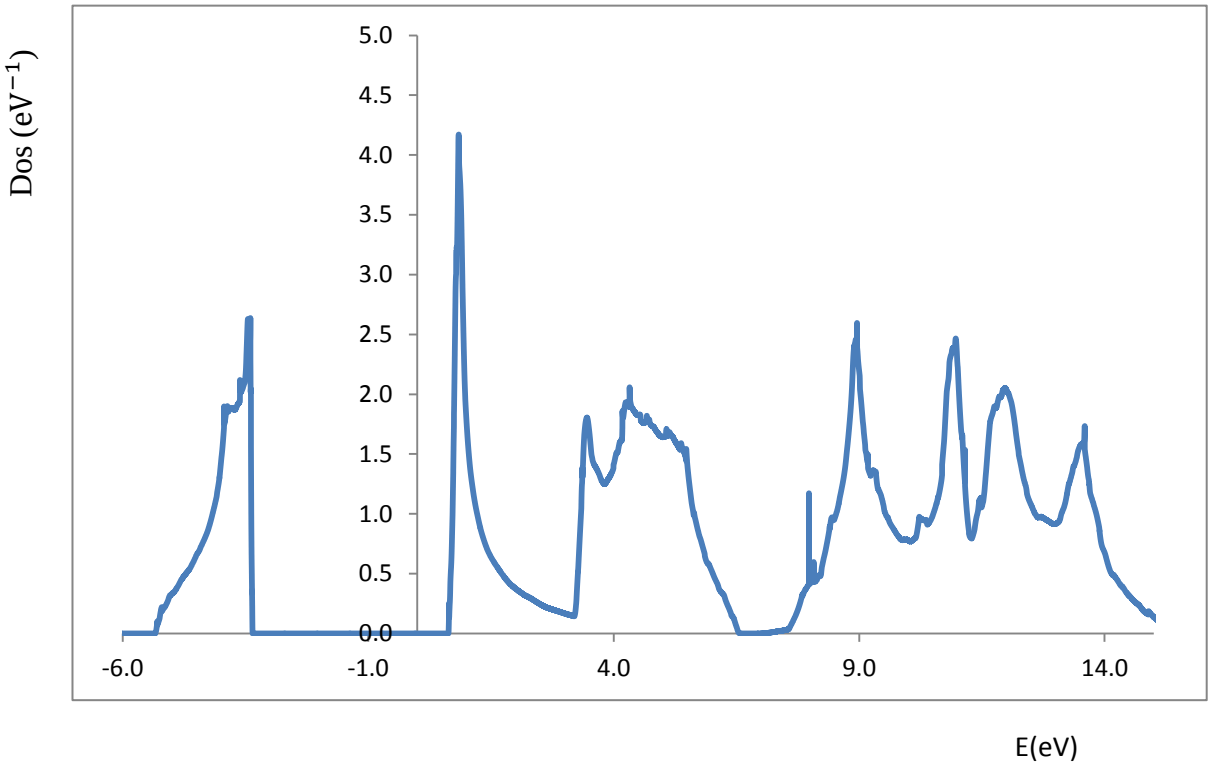
Şekil 3.37'de InAs yarıiletken alaşımının elektron durum yoğunluğu çizilmiştir. Şekil 3.37.a ve 3.37.b' de değişimler daha ayrıntılı şekilde gözükmektedir.



Şekil 3. 37. InAs durum yoğunluğu



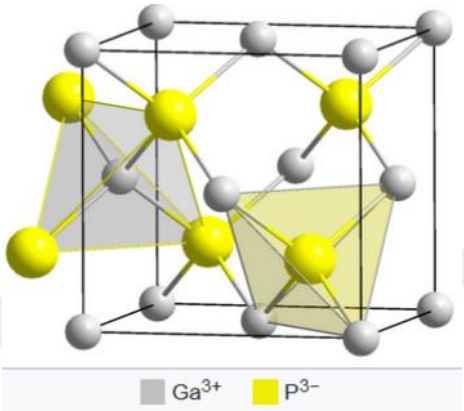
Şekil 3.37.a. InAs durum yoğunluğu



Şekil 3.37.b. InAs durum yoğunluğu

3.4.3. GaP Yarıiletken Bileşiği

Periyodik tabloda V-A grubunda atom numarası 15 olan ametal özelliğe sahip fosfor, galyum ile birleşerek galyum fosfür yarıiletken bileşiğini oluşturur. Şekil 3.40'da zincblende kristal yapısına sahip GaP gösterilmektedir.



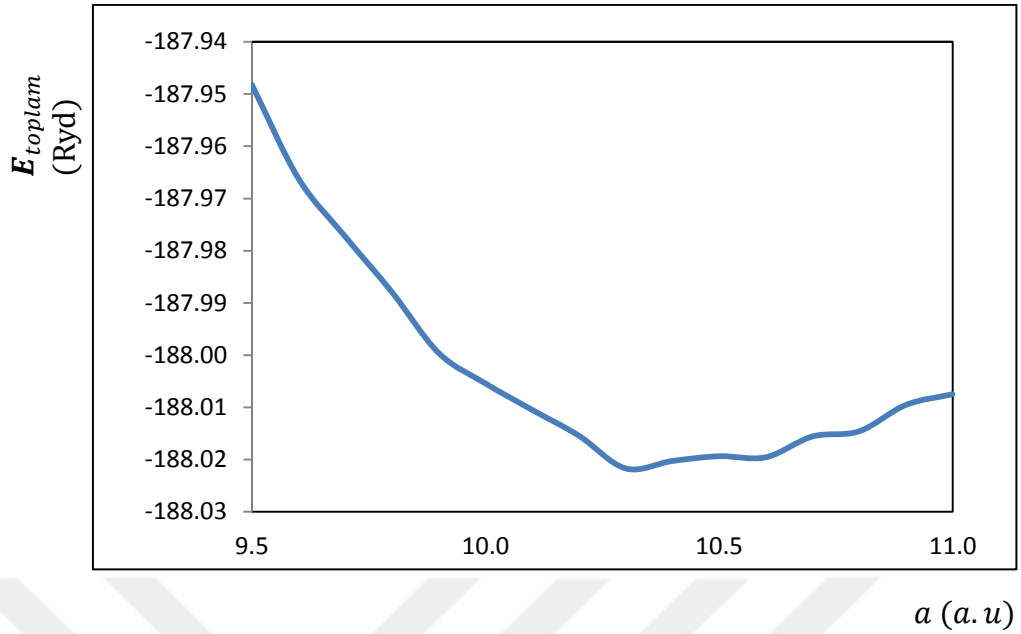
Şekil 3. 38. GaP kristal yapısı

Optik sistemlerde birçok uygulamaları mevcut olan GaP düşük ila orta parlaklığa sahip düşük maliyetli günümüzde yaygın bir şekilde kullanılan kırmızı, turuncu ve yeşil ışık yayan diyotların (LED) üretiminde kullanılmaktadır.

Çizelge 3. 7. GaP için hesaplanan bant aralığı ve hacim modülünün literatür değeri ile karşılaştırılması

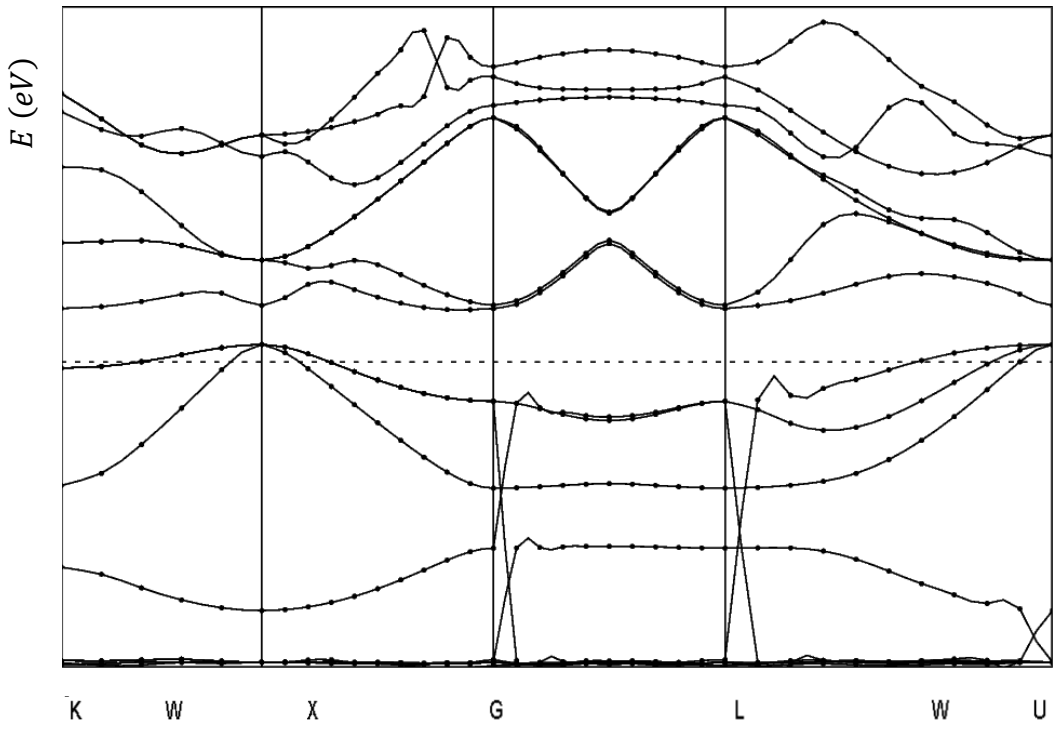
	Hesaplanan değer	Literatür değeri
Bant aralığı (eV)	1.86	2.26
Hacim modülü (GPa)	79.5	88.0
Örgü sabiti (a.u.)	10.30	10.29

Örgü sabiti yakınsaması sonucunda elde edilen örgü sabiti, bant aralığı ve hacim modülü Çizelge 3.7'de literatür değerler ile birlikte gösterilmiştir.

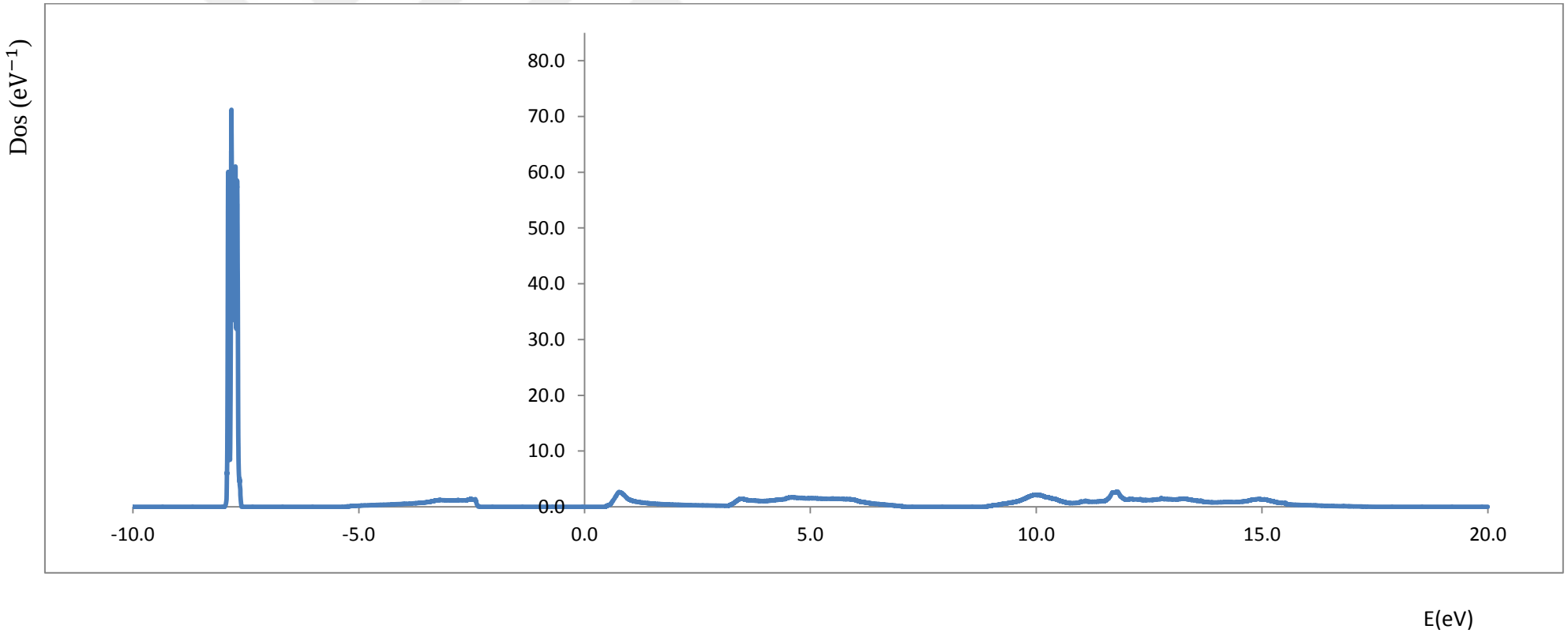


Şekil 3. 39. GaP için örgü sabiti yakınsaması

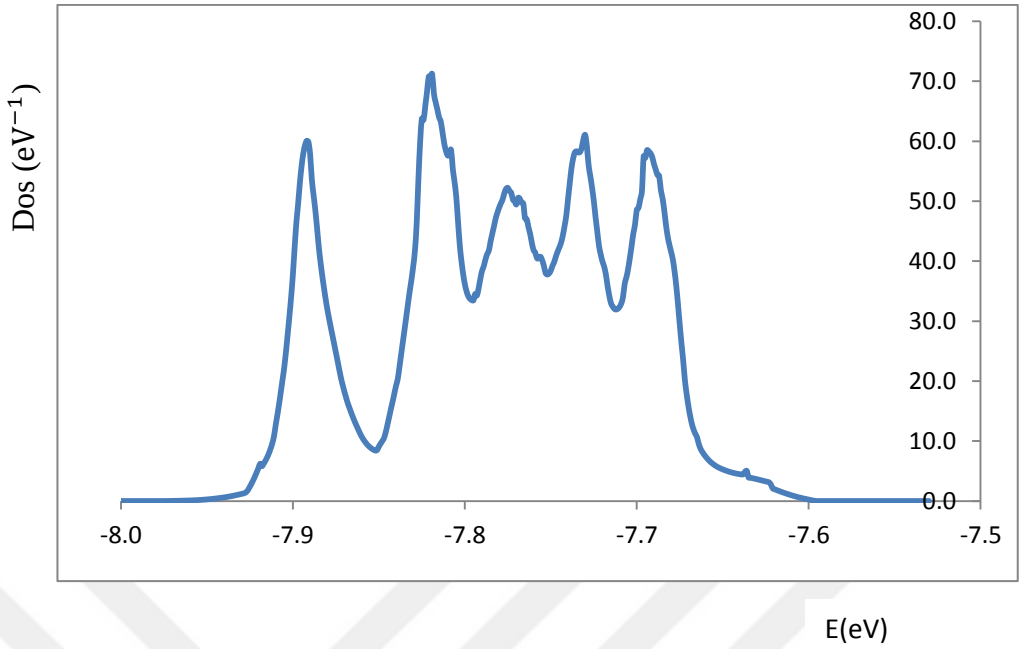
Bant yapısı Şekil 3.40' da çizilmiş ve literatür değeri 2.26 eV olan bant aralığı 1.86 eV olarak hesaplanmıştır. Şekil 3.41' de elektron durum yoğunluğu çizilmiştir.



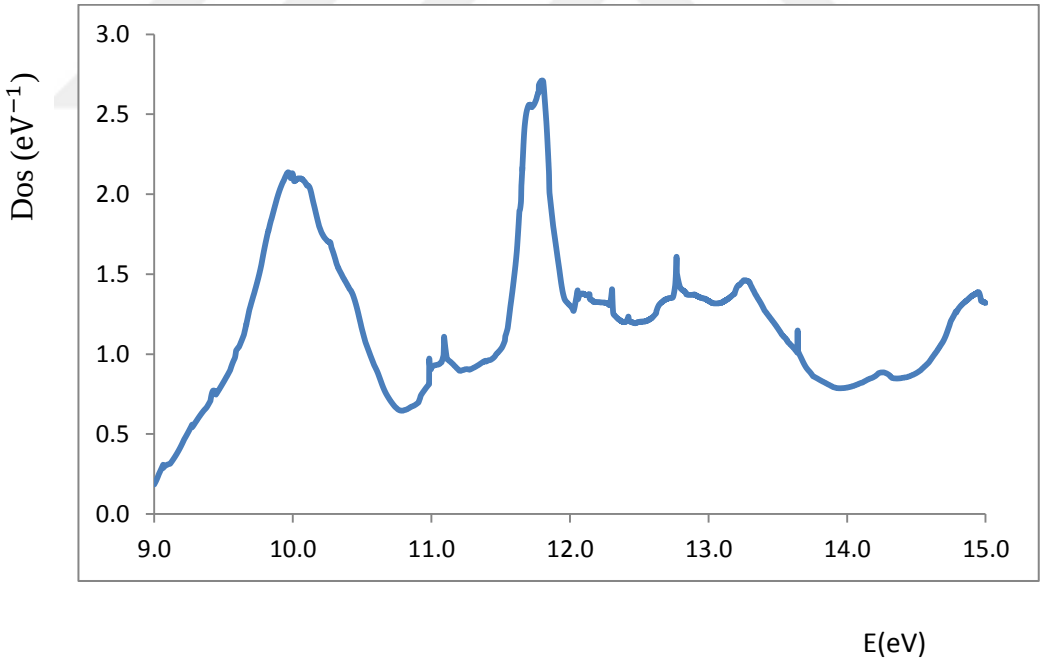
Şekil 3. 40. GaP bant yapısı



Şekil 3. 41. GaP durum yoğunluğu



Şekil 3.41.a. GaP durum yoğunluğu



Şekil 3. 41.b. GaP durum yoğunluğu

3.5. Sonuçlar

Bu tez çalışmasında silisyum, germanyum ve aynı oranda silisyum ve germanyum oranına sahip ikili yarıiletken bileşiği için YFT kullanılarak elektronik yapı hakkında bize bilgi verecek olan bazı parametreler hesaplanmıştır. Denge halindeki bir sistemin olasılık dağılım fonksiyonunu hakkında bize bilgi veren durum yoğunluğu elde edilmiştir. Ayrıca yarıiletkenlerde bant aralığı iletkenlik özelliğini etkileyen bir faktör olmasından dolayı bant aralığı hesaplamaları da yapılmıştır.

Hesaplamalar Quantum Espresso programının Düzlem Dalga Öz Uyumlu Alan bileşeni kullanılarak yapılmıştır. Silisyum için hacim modülü hesaplamalarından elde edilen veriler arasında çok büyük farklılıklar olmamasına rağmen germanyum için elde edilen sonuçlar değişkenlik göstermektedir. Sonuçlar kullanılan pseudopotansiyellerin sistemin hem hacim modülü hem de bant aralığında etkin bir rolü olduğunu göstermektedir.

Silisyum ve germanyum için hesaplanan parametrelerin $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ ikili bileşiğinde ne gibi sonuçlar vereceği hesaplanmış ve elde edilen sonuçlar ile karşılaştırıldığında aralarında farklılıklar olduğu gözlemlenmiştir. Silisyum ve germanyum'da iyi sonuçlar veren pseudopotansiyeller ikili alaşımında istenilen sonuçları vermemiştir ve sonuçlar arasında tutarsızlıklar gözlenmiştir. Ayıca GaAs, In As ve GaP gibi yarıiletken bileşiklerde aynı hesaplamalar yapılarak parametrelerin birbirlerine olan bağlılığı kontrol edilmiştir.

Yapılan hesaplamalar sonucunda görülüyor ki örgü sabiti değerinin literatür değerine ne kadar yaklaşılırsa hacim modülünde o kadar iyi bir sonuç elde ediliyor. Bu da örgü sabiti ve hacim modülünün birbirleri arasındaki bağı göstermektedir. Bant yapılarından bant aralıkları görülmektedir. Bant aralığı değerlerindeki değişimler durum yoğunluğunu etkilemektedir.

Bu tez çalışmasında yarıiletkenlerin elektronik özellikleri hakkında temel bilgi verilmesi amaçlanmış ve termodinamik ve optik özellikleri gibi yarıiletkenleri tanımlayan diğer özellikleri hesaplanarak ihtiyaç duyulan bilgiye yardımcı olabilir.

KAYNAKLAR

Antoncik E. (1959). Approximate formulation of the orthogonalized plane-wave method. *Journal of Physics Chemistry of Solids, 10*, 314-320.

Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics.* (s.826), New York.: Harcourt College Publishers.

Born M., & Oppenheimer R. (1927). Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik, 84*, 457-484.

de Broglie, L. (1924). A Tentative Thoery of Light Quanta. *Philosophical Magazine, 47*, 446.

Dirac, P.A.M. (1930). Note on exchange phenomena in the Thomas-Fermi atom. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 26*, 376-385.

Fermi E. (1928). A statistical method for determining some properties of the atom and their application to the theory of the periodic system of the elements. *Zeitschrift für Physik, 48*, 73.

Joannopoulos, J. D. (1992). Iterative Minimization Techniques for ab initio Total - Energy Calculations: Moleculer Dynamics and Conjugate Gradients. *Reviews of Modern Physics, 64*, 1045-1097.

J. D. Meindl, (1984). Ultra-Large Scale Integration. *IEEE Transactions on Electron Devices, 6,* 1555-1561.

Jones, R.O., & Gunnarsson, O. (1989). The Density Functional Formalism, Its Applications and Prospects. *Reviews of Modern Physics, 61*, 689-746.

Perdew John P., Chevary J. A., Vosko S. H. Jackson Koblar A., Pederson Mark R., Singh D. J., & Fiolhais C. (1993). Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Physical Review B, 46*(11), 6671.

Kittel, C. (1986). *Introduction to Solid State Physics* (6. Baskı). New York: John Wiley.

Kohanoff, J. (2006). *Electronic structure calculations for solids and molecules: theory and computational methods.* (s.75-120). Cambridge, UK: Cambridge University Press.

Brunner K., Winter W., Eberl K., Jin-Phillipp N. Y., & Phillipp F., (1998). *Journal of Vacuum Science and Technology B, 16*, 1701.

Kohn, W. & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review B, 140*, A1133–A1138.

Monkhorst H. J., & Pack J. D., (1976). Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B, 13*, 5188.

Oganov, A.R. (2002). Ab initio theory of phase transitions and thermoelasticity of minerals. *Emu Notes in Mineralogy, 4*, 83- 170.

Ohen, M. L., & Chelikowsky J. R. (1988). *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*. (s.264). Berlin: Springer.

P. Giannozzi, (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *Journal of Physics:Condensed Matter, 21*, 395502.

P. Giannozzi, (2017). Advanced capabilities for materials modelling with QUANTUM ESPRESSO, *Journal of Physics:Condensed Matter, 29*, 465901.

Payne, M.C., Teter, M.P., Allan, D.C., Arias, T.A. & Joannapoulos, J.D. (1992). Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Reviews of Modern Physics, 64*, 1045.

Phillips J. C., & Kleinman L., (1959). Crystal Potential and Energy Bands of Semiconductors. I. Self-Consistent Calculations for Diamond. *Physical Review, 116*, 880-884.

Sze, S. M. (Ed.) (1990). *High-Speed Semiconductor Devices.* New York: Wiley-Interscience.

Levinshtein M.E. (Ed.), Rumyantsev S.L. (Ed.) & Shur M.S. (Ed.) (2001). (s. 149-188). *Properties of Advanced SemiconductorMaterials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe* . New York: John Wiley & Sons, Inc.

Shockley, W., (1950). *Electrons and holes in semiconductors : with applications to transistor electronics.* New Jersey: D. Van Nostrand Company, Inc.

Thomas L. H., (1926)., The calculation of atomic fields. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 23*, 542-548.

Troullier N., Martins J. L., (1991). Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. *Physical Review B, 43*, 1993-2006.

Yin M. T., Cohen M. L., (1982). Theory of ab initio pseudopotential calculations. *Physical Review B, 25*, 7403-7412.

Sever, K., Sarikanat, M., Seki, Y., Gülec, H. A., Mutlu, M. & Tavman, İ. H. (2010). Improvement of interfacial adhesion of glass fiber/epoxy composite by using plasma polymerized glass fibers. *The Journal of Adhesion*, *86*(9), 915-938.

Gupta Dinesh C., Kulshrestha S., (2009). Effect of high pressure on polymorphic phase transition and electronic structure of XAs (X=Al, Ga, In). *Phase Transitions*, *82*(12), 850-865.

Reade. (2018). 29 Mayıs 2019 tarihinde https://www.reade.com/products/indium-arsenide-inas adresinden erişildi.

ÖZGEÇMİŞ

1985 yılında Edirne'de doğdum. ilkokul, ortaokul ve lise eğitimimi Edirne'de tamamladım. Hacettepe Üniversitesi Fizik Mühendisliği bölümünü bitirdikten sonra Trakya Üniversitesi Katıhal Fiziğinde yüksek lisansıma başladım.

2012 yılından bu yana Aile, Çalışma ve Sosyal Hizmetler Bakanlığı İş Sağlığı ve Güvenliği Genel Müdürlüğünde AÇSH Uzmanı olarak çalışmaktayım.