

**$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ YARIİLETKEN ALAŞIMININ ENERJİ-BANT
HESAPLAMALARI**

Ayten KAYA

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
İLERİ TEKNOLOJİLER**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ŞUBAT 2007
ANKARA**

Ayten KAYA tarafından hazırlanan $Al_xGa_{1-x}N$ YARIİLETKEN ALAŞIMININ ENERJİ-BANT HESAPLAMALARI adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Bülent KUTLU
Tez Yöneticisi

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

Başkan : Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK

Üye : Prof. Dr. Bülent KUTLU

Üye : Prof. Dr. Bora ALKAN

Üye : Prof. Dr. Mehmet KASAP

Üye : Doç. Dr. Mehmet ÇAKMAK

Tarih : 02.02.2007

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

TEZ BİLDİRİMİ

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

Ayten KAYA

**Al_xGa_{1-x}N YARIİLETKEN ALAŞIMININ ENERJİ-BANT
HESAPLAMALARI
(Yüksek Lisans Tezi)**

Ayten KAYA

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Şubat 2007**

ÖZET

Bu çalışmada zinc-blende yapıdaki Al_xGa_{1-x}N alaşımının fiziksel özelliklerinin Al konsantrasyonuna bağlı değişimi Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) ile belirlenmiştir. Elektronların değiştokuş-korelasyon enerjileri ultrasoft sözde potansiyel ile GGA-PBE fonksiyoneli kullanılarak tanımlanmıştır. Yapılan ön çalışmalar hesaplamalar için uygun kesilim enerjisinin GaN için 330 eV ve AlN için 280 eV olduğunu göstermektedir. Hesaplamalar 2x2x1 süper örgü Al_xGa_{1-x}N alaşımını için 350 eV kesilim enerjisinde yapılmıştır. Her bir konsantrasyon için enerji-bant ve durum yoğunluğu hesaplamaları yapılmış, yasak enerji aralığının konsantrasyona bağlı değişimini karakterize eden bowing (b) parametresi doğrudan bant geçişinde b(ΓΓ) 0,1eV , dolaylı bant geçişinde b(ΓX) değeri -0,04 eV bulunmuştur. CASTEP ile elde edilen bowing parametre değerleri diğer hesaplama değerleriyle uygunluk göstermektedir.

Bilim Kodu : 202.1.147
Anahtar Kelimeler : YFT, Al_xGa_{1-x}N, yasak enerji aralığı
Sayfa Adedi : 52
Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Bülent KUTLU

ENERGY-BAND CALCULATION OF $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ALLOYS**(M.Sc. Thesis)****Ayten KAYA****GAZI UNIVERSITY****INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY****February 2007****ABSTRACT**

The variation, related to Al concentration of the physical properties of zinc-blende $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ were performed using CASTEP programme within the framework of density function theory (DFT). The exchange-correlation energy of the electrons is described in the GGA-PBE function with ultrasoft pseudopotential. The calculations show that, the convenient cut-off energy is 330 eV for GaN and 280 eV for AlN. For 2x2x1 supercell $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, the calculations were performed with 350 eV cut-off energy and produced the energy-band gaps and the density of states (DOS) for each concentrations of Al. We note that the bowing parameter which was determining the variation, related to Al concentration of the energy-band gap is 0,1 for the direct band-gap and -0,04 for the indirect band-gap. The values of the bowing parameter which were performed with CASTEP are agreeable with the other calculation values.

Science Code : 202.1.147**Key Words : DFT, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, energy gap****Page Number: 52****Adviser : Prof. Dr. Bülent KUTLU**

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren Hocam Prof. Dr. Bülent KUTLU' ya , maddi ve manevi destekleriyle beni hiçbir zaman yalnız bırakmayan aileme ve eşime ayrıca DPT 2001K120590 nolu projenin yürütücüsü ve Fizik Bölüm Başkanı Sayın Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK'e proje kapsamında tez çalışmamın tamamlanmasını sağladığı için teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR	xi
1. GİRİŞ	1
2. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ	4
2.1. Çok-cisim Problemi	4
2.2. Hartree ve Hartree-Fock Yaklaşımı	6
2.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı	7
2.4. Hohenberg-Kohn Teoremi	8
2.5. Kohn-Sham Denklemi	11
2.5.1. Toplam enerji fonksiyoneli	14
2.6. Enerji Fonksiyonelleri	17
2.6.1. Thomas-Fermi teorisi	17
2.6.2. Yerel yoğunluk yaklaşımı ve genelleştirilmiş eğim yaklaşımı	18
2.7. Sözde-Potansiyel Yaklaşımı	20
2.7.1. Norm-conserving sözde potansiyeli	22
2.7.2. Ultrasoft sözde potansiyeli	23

Sayfa

2.8. Bloch teoremi	23
3. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ YARIİLETKEN BİLEŞİKLERİN ÖZELLİKLERİ	24
3.1. GaN Yarıiletkenin Özellikleri	26
3.2. AlN Yarıiletkenin Özellikleri	28
4. ARAŞTIRMA BULGULARI	30
4.1. Zinc-blende GaN ve AlN Yarıiletkenlerinin Bulk Özellikleri	30
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	44
KAYNAKLAR	46
ÖZGEÇMİŞ	52

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. Zinc-blende bulk GaN için CASTEP ile yapılan ölçüm değerleri.....	33
Çizelge 4.2. Zinc-blende bulk AlN için CASTEP ile yapılan ölçüm değerleri.....	34
Çizelge 4.3. Zinc-blende GaN için yapılan örgü parametresi ve enerji-bant değerleri.....	34
Çizelge 4.4. Zinc-blende AlN için yapılan örgü parametresi ve enerji-bant değerleri.....	35
Çizelge 4.5. Zinc-blende $2 \times 2 \times 1$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı ve $1 \times 1 \times 1$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı için değişik Al yoğunluğuna karşı değişim değerleri.....	37
Çizelge 4.6. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımının $(\Gamma\Gamma)$ ve (ΓX) noktalarına karşı gelen bowing parametre değerleri.....	39
Çizelge 4.7. $2 \times 2 \times 1$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı ve $1 \times 1 \times 1$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı için x'e bağlı örgü parametre hesaplamaları.....	42

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 3.1. GaN ilkel birim hücresi.....	25
Şekil 3.2. Zinc-blende GaN için CASTEP ile hesaplanan a)enerji-bant, b)durum yoğunluğu grafiği.....	27
Şekil 3.3. GaN ilkel birim hücresi.....	28
Şekil 3.4. Zinc-blende AlN için CASTEP ile hesaplanan a)enerji-bant, b)durum yoğunluğu grafiği.....	29
Şekil 4.1. GaN için kesilim enerjisi-örgü parametre grafiği.....	30
Şekil 4.2. GaN için kesilim enerjisi-eg grafiği.....	31
Şekil 4.3. GaN için toplam enerji-kesilim enerji grafiği.....	31
Şekil 4.4. AlN için kesilim enerjisi-örgü parametre grafiği.....	32
Şekil 4.5. AlN için kesilim enerjisi-eg grafiği.....	32
Şekil 4.6. AlN için toplam enerji-kesilim enerji grafiği.....	33
Şekil 4.7. $Al_xGa_{1-x}N$ alaşımının enerji-bant diyagramı ve durum yoğunluğunun konsantrasyona bağlı değişim grafiği.....	36
Şekil 4.8. $Al_xGa_{1-x}N$ alaşımının enerji-bant aralığının x'e bağlı değişimi.....	38
Şekil 4.9. $Al_xGa_{1-x}N$ alaşımının x'e bağlı örgü parametre değişimi.....	43

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
eV	Elektron volt
Å	Angstrom
Al	Alüminyum
Ga	Galyum
N	Azot
AlN	Alüminyum Nitrür
GaN	Galyum Nitrat
AlGaN	Alüminyum Galyum Nitrat
Si	Silisyum
GaAs	Galyum Arsenik
Kısaltmalar	Açıklama
KS	Kohn-Sham
E_g	Enerji-bant aralığı
TF	Thomas-Fermi
TFD	Thomas-Fermi-Dirac
PW91	J.P.Perdew - Y.Wang (1991)
PBE	J.P.Perdew, K.Burke, ve M.Ernzerhof
RPBE	Revised PBE
BE	Bütün Elektron
SP	Sözde Potansiyel
FFT	Hızlı Fourier Dönüşümü (Fast Fourier Transformation)
VCA	Virtual Kristal Yaklaşımı

Kısaltmalar**Açıklama****EPM**

Sözde Potansiyel Yaklaşımı

FP-LMTO

Full Potential Lineer Muffin-Tin Orbital

FP-LAPW

Full Potential Lineerized Augmented

LMTO-ASALineer Muffin-Tin Orbital-Atomic Sphere
Approximation**CASTEP**

Cambridge Serial Total Energy Package

YFT

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

(Density Functional Theory)

YYY

(Local Density Approximation)

Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

GEY

(Generalized Gradient Approximation)

Genelleştirilmiş Eğim Yaklaşımı

SCF

(Self Consistent Field)

Öz-uyumlu Alan

HK

Hohenberg-Kohn

1. GİRİŞ

III-V nitrür yarıiletken ince film malzemeler, bilimsel ve teknolojiksel özelliklerinden dolayı son yıllarda kapsamlı bir şekilde araştırılmaktadırlar [1-2]. Yasak enerji aralıkları sırasıyla 1,9 eV, 3,4 eV ve 6,2 eV olan InN, GaN ve AlN yapılarının wurtzite bileşimlerini elde etmek mümkündür [3-6]. Bu bileşimlerden yeşilden morötesi bölgeye kadar dalga boyu aralığında aktif olan optik cihazlar üretilmektedir [7].

Son on yılın ortalarına kadar çalışmalar sadece hegzagonal wurtzite fazdaki GaN için yapılmıştır. Fakat son zamanlarda yapılan çalışmalarla zinc-blende tipli GaN için de başarılı sonuçlar elde edilmiştir [8].

III-V bileşikli yarıiletken materyallerin genel özelliklerine göre, zinc-blende GaN, kontrol edilebilen n-tipi ve p-tipi katkıları için wurtzite'dan daha iyi sonuçlar vermiştir. Ayrıca kübik GaN, yüksek sürüklenme hızına ve wurtzite yapıdan daha düşük bant-aralığına sahiptir [9]. AlN yarıiletkeni wurtzite ve zinc-blende yapıların her ikisi için de uygun bir yapıya sahiptir [9]. Farklı elektron bant yapılarına sahip GaN ve AlN bileşikleri $Al_xGa_{1-x}N$ alaşım sistemi için başka merak konularının oluşmasına sebep olmuştur.

III nitrür bileşimlerin enerji-bant ve durum yoğunluklarının hesabı çeşitli metotlarla yapılabilmektedir [10]. Literatürde hesaplama metodu olarak Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT) yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. YFT yada farklı teoriler kullanılarak hesaplamalar yapmak amacıyla çeşitli yazılımlar geliştirilmiştir [10]. Bu yazılımlar hesaplama tekniklerindeki yaklaşımlarda hesaplama hızları açısından önemlidirler.

Geliştirilen yazılımlardan biri de hassas ve güvenilir sonuçlar veren CASTEP paket programıdır [10]. CASTEP paket programında hesaplama metodu olarak YFT kullanılır. Bu paket programı özellikle malzeme bilimiyle ilgili hesap yapmakla birlikte süper hücreleri kullanarak moleküller için de hesap yapmaktadır [10].

Malzemelerin yapısı atom ve/veya moleküllerden oluştuğu için teorik kısım açıklanırken malzeme yerine genellikle molekülden bahsedilir.

YFT metallerin, yarıiletkenlerin ve yalıtkanların taban durum özelliklerini tanımlamak için kullanılan son derece başarılı bir yaklaşımdır. YFT'nin başarısı sadece standart bulk materyallerini değil protein ve karbon gibi karmaşık materyallerin özelliklerinin incelenmesini de kapsamaktadır.

YFT, Born-Oppenheimer yaklaşıklığı ile çekirdeklerin hareketini incelemekle işe başlamaktadır. Born-Oppenheimer yaklaşımı bir veya iki elektronlu sistemlerden daha karmaşık yapılara sahip olan sistemlerin Schrödinger denklemini çözmeye çalışan yaklaşımlardan birisidir [11]. YFT, Hohenberg-Kohn teoreminden hareketle elde edilir [12]. YFT uygulamalarının bir çoğu temel olarak Kohn-Sham denklemlerini kullanır.

Yerel yoğunluk yaklaşımı “Local Density Approximation” (YYY), çoğunlukla Kohn-Sham denklemlerinin çözümünde kullanılmaktadır. YYY, elektronik değiş tokuş-korelasyon potansiyel enerjisi için kullanılan bir yaklaşımdır. Elektron-iyon etkileşmelerinin sebep olduğu Coulomb potansiyel enerjisini sözde potansiyelle nasıl kullanılacağını tarif etmektedir. Toplam enerji ve yük yoğunluğunun YFT kullanılarak hesaplanması Brillouin bölgesi üzerinden birçok integralin alınmasını gerektirir.

YYY'nın başa çıkamadığı durumlarda bazı sınırlamaların çiğnenmesiyle saf eğim genişlemesi ortaya çıkar. Eğim genişlemesinin fiziksel olmayan sistemlere karşılık gelmesi, YYY'nın fiziksel sistemden başka bir yaklaşıklığa karşılık gelmesi ile yorumlanır. Genelleştirilmiş eğim yaklaşımı “Generalized Gradient Approximation” (GEY), ρ_{xc} değiş tokuş-korelasyon yoğunluğu üzerine bilinen birçok kısıtlamaların zorla toplandığı açıkça düzenlenmiş bir fonksiyonel tarafından ortaya konulmuştur [13]. Genellikle kullanılan GEY fonksiyonelleri PW91, PBE ve RPBE'dir [13-15].

YYY ile yapılan örgü sabiti hesabı GEY ile yapılan hesaplamadan daha iyi sonuç vermekle birlikte YYY ile yapılan enerji-bant hesabı GEY ile yapılan hesaplamadan daha kötü sonuç vermektedir. Bu çalışmada enerji-bant hesaplamaları yapıldığından hesaplamalar GEY kullanılarak gerçekleştirildi.

Bu çalışmada enerji-bant hesaplamaları YFT teorisi kullanılarak CASTEP programı ile GEY-PBE yerel yoğunluk yaklaşımı ve ultrasoft sözde potansiyel kullanılarak gerçekleştirildi. Zinc-blende $2 \times 2 \times 1$ süperhücre $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ yarıiletken alaşımının fiziksel özelliklerinin Al yoğunluğuna bağlı değişimi yoğunluk fonksiyoneli teorisi (YFT) ile belirlendi.

YFT ile ilgili yapılan hesaplamalarda giriş parametrelerinin tayini sonuçlar üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Bu yüzden $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ yarıiletken alaşımının x 'e bağlı özelliklerinin hesaplanmasından önce $x=0$ 'a karşılık gelen GaN yarıiletkeni ve $x=1$ 'e karşılık gelen AlN yarıiletkeni hakkındaki giriş parametrelerinin tayini oldukça büyük bir önem taşımaktadır. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ yarıiletken alaşımı için enerji-bant aralığının Al yoğunluğuna bağlı değişimi ve Al yoğunluğunun yaklaşık $x=0,6$ 'dan küçük olduğu yerlerde doğrudan geçiş, büyük olduğu yerlerde ise dolaylı geçiş gözlemlendi [16].

Bu tez çalışmasının 2. bölümünde Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, kullanılan yaklaşımlar ve teoremlerle birlikte detaylı olarak tanıtıldı, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ yarıiletken alaşımının ve bileşenlerinin tanıtımı 3. bölümde sunuldu. Bu alaşımın CASTEP programı kullanılarak yapılan enerji-bant hesaplamaları literatürle karşılaştırmalı olarak detaylı bir şekilde verildi. Elde edilen bulgular sonuç ve öneriler kısmında tartışıldı.

2. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (YFT), atomik ölçekteki sistemler için çok cisim probleminin çözümünde bir standart olarak ortaya çıkmış ve son yıllarda katıların bulk ve yüzey özelliklerinin yanı sıra nano tüplerin fiziksel özelliklerinin incelenmesinde de kullanılmaktadır [17,18]. Born-Oppenheimer yaklaşıklığı ile çekirdeklerin hareketini, elektronların hareketinden ayıran ve Hohenberg-Kohn (HK) teoreminden [19] hareket ile elde edilen YFT, N elektron etkileşim problemini, taban durum parçacık yoğunluğu $\rho(r)$ cinsinden ifade etmektedir. Daha sonra Kohn-Sham (KS) denklem sistemi yani lineer olmayan öz-uyumlu tek parçacık Schrödinger denkleminin çözümleri, $\{\Psi_i\}$ moleküler yörüngesilerin bir kümesi cinsinden tanımlanır ve N elektronların sayısı olmak üzere taban durum parçacık yoğunluğu,

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(r)|^2 \quad (2.1)$$

biçiminde gösterilir [19].

Atomik bir sistemin özellikleri büyük ölçüde, bileşen atomlarının değerlik kabuğundaki elektronları tarafından belirlenir. Tanımlanan sözde-potansiyel yaklaşımı, değerlik ve çekirdeğe en yakın dolu yörünge elektronlarının yani kor elektronlarının etkin etkileşmelerini belirtir ve kor elektronlarının çekirdeğin yerine geçmesini tanımlar. Kohn-Sham denklemlerinin sayısal çözümü, elektronik dalga fonksiyonlarını temsil eden uygun temelin seçimine dayanır. Bu temeller Bölüm 2.8 de gösterildi.

2.1. Çok-Cisim Problemi

Çok-cisim problemini açıklamak için uzaysal ve zamansal olarak değişimi zayıf olan, kendi hareketinden bağımsız çeşitli kuvvve arkadaşlarılarında hareket edebilen sert bir küre ele alalım. Uzayın her noktasında kürenin üzerindeki kuvvet bilinir ise

Newton yasalarıyla kürenin yörüngesi hesaplanılabilir. Bu durum dış bir alanda hareket eden parçacığın hareketine benzetilebilir. Daha sonra bu probleme ikinci bir sert kürenin daha eklendiğini ve bunun da bir yay aracılığıyla birinci küre ile birleştirildiğini düşündüğümüzde ise işler biraz daha karmaşık hale gelecektir. Yay doğal uzunluğundayken küreler arasında bir kuvvet olmayacaktır. Fakat yaydaki gerilme ve sıkışma, kürelerin birbirine kuvvet uygulamasına sebep olacaktır. Burada da kürelerin hareketi Newton hareket yasaları ile tanımlanabilir. Ancak birinci ve ikinci kürelerin hareketi birbirine oldukça bağlı olduğundan bu kürelerin yörüngeleri birbirinden bağımsız olarak hesaplanamaz. Probleme daha fazla kürenin ilave edildiğini düşünürsek, problemde Newton yasalarına bağlı olarak küreler arasındaki bağ durumlarının artması nedeni ile çözüm daha da karmaşık bir hale gelecektir. Bu anlatım, çok-cisim probleminin temelini neye dayandığını açıklamaktadır.

Şimdi de kürelerin birbirine yaylarla bağlı olmadığı durumu düşünelim. O zaman, küreler birbiri ile çarpışmaya kadar tek parçacık olarak hareket edecektir. Bu yaklaşım, problemi tekrar çözülmesi kolay bir duruma indirger ve bundan sonra her bir kürenin yörüngesini belirlemek için tek parçacık teorisi kullanılabilir. Bu durumun sağlanabilmesi için kürelerin birbiri ile etkileşmeyecek mesafede hareket etmeleri gerekmektedir. Eğer birbirlerine çok fazla yaklaşacak olurlar ise birbirlerine kuvvet uygulayacaklardır. Parçacıkların yaklaşma oranı çok küçük ise durum tek parçacık problemine indirgenir; yaklaşma oranı çok büyük ise durum çok cisim problemi haline gelir.

Katı içerisindeki elektronlar kristal yapısını oluşturan çekirdek korları ve birbirleri ile güçlü bir etkileşim içindedirler. Burada çekirdeklerin, elektronların hareket zamanına göre hareket etmediği düşünülür. Başka bir ifade ile elektronların hareket denklemi, elektrostatik etkileşmeler ile birbirine sıkıca bağlıdır. Elektrostatik etkileşmelerin uzun erimli doğası tek parçacık problemi için iyi bir açıklama olmayacaktır. Buna rağmen katı içindeki elektronik yapıyı açıklamak için en başarılı yöntem, tek parçacık yaklaşımı üzerinden kurulmuştur.

2.2. Hartree ve Hartree-Fock Yaklaşımı

Katı içindeki elektronların kuantum mekaniksel davranışını bütünüyle açıklamak için sistemin çok elektronlu dalga fonksiyonunu hesaplamak gerekir. Teorik olarak bu, zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilir. Potansiyel, katı içindeki diğer elektronların davranışları ile belirlenir. Gerçekte birbirine yakın elektronlar, uzak olan elektronlardan daha güçlü bir etkileşim içerisinde bulunurlar. Bütün elektronların Schrödinger denklemini çözebilmek, aynı anda yaklaşık 10^{23} tane diferansiyel denklemi çözebilmek demektir. Ne yazık ki günümüzde bu tür hesaplamalar için gerekli bilgisayar kapasitesine ulaşılamamıştır.

Problemi çözmek için ilk adım Hartree tarafından atılmıştır [20]. Hartree, çok-cisim dalga fonksiyonlarının biçimi hakkında bir varsayım yapmış ve çok-cisim dalga fonksiyonlarını tek elektron dalga fonksiyonlarının bir kümesi olarak düşünmüştür. Homojen bir sistem içinde bu dalga fonksiyonları basit düzlem dalgalar olarak alınabilir.

Hartree, çok elektronlu sistemin Hamiltonyen denklemini ifade etmiştir [20]. N elektronlu bir sistem için, N tane denklem vardır. N tane tek-elektron dalga fonksiyonlarının her biri çarpım şeklinde çok-elektron dalga fonksiyonunu oluşturur. Bu denklemler zamandan bağımsız Schrödinger denklemine çok benzer. Diğer elektronların hareketi, sistemin elektron dağılımının zaman ortalamasına yakından bağlıdır. Bu önemli faktör her bir elektronu tek parçacık olarak ayırmaya imkan sağlar. Dolayısıyla Hartree yaklaşımı, kristal içindeki elektronlar için yaklaşık olarak tek-parçacık dalga fonksiyonlarını hesaplamamıza izin verir.

Fakat Hartree yaklaşımı nötr, homojen bir sistemde katı içindeki elektronları tutan bağlanma enerjilerinin olmayacağını ifade ettiğinden iyi sonuçlar vermez. Aynı zamanda bu ifade elektronları katıdan koparmak için sonlu bir enerji verilmesi gerektiğini ispat eden deneysel bulgulara da ters düşer.

Pauli dışarlama ilkesine göre, uzayın aynı noktasında aynı kuantum sayılarına sahip iki elektron bulunamaz. Bu ilke açıkça, aynı kuantum kümelerine sahip özdeş elektron çiftleri arasındaki etkin itmeyi ifade eder. Matematiksel olarak Pauli dışarlama ilkesi, parçacık çiftlerinin değiş-tokuş sırasında simetrik olmayan dalga fonksiyonlarını sağlamak için kullanılır. Elektronların değiş-tokuş işlemi sırasında sadece işaretleri değişir. Hartree dalga fonksiyonları simetrik olmamaktan ziyade simetrik bir özelliktedir.

Hartree-Fock yaklaşımı ise simetrik olmayan dalga fonksiyonlarını kullanarak tek-elektron dalga fonksiyonlarından çok-elektron dalga fonksiyonunu, Hartree teorisinden daha iyi bir şekilde ifade etmiştir. Bu yaklaşımda dalga fonksiyonu, Hartree dalga fonksiyonundan daha karmaşıktır. Ancak bu fonksiyon “Slater Determinantı” ile tanımlanabilir. Bu önerinin ortaya atılması ile birlikte değişim ilkesi boyunca sistem için Hamiltonyen denklemini açıklamak tekrar mümkün hale gelmiştir. Burada, bir elektron ile ortalama elektron yoğunluğu arasındaki Coulomb etkileşmesini tanımlayan, Hartree potansiyeli vardır. Simetrik olmayan dalga fonksiyonu kullanan değiş-tokuş potansiyeli doğrudan Pauli dışarlama ilkesi ile ilişkilidir. Bu potansiyel nötr, homojen bir sistemdeki elektronların bağlanma enerjilerine katkıda bulunur. Böylelikle Hartree teorisinin başlıca yetersizliği düzeltilmiş olur. Fakat Hartree-Fock teorisi fiziğin bazı dallarında basit durumların ihmal edildiği zamanlarda, Hartree teorisinden daha kötü sonuçlar vermiştir. Bir yere kadar değiş-tokuş etkisi ihmal edilir ise o zaman Hartree teorisini kullanmak daha uygun sonuçlar verir. Anlatılan iki metot katı içindeki elektronların çok-cisim problemini çözmede başarılı olmasalar da iki önemli fiziksel işlemi, değiş-tokuş ve korelasyonu açıklamışlardır. Hartree-Fock yaklaşımı aynı zamanda öz uyumlu alan metodu (SCF “Self Consistent Field”) olarak da bilinmektedir [20].

2.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Birden fazla elektron içeren büyük bir sistemin Schrödinger denkleminin çözümü için çeşitli yaklaşımlara gereksinim duyulur. Born-Oppenheimer yaklaşımı bir veya

iki elektronlu sistemlerden daha karmaşık yapılara sahip olan sistemlerin Schrödinger denklemini çözmede kolaylık sağlayan yaklaşımlardan birisidir [11].

Elektronlar çekirdeğin konumundaki değişimlerden ani olarak etkilenirler. Moleküler bir sistem için tam Hamiltonyen aşağıdaki gibi verilir:

$$H = T_{elektron}(r) + T_{çekirdek}(R) + V_{ç-e}(R, r) + V_{e-e}(r) + V_{ç-ç}(R) \quad (2.2)$$

Çekirdeklerin kütesinin elektronların kütesinden çok büyük ($M_{çekirdek} \gg M_{elektron}$) olması katı içindeki çekirdeklerin hareketlerinin elektronların hareketlerinden daha yavaş olmasına yol açar. Bu yaklaşımda, çekirdeklerin hareketleri elektronların hareketleri ile karşılaştırıldığında çekirdekler sabit olarak kabul edilir ve denklem Eş.2.2'deki $T_{çekirdek}(R)$ kinetik enerji terimi ihmal edilir. Elektronlar, çekirdek korları tarafından üretilen ve elektronları atoma bağlayan, $V_{ç-e}(R, r)$ dış potansiyelinde hareket ederler.

$$V_{ç-e}(R, r) = -\sum_j^{\infty} \sum_i^e \left(\frac{Z_j}{|R_j - r_i|} \right) \quad (2.3)$$

Bu yaklaşımda çekirdekler, $V_{ç-e}(R, r)$ dış potansiyelini üreten sözde-çekirdekler ile değiştirilmiştir. Born-Oppenheimer yaklaşımında toplam enerji, bir sistemdeki elektronların toplam enerjisine karşılık gelir.

2.4. Hohenberg-Kohn Teoremi

YFT, Hohenberg-Kohn teoreminden hareket ile elde edilir [12]. Bu teorem, N elektron etkileşim problemini, taban durum parçacık yoğunluğu $\rho(r)$ cinsinden ifade etmektedir. Dejenere olmayan N elektronlu bir sistemin taban durum enerjisi E_N , tek parçacık yoğunluğu $\rho(r)$ 'nin birim evrensel fonksiyoneli biçiminde aşağıdaki gibidir:

$$E_N = E_N [\rho(r)] \quad (2.4)$$

Bu durumda etkileşen bir sistemin elektronları için elektronik hamiltonyen aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i^e \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) - \sum_j^{\zeta} \sum_i^e \left(\frac{Z_j}{|R_j - r_i|} \right) + \sum_i^e \sum_{j < i}^e \left(\frac{1}{|r_i - r_j|} \right) + \sum_i^{\zeta} \sum_{j < i}^{\zeta} \left(\frac{Z_j Z_i}{|R_i - R_j|} \right) \quad (2.5)$$

$$T = -\frac{1}{2} \sum_i^e \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) \quad (2.6)$$

$$V_{e-e} = \sum_i^e \sum_{j < i}^e \left(\frac{1}{|r_i - r_j|} \right) \quad (2.7)$$

$$V_{\zeta-\zeta} = \sum_i^{\zeta} \sum_{j < i}^{\zeta} \left(\frac{Z_j Z_i}{|R_i - R_j|} \right) \quad (2.8)$$

$$V_{\zeta-e}(r) = -\sum_j^{\zeta} \sum_i^e \left(\frac{Z_j}{|R_j - r_i|} \right) \quad (2.9)$$

Burada çekirdeğin kinetik enerjisi ihmal edilir. Bunlar sırasıyla T kinetik enerji operatörü, $V_{elektron-elektron}$ ve $V_{çekirdek-çekirdek}$ etkileşim enerji operatörleri ve $V_{çekirdek-elektron}$ dış potansiyeldir. Dış potansiyel $V_{çekirdek-elektron}(r)$ ve yoğunluk elektronların sayısı N sistem tarafından belirlenir. Yoğunluk elektron sayısı, $N = \int dr \rho(r)$ ile tanımlanır. Böylece sistemin toplam enerjisi E_N , $E_N = E_N [\rho(r)]$ biçiminde $\rho(r)$ ' ya bağlı

olarak belirlenir. Aynı $\rho(r)$ taban durum yoğunluğunda, iki farklı $V_{\zeta-e}(r)$ ve $V'_{\zeta-e}(r)$ potansiyeli olduğunu kabul edelim. Bu farklı potansiyeller sırası ile E ve E' enerjileri, H ve H' hamiltonyenleri, ψ ve ψ' dalga fonksiyonları ile ilişkilidirler. ψ 'nin, H 'nin dejenere olmayan taban durum dalga fonksiyonu olduğu gerçeğini kullanarak;

$$\begin{aligned} \langle \Psi' | H' | \Psi' \rangle &< \langle \Psi | H' | \Psi \rangle \\ E' &< \langle \Psi | H | \Psi \rangle + \langle \Psi | V' - V | \Psi \rangle \\ E' &< E + \int dr \rho(r) (V'_{\zeta-e}(r) - V_{\zeta-e}(r)) \end{aligned} \quad (2.10)$$

ifadesini elde ederiz.

Benzer olarak,

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H | \Psi \rangle &< \langle \Psi' | H | \Psi' \rangle \\ E &< \langle \Psi' | H' | \Psi' \rangle + \langle \Psi' | V - V' | \Psi' \rangle \\ E &< E' + \int dr \rho(r) (V_{\zeta-e}(r) - V'_{\zeta-e}(r)) \end{aligned} \quad (2.11)$$

ifadesi elde edilir. Bu iki denklemin taraf tarafa birbirine eklenmesiyle elde edilen $(E + E' < E' + E)$ sonucu tutarsızdır. Böylece, dejenere olmayan taban durumlarında aynı $\rho(r)$ taban durum yoğunluğu için $V_{\zeta-e}(r)$ ve $V'_{\zeta-e}(r)$ olmak üzere iki farklı dış potansiyel olamaz. Yani, $V'_{\zeta-e}(r) - V_{\zeta-e}(r) = \text{sabit}$ bir değer olmadıkça ψ ve ψ' dalga fonksiyonları bir birine eşit olamaz ve bunlar farklı Schrödinger denklemlerini sağlar. Sonuç olarak $\rho(r)$ sadece $V_{\zeta-e}(r)$ dış potansiyel ve N yoğunluk elektron sayısı olmak üzere sistemin bütün özelliklerini belirler. Her ne kadar bu ispat dejenere olmayan taban durumları için geliştirilmiş olsa da, YFT dejenere taban durumlu sistemlerde dahi Hohenberg-Kohn teoremi yoluyla formüle edilebilir [21].

Bütün özellikler $\rho(r)$ taban durum yoğunluğu tarafından belirlendiğinden herhangi bir sistemin özellikleri, $E[\rho(r)]$ birim evrensel toplam enerji fonksiyonelinin

minimize edilmesi ile elde edilebilir. Bundan sonra YFT'nin temel problemi, $E[\rho(r)]$ toplam enerji fonksiyonelinin uygun biçiminin belirlenmesidir. Enerjinin gerçek biçimi bilinmemekle birlikte teorik olarak,

$$E[\rho(r)] = T[\rho(r)] + \frac{1}{2} \int dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + \int dr \rho(r)(V'_{\zeta-e}(r) - V_{\zeta-e}(r)) + E_{XC}[\rho(r)] \quad (2.12)$$

şeklinde yazılabilir. $T[\rho(r)]$, kinetik enerjidir ve sonraki iki terim sırasıyla etkileşim enerjisinin ortalama alanını ve $V_{\zeta-e}(r)$ dış potansiyeli nedeniyle oluşan enerjiyi temsil eder. Bütün klasik olmayan düzeltmeleri ve çok-cisim etkilerini, $E_{XC}[\rho(r)]$ değiş tokuş-korelasyon fonksiyoneli içerir. Bu düzeltmeler hem aynı spinli etkileşimler nedeni ile (X), değiş tokuş etkilerini hem de farklı spinli etkileşimler nedeni ile (C), korelasyon etkilerini içerir. Pratikte değiş tokuş-korelasyon fonksiyoneli, $E_{XC}[\rho(r)]$ 'nin yaklaşık biçimleri arasından seçilir. $E_{XC}[\rho(r)]$ 'nin en yaygın seçimleri bölüm 2.6'da tanımlanmıştır.

2.5. Kohn-Sham Denklemi

YFT uygulamalarının bir çoğu temel olarak Kohn-Sham denklemlerini kullanır. Bu denklemler, Hohenberg-Kohn teoreminden elde edilir. Kohn ve Sham, Hartree-Fock metoduna benzer olarak, $\{\Psi_i\}$ moleküler yörüngesilerin bir kümesinden oluşturulan etkileşmeyen referans yoğunluğunu ortaya koymuştur [19].

Bu etkileşmeyen referans yoğunluğu:

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N (\Psi_i(r))^* \Psi_i(r) \quad (2.13)$$

biçiminde gösterilmektedir. Dalga fonksiyonları için

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.14)$$

olmak üzere, Kohn-Sham kinetik enerjisi:

$$T_{KS}[\rho] = \sum_{i=1}^N \langle \Psi_i | -\frac{\nabla_i^2}{2} | \Psi_i \rangle \quad (2.15)$$

olarak verilmiştir.

Sistemin kinetik enerjisi $T[\rho]$ tam olarak Kohn-Sham kinetik enerjisine $T_{KS}[\rho]$ eşit değildir. Bununla birlikte bu kinetik enerjiler arasındaki fark ($T[\rho] - T_{KS}[\rho]$), değiş tokuş-korelasyon fonksiyonelinin yeniden tanımlanması ile $E_{XC}[\rho]$ değiş tokuş-korelasyon fonksiyonelinin içine eklenebilir.

$$E_{XC}[\rho] \equiv (T[\rho] - T_{KS}[\rho]) + E_X[\rho] + E_C[\rho] \quad (2.16)$$

Kohn-Sham denklemlerinin gerisindeki temel fikir, küçük, klasik olmayan $E_{XC}[\rho]$ değiş tokuş-korelasyon fonksiyoneli için iyi bir yaklaşım yapılmasıdır. Taban durumunda toplam enerji, $\{\Psi_i(r)\}$ dalga fonksiyonlarının bir kümesine göre değişmezdir.

Bu durum, matematiksel olarak aşağıdaki biçimde ifade edilir:

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \Psi_i(r)} = 0 \quad (2.17)$$

Diklik şartları E_{ij} Lagrange çarpanlarının ortaya koyulmasıyla sağlanır.

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \Psi_i(r)} - E_{ij} \Psi_j = 0 \quad (2.18)$$

bu da,

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_{e-e} + V_{\zeta-e}(r) + V_{XC}[\rho(r)] \right) \Psi_i(r) = E_{ij} \Psi_j(r) \quad (2.19)$$

Kohn-Sham denkleminin yazılmasına yol açar. Burada $V_{XC}[\rho(r)]$, değiş tokuş-korelasyon potansiyelidir:

$$V_{XC}[\rho(r)] \equiv \frac{\delta E_{XC}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \quad (2.20)$$

E_{ij} matrisi köşegenleştirilebilir, bu durumda Kohn-Sham denklemi aşağıdaki şekilde yazılabilmektedir:

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_{e-e} + V_{\zeta-e}(r) + V_{XC}[\rho(r)] \right) \Psi_i(r) = E_i \Psi_i(r) \quad (2.21)$$

Böylece, çok elektron etkileşim problemi, öz-uyumlu tek elektron (ortalama-alan potansiyelinde diğerleri ile etkileşen) Schrödinger benzeri denklemler kümesine indirgenebilmektedir.

Burada $E_{XC}[\rho]$ değiş tokuş-korelasyon fonksiyoneli tam olarak bilinmesi doğru taban durum enerjisinin elde edilmesine imkan vermektedir. Bununla beraber, tam $V_{XC}[\rho]$ değiş tokuş-korelasyon potansiyel fonksiyoneli bilinmediğinden $V_{XC}[\rho]$ fonksiyoneli için yaklaşık bir biçim seçilmelidir. Aynı zamanda Eş. 2.21 deki Kohn-Sham hamiltonyeni yoğunluk fonksiyonu içindeki $\{\Psi_i\}$ çözümlerine de bağlıdır. Bu yüzden Kohn-Sham denklemleri, çözülmesi için çok fazla çaba harcanması gereken lineer olmayan öz-uyumlu öz değer problemidir. Pratikte Ψ_i molekül yörüngemsipleri atomik yörüngemsiplerin lineer kombinasyonu olarak verilmektedir.

$$\Psi_i = \sum_{\mu} C_{i\mu} \phi_{\mu} \quad (2.22)$$

Bu ifadedeki ϕ_{μ} atomik yörüngemsiler, atomik temel fonksiyonlar olarak adlandırılır ve $C_{i\mu}$ molekül yörüngemsilerinin açılım katsayısıdır. Atomik yörüngemsiler moleküler yörüngemsiler gibi ortonormal değildir. $H_{\mu\nu}, S_{\mu\nu}$ sırası ile Kohn-Sham operatörü ve çakışma matrisi olmak üzere

$$H_{\mu\nu} = \left\langle \Phi_{\mu}(r) \left| -\frac{\nabla^2}{2} + V_{e-e} + V_{\zeta-e} + V_{XC} \right| \Phi_{\nu}(r) \right\rangle \quad (2.23)$$

ve,

$$S_{\mu\nu} = \left\langle \Phi_{\mu}(r) \left| \Phi_{\nu}(r) \right\rangle \quad (2.24)$$

şeklinde tanımlandığında, Eş. 2.21 aşağıdaki şekilde yeniden düzenlenir.

$$H_{\mu\nu} C_{i\mu} = E_i S_{\mu\nu} C_{i\mu} \quad (2.25)$$

Bu temel küme için Gaussian fonksiyonlarını [22], Slater fonksiyonlarını [23], düzlem dalgaları [24,25] ve sayısal yörüngemsileri içeren birkaç seçim yapmak mümkündür. CASTEP' te düzlem dalgalar kullanılmaktadır.

2.5.1. Toplam enerji fonksiyoneli

Taban durum enerjisi,

$$E_{Top} = T_{KS} + \frac{1}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + \int dr \rho(r) V_{\zeta-e}(r) + E_{\zeta-\zeta}[\{R_I\}] \quad (2.26)$$

olarak yazılabilir. Burada atomik korların etkileşmesi nedeniyle dahil edilen $V_{\zeta-e}$ dış potansiyeline sahibiz. Toplam enerji:

$$E_{Top} = E_{BS} - \delta E_H + \delta U_{XC} + E_{\zeta-\zeta}[\{R_I\}] \quad (2.27)$$

olarak yazılabilir. Eş. 2.27 deki ifadeler sırasıyla aşağıdaki şekilde tanımlanır:

$$E_{BS} = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.28)$$

$$\delta E_H = -\frac{1}{2} \int dr \rho(r) \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} \quad (2.29)$$

$$\delta U_{XC} = \int dr \rho(r) \left(\frac{E_{XC}[\rho(r)]}{\rho(r)} - V_{XC}[\rho(r)] \right) \quad (2.30)$$

$$E_{\zeta-\zeta}[\{R_I\}] = \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J}{|R_I - R_J|} \quad (2.31)$$

ve E_i Kohn-Sham öz değerleri:

$$E_i = \int dr (\Psi_i(r))^* \left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + \int dr' \frac{\rho(r')}{|r-r'|} + V_{\zeta-e}(r) + V_{XC}[\rho(r)] \right\} \Psi_i(r) \quad (2.32)$$

biçiminde verilir. KS denklemlerinde iki tane uzun menzilli potansiyel vardır. Bunlar R mesafesinde birbirini yok eder ve Hartree potansiyeli aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$V_H = \int dr' \frac{\rho(r')}{|r-r'|} \sim \frac{N}{R} V_{\zeta-e} \sim -\frac{N}{R} \quad (2.33)$$

Bu potansiyeller, nötr yük yoğunluğu $\int dr \rho^{NA}(r - R_I) = Z_I$ nedeniyle, V_H Hartree potansiyelinin eklenip çıkartılması ile perdelenebilir. Bunlar, perdelenmiş çekirdek-elektron etkileşimleri veya V^{NA} nötr atom potansiyelinden ayrıdır.

Hartree düzeltmesi $V_{\delta H}$:

$$\nabla^2 V_{\delta H} = 4\pi \left[\rho(r) - \sum_I \rho^{NA}(r - R_I) \right] \quad (2.34)$$

$$V^{NA} = \sum_K V^{NA,K}(r - R_K) = \sum_K \left\{ V_{\zeta-e}^K(r - R_K) + \int dr' \frac{\rho^{NA,K}(r - R_K)}{|r - r'|} \right\} \quad (2.35)$$

nötr atom potansiyeli sağlar. Kohn-Sham Hamiltoniyeni şimdi:

$$H = -\frac{\nabla^2}{2} + \sum_K V^{NA,K}(r - R_K) + V_{\delta H}(r) + V_{\zeta-e}(r) + V_{XC}(r) \quad (2.36)$$

biçimindedir. Aynı zamanda δE_H , Hartree düzeltmesi ve $E_{\zeta-\zeta}$, çekirdek-çekirdek etkileşmesi gibi uzun menzilli toplam enerji terimleri de vardır. Bu terimlerin sırası ile $\rho^{NA}(r)$, nötr atom elektron yoğunluğuna eklenip çıkartılması ile toplam enerji şimdi aşağıdaki gibi yazılabilir [26]. Bu ifade Eş 2.27 ile Eş 2.37 karşılaştırıldığında daha rahat anlaşılır.

$$E_{Top} = E_{BS} + \delta E_{\delta H} + \delta U_{XC} + E_{KM} \quad (2.37)$$

Burada, $\delta E_{\delta H}$ Hartree düzeltmesi:

$$\delta E_{\delta H} \equiv \int dr V_{\delta H}(r) \rho^{NA}(r) - \frac{1}{2} \int dr V_{\delta H} [\rho(r) - \rho^{NA}(r)] \quad (2.38)$$

ve kısa menzilli (KM) çekirdek etkileşme enerjisi E_{KM} :

$$E_{KM} \equiv \sum_I E_{KM}^I + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{KM}(|R_i - R_j|) \quad (2.39)$$

ifadesi ile verilmektedir. Eş. 2.39 deki E_{KM}^I ve V_{KM} enerjileri aşağıdaki şekilde verilmektedir:

$$E_{KM}^I = \frac{1}{2} \iint dr dr' \frac{\rho^{NA,K}(r) \rho^{NA,K}(r')}{|r - r'|} \quad (2.40)$$

$$V_{KM}(|R_i - R_j|) = \frac{Z_i Z_j}{|R_i - R_j|} - \iint dr dr' \frac{\rho^{NA,K}(r - R_i) \rho^{NA,J}(r - R_j)}{|r - r'|} \quad (2.41)$$

2.6. Enerji Fonksiyonelleri

Hohenberg-Kohn teoremi ve Kohn-Sham denklemlerinin en büyük avantajı, N parçacık etkileşim probleminin çözümünü tamamı ile öz uyumlu tek parçacık denklem kümesi olarak ifade etmesidir. Prensipite, verilmiş olan $E[\rho]$ toplam enerji fonksiyoneli için N parçacık etkileşim problemi çözülebilmektedir. Ancak, $E[\rho]$ toplam enerji fonksiyonelinin kesin biçimi bilinmemektedir.

Daha önce belirtildiği gibi yoğunluk fonksiyoneli teorisinin esas zorluğu, $E[\rho]$ toplam enerji fonksiyoneli belirlemektir. $\rho(r) = \rho_0$, homojen elektron gazının yoğunluğunu esas alan iyi belirlenmiş birkaç yaklaşım vardır.

2.6.1. Thomas-Fermi teorisi

İlk yoğunluk fonksiyoneli teorisi Thomas-Fermi (TF) teorisi, Hohenberg-Kohn (HK) teoremi kanıtlanmadan önce geliştirilmiştir [21]. TF toplam enerji fonksiyoneli,

homojen etkileşmeyen elektron gazından elde edilmiştir. Bu ifade Eş 2.42 de gösterildiği gibidir.

$$E_{TF}[\rho] = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10} \int dr \rho^{5/3}(r) + \frac{1}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + \int dr \rho(r)V(r) \quad (2.42)$$

ve daha sonra Thomas-Fermi-Dirac (TFD) teorisi, değiş tokuş etkisi ile bir düzeltme ekler [21].

Bu ifade:

$$E_{TF}[\rho] = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10} \int dr \rho^{5/3}(r) + \frac{1}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \int dr \rho^{1/3}(r) + \int dr \rho(r)V(r) \quad (2.43)$$

biçimde verilmiştir.

2.6.2. Yerel yoğunluk yaklaşımı ve genelleştirilmiş eğim yaklaşımı

Yerel yoğunluk yaklaşımı “Local Density Approximation” (YYY), çoğunlukla Kohn-Sham denklemlerinin çözümünde kullanılmaktadır. KS denklemlerini çözerken, sadece klasik olmayan;

$$E_{XC}[\rho] = T[\rho] - T_{KS}[\rho] + E_X[\rho] + E_C[\rho] \quad (2.44)$$

yaklaşımı yapılmalıdır. Etkileşmeyen Kohn-Sham enerjisi için, tahminen küçük düzeltmeler vardır ve bunlar homojen elektron gazının yüksek ve düşük yoğunluk limitleri için doğru olarak hesaplanabilir ve ρ_0 homojen elektron gazı yoğunluğu olarak eklenebilir [27]. Sonuç, yoğunluk için rasyonel çok terimli olarak eklenilebilir [28]. YYY’da homojen olmayan elektron gazı enerjisi, aşağıdaki yerel yaklaşımlar kullanılarak hesaplanmaktadır:

$$E_{XC}[\rho(r)] = \int dr \rho(r) \varepsilon_{XC}^{\rho_0}[\rho(r)] \quad (2.45)$$

$$\varepsilon_{XC}^{\rho_0} = \frac{E_{XC}(\rho_0)}{\rho_0} \quad (2.46)$$

Yerel yoğunluk yaklaşımını genişletmek için doğal bir yol, ona safsızlık hakkında bilgi dahil etmektir. $|\nabla \rho(r)|$, yerel eğimin büyüklüğü safsızlığın bir ölçüsüdür ve bu bilgi $E_{XC}(r) = E_{XC}(\rho(r), |\nabla \rho(r)|)$ değiş tokuş-korelasyon fonksiyonelinin içine dahil edilebilir. İlk denklemler, $|\nabla \rho(r)|$ yerel eğimin usulüne göre saf genişlemenin orijinal yerel yoğunluk yaklaşımından daha az doğru olduğu izlenimini bırakmıştır. YYY'nın başa çıkamadığı durumlarda bazı sınırlamaların çiğnenmesiyle saf eğim genişlemesi ortaya çıkar. Eğim genişlemesinin fiziksel olmayan sistemlere karşılık gelmesi, YYY'nın fiziksel sistemden başka bir yaklaşıklıkla karşılık gelmesi ile yorumlanır. Genelleştirilmiş eğim yaklaşımı “Generalized Gradient Approximation” (GEY), ρ_{XC} üzerine bilinen birçok kısıtlamaların zorla toplandığı açıkça düzenlenmiş bir fonksiyonel tarafından ortaya konulmuştur [13]. YYY ve GEY’deki E_{XC} değiş-tokuş korelasyon fonksiyonelleri sırası ile aşağıdaki biçimde verilebilmektedir:

$$E_{XC}^{YYY}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}^{\rho}[\rho(r)] dr \quad (2.47)$$

$$E_{XC}^{GEY}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}^{GGA}[\rho(r), \nabla \rho(r)] dr \quad (2.48)$$

E_{XC} YYY’da sadece $\rho(r)$ yoğunluk değişkenine bağlı iken GEY’da $\rho(r)$ yoğunluk değişkeni ve onun eğimi $\nabla \rho(r)$ ’ye bağlıdır [29]. Genellikle kullanılan GEY fonksiyonelleri, PW91, PBE ve RPBE dir [13-15].

2.7. Sözde-Potansiyel Yaklaşımı

Bir deęiş tokuş–korelasyon fonksiyonelinin seçilmiş olmasıyla, sistem bir $V_{\zeta-e}(r)$ dış potansiyeline kadar tanımlanmıştır. Potansiyel, çekirdeęe en yakın yörüngeler yakınında tekildir ve özellikle gerçek-uzay temelleri kullanılırken Kohn-Sham denklemlerinin çözümünde buna dikkat edilmelidir.

Atomlar katıyı oluşturmak için bir araya geldiğinde, her bir atom etrafına yerleşmiş kor elektronları sadece diğer atomların kor elektronları ile zayıfça etkileşecektir. Sözde-potansiyel yaklaşımında, kor elektronları donmuş kabul edilir. Aslında, onlar daha çok bir dış potansiyel üreten çekirdek gibi davranırlar. Orijinal referans veya atomun bütün elektronlarının toplam dış potansiyeli, çekirdek ve kor elektronlarını kapsayacak şekilde düzgün ve tekil olmayan bir potansiyel ile deęiştirildikten sonra deęerlik elektronlarına etkiyen sözde-potansiyel olarak bilinir.

Kor elektronları çıkarıldığı zaman, toplam enerjinin büyük bir kısmı görmezden gelinilmiş olur. Bu yüzden sadece deęerlik yüklerinin yeniden düzenlenmesinden dolayı toplam enerjideki deęişmeler sözde-potansiyel hesaplamalarında anlamlı hale gelir. Bu, çekirdeklerin komşu atomlar ile zayıfça etkileştięi ve onların çevresine duyarlı olmadığı sürece kabul edilebilir.

Sözde-potansiyel veya sözde-yörüngemsilerin öz durumları'nın kor elektronlarına dik olması gerekmedięi için kor durumları fiilen çıkarılmıştır ve o yüzden kor durumları $r < r_c$ kor bölgesinde düğümsüzdür. Sonuç olarak, sözde-yörüngemsilerin sayısal bir ızgara (grid) üzerinde gösterimi, genellikle atomun orijinal bütün elektronlarının yörüngemsileri gösteriminden daha düzgün ve daha kolaydır. $r > r_c$ kor bölgesinin dışında, sözde-potansiyeller ve sözde-yörüngemsiler bütün elektron potansiyel ve yörüngemsilerine özdeştir.

Ampirik, sözde-potansiyeller bir sistemin hacım (bulk) özelliklerini ayarlamaya dayanır. Sözde-potansiyellerin bulk sistemler için deneysel sonuçlar ile iyi uyuşması

şaşırtıcı değildir. Bununla birlikte, bu potansiyeller çok taşınabilir değildir, şöyle ki bu potansiyeller bulk' dan farklı kimyasal çevreler ile birlikte sistemleri modellemek için kullanıldığında çalışmayabilir.

Bir atomun bütün elektronları için Kohn-Sham problemini çözmenin ilk adımı, kor durumlarını ve değerlik durumlarını hesaba katmaktır. Bu, bütün elektron dalga fonksiyonu $\{\Psi_{BE}\}$ ve bütün elektron potansiyelini $V_{BE}(r)$ verir. V_{SP} sözde-potansiyel aşağıdaki sınırlamaları gidermek için tasarlanmıştır;

1) Bütün elektron öz değerleri sözde-potansiyel öz değerlerine eşittir.

$$E_{BE} = E_{SP} \quad (2.49)$$

2) Kesilim (Cutoff) yarıçapı r_c dışındaki potansiyel bütün elektron potansiyeline Özdeştir.

$$V_{SP}(r > r_c) = V_{BE}(r > r_c) \quad (2.50)$$

3) Sözde-yörüngemsiler (sözde-potansiyelin öz durumları) r_c kesilme yarıçapı dışında, bütün elektron öz durumları için özdeştir.

$$\Psi_{SP}(r > r_c) = \Psi_{BE}(r > r_c) \quad (2.51)$$

4) r_c içerisinde sözde-potansiyel ve bütün elektron potansiyeli için yük aynıdır.

$$\int_0^{r_c} dr r^2 |\Psi_{SP}(r)|^2 = \int_0^{r_c} dr r^2 |\Psi_{BE}(r)|^2 \quad (2.52)$$

Birinci sınırlama, sözde-atom ve bütün elektron atomunun değerlik enerjilerinde aynı spektruma sahip olmasını sağlar. İkinci sınırlama, kor bölgesi dışındaki potansiyelin

sözde-potansiyel yaklaşımı tarafından değiştirilmediğini sağlar. Üçüncü ve dördüncü sınırlamalar, bütün elektron atom ve sözde-atomun logaritmik türevlerinin r_c kesilme yarıçapı dışında birinci kurala uymasını sağlar. Genelde kesilme yarıçapı r_c küçüldükçe sözde-potansiyel daha taşınabilir. Bununla birlikte, kesilme yarıçapının azaltılmasıyla, sözde-potansiyeli doğru olarak göstermek için daha ince bir grid ve daha fazla düzlem dalga gereklidir, bu anlamda sözde-potansiyel zorlaşır. Bu Kohn-Sham denklemlerini çözmek için gerekli, düzlem dalga yaklaşımları ile ilgili husustur [24].

2.7.1. Norm-Conserving sözde potansiyeller

Sözde potansiyel yöntemlerin temel gereksinimi valans yoğunlukları ile kimyasal bağları birleştirmeyi sağlamaktır. Bu ise, sözde ve tüm-elektron dalga fonksiyonlarının çekirdek yarıçapı etrafında benzer özellik göstermesini gerektirir. Sözde dalga fonksiyonlarından ötürü norm-conserving potansiyele ihtiyaç duyulmuştur. Bu potansiyellerin her biri sadece bir elektron taşıyabilir. Dolayısıyla sözde potansiyellerin saçılma özellikleri istenilen şekilde sonuç vermiş olur. Sözde potansiyel oluşturmak için seçilen metot şu şekildedir. Tüm-elektron hesaplamaları seçilen elektronik konfigürasyonda izole atomlar için yapılır. Bu, atomlar için valans elektron dalga fonksiyonun ortaya çıkmasını sağlar. İyonik sözde potansiyel için parametrize form seçilir. Daha sonra bu parametreler ayarlanır. Tüm-elektron atomlardaki gibi aynı değiş tokuş-korelasyon potansiyeli ile yapılan sözde atom hesaplamaları sözde dalga fonksiyonu Ψ_{ps} yi verir. Bu prosedür sözde dalga fonksiyonu parametrize edildiğinde radyal Kohn-Sham eşitliklerinin doğrudan ters çevrilmesini öngörür. Eğer her bir dalga fonksiyonu, sözde ve tüm-elektron fonksiyonları normalize edilmiş ise norm-conserving kısıtlaması çekirdek yarıçapı dışındaki fonksiyonlar için de uyumlu hale gelir.

2.7.2. Ultrasoft Sözde potansiyeller

Ultrasoft sözde potansiyeller Vandervilt tarafından 1990 yılında tanıtılmıştır [10]. Bu çalışma düzlem dalga temel seti için uygun olabilecek düşük kesilim enerjisi ile hesap yapmayı öngörmüştür.

Diğer bir ultrasoft potansiyel yaklaşımı da yüksek kesilim enerjili durumlarda sadece düzlem dalga seti için gereklidir. Bu, sıkı bağlı orbitallerin sahip olduğu atomların kor bölgesi içindeki ağırlıklarının dikkate alındığı durumlar için geçerlidir. Böylesi durumlarda temel seti indirgemek için uygulanan tek yol kor bölgesindeki orbitallerle yük durumunun birleşiminden oluşan durumun norm-conserving potansiyelle uyuşmasıdır. Böylece sözde dalga fonksiyonu, kor içindeki durum kadar kolay elde edilebilir hale gelmiş olur.

Teknik olarak bu, genelleştirilmiş ortonormal durumun ortaya çıkmasıyla başarı sağlayabilmiştir.

2.8. Bloch Teoremi

Periyodik bir potansiyelde Schrödinger denklemi çözümlerinin alacağı özel şekil F.Bloch tarafından verilmiştir [30].

$$\Psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}).e^{i\vec{k}.\vec{r}} \quad (2.55)$$

Burada $u_k(\vec{r})$ kristal örgünün periyoduna sahip bir fonksiyondur: $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{T})$, bu sonuç Bloch teoremi olarak şöyle ifade edilir: Periyodik bir potansiyelde, dalga denkleminin öz fonksiyonları $e^{i\vec{k}.\vec{r}}$ düzlem dalgası ile kristal örgüsünün periyoduna sahip bir $u_k(\vec{r})$ fonksiyonunun çarpımı şeklinde yazılabilir [15]. Bu yapıdaki tek elektron dalga fonksiyonuna Bloch fonksiyonu denir ve ilerleyen dalgaların toplamı olarak yazılabilir [30].

3. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ALAŞIMININ ÖZELLİKLERİ

III-V grubu nitratlar bilimsel ve teknolojiksel özelliklerinden dolayı son yıllarda kapsamlı bir şekilde araştırılmaktadırlar [1-2]. Yasak enerji aralıkları sırasıyla 1,9 eV, 3,4 eV ve 6,2 eV olan InN, GaN ve AlN yapılarının wurtzite bileşimlerini elde etmek mümkündür [3-6]. Bu bileşimlerden yeşilden morötesi bölgeye kadar dalga boyu aralığında aktif olan optik cihazlar üretilebilmektedir [7].

Son on yılın ortalarına kadar sadece hegzagonal wurtzite fazdaki GaN için yapılmış hesaplamalar vardı [8]. Fakat son zamanlarda yapılan çalışmalarla zinc-blende tipli GaN için de başarılı sonuçlar elde edildi [8].

III-V bileşikli yarıiletkenlerin genel özelliklerine göre, zinc-blende GaN, kontrol edilebilen n-tipi ve p-tipi katkılılar için wurtzite'dan daha iyi sonuçlar vermiştir. Ayrıca kübik GaN, yüksek sürüklenme hızına ve wurtzite yapıdan daha düşük bant-aralığına sahiptir [9]. AlN'da her iki wurtzite ve zinc-blende yapıda çalışma yapılmasına uygun bir yapıya sahiptir [9]. Değişik elektron bant yapılarıyla iki kristal fazdaki GaN ve AlN'ın varlıkları $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşım sistemi için başka merak konuları daha uyandırmıştır.

Doğrudan ve dolaylı enerji yapıları, elektron ve holl etkin kütleleri III-V nitrat alaşımlarının bant yapı hesaplamalarının yapılabilmesi için gereken oldukça kritik parametrelerden bazılarıdır. Bununla beraber $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ için bu parametrelerin tam olarak bilinmesi de çok büyük bir önem taşımaktadır.

Günümüzde literatürdeki teorik ve deneysel bilgiler, zinc-blende $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ için elektronik bant parametre hesabı yapılması konusunda çalışmalar yapılmasını gerektirmiştir [2]. Bu amaç doğrultusunda virtual kristal yaklaşımı (VCA) altında deneysel sözde potansiyel metodu (EPM) kullanılmıştır. Bant offset hesaplamalarında katı teorisinin temeli kullanılmaktadır [31].

Bu teoriye göre iki asıl durum mevcuttur. Birincisi özel bulk yarıiletkenleri 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.

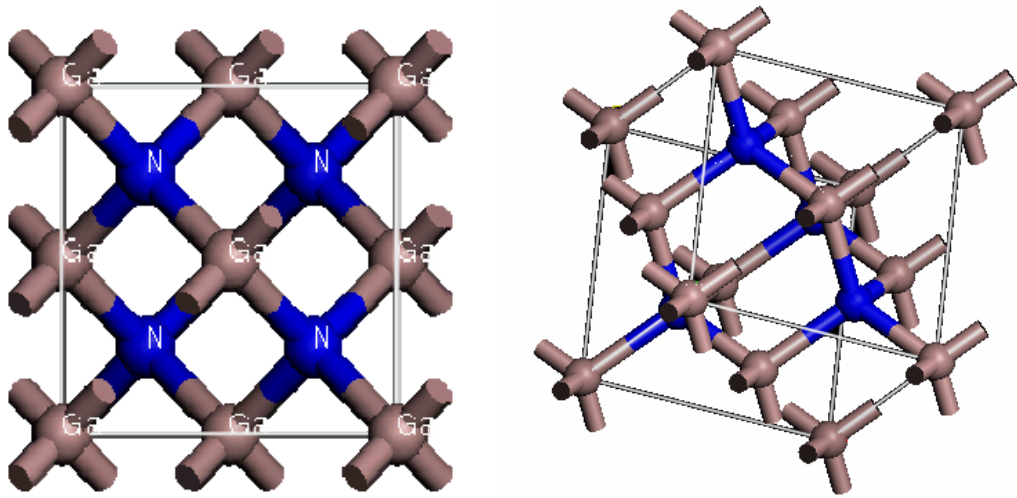
Bant-aralığı enerjisi E_g alaşımların temel karakteristiğidir. Birçok uygulama için materyal oluşum üzerindeki bant-aralığı bağımlılığının bilinmesi çok önemlidir. Çoğu materyal sistemlerde bu bağımlılık lineer değildir. Bununla beraber parabolik yaklaşımı, bowing parametresi kullanılarak hesaplayabiliriz.

$$E_g (Al_xGa_{1-x}N) = x E_g (AlN) + (1-x) E_g (GaN) - bx (1-x) \quad (3.1)$$

şeklinde ifade edilir [32].

Burada x , Al miktarını, $E_g (AlN)$, AlN'in bant-aralığı enerjisini ve $E_g (GaN)$ ise GaN'in bant-aralığı enerjisini gösterir.

3.1. GaN Yarıiletkenin Özellikleri



Şekil 3.1. GaN birim hücresi.

GaN'ın birim hücresi Şekil 3.1' de, bileşimi oluşturan atomların konumları ile gösterildi. GaN ve GaN tabanlı III-V nitrürleri geniş bant enerji aralığına sahip yarıiletkenler olarak morötesi-yeşil ışık aralığındaki emisyon cihazları ve yüksek sıcaklıkta çalışan elektronik cihazlardaki uygulamaları nedeniyle büyük ilgi çekmektedirler.

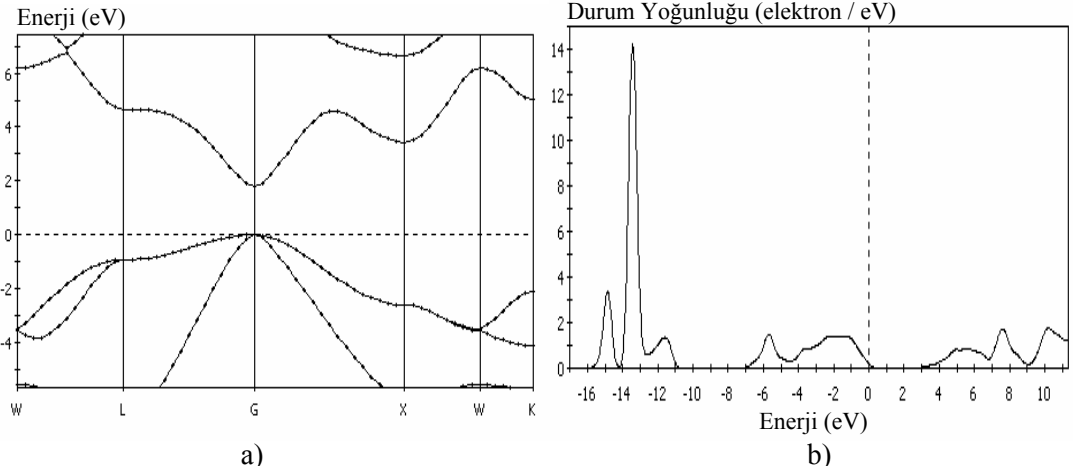
GaN doğrudan geçişli bant enerji aralığına sahiptir ve kimyasal olarak kararlıdır. Bu özellikler onun mavi ve morötesi ışık yayan diyotlar ve dedektörlerin fabrikasyonu için uygun materyal olmasını sağlamaktadır.

Genellikle daha çok çalışılan Si ve GaAs yarıiletkenleri ile karşılaştırıldığında GaN hakkında bilgilerimiz daha azdır. Büyük n-tipi taşıyıcı konsantrasyonu (yoğunluğu), uygun alttaş materyal eksikliği, GaN için p-tipi katkı yapmadaki zorluklar geçmişte birçok araştırmacıyı GaN üzerinde araştırma yapmaktan uzak tutmuştur.

Geniş bant enerji aralığına sahip değişik kalitede üretilen yarıiletkenler için olduğu gibi GaN'ın kabul edilebilir birçok fiziksel özelliği literatürlerde mevcuttur. GaN aynı zamanda sertliği nedeniyle koruyucu kaplama için de iyi bir adaydır [33].

Genellikle III-V nitratlarla ilgili yapılan araştırmalar wurtzite fazda olmuştur. Bu nitratların çoğu safir yüzeyler üzerinde geliştirilmiştir. Buna rağmen Mizuta ve arkadaşları [34] GaAs (001) yüzeyinde zinc-blende GaN çalışmıştır.

Bu çalışmalarla beraber zinc-blende nitratlar üzerinde geniş çaplı araştırmalar yapılmaya başlanmıştır [35,36]. Zinc-blende GaN bazlı ışık yayan diyotlardaki gelişmeler GaAs taban üzerinde yapılmıştır [37].



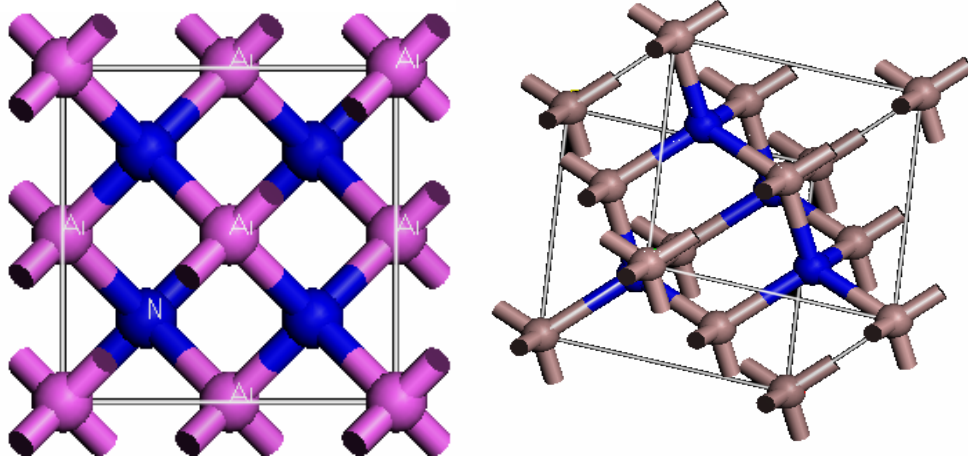
Şekil 3.2. Zinc-blende GaN için CASTEP ile hesaplanan a)Enerji-bant, b)Durum yoğunluğu grafiği.

Her katı madde elektronlar içerir. Kristaldeki elektronlar, elektron yörüngelerinin bulunamadığı enerji bölgeleriyle ayrılmış enerji bantları içinde yer alırlar. Enerji aralıkları veya bant aralıkları denilen bu yasak bölgeler iletkenlik elektron dalgalarının kristal iyonları ile etkileşimleri sonucu oluşurlar.

Bant aralığı, iletkenlik bandının en düşük enerjisi ile valans bandının en yüksek enerjisi arasındaki enerji farkına denir. İletkenlik bandının en düşük noktası iletkenlik bant kıyısı, valans bandının en yüksek noktası ise valans bant kıyısı olarak adlandırılır. Valans bandının maksimum noktasıyla iletkenlik bandının minimum noktası aynı doğrultuda olan geçişlere doğrudan geçiş denir.

Literatürde yapılan çalışmalar sonucunda ve Şekil 3.2'den de anlaşılabileceği gibi GaN yarıiletkeninin valans bandının maksimum noktasıyla iletkenlik bandının minimum noktası aynı doğrultuda olduğundan dolayı doğrudan geçişe sahiptir.

3.2. AlN Yarıiletkenin Özellikleri



Şekil 3.3. AlN birim hücresi.

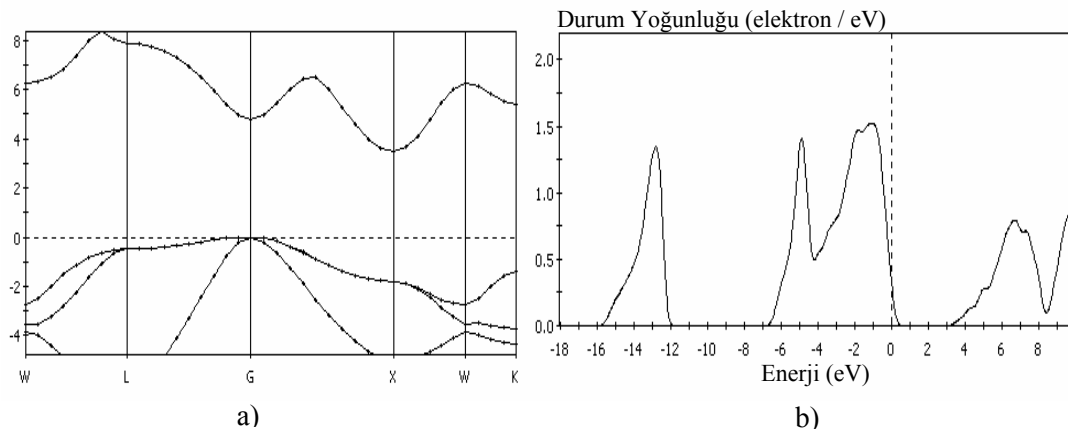
Birim hücresi Şekil 3.3’de gösterilen AlN, yararlı birçok mekaniksel ve elektroniksel özelliğe sahiptir. Örneğin sertliği, yüksek termal iletkenliği, kristalize olmamış formda yakıcı birleşimi, yüksek sıcaklığa karşı olan direnci, Si ve GaAs ile termal uyumluluğu AlN’in elektronik paket uygulamaları için çekici hale gelmesini sağlamıştır.

AlN’in yarıiletken alet uygulamalarında izole edilmiş materyal olarak kullanılması, onun geniş bant aralığı aralığına sahip olmasından kaynaklanmaktadır.

AlN yarıiletkeni için en çok merak edilen konu, AlGaN / GaN bazlı elektronik ve optik alet fabrikasyonunun oluşumu ve GaN ile üretilen AlGaN alaşım formunun özelliklerinin bilinmesidir. Bunlardan ilki ultravioleto bölgede yeşil dalga boyu için aktif hale gelmektedir.

AlN, araştırılması kolaylıkla yapılabilen bir materyal değildir. AlN’in geliştirilmesinde oksijen ve alüminyumun yüksek reaktivitesi önemli bir rol oynar. Önceden yapılan ölçümler, oksijen kirlenmesinin materyallerin enerji bant

aralıklarında hatalara neden olduğunu göstermiştir. Son zamanlarda yapılan çalışmalar sonucu AlN'in birçok fiziksel özelliği güvenilir biçimde tarif edilmiş ve bulk AlN sentezlenmiştir [38].



Şekil 3.4. Zinc-blende AlN için CASTEP ile hesaplanan a)Enerji-bant, b)Durum yoğunluğu grafiği.

Valans bandının maksimum noktasıyla iletkenlik bandının minimum noktası aynı doğrultuda olmayan geçişlere dolaylı geçiş denir.

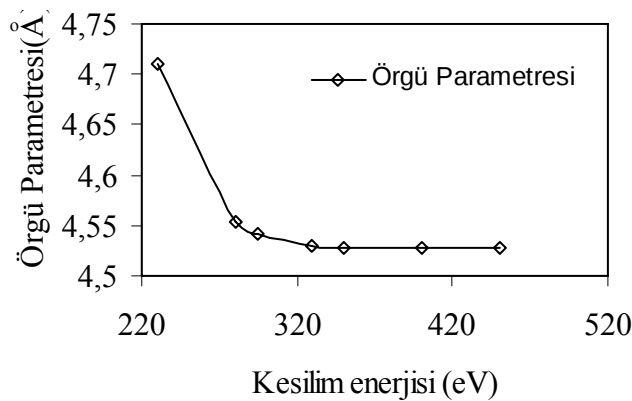
Literatürde yapılan çalışmalar sonucunda ve aynı zamanda Şekil 3.4'den de anlaşılacağı gibi AlN yarıiletkeninin valans bandının maksimum noktasıyla iletkenlik bandının minimum noktası aynı doğrultuda olmadığı için dolaylı geçişe sahiptir.

4. ARAŞTIRMA BULGULARI

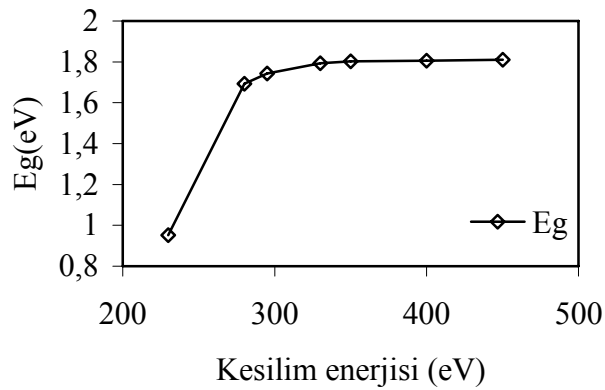
4.1. Zinc-blende GaN ve AlN Yarıiletkenlerinin Bulk Özellikleri

Yoğunluk fonksiyon teorisi ile ilgili yapılan hesaplamalarda giriş parametrelerinin (kesilim enerjisi, k-nokta sayısı vb.) tayini sonuçlar üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Bu yüzden $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımının x 'e bağlı özelliklerinin hesaplanmasından önce $x=0$ a karşılık gelen GaN ve $x=1$ e karşılık gelen AlN hakkındaki giriş parametre tayinleri oldukça büyük bir önem taşımaktadır.

CASTEP paket programında genelleştirilmiş eğim yaklaşımı içerisinde PBE fonksiyoneli ve ultrasoft sözde potansiyelde k-nokta sayısı $2 \times 2 \times 5$ kullanılarak yapılan geometrik optimizasyonlar sonucunda zinc-blende GaN için elde edilen örgü parametresinin kesilim enerjine karşı değişimi Şekil 4.1 de verilmektedir. Şekil 4.1 dikkatle incelendiğinde örgü parametresinin değerinin 320 eV kesilim enerjisinden sonra önemli bir değişime uğramadığı görülmektedir. 330-350 eV kesilim enerjisi arasında örgü parametresindeki değişimin %0,0005 olduğu tespit edildi.

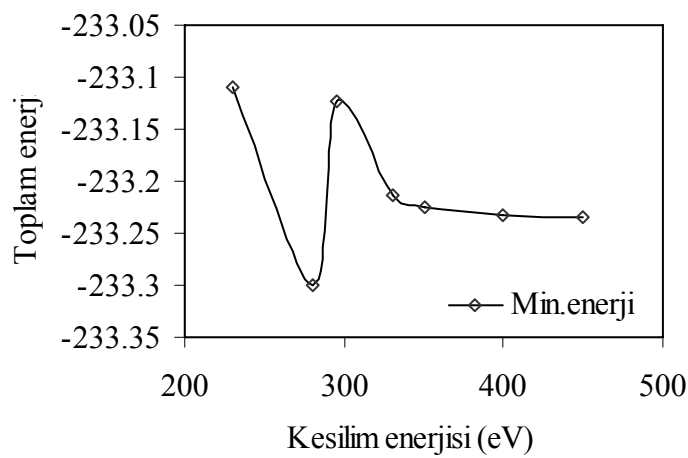


Şekil 4.1. GaN yarıiletkeni için kesilim enerjisi-örgü parametresi grafiği.



Şekil 4.2. GaN yarıiletkeni için kesilim enerjisi-Eg grafiği

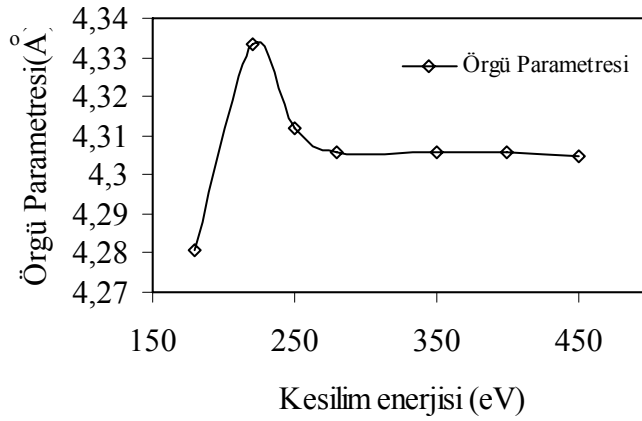
Şekil 4.2 dikkatle incelendiğinde ise kesilim enerjisi değeri arttıkça bant-aralığı da arttığını ve 330 eV dan sonra sabit değer aldığını görülür. 330-350 eV kesilim enerjisi arasında bant-aralığı değişimin %0,005 olduğu tespit edildi.



Şekil 4.3. GaN yarıiletkeni için toplam enerji-kesilim enerjisi grafiği.

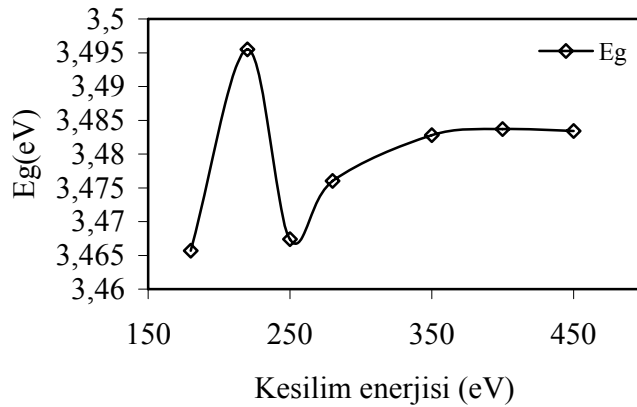
Şekil 4.3'ten 330 eV dan öncesinde kesilim enerjisi değıştikçe toplam enerjinin azalıp arttığını fakat 330 eV dan sonrasında sabitlendiğini, toplam enerjinin değışmediğini görülür. 330-350 eV kesilim enerjisi arasında toplam enerji değışimin %0,00005 olduğu belirlendi.

Aynı durumlar AlN yarıiletkeni için de incelenirse;



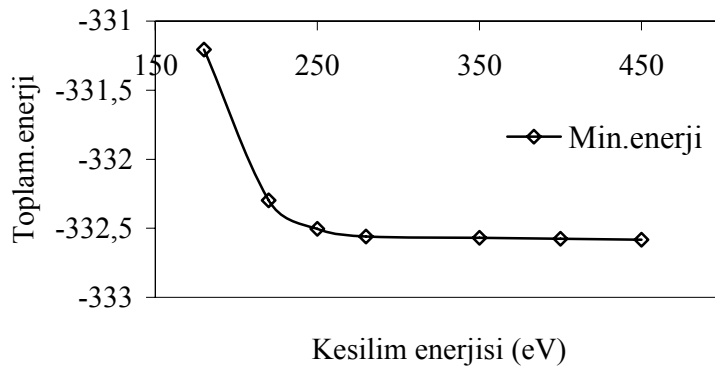
Şekil 4.4. AlN yarıiletkeni için kesilim enerjisi-örgü parametresi grafiği.

Örgü parametresinin değerinin 280 eV kesilim enerjisinden sonra önemli bir değişime uğramadığı Şekil 4.4'den görülmektedir. 280-350 eV kesilim enerjisi arasında örgü parametresindeki değişimin %0,00005 olduğu tespit edildi.



Şekil 4.5. AlN yarıiletkeni için kesilim enerjisi-Eg grafiği

Şekil 4.5 incelendiğinde ise enerji-bant aralığının 280 eV kesilim enerjisinden sonra önemli bir değişime uğramadığı görülür. 280-350 eV kesilim enerjisi arasında bant-aralığı değişimin %0,002 olduğu tespit edildi.



Şekil 4.6. AlN yarıiletkeni için toplam enerji-kesilim enerjisi grafiği.

Şekil 4.6 incelendiğinde ise toplam enerjinin 280 eV kesilim enerjisinden sonra önemli bir değişime uğramadığı görülür. 280-350 eV kesilim enerjisi toplam enerji değişiminin %0,00002 olduğu tespit edildi.

Çizelge 4.1. Zinc-blende bulk GaN için CASTEP ile yapılan ölçüm değerleri.

GaN							
Kesilim Enerjisi(eV)	230	280	295	330	350	400	450
Örgü Parametresi a(Å)	4,598	4,553	4,541	4,529	4,527	4,528	4,527
Enerji-bant aralığı (eV)	0,95	1,69	1,74	1,79	1,80	1,80	1,80
Toplam enerji(eV)	-233,11	-233,30	-233,31	-233,32	-233,33	-233,32	-233,32

Çizelge 4.2. Zinc-blende bulk AlN için CASTEP ile yapılan ölçüm değerleri.

AlN

Kesilim Enerjisi(eV)	180	220	250	280	350	400	450
Örgü Parametresi a(Å)	4,280	4,333	4,311	4,305	4,305	4,305	4,304
Enerji-bant aralığı (eV)	3,46	3,49	3,46	3,47	3,48	3,48	3,48
Toplam enerji(eV)	-331,20	-332,20	-332,50	-332,56	-332,56	-332,57	-332,58

Çizelge 1 ve Çizelge 2’de bulk GaN ve AlN ile ilgili yapılan çalışma sonuçları gösterildi. Lineerliğin tam olarak sağlandığı 350 eV kesilim enerjisi değerinin $Al_xGa_{1-x}N$ alaşımı için yapılacak hesaplamalarda en uygun değer olduğu kanısına varıldı ve hesaplamalar 350 eV kesilim enerjisinde yapıldı.

Çizelge 4.3. Zinc-blende bulk GaN için yapılan örgü parametresi ve enerji-bant değerleri.

GaN

	CASTEP GGA- PBE	GGA-PBE [23]	GGA-PW [22]	DENEYSEL	YYY (LDA)
Örgü parametresi a(Å)	4,527	4,558	4,468	4,49 [13] 4,54 [29]	4,537 [39]
Enerji-bant aralığı (eV)	1,80	1,83	1,83	3,2 [33] 3,3 [34]	3,4 [40]

Çizelge 4.4. Zinc-blende bulk AlN için yapılan örgü parametresi ve enerji-bant değerleri.

AlN

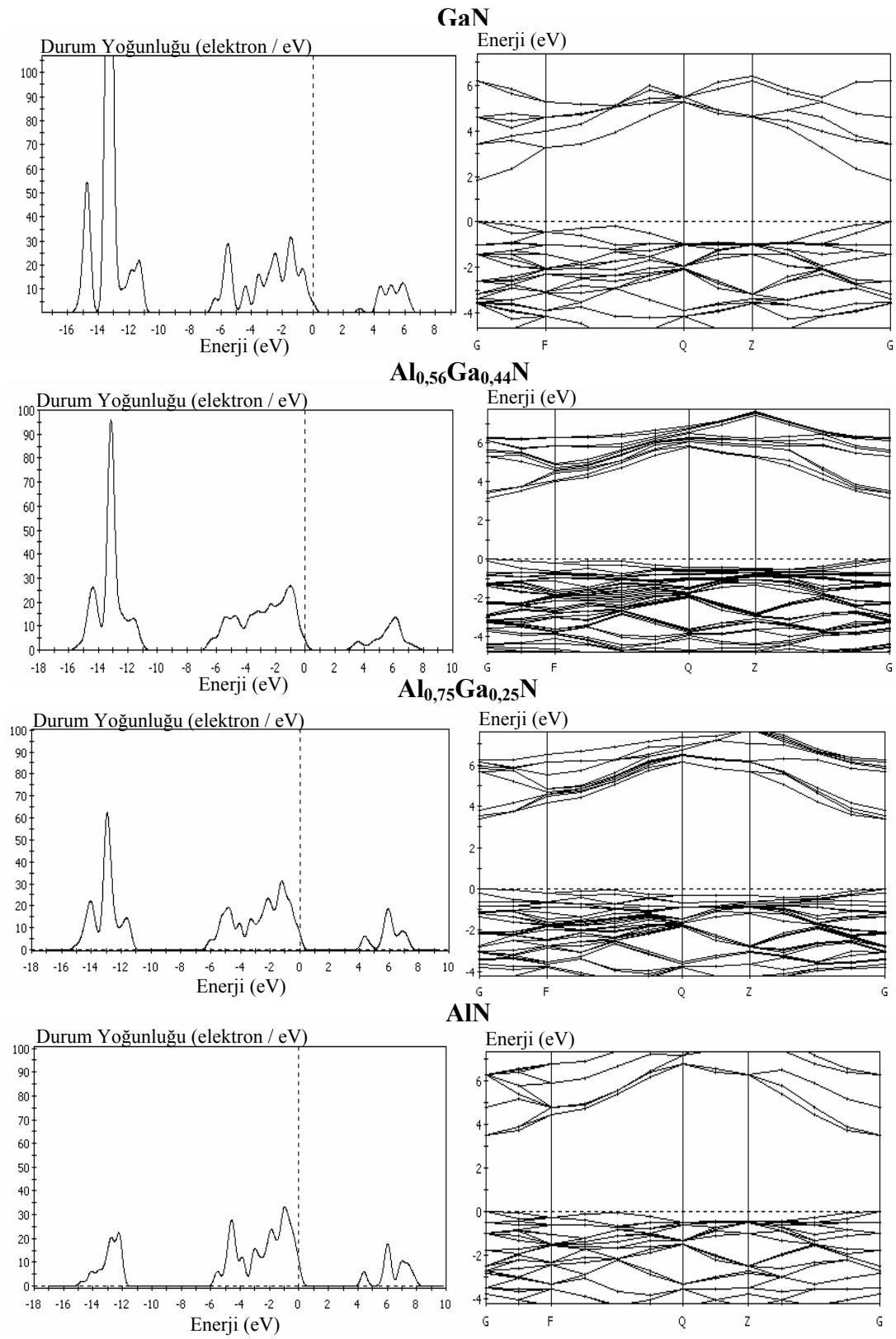
	CASTEP GGA- PBE	GGA-PBE [23]	GGA-PW [22]	DENEYSEL	YYY (LDA)
Örgü parametresi a(A)	4,305	4,417	4,353	4,38 [14]	4,376 [39]
Enerji-bant aralığı (eV)	3,48	3,32	3,24	6,28 [30]	6,2 [41]

Çizelge 4.3 ve Çizelge 4.4'den de görüldüğü gibi zinc-blende bulk GaN için örgü parametresi 4,529 angstrom, enerji-bant aralığı ise 1,80 eV ve zinc-blende bulk AlN için örgü parametresi 4,305 angstrom, enerji-bant aralığı ise 3,47 eV bulundu.

Çizelge 4.3 ve Çizelge 4.4'deki CASTEP ile yaptığımız hesaplama sonuçlarıyla beraber diğer hesaplama sonuçları verildi.

Bu hesaplamalar yapılırken yoğunluk fonksiyoneli teorisinde bulunan GEY'daki FP-LAPW (full potential linearized augmented) metodu [42,43] ve iki değişik değiş-tokuş korelasyon potansiyeli kullanıldı.

Bunlardan ilki Perdew ve Wang (PW) [44], diğeri ise Perdew, Burke ve Ernzerhof (PBE)'nin GEY potansiyelidir [45]. Değiş,tokuş-korelasyon potansiyeli için kullanılan YYY'da ise yine yoğunluk fonksiyoneli teorisine dayanan Kohn-Sham teoremi kullanıldı [46].



Şekil 4.7. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımının enerji-bant diyagramı ve durum yoğunluğunun yoğunluğa bağlı değişim grafiği.

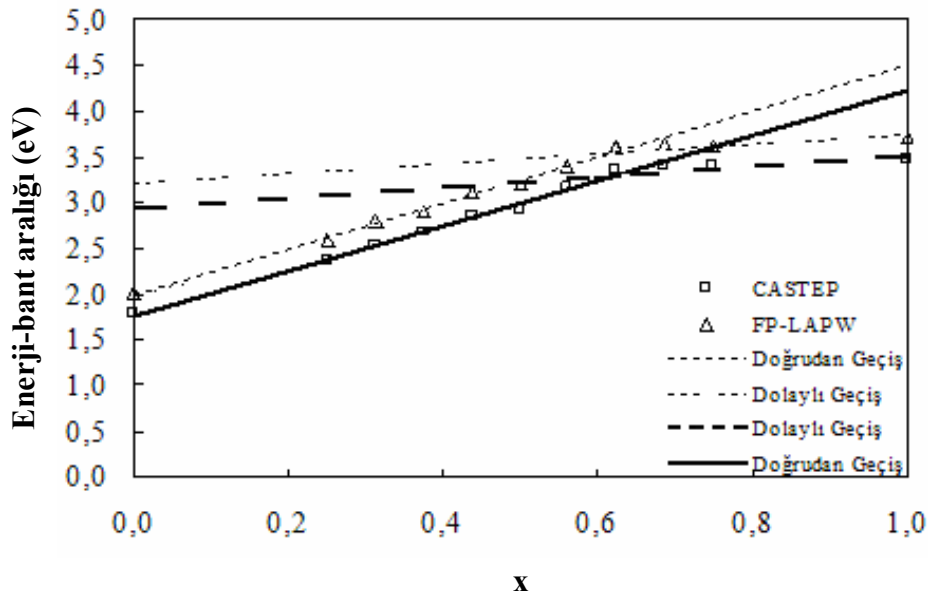
Şekil 4.7’de durum yoğunluğu ve enerji-bant diyagramı seçilen belirli yoğunluklar için gösterildi. Şekilden de açıkça görülmektedir ki; $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımının enerji-bant diyagramı ve durum yoğunluğu, yoğunluğa bağlı olarak yapısal bir değişiklik göstermemektedir. Bunun yanı sıra Γ noktasından enerji-bant aralığı takip edildiğinde GaN’dan AlN’a geçişte x’i değiştirirken Al yoğunluğuna bağlı olarak değerlerin arttığı görülmektedir. Durum yoğunluğundaki değişim göz önüne alındığında kor bölgesinde Ga için $3d^{10}4s^24p^1$ durumundan $3d^{10}$ katkısı geldiğinden şiddet daha fazla, AlN’a gittikçe Al için $3s^23p^1$ de $3d^{10}$ katkısı gelmediğinden şiddetin daha az olduğu görülmektedir.

Çizelge 4.5. Zinc-blende $2\times 2\times 1$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı ve $1\times 1\times 1$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı için değişik Al yoğunluğuna karşı değişim değerleri.

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

x	Enerji-bant aralığı (eV) $2\times 2\times 1$	Enerji-bant aralığı (eV) $1\times 1\times 1$ [47]
0	1,79	2,01
0,25	2,37	2,6
0,3125	2,54	
0,375	2,68	
0,4375	2,83	
0,5	2,92	3,2
0,5625	3,16	
0,625	3,36	
0,6875	3,42	
0,75	3,39	3,63
0,8125	3,44	
0,875	3,46	
0,93	3,49	
1	3,48	3,71

Çizelge 5’deki ilk hesaplama zinc-blende $2 \times 2 \times 1$ süperhücre $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı için CASTEP programı ile tüm Al yoğunlukları için ve ikinci hesaplama zinc-blende $1 \times 1 \times 1$ süperhücre $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı için yoğunluk fonksiyoneli teorisindeki FP-LAPW metodu kullanılarak Al yoğunluğu 0, 0,25, 0,75 ve 1 olduğu durumlar için yapıldı [47]. Sonuçlar aralarındaki farklılığın yapılardaki değişiklikten ve kullanılan metotlardan kaynaklandığını söyleyebiliriz.



Şekil 4.8. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımının enerji-bant aralığının x'e bağlı değişimi.

Şekil 4.8’de CASTEP ile hesapladığımız enerji-bant aralığı grafiği ile Agrawal ve arkadaşları tarafından FP-LAPW metoduyla hesaplanmış olan enerji-bant aralığı grafiği karşılaştırmalı olarak verildi. Hesaplama YFT yapısı içindeki FP-LAPW metoduyla YYY değiş tokuş-korelasyon potansiyeli ile yapıldı [47]. FP-LAPW metodunda kristal ve yüzeylerin elektronik ve manyetik özelliklerinin ayrıntılı olarak hesaplanması öngörülür.

APW (augmented plane wave) metodu [48-52] ve özellikle onun lineerleştirilmiş formu LAPW [53-61] metodu YFT teorisinde kullanılan sistemler için tanımlanır [62,63]. FP-LAPW metodunun başarı sağlamasının altında WIEN programının

kullanılması yatmaktadır. Bu program Blaha ve Schwarz tarafından geliştirilmiştir [60]. Bu kod elektrik alan gradyentleri gibi geniş alan içeren programlara [64,65], yüksek sıcaklıktaki yarıiletken sistemlere [66], minerallere [67], dönüşüm metallerinin yüzeylerine [68] ve hatta moleküllere [69] bile uygulanmıştır. Şu ana kadar FP-LAPW metodunun en büyük sorunu APW metoduna göre daha fazla efor sarf ettiriyor olmasıdır [70].

Al yoğunluğunun yaklaşık $x=0,6$ 'dan küçük olduğu yerlerde doğrudan geçiş, büyük olduğu yerlerde ise dolaylı geçiş gözlemlenmektedir [16].

Literatürde yapılmış olan çalışmalarda enerji aralığındaki doğrudan geçişin Γ noktasında, dolaylı geçişin ise X noktasında gerçekleştiği görülmektedir. Bizim yapmış olduğumuz hesaplamalar sonucunda da aynı durum elde edildi.

Çizelge 4.6. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımının ($\Gamma\Gamma$) ve (ΓX) noktalarına karşı gelen bowing parametre değerleri.

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, b (eV)

	Bu çalışma	LMTO-ASA 1x1x1 [71]	FP-LAPW 1x1x1 [72]	LMTO 1x1x1 [73]	FP-LMTO 1x1x1 [74]
b($\Gamma\Gamma$)	0,1	-0,4	0,36	0,62	0,4
b(ΓX)	-0,04	0,04	0,092		-0,04

Şekil 4.8'de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımının doğrudan ve dolaylı bant geçişleri, çizelge 6 da ise diğer hesaplama sonuçları ile bizim yaptığımız hesaplama sonuçları gösterilmektedir.

Bizim yaptığımız hesaplamalar sonucu doğrudan bant geçişinde bowing parametre değeri b($\Gamma\Gamma$) 0,1eV, dolaylı bant geçişinde bowing parametre değeri b(ΓX) değeri -0,04 eV bulundu.

Çizelge 5.6 incelendiğinde; (a) Albanesi ve arkadaşları [71] LMTO-ASA metodunu kullanarak doğrudan geçiş bowing parametresini $-0,4$ eV, dolaylı geçiş bowing parametresini $0,04$ eV, (b) Paiva ve arkadaşları [72] FP-LAPW metodunu kullanarak doğrudan geçiş bowing parametresini $0,36$ eV, dolaylı geçiş bowing parametresini $-0,092$ eV, (c) Schilfgaarde ve arkadaşları [73] doğrudan geçiş bowing parametresini $0,62$ eV, (d) Agrawal ve arkadaşları [74] FP-LMTO metodunu kullanarak $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımını için doğrudan geçiş bowing parametresini $0,4$ eV, dolaylı geçiş bowing parametresini ise $-0,04$ eV olarak hesaplamışlardır. Sonuçlar arasındaki farklılık yapıların ve hesaplama metotlarının değişik olmasından kaynaklanmaktadır.

FP-LMTO (full potential linear muffin-tin orbital) metodu YFT teorisinde YYY için kullanılan özel bir uygulamadır. Burada kristal potansiyeline uygulanan temel yaklaşımlar mevcut değildir. Bu metot ASA (atomic spheres approximation) yaklaşımına dayanır. Buna göre potansiyel her bir atom etrafında küresel simetrik varsayılır.

LMTO metodunda seçilen bölge içindeki dalga fonksiyonları aslında Hankel fonksiyonlarıdır. Her bir temel fonksiyonun seçili küre içinde sayısal bir çözümü mevcuttur. Bu metodun diğer bir avantajı sözde potansiyel metodunu kullanmasıdır. Burada yüksek basınçtaki kor ve yarı kor elektronlar hesaplamalara dahil edilir. Bu yüzden sözde potansiyel bazlı metotlar genellikle atom numaraları büyük atomlar için daha geniş ölçümler gerektirir. Metal ve alaşımlar için iki değişik FP-LMTO metodu kullanılmıştır. Bunlardan biri Methfessel ve Van Schilfgaarde tarafından [75,76], diğeri ise Wills tarafından [77] geliştirilmiştir.

Albanesi (1993) örgü parametresi hesabını LMTO metodu içerisindeki ASA (atomic sphere approximation) yaklaşımı ile gerçekleştirmiştir. Genellikle LMTO metoduyla yapılan uygulamalarda, ASA yaklaşımını kullanmak daha avantajlıdır.

Bu metot moleküler dinamik esaslıdır. Bu yaklaşımda elektrostatik ve değiş tokuş-korelasyon katkılarının değerlendirilmesi yapılırken yük yoğunluğu esas alınarak küresel yaklaşımlar kullanılarak toplam enerji hesabı yapılır.

Bu metotta potansiyel matris elementleri iki parçaya ayrılır. Birinci katkı atomik kürelerden, diğeri ise daha karmaşık olan dış alandan gelmektedir. Atomik küre katkısı küresel harmonik terimlerindeki genişlemenin değerlendirilmesinde kolaylık sağlar. Diğer yandan dış alandan gelen katkının standart tekniklerle ölçümü hem daha zordur hem de daha fazla vakit alır [71].

Hesaplama sonuçlarını incelediğimiz zaman Agrawal ve arkadaşları FP-LMTO metodunu kullanarak yaptığı hesaplama sonuçlarıyla bizim hesaplama sonuçlarının uyum içerisinde olduğu görüldü.

Çizelge 5.6 incelendiğinde tüm bu yapılan çalışmalardan bowing faktörünün değerlerinin -0,4 eV ile 0,62 eV arasında değişim gösterdiği görülmektedir.

Vegard kanununa göre Al yoğunluğuna bağlı olarak $Al_xGa_{1-x}N$ alaşımı için örgü sabiti;

$$a_{AlGaN} = (1-x) a_{GaN} + x a_{AlN} \quad (4.1)$$

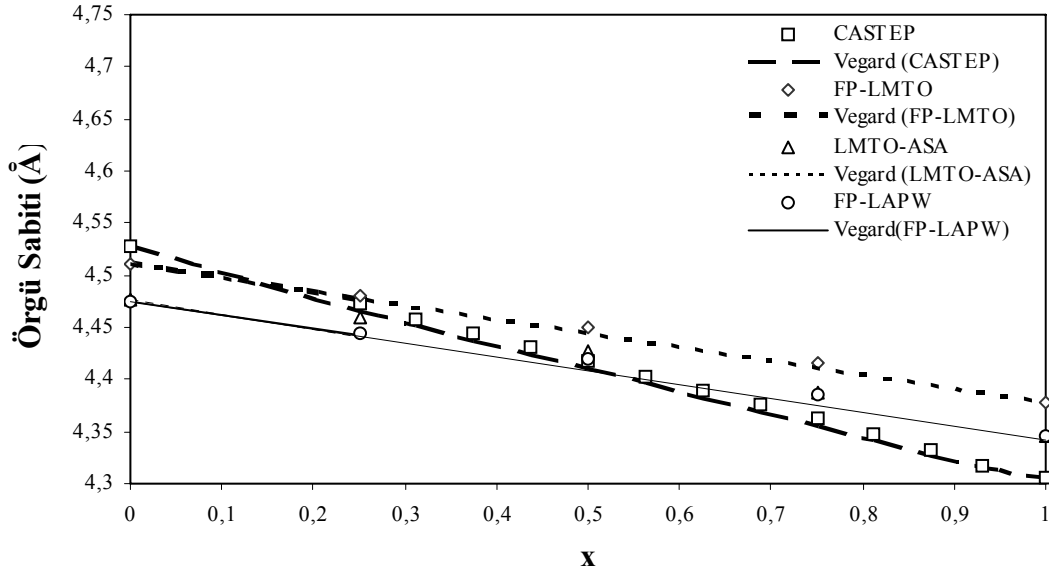
denklemleriyle verilmektedir. Burada a_{AlGaN} $Al_xGa_{1-x}N$ alaşımı için örgü sabiti, a_{GaN} GaN yarıiletkeni için örgü sabiti, a_{AlN} AlN yarıiletkeni için örgü sabiti, x ise Al yoğunluğunu ifade etmektedir.

Bu kanuna göre değişik yoğunluklarla örgü sabitleri arasındaki ilişki incelenmektedir.

Çizelge 4.7. $2 \times 2 \times 1$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı ve $1 \times 1 \times 1$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı için x 'e bağlı örgü parametre hesaplamaları .

x	Örgü parametresi $a(\text{\AA})$ CASTEP $2 \times 2 \times 1$	CASTEP'in Vegard kanunuyla hesaplanan Örgü parametresi $a(\text{\AA})$	Örgü parametresi $a(\text{\AA})$ [74] FP-LMTO $1 \times 1 \times 1$	Örgü parametresi $a(\text{\AA})$ [71] LMTO-ASA $1 \times 1 \times 1$	Örgü parametresi $a(\text{\AA})$ [70] FP-LAPW $1 \times 1 \times 1$
0	4,527	4,527	4,51	4,476	4,475
0,25	4,473	4,465	4,48	4,46	4,445
0,3125	4,458	4,451			
0,375	4,445	4,437			
0,4375	4,431	4,423			
0,5	4,418	4,41	4,45	4,427	4,42
0,5625	4,403	4,396			
0,625	4,389	4,382			
0,6875	4,376	4,368			
0,75	4,363	4,355	4,415	4,388	4,386
0,8125	4,347	4,341			
0,875	4,333	4,327			
0,93	4,318	4,315			
1	4,305	4,305	4,378	4,345	4,345

Çizelge 5.7'de CASTEP paket programı ile $2 \times 2 \times 1$ süperhücre $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı için hesapladığımız örgü parametre değeri Vegard kanunuyla beraber ve $1 \times 1 \times 1$ süperhücre $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaşımı için FP-LAPW, FP-LMTO, LMTO-ASA metotlarıyla hesaplanan örgü parametre değerleri gösterildi.



Şekil 4.9. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaışımının x 'e bağlı örgü parametre değişimi.

CASTEP, FP-LMTO hesabı Agrawal ve arkadaşları [74], LMTO-ASA hesabı Albanesi ve arkadaşları [71], FP-LAPW hesabı Paiva ve arkadaşları [72].

2x2x1 süperhücre $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaışımının örgü parametresinin Al yoğunluğuna bağlı değişimi için elde edilen CASTEP hesaplama sonuçları ve 1x1x1 süperhücre $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaışımının örgü parametresinin Al yoğunluğuna bağlı değişimi, LMTO-ASA, FP-LMTO ve FP-LAPW sonuçları ile birlikte Çizelge 5.7 ve Şekil 4.8'de gösterilmektedir. Sonuçlar arasındaki değişikliğin, alaşımların yapılarındaki değişimden ve kullanılan metotların farklılığından kaynaklanmaktadır.

Şekil 4.8 incelendiğinde hesaplamalar sonucunda $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alaışımı için elde edilen örgü sabitlerinin Al yoğunluğuna karşı değişiminin Vegard kanununa iyi bir şekilde uyduğu görülmektedir. Hesaplamalarda 2x2x1 örgüde GaN yarıiletkeninden AlN yarıiletkenine x 'e bağlı olarak geçişinde örgü parametresinin GaN yarıiletkeni ve AlN yarıiletkeni için diğer hesaplama metotlarıyla oldukça uyumlu olduğu ve sadece %1 lik sapma olduğu gözlemlendi. Grafikte LMTO-ASA, FP-LMTO ve FP-LAPW metotlarının Vegard kanunuyla hesaplanmış değerleri de gösterildi.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışma YFT teorisi kullanılarak CASTEP programı ile GEY-PBE yerel yoğunluk yaklaşımı ve ultrasoft sözde potansiyel kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Bu çalışma düzlem dalga temel seti için uygun olabilecek düşük kesilim enerjisi ile hesap yapmayı öngörmüştür.

CASTEP programı ile yaptığımız hesaplama sonucunda bulk GaN yarıiletkeni için örgü sabiti 4,529 angstrom, enerji-bant aralığı 1,79 eV ve bulk AlN yarıiletkeni için örgü sabiti 4,305 angstrom, enerji-bant aralığı 3,47 eV bulundu.

Yaptığımız ön çalışmalar hesaplamalar için uygun kesilim enerjisinin GaN yarıiletkeni için 330 eV, AlN yarıiletkeni için ise 280 eV olduğunu göstermektedir. $Al_xGa_{1-x}N$ yarıiletken alaşımı için ise hesaplamalar 350 eV'da gerçekleştirildi.

YFT ile ilgili yapılan hesaplamalarda giriş parametrelerinin tayini sonuçlar üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Bu yüzden $Al_xGa_{1-x}N$ yarıiletken alaşımının x'e bağlı özelliklerinin hesaplanmasından önce $x=0$ 'a karşılık gelen GaN yarıiletkeni ve $x=1$ 'e karşılık gelen AlN yarıiletkeni hakkındaki giriş parametrelerinin tayini oldukça büyük bir önem taşımaktadır.

Hesaplamalarımız sonucunda elde edilen durum yoğunluğu ve enerji-bant aralığı grafikleri incelenmiş ve $Al_xGa_{1-x}N$ yarıiletken alaşımının enerji-bant aralığı diyagramını ve durum yoğunluğunun Al yoğunluğuna bağlı olarak yapısal bir değişiklik göstermediği gözlemlendi. Bunun yanı sıra Γ noktasından enerji-bant aralığı takip edildiğinde GaN'dan AlN'a geçişte x'i değiştirirken Al yoğunluğuna bağlı olarak değerlerin arttığı görülmektedir.

Sonuçlar bizim hesaplamalarımızla karşılaştırılmıştır. Al yoğunluğunun yaklaşık $x=0,6$ 'dan küçük olduğu yerlerde doğrudan geçiş, büyük olduğu yerlerde ise dolaylı geçiş gözlemlenmektedir [16].

Yasak enerji aralığının yoğunluğa bağlı değişimini karakterize eden bowing (b) parametresi hesabı yapıldı ve sonuçta doğrudan bant geçişinde bowing parametre değeri 0,1 eV, dolaylı bant geçişinde bowing parametre değeri -0,04 eV bulundu.

Değişik metotlarla yapılan sonuçlar incelendiğinde Albanesi ve arkadaşları [71] LMTO-ASA metodunu kullanarak doğrudan geçiş bowing parametresini -0,4 eV, dolaylı geçiş bowing parametresini 0,04 eV, Paiva ve arkadaşları [72] FP-LAPW metodunu kullanarak doğrudan geçiş bowing parametresini 0,36 eV, dolaylı geçiş bowing parametresini -0,092 eV, Schilfgaarde ve arkadaşları [73] LMTO metodunu kullanarak doğrudan geçiş bowing parametresini 0,62 eV, Agrawal ve arkadaşları [74] FP-LMTO metodunu kullanarak $Al_xGa_{1-x}N$ alaşımını için doğrudan geçiş bowing parametresini 0,4 eV, dolaylı geçiş bowing parametresini ise -0,04 eV olarak hesaplamışlardır.

Hesaplamalarımız sonucunda bulduğumuz örgü sabitlerinin Vegard kanununa uyarlanmasıyla elde edilen sonuçlar incelendi ve grafiğin lineer olarak azaldığı gözlemlendi. Bunun yanı sıra yaptığımız hesaplama sonuçlarıyla Agrawal ve arkadaşlarının [74] FP-LMTO metoduyla yaptığı örgü sabiti, Albanesi ve arkadaşlarının [71] LMTO-ASA metoduyla yaptığı örgü sabiti ve Paiva ve arkadaşlarının [72] FP-LAPW metoduyla yaptığı örgü sabiti sonuçlarının Vegard kanununa uyarlanmış biçimleri gösterildi. Sonuç olarak bu metotlarla yapılan hesaplama sonuçlarının da lineer olarak azaldığı gözlemlendi.

Yaptığımız çalışma sonuçlarından da anlaşılacağı gibi III-V grubu yarıiletkenler için yapılacak hesaplamalarda CASTEP paket programının kullanılması literatürle uygunluk göstermektedir.

KAYNAKLAR

1. Razeghi M. ve A.Rogalski ‘Journal Research Nitride Semiconductor’ **J. Appl. Phys.**, 79: 7433-7473 (1996).
2. Vurgaftman I, Meyer J. R. ve Ram-Mohan L. R. ‘Band Parameters for III-V Semiconductors and Their Alloys’ **J. Appl. Phys.**, 89: 5815 (2001).
3. B. Monemar, ‘ Fundamental Energy Gap of GaN.’ **Phys. Rev. B**, 10: 676-681 (1974).
4. P. B. Perry, R. F. Rutz, ‘The Rate of Radiative Recombination in the Nitride Semiconductors and Alloys’ **Appl. Phys. Lett.**, 33: 319 (1978).
5. M. Suzuki, T. Uenoyama, A. Yanase, ‘First-Principles Calculations of Effective-Mass Parameters of AlN and GaN’ **Phys. Rev. B**, 52: 8132-8139 (1995).
6. Y. C. Yeo, T. C. Chong, M. F. Li, ‘Electronic Band Structure and Effective Mass of GaN’ **J. Appl. Phys.**, 83: 1429 (1998).
7. Shan W, Ager J W III, Yu K. M., Walukiewicz W, Haller E E, Martin M. C., McKinney W. R. ve Yang W. ‘Effect of Nitrogen on The Electronic Band Structure of group III-N-V Alloys.’ **J. Appl. Phys.**, 85: 8505 (1999).
8. Rodrigues S. C. P., Rosa A. L., Scolfaro L. M. R., Beliaev D., Leite J. R., Enderlein R. ve Alves J. L. A. ‘Miniband structures and effective masses of n-type delta-doping superlattices in GaN’ **Semicond. Sci. Technol.** 13: 981 (1998).
9. Albanesi E .A., Lambrecht W. R. L. ve Segall B. ‘Ab-initio Calculation of Electronic Properties of GaAlN Alloys’ **Phys. Rev. B**, 48: 17841-17847 (1993).
10. Fischer, S. ve Karplus, M. J. Chem. ‘CASTEP.’ **Phys. Lett.**, 194: 252 (1992).
11. Oppenheimer, JR., Born, M., “Zur Quantentheorie der Molekeln”, **Ann Phys.**, 84: 457 (1927).
12. P. Hohenberg ve W. Kohn, “Inhomogeneous Electron Gas,” **Phys. Rev. B**, 136: 864–871 (1964).
13. W. Kohn ve L. J. Sham, ‘ Self-consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, ‘ **Phys. Rev. A**, 140: 1133-1138, (1965).
14. John P. Perdew ve Yue Wang, “Accurate and Simple Analytic Representation of the Electron-gas Correlation Energy”, **Phys. Rev. B**, 45: 13244–13249 (1992).

15. B. Hammer, L. B. Hansen ve J. K. Nørskov, "Improved Adsorption Energetics within Density-functional Theory Using Revised Perdew-Burke-Ernzerhof Functionals", **Phys. Rev. B.**, 59: 7413–7421 (1999).
16. Z. Dridi, B. Bouhafs, P. Ruterana Comp.'First-Principle Study of Cubic AlGa_N Alloys.' **Materials Sci.** 33: 136-140 (2004).
17. P. Hohenberg ve W. Kohn, "Inhomogeneous Electron Gas," **Phys. Rev. B**, 136: 864–871 (1964).
18. R. O. Jones ve O. Gunnarsson, "The Density Functional Formalism, its Applications and Prospects," **Rev. Mod. Phys.**, 61 (3): 689–746 (1989).
19. W. Kohn ve L. J. Sham, "Self-consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects," **Phys. Rev. A**, 140: 1133–1138, (1965).
20. Haug, A., "Theoretical Solid State Physics", **Pergamon**, New York, 20 (1972).
21. R. G. Parr ve W. Yang: Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, **Phys. Rev.A**, 150: 154-159 (1989).
22. Andzelm, J.; Wimmer, E.; Salahub, D. R. "Spin Density Functional Approach to the Chemistry of Transition Metal Clusters: Gaussian-type Orbital Implementation **ACS Symp. Ser.**, 394: 312-320 (1989).
23. Versluis, L., Ziegler T., 'Novel Density Functional Exchange and Correlation Functionals' **J. Chem. Phys.**, 88: 322-328 (1988).
24. M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias ve J. D. Joannopoulos, "Iterative Minimization Techniques for *ab initio* Total-Energy Calculations: Molecular Dynamics and Conjugate Gradients," **Rev. Mod. Phys.**, 64: 1045–1097 (1992).
25. N. W. Ashcroft ve N. D. Mermin, "Solid State Physics", **Holt, Rinehart and Winston**, New York, 123-132 (1976).
26. P. Ordejón, E. Artacho ve J.M. Soler., "Self-Consistent Order-N Density-Functional Calculations for Very Large Systems," **Phys. Rev. B.**, 53 (16): 10441–10444 (1996).
27. D. M. Ceperley ve B. J. Alder, "Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method," **Phys. Rev. Lett.**, 45: 566–569 (1980).
28. S. Goedecker, M. Teter ve J. Hutter, "Separable Dual-Space Gaussian Pseudopotentials," **Phys. Rev. B.**, 54 (3): 1703–1710 (1996).

29. S. Clark, "Gradient Corrections, Other Functionals."Castep Workshop (2001).
30. Charles K., "Introduction to Solid State Physics" ***Solid State***, 124-125 (1986).
31. Van de Walle C .G. ve Martin ' ' ***Phys. Rev. B***, 34: 5621-5634 (1986).
32. O. Katz, B. Meyler, U. Tisch ve J. Salzman 'Determination of Band Gap Bowing Parameter of AlGaN.' ***Phys. Stat. Sol.*** 188 (2): 789-792 (2001).
33. C. Persson, A. Ferreira da Silva, R. Ahuja, B. Johansson' Journal of Crystal Growth' ***Phys. Rev.***, 231: 397-406 (2001).
34. J. C. Slater, 'Note on Hartree's Method.' ***Phys. Rev.*** 35: 210-211 (1930).
35. W. Pauli, Z.' An upper limit to violations of the Pauli exclusion principle.' ***Phys.*** 31: 765 (1925).
36. T. Koopmans, ' Physical interpretation and assessment of the Coulomb-hole and screened-exchange approximation for molecules.' ***Physical*** 1: 104 (1934).
37. C. C. J. Roothaan, 'New Developments in Molecular Orbital Theory ' ***Rev. Mod. Phys.*** 23: 69 (1951).
38. Hadis Morkoç 'Nitride Semiconductor and Devices' CASTEP Workshop, ***Springer-Verlag***, Berlin 21-23 (1999).
39. C. Persson, U. Lindefelt, 'Dependence of energy gaps and effective masses on atomic positions in hexagonal SiC.' ***J. Appl. Phys.*** 86: 5036 (1999).
40. S. Strite, H. Morkoç, J. Vac. 'Investigation of the chemistry and electronic properties of metal/gallium nitride interfaces' ***Sci. Technol. B***,10: 1237 (1992).
41. S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Nagahama, T. Yamada, T.Mukai, Jpn. 'Room-temperature continuous-wave operation of InGaN multi-quantum-well structure laser diodes.' ***J. Appl. Phys.*** 34: 1332 (1995).
42. P. Blaha, K. Schwarz, J. Luitz, WIEN97, 'A Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Package for Calculating Crystal Properties' (Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Wien, Austria), ,ISBN 3-9501031-0-4 (1999)
43. D.J. Singh, 'Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method', ***Kluwer Academic***, Norwell, 32 (1994).

44. J.P. Perdew, Y. Wang, 'Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation' **Phys. Rev. B**, 45: 13244-13249 (1992).
45. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, 'Generalized Gradient Approximation Made Simple.', **Phys. Rev. Lett.** 77: 3865-3868 (1996).
46. W. Kohn, 'Discontinuity of the exchange-correlation potential from a density-functional viewpoint' **Phys. Rev. B**, 33: 4331-4333 (1986).
47. O.K. Andersen, 'Supplementary Materials' **Phys. Rev. B**, 12: 3060-3083 (1975).
48. J. C. Slater, 'Wavefunction in a Periodic Potential' **Phys. Rev.** 51: 816 (1937).
49. J. C. Slater, 'Advances in Quantum Chemistry' **Phys. Rev.** 1: 35 (1964).
50. T. L. Loucks, 'Augmented Plane Wave Method' (**Benjamin**), Newyork (1967).
51. L. F. Mattheiss, J. H. Wood ve A. C. Switendick, 'Densities of States and Calculated K X-Ray Spectra of TiFe' **Meth. Comp. Phys.** 8: 122-129 (1968).
52. J. O.'Dimmock, 'Superconductivity in the Palladium-Hydrogen System' **Solid State Phys.** 26: 103 (1971).
53. H. Bross, 'Density-functional theory of the Compton profile anisotropy of copper metal' **Phys. Kondens. Mater.** 3: 119 (1964).
54. P. Marcus, 'Accuracy and convergence properties of the extended linear augmented-plane-wave method' **J. Quantum. Chem. Suppl.** 1: 567 (1967).
55. D.D. Koelling, 'FP-LAPW Investigation of Electronic Structure' **J. Phys. Chem. Solids** 33: 1335 (1972).
56. O. K. Andersen, 'Solid State Commun.'. 13: 133 (1973).
57. E. Wimmer, H. Krakawer, M. Weinert, ve A. J. Freeman, 'A Surface Alloys.' **Phys. Rev. B**, 24: 864-875 (1981).
58. H. J. F. Jansen ve A. J. Freeman, 'Total-energy full-potential linearized. Augmented Plane Wave Method' **Phys. Rev. B**, 30: 561-569 (1984).
59. L. F. Mattheiss ve D. R. Hamann 'Linear augmented-plane-wave calculation of the structural properties of bulk cr, mo, and w.', **Phys. Rev. B**, 33: 823-840 (1986).

60. P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, ve S. B. Trickey, 'Low-pressure crystalline phases of lithium' **Comput. Phys. Commun.** 59: 399 (1990).
61. D. J. Singh, 'Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW Method' (**Kluwer Academic**), Boston (1994.)
62. P. Hohenberg ve W. Kohn, 'Inhomogeneous electron gas,.' **Phys. Rev. B**, 136: 864 (1964).
63. W. Kohn ve L. J. Sham, 'Atomic Referans Data for Electronic Structure Calculation' **Phys. Rev. A**, 140: 1133 (1965).
64. P. Blaha, K. Schwarz, ve P. Herzig, 'First-principles calculation of the electric field gradient of Li₃N.' **Phys. Rev. Lett.** 54: 1192-1195 (1985).
65. P. Dufek, P. Blaha, ve K. Schwarz, ' Determination of the Nuclear Qadrupole Moment of ⁵⁷Fe' **Phys. Rev. Lett.** 75: 3545-3548 (1995).
66. K. Schwarz, C. Ambrosch-Draxl ve P. Blaha, ' Electric-field-gradient analysis of high-*T_c* superconductors.' **Phys. Rev. B**, 42: 2052 (1990).
67. B. Winkler, P. Blaha ve K. Schwarz, 'Improving The Efficiency of FP-LAPW Calculation.' **Am. Mineralogist** 81: 545 (1996).
68. B. Kohler, P. Ruggerone, S. Wilke ve M. Scheffler, 'Electronic Surface and Interface States on Metallic Systems' **World Scientific**,.Singapore (1995).
69. B. Kohler, S. Wilke, M. Scheffer, R. Kouba ve C. Ambrosch-Draxl, ' The Full Potential APW methods' **Phys. Commun.** 94: 31 (1996).
70. M. Bockstedte, A. Kley, J. Neugebauer ve M. Scheffler, (Density Functional Theory Calculations for Poly-atomic System: electronic Structure, static and ab-initio molekuler dynamics'- **Phys. Commun.** 107: 187 (1997)
71. E. A. Albanesi, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, 'Electronic Structure and Equilibrium Properties of GaAlN Alloy.' **Phys. Rev. B**, 48:178-183 (1993).
72. R. De Paiva, J. L. A. Alves, R. A. Noueira, 'Theoretical Optical Parameters for III-Nitride Semiconductors', **Mater. Sci. Eng. B**, 93: 2 (2002).
73. M. Van Schilfgaarde, A. Sher, A.-B. Chen, 'First-Principles Calculation of Structural and Electronic Properties of Wurtzite Al_xGa_{1-x}N, In_xGa_{1-x}N, and In_xAl_{1-x}N Random Alloys' **J. Cryst. Growth** 178: 1763 (1997).
74. B. K. Agrawal, P.S. Yadav, S. Kumar, 'A First Prenciples Study of cubic AlGa_N.' **J. Phys. Condens. Matter** 9 :1763 (1997).

75. M. Methfessel, 'Elastic Constants and Phonon Frequencies of Si' *Phys. Rev. B*, 38: 1537-1540 (1988).
76. M. Methfessel, M. Van Schilfgaarde ve R. A. Casali, 'Electronic Structure and Physical Properties of Solids: The Uses of the LMTO Method, edited by H. Dreyse, Lecture Notes in Physical Vol: 535 (**Springer-Verlag**), Berlin (2000).
77. J. M. Wills, O. Eriksson, M. Aluani, D. L. Price, 'Electronic Structure and Physical Properties of Solids: The Uses of the LMTO Method, edited by H. Dreyse, Lecture Notes in Physical Vol: 535 (**Springer-Verlag**), Berlin (2000).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : KAYA, Ayten
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 25.03.1981 Almanya
 Medeni hali : Evli
 Telefon : 0 (312) 213 58 15
 GSM : 0 (505) 733 57 91
 e-mail : aytenkayamir@yahoo.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Fizik Bölümü	2007
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2003
Lise	Kılıçarslan Lisesi	1999

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

1. ‘DNA Baz Dizisinin Automata Olarak Modellenmesi’, 2003
2. ‘Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi’, 2004

Hobiler

Seyahat etmek, Kitap okumak, Sportif aktiviteler.