

GaN(100) YÜZEYİNDE (1x4)-(1x1) FAZ GEÇİŞİNİN İNCELENMESİ

Nesrin YENİHAYAT

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**Eylül 2012
ANKARA**

Nesrin YENİHAYAT tarafından hazırlanan “GaN(100) YÜZEYİNDE (1x4)-(1x1) FAZ GEÇİŞİNİN İNCELENMESİ” adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Bülent KUTLU
Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

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

Prof. Dr. Bülent KUTLU
Fizik, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Abdullah GÜNEN
Fizik, Gazi Üniversitesi

Doç. Dr. Celal BAYRAK
Fizik Eğitimi, Hacettepe Üniversitesi

Tarih: 19/09/2012

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

Prof. Dr. Şeref SAĞIROĞLU
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

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

Nesrin YENİHAYAT

GaN(100) YÜZEYİNDE (1x4)-(1x1) FAZ GEÇİŞİNİN İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)

Nesrin YENİHAYAT

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Eylül 2012

ÖZET

Bu tezde GaN(100) yüzeyi için düzen düzensizlik faz geçişinin kritik davranışı spin-1 Ising modelde cellular automaton (CA) simülasyonları kullanarak incelendi. Bilindiği gibi, GaN(100) (1x4), c(2x2), (2x2) ve ms(2x2) yeniden yapılanma yüzeylerine sahiptir. Ayrıca, bu yüzeyler için yapılan toplam enerji hesaplamaları (1x4) yeniden yapılanmış yüzeyin diğer yüzeyler içinde en düşük enerjili yüzey olduğunu göstermiştir. Bu nedenle, ilk olarak, (1x4) taban durum için spin-1 Ising model hamiltonyeni 4x4 süper örgülerdeki toplam enerji sonuçları kullanılarak oluşturulmuştur. Ising model simülasyonları GaN(100) yüzeyinin beklendiği gibi (1x4) yüzeyden diğer yüzeylere sıcaklık ile ikinci derece faz geçişi sergilediğini göstermiştir. (1x4) den diğer yüzeylere faz geçiş sıcaklığı (T_c) $L_x=60, 90, 120$ ve $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ periyodik sınır şartlı sonlu dikdörtgen örgüler için öz ısı ve alınganlık maksimumlarından elde edilmiştir. Simülasyonlar ile oluşturulan yüzey görüntüleri GaN(100) yüzeyindeki faz geçişinin (1x4) yeniden yapılanmış yüzeyde (1x1) yapılanmamış yüzeye oluşunu göstermiştir.

Bilim Kodu : 202.1.167

Anahtar Kelimeler : GaN(100), Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, Ising Model

Sayfa Adedi : 56

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Bülent KUTLU

**INVESTIGATION GaN(100) SURFACE (1x4)-(1x1) PHASE
TRANSITION
(Master Thesis)**

Nesrin YENİHAYAT

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
September 2012**

ABSTRACT

In this thesis, we study the critical behaviour of the order disorder phase transition for a GaN(100) surface using cellular automaton (CA) simulations on spin-1 Ising model. As is known, GaN (100) exhibits (1x4), c(2x2), (2x2) and ms(2x2) reconstructions. Also, the total energy calculations for these surfaces shows that (1x4) reconstruction is favorable than other phases. Therefore, firstly, the spin-1 Ising model Hamiltonian for (1x4) ground state has been obtained using the results of total energies on 4x4 super cells. Ising model simulations show that GaN(100) surface exhibits a second order phase transition to other surfaces from (1x4) surface with temperature as expected. The phase transition temperature (T_c) to other surfaces from (1x4) surface has been obtained from the peaks of susceptibility and specific heat on finite rectangular lattice for linear dimensions $L_x=60, 90, 120$ and $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ with periodic boundary condition. The obtained surface images from simulations indicated that phase transition on GaN (100) surface is to 1x1 from 1x4.

Science Code :202.1.167
Key Words : GaN(100), Density Functional Theory, Ising Model
Page Number :56
Adviser :Prof.Dr. Bülent KUTLU

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım süresince beni yönlendiren değerli tez danışmanım Prof. Dr. Bülent KUTLU' ya sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

GaN(100) yüzeyi için bu tezde kullanılan CASTEP sonuçları Durham Üniversitesi'nde Prof. Dr. S. J. Clark davetiyle Prof. Dr. Bülent Kutlu tarafından hesaplanmıştır. Bu nedenle Durham Üniversitesi'ne ve Prof. Dr. S. J. Clark'a teşekkür ederim.

Ayrıca çalışma arkadaşlarım Araş. Gör. Ali Emre Genç'e ve Abdullah ATILGAN' a yardımlarından dolayı teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	x
KISALTMALAR.....	xiii
1. GİRİŞ	1
1.1. GaN(100) Yüzeyinin Yapısal ve Elektronik Özellikleri	3
1.2. Yüzey Oluşumu ve Yeniden Yapılanmanın Gerçekleşmesi	4
1.3. Durulma.....	5
1.4. Yeniden Yapılanma.....	6
1.4.1. Korunumlu ve korunumsuz yeniden yapılanma.....	7
1.5. GaN Yüzey Yapılanmaları	9
2. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ	13
3. MODEL	17
3.1. Ising model.....	17
3.2. GaN(100) Yüzey için Ising Model Hamiltoniyeni.....	19
3.3. GaN Yüzey Potansiyeli	24

4. GaN(100) YÜZEYİ İÇİN CELLULAR AUTOMATA ALGORİTMASI	29
4.1. Cellular Automaton Ising Algoritması	30
4.2. Creutz Cellular Automatonunda Termodinamik Niceliklerin Hesabı	32
4.3. Soğutma Algoritması	34
5. BULGULAR ve TARTIŞMA.....	38
5.1. Parametre-Örgü İlişkisi:	38
5.2. Yüzey Fotoğrafları	40
5.3. (1x4)→(1x1) Faz Geçişi için Kritik Sıcaklık Tayini	48
6. SONUÇ	49
KAYNAKLAR	51
ÖZGEÇMİŞ	58

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. 4x4 olarak tanımlanmış yüzeylerin CASTEP ile hesaplanan enerjileri.....	25
Çizelge 3.2. Kullanılan kusursuz yüzeyler ve bu yüzeylerin enerjisinden elde edilen etkileşim parametresi değerleri.....	26
Çizelge 3.3. Dört farklı Ising yüzey potansiyeli için yüzey enerjileri... ..	26
Çizelge 5.1. Etkileşme parametrelerinin, CA' da kullanmak üzere değiştirilmiş tamsayı değerleri.	35
Çizelge 5.2 Özısı ve alınganlıktan elde edilen kritik sıcaklık.....	48

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 1.1. a) Normal durulma, b) Paralel durulma. Üst katmanların yeniden yapılandığı yarı sonsuz kristaldeki şematik gösterim.....	5
Şekil 1.2. ● N atomu ve ○ Ga atomu olmak üzere GaN yüzeyin a) yeniden yapılanmamış, b) yeniden yapılanmış (100) yüzeyi.....	6
Şekil 1.3. a) Kırık bağlar ve b) 2x2 yüzey yapılanmaları için STM fotoğrafı.....	7
Şekil 1.4. a) ve b) korunumlu yeniden yapılanma durumları.....	8
Şekil 1.5. a) üst katmanda ve b) birkaç katmanda korunumsuz yeniden yapılanma durumları.....	8
Şekil 1.6. GaN (100) yüzeyinin a) 1x1, b) (2x2), c) c(2x2), d) ms(2x2) ve e) 1x4 yeniden yapılanması.	10
Şekil 1.7. (a) Zinc-blende GaN[33], GaN (100) yüzeyi (b) (1x1), (c) (2x2) ve (d) 1x4 yüzey yapılanmaları için enerji band grafikleri[24].....	11
Şekil 1.8. a) GaN ve GaAs için yüzey enerjileri. b) a kimyasal potansiyeli μ_{Ga} 'un fonksiyonu olarak clean GaN yüzeyleri[14].....	12
Şekil 3.1. GaN yüzeyinde y eksenini doğrultusunda a) 1x4, b) 2x2, c) c(2x2) ve d)ms(2x2)yeniden yapılanmaları.....	20
Şekil 3.2. $S_i = +1, 0$ ve -1 durumlarının karşılık geldiği atom yönelimleri.....	21
Şekil 3.3. GaN(100) yüzey yapılanmasında 1x4'ün spin gösterimi.....	21

Şekil 3.4. GaN için 1x4, 2x2, ms(2x2) ve c(2x2) yüzeylerinin spin temsili.....	21
Şekil 3.5. Spin-1 Ising model için a) Ferromanyetik taban durumları, b)Antiferromanyetik taban durumları.....	23
Şekil 3.6. GaN (100) yüzeyinde yüzey etkileşme durumları.....	23
Şekil 3.7. (1x4) _{2d} , parametre arayışında kullanılan beşinci yüzey.....	27
Şekil 4.1. (a) (1x4), (b) (2x2) ve (c) ms(2x2) yapılanmalarında merkezi spinin bozulması.....	33
Şekil 5.1. $L_x=60$, $L_y=L_x$, $2L_x, \dots$, $10L_x$ için düzen parametresi-sıcaklık grafiği.....	36
Şekil 5.2. GaN(100) yüzeyinde oluşan kaymış 1x4 şekillenimi.....	37
Şekil 5.3. $L_x=60$, $L_y=L_x$, $2L_x, \dots$, $10L_x$ için iç enerji değerinin sıcaklıkla değişimi.....	37
Şekil 5.4. $L_x=60$, $L_y=L_x$, $2L_x, \dots$, $10L_x$ örgüsü için öz ısı niceliğinin sıcaklıkla değişimi.....	38
Şekil 5.5. $L_x=60$, $L_y=L_x$, $2L_x, \dots$, $10L_x$ için alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.....	39
Şekil 5.6. GaN(100) yüzeyi için a) kritik sıcaklık altında, b) kritik sıcaklıkta ve c) kritik sıcaklık üstünde yüzey STM görüntüleri.....	40
Şekil 5.7. a) $\Omega= 0,01$ b) $\Omega= 0,02$ c) $\Omega= 0,05$ için kritik sıcaklık civarında ($T=T_c$),kritik sıcaklığın altında($T<T_c$) ve üstünde($T>T_c$) yüzey STM görüntüleri.....	42

Şekil 5.8. $\Omega= 0,07$ b) $\Omega= 0,09$ c) $\Omega= 0,2$ için kritik sıcaklık civarında ($T=T_c$), kritik sıcaklığın altında ($T<T_c$) ve üstünde ($T>T_c$) yüzey STM görüntüleri.....	43
Şekil 5.9. $\Omega=0,02$ olmak üzere $L_x =120$, $L_y=720$ örgüsü için yüzey fotoğrafları.....	44
Şekil 5.10. $L_x=60$ için alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_y$ ' e karşı değişim grafikleri.....	46
Şekil 5.11. $L_x=90$ için alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_y$ ' e karşı değişim grafikleri.....	46
Şekil 5.12. $L_x=120$ için alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_y$ ' e karşı değişim grafikleri.....	47
Şekil 5.13. $L_x=60, 90, 120$ nin kritik sıcaklığa göre alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_x$ 'e karşı değişim grafikleri.....	47

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Kısaltmalar	Açıklama
T	Sıcaklık
T_c	Kritik Sıcaklık
L_x	x-doğrultusundaki Örgü Kenar Uzunluğu
L_y	y-doğrultusundaki Örgü Kenar Uzunluğu
M	Manyetizasyon
χ	Staggered Alınganlık
C	ÖZİSİ
H_i	İç Enerji
M_{ij}	Mıknatıslanmanın Örgü Noktası İçin Zaman Adımı Ortalaması
Ω	Hücre Başına Spin Ortalamalarının Ayrılma Oranı
C_x	Dimerler Arası Yatay Etkileşme Parametresi
C_y	Dimerler Arası Dikey Etkileşme Parametresi
C_K	Dimerler Arası Diagonal Etkileşme Parametresi
LEED	Düşük enerjili elektron kırınımı
STM	Taramalı Tünelleme Mikroskobu
AF	Antiferromanyetik
SAF	Süperantiferromanyetik
LDA	Yerel yoğunluk yaklaşımı
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
CA	Cellular Automaton
BC	Blume-Capel Ising modeli
BEG	Blume-Emery-Griffiths Ising modeli
MCRG	Monte Carlo Renormalizasyon Grup Teorisi

1. GİRİŞ

Yarıiletkenler, günümüzde teknolojik cihazların temelidir. Yarıiletken malzemeler, bilimsel ve teknolojik özelliklerden dolayı son yıllarda kapsamlı bir şekilde araştırılmaktadır. Başlangıçta yarıiletken malzemelerde yüzeyin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin malzemenin genel davranışının yanında ihmal edilebileceği düşünülmüş ve gereken önem gösterilmemiştir. Ancak malzemenin boyutları küçüldükçe yüzey özellikleri giderek malzemenin bütünü temsil edebilecek hale gelmiştir. Bir malzemenin yüzey atomik yapısı, malzemenin elektronik ve optik özelliklerini belirlediğinden, teknolojide büyük öneme sahiptir. Yapılan çalışmalar yarıiletken yüzeylerin farklı yüzey yapılanmaları sergilediğini ve bu yapılanmalara bağlı olarak elektriksel özelliklerinin değiştiğini göstermektedir. Ayrıca ince filmlerde yüzey yapısal faz geçişi, optik özellikler ve band yapısı gibi malzemenin elektronik özelliklerini değiştirdiğinden yarıiletken dedektörler, kuantum kuyuları gibi elektronik cihazların üretiminde oldukça önemlidir.

Yüzey faz geçişleri deneysel olarak STM, LEED ve RHEED gibi görüntüleme teknikleriyle gözlenmiştir[1-5]. Si, Ge gibi yarıiletkenlerin sıcaklığa bağlı yüzey faz geçişi özellikleri Ising model kullanılarak, Monte Carlo simülasyon tekniği ile birçok araştırmacı tarafından incelenmiştir[6-8]. Bu tarz hesaplamalarda yüzey potansiyeli μ ile hesaplamalar ile elde edilen yüzey enerjileri kullanılarak elde edilmektedir. μ ile hesaplamalar ile yüzey durumları potansiyel çukurlarından elde edilmektedir. Potansiyel çukuru, kuvvetin türevinin sıfır olduğu noktadan hesaplanır. Kuvvetin türevinin sıfır olması, enerjinin o noktada sabit olduğu anlamına geldiğinden yüzeyin kararlı olduğu durumu gösterir. Eğer malzemenin birden fazla potansiyel çukuru varsa, bu malzemenin birden fazla kararlı yüzey durumunun varlığını gösterir.

Yüzeydeki yapı değişimini anlamak için yüzeyin modellenmesi önemlidir. Ising model, yüzeydeki dimer veya atomik yapılanmaları, mümkün yönelimlere sahip spinler olarak varsayar. Ising model yıllardır numerik olarak birçok simülasyon

yöntemiyle incelenmiş ve yarıiletken malzemelere uygulanmıştır. Monte Carlo yöntemi ile Si ve Ge yüzeylerine uygulanan Ising model, son yıllarda sıcaklığa bağlı değişimleri oldukça önemli biçimde etkileyen Creutz Cellular automata algoritması kullanılarak Si(100) yüzeyine uygulanmıştır[9]. Sıcaklığa bağlı değişimlerin incelendiği Monte Carlo yöntemine alternatif olarak 1986 yılında Creutz tarafından oluşturulan “cellular automaton” Ising modelin simülasyonunu mümkün kılmakta ve 10 kat daha hızlı çalışmaktadır[10].

GaN, LED’ler ve mavi ışık yayan lazerler gibi kısa dalga boylu optoelektronik cihazlar[11] ve dayanıklılığından dolayı sanayi için önemli bir materyaldir[12]. Bu yüzden GaN’ün bulk ve yüzey özellikleri ilgi çekmektedir. Fakat sertliği ve farklı atom dizilişi yüzünden fazla çalışma yapılmamıştır. GaN ince filmler için STM, LEED ve RHEED görüntüleme teknikleri kullanılarak yapılan incelemeler GaN(100) yüzeyinin 1x1, 1x4, 2x2, c(2x2), ms(2x2) yüzey yapılanmaları sergilediğini göstermektedir. Bugüne kadar yapılan deneysel çalışmalarda GaN(100) yüzeyinde en kararlı yüzeyin 1x4 olduğu ve bu yüzden sıcaklıkla c(2x2), ms(2x2), 2x2 ve 1x1 yüzeylerine faz geçişlerinin olduğu gözlenmiştir. Feuillet[5] ile Brandt[13] ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada (1x4)→(1x1) faz geçişinin $T_c=1000$ K üzerinde, Neugebauer[14] ile Brandt[15] ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada (1x4)→(2x2) faz geçişinin $T_c=900$ K civarında olduğu rapor edilmiştir.

Bu tez kapsamında öncelikle GaN(100) yüzeyinde oluşan (1x4), (2x2), c(2x2) ve ms(2x2) yüzey durumları DFT (yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi) kullanılarak optimize edilmiştir. Hesaplamalar CASTEP programı ile GGA genelleştirilmiş eğim yaklaşımı içinde PW91 değiş-yokuş korelasyon fonksiyoneli ve sözde potansiyel kullanılarak 340 eV kesilim enerjisi ve (2x2) ile c(2x2) yüzeyleri için 1x2x2 k-nokta seti, (1x4) yüzeyi için 1x1x1 k-nokta seti kullanılarak ab-initio olarak gerçekleştirilmiştir. Bu yüzey durumlarının 4x4 yüzey yapılanmaları oluşturularak yüzey enerjileri hesaplanmış ve elde edilen bu yüzey enerjileri kullanılarak kusur içermeyen yüzey için yüzey etkileşme potansiyeli Ising model yaklaşımı ile oluşturulmuştur. Bunu yaparken Ising modelin taban durumu karşılmasına ve yüzey

enerjilerini birbirinden ayırmasına dikkat edilerek farklı parametre setlerine ulaşılmıştır. Son olarak simülasyon teknikleri ile yüzeyin sıcaklığa bağlı yapısal değişimleri incelenmiştir. Bunun için cellular automatonda soğutma algoritması kullanılmıştır[10]. Simülasyonlar $L_x=60, 90$ ve 120 , $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ kenar uzunluklu (L_x, L_y) dikdörtgen örgülerde 500.000 CA zaman adımı üzerinden gerçekleştirilmiştir. Farklı sıcaklıklardaki yüzey durumları, düzensiz durumda oluşturulan bir yüzey konfigürasyonundan başlayarak 500.000 adımda bir soğutularak elde edilen yüzey konfigürasyonları üzerinden ortalamalar alınarak elde edilmiştir. Faz geçiş sıcaklığı; düzen parametresi (M), manyetik alınganlık (χ), öz ısı (C) ve iç enerji (H_i) termodinamik niceliklerinin sıcaklıkla değişim eğrilerinden elde edilmiştir. Ayrıca kritik sıcaklıkta, kritik sıcaklığın altında ve kritik sıcaklığın üstünde yüzey fotoğrafları oluşturularak faz geçişi incelenmiştir. Bu çalışmada GaN(100) yüzeyinde (1x4)-(1x1) faz geçişi görüntülenerek, faz geçiş sıcaklığı sonlu örgülerde yapılan hesaplamalardan sonsuza ekstrapolasyon tekniği kullanılarak elde edilmiştir.

1.1. GaN(100) Yüzeyinin Yapısal ve Elektronik Özellikleri

GaN günümüzde teknolojik cihazların yapımında sıklıkla kullanılan bir yarıiletkenidir. GaN'ün bulk ve teknolojik cihazlardaki küçülmeden dolayı yüzey özelliklerinin bilinmesi, teknolojideki kullanımını ve malzemenin anlaşılması açısından oldukça önemlidir.

III nitrürleri geniş bant enerji aralığına sahip yarıiletken ince film malzemeler olarak morötesi-yeşil ışık aralığındaki emisyon cihazları ve yüksek güçte, yüksek sıcaklıkta çalışan elektronik cihazlardaki uygulamaları nedeniyle büyük ilgi çekmektedirler [16, 17]. III-V grubu yarıiletkenlerinden GaN, parlak ışık yayan LED elde etmek için 1990'lardan itibaren yaygın olarak kullanılır[18]. GaN bileşiğinin kristal yapısı oldukça serttir, bu nedenle koruyucu kaplamalar için önemli bir materyaldir. GaN doğrudan geçişli bant enerji aralığına sahiptir ve kimyasal olarak kararlıdır. Bu

özellikler onun mavi ve morötesi ışık yayan diyodlar ve detektörlerin fabrikasyonu için uygun materyal olmasını sağlamaktadır.

GaN, diğer III grubu nitritlerine göre iyonize radyasyonu düşük olduğundan güneş pili ve uydu yapımında uygun malzemedir. GaN'ün erime noktası 2500 K üzerinde olduğundan GaN transistörler yüksek sıcaklık ve yüksek voltajda çalışabilmektedir[19, 20]. p tipi GaN'ün keşfi, yüksek performanslı mavi LED'ler ve uzun ömürlü lazer diyotlar, nitrid tabanlı UV dedektörleri, yüksek hızlı alan etkili transistörler gibi cihazların gelişmesine yol açmıştır[21]. Grup III nitrür yarıiletkenleri genellikle kısa dalga boylu optik cihazların imalatı için kullanılır. Oldukça yüksek kesme potansiyeli, yüksek elektron iletkenliği ve doyumluk hızı GaN'ün yüksek güç ve yüksek sıcaklıkta mikrodalga uygulamaları için idealdir[22]. Bunların yanısıra askeri alanda aktif elektronik tarama radarı yapımında da kullanışlıdır[23].

İlerleyen teknoloji ile birlikte yeni malzeme arayışları yukarıda sayılan birçok özelliğinden dolayı araştırmacıları GaN'e yönlendirmiştir. Fakat genellikle daha çok çalışılan Si, Ge ve GaAs yarıiletkenleri ile karşılaştırıldığında GaN hakkında bilgilerimiz yetersizdir. Farklı dimer dizilişi, büyük n-tipi taşıyıcı konsantrasyonu, uygun alttaş materyal eksikliği, GaN için p-tipi katkı yapmadaki zorluklar, geçmişte birçok araştırmacıyı GaN üzerinde araştırma yapmaktan uzak tutmuştur.

1.2. Yüzey Oluşumu ve Yeniden Yapılanmanın Gerçekleşmesi

Yüzeyleri doğru tanımlayan bir Ising model hamiltonyeni yazabilmek için öncelikle bulk ile yüzey farkını, durulma ve yeniden yapılanma gibi yüzey fiziği tanımlarını bilmek gereklidir. Bulk, uzayı periyodik dolduran atom gruplarından oluşan, idealleştirilmiş, 3 boyutlu, sonsuz örgüdür. Bulkteki atomlar belli bir düzen içindedir. Yüzey ise bulkten oluşturulan 2 boyutlu yapıdır. Ayrıca bir katının büyümesi durdurulduğunda da yüzey oluşur. Yüzeyde elektronik yapı bozulduğundan dolayı periyodiklik gözlenmez[24]. Sonsuz uzunluktaki kristal kristalografik koordinatlarda

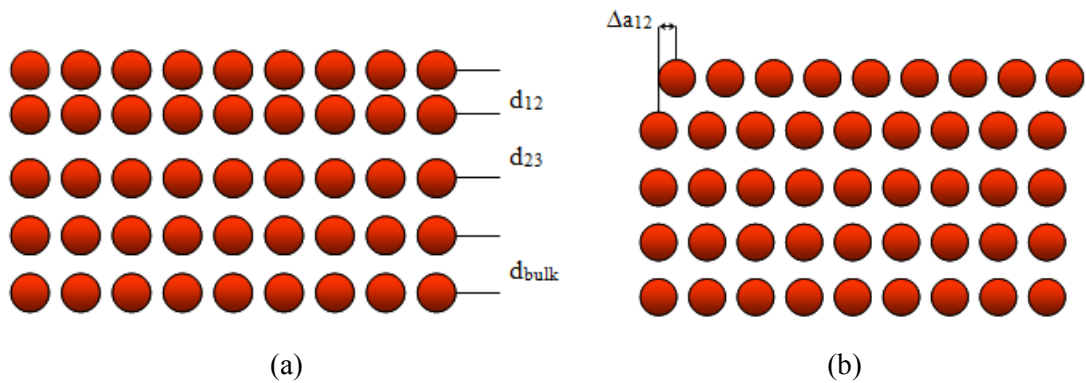
kırıldığında yüzeydeki atomik yapı bunun bir parçası olur. Komşu atomlar yüzey atomlarını modifiye olmaya zorlar. Bu sebeple yeniden dengeye gelen yapı bulktaki atomik yapıdan farklıdır.

Yüzey fiziğindeki birçok çalışma kusursuz yüzeyde başladığı için kusursuz yüzeydeki atomik yapı bilgisi büyük öneme sahiptir. Görünüyor ki; özellikle yarıiletkenler olmak üzere birçok yüzeyde atomik koordinatlarda modifiye oluşur. Modifikasyonların en genel tipi durulma ve yeniden yapılanmadır.

1.3. Durulma

En üst tabakadaki atomik yapının bulka benzer olması fakat ilk ara katmanın modifiye olması durumuna normal durulma denir. Normal durulma metallerde gözlemlenmiştir. Çoğu durumda yapılanma ilk ara katmanda oluşmaktadır. Bazen durulma en üst katmanın yüzeye paralel olacak şekilde yer değiştirmesi ile gerçekleşir. Buna paralel durulma denir. Paralel durulma düşük atomik yoğunluklu, yüksek indisli yüzeylerde görülür[25].

Şekil 1.1'de üst katmanların yeniden yapılandığı yarı sonsuz kristaldeki normal ve paralel durulma şematik olarak gösterilmektedir.

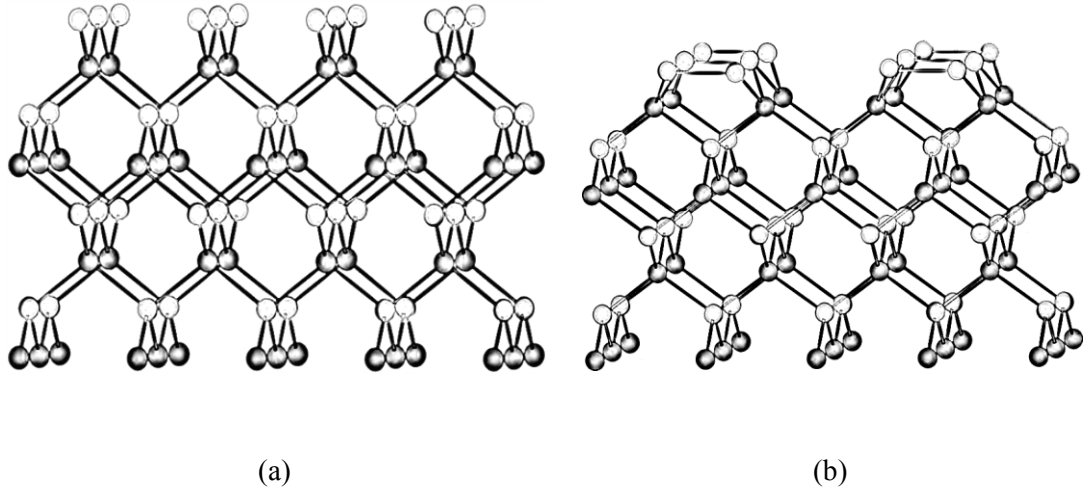


Şekil 1.1. a) Normal durulma, b) Paralel durulma. Üst katmanların yeniden yapılandığı yarı sonsuz kristaldeki şematik gösterim.

1.4. Yeniden Yapılanma

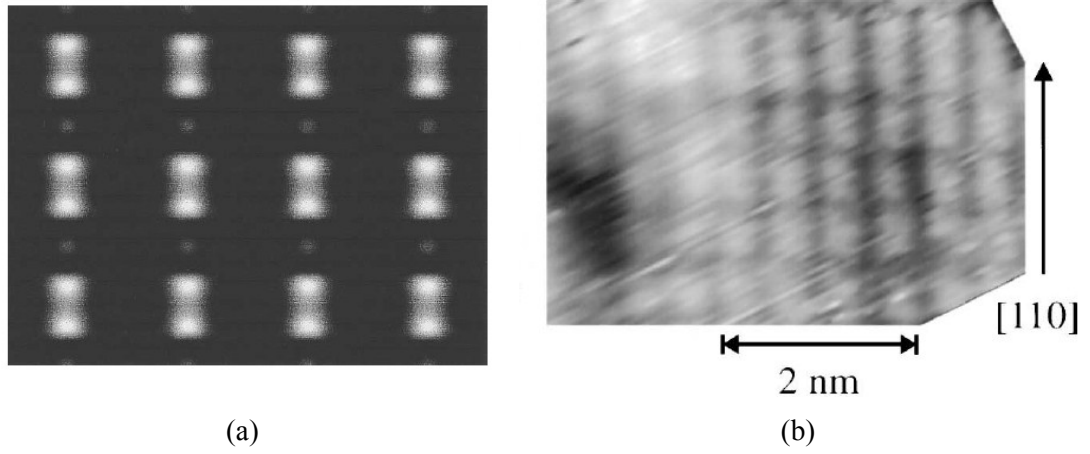
Bulkün bir yüzey tarafından sonlandırılmasından doğan bozulma (yüzeydeki atomların yüzey tarafındaki bağ yokluğu nedeniyle olan bozulma) yüzeydeki ve yüzey yakınındaki atomların toplam serbest enerjisi azaltacak şekilde yeni denge konumlarının oluşturmasına sebep olur. Yarıiletkenlerde kristalin bulk bitimi kararsızdır. Serbest yüzey enerjisini minimize etmek için doymamış bağlar doyurularak ve yeni bağlar kendi aralarında şekillendirilerek konumlandırılır. Yüzeyde yüksek enerjili salınan atomlar (kırık bağlar) yüzeyi çok kararsız tutar ve kararlı hale gelebilmek için sağa sola hareket ederken birbirleri ile kovalent bağ oluşturur. Böylece yeniden yapılanma gerçekleşir[24].

Yeniden yapılanma en üstteki katmanın atomik yapısının modifiye olmasıdır. Yeniden yapılanmış yüzeyin simetrisi ve periyodikliği bulkten farklıdır[26].



Şekil 1.2. ● N atomu ve ○ Ga atomu olmak üzere GaN yüzeyinin a) yeniden yapılanmamış, b) yeniden yapılanmış (100) yüzeyi

Şekil 1.2’de GaN(100) yüzeyinde oluşan yeniden yapılanma görülmektedir. Şekil 1.2.(a)’da 1x1 yüzey durumuna karşılık gelen kırık bağlar ve Şekil 1.2.(b)’de 2x2 yüzey durumuna karşılık gelen yeniden yapılanma durumları görülmektedir.



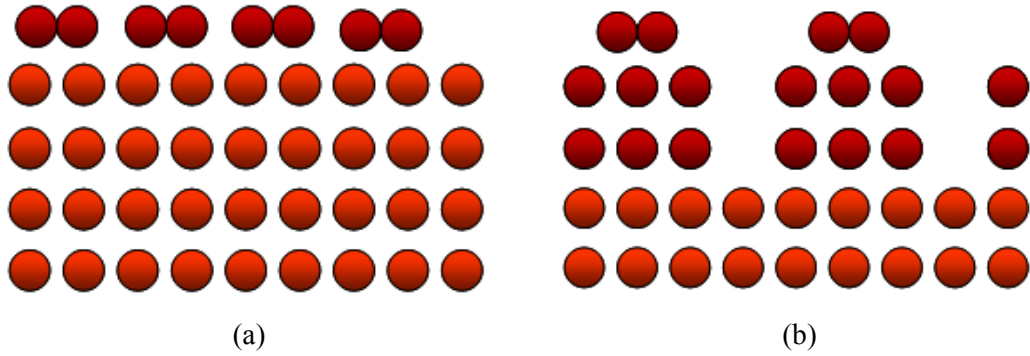
Şekil 1.3. a) Kırık bağlar ve b) 2x2 yüzey yapılanmaları için STM fotoğrafı.

Şekil 1.3.(a)'da GaN için Ga ile sonlandırılmış kırık bağların ve şekil 1.3.(b)'de yeniden yapılanmış yüzeyin STM fotoğrafları görülmektedir. Burada kırık bağlar yeniden yapılanmanın olmadığı 1x1 durumuna ve yeniden yapılanmanın olduğu durum ise 2x2 yüzey yapılanmasına karşılık gelmektedir[4].

Diğer taraftan, en üstteki katman ya da katmanlarda atom sayısının korunup korunmadığına bağlı olarak korunumlu ve korunumsuz yapılanma olmak üzere 2 tip yeniden yapılanma vardır:

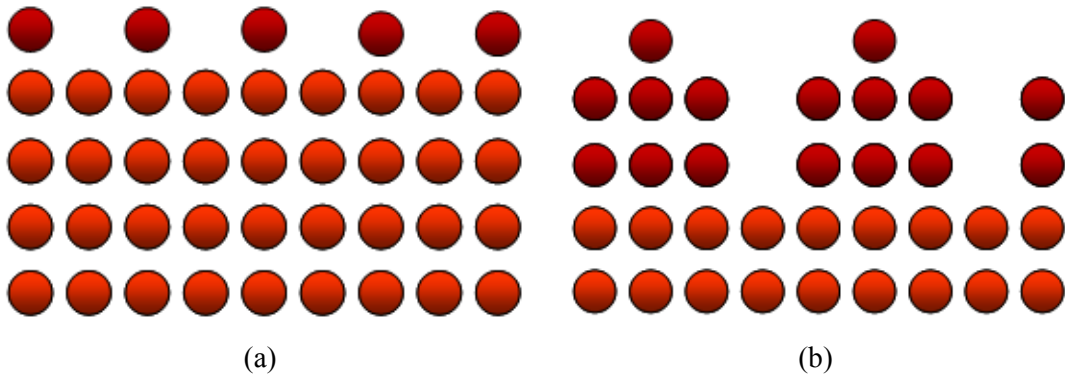
1.4.1. Korunumlu ve korunumsuz yeniden yapılanma

Korunumlu yeniden yapılanma; en üst tabakadaki atom sayısı korunarak, atomların ideal durumlarından yer değiştirmesi şeklinde olan yapılanmadır. Şekil 1.4(a)'da ve Şekil 1.4(b)'de korunumlu yeniden yapılanmanın mümkün bir hali görülmektedir. Şekilden de görülebileceği gibi yüzeydeki atom sayısı değişmemektedir.



Şekil 1.4. a) ve b) korunumlu yeniden yapılanma durumları.

Şekil 1.5’de korunumsuz yeniden yapılanma görülmektedir. Bu yapılanmada yapılanma tabakasındaki atom sayısı bulktan farklı olmaktadır. Bu tür yeniden yapılanmada atomik yoğunluk değişmektedir. Şekil 1.5.(a)’da yeniden yapılanma sadece en üst katmanda ve Şekil 1.5.(b)’de en üstteki birkaç katmanda oluşmaktadır.



Şekil 1.5. a) üst katmanda ve b) birkaç katmanda korunumsuz yeniden yapılanma durumları.

Yeniden yapılanma sınırlı sayıda metal yüzeyde oluşurken yarıiletken yüzeylerde oldukça yaygındır. Yarıiletkenlerde ideal kristal bitimi kararsızdır ve yüzey yüksek yoğunlukta kırık bağ içerir. Yüzeyin serbest enerjisini azaltmak için yüzey atomları kendi aralarında yeni bağ yapacak şekilde orijinal pozisyonlarından yer değiştirirler.

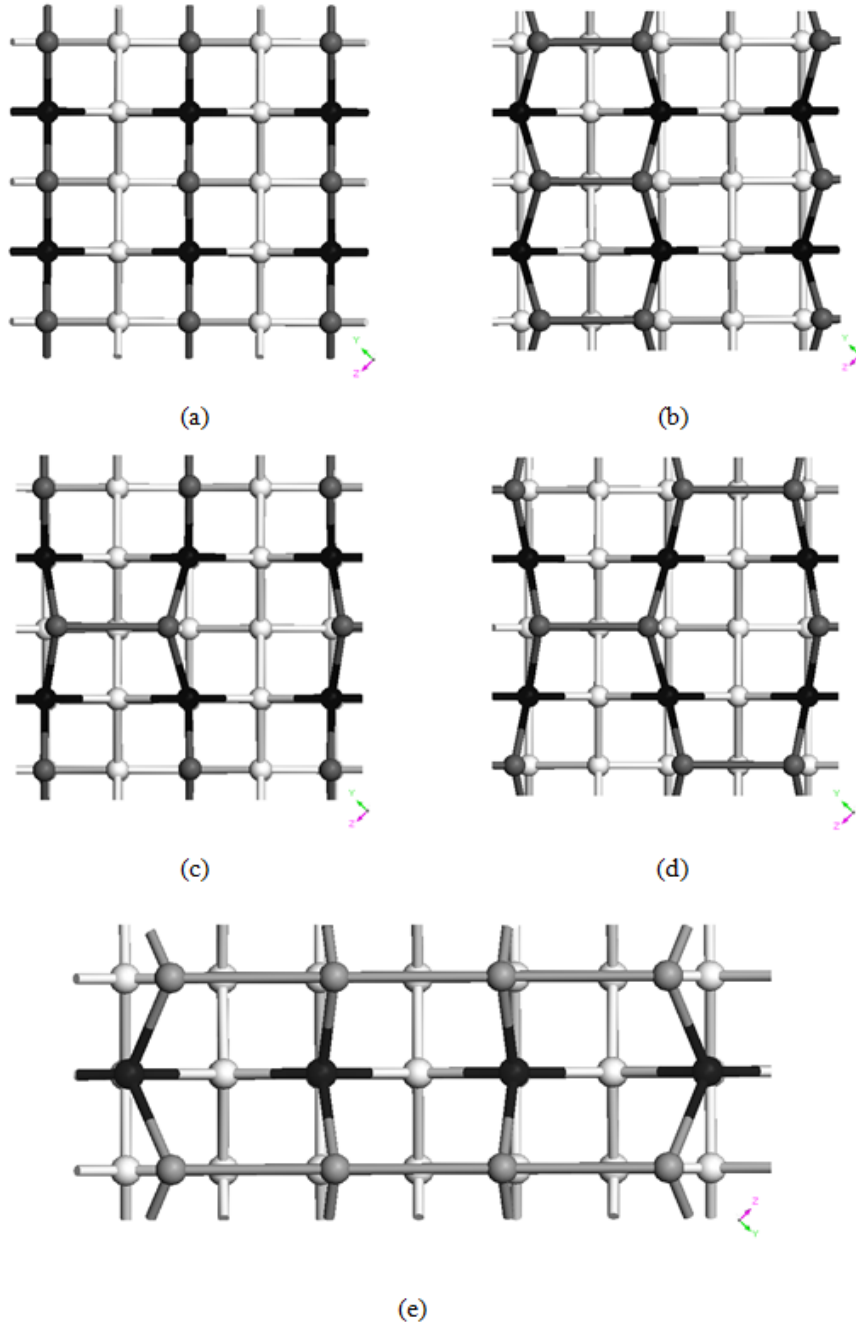
Yüzey enerjisi kazanımı elektrik yükünü kırık bağlar arasında transfer ederek, bazılarını doldurup bazılarını boşaltır. Buna karşın atomların yer değiştirmesi örgüde stresin sonucudur. Yeniden yapılanmadaki en üst katman genellikle daha alt katmandaki durulma sayesinde olur[25].

1.5. GaN Yüzey Yapılanmaları

Son yıllarda katılarda faz geçişi araştırmaları temel ilgi ve teknolojik önemden dolayı büyük artış göstermiştir. Bu araştırmacıların temel amacı, faz geçişiyle materyalin özelliklerini açıklayabilmek, yeni materyaller yapabilmek ve materyal seçimindeki rasyonel temeli kanıtlayabilmektir. Faz geçişi temel araştırma odağıdır çünkü faz yapısını ve buna bağlı olarak da materyalin genel yapısından farklı yeni formunu oluşturmaktadır[27].

GaN yüzeyinde beş farklı yüzey yapılanması görülmektedir. Bu yüzeyler (1x1), (2x2), c(2x2), ms(2x2) ve (1x4) olarak adlandırılır. Zinc-blende c-GaN(001) yüzey yeniden yapılandırılmaları geçmişte araştırmacılar tarafından (1x1), (2x2), c(2x2), ms(2x2) ve (1x4) tekrarlanımları biçiminde STM ve RHEED ile görüntülenerek raporlanmıştır[5].

Şekil 1.6.(a)'da görüldüğü üzere (1x1) yüzeyinde dimer oluşumu yoktur. 1x1 yüzeyi maksimum sıcaklıkta karşılaşılan en kararsız duruma denk gelmektedir. Yüzey enerjisini düşürecek dimer yapılanması olmadığından en yüksek enerjiye sahiptir. Şekil 1.6.(b), Şekil 1.6.(c), Şekil 1.6.(d) ve Şekil 1.6.(e)'de Ga ile sonlandırılmış GaN(100) yüzeyinin yeniden yapılanmış (2x2), c(2x2), ms(2x2) ve (1x4) yüzey yapılanmalarının atomik durumları görülmektedir. Bu şekillerdeki gri yuvarlaklar yüzeydeki Ga atomlarını, siyah yuvarlaklar bir alt tabakadaki N atomlarını ve beyaz yuvarlaklar ise üçüncü tabakadaki Ga atomlarını göstermektedir. GaN yüzey yapılanmaları içinde (1x4) yüzeyi en karalı durumdur. En düşük sıcaklıkta gözlemlendiğinden minimum enerjiye sahiptir. Taban durum enerjisine denk gelir.

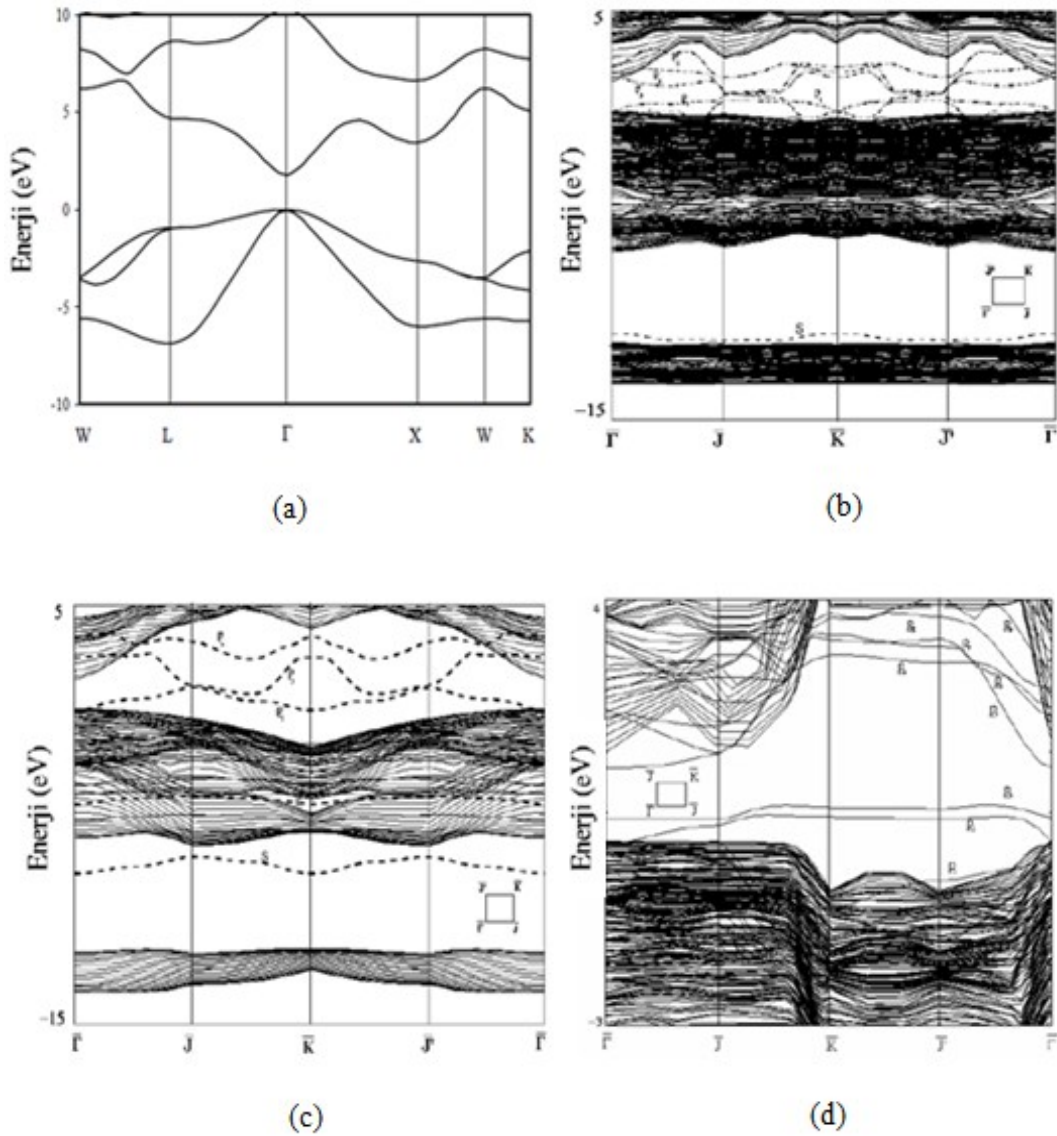


Şekil 1.6. GaN (100) yüzeyinin a) 1x1, b) (2x2), c) c(2x2), d) ms(2x2) ve e) 1x4 yeniden yapılanması.

Yapılan çalışmalar, 1x4 yüzeyinin sıcaklıkla c(2x2) yüzeyine yapısal faz geçişi gerçekleştirdiğini göstermektedir. c(2x2) yüzeyi ve ms(2x2) ile (2x2) yüzeyi faz geçiş sıcaklıkları birbirine oldukça yakındır. (2x2) yüzeyi vakumda en yüksek 680°C’de rapor edilmiştir. c(2x2) yüzeyi, (2x2) yüzeyinin 550°C ‘ye soğutulmasıyla

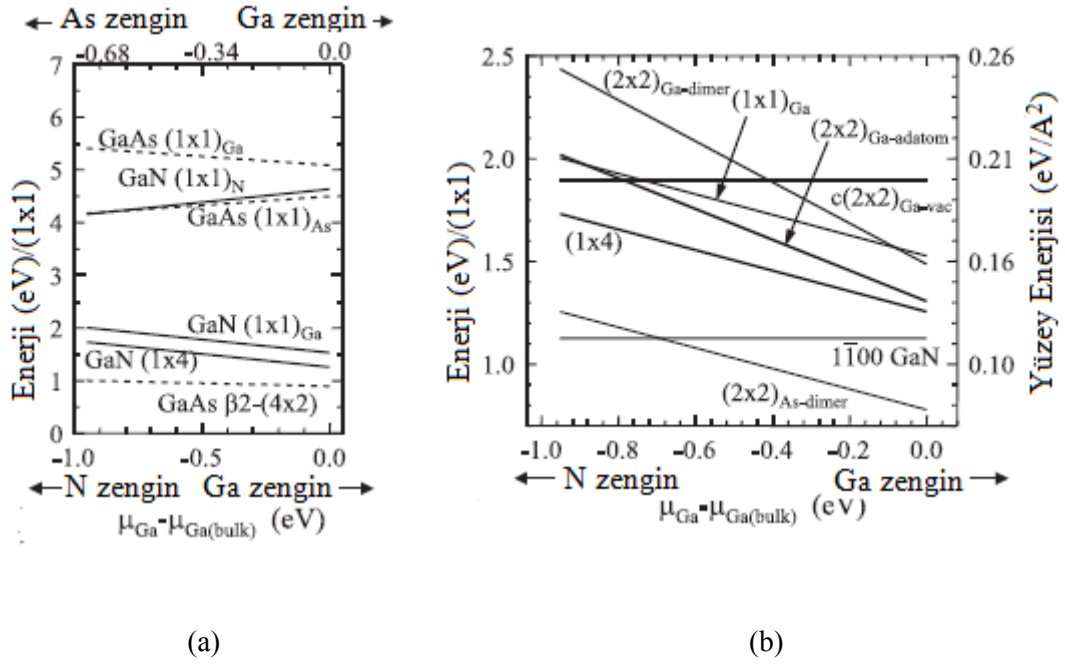
oluşur. $c(2 \times 2)$ yüzeyi periyodikliğinde bir satırda dimer oluşumu gözlenirken diğer satırda dimer oluşumu yoktur. $ms(2 \times 2)$ yüzeyi, $c(2 \times 2)$ yüzeyine göre daha yüksek enerjiye sahiptir ve daha yüksek sıcaklıkta görülür[4, 14, 15, 28-32].

Farklı sıcaklık bölgelerinde farklı yüzey yapılanmaları sergileyen GaN(100) yüzeyi aynı zamanda elektronik davranış olarak da farklılıklar sergilemektedir. Şekil 1.7'de GaN bulk yapısı ve üç farklı yüzey yapısı için enerji bant grafikleri görülmektedir.



Şekil 1.7. (a) Zinc-blende GaN[33], GaN (100) yüzeyi (b) (1×1) , (c) (2×2) ve (d) 1×4 yüzey yapılanmaları için enerji bant grafikleri[24].

Şekil 1.7'den açıkça görüldüğü gibi farklı yapılanmalar için malzemenin elektronik yapısı değişmektedir. Enerji band grafikleri detaylı olarak incelendiğinde yasak enerji aralığının yüzey yapılanmasına bağlı olarak değiştiği görülmektedir.



Şekil 1.8. a) GaN ve GaAs için yüzey enerjileri. b) Ga kimyasal potansiyeli μ_{Ga} 'un fonksiyonu olarak kusursuz GaN yüzeyleri[14].

Şekil 1.8'de GaN için en düşük ve en yüksek enerjili yüzey durumları verilmiştir. En düşük enerjili yüzeyler GaN için (1x4), GaAs için $\beta 2$ -(4x2) olarak görülmektedir. Grafikte, GaN(1x1)_N enerjisi (1x1)_{Ga} enerjisinden daha büyük olduğu görünmektedir. Bu durum Ga ile sonlandırılmış yüzeyin N ile sonlandırılmış yüzeye göre daha kararlı olduğuna işaret etmektedir. Benzer durum GaAs için de geçerlidir. Bu nedenle tez kapsamında yapılan çalışmalarda Ga atomu ile sonlandırılmış yüzey durumları ele alınmıştır.

2. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ

1980'lerin başından itibaren yarıiletkenler ve yüzeyleri, onların atomik, elektronik ve titreşim özellikleri ab initio olarak çalışılmaktadır. Ab initio hesaplamalarda öncelik sistemi tanımlayan parametre setini oluşturmaktır. Ab- initio yaklaşımlarının temel gereksinimleri; elektron- iyon potansiyel enerjisini ve elektron- elektron etkileşimini iyi tanımlamaktır.

Deneysel verilerin kullanılmadığı, verilerin teorik ilkeler üzerine kurulu olduğu kuantum kimyasal hesaplamalara ab initio (Latince başlangıçtan) denir. Ab initio hesaplama zamandan bağımsız schrödinger denkleminin deneysel olmayan çözümüdür. Born Oppenheimer yaklaşımının yanında, görelilik etkiler göz ardı edilir ve moleküler orbital ya da dalga fonksiyonu kavramı ortaya konulur.

Ab initio methodlarında moleküler orbitaller atomik orbitallerin lineer kombinasyonu olarak alınır. Bilinen en temel ab-initio hesaplama yöntemi Hartree Fock'dur. Hesaplamalarda çoğunlukla Gaussian, Gamess, Hyperchem, Cache paket programları kullanılır. Katsayı tanımlaması çeşitli ilkelerle hesaplanmış lineer kombinasyonlarla, moleküler sistemin elektronik enerjisini minimize yapacak orbitaller seçilir. Bu enerji Hartree Fock enerjisi olarak bilinir. Pratikte moleküler dalga fonksiyonları seti matematiksel üsler ve katsayılar önemsiz olarak bilgisayar programlarına girilir. İlişkili integraller ile Hamiltonyen matriksi hesaplandıktan sonra potansiyel hesabı yapılır. Göz ardı edilen etkileşim etkileri ab initio hesap sonuçlarındaki kaliteyi değiştirir[34]. Ab initio'nun dezavantajı ise CPU zamanı ve bellek kullanımınıdır. Bir hesabın iki katı büyüklüğünde başka bir hesap, ilkinden 16 kat daha fazla zaman alır.

Hartree Fock dışındaki bir diğer ab initio yaklaşım Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)'dir. DFT, çok parçalı dalga fonksiyonu olmadan, yoğunlukların yardımı ile fermiyonların etkileştiği bir sistemi tanımlamaktadır.

Sistemin dolu olmayan elektron seviyelerinin fiziksel özellikleri, elektronik band boşluk yapısı ve optik özellikleri DFT ile çalışılabilir. DFT-LDA ve pseudopotansiyelde sistemi tanımlayan denklem yazılır. Atomik bir sistemin özellikleri çoğunlukla 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. Bu Kohn-Sham (KS) methodu takip edilerek yapılabilir. Bu yöntem hamiltonyen yaklaşımıyla matris çözümü yapar. Diğer bir alternatif çözüm ise Car- Parrinello (CP) methodudur. CP Lagrange denklemlerinin diferansiyel çözümüdür. KS ve CP methodları ya da bunların çeşitleri Born-Oppenheimer yaklaşımının uzantısıdır[26].

Moleküler bir sistem için tam Hamiltonyen denklemi aşağıdaki gibi verilir:

$$H = T_{\text{elektron}}(\mathbf{r}) + T_{\text{çekirdek}}(\mathbf{R}) + V_{\text{ç-e}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + V_{\text{e-e}}(\mathbf{r}) + V_{\text{ç-ç}}(\mathbf{R}) \quad (2.1)$$

Protonun kütlesinin elektronun kütlesinden yaklaşık 1836 kat fazla olması yani çekirdeklerin kütlesinin elektronların kütlesinden çok büyük olması çekirdeğin hareketinin elektronun hareketinden daha yavaş olmasına yol açar. Born-Oppenheimer yaklaşımında, çekirdekler sabit olarak kabul edilir. Elektronlar, çekirdek korları tarafından üretilen ve elektronları atoma bağlayan bir dış potansiyelinde hareket ederler. Born-Oppenheimer yaklaşımında toplam enerji, bir sistemdeki elektronların toplam enerjisine karşılık gelir[35].

Yoğunluk fonksiyoneli teorisine göre, taban durum parçacık yoğunluğu schrödinger denkleminde bağlı olarak:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.2)$$

şeklinde tanımlanır[36]. Yük yoğunluğu Ψ dalga fonksiyonuna bağlıdır. Yük yoğunluğundan toplam enerji hesaplanması:

$$E_t[\rho] = T[\rho] + U[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (2.3)$$

şeklinde olur. Burada $T[\rho]$, ρ yoğunluklu etkileşmeyen parçacıkların enerjisi, $U[\rho]$ Coulomb etkileşmesini de içeren elektrostatik enerji, $E_{xc}[\rho]$ değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi gibi katkılardır[37,38].

Dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\Psi = A(n)|\Phi_1(1)\Phi_2(2) \dots \Phi_n(n)| \quad (2.4)$$

Buradaki Φ moleküler orbitallerdir ve aşağıdaki gibi orthonormal bir set oluştururlar:

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.5)$$

Bu durumda yük yoğunluğu moleküler orbitallere bağlı olarak da ifade edilebilir:

$$\rho(r) = \sum_i |\Phi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.6)$$

Moleküler orbitaller spin yukarı veya spin aşağı elektronlar ile doldurulabilir. Elektronlar için aynı Φ_{ij} fonksiyon kullanılırsa sınırlandırılmış spin durumu, iki ayrı fonksiyon kullanılırsa sınırlandırılmamış spin durumu ortaya çıkar. Sınırlandırılmamış spin durumunda iki farklı yük yoğunluğu elde edilir. Bu iki farklı yük yoğunluğunun toplamı; toplam yük yoğunluğuna, farkı ise; spin yoğunluğuna karşılık gelir. Sınırlandırılmış ve sınırlandırılmamış Hartree-Fock hesapları buna benzerdir[39].

$$\Phi_i = \sum_{\mu} C_{i\mu} \chi_{\mu} \quad (2.7)$$

Atomik yörüngemsiler χ_{μ} atomik temel fonksiyonlar olarak adlandırılır ve $C_{i\mu}$ moleküler yörüngemsilerin açılım katsayısıdır. Bu temel setler için Gaussian fonksiyonlar, Slater fonksiyonlar, düzlem dalgalar ve sayısal yörüngemsilerden birine karşılık gelen bir seçim yapmak mümkündür. CASTEP' te düzlem dalgalar

kullanılmaktadır. Moleküler yörüngemsilerden farklı olarak atomik yörüngemsiler orthonormal değildir.

$$H_{\mu\nu}C_{i\mu} = E_i S_{\mu\nu}C_{i\mu} \quad (2.8)$$

$$H_{\mu\nu} = \langle \chi_\mu(\bar{r}_1) \left| -\frac{\nabla^2}{2} + V_n + V_e + \mu_{xc} \rho(\bar{r}_1) \right| \chi_\nu(\bar{r}_1) \rangle \quad (2.9)$$

$$S_{\mu\nu} = \langle \chi_\mu(\bar{r}_1) | \chi_\nu(\bar{r}_1) \rangle \quad (2.10)$$

H, C'ye bağlı olduğundan $H_{\mu\nu} C_{i\mu} = E_i S_{\mu\nu} C_{i\mu}$ denklemini aşağıdaki iteratif teknik kullanılarak çözmek mümkündür:

1. Başlangıç olarak $C_{i\mu}$ moleküler yörüngemsi açılım katsayısı seçilir
2. Moleküler yörüngemsilerin başlangıç seti oluşturulur.
3. $\rho(r)$ yoğunluğu oluşturulur.
4. $\rho(r)$ yoğunluğu kullanılarak V_{e-e} ve μ_{xc} oluşturulur.
5. $H_{\mu\nu}$ denklemi oluşturulur.
6. Yeni bir $C_{i\mu}$ moleküler yörüngemsi açılım katsayısı için $H_{\mu\nu} C_{i\mu} = E_i S_{\mu\nu} C_{i\mu}$ çözülür.
7. Yeni bir Φ_i ve ρ oluşturulur.
8. Eğer yeni $\rho(r) =$ eski $\rho(r)$ ise toplam enerji hesaplanır ve durur.
9. Eğer 8. adımdaki eşitlik şartı sağlanmadıysa 4. adıma geri dönülür.

Organik moleküller için bu iterasyon $|\rho(r)_{\text{yeni}} - \rho(r)_{\text{eski}}| < 10^{-6}$ miktarda yakınsamanın oluşması için yeterlidir. Ancak metalik sistemler için daha fazla iterasyon gerekir[33].

3. MODEL

3.1. Ising Model

Ising model, ferromanyetik malzemelerin termodinamik özelliklerini incelemek amacıyla kurulmuş bir modeldir. Birçok fiziksel olayların termodinamik özelliklerinin açıklanması Ising model kullanılarak yapılmaktadır. Örneğin: donma, manyetik düzenlilik, manyetik faz geçişleri, düzenli ve düzensiz geçişler v.b. Kalıcı olarak mıknatıslanabilen malzemelerin (ferromanyetler) bu özelliklerini kayb ettikleri sıcaklığa (manyetik özelliklerinin sıcaklıkla değişimini inceleyen Pierre Curie'nin anısına) Curie sıcaklığı (kritik sıcaklık, T_C) denir. Kritik sıcaklıkta ferromanyetik malzemeler paramanyetik özellik gösterir. Kritik sıcaklığın altında komşu manyetik spinler paralel şekilde durur. Kritik sıcaklığın üstünde malzemenin manyetik momentini tamamen düzensiz hale gelir. Magnet kritik sıcaklığın üzerine ısıtılsa manyetik özelliğini kaybeder. Her iki taraftan curie sıcaklığına yaklaşıldığında özısı ve manyetik alınganlık iraksamaktadır.

Ising model 1925 yılında ferromanyetizma problemi için Ernst Ising tarafından önerilmiş ve bir boyutlu spin-1/2 sistemin tam çözümünü yapılmıştır. 1944 yılında dış manyetik alanın olmadığı durumda iki boyutlu Ising modelinin tam çözümü Onsager tarafından yapılmıştır[40].

Bugüne kadar Ising modelin en yakın komşu etkileşmeler dışında etkileşmeler içeren Hamiltonyenleri, üç boyut ve üzeri uzaylardaki davranışı, tam olarak çözülememiştir. Bu yüzden çözümlenemelerinde Monte Carlo Renormalizasyon Grup yaklaşımı (MCRG) gibi yaklaşık ve numerik hesaplama teknikleri kullanılmaktadır[41].

Ising model, N tane sabit noktadan oluşan d -boyutlu periyodik sistemleri inceler. İncelenen sistemin örgü noktalarında spinler bulunur. Her bir spin, incelenen sisteme göre birçok değer ($S = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) alabilir. En basit durumda manyetik sistemler için belli bir eksen boyunca veya bu eksene zıt yönde olmak üzere iki durumda

bulunabilir. Spinler spin yukarı ise $S = +1$, spin aşağı ise $S = -1$ olarak kabul edilir. Bu durumda Ising Hamiltonyeni S 'e bağlı olarak aşağıdaki şekilde yazılabilmektedir.

$$H_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (3.1)$$

Burada J_{ij} bilineer etkileşme sabitidir. İzotropik etkileşmelere sahip sistemler için J sabit değerler alırken izotropik olmayan sistemler için doğrultuya bağlı olarak farklı değerler alabilmektedir. H dış manyetik alandır. $\langle ij \rangle$ sembolü en yakın komşu spin çifti anlamına gelir. Bu hamiltonyenin $J > 0$ için taban durumu bütün spinlerin aynı yönde yöneldiği ferromanyetizmadır. J 'nin $+$ ve $-$ olma durumuna göre farklı taban durumlar oluşmaktadır. $+J$ için taban durum ferromanyetizma iken $-J$ için antiferromanyetizmadır.

En basit durum olan spin-1/2 Ising model için Hamiltonyen yazılırken örgü düzenine bağlı olarak en yakın komşu bilineer etkileşmeler göz önüne alınır. Diğer etkileşimler ihmal edilir. 1/2 spinli bir sistem için spinler ya aşağı ya da yukarı yönelecektir. Dolayısıyla örgüdeki atom sayısı arttıkça ikisi aşağı, ikisi yukarı, biri aşağı biri yukarı olmak üzere konfigürasyonlar artar. Sistemin en düşük enerjili yani kararlı durumu spinlerin $\uparrow\uparrow$ veya $\downarrow\downarrow$ olduğu ferromanyetizmadır[23].

Ising modelde tüm termodinamik fonksiyonlar E_I enerjili mümkün konfigürasyonlar üzerinden hesaplanmaktadır. E_I enerjili bir sistemin ağırlık fonksiyonu aşağıdaki gibidir.

$$Z_I(H, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{-\beta E_I(S_j)} \quad (3.2)$$

Burada her bir S_i spin değişkeni bağımsız olarak ± 1 değeri alabildiğinden yukarıdaki toplam 2^N terimden oluşmaktadır. Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir.

$$f(H, T) = -kTN^{-1} \log Z_I(H, T) \quad (3.3)$$

Bu serbest enerjiye bağılı olarak spin başına termodinamik nicelikler aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$U_I(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (3.4)$$

$$C_I(H, T) = \frac{\partial U_I}{\partial T} \quad (3.5)$$

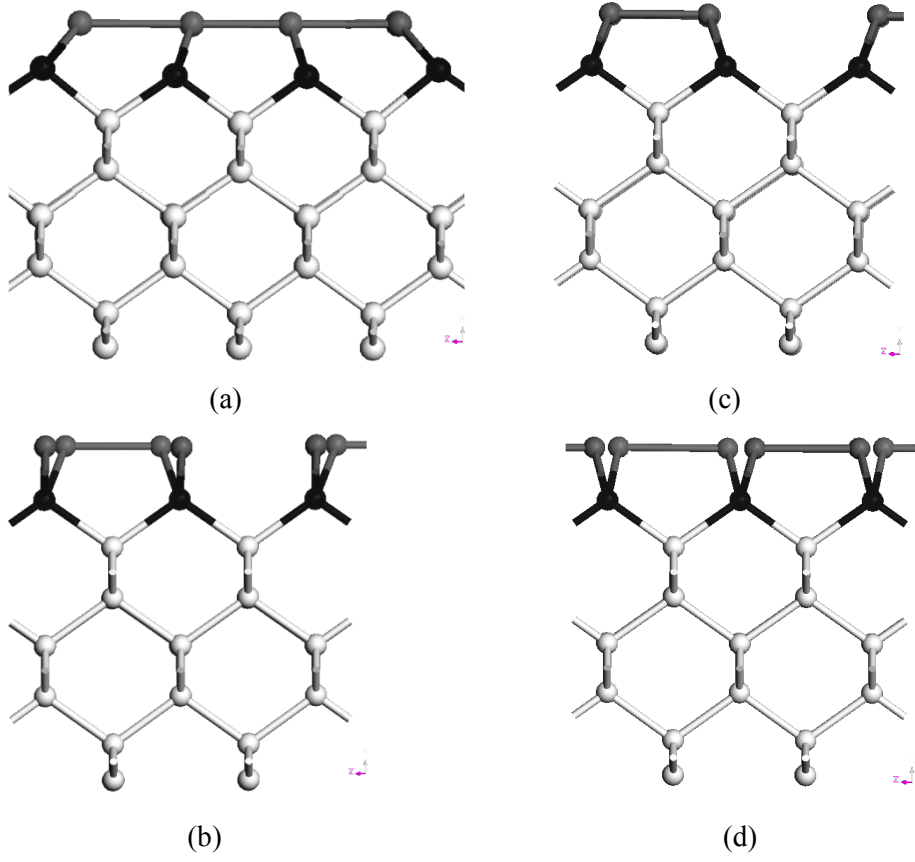
$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (3.6)$$

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (3.7)$$

Burada U_I iç enerji, C_I özısı, M düzen parametresi ve χ manyetik alınganlıktır. Dış alan $H=0$ olduğu durumda $M(0, T)$ niceliği kendiğilinden mıknatıslanma veya düzen parametresi olarak adlandırılmaktadır. Ferromanyetik sistemlerde $M(0, T)$ sıfırdan farklıdır[42-44].

3.2. GaN(100) Yüzey için Ising Model Hamiltonyeni

Bu güne kadar Si ve Ge için yapılan yüzey modelleme çalışmalarında yüzeyde oluşan dimer bükülmeleri spin-1/2 Ising model kullanılarak başarı ile temsil edilmiştir[6-8]. Fakat GaN(100) yüzeyinde açılı yönelimin olmadığı atom durumlarının varlığından spin-1/2'yi kullanmak mümkün değildir. GaN(100) yeniden yapılanmış 1x4 2x2 ve ms(2x2) yüzeylerde oluşan dimerler belirli bir bükülme açısı göstermemekte, bir çok durumda sağa veya sola belirli açılar yapmaktadır. 1x1 ve c(2x2) yüzeylerde ise dimer oluşmamaktadır [Şekil 3.1].

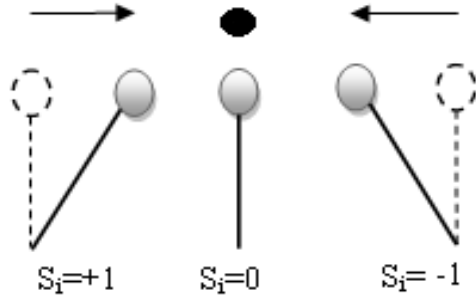


Şekil 3.1. GaN yüzeyinde y eksenini doğrultusunda a) 1x4, b) 2x2, c) c(2x2) ve d) ms(2x2) yeniden yapılanmaları.

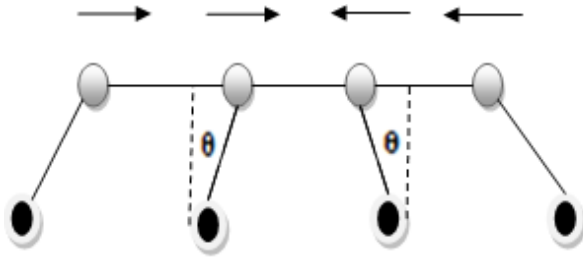
Şekil 3.1'de GaN(100) yeniden yapılanmış yüzeylere y eksenini doğrultusunda bakıldığında elde edilen görüntüler verilmektedir. Bu yüzeylerin yeniden yapılanma tabakalarındaki atomların bükülme açısı sergilemeden dimer oluşturacak şekilde sağa sola aç yaptıkları görülmektedir. Gri yuvarlaklar yüzeydeki Ga atomlarını, siyah yuvarlaklar bir alt tabakadaki N atomlarını ve beyaz yuvarlaklar ise alt tabakadaki atomları göstermektedir.

GaN (100) yüzeyindeki atomlar bükülme açısı oluşturmadan sadece sağa veya sola yönelerek dimer oluşturduklarından, dimer bükülme açısı yerine GaN atomlarının sağa ve sola yönelimlerini spin durumu olarak düşünmek mümkündür. Bu yüzden spin durumları, atom yapılanmamış duruma göre sağa doğru bir θ açısı yapıyor ise

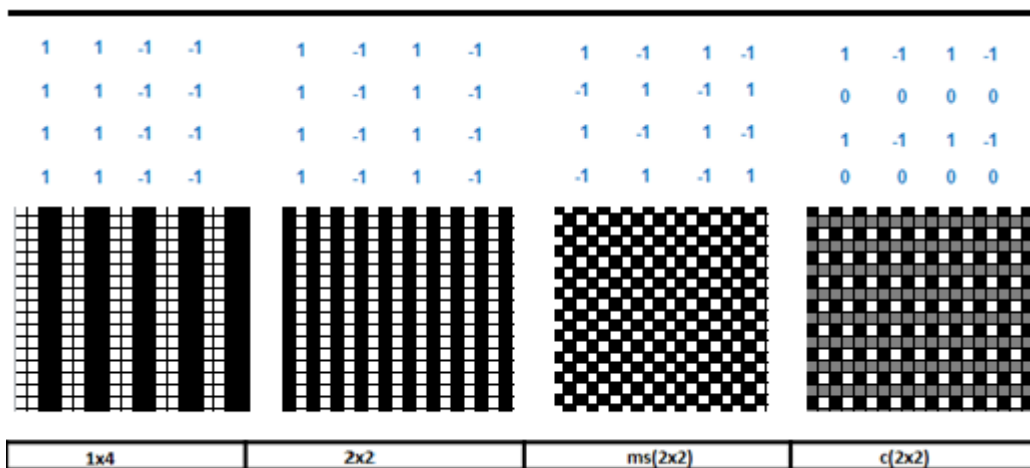
$S = +1$, sola doğru bir θ açısı yapıyor ise $S = -1$ ve herhangi bir yönelim göstermiyorsa $S = 0$ olarak seçilmiştir. Atom durumlarına bağlı olarak spin seçimi Şekil 3.2' de görülmektedir.



Şekil 3.2. $S_i = +1, 0$ ve -1 durumlarının karşılık geldiği atom yönelimleri.



Şekil 3.3. GaN(100) yüzey yapılanmasında 1×4 'ün spin gösterimi.



Şekil 3.4. GaN için $1 \times 4, 2 \times 2, ms(2 \times 2)$ ve $c(2 \times 2)$ yüzeylerinin spin temsili.

Şekil 3.3 de 1x4 taban durumu için atomik yönelimlere bağlı olarak spin gösterimi verilmektedir. Şekil 3.4 de ise GaN (100) yeniden yapılanmış yüzeylerinin spin temsili görülmektedir.

Bugüne kadar yapılan Ising model çalışmalarından GaN(100) yüzey yapılanmaları içinde en düşük enerjili olan 1x4 yüzey spin temsiline sadece en yakın komşu etkileşmeli ve izotropik bir Ising Hamiltonyen ile modellenemeyeceği görülmektedir.

Ising modelde izotropik (yöne bağlı) etkileşmeler dışında, anizotropik etkileşmeler de tanımlanabilir. Anizotropik Ising modelde, bir spin kendisine en yakın yatay, dikey ve diagonal (çapraz) komşuluktaki spinlerle farklı miktarlarda etkileşir. GaN(100) yüzey yapılanmalarında dimerlerin kendilerine en yakın yatay, dikey ve diagonal doğrultudaki komşu atomlar ile etkileşmeleri dikkate alındığında, anizotropik olduğu görülür.

Spin $\frac{1}{2}$ Ising model, $S = +1$ ve $S = -1$ olmak üzere iki spin durumudur. Spin 1 Ising model ise; GaN(100) gibi spin değeri $S = -1$, $S = 0$ ve $S = +1$ olan üç durumlu fiziksel sistemleri incelemeye uygun bir modeldir. En yakın komşu etkileşmeli Spin-1 Ising model için en genel hamiltonyen aşağıdaki gibi verilmektedir.

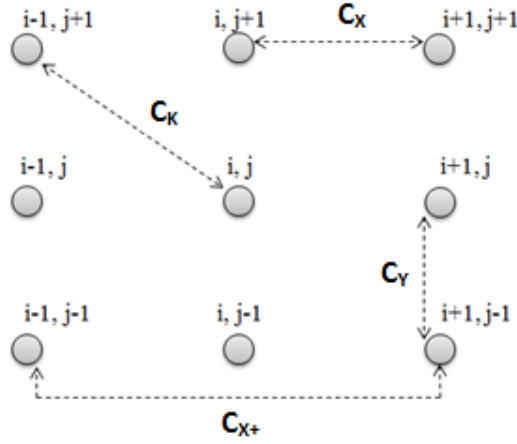
$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + L \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) + D \sum_i S_i^2 + H \sum_i S_i \quad (3.8)$$

Burada $S_i = -1, 0, +1$ değerlerini alır. J bilineer değişim etkileşme sabitini, K bikuadratik değişim etkileşme sabitini, L çift kutup-dört kutup etkileşim parametresini, H ise dış magnetik alanı göstermektedir. Parametrelerin birbirlerine göre durumları farklı spin durumlarının oluşmasına neden olmaktadır[45,46]. Şekil 3.5 'de ferromanyetik ve antiferromanyetik mümkün taban durumlar verilmiştir.

Spin-1 Ising hamiltonyeninde eğer $K=L=0$ olursa Blume-Capel (BC) model olarak adlandırılır. Eğer $L=H=0$ olursa Blume-Emery-Griffiths (BEG) model olarak adlandırılır. BC ve BEG model de 3 spin durumlu fiziksel sistemleri modeller.

+ +	- -	0 0	+ -	0 -	0 -	0 +
+ +	- -	0 0	- +	+ 0	- 0	+ 0
	a)		b)			

Şekil 3.5. Spin-1 Ising model için a) Ferromanyetik taban durumları, b)Antiferromanyetik taban durumları.



Şekil 3.6. GaN (100) yüzeyinde yüzey etkileşme durumları.

Şekil 3.6'da herhangi bir spin sisteminde olabilecek mümkün etkileşmelerden birkaçı gösterilmektedir. Burada C_X ve C_Y satır ve sütun doğrultusundaki en yakın komşu etkileşmeleri, C_K diagonal etkileşmeyi ve C_{X+} satırdaki ikinci derece etkileşmeyi göstermektedir. Böyle bir spin sistemi için Ising spin hamiltonyenini genel olarak aşağıdaki şekilde yazmak mümkündür.

$$H_I = \sum_{m,n} C_{m,n} S_m S_n \quad (3.9)$$

Burada $C_{m,n}$ katsayısı satırdaki en yakın komşu $[S_{i,j} S_{i,j+1}]$, sütundaki en yakın komşu $[S_{i,j} S_{i+1,j}]$ ve diagonal komşu $[S_{i,j} S_{i+1,j-1} + S_{i,j} S_{i+1,j+1}]$ etkileşmelerine ve diğer etkileşmelere karşılık gelebilir.

3.3. GaN Yüzey Potansiyeli

Herhangi bir yüzey için uygun bir Ising spin Hamiltonyeni elde etmek için yüzey etkileşim enerjilerini doğru hesaplamak ve yüzey etkileşmelerini doğru tanımlamak gerekir. Ising spin hamiltonyenindeki etkileşim parametrelerini tespit etmek için en az parametre sayısı kadar yüzey etkileşim enerjisine ihtiyaç duyulmaktadır. Bu çalışmada GaN(100)'ın yeniden yapılanmış 1x4, 2x2, ms(2x2) ve c(2x2) yüzey enerjileri DFT (Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi) ni temel alan CASTEP programı kullanılarak GGA genelleştirilmiş eğim yaklaşımı içinde PW91 değiş-yokuş korelasyon fonksiyoneli ve sözde potansiyeli ile hesaplanmıştır. Hesaplamalarda 340 eV kesilim enerjisi, ms(2x2), (2x2) ve c(2x2) yüzeyleri için 1x2x2 k-nokta seti ve (1x4) yüzeyi için 1x1x1 k-nokta seti kullanılarak ab-initio olarak hesaplanmıştır. GaN(100)'ın mümkün yüzey durumları için 4x4 süper yüzeyler oluşturularak enerjileri hesaplanmış ve bu yüzey enerjileri kullanılarak kusur içermeyen yüzey için yüzey etkileşme potansiyeli aşağıda tanımlanan yöntem ile oluşturulmuştur.

Yüzey potansiyelini doğru bir şekilde oluşturabilmek için yüzey etkileşim enerjisinin hesaplanması gerekir. Yeniden yapılanmış yüzeyler için oluşturulan simetrik 4x4 süper örgülerinin yüzey enerjisini hesaplamak için iki yöntem izlemek mümkündür. Bunlardan ilki hesaplanan yüzey enerjisinden bulk enerjisini çıkarmaktır. İkinci yöntem ise taban duruma karşılık gelen yüzeyin enerjisi ile mümkün tüm durumların enerjilerinin farkını almaktır. Bu durumda elde edilen enerjiler bağıl olarak yüzey enerjisine karşılık gelmektedir[6,9]. Bu tez kapsamında yapılan çalışmalarda, 4x4 süper örgülerde üst ve alt yüzeyler simetrik olarak oluşturulduğundan enerji farklarının yarısı alınarak, yüzeylerin 1x4'e göre enerji farkları elde edilmiştir.

Çizelge 3.1'de GaN(100) için hesaplamalarda kullanılan yüzeyleri için Castep paket programı kullanılarak hesaplanan 1x4'e göre yüzey enerji farkları görülmektedir.

Çizelge 3.1. 4x4 olarak tanımlanmış yüzeylerin CASTEP ile hesaplanan enerjileri.

	4x4 yüzeyin toplam enerjisi (eV)	1x4'e göre bir tane 4x4 yüzeyin enerjisi (eV)
(1x4)	-256179,140	0,0000
(2x2)	-256172,211	3,4645
ms(2x2)	-256172,342	3,3995
c(2x2)	-256171,618	3,7610
(1x4)2d	-256176,336	1,4020

GaN için literatürde dimer oluşumu gözlenen dört temel yüzey vardır. Çizelge 3.1'den de görülebileceği gibi bu yüzeylerden enerjisi en düşük olan yani taban duruma denk gelen 1x4 yüzeyidir. Artan sıcaklıkla (1x4) yüzeyinin yüksek enerjili diğer yüzeylere dönüşmesi beklenebilir. Çünkü (2x2) ve c(2x2), ms(2x2) ve (1x1) yüzeylerin oluşma sıcaklıkları 1x4'den daha yüksektir[14].

Si ve Ge için yapılan Ising model hesaplamaları gözönüne alındığında GaN(100) yüzeyi için yüzey potansiyeli olarak aşağıdaki hamiltonyeni yazmak mümkündür.

$$H_I = C_X \sum S_{ij} S_{i,j+1} + C_Y \sum S_{ij} S_{i+1,j} + C_K \sum S_{ij} (S_{i+1,j-1} + S_{i+1,j+1}) + C_{X+} \sum S_{ij} S_{i,j+2} \quad (3.10)$$

Burada, ij bütün komşu hücre çiftleri üzerinden alınan toplamı göstermektedir ve C_X yatay, C_Y düşey, C_K diogonal en yakın etkileşme ve C_{X+} yatayda ikinci dereceden etkileşme enerjileridir.

Yüzeyi tanımlayan bir hamiltonyen arayışında ilk olarak üç yüzey durumu ve buna bağlı olarak C_X ve C_Y olmak üzere iki parametre gözönüne alınmıştır. Fakat elde edilen bu parametre seti taban durumu olarak 1x4'ü vermediğinden bu parametreler ile sistemi tanımlayan potansiyel elde etmek mümkün değildir. Bu yüzden potansiyel arayışında yeni parametreler denenmiştir. İkinci deneme dört yüzey durumu için C_X , C_Y ve C_K parametreleri kullanılarak yapılmıştır. Seçilen bu parametreler taban

durumu için yine 1x4 durumunu vermemiştir. Elde edilen parametreler ve onlara karşılık hesaplanan yüzey enerjileri Çizelge 3.2 ve Çizelge 3.3’de görülmektedir.

Çizelge 3.2. Kullanılan kusursuz yüzeyler ve bu yüzeylerin enerjisinden elde edilen etkileşim parametresi değerleri.

Kullanılan Yüzeyler	C_X (eV)	C_Y (eV)	C_K (eV)	C_{X+} (eV)
1x4, 2x2, c(2x2)	-0,2165	-0,1268	-	-
1x4, 2x2, c(2x2), ms(2x2)	0,0412	-0,2556	-0,1288	-
1x4, 2x2, c(2x2), ms(2x2), (1x4)2d	0,1608	-0,1360	-0,0690	0,1196

Çizelge 3.3. Dört farklı Ising yüzey potansiyeli için yüzey enerjileri.

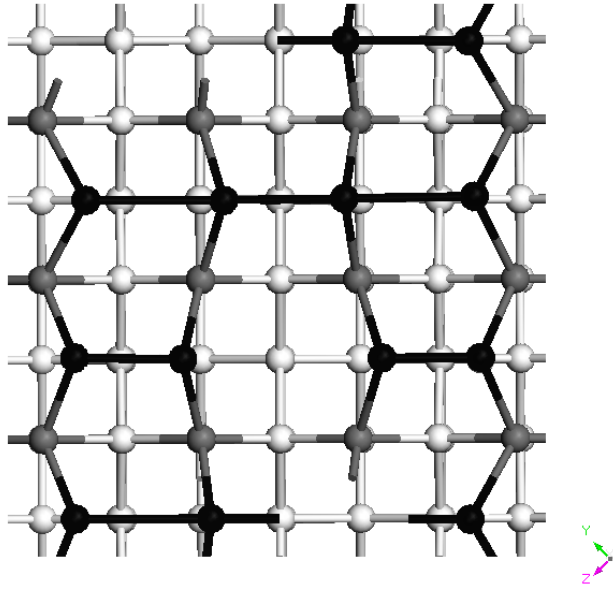
Yüzey Enerjisi (eV)					
Parametreler	1x4	2x2	c(2x2)	ms(2x2)	Ferromanyetik durum
C_X, C_Y	-2,02875	1,43575	1,73225	5,49325	-5,49325
C_X, C_Y, C_K	-4,09025	-0,62575	-0,32925	-0,69125	-7,55475
C_X, C_Y, C_K, C_{X+}	-4,09025	-0,62575	-0,32925	-0,69125	0,10148

Burada elde edilen parametreler ve enerjiler için Eşitlik 3.10 kullanılmıştır. C_X , C_Y ve C_K parametreleri kullanılarak oluşturulan hamiltonyenin enerji sıralamasını uygun bir şekilde vermemesi yüzeyde yeni bir etkileşmelerin olduğuna işaret etmektedir. Etkileşme parametreleri incelendiğinde C_Y ve C_K parametreleri ferromanyetik iken C_X parametresinin antiferromanyetik olduğu görülmektedir. 1x4 taban durumu dikey

olarak ferromanyetik bir düzen gösterirken yatay olarak antiferromanyetik etkileşmeler içermektedir. Bu durum 1x4 yüzey yapılanmasının ancak yatay ikinci derece etkileşmelerin gözönüne alınarak elde edilebileceğine işaret etmektedir.

Bu yüzden sistemi tanımlayan bir potansiyelin yazılabilmesi için C_X , C_Y , C_K , C_{X+} parametrelerinin hesaplanması gerektiği sonucuna ulaşılmıştır. Fakat kullanılan dört temel yüzeyden bulk enerjisi çıkarıldığı için kalan denklemler kullanılarak dört parametreyi elde etmek mümkün değildir. Bu durumda ancak C_{X+} parametresi diğer parametrelere bağlı olarak elde edilebilir. Bu sebeple parametreleri birbirinden bağımsız şekilde hesaplayabilmek için beşinci yüzeye ihtiyaç duyulmuştur. Bu yüzden yeni yüzey olarak diğer yüzeylerde küçük farklılıklar oluşturup enerjisi hesaplanmıştır.

Bu amaçla oluşturulan yüzeylerden en uygun olanı Şekil 3.7’de görülmektedir. (1x4)2d yüzeyi olarak adlandırılan bu yüzey 1x4 yüzeyinde iki atomun yönelimi ters çevrilerek elde edilmiştir. Siyah renk Ga atomlarını, gri renk N atomlarını, beyaz renk ise alt tabakalardaki atomları göstermektedir.



Şekil 3.7. (1x4)2d, parametre arayışında kullanılan beşinci yüzey.

Eşitlik 3.10 kullanılarak (1x4)_{2d} yüzeyi ile birlikte 4x4 olarak tanımlanmış 1x4, 2x2, ms(2x2) ve c(2x2) yüzeyler için Ising spin enerjileri C_X , C_Y , C_K ve C_{X+} parametrelerine bağlı olarak aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$E_{(1x4)} = 16C_Y - 16C_{X+} \quad (3.11)$$

$$E_{(2x2)} = -16C_X + 16C_Y - 32C_K + 16C_{X+} \quad (3.12)$$

$$E_{ms(2x2)} = -16C_X - 16C_Y + 32C_K + 16C_{X+} \quad (3.13)$$

$$E_{c(2x2)} = -8C_X + 8C_{X+} \quad (3.14)$$

$$E_{(1x4)_{2d}} = -4C_X + 8C_Y - 8C_{X+} \quad (3.15)$$

Bu denklemlerin çözümünden Ising model hamiltonyeni kurabileceğimiz bir C_X , C_Y , C_K ve C_{X+} parametre seti elde edilmiş ve Çizelge 3.2'de gösterilmiştir. Çizelge 3.3 incelendiğinde bu parametre seti için yapılan enerji hesaplamaları 1x4'ü taban durumu olarak verdiği görülmektedir. Bu sonuç GaN(100) yüzeyindeki faz geçişi hesaplamaları için C_X , C_Y , C_K ve C_{X+} parametreleri kullanılarak oluşturulan hamiltonyenin kullanılabilirliğini göstermektedir.

4. GaN(100) YÜZEYİ İÇİN CELLULAR AUTOMATA ALGORİTMASI

Cellular Automaton, doğal sistemler için matematiksel bir modeldir. Bu model için ilk temel teoriler Wolfram tarafından verilmiştir[47] Bu model, kullanılan diğer modellerden daha farklıdır. "Cellular Automaton" (CA)'da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir "CA" hali bu hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir. "CA" kesikli zaman adımlarında gelişir ve gelişim esnasında bir hücre değişkeninin değeri bölgesel bir kural yardımı ile bir önceki zaman adımında ona komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak oluşmaktadır. Bir hücrenin komşuları olarak genellikle, hücrenin kendisi ve ona en yakın komşu hücreler alınmaktadır. Herhangi bir zaman adımında tüm hücre değişkenlerinin değerleri özdeş bir kural yardımı ile eş zamanlı olarak elde edilmektedir. Genel olarak d-boyutlu bir "cellular automaton" nın gelişimi için periyodik sınır şartı kullanılmaktadır. Herhangi bir fiziksel sistem için "cellular automaton" ile bir model oluşturulurken;

i- Sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (örneğin iki boyutta kare, üçgen, vb.) seçilir.

ii- Örgüyü oluşturan hücrelerin sahip olabileceği hallere karşılık gelen değişken veya değişkenler belirlenir. Yani herbir hücrenin durumunu belirleyen değişken ve değişkenler belirlenir.

iii- Hücrelerin birbirleriyle etkileşme şekli ve gelişimi sağlayan bir bölgesel kural tanımlanır.

En belirgin durumlarda CA örgüsü konum uzayındadır. Mikroskobik seviyede her bir konum kristal örgüdeki spin bileşeni gibi kesikli ölçülebilirler veya atom tiplerine karşılık gelen noktaları temsil edebilir. Bu yüzden Ising model ve diğer örgü spin sistemleri basit bir "cellular automaton"dır. Daha genel olarak makroskobik seviyede her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri

birkaç mümkün farklı fazdan birine karşılık gelebilir. Ising modelin ve çeşitli fiziksel problemlerin "cellular automaton" olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiş ve iki boyutlu kare örgüler için komşuluktaki hücrelerin, sayısına ve konumuna bağlı olarak birçok cellular automaton kuralı isimlendirilmiştir. Vichniac'ın Ising Model için önerdiği kural Pomeau ve Herrmann tarafından Q2R cellular automaton olarak geliştirilmiştir[48, 49]. Q2R algoritmasında sistemi tanımlayan hamiltoniyen spin-spin etkileşme enerjisinden oluşmaktadır. Algoritmada iç enerji simülasyon süresince korunduğundan, özısı hesabını iç enerji dalgalanmalarını kullanarak hesaplamak mümkün olmamaktadır. Bu kısıtlama iç enerji ve spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamının korunduğu Creutz algoritması ile ortadan kalkmaktadır[10]. Bu algoritma kullanılarak dış alanın yokluğunda iki, üç ve daha yüksek boyutlarda en yakın komşu etkileşmeler için yapılan Ising model hesaplamaları Creutz cellular automaton'un Ising modeli taklit etmekte oldukça başarılı olduğunu göstermiştir[50-52]. Birçok fiziksel problem, bir cellular automaton olarak incelenebilmektedir. Dinamik Ising Model (kinetik enerji terimi bulunduran) ve diğer spin sistemleri basit bir cellular automaton problemi olarak ele alınmaktadır[37].

Trafik, kum gibi tanecikli sistemlerin akışı[53], difüzyon[54], Conus ve Cymbiola cinsi denizkabuklarında şekillerin oluşması, hata düzeltme kodlaması[55], bitkilerde besin alımı ve gazların kaybı CA mekanizması yoluyla olur. Yapraktaki her stoma bir CA hücresi gibi davranır[56]. CA'nın nörobiyoloji, bilgisayar bilimleri[57] ve müzikte[58] örnekleri vardır. Ayrıca orman yangınlarının yayılması da CA kuralına uygundur[59].

4.1. Cellular Automaton Ising Algoritması

Bu modelde örgünün her bir hücresinde üç değişken bulunmaktadır. Her bir hücredeki değişkenlerin değerleri, kendi değişkenleri ve en-yakın komşuların değişkenlerinden deterministik bir cellular automaton kuralı ile belirlenir. Her bir hücreye atanan değişkenlerden ilki B_i Ising spinidir. $B_i=0,1,2$ değerlerini alır.

$S_i = B_i - 1$ olmak üzere GaN (100) yüzeyi için Ising model Hamiltonyenini aşağıdaki ifade ile yazmak mümkündür.

$$H_I = C_X \sum S_{ij} S_{i,j+1} + C_Y \sum S_{ij} S_{i+1,j} + C_K \sum S_{ij} (S_{i+1,j-1} + S_{i+1,j+1}) + C_{X+} \sum S_{ij} S_{i,j+2} \quad (4.1)$$

Burada, ij bütün komşu hücre çiftleri üzerinden alınan toplamı göstermektedir ve C_X yatay, C_Y düşey, C_K diogonal en yakın etkileşme ve C_{X+} yatayda ikinci dereceden etkileşme enerjileridir.

İkinci değişken spine eşlik eden momentum değişkenidir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji H_k , $(0,m)$ aralığında herhangi bir spin değişimi için Ising enerjideki değişime eşit olan tamsayı değerler almaktadır. Toplam enerji ise

$$H = H_I + H_K \quad (4.2)$$

olmak üzere tüm zaman adımlarında korunur. Üçüncü bit ise paritedir. Ising hamiltonyende diogonal etkileşmelerin yanında ikinci en yakın komşu satır etkileşmeleri gözönüne alındığından, örgü 3×5 bölgelere ayrılarak herbir bölge 1'den 15'e kadar etiketlenmiştir. Bu etiketler örgünün paritesine karşılık gelmektedir. Bir zaman adımında sadece bir pariteli hücrelere kural uygulanmaktadır. Bu yüzden bir tam tarama için 15 zaman adımı gerekir. Ancak böyle bir parite seçimi bu sistemin "CA" ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Değeri değiştirilecek hücrenin spini $\frac{1}{2}$ olasılıkla diğer iki halden birine çevrilir ve Ising enerjisindeki değişim hesaplanır. Enerji değişimi bu hücrelerin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ise ve toplam enerji korunuyorsa spin ters çevrilir. Buna uygun olarak momentum değiştirilir. Aksi halde spin ve momentum değiştirilmez[52, 42].

4.2. Creutz Cellular Automaton'da Termodinamik Niceliklerin Hesabı

CA, toplam enerjinin korunumu altında mikrokronik, kinetik enerji ve iç enerji açısından kanonik bir davranış sergilemektedir. Yani simülasyon süresince enerjiler dalgalanmaktadır. Sistemin sıcaklığı aşağıda tanımlanan kinetik enerji beklenen değerinden elde edilir.

$$\langle H_k \rangle = \frac{\sum_{n=0}^m n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^m e^{-4n\beta}} \quad (4.3)$$

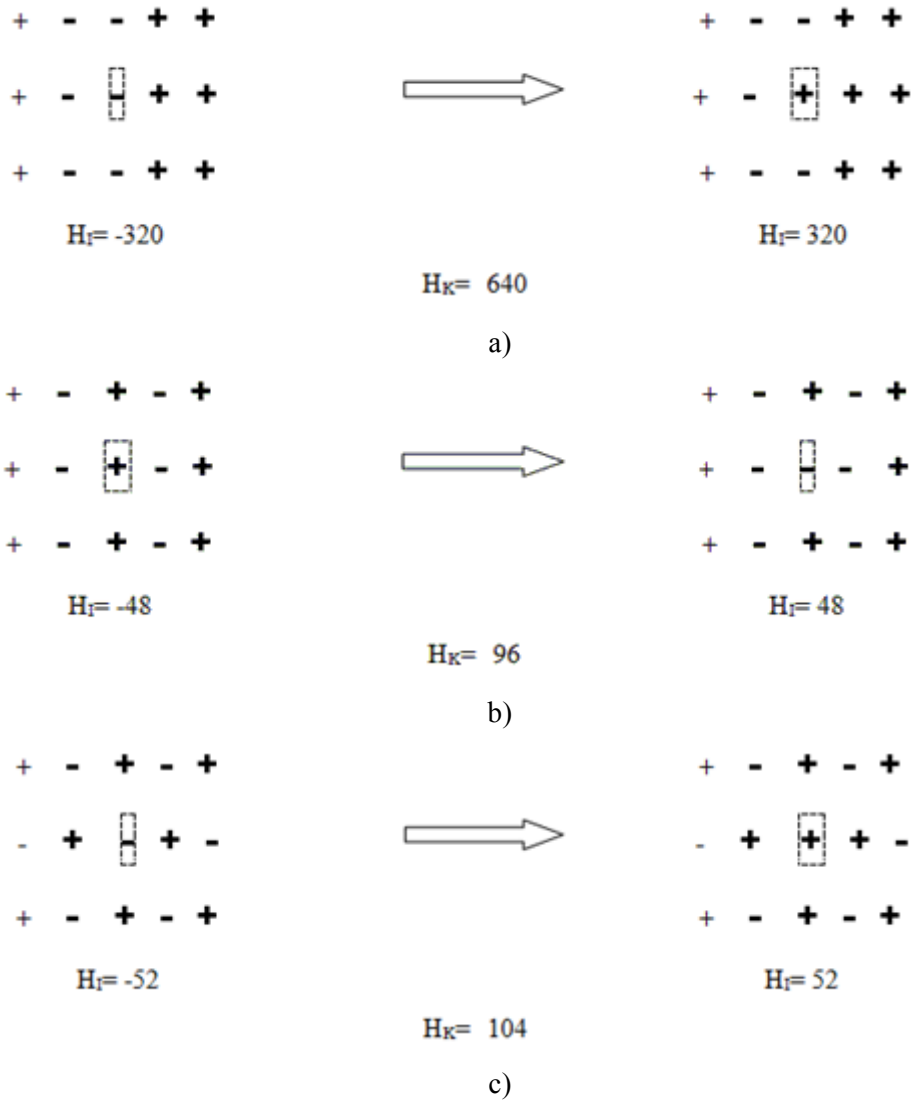
Burada n bir spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerji değerleridir. Onun değeri bir spini ters çevrilmesinde Ising enerjideki değişime karşılık gelmektedir. Farklı üç spin durumu için Ising enerji hesabı Şekil 4.1 de verilmiştir.

Şekil 4.1.'de GaN(100) 1x4, 2x2, ms(2x2) yüzey yapılanmalarında merkezi spinin bozulması için gerekli kinetik enerji miktarları ve enerji değişimi, taban durum şekillenimi ile birlikte verilmiştir.

Bütün spin durumları yaratılarak merkezi spinin değişmesi için gerekli kinetik enerji değerleri tespit edildiğinde H_k değerinin 0'dan 640'a kadar 4'er 4'er değiştiği görülmüştür. Yüksek enerjili durumların yaratılabilmesi için n'nin maksimum değeri olan m taban durumdaki merkezi spinin bozulması için gerekli 640 birim enerjinin iki katı olarak alınmıştır.

Bu çalışmada H_k'nın beklenen değeri, birim yüzey başına ve zaman adımı başına hesaplanıp, sıcaklık ise yukarıdaki ifade kullanılarak $\beta = \frac{C_X}{kT}$ olmak üzere aşağıdaki ifade yardımıyla hesaplanmıştır.

$$T = \frac{C_X}{k\beta} \quad (4.4)$$



Şekil 4.1. (a) (1×4) , (b) (2×2) ve (c) $ms(2 \times 2)$ yapılanmalarında merkezi spinin bozulması.

Termodinamik niceliklerin spin başına ve zaman adımı başına ortalama değerleri aşağıda verilmiştir.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1,5}^{N-4} (S_{i,j} + S_{i,j+1} - S_{i,j+2} - S_{i,j+3}) \quad (4.5)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = N \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (4.6)$$

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_I}{\partial T} = N \frac{\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2}{(kT)^2} \quad (4.7)$$

$$U = \langle H_I \rangle / 2NC_X \quad (4.8)$$

Burada $N = L_x \times L_y$, kendiliğinden mıknatıslanma M , iç enerji (Ising enerji) H_I , alınganlık χ , öz ısı C 'dir. Alınganlık ve öz ısı manyetizasyon ve iç enerjideki dalgalanmalardan elde edilmektedir.

4.3. Soğutma Algoritması

Soğutma algoritması, başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Başlangıç prosedüründe, ilk olarak örgü üzerindeki spinler ferromanyetik düzende alınır ve hücre başına düşen kinetik enerji, ikinci değişken yoluyla, her spin dönmesi için gerekli Ising spin enerjisindeki maksimum değişime eşit alınır. Bu konfigürasyon 20000 CA adımı için çalıştırılır. Bir sonraki adımda, düzensiz yapıdaki son konfigürasyon soğutma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır ve her toplam enerjiye karşılık gelen sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç teşkil eder. Soğutma işlemi boyunca enerji spin sisteminden ikinci değişken (demon) yardımıyla alınır. Üçüncü değişkenden dolayı iki Cellular Automaton adımı bir Monte Carlo adımına karşılık gelir.

5. BULGULAR ve TARTIŞMA

Bu çalışmada Creutz cellular automaton algoritması kullanılarak kenar uzunluğu $L_x = 60, 90, 120$ ve $L_y = L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ olan dikdörtgen örgülerle termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı davranışı incelenmiştir. Soğutma algoritmasının ilk prosedürü olarak sistemin başlangıç konfigürasyonu GaN(100) yüzeyinde 1×4 yapılanmaya uygun olarak süperantiferromanyetik spin yapısında tanımlanmış ve yüksek sıcaklıkta bir yüzey elde etmek için örgünün kinetik enerji değişkenlerinin %45' ine enerji aktarılmıştır. Bu konfigürasyon 20.000 CA zaman adımı çalıştırılarak, soğutma algoritmasında ölçümlerin yapılacağı prosedür için düzensiz yapıda bir başlangıç konfigürasyonu elde edilmiştir. Soğutma prosedürünün ikinci adımında yüksek sıcaklık bölgesinde elde edilen bu konfigürasyon başlangıç konfigürasyonu olarak alınmış ve 500.000 CA zaman adımında bir örgünün kinetik enerji değişkenlerinin $1/10$ 'nu sıfırlanarak düşük sıcaklıklara inilmiştir.

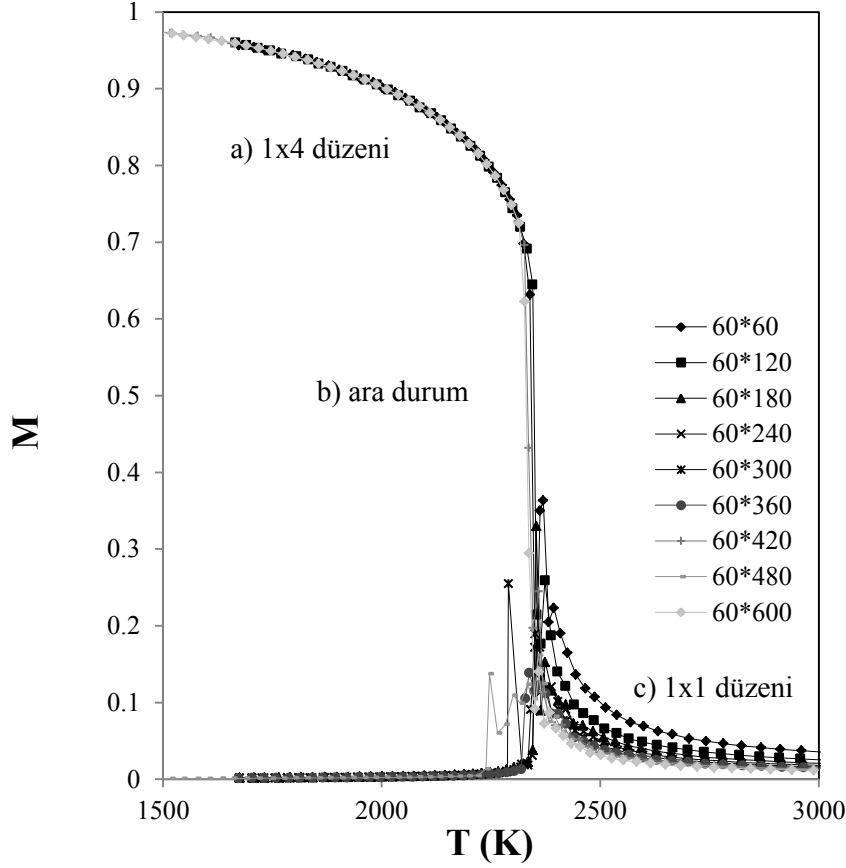
5.1. Parametre-Örgü İlişkisi:

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

	C_X	C_Y	C_K	C_{X+}
Enerji değeri (eV)	0,160785	-0,13601	-0,06903	0,119629
Normalize edilmiş değeri $100 \times C/C_X$	100	-85	-43	75

Algoritmada kullanılan Ising hamiltonyende ab-initio sonuçlarından elde edilen C_X, C_Y, C_K, C_{X+} parametreleri 100'e normalize edilerek kullanılmıştır. Çizelge 5.1'de ab-initio hesaplamalar sonucunda belirlenen C_X, C_Y, C_K, C_{X+} etkileşme parametreleri ve

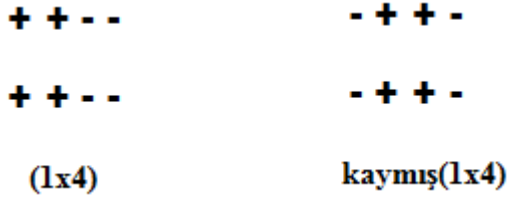
onların C_X değeri ile 100'e normalize edilmiş değerleri görülmektedir. İç enerji ve sıcaklık değerleri hesaplanırken yapılan bu normalizasyon gözününe alınmıştır.



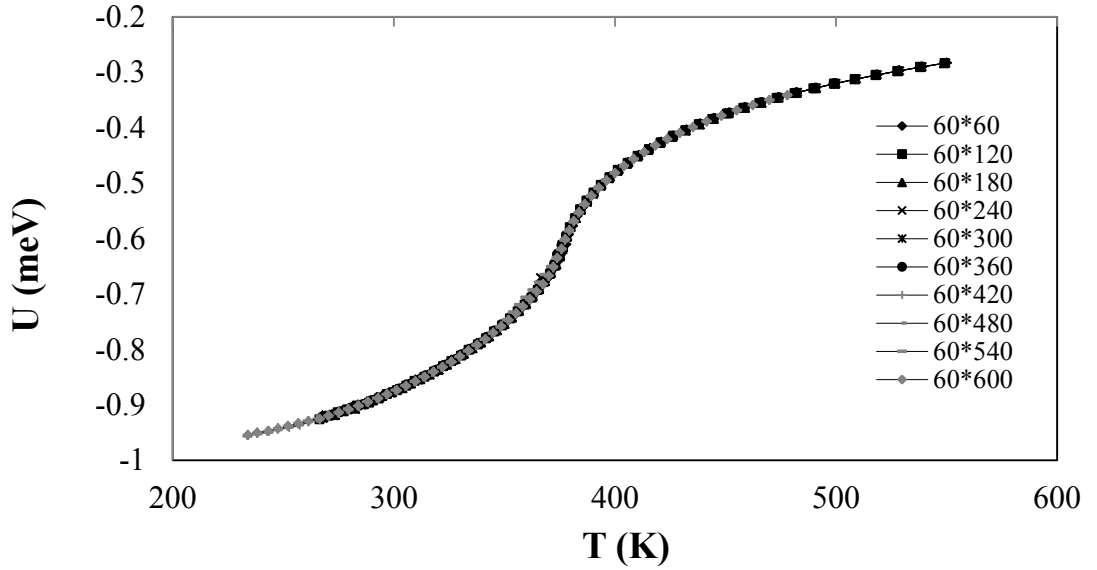
Şekil 5.1. $L_x=60$, $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ için düzen parametresi-sıcaklık grafiği.

Şekil 5.1'de $L_x=60$ ve $L_y=60, 120, 180, \dots, 600$ kenar uzunluğuna sahip dikdörtgen örgüler için düzen parametresinin sıcaklığa karşı değişimi görülmektedir. Düzen parametresinin sıcaklık değişimi incelendiğinde düşük sıcaklıkta düzen parametresinin Eşitlik 4.9'a uygun olarak 1x4 taban durumunu verecek şekilde 1'e yaklaştığı ve sıcaklık arttıkça belirli bir kritik sıcaklıkta (T_c) faz geçişi sergileyerek düzensiz duruma uygun olarak 0'a yaklaştığı görülmektedir. Ayrıca kritik sıcaklıktan yüksek sıcaklıklarda örgü kenar uzunluğu arttıkça düzen parametresinin sıfıra yaklaşma miktarının arttığı görülmektedir. Bu durum örgü etkisi olarak bilinmektedir. Diğer taraftan düzen parametresi- sıcaklık değişimi incelendiğinde,

bazı örgüler için düzen parametresinin 1'e değil kritik sıcaklığın altında 0'a gittiği görülmektedir. Yapılan incelemelerde bu durumun düzen parametresi tanımından kaynaklandığı anlaşılmıştır. Kaymış 1x4 yüzeyi görülen örgülerde düzen parametresinin 1 yerine sıfıra yaklaştığı görülmektedir. Şekil 5.2'de kaymış 1x4 yüzey yapılanması görülmektedir.



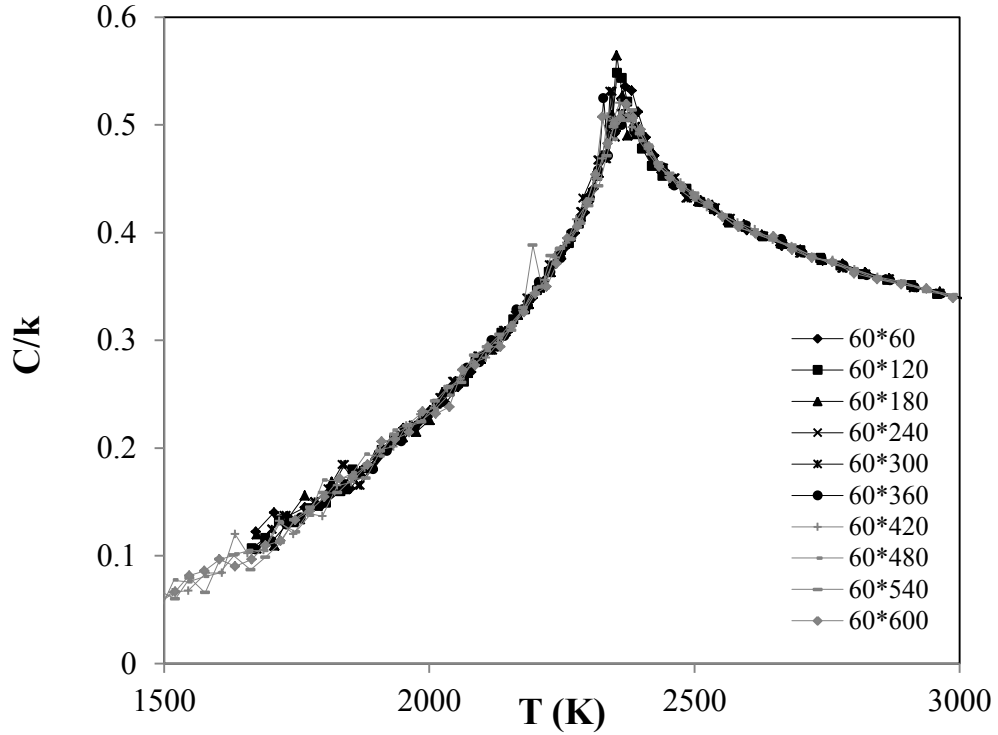
Şekil 5.2. GaN(100) yüzeyinde oluşan kaymış 1x4 şekillenimi.



Şekil 5.3. $L_x=60$, $L_y=L_x$, $2L_x, \dots, 10L_x$ için iç enerji değerinin sıcaklıkla değişimi.

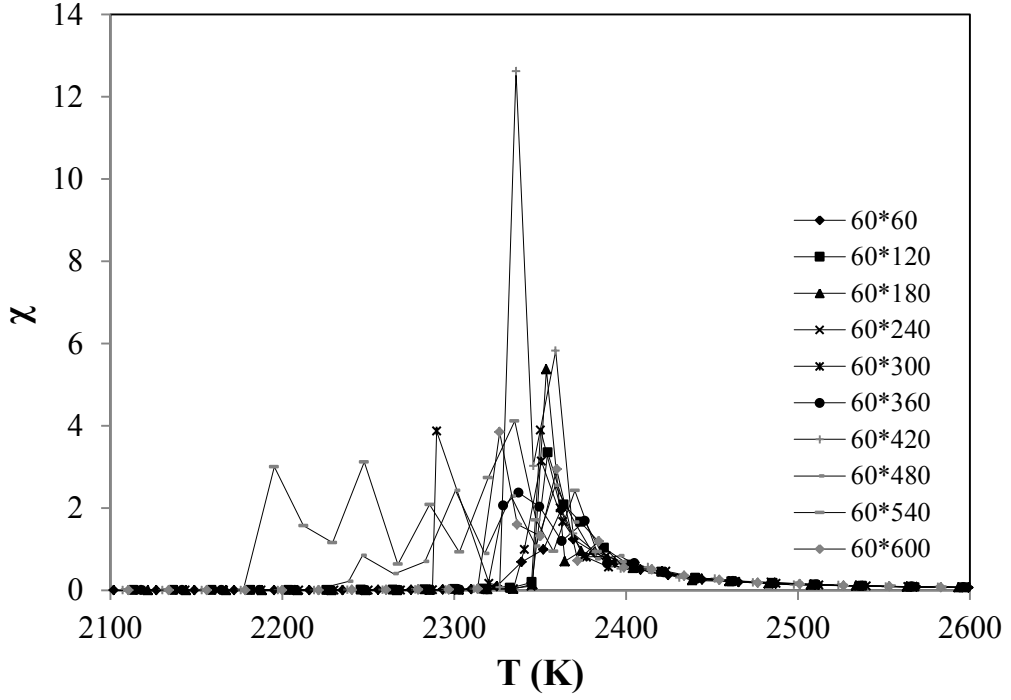
Şekil 5.3'de $L_x=60$ örgüsü için iç enerji-sıcaklık değişim grafiği verilmiştir. Grafikten iç enerjinin düşük ve yüksek sıcaklık bölgelerinde farklı birer düzlüğe sahip olduğu görülmektedir. Düşük sıcaklık bölgesindeki enerji düzlüğü yüksek sıcaklıktakine göre daha düşük enerjiye sahiptir. Bu durum bu bölgedeki yüzey

şekilleniminin taban duruma karşılık geldiğini göstermektedir. İç enerji sıcaklık grafiğinin davranışı belirli bir sıcaklık civarında faz geçişi olduğuna işaret etmektedir. Düşük sıcaklık bölgelerinde spin sisteminin 1×4 yüzey durumunu temsil etmesi beklenmektedir. Yüksek sıcaklıklarda ise diğer yüzey durumlarından biri olabilir.



Şekil 5.4. $L_x=60$, $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ örgüsü için öz ısı niceliğinin sıcaklıkla değişimi

Şekil 5.4'de $L_x=60$, $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ örgüler için verilen öz ısı-sıcaklık değişim grafiği incelendiğinde her örgünün belirli bir sıcaklıkta pik verdiği görülmektedir. Bilindiği üzere öz ısı-sıcaklık grafiğinde pik noktalarından kritik sıcaklık tayini yapılmaktadır. Bu eğrilerin davranışı ikinci derece faz geçişinde karşılaşılan özısı davranışıyla uyum içindedir. Bu durum GaN yüzeyindeki bu faz geçişinin ikinci derece faz geçişi olduğunu göstermektedir.



Şekil 5.5. $L_x=60$, $L_y=L_x, 2L_x, \dots, 10L_x$ için alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.

Şekil 5.5’de sonlu örgüler için düzen parametresinin dalgalanmalarından hesaplanan alınganlık değerlerinin sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Grafikte örgülerin pik verdiği noktalardan kritik sıcaklık tayini yapılmaktadır. Alınganlık grafiğinde dalgalanmadan dolayı, pik verilen noktalar birden fazla olduğundan, öz ısı-sıcaklık grafiğinden elde edilen sonuç kadar kesin değildir.

Yapılan hesaplamalar $L_x=90, 120$ $L_y=L_x, 2L_x, 3L_x, \dots, 10L_x$ örgüsü için tekrarlanmış, örnek olarak $L_x=60, L_y=L_x, 2L_x, 3L_x, \dots, 10L_x$ örgüsünün sonuçları gösterilmiştir.

5.2. Yüzey Fotoğrafları

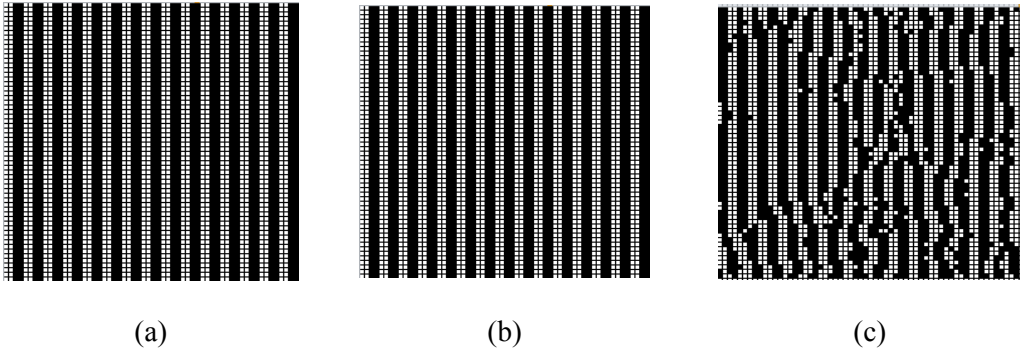
Bu çalışmada GaN (100) yüzeyinin izotropik olmayan bir spin-1 Ising model ile benzetişimi sonucunda termodinamik niceliklerin ikinci derece bir düzen-düzensizlik faz geçişi sergilediğini görülmüştür. 1x4 taban durumundan sıcaklık artışı ile gerçekleşen bu geçiş sonucunda geçiş bölgesi ve sonrasında yüzey durumunun ne olduğu merak konusudur. Ising model simülasyonlarında bir yüzeyin STM fotoğraflarına elde etmek amacıyla yüzey atomlarına karşılık gelen spinlerin zaman adımı üzerinden ortalamaları alınarak hücrelerin durumu tanımlamak mümkündür. Bir hücrenin zaman üzerinden ortalama spin değeri aşağıdaki ifade ile hesaplanmak üzere,

$$M(i, j) = \sum_{(t)} S_{ij}(t) / t_{son} \quad (5.1)$$

Bir hücrenin durumu şu şekilde tanımlanabilir:

$$m_{i,j} = \begin{cases} 1 & M(i, j) > 0 & \square \text{ beyaz} \\ 0 & M(i, j) = 0 & \blacksquare \text{ gri} \\ -1 & M(i, j) < 0 & \blacksquare \text{ siyah} \end{cases} \quad (5.2)$$

Bu tanımlamaya göre örgüdeki bir hücrenin rengi spinin zaman adımı başına ortalama değeri, $M_{i,j}$, eğer sıfır ise gri, sıfır ile bir arasındaysa beyaz, sıfırdan küçükse siyah olarak alınmıştır.



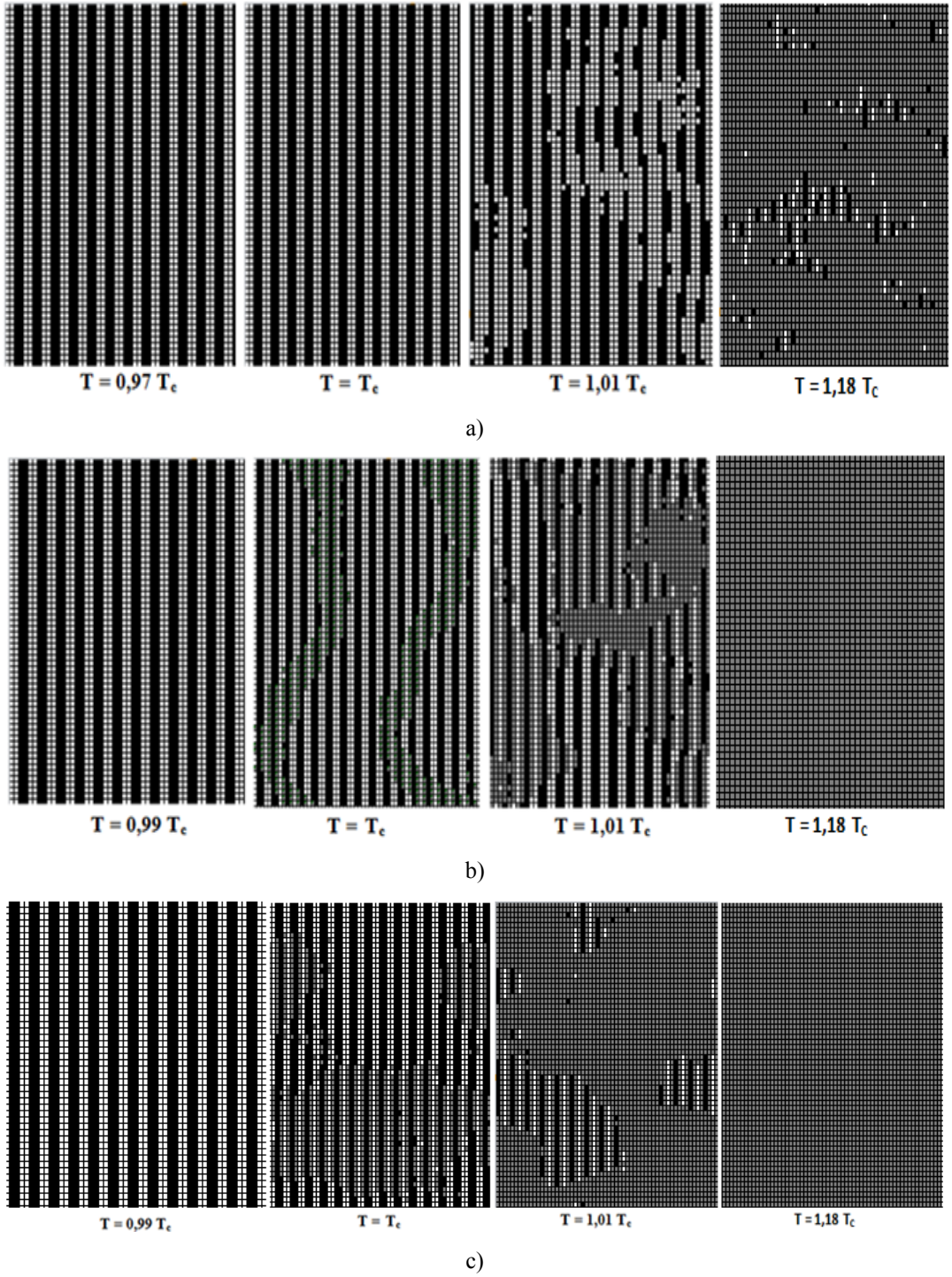
Şekil 5.6. GaN(100) yüzeyi için a) kritik sıcaklık altında, b) kritik sıcaklıkta ve c) kritik sıcaklık üstünde yüzey STM görüntüleri.

Şekil 5.6'da $L_x \times L_y = 60 \times 60$ örgüsü için manyetik alınganlık ve öz ısının pik verdiği sıcaklık değeri civarında üç farklı sıcaklık değeri için Eşitlik 5.2 de verilen tanıma uygun olarak elde edilen yüzey resimleri görülmektedir. Şekil 5.6(a) 'da $T < T_c$ için elde yüzey resmi incelendiğinde bir satır boyunca 1×4 yüzey yapılanmasına uygun olarak iki hücre siyah iki hücre beyaz olacak şekilde bütün örgüde kendisini tekrarladığı görülmekte ve $T > T_c$ bölgesinde elde edilen yüzey resmi ise beklendiği gibi 1×4 den farklı düzensiz bir yüzey yapısını temsil etmektedir. Diğer taraftan $T = T_c$ için elde edilen yüzey resminin 1×4 'den farklı faz geçişini temsil edecek yeni bir desen oluşturması beklenmesine rağmen 1×4 düzene karşılık geldiği görülmektedir. Bu durum faz geçişinin doğasına aykırıdır. Bu sonuç Eşitlik 5.2 de yapılan tanımlama kullanılarak doğru yüzey görüntüsünün elde edilmesinin mümkün olmadığını göstermektedir. Bu yüzden yeni bir hücre durum tanımlaması yapılması gerekir. İnce filmlerin yüzey STM görüntülerinin elde edilmesinde görüntünün STM ucunun algılama hızına bağlı olarak değiştiği bilinmektedir[60, 61]. Yukarıda yapılan yüzey görüntüleme tanımı çok yüksek hızda algılama yapabilen bir STM ucuna karşılık gelmektedir. Doğada bu kadar hızlı bir ölçüm ucu oluşturmanın bir yolu yoktur. Diğer taraftan düşük algılama hızlı bir STM ucu örgüdeki her bir hücre için belirli bir durum aralığı (Ω) tanımlayarak oluşturulabilir.

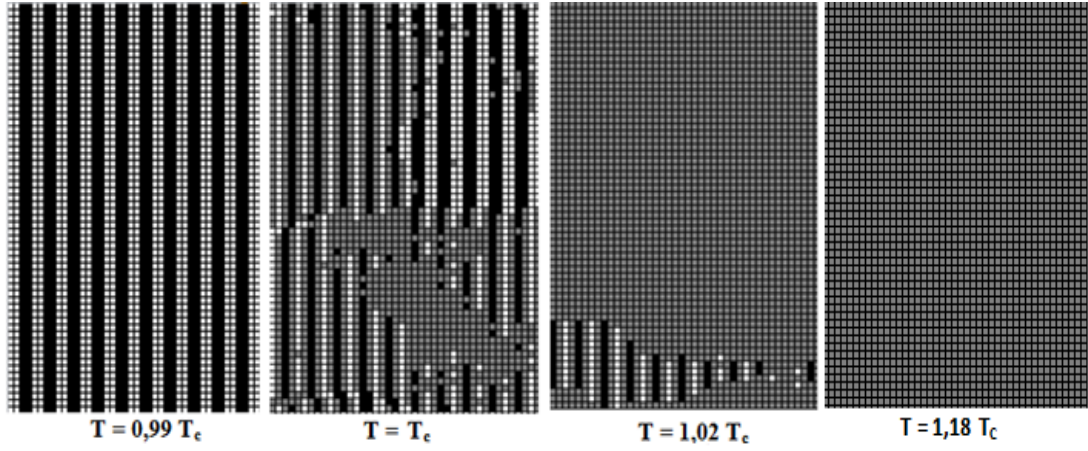
Bir hücre durumunun yani atomik yönelimlerin bir hücrenin M_{ij} ortalama değerine bağlı olarak seçimini aşağıdaki gibi tanımlamak mümkündür.

$$m_{i,j} = \begin{cases} 1 & 1 \geq M_{i,j} \geq \Omega & \square \text{ beyaz} \\ 0 & \Omega > M_{i,j} \geq -\Omega & \blacksquare \text{ gri} \\ -1 & -\Omega > M_{i,j} \geq -1 & \blacksquare \text{ siyah} \end{cases} \quad (5.3)$$

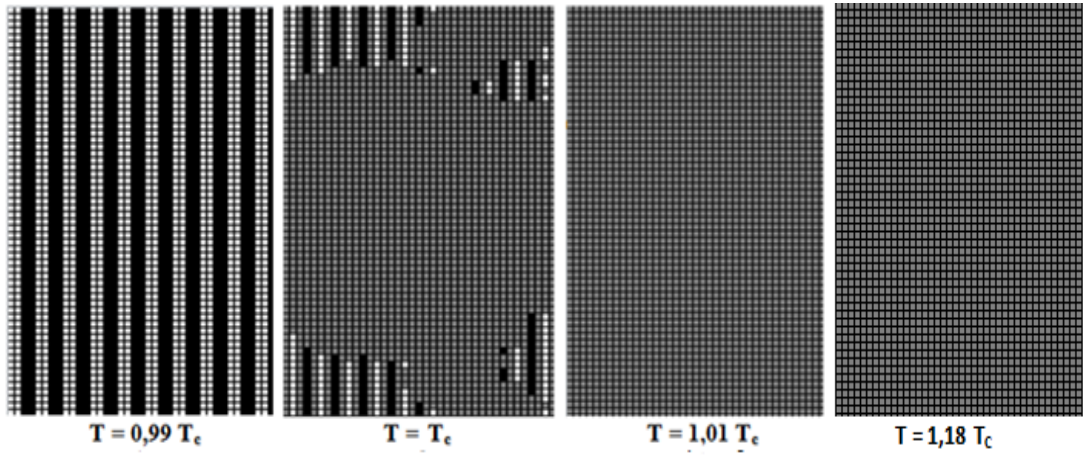
Doğru yüzey görüntülerini oluşturmanın yolu Eşitlik 5.4 için uygun Ω değerinin belirlenmesi gerekir. Bu yüzden ilk olarak birçok farklı Ω değerleri için STM görüntüleri oluşturulmuştur.



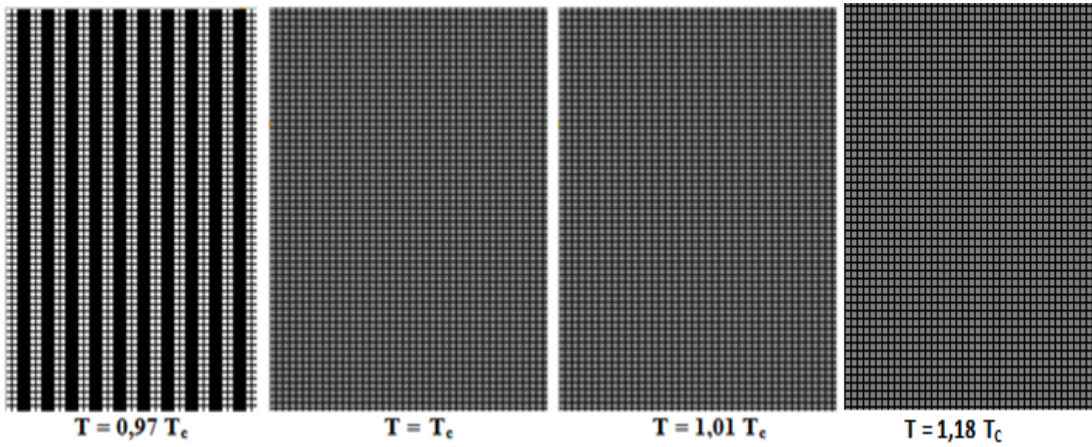
Şekil 5.7. a) $\Omega = 0,01$ b) $\Omega = 0,02$ c) $\Omega = 0,05$ için kritik sıcaklık civarında ($T=T_c$), kritik sıcaklığın altında ($T<T_c$) ve üstünde ($T>T_c$) yüzey STM görüntüleri.



a)



b)

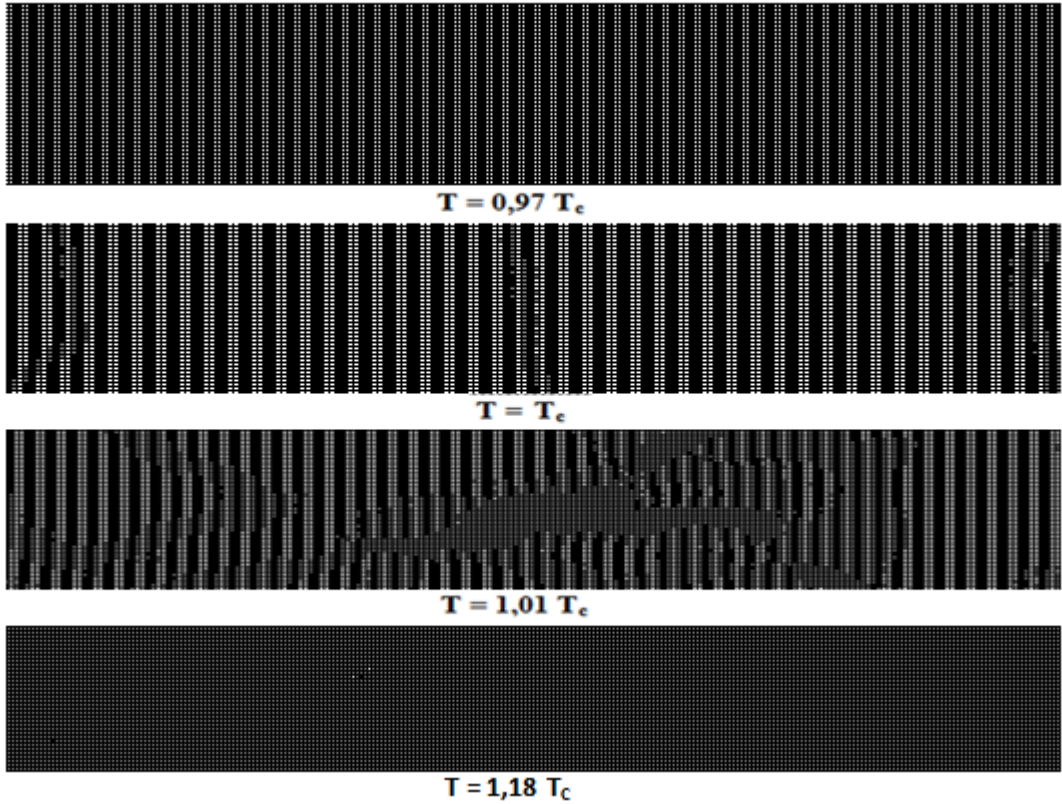


c)

Şekil 5.8. $\Omega = 0,07$ b) $\Omega = 0,09$ c) $\Omega = 0,2$ için kritik sıcaklık civarında ($T=T_c$), kritik sıcaklığın altında ($T<T_c$) ve üstünde ($T>T_c$) yüzey STM görüntüleri.

Şekil 5.7 ve Şekil 5.8’de $\Omega = 0.01, 0.02, 0.05, 0.07, 0.09$ ve 0.20 için elde edilen yüzey resimleri görülmektedir. Bu resimler incelendiğinde Ω değeri arttıkça kritik sıcaklık bölgesinde elde edilen yüzey yapılanması 1×4 den farklılaşırken $T > T_c$ bölgesinde 1×1 yüzey durumuna karşılık gelen 0 durumları ortaya çıkmaktadır.

$\Omega \geq 0,09$ değerleri için oluşturulan yüzey görüntülerinin kritik ve kritik üstü sıcaklıklarda 1×1 yüzey yapılanmasına uygun olarak sifıra gittiği görülmektedir. GaN (100) yüzey için Ising modelde gözlenen faz geçişinin ikinci derece faz geçişi olması nedeniyle kritik sıcaklık bölgesinde karışık bir yüzey yapısının oluşması beklendiğinden bu Ω değerleri uygun bir STM ucu oluşturmamaktadır. Simülasyon için tanımlanan STM ucu çok hızlı olduğunda ($\Omega=0$) veya yavaş olduğunda ($\Omega>0.05$) elde edilen yüzey görüntülerinin beklenen faz geçişi yapısına uymaması nedeniyle yüzey resimlerini oluştururken Ω değeri olarak 0.02 veya 0.05 seçmek uygun olacaktır.



Şekil 5.9. $\Omega=0,02$ olmak üzere $L_x=120, L_y=720$ örgüsü için yüzey fotoğrafları.

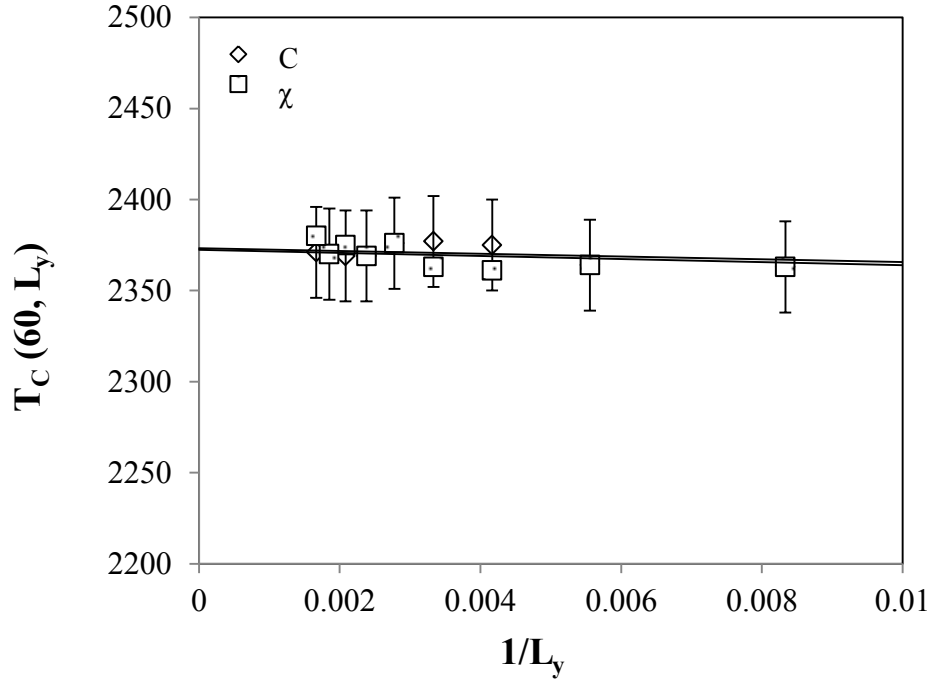
Şekil 5.9'da ($L_x = 120$, $L_y = 720$) $L_x \times L_y$ dikdörtgen örgüsü için $\Omega=0.02$ değeri kullanılarak elde edilen yüzey resimleri verilmiştir. Bu yüzey resimleri Ising model sonuçlarına göre beklenen faz geçiş doğası ile uyumludur. Ayrıca elde edilen yüzey resimleri GaN(100) yüzeyinde ikinci derece (1x4)-(1x1) faz geçişinin olduğunu göstermektedir.

5.3. (1x4)→(1x1) Faz Geçişi için Kritik Sıcaklık Tayini

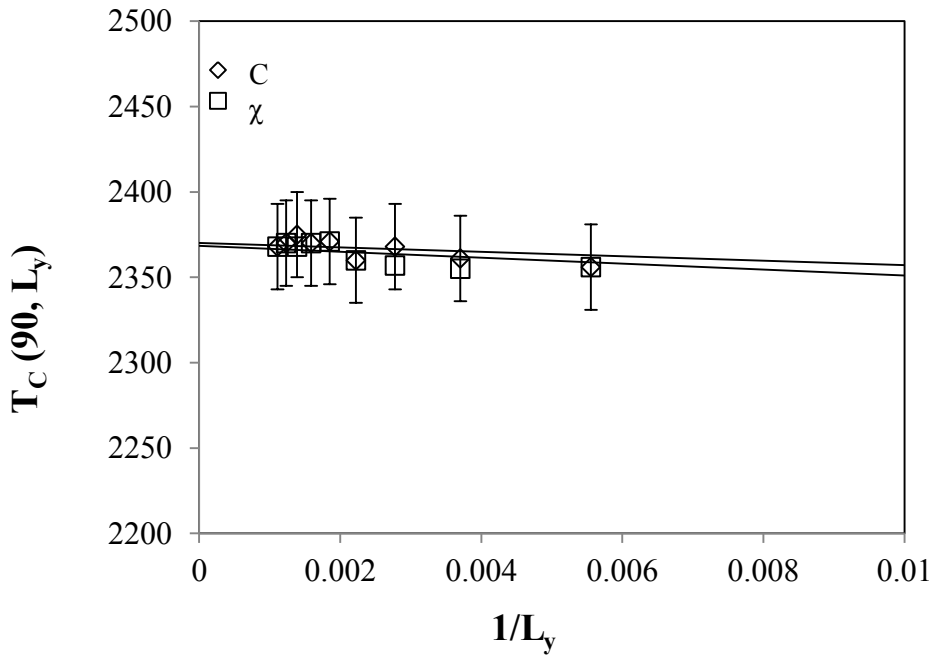
Bir örgünün kritik sıcaklık değerini alınganlık ve öz ısının pik verdiği sıcaklıklardan tespit etmek mümkündür. GaN(100) yüzeyi, izotropik olmayan etkileşmeler içerdiğinden iki boyutta sonlu dikdörtgen örgülerde tanımlanmıştır. Yapılan hesaplamalar sonuçların örgü kenar uzunluğuna bağlı olarak değiştiğini göstermiştir. Özellikle alınganlık ve öz ısı pikleri kenar uzunluğuna bağlı olarak kaymaktadır. Bu durum her bir örgü için farklı bir sıcaklık değeri tespit edilmesine neden olmaktadır. İkinci derece faz geçişi sergileyen bir sistem için sonlu örgü ölçekleme teorisi gereğince sonsuz örgü kritik sıcaklığı aşağıda verilen ifade yardımı ile elde edilmektedir [43].

$$T_c(L) = T_c(\infty) + a L^{-1/X} \quad (5.4)$$

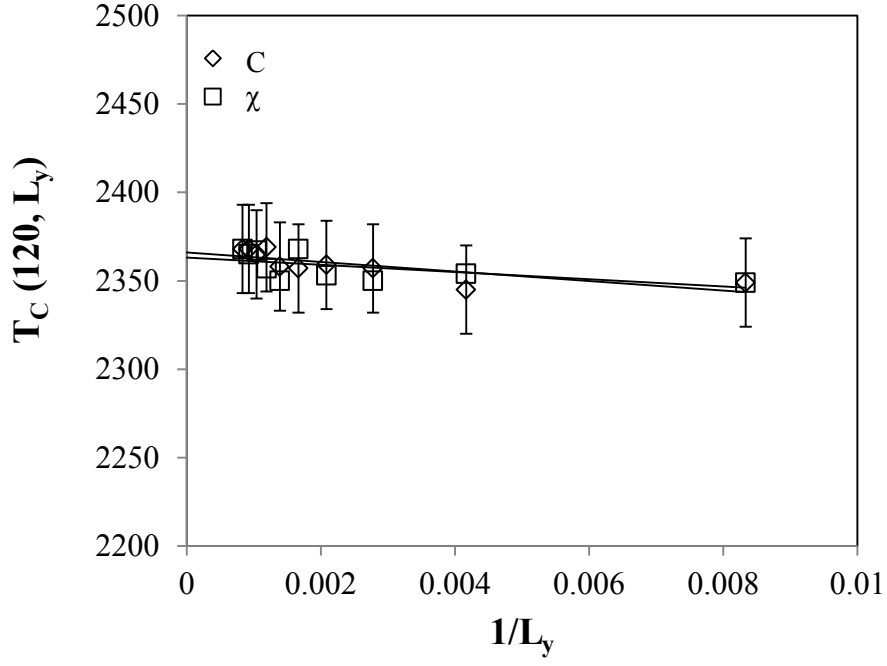
Bu çalışmada $L_x=60$, 90 ve 120 için $L_y=L_x, 2L_x, 3L_x, \dots, 10L_x$ kenar uzunluğuna sahip dikdörtgen örgüler için hesaplamalar tekrarlanmış ve bu örgüler için oluşturulan alınganlık ve öz ısı eğrilerinden her bir örgü için kritik sıcaklık değerleri tespit edilmiştir. Dikdörtgen örgüde sonsuz örgü kritik sıcaklığını iki basamakta elde etmek mümkündür. Öncelikle Eşitlik 5.4 kullanılarak sabit $L_x=60$, 90 ve 120 kenar uzunluklarına sahip örgüler için L_y kenarı sonsuza ekstrapole edilerek kritik sıcaklık değerleri elde edilmiştir.



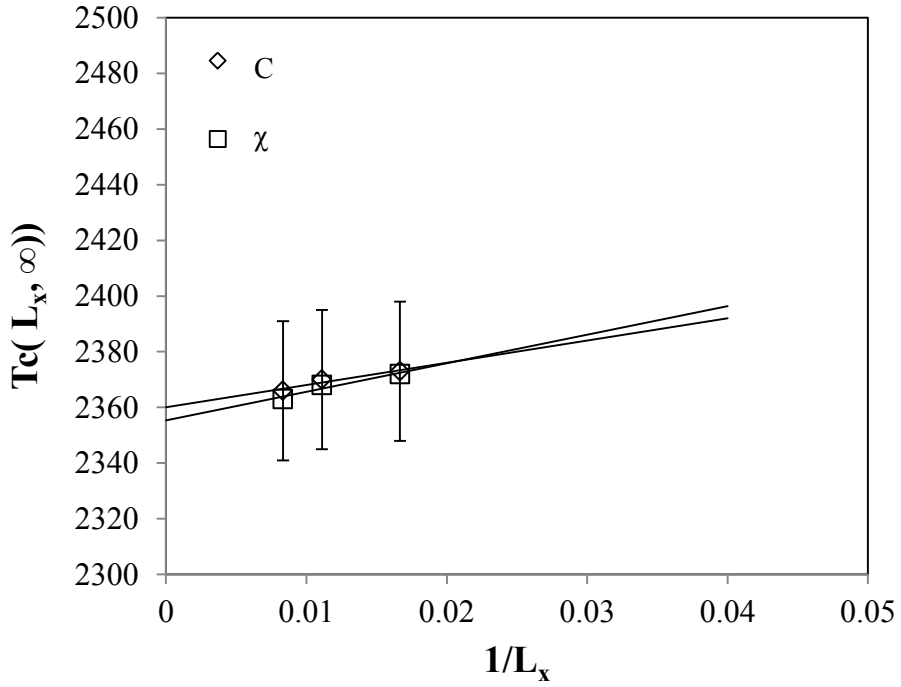
Şekil 5.10. $L_x=60$ için alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_y$ ' e karşı değişim grafikleri



Şekil 5.11. $L_x=90$ için alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_y$ ' e karşı değişim grafikleri.



Şekil 5.12. $L_x=120$ için alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_y$ ' e karşı değişim grafikleri



Şekil 5.13. $L_x=60, 90, 120$ nin kritik sıcaklığa göre alınganlık ve özısı niceliklerinin $1/L_x$ 'e karşı değişim grafikleri.

Şekil 5.10, Şekil 5.11 ve Şekil 5.12 'de L_y ekstrapolasyonu için çizilen grafikler görülmektedir. Elde edilen sonuçlar Çizelge 5.2'de verilmiştir. Daha sonra elde edilen bu değerler kullanılarak L_x için sonsuza ekstrapolasyon yapılmış ve sonsuz dikdörtgen örgü için kritik sıcaklık değeri elde edilmiştir[Şekil 5.13].

Çizelge 5.2 Özısı ve alınganlıktan elde edilen kritik sıcaklık

L	T_c^x	T_c^c
60	2372 K	2373 K
90	2368 K	2370 K
120	2363 K	2366 K
∞	2355 K	2360 K

6. SONUÇ

Bu çalışmada, daha önce dimerleri açılı şekilde duran malzemelerde sıkça çalışılan Ising model, dimer açısı olmadığından, atomun yönelimi dimer gibi düşünülerek GaN (100) için uyarlanmıştır. Hesaplamalarda öncelikle yüzeydeki etkileşimleri doğru tanımlayan ve taban durumunu karşılayan bir Ising spin hamiltonyeni yazılmıştır. Yeniden yapılanan yüzeylerin enerjileri hesaplanarak, etkileşim parametre seti oluşturulmuştur. Ardından GaN(100) yüzeyi için oluşturulmuş iki boyutlu Creutz Cellular Automata Ising Model algoritması kullanılarak, termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri incelenmiştir. Kritik sıcaklıkta, kritik altında ve üstünde yüzey fotoğrafları, spinlerin tüm zaman adımı üzerinden alınan ortalamalarını kullanarak elde edilmiştir. Elde edilen yüzey fotoğraflarının ikinci derece faz geçişi ile uyumlu olması için Ω durum aralığının çeşitli değerlerinde denemeler yapılmıştır. Bunun sonucunda en uyumlu yüzey fotoğrafını veren Ω durum aralığının %2 ve %5 aralığında olabileceği sonucuna ulaşılmıştır. Faz geçişi kritik sıcaklığı manyetik alınganlık ve öz ısının pik verdiği noktalardan tespit edilmiştir.

Bu tez kapsamında yapılan hesaplamalar sonucunda GaN(100) yüzeyinde ikinci derece $(1 \times 4) \rightarrow (1 \times 1)$ yapısal faz geçişi olduğu tespit edilmiştir. CA soğutma algoritması simülasyonları kullanılarak yapılan kritik sıcaklık hesaplaması, daha önce başka araştırmacılar tarafından bulunan deneysel sonuçlarla uyum göstermemektedir. Kritik sıcaklık deneysel sonuçlara göre iki kat civarında ölçülmüştür. Hesaplama sonuçlarının bu deneysel sonuçlarla uyumsuzluk sebebi şu şekilde izah edilebilir:

Bu çalışmada tanımlanan GaN yüzeyi kusursuzdur oysa deneysel olarak böyle kusursuz bir yüzey tanımlamak mümkün değildir. Daha önce Si ve Ge gibi malzemeler için yapılan Ising Model incelemelerinden bilindiği üzere kusurlar faz geçişi sıcaklığını etkileyen önemli faktördür. Örneğin Si(100) kritik sıcaklığı Ising model ile incelendiğinde 340 K civarında iken deneysel hesaplamalarda 200 K

civarındadır[8]. Ge (100) yüzeyi ise Ising model ile modellenerek kritik sıcaklık hesaplandığında kritik sıcaklık 350 K civarı gelirken deneysel hesaplamalar 190 K civarı ölçülmüştür[7]. Artan sıcaklık faz geçişi sırasında yüzeyde atom kopmasına yani kusur oluşumuna sebep olmaktadır. Kusur içeren Ising model kullanılarak Si ve Ge için yapılan Ising model hesaplamaları ile elde edilen faz geçiş sıcaklıkları deneysel sonuçlar ile oldukça uyumludur. Bu yüzden GaN için de bu tez kapsamında geliştirilen Ising modele yüzey safsızlıkları katılarak yapılacak simülasyonların faz geçiş sıcaklıkları için uygun sonuçlar oluşturabileceğini düşünmek mümkündür. Bu çalışmada GaN(100) yüzeyi için oluşturulan spin-1 Ising modelin beklenen yüzey yapısını oluşturması ve mümkün faz geçişlerinden (1x4)-(1x1) faz geçişini temsil etmesi nedeniyle oldukça başarılı olduğu söylenebilir.

KAYNAKLAR

1. Ohachi, T., Kikuchi, T., Somintac, A., Yamaguchi, S., Yasuda, T., Wada, M.,” Radio-frequency MBE growth of cubic GaN on 3C-SiC(001)/Si(001) template” **Physica Status Solidi C**, 3 (6): 1404-1407 (2006).
2. Cui, Y., Lazorov, Y., Goetz, V., Liu, M., Robertson, H., Gajdardziska-Josifovska, M., D., and Li, L., “Cubic GaN formation in Mn/GaN multilayer films grown on 6H-SiC(0001)” **Appl. Phys. Lett.**, 82, 4666 (2003).
3. Mühlhäuser, J., “Properties of Zinblende GaN and (In,Ga,Al)N Heterostructures grown by Molecular Beam Epitaxy” **Doktora Tezi Humboldt Univ. Berlin** (1999).
4. Wassermeier, M., Yamada, A., Yang, H., Brandt, O., Behrend, J., Ploog, K.H., “Atomic structure of the surface reconstructions of zinblende GaN(001)” **Surface Science**, 385:178–186 (1997).
5. Okumura, H., Ohta, K., Feuillet, G., Balakrishnan, K., Chichibu, S., Hamaguchi, H., Hacke, P., Yoshida, S., “Growth and characterization of cubic GaN” **Journal of Crystal Growth**, 178:113-133 (1997).
6. Pillay, D., B., Stewart, C., B., Shin, G., S., Hwang, **Surface Science** 554, 150–158 (2004).
7. Needels, M., Payne, M. C., Joannopoulos, J., D., “High-order reconstructions of the Ge(100) surface” **Phys. Rev. B**, 38, 5543–5546 (1988).
8. Inoue, K., Morikawa, Y., Terakura, K., ve Nakayama, M., “Order-disorder phase transition on the Si(001) surface: Critical role of dimer defects”, **Phys. Rev. B**, 49: 14774-14777 (1994).

9. Genç, A., E., "Si (100) Yüzeyinin 2-Boyutlu Ising Model ile İncelenmesi" **Gazi Üniversitesi Yüksek Lisans Tezi**, Ankara (2011).
10. Creutz, M., "Deterministic Ising Dynamics", **Annals of Physics** 167: 62(1986).
11. Shan, W., Ager, J., W., 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).
12. Ashcroft, N., W., ve Mermin, N., D.: "Solid State Physics", **Holt, Rinehart and Winston**, New York, 123-132 (1976).
13. Brandt, O., Yang, H., Jenichen, B., Suzuki, Y., Däweritz, L., ve Ploog, K., H., "Surface reconstructions of zinc-blende GaN/GaAs(001) in plasma-assisted molecular-beam epitaxy" **Phys. Rev. B** 52, R2253–R2256 (1995).
14. Neugebauer, J., Zywietz, T., Scheffler, M., Northrup, J, Walle, C., "Clean and As-covered zinc-blende GaN (001) surfaces: Novel surface structures and surfactant behavior" **Phys. Rev. Lett.** 80, 3097–3100 (1998).
15. Brandt, O., Yang, H., Yamada, A., Ploog, K., H., "Relation between surface reconstruction transitions and growth kinetics of zincblende (0 0 1) GaN" **Journal of Crystal Growth** 175-176:134-138 (1997).
16. Carlo., A., D., "Tuning Optical Properties of GaN-Based Nanostructures by Charge Screening". **Physica Status Solidi (A)** 183 (1): 81–85, (2001)
17. Arakawa, Y., Res. Progress in GaN-based quantum dots for optoelectronics applications. **Tokyo Üniversitesi**.

18. Mion, C., "Investigation of the Thermal Properties of Gallium Nitride Using the Three Omega Technique." Diss. **North Carolina State University**. Raleigh, (2005).
19. Lidow, A., Witcher, J., B., Smalley, K., "Enhancement Mode Gallium Nitride (eGaN) FET Characteristics under Long Term Stress". GOMAC Tech Conference (2011).
20. Harafuji, T., Kawamura, J., "Molecular dynamics simulation for evaluating melting point of wurtzite-type GaN crystal". **Appl. Phys.** 96 (5): 2501. (2004).
21. Amano, H., "Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film using an AlN buffer layer". **Applied Physics Letters** 48 (5): 353. (1986).
22. Dora, Y.; Arpan, C., Lee, M., Stacia, K., Stephen, D. Umesh , M., "High Breakdown Voltage Achieved on AlGaN/GaN HEMTs With Integrated Slant Field Plates". **IEEE Electron Device Letters** 27 (9): 713 (2006).
23. Grumman, N., "Gallium Nitride-Based Modules Set New 180-Day Standard For High Power Operation." (2011).
24. Gürünlü, H., "Kübik GaN (001) yüzeyinin elektronik yapısı", **Yüksek Lisans Tezi, Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 1-73 (2005).
25. Oura, K., Lifshits, V., G., Saranin, A., A., Zotov, A.V., Katayama, M., "An Introduction to Surface Science", **Springer**: 181-182 (2003).
26. Srivastava, G., P., "Theory of semiconductor surface reconstruction" **Rep. Prog. Phys.**, 60, 561-613 (1997).

27. Tsakalakos, T., “Phase transformations in solids symposium held June-July 1983 in Malema-Chania, Crete, Greece” Materials Research Society symposia proceedings ; 21
28. Brandt, O., Yang, H., Jenichen, B., Suzuki, Y., Daweritz, L. and Plogg, K. H. “Surface reconstructions of zinc-blende GaN/GaAs(001) in plasma-assisted molecular-beam epitaxy”. **Physical Review B**, 52 (4); R2253-R2256 (1995).
29. Wassermeier, M., Yang, H., Brandt, O., Yamada, A., Behrend, J., Plogg, K.H., “Ga-terminated/ β -GaN(001) surface reconstructions studied by scanning tunneling microscopy” **Applied Surface Science** 123/124 181 – 186 (1998).
30. Plogg, K., H., Brandt, O., Yang, H., Menniger, J., Klann, R., “Interplay between growthkinetics and materialquality of cubic GaN” *Solid-State Electronics* 41(2):235–237 (1997).
31. Foxon, C., T., Cheng, T., S., Novikov, S., V., Jeffs, N., J., Hughes, O.H., Melnik, Y.V., Nikolaev, A., E., Dmitriev, V., A., “Gallium-induced surface reconstruction patterns of GaN grown by molecular beam epitaxy” *Surface Science* 421 377–385 (1999).
32. Feuillet, G., Hamaguchi, H., Okumura, H., Yoshida, S., “Arsenic on cubic GaN surfaces: surfactant effect versus incorporation” *Mater. Sci. Eng. B* 59 1–3 (1999).
33. Kesici, Z., “GaN Yarıiletkeninde Kusurlar ve Kusurların Etkisi: Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (YFT) Hesaplamaları” **Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, (2010).
34. Schlick, T., “Molecular modeling and simulation” Springer, c2006.

35. Oppenheimer, J.R., Born, M., "Zur Quantentheorie der Molekeln", **Ann Phys.**,84: 457 (1927).
36. Kohn, W., ve Sham, L., J., "Self - consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, " **Phys. Rev. A**, 140: 1133-1138, (1965).
37. Hohenberg, P., ve Kohn, W., "Inhomogeneous Electron Gas," **Phys. Rev. B**, 136:864-871 (1964).
38. Levy, M., "Universal variational functionals of electron densities, first – order density matrices, and natural spin-orbitals and solution of the v – representability problem", **Proc. Natl. Acad. Sci. USA**, 76: 6062–6065 (1979).
39. Pople, J., A., Nesbet, R., K., " Self-consistent orbitals for radicals ", **J. Chem.Phys.**, 22:571 (1954).
40. Onsager, L., "Crystal Statistics I.A Two dimensional model with an Order-Disorder Transition", **Phys. Rev.**, 65:117-149 (1944).
41. Ihm, J., Lee, D., H., Joannopoulos, J., D., Xiong, J., J.," Structural Phase Diagrams for the Surface of a Solid: A Total-Energy, Renormalization-Group Approach Physics" **Rev. Lett.**, 52, 1872-1875, (1983).
42. Kutlu, B.,"Critical behavior of the two-dimensional Ising model with next-nearest-neighbor antiferromagnetic interaction on the Creutz cellular automaton" **Physica A**, 234 807 (1997).
43. Huang, K., "Statistical Mechanics" Wiley, New York (1987).
44. Chandler, D., Introduction to Modern Statistical Mechanics (Oxford University Press, New York, (1987).

45. Özkan, A., “FCC Blume-Emery-Griffiths modelin faz uzayı üzerinde dipol-kuadrupol etkileşim etkisi”, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 44 (2007)
46. Seferoğlu, N., “Üç Boyutlu Blume-Emery-Griffiths Modelin Faz Geçişlerinin Cellular Automaton İle Simülasyonu” **Doktora Tezi Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü** (2007).
47. Wolfram, S., “University and Complexity in Cellular Automata”, *Physica D*, 10: 1-35 (1984).
48. Pomeau, Y., “Invariant in Cellular Automata”, *J. Phys. A; Math. Gen.*, 17: L415-L418 (1984).
49. Hermann, H., J., “Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model”, *J. Stat. Phys.*, 45: 145-151 (1986).
50. Kutlu, B., Aktekin, N., ”**Critical Slowing Down in Ising Model for Creutz Algorithm**”, *Physica A*, 208, 423 (1994).
51. Kutlu, B., Aktekin, N., ”**Computation of Correlation Functions of the Two Dimensional Ising Model**”, *Physica A*, 215, 370 (1995).
52. Kutlu, B., “**The Simulation of The 2D Ferromagnetic Blume-Capel on a Cellular Automaton**”, *Int. J. Of Mod. Phys. C*, 9,1401 (2001).
53. Barlovic, R., Santen, L., Schadschneider, A., Schreckenberg, M., “Metastable states in cellular automata for traffic flow” **The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems** 5 (3): 793-800 (1998).

54. Chopard, B., Droz, M., "Cellular automata modeling of physical systems" University of Geneva, Cambridge University Press (1998).
55. Chowdhury, D., R., Basu, S., Sen, Gupta, I., Chaudhuri, P., P., "Design of CAECC – Cellular Automata Based Error Correcting Code" **Journal IEEE Transactions on Computers** 43 (6): 759-764 (1994).
56. West, P., Mott, M., "Evidence for complex, collective dynamics and emergent, distributed computation in plants". Proceedings of the **National Institute of Science of the USA** 101 (4): 918–922 (2004).
57. Rujan, P., "Cellular Automata and Statistical Mechanical Models" **Journal of Statistical Physics**, 49, 1/2, (1987).
58. Reiners, P., D., Staff Software Engineer, IBM "Cellular automata and music" (2004).
59. Bodroži, L., Stipanicev, D., Šeric, M., "Forest fires spread modeling using cellular automata approach" Department for Modelling and Intelligent Systems FESB - **Faculty of Electrical Engineering**, Mechanical Engineering and Naval Architecture **UNIVERSITY OF SPLIT**.
60. Hudson, J., B., "An Introduction to surface science", **John Wiley&sons**, New York, 18-19 (1998).
61. Bai, C., "Scanning tunneling microscopy and its applications.", **Springer Verlag**, New York, (2000).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı :YENİHAYAT, Nesrin
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 02.09.1986 Ankara
Medeni hali : Bekar
E-mail : yenihayat@live.nl

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Fizik Bölümü	2012
Lisans	Balıkesir Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2008
Lise	Fatih Sultan Mehmet Lisesi	2003

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Tiyatro, anime film, tasarım, doğa yürüyüşü, seyahat.