

Geniş Bant Aralıklı Yarı İletkenlerde Geçiş Metali Merkezlerinin Elektronik ve Spin Özellikleri

Cüneyt Şahin

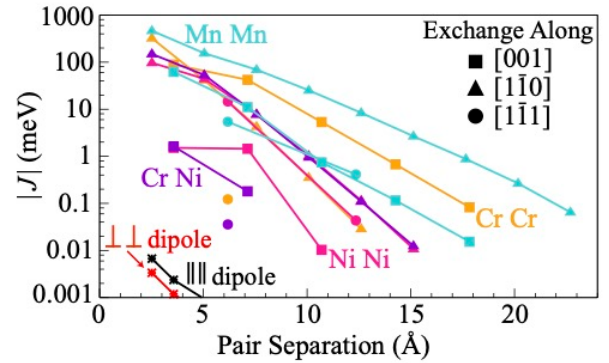
Bilkent Üniversitesi, UNAM- Ulusal Nanoteknoloji Araştırma Merkezi ve Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Enstitüsü, 06800, Ankara

Bu çalışmada geniş bant aralıklı yarı iletkenlerde gözlemlenebilen kusur merkezlerinin elektronik, yapısal ve spin özelliklerinden bahsedilmektedir. Bu kusur merkezlerinin bulunduğu konak malzemeler olarak elmas, galyum arsenik ve çinko sülfid seçilmiştir. Kusur merkezi olarak ise geçiş metali merkezleri konu alınmıştır.

Geniş bant aralıklı yarı iletkenlerde bulunan geçiş metalleri ve bunların oluşturduğu kompleksler çeşitli optoelektronik uygulamalar ve oda sıcaklığında çalışan spin ve foton ara yüzleri için uygun platformlardır. Bu merkezlerin en belirgin özellikleri arasında minimum seviyede bozunma ile tek foton emisyonu [1], spin merkezleri arasında muazzam güçlü değiş-tokuş etkileşimleri [2], ferro-manyetik düzen oluşturabilme ve bunu güçlendirebilme kabiliyetleri yer alır ve bu nedenlerle hem teorik hem de deneysel çalışmaların parçası olmuşlardır.

Bu konuşmada yukarıda bahsettiğimiz birkaç sistemi ele alacağız. Bunlardan ilki çinko sülfid (ZnS) geniş bant aralıklı yarı iletken içerisinde konuşlanmış bakır nikel kobalt gibi geçiş metal elementlerinin oluşturduğu spin merkezleri. Bu merkezlerin farklı yüklü versiyonlarının yapısal ve elektronik özelliklerini VASP ve Quantum Espresso yazılımlarıyla ilk prensiplerden hesaplayarak inceleyeceğiz. Bant genişliği problemini hibrit fonksiyoneller kullanarak çözdüğümüz bu sistemde buna ek olarak farklı yüklerde kusur (defekt) formasyon enerjilerini kıyaslayacağız. Konuşmanın ikinci kısmında galyum arsenik (GaAs) yüzeyinde veya yüzeyden iki veya üç tekil tabaka altında bulunan demir (Fe) ve silikon (Si) atomlarının meta stabil pozisyonlar alabildiklerini ilk prensip hesapları yoluyla göstereceğiz. Taramalı tünelleme mikroskobu yoluyla elde edilen topoğrafik resimlerle desteklenen bu çalışma geçiş metallerinin negatif yük kazanarak bu sistemlerde DX merkezlerini oluşturduklarını geçiş metallerinin kısa süreliğine de olsa ikincil bir meta stabil pozisyona transfer

olabildiğini göstermektedir. Son konu olarak elmas içinde izole edilmiş spin çiftleri arasındaki değiş-tokuş etkileşimlerinden bahsedeceğiz. Konak malzemenin (elmas kristali) homojen Green fonksiyonunun spds* sıkı bağlanma modeli ile momentum uzayında hesaplanması ve Dyson denkleminin reel uzayda kusur veya kusur çiftleriyle çözülmesiyle lokal durum yoğunluklarını elde edilmesinden bahsedeceğiz. Değiş-tokuş etkileşiminin büyüklüğünün de bu hesabı takiben paralel ve anti paralel hizalanan spin merkezlerinin enerji farkından hesaplandığını göstereceğiz. (Şekil 1) Hesaplarımız bu etkileşimin büyüklüğünün hem spin merkezleri arasındaki mesafeye hem de bu merkezleri birbirine bağlayan vektörün kristal vektörlerine göreli açısına bağlı olduğunu göstermektedir.



Şekil 1: Geçiş metallerinin spin merkezleri arasındaki değiş-tokuş etkileşiminin merkezler arası uzaklığa bağlı büyüklükleri

Bu çalışmalar DMR-19218771 nolu proje ile NSF DMREF tarafından DE-SC0016379 nolu proje ile ABD Enerji Bakanlığı Bilim Ofisi tarafından desteklenmiştir.

Kaynakça

1. M. Koperski et al., "Single photon emitters in exfoliated WSe2 structures", Nature Nanotechnology, **10**, 503-506 (2015)
2. C. Şahin et al., "Nanometer-scale exchange interaction between spin centers in diamond", Phys. Rev.B **93**, 220402(R) (2016)