İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

METAL BASAMAKLI YÜZEYLERİN TİTREŞİMSEL ÖZELLİKLERİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizikçi Önder YARGI

Anabilim Dalı: Fizik

Programı: Fizik Mühendisliği

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Sondan Durukanoğlu FEYİZ

TEMMUZ 2004

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

METAL BASAMAKLI YÜZEYLERİN TİTREŞİMSEL ÖZELLİKLERİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
Önder YARGI
(509001157)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 5 Temmuz 2004
Tezin Savunulduğu Tarih : 8 Temmuz 2004

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Sondan DURUKANOĞLU FEYİZ
Diğer Jüri Üyeleri Doç. Dr. Orhan KAMER
Prof. Dr. Gülay DERELİ

TEMMUZ 2004

ÖNSÖZ

Yüksek Lisans tez çalışmam sırasında bana her konuda yardımcı olan, çalışmalarımda bana yön gösteren sayın hocam Yrd. Doç. Dr. M. Sondan DURUKANOĞLU FEYİZ'e teşekkür ederim. Çalışmalarımda bana yardımcı olan arkadaşım Arş. Gör. Ali Gelir'e, Arş. Gör. Handan Yıldırım'a ve Arş. Gör. Kenan Koç'a ayrıca, hayatım boyunca sevgilerini ve desteklerini esirgemeyen aileme, tüm dostlarıma ve sevgisiyle bana güç veren hep yanımda olan sevgili eşim Leman Yargı'ya minnettarım.

Haziran 2004 ÖNDER YARGI

İÇİNDEKİLER

	Sayfa No:
TABLO LİSTESİ	**v**
ŞEKİL LİSTESİ	**vi**
ÖZET	**vii**
SUMMARY	**viii**
1. GİRİŞ	**1**
2. KRİSTAL GEOMETRİSİ	**3**
2.1. Giriş	3
2.2. Kristal düzenleri ve Bravais Kafesleri	4
2.3. Kristalde doğrultular	6
2.4. Kübik Birim Hücrelerde Miller İndisleri ve Düzlemler	7
3. GEOMETRİ	**11**
3.1. Yüksek miller indisli yüzeylerin geometrisi	11
3.2. İncelenen yüzeylerin geometrik yapıları	12
4. KURAMSAL YÖNTEMLER	**16**
4.1. Gömülü Atom Yöntemi (GAY)	16
4.2. Titreşim modları ve fononlar	17
4.3. Fononların durum yoğunluklarının hesaplanması	17
4.4. Çözüm matrisi metodu	19
4.5. Tek bir noktada birleşme süreci	21
4.6. Tekrarlama bağıntısı	22
5. HESAPLAMALAR VE TARTIŞMALAR	**27**
5.1. Cu(551) Vicinal Yüzeyinin Yerel Durum Yoğunluklarının Frekansa Bağlı değişimi	28
5.2. Cu(310) Vicinal Yüzeyinin Yerel Durum Yoğunluklarının Frekansa Bağlı Değişimi	31
5.2. Cu(320) Vicinal Yüzeyinin Yerel Durum Yoğunluklarının Frekansa Bağlı değişimi	33
6. SONUÇLAR	**36**
KAYNAKLAR	**38**
ÖZGEÇMİŞ	**40**

TABLO LİSTESİ

		Sayfa No
Tablo 2.1.	Uzay kafeslerinin Kristal dizgelerine Göre Sınıflandırılması	4
Tablo 3.1.	Yüzeylerin Yapısal (notasyonları) ve Gösterimleri…….	15
Tablo 5.1.	Cu(551) Yüzeyinin basamak zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	30
Tablo 5.2.	Cu(551) Yüzeyinin orta zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	30
Tablo 5.3.	Cu(551) Yüzeyinin köşe zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	30
Tablo 5.4.	Cu(310) Yüzeyinin basamak zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	32
Tablo 5.5.	Cu(310) Yüzeyinin orta zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	32
Tablo 5.6.	Cu(310) Yüzeyinin köşe zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	32
Tablo 5.7.	Cu(320) Yüzeyinin basamak zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	34
Tablo 5.8.	Cu(320) Yüzeyinin orta zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	34
Tablo 5.9.	Cu(320) Yüzeyinin köşe zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların arasındaki kuvvet sabitleri.....	35

ŞEKİL LİSTESİ

		Sayfa No
Şekil 1.1	:Basamaklı bir yüzeydeki bazı kusurlar……..	1
Şekil 2.1	:Bir birim hücre ve kafes sabitleri.....…….	3
Şekil 2.2.a	:Yüzey merkezli Kübik (fcc).....……..	5
Şekil 2.2.b	:Hacim merkezli Kübik (fcc).....……..	5
Şekil 2.2.c	:Hekzagonal sıkı düzen (hcp).....……	5
Şekil 2.3.a	:Kübik birim hücrede bazı yönler. [100] ve [110] yönleri……..	6
Şekil 2.3.b	:Kübik birim hücrede bazı yönler. [210] yönü……	7
Şekil 2.3.c	:Kübik birim hücrede bazı yönler. [$\bar{1}10$]yönü……...……..	7
Şekil 2.4.a	:Bazı kübik kristal düzlemlerinin Miller indisleri (101).....……..	9
Şekil 2.4.b	:Bazı kübik kristal düzlemlerinin Miller indisleri (111).....……..	9
Şekil 2.4.c	:Bazı kübik kristal düzlemlerinin Miller indisleri. ($\bar{1}02$) .....…….	10
Şekil 3.1	:Düzenli basamaklı yüzeylerin elde edilişi.....…….	11
Şekil 3.2	:Düzenli basamaklı fcc(410) yüzeyinin önden görünüşü .....……...	12
Şekil 3.3	: fcc(100) yüzeyinin üstten görünüşü……..	13
Şekil 3.4	: fcc(110) yüzeyinin üstten görünüşü……..	13
Şekil 3.5	:Cu(320)yüzeyin önden görünüşü .....……..	14
Şekil 3.6	:Cu(310) yüzeyin önden görünüşü .....……...	15
Şekil 3.7	:Cu(551) yüzeyin önden görünüşü .....…….	15
Şekil 5.1	:Kristalde basamaklı bir yüzeyin elde edilişi……..	27
Şekil 5.2	:Basamaklı bir yüzeyin doğrultuları.....……..	28
Şekil 5.3	:Terasta bulunan atomların isimlendirilmesi.....……	28
Şekil 5.4	:Cu(551) yüzeyinin durum yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi……	29
Şekil 5.5	:Cu(310) yüzeyinin durum yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi……	32
Şekil 5.6	:Cu(320) yüzeyinin durum yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi……	34

METAL BASAMAKLI YÜZEYLERİN TİTREŞİMSEL ÖZELLİKLERİ

ÖZET

Bu tezde yüksek Miller indisli Cu(310), Cu(320) ve Cu(551) yüzeylerinin titreşimsel durum yoğunluklarını, gömülü atom yönteminden elde ettiğimiz kuvvet sabitlerine dayalı olarak yazılan etkileşim matrisiyle *Real space Green's Function* (RSGF) yöntemi kullanarak hesapladık. İçteki (Bulk) ve yüzeydeki atomların yerel titreşim durum yoğunlukları (LDOS) ve yüzeydeki atomların arasındaki kuvvet sabitleri araştırıldı. Yüzey atomlarının durum yoğunluklarında bulk daki karşılıklarına göre önemli değişimler gözlendi. Yüzey atomlarının yerel durum yoğunluklarındaki yüzey geometrisinin etkisini incelemek için farklı teras ve basamak yönelimine sahip yüzeyleri araştırdık. Yerel durum yoğunluklarının, yerel atomik çevreye karşı duyarlı olduğu bulundu. Ayrıca vicinal (yüksek Miller indisli) yüzeylerin simetrisindeki kompleks doğanın bir yansıması olarak yüzey atomlarının durum yoğunluklarında içteki (bulk) atomlarına nazaran düşük frekanslara doğru bir kayma vardır. Aynı zamanda yerel durum yoğunluklarındaki farklılıklarıyla ilgili atomların arasındaki kuvvet sabitlerinin bulkdaki karşılıklarına göre değişimleriyle ilişkilendirdik.

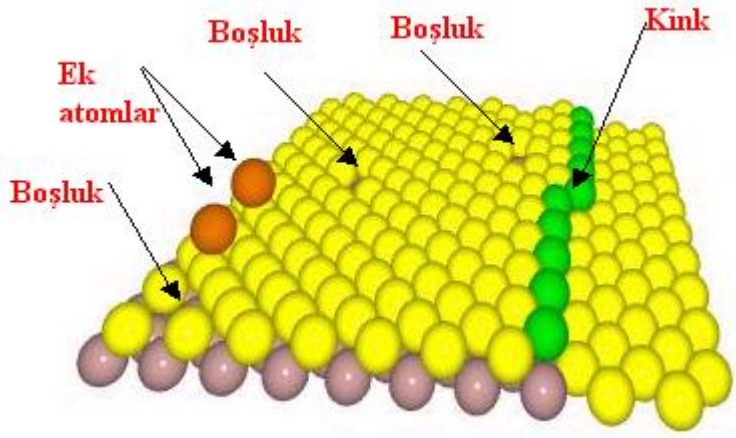
VIBRATIONAL PROPERTIES OF STEPPED METAL SURFACES

SUMMARY

In this thesis, the vibrational density of states for high Miller index surfaces of Cu(310), Cu(320) and Cu(551) are calculated using Real space Green's Function (RSGF) method with the interaction matrices based on the force constants obtained from the embedded atom method. The quantities investigated are force constants between the surface atoms and bulk atoms and local vibrational density of states (LDOS) of the atoms at the surface and in the bulk. We investigate surfaces with different terraces and step orientations to observe the effect of surface geometry on LDOS of surface atoms. Substantial modifications in LDOS of surface atoms are observed as compared to the one for a bulk atom. The local density of states is found to be sensitive to the local atomic environment. In addition there is an overall shift towards the lower frequencies for LDOS of surface atoms compared to that of a bulk atom, reflecting the complex nature of symmetry for the vicinal surfaces. We also trace the modifications in LDOS to the changes in force constants between the associated atoms with respect to the corresponding ones in the bulk.

1. GİRİŞ

Atomik seviyede yüzeylerin morfolojisi, (geometrik yapısı) epitaxiel büyüme ve kimyasal reaktivite gibi birçok fiziksel olayda yüzeyin davranışını belirlemede önemli rol oynar. Herhangi bir yüzeyde basamaklar, boşluklar, ek atom gibi yapısal kusurlar yüzeydeki olabilecek yapısal kusurlardandır.. Bu tür kusurların varlığı sistemde var olan simetriği bozduğundan, bulundukları bölgelerde sistemin elektronik ve iyonik yapısında yeniden yapılanmaya yol açması beklenir. Bu da kusur bölgelerinde kristalin iç bölgesindeki (bulk) kuvvet alanlarında farklı yeni kuvvet alanlarının oluşmasına ve dolayısıyla bu bölgelerde kendine has titreşimsel (fonon) özellikler göstermesine yol açar. Örneğin, bazı durumlarda bu tür yapısal kusurların varlığı sistem için o kadar güçlü uyarım (pertürbasyon) dır ki, kusur bölgelerinde örneğin basamaklarda yerelleşmiş modlar gözlenmiştir [1].



Şekil 1.1. Basamaklı bir yüzeydeki bazı yapısal kusurlar

Bu tezde Cu(100) ve Cu(110)'ın vicinal (yüksek Miller indisli-düzenli basamaklı)yüzeyleri olan Cu(310), Cu(320) ve Cu(551) yüzeylerinin, yüzey atom fonon durum yoğunluklarının bulk atomuna karşılık gelen durum yoğunluklarına nazaran nasıl bir değişim gösterdiği ve bu değişimin doğası, ilgili atomlar arası kuvvet sabitleri incelenerek açıklanmaya çalışılmıştır. Bu yüzeylerden (310) yüzeyi (100)'ın sıkı istiflenmiş yüzeyi iken (320) ve (551) yüzeyleri (110)'ın gevşek istiflenmiş yüzeyleridir. (320) ve (551) yüzeyleri aynı teras yönelimine ve farklı basamak yönelimine sahiptirler. Üç yüzeyinde teras genişlikleri aynıdır. (310)

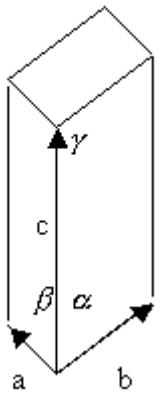
yüzeyinin teras yönelimi diğer iki yüzeyden farklıdır. Böylelikle değişik geometrik yapıya sahip yüzeylerdeki atomların fonon durum yoğunluklarının yapıdan yapıya nasıl değişim gösterdiğini incelemek hedeflenmiştir. Bu tezde bu yüzeylerin titreşimsel özelliklerini incelemek için Real space Green's function (RSGF) (gerçek uzay green fonksiyonu) yöntemi kullanılmıştır. Bu yöntemin en önemli malzemesi olan *H* etkileşim matrisini oluşturmak için model sistemlerimizdeki atomlar arası etkileşim Gömülü Atom Yönteminden üretilen potansiyel ile tanımlanmıştır. Sistemlerin 0 K deki denge konumlarını elde etmek için sistemlerin toplam enerjileri Eşlenik Gradient (Conjugate Gradient) yöntemi [2] kullanılarak minimize edilmiştir. Ayrıca, atomlar arası kuvvet sabitleri GAY potansiyellerinin ikinci türevleri alınarak hesaplanmıştır [2].

Tezin geri kalan bölümü aşağıdaki gibi düzenlenmiştir: İkinci ve üçüncü bölümlerde kristal yapı ve çalışılan yüzeylerin geometrik yapıları özetlenmiştir. Dördüncü bölümde ise hesaplamalarda izlenen yöntem ve teknikler sunulmuştur ve son olarak beşinci bölümde elde edilen sonuçlar ve analizler özetlenmiştir.

2. KRİSTAL GEOMETRİSİ

2.1. Giriş

Katı hal fiziğinde katının fiziksel yapısı için birinci derecede önemli olan, katıyı oluşturan atomların, iyonların veya moleküllerin uzaydaki dizilimleri ve bunların arasındaki bağ kuvvetidir. Bir katının atomları veya iyonları kendini üç boyutta tekrar eden bir örgü içinde dizilmişlerse oluşturdukları geometrik yapıya kristal, katıya ise kristalleşmiş malzeme adı verilir. Kristalleşmiş malzemelere örnek olarak metalleri ve alaşımları gösterebiliriz. Kristal yapıya sahip katılarda atomların dizilimi, üç boyuttaki bir çizgiler ağının kesişme noktalarına atomlar yerleştirilerek gösterilebilir. Bu çizgiler ağına uzay kafesi (lattice) adı verilir ve birim hücrelerin yan yana gelmesinden oluşur (şekil 2.1). Temsil ettiği kristalin geometrisini, simetrisini ve biçimini tanımlayan en küçük hücre olarak adlandırılan birim hücre kristal öteleme işlemini tüm boyutlarda tekrarlamak suretiyle karşılık geldiği malzemenin tüm uzayını doldurur.



Şekil 2.1. Bir birim hücre ve kafes sabitleri

Birim hücrenin boyutu ve biçimi, birim hücrenin bir köşesinden çıkan üç kafes vektörü a, b ve c ile tanımlanabilir. a, b ve c eksenel uzunlukları ve eksenler arasındaki α, β ve γ eksenel açıları birim hücrenin kafes sabitleridir.

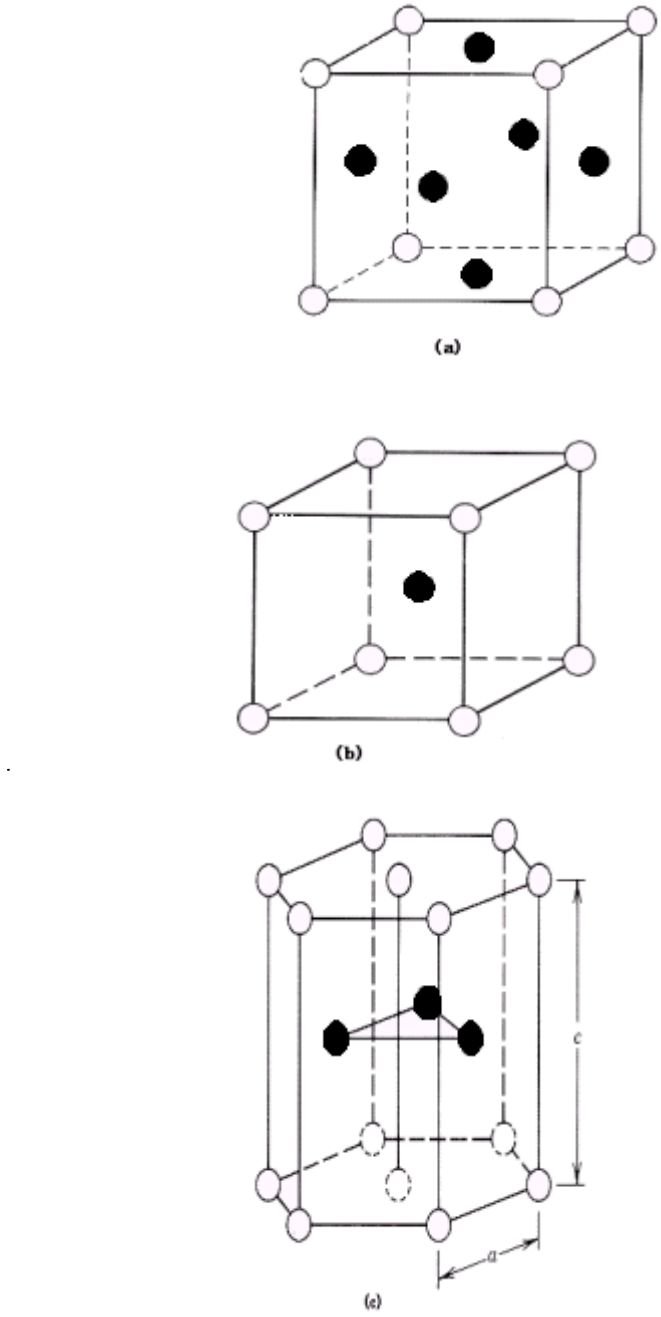
2.2. Kristal düzenleri ve Bravais Kafesleri

Eksenel uzunluklara ve eksenel açılara belirli değerler verilerek farklı türde birim hücreler oluşturulabilir. Kristal ya da örgü sistemleri birim hücrenin bir paralel yüz olması şartıyla eksenel uzunluk ve açılara bağlı olarak yedi farklı birim hücre tipinde yazılırlar. Bu birim hücreler tabloda görüldüğü gibi kübik, tetragonal, ortorombik, trigonal, hekzagonal, monoklinik ve triklinikdir. Yedi kristal dizgesinin çoğu temel bir birim hücrenin değişik durumlarıdır. En küçük hacimli birim hücrelerin uygun doğrultularda tekrarlanmasıyla oluşan kristal örgüleri Bravais örgüleri olarak adlandırılırlar. Bravais örgüde tüm örgü noktaları özdeştir. A.J. Bravais bütün mümkün olan kafes ağlarını tanımlamak için üç boyutlu herhangi bir örgünün sahip olduğu simetriye uygun olarak, ondört standart birim hücrenin yeterli olduğunu göstermiştir [3].

Tablo 2.1. Uzay Kafeslerinin Kristal Dizgelerine Göre sınıflandırılması

Kristal dizgesi	Eksenel uzunluklar ve eksenler arası açılar	Uzay kafesleri
Kübik	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Basit kübik Hacim merkezli kübik Yüzey merkezli kübik
Tetragonal	$a=b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Basit tetragonal Hacim merkezli tetragonal
Ortorombik	$a\neq b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Basit ortorombik Hacim merkezli ortorombik Taban merkezli ortorombik Yüzey merkezli ortorombik
Trigonal	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma\neq 90^\circ$	Basit trigonal
Hekzagonal	$a=b\neq c, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	Basit hekzagonal
Monoklinik	$a\neq b\neq c, \alpha=\gamma=90^\circ\neq\beta$	Basit monoklinik Taban merkezli monoklik
Triklinik	$a\neq b\neq c, \alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90^\circ$	Basit triklinik

Metaller genellikle üç tip sıkı istiflenmiş olan yüzey merkezli kübik (face centered cubic-(fcc)), hacim merkezli kübik (body centered cubic-(bcc)) ve hekzagonal sıkı paket (hexagonal close packed-(hcp)) kristal yapılarına sahiptir (Şekil2.2).

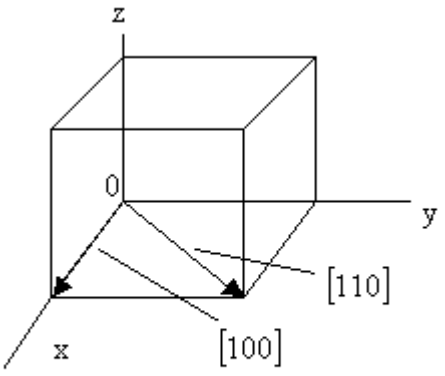


Şekil 2.2. Başlıca metal kristali birim hücreleri: (a) yüzey merkezli kübik (fcc), (b) hacim merkezli kübik (bcc), (c) hekzagonal sıkı düzen (hcp)

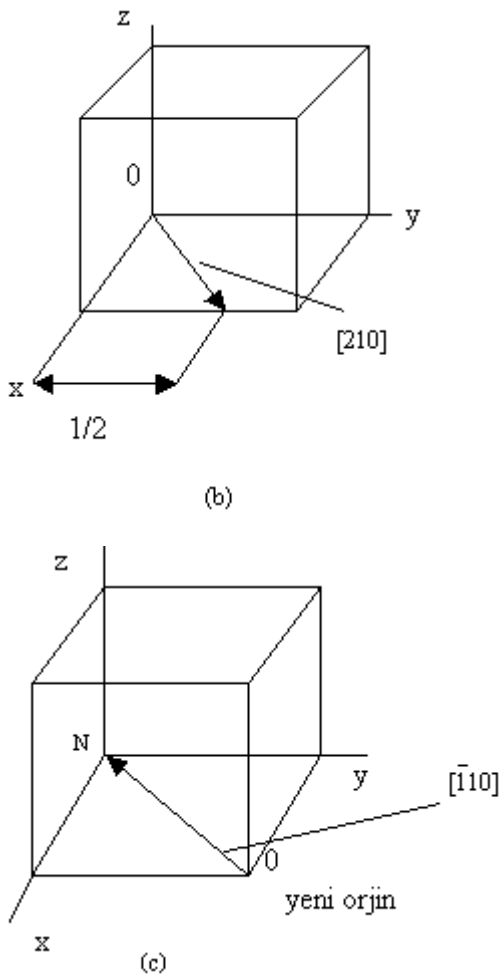
Bu tezde incelenen bakır elementi fcc yapıya sahiptir.

2.3. Kristalde doğrultular

Bir kristal örgü içindeki eşit aralıklı paralel düzlemler takımını belirlemek mümkündür. Bir takımın her bir düzlemindeki örgü noktalarının yoğunluğu aynıdır ve her bir düzlem takımı örgü noktalarının tümünü içerir. Örgü noktalarından geçen düzlemler, Miller indisleri ile tanımlanırlar. Miller indislerini belirlemek için kübik birim hücrede atomların konumlarının bilinmesi gerekir ve bunun için birbirine dik x, y ve z eksenlerinden yararlanılmaktadır. Birim hücredeki atomların yerleri x, y ve z eksenleri boyunca uzaklıklar verilerek belirlenir. Örneğin, hacim merkezli kübik yapı için birim hücrede sekiz köşe atomunun koordinatları: (0,0,0) (1,0,0) (0,1,0) (0,0,1) (1,1,1) (1,1,0) (1,0,1) (0,1,1) iken bcc yapının merkezindeki atomların koordinatları ise (1/2,1/2,1/2)' dir. Koordinatları basitleştirmek için bcc yapının sadece iki atomunun yeri belirlenir (0,0,0) ve (1/2,1/2,1/2). bcc yapının geri kalan atomlarının konumları bu iki koordinatlarla belirlenir. Kübik bir birim hücrede yönü şekil üzerinde göstermek için küpün bir köşesinden çıkıp yüzeyin birini geçen bir yön vektörünü çizeriz (Şekil 2.3). Yön vektörünün küp yüzeyinden çıktığı yerlerin koordinatları tam sayıya dönüştürülerek birim hücrenin yön indisleri elde edilir. Yön indisleri dik paranteze çevrilir ve virgülle ayrılmaz.



(a)



Şekil 2.3. Kübik birim hücrede bazı yönler (a) [100] ve [110] yönleri (b)[210] yönü (c) [$\bar{1}$10] yönü

Şekil 2.3(a)'da yön vektörü (1,0,0) iken yön vektörü $[100]$ doğrultusunda olur. Aynı şekilde (1,1,0) yer koordinatlarındaki şeklindeki vektörü $[110]$ doğrultusunda olur. Şekil2.3(b) de vektörün yer koordinatları (1,1/2,0) dır ve yön vektörü tam sayı olması gerektiğinden bu yer koordinatları iki ile çarpılarak tam sayı haline getirilir. Buna göre yön işaretleri $[210]$ olmaktadır. Şekil2.3(c) de yer koordinatları (-1,-1,0) Eksi bir yön işareti koordinatın üzerine bir çizgi konarak yazılır. Buna göre Şekil 2.3 (c) deki **ON** vektörünün yön işareti $[\bar{1}\,\bar{1}0]$ olacaktır. Küp içinde ON'nin yönünü çizmek için vektörün başlangıç noktasının birim küpün ön, alt sağ köşesine taşınması gerekmektedir.

2.4. Kübik Birim Hücrelerde Miller İndisleri ve Düzlemler

Kübik kristal yapılarda kristal düzlemlerini göstermek için Miller indis düzeni kullanılır. Bir kristal düzleminin Miller indisi; düzlemin, küpün birim hücresinin x, y

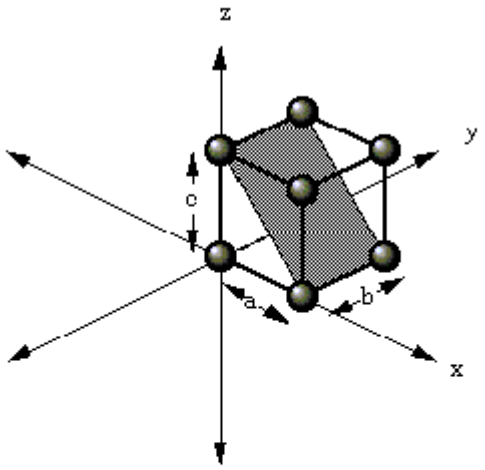
ve z eksenlerini kestiği kesirli kesişme noktalarının, kesirler tam sayıya çevrilerek bulunan katsayılarıdır. Bir kübik kristalin düzleminin Miller işaretini belirlemenin yolu aşağıdaki gibidir:

1. (0,0,0)' da ki başlangıç noktasından geçmeyen bir düzlem seçilir.

2. Düzlemin, birim küpün x, y ve z eksenleri cinsinden, bu eksenleri kestiği noktaları bulunur ve bu kesişmeler kesirli olabilir.

3. Bu kesişme sayılarının tersleri bulunur.

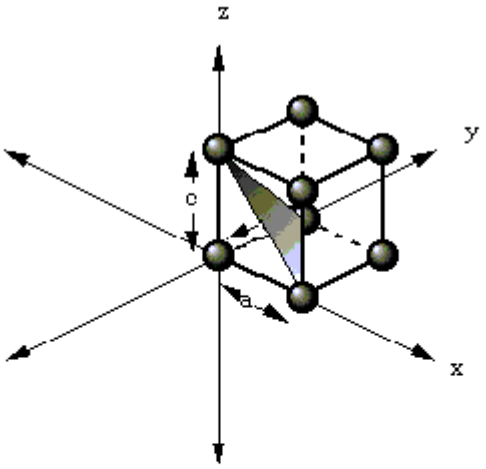
4. Kesirler tam sayıya çevrilir ve kesişme noktaları ile aynı oranda en küçük tamsayılar bulunur. Bu tamsayılar bir kristal düzleminin Miller indisleridir ve virgülsüz olarak parantez içinde gösterilir. (hkl) Miller indislerinin genel gösterilişidir ve sırasıyla kübik kristalin bir düzleminin x, y ve z eksenlerine ait indislerdir. Bu tanımlara uygun Miller indislerini gösteren bazı şekiller aşağıda gösterilmiştir:



(a)

a		c
1	∞	1
$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1}$
1	0	1

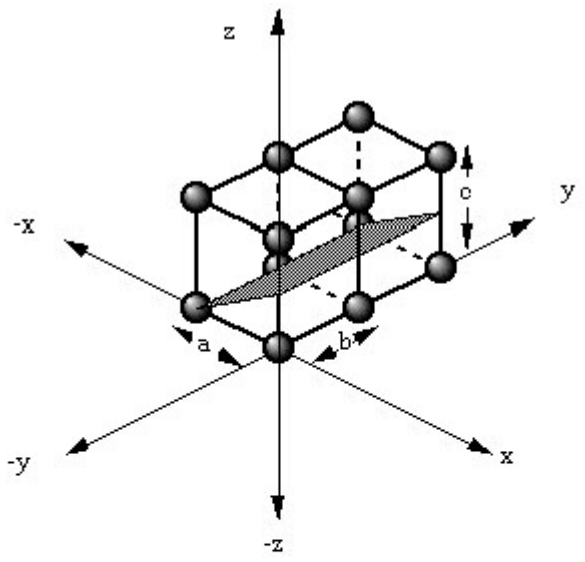
(101)



(b)

a	b	c
1	1	1
$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$
1	1	1

(111)



(c)

a	b	c
-1	∞	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{-1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1/2}$
-1	0	2

$(\bar{1}02)$

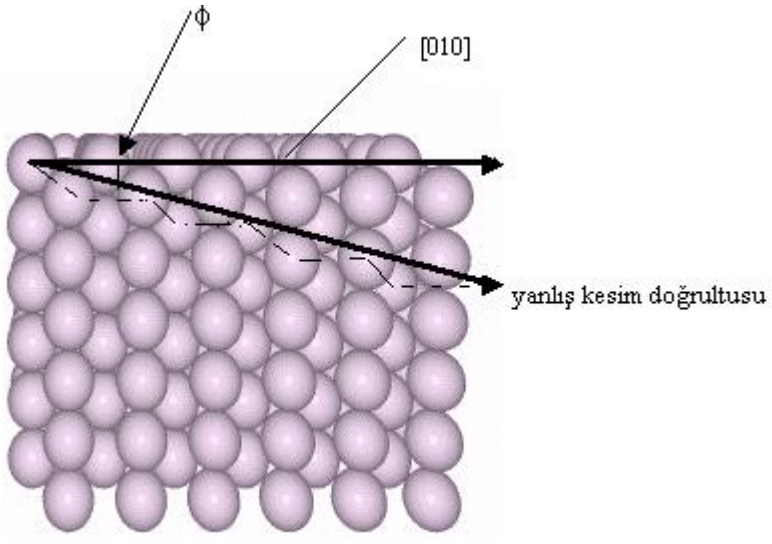
Şekil 2.4. Bazı kübik kristal düzlemlerinin Miller İndisleri (a) (101) (b) (111) (c) $(\bar{1}\,02)$

Şekil 2.4.a' da ki x, y ve z eksenlerini sırasıyla $(1,\infty,1)$' da kesen gölgelenmiş kristal düzlemi göstermektedir. Miller indislerini bulmak için bunların karşıtları alınır dolayısıyla indisler 1/1=1, $1/\infty=0$, 1/1=1 olacaktır. Bu düzlem için Miller indisleri (101) şeklindedir.

3. GEOMETRİ

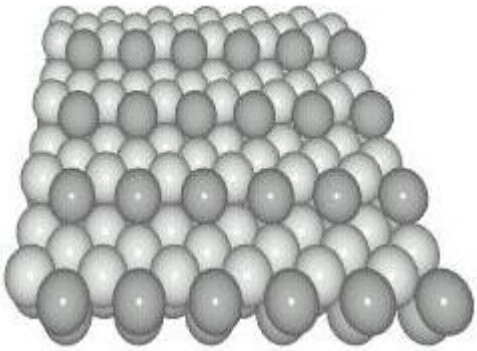
3.1. Yüksek miller indisli (Vicinal-düzenli basamaklı) yüzeylerin geometrisi

Kristalografide düzlemler (h,k,l) ile sembolize edilen Miller indisleriyle tanımlanırlar ve bunlardan herhangi birinin birden büyük olması durumunda yüksek Miller indisli (düzenli basamaklı) yüzeyleri temsil ederler ve $\{(100),(110),(111)\}$ düzlemleri ile belirli bir açıyla (yanlış kesim açısı) kesilmeleri sonucu oluşurlar. Bu açının büyüklüğü yüzeyi oluşturan terasların genişliğini de belirler.



Şekil 3.1. Düzenli basamaklı yüzeylerin elde edilişi.

Şekil 3.1 de gösterildiği gibi, yanlış kesim sonucu sistem yanlış kesim doğrultusu üstündeki atomları kaybeder ve geriye kesikli çizgilerin oluşturduğu basamaklı bir yüzey kalır. Yüksek Miller indisli yüzeyler, yüzey üzerinde basamaklar belli bir uzaysal periyodik dağılım gösterdiğinden aynı zamanda düzenli basamaklı yüzeyler olarak da adlandırılırlar ve bunların bir örneği olan fcc(410) yüzeyinin önden görünüşü Şekil3.2 de gösterilmiştir.



Şekil 3.2. Düzenli basamaklı fcc(410) yüzeyin önden görünüşü

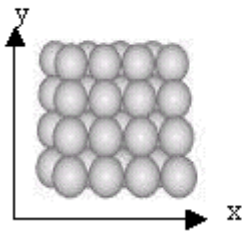
Yüksek Miller indisli yüzeylerin görselleştirilmesini kolaylaştıracak yapısal gösterim (notasyon), ilk olarak Joyner Lang ve Smorjai tarafından geliştirilmiştir [4]. Bu gösterimde herhangi bir basamaklı yüzey

$$\text{El(S)-}\{m(h_t k_t l_t) x n(h_s k_s l_s)\ \}$$

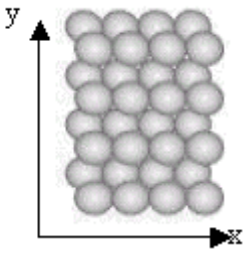
şeklinde temsil edilir. Burada El(S) elementi gösterirken, $(h_t k_t l_t)$ ve $(h_s k_s l_s)$, sırasıyla teras düzleminin ve basamak düzleminin yönelimlerini gösteren Miller indisleridir. Bu ifadede *m* terastaki zincir sayısını, *n* ise basamak yüksekliğindeki atom sayılarını tanımlar. *n*=1 iken basamak tek atomludur.

3.2. İncelenen yüzeylerin geometrik yapıları

Bu tezde fcc(100) ve fcc(110) (şekil3.3 ve şekil 3.4) kristalinin sıkı ve açık istiflenmiş basamaklı yüzeyleri olan (310), (320) ve (551) vicinal (yüksek Miller indisli) yüzeyleri üzerinde çalışılmıştır.

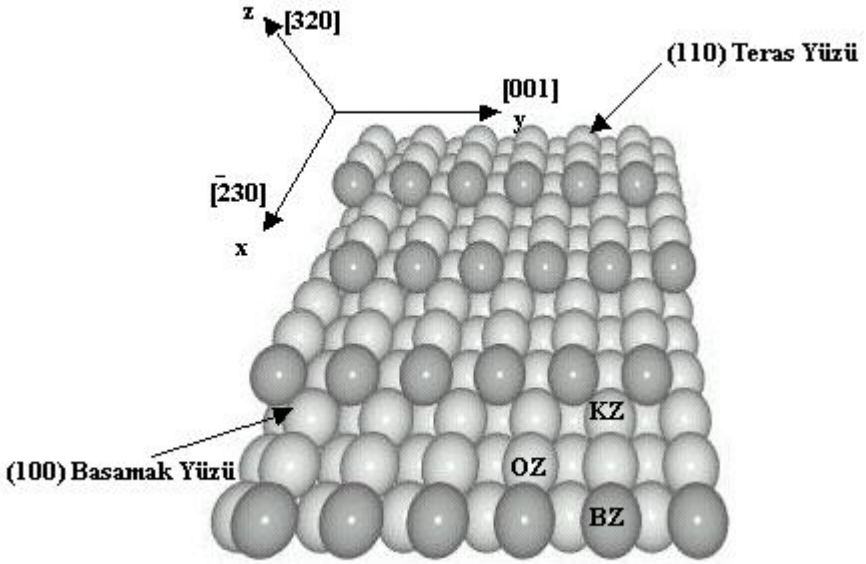


Şekil 3.3. fcc(100) yüzeyinin üstten görünüşü. x ve y doğrultusu boyunca atomlar arası mesafe aynıdır ve 2.556 A° dur.



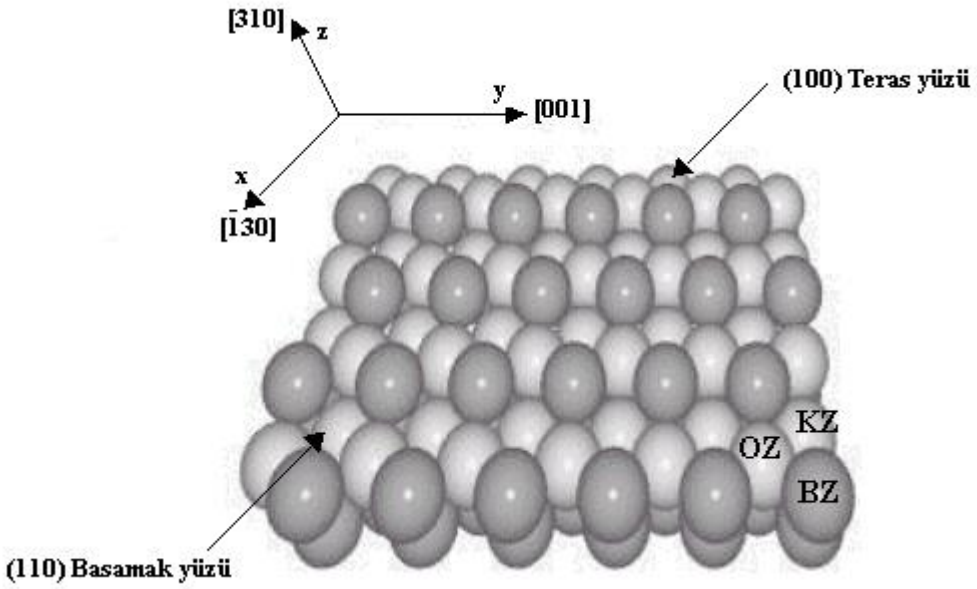
Şekil 3.4. fcc(110) yüzeyinin üstten görünüşü. x ve y doğrultusu boyunca atomlar arası mesafe 2.556 A° ve 3.615 A° dür.

(320) yüzeyi (şekil 3.5) (110) teras yönelimli ve açık bir şekilde istiflenmiş olan (100) basamak yönelimine sahiptir. Bu yüzeyin bir terasında bulunan atomik zincir sayısı üçtür. (310) yüzeyi (3.6) ise (100) teras yönelimli ve (110) basamak yönelimine sahiptir. Aynı şekilde bu yüzeyinde bir terasında bulunan zincir sayısı üçtür. (551) (şekil 3.7) yüzeyi, (110) teras ve (111) basamak yönelimlidir ve bu yüzeyin bir terasında bulunan atomik zincir sayısı üçtür. Bu tezde, çalışılan yüzeyler için oluşturulan model sistemlerde basamakları oluşturan atomik zincirdeki atomların sayısı altı olarak alınmıştır. Çalışılan yüzeylerin geometrik özellikleri Tablo 3.1 de özetlenmiştir ve önden görünüşleri şekil 3.5, şekil3.6 ve şekil3.7 de gösterilmiştir.

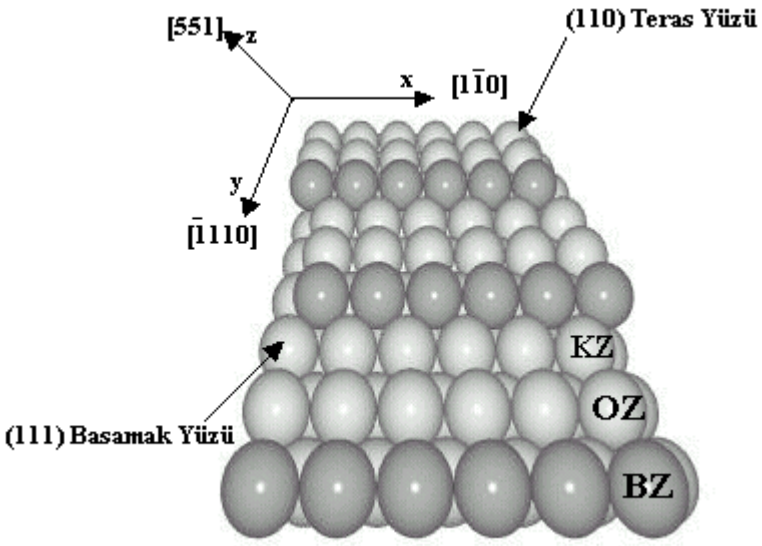


Şekil 3.5. Cu(320) yüzeyinin önden görünüşü

Hesaplamalarımızda x ve y eksenleri yüzey düzleminde iken z-ekseni yüzey düzlemine dik doğrultuda alınmıştır. Şekil 3.5 de görüldüğü gibi çalışılan yüzeylerin teraslarını oluşturan atomik zincirler; basamak zinciri-(BZ), orta zincir-(OZ) ve köşe zinciri-KZ olarak adlandırılmıştır.



Şekil 3.6. Cu(310) yüzeyinin önden görünüşü



Şekil 3.7. Cu(551) yüzeyinin önden görünüşü

Bu yüzeylerin hesaplamaları için kullanılan hesaplama hücrelerinin z-ekseni boyunca tabaka sayısı, alt ve üst yüzeylerin birbirleriyle etkileşmeyecek şekilde belirlendi. Süper hücrelerin yüzey boyutları olan N_x x N_y sırasıyla yüzeyin teras sayısı ve basamak doğrultusundaki atomların sayısını belirtir. Bu tezde incelenilen tüm yüzeylerin yapısal gösterimleri (notasyonları) ve , kristalografik özellikleri tablo 3.1 de görülmektedir.

Tablo 3.1. Yüzeylerin yapısal gösterimleri (notasyonları) ve özellikleri

Miller İndisi	Basamak Gösterimi (Notasyonu)	Basamak Köşesi	Kesim Doğrultusu	Kesme Açısı (Derece)	Süper Hücre Boyutları
(hkl)	$m(h_t k_t l_t)xn(h_s k_s l_s)$	$h_b k_b l_b$	$h_k k_k l_k$		$N_x x N_y$
(310)	3(100)x(110)	[001]	[$\bar{1}$30]	18.4	4x6
(320)	3(110)x(100)	[001]	[$\bar{2}$30]	11.3	4x6
(551)	3(110)x(111)	[1$\bar{1}$0]	[$\bar{1}\,\bar{1}$10]	8.04	4x6

4. KURAMSAL YÖNTEMLER

4.1. Gömülü Atom Yöntemi (GAY)

Model sistemlerimizde atomlar arası etkileşimleri tanımlayabilmek için 1986 da Foiles, Baskes ve Daw tarafından geliştirilen Gömülü Atom Yöntemi (GAY) kullanılmıştır [5]. Gömülü Atom yöntemi ile üretilen potansiyeller, çok cisimlidir ve bu yöntemde kullanılan fonksiyonlar ilgili fcc metalleri ve alaşımları için deneysel olarak belirlenen örgü sabiti ve elastik sabitleri gibi fonksiyonlara fitlenerek belirlendiğinden yarı deneyseldir. Bu potansiyel altı tip fcc metalleri olan Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt ve bunların alaşımları için iç bölgenin (bulk) ve yüzeylerin özelliklerinin belirlenmesinde deneysel sonuçlarla uyum göstermiştir [6]. Bu yöntem sistemin taban durum toplam enerjisi ile ilgili aşağıdaki bilgileri kullanır:1) Etkileşen bir elektron gazının taban durumundaki enerjisi, toplam elektron yoğunluğunun bir fonksiyonudur [7]. 2) ortamdaki bir katışkının (diğer atomların oluşturduğu bölgeye gömülü olarak kabul edilen her bir atom) enerjisi ortam uyarılmadan önceki elektron yoğunluğunun bir fonksiyonudur [8]. Yani

$$E = F_Z\left(\rho_h(R)\right) \tag{4.1}$$

Bu eşitlikte $\rho_h(R)$ katışkının konulmadan önceki, yani uyarılmamış ortamın elektron yoğunluğunu belirlerken Z ve R atomun tipini ve konumunu belirler. Bu yöntemde her bir atomun katışkı enerjisi aşağıdaki gibi verilebilir;

$$E_i = F_i(\rho_{h,i}) + 1/2 \sum_j \varphi(R_{i,j}) \tag{4.2}$$

Bu eşitlikte $\rho_{h,i}$ i atomunun bulunduğu konumda i atomunun olmadığı durumdaki elektron yoğunluğudur ve bu yoğunluğa katkı yapan komşu atomların atomik yük yoğunluklarının (ρ_j^q) üst üste bildirilmesi olarak tanımlanır, j atomunun elektron yoğunluğu, merkezinden uzaklığın bir fonksiyonu olarak;

$$\rho_{h,i} = \sum_{i \neq j} \rho_j^q(R_{i,j}) \tag{4.3}$$

şeklinde verilir. $R_{i,j}$ i ve j atomları arasındaki mesafe, $F_i(\rho_{h,i})$ i atomunu elektron yoğunluğu $\rho_{h,i}$ olan yere gömmek için gerekli olan enerji ve φ ise i ve

j atomlarının birbiri üzerine çökmemesi için gerekli olan kısa erimli ve itici potansiyel olarak tanımlanır. Buna göre bir katının toplam enerjisi E_i ler üzerinden toplamdır.

$$E_{toplam} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + 1/2 \sum_{i,j} \varphi(R_i, j) \tag{4.4}$$

4.2. Titreşim modları ve fononlar

Kristalin yapısını incelemek için kristalde bulunan atomların durağan olduğu kabul edilir. Halbuki Heisenberg belirsizlik ilkesine göre atomlar sıfır sıcaklıkta bile denge konumlarının etrafında titreşirler. Bu sıcaklıktaki enerjiye ise sıfır nokta enerjisi denmektedir. Daha yüksek sıcaklıklarda atomlar kazandıkları termal enerjinin etkisiyle daha büyük genliklerde titreşirler. Bir titreşimin normal modu, sistemi oluşturan atomların uyum (harmoni) içerisinde birlikte hareketini tanımlar. Harmonik yaklaşımda A genliğindeki bir titreşim modu

$$A\exp[i(\vec{k}.\vec{r} - wt)]$$

şekliyle ifade edilir. Burada $\vec{k}$ vektörü dalganın ilerleme yönünü temsil ederken, w titreşim frekansı ve A titreşimin genliğidir. Latis titreşiminin enerjisi kuantize dir ve aşağıdaki formda yazılır.

$$En_k = (n_k + \frac{1}{2})\eta w(\vec{k}) \tag{4.5}$$

burada n_k tamsayı olmak üzere, açısal frekansı w olan n_k tane fononun enerjisi belirtilmektedir. Fononlar temel uyarılmalar sonucu oluşan kuantalaşmış enerji paketleridir.

4.3. Fonon durum yoğunluklarının hesabı

Bir katının titreşimsel (fonon) durumlarının hesabı *H* sistemi temsil eden N tabakalı slab (kütük) deki atomlar arası etkileşim (dinamik) matrisi olmak üzere,

$$H\Psi = E\Psi \tag{4.6}$$

şeklindeki özdeğer probleminin çözümünü içerir. Bunun çözümünün bir yolu doğrudan *H* matrisinin köşegenleştirilmesidir. Bu yönteme slab yöntemi denir ve frekans spektrumunu (dispersiyon eğrisi) elde etmek için en yaygın kullanılan yöntemdir [9]. Fakat geniş teraslı yüksek Miller indisli yüzeyler söz konusu olduğunda yüzeyi tanımlayan slab'inde büyük olması gerekir ki yüzey periyodikliğini temsil edebilsin. *3Nx3N* matrisi köşegenleştirme işlemi için gerekli olan süre zamana göre N^3 ile ölçeklenerek arttığından, büyük boyutlu kütük için hesaplamalar zaman açısından çok pahalıdır.

Durum yoğunluklarını doğrudan veren yöntem ise H etkileşim matrisine karşılık gelen Green fonksiyonunu bulmaktır. Green fonksiyonu; *I, 3Nx3N* boyutlu etkileşim matrisi (N sistemdeki atom sayısı) *H* ile aynı boyutta birim matris olmak üzere,

$$G = (zI - H)^{-1} \tag{4.7}$$

olarak verildiğinden, çok sayıda atom içeren sistemler için bu fonksiyonu hesaplamak oldukça güç bir görevdir. Haydock ve arkadaşlarının önerdiği [10] sürekli kesir (Continued fraction) yöntemi büyük etkileşim matrisleri gerektiren sistemler için Green fonksiyonunu elde etmede karşımıza çıkan bu tür problemlerin çözümü için ilk ortaya atılan tekniktir. Bu yöntemde içinde *N* atom olan sistem, *n* kabuğa bölünür. Birinci kabuk birinci bölgede bulunan atomların etkileşim menzili içinde olan tüm atomları içerir. Dolayısıyla bir kabuktaki atom sayısı kabuk sayısı ile lineer olmayacak şekilde artar. Belirlenen yerel bölgeye karşılık gelen Green fonksiyonu içinde tekrarlama katsayıları (a_n, b_n) olan sürekli kesir (Continued fraction) şeklinde yazılır. Her bir (a_n, b_n) çifti *n* kabuğunda ki katsayıları tanımlar. Artan kabuk sayısı ile atom sayısı çok hızlı arttığından kesirde bulunan (a_n, b_n) de artar. Problemi çözülebilir hale getirebilmek için, kesir bir yerde kesilmek zorundadır. Bu da hesaplamalarda hatalara yol açar.

Gerçek uzayda diğer bir yerel yaklaşım metodu ise Real space Green's function (gerçek uzay Green fonksiyonu) yöntemidir[11]. Sistemin periyodikliğini gerektirmediğinden, düşük simetrili ve kusurlu sistemlerin durum yoğunluklarını hesaplamayı olanaklı kılar. Yöntem, blok-tridiagonal matrisin özdeğerlerini bulmak için geliştirilen resolvent matrix tekniğini [12,13,14] kullandığından bir tek ön koşulu vardır o da etkileşim potansiyelinin sonlu olmasıdır. Ancak bu durumda etkileşim matrisi Blok-tridiagonal matris şeklinde yazılabilir. Bu yöntem k-uzayı yerine gerçek uzayda çalışabilmemizi sağladığından kütük yöntemine ve tekrarlama

katsayılarını hesaplama zorunluluğunu ortadan kaldırarak çok daha basit tekrarlama şeması kullandığından sürekli kesir yöntemine nazaran üstünlüğü vardır.

4.4. Çözüm matrisi metodu

Aşağıdaki gibi blok-tridiagonal şekilde verilen etkileşim matrisi *H*, göz önüne alalım[15].

$$H = \begin{bmatrix} O & & & \\ v_{i,i-1} & h_i & v_{i,i+1} & \\ & v_{i+1,i} & h_{i+1} & v_{i+1,i+2} \\ & & & O \end{bmatrix} \tag{4.8}$$

Burada h_i alt matrisler *i.* bölgede bulunan atomlar arası etkileşimleri tanımlarken $v_{i,i+1}$ ise *i.* ve $(i+1)$. bölgeler arası etkileşimi ifade eder. Örneğin h_1 birinci bölgede bulunan parçacıkların kendi içindeki etkileşimlerine dayanılarak yazılan matris iken, v_{12} birinci ve ikinci bölgedeki atomlar arası etkileşimleri tanımlayan matristir. n_i, *i.* bölgede bulunan atom sayısı olmak üzere, h_i ve $v_{i,i+1}$ matrislerinin boyutları sırasıyla $(3n_i x 3n_i)$ ve $(3n_i x 3n_{i+1})$ dır. Bir öz değer problemi olan

$$H\Psi = Z\Psi \tag{4.9}$$

denkleminin çözümü

$$(H\text{-}IZ)\,\Psi = 0 \tag{4.10}$$

denklemine karşılık gelen Green fonksiyonunu bulma problemidir ve aşağıdaki gibi yazılır.

$$G(z)=(zI\text{-}H)^{-1} \tag{4.11}$$

Yukarıda ε, w^2 deki Lorentzian genişliği olmak üzere $z = w^2 + i\varepsilon$ dır.

Green fonksiyon matrisinin köşegen elemanları bize seçilen herhangi bir yerel bölge için yerel Green fonksiyon matrisini verir ve aşağıdaki gibi yazılır:

$$G_{ii}(z) = \left[(z I_i - h_i) - v_{i,i+1}\Delta_{i+1}^{+} v_{i+1,i} - v_{i,i-1}\Delta_{i-1}^{-} v_{i-1,i}\right]^{-1} \tag{4.12}$$

Green fonksiyonlarının köşegen olmayan elemanları:

$$G_{ij}(z) = G_{ii} v_{i,i\pm1} \quad \Delta_{i\pm1}^{\pm} K \, v_{j\pm1,j} \Delta_j^{\pm} \tag{4.13}$$

şeklindedir ve burada

$$\Delta_i^{\pm}(z) = [(zI_i - h_i) - v_{i,i\pm1} \Delta_{i\pm1}^{+} v_{i\pm1,i}]^{-1} \tag{4.14}$$

olmak üzere Δ_i^{+} olan ileri bölge kısmi Green fonksiyonunu temsil eder ve Δ_i^{-} ise geri bölge kısmi Green fonksiyonunu temsil eder.

G_{ii} ve $G_{i\pm1,i\pm1}$ arasındaki ilişki ise aşağıdaki gibidir.

$$G_{ii} = \Delta_i^{\pm} + \Delta_i^{\pm} v_{i,i\pm1} G_{i\mu1,i\mu1} v_{i\pm1,i} \Delta_i^{\pm} \tag{4.15}$$

Özetlemek gerekirse, bu yöntem de çözüm matrisi, boyutları çok daha küçük olan alt matrislere bölünerek, ilgili bölgeye karşılık gelen Green fonksiyonu bu alt matrisler arasındaki işlemlerle elde edilebilir hale getiriliyor.

4.5. Tek bir noktada birleşme (convergence) süreci

Burada özetlenen süreç Green fonksiyonunun köşegen elemanlarının hesabını içerir. İlgilenilen yerel bölgeyi sıfırıncı bölge olarak adlandırırsak, karşılık gelen Green fonksiyonu şöyle yazılır:

$$G_{00} = \{(zI_0 - h_0) - \mathrm{v}_{0,1}\Delta_1^{+}\mathrm{v}_{1,0} - \mathrm{v}_{0,-1}\Delta_1^{-}\mathrm{v}_{-1,0}\}^{-1} \tag{4.16}$$

Burada h_0 sıfırıncı yerel bölge için kuvvet sabiti matrisi, $\mathrm{v}_{0,\pm1}$ ise sıfır ve (±1) bölgeleri arasındaki etkileşim matrisidir. Denklem 4.14 de ki tekrarlama bağıntılarını kullanarak

$$\Delta_1^{+}(m) = \left[(z\,I_1 - h_1) - \mathrm{v}_{12}\left[(z\,I_2 - h_2) - \mathrm{K}\left[\mathrm{K} - \mathrm{v}_{m-1,m}(z\,I_m - h_m)^{-1}\,\mathrm{v}_{m,m-1}\right]^{-1}\right.\right.$$
$$\left.\left.\mathrm{K}\right]^{-1}\mathrm{v}_{21}{}^{-1} \tag{4.17}$$

denklemi elde edilir. Yukarıdaki denklemde m sonsuza gidiyor. $\Delta_1^{+}(m)$ ifadesindeki *m.* adımda Δ_1^{+} olmak üzere bu ifadeyi değişen m değerine bağlı olarak bir limit halde yazmak mümkündür:

$$\Delta_1^{+} = \lim_{m \to \infty} \Delta_1^{(+m)}(z) \tag{4.18}$$

$\mathrm{z}= w^2 + \mathrm{i}\,\varepsilon$ olmak üzere w^2 de verilen bir ε değeri için $\Delta_1^{+(m)}(z)$ serileri izin verilen belirli bir tolerans değerine kadar hesaplanır. Aynı işlem azalan ε değerleri için daha önce tanımlanan kriterin belirlediği en son değerine kadar tekrarlanır. Yukarıdaki bağıntıda da görüldüğü gibi $\Delta_1^{(+m)}$, $\Delta_1^{+(m-1)}$, den bağımsızdır. Yani Δ_1^{+} her basamakta ayrı ayrı hesaplanması gerekir. Gereğinden fazla olan $\{\ \Delta_1^{+m}\ \}$ hesabından kurtulmak için $\Delta_1^{(+m)}$ ve $\Delta_1^{+(m-1)}$, i birbirine bağlayan tekrarlama bağıntısı geliştirilmiştir [13].

4.6. Tekrarlama bağıntısı

$$H = \begin{bmatrix} h_1 & v_{12} & & \\ v_{21} & h_2 & v_{23} & \\ & v_{32} & h_3 & v_{34} \\ & & O & \\ & & h_i & v_{i,i+1} \end{bmatrix} \tag{4.19}$$

Eğer etkileşim matrisi küresel olarak büyüyen bir katıdaki etkileşmeleri temsil ederse bu durumda i değerinin artmasıyla h_i matrislerinin boyutlarıda artar. Halbuki eşit boyutlardaki bölgelere ayrılmış yarı sonsuz bir kristalde yerel bölgelerdeki parçacık sayıları eşit olacağından h_i matrisinin boyutu i değerinin artmasına bağlı olarak artmaz. Örneğin, yüzeyi olan bir katı için blok-tridiagonal şeklinde yazılan H etkileşim matrisinde, h_1 en üst tabakaları içerir ve bu bölgedeki atomlar arası etkileşimleri tanımlar. i>1 olduğu durumlarda, h_i ve $v_{i,i\pm1}$ alt matrisleri içe (bulka) doğru olan bölgelerde ve bölgeler arası etkileşimleri tanımlar. h ye karşılık gelen yerel Green fonksiyonu kısmi ileri ve kısmi geri Green fonksiyonları $\Delta_1^{\pm}$ olarak bulunur. Denklem 4.17 den, m =1 den m=m ye kadar her bir seviye için aşağıdaki denklemler yazılır.

$$\Delta_1^{+}(1) = G_{11}^{(1)} = (zI\text{-}H)^{-1} = \Delta_1^{-} = \Delta_1^{+} \tag{4.20}$$

$$\Delta_1^{+}(2) = G_{11}^{(2)}$$

$$\Delta_1^{+}(3) = G_{11}^{(3)}$$

M

$$\Delta_1^{+}(m) = G_{11}^{(m)}$$

Burada $G_{ll}^{(m)}$ ilgilenilen bölgedeki H etkileşim matrisine karşılık gelen Green fonksiyon matrisini tanımlar. $\Delta_1^{(m)}$' i $\Delta_1^{(m-1)}$'e bağlayan tekrarlama bağıntısını elde etme süreci aşağıdaki gibidir.

1.Adım

Sistemi sadece ilgilendiğimiz bölge olan ilk bölgeden oluştuğunu varsayıyoruz. Bu durumda H etkileşim matrisi sadece h_1 den oluşur.

$H^{(1)}=h_1$

Buna karşılık gelen Green fonksiyonu da

$$G_{11}^{(1)} = (\mathrm{zI\text{-}H})^{-1} = \Delta_1^- = \Delta_1^+ = \Delta_1^{+(1)} \tag{4.21}$$

2.Adım

Sıradaki ikinci bölgenin eklendiği durum: H etkileşim matrisi ve buna karşılık gelen Green's fonksiyonu matrisi,

$$H^{(2)} = \begin{bmatrix} h_1 & \mathrm{v}_{12} \\ \mathrm{v}_{21} & h_2 \end{bmatrix} \quad , \quad G^{(2)} = \begin{bmatrix} G_{11}^{(2)} & G_{12}^{(2)} \\ G_{21}^{(2)} & G_{22}^{(2)} \end{bmatrix} \tag{4.22}$$

4.15 denklemini kullanarak

$$\Delta_1^{+(2)} = G_{11}^{(2)} = \Delta_1^- + \Delta_1^- \ \mathrm{v}_{12} G_{22}^{(2)} \mathrm{v}_{21} \Delta_1^- \tag{4.23}$$

4.12 denkleminden

$$G_{22}^{(2)} = \Delta_2^- = \{ \ (z I_2 - h_2) - \mathrm{v}_{21} \Delta_1^- \mathrm{v}_{12} \ \}^{-1} \tag{4.24}$$

$$\Delta_1^{+(2)} = G_{11}^{(2)} = \Delta_1^{+(1)} + \Delta_1^- \mathrm{v}_{12} \Delta_2^- \mathrm{v}_{21} \Delta_1^- \tag{4.25}$$

4.24 ve 4.23 denklemleri kullanılarak ikinci aşamadaki Δ_1 ve dolayısıyla ile Green fonksiyonu belirlenmiş olur.

$$\Delta_1^{+(2)} = \Delta_1^{+(1)} + A_1 \Delta_2^- B_1 \tag{4.26}$$

Buradaki A_1 ve B_1,

$$A_1 = \Delta_1^- \mathrm{v}_{12} \tag{4.27}$$

$$B_1 = \mathrm{v}_{21} \Delta_1^- \tag{4.28}$$

$$B_1 = A^T \tag{4.29}$$

Görüldüğü gibi B_1 A_1'in transpozesidir.

3.Adım

Bu adımda sıradaki üçüncü bölge de eklenerek ilgilendiğimiz yerel bölgeye karşılık gelen Green's fonksiyonu aranır.

$$H^{(3)} = \begin{bmatrix} h_1 & v_{12} & 0 \\ \mathrm{v}_{21} & h_2 & \mathrm{v}_{23} \\ 0 & \mathrm{v}_{32} & h_3 \end{bmatrix}, \; G^{(3)} = \begin{bmatrix} G_{11}^{(3)} & G_{12}^{(3)} & G_{13}^{(3)} \\ G_{21}^{(3)} & G_{22}^{(3)} & G_{23}^{(3)} \\ G_{31}^{(3)} & G_{32}^{(3)} & G_{33}^{(3)} \end{bmatrix} \tag{4.30}$$

Bu durumda *H* ve G matrisleri aşağıdaki şekli alırken bu aşamada ki G_{11}'i veren

Δ_1^+:

$$\Delta_1^{+(3)} = G_{11}^{(3)} = \Delta_1^- + \Delta_1^- \mathrm{v}_{12} G_{22}^{(3)} \mathrm{v}_{21} \Delta_1^- \tag{4.31}$$

Bu denklemde $G_{22}^{(3)}$ bulmak için 4.12 den yararlanılır.

$$G_{22}^{(3)} = \Delta_2^- + \Delta_2^- \mathrm{v}_{23} G_{33}^{(3)} \mathrm{v}_{32} \Delta_2^- \tag{4.32}$$

4.32 denklemi 4.31'in içine yerleştirildiğinde

$$G_{11}^{(3)} = \Delta_1^{+(3)} = \Delta_1^- + \Delta_1^- \mathrm{v}_{12} \Delta_2^- \mathrm{v}_{21} \Delta_1^- + \Delta_1^- \mathrm{v}_{12} \Delta_2^- \mathrm{v}_{23} G_{33}^{(3)} \mathrm{v}_{32} \Delta_2^- \mathrm{v}_{21} \Delta_1^-$$

(4.33)

4.12 denkleminden $G_{33}^{(3)}$ elde edilebilir.

$$G_{33}^{(3)} = \Delta_3^- \tag{4.34}$$

$$A_2 = \Delta_1^- v_{12}\, \Delta_2^- v_{23} \ , \quad A_1 = \Delta_1^- v_{12} \tag{4.35}$$

$$B_2 = v_{32}\, \Delta_2^- v_{21}\, \Delta_1^- \ , \ B_1 = v_{21}\, \Delta_1^- \tag{4.36}$$

$$\Delta_1^+(3) = G_{11}^{(3)} = \Delta_1^+(2) + A_2 \Delta_3^- B_2 \tag{4.37}$$

4.37 eşitliği elde edilir.

Bu tekrarlama bağıntılarını sıradaki bölgeleri (bulka doğru) ekleyerek aşağıdaki genelleştirme yapılabilir.

$$\Delta_1^+(m) = \Delta_1^+(m-1) + A_{m-1} \Delta_m^- B_{m-1} \tag{4.38}$$

Burada

$$A_{m-1} = A_{m-2}\, \Delta_{m-1}^- v_{m-1,m} \tag{4.39}$$

$$B_{m-1} = v_{m,m-1} \Delta_{m-1}^- B_{m-2} \tag{4.40}$$

Kısmi Green fonksiyonlarını hesaplamak için hesaplanan ifadeleri özetlemek gerekirse;

1. 4.20 denklemini kullanarak Δ_1^- hesaplanır.
2. 4.27 ve 4.28 den A_1 ve B_1 elde edilir.
3. 4.14 denklemini kullanarak (kısmi Green's fonksiyonları) Δ_m^- hesaplanır.
4. 4.38 deki tekrarlama ilişkisini kullanarak $\Delta_1^{(m)}$ hesaplanır.
5. 4.39 ve 4.40 dan A_{m-1} ve B_{m-1} belirlenir. Hesaplanmış olan bu Green fonksiyonları ile titreşim durum yoğunluklarını hesaplamak mümkündür. Bunun için belirtilen ifade aşağıdaki gibidir:

$$g_j(w^2) = -\frac{1}{3N_J\pi} \lim_{\varepsilon \to 0} \{\mathrm{Im}[TrG_{jj}(w^2 + i\varepsilon)]\} \tag{4.41}$$

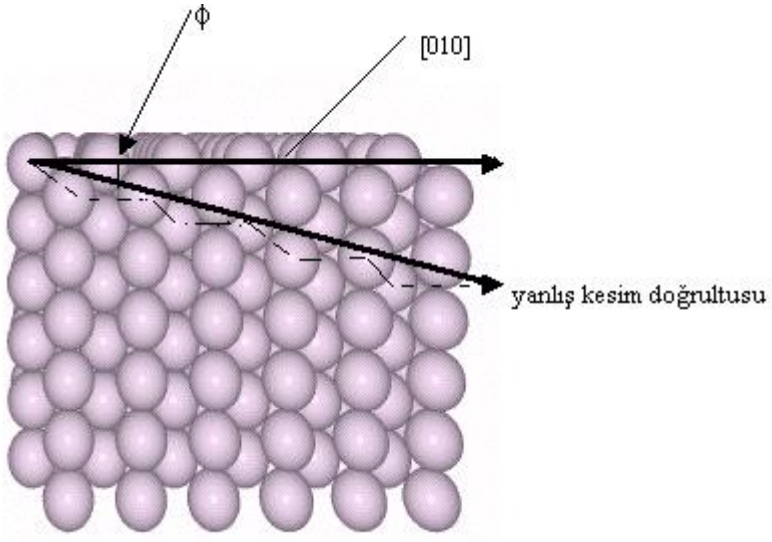
Burada

$$n_j(w) = 2w g_j(w^2) \tag{4.42}$$

w titreşim frekansı ve G_{jj} j yerel bölgesine karşılık gelen Green fonksiyonu matrisidir ve N_j ilgilenilen yerel bölgedeki atomların sayısını vermektedir.

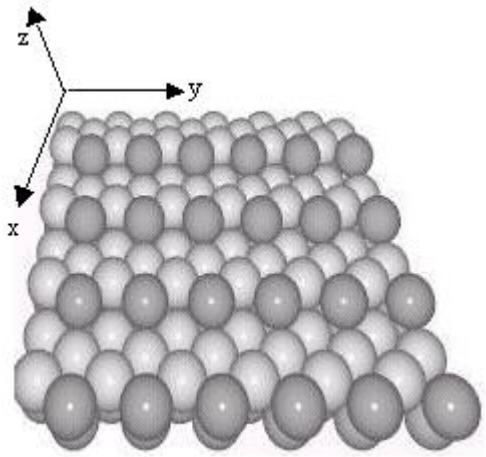
5. HESAPLAMALAR VE TARTIŞMALAR

Kristalde bir yüzey oluşturulduğunda kesim doğrultusu boyunca bulunan atomlar, doğrultu üzerindeki komşu atomlarla olan bağlarını kaybederler (bknz şekil 5.1).



Şekil 5.1. Kristalde basamaklı bir yüzeyin elde edilişi

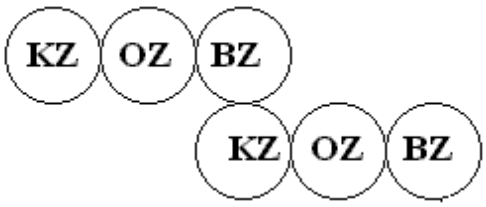
Böyle bir uyarım (pertürbasyon) sonucunda ise yüzeye normal doğrultudaki simetri bozulduğundan dolayı oluşan yeni kuvvet alanlarının etkisiyle atomlar sistemin enerjisini en az kılacak yeni denge konumlarını bulurlar. Bu değişimden dolayı sistemdeki parçacıkların birlikte uyum içinde hareketlerini tanımlayan titreşim modlarının bir değişim göstermesi beklenir. Basamaklı yüzeylerde yüzeye dik doğrultudaki simetriye ek olarak teras düzlemi içinde basamağa dik doğrultuda da simetri kaybolduğundan yüzey düzlemi içinde de iç bölgedeki (bulk) kuvvet alanlarına nazaran bir değişim beklenir. Kuvvet alanlarında bu yenilenmenin yüzey atomlarının yerel titreşim modlarının karakteristiklerine yansıyacağı aşikardır. Bu nedenle yüzey atomlarının titreşimsel durum yoğunluklarında içteki bir atomunkine nazaran herhangi bir farklılığı, aynı yüzey atomları arasındaki kuvvet sabitlerine göre nasıl bir değişim gösterdiğine bakarak yorumlamaya çalışmak yararlı bir yaklaşım olabilir. Yalnız, bir şeyi hatırda tutmak gerekir. Sistemdeki atomların topluca (kolektif) hareketini tanımlayan titreşim modlarını, bireysel atomlar arasındaki kuvvet sabitlerine dayandırmak tek başına yeterli olamaz.



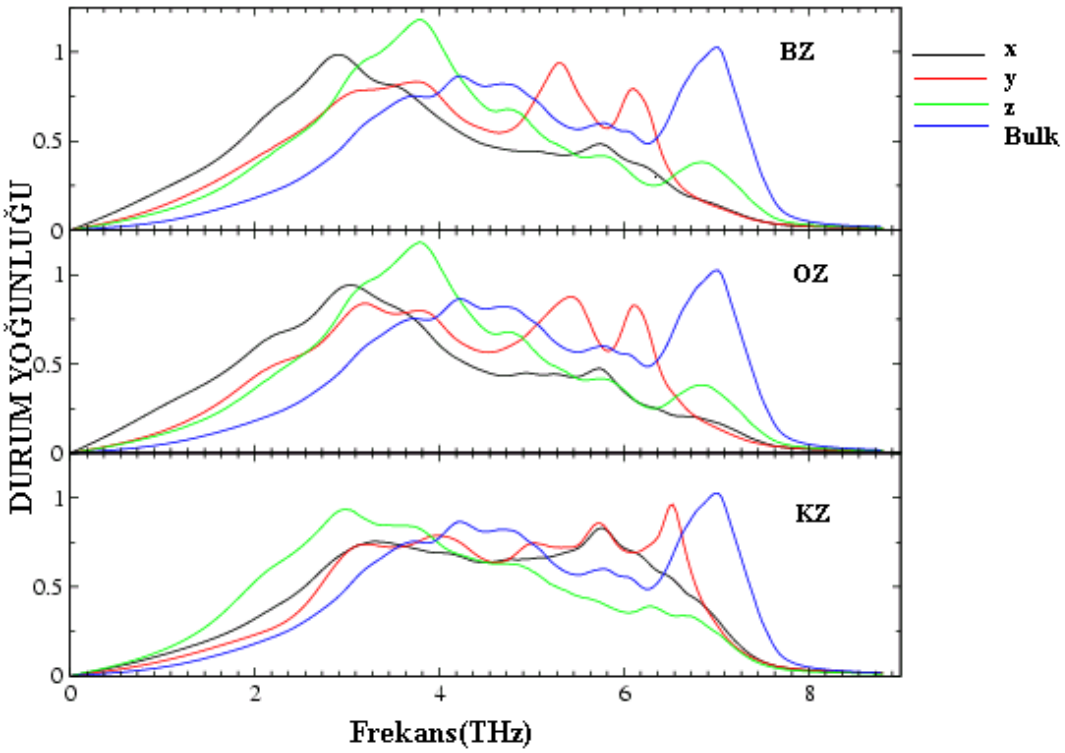
Şekil 5.2. basamaklı bir yüzeyin doğrultuları

5.1. Cu(551) Vicinal Yüzeyinin Yerel Durum Yoğunluklarının Frekansa Bağlı Değişimi

Cu(551) yüzeyinin geometrik yapısına bakıldığında (110) teras ve (111) basamak yönelimine sahiptir ve her bir terasta bulunan atomik zincir sayısı üçtür. Hesaplamalarımızda bir atomik zincirdeki atom sayısını altı olarak belirlerken tabaka sayısını ise en üst ve en alttaki tabakanın birbiriyle etkileşmemesine bağlı kalarak belirledik. Bu yüzeyin teraslarını oluşturan atomlar Şekil 5.3 de gösterildiği gibi Basamak zinciri atomları BZ, orta zincir atomları (OZ) ve köşe zincir atomları (KZ) olarak isimlendirilmiştir. Bu atomlar için yerel titreşimsel durum yoğunluklarının (YTDY) frekansa bağlı olarak değişimleri, bulk atomuna karşılık gelen YTDY ile beraber çizilmiştir.



Şekil 5.3. terasta bulunan atomların isimlendirilmesi



Şekil 5.4. Cu(551) yüzeyinin durum yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi

Şekilden görüldüğü gibi bulk atomu için YTDY, x, y ve z yönünde simetri aynı olduğundan tamamıyla çakışıktır (dejenere). Sistemde bir yüzey oluşturulduğunda yüzeye normal doğrultuda simetri kaybolur. Buna ek olarak yüzeyde ayrıca basamak oluşturulduğunda düzlemi içerisinde basamak doğrultusuna dik yönde simetri kaybolur. Simetrilerde bu azalma etkisi ile ilgili doğrultularda çakışıklığın kalkmasıyla görülür. Şekil 5.4 e baktığımızda yüzey atomlarının yerel atomik çevrede simetri azalmasının etkisini, bulk atomu için x, y ve z yönlerinde var olan çakışıklığın olduğu gibi kalkmasıyla görebiliyoruz. Ayrıca tüm yüzey atomları (BZ, OZ ve KZ) için YTDY lerde her bir doğrultuda bulka nazaran düşük frekanslara doğru bir kayma olduğunda görülüyor. Bu düşük frekanslara kayma BZ ve OZ atomları için en fazla x yönünde olurken, KZ atomu için z yönündedir. Frekans kuvvet sabiti ile orantılı olduğundan YTDY da düşük frekanslara kayma eğilimi kuvvet sabitlerinde bir yumuşama olarak yansıması beklenebilir. Basamak zincirinin bulunduğu atomların durum yoğunluklarındaki değişime bakıldığında düşük frekanslara doğru kayma eğiliminin en fazla olduğu yön x-doğrultusudur. Basamaklı yüzeyin geometrisine bakıldığında, basamak atomu en yakın komşu (koordinasyon) atom sayısı en az olan atomdur. Basamaklı yüzeyin oluşmasıyla BZ atomu üzerindeki atomlara ek olarak x-doğrultusunda da komşularını kaybetmiştir. Şekil 5.3 Bu nedenle kuvvet sabitlerindeki yumuşamanın en fazla x-doğrultusunda olması beklenir. Bunu görebilmek için yüzeydeki ardışık basamak atomları arasında x, y ve

z yönlerindeki kuvvet sabitlerinin bulkdaki karşılığına göre değişimi hesapladık ve sonuçları Tablo 5.1 de gösterdik. Kuvvet sabitlerindeki en fazla yumuşama $k_{xx} = \%86$ ile x-doğrultusunda olduğu görülüyor. Burada basamak atomları için k_{xx} birini x-doğrultusunda kaydırılmasıyla diğer komşu atom üzerinde hissedilen kuvvetin bir ölçüsüdür. Görüldüğü gibi x-doğrultusunda yaklaşık dört kat daha az bir kuvvet yükü oluşmuştur. Basamak atomları arasında k_{yy} ise bulka nazaran %19 yumuşamıştır. Şekil 5.3 ten görüldüğü gibi, KZ-atomu efektif koordinat sayısını en fazla z-doğrultusunda kaybetmiştir. Bunun kuvvet sabitlerine yansımasını görebilmek için, yüzeydeki KZ atomları ve bulktaki atomlar arası kuvvet sabitlerini hesapladık. Grafikten de görüldüğü üzere atomların durum yoğunlukları BZ ve OZ den farklı olarak düşük frekanslara doğru kayma eğilimi en fazla z-doğrultusundadır. %59 ile en fazla yumuşama k_{zz} için hesaplanmıştır. Daha sonra %24 ile k_{xx} ve %10 ile k_{yy} gelir. Yumuşamalarındaki bu sıralar KZ atomununun YTDY bileşenlerindeki düşük frekanslara kayma sıralamasıdır.

Tablo 5.1. Cu(551) yüzeyinin basamak zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

BZ – Atom				**BULK – Atom**		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	0.0148	-0.0245	-0.0012	0.1039	0.0000	0.0023
Y	0.0245	-1.6052	-0.2400	0.0000	-1.9776	0.0000
Z	-0.0012	0.2400	-0.0055	0.0023	0.0000	0.0878

Tablo 5.2. Cu(551) yüzeyinin orta zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

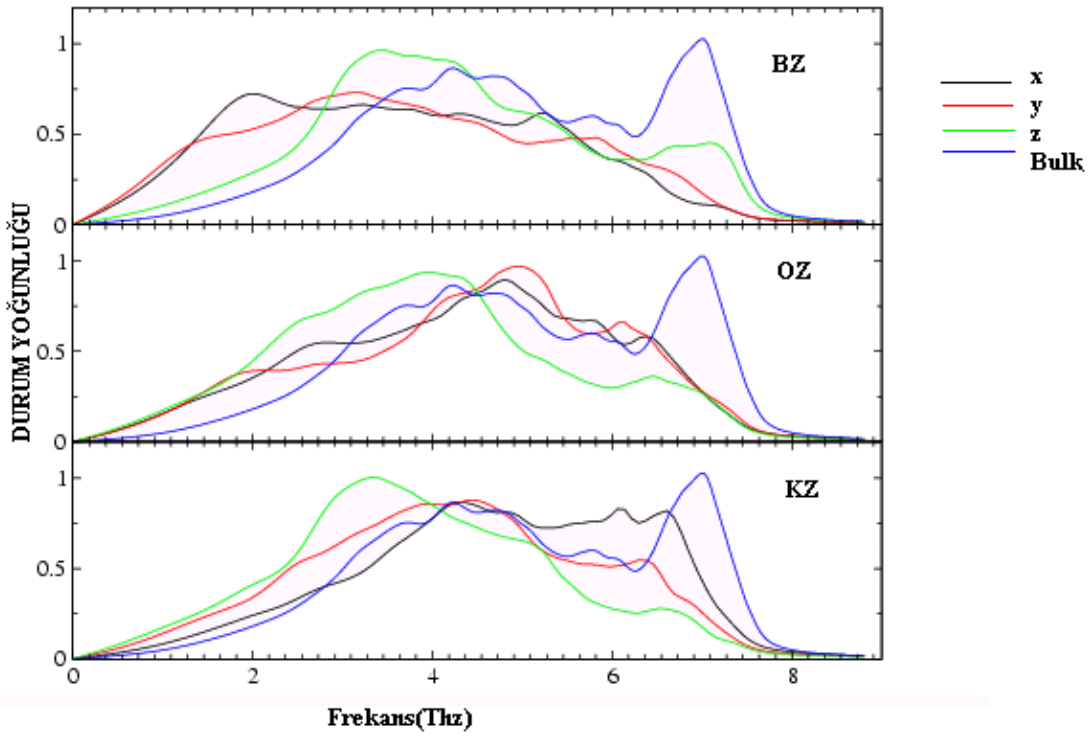
OZ – Atom				**BULK – Atom**		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	0.0076	-0.0325	0.0021	0.1039	0.0000	0.0023
Y	0.0325	-1.6096	-0.2310	0.0000	-1.9777	0.0000
Z	0.0021	0.2310	-0.0058	0.0023	0.0000	0.0878

Tablo 5.3. Cu(551) yüzeyinin köşe zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

KZ – Atom				**BULK – Atom**		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	0.0787	0.0719	-0.0197	0.1039	0.0000	0.0023
Y	-0.0719	-1.7835	0.1180	0.0000	-1.9777	0.0000
Z	-0.0197	0.1180	0.0356	0.0023	0.0000	0.0878

5.3.Cu(310) Vicinal Yüzeyinin Yerel Durum Yoğunluklarının Frekansa Bağlı Değişimi

Düzenli basamaklı Cu(310) yüzeyinin geometrik yapısı (100) teras ve (110) basamak yönelimi içerir ve bir terastaki atomik zincir sayısı ise üçtür. Basamak boyunca atomların gevşek istiflendiği Cu(310) yüzeyi atomlarının hesapladığımız yerel titreşimsel durum yoğunluklarını Şekil 5.5 de sunduk. BZ atomu için YTDY nin x ve y bileşenleri hemen hemen aynı oranda düşük frekanslara kaymıştır. KZ atomu için, Cu(551) de olduğu gibi en fazla kayma z bileşeninde gözlenmektedir. Yine Cu(551) yüzey atomlarının YTDY lerinde gözlendiği gibi, durum yoğunluklarındaki çakışıklık Cu(310)'ın yüzey atomları içinde yok olmuştur. Yerel durum yoğunlukları hesaplamalarına ek olarak, Cu(310) yüzeyindeki atomlar ve içteki atomlar arası kuvvet sabitlerini de hesapladık. Hesaplanan değerler Tablo 5.4, 5.5 ve 5.6 da görüldüğü gibi, yüzey atomları durum yoğunluklarında gözlenen düşük frekanslara kaymayı ilgili atomlar arası kuvvet sabitlerinde yumuşama olarak yansımıyor. Örneğin, BZ atomu için YTDY nin x ve y bileşenlerinde en fazla düşük frekanslara kayma görülüyor. Bu atomların kendi aralarındaki kuvvet sabitleri içteki atomlarına nazaran ilgili bileşenlerde sırasıyla % 124 ile k_{xx} ve %65 ile k_{yy} de sertleşme görülüyor. Benzer şekilde KZ atomu için, Bu atomların kendi aralarındaki kuvvet sabitleri içteki atomlarına nazaran ilgili bileşenlerde sırasıyla % 95 ile k_{xx}, sertleşme ve %37 ile k_{yy} de bir yumuşama görülüyor. Atomların arasındaki kuvvet sabitlerindeki bu yumuşamadan dolayı Şekil 5.5 den de görüldüğü gibi y-doğrultusunda düşük frekanslara doğru bir kayma beklenir. Benzer bir çalışmada, Cu(310) yüzeyi ile aynı teras ve basamak yönelimine sahip Cu(410) yüzeyi üzerinde ki YTDY lerde Cu(310) yüzeyine benzemektedir [17].



Şekil 5.5. Cu(310) yüzeyinin durum yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi

Tablo 5.4. Cu(310) yüzeyinin basamak zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

BZ – Atom				BULK– Atom		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	-0.0067	0.0255	0.0016	0.0000	0.0000	0.0000
Y	-0.0255	0.1825	-0.0632	0.0000	0.1110	0.0000
Z	0.0016	0.0632	-0.0175	0.0000	0.0000	0.0000

Tablo 5.5. Cu(310) yüzeyinin orta zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

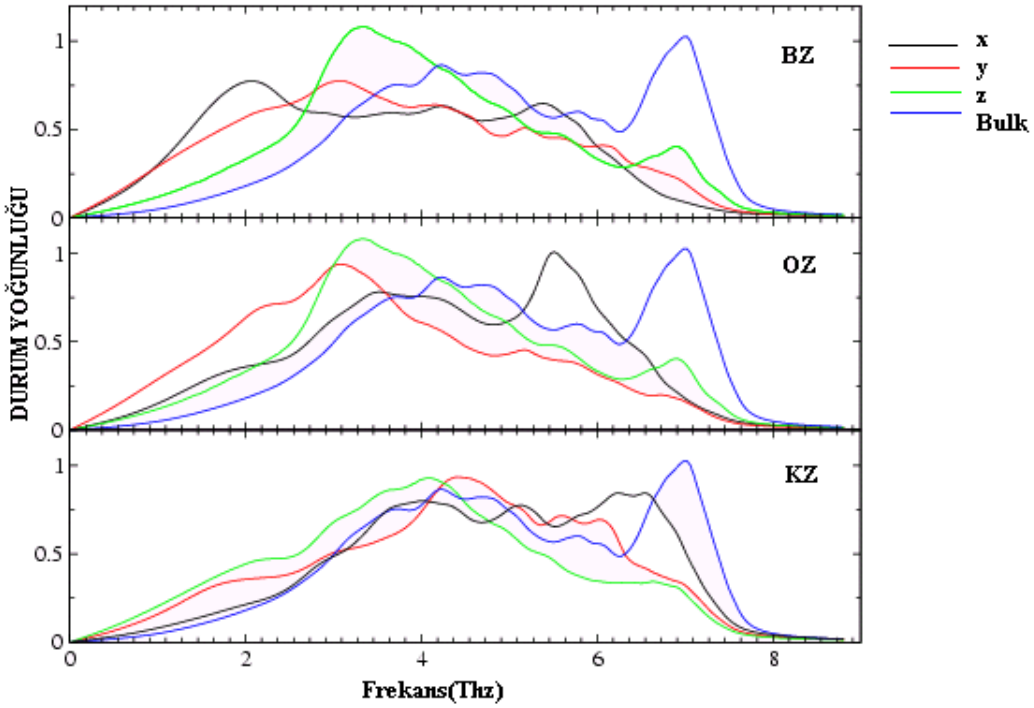
OZ – Atom				BULK– Atom		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	0.0317	-0.0295	0.0146	0.0000	0.0000	0.0000
Y	0.0295	0.1186	-0.0264	0.0000	0.1110	0.0000
Z	0.0146	0.0264	-0.0146	0.0000	0.0000	0.0000

Tablo 5.6. Cu(310) yüzeyinin köşe zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

KZ – Atom				BULK– Atom		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	0.0113	0.0059	-0.0100	0.0000	0.0000	0.0000
Y	-0.0059	0.0701	0.0331	0.0000	0.1110	0.0000
Z	-0.0100	-0.0331	0.0290	0.0000	0.0000	0.0000

5.4.Cu(320) Vicinal Yüzeyinin Yerel Durum Yoğunluklarının Frekansa Bağlı Değişimi

Düzenli basamaklı Cu(320) yüzeyinin geometrik yapısı (110) teras ve (100) basamak yönelimi içerir ve bir terastaki atomik zincir sayısı ise üçtür. Bu yüzeyi yerel titreşimsel durum yoğunluklarını şekil 5.6 da sunduk. BZ atomu için YTDY nin x ve y bileşenleri Cu(310) yüzeyinde olduğu gibi hemen hemen aynı oranda düşük frekanslar doğru kayma görülürken, OZ atomunun YTDY nin bileşenleri Cu(310) yüzeyinde olduğu gibi aynı oranlarda değil değişen oranlarda düşük frekanslara kaymıştır. KZ atomu Cu(310) ve Cu(551) yüzeyinde olduğu gibi en fazla kayma z-doğrultusunda olmaktadır. Yine diğer iki yüzeyde olduğu gibi Cu(320) yüzey atomlarının YTDY lerinde de bir çakışıklık görülmemektedir. Yerel durum yoğunlukları hesaplamalarına ek olarak, Cu(320) yüzeyindeki atomlar ve içteki atomlar arası kuvvet sabitlerini de hesapladık. Yüzey atomlarının durum yoğunluklarında gözlenen düşük frekanslara kayma Cu(310) yüzeyinde olduğu gibi ilgili atomlar arası kuvvet sabitlerinde yumuşama olarak yansımıyor. Kuvvet sabitleri içteki atomlarına nazaran ilgili bileşenlerde %99 ile k_{xx} de ve %109 ile k_{zz} de sertleşme verdi. Çalışılan bütün yüzeylerdeki bulk atomlarının durum yoğunluklarının frekansa bağlı değişimi Sondan Durukanoğlu'nun doktora çalışmasından alınmştır [18].



Şekil 5.6. Cu(320) yüzeyinin durum yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi

Tablo 5.7. Cu(320) yüzeyinin basamak zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

BZ – Atom				BULK– Atom		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	-0.0104	-0.0069	-0.0024	0.0000	0.0007	0.0000
Y	0.0069	0.1865	-0.0616	0.0007	0.0014	0.0000
Z	-0.0024	0.0616	-0.0174	0.0000	0.0000	0.0083

Tablo 5.8. Cu(320) yüzeyinin orta zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

OZ – Atom				BULK– Atom		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	-0.0146	-0.0094	0.0009	0.0000	0.0007	-0.0017
Y	0.0094	0.1836	-0.0493	0.0007	0.0013	0.0000
Z	0.0009	0.0493	-0.0178	0.0000	0.0000	0.0083

Tablo 5.9. Cu(320) yüzeyinin köşe zincirindeki ardışık atomların ve içteki atomların (Bulk) arasındaki kuvvet sabitleri

KZ – Atom				BULK– Atom		
	X	Y	Z	X	Y	Z
X	0.0159	0.0307	-0.0193	0.0000	0.0000	0.0000
Y	-0.0307	0.1199	-0.0120	0.0000	0.1110	0.0000
Z	-0.0193	0.0120	-0.0067	0.0000	0.0000	0.0000

6. SONUÇLAR

Bu çalışmada Cu'n yüksek Miller indisli yüzeylerinden farklı teras ve basamak yönelimine sahip yüzeylerin titreşimsel özellikleri, Real space Green's Function-RSGF (Gerçek uzay Green Fonksiyonu) yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Bu özelliklerin belirlenebilmesi için gerekli olan potansiyel gömülü atom yönteminden elde edilen yarı deneysel potansiyel kullanılmıştır yüzey atomlarının titreşimsel özellikleri ile bulkda ki atomların titreşimsel özellikleri farklılık gösterdiği gözlenmiştir. Bu tezde bulduğumuz titreşimsel özellikler Cu(551), Cu(310) ve Cu(320) yüzeyleri için aşağıda özetlenmiştir.

1. Terasları oluşturan atomik zincirlerden basamak zincirinde, orta zincirde atomların ve kenar zincirde bulunan atomların yerel durum yoğunluklarında bulk atomlarına nazaran düşük frekanslara doğru bir kayma eğilimi gözlenmiştir.

2. Yüzeyin karmaşık simetrisinin yansıması olarak bulk atom YTDY de gözlenen çakışıklık ortadan kalkıyor.

3. Bütün atomik zincirlerin durum yoğunluklarında bulk sınırının aşıldığı yüksek frekanslara doğru bir kayma eğilimi görülmemektedir. Bu yüzey atomlarında yerelleşmiş yerelleşmiş yüksek frekanslı özel modlarının olmadığının bir göstergesidir.

4. Gevşek istifli Cu(310) ve Cu(320) yüzeylerinin durum yoğunluklarının frekansa bağlı değişiminde, düşük frekanslara doğru kaymanın en fazla olduğu yönlerde ilgili atomların arasındaki kuvvet sabitlerinde, içteki (bulk) karşılıklarına göre bir yumuşama olması beklenirken böyle bir durumu bu yüzeyler üzerinde göremiyoruz. Halbuki çalıştığımız diğer bir yüzey olan sıkı istifli Cu(551) yüzeyinin teraslarında bulunan üç atomik zincir üzerinde de bu durumu ayrı ayrı görebiliyoruz. Bütün bu sonuçlardan elde ettiğimiz en temel çıkarımımız, atomların yüzey üzerindeki geometrik dağılımının durum yoğunluklarına ve kuvvet sabitlerine yansımasına bir etkisinin olmasıdır. Her ne kadar sadece üç yüzey üzeride çalıştıysak da bir genelleştirme de bulunursak, eğer yüzeylerin terasında bulunan atomik zincirlerdeki atomların zincir boyunca sırası sıkı istifli bir yapıya sahipse bu atomların durum

yoğunluklarını kuvvet sabitleri ile ilişkilendirebiliyoruz. Bu atomlar sıkı değilde gevşek istifli bir şekilde sıralanmışlarsa bu ilişkiyi kuramıyoruz. Bunun daha genel bir ifade olabilmesi için bir çok değişik Cu vicinal yüzeyleri için bu hesapların yapılıp, yukarıdaki çıkarımın test edilmesi gerekir.

5. Sistemde bulunan parçacıkların kolektif olarak hareketini tanımlayan modlarındaki değişime bağlı olarak sistemin titreşimsel özellikleri değişmektedir. Parçacıkların kolektif hareketinin tanımlandığı bir yapıda atomların tek tek kuvvet sabitlerine bakarak bir yüzeyin durum yoğunluklarını açıklamak mümkün değildir. Ancak kuvvet sabitleri durum yoğunluklarının bir yansıması olduğundan bu değişim bir fikir edinmek amacıyla kuvvet sabitlerine bakarak yorumlanabilir.

KAYNAKLAR

[1] **Ibach, H., ve Bruchmann, D.,** 1978. Surface Phonons on Stepped Pt(111) surfaces, *Phys. Rev. Lett.,* **41,** 958.

[2] **Yıldırım H.** 2003. Yüksek Lisans Tezi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, İTÜ, İstanbul.

[3] **Omar, M.A.,** 1975. Elementary Solid State Physics, pp. 2-24, Addison-Wesley, Massachusetts.

[4] **Lang, B., Joyner, W.R., Somorjai, G.A.,** 1972. Low Energy Electron Diffraction Studies of High Index Crystal Surfaces of Platinum, *Surf. Sci.,* **30,** 440-453

[5] **Daw, M. S., ve Baskes, M.I.,** 1983. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals, *Phys. Rev. Lett.,* **50,** 1285.

[6] **Foiles, S.M., Baskes, M.I., ve Daw, M.S.,** 1986. Embedded-Atom-Method Functions for the fcc Metals Cu, Ag, Ni, Pd, Pt, and Their Alloys, *Phys. Rev. B*, **33,** 7983.

[7] **Hohenberg, P. ve Kohn, W.** 1964. Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev. B, **136***, 864.

[8] **Stott, M. J., ve Zaremba, E.**, 1980. Quasiatoms: An Approach to Atoms in Nonuniform Electronic Systems, *Phys. Rev. B,* **22**, 1564

[9] **Benedek, G.** Status Solidi B **58,** 661 (1973); **Armand, G.,** *Phys.Rev. B,* **14,** 2218 (1976)

[10] **Haydock, R. Heine, V. ve Kelly, M. J.** Electronic Structure Based on the Local Atomic Environment for Tight Binding Bands, J.Phys. C **5**, 2845 (1972).

[11] **Kara. A., C.S. Jayanthi., Wu. S.Y., ve Ercolessi F.,** Local Analysis of the Dynamics of the Relaxed and Reconstructed Au(511) Surface Using the Real Space Green's Function, *Phys.Rev. B,* **49,** 7957 (1994)

[12] **Dy, K.S.,Yu- Wu, Shi ve Spratlin, T.,** Exact solution for the resolvent matrix of a generalized tridiagonal Hamiltonian, Phys. Rev. B, **20**, pp-4237-4243(1979).

[13] Wu, S.Y., Xie, Z.L., ve Potoczak N., Feasibility study on the application of the method of the resolvent marix to complex systems, *Phys. Rev. B,* **48,** pp-14826- 14832(1993).

[14] Wu, S.Y., Cocks, J., ve Jayanthi C.S., General recursive relation for the calculation of calculation of the local Green's function in the resolvent-matrix approach, *Phys.* Rev. B, **49**, pp-7957-7963(1994).

[15] Kara. A., C.S. Jayanthi., Wu. S.Y., ve Ercolessi F., Local Analysis of the Dynamics of the Relaxed and Reconstructed Au(511) Surface Using the Real Space Green's Function

[16] K.S. Dy, Shi-Yu Wu, and T. Spratlin, Exact Solution for the Resolvent Matrix of a Generalized Tridiagonal Hamiltonian, *Phys. Rev.* B **20,** 4237 (1979)

[17] Durukanoğlu, S., ve Rahman, T.S., 1998. Atomic Relaxations and Thermodynamics of Cu(410), *Surf. Sci.,* **409**, 395-402.

[18] Durukanoğlu, S. 1999. Structural, vibrational, and Thermodynamical properties of metal vicinal surfaces, Doctor of philosophy Kansas State University

ÖZGEÇMİŞ

1978'de Iğdır'da doğdu. Orta öğrenimini Silivri Lisesinde tamamladıktan sonra 1996 yılında Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik bölümüne kayıt oldu. 1997 yılında Yıldız Teknik Üniversitesi Fizik bölümüne yatay geçiş yaptı 2000 yılında mezun oldu. 2000 yılında İTÜ' de Fizik bölümünde lisansüstü eğitim yapmaya başladı ve önce İTÜ yabancı diller okulunda 1 yıl İngilizce hazırlık gördü. Daha sonra 2001 de Yıldız Teknik Üniversitesinde Araştırma Görevlisi unvanını aldı ve halen çalışmalarına İTÜ Fizik bölümünde devam etmektedir.