
GAZİ ÜNİVERSİTESİ
Gazi
1926

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ ALAŞIMLARININ; YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK VE OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Ali GÜLTEKİN

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HAZİRAN 2016

Ali GÜLTEKİN tarafından hazırlanan "$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ ALAŞIMLARININ; YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK VE OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ" adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi FİZİK Anabilim Dalında DOKTORA TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Doç. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum .....

Başkan : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum .....

Üye : Doç. Dr. Metin ÖZER

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum .....

Üye : Doç. Dr. Hamit ALYAR

Fizik Anabilim Dalı, Çankırı Karatekin Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum .....

Üye : Doç. Dr. Halit ALTUNTAŞ

Fizik Anabilim Dalı, Çankırı Karatekin Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum .....

Tez Savunma Tarihi: ...../……/……

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Doktora Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

……

Prof. Dr. Metin GÜRÜ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmasında yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Ali GÜLTEKİN

…./…./2016

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ ALAŞIMLARININ; YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK VE OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

(Doktora Tezi)

Ali GÜLTEKİN

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Haziran 2016

ÖZET

Bu çalışmada $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımlarınınbazı yapısal, elektronik, optik, elastik, özelikleri norm-conserving ve ultrasoft pseudopotansiyel kullanarak yoğunluk fonksiyoneli teorisine dayalı ab- initio metotlarla ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarakvegards yasasına bağlı olarakhesaplandı. Spesifik olarak, incelenen alaşım ve bileşiklerin kararlı fazlardaki örgü parametreleri, bant yapıları, dielekrik fonksiyonları, kırılma indisi, soğurma katsayıları, elastik sabitleri, debye sıcaklıkları, ses hızları, ve durum yoğunlukları hesaplandı. Elde edilen bulgular mevcut deneysel ve teorik değerlerle karşılaştırıldı. Kullanılan yöntemin alaşımların özelliklerini belirlemede doğru sonuçlar verdiği görüldü.

Bilim Kodu : 20226
Anahtar Kelimeler : Yarı İletkenler, ab- initio, $Be_{1-x}Zn_xSe$,$Be_{1-x}Zn_xTe$,optik, örgü
Sayfa Adedi : 141
Tez Yöneticisi : Doç. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

INVESTIGATING THE STRUCTURAL, ELECTRONICAL, ELASTIC AND OPTICAL PROPERTIES OF $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ ALLOYS

(Ph.D. Thesis)

Ali GÜLTEKİN

GAZİ UNIVERSITY

GARDUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

June 2016

ABSTRACT

In this, study some of the structural, electronic, optical and elastic properties of $Be_{1-x-y}Zn_xHgySe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$ and $Be_{1-x}Zn_xS$ alloys are calculated via density function theorem based on ab- initio methods and with the data which is taken from an x-ray machine and which depends on the vegards law. Specifically, the lattice parameters, bant gap, dielectric functions, refractive indexes, absorption coefficients, elastic moduluses, debye temperatures, acoustic velocities and state densities of the alloys and compounds which are investigated are calculated on their stable phases. The results are compared with the experimental and theoritical values. It is observed that the method gives correct results on determining the properties of alloys.

Science Code : 20226
KeyWords : Yarı İletkenler, ab- initio, $Be_{1-x}Zn_xSe$,$Be_{1-x}Zn_xTe$,optik, örgü
PageNumber : 141
Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın hazırlık çalışmalarında değerli bilgi ve desteklerini esirgemeyen başta Doç. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK olmak üzere, Yrd. Doç. Dr. Nurettin Körözlü'ye teşekkürü borç bilirim.

Çalışmalarım sırasında her zaman yanımda olan ve daima desteklerini ve dualarını eksik etmeyen anneme, babama ve kardeşlerime çok teşekkür ediyorum.

Çalışmalarım boyunca yardımlarını ve manevi destekletini her zaman hissettiğim arkadaşlarım Yrd.Doç.Dr. Mehmet TAMER, Dr. Yunus BAŞve Ferhat YILDIZ'a teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET iv

ABSTRACT v

TEŞEKKÜR vi

İÇİNDEKİLER vii

ÇİZELGELERİN LİSTESİ x

ŞEKİLLERİN LİSTESİ xii

SİMGELER VE KISALTMALAR xiv

1. GİRİŞ 1

2. TEMEL VE TEORİK BİLGİLER 5

2.1. Kristal Yapılar 5

2.2. Örgü Çeşitleri 7

2.2.1. İki boyutlu örgü türleri 8

2.2.2. Üç boyutlu örgü türleri 8

2.3. Basit Kristal Yapılar 11

2.3.1. Sodyum klorür yapı 11

2.3.2. Sezyum klorür yapı 12

2.3.3. Zinc blende yapı 13

2.3.4. Florit yapı 14

2.4. Miller İndisleri ve Ters Örgü Vektörleri 14

2.5. Brillouin Bölgesi ve İndirgenemeyen Brillouin Bölge 15

2.6. Yüksek Simetri Noktaları 17

3. TEMEL ÖZELLİKLER 19

3.1. Kohesif Enerji 19

3.2. Bulk Modülü 19

Sayfa

3.3. Elastik Sabitler 20
3.4. Tetragonal Shear Modülü 25
3.5. Poisson Oranı 26
3.6. Young Modülü 26
3.7. Zener Anizotropi Faktörü 27
3.8. Kleinman Parametresi (ξ) 27
3.9. Debye Sıcaklığı 27
4. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİ 31
4.1. Çok Cisim Problemi 31
4.2. Born-Oppenheimer Yaklaşımı 32
4.3. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları 33
4.3.1. Hartre yaklaşımı 33
4.3.2. Hartree-Fock yaklaşımı 34
4.4. Yoğunluk Fonksiyoneli Yaklaşımları 35
4.4.1. Thomas fermi teorisi 35
4.4.2. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi 36
4.4.3. Hohenberg-Kohn teoremleri 39
4.4.4. Kohn-Sham eşitlikleri 42
4.4.5. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) 45
4.4.6. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımları (GGA) 46
4.4.7. LDA ve GGA yaklaşımlarının sınırları 48
4.5. Pseudopotansiyel Metot 49
4.5.1. Pseudopotensiyel üretimi 51
4.6. CASTEP Metodu 53
5. BANT YAPISI HESAPLAMA YÖNTEMLERİ 57
5.1. Bant Yapısı 57

Sayfa

5.2. Atomik Orbitallerin Lineer Bileşimi (LCAO) 58
6. OPTİK ÖZELLİKLER 63
6.1. Lorentz Modeli 63
6.2. Drude Modeli 66
6.3. Kramers-Kronig Bağıntıları 66
6.4. X-Işınları Difraksiyonu (XRD) 67
6.5. X-Işınları Kırınımı ile Kristal YapılarınTayini 70
6.6. Vegards Kanunu 70
7. BULGULAR VE TARTIŞMA 71
7.1. Alaşımların Elekronik ve Yapısal Özellikleri 71
7.2. Alaşımların Optiksel Özellikleri 87
7.2.1. Alaşımların dielektrik sabitleri 87
7.2.2. Alaşımların kırılma ve soğurma katsayısı 95
7.2.3. Kayıp fonksiyonun hesabı 102
7.2.4. Soğurma katsayısı 110
7.3. Alaşımların Elastik Özellikleri 115
7.4. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ Alaşımının Debye Sıcaklığı 122
8. SONUÇLAR VE ÖNERİLER 125
KAYNAKLAR 129
ÖZGEÇMİŞ 137

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge **Sayfa**

Çizelge 2.1. Yedi Kristal Sistemi ve Bravais Örgüleri 9

Çizelge 3.1. $c_{\alpha\beta}$ ve c_{ijkl}'nın indisleri arasındaki Voig bağıntıları 22

Çizelge 3.2. Kristal simetrilerine göre Born mekanik kararlılık kriterleri 23

Çizelge 7.1. $Be_{1-x}Zn_xTe$ için DFT ile elde edilen kristal yapıları ve bağ uzunlukları 72

Çizelge 7.2. $Be_{1-x}Zn_xTe$ içinDFT ile elde edilen, örgü sabitia$_0$, bulk modülü, V hücre hacmi diğer deneysel ve teorik çalışmalar..... 73

Çizelge 7.3. $Be_{1-x}Zn_xTe$ için DFT ile elde edilen, band aralığı diğer deneysel ve teorik çalışmalar 75

Çizelge 7.4. DFT ile elde edilen,$Be_{1-x}Zn_xSe$ Alaşımlarının Kristal yapıları ve bağ uzunlukları..... 76

Çizelge 7.5. DFT ile elde edilen,$Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımlarının örgü sabiti a_0, bulk modülü, V hücre hacmi diğer deneysel ve teorik çalışmalar 77

Çizelge 7.6. DFT ile elde edilen, $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımlarının; band aralığı diğer deneysel ve teorik çalışmalar 77

Çizelge 7.7. DFT ile elde edilen,$Be_{1-x}Zn_xS$Alaşımları için Bağ uzunlukları ve kristal yapıları..... 80

Çizelge 7.8. DFT ile elde edilen, $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için örgü sabitia$_0$, bulk modülü, V hücrehacmi diğer deneysel ve teorik çalışmalar 81

Çizelge 7.9. DFT ile elde edilen, $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için band gap diğer deneysel ve teorik çalışmalar 82

Çizelge 7.10. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için Kristal yapıları ve bağuzunlukları..... 84

Çizelge 7.11. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için örgü sabiti(a_o), bulk modülü (B), (V) hücre hacmi diğer deneysel ve teorik çalışmalar..... 85

Çizelge 7.12. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için band gap 85

Çizelge 7.13. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız Elastik sabitleri 116

Çizelge 7.14. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız; Bulk modülü(B), Young modulü(E), Shear (kayma) modülü(G), Sıkıştırılabilirlik B/G, Kleinman parametersi(ξ) ve Poisson oranı (ν) için hesapladığımız sonuçlar 117

Çizelge **Sayfa**

Çizelge 7.15. $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için DFT ile hesaplanan Elastik sabitleri..... 117

Çizelge 7.16. $Be_{1-x}Zn_xS$ X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımızelastik sabitleri 117

Çizelge 7.17. $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için DFT ile hesapladığımız; Bulk modülü Shear (kayma) modülü (G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (ν) için hesaplanan sonuçlar..... 118

Çizelge 7.18. $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak Vegard yasası ile hesapladığımız; Bulk modülü, Shear (kayma] modülü (G) Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı(ν) için hesaplanan sonuçlar 119

Çizelge 7.19. $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımları için DFT ile hesapladığımız Elastik sabitleri..... 119

Çizelge 7.20. $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımları için X-ray cihazından alınan verilerkullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız Elastik sabitleri 119

Çizelge 7.21. $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımları için DFT ile hesaplanan; Bulk modülü, Shear (kayma)modülü (G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (ν) için hesaplanan sonuçlar..... 120

Çizelge 7.22. $Be_{1-x}Zn_xSe$Alaşımları için X-ray cihazından alınan veiler kullanılarak yapılan hesaplamalar; Shear modülü (G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (ν) için hesaplanan sonuçlar 120

Çizelge 7.23. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$' inalaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız; Elastik sabitleri (GP) 121

Çizelge 7.24. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile Bulk modülü(B), Young modulü(E), Shear modülü (G), Sıkıştırılabilirlik,B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (ν) için hesapladığımız sonuçlar 122

Çizelge 7.25. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$'inYoğunluğu (ρ), Boyuna (υ_l), Enine (υ_t), ortalama dalga hızı ve Debye sıcaklığı (θ_D) 123

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekiller **Sayfa**

Şekil 2.1. (a) Birim hücre (b) Kristal yapı 5

Şekil 2.2. İlkel hücre 7

Şekil 2.3. Wigner–Seitz hücresi 7

Şekil 2.4. İki boyutlu Kristal örgü çeşitleri 8

Şekil 2.5. x, y, z koordinat eksenlerine sahip bir birim hücrenin, örgü parametrelerini (kenar uzunlukları ve eksenler arası açılar) gösterilmektedir 9

Şekil 2.6. Üç boyutlu Kristal örgü çeşitleri 10

Şekil 2.7. Sodyum klorür yapı 11

Şekil 2.8. Sezyum klorür yapı 12

Şekil 2.9. Zinc-Blende yapı 13

Şekil 2.10. Florit yapı 14

Şekil 2.11. Basit kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları 17

Şekil 2.12. Cisim merkezli kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları 17

Şekil 2.13. Cisim merkezli kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları. Bu aynı zamanda gerçek uzayda cisim merkezli kübik örgünün Wigner-Seitz hücresidir 18

Şekil 4.1. Pseudopotansiyel ve dalga fonksiyonu. 51

Şekil 5.1. İletkenlik derecesine göre değişen bant enerjileri: (a) iletken, (b) yarı iletken, (c) yalıtkan 58

Şekil 6.1. Bir kristalde X-ışını kırınımı 69

Şekil 6.2. Bruker D8 Discover XRD cihazı 70

Şekil 7.1. DFT ile elde edilen $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$, $Be_{0,50}Zn_{0,50}Te$ ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$' nin kristal yapıları ve bağ uzunlukları. Alaşımlarının kristal yapıları ve bağ uzunlukları 72

Şekil 7.2. DFT ile elde edilen, Fermi seviyesinin 0 eV'da x' e bağlı olarak $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ (#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#3) alaşımları için band yapısı ve DOS hesaplandı 74

Şekiller **Sayfa**

Şekil 7.3. DFT ile elde edilen $Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$, $Be_{0,50}Zn_{0,50}Se$ ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$' nin Kristal yapıları ve bağ uzunlukları, Alaşımlarının Kristal yapıları ve bağ uzunlukları 76

Şekil 7.4. DFT ile elde edilen,Fermi seviyesinin 0 eV'da x' e bağlı olarak $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ (#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$ (#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#3) alaşımlar için band yapısı ve DOS hesaplandı 79

Şekil 7.5. DFT ile elde edilen $Be_{0,25}Zn_{0,75}S$, $Be_{0,50}Zn_{0,50}S$ ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$' nin Kristal yapıları ve bağ uzunlukları.Alaşımlarının Kristal yapıları ve bağ uzunlukları 80

Şekil 7.6. Fermi seviyesinin 0 eVda x' e bağlı olarak $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#3) alaşımları için band yapısı ve DOS hesaplandı..... 83

Şekil 7.7. Fermi seviyesinin 0 eV'da x'e bağlı olarak $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ (#1), $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (#2), ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{02,5}Se$(#3), alaşımları için Band yapısı ve DOS hesaplandı 86

Şekil 7.8. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$(#3) alaşımları için dielektrik sabitinin reel ve imaginary kısımları 88

Şekil 7.9. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ (#3) alaşımları için dielektrik sabitinin reel ve imaginary kısımları 90

Şekil 7.10. $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#3) alaşımları için dielektrik sabitinin reel ve imaginary kısımları 92

Şekil 7.11. $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$(#1), $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (#2) ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{02,5}Se$ (#3)alaşımların için dielektrik sabitininreel ve imaginary kısımları..... 94

Şekil 7.12. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#3) alaşımları için kırılma (n) sabiti ve sönüm (k) sabiti 96

Şekil 7.13. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#3) alaşımları için kırılma (n) sabiti ve sönüm (k) sabiti 97

Şekil 7.14. $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#3) alaşımları için kırılma sabiti (n) ve sönüm sabiti (k) 99

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklamalar
θ_D	Debye sıcaklığı
$\kappa(\omega)$	Sönüm katsayısı
γ	Sönüm katsayısı
Å	Angstrom
A	Zener anisotropy faktörü
a_0	Örgü sabiti
b_c	Normalizasyon sabiti
B	Bulk Modülü
b_0	Örgü sabiti
Bcc	Cisim merkezli kübik örgü
Be	Berilyum
C	Elastik sabiti
c_0	Örgü sabiti
E_{cut}	Düzlem dalga baz setleri için kinetik enerji kesme değeri
E_f	Fermi seviyesi
E_g	Yasak bant aralığı
Fcc	Yüzey merkezli kübik örgü
F-43m	Yüzey merkezli kübik yapı
G	Shear modülü
GW	Green Fonksiyonu
H H	Hamiltonyen operatörü
H h	Planck sabiti
Hg	Civa
$L(\omega)$	Enerji kayıp fonksiyonu
M	Moleküler ağırlığı

Simgeler	Açıklamalar
$n(\omega)$	Kırılma indisi
$\boldsymbol{n}$	Moleküldeki atom sayısını
$\boldsymbol{N_A}$	Avogadro sayısı
$\rho(\vec{r})$	Parçacık yoğunluğu
P-4m2	Primitive Tetrogonal
S	Kükürt
Se	Selenyum
T	Mutlak sıcaklık
Te	Tellür
$\boldsymbol{U}$	Potansiyel enerji
v_l	Enine dalga hızı
$V_H(\vec{r})$	Hartree potansiyeli
V	Hücre hacmi
$V_{iyon}(\vec{r})$	Iyon potansiyeli
v_t	Ortalama hız
$\boldsymbol{v}$	Poisson oranı
$\boldsymbol{v_m}$	Boyuna dalga hızı
χ	Geçirgenlik katsayısıdır
XC	Değişim-Korelasyon
Y	Young's Modulü
Z_I	Atom numarası
Zn	Çinko
ε1 (ω)	Dielektrik fonksiyunun gercek kısmı
ε2 (ω)	Dielektrik fonksiyunun imajiner kısmı
ξ	Kleinman parametresi

Kısaltmalar	Açıklamalar
Ab-initio	Temel ilkelere dayanan
BZ	Brillouin bölgesi

Kısaltmalar	Açıklamalar
CASTEP	Cambridge Sequential Total Energy Package
DFT	Yoğunluk fonksiyoneli teorisi
DFT	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory)
HRXRD	Yüksek çözünürlüklü X-ışını kırınımı
IBZ	İndirgenemeyen Brillouin bölgesi
LCAO	Genelleştirilmiş Gradiyent Yaklaşımı (Generalized Gradient Approximation)
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (Local Density Approximation)
LED	Işık veren diyot
OPW	Ortogonalize Düzlem Dalgalar

1. GİRİŞ

Uzay çağının başlaması ile yarı iletken malzemelerin kullanılması, mobil teknolojinin ortaya çıkmasında en büyük katkı olarak bilinmektedir. Bir ve ikili bileşiklerin yeterli optiksel özellikleri sağlamadığından dolayı, birden fazla ikili ve üçlü bileşiklerin farklı oranlarda birleşmesiyle, başta görünür bölge olmak üzere, spektrumun x ışınları, gama ışınları, uv ve kızıl ötesi bölgelerinde yüksek kalitede optik elektronik aygıt uygulamaları için büyük çabalar gösterilmektedir.Yarıiletken alaşımların, fiziksel özelliklerinin hesaplanabilmesi, farklı oranlardax ve y nin fonksiyonu olarak araştırılabilir olması açısından önem taşımaktadır. Alaşımların bileşenleri değiştirilerek performansları uygun hale getirilebilmekte, en önemlisideyüksek enerji aralıkları, bileşik oranları değiştirilerek ayarlanabilmektedir. AC,AB ve AD bileşiklerinin karışımıyla oluşan $A_xB_{1-x}C$ ve $A_xB_{1-x-y}C_yD$ dir tipi yarıiletkenler teknolojik olarak çok önemli malzemelerdir. Çünkü alaşım oranları geniş skalada ayarlanabilmektedir. X ve y konsantrasyonları ve A, B, C, D bileşen atomlarıdır. ABCD alaşımlarının formülleri kullanılarak, bu sayede malzeme özellikleri, özel uygulamalar için genişletilebilir ve bu da teknolojik araçlar için önemlidir [1-2]. Bu materyaller geniş uygulama alanları ile örneğin; fotodedektörlerde, fiber optiklerde, katı lazerlerde, ışık emisyon diyotlarda, transistörlerde kullanılmaktadırlar. Son zamanlarda ciihazların dizaynında, X-ışınları, gama-ışınları dedektör olarak kullanılmaktadır [3]. Çeşitli yarıiletken elektriksel ve optiksel cihazlara artan bir talep vardır. Bu kapsamda II-VI ve III-V bileşikleri yaygın olarak incelenmiştir. Berilyum ile kalkojenlerin yaptığı bileşiklerin optoelektronik cihazlarda kullanılması çok dikkat çekmektedir. Ledler ve lazer diyotlar(LDs), görünür bölgedeki mavi ve yeşil dalga boyunda ışınım kullanan teknoloji için oldukça önemlidir [4]. Berilyum ile kalkojenlerin bileşikleri, BeSe, BeS ve BeTe güçlü örgü, sert ve yüksek kovelent bağlarından dolayı dikkat çekmekte ve aygıt ömrünü uzatmaktadır. Bunun uygulaması olarak, malzemenin ömrünü ve sertliğini geliştirmek içinçalışılmıştır [5,6]. Çinko-blend, çinko sülfür (ZnS) ve çinko selenyum (ZnSe) geniş bantlı II-VI yarı iletkenlerdir ve özellikle yarıiletken cihazların üretiminde kullanılmaktadırlar [7]. Son zamanlarda, berilyum kalkogejenler BEX (X = S, Se, Te) ilgi odağı haline gelmiştir. Çünkü II-VI bileşikleri arasında benzersiz bir kovalent bağ ve büyük bant boşluklara sahiptirler. Bu nedenle, Be kullanımı ZnX dayalı üçlü bir alaşım ($Zn_{1-x}Be_xS$), malzemenin sertliğini artırılması, bozunma oranlarının azaltılması ve daha gelişmiş bir aygıt ömrüne katkı sağlaması için önemlidir [8-9]. Berilyum Kalkojenürlerin diğer ilginç özelliği $Zn_{1-x}Be_xS$ üçlü bir alaşım durumunda alt

tabakalarda örgü uyumunun olmasıdır [10]. $Zn_{1-x}Be_xSe$ alaşımları kompozisyon değişimi bağ iyonikliği, elektronik bant yapıları ve örgü parametresi gibi fiziksel özelliklerinde önemli değişikliklere neden olur. Bu yeni malzeme sistemlerine dayalı heteroyapıların geliştirilmesi için alaşımların detaylı araştırılmasına ihtiyaç vardır bu kapsamda mavi-yeşil lazer diyotların tasarımı için berilyum ile kalkojenlerin yaptığı alaşımların ($Zn_{1-x}Be_xS$) yapısal ve elektronik özellikleri incelenmiştir [11]. Metal kalkojenlerin yapısal çeşitlilikleri süper iletkenlik gibi fiziksel özellikleri,optikal özelliklerinden, güneş enerjisi dönüşümlerinde kullanılmalarından ve termoelektrik gibi özelliklerinden dolayı sıklıkla çalışılmaktadırlar [4, 12-15]. II-VI grubunda bulunan Be, Cd, Cu, Hg, Zn, Ag elementlerinin, S, Se, Te kalkojenleri ile yaptığı alaşımlar, direkt bant geçişine ve geniş bir bant aralığına sahip olmalarından dolayı $A_xB_{1-x}C$, $A_xB_{1-x,y}C_yD$, tipi yarıiletken grubunun en önemli üyeleridir. Bunların karıştırılmış (mixed) üçlü II-VI grubu yarıiletkenleri, maviden, ultraviyoleye yakın spectral bölgeye uygun cihazların yapımında ve X-ray ve γ-ray detektörlerinin üretiminde kullanılırlar. II-VI bileşiklerinin BeSe ve BeTe gibi berilyum kalkojenler görünür bölgede optik cihazlarda malzeme kaynağı olarak kullanılmışlardır [16-20]. II-VI lazer diyotların içine Berilyum-Kalkojenler eklenerek, arıza önleyici bir özellik kazandırılır vemalzeme için yararlı olur. Özellikle IIB grubu katyonlarının ve periyodik çizelgeninin VIA grubu anyonlarının ikili bileşikleri, optoelektronik cihazlar, IR dedektörler ve güneş pili teknolojisinde büyük ilgi çekmektedir [21-23]. HgZnSe alaşımının bant gap enerjisi infraed bölgede yeşilden kırmızıya tüm görünür bölge spektrumu üzerinde emisyon elde etmek için değiştirilebilir [24]. AC ve AB bileşenlerinin karışımıyla oluşan $A_xB_{1-x}C$ tipi yarı iletkenler teknolojik olarak çok önemli malzemelerdir. Bunların yapısal, optik ve epitaksiyel özellikleri, x katkılaması tarafından ayarlanır. Bu sayede malzeme özellikleri özel uygulamalar için genişletilebilir [25-26]. Son zamanlarda CdHgTe ve ZnCdSe oda sıcaklığında kullanılmasından dolayı güneş pillerinde ve IR cihazı için çok önem kazanmıştırlar [27-28].

Metaryallerin teknolojide kullanılabilmesi için fiziksel ve kimyasal özelliklerinin bilinmesi gerekir ve bunun için Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Hidrojen atomu, harmonik osilatör ve kutudaki parçacık için Schrödinger denkleminin analitikçözümü mümkün olmaktadır. Çok parçacıklı sistemlerde analitik çözüm, elektron-elektron ve elektron-çekirdek etkileşmelerinden dolayı tam olarak yapılamadığından dolayı yaklaşık yöntemlere ihtiyaç duyulmuştur.

Born-Oppenheimer (1927) yaklaşımı; çekirdeğin kütlesi elektronun kütlesinden çok büyük olduğu için, çekirdeğin hareketinin, elektron hareketinin yanında ihmal edecek kadar yavaş kabul etmiştir [29]. Hartree-Fock (1957) toplam enerji hesabıiçin tek elektronun dalga fonksiyonunu alıp slater determinantı kullanarak çözmüştür ve bu teoremle DFT oluşturulmaya başlanmıştır [29,30-32]. Hohenberg ve Kohn(1964), yoğunluğu, potansiyel yerine kullanarak sistemi karakterize edecek temel fonksiyon olarak kullanılabileceğini göstermiştir. DFT, n tane elektronun etkileşimini, taban durumun parçacık yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ cinsinden ifade etmektedir [33-36]. DFT'de çok cisim dalga fonksiyonu yerine tek cisim dalga fonksiyonu kullanılarak hesaplama yapmadır. Bahsedilen bu teoriler *ab-initio* (temel prensip) yöntemler olarakadlandırılmaktadırlar.Günümüzde kristal yapıların fiziksel parametrelerinin hesaplanmasında*ab-initio* yöntemlere dayanan SIESTA, ABINIT, VASP, Wien2k ve Castep gibi bilgisayar yazılımlı paket programı kullanılmaktadır. Programlar oldukça karmaşık yapılardaki malzemelerin, toplam enerjisi, örgü parametreleri, elektronik bant yapısı, kısmi ve toplam durum yoğunluğu, atomik kuvvetler, elastik sabitler ve mekanik özellikler, yük yoğunluğu, manyetik moment, fonon dağılım eğrileri, termodinamik özellikler, optik özellikler gibi özelliklerini kısa sürede hesaplamaktadırlar. Sürekli olarak hesaplara yönelik yeni teoriler geliştirilmiş ve güncellenmiştir. Programların yazılımlarının çoğu DFT baz alınarakyazılmaktadır.

Bu tez de; yariletken alaşımların teknolojik olarak araştırılmasının önemli olması temel özelliklerinin teknolojik yaklaşımlarda kullanılabilir ve geliştirilebilir olmasından dolayı $Be_{1-x}Zn_xSe$, $Be_{1-x}Zn_xS$, $Be_{1-x}Zn_xTe$ ve $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ mixed kristallerin optikal, elektronik özellikler ve elastik sabitleri, elastik sabitlerine bağlı olarak bulk modulü, shear modülü ani izotropluk katsayısı gibi DFT'yi temel alan (*Cambridge Sequential Total Energy Package*) CASTEP paket programları kullanarak ab initio metotu [37,38] ve X-ray cihazından alınan veriler [39-41] kullanılarak Vegards yasası ile hesaplandı. Elde edilen sonuçlar mevcut teorik hesaplamalarla ve deneysel bulgularla karşılaştırıldı.

ikinci bölümünde Katıhal Fiziği ve Yoğun madde fiziğinin temel özellikleri; kristal yapıları, örgü çeşitleri, basit kristal yapılar, miller indisleri ve ters örgü vektörleri, Brillouin Bölgesi ve indirgenemeyen Brillouin Bölge,yüksek simetri noktaları, üçüncü bölümde hesaplanan temel özellikler; Kohesif Enerji, Bulk Modülü, Elastik Sabitler, Tetragonal Shear Modülü, Poisson Oranı, Zener Anizotropi Faktörü, Kleinman parametresi (ξ), Debye Sıcaklığı, dördüncü bölümde bu çalışmanın temelini oluşturan Yoğunluk Fonksiyoneli

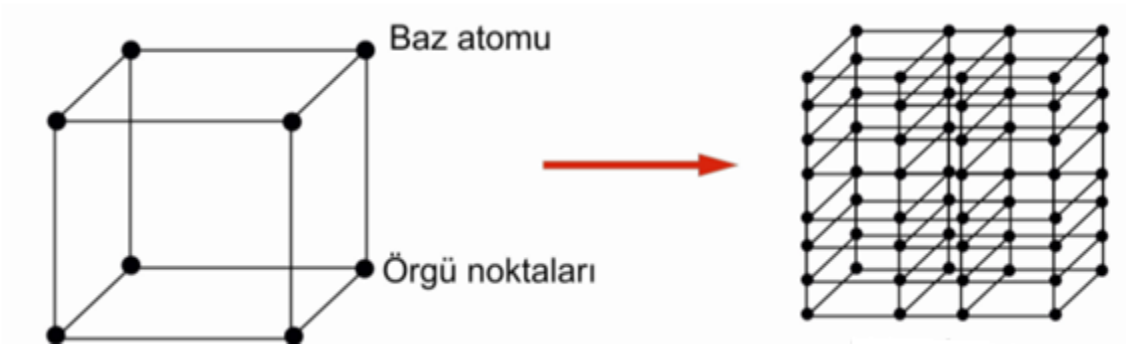
Teorisinin tarihçesi ve dayandığı temel ilkeler açıklandı. Beşinci bölümde bant yapılarını hesaplama yöntemleri, altıncı bölümde, optik özelliklerin genel kavramları ve hesaplama yöntemler, yedinci bölümde X- ışınları Difraksiyonu (Kırınımı) XRD ve Vegards kanunu, sekizinci bölümde ise hesaplanan sonuçlar açıklandı ve tartışıldı.

2. TEMEL VE TEORİK BİLGİLER

Bu bölümde Kristal yapılar, ters örgü vektörleri, Brillouin bölgesi ve yüksek simetri noktaları ile ilgili özet bilgiler verilmiştir.

2.1. Kristal Yapılar

Atomlar üç boyutta, geometrik düzene göre bir araya gelerek kafes oluştururlar, bu birim kafese örgü denir. Kristal yapılar; örgülerin düzenli tekrar etmesiyle oluşurlar, atomlar örgülerde düzenli olarak dizilirler, atomların dizildiği noktalara düğüm noktaları, düğüm noktalarında bulunan atomlara baz atomları denir. Kristal yapı=baz+örgü şeklinde ifade edilir.



Şekil 2.1. (a) Birim hücre (b) Kristal yapı

Kristali oluşturan atomların ortaya çıkardığı olaylardan çok, kristalin geometrik özellikleri daha önemlidir. Bu yüzden her atom, denge konumuna yerleştirilen geometrik bir nokta ile temsil edilir. Bu şekilde meydana gelen noktalar kümesine “uzay örgüsü” veya “Bravais Örgüsü” denir. Bir noktaya karşılık gelen atom veya atom gurubuna “Baz” denir. Periyodik bir yapısı olup bu yapıya kristalin tekrarlanmış birim yapıları yerleştirilmiştir. Böylece kristal ile aynı geometrik özelliklere sahip bir desen elde edilir. Desen üzerinde atomların yerleri belli bir simetriye göre kolay bir şekilde belirlenelir. Örgü ötelemesi böyle bir işlemdir. Bunun dışındaki dönme ve yansıma işlemleri noktasal işlemler olarak ifade edilir, Örgü noktaları etrafında veya paralel prizma içindeki özel noktalar etrafında yapılan dönme ve yansıma işlemleri sonucunda kristali eski konumuna getirmek mümkündür [42]. Pek çok kristalin atomik yapısı yüksek bir simetriye sahip olması ile tanımlanır ve çoğu

zaman Kristal yapılar gösterdikleri simetriye göre sınıflandırılır.Üç boyutlu bir kristal örgü, öteleme vektörleri $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ ile tanımlanır. Atomların dizilişi bir $\vec{r}$ konumunda

$$\vec{r} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \tag{2.1}$$

şeklinde ifade edilir ve n_1, n_2, $n_3$tamsayılardır. Buna göre r konumunda atomdan baktığımızda kristalin görünümü nasıl ise, $\vec{r}'$ konumlu atomdan baktığımızda görünümü de aynı olur ve konum vektörü,

$$\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \tag{2.2}$$

şeklinde ifade edilebilirve n_1, n_2 ve n_3 birer tamsayıdır.

$$r' = \vec{r} + \vec{2}\vec{a} + \vec{b} \text{ dir.} \tag{2.3}$$

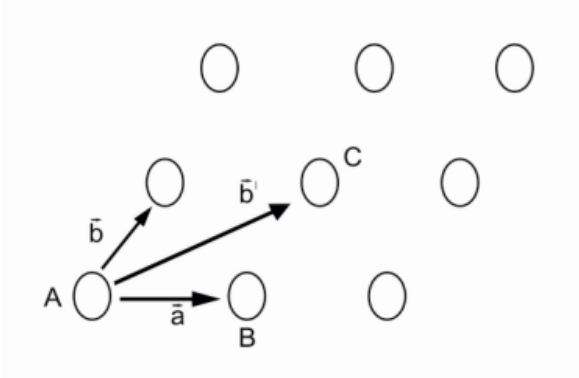
$$T = \vec{2}\vec{a} + \vec{b}$$
(2.4)

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{T} \tag{2.5}$$

Burada $\vec{T}$ öteleme vektörüdür.

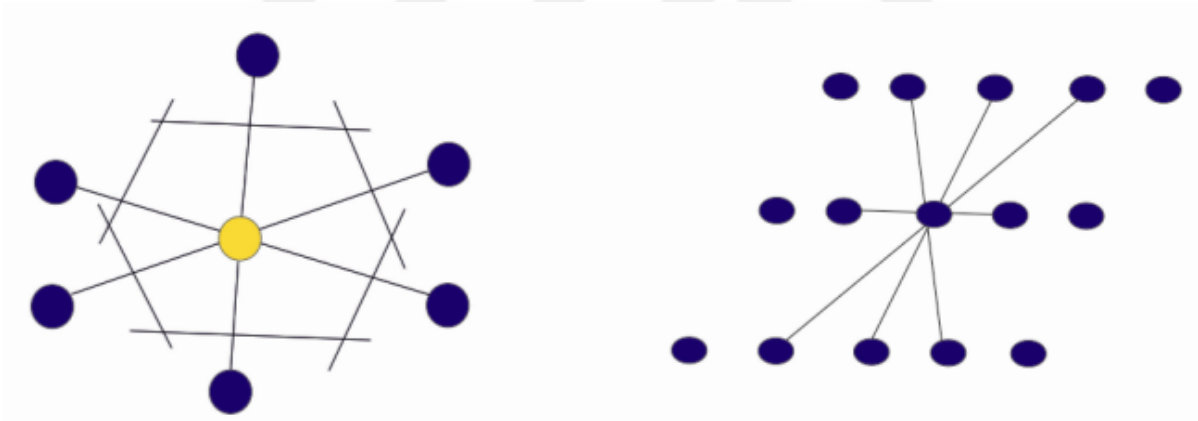
$\vec{a},\vec{b}$ ve $\vec{c}$ ilkel öteleme vektörü ve bunların oluşturacağı paralelkenar ise birim hücredir. Bir başka ifadeyle, herhangi iki $\vec{r}$ $veya$ $\vec{r}'$ noktasından bakıldığında atomların dizilişini aynı kılan bir $\{n_1, n_2\ ve\ n_3\}$tamsayı üçlüsü her zaman bulunabiliyorsa $\vec{a},\vec{b}$ ve $\vec{c}$ vektörlerine ilkel öteleme vektörleri adı verilir [29]. Bu vektörlerin oluşturduğu hücrede ilkel hücre denir. İlkel hücrede her zaman bir örgü noktası vardır. Bu hücre en küçük hacme sahiptir ve bu hacim;

$$V = \left|\vec{a}\cdot(\vec{b}x\vec{c})\right| \tag{2.6}$$



Şekil 2.2. İlkel hücre

Bir ilkel hücre türü de Wigner-Seitz hücresidir, şu şekilde ifade edilir. Bir örgü noktası etrafındaki wigner-seitz birim hücresi içerisindeki bir noktanın uzaklığı seçilen örgü noktasına diğer örgü noktalarından daha yakındır. Wigner-Seitz temel birim hücresi temel örgü vektörleriyle öteleme yaptırılırsa tüm uzayı doldururlar ve bu hücre bravais örgünün simetrisini içerir [43].



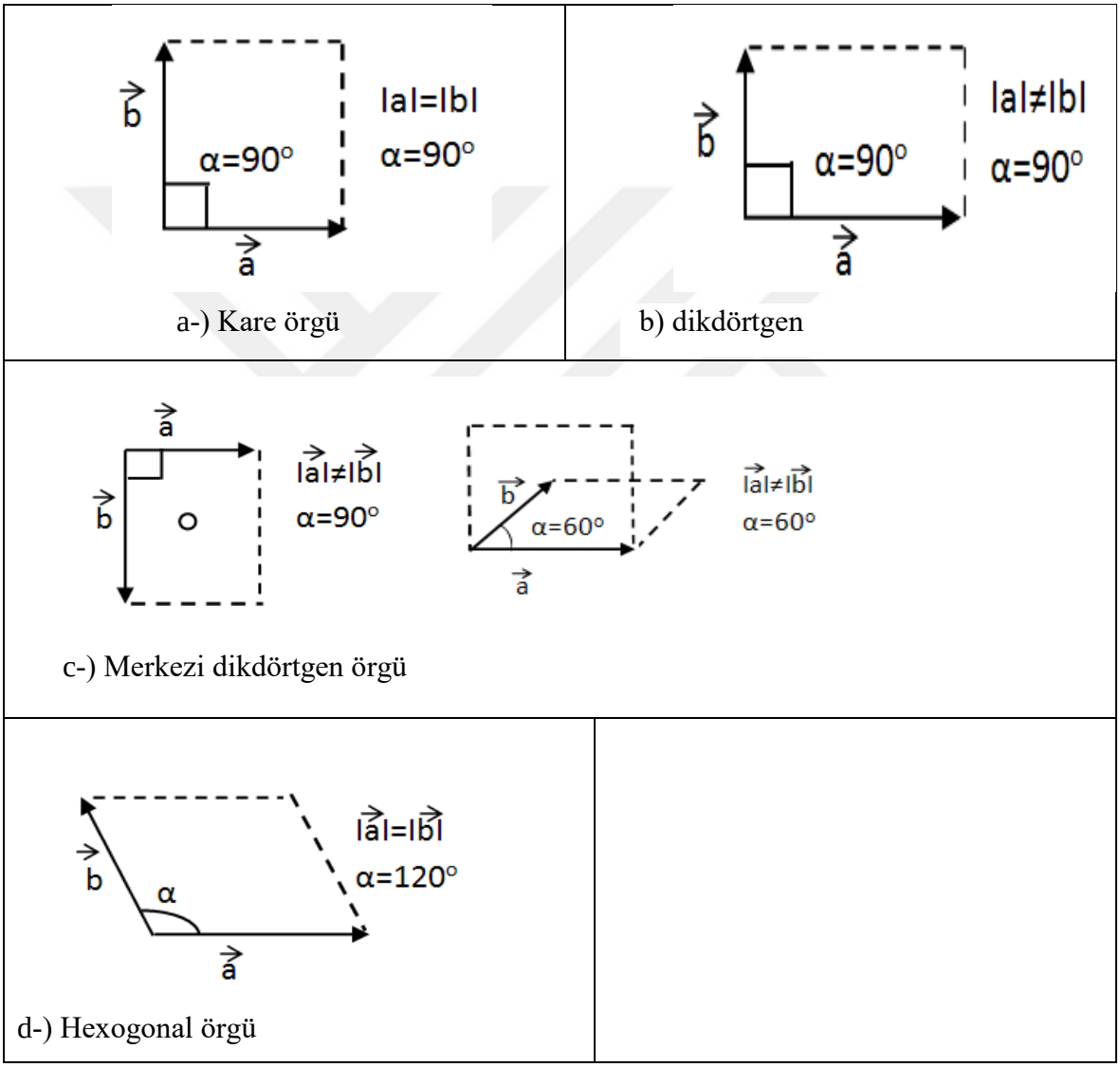
Şekil 2.3. Wigner–Seitz hücresi

2.2. Örgü Çeşitleri

Örgü öteleme vektörlerinin boyları ve aralarındaki açının değerlerinde kısıtlama olmadığı takdirde olabilecek örgü türü sayısı sınırsızdır. Belirli kısıtlamalar sonucu elde edilen örgü türlerine Bravais örgüleri adı verilir.Bravais örgünün başka bir özelliği de bütün örgü noktalarının eşdeğer olmasıdır. Dolayısı ile bütün atomlar aynı cinstir. Bravais olmayan örgüde, örgü noktalarının bir kısmı eşdeğer bir kısmı eşdeğer değildir [43].

2.2.1. İki boyutlu örgü türleri

- Kare örgü
- Dikdörtgen örgü
- Merkezi dikdörtgen örgü
- Hexogonal örgü

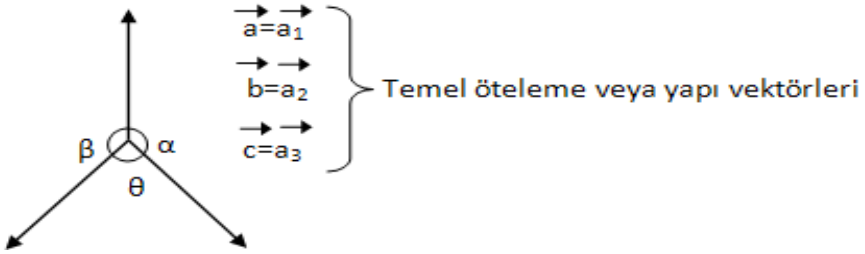


Şekil 2.4. İki boyutlu Kristal örgü çeşitleri [42]

2.2.2. Üç boyutlu örgü türleri

Bir birim hücrenin geometrisi, iki farklı parametrenin verilmesi ile tarif edilir. Bu vektörlerin uzunlukları ile aralarındaki açılar belirli bir kristalin özelliklerini ortaya

koyarlar. Vektörlerin uzunluklarının bir birine eşit ya da eşit olmama durumları ve aralarındaki açılar düşünülürse, birbirinden farklı 14 değişik örgü ortaya çıkar. Bu örgüler Bravais örgüleri olarak adlandırılır.



Şekil 2.5. x, y, z koordinat eksenlerine sahip bir birim hücrenin, örgü parametrelerini (kenar uzunlukları ve eksenler arası açılar) gösterilmektedir

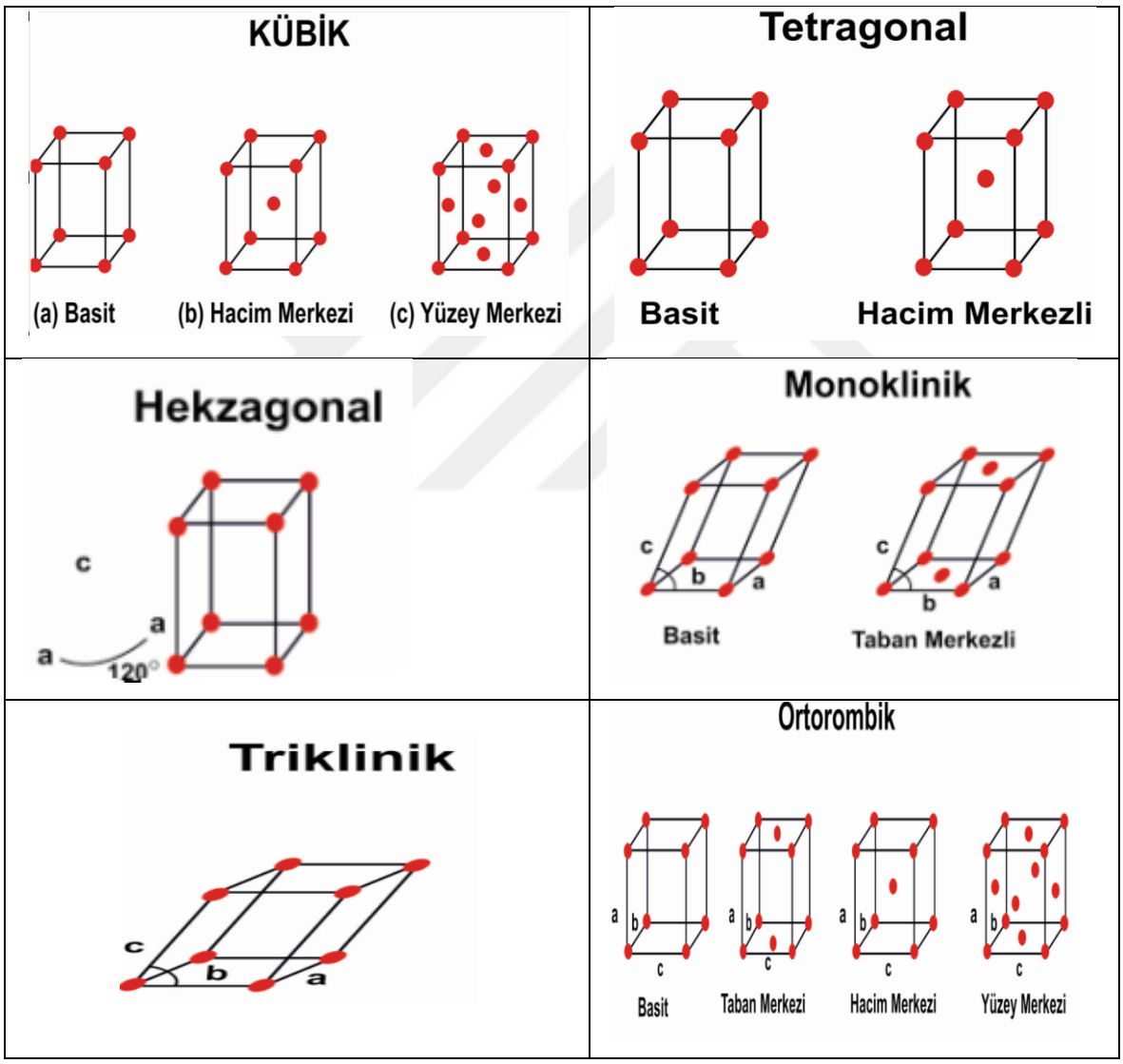
Örgü parametrelerinin farklı kombinasyonları sonucu ortaya çıkan ve farklıgeometrik şekillere sahip kristal sistemleri, kübik, hegxogonal, tetragonal, rombohedral, ortorombik, monoklinik ve triklinik olmak üzere yedi adet kristal sistemi vardır. Yedi kristal sistemine ait toplam 14 farklı kristal örgü geometrisi bulunmaktadır. Çizelge 2.1'de bu kristal sistemlerinin örgü parametreleri ve açılar arasındaki ilişkiler gösterilmektedir [42].

Çizelge 2.1. Yedi Kristal Sistemi ve Bravais Örgüleri [42]

Sistem	Eksen Uzunlukları ve Açılar	Bravais Örgüsü
Kübik	Üçü eşit, birbirine dik üç eksen a= b = c, $\alpha = \beta = \theta = 90^0$	Basit (P)Cisim merkezli (I)Yüzey merkezli (I)
Tetragonal	İkisi eşit olan birbirine dik üç eksen $a = b \neq c$,$\alpha = \beta = \theta = 90^0$	Basit (P)Cisim merkezli (I)
Ortorombik	Birbirine dik eşit olmayan dik üç eksen $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \theta = 90^0$	Basit (P)Taban merkezli (C)Cisim merkezli (I)Yüzey merkezli (I)
Rombohedral	Eksenler eşit, aralarındaki açılar birbirinden farklı, a = b = c, $\alpha = \beta \neq \theta = 90^0$	Basit (P)
Hekzagonal	Aralarındaki açı 120^0 olan iki eşit eksen ve üçüncü eksen ilk ikisinin düzlemine dika = $b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^{0,}$ $\theta = 120^0$	Basit (P)
Monoklinik	üç eksen birbirine eşit değil, eksenlerden ikisi birbirine dik, diğeri dik değil a $\neq b \neq c$ $\alpha = \theta = 90^0 \neq \beta$	Basit (P)Taban merkezli (C)
Triklinik	Birbirine eşit olmayan üç eksen ve aralarındaki farklı açılar ve birbirine dik olmayan eksenlera $\neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \theta \neq 90^0$	Basit (P)

Bu çizelgede;

- Basit örgüde sadece köşelerde örgü noktaları vardır.
- Cisim merkezli örgü de, örgü noktalarına ilave olarak hücrenin merkezinde bir örgü noktası vardır,
- Yüz merkezli örgü de, örgü köşelerindekilere ilave olarak hücrenin her yüzünün merkezinde bir tane olmak üzere altı örgü noktası vardır.



Şekil 2.6. Üç boyutlu Kristal örgü çeşitleri [42]

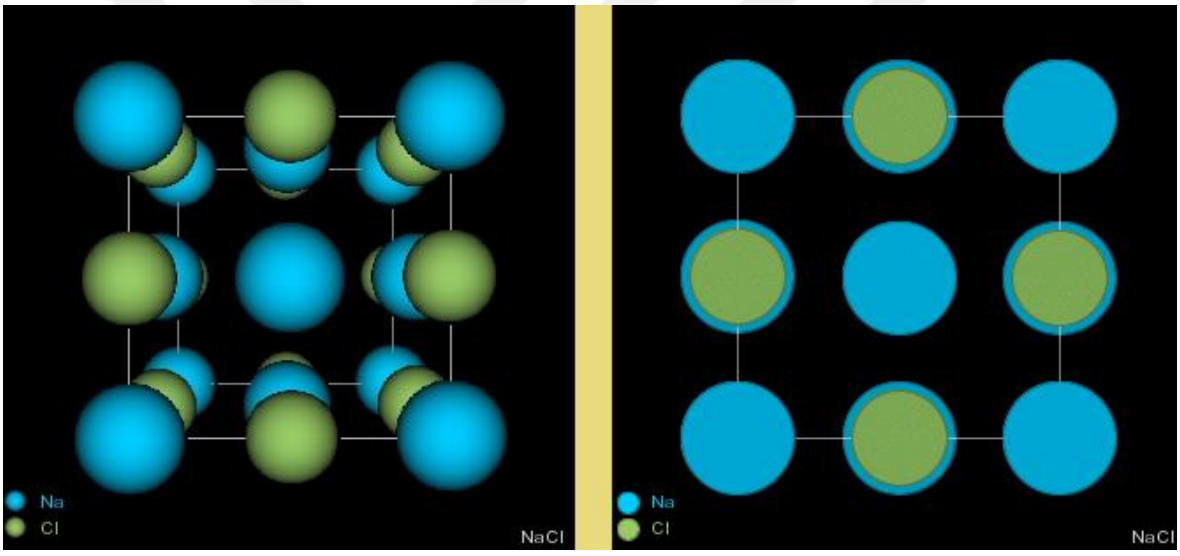
2.3. Basit Kristal Yapılar

2.3.1. Sodyum klorür yapı

Bu yapıya örnek bileşikler AgCl, BaS, MgO, NaBr ve CeSe dir. Örgü yüzey merkezli kübik olup, atomik koordinatlar

Na0, 00 0, 00 0, 00
Cl 0, 50 0, 50 0, 50

şeklindedir [44].



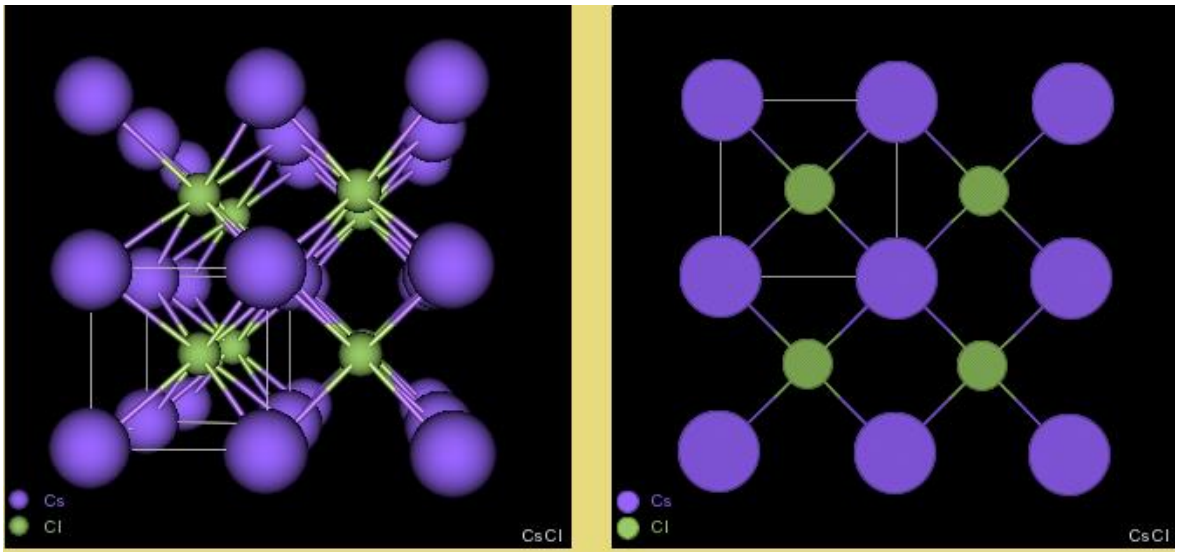
Şekil 2.7. Sodyum klorür yapı

2.3.2. Sezyum klorür yapı

Uzay örgüsü basit kübik olup, bu yapıya örnek bileşikler CsBr, CsI, RbCl, AlCo, AgZn, BeCu, MgCe, RuAl ve SrTl dir ve atomik koordinatlar

Cs 0,00 0,00 0,00
Cl 0,50 0,50 0,50

şeklindedir [44].



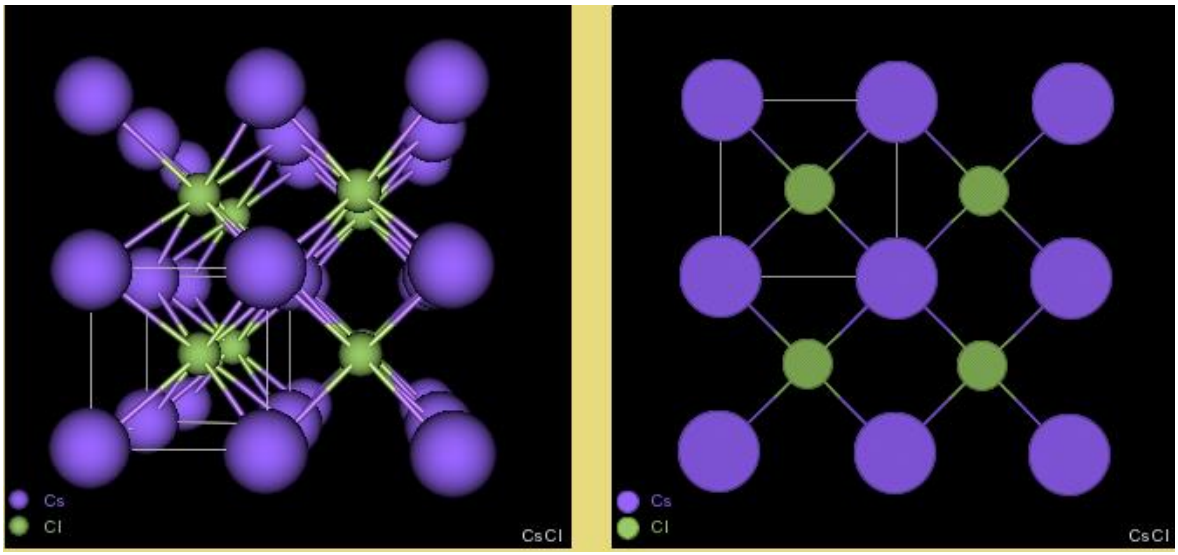
Şekil 2.8. Sezyum klorür yapı

2.3.3. Zinc blende yapı

Uzay örgüsü yüzey merkezli kübik olup, örnek bileşikler ZnS, BeS, BeSe, BeTe, BAs, BN, BP, GaAs ve GaP dirve atomik koordinatlar

Zn 0,00 0,00 0,00
S 0,25 0,25 0,25

Şeklindedir [44].



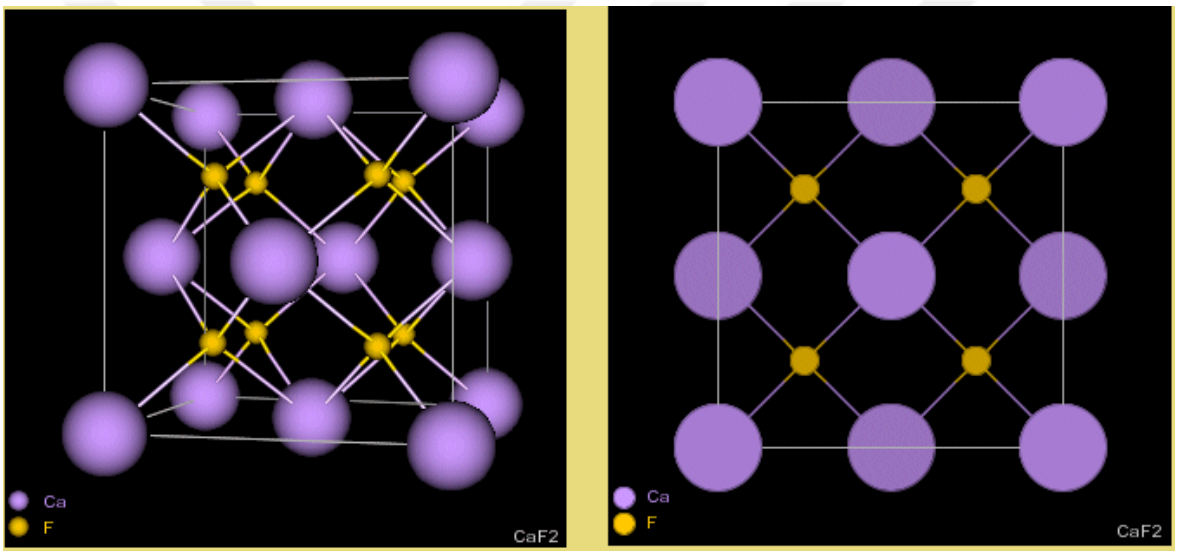
Şekil 2.9. Zinc-Blende yapı

2.3.4. Florit yapı

Uzay örgüsü yüzey merkezli kübik olup, örnek bileşikler BaF_2, CaF_2, ZrO_2 ve $PtAl_2$dir ve Atomik koordinatlar

Ca 0,00 0,00 0,00
F 0.,25 0,25 0,25
F 0,75 0,75 0,75

şeklindedir [44].



Şekil 2.10. Florit yapı

2.4. Miller İndisleri ve Ters Örgü Vektörleri

Kristal yapılar her doğrultuda ve düzlemde farklı özellik gösterirler. Bu nedenle, kristal yapı analizleri için her düzlem, indisler ile tanımlanmaktadır. Bu indilere Miller indisleri denir ve h, k, l ile gösterilir [42].

Bütün kristallerde yapısına bağlı olarak iki örgü vardır: kristal örgüsü ve ters örgü. Ters örgü, örgü periyodikliği ile birlikte verilen Fourier serisi ve Fourier dönüşümlerinin, izin verilen dalga vektörü değerlerini temsil eder [29]. Bu dönüşüm;

$$f(\vec{r}) = \int d^3k f(\vec{k}) \frac{\exp(i\vec{k}\vec{x})}{\sqrt{2\pi}} \tag{2.7}$$

olarak ifade edilir ve burada $f(\vec{k})$, $f(\vec{r})$ 'nin Fourier dönüşümüdür. Eşitlik 2.6 herhangi bir $\vec{T}$ örgü ötelemesi altında yazılır ise;

$$f(\vec{r}+\vec{T}) = \int d^3k f(\vec{k}) \frac{\exp(i\vec{k}(\vec{r}+\vec{T}))}{\sqrt{2\pi}} \tag{2.8}$$

şeklinde olur. Örgünün bir öteleme durumunda değişmez kalması gerektiğinden Eşitlik 2.6 ve 2.7'nin eşit olması gerekir. Bunun için $\exp(i\vec{k}\vec{T}) = 1$ sınırlaması getirilir. Bu sınırlandırma ile sadece belli bir $\vec{k}$ vektörüne izin verilmektedir. Sınırlandırmayı sağlayan vektörler ise $\vec{k} \cdot \vec{T} = 2\pi n$ olmalıdır. Sonuç olarak $\vec{k}$ vektörü ters örgü vektörüdür ve $\vec{G}$;

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \tag{2.9}$$

ile temsil edilir. Burada h, k, l tamsayılardır ve $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ ters örgü vektörleridir. $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vektörleri cinsinden ters örgü vektörleri;

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)},\ \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)},\ \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \tag{2.10}$$

şeklinde verilir. Eşitlik 2.8'de ki ifadelerin paydaları birim hücrenin hacmidir ve normalizasyon sabiti olarak etki eder. Ters örgü vektörlerinin boyutu [1/uzunluk] tur.

2.5. Brillouin Bölgesi ve İndirgenemeyen Brillouin Bölge

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \tag{2.11}$$

Bir Brillouin bölgesi (BZ) ters örgüde Wigner-Seitz ilkel hücresi olarak tanımlanır. Brillouin bölgesi sınırlarında Bragg saçılma şartı sağlanmalıdır. Eğer saçılma vektörü ters örgü vektörlerinden birine eşitse;

ya da

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} \tag{2.12}$$

olarak ifade edilebilir. Burada $\vec{G}$ ters örgü vektörü, $\vec{k}'$ saçılan dalga vektörüdür. Bir fotonun elastik saçılmasında enerji korunumlu olduğundan $\vec{k} = \vec{k}'$ olur. Kırınım koşulunu elde etmek için Eşitlik 2.10' nun karesi alınırsa;

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2 \tag{2.13}$$

olur. Eşitlik 2.11 periyodik bir örgüden elastik saçılma teorisinin temel sonucudur. İndirgenemeyen Brillouin bölgesinde (IBZ) ise alınan integraller, sadece BZ üzerinden alına integrallerle yer değiştirebilir. Örnek vermek gerekirse, toplam enerji için gerekli olan toplam ifadeleri;

$$\bar{f}_i = \frac{1}{N_k} \sum_k f_i(\mathbf{k}) \tag{2.14}$$

$$\bar{f}_i = \sum_k^{IBZ} w_k \, f_i(\mathbf{k}) \tag{2.15}$$

Şeklinde ifade edilir. Yoğunluk ise;

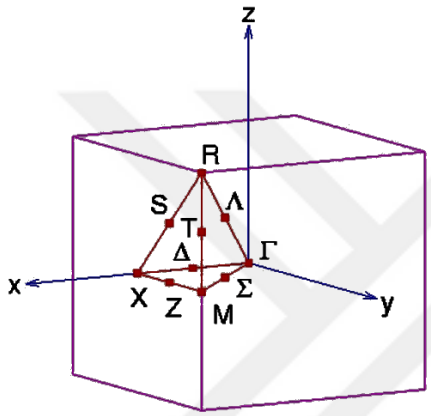
$$n(r) = \frac{1}{N_k} \sum_k n_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_{grup}} \sum_{R_n} \sum_k^{IBZ} w_k \, n_k \left(R_n \, r + t_n \right) \tag{2.16}$$

eşitliği ile temsil edilir. Hesapları basitleştirmek için simetri işlemleri kullanılabilir. Örneğin, kübik kristallere uygulanan Monkhorst-Pack "mesh" lerinde 48 tane simetri işlemi vardır ve dolayısıyla IBZ, toplam BZ'nin 1/48'i olur. Örneğin, N_i=2 ile tanımlanan bir set göz önüne alınırsa BZ'u içinde 2^3 = 8 tane nokta vardır ve bu IBZ'u içinde 1 tek noktaya indirgenir. Buna benzer olarak BZ içinde N_i= 4 için 4^3 = 64 nokta olur. Bu da IBZ içinde 2'ye inecektir. N_i = 6 için 6^3 = 216 ve BZ'unda ki nokta sayısı IBZ'unda 10 olacaktır. Örnek olarak, fcc için 2 nokta seti ($2\pi/a$) (1/4, 1/4, 1/4) ve ($2\pi/a$) (1/4, 1/4, 3/4) olarak alındığında özellikle yarıiletkenler için enerji değerlerini doğru olarak verdiği

görülmüştür. 10 nokta setinin birçok malzeme özelliği hesabında yeterli olduğu görülmüştür [43].

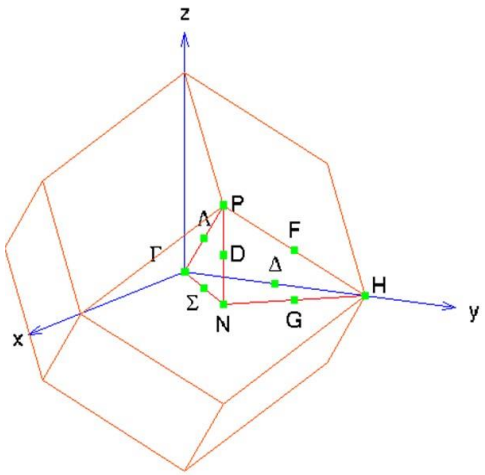
2.6. Yüksek Simetri Noktaları

Basit kübik yapı için yüksek simetri noktaları Şekil 2,11'de gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde Γ (0.0.0), X (1/2,0,0), M (1/2,1/2,0),R(1/2,1/2,1/2), Δ (1/4,0,0) Σ (1/4,1/4,0) şeklindedir [38,45].



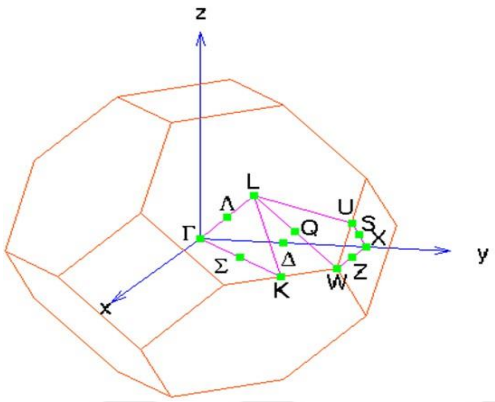
Şekil 2.11. Basit kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları

Birinci Brillouin bölgesinde cisim merkezli kübik örgü için yüksek simetri noktaları Şekil 2.12'de gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde Γ (0,0,0), H (1/2,-1/2,1/2), P (1/4,1/4,1/4), N (0,0,1/2), Δ (1/4,-1/4,1/4) şeklindedir [38,45].



Şekil 2.12. Cisim merkezli kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları

Şekil 2.13'de yüzey merkezli kübik örgü için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde Γ (0.0.0), X (1/2,1/2,0), L (1/2,1/2,1/2), W (3/4,1/2,1/4), Δ (1/4,1/4,0), Σ (1/4,1/4,1/4) şeklindedir [38,45].



Şekil 2.13. Cisim merkezli kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktaları. Bu aynı zamanda gerçek uzayda cisim merkezli kübik örgünün Wigner-Seitz hücresidir

3. TEMEL ÖZELLİKLER

3.1. Kohesif Enerji

Kristali meydana getiren atomları, sonsuz uzaklıkta, nötr, hareketsiz ve serbest hale getirebilmek için kristale verilmesi gereken enerjiye *kohesif enerji* denir. Denge konumunda (r_0), potansiyel enerji çukurundaki minimum enerjinin derinlik değeridir. Bu değer, kararlı haldeki kristaldeki atomlardan herhangi birini söküp serbest hale kalabilmesi için yapılan iş' tir. Kohesif enerji,

$$E_{coh}^{AB} = \left[E_{atom}^{A} + E_{atom}^{B} - E_{top}^{AB}\right] \tag{3.1}$$

eşitliği kullanılarak hesaplanır. Burada E_{top}^{AB} sistemin toplam enerjisi E_{atom}^{A} ve E_{atom}^{B} ise sistemi oluşturan atomların birbirinden sonsuz uzakta oldukları zamanki enerjidir. Kohesif enerjiyi doğru bir şekilde hesaplayabilmek için çoğu kez, spin etkileşmelerini göz önüne almak gerekmektedir [46].

3.2. Bulk Modülü

Bulk modülü, bir malzemenin düzgün bir basınç altında sıkıştırılması sırasında hacimde oluşacak değişime karşı gösterdiği direncin bir ölçüsü olarak önemli bir fiziksel parametredir. Bir kristalin bulk modülü,

$$B = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = \frac{1}{X} \tag{3.2}$$

eşitliği ile tanımlanır. Burada X sıkışabilirlik, P basınç ve V hacmi temsil eder.Bilindiği üzere mutlak sıfırda entropi sabit olduğundan, bulk modülü

$$\partial\phi = -P\partial V \tag{3.3}$$

tanımına göre,

$$\frac{\partial P}{\partial V} = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2} \qquad (3.4)$$

veya

$$B = V\frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2} \qquad (3.5)$$

olarak verilir. Bulk modülü ile kristal yapının sertliği doğrudan ilişkili olduğundan basınçla değişimi (B') önemli bir parametredir [47].

3.3. Elastik Sabitler

Elastik sabitleri,birim yüzeye uygulanan kuvvet, zor (stres) tensörü ile kristalin yapısında oluşan değişme, zorlanma (strain) matrisi ile ifade edilir. Bu matrisler bir biriyle orantılıdır ve bu orantı katsayısına elastik sabiti denir. Kristalin önemli mekanik özellikleri bu sabitlere bağlıdır.

Kristalin elastik sabiti, kristale stress uygulandığında; kristalin verdiği tepkinin (zorlanma) ölçüsüdür. Elastik sabitler için, zor da üç gerilme ve zorlanma da üç kayma olmak üzere toplam altı bileşene sahiptir. Lineer elastik sabitler 6x6 simetrik matris formunda

$$\sigma_i = c_{ij}\varepsilon_j \qquad (3.6)$$

ε, zor ve σ, küçük zorlanmalar olmak üzre yirmi yedi bileşene sahiptirler [48]. Elastik sabitler, kristalde bulunan en yakın atomlar arasındaki bağ şiddetleri hakkında önemli bilgi verir. Elastik sabitleri, doğru hesaplanırsa, kristalin mekaniksel özelliklerinin belirlenmesinde oldukça önemli olur.

Kristalde tersinir bir deformasyon meydana geldiğinde, enerji korunumlu olduğundan, uygulanan bir zorun yaptığı iş, kristalin iç enerji artışına eşit olmalıdır. Bu durum Einestein'ın "toplam kuralı" na dayanarak

$$dW = \sigma_{ij}\, d\varepsilon_{ij} = dU \equiv \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{IJ}}\, d\varepsilon_{ij} \tag{3.7}$$

eşitliği ile ifade edilebilir. Buradan da

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}} \tag{3.8}$$

olduğu görülür. Zor tensörü σ_{ij}'de ki *i* indisi kuvvetin yönünü, *j* indisi ise uygulandığı yüzeyi gösterir. Zorun büyüklüğü uygulanan kuvvetin yüzey alanına oranıdır. Zor tensörünün diagonal elemanları kristali germe ya da sıkıştırma eğilimindedir. Bu diagonalelemanlar germe eğiliminde ise pozitif, sıkıştırma eğiliminde ise negatif olur. Katıdaki deformasyonlar zorlanma matrisi ile tanımlanır. Numuneye bir zor uygulandığında kristal $r' = r + u$ kadar hareket eder. Eştlik 3.7 ile verilen ifadeyi $\boldsymbol{\varepsilon_{kl}}$, ye göre türevalınıp, Eşitlik 3.9'dan elde edilen σ_{ij} yerine konulursa

$$c_{ijkl} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{kl}\, \partial \varepsilon_{ij}} \tag{3.9}$$

eşitliği elde edilir. Burada *c* esneklik tensörüdür ve 81 elemana sahiptir. Ancak zor ve zorlanma tensörlerinin simetrisinden dolayı indisler birbirlerinin yerini alabilir ve $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk}$ yazılabilir; bu sayede *c*'nin bağımsız bileşen sayısı 36'ya düşer. Buna ilaveten, elastik deformasyon sırasında yapılan iş, yalnızca zorun fonksiyonu olduğundan ve alınan mesafeden bağımsız olduğundan,

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{ij}\, \partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{kl}\, \partial \varepsilon_{ij}} \tag{3.10}$$

şeklinde kısmi türevli olarak yazılabilir. Bu sonuç, Eştlik 3.10'da göz önüne alınırsa $c_{ijkl} = c_{klij}$ olacağını gösterir. Bu da *c*'nin bağımsız bileşen sayısını 21'e düşürür. Bu bileşenler genelde kısaca 6x6' lık $c_{\alpha\beta}$ matrisi şeklinde gösterilir. $c_{\alpha\beta}$ ile c_{ijkl}arasındaki ilişkiler Çizelge 3.1'de verilmiştir;

Çizelge 3.1. $c_{\alpha\beta}$ ve c_{ijkl}'nın indisleri arasındaki Voig bağıntıları

Tensör notasyon (ij veya kl)	11	22	33	23 veya 32	13 veya 31	12 veya 21
Matris notasyon (α veya β)	1	2	3	4	5	6

Çizelge 3.1'e bakıldığında, örneğin C_{1112} yerine C_{16} alınabilir. Bu ilişkilerden Eştlik 3.10;

$$\sigma_\alpha = \sum_{\beta-1}^{6} c_{\alpha\beta}\,\varepsilon_\beta \tag{3.11}$$

Formunda yazılabilir. Burada,

$$\sigma_\alpha = \sigma_{ij} \tag{3.12}$$

$$\varepsilon_\beta = \begin{cases} \varepsilon_{kl}, & \beta \in \{1,2,3\}; \\ 2\varepsilon_{kl}, & \beta \in \{4,5,6\}. \end{cases} \tag{3.13}$$

Bağıntıları geçerlidir. Sistemin simetrisine bağlı olarak, $c_{\alpha\beta}$'nın bağımsız bileşen sayısı azalır. Örneğin kübik kristaller için sadece üç tane

$$\begin{aligned} &c_{11} \equiv c_{22} \equiv c_{33}, \\ &c_{12} \equiv c_{13} \equiv c_{23}, \\ &c_{44} \equiv c_{55} \equiv c_{66}, \end{aligned} \tag{3.14}$$

diğerleri için $c_{\alpha\beta} \equiv 0$, bağımsız elastik sabiti olabilir [49]. Bundan dolayı kübik kristallerin esneklik özelliklerini belirlemek için üç elastik sabiti (c_{11}, c_{12}, c_{44}) yeterlidir. Bu simetriye göre $c_{\alpha\beta}$matrisinin özdeğerleri

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= c_{11} + 2c_{12}, \\ \lambda_2 &= c_{11} - c_{12}, \\ \lambda_3 &= c_{44} \end{aligned} \tag{3.15}$$

özvektörleri de;

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}_1 &= (\varepsilon_1, \varepsilon_1, \varepsilon_1, 0, 0, 0),\\ \boldsymbol{\varepsilon}_2 &= (\varepsilon_2, \varepsilon_3, -\varepsilon_2 - \varepsilon_3, 0, 0, 0),\\ \boldsymbol{\varepsilon}_3 &= (0, 0, 0, 2\varepsilon_4, 2\varepsilon_5, 2\varepsilon_6).\end{aligned} \tag{3.16}$$

eşitlikleriyle ifade edilir. Kararlı bir kristalin mekaniksel olarak kararlılık şartlarını sağlaması gerekir. Elastik sabitlerin pozitif olması gerekir. Bu şartlar Born kararlılık kriteri olarak bilinir ve kristal yapılar için,Çizelge 3.2' de verilmiştir olmalıdır [46,50,51].

Çizelge 3.2. Kristal simetrilerine göre Born mekanik kararlılık kriterleri

Kristal Simetri	Born kararlılık kriterleri
Kübik	$C_{11}>0$, $C_{12}>0$, $C_{44}>0$, $C_{12}>C_{44}$, $C_{11}+2C_{12}>0$, $C_{11}-C_{12}>0$
Hekzagonal	$C_{11}>0$, $C_{11}-C_{12}>0$, $C_{44}>0$, ve $(C_{11}+C_{12})C_{33}-2C_{12}^2>0$
Tetragonal	$C_{ii}>0$ (i=1, 3, 4, 6), $C_{11}-C_{12}>0$, $C_{11}-2C_{13}+C_{33}>0$, $2C_{11}+2C_{12}+4C_{13}+C_{33}>0$
Trigonal	$C_{11}-\lvert C_{12}\rvert>0$, $(C_{11}+C_{12})C_{33}-2C_{13}^2>0$, $(C_{11}-C_{12})C_{44}-2C_{14}^2>0$.
Ortorombik	$C_{ii}>0$ (i=1–6), $(C_{11}+C_{12}-2C_{12}>0)$, $(C_{11}+C_{33}-2C_{13}>0)$, $(C_{22}+C_{33}-2C_{23}>0)$
Monoklinik	$C_{ii}>0$ (i=1–6), $[C_{11}+C_{22}+C_{33}+2(C_{12}+C_{13}+C_{23})]>0$, $(C_{33}C_{55}-C_{35}^2)>0$, $(C_{44}C_{66}-C_{46}^2)>0$, $(C_{22}+C_{33}-2C_{23})>0$.

Elastik özellikler günümüzde, ab-initio metotlarla hem normal şartlarda hem de çeşitli basınç ve sıcaklıklarda hesaplanabilmektedir.

Bu çalışmada bileşiklerin ve alaşımların elastik sabitlerinin hesaplanmasında hacim-korunumlu (volume conserving) methot kullanılmıştır. Bu yöntemde, kristalin birim hücresinin hacmini korumak şartıyla belirli ve küçük bir deformasyon oluşturularak enerjideki değişim elde edilir ve bu enerji yardımı ile elastik sabitler hesaplanır. Bu yöntemin özeti aşağıda verilmiştir;

Bir zorlanma uygulanan kristalin yukarda bahsedilen enerjisi

$$\Delta E = E_{top} - E_0 = \frac{V}{2}\sum_{i=1}^{6}\sum_{j=6}^{6} C_{ij} e_i e_j \tag{3.17}$$

eşitliğiyle ifade edilir [52-53]. Burada V, birim hücrenin zorlanma uygulanmadan önce ki deformasyona uğramamış hacim; C, elastik sabitleri matrisi. ΔE, ise e=(e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6) zorlanmadan kaynaklanan enerji farkıdır. Kübik bir kristalde C_{11}, C_{12}, C_{44} olmak üzere üç tane bağımsız elastik sabit vardır. Fcc yapı için ilkel hücre vektörleri,

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 & a/2 \\ a/2 & a/2 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.18}$$

matrisi ile tanımlanır. Burada a örgü sabitini temsil eder. İlkel hücre vektörleri $a_i(1,.....,3)$ bir zorlanma altında

$$\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} * (I + \varepsilon) \tag{3.19}$$

şeklinde ifade edilen a_1, a_2 ve a_3 vektörleri ile yer değiştirir. Burada I birim matrisi, ε ise

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} e_1 & e_6/2 & e_5/2 \\ e_6/2 & e_2 & e_4/2 \\ e_5/2 & e_4/2 & e_3 \end{pmatrix} \tag{3.20}$$

eşitliği ile ifade edilen matris strain matrisini gösterir. Yapıya ortorombik bir strain $e = (\delta, \delta, (1+\delta)^{-2} - 1, 0, 0, 0)$ uygulandığında

$$\frac{\Delta E}{V} = 6C'\delta^2 + O(\delta^3) \tag{3.21}$$

şeklinde ifade edilir.

Buna benzer olarak bir tri-axial shear straini $e = (0,0,0,\delta,\delta,\delta)$ uygulandığı zaman

$$\frac{\Delta E}{V} = \frac{3}{2} C_{44}\delta^2 \tag{3.22}$$

eşitliğinden C_{44} hesaplanabilir. Sabit bir basınç altında bulk modülünü (B) hesaplamak için yapıya $(\delta,\delta,\delta,0,0,0)$ zorlanması uygulanarak

$$\frac{\Delta E}{V}=\frac{9}{2}B\delta^2 \tag{3.23}$$

eşitliği kullanılır. Buradan

$$C_{11}=\frac{3B-4C'}{3} \tag{3.24}$$

$$C_{12}=\frac{3B-2C'}{3} \tag{3.25}$$

$G=\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$ Shear modülüdür. Eşitlik 3.24 ile birlikte $B=\frac{1}{3}(C_{11}+2C_{12})$ eşitliği de kullanılarakC_{11} ve C_{12}hesaplanır. Bundan başka hacmi koruyan strain matrisleriyle de elastik sabitler hesaplanabilir [54-55].

Bahsedilen bu teoriyi uygularken, farklı strainlere (δ) (0,01, 0,02, 0,03 ….) karşılık gelen $\frac{\Delta E}{V}$ değişimi hesaplanır. Pratikte, bu değişimin δ^2 göre grafiği çizilir. Bu grafikten yola çıkılarak doğrunun eğimi ve yukarıda verilen eşitlikler kullanılarak elastik sabitler hesaplanır.

3.4. Tetragonal Shear Modülü

Tetragonal Shear Modülü**,** bir kristalin hacmini değiştirmeden tetragonal shearzorlanması (strain) uygulandığında kristalin gösterdiği tepkinin bir ölçüsüdür. Tetragonal kayma modülünü elde etmek üzere

$$\varepsilon=(-\gamma_2/2,-\gamma_2/2,\gamma_2,0,0,0), \tag{3.26}$$

gibi bir zorlanma seçilip yukarıdakilere benzer işlemler yapılırsa

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \gamma_2^2} = \frac{c_{11} - c_{12}}{6} = \frac{G}{3}, \tag{3.27}$$

ifadesi elde edilir. Buradaki $G = ½ (c_{11} + c_{12})$ ifadesine tetragonal kayma modülüdür [55].

3.5. Poisson Oranı

Poisson oranı, bir kristalin yanal deformasyonunun eksensel deformasyonuna oranıdır. Poisson oranı, aynı zamında sıkışabilirlik ölçüsüdür v,1/2 ye yaklaşırken, malzeme sıkıştırılamamazlık eğilimi gösterir. Poisson oranı v = 1/2 iken malzeme neredeyse sıkıştırılamaz. Poission oranı esneklik içinde kullanılabilir. Malzemenin Poission oranı v>1/3 için esnek olarak, v<1/3 için ise kırılgan olarak davranabilir [56]. Poisson oranı (v) = 0,25 ve (v)= 0,5 değerleri katılarda merkezi kuvvetin alt ve üst sınırlarıdır [57].

$$v = \frac{1}{2}\left[\frac{(B - \frac{2}{3}G)}{(B + \frac{1}{3}G)}\right] \tag{3.28}$$

ifadesinden hesaplanabilir. Burada B bulk modülünü, G ise trigonal shear modülünü temsil eder.

3.6. Young Modülü

Young modülü, malzemeye bir gerilme kuvveti uygulanması halinde oluşan *zor / zorlanma* (stres/strain) oranı olarak tanımlanır Bulk modülü ve Poisson oranının hesaplanan değerlerinden (Y = 3B (1- 2 v)) hesaplanabileceği gibi

$$Y = \frac{9GB}{G + 3B} \tag{3.29}$$

eşitliği ile de hesaplanabilir [38].

3.7. Zener Anizotropi Faktörü

Zener Anizotropi Faktörü, elastik anizotropluk derecesinin bir ölçüsüdür. Madde elastik olarak izotropik ise Zener Anizotropi faktörünün değeri bir, değilse birden farklı olur. Kübik bir yapı için elastik sabitleri cinsinden

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \tag{3.30}$$

şeklindeifade edilir [46].

3.8. Kleinman Parametresi (ξ)

İç gerilme parametresi olarak adlandırılan Kleinman parametresi ξ önemli bir parametredir [58] ve maksimum gerilmelerle ilgilidir. ξ =0 ise, şekli bozulmuş dört yüzlüde atom merkezde kalır. ξ =1 ise yalnızca bağ bükülmesi görülür [59].Aşağıdaki eşitlikle hesaplanır.

$$\xi = \frac{C_{11} + 8C_{12}}{7C_{11} + 2C_{12}} \tag{3.31}$$

3.9. Debye Sıcaklığı

Debye sıcaklığı; kristalin en yüksek titreşim modunun sıcaklığıdır ve θ_D ile gösterilir. Elastik sabitler ve erime sıcaklığı ile ilgili önemli bir temel fiziksel özelliktir. Katıları yüksek ve düşük sıcaklık bölgelerine göre sınıflandırmada kullanılır. Katının sıcaklığı T Debye sıcaklığı θ_D olmak üzere, $T > \theta_D$ iken bütün modların $k_\beta T$ enerjisine sahip olduğunu, fonon titreşimlerinin dalga boylarını küçük olduğunu, $T < \theta_D$ iken dalga boylarının büyük olduğu söylenir. Akustik titreşimlerden dolayı düşük sıcaklıklarda titreşimsel uyarılma olur ve bu sayede düşük sıcaklıklarda Debye sıcaklığı elastik sabitlerden elde edilebilir. Yani düşük sıcaklılarda fonon eğrisinde akustik titreşimlerin eğimi ses hızını verir buradan da elastik sabitler elde edilerek Debye sıcaklığı hesaplanır. Bu ilişkiden Debye sıcaklığının hesaplanması [60-61].

$$\theta_D = \frac{h}{k}\left[\frac{3n}{4\pi}\left(\frac{N_A\,\rho}{M}\right)\right]^{1/3} \nu_m \tag{3.32}$$

eşitliği ile mümkün olur. Burada, *h*Planck sabiti, *k* Boltzmann sabiti, N_A Avogadro sayısı, *M* moleküler ağırlığı, ρ yoğunluğu, *n* moleküldeki atom sayısını ve $\nu_m$ise ortalama ses hızını temsil eder. Ses hızının ortalama değeri

$$\nu_m = \left[\frac{1}{3}\left(\frac{2}{\nu_t^3}+\frac{1}{\nu_l^3}\right)\right]^{-1/3} \tag{3.33}$$

eşitliğinden elde edilir. Burada, ν_l ve ν_t boyuna ve enine dalga hızlarıdır ve Navier eşitliğinden

$$\nu_l = \sqrt{\frac{3B+4G}{3\rho}} \tag{3.34}$$

$$\nu_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \tag{3.35}$$

elde edilir [62]. Burada geçen *G* kayma (shear) modülü,

$$G = \frac{1}{2}\left[\frac{(C_{11}-C_{12})+C_{44}}{5}+\frac{5C_{44}(C_{11}-C_{12})}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})}\right] \tag{3.36}$$

eşitliği ile elastik sabitleri cinsinden ifade edilir [62]. Eşitlik 3.36' daki

$$G=(G_V+G_R)/2 \tag{3.37}$$

Şeklinde yazılabilir burdaki; G_V, *G* değerlerinin üst sınırına karşılık gelen Voigt's shear modülleri, G_R ise *G* değerlerinin alt sınırına karşılık gelen Reuss's Shear modülleridir ve

$$G_V=(c_{11}-c_{12}+3c_{44})/5 \tag{3.38}$$

$$5/G_R = 4/(c_{11}-c_{12})+3/c_{44} \tag{3.39}$$

eşitlikleri ile ifade edilir [62].

4. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİ

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) Hohenberg,Kohn ve Kohn–Sham tarafından, önerilen iki teoreme dayanmaktadır [33,35]. Hohenberg ve Kohn, elektron gazında değiş-tokuş ve korelasyon etkisini tanımlamak için geliştirilmiş, değiş-tokuş ve korelasyon etkisini içeren elektron gazının toplam enerjisinin elektron yoğunluğunun özel foksiyonu olduğunu göstermiştir. Kohn–Sham, çok elektron problemi yerine tek elektronlu denklemlerin kullanılabileceğini göstermiştir. Elektron yük yoğunluğu $\rho(\vec{r})$'yi temel değişken alarak, çok elektronlu sistemlerin taban durum özelliklerini belirlemiştir. DFT, çalışmamızın temellerini oluşturduğu için ayrıntılı olarak açıklanmıştır. İlk olarak çok cisim problemi ve Born-Oppenheimer yaklaşımı devamında ise dalga fonksiyonu ve yoğunluk fonksiyoneli yaklaşımları farklı kaynaklardan faydalanarak derlenmiştir [30,63].

4.1. Çok Cisim Problemi

Kristal yapı oluşurken elektronlar, çekirdekle ve kendi aralarında güçlü bir etkileşim içindedirler. Bu etkileşim olurken elektronların hareketi, çekirdeğin hareketi ile uyumlu olmadığı görülür. Elektronların hareket denklemi, elektrostatik etkileşmeler ile birbirine sıkıca bağlıdır. Bir sistemin toplam enerjisini hesaplamak için Schrödinger denklemi kullanılır. Kristaller elektronlar ve çekirdekten oluşan bir sitemdir. Böyle bir sistemin zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$H\Psi = E\Psi \tag{4.1}$$

eşitliği ile ifade edilir. Burada Ψ dalga fonksiyonu, E sistemin toplam enerjisi, H ise Hamiltonyen operatördür ve

$$H = -\sum_{i=1}^{N_e}\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_i}\frac{1}{2M_I}\nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{N_e}\sum_{I=1}^{N_i}\frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^{N_e}\sum_{j>i}^{N_i}\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{I=1}^{N_e}\sum_{j>I}^{N_i}\frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \tag{4.2}$$

ile ifade edilir. Burada M_I kütle, Z_I atom numarsı $\vec{r}_i$ ve $\vec{R}_I$ ise elektron ve çekirdeğin konumlarının koordinatlarıdır. Eşitlik 4.2'de verilen birinci terim elektronun ikinci terim

çekirdeğin kinetik enerjisidir. Üçüncü terim ise çekirdek ve elektronlar arasındaki Coulomb çekim alanını temsil eder. Dördüncü terim elektronlar arasında meydana gelen, beşinci terim çekirdekler arasında meydana gelen Coulomb itme etkileşimidir.

Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümü bir sistemin taban durum özelliklerini belirler. Bu denklem

$$H\Psi\left(\{\vec{r}_i\},\{\vec{R}_I\}\right)=E\Psi\left(\{\vec{r}_i\},\{\vec{R}_I\}\right). \tag{4.3}$$

şeklinde ifade edilir.Burada $\Psi\left(\{\vec{r}_i\},\{\vec{R}_I\}\right)$, çok cisimli sistemin dalga fonksiyonu ve E sistemin enerjisidir. Eşitlik 4.2'in çözümünü kolaylaştırmak için bazı yaklaşımlar geliştirilmiştir. Born-Oppenheimer yaklaşımında, elektronlar ve çekirdeklerin hareketleri ayrı ayrı incelenir.

4.2. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Born-Oppenheimer Yaklaşımı; birden fazla elektrona sahip olan sistemlerin Schrödinger denklemini çözmek için yaklaşımlarda bulunmaktır. Elektronun kütlesi çekirdeğin kütlesinden çok küçük olduğu için, kristal içindeki çekirdeklerin hareketlerini elektronların hareketlerinin yanında ihmal edecek kadar yavaş kabul ediyor [29]. Çekirdek hareketsiz olarak kabul edildiğinden Eşitlik 4.2'de verilen 2. terim (çekirdeğin kinetik enerjisi) ihmal edilebilir. Buna ilaveten çekirdekler arasındaki Coulomb itme etkileşmesi sabit düşünülebilir . Bu durumda eşitlik 4.2,

$$H_e=-\sum_{i=1}^{N_e}\frac{1}{2}\nabla_i^2-\sum_{i=1}^{N_e}\sum_{I=1}^{N_i}\frac{Z_I}{\vec{r}_i-\vec{R}_I}+\sum_{i=1}^{N_e}\sum_{j>1}^{N_i}\frac{1}{\vec{r}_i-\vec{r}_j} \tag{4.4}$$

haline dönüşür. Eşitlik 4.4 ile verilen hamiltonyen ifadesi N_e tane elektronun, N_i tane çekirdeğin alanında hareketini tanımlar. Elektronların hareketi ve enerjisi sırasıyla

$$\Psi_e=\Psi_e\left(r,R\right) \tag{4.5}$$

$$\varepsilon_e=\varepsilon_e\left(R\right) \tag{4.6}$$

eşitlikleriyle temsil edilir. Buradan nükleer itme ile toplam enerji

$$\varepsilon_{top}(R) = \varepsilon_e(R) + \sum_{\alpha=1}^{N_i} \sum_{\beta>\alpha}^{N_i} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \tag{4.7}$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifade potansiyel enerji yüzeyini oluşturur. Bu yaklaşım her Zaman geçerli olmayabilir. Bu yaklaşımın geçerli olması için elekron ile çekirdeğin hareketi bir birinden ayrılmalıdır.

4.3. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları

4.3.1. Hartre yaklaşımı

Bir sistemde N tane elektron varsa, N tane de denklem vardır. Toplam elektron dalga fonksiyonu, N tane elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde yazılarak ifade edilir [29-30]. Bu durumda dalga fonksiyonu,

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \Pi \tag{4.8}$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^{N} \Psi_i(r_i) \tag{4.9}$$

Şeklinde ifade edilir ve

$$V_i(\vec{r}) = V_{iyon}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \tag{4.10}$$

eşitliği *i.* elektrona etki eden potansiyeli ifade eder. Burada $V_{iyon}(\vec{r})$ iyon potansiyeli, $V_H(\vec{r})$ Hartree potansiyelidir. Eşitlik 4.8'den yaralanılarak V_{iyon}ve $V_{Hartree}$ potansiyelleri,

$$V_{iyon}(\vec{r}) = -\sum_{\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\vec{r} - \vec{r}_\alpha|}, \; V_H(\vec{r}) = -\int d\vec{r}' \, \frac{r(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \tag{4.11}$$

şeklinde elde edilir. *i.* elektrona etkiyen Hartree potansiyelindeki yoğunluk terimi

$$\rho\left(\vec{r}^{'}\right)=\sum_{i\neq j}\left|\Psi_j(\vec{r}^{'})\right|^2 \tag{4.12}$$

eşitliği ile gösterilir. Hamiltonyen

$$\hat{H}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}\nabla_i^2+V_i(\vec{r}) \tag{4.13}$$

şeklinde ifade edilirse bunun eşitlik 4.9 ile alınan beklenen değerini minimum yapan tek elektron dalga fonksiyonları

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2+V_{iyon}(\vec{r})\right]\Psi_i(\vec{r})+\sum_{j\neq i}\int d\vec{r}'\frac{\left|\Psi_j\left(\vec{r}'\right)\right|^2}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}\Psi_i(\vec{r})=\varepsilon_i\Psi_i\left(\vec{r}\right) \tag{4.14}$$

İle temsil edilen Hartree denklemi ile verilir. Sistemin dalga fonksiyonunu elde etmek için Hartree denklemi 4.9 eşitliği ile birlikte orbitaller için öz uyumlu olarak çözülür. Değiş tokuş ve korelasyon etkileri hesaba katılmadığından pek tercih edilmemektedir.

4.3.2. Hartree-Fock yaklaşımı

Hartree-Fock yaklaşımı birbirleriyle ve çekirdekle etkileşmeyen elektronların orbitalerine karşılık dalga fonksiyonlarını ifade eder [30,32]. Burada dalga fonksiyonları simetrik değildir. Pauli dışarlama ilkesine göre elektronlardan oluşan sistemin dalga fonksiyonu, iki elektronun yer değiştirmesi göz önüne alınarak

$$\Psi\left(...,\vec{r}_i,...,\vec{r}_j,...\right)=-\Psi(...,\vec{r}_j,...,\vec{r}_i,...) \tag{4.15}$$

antisimetrik olmalıdır. Bu eşitliği daha basit hale getirmek için Slater determinantı kullanılır [57].

$$D\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...\vec{r}_N\right)=\begin{vmatrix}\Psi_1(\vec{r}_1) & \Psi_1(\vec{r}_2) & \cdots & \Psi_1(\vec{r}_N)\\ \Psi_2(\vec{r}_1) & \Psi_2(\vec{r}_2) & \cdots & \Psi_2(\vec{r}_N)\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ \Psi_N(\vec{r}_1) & \Psi_N(\vec{r}_2) & \cdots & \Psi_N(\vec{r}_N)\end{vmatrix} \tag{4.16}$$

eşitliği ile ifade edilir. Eşitlik 4.16'da verilen tek elektron dalga fonksiyonlarının beklenen değerini minimum yapan denklem

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2+V_{iyon}\left(\vec{r}\right)\right]\Psi_i\left(\vec{r}\right)+\sum_j\int d\vec{r}'\frac{\left|\Psi_j\left(\vec{r}'\right)\right|^2}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}\Psi_i\left(\vec{r}\right)-\sum_j\delta_{\sigma i,\sigma j}\int d\vec{r}'\frac{\Psi_j^*\left(\vec{r}'\right)\Psi_i\left(\vec{r}'\right)}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}\Psi_j\left(\vec{r}\right)=\varepsilon_i\Psi_i\left(\vec{r}\right) \qquad (4.17)$$

ile verilen Hartree-Fock denklemidir. Burada son terim değiş tokuş terimidir ve σ_i ile σ_j spinleri aynı olduğunda sıfırdan farklıdır.

Hartree–Fock yaklaşımı toplam enerji hesabı için tek elektron dalga fonksiyonu bulundurur ve slater determinantı kullanılması açısından avantajlıdır. Fakat Hartree-Fock denkleminin karmaşık ve çözümü zor olduğundan, toplam enerjiyi hesaplamada yetersiz kalır. Hartree-Fock yaklaşımı aynı zamanda öz uyumlu alan metodu (SCF "Self Consistant Field") olarak da bilinmektedir [30,32].

4.4. Yoğunluk Fonksiyoneli Yaklaşımları

4.4.1. Thomas fermi teorisi

Yoğunluk fonksiyoneli teorisinin (DFT) en temeli; *Thomas-Fermi* teorisidir [38,66,67]. Teori temel değişken olarak dalga fonksiyonunun yerine elektronik yük yoğunluğunu kullanmayı önermektedir. Burada $n\left(r\right)$, elektron gazının yük yoğunluğunu temsil eder. Sistemde ki elektron-elektron ve elektron-çekirdek etkileşmesi göz önüne alınarak yük yoğunluğu cinsinden sistemin enerjisi

$$E\left[n\right]=A_s\int d^3r n^{5/3}\left(r\right)+\int d^3r V_{dış}\left(r\right)n\left(r\right)+\frac{1}{2}\int d^3r\int d^3r'\frac{n\left(r\right)n\left(r'\right)}{\left|r-r'\right|} \qquad (4.18)$$

eşitliği ile verilir. Eşitlikte yer alan A_s, katsayı olup $A_s=\left(3/10\right)\left(3\pi^2\right)^{2/3}$ şeklindedir. Thomas-Fermi teorisi önemli bir ilk adım olmasına rağmen, değiş-tokuş enerjisi dikkate alınmadığından yetersiz kalmıştır. Ayrıca teorinin formülasyonu tam değildir.

4.4.2. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi

Yoğunluk fonksiyonel teoris (DFT), Born-Oppenheimer yaklaşımı ile çekirdeklerin hareketini, elektronların hareketinden ayıran ve Hohenberg-Kohn teoreminden hareket ile elde edilen DFT, N elektron etkileşim problemini, taban durum parçacık yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ cinsinden ifade etmektedir [33]. Daha sonra Kohn-Sham denklem sistemi yani lineer olmayan öz-uyumlu tek parçacık Schrödinger denkleminin çözümleri, $\{\Psi_i\}$ dalga fonksiyonlarının bir fonksiyonu cinsinden, parçacık yoğunluğu ile birlikte tanımlanır. Bu denklem çözülerek sistemin taban durum enerjisi elde edilir. DFT'de temel olarak çok cisim dalga fonksiyonu yerine tek cisim dalga fonksiyonu kullanılır. Aşağıda bu anlatılanlar ifade edilmiştir.

Sistem çok cisimli bir sistem olarak tanımlansın ve r gibi bir noktaya yerleşmiş, $V_{dış}(r)$ ile tanımlanan bir dış potansiyel altında N tane elektrona sahip olsun. Bilinen Schrödinger denklemi bu sistem için çözülerek taban durum enerjisi elde edilebilir. Böyle bir sistem için Hamiltoniyen

$$H=\sum_i\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\right)+\sum_i V_{dış}\left(r_i\right)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}\frac{e^2}{\left|r_i-r_j\right|} \tag{4.19}$$

eşitliği ile tanımlanır. Bu Hamiltonyene ait Schrodinger denklemi, N elektronlu sistemden N tane tek elektronlu sisteme indirgendiğinde

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2+V\left(\vec{r}\right)\right]\Psi_i(\vec{r})=\varepsilon\Psi_i(\vec{r}) \tag{4.20}$$

eşitliği elde edilir. Buradaki $\Psi_i(\vec{r})$ ler tek elektron dalga fonksiyonları ve $V\left(\vec{r}\right)$ tek elektronun tüm etkileşimlerini içeren potansiyel terimidir. Dolayısıyla çok cisim problemi tek cisim problemine indirgenmiş olur. $V\left(\vec{r}\right)$ potansiyeli

$$V\left(\vec{r}\right)=V_{dış}\left(\vec{r}\right)+V_H\left(\vec{r}\right)+V_{XC}\left(\vec{r}\right) \tag{4.21}$$

eşitliği ile ifade edilir. Buradaki $V_{dış}(\vec{r})$ elektronların iyonlarla olan etkileşimini, $V_H(\vec{r})$ elektronların diğer elektronlarla olan etkileşimini, $V_{XC}(\vec{r})$ ise değiştokuş ve korelasyon etikleşimini temsil eder.

Hohenberg ve Kohn [33]'nun öne sürdüğü N elektronlu bir sistemin parçacık yoğunluğu

$$\rho(\vec{r}) = N\int\left|\Psi_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N)\right|^2 d\vec{r}_2...\vec{r}_N \tag{4.22}$$

şeklinde ifade edilir. Burada Ψ_0 sistemin taban durumu dalga fonksiyonudur. DFT teorisi, Kohn ve Sham [34], Hohenberg ve Kohn [33] teoremlerini kullanarak enerji fonksiyonunun minimum yapan yoğunluğun $\rho(\vec{r})$ bulunabileceği denklemleri

$$E\left[\rho(\vec{r})\right]=T\left[\rho(\vec{r})\right]+\int d\vec{r}'d\vec{r}\,\frac{\rho(\vec{r}')\rho(\vec{r})}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}+E_{XC}\left[\rho(\vec{r})\right]+\int\rho(\vec{r})V_{dış}(\vec{r})d\vec{r} \tag{4.23}$$

ile ifade eder ve bu denklemler günümüzde Kohn Sham denklemleri olarak bilinir. Bu noktadan sonra Schrödinger denklemi, yoğunluk fonksiyonelinin

$$V_{etk} = \int d\vec{r}'\frac{\rho(\vec{r}')}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}+V_{XC}\left[\rho(\vec{r})\right]+V_{dış}(\vec{r}) \tag{4.24}$$

ile tanımlanması ve bu fonksiyonelin

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N}\left|\Psi_i(\vec{r})\right|^2 \tag{4.25}$$

eşitliğinde ki yoğunluğa göre minimize edilmesiyle

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2+V_{etk}(\vec{r})\right]\Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon\Psi_i(\vec{r}) \tag{4.26}$$

eşitliği ile verilen hale gelir [38].

Sonuç olarak 4.26 denklemi DFT'ye göre öz uyumlu çözülmelidir. Bunun için verilen başlangıç yoğunluğundan eşitlik 4.24'te ki V_{etk} potansiyel hesaplanarak eşitlik 4.26' da yerine yazılır ve Ψ_i dalga fonksiyonları elde edilir. Bulunan dalga fonksiyonları yardımı ile 4.24 denkleminden yeni yoğunluk ifadeleri elde eldir. Yoğunluklar elde edildiğine göre 4.22 denklemi kullanılarak asıl amaç olan taban durum enerjisi elde edilmiş olur.

DFT 'yi diğer teorilerden ayıran bazı sebepler aşağıdaki gibi sıralanabilir;

- Hesap kolaylığı açısından kullanışlıdır.
- 3-boyutlu elektronik yoğunluk dağılımı $\rho(\vec{r})$)'nin, 3N-boyutlu dalga fonksiyonu Ψ_i 'ye göre daha kolay ifade edilebilirdir.
- DFT, periyodik sistemlerin yanı sıra çok atomlu periyodik olmayan sistemleri de hesaplayabilir.
- Taban durum enerjisi elde etmede en kullanışlı teoridir.
- DFT, manyetik özellik gösteren katılara da spin-polarize etki hesaba katılarak uygulanabilir.

Sistemin taban durumu özelliklerinin taban durum yoğunluğunun fonksiyoneli olarak formüle edilmesine rağmen, değiş-tokuş ve korelasyon enerjisini içeren E_{XC} tam olarak bilinmemektedir. E_{XC} etkin olarak kullanılan iki yaklaşım ile ifade edilmektedir. Bunlar Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (*local density approximation*, LDA) ve Genelleştirilmiş Gradiyent Yaklaşımıdır (*generalized gradient approximation*, GGA).

Bu bölümde ayrıntılı olarak bahsedilen DFT ile Hartree-Fock yöntemlerinin ortak bir noktası da vardır. DFT'de, toplam elektron yoğunluğu, her biri bir-elektron yoğunluğuna sahip olan tek-elektron yoğunluklarına ayrıştırıldığında elde edilen dalga fonksiyonları, Hartree-Fock teorisindeki dalga fonksiyonlarına benzer. DFT moleküler sistemler için tanımlandığında Hartree-Fock yaklaşımındaki moleküler orbital (MO) tanımıyla eşleşir. LDA ve Hartree-Fock metotlarının doğru sonuç verdiği durumlar elektronlar arası mesafeye bağlıdır. Bu mesafe atomlar arası mesafenin çok üzerindeyse Hartree-Fock metodu LDA'ye göre daha doğru sonuç verir. Hartree-Fock metodunda ifade edilen moleküler orbitaller, çok cisim veya elektron korelasyon etkilerini tanımlamak için kullanılır ve bu orbitaller oldukça büyük ve atomlar arası uzaklıkların birkaç katı kadardır.

Ancak bu çok-cisim etkileri daha kısa (belki atomlar arası mesafeden daha küçük) karakterde ise, bu durumda LDA yaklaşımı tercih edilir. Bu durumda da, moleküler orbitaller gibi böyle kısa-erişimli olayların tasvirinde yakınsama süreci çok yavaş olmaktadır.

4.4.3. Hohenberg-Kohn teoremleri

İlk olarak, bir fonksiyon ile *fonksiyonel* kavramları arasında ki fark çok iyi bilinmelidir. Fonksiyon, değişken sayıları girdi olarak kabul edip bunlardan bir çıktı sayısı oluşmasını sağlayan kurallardır. *Fonksiyonel* ise,bir fonksiyonu, reel veya karmaşık sayılara dönüştürebilen bağıntılardır ve genellikle köşeli parantezlerle yazılır. Şöyle ki;

$$F[f]=\int g\left(f(r)\right)dr \tag{4.27}$$

fonksiyonelinde, g(x) fonksiyon olarak çok iyi tanımlanmıştır. Bir fonksiyoneli tanımlamak için en basit örnek,

$$F[f(r)]=\int_{a}^{b} f^{2}(r)dr \tag{4.28}$$

ile ifade edilen bir $f^{2}(r)$ fonksiyonuna ait eğrinin altında kalan alan olabilir. Bu fonksiyonelin diferansiyeli,

$$\delta F=\int \frac{\partial F[f]}{\partial f(x)}\delta f(x)dx \tag{4.29}$$

eşitliği ile ifade edilir ve df'ye lineer olarak bağlı olan $F[f+df]-F[f]$ farkının bir parçasıdır. Buradaki $\frac{\delta F[f]}{\delta f(x)}$ terimi, x değişken olmak üzere *F*'nin, *f*'ye göre fonksiyonel türevidir. Bir fonksiyonelin türevi pratik olarak

$$\frac{\partial F[f]}{\partial f(x)}=\int \frac{\delta g(f(x'))}{\delta f}\delta(x-x')dx' \tag{4.30}$$

eşitliği ile verilen formülle hesaplanır.

Örneğin, eğer $T[f]=\int f^{n}(x')dx'$ ise, bu durumda

$$\frac{\delta T[f]}{\delta f(x)}=n\,f^{n-1}(x) \tag{4.31}$$

olur. Bir diğer örnek,

$$J[\rho]=\frac{1}{2}\int\int\frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1-r_2|}dr_1\,dr_2 \text{ ise, } \frac{\delta J[p]}{\delta\rho(r)}=\int\frac{\rho(r_1)}{|r_1-r_2|}dr_1 \tag{4.32}$$

olabilir [30].

Prensip olarak bir dış potansiyel, Schrödinger denklemini çözerek sistemin tüm özelliklerini belirler Bu kuantum mekaniksel sistemlere uygulanan normal yaklaşımdır. İlk Hohenberg-Kohn teoremi [33], potansiyel yerine yoğunluğu kullanarak sistemi tek başına karakterize edecek temel fonksiyon olarak kullanılabileceğini göstermektedir. Bu teoremle DFT oluşturulmaya başlanmıştır. Hohenberg-Kohn iki tane teorem ileri sürmüşlerdir. Bunları izah etmeden önce bahsedilen kuantum mekaniksel sistemi hatırlamada yarar vardır. Sistemin Hamiltonyen'i

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\nabla_i^2}{2}\right)+\sum_{i=1}^{N}V_{dış}(\mathbf{r_i})+\sum_{i<j}^{N}\frac{1}{r_{ij}} \tag{4.33}$$

eşitliği ile verilir. Burada ikinci terimdeki

$$V_{dış}(\mathbf{r_i})=-\sum_{\alpha}\frac{Z_\alpha}{r_{i\alpha}} \tag{4.34}$$

ifadesi *i.* elektrona etkiyen dış potansiyeldir. Potansiyel, çekirdeğin Z_α yükünden kaynaklanır. Taban durum enerjisi ve dalga fonksiyonu,

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \tag{4.35}$$

ile verilen enerji fonksiyonelini $E(\Psi)$ minimize ederek hesaplanır. N tane elektrona sahip bir sistemdeki dış potansiyel $V_{dış}(\mathbf{r})$, Hamiltonyeni tamamen sabit hale getirir; bu sayede N ve $V_{dış}(\mathbf{r})$, taban-durumların bütün özelliklerini belirleyebilmektedir. $\rho(\mathbf{r})$ *ve* N arasındaki ilişki

$$N = \int \rho(\mathrm{r}) d\,\mathrm{r} \tag{4.36}$$

olarak verilen normalizasyon şartı ile ifade edilir. Birinci Hohenberg-Kohn teoremi, bu normalizasyon şartı yerine N ve dış potansiyel $V_{dış}(\mathbf{r})$ yerine de elektron yoğunluğu $\rho(\mathrm{r})$ 'yi temel değişken olarak alır ve bu teorem;

"*Dışsal potansiyel* $V_{dış}$ $(\mathbf{r})$*, küçük bir sabitle toplanan elektron yoğunluğu* $\rho(\mathbf{r})$ *vasıtası ile belirlenir*."

ifadesi ile tanımlanır. Bu sabit, sonuçta aynı özfonksiyonları verdiğinden ve elde edilen bütün enerji özdeğerleri sadece bir sabit kadar değişmiş olduğundan hiç bir şeyi değiştirmemektedir. Bu teorem başka bir değişle;

"*Kararlı bir kuantum mekanik sisteminin taban-durum yoğunluğundan, sistemin bütün gözlenebilir parametreleri hesaplanabilir; dolayısıyla bütün gözlenebilirler, taban-durumu yoğunluğunun fonksiyoneli olarak yazılabilir*"

olarak ifade edilebilir. Bundan dolayı; $\rho(\mathrm{r})$, N ve $V_{dış}(\mathrm{r})$belirlenebilir. O halde taban durumun kinetik enerjisi $T[\rho(r)]$, potansiyel enerjisi $V[\rho(\mathbf{r})] = U_{ee}[\rho(\mathbf{r})] + V_{dı}[\rho(\mathbf{r})]$' dır. Burada U_{ee}elektron-elektron etkileşmesini temsil eder. Buradan toplam enerji $E[\rho(\mathrm{r})]$;

$$\mathrm{E}[\rho(\mathrm{r})] = \mathrm{V_{dış}}(\rho) + \mathrm{T}[\rho] + \mathrm{U_{ee}}[\rho] \tag{4.37}$$

eşitliği ile belirlenebilir. Toplam enerjiyi kısaca ifade edebilmek için fonksiyoneller gruplandırılıp

$$E\left[\rho(r)\right] = V_{dış}\left[\rho\right] + F_{HK}\left[\rho\right] = \int \rho(r) V_{dış}(r)\, dr + F_{HK}\left[\rho\right] \tag{4.38}$$

şeklinde yazılabilir. Hohenberg-Kohn fonksiyoneli F_{HK} tüm elektronik yapı problemleri için aynı fonksiyoneldir ve sadece yoğunluk üzerine etki etmektedir. Eşitlik 4.36' da ki elektronların sayısı, yoğunluğun kendisinden pratik olarak belirlenebilir.

İkinci Hohenberg-Kohn teoremi,

"$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) \geq 0$ *ve* $\int \tilde{\rho}(\mathbf{r}) d\,\mathbf{r} = N$ *olmak üzere bir* $\rho(\mathbf{r})$ *deneme yoğunluğu için;* $E_0 \leq E[\tilde{\rho}]$ *dir*."

ile ifade edilir ve enerjinin varyasyonel prensibini verir. Burada $E\left[\tilde{\rho}\right]$, enerji fonksiyonelidir. Yani, eğer bir yoğunluk ifadesi, elektron sayısını (N) doğru olarak temsil edebiliyorsa, bu yoğunluktan elde edilen toplam enerji, taban-durumun gerçek enerjisinden daha az olamaması gerekir ve taban duruma ait yoğunluk prensip olarak sadece yoğunluk içeren varyasyonel metot kullanılarak elde edilebilir. Buradan yola çıkılarak taban durumun enerjisi önceki nicelikler cinsinden

$$\left\langle \tilde{\psi} \middle| H \middle| \tilde{\psi} \right\rangle = \int \tilde{\rho}(\mathbf{r}) V_{dış}(\mathbf{r}) dr + F_{HK}[\tilde{\rho}] = E[\tilde{\rho}] \geq E\left[\rho\right] = E_0 \tag{4.39}$$

ile verilir [33].

4.4.4. Kohn-Sham eşitlikleri

Kohn-Sham eşitliklerinin çözümü, neredeyse tümü doğru kinetik enerjiyi içeren, birbiri ile etkileşmeyen parçacıklar için tam kinetik enerjiyi verir. Bu parçacıklar için Hamiltonyen ifadesi

$$H_s = T + V_{dış} = \sum_i \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{dış}(r_i) \right) \tag{4.40}$$

eşitliği ile verilebilir. Burada yer alan dalga fonksiyonu

$$\Psi_s(r_1, r_2, r_3 ... r_N) = \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)\Psi_3(r_3)...\Psi_1(r_N) \tag{4.41}$$

ile ifade edilir. Bir parçacık için Schrödinger denklemi ise

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \Psi_i(r) + V_{dış}(r_i)\Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \tag{4.42}$$

şeklinde ifade edilir. Böyle bir sistem için fermiyon dalga fonksiyonlarının simetri özellikleri göz önüne alınırsa, kesin sonuçlar Ψ dalga fonksiyonundan oluşan Slater determinatı ile elde edilecektir. Bu durumda elektron yoğunluğu

$$n(r) = \sum_{i=1}^{N} |\Psi_i(r)|^2 \tag{4.43}$$

eşitliği ile ifade edilebilir. Burada N, en düşük enerji seviyesi üzerinden toplamdır. Kohn-Sham denklemlerini elde etmek için

$$T_s[n] = \langle \Psi_s | T | \Psi_s \rangle \tag{4.44}$$

gösterimi kullanılabilir. Burada $T_s[n]$ etkileşen parçacıkların dikkate alınmadığı sistemin kinetik enerjisidir ve bu fonksiyondan bir sistemin toplam enerjisini tanımlamak için yararlanılır. Bu durumda enerji

$$E[n] = T_s[n] + \int V_{dış}(r) n(r) dr \tag{4.45}$$

eşitliği ile verilir. Eşitlik 4.45, Euler denklemi kullanılarak yeniden yazılırsa

$$\frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + V_{dış}(r) = \mu \tag{4.46}$$

eşitliği elde edilir. Burada μ maddenin elektrokimyasal potansiyelidir. Eğer bu eşitlik taban durum yoğunluğu hesabı için kullanılırsa, tüm taban durum özellikleri elde edilebilir. Bahsedilen sistem için Schrödinger denklemi

$$H = T + U + V_{dış} \tag{4.47}$$

$$E = E[n] = T_s[n] + V[n] \tag{4.48}$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $V[n]$ zamana bağlı bilinmeyen bir fonksiyon, $T_s[n]$ fonksiyonu ise etkileşmeyen sistem için kinetik enerjidir. Etkin potansiyel için notasyon kullanıldığında

$$V_{etkin}(r) = \frac{\delta V[n]}{\delta n(r)} \tag{4.49}$$

eşitliği elde edilir. Euler denkleminden

$$\frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + V_{etkin}(r) = \mu \tag{4.50}$$

eşitliği yazılır. Eşitlilik 4.48 ve 4.50'i karşılaştırılarak eşitlik 4.50' in çözümleri

$$n(r) = \sum_{i=1}^{N} \left|\Psi_i(r)\right|^2 \tag{4.51}$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\Psi_i(r)$ dalga fonksiyonu matematiksel olarak diferansiyel denklemini sağlamalıdır. Bu durumda

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_i(r) + V_{etk}(r)\Psi_i(r) = \varepsilon_i\Psi_i(r) \tag{4.52}$$

denklemi yazılır. Denklem 4.49, 4.51 ve 4.52 Kohn-Sham eşitlikleri olarak adlandırılır. Bu eşitliklerden yararlanarak taban durumundaki etkileşen çok cisim sistemi için taban durum yoğunluğunu çözülebilir. Burada V_{etk} etkin potansiyeli *Değiştokuş* ve *Korelasyon* enerji E_{xc} cinsinden

$$V_{etk}(r) = e\phi(r) + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} \tag{4.53}$$

Şeklinde ifade edilir. Burada E_{xc}

$$E_{xc}[n] = E[n] - T_s[n] - V_{dış}[n] - H[n] \tag{4.54}$$

Şeklindedir. Eşitlikte sadece $V_{dış}[n]$ fonksiyonu bilinmez. Değiştokuş ve Korelasyon enerjisi çoğunlukla *Yerel Yoğunluk Yaklaşımı* (LDA) veya *Genelleştirilmiş GradyentYaklaşımı*'ından (GGA) hesaplanır [38].

4.4.5. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)

DFT'de yerel yoğunluk yaklaşımı *(LDA)* değiştokuş korelasyon enerjisini (E_{xc}) belirlemede en yaygın yöntemdir. Yaklaşımın hem hesaplama kolaylığı hem de şaşırtıcı derece doğru sonuçlar verdiği görülmüştür. LDA yaklaşımında, sistemdeki her bir noktanın aynı elektron yoğunluğuna sahip olduğu ve her noktadaki elektron etrafındaki diğer elektronlarla aynı çok cisim etkileşmesine sahip olduğu varsayılır. Bu durum göz önüne alınarak sistemin LDA 'da değiş-tokuş korelasyon enerjisi,

$$E_{XC}^{LDA}[n] = \int d^3 r n(r) e_{xc}^{unif}\left(n(r)\right) \tag{4.55}$$

eşitliği ile ifade edilir. Buradaki e_{xc}^{unif} $(n(r))$, n(r) yoğunluğundaki bir homojen elektron gazının parçacık başına değiş-tokuş korelasyon enerjisidir. Bu enerji kuantum Monte-Carlo yöntemlerinden elde edilebilir. e_{xc}^{unif} $(n(r))$ enerjisinin birçok kere oluşturulması ile düşük ivmeyle değişen yoğunluklar için LDA'nın iyi bir yaklaşım olması beklenir. Bu şart, gerçek elektronik sistemlerle asla birebir uyuşmaz. Buna rağmen LDA'nın çoğu sistemler için oldukça doğru sonuçlar verdiği görülmüştür.

Değiş-tokuş korelasyon enerjisi E_{xc} 'yi hesaplamak için kullanılan yaklaşımlardan en doğru sonuç veren Ceperley-Alder yaklaşımıdır [61]. E_{xc} , değiş-tokuş ve korelasyon olmak üzere

$$E_{xc} = E_x + E_c \tag{4.56}$$

iki kısma ayrılır. Burada E_x ve E_c Hartree biriminde

$$E_x = -\frac{0,4582}{\tau_s} \tag{4.57}$$

$$E_c = \begin{cases} -0,0480 + 0,0311 \ln \tau_s & \tau_s \geq 1, \\ -0,0116\tau_s + 0,0020\tau_s \ln \tau_s & \tau_s < 1, \end{cases} \tag{4.58}$$

ile verilir. Eşitliklerde yer alan τ_s yoğunlukla ilişkili olup, bu ilişki $\rho^{-1} = \frac{4\pi}{3}\tau_s^3$ şeklindedir. Değiştokuş Korelasyon potansiyeli ise

$$V_{XC} = E_{XC} - \frac{\tau_s}{3}\frac{dE_{XC}}{d\tau_s} \tag{4.59}$$

şeklinde ifade edilir [38].

4.4.6. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımları (GGA)

Yoğunluk gradyentinin büyük değerlere sahip olması durumunda yerel yaklaşımlar yetersiz kalır ve bu durumlarda GGA kullanılır. Yoğunluğun uzaysal değişimini hesaba katan yaklaşımlara genellikle *Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımları* (GGA) denilir. GGA, büyük örgü sabitleri ve düşük bağlanma enerjilerine sahip sistemlerde LDA'ya göre daha iyi sonuçlar verir. Ayrıca GGA kullanılarak fonksiyonel çalışmalarında önemli mesafeler alınmıştır. Spin-polarize etkileri göz önüne alınmayan bir sistem için

GGA'da değiş-tokuş korelasyon enerjisi;

$$E_{XC}^{GGA}[n]=\int d^3rf\,(n(r),\nabla n(r)) \tag{4.60}$$

eşitliği ile verilir.LDA'da e_{xc}^{unif} çıktısı tek(benzersiz) olmasına rağmen, GGA' da *f* fonksiyonu benzersiz değildir ve araştırmacılar tarafından çeşitli türleri önerilmiştir. Günümüzde GGA ile ilgili yeni fonksiyoneller ileri sürülmektedir. Bunlardan biri de "Meta-GGA" adı verilen fonksiyonellerdir. meta-GGA fonksiyonelleri,

$$\tau(r)=\frac{1}{2}\sum_{i}^{occ}|\nabla\varphi_i(r)|^2 \tag{4.61}$$

ile ifade edilir. Meta-GGA fonksiyoneli hem yoğunluk ve birinci mertebeden gradyente bağlıdır hem de Kohn-Sham orbitallerinin kinetik enerji yoğunluğuna bağlıdır. Bu durumda meta-GGA fonksiyoneli,

$$E_{XC}^{MGGA}[n]=\int d^3rg(n(r),\tau(r)) \tag{4.62}$$

eşitliği ile temsil edilir. Meta-GGA'nın ortaya çıkmasıyla doğal olarak yeni özelliklerde elde edilebilir olmuştur. Bundan dolayı GGA'nın güvenirliliği artmıştır.

Meta-GGA fonksiyonelleri Kohn-Sham orbitallerine bağlıdır ve DFT içinde kabul edilir. Çünkü bu orbitaller Kohn-Sham potansiyelinin fonksiyonelleridir ve Hohenberg-Kohn teoremi nedeni ile de ayrıca yoğunluğun fonksiyonelleridir.Buna benzer orbital fonksiyonelleri veya örtülü yoğunluk fonksiyonelleri popülerdir ve yoğun araştırma alanlarıdır. Aşağıdaki *tam değiş-tokuş enerji* fonksiyoneli

$$E_X^{EXX}[n]=-\frac{1}{2}\sum_{\sigma}\int d^3r\int d^3r'x\sum_{ij}^{occ}\frac{\varphi_{i\sigma}(r)\varphi^*_{i\sigma}(r')\varphi^*_{i\sigma}(r)}{|r-r'|} \tag{4.63}$$

ile verilmiştir ve en iyi bilinen orbital fonksiyoneli olması ihtimali yüksektir. Bu noktada, Hartree-Fock ile Kohn-Sham teorileri arasındaki benzerlik ve farklılıklardan söz edilmelidir. Hartree-Fock fonksiyonelinde değiş-tokuş fonksiyoneli kullanılıp korelasyon ihmal edilir [31]. Diğer taraftan tam değiş-tokuş, Hartree-Fock orbitallerinden çok Kohn-Sham denklemi ile elde edilir. Ayrıca, Hartree-Fock orbitalleri, ortonormalite dışında hiçbir sınırlama olmadan minimizasyon yapılarak hesaplanır. Elde edilen bu orbitaller bizi

yerel olmayan Hartree-Fock potansiyeline götürür. Diğer taraftan tam-değiştokuş Kohn-Sham orbitalleri, Hartree-Fock orbitalleri'nin aksine ek sınırlamalarla ayni fonksiyonelin minimize edilmesiyle hesaplanır. Bu durumda ise tek-parçacık orbitalleri yerel potansiyelden gelir. Bu nedenle, toplam Hartree-Fock enerjisi her zaman, tam değiş-tokuş toplam enerjisinden biraz daha azdır. Fakat orbitaller ve orbital özdeğerleri gibi özellikler her iki yaklaşımda da bir hayli farklıdır. Mesela deneysel sonuçlara, Kohn-Sham tam enerji spektrumları, Hartree-Fock spektrumlarından daha yakındır. Dolayısıyla DFT daha iyi bir çözüm yoludur.

4.4.7. LDA ve GGA yaklaşımlarının sınırları

Günümüzde, ab-initio hesaplamalarda LDA yaygın olarak kullanılır. Çünkü taban durum özelliklerini deneysel değerlere çok yakın bir şekilde hesaplayabilmesidir. Yapılan hesaplamalarda bağ enerji değerleri deneysel değerlerden büyük; örgü sabiti değerleri ise deneysel değerlerden küçük sonuçlar vermektedir. LDA, yüzey, ara yüzey ve dinamik hesaplamaların fonon dispersiyon bağıntılarını belirlemede doğru sonuçlar vermektedir [66-67]. Buna ilaveten dielektrik sabitleri ve dolayısıyla optik özelliklerin hesabında, ayrıca zayıf bağlarda ve bilhassa Hidrojen bağlarında oldukça iyi sonuçlar vermektedir [68].

Bant aralığı hesaplamalarında, yarı iletkenler için hem LDA, hem de GGA deneysel değerlerden düşük sonuçlar vermesine rağmen, bir kısım basit metaller için deneysele yakın sonuçlar verir. Bu durum DFT yaklaşımından kaynaklanır.DFT, tam çözüm yapılabilirse bant aralığı hesabında olduğu gibi LDA ve GGA'nın eksik kaldığı durumlarda daha iyi sonuçlar vermesi beklenir. Fakat günümüzde bant aralığı hesaplamalarında iyi sonuçlar veren tam değişim ve zamana bağlı DFT (ZB-DFT) ve Green Fonksiyonu (GW) gibi metotlar kullanılabilmektedir. Bahsi geçen metotlarla yapılan hesaplar üstün özellikli ve yüksek maliyetli bilgisayarlarla mümkün olabilir.

GGA ile moleküllerin bağ uzunluklarının hesabı deneysel sonuçlardan büyük, hacim modülünün hesabı ise küçük sonuçlar verir. Reaksiyon bariyerleri hesaplarında GGA'da daha iyi sonuç verir [69]. Ayrıca GGA yüzey enerji hesaplamalarında LDA'dan daha düşük değerler verir. Tahminen bu durum GGA'nın zayıf bağlar öngörmesinden kaynaklanabilir.

4.5. Pseudopotansiyel Metot

Pseudopotansiyel kavramı düzlem-dalga toplam enerji metotları için oldukça önemlidir. Bir katı değerlik elektronları ve iyon korlarının bir birleşimi olarak ele alınır. İyon korları, çekirdekleri ve sıkı bağlı kor elektronlarını içerirler. Değerlik elektronu dalga fonksiyonlar, kor-elektronu dalga fonksiyonlarına ortonormaldirler (normu N=1 dir). Tam-elektron DFT metotları kor ve değerlik elektronlarını aynı temel üzerinde incelerler. Pseudopotansiyel yaklaşımında, iyon korlarının donmuş (hareketsiz) olduğu göz önüne alınır. Bu durum, katıların veya moleküllerin özelliklerinin, "iyon korları kimyasal bağlanma içermezler ve yapısal değişimlerin bir sonucu olarak değişmezler" yaklaşımıyla hesaplandığını ifade eder.

Değerlik elektronlarının tam-elektron dalga fonksiyonları ortogonallik şartını sağlamak için kor bölgesinde hızlı titreşimler sergiler. Baz setinin boyutu sınırlı olduğundan, düzlem-dalgaları kullanarak bu tür fonksiyonları temsil etmek pratik bir yöntem değildir. Pseudopotansiyel yaklaşımı kor elektronlarını ve kuvvetli Coulomb etkileşmesini daha zayıf bir pseudopotansiyel ile değiştirir. Bu potansiyel az sayıda Fourier bileşeniyle temsil edilebilir. Pseudo dalga fonksiyonları prensipte kor bölgesi içinde bir moda sahip olmamalıdırlar ve bu nedenle küçük bir baz seti gerektirirler. İyi bilindiği gibi, düzlem-dalga teknolojisinin gücü ve pseudopotansiyel kavramının birleşmesi kimyasal bağlanmanın tanımı için mükemmel derecede yararlıdır [30]. Aşağıda Pseudopotansiyel metodunun kısa teorik özeti verilmiştir.

Öncelikle Ψ dalga fonksiyonunu, değerlik elektronlarından gelen etkisi az olan bir ϕ fonksiyonu ile iyon korlarından kaynaklanan ϕ_c fonksiyonlarının toplamı şeklinde yazmak gerekir. Bunun için eşitlik 4.3'te verilen Schrödinger denklemi

$$\Psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \tag{4.64}$$

şeklinde ifade edilir [67-68]. Burada ikinci terimde ki b_c katsayısı normalizasyon sabitidir ve

$$\langle \Psi | \phi_c \rangle = 0 \tag{4.65}$$

eşitliğiyle ifade edilir. Bu Ψ ile ϕ_c'nin ortogonal olmalarını sağlayan normalizasyon sabitidir. Buradan Eştlik 4.64 ve Eştlik 4.65'den yararlanarak Schrödinger denklemi

$$H\varphi + \sum_c (\varepsilon - E_c \left|\varphi_c\right\rangle \left\langle\varphi_c\right| \varphi = \varepsilon\varphi \tag{4.66}$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Burada ki E_c ifadesi, sistemin kor bölgesindeki öz değerlerden biridir. Eşitlik 4.66'dan faydalanarak

$$(H + V_R)\phi = \varepsilon\phi \tag{4.67}$$

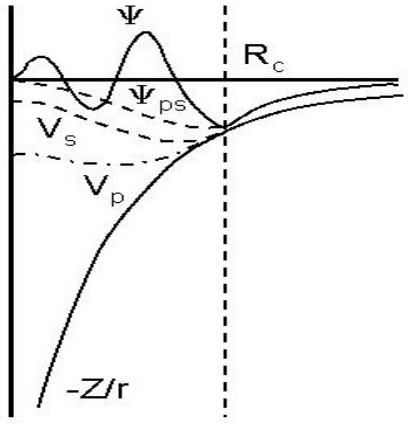
$$(T + V_{ps})\phi = \varepsilon\phi \tag{4.68}$$

eşitlikleri yazılabilir. Eştlik 4.67'de ki V_R, itici bir potansiyel operatörü olarak tanımlanır. Bu operatörü Phillips ve Kleinman [31].

$$V_{ps} = V_A + V_R \tag{4.69}$$

olarak tanımlamışlardır. Eşitlik 4.68'de yer alan V_{ps}, itici bir potansiyel olan V_R ile etkin bir potansiyel olan V_A'nın kendi aralarında oluşan etkileşmeden meydana gelen zayıf etkili bir potansiyeldir. Bu şekilde tanımlanan V_{ps} potansiyeline pseudo potansiyel ve ϕ'ye ise pseudo dalga fonksiyonu denir.

Pseudopotansiyel V_{ps} kısa menzilli bir potansiyeldir. Ayrıca çabuk yakınsadığı için dalga fonksiyonu hesaplamalarında özellikle tercih edilir. Bu durum Şekil 4.1'de gösterilmiştir. Şekil 4.1'de ki R_c, kor bölgesinin yarıçapıdır.



Şekil 4.1. Pseudopotansiyel ve dalga fonksiyonu.

4.5.1. Pseudopotensiyel üretimi

Pseudopotansiyel dalga fonksiyonu üretmek için ilk olarak bir atom seçilir ve devamında atoma ait olan Kohn-Sham denklemleri yazılır. Buradan $n\ (\vec{r})$ elektron yoğunluğunun çekirdek çevresinde küresel simetrik olduğu göz önünde bulundurularak Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\ \nabla^2\ \Psi_\ell(\vec{r})\ +\ \left[U(\vec{r})\ +\ \int d\vec{r}'\ \frac{e^2 n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\ -\ e^2\ \left(\frac{3}{\pi}\ n(\vec{r})\right)^{1/3}\right]\ \Psi_\ell(\vec{r})\ =\ \varepsilon_\ell(\vec{r}) \qquad (4.70)$$

formunda yazılır. Sitemin küresel simetriye sahip olmasından dolayı 4.70 Schrödinger denkleminin çözümleri de $R_{nl}(r)Y_{lm}$ şeklinde olur. Burada Y_{lm} küresel harmonikler, R_{nl} ise radyal dalga fonksiyonudur. Buna bağlı olarak radyal Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{nl}\ +\left[\int\frac{e^2 n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}d\vec{r}'-\frac{e^2 Z}{r}+\frac{\delta\varepsilon_{XC}}{\delta n}-\varepsilon_{nl}\right]R_{nl}(r)=0 \qquad (4.71)$$

şeklinde olur. Elde edilen bu denklem atomdaki bütün elektronlar için çözülür ve orbitallerin enerjileri ϵ_{nl} ile gösterilir.

Bu aşamadan sonra, en dış yörüngedeki kısmen dolu olan s, *p,d* ve *f* seviyeleri incelenir ve son olarak asıl Coulomb potansiyeli ($\hat{U}$) pseudopotansiyelle ($\hat{U}^{ps}$) değiştirilip Kohn-Sham denklemleri R^{ps} bulunacak şekilde çözülür. Bunun için Eştlik 4.71 çözülerek göre radyal dalga fonksiyonlarına bağlı denklem

$$U_l^{ps}(r)=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r\,R_{nl}^{ps}}\frac{\partial^2 r\,R_{nl}^{ps}}{\partial r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]-\left[\int\frac{e^2 n^{ps}(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}d\vec{r}\,'+\frac{\delta\varepsilon_{xc}}{\delta n^{ps}}-\varepsilon_{nl}\right] \tag{4.72}$$

şeklinde olur. Diğer bir deyişle, aranan R_{nl} fonksiyonu, küresel simetrik olması istendiğinden $U_l^{ps}(r)$'den hesaplanabilir. Her bir açısal momentum seviyesi için farklı pseudopotansiyeller var olabileceğinden, Pseudopotansiyel, keyfi bir $\Psi(r)$ fonksiyonuna uygulanarak, açısal momentum,

$$\psi(\vec{r})=\sum_{lm}Y_{lm}(\theta,\phi)\psi_{lm}(r)\,\psi_{lm}(r)=\int d\theta\,d\phi\,Y_{lm}^{*}(\theta,\phi)\psi(\vec{r}) \tag{4.73}$$

Şeklinde iki bileşene ayrılır. Sonra, Hamiltonyeni oluşturmak için, $\Psi_{\ell m}(r)$, $U_l^{ps}(r)$ ile çarpılır. Bu integraller, pseudopotansiyelin "yerel olmayan" türdenolduğu için kullanılır.

Pseudopotansiyelin biçimini biraz daha iyileştirmek için analitik sonuçlar da kullanılabilir. Hartree-Fock yaklaşımı, Fermi yüzeyi civarındaki elektronlar için doğru sonuçlar vermez. Çünkü bu yaklaşım çok-elektronlu perdeleme olayını hesaba katmaz. Her bir çekirdeği çevreleyen elektronlar, Coulomb potansiyelini perdelemelidir, fakat Hartree-Fock ve ondan türeyen yaklaşımlar bu olayı tam doğru olarak vermezler. Perdelenmemiş Coulomb potansiyeli (Ze^2/r)'nin Fourier dönüşümü $4\pi Ze^2/q^2$'dir ve perdelemenin ana etkisi $q=0$'deki singülariteyi yok ederek aşağıdaki pseudopotansiyeli oluşturmaktır;

$$U^{ps}=\frac{4\pi Z e^2}{q^2+\kappa^2} \tag{4.74}$$

Buradaki κ perdeleme mesafesidir. Bir elektron bulutu sade bir çekirdeği sardığında

$$\frac{1}{\Omega}U^{ps}(q=0)=-\frac{2}{3}\varepsilon_F \tag{4.75}$$

eşitliği pseudopotansiyel için türetilebilmektedir. Eşitlik 4.75,pseudopotansiyeller üzerinde bir sınırlama olarak kullanılabilir. Yukarıda teorisi kısaca anlatılan ve Şekil 4.2'de şematik

olarak gösterilen işlemle üretilen bir pseudopotansiyel tüm-elektron hesaplamalarını doğru şekilde türetecektir.

4.6. CASTEP Metodu

Bu tezdeki hesaplamalar; (*Cambridge Sequential Total Energy Package*) CASTEP [37] *ab-initio* programı ve X-raycihazının ölçüm sonuçları vegards yasası kullanılarak yapılmıştır.

CASTEP, katı ve moleküllerin elektronik yapı ve dinamik özelliklerini hesaplayan yapan bir *ab-initio* metottur. Bu programla sistemin, toplam enerjisi, örgü parametreleri, elektronik bant yapısı, kısmi ve toplam durum yoğunluğu, atomik kuvvetler, elastik sabitler ve mekanik özellikler, yük yoğunluğu, manyetik moment, fonon dağılım eğrileri, termodinamik özellikler, optik özellikler, popülasyon analizi yapılabilir. Bunların yanı sıra, basınca ve sıcaklığın değişimine göre moleküler dinamik hesaplamalarda yapabilmektedir. CASTEP programı, aşağıdaki temel kavramları belirler ve

- Elektron iyon etkileşiminin pseudopotansiyelini tanımlar.
- Süper hücre yaklaşımıyla periyodik sınır şartlarını belirler.
- Düzlem dalga temel seti kullanır.
- Hamiltonyen terimlerinin gelişimi için çoğunlukla hızlı (fast) Fourier dönüşümlerini kullanır.
- Öz uyumlu elektronik minimizasyon için yinelemeli bir yol izler.
- Değiş-tokuş fonksiyonelleri için en popular DFT yaklaşımlarının uygulamalarını kullanır.

Elektron iyon etkileşiminin pseudopotansiyelinin nasıl tanımlandığı kısım 4.5'te anlatılmıştır. CASTEP, Troullier-Martins tipi norm korunumlu pseudopotansiyel, Vanderbilt ultrasoft pseudopotansiyeller kullanır [70-71].

Süper hücre yaklaşımı: CASTEP, süper hücre metoduna dayanır. Periyodik bir sistemde bütün hesaplar bu metot kapsamında gerçekleştirilir. Hesaplamalar için sistem periyodik olarak ele alınır. Burada süper hücre biçiminde herhangi bir sınırlama yoktur.

Hızlı (fast) Fourier dönüşümlerini: CASTEP'de temel hesapsal basamaklardan biri dalga fonksiyonuyla Hamiltonyenin $(H\Psi)$, ters uzayda, Hamiltonyen ve kinetik enerji operatörü diyagonaldir. Yerel pseudopotansiyel operatörü ve Hartre operatörü de aynı şekildedir. Diğer taraftan gerçek uzayda da değiş-tokuş potansiyeli yine diyagonaldir. Bunun anlamı, gerçek ve ters uzaydan dönüşümler için uygun bir yola ihtiyaç olduğudur. Hızlı Fourier dönüşümleri bunu sağlar.

Öz uyumlu elektronik minimizasyon: CASTEP geometri optimizasyonunu (*Broyden, Fletcher, Goldfarb and Shannon*) BFGS metodundan yapar [72]. BFGS minimizerinin ana avantajı, sabit dış streslerdeki optimizasyonu da kapsayacak şekilde hücre optimizasyonu yapabilmesidir. BFGS, başlangıçta standart değerlere sahip bir kalıp kullanır ve bu optimizasyon süresince tekrar tekrar yenilenir. CASTEP hesabı, iç serbestlik derecelerini ve hücre serbestlik derecelerini içeren karma uzayda bir kalıp içerir, böylece örgü parametreleri ve atomik koordinatlar optimize edilebilir.

Hücre optimizasyonu gerektiğinde, sonlu baz seti düzeltme teriminin kullanılması önerilir. Bu terimin hesaplanması, sağladığı avantajlar göz önüne alındığında fazla bir hesapsal yük getirmez. Sonlu baz seti düzeltmesi kullanılmazsa veya kesilim enerjisi, düzeltme terimi hassas olmayacak şekilde çok küçük seçilmişse, hücre optimizasyonları problem çıkarabilir. Böyle durumlarda, optimizasyon "enerji yakınsadı, fakat stres hala sıfır değil" şeklinde bir mesaj vererek durabilir. Minimizer stres sıfırını değil, enerji minimumunu bulmaya çalışır.

Diğer potansiyel bir tehlike, başlangıç geometrisi son geometriden çok farklı olduğunda hücre optimizasyonu ayarı için "Fixed Basis Size" kullanılmasıdır. Sonlu baz seti düzeltmesi, minimizer tarafından dikkate alınmamasına rağmen hücre boyutuna ve şekline bağlıdır. Ek olarak, yukarıdaki ayarlama yapıldığında, yani düzlem dalgaların sayısı sabit tutulduğunda, hücre geometrisi değiştirildiğinde efektif kesilim enerjisi değişir. Bu değişim, sonlu baz seti düzeltmesini hesaplamak için kullanılan noktadan çok uzaklarda $dE_{tot}/d(\ln E_{kesi\,\lim})$ fonksiyonu olarak alındığında, sonuçlar hassas olmayacaktır. Bu nedenle, başlangıç ve son geometrileri karşılaştırılmalıdır ve iki yapı arasında çok büyük farklılık varsa, son yapıdan başlayarak tamamen yeni bir hesaplama yapılmalıdır.

Değiş-tokuş fonksiyonelleri için en popüler DFT yaklaşımlarının uygulamalarını kullanır: CASTEP değiş tokuş fonksiyonellerinden LDA, GGA ve spin-GGA yaklaşımlarını kullanır. GGA yaklaşımlarında ise PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [73], gözden geçirilmiş PBE [75] ve PW91 (Perdew-Wang) [74] kullanılır.LDA yaklaşımlarında CA (Ceperley-Alder) [76].

Sönümlü moleküler dinamik, geometri optimizasyonu için alternatif bir metottur, sadece iç koordinatları kapsar (hücre parametreleri sabit olmak zorundadır). Bu metot taban duruma ulaşmak için kritik sönüm rejimini kullanır. Bu eğilim, bütün serbestlik dereceleri için tek bir sönüm sabiti kullanarak (çiftlenmiş modlar) veya farklı serbestlik dereceleri için farklı katsayılar kullanılarak (bağımsız modlar) uygulanabilir. Alternatif olarak, sabit bir katsayıyla en baskın sönümleme yapılabilir. Bununla birlikte, bu düşük verimli bir yaklaşımdır. Aslında, ikinci mertebe denklemleri değil birinci mertebe hareket denklemlerini çözdüğünden dolayı, o bir moleküler dinamik tekniği değildir.

Bağımsız mod ve çiftlenimli mod sönümlü moleküler dinamik hesaplamaları, sönümsüz moleküler dinamik simülasyonlarından daha büyük zaman adımlarıyla yapılabilir. Sistem dengeye yaklaştığında, hızlı modlar yavaş modlardan önce kararlı olduklarından dolayı zaman adımı daha yukarılara artırılabilir. CASTEP, algoritmanın verimliliğinin bir sonucu olarak zaman adımı otomatik bir şekilde ayarlayabilir. Bir de, sönümlü moleküler dinamik hesabı boyunca, sönüm katsayılarını periyodik olarak tekrardan hesaplanması önerilir [77].

5. BANT YAPISI HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

Katıların bant yapılarını hesaplamak için çeşitli hesaplama yöntemleri

geliştirilmiştir. Bu yöntemler [78-80] kaynaklardan faylanılarak anlatılmıştır.

- Lineer genişletilmiş düzlem dalga (Lineear Augmented Plane Wave (LAPW)) metodu
- Green fonksiyonuna dayalı metotlar
- Sıkı-bağ (Tight-Binding) metodu
- Hubbard modeli
- Lineerleştirilmiş muffin tin orbital (LMTO) metodu
- Düzlem dalga (plane wave) metodugibi çok sayıda hesaplama yöntemleri geliştirilmiştir.

5.1. Bant Yapısı

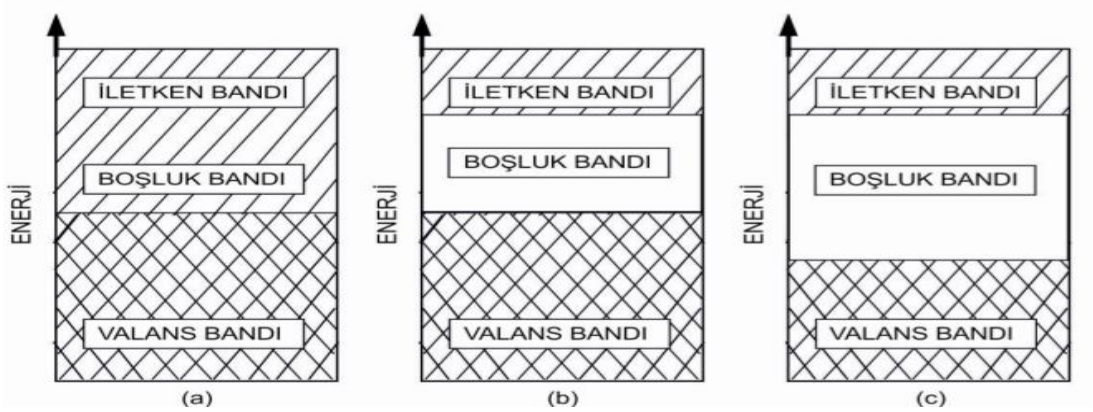
ki atomun bir araya gelip bir molekül oluşturması sırasında atomlar birbirlerinden uzaktayken bir atoma ait elektron yörüngelerden sadece birinde bulunabilir. Elektron her iki atomda da aynı yörüngede olduğunda aynı enerjiye sahip iki dalga fonksiyonu bulunur. Atomlar birbirlerine yaklaşıp elektron dağılımları örtüşmeye başladığında bu iki dalga fonksiyonun katlılığı ortadan kalkar ve enerjileri farklı iki seviye meydana gelir. Birbirinden uzakta üç atom varken, her atomik seviye üç kez katlı yani aynı enerjili üç dalga fonksiyonu olur. Atomlar birbirlerine yaklaştırıldığında bu üç kez katlı seviyeler birbirinden ayrılır ve enerjileri farklı üç durum meydana gelmiş olur. Bu birbirinden uzakta N atomlu sistem için genelleştirilirse her bir elektron düzeyi N kez katlı olur ve atomlar birbirlerine yaklaştığında katlı enerjiler birbirinden ayrılarak sonlu bir enerji aralığına yayılır. Atomlar arası uzaklık büyükken N kez katlı olan bir atomik seviye, enerjileri farklı N sayıda seviyeye ayrılır. Sık aralıklarla dizilmiş bu N sayıda enerji seviyesi takımına enerji bandı denir. Şekil 5.1'de görüldüğü gibi metallerde Fermi enerjisi (E_f) izinli bir bant içinde bulunur, yalıtkanlarda ise bantlar elektronlar tarafından tamamıyla doldurulmuş olup bunun üzerindeki bant ise tamamen boştur ve bu iki bant birbirinden uzun bir E_g yasak enerji aralığı ile ayrılmıştır. E_f bu yasak enerji aralığında yer alır. Yalıtkanlarda bir elektronun yakınında geçebileceği izinli bir enerji düzeyi olmadığı için elektrik iletkenliği göstermezler. Metallerde ise birçok izinli durum bulunduğundan metaller elektrik

iletkenliği gösterirler. Bir yarıiletkenin bant yapısı yalıtkanın bant yapısıyla aynı olmasına rağmen yasak enerji aralığı daha azdır. Bu yüzden valans bandından iletkenlik bandına elektron geçebilir. Böylece Elektron; iletkenlik bandında birçok izinli enerji seviyesi bulduğunda yarıiletken, elektrikçe iletken olur.

Elektronik bant yapısı kristalin,

- Elektronik iletkenlik
- Optik özellikler
- Elektronik özelliklerden kaynaklanan yapısal bozulmalar
- Mekanik ve manyetik özellikler

gibi malzemenin doğal karakterini belirleyen birçok özelliğinin belirlenmesine katkıda bulunur.



Şekil 5.1. İletkenlik derecesine göre değişen bant enerjileri: (a) iletken, (b) yarı iletken, (c) yalıtkan

5.2. Atomik Orbitallerin Lineer Bileşimi (LCAO)

Bu tezçalışmasında kullandığımız CASTEPprogramı, atomik orbitallerin lineer bileşimi metodunu kullanır [78-80]. Metotta, atomların bir örgü üzerinde uygun bir şekilde yerleştirildiği ve bunların pseudopotansiyellerinin bilindiği kabul edilir. Daha sonra, uygun "basis" fonksiyonları seçilerek Schrödinger denklemi çözülür. Bu metoda yalıtılmış atomların özfonksiyonlarını "basis" fonksiyonları olarak kullandığından *atomik orbitallerin lineer kombinasyonu (LCAO)* adı verilmiştir. Yapılan hesaplamalar, Winnier fonksiyonlarında yapılanlara benzer, fakat onlardan daha pratiktir.

Kristaldeki atomlar birbirinden bir hayli uzakken bunların elektronları arasında zayıf bir etkileşim olur ve olaya $a_l^{at}(\ r\ )$ atomik orbitalleri ile dahil olurlar; bu orbitaller, U^{at}pseudopotansiyellerin özfonksiyonları olarak göz önüne alınır. Süreç devam edip katı oluştuğunda bile, bu atomların civarında onların dalga fonksiyonları hemen hemen değişmez. Schrödinger denklemi varyasyonel ilkeden türetilerek bu fikir uygulanabilir bir plana dönüştürülebilir ve bütün enerji seviyeleri Hamiltonyenin beklenen değerinin ekstremumları olarak elde edilebilir. Atomik orbital yaklaşımının lineer kombinasyonu yaklaşımı, dalga fonksiyonu $\Psi_k(\ r\ )$'yi

$$\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}\right)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R},l} b_l\, e^{i\vec{k}.\vec{R}}\, a_l^{at}\left(\vec{r}\ -\ \vec{R}\right) \tag{5.1}$$

eşitliğinde ki gibi seçme şansı verir. Buradaki b_l'ler bilinmeyen katsayılar, a_l^{at} 'ler atomik dalga fonksiyonlarıdır. Eştlik 5,1'daki dalga fonksiyonu, Bloch teoremini otomatik olarak sağlayan bir fonksiyon üretir. b_l 'ler,

$$\left\langle \Psi \middle| \hat{H}-\varepsilon \middle| \Psi \right\rangle \tag{5.2}$$

İle verilen eşitliği maksimize, edecek şekilde seçilir. Genel süreçte, Eştlik 5.1, Eştlik 5.2'da yerine konur ve $b_l$katsayılarına göre türevlerin sıfır olması istenir. Böylece bilinmeyenleri b_l'ler olan çok sayıda denklem elde edilir. Örneğin 5 tane atomik dalga fonksiyonu ile hesap yapılıyorsa, 5 tane $b_l$bilinmeyen ve 5 tane çözülmesi gereken denklem olacaktır. Bu da 5×5 tane özdeğer probleminin varlığını ve her $\vec{k}$ değeri için 5 tane çözüme sahip olunduğu anlamına gelir; bunlar da 5 tane banda karşılık gelir.Bir tek b, bir tek atomik orbital (a^{at})'in varlığı varsayılarak s orbitali için, Eşitlik 5.2'yi hesaplamak üzere aşağıdaki ifade

$$\left\langle \psi \middle| \varepsilon \middle| \psi \right\rangle = \varepsilon \sum_{\vec{R}\vec{R}'} \int d\vec{r}\, a^{at}\left(\vec{r}\ -\ \vec{R}\right) a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}'\right)\frac{e^{i\vec{k}.\left(\vec{R}-\vec{R}'\right)}}{N} b^2 \tag{5.3}$$

$$= b^2\,\varepsilon\left(1+\sum_{\delta}\alpha e^{i\vec{k}.\vec{\delta}}\right) \tag{5.4}$$

yazılabilir. Buradaki α

$$\alpha = \int d\vec{r} a^{at}(\vec{r}) a^{at}\left(\vec{r}+\vec{\delta}\right) \tag{5.5}$$

ile verilir. Buradaki atomik dalga fonksiyonları normalizedir ancak ortogonal değildir. Bu aşamadan sonra yapılaması gereken, Hamiltonyenin matris elemanlarını hesaplamaktır. Hamiltonyende görülen potansiyel enerji (*U)*, katıdaki atomların pseudopotansiyellerinin toplamı olur. Her hangi bir **R** örgü noktası civarındaki potansiyel, öteki örgü noktalarındaki pseudopotansiyellerden (U^a) gelen katkıları içerir. Bu durumda Hamiltonyen için

$$\left\langle \Psi \middle| \hat{H} \middle| \Psi \right\rangle = \sum_{\vec{R}\,\vec{R}'} \int d\vec{r} \quad a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\left(\vec{r}\right)\right] a^{at} \quad \left(\vec{r}-\vec{R}'\right)\frac{e^{i\vec{k}.\left(\vec{R}-\vec{R}'\right)}}{N} b^2 \tag{5.6}$$

$$= \sum_{\vec{R}\,\vec{R}'} \int d\vec{r}\, a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\begin{Bmatrix}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}'\right)\right] a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}'\right) \\ +\left[U\left(\vec{r}\right) - U^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\right] a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}'\right)\end{Bmatrix}\frac{e^{i\vec{k}.\left(\vec{R}-\vec{R}'\right)}}{N} b^2 \tag{5.7}$$

$$\begin{aligned} &= \int d\vec{r} \sum_{\vec{R}\,\vec{R}'} \varepsilon^{at} \frac{a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}'\right)}{N} e^{i\vec{k}.\left(\vec{R}-\vec{R}'\right)} b^2 \\ &+ \int d\vec{r} \sum_{\vec{R}\,\vec{R}'} a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\left[U\left(\vec{r}\right) - U^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}'\right)\right] a^{at}\left(\vec{r}-\vec{R}'\right)\frac{e^{i\vec{k}.\left(\vec{R}-\vec{R}'\right)}}{N} b^2 \end{aligned} \tag{5.8}$$

eşitlikleri yazılabilir. En yakın komşular olarak **R** ve **R'** alınır veEştlik5.8'deki katlı integral bırakılarak, Eştlik5.4'ü Eştlik5.8'den çıkarılıp *b*'ye göre değişim sıfıra eşitlenirse

$$\varepsilon\left(1 + \sum_{\delta} \alpha e^{i\vec{k}.\vec{\delta}}\right) = \varepsilon^{at} \sum_{\delta} \alpha e^{i\vec{k}.\vec{\delta}} + U + \left(t - \alpha\varepsilon^{at}\right)\sum_{\delta} e^{i\vec{k}.\vec{\delta}} \tag{5.9}$$

denklemi elde edilir. Burada

$$U = \varepsilon^{at} + \int d\vec{r}\, a^{at}(r)\left[U(\vec{r}) - U^{at}(\vec{r})\right] a^{at}(\vec{r}) \tag{5.10}$$

ve

$$t = \alpha\, \varepsilon^{at} + \int d\vec{r}\, a^{at}(r)\left[U(\vec{r}) - U^{at}(\vec{r})\right] a^{at}(\vec{r} + \delta) \tag{5.11}$$

İle temsil edilir. Bazı matematiksel düzenlemelerden sonra enerji

$$\varepsilon = U + t \sum_{\delta} e^{i\vec{k}.\vec{\delta}} \tag{5.12}$$

olarak elde edilir. Buradaki *U* parametresi, elektronu bir atomik konuma yerleştirmek için gerekli olan enerjidir ve *t* elektronu bir konumdan komşu bir konuma getirmek için gerekli enerjidir.

6. OPTİK ÖZELLİKLER

Malzeme üzerine elektro manyetik ışınım gönderildiğinde; fotonlarla atomların elektronlarının etkileşmesi sonucu optiksel olaylar meydana gelir. Gönderilen fotonların, sahip olduğu enerji yasak enerji aralığı (E_g)'ye eşitse malzemenin elektronu yüksek enerji seviyesine uyarılır. Yasak enerji aralığından küçükse soğurulma yerine fotonlar geçirilir ve malzeme de saydam olarak adlandırılır [81].Bir fotonun soğurulması veya geçirilmesi, fotonun enerjisine, metal, yarıiletken ya da yalıtkan oluşuna ve atomların elektron dizilişine bağlıdır [82]. Dielektrik fonksiyon bir malzemenin yalıtkanlığının ölçüsüdür ve yasak enerji aralığı malzemenin ne kadar yalıtkan ya da ne kadar iletken olduğunu belirler. Dolayısıyla dielektrik fonksiyon hesaplanarak malzemenin optik özellikleri elde edilebilir.

Malzemenin gelen ışınımı soğurması belirli sınırlara sahiptir. Soğurma nedeni, malzemenin temel bant aralıklarında optik geçişlerin olmasıdır. Bantlar arası soğurma, katı bir maddenin bantları arasında ki elektronların optik geçiş yaparak uyarılmasıdır. Bantlar arası geçiş bütün katılarda gözlenir. Sonuç olarak bir malzemenin optik özellikleri, o malzemenin bant yapısı ve geçiş durumlarındaki yoğunlukla ilgilidir [83].

Dielektrik fonksiyon;

- Lorentz Model
- Drude Model
- Hagen-Rubens denklemi
- İndüklenmiş alan etkisi yöntemi
- Debye relaksasyonu
- Kramer-Kronig bağıntıları

yaklaşımlarıyla hesaplanabilir [84].

6.1. Lorentz Modeli

Lorentz modeli, dielektrik fonksiyonu Newton'un ikinci hareket yasasından yola çıkarak ifade eder. Bir elektromanyetik alanda Newton'un ikinci hareket yasası

$$m\ddot{x} = -\beta\dot{x} - k_s x - eE_x \tag{6.1}$$

eşitliği ile verilir. Burada E_x, yerel elektrik alandır. Elektrik alan harmonik olduğunda, $E_x = E_0 \exp(-i\omega t)$ ile ifade edilir. Buradan yola çıkarak hareket denklemi yeniden yazılırsa

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = -eE_0 e^{-i\omega t/m} \tag{6.2}$$

olur. Burada $\beta = \gamma m$ ve $k_s = \omega_0^2 m$ ile temsil edilir. ω_0 , doğal frekans, γ sönüm katsayısıdır. Denklem 6.2 çözülürse

$$x(t) = Ae^{-i\omega t} \tag{6.3}$$

eşitliği elde edilir. Bu çözüm Eşitlik 6.2'de yerine yazılırsa

$$A = -\frac{eE_0}{m}\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \tag{6.4}$$

ve

$$x(t) = \frac{eE_0}{m}\frac{e^{-i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \tag{6.5}$$

Eşitlikleri elde edilir. Buradan hareketle bir salınıcının polarizasyonu tanımlanmalıdır. Birim hacim başına toplam polarizasyon

$$P = N_0 ex = \frac{N_0 e^2 E_0}{m}\frac{e^{-i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}\varepsilon_0 E \tag{6.6}$$

ile verilir ve burada

$$\omega_p^2 = \frac{N_0 e^2}{m\varepsilon_0} \tag{6.7}$$

şeklinde ifade edilir. Polarizasyon elektriksel geçirgenlikten dolayı elektrik alanla ilişkilidir. Bu ilişki

$$P = \chi \varepsilon_0 E \tag{6.8}$$

ile ifade edilir. Burada χ geçirgenlik katsayısıdır ve

$$\chi = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \tag{6.9}$$

eşitliği ile verilir. Bununla ilgili dielektrik sabiti

$$\varepsilon = 1 + \chi = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \tag{6.10}$$

ile verilir. Dielektrik sabitinin reel ve imajiner kısımları

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \tag{6.11}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\omega_p^2 \gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \tag{6.12}$$

eşitlikleri ile verilir. Klasik yaklaşımda ω_0, basit harmonik osilatörün rezonans frekansıdır. Kuantum mekaniksel yaklaşımda ise sistemin ilk ve son enerjisi arasındaki farktır. Buradan bir osilatör için Lorentz modeli

$$\varepsilon = 1 + \sum_j \frac{\omega_{pj}^2}{\omega_{oj}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega} \tag{6.13}$$

ile verilir.

6.2. Drude Modeli

Bu model metaller için geçerlidir ve $\omega_0 = 0$ dır. Lorentz modeli farklı bir formda

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \tag{6.14}$$

yazılabilir. Buradan reel ve imajiner kısımlar

$$\varepsilon_1 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} \tag{6.15}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} \tag{6.16}$$

Eşitlikleri ile verilir. Bu sonuçlar *Drude Modeli* olarak isimlendirilir. Genelde, $\omega_p > 0$ dır. Eğer, $\omega > \omega_p$ ise $\varepsilon_2 \to 0$ olur. Yani yüksek frekanslarda optik soğurma yoktur ve böyle bir metal saydamdır. Çünkü bu frekansta metaldeki elektronlar oluşan elektrik alana hızlı tepki veremez.

6.3. Kramers-Kronig Bağıntıları

Kuantum mekaniği açısından bakıldığında bir fotonun elektronla etkileşimi sonucu elektronların uyarılması zamana bağımlı olarak tarif edilmelidir. Fotonların soğurulması ve emisyonu, doldurulmuş ve doldurulmamış durumların ikisi arasında geçişlere neden olur. Dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı olarak bilinen ε_2 (ω), doldurulmuş vedoldurulmamış dalga fonksiyonlarının seçim kuralıile birlikte momentumun matris elamanları ile hesaplanabilir. Dielektrik fonksiyunun gercek kısmı ε_1 (ω) ise Kramers-kroning bağıntısını ile ilişkilidir. Diğer optikal özelliklerde dielektrik fonksiyonunun kompleks kısmından türetilmiştir. Dielektrik fonksiyonları, kırılmaindeksin(ω), sönüm katsayısı $\kappa(\omega)$, soğurma katsayısını $\alpha(\omega)$ ve enerji kayıp fonksiyonu L(ω) içinkullanılanifadeleraşağıdaki gibiverilir.

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \tag{6.17}$$

İle verilir. Enerji kayıp fonksiyonu ise $L(\omega)$:

$$L(\omega) = \mathrm{Im}\left[\frac{-1}{\varepsilon(\omega)}\right] = \varepsilon_2(\omega)/\left[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)\right] \tag{6.18}$$

Eşitliği ile tanımlanır. Kırılma indisi $n(\omega)$ ve sönüm katsayısı $\kappa(\omega)$ de dielektrik fonksiyonun bileşenleri ile belirlenir;

$$n(\omega) = \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)\right]^{1/2} / \sqrt{2} \tag{6.19}$$

$$\kappa(\omega) = c\left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)\right]^{1/2} / \sqrt{2} \tag{6.20}$$

Yansıtma katsayısı $R(\omega)$ ve soğurma katsayısı $\alpha(\omega)$ ise aşağıdaki eşitliklerden hesaplanabilir;

$$R(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + j\varepsilon_2^2(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + j\varepsilon_2^2(\omega)} + 1}\right]^2, \tag{6.21}$$

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2\omega}\left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)\right]^{1/2} \tag{6.22}$$

Burada kullanılan ilişkiler dielektrik fonksiyonları $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$, kırılmaindisinin (ω), sönüm katsayısı $\kappa(\omega)$, soğurma katsayısını $\alpha(\omega)$ ve enerji kaybıfonksiyon $L(\omega)$ içinkullanılanifadeler hesaplandı [84].

6.4. X-Işınları Difraksiyonu (XRD)

Kristal yapı, üç boyutlu uzayda düzgün tekrarlanan bir deseni temel alan bir atomik yapıya sahiptir. Bu nedenle, katıların Kristal yapısı, yapıda bulunan atom gruplarının ya da moleküllerin katıya özgü olacak şekilde geometrik düzende biraraya gelmesi ile oluşur. İlk

kez Max van Laue tarafından Kristal yapı ve yapı içerisindeki atomların dizilişleri X-ışını kırınım desenleri kullanılarak incelenmiştir. Fakat bilinmeyen yapıları belirtmek veya yapısal parametreleri tayin etmek için kırınım tekniklerini kullanmak gerekir.Katıların kristal yapılarını incelemek için en çok kullanılan kırınım tekniği X ışını kırınımıdır. Bu tekniğin ince film analizi için uygun olması, temelde iki nedenden dolayıdır;

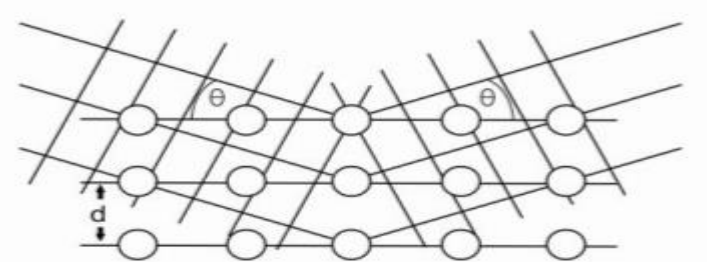
1. X-ışınlarının dalga boyları, yoğunlaştırılırmış maddedeki (condensed matter) atomik mesafeler ölçüsündedir ve bu özellik, yapısal araştırmalarda kullanılmalarını sağlar.

2. X-ışını saçılım teknikleri, yıkıcı değildir ve incelenen numuneyi değiştirmez [39]. Katı malzemelerin incelenmesinde kullanılan X-ışınlarının dalgaboyları, atomlararası mesafelerle kıyaslanabilir büyüklükte olup yaklaşık olarak 0.5 Å ile 2.5 Å arasında değişir.Kristal ve moleküllerdeki atomlar arası mesafeler 0.15-0.4 nm arasındadır. Bu mesafe 3 keV ve 8 keV arasında foton enerjilerine sahip X-ışınlarının elektromagnetik spectrum dalga boyuna karşılık gelir. Bundan dolayı, Kristal ve molekül yapıları X-ışınlarına maruz kaldığında, yapıcı ve yıkıcı girişim gibi olgular gözlemlenebilmektedir. İnce film fiziğinde electron saçılması, X-ışını saçılmasından daha sıkkullanılır, fakat X-ışını saçılması kafes parametrelerinin kesin ölçümlerinin gerekli olduğu yerlerde kullanılır.İki metot arasındaki farklardan birisi, X-ışının daha derin nüfuz derinliğine sahipolması ve X-ışınlarının saçılma noktalarının elektronunkinden 103 kat daha zayıf olmasıdır.X-ışını saçılmasının daha kalın örnekler için uygun olmasının nedeni, daha büyük nüfuz derinliğine sahip olmasıdır.Fakat çok ince örnekler (5nm) için bile saçılma modelleri elde edilebilmektedir. Çok keskin odağa sahip X-ışını tüpü kullanılarak, yoğunluk artırılabilir ve böylece maruz kalma suresi dörtte bir oranında azaltılabilir. Diğer taraftan, saçılma açıları, X-ışınlarında daha büyüktür ve bu kafes parametrelerinin elektronlara nazaran daha kesin olarak belirlenmesini sağlar.Saçılma modelleri,filmin toplam kalınlığı veya belki de altlık tarafından elde edilir, bazı durumlarda altlıkla elde edilmesi, kafes sabitlerinin belirlenmesi için avantaj sağlar.X-ışını saçılması, filmler deki mekanik stress incelemes iiçin de kullanılabilmektedir. Saçılma çizgilerinin genişliğinden, çok kristalli polikristal) filmlerdeki kristallerin büyüklüğü a´yı çıkarmak şu ifadeye göre mümkündür;

$$a = 1/ D\cos\theta \qquad (6.23)$$

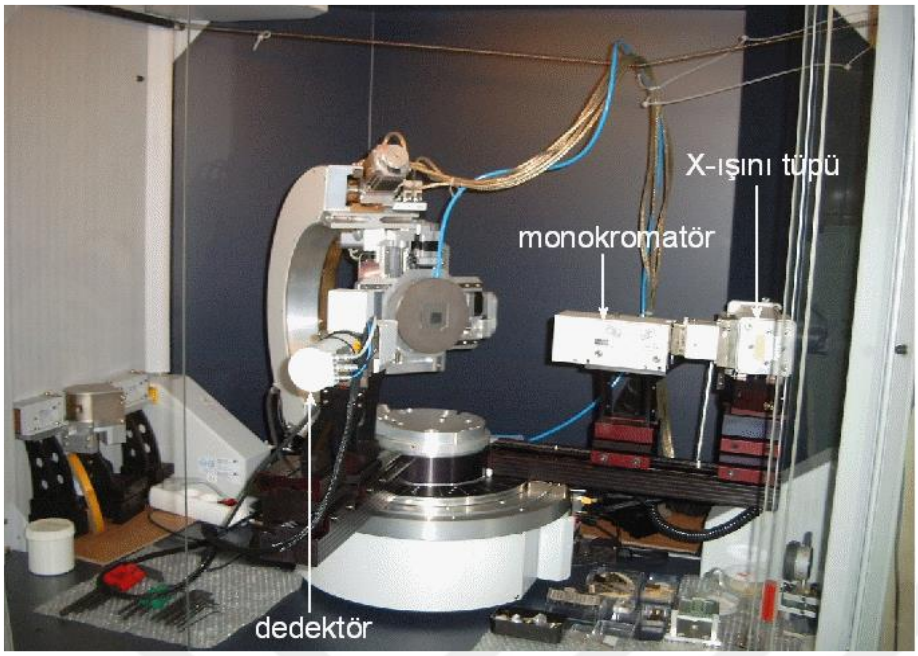
Burada D, maksimum yoğunluğun yarısındaki saçılım çizgisinin acısal genişliği, kullanılan ışığın dalgaboyu λ,θ ise Bragg açısıdır. Bu yolla, 5 ile 120 nm arasındaki Kristal boyutları belirlenebilmektedir. Benzer ölçümler, electron saçılmasında da gerçekleştirilmesine rağmen, bu metot sadece yaklaşık 10 nm´den küçük kristallere uygulanabilir.Bunun nedeni de elektronların çok daha küçük dalga boylarına sahip olmasıdır. X-ısınlarıkristalyapıüzerinedüşürüldüğünde, ısınlar katı yüzeyinden küçük geliş açılarıyla tam yansımaya uğrarlar ve ısınlar kristaldeki atomların parallel düzlemleri tarafından saçılırlar. Kristal yapıdaki bu saçılımlar kırınım olarak adlandırılır ve kırınım çok sayıda atomu içeren saçılmalardan meydana gelir.X ısınlarının Kristal yapıda kırınımı Bragg Kanunu ile açıklanır ve Bragg kanunun en Basit sekli aşağıda şekil 7.1' de belirtildiği gibi olabilir. Bilinen en basit formülü de aşağıdaki formül ile verilmiştir [39,85].

$$n\lambda=2D\sin\theta \qquad (6.24)$$



Şekil 6.1. Bir kristalde X-ışını kırınımı

Modern X-ışını cihazlarında, kırınıma uğrayan ışının kırınım açısını ve şiddetini ölçecek ısınım sayıcılar bulunur.Böylece kırınım açısı (2θ)'nın, kırınıma uğrayan ışının şiddetine gore değişimini veren kırınım deseni elde edilir.Desen üzerindeki pik genişliklerine ve zemin şiddetine bakılarak malzemenin kristalleşmesi hakkında bilgi edinilebilir.



Şekil 6.2. Bruker D8 Discover XRD cihazı

6.5. X-Işınları Kırınımı ile Kristal YapılarınTayini

Kristallerde X-ışını kırınımı ve diğer kırınım (elektron ve nötron kırınımı)teknikleri ile sağlanan bilgiler şunlardır. Kristalin yapısını belirleme, kristalin mükemmelliğiveya fazın saflığını, kristalin doğrultularını, ve kristalin örgü sabitlerini belirlemedir.

6.6. Vegards Kanunu

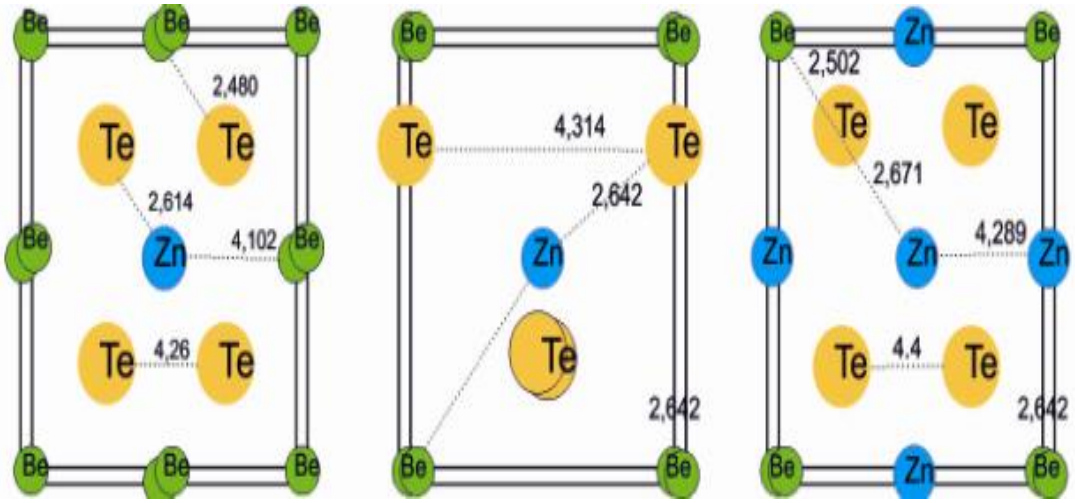
A ve B iki yarıiletken ve yarıiletken alaşımı $A_{1-x}B_xC$ dir, x alaşımın bileşeni veya alaşımın mole kesri A' nın örgü parametresi $a^{A,}$, B'nin örgü parametresi a^B ve alaşımın örgü parametresi de $a^{AB}(x)=xa^A+(1-x)a^B$ olarak ele alınır, bu kanuna vegards kanunu denir. Band aralığı için iki yarı iletken A, B ve alaşım $A_{1-x}B_xC$ düşünülür, A'nın temel band gap E_g^A, B için temel band gap Eg^B ve alaşım için band aralığı $E_g(x) =x E_g^A+ (1-x) Eg^B-x (1-x) E_b$, E_b burada E_b bowing parametresidir ve bowing enerjisi olarak isimlendirilmektedir [41].

7. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, $Be_xZn_{1-x}X$(X=Te, Se, S) alaşımlarının ve $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımlarının bazı yapısal, elektronik, elastik ve optik yoğunluk fonksiyonel teorisindeki (DFT) ab initio metodu ile incelenmiştir. Hesaplamalarda *ab initio* kod olarak CASTEP ve X-ray den alınan sonuçların vegards yasasına bağlı olarak hesaplanmıştır. Yoğunluk fonksiyonel teorisindeki yaklaşım olarak LDA ve GGA kullanılmıştır. Pseudopotensiyeller için ise "Troullier-Martins'in norm conserving pseudopotansiyeli" ve "Vanderbilt'in ultrasoft pseudopotansiyeli" kullanılmıştır. Pseudopotansiyel üretirken elektron dağılımı Be; s^2, Zn; $3d^{10}$ $4s^2$, S; $3s^23p^4$, Se;$4s^2sp^4$, Te; $5s^25p^4$ ve Hg;$5d^{10}6s^2$ şeklinde alınmıştır. Optimizasyon $Be_xZn_{1-x}X$(X=Te, Se, S) için *cut –off* değeri 600 eV, $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ 600 eV, ayrıca $Be_xZn_{1-x}X$(X=Te, Se, S) ve $Be_{1-x-y}Zn_xHg_y$Seiçin 6x6x4 *k-point* için yeterli olmuştur.

7.1. Alaşımların Elekronik ve Yapısal Özellikleri

Alaşımların ve bileşiklerinin denge durumundaki örgü sabitlerini bulmak için, kristallerin toplam enerjileri farklı örgü sabitlerine bağlı olarak hesaplandı. BeTe bileşiğinin, Yüzey merkezli kübik yapısının (F-43m) Birim hücresinde sekiz tane atom (4 tane Be ve 4 tane Te) vardır. Be yerine Zn ilave ettiğimiz zaman $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımında x' in artışına bağlı olarak $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ ve $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ muhtemel kristal yapıları için Basit kübik yapı (P-43m) iken, $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ için basit tetroganal (P4m2) yapıdır. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımında x' in artışına bağlı olarak kristal yapıları ve bağ uzunlukları, Şekil 7.1 ve Çizelge 7.1' de gösterilmişdir. Bağ uzunlukları, Be-Te ve Be-Zn için, x=0,5 de, en büyük değeri alır. Te-Te ve Zn-Te Bağ uzunlukları x arttıkça (x = 0,25- 0,50 ve0,75) artar.



Şekil 7.1. DFT ile elde edilen $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$, $Be_{0,50}Zn_{0,50}Te$ ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$' nin kristal yapıları ve bağ uzunlukları. Alaşımlarının kristal yapıları ve bağ uzunlukları

Çizelge 7.1. $Be_{1-x}Zn_xTe$ için DFT ile elde edilen kristal yapıları ve bağ uzunlukları

$Be_{1-x}Zn_xTe$	Uzay grubu –Yapı	Be-Te(Å)	Zn-Te(Å)	Te-Te(Å)	Zn-Be(Å)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$	P-43m Primitive kübik	2,48	2,61	4,26	4,10
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	2,64	2,64	4,31	4,31
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$	P-43m Primitive kübik	2,50	2,67	4,4	4,28

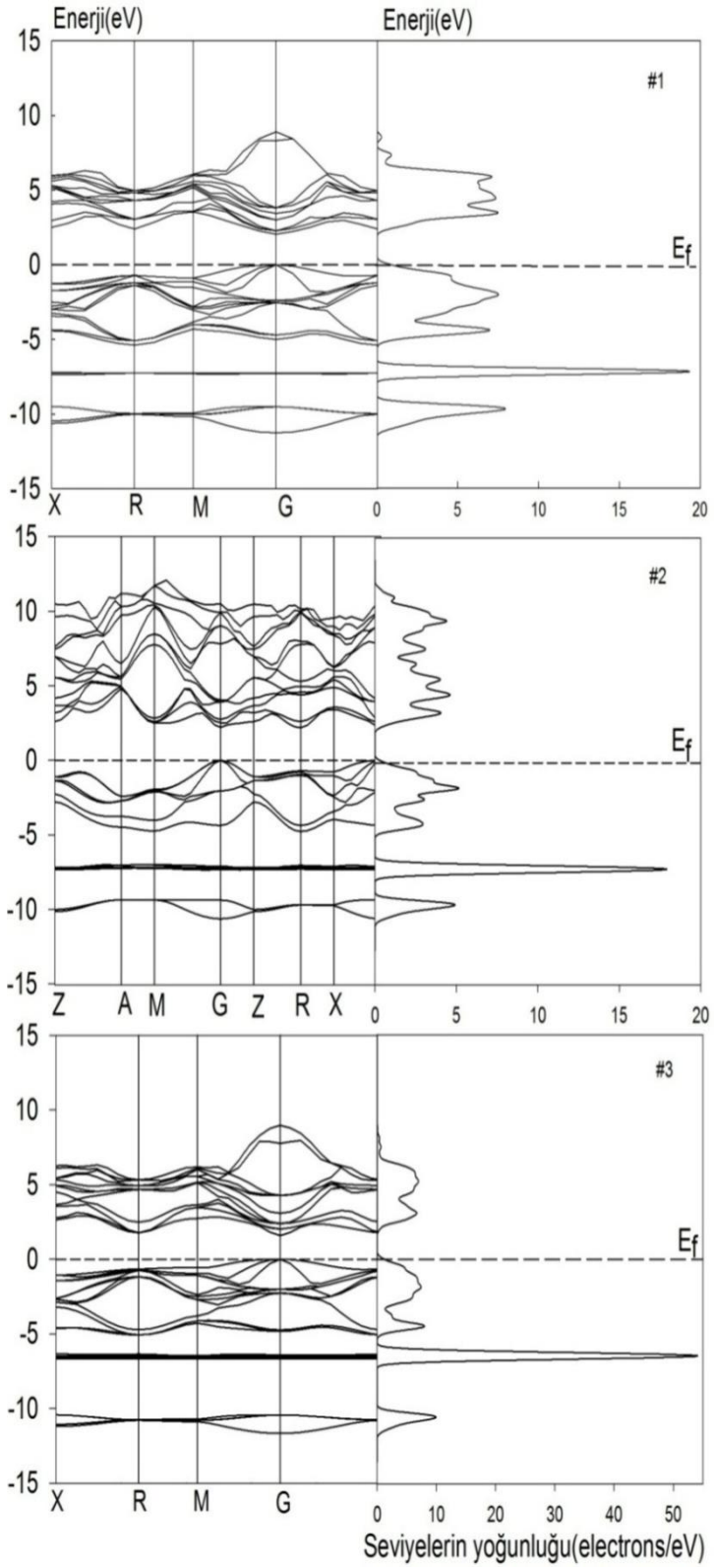
İlk önce DFT ile $Be_{1-x}Zn_xTe$ nin her x değeri için, örgü sabitleri, hücre hacmi ve bulk modülü hesaplandı. Sonuçlar deneysel ve teorik değerlerle birlikte Çizelge 7,2' de gösterildi [90-91]. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için örgü parametreleri sırasıyla Zn, x = 0,25 için 5,80 Å, x=0,5 için 4,31 Å ve 6,10 Å x= 0,75 Å için ise 6,06 Å olarak bulunmuştur. Örgü parametrelerinin daha önce hesaplanan örgü parametreleriyle uyumlu olduğu görülmektedir [88-89]. $Be_{1-x}Zn_xTe$ için bulk modülleri 57,01 GPa - 52,50 GPa ve 45,84 GPa dır. En büyük bulk modülü (57,01GPa) $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ içindir. Sonuç olarak, daha az sıkıştırılabilirdir ve değeri 0,016 1/GPa dır. Sıkıştırılabilirlik x' in artan değerine göre değişmekte ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ <$Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ <$Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ şeklinde sıralanmaktadır.

Çizelge 7.2. $Be_{1-x}Zn_xTe$ içinDFT ile elde edilen, örgü sabitia$_0$, bulk modülü, V hücre hacmi diğer deneysel ve teorik çalışmalar

$Be_{1-x}Zn_xTe$	Uzay grubu -Yapı	a_0(Å)	b_0(Å)	c_0(Å)	V(Å)^3	B(GPa)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$	P-43m Primitive kübik	5,80	5,80	5,80	195,24	57,01
						60,79
		5,80[a]	5,80[a]	5,80[a]	-	64,4[a]
		5,71[b]	5,71[b]	5,71[b]	-	53,27[b]
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	4,31	4,31	6,10	113,54	52,50
		-	-	-		57,55
		5,83[a]	5,83[a]	5,83[a]	-	59,84[a]
		5,93[b]	5,93[b]	5,93[b]	-	49,76[b]
$Be_{0,5}Zn_{0,75}Te$	P-43m Primitive kübik	6,06	6,06	6,06	225,99	45,84
		-	-	-	-	54,84
		6,06[a]	6,06[a]	6,06a	-	46,18[a]
		5,95[b]	5,95[b]	5,95[b]	-	55,57[b]

[a] Referans [90], [b] Referans [91]

$Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için denge konumunda hesaplanan örgü sabitleri kullanılarak, birinci brilloun bölgesinde yüksek simetri yönlerine karşılık gelen elektronik bant yapıları ve bant yapılarına karşılık gelen durum yoğunluğu fonksiyonu (DOS) ve band aralıkları enerjileri, Şekil 7.2' de gösterildi. Bant yapıları ve durum yoğunluklarının uyumlu olduğu görüldü. Bant grafiğinde, enerji değerlerinin yoğun bir şekilde süreklilik gösterdiği bantlarda durum yoğunluğunun (DOS) eğrilerinin keskin pikler meydana getirdiği görüldü.



Şekil 7.2. DFT ile elde edilen, Fermi seviyesinin 0 eV'da x' e bağlı olarak $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ (#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#3) alaşımları için band yapısı ve DOS hesaplandı

Tüm alaşımlar direkt bir bant geçişine sahiptirler ve yarıiletken özellik göstermekteler. Hesaplanan sonuçlar, diğer teorik verilerle [90-91] birlikte Çizelge7.3' de listelendi. Bant profilleri ve bant aralık değerleri daha önceki çalışmalar ile uyum içinde oldukları görülmektedir.

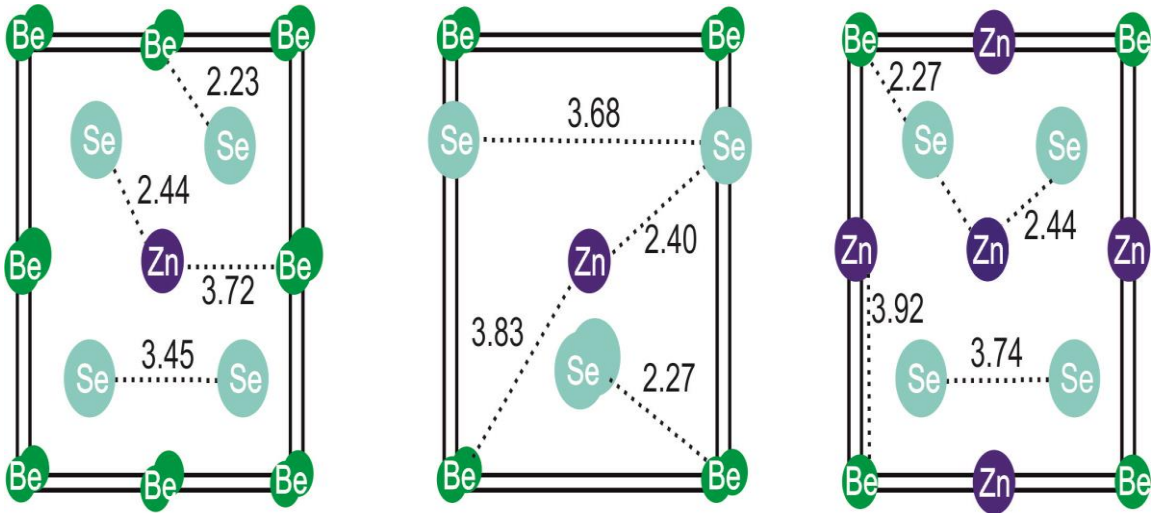
Çizelge 7.3. $Be_{1-x}Zn_xTe$ için DFT ile elde edilen, band aralığı diğer deneysel ve teorik çalışmalar

$Be_{1-x}Zn_xTe$	Uzay grubu -Yapı	E_g(eV)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$	P-43M Primitive kübik	2,07
		1,97[a]
		2,14[b]
$Be_{0,50}Zn_{0,50}Te$	P-4M2 Primitive Tetrogonal	2,18
		2,03[a]
		2,02[b]
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$	P-43M Primitive kübik	1,58
		1,66[a]
		1,49[b]

[a] Referans [90], b Referans [91]

X-ray cihazından alınan veriler vegards yasasının kullanılması ile $Be_{1-x}Zn_xTe$ için bulk modülleri;60,79 GPa-57,55 GPa-54,84 GPa olarak hesaplandı. En büyük bulk modulü (60,79 GPa) $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ içindir, daha az sıkıştırılabilirdir ve değeri 0,016 1/GPa. Sıkıştırılabilirlik x' in artan değerine göre, $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ <$Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ <$Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ olarak değişmektedir.

BeSe bileşiğinin, Yüzey merkezli kübik yapısının (F-43m) Birim hücresinde sekiz tane atom (4 tane Be ve 4 tane Se) vardır. Be yerine Zn ilave ettiğimiz zaman $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımında x in artışına bağlı olarak $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ ve $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ muhtemel kristal yapıları için Basit kübik yapı (P-43m) iken, $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ için basit tetroganal yapıdır (P-4m2). $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımında x' in artışına bağlı olarak kristal yapıları ve bağ uzunlukları, Şekil 7.3 ve Çizelge 7.4' de görülmektedir. Bağ uzunlukları, Be-Se için, x=0,25 dışında, Se-Zn içinse, x=0,5 dışında değişmeden kalmaktadır. Se-Se ve Zn-Be Bağ uzunlukları x artıkça(x = 0,25, 0,50 ve 0,75) artmaktadır.



Şekil 7.3. DFT ile elde edilen $Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$, $Be_{0,50}Zn_{0,50}Se$ ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$' nin Kristal yapıları ve bağ uzunlukları, Alaşımlarının Kristal yapıları ve bağ uzunlukları

Çizelge 7.4. DFT ile elde edilen,$Be_{1-x}Zn_xSe$ Alaşımlarının Kristal yapıları ve bağ uzunlukları

$Be_{1-x}Zn_xSe$	Uzay grubu Yapı	Be-Se(Å)	Zn-Se(Å)	Se-Se(Å)	Zn-Be(Å)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$	P-43mPrimitive kübik	2,23	2,44	3,45	3,72
		2,22[c]	2,38[c]		
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	2,27	2,40	3,68	3,83
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$	P-43m Primitive kübik	2,27	2,44	3,74	3,92
		2,25[c]	2,42[c]		

[c] Referans [100]

DFT ile, $Be_{1-x}Zn_xSe$' nin her x değeri için örgü sabitleri hesaplandı, örgü, sabitleri kullanılarak hücre hacmi ve bulk modülü hesaplandı. Sonuçlar deneysel ve teorik değerlerle birlikte Çizelge7.5'de gösterildi [90-92]. $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımları için, sırasıyla, örgü parametreleri x =0,25 için 5,26Å, x =0,50 için 3,78Å, 3,78Å, 5,49Å ve x =0,75 için 5,54Å olarak bulundu [93-94]. Örgü parametrelerinin daha önce hesaplanan örgü parametreleriyle uyumlu olduğu görüldü. $Be_{1-x}Zn_xSe$ için bulk modülleri 72,58 GPa - 71,02 GPa ve 57,70 GPa'dır. En büyük bulk modülü (72,58GPa) $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ içindir, daha az sıkıştırılabilirdir ve değeri 0,013 1/GPa. Sıkıştırılabilirlik x' in artan değerine göre değişmekte ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ <$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$ <$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$ şeklinde sıralanmaktadır.

X-ray cihazından alınan veriler Vegards yasasında kullanılarak $Be_{1-x}Zn_xSe$ için hesaplanan bulk modülleri; 68.70 GPa, 65.03 GPa, 61.71 GPa olarak hesaplandı. En büyük bulk modülü (68.70 GPa), $Be_{0.75}Zn_{0.25}Se$ içindir, en az sıkıştırılabilirdir ve değeri 0,014 1/GPa' dır. Sıkıştırılabilirlik x' in artan değerine göre, $Be_{0.75}Zn_{0.25}Se$ <$Be_{0.5}Zn_{0.5}Se$ <$Be_{0.25}Zn_{0.75}Se$ olarak değişmektedir.

Çizelge 7.5. DFT ile elde edilen,$Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımlarının örgü sabiti a_0, bulk modülü, V hücre hacmi diğer deneysel ve teorik çalışmalar

$Be_{1-x}Zn_xSe$	Uzay grubu -Yapı	a_0(Å)	b_0(Å)	c_0(Å)	V(Å)^3	B(GPa)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$	P-43m Primitive kübik	5,26	5,26	5,26	146,3	73,58
						68,70
		5,27[d]	5,27[d]	5,27[d]		
		5,35[e]	5,35[e]	5,35[e]		70,13[e]
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	3,78	3,78	5,49	78,9	71,01
						65,03
		5,40[d]	5,40[d]	5,40[d]		
		5,05[e]	5,05[e]	5,05[e]		65,40[e]
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$	P-43m Primitive kübik	5,54	5,54	5,54	170,4	57,74
						61,71
		5,53[d]	5,53[d]	5,53[d]		
		5,63[e]	5,63[e]	5,63[e]		60,81[e]

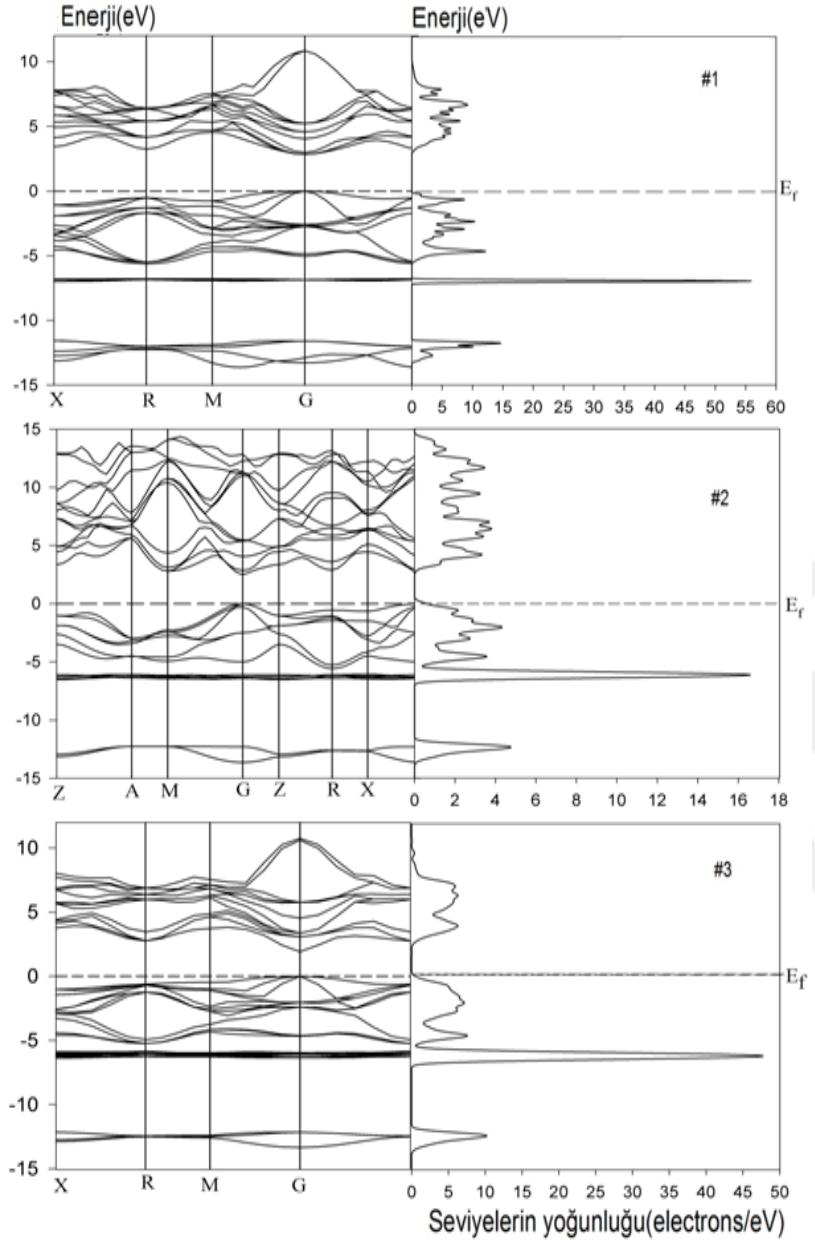
[d] Referans [92],[e]Referans [90]

Çizelge 7.6. DFT ile elde edilen, $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımlarının; band aralığı diğer deneysel ve teorik çalışmalar

$Be_{1-x}Zn_xSe$	Uzay grubu -Yapı	E_g(eV)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$	P-43m Primitive kübik	2,83
		3,35[d]
		2,75[e]
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	2,50
		2,54[d]
		2,27[e]
$Be_{0,5}Zn_{0,75}Se$	P-43m Primitive kübik	1,92
		1,90[d]
		11,64[e]

[d]Referans [92],[e]Referans [90]

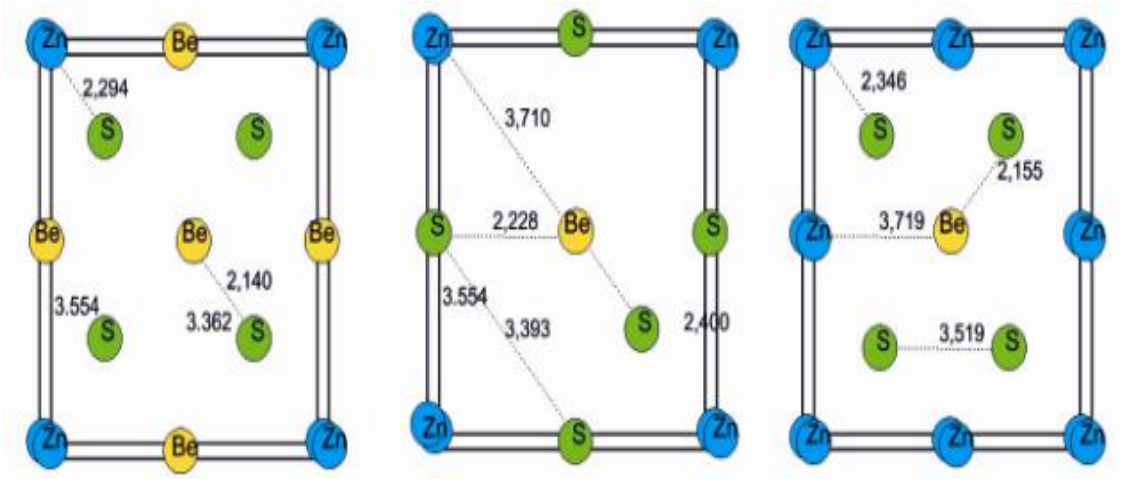
$Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımları için denge konumunda hesaplanan örgü sabitleri kullanılarak, birinci brilloun bölgesinde yüksek simetri noktalarına karşılık gelen elektronik bant yapıları ve bant yapılarına karşılık gelen durum yoğunluğu fonksiyonları (DOS) elde edildi ve Şekil.7.4'de gösterildi. Bant yapıları ile durum yoğunluklarının uyumlu olduğu görüldü. Bant grafiğinde, enerji değerlerinin yoğun bir şekilde süreklilik gösterdiği bantlarda durum yoğunluğunun (DOS) eğrilerinin keskin pikler meydana getirdiği görülmektedir. Tüm alaşımlar direkt bant geçişine sahip, yarıiletken özellik göstermekteler. Hesaplanan sonuçlar, diğer teorik veriler ile birlikte Çizelge7.5' de listelendi [90-92]. Bant profilleri ve band aralık değerleri daha önceki çalışmalar ile uyum içindedir.



Şekil 7.4. DFT ile elde edilen,Fermi seviyesinin 0 eV'da x' e bağlı olarak $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ (#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$ (#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#3) alaşımlar için band yapısı ve DOS hesaplandı

BeS bileşiğinin, Yüzey merkezli kübik yapısının (F-43m) Birim hücresinde sekiz tane atom (4tane Be ve 4tane S) vardır. Be yerine Zn ilave ettiğimiz zaman $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımında x' in artışına bağlı olarak $Be_{0.75}Zn_{0.25}S$ve $Be_{0.25}Zn_{0.75}S$ muhtemel kristal yapıları için Basit kübik yapı (P-43m) iken, $Be_{0.5}Zn_{0.5}S$ için basit tetroganal (P4m2) yapıdır. $Be_{1-x}Zn_xS$ Alaşımında x' in artışına bağlı olarak kristal yapıları ve bağ uzunlukları, Çizelge 7.7 ve Şekil 7.5' de gösterilmişdir. Bağ uzunlukları, Be-S için, x=0,25 dışında, S-Zn içinse,

x=0,5 dışında değişmeden kalır. S-S ve Zn-Be Bağ uzunlukları x artıkça (x =0,25, 0,50 ve 0,75) artmaktadır.



Şekil 7.5. DFT ile elde edilen $Be_{0,25}Zn_{0,75}S$, $Be_{0,50}Zn_{0,50}S$ ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$' nin Kristal yapıları ve bağ uzunlukları.Alaşımlarının Kristal yapıları ve bağ uzunlukları

Çizelge 7.7. DFT ile elde edilen,$Be_{1-x}Zn_xS$Alaşımları için Bağ uzunlukları ve kristal yapıları.

$Be_{1-x}Zn_xS$	Uzay grubu Yapı	Be-S(Å)	Zn-S(Å)	S-S(Å)	Zn-Be(Å)
$Be_{0.75}Zn_{0,25}S$	P-43m Primitive kübik	2,14	2,30	3,36	3,55
$Be_{0,5}Zn_{0,5}S$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	2,12	2,40	3,39	3,71
$Be_{0,25}Zn_{0,75}S$	P-43m Primitive kübik	2,15	2,34	3,51	3,74

DFT ile $Be_{1-x}Zn_xS$ nin her x (Zn) değeri için, örgü sabitleri, hücre hacmi ve bulk modülü hesaplandı. Sonuçlar deneysel ve teorik değerlerle birlikte Çizelge 7.8' de gösterildi [90,93-94]. $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için örgü parametreleri sırasıyla x = 0,25 için 5,02, x=0,5 için 3,63 ve 5,35, x= 0,75 için ise 5,30 Å olarak bulundu. Örgü parametrelerinin daha önce hesaplanan örgü parametreleriyle uyumlu olduğu görüldü [93-94]. $Be_{1-x}Zn_xS$ için bulk modülleri; x= 0,5 için 88,53 GPa, x=0,50 için 75,38 GPa ve x=0.75 için 73,72 GPa' dır. En büyük bulk modulü (88,53GPa) $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$ içindir. Sonuç olarak, daha az sıkıştırılabilirdir ve değeri 0,013 1/GPa' dır. Sıkıştırılabilirlik x' in artan değerine göre değişir, $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$<$Be_{0,5}Zn_{0,5}S$ <$Be_{0,25}Zn_{0,75}S$ dir. X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasasına göre yapılan hesaplamalarda Çizelge 7.8'de gösterildiği gibi

$Be_{1-x}Zn_xS$ için bulk modülleri; x= 0,5 için 88,97 GPa, x=0,50 için 85,31 GPa ve x=0.75 için 81,71 GPa olarak hesaplandı. En büyük bulk modulü (88,97 GPa) $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$ içindir, daha az sıkıştırılabilirdir ve değeri 0,0112 1/GPa dır. Sıkıştırılabilirlik x' in artan değerine göre, $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$ <$Be_{0,5}Zn_{0,5}S$ <$Be_{0,25}Zn_{0,75}S$ olarak değişir.

Çizelge 7.8. DFT ile elde edilen, $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için örgü sabitia$_0$, bulk modülü, V hücrehacmi diğer deneysel ve teorik çalışmalar

$Be_{1-x}Zn_xS$	Uzay grubu –Yapı	a_0(Å)	b_0(Å)	c_0(Å)	V(Å)^3	B(GPa)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}S$	P-43m Primitive kübik	5,02	5,02	5,02	127,0	88,53
						88,97
		5,06[a]	5,06[a]	5,06[a]	-	86,60
		4,98[b]	4,98[b]	4,98[b]	-	92,63[b]
$Be_{0,5}Zn_{0,5}S$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	3,63	3,63	5,35	70,65	75,38
		-	-	-		85,31
		5,21[b]	5,21[b]	5,21[b]	-	80,74
		5,11[e]	5,11[e]	5,11[e]	-	89,10[e]
$Be_{025}Zn_{075}S$	P-43m Primitive kübik	5,30	5,30	5,30	149,0	73,72
		-	-	-	-	81,71
		5,33[b]	5,33[b]	5,33[b]	-	74,58[b]
		5,23[e]	5,23[e]	5,23[e]	-	83,06[e]

[a] Referans [90],[b]Referans [91], [e]Referans [90]

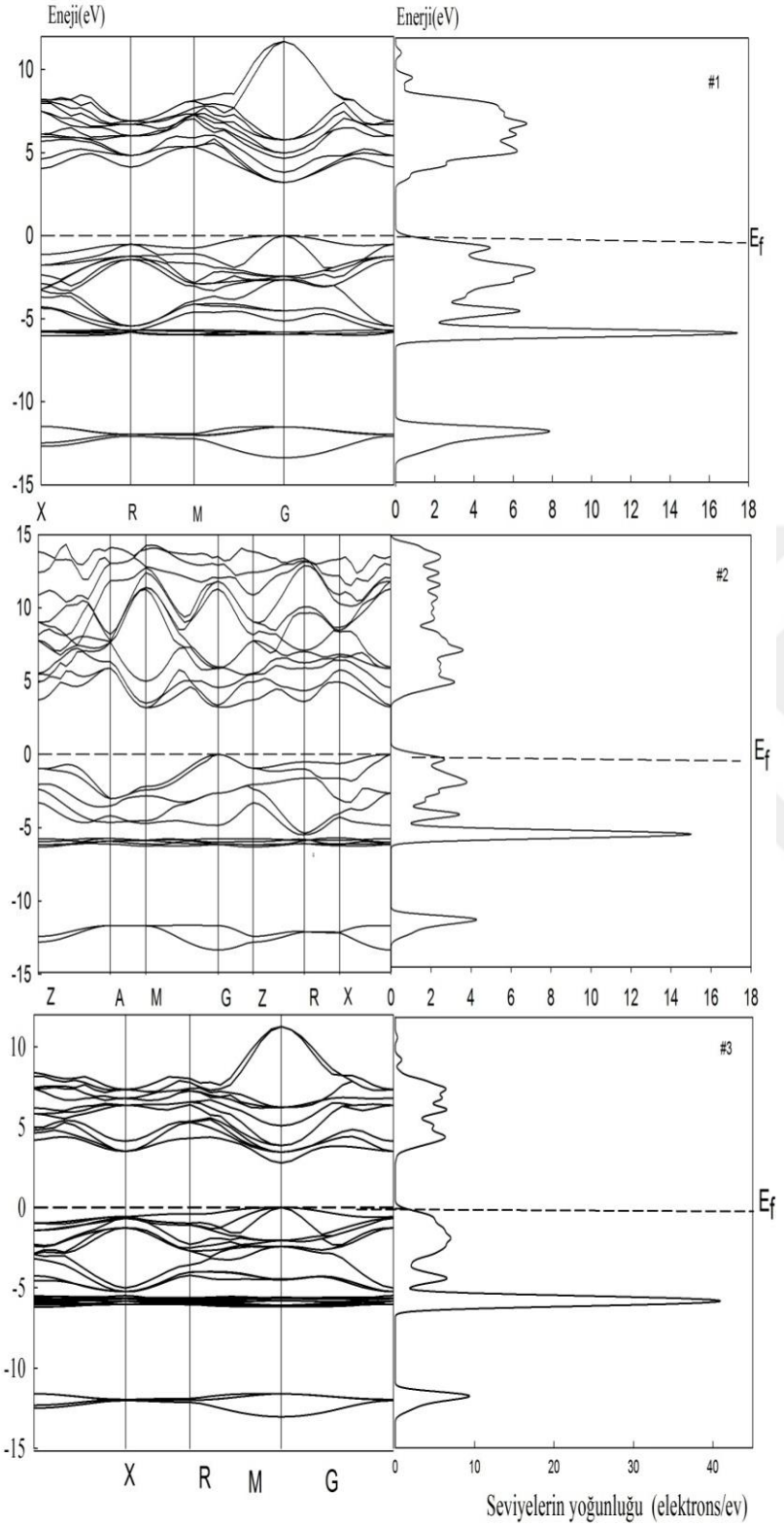
$Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için denge konumunda hesaplanan örgü sabitleri kullanılarak, birinci brilloun bölgesinde yüksek simetri yönlerine karşılık gelen elektronik bant yapıları ve bant yapılarına karşılık gelen durum yoğunluğu fonksiyonu (DOS) elde edilerek. Şekil 7-6' da gösterildi. Bant yapıları ve durum yoğunluklarının uyumlu olduğu görüldü. Bant grafiğinde, enerji değerlerinin yoğun bir şekilde süreklilik gösterdiği bantlarda durum yogunluğunun (DOS) eğrilerinin keskin pikler meydana getirdiği görülmektedir.

Tüm alaşımlar direkt bir bant geçişine sahip, yarı iletken özellik göstermektedirler. Hesaplanan sonuçlar, diğer teorik verilerle [61,95] birlikte Çizelge 7.9' da listelendi. Bant profilleri ve band aralık değerleri daha önceki çalışmalar ile uyum içindedir. $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımının x (x=0,25-0,5-0,75) karşılık gelen band gap enerjileri Şekil 7.6' da gösterilmiştir. Yasak band aralığı x artıkça azalış eğilimi sergilediği görüldü.

Çizelge 7.9. DFT ile elde edilen, $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için band gap diğer deneysel ve teorik çalışmalar

$Be_{1-x}Zn_xS$	Uzay grubu -Yapı	E_g(eV)
$Be_{0.75}Zn_{0.25}S$	P-43m Primitive kübik	3,20
		3,19[a]
		2,94[b]
$Be_{0.5}Zn_{0.5}S$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	3,18
		3,22[a]
		2,95[b]
$Be_{0.25}Zn_{0.75}S$	P-43m Primitive kübik	2,76
		2,58[a]
		2,81[b]

[a]Referans [90], [b]Referans [91]



Şekil 7.6. Fermi seviyesinin 0 eVda x' e bağlı olarak $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#3) alaşımları için band yapısı ve DOS hesaplandı

BeSe bileşiğinin, Yüzey merkezli kübik yapısının (F-43m) Birim hücresinde sekiz tane atom (4 tane Be ve 4 tane Te) vardır. Be yerine Zn ve Hg ilave ettiğimiz zaman $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımında x ve y'nin artışına bağlı olarak $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,50}Se$, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Be$ ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ için muhtemel kristal yapıları tetroganal (P-4m2) yapıdadır. $Be_{-x-y}Zn_xHg_ySe$ Alaşımında x ve y' nin artışına bağlı olarak kristal yapıları ve bağ uzunlukları, Çizelge7.10'da gösterildi. Bağ uzunlukları, $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşıma, Zn ve Hg ekledikçe artmaktadır, Hg miktarı fazla iken bağ uzunluğa en uzun, Be miktarı fazla iken bağ uzunluğu en kısadır.

Çizelge 7.10. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için Kristal yapıları ve bağuzunlukları

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$	Uzay Grubu Yapı	Be-Se(Å)	Zn-Se(Å)	Hg-Se(Å)	Hg-Be(Å)
$Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,50}Se$	P-4m2 Tetrogonal	2,640	5,095	2,640	4,104
$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$	P-4m2 Tetrogonal	2,252	4,657	2,630	4,024
$Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Be$	P-4m2 Tetrogonal	2,249	4,445	2,594	3,946

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ nin her x ve y değeri için, örgü sabitleri, hücre hacmi ve bulk modülünü DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesaplanan sonuçlar, Çizelge 7.11' de gösterildi. Örgü parametrelerinin DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesaplananan sonuçlar ile uyumlu olduğu görüldü, DFT ile hesaplanan sonuçlar sırasıyla (x=0,25, y=0,25), (x=0,5, y=0,25) ve (x=0,25, y=0,5) için hesaplanan bulk modülü 63,45 GPa, 57,02 GPa ve 55,37 GPa' dır. En büyük bulk modülü (63,45 GPa) $Be_{0,5}Zn_{02,5}Hg_{0,25}Se$ için dir en az sıkıştırılabilirdir ve değeri 0,0157 1/GPa' dır. Sıkıştırılabilirlik x ve y' nin değerine göre değişir, $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$> $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$> $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$' dir. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımı için, X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak Vegards yasası ile hesaplanan sonuçlar; (x=0,25, y=0,25), (x=0,5, y=0,25) ve (x=0,25, y=0,5) için hesaplanan bulk modülü 67,03 GPa, 62,65 GPa ve 58,57 GPa' dır. En büyük değere sahip bulk modülü (67,03 GPa) ile $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ içindir en az sıkıştırılabilirdir ve değeri 0,0150 1/GPa' dır. X ve y' nin değerine göre, sıkıştırılabilirlik $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$> $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$> $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ şeklinde sıralanır.

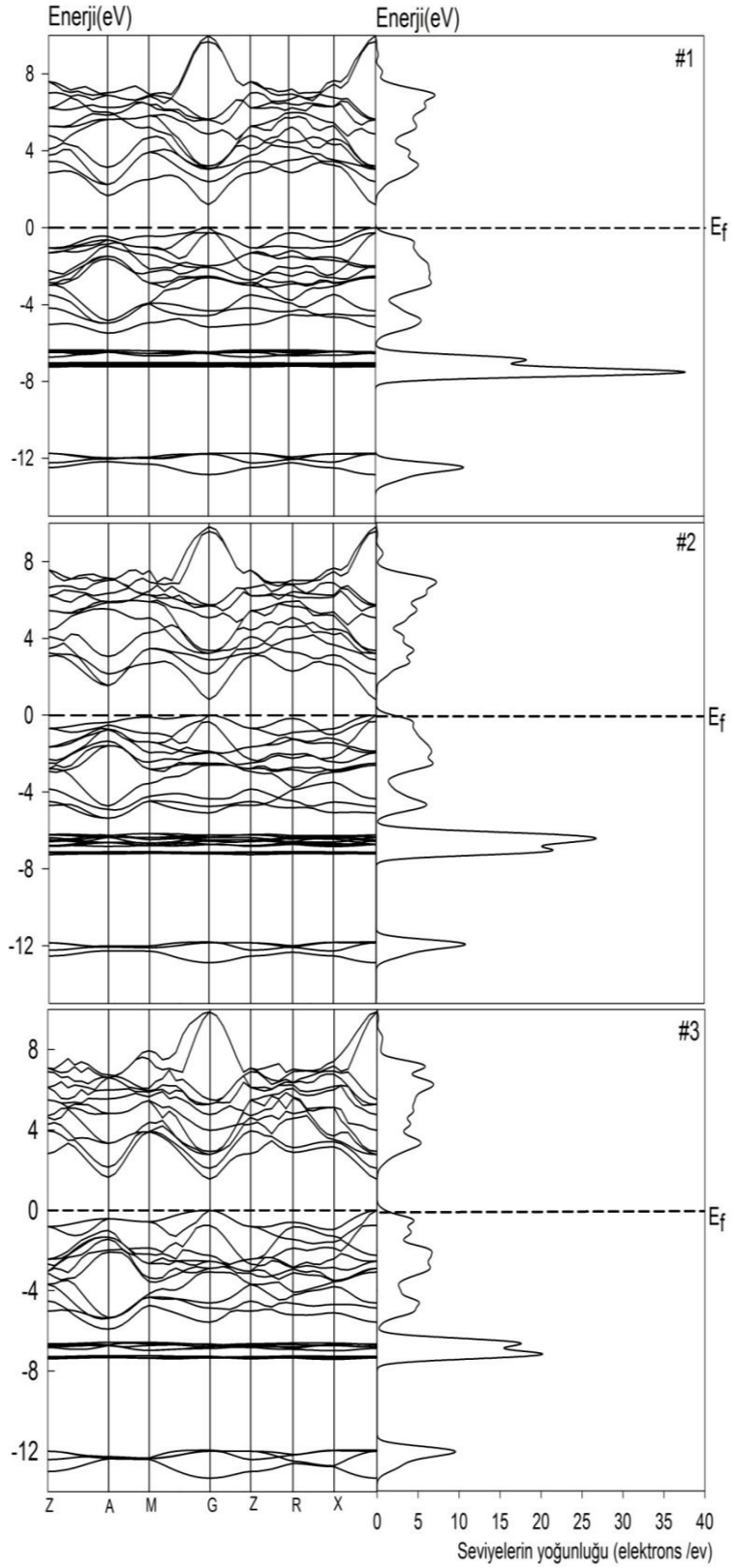
Çizelge 7.11. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için örgü sabiti(a_o), bulk modülü (B), (V) hücre hacmi diğer deneysel ve teorik çalışmalar

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$	Uzay Grubu Yapı	a_0(Å)	b_0(Å)	c_0(Å)	V(Å)^3	B(GPa)
$Be_{0.25}Zn_{0,25}Hg_{0,50}Se$	P-4m2 Tetrogonal	5,76	5,76	5,84	194,4	55,37
	P-43m kübik	5,74	5,74	5,74	189,1	58,57
$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$	P-4m2 Tetrogonal	5,74	5,74	5,69	188,1	57,02
	P-43m kübik	5,63	5,63	5,63	178,5	62,65
$Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$	P-4m2 Tetrogonal	5,43	5,43	5,72	169,1	63,45
	P-43m kübik	5,50	5,50	5,50	166,4	67,03

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için denge konumunda hesaplanan örgü sabitleri kullanılarak, birinci brilloun bölgesinde yüksek simetri yönlerine karşılık gelen elektronik bant yapıları ve bant yapılarına karşılık gelen durum yoğunluğu fonksiyonu (DOS) elde edilerek. Şekil 7.7' de gösterildi. Bant yapıları ve durum yoğunluklarının uyumlu olduğu görüldü. Bant grafiğin de, enerji değerlerinin yoğun bir şekilde süreklilik gösterdiği bantlarda durum yoğunluğunun (DOS) eğrilerinin keskin pikler meydana getirdiği görülmektedir. Tüm alaşımlar direkt bir bant geçişine sahip, yarı iletken özellik göstermektedirler ve hesaplanan sonuçlar, Çizelge 7.12' de listelendi. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımının x ve y' ye karşılık gelen band aralığı enerjileri Şekil 7.7' de gösterildi.

Çizelge 7.12. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için band gap

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$	Uzay grubu –Yapı	E_g(eV)
$Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,50}Se$	P-4m2 Tetrogonal	0,81
	P-43m kübik	0,86
$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$	P-4m2 Tetrogonal	1,20
	P-43m kübik	1,25
$Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$	P-4m2 Tetrogonal	1,55
	P-43m kübik	1,58



Şekil 7.7. Fermi seviyesinin 0 eV'da x'e bağlı olarak $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ (#1), $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (#2), ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{02,5}Se$(#3), alaşımları için Band yapısı ve DOS hesaplandı

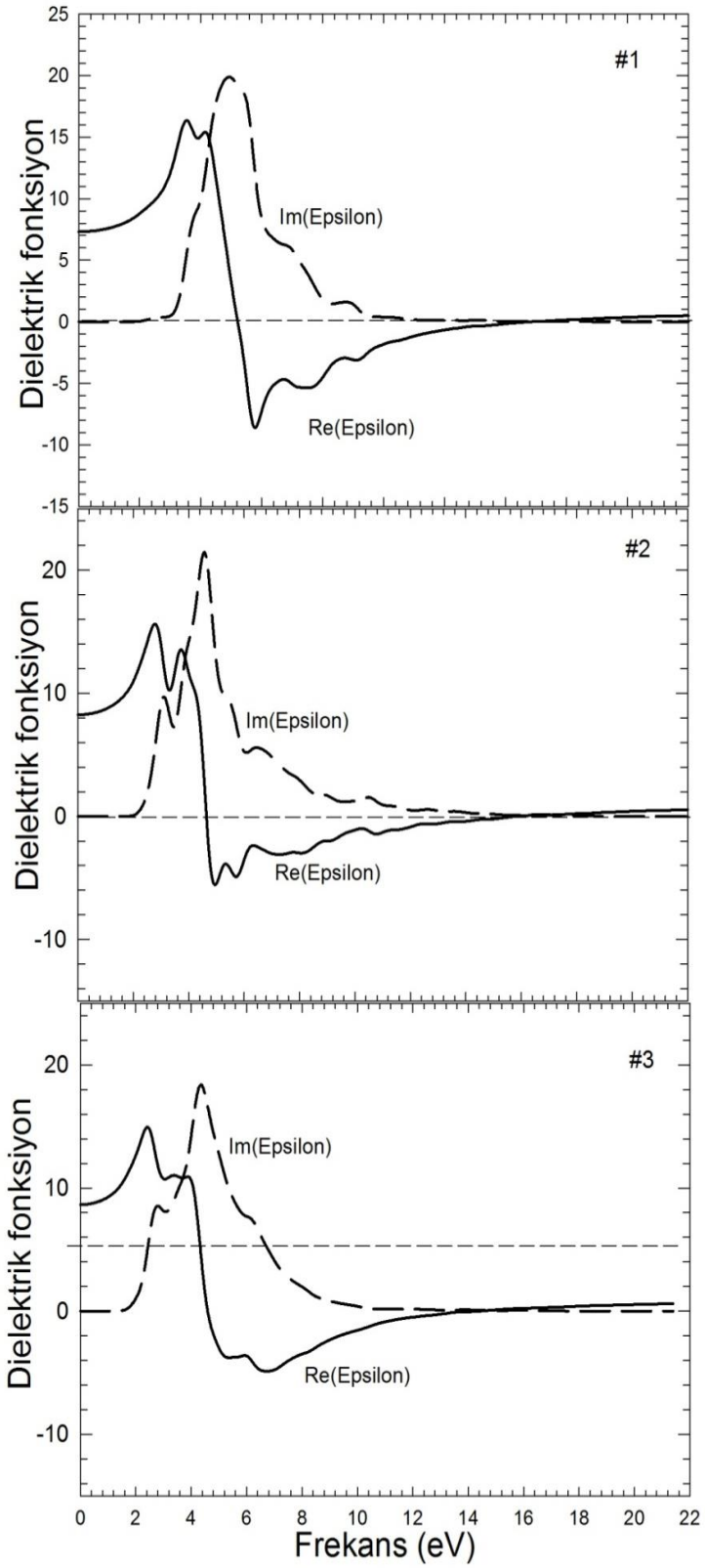
7.2. Alaşımların Optiksel Özellikleri

Bu kısmındaBe$_x$Zn$_{1-x}$X(X=Te, Se ve S) ve Be$_{1-x-y}$Zn$_x$Hg$_y$Se alaşımlarının optik özellikleri; statik dielektrik sabitleri, kırılma indisleri, soğurma katsayıları ve plasmon frekans değerleri, x ve y nin değişen değerlerine göre hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçların birçoğu bu çalışmada ilk defa hesaplanmıştır.

7.2.1. Alaşımların dielektrik sabitleri

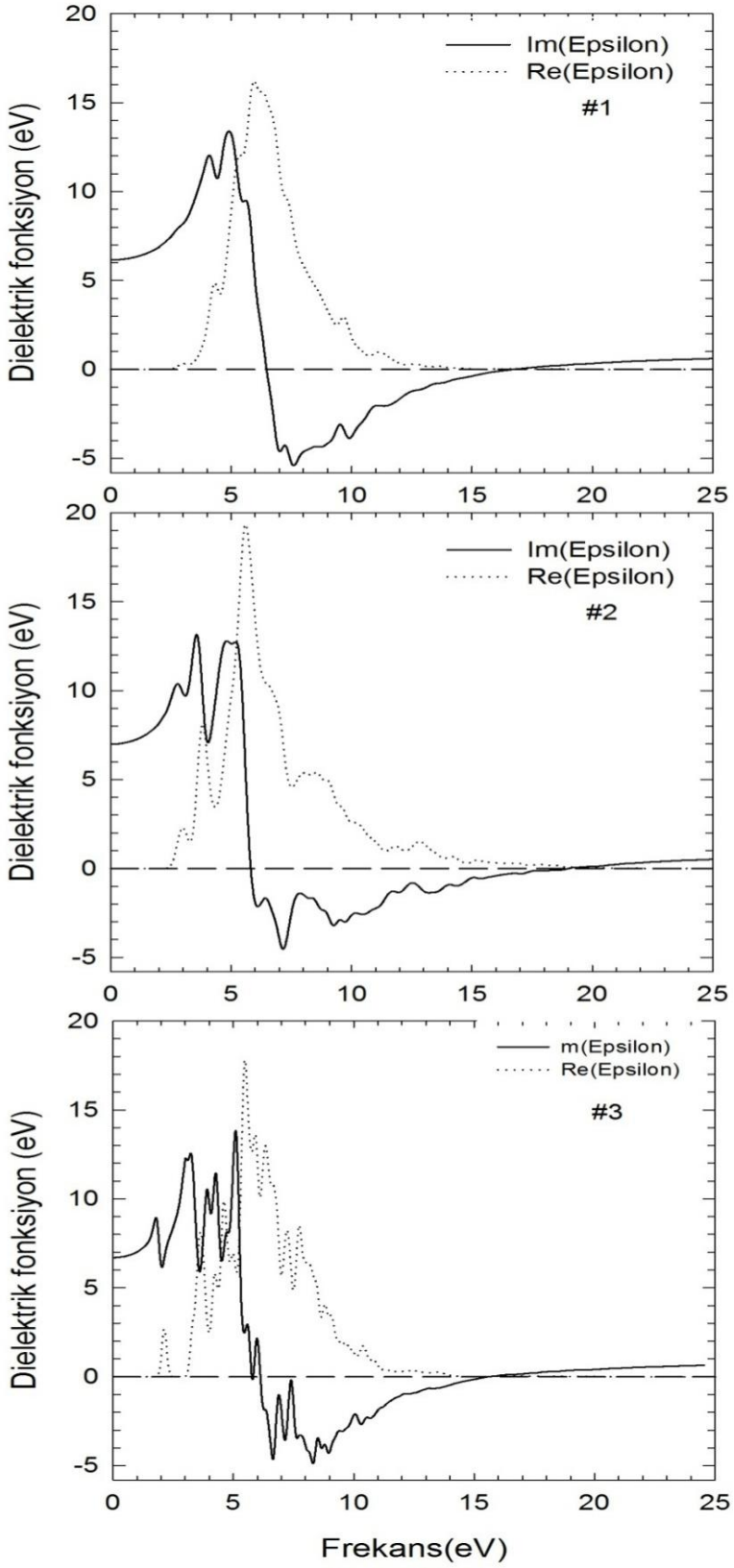
Be$_{1-x}$Zn$_x$X(Te,S,Se) ve Be$_{1-x-y}$Zn$_x$Hg$_y$Seiçin Dielektrik fonksiyonun imajiner kısmının soğurmaya başladığı değer Γ_v-Γ_c yarılmasını verir ve iletkenlik bandıyla valans bandı arasındaki doğrusal optik geçişi temsil eder. Ayrıca bu değerler bant aralığı enerjisiyle aynı değerlere sahiptir [96]. Be$_x$Zn$_{1-x}$Te için dielektrik fonksiyonun reel kısmı ve imajiner kısmı Şekil.7.8'de verilmiştir. Benzer şekiller Be$_x$Zn$_{1-x}$Se için Şekil 7.9'da, Be$_x$Zn$_{1-x}$S için Şekil 7.10'dave Be$_{1-x-y}$Zn$_x$Hg$_y$Se için Şekil 7.11'de gösterildi.

Be$_{1-x}$Zn$_x$Te için Şekil7.8'de gösterildiği gibi; Dielektrik fonksiyonunun reel kısmının ana pikleri x=0,25-0,50-0,75 katkılama değerleri için sırayla 3,54- 2,79-2,37 eV dir. $\varepsilon_1(w)$= 0 frekans değeri için 7,29-8,43 ve 8,75 eV sırasıyla x=0,25-0,50-0,75 için statik dielektrik sabitini verir. Dielekrik sabitinin imajiner kısmı; katkılama değerlerine göre 2,04-2,11-1,58 eV civarında ışınımı soğurmaya başlar, bu değerler bant aralığı enerjisine yakın değerlere sahiptir, iletkenlik bandı ile valans bandı arasında ki optik geçişi temsil eder, dispersiyon eğrisinin yükselmeye başladığı değere kadar alaşım saydam bir madde gibi davranır ve dispersiyonun az olduğu bölgedir, dielektrik sabitinin imajiner kısmının maksimum olduğu değerler x=0,25-0,50-0,75 katkılama değerleri için sırayla 4,96- 4,5- 4,37 eV dir, bu değerler interband geçişlerine karşılık gelmektedir [97-98].



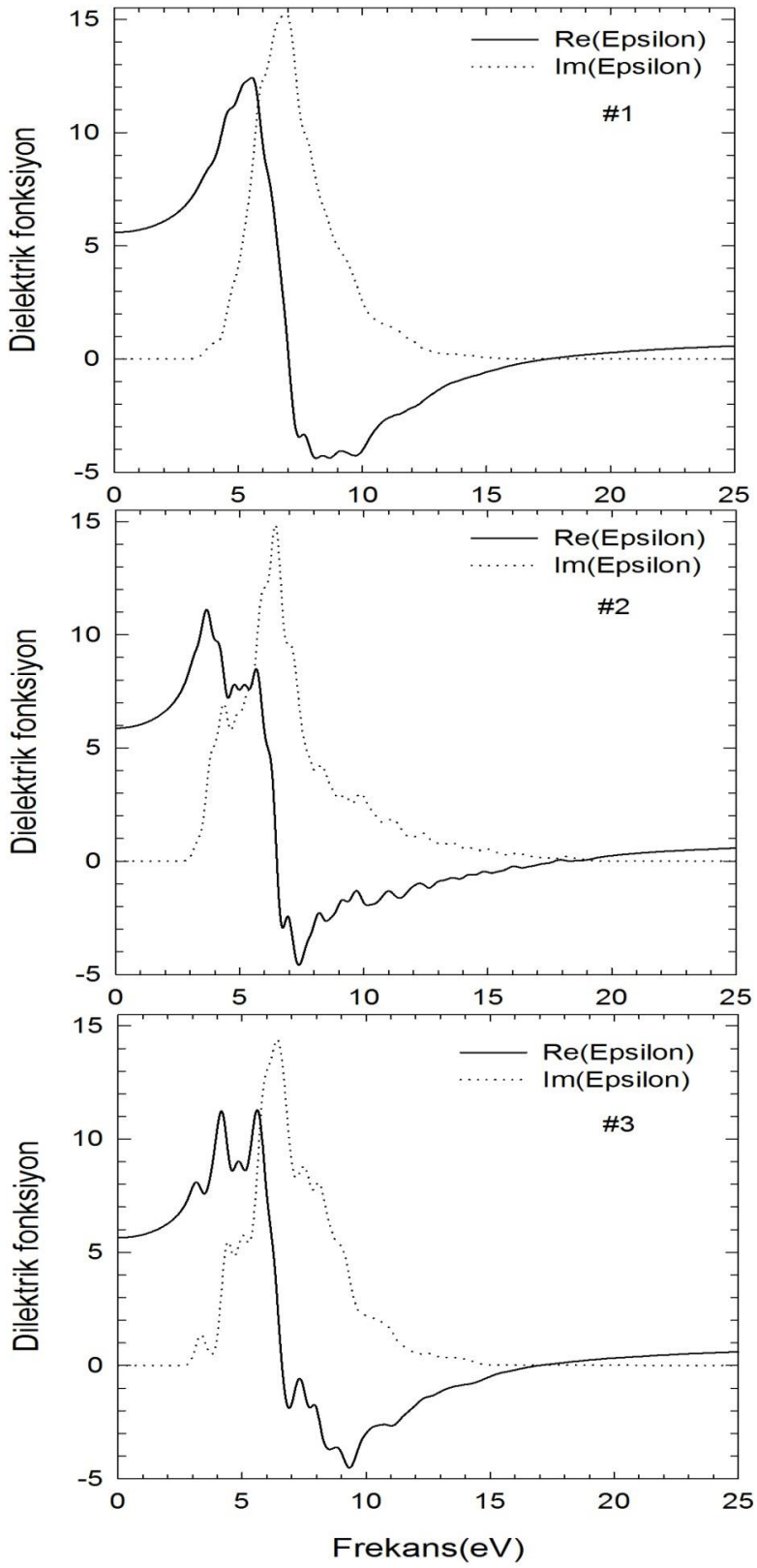
Şekil 7.8. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$(#3) alaşımları için dielektrik sabitinin reel ve imaginary kısımları

Şekil 7.9’ da gösterildiği gibi $Be_{1-x}Zn_xSe$ için; dielektrik fonksiyonunun reel kısmının ana pikleri x=0,25-0,50-0,75 katkılama değerleri için sırayla 4,89- 3,54-5,15 eV dir. $\varepsilon_1(w)= 0$ frekans değeri için 6,24 -6,96 -6,78 eV sırasıyla x=0,25-0,50-0,75 için statik dielektrik sabitini verir. Dielekrik sabitinin imajiner kısmı; x=0,25 için 2,71, x=0,50 için 2,47 ve x=0,75 için1,9 eV civarında ışınımı soğurmaya başlar, bu değerler bant aralığı enerjisine yakın değerlere sahiptir, iletkenlik bandı ile valans bandı arasında ki optik geçişi temsil eder, dispersiyon eğrisinin yükselmeye başladığı değere kadar alaşım saydam bir madde gibi davranır ve dispersiyonun az olduğu bölgedir, dielektrik sabitinin imajiner kısmının maksimum olduğu değerler x=0,25-0,50-0,75 katkılama değerleri için sırayla 6,0 - 5,6 -5,4 eV dir, bu değerler interband geçişlerine karşılık gelmektedir [97-98].



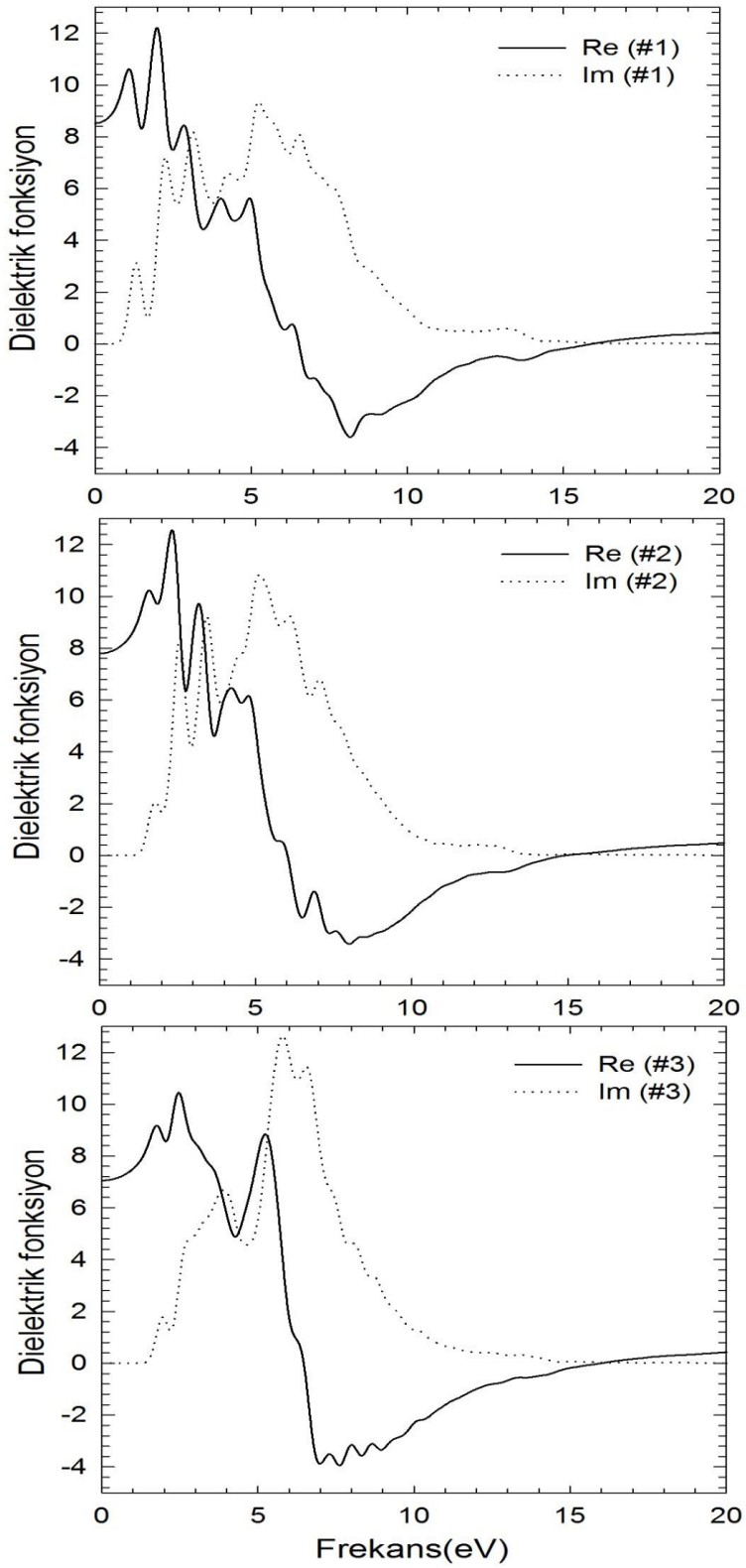
Şekil 7.9. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ (#3) alaşımları için dielektrik sabitinin reel ve imaginary kısımları

$Be_{1-x}Zn_xS$ için dielektrik fonksiyonunun reel kısmının ana pikleri x=0,25-0,50-0,75 katkılama değerleri için sırayla 6,93- 6,99-6,20 eV dir. Şekil 7.10' da gösterilmiştir. x=0,25-0,50-0,75 için $\varepsilon_1(w)= 0$ frekans değerinde statik dielektrik sabiti 5,62-5,93 -5,64 eV olarak hesaplandı. Dielekrik sabitinin imajiner kısmı; katkılama değerlerine göre 3,23-3,19-2,8 eV civarında ışınımı soğurmaya başlar, bu değerler bant aralığı enerjisine yakın değerlere sahiptir, iletkenlik bandı ile valans bandı arasında ki optik geçişi temsil eder, dispersiyon eğrisinin yükselmeye başladığı değere kadar alaşım saydam bir madde gibi davranır ve dispersiyonun az olduğu bölgedir, dielektrik sabitinin imajiner kısmının maksimum olduğu değerler x=0,25-0,50-0,75 katkılama değerleri için sırayla 5,27- 3,9-5,4 eV dir, bu değerler interband geçişlerine karşılık gelmektedir [81,97].



Şekil 7.10. $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#3) alaşımları için dielektrik sabitinin reel ve imaginary kısımları

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ için Şekil 7.11'de gösterildiği gibi; Dielektrik fonksiyonunun reel kısmının ana pikleri $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ için 1,98 eV, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için 2,3 eV ve $Be_{0,5}Zn_{0,5}Hg_{0,25}$ Se için 2,51 eV dur. $\varepsilon_1(0)$, frekans değerleri $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ için 7,72 eV, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Te$ 8,87 eV ve $Be_{0,5}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için 7,12 eV statik dielektrik sabitini verir. Dielekrik sabitinin imajiner kısmı; katkılama değerlerine göre $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ için 0,85 eV, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için 1,28 eV ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ için 1,55 eV civarında ışınımı soğurmaya başlar, bu değerler bant aralığı enerjisine yakın değerlere sahiptir, iletkenlik bandı ile valans bandı arasında ki optik geçişi temsil eder, dispersiyon eğrisinin yükselmeye başladığı değere kadar alaşım saydam bir madde gibi davranır ve dispersiyonun az olduğu bölgedir, dielektrik sabitinin imajiner kısmının maksimum olduğu değerler sırayla $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için, 5,25 eV, $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ için 5,32 eV ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{02,5}Se$ için 5,89 eV dur. Bu değerler interband geçişlerine karşılık gelmektedir [80,97].



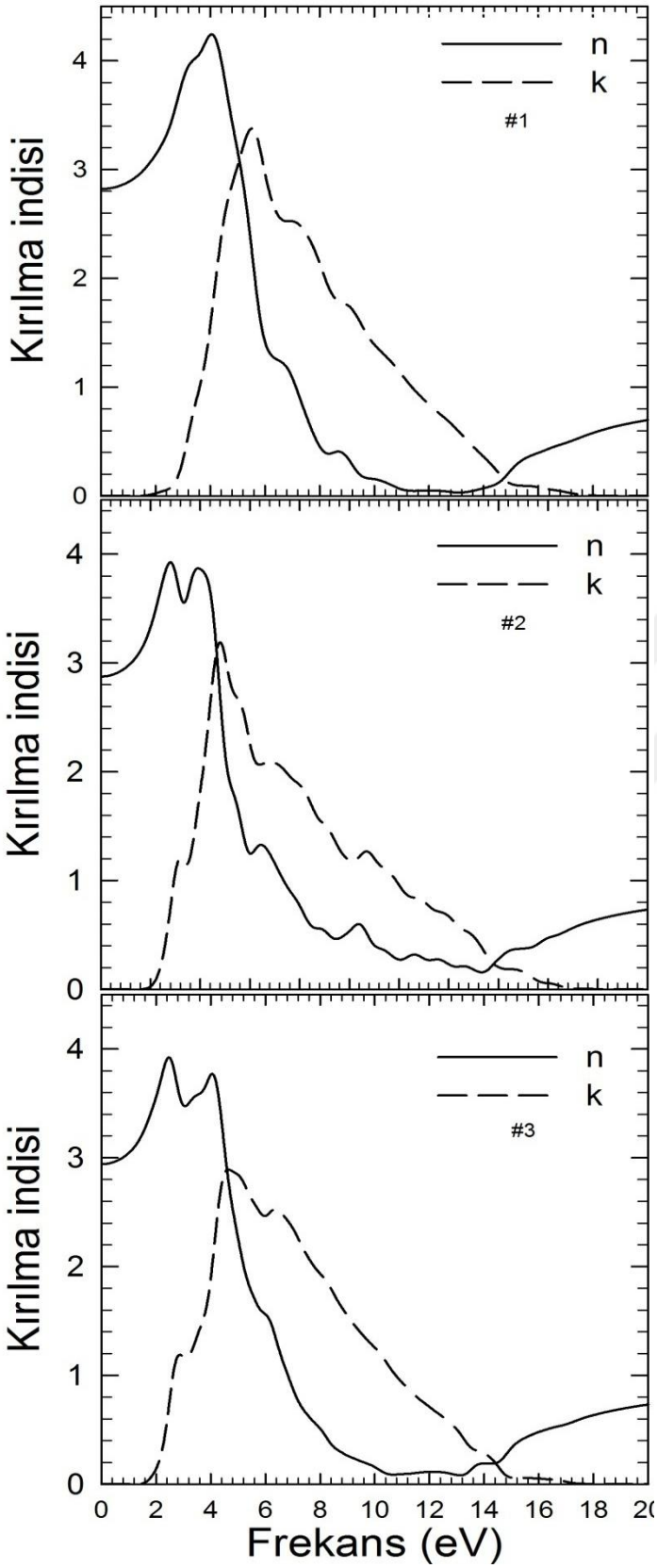
Şekil 7.11. $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$(#1), $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (#2) ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{02,5}Se$ (#3)alaşımların için dielektrik sabitininreel ve imaginary kısımları

7.2.2. Alaşımların kırılma ve soğurma katsayısı

Kırılma indisi n(w) ve soğurma katsayısı k(w)' nin nasıl hesaplandığı Bölüm 6' da verildi. Kırılma indisi n(w) ve soğurma katsayısı k(w)' nin değişimleri $Be_xZn_{1-x}Te$ için Şekil.7-12' de, $Be_xZn_{1-x}Se$ için Şekil.7-13' de ve $Be_xZn_{1-x}S$ için ise Şekil. 7-14' de gösterildi.

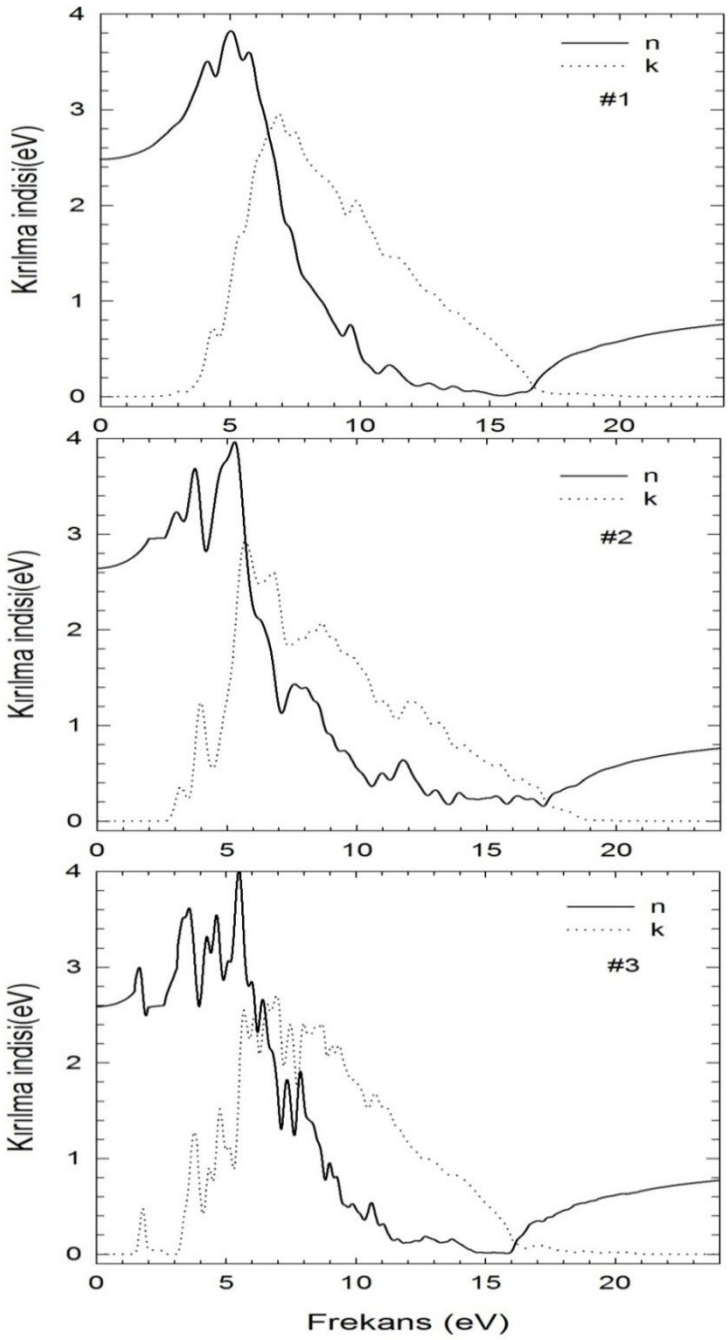
Kırılma indisinin n(ω), maksimum olduğu bölgeler geçirgen bölgeyi gösterirken, n(ω)'nin sıfır enerji değeri, kırılma indisinin enerji değerine eşittir. Sıfır değerine karşılık gelen n(0)'nın karesi, statik reel dielektrik sabiti $\varepsilon_1(0)$ değerine eşittir. Tüm alaşımlar için $\varepsilon_1(0)$ değeri ile $[n(0)]^2$'nın uyumlu olduğuve alaşımların sönüm katsayısı k(ω)' nın maksimum değerler ile $\varepsilon_1(\omega)$' nin sıfır değerine karşılık gelen statik dielektrik sabiti uyumlu olduğu görüldü. $Be_{1-x}Zn_xTe$ için kırılma indisinin dispersiyon eğrileri, her x bileşeni için, n (0) da ki kırılma indisleri 2, 85-2, 89-2, 95 olarak bulundu ve şekil 7.12' de gösterildi. Zn miktarı artıkça kırılma indisi artmaktadır.

$Be_{1-x}Zn_xTe$ için x katkılama değerlerine göre sırayla sönüm katsayı değerleri, 2,04-2,11-1,58 eV olarak hesaplandı. Dielektrik fonksiyonun reel kısmı ile kırılma fonksiyonun dielektrik imajiner kısmı ile sönüm katsayısının bir biri ile uyumlu olduğu görüldü.



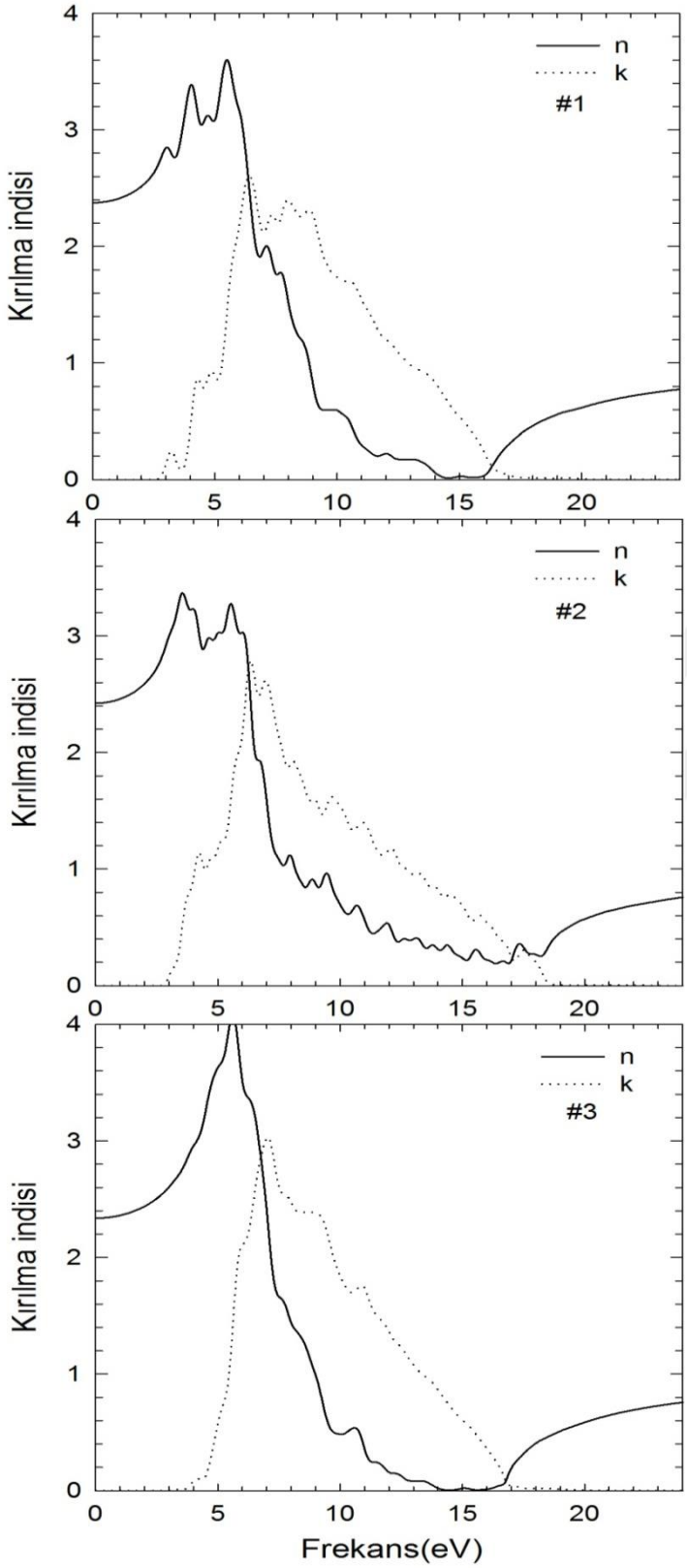
Şekil 7.12. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#3) alaşımları için kırılma (n) sabiti ve sönüm (k) sabiti

$Be_{1-x}Zn_xSe$ için kırılma indisinin dispersiyon eğrileri, x=0,25-0,50 ve 0,75 bileşenleri için, n(0)' da ki kırılma indisleri 2,48-2,66-2,59 olarak bulundu ve şekil 7.13'de gösterildi. Zn değeri artıkça kırılma indisi değişmektedir.$Be_{1-x}Zn_xSe$ için x=0,25-0,50 ve 0,75 katkılama değerlerine göre sırayla sönüm katsayı değerleri, 2,8-2,5-1,9 olarak hesaplandı. Dielektrik fonksiyonun reel kısmı ile kırılma katsayısı, dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı ile sönüm katsayısı bir biri ile uyumlu olduğu görüldü.



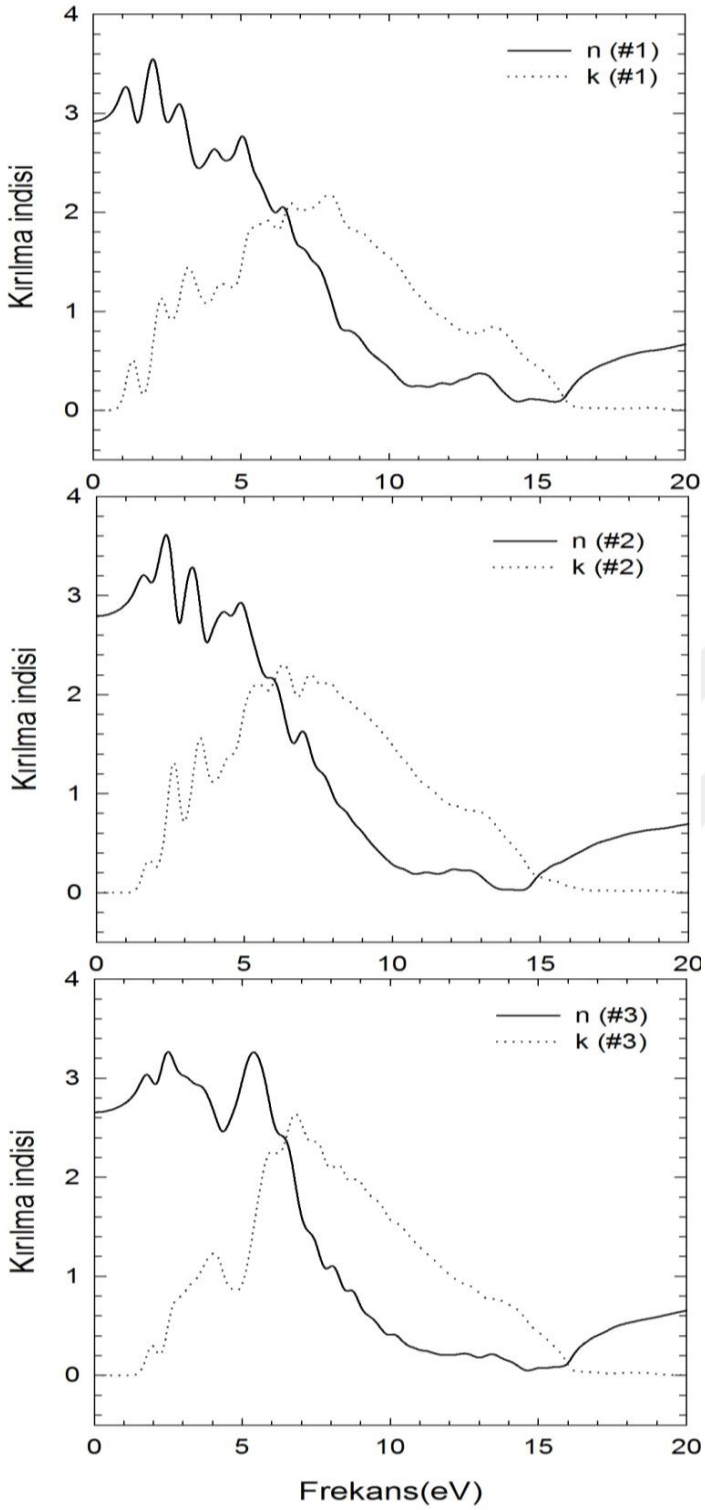
Şekil 7.13. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#3) alaşımları için kırılma (n) sabiti ve sönüm (k) sabiti

$Be_{1-x}Zn_xS$ için kırılma indisinin dispersiyon eğrileri, x=0,25-0,50 ve 0,75 bileşenleri için, n (0)' da ki kırılma indisleri 2,38-2,44-2,40 olarak bulundu ve şekil 7.14' de gösterildi. Zn değerine bağlı olarak kırılma indisi de değişmektedir. $Be_{1-x}Zn_xS$ için x' in (Zn) katkılama değerlerine göre sırayla sönüm katsayının yükselmeye başladığı değerleri,x=0,25-0,50 ve 0,75 değerleri için 3,23-3,20-2,8 eV olarak hesaplandı. Zn miktarı arttıkça sönüm katsayısı azalmaktadır. Dielektrik fonksiyonun reel kısmı ile kırılma indisi, dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı ile sönüm katsayısının uyumlu olduğu görülmüştür.



Şekil 7.14. $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#3) alaşımları için kırılma sabiti (n) ve sönüm sabiti (k)

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_yTe$ için kırılma indisinin dispersiyon eğrileri, her x ve y bileşeni için, n(0)' da ki kırılma indisleri $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ için 2,92 eV, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için 2,78 ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ için 2,67 olarak bulundu ve şekil 7.15' de gösterildi. Hgmiktarı artıkça kırılma indisi artmaktadır. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ in katkılama değerlerine göre sırayla sönüm katsayı değerlerinin yükselmeye başladığı değerler, $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ için 0,88- $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için 1,28 ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ için 1,58 eV olarak hesaplandı. Dielektrik fonksiyonun reel kısmı ile kırılma katsayısı, dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı ile sönüm katsayısının uyumlu olduğu görüldü.

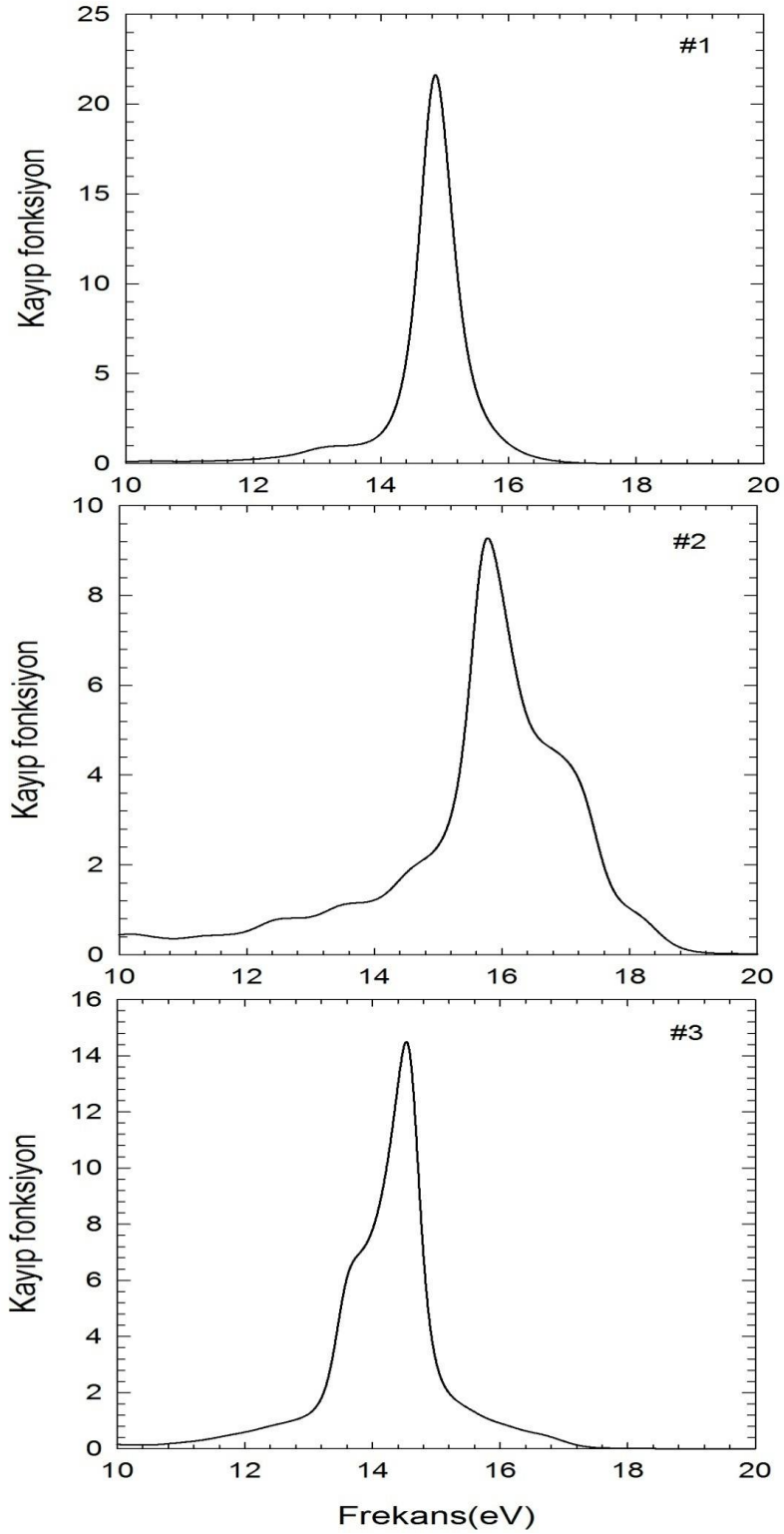


Şekil 7.15. $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$(#1), $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$(#2) ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{02,5}Se$(#3) alaşımların için kırılma (n) sabiti ve sönüm (k) sabiti

7.2.3. Kayıp fonksiyonun hesabı

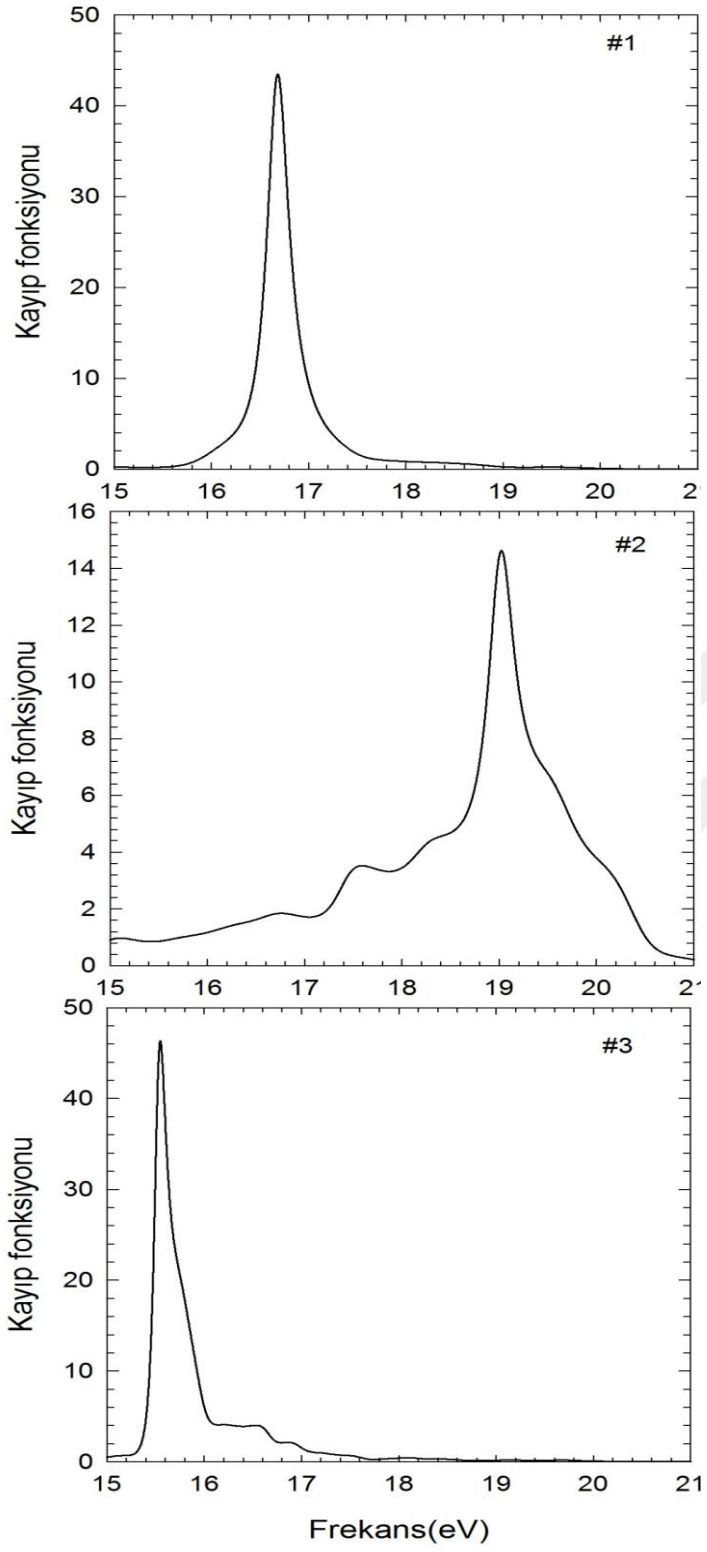
Kayıp fonksiyonun değişimi ve Plasmon frekansları $Be_xZn_{1-x}Te$ için Şekil.7-16' da, $Be_xZn_{1-x}Se$ için Şekil.7.17' de ve $Be_xZn_{1-x}S$ ise Şekil.7.18' de verildi. Kayıp fonksiyon iletkenlik bandının en üst yörüngesindeki bir elektronun valans bandının en alt yörüngesine geçerken kaybettiği enerjinin değişimidir. Burada ki ana pik değeri *plasmon frekansı* olarak bilinir. Plasmon frekansından büyük değerlerde yalıtkan olarak,küçük değerlerde ise alaşımlar metalik özellik gösterirler.

$Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımların için Dielektrik fonksiyonun reel ve imajiner kısmından, elektronun kayıp fonksiyonu elde edildi ve sonuçlar Şekil 7.16' da gösterildi. 12-19 eV aralığında kayıp fonksiyonu çeşitli piklere sahip olmaktadır. Kayıp fonksiyonun temel piki plasmon frekansı olarak adlandırılmaktadır. Pikin maksimum olduğu değerde dielektrik sabitininin imajiner kısmı minumum olmaktadır. X'e (x=0,25-0,5-0,75) bağlı olarak, plasmon frekansı 14, 80-15,70-14,48 eV değerlerini almaktadır. Pikten büyük değerlerde alaşımlar, yalıtkan olarak davranırken, küçük değerler de metal gibi davranır. Grafiklere bakıldığında 0-12 eV aralığında soğurmanın çok az olduğu ggörülmektedir, bunun nedeni dielektrik sabitinin imajiner kısmının bu frekans aralığında soğurma yapmasıdır [99].



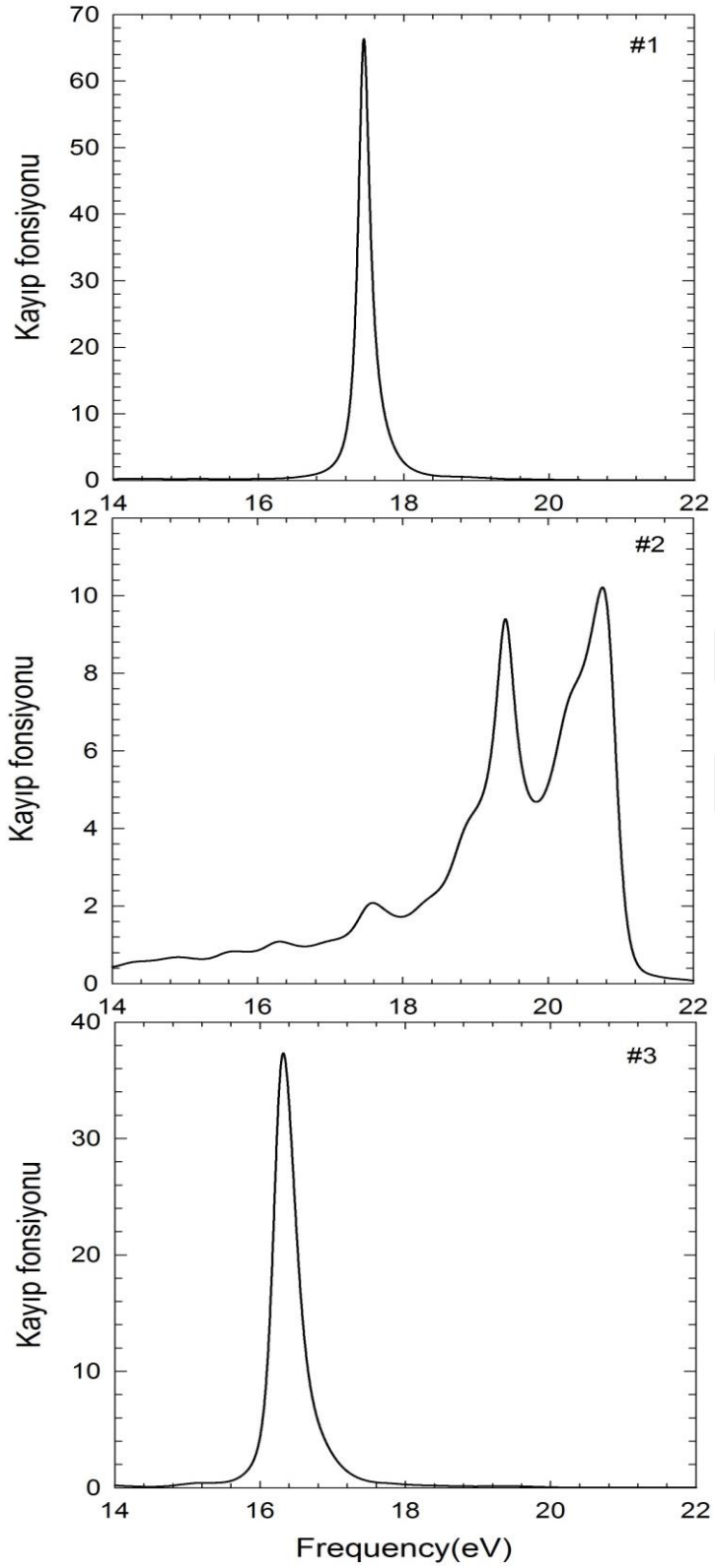
Şekil 7.16. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$(#3) alaşımları içinkayıp fonksiyonu L (ω)

$Be_{1-x}Zn_xSe$, alaşımların için Dielektrik fonksiyonun reel ve imajiner kısmından, elektronun kayıp fonksiyonu elde edildi ve sonuçlar şekil 7.17' de gösterildi. 15-20 eV aralığında kayıp fonksiyonu çeşitli piklere sahip olmaktadır. Kayıp fonksiyonun temel piki plasmon frekansı olarak adlandırılmaktadır. Pikin maksimum olduğu değerde dielektrik sabitininin imajiner kısmı minumum olmaktadır. X'e (x=0,25-0,5-0,75) bağlı olarak, plasmon frekansı 16,68-19,01-15,52 eV değerlerini almaktadır. Pikten büyük değerlerde alaşımlar, yalıtkan olarak davranırken, küçük değerler de metal gibi davranır. Grafiklere bakıldığında genelde 0-15 eV aralığında soğurmanın olmadığı görülmektedir, bunun nedeni dielektrik sabitinin imajiner kısmının bu frekans aralığında soğurma yapmasıdır [99].



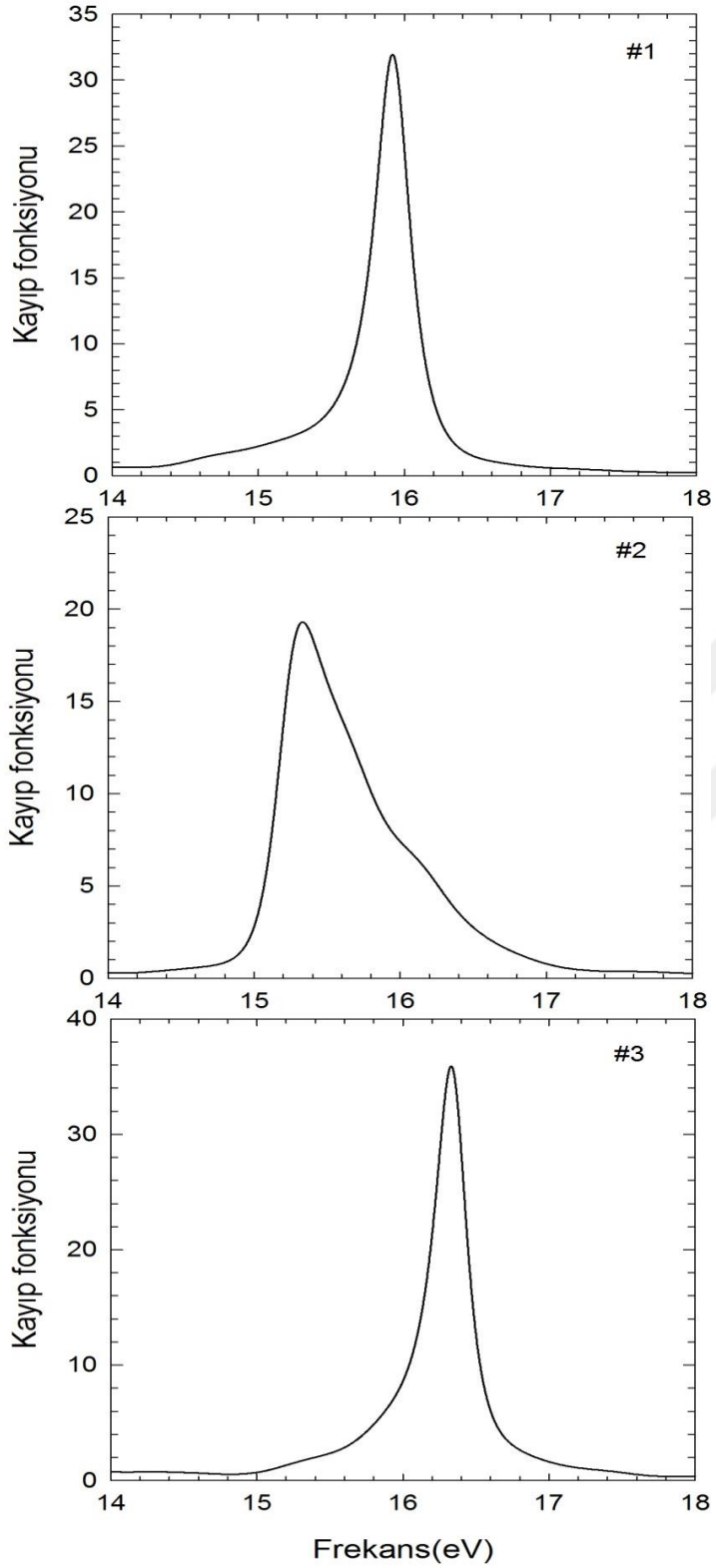
Şekil 7.17. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#3) alaşımların için kayıp fonksiyonu L (ω)

$Be_{1-x}Zn_xS$ alaşmları için Dielektrik fonksiyonun reel ve imajiner kısmından, elektronun kayıp fonksiyonu elde edildi ve sonuçlar Şekil.7.18'de gösterildi. 15-22 eV aralığında kayıp fonksiyonu çeşitli piklere sahip olmaktadır. Kayıp fonksiyonun temel piki plasmon frekansı olarak adlandırılmaktadır. Pikin maksimum olduğu değerde dielektrik sabitininin imajiner kısmı minumum olmaktadır. X'e (x=0,25-0,5-0,75) bağlı olarak, plasmon frekansı 16,30-20,70-17,44 eV değerlerini almaktadır. Pikten büyük değerlerde alaşımlar, yalıtkan olarak davranırken, küçük değerler de metal gibi davranır. Grafiklere bakıldığında genelde 0-15 eV aralığında soğurmanın olmadığı görülmektedir, bunun nedeni dielektrik sabitinin imajiner kısmının bu frekans aralığında soğurma yapmasıdır [99].



Şekil 7.18. $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#3) alaşımların içinkayıp fonksiyonu L (ω)

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımların için, Dielektrik fonksiyonun reel ve imajiner kısmından, elektronun kayıp fonksiyonu elde edildi ve sonuçlar Şekil 7.19' da gösterildi. 10,8-19,74 eV aralığında kayıp fonksiyonu çeşitli piklere sahip olmaktadır. Kayıp fonksiyonun temel piki plasmon frekansı olarak adlandırılmaktadır. Pikin maksimum olduğu değerde dielektrik sabitininin imajiner kısmı minumum olmaktadır. X ve y'nin katkılanma değerlerine bağlı olarak, plasmon frekansı $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için 15,33 eV-$Be_{0,25}Zn_{02,5}Hg_{0,5}Se$ için 15,92 eV ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ için 16,31 eV değerlerini almaktadır. Pikten büyük değerlerde alaşımlar, yalıtkan olarak davranırken, küçük değerler de metal gibi davranır. Grafiklere bakıldığında 0-10,8 eV aralığında soğurmanın çok az olduğu gözükür, bunun nedeni dielektrik sabitinin imajiner kısmının bu frekans aralığında soğurma yapmasıdır [99].

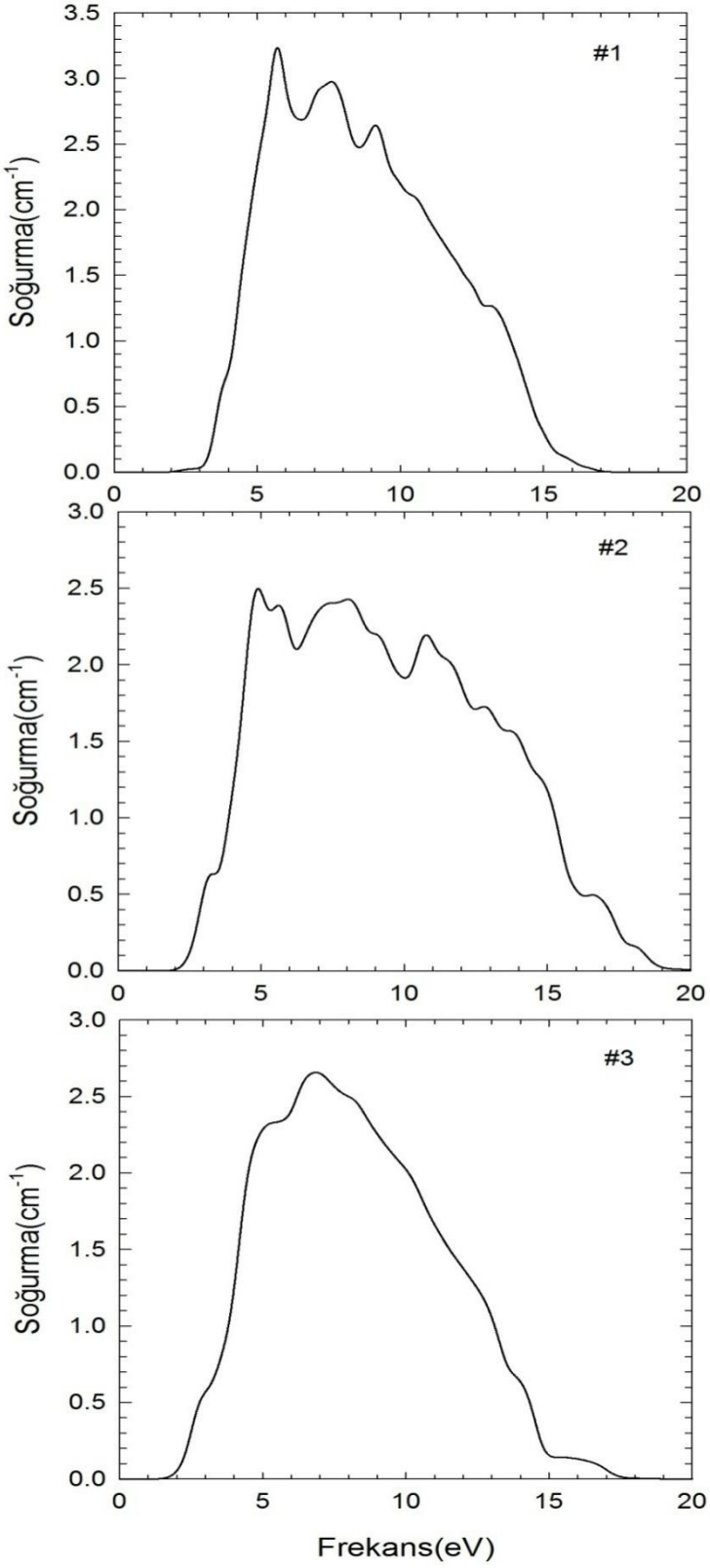


Şekil 7.19. $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$(#1), $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (#2) ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ (#3)alaşımlarıiçin kayıp fonksiyonu L (ω)

7.2.4. Soğurma katsayısı

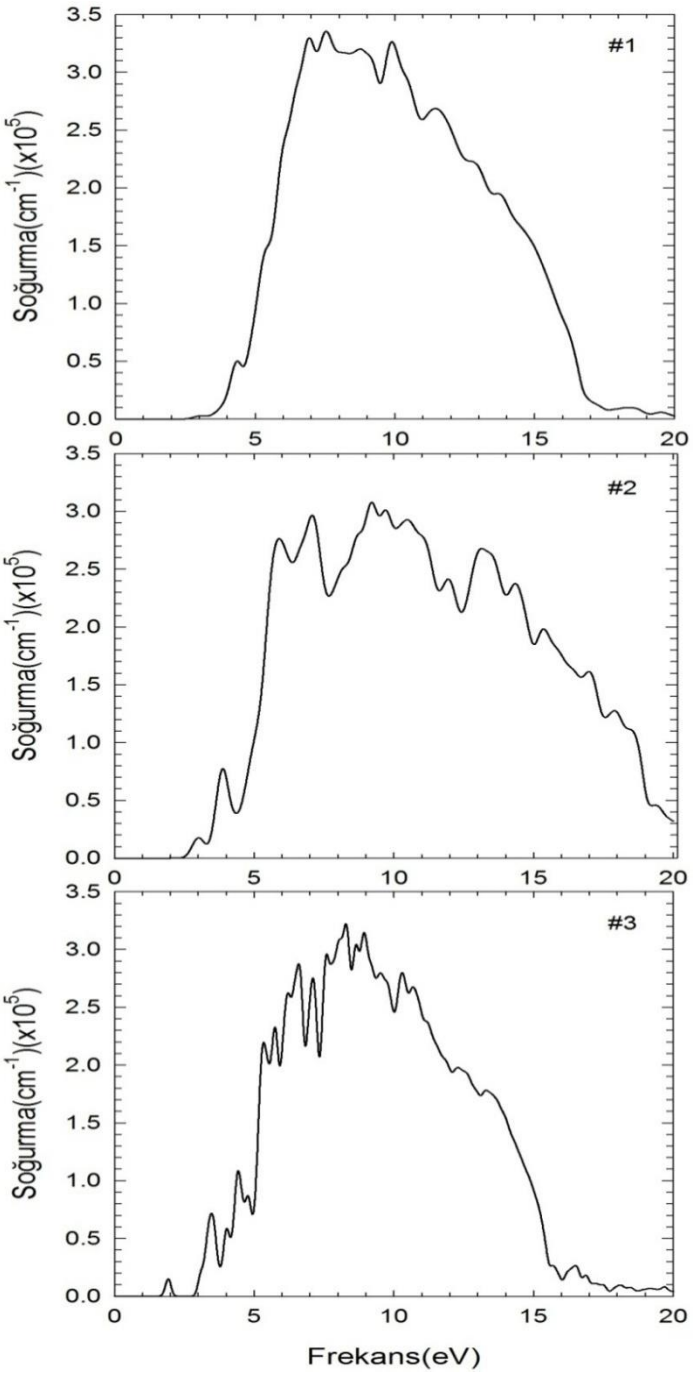
Soğurma katsayısı, materyalin birim uzunluğu başına üzerine düşen ışığı soğurmasını ifade eder. Gönderilen fotonun, materyal tarafından soğrulması için materyalin atomunlarının uyarılma seviyelerinin enerjilerinden birine eşit olması gerekir. Aksi takdirde foton soğurulmadan atomu terk eder ya da yansır. Ayrıca malzemenin karakterine göre gelen foronun soğurulması belirli sınırlara sahiptir. Soğurma sınırı malzemenin temel bant aralıklarında optik geçişlerin olmasıdır. Bantlar arası soğurma, katı bir maddenin bantları arasındaki elektronların optik geçiş yaparak uyarılmasıdır. Dielektrik fonksiyonun reel ve imajiner kısmından, elektronun soğurma katsayısı elde edildi ve sonuçlar; $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımı için Şekil7.20' de, $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımı için Şekil7.21'de, $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımı için Şekil7.22' de ve $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımı için Şekil7.23' de gösterildi.

$Be_{1-x}Zn_xTe$ için x katkılama değerlerine göre sırayla soğurma katsayı değerleri; 2,06-2,11-1,56 eV olarak hesaplandı. Soğurma katsayısının yükselmeye başladığı nokta ile Dielektrik fonksiyonun imajiner kısmının ve sönüm katsayısının yükselmeye başladığı değerlerin bir birine çok yakın olduğu görüldü.



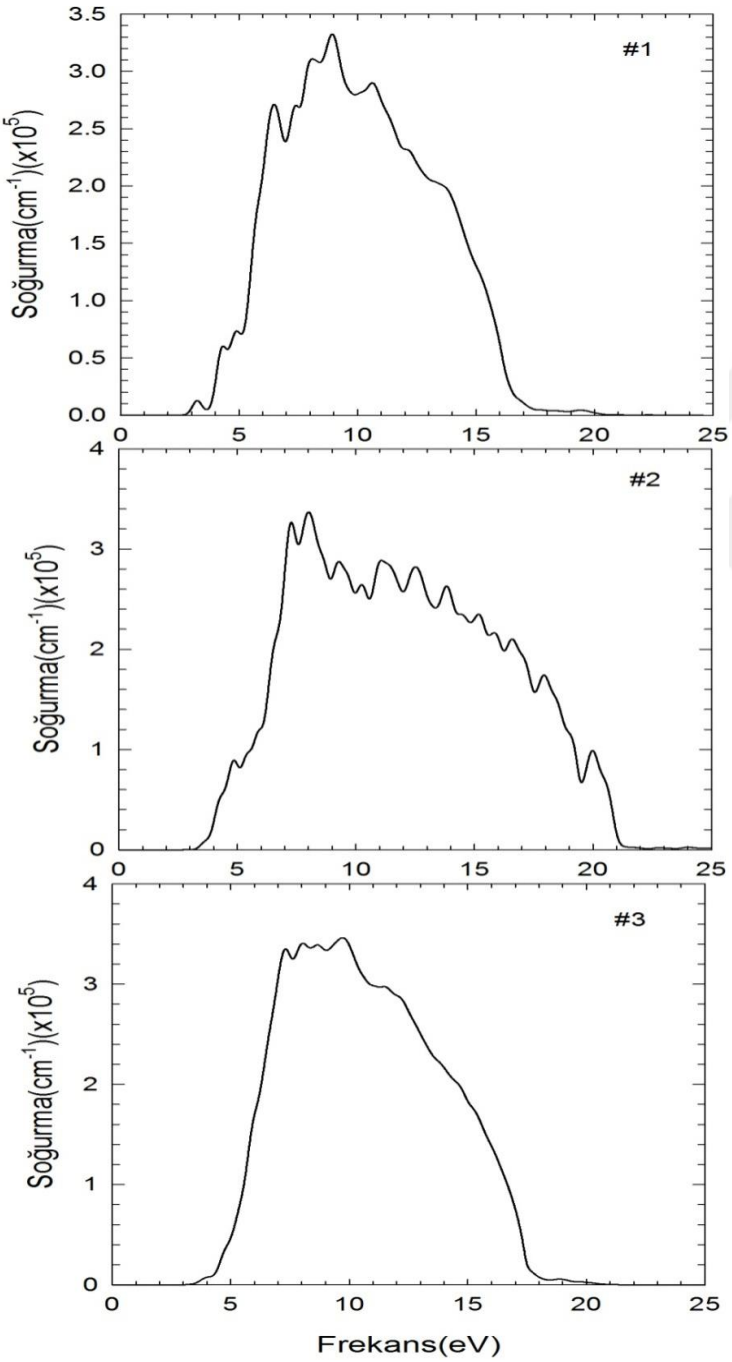
Şekil 7.20. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$(#2) ve$Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ (#3) alaşımları için soğurma katsayı değerleri

$Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımı için x katkılama değerlerine göre sırayla soğurma katsayı değerleri 2,8-2,5-1,9 olarak hesaplandı. Soğurma katsayısının yükselmeye başladığı değer ile Dielektrik fonksiyonun imajiner kısmının, band aralığının ve sönüm katsayısının yükselmeye başladığı değerlerin aynı olduğu görüldü.



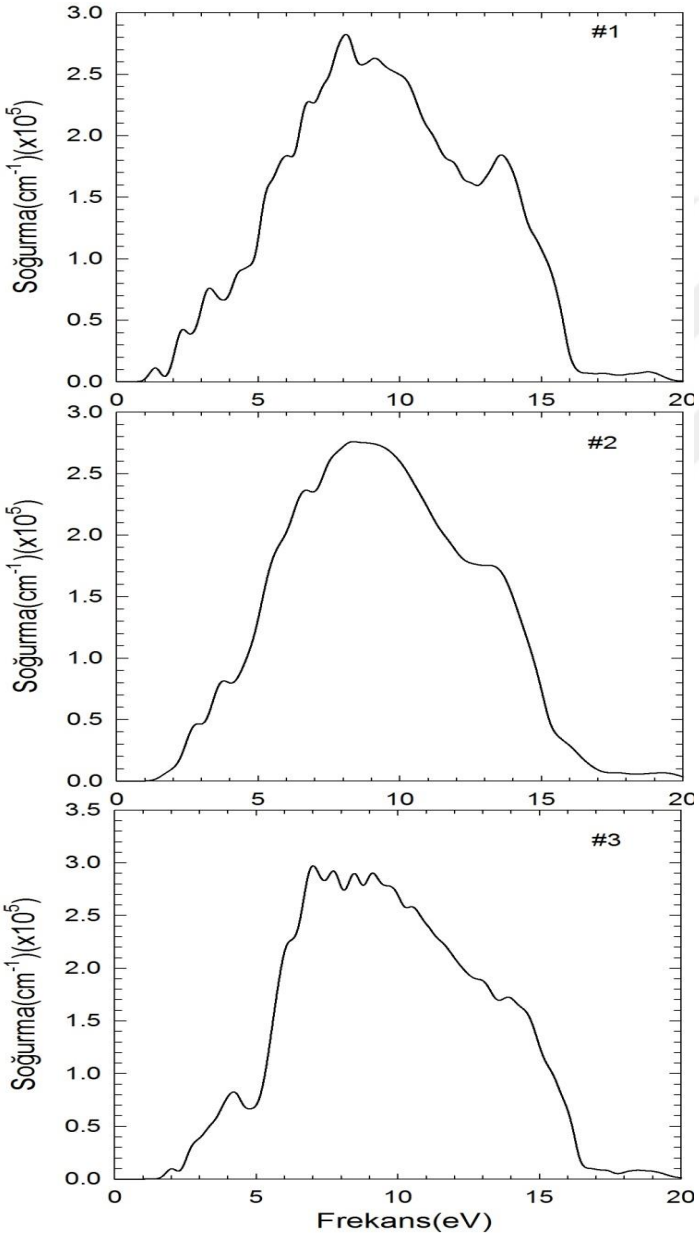
Şekil 7.21. $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$(#2) ve$Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ (#3) alaşımları için soğurma katsayı değerleri

$Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımı için x katkılama değerlerine göre sırayla soğurma katsayı değerleri, x=0,25 için 3,23-x=0,50 için 3,20 ve x=0,75 için 2,80 eV olarak hesaplandı. Soğurma katsayısının yükselmeye başladığı değer, band aralığı, dielektrik fonksiyonun imajiner kısmının ve sönüm katsayısının yükselmeye başladığı değerle aynı olduğu görüldü.



Şekil 7.22. $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#1), $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$(#2) ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$(#3) alaşımları için soğurma katsayı değerleri

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ için x ve y katkılama değerlerine göre sırayla soğurma katsayısının yükselmeye başladığı değerler, $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ için 0,88 eV, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için 1,28 eV ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{02,5}Se$ için 1,58 eV olarak hesaplandı. Soğurma katsayısının yükselmeye başladığı nokta ile Dielektrik fonksiyonun imajiner kısmının ve sönüm katsayısının yükselmeye başladığı değerlerin band aralığının bir birine çok yakın olduğu görüldü.



Şekil 7.23. $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$(#1), $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$(#2) ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{02,5}Se$(#3) alaşımlarıiçin soğurma katsayı değerleri

7.3. Alaşımların Elastik Özellikleri

$Be_{1-x}Zn_xX$ (X=Te,Se,S) ve $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için elastik sabitleri DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesaplandı. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları, $Be_{0,25}Zn_{0,25}S_{0,50}$- $Be_{0,25}Zn_{0,25}Se_{0,50}$ ve $Be_{0,25}Zn_{0,25}Te_{0,50}$için DFT ile hesapladığında Primitive Tetrogonal (P-4M2) yapı için 6 tane elastik sabiti elde edildi.

X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak Vegards yasası ile Primitive kübik (P-43m) olarak hesapladığımız yapılar için 3 tane elastik sabiti elde edildi. Hesapladığımız elastik sabitleri tüm kararlılık koşullarını sağlamaktadır . Her iki metot ile bulduğumuz sonuçların uyumlu olduğu görüldü. Elastik sabitlerini kullanarak, Bulk modülü, Shear (kayma) modülü (G), Sıkıştırılabilirliği, B/G ve Poisson oranı (ν) oranını hesaplandı [86-87]. Bulk modülü, Young modulü, Shear (kayma) modülü (G), sıkıştırılabilirliği, B/G oranı ve Poisson oranı (ν) malzemenin sertlik ve dayanıklılığı için önemli niceliklerdir [88].

B/G >1,75 ise alaşım esnek, B/G <1,75 ise kırılgan demektir [89]. Bulk modulü (B) büyük olan alaşım daha az sıkıştırılabilirdir. Poission oranı esneklik için kullanılabilir. Malzemenin Poission oranı; V>1⁄3 ise malzeme esnek olarak, V<1/3 için ise kırılgan olarak davranabilir [56]. Poisson oranı (ν) = 0,25 ve (ν)= 0,5 değerleri katıların merkezinde kuvvetin alt ve üst sınırlarıdır [57]. İç gerilme parametresi olarak adlandırılan Kleinman parametresi ξ önemli bir parametredir [58], maksimum gerilmelerle ilgilidir. ξ =0 ise, şekli bozulmuş dört yüzlüde atom merkezde kalır. ξ =1 ise yalnızca bağ bükülmesi görülür [59]. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak Vegards yasası ile hesapladığımız elastik sabitleri Çizelge 7.13’ de gösterildi ve elastik sabitlerinin Born kararlılık ilkelerini sağladığı görüldü.

Çizelge 7.13. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız Elastik sabitleri

$Be_{1-x}Zn_xTe$ Castep/ X-Ray	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$	94,60/96,05	43,83/43,17	-	-	47,85/53,17	-
	96,66 [90]	41,94 [90]			69,95 [90]	
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$	93,84/87,95	20,20/42,35	37,10 /-	84,31 /-	39,83/42,30	20,66/-
	100,48 [90]	44,22 [90]			62,78 [90]	
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$	68,32/79,82	34,61/42,35	-	-	31,97/36,75	-
	73,26 [90]	49,58 [90]			66,37 [90]	

Vegardsyasası ve DFT ile elde edilen verilere göre,$Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için, Bulk modülü(B), Young modulü(E), Shear (kayma) modülü(G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi(ξ) ve Poisson oranı (ν) hesaplandı ve Çizelge 7.14'de gösterildi. $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ alaşımının B/G oranı 1,75' den büyük olduğu için esnek,$Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ ve $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ alaşımlarının B/G oranı 1,75' den küçük olduğu için, kırılgan özelliğe sahip oldukları görüldü. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımlarının hepsi için Poisson oranı (ν) büyüklükleri 0, 25 ile 0, 5 aralığında olduğu için atomlar arası kuvvetler ağırlıklı olarak merkezi kuvvetlerdir. Her iki metot içinde $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ alaşımının poission oranı, 1/3' den büyük olduğu için esnek, $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ alaşımları için 1/3 den küçük olduğu için kırılgan özellik gösterirler. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için, DFT ile ölçülen en büyük bulk modulü değeri, $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$(57,01GPa) içindir ve en az sıkıştırılabilen alaşımdır. Değeri 0,016 1/GPa dır. Vegards ile hesaplanan en büyük bulk modülü $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ (60,79GPa) içindir ve en az sıkıştırılabilirdir. Değeri 0,016 1/GPa dır. Her iki metotla, sıkıştırılabilirlik x' in artan değerine göre değişir, $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te<Be_{0,5}Zn_{0,5}Te<Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ şeklinde sıralanır. DFT ile hesaplanan verilere göre; Kleinman parametresi(ξ) sırasıyla; $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ için 0,59 ve $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ için 0,63 dür.$Be_{0,50}Zn_{0,50}Te$ alaşımı,Tetragonal yapıda olduğu için hesaplanmadı. Vegards yasası ile hesaplanan Kleinman parametresi(ξ) $Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$ için 0,58, $Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$ için 0,61 ve $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ için 0,65' dir.

Çizelge 7.14. $Be_{1-x}Zn_xTe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız; Bulk modülü(B), Young modulü(E), Shear (kayma) modülü(G), Sıkıştırılabilirlik B/G, Kleinman parametersi(ξ) ve Poisson oranı (*v*) için hesapladığımız sonuçlar

$Be_{1-x}Zn_xTe$ Castep/ X-Ray	Poisson oranı (*v*)	Bulk modül B(GPa)	Young modülü E(GPa)	shear modülü (GPa)	B/G	Sıkıştırılabilirlik (1/GPa)	Kleinman paramete(ξ)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Te$	0,31/ 0,31	57,01/ 60,79	66,83/ 69,27	39,51/ 37,71	1,44/ 1,61	0,016/ 0,016	0,59/ 0,58
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Te$	0,32/ 0,32	51,11/ 57,55	60,17/ 60,42	29,31/ 33,00	1,74/ 1,74	0,019/ 0,017	-/ 0,61
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$	0,34/ 0,34	45,84/ 54,84	45,05/ 50,45	24,73/ 28,04	1,85/ 1,95	0,021/ 0,018	0,63/ 0,65

Be_{1-x} Zn_xS alaşımları için elastik sabitleri, hesaplandı, DFT ile elde edilen sonuçlar Çizelge 7.15' de gösterildi. Vegards yasasına göre hesaplanan sonuçlar ise çizelge 7.16' da gösterildi. Tüm alaşımlar için, elastik sabitlerin Born kriterlerini sağladığı görüldü.

Çizelge 7.15. $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için DFT ile hesaplanan Elastik sabitleri

$Be_{1-x}Zn_xS$	Uzay grubu –Yapı	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}
$Be_{0,75}Zn_{0,25}S$	P-43m Primitive Kübik	143,16	61,22	-	-	70,59	-
$Be_{0,5}Zn_{0,5}S$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	112,92	59,81	55,13	112,76	68,91	61,70
$Be_{0,25}Zn_{0,75}S$	P-43m Primitive Kübik	108,73	56,21	-	-	55,5	-

Çizelge 7.16. $Be_{1-x}Zn_xS$ X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımızelastik sabitleri

$Be_{1-x}Zn_xS$	Uzay grubu –Yapı	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}
$Be_{0,75}Zn_{0,25}S$	P-43m Primitive Kübik	142,25	62,33	-	-	72,79	-
$Be_{0,5}Zn_{0,5}S$	P-4m2 Primitive Tetrogonal	129,5	63,25	-	-	63,93	-
$Be_{0,25}Zn_{0,75}S$	P-43m Primitive Kübik	116,75	63,25	-	-	55,06	-

DFT ile elde edilen verilere göre, $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için, Bulk modülü(B),Young modulü(E), Shear (kayma) modülü(G), Sıkıştırılabilirlik, alaşımların hepsi için B/G oranı 1,75'dan küçük olduğu için kırılgan özelliğe sahiptirler. Bütün alaşımlar için, Poisson oranı (v) büyüklükleri 0, 25 ile 0, 5 aralığında olduğu için atomlar arası kuvvetler ağırlıklı olarak merkezi kuvvetlerdir. $Be_{1-x}Zn_xS$ için DFT proğramı ile hesaplanan en büyük bulk modülü (88,53GPA) $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$ içindir ve en az sıkıştırılabilirdir, değeri 0,011 1/GPa' dır. DFT ile hesaplanan verilere göre; Kleinman parametresi(ξ) sırasıyla; $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$ için 0,56 ve $Be_{0,25}Zn_{0,75}S$ için 0,63 dür, $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$ Tetrogonal yapıda olduğu için hesaplanamadı.

Çizelge 7.17. $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için DFT ile hesapladığımız; Bulk modülü Shear (kayma) modülü (G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (*v*) için hesaplanan sonuçlar

$Be_{1-x}Zn_xS$	Poisson oranı (*v*)	Bulk modulus(B)	Shear modülü (G)	B/G	Sıkıştırılabilirlik (1/GPa)	Kleinman parametresi (ξ)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}S$	0,29	88,53	61,10	1,38	0,0112	0,56
$Be_{0,5}Zn_{0,50}S$	0,32	75,38	46,99	1,60	0,0132	0,64
$Be_{0,25}Zn_{0,75}S$	0,34	73,72	41,10	1,68	0,0135	0,63

Vegards ile elde edilen verilere göre, $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için, Bulk modülü (B), Young modulü(E), Shear (kayma) modülü (G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi(ξ) ve Poisson oranı (*v*) Çizelge 7.18' de gösterildi. B/G oranı $Be_{0,25}Zn_{0,75}S$ için 1,75' den büyük olduğu için esnek özelliğe sahiptir. $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$ve $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$ alaşımların için B/G oranı 1,75' den küçük olduğu için kırılgan özellik gösterirler. Poisson oranı (*v*) büyüklükleri 0,25 ile 0,5 aralığında olduğu için atomlar arası kuvvetler ağırlıklı olarak merkezi kuvvetlerdir. $Be_{1-x}Zn_xS$ için Vegards yasası ile ölçülen en büyük bulk modülü 88,97 GPa $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$ içindir ve en az sıkıştırılabilirdir, değeri 0,011 1/GPa' dır. Sıkıştırılabilirlik x' in artan değerine göre değişir ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}S<Be_{0,5}Zn_{0,5}S<Be_{0,25}Zn_{0,75}S$ şeklinde sıralanır. Vegards yasası ile hesaplanan Kleinman parametresi(ξ) ise $Be_{0,75}Zn_{0,25}S$ için 0,57, $Be_{0,5}Zn_{0,5}S$ için 0,61 ve $Be_{0,25}Zn_{0,75}S$ 0,65' dir.

Çizelge 7.18. $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak Vegard yasası ile hesapladığımız; Bulk modülü, Shear (kayma] modülü (G) Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı(*v*) için hesaplanan sonuçlar

$Be_{1-x}Zn_xS$	Poisson oranı (*v*)	Bulk modulus (B)	Shear modülü (G)	B/G	Sıkıştırılabilirlik (1/GPa)	Kleinman parametresi (ξ)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}S$	0,30	88,97	57,22	1,49	0,0112	0,57
$Be_{0,5}Zn_{0,50}S$	0,32	85,31	49,11	1,65	0,0117	0,61
$Be_{0,25}Zn_{0,75}S$	0,35	81,06	41, 21	1,85	0,0123	0,65

Be_{1-x} Zn_xSe alaşımları için elastik sabitleri, hesaplandı, DFT ile elde edilen sonuçlar Çizelge 7.19' da gösterildi. Vegards yasasına göre hesaplanan sonuçlar ise Çizelge 7.20' de gösterildi. Tüm alaşımlar için, elastik sabitlerin Born kriterlerinin sağlandığı görüldü.

Çizelge 7.19. $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımları için DFT ile hesapladığımız Elastik sabitleri

$Be_{1-x}Zn_xSe$	Uzay Grubu Yapı	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$	P-43m Primitive Kübik	118,51	49,62	-	-	61,07	-
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$	P-4m2 Primitive Tetragonal	145,70	12,17	51,99	116,72	64,98	25,09
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$	P-43m Primitive Kübik	82,12	45,55	-	-	49,38	-

Çizelge 7.20. $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımları için X-ray cihazından alınan verilerkullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız Elastik sabitleri

$Be_{1-x}Zn_xSe$	Uzay Grubu–Yapı	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$	Primitive Kübik P-43m	114,78	45,67			65,34	
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$	Primitive Kübik P-4m2	103,90	45,60			57,10	
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$	Primitive Kübik P-43m	93,350	45,90			49,15	

Be_{1-x} Zn_xSe Alaşımları için B/G oranı 1,75' den küçük olduğu için kırılgan özelliğe,Poisson oranı (*v*) değerleri 0,25 den büyük olduğu için iyonik yapıya sahiptirler. Poisson oranı (*v*) büyüklükleri 0,25 ile 0,5 aralığında olduğu için atomlar arası kuvvetler

merkezi kuvvetlerdir. $Be_{1-x}Zn_xSe$ için DFT ile ölçülen en büyük bulk modulü (72,58 GPa) $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ içindir, en az sıkıştırılabilirdir. Değeri 0,013 1/GPa' dır. Vegards yasası ile hesaplanan en büyük bulkmodülü (68,7GPa) $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ içindir, en az sıkıştırılabilirdir. Değeri 0,014 1/GPa'dır. X 'in artan değerine göre değişir, $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ <$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$ <$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$ şeklinde sıralanır. DFT ile hesaplanan verilere göre; Kleinman parametresi(ξ) sırasıyla $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ için 0,55 ve $Be_{0,25}Zn_{0,75}Te$ için 0,67 dir.

Çizelge 7.21. $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımları için DFT ile hesaplanan; Bulk modülü, Shear (kayma)modülü (G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (*v*) için hesaplanan sonuçlar

$Be_{1-x}Zn_xSe$	Poisson ratio (ν)	Shear modülü (G)	B/G	Sıkıştırılabilirlik (1/GPa)	Kleinman parametresi (ξ)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$	0,29	48,53	1,43	0,013	0,554
$Be_{0,50}Zn_{0,50}Se$	0,32	46,35	1,53	0,014	-
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$	0,35	33,16	1,56	0,017	0,670

Be_{1-x} Zn_xSe alaşımları için Poisson oranı (*v*) büyüklükleri 0,25 ile 0,5 aralığında olduğu için atomlar arası kuvvetler ağırlıklı olarak merkezi kuvvetlerdir. Vegards yasası ile alaşımlar için hesaplanan en büyük bulk modülü (68,7GPa) $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ içindir, en az sıkıştırılabilirdir. Değeri 0,014 1/GPa' dır. X' in artan değerine göre değişir ve $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ <$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$ <$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$ şeklinde sıralanır. Vegards yasası ile hesaplanan Kleinman parametresi(ξ); $Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$ için 0,53, $Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$ için 0,57 ve $Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$ için 0,62 dir.

Çizelge 7.22. $Be_{1-x}Zn_xSe$Alaşımları için X-ray cihazından alınan veiler kullanılarak yapılan hesaplamalar; Shear modülü (G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (*v*) için hesaplanan sonuçlar

$Be_{1-x}Zn_xSe$	Poisson oranı (ν)	Shear (kayma) modülü (G)	B/G	Sıkıştırılabilirlik (1/GPa)	Kleinman parametresi (ξ)
$Be_{0,75}Zn_{0,25}Se$	0,28	50,59	1,29	0,014	0,53
$Be_{0,5}Zn_{0,5}Se$	0,31	43,59	1,41	0,015	0,57
$Be_{0,25}Zn_{0,75}Se$	0,33	36,69	1,58	0,016	0,62

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız elastik sabitleri Çizelge 7.23' de gösterildi. Tüm alaşımlar için, elastik sabitlerin Born kriterlerinin sağlandığı görüldü.

Çizelge 7.23. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$' inalaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız; Elastik sabitleri (GP)

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$	Uzay Grubu -Yapı	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}
$Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$	P-4M2 Tetrogonal (Castep)	76,30	43,84	45,16	77,52	34,39	31,76
	P-43M kübik (X-ray)	79,41	48,15			45,74	
$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$	P-4M2 Tetrogonal (Castep)	80,94	46,23	44,87	79,51	35,94	36,98
	P-43M kübik (X-ray)	88,21	49,88	-	-	48,32	-
$Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$	P-4M2 Tetrogonal (Castep)	90,80	46,22	50,01	105,16	55,01	46,95
	P-43M kübik (X-ray)	99,33	50,88	-	-	58,62	-

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız Bulk modülü(B), Young modulü(E), Shear modülü (G), Sıkıştırılabilirlik, B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (*v*) sonuçları Çizelge 7.24' de gösterildi. $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ alaşaımı için B/G oranı 1,75' den küçük olduğu için kırılgan $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ ve $Be_{025}Zn_{025}Hg_{05}Se$ alaşımları için 1,75' den büyük olduğu için esnek özelliğe sahiptirler. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için, Poisson oranı (v) büyüklükleri 0,25 ile 0,5 aralığında olduğu için atomlar arası kuvvetler ağırlıklı olarak merkezi kuvvetlerdir. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ için DFT ile ölçülen en büyük bulk modülü (63,86GPa) $Be_{0.5}Zn_{0.25}Hg_{0.25}Se$ içindir, en az sıkıştırılabilirdir. Değeri 0,0156 1/GPa dır. Vegards yasası ile hesaplanan, en büyük bulk modülü (67,03GPa) $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ içindir, en az sıkıştırılabilirdir. Değeri 0,0150 1/GPa dır. Vegards yasası ile hesaplanan verilere göre, Kleinman parametresi(ξ); $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,50}Se$ için 0,71-$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ için 0,67 ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ 0,63 dir. Debye sıcaklıkları, DFT ile yapılan hesaplamalara göre $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,50}Se$ için 220 K, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{025}Se$ için 250 K ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ için 294 K olarak bulundu. X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile

yapılan hesaplamalardan, $Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,50}Se$ için 240 K, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{025}Se$ için 274 K ve $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ için 316 K olarak bulundu.

Çizelge 7.24. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile Bulk modülü(B), Young modulü(E), Shear modülü (G), Sıkıştırılabilirlik,B/G, Kleinman parametresi (ξ) ve Poisson oranı (v) için hesapladığımız sonuçlar

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$	v	E(GPa)	G(GPa)	B/G	Sıkıştırılabilirlik (1/GPa)	(ξ)	B(GPa)
$Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ (Castep)	0,35	43,84	24,89	2,22	0,0180	-	55,37
$Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ (X-ray)	0,37	43,05	29,76	1,96	0,0170	0,71	58,57
$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (Castep)	0,37	47,76	27,12	2,10	0,0175	-	57,02
$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (X-ray)	0,36	52,17	33,34	1,88	0,0160	0,67	62,65
$Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ (Castep)	0,33	59,50	37,79	1,68	0,0156	-	63,86
$Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ (X-ray)	0,33	64,86	41,12	1,49	0,0150	0,63	67,03

7.4. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ Alaşımının Debye Sıcaklığı

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$'in Alaşımları için; DFT ve X-ray cihazından alınan veriler kullanılarak vegards yasası ile hesapladığımız, yoğunluğu (ρ), boyuna (υ_l), enine (υ_t), ortalama dalga hızı ve Debye sıcaklığı (θ_D) Çizelge 7.25' de gösterildi. DFT ile yapılan hesaplamalara göre Debye scaklıkları; $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ için 220 K, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ 250 K, $Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ için 294 K'dir. Alaşımlar, Debye sıcaklığından büyük sıcaklıklarda bütün modlarında $k_\beta T$ enerjisine sahipdirler ve bu durumda fonon titreşimlerinin dalga boyları küçüktür. Debye sıcaklığından küçük sıcaklıklarda ise yüksek frekans modları donmuşdur ve fononların dalga boyları büyüktür.Vegardas yasasına göre yapılan hesaplamalarda Debye sıcaklıkları; $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ için 240 K, $Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ 274 K, bütün modlarında $k_\beta T$ enerjisine sahiptirler ve bu durumda fonon titreşimlerinin dalga boyları küçüktür. Debye sıcaklığından küçük sıcaklıklarda ise yüksek frekans modları donmuşdur ve fononların dalga boyları büyüktür.

Çizelge 7.25. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$'inYoğunluğu (ρ), Boyuna (υ_l), Enine (υ_t), ortalama dalga hızı ve Debye sıcaklığı (θ_D)

$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$	ρ(gr/cm^3)	$\upsilon_l(10^3\ m/s$	$\upsilon_t(10^3\ m/s)$	$\upsilon_m(10^3\ m/s)$	$\theta_D(K)$
$Be_{0.25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ (Castep)	6,76	1,92	3,20	2,14	220
$Be_{0,25}Zn_{0,25}Hg_{0,5}Se$ (X-ray)	6,81	2,09	3,79	2,33	240
$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (Castep)	5,97	2,13	3,96	2,38	250
$Be_{0,25}Zn_{0,5}Hg_{0,25}Se$ (X-ray)	6,32	2,29	4,11	2,56	274
$Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ (Castep)	5,89	2,46	4,34	2,73	294
$Be_{0,5}Zn_{0,25}Hg_{0,25}Se$ (X-ray)	5,81	2,67	4,58	2,95	316

8. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımlarının bazı yapısal, elektronik, optik ve elastik özellikleri araştırıldı. $Be_xZn_{1-x}X$ (X=Te, Se,S) alaşımlarının x=0,25-0,75 değerleri için Basit kübik yapı, x= 0,5 ve $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için tetragonal yapı olarak incelendi. Elde edilen sonuçlar aşağıda özetlendi.

- Hesaplanan örgü sabitleri, Bulk modülleri, teorik ve deneysel çalışmalar ile karşılaştırıldı ve uyumlu oldukları görüldü. $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ Alaşımlarının değerleri deneysel ve teorik olarak incelenemediğinden karşılaştırma yapılamadı. Alaşımların ve bileşiklerinin denge durumundaki örgü sabitlerini bulmak için, kristallerin toplam enerjileri farklı örgü sabitlerine bağlı olarak hesaplandı.

- $Be_{1-x}Zn_xX$ (X=Te, Se, S) alaşımları için x=0' dan x=1'e doğru gidildikçe örgü sabiti ve Bulk modülü arttığı görüldü. Te, Se ve S VIA grubu elementlerdir ve periyodik cetvelde yukardan aşağı inildikçe atom çapının artmasından veelektron ilgilerinin azalmasından dolayı alaşımların Bulk modülü azalmakta ve sıkıştırılabilirliği artmaktadır. Bu yüzden S kükürtlü alaşımların Bulk modulünün daha fazla ve sıkıştırılablirliğinin küçük olduğu değerlendirildi.

- Alaşımlar için denge konumunda hesaplanan örgü sabitleri kullanılarak, birinci brilloun bölgesinde yüksek simetri yönlerine karşılık gelen elektronik bant yapıları ve bant yapılarına karşılık gelen elektronik durum yoğunluğu (DOS) elde edildi. Alaşımların hepsi için direkt band geçişinin olduğu görüldü.

- Alaşımların bant yapıları ve elektronikdurum yoğunluğu (DOS) çizildi. Sonuçların önceki çalısmalar ile uyumlu olduğu görüldü.

- $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımlarının optik özellikleri Kramer-Kronig bağıntılarından elde edildi. Optik özelliklerden dielektrik fonksiyon, kırılma indisi ve soğurma katsayısı ve enerji kayıp fonksiyonu hesaplandı. Dielektrik fonksiyonun imajiner kısmının yükselmeye başladığı noktanın ve sönüm katsayısının yükselmeye başladığı değerlerin, yasak bant aralığına çok yakın olduğu görüldü.

- $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için elastik sabitler hesaplandı. Elastik sabitlerin hesabı için literatürde "hacmi- koruyan" (volume-conserving) adı verilen metot kullanıldı.Alaşımlar için elde edilen sonuçların Born kararlılık kriterlerini sağladığı görüldü.

- $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımlarının mekaniksel özelliklerden, Poisson oranı ve Shear modulü literaturde ilk defa bu çalışmada hesaplandı.

- $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımları için boyuna, enine ve ortalama ses hızları ve Debye sıcaklığı hesaplandı.

- $Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$, $Be_{1-x}Zn_xTe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımlarının Poisson oranı (ν) büyüklükleri 0,25 ile 0,5 aralığında olduğu için atomlar arası kuvvetlerin merkezi kuvvetler olduğu öngörüldü.

- $Be_{1-x}Zn_xTe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşımları için band aralıkları karşılaştırıldığında, sıralama $Be_{1-x}Zn_xTe$ $<Be_{1-x}Zn_xSe$ $<Be_{1-x}Zn_xS$ şeklindedir.

- $Be_{1-x}Zn_xTe$, $Be_{1-x}Zn_xSe$ ve $Be_{1-x}Zn_xS$ alaşmları için bulk modülü, young modülü karsılaştırıldığında, sıralama $Be_{1-x}Zn_xTe$ $<Be_{1-x}Zn_xSe$ $<Be_{1-x}Zn_xS$ şeklinde gerçekleşti.

Sonuç olarak özetlersek, Te, Se ve S, VIA grubu elementlerdir, periyodik cetvelde yukardan aşağı inildikçe atom çapı artmakta,elektron ilgisi azalmakta, alaşımların bulk modülü azalmakta ve sıkıştırılabilirliği artmakta olduğu belirlendi. S kükürtlü alaşımların bulk modulünün daha fazla ve sıkıştırılabilirliğinin az olduğu bulundu.

Alaşımlarda Be miktarı arttıkça, Bulk modülü değeri daha büyük ve alaşımlar daha az sıkıştırılabilir olduğu tespit edildi, bunun sebebi, Be elementinin değerlik elektronu iki olup diamanyetik olmasına, küresel simetrisinin varlığına, electron diziliminin s^2 bittiği için orbitalleri Sp hibridleşmesine uğrayarak 2 tane sağlam δ bağı yapmasına, bundan dolayı da kovalent bağ yaptıkları içinde Bulk modulünün artmasına sebep olmuştur.

Bu tez çalışmasından; 3 tane makale yayınlanmıştır. Bunlar;

Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., ve Baş, Y. (2015, November). The study of structural, electronic, elastic and optical properties in $Be_{1-x}Zn_xTe$ alloys. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 39, 629-635.

Gültekin, A., Pashaeı, P., Khan, Z., Ozturk, M.K., Tamer, M. ve Bas Y. (2015). DFT And X-ray Study Of Structural, Electronic, Elastic And Optical Properties In $Be_{1-x}Zn_xS$ Alloys Depending On Vegard's Law. *International Journal of Computational Methods and Experimental Measurements*, 3(4), 340 – 349.

Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., ve Baş, Y., ve Özçelik, S. (2015). The Study OF Structural, Electronic, Elastic and Optical Properties in $Be_{1-x}Zn_xSe$ Alloys. Gazi University Journal of Science Science, 28(4), 577-586 Şeklindedir.

KAYNAKLAR

1. Hacini, K., Meradji, H., Ghemid, S., and El Haj Hassan, F. (2012). Theoretical prediction of structural, electronic and optical properties of quaternary alloy Zn1−xBexSySe1−y. *Chinese Physics*, 21(3).

2. Mourad, D., Czycholl, G., Kruse, C., Klembt, S., Retzlaff, R., Hommel, D., ... and Anastasescu, M. (2010). Band gap bowing of binary alloys: Experimental results compared to theoretical tight-binding supercell calculations for $Cd_x Zn_{1-x} Se$. *Physical Review B*, 82(16), 165204.

3. Gunshor, R., Nurmikko, A. (1995). II-VI Blue-Green Laser Diodes: A Frontier of Materials Research. *Materials Research Bulletin*, (20), 15.

4. Verie, C. (1998). Beryllium substitution-mediated covalency engineering of II–VI alloys for lattice elastic rigidity reinforcement. *Journal of Crystal Growth*, 184, 1061-1066.

5. Maruyama, K., Suto, K., and Nishizawa, J. I. (2000). ZnSe horizontal traveling solvent growth using selenium solution. *Journal of Crystal Growth*, 216(1), 113-118.

6. Wang, H. Y., Cao, J., Huang, X. Y., and Huang, J. M. (2012). Pressure dependence of elastic and dynamical properties of zinc-blende ZnS and ZnSe from first principle calculation. *Huang Condensed Matter Physics*, 15(1), 1–10.

7. Kuskovsky, I. L., Gu, Y., Van Der Voort, M., Tian, C., Kim, B., Herman, I. P., Neumark, G. F., Guo, S. P., Maksimov, O., and Tamargo, M. C. (2002). Properties of MBE-Grown ZnBeSe: Study of Be Isoelectronic Traps and of Dopant Behavior. *Physica Status Solidi (b)*, 229(1), 239-243.

8. Buckley, M. R., Peiris, F. C., Maksimov, O., Munoz, M., and Tamargo, M. C. (2002). Dielectric functions and critical points of BexZn1− xTe alloys measured by spectroscopic ellipsometry. *Applied Physics Letters*, 81(27), 5156-5158.

9. Faurie, J. P., Bousquet, V., Brunet, P., and Tournié, E. (1998). Hetero-epitaxial growth of Be x Zn 1− x Se on Si (0 0 1) and GaAs (0 0 1) substrates. *Journal of Crystal Growth*, 184, 11-15.

10. Baaziz, H., Charifi, Z., El Haj Hassan, F., Hashemifar, S. J., and Akbarzadeh, H. (2006). FP-LAPW investigations of Zn1–xBexS, Zn1–xBexSe and Zn1–xBexTe ternary alloys. *Physica Status Solidi (b)*, 243(6), 1296-1305.

11. Hacini, K., Ghemid, S., Meradji, H., and Hassan, F. E. H. (2011). Theoretical study of structural, electronic and thermal properties of Zn 1− xBexS ternary alloy. *Computational Materials Science*, 50(11), 3080-3084.

12. Huang, X., Li, J., Zhang, Y., and Mascarenhas, A. (2003). From 1D chain to 3D network: tuning hybrid II-VI nanostructures and their optical properties. *Journal of the American Chemical Society*, 125(23), 7049-7055.

13. Steward, J. M., Chen, W. S., Deveny, W. E., Mickelson, R. A., Deb, S. K., and Zunger, A. (1987). Proceedings of the 7th Conference on Ternary and Multinary Compounds, *Materials Research Society*, 59.

14. Waag, A., Litz, T., Fischer, F., Lugauer, H. J., Baron, T., Schüll, K., Zehnder, U., Gerhard, T., Lunz, U., Keim, M., Landwehr, G., and Reuscher, G. (1998). Novel beryllium containing II–VI compounds: basic properties and potential applications. *Journal of Crystal Growth*, 184, 1-10.

15. Cho, M. W., Chang, J. H., Bagnall, D. M., Koh, K. W., Saeki, S., Park, K. T., Zhu, K., Hiraga, T., and Yao, T. (1999). Growth and characterization of beryllium-based II–VI compounds. *Journal of Applied Physics*, 85(1), 512-517.

16. Bhuse, V. M., Hankare, P. P., and Sonandkar, S. (2007). Structural, optical, electrical and photo-electrochemical studies on indium doped Cd 0.6 Hg 0.4 Se thin films. *Materials Chemistry and Physics*, 101(2), 303-309.

17. Dappadwad, U. R., Lande, M. K., Chonde, S. G., Arbad, B. R., Hankare, P. P., and Bhuse, V. M. (2008). Synthesis and characterization of Zn 0.5 Hg 0.5 Se thin films. *Materials Chemistry and Physics*, 112(3), 941-944.

18. Mahalingam, T., Kathalingam, A., Velumani, S., Lee, S., Lew, K. S., & Kim, Y. D. (2005). Characterization of electrodeposited Zn1− xHgxSe thin films. *Semiconductor Science and Technology*, 20(8), 749.

19. Gaines, J. M., Drenten, R. R., Haberern, K. W., Marshall, T., Mensz, P., and Petruzzello, J. (1993). Blue-green injection lasers containing pseudomorphic Zn1− xMgxSySe1− y cladding layers and operating up to 394 K. *Applied physics letters*, 62(20), 2462-2464.

20. Khenata, R., Bouhemadou, A., Hichour, M., Baltache, H., Rached, D., and Rerat, M. (2006). Elastic and optical properties of BeS, BeSe and BeTe under pressure. *Solid-State Electronics*, 50(7), 1382-1388.

21. Berchenko, N.N., Krevs, V.E., and Sredin, V.G. (1982). *Poluprovodnikovye tverdye rastvory i ikh primenenie* (Semiconductor Solid Solutions and Their Applications), Moscow: Voenizdat, 1982.

22. Ahrenkiel, R. K., Keyes, B. M., Levi, D. L., Emery, K., Chu, T. L., and Chu, S. S. (1994). Spatial uniformity of minority-carrier lifetime in polycrystalline CdTe solar cells. *Applied Physics Letters*, 64(21), 2879-2881.

23. Parikh, A., Pearson, S. D., Tran, T. K., Bicknell, R. N., Benz, R. G., Wagner, B. K., Schäfer, P., and Summers, C. J. (1996). Growth and characterization of HgCdTe heterostructures by metalorganic molecular beam epitaxy. *Journal of Crystal Growth*, 159(1), 1152-1156.

24. Cobb, S. D., Szofran, F. R., Jones, K. S., and Lehoczky, S. L. (1999). Microstructural development of directionally solidified Hg1− xZnxSe alloys. *Journal of Electronic Materials*, 28(6), 732-739.

25. Gaines, J. M., Drenten, R. R., Haberern, K. W., Marshall, T., Mensz, P., and Petruzzello, J. (1993). Blue-green injection lasers containing pseudomorphic Zn1− xMgxSySe1− y cladding layers and operating up to 394 K. *Applied Physics Letters*, 62(20), 2462-2464.

26. Ameri, M., Rached, D., Rabah, M., El Haj Hassan, F., Khenata, R., & Doui-Aici, M. (2008). First principles study of structural and electronic properties of Bex Zn1–xS and Bex Zn1–xTe alloys. *Physica Status Solidi* (b), 245(1), 106-113.

27. Yang, Z., Chang, H. T. (2010). CdHgTe and CdTe quantum dot solar cells displaying an energy conversion efficiency exceeding 2%. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(12), 2046-2051.

28. Surkova, T. P., Kaczor, P., Zakrzewski, A. J., Swiatek, K., Ivanov, V. Y., Godlewski, M., Polimeni, A., Eaves, L., and Giriat, W. (2000). Optical properties of ZnSe, ZnCdSe and ZnSSe alloys doped with iron. *Journal of Crystal Growth*, 214, 576-580.

29. Born, M., Oppenheimer, R. (1927). Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 389(20), 457-484.

30. İnternet: Akıncı, Ü. (2016). *Yoğunluk fonksiyoneli teorisi*. İzmir: Dokuz Eylül Üniversitesi. URL: http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fkisi.deu.edu.tr%2Fumit.akinci%2Fkmc%2Fnode1.html+&date=2016-06-02, Son Erişim Tarihi: 17.03.2016.

31. Hartree, D. R. (1928). The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24(1), 89-110.

32. Fock, V. (1930). Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. *Zeitschrift für Physik*, 61(1-2), 126-148.

33. Kohn, W., Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133.

34. Fermi, E. (1927). Statistical method to determine some properties of atoms. *Accademia Nazionale dei Lincei*, 6, 602-607.

35. Hohenberg, P., Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B), B864.

36. Fermi, E. (1928). A statistical method for th e determination of some properties of atoms. II. Application to the periodic system of the elements. *Zeitschrift für Physik,* 48, 73-79.

37. Segall, M. D., Lindan, P. J., Probert, M. A., Pickard, C. J., Hasnip, P. J., Clark, S. J., and Payne, M. C. (2002). First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(11), 2717.

38. Körözlü, N. (2009). *$Cd_xZn_{1-x}X$(X=Te, Se, S) alaşimlarinin ve WP, GdX (X=Bi, Sb) bileşiklerinin temel fiziksel özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT)'ne*

dayali yöntemlerle hesaplanması. Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Ensitüsü, Ankara.

39. Arslan, T. (2010). X-ışınları ve kullanım alanları. Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Eğitim Bilimleri Ensitüsü, Ankara.

40. Şahin, Y. (1999). *Çekirdek fiziğinin esasları*. Erzurum: Atatürk üniversitesi Yayınları.

41. Wu, J., Walukiewicz, W., Yu, K. M., Ager, J. W., Li, S. X., Haller, E. E., William, H. L., and Schaff, W. J. (2003). Universal bandgap bowing in group-III nitride alloys. *Solid State Communications*, 127(6), 411-414.

42. Kittel, C. (1996). *Introduction to solid state physics.* New York: John Wiley and Sons.

43. Martin, R. M. (2004). *Electronic structure*. Cambridge: Cambridge University Press.

44. İnternet: Weber, S. (2001). *Kristal örgü yapıları*. 2016 VRML Structure Type gallery. URL: http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fjcrystal.com%2Fsteffenweber%2Fgallery%2FStructureTypes%2Fst2.html&date=2016-06-11, Son Erişim Tarihi: 17.03.2016.

45. İnternet: U.S. Naval Research Laboratory. (2007). *Yüksek simetri noktaları.* URL: http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fcst-www.nrl.navy.mil%2F%7Emehl%2Fphonons%2F&date=2016-06-12, Son Erişim Tarihi: 17.03.2016.

46. Deligöz, E. (2007). *Bazı ikili (CdS, CdSe, CdTe, CdF2, AlBi,BBi) bileşiklerin yapısal, elektronik, elastik, termodinamik, ve titreşimsel özeliklerinin ab initio yöntemlerle incelenmesi.* Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Ensitüsü, Ankara.

47. Murnaghan, F. D. (1944). The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244-247.

48. Ashcroft, N. W., Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics.* Philadelphia: W. B. Saunders Company.

49. Grimvall, G. (1986). *Thermophysical properties of materials*. Amesterdam: North-Holland.

50. Wang, J., Yip, S., Phillpot, S. R., and Wolf, D. (1993). Crystal instabilities at finite strain. *Physical Review Letters*, 71(25), 4182.

51. Wu, Z. J., Zhao, E. J., Xiang, H. P., Hao, X. F., Liu, X. J., and Meng, J. (2007). Crystal structures and elastic properties of superhard Ir N 2 and Ir N 3 from first principles. *Physical Review B*, 76(5), 054115.

52. Wang, S. Q., Ye, H. Q. (2003). First-principles study on elastic properties and phase stability of III–V compounds. *Physica Status Solidi (b)*, 240(1), 45-54.

53. Mehl, M. J. (1993). Pressure dependence of the elastic moduli in aluminum-rich Al-Li compounds. *Physical Review B*, 47(5), 2493.

54. Gülseren, O., Cohen, R. E. (2002). High-pressure thermoelasticity of body-centered-cubic tantalum. *Physical Review B*, 65(6), 064103.

55. Bannikov, V. V., Shein, I. R., and Ivanovskii, A. L. (2007). Electronic structure, chemical bonding and elastic properties of the first thorium-containing nitride perovskite TaThN3. *Physica Status Solidi (RRL)-Rapid Research Letters*, 1(3), 89-91.

56. Frantsevich, I. N., Voronov, F. F., Bokuta, S. A., and Frantsevich, I. N. (1983). *Elastic constants and elastic moduli of metals and insulators handbook*. Kiev: Naukova Dumka.

57. Korozlu, N., Colakoglu, K., and Deligoz, E. (2009). Structural, electronic, elastic and optical properties of CdxZn1− xTe mixed crystals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(17), 175406.

58. Kleinman, L. (1962). Deformation potentials in silicon. I. Uniaxial strain. *Physical Review*, 128(6), 2614.

59. Anwand, W., Kissener, H., and Brauer, G. (1995). A magnetically guided slow positron beam for defect studies. *Acta Physica Polonica A*, 1(88), 7-11.

60. Chrisman, J. R. (1988). *Fundamentals of solid state physics*. New York: John Wiley & Sons.

61. Johnston, I., Keeler, G., Rollins, R., and Spicklemire S. (1996). *Solid state physics simulations, the consortium for upper-level physics software*. New York: John Wiley.

62. Schreiber, E., Anderson, O.L., and Soga, N. (1973). *Elastic constants and their measurements*. New York: McGraw-Hill.

63. İnternet: University of Minesota. (2008). *Yoğunluk fonksiyoneli teorisi*. URL: http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fwebusers.physics.umn.edu%2F&date=2016-06-25, Son Erişim Tarihi: 11.05.2016.

64. Thomas, L. H. (1927). The calculation of atomic fields. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 23, 542-550

65. Fermi, E. (1928). A statistical method for th e determination of some properties of atoms. II. Application to the periodic system of the elements. *Zeitschrift für Physik,* 48, 73-79

66. Giannozzi, P., de Gironcoli, S., Pavone, P. and Baroni, S. (1991). Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors. *Physical Review B*, 43, 7231-7242

67. Gonze, X., Allan, D. C. and Teter, M. P. (1992). Dielectric tensor, effective charges, and phonons in α-quartz by variational density-functional perturbation theory. *Physical Review Letters*, 68, 3603-3606.

68. Laasonen, K., Csajka, F. and Parrinello, M. (1992). Water dimer properties in the gradient-corrected density functional theory. *Chemical Physics Letters*, 194, 172-174

69. Sprik, M., Hutter, J. and Parrinello, M. (1996). Ab initio molecular dynamics simulation of liquid water: Comparison of three gradient-corrected density functionals. *The Journal of Chemical Physics*, 105,1142-115.

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

71. Perdew, J. P., and Wang, Y. (1992). Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, 45,13244-13249.

72. Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, 41, 7892-7895.

73. Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 77, 3865-3868.

74. Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J., and Fiolhais, C. (1992). Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Physical Review B*, 46, 6671-6687.

75. Parlinski K., Li Z. Q., and Kawazoe Y. (1997). First-principles determination of the soft mode in cubic ZrO2. *Physical Review Letters*, 78, 4063-4066

76. Ceperley, D. M., Alder, M. J. (1980). Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Physical Review Letters*, 45, 566-569.

77. Probert, M. I. J. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, 41, 7892-7895.

78. Marder, M. P. (2000). *Condensed matter physics*. NewYork: John Wiley&Sons.

79. Young, D. A. (1991). *Phase diagrams of elements*. England: University of California Press.

80. Wang S. Q., Ye H. Q. (2002). Plane-wave pseudopotential study on mechanical and electronic properties for IV and III-V crystalline phases with zinc-blende structure. *Physical Review B*, 66, 235111.

81. Fox, M. (2001). *Optical properties of solids, oxford master series in condensed matter physics.* United Kingdom: Oxford University Press.

82. Akkuş, H., Mamedov, A. M., (2007). *SbSI kristalinin elektronik optik özellikleri: Yoğunluk fonksiyonel teorisinin uygulanması*. Doktora Tezi, Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Adana.

83. Wooten, F. (1972). *Optical properties of solids*. New York: Academic.

84. İnternet: Massachusetts Institute of Technology. (2016). *Optical properties.* URL: http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Focw.mit.edu%2FNR%2Frdonlyres%2F6A67F72-D66A-474A-AAEF10B4148B0C48%2F0%2Fchap6_solid_prop.pdf%2F&date=2016-06-21, Son Erişim Tarihi: 17.03.2016.

85. Şahin, Y. (1999). *Çekirdek fiziğinin esasları.* Erzurum: Atatürk üniversitesi Yayınları.

86. Born M., Huang. K. (1956). *Dynamical theory of crystal lattices*. Oxford: Clarendon.

87. Zhai, H., Li, X., and Du, J. (2012). First-Principles Calculations on Elasticity and Anisotropy of Tetragonal Tungsten Dinitride under Pressure. *Materials Transactions*, 53(7), 1247-1251.

88. Matori, K. A., Zaid, M. H. M., Sidek, H. A. A., Halimah, M. K., Wahab, Z. A., and Sabri, M. G. M. (2010). Influence of ZnO on the ultrasonic velocity and elastic moduli of soda lime silicate glasses. *International Journal of Physical Sciences*, 5(14), 2212-2216.

89. Ponomareva, A. V., Isaev, E. I., Vekilov, Y. K., and Abrikosov, I. A. (2012). Site preference and effect of alloying on elastic properties of ternary B 2 NiAl-based alloys. *Physical Review B*, 85(14), 144117

90. Baaziz, H., Charifi, Z., El Haj Hassan, F., Hashemifar, S. J., and Akbarzadeh, H. (2006). FP-LAPW investigations of Zn1–xBexS, Zn1–xBexSe and Zn1–xBexTe ternary alloys. *Physica Status Solidi (b)*, 243(6), 1296-1305.

91. Ameri, M., Rached, D., Rabah, M., El Haj Hassan, F., Khenata, R., and Doui-Aici, M. (2008). First principles study of structural and electronic properties of Bex Zn1–xS and Bex Zn1–xTe alloys. *Physica Status Solidi (b)*, 245(1), 106-113.

92. Kumar, S., Maurya, T. K., and Auluck, S. (2008). Electronic and optical properties of ordered BexZn1− xSe alloys by the FPLAPW method. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(7), 075205.

93. Ashcroft, N. W., Mermin, N. D. (1976). *Solid state physics*. Philadelphia, Saunders.

94. Nye, J. F. (1957). *Physical properties of crystals.* Oxford: Clarendon.

95. Perdew, J. P., Zunger, A. (1981). Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. *Physical Review B*, 23(10), 5048.

96. Li, D. X., Haga, Y., Shida, H., Suzuki, T., Kwon, Y. S., and Kido, G. (1997). Magnetic properties of stoichiometric Gd monopnictides. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9(48), 10777.

97. Hosseini, S. M. (2008). Optical properties of cadmium telluride in zinc-blende and wurzite structure. *Physica B: Condensed Matter*, 403(10), 1907-1915.

98. Khenata, R., Bouhemadou, A., Sahnoun, M., Reshak, A. H., Baltache, H., and Rabah, M. (2006). Elastic, electronic and optical properties of ZnS, ZnSe and ZnTe under pressure. *Computational Materials Science*, 38(1), 29-38.

99. Hongsheng, Z., Tao, Y., and Deqi, W. (2012). First principles calculations of the electronic and optical properties in Cd_xZn_ (1-x) Se ternary alloys. *Journal of Ningxia University (Natural Science Edition)*, 1, 012.

100. Postnikov, A. V., Pages, O., Tite, T., Ajjoun, M., and Hugel, J. (2005). Isolated modes and percolation in the lattice dynamics of (Be, Zn) Se. *Phase Transitions*, 78(1-3), 219-228.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler



Soyadı, Adı : Ali GÜLTEKİN

Uyruğu : T.C.

Doğum tarihi ve yeri : 08.11.1972 İskilip

Medenî hali : Bekâr

Telefon : 0 (506) 631 59 59

e-posta : aligultekin19@gmail.com

Eğitim Derecesi	**Okul/Program**	**Mezuniyet yılı**
Doktora	Gazi Üniversitesi /Fizik Bölümü	Devam Ediyor
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Kazaların Demografisi ve Epidemiyolojisi (Tez Aşaması)	Devam Ediyor
Yüksek lisans	Zirve Üniversitesi /İş Sağlığı ve Güvenliği Bölümü (Tez Aşaması)	Devam Ediyor
Yüksek Okul	Atatürk Üniversitesi (Açık Öğretim) /İş Sağlığı ve Güvenliği Bölümü	2016
Tezsiz Yüksek lisans	Akasaray Üniversitesi / İş Sağlığı ve Güvenliği Bölümü	2015
Yüksek Okul	Ankara Üniversitesi /Elmadağ Meslek Yüksek Okulu Bilgisayar Proğramcılığı	2013
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Fizik Bölümü	2002
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	1997
Lise	İskilip Lisesi Lisesi	1990

İş Deneyimi

Yıl	**Çalıştığı Yer**	**Görev**
2016- devam ediyor	TÜBİTAK	"Tübitak-Ulakbim" Proje
2010-2016	Çağrıbey Anadolu Lisesi	Bilgisayar Formatör Öğretmeni
2014-2015	Mamak İlçe Milli Eğitim	A sınıfı iş güvenliği uzmanı
2010-2013	İTAP	İTAP Fizik Olimpiyat Okulunda 4. Aşamaya Geldim
2009-2016	Çağrıbey Anadolu Lisesi	Fizik Öğretmeni
2009- 2010	MEB Eğitimi Araştırma ve Geliştirme Dairesi Başkanlığı	Öğretmen
2002-2005	Polatlı Anadolu Lisesi	Fizik Öğretmeni
2015	Çalışanların Temel İş Sağlığı ve Güvenliği Kursu	Egitim Görevlisi

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

- **SCI Dergilerde**

1- Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2015, November). The study of structural, electronic, elastic and optical properties in $Be_{1-x}Zn_xTe$ alloys, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 39, 629-635.

2- Durukan, I. K., Bayal, Ö., Kurtuluş, G., Baş, Y. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Çörekçi, S., Tamer, M., Özçelik, S. and Özbay, E. (2015). Examination of the temperature related structural defects of InGaN/GaN solar cells. *Superlattices and Microstructures*. 86, 379–389.

3- Gültekin, A., Pashaei, P., Khan, Z., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2015). DFT and X-ray study of structural, electronic, elastic and optical properties in $Be_{1-x}Zn_xS$ alloys depending on Vegard's law. *International Journal of Computational Methods and Experimental Measurements*, 3(4), 340 – 349.

4- Baş, Y., Tamer, M., Gültelin, A., Öztürk, M. K., Altuntaş, H., Özçelik, S., and Özbay, E. (2015). Defect research of InGaN based blue LED structures using reciprocal space mapping. *Gazi University Journal of Science*, 28(3), 365-375.

5- Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., Baş, Y. and Özçelik, S. (2015). The study of structural, electronic, elastic and optical properties in $Be_{1-x}Zn_xSe$ alloys. *Gazi University Journal of Science Science*, 28(4), 577-586.

6- Durukan, İ. K., Bayal, Ö., Kurtuluş, G., Baş, Y., Gültekin, A., Öztürk, M. K., Çörekçi, S., Tamer, M., Özçelik, S., and Özbay, E. (2015, October). Examination of the temperature related structural defects of InGaN/GaN solar cells. *Superlattices and Microstructures*. 86, 379–389.

7- Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2015). Investigation of structural, electronic, elastic and optical properties of $Cd_{1-x-y}Zn_xHg_yTe$ alloys with X-Ray device and AB-Inito Method (Hakemde).

- **Ulusal Kongre ve Uluslar arası Kongre Tebliğleri**

1. Baş, Y., Pashaie, P., Gültekin, A., Tamer, M., Akdoganand, C., and Ozturk, M. K. (2015, 24 Haziran). *Investigation of structural, electronic, elastic and optical properties of $B_{1-x-y}Ga_xAl_yN$ alloys depending on the vegards law with ab-initio method by using x-ray device*. Uluslararası Nano TR-11, Ankara. (Oral Presentation)

2. Baş, Y., Tamer, M., Gültekin, A., Akdoğanand, C., Öztürk, M. K. (2015, 24 Haziran). *Comparison of the Mosaic Defects in the In Grade and Ungraded $In_xGa_{1-x}N$ Solar Cells.* Uluslararası Nano TR-11, Ankara. (Poster Sunum)

3. Baş, Y., Tamer, M., Gültekin, A., and Ozturk, M. K. (2015, 26 May). *The research of structural, electronic, elastic and optical features of Cd1-x-yZnxHgyTe alloys depending on the Vegards Law through X-Ray machine and ab-inito method.* International Conference for Academic Disiplines, Harvard Medical School, Boston, Massachusetts. (Oral Presentation)

4. Tamer, M., Öztürk, M. K., Gültekin, A., Baş, Y., Özçelik, S., and Özbay, E. (2015, 24-27 August). *Grain boundary related electrical transport in al_rich $Al_XGa_{1-X}N$ layers grown by metal–organic chemical vapor deposition*. 9th International Physics Conference of the Balkan Physical Union, Istanbul University, Istanbul, Turkey. (Oral Presentation)

5. Gültekin, A., Baş, Y., Tamer, M., Öztürk, M. K. (2015, 24-27 August). *Examination of structural, optical, electronic, elastic properties of B_{1-x-y} In_xAl_xN alloys depend on vegards law in X- ray machine and Ab-Initio method.* 9th International physics Conference of the Balkan physical Union, Istanbul University, Istanbul / Turkey. (Oral Presentation)

6. Tamer, M., Öztürk, M. K., Gültekin, A., Baş, Y., Özçelik, S., and Özbay, E. (2015, 24-27 August). *Calculations of the elastic scattering properties of ultra-cold francium isotopes.* 9th International physics Conference of the Balkan physical Union, Istanbul University, Istanbul, Turkey. (Poster Presentation)

7. Gültekin, A., Baş, Y., Tamer, M., and Öztürk, M. K. (2015, 24-27 August). *Examinations of structural, optical, electronic, elastic properties of 2x1x1 B1-xGaxN supercellalloys depend on vegards law in x ray machine and Ab-Initio method.* 9th

International physics Conference of the Balkan physical Union, Istanbul University, Istanbul, Turkey. (Poster Presentation)

8. Ataşer, T., Tamer, M., Öztürk, M. K., Çörekçi, S., Baş, Y., Gültekin, A., Kurtuluş, G., Özçelik, S., and Özbay, E. (2015, 25 Aralık). *AlInN/AlN/GaN HEMT yapıların yapısal özellikleri.* 21. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye.

9. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2015, 25 Aralık). *$Be_{1-x-y}Zn_xHg_ySe$ alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik ve optiksel özelliklerinin vegards yasasina bağli olarak X–Ray cihazi ve ab-Initio metodla incelenmesi.* 21. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye.

10. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., Baş, Y. (2015, 25 Aralık). *2×1×1 $Be_{1-x}Zn_xSe$ alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik ve optiksel özelliklerinin vegards yasasına bağlı olarak X–Ray cihazi ve Ab-Initio metodla incelenmesi.* 21. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye.

11. Baş, Y., Öztürk, M. K., Tamer, M., Gültekin, A., Altuntaş, H., Özçelik, S. and Özbay, E. (2014, 17-21 Haziran).*Defect research of InGaN based blue LED structures with reciprocal lattice space mapping*. Nano TR-10, İstanbul.

12. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2014, 21-24 Temmuz). *$Cd_{1-x}Zn_xTe$ alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik ve optiksel özelliklerinin vegard yasası ve ab-initio metodla incelenmesi.* Türk Fizik Derneği 31. Uluslararası Fizik Kongresi, Bodrum, Muğla.

13. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2014, 21-24 Temmuz). *Structural and optical properties of an $In_xGa_{1_x}N$/GaN nanostructure*. Türk Fizik Derneği 31. Uluslararası Fizik Kongresi, Bodrum, Muğla.

14. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2014, 21-24 Temmuz). *Structural, electrical and optical characterization of InGaN layers grown by MOVPE*. Türk Fizik Derneği 31. Uluslararası Fizik Kongresi, Bodrum, Muğla.

15. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2014, 21-24 Temmuz). *$Cd_{1-x}Zn_xSe$ alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik ve optiksel özelliklerinin vegard yasası ve ab-initio metodla incelenmesi*. Türk Fizik Derneği 31. Uluslararası Fizik Kongresi, Bodrum/Muğla.

16. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M., and Baş, Y. (2014, 21-24 Temmuz). *$Cd_{1-x}Hg_xS$ alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik ve optiksel özelliklerinin vegard yasası ve ab-initio metodla incelenmesi*. Türk Fizik Derneği 31. Uluslararası Fizik Kongresi, Bodrum, Muğla.

17. Tamer, M., Baş, Y., Öztürk, M. K., Gültekin, A., Özçelik, S., and Özbay, E. (2013, 2-5 Eylül). *X-ışınları kırımı ile yüksek elektron-hareketlilikli transistör (HEMT) AlInN'ın yapısal analizi.* Türk Fizik Derneği 30. Uluslararası Fizik Kongresi, İstanbul.

18. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M. (2013). *$Cd_{1-x-y}Hg_xZn_ySe$ alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik veoptiksel özelliklerinin ab-ınıtıo metodla incelenmesi.* 2. Yoğun Madde Fiziği (YMF)-İzmir Toplantısı, İzmir.

19. Gültekin, A., Öztürk, M. K., Tamer, M. (2013). *$Cd_{1-x-y}Hg_xZn_yS$ alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik ve optiksel özelliklerinin ab-ınıtıo metodla incelenmesi.* 2. Yoğun Madde Fiziği (YMF)-İzmir Toplantısı, İzmir.



GAZİ GELECEKTİR..