

**T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**BOR BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK VE
OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK
İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
Mehmet ÜSTÜNDAĞ**

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK
Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Metin ASLAN

Haziran 2013

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

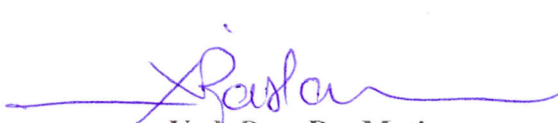
**BOR BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK VE
OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK
İNCELENMESİ**


YÜKSEK LİSANS TEZİ


Mehmet ÜSTÜNDAĞ

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 27 / 06 / 2013 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.


Yrd. Doç. Dr. Metin
ASLAN
Jüri Başkanı


Doç. Dr. Sıtkı
DUMAN
Üye


Yrd. Doç. Dr. Hüseyin
KARACA
Üye

TEŐEKKÜR

Bu tez alıřmam boyunca bana danıřmanlık eden ve maddi manevi desteęini hi esirgemeyen deęerli hocam Yrd. Do. Dr. Metin Aslan'a teőekkürlerimi sunuyorum. Ayrıca alıřmam süresince bana destek olan mesai arkadařım Arř. Gör. Battal Gazi Yalın'a teőekkür ederim.

Ayrıca tez alıřmamda bana bölümün her türlü imkânını sunan deęerli bölüm hocalarımıza, özellikle katkılarından dolayı Do. Dr. Sadık Baęcı ve Sıtkı Duman'a teőekkürlerimi bildiririm. alıřmam süresince bana hep desteki olan kıymetli eřim ve oęluma da ok teőekkür ederim.

Bu tez alıřması Sakarya Üniversitesi Bilimsel Arařtırma Projeleri Koordinatörlüęü (BAPK) tarafından (Proje No: 2012-50-01-008) desteklenmiřtir. Desteęinden dolayı BAPK'ya da teőekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	ii
İÇİNDEKİLER	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	vi
ŞEKİLLER LİSTESİ	viii
TABLolar LİSTESİ	x
ÖZET	xi
SUMMARY	xii
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ	1
BÖLÜM.2.	
BOR MADENİNİN ÖNEMİ	3
BÖLÜM.3.	
TEORİ VE UYGULANIŞI.....	6
3.1. Giriş.....	6
3.2. Çok Cisim Problemi.....	6
3.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı.....	7
3.4. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi	8
3.4.1. Hohenberg Kohn teoremi.....	8
3.4.2. Kohn Sham eşitlikleri.....	10
3.4.3. Değiş tokuş ve karşılıklı etkileşim fonksiyonu.....	14
3.5. Teorinin Uygulanışı.....	15
BÖLÜM.4.	
YAPISAL ÖZELLİKLER	16

4.1. Bor-V Grubu Bileşiklerin Taban Durumu Kristal Yapısı.....	16
4.2. Yüzey Merkezli Kübik Örgü.....	19
4.3. ZnS Kristal Fazı	20
4.4. Ters Örgü	21
4.5. Yüzey Merkezli Kübik Örgünün Birinci Brillouin Bölgesi.....	22
4.6. Bor-V Grubu Bileşiklerin ZnS Fazda Örgü Sabiti ve Sertlik Değerleri	23
4.7. Bor-V Grubu Bileşiklerin Elastik Özellikleri	24
4.8. Bor-V Grubu Bileşiklerin Debye Sıcaklığı ve Erime Noktası.....	30
BÖLÜM.5.	
ELEKTRONİK ÖZELLİKLER	33
5.1. Yarı İletken Bant Yapıları.....	33
5.2. BN Bileşiğinin Elektronik Özellikleri	34
5.3. BP Bileşiğinin Elektronik Özellikleri	36
5.4. BAs Bileşiğinin Elektronik Özellikleri	38
5.5. BSb Bileşiğinin Elektronik Özellikleri	39
5.6. BBi Bileşiğinin Elektronik Özellikleri.....	41
5.7. Sonuçlar	43
BÖLÜM.6.	
OPTİKSEL ÖZELLİKLER.....	44
6.1. Kompleks Dielektrik Fonksiyonu	44
6.1.1. Kompleks dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmı	45
6.1.2. Kompleks dielektrik fonksiyonunun reel kısmı	46
6.2. Kırılma İndisi	48
6.3. Soğurma Katsayısı	49
6.4. Enerji Kayıp Fonksiyonu	51
6.5. Yansıma Katsayısı	52
6.6. Optiksel İletkenlik.....	53
BÖLÜM 7.	
SONUÇLAR VE ÖNERİLER	55

KAYNAKLAR.....	57
ÖZGEÇMİŞ	63

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

A	: Anizotropi faktörü
a	: Örgü parametresi
au	: Atomik kütle birimi
B	: Bulk (hacim) modülü
C_s	: Dalga kayma modülü
E_{HF}	: Toplam Hartree-Fock enerjisi
$E_{V_{dış}}$: Bir sistemde dış potansiyelden kaynaklanan enerji
E_e	: Elektronik toplam enerji
e	: Elektron yükü
ϵ_0	: Başlangıç boşluk oranı
$f_{(k_n)}$: Kristalin n'inci öz değerine karşılık gelen fermi dağılım fonksiyonu
F_{HK}	: Hohenberg ve Kohn yoğunluk fonksiyonu
G	: Kayma (shear) modülü
G_R	: Reuss ve Angel'in kayma modülü
G_V	: Voight'in kayma modülü
H	: Hamilton işlemcisi
H_{KS}	: Kohn-Sham hamiltonu
h	: Planck sabiti
k_n	: Kristalin n'inci öz değerine karşılık gelen dalga vektörü
k_β	: Boltzman sabiti
$L(\omega)$: Enerji kayıp fonksiyonu
M	: Çekirdeğin kütlesi
m_e	: Elektron kütlesi
$n(\omega)$: Kırılma indisi

\hat{O}	: Durum yoğunluğu işlemcisi
p	: Momentum matris elemanı
\vec{R}	: Çekirdeğin konum vektörü
$R(\omega)$: Yansıma katsayısı
\vec{r}	: Elektronun konum vektörü
\hat{T}	: Kinetik enerji işlemcisi
T_m	: Erime noktası.
u	: Wurtzite yapının iç parametresi
\hat{V}	: Potansiyel enerji işlemcisi
V_H	: Hartree potansiyel enerjisi
V_x	: Değiş tokuş potansiyel enerjisi
V_c	: Karşılıklı ilişki potansiyel enerjisi
V_{xc}	: Değiş tokuş ve karşılıklı etkileşim potansiyel enerjisi
Z	: Atomun proton sayısı
ϵ_0	: Serbest uzayın elektrik geçirgenliği
δ	: Türev işlemcisi
Ψ	: Dalga fonksiyonu
$\rho(r)$: Taban durumu elektronik yük yoğunluğu
Φ_i	: Tek parçaçığın dalga fonksiyonları
ζ	: Kleinmann parametresi
v_m	: Ortalama dalga hızı
v_l	: Boyuna dalga hızı
v_t	: Enine dalga hızı
$\epsilon(\omega)$: Kompleks dielektrik fonksiyonu
$\epsilon_1(\omega)$: Kompleks dielektrik fonksiyonun reel kısmı
$\epsilon_2(\omega)$: Kompleks dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı
$\alpha(\omega)$: Soğurma katsayısı
$\sigma(\omega)$: Optiksel iletkenlik
Ω	: Kristalin birim hücrenin hacmi

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 3.1.	Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış çizelgesi...	13
Şekil 4.1.	Atomlar arası mesafeye bağlı etkileşimi gösteren kuvvet ve enerji grafikleri.....	17
Şekil 4.2.	Bor-V bileşiklerinin enerjiye karşılık hacim grafikleri.....	18
Şekil 4.3.	Bor-V bileşiklerinin minimum enerjiye karşılık örgü sabiti grafiği.....	19
Şekil 4.4.	Yüzey merkezli kübik hücrenin geleneksel birim hücresi.....	20
Şekil 4.5.	ZnS kristal yapının geleneksel birim hücresi.....	21
Şekil 4.6.	Yüzey merkezli kübik hücrenin indirgenmiş I. Brillouin bölgesi..	22
Şekil 5.1.	Yarı iletkenlerde doğrudan ve dolaylı geçişler	34
Şekil 5.2.	BN bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu	34
Şekil 5.3.	B ve N için toplam ve parçalı durum yoğunlukları	36
Şekil 5.4.	BP bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu	36
Şekil 5.5.	B ve P için toplam ve parçalı durum yoğunlukları	37
Şekil 5.6.	BA _s bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu	38
Şekil 5.7	B ve As için toplam ve parçalı durum yoğunlukları	39
Şekil 5.8.	BS _b bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu	40
Şekil 5.9.	B ve Sb için toplam ve parçalı durum yoğunlukları	41
Şekil 5.10.	BB _i bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu	42
Şekil 5.11.	B ve Bi için toplam ve parçalı durum yoğunlukları	43
Şekil 5.12.	Enerji bant aralığı-örgü sabiti grafiği.....	43

Şekil 6.1.	Bor-V bileşiklerinin $\varepsilon_2(\omega)$ grafiği	46
Şekil 6.2.	Bor-V bileşiklerinin $\varepsilon_1(\omega)$ grafiği	47
Şekil 6.3.	Bor-V bileşiklerinin $n(\omega)$ grafiği	49
Şekil 6.4.	Bor-V bileşiklerinin $\alpha(\omega)$ grafiği.....	50
Şekil 6.5.	Bor-V bileşiklerinin $L(\omega)$ grafiği.....	51
Şekil 6.6.	Bor-V bileşiklerinin $R(\omega)$ grafiği.....	53
Şekil 6.7.	Bor-V bileşiklerinin $\sigma(\omega)$ grafiği.....	54

TABLolar LİSTESİ

Tablo 2.1.	Bor rezervlerinin ÷lkelere göre dağılımı.....	4
Tablo 2.2.	2008 yılı dünya bor üretiminin bölgesel dağılımı.....	5
Tablo 4.1.	Bor-V grubu bileşiklerinin üç fazda hesaplanan yapısal özellikleri ve digger çalışmalar.....	24
Tablo 4.2.	ZnS yapıdaki Bor-V grubu bileşiklerinin elastik sabitleri.....	27
Tablo 4.3.	İncelenen Bor-V grubu bileşiklerin Bulk mod÷lü (B), Kayma mod÷lü (G), Young mod÷lü (Y) ve Poisson oranları ve Kleinmann parametreleri(ζ).....	30
Tablo 4.4.	İncelenen Bor-V grubu bileşiklerin yoğunluk (ρ), enine, boyuna ve ortalama dalga hızları (v_t , v_l , v_m), debye sıcaklıkları (θ_D) ve erime noktaları (T_m) verileri.....	32
Tablo 4.5.	Bor-V grubu bileşikleri ile bilinen sert maddelerin yoğunluk ve Bulk mod÷l deęerleri.....	32
Tablo 5.1.	BN bileşięinin E_g deęerleri.....	35
Tablo 5.2.	BP bileşięinin E_g deęerleri.....	37
Tablo 5.3.	BAs bileşięinin E_g deęerleri.....	39
Tablo 5.4.	BSb bileşięinin E_g deęerleri.....	40
Tablo 5.5.	BBi bileşięinin E_g deęerleri.....	41
Tablo 6.1.	Bor-V bileşiklerinin $n(0)$ deęerleri ve dięer çalıřmalar.....	48

ÖZET

Anahtar kelimeler: Yoğunluk fonksiyon teorisi, Bor-V bileşikleri, WIEN2k, yapısal özellikler, elektronik özellikler, optiksel özellikler.

Bu tez Bor-V grubu yarı iletken bileşiklerin (BN, BP, BAs, BSb, BBi) yapısal, elektronik ve optiksel özelliklerini bir arada inceleyen ilk çalışmadır. Ayrıca Bor-V grubu bileşiklerin bazı yapısal ve optiksel parametreleri ilk bu tezde hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçların var olan deneysel ve teorik çalışmalarla uyum içinde olduğu gözlemlendi. Hesaplamaların tümünde DFT tabanlı WIEN2k simülasyon programı kullanıldı. Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim enerjileri GGA kullanılarak ele alındı.

Tez çalışmasının giriş bölümünde yapılan çalışmanın amacı bahsedildi. İkinci bölümde, Bor-V bileşikleri için yapılan önceki çalışmalardan ve ülkemiz için bor madeninin öneminden bahsedilmiştir. Üçüncü bölümde, hesaplamalarda kullanılan WIEN2k programının dayandığı teorik temeller özetlenmiştir.

Dördüncü, beşinci ve altıncı bölümlerde çalışılan Bor-V bileşiklerinin sırasıyla yapısal, elektronik ve optiksel özellikleri detaylı bir şekilde incelenmiştir ve son bölümde ise elde edilen bulguların değerlendirilmesi yapılmış ve gelecekteki çalışmalar için öneriler verilmiştir.

THEORETICAL INVESTIGATION OF STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF BORON COMPOUNDS

SUMMARY

Key Words: Density functional theory, Boron-V compounds, WIEN2k, structural properties, electronic properties, optical properties.

In this thesis, for the first time, the structural electronic and optical properties of Boron-V compounds (BN, BP, BAs, BSb, BBi) are investigated all together. Furthermore, some structural and optical properties of Boron-V compounds are investigated for the first time in this study. The obtained results are in good agreement with other experimental and theoretical values. The calculations on the Boron-V compounds are performed using WIEN2k simulation package program within the framework of density functional theory. The exchange and correlation effects are treated using generalized gradient approach.

In the introduction part of this thesis, information is given on previous studies of the Boron-V compounds. In the second part, the importance of boron for Turkey is mentioned. In the third part, the theories that WIEN2k based on are explained briefly.

In the fourth, fifth and sixth parts, the structural, electronic, and optical properties of Boron-V compounds are explained respectively. Finally, in the last part, the evaluation of calculated materials is performed and the advices are given for future studies.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

III-V grubu yarı iletkenler, teknolojinin gelişiminde önemli bir yere sahip malzemelerdir. Son yıllarda, özellikle Bor elementini içeren III-V grubu yarı iletkenler birçok araştırmacı için ilgi çekici hale gelmiştir. Çünkü Bor'lu bileşiklerin kısa bağ uzunlukları ve mekanik dayanıklılığı, Surh (1991), geniş ya da negatif yasak bant aralığına sahip olması, Wentzcovitch (1987), yasak bant aralığındaki bükülme (bowing), Aslan (2012), düşük iyoniklikleri, Garcia (1993), yüksek erime noktası, Golikova (1979), gibi birçok özellikleri bakımından diğer III-V grubu yarı iletkenlere göre farklılık göstermektedir.

Bor bileşikleri birçok elektronik ve opto-elektronik uygulamalar için çok önemli bir yere sahiptir. Örneğin, yarı iletken optik büyütücüler, Perri (1958), diyot lazerler, Ku (1966), foto detektörler, Chu (1972), bu yarı iletken bileşiklerinin sadece bir kaç uygulama alanını göstermektedir. Ayrıca sanayide elmas ve diğer sert maddelere alternatif olarak Bor bileşikleri kullanılmaktadır.

Bor bileşiklerinin sentezlenmesinde ortaya çıkan güçlükler, bor bileşiklerinin deneyselden daha çok teorik olarak çalışılmasına neden olmuştur. Son zamanlarda bor bileşiklerinin özelliklerini incelemek için birçok çalışma yapılmıştır. Örneğin Wang ve Ye, Wang (2002), çinko sülfür yapıda Bor-V grubu bileşiklerinin (BN, BP, BAs, BSb, BBi) yapısal özelliklerini teorik yöntemle incelemişlerdir. Talwar ve arkadaşları, çinko sülfür yapıda, Bor-V grubu bileşiklerinin elastik özelliklerini incelemişlerdir, Talwar (2002). Ferhat ve Zaoui, BBi'nin farklı fazlarda fiziksel özelliklerini incelemişlerdir, Ferhat (2006). Diğer fiziksel özelliklerine eşit parametreler (debye sıcaklığı, erime noktası, dalga hızı vb.) ise ya hiç incelenmemiş ya da çok az bilgi verilmiştir. Öz ısı ve termal iletkenlik için çok önemli bir parametre olan deneysel debye sıcaklığı, sadece BP ve BAs için Kumar ve arkadaşları tarafından incelenmiştir, Kumar (2010). Yine Ferhat ve arkadaşları

BSb'nin yapısal ve elektronik özelliklerini incelemişlerdir, Ferhat (2001). Lachebi ve arkadaşları BN'nin elektronik özelliklerini incelemişlerdir, Lachebi (2009). Schroten ve arkadaşları BP'nin elektronik özelliklerini teorik, Schroten (1998), Paulus ve arkadaşları ise deneysel olarak incelemişlerdir, Paulus (1996). BBi'nin elektronik özelliklerini Madouri ve arkadaşları teorik olarak incelemişlerdir, Madouri (2005). BP, BAs, ve BSb'nin optiksel özelliklerini Zaoui ve arkadaşları incelemişlerdir, Zaoui (2005). Schroten ve arkadaşları BP'nin bazı optiksel parametrelerini, Schroten (1998), Riane ve arkadaşları ise BN'nin bazı optiksel parametrelerini incelemişlerdir, Riane (2010). Görüldüğü gibi Bor-V grubu yarı iletken bileşiklerinin yapısal, elektronik ve optiksel özelliklerinin aynı anda bir arada çalışıldığı bir araştırma yoktur. Bu tezde bu bileşiklerin bahsedilen bütün özelliklerini (yapısal, elektronik, optik) aynı anda bulmak mümkündür.

Ayrıca ülkemiz Bor rezervleri bakımından dünyada ilk sıradadır. Fakat Bor genellikle hammadde olarak ihraç edilmektedir. Bor elementinin işlenip satılması ülkemiz adına daha yararlı olacaktır. Türkiye'de son zamanlarda Bor elementini daha etkin kullanabilmek için ar-ge çalışmaları yapılmaktadır ve bunun için 2003 yılında Ulusal Bor Araştırma Enstitüsü (BOREN) kurulmuştur. Bu kurumun amacı, Türkiye'de ve dünyada Bor ürün ve teknolojilerinin geniş bir şekilde kullanımını, yeni Bor ürünlerinin üretimini ve geliştirilmesini temin edip değişik alanlarda kullanıcıların araştırmaları için gerekli bilimsel ortamı sağlamak, bor ve ürünlerini kullanan ve/veya bu alanda araştırma yapan kamu ve özel hukuk tüzel kişileri ile işbirliği yaparak bilimsel araştırmaları yapmak, yaptırmak, koordine etmek ve bu araştırmalara katkı sağlamaktır, Boren (2013). Bu tezin bir amacı da ülkemizde bu yönde yapılan çalışmalara katkı sağlamaktır.

Bu tezde öncelikle Bor maddesinin ülkemiz için öneminden bahsedilmiştir. Daha sonra Bor-V grubu bileşiklerinin özelliklerini hesaplamada kullanılan WIEN2k, Blaha (2010), programının temel aldığı yoğunluk fonksiyon teorisinden özet olarak bahsedilmiştir. Son olarak, Bor-V grubu bileşiklerinin hesaplamalar sonucunda elde edilen yapısal, elektronik ve optiksel özellikleri, sırasıyla ve detaylı bir şekilde ele alınmıştır.

BÖLÜM 2. BOR MADENİNİN ÖNEMİ

Bor, periyodik tabloda “**B**” simgesiyle gösterilen, atom numarası 5, atom ağırlığı 10.811 au, normal şartlarda yoğunluğu 2.35 gr/cm^3 , ergime noktası $2300 \text{ }^\circ\text{C}$ ve kaynama noktası $2550 \text{ }^\circ\text{C}$ olan, metalle ametal arası yarı iletken özelliklere sahip bir elementtir. Periyodik tablonun 3A grubunun ilk ve en hafif üyesidir. Elektronik konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^1$ şeklindedir. Bor ve türevleri tarihte çok uzun yıllardır kullanılmaktadır. Tarihte Bor tuzlarının 4 bin yıl önce ilk kez Tibet’te kullanıldığı, Babiller tarafından değerli eşyaların ergitilmesinde, Mısırlılarca mumyalamada, Eski Yunan ve Romalılarca da zemine serpilerek arena temizliği için kullanıldığı saptanmıştır. 875 yılında ise, Araplar ilk kez bor tuzlarından ilaç yapmışlardır, Boren (2013).

Bor bileşiklerinin günümüz teknolojisinde kullanım alanlarını şöyle özetlemek mümkündür. Cam sanayisinde, ergimiş haldeki cam ara ürününe katılarak onun yüzey sertliğini ve dayanıklılığını arttırmaktadır. Seramik sanayisinde, görünümü iyileştirmek genleşme katsayısını arttırmak, mekanik gücü ve çizilme direncini arttırmak için kullanılır. Temizletme ve beyazlatma sanayisinde, sabun ve deterjanların su yumuşatıcı ve beyazlatıcı etkisini arttırmak için kullanılır. Alev geciktirici olarak bor, yanan malzeme üzerine kaplayarak yanan kısmın oksijenle temasını önler. Ayrıca bor bileşikleri, ahşap yüzeylerde mantar ve diğer mikroorganizmaların gelişimini önler. Nükleer uygulamalarda bor, nötron absorbanı olarak, reaktör soğutma sistemlerinde, nükleer atıkların depolanmasında kullanılır. Uzay ve havacılıkta ise bor bileşikleri ile ilgili, yüksek ısıya dayanıklı gövde, düşük ağırlık ve yüksek kapasite uygulamaları üzerinde çalışılmaktadır. Savunma sanayisinde ise tank zırhında ve kurşungeçirmez yeleklerde kullanılmaktadır. Enerji alanında ise hidrojenin yakıt olarak kullanılmasının yaygınlaşması ile birlikte bor, enerji alanında önemli bir ürün haline gelecektir. Hidrojeni depolama özelliğinin yanı

sıra, yakıt pillerinde doğrudan yakıt olarak da kullanılabilir. Sağlıkta ise BNCT (Boron Neutron Capture Therapy) kanser tedavisinde kullanılmaktadır. Özellikle; beyin kanserlerinin tedavisinde hasta hücrelerin seçilerek imha edilmesinde kullanılmakta ve sağlıklı hücrelere zararının minimum düzeyde olması nedeniyle tercih nedeni olabilmektedir. Ayrıca, insan vücudunda normalde bulunan bor, bazı ülkelerde tabletler şeklinde üretilmeye başlanmıştır, Boren (2013).

Bor bileşikleri genellikle yüksek sertlik derecesine sahiptir. Bu sebeple, metalleri ve süper alaşımları kesme, bileme ve cilalamada kullanılmaktadır. Bor bileşikleri tungsten karbürü göre daha yüksek kesme oranına, sürekli ağır iş görme kabiliyetine sahiptir ve soğutuculara ihtiyaç göstermez, Garret (1998).

Ülkemiz dünya bor rezervleri açısından önemli bir yere sahiptir. ROSKILL (Reports On Metals and Minerals and the Marketplace) 2010 verilerine göre hazırlanan Tablo2.1'de görüldüğü gibi ülkemiz dünya bor rezervlerinin %71.3'ünü elinde bulundurmaktadır. Bu orana bakıldığında ülkemiz Bor rezervleri bakımından dünyada söz sahibi olan tek ülke konumundadır.

Tablo 2.2. Bor rezervlerinin ülkelere göre dağılımı

Ülke	Toplam Rezerv (Bin ton B ₂ O ₃)	Toplam Rezerv (% B ₂ O ₃)
Türkiye	885.000	71.3
A.B.D.	80.000	6.5
Rusya	35.000	2.8
Çin	47.000	3.8
Arjantin	9.000	0.7
Bolivya	19.000	1.5
Şili	41.000	3.3
Peru	22.000	1.8
Kazakistan	102.000	8.2
Sırbistan	-	-
İran	1.000	0.1
Toplam	1.241.000	100

2008 yılı dünya bor üretiminin bölgesel dağılım verileri Tablo 2.2’de gösterilmiştir. Türkiye dünya bor rezervlerinin büyük bir çoğunluğunu elinde bulundurmasına rağmen pazar payı beklenen oranda yüksek değildir. Ancak bu kaynakların verimli kullanılıp değerlendirilmesi ve dünya ölçüsünde üstün bir rekabet gücü kazanılması için ürün çeşidinin artırılması ve özellikli bor ürünlerinin üretimine geçilmesi gerekmektedir. Bu amaca katkı sağlamak için bu tezde bor bileşiklerinin (BN, BAs, BP, BSb ve BBi) yapısal, elektronik ve optiksel özellikleri detaylı bir şekilde incelenmiştir.

Tablo 2.2. 2008 yılı dünya Bor üretiminin bölgesel dağılımı

BÖLGELER	ÜRETİMDEKİ PAY (%)
Avrupa (Türkiye)	42
Kuzey Amerika (ABD)	35
Güney Amerika (Şili, Arjantin, Peru ve Bolivya)	11
Asya (Rusya ve Çin)	12

BÖLÜM 3. TEORİ VE UYGULANIŞI

3.1. Giriş

Proton, nötron ve elektronlardan oluşan atom, katı maddenin temel yapı taşıdır. Katı denildiğinde milyonlarca küçük parçacığın bir arada durduğu yapı anlaşılmalıdır. Katıyı oluşturan parçacıklar, çevresiyle ve birbiriyle etkileşim halindedir. Bu yüzden katıyı oluşturan parçacıkların davranışlarını incelemek oldukça karmaşık bir problemdir. Bu karmaşık yapıyı belirlemeye yönelik birçok deneysel teknik ve teorik modeller geliştirilmiştir. Bu teorik modellemeler özellikle kristal yapı halindeki katı cisimlerin yapısal, elektronik ve optiksel özelliklerin analizinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Özellikle kristal yapıyı inceleyen modellemelerin çoğu yoğunluk fonksiyon teorisi (DFT) temellidir. DFT, diğer çok-cisim teorilerine göre hem daha basit, hem de nicel olarak doğru sonuçlar veren güçlü bir tekniktir. Bu tezdeki bütün hesaplamalarda kullanılan WIEN2k simülasyon programı da, Blaha (1997), DFT'yi temel alan programlardan biridir. Bu bölümde yoğunluk fonksiyon teorisinin dayandığı temel esaslar hakkında bilgi verilecektir.

3.2. Çok Cisim Problemi

Katı bir cismi oluşturan atomlar pozitif yüklü protonlar ve negatif yüklü elektronları ihtiva etmektedir. Pozitif yüklü parçacıklar (çekirdek), negatif yüklü parçacıklara (elektronlar) göre daha ağırdır. Eğer bir katıda N tane çekirdek varsa bunun anlamı, Z proton sayısı olmak üzere, $N+ZN$ kadar parçacığın birbirleriyle elektromanyetik etkileşim halinde olduğudur. Böyle çok sayıda parçacığın birbiriyle etkileştiği duruma kuantum çok cisim problemi denir ve DFT'nin dayandığı temellerden biridir. Böyle çok cisim sistemini ifade eden Hamilton denklemi;

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{R}_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (3.1)$$

Burada M ve \vec{R} sırasıyla çekirdeğin kütesini ve konum vektörünü, m_e ve \vec{r} ise elektronun kütesini ve konum vektörünü simgelemektedir. Denklem 3.1'in ilk iki terimi sırasıyla çekirdeğin ve elektronun kinetik enerjilerini, son üç terimi ise elektron-çekirdek, elektron-diğer elektronlar ve çekirdek-diğer çekirdekler arasındaki coulomb etkileşimini göstermektedir. Bu denklemi çözmek çok kolay değildir. Bundan sonraki bölümlerde bu denklemin çözümü ile ilgili yaklaşımlar sırasıyla açıklanacaktır.

3.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Born-Oppenheimer yaklaşımında, Born (1927), elektron ve çekirdeklerin hareketleri ayrı ayrı incelenir. Elektron ve çekirdeğin kütlelerini karşılaştırdığımızda elektronun kütlesi çekirdeğin kütesine göre çok hafiftir. Bu nedenle bu yaklaşımda çekirdeği bir bölgede hareketsiz varsayıp, elektronları hareket halinde düşünebiliriz. Bu yaklaşım dikkate alındığında denklem 3.1'de verilen çekirdeğin kinetik enerjisi (1. terim) ihmal edilebilir. Bunun yanında çekirdekler arasındaki Coulomb itme etkileşmesinin de sabit olduğu düşünülmektedir (son terim). Bu durumda elektron gazının kinetik enerjisi, elektron–elektron etkileşiminden kaynaklanan potansiyel enerji ve dış çekirdekten kaynaklanan potansiyel enerjiler dikkate alınarak 3.1 eşitliği 3.2 eşitliğine indirgenmektedir.

$$H = \hat{T} + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{dış} \quad (3.2)$$

Born-Oppenheimer yaklaşımı yaygın bir şekilde kullanılmasına rağmen, her zaman geçerli olmayabilir. Bu yaklaşım, elektron ile çekirdeğin hareketini birbirinden ayrılmadığında yani elektron hareket ederken çekirdekte hareket ediyorsa geçersizdir.

3.4. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

Çok cisim problemi, Born-Oppenheimer yaklaşımıyla daha basit hale gelmiştir fakat bu da problemin çözümü için tamamen yeterli olamamıştır. Denklem 3.2'yi çözmek için birçok metot ortaya konulmuştur. Bunlardan en bilineni ise birçok katıhal kitabında bahsedilen HartreeFock (HF) metodudur. Bu metodun atomlarda ve moleküllerde iyi sonuçlar verdiği için kuantum kimya uygulamalarında kullanımı yaygın olarak görülür. Fakat katılarda HF çok iyi sonuçlar verememektedir. Bu yüzden katılarda daha yaygın kullanımı olan ve daha doğru sonuçlar veren DFT kullanılmaktadır. DFT'nin temelleri, 1920'lerde Thomas ve Fermi'nin; Fermi (1927-1928); Thomas (1928); yaptığı çalışmaları temel alan Hohenberg-Kohn, Hohenberg (1964), ve Kohn-Sham, Kohn (1965), tarafından atılmıştır.

3.4.1. Hohenberg Kohn teoremi

1964 yılında Hohenberg ve Kohn, çok-cisim sistemini tam olarak çözen DFT'yi elde etmişlerdir, Hohenberg(1964). DFT Hohenberg ve Kohn tarafından iki teorem üzerine oturtulmuştur.

Teorem-1: $\hat{V}_{\text{dış}}$ potansiyeli altında etkileşen çok atomlu bir sistemin (atomlar, molekül ya da katı) taban durum yoğunluğu ($\rho(\vec{r})$) ile birebir uyum içinde olduğunu belirtir. Bunun sonucu ise gözlemlenebilir bir \hat{O} işlemcisinin taban durumunun beklenen değeri, O 'nun taban durum elektron yoğunluğu cinsinden fonksiyonu ile ifade edilir (Denklem 3.3).

$$\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle = O[\rho] \quad (3.3)$$

Teorem-2: \hat{O} işlemcisi \hat{H} hamilton işlemcisi olmak üzere, taban durumu toplam enerji fonksiyonu $H[\rho] = E_{\text{vdış}}[\rho]$ formundadır (Denklem 3.4-3.5).

$$E_{V_{\text{dış}}}[\rho] = \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{V}_{\text{dış}} | \Psi \rangle \quad (3.4)$$

$$= F_{\text{HK}}[\rho] + \int \rho(\vec{r}) V_{\text{dış}}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.5)$$

Buradaki $F_{\text{HK}}[\rho]$ Hohenberg ve Kohn yoğunluk fonksiyonu olarak tanımlanır ve çok elektronlu sistemler için evrenseldir. $E_{V_{\text{dış}}}[\rho]$ (taban durum toplam enerjisi) minimum değere, $V_{\text{dış}}$ 'in taban durum yoğunluğuyla eşleşen değerinde ulaşır. Dış potansiyel ve taban durum yoğunluğu arasındaki birebir ilişki oldukça etkileyicidir. Çok elektronlu bir sistem kendine has bir dış potansiyele sahiptir. Denklem 3.2'deki Hamiltonyenden ve Schrödinger denkleminde, o çok elektronlu duruma ait taban durumu dalga fonksiyonu elde edilir. Bu durumun dalga fonksiyonundan ise sistemin elektron yoğunluğu kolaylıkla bulunur. Burada, dış potansiyelin taban durum yoğunluğunu bulmada önemli bir faktör olduğu anlaşılmaktadır. Hohenberg ve Kohn'un birinci teoremi, yoğunluğun elektronun dalga fonksiyonu kadar bilgiye sahip olabileceğini belirtmektedir. Diğer bir ifadeyle, katıya ya da moleküle ait bütün özelliklerin en iyi anlaşılabilmesi için yoğunluğun fonksiyonları kullanımıyla elde edilir.

Denklem 3.5'teki yoğunluk işlemcisi $\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i=1} \delta(\vec{r}_i - \vec{r})$ ile ifade edilebilir. Dış potansiyelin toplam enerjiye katkısı, taban durum yoğunluğu bilinerek bulunabilir. Hohenberg ve Kohn fonksiyonu $F_{\text{HK}}[\rho]$ çekirdek ve çekirdeğin konumu hakkında bilgi vermez. Bu durumda çok elektronlu sistemler için bu fonksiyona evrensel fonksiyon diyebiliriz. Bunun anlamı $F_{\text{HK}}[\rho]$ ifadesi herhangi bir atom, molekül ya da katı için kullanılabilir.

Teorem 2 Rayleigh-Ritz varyasyon prensibini kullanarak taban durum yoğunluğunu bulmaya olanak sağlar, Finlayson (1996). Sınırsız sayıdaki durumların dışında taban durum toplam enerjisini minimum değere, $V_{\text{dış}}$ 'in taban durum yoğunluğuyla eşleşen değerinde ulaşılır. Bu durum, $F_{\text{HK}}[\rho]$ bilindiği varsayılarak elde edilir. ρ vasıtasıyla sistem içindeki bir çok bilgiye ulaşmak mümkündür.

3.4.2. Kohn-Sham eşitlikleri

Kohn ve Sham 1965 yılında elde ettikleri eşitliklerde, hem taban durumu enerjisini minimum yapan temel hal elektronik yük yoğunluğu tanımlanmıştır, hem de dalga fonksiyonu ile ilgili bilgi olmadığından $\rho(\vec{r})$ yoğunluklu birbirleriyle etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistemin kinetik enerjisi hakkında bilgi edinilmiştir, Kohn (1965). Kohn–Sham eşitliklerinde tam enerji fonksiyonu E_e ve Hartree-Fock hamiltonu E_{HF} olmak üzere:

$$E_e = T + V \quad (3.6)$$

$$E_{HF} = T_0 + (V_H + V_X) \quad (3.7)$$

burada T ve V sırasıyla kinetik enerji ve elektron-elektron potansiyel enerji fonksiyonlarıdır. T_0 etkileşimde olmayan elektron gazının kinetik enerjisidir. V_H ve V_X ise sırasıyla Hartree katkısı ve sonraki bölümde bahsedilecek değiş-tokuş katkısıdır. $V = V_H + V_X$ olarak kabul edilip denklemler birbirinden çıkarılırsa potansiyelin korelasyon katkısı:

$$V_c = T - T_0 \quad (3.8)$$

şeklinde ifade edilir. Hartree-Fock çözümünde toplam enerjiye değiş tokuş katkısı tanımlanmaktadır. Fakat Hartree çözümünde bu katkı bulunmamaktadır. Açıkça Hartree fonksiyonu şu şekilde verilir:

$$E_H = T_0 + V_H \quad (3.9)$$

$$V_X = V - V_H \quad (3.10)$$

Bu bilgilerle Hohenberg-Kohn fonksiyonunu şu şekilde yazabiliriz:

$$E_{HK} = T + V + T_0 - T_0 \quad (3.11)$$

$$= T_0 + V + (T - T_0) \quad (3.12)$$

$$=T_0+V+V_C+V_H-V_H \quad (3.13)$$

$$=T_0+V_H+V_C+(V-V_H) \quad (3.14)$$

$$=T_0+V_H+(V_X+V_C) \quad (3.15)$$

Burada V_X+V_C 'ye deęiş tokuş karşılıklı etkileşim enerjisi (V_{XC}) denir. Bu enerji bilindięinde, enerji fonksiyonunu açıkça şu şekilde yazabiliriz:

$$E_{V_{dış}}[\rho]=T_0[\rho]+V_H[\rho]+V_{xc}[\rho]+V_{dış}[\rho] \quad (3.16)$$

Taban durum yoğunluęunu bulmak için Hohenberg-Kohn'un ikinci teoremi kullanılır. Fakat bunun sonucunda eşitlięi başka türlü ifade etmekten başka bir şey elde edemeyiz. Bunun yerine 3.16 eşitlięi iki dış potansiyel altında, birbiriyle etkileşim içinde olmayan elektron gazının enerji fonksiyonu şeklinde ifade edilirse ilgili Hamilton denklemleri Kohn-Sham Hamiltonu (H_{KS}) olarak verilir.

$$H_{KS}=\hat{T}_0+\hat{V}_H+\hat{V}_{XC}+\hat{V}_{dış} \quad (3.17)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int\frac{\rho(\vec{r}^1)}{|\vec{r}-\vec{r}^1|}d\vec{r}^1+V_{XC}+V_{dış} \quad (3.18)$$

Deęiş tokuş karşılıklı etkileşim fonksiyonu, fonksiyonel türev olarak denklem 3.19'deki halini alır.

$$V_{XC}=\frac{\delta V_{XC}[\rho]}{\delta\rho} \quad (3.19)$$

Sonuç olarak Kohn-Sham teoremi, $\rho(\vec{r})$ N elektronlu sistemin taban durum yoğunluęu olmak üzere:

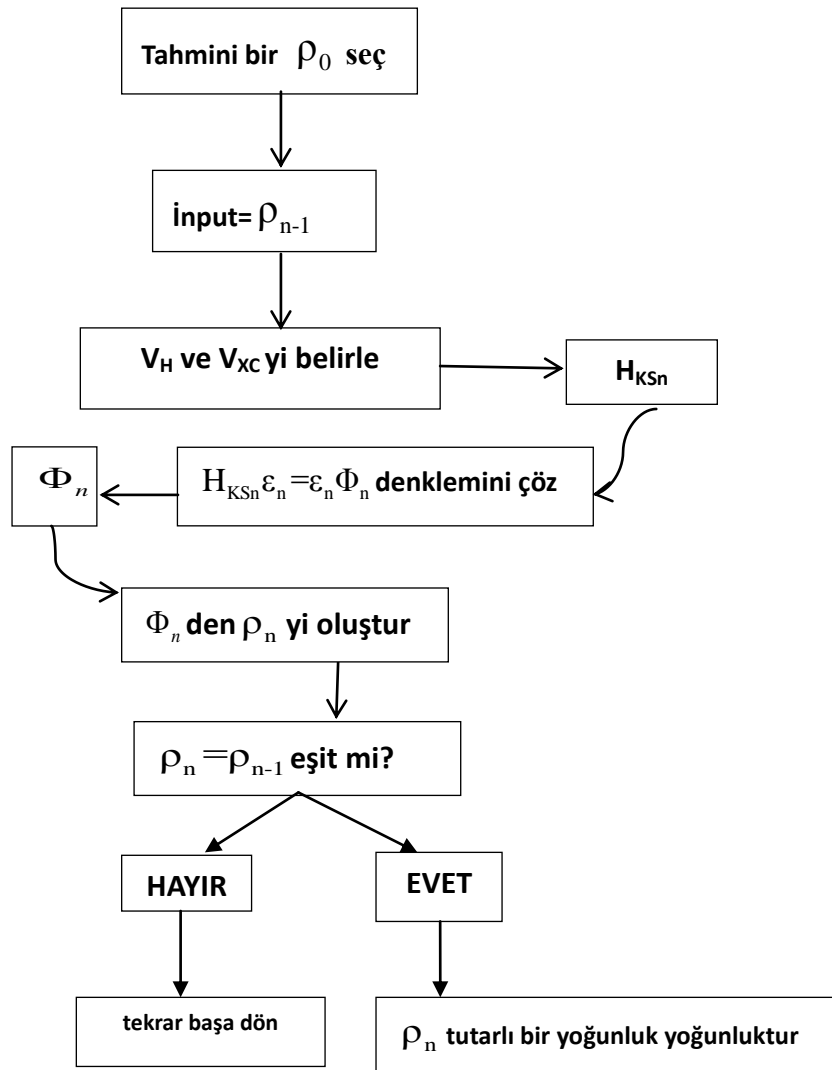
$$\rho(\vec{r})=\sum_{i=1}^N\Phi_i(\vec{r})^*\Phi_i(\vec{r}) \quad (3.20)$$

elde edilir. Burada $\Phi_i(\vec{r})$ tek parçacığın dalga fonksiyonlarını temsil eder. Kohn-Sham denklemlerinin N tane en düşük enerji çözümleri denklem 3.21'deki gibidir.

$$H_{KS}\Phi_i = \epsilon_i\Phi_i \quad (3.21)$$

Bu durumda artık taban durum yoğunluğunu elde edebilmek için, Hohenberg-Kohn'un ikinci teoremine ihtiyaç duyulmamaktadır. Burada tek parçacık dalga fonksiyonu Φ_i 'ler elektronların dalga fonksiyonları değildirler. Bunlar, direk fiziksel anlamı olmayan quasi (yarı) parçacıklarını simgeler. Bütün bu parçacıkların elektron yoğunlukları toplamı gerçek elektron yoğunluğunu verir. Aynı şekilde ϵ_i 'ler de sadece elektronun enerjisi değildirler.

Hartree operatörü (V_H) ve değiş tokuş karşılıklı etkileşim işlemcisinin (V_{XC}) ikisi de $\rho(\vec{r})$ 'ye bağlıdır ve bunlar da dönüşümlü olarak araştırılan Φ_i 'ye bağlıdır. Bunun anlamı Φ_i 'nin çözümü orijinal denklemi belirler ve bu denklem onun doğru değeri bilinmeden çözülemez. Bu paradokstan kurtulmak için yinelemeli çözüme ihtiyaç vardır (Şekil-3.1).



Şekil 3.1. Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış çizelgesi

Burada bir başlangıç yoğunluğu ρ_0 tahmini olarak alınır ve Hamilton denklemleri H_{KS1} buna bağlı olarak oluşturulur. Öz değer denklemleri çözülür ve sonuç Φ_1 'lerin çözüm kümesi ρ_1 'lerden elde edilir. Sonuçta da ρ_0 ve ρ_1 uyumluluğuna bakılır eğer farklı iseler tekrar ρ_1 den H_{KS2} oluşturulup ρ_2 sonucu elde edilir. Bu prosedür bu şekilde devam ederek Hamilton ile H_{KSf} tutarlı olacak final ρ_f yoğunluğuna ulaşılır.

3.4.3. Değiş tokuş ve karşılıklı etkileşim fonksiyonu:

Bu ana kadar değiş tokuş karşılıklı etkileşim fonksiyonunun nasıl bulunulacağı hakkında bilgi sahibi değiliz. Bu problem, E_{XC} değerinin belirlenmesi yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) kullanılarak aşılmıştır, Cottenier (2002). Bu yaklaşımda, sistem homojen bir elektron gazı olarak düşünülür ve elektronik yük yoğunluğu bu sisteme göre belirlenir. Böylece $\rho(r)$ sistem içinde çok az değişir ve aşağıdaki yaklaşımı yapmak mümkün hale gelir.

$$E_{XC}^{LDA} = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{XC} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.22)$$

Buradaki, ϵ_{XC} elektron gazındaki her bir elektronun değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim enerjisidir. Bu yaklaşımda belli bir elektron yoğunluğundan kaynaklanan değiş tokuş karşılıklı etkileşim enerjisi, materyali sabit yoğunluklu sonsuz küçük hacimlere bölerek bulunabilir. Her bir hacim değiş tokuş karşılıklı etkileşim enerjisini, materyali oluşturan homojen elektron gazlarının işgal ettiği hacimdeki değiş tokuş karşılıklı etkileşim enerjisi kadar katkıda bulunur. Yerel yoğunluk yaklaşımının sonuçlarının birçok deneysel sonuçlarla tutarlı olması bu yaklaşımı teorik modellemelerde cazip hale getirmiştir.

Yerel yoğunluk yaklaşımının başarısı, bir adım daha ileri gidilerek genelleştirilmiş gradyan yaklaşımının (GGA), Perdew (1996), oluşmasına imkân sağlamıştır. Bu yaklaşım yerel yoğunluk yaklaşımına ek olarak, her noktada elektronik yük yoğunluğunun (ρ) yanı sıra o noktanın komşuluğundaki hacimlerin yoğunluklarını da dikkate almıştır. Diğer bir ifadeyle yoğunlukların gradyenleri de önemli bir rol oynar.

$$E_{XC}^{GGA} = \int \rho(\vec{r}) F[\rho(\vec{r}), \nabla \rho(\vec{r})] d\vec{r} \quad (3.23)$$

3.5. Teorinin Uygulanışı

Bor-V bileşiklerinin çinko sülfür (ZnS) fazı için teorik hesaplamaları yaparken DFT tabanlı WIEN2k kodu kullanıldı. Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim etkileri GGA kullanılarak ele alındı. Toplam enerjiyi elde etmek için, Khon-Sham dalga fonksiyonlarını $R_{mt}K_{max}=7$ 'ye genişletildi (Burada, R_{mt} düzlem dalga yarıçapı, K_{max} ise maksimum ters örgü vektörünü temsil etmektedir). Atomik küreler içinde kullanılan parçalı dalgalar $l_{max}=10$ ' a genişletildi. Yük yoğunluğu Fourier genişlemesi için en büyük G vektörünün büyüklüğü $12 \text{ Ry}^{1/2}$ olarak tanımlandı. Kor seviyelerini değerlik seviyelerinden ayırmak için cut-off enerji değeri -6 Ry olarak belirlendi.

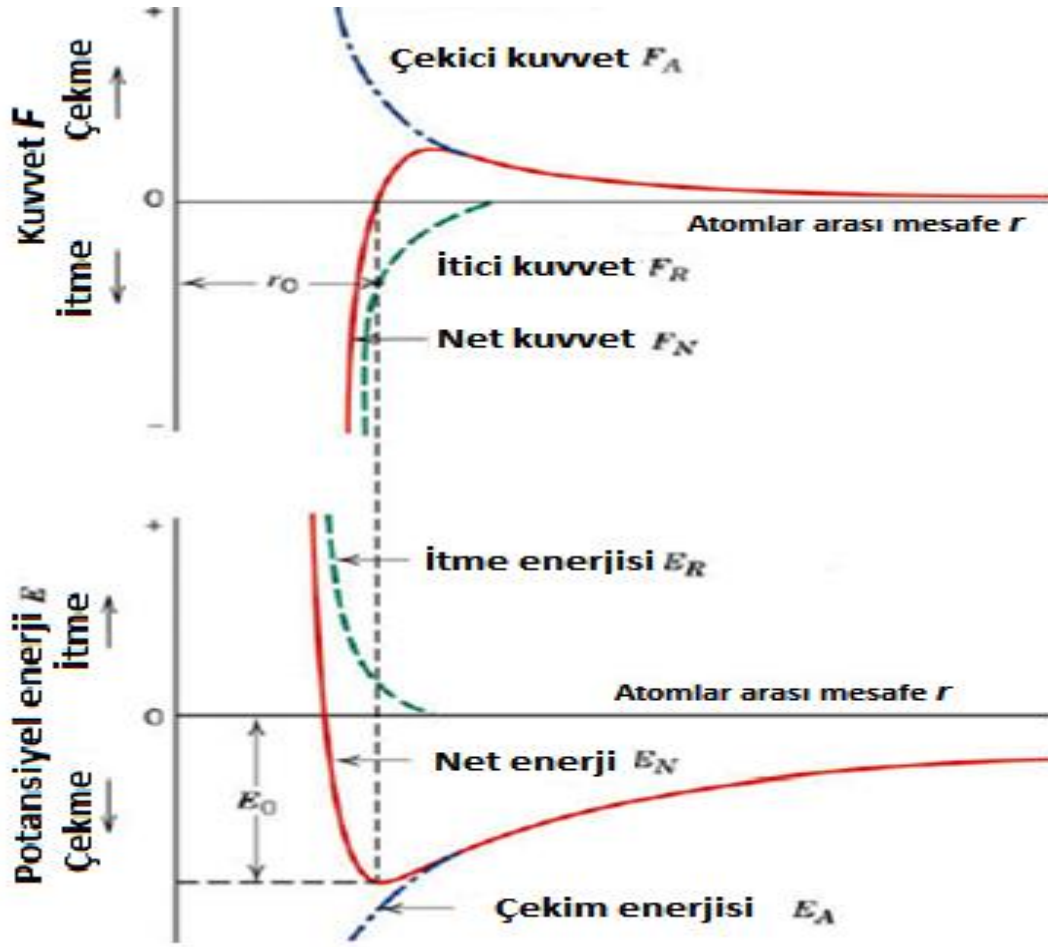
Brillouin bölgesini tanımlamak için Monkhorst ve Pack'ın (MP) standart özel k-noktaları tekniği kullanıldı, Monkhorst (1996). Bu çalışmada ZnS fazı için $9 \times 9 \times 9$ MP örgüsü(mesh) kullanıldı. Bu çalışmada, denge durumundaki örgü parametresi (a_0), denge durumundaki hacim (V_0), bulk (hacim) modülü (B_0) ve bulk modülünün basınca göre birinci türevi (B') sıfır basınç altında elde edildi. Bu parametreler fit edilen, Murnaghan (1944), eşitliklerinin minimum eğrileri yardımıyla elde edildi.

BÖLÜM 4. YAPISAL ÖZELLİKLER

III-V grubu yarı iletken bileşikler elektronik ve opto-elektronik aygıtlarda kullanılmaya elverişli oldukları için literatürde geniş bir şekilde incelenmişlerdir. Bu sınıftaki Bor-V grubu yarı iletken bileşiklerinin (BN, BP, BAs, BSb, BBi) ilgi çekici fiziksel özelliklere sahip olması son zamanlarda bu konudaki çalışmaların artmasına neden olmuştur. Bu bölümde Bor-V grubu bileşiklerinin öncelikle taban durumu kristal yapısı tespit edilmiştir. Daha sonra Bor-V grubu bileşiklerinin ZnS kristal fazında örgü sabitleri ve sertlikleri incelenmiştir. En son olarak, bu bileşiklerin elastik özellikleri termodinamik özellikleri tespit edilmiştir.

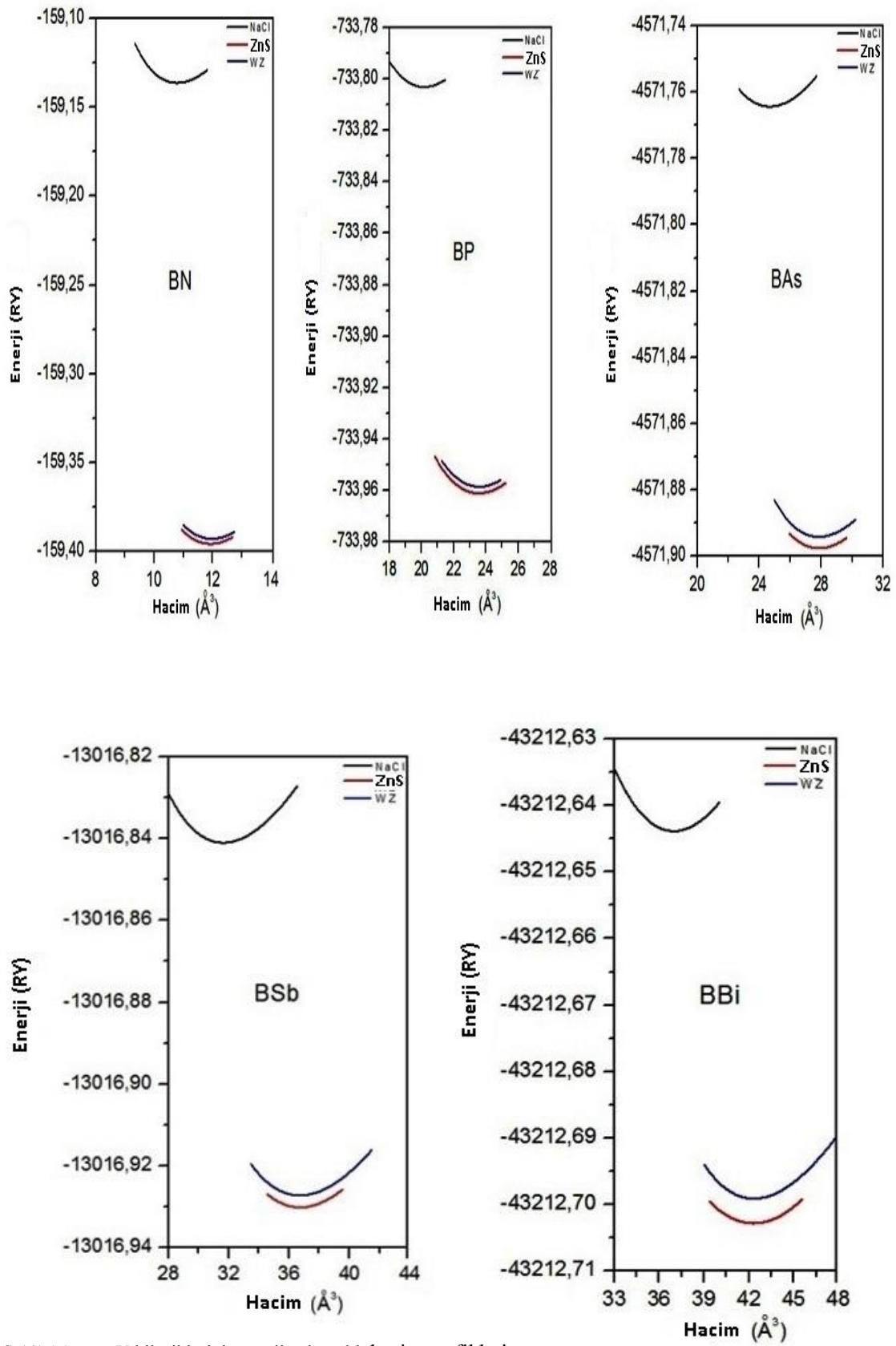
4.1. Bor-V Grubu Bileşiklerin Taban Durumu Kristal Yapısı

Katılar kararlı yapılardır. Örneğin NaCl kristali, serbest Na ve Cl atomları bir araya toplanarak elde edilen yapıdan çok daha karardır. Na ve Cl atomları birbirlerine yaklaştıkça birbirini çekerler; atomları bir arada tutan atomlar arası çekici bir kuvvet oluşur. Bu kuvvet kristalin oluşumundan sorumludur. Şekil 4.1'de iki atom arasındaki itici ve çekici etkileşimin mesafeye bağımlılığını gösteren kuvvet ve potansiyel enerji grafikleri gösterilmiştir. Buna göre, atomlar arası mesafe çok büyük iken iki atomun birbirine çekici ya da itici bir kuvvet uygulamazlar. Fakat atomlar birbirine yaklaştıkça coulomb etkileşiminden bir çekici kuvvet uygularlar. Bu mesafe belli bir uzaklık değerinin (r_0) altına düştüğünde ise Pauli dışarlama ilkesi gereğince atomlar birbirine itme kuvveti uygularlar. Bu itme ve çekme kuvvetlerinin birbirini dengelediği noktada ise kristali oluşturan atomlar minimum enerjiye sahiptirler. Bu uzaklık mesafesine kristalin en kararlı olduğu durumdur denilir. Bu değer, kristalde örgü sabiti değerine eşittir.



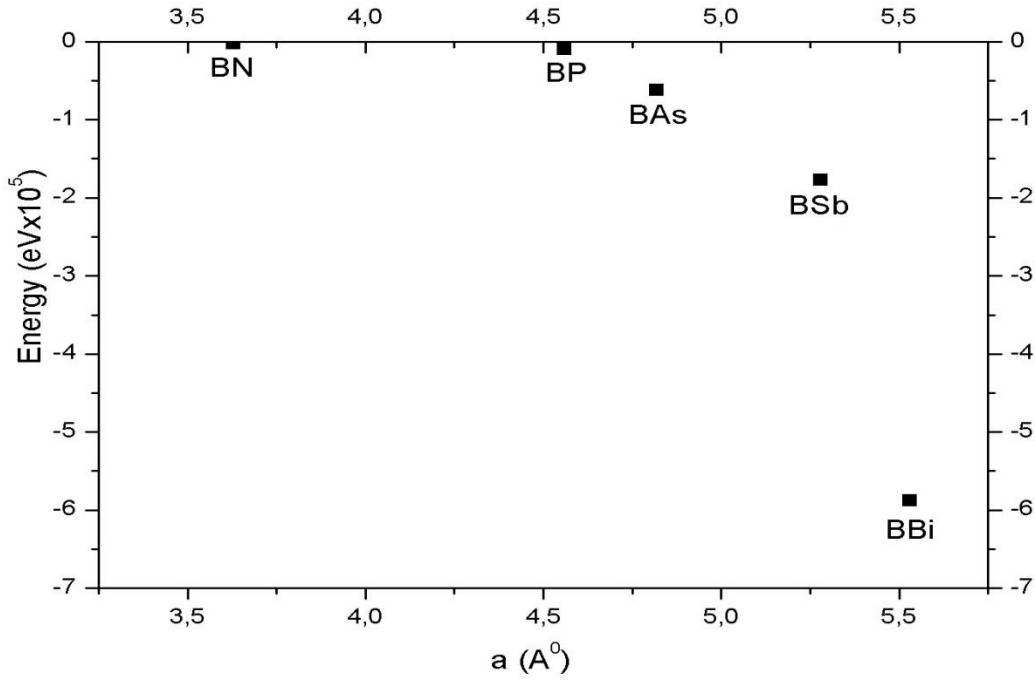
Şekil 4.1. Atomlar arası mesafeye bağlı etkileşimi gösteren Kuvvet ve Enerji grafikleri

Bu çalışmada ilk olarak, Bor-V bileşiklerinin hangi kristal fazında minimum enerjiye sahip olduklarını bulmak için farklı fazlarda hacim enerji grafikleri elde edilmiştir. Bu fazlar III-V grubu yarı iletkenlerin en çok kristalleştikleri çinko-sülfür (ZnS) bir diğer adıyla zinc-blende (ZB), sodyum klorür (NaCl) ve wurtzite (WZ) fazlarıdır. Elde edilen enerji hacim grafikleri yardımıyla kübik yapının örgü sabiti değerleri bulunmuştur. Hesaplanan enerji-hacim grafikleri Şekil 4.2’de görülmektedir. Şekilde her bir bileşik için (BN, BP, BAs, BSb, BBi) üç fazda hesaplanan enerji-hacim grafiklerinin hepsinde, enerji belli bir hacim değerinde minimuma ulaşmaktadır. Üç faz için sahip olunan minimum değerler, bileşiğin hangi fazda kristalleşeceğini göstermektedir. Şekil 4.2’de görüldüğü gibi incelenen bütün Bor-V bileşikleri için en uygun faz ZnS fazı olarak bulunmuştur.



Şekil 4.2. Bor-V bileşiklerinin enerjiye karşılık hacim grafikleri

ZnS fazda, BN bileşiginden BBi bileşigine doğru gidildikçe elde edilen örgü sabiti ve buna karşılık gelen minimum enerji grafiği Şekil 4.3'te verilmiştir. Buna göre BN'den BBi ye doğru gidildikçe örgü sabiti ve minimum enerji değeri giderek artmaktadır.



Şekil 4.3. Bor-V bileşiklerinin minimum enerjiye karşılık örgü sabiti grafiği

4.2. Yüzey Merkezli Kübik Örgü

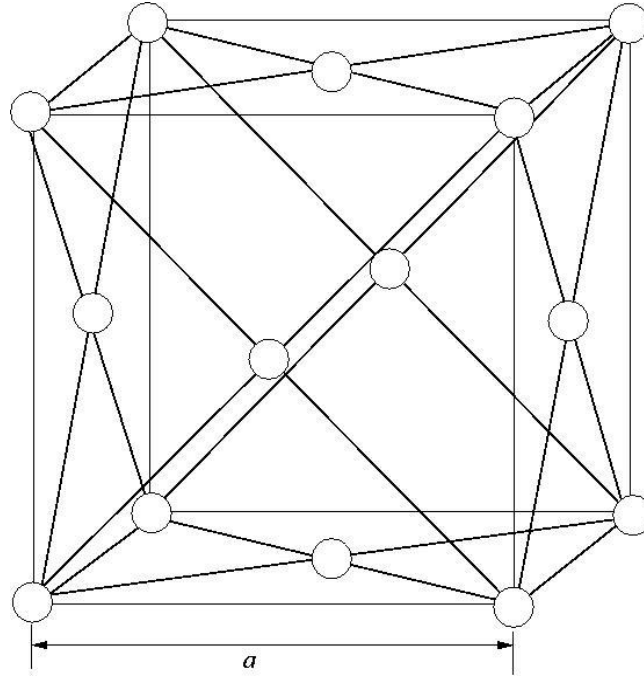
Yüzey merkezli kübik örgüyü basit kübik örgüden kolaylıkla tanımlamak mümkündür. Basit kübik örgünün yüzey merkezlerine birer örgü noktası konulmasıyla yüzey merkezli kübik elde edilir. Şekil 4.4'te yüzey merkezli kübik örgünün geleneksel birim hücresi verilmiştir. Geleneksel hücrede yüzey merkezli kübik örgü toplam dört örgü noktasına sahiptir. Yüzey merkezli kübik örgünün temel örgü vektörleri;

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a\hat{j} + \frac{1}{2}a\hat{k} \quad (4.1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{1}{2}a\hat{k} \quad (4.2)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{1}{2}a\hat{j} \quad (4.3)$$

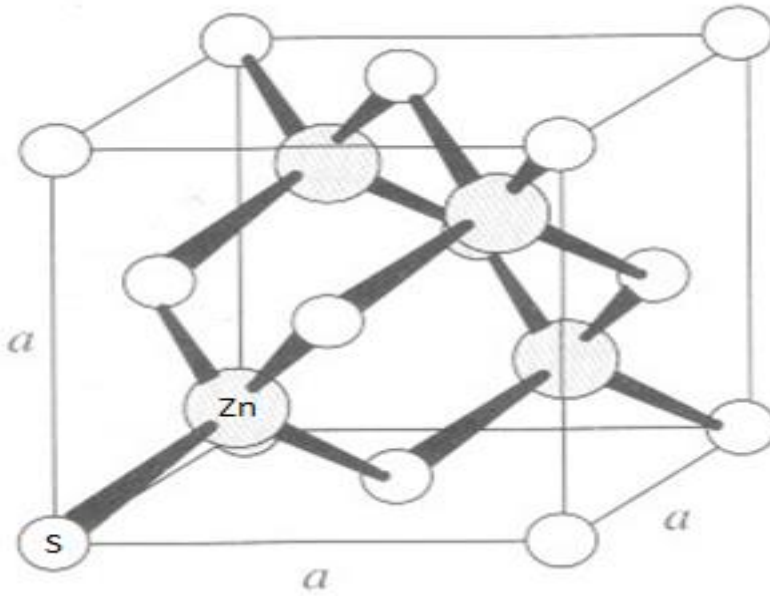
olarak verilir. $[110]$ yönündeki örgü atomları en yakın komşu atomlardır. En yakın komşu atom uzaklığı $\frac{a}{\sqrt{2}}$ olarak ifade edilir.



Şekil 4.4. Yüzey merkezli kübik hücrenin geleneksel birim hücresi

4.3. ZnS Kristal Fazı

Bu bölümde, bu tezde yapılan bütün teorik hesaplamalarda kullanılan ZnS yapısı ile ilgili genel bilgiler verilecektir. Bu yapının ilkel birim hücresinde bir tane Zn ve bir tane de S atomu olmak üzere iki atom bulunur. Yüzey merkezli kübik örgü vektörleri cinsinden S atomunun pozisyonu $\{0, 0, 0\}$ ve Zn atomunun pozisyonu ise $\{1/4, 1/4, 1/4\}$ olarak verilir, Srivastava (1990). Şekil 4.5'te gösterilen ZnS yapının geleneksel birim hücresinde 4 tane Zn 4 tane de S atomu olmak üzere toplam 8 tane atom bulunmaktadır. Bu kristal yapıda her bir atom kendi cinsinden olmayan 4 atom ile en yakın komşudur. Bu sebeple bu kristal yapıda tetrahedral (dörtlü) bağlanma söz konusudur.



Şekil 4.5. ZnS kristal yapının geleneksel birim hücresi

4.4. Ters Örgü

Bir kristalin özelliklerini incelemek dalga vektörleri yardımıyla olur. Bu dalga vektörleri de kristalin ters örgüsünden belirlenir. Ters örgü vektörü;

$$\vec{G}_m = \sum_{j=1,2,3} m_j \vec{g}_j \quad (4.4)$$

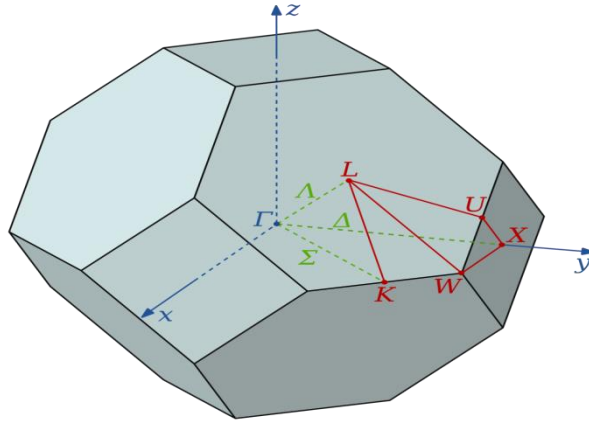
olarak ifade edilir, Srivastava (1990). Burada m_j değerleri pozitif-negatif tamsayılar ve sıfır değerlerini alabilir. g_j parametreleri ise ters örgü temel yer değiştirme vektörleri olup düz örgü vektörleri cinsinden aşağıdaki şekilde yazılır.

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \quad (4.5)$$

Burada $\Omega = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ olarak hesaplanan kristalin ilkel birim hücre hacmini temsil eder.

4.5. Yüzey Merkezli Kübik Örgünün Birinci Brillouin Bölgesi

Yüzey merkezli kübik örgünün I. Brillouin bölgesi Şekil 4.6'da gösterilmiştir. Γ -L-U-X-K-W noktaları yüzey merkezli kübik yapının yüksek simetri noktalarını temsil eder ve bu noktalarla çevrili alan indirgenmiş I. Brillouin bölgesidir. Bu bölge, I. Brillouin bölgesinin 1/48'ine eşittir. Bu bölgedeki dalga vektörleri vasıtasıyla kristalin bütün özelliklerini incelemek mümkündür. Simetriden dolayı bu bölgenin dışında kalan dalga vektörleri aynı sonuçlar verecektir.



Şekil 4.6. Yüzey merkezli kübik hücrenin indirgenmiş I. Brillouin bölgesi

Yüzey merkezli kübik yapının yüksek simetri yönleri şu şekilde ifade edilir;

$$\begin{aligned}
 \Gamma &: \frac{2\pi}{a}(0, 0, 0) & \mathbf{K} &: \frac{2\pi}{a}\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right) & \mathbf{X} &: \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0) \\
 \mathbf{L} &: \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & \mathbf{W} &: \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, 1, 0\right) & \mathbf{U} &: \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{4}, 1, \frac{1}{4}\right)
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

İndirgenmiş Brillouin bölgesinin ana simetri yönleri ise;

$$\Delta = \Gamma - \mathbf{X} \quad \Lambda = \Gamma - \mathbf{L} \quad \Sigma = \Gamma - \mathbf{K} \tag{4.7}$$

olarak verilir. Bu yönlerde deneysel ölçümlerin yapılması daha kolay olduğundan genellikle araştırmalar bu yönlerde yapılır, Bağcı (2008)

4.6. Bor-V Grubu Bileşiklerin ZnS Fazda Örgü Sabiti ve Sertlik Değerleri

Bulunan minimum enerjiye karşılık gelen hacim değerleri, denge durumundaki örgü sabitini (a_0) vermektedir. ZnS faz için bulunan örgü sabiti değerleri Tablo 4.1'de gösterilmiştir. Bu fazda BN, BP ve BAs için hesaplanan örgü sabiti değerleri deneysel değerlerle büyük uyum göstermektedir, Madelung (1996); Saib (2008); Varshney (2010). BSb ve BBi için bulunan örgü sabiti değerleri, önceki teorik çalışmalardan çok az fazlalık göstermektedir Ferhat (2006); Singh (2010).

Bor-V grubu bileşikleri için hesaplanan örgü sabiti değerleri, beklenildiği gibi Bor elementiyle bileşik yapan V. grup elementinin atom numarası büyüdükçe artmaktadır.

Yapısal özelliklerle ilgili diğer bir parametre de hacim (bulk) modülüdür (B_0). Bulk modülü, bir malzemenin hidrostatik basınç altında sıkıştırılması halinde onun hacminde oluşacak değişime karşı gösterdiği direnci tanımlayan bir özelliktir. Diğer bir ifadeyle, bir deformasyon oluşturmak için gerekli enerjinin bir ölçüsüdür. Bu sebeple bulk modülü bir malzemenin (özellikle kübik kristallerin) hem teorik hem de deneysel açıdan, sertliğini temsil eden en önemli malzeme özelliği sayılır. Aynı zamanda Bulk modülünün birinci türevi (B') kristalin sıkışabilirliği hakkında bilgi verir.

Tablo 4.1'e bakıldığında, bu çalışmada ZnS fazda bulunan B_0 değerleri, diğer teorik Mohammad (2009); Saib (2008); Varshney (2010) ve deneysel Madelung (1996); Singh (2010) değerlerle % 0.8 - % 5 oranında sapmalar göstermektedir. BN, BP ve BAs için elde edilen B_0 sonuçlarından, hemen hemen aynı olduğu görülmektedir. Ayrıca, hesaplanan B_0 değerleri BN'den BBi'ye doğru gidildikçe artan atom numarasına göre azalmaktadır. Bir diğer ifadeyle BN bileşiği en az sıkıştırılabilirliğe sahip iken BBi bileşiği ise en fazla sıkıştırılabilirliğe sahiptir.

Tablo 4.1. Bor-V grubu bileşiklerinin ZnS fazda hesaplanan yapısal özellikleri ve diğer çalışmalar

Madde	a_0 (Å)	B_0 (GPa)	B'	Referanslar
BN	3.627	375.90	3.000	Bu çalışma
	3.615	369.00	4.000	Deney, Knittle (1989)
	3.649	366.00	2.910	Teori, Camp (1988)
	3.623	365.00	3.940	Teori, Sekkal (1998)
	3.610	370.83	3.640	Teori, Saib (2008)
	3.623	368.00	3.320	Teori, Zaoui (2001)
BP	4.551	161.73	3.649	Bu çalışma
	4.543	152.00	4.300	Deney, Xia (1993)
	4.551	162.00	3.860	Teori, Mohammad (2009)
	4.546	170.00	3.070	Teori, Zaoui (2001)
	4.464	176.00	4.000	Teori, Touat (2006)
	4.554	175.00	3.510	Teori, Mori (2001)
BAs	4.812	130.91	3.708	Bu çalışma
	4.777	-	-	Deney, Madelung (1996)
	4.810	131.00	3.930	Teori, Mohammad (2009)
	4.743	133.00	3.650	Teori, Meradji (2004)
	4.817	131.20	4.170	Teori Ahmed (2007a)
	4.728	141.40	4.000	Teori, Bouhafs (1999),(2000)
BSb	5.277	99.50	3.718	Bu çalışma
	5.120	103.00	-	Teori, Varshney (2010)
	5.210	110.00	-	Teori, Singh (2010)
BBi	5.531	66.84	4.395	Bu çalışma
	5.529	72.20	4.730	Teori, Ferhat (2006)
	5.416	86.27	4.600	Teori, Ferhat (2006)
	5.448	85.87	2.903	Teori, Amara (2008)

4.7. Bor-V Grubu Bileşiklerin Elastik Özellikleri

Elastik sabitler, bir maddenin belli bir baskıya ya da basınca maruz kaldığında göstereceği davranışı belirleyen önemli niceliklerdir. Elastik özellikler bir kristalde atomların periyodikliği yerine, homojen sürekli bir ortam olarak düşünülmesiyle açıklanır. Elastiklikle ilgili temel kavramları aşağıdaki gibi tanımlamak mümkündür.

- σ zor olarak adlandırılır uygulanan kuvveti ve ϵ zorlanma olarak adlandırılır atomların yer değiştirmesi belirtir.
- Zor terimi σ ve zorlanma ϵ ilişkisi ile C elastik sabitleri belirlenir. Bunlar arasındaki ilişki: $\sigma = C \cdot \epsilon$ şeklinde ifade edilir.

Zor terimi σ birim alana uygulanan kuvvet olarak tanımlanır ve zorlanma ϵ ise boyutsuz bir sabit olup yer değiştirmeye bağlıdır. Üç boyutlu bir kristalde zor ve

zorlanma tensörleri C elastik sabitleriyle aralarındaki ilişki denklem 4.8'te ifade edilmiştir.

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (4.8)$$

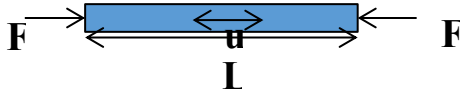
Denklem 4.8 Hooke kanununun genel ifade şeklidir. Burada C matrisi $3 \times 3 \times 3 \times 3 = 81$ elmana sahiptir. ε_{ij} ve σ_{ij} simetri durumlarından bu sayı 36'ya inmektedir. Bu sabitler C_{mn} ile gösterilir. Sıkıştırma bileşenlerinde 1=xx, 2=yy, 3=zz ve kayma bileşenleri için 4=yz, 5=zx, 6=xy ile temsil edilir. Bu durumda Hooke kanununun genel şekli denklem 4.9'daki gibidir.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (4.9)$$


36 elastik sabit kristaldeki simetriden dolayı indirgenir. Kübik kristallerde, $C_{11}=C_{22}=C_{33}$, $C_{12}=C_{21}=C_{33}=C_{13}=C_{31}=C_{32}=C_{23}$, $C_{44}=C_{55}=C_{66}$ bağlı oldukları simetri eksenlerinden dolayı bu eşitlikler elde edilir. Bunun yanında köşegenlerdeki kayma bileşenleri sıfırdır. $C_{45}=C_{54}=C_{56}=C_{65}=C_{46}=C_{64}=0$ ve sıkıştırma kayma/karışıklığı meydana gelmez. Bunun sonucunda, $C_{14}=C_{41}=\dots\dots\dots=0$ bu nedenle kübik esneklik matrisi 4.10'de ifade edilmiştir.

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

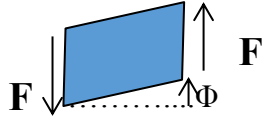
Görüldüğü gibi kübik bir kristalin esneklik özellikleri açıklamak için C_{11}, C_{12} ve C_{44} olmak üzere 3 tane elastik sabitin bilinmesi yeterlidir. C_{11} sabiti boylamsal sıkışmayı (Young's Modülü) temsil eder. (Denklem 4.11)

$$C_{11} = \frac{\sigma_{xx}}{\varepsilon_{xx}} = \frac{F/A}{u/L} \quad (4.11)$$


Burada F uygulanan kuvveti L kristalin boyunu A kesit alanını u ise boy değişimini temsil eder. C_{12} sabiti ise enine genişlemeyi temsil eder. (Denklem 4.12)

$$C_{12} = \frac{\sigma_{xx}}{\varepsilon_{yy}} = \frac{F/A}{u/S} \quad (4.12)$$


Burada F uygulanan kuvveti S kristalin kesitinin uzunluğu, A kesit alanını u ise kesitte meydana gelen boy değişimini temsil eder. C_{44} sabiti kayma modülünü temsil eder. (Denklem 4.13)

$$C_{44} = \frac{\sigma_{xy}}{\varepsilon_{xy}} = \frac{F/A}{\Phi} \quad (4.13)$$


Burada F uygulanan kuvveti Φ kayma açısını temsil eder.

Katıhal fiziğinde bu sabitler çok önemli bir yere sahiptir. Elastik sabitler malzemenin sertlik ve kararlılığı hakkında da bilgi verir. Elastik sabitlerinin teorik ve deneysel değerlerinin karşılaştırılması, kullanılan bir potansiyelin güvenilirliğinin testi için de önemlidir. Bu yüzden hesaplanan elastik sabitlerinin doğruluğu mevcut metodun doğruluğu için de önemli bir kriterdir. Bunun yanında Young modülü, denge durumu, Poission oranı, Debye sıcaklığı gibi birçok nicelik bu sabitlerle ilişkilidir.

Tablo 4.2'de ise Bor-V grubu bileşikler için ZnS fazda elde edilen elastik sabit değerleri (C_{11}, C_{12} ve C_{44}) ile diğer teorik ve deneysel sonuçlar verilmiştir.

Tablo 4.2. ZnS yapıdaki Bor-V grubu bileşiklerinin elastik sabitleri

Material	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	Ref.
BN	782.30	167.28	442.64	Bu çalışma
	820.00	190.00	480.00	Deney Grimsditch (1994)
	770.90	149.00	456.30	Teori Fatmi (2011)
	778.51	194.63	432.51	Teori Saib (2008)
BP	339.64	73.61	203.41	Bu çalışma
	315.00	100.00	160.00	Deney Wettling (1984)
	337.00	78.00	200.00	Teori Meradji (2004)
	359.00	81.00	202.00	Teori İnaba (1997)
BAs	267.31	64.02	162.10	Bu çalışma
	292.50	72.70	159.00	Teori Fatmi (2011)
	286.00	67.0	148.00	Teori Chimot (2005)
BSb	184.22	54.80	119.03	Bu çalışma
	192.00	58.50	105.00	Teori Ku (1966)
	205.00	62.50	112.10	Teori Wang (2003)
	223.00	62.00	140.00	Teori Meradji (2004)
BBi	128.57	39.80	85.22	Bu çalışma
	147.35	46.16	83.81	Teori Cui (2010)
	154.65	51.48	76.22	Teori Amara (2008)
	163.80	28.30	86.30	Teori Ferhat (2006)
	160.20	51.50	87.40	Teori Wang (2003)

BN bileşiğinden BBi bileşiğine doğru gidildikçe hesaplanan elastik sabitleri değerlerinde azalma görülmektedir. Bunun yanında, BN ve BP için hesaplanan elastik sabitleri deneysel değerlere göre teorik değerlerle daha iyi uyum içindedir. Ayrıca, BAs, BSb ve BBi bileşiklerinin elastik sabit değerleri teorik değerlerle mükemmel uyum içinde olduğu görülmektedir. Sonuç olarak Bor-V grubu bileşiklerin sert yapıda olduğu anlaşılmaktadır.

Bir kristalin mekanik stabilitesi 4.11 ifadesindeki koşullarla belirlenir, Wallace (1972).

$$C_{11} - C_{12} > 0, C_{44} > 0, C_{11} + 2C_{12} > 0 \text{ ve } C_{12} < B < C_{11} \quad (4.14)$$

ZnS yapıda hesaplanan Bor-V bileşikleri bu 4.14 ifadesindeki eşitsizlikleri sağlamaktadır. Bu durumda, Bor-V bileşiklerinin ZnS kristal yapıda mekanik olarak kararlı oldukları sonucuna varılır.

Kristalde esneklikle ilgili diğer önemli bir nicelik ise Kleinmann parametresidir (ζ). Bu parametre, simetri tarafından konumları sabit olmayan anyon ve kation alt

örgülerinin hacim koruyucu zorlanmalarda nasıl bir pozisyonda bulunacağı hakkında bilgi verir. Bu parametre, denklem 4.15'deki gibi ifade edilir, Tan (2012).

$$\zeta = \frac{C_{11} + 8C_{12}}{7C_{11} + 2C_{12}} \quad (4.15)$$

Bu tezde aynı zamanda anizotropi faktörü de (A) hesaplanmıştır, Kleinman (1962).

$$A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) \quad (4.16)$$

İzotropik bir kristalde A değeri 1'e eşittir. 1'den büyük ya da küçük A değerleri kristalin anizotropisini ifade eder. A değerinin 1 değerine yakınlığı bu kristalin izotropik olup olmadığı hakkında bilgi verir.

İzotropik bulk modülü, $B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$ ve kayma (shear) modülü (G) hesaplanan elastik sabitlerinden yararlanılarak elde edilmiştir, Harrison (1980). Bu iki nicelik elde edilen elastik sabitlerin direk hesaba katılmasıyla bulunamaz. Reuss ve Angev, Reuss (1929), bu niceliklerle ilgili alt sınırları; Voight (1928) ise üst sınırları tespit etmişlerdir. Hill ise daha gerçek etkin elastik modüllerin bu iki sınırın aritmetik ortalamasıyla elde edilebileceğini göstermiştir, Hill (1952). Bunun anlamı G_V Voight'in, G_R Reuss ve Angel'in kayma modüllerini temsil etmek üzere, G aşağıdaki denklemlerle elde edilir.

$$5/G_R = 4/(C_{11} - C_{12}) + 3/C_{44} \quad (4.17)$$

$$G_V = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5 \quad (4.18)$$

$$G = \frac{1}{2}(G_R + G_V) \quad (4.19)$$

B ve G belirlendikten sonra polikristal materyallerin sertliğini belirleyen, Poisson oranı (ν), ve Young modülü (Y) bulunabilir. Poisson oranı (ν); serbest yanal yüzeye (lateral surface) sahip bir numunenin, tek yönlü bir stres altında iken kesit çapındaki azalma olarak tanımlanır. Young modülü ise, malzemeye bir gerilme kuvveti uygulanması halinde oluşan zor/zorlanma (stres/strain) oranı olarak tanımlanır. Bu modüller aşağıdaki şekilde ifade edilirler, Voight (1928).

$$Y = 9GB / (G + 3B) \quad (4.20)$$

$$\nu = \frac{1}{2} \left[\frac{(B - \frac{2}{3}G)}{(B + \frac{1}{3}G)} \right] \quad (4.21)$$

Bor-V bileşikleri için hesaplanan anizotropi faktörü, Poisson oranı, Young modülü, Kleinmann parametresi ve kayma modülü Tablo 4.3'te verilmiştir. Bu tezde elde edilen sonuçların önceki teorik değerlerle (Bkz. Tablo 4.3) gayet iyi uyum içinde oldukları anlaşılmaktadır. Bileşiklerin anizotropilerinin ve Kleinmann parametrelerinin BN'den BBi'ye doğru arttığı gözlenmektedir. G, Y değerlerinde ise BBi'den BN'ye doğru bir artış olduğu gözlenmektedir. Poisson oranı bir maddenin kırılabilirliği ile ilişkilidir. Hesaplamalar sonucunda Poisson oranı değerlerinin ise 0.109-0.141 aralığında değiştiği gözlemlenmektedir. BP burada en az Poisson oranı değerine sahiptir. Bu da BP'nin kırılabilirliğinin en az olduğunu göstermektedir.

Tablo 4.3. İncelenen Bor-V gurubu bileşiklerin Kayma modülü (G), Young modülü (Y), Poisson oranı (ν) ve Kleinmann parametreleri(ζ)

Madde	A	G (GPa)	Y (GPa)	ν	ζ
BN Bu çalışma Diğer çalışmalar	1.439 1.473 Wang (2003)	382.526 401.000 Anderson (1963)	854.808 890.400 Meradji (2004)	0.117 0.110 Meradji (2004)	0.365 0.117 Varshney (2010)
BP Bu çalışma Diğer çalışmalar	1.529 1.414 Wang (2003)	171.567 173.000 Hill (1952)	380.585 390.600 Hill (1952)	0.109 0.127 Hill (1952)	0.368 0.400 Hill (1952) 0.355 Wang (2003)
BA_s Bu çalışma Diğer çalışmalar	1.595 1.445 Wang (2003)	134.437	300.968 262.300 Wang (2003)	0.119 0.200 Wang (2003)	0.390 0.362 Wang (2003)
BS_b Bu çalışma Diğer çalışmalar	1.839 1.110 Singh (2007) 1.664 Deligöz (2007)	93.206 78.950 Singh (2007) 62.550 Deligöz (2007)	212.278 202.622 Bouhemadou (2009) 221.810 Deligöz (2007)	0.139 0.200 Singh (2007) 0.163 Deligöz (2007)	0.445 0.436 Wang (2003a)
BB_i Bu çalışma Diğer çalışmalar	1.920 1.478 Amara (2008) 1.608 Wang (2003)	65.593 54.300 Wang (2003)	149.631 159.730 Cui (2010) 135.100 Wang (2003) 156.060 Amara (2008)	0.141 0.197 Amara (2008)	0.456 0.421 Wang (2003)

4.8. Bor-V Grubu Bileşiklerin Debye Sıcaklığı ve Erime Noktası

Debye sıcaklığı (θ_D) temel bir fiziksel özelliktir. Katıların yüksek ve düşük sıcaklık bölgelerini ayırmak için kullanılır. Eğer $T > \theta_D$ ise bütün modların $k_B T$ enerjisine sahip olduğu, eğer $T < \theta_D$ ise yüksek frekans modlarının donmuş olduğu söylenir, Kohn (1965). Debye sıcaklığı, elastik sabitler vasıtası ile aşağıdaki yaygın olarak kullanılan temel bir formülden hesaplanır, Voight (1928).

$$\theta_D = \frac{\hbar}{k_B} \left[\frac{6\pi^2 n}{V_0} \right]^{1/3} v_m \quad (4.22)$$

Burada V_0 atom hacmi ve v_m ortalama dalga hızıdır. Bir polikristalde v_m 4.23 denkleminde hesaplanır:

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (4.23)$$

Burada v_t ve v_l sırasıyla enine ve boyuna elastik dalga hızlarıdır ve G , B ve ρ (yoğunluk) yardımıyla Navier denkleminde türetilir, Schreiber (1973). Burada yoğunluklar ZnS yapıdaki kristalin kütesinin hacmine oranıyla elde edilmiştir.

$$v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (4.24)$$

$$v_l = \sqrt{\frac{3B + 4G}{3\rho}} \quad (4.25)$$

Erime noktası (T_m) ve elastik sabitleri arasındaki ilişki 4.26 ifadesindeki gibidir, Fine (1984).

$$T_m = 553 \text{ K} + (591/\text{Mbar})C_{11} \pm 300 \text{ K} \quad (4.26)$$

Denklem 4.26'dan erime noktasını elde edebiliriz. Hesaplamalar sonucunda elde edilen dalga hızları, debye sıcaklıkları, erime noktaları ve yoğunluk verileri Tablo 4.4'te belirtilmiştir. Hesaplanan yoğunluk değerleri önceki teorik değerlerle mükemmel uyum içindedir. Yoğunlukta, BN'den BBi'ye doğru inildikçe bir artış gözlenmektedir. Fakat BP bileşiğinin yoğunluğunda bunun tersi bir durum söz konusudur. Bu durum P elementinin atom hacmindeki ani artıştan kaynaklanmaktadır. BAs, BSb ve BBi bileşiklerinin yoğunlukları için yapılan literatür taramasında herhangi bir çalışmaya rastlanmamıştır. Bu özellik bu tezde ilk defa bahsedilmiştir. Enine, boyuna ve ortalama dalga hız değerleri, BAs bileşiği hariç diğer çalışmalarla gayet iyi uyum içindedir. Aynı şekilde BAs içinde bu özellikler ilk defa bu tezde bahsedilmiştir.

Debye sıcaklığı ve erime noktası BN bileşiğinden BBi doğru giderken azalan yönde değişim göstermektedir. T_m ve θ_D değerleri yapılan çalışmalarla büyük uyumluluk içinde olduğu Tablo 4.4'ten de anlaşılmaktadır.

Tablo 4.4. İncelenen Bor-V grubu bileşiklerin yoğunluk (ρ), enine, boyuna ve ortalama dalga hızları (v_t , v_l , v_m), debye sıcaklıkları (θ_D) ve erime noktaları (T_m) verileri

Madde	$\rho(\text{gr/cm}^3)$	v_t (m/s)	v_l (m/s)	v_m (m/s)	θ_D (K)	T_m (K) ± 300	Referanslar
BN Bu çalışma Diğer çalışmalar	3.475 3.54 ^a	15935.44 1 16141 ^a	10492.52 9 8235 ^a	11488.48 1 9227 ^a	1886.06 2 1850 ^b	5176.394	a: Anderson (1963) b: Bouhemadou (2009)
BP Bu çalışma Diğer çalışmalar	2.962 3.04 ^c	11489.93 3 11554 ^c	7610.650 7550 ^c	8326.804 8275 ^c	1089.55 6 1095 ^c 980 ^d	2560.313 2800 ^d	c: Hill (1952) d: Lide (1999) deneysel
BAs Bu çalışma Diğer çalışmalar	5.139	7779.686	5114.690	5601.236	693.068 625 ^d	2132.825 2300 ^d	d: Lide (1999) deneysel
BSb Bu çalışma Diğer çalışmalar	6.027	6072.134 7068.60 ^e 6170.5 ^f	3932.587 4323.68 ^e 3911.22 ^f	4314.577 4777.60 ^e 4302.35 ^f	486.858 505.90 ^f	1641.734 1696 ^f	e: Singh (2010) f: Deligöz (2007)
BBi Bu çalışma Diğer çalışmalar	8.676	4251.898 4372.87 ^g 4374.68 ^h	2749.621 2765.40 ^g 2686.98 ^h	3017.240 3042.41 ^g 2965.458 ^h	324.806 331.56 ^g 324.11 ^h	1312.866 1467 ^h	g: Cui (2010) h: Amara (2008)

Günümüz teknolojisinde kullanılan çelik demir gibi sert ve dayanıklı malzemeleri sertlik değerlerini Bor-V grubu bileşiklerle karşılaştırıldığında (Tablo 4.5) en sert ve hafif maddenin BN olduğu görülmektedir. Bor-V grubu bileşiklerin yoğunlukları diğer sert malzemelerden daha düşüktür. Bu da Bor-V grubu bileşiklerin hafiflik ve dayanıklılık gereken uzay teknolojisinde ve savunma sanayisinde kullanılabileceğini göstermektedir.

Tablo 4.5 Bor-V grubu bileşikleri ile bilinen sert maddelerinin yoğunluk ve Bulk modül değerleri

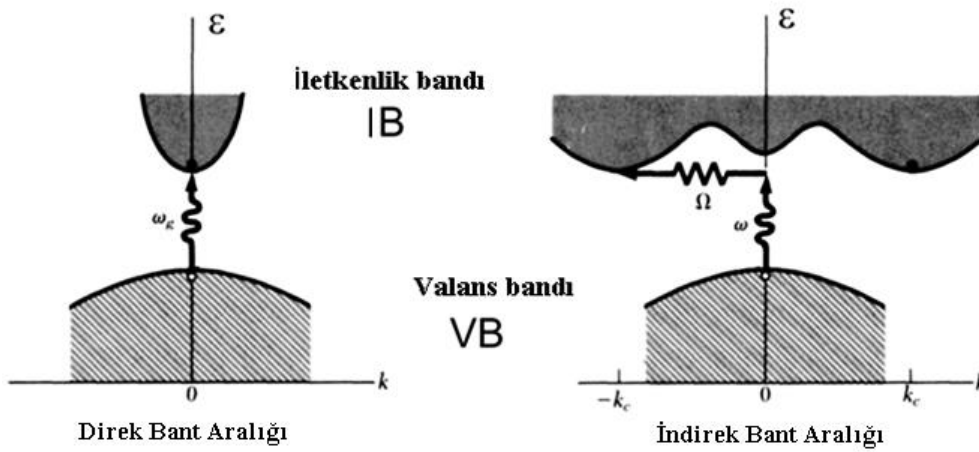
Madde	Yoğunluk (gr/cm^3)	Bulk modülü (GPa)
Tungsten	19,3	200
Demir	7,87	170
Çelik	7,75	160
BN	3,47	375
BP	2,96	161
BAs	5,13	130
BSb	6,02	99,5
BBi	8,6	66,8

BÖLÜM 5. ELEKTRONİK ÖZELLİKLER

Bor-V grubu bileşiklerinin elektronik özelliklerinin bilinmesi, bu bileşiklerin teknolojik alanda kullanımını arttıracaktır. Özellikle elektronik ve opto-elektronik uygulamalarda III-V grubu yarı iletken malzemeler yoğun bir şekilde kullanılmaktadır. Bu bölümde, ZnS yapıdaki BN, BP, BAs, BSb ve BBi yarı iletkenlerinin denge konumunda hesaplanan örgü sabitleri kullanılarak yüksek simetri yönlerine karşılık gelen elektronik bant yapıları ve durum yoğunlukları ayrı ayrı elde edilmiştir. Bulunan sonuçlar yapılan çalışmalarla karşılaştırılıp doğruluğu test edilmiştir.

5.1. Yarı İletken Bant Yapıları

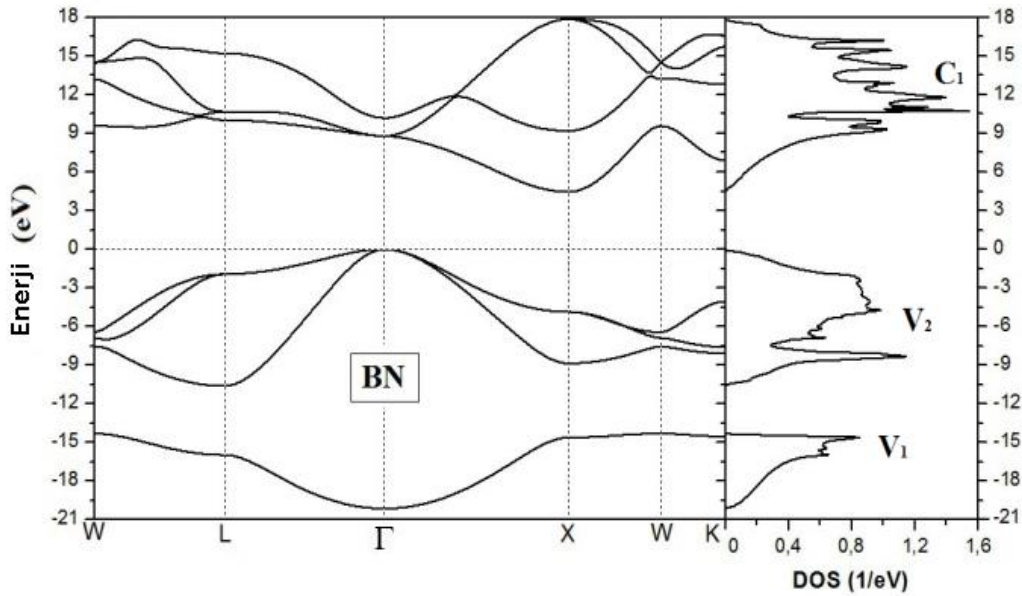
Bir yarı iletkenin kullanım alanı onun sahip olduğu bant yapısıyla doğrudan ilişkilidir. Doğada yarı iletkenler genellikle doğrudan (direk) veya dolaylı (indirek) bant aralığına sahip yarı iletkenler olarak sınıflandırılırlar. Doğrudan bant aralığına sahip yarı iletkenlerde, valans bandının (VB) maksimumu ile iletkenlik bandının (İB) minimumu aynı \mathbf{k} dalga vektörü üzerindedir. Dolaylı bant aralığına sahip yarı iletkenlerde ise valans bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu farklı \mathbf{k} dalga vektörü üzerindedir. Şekil 5.1'deki grafikte de açıkça görüldüğü gibi valans bandının maksimum noktası ile iletkenlik bandının minimum noktası arasında hiçbir enerji seviyesinin olmadığı boş bir bölge bulunmaktadır. Bu bölge yasak bant aralığı olarak ifade edilir ve E_g simgesiyle gösterilir. Maddeleri iletken, yalıtkan ya da yarı iletken olarak sınıflandırırken bu E_g değeri dikkate alınır. E_g değeri 0.5 eV den küçük maddeler genellikle iletken, 5 eV'den büyük maddeler ise genellikle yalıtkan olarak sınıflandırılır. 0.5-5 eV aralığı ise genellikle yarı iletken sınıfına aittir.



Şekil 5.1. Yarı iletkenlerde doğrudan ve dolaylı geçişler

5.2. BN Bileşiğinin Elektronik Özellikleri

BN bileşiği için hesaplanan elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu (DOS) grafiği Şekil 5.2’de verilmiştir.



Şekil 5.2. BN bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu (DOS)

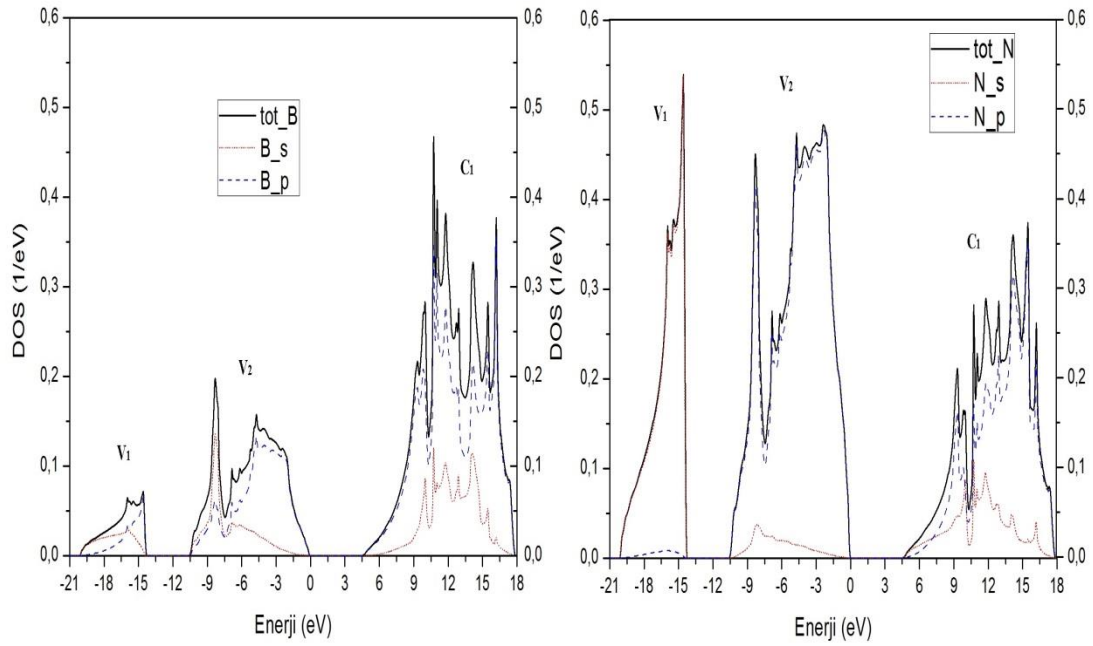
Grafikte dikey eksen enerjiiyi, yatay eksen ise ZnS yapının yüksek simetri noktalarını (W, L, Γ , X, K) ve toplam durum yoğunluğunu temsil etmektedir. Fermi enerji düzeyi, sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir. Fermi enerji düzeyinin alt kısmındaki bantlar valans bantlarını temsil ederken, üst kısım ise iletkenlik bantlarını temsil etmektedir.

Grafikten de (Şekil 5.2) açıkça görüldüğü gibi BN bileşiğinin dolaylı bant yapısına sahip olduğu görülmektedir. BN'nin E_g değeri 4.46 eV olarak hesaplanmıştır. Bulunan bu sonuç diğer teorik değerlerle gayet iyi uyum içindedir (Bkz. Tablo-5.1). BN bileşiğinin bant aralığının yüksek olması, BN'nin mor ötesi (UV) bölgesini içeren geniş bant aralık uygulamalarında kullanılabileceğini gösterir.

Tablo 5.1 BN bileşiğinin E_g değerleri

Materyal	E_g (eV)	Doğrudan-Dolaylı	Referans
BN	4,46	Dolaylı	Bu çalışma
	4,45	Dolaylı	Zaoui (2001)
	4,47	Dolaylı	Ahmed (2007b)
	4,44	Dolaylı	Lachebi (2009)

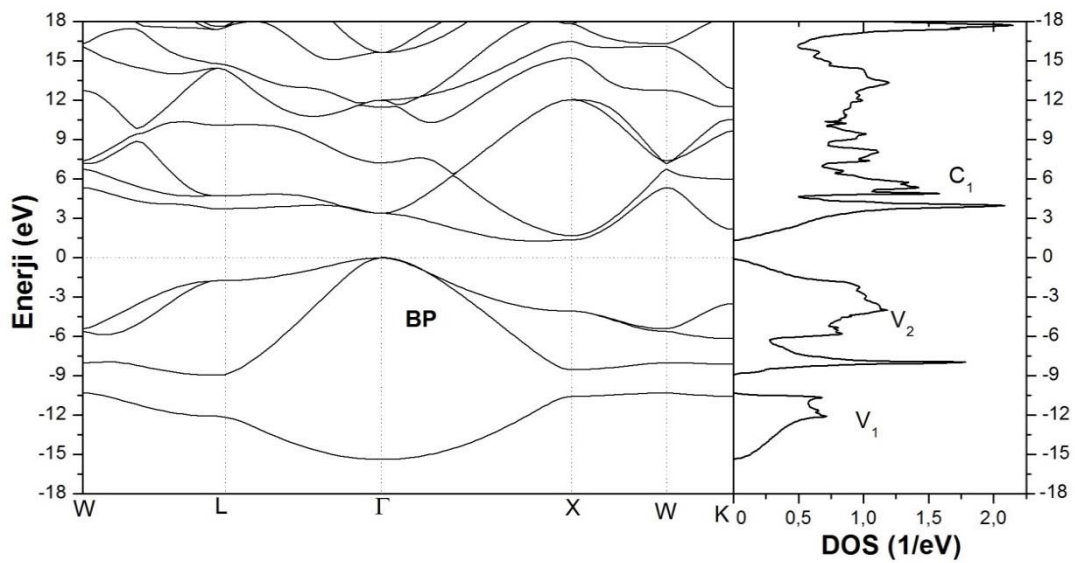
Şekil 5.2'de görülen BN bileşiğinin toplam durum yoğunluğuna her bir elementin (B ve N) ayrı ayrı ne kadar katkıda bulunacağı, Şekil 5.3'te gösterilmiştir. Elektronik bant yapısı grafiklerinde, valans bandının alt kısımları V_1 ile üst kısımlarını ise V_2 ile iletkenlik bandının alt kısmı ise C_1 ile temsil edilmektedir. Valans bandının üst kısmından olan geçişler daha baskın olduğu için valans bandının DOS'u için V_2 incelenecektir. V_2 bölgesinde BN için katkı, N atomunun 2p seviyesinden daha baskın bir şekilde sağlanmaktadır. İletkenlik bandının alt seviyesine N ve B atomlarının 2p seviyelerinden birbirine yakın katkı sağlandığı görülmektedir.



Şekil 5.3. B ve N için toplam ve parçalı durum yoğunlukları

5.3. BP Bileşiğinin Elektronik Özellikleri

BP bileşiği için hesaplanan elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu grafiği Şekil 5.4'deki grafikte verilmiştir. Grafikte Fermi enerji düzeyi, sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir.

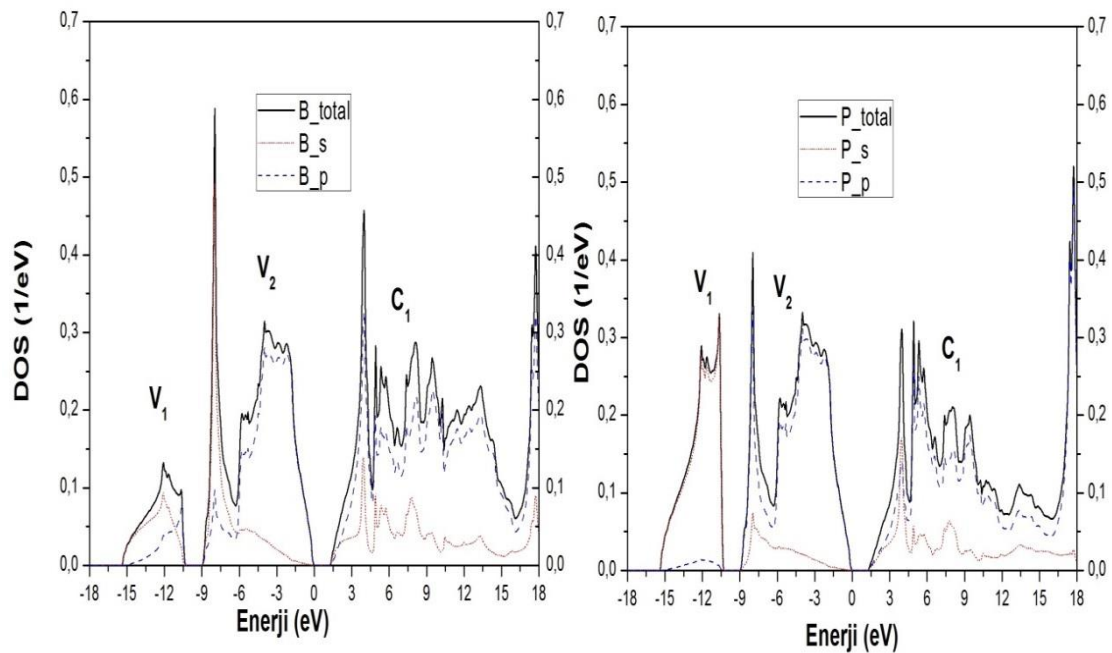


Şekil 5.4. BP bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu

Şekil 5.4'deki grafikten de açıkça görülebileceği gibi, BP'nin dolaylı bant aralığına sahiptir. Hesaplamalar sonucunda elde edilen BP'nin E_g değeri ve diğer çalışmalarda E_g değerleri Tablo 5.2'de gösterilmiştir. Bu çalışmada elde edilen sonuç, diğer teorik çalışmalar ile mükemmel uyum içindedir. Fakat deneysel çalışmalarda bulunan sonuçlar ile % 40 civarında farklılık görülmektedir.

Tablo 5.2 BP bileşiğinin E_g değerleri

Materyal	E_g (eV)	Doğrudan-Dolaylı	Referans
BP	1,25	Dolaylı	Bu çalışma
	1,25	Dolaylı	Schroten (1998)
	1,24	Dolaylı	Ahmed (2008), Wang (2002)
	2	Dolaylı	Paulus (1996) ^{Deney.}
	2	Dolaylı	Wyckoff (1986) ^{Deney.}

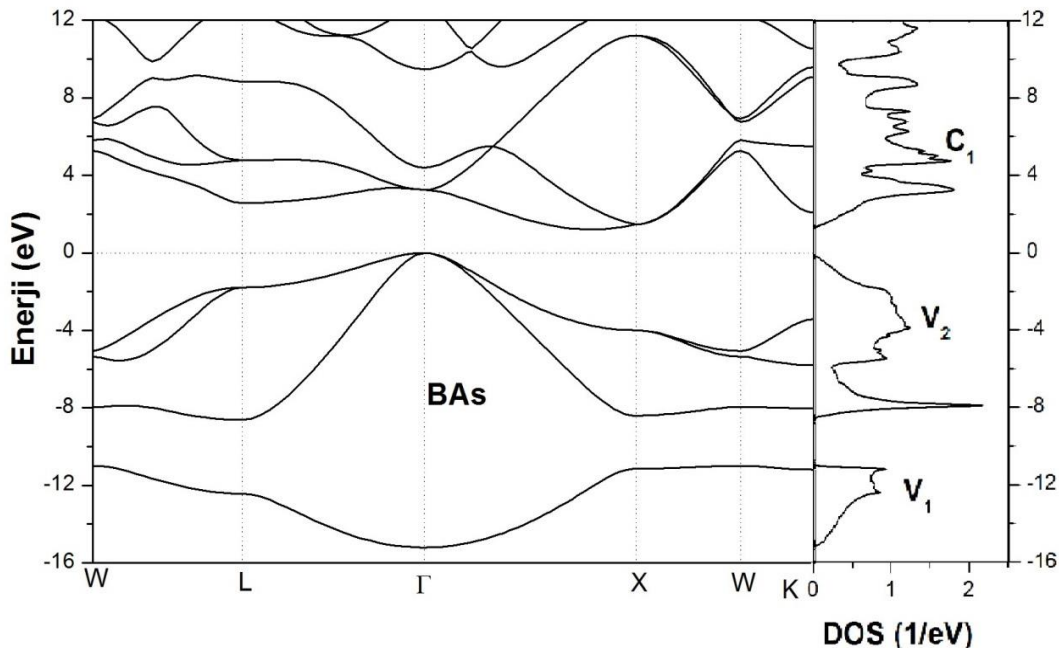


Şekil 5.5. B ve P için toplam ve parçalı durum yoğunlukları

Şekil 5.4'deki toplam durum yoğunluğuna B ve P atomlarının ayrı ayrı katkıları, Şekil 5.5'teki parçalı durum yoğunlukları grafiğinden anlaşılmaktadır. V_2 bölgesinde B ve P elementlerinin sırasıyla 2p ve 3p seviyelerindeki katkı 2s ve 3s seviyelerinden fazla olup bu iki atom birbirine yakın katkıda bulunmuşlardır. C_1 de ise ağırlıklı katkı B ve P'nin sırasıyla 2p ve 3p seviyelerindedir. Burada iki atom da birbirine neredeyse eşit katkı sağlamışlardır. Ayrıca iki grafikte de yasak bant aralığı (0-1.25 eV) civarında herhangi bir durum olmayışından, durum yoğunlukları değerlerinin bu bölgelerde beklenildiği gibi sıfır olduğu görülmektedir.

5.4. BAs Bileşiğinin Elektronik Özellikleri

BAs için elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu grafiği Şekil 5.6'daki grafikte gösterilmiştir. Grafikte Fermi enerji düzeyi, sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir.



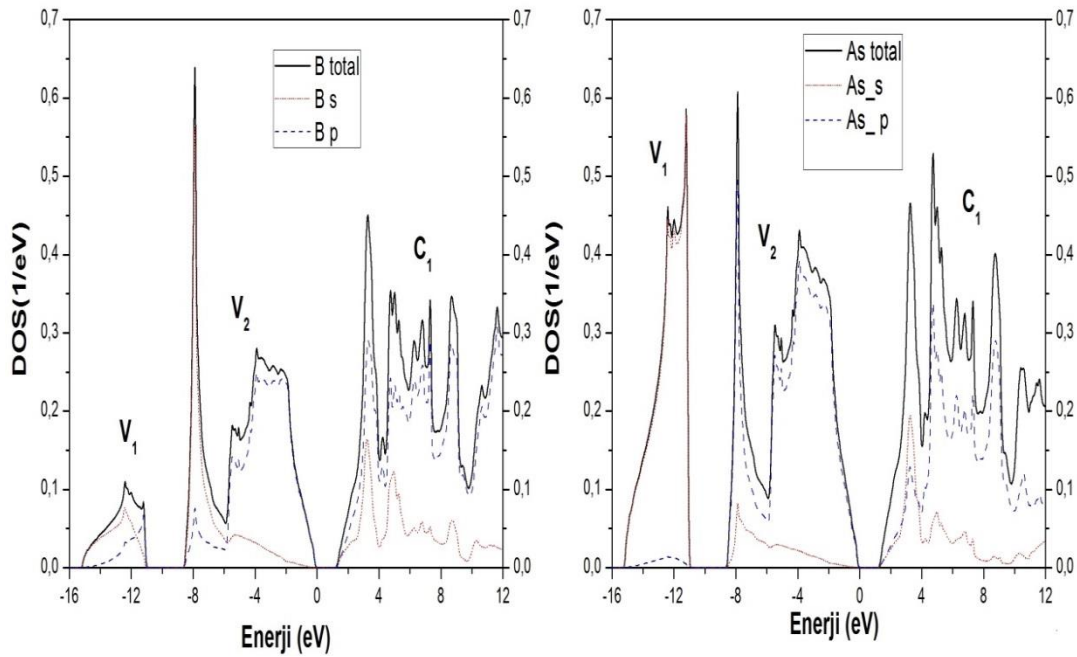
Şekil 5.6. BAs bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu

BAs bileşiği de dolaylı bant aralığına sahiptir. BAs'nin E_g değeri ve diğer çalışmalar Tablo 5.3'te verilmiştir. Bulunan bu sonucun deneysel sonuçlara yakın çıktığı görülmektedir.

Tablo 5.3 BAs bileşiğinin E_g değerleri

Materyal	E_g (eV)	Doğrudan-Dolaylı	Referans
BAs	1,20	Dolaylı	Bu çalışma
	1,46	Dolaylı	Ku (1966) ^{Deney} Chu (1972) ^{Deney}

Şekil 5.6'daki toplam durum yoğunluğuna B ve As atomlarının ayrı ayrı katkıları, Şekil 5.7'deki parçalı durum yoğunlukları grafiğinden anlaşılmaktadır. V_2 'nin -0.6 eV ile -0.8 eV bölgesinde ise B için 2s'den gelen katkı; As için ise 4p'den gelen katkılar daha belirgindir. V_2 'nin -0.4 eV ile 0 eV bölgesinde ise B'nin 2p'den gelen katkısı ve As'nin ise 4s'den gelen katkısı daha belirgindir. C_1 de ise hem B'nin 2p ve As'nin 4p seviyelerinin katkıları s seviyelerine göre daha fazladır. Burada iki atom da birbirine yakın katkıda bulunmuşlardır.



Şekil 5.7. B ve As için toplam ve parçalı durum yoğunlukları

5.5. BSb Bileşiğinin Elektronik Özellikleri

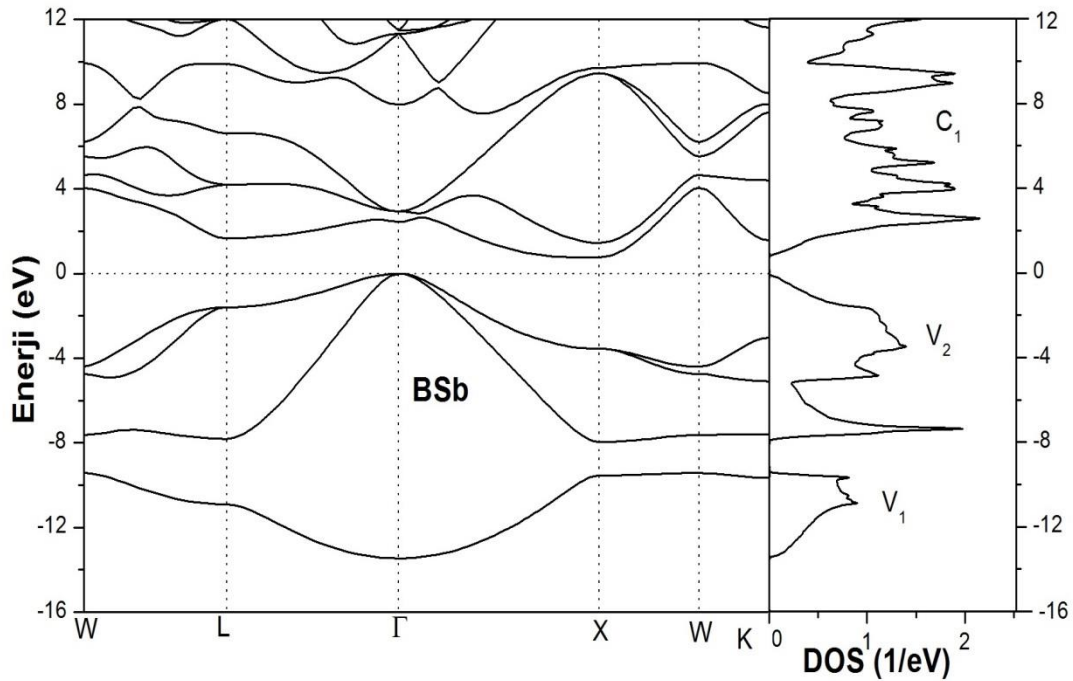
BSb bileşiğinin elektronik bant yapı ve toplam durum yoğunluğu diyagramı Şekil 5.8'de gösterilmiştir. Bu grafikte de Fermi enerji düzeyi, sıfır enerji noktası olarak

seçilmiştir. BSb de dolaylı bant aralığına sahiptir. Hesaplamalar sonucunda BSb'nin E_g değeri 0.76 eV olarak bulunmuştur. Tablo 5.4'e bakıldığında bulunan bu sonucun diğer teorik çalışmalarla kıyaslandığında oldukça uyumlu olduğu anlaşılmaktadır.

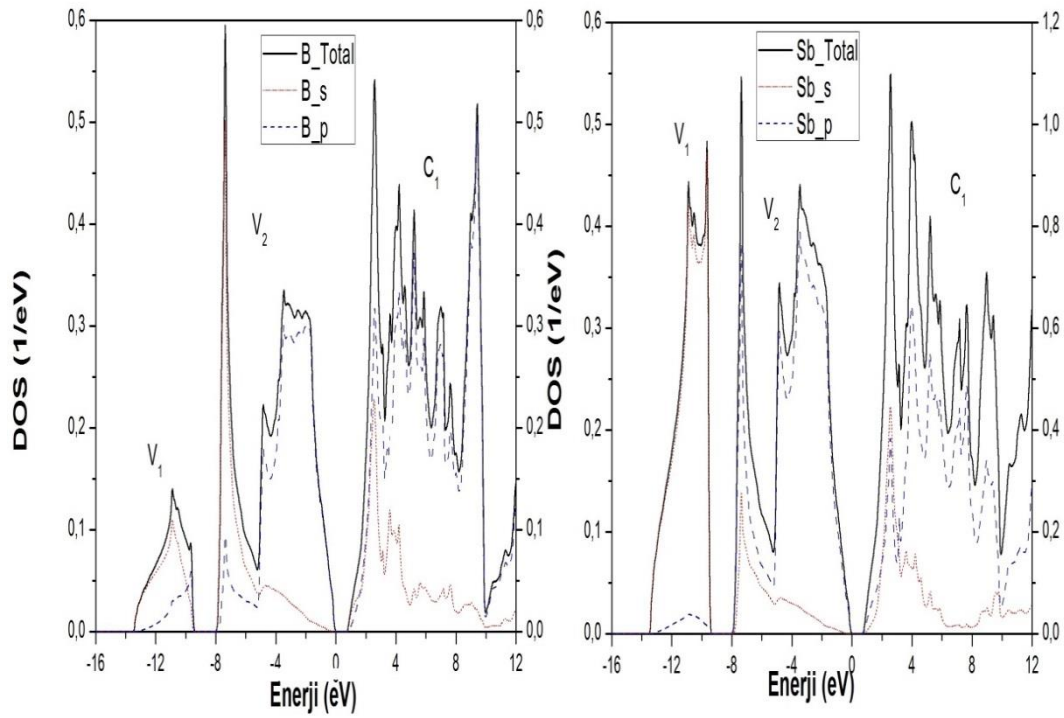
Tablo 5.4 BSb bileşiğinin E_g değerleri

Materyal	E_g (eV)	Doğrudan-Dolaylı	Referans
BSb	0,76	Dolaylı	Bu çalışma
	0,71	Dolaylı	Meradji (2004)
	0,75	Dolaylı	Zaoui (2001)

BSb'nin toplam durum yoğunluğuna atomların ayrı ayrı katkılarına bakıldığında Şekil 5.9'da görüldüğü gibi V_2 bölgesinde B atomu için -6 eV ile -4 eV aralığında 2s katkısı daha fazla, -4 eV ile 0 eV aralığında ise 2p katkısı daha fazladır. Sb atomu için bu bölgede 5p'nin katkısı daha belirgindir. İletkenlik bandının minimum bölgesinde B için 2p fakat Sb için 5s seviyesinin katkısı daha belirgindir.



Şekil 5.8. BSb bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu



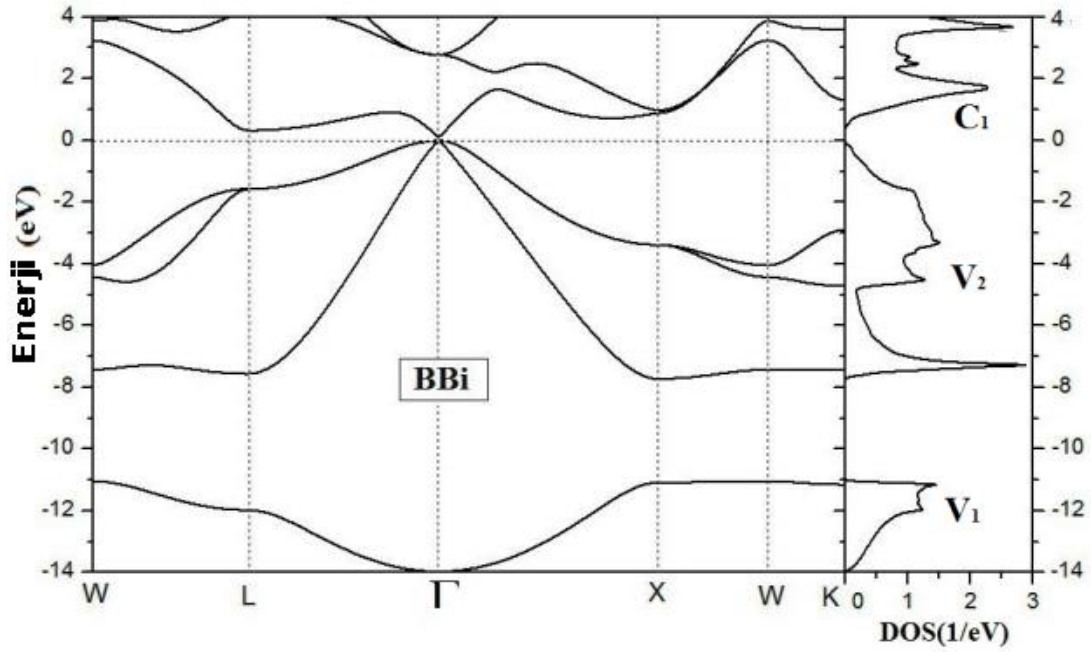
Şekil 5.9. B ve Sb için toplam ve parçalı durum yoğunlukları

5.6. BBi Bileşiğinin Elektronik Özellikleri

Şekil 5.10’da BBi bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluk grafiği gösterilmiştir. Yine Fermi enerji düzeyi, sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir. Şekilde de görüldüğü gibi diğer Bor-V bileşiklerinden farklı olarak BBi, doğrudan bant aralığına sahiptir. BBi bileşiğinin E_g değeri ise 0,10 eV olarak bulunmuştur. Bu da diğer teorik çalışmalarla uyum içindedir (Bkz Tablo 5.5). BBi’nin yasak bant aralığının bu kadar düşük olması bu bileşiğin iletkenliğe çok yakın olduğunu gösterir.

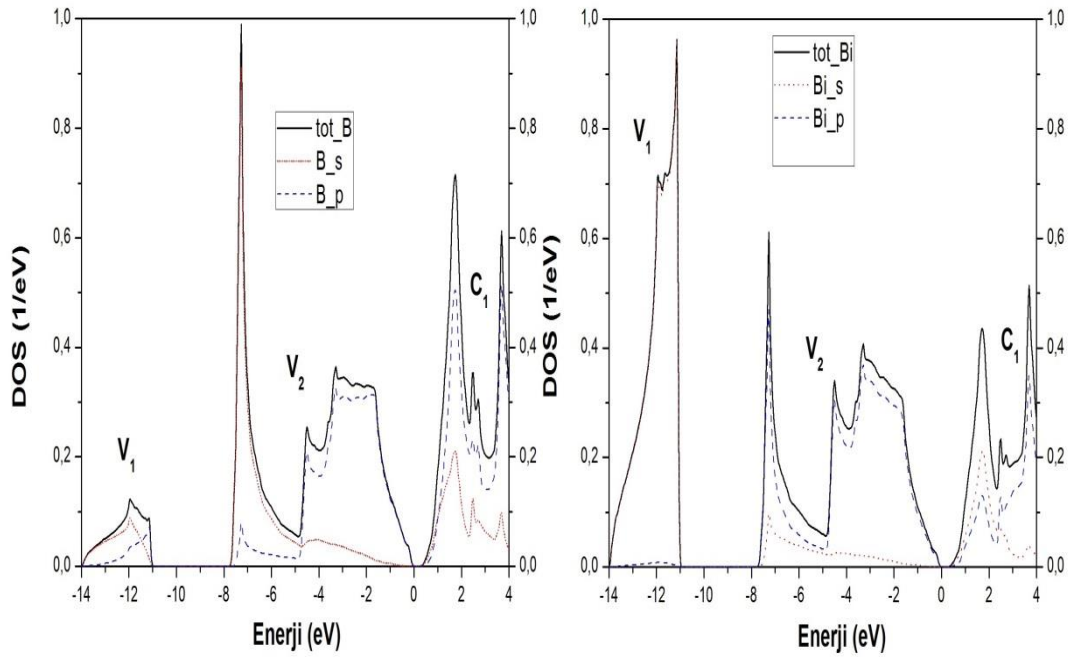
Tablo 5.5 BBi bileşiğinin E_g değerleri

Materyal	E_g (eV)	Doğrudan-Dolaylı	Referans
BBi	0,10	Doğrudan	Bu çalışma
	0,13	Doğrudan	Madouri (2005)



Şekil 5.10. BBi bileşiğinin elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu

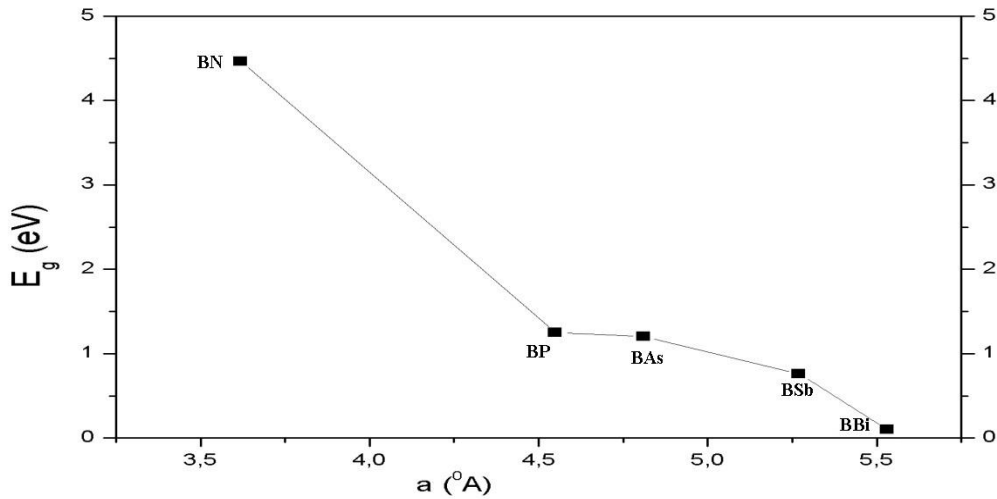
Şekil 5.10'daki toplam durum yoğunluğunun B ve Bi atomlarından gelen katkıları Şekil 5.11'deki grafiklerde ayrı ayrı ifade edilmiştir. Burada, V₂'nin -8 eV ile -5 eV aralığında B'nin 2s ve Bi'nin 6p katkıları fazladır. Bu bölgede B atomu Bi atomundan daha fazla katkı sağlamıştır. Fakat V₂'nin -5 eV ile 0 eV aralığında B'nin 2p ve Bi'nin 6p katkıları fazladır ve bunlar birbirlerine neredeyse eşit katkıda bulunmuşlardır. İletkenlik bandının minimumlarında ise B'nin 2p ve Bi'nin 6s durumlarının toplam durum yoğunluğuna katkıları daha belirgin olarak ortaya çıkmıştır.



Şekil 5.11. B ve Bi için toplam ve parçalı durum yoğunlukları

5.7. Sonuçlar

Hesaplamalar sonucunda Bor-V bileşiklerinin, BBi hariç diğerleri dolaylı bant aralığına sahip olduğu anlaşılmaktadır. BBi bileşiği ise dorudan bant aralığına sahip olup neredeyse iletken gibi görülebilir. Bor atomunun V-A grubu elementlerinin artan atom numarasına göre yaptığı bileşiklerin sonucunda örgü sabiti değeri artarken E_g değerinin azaldığı gözlenmektedir (Bkz Şekil 5.12).



Şekil 5.12. Enerji bant aralığı-örgü sabiti grafiği

BÖLÜM 6. OPTİKSEL ÖZELLİKLER

Bir foton bir yarıiletken üzerine gönderilirse, fotonların atomlar ve elektronlar arasındaki etkileşimden dolayı belirli optik olaylar meydana gelir (soğurma, geçiş, yansıma, kırılma vb.). Materyal üzerine gönderilen foton, elektronu bir üst enerji seviyesine çıkaracak yeterli enerjiye sahip değilse ya da gönderilen fotonun frekansı atomik titreşim frekansında değilse, bu durumda foton soğurulamaz ve geçirgen olarak davranan materyalin içinden geçer. Bu yüzden, yarıiletkenler genellikle kısa dalga boylu fotonlar için soğurucu, uzun dalga boylu fotonlar için de geçirgen olarak davranırlar. Bir fotonun soğurulması veya geçirilmesi, fotonun enerjisine, yarıiletkenin yasak enerji aralığına ve atomların dizilimlerine bağlıdır. Bir maddenin optiksel özelliklerini açıklamak öncelikle bir takım optiksel sabitlerin hesaplanması yardımıyla olur. Bu tezde Bor-V bileşiklerinin ayrı ayrı optiksel sabitleri incelenmiştir. Bu bölümde optiksel sabitler açıklanacak, incelenen bileşiklerin optiksel özellikleri bu sabitler yardımıyla yorumlanacaktır.

6.1. Kompleks Dielektrik Fonksiyonu

Maddenin optiksel özelliklerini açıklayan en önemli parametrelerden birisi kompleks dielektrik fonksiyonudur $\epsilon(\omega)$. Kompleks dielektrik fonksiyonu, fotonlarla elektronların birbiri arasındaki etkileşim ilişkisini gösteren elektromagnetik radyasyona (ışınım, ışıma) karşı sistemin lineer tepkisini tanımlamak için kullanılır. Bu fonksiyon $\epsilon(\omega)$ ifadesiyle gösterilmektedir. $\epsilon(\omega)$ 'nin bileşenleri denklem 6.1'de ifade edilmiştir.

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i \epsilon_2(\omega) \quad (6.1)$$

Bu denklemde $\epsilon_1(\omega)$ ve $\epsilon_2(\omega)$, kompleks dielektrik fonksiyonunun sırasıyla reel ve imajiner kısımlarını simgeler.

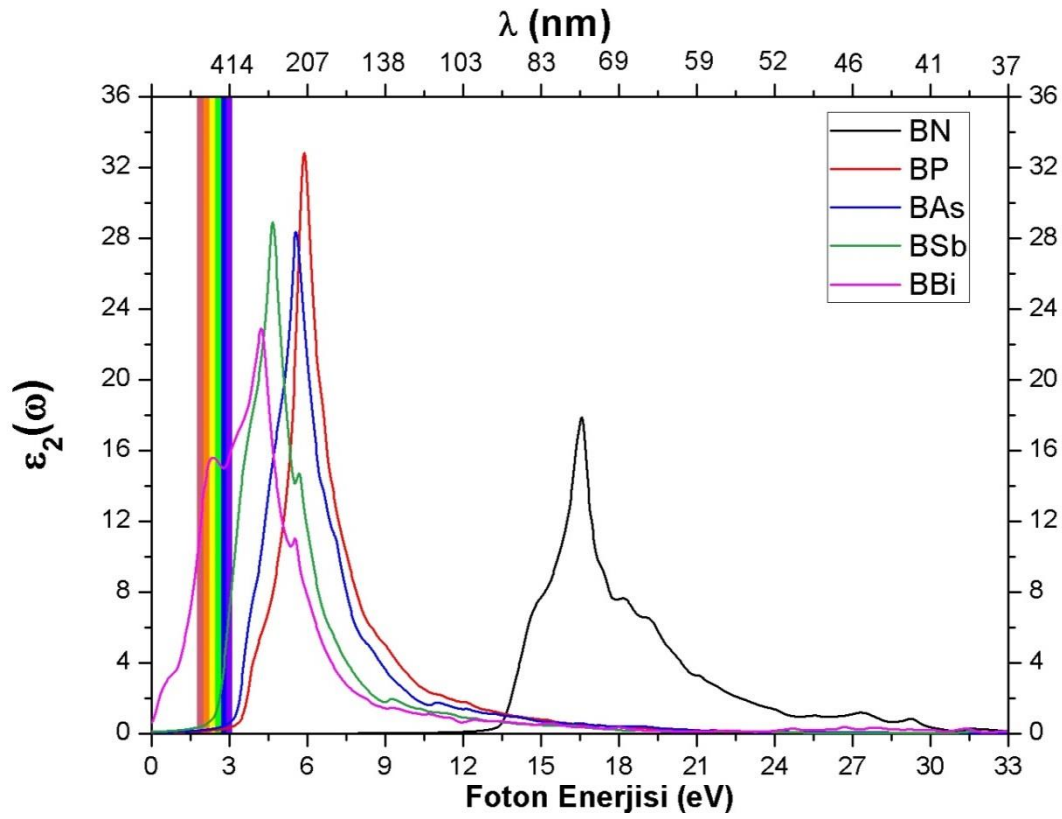
6.1.1. Kompleks dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı

Dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmı $\epsilon_2(\omega)$, tüm materyaller için optik özelliklerin temel elemanıdır. Bütün optiksel parametreleri $\epsilon_2(\omega)$ 'den türetmek mümkündür. $\epsilon_2(\omega)$ 6.2 denkleminde hesaplanır.

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi m^2 \omega^2} \times \int d^3k \sum_{nn'} |k_n \langle p | k_{n'} \rangle|^2 f(k_n) \times [1 - f(k_{n'})] (E_{k_n} - E_{k_{n'}} - \omega) \quad (6.2)$$

Burada, V kristalin hacmi, e elektronun yükü, m elektronun kütlesi, p momentum matris elemanı; k_n , $f(k_n)$, E_{k_n} ise sırasıyla kristalin n'inci öz değerine karşılık gelen dalga vektörü, fermi dağılım fonksiyonu ve enerjisidir.

Hesaplamalar sonucu elde edilen Bor-V bileşiklerinin $\epsilon_2(\omega)$ grafiği Şekil 6.1'de verilmiştir. Bu grafikte de görüldüğü gibi her Bor-V bileşiği belli bir enerji değerinde maksimuma ulaşmıştır ve buralarda pikler görülmektedir. Bu pikler, valans bandından iletim bandına (optiksel iletim) elektronik geçişlere karşılık gelir. Buralar bantlar arası geçişin yoğun olduğu bölgelerdir. Görünür bölgede Bor-V bileşiklerinin $\epsilon_2(\omega)$ değerlerindeki artışların başlamakta olması, buralarda soğurmanın da başlayacağı anlamına gelmektedir. Bütün pikler mor ötesi bölgesinde oluşmaktadır. Bor-V bileşikleri için optiksel iletim değerleri $BBi=3.79$ eV, $BSb=4.66$ eV, $BAs=5.51$ eV, $BP=5.89$ eV ve $BN=16.58$ eV'yi göstermektedir. Bu değerler sonucunda BBi 'den BN 'ye doğru gidildikçe optiksel geçiş enerji değerinin arttığı kanısına varılır.



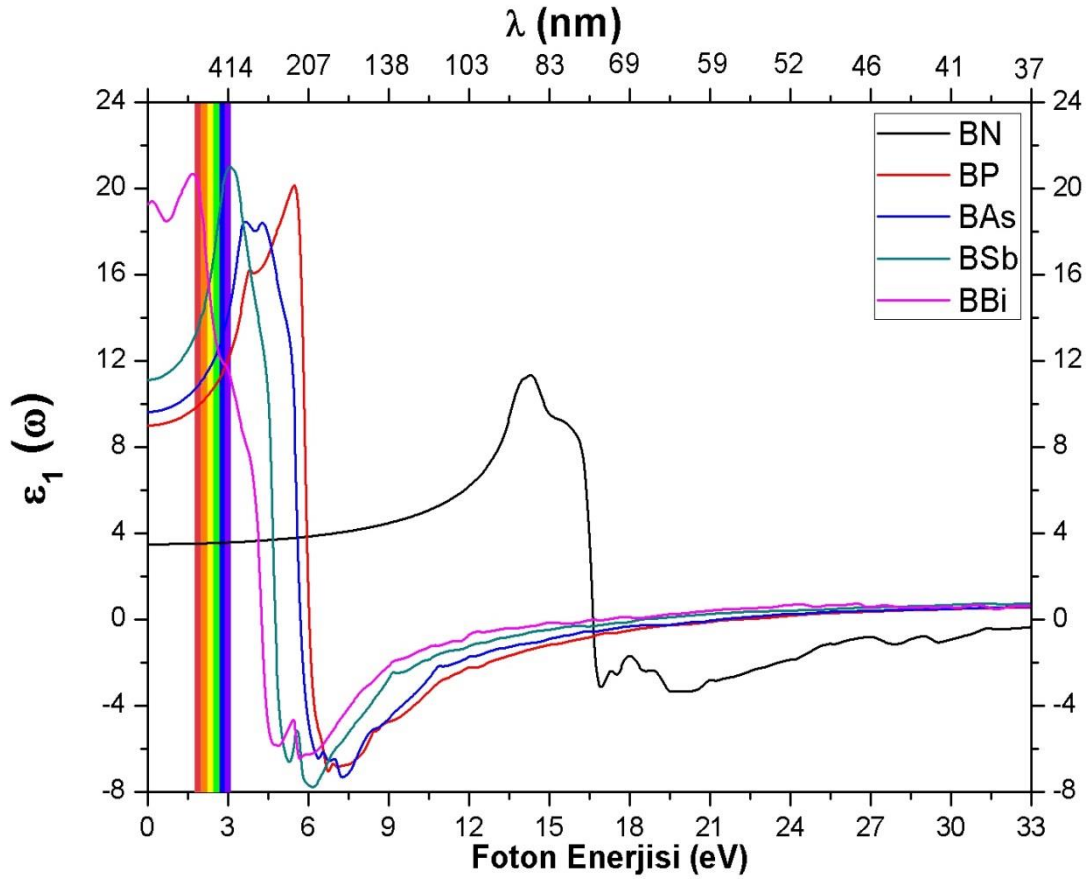
Şekil 6.1. Bor-V bileşiklerinin $\epsilon_2(\omega)$ grafiği

6.1.2. Kompleks dielektrik fonksiyonun reel kısmı

Kramer-Kronig bağıntılarıyla kompleks dielektrik fonksiyonunun reel kısmı $\epsilon_1(\omega)$, belirlenir, Wooten (1972). $\epsilon_1(\omega)$ için bu bağıntı denklem 6.3'te verilmiştir.

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_2(\omega') \omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (6.3)$$

Burada ϵ_2 kompleks dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmı ve ω ise frekansı temsil eder.



Şekil 6.2. Bor-V bileşiklerinin $\epsilon_1(\omega)$ grafiği

Hesaplamalar sonucunda elde edilen Bor-V bileşiklerinin $\epsilon_1(\omega)$ grafiği Şekil 6.2’de gösterilmiştir. Şekildeki ana pikler, BBi ve BSb için görünür bölge sınırlarıdır. BP ve BAs için yakın mor ötesi bölgesinde ve BN için X ışınlarına yakın bölgede bu pikler oluşmuştur. Bu pikler, genellikle valans bandının maksimumun bölgelerinden iletkenlik bandının minimum bölgelerine geçiş yapan elektronlar tarafından üretilir. Bor-V bileşikleri için bu geçiş değerleri hesaplamalardan BBi=1.70 eV, BSb=3.11 eV, BAs=3.68 eV, BP=5.48 eV ve BN=14.32 eV olarak bulunmuştur.

$\epsilon_1(\omega)$ için diğer önemli bir nicelik ise $\epsilon_1(0)$ değeridir. Bu değer, yasak bant aralığına da bağlı olup statik dielektrik sabitinin elektronik kısmı hakkında bilgi verir. Bor-V bileşikleri için $\omega=0$ ’da $\epsilon_1(0)$ değerleri BBi=19.27, BSb=11.12, BAs=9.64, BP=9.01 ve BN=3.5 olarak bulunmuştur. Bu değerlere yakın bölgeler yansımaların azalacağı yerleri tanımlar. Buradan statik dielektrik sabitinde BN’den BBi’ye doğru bir azalma gözlemlenmektedir.

6.2. Kırılma İndisi

Materyallerin kırılma indisleri ($n(\omega)$) hakkında bilgi sahibi olmak, o materyalin performansı ve verimliliği için çok önemlidir. Kırılma, materyallerin foton enerjisiyle bağlantılıdır. Kırılma indisinin kompleks dielektrik fonksiyonunun reel ve imajiner kısımlarına bağlı ifadesi 6.4 denkleminde verilmiştir.

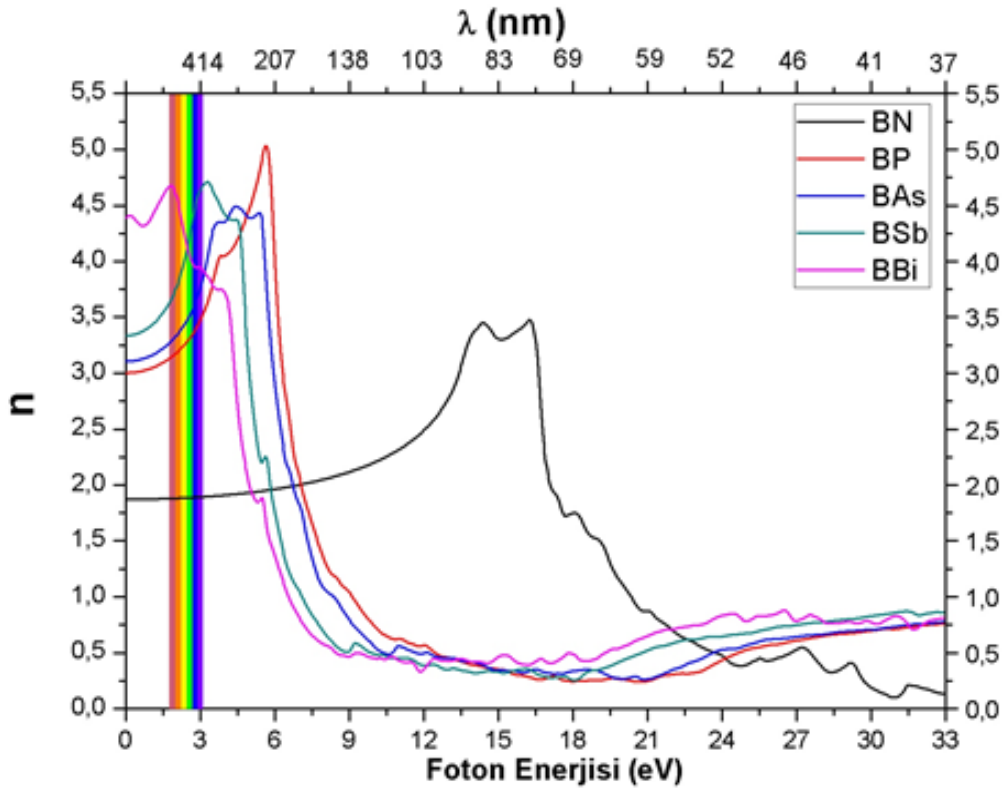
$$n(\omega) = \frac{\left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2}}{\sqrt{2}} \quad (6.4)$$

Hesaplamalar sonucu Bor-V bileşiklerinin statik kırılma indis değerleri $n(0)$ elde edilmiştir. Bu değerler Tablo 6.1’de verilmiştir. Bu değerlerin yapılan teorik çalışmalarda uyum içinde olması, bu çalışmanın doğruluğunu gösteren önemli bir faktördür. Ayrıca Sb ve BBi için literatür taramalarında herhangi bir kırılma indis $n(0)$ değerine rastlamamıştır. Bu değerler bu tezde ilk olması açısından önemlidir.

Tablo 6.1. Bor-V bileşiklerinin $n(0)$ değerleri ve diğer çalışmalar

Madde	Bu Çalışma	Diğer Çalışma	Referanslar
BN	1,87	2,04	Riane (2010)
BP	3,00	3,10	Schroten (1998)
BA _s	3,10	3,35	Zaoui (2005)
BS _b	3,33	-----	-----
BB _i	4,39	-----	-----

Hesaplamalar sonucu Bor-V bileşikleri için elde edilen kırılma indis grafikleri Şekil 6.3’te gösterilmiştir. Görünür bölgede BN dışındaki Bor-V bileşiklerinin kırılma indis değerleri artmaktadır. Fakat BN, görünür bölgeyi de kapsayan enerji aralığında neredeyse sabit kırılma indis değerine sahiptir. Bu da gönderilen güneş ışığının kırılma dispersiyonunun en az BN bileşiğiyle yapılan malzemede olacağını gösterir. Ayrıca görünür bölgede kırıcılığı en düşük olan BN, en yüksek olan ise BBi bileşiğidir. Mor ötesi bölgesinde ise bileşiklerinin kırılma indislerinde, ani düşüşlerin olduğu gözlenmektedir.



Şekil 6.3. Bor-V bileşiklerinin $n(\omega)$ grafiği

6.3. Soğurma Katsayısı

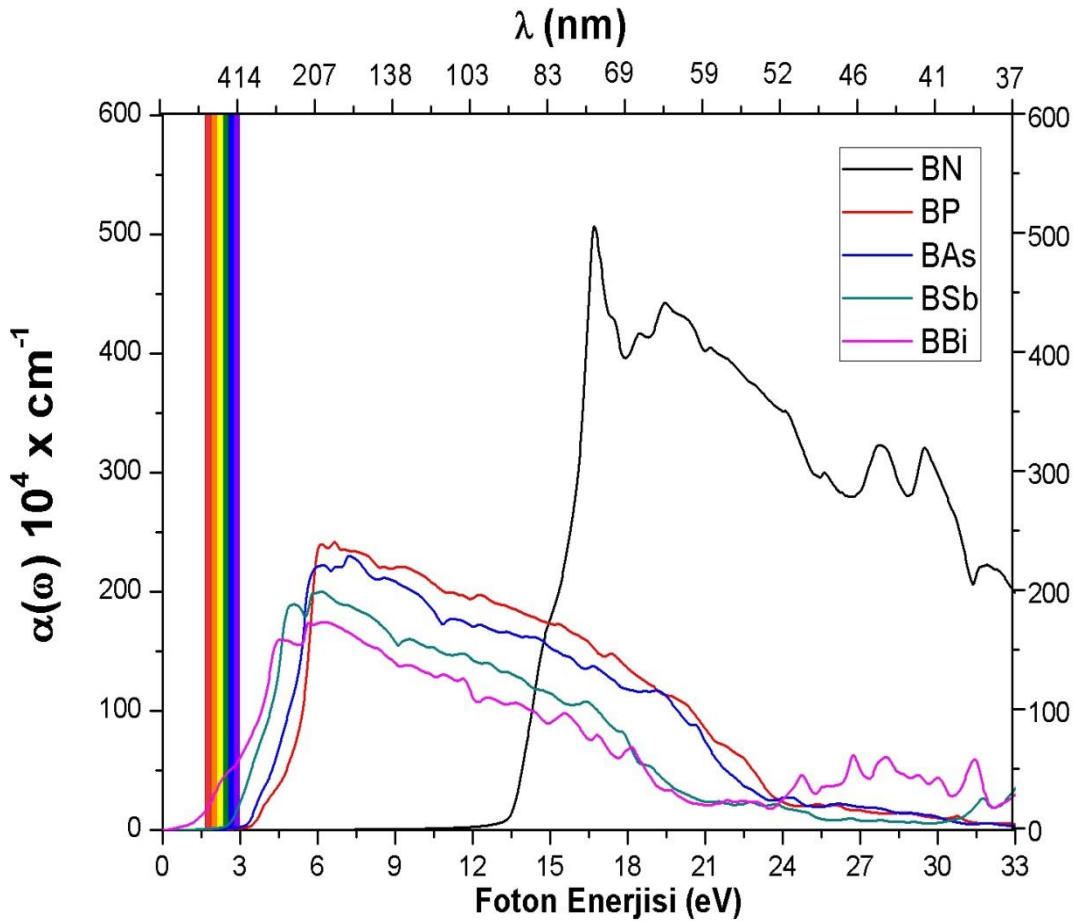
Soğurma katsayısı $\alpha(\omega)$, belirli bir ortamda, birim uzunlukta ilerleyen ışığın şiddetindeki azalma hakkında bilgi veren bir parametredir. Soğurma katsayısının kompleks dielektrik fonksiyonunun reel ve imajiner kısımlarına bağlı ifadesi 6.5 denkleminde verilmiştir.

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2\omega} \left[\sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} - \epsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (6.5)$$

Soğurma katsayısı yasak bant aralığıyla ve DOS'la ilişkili bir niceliktir. Bor-V bileşiklerinin soğurma katsayısı-enerji grafikleri Şekil 6.4'te verilmiştir. Soğurmanın başladığı bölgeler valans bandından iletim bandına optik soğurmaları temsil eder. Bu grafikte α 'nın ani yükseliş gösterdiği enerji bölgeleri vardır. Bu bölgelere soğurma kenarları denir. Eğer fotonun enerjisi soğurma kenarının enerjisinde ise α ani yükseliş gösterir. Bor-V bileşiklerinin soğurma kenar enerjileri BBi'den BN'ye

dođru artmıřtır. Bunun anlamı dıřuk enerji deđerlerinde BN sođurması BBi, BSb, BAs ve BP bileřiklerinden ok azdır. Bu da sođurma katsayısı ok dıřuk malzeme yapımında BN'nin kullanılabileceđini gosterir.

Yarı iletkenlerde ve yalıtkanlarda genellikle dıřuk enerji blgelerinde sođurma dıřuk olmaktadır. řekil 6.4'teki grafiđe bakıldıđında, gornr blgede BN haricindeki Bor-V bileřiklerinde azda olsa sođurmanın olduđu gorlmektedir. BN bileřiđinde ise uzak mor tesi blgelerinde sođurmanın olduđu; gornr blgede ve yakın mor tesi blgesinde sođurmanın olmadıđı gorlmektedir. Bu da atmosferde zararlı mor tesi ışınları BN'den yapılan malzemenin sođurabileceđini gostermektedir.



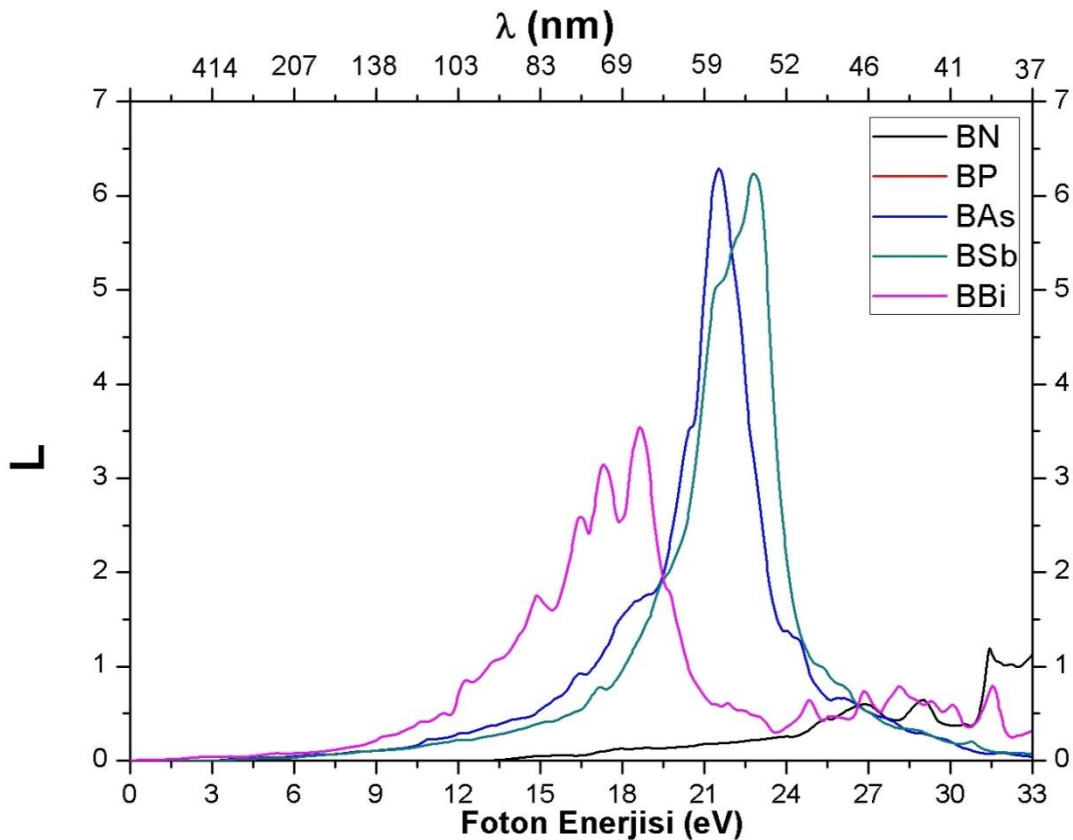
řekil 6.4. Bor-V bileřiklerinin $\alpha(\omega)$ grafiđi

6.4. Enerji Kayıp Fonksiyonu

Enerji kayıp fonksiyonu $L(\omega)$, bantlar arasında ilerleyen elektronların enerji kaybını tanımlar. $L(\omega)$, ϵ_1 'in sıfır ϵ_2 'nin minimuma yakın olduğu bölgelerde maksimuma yaklaşır. $L(\omega)$, fonksiyonunun reel ve imajiner kısımlarına bağlı ifadesi 6.6 denkleminde verilmiştir.

$$L(\omega) = -\text{Im}\left(\frac{1}{\epsilon}\right) = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} \quad (6.6)$$

Şekil 6.5'te Bor-V bileşiklerinin enerji kayıp fonksiyonlarının enerji ile değişimi gösterilmiştir. Grafikte maksimum piklerin olduğu bölgeler plazma frekansı olarak adlandırılır. Bu bölgeler valans elektronlarının kolektif titreşimleriyle ilişkilidir. Grafığe bakıldığında BP, BAs, BSb ve BBi için belirgin bir plazma frekansı varken BN için plazma frekans değerinin belirgin olmadığı anlaşılmaktadır. Grafikte Düşük dalga boylarında enerji kaybının daha fazla olduğu görülmektedir.



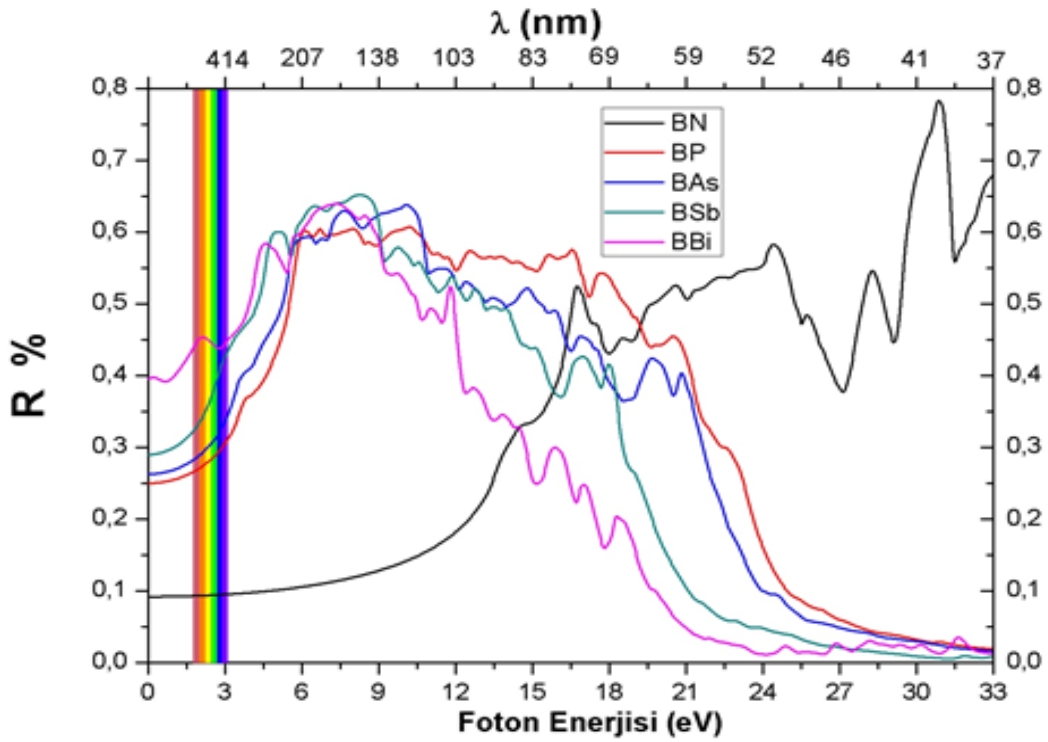
Şekil 6.5. Bor-V bileşiklerinin $L(\omega)$ grafiği

6.5. Yansıma Katsayısı

Yansıma katsayısı $R(\omega)$, bir maddenin ışığı hangi oranda yansıtacağı hakkında bilgi verir. Yarı iletkenlerde genellikle bu parametre, materyallerin elektronik bant yapılarının ayrıntılarına bağlıdır. Yansıma spektrumunu veren ifade denklem 6.7'de gösterilmiştir.

$$R(\omega) = \left(\frac{(n(\omega)-1)^2 + k(\omega)^2}{(n(\omega)+1)^2 + k(\omega)^2} \right) \quad (6.7)$$

Bor-V bileşikleri için elde edilen $R(\omega)$ grafiği Şekil 6.6'da verilmiştir. Grafikte her bir bileşik için birçok pik görülmektedir. Bu pikler, farklı yüksek simetri noktaları arasında bantlar arası geçişten kaynaklanmaktadır. Görünür bölgedeki yansıtıcılığı en yüksek olan BBi bileşiğidir. Bu da ışığı yansıtma özelliğinin yüksek olması istenen uygulamalar için uygun bir malzeme olduğunu gösterir. Görünür bölgede yansıtıcılığı en düşük olan BN bileşiğidir. BN'nin soğurma spektrumuna bakıldığında (Şekil 6.4), görünür bölgede neredeyse hiç soğurmanın olmadığı, mor ötesi ışıklarını yani göz için zararlı ışıkları ise kuvvetli soğurduğu görülmektedir. Bu durum BN bileşiğinin bu tür uygulamalarda kullanılabileceğini gösterir. Güneş gözlüğü camı buna iyi bir örnektir.



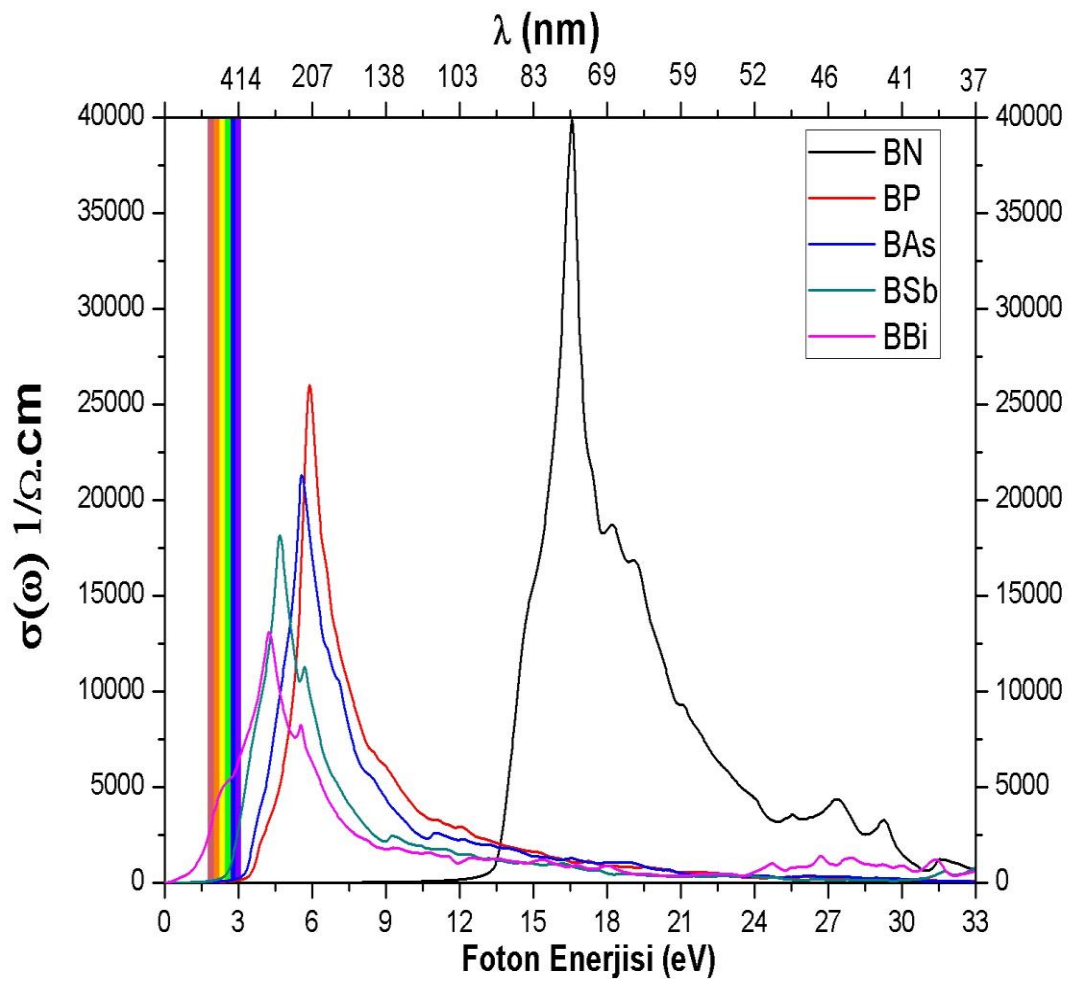
Şekil 6.6. Bor-V bileşiklerinin $R(\omega)$ grafiği.

6.6. Optiksel İletkenlik

Optiksel iletkenlik $\sigma(\omega)$, malzemenin değişen elektrik alanı altında sahip olduğu elektrik iletkenliğini açıklar. $\sigma(\omega)$ ile $\epsilon(\omega)$ arasındaki ilişki 6.8 denkleminde verilmiştir.

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi i \sigma(\omega)}{\omega} \quad (6.8)$$

Bor-V bileşikleri için elde edilen $\sigma(\omega)$ grafikleri Şekil 6.7'de verilmiştir. Optiksel iletkenlik spektrumundaki pikler, dolu ve boş seviyeler arasında elektrik-dipol geçişlerinden kaynaklanmaktadır. Burada BP, BAs, BSb ve BBi için görünür bölge dalga boylarında optiksel iletkenlikler daha fazla iken, BN bileşiğinin ise mor ötesi dalga boylarında optiksel iletkenliğinin fazla olduğu görülmektedir.



Şekil 6.7. Bor-V bileşiklerinin $\sigma(\omega)$ grafiği.

BÖLÜM 7. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tezde Bor-V grubu yarı iletkenler olarak bilinen BN, BP, BAs, BSb ve BBi yarı iletken bileşiklerinin yapısal, elektronik ve optiksel özellikleri yoğunluk fonksiyon teorisi temelli WIEN2k simülasyon programını kullanılarak incelenmiştir.

İlk olarak Bor-V tipi yarı iletkenlerin yapısal özellikleri araştırılmıştır. Burada Bor-V grubu yarı iletken bileşiklerinin en kararlı faz durumları elde edilmiştir. Bunun sonucunda bütün Bor-V grubu yarı iletken bileşiklerinin ZnS yapıda kristalleştiği sonucuna varılmıştır. Bu bileşikler için bütün hesaplamalarda, yapısal elektronik ve optiksel özelliklerin incelenmesi bu fazda olmuştur. Aynı zamanda bu bileşiklerin elastik ve termodinamik özellikleri de ele alınmıştır. Elde edilen sonuçların diğer deneysel ve teorik çalışmalarla karşılaştırması yapılmış ve uyum içinde olduğu görülmüştür. Yapısal özelliklerden elde edilen sonuçlardan bazılarının ilk kez ele alınmış olması teze özgünlük kazandırmıştır ve bundan sonra yapılacak teorik ve deneysel çalışmalara yol göstermesi açısından önem arz etmektedir.

Son olarak Bor-V grubu bileşiklerinin elektronik ve optiksel özellikleri ele alınmıştır. Elektronik özelliklerde, öncelikle bileşiklerin bant yapıları incelenmiştir. Daha sonra, bütün maddelerin toplam ve parçalı durum yoğunluğu grafiği tek tek ele alınmıştır. Elde edilen sonuçların diğer teorik ve deneysel sonuçlarla uyum içinde olduğu bulunmuştur. Optiksel özelliklerde Bor-V grubu bileşiklerinin, öncelikle optiksel dielektrik sabitleri tespit edilmiştir. Sonra bu sabitlerden türetilen diğer optiksel parametreler, bütün bileşikler için, elde edilmiştir. BSb ve BBi bileşiklerinin optiksel özellikleri ile ilgili yapılan literatür çalışmasında hiçbir bilgiye rastlanmamıştır. Bu özellikler ilk kez bu tezde bahsedilmiştir

Sonu olarak ise, Bor elementinin V-A grubu elementlerle yaptığı yarı iletken bileşiklerin yapısal, elektronik ve optiksel özellikleri deęişimini bir arada gösteren bir tez ortaya çıkmıştır. Bulunan sonuçların yarı iletken teknolojisine katkıda bulunacağı ümit edilmektedir. Aynı zamanda bu çalışmanın, incelenen ikili bileşiklerin yapılarını ve özelliklerini temel alarak oluşturulabilecek üçlü ve daha fazla elementli yarı iletken alaşımların özelliklerinin teorik ve deneysel olarak incelenmesine katkı yapacağı düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

AHMED, R., HASHEMIFAR, S.J., AKBARZADEH, H., AHMED, M., ALEEM, F., Ab initio study of structural and electronic properties of III-arsenide binary compounds, *Comp. Mater. Sci.* 39:580-586, 2007 a.

AHMED, R., ALEEM, F., HASHEMIF ARS., AKBARZADEH, H., First principles study of structural and electronic properties of different phases of boron nitride, *Physica B*, 400:297–306, 2007 b.

AMARA, K., SOUDINI, B., RACHED, D., BOUDALI, A., Molecular dynamics simulations of the structural, elastic and thermodynamic properties of cubic BBi, *Comp. Mat. Sci.*, 44:635-640, 2008.

ANDERSON, OL., A simplified method for calculating the debye temperature from elastic constants, *J. Phys. Chem. Solids*, 24:909-917, 1963.

ARBOUCHE, O., BELGOUMÈNE, B., SOUDINI, B., AZZAZ, Y., BENDAOU, H., AMARA, K., First-principles study on structural properties and phase stability of III-phosphide (BP, GaP, AlP and InP), *Comp. Mat. Sci.*, 47:685–692, 2010.

BAĞCI, S., III-N tipi Yarıiletkenler ile Berilyum Kalkojenlerin Yapısal Elektronik ve Titreşim Özelliklerinin İncelenmesi, Doktora, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 10, 2008.

BOREN., <http://www.boren.gov.tr/icerik.php?id=23>, Erişim Tarihi: 05.04.2013.

BORN, M., OPPENHEIMER, R., Zur Quantentheorie der Molekeln. *Ann. Phys.*, 84: 457-460, 1927.

BOUHAFS, B., AOURAG, H., FERHAT, M., CERTIER, M., Competition between the ionic and covalent character in the series of boron compounds BP, BAs, and BSb, *J. Phys. Condens. Matter*, 11:5781-5796, 1999.

BOUHAFS, B., AOURAG, H., CERTIER, M., Trends in band-gap pressure coefficients in boron compounds BP, BAs, and BSb, *J. Phys. Condens. Matter*, 12:5655-5668, 2000.

BOUHEMADOU, A., KHENATA, R., KHAROUBI, M., SEDDIK, T., RESHAK, AH., AL-DOURI, Y., FP-APW + lo calculations of the elastic properties in zinc-blende III-P compounds under pressure effects, *Comp. Mat. Sci.*, 45:474–479, 2009.

CHRISTENSEN, NE., GORCZYCA, I., Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure, *Phys. Rev. B*, 50:4397-4415, 1994.

COTTENIER, S., Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step by step introduction, Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, K.U.Leuven, Belgium, 2002.

CUI, S., FENG, W., HU, H., FENG, Z., WANG, Y., First principles studies of phase stability, electronic and elastic properties in BBi compound, *Comput. Mater. Sci.* 47:968–972, 2010.

BLAHA P., SCHWARZ K., LUITZ J., WIEN2k, Vienna University of Technology, 1997.

BLAHA, P., SCHWARZ, K., MADSEN, G., KVASNICKA, D., LUITZ, J., An Augmented Plane Wave plus Local orbital program for Calculating the Crystal Properties. 12th ed., WIEN, 2012.

CAMP, PEV., DOREN, VEV., DEVREESE, JT., Ground State and Electronic Properties of Silicon Carbide and Boron Nitride, *Phys. Stat. Sol. B*, 146:573-587, 1988.

CHIMOT, N., EVEN, J., FOLLIOT, H., LOUALICHE, S., Structural and electronic properties of BAs and $B_xGa_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}As$ alloys, *Physica B*, 364:263–272, 2005.

CHU, TL., HYSLOP, AE., Crystal Growth and Properties of Boron Monoarsenide, *J. Appl. Phys.*, 43:276-4, 1972.

DELIGOZ E., COLAKOGLU K., CIFTCI YO., The first principles study on the Boron antimony compound, *J. Phys. Chem. Sol.*, 68:482-489, 2007.

FATMI, M., GHEBOULI, B., GHEBOULIAND, MA., HIEBA, ZK., First-principles study of structural, elastic, electronic, lattice dynamic and optical properties of XN (X=Ga, Al and B) compounds under pressure, *Phys. Scr.*, 83:065702, 2011.

FERHAT, M., ZAOUI, A., Structural and electronic properties of III-V bismuth compounds, *Phys. Rev. B*, 73:115107-7, 2006.

FERMÍ, E., “A statistical method for determining some properties of the atom. I”, *Rend. Accad.*, 6: 602-7, 1927.

FERMÍ, E., “A statistical method for the determination of some properties of atoms. II. Application to the periodic system of the elements”, *Z. Phys.* 48: 73-79, 1928.

FINLAYSON, BA., SCRIVEN, LE., The Method of weighted residuals- a review, *Appl. Mech. Rev.*, 19:735-748, 1996.

FINE, ME., BROWN, LD., MARCUS, HL., Elastic constants versus melting temperature in metals, *Scripta Metallurgica*, 18 :951-956, 1984.

GARCÍA, A., COHEN, ML., First-principles ionicity scales. I. Charge asymmetry in the solid state, *Phys. Rev. B*, 47: 4215-4220, 1993.

GARRETT, D., *Borates: Handbook of Deposits, Processing, Properties and Use*, Academic Press, San Diego, 1998.

GOLIKOVA, OA., Boron and Boron-Based Semiconductors, *Phys. Status Solidi A*, 51:11-40, 1979.

GRIMSDITCH, M., ZOUBOULIS, ES., POLIAN, A., Elastic constants of boron nitride. *J. Appl. Phys.*, 76:832-3, 1994.

HARRISON, WA., *Elastic Structure and Properties of Solids*, Dover Publications, INC., New York, 1980.

HILL, R., The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate, *Proc. Phys. Soc. A*, 65:349-354, 1952.

HOHENBERG, P., KOHN, W., Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.* 136:B864-B867, 1964.

KLEINMAN, L., Deformation Potentials in Silicon. I. Uniaxial Strain, *Phys. Rev.*, 128:2614-2621 (1962).

KNITTLE, E., WENZCOVITCH, RM., JEANSLOZ, R., COHEN, ML., Experimental and theoretical equation of state of cubic boron nitride, *Nature*, 337:349-352, 1989.

KOHN, W., SHAM, LJ., Self-Consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.* 140:A1133-A1138, 1965.

KU, SM., Preparation and Properties of Boron Arsenides and Boron Arsenide-Gallium Arsenide Mixed Crystals, *J. Electrochem Soc.* 113:813, 1966.

KUMAR, V., JHA, V., SHRIVASTAVA, AK., Debye temperature and melting point of II-VI and III-V semiconductors, *Cryst. Res. Technol.*, 45:920-924, 2010.

LACHEBI, A., SEHIL, M., ABID, H., First-principles study of cubic $B_xIn_{1-x}N$ alloys, *Turk J. Phys.*, 33: 325 – 332, 2009.

LIDE, DR., *Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press, Boca toan, 80th ed., 1999.

MADLUNG, O., SCHULZ M., WEISS, H., *Landolt-Bornstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*. Springer, 2nd ed., New York, 1996.

MADOURI, D., FERHAT, M., How do electronic properties of conventional III–V semiconductors hold for the III–V boron bismuth BBi compound?, *Phys. Status Solidi B*, 242: 2859, 2005.

MERADJI, H., DRABLIA, S., GHEMID, S., BELKHIR, H., BOUHAFS, B., TADJER, A., First-principles elastic constants and electronic structure of BP, BAs, and BSb. *Phys. Status Solidi B*, 241:2881-2885, 2004.

MOHAMMAD, R., KATIRCOGLU, S., The structural and electronic properties of BAs and BP compounds and BP_xAs_{1-x} alloys, *J. Alloy. Compd.* 485:687-694, 2009.

MONKHORST, HJ., PARK, JD., Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B*, 13:5188-5192, 1976.

MORI-SANCHEZ, P., PERDAS, AM., LUANA, V., Polarity inversion in the electron density of BP crystal, *Phys. Rev. B*, 63:125103-4, 2001.

MURNAGHAN, FD., The compressibility of media under Extreme pressures. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 30:244-247, 1944.

PAULUS, B., FULDE P., STOLL H., Cohesive energies of cubic III-V semiconductors, *Phys. Rev. B*, 54: 2556, 1996.

PERDEW, JP., BURKE, K, ERNZERHOF. M., Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Let.*,77:3865-3868, 1996.

PERRI, JA., LAPLACA, S., POST, B., New group III-group V compounds: BP and Bas, *Acta. Crystallogr.*, 11:310, 1958.

REUSS, A., ANGEW, Z., *Math. Mech.*, 8:55, 1929.

SAIB, S., BOUARISSA, N., Density functional calculation of band-parameters for boron nitride at normal and high pressures, *J. Alloy Compd.* 448:11-16, 2008.

SEKKAL, W., BOUHAFS, B., AOURAG, H., CERTIER, M., Molecular-dynamics simulation of structural and thermodynamic properties of boron nitride, *J. Phys. Condens. Mat.*, 10:4975-4984, 1998.

SCHREIBER, E., ANDERSON, OL., SOGA, N., *Elastic Constants and Their Measurements*. 3th ed. New York: McGraw-Hill, 1973.

SCHROTEN, E, GEOSSENS A., SCHOONMAN., *J. Appl. Phys.*, 83 (3) 1660, 1998.

SINGH, S., SARWAN, M., Structural phase transition and high pressure elastic behavior of BX (X= Sb, Bi) compounds, *J. Opto. Adv. Mat.* 12:2106 – 2112, 2010.

SLATER, JC., *Energy Band Calculations by the Augmented Plane Wave Method*, *Ad. Quantum Chem.*,1:35-58, 1964.

SURH, MP., LOUIE, SG., COHEN, ML., Quasiparticle energies for cubic BN, BP, and Bas, *Phys. Rev. B*, 43:9126-9132, 1991.

SRIVASTAVA, G. P., *The physics of phonons*. Adam Hilger: Bristol, 1990.

RIANE, R., ZAOUI, A., MATAR, SF., ABDICHE, A., Pressure dependence of electronic and optical properties of Zinc-blende GaN, BN and their $B_{0.25}Ga_{0.75}N$ alloy, *Physica B* 405, 958-989, 2010.

TALWAR, DN., SOFRANKO, D., MOONEY, C., TALLO, S., Elastic, structural, bonding, and defect properties of zinc-blende BN, AlN, GaN, InN and their alloys, *Mater. Sci. Eng. B*, 90:269–277, 2002.

TAN, J., LI, Y., JI, G., Elastic constants and bulk modulus of semiconductors: Performance of plane-wave pseudopotential and local-density-approximation density functional theory, *Comp. Mat. Sci.*, 58:243–247, 2012.

TOUAT, D., FERHAT, M., ZAOUI, A., Dynamical behaviour in the boron III–V group: a first-principles study, *J. Phys. Condens. Mat.* 18:3647-3654, 2006.

THOMAS, LH., “The calculation of atomic fields”, *Proc. Cam. Phil. Soc.*, 23: 542-550, 1927.

VARSHNEY, D., JOSHI, G., VARSHNEY, M., SHRIYA, S., Pressure induced structural phase transition and elastic properties in BSb, AlSb, GaSb and InSb compounds, *Physica B*, 405:1663–1676, 2010.

VOIGT, W., *Lehrbuch der Kristallphysik*. Leipzig Berlin, Teubner BG, 1928.

WALLACE, DC., *Thermodynamics of Crystals*; New York: John Wiley, 1972.

WANG, SQ., YE, HQ., Plane-wave pseudopotential study on mechanical and electronic properties for IV and III-V crystalline phases with zinc-blende structure, *Phys. Rev. B*, 66:235111-7, 2002.

WANG, SQ., YE, HQ., First-principles study on elastic properties and phase stability of III–V compounds, *Phys. Status Solidi B*, 240:45-54, 2003.

WENTZCOVITCH, RM., COHEN, ML., LAM, PK., Theoretical study of BN, BP, and BAs at high pressures, *Phys. Rev. B*, 36:6058-6068, 1987.

WETTLING, W., WINDSCHEIF, J., Elastic constants and refractive index of boron phosphide, *Solid State Com.* 50:33-34, 1984.

WOOTEN, F., *Optical Properties of Solids*, Academic press, New York, 1972.

WYCKOFF, RWG., *Crystal Structures*, ROBERT, E., Krieger Publishing Company, 2nd ed. Malabar, FL, 1986.

XIA, H., RUOFF, AL., BP at megabar pressures and its equation of state to 110 GPa., J. App. Phys. 74:1660-3b, 1993.

ZAOUI, A., EL HAJ HASSAN F., Full potential linearized augmented plane wave calculations of structural and electronic properties of BN, BP, BAs and BSb, J. Phys. Condens. Mat. 13:253-262, 2001.

ZAOUI, A., KACIMI, S., YAKOUBI, A., ABBAR, B., Bouhafs Optical properties of BP, BAs and BSb compounds, under hydrostatic pressure, Physica B 367: 195–204, 2005.

ÖZGEÇMİŞ

Mehmet Üstündağ, 28.11.1982 de Manisa Akhisar'da doğdu. İlk ve orta eğitimini Akhisar'da tamamladı. Lise eğitimini Kütahya Simav'da tamamladı. 2000 yılında Simav Anadolu Öğretmen Lisesi'nden mezun oldu. Aynı yılda Boğaziçi Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Fizik Bölümü'ne girdi ve 2007 yılında mezun oldu. 2007-2010 yılları arasında özel kuruluşlarda öğretmen olarak çalıştı. 2011 yılında Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik anabilim dalında yüksek lisans yapmaya başladı. Yine aynı yıl içerisinde, Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nde araştırma görevlisi olarak göreve başladı. Halen araştırma görevlisi olarak burada görevine devam etmektedir.