



BBi_{1-x}M_x(M=N, P, As, Sb) Üçlü Alaşımlarının Düşük Konsantrasyon Değişimleri Altında Yapısal, Elastik, Termodinamik, Elektronik ve Optiksel Özelliklerinin İncelenerek Teknolojik Uygulama Alanlarının Araştırılması

Program Kodu: 1002

Proje No: 114F479

Proje Yürütücüsü:

Dr. Battal Gazi YALÇIN

Bursiyer(ler):

Mehmet Hüseyin ÖZCAN

OCAK 2016

ANKARA



ÖNSÖZ

Bu projede, $BBi1-xMx(M=N, P, As, Sb)$ üçlü alaşımlarının yapısal, elastik, termodinamik, elektronik ve optik gibi fiziksel özellikleri deneysel çalışmalara öncülük etmesi için düşük konsantrasyonlar ($x \sim \%3$) altında incelenmesi hedeflenmiştir.

Proje kapsamında ortaya çıkan ürünlerde şahsımla fikir birliği eden Doç. Dr. Sadık BAĞCI'ya, Yrd. Doç. Dr. Metin ASLAN'a ve Arş. Gör. Mehmet ÜSTÜNDAĞ'a teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca 1002-Hızlı Destek Programı kapsamında proje çalışmalarım için sağlamış olduğu destekten ötürü Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu'na (TÜBİTAK) teşekkürlerimi sunarım.



İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
TABLolar VE ŞEKİLLER LİSTESİ.....	iv
ÖZET.....	v
ABSTRACT.....	vi
1.SONUÇ RAPORU.....	1
1.1.Giriş.....	1
1.2.Literatür Özeti.....	1
1.3. Yöntem.....	2
1.3.1.Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi.....	2
1.3.2.Kohn-Sham Denklemleri.....	3
1.4.Bulgular ve Tartışma.....	6
1.4.1.Yapısal ve mekaniksel sonuçlar.....	6
1.4.2. Elektronik ve optiksel sonuçlar.....	13
KAYNAKLAR.....	17



TABLolar VE ŞEKİLLER LİSTE

Şekil 1. Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış diyagramı.....	4
Şekil 2. Çalışılan üçlü alaşımların (a) örgü sabiti (b) bulk modüllerinin konsantrasyona bağlı değişimleri.....	8
Şekil 3. $B\text{Bi}_{1-x}\text{N}_x$ üçlü alaşımının (a) hacim, (b) tetragonal ve (c) rhombohedral zorlanma değişimlerinin enerjiye göre değişimi.....	9
Şekil 4. Elastik sabitlerden elde edilen parametreler.....	10
Şekil 5. Üçlü alaşımların elde edilen reel ve imajiner dielektrik fonksiyonu.....	16
Y	
Tablo 1. $B\text{Bi}_{1-x}\text{N}_x$ üçlü alaşımının yapısal özellikleri ve diğer çalışmalar.....	7
Tablo 2. Hesaplanan elastik sabitler ve mekaniksel parametreler.....	11
Tablo 3. Çalışılan üçlü malzemeler için elde edilen yasak bant enerjisi.....	14



ÖZET

Alaşımlama, yasak bant enerjisi (E_g), denge durumu örgü sabiti (a_0) gibi parametrelerin kontrol edilebilirliği nedeniyle bant yapı mühendisliğinde büyük öneme sahiptir. Alaşım, mükemmel periyodik yapıya sahip ikili bileşiklerin ($A^{III}B^V$ veya $A^{II}B^{VI}$) kendi grup elementleriyle (veya uygun bağ yapısına sahip elementlerle) yer değiştirmesiyle oluşturulur. Günümüzde, ikili bileşikler yardımıyla elde edilen üçlü ($A^{III}B^{V_{1-x}}C^{V_x}$) ve dördü alaşımlara ($A^{III}_x B^{III}_{1-x} C^{V_y} C^{V_{1-y}}$) sıkça rastlamak mümkündür. Küçük E_g 'ye sahip yarıiletkenlerle ($BBi^{Eg} \sim 1eV$) büyük E_g 'ye sahip yarıiletkenlerin ($BN^{Eg} \sim 6 eV$) alaşımlanması, elektro-manyetik spektrumun mor ötesinden (UV) kızıl ötesine (IR) kadar geniş bir frekans aralığında çalışabilecek aygıt üretimi için elverişli sistemlerin elde edilmesine olanak sağlar. Bu kapsamda B-Bi içeren $BBi_{1-x}M_x$ ($M=N, P, As, Sb$) üçlü alaşımlarının temel özelliklerinin araştırılmasının bilim dünyasına yenilikler katacağı düşünülmektedir. Proje konusu olarak $BBi_{1-x}M_x$ ($M=N, P, As, Sb$) üçlü alaşımlarının yapısal, elastik, termodinamik, elektronik ve optik gibi fiziksel özellikleri deneysel çalışmalara öncülük etmesi için düşük konsantrasyonlar ($x \sim \%3$) altında incelenecektir. Projede çalışılacak üçlü alaşımların tüm özelliklerinin ilk kez araştırılacak olmaları projenin özgünlüğüne büyük katkı sağlayacaktır. Böylece proje sonunda elde edilecek bulguların deneysel çalışmalara yol gösterici olacağı düşünülmektedir. $BBi_{1-x}M_x$ üçlü alaşımlarının fiziksel özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi 'Density Functional Theory' (DFT) kullanılarak araştırılacaktır. Teori kapsamında Khon-Sham eşitliklerini çözmek için tüm potansiyel (lineerleştirilmiş) genişletilmiş düzlem-dalga ve lokal orbitaller 'Full Potential (Linearized) Augmented Plane-Wave+Local Orbital' [FP-(L)APW+lo] temel kümesini kullanan WIEN2k simülasyon programı paketi kullanılacaktır. DFT'de bilinen en büyük problem yarıiletkenlerin yasak bant aralıklarının deneysel çalışmalara kıyasen %60-80 hata oranına sahip olmasıdır. WIEN2k'da kullanılabilen modifiye edilmiş Berke-Johnson (mBJ)-potansiyeli kullanılmasının E_g 'yi deneysel verilerle kıyaslanabilir düzeyde (%5-10 hata payı) iyileştirdiği görülmektedir. Bu nedenle projede hesaplamaların doğruluğunu arttırmak için WIEN2k programı seçilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Yoğunluk fonksiyonel teorisi, WIEN2k, B-Bi-V alaşımları, Elektronik özellikler, Optik özellikler, Termal özellikler



ABSTRACT

Alloying has great significance in the band structure engineering due to the controllability of parameters such as forbidden band energy (E_g) and ground state lattice parameter (a_0). Alloy is generated by replacing with their group element (or accordance with the bond structure element) of perfectly periodic structure of binary compounds ($A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ or $A^{\text{II}}B^{\text{VI}}$). It is possible to come across nowadays often with ternary ($A^{\text{III}}B^{\text{V}}_{1-x}C^{\text{V}}_x$) and quaternary ($A^{\text{III}}_x B^{\text{III}}_{1-x} C^{\text{V}}_y C^{\text{V}}_{1-y}$) alloys with the aid of binary compounds. Alloying of semiconductor with small ($B\text{Bi}^{E_g} \sim 1\text{eV}$) and large ($B\text{N}^{E_g} \sim 6\text{eV}$) E_g allows obtaining favorable system in a wide frequency range of the electromagnetic spectrum from ultraviolet (UV) to infrared (IR) for manufacturing devices. In this context, investigation of key features of ternary alloys $B\text{Bi}_{1-x}\text{M}_x$ ($M=\text{N}, \text{P}, \text{As}, \text{Sb}$) comprising B-Bi will add innovation to the world of science. As the project subject, the physical properties of ternary alloys, such as structural, elastic, thermodynamics, electronic and optics, $B\text{Bi}_{1-x}\text{M}_x$ ($M=\text{N}, \text{P}, \text{As}, \text{Sb}$) will be examined under a low concentration ($\sim 3\%$) to lead to experimental studies. All of the physical properties of ternary alloys are investigated for the first time by means of this project. The physical properties of ternary alloys $B\text{Bi}_{1-x}\text{M}_x$ will be investigated by means of WIEN2k software package, which is used the Full Potential (Linearized) Augmented Plane-Wave+Local Orbital [FP-(L)APW+lo] basic cluster for solving the Khon-Sham equations based on Density Functional Theory (DFT). The biggest problem is known in DFT that, it has 60-80% error rate in comparison with the experimental study of semiconductor forbidden band energy. Using modified Berke-Johnson (mBJ) potential, used in WIEN2k, results of semiconductor E_g appear to improve comparable (5-10% error rate) with the experimental data. In this respect, WIEN2k software package was selected to improve the accuracy of the calculations.

Keywords: Density functional theory, WIEN2k, BBi-V alloys, Electronic properties, Optical properties, Thermal Properties



1.SONUÇ RAPORU

1.1.Giriş

III-V yarıiletken bileşikler ve alaşımlar üzerine yapılan çalışmalar son yarım yüzyıldır hem teorik hem de deneysel olarak devam etmektedir. Epitaksiyel büyütme tekniklerinin (MOVPE, MBE) gelişmesiyle bu bileşiklerin araştırılmasına yeni yollar açılmıştır. Yarıiletkenler, hem teknolojik hem de ekonomik bakımdan büyük öneme sahiptirler. Yarıiletkenlerin güvenilir elektronik özelliklerinin incelenmesi seri üretimde de çok önemli yer tutmaktadır. Ayrıca, bileşik yarıiletkenler elektrikten ışık üretiminde ve ışıktan da tekrar elektrik üretiminde çok verimli olmaları, yarıiletken lazerler, dedektörler ve LED yapımında anahtar malzeme olmalarına olanak sağlamaktadır. Sonuç olarak, teknolojide çok önemli yer tutan bu materyallerin temel özelliklerini incelemek, onlar üzerine yapılacak olan uygulamalara büyük katkı sağlayacaktır.

1.2.Literatür Özeti

Projenin ana iskeletini periyodik tabloda III-A grubunun birinci elementi olan Bor ve V-A grubunun elementleri N, P, As, Sb ve Bi ile oluşturulan BN, BP, BAs, BSb ve BBi ikili bileşikler oluşturacaktır. Bilim dünyasında III-V grubu bileşikler üzerine yapılan birçok deneysel ve teorik çalışmalar bu bileşiklerin taban durumunda Çinko-Sülfür (ZnS) kristal fazına sahip olduklarını tespit etmişlerdir. Ustundag ve arkadaşları Ustundag vd. (2014) 2014 yılında BX(X=N, P, As, Sb ve Bi) bileşiklerinin ZnS, Wurt-Zite (WZ) ve NaCl fazlarını inceleyerek bu bileşiklerin taban durumu fazının ZnS yapıda olduğunu göstermişlerdir. Proje kapsamında çalışılan BN (Ustundag vd., 2014; Wentorf 1957; Wentzcovitch vd., 1986), BP (Ustundag vd.,2014; Wentzcovitch vd,1986), BAs (Ustundag vd.,2014; Surh vd,1991; Wentzcovitch,1987), BSb (Ustundag vd., 2014; Wang vd.,2003), ve BBi (Ustundag vd., 2014; Ferhat vd., 2006) yarıiletken bileşiklerinin ZnS kristal fazına sahip oldukları başka deneysel ve teorik çalışmalarla da tespit edilmiştir. . 1986 yılında Wentzcovitch ve arkadaşları tarafından BN ve BP yarıiletkenlerinin hemen hemen elmasa yakın olağanüstü sertliklerini, yüksek erime noktalarını ve termal karakteristik özelliklerini tespit etmişlerdir Wentzcovitch vd.(1986). Özellikle BN yarıiletkenin hem opto-elektronik alanda hem de temel malzeme bilimi uygulamalarında çok büyük bir öneme sahip olduğu görülmüştür (Wentzcovitch., 1986; Geisz vd., 2000; Sanjurjo vd., 1983; Knittle vd., 1989; Karch vd.,1997). 1989 yılında, Nature dergisinde Knittle ve arkadaşları Knittle vd.(1989) kübik BN yarıiletkenin sahip olduğu sertliğin hem deneysel hem de teorik olarak elmasa çok yakın olduğunu bulmuşlardır. Diğer

taftan sentezlenmesi oldukça zor olan BAs yarıiletkeninin elastik, elektronik ve optik özellikleri birçok deneysel ve teorik çalışmalar yapılarak (Surh vd., 1991; Wentzcovitch vd., 1987; Hart vd.,2000; Szwacki vd., 2001; Chu vd., 1972) araştırılmıştır. . Elastik sabitler yapısal kararlılığı, katının mekanik özelliklerini ve uygulanan kuvvete karşı verilen tepkiyi tanımlar ve malzeme üzerine uygulanan kuvvet hakkında çok önemli bilgiler içerir Cui vd. (1972). Elastik özellikler kapsamında elastik sabitler (C_{11} , C_{12} ve C_{44}) hesaplanacaktır. Literatürde proje kapsamında incelenen B içeren ikili bileşikler mekanik kararlılık şartlarını sağladıkları görülmüştür (Shimada vd., 1998; Deligoz vd., 2007; Grimsditch vd., 1994; Ferhat vd., 2006). 1987 yılında Wentzcovitch Wentzcovitch vd. (1987) ve 1999 yılında Bouhafs Bouhafs vd. (1999) BP için ZnS-NiAs geçiş basıncını 160 GPa olarak tespit etmişlerdir. Wang ve Ye'nin fizik alanında prestijli dergilerden biri olan Physical Review B'de 2002 yılında yaptıkları çalışma BBi dahil bu beş ikili bileşiğin dolaylı bant aralığına sahip olduklarını hesaplamışlardır Wang vd.(2002) 2006 yılında ise Ferhat ve Zaoui yine aynı dergide BBi bileşiğinin Γ noktasında doğrudan bant aralığına sahip olduğunu belirlemişlerdir Ferhat vd. (2006)

1.3. Yöntem

Deneysel çalışmalara öncülük etmesi hedeflenen $BBi_{1-x}M_x$ üçlü alaşımlarının fiziksel özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisine 'Density Functional Theory' (DFT) dayalı Khon-Sham eşitliklerini çözmek için tüm potansiyel (lineerleştirilmiş) genişletilmiş düzlem-dalga ve lokal orbitaller 'Full Potential (Linearized) Augmented Plane-Wave+Local Orbital' [FP-(L)APW+lo] temel kümesini kullanan WIEN2k simülasyon programıyla araştırılacaktır. Bu kısımda öncelikle DFT hakkında temel bilgiler verilecek daha sonra yapısal, elastik, termodinamik, elektronik ve optiksel özellikler için wien2k programı kullanılarak elde edilen hesaplamalar tartışılacaktır.

1.3.1.Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

Teorik modellemeler özellikle kristal yapı halindeki katı cisimlerin yapısal, elektronik ve optiksel özelliklerinin analizinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu teorik modellerden biri de Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisine "Density Functional Theory" (DFT) dayalı modellemedir. Bu teorik modelleme özellikle kristal yapı halindeki katı cisimlerin yapısal ve elektronik analizinde yaygın olarak kullanılmaktadır. DFT, diğer çok-cisim teorilerine göre hem daha basit, hem de nicel olarak doğru sonuçlar veren güçlü bir tekniktir. Bu modelleme ile yapılan hesaplamalar deneysel yöntemlerle yapılan hesaplamalar ile uyum içinde olmaktadır.

Temeli yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan *ab initio* teorileri, kristallerin yapısal, elektronik ve dinamik özelliklerini araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilmeleri ve bu metotların hesaplanmasında sadece atom numarası ve kristal yapıya ihtiyaç duyulmasıdır. DFT, elektron yük yoğunluğunu $n(\vec{r})$ temel değişken kabul ederek çok elektrona sahip sistemlerin taban durumu özelliklerini belirler. Ayrıca, katıların elektronik yapılarını başarılı şekilde hesaplayabilen çok önemli bir yaklaşımdır. DFT temel değişken olarak elektron yoğunluğunu kullandığından dolayı, çok büyük sistemleri bile hesaplama olanağına sahiptir. Yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temelleri, 1920'lerde Thomas ve Fermi'nin yaptığı çalışmaları temel alan Hohenberg-Kohn Hohenberg vd.(1964) ve Kohn-Sham Kohn vd. (1965) tarafından atılmıştır.

1.3.2.Kohn-Sham Denklemleri

Kohn – Sham 1965 yılında elde ettikleri eşitliklerle, hem taban durumu enerjisini minimum yapan $n(\vec{r})$ temel hal elektronik yük yoğunluğunu tanımlamışlardır hem de dalga fonksiyonu ile ilgili bilgi olmadığından $n(\vec{r})$ yoğunluklu birbirleriyle etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistemin kinetik enerjisi hakkında bilgi edinmişlerdir.

Aşağıda gösterilen Eş.1, Eş.2 ve Eş.3 denklemlerine Kohn-Sham denklemleri denir.

$$H_{eff}\psi_i = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_{eff}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \sum_j^N \epsilon_j \psi_j(\vec{r})$$

(1)

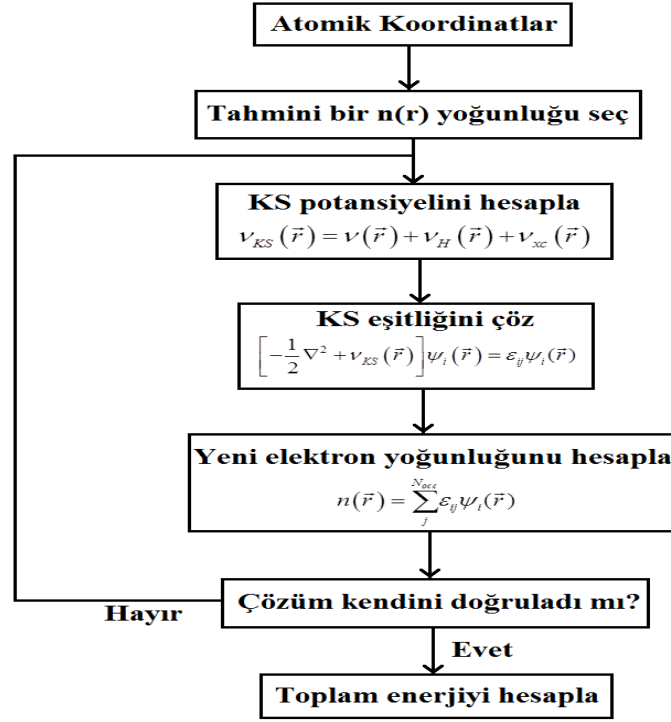
$$v_{eff}(\vec{r}) = v(\vec{r}) + \frac{\delta J[n]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\vec{r})} = v(\vec{r}) + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + v_{xc}(\vec{r}) = v(\vec{r}) + v_H(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r})$$

(2)

$$n(\vec{r}) = \sum_j^N |\psi_j(\vec{r})|^2$$

(3)

Eş.1'de gösterilen köşeli parantez içindeki ifade Kohn-Sham Hamiltoniyeni (H_{KS}) olarak bilinir. Bu denklemler kendini doğrularak çözülebilmektedir. Bu yüzden bunlar kendini doğrulayabilen Kohn-Sham eşitlikleri olarak bilinirler. Bu doğrulama işlemi Şekil 1'de verilen algoritma diyagramıyla açık şekilde gösterilmiştir (Ming vd., 1995; Payne vd., 1992).



Şekil 1. Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış diyagramı

Eş. 1'de yer alan $v_{eff}(\vec{r})$ etkin potansiyel ifadesi değiş-tokuş korelasyon enerjisi $E_{xc}(n)$ $E_{xc}[n]$ cinsinden Eş. 2'de gösterilmiştir. $E_{xc}(n)$ ifadesi daha açık olarak aşağıdaki ifadeyle belirtilebilir:

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

(4)

Yukarıda ifade edilen KS denklemleri incelendiğinde $E_{xc}(n)$ değiş-tokuş korelasyon enerjisi için bir belirsizlik olduğu görülmektedir. $E_{xc}(n)$ niceliğinin hesaplanması büyük güçlükler içerir ve halen DFT'nin geliştirilmesinde temel rol oynar. Eş.4 ile verilen değiş-tokuş korelasyon enerjisini elde edebilmenin bir çok yolu vardır. En yaygın olarak kullanılan yerel yoğunluk yaklaşımı "Local Density Approximation" (LDA) ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı "Generalized Gradient Approximation" (GGA)'dır.

Elektronik hesaplamalarda kullanılması planlanan mBJ potansiyeli yardımıyla yarıiletkenler için DFT'de meydana gelen yasak bant aralığı probleminin çözümünde büyük oranda doğrulayıcı sonuçlara sahiptir (Tran vd., 2009; Koller vd., 2001; Koller vd., 2012). MBJ potansiyeli, standart DFT bazlı metotların geliştirilmesiyle elde edilen Becke-Jonhson potansiyelinin modifiye edilmiş bir versiyonudur. MBJ potansiyeli aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$v_{x,\sigma}^{\text{mBJ}}(\mathbf{r}) = c v_{x,\sigma}^{\text{BR}}(\mathbf{r}) + (3c-2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{6}} \sqrt{\frac{\tau_{\sigma}(\mathbf{r})}{\rho_{\sigma}(\mathbf{r})}}$$

(5)

burada ρ_{σ} elektron yoğunluğu, τ_{σ} kinetik enerji ve $v_{x,\sigma}^{\text{BR}}$ ifadesi ise Becke-Roussel potansiyelidir. 'c' ise sisteme bağlı bir parametredir. c'nin 1'e eşit olması orijinal Becke-Johnson potansiyelini ifade eder. Kristal malzemeler için 2009 yılında Tran ve Blaha Tran vd. (2009) 'c' için aşağıdaki deneysel bağıntıyı önerdiler:

$$c = \alpha + \beta \frac{1}{V_{\text{cell}}} \frac{\int \rho_{\sigma}(\mathbf{r}) d^3r}{\rho_{\sigma}(\mathbf{r})}$$

(6)

burada V_{cell} birim hücre hacmi, $\alpha = -0.012$ and $\beta = 1.023 \text{ bohr}^{1/2}$ ifadeleri ise deneysel değerlerden Tran vd. (2009) elde edilen fit parametreleridir. MBJ için önemli olan diğer bir nokta ise bu metot sadece bir fonksiyoneli temsil eder, bir değiş-tokuş korelasyon enerjisi değildir.

Kristal yapıya sahip malzemelerin bant yapılarının daha iyi anlaşılabilmesi için optiksel dielektrik spektrumunun incelenmesi gerekir. Dielektrik fonksiyonu, fotonlarla elektronların birbiri arasındaki etkileşimi gösteren elektromanyetik radyasyona (ışınım, ışıma) karşı sistemin tepkisini tanımlamak için kullanılır.

Bir malzemenin optiksel özellikleri frekansa bağlı olan kompleks dielektrik fonksiyonuyla $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ tanımlanır. Burada $\epsilon_1(\omega)$ ve $\epsilon_2(\omega)$ kompleks dielektrik fonksiyonun sırayla reel ve imajiner kısımlarını oluştururlar.

Dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı, $\epsilon_2(\omega)$, dolu ve boş dalga fonksiyonları arasındaki momentum matris elemanlarıyla aşağıda verilen denklemlerle hesaplanır Kramers vd. (1927) :

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi m^2 \omega^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{n}} |\langle \mathbf{k} | \mathbf{p} | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | \mathbf{p} | \mathbf{m} \rangle| f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{n})] \delta(E_{\mathbf{k}n} - E_{\mathbf{m}} - \omega)$$

(7)

Burada p , n ve n' seviyeleri arasındaki momentum matris elemanı, e ; elektron yükü, m ; elektronun kütlesi; V ; kristalin hacmi, $f(kn)$; Fermi dağılım fonksiyonu, kn ise k dalga fonksiyonuna sahip n . özdeğere karşılık gelen kristal dalga fonksiyonudur.

Dielektrik fonksiyonun reel kısmı, $\epsilon_1(\omega)$, Kramer-Kronig bağıntıları (Kramer vd., 1927; Kronig vd., 1926) kullanılarak imajiner kısımdan elde edilir:

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

(8)

1.4.Bulgular ve Tartışma

1.4.1.Yapısal ve mekaniksel sonuçlar

Günümüzde ikili bileşikler kullanılarak elde edilen üçlü ve dördü alaşımlar hem teknolojik hem de ticari açıdan çok büyük önem kazanmıştır. Alaşım oluşturma; yasak bant enerjisi, örgü sabiti, kırılma indisi gibi parametrelerin kontrol edilebilirliği nedeniyle bant yapı mühendisliğinde önemli bir daldır. Yarıiletken alaşımlama, yarıiletken bant aralığı ve diğer parametre değerlerini ayarlayarak geniş uygulama alanlarına yönelik yarıiletken cihazların üretilebilmesini sağlar. Çok geniş bir uygulama alanını kapsadığı ve gelecekte yeni uygulama alanları açılması beklendiği için özellikle III-V grubu yarıiletken alaşımlar günümüzde esaslı bir şekilde araştırılmaya devam etmektedir. Genellikle alaşımlar, kuantum kuyuları gibi düşük boyutlu elektronik sistemlerde yaygın olarak kullanılırlar.

Bu aşamada öncelikle çalışılan malzemelerin kristal yapıları tayin edildi. Wurtzite, NaCl ve ZnS kristal yapıları karşılaştırıldı. ZnS kristal yapıya sahip BBiM ikili yarıiletken bileşiklerin ve üçlü alaşımların yapısal özelliklerinin incelenmesinde ilk olarak her materyalin örgü sabitlerinin tayini yapıldı. Bu hesaplamalar yapılırken denge durumu civarında farklı örgü sabitleri için enerji değerleri hesaplandı ve bulunan enerji değerleri örgü sabitine göre grafiğe aktarıldı. Grafiklerin her birinde belli bir örgü sabiti değeri için enerjinin minimum olduğu görüldü. Enerjinin minimum olduğu değere karşılık gelen örgü sabiti, denge durumu örgü sabiti olarak bulundu. Proje kapsamında yapısal özellikler için çalışılacak potansiyel olan Wu-Cohen-Tran (WCT)-GGA potansiyelinin LDA ve GGA ile kıyaslanması Tablo 1'de temsili olarak BBi_{1-x}N_x üçlü alaşımı için görülmektedir. Elde edilen taban durumu örgü parametresi (a_0) diğer fiziksel özelliklerin araştırılmasında kullanılacağı için 'olabildiğince' literatürle

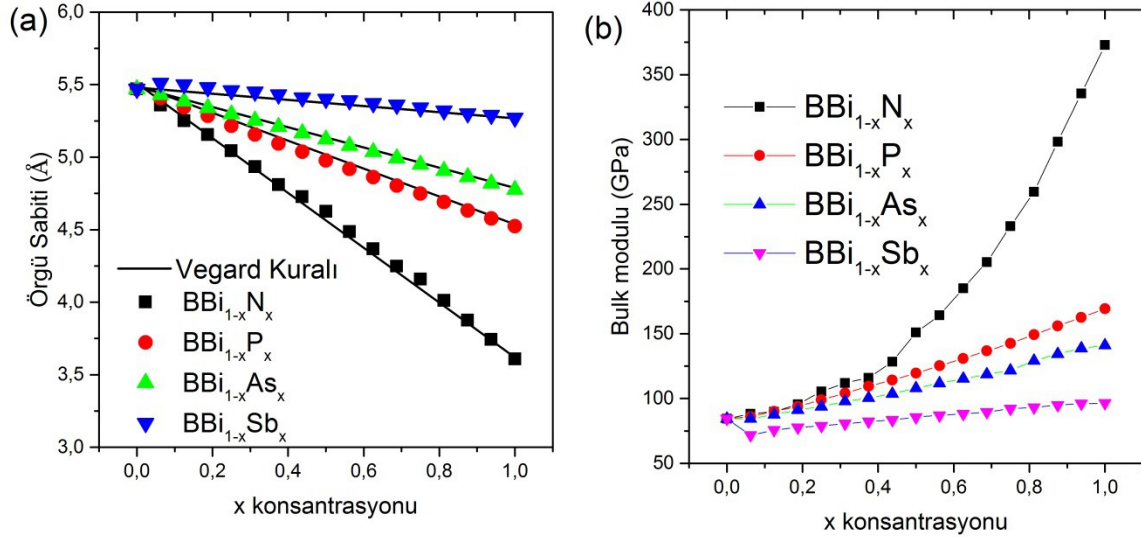
uyuşması son derece önemlidir. Bu kapsamda, aynı yakınsama kriterleri altında elde edilen sonuçlar WCT-GGA potansiyelinin daha başarılı olduğu Tablo 1’de açıkça görülmektedir. Bu yüzden yapılan hesaplamalarda WCT-GGA korelasyon potansiyeli tercih edilmiştir.

Tablo 1. $\text{BBi}_{1-x}\text{N}_x$ üçlü alaşımının yapısal özellikleri ve diğer çalışmalar.

Material ($\text{BBi}_{1-x}\text{N}_x$)	a_0 (Å)	B_0 (GPa)	Ref.
BBi	5.470	84.370	Bu çalışma (WC)
	5.437	88.210	Bu çalışma (LDA)
	5.526	72.280	Bu çalışma (GGA)
	5.531	66.846	GGA Ustundag vd. (2015)
	5.529	72.209	GGA Ferhat vd. (2008)
	5.416	86.270	LDA Ferhat vd. (2008)
$\text{BBi}_{0.9375}\text{N}_{0.0625}$	5.359	88.270	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.875}\text{N}_{0.125}$	5.251	89.774	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.8125}\text{N}_{0.1875}$	5.155	95.473	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.75}\text{N}_{0.25}$	5.043	105.425	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.6875}\text{N}_{0.3125}$	4.934	111.98	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.625}\text{N}_{0.375}$	4.810	115.961	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.5625}\text{N}_{0.4375}$	4.727	128.457	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.50}\text{N}_{0.50}$	4.627	150.946	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.4375}\text{N}_{0.5625}$	4.486	164.154	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.375}\text{N}_{0.625}$	4.368	185.124	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.3125}\text{N}_{0.6875}$	4.248	205.252	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.25}\text{N}_{0.75}$	4.159	233.157	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.1875}\text{N}_{0.8125}$	4.012	259.544	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.125}\text{N}_{0.875}$	3.875	298.317	Bu çalışma (WC)
$\text{BBi}_{0.0625}\text{N}_{0.9375}$	3.743	335.388	Bu çalışma (WC)
BN	3.610	372.881	Bu çalışma (WC)
	3.583	401.499	Bu çalışma (LDA)
	3.628	383.666	Bu çalışma (GGA)
	3.615	369.000	Exp. (Wentorf vd., 1957;
	3.627	375.923	Bundy vd., 1963)
	3.570	398.740	GGA Ustundag vd. (2015) LDA Saib vd. (2008)

Çalışılan üçlü alaşımların örgü sabiti ve bulk modüllerinin konsantrasyona bağlı değişimleri Şekil 2a ve Şekil 2b’de gösterilmektedir. Yapılan çalışmalar incelendiğinde örgü parametresinin (a_0) atom numaralarıyla doğru orantılı olduğu gözükmektedir. Çalışılan malzemelerin örgü parametreleri M elementinin atom numaraları arttıkça a_0 ’nın da arttığı gözlenmiştir. Bu artış Şekil 2a’da açıkça görülmektedir. Örgü parametresinin büyümesi yapının hacminin artmasına sebep olacaktır. Bir sistemin yoğunluğu hacimle ters orantılı olduğundan hacmi büyük olanın daha küçük yoğunluğa sahip olacağı anlamına gelmektedir.

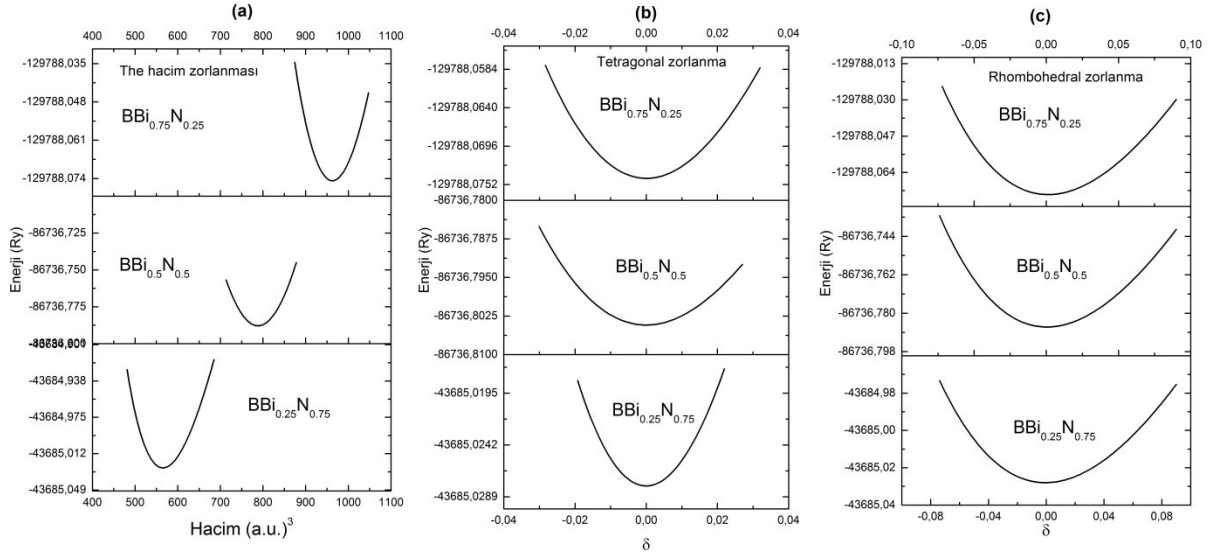
Yoğunluğun azalması ise yapının sahip olduğu sertlik parametresiyle açıklanabilir. İncelenen malzemelerin sertliği, bulk modülü hesaplanarak elde edilebilir. Bu sonuçlara göre en yüksek sertliğe yani en düşük hacme en yüksek yoğunluğa sahip kristalin BN ve en düşük sertliğe yani en yüksek hacme en düşük yoğunluğa sahip kristalinde BBi olduğu söylenebilir. Bulk modülünün BBi'dan BM'ye doğru gidildikçe arttığı Şekil 2b'den açıkça görülmektedir.



Şekil 2.Çalışılan üçlü alaşımların (a) örgü sabiti (b) bulk modüllerinin konsantrasyona bağlı değişimleri

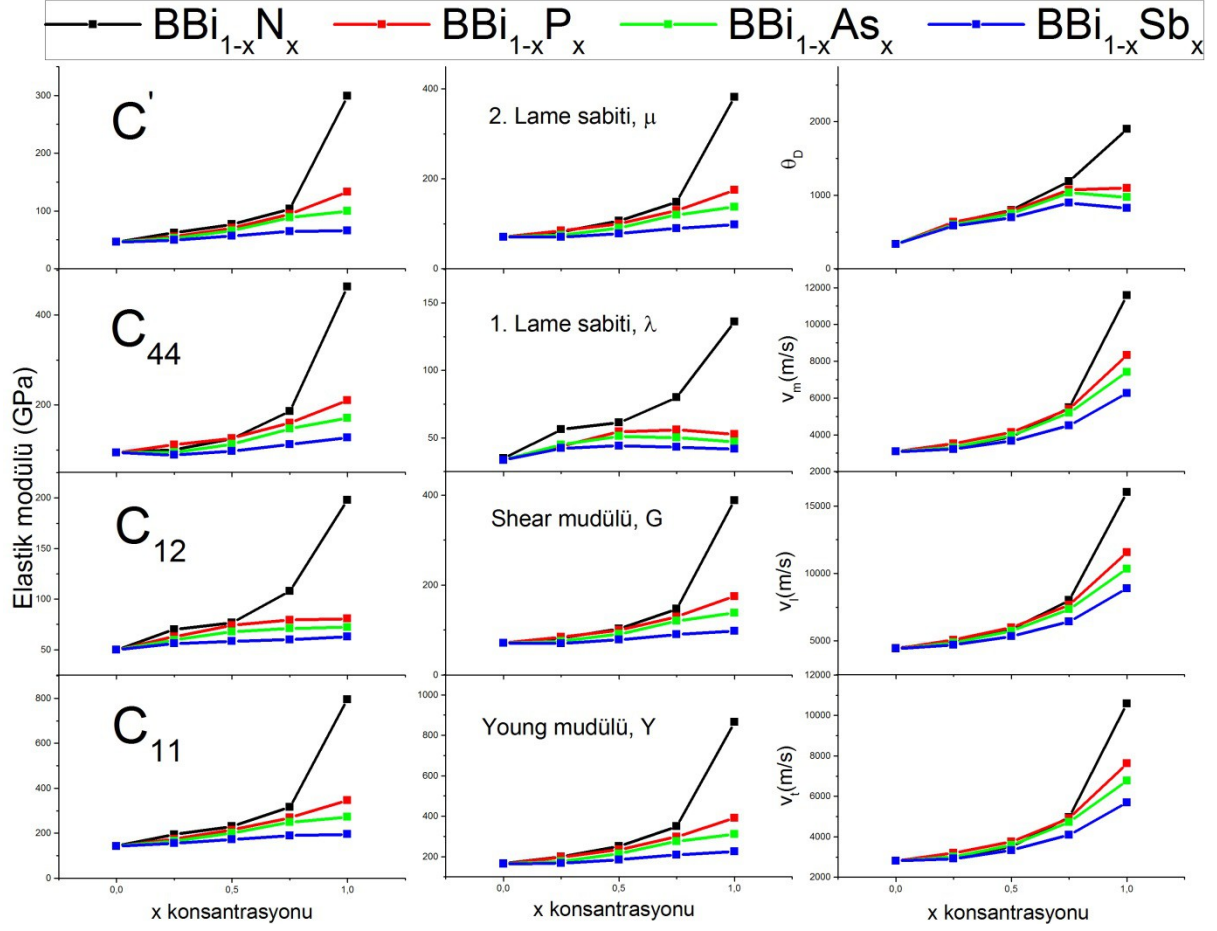
Elastik sabitler; sıkışma, gerilme, basınç ve zor altındaki malzemelerin üzerlerindeki zorlanmanın kaldırılması sonucu tekrar eski haline dönmesinde ortaya çıkan özelliklerin tanımlanmasında önemli parametrelerdir. Elastik sabitleri, katıların dayanıklılık ve mekanik özellikleri hakkında bilgiler içerir. Ayrıca uygulanan kuvvete karşı verilen tepkiyi tanımlanmasında rol oynarlar ve malzeme üzerine uygulanan kuvvet hakkında çok önemli bilgiler içerirler. Elastik sabitler, C_{klmn} , (burada k,l,m,n kartezyen bileşenler) bir sistemin toplam enerjisinin Taylor serisine açılması yardımıyla tanımlanır. Yirmi bir tane bağımsız elastik sabiti vardır, fakat kübik örgü simetrisi bu sayıyı üçe düşürür (C_{11} , C_{12} ve C_{44}). Bu üç elastik sabit kübik bir kristalin esneklik özelliğini tanımlamada yeterli olur. Bu sabitleri belirleyebilmek için üç tane eşitliğe ihtiyaç duyulmaktadır. Burada üç çeşit zorlanma (strain) dikkate alınmaktadır: I. Değişen hacim zorlanması (volume change strain) II. Sabit hacimli tetragonal zorlanma (volume conserved tetragonal strain) III. Rhombohedral kayma zorlanması (rhombohedral shear strain). Şekil 3'de bu üç zorlanmayı temsili olarak BBi_{1-x}N_x üçlü alaşımı için Enerji-strain (zorlanma) grafiği görülmektedir. Bir kübik kristalde kayma distorsiyonlarına karşı ortaya çıkan direnç, tetragonal kayma modülü $C'=(C_{11}-C_{12})/2$ ve elastik modülü C_{44} tarafından en iyi

şekilde karakterize edilir. C_{44} ortorombik bir deformasyonla ilişkilidir. C' ise tetragonal deformasyonla ilişkilidir. Diğer taraftan, herhangi bir V hacminde kübik kristaller için izotropik bulk modülü, B , elastik sabitlerle ilişkilidir, $B = (C_{11}+2C_{12})/3$. Burada C_{11} ve C_{12} hesaplanan B ve C' parametrelerinden elde edilebilir. Elastik sabitleri, harmonik yaklaşım altında küçük zorlanmalar için ful-gerilim tensörü hesaplanarak elde edildi.



Şekil 3. $BBi_{1-x}N_x$ üçlü alaşımının (a) hacim, (b) tetragonal ve (c) rhombohedral zorlanma değişimlerinin enerjiye göre değişimi.

Bir kristalin mekanik stabilitesi $C_{11}-C_{12}>0$, $C_{44}>0$, $C_{11}+2C_{12}>0$ ve $C_{12}<B<C'$ eşitlikleriyle belirlenir. ZnS yapıda hesaplanan alaşım ve ikili bileşikler bu eşitsizlikleri sağlamaktadır. Bu durumda, bu malzemelerin ZnS kristal yapıda mekanik olarak kararlı oldukları sonucuna varılır. İncelenen üçlü alaşımların diğer elastik parametrelerinin konsantrasyona bağlı değişimleri Şekil 4'de görülmektedir. B ve G belirlendikten sonra polikristal materyallerin sertliğini belirleyen Young modülü (Y) bulunabilir. Young modülü, malzemeye bir gerilme kuvveti uygulanması halinde oluşan zor/zorlanma (stres/strain) oranı olarak tanımlanır. 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). Elastik parametreler BBi 'dan BM 'ye ve BSb 'dan BN 'ye doğru gidildikçe artmaktadır. Bu ilişki doğrudan atomlar arası moleküler ağırlıkla ilişkilidir.



Şekil 4. Elastik sabitlerden elde edilen parametreler.

Tablo 2’de temsili olarak $BBi_{1-x}N_x$ üçlü alaşımı için hesaplanan elastik parametrelerin literatürle kıyaslanması görülmektedir. Elde edilen sonuçlar literatürle uyumlu oldukları Tablo 2’de açıkça görülmektedir.

Tablo 2.Hesaplanan elastik sabitler ve mekaniksel parametreler

Material	B _{Bi}	B _{Bi} _{0.75} N _{0.25}	B _{Bi} _{0.50} N _{0.50}	B _{Bi} _{0.25} N _{0.75}	B _N
C ₁₁ (GPa)	142.300 128.573 Ustundag vd. (2015) 163.800 Ferhat vd.(2006) 154.650 Amara vd. (2008)	194.036	230.201	315.361	795.971 820 Grimsditch vd. (1994) 778.51 Saib vd. (2008) 837 Kim vd. (1996)
C ₁₂ (GPa)	49.781 39.799 Ustundag vd. (2015) 28.300 Ferhat vd.(2006) 51.480 Amara vd. (2008)	69.972	76.496	108.016	198.071 190 Grimsditch vd. (1994) 194.63 Saib vd. (2008) 182 Kim vd. (1996)
C ₄₄ (GPa)	93.951 85.223 Ustundag vd. (2015) 86.300 Ferhat vd.(2006) 76.220 Amara vd. (2008)	100.050	124.763	185.876	462.750 480 Grimsditch vd. (1994) 432.51 Saib vd. (2008) 493 Kim vd. (1996)
ξ	0.493 0.456 Ustundag vd. (2015) 0.421Wang vd. (2003)	0.503	0.477	0.487	0.399 0.365 Ustundag vd. (2015) 0.117 Wang vd. (2003)
A	2.031 1.920 Ustundag vd. (2015) 1.608 Wang vd. (2003)	1.613	1.623	1.793	1.549 1.439 Ustundag vd. (2015) 1.473 Wang vd. (2003)
Y (GPa)	164.685 149.631 Ustundag vd. (2015) 135.1 Wang vd. (2003)	198.565	251.150	349.251	864.765 854.808 Ustundag vd. (2015)

					753.1 Wang vd. (2003)
G (GPa)	70.697 65.593 Ustundag vd. (2015) 72.24 Wang vd. (2003)	82.597	102.730	147.056	388.318 382.526 Ustundag vd. (2015) 402.388 Wang vd. (2003)
ν	0.165 0.141 Ustundag vd. (2015) 0.243 Wang vd. (2003)	0.203	0.183	0.175	0.131 0.117 Ustundag vd. (2015) 0.18 Wang vd. (2003)
B₀/G	1.158	1.345	1.468	1.267	0.960
H (GPa)	15.80	16.37	22.44	32.22	93.92
C₄₄ (GPa)	-44.170	-30.078	-48.267	-77.860	-264.679
λ (GPa)	34.733	56.235	61.223	79.942	136.203
μ (GPa)	70.697	82.557	106.160	148.634	382.174

Material (BBi _{1-x} N _x)	ν_t (m/s)	ν_l (m/s)	ν_m (m/s)	Θ_D (K)	T _m (K)±300
BBi	2808.917 2749.621 Ustundag vd. (2015)	4433.552 4251.898 Ustundag vd. (2015)	3089.642 3017.240 Ustundag vd. (2015)	336.197 324.806 Ustundag vd. (2015)	1499.412 1312.866 Ustundag vd. (2015)
	2841.25 Deligoz vd. (2007)	4563.58 Deligoz vd. (2007)	3131.204 Deligoz vd. (2007)	352.56 Deligoz vd. (2007)	1522 Deligoz vd. (2007)
	BBi_{0.75}N_{0.25}	3017.402	4937.745	3331.877	628.275
BBi_{0.50}N_{0.50}	3506.547	5868.652	3880.660	796.165	1797.616
BBi_{0.25}N_{0.75}	4968.545	8011.330	5477.902	1189.422	2416.165
BN	10574.541 10492.529 Ustundag vd. (2015)	16014.687 15935.441 Ustundag vd. (2015)	11574.177 11488.481 Ustundag vd. (2015)	1899.703 1886.062 Ustundag vd. (2015)	5255.416 5176.394 Ustundag vd. (2015)
	9774 Fan vd. (2014)	15211 Fan vd. (2014)	10733 Fan vd. (2014)	1734 Fan vd. (2014)	-

1.4.2. Elektronik ve optiksel sonuçlar

Teknolojik olarak oldukça önemli olan yarıiletken materyallerin elektronik özellikleri bu kısımda incelenmiştir. ZnS yapıda kristalleşen bu materyallerin elektronik özellikleri incelenirken, ikili bileşikleri ve üçlü alaşımları oluşturan elementler için elektronik dizilimler:

5Boron (B): [He]2s² 2p¹

15 Fosfor (P): [Ne]3s² 3p³

33Arsenik (As): [Ar]3d¹⁰ 4s² 4p³

51Antimon (Sb): [Kr]4d¹⁰ 5s² 5p³

83Bizmut (Bi): [Xe]4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s² 6p³

olarak alınmıştır. Yarıiletken malzemeler için valans bandının maksimum noktası ile iletkenlik bandının minimum noktası arasında hiçbir bandın olmadığı boş bir bölge bulunur. 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. Ayrıca, valans bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu aynı k-dalga vektörüne sahip yarıiletkenler doğrudan bant aralığına sahip yarıiletkenler olarak adlandırılırlar. Bu durumda k değişmediğinden elektronun sahip olduğu momentum kristal örgüsüne verilmez. Valans bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu farklı dalga vektörü değerlerindeyse yani iletim bandı en düşük enerjiye $k \neq 0$ 'da sahip ise bu tip yarıiletkenlere dolaylı bant aralıklı yarıiletkenler denir. Bir yarıiletken malzemenin doğrudan veya dolaylı bant aralığına sahip olması bu malzemelerin optoelektronik uygulamalar için uygun bir malzeme olup-olmadığının en büyük kriterlerinden biridir. Proje kapsamında incelenen $B\text{Bi}_{1-x}\text{M}_x$ yarıiletken malzemelerin elektronik bant enerjileri hesaplandı (Tablo 3). Tablodan açıkça görülmektedir ki incelenen alaşımlar doğrudan-dolaylı geçiş göstermektedirler. Doğrudan-dolaylı geçiş konsantrasyonları Tablo 3'de tüm üçlü alaşımlar için görülmektedir. Bi içeren bileşikler veya alaşımlar için spin-orbit etkileşmesi (SOE) çok önemli rol oynadığından hesaplamalarda dikkate alınmıştır. SOE ve non-SOE ile elde edilen sonuçlar Tablo 3'de gösterilmiştir. Beklendiği gibi SOE yasak bant aralığının küçülmesine sebep olmuştur. Bu durum, birinci dejenere iletkenlik seviyelerinde meydana gelen geniş ayrılmadan (splitting) kaynaklanmaktadır.

Tablo 3.Çalışılan üçlü malzemeler için elde edilen yasak bant enerjisi.

Materyal	E_g (eV)
----------	------------

		non-SOE	SOE
BBi_{1-x}N_x			
BBi	$\Gamma - \Gamma$	0.817	0.381
BBi_{0.9375}N_{0.0625}	$\Gamma - \Gamma$	0.299	0.130
BBi_{0.875}N_{0.125}	$\Gamma - \Gamma$	0.080	-0.027
BBi_{0.8125}N_{0.1875}	$\Gamma - \Gamma$	-0.102	-0.259
BBi_{0.125}N_{0.875}	$\Gamma - \Gamma$	-0.212	-0.348
BBi_{0.0625}N_{0.9375}	$\Gamma - \Gamma$	2.300	1.970
BN	$\Gamma - X$	5.945	5.828
BBi_{1-x}P_x			
BBi	$\Gamma - \Gamma$	0.817	0.381
BBi_{0.9375}P_{0.0625}	$\Gamma - \Gamma$	0.90	0.71
BBi_{0.75}P_{0.25}	$\Gamma - \Gamma$	0.96	0.82
BBi_{0.5}P_{0.5}	$\Gamma - \Gamma$	0.29	0.09
BBi_{0.25}P_{0.75}	$\Gamma - \Gamma$	0.72	0.52
BBi_{0.125}P_{0.875}	$\Gamma - \Gamma$	1.27	1.11
BBi_{0.0625}P_{0.9375}	$\Gamma - X$	1.62	1.53
BP	$\Gamma - X$	1.91	1.89
BBi_{1-x}As_x			
BBi	$\Gamma - \Gamma$	0.817	0.381
BBi_{0.9375}As_{0.0625}	$\Gamma - \Gamma$	0.791	0.59
BBi_{0.875}As_{0.125}	$\Gamma - \Gamma$	0.966	0.766
BBi_{0.8125}As_{0.1875}	$\Gamma - X$	1.023	0.822
BA_s	$\Gamma - X$	1.601	1.598
BBi_{1-x}Sb_x			
BBi	$\Gamma - \Gamma$	0.817	0.381
BBi_{0.9375}Sb_{0.0625}	$\Gamma - \Gamma$	0.23	0.210
BBi_{0.875}Sb_{0.125}	$\Gamma - \Gamma$	0.36	0.325
BBi_{0.8125}Sb_{0.1875}	$\Gamma - \Gamma$	0.49	0.458
BBi_{0.75}Sb_{0.25}	$\Gamma - \Gamma$	0.60	0.589
BBi_{0.625}Sb_{0.375}	$\Gamma - X$	0.75	0.734
BBi_{0.5625}Sb_{0.4375}	$\Gamma - X$	0.74	0.714
BSb	$\Gamma - X$	0.76	0.751

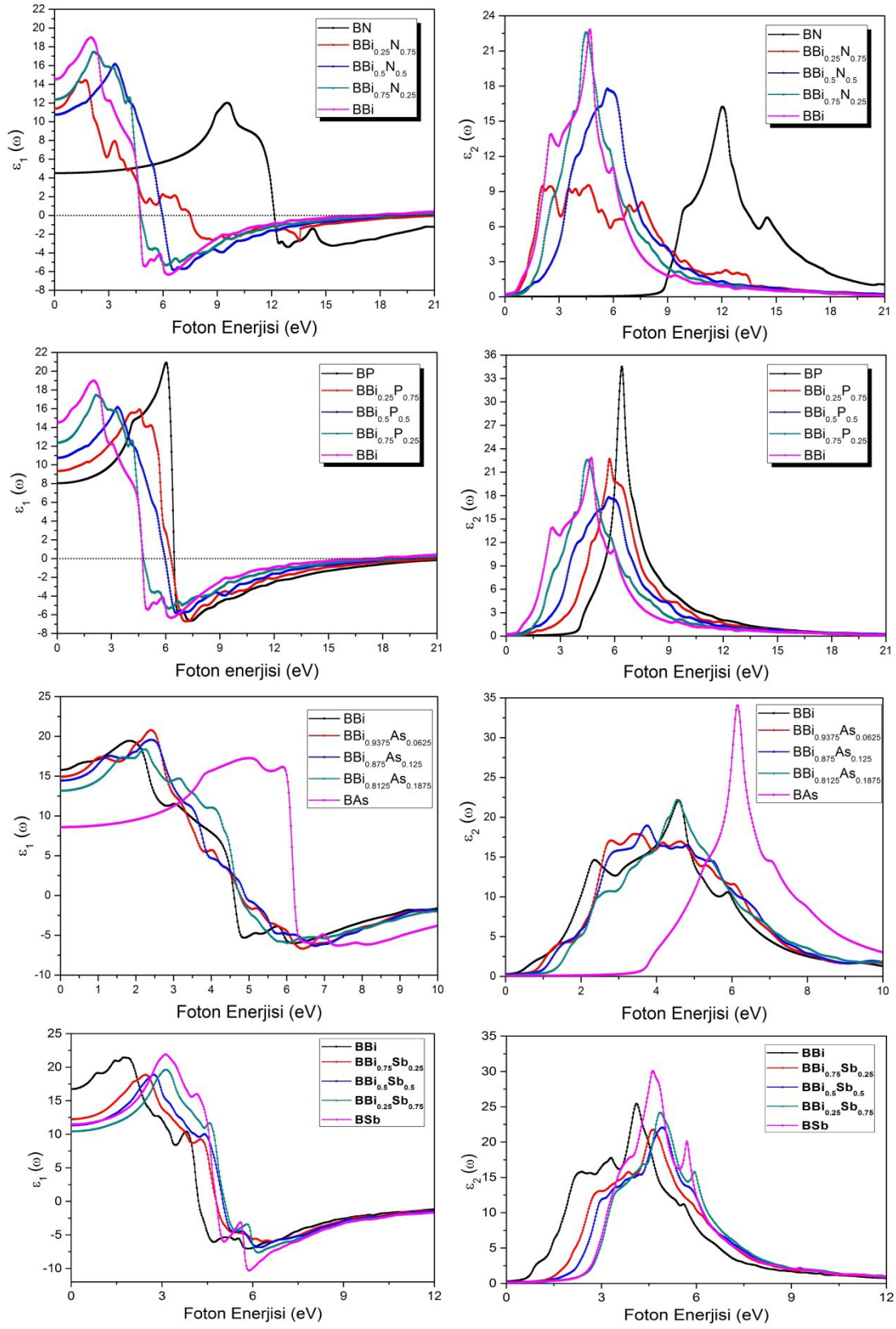
Kristal yapıya sahip malzemelerin bant yapılarının daha iyi anlaşılabilmesi için optiksel dielektrik spektrumunun incelenmesi gerekir. Dielektrik fonksiyonu, fotonlarla elektronların birbiri arasındaki etkileşimi gösteren elektromanyetik radyasyona (ışınım, ışıma) karşı sistemin tepkisini tanımlamak için kullanılır.

Bir malzemenin optiksel özellikleri frekansa bağlı olan kompleks dielektrik fonksiyonuyla $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ tanımlanır. Burada $\epsilon_1(\omega)$ ve $\epsilon_2(\omega)$ kompleks dielektrik fonksiyonun sırayla reel ve imajiner kısımlarını oluştururlar.

Çalışılan üçlü alaşımlar için elde edilen reel ve imajiner dielektrik fonksiyonuna ait grafik Şekil 5'de görülmektedir. Bileşikler arasındaki davranış benzerlikleri anyon:kasyon oranından kaynaklanmaktadır. Şekil 5'de ortaya çıkan pikler elektronik bant grafiklerinde gözlemlenen kritik noktadaki geçişlere karşılık gelmektedir. Dispersiyonun ilk başladığı nokta temel



soğurma sınırı (TSS) olarak bilinir. Hesaplanan TSS değerlerinin yasak bant enerji değerlerinden küçük bir miktar sapmasının nedenleri elektronlar ve boşluklar arasındaki Coulomb etkileşimi, eksitonik etkiler, safsızlıklar ve kusur seviyelerinden kaynaklanmaktadır. BBi yarıiletkeni için temel soğurma sınırı elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık gelmektedir (E_0 noktası, ~ 0.8 eV). Yasak bant aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırı bu bileşik için teknolojik uygulamalarda iletişim araçlarında büyük bir öneme sahip olan kızıl-ötesi spektrum bölgesinde elde edilmiştir. Ortaya çıkan diğer piklerde, yüksek simetri noktalarındaki bantlar arası geçişleri temsil etmektedir. Şekil 5'de meydana gelen maksimum pik rezonans frekansı olarak bilinir. Rezonans frekansı, malzemenin en fazla duyarlı olduğu frekans olarak adlandırılır. Genel olarak çalışılan malzemeler yakın kızıl ötesi (NIR) ve görünür bölgede reel dielektrik fonksiyonunda bir artış görülmektedir. Yakın ve orta mor-ötesi (UV) bölgede ise tüm bileşikler için bir azalma ortaya çıkmaktadır. Reel dielektrik fonksiyonunda meydana gelen bu artış ve azalışlar rezonans frekansı ve sönüm parametresiyle ilişkilidir. Reel dielektrik fonksiyonunun sıfır olduğu nokta rezonans frekansına, yani maksimum soğurmaya, karşılık geldiği tespit edildi. Malzemeler için çok önemli olan fiziksel bir nicelik statik dielektrik fonksiyonudur, $\epsilon_1(0)$.



Şekil 5. Üçlü alaşımların elde edilen reel ve imajiner dielektrik fonksiyonu.



KAYNAKLAR

Bouhafs, B., Aourag, H., Ferhat, M., Certier, M. 1999. "Competition between the ionic and covalent character in the series of boron compounds BP, BAs, and BSb ", J. Phys. Condens. Matter, 11, 5781-5796.

Chu, T. L., Hyslop, A. E. 1972. "Crystal Growth and Properties of Boron Monoarsenide", J. Appl. Phys., 43, 276-279.

Cui, S., Feng, W., Hu, H., Feng, Z., Wang, Y. 2010. "First principles studies of phase stability, electronic and elastic properties in BBi compound", Compu. Mater. Sci., 47, 968-972.

Deligoz, E., Colakoglu, K., Ciftci, Y. O. 2007. "The first principles study on the Boron antimony compound", J. Phys. Chem. Sol., 68, 482-489.

Ferhat, M., Zaoui, A. 2006. "Structural and electronic properties of III-V bismuth compounds", Phys. Rev. B, 73, 115107-7.

Ferhat, M., Zaoui, A. 2006. "Structural and electronic properties of III-V bismuth compounds ", Phys. Rev. B, 73, 115107-7.

Geisz, J. F., Friedman, D. J., Olson, J. M., Kurtz, S. R., Reedy, R. C. 2000. "BGaInAs alloys lattice matched to GaAs", App. Phys. Lett., 76, 1443-1445.

Grimsditch, M., Zouboulis, E. S., Polian, A. 1994. "Elastic constants of boron nitride ", J. Appl. Phys., 76, 832-834.

Hart, G. L. W., Zunger, A. 2000. "Electronic structure of BAs and boride III-V alloys ", Phys. Rev. B, 62, 13522-13537.

Karch., K., Bechstedt, F. 1997. "Ab initio lattice Dynamics of BN and AlN:Covalent versus ionic forces"Phys. Rev. B, 56, 7404-7415.

Knittle, E., Wentzcovitch, R. M., Jeanloz, R., Cohen, M. L. 1989. "Experimental and theoretical equation of state of cubic boron nitride", Nature, 337, 349-352.

Sanjurjo, J. A., Cruz, E. L., Vogl, P., Cardona, M. 1983. "Dependence on volume of phonon frequencies and their effective charges of several III-V semiconductors", Phys. Rev. B, 28, 4579-4584.

Shimada, K., Sota, T., Suzuki, K. 1998. "First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN", *J. App. Phys.*, 84, 4951-4958.

Surh, M. P., Louie, S. G., Cohen, M. L. 1991. " Quasiparticle energies for cubic BN, BP and BAs ", *Phys. Rev. B*, 43, 9126-9132.

Szwacki, N. G., Bogulawski, P. 2001. "GaAs:N vs GaAs:B alloys: Symmetry-induced effects ", *Phys. Rev. B*, 64, 161201-4.

Ustundag, M., Aslan, M., Yalcin, Battal G. 2014. "The first-principles study on physical properties and phase stability of Boron-V (BN, BP, BAs, BSb and BBi) compounds", *Comput. Mater. Sci*, 1, 471-477.

Wang, S. Q., Ye, H. Q. 2002. "Plane-wave pseudopotential study on mechanical and electronic properties for IV and III-V crystalline phases with zinc-blende structure", *Phys. Rev. B*, 66, 235111-7.

Wang, S. Q., Ye, H. Q. 2003. "First-principles study on elastic properities and phase stability of III-V compounds", *Stat. Sol. (b)*, 240, 45-54.

Wentorf, R. H. 1957. "Cubic Form of Boron Nitride ", *J. Chem. Phys.*, 26, 956.

Wentzcovitch, R. M., Chang, K. J., and Cohen, M. L. 1986. " Electronic and structural properities of BN and BP", *Phys. Rev. B*, 34, 1071-1079.

Wentzcovitch, R. M., Cohen, M. L., Lam, P. K. 1987. "Theoretical study of BN, BP, and BAs at high pressures", *Phys. Rev. B*, 36, 6058-6068.

Hohenberg, P., Kohn, W. 1964. "Inhomogeneous electron gas", *Phys. Rev.* 136, B864-B867.

Kohn, W., Sham, L. J. 1965. "Self-Consistent equations including exchange and correlation effects", *Phys. Rev.* 140, A1133-A1138.

Ming – FU L. 1995. *Modern semiconductor quantum physics*. Chih-Tang S (ed). New York: World Scientific.

Payne, M. C., Teter, M. P., Allan, D. C., Arias, T. A., Joannopoulos, J. D. 1992. "Iterative minimization techniques for abinitio total energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients", *Rev. of Mod. Phys.*, 64, 1045-1097.

Tran, F., Blaha, P. 2009. "Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential", *Phys. Rev. Lett.*, 102, 226401-4.

Koller, D., Tran, F., Blaha, P. 2011. 'Merits and limits of the modified Becke-Johnson exchange potential', *Phys. Rev. B*, 83, 195134-10.

Koller, D., Tran, F., Blaha, P. 2012. 'Improving the modified Becke-Johnson exchange potential', *Phys. Rev. B*, 85, 155109-8.

Kramers, H. A., 1927. *Atti. Congr. Int. Fis Transactions of Volta Centenary Congress*, 2, 545.

Kronig, R. de L. 1926. "On the theory of the dispersion of X-rays", *J. Opt. Soc. Am.*, 12, 547-57.

R. H. Wentorf, Cubic Form of Boron Nitride, *J. Chem. Phys.* 26 (1957) 956.

M. Ustundag, M. Aslan, B.G. Yalcin, The first-principles study on physical properties and phase stability of Boron-V (BN, BP, BAs, BSb and BBi) compounds, *Comput. Mater. Sci.* 81

F.P. Bundy, R.H. Wentorf, Direct Transformation of Hexagonal Boron Nitride to Denser Forms, *J. Chem. Phys.* 38 (1963) 1144-1149.

S. Saib, N. Bouarissa, S. Saib, N. Bouarissa, Density functional calculation of band-parameters for boron nitride at normal and high pressures, *J. Alloy Compd.* 48 (2008) 11-16.

M. Ferhat and A. Zaoui, Structural and electronic properties of III-V bismuth compounds, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 115107-7.

K. Amara, B. Soudini, D. Rached, A. Boudali, Molecular dynamics simulations of the structural, elastic and thermodynamic properties of cubic BBi, *Comput. Mater. Sci.* 44 (2008) 635-40.

M.Grimsditch, E.S. Zouboulis, A. Polian, Elastic constants of boron nitride, *J. Appl. Phys.* 76 (1994) 832-3.

K. Kim, W.R.L. Lambrecht, B. Segall, Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN, *Phys. Rev. B* 53 (1996) 16310.

E. Deligoz, K. Colakoglu, Y. O. Ciftci, H. Ozisik, The first principles study on boron bismuth compound, *Comput. Mater. Sci.* 39 (2007) 533-540.

Q. Fan, Q. Wei, H. Yan, M. Zhang, Z. Zhang, J. Zhang, D. Zhang, Elastic and electronic properties of Pbca-BN: First-principles calculations, *Comput. Mater. Sci.* 85 (2014) 80-87.

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

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Dr. BATTAL GAZI YALÇIN
Proje No:	114F479
Proje Başlığı:	Bbi1-Xmx(M=N, P, As, Sb) Üçlü Alaşımlarının Düşük Konsantrasyon Değişimleri Altında Yapısal, Elastik, Termodinamik, Elektronik Ve Optiksel Özelliklerinin İncelenerek Teknolojik Uygulama Alanlarının Araştırılması
Proje Türü:	1002 - Hızlı Destek
Proje Süresi:	12
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	SAKARYA Ü. FEN-EDEBİYAT F. FİZİK B.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	15/01/2015 - 15/01/2016
Onaylanan Bütçe:	30000.0
Harcanan Bütçe:	29999.27
Öz:	<p>ÖZET</p> <p>Alaşımlama, yasak bant enerjisi (Eg), denge durumu örgü sabiti (a0) gibi parametrelerin kontrol edilebilirliği nedeniyle bant yapı mühendisliğinde büyük öneme sahiptir. Alaşım, mükemmel periyodik yapıya sahip ikili bileşiklerin (AIIIBV veya AIIBVI) kendi grup elementleriyle (veya uygun bağ yapısına sahip elementlerle) yer değiştirmesiyle oluşturulur. Günümüzde, ikili bileşikler yardımıyla elde edilen üçlü (AIIIBV1-xCVx) ve dördümlü alaşımlara (AIIIBV1-xCVyCV1-y) sıkça rastlamak mümkündür. Küçük Eg?ye sahip yarıiletkenlerle (BBIEg~1eV) büyük Eg?ye sahip yarıiletkenlerin (BNEg~6 eV) alaşımlanması, elektromanyetik spektrumun mor ötesinden (UV) kızıl ötesine (IR) kadar geniş bir frekans aralığında çalışabilecek aygıt üretimi için elverişli sistemlerin elde edilmesine olanak sağlar. Bu kapsamda B-Bi içeren BBi1-xMx(M=N, P, As, Sb) üçlü alaşımlarının temel özelliklerinin araştırılmasının bilim dünyasına yenilikler katacağı düşünülmektedir. Proje konusu olarak BBi1-xMx(M=N, P, As, Sb) üçlü alaşımlarının yapısal, elastik, termodinamik, elektronik ve optik gibi fiziksel özellikleri deneysel çalışmalara öncülük etmesi için düşük konsantrasyonlar (x~%3) altında incelenecektir. Projede çalışılacak üçlü alaşımların tüm özelliklerinin ilk kez araştırılacak olmaları projenin özgünlüğüne büyük katkı sağlayacaktır. Böylece proje sonunda elde edilecek bulguların deneysel çalışmalara yol gösterici olacağı düşünülmektedir. BBi1-xMx üçlü alaşımlarının fiziksel özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi `Density Functional Theory? (DFT) kullanılarak araştırılacaktır. Teori kapsamında Khon-Sham eşitliklerini çözmek için tüm potansiyel (lineerleştirilmiş) genişletilmiş düzlem-dalgı ve lokal orbitaller `Full Potential (Linearized) Augmented Plane-Wave+Local Orbital? [FP-(L)APW+lo] temel kümesini kullanan WIEN2k simülasyon programı paketi kullanılacaktır. DFT?de bilinen en büyük problem yarıiletkenlerin yasak bant aralıklarının deneysel çalışmalara kıyasen %60-80 hata oranına sahip olmasıdır. WIEN2k?da kullanılabilen modifiye edilmiş Berke-Johnson (mBJ)-potansiyeli kullanılması Eg?yi deneysel verilerle kıyaslanabilir düzeyde (%5-10 hata payı) iyileştirdiği görülmektedir. Bu nedenle projede hesaplamaların doğruluğunu arttırmak için WIEN2k programı seçilmiştir.</p>
Anahtar Kelimeler:	Yoğunluk fonksiyonel teorisi, BBi-V alaşımları, Opto-Elektronik özellikler, Termal özellikler
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır

Projenin Yapılan Yayınlar:	<p>1- Theoretical calculations on structural and electronic properties of BGaAsBi alloys (Makale - İndekli Makale),</p> <p>2- Structural, mechanical and thermodynamic properties of N-doped BBi compound under pressure (Makale - Diğer Hakemli Makale),</p> <p>3- Band gap characterization of ternary BB1-xNx (0 ≤ x ≤ 1) alloys using modified Becke-Johnson (mBJ) potential (Makale - Diğer Hakemli Makale),</p> <p>4- Band Gap Characterization of Ternary BBi1-xNx Alloys: A First-Principles Study (Makale - Diğer Hakemli Makale),</p> <p>5- Structural, mechanical, electronic and optical properties of BBi, BP and their ternary alloys BBi1-xPx (Makale - Diğer Hakemli Makale),</p> <p>6- The Optoelectronic properties of Sb Doped BBi Compounds (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Poster Sunum),</p> <p>7- The Optical Spectrum of Ternary Alloy BBi1-xAsx (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Poster Sunum),</p>
----------------------------	---

TÜBİTAK