

T.C.
VAN YÜZÜNCÜ YIL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

**YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ İLE BaGePt KRİSTALİNİN
YAPISAL, ELEKTRONİK VE ELASTİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZIRLAYAN: Ferhat ARSLANBAŞ
DANIŞMAN: Doç.Dr. Emel Kilit DOĞAN

Van-2019

T.C.
VAN YÜZÜNCÜ YIL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

**YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ İLE BaGePt KRİSTALİNİN
YAPISAL, ELEKTRONİK VE ELASTİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZIRLAYAN: Ferhat ARSLANBAŞ
DANIŞMAN: Doç.Dr. Emel Kilit DOĞAN

Van-2019

KABUL VE ONAY SAYFASI

Fizik Anabilim Dalı'nda Doç. Dr. Emel KİLİTDOĞAN danışmanlığında, Ferhat Arslanbaş tarafından sunulan "Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile BaGePt Kristalinin Yapısal, Elektronik ve Elastik Özelliklerinin İncelenmesi" isimli bu çalışma Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği'nin ilgili hükümleri gereğince 17/01/2019 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği / oy çokluğu ile başarılı bulunmuş ve yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Prof. Dr. Harun AKKUŞ

İmza: 

Üye: Dr. Öğr. Ü. Hanife Can ŞEN

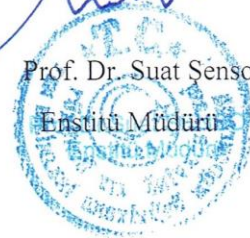
İmza: 

Üye: Doç. Dr. Emel KİLİT DOĞAN

İmza: 

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 25/01/2019 tarih ve 2019/6-I sayılı kararı ile onaylanmıştır.

Prof. Dr. Suat Sensoy
Enstitü Müdürü



TEZ BİLDİRİMİ

Hazırladığım tezin tamamen kendi çalışmam olduğunu ve tüm alıntılara kaynak gösterdiğimi taahhüt eder, tezimin kâğıt ve elektronik kopyalarının Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü arşivlerinde aşağıda belirttiğim koşullarda saklanmasına izin verdiğimi onaylarım.

Ferhat ARSLANBAŞ

ÖZET

YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ İLE BaGePt KRİSTALİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK VE ELASTİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

ARSLANBAŞ, Ferhat
Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı
Tez Danışmanı: Doç. Dr. Emel KİLİT DOĞAN
Ocak 2019, 67 Sayfa

Bu tez çalışmasında BaGePt kristalinin yapısal, elektronik ve elastik özellikleri, yoğunluk fonksiyoneli teorisine (DFT) dayalı olarak hesaplamalar yapan ABINIT programı ile farklı basınçlar (0, 10, 20, 30, 40 ve 50GPa) altında incelenmiştir. Tüm bu fiziksel özelliklerin incelenmesi hem genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) hem de yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) kullanarak yapılmıştır. İlk olarak BaGePt kristali için yapısal özellikler incelenmiştir. Ardından elde edilen elektronik bant yapısı, BaGePt kristalinin yasak bant aralığına sahip olmadığını göstermektedir. Ayrıca BaGePt kübik kristalinin Bulk modülü, Young modülü, Shear modülü gibi elastik özellikleri farklı basınçlarda incelenmiştir.

Literatür taramasında BaGePt kristali ile ilgili Materials Project adlı web sitesindeki teorik değerler haricinde hiç bir çalışmaya rastlanmadığından elde edilen sonuçlar karşılaştırılamamıştır.

Anahtar Kelimeler: ABINIT, BaGePt, Durum yoğunluğu, Elastik özellikler, Elektronik özellikler, Yoğunluk fonksiyoneli teorisi.



ABSTRACT

INVESTIGATION OF STRUCTURAL, ELECTRONIC AND ELASTIC PROPERTIES OF BaGePt CRYSTAL BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY

ARSLANBAŞ, Ferhat
M. Sc. Thesis, Department of Physics
Supervisor: Assoc.Prof. Emel KİLİT DOĞAN
January 2019, 67 Pages

In this thesis, structural, electronic and elastic properties of BaGePt crystal were investigated under different pressures (0, 10, 20, 30, 40 and 50GPa) with ABINIT program which performs calculations based on density functional theory (DFT). Investigation of all these physical properties were examined using both generalized gradient approach (GGA) and local density approach (LDA). First of all, the structural properties of BaGePt crystal were investigated. Then the obtained electronic band structure has shown that the BaGePt crystal does not have a forbidden band gap. In addition, elastic properties of BaGePt cubic crystal such as Bulk module, Young's modulus and Shear module were investigated at different pressures.

In the literature review, since no studies were met other than the theoretical values in the Materials Project website, the results could not be compared.

Keywords: ABINIT, BaGePt, Density of states, Elastic properties, Electronic properties, Density functional theory.



ÖN SÖZ

Bu tez çalışmasında değerli bilgilerini benimle paylaşan, her türlü ilgi ve desteğini esirgemeyen, bana her fırsatta yardımcı olan, çok sevdiğim ve her zaman örnek kişilik olarak gördüğüm değerli danışmanım Sayın Doç. Dr. Emel KİLİT DOĞAN'a teşekkür ederim.

Hayatım boyunca bana maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen annem Ayşe ARSLANBAŞ'a babam Mehmet ARSLANBAŞ'a ve abim Mesut ARSLANBAŞ'a ve bölümde çalışmama desteğini esirgemeyen Prof. Dr. Harun AKKUŞ'a Doç. Dr. Murat AYCİBİN hocama ve Mehmet ERZEN'e teşekkür ederim.

Ayrıca bu tez çalışmasına verdikleri destekten dolayı TÜBİTAK/ULAKBİM yöneticilerine teşekkür ederim.

2019

Ferhat ARSLANBAŞ



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	i
ABSTRACT	iii
ÖN SÖZ.....	v
İÇİNDEKİLER.....	vii
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	ix
ÇİZELGELER LİSTESİ	ix
SİMGELER VE KISALTMALAR	xiii
1.GİRİŞ.....	1
2.KAYNAK BİLDİRİŞLERİ	3
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	5
3.1. Katıların Sınıflandırılması ve Kristal Yapısı	5
3.1.1. Kristal yapı	5
3.1.1.1. Bir boyutlu örgü	8
3.1.1.2. İki boyutlu örgü türleri	8
3.1.1.3. Üç boyutlu örgü türleri.....	11
3.1.2. Kristallerde kırınım ve ters örgü	15
3.1.2.1. Kristallerde kırınım	15
3.1.2.2. Ters örgü	16
3.1.3. Brillouin bölgesi ve Brillouin bölgesindeki özel k noktaları	17
3.1.4. Yüksek Simetri Noktaları.....	18
3.1.5. Katıların Bant Yapısı.....	20
4. ÇOK PARÇACIK PROBLEMİ	21
4.1. Born- Oppenheimer Yaklaşımı.....	22
4.2. Hartree Yaklaşımı ve Öz-Uyumlu Alan.....	23
4.3. Hartree-Fock Yöntemi, Slater Determinantı ve Değişim Enerjisi.....	24
4.4. Thomas-Fermi Teorisi Dirac Değişim Enerjisi.....	25
5. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ (DFT).....	27

	Sayfa
5.1. Hohenberg-Kohn Teoremleri.....	27
5.2. Kohn-Sham Denklemleri.....	29
5.3. Yoğunluk Fonksiyoneli Oluşturma Yöntemleri.....	31
5.3.1. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA).....	31
5.3.2. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA).....	31
5.4. Pseudo Potansiyel Yaklaşımı.....	32
5.5. Abinit.....	33
6. BULGULAR	35
6.1. BaGePt Kristalini Oluşturan Elementlerin Özellikleri.....	35
6.2. Yapısal Optimizasyon.....	37
6.2.1. Kesme enerjisi	37
6.2.2. k- noktaları sayısı	40
6.2.3. Hacim Optimizasyonu.....	42
6.3. BaGePt Kristalinin Elektronik Bant Yapısı.....	45
6.4. Durum Yoğunluğu.....	50
6.5. Elastik Özellikler.....	53
6.6. BaGePt: Elastik Özellikler.....	56
7. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	63
KAYNAKLAR.....	65
ÖZ GEÇMİŞ.....	67

ÇİZELGELER LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. Üç boyutta kristal sistemi ve Bravais örgüleri	13
Çizelge 6.1. Ba-Ge-Pt elementlerinin özellikleri.....	36
Çizelge 6.2. BaGePt kristali atom ve molekül sayısı	36
Çizelge 6.3. Grup 198'in Wyckoff Pozisyonları (P 2 1 3).....	37
Çizelge 6.4. BaGePt kristalinin GGA ve LDA yaklaşımı altında k noktası sayısı E _{kes} enerjisi değeri ve k noktalarının sayısı.....	42
Çizelge 6.5. BaGePt kristalinin teorik değerler ile örgü sabitlerinin karşılaştırılması ...	45
Çizelge 6.6. BaGePt kristalinin farklı basınçlarda ki örgü sabitleri değerleri.....	45
Çizelge 6.7. BaGePt (P 2 1 3) kristalinin uzay grubu için yüksek simetri noktalar.....	46
Çizelge 6.8. BaGePt kristalinin yüksek simetri noktaları arasında enerji geçişleri.....	49
Çizelge 6.9. BaGePt kristalinin temel Durumda GGA yaklaşımı altında elastik sertlik sabitleri C _{ij} (GPa) katsayıları	57
Çizelge 6.10. BaGePt kristalinin temel Durumda LDA yaklaşımı altında elastik sertlik sabitleri C _{ij} (GPa) katsayıları	57
Çizelge 6.12. BaGePt kristalinin temel durumda LDA yaklaşımı altında elastik sertlik sabitleri S _{ij} (1/GPa) katsayıları	58
Çizelge 6.13. BaGePt kristali için farklı basınçlardaki Bulk modülü değerleri	59
Çizelge 6.14. BaGePt kristali için farklı basınçlarda Shear modülü	60
Çizelge 6.15. BaGePt kristali için farklı basınçlarda Young modülü	61
Çizelge 6.16. BaGePt kristalinin farklı basınçlardaki Elastik Sabitler.....	62

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 1.1. Kübik BaGePt kristalinin birim hücresi (GaussView 5 ile elde edildi).	2
Şekil 3.1. Atom dizilişine göre katılar: a) Tek kristal b) Polikristal c) Amorf.....	6
Şekil 3.2. Kristal tanımı.....	7
Şekil 3.3. birim hücrenin şematik olarak gösterimi.....	7
Şekil 3.4. Bir boyutlu örgü.	8
Şekil 3.5. Basit örgü, cisim merkezli örgü, yüzey merkezli örgü.....	12
Şekil 3.6. Yedi kristal sistemi ve Bravais örgülerinin şekil ile gösterimi: (P: İlkel birim hücre, I: Cisim merkezli birim hücre, F: Yüzey merkezli birim hücre, C: Taban merkezli hücre (Dede, 2015).....	14
Şekil 3.7. Elektromanyetik dalgaların kristalde kırınımı.....	15
Şekil 3.8. Wigner-Seitz hücresi	17
Şekil 3.9. Basit kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi	18
Şekil 3.10. Cisim merkezli kübik yapı için birinci Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktalarının gösterilmesi.	19
Şekil 3.11. Yüzey merkezli kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi.	19
Şekil 5.1. Bir kristalin toplam enerjisini hesaplayan bir bilgisayar programının akış diyagramı	30
Şekil 5.2. Pseudo-potansiyel gerçek ve pseudo dalga fonksiyonlarının gösterimi.....	33
Şekil 6.1. BaGePt kristalinin birim hücresinin gösterimi (Vesta programı ile elde edilmiştir).....	36
Şekil 6.2. BaGePt kristalinin GGA yaklaşımına göre BaGePt kristalinin Etop-Ekes grafığı.....	38
Şekil 6.3. LDA yaklaşımına göre BaGePt kristalinin Etop-Ekes grafığı.....	39

Şekil 6.4. BaGePt kristali için GGA yaklaşımına göre E_{top} - k noktaları sayısı grafiği.....	41
Şekil 6.5. BaGePt kristalinin LDA yaklaşımına göre E_{top} - k noktalarının sayısı grafiği.....	41
Şekil 6.6. GGA ve LDA yaklaşımı altında BaGePt kristalinin E_{top} - Basınç grafiği	43
Şekil 6.7. GGA ve LDA yaklaşımı altında BaGePt kristalinin E_{top} - Hacim grafiği.....	43
Şekil 6.10. Kübik yapı için Birinci Brillouin bölgesi yüksek simetri noktaları (Doru, 2017).....	46
Şekil 6.11. BaGePt kristalinin temel durumda elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu	47
Şekil 6.12. BaGePt kristalinin GGA ve LDA yaklaşımı altında farklı basınçlardaki elektronik bant yapısı.....	48
Şekil 6.13. BaGePt kristalinin GGA ve LDA yaklaşımı altında toplam durum yoğunluğu (DOS) grafiği.....	50
Şekil 6.14. BaGePt kristalinin GGA yaklaşımı altında farklı basınçlar altında toplam durum yoğunluğu.....	51
Şekil 6.15. BaGePt kristalinin GGA yaklaşımı altında her bir elementin durum yoğunluğuna katkısı (DOS) grafiği	51
Şekil 6.16. BaGePt kristalinin LDA yaklaşımı altında farklı basınçlar altında toplam durum yoğunluğu.....	52
Şekil 6.17. BaGePt kristalinin LDA yaklaşımı altında her bir elementin durum yoğunluğuna katkısı (DOS) grafiği	52
Şekil 6.18. (S_{ij}) ve (C_{ij}) matrislerinin bileşenleri arasındaki ilişkiler (Nye, J. F., 1985)	54
Şekil 6.19. BaGePt kristali için elde edilen Bulk Modülü-Basın grafiği	59
Şekil 6.20. BaGePt kristali için elde edilen Shear Modülü-Basın grafiği	60
Şekil 6.21. BaGePt kristali için elde edilen Young Modülü-Basın grafiği	61
Şekil 6.22. BaGePt kristali için elde edilen Elastik Sabitler-Basın grafiği	62

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
Ba	Baryum
Ge	Germanyum
Pt	Platin
E_0	Temel durum enerjisi
E_c	Korelasyon enerjisi
E_{kes}	Düzlem dalga baz setleri için kinetik enerji kesme değeri
E_f	Fermi enerjisi
E_k	Kinetik enerji
E_{HF}	Hartree-Fock enerjisi
BaGePt	Baryum Germanyum Platin

Kısaltmalar	Açıklama
Ab-initio	Temel İkelere Dayanan Metot
DFT	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
DOS	Durum Yoğunluğu
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
V	Potansiyel enerji



1.GİRİŞ

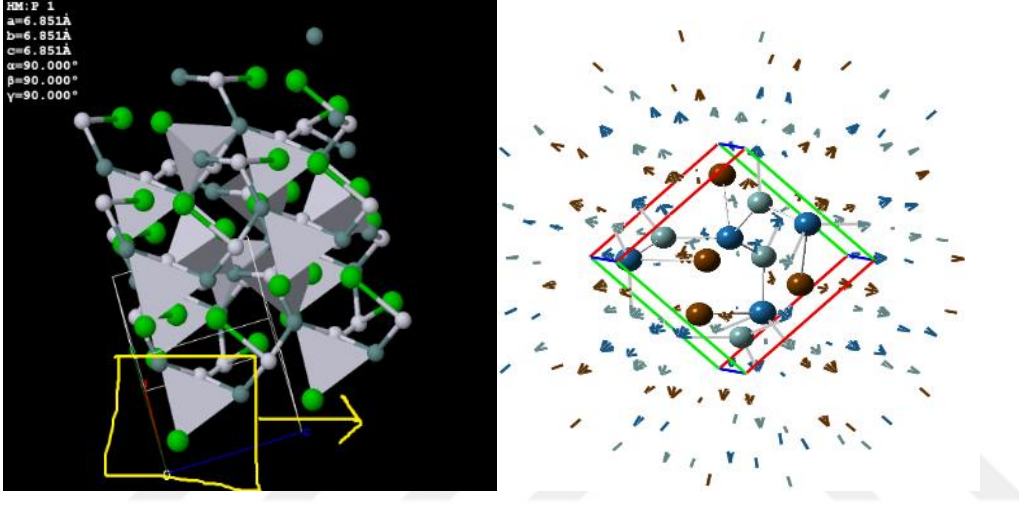
Fizik bilinen en eski bilim dallarının biridir. M.Ö 5000 yılından günümüze kadar, bilim ve teknolojide çok büyük ilerlemeler olmuştur. MÖ 3000 yıllarında fizik yasalarını bilmeden su değirmenlerini kullanan Sümerler fiziğin tarihsel gelişiminin ilk basamağını oluştururlar. Günümüzde fizik makro âlemde milyarlarca ışık yılı uzaktaki bir gezegenden, mikro âlemdeki bir kuarka kadar tüm sistemleri inceler.

Tüm yüz yılların dâhileri diyebileceğimiz fizikçiler, olayları tam olarak doğru bir şekilde anlamak için 20.yüzyılın başında her türlü geleneksel fizik düşüncelerini altüst eden bazı kuramlar ortaya attılar. Bunlardan bir tanesi Max Planck 1900 yılında Kuvanta kuramı olarak isimlendirilen enerji tanecikleri kuramını, 1905'te ise Albert Einstein izafiyet kuramını tüm dünyaya açıkladı. Günümüzde nükleer fizik sayesinde, enerjide ve teknolojide birçok yenilikler getirdi. Teknolojini gelişmesiyle birlikte astrofizikte, uzayda daha çok araştırmaya yapılmaya başlandı ve gök cisimleri arasındaki mekanizma anlaşıldıktan sonra, izafiyet yasaları uygulanarak evrenin tarihine ışık tutulmaya çalışılacaktır.

Katıhal fiziğinin en önde gelen çalışma konularından bir tanesi de kristallerdir. Çünkü bir kristalin atomları genellikle düzenli (periyodik) dizildiğinde matematiksel modeli daha kolay çıkartılabilir. Bu düzenli yapıya kristalin karakteristiği denir. Katıların bu özelliklerinden yararlanarak kristallerin birim hücrelerinin belirlenmesiyle birlikte kristalin yapısı ve fiziksel özellikleri hakkında bilgi elde edilebilir ve elde edilen bu bilgi ile malzemenin mekanik, optik, elektrik, manyetik gibi özellikleri ile teknolojik alanlarda kullanım olanağı sağlaması günlük hayatta kullandığımız birçok buluşun yapılmasına neden olmuştur.

İncelediğimiz bu katı malzemelerin fiziksel özelliklerini teorik olarak nasıl bulabiliriz. Teorik hesaplamalar için Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory, DFT) elektron yoğunluğunu temel alarak malzemelerin fiziksel özelliklerinin hesaplanmasında da kullanılan bir teoridir.

Malzemelerin fiziksel özelliklerini hesaplamak için ab-initio (temel prensip) yöntemine dayanan çeşitli yazılımlar vardır. Bunlara örnek verecek olursak SIESTA, ABINIT, GaussView5, VASP ve WIEN2K gibi programlardır. Bu tez çalışmasında BaGePt kristalinin bazı fiziksel özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi tabanlı Abinit yazılımı ile incelenmiştir ve temel durumda yani kristalin en kararlı olduğu durumda yapısal, elektronik ve elastik özelliklerinin farklı basınç değerleri (0, 10, 20, 30, 40 ve 50 GPa) altında incelenmesi amaçlanmıştır.



Şekil 1.1. Kübik BaGePt kristalinin birim hücresi (GaussView 5 ile elde edildi).

2. KAYNAK BİLDİRİŞLERİ

Literatür taramasında BaGePt kristali ile ilgili Materials Project (Kocher ve ark., 2013) adlı web sitesindeki teorik değerler haricinde hiç bir tez, makale ya da dergide herhangi bir çalışma veya bir veriye rastlanmamıştır.

Tez çalışmasında BaGePt kübik kristalinin kesme enerjisi, k noktalarının sayısı ve hacim optimizasyonlarından oluşan yapı optimizasyonu, bant yapısı ve durum yoğunluğu hesaplamalarının yer aldığı elektronik özellikleri, bulk modülü, Young modülü, shear modülü ve elastik sabitler hesaplamalarından oluşan elastik özellikleri, bu kristal için literatürden elde edilen teorik örgü parametreleri ve atomik pozisyonlar kullanılarak hesaplanmıştır.

BaGePt kristali ile ilgili gerçekleştirdiğim bu çalışma ile bu malzemenin teknolojik olarak veya sanayide kullanımının artması konusunda daha çok bilgiye sahip olunması açısından önemli bir kaynak oluşturduğumuz kanaatindeyim.



3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Katıların Sınıflandırılması ve Kristal Yapısı

Katı yapılar birbirine elektriksel kuvvetlerle bağlanmış atomların düzenli olarak sıralanmasıyla oluşurlar. Bu kadar çok etkileşen parçacıkların incelenmesi imkânsız olarak görülebilir ancak bu sorun kristallerin simetri özelliği dikkate alınarak basitleştirilebilir.

Katı: Maddenin en düzenli halidir. Belirli sıcaklık, basınç ve hacimde atomlar arasında kuvvetli bağlar vardır. Bu bağları koparmak için çok yüksek enerjiye ihtiyaç duyulur. Katıların belli bir basınç ve sıcaklıkta hacim ve şekilleri sabit olur.

Sıvı: Maddenin bu halinde atomlar arasındaki düzen katılara oranla daha azdır. Atomlar veya moleküller arasındaki bağlar zayıftır bu nedenle düşük bir enerji ile zayıf bağlar koparılabilir. Sıvılar belli bir basınç ve sıcaklıkta sabit hacme sahiptirler ancak belirli bir şekilleri yoktur. Sıvı maddeler buldukları kabın şeklini alırlar.

Gaz: Maddenin en düzensiz halidir. Maddeyi oluşturan atom veya moleküllerin kinetik enerjisi oldukça yüksektir. Moleküller arasındaki bağlar oldukça zayıftır ve aralarındaki etkileşimlerinden kaynaklanan potansiyel enerji, kinetik enerjiyle karşılaştırıldığında oldukça düşüktür.

3.1.1. Kristal yapı

Atom veya atom gruplarının uzayda 3-boyutlu olarak geometrik düzende ya da şekilde dizilmesi sonucu oluşan yapıya kristal katı denir. Atom veya moleküllerin dizilişine göre katılar ikiye ayrılır. Bunlar;

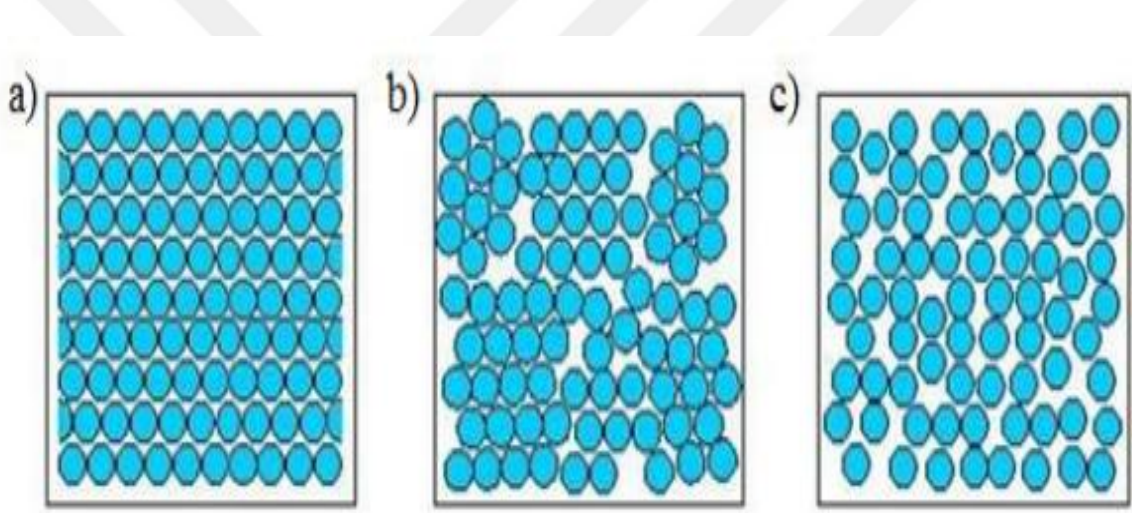
- Kristal katılar
- Amorf katılar olarak isimlendirilir.

Düzensiz yapıya sahip olan katılara amorf katılar denir. Örneğin elmas, pırlanta ve tuz (NaCl) birer kristal katı iken cam ve seramik düzensiz yapılarından dolayı amorf katılardır. Kristal katılar da kendi aralarında 2 ayrı kategoride ele alınırlar. Bunlar;

- Tek kristaller
- Polikristaller olarak bilinirler.

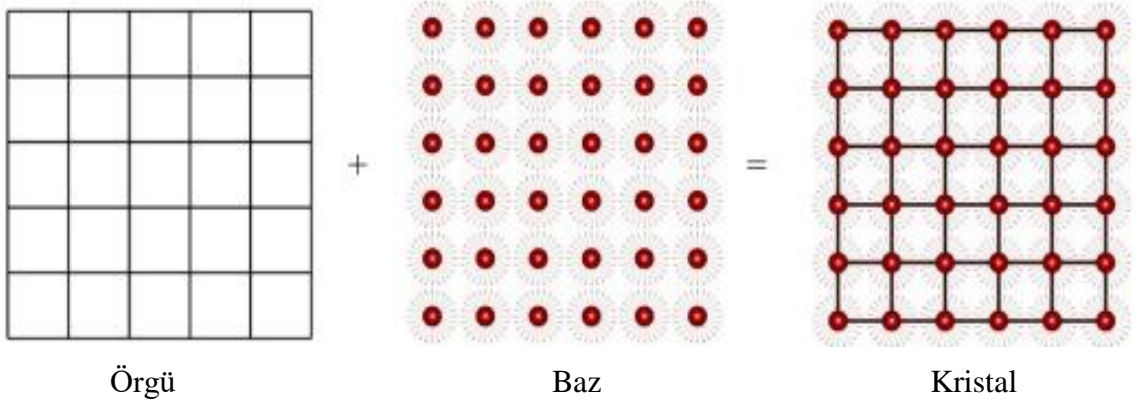
Tek kristal: Kristali meydana getiren alt birimlerin, kristalin her yerinde aynı düzgün sırada bulunması ile elde edilen kristal çeşitleridir

Polikristal: Bu kristal çeşidinde de düzen vardır. Fakat bu düzen ancak angström kadar olan tane boyutuna sahip kristal bölgeleri kadardır. Burada kristal, polikristal ve amorf katıların temsili şekilleri Şekil 3.1.'de gösterilmiştir.



Şekil 3.1. Atom dizilişine göre katılar: a) Tek kristal b) Polikristal c) Amorf.

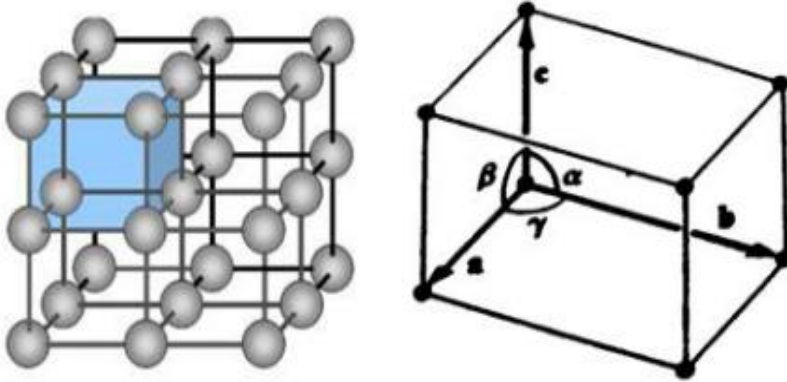
Bir kristaldeki genel ağ yapıya örgü denir. Bir örgüde bulunan en yakın iki eş atom arasındaki mesafeye örgü sabiti veya örgü sabitleri denir. Örgü sabitleri genelde “a, b ve c” ile gösterilir. Bu örgünün her düğüm noktasında bulunan atom veya atom gruplarına baz denir. Bazın tekrarlanmasıyla kristal oluşur (Kittel, 1996).



Şekil 3.2. Kristal tanımı.

$$\text{Örgü} + \text{Baz} = \text{Kristal Yapı}$$

Bu şekilde tanımlanabilir Kristalin tüm özelliklerini taşıyan kristalin en küçük parçasına birim hücre denir (Şekil 3.3) Tüm kristali incelemek yerine sadece birim hücreyi incelemek yeterli olur. Eğer birim hücrede tek atom varsa basit örgü, 2 veya daha fazla atom varsa buna da bileşik örgü denir. Herhangi bir birim hücre üç boyuttaki üç kenarı taban vektörleri olan a , b ve c ile bu kenarlar arasındaki üç açı, sırasıyla α (b ile c arasında), β (c ile a arasında) ve γ (a ile b arasında) ile tanımlanır (Dede,2015).



Şekil 3.3. Birim hücrenin şematik olarak gösterimi.

İlkel hücre seçimi için Wigner-Seitz hücresi çizilebilir. Wigner-Seitz hücresinin çizimi için merkez olarak bir örgü noktası seçilir. Daha sonra en yakın komşu atomlara bir doğru çizilir ve bu doğruların orta noktalarına bir dikme indirilir. Bu dikmelerin oluşturduğu alana Wigner-Seitz hücresi denir. Bu hücre ile simetri operasyonları

(dönme, yansıma, dönme+yansıma, inversiyon) kullanılarak tüm uzay doldurulabilir (Erzen, 2017).

3.1.1.1. Bir boyutlu örgü

3 boyutlu gerçek örgüyü daha kolay anlamak için öncelikle daha kolay anlaşılan bir boyutlu örgüyü inceleyelim.

N tane aynı atomdan oluşmuş bir sistem inceleyelim (Şekil 3.4) Bir doğrultu boyunca atomları birbirinden aynı uzaklıkta dizelim.



Şekil 3.4. Bir boyutlu örgü.

Burada “a” bir boyutlu örgü için örgü sabitidir. Çizilen bu sisteme bir boyutlu basit örgü denir. Örgü birimini, parçayı kendisine paralel olarak a'nın tam katlarında öteleyerek bu parça kendisine özdeş bir parça ile üst üste gelir. Bu işleme öteleme işlemi denir. Öteleme vektörü

$$\vec{T} = n\vec{a} \quad (3.1)$$

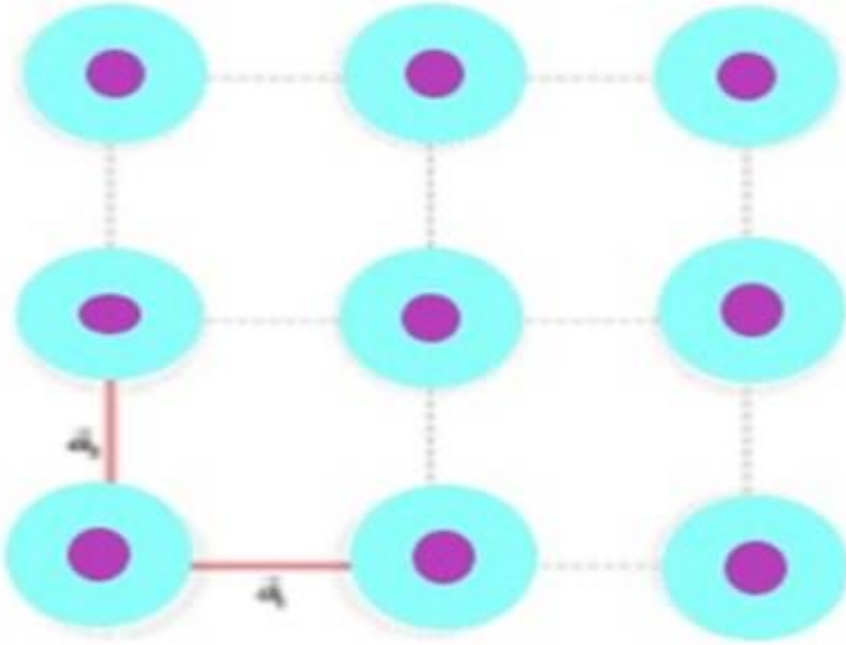
şeklinde ifade edilir. Buradaki \vec{a} örgü eksen vektörü ve n bir tam sayıdır. Örgü üzerindeki herhangi iki nokta bu tür vektörle birbirine ötelenebilir.

3.1.1.2. İki boyutlu örgü türleri

İki boyutlu örgü türleri olarak kare örgü, altıgen örgü, dikdörtgen örgü, merkezli dikdörtgen örgü ve eğik örgü olmak üzere 5 yapı mevcuttur. Bu yapılar için ilkel eksenler ve ilkel eksenler arasındaki açılar aşağıda verilmiştir (Erzen, 2017).

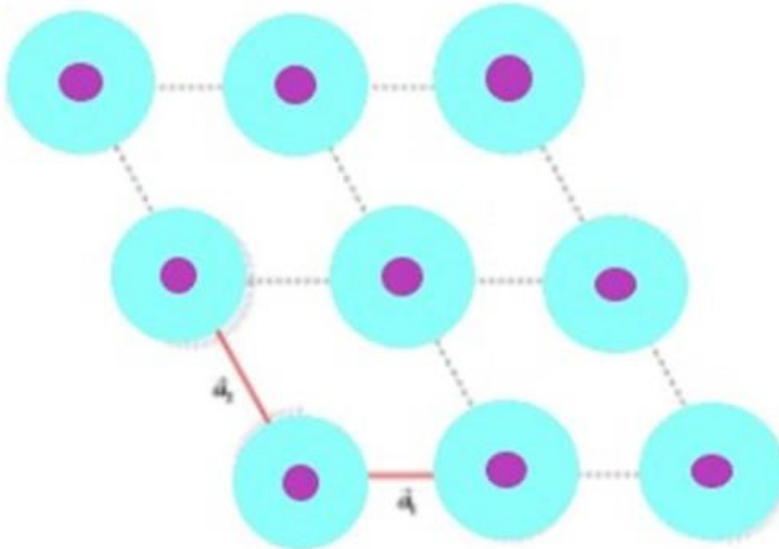
- Kare Örgü: Eksenlerinin uzunlukları birbirine eşit ve eksenler arasındaki açı 90° dir

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| \quad \emptyset = 90^\circ$$

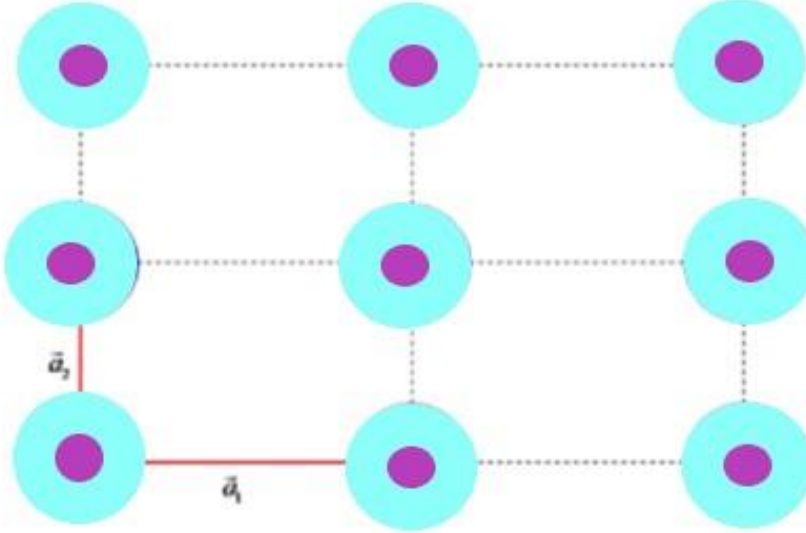


- Altıgen Örgü: Eksenlerinin uzunlukları birbirine eşit ve eksenler arasındaki açı $\phi = 120^\circ$ dir.

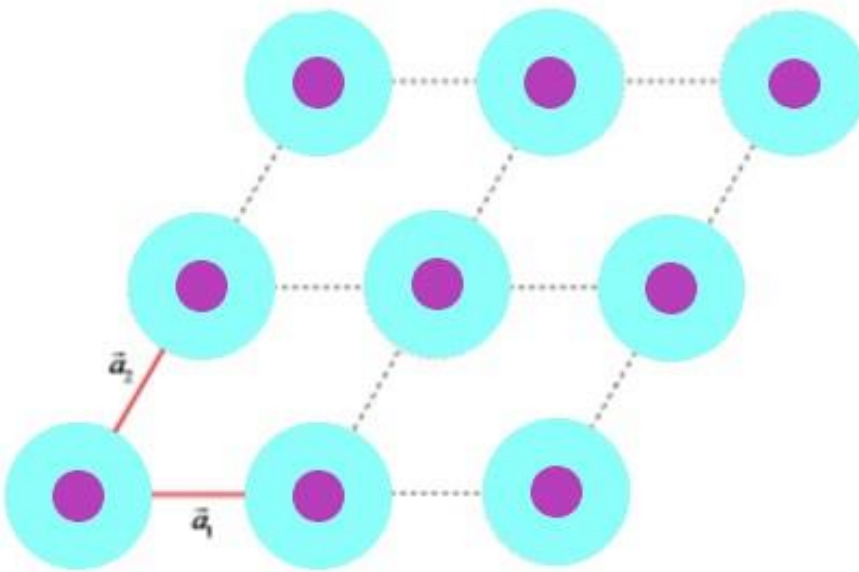
$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| \quad \phi = 120^\circ$$



- Dikdörtgen Örgü: Eksen uzunlukları birbirine eşit değil ve eksenler arasındaki açı $\phi = 90^\circ$ dir. $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$ $\phi = 90^\circ$

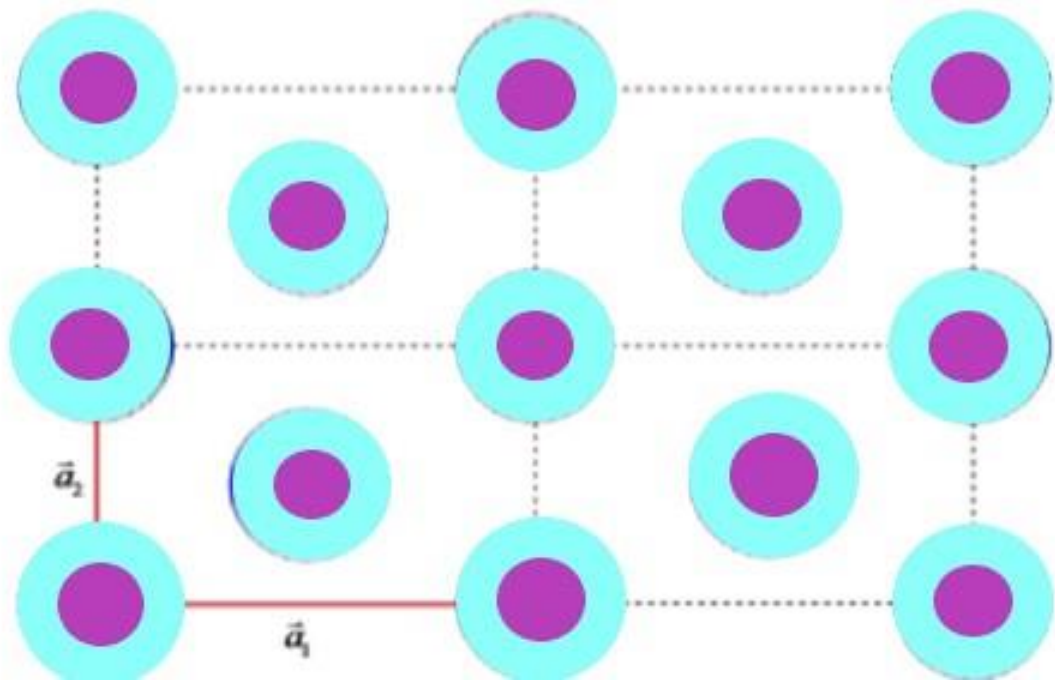


- Eğik Örgü: Eksen uzunlukları birbirinden farklı ve eksenler arasındaki açı $\phi \neq 90^\circ$ dir. $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$ $\phi \neq 90^\circ$



- Merkezli Dikdörtgen Örgü: Merkezde bir atom ve eksen uzunlukları birbirine eşit değil ve eksenler arasındaki açı $\phi = 90^\circ$ dir.

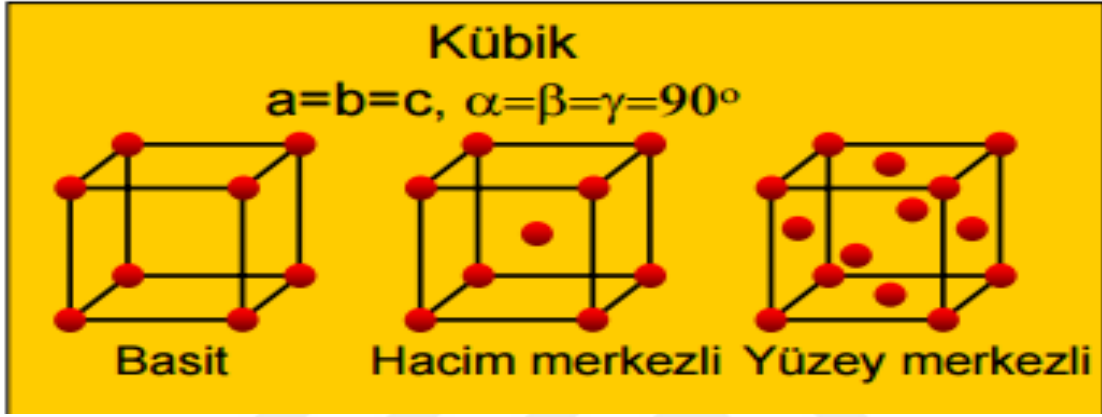
$$|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2| \quad \phi = 90^\circ$$



3.1.1.3. Üç boyutlu örgü türleri

Atomlar birim hücrede kafes noktaları olarak adlandırdığımız kısımlarda bulunmaktadır. Kafes parametresi olarak isimlendirilen yani kafes noktalarının birbirine göre yerleşim şekilleri bu kristal yapının karakteristiğidir. Kafesteki birim hücrelerinin alabileceği farklı değerlere bağlı olarak, doğada bulunan tüm kristalleri temsil eden yedi farklı şekilde ve büyüklükte birim hücre olduğunu ve bunların kübik hegzagonal, tetragonal, rombohedral, ortorombrik, monoklinik ve triklinik olmak üzere üç boyutlu uzayda 7 tane kristal sistem ve atomların bu kristal sistem içinde farklı konumlarda bulunma pozisyonlarına göre 14 tane farklı örgü (Bravais örgüleri) mevcuttur (Dede, 2015).

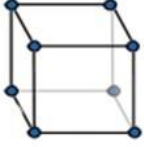
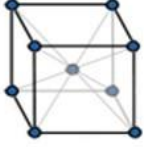


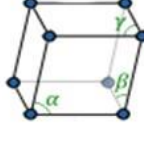
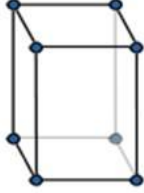
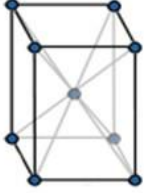
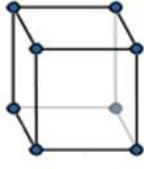

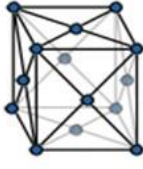
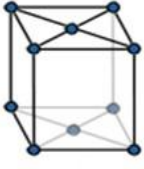
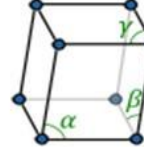
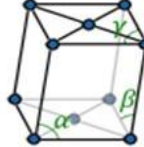
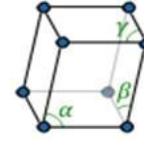
Bravais örgüleri kristal içindeki atomların farklı konumda yerleşmesiyle oluşur. Kristal içinde atomlar sadece köşelerde bulunursa basit örgü, hem köşelerde ve hem de yüzeylerde bulunursa yüzey merkezli örgü, köşelerde ve merkezde bulunursa hacim merkezli örgü ve sadece kristalin tavan ve tabanında ve köşelerinde bulunursa taban merkezli olur. Aşağıdaki Şekil 3.6'te kristal sistem ve bu kristal sistemdeki atomların farklı konumlarından dolayı oluşan 14 adet Bravais örgüsü verilmiştir.



Şekil 3.5. Basit örgü, cisim merkezli örgü, yüzey merkezli örgü.

Çizelge 3.1. Üç boyutta kristal sistemi ve Bravais örgüleri

Sistem	Eksen uzunlukları ve açılar	Bravais örgüsü
Kübik	Birbirine dik üç eksen	1)basit
	$a=b=c$	2)cisim merkezli
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3)yüzey merkezli
Tetragonal	İkisi eşit olan birbirine dik üç eksen,	4)basit
	$a=c \neq b$	5)taban merkezli
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Ortorombik	Birbirine dik eşit olmayan üç eksen,	6)basit
	$a \neq b \neq c$	7)taban merkezli
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	8)cisim merkezli
		9)yüzey merkezli
Rombohedral	Aralarındaki açılar birbirine eşit, üç eşit eksen	10) basit
(Trigonal)	$a=b=c,$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hegzagonal (Altıgen)	Aralarındaki açı 120° olan iki eşit eksen ve üçüncü eksen ilk ikisinin düzlemine dik,	11)basit
	$a=b \neq c,$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Monoklinik	Birbirine eşit olmayan üç eksen, eksenlerden ikisi birbirine dik değil, $a \neq b \neq c$	12)basit
	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	13)taban merkezli
Triklinik	Birbirine eşit olmayan üç eksen $a = b = c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	14) basit

	Temel yapılar	Hacim merkezli yapılar	Yüzey merkezli yapılar	Taban merkezli yapılar
Kübik				
Hegzagonal (altigen)				
Rombohedral				
Tetragonal				
Ortorombik				
Monoklinik				
Triklinik				

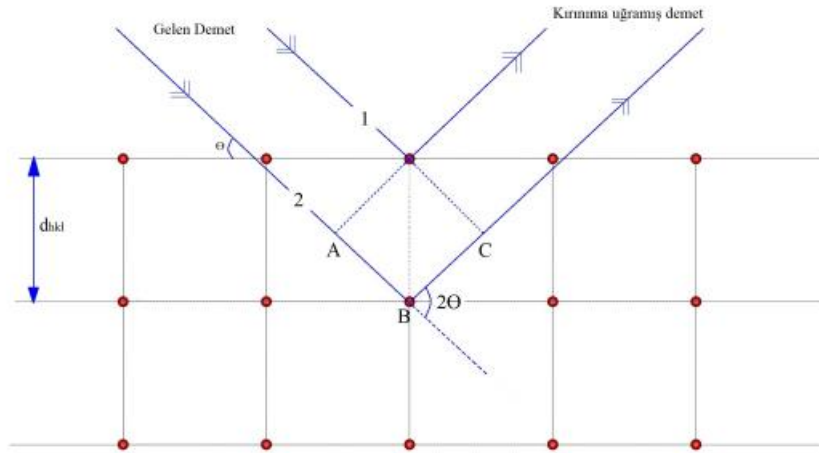
Şekil 3.6. Yedi kristal sistemi ve Bravais örgülerinin şekil ile gösterimi: (P: İlkel birim hücre, I: Cisim merkezli birim hücre, F: Yüzey merkezli birim hücre, C: Taban merkezli hücre (Dede, 2015).

3.1.2. Kristallerde kırınım ve ters örgü

3.1.2.1. Kristallerde kırınım

Kristallerin yapısı foton, nötron ve elektronların kırınımı ile incelenir. Atomik yapı düzeninin analizi için x-ışınları kullanılır. X ışınlarının kullanım sebebi ise bu ışının dalga boyunun kristallerde bulunan atomlar arasındaki mesafe ile aynı boyutlarda olmasıdır. X-ışınlarını merceklerle odaklamak ve büyütme mümkün olmadığı için, atomlara direk olarak bakılamaz. Bunun yerine kristal örgüyü oluşturan atomlardan yansıyan x-ışınlarının girişim etkileri dikkate alınır (Dede, 2015).

Kristale gelen x-ışını kristalin her tabakasında belli bir miktarı yansıtmaya uğrar. Yansıma sonucunda x-ışınları elastik saçılma yaparlar. Yani, kristaldeki atomlar ile x-ışınlarının çarpışmasından dolayı herhangi bir enerji değişiminin olmadığı kabul edilir. Kırınım, kullanılan dalga boyuna ve kristalin yapısına bağlı ve Şekil.3.7.'de görüldüğü gibi kristal yüzeyine tek dalga boylu X-ışını düştüğünü düşünelim. Yüze düşen X-ışını her tabakada belli miktarda yansıtmaya uğrayacaktır .



Şekil 3.7. Elektromanyetik dalgaların kristalde kırınımı.

Kübik yapılarda düzlemler arası mesafe (d_{hkl}) (a) örgü sabiti ile orantılıdır.

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \quad (3.2)$$

Saçılan X-ışınlarının yapıcı girişimi için ardışık düzlemlerden yansıyan demetlerin kristal yüzeyinden ayrıldıktan sonra, aynı fazda olmaları gerekmektedir. Bu durum

altında Şekil 3.7’de 1 ve 2 ile gösterilen ışın demetleri için, AB+BC toplamının gelen ışığın dalga boyu olan λ ’nın tam katlarına eşit olmalıdır. Bu nedenle;

$$AB + BC = n\lambda \quad (n=1,2,3,\dots)$$

Denklemdaki n yansıma katsayısı olarak bilinir.

AB =BC olduğu zaman,

$$\sin\theta = \frac{AB}{d_{hkl}} \rightarrow AB = d_{hkl} \cdot \sin\theta \text{ olur}$$

Bu durum Bragg yasası ile aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad (3.3)$$

Burada, d paralel örgü düzlemleri arasındaki mesafe, $2d\sin\theta$ komşu iki düzlemden yansıyan ışınların arasındaki yol farkıdır. Yapıcı girişim olması için bu iki düzlem arasındaki yol farkı dalga boyunun tam katları olması gerekir. Ancak bu yasanın gerçekleşmesi için ($\sin\theta \leq 1$ olduğundan) $\lambda \leq 2d$ şartı sağlanmalıdır (Aydoğan, 2014).

3.1.2.2. Ters örgü

Ters uzay ve ters örgü fizikte önemli kavramlardır. Çünkü fizikte kullanılan tüm nicelikler düz yani gerçek uzayda ifade edilemezler. Örneğin, potansiyel enerji gerçek uzayda kullanabileceğimiz bir nicelik iken, momentum ters uzayda kullanılabilen bir fiziksel niceliktir. Bir kristalde elektronların hareketi hem gerçek uzayda hem de ters uzayda tanımlanır. Gerçek örgü ile ters örgü arasındaki ilişki, periyot ile frekans arasındaki ilişkiye benzerdir. Gerçek uzaydaki örgü vektörleri “uzunluk” boyutunda iken, ters örgüde vektörler “ $\frac{1}{\text{uzunluk}}$ ” boyutundadır. Ters örgü aynı zamanda momentum uzayı veya k-uzayı olarak da bilinir (Ece, 2017).

Tüm kristallerin sahip olduğu örgü vektörleri ile ters örgü vektörleri birbirine dönüştürülebilir. \vec{a}_1, \vec{a}_2 , ve \vec{a}_3 gerçek uzayda kristal örgünün eksen vektörleri olmak üzere ters örgünün eksen vektörleri olan \vec{b}_1 , \vec{b}_2 ve \vec{b}_3 vektörleri,

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (3.4)$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{(\vec{a}_1 \times \vec{a}_3)}{\vec{a}_2(\vec{a}_1 \times \vec{a}_3)} \quad (3.5)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{\vec{a}_3(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)} \quad (3.6)$$

şeklinde ifade edilir. Tanımlanan her bir ters vektör, kristal örgünün diğer iki eksenine dik olur.

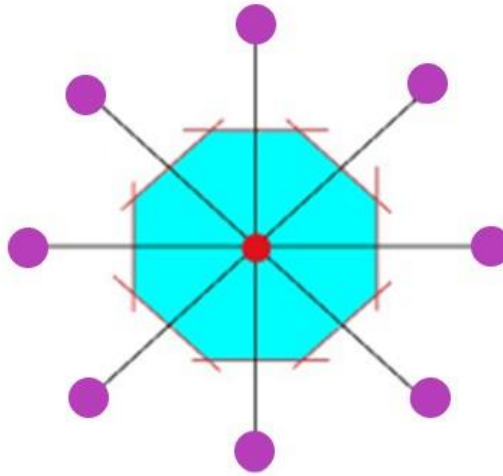
Ters örgü noktaları için genel öteleme vektörü,

$$\vec{G} = t_1 \vec{b}_1 + t_2 \vec{b}_2 + t_3 \vec{b}_3 \quad (3.7)$$

şeklinde ifade edilir. Burada t_1 , t_2 ve t_3 tamsayıları ifade etmektedir. \vec{G} vektörüne ise ters örgü vektörü denir. Tüm gerçek kristallerin bir ters örgüsü vardır. Örneğin, kübik bir kristalin ters örgüsü yine küptür. Hacim merkezli bir küpün ters örgüsü yüzey merkezli bir kübiktir. Yüzey merkezli bir küpün ters örgüsü hacim merkezli bir kübiktir.

3.1.3. Brillouin bölgesi ve Brillouin bölgesindeki özel k noktaları

Gerçek örgüdeki Wigner-Seitz hücresi ters örgüde Brillouin bölgesi olarak isimlendirilir. Başlangıç noktasından başlayan ters örgü vektörlerinin orta noktasına çizilen düzlemlerin oluşturduğu en küçük hacime Birinci Brillouin bölgesi denir.



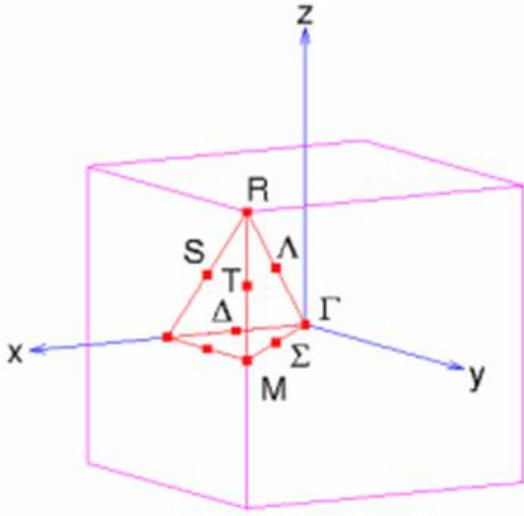
Şekil 3.8. Wigner-Seitz hücresi.

Kristal yapılarıdaki hesaplamalar için dalga vektörünün periyodik fonksiyonunun Brillouin bölgesinde integralinin alınması gerekmektedir. Bu integralin alınabilmesi için fonksiyonun her bir noktadaki değerinin bilinmesi gerekir. Kristal yapılarda sonsuz sayıda elektron olduğundan sonsuz sayıda da k noktası bulunur. Bu durum hesaplamaları imkânsız hale getirmektedir. Fakat elektronik dalga fonksiyonunun değeri kristalin simetri özelliklerinden dolayı birçok k noktalarında aynı olacağından birçok k noktasının integralini almaktansa bir tek k noktasının integralini almak daha kolay ve yeterli olacaktır (Erzen, 2017).

3.1.4. Yüksek Simetri Noktaları

Şekil 3.9'daki basit küp için yüksek simetri noktaları gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde,

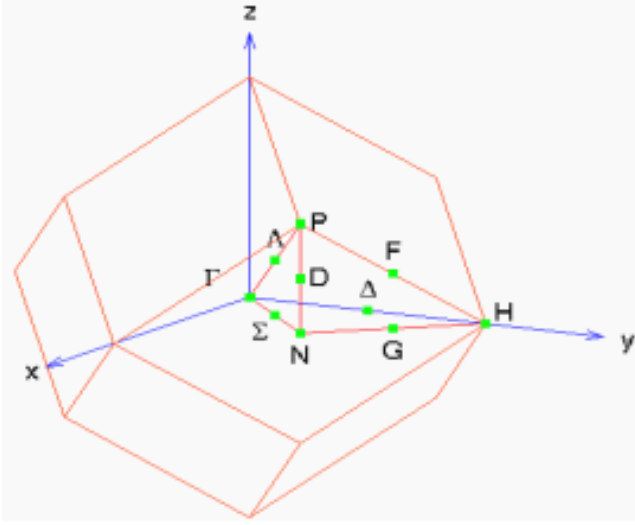
Γ (0,0,0) X (1/2,0,0) M (1/2,1/2,0) R (1/2,1/2,1/2) Δ (1/4,0,0) Σ (1/4,1/4,0) şeklindedir (Deligöz, 2007).



Şekil 3.9. Basit kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi.

Cisim merkezli kübik yapıdaki örgü için birinci Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktaları Şekil 3.10'daki gibi gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatlarının ters örgüdeki gösterimi;

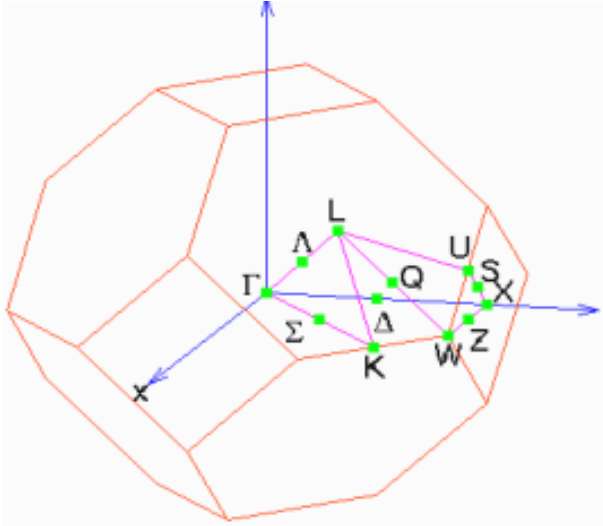
Γ (0,0,0), H (1/2,-1/2,1/2), P (1/4,1/4,1/4) N (0,0,1/2) Δ (1/4,-1/4,1/4) şeklindedir



Şekil 3.10. Cisim merkezli kübik yapı için birinci Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktalarının gösterilmesi.

Yüzey merkezli kübik yapıdaki örgü için birinci Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktaları Şekil 3.11’de gösterilmiştir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde gösterimi(Deligöz, 2007).;

Γ (0,0,0), X (1/2,1/2,0), L (1/2,1/2,1/2) W (3/4,1/2,1/4) Δ (1/4,1/4,0) Σ (1/4,1/4,1/4) şeklindedir.



Şekil 3.11. Yüzey merkezli kübik yapı için birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri noktalarının gösterilmesi.

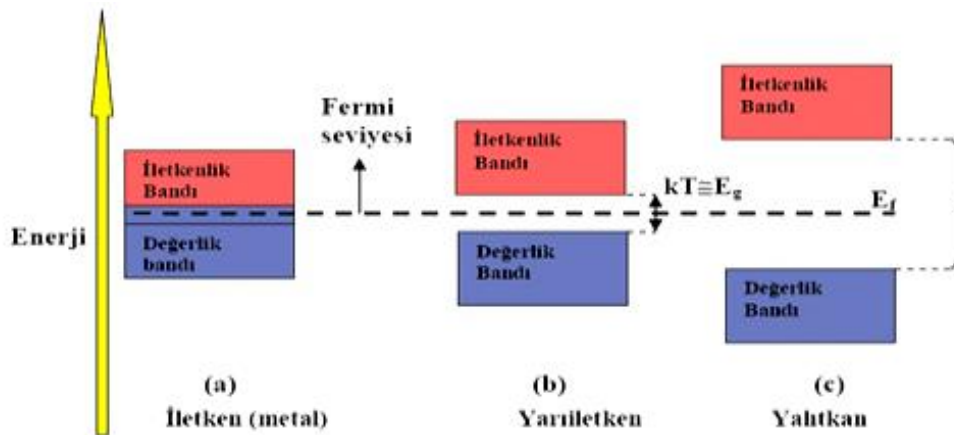
3.1.5. Katıların Bant Yapısı

Atomlar arasındaki etkileşim, uzaklığın karesi ile ters orantılıdır ve bu nedenle atomlar birbirlerine yaklaştıkça aralarındaki etkileşimde artar. Elektronlar orbitalleri doldururken düşük enerji seviyelerinden yüksek enerji seviyelerine doğru doldururlar. Tam dolu olan orbitaller kor bölgede bulduklarından atoma çok sıkı bağlıdır.

Elektronlarla doldurulan banda değerlilik (valans) bandı, elektronların geçebileceği izinli boş banda da ise iletkenlik bandı denilir. İletkenlik bandı ile değerlik bandı arasındaki elektronların bulunma ihtimalinin olmadığı aralığa ise yasak bant (E_g) aralığı denir. Yarı iletken ve yalıtkanlarda değerlilik bandı ile iletim bandı metallerde olduğu gibi kesişmezler. Metallerde iletkenlik bandı ile değerlik bandı üst üste çakışık haldedir, yani bu iki bant arasında yasak bant aralığı bulunmaz.

Yarı iletken malzemelerde bu aralık 0 ile 4 eV arasında değişmektedir. Yalıtkanlarda ise yasak bant aralığı 4 eV' den büyüktür. Şekil 3.1.4'da metal, yarı iletken ve yalıtkanlara ait bant yapısı gösterilmektedir (Doru, 2017).

Metaller, izinli durumları fazla olduğundan çok iyi iletkenlerdir. Şekil 3.12'de görüldüğü gibi Fermi enerjisi seviyesi (E_f) izinli bant aralığında bulunur. Fermi enerjisi yasak bant aralığında bulunmaktadır. Yarı iletkenlerde yasak bant aralığı yalıtkanlara göre daha az olduğundan elektronlar iletim bandına geçebilirler. Ancak yalıtkanlarda yasak bant aralığı çok büyük olduğu için elektronlar iletim bandına geçemezler ve iletkenlik özelliği göstermezler (Ece, 2017).



Şekil 3.12. İletken, yarı iletken ve yalıtkanlarda bant yapısı.

4. ÇOK PARÇACIK PROBLEMİ

Çok parçacık sistemine sahip atomlar, moleküller ve katılar gibi sistemlerin yapısal özelliklerini belirlemek için öncelikle bu sistemlerin elektronik yapılarının belirlenmesi gerekir. Bu bölümde temel durumda elektron-elektron etkileşiminin katıların özelliklerini nasıl etkilediğini inceleyeceğiz. Herhangi bir kristal sisteminde N tane birim hücre ve her birim hücrede s tane atom varsa bu kristal sisteminde $N \times s$ tane atom yer alacaktır. Aynı zamanda her atomda Z tane proton ve buna karşılık Z tane de elektron olacaktır. Elektronların de Broglie dalga boyu ile aralarındaki ortalama mesafe karşılaştırılabilir olduğunda kuantum etkiler ortaya çıktığından, madde içindeki elektronları tanımlamak için kuantum mekaniğinin yasalarını kullanmak gerekmektedir. Ayrıca elektronların sayısı arttıkça, birbirleriyle olan etkileşimleri hızla karmaşıklaşmaktadır. Sonuç olarak madde içindeki elektron sistemi bir kuantum sistemi olarak ele alınmak zorundadır (Akkuş, 2007). Temel durum enerjisi zamandan bağımsızdır. Böyle bir sistemin özellikleri, zamandan bağımsız Schrödinger (1926) dalga denklemi,

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (4.1)$$

ile ifade edilir. Burada \hat{H} çok parçacık sisteminin hamiltoniyeni, ψ çok parçacık dalga fonksiyonu ve E sistemin toplam enerjisidir. Elektron ve iyonlardan oluşan çok parçacıklı bir sistemi göz önüne aldığımızda dış alandaki bir kristal için hamiltoniyen,

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_1 + \hat{V}_{ii} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ei} + \hat{V}_{ext} \quad (4.2)$$

şeklinde ifade edilir. Burada, atomik birimlerde ve $m_i = m_e = \hbar = e = 1$ olmak üzere; Elektronların kinetik enerjisi,

$$\hat{T}_e = \sum_i^N -\frac{1}{2} \nabla_i^2 \quad (4.3)$$

İyonların kinetik enerjisi,

$$\hat{T}_1 = \sum_j^M -\frac{1}{2} \nabla_j^2 \quad (4.4)$$

Elektron – elektron etkileşim enerjisi,

$$\widehat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (4.5)$$

iyon – iyon etkileşim enerjisi,

$$\widehat{V}_{ii} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R_\alpha - R_\beta} \quad (4.6)$$

elektron iyon etkileşimi,

$$\widehat{V}_{ei} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1} \sum_{\alpha=1} \frac{Z_\alpha}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \quad (4.7)$$

Ve sistemi oluşturan tüm parçacıkların dış alandaki enerjisi,

$$\widehat{V}_{ext} = (r_1, r_2, r_3 \dots r_N; R_1, R_2, R_3 \dots R_M) \quad (4.8)$$

olarak tanımlanır. Çok elektron içeren sistemler için Schödinger dalga denklemini yaklaşımlar kullanmadan çözmek mümkün değildir. Bu problemi daha basit bir hale getirmek için Born-Oppenheimer, Hatree-Fock, Fermi-Dirac gibi bazı yaklaşımlar yapılmıştır.

4.1. Born- Oppenheimer Yaklaşımı

Çok cisim probleminin çözümü için yapılan ilk çalışma Born-Oppenheimer tarafından gerçekleştirilmiştir. Elektronların, iyonlara göre ağırlıkları çok daha azdır. Elektronların hareket enerjisine karşılık gelen kinetik enerji iyonların kinetik enerjileri ile karşılaştırıldığında elektronlar iyonlara göre çok daha hızlı parçacıklardır. Ancak, iyonlar elektronların tek bir tanesinin hareketinden etkilenmezler sadece elektronların ortalama hızından etkilenirler. Yani bu yaklaşıma göre iyonların kinetik enerjisi sıfır kabul edilebilir. İyon-iyon etkileşimi de sabit olacağından uygun bir referans enerjisi seçilerek sıfır alınabilir (Akkuş, 2007). Kristalin bulunduğu dış alan da sıfır kabul edildiğinde (3.9) verilen hamiltoniyen, elektronik hamiltoniyene dönüşür. Yani sonuç olarak

$$\frac{m_p}{m_e} = 1.836,152, \widehat{T}_1 = \widehat{V}_{ii} = \widehat{V}_{ext} = 0,$$

olduğundan elektronik hamiltoniyen,

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ei} \quad (4.9)$$

şeklini alır ve bu haliyle bile hala çözülemeyecek kadar karmaşıktır ve çözümü için yeni yaklaşımlar yapılmıştır.

4.2. Hartree Yaklaşımı ve Öz-Uyumlu Alan

Hartree (Hartree, 1928) çok parçacık problemin çözümünü daha basit hale getirmek için etkileşen elektronlar yerine etkileşmeyen elektronlar sistemini ele alarak çalışmıştır. Elektronların birbiri ile etkileşmediği varsayıldığından, elektron-elektron etkileşmesini ifade eden $\hat{V}_{ee} = 0$ olarak kabul edilmiştir. Etkileşen elektronları hesaba katmak için öz uyumlu alan olarak isimlendirilen ortalama bir alan tanımlanır. Hartree bu alanı şu şekilde ifade eder: N tane elektron olduğu düşünelim ele aldığımız elektron haricinde geriye kalan N-1 tane elektron bir elektron bulutu oluşturur. Bu elektron bulutundan kaynaklanan bir ortalama potansiyel ele alınan elektron üzerine etki eder ve ayrıca elektronun kendi etrafında dönmesinden dolayı bir potansiyel meydana gelir. Oluşan bu iki potansiyelin toplamına öz uyumlu alan denir. Bu şekilde tek bir elektron için Schrödinger dalga denklemi,

$$\hat{H}_i \psi_i = E_i \psi_i \quad (4.10)$$

şeklinde yazılır. Yani özuyumlu alan kullanılarak, çok-elektronlu Schrödinger dalga denklemi tek-elektronlu Schrödinger dalga denklemine dönüştürülmüş olur. Dolayısıyla çok elektron dalga fonksiyonu tek elektron dalga fonksiyonun çarpımı olarak yazılır, sistemin toplam enerjisi ise tek tek elektronların enerjilerinin toplamı olarak yazılır. Dalga fonksiyonu ve toplam enerji:

$$\psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_i^N \psi(\vec{r}_i) \quad (4.11)$$

$$E_e = \sum_{i=1}^N E_i \quad (4.12)$$

Çok elektron dalga fonksiyonuna tek elektron dalga fonksiyonuna indirgeyen Hartree denklemi;

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_i(\vec{r}_i) + \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \int |\psi_j(\vec{r}_j)|^2 \frac{d\vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \psi_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i) \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i) \quad (4.13)$$

şeklinde verilir.

Pauli dışarlama ilkesi iki fermiyonun aynı anda tamamen aynı kuantum sayılarına sahip olamayacaklarını ifade eder. Ancak denklemde de görüldüğü gibi elektronik dalga fonksiyonları tek elektronların dalga fonksiyonunun çarpımı şeklinde yazılmıştır. Bu yüzden dalga fonksiyonu denkleminde iki değişken yer değiştirdiğinde dalga fonksiyonu işaret değiştirmez, yani simetrik kalır. Bu durum Pauli dışarlama ilkesine uymaz. Çünkü Pauli ilkesine göre bu durumda elektronik dalga fonksiyonu anti simetrik olmalıdır çünkü fermiyonlar aynı kuantum sayılarına sahip olamazlar.

4.3. Hartree-Fock Yöntemi, Slater Determinantı ve Değişim Enerjisi

Hartree yönteminin Pauli ilkesini sağlamaması üzerine Hartree-Fock (Hartree-Fock, 1930) yöntemi ile yeni bir yaklaşım yapıldı. Hartree-Fock yaklaşımı ile elektronik dalga fonksiyonu, elektronik orbitallerin anti simetrik çarpımı olarak yazıldı (Akkuş, 2007)

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} [\psi_1(\vec{r}_1 s_1) \psi_2(\vec{r}_2 s_2) \dots \psi_N(\vec{r}_N s_N) - \psi_1(\vec{r}_2 s_2) \psi_2(\vec{r}_1 s_1) \dots \psi_N(\vec{r}_N s_N) + \dots] \quad (4.14)$$

Bu denklemde iki elektronun yer değiştirip çarpılması sonucunda dalga denkleminin yine anti simetrik çarpım olur ve bu çarpım Slater (1951) tarafından $N \times N$ şeklinde bir determinanta dönüştürülmüştür

$$\psi(\vec{r}_1 s_1, \vec{r}_2 s_2 \dots \vec{r}_N s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1 s_1) & \psi_1(\vec{r}_2 s_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N s_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1 s_1) & \psi_2(\vec{r}_2 s_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_N s_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1 s_1) & \psi_N(\vec{r}_2 s_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N s_N) \end{vmatrix} \quad (4.15)$$

ve bu şekilde ifade edilmiştir. Fock, Hartree'nin denkleminde değiş tokuş terimini ekleyerek denklemin yeniden düzenlendi ve elde edilen Hartree-Fock denkleminin, Denklem (4.3.3) de görüldüğü gibidir.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \psi_i(\vec{r}_i) + \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \int |\psi_j(\vec{r}_j)|^2 \frac{e^2 d\vec{r}_j}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \psi_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i) \psi_i(\vec{r}_i) - \sum_j \int \frac{e^2 d\vec{r}_j d\vec{r}_j'}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \psi_j^*(\vec{r}_j') \psi_i(\vec{r}_j') \psi_j(\vec{r}_j) \delta_{s_i s_j} = E_i \psi_i(\vec{r}_i) \quad (4.16)$$

Bu denklemin sol tarafındaki negatif terim değişim terimidir. Hartree-Fock yaklaşımı etkileşmeyen elektronlar sistemleri için geçerlidir ancak gerçekte elektronlar bir

birleriyle etkileşim içindedir. Bu nedenle Hartree-Fock yaklaşımında göz ardı edilen bu etkileşim enerjisine korelasyon enerjisi denir.

$$E_c = E_0 - E_{HF} \quad (4.17)$$

Korelasyon enerjisi Denklem (4.3.4) 'deki gibi ifade edilir. Denklemdaki E_0 terimi taban durum enerjisi E_{HF} terimi Hartree-Fock enerjisidir. Hartree-Fock enerjisi her zaman taban durum enerjisine eşit veya büyüktür. Bundan dolayı korelasyon enerjisi sıfıra eşit ya da sıfırdan küçük yani negatif olmaktadır.

4.4. Thomas-Fermi Teorisi Dirac Değişim Enerjisi

Çok parçacık probleminin çözümü için yapılan yaklaşımdan biride Thomas (1927) ve Fermi (1928) tarafından yapılmıştır. Bir atomun, molekülün veya katı bir maddenin elektronik yapısının elektron yoğunluğu ile tanımlandığı en basit teori Thomas-Fermi tarafından yapılmıştır. Bu yaklaşıma göre temel değişken elektron yoğunluğudur. Kullanmakta olduğumuz dalga fonksiyonları yerine elektron yoğunluğu ele alınmıştır. Elektron yoğunluğu birim hacimdeki elektron sayısıdır. Dolayısı ile bu yaklaşımda hamiltoniyeni oluşturan terimler elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli olarak tanımlanmış ve toplam enerji bu yolla hesaplanmıştır. Bu yaklaşımda da elektronlar bağımsız parçacıklar olarak ele alınmış ve değiş tokuş ve korelasyon enerjisi hesaba katılmamıştır. Daha sonra değiş-tokuş terimi Dirac (1930) tarafından hesaplamaya dahil edilmiştir



5. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ (DFT)

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) katıların fiziksel özelliklerini incelemede kullanılan önemli bir teoridir. DFT, Thomas ve Fermi'nin 1927 ve 1928 yıllarında yaptıkları çalışmalara dayanan bir teoridir. Ancak tam olarak temelleri Hohenberg-Kohn teoremleri ile atılmıştır. Daha sonra Kohn-Sham denklemleri yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temel denklemlerini oluşturmuştur (1965). Aynı zamanda katıların, molekül ve atomların elektronik yapılarını hesaplayabilen başarılı bir teoridir. Hesaplamalarda Schrödinger dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu kullanılır. Çünkü dalga fonksiyonun serbestlik derecesi birden fazla olduğu için çözümlenmek oldukça zordur bunun yerine elektron yoğunluğunun serbestlik derecesinin bir olması bu durumun karmaşıklığını en aza indirmektedir. Bu teorem, kimya, malzeme bilimi ve fizik dallarında, molekülün herhangi bir atomun veya katı yapının elektronik yapısını araştırmak için kullanılan bir yöntemdir. Bu teorem çok cisim probleminin çözümünde en sık kullanılan yöntemdir. Bu teoride çok elektronlu yapıların özellikleri fonksiyonellerle tanımlanır. Nedeni elektron yoğunluğuna bağlı olmasıdır.

Problemin çözümünü yapılırken bazı yaklaşımlar altında çözüm yapıldığından dolayı yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile yaptığımız çalışmaların sonuçları kesin değildir.

5.1. Hohenberg-Kohn Teoremleri

Hohenberg-Kohn (1964) yoğunluk fonksiyonelinin temelini, Thomas-Fermi teoreminden yararlanarak oluşturmuşlardır. Hohenberg ve Kohn $n(\vec{r})$ elektron yoğunluğunun fonksiyoneli varyasyonel yeni bir yol geliştirerek iki teoremin çözümünü ispat etmişlerdir (Akkuş, 2007). Bu yeni metod da dış potansiyelin değeri ne olursa olsun temel durumda elektronik sistemlerin tamamına uygulanan bir $F[n(\vec{r})]$ evrensel fonksiyoneline dayanır. Bu evrensel fonksiyonel bir dış potansiyeldeki minimum durum enerjisini hesaplamaya ve işlemleri kolaylaştırmaya oldukça yardımcı olmaktadır.

Bu teoremlerden ilki; ‘*Temel elektron durum yoğunluğu $n(\vec{r})$, bir sabit ile elektronlar sistemine bir dış potansiyel tanımlar.*’ Bu teoreme göre temel elektron yoğunluğu kullanılarak sistemin enerjisi bulunabilir ve böylece enerjiye bağlı tüm özellikler hesaplanabilir (Ece, 2017)

Bu ilk teorem de Schrödinger denkleminin çözülebilmesi için elektron yoğunluğu fonksiyonelinin olması gerektiğini söyler ama bu fonksiyonelin ne olduğunu ilk teoremde söylenmemiştir.

Hohenberg-Kohn’ nun ikinci teoreminde; ‘ *$E[n(\vec{r})]$ evrensel fonksiyonelinin kullanmak temel durum enerjisini ve yoğunluğunu bulmak için kafidir*’.

Her hangi bir $V(\vec{r})$ dış potansiyelin etkisi ile hareket eden rast gele alınan bir sayıdaki elektron grubu için elektronik hamiltoniyenin ifadesi:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{V}_{ee} \quad (5.1)$$

bu şekildedir. Buradaki denklemin açık hali:

$$\hat{T} = \frac{1}{2} \int \vec{\nabla}\psi^*(\vec{r})\vec{\nabla}\psi(\vec{r})d\vec{r} \quad (5.2)$$

$$\hat{V} = \int v(\vec{r})\psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d\vec{r} \quad (5.3)$$

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \int \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi^*(\vec{r}')\psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}')\psi(\vec{r})d\vec{r}d\vec{r}' \quad (5.4)$$

bu şekilde ifade edilir. Buradaki elektron yoğunluğu,

$$n(\vec{r}) = (\psi, \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})\psi) \quad (5.5)$$

ile ifade edilir. $\psi, n(\vec{r})$ ’nin fonksiyoneli olduğu için kinetik enerjisi ve etkileşim enerjisi de elektron yoğunluğunun fonksiyonelidir.

$$F[n(\vec{r})] = (\psi, (T + V_{ee})\psi) \quad (5.6)$$

Buradaki $F[n(\vec{r})]$, herhangi bir sayıda parçacık ve dış potansiyel için geçerli olan evrensel bir fonksiyoneldir. Bu fonksiyoneli kullanarak elektron yoğunluğunun temel durum enerjisini ve durum yoğunluğunu hesaplayabiliriz.

5.2. Kohn-Sham Denklemleri

Kohn ve Sham (1965) çok-elektron sistemleri için, değişim ve korelasyon etkilerini de içeren, Hatree Fock denklemlerine benzer öz uyumlu denklemler için bir formülasyon verdiler. Bu formülasyonlarda reel ve etkileşen bir elektronlar sistemi, etkileşmeyen hayali bir sisteme dönüştürülerek elektronlar etkin bir potansiyelde hareket ettirilir. Bu potansiyel 'Kohn-Sham tek parçacık potansiyelidir

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, dalga fonksiyonlarını kullanmadan sadece temel durum elektron yoğunluğunu kullanarak çok elektron sistemlerinin özelliklerini belirlemeyi amaçlar (Akkuş, 2007). Burada etkileşmeyen bir sistem göz önüne alınmıştır. Bu sistemin temel değişkeni olan elektron yoğunluğu,

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\vec{r})|^2 \quad (5.7)$$

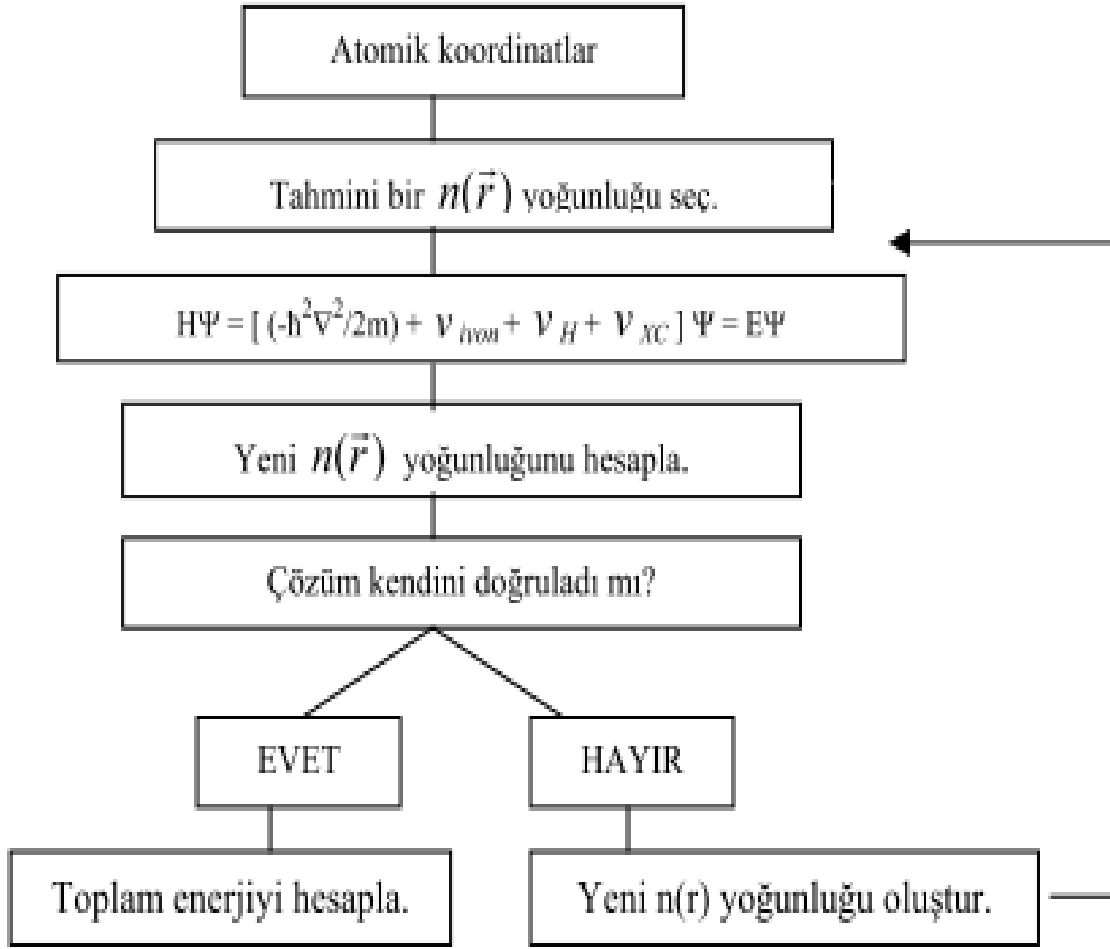
etkin potansiyeli,

$$V_{\text{etk}}[n(\vec{r})] = V(\vec{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r}' + V_{\text{xc}}(\vec{r}) \quad (5.8)$$

ve

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 V_{\text{etk}}(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (5.9)$$

olarak ifade edilir. Burada verdiğimiz üç denklem (5.2.1) başlayıp (5.2.3) e kadar olan denklemlere Kohn-Sham denklemleri denir. Tüm denklemler elektron yoğunluğu cinsinden yazılmıştır.



Şekil 5.1. Bir kristalin toplam enerjisini hesaplayan bir bilgisayar programının akış diyagramı

Şekil (5.1) de görüldüğü gibi burada aşağıdaki basamaklar uygulanır (Soyalp, 2006).

- İlk olarak $n(\vec{r})$ durum yoğunluğu tanımlanır.
- İkinci olarak $n(\vec{r})$ durum yoğunluğunu, Denklem (5.2.1), kullanılarak $\varphi_i(\vec{r})$ yani tek elektron dalga fonksiyonu bulunur
- Denklem (5.2.1) elde edilen tek elektron dalga fonksiyonları kullanılarak yeni durum yoğunluğu hesaplanır.
- Yeni elde ettiğimiz durum yoğunluğu ile 1. basamakta belirlediğimiz referans durum yoğunluğu, belirli bir tolerans değeri kadar yakınsa çözüm yapılmış olur yoksa 1. basamağa geri dönülerek durum yoğunluğu değiştirilir ve hesaplama baştan yapılır. Yoğunluklar arasındaki uyum sağlanana kadar işlem devam eder.

Kohn-Sham denklemlerinde deęiş-tokuş ve korelasyon terimlerini belirleyebilmek için bazı yaklaşımlar yapılır bunların en sık kullanılanları; Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) ve Yerel Yoęunluk Yaklaşımı (LDA) dır.

5.3. Yoęunluk Fonksiyoneli Oluşturma Yöntemleri

Deęişim- korelasyon fonksiyoneli tam olarak bilemediğimizi için bu nedenle ortaya çıkan bazı yaklaşımlar vardır. Bu yaklaşımlar Genelleştirilmiş Gradyent yaklaşımı (GGA) ve Yerel yoęunluk Yaklaşımı (LDA) gibi yaklaşımlardır.

5.3.1. Yerel yoęunluk yaklaşımı (LDA)

LDA (Local Density Approximation) korelasyon ve deęiş-tokuş enerjisi (E_{XC}) belirli bir yoęunlukta homojen olan elektron gazı; elektron sistemindeki çok-elektron etkileşmelerine ait analitik teorisinden türetilirler ve doğrudan veya deneysel yollarla düzgün olmayan elektron sistemlerine uygulanabilir hale getirilir. Bu yöntem, elektron yoęunluğunun yani birim hacimdeki elektron sayısının uzay boyunca deęişmez kaldığı şartlarda da ele alınır. Bu yaklaşımın hesaplamalarda birçok alanda kolaylık sağladığı ve doğru sonuçlar verdiği görülmektedir ve tüm LDA fonksiyonelleri aşağıdaki yapıdadırlar:

$$E_{XC}^{LDA}[n] = \int n(\vec{r})\epsilon_{XC}(n)d\vec{r} \quad (5.10)$$

Bu denklemdeki $\epsilon_{XC}(n)d\vec{r}$ ifadesi her bir elektronun deęişim korelasyon enerjisidir.

$$\epsilon_{XC}(n) = \epsilon_{X(n)} + \epsilon_C(n) \quad (5.11)$$

5.3.2. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA)

Kohn-Sham denklemlerinde eksikliği giderilemeyen deęiş-tokuş ve korelasyon enerjisi terimlerinin çözümlerini kolaylaştırmak için yapılan ikinci bir yaklaşımdır genelleştirilmiş Gradyent yaklaşımıdır. Bu yaklaşımın temelinde homojen olmayan hidrojen gazı baz alınarak hesaplamalar yapılmaktadır. Yani yoęunluğun uzaysal deęişimi hesaba dahil edilmektedir(Erzen, 2017). Bu yaklaşımında elektronlar bir

kristalin herhangi bir bölgesinde aynı yani homojen yoğunlukta olmadığı için hesaplamalar GGA yaklaşımına göre yapılmaktadır. GGA daki değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi,

$$E_{XC}^{GGA}[n] = \int d^3r f[n(\vec{r}), \nabla n(\vec{r})] \quad (5.12)$$

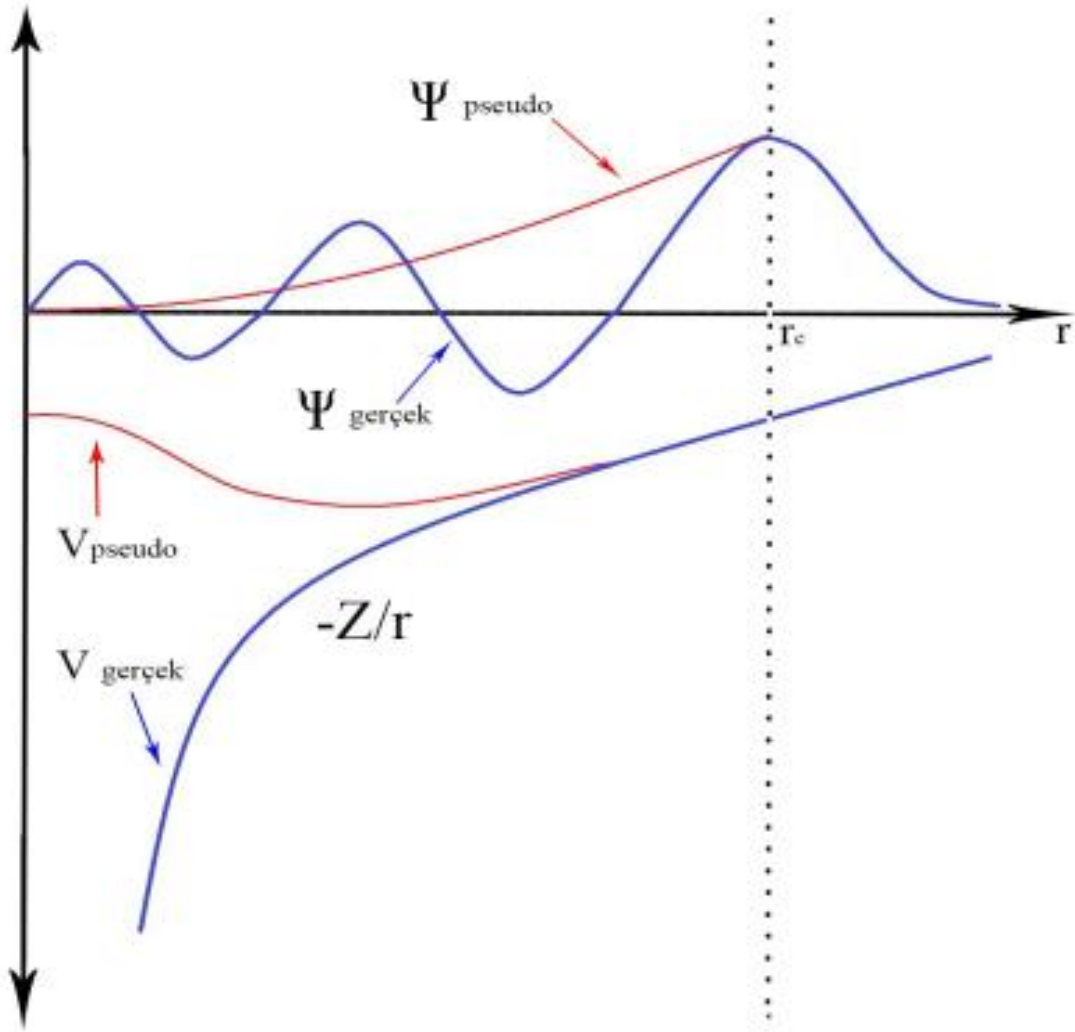
$$\varepsilon_{XC}(n) \neq \varepsilon_X(n) + \varepsilon_C(n) \quad (5.13)$$

şeklinde verilir. GGA ve LDA yaklaşımlarından hangisinin daha iyi sonuç vereceği kesin değildir. Bazı hesaplamalarda GGA iyi sonuçlar verirken bazı hesaplamalarda da LDA daha kesin sonuçlar vermektedir.

5.4. Pseudo Potansiyel Yaklaşımı

Pseudo-Potansiyel yaklaşımı, malzeme bilimi, yoğun madde fiziği ve kimyasal fizik gibi çalışma alanlarında kullanılan başarılı bir yaklaşımdır. Atomların çekirdeğe en yakın, en iç yörüngesinde bulunan elektronlar kor elektronları olarak isimlendirilir. Atomun en dış yörüngesinde bulunan elektronlara ise valans elektronları denilir.

Pseudo-Potansiyel yaklaşımına göre herhangi bir kristalin elektronik özellikleri belirlenirken valans elektronları da hesaba dahil edilir. Bunun nedeni kor elektronlarının, çekirdeğe çok yakın oldukları için çok sıkı bağlar yapmış olmalarıdır. Atomun son yörüngesindeki valans elektronları çok yüksek E_k enerjiye sahiptirler ve bundan dolayı yüksek hızlarla hareket ederler. Titreşim yaparken bazı elektronlar kor bölgesine girerler ve bu bölgede bulunan elektronlarla etkileşirler. Kor bölgesine giren valans elektronlarını temsil eden dalga fonksiyonları çok fazla sayıda düğüm noktalarına sahip olurlar. Tüm düğüm noktaları etrafında potansiyeli temsil eden dalga fonksiyonunu Fourier serisine göre hesaplamak gerektiğinden işlemler daha karmaşık hale gelir. Ancak elde edilen pseudo-potansiyele karşılık gelen pseudo dalga fonksiyonu kor yarıçap bölgesinin içerisinde hemen hemen hiç düğüm noktası içermez bu durum işlemlerde kolaylık sağlar(Dede, 2015). Kor yarıçapı içerisindeki pseudo-potansiyel kor elektronları neredeyse hiç denilecek kadar az düğüm yapmalıdırlar ve kor bölgesinin dışında gerçek potansiyellerle uyuşmalıdır.



Şekil 5.2. Pseudo-potansiyel gerçek ve pseudo dalga fonksiyonlarının gösterimi.

5.5. Abinit

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisine (DFT) dayanan ABINIT programı bu teoride kullanılan denklemleri baz alarak hesaplamaları bilgisayarlar ile yapan açık kaynak kodlu bir programdır. Abinit programının yapımını 1997 yılında Xavier GONZE ve arkadaşları başlatmışlardır, 2000 yılında ise ilk sürümü yayınlanmıştır. Malzemelerin özellikleri ile ilgili geniş bir araştırma olanağı ve

- Metal, yalıtkan ve yarı iletkenin malzemelerinin örgü parametrelerini hesaplar
- Atomların konumlarını, elastik özelliklerini, fonon, dielektrik ve piezoelektrik özelliklerini, lineer ve lineer olmayan optik özelliklerini
- Manyetik özellikler, termodinamik özellikler vb. özelliklerini hesaplayan bir bilgisayar yazılım programıdır

gibi kolaylıklar sağlar (Doru, 2010).

GGA ve LDA gibi yaklaşımlar kullanarak deęiş-tokuş enerjisi, enerji fonksiyonları hesaplamalarında kullanılır. Yalıtkan metal ve yarı iletken malzemelerin, baę açıları, atom konumları, örgü parametreleri elastik özellikleri, lineer ve lineer olmayan optik özellikleri, elektronik özellikleri manyetik özellikleri, dinamik ve termodinamik özellikleri (fonon dispersiyonu, entropi, vs.), gibi birçok hesaplama yapabilir. Abinit sadece Yoęunluk Fonksiyoneli Teorisi deęil, ayrıca Çok Cisim Pertürbasyon Teorisi ve Yoęunluk Fonksiyoneli Pertürbasyon Teorisi tabanlı olarak da çalışabilir. Periyodik tablodaki hemen hemen bütün elementler için pseudo potansiyeller kullanılarak hesaplamalar yapılmaktadır GGA yaklaşımı için FHI kodundan GGA (PBE) pseudo potansiyeli, LDA için (Troullier-Martins) pseudo potansiyelleri kullanılarak hesaplamalar yapıldı.

Biz bu çalışmada Abinit programını kullanarak BaGePt kristalinin birçok fiziksel özelliklerini LDA ve GGA yaklaşımlarını kullanarak malzemeyi incelendi ve sonuçları yorumlandı.

6. BULGULAR

6.1. BaGePt Kristalini Oluşturan Elementlerin Özellikleri

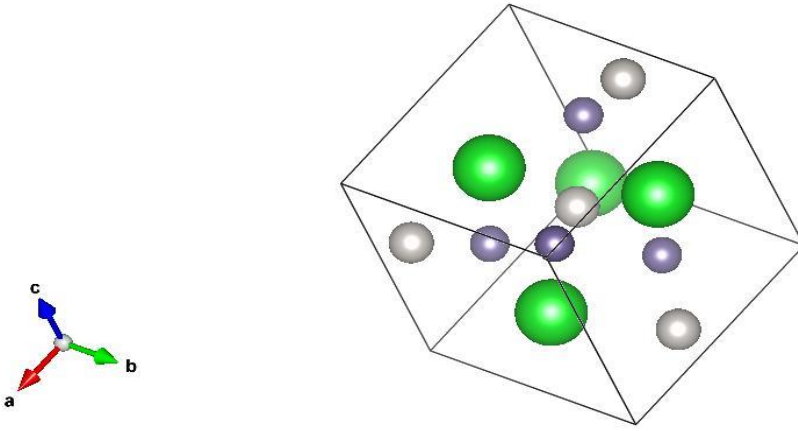
Baryum'un kimyasal sembolü "Ba"dır. Atom numarası 56, atom ağırlığı 137.32, yoğunluğu 3.51 gr/cm^3 'tür. Erime noktası 727^0 , kaynama noktası ise 1897^0 'dir. Periyodik cetvelin 2-A grubunda toprak alkali metaldir. Element halinde beyaz gri metalik görünümünde bulunabilirler. Isı ve elektriği iyi iletirler. Tel ve levha haline dönüştürülebilirler. Baryum, oldukça yüksek aktifliği olan bir elementtir. Yüksek reaktivitesi nedeniyle element halinde bulunmaz. Aktif bir element olduğu için su, oksijen, azot, kükürt, hidrojen, amonyak, halojenler ve asitlerle kolayca reaksiyona girebilir.

Germanyum'un kimyasal sembolü "Ge"dir, atom numarası 32, atom ağırlığı 72.64 olan bir elementtir. Periyodik tabloda 4-A grubunda bulunur. Erime noktası 938^0 , kaynama noktası ise 2833^0 dir. $600^0 - 700^0$ havada oksitlenir. Germanyum, gümüş grisi rengindedir. Kristal yapısı, elmasa benzer. Yarı iletken bir elementtir. Normal atmosferik şartlarda oldukça kararlı bir yapıdadır.

Platin'in kimyasal sembolü "Pt" dir, element tablosunun 8-B grubunda bulunur. Atom numarası 78, atom ağırlığı 195.09'dur. Katı, toz ve yumuşak olarak elde edilebilir. Platin, 1772^0 de erir, 3827^0 de kaynar. Çekirdeğinde 78 proton, 117 nötron vardır. Bir geçiş metalidir. Metalik parlaklıkta görünüşe ve kübik kristal sistemine sahip platinin kristalleri küçük taneler ve pullar halindedir. Elektrik ve ısı iletir. Sıcak altın suyunda çözünür. Yüksek sıcaklıklarda reaksiyona girer. Atmosferik korozyona ve kimyasal reaktiflere karşı dayanıklıdır. Çok yoğun ve ağır bir elementtir

Çizelge 6.1. Ba-Ge-Pt elementlerinin özellikleri

Elementler	Semboller	Atom Numarası	Element Serisi	Görünüm
Baryum	Ba	56	Alkali Metal	Beyaz/gri
Germanyum	Ge	32	Yarı Metal	Gümüş grisi
Platin	Pt	76	Geçiş metali	Metalik renkte



Şekil 6.1. BaGePt kristalinin birim hücresinin gösterimi (Vesta programı ile elde edilmiştir).

Çizelge 6.2. BaGePt kristali atom ve molekül sayısı

BaGePt ($P 2_1 3$)Kristali	
Birim Hücredeki Atom Sayısı	12
Birim Hücredeki Molekül Sayısı	4

Çizelge 6.3. Grup 198'in Wyckoff Pozisyonları (P 2 1 3)

Çarpan	Wyckoff harfi	Koordinatlar
4Ba	a	(x, y, z)
		(-x + 1/2, y, z + 1/2)
		(-x, y + 1/2, -z + 1/2)
		(x + 1/2, y + 1/2, -z)
4Ge	b	(z, x, y)
		(Z + 1/2, -x + 1/2, -y)
		(-z + 1/2, -x, y + 1/2)
		(-z, x + 1/2, y + 1/2)
4Pt	c	(y, z, x)
		(-y, z + 1/2, -x + 1/2)
		(y + 1/2, -z + 1/2, -x)
		(-y + 1/2, -z, x + 1/2)

6.2.Yapısal Optimizasyon

BaGePt kristalinin fiziksel özelliklerini GGA ve LDA yaklaşımları altında yoğunluk fonksiyoneli teorisi tabanlı Abinit programını kullanarak hesaplandı ve grafikleri elde edildi.

6.2.1 Kesme enerjisi

Bloch teoremine göre elektronik dalga fonksiyonu her bir noktasında bir kesikli düzlem dalga setine göre açılarak

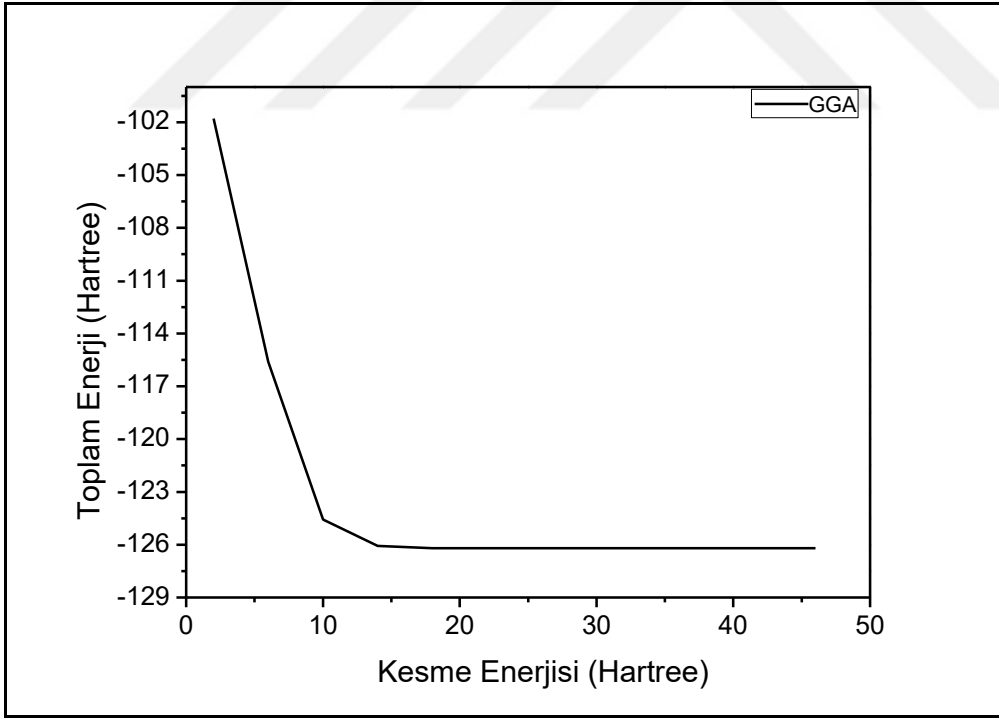
$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{n,\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} \quad (6.1)$$

şeklinde ifade edilir (Erzen, 2017). Bu denklemde ifade edildiği gibi elektronik dalga fonksiyonunu açmak için sonsuz bir düzlem dalga seti gereklidir. Ancak hesaplamalarda bu sonsuz düzlem dalga setine bir sınırlama getirilir. Bu sete sadece kinetik enerjileri belirli bir kesme enerjisinden küçük düzlem dalgalar dahil edilir (Akkuş, 2007).

$$\frac{\hbar}{2m} |\vec{k} + \vec{G}| \leq E_{\text{kes}} \quad (6.2)$$

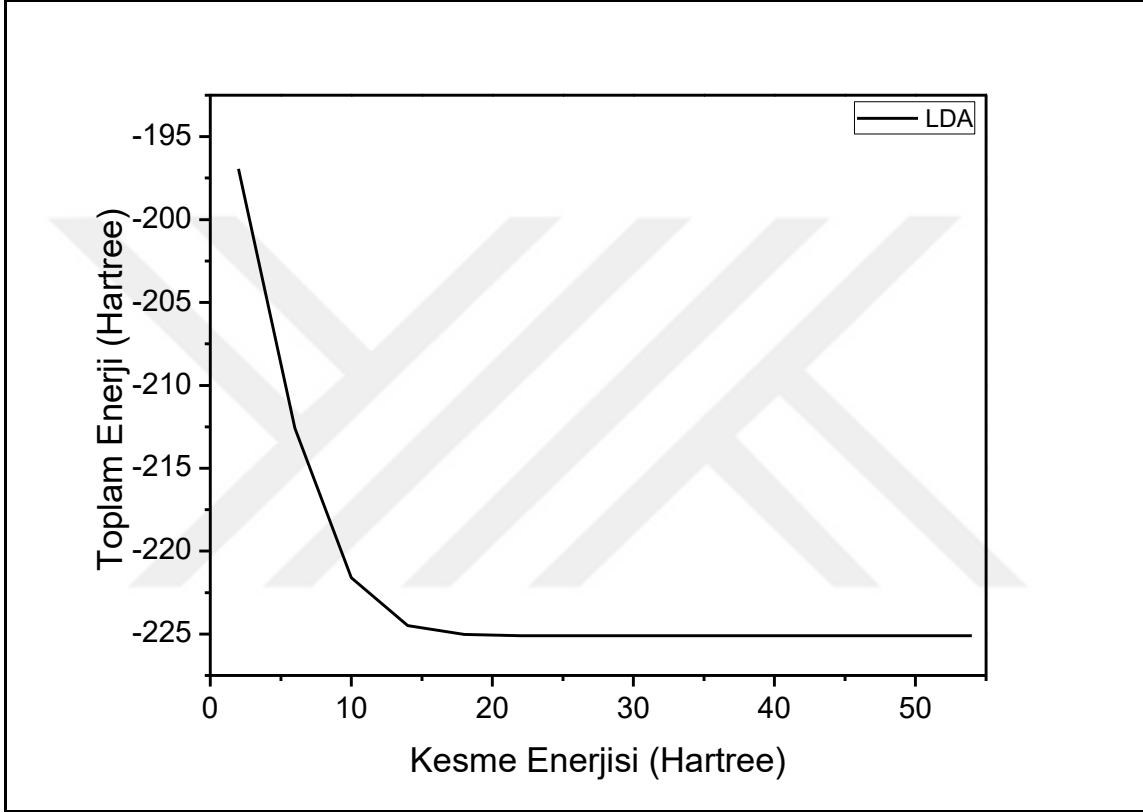
Düzlem dalgalarının bu şekilde kesilmesi, toplam enerji hesaplamalarında hataya sebep olur. Bu durumda kesme enerjisinin büyüklüğünün artırılmasıyla bu hata değerinin büyüklüğü azaltılabilir.

Bu tez çalışmasında biz GGA ve LDA yaklaşımları altında düzlem dalgaları için kesme enerjilerini hesaplandı. Hesaplamalarımızı ilk olarak GGA yaklaşımı altında kinetik enerji kesme (E_{kes}) değerini 2 Hartree'den başlatarak 4 er Hartree lik artışlarla 12 adım devam ettirerek gerçekleştirildi. Toplam enerjinin kesme enerjisine göre grafiği aşağıdaki Şekil 6.2.'deki gibidir.



Şekil 6.2. BaGePt kristalinin GGA yaklaşımına göre BaGePt kristalinin $E_{\text{top}} - E_{\text{kes}}$ grafiği.

Şekildeki grafikte de görüldüğü gibi toplam enerjinin -126.20006 Hartree'lik değerine karşılık kesme enerjisi değeri yaklaşık 20 Hartree'de sabitlenmektedir. Kesme enerjisinin bu değerinden sonra toplam enerjiye etkisi önemsenmeyecek kadar azdır bu nedenle E_{kes} değeri 20 seçilebilir ama biz hata oranını azaltmak için E_{kes} değerini biraz daha büyük bir değer seçerek daha detaylı incelemeyi amaçlandı ve bundan sonraki hesaplamalar için $E_{kes} = 30$ Hartree alındı.



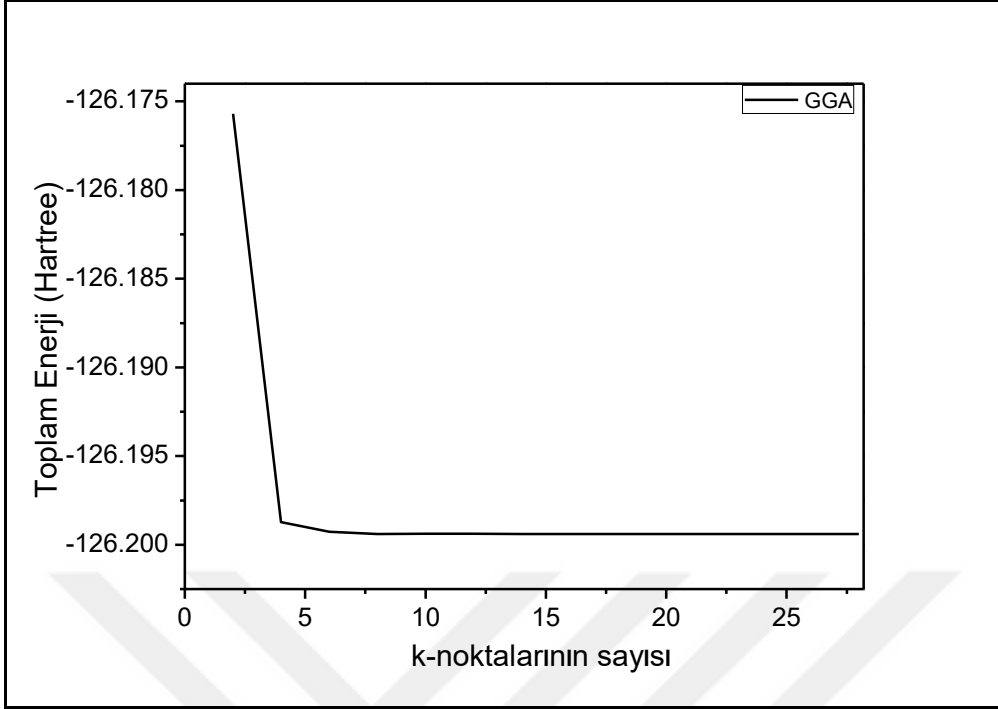
Şekil 6.3. LDA yaklaşımına göre BaGePt kristalinin $E_{top} - E_{kes}$ grafiği.

LDA yaklaşımı içinde aynı işlemleri yapıldı. Bu yaklaşımda toplam enerji (E_{top}) değişmiş ancak kesme enerjisi değeri GGA daki gibi yaklaşık 20 Hartree değerinde elde edilmiştir. Yine daha hassas hesaplamalar yapabilmek için sonraki hesaplamalara 30 Hartree değerinde devam edildi.

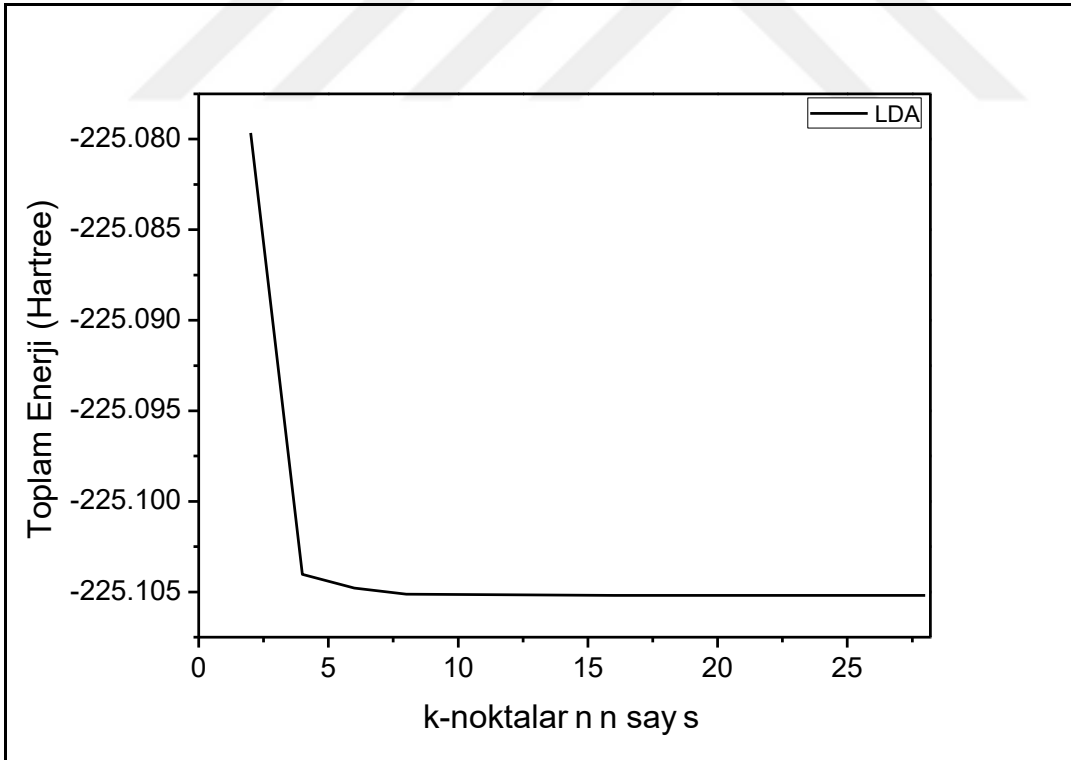
6.2.2. k- noktaları sayısı

Kristallerde birçok hesaplamanın yapılabilmesi için dalga vektörünün periyodik fonksiyonunun Brillouin bölgesi üzerinden integralinin alınabilmesi gerekir. Bu işlemi yapmak çok zordur hatta mümkün değildir çünkü bu fonksiyonun her \vec{k} noktasındaki değerini bilmek gerekir. Kristallerde neredeyse sonsuz sayıda elektron olduğundan sonsuz sayıda \vec{k} noktası vardır. Bu karmaşıklığı ortadan kaldırmak amacıyla Monkhorst ve Pack tarafından bir yöntem geliştirilmiştir (Monkhorst-Pack, 1976). Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, \vec{k} noktalarının sayısının bulunmasında bu yöntemi göz önünde bulundurarak hesaplama yapar. Bu yöntemle göre ters uzayda birbirlerine yakın \vec{k} noktalarında elektronik dalga fonksiyonunun büyüklükleri birbirlerine çok yakındır. Bu nedenle çok sayıda \vec{k} değerinin integralini almak yerine kristallerin simetri özelliğinden yararlanılarak tüm Brillouin bölgesinde belirli sayıda bulunan simetri noktalarındaki \vec{k} noktalarının integralini alarak hesaplamayı yapmak daha kolay olacaktır.

Bu tez çalışmasında BaGePt kristalinin \vec{k} noktaları optimizasyonu ve bu noktaların değerlerine karşılık gelen toplam enerjisi GGA ve LDA yaklaşımları altında hesaplandı ve grafiklerini gösterildi. Burada \vec{k} noktaları optimizasyonu yapılırken daha önceki adımda elde ettiğimiz toplam kesme enerjisini kullanıldı. \vec{k} noktalarının sayısını $2 \times 2 \times 2$ 'değerinden $28 \times 28 \times 28$ değerine kadar ikişer ikişer artırarak bu hesaplamayı yapıldı ve \vec{k} noktalarının değerlerini grafikte gösterildi.



Şekil 6.4. BaGePt kristali için GGA yaklaşımına göre E_{top} - k noktaları sayısı grafiği.



Şekil 6.5. BaGePt kristalinin LDA yaklaşımına göre E_{top} - k noktalarının sayısı grafiği.

Şekil 6.4 ve Şekil 6.5. de görüldüğü gibi Monkhorst-Pack bölümlenmesi hem GGA ve LDA yaklaşımlarına göre $10 \times 10 \times 10$ olarak seçildi. Bu değerler BaGePt kristalinde inceleyeceğimiz diğer hesaplamalarda kullanıldı.

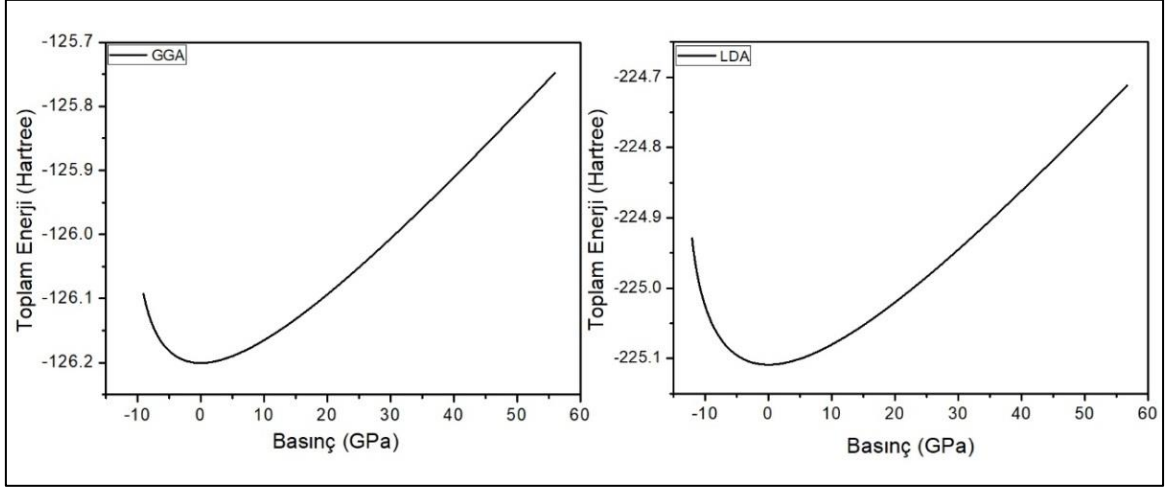
Çizelge 6.4. BaGePt kristalinin GGA ve LDA yaklaşımı altında k noktası sayısı E_{kes} enerjisi değeri ve k noktalarının sayısı

	E_{kes} değeri	Monkhorst Pack Bölümlenmesi	k noktalarının sayısı
GGA	30 Hartree	$10 \times 10 \times 10$	45
LDA	30 Hartree	$10 \times 10 \times 10$	45

6.2.3. Hacim Optimizasyonu

Çalışmamızın bu kısmını yapabilmek için önceden elde ettiğimiz kesme enerjisini ve k noktalarının sayısını GGA ve LDA yaklaşımları altında kullanarak hacim optimizasyonu yapıldı. Burada BaGePt kristalinin örgü parametrelerini kullanarak bu kristal için toplam enerji – basınç, toplam enerji – hacim, basınç – hacim ve örgü sabiti basınç değerleri arasındaki ilişki incelendi ve teorik olarak örgü parametreleri elde edildi.

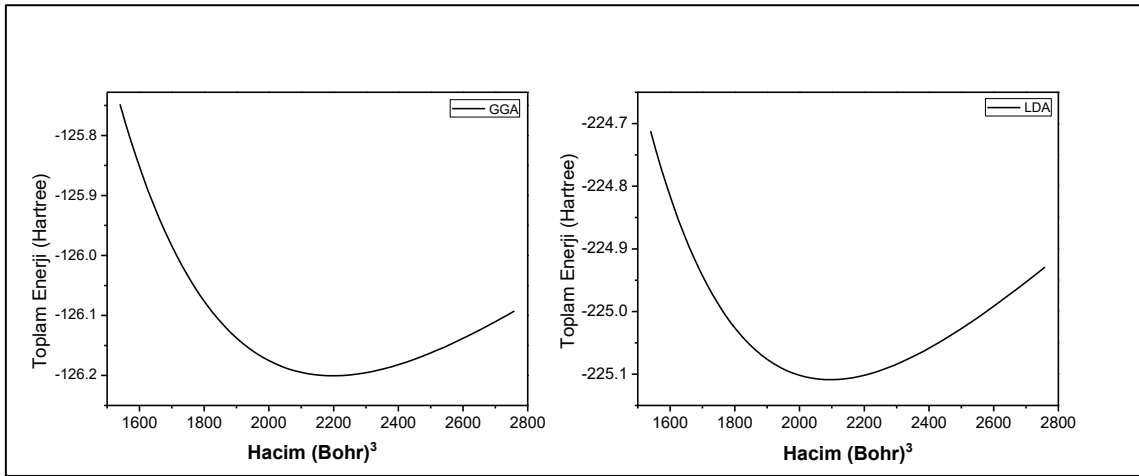
Kristallerde kararlı örgü sabitleri, toplam enerjinin en küçük değerine karşılık olarak bulunur. Toplam enerjinin elde edilmesiyle kristale ait tüm fiziksel özellikleri bulunabilir. Bu durum fiziksel özellikler ile toplam enerji arasındaki ilişkiyi ifade eder.



Şekil 6.6. GGA ve LDA yaklaşımı altında BaGePt kristalinin E_{top} - Basınç grafiği.

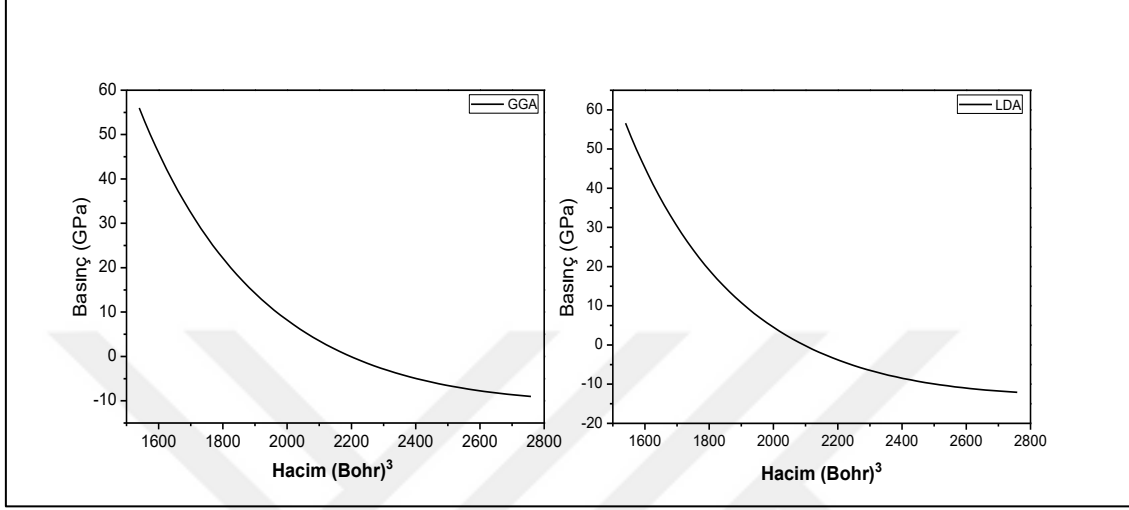
Şekil 6.6. de BaGePt kristali için GGA ve LDA yaklaşımları altında toplam enerjiye karşılık basınç grafikleri görülmektedir. Bu kristal için GGA ve LDA yaklaşımları altında basıncın sıfır olduğu değere karşılık gelen toplam enerji değerleri hesaplanmıştır.

Bu tez çalışmasında bu aşamadan itibaren araştırdığımız ve hesapladığımız tüm fiziksel özellikleri basıncın 0 GPa olduğu temel durumun yanı sıra 10, 20, 30, 40 ve 50 GPa basınç değerleri için de incelendi. Bu açıdan Şekil 6.6.'da da görüldüğü gibi BaGePt kristalinin 10, 20, 30 40 ve 50 GPa değerlerine karşılık gelen toplam enerji değerleri de görülmektedir.



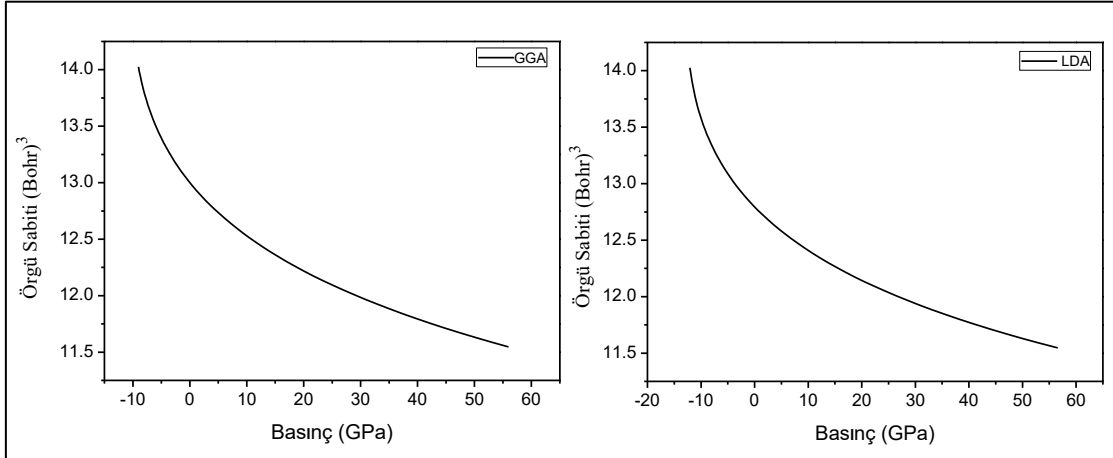
Şekil 6.7. GGA ve LDA yaklaşımı altında BaGePt kristalinin E_{top} - Hacim grafiği.

Şekil 6.7 de GGA ve LDA yaklaşımları altında BaGePt kristalinin toplam enerjiye karşılık hacim grafikleri görülmektedir. Bu hesaplamalardan toplam enerjinin minimum olduğu yada diğer bir ifadeyle kristalin en kararlı olduğu değer her iki yaklaşım için de hacim değerinin minimum noktasına karşılık gelen değer bulundu.



Şekil 6.8. GGA ve LDA yaklaşımı altında BaGePt kristalinin Basınç - Hacim grafiği.

BaGePt kristali için GGA ve LDA yaklaşımları altında basınç-hacim grafikleri elde edilmiş ve Şekil 6.8’de verilmiştir. Bu grafiklerden de görüldüğü gibi hacim ve basınç değerleri ters orantılı olarak değişmekte diğer bir deyişle, hacim değerleri artarken basınç değerleri azalmaktadır.



Şekil 6.9. GGA ve LDA yaklaşımı altında BaGePt kristalinin Örgü Sabiti–Basınç grafiği.

BaGePt kristali için basınç değerlerine karşılık örgü sabiti grafiklerini hem GGA hem de LDA yaklaşımları altında elde edildi. Şekil 6.9’da da görüldüğü gibi basınç değerleri arttıkça örgü sabiti değerleri azalmaktadır. Bu aşamadan itibaren tüm fiziksel özellikleri incelediğimiz basınç değerleri olan 10, 20, 30, 40 ve 50 GPa için örgü parametreleri değerleri GGA ve LDA yaklaşımları için karşılaştırmalı olarak Çizelge 6.5’de verilmiştir.

Çizelge 6.5. BaGePt kristalinin teorik değerler ile örgü sabitlerinin karşılaştırılması

BaGePt ($P 2_1 3$) Temel Durumda		GGA	LDA
Örgü Sabiti (Bohr)	Bu Çalışma	12.9999	12.7833
	Teorik değer	12.9471	
	Teorik Değerden		
	Sapma miktarı (%)	%0.41	%1.28

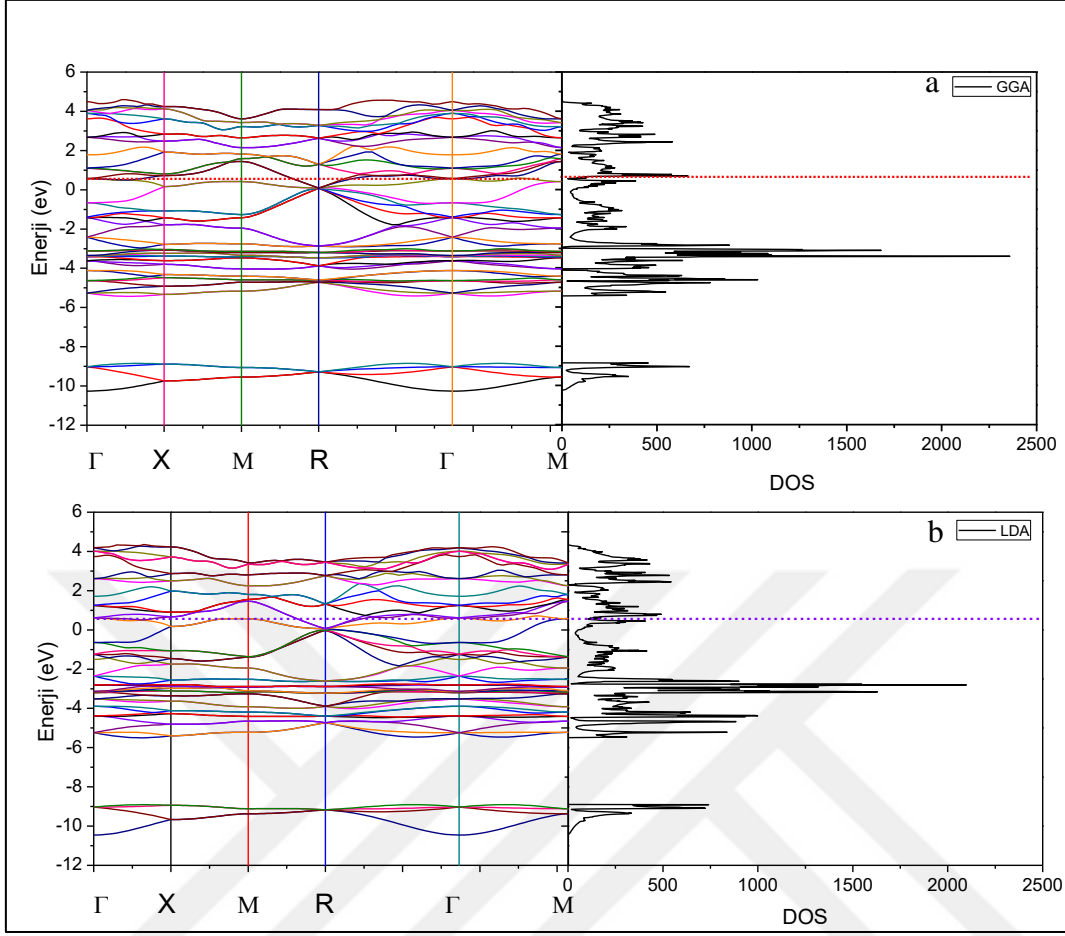
Çizelge 6.6. BaGePt kristalinin farklı basınçlarda ki örgü sabitleri değerleri.

BaGePt($P 2_1 3$)		0 GPa	10GPa	20 GPa	30 GPa	40 GPa	50 GPa
Örgü Sabiti (Bohr)	GGA	12.9999	12.5146	12.2137	11.9744	11.7759	11.6126
	LDA	12.7833	12.3986	12.1305	11.9207	11.7687	11.6372

6.3. BaGePt Kristalinin Elektronik Bant Yapısı

Çalışmamızın bu kısmında BaGePt kristalinin elektronik bant özelliklerini GGA ve LDA yaklaşımları ile temel durumda ve farklı basınçlar altında incelendi. BaGePt kristali için yüksek simetri noktalarında temel durumdaki ve farklı basınçlar altındaki örgü parametrelerini kullanarak elektronik bant yapıları elde edildi.

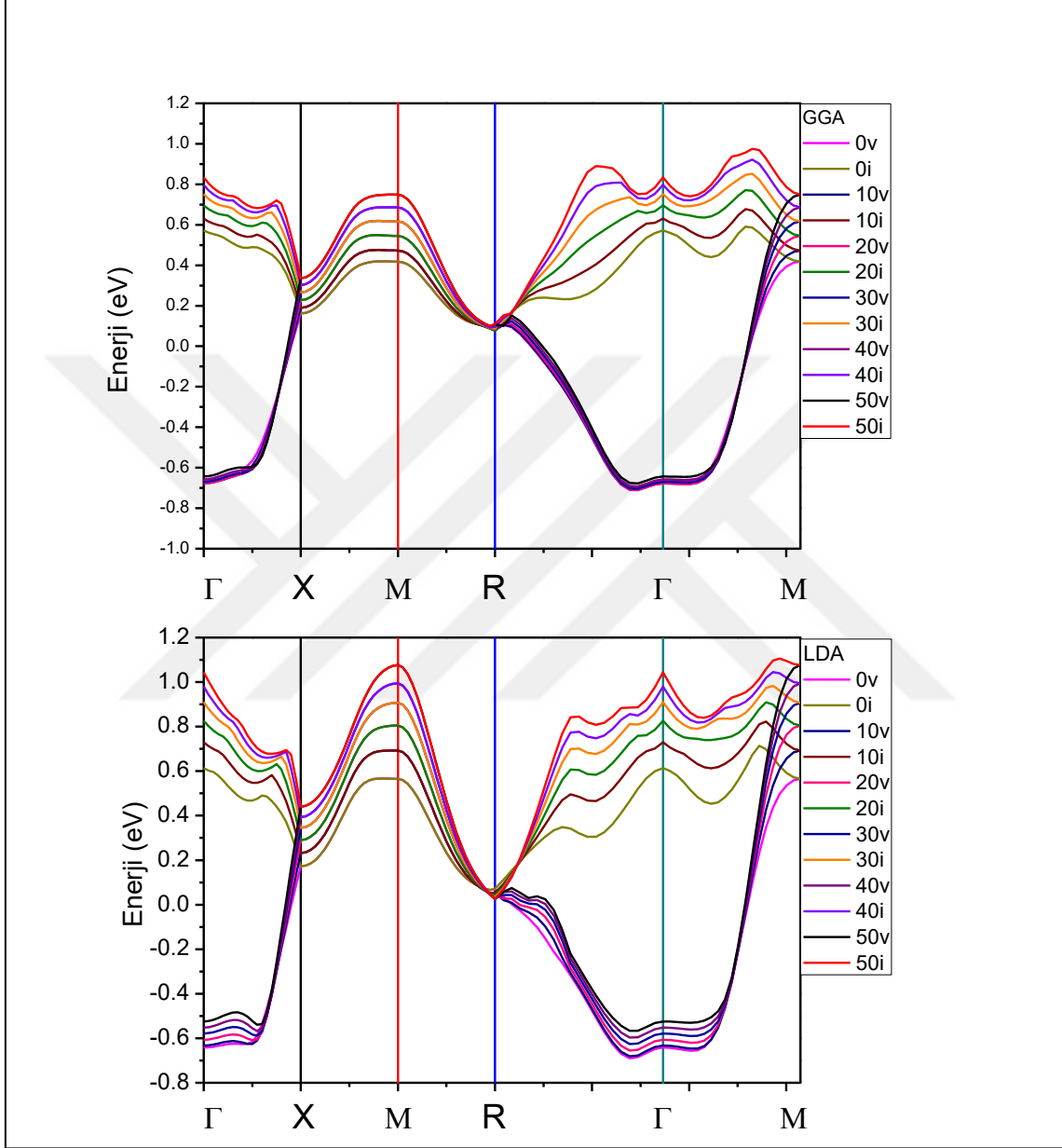
Aşağıda Şekil 6.10.’da kübik yapıdaki BaGePt kristali için yüksek simetri noktaları verilmiştir(Deligöz, 2007). Çizelge 6.7’de kübik yapıdaki BaGePt kristali için yüksek simetri noktaları koordinatları gösterilmiştir. Burada gidilen yol için kullanılan



Şekil 6.11. BaGePt kristalinin temel durumda elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.

BaGePt kristali için 0, 10, 20, 30, 40, ve 50GPa basınç değerlerindeki örgü parametrelerini kullanarak, her basınç değerinde elektronik bant yapısını GGA ve LDA yaklaşımları altında elde edildi. Şekil 6.11.'de BaGePt kristalinin temel durumda yani 0GPa lık basınç altındaki elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu grafikleri GGA (Şekil 6.11.a) ve LDA (Şekil 6.11.b) için gösterilmektedir. Temel durumdaki bu elektronik bant yapısı grafiklerini incelediğimizde M yüksek simetri noktasında 0.415894412 eV değerinde valans bandının tepe noktası ile iletkenlik bandının minimum noktasının çakıştığı görülmektedir. Bu nedenle yasak band aralığı değeri bulunmamaktadır. Yasak bant aralığının olmamasından dolayı BaGePt kristalinin metal olduğunu anlamaktayız.

Yine Şekil 6.11.'de de görüldüğü gibi BaGePt kristali için GGA ve LDA yaklaşımlarının her ikisinde de elektronik bant yapısı ile durum yoğunlukları uyumludurlar.



Şekil 6.12. BaGePt kristalinin GGA ve LDA yaklaşımı altında farklı basınçlardaki elektronik bant yapısı.

Bu kristal yapıdaki birim hücrenin her biri 4 atomdan oluşan 3 tane BaGePt molekülü olmak üzere toplam 12 atomdan oluşmaktadır. Ba, Ge ve Pt atomlarının

valans elektronları sırasıyla $4d^{10}5p^66s^2$, $4s^23d^{10}4p^2$ ve $6s^14f^{14}5d^9$ şeklindedir. Hesaplamalarda kullandığımız valans bandı sayısını 60 olarak alındı ve hesaplandı.

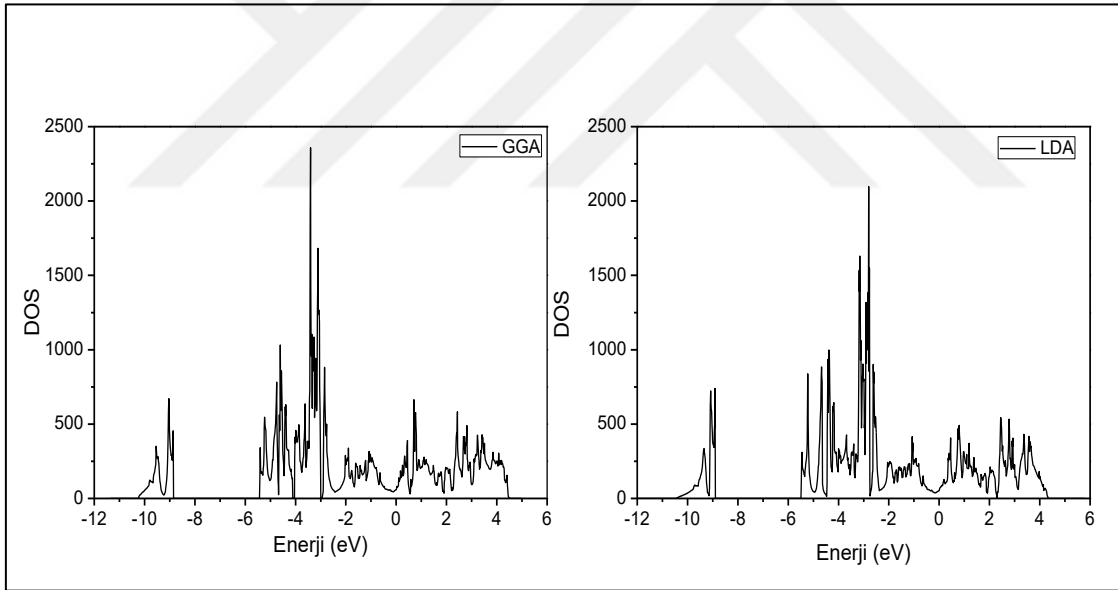
BaGePt kristalinin elektronik bant yapısını 0GPa- 50GPa arasındaki basınçlar altında GGA ve LDA yaklaşımlarıyla incelendi, elde edilen grafikler Şekil 6.12.'de verilmiştir. Tüm basınç değerlerinde temel durumda olduğu gibi, valans bandı ile iletim bandı çakışık durumdadır. Çizelge 6.8.'de BaGePt kristalinin yüksek simetri noktaları arasında enerji geçişleri tüm basınç değerleri için verilmiştir.

Çizelge 6.8. BaGePt kristalinin yüksek simetri noktaları arasında enerji geçişleri

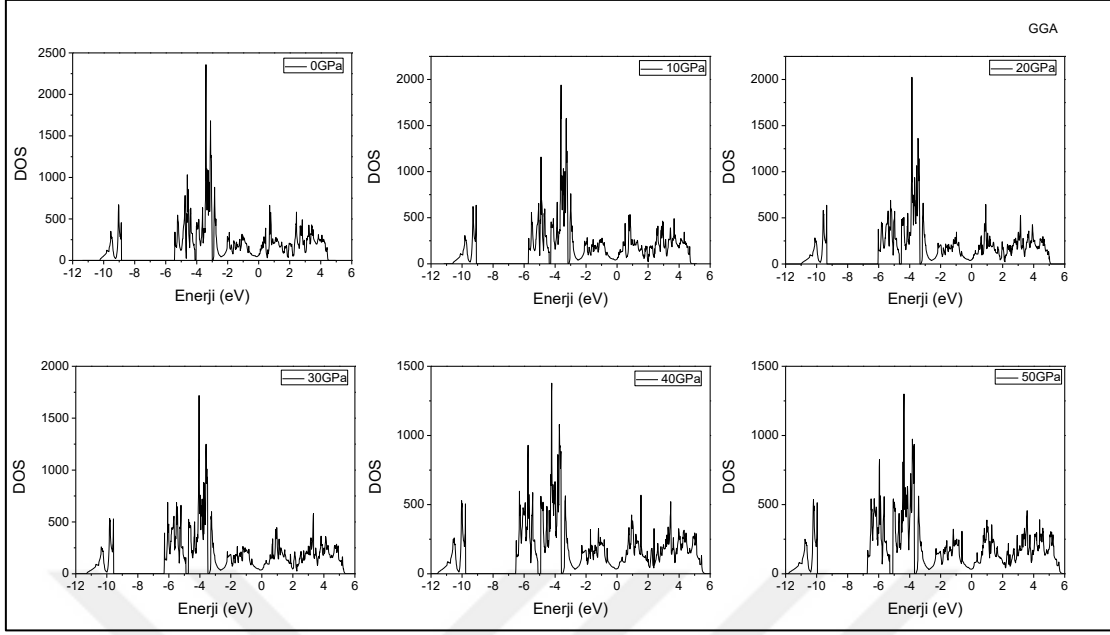
	0GPa	10GPa	20GPa	30GPa	40GPa	50GPa
$E_{(\Gamma-\Gamma)}$	1.2268	1.3074	1.3731	2.1386	1.4548	1.4784
$E_{(\Gamma-x)}$	1.4074	1.7539	1.8617	1.9431	1.9991	2.0476
$E_{(\Gamma-m)}$	1.8187	1.9258	2.0125	2.0821	2.1355	2.1768
$E_{(\Gamma-R)}$	0.4934	0.5628	0.6259	0.6908	0.7414	0.7826
$E_{(x-x)}$	0	0	0	0	0	0
$E_{(x-\Gamma)}$	0.8258	0.8693	0.903	1.6539	0.9611	0.9797
$E_{(x-m)}$	1.4177	1.4877	1.5424	1.5974	1.6418	1.6781
$E_{(x-R)}$	0.0924	0.1247	0.1558	0.2061	0.2477	0.2839
$E_{(m-m)}$	0	0	0	0	0	0
$E_{(m-x)}$	1.2594	1.6023	1.7109	1.8067	1.8887	1.9626
$E_{(m-\Gamma)}$	1.0788	1.1558	1.2223	2.0022	1.3444	1.3934
$E_{(m-R)}$	0.3454	0.4112	0.4751	0.5544	0.631	0.6976
$E_{(R-R)}$	0	0	0	0	0	0
$E_{(R-x)}$	0.9340	1.2013	1.2435	1.2782	1.3015	1.3189
$E_{(R-m)}$	1.3453	1.3732	1.3943	1.4172	1.4379	1.4481
$E_{(R-\Gamma)}$	0.7534	0.7548	0.7549	1.4737	0.7572	0.7497

6.4. Durum Yoğunluğu

Birim enerji aralığında bulunan toplam durumların sayısına durum yoğunluğu denir. Durum yoğunluğunu kullanarak malzemenin yalıtkan, iletken ya da yarı iletken olup olmadıklarını anlayabiliriz. Bu çalışmamızda GGA ve LDA yaklaşımları altında BaGePt kristalinin toplam durum yoğunluğunu incelendi ve LDA ve GGA yaklaşımları altında temel durumda ve 0GPa – 50GPa basınları arasında malzemenin toplam durum yoğunluğunu hesaplayarak grafiklerini çizildi. Şekil 6.13.'de BaGePt kristalinin toplam durum yoğunluğu GGA ve LDA yaklaşımları altında elde edilmiş ve gösterilmiştir. Burada kristalin durum yoğunluğu -11.8 eV ile 5 eV arasındadır ve bu aralıklara bakıldığında yasak bant aralığı görülmediği için malzemenin metal olduğu söylenebilir. Şekil 6.14.'de ve Şekil 6.16'da farklı basınçlar altındaki toplam durum yoğunluğu GGA ve LDA yaklaşımları altında gösterilmiştir.

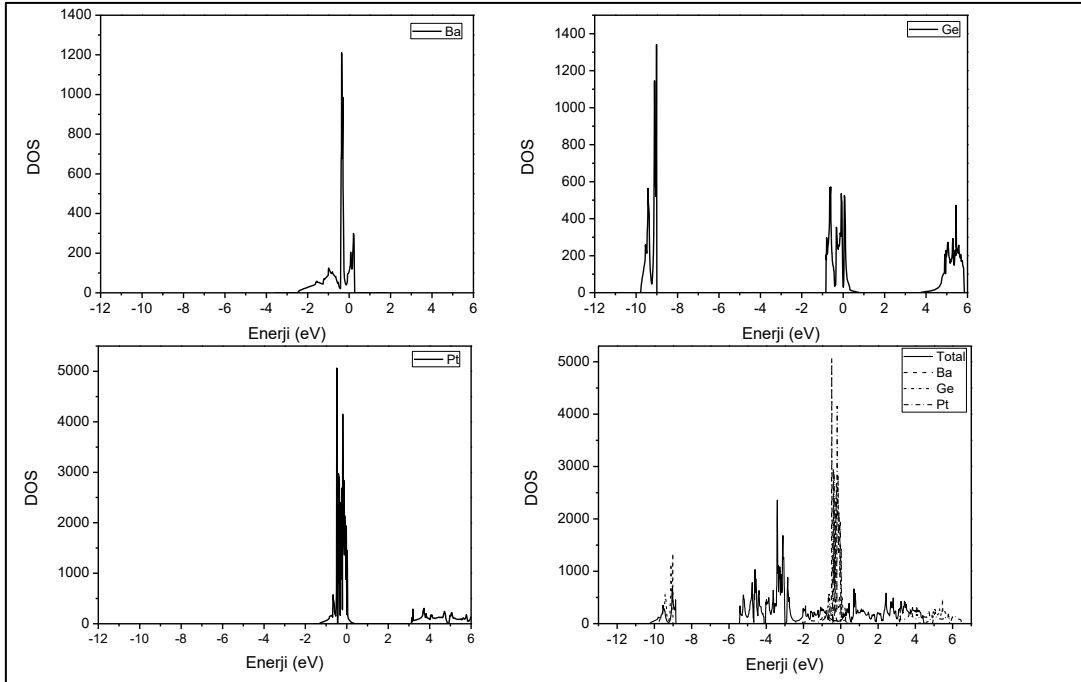


Şekil 6.13. BaGePt kristalinin GGA ve LDA yaklaşımı altında toplam durum yoğunluğu (DOS) grafiği.

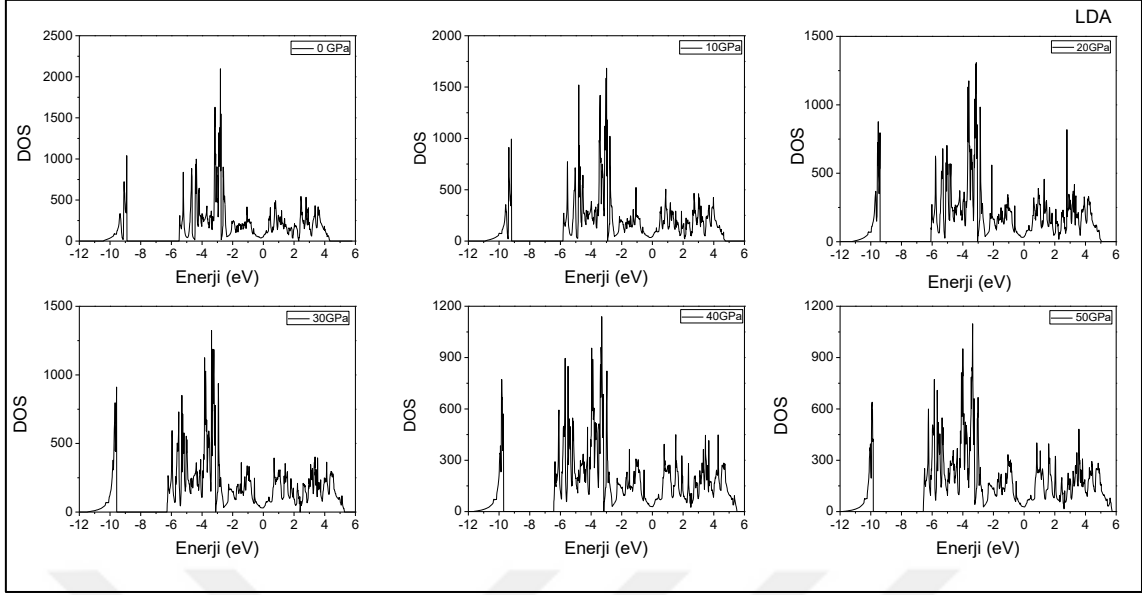


Şekil 6.14. BaGePt kristalinin GGA yaklaşımı altında farklı basınçlar altında toplam durum yoğunluğu.

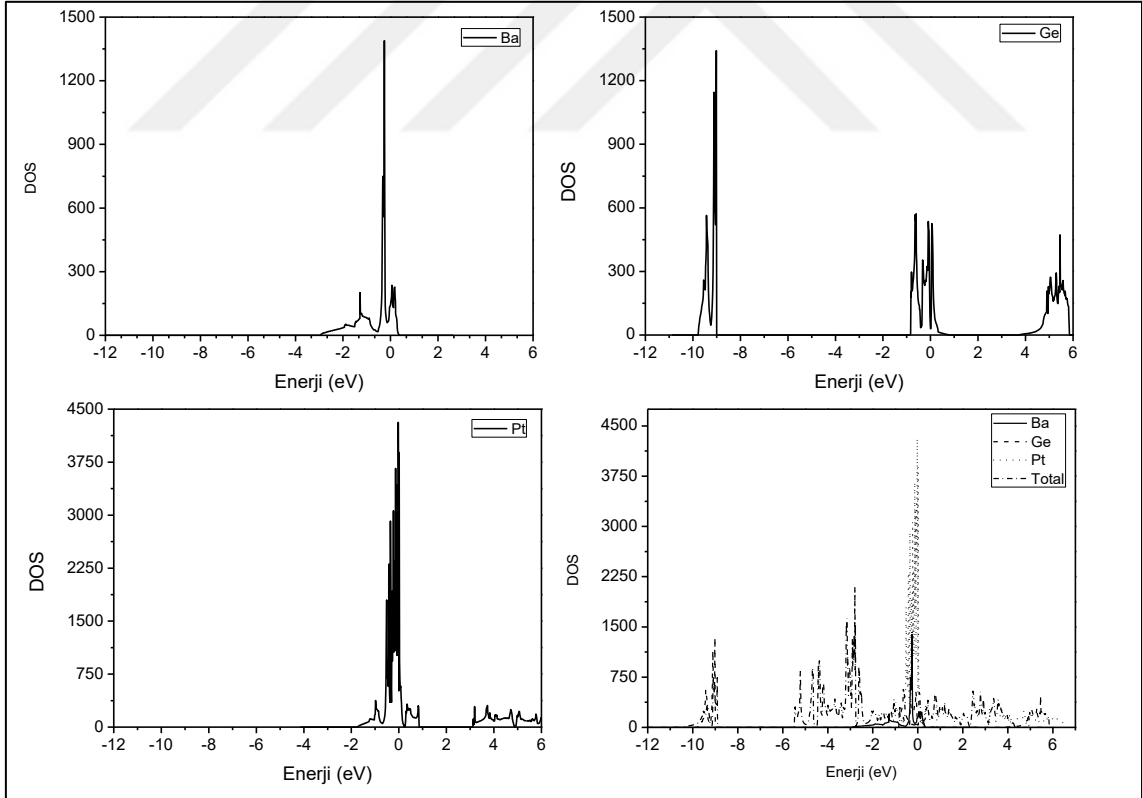
BaGePt kristalini oluşturan her bir atom türünün yani Baryum, Germanyum ve Platin atomlarının farklı elektronik orbitallerinin toplam durum yoğunluğuna katkıları yine GGA için Şekil 6.15 de, LDA için ise Şekil 6.17’de gösterilmiştir.



Şekil 6.15. BaGePt kristalinin GGA yaklaşımı altında her bir elementin durum yoğunluğuna katkısı (DOS) grafiği.



Şekil 6.16. BaGePt kristalinin LDA yaklaşımı altında farklı basınçlar altında toplam durum yoğunluğu.



Şekil 6.17. BaGePt kristalinin LDA yaklaşımı altında her bir elementin durum yoğunluğuna katkısı (DOS) grafiği.

6.5. Elastik Özellikler

Katı bir cisme kuvvet uygulandığında cismin şekli değişir. Eğer uygulanan kuvvet kaldırıldığı zaman cisim eski haline geri gelebiliyorsa böyle değişimlere elastik değişimler denir. Bir birim yüzeye etki eden kuvvete gerilim (stres, zor) denir. Uygulanan gerilime karşı cismin verdiği tepkiye yada şekil değişikliğine gerinim (strain, zorlanma) denir. Yöne bağlı olarak fiziksel özelliği değişen ortamlarda gerilim tensörü rankı 2 olan bir tensördür ve σ_{ij} ile ifade edilir. Deformasyon (şekil değişikliği) gerinim tensörü de gerilim gibi rankı iki olan bir tensördür ve ε_{ij} ile gösterilir. Bu her iki tensörün de 9'ar tane bileşenleri vardır. Hooke Yasası, yeterince küçük gerilmeler için gerilme miktarının, uygulanan stresin büyüklüğü ile orantılı olduğunu söyler. Fiziksel özellikleri ifade eden iki ranklı tensörlerin simetri özelliklerinden dolayı gerilim ve gerinim tensörlerinin bileşen sayısı 9'dan 6'ya düşer. Hooke yasasına göre;

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (6.3)$$

Burada ε gerinimi, σ gerilimi ve S , gerilme ile gerinim yönlerinin bu özel düzeni için elastik uyum sabitini ifade eder. Bu uyum sabitine uyumluluk da denir. Ayrıca bu denklemin diğer bir ifadesi de mümkündür,

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}, C = \frac{1}{S} \quad (6.4)$$

şeklinde ifade edilir. Denklemdaki C elastik sertlik (stiffness) sabitidir. C ve S rankı 4 olan tensörlerdir ve herbiri 81 tane bileşene sahiptir. Ancak daha kolay işlem yapabilmek için özel bir notasyon kullanılarak bu bileşen sayısı 36 ya indirilir. İndirgenmiş olan bu gösterimleri artık tensör değildir ve indirgenmiş olarak 6×6 'lık simetrik bir matris oluşturur. Bu tensör notasyonu ile matris notasyonu arasındaki ilişki aşağıdaki gibidir (J.F.NYE).

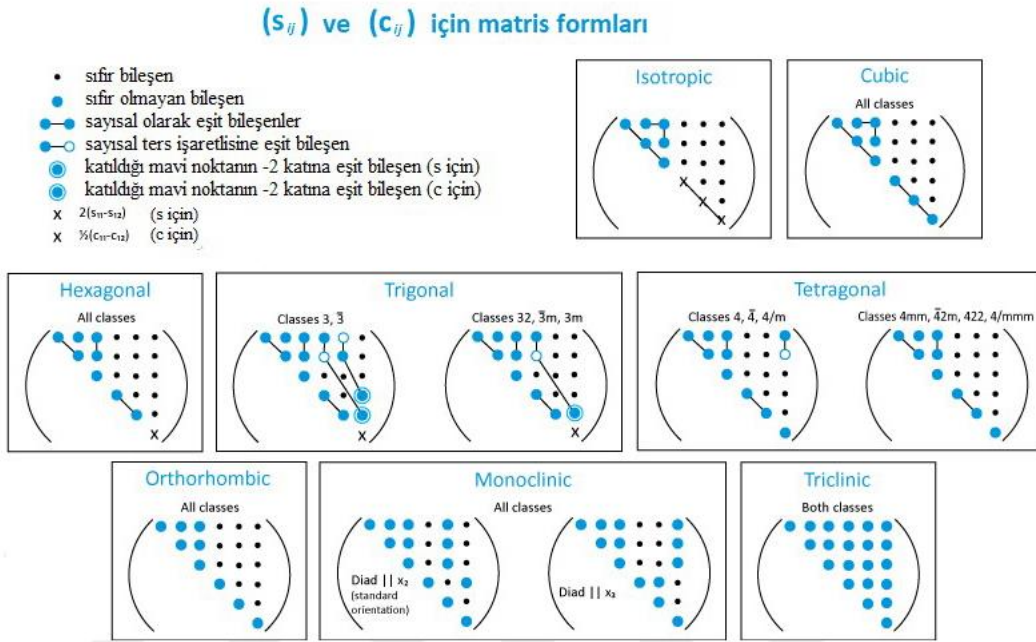
Tensör notasyonu 11 22 33 23,32 13,31 12,21

Matris notasyonu 1 2 3 4 5 6

S_{ij} ve C_{ij} katsayılarını matris formunda yazılışı aşağıdaki gibidir,

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \text{ ve } \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{bmatrix}$$

şeklinde yazılır. Bu matrisleri arasında bazı ilişkiler vardır bunlar şekil 6.18.'de gösterilmiştir.



Şekil 6.18. (S_{ij}) ve (C_{ij}) matrislerinin bileşenleri arasındaki ilişkiler (Nye, J. F., 1985).

Bulk modülü (B), bir kristalin belli bir basınç altında malzemenin sıkıştırılması sırasında haciminde meydana gelen değişime karşı gösterdiği direncin büyüklüğünün bir ölçüsü olarak ifade edilir. Bulk modülü, Voigt ve Reuss teorileri ile elastik sabitler (S ve C) türünden bulunabilir. Kayma modülü, kayma gerilimin kayma gerinime bölünmesi olarak tanımlanabilir. Kristallerin sertlik derecelerini belirleyen önemli etkenlerden biridir. Bulk modülü ve Kayma modülü aşağıdaki gibi elde edilir.

$$9B_V = (C_{11} + C_{22} + C_{33}) + 2(C_{12} + C_{23} + C_{31}) \quad (6.5)$$

$$\frac{1}{B_R} = (S_{11} + S_{22} + S_{33}) + 2(S_{12} + S_{23} + S_{31}) \quad (6.6)$$

$$15G_V = (C_{11} + C_{22} + C_{33}) - (C_{12} + C_{23} + C_{31}) + 3(C_{44} + C_{55} + C_{66}) \quad (6.7)$$

$$\frac{15}{G_R} = 4(S_{11} + S_{22} + S_{33}) - 4(S_{12} + S_{23} + S_{31}) + 3(S_{44} + S_{55} + S_{66}) \quad (6.8)$$

$$B_{VRH} = \frac{B_R + B_V}{2}, \quad G_{VRH} = \frac{G_V + G_R}{2}$$

Kübik yapıdaki kristaller için $C_{11} = C_{22} = C_{33}$, $C_{12} = C_{23} = C_{31}$ ve $C_{44} = C_{55} = C_{66}$ eşitliği vardır. Bu eşitlik S_{ij} içinde vardır bu nedenden dolayı Bulk ve kayma modeli aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$B_V = B_R = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (6.9)$$

$$5G_V = (C_{11} - C_{12}) + 3C_{44}, \quad \frac{1}{G_R} = 4(S_{11} + S_{12}) + 4S_{44} \quad (6.10)$$

- Young modülü (E), bir madde üzerinde boyuna deformasyona boyuna gerilmenin oranı olarak bilinir ve aşağıdaki denklemlerle gösterilir.

$$E = \frac{9G_{VRH}B_{VRH}}{G_{VRH} + 3B_{VRH}} \quad (6.11)$$

- Poisson oranı (ν), normal gerilmelerin etkisi altında, enine genişlemenin boyuna kışalmasına oranıdır ve bu oran 0 - 0.5 arasında değişir ve aşağıdaki denklemle ifade edilir.

$$\nu = \frac{3B_{VRH} - E}{6B_{VRH}} \quad (6.12)$$

- Esneklik katsayısı (K), Bulk modülünün Kayma modülüne oranı olarak tanımlanır ve aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$K = \frac{B_{VRH}}{G_{VRH}} \quad (6.13)$$

Debye sıcaklığı (θ_D), kristalin en yüksek titreşim modunun sıcaklığıdır. Ayrıca elastik sabitler ve erime sıcaklığı ile ilgili önemli bir temel fiziksel özelliktir. Katıları sıcaklık bölgelerine göre sınıflandırmada kullanılır. Katının sıcaklığı T olmak üzere Debye sıcaklığı, $T > \theta_D$ ise bütün modların $k_B T$ enerjisine sahip olduğunu, eğer $T < \theta_D$ ise yüksek frekans modlarının donmuş olduğunu ifade eder. Akustik titreşimler nedeniyle düşük sıcaklıklarda titreşimsel uyarılmalar olur ve bu nedenle düşük sıcaklıklarda Debye sıcaklığı elastik sabitlerden elde edilebilir. Yani düşük sıcaklıklarda fonon

eğrisinde akustik titreşimlerin eğimi ses hızını verir bunları kullanarak da elastik sabitler elde edilir ve böylece Debye sıcaklığı hesaplanır(Erzen, 2017).

Dolayısı ile Debye sıcaklığı;

$$\theta_D = \frac{h}{2\pi k_B} \left[\frac{6\pi^2 n \rho}{M} \right]^{1/3} v_m \quad (6.14)$$

ile ifade edilir. Denklemdaki h Planck sabiti, n birim hücredeki molekül sayısı k_B boltzman sabiti, M moleküler ağırlık, ρ yoğunluk ve v_m ortalama ses hızıdır. Ortalama ses hızı aşağıdaki gibidir;

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{-1/3}, \quad v_l = \left[\left(B_{VRH} + \frac{4G_{VRH}}{3} \right) / \rho \right]^{1/2}, \quad v_t = \left(\frac{G_{VRH}}{\rho} \right)^{1/2}$$

şeklinde gösterilir. Denklemdaki v_l boyuna ses dalgası, v_t enine ses dalgası hızını ifade eder.

6.6. BaGePt: Elastik Özellikler

BaGePt kristalinin Abinit programı kullanılarak elastik özelliklerini GGA ve LDA yaklaşımları altında 0-10-20-30-40-50 GPa aralığındaki farklı basınçlar için elde edildi. BaGePt kristali için elastik rijitlik sabitleri, elastik uyum sabitleri, Shear Modülü, Bulk modülü, Poisson oranı, Young modülü, Debye sıcaklığı, esneklik katsayısını farklı basınçlar altında inceleyip elde edildi. Elde ettiğimiz bu sonuçları gerek çizelgelerle gerekse grafiklerle ifade edilmiştir.

Temel durumdaki BaGePt kristali için C_{ij} ve S_{ij} bileşenleri aşağıda çizelgeler ile gösterilmiştir;

Çizelge 6.9. BaGePt kristalinin temel Durumda GGA yaklaşımı altında elastik sertlik sabitleri C_{ij} (GPa) katsayıları

C_{ij}	1	2	3	4	5	6
1	91.7467	76.6601	76.6601	0	0	0
2	76.6601	91.7467	76.6601	0	0	0
3	76.6601	76.6601	91.7467	0	0	0
4	0	0	0	45.8915	0	0
5	0	0	0	0	45.8915	0
6	0	0	0	0	0	45.8915

Çizelge 6.10. BaGePt kristalinin temel Durumda LDA yaklaşımı altında elastik sertlik sabitleri C_{ij} (GPa) katsayıları

C_{ij}	1	2	3	4	5	6
1	94.3818	81.3319	81.3319	0	0	0
2	81.3319	94.3818	81.3319	0	0	0
3	81.3319	81.3319	94.3818	0	0	0
4	0	0	0	47.5860	0	0
5	0	0	0	0	47.5860	0
6	0	0	0	0	0	47.5860

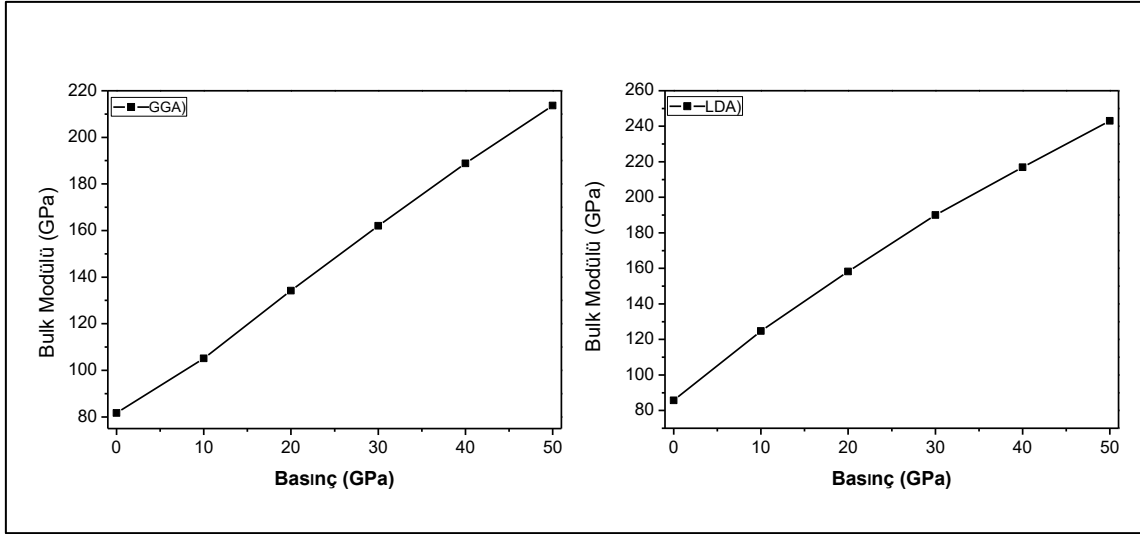
Çizelge 6.11. BaGePt kristalinin temel durumda GGA yaklaşımı altında elastik sertlik sabitleri S_{ij} (1/GPa) katsayıları

S_{ij}	1	2	3	4	5	6
1	0.0108	0.0130	0.0130	0	0	0
2	0.0130	0.0108	0.0130	0	0	0
3	0.0130	0.0130	0.0108	0	0	0
4	0	0	0	0.0217	0	0
5	0	0	0	0	0.0217	0
6	0	0	0	0	0	0.0217

Çizelge 6.12. BaGePt kristalinin temel durumda LDA yaklaşımı altında elastik sertlik sabitleri S_{ij} (1/GPa) katsayıları

S_{ij}	1	2	3	4	5	6
1	0.0105	0.0122	0.0122	0	0	0
2	0.0122	0.0105	0.0122	0	0	0
3	0.0122	0.0122	0.0105	0	0	0
4	0	0	0	0.0210	0	0
5	0	0	0	0	0.0210	0
6	0	0	0	0	0	0.0210

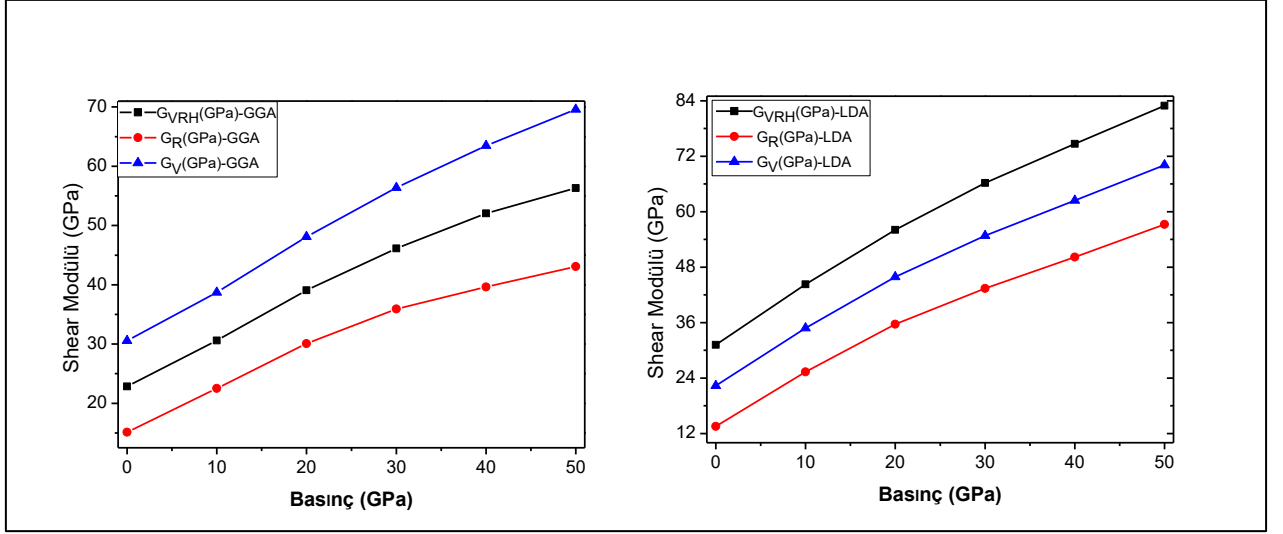
Elde ettiğimiz bu değerleri kullanarak BaGePt kristali için elastik sabitleri elde edildi bu değerler aşağıda çizelge ile gösterilmiştir. Eğer normal deformasyon pozitif ise, malzeme o yönde uzuyor (çekiliyor), negatif ise malzeme o yönde kısalıyordur. Elde edilen bu değerlerin grafikleri Şekil 6.19. ile 6.6.7. arasındaki şekillerde gösterilmiştir ve grafiklerde görüldüğü gibi basınç arttıkça değerler de artmaktadır buda teorik olarak beklenen bir sonuçtur.



Şekil 6.19. BaGePt kristali için elde edilen Bulk Modülü-Basın grafiği

Çizelge 6.13. BaGePt kristali için farklı basınçlardaki Bulk modülü değerleri

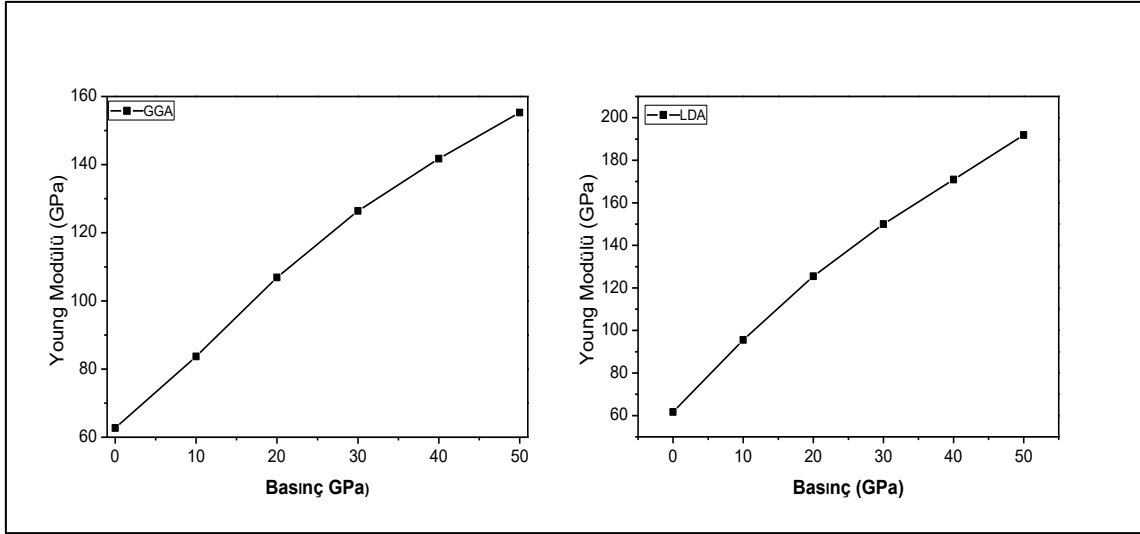
B_{VRH} (GPa)		
Basınç (GPa)	GGA	LDA
0	81.6890	85.6819
10	105.0856	124.7560
20	134.1686	158.1783
30	162.0721	190.0134
40	188.7839	216.8608
50	213.6104	243.0554



Şekil 6.20. BaGePt kristali için elde edilen Shear Modülü-Basın grafiği.

Çizelge 6.14. BaGePt kristali için farklı basınçlarda Shear modülü

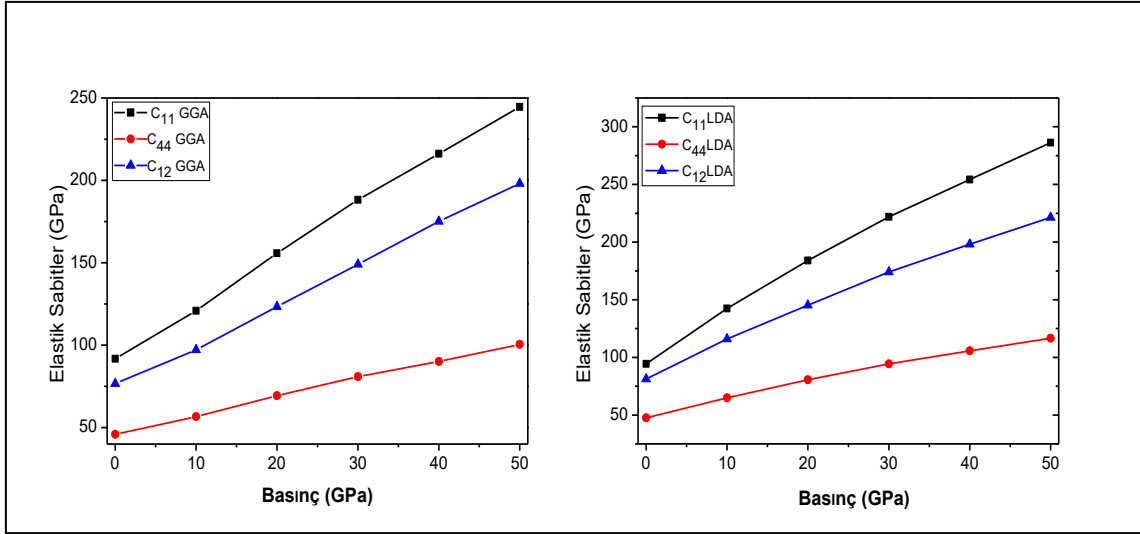
G_{VRH} (GPa)		
Basınç (GPa)	GGA	LDA
0	22.8402	22.3456
10	30.6123	34.8150
20	39.0866	45.8611
30	46.1451	54.7979
40	52.0536	62.4291
50	56.3197	70.0963



Şekil 6.21. BaGePt kristali için elde edilen Young Modülü-Basın grafiği.

Çizelge 6.15. BaGePt kristali için farklı basınçlarda Young modülü

E (GPa)		
Basınç (GPa)	GGA	LDA
0	62.6790	61.6752
10	83.7085	95.5564
20	106.8809	125.4585
30	126.4359	149.9765
40	141.7710	170.8890
50	155.3098	191.8464



Şekil 6.22. BaGePt kristali için elde edilen Elastik Sabitler-Basın grafiği

Çizelge 6.16. BaGePt kristalinin farklı basınçlardaki Elastik Sabitler

Basınç(GPa)	GGA			LDA		
	C_{11}	C_{44}	C_{12}	C_{11}	C_{44}	C_{12}
0	91.7467	45.8915	76.6601	94.3818	47.5860	81.3319
10	120.8540	56.6339	97.2014	142.3982	64.9946	115.9350
20	155.8458	69.3353	123.3300	184.0717	80.5063	145.2317
30	188.1752	80.9149	149.0206	221.9741	94.3595	174.0330
40	216.1421	90.1363	175.1049	254.2941	105.7239	198.1442
50	244.5302	100.4938	198.1506	286.3418	116.5937	221.4122

7. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında BaGePt kristalinin yoğunluk fonksiyoneli teorisi temeline dayanan Abinit bilgisayar programı ile bazı fiziksel özellikleri GGA ve LDA yaklaşımları altında incelendi. Bu tez çalışmasında yapılan hesaplamalar ve elde edilen sonuçlar, Materials Project adlı web sitesindeki kısıtlı değerler haricinde, literatürde başka herhangi bir çalışma olmadığı için karşılaştırılamamıştır.

İlk olarak BaGePt kristalinin fiziksel özelliklerini incelerkenki hesaplamalarda da kullanılacak olan kesme enerjisi ve k noktaları sayısı elde edildi.

Ardından, BaGePt kristalinin hacim optimizasyonu yapılarak, enerjin en kararlı olduğu temel durumda teorik örgü parametrelerine göre hesaplamalar gerçekleştirildi. Hacim optimizasyonundan elde edilen sonuçlarla toplam enerji-basınç, toplam enerji-hacim, hacim-basınç çizdirildi. Örgü parametreleri değerleri farklı basınç değerleri için (0, 10, 20, 30, 40 ve 50 GPa) hesaplanarak örgü parametreleri-basınç grafikleri çizdirildi.

BaGePt kristalinin elektronik özellikleri be durum yoğunluğu değerleri GGA ve LDA yaklaşımları altında yine 0-50 GPa aralığındaki farklı basınç değerleri için incelendi. Elektronik band yapısına bakıldığında, BaGePt kristalinin iletim bandı ile valans bantlarının çakışık olduğu görüldü. Bu durum kristalin metalik özellik gösterdiğini ifade etmektedir. BaGePt kristali metalik özellik gösterdiği için bu malzemenin optik özellikleri incelenememiştir.

BaGePt kristalinin elastik özelliklerinde elastik sabitler, bulk modülü, young modülü, shear modülü, farklı basınçlarda incelendi grafikleri çizildi.

Sonuç olarak çalışmamızın ileride bu alanda teorik veya deneysel olarak çalışacak olan kişilere güvenilir ve faydalanabilecekleri bir kaynak olduğu düşünülmektedir.



KAYNAKLAR

- Akkuş, H., 2007. *SbSI Kristalinin Elektronik ve Optik Özellikleri: Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisinin Uygulanması* (doktora tezi). ÇÜ, Fen Bilimleri Enstitüsü, Adana.
- Anonim, 2017. Fiziğin tarihsel gelişimi. <http://webders.net/446/fizigin-tarihsel-gelisimi-gecmisten-gunumuze-fizik.html>. Erişim tarihi: 03.06.2018.
- Aydoğan, Ş., 2011. *Katıhal Fiziği*. Ankara, Yay. No: 69, Ankara. 616.
- Born, M., Oppenheimer, R., 1927. Zur quantentheorie der molekeln. *Ann. Physik*, **84**: 457-484.
- Capillas, C., Kroumova, E., Ivantchev, S., Madariaga, G., Kirov, A., 2012. "Bilbao Crystallographic Server I: Veritabanları. <http://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-wp-list?gnum=198>. Erişim tarihi: 26.06.2018.
- Dede, M., 2015. Perovskite *RbCdBr₃* Kristalinin Fiziksel özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi İle İncelenmesi (yüksek lisans tezi). Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Van.
- Deligöz, E., 2007. *Bazı İkili (CdS, CdSe, CdTe, CdF₂, AIBi, BBi) Bileşiklerin Yapısal, Elektronik, Elastik Termodinamik ve Titreşimsel Özelliklerinin ab-initio Yöntemi İle İncelenmesi* (doktora tezi). Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Dirac, P. A. M., 1930. Note on exchange phenomena in the Thomas-Fermi atom. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **26**: 376-385.
- Ece, N., 2017. *BiRhO₃* Kristalinin Fiziksel Özelliklerinin DFT İle İncelenmesi (yüksek lisans tezi). Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Van.
- Eskier U., 2002. Kimya. <https://www.makaleler.com/>. Erişim Tarihi: 10.06. 2018.
- Fermi, E., 1928. 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.
- Fock, V., 1930. Näherungsmethode zur lösung des quantenmechanischen mehrkörperproblems, *Z.Phys.*, **61**: 126-148.
- Gulebaglan, S. E., Dogan, E. K., Secuk, M. N., Aycibin, M., Erdinc, B., Akkus, H. 2015. First-principles study on electronic, optic, elastic, dynamic and thermodynamic properties of RbH compound. *International Journal for Simulation and Multidisciplinary Design Optimization*, **6**: 1-6.
- Hartree, D. R., 1928. The wave mechanics of an atom with a non-coulomb Central Field . Theory and Methods. *Proc. Camb. Phil. Soc*, **24**: 89-110.
- Hohenberg, P., Kohn, W., 1924. Inhomogeneous electron gas. *Phys.Rev.*, **136**: B864 – B871.
- Hratchian, H.P., Millam, J., Frisch, A., 1997. Moleküler sistemleri modellemek için tasarlanmış 3D görselleştirme programı. <http://gaussian.com/>. Erişim Tarihi: 29.06.2018.
- Kaval, M., 2017. *Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi İle LuRhO₃ Bileşiğinin Elektronik, Optik ve Dinamik Özelliklerinin İncelenmesi*. (yüksek lisans tezi) Yüzüncü Yıl Üniversitesi Van.
- Kittel, C., 1996. *Introduction to Solid State Physics*. 6. Güven, Yay. New York. 434.

- Kocher, M., Anubhav Jain Shyue Ping Ong Geoffroy Hautier, 2013. Malzeme bilgisi. <https://materialsproject.org/materials/mp-22151/>. Erişim Tarihi: 01.11.2017.
- Kohn, W., Sham, L.J., 1965. Self- consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, **140**: A1133 – 1138.
- Monkhorst, H. J., and Pack, J. D., 1976. Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B*, **13**: 5188-5192.
- Nye, J. F., 1985. *Physical Properties Of Crystals: Their Representation By Tensors And Matrices*. Oxford university press, New York. 329.
- Payne, M. C., Teter, M.P., Allan, D. C., Arias, T. A., Joannopoulos, J. P., 1992. Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Reviews of Modern Physics*, **64**: 1045-1097.
- Ruben,A., Fujio, I., 2004. Yapısal modeller, hacimsel veriler ve kristal morfolojileri için bir 3D görselleştirme programı. <http://jp-minerals.org/vesta/en/>. Erişim Tarihi: 19.05.2018.
- Schrödinger, E., 1926. Quantisierung als eigenwertproblem. *Ann Physik*, **79**: 361-376.
- Slater, C. J., 1951. A Simplification of the Hartree- Fock method. *Phys .Rev.*, **81**: 385390.
- Soyalp, F., 2006. *Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile Bazı Bileşiklerin Elektronik Yapılarının ve Titreşim Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi* (doktora tezi). Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Taş, N., 2016. Kristal Sistemler. <http://kristalhayaller.blogspot.com/>. Erişim Tarihi: 24.12.2018.

ÖZ GEÇMİŞ

1990 yılında Kahramanmaraş'ta doğdu. İlk okulu Kahramanmaraş'ta 80.yıl İÖO' da tamamladı sonra orta öğretimimi Türkođlu Anadolu Lisesi'nde 2009 yılında tamamladım. 2011 yılında Yüzüncü Yıl Üniversitesi Fakültesi Fizik Öğretmenliđi Bölümü'nde başladığım lisans eğitimini 2016 yılı haziran ayında tamamladı. 2016 yılının Eylül ayında Yüzüncü Yıl Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı Yođun Madde Fiziđi Bilim Dalı'nda yüksek lisans eğitimine başladı.



T.C
VAN YÜZÜNCÜ YIL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
LİSANSÜSTÜ TEZ ORJİNALLİK RAPORU

Tarih:02/01/2019

Tez Başlığı / Konusu: Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile BaGePt Kristalinin Yapısal, Elektronik ve Elastik Özelliklerinin İncelenmesi

Yukarıda başlığı/konusu belirlenen tez çalışmamın Kapak sayfası, Giriş, Ana bölümler ve Sonuç bölümlerinden oluşan toplam 67 sayfalık kısmına ilişkin, 02/01/2019 tarihinde şahsım/tez danışmanım tarafından Turnitinintihal tespit programından aşağıda belirtilen filtreleme uygulanarak alınmış olan orijinallik raporuna göre, tezimin benzerlik oranı % 12 (On İki) dir.

Uygulanan filtreler aşağıda verilmiştir:

- Kabul ve onay sayfası hariç,
- Teşekkür hariç,
- İçindekiler hariç,
- Simge ve kısaltmalar hariç,
- Gereç ve yöntemler hariç,
- Kaynakça hariç,
- Alıntılar hariç,
- Tezden çıkan yayınlar hariç,
- 7 kelimededen daha az örtüşme içeren metin kısımları hariç (Limit inatch size to 7 words)

Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi Lisansüstü Tez Orijinallik Raporu Alınması ve Kullanılmasına İlişkin Yönergeyi inceledim ve bu yönergede belirtilen azami benzerlik oranlarına göre tez çalışmamın herhangi bir intihali içermediğini; aksinin tespit edileceği muhtemel durumda doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabulettiğimi ve yukarıda vermiş olduğum bilgilerin doğru olduğunu beyan ederim.

Gereğini bilgilerinize arz ederim.



02/01/2019

Adı Soyadı: FerhatARSLANBAŞ
Öğrenci No: 169102002
Anabilim Dalı: Fizik Anabilim Dalı
Programı: Yoğun Madde Fiziği
Statüsü: Y.Lisans Doktora

DANIŞMAN ONAYI
UYGUNDUR


Doç. Dr. Emel Kilit Doğan

ENSTİTÜ ONAYI
UYGUNDUR


Prof. Dr. Suat ŞENSOY
Prof. Dr. Suat Şensoy