

**T.C.
SÜLEYMAN DEMİREL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**KUSURLU VE KATKILI $KTaO_3$ BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL,
ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK
FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ**

İsmail YÜCEL

**Danışman
Prof. Dr. Seyfettin ÇAKMAK**

**DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
ISPARTA - 2018**



© 2018 [İsmail YÜCEL]

TEZ ONAYI

İsmail YÜCEL tarafından hazırlanan "**Kusurlu ve Katkılı $KTaO_3$ Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi**" adlı tez çalışması aşağıdaki jüri üyeleri önünde Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü **Fizik Anabilim Dalı**'nda **DOKTORA TEZİ** olarak başarı ile savunulmuştur.

Danışman

Prof. Dr. Seyfettin ÇAKMAK
Süleyman Demirel Üniversitesi



Jüri Üyesi

Prof. Dr. Arif BABANLI
Süleyman Demirel Üniversitesi



Jüri Üyesi

Prof. Dr. İzzet KARA
Pamukkale Üniversitesi



Jüri Üyesi

Prof. Dr. Ekrem ARTUÇ
Süleyman Demirel Üniversitesi



Jüri Üyesi

Prof. Dr. Veysel KUZUCU
Pamukkale Üniversitesi



Enstitü Müdürü Prof. Dr. Yasin TUNCER

TAAHHÜTNAME

Bu tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin referans gösterilerek tezde yer aldığını beyan ederim.

İsmail YÜCEL



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
İÇİNDEKİLER.....	i
ÖZET	iii
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR.....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ	xvi
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	xviii
1. GİRİŞ.....	1
1.1. ABO ₃ tipi Perovskit Yapılar	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ.....	4
3. TEORİ.....	12
3.1. Çok Cisim Problemi.....	12
3.2. Schrödinger Denklemi	12
3.3. Hartree ve Hartree-Fock Methodu.....	14
3.4. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)	15
3.5. Kohn-Sham Denklemleri.....	17
3.6. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA)	18
3.7. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA)	19
3.8. WIENk Programı	19
4. ARAŞTIRMA BULGULARI.....	22
4.1. Katkısız, Katkılı ve Kusurlu KTaO ₃ Bileşiklerinin Fiziksel Özellikleri.....	22
4.2. Katkısız KTaO ₃ Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri.....	23
4.2.1. Katkısız KTaO ₃ bileşiğinin yapısal özellikleri.....	23
4.2.2. Katkısız KTaO ₃ bileşiğinin elektronik özellikleri	26
4.2.3. Katkısız KTaO ₃ bileşiğinin optik özellikleri.....	30
4.3. Sb Katkılı KTaO ₃ Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri.....	39
4.3.1. Sb katkılı KTaO ₃ bileşiklerin yapısal özellikleri.....	39
4.3.2. Sb katkılı KTaO ₃ bileşiklerin elektronik özellikleri	49
4.3.3. Sb katkılı KTaO ₃ bileşiklerin optik özellikleri	60
4.4. Nb Katkılı KTaO ₃ Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri.....	71
4.4.1. Nb katkılı KTaO ₃ bileşiklerin yapısal özellikleri.....	71
4.4.2. Nb katkılı KTaO ₃ bileşiklerin elektronik özellikleri	81
4.4.3. Nb katkılı KTaO ₃ bileşiklerin optik özellikleri	92
4.5. V Katkılı KTaO ₃ Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri.....	102
4.5.1. V katkılı KTaO ₃ bileşiklerin yapısal özellikleri.....	102
4.5.2. V katkılı KTaO ₃ bileşiklerin elektronik özellikleri	113
4.5.3. V katkılı KTaO ₃ bileşiklerin optik özellikleri	124

4.6. Kusurlu KTaO_3 Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri.....	135
4.6.1. Kusurlu KTaO_3 bileşiklerinin yapısal özellikleri	135
4.6.2. Kusurlu KTaO_3 bileşiklerinin elektronik özellikleri.....	146
4.6.3. Kusurlu KTaO_3 bileşiklerinin optik özellikleri	156
5. TARTIŞMA VE SONUÇLAR.....	168
KAYNAKLAR	177
ÖZGEÇMİŞ.....	183



ÖZET

Doktora Tezi

KUSURLU VE KATKILI $KTaO_3$ BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ

İsmail YÜCEL

Süleyman Demirel Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Seyfettin ÇAKMAK

Bu tez çalışmasında Sb, Nb, V katkılı ve kusurlu $KTaO_3$ bileşiklerinin yapısal, elektronik ve optik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı WIEN2k simülasyon programı kullanılarak incelendi. Yapısal özelliklerin incelenmesinde LDA ve GGA yaklaşımları kullanıldı. Elektronik ve optik özelliklerinin incelenmesinde ise gradyent-düzeltilmeli Becke-Johnson potansiyeli kullanıldı.

Sb^{+5} katkılı $KTaO_3$ bileşiklerinin, Sb^{+5} konsantrasyonuna bağlı olarak bulk modüllerinin azaldığı ve taban durum enerjilerinin arttığı tespit edildi. $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ ve $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ bileşiklerinin yasak band enerjisi ise sırasıyla 2,77 eV, 2,48 eV, 1,66 eV ve 1,77 eV olarak hesaplandı. Sb^{+5} konsantrasyonu arttıkça dielektrik sabitinin azaldığı tespit edildi. Sb^{+5} katkısı ile optik geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlendi.

Nb^{+5} katkılı $KTaO_3$ bileşikleri için yapılan hesaplamalarda, Nb^{+5} katkısı arttıkça taban durum enerjileri, bulk modülünün basınca göre türevi ve dielektrik sabitleri artmıştır. Nb^{+5} katkısı ile optik geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlendi. TSS enerjileri elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık geldiği tespit edildi. Nb^{+5} katkılı bileşikler için soğurma başlangıç sınırı ise elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir. Nb^{+5} katkısı arttıkça kırılma indislerinin arttığı tespit edildi. Nb^{+5} katkılı bileşikler için kızıl altı bölgede yansıma değerleri hemen hemen sabit kalmaktadır. Görünür bölgede ise Nb^{+5} katkılı bileşiklerin yansıma oranında artış görülmektedir.

V^{+5} katkılı $KTaO_3$ bileşiği için yapılan yapısal hesaplamalarda, V^{+5} katkısı arttıkça taban durum enerjilerinin arttığı tespit edilmiştir. GGA method için bulk modülü ve örgü sabiti V^{+5} katkısı ile azalmıştır. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiğinin yasak band aralığı içerisinde 1,41 eV ile 1,68 eV aralığında tuzak bandının oluştuğu görüldü. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiklerinin yasak band enerjisi ise sırasıyla 1,01 eV, 0,74 eV, 0,51 eV, 0,53 eV ve 0,56 eV olarak hesaplandı. V^{+5} katkısı arttıkça dielektrik sabitlerinin arttığı tespit edildi. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$ ve $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$ bileşikleri mor ötesi bölgede metalik davranış sergilemektedir.

$KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşikleri ise hem görünür bölge hem de mor ötesi bölgede metalik davranış sergilemektedir. V^{+5} katkısı ile optik geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlendi.

Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu (kusurlu yapı) $KTaO_3$ bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. İlk boşluk katkı atomu ile Ta atomu arasında yer alan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturuldu (Kusur-1). İkinci yapıda ise O^{-2} boşluğu Ta-Ta arasında bulunan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturuldu (Kusur-2). O^{-2} boşluklarının farklı noktalarda olması yapısal özelliklerde hemen hemen bir değişikliğe neden olmamıştır. Katkı atomu ile Ta atomu arasında yer alan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturulan kusurlu yapılar (kusur-1) için elde edilen band yapılarından Nb^{+3} katkılı bileşik metalik karakter sergilediği bulunurken Sb^{+3} ve V^{+3} katkılı bileşikler yarıiletken karakter sergilemektedir. Ta-Ta arasında bulunan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturulan kusurlu yapıların (kusur-2) için elde edilen band yapılarından tamamı metalik karakter sergilemektedir. Nb^{+3} katkılı yapılarda O^{-2} boşluğunun yerinin değişmesi bileşiğinin karakteristik yapısını değiştirmemiştir. Sb^{+3} ve V^{+3} katkılı bileşiklerde O^{-2} boşluğunun yerinin değişmesi ile bileşiğin karakteristik yapısını değiştirmektedir.

Anahtar Kelimeler: $KTaO_3$, WIEN2k, Yapısal özellikler, Elektronik özellikler, Optik özellikler, Katkılı ve kusurlu yapılar.

2018, 185 sayfa

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

INVESTIGATION OF STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTIC PROPERTIES OF DEFECTIVE AND DOPED KTaO_3 COMPOUNDS WITH DENSITY FUNCTIONAL THEORY

İsmail YÜCEL

Süleyman Demirel University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Seyfettin ÇAKMAK

In this thesis, structural, electronic and optical properties of Sb, Nb, V doped and defective KTaO_3 compounds have been investigated by using WIEN2k simulation program based on density functional theory. The structural properties have been examined using LDA and GGA method. In order to improve band gap and electronic structure calculations, Tran-Blaha modification of the Beckee-Johnson potential has been used.

It is detected that, the bulk modules and ground state energies increases depending on Sb^{+5} concentration for Sb^{+5} doped KTaO_3 compounds. The calculated band gap energies of $\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$ and $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ compounds are 2, 77 eV, 2,48 eV, 1,66 eV ve 1,77 eV, respectively. As the Sb^{+5} concentration increases, the static dielectric constant decreases. It is observed that, the optical transition energies decrease with the increasing Sb^{+5} concentration.

In the calculation for Nb^{+5} doped KTaO_3 compounds, it is found that, the ground state energies, pressure derivatives of the bulk modulus and dielectric constants increase with increasing Nb^{+5} concentration. It is observed that, the optical transition energies decrease with Nb^{+5} doping. It is found that, the initial limit of absorption energies correspond to the transitions of Γ - Γ . In addition, the initial limit of absorption energies correspond to the visible region in the electromagnetic spectrum for Nb^{+5} compounds. The refractive indices increase with increasing Nb^{+5} concentration. The reflection values for Nb^{+5} doped compounds are almost constant in the infrared region. On the other hand, in the visible region, reflection values increase with the effect of Nb^{+5} .

In the calculation for V^{+5} doped KTaO_3 compounds, the ground state energies increase with increasing V^{+5} concentration. On the other hand, the bulk modulus and lattice constants decrease with increasing V^{+5} concentration. The trapping band formation is observed between 1.41 eV and 1.68 eV for $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ compound. The calculated band gap energies of $\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$,

$\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ are 1,01 eV, 0,74 eV, 0,51 eV, 0,53 eV and 0,56 eV, respectively. When the band gap are examined, the band energies for $x = 0,500, 0,625$ and $0,750$ are almost unchanged. As the V^{+5} doping increases, the static dielectric constant values increase. $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$ and $\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$ compounds exhibit metallic behavior only in the ultraviolet region. Besides, $\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ and $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ compounds exhibit metallic behavior in both the visible region and the ultraviolet region. It is observed that, the optical transition energies decreased with increasing of V^{+5} concentration. While the $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ compound reaches the highest reflection value in the ultraviolet region, all other V-doped compounds reach the highest value in the visible region.

The structural properties of Sb^{3+} , Nb^{3+} and V^{3+} doped and including O^{2-} vacancy KTaO_3 compounds (defective structures) are examined LDA and GGA methods. Firstly, the one oxygen atom has been removed between doping atom and Ta atom (defect-1). Secondly, the one oxygen atom has been removed between Ta and Ta atom (defect-2). It is found that, the oxygen vacancies at different points do not cause a huge change on structural properties. For the defect-1, Nb^{3+} doped and defective structure exhibits metallic character, whereas Sb^{3+} , V^{3+} doped and defective structures exhibit semiconductor character. For the defect-1, all compounds exhibit metallic character. These results show that, the location of the oxygen vacancy does not affect the characteristic features of the Nb^{3+} -doped compound. On the other hand, the location of oxygen vacancy have changed characteristic features of the Sb^{3+} and V^{3+} doped KTaO_3 compounds.

Keywords: KTaO_3 , WIEN2k, Structural properties, Elektronic properties, Optic properties, Doped and defective structure.

2018, 185 pages

TEŐEKKÜR

Bu arařtırma iin beni ynlendiren, karřılařtıđım zorlukları bilgi ve tecrbesi ile ařmamda yardımcı olan deđerli Danıřman Hocam Prof. Dr. Seyfettin AKMAK'a teőekkr ederim.

4763-D2-16 No`lu Proje ile tezimi maddi olarak destekleyen Sleyman Demirel niversitesi Bilimsel Arařtırma Projeleri Ynetim Birimi Bařkanlıđı'na teőekkr ederim.

Tezimin her ařamasında beni yalnız bırakmayan aileme sonsuz sevgi ve saygılarımı sunarım.

İsmail YCEL
İSPARTA, 2018



ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa
Şekil 1.1. CaTiO ₃ bileşiğinin kristal yapısı.....	1
Şekil 1.2. ABO ₃ perovskit yapının kübik birim hücresi.....	2
Şekil 3.1. Elektromanyetik spektrum (Dersim Fizik, 2018).....	21
Şekil 3.2. Bir kristalin toplam enerjisini WIEN2k programı kullanılarak bilgisayarla yapılan hesaplamalardaki akış diyagramı (Yalçın, 2014)	21
Şekil 4.1. KTaO ₃ bileşiğinin 5 atomlu kristal yapısı.....	22
Şekil 4.2. Basit kübik örgünün 1. Brillouin bölgesi ve özel simetri noktaları (Acquarone ve Ventura, 2008)	23
Şekil 4.3. KTaO ₃ bileşiğinin 40 atomlu kristal yapısı	24
Şekil 4.4. KTaO ₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği.....	25
Şekil 4.5. KTaO ₃ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği.....	25
Şekil 4.6. KTaO ₃ bileşiğinin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen band yapı grafiği	28
Şekil 4.7. KTaO ₃ bileşiğinin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen band yapı grafiği	28
Şekil 4.8. KTaO ₃ bileşiğinin TB-mBJ değiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen band yapı grafiği	29
Şekil 4.9. KTaO ₃ bileşiğinin mBJ değiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen toplam durum yoğunluğu.....	29
Şekil 4.10. KTaO ₃ bileşiğinin mBJ değiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen kısmi durum yoğunluğu	30
Şekil 4.11. Katkısız KTaO ₃ bileşiği için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonu	32
Şekil 4.12. Katkısız KTaO ₃ bileşiği için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu	33
Şekil 4.13. Katkısız KTaO ₃ bileşiği için hesaplanan soğurma spektrumu	34
Şekil 4.14. Katkısız KTaO ₃ bileşiği için kırılma indisi spektrumu.....	35
Şekil 4.15. Katkısız KTaO ₃ bileşiği için sönüm katsayısı spektrumu	36
Şekil 4.16. Katkısız KTaO ₃ bileşiği için yansıma spektrumu.....	37
Şekil 4.17. Katkısız KTaO ₃ bileşiği için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu	38
Şekil 4.18. KTa _{0.875} Sb _{0.125} O ₃ bileşiğinin kristal yapısı	40
Şekil 4.19. KTa _{0.750} Sb _{0.250} O ₃ bileşiğinin kristal yapısı	40
Şekil 4.20. KTa _{0.625} Sb _{0.375} O ₃ bileşiğinin kristal yapısı	41
Şekil 4.21. KTa _{0.500} Sb _{0.500} O ₃ bileşiğinin kristal yapısı	41
Şekil 4.22. KTa _{0.375} Sb _{0.625} O ₃ bileşiğinin kristal yapısı	42
Şekil 4.23. KTa _{0.250} Sb _{0.750} O ₃ bileşiğinin kristal yapısı	42
Şekil 4.24. KTa _{0.875} Sb _{0.125} O ₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	43
Şekil 4.25. KTa _{0.750} Sb _{0.250} O ₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	43

Şekil 4.26. $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	44
Şekil 4.27. $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	44
Şekil 4.28. $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	45
Şekil 4.29. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	45
Şekil 4.30. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	46
Şekil 4.31. $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	46
Şekil 4.32. $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	47
Şekil 4.33. $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	47
Şekil 4.34. $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	48
Şekil 4.35. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği	48
Şekil 4.36. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_3$ band yapı grafiği.....	51
Şekil 4.37. $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$ band yapı grafiği.....	51
Şekil 4.38. $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$ band yapı grafiği.....	52
Şekil 4.39. $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ band yapı grafiği.....	52
Şekil 4.40. $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ band yapı grafiği.....	53
Şekil 4.41. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ band yapı grafiği.....	53
Şekil 4.42. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi	54
Şekil 4.43. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi	54
Şekil 4.44. $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi	55
Şekil 4.45. $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi	55
Şekil 4.46. $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi.....	56
Şekil 4.47. $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi	56
Şekil 4.48. $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi	57
Şekil 4.49. $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi	57
Şekil 4.50. $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi.....	58
Şekil 4.51. $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi	58
Şekil 4.52. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi	59
Şekil 4.53. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi	59
Şekil 4.54. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonları	61
Şekil 4.55. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonları	62
Şekil 4.56. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan soğurma spektrumu	63
Şekil 4.57. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için soğurma spektrumu	63
Şekil 4.58. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan kırılma indisi spektrumu....	64
Şekil 4.59. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için kırılma indisi spektrumu	65
Şekil 4.60. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu	66

Şekil 4.61. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için sönüm katsayısı spektrumu	67
Şekil 4.62. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan yansıma spektrumu.....	68
Şekil 4.63. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için yansıma spektrumu	69
Şekil 4.64. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu.....	70
Şekil 4.65. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu.....	70
Şekil 4.66. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı.....	72
Şekil 4.67. $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı.....	72
Şekil 4.68. $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı.....	73
Şekil 4.69. $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı.....	73
Şekil 4.70. $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı.....	74
Şekil 4.71. $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı.....	74
Şekil 4.72. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	75
Şekil 4.73. $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	75
Şekil 4.74. $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	76
Şekil 4.75. $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	76
Şekil 4.76. $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	77
Şekil 4.77. $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	77
Şekil 4.78. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	78
Şekil 4.79. $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	78
Şekil 4.80. $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	79
Şekil 4.81. $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	79
Şekil 4.82. $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	80
Şekil 4.83. $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri	80
Şekil 4.84. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$ band yapı grafiği.....	83
Şekil 4.85. $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$ band yapı grafiği.....	83
Şekil 4.86. $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$ band yapı grafiği.....	84
Şekil 4.87. $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$ band yapı grafiği.....	84
Şekil 4.88. $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ band yapı grafiği.....	85
Şekil 4.89. $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ band yapı grafiği.....	85
Şekil 4.90. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri .	86
Şekil 4.91. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri.....	86

Şekil 4.92. $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri .	87
Şekil 4.93. $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri.....	87
Şekil 4.94. $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri .	88
Şekil 4.95. $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri.....	88
Şekil 4.96. $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri..	89
Şekil 4.97. $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri.....	89
Şekil 4.98. $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri .	90
Şekil 4.99. $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri.....	90
Şekil 4.100. $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri	91
Şekil 4.101. $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri ..	91
Şekil 4.102. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonları	93
Şekil 4.103. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonları	94
Şekil 4.104. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan soğurma spektrumu	95
Şekil 4.105. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için soğurma spektrumu	95
Şekil 4.106. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan kırılma indisi spektrumu	96
Şekil 4.107. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için kırılma indisi spektrumu.....	97
Şekil 4.108. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu.....	98
Şekil 4.109. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için sönüm katsayısı spektrumu	99
Şekil 4.110. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan yansıma spektrumu	100
Şekil 4.111. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için yansıma katsayısı spektrumu	100
Şekil 4.112. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu.....	101
Şekil 4.113. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu	102
Şekil 4.114. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı	103
Şekil 4.115. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı	104
Şekil 4.116. $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı	104
Şekil 4.117. $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı	105
Şekil 4.118. $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı	105
Şekil 4.119. $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiğinin kristal yapısı	106
Şekil 4.120. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	106
Şekil 4.121. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	107
Şekil 4.122. $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	107
Şekil 4.123. $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	108
Şekil 4.124. $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	108

Şekil 4.125. $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	109
Şekil 4.126. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	109
Şekil 4.127. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	110
Şekil 4.128. $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	110
Şekil 4.129. $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	111
Şekil 4.130. $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	111
Şekil 4.131. $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri.....	112
Şekil 4.132. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ band yapı grafiği	115
Şekil 4.133. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$ band yapı grafiği	115
Şekil 4.134. $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$ band yapı grafiği	116
Şekil 4.135. $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$ band yapı grafiği	116
Şekil 4.136. $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ band yapı grafiği	117
Şekil 4.137. $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ band yapı grafiği	117
Şekil 4.138. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri..	118
Şekil 4.139. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri	118
Şekil 4.140. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri..	119
Şekil 4.141. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri	119
Şekil 4.142. $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri..	120
Şekil 4.143. $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri	120
Şekil 4.144. $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri..	121
Şekil 4.145. $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri	121
Şekil 4.146. $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri..	122
Şekil 4.147. $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri	122
Şekil 4.148. $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri..	123
Şekil 4.149. $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri	123
Şekil 4.150. V katkılı bileşikler için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonları	125
Şekil 4.151. V katkılı bileşikler için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonları	125
Şekil 4.152. V katkılı bileşikler için hesaplanan soğurma spektrumu	127
Şekil 4.153. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için soğurma spektrumu	128
Şekil 4.154. V katkılı bileşikler için hesaplanan kırılma indisi spektrumu ...	129
Şekil 4.155. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için kırılma indisi spektrumu	129
Şekil 4.156. V katkılı bileşikler için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu	131
Şekil 4.157. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için sönüm katsayısı spektrumu	131
Şekil 4.158. V katkılı bileşikler için hesaplanan yansıma spektrumu	132
Şekil 4.159. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için yansıma katsayısı spektrumu	133

Şekil 4.160. V katkılı bileşikler için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu	134
Şekil 4.161. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu	134
Şekil 4.162. Sb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Sb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-1 için kristal yapısı.....	136
Şekil 4.163. Sb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Sb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-2 için kristal yapısı.....	136
Şekil 4.164. Nb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Nb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-1 için kristal yapısı	137
Şekil 4.165. Nb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Nb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-2 için kristal yapısı	137
Şekil 4.166. V ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} V _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-1 için kristal yapısı	138
Şekil 4.167. V ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} V _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-2 için kristal yapısı	138
Şekil 4.168. Sb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Sb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-1 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	139
Şekil 4.169. Sb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Sb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-2 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	139
Şekil 4.170. Sb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Sb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-1 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	140
Şekil 4.171. Sb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Sb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-2 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	140
Şekil 4.172. Nb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Nb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-1 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	141
Şekil 4.173. Nb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Nb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-2 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	141
Şekil 4.174. Nb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Nb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-1 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	142
Şekil 4.175. Nb ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} Nb _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-2 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	142
Şekil 4.176. V ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} V _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-1 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	143
Şekil 4.177. V ⁺³ katkılı ve O ⁻² boşluklu KTa _{0.875} V _{0.125} O _{2.875} bileşiğinin kusur-2 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	143

Şekil 4.178. V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	144
Şekil 4.179. V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği	144
Şekil 4.180. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için band yapı grafiği.....	146
Şekil 4.181. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için band yapı grafiği.....	147
Şekil 4.182. V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için band yapı grafiği.....	147
Şekil 4.183. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için toplam durum yoğunluğu eğrisi.....	148
Şekil 4.184. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi.....	148
Şekil 4.185. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için toplam durum yoğunluğu eğrisi.....	149
Şekil 4.186. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi.....	149
Şekil 4.187. V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için toplam durum yoğunluğu eğrisi.....	150
Şekil 4.188. V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi.....	150
Şekil 4.189. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için band yapı grafiği.....	151
Şekil 4.190. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için band yapı grafiği.....	152
Şekil 4.191. V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için band yapı grafiği.....	152
Şekil 4.192. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için toplam durum yoğunluğu eğrisi.....	153
Şekil 4.193. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi.....	153
Şekil 4.194. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için toplam durum yoğunluğu eğrisi.....	154
Şekil 4.195. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi.....	154
Şekil 4.196. V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için toplam durum yoğunluğu eğrisi.....	155
Şekil 4.197. V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi.....	155
Şekil 4.198. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için reel dielektrik fonksiyonları.....	157
Şekil 4.199. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için reel dielektrik fonksiyonları.....	157
Şekil 4.200. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için imajiner dielektrik fonksiyonları.....	158

Şekil 4.201. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için imajiner dielektrik fonksiyonları.....	158
Şekil 4.202. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan soğurma spektrumu	159
Şekil 4.203. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan soğurma spektrumu	160
Şekil 4.204. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan kırılma indisi spektrumu	161
Şekil 4.205. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan kırılma indisi spektrumu	161
Şekil 4.206. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu	163
Şekil 4.207. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu	163
Şekil 4.208. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan yansıma spektrumu	164
Şekil 4.209. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan yansıma spektrumu	165
Şekil 4.210. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu ..	166
Şekil 4.211. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu .	167

ÇİZELGELER DİZİNİ

	Sayfa
Çizelge 4.1. KTaO_3 bileşiğinin örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP)	26
Çizelge 4.2. KTaO_3 bileşiğinin hesaplanan yasak band enerjisi	27
Çizelge 4.3. Sb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP)ve taban durum enerjisi (Ry)	49
Çizelge 4.4. Sb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP)ve taban durum enerjisi (Ry)	49
Çizelge 4.5. En yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	60
Çizelge 4.6. Sb katkılı bileşikler için optik geçişleri temsil eden ilk üç pik için enerji değerleri ve temel soğurma sınırları (TSS) değerleri	61
Çizelge 4.7. En yüksek kırılma indisi ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	65
Çizelge 4.8. En yüksek sönüm katsayısı ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	67
Çizelge 4.9. Nb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP)ve taban durum enerjisi (Ry).....	81
Çizelge 4.10. Nb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP)ve taban durum enerjisi (Ry)	81
Çizelge 4.11. Nb katkılı bileşikler için en yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	92
Çizelge 4.12. Nb katkılı bileşikler için optik geçişleri temsil eden ilk üç pik için enerji değerleri ve temel soğurma sınırları (TSS) değerleri	93
Çizelge 4.13. Nb katkılı bileşikler için en yüksek kırılma indisi ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	97
Çizelge 4.14. Nb katkılı bileşikler için en yüksek sönüm katsayısı ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	98
Çizelge 4.15. V katkılı KTaO_3 bileşiklerinin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP)ve taban durum enerjisi (Ry)	112

Çizelge 4.16. V katkılı $KTaO_3$ bileşiklerinin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).	113
Çizelge 4.17. V katkılı bileşikler için en yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	126
Çizelge 4.18. V katkılı bileşiklerin metalik davranış sergiledikleri enerji değerleri	126
Çizelge 4.19. V katkılı bileşikler için optik geçişleri temsil eden ilk üç pik için enerji değerleri ve temel soğurma sınırları (TSS) değerleri.....	126
Çizelge 4.20. V katkılı bileşikler için en yüksek kırılma indisi ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	130
Çizelge 4.21. V katkılı bileşikler için en yüksek sönüm katsayısı ve bu değere karşılık gelen enerji değeri	130
Çizelge 4.22. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).	145
Çizelge 4.23. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).	145
Çizelge 4.24. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri optik geçişleri temsil eden ilk üç pik için enerji değerleri.....	156
Çizelge 4.25. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için en yüksek kırılma indisi ve bu değere karşılık gelen enerji değeri.....	162
Çizelge 4.26. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için en yüksek sönüm katsayısı ve bu değere karşılık gelen enerji değeri.....	162
Çizelge 4.27. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için en yüksek yüzde yansımaya değeri ve bu değere karşılık gelen enerji değeri.....	165

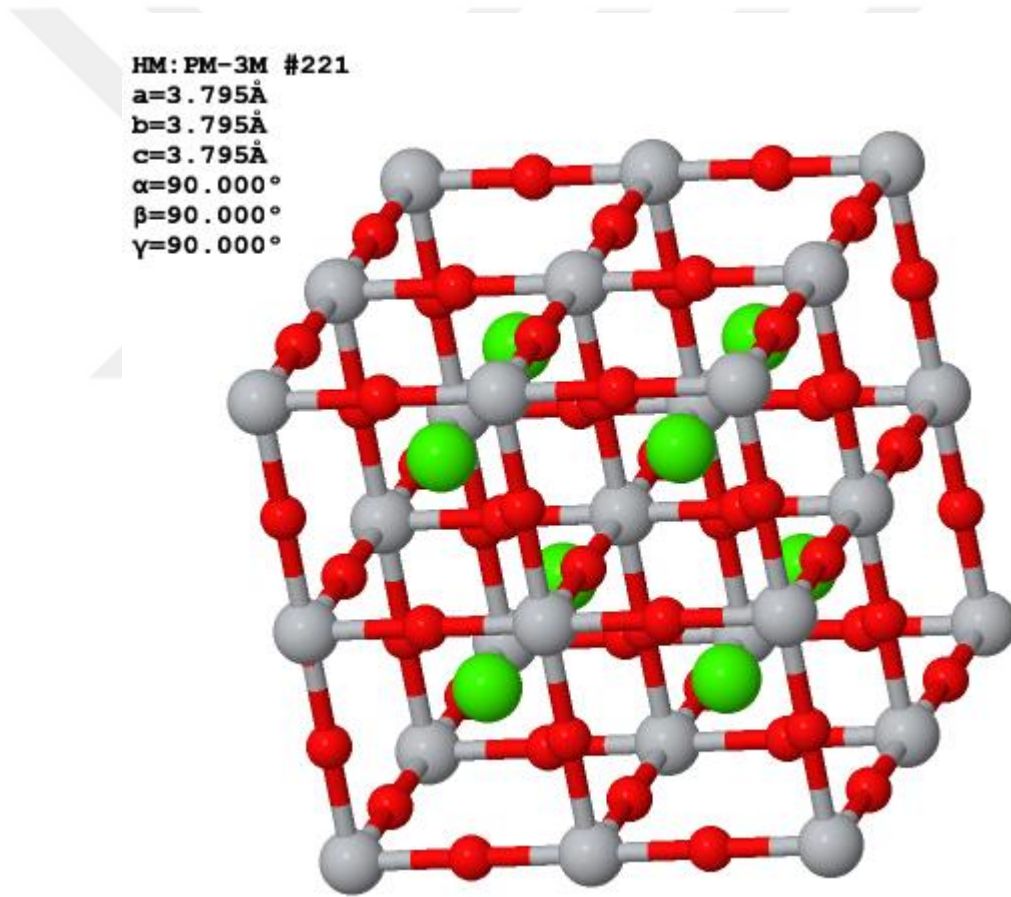
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

a, b, c	Örgü sabitleri
DFT	Yoğunluk fonksiyonel teorisi
e	Elektron yükü
E	Taban durum enerjisi
E_F	Fermi enerjisi
$E_{xc}(\mathbf{r})$	Değiş-tokuş korelasyon enerjisi
$f(\mathbf{x})$	Fonksiyon gösterimi
GGA	Genelleştirilmiş gradyant yaklaşımı
H	Hamiltonyen operatörü
\mathbf{k}	Dalga vektörü
k_x, k_y, k_z	\mathbf{k} dalga vektörünün x, y, z yönlerindeki sayısı
K_{\max}	Maksimum ters örgü vektörü
LDA	Yerel yoğunluk yaklaşımı
PBE	Perdew-Burke-Ernzerhof fonksiyoneli
R_{mt}	Düzlem dalga yarıçapı
s, p, d, f	Atomik orbitaller
TB-mBJ	Gradyant düzeltmeli Becke-Johnson potansiyeli
$V_H(\mathbf{r})$	Hartree potansiyeli
$V_{xc}(\mathbf{r})$	Değiş-tokuş korelasyon potansiyeli
h	Planck sabiti
ψ	Dalga fonksiyonu
$\psi_i(\mathbf{r})$	Bireysel elektron dalga fonksiyonu
$\psi_i^*(\mathbf{r})$	Bireysel elektron dalga fonksiyonunun kompleks eşleniği

1. GİRİŞ

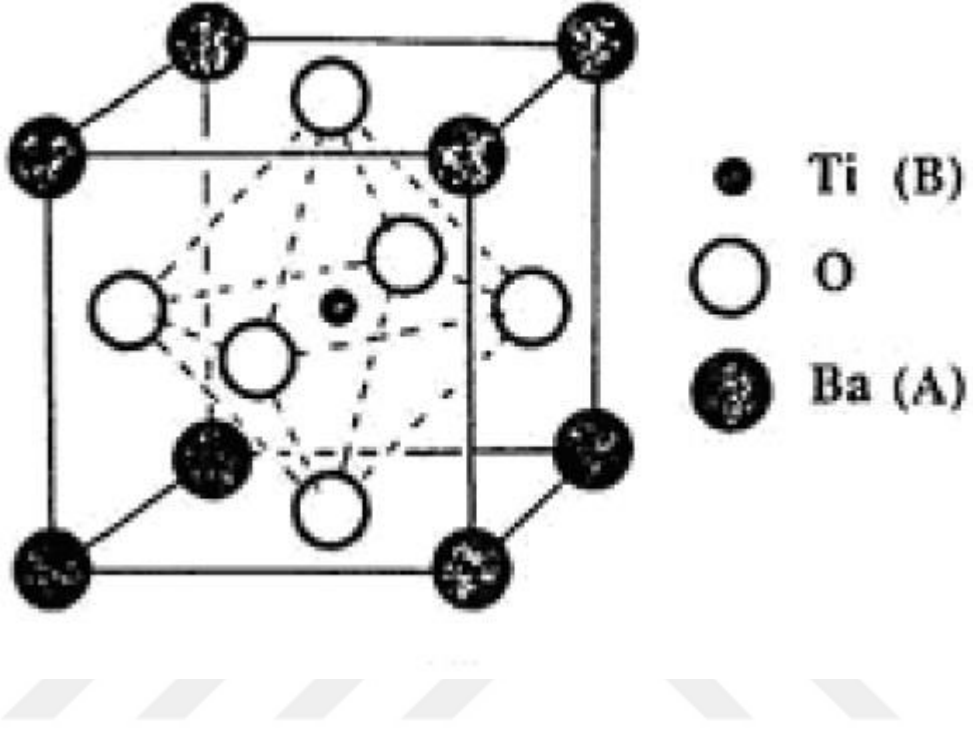
1.1. ABO₃ Tipi Perovskit Yapılar

ABO₃ perovskit oksit ailesi teknolojik anlamda önemli bileşiklerdir. Genelde A ve B geçiş metalleri, alkali metaller veya nadir toprak elementlerinden oluşmaktadır. Burada O oksijen atomudur. Perovskit malzemelerin çoğu kübik yapıda olup *Pm-3m* uzay grubuna sahiptir (Grabowska, 2016). Birden fazla perovskit bileşik olmakla beraber ilk keşfedilen perovskit malzeme doğada bulunan CaTiO₃ mineralidir (Davidson ve Lofgren, 1991). CaTiO₃ bileşiğinin yapısı Şekil 1.1 de gösterilmektedir.



Şekil 1.1. CaTiO₃ bileşiğinin kristal yapısı (University of Liverpool, 2017).

Perovskit yapıdaki malzemeler $A^{+2}B^{+4}O_3^{-2}$, $A^{+1}B^{+5}O_3^{-2}$ ve $A^{+3}B^{+3}O_3^{-2}$ kimyasal formülleri ile ifade edilir (Öteleş, 2011). ABO_3 perovskit yapının kübik birim hücresi Şekil 1.2. de gösterilmektedir.



Şekil 1.2. ABO_3 perovskit yapının kübik birim hücresi (Öteleş, 2011).

Perovskit bileşikler oldukça önemli uygulama alanlarına sahiptir. Perovskit bileşikler enerji depolama aygıtlarında (Busico vd., 1980 ve Liu vd., 2010) ve fotoelektrik (Hill, 2000) özelliklerinden dolayı çeşitli aygıtlarda kullanılmaktadır. Ayrıca iyi bir fotokatalizör özelliği sergilemesinden dolayı suyu ayrıştırarak hidrojen üretiminde kullanılmaktadır (Mavroides vd., 1976 ve Shi ve Guo, 2012). $SrTiO_3$ bileşiği perovskit ailesinin bir üyesi olup fotokatalizör malzeme olma açısından iyi bir aday bileşiktir (Wang vd., 2014).

Bu tez çalışmasında incelenen $KTaO_3$ bileşiği perovskit bileşiklerden biri olup sahip olduğu özelliklerden dolayı araştırmacılar tarafından yaygın bir ilgi görmektedir (Wadehra vd., 2017, Song vd., 2017, Himmetoglu ve Janotti, 2016,

Zhu vd., 2016). KTaO_3 bileşii iřıma kapasit6rleri (Vikhnin vd., 2000), hava arıtımı (Marchelek vd., 2015) ve ayarlanabilir mikrodalga cihazlar (Geyer vd., 2005) gibi uygulama alanlarında kullanılmaktadır. Ayrıca KTaO_3 bileşii oda sıcaklıęında ferromanyetik 6zellik g6stermektedir (Cheong ve Mostovoy, 2007 ve Hong vd., 2006). KTaO_3 bileşii g6neř enerjisini kullanarak hidrojen üretiminde kullanılabilir alternatif malzemelerden biridir. Sahip olduęu yasak band enerjisi (3,60 eV) olup, bu bileşii verimini d6ř6rmektedir. Bu alıřmada KTaO_3 bileşiiine farklı atomlar katkılarak ve kristal yapı ierisinde kusur oluřturarak yapısal, elektronik ve optik 6zellikler incelenmiřtir. Katkı atomları veya kusurlar yardımıyla yasak band enerjisi 1,65 eV-3,10 eV aralıęına ekildięi takdirde, elektromanyetik spektrumun g6r6n6r b6lgesi, hidrojen üretiminde kullanılabilir verimli bir fotokataliz6r olması beklenmektedir.

2. KAYNAK ÖZETLERİ

Rao vd. (2018), yaptıkları çalışmada azot içeren potasyum tantalat bileşimini solvotermal yöntemi ile sentezlenmiştir. Hazırlanan numune, X-ışını kırınımı (XRD), Fourier dönüşümü kızılötesi spektroskopisi (FT-IR), difüzyon yansıtma spektroskopisi (DRS), taramalı elektron mikroskopu (SEM) ve enerji dağılımlı X-ışını spektroskopisi (EDX) ve X-ışını fotoelektron spektroskopisi kullanılarak analiz edilmiştir. SEM görüntülerinden azot içeren KTaO_3 bileşiğinin parçacık boyutunun 100-150 nm olduğu tespit edilmiştir. Azot ile KTaO_3 'ün bant aralığı 3,50 eV den 2,54 eV ye düşmüştür. Bu sayede görünür bölgede fotokatalizör etkisi artmıştır.

Modak ve Ghosh (2017), yaptıkları çalışmada (N, Mo / W) çiftinin KTaO_3 bileşiğinin elektronik yapısı üzerindeki etkisini yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanarak araştırmıştır. KTaO_3 'ün özellikleri Heyd, Scuseria ve Ernzerhof tarafından önerilen hibrit fonksiyonel kullanılarak başarıyla invelenmiştir. Mevcut çalışmada, katkı atomlarının bireysel olarak katılanması sonucu, valans bandı ile iletim bandı arasında yerel boş veya işgal edilmiş durumlar oluşturarak bant aralığını azaltabilir. Ancak bu durumlar fotokatalizör verimliliğini azaltabilir. (Mo, W) ve (Mo,N) çiftlerinin katılanması ile toplam elektron yük dengesi sağlanmış olur. Bu sayede elektron-deşik rekombinasyonundan kaçınılmış olur. İlginç olarak, hem katyonik (Mo / W) hem de anyonik katkı maddesinin (N) varlığında, iyi bir fotokonversiyon verimliliği için temiz bir bant yapısı üretilmektedir. (Mo, W) ve (Mo, N) çiftlerine bağlı olarak bant aralığındaki azalma, görünür ışık emiliminin arttırılması için oldukça önemlidir ve (Mo, N) çifti durumunda daha belirgindir.

Koirala vd., (2017) yaptıkları çalışmada Ar^+ iyon bombardımanındaki (001) yönelimli KTaO_3 'ün örneklerdeki yüzey heterojenliği, elektron mikroskobu ve atomik kuvvet mikroskobu kullanılarak araştırılmıştır. K ve Ta atomlarının yarıçapında büyük farklılıklar olması, farklı kuru aşındırma oranlarına sahip olması ile sonuçlanır. Bu sebepten dolayı yüzey hasarının yanı sıra K ve Ta

atomlarının stokiyometrisinin deęişmesine neden olur. Bu tür numunelerin daha sonra tavlama, buharlaşma yoluyla potasyum içeriğini azaltır ve yüzeyde tantal bakımından zengin ikincil fazlar oluşturur. Bu faz tavlama sıcaklığı ve K:Ta stokiyometrisinin yanı sıra oksijenin kısmi basıncına da bağlıdır. Bununla birlikte, tavlama öncesi örgü hasarını ve yüzey bozukluğunu gidermek için kimyasal yollarla kazanmış numuneler, yüzey heterojenliğin az veya hiç olmamasına işaret etmektedir.

Trybula vd. (2015), yaptıkları çalışmada saf potasyum tantalat $KTaO_3$ kristallerinin lineer ve lineer olmayan dielektrik özellikleri incelemiştir. Dielektrik kayıp faktörü ve polarizasyona ilaveten elektrik duyarlılığını elde etmişlerdir. Saf potasyum tantalat ($KTaO_3$) tek kristalinde 40K'ın altındaki polar nano bölgelerin varlığını kanıtlamışlardır.

Yagi ve Fujiura (2014), yaptıkları çalışmada Nb katkılı $KTaO_3$ bileşiklerini ile yüksek hızlı demet saptırıcılar ve deęişken odak uzaklıklı lensler geliştirmişlerdir. Ayrıca demet saptırıcıları kullanarak 200 kHz'de çalışabilen yüksek hızlı optik koherens tomografi için tarama ışık kaynağı geliştirilmiştir.

Kubacki vd. (2012) yaptıkları çalışmada 1 keV enerjili Ar^+ iyon demetinin $KTaO_3$ tek kristalinin (100) yüzeyine püskürtürmesi sonucu yüzey tabakasının topografya, morfoloji, kimyasal bileşim, elektronik yapı ve elektriksel özellikleri incelenmiştir. Elektronik yapıdaki deęişiklikler, yüzey tabakasının kimyasal ayrışması sonucunda oluşmuştur. Band aralığında görülen elektronik durumlar ile Ta iyonlarının yük durumundaki deęişiklikler arasında bir korelasyon bulunmuştur. Yerel temas potansiyel farkındaki deęişiklikler (LCPD) nano ölçekte kimyasal bileşimde deęişiklikler olduğunu göstermiştir.

Zhang vd. (2012) yaptıkları çalışmada ortorombik olarak uzatılmış oktahedradaki bir 3d iyonu için g faktörlerinin pertürbasyon teorisini kullanarak $MTaO_3$ bileşięi içerisindeki Ni^+ merkezlerinin lokal yapısını ve g faktörlerini incelemiştir. Sistemin üstüste binme modeli ve yerel geometrisinden

kullanılarak ortorombik alan parametresi tanımlanmıştır. Kovalentlik açısından, ligand orbitali ve spin-yörünge bağlama etkileşimlerinden gelen katkılar kümelenme yaklaşımından dikkate alınarak incelenmektedir. Yerel bozulmalar dikkate alınarak hesaplanan g faktörleri deney verileri ile iyi bir uyum göstermektedir.

King vd. (2012) yaptıkları çalışmada 5d geçiş metaline sahip KTaO_3 bileşiğinin (100) yüzeyinde iki boyutlu bir elektron gazının oluşumunu göstermişlerdir. Açık-çözünür fotoemisyon, kuantum sınırlamanın yığın band yapısının yörüngesel dejenerasyonunu kaldırdığını ve hem hafif hem de ağır taşıyıcıların alt bant durumlarından oluşan bir-iki boyutlu bir elektron gazına neden olduğunu buldu. Güçlü spin-yörünge etkileşmesine rağmen ölçümler Fermi seviyesinde Rashba spin bölüşümü için direkt bir üst sınır sağlamaktadır. KTaO_3 bileşiğinin (100) yüzeyinin kutupsal yapısı iki boyutlu bir elektron gazının oluşumuna aracılık etmeye yardımcı olduğu görülmektedir.

Golovina vd. (2011) yaptıkları çalışmada saf KTaO_3 nanokristalinin özelliklerini mikro raman ve manyetik rezonans spektroskopisi tekniklerini kullanarak incelemiştir. Kusurlu ferroelektrik ve manyetizma tüm örneklerde vardır. Kusurların konsantrasyonunun, 0,04 ve 0,06-0,1 mol% olduğu tahmin edilmiştir. Katkısız KTaO_3 kristalleri manyetik ve ferromanyetik özellik sergilememektedir.

Choi vd. (2011) yaptıkları çalışmada, Heyd-Scuseria-Ernzerhof hibrid fonksiyonel kullanarak, KTaO_3 ve NaTaO_3 'deki oksijen boşluklarının enerjilerini ve elektronik özelliklerini incelemiştir. Bu sistemlerin oksijen boşlukları benzer bir davranış sergiler. Bant boşluğu içindeki Fermi seviyesinin çoğu konumu için +2 yük durumu en karardır. Nötr ve + yük durumları, Fermi seviyesi iletim bandının minimum değerine yakın olduğu zaman, oluşum enerjisinde +2 yük durumuyla karşılaştırılabilir hale gelir. Bu nedenle, oksijen boşlukları, taşıyıcı elektron sağlayabilen çift donörlerdir. Oksijen boşluklarının en yakınındaki iki tantal atomunun asimetric olarak bulunduğu iki tür kapalı simetric konfigurasyon, muhtemelen metastabil konfigurasyonlar şeklinde oluşturulur.

Bu yarı geçirilebilir konfigürasyonlar, elektronik yapıda birbirinden çarpıcı bir fark gösterir. Kararlı konfigürasyonda olduğu gibi delokalize bir karaktere sahiptir ve diğeri bant boşluğunda derin, lokalize bir duruma neden olur.

Usui vd. (2010) yaptıkları çalışmada Ba katkılı KTaO_3 'teki metal iletkenliğine rağmen, büyük Seebeck katsayısının kökenini incelendi. Boltzmann denklemi ile Seebeck katsayısının elde edildiği KTaO_3 'ün bant yapısı hesaplandı. Bu malzemede t_{2g} bantlarının çoğulluğunun iyi bir termoelektrik özelliğın önemli bir kaynağı olduğu sonucuna ulaşıldı. Ayrıca, bu malzemelerde genellikle negatif değerlere sahip olan ve Seebeck etkisine karşı yıkıcı bir şekilde çalışan ikinci en yakın komşu atlama integralinin olduğunu da görüldü. Bu, Ba katkılı KTaO_3 'teki termik güç için başka bir faktör olabilir.

Zou vd., (2009) yaptıkları çalışmada oktahedral morfolojiye sahip KTaO_3 nanokristalini hidrotermal yolla sentezlemiştir. Hazırlanan numuneler, yaklaşık 500 nm'lik üniform kenar boyutu ile çok miktarda oktahedral nanokristalin içeren piroklor yapılara sahiptir. KTaO_3 nanokristalin yasak band enerjisi yaklaşık 4.06 eV'dir. Raman çalışmaları, KTaO_3 nanokristalin ve zayıf kuantum sınırlama etkisinin kusurlarından dolayı nanokristalin titreşim modlarının kırmızıya kaydığı ve genişlediğini göstermektedir. PL çalışması oda sıcaklığında yaklaşık 490 nm'de (2.53 eV) zirve yapan geniş bir mavi ışık emisyon bandının gözlendiğini göstermektedir.

Liu vd., (2007) yaptıkları çalışmada alkali tantalat ATaO_3 ve perovskit yapılı alkali niobat ANbO_3 (A = Na ve K) tozları hidrotermal yöntemle sentezlenmiştir. Niyobyum içeren bileşiklerin band enerjisi, tantalum içeren bileşiklerin band enerjisinden daha küçüktür. Band enerjilerindeki bu fark, difüzyon yansıma spektrumlarındaki absorpsiyon eğrilerinde tantallardan niobatlara doğru kırmızı kaymaya katkıda bulunur. Kübik kristal yapıdaki NaTaO_3 tozu en yüksek fotokatalitik aktiviteyi gösterir.

Bae vd. (2005) yaptıkları çalışmada KTaO_3 kristalinin (100) yüzeyi üzerinde birim hücre yüksekliğindeki adımların hazırlanması için bir yöntem geliştirdi. Bu çalışmada (100) KTaO_3 yüzeyinde çeşitli yüzey işlemlerinin etkileri, özellikle kimyasal aşındırma ve tavlama özellikleri açıklanmaktadır. (001) KTaO_3 'ün yüzey morfolojisi, atomik kuvvet mikroskobu (AFM) kullanılarak incelendi. KTaO_3 yüzeyinde elde edilen basamak yapısını, pürüzlülüğü ve parçacık oluşumunu belirlemede aşınma süresinin ve tavlama sıcaklığının rolü tartışılmıştır.

He vd. (2004) yaptıkları çalışmada perovskit ve pyrochlore KTaO_3 bileşiklerini KOH ile solvotermal reaksiyon ile sentezlenmiştir. Elde edilen numuneler X-ışını kırınımı ve transmisyon elektron mikroskobu ile karakterize edilmiştir. Sonuçlar, aktif çözücüye (su) inert çözücülerin (etanol veya heksan) oranının, KTaO_3 'ün piroklore veya perovskite nanokristallerine dönüştürülmesinde önemli bir rol oynadığını göstermektedir. Ayrıca yapılan çalışmada olası reaksiyonlar tartışılmıştır.

Akbarzadeh vd. (2004) yaptıkları çalışmada KTaO_3 bileşiğini araştırmak için etkin bir Hamiltonyen parametrelili yaklaşımı kullanılır. Bu yaklaşımla kuantum etkileri hesaba katıldığında deneysel olarak gözlenen anormal dielektrik tepkileri iyi bir şekilde oluşturulmuştur. Kuantum dalgalanmaları paraelektrik-ferroelektrik faz geçişini bastırıyor ve dielektrik davranışını açıklamak için kusurların ortaya çıkmasına gerek kalmadığı bildirilmiştir. Ortaya çıkan kuantuma bağlı yerel yapı örgü sabitini uzatan boylamsal, iğne benzeri korelasyonlar gösteren merkez dışı atomik yer değiştirmeleri gösterir.

Sigman vd. (2002) yaptıkları çalışmada yapay olarak elde edilmiş tabakalı KTaO_3 perovskite süper çökeltilerinde antiferroelektrik davranış gözlememiştir. KTaO_3 ferroelektrik ve paraelektronik özellik sergilemesine rağmen uygulanan dc akım ile dielektrik sabitinin artması sonucu anti ferroelektrik özellik sergilemektedir. Bu dielektrik davranış, hem para elektrolitik hem de ferroelektrik malzemeler için doğrusal olmayan tepki ile tutarsızdır. Bununla birlikte, uygulanan elektrik

alanı ile dielektrik sabitindeki artış, antiferroelektrik davranış ile tutarlıdır. Antiferroelektrik sıralama, süper örgünün neden olduğu katyon modülasyonu ile indüklenmektedir.

Leung (2001) KTaO_3 bileşiğinde izole edilmiş Co^{+2} , Fe^{+3} ve Cu^{+2} nokta kusurlarını dikkate alarak perovskitlerdeki geçiş metali safsızlık merkezlerinin bir çalışması yapılmıştır. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) içinde, Fe^{+3} hariç kusur merkezi manyetik momentleri deneyler ile aynı sonucu vermektedir. GGA yöntemi Fe^{+3} 3d elektron korelasyonlarını hafife aldığı düşünülmektedir.

Tupitsyn vd. (2001) yaptıkları çalışmada saf ve Li katkılı KTaO_3 bileşiklerini yoğunluk fonksiyonel teoriye dayalı CASTEP programı ile incelemiştir. KTaO_3 bileşiği için optimize edilmiş örgü parametreleri mevcut deneysel veriler ile uyum içerisindedir. KTaO_3 'ün karışık bir iyonik-kovalent tipte bağlara sahip olduğunu tespit edilmiştir. K^+ atomunun yerine Li^+ atomu katkılanan bileşikler için yoğunluk fonksiyonel teoriye dayalı yapılan hesaplamalarda $2 \times 2 \times 2$ süper hücre kullanılmıştır. Li^+ merkezinden uzaktaki iyonların çevresindeki oksijen yer değiştirmelerinin, valans bandının tepe noktasında 60 meV ve 90 meV band aralığında iki yerel durumun üretilmesine yol açtığı gösterilmiştir.

Grass vd., (1996) yaptıkları çalışmada kübik KTaO_3 bileşiğinin elektronik özelliklerini TB-LMTO ve FP-LMTO methodlarını kullanarak incelemiştir. Birim hücre başına birçok atom durumunda fotoemisyonun bir adımlı modelinin genelleştirilmesi ve tam potansiyel fotomiyon teorisinin geliştirilmesi ile aç çözünürlüğü ultraviyole ışık yayılımı yoğunluklarının ayrıntılı bir çalışması mümkündür. Her iki yöntem için KTaO_3 kristalinin (100) yüzeyi için kübik fazda hesaplanan fotoemisyon spektrumlarını hesaplamıştır. TB-LMTO ve FP-LMTO potansiyelleri ile hesaplanan teorik veriler deneysel spektrumlarla ile karşılaştırıldığında sonuçların tatmin edici olduğu görülmektedir.

Klein vd. (1995), yaptıkları çalışmada $K_{1-x}Li_xTaO_3$ ($0,016 \ll x \ll 0,05$) bileşiminde $T < 80$ K iken düzensiz ferroelektrik özellik gözlenmiştir. KTL bant aralığı genişliğinden daha düşük enerji ile argon lazer aydınlatması altında, KTL'de fotoiletkenlik değeri, saf olmayan konvansiyonel yarı iletkenler ile aynı sıradadır. Fotokoiletkenliğin sıcaklığa, Li konsantrasyonuna, dış elektrik alanına, aydınlatma gücüne ve numuneye bağımlılığı araştırılmıştır. Li^+ iyonlarının merkez dışı konumunun yanında bulunan oksijen atomlarının yer değiştirmesini hesaba katan bir model kullanarak, sıg oksijen yerel seviyesini ve istem dışı demir iyonlarını içeren bant aralığındaki yerel seviyelerin enerjik bir şeması önerilmiştir.

Glinchuk vd. (1995), yaptıkları çalışmada yüzeysel saf $KTaO_3$ bileşiminin ESR araştırmasını 4,2 K ile 77 K arasında gerçekleştirmiştir. İki yeni ESR spektrumu gözlenmiştir. İlk spektrumun oluşmasında K^+ atomunun Gd^{+3} atomu ile yer değiştirmesi neden olmaktadır. Spektrum çizgi yoğunluklarının ve genişliklerinin analizi, düşük sıcaklıktaki Ta iyon yer değiştirmeleri hakkında herhangi bir kanıt vermemektedir. İkinci spektrum ise eksensel simetriye sahip olup, K^+ atomunun Fe^+ atomu ile yer değiştirmesi etkilidir. Çevredeki oksijen iyonu yer değiştirmeleri Fe^+ ESR spektrum eksenliğinin başlıca nedeni olduğu gösterilmiştir.

Nishihata vd. (1995) yaptıkları çalışmada $KTaO_3$ bileşiminde Ta atomu etrafındaki lokal yapıları ince yapı ölçümleri kullanılarak, genişletilmiş X-ışını emilimi ile (EXAFS) araştırılmıştır. Ta- L_m kenarındaki EXAFS spektrumları, oda sıcaklığından 700 K'ye kadar olan sıcaklıklarda gözlendi. Ta-O atomik çifti içindeki termal titreşimin uyumsuzluğu, bu atomların inversiyon merkezinde istatistiksel olarak yerini aldığı yerde, yüksek sıcaklıklarda, ise 700 K'nin altında neredeyse önemsiz olduğu tespit edilmiştir.

Perry ve McNelly (1967), yaptıkları çalışmada $KTaO_3$ 'ün uzak kızıl altı yansımalarını 12-463 K arasında sıcaklığın bir fonksiyon olarak incelenmiştir. Sonuçlar bir Kramers-Kronig yöntemi ile analiz edilmiş ve sıcaklık "Curie"

sıcaklığına indirildiğinde frekansını düşüren "yumuşak" bir modu belirtmiştir. Bu, Cochran'ın teorisi ile yorumlanan dielektrik sabitinin sıcaklık bağımlılığına uygundur.

Miller ve Spitzer (1963), tek-kristal KTaO_3 'ün oda sıcaklığı yansıması 5000 ile 77 cm^{-1} arasında ölçülmüştür. Veriler bir Kramers-Kronig ilişkisi ve klasik dağılım teorisi ile analiz edilmiştir. Üç aktif kızılötesi temel titreşim gözlemlenmiştir. En düşük frekans modunun gücü, malzemenin düşük frekanslı dielektrik sabitini oluşturur. Hesaplamalar ile veriler arasında iyi bir uyuşma elde etmek için düşük frekanslı rezonansa yönelik frekansa bağlı bir sönüm sabitinin gerekli olduğunu göstermektedir.



3. TEORİ

3.1. Çok-cisim problemi

Parçacığı temsil etmek amacıyla bir küre ele alalım. Buna etkiyen kuvvetler bilinirse klasik mekanik kanunlarıyla bu kürenin yörüngesi tespit edilebilir. Bu küreye etkiyen ya da etkimeyen ikinci bir küre ele alırsak, bu iki kürenin hareketi yine klasik mekanik kanunlarıyla tespit edilebilir. Fakat çok fazla sayıda küre ele alırsak ve her bir kürenin birbirine etki ettiğini düşünürsek o zaman her bir kürenin yörüngesini bulmak oldukça güçleşir. Bu çok cisim problemi olarak açıklanır. Bu çok sayıdaki kürenin birbirine etki etmediğini ve her bir kürenin bağımsız olarak hareket ettiğini düşünürsek yine her bir kürenin yörüngesini bulmak kolaylaşır.

3.2. Schrödinger denklemi

Atom topluluklarının özelliklerini tarif etmek isteyelim. Bunun için bir mineral kristal yapısını örnek alabiliriz. Bilmek istediğimiz şey buradaki atomların enerjilerinin nasıl değiştiğidir. Kuantum mekaniği bir çekirdek içindeki protonun kütesinin, elektronun kütesinden 1800 kat daha fazla olduğunu söyler. Bunun anlamı elektronların çevredeki değişimlere çekirdekten daha hızlı cevap verdiğidir. Çekirdeğin elektrondan daha ağır olması nedeniyle çekirdeği sabit, çakılı parçacıklar olarak düşünebiliriz. Daha sonra elektron hareketini açıklayan denklemleri çözeriz. Bundan sonra çekirdeği ayrı bir topluluk, elektronları ayrı bir topluluk olarak düşünürüz. Elektron topluluğunun çekirdek topluluğu alanı içinde hareket ettiğini düşünerek elektronların en düşük enerjili durumunu buluruz. Bu elektronların taban durumudur. Burada kullandığımız yaklaşım Born-Oppenheimer yaklaşımıdır (Born, 1927). Schrödinger denklemini en basit olarak denklem (3.1) deki gibi tanımlayabiliriz;

$$H\psi=E\psi \quad (3.1)$$

(3.1) denkleminde H hamiltonyen operatörü, ψ öz durum, E ise özdeğerdir. Burada ψ kompleks sayı, E ise reel sayıdır. Hamiltonyenin içeriği ilgilenilen fiziksel sisteme bağlı olarak değişiklik gösterir. Kare kuyu potansiyelindeki bir parçacıkla ilgileniyorsak H operatörün içeriği basittir. Bir kristalle ilgileniyorsak çok sayıda elektron ve çok sayıda çekirdek birbiriyle etkileşir. Böyle bir durumda Schrödinger denklemi (3.2) daki gibi tanımlanır:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j<i}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \psi = E\psi \quad (3.2)$$

(3.2) denkleminde parantez içindeki ilk terim elektronların kinetik enerjisi, ikinci terim elektron topluluğu ile çekirdek topluluğu arasındaki etkileşme enerjisi, üçüncü terim farklı elektronlar arasındaki etkileşme enerjisidir. \hbar planck sabiti, m elektronun kütlesi, N elektron sayısı, $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ konum vektörleridir. ψ dalga fonksiyonudur. N tane elektron olduğu için, N tane elektronun dalga fonksiyonudur. E, elektronların taban durum enerjisidir.

ψ , materyalde bulunan bütün elektronları kapsar. Ayrıca ψ yi tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazabiliriz. Bu tam dalga fonksiyonudur. Tam dalga fonksiyonu N elektronlu bir sistem için 3N boyuta sahiptir. Eğer çok atomlu bir sistemi düşünürsek boyut çok fazla olur. Elektron yoğunluğu ise üç boyutludur. Bu yüzden tam dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunu kullanmak işleri kolaylaştırır. Elektron yoğunluğu $n(\mathbf{r})$ ile gösterilir ve bireysel elektron dalga fonksiyonları cinsinden yazarsak denklem (3.3) daki gibi ifade edilir:

$$n(\mathbf{r}) = 2 \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) \quad (3.3)$$

Denklem (3.3) de $\psi_i(\mathbf{r})$ bireysel elektron dalga fonksiyonudur. $\psi_i^*(\mathbf{r})\psi_i$, bireysel elektron dalga fonksiyonun kompleks eşleniğidir. 2 çarpanı elektron spininden kaynaklanır ve farklı spine sahip iki elektronu gösterir.

3.3. Hartree ve Hartree-Fock metodu

Hartree 1928 yılında, (Hartree, 1928), atomların taban durumu enerjisini dalga fonksiyonlarına bağlı olarak elde ederek, bu alanda çok başarılı bir adım atmıştır. Bu yaklaşımda çok sayıda elektronun dalga fonksiyonu, tek elektron fonksiyonlarının çarpımı olarak ifade edilmiştir. Hartree-Fock yaklaşımı elektronların birbirinden bağımsız hareket ettiğini kabul eder. Fakat Coulomb etkileşmesi elektronların birbirine bağlı olduğunu ifade eder. Ayrıca bu yaklaşım elektronların antisimetri özelliğinin olmadığını kabul etmektedir. Bu durum ise Pauli dışarlama ilkesiyle çelişmektedir. Hartree-Fock yaklaşımının sahip olduğu bu olumsuzluklar bu yaklaşımın sadece tek elektrona sahip sistemler de başarılı olduğunu ortaya koyar 1930 yılında antisimetri problemini ortadan kaldırmak için Fock ve Slater, (Fock, 1930), antisimetri özelliğine sahip dalga fonksiyonunu Slater determinantının kullanılmasıyla çözülebileceğini öngördüler. Bu dalga fonksiyonun kullanılmasıyla da toplam enerji minimize edilebilecektir. Fakat kullanılan dalga fonksiyonunun elektronlar arasındaki etkileşimi ihmal etmesi önemli bir sorun olmaktadır. Bu yüzden son yıllarda elektron sistemlerinin incelenmesinde dalga fonksiyonlarından ziyade elektron yoğunluğu tercih sebebi olmuştur. Günümüzde elektron yoğunluğunu kullanarak taban durumu enerjisini elde eden en yaygın kullanımlardan biri yoğunluk fonksiyonel teorisidir.

Elektron dalga fonksiyonu sistemdeki elektronların tamamının bir fonksiyonudur. ψ , bireysel elektron dalga fonksiyonların çarpımı olarak yazılabilir.

$$\psi = \psi_1(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r}), \dots, \psi_N(\mathbf{r}) \quad (3.4)$$

Yukarıdaki ifadeye Hartree çarpımı denir. Hartree metodu dalga fonksiyonunun bütün özelliklerini sağlamaz. İki elektron yerdeğiştirdiğinde dalga fonksiyonunun işaret değiştirmesine anti-simetri prensibi denir. Hartree metodunda iki elektron değiş-tokuş edildiğinde yukarıda tanımladığımız Hartree çarpımının işareti değişmez.

Dalga fonksiyonunu hesaplama yöntemlerinden birisi de Slater determinantını kullanmaktır. Bu determinant anti-simetri kuralını sağlar. Burada toplam dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarından oluşan matrisin determinantıdır. Ayrıca Slater determinantı Pauli dışarlama ilkesini sağlar. Burada toplam dalga fonksiyonu şu şekilde bulunur; N-elektronlu bir sistem için tek elektron dalga fonksiyonlarından oluşan NxN boyutlu matrisin determinantıdır. Hartree-Fock metodunda tek elektron Schrödinger denklemi (3.5) da tanımlanır;

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) \right] x_j(\mathbf{r}) = E_j x_j(\mathbf{r}) \quad (3.5)$$

(3.5) denkleminde solda parantez içine baktığımızda, Kohn-Sham denkleminde tanımlanan değiş-tokuş korelasyon potansiyelinin olmadığı görülür. $x_j(\mathbf{r})$, spin yörüngeleri/orbitalleridir. Bu denklem çözülerek spin orbitalleri bulunur. Toplam dalga fonksiyonu bu spin orbitallerinin Slater determinantı aracılığı ile bulunur. Bu şekilde Hartree-Fock metodu toplam dalga fonksiyonunu hesaplar.

3.4. Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT)

Yoğunluk Fonsiyonel Teorisi, (Hohenberg ve Kohn, 1964) tarafından ispatlanmış olan iki temel matematiksel teorem ve bir dizi denklem üzerine inşa edilmiştir. Hohenberg ve Kohn tarafından ispatlanan ilk teorem şudur: Schrödinger Denkleminde elde edilen taban-durum enerjisi elektron yoğunluğunun tek bir fonksiyoneldir (Sholl ve Steckel, 2009).

Bu ilk teoremi şu şekilde açıklayabiliriz; fonksiyonel kavramı adından da anlaşılacağı üzere fonksiyon kavramıyla ilişkilidir. Fonksiyon, değişkenleri kullanır ve bunlardan bir sayı üretir. Fonksiyonel ise fonksiyonu kullanır ve bundan bir sayı üretir. Fonksiyonu $f(x)$ ile gösterirsek, fonksiyoneli $F[f]$ ile gösteririz. $n(\mathbf{r})$ elektron yoğunluğudur, E taban-durum enerjisidir. E, $E[n(\mathbf{r})]$ olarak gösterilebilir. Burada taban-durum enerjisi, elektron yoğunluğunun

fonksiyoneldir. Bu yüzden DFT, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi olarak adlandırılır.

Birinci Hohenberg-Kohn teoremi, Schrödinger denklemini çözmek için kullanılacak bir elektron yoğunluğu fonksiyonelinin mevcut olduğunu söyler, ancak fonksiyonelin gerçekte ne olduğu hakkında bir şey söylemez. İkinci Hohenberg-Kohn teoremi bu fonksiyonelin önemli bir özelliğini tanımlar: Toplam fonksiyonelin enerjisini minimize eden elektron yoğunluğu, Schrödinger denkleminin tam çözümüne karşılık gelen doğru elektron yoğunluğudur (Sholl ve Steckel, 2009).

$\psi_i(\mathbf{r})$, elektron yoğunluğunu tanımladığı için enerjiyi tek-elektron dalga fonksiyonu cinsinden yazabiliriz. Enerji fonksiyoneli,

$$E[\{\psi_i\}] = E_{bilinen}[\{\psi_i\}] + E_{xc}[\{\psi_i\}] \quad (3.6)$$

olarak yazabiliriz. Eşitliğin sağındaki ilk terim bilinen enerjiler, ikinci terim ise değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneldir.

Fizik ve fizikle ilişkili bilimlerde temel amaç, maddenin özelliklerini anlayabilmek ve kontrol edebilmektir. Atom ve moleküllerin kuantum davranışlarını tanımlayan temel denklem Schrödinger Denklemdir. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT), Schrödinger Denklemini çözüme olağanüstü başarılı bir yaklaşımdır. Bu teori maddenin (çok elektronlu sistemin) temel durum özelliklerini açıklamada kullanılır. DFT, uyarılmış durumlarda da kullanılabilir. Fakat temel durumdaki kadar başarılı değildir. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi çok parçacık dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunu kullanır.

DFT, deneysel olarak yapılması güç ya da imkansız olan olaylarda da kullanılır. Örneğin çok yüksek sıcaklık ve çok yüksek basınç gereken olaylarda DFT kullanmak çok daha yararlıdır. Atomik uzunluk ölçeklerinde bir fiziksel problem araştırılacaksa burada deney yerine DFT kullanmak daha yararlıdır.

3.5. Kohn-Sham denklemleri

Kohn ve Sham (1965), doğru elektron yoğunluğunu bulmak için tek elektron denklemlerinin biraraya gelmesiyle oluşan denklem setinin çözülmesi gerektiğini gösterdiler. Buna göre Kohn-Sham denklemi (3.7) de gösterilmiştir;

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{XC}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (3.7)$$

Denklem (3.7) da parantez içindeki ilk terim elektronların kinetik enerjisidir. İkinci terim elektron toplulukları ve çekirdek toplulukları arasındaki etkileşme enerjisidir. Üçüncü terim Hartree potansiyelidir. Formülü (3.8) de verilmiştir;

$$V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (3.8)$$

Hartree potansiyeli, (3.6) denkleminde çözülen elektron ile bütün elektronların oluşturduğu toplam elektron yoğunluğu arasındaki coulomb itmesidir. Burada e elektronun yükü, r , \mathbf{r}' konum vektörleri, $n(\mathbf{r}')$ elektron yoğunluğu, d^3r' integral sabitidir. Dördüncü terim değiş-tokuş ve korelasyon potansiyelidir. Bu potansiyel değiş-tokuş korelasyon enerjisinin foksiyonel türevidir. Formülü (3.9) da verilmiştir;

$$V_{XC}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{XC}(\mathbf{r})}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (3.9)$$

Bu denklemlerden elektron yoğunluğu şu şekilde hesaplanır; bir başlangıç elektron yoğunluğu tanımlanır. Bu tanımlanan elektron yoğunluğunu kullanarak Kohn-Sham denklemleri çözülür. Buradan tek-parçacık dalga fonksiyonu bulunur. Bu tek-parçacık dalga fonksiyonunu ve elektron yoğunluğu denklemini kullanarak elektron yoğunluğu hesaplanır. Buradan hesapladığımız elektron yoğunluğu ile başlangıçta tanımlanan elektron yoğunluğu karşılaştırılır. Bu iki elektron yoğunluğu aynı ise aradığımız taban durum elektron yoğunluğunu

bulmuş oluruz. Bu elektron yoğunluğunu denklemleri çözmede kullanabiliriz. Aynı değil ise başlangıçta tanımlanan elektron yoğunluğunu değiştirerek aşamaları tekrardan yaparız. İki elektron yoğunluğu aynı oluncaya kadar bu döngü devam eder.

3.6. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)

Kohn-Sham denklemlerini çözebilmek için değiş-tokuş korelasyon potansiyelini $V_{xc}(\mathbf{r})$ belirlemek zorundayız. Bunu belirlemede kullanılan yaklaşımlardan birisi yerel yoğunluk yaklaşımıdır. Sadece yerel yoğunluğu kullandığı için bu yaklaşıma yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) denir. Burada gerçek değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli kullanılmadığından elde edilen çözüm tam çözüm değildir. Burada elektronlar, homojen elektron gazıdır. Elektron yoğunluğu uzayın her yerinde sabittir. Bu yaklaşım en çok kullanılan yaklaşımdır. LDA'da bir katının toplam değiş-tokuş korelasyon enerjisi;

$$E_{xc}^{LDA}[n] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}(n) d\vec{r} \quad (3.10)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\varepsilon_{xc}(n)$ niceliği, $n(r)$ yoğunluklu homojen bir elektron gazı için parçacık başına değiş-tokuş korelasyon enerjisidir. Bu enerjiye karşılık gelen değiş-tokuş korelasyon potansiyeli;

$$V_{xc}^{LDA}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}^{LDA}}{\delta n(\vec{r})} = \varepsilon_{xc}(n(\vec{r})) + n(\vec{r}) \frac{\partial \varepsilon_{xc}(n)}{\partial n} \quad (3.11)$$

eşitliği ile ifade edilir. Böylece Kohn-Sham denklemleri LDA altında;

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v(\vec{r}) + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + v_{xc}^{LDA}(\vec{r}) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (3.12)$$

İfadesini alır. Bu ifadenin kendi içinde tutarlı olarak çözülmesi LDA yöntemi olarak adlandırılır.

3.7. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA)

LDA' dan sonra en iyi bilinen yaklaşım genelleştirilmiş gradyent yaklaşımıdır. Elektron yoğunluğu ve bu yoğunluğun gradyentinden gelen bilgileri içerir. Bu bilgiler çok çeşitli yollarla elde edilebildiğinden çok sayıda GGA fonksiyoneli vardır. Bu fonksiyonellerden bazıları, Perdew-Burke-Wang, (1996), Lee-Yang-Parr (1988), Perdew-Wang (1992) ve Perdew-Burke-Ernzerhof (1996) bu yaklaşımlara örnek olarak gösterilebilir.

Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı yerel yoğunluk yaklaşımına ek olarak, her noktada elektron yoğunluğunun $n(\vec{r})$ yanı sıra bu yoğunluğun $|\nabla n|$ olarak ifade edilen gradyentinde hesaplanması gerektiğini ifade eder. Bu yaklaşımın genel ifadesi;

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int F_{xc}[n(\vec{r}), |\nabla n(\vec{r})|] d\vec{r} \quad (3.13)$$

şeklinde. F_{xc} fonksiyonelinin çeşitli formları birçok bilim adamı tarafından önerildi. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımında, değiş-tokuş korelasyon enerjisi bir F_{xc} faktörü LDA üzerine eklenerek aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir.

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc} F_{xc}(r_s, s) d\vec{r} \quad (3.14)$$

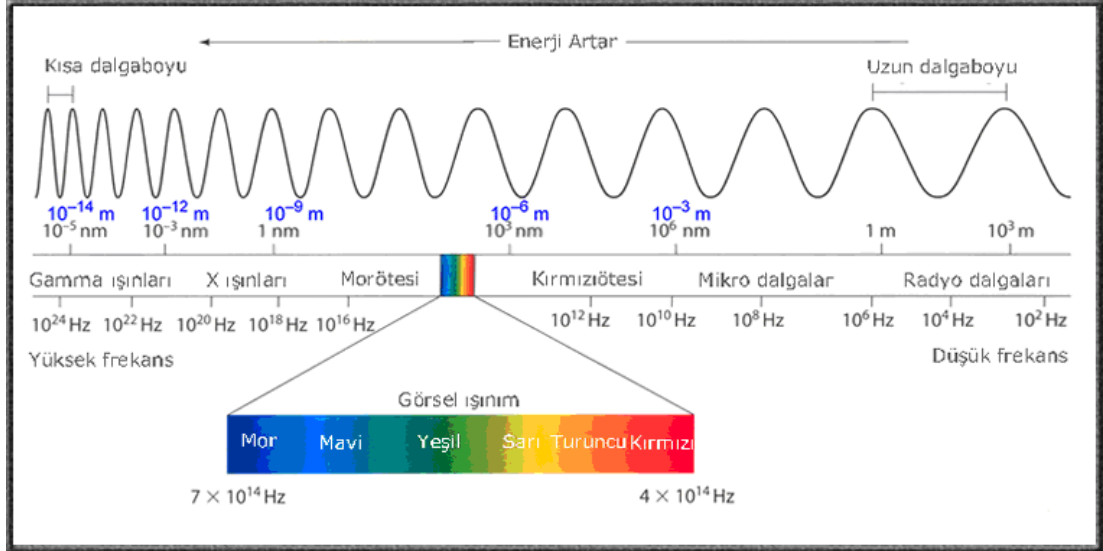
3.8. WIEN2k Programı

Bu çalışmada hesaplamaların yapılması için WIEN2k simülasyon programı kullanıldı (Blaha vd., 2014). Taban durum özelliklerinin incelenmesinde (örgü sabiti, bulk modülü, bulk modülünün basınca göre birinci türevi ve taban durum enerjisi) LDA ve GGA yaklaşımları kullanılarak elde edildi. LDA ve GGA

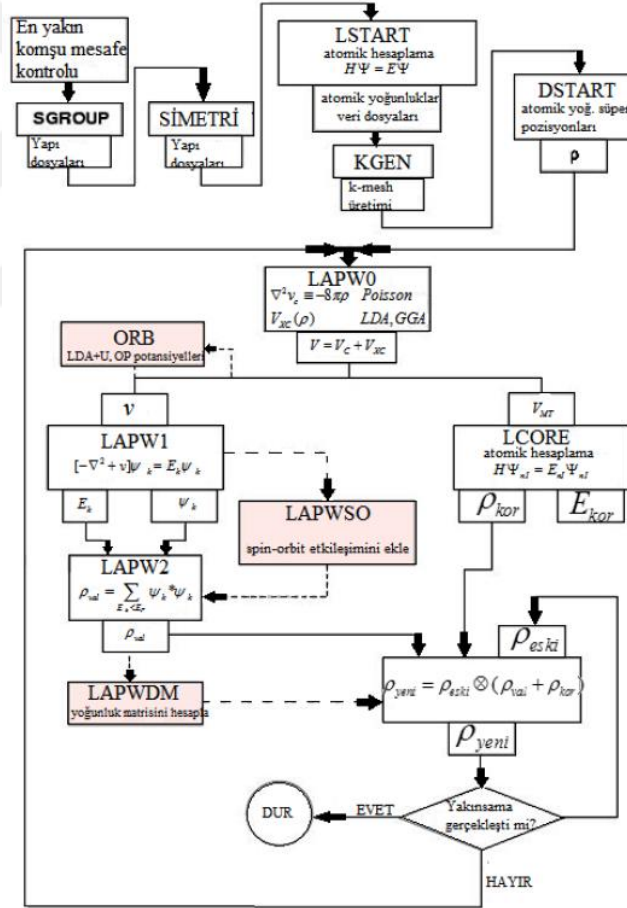
yaklaşımları deneye yakın taban durum özelliklerini belirleyebilmektedir (Yalçın, 2014). LDA yaklaşımı 4d ve 5d gibi güçlü korelasyon içeren hesaplamalarda GGA'ya göre daha başarılıdır (Klein vd, 1995). Bununla birlikte 3d ve daha hafif metaller için GGA daha başarılıdır (Fritsche, 1993). Ancak LDA ve GGA yaklaşımları yarıiletkenlere uygulandığında yasak band enerjisi deneysel ile karşılaştırıldığında daha düşük çıkmaktadır. Bu nedenle son yıllarda bilim insanları gradyent-düzeltilmiş fonksiyoneller kullanmaya başlamıştır. Bu tez çalışmasında yasak band enerjisi, elektronik ve optik özelliklerin incelenmesinde gradyent-düzeltilmiş Becke-Johnson potansiyeli kullanıldı (Tran ve Blaha, 2009 ve Koller vd., 2012). Hesaplanan yasak band enerjileri elektromanyetik spektrum ile karşılaştırılarak hangi dalga boyuna karşılık geldiği tespit edildi. Elektromanyetik spektrum Şekil 3.1'de verilmiştir.

Bu çalışmada WIEN2k simülasyon programı Şekil 3.2'de verilen algoritma diyagramı kullanılmaktadır. Kullanılan program, enerjinin minimum değerini bulmaya çalışmaktadır. Enerjinin minimum değerini veren elektron yoğunluğu fonksiyonu aranılan doğru taban durumu yoğunluk fonksiyonu olur ve bundan sonraki işlemler bu değer esas alınarak yapılır. Bu denklemlerin öz-uyumlu olarak çözülmesi gerekir.

Toplam enerjiyi elde etmek için $R_{mt}K_{max}=7$ olarak ayarlandı. Burada R_{mt} düzlem dalga yarıçapı, K_{max} ise maksimum ters örgü vektörünü tanımlamaktadır. Atomik küreler içinde kullanılan parçalı dalgalar $l_{max} = 10$ 'a genişletildi. Fourier genişlemesini tanımlayan G vektörü $12 Ry^{1/2}$ olarak seçildi. Çekirdek seviyelerini değerlik seviyelerinden ayırmak için kesilme (Cut-off) enerjisi GGA için $-8,0 Ry$, LDA için ise $-9,0 Ry$ olarak belirlendi.



Şekil 3.1. Elektromanyetik spektrum (Dersim Fizik, 2018)



Şekil 3.2. Bir kristalin toplam enerjisini WIEN2k programı kullanılarak bilgisayarla yapılan hesaplamalardaki akış diyagramı (Yalçın, 2014)

4. ARAŞTIRMA BULGULARI

4.1. Katkısız, Katkılı ve Kusurlu KTaO_3 Bileşiklerinin Fiziksel Özellikleri

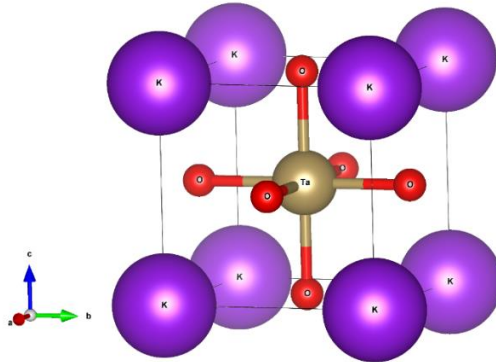
Oda sıcaklığında KTaO_3 bileşiği (Şekil 4.1) kübik perovskit yapıda olup basit kübik örgüye sahiptir. Basit kübik örgünün 1. Brillouin bölgesi ve özel simetri noktaları Şekil 4.2 de verilmiştir. Kenar uzunlukları birbirine eşit ve aralarındaki açılar doksan derecedir. Köşegenlerde potasyum, cisim merkezinde talyum ve yüzey merkezlerinde oksijen atomları vardır. K, Ta ve O atomları için sırasıyla baz noktaları aşağıdaki gibi tanımlanır.

K: 000

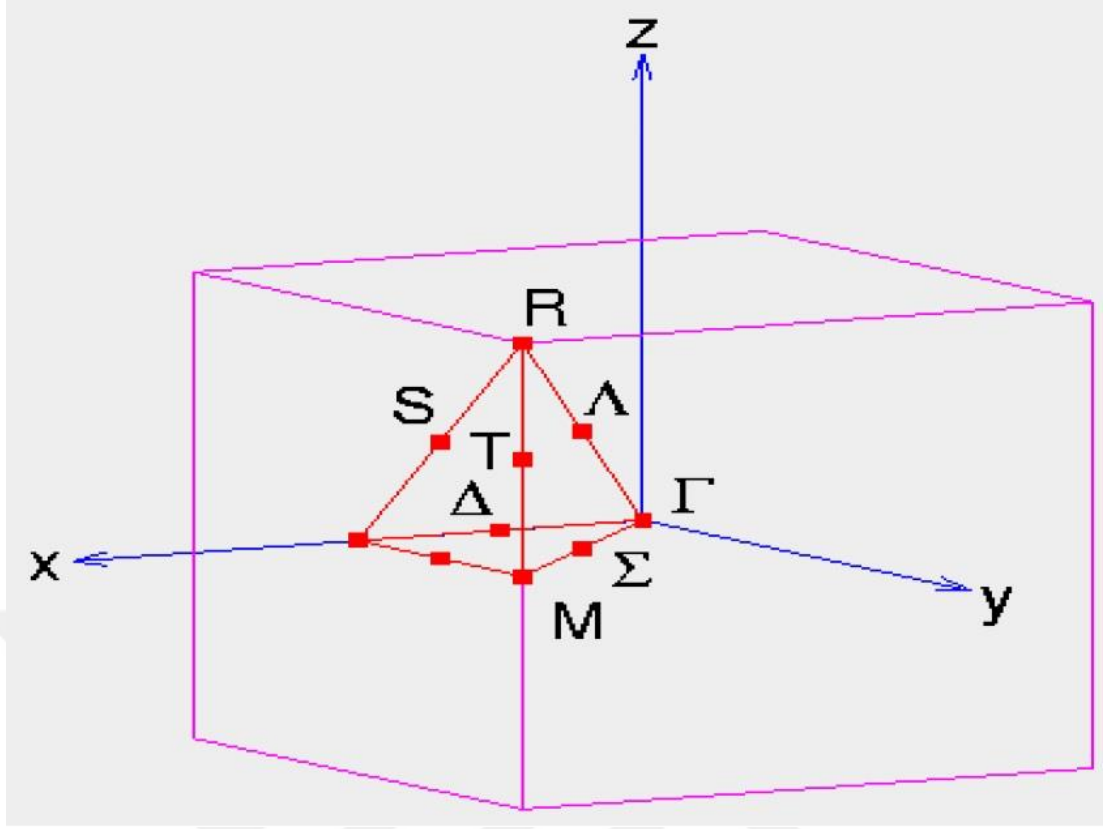
Ta: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

O: $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

KTaO_3 bileşiği birim hücrelerinde bir potasyum, bir talyum ve üç oksijen olmak üzere toplam beş atom içerir. Potasyum, talyum ve oksijen atomları sırasıyla (+1), (+5) ve (-2) iyon yüklerine sahiptir. Bu durumda KTaO_3 bileşiğinin toplam yükü sıfır olur $((+1)+(+5)+(3 \times (-2))=0$. Yük dengesi dikkate alındığında KTaO_3 bileşiğine katılacak atomlarında seçilmesi önem kazanmaktadır. Bu tez çalışmasında Sb^{+5} , Nb^{+5} ve V^{+5} yüklü atomlar katılmıştır. Kusurlu yapıların incelenmesinde ise Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} yüklü atomlar katılmış olup yük dengesinin sağlanması için yapı içerisinde bir tane O^{-2} yüklü oksijen atomu çıkarılmıştır.



Şekil 4.1. KTaO_3 bileşiğinin 5 atomlu kristal yapısı



Şekil 4.2. Basit kübik örgünün 1. Brillouin bölgesi ve özel simetri noktaları (Acquarone ve Ventura, 2008)

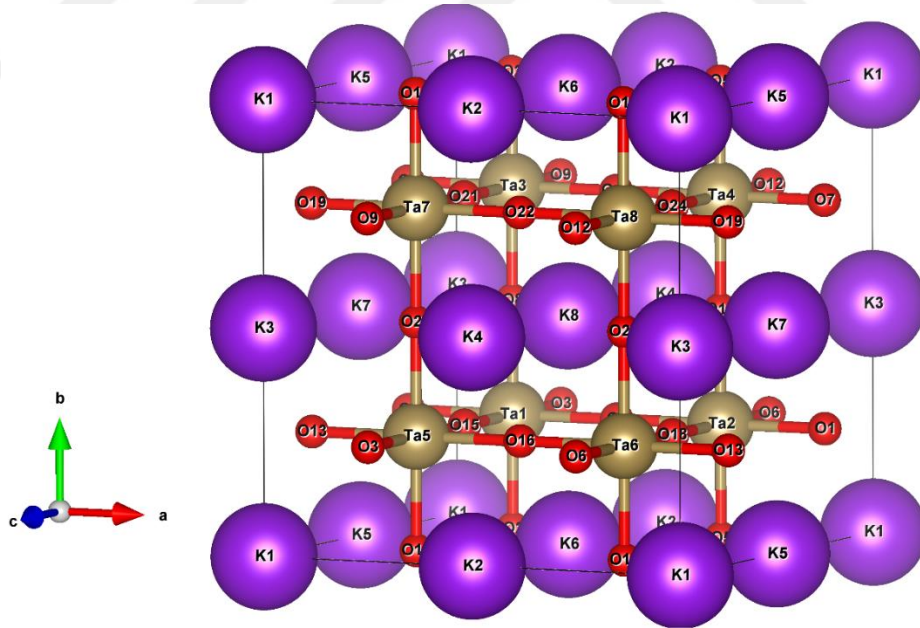
4.2. Katkısız KTaO_3 Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri

4.2.1. Katkısız KTaO_3 bileşiğinin yapısal özellikleri

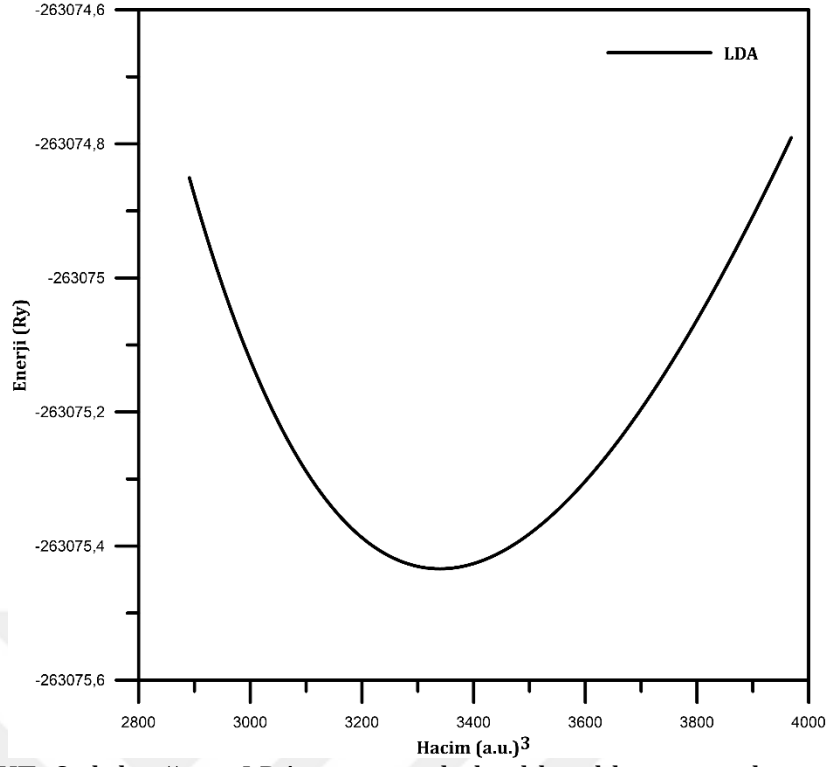
Katkısız KTaO_3 bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. Kristal yapıyı oluşturmak için 40-atomlu $2 \times 2 \times 2$ süper hücre (Şekil 4.3) kullanıldı. Simetri grubu ise basit kübik olan P1 seçildi. KTaO_3 bileşiklerin yapısal özelliklerinin incelenmesinde ilk olarak her materyalin örgü sabitlerinin tayini yapıldı. Başlangıç örgü parametresi, $3,9885 \text{ \AA}$, deneysel verilerden temin edildi (Sigman vd., 2002). Bu hesaplamalar yapılırken denge durumu civarında farklı örgü sabitleri için enerji değerleri LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak hesaplandı ve grafiğe aktarıldı (Şekil 4.4-Şekil 4.5). Grafiklerin her birinde belli bir hacim değeri için enerjinin minimum olduğu görüldü. Enerjinin minimum olduğu değere karşılık gelen hacim değeri kullanılarak örgü sabiti hesaplandı. Örgü sabiti parametresine ek

olarak hacim (bulk) modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri hesaplandı. Bulk modülü, bir malzemenin hidrostatik basınç altında sıkıştırılması halinde onun hacminde oluşacak değişime karşı gösterdiği direnci tanımlayan bir özelliktir. Diğer bir deyişle, bir deformasyon oluşturmak için gerekli enerjinin bir ölçüsüdür. Bulk modülü katıların durum-denklemleri (EOS-Equation of State) için de önemli bir parametredir. Bunun için incelenen yapı optimize edilir ve farklı hacimlere karşı gelen toplam enerji değerleri hesaplanır. Hesaplanan toplam enerji ve hacim değerleri Murnaghan hal denklemine fit edilir, Murnaghan (1944). Elde edilen hacim-enerji eğrisinin minimumu teorik örgü sabitini verir. Ayrıca bu grafikten bulk modülü ve bulk modülünün birinci türevi de hesaplanabilir. Murnaghan hal denkleminin analitik bir ifadesi aşağıdaki gibi ifade edilir.

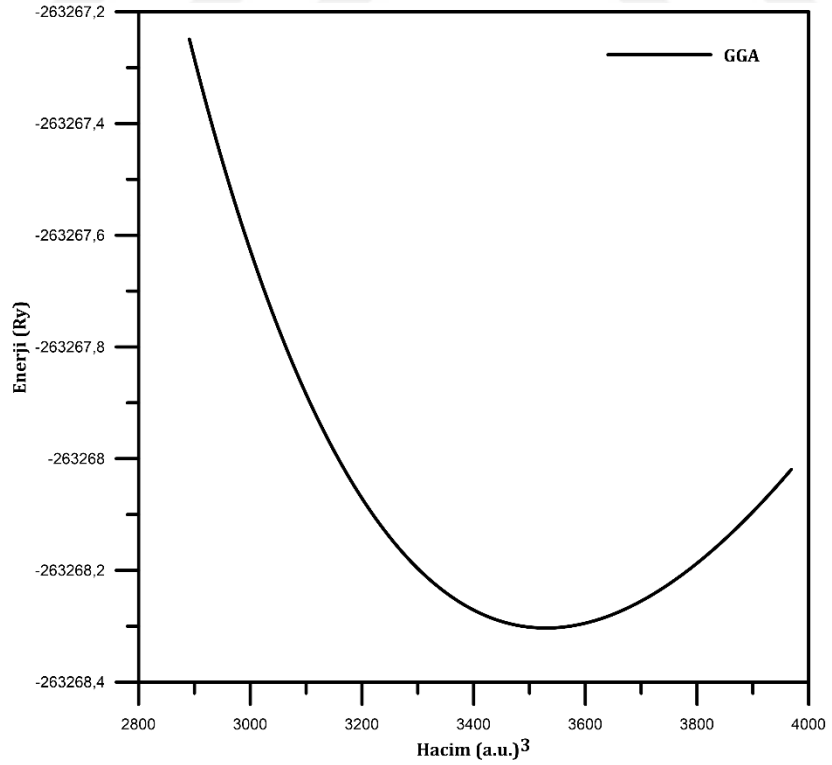
$$P = \frac{3B(1-x)}{x^2} \exp\left[\left(\frac{3}{2}B' - 1\right)(1-x)\right] \quad (4.1)$$



Şekil 4.3. KTaO₃ bileşiğinin 40 atomlu kristal yapısı.



Şekil 4.4. KTaO₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



Şekil 4.5. KTaO₃ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği

Burada B bulk modülü, B' bulk modülünün basınca göre birinci türevi, x ise $(\frac{V}{V_0})^{1/3}$ şeklinde ifade edilir. Burada V_0 ilk hacim, V ise son hacimdir. Murnaghan denkleminin basınç cinsinden ifadesi ise aşağıdaki gibidir.

$$P = \frac{B}{B'} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad (4.2)$$

Katkısız KTaO_3 bileşiklerin örgü sabiti, bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri Çizelge 4.1 de literatür ile karşılaştırmalı olarak verilmektedir.

Çizelge 4.1. KTaO_3 bileşiğinin örgü parametresi (Å), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP).

KTaO_3	LDA	GGA	Literatür
Örgü Parametresi (Å)	3,9550	4,0281	4,0310, Bouafia vd., GGA (2013) 3,9500, Benrekia vd., GGA (2012) 4,0316, Zhao vd., GGA, (2012)
B (GPa)	218,10	187,21	183,5106, Bouafia vd., GGA (2013) 168,8000, Benrekia vd., GGA (2012) 196,5100, Zhao vd., GGA, (2012)
dB/dP	4,45	4,44	4,36, Bouafia vd., GGA (2013) 4,44, Benrekia vd., GGA (2012)

4.2.2. Katkısız KTaO_3 bileşiğinin elektronik özellikleri

Katkısız KTaO_3 bileşiğini oluşturan elementlerin elektronik dizilimleri:

^{19}K : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3s^1$

^{73}Ta : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^3 6s^2$

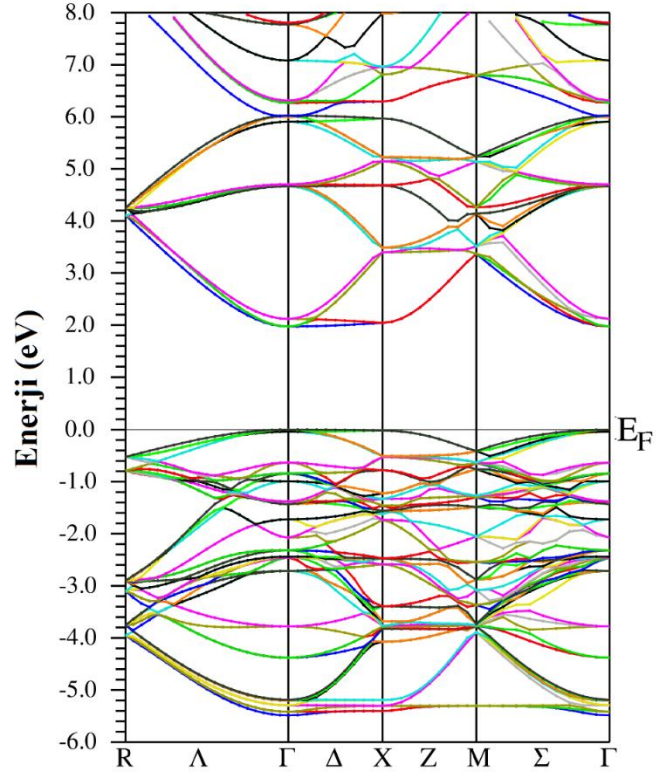
^8O : $1s^2 2s^2 2p^4$

olarak alınmıştır. Tüm elektronik bant yapısı grafiklerinde dikey eksen enerjiyi, yatay eksen yüksek simetri noktalarını (Γ , R, X, M) temsil etmektedir. Fermi enerji düzeyi sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir. Fermi enerji düzeyinin alt kısmındaki bantlar valans bantlarını temsil ederken, üst kısım ise iletkenlik

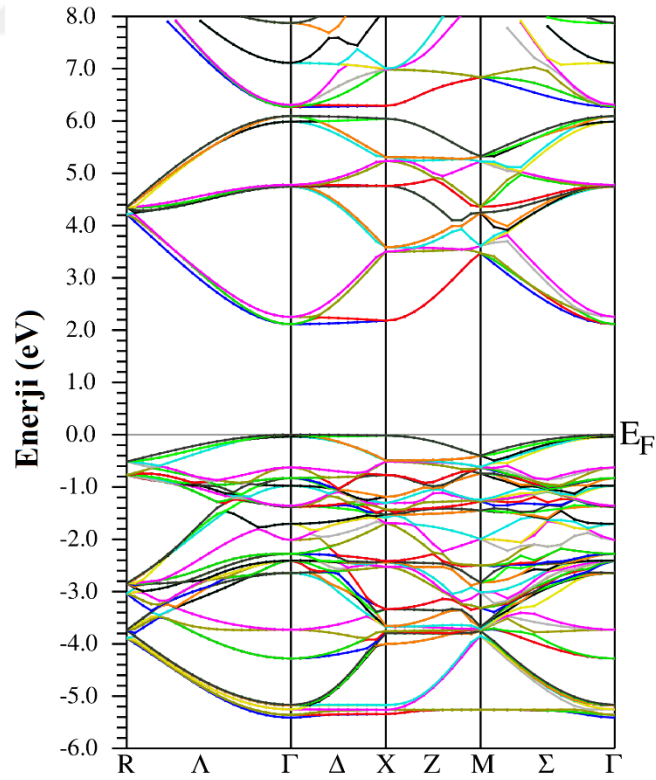
bantlarını temsil etmektedir. Hesaplamalar yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) (Perdew ve Wang, 1992), genelleştirilmiş gradyant yaklaşımı (GGA), Perdew vd. (1996), kullanılarak gerçekleştirildi. Yasak band enerji hesaplamalarını iyileştirilmek için düzeltilmiş Tran-Blaha (TB-mBJ) (Tran ve Blaha 2009), değişim potansiyeli kullanıldı. Katkısız KTaO_3 bileşiğinin elektronik özelliklerini incelemek için ban enerjileri ve durum yoğunlukları hesaplandı. Yasak band enerjileri literatür ile karşılaştırmalı olarak Çizelge 4.2 de verilmiştir. Deneysel sonuçlara uyum içerisinde olan potansiyel ise TB-mBJ değiş tokuş korelasyon potansiyelidir. Şekil 4.6-Şekil 4.8 de görüldüğü gibi KTaO_3 bileşiği yarıiletken bir malzemedir. Ayrıca band grafiklerinde (Şekil 4.8) iletkenlik bandının minimum ve valans bandını maksimum noktası Γ dir. Ayrıca deneysel sonuçlar ile uyuşan yasak band enerjisi düzeltilmiş Tran-Blaha (TB-mBJ) değiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilmiştir. Band yapı ve toplam durum yoğunluğu eğrileri bu bileşiğin yarıiletken özellikte olduğunu gösterir. Valans band içerisinde O atomunun 2p-orbitalleri baskındır. Valans band içerisinde Ta atomunun 5d-orbitalleri ile O atomunun 2p-orbitalleri arasında hibritleşme gözlenmektedir (Şekil 4.9 ve Şekil 4.10). Bu hibritleşme Ta ile O atomu arasında kovalent bağ olduğunu ortaya koymaktadır. İletkenlik bandında ise Ta atomunun 5d-orbitalleri baskındır.

Çizelge 4.2. KTaO_3 bileşiğinin hesaplanan yasak band enerjisi

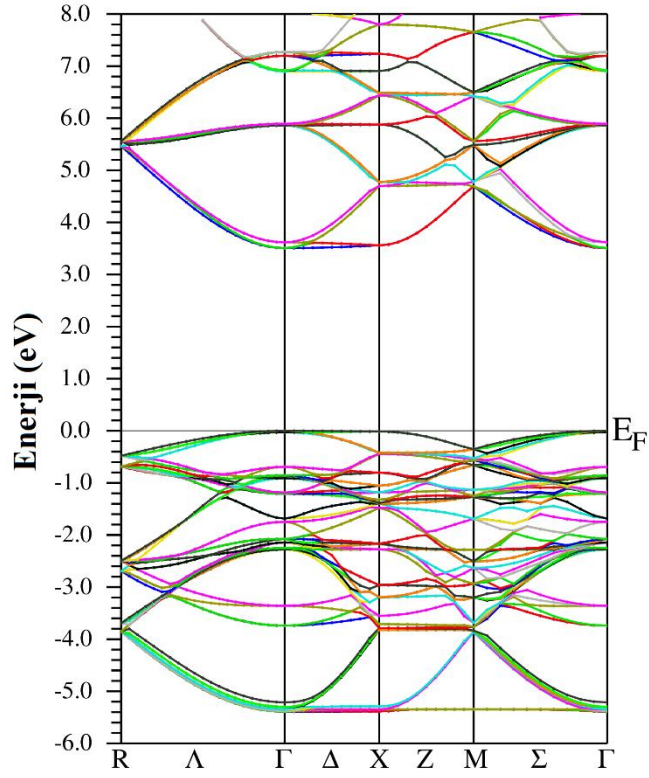
Değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri	Band Enerjisi (eV)	Referans
LDA	1,97	Bu çalışma
GGA	2,11	Bu çalışma
TB-mBJ	3,51	Bu çalışma
Deneysel Çalışmalar	3,60	Kato ve Kuda (2001)
	3,42	Liu vd., (2007)
	3,40-3,60	Grabowska (2015)
Teorik Çalışmalar	2,15 (GGA), 3,40 (mBJ)	Bouafia vd., (2013)
	2,14 (GGA)	Zhao vd., (2012)
	2,10 (GGA)	Tupitsyn vd., (2001)



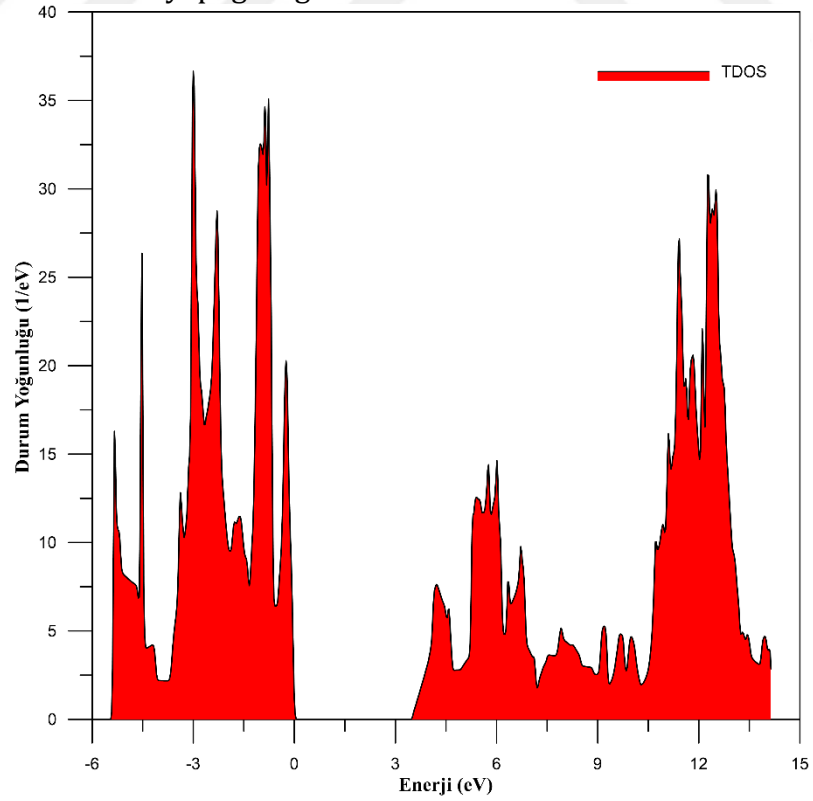
Şekil 4.6. KTaO₃ bileşiğinin LDA deęiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen band yapı grafięi



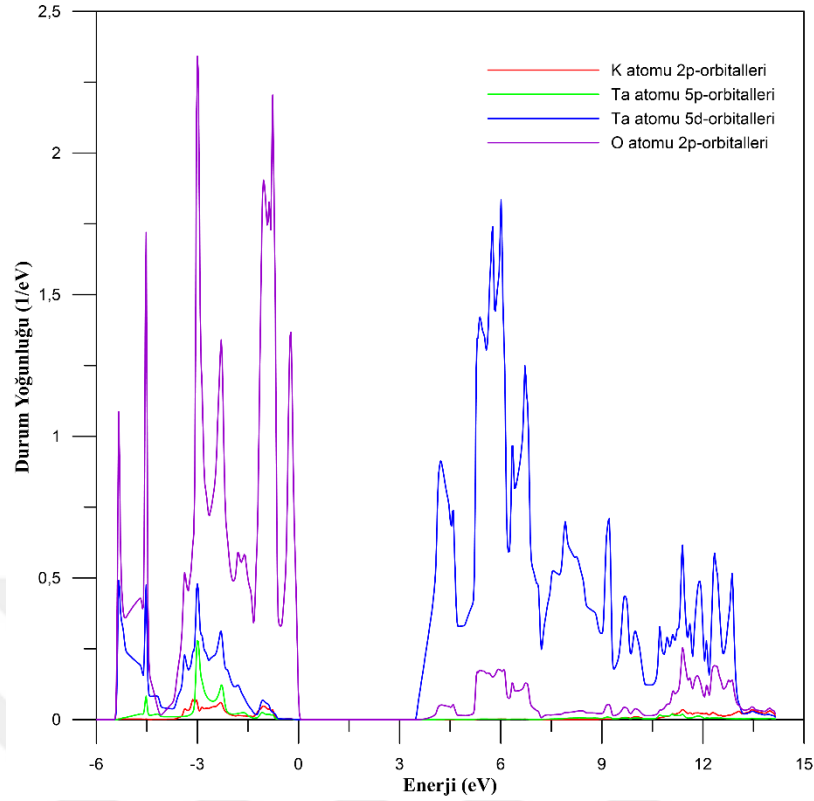
Şekil 4.7. KTaO₃ bileşiğinin GGA deęiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen band yapı grafięi



Şekil 4.8. KTaO₃ bileşiğinin TB-mBJ deęiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen band yapı grafięi



Şekil 4.9. KTaO₃ bileşiğinin mBJ deęiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen toplam durum yoęunluęu



Şekil 4.10. KTaO₃ bileşiğinin mBJ deęiş-tokuş korelasyon potansiyeli ile elde edilen kısmi durum yoğunluęu

4.2.3. Katkısız KTaO₃ bileşiğinin optik özellikleri

Katkısız KTaO₃ bileşiğinin optik özellikleri dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. Dielektrik fonksiyonu elektronlar ile fotonlar arasındaki etkileşimi açıklamaktadır. Bir malzemenin optiksel özellikleri frekansa baęlı olan kompleks dielektrik fonksiyonuyla $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ tanımlanır. Yansımaya katsayıları (R), soęurma katsayıları (α), kırılma indisi (n) ve enerji kayıp fonksiyonu (L) gibi optik parametreler dielektrik sabitlerine doğrudan baęlıdır. Dielektrik sabitleri hesaplandığı takdirde yansımaya katsayıları (R), soęurma katsayıları (α), kırılma indisi (n) ve enerji kayıp fonksiyonu (L) kolaylıkla hesaplanabilir. Dielektrik fonksiyonun reel ($\epsilon_1(\omega)$) ve imajiner ($\epsilon_2(\omega)$) kısımlarının hesaplanmasında, sırasıyla, Denklem 4.3 ve Denklem 4.4 kullanılmıştır (Kronig, 1926 ve Ambrosch-Draxl ve Sofo 2006).

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi m^2 \omega^2} x \int d^3 \sum_{nn'} |kn|p|kn'|^2 f(kn)x[1 - f(kn')] \delta(E_{kn} - E_{kn'} - \omega) \quad (4.3)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_2(\omega') \omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (4.4)$$

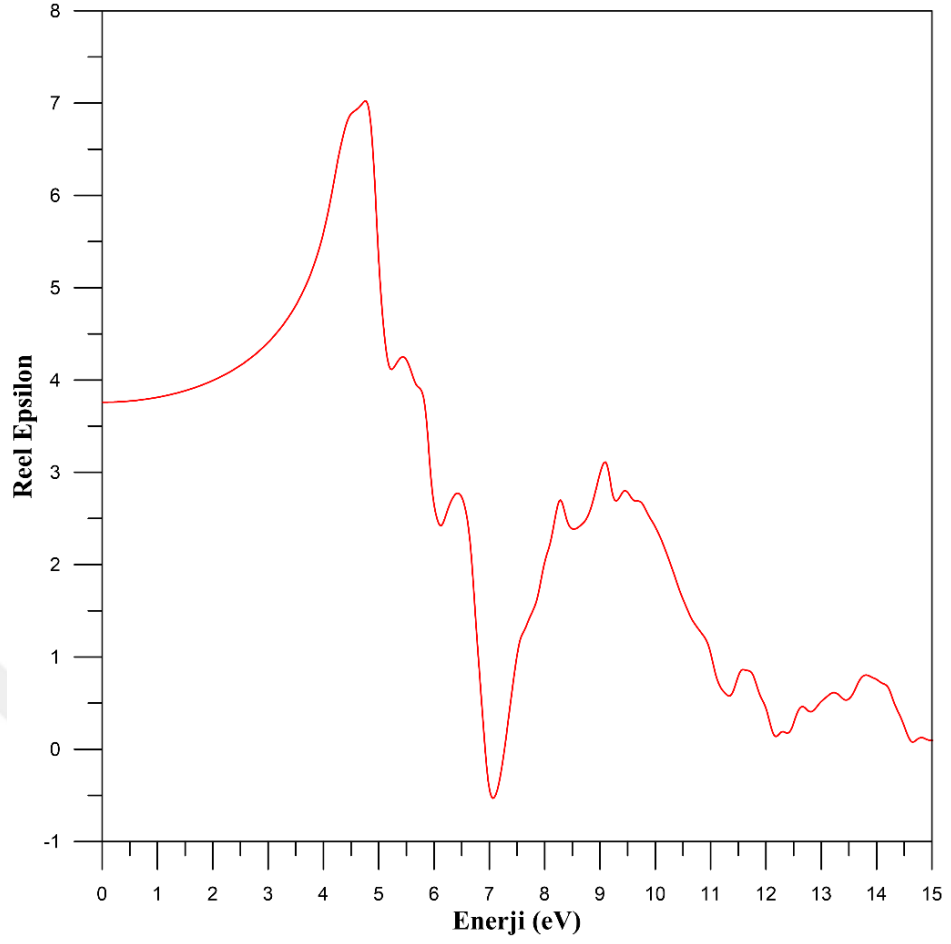
$$R(\omega) = \left(\frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right)^2 \quad (4.5)$$

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2\omega} \left(\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right)^{1/2} \quad (4.6)$$

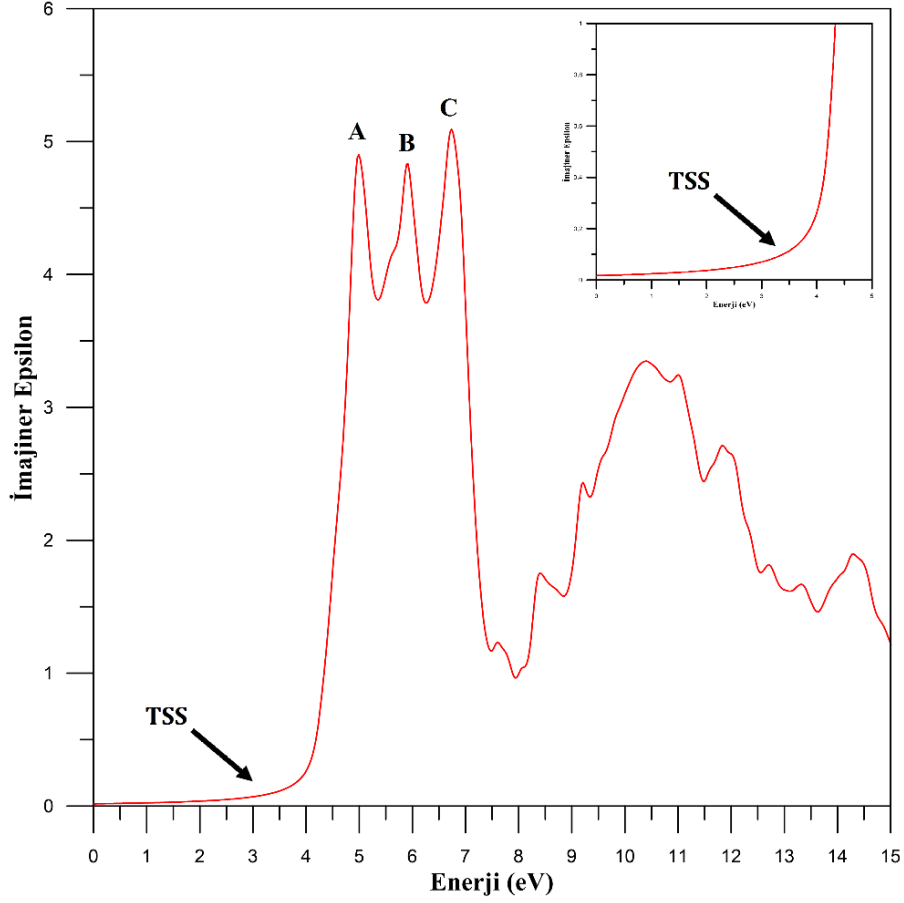
$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varepsilon_1 + (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2})^{1/2} \quad (4.7)$$

$$L_{ij}(\omega) = -Im \left(\frac{1}{\varepsilon_{ij}(\omega)} \right) \quad (4.8)$$

Dielektrik fonksiyonunun reel kısmı malzemenin fiziksel özellikleri hakkında bilgi verirken, imajiner kısmı ise malzemedeki enerji kayıpları hakkında bilgi vermektedir. Katkısız KTaO₃ bileşiğine ait reel dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4.11 de gösterilmektedir. $\varepsilon_1(\omega)$, dielektrik sabiti 3,76 olarak hesaplandı. En yüksek dielektrik sabiti değeri 7,02 olup, bu değer 4,75 eV ile 4,78 eV enerji aralığındadır. Dielektrik sabiti değeri 0-4,75 eV aralığında artış sergilerken, 4,75 eV' dan sonra azalmaktadır. Ayrıca 6,93 eV ile 7,25 eV arasında negatife düşen reel dielektrik sabiti malzemenin bu aralıkta metalik davranış sergilediğini gösterir (Şekil 4.11). Katkısız KTaO₃ bileşiğine ait imajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4.12 de gösterilmektedir. İmajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafiğinde oluşan pikler valans bandından iletim bandına geçen elektronların optik geçişlerini temsil etmektedir. Şekil 4.12 de A, B ve C olarak gösterilen, optik geçişleri temsil eden, ilk üç pik için enerji değerleri sırasıyla 4,99 eV, 5,89 eV ve 6,73 eV olarak hesaplanmıştır. Ayrıca yasak band aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırı (TSS) yaklaşık 3,52 eV hesaplanmıştır. Elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık gelir.

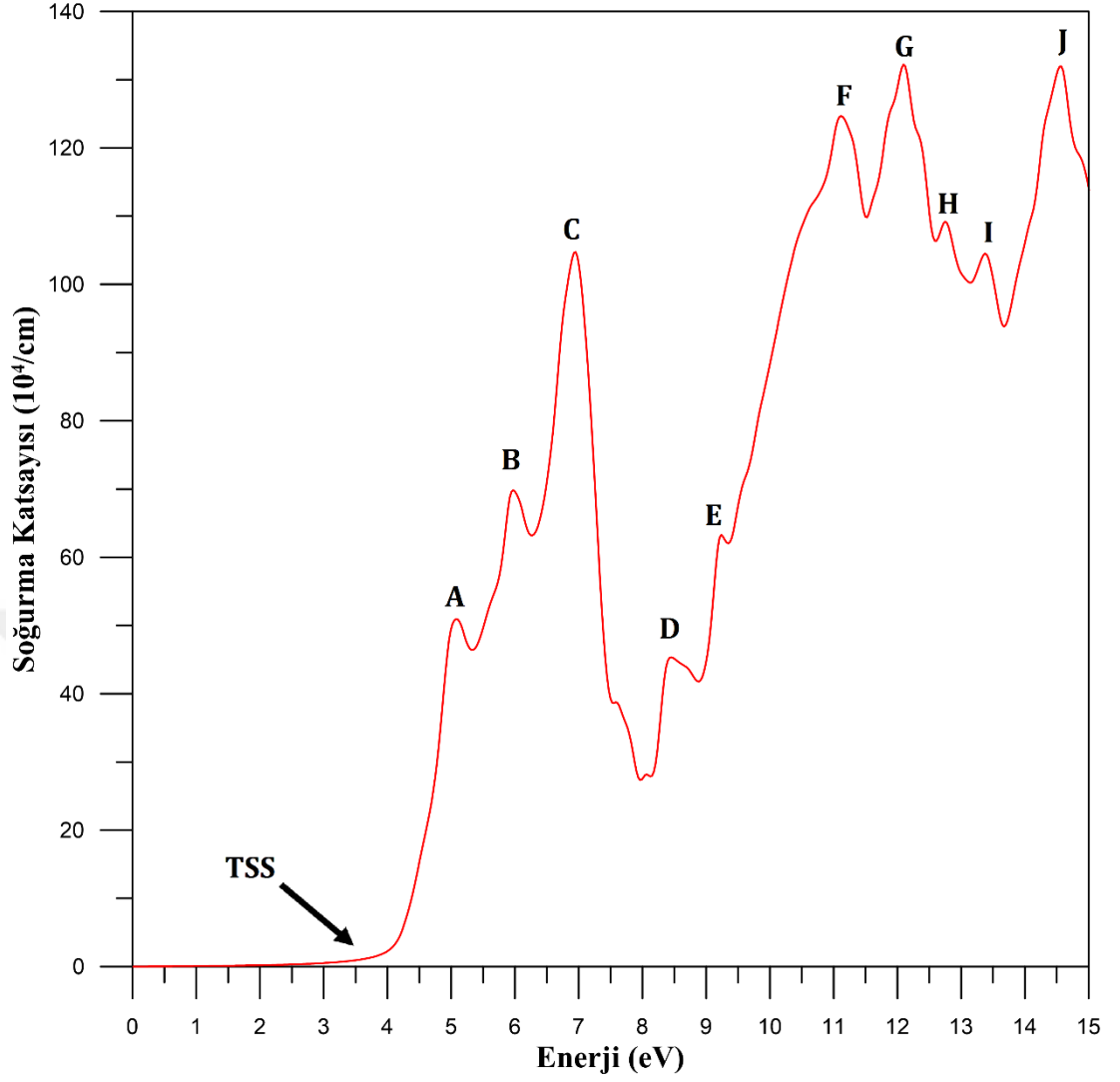


Şekil 4.11. Katkısız KTaO₃ bileşiği için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonu



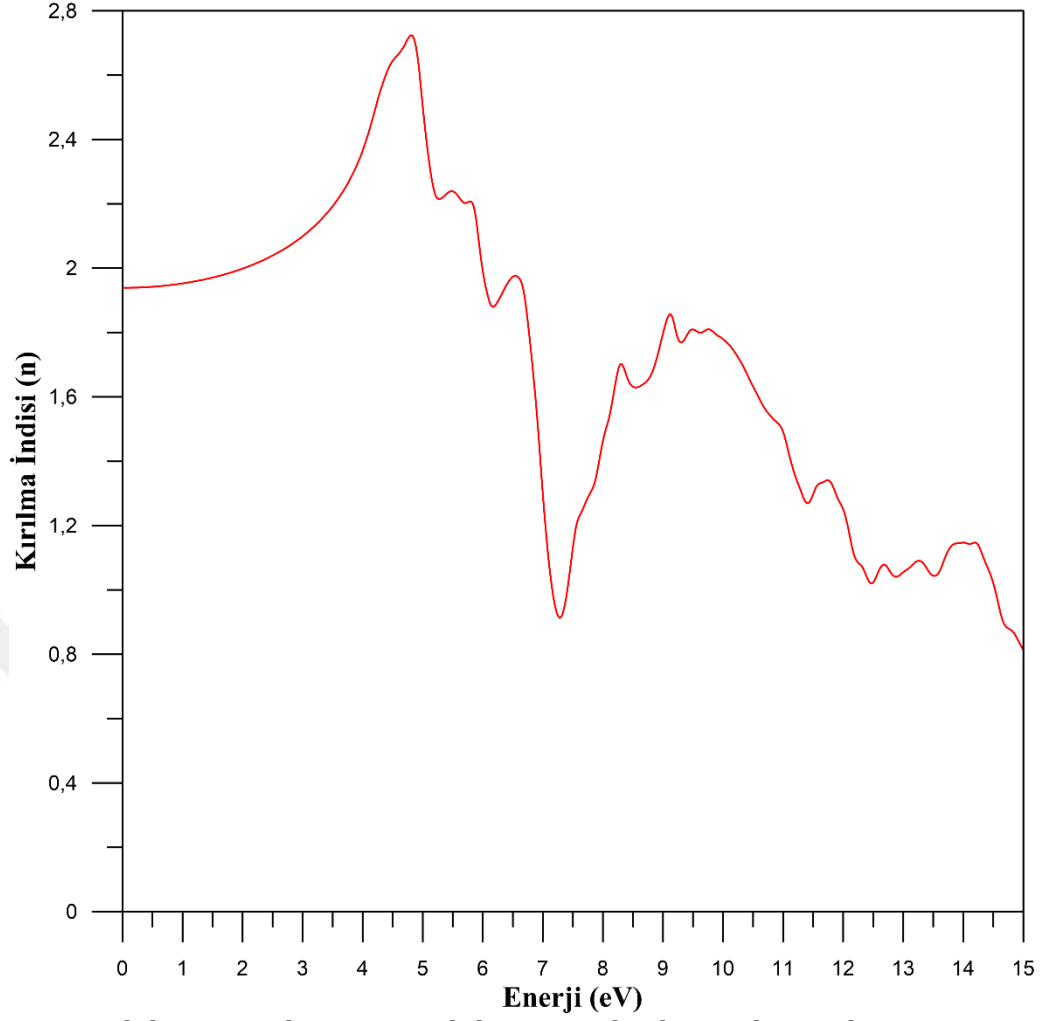
Şekil 4.12. Katkısız KTaO₃ bileşiği için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonu

Ortamda yayılan ışığın şiddetinde meydana gelen azalma soğurma katsayısı (α) ile tanımlanır. Soğurma katsayısı yayılan ışığın malzemenin içine ne kadar nüfuz edebileceğinin bir ölçüsüdür. Şekil 4.13' de görüleceği gibi soğurma katsayısı bir sınıra sahiptir. Çünkü gönderilen ışığın enerjisi yasak enerji aralığından küçük bir enerjiye sahip olduğunda valans bandındaki bir elektronu uyaracak enerjiye sahip değildir. Dolayısıyla gelen ışık soğurulmayacaktır. Soğurmanın başladığı minimum enerji noktası temel soğurma noktası olarak tanımlanır. Şekil 4.12'de görüldüğü gibi KTaO₃ bileşiğinin soğurma katsayıları 3,53 eV civarından başlamaktadır. Bu değer yasak band enerjisine karşılık gelmektedir ve KTaO₃ bileşiğinin Γ noktasındaki soğurma başlangıç noktasıdır. Soğurma spektrumunda ortaya çıkan pikler bandlar arası geçişin göstergesidir. A'dan I'ya kadar gösterilen ve optik geçişleri temsil eden pikler için enerji değerleri sırasıyla 5,07 eV, 5,97 eV, 6,95 eV, 8,45 eV, 1,12 eV, 2,10 eV, 12,72 eV, 13,37 eV ve 14,57 eV olarak hesaplanmıştır.



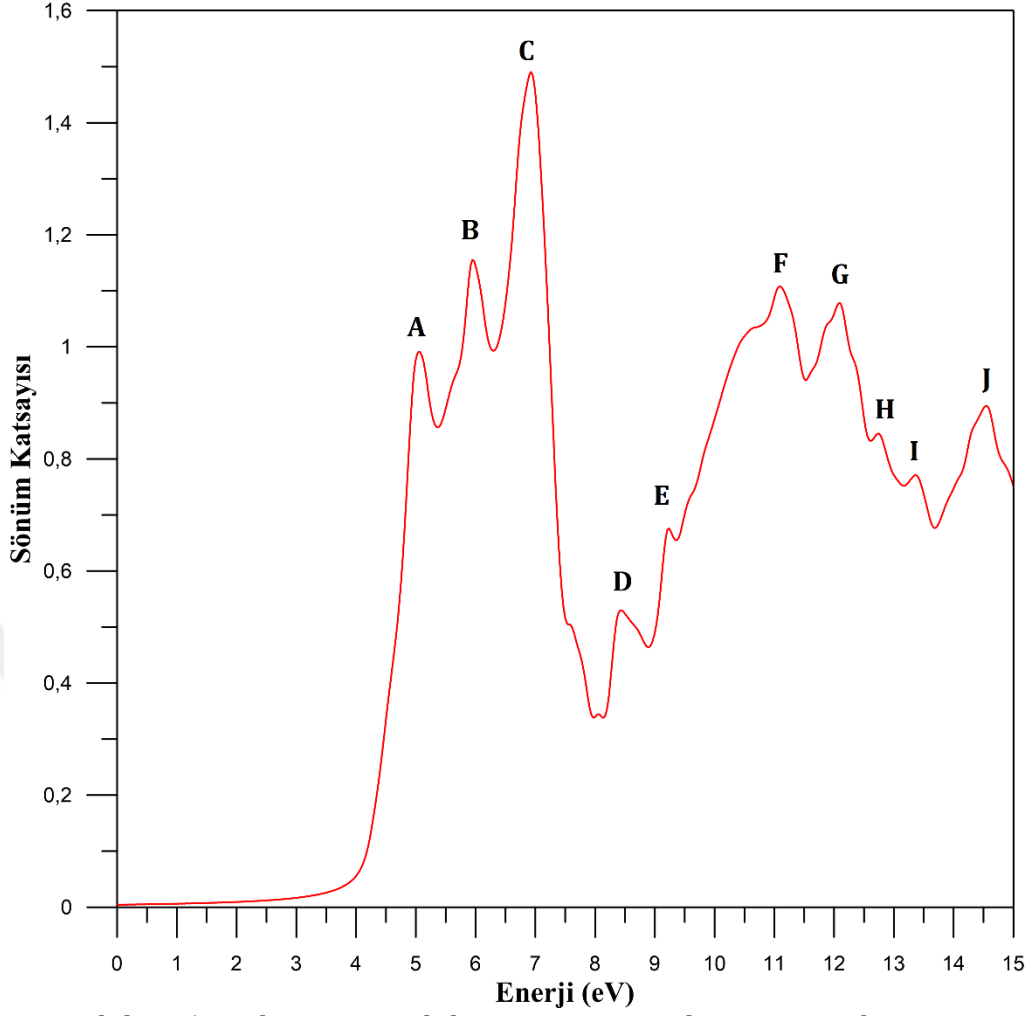
Şekil 4.13. Katkısız KTaO₃ bileşiği için hesaplanan soğurma spektrumu.

Katkısız KTaO₃ bileşiği için elde edilen kırılma indisi spektrumu Şekil 4.14 de verilmiştir. Katkısız KTaO₃ bileşiği için hesaplanan kırılma indisi, $n(0)$, 1,94 olarak hesaplanmıştır. Kırılma indisi kızıl altı-görünür bölge sınırında 1,98 iken görünür bölge-mor ötesi sınırında ise 2,11 olarak hesaplanmıştır. Ayrıca kırılma indisi kızıl altı bölgeden mor ötesi bölgeye kadar artarken, mor ötesi bölgeden itibaren azalmıştır. Ayrıca maksimum kırılma indisine mor ötesi bölge içerisinde 4,80 eV değerinde ulaşmaktadır. Bu değere karşılık gelen kırılma indisi ise 2,72 dir.



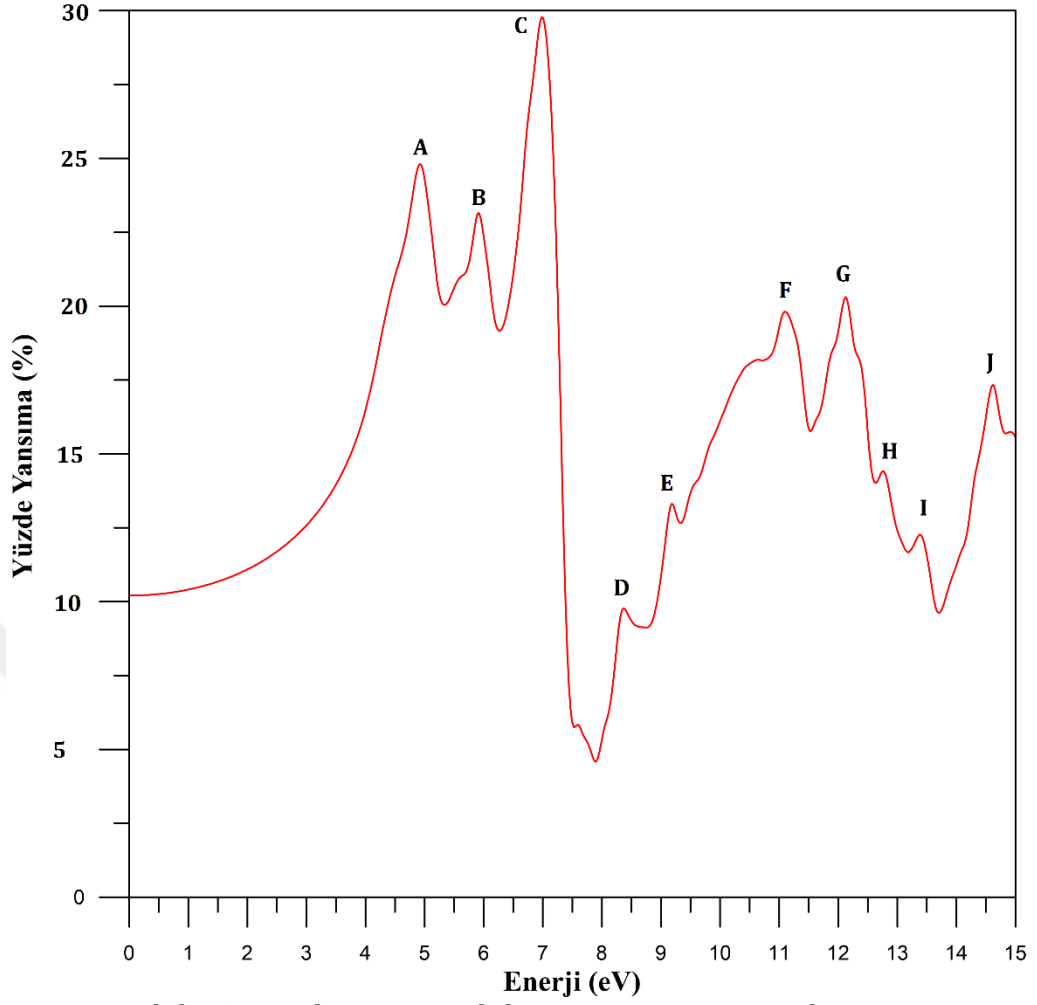
Şekil 4.14. Katkısız KTaO₃ bileşiği için kırılma indisi spektrumu

Sönüm katsayısı kompleks dielektrik sabitinin imajiner kısmı ve kırılma indisi ile doğrudan alakalıdır ve $\kappa = \frac{\epsilon_2}{2n}$ eşitliği ile ifade edilir. Bu nedenle sönüm katsayısının enerjiye bağlı grafiği (Şekil 4.15) ile kompleks dielektrik sabitinin imajiner kısmı ve kırılma indisinin enerjiye bağlı grafikleri benzerdir. Ayrıca, sönüm katsayısı spektrumunda meydana gelen yerel maksimum pikler reel dielektrik fonksiyonunun sıfır olduğu noktalara karşılık gelmektedir. Rezonans enerjisine yakın değerlerde sönüm katsayısı yüksek olmasından dolayı soğurma katsayısının yüksek olması beklenir. A'dan J'ye kadar gösterilen ve optik geçişleri temsil eden pikler için enerji değerleri sırasıyla 5,05 eV, 5,95 eV, 6,92 eV 8,42 eV, 9,23 eV, 11,09 eV, 12,10 eV, 12,75 eV 13,32 eV ve 14,54 eV olarak hesaplanmıştır. Katkısız KTaO₃ bileşiği için en yüksek sönüm katsayısı değeri 1,49 olarak hesaplanmıştır ve bu değer 6,92 eV'a karşılık gelmektedir.



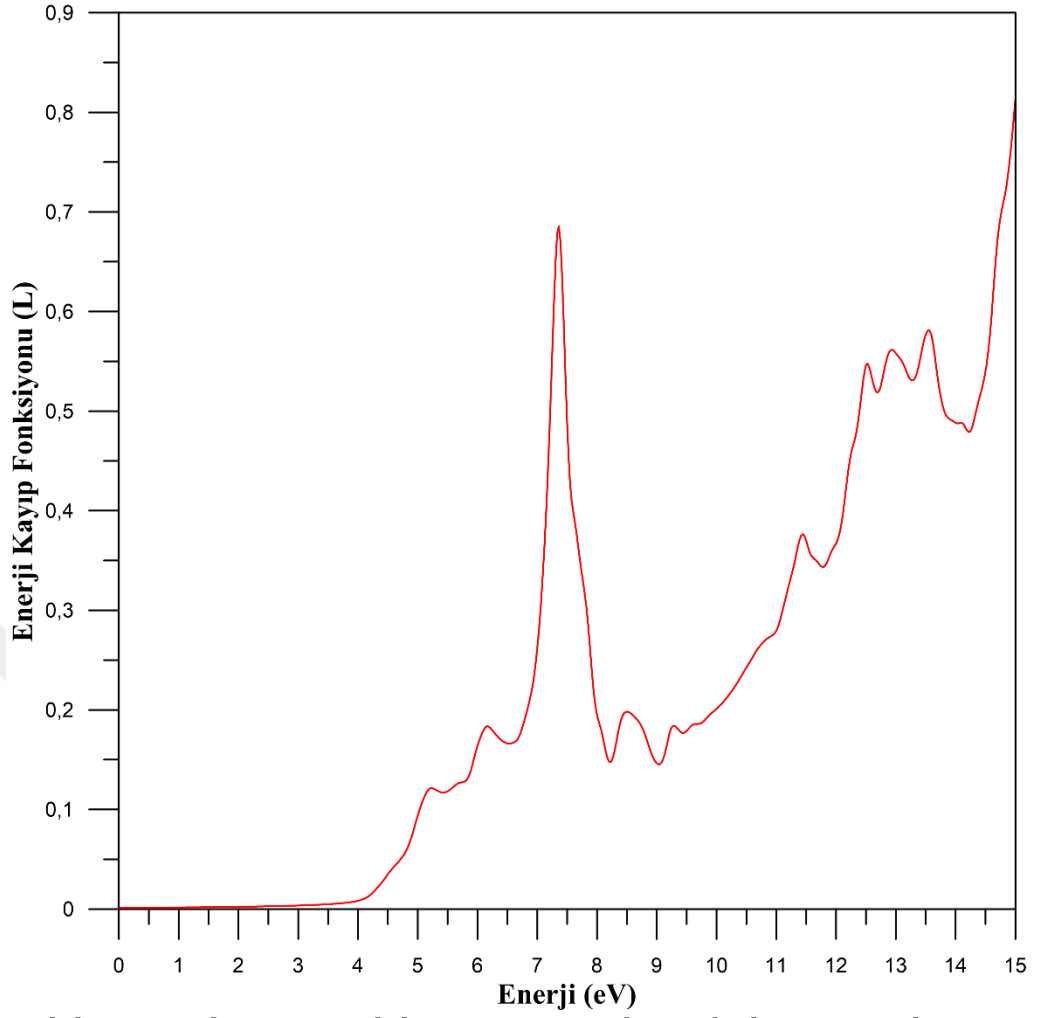
Şekil 4.15. Katkısız KTaO₃ bileşiği için sönüm katsayısı spektrumu

Katkısız KTaO₃ bileşiği için edilen yansımaya spektrumu Şekil 4.16 da gösterilmektedir. Katkısız KTaO₃ bileşiği için yaklaşık yansımaya başlangıç değerleri %10 dur. Kızılötesi bölgede yansıtma oranı hemen hemen sabit kalmıştır (%10). Görünür bölgede ise yansıtma oranı %11'den %13'e artmıştır. 0-15 eV aralığında en yüksek yansıtma oranına 6,98 eV değerinde ulaşmıştır. Bu enerji değerindeki yansıtma oranı ise %29,8 dir. Yansımaya spektrumu soğurma spektrumu ile benzerlik göstermektedir. Soğurma spektrumunda oluşan maksimum pikler yansımaya spektrumunda da oluşmaktadır. A'dan J'ye kadar gösterilen pikler için enerji değerleri sırasıyla 5,05 eV, 5,95 eV, 6,92 eV 8,42 eV, 9,23 eV, 11,09 eV, 12,10 eV, 12,75 eV 13,32 eV ve 14,54 eV olarak hesaplanmıştır.



Şekil 4.16. Katkısız KTaO₃ bileşiği için yansıtma spektrumu

Bir elektronun kristal yapı içerisinde hareket ederken kaybettiği enerji miktarı enerji kayıp fonksiyonu ile ifade edilir. Katkısız KTaO₃ bileşiği için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu Şekil 4.17 de gösterilmektedir. Kayıp fonksiyonu iletkenlik bandının en üst yörüngesindeki bir elektronun valans bandına geçerken kaybettiği enerjiyi ifade eder. Ayrıca enerji kayıp spektrumundaki keskin maksimumlar valans elektronlarının kolektif titreşimlerinden kaynaklanmaktadır (Akkuş 2007, Çelik 2010, Eyi 2009 ve Othman 2009).

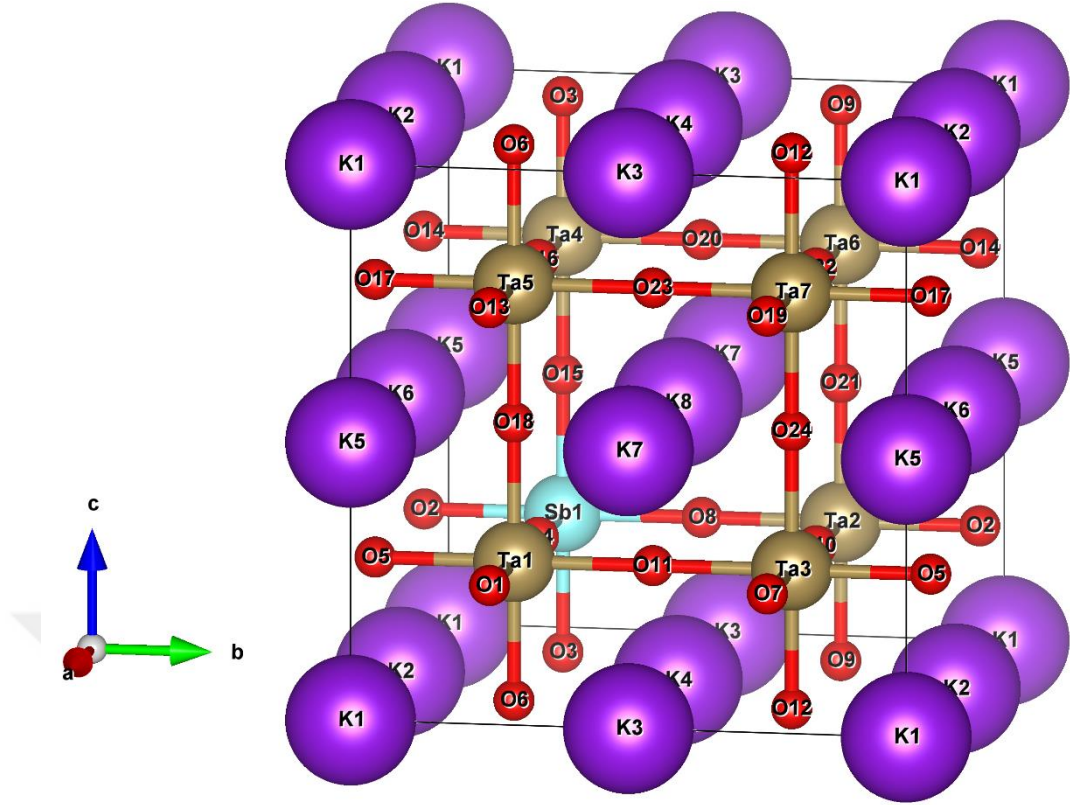


Şekil 4.17. Katkısız KTaO₃ bileşiği için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu

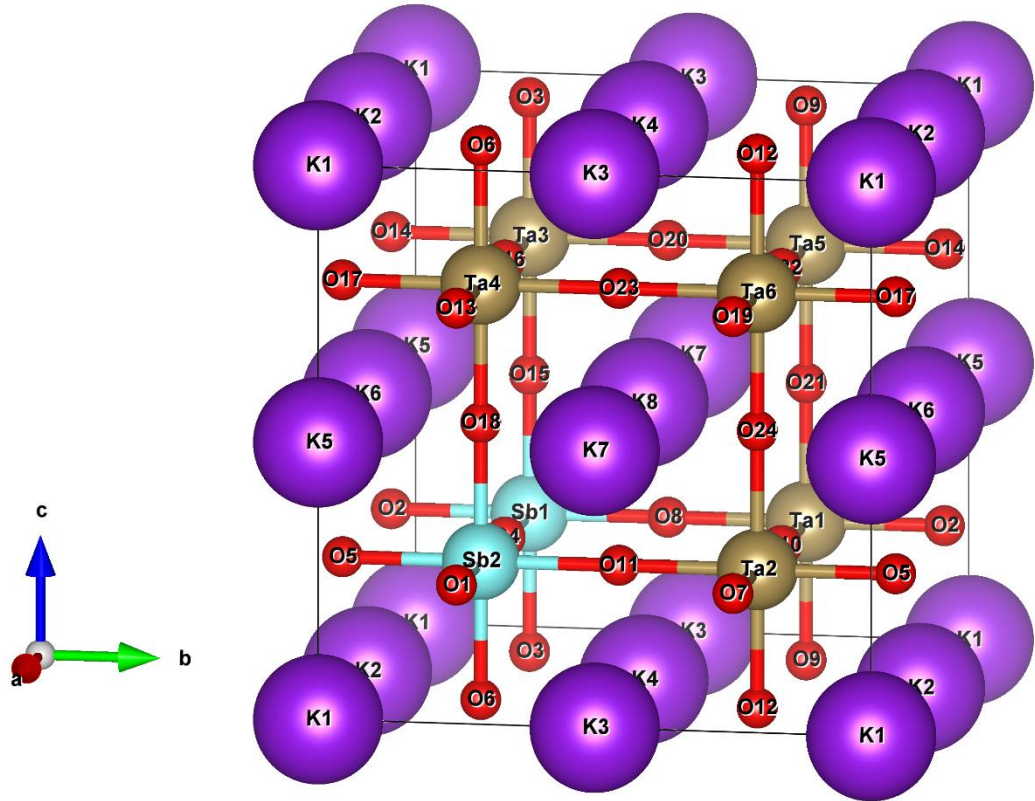
4.3. Sb Katkılı KTaO₃ Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri

4.3.1. Sb katkı KTaO₃ bileşiklerin yapısal özellikleri

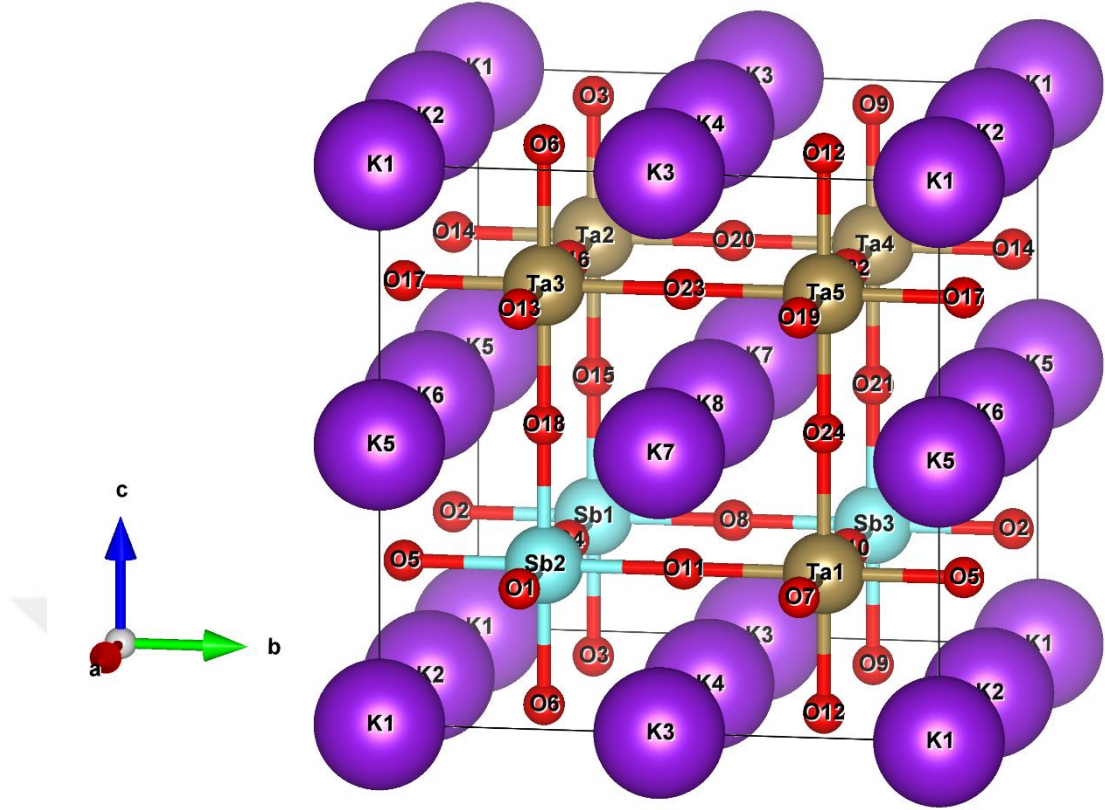
Sb katkı KTaO₃ bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. Kristal yapıların oluşturulmasında KTa_{1-x}Sb_xO₃ (x=0,125, 0,250, 0,375, 0,500, 0,625 ve 0,750) kimyasal formülü kullanıldı. Kristal yapıyı oluşturmak için 40-atomlu 2X2X2 süper hücre (Şekil 4.18-Şekil 4.23) kullanıldı. Simetri grubu ise basit kübik olan P1 seçildi. Sb katkı KTaO₃ bileşiklerinin yapısal özelliklerinin incelenmesinde ilk olarak her materyalin örgü sabitlerinin tayini yapıldı. Bu hesaplamalar yapılırken denge durumu civarında farklı örgü sabitleri için enerji değerleri LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak hesaplandı ve grafiğe aktarıldı (Şekil 4.24-Şekil 4.35). Grafiklerin her birinde belli bir hacim değeri için enerjinin minimum olduğu görüldü. Enerjinin minimum olduğu değere karşılık gelen hacim değeri kullanılarak örgü sabiti hesaplandı. Murnaghan denklemleri (Denklem 4.1 ve Denklem 4.2) kullanılarak, örgü sabiti parametresine ek olarak bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri hesaplandı. LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen Sb katkı KTaO₃ bileşiklerinin örgü sabiti, bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri Çizelge 4.3 ve Çizelge 4.4' de verilmiştir. Her iki potansiyel içinde Sb katkısı arttıkça taban durum enerjileri ve bulk modülünün basınca göre türevinin arttığı tespit edilmiştir. Bulk modülü ve örgü sabiti ise Sb katkısı ile azalmıştır. Bu azalışı Sb atomunun yarıçapının neden olduğu düşünülmektedir. Çünkü Sb atomunun yarıçapı 1,41 Å iken Ta atomunun yarıçapı 1,47 Å dur.



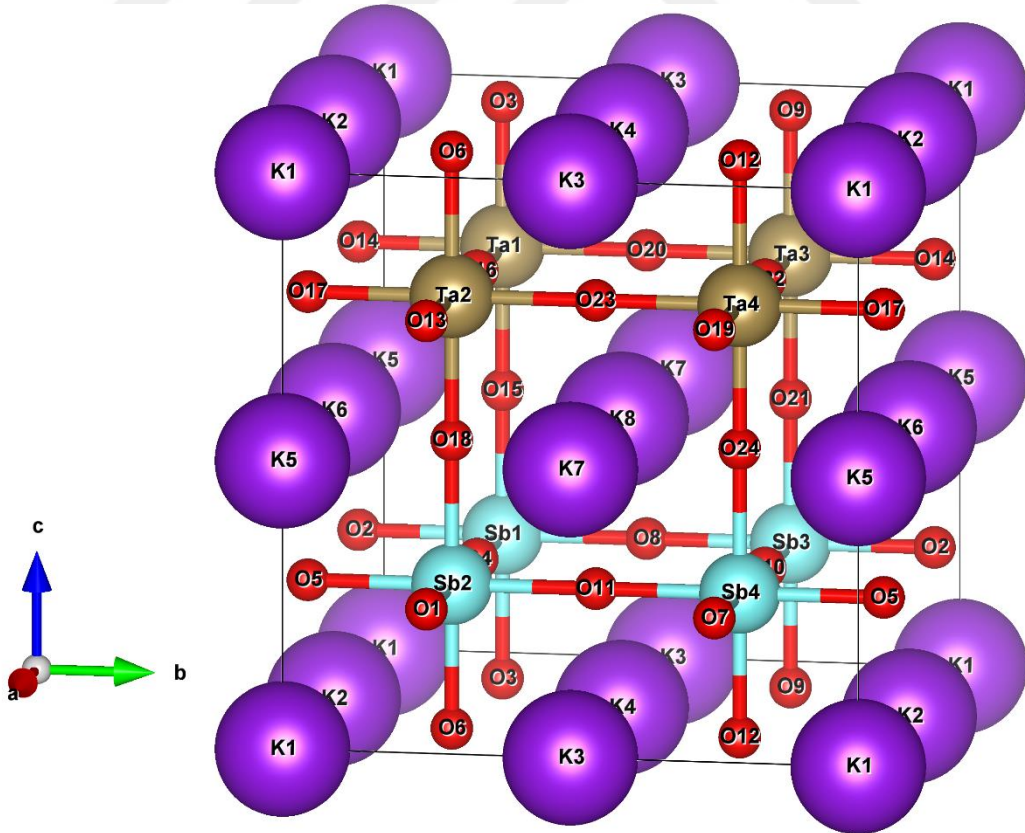
Şekil 4.18. $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



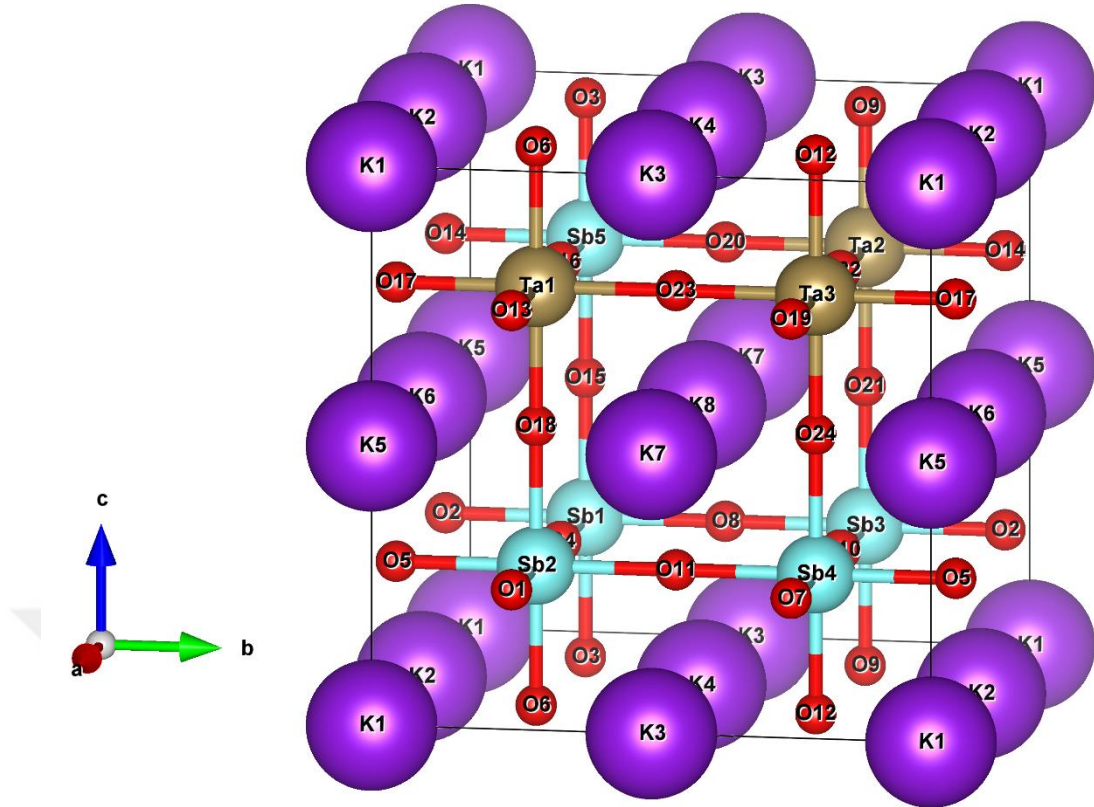
Şekil 4.19. $\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



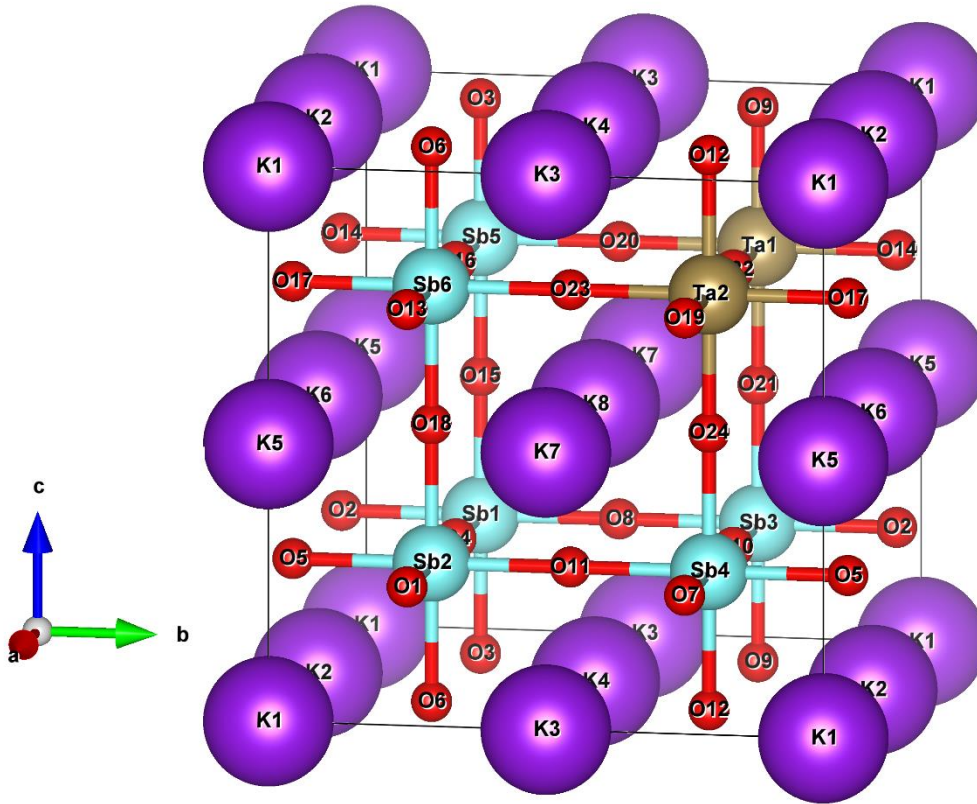
Şekil 4.20. $\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



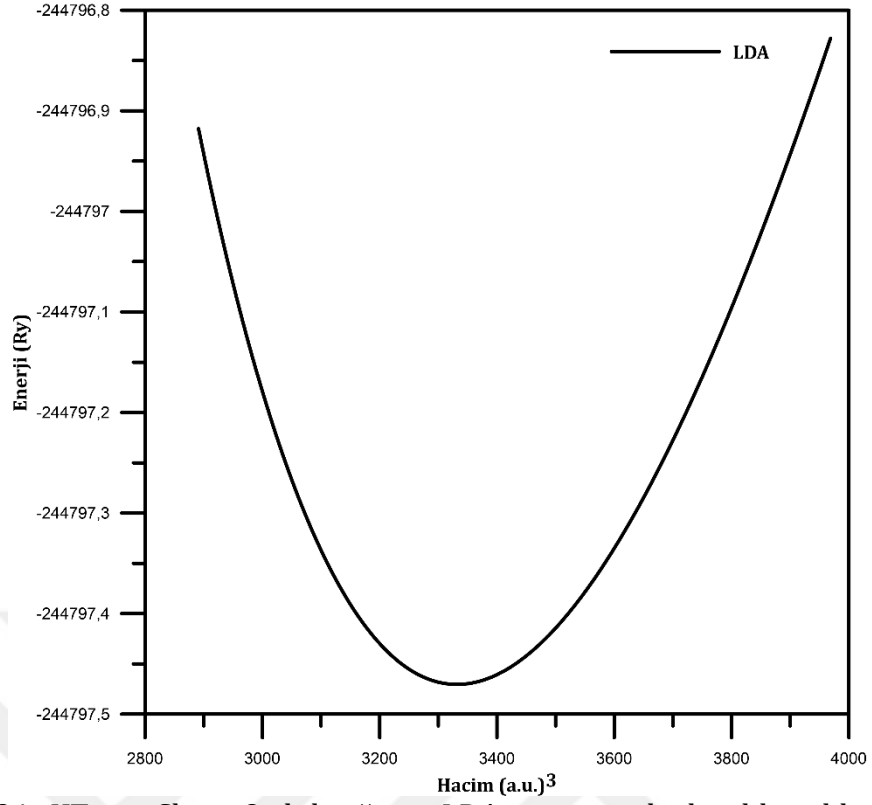
Şekil 4.21. $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



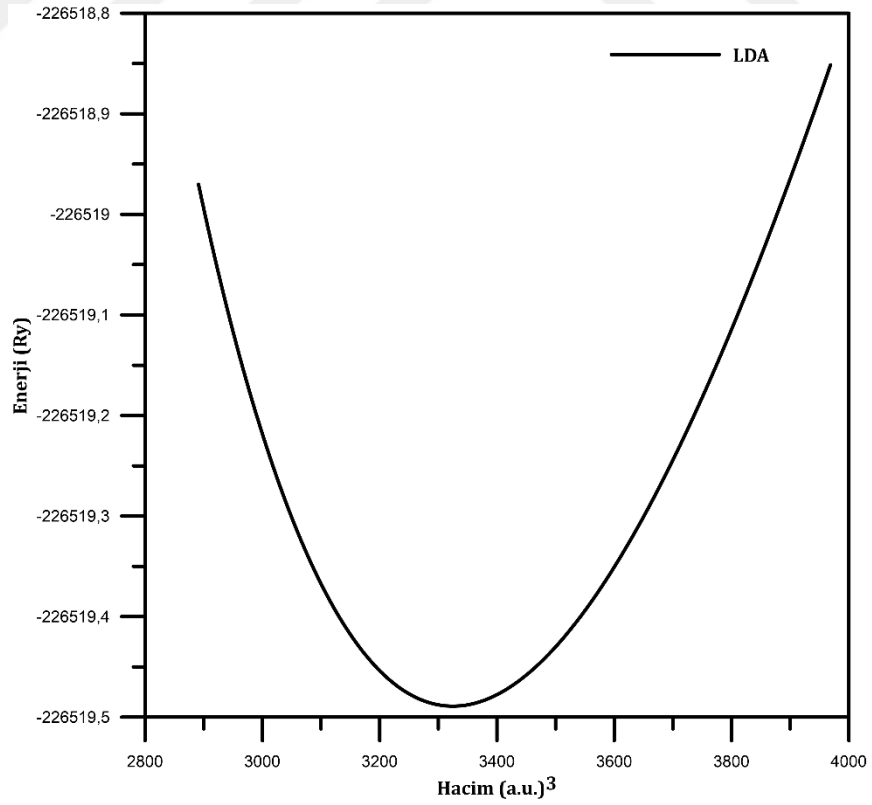
Şekil 4.22. $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



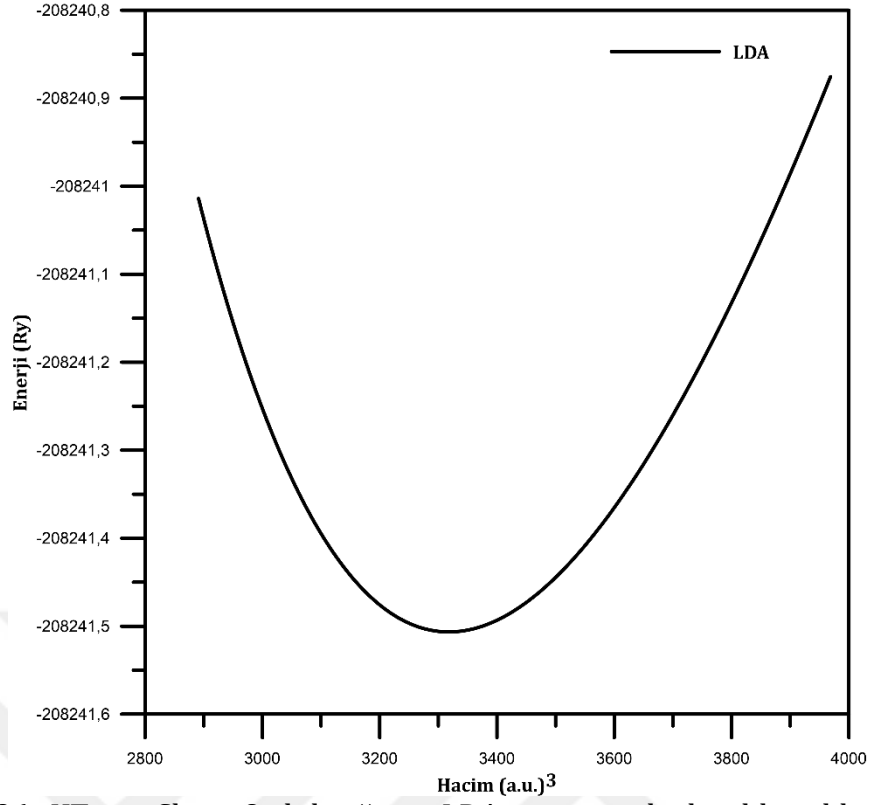
Şekil 4.23. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



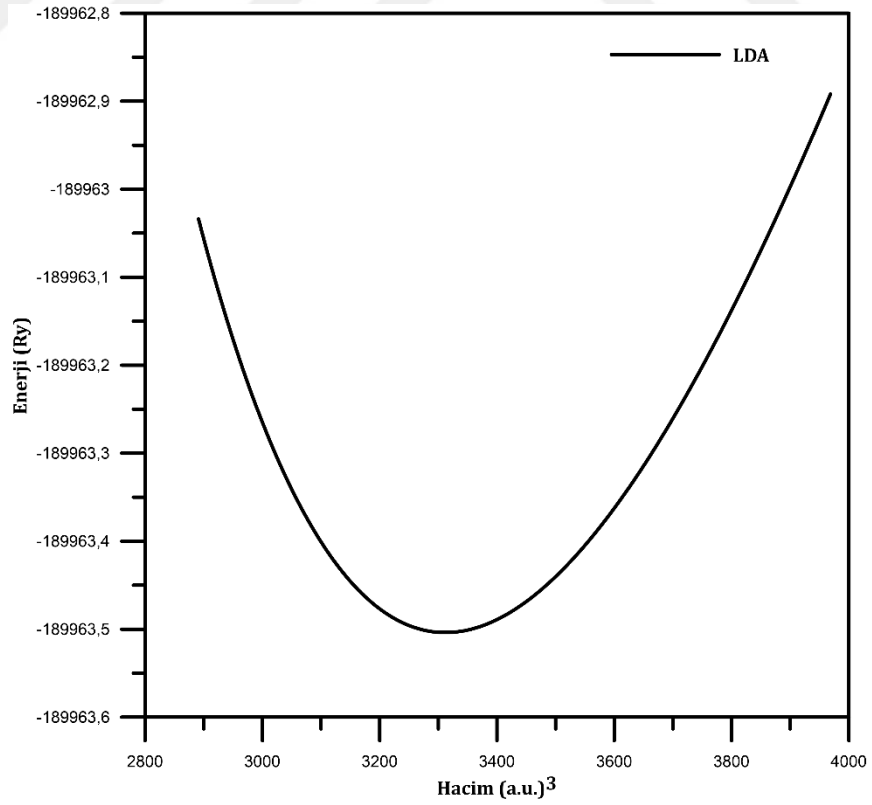
Şekil 4.24. KTa_{0.875}Sb_{0.125}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



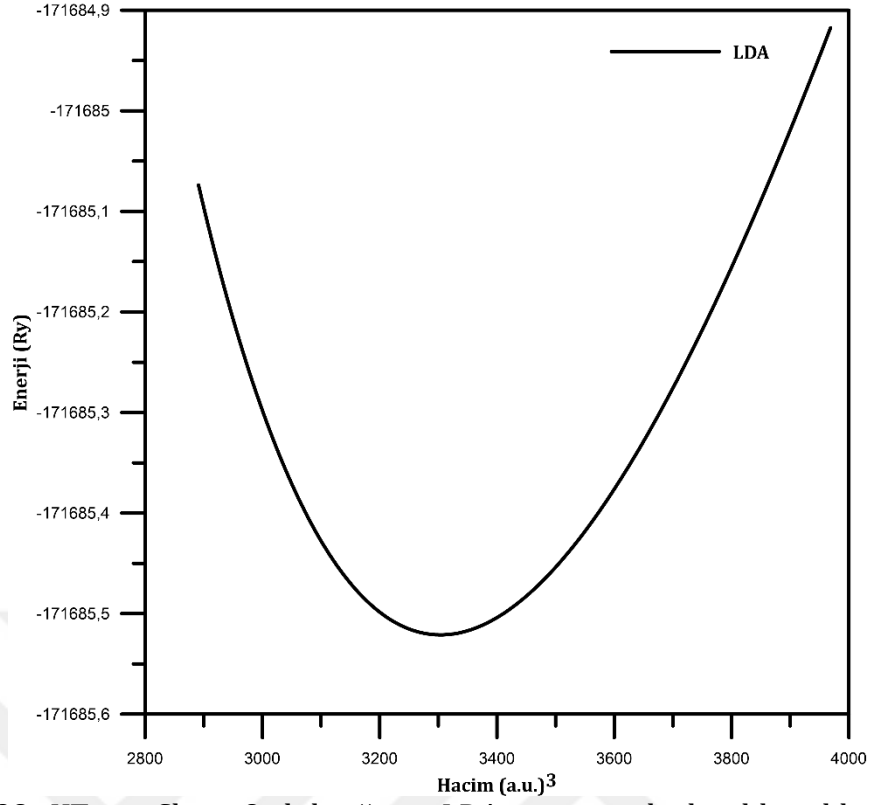
Şekil 4.25. KTa_{0.750}Sb_{0.250}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



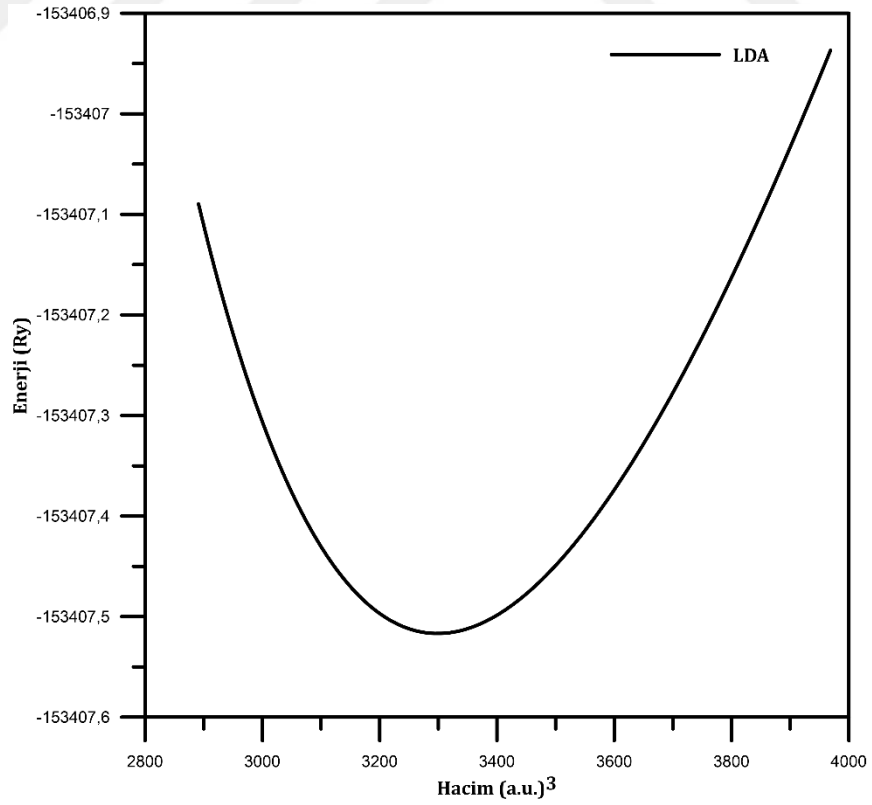
Şekil 4.26. KTa_{0.625}Sb_{0.375}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



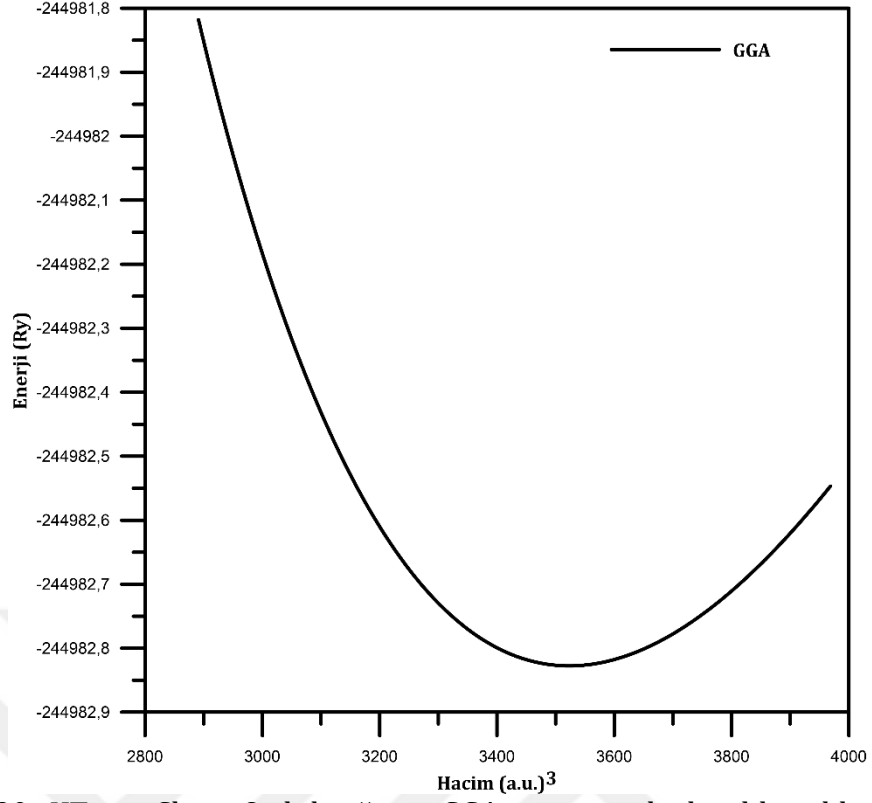
Şekil 4.27. KTa_{0.500}Sb_{0.500}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



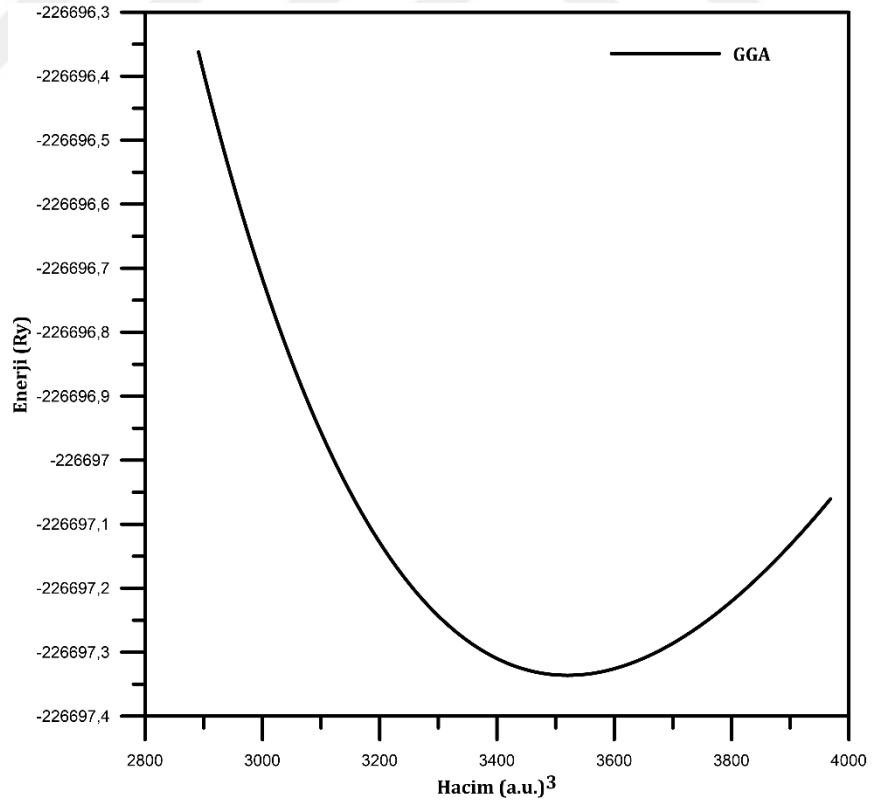
Şekil 4.28. $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



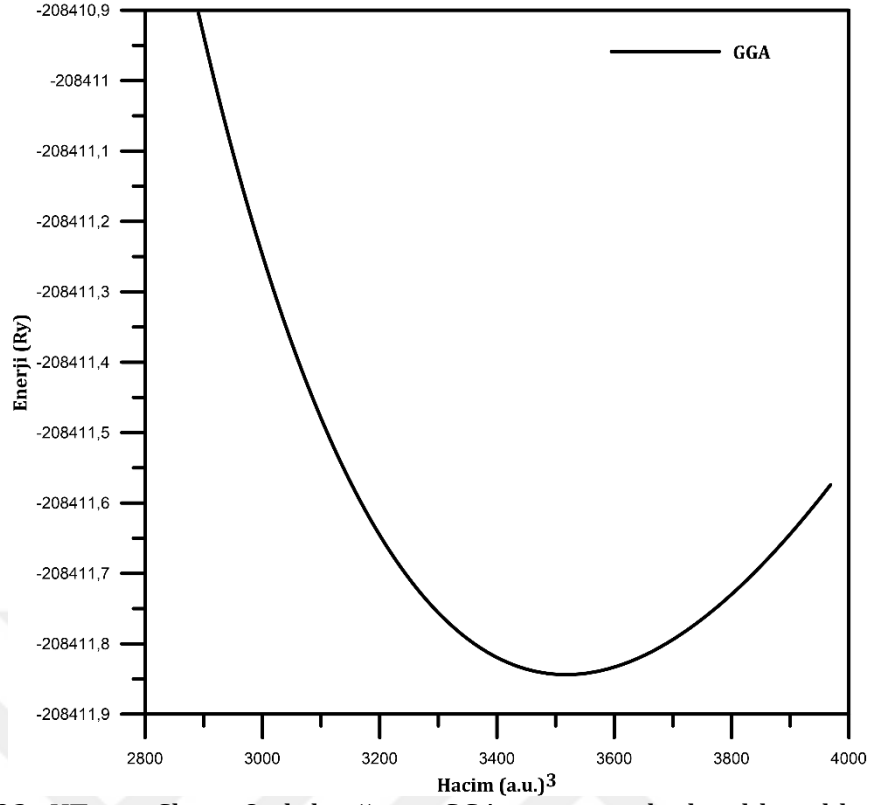
Şekil 4.29. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



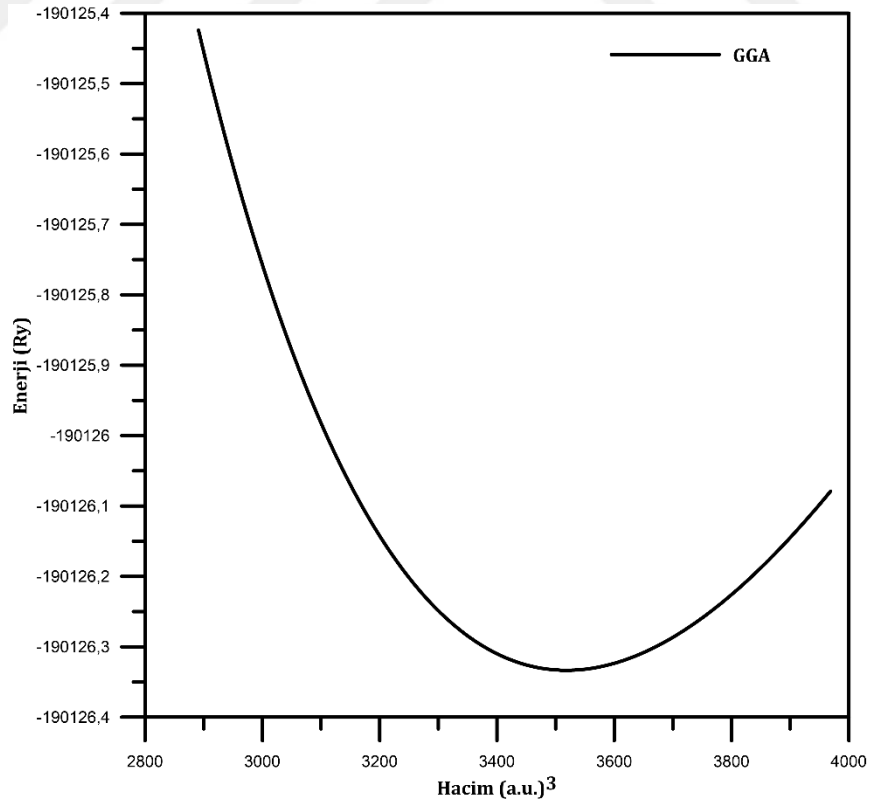
Şekil 4.30. KTa_{0.875}Sb_{0.125}O₃ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



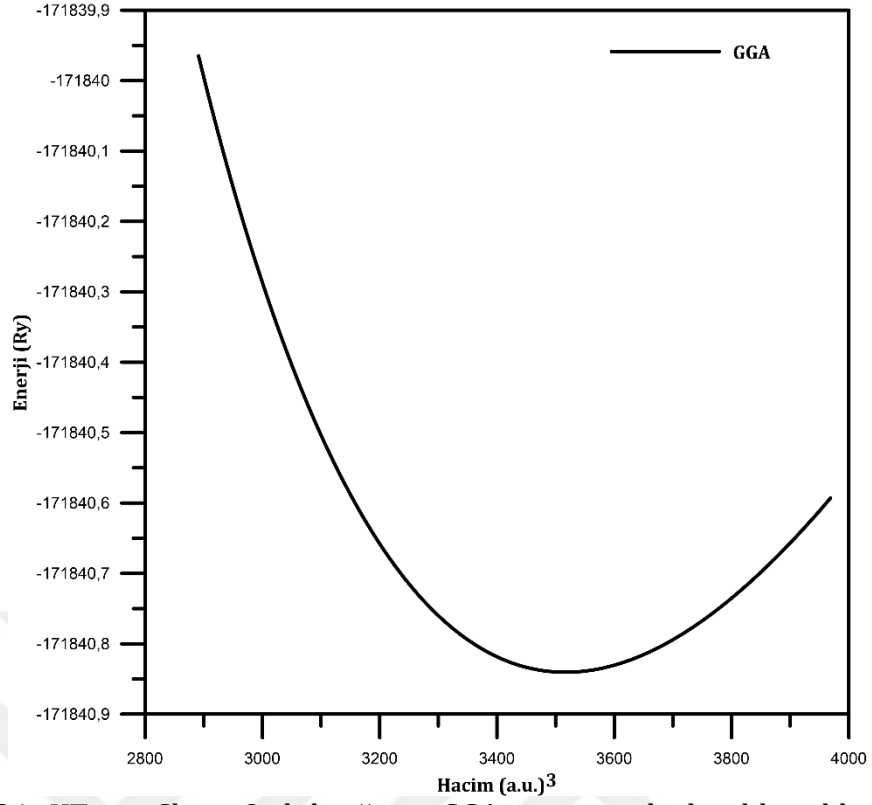
Şekil 4.31. KTa_{0.750}Sb_{0.250}O₃ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



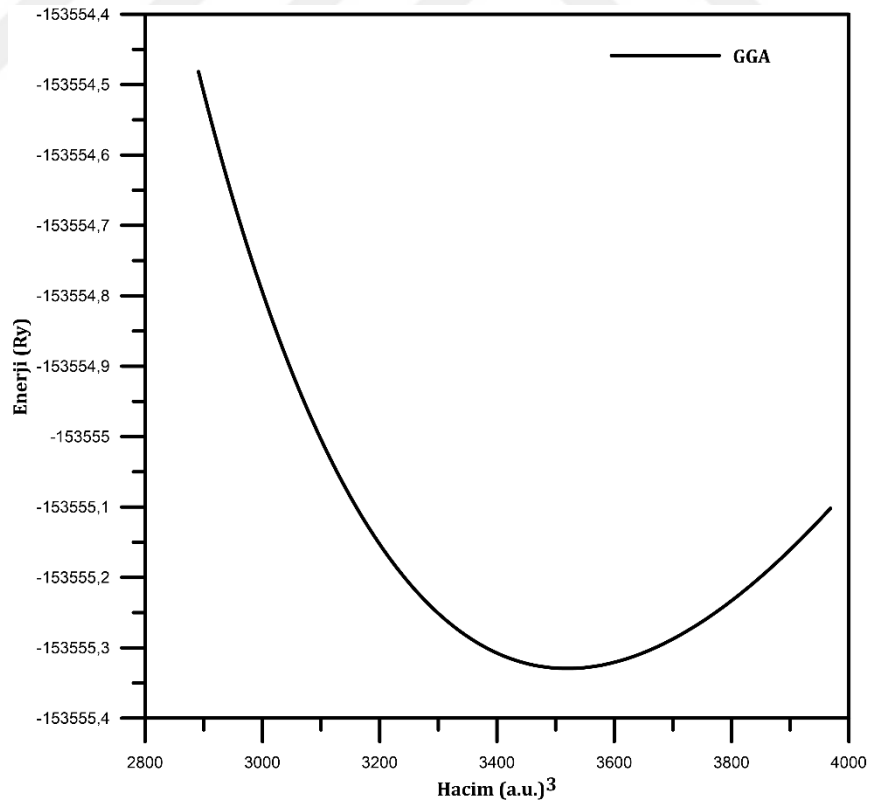
Şekil 4.32. KTa_{0.625}Sb_{0.375}O₃ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



Şekil 4.33. KTa_{0.500}Sb_{0.500}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



Şekil 4.34. $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği



Şekil 4.35. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafiği

Çizelge 4.3. Sb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (Å), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).

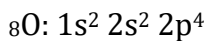
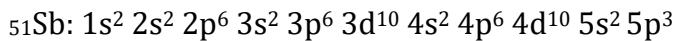
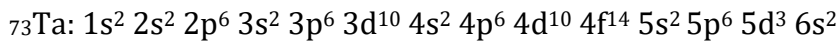
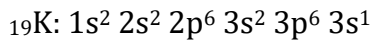
Bileşik	Örgü Parametresi (Å)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$	7,9039	213,68	4,50	-244797,47
$\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$	7,8983	207,71	4,49	-226519,49
$\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$	7,8930	202,80	4,59	-208241,51
$\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$	7,8884	196,58	4,87	-189963,50
$\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$	7,8819	192,51	5,11	-171685,52
$\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$	7,8784	185,84	5,38	-153407,52

Çizelge 4.4. Sb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (Å), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).

Bileşik	Örgü Parametresi (Å)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$	8,0517	181,53	4,56	-244982,83
$\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$	8,0494	176,25	4,61	-226697,34
$\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$	8,0475	170,84	4,66	-208411,84
$\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$	8,0480	162,81	4,86	-190126,33
$\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$	8,0465	157,41	4,90	-171840,84
$\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$	8,0487	148,05	5,19	-153555,33

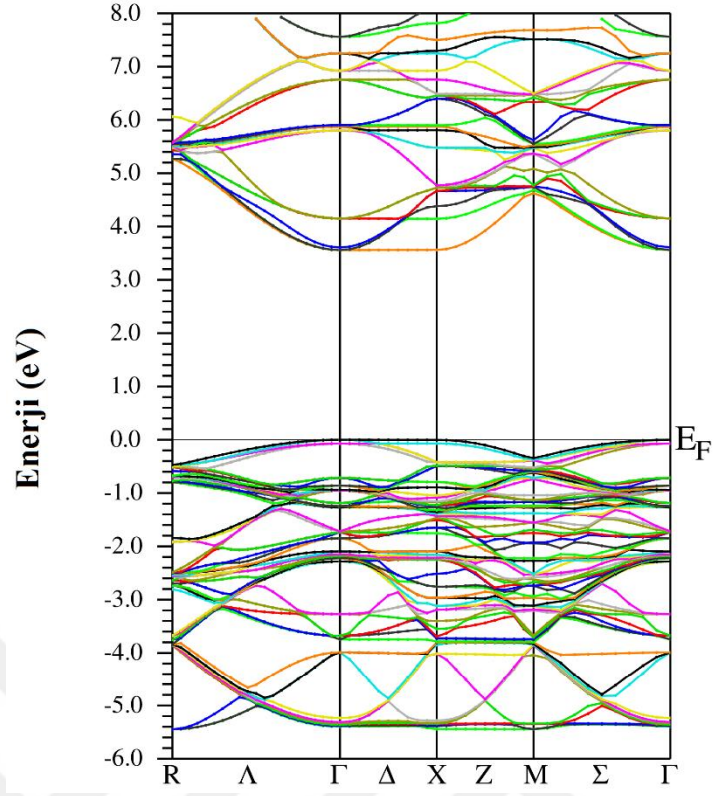
4.3.2. Sb katkılı KTaO_3 bileşiklerin elektronik özellikleri

Sb katkılı KTaO_3 bileşiklerini oluşturan elementlerin elektronik dizilimleri:

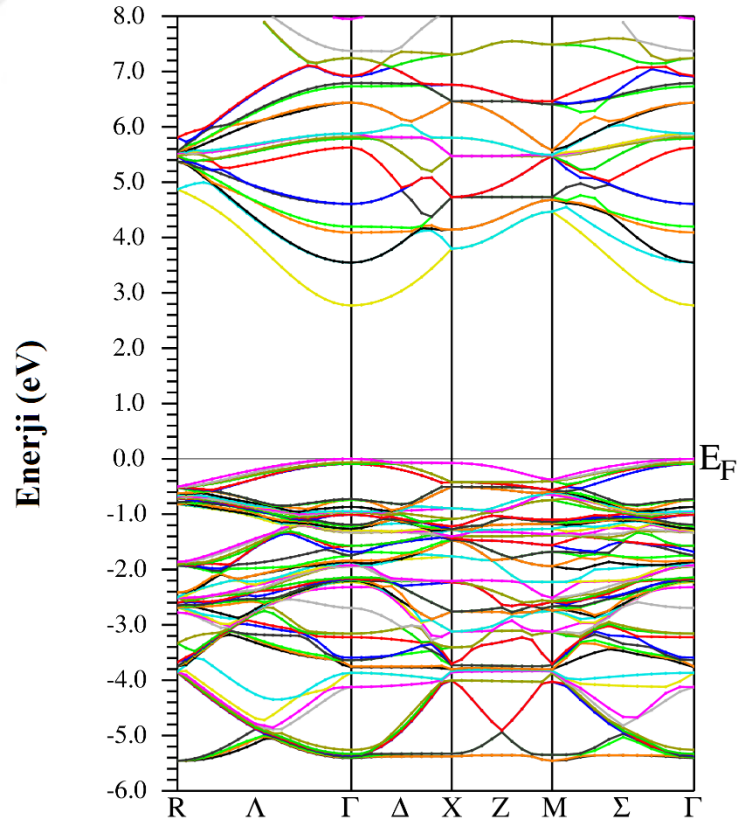


olarak alınmıştır. Tüm elektronik bant yapısı grafiklerinde dikey eksen enerjiyi, yatay eksen yüksek simetri noktalarını (Γ , R, X, M) temsil etmektedir. Fermi enerji düzeyi sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir. Fermi enerji düzeyinin alt

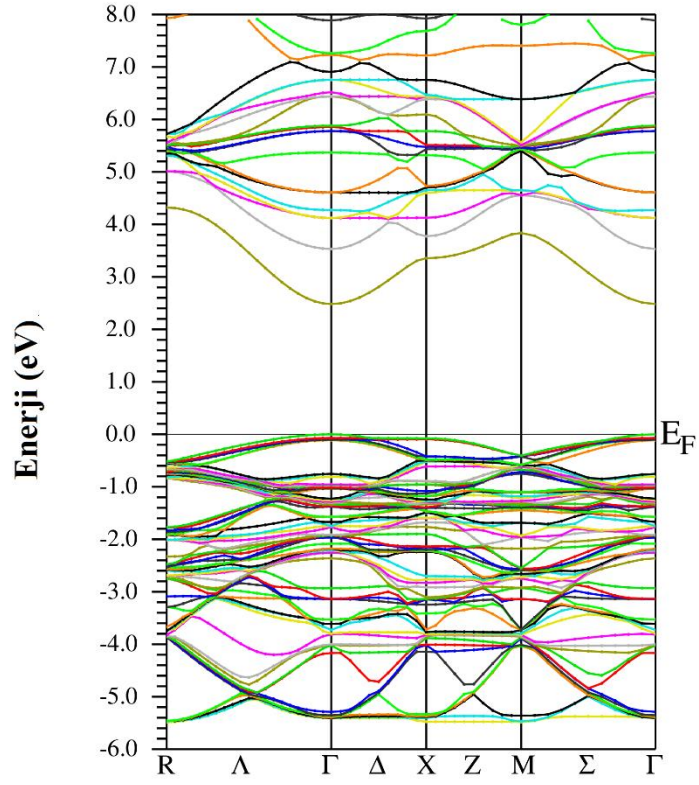
kısımındaki bantlar valans bantlarını temsil ederken, üst kısım ise iletkenlik bantlarını temsil etmektedir. Yarıiletken malzemeler için valans bandının maksimum noktası ile iletkenlik bandının minimum noktası arası Eg yasak bant aralığı olarak ifade edilir. Hesaplamalar genelleştirilmiş gradyant yaklaşımı (GGA), Perdew vd. (1996), kullanıldı ve yasak band enerji hesaplamalarını iyileştirilmek için düzeltilmiş Tran-Blaha (TB-mBJ) (Tran ve Blaha 2009), değişim potansiyeli kullanıldı. Sb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin elektronik özelliklerini incelemek için bant enerjileri ve durum yoğunlukları hesaplandı. Şekil 4.35-Şekil 4.40' da görüldüğü gibi Sb katkılı KTaO_3 bileşikleri yarıiletken bir malzemedir. Ayrıca band grafiklerinde iletkenlik bandının minimum ve valans bandını maksimum noktası Γ dir (Şekil 4.36-Şekil4.41) . $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin yasak band enerjisi 3,56 eV olarak hesaplandı. Bu enerji elektromanyetik spektrumda mor ötesi bölgeye karşılık gelmektedir. Dalga boyu ise 343,31 nm dir. $\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiklerinin yasak band enerjisi ise sırasıyla 2,77 eV, 2,48 eV, 1,66 eV ve 1,77 eV olarak hesaplandı. Bu enerji değerleri elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir. Dalga boyları ise sırasıyla 447,65 nm, 500,00 nm, 746,99 nm ve 725,15 nm dir. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin yasak band enerjisi 1,28 eV olup, elektromanyetik spektrumda kızıl altı bölgeye karşılık gelmektedir. Dalga boyu ise 968,75 nm dir. Band yapı ve toplam durum yoğunluğu eğrileri bu bileşiğin yarıiletken özellikte olduğunu gösterir. Valans band içerisinde O atomunun 2p-orbitalleri baskındır. Ayrıca valans band içerisinde Ta atomunun 5d-orbitalleri ile O atomunun 2p-orbitalleri arasında hibritleşme gözlenmektedir (Şekil 4.42-Şekil 4.53). Bu hibritleşme Ta ile O atomu arasında kovalent bağ olduğunu ortaya koymaktadır. İletkenlik bandında ise Ta atomunun 5d-orbitalleri baskındır. Yasak band enerjisindeki azalma ise Sb atomlarının 5s-orbitallerinden kaynaklanmaktadır. Sb katkısı arttıkça 5s-orbitallerinin iletkenlik bandı içerisinde etkisinin arttığı kısmı durum yoğunluğu eğrilerinden (Şekil 4.42-Şekil 4.53) açıkça görülmektedir.



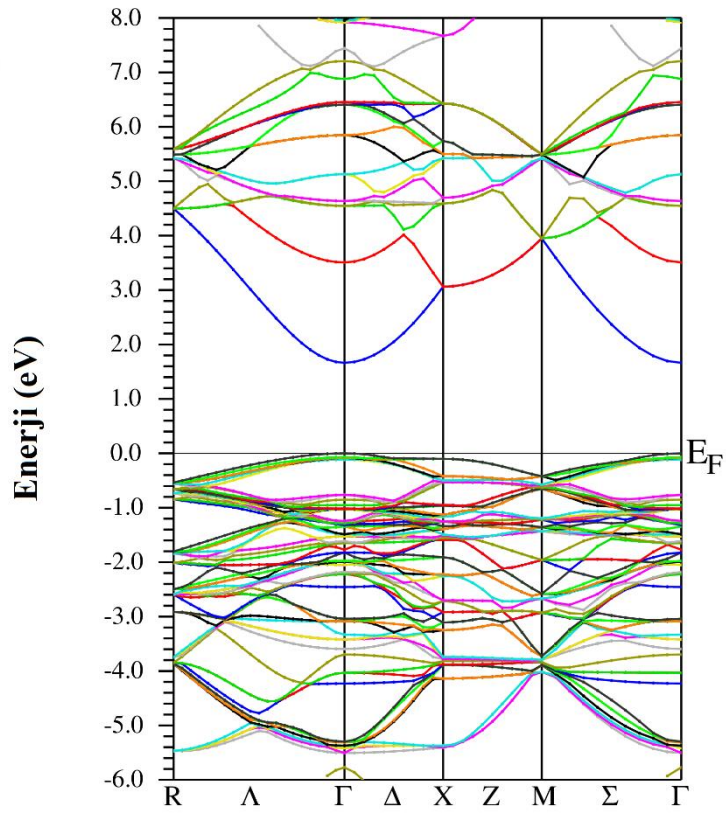
Şekil 4.36. $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$ band yapı grafiği



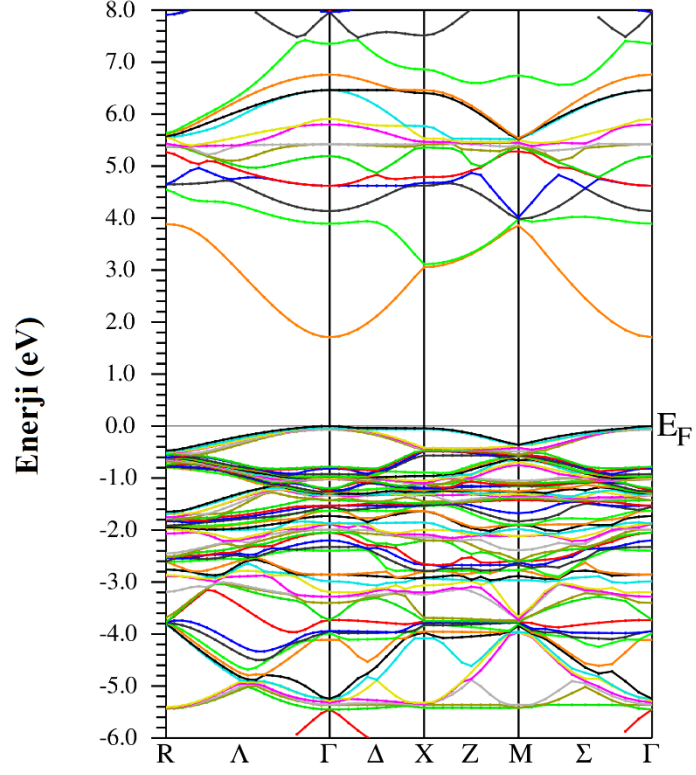
Şekil 4.37. $\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$ band yapı grafiği



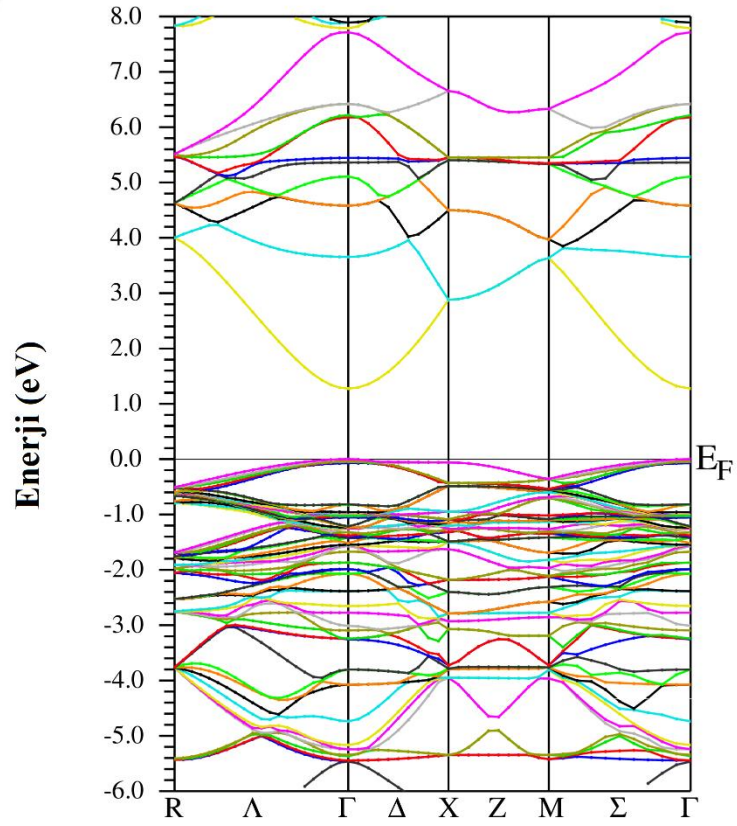
Şekil 4.38. $\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$ band yapı grafiği



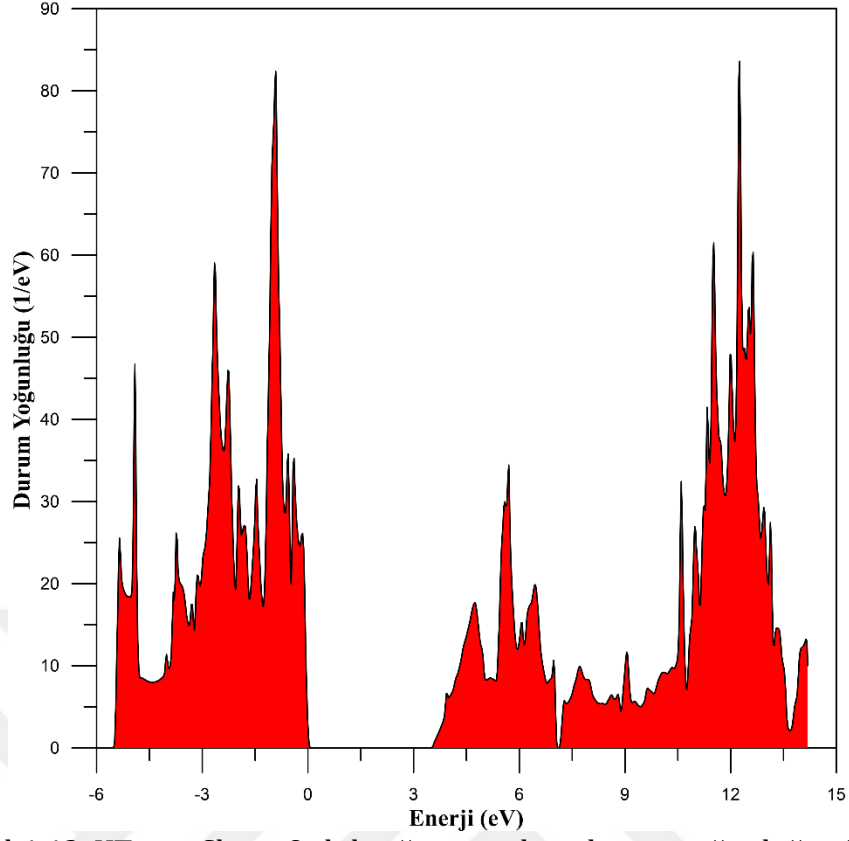
Şekil 4.39. $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$ band yapı grafiği



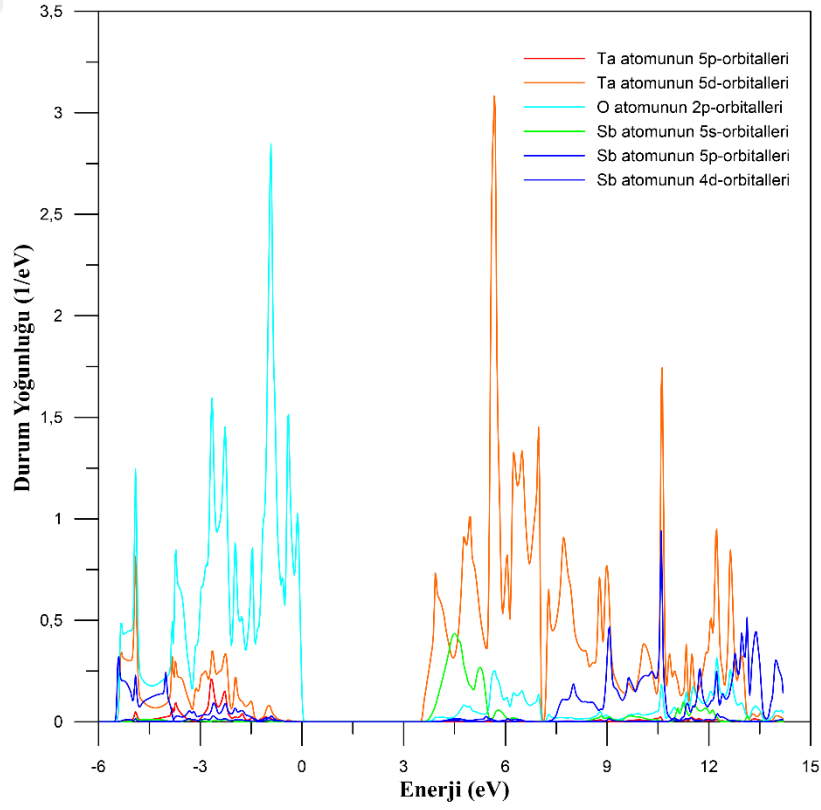
Şekil 4.40. $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ band yapı grafiği



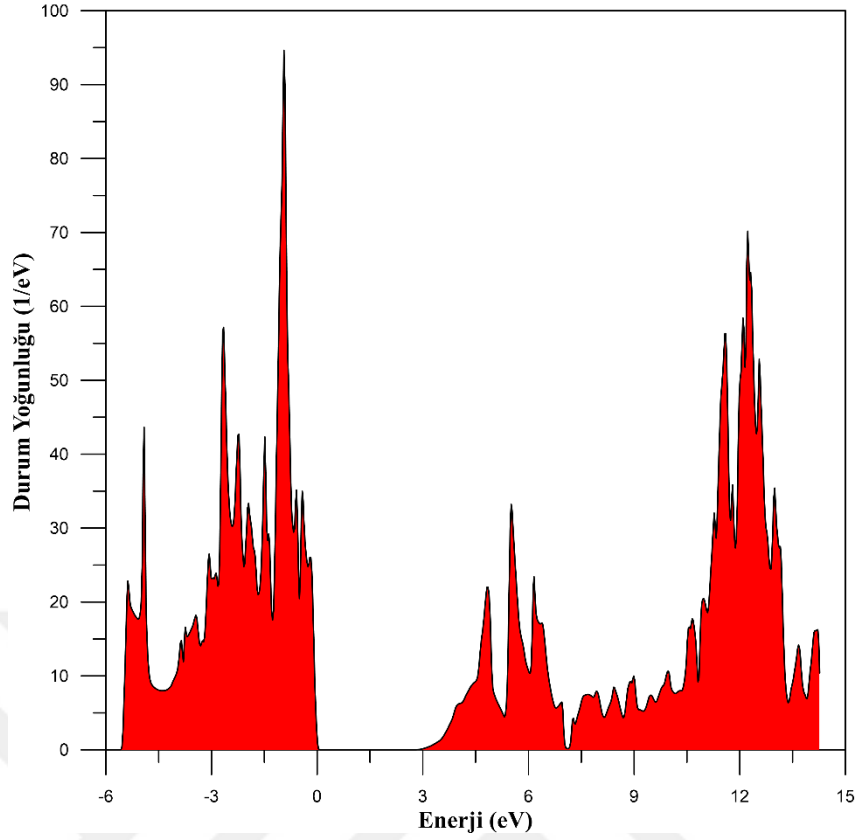
Şekil 4.41. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ band yapı grafiği



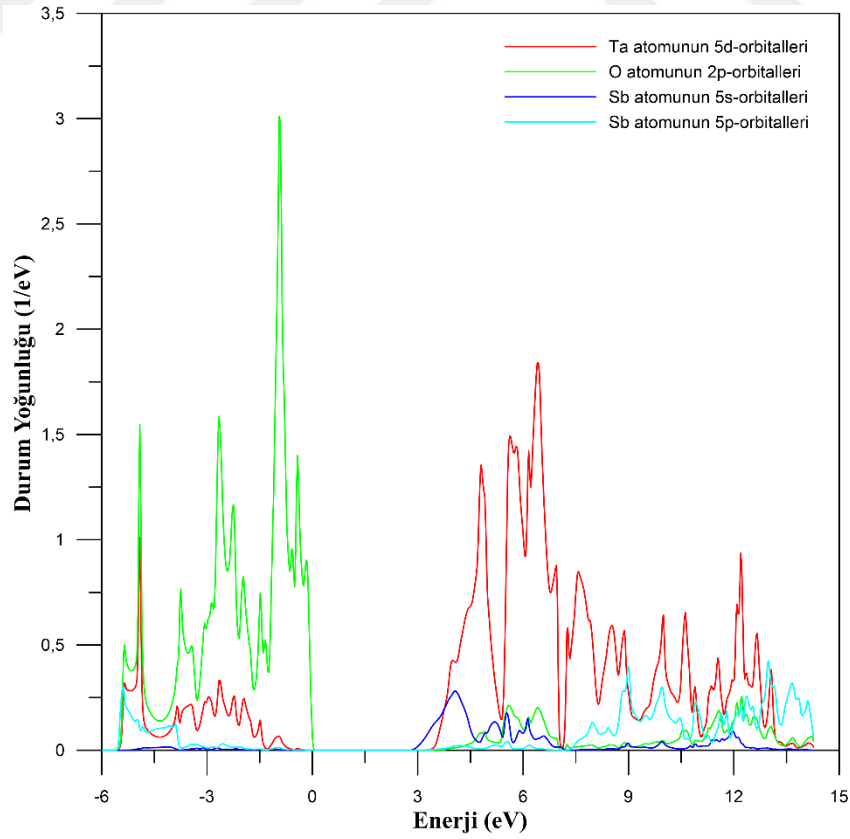
Şekil 4.42. $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi



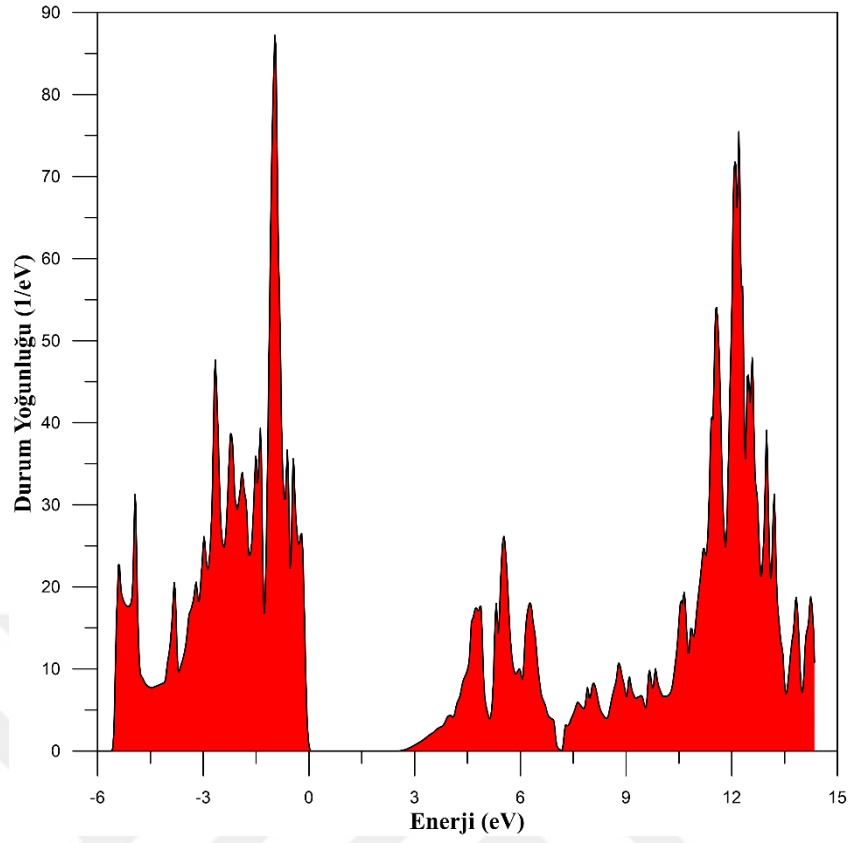
Şekil 4.43. $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi



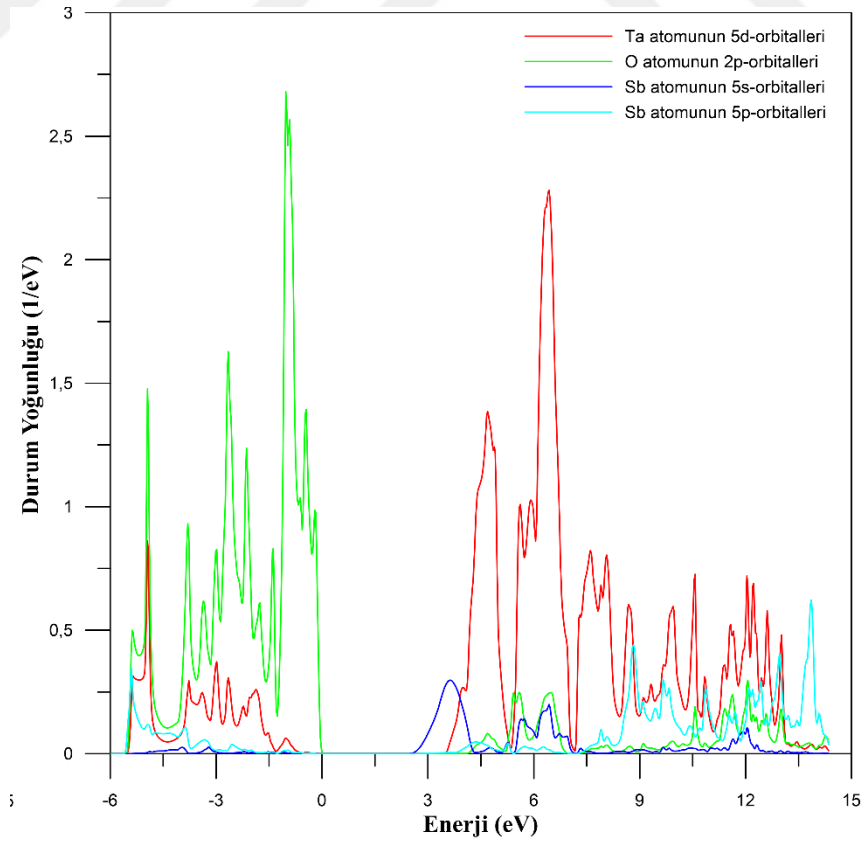
Şekil 4.44. $\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi



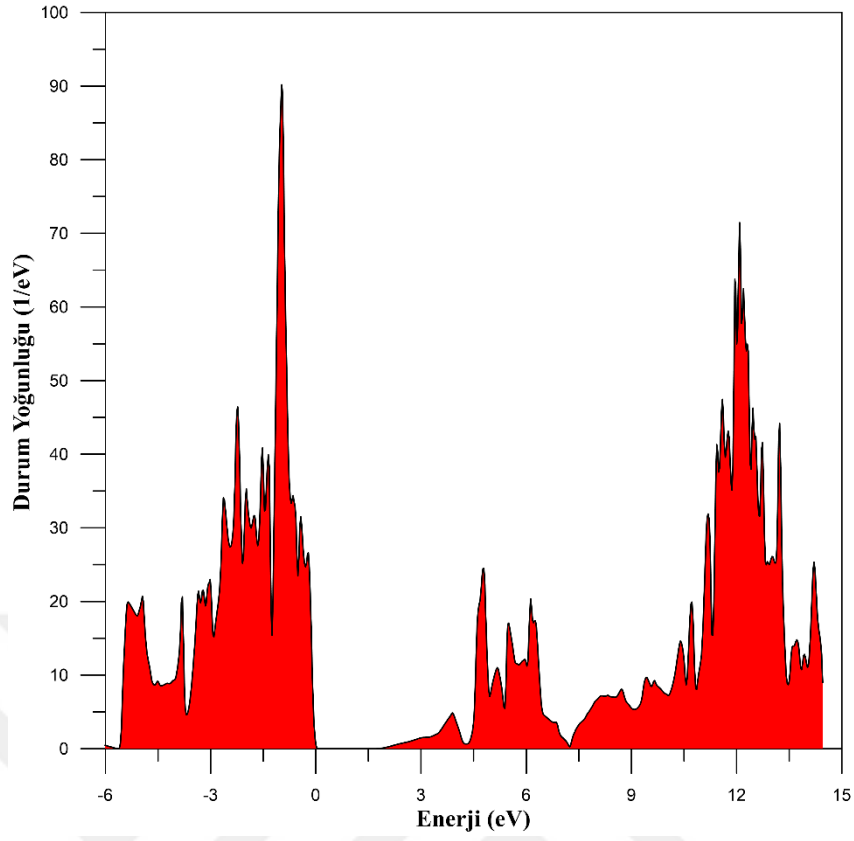
Şekil 4.45. $\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi



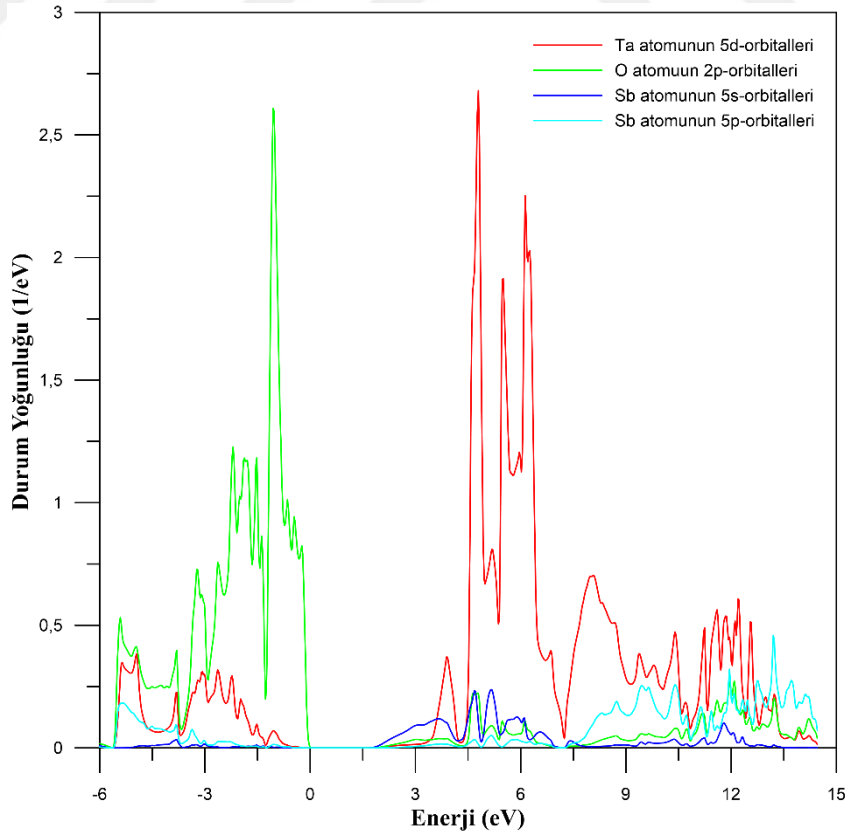
Şekil 4.46. $\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi



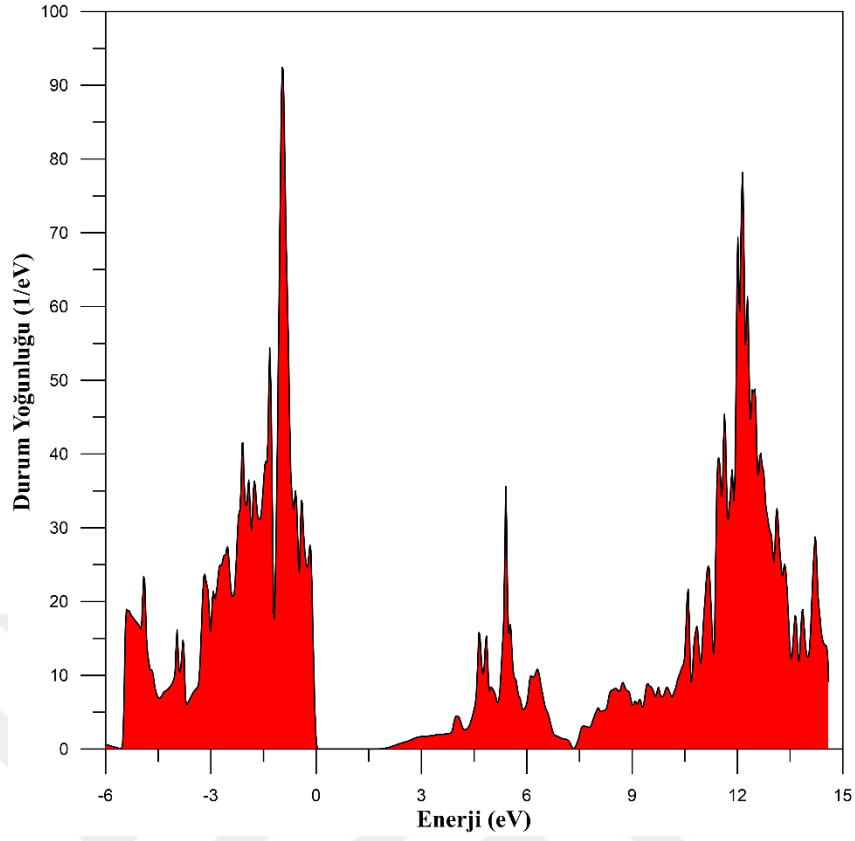
Şekil 4.47. $\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi



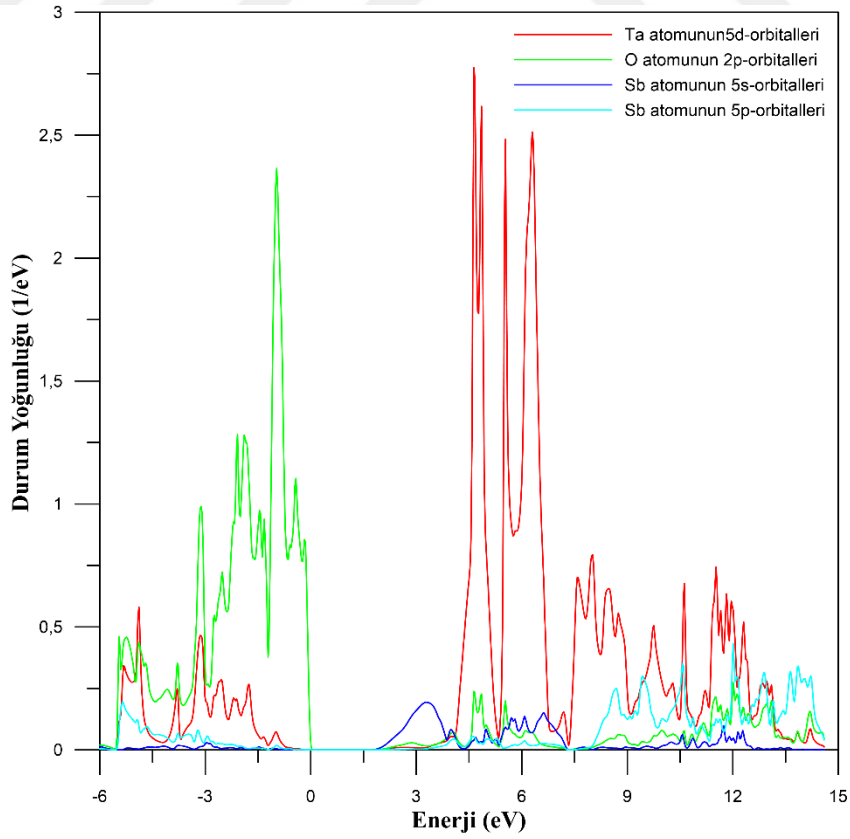
Şekil 4.48. $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi



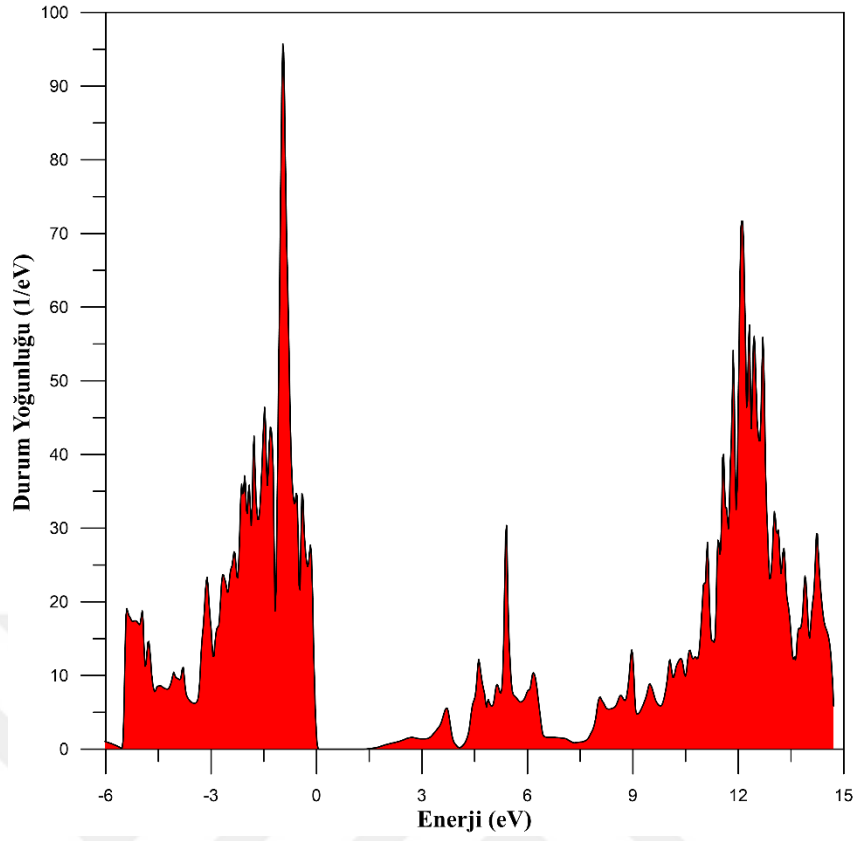
Şekil 4.49. $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi



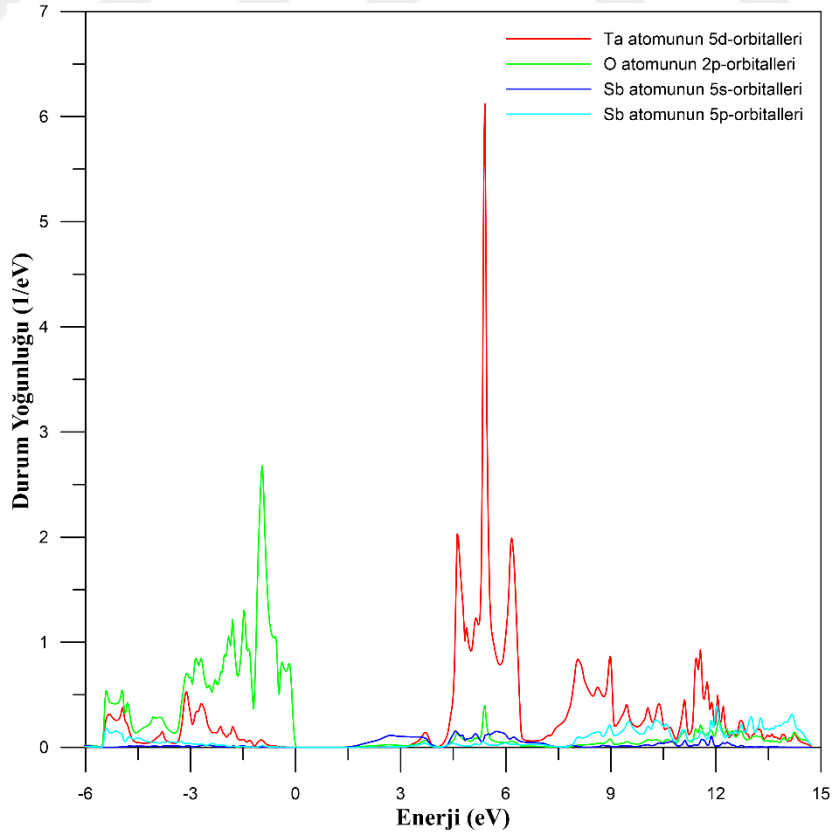
Şekil 4.50. $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi



Şekil 4.51. $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi



Şekil 4.52. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrisi



Şekil 4.53. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrisi

4.3.3. Sb katkılı KTaO₃ bileşiklerin optik özellikleri

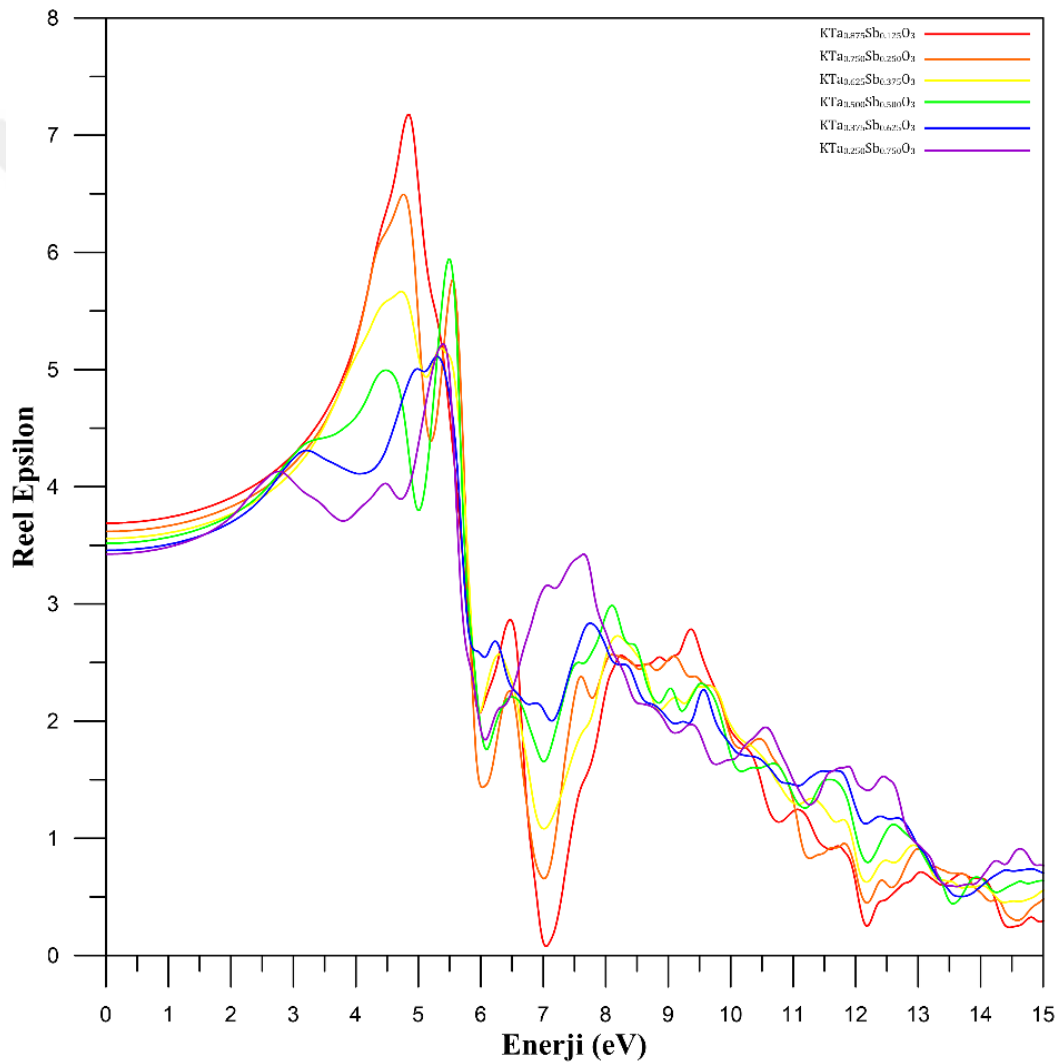
Sb katkılı bileşiklerin optik özellikleri dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. Dielektrik fonksiyonları yardımıyla yansıma katsayıları (R), soğurma katsayıları (α), kırılma indisi (n), sönüm katsayısı ve enerji kayıp fonksiyonları (L) hesaplandı. KTa_{0.875}Sb_{0.125}O₃, KTa_{0.750}Sb_{0.250}O₃, KTa_{0.625}Sb_{0.375}O₃, KTa_{0.500}Sb_{0.500}O₃, KTa_{0.375}Sb_{0.625}O₃ ve KTa_{0.250}Sb_{0.750}O₃ bileşikleri için dielektrik sabitleri $\epsilon_1(\omega)$ değerleri, sırasıyla 3,69, 3,62, 3,56, 3,52, 3,46 ve 3,43 olarak hesaplandı. En yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji Çizelge 4.5 de verilmiştir. Dielektrik sabiti değeri kızıl altı bölgeden mor ötesi bölgeye kadar artış sergilerken mor ötesi bölgede düşüşe geçmiştir. Ayrıca reel dielektrik sabitinin 0-15 eV aralığında negatife düşmemesi bu malzemelerin 0-15 eV aralığında yarıiletken davranış sergilediğini gösterir. İmajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafiğinde oluşan pikler valans bandından iletim bandına geçen elektronların optik geçişlerini temsil etmektedir. Sb katkılı bileşikler için optik geçişleri temsil eden, ilk üç pik için enerji değerleri Çizelge 4.6' da verilmiştir. Ayrıca yasak band aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırları (TSS) için elde edilen enerji değerleri (Çizelge 4.6) yasak band enerjileri ile uyumludur. Sb katkısı ile optik geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlendi. Katkısız KTaO₃ bileşiğine ait reel ve imajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4.54 ve Şekil 4.55 de gösterilmektedir.

Çizelge 4.5. En yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

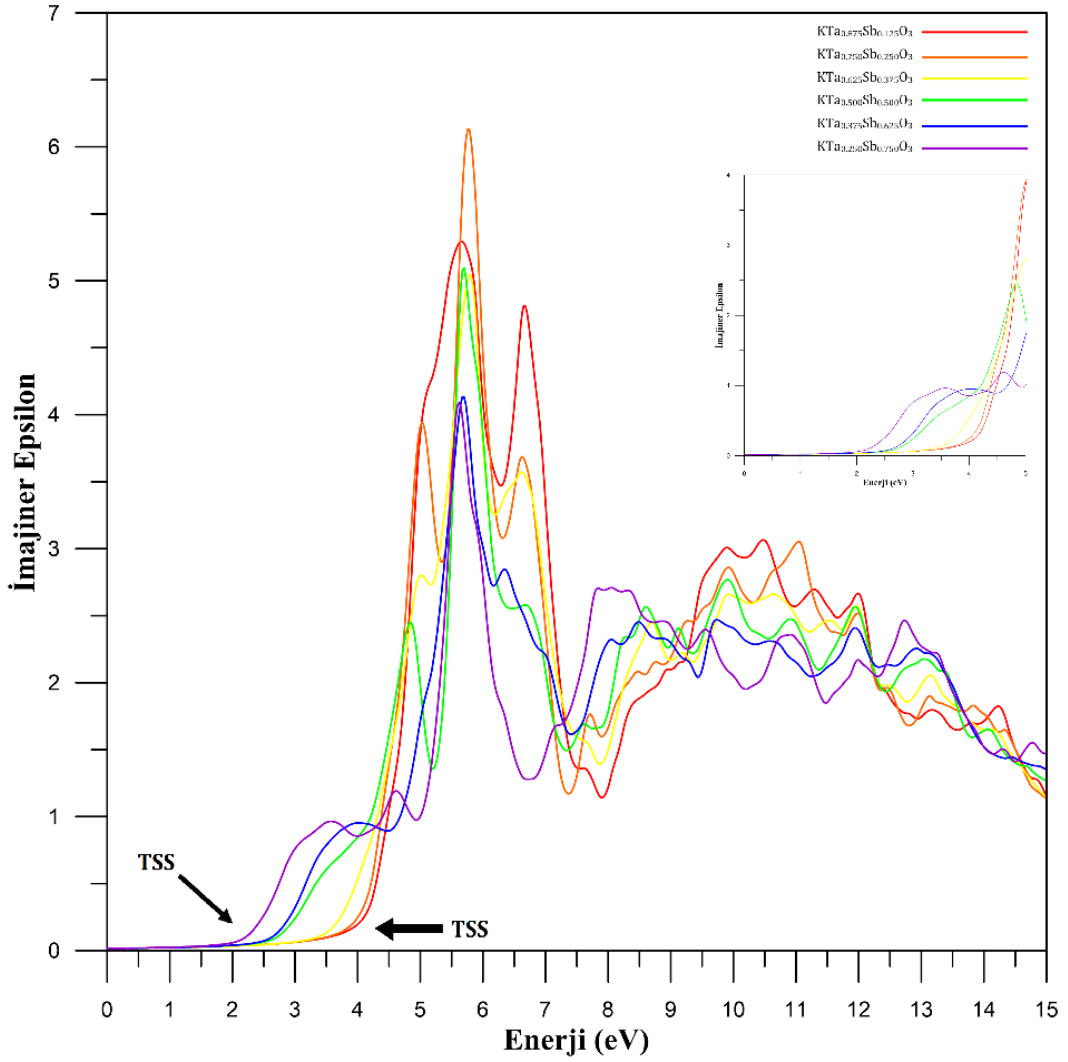
Bileşik	Reel dielektrik sabiti $\epsilon(\omega)$	Enerji değeri
KTa _{0.875} Sb _{0.125} O ₃	7,18	4,83 eV
KTa _{0.750} Sb _{0.250} O ₃	6,50	4,78 eV
KTa _{0.625} Sb _{0.375} O ₃	5,67	4,72 eV
KTa _{0.500} Sb _{0.500} O ₃	5,94	5,48 eV-5,51 eV
KTa _{0.375} Sb _{0.625} O ₃	5,11	5,29 eV-5,32 eV
KTa _{0.250} Sb _{0.750} O ₃	5,22	5,40 eV

Çizelge 4.6. Sb katkılı bileşikler için optik geçişleri temsil eden ilk üç pik için enerji değerleri ve temel soğurma sınırları (TSS) değerleri

Bileşik	E ₁ (eV)	E ₂ (eV)	E ₃ (eV)	TSS (eV)
KTa _{0.875} Sb _{0.125} O ₃	5,65	6,65	9,89	3,55
KTa _{0.750} Sb _{0.250} O ₃	5,02	5,76	6,63	2,89
KTa _{0.625} Sb _{0.375} O ₃	4,99	5,78	6,60	2,43
KTa _{0.500} Sb _{0.500} O ₃	4,83	5,70	6,65	1,67
KTa _{0.375} Sb _{0.625} O ₃	3,93	5,67	6,35	1,78
KTa _{0.250} Sb _{0.750} O ₃	3,58	4,59	5,62	1,30

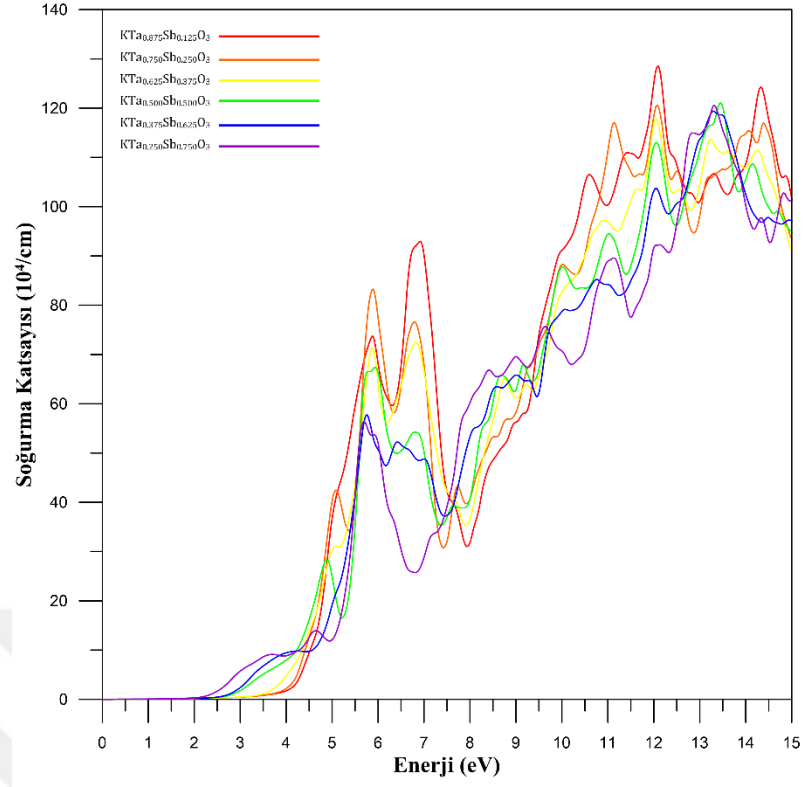


Şekil 4.54. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonları

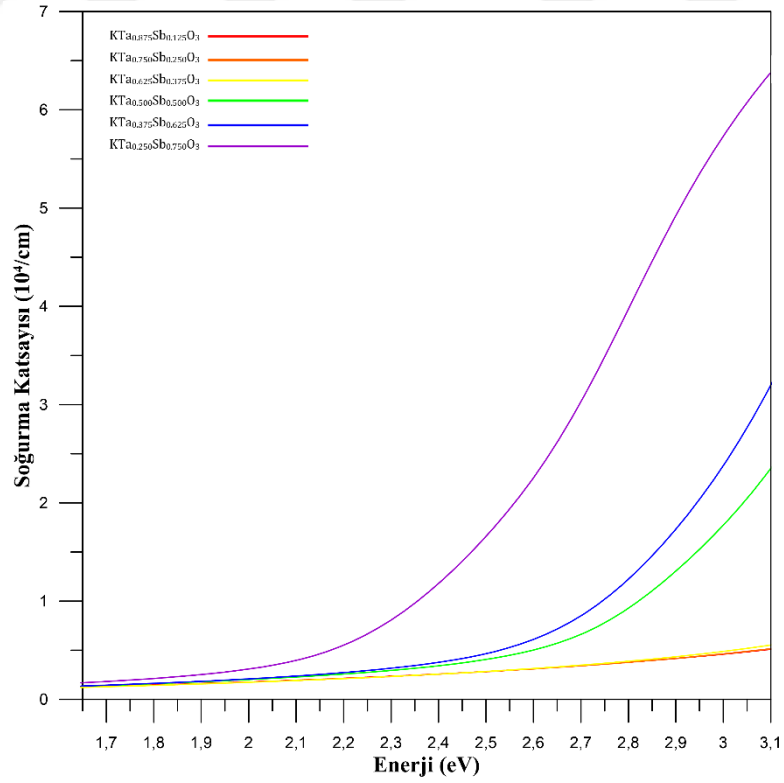


Şekil 4.55. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonları

Sb katkılı bileşiklere ait soğurma spektrumları Şekil 4.56 ve Şekil 4.57 de gösterilmektedir. Soğurma katsayısı yayılan ışığın malzemenin içine ne kadar nüfuz edebileceğinin bir ölçüsüdür. Düşük soğurma katsayısına sahip malzemelerde malzeme yeterli inceliğe sahipse dalga boyuna bağlı olarak saydam görünebilir. Sb katkılı bileşikler için elde edilen temel soğurma sınırı (TSS) enerjileri yasak band hesaplamaları ile uyum içerisindedir. Soğurma spektrumunda görülen diğer pikler ise bandlar arasındaki optik geçişlere karşılık gelmektedir. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşikleri için soğurma elektromanyetik spektrumun görünür keskin bir artışa geçmektedir. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiği için soğurma başlangıç sınırı kızılaltı bölge iken, diğer Sb katkılı bileşikler için bu sınır elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir.

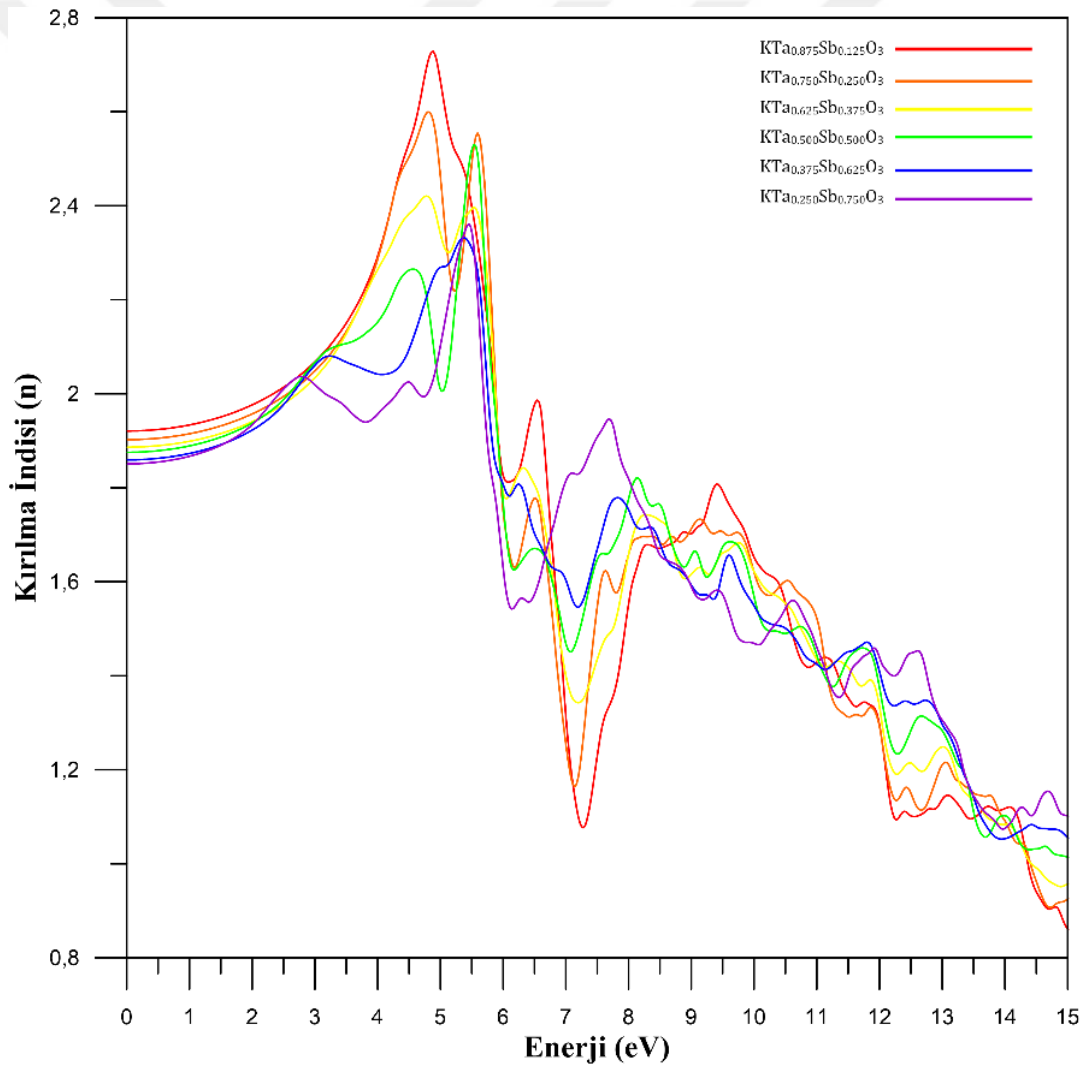


Şekil 4.56. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan soğurma spektrumu

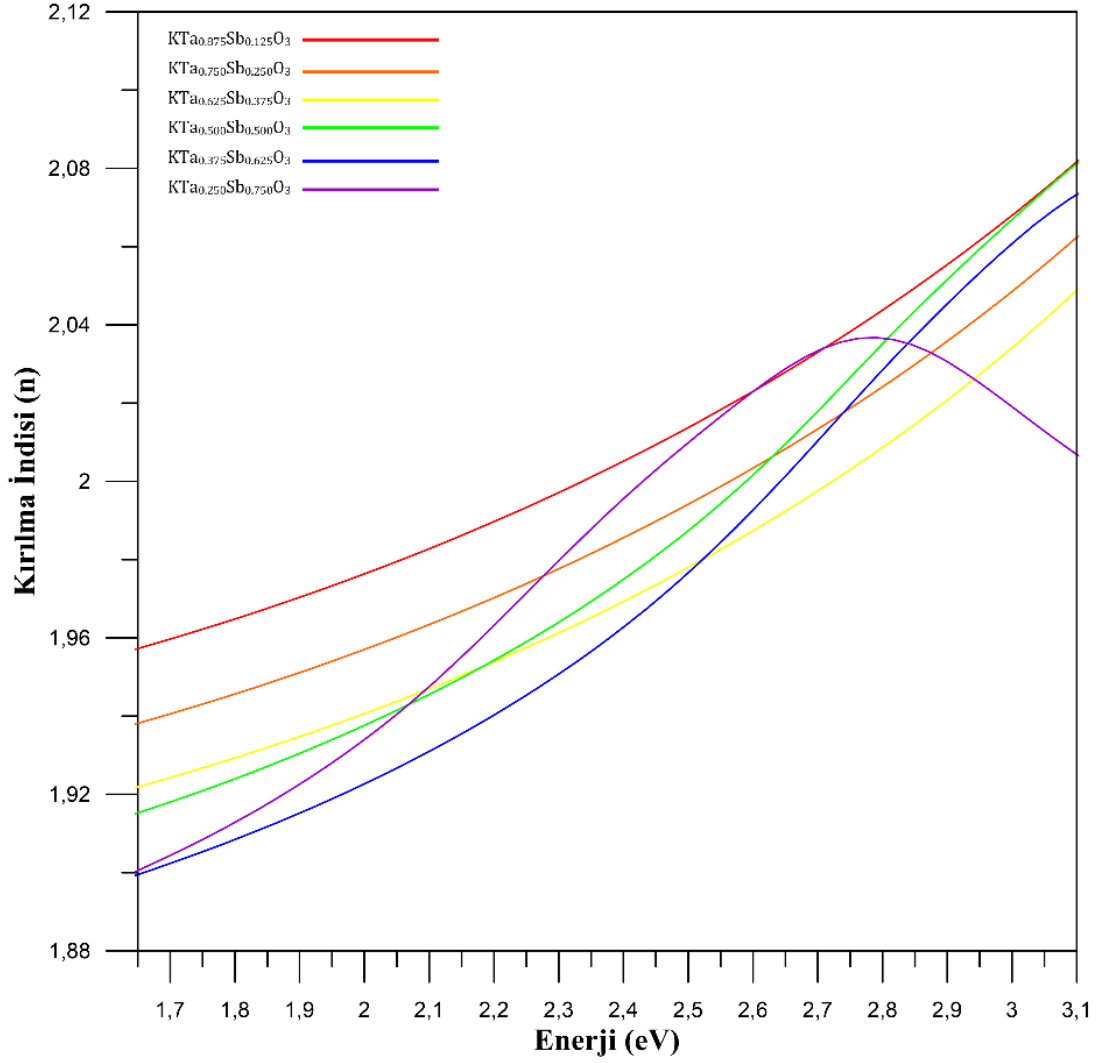


Şekil 4.57. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için soğurma spektrumu

Sb katkılu bileşiklere ait kırılma indisi spektrumları Şekil 4.58 ve Şekil 4.59 da gösterilmektedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşikleri için kırılma indisleri $n(0)$ değerleri, sırasıyla 1,92, 1,90, 1,89, 1,88, 1,86 ve 185 olarak hesaplandı. Ayrıca, en yüksek kırılma indisi mor ötesi bölgede ulaşırken, bu değere karşılık gelen enerji ve kırılma indisi değerleri Çizelge 4.7' de verilmiştir. Kırılma indisleri, $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiği hariç, kızılötesi bölgeden mor ötesi bölgeye kadar artış sergilemektedir. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiği ise görünür bölgede (2,74 eV civarı) düşüşe geçerken mor ötesi bölgede tekrar artış sergilemektedir.



Şekil 4.58. Sb katkılu bileşikler için hesaplanan kırılma indisi spektrumu



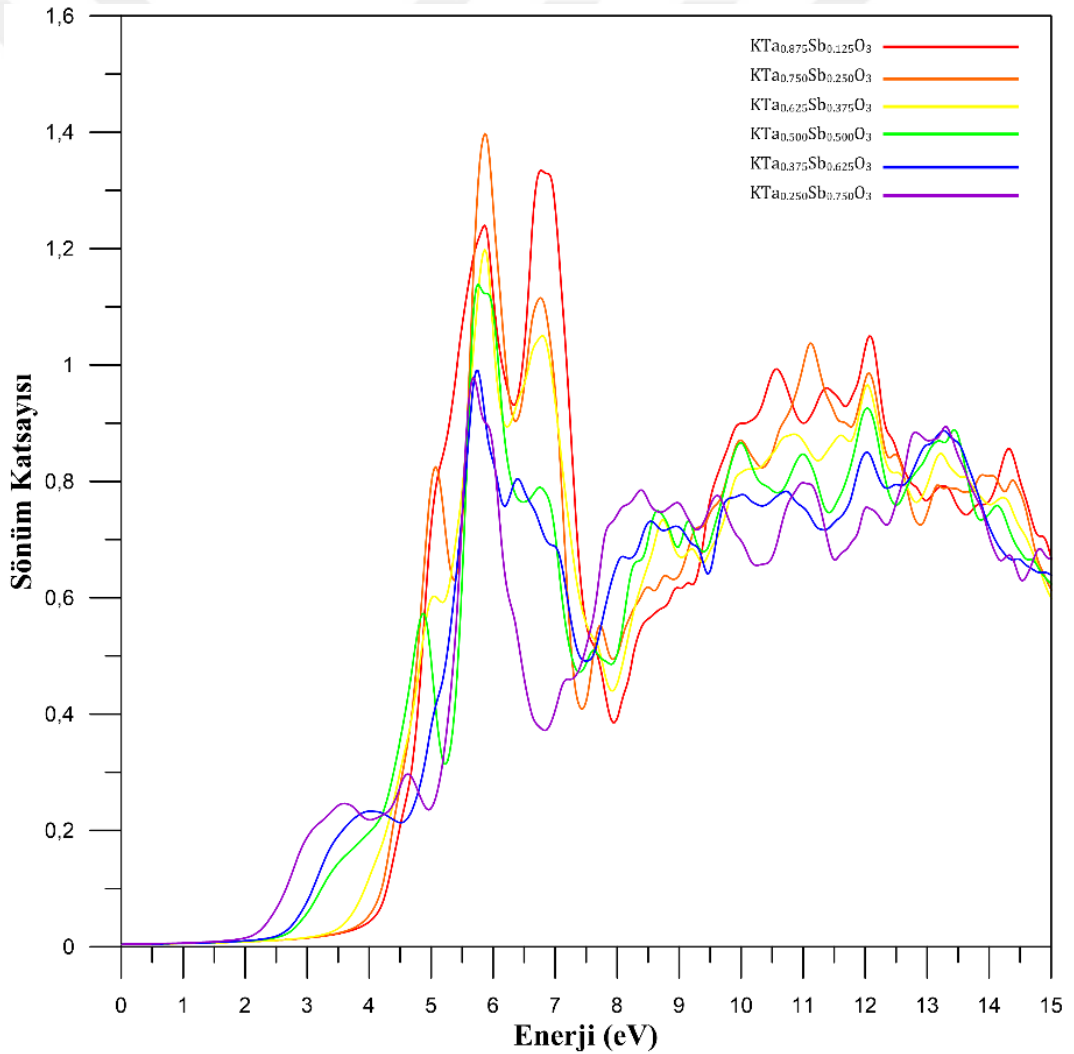
Şekil 4.59. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için kırılma indisi spektrumu

Çizelge 4.7. En yüksek kırılma indisi ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

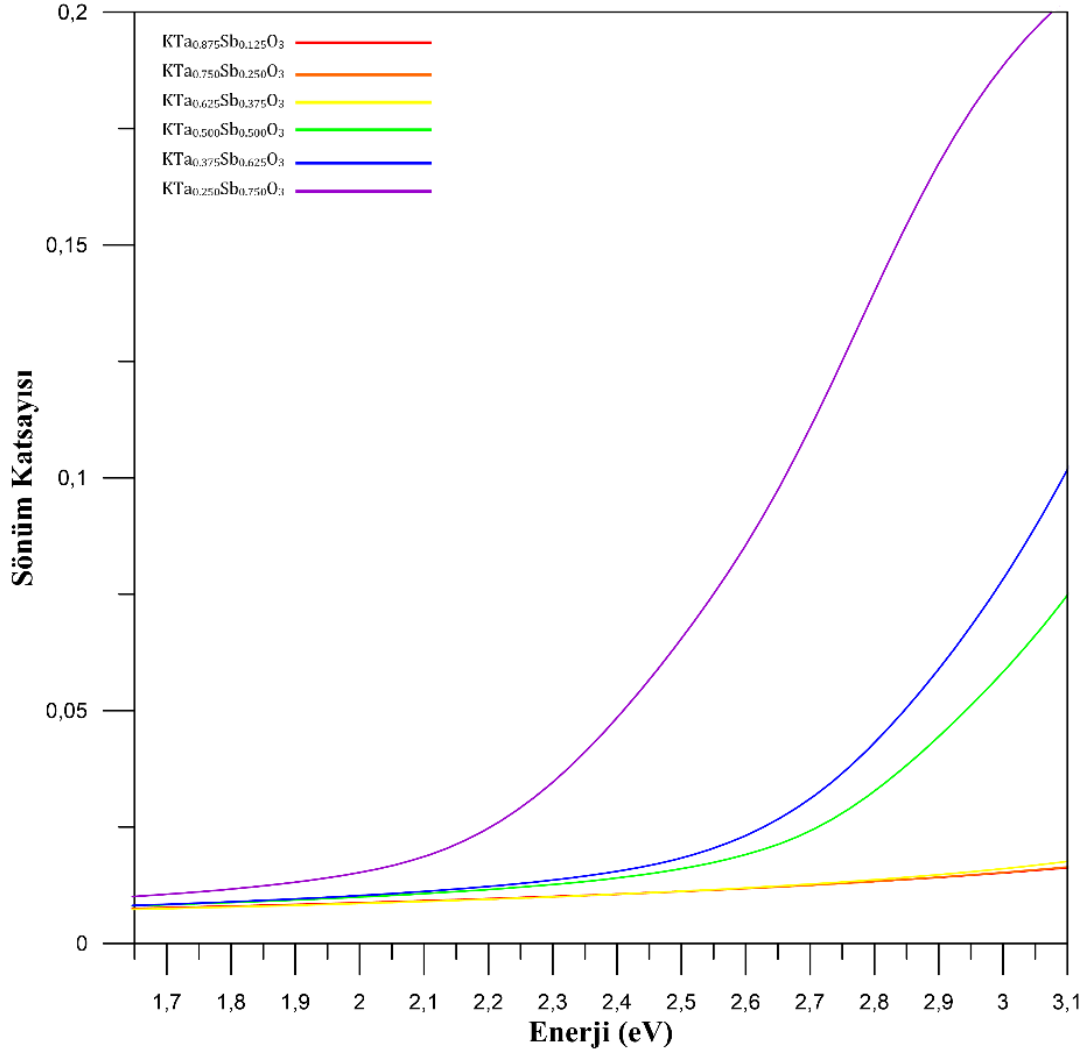
Bileşik	Kırılma İndisi	Enerji değeri
$\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$	2,73	4,86 eV
$\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$	2,60	4,78 eV
$\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$	2,42	4,72 eV
$\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$	2,53	5,54 eV
$\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$	2,33	2,32 eV
$\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$	2,36	5,43 eV

Sönüm katsayısı kompleks dielektrik sabitinin imajiner kısmı ve kırılma indisi ile doğrudan alakalıdır ve $\kappa = \frac{\epsilon_2}{2n}$ eşitliği ile ifade edilir. Bu nedenle sönüm katsayısının enerjiye bağlı grafiği (Şekil 4.60 ve Şekil 4.61) ile kompleks dielektrik

sabitinin imajiner kısmı ve kırılma indisinin enerjiye bağı grafikleri benzerdir. Ayrıca, sönüm katsayısı spektrumunda meydana gelen yerel maksimum pikler reel dielektrik fonksiyonunun sıfır olduğu noktalara karşılık gelmektedir. Rezonans enerjisine yakın değerlerde sönüm katsayısı yüksek olmasından dolayı soğurma katsayısının yüksek olması beklenir. Sb katkılı bileşikler için elde edilen en yüksek sönüm katsayısı ve bu katsayıya karşılık gelen enerji değeri Çizelge 4.8'de verilmiştir. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$, $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ ve $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ bileşikleri için sönüm katsayısı görünür bölgede içerisinde keskin bir artışa geçerken, diğer Sb katkılı bileşiklerde sönüm katsayısı artmaktadır (Şekil 4.60).



Şekil 4.60. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu



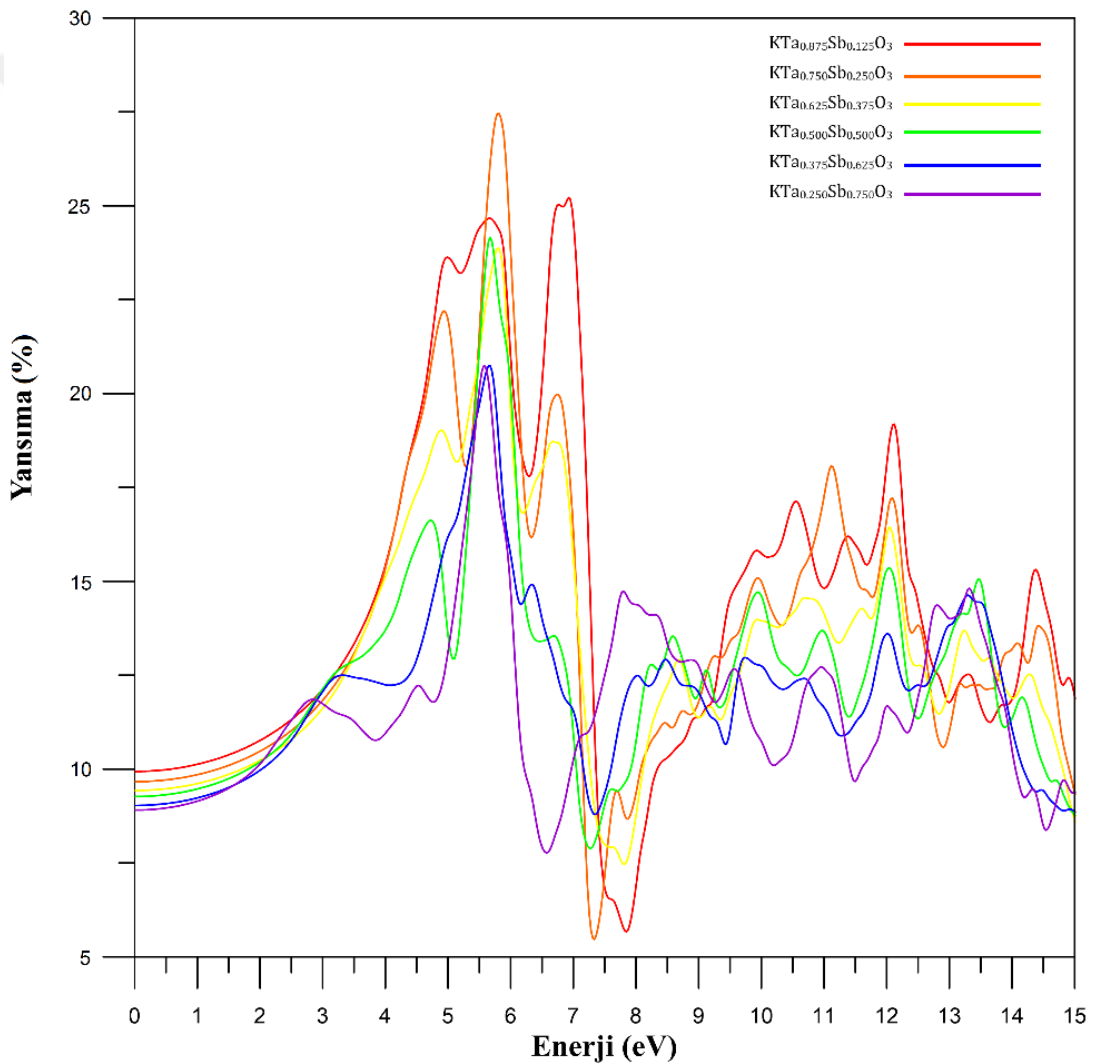
Şekil 4.61. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için sönüm katsayısı spektrumu

Çizelge 4.8. En yüksek sönüm katsayısı ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

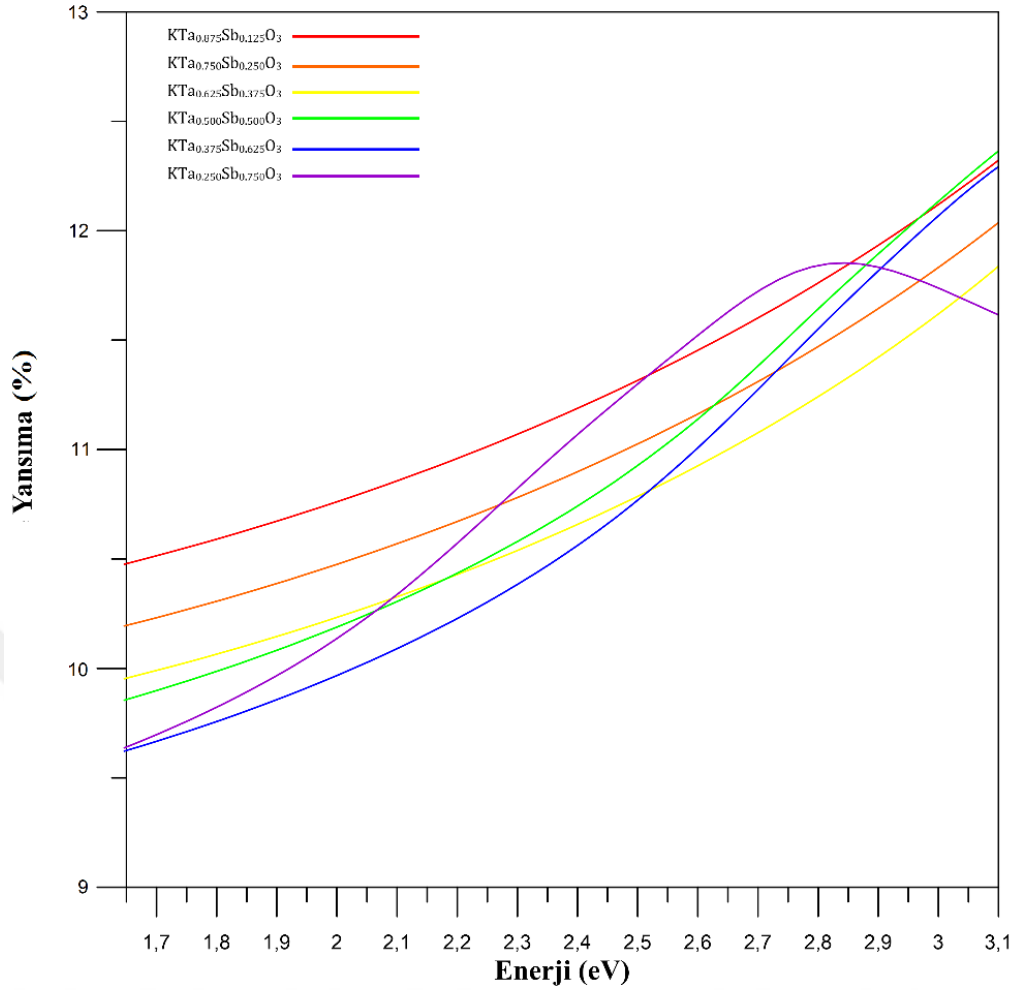
Bileşik	Sönüm katsayısı	Enerji değeri
$\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$	1,33	6,73 eV
$\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$	1,40	5,86 eV
$\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$	1,20	5,86 eV
$\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$	1,14	5,76 eV
$\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$	0,99	5,73 eV
$\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$	0,98	5,67 eV

Sb katkılı bileşikler için elde edilen yansımaya spektrumu Şekil 4.62 ve Şekil 4.63 de gösterilmektedir. $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$ bileşikleri için yansımaya başlangıç değerleri %10 dur. $\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşikleri için ise yansımaya başlangıç değerleri %9 dur. Kızıl

altı bölgede yansıtma değerleri hemen hemen sabit kalmaktadır. Kızılötesi bölgede yansıtma oranı hemen hemen sabit kalmıştır (%10). Görünür bölgede ise $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiği hariç Sb katkılı diğer bileşiklerin yansıtma oranında artış görülmektedir. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiği ise 2,80 eV civarında yansıtma oranında düşüş gözlenmektedir. Yansıtma oranı %11'den %13'e küçük bir artış sergilemektedir. Sb katkılı bileşikler 0-15 eV aralığında en yüksek yansıtma oranına 5 eV ile 8 eV arasında ulaşmaktadır. Ayrıca yansıtma spektrumu soğurma spektrumu ile benzerlik göstermektedir. Soğurma spektrumunda oluşan maksimum pikler yansıtma spektrumunda da oluşmaktadır.

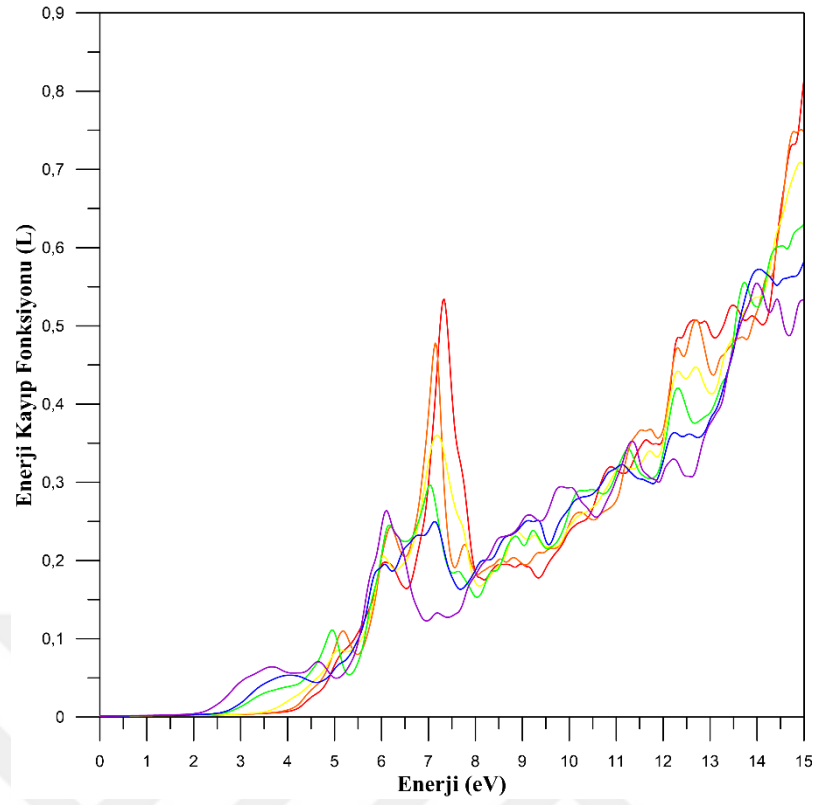


Şekil 4.62. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan yansıtma spektrumu

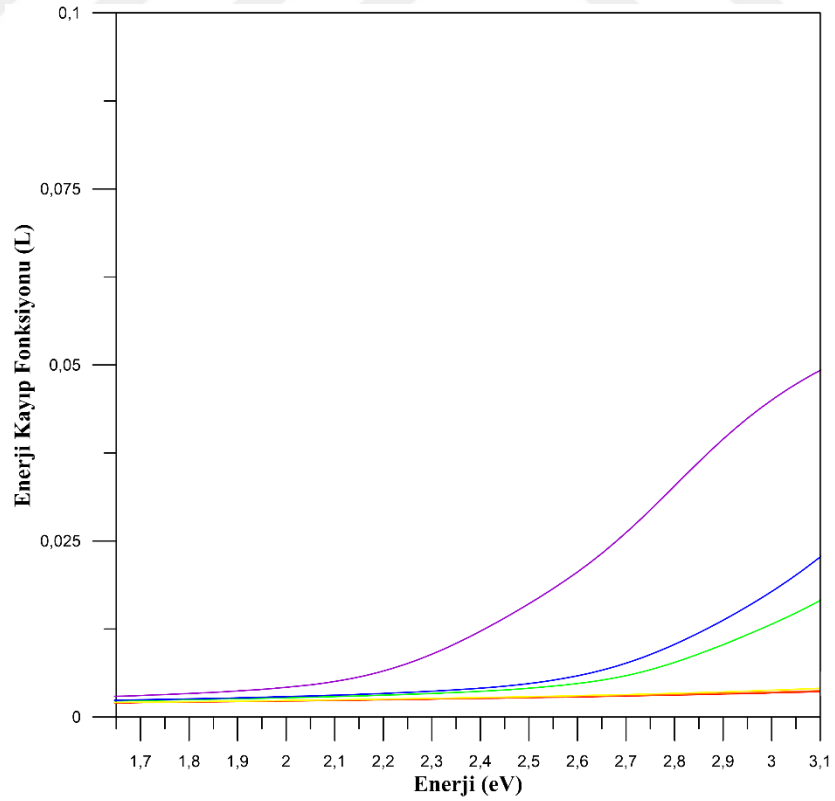


Şekil 4.63. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için yansıma spektrumu

Bir elektronun kristal yapı içerisinde hareket ederken kaybettiği enerji miktarı enerji kayıp fonksiyonu ile ifade edilir. Katkısız $KTaO_3$ bileşiği için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu Şekil 4.64 ve Şekil 4.65 de gösterilmektedir. Kızıl altı bölgede enerji kayıp fonksiyonu neredeyse sıfıra eşittir. Görünür bölgede ise $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$ ve $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$ bileşikleri için enerji kayıp fonksiyonları hemen hemen sabittir ve birbirine çok yakındır. $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşikleri için ise enerji kayıp fonksiyonu görünür bölge içerisinde artış sergilemektedir. Kayıp fonksiyonu iletkenlik bandının en üst yörüngesindeki bir elektronun valans bandına geçerken kaybettiği enerjiyi ifade eder. Ayrıca enerji kayıp spektrumundaki keskin maksimumlar valans elektronlarının kolektif titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.



Şekil 4.64. Sb katkılı bileşikler için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu

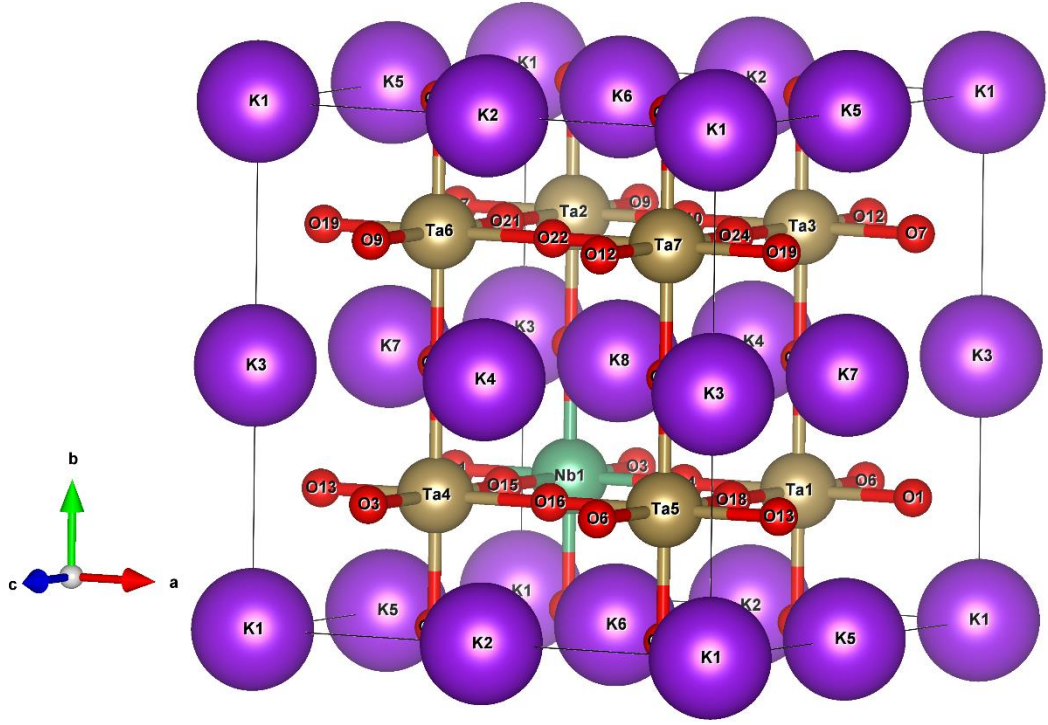


Şekil 4.65. Sb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu

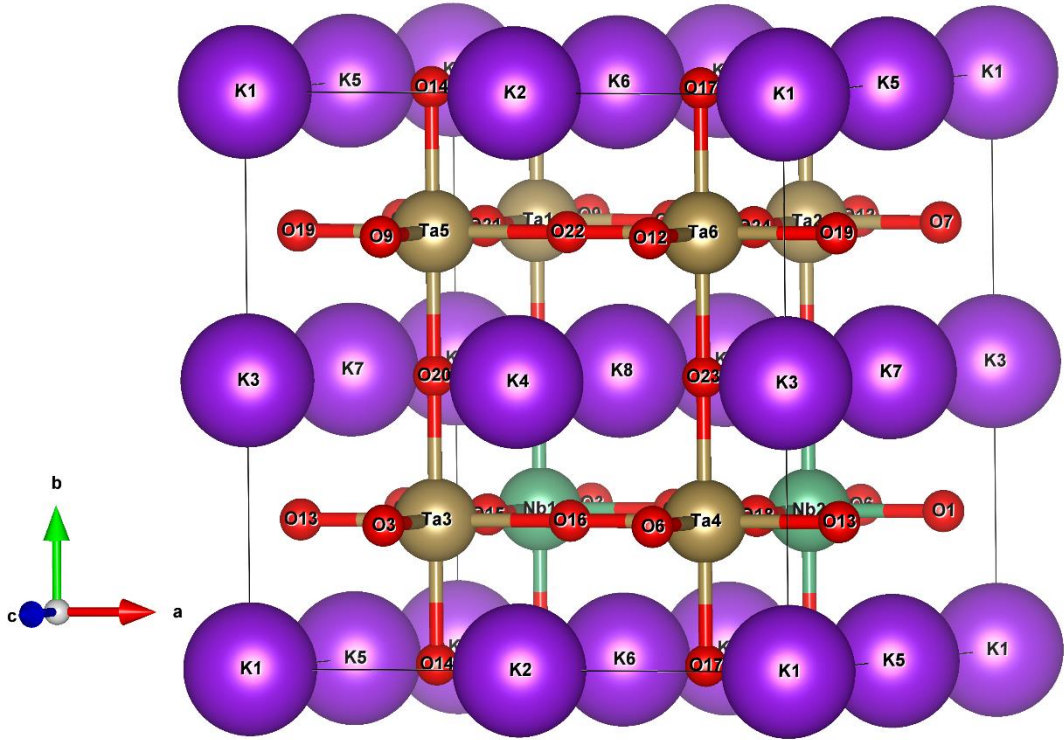
4.4. Nb Katkılı KTaO₃ Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri

4.4.1. Nb katkılı KTaO₃ bileşiklerin yapısal özellikleri

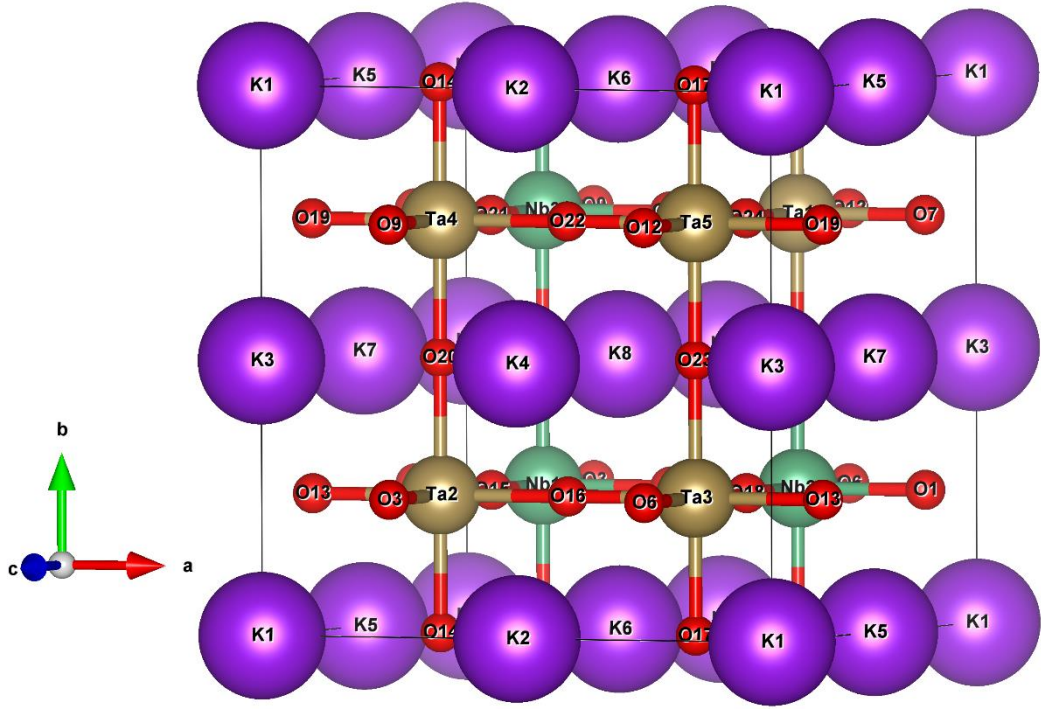
Nb katkılı KTaO₃ bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. Kristal yapıların oluşturulmasında KTa_{1-x}Nb_xO₃ (x=0,125, 0,250, 0,375, 0,500, 0,625 ve 0,750) kimyasal formülü kullanıldı. Kristal yapıyı oluşturmak için 40-atomlu 2X2X2 süper hücre (Şekil 4.66-Şekil 4.71) kullanıldı. Simetri grubu ise basit kübik olan P1 seçildi. Nb katkılı KTaO₃ bileşiklerinin yapısal özelliklerinin incelenmesinde ilk olarak her materyalin örgü sabitlerinin tayini yapıldı. Bu hesaplamalar yapılırken denge durumu civarında farklı örgü sabitleri için enerji değerleri LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak hesaplandı ve grafiğe aktarıldı (Şekil 4.72 ve Şekil 4.83). Grafiklerin her birinde belli bir hacim değeri için enerjinin minimum olduğu görüldü. Enerjinin minimum olduğu değere karşılık gelen hacim değeri kullanılarak örgü sabiti hesaplandı. Murnaghan denklemleri (Denklem 4.1 ve Denklem 4.2) kullanılarak, örgü sabiti parametresine ek olarak bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri hesaplandı. LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen Nb katkılı KTaO₃ bileşiklerinin örgü sabiti, bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri Çizelge 4.9 ve Çizelge 4.10' da verilmiştir. Her iki potansiyel içinde Nb katkısı arttıkça taban durum enerjileri ve bulk modülünün basınca göre türevinin arttığı tespit edilmiştir. Bulk modülü ve örgü sabiti ise Nb katkısı ile azalmıştır. Bu azalışı Nb atomunun yarıçapının neden olduğu düşünülmektedir. Çünkü Nb atomunun yarıçapı 1,41 Å iken Ta atomunun yarıçapı 1,47 Å dur.



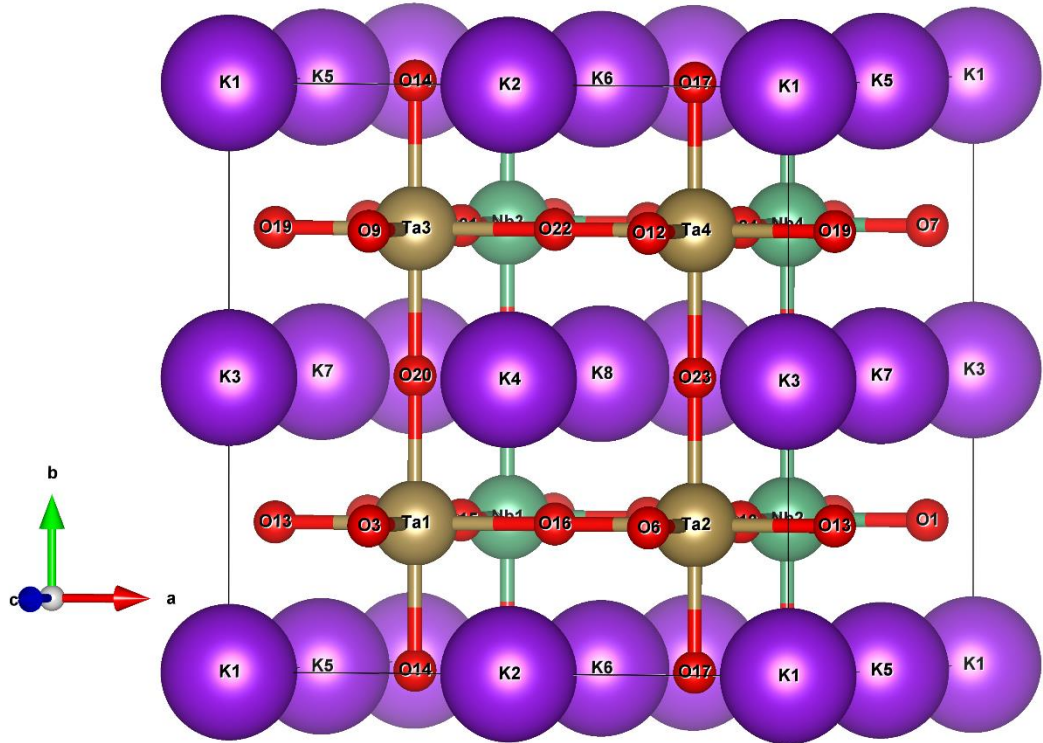
Şekil 4.66. $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



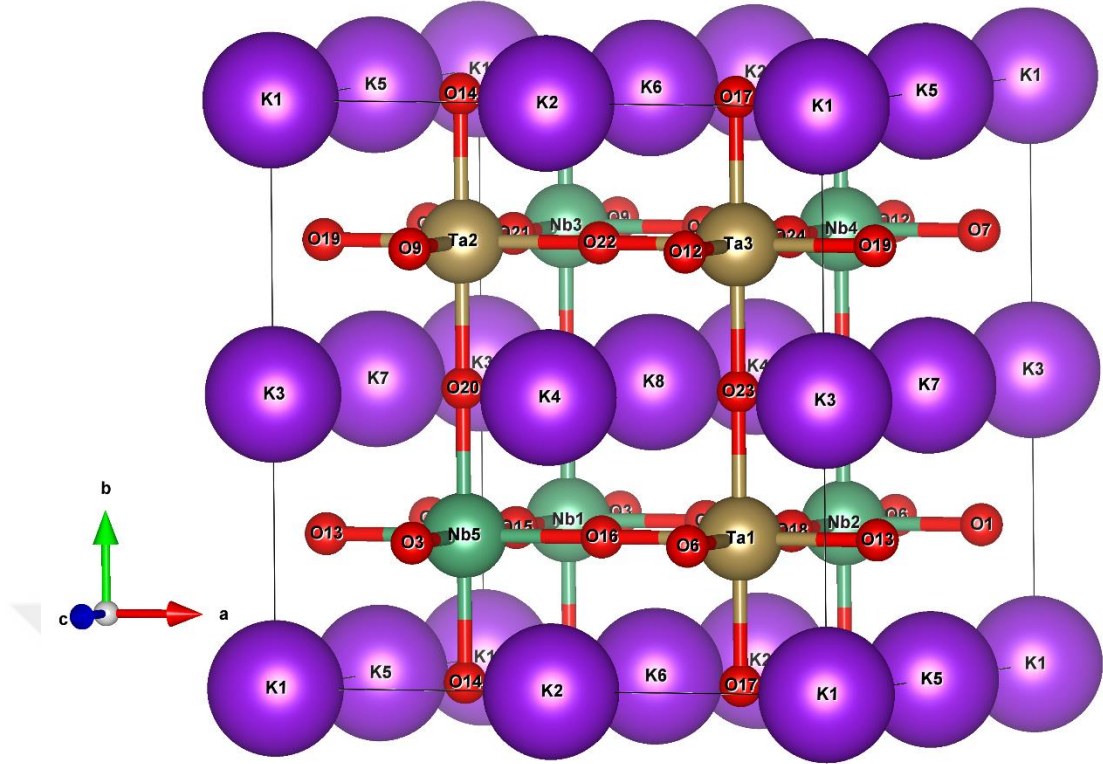
Şekil 4.67. $\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



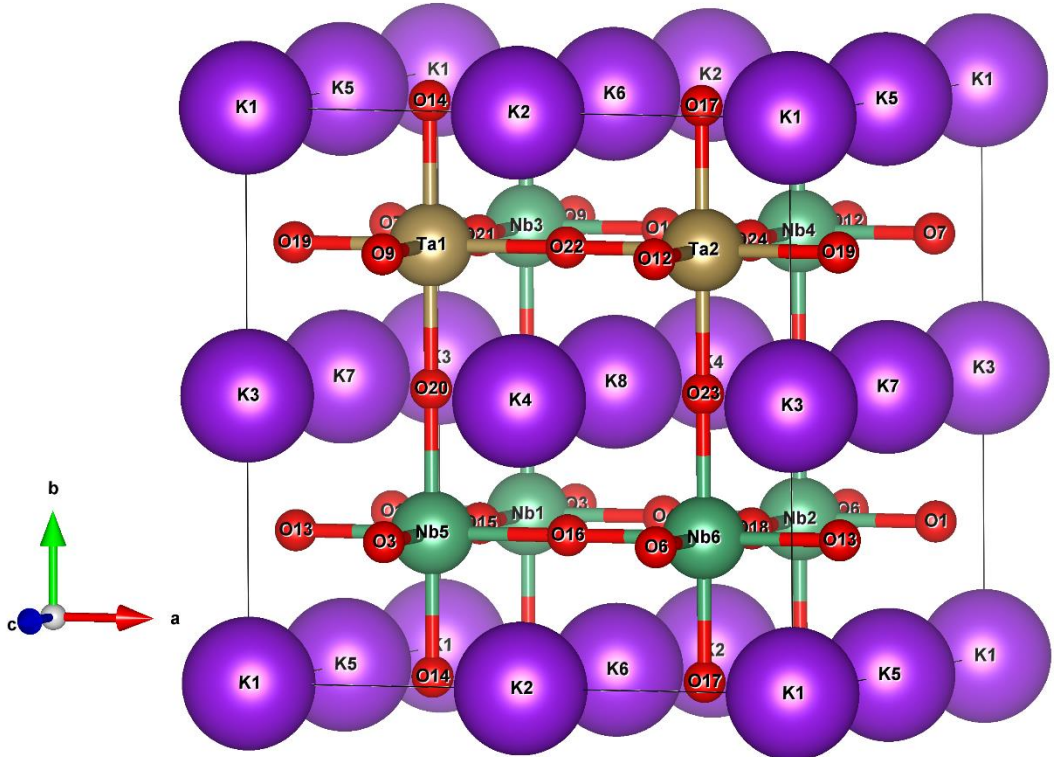
Şekil 4.68. $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



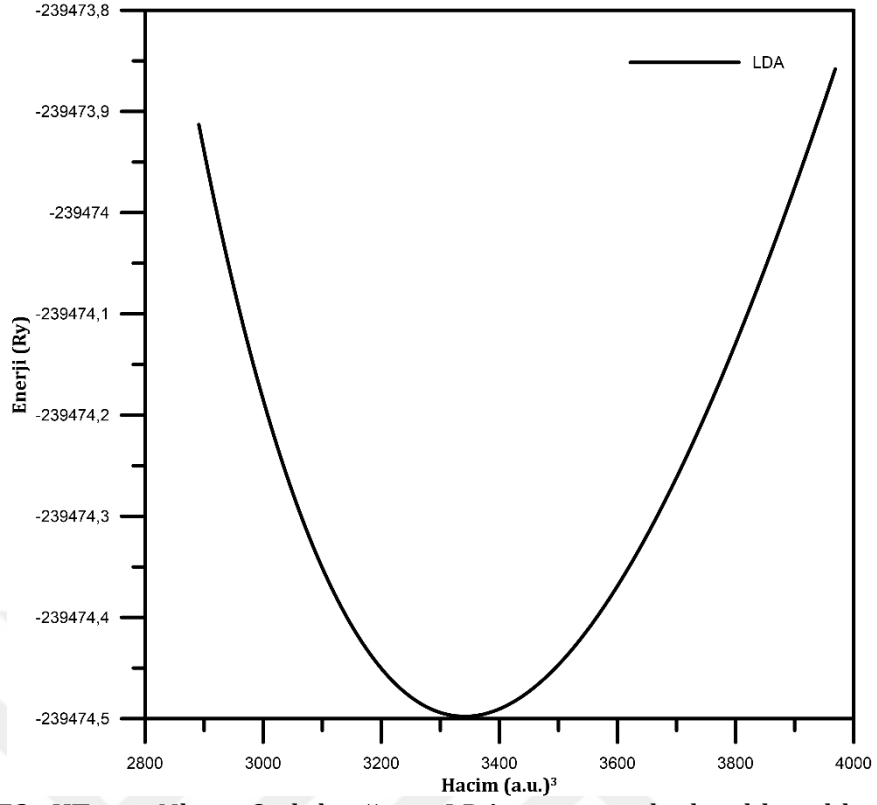
Şekil 4.69. $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



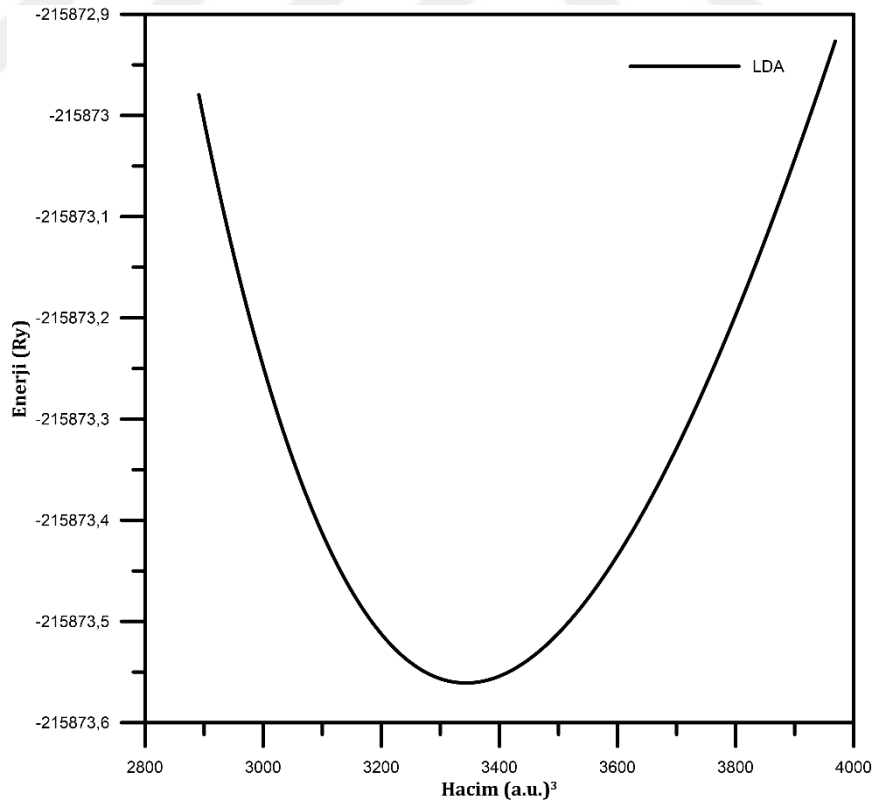
Şekil 4.70. $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



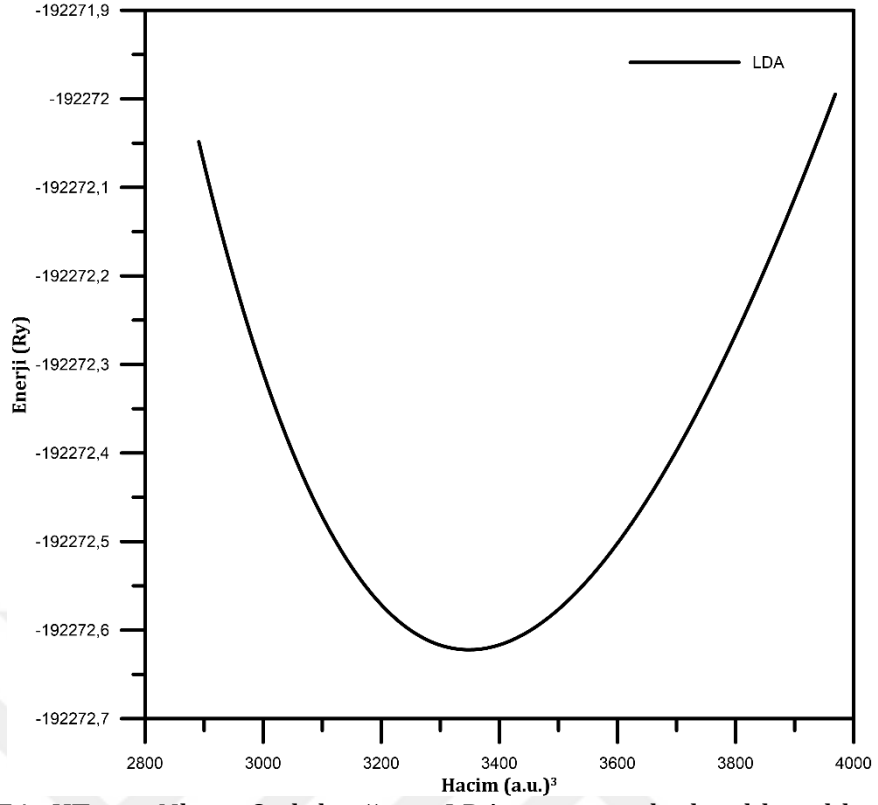
Şekil 4.71. $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



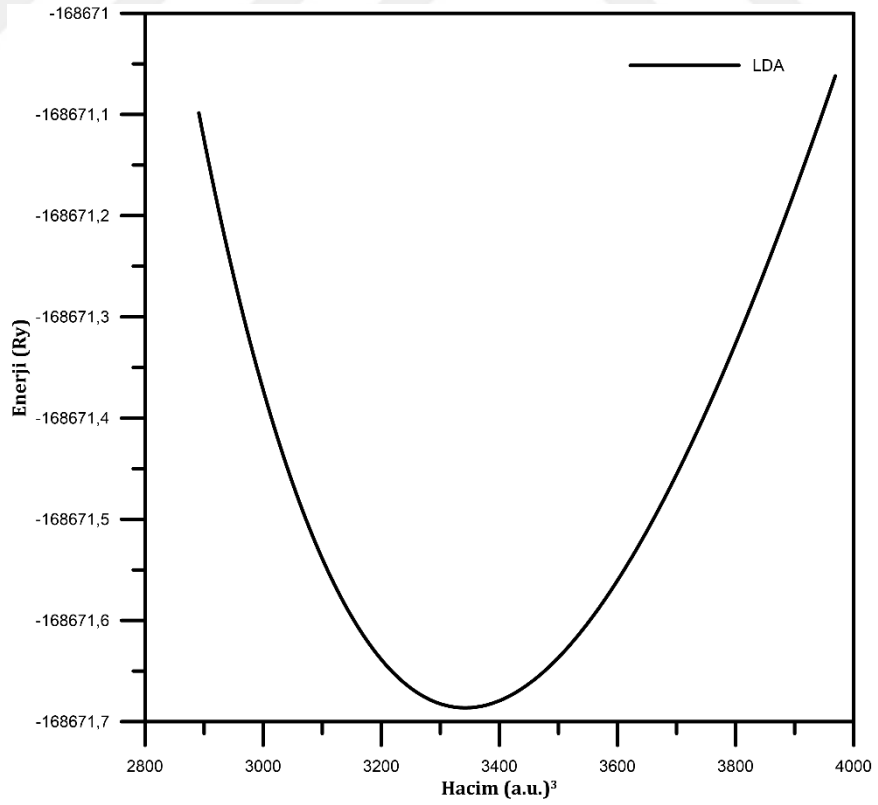
Şekil 4.72. $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



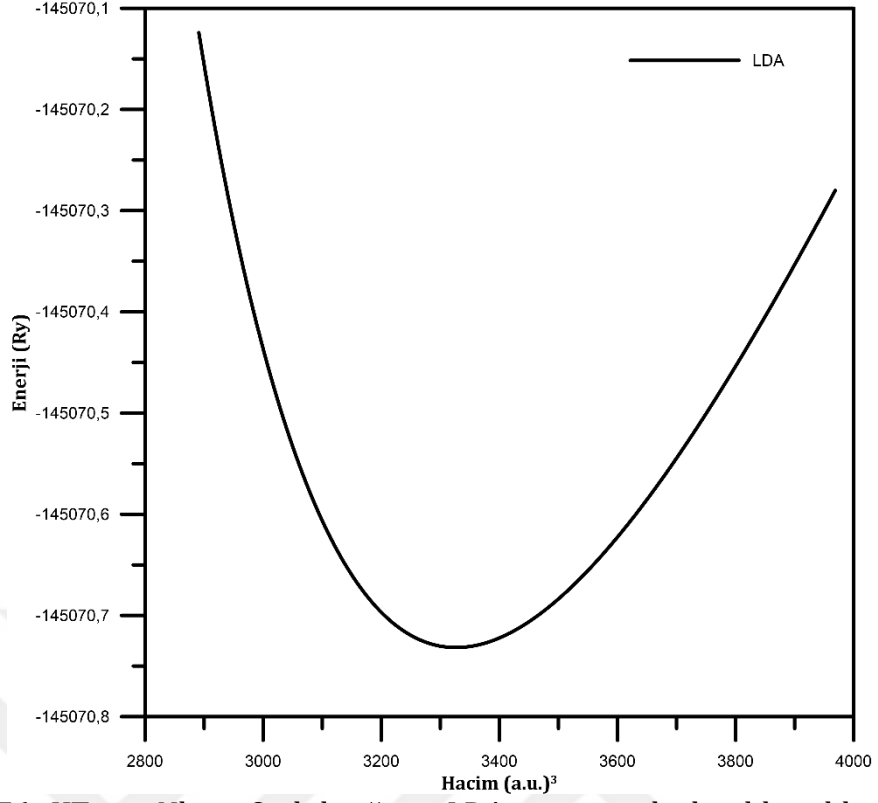
Şekil 4.73. $\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



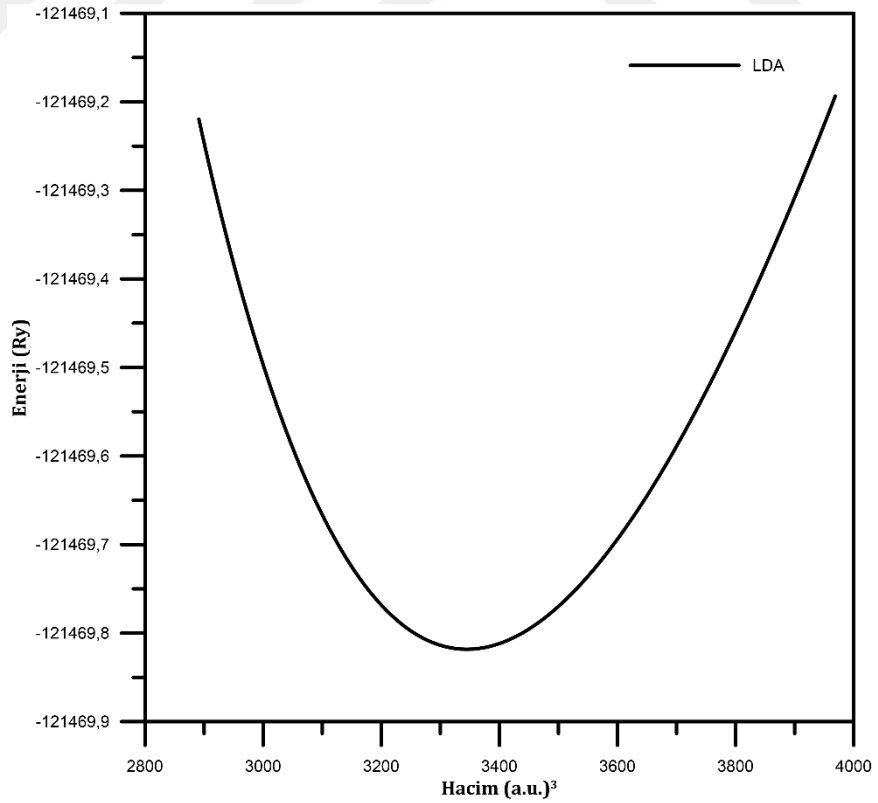
Şekil 4.74. $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



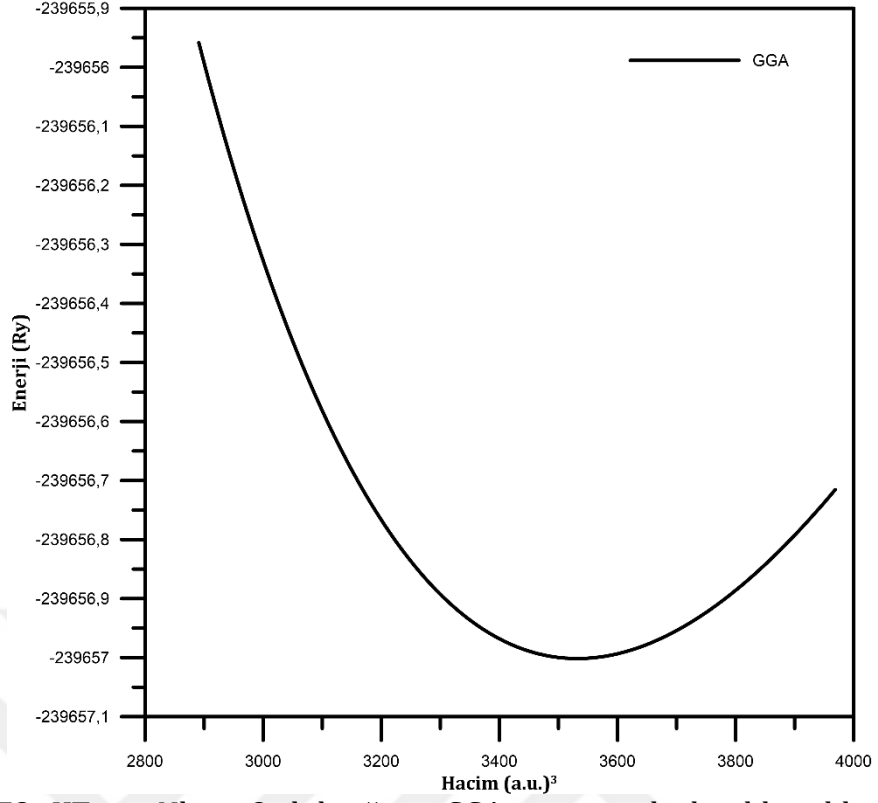
Şekil 4.75. $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



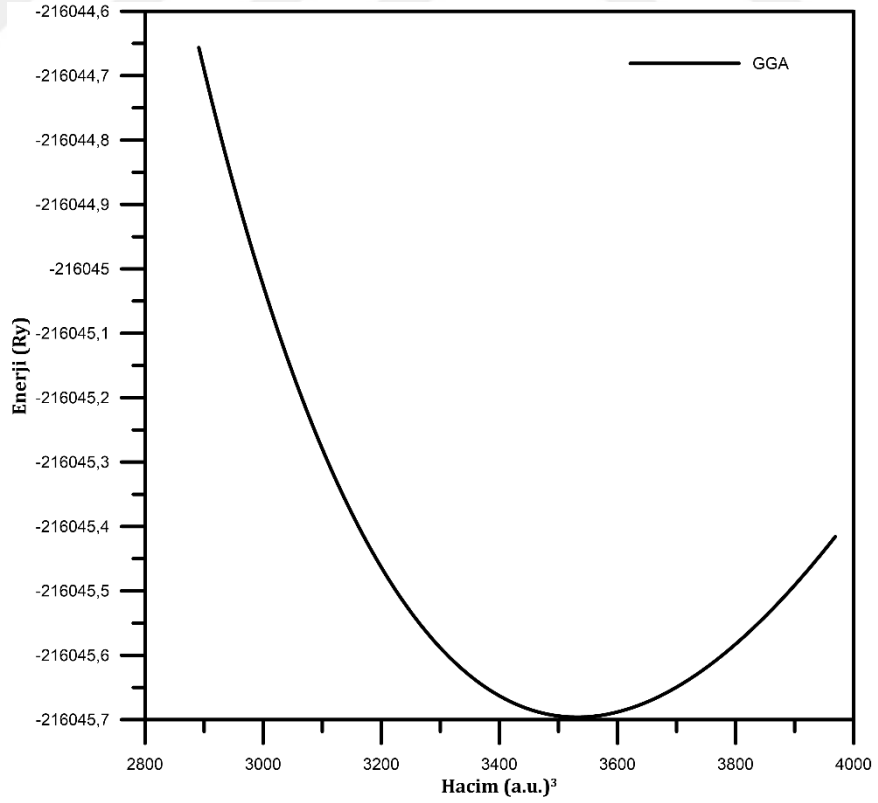
Şekil 4.76. $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



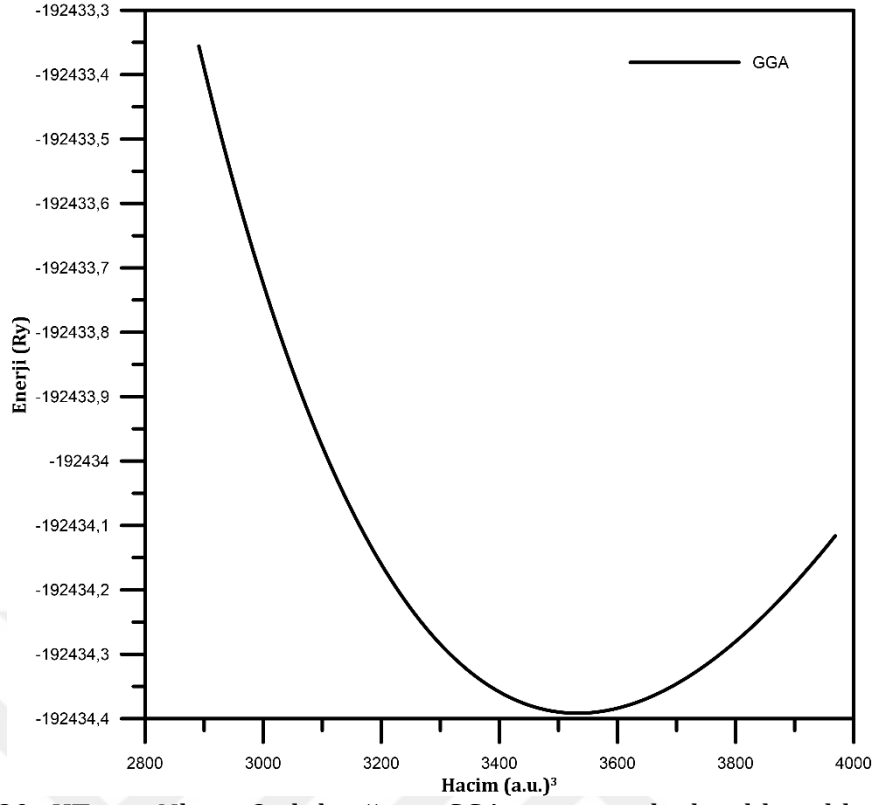
Şekil 4.77. $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



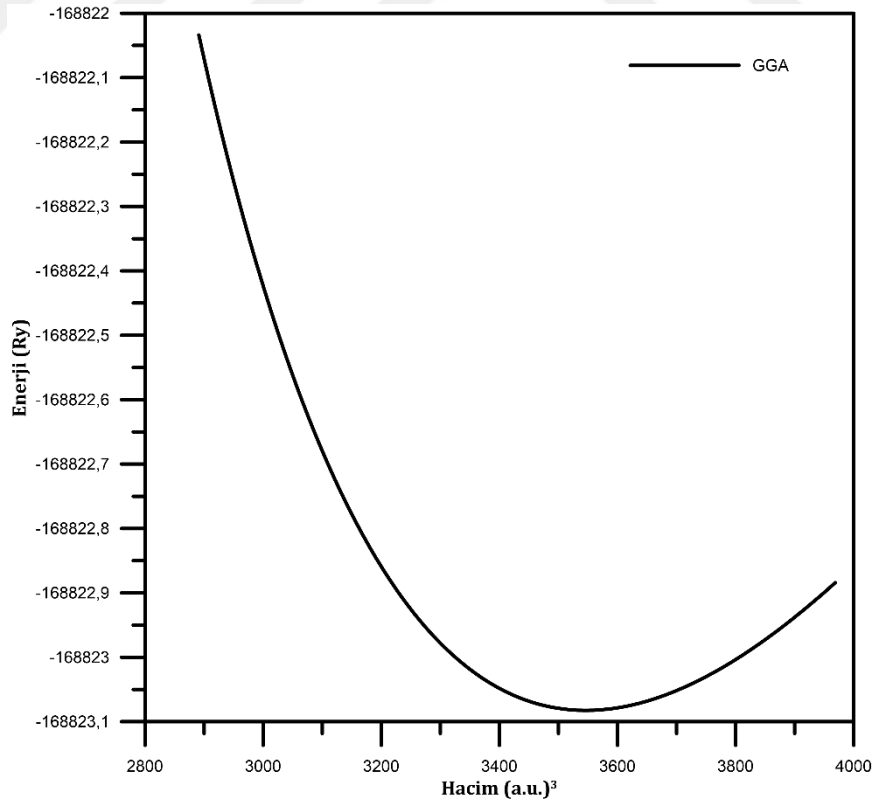
Şekil 4.78. KTa_{0.875}Nb_{0.125}O₃ bileşiminin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



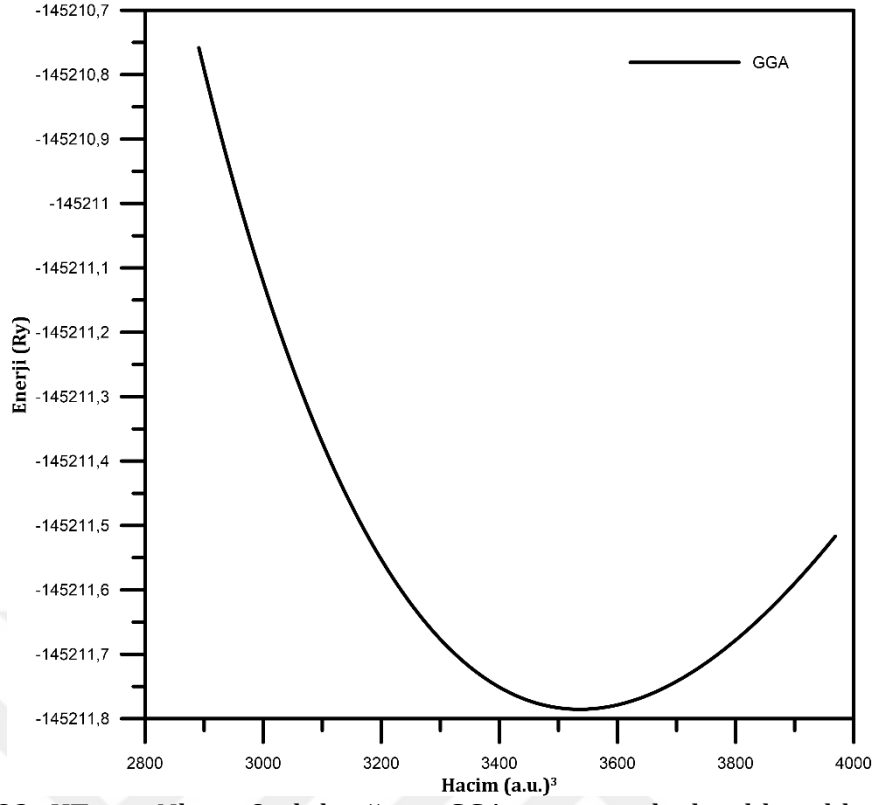
Şekil 4.79. KTa_{0.750}Nb_{0.250}O₃ bileşiminin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



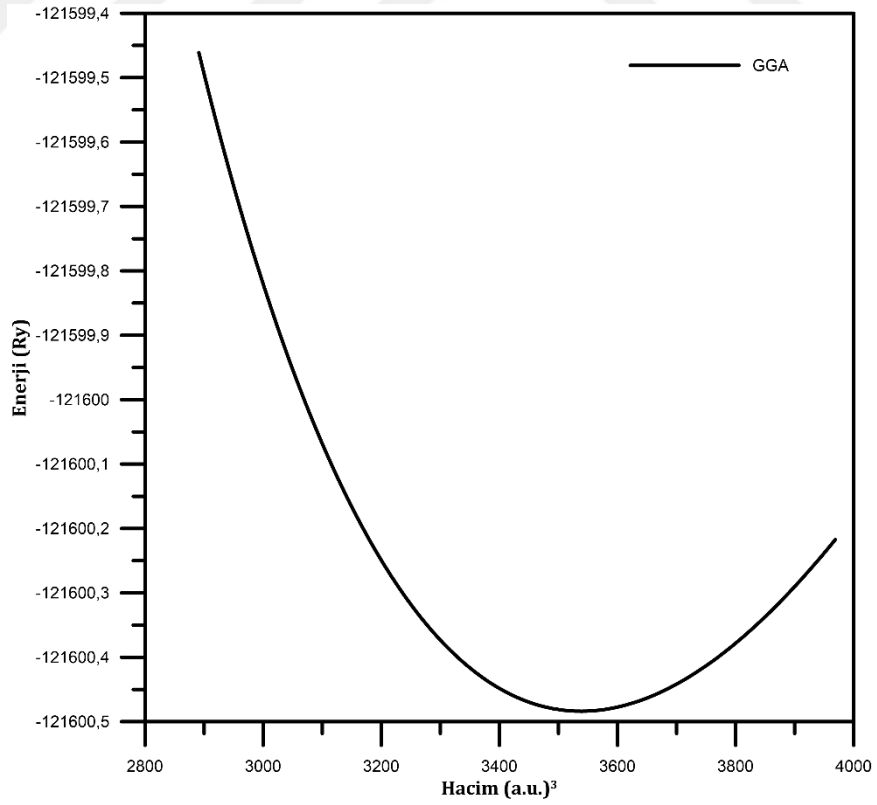
Şekil 4.80. $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiminin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



Şekil 4.81. $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiminin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



Şekil 4.82. $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



Şekil 4.83. $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri

Çizelge 4.9. Nb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (Å), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).

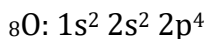
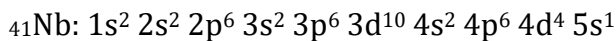
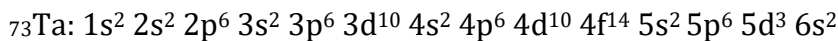
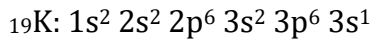
Bileşik	Örgü Parametresi (Å)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$	7,9113	217,5687	4,4003	-239474,50
$\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$	7,9132	215,4634	4,2502	-215873,56
$\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$	7,9172	212,0061	3,8608	-192272,62
$\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$	7,9121	215,3834	4,6112	-168671,69
$\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$	7,8995	196,661	9,0877	-145070,74
$\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$	7,9141	216,9958	4,6119	-121469,82

Çizelge 4.10. Nb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (Å), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).

Bileşik	Örgü Parametresi (Å)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$	8,0583	188,4795	4,0708	-239657,00
$\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$	8,0582	185,7070	4,2362	-216045,70
$\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$	8,0587	183,5187	4,3261	-192434,39
$\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$	8,0675	150,4745	6,9504	-168823,08
$\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$	8,0614	181,1780	4,2223	-145211,79
$\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$	8,0632	180,7478	4,0791	-121600,48

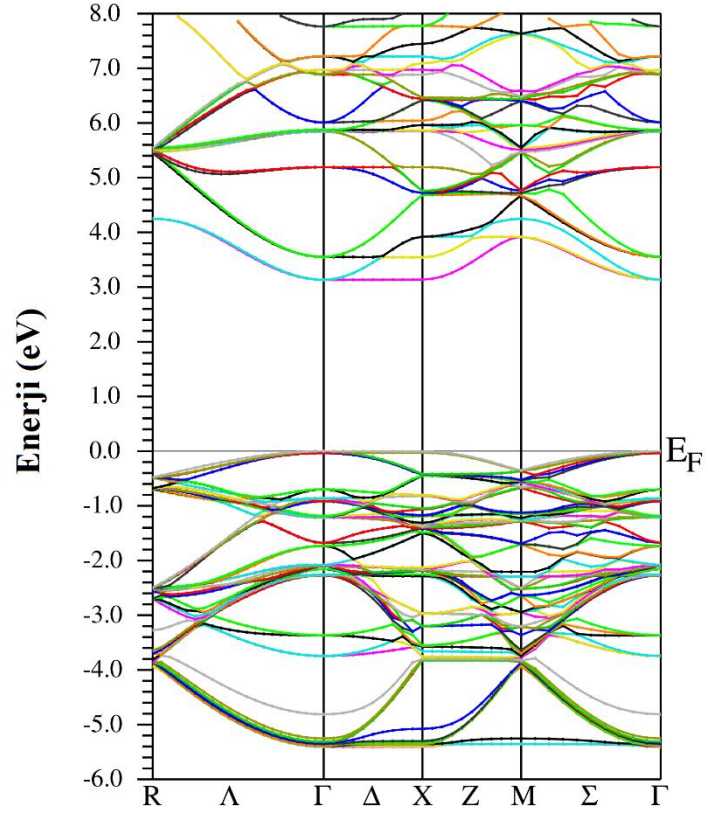
4.4.2. Nb katkılı KTaO_3 bileşiklerin elektronik özellikleri

Nb katkılı KTaO_3 bileşiklerini oluşturan elementlerin elektronik dizilimleri:

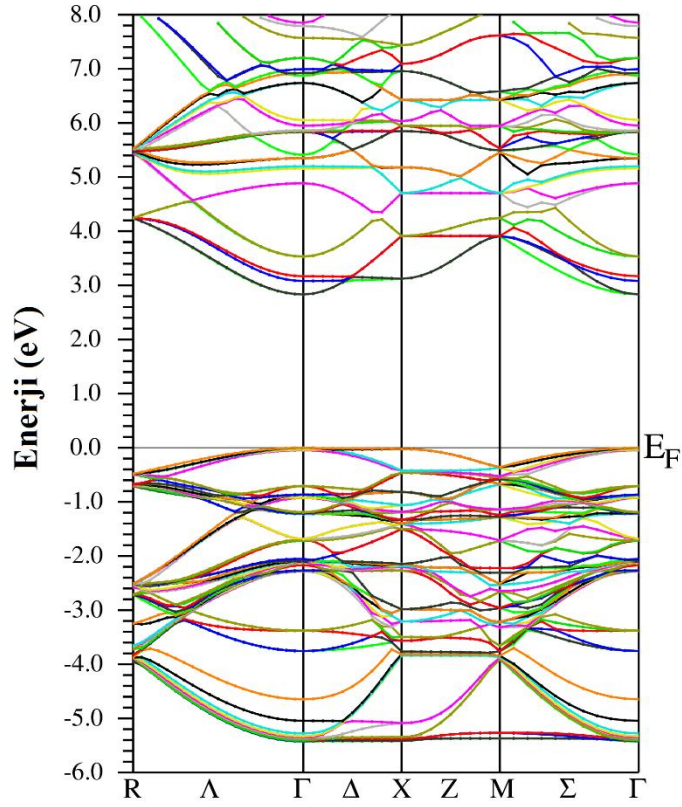


olarak alınmıştır. Nb katkılı bileşiklerde, Sb katkılı bileşiklerde olduğu gibi, Fermi enerji düzeyi sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir. Hesaplamalar genelleştirilmiş

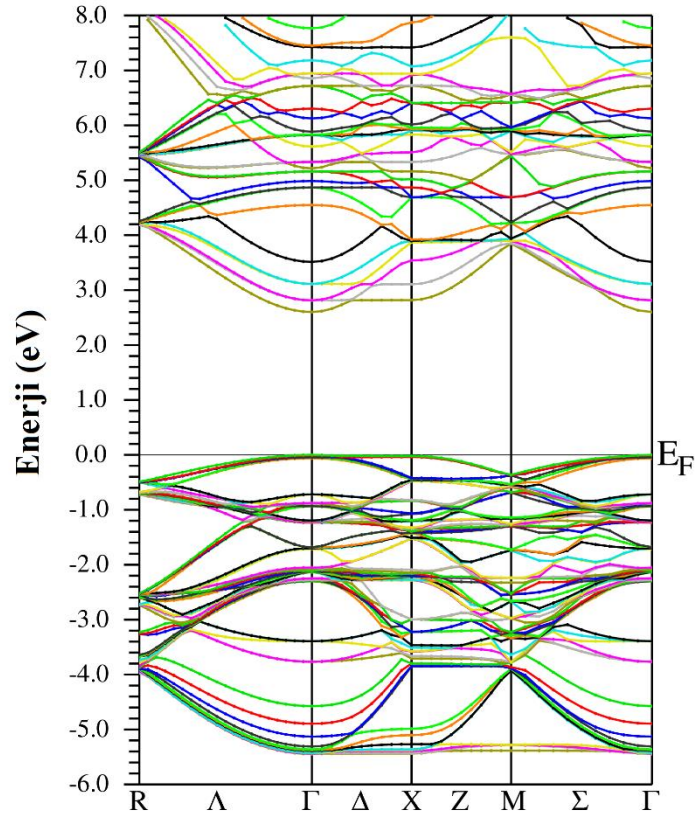
gradyant yaklaşımı (GGA), Perdew vd. (1996), kullanıldı ve yasak band enerji hesaplamalarını iyileştirilmek için düzeltilmiş Tran-Blaha (TB-mBJ) (Tran ve Blaha 2009), değişim potansiyeli kullanıldı. Nb katkılı KTaO_3 bileşiklerinin elektronik özelliklerini incelemek için bant enerjileri ve durum yoğunlukları hesaplandı. Şekil 4.84-Şekil 4.89 da görüldüğü gibi Nb katkılı KTaO_3 bileşikleri yarıiletken bir malzemedir. Ayrıca band grafiklerinde (Şekil 4.83-Şekil 4.88) iletkenlik bandının minimum ve valans bandını maksimum noktası Γ dir. $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin yasak band enerjisi 3,15 eV olarak hesaplandı. Bu enerji elektromanyetik spektrumda mor ötesi bölgeye karşılık gelmektedir. Dalga boyu ise 393,65 nm dir. $\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiklerinin yasak band enerjisi ise sırasıyla 2,83 eV, 2,60 eV, 2,39 eV, 2,40 eV ve 2,39 olarak hesaplandı. Yasak band grafikleri incelendiğinde $x=0,500$, $0,625$ ve $0,750$ değerleri için band enerjileri hemen hemen değişmemektedir. Yasak band enerjileri elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir. Dalga boyları ise sırasıyla 438,16 nm, 476,92 nm, 518,83 nm, 516,67 nm ve 518,83 nm dir. Band yapı ve toplam durum yoğunluğu eğrileri bu bileşiğin yarı iletken özellikte olduğunu gösterir. Valans band içerisinde O atomunun 2p-orbitalleri baskındır. Nb katkısı ile valans band içerisinde zayıf oranda Nb atomunun 4p-orbitallerinde etkisi vardır. Ayrıca valans band içerisinde Ta atomunun 5d-orbitalleri ve Nb atomunun 4d-orbitalleri ile O atomunun 2p-orbitalleri arasında hibritleşme gözlenmektedir (Şekil 4.90-Şekil 4.101). Bu hibritleşme Ta ve Nb ile O atomu arasında kovalent bağ olduğunu ortaya koymaktadır. İletkenlik bandında ise Ta atomunun 5d-orbitalleri ve Nb atomunun 4d-orbitalleri baskındır. Yasak band enerjisindeki azalma ise Nb atomlarının 4d-orbitallerinden kaynaklanmaktadır. Nb katkısı arttıkça 4d-orbitallerinin iletkenlik bandı içerisinde etkisinin arttığı kısmı durum yoğunluğu eğrilerinden (Şekil 4.90-Şekil 4.101) açıkça görülmektedir.



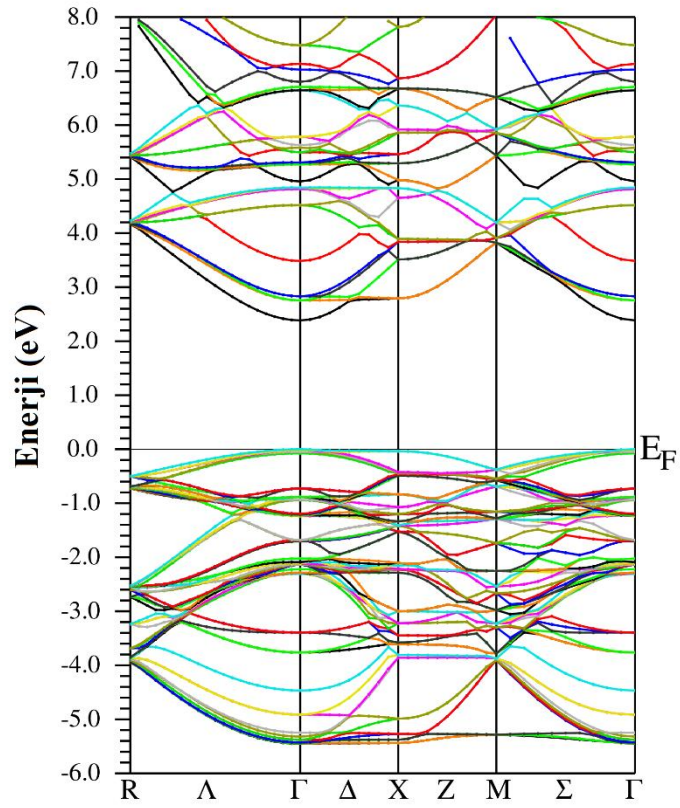
Şekil 4.84. $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$ band yapı grafiği



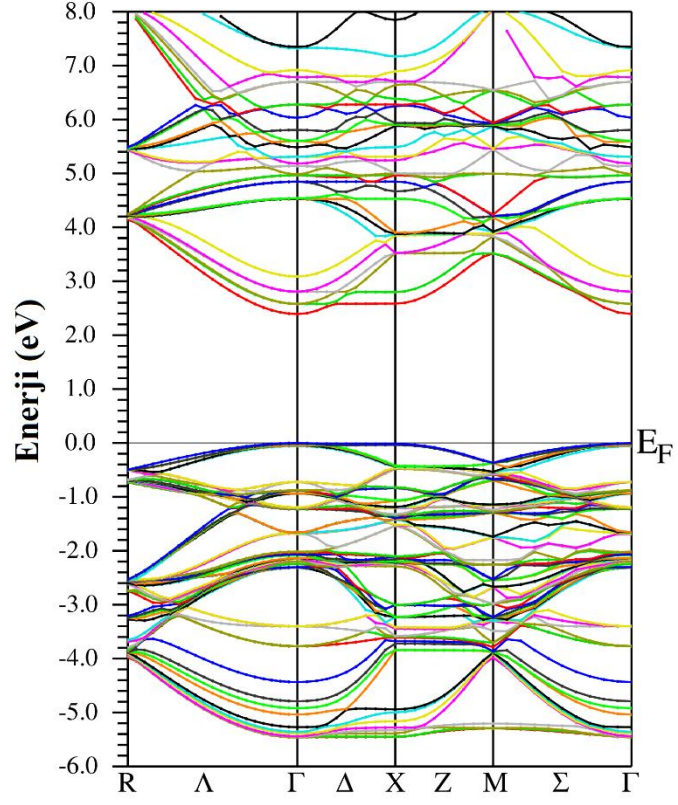
Şekil 4.85. $\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$ band yapı grafiği



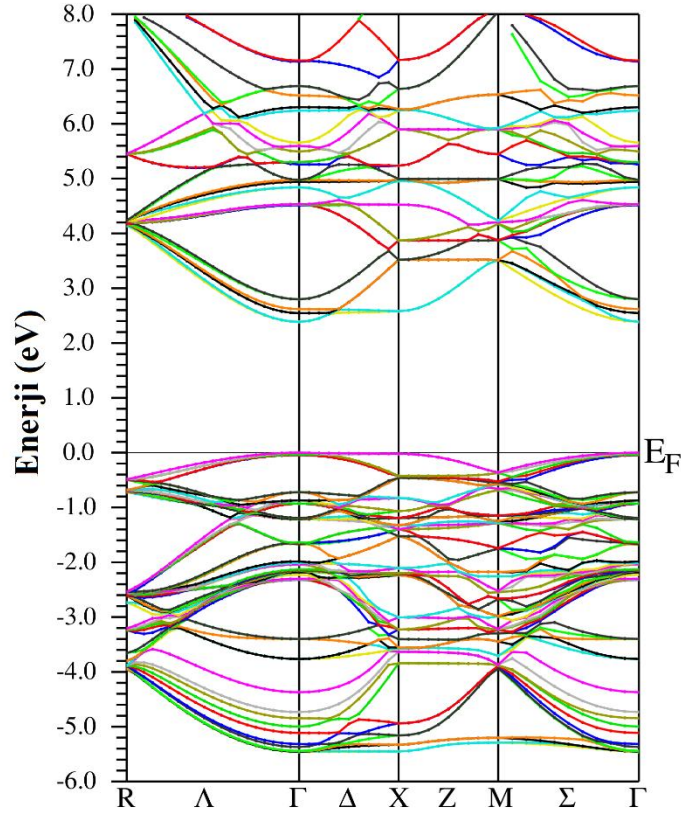
Şekil 4.86. $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$ band yapı grafiği



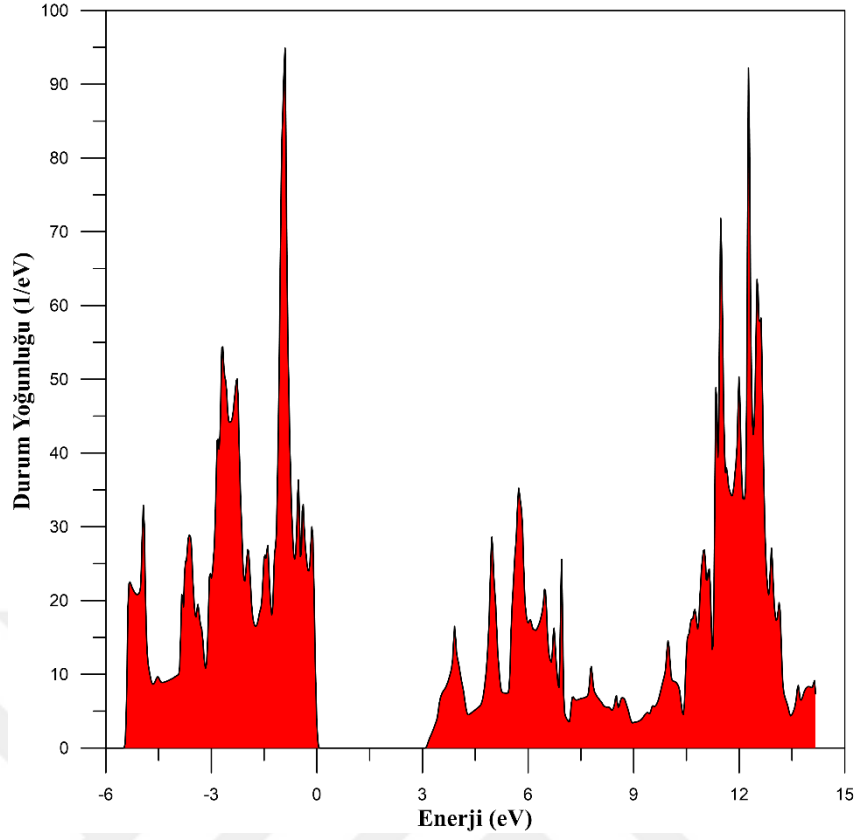
Şekil 4.87. $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$ band yapı grafiği



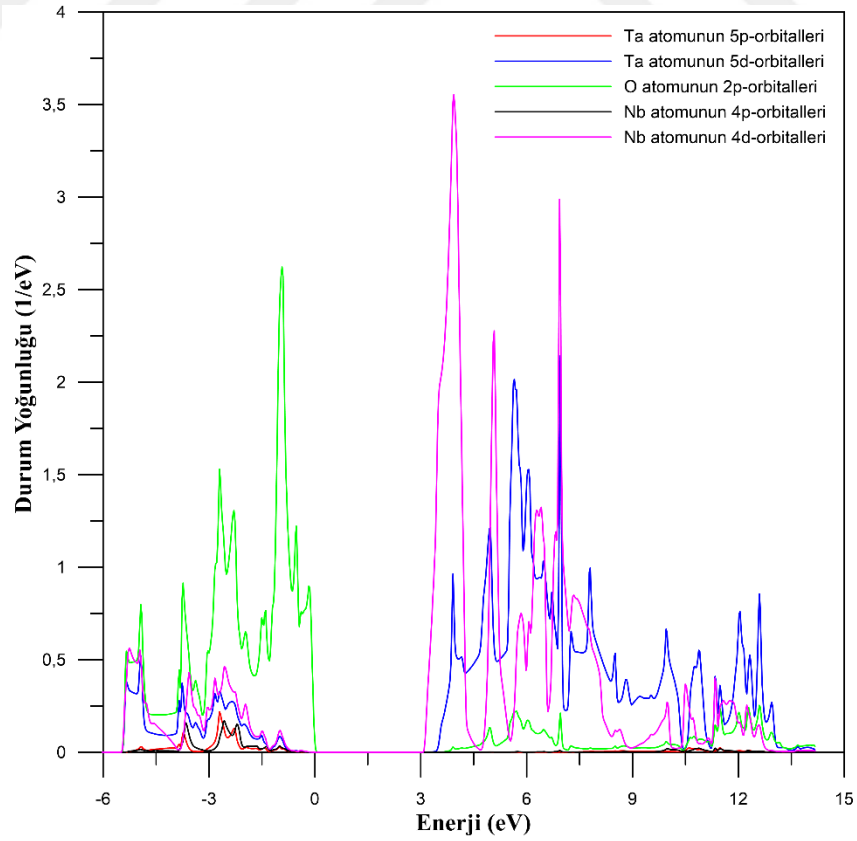
Şekil 4.88. $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ band yapı grafiği



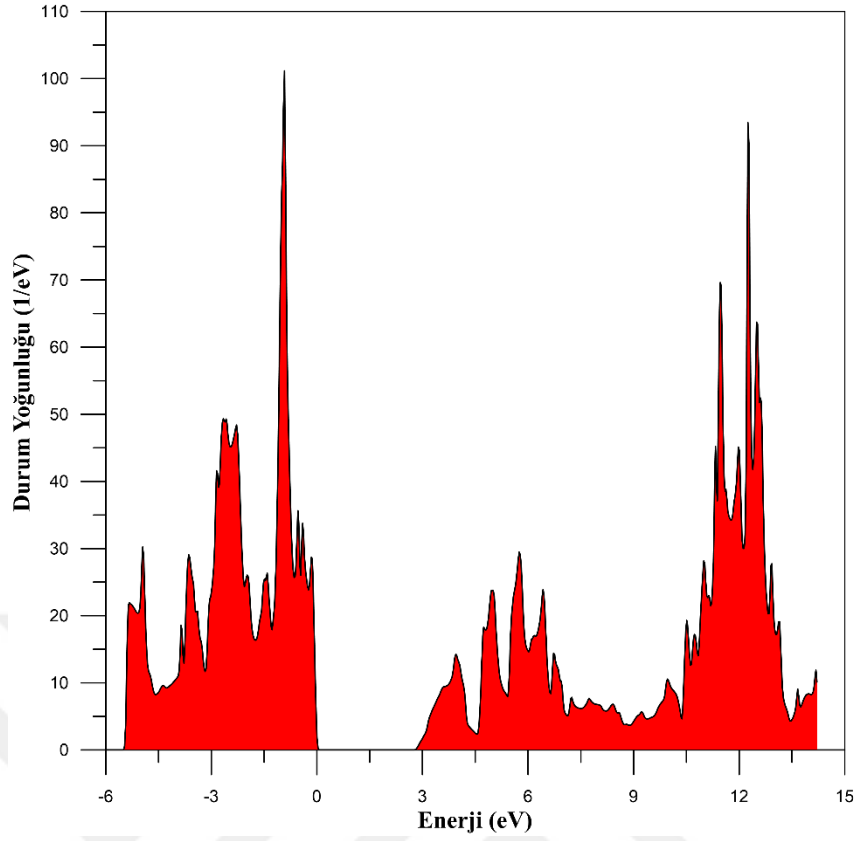
Şekil 4.89. $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ band yapı grafiği



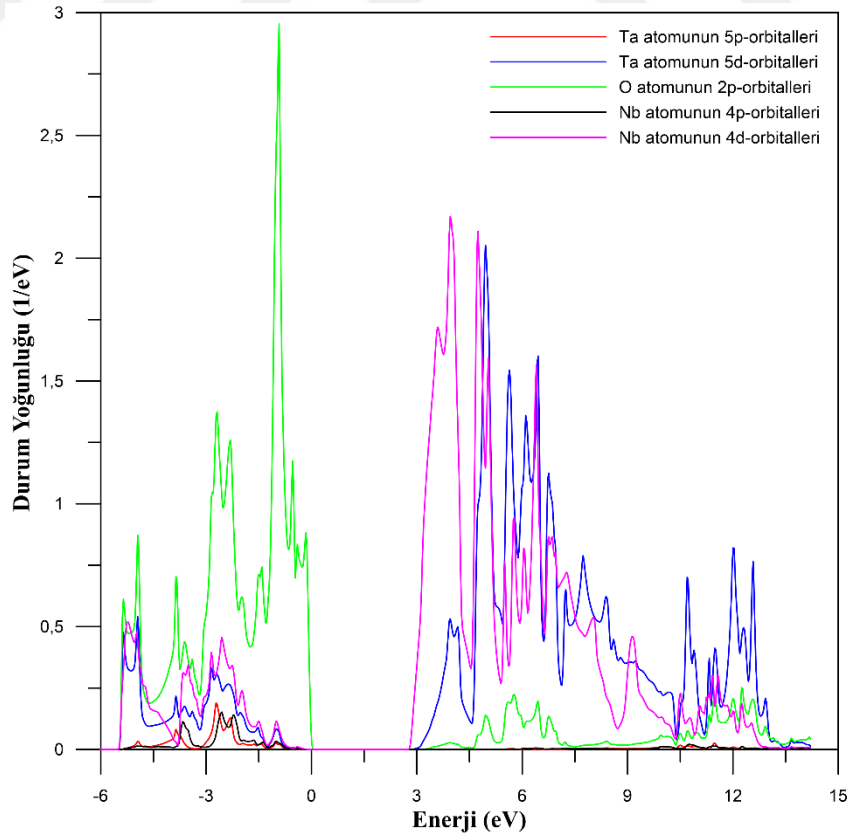
Şekil 4.90. $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



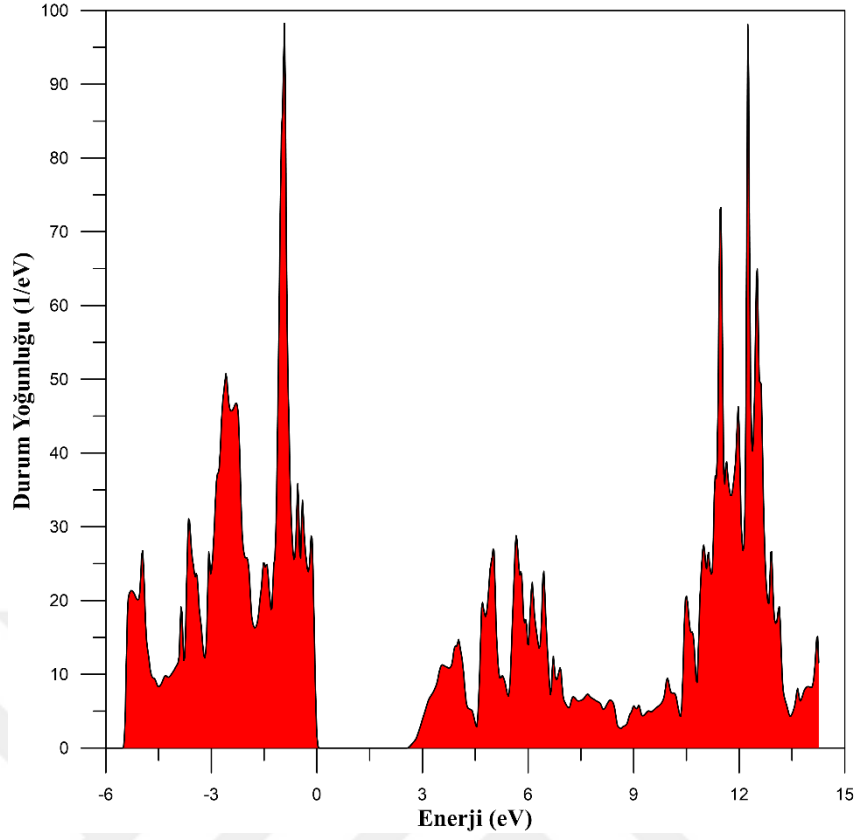
Şekil 4.91. $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



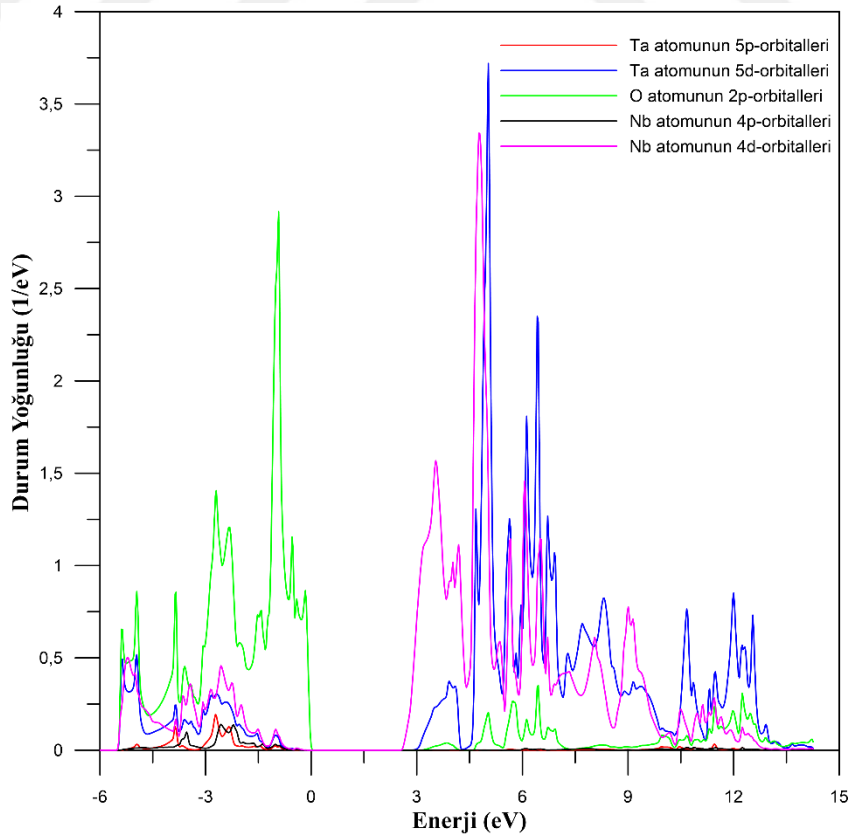
Şekil 4.92. $\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



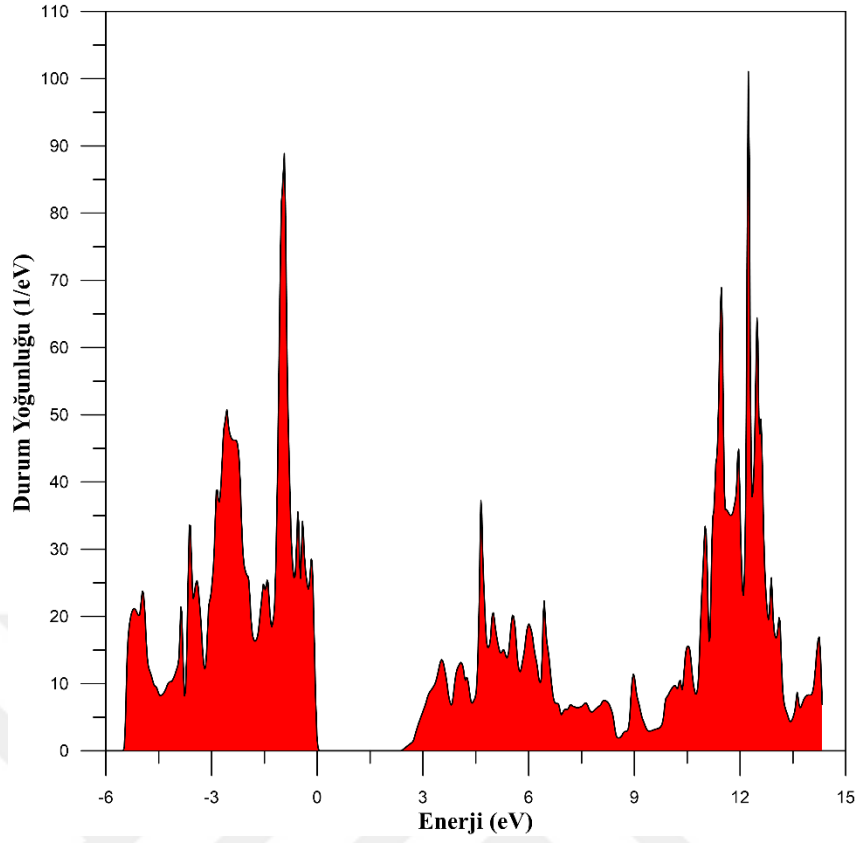
Şekil 4.93. $\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



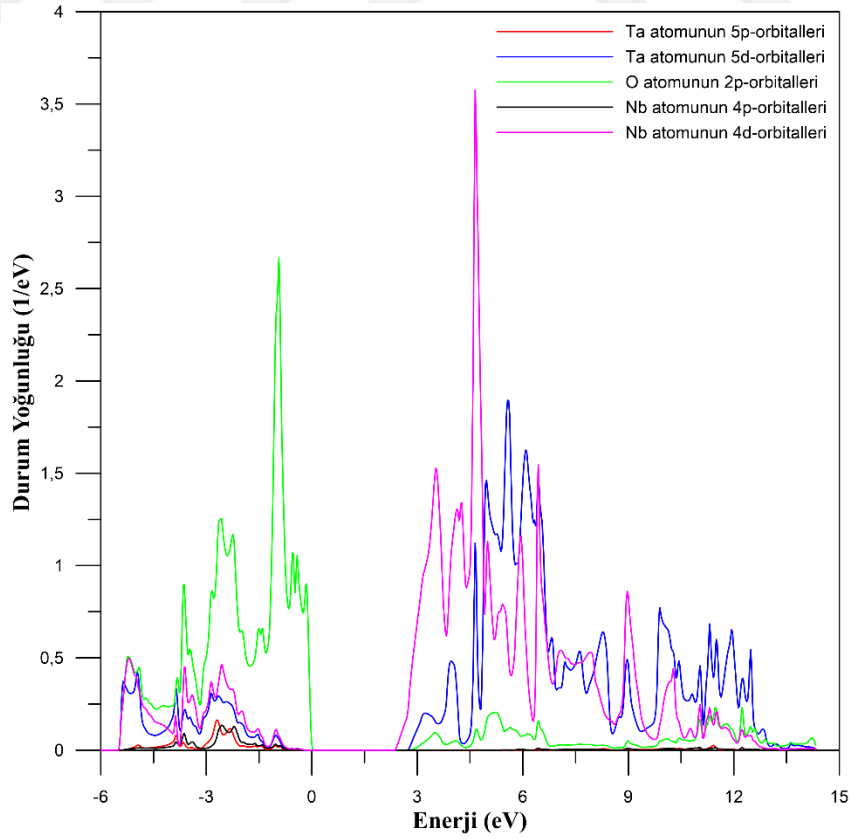
Şekil 4.94. $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



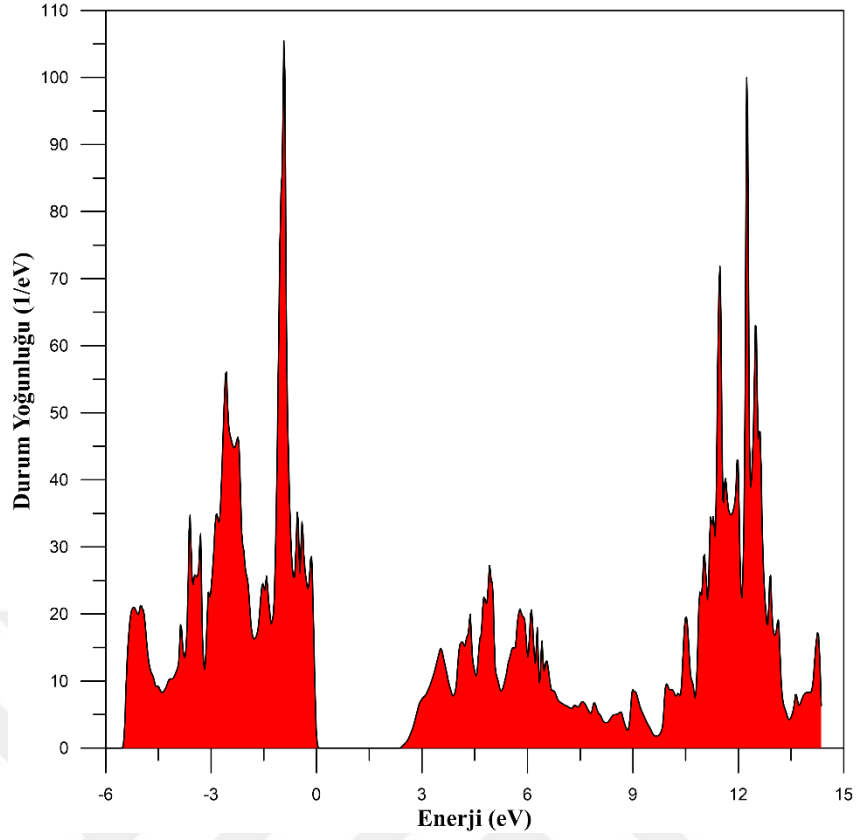
Şekil 4.95. $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



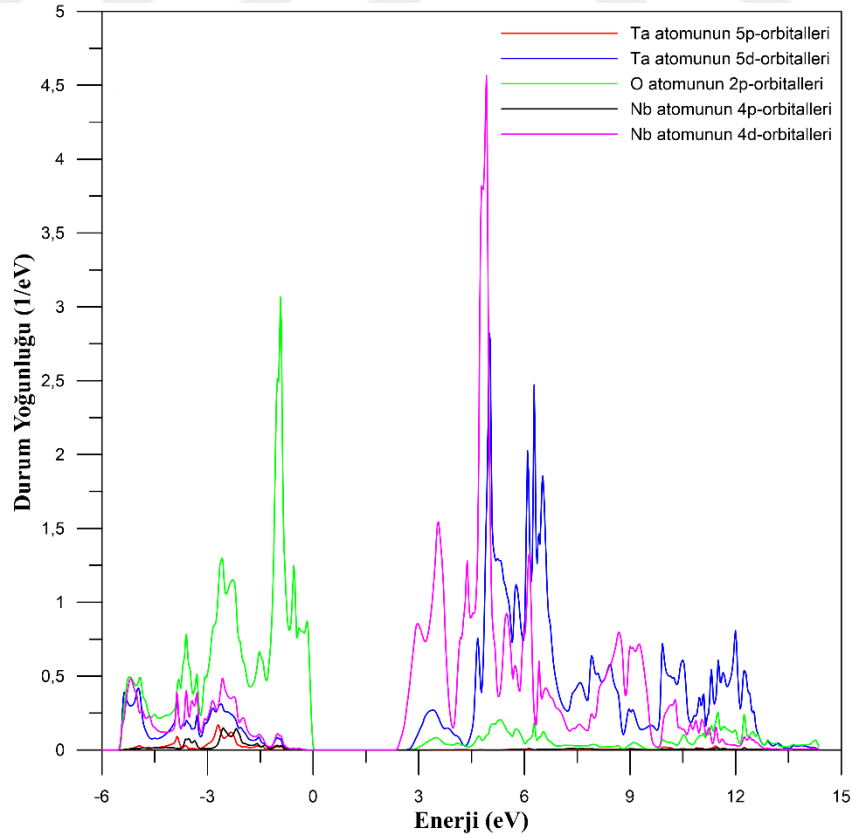
Şekil 4.96. $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



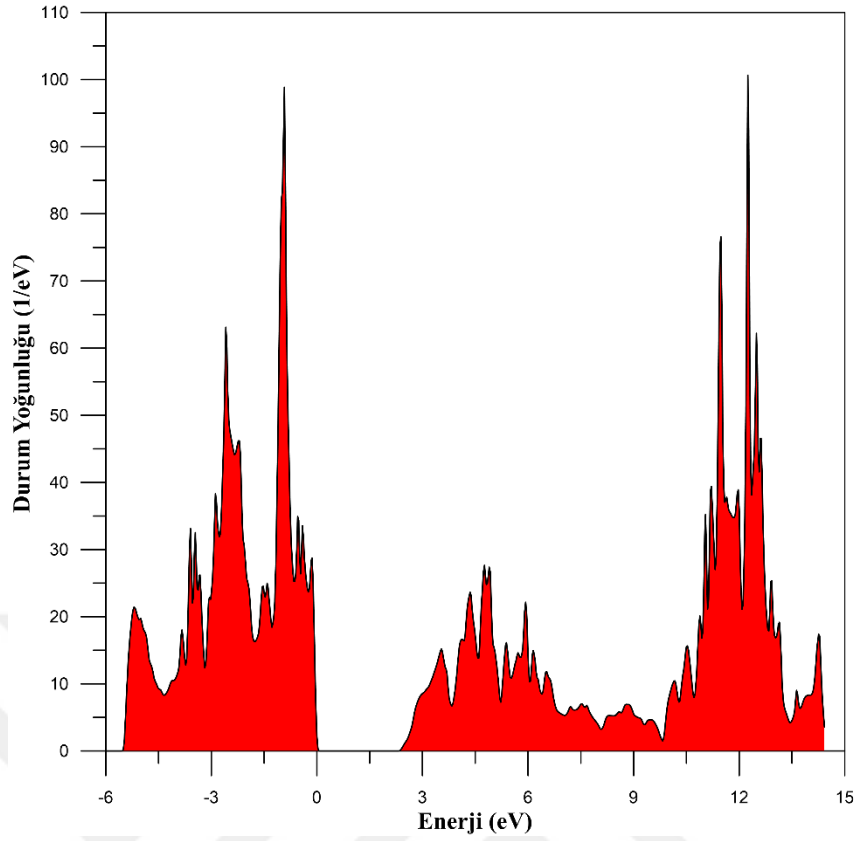
Şekil 4.97. $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



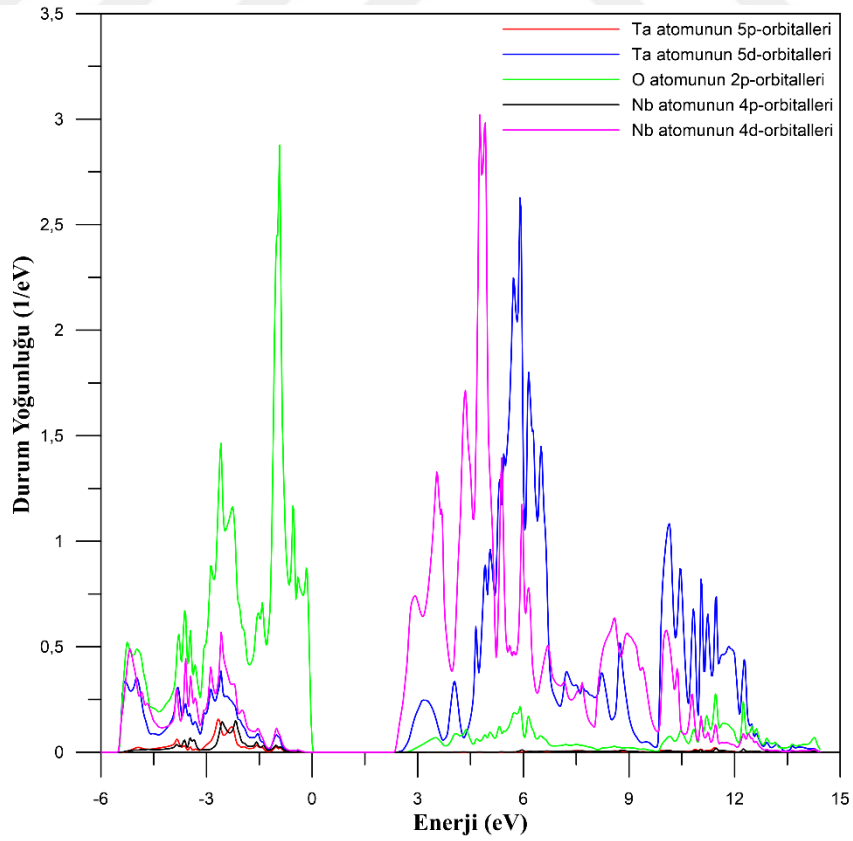
Şekil 4.98. $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 4.99. $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 4.100. $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 4.101. $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri

4.4.3. Nb katkılı KTaO₃ bileşiklerin optik özellikleri

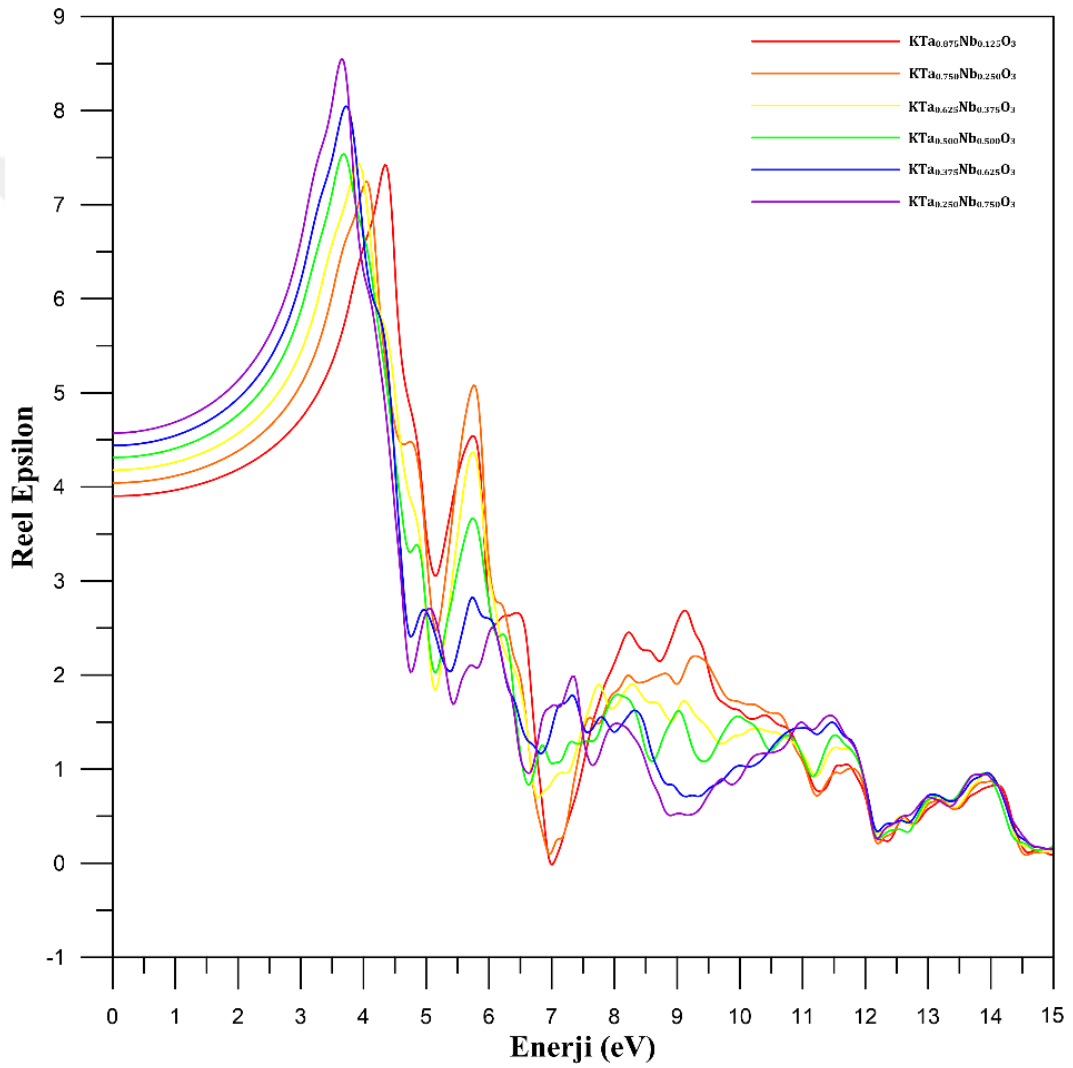
Nb katkılı bileşiklerin optik özellikleri Sb katkılı bileşiklerde olduğu gibi dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. Dielektrik fonksiyonları yardımıyla yansıma katsayıları (R), soğurma katsayıları (α), kırılma indisi (n), sönüm katsayısı ve enerji kayıp fonksiyonları (L) hesaplandı. KTa_{0.875}Nb_{0.125}O₃, KTa_{0.750}Nb_{0.250}O₃, KTa_{0.625}Nb_{0.375}O₃, KTa_{0.500}Nb_{0.500}O₃, KTa_{0.375}Nb_{0.625}O₃ ve KTa_{0.250}Nb_{0.750}O₃ bileşikleri için dielektrik sabitleri, $\epsilon_1(\omega)$, sırasıyla 3,90, 4,04, 4,18, 4,31, 4,44 ve 4,57 olarak hesaplandı. En yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji Çizelge 4.11 de verilmiştir. Dielektrik sabiti değeri kırmızı altı bölgeden mor ötesi bölgeye kadar artış sergilerken mor ötesi bölgede azalmıştır. Ayrıca reel dielektrik sabitinin 0-15 eV aralığında negatife düşmemesi bu malzemelerin 0-15 eV aralığında yarıiletken davranış sergilediğini gösterir. İmajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafiğinde oluşan pikler valans bandından iletim bandına geçen elektronların optik geçişlerini temsil etmektedir. Şekil 4.103' den elde edilen Nb katkılı bileşikler için optik geçişleri temsil eden, ilk üç pik için enerji değerleri Çizelge 4.12 de verilmiştir. Ayrıca yasak band aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırları (TSS) için elde edilen enerji değerleri (Çizelge 4.12) yasak band enerjileri ile uyumludur. Nb katkılı bileşiklere ait reel ve imajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4.102 ve Şekil 4.103 de gösterilmektedir.

Çizelge 4.11. Nb katkılı bileşikler için en yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

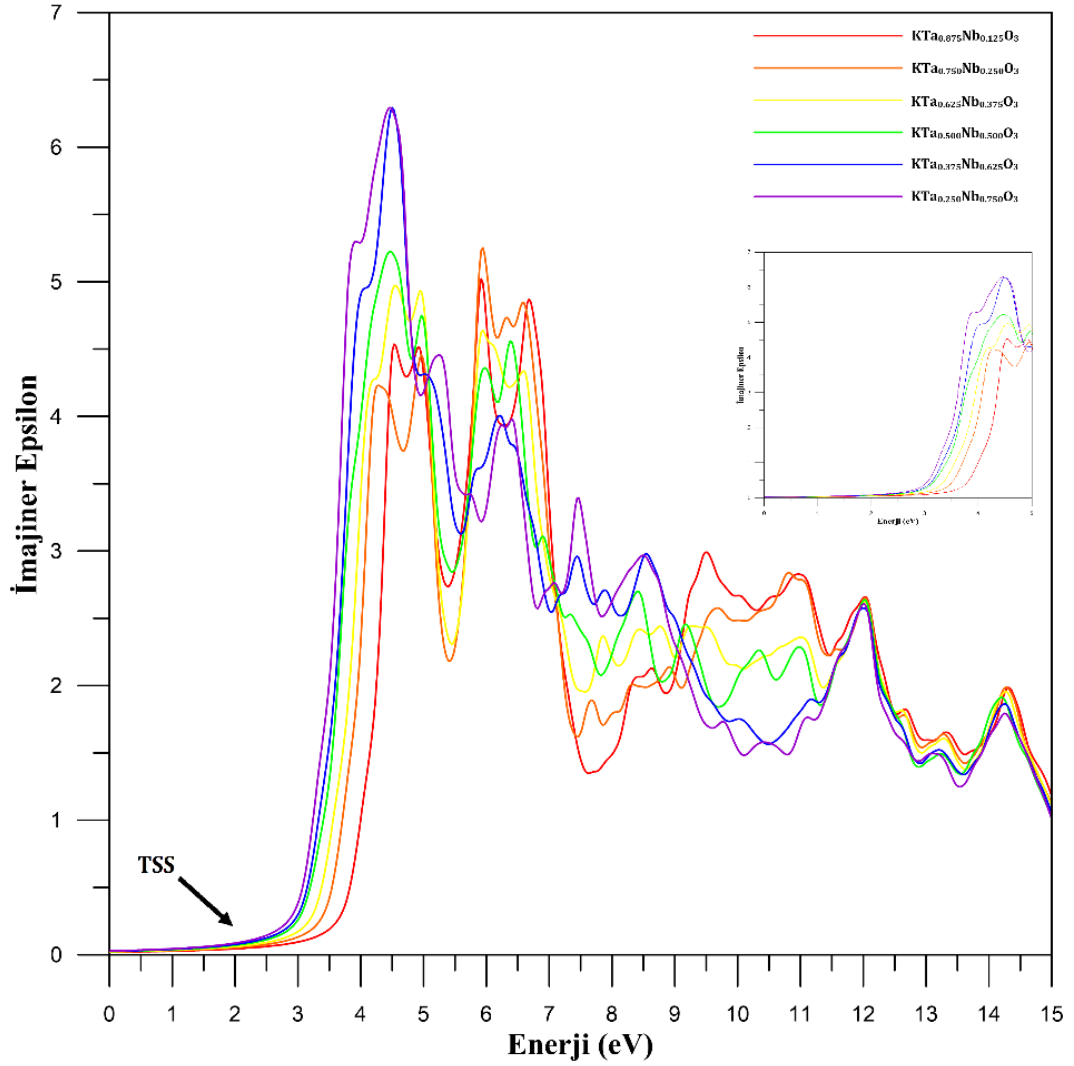
Bileşik	Reel dielektrik sabiti $\epsilon(\omega)$	Enerji değeri
KTa _{0.875} Nb _{0.125} O ₃	7,42	4,34 eV
KTa _{0.750} Nb _{0.250} O ₃	7,25	4,04 eV
KTa _{0.625} Nb _{0.375} O ₃	7,44	3,90 eV-3,93 eV
KTa _{0.500} Nb _{0.500} O ₃	7,54	3,69 eV
KTa _{0.375} Nb _{0.625} O ₃	8,05	3,71 eV
KTa _{0.250} Nb _{0.750} O ₃	8,55	3,66 eV

Çizelge 4.12. Nb katkıli bileşikler için optik geçişleri temsil eden ilk üç pik için enerji değerleri ve temel soğurma sınırları (TSS) değerleri

Bileşik	E ₁ (eV)	E ₂ (eV)	E ₃ (eV)	TSS (eV)
KTa _{0.875} Nb _{0.125} O ₃	4,53	4,91	5,92	3,17
KTa _{0.750} Nb _{0.250} O ₃	4,26	4,97	5,95	2,90
KTa _{0.625} Nb _{0.375} O ₃	4,56	4,94	5,95	2,68
KTa _{0.500} Nb _{0.500} O ₃	4,48	4,97	5,97	2,41
KTa _{0.375} Nb _{0.625} O ₃	4,50	6,22	7,44	2,44
KTa _{0.250} Nb _{0.750} O ₃	4,45	5,24	6,25	2,42

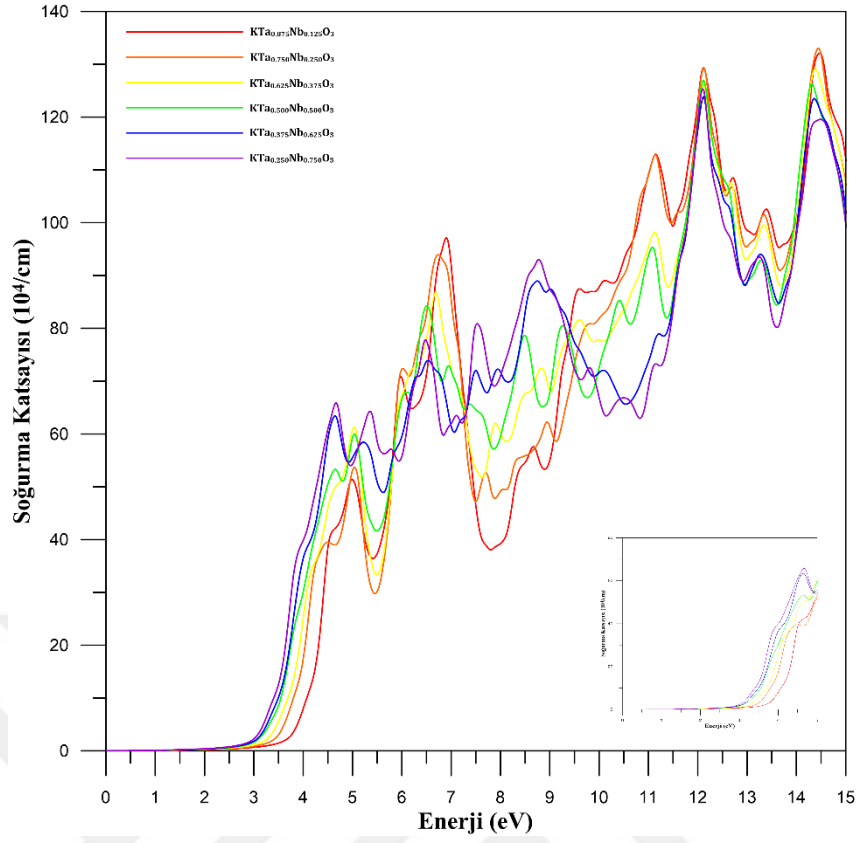


Şekil 4.102. Nb katkıli bileşikler için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonları

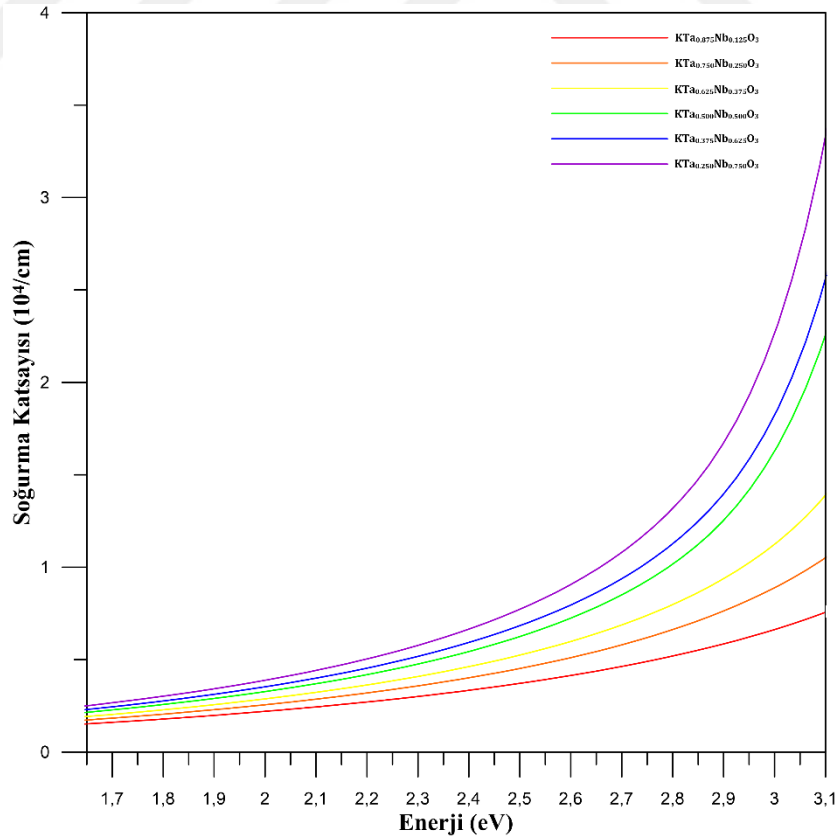


Şekil 4.103. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonları

Nb katkılı bileşiklere ait soğurma spektrumları Şekil 4.104 ve Şekil 4.105 de gösterilmektedir. Nb katkılı bileşikler için elde edilen temel soğurma sınırı (TSS) enerjileri yasak band hesaplamaları ile uyum içerisindedir. Soğurma spektrumunda görülen diğer pikler ise bandlar arasındaki optik geçişlere karşılık gelmektedir. $\text{KTa}_{0.125}\text{Nb}_{0.875}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşikleri için soğurma elektromanyetik spektrumun görünür bölgesinde (yaklaşık 2,50 eV civarı) keskin bir artışa geçmektedir. $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşikleri için ise bu artış mor ötesi bölgede gerçekleşmektedir. Nb katkılı bileşikler için soğurma başlangıç sınırı ise elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir.

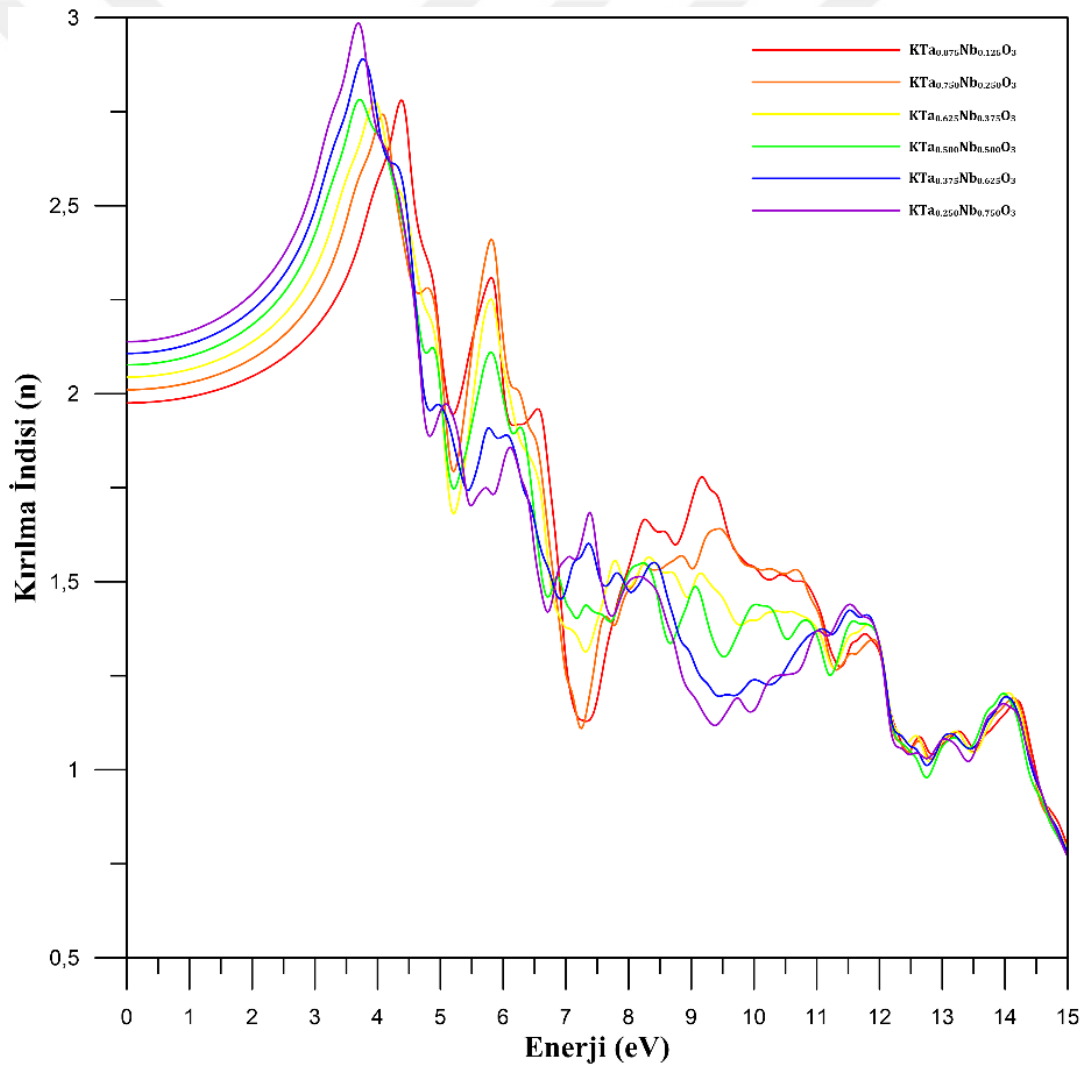


Şekil 4.104. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan soğurma spektrumu

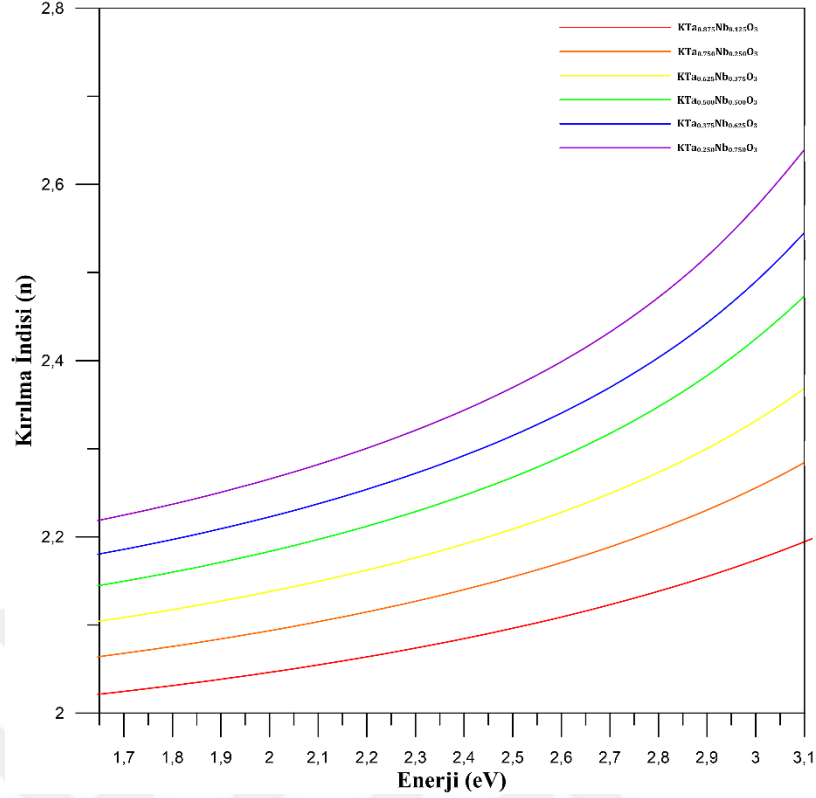


Şekil 4.105. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için soğurma spektrumu

Nb katkılu bileşiklere ait kırılma indisi spektrumları Şekil 4.106 Şekil 4.107 de gösterilmektedir. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri için kırılma indisleri ($n(0)$) sırasıyla 1,98, 2,01, 2,04, 2,08, 2,11 ve 2,14 olarak hesaplandı. Ayrıca, en yüksek kırılma indisi mor ötesi bölgede ulaşırken, bu değere karşılık gelen enerji ve kırılma indisi değerleri Çizelge 4.13 de verilmiştir. Kırılma indisleri, elektromanyetik spektrumun kızılötesi bölgesinde ve görünür bölgesinde artış sergilemektedir. Kırılma indisleri mor ötesi bölgede maksimum değere ulaşına kadar artarken bu bölge içerisinde ikinci pik değerlerine kadar tekrar düşüş sergilemektedir.



Şekil 4.106. Nb katkılu bileşikler için hesaplanan kırılma indisi spektrumu



Şekil 4.107. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için kırılma indisi spektrumu

Çizelge 4.13. Nb katkılı bileşikler için en yüksek kırılma indisi ve bu değere karşılık gelen enerji değeri.

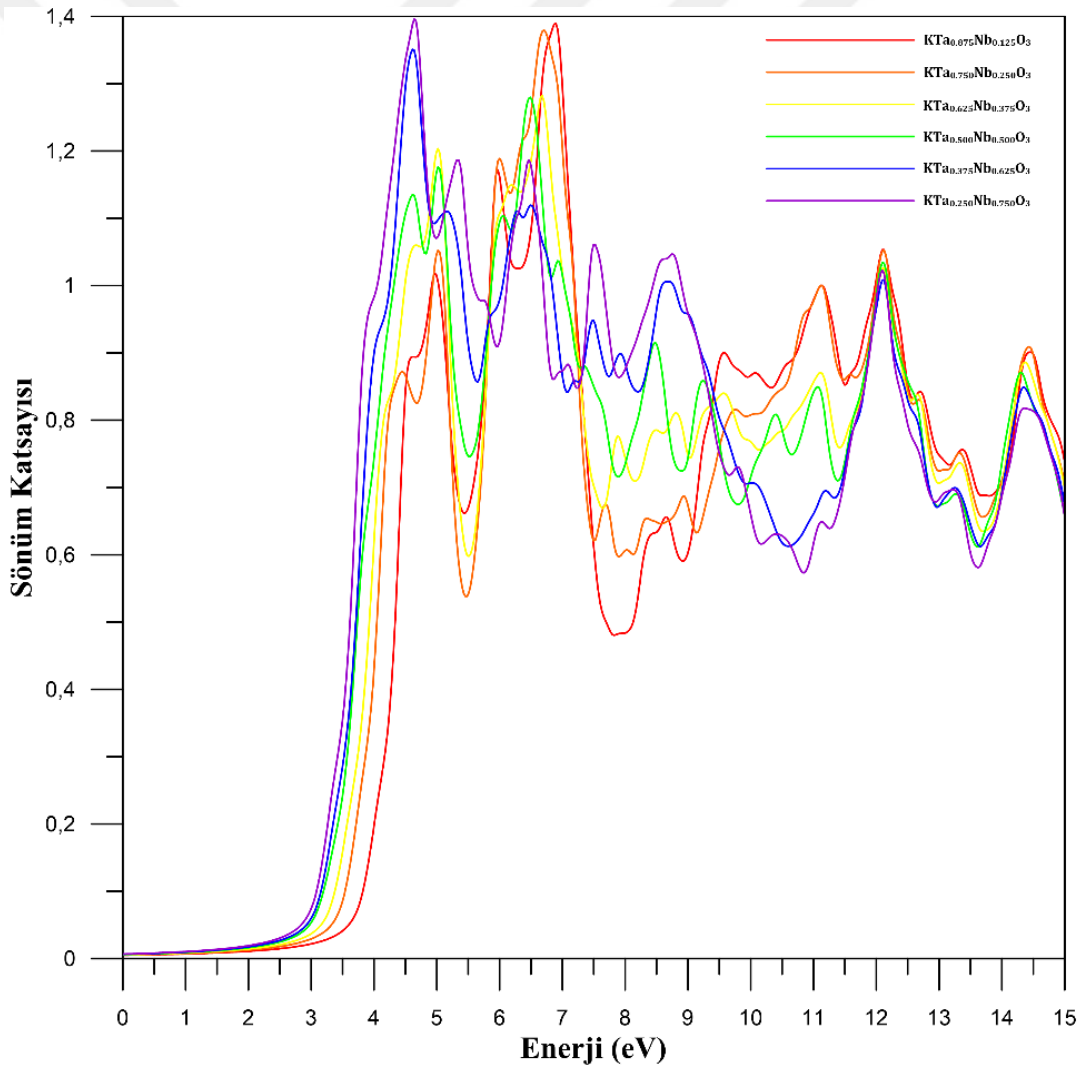
Bileşik	Kırılma İndisi	Enerji değeri
$\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$	2,78	4,37 eV-4,39 eV
$\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$	2,74	4,04 eV-4,10 eV
$\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$	2,78	3,96 eV
$\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$	2,78	3,69 eV-3,74 eV
$\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$	2,89	3,74 eV-3,80 eV
$\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$	2,99	3,69 eV

$\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$ bileşikleri için sönüm katsayısı mor ötesi bölgede keskin bir artışa geçmektedir. $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşikleri için ise sönüm katsayısı görünür bölgede keskin bir artışa geçmektedir. Nb katkılı bileşikler için elde edilen en yüksek sönüm katsayısı ve bu katsayıya karşılık gelen enerji değeri Çizelge 4.14'de verilmiştir. En yüksek sönüm katsayısı değerlerine mor ötesi bölgede ulaşmaktadır. Kızıl altı bölgede ise sönüm katsayısı hemen hemen sabit kalmaktadır. Sönüm katsayısı spektrumunda mor ötesi bölgede görülen diğer

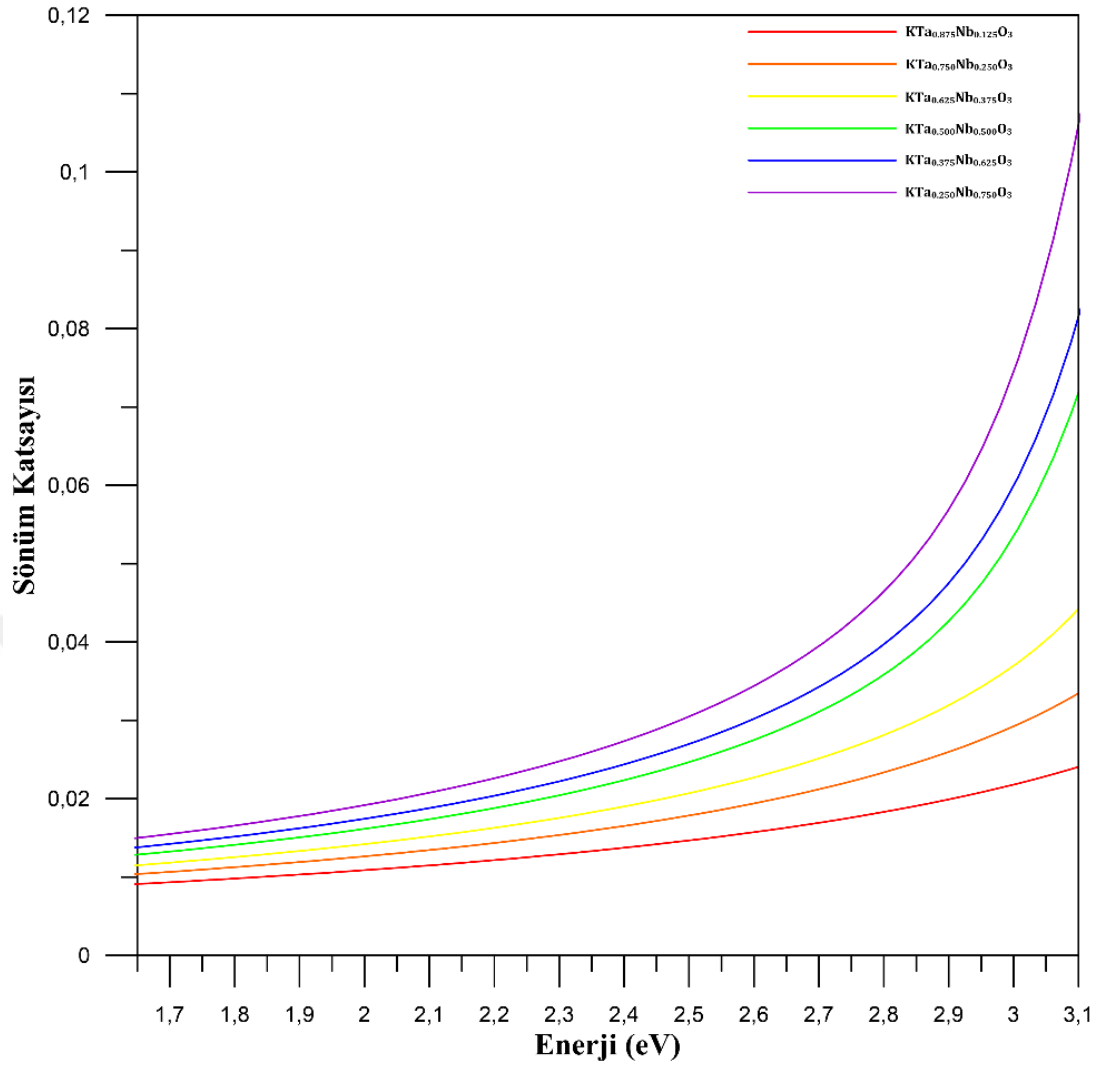
pikler ise bandlar arasındaki optik geçişlere karşılık gelmektedir. Nb katkılu bileşikler için elde edilen sönüm katsayısının enerjiye bağlı grafiği Şekil. 4.108 ve Şekil 4.109 da verilmiştir.

Çizelge 4.14. Nb katkılu bileşikler için en yüksek sönüm katsayısı ve bu değere karşılık gelen enerji değeri.

Bileşik	Sönüm katsayısı	Enerji değeri
$\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_3$	1,39	6,87 eV-6,90 eV
$\text{KTa}_{0.750}\text{Nb}_{0.250}\text{O}_3$	1,38	6,68 eV-6,73 eV
$\text{KTa}_{0.625}\text{Nb}_{0.375}\text{O}_3$	1,28	6,65 eV-6,68 eV
$\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$	1,28	6,46 eV-6,52 eV
$\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$	1,12	6,46 eV-6,52 eV
$\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$	1,19	6,46 eV

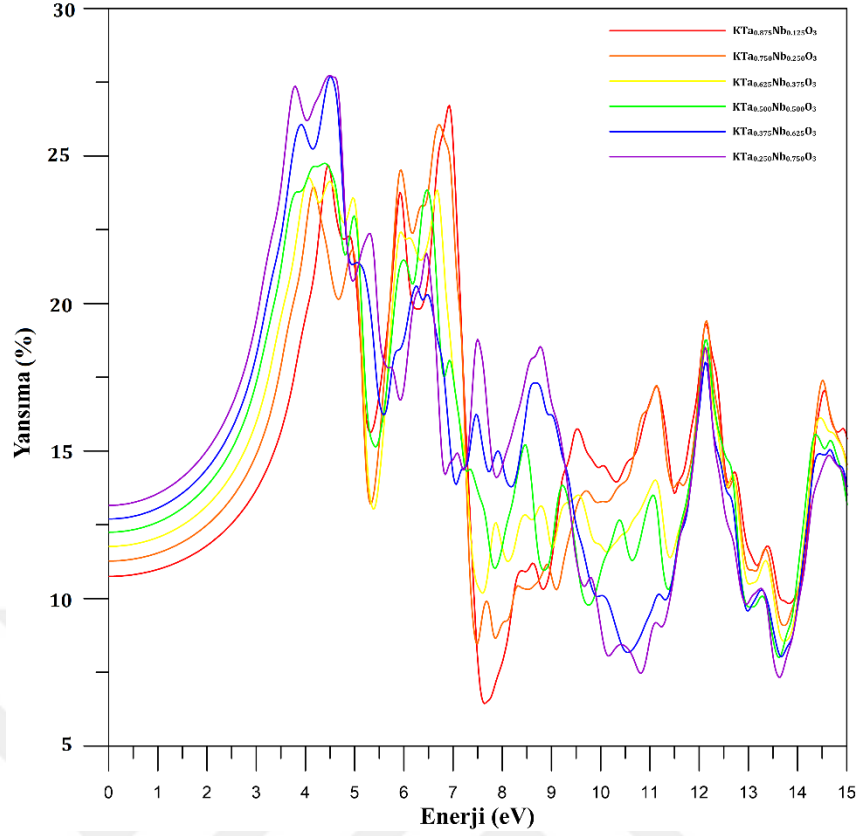


Şekil 4.108. Nb katkılu bileşikler için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu

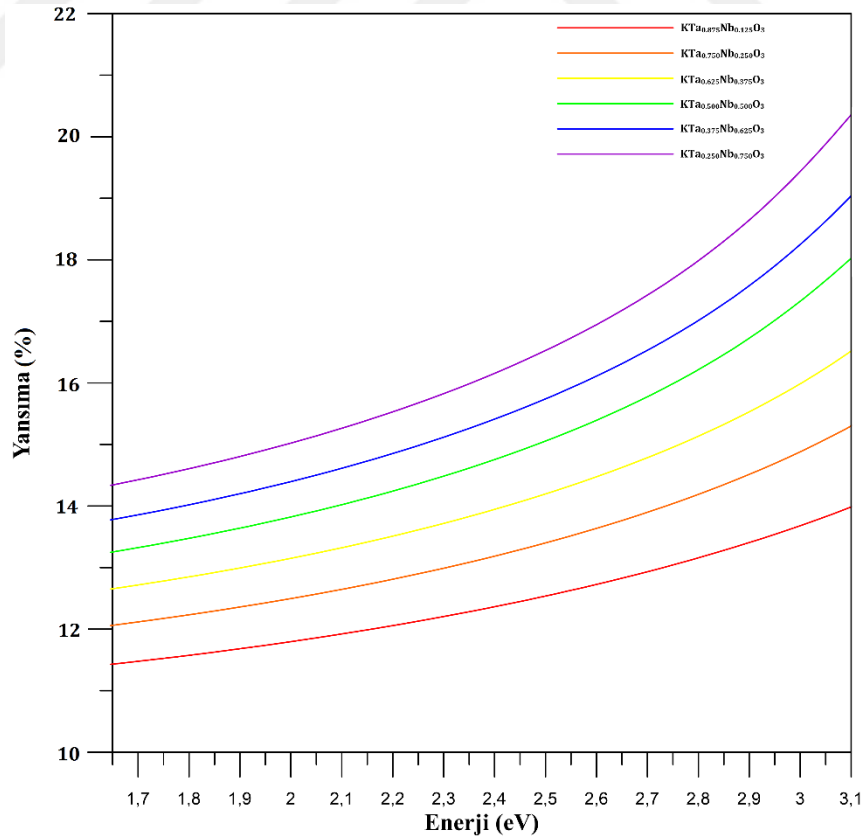


Şekil 4.109. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için sönüm katsayısı spektrumu

Nb katkılı bileşikler için elde edilen yansıtma spektrumu Şekil 4.110 ve Şekil 4.111 de gösterilmektedir. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri için yansıtma başlangıç değerleri sırasıyla %10,7, %11,3, %11,8, %12,2, %12,7 ve %13,2 dir. Kızıl altı bölgede yansıtma değerleri hemen hemen sabit kalmaktadır. Görünür bölgede ise Nb katkılı bileşiklerin yansıtma oranında artış görülmektedir. $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri 0-15 eV aralığında en yüksek yansıtma oranına 4 eV ile 5 eV arasında ulaşmaktadır. $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri ise en yüksek yansıtma oranına 6 eV ile 7,50 eV arasında ulaşmaktadır. Soğurma spektrumunda oluşan maksimum pikler yansıtma spektrumunda da oluşmaktadır.

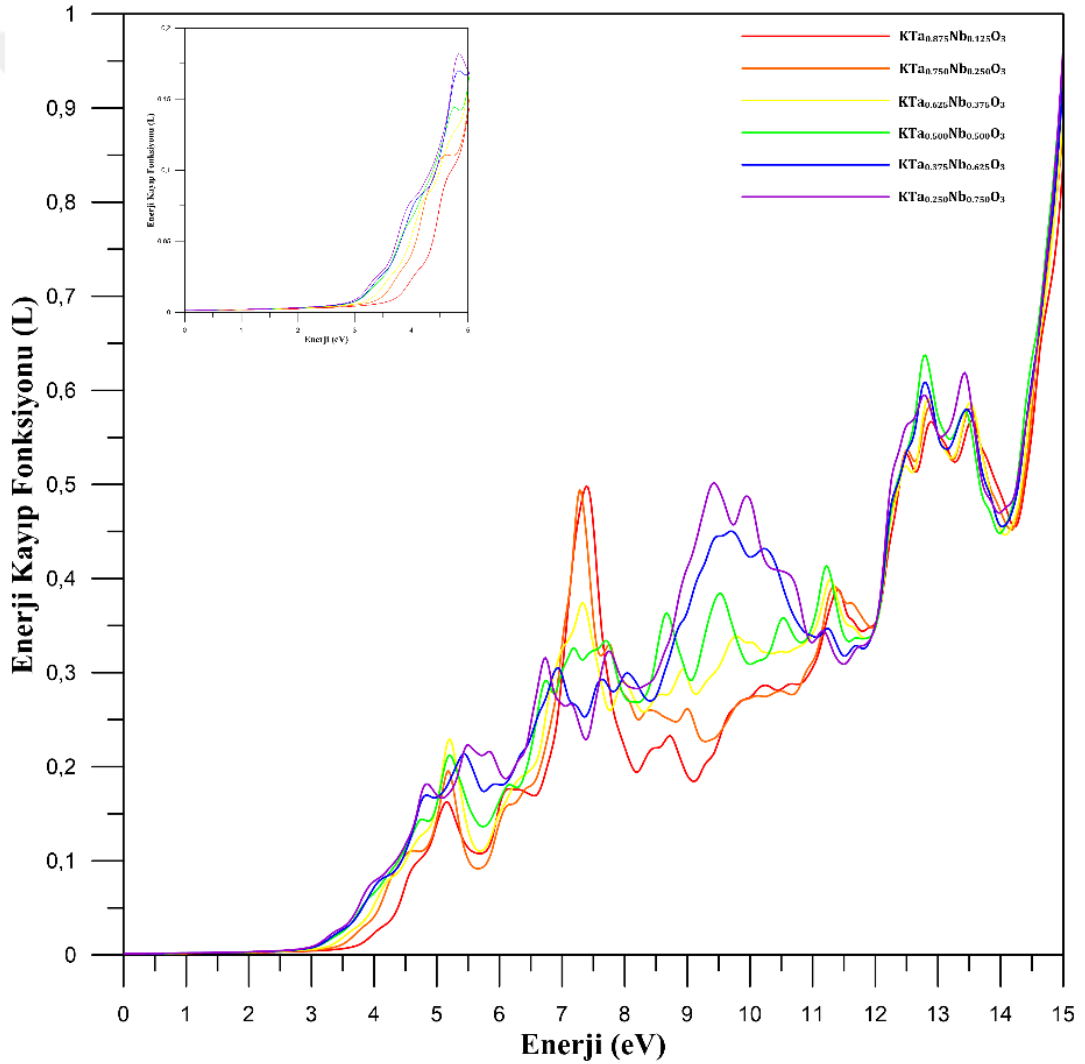


Şekil 4.110. Nb katkılı bileşikler için hesaplanan yansıtma spektrumu

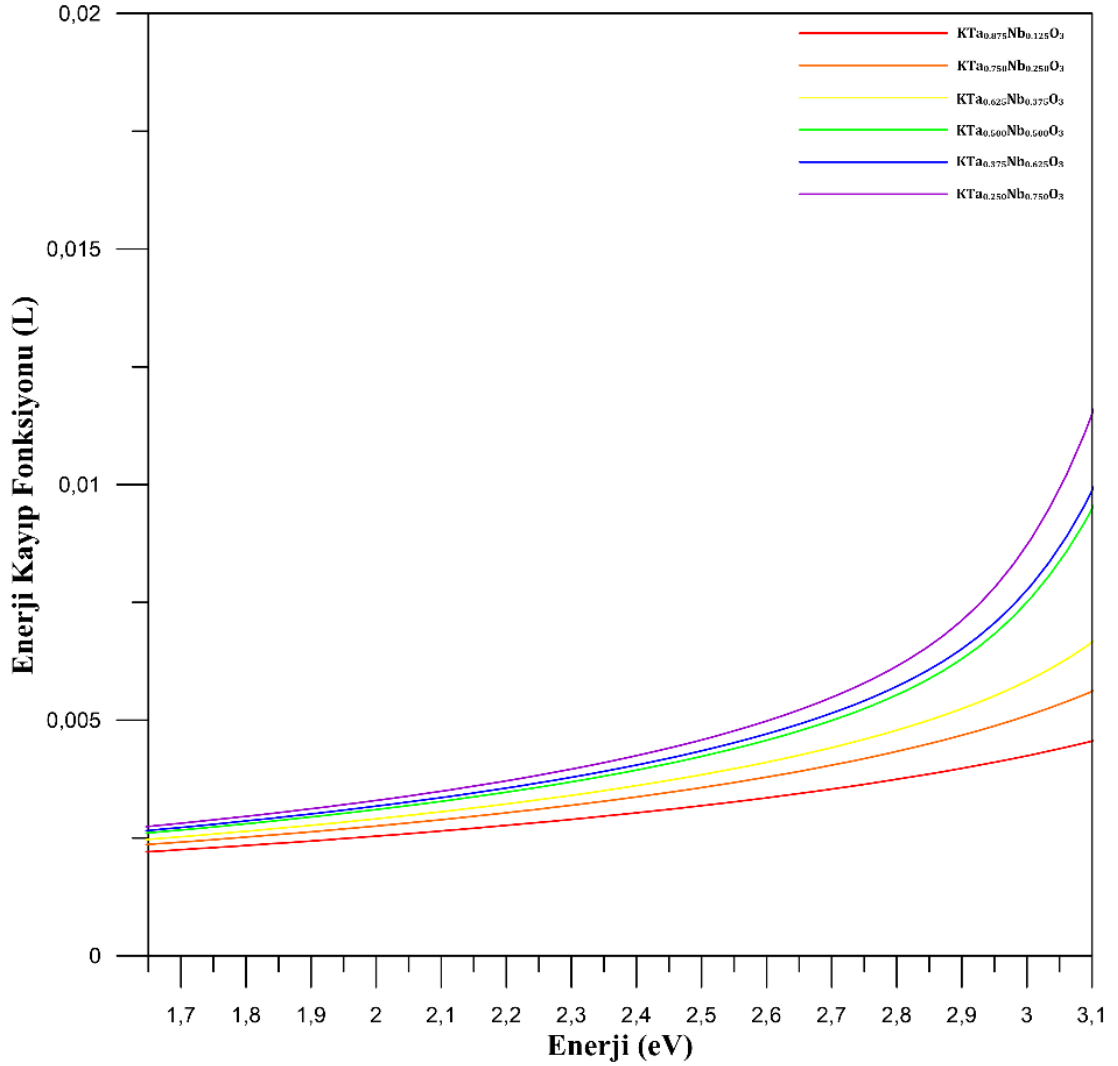


Şekil 4.111. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için yansıtma katsayısı spektrumu

Nb katkıli KTaO_3 bileşikleri için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu Şekil 4.112 ve Şekil 4.113'de gösterilmektedir. Kızıl atı bölgesinde enerji kayıp fonksiyonu neredeyse sıfıra eşittir. Görünür bölge içerisinde ise $\text{KTa}_{0.500}\text{Nb}_{0.500}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.375}\text{Nb}_{0.625}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.250}\text{Nb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşikleri artış sergilemektedir. Kayıp fonksiyonu iletkenlik bandının en üst yörüngesindeki bir elektronun valans bandına geçerken kaybettiği enerjiyi ifade eder. Ayrıca enerji kayıp spektrumundaki keskin maksimumlar valans elektronlarının kollektif titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.



Şekil 4.112. Nb katkıli bileşikler için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu



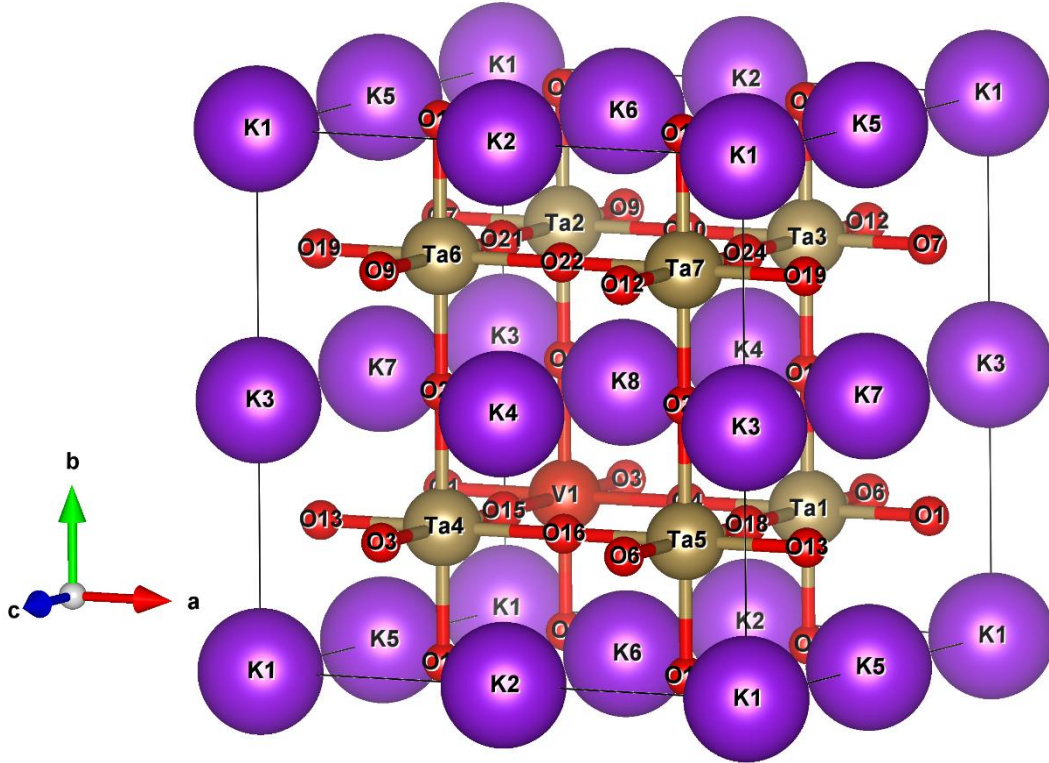
Şekil 4.113. Nb katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu

4.5. V Katkılı $KTaO_3$ Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri

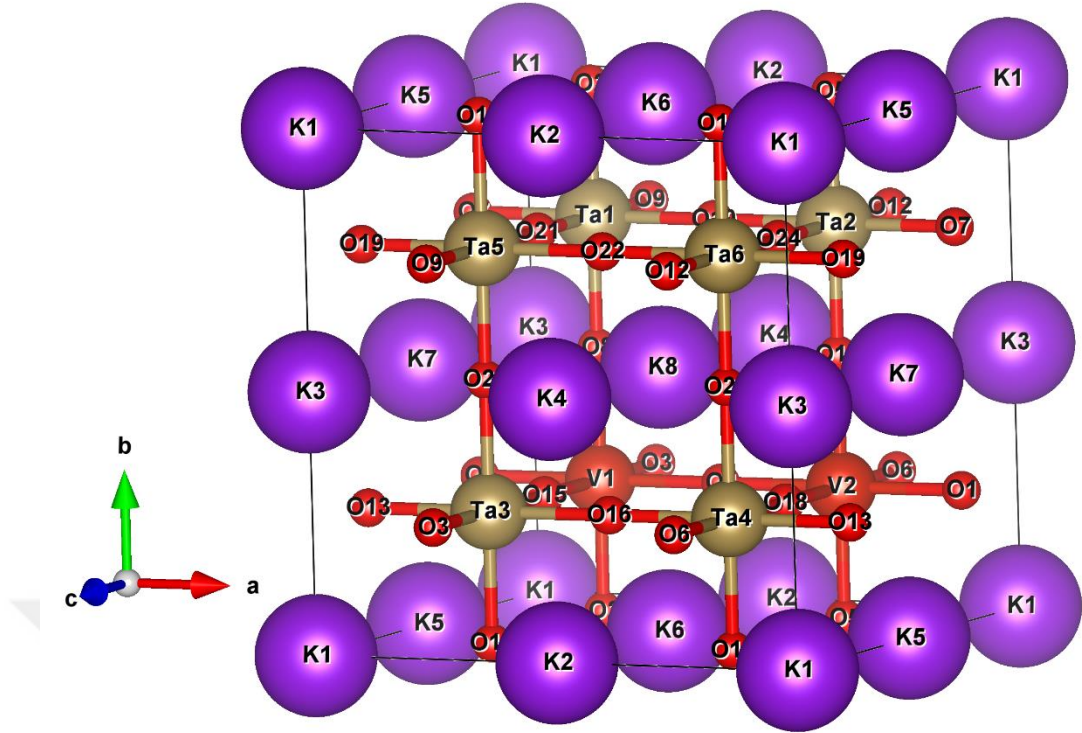
4.5.1. V katkılı $KTaO_3$ bileşiklerin yapısal özellikleri

V katkılı $KTaO_3$ bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. Kristal yapıların oluşturulmasında $KTa_{1-x}V_xO_3$ ($x=0,125, 0,250, 0,375, 0,500, 0,625$ ve $0,750$) kimyasal formülü kullanıldı. Kristal yapıyı oluşturmak için 40-atomlu $2X2X2$ süper hücre (Şekil 4.114-Şekil 4.119) kullanıldı. Simetri grubu ise basit kübik olan P1 seçildi. V katkılı $KTaO_3$ bileşiklerinin yapısal özelliklerinin incelenmesinde ilk olarak her materyalin örgü sabitlerinin tayini yapıldı. Bu hesaplamalar yapılırken denge durumu

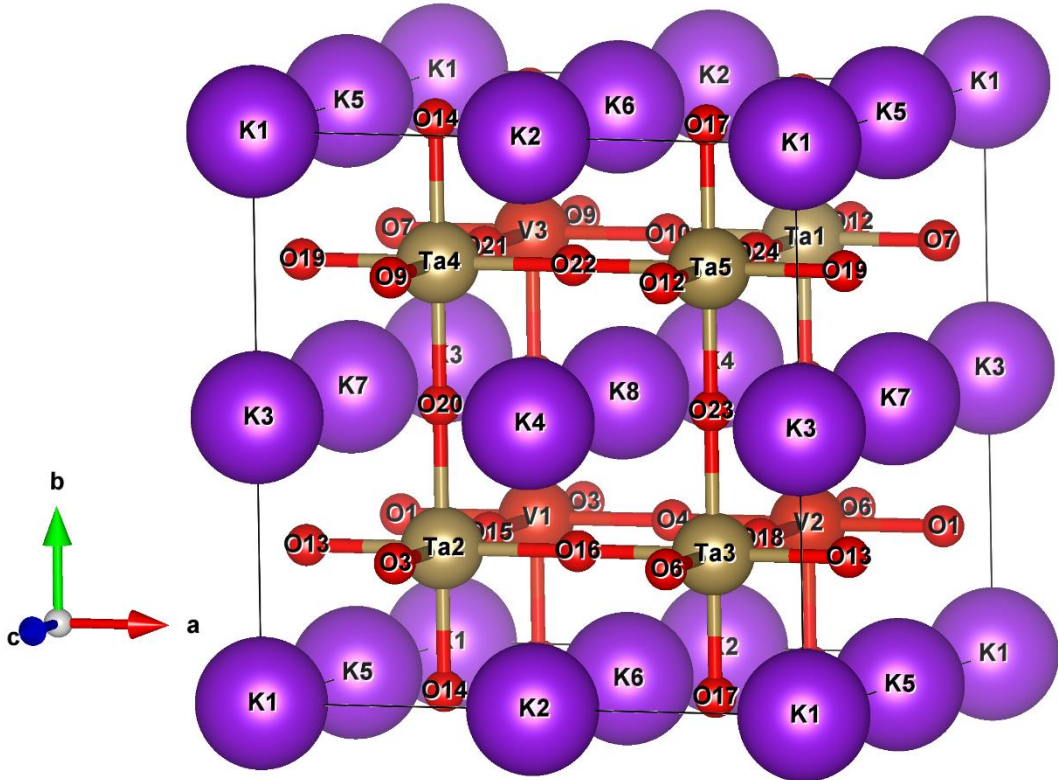
civarında farklı örgü sabitleri için enerji değerleri LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak hesaplandı ve grafiğe aktarıldı (Şekil 4.120-Şekil 4.131). Grafiklerin her birinde belli bir hacim değeri için enerjinin minimum olduğu görüldü. Enerjinin minimum olduğu değere karşılık gelen hacim değeri kullanılarak örgü sabiti hesaplandı. Murnaghan denklemleri kullanılarak, örgü sabiti parametresine ek olarak bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri hesaplandı. LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen V katkılı KTaO_3 bileşiklerinin örgü sabiti, bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri Çizelge 4.15 ve Çizelge 4.16' da verilmiştir. Her iki potansiyel içinde V katkısı arttıkça taban durum enerjilerinin arttığı tespit edilmiştir. GGA method için bulk modülü ve örgü sabiti V katkısı ile azalmıştır. Bu azalışı V atomunun yarıçapının neden olduğu düşünülmektedir. Çünkü V atomunun kovalent yarıçapı 1,25 Å iken Ta atomunun kovalent yarıçapı 1,38 Å dur.



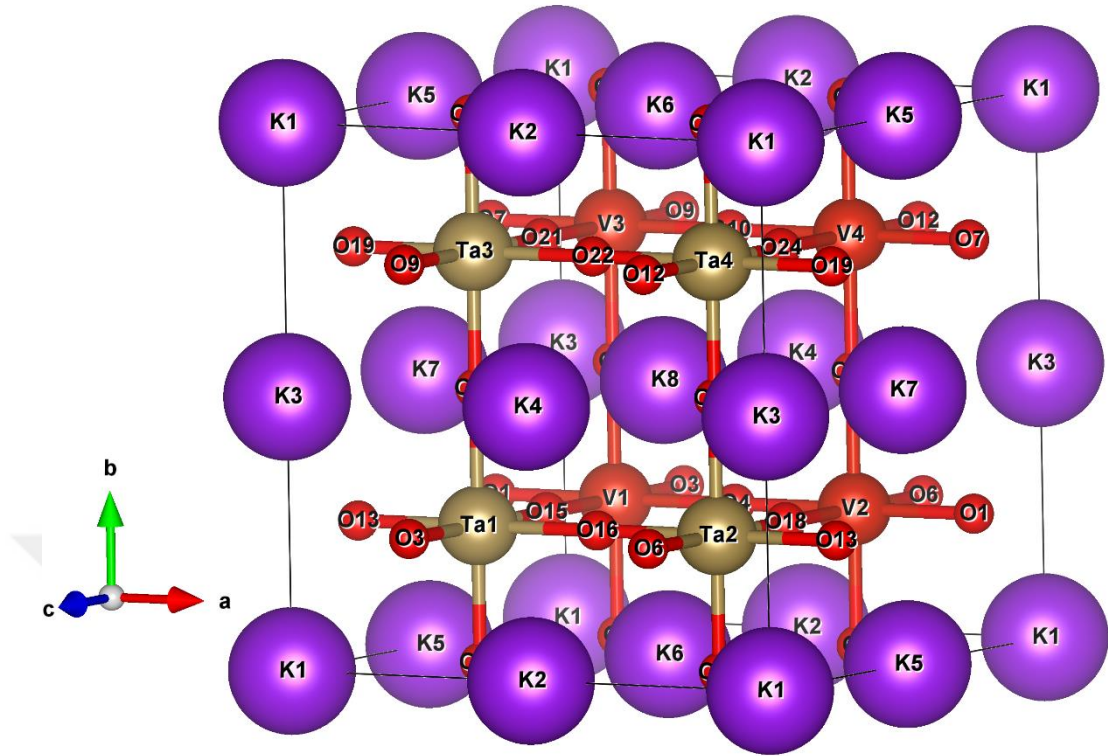
Şekil 4.114. $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



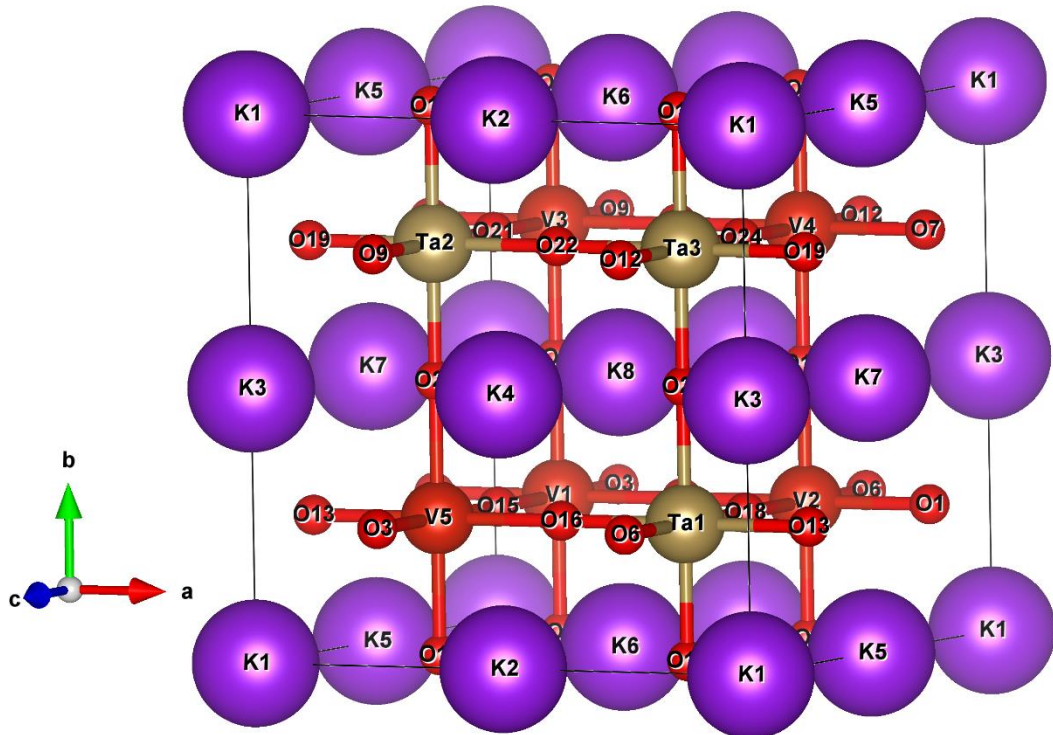
Şekil 4.115. $\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



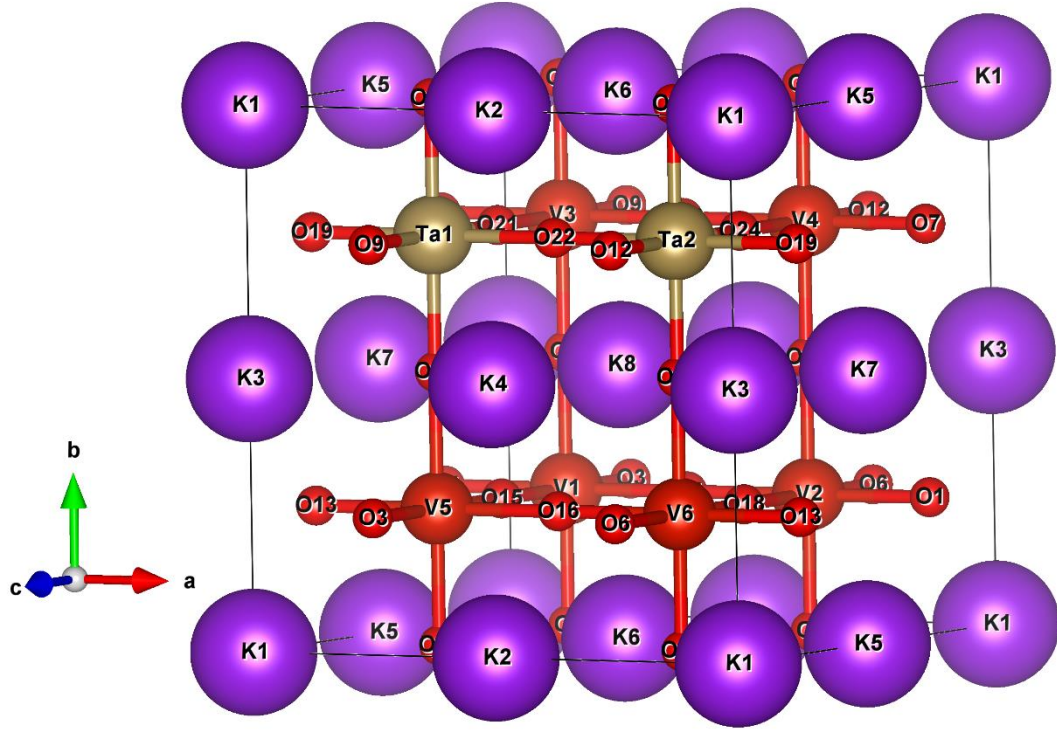
Şekil 4.116. $\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



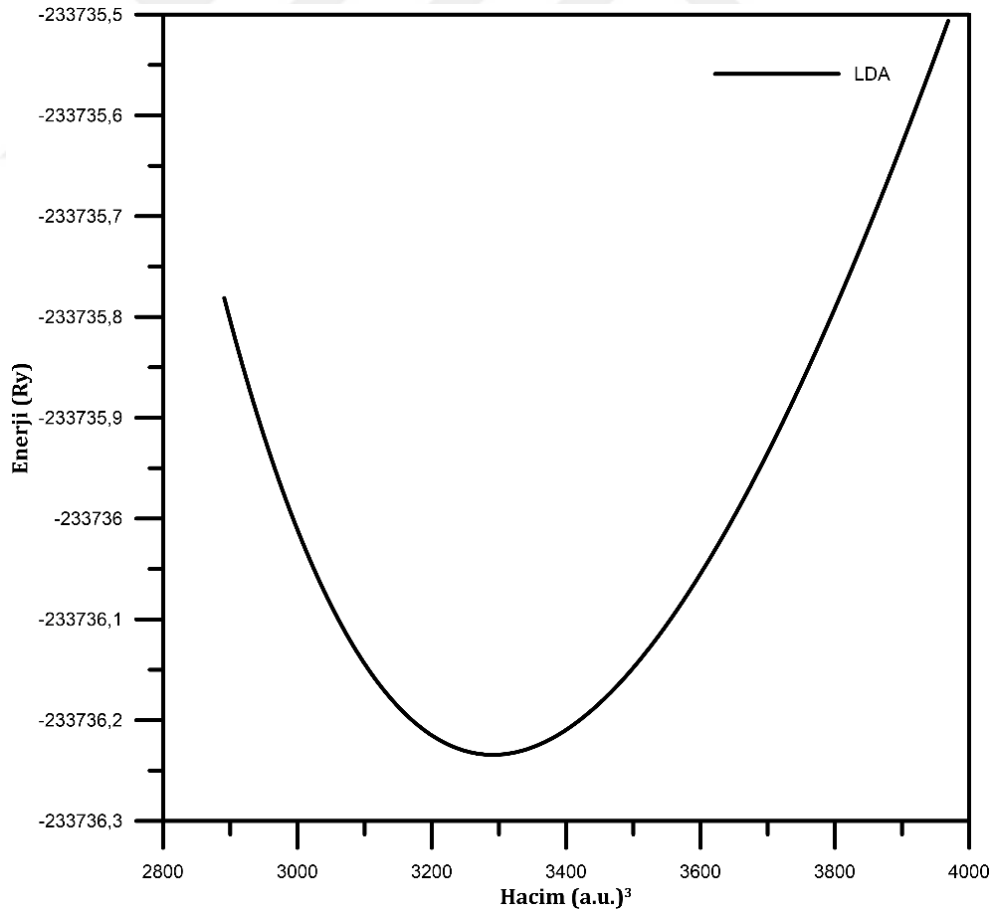
Şekil 4.117. $\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



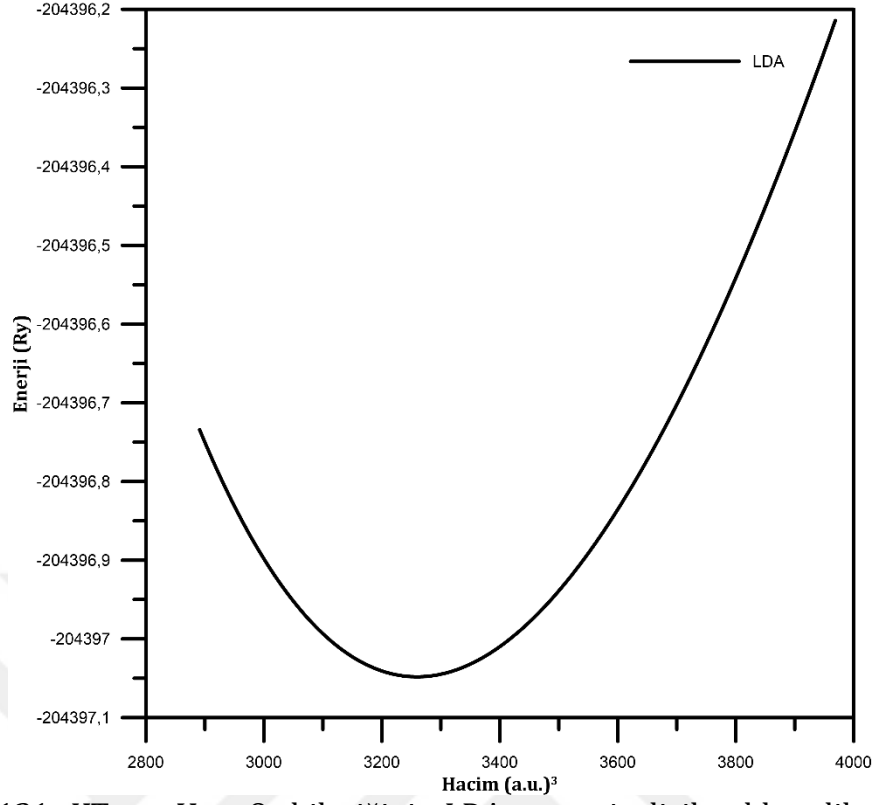
Şekil 4.118. $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



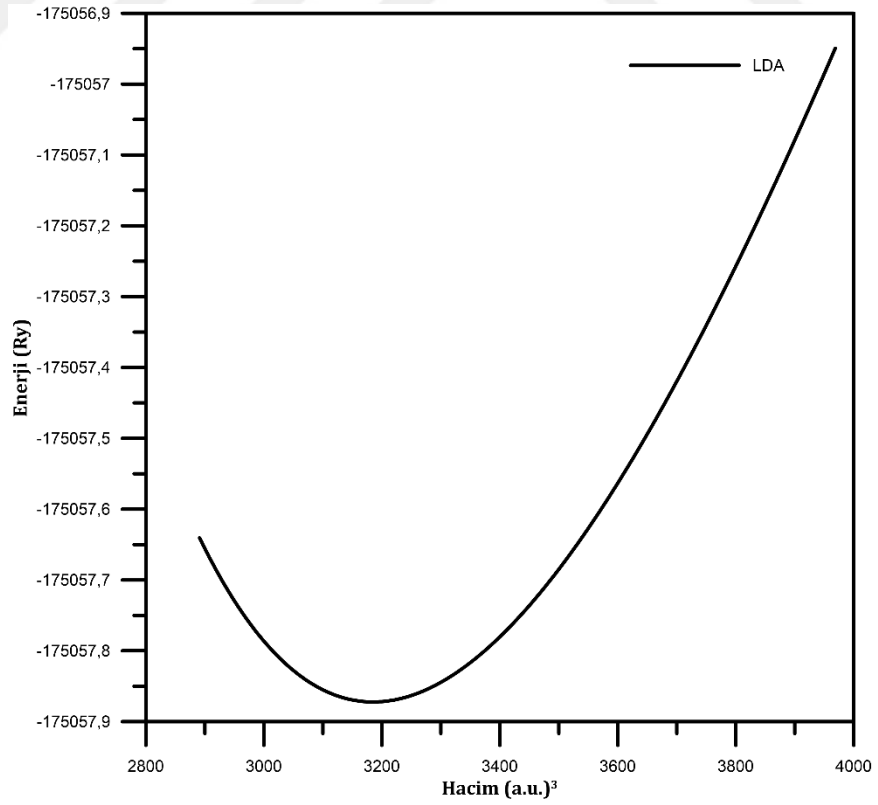
Şekil 4.119. $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin kristal yapısı



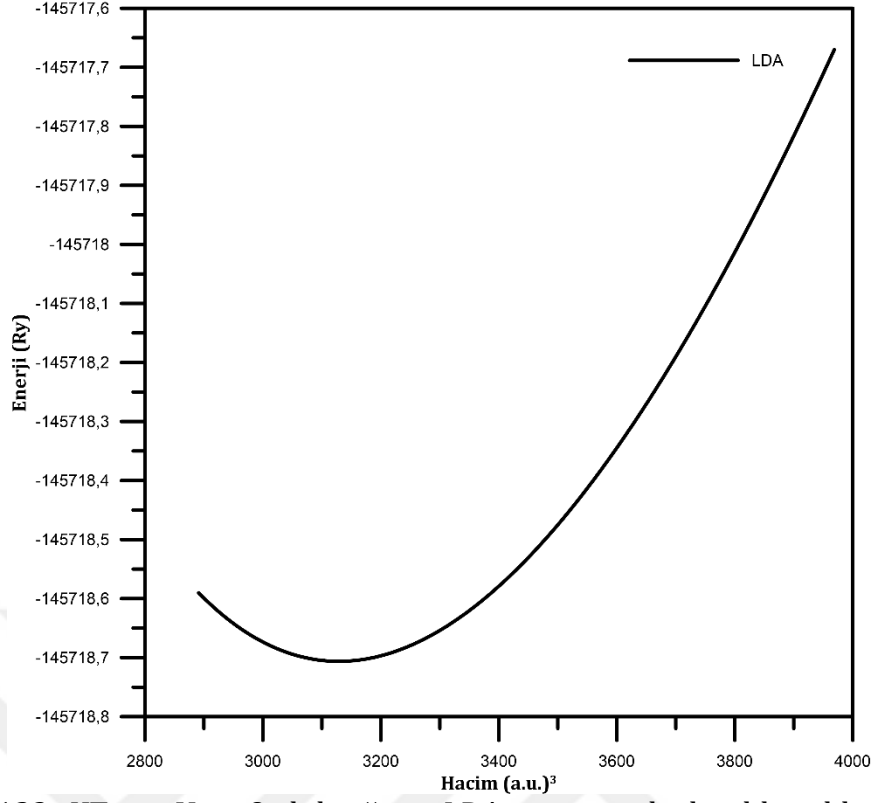
Şekil 4.120. $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



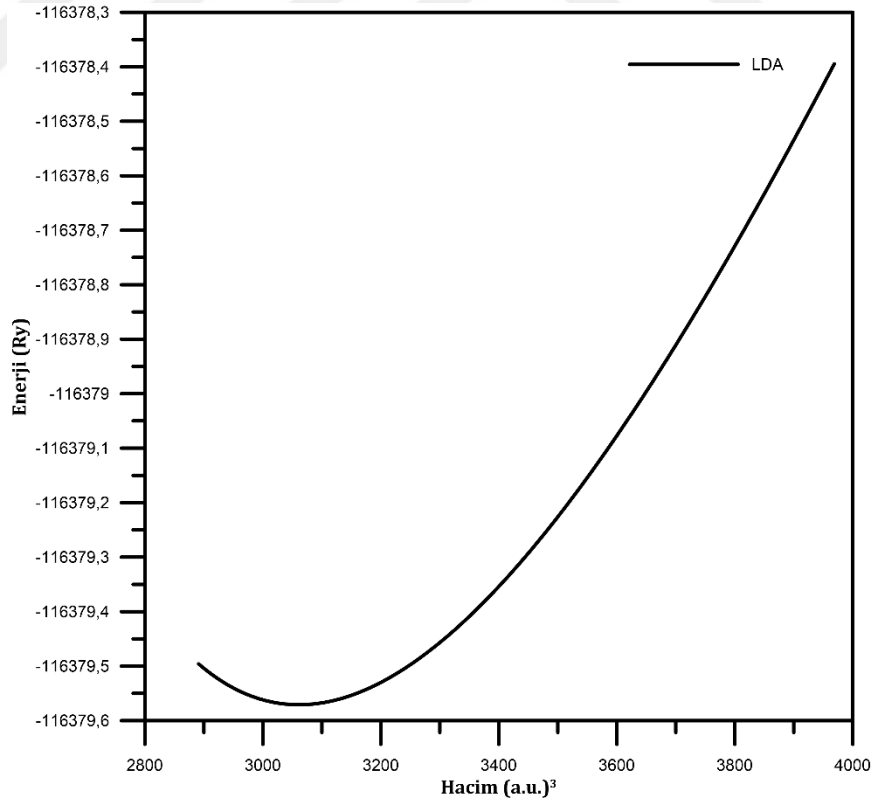
Şekil 4.121. KTa_{0.750}V_{0.250}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



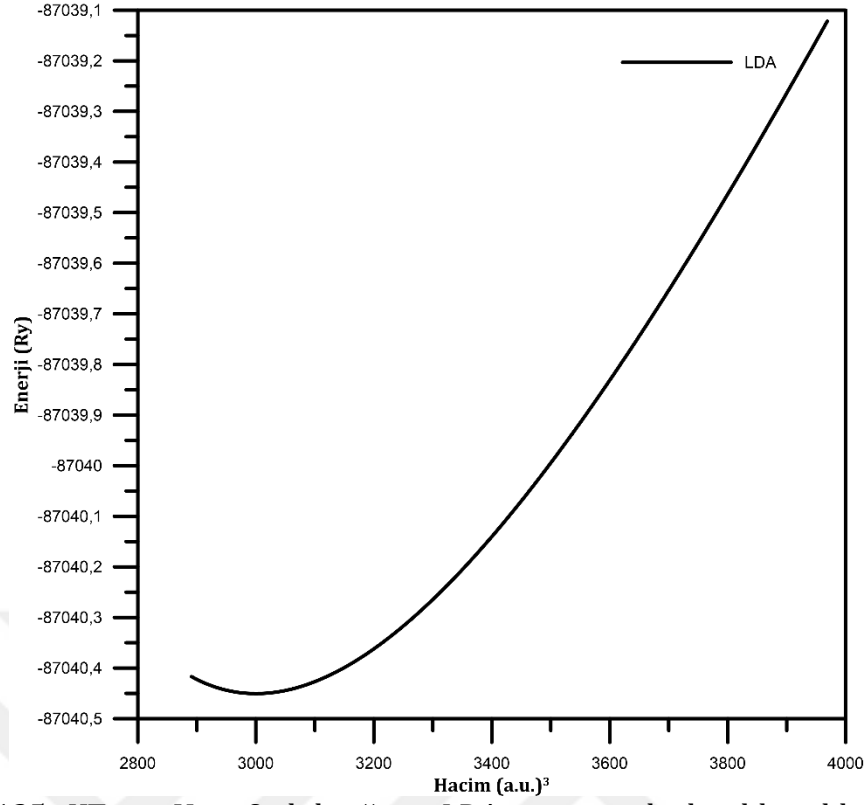
Şekil 4.122. KTa_{0.625}V_{0.375}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



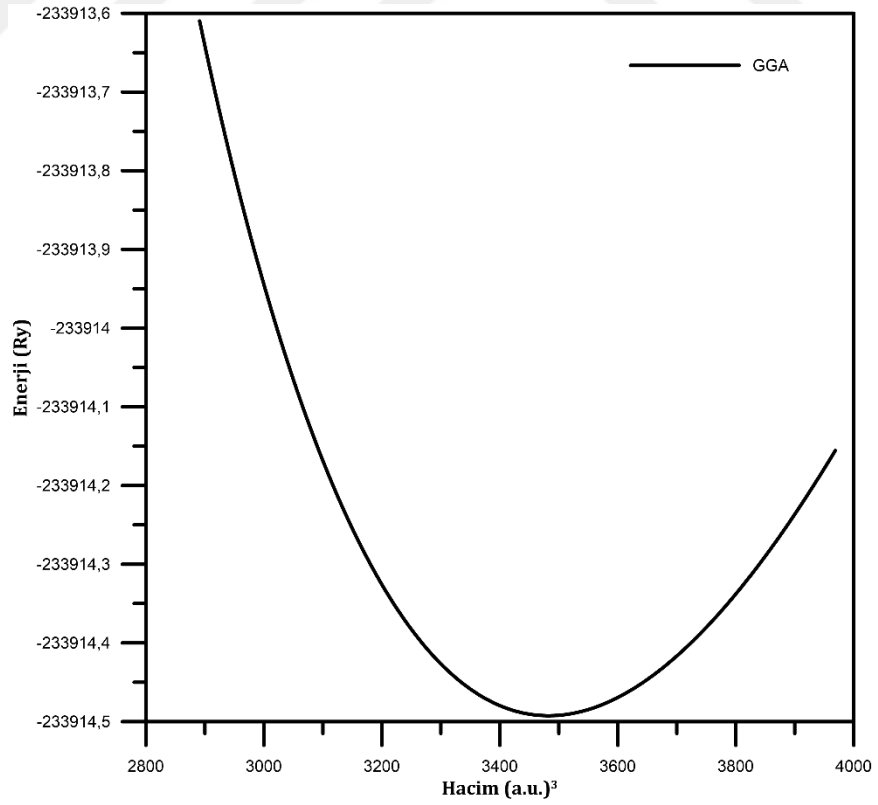
Şekil 4.123. KTa_{0.500}V_{0.500}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



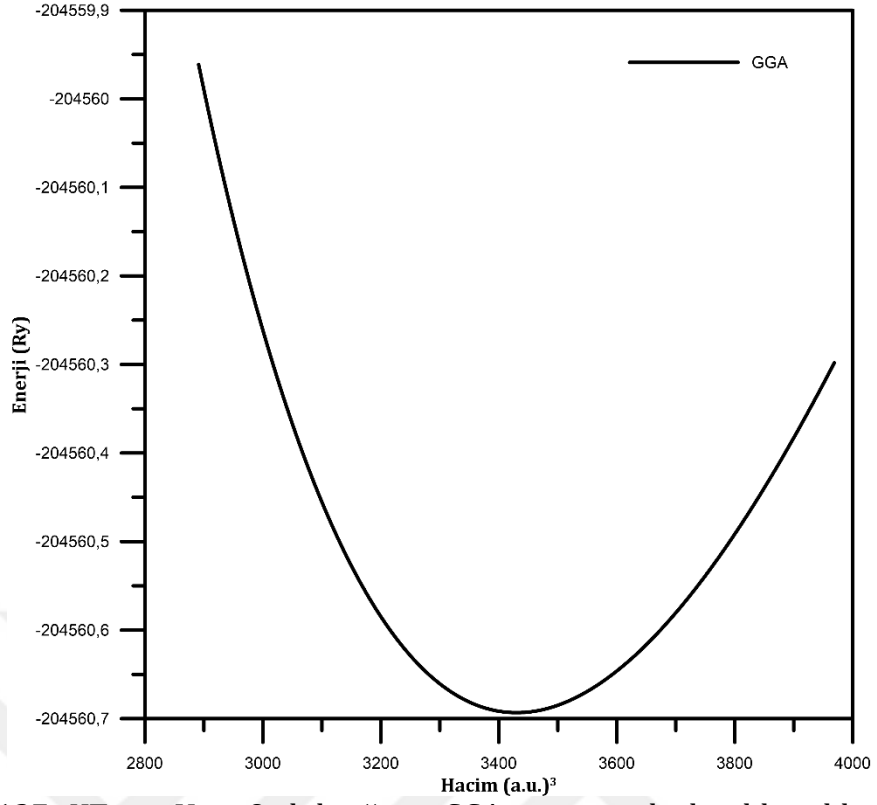
Şekil 4.124. KTa_{0.375}V_{0.625}O₃ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



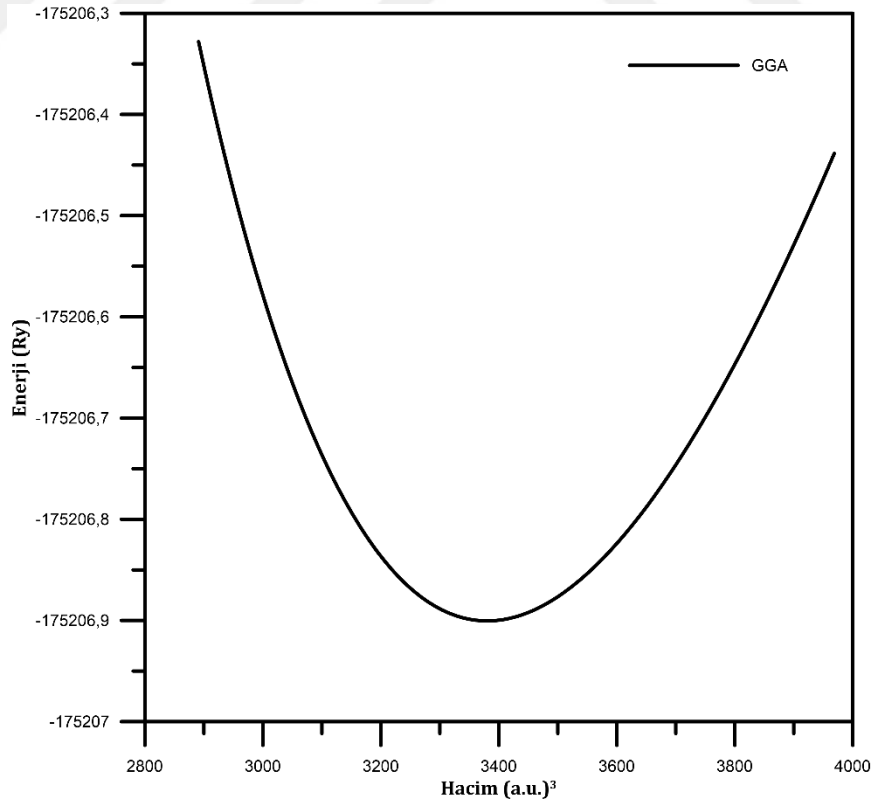
Şekil 4.125. $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin LDA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



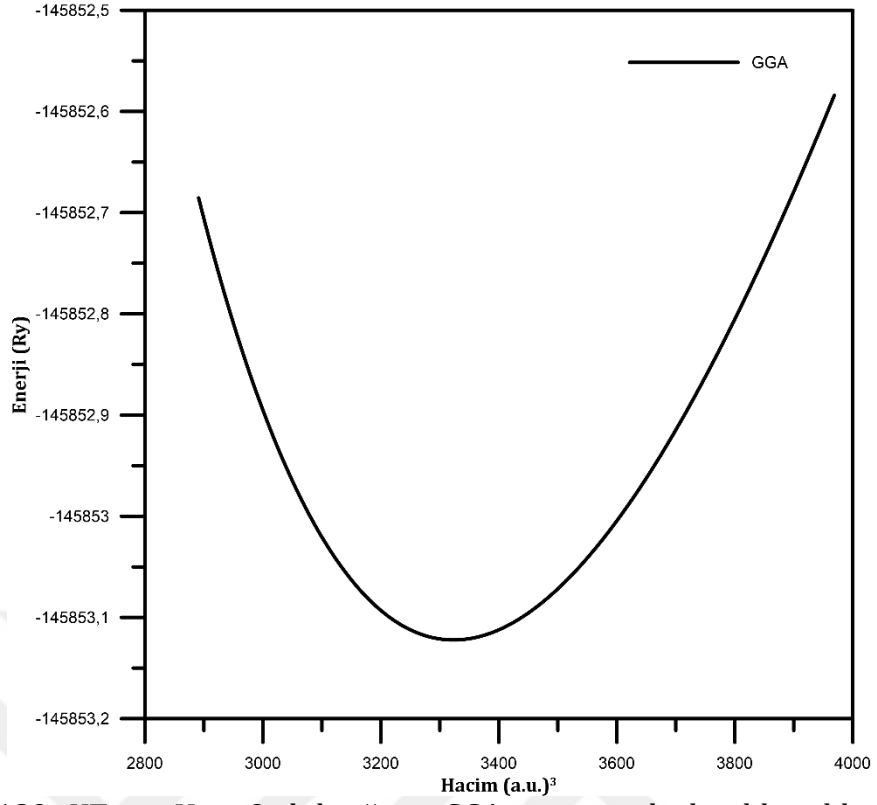
Şekil 4.126. $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



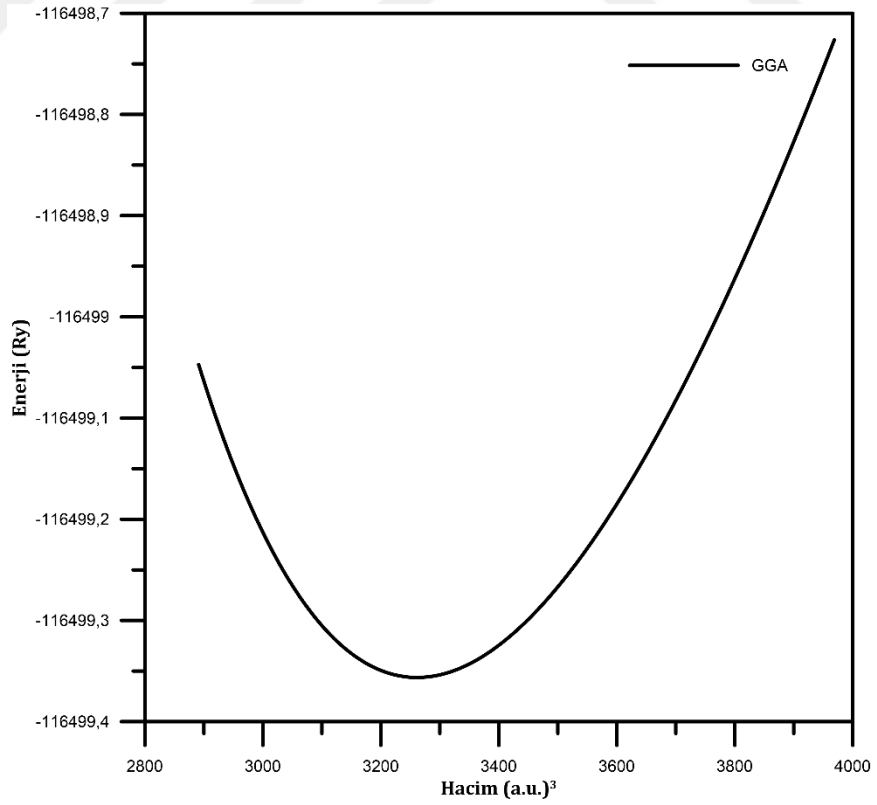
Şekil 4.127. $\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiminin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



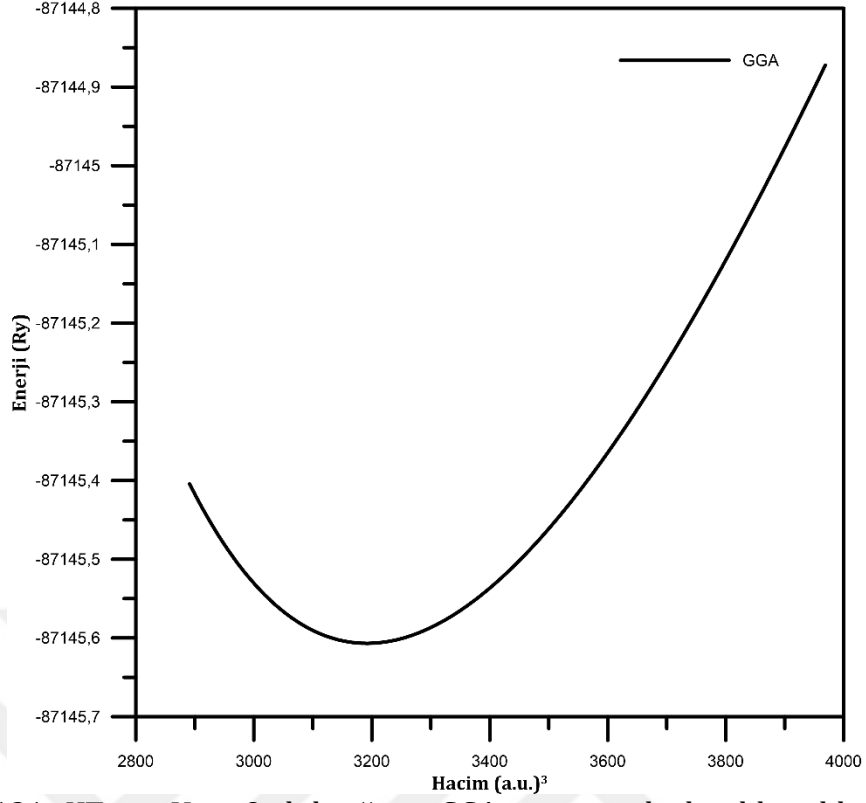
Şekil 4.128. $\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiminin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



Şekil 4.129. $\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiminin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



Şekil 4.130. $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiminin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri



Şekil 4.131. $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin GGA potansiyeli ile elde edilen enerji-hacim grafikleri

Çizelge 4.15. V katkılı KTaO_3 bileşiklerinin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).

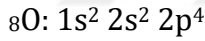
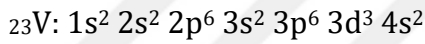
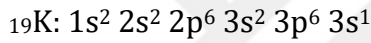
Bileşik	Örgü Parametresi (\AA)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$	7,8718	215,37	4,42	-233736,24
$\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$	7,8469	196,58	1,97	-204397,05
$\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$	7,7860	210,19	4,46	-175057,87
$\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$	7,7407	173,46	1,80	-145718,71
$\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$	7,6832	203,61	4,32	-116379,57
$\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$	7,6296	215,28	4,91	-87040,45

Çizelge 4.16. V katkılı KTaO_3 bileşiklerinin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (\AA), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).

Bileşik	Örgü Parametresi (\AA)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$	8,0206	184,22	4,44	-233914,49
$\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$	7,9803	181,75	4,86	-204560,69
$\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$	7,9418	177,79	4,52	-175206,90
$\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$	7,8974	175,33	4,56	-145853,12
$\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$	7,8483	172,24	4,40	-116499,36
$\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$	7,7922	171,69	4,61	-87145,61

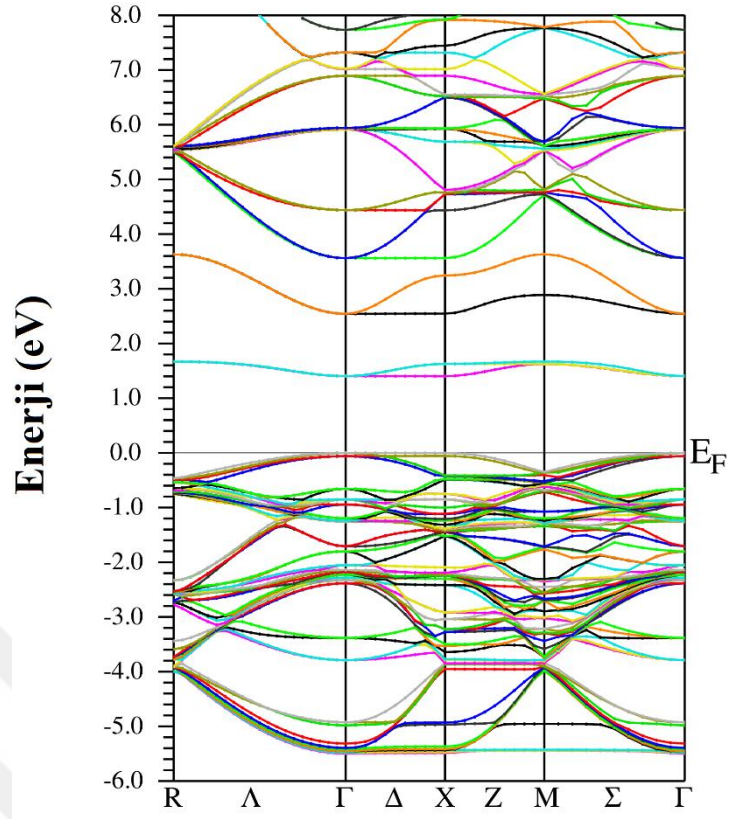
4.5.2. V katkılı KTaO_3 bileşiklerin elektronik özellikleri

V katkılı KTaO_3 bileşiklerini oluşturan elementlerin elektronik dizilimleri:

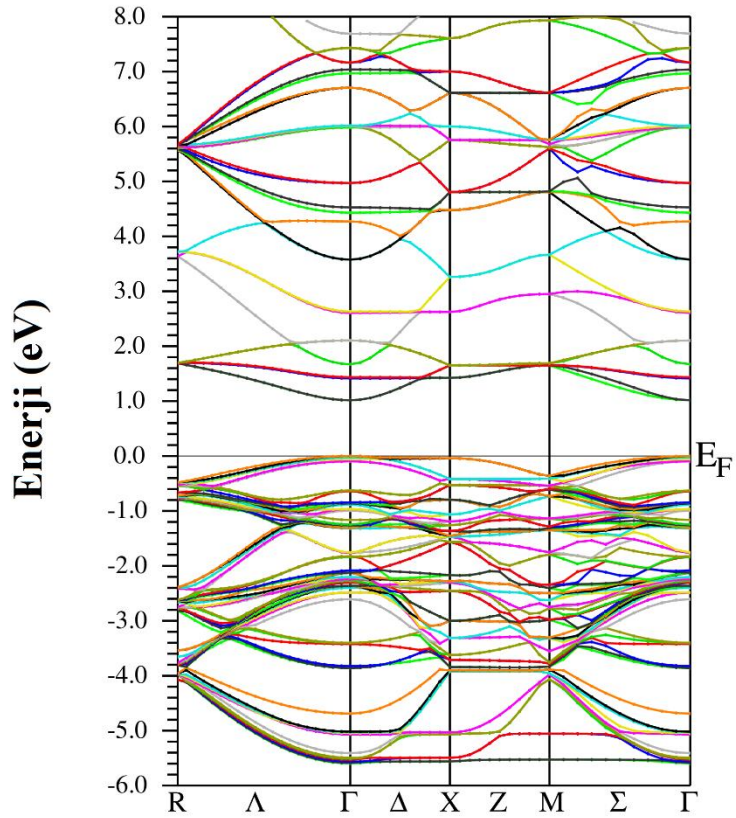


olarak alınmıştır. V katkılı bileşiklerde olduğu gibi, Fermi enerji düzeyi sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir. Hesaplamalar genelleştirilmiş gradyant yaklaşımı (GGA), Perdew vd. (1996), kullanıldı ve yasak band enerji hesaplamalarını iyileştirilmek için düzeltilmiş Tran-Blaha (TB-mBJ) (Tran ve Blaha 2009), değişim potansiyeli kullanıldı. V katkılı KTaO_3 bileşiklerinin elektronik özelliklerini incelemek için bant enerjileri ve durum yoğunlukları hesaplandı. Şekil 4.132-Şekil 4.137 de görüldüğü gibi V katkılı KTaO_3 bileşikleri yarıiletken bir malzemedir. Ayrıca band grafiklerinde iletkenlik bandının minimum ve valans bandını maksimum noktası Γ dır (Şekil 4.132-Şekil 4.137). $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin yasak band enerjisi 2,54 eV olarak hesaplandı. Ayrıca $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin yasak band aralığı içerisinde 1,41 eV ile 1,68 ev aralığında tuzak bandının olduğu görüldü. Valans band ile tuzak band arasındaki enerji değeri 1,40 eV hesaplandı. Yasak band enerjisi elektromanyetik spektrumda görünür

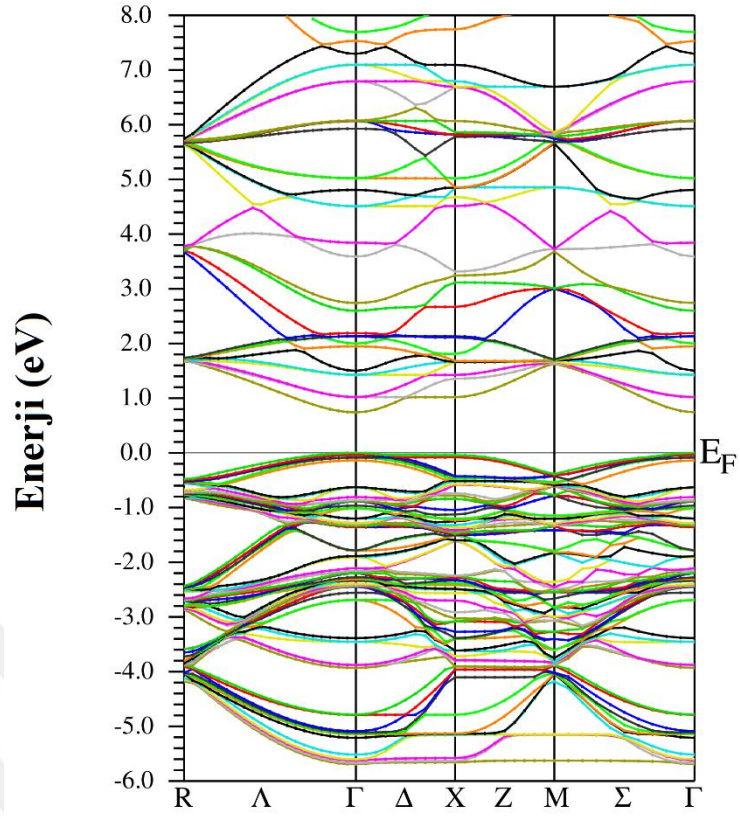
bölgeye karşılık gelirken, tuzaklama bandı ise kızıl altı bölgeye karşılık gelmektedir. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiklerinin yasak band enerjisi ise sırasıyla 1,01 eV, 0,74 eV, 0,51 eV, 0,53 eV ve 0,56 olarak hesaplandı. Yasak band grafikleri incelendiğinde $x=0,500$, $0,625$ ve $0,750$ değerleri için band enerjileri hemen hemen değişmemektedir. Yasak band enerjileri elektromanyetik spektrumda kızıl altı bölgeye karşılık gelmektedir. Dalga boyları ise sırasıyla 1227,72 nm, 1675,68 nm, 2431,37 nm, 2339,62 nm ve 2214,29 nm dir. Band yapı ve toplam durum yoğunluğu eğrileri bu bileşiğin yarıiletken özellikte olduğunu gösterir. Valans band içerisinde O atomunun 2p-orbitalleri baskındır. V katkısı ile valans band içerisinde V atomunun 3d-orbitallerinin etkisi artmaktadır. Ayrıca valans band içerisinde Ta atomunun 5d-orbitalleri ve V atomunun 3d-orbitalleri ile O atomunun 2p-orbitalleri arasında hibritleşme gözlenmektedir (Şekil 4.138-Şekil 4.149). Bu hibritleşme Ta ve V ile O atomu arasında kovalent bağ olduğunu ortaya koymaktadır. İletkenlik bandında ise Ta atomunun 5d-orbitalleri ve V atomunun 3d-orbitalleri baskındır. Yasak band enerjisindeki azalma ise V atomlarının 3d-orbitallerinden kaynaklanmaktadır. V katkısı arttıkça 4d-orbitallerinin iletkenlik bandı içerisinde etkisinin arttığı kısmı durum yoğunluğu eğrilerinden (Şekil 4.138-Şekil 4.149) açıkça görülmektedir.



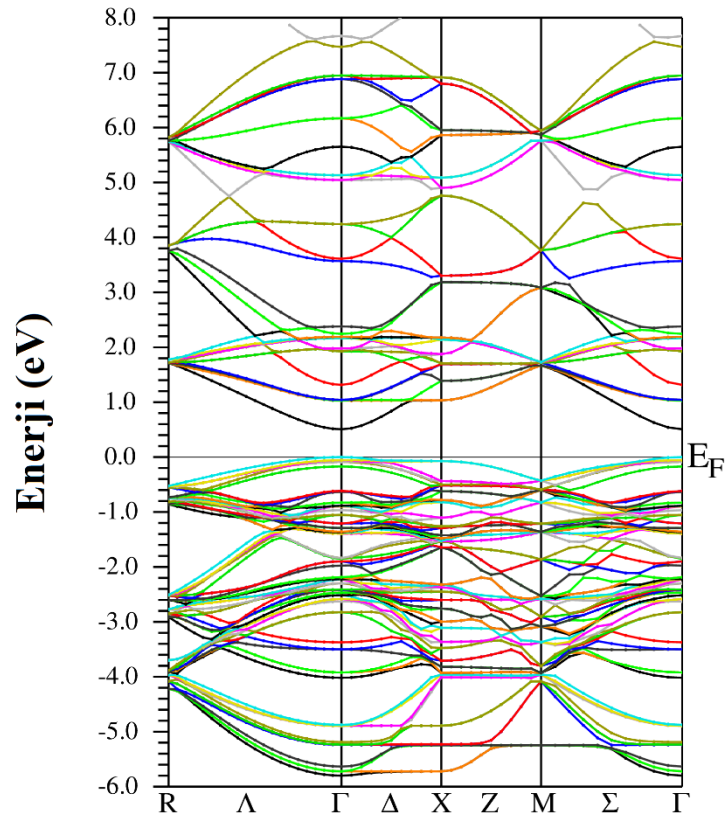
Şekil 4.132. $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ band yapı grafiği



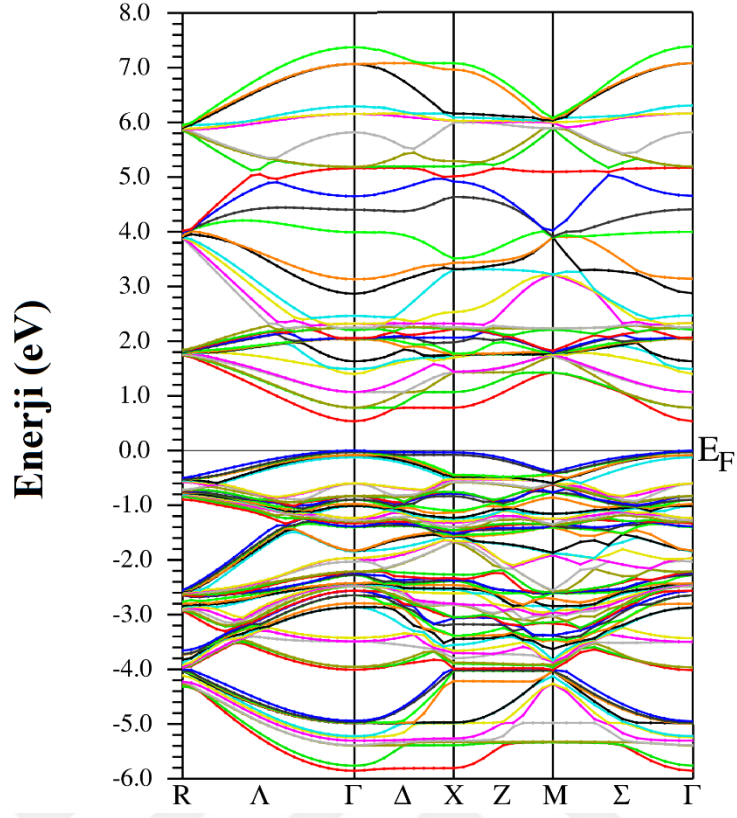
Şekil 4.133. $\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$ band yapı grafiği



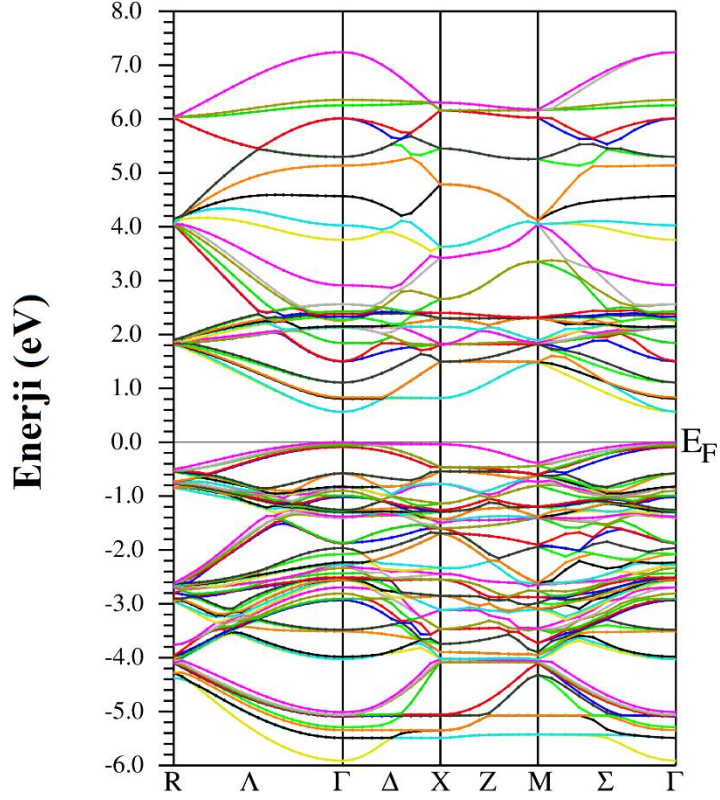
Şekil 4.134. $\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$ band yapı grafiği



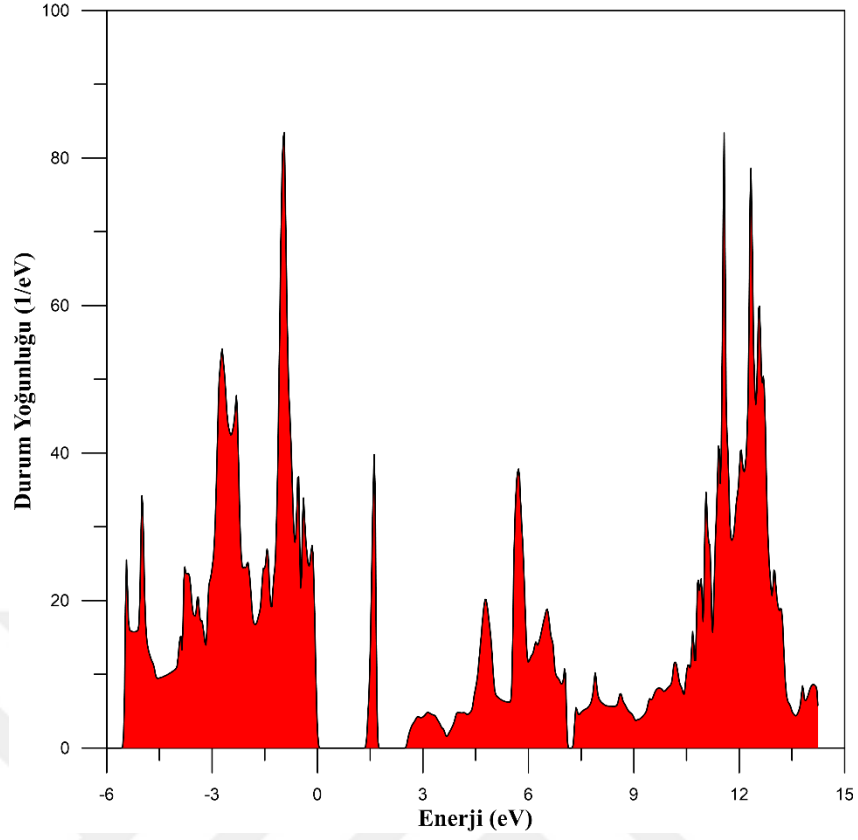
Şekil 4.135. $\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$ band yapı grafiği



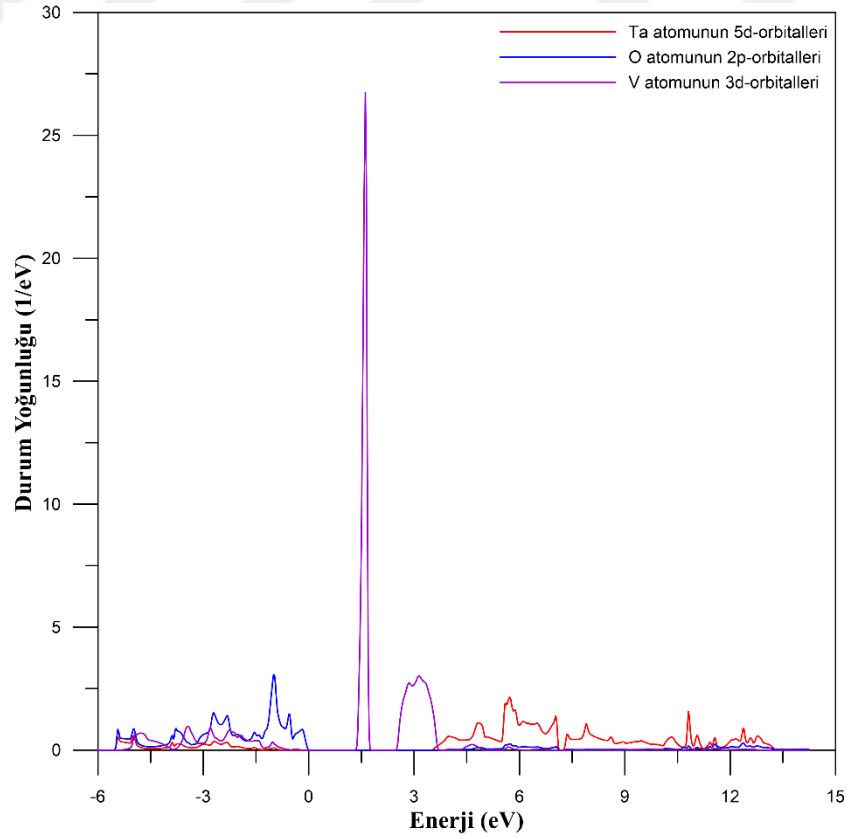
Şekil 4.136. $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ band yapı grafiği



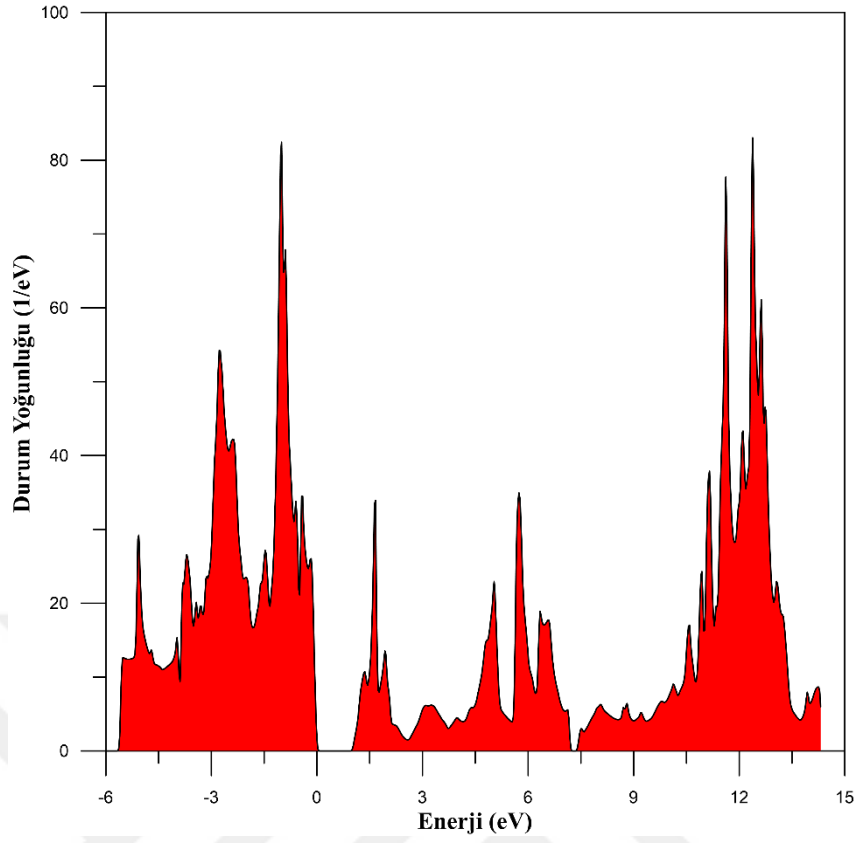
Şekil 4.137. $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ band yapı grafiği



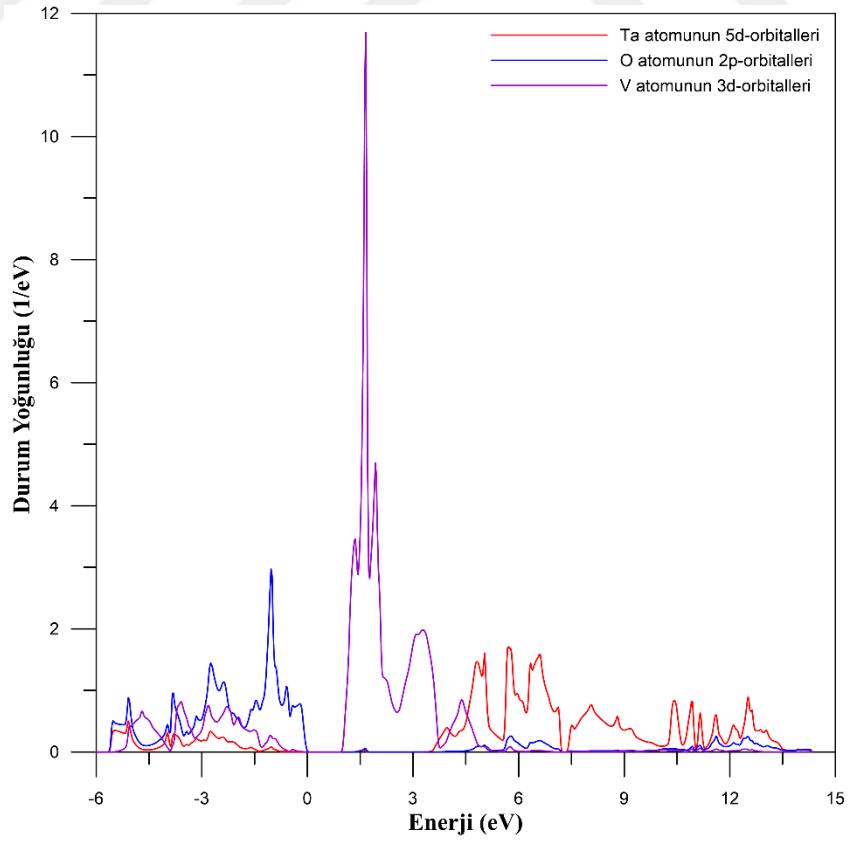
Şekil 4.138. $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



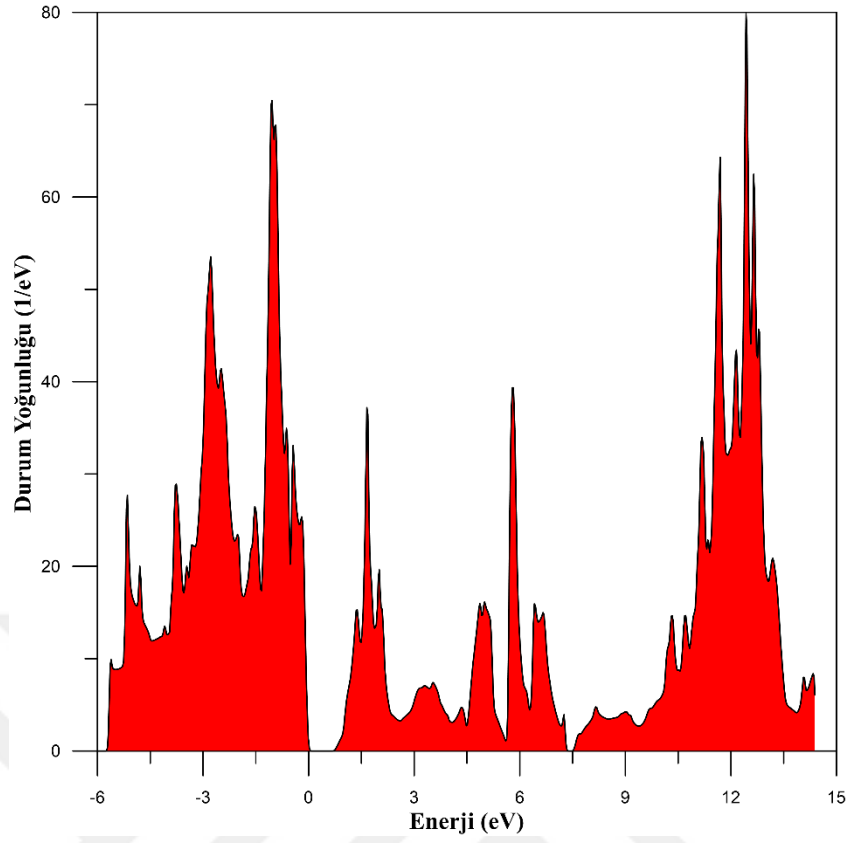
Şekil 4.139. $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



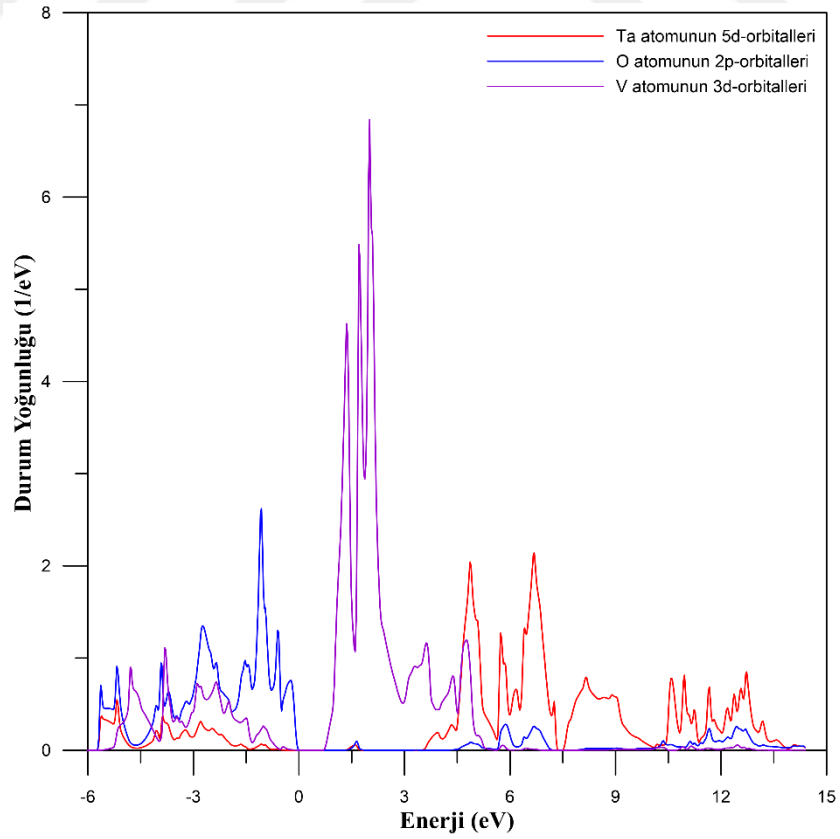
Şekil 4.140. $\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



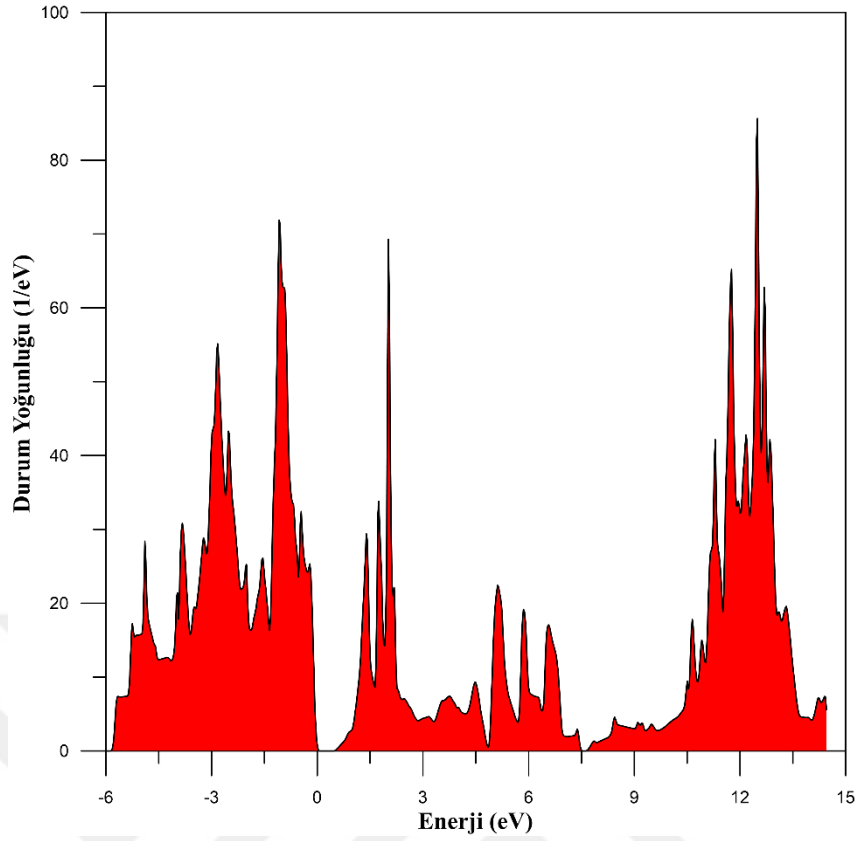
Şekil 4.141. $\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



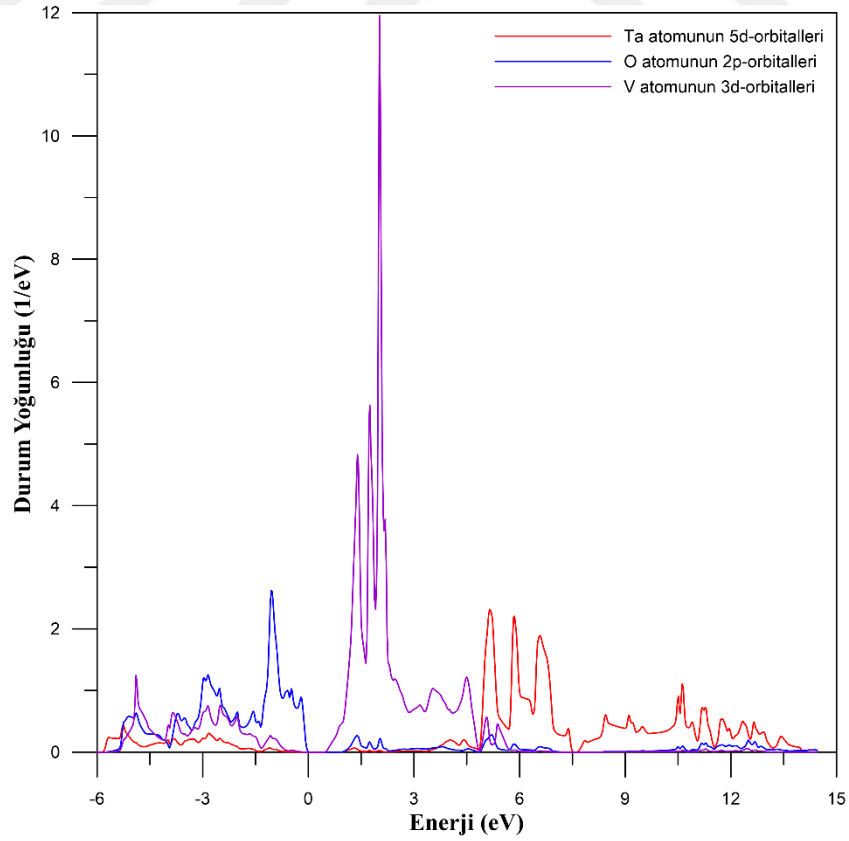
Şekil 4.142. $\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



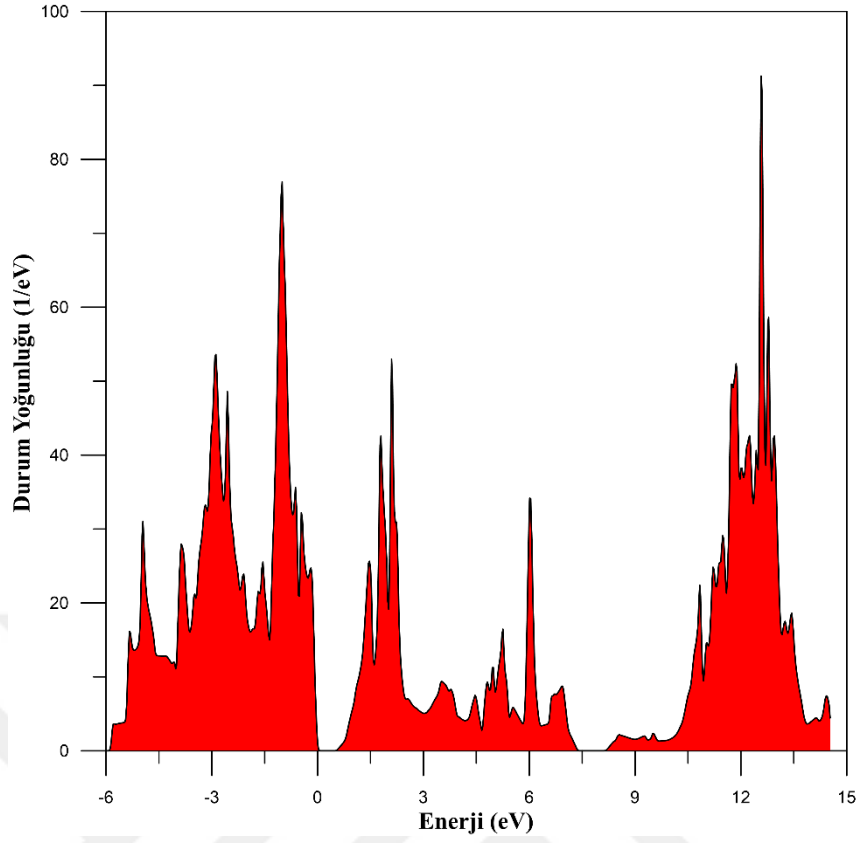
Şekil 4.143. $\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



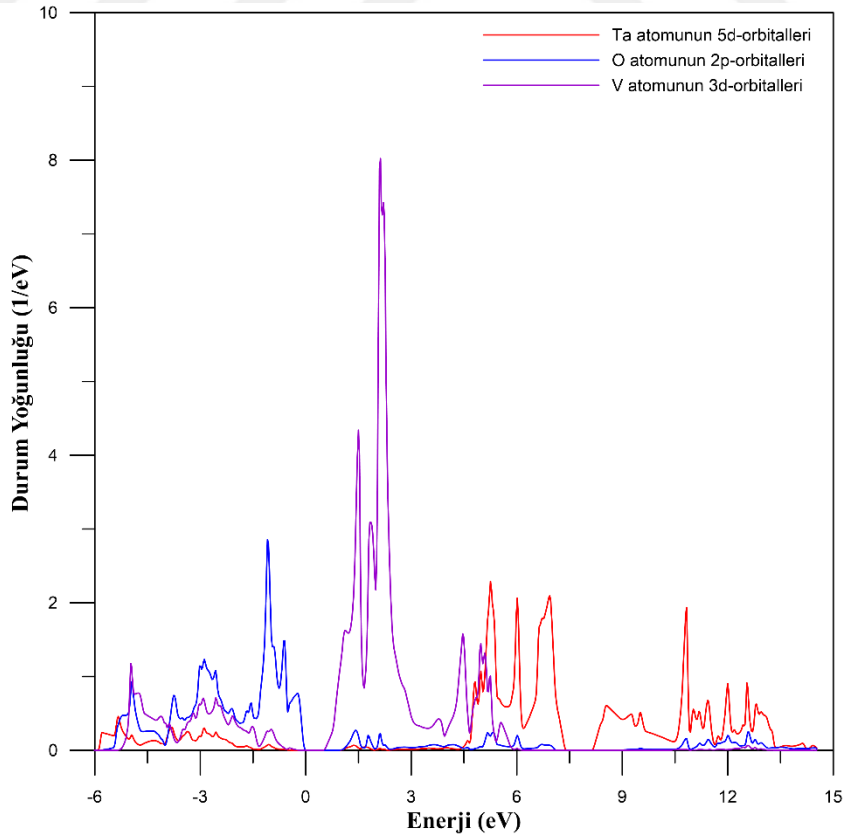
Şekil 4.144. $\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



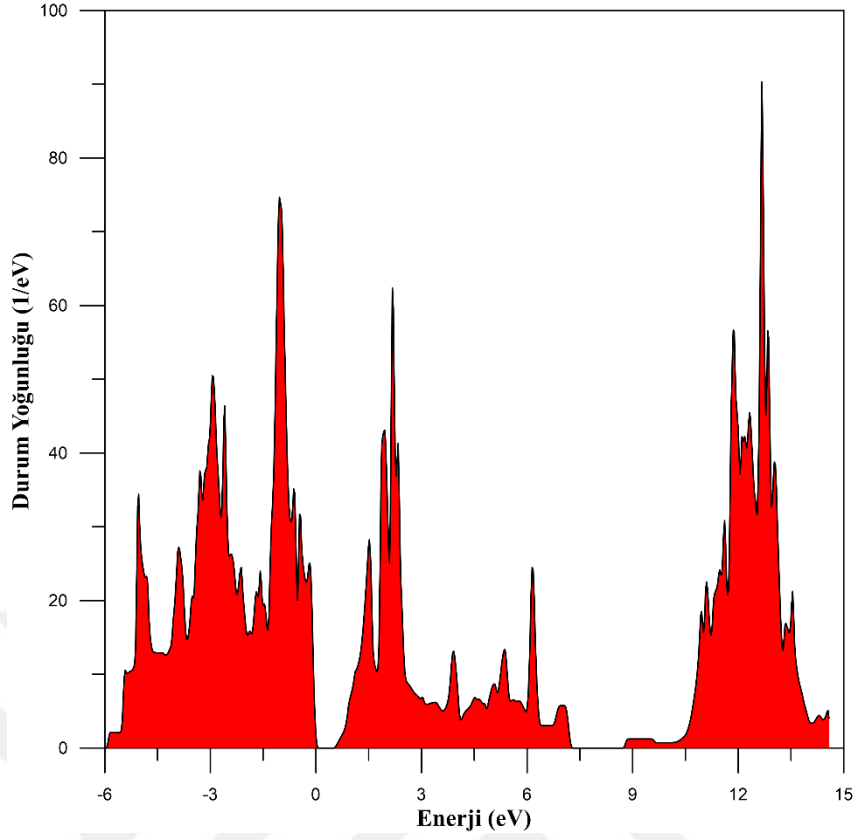
Şekil 4.145. $\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



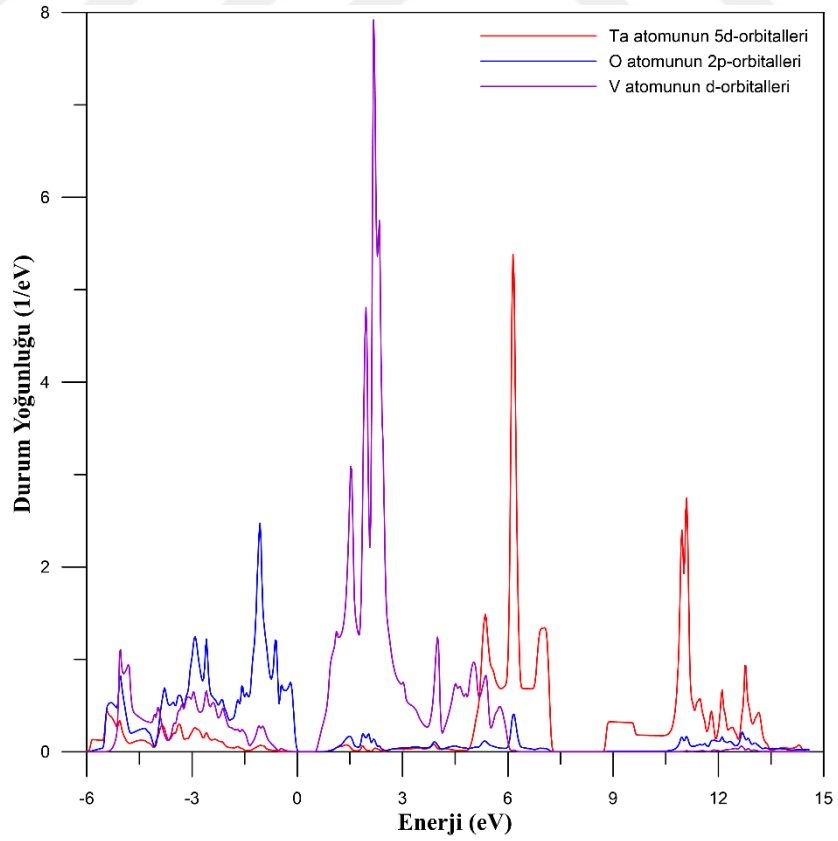
Şekil 4.146. $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 4.147. $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri



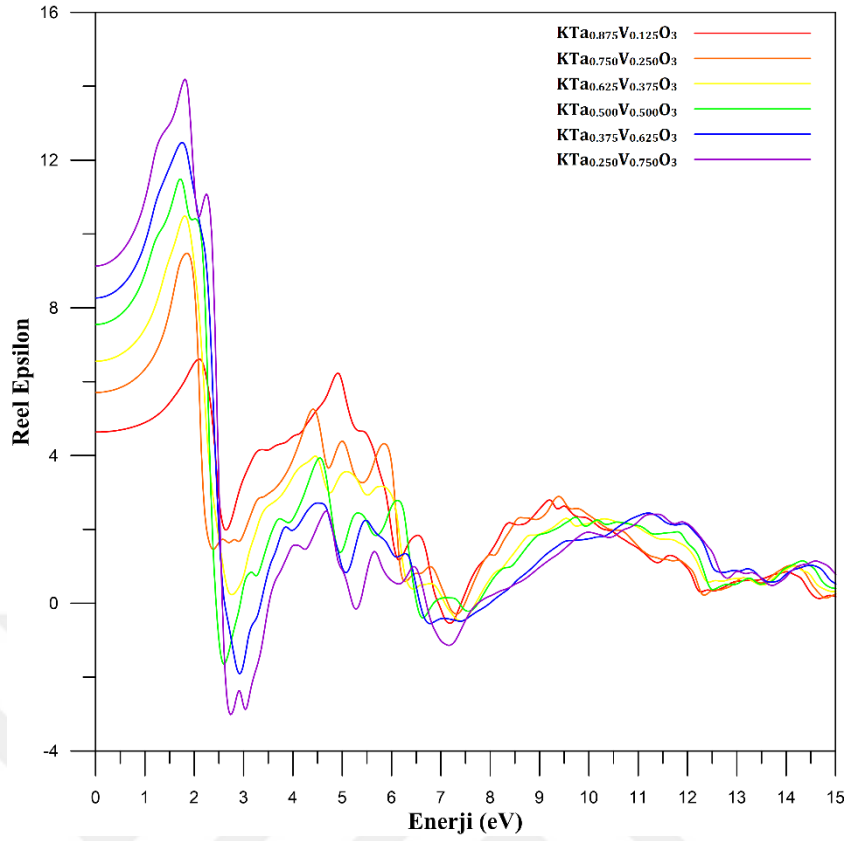
Şekil 4.148. $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin toplam durum yoğunluğu eğrileri



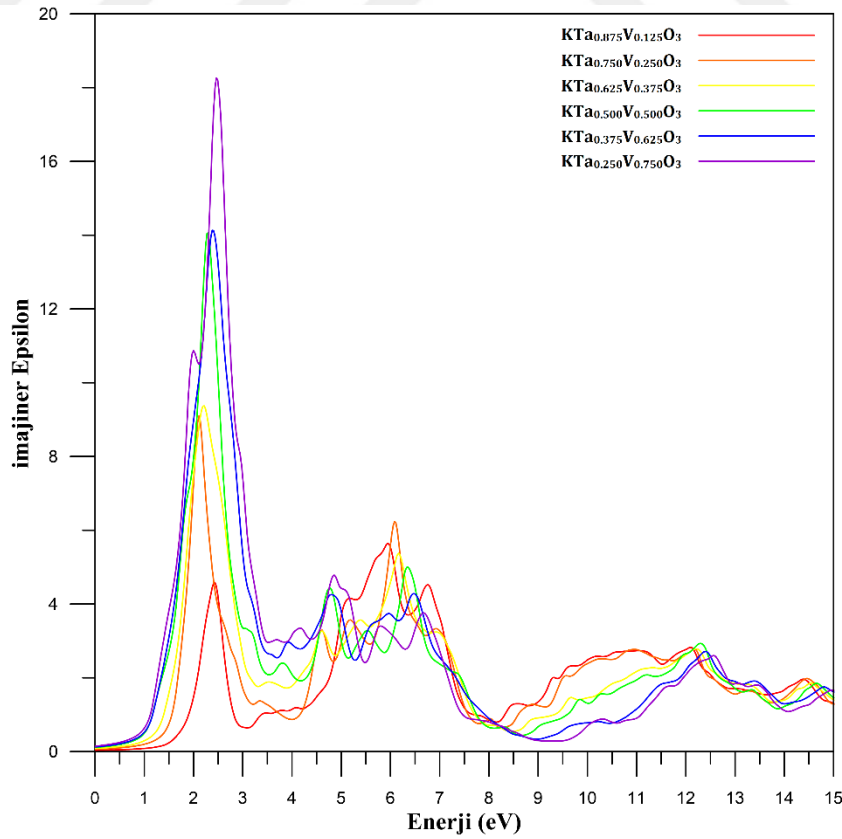
Şekil 4.149. $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri

4.5.3. V katkılı KTaO₃ bileşiklerin optik özellikleri

V katkılı bileşiklerin optik özellikleri Sb ve Nb katkılı bileşiklerde olduğu gibi dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. Dielektrik fonksiyonları yardımıyla yansıma katsayıları (R), soğurma katsayıları (α), kırılma indisi (n), sönüm katsayısı ve enerji kayıp fonksiyonları (L) hesaplandı. Nb katkılı bileşiklere ait reel ve imajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4.150 ve Şekil 4.151 de gösterilmektedir. KTa_{0.875}V_{0.125}O₃, KTa_{0.750}V_{0.250}O₃, KTa_{0.625}V_{0.375}O₃, KTa_{0.500}V_{0.500}O₃, KTa_{0.375}V_{0.625}O₃ ve KTa_{0.250}V_{0.750}O₃ bileşikleri için dielektrik sabitleri ($\epsilon_1(o)$) sırasıyla 4,64, 5,71, 6,55, 7,55, 8,27 ve 9,13 olarak hesaplandı. En yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji Çizelge 4.17' de verilmiştir. Dielektrik sabiti değeri kızıl altı bölgede artış sergilerken görünür bölgede düşüşe geçmiştir. Ayrıca reel dielektrik sabitinin 0-15 eV aralığında negatife düştüğü bölgelerde metalik davranış sergilediğini gösterir (Şekil 4.150). Metalik davranış sergiledikleri enerji aralıkları Çizelge 4.18'de verilmiştir. KTa_{0.875}V_{0.125}O₃, KTa_{0.750}V_{0.250}O₃ ve KTa_{0.625}V_{0.375}O₃ bileşikleri yalnız mor ötesi bölgede metalik davranış sergilemektedir. KTa_{0.500}V_{0.500}O₃, KTa_{0.375}V_{0.625}O₃ ve KTa_{0.250}V_{0.750}O₃ bileşikleri ise hem görünür bölge hem de mor ötesi bölgede metalik davranış sergilemektedir. V katkılı KTaO₃ bileşiklerine ait imajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4.150'de gösterilmektedir. İmajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafiğinde oluşan pikler valans bandından iletim bandına geçen elektronların optik geçişlerini temsil etmektedir. Şekil 4.151 den elde edilen V katkılı bileşikler için optik geçişleri temsil eden, ilk üç pik için enerji değerleri Çizelge 4.19' da verilmiştir. Ayrıca yasak band aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırları (TSS) için elde edilen enerji değerleri (Çizelge 4.19) yasak band enerjileri ile uyumludur. V katkısı ile optik geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlendi. TSS enerjileri elektronların $\Gamma-\Gamma$ geçişlerine karşılık gelir.



Şekil 4.150. V katkılı bileşikler için hesaplanan reel dielektrik fonksiyonları



Şekil 4.151. V katkılı bileşikler için hesaplanan imajiner dielektrik fonksiyonları

Çizelge 4.17. V katkı bileşikler için en yüksek dielektrik sabiti ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

Bileşik	Reel dielektrik sabiti $\epsilon(\omega)$	Enerji değeri
KTa _{0.875} V _{0.125} O ₃	6,61	2,08 eV-2,11 eV
KTa _{0.750} V _{0.250} O ₃	9,48	1,84 eV-1,86 eV
KTa _{0.625} V _{0.375} O ₃	10,49	1,81 eV
KTa _{0.500} V _{0.500} O ₃	11,49	1,73 eV
KTa _{0.375} V _{0.625} O ₃	12,48	1,76 eV
KTa _{0.250} V _{0.750} O ₃	14,19	1,81 eV

Çizelge 4.18. V katkı bileşiklerin metalik davranış sergiledikleri enerji değerleri

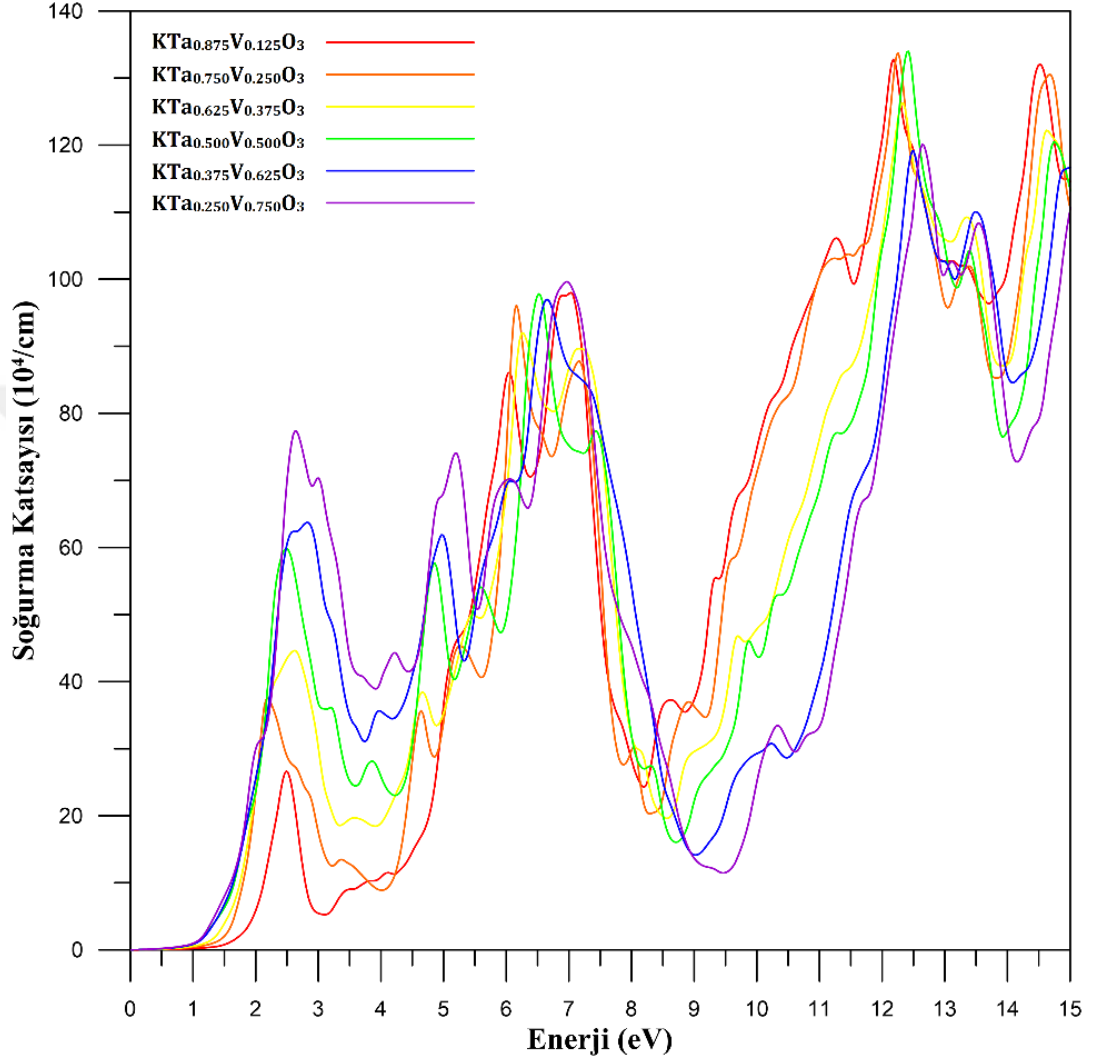
Bileşik	Enerji değeri
KTa _{0.875} V _{0.125} O ₃	6,95 eV-7,39 eV
KTa _{0.750} V _{0.250} O ₃	7,17 eV-7,47 eV
KTa _{0.625} V _{0.375} O ₃	7,09 eV-7,69 eV
KTa _{0.500} V _{0.500} O ₃	2,46 eV-2,93 eV 6,52 eV-6,84 eV 7,39 eV -7,74 eV
KTa _{0.375} V _{0.625} O ₃	2,63 eV -3,33 eV 6,60 eV-7,99 eV
KTa _{0.250} V _{0.750} O ₃	5,27 eV-3,50 eV 6,71 eV-7,74 eV

Çizelge 4.19. V katkı bileşikler için optik geçişleri temsil eden ilk üç pik için enerji değerleri ve temel soğurma sınırları (TSS) değerleri

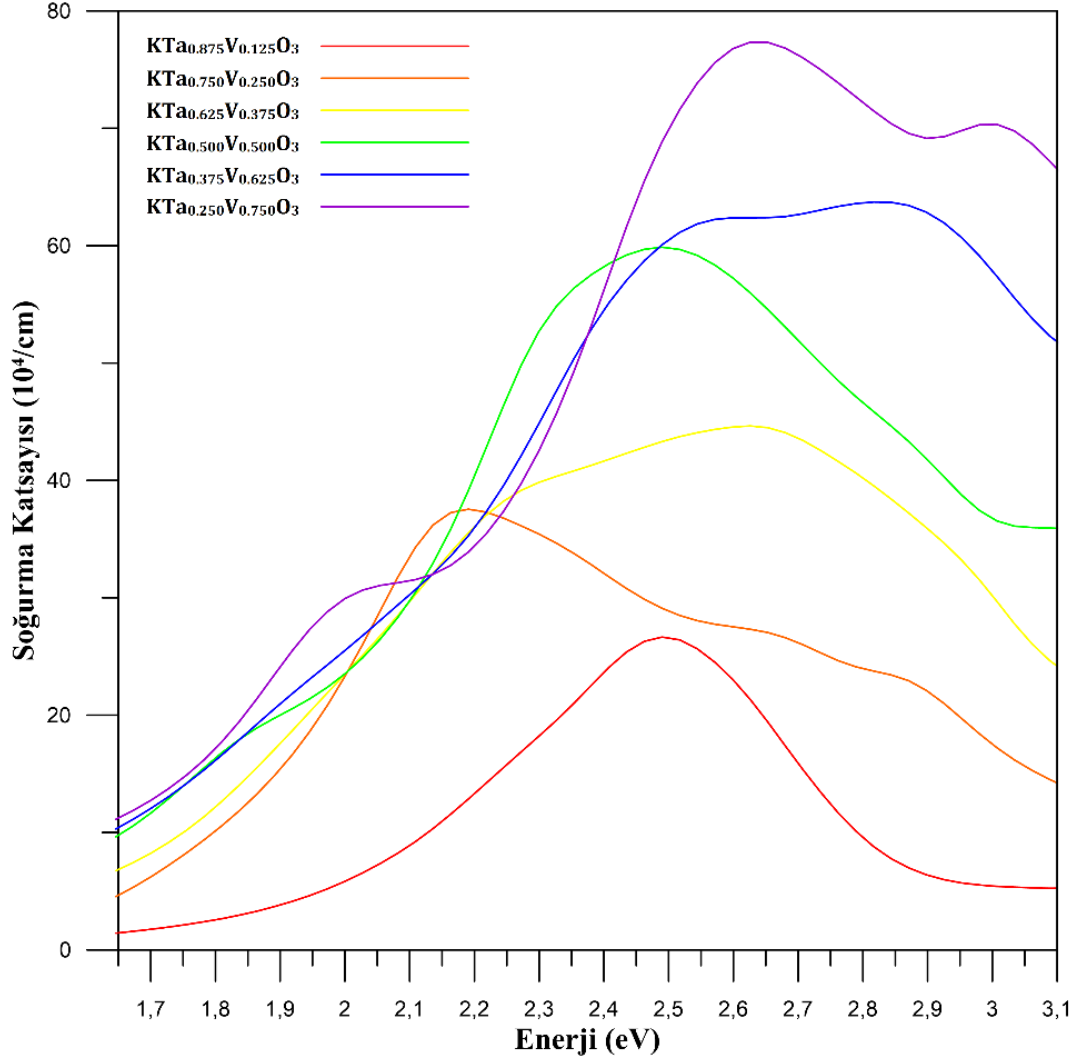
Bileşik	E ₁ (eV)	E ₂ (eV)	E ₃ (eV)	TSS (eV)
KTa _{0.875} V _{0.125} O ₃	2,44	5,95	6,76	1,43
KTa _{0.750} V _{0.250} O ₃	2,11	4,61	5,18	0,94
KTa _{0.625} V _{0.375} O ₃	2,22	4,61	5,40	0,72
KTa _{0.500} V _{0.500} O ₃	2,30	4,78	5,54	0,50
KTa _{0.375} V _{0.625} O ₃	2,38	3,93	4,80	0,53
KTa _{0.250} V _{0.750} O ₃	2,00	2,46	3,71	0,56

V katkı bileşiklere ait soğurma spektrumları Şekil 4.152 ve Şekil 4.153 de gösterilmektedir. V katkı bileşikler için elde edilen temel soğurma sınırı (TSS) enerjileri yasak band hesaplamaları ile uyum içerisindedir. Soğurma spektrumunda görülen diğer pikler ise bandlar arasındaki optik geçişlere karşılık gelmektedir. V katkı bileşikler için soğurma elektromanyetik spektrumun kızılötesi bölgesinde artışa geçmektedir. Görünür bölge içerisinde

$\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiđi sođurma katsayısı en yüksek malzemedir (2,7 eV civarı). V katkılı bileşikler için sođurmanın en yüksek olduđu bölge ise elektromanyetik spektrumda morötesi bölgeye karşılık gelmektedir.

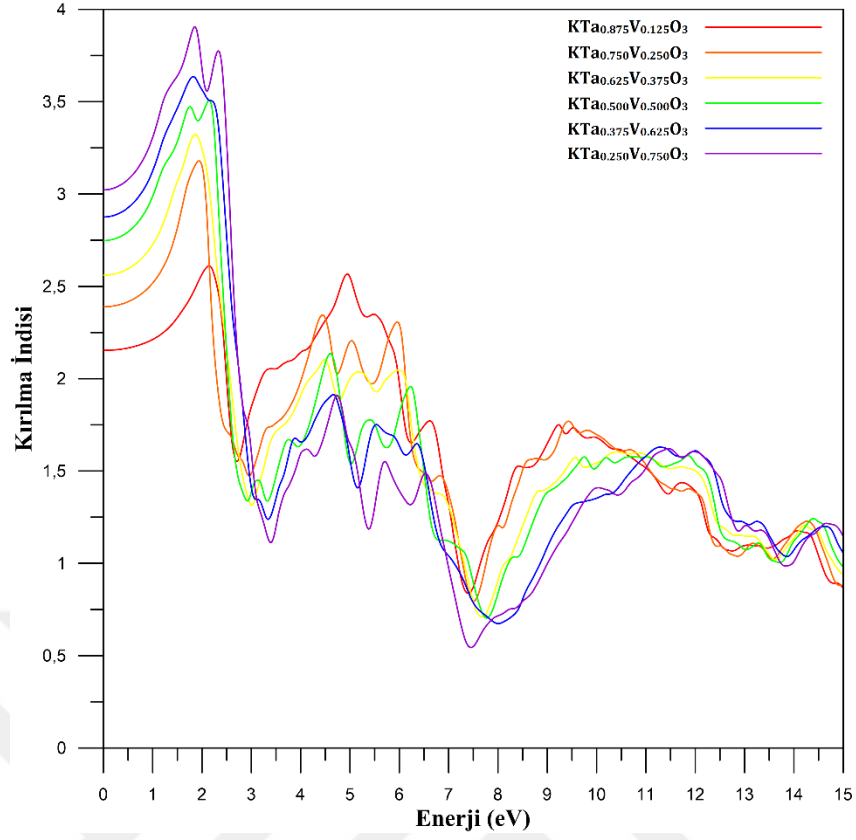


Şekil 4.152. V katkılı bileşikler için hesaplanan sođurma spektrumu

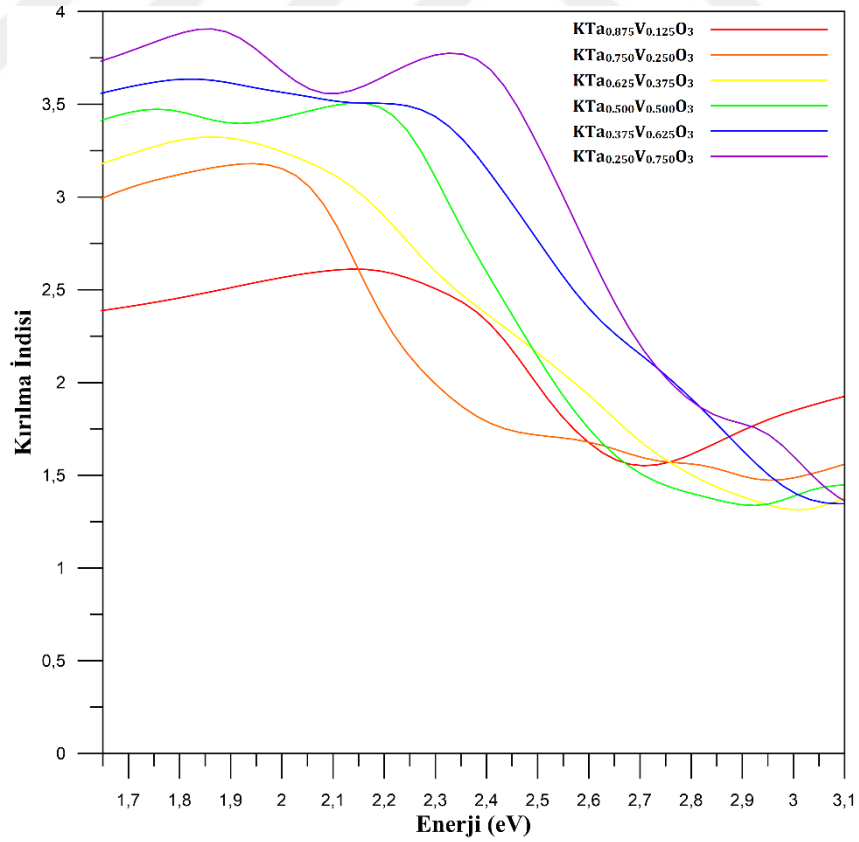


Şekil 4.153. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için soğurma spektrumu

V katkılı bileşiklere ait kırılma indisi spektrumları Şekil 4.154 ve Şekil 4.155 de gösterilmektedir. $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.750}\text{V}_{0.250}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.625}\text{V}_{0.375}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.500}\text{V}_{0.500}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ bileşikleri için kırılma indisleri ($n(0)$) sırasıyla 2,15, 2,39, 2,56, 2,75, 2,88 ve 3,02 olarak hesaplandı. Ayrıca, en yüksek kırılma indisi değerine görünür bölgede ulaşırken, bu değere karşılık gelen enerji ve kırılma indisi değerleri Çizelge 4.20' de verilmiştir. Elektromanyetik spektrumun görünür bölgesinde kırılma indisi en yüksek bileşik $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ dir. Kırılma indisleri, elektromanyetik spektrumun kızılötesi bölgesinde artış sergilemektedir. Kırılma indisleri görünür bölgede maksimum değere ulaşana kadar artarken bu bölge içerisinde ikinci pik değerlerine mor ötesi bölgede ulaşmaktadır.



Şekil 4.154. V katkılı bileşikler için hesaplanan kırılma indisi spektrumu



Şekil 4.155. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için kırılma indisi spektrumu

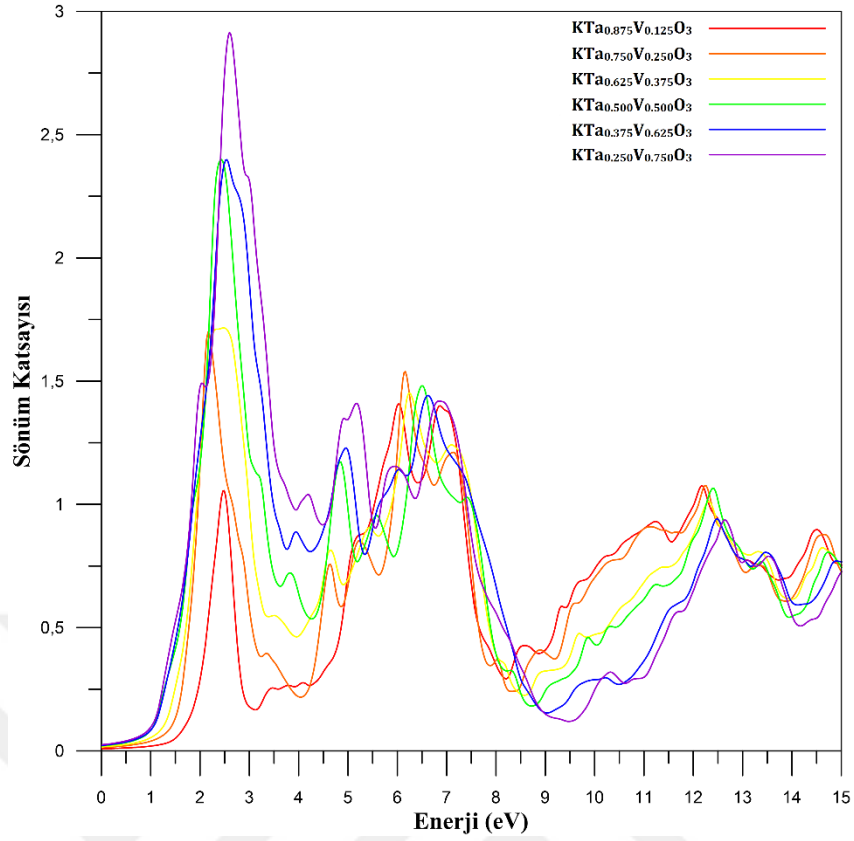
Çizelge 4.20. V katkılı bileşikler için en yüksek kırılma indisi ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

Bileşik	Kırılma İndisi	Enerji değeri
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$	2,61	2,11 eV-2,16 eV
$KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$	3,18	1,92 eV-1,95 eV
$KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$	3,32	1,84 eV-1,89 eV
$KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$	3,47	1,73 eV-1,78 eV
$KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$	3,64	1,81 eV-1,84 eV
$KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$	3,91	1,86 eV

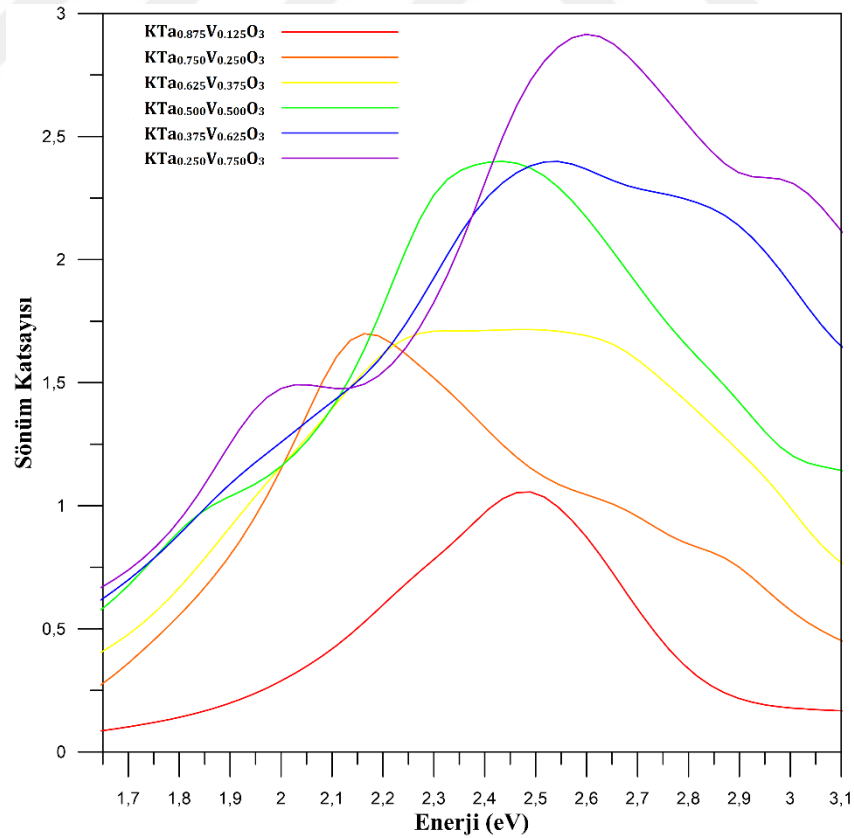
V katkılı bileşikler için sönüm katsayısı değeri kızılötesi bölgede hemen hemen sifıra eşittir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiği en yüksek sönüm katsayısı değerine morötesi bölgede ulaşırken diğer tüm V katkılı bileşikler en yüksek değerlerine görünür bölgede ulaşmaktadır. V katkılı tüm bileşikler için sönüm katsayısı görünür bölgede ilk piklerini verdikten sonra tekrar düşüşe geçmektedir. V katkılı bileşikler için elde edilen en yüksek sönüm katsayısı ve bu katsayıya karşılık gelen enerji değeri Çizelge 4.21 de verilmiştir. Sönüm katsayısı spektrumunda mor ötesi bölgede görülen diğer pikler ise bandlar arasındaki optik geçişlere karşılık gelmektedir. V katkılı bileşikler için elde edilen sönüm katsayısının enerjiye bağlı grafiği Şekil 4.156 ve Şekil 4.157 de verilmiştir.

Çizelge 4.21. V katkılı bileşikler için en yüksek sönüm katsayısı ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

Bileşik	Sönüm katsayısı	Enerji değeri
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$	1,41	6,03 eV
$KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$	1,70	2,16 eV
$KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$	1,72	2,46 eV
$KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$	2,40	2,41 eV-2,44 eV
$KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$	2,40	2,52 eV-2,54 eV
$KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$	2,92	2,60 eV

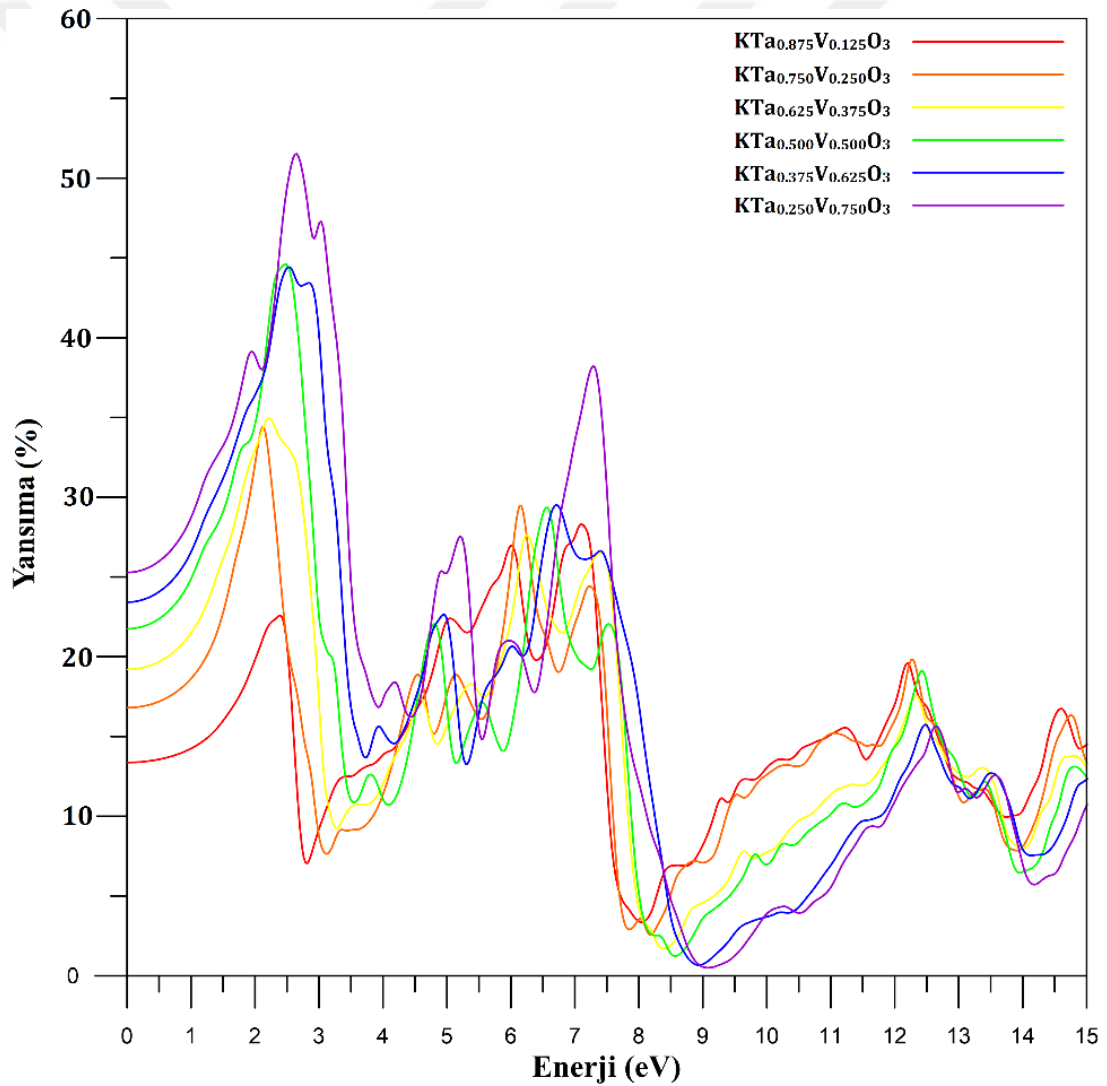


Şekil 4.156. V katkılı bileşikler için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu

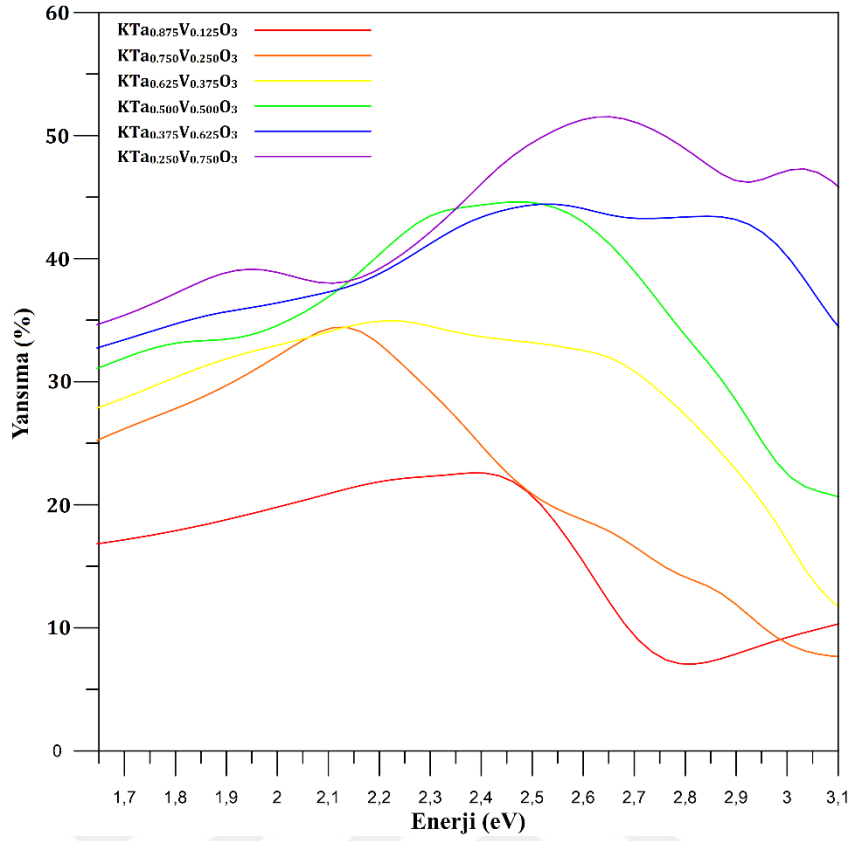


Şekil 4.157. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için sönüm katsayısı spektrumu

V katkıli bileşikler için elde edilen yansımaya spektrumu Şekil 4.158 ve Şekil 4.159 da gösterilmektedir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşikleri için yansımaya başlangıç değerleri sırasıyla %13, %17, %19, %22, %23 ve %25 dir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiği en yüksek yansımaya değerine morötesi bölgede ulaşırken diğer tüm V katkıli bileşikler en yüksek değerlerine görünür bölgede ulaşmaktadır. Görünür bölgede ise en yüksek yansımaya değeri (%52) $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiğine aittir. Ayrıca yansımaya spektrumu soğurma spektrumu ile benzerlik göstermektedir

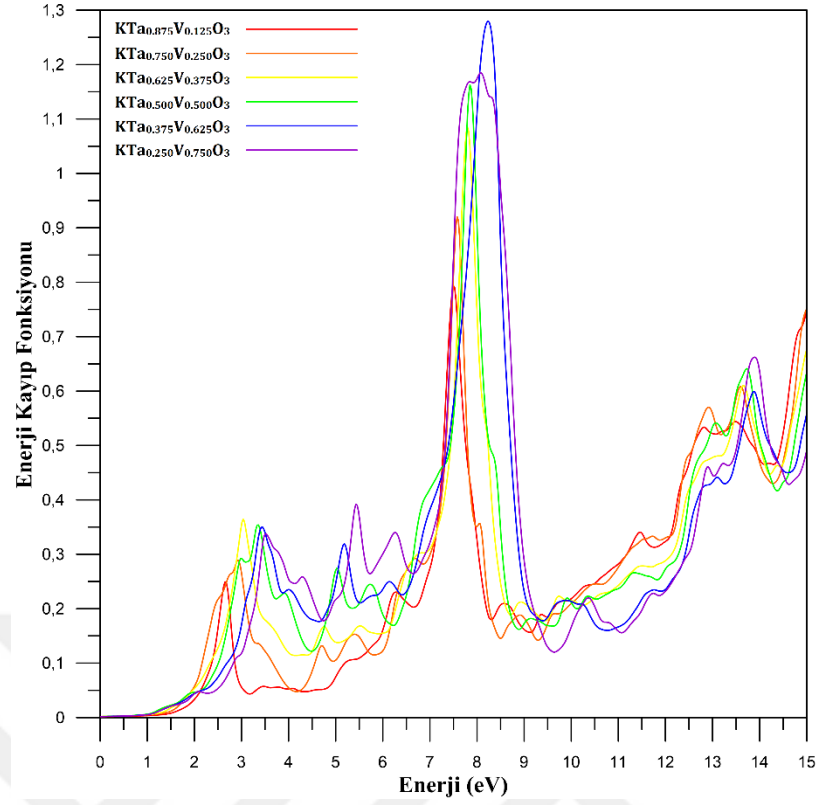


Şekil 4.158. V katkıli bileşikler için hesaplanan yansımaya spektrumu

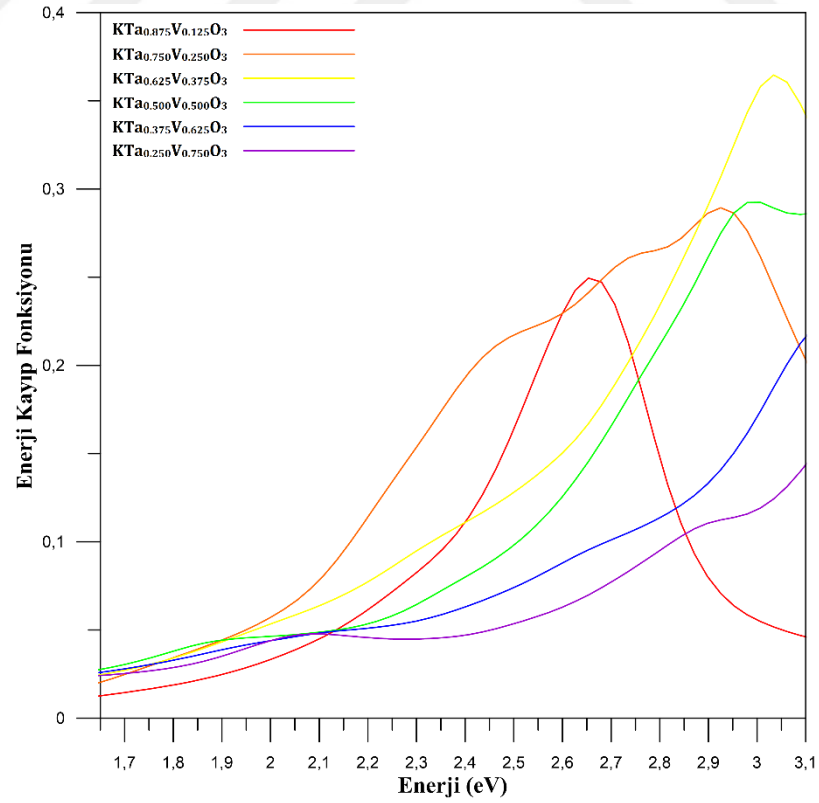


Şekil 4.159. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için yansıma katsayısı spektrumu

V katkılı KTaO_3 bileşikleri için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu Şekil 4.160 ve Şekil 4.161 da gösterilmektedir. Kızıl altı bölgede enerji kayıp fonksiyonu neredeyse sifıra eşittir. $\text{KTa}_{0.375}\text{V}_{0.625}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.250}\text{V}_{0.750}\text{O}_3$ bileşikleri ise artış sergilemektedir. V katkılı bileşikler için enerji kayıp fonksiyonunun en yüksek olduğu bölge ise elektromanyetik spektrumda morötesi bölgeye karşılık gelmektedir.



Şekil 4.160. V katkılı bileşikler için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu

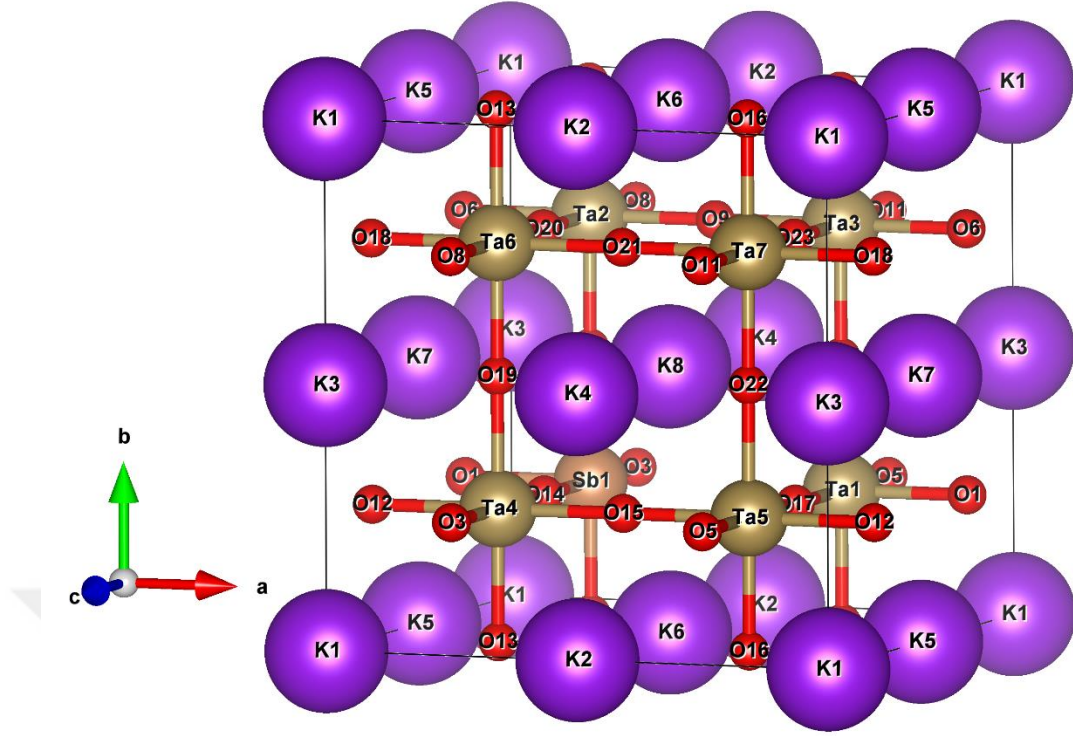


Şekil 4.161. V katkılı bileşikler hesaplanan elektromanyetik spektrumun görünür bölgesi için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu

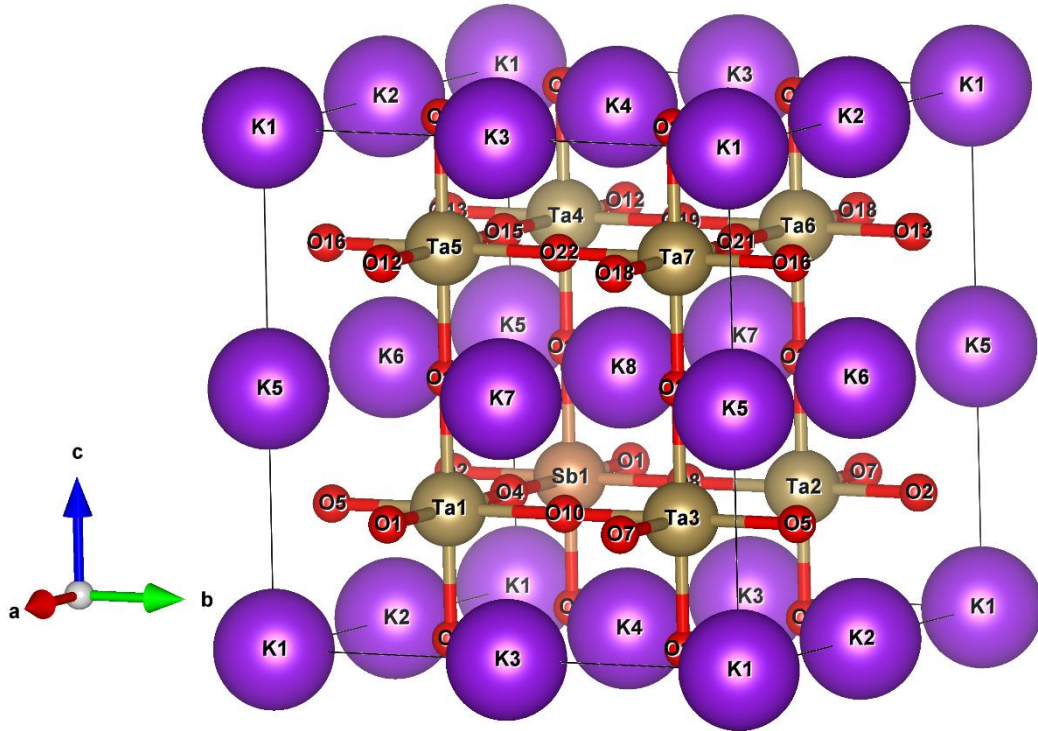
4.6. Kusurlu KTaO_3 Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri

4.6.1. Kusurlu KTaO_3 bileşiklerinin yapısal özellikleri

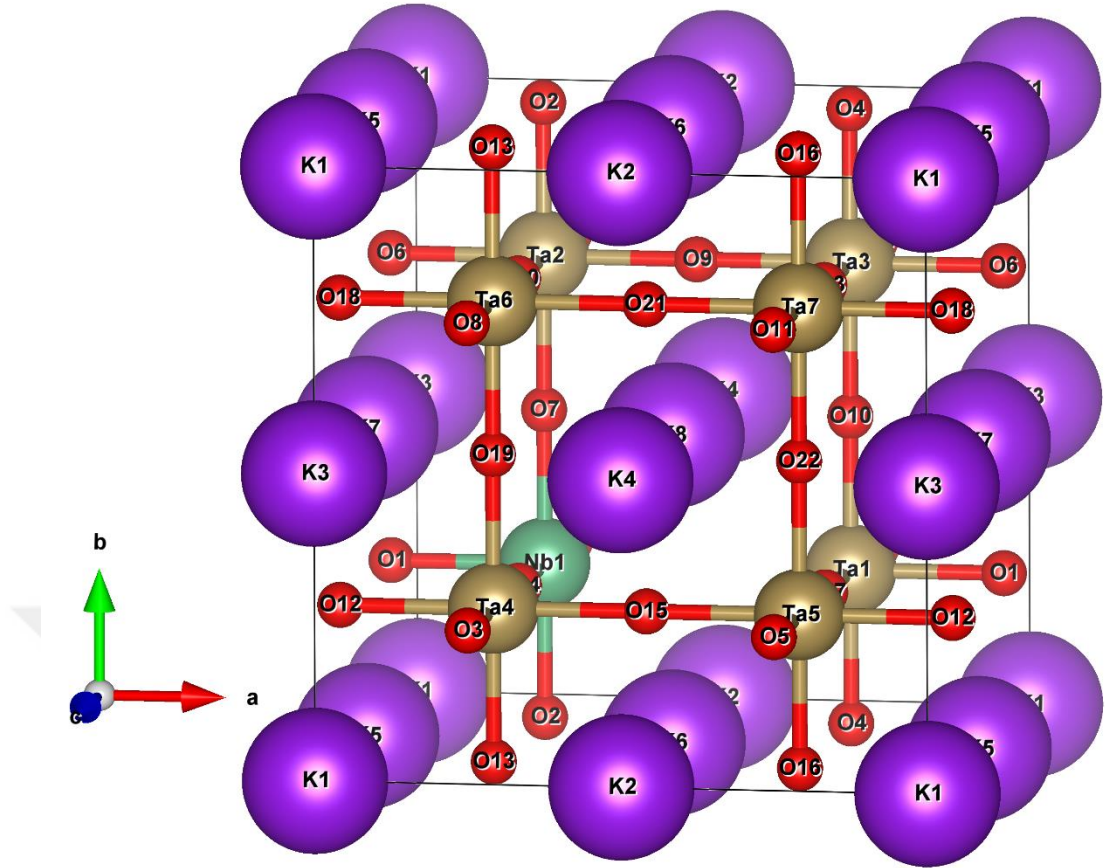
Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu KTaO_3 bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. Kristal yapıların oluşturulmasında $\text{KTa}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_{3-x}$ ($x=0,125$) kimyasal formülü kullanıldı. Kristal yapıyı oluşturmak için 39-atomlu $2\text{X}2\text{X}2$ süper hücre (Şekil 4.162-Şekil 4.167) kullanıldı. O^{-2} boşlukları iki farklı noktada oluşturuldu. İlk boşluk katkı atomu ile Ta atomu arasında yer alan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturuldu (Kusur-1). İkinci yapıda ise O^{-2} boşluğu Ta-Ta arasında bulunan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturuldu (Kusur-2). Simetri grubu ise basit kübik olan P1 seçildi. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu KTaO_3 bileşiklerinin yapısal özelliklerinin incelenmesinde ilk olarak her materyalin örgü sabitlerinin tayini yapıldı. Bu hesaplamalar yapılırken denge durumu civarında farklı örgü sabitleri için enerji değerleri LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak hesaplandı ve grafiğe aktarıldı (Şekil 4.168-Şekil 4.179). Grafiklerin her birinde belli bir hacim değeri için enerjinin minimum olduğu görüldü. Enerjinin minimum olduğu değere karşılık gelen hacim değeri kullanılarak örgü sabiti hesaplandı. Murnaghan denklemleri kullanılarak, örgü sabiti parametresine ek olarak bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri hesaplandı. LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu KTaO_3 bileşiklerinin örgü sabiti, bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri Çizelge 4.22 ve Çizelge 4.23' de verilmiştir. O^{-2} boşluklarının farklı noktalarda olması yapısal özelliklerde hemen hemen bir değişikliğe neden olmadığı tespit edildi.



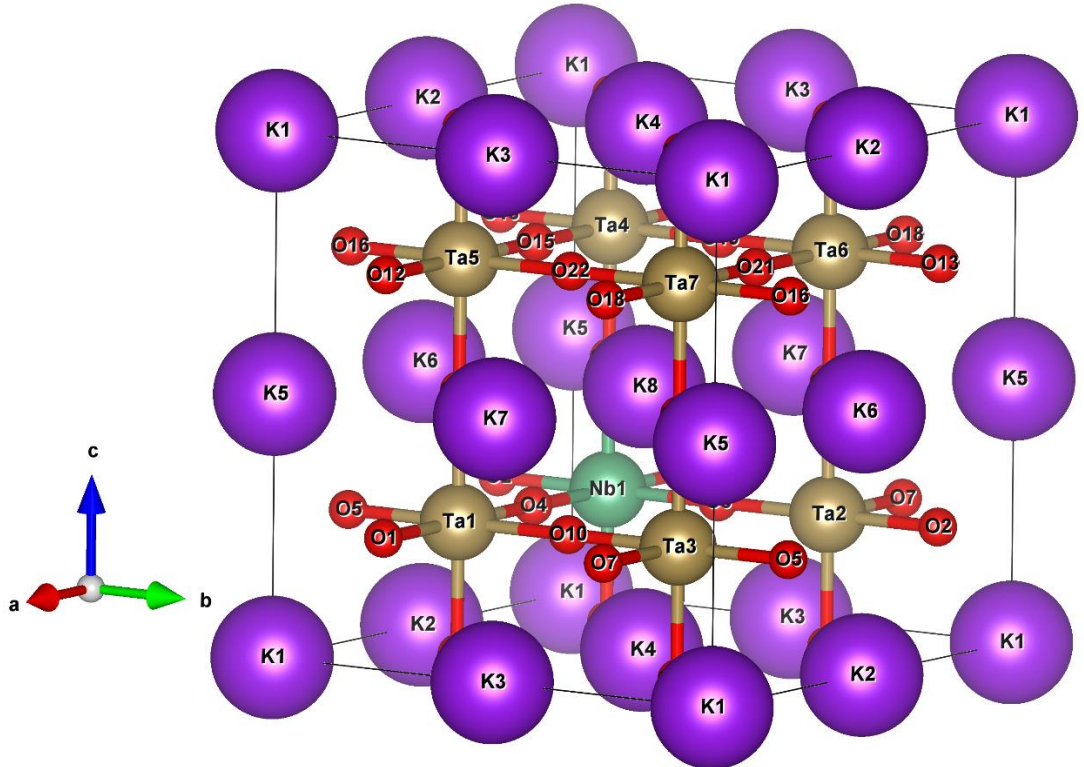
Şekil 4.162. Sb^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kristal yapısı



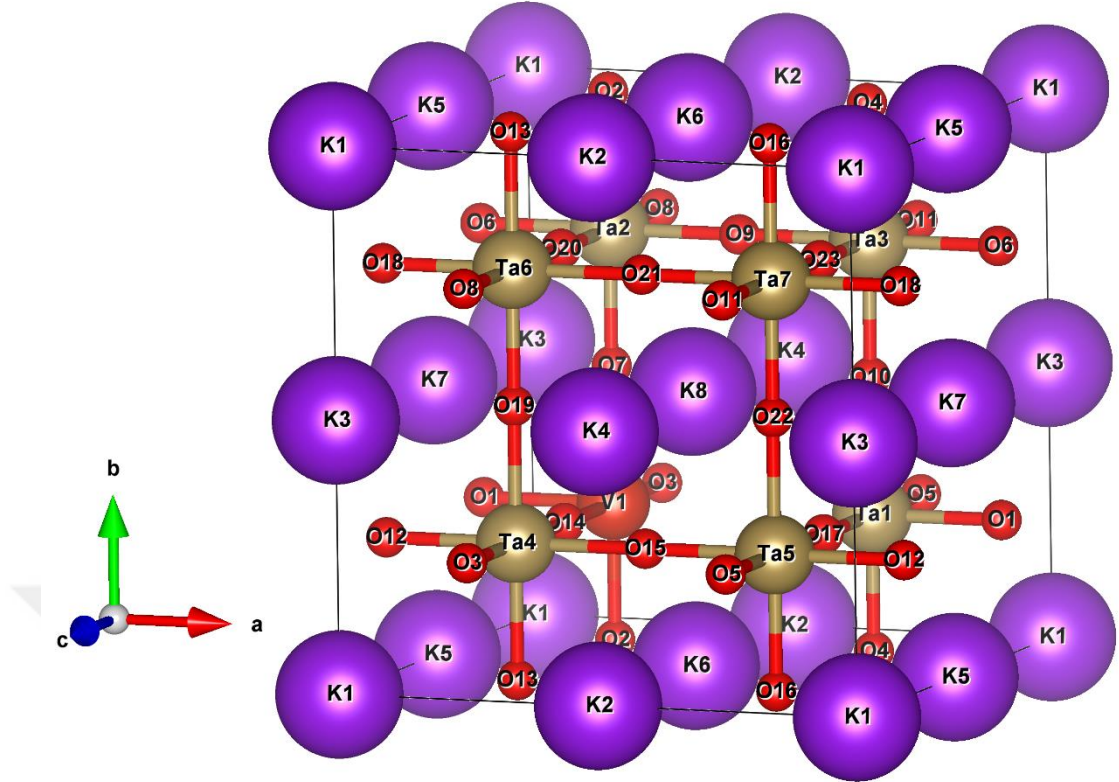
Şekil 4.163. Sb^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kristal yapısı



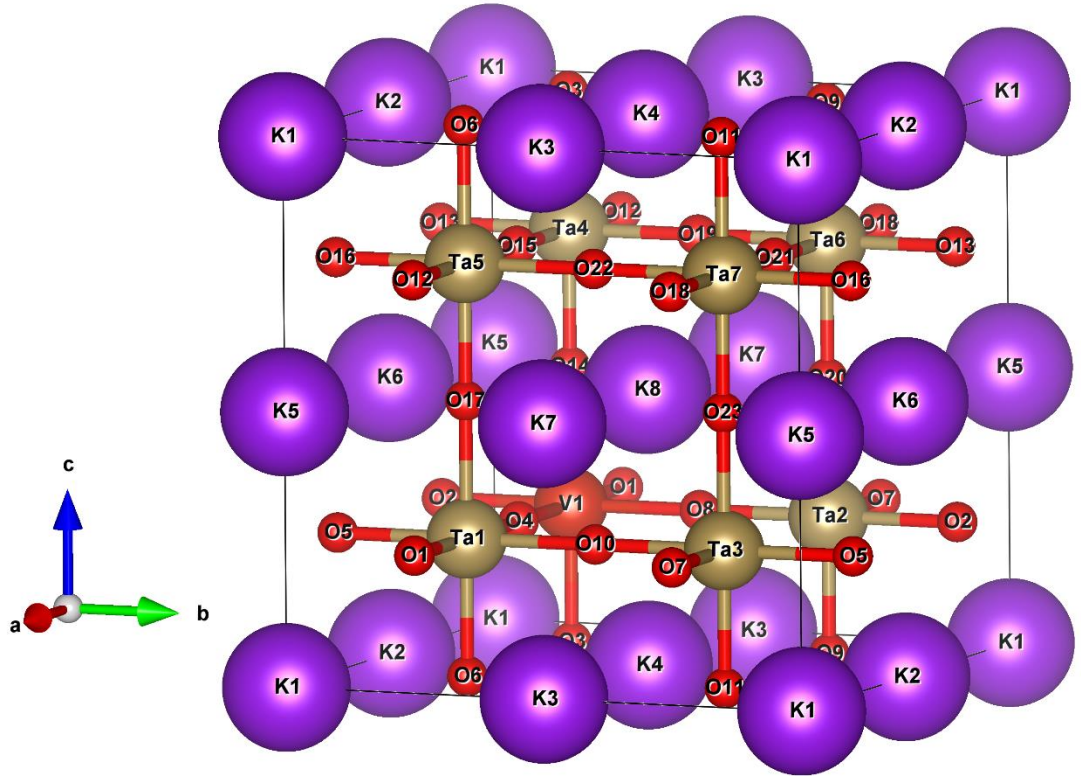
Şekil 4.164. Nb^{+3} katkılı ve O^{2-} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kristal yapısı



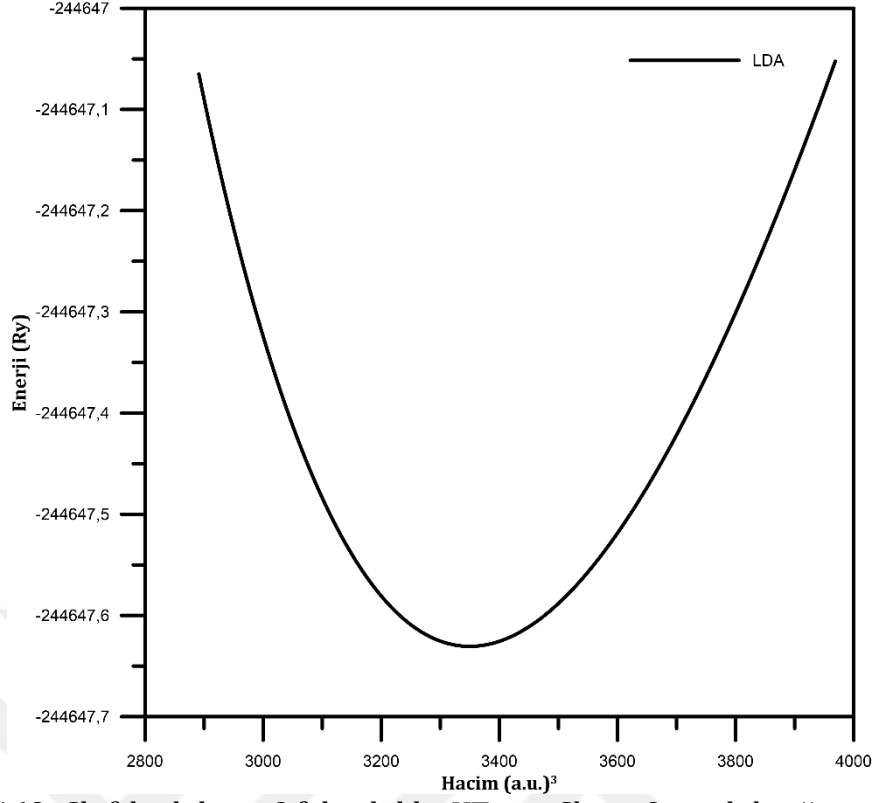
Şekil 4.165. Nb^{+3} katkılı ve O^{2-} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kristal yapısı



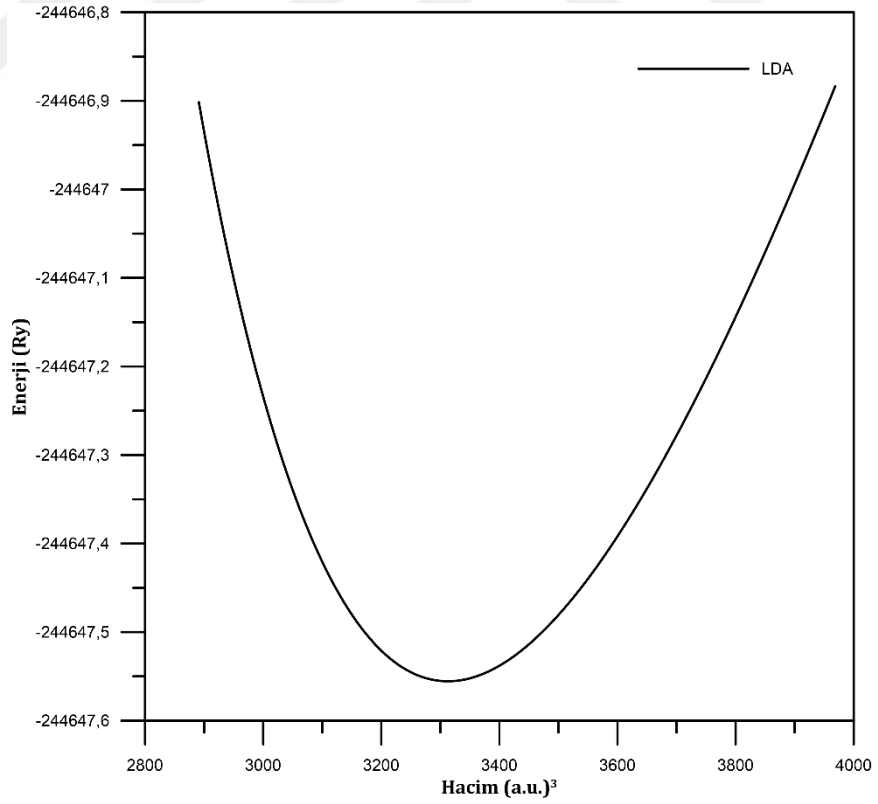
Şekil 4.166. V^{+3} katkılı ve O^{2-} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kristal yapısı



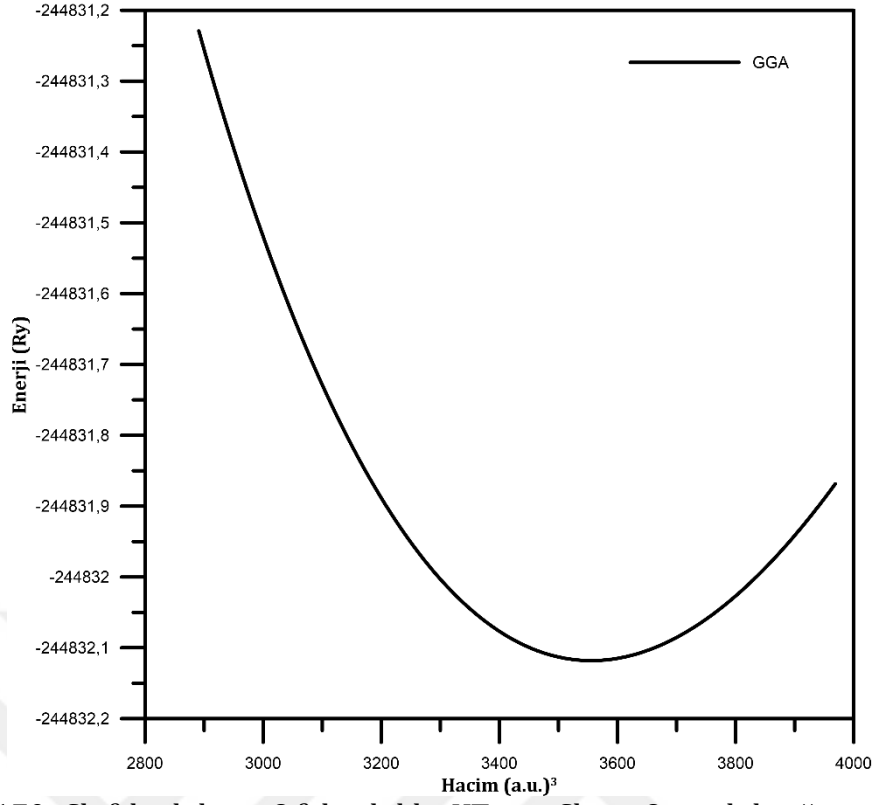
Şekil 4.167. V^{+3} katkılı ve O^{2-} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kristal yapısı



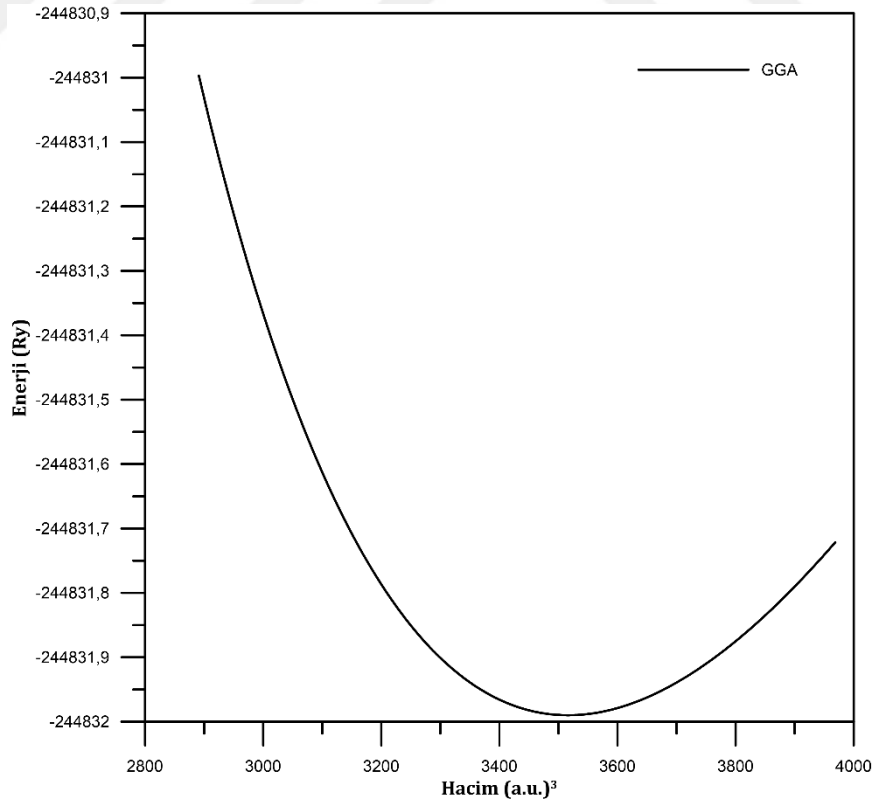
Şekil 4.168. Sb^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



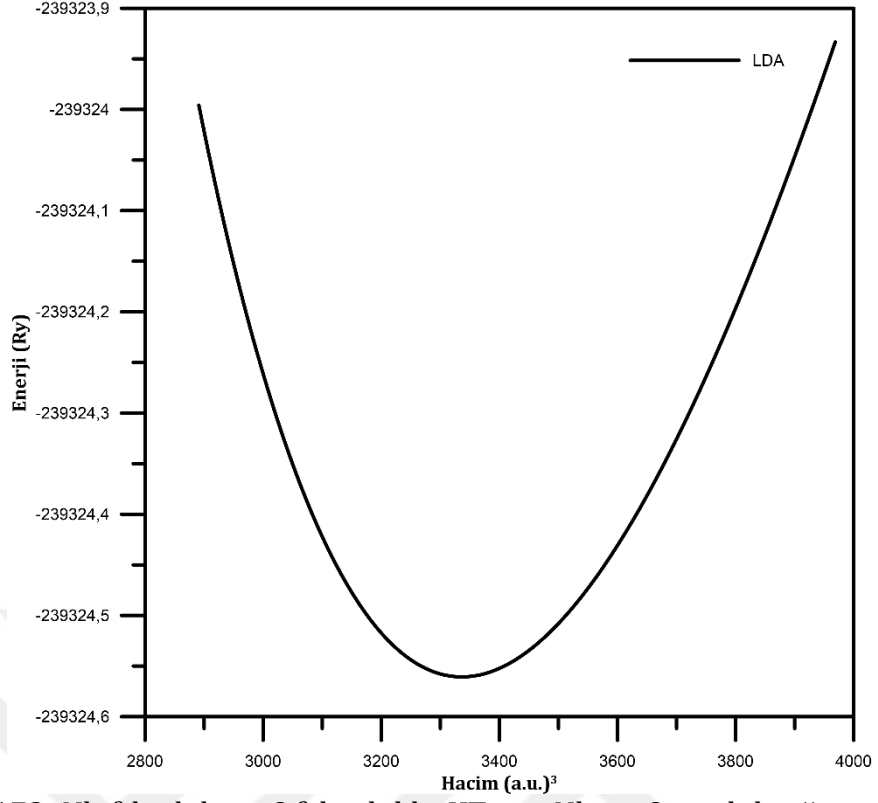
Şekil 4.169. Sb^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



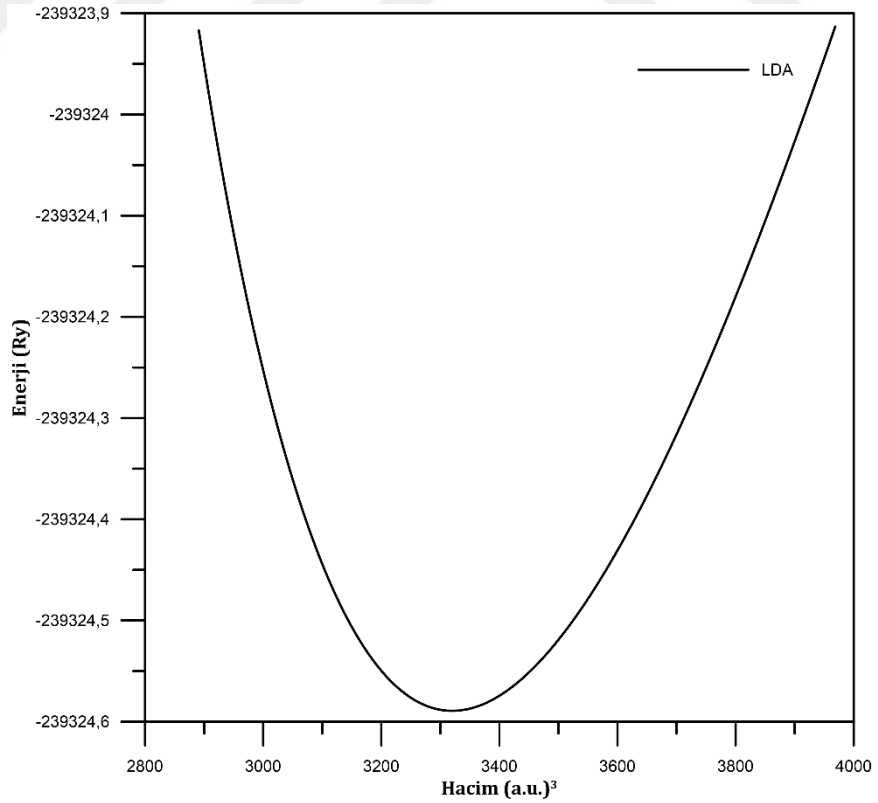
Şekil 4.170. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



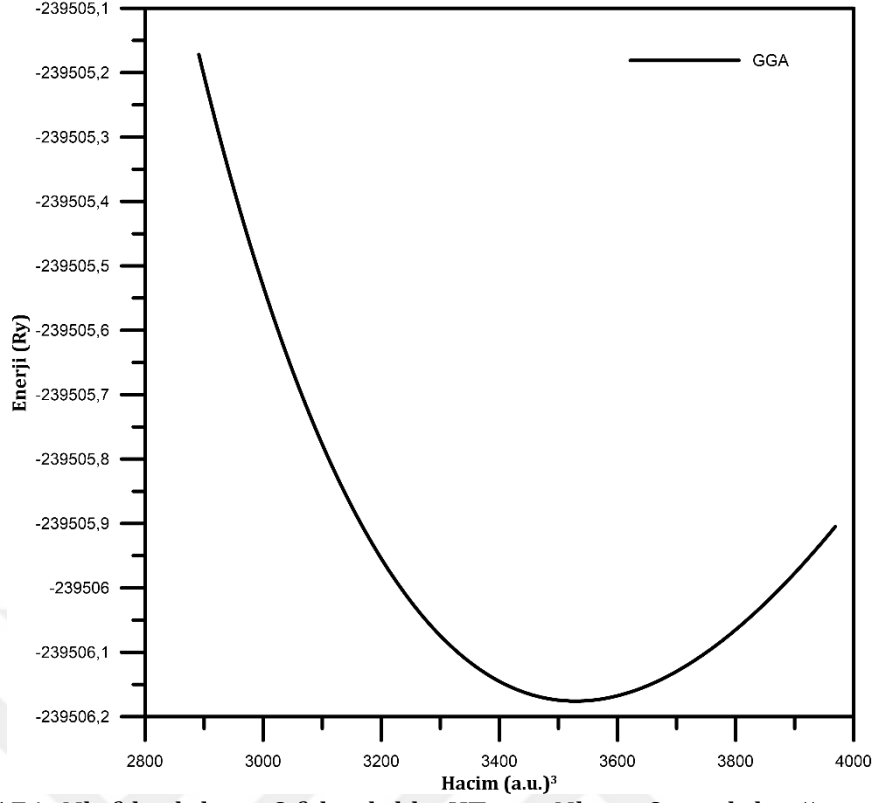
Şekil 4.171. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



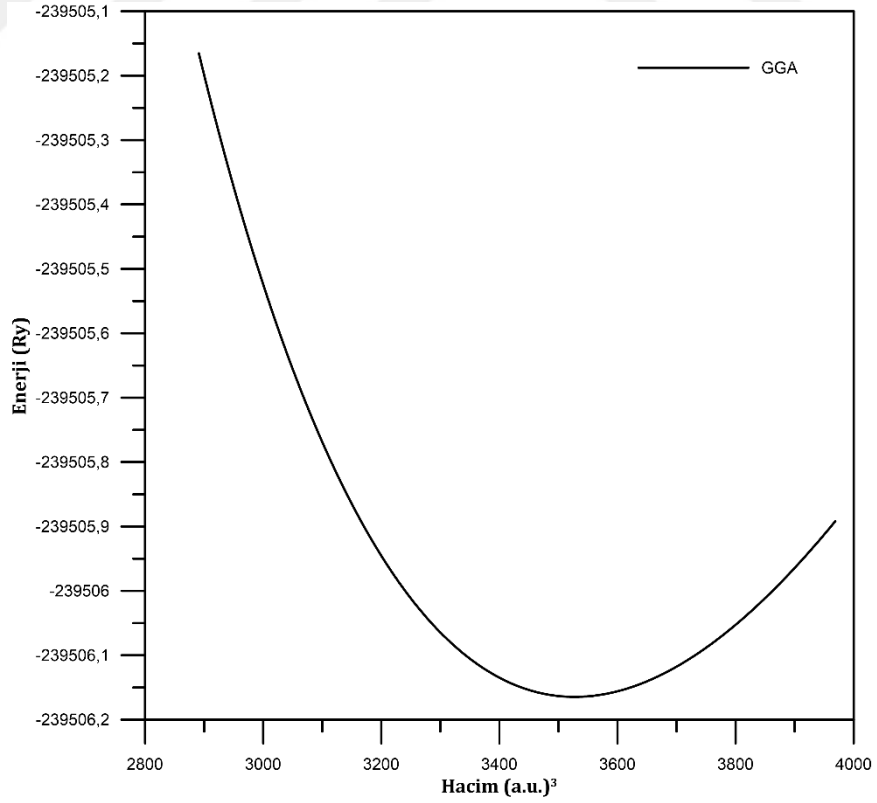
Şekil 4.172. Nb⁺³ katkı ve O⁻² boşluklu KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875} bileşiğinin kusur-1 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



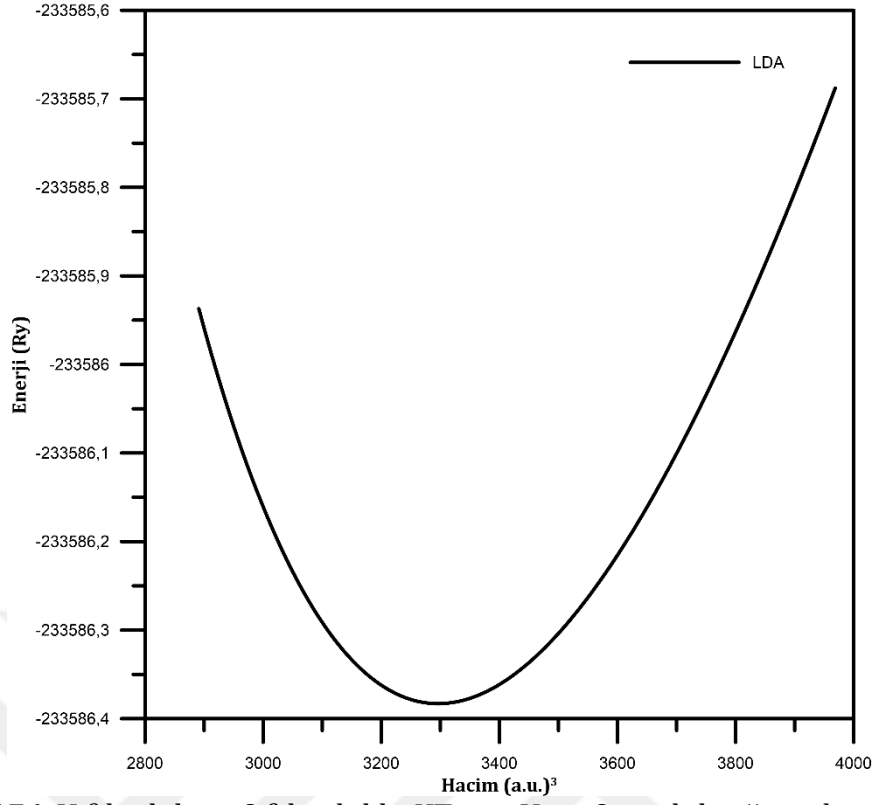
Şekil 4.173. Nb⁺³ katkı ve O⁻² boşluklu KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875} bileşiğinin kusur-2 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



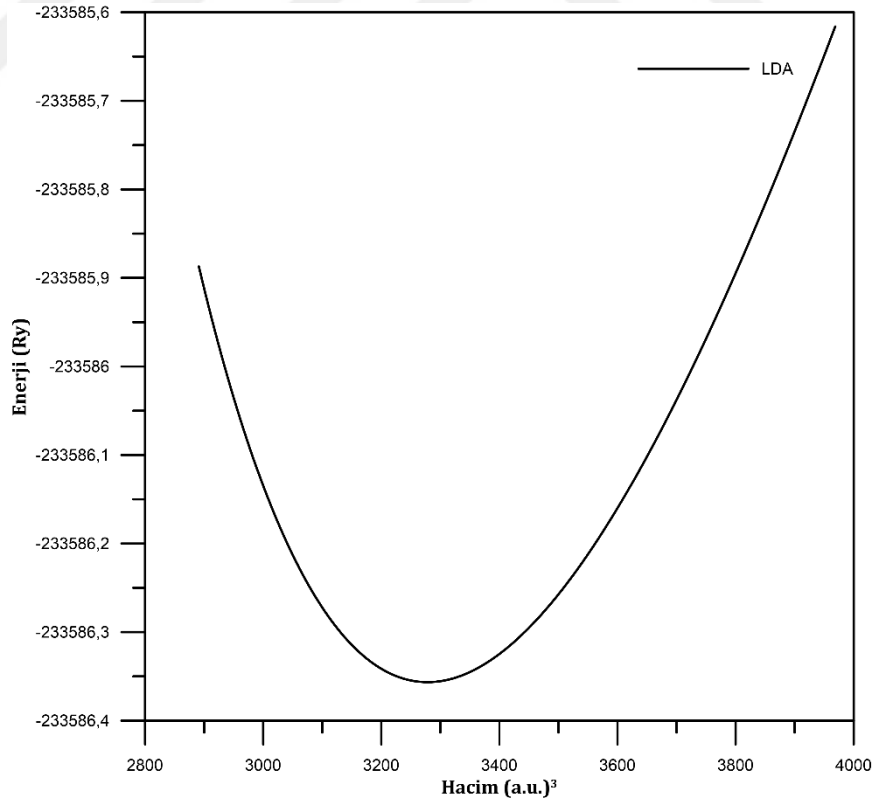
Şekil 4.174. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



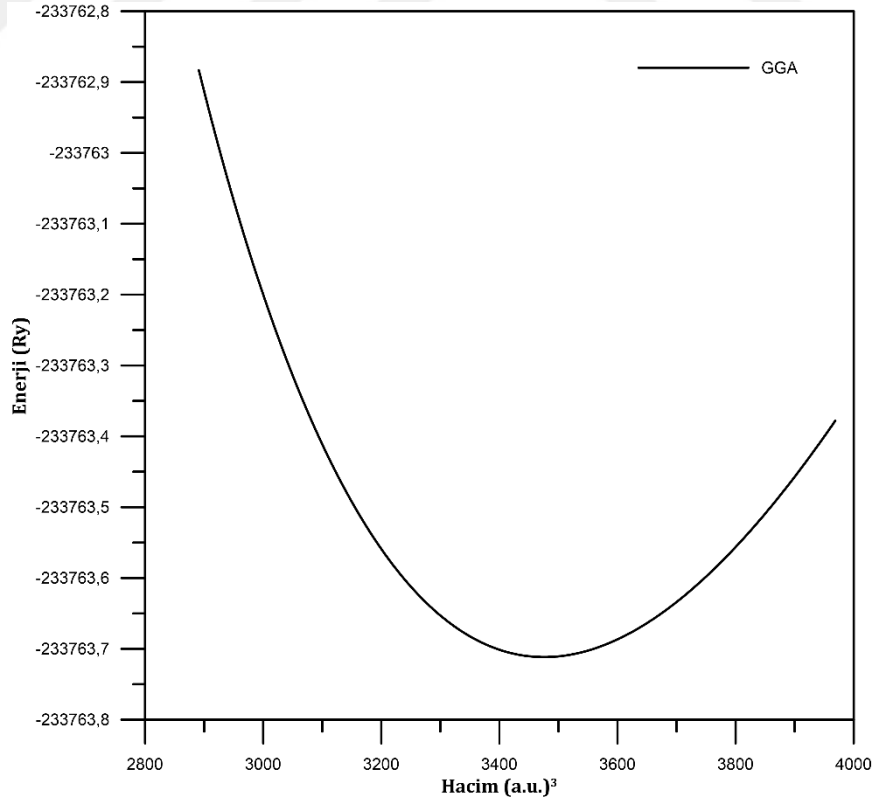
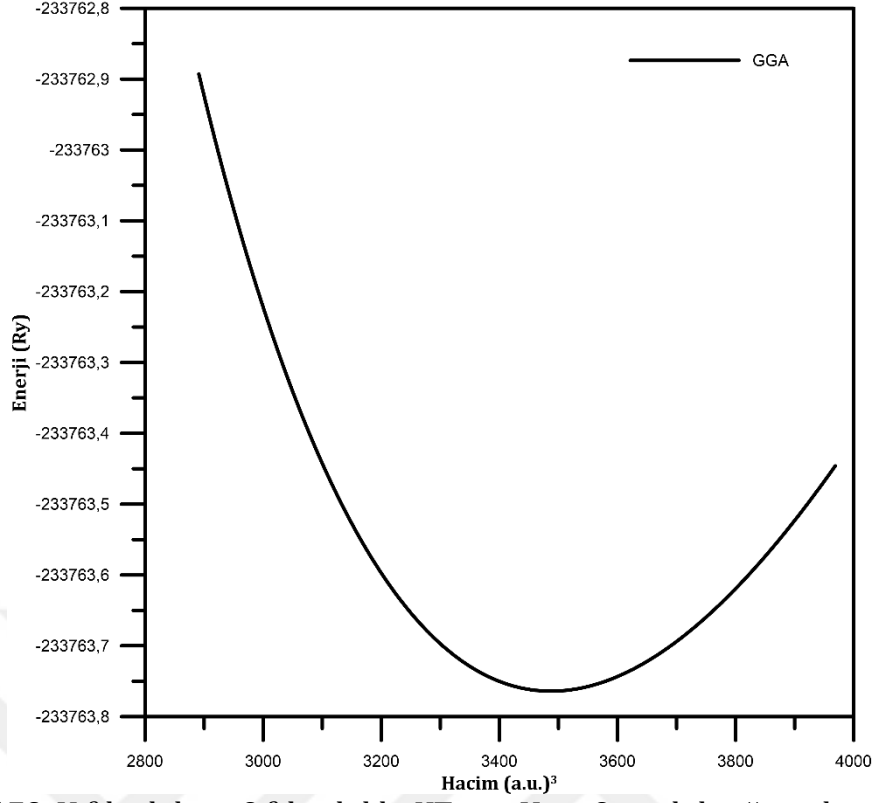
Şekil 4.175. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için GGA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



Şekil 4.176. V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



Şekil 4.177. V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için LDA potansiyeli kullanılarak elde edilen enerji-hacim grafiği



Çizelge 4.22. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerin LDA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (Å), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).

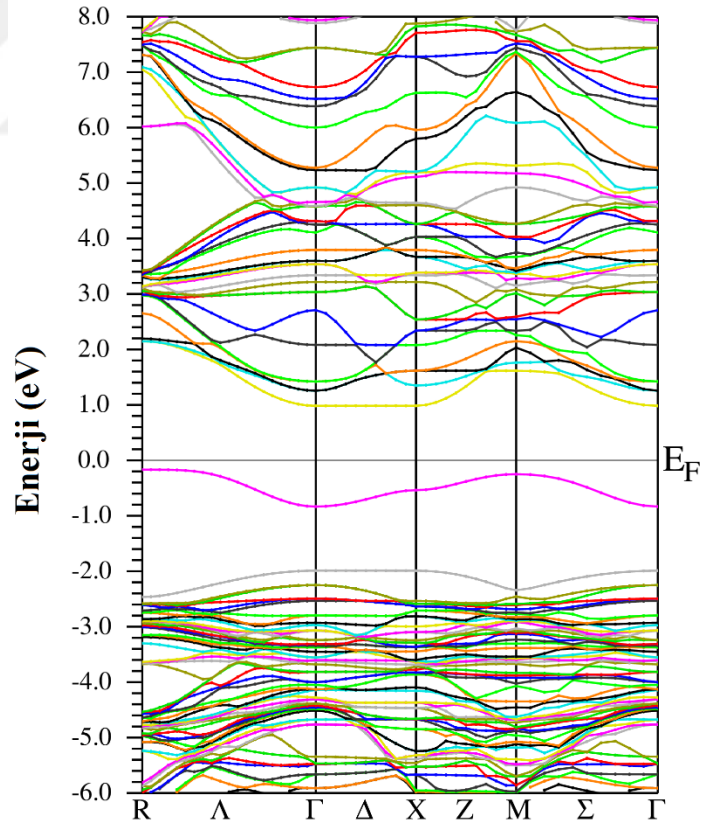
Kusur-1				
Bileşik	Örgü Parametresi (Å)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	7,9181	201,92	4,42	-244647,63
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	7,9076	212,81	4,61	-239324,56
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	7,8760	207,23	4,30	-233586,38
Kusur-2				
Bileşik	Örgü Parametresi (Å)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	7,8875	248,51	7,31	-244647,56
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	7,8935	249,26	6,95	-239324,59
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	7,8616	227,26	5,59	-233586,36

Çizelge 4.23. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerin GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen örgü parametresi (Å), bulk modülü (B) ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevi (dB/dP) ve taban durum enerjisi (Ry).

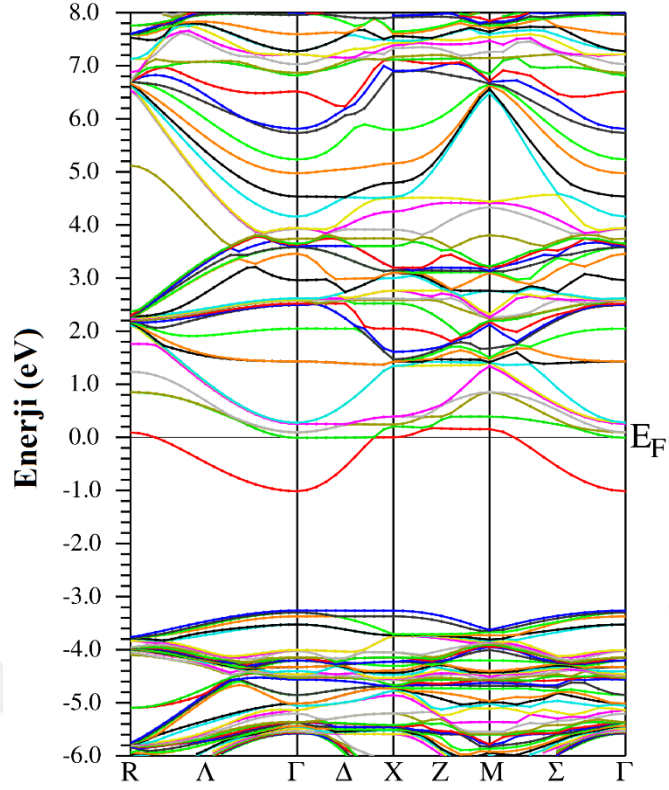
Kusur-1				
Bileşik	Örgü Parametresi (Å)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	8,0760	171,73	2,25	-244832,12
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	8,0561	178,79	4,42	-239506,18
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	8,0243	177,86	4,54	-233763,76
Kusur-2				
Bileşik	Örgü Parametresi (Å)	B (GPa)	dB/dP	E_0 (Ry)
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	8,0463	173,29	5,41	-244831,99
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	8,0550	178,81	4,42	-239506,16
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	8,0156	177,62	4,42	-233763,71

4.6.2. Kusurlu KTaO_3 bileşiklerinin elektronik özellikleri

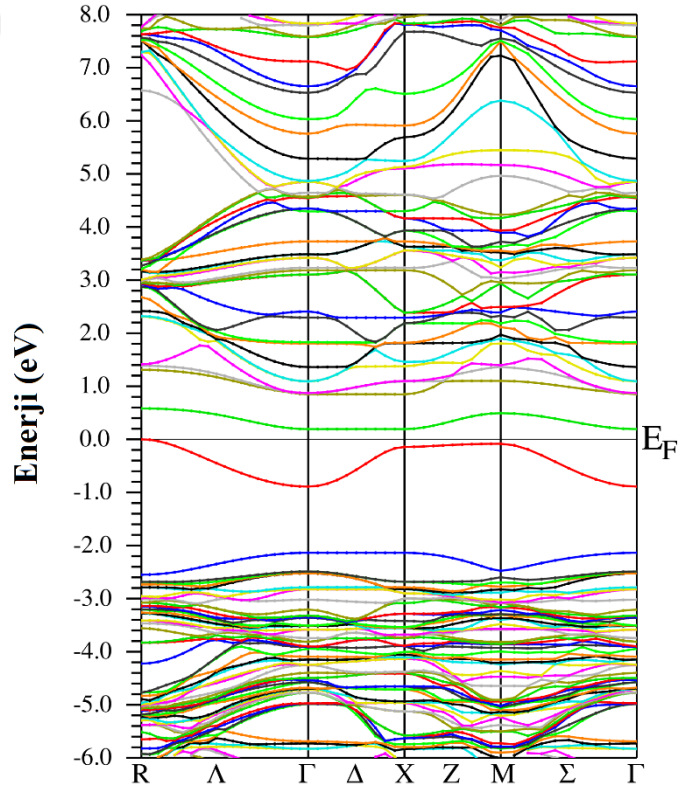
Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu KTaO_3 bileşikleri için yapılan hesaplamalarda Fermi enerji düzeyi sıfır enerji noktası olarak seçilmiştir. Hesaplamalar genelleştirilmiş gradyant yaklaşımı (GGA), Perdew vd. (1996), kullanıldı ve yasak band enerji hesaplamalarını iyileştirilmek için düzeltilmiş Tran-Blaha (TB-mBJ) (Tran ve Blaha 2009), değişim potansiyeli kullanıldı. Katkı atomu ile Ta atomu arasında yer alan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturulan kusurlu yapıların (kusur-1) elde edilen band yapıları Şekil 4.180-Şekil 4.182 de verilmiştir. Nb^{+3} katkı bileşik metalik karakter sergilerken, Sb^{+3} ve V^{+3} katkı bileşikler yarıiletken karakter sergilemektedir. $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ ve $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiklerinin yasak band enerjileri sırasıyla 1,23 eV ve 0,27 eV tur. Yasak band enerjisi elektromanyetik spektrumda kızıl altı bölgeye karşılık gelmektedir.



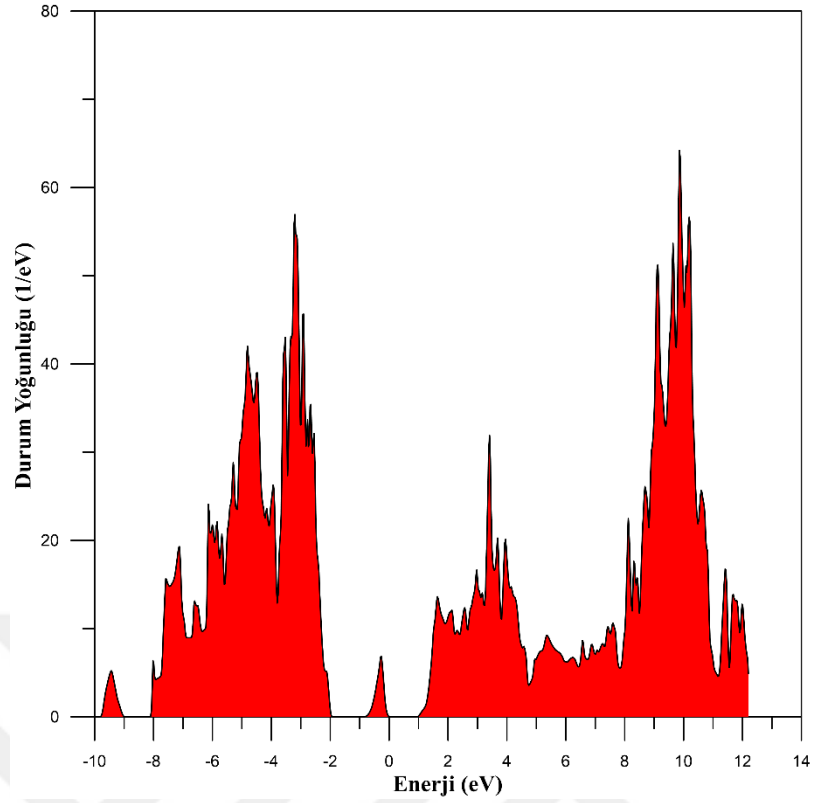
Şekil 4.180. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için band yapı grafiği



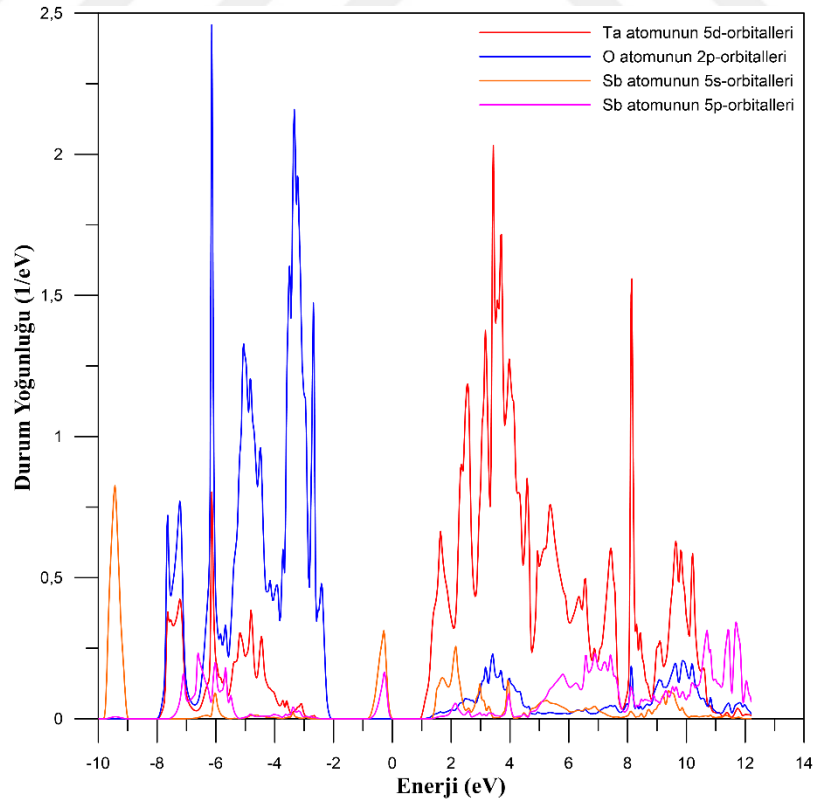
Şekil 4.181. Nb^{+3} katkılı ve O^{2-} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için band yapı grafiği



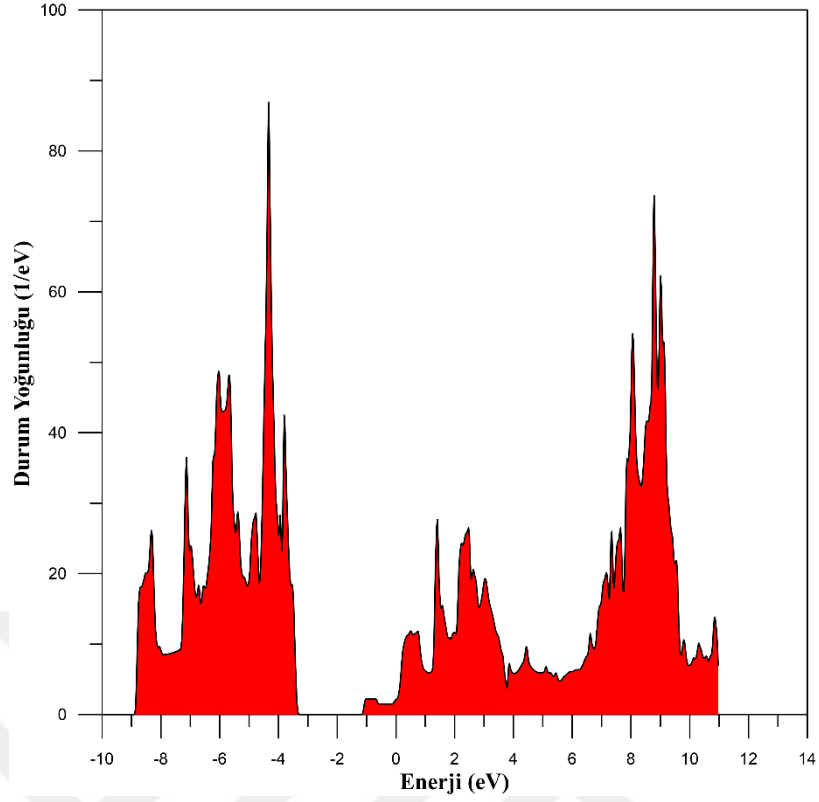
Şekil 4.182. V^{+3} katkılı ve O^{2-} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için band yapı grafiği



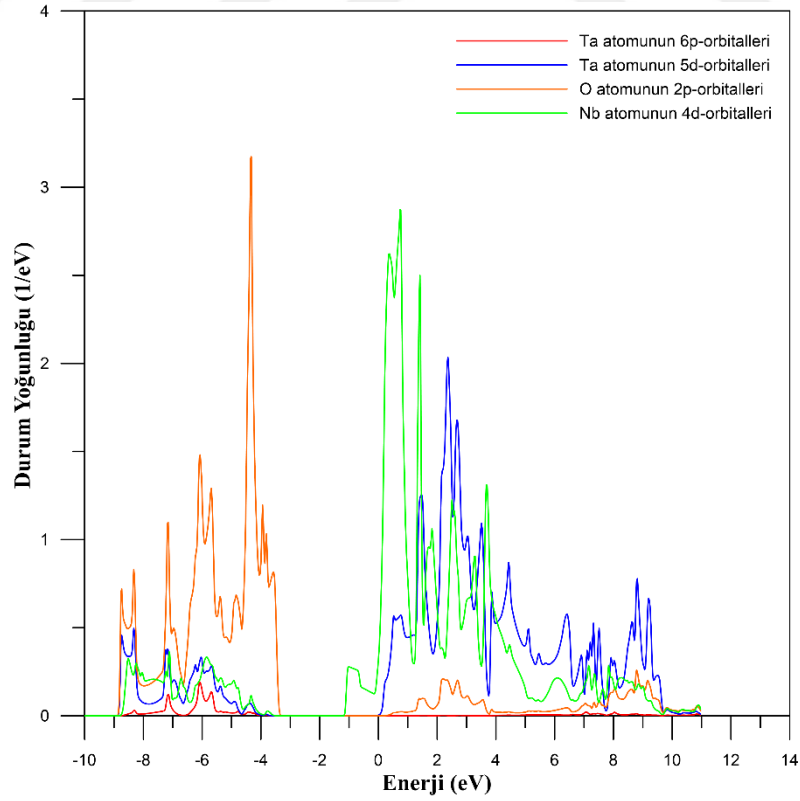
Şekil 4.183. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için toplam durum yoğunluğu eğrisi



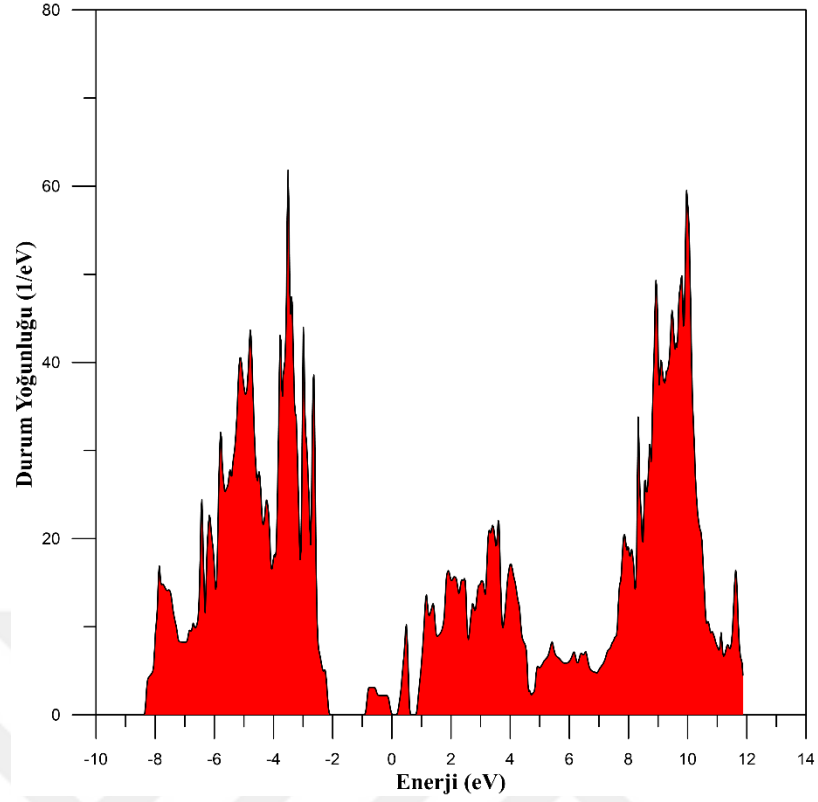
Şekil 4.184. Sb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi



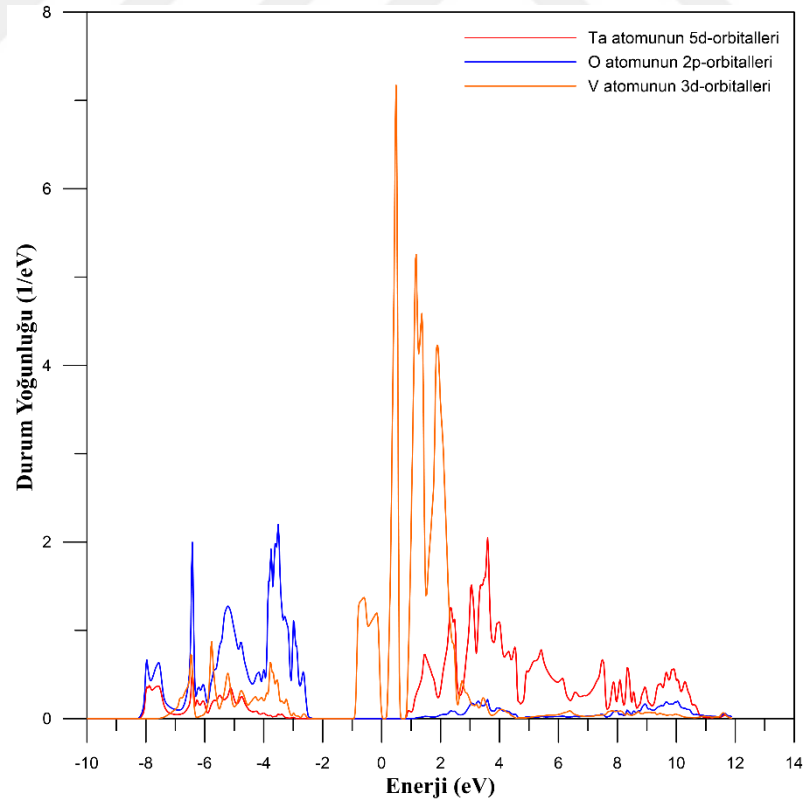
Şekil 4.185. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için toplam durum yoğunluğu eğrisi



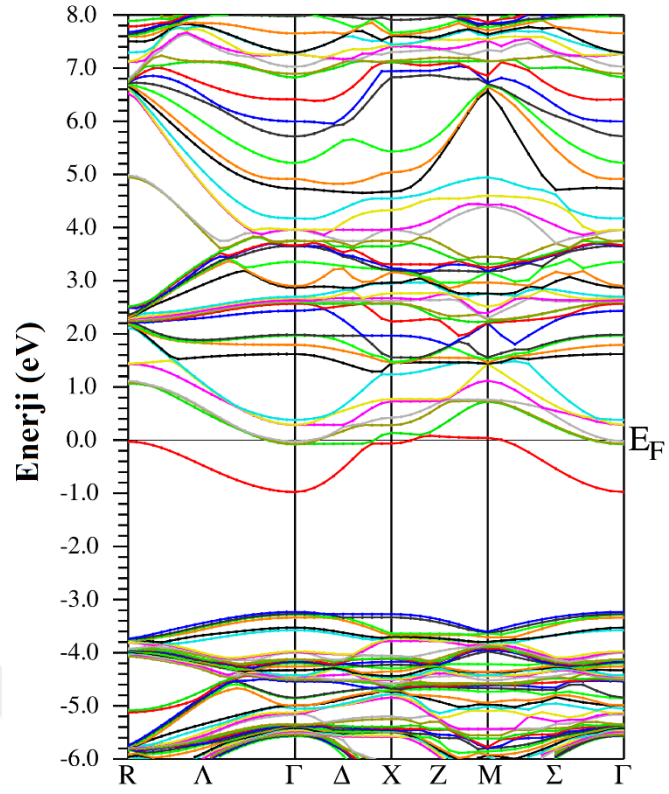
Şekil 4.186. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{Nb}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi



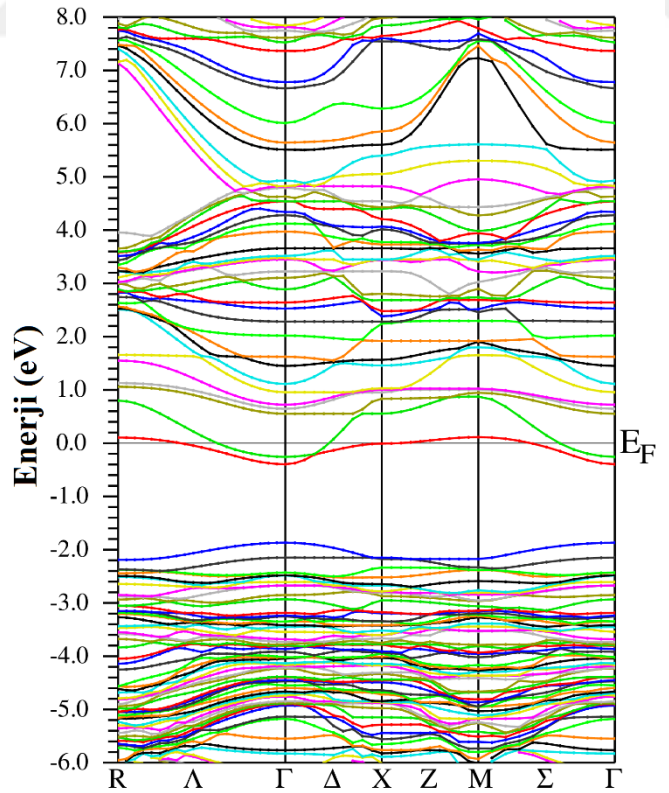
Şekil 4.187. V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için toplam durum yoğunluğu eğrisi



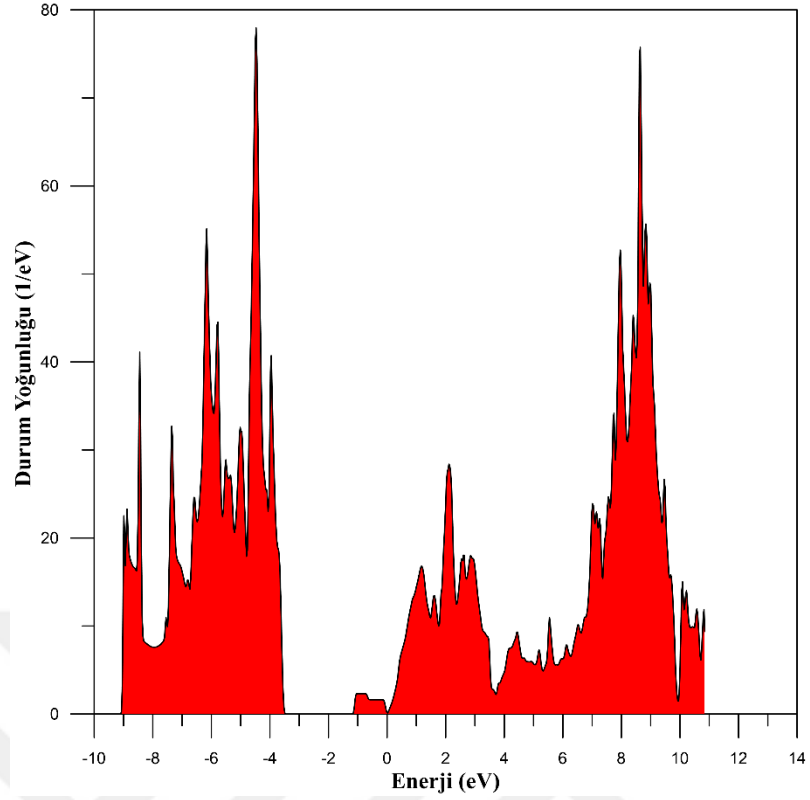
Şekil 4.188. V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-1 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi



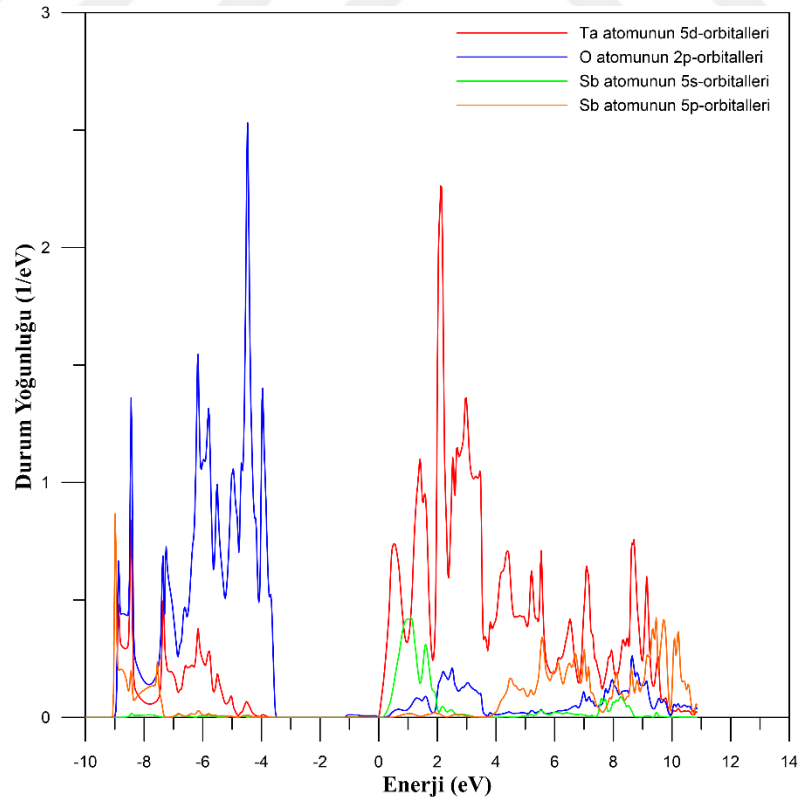
Şekil 4.190. Nb⁺³ katkı ve O⁻² boşluklu KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875} bileşiğinin kusur-2 için band yapı grafiği



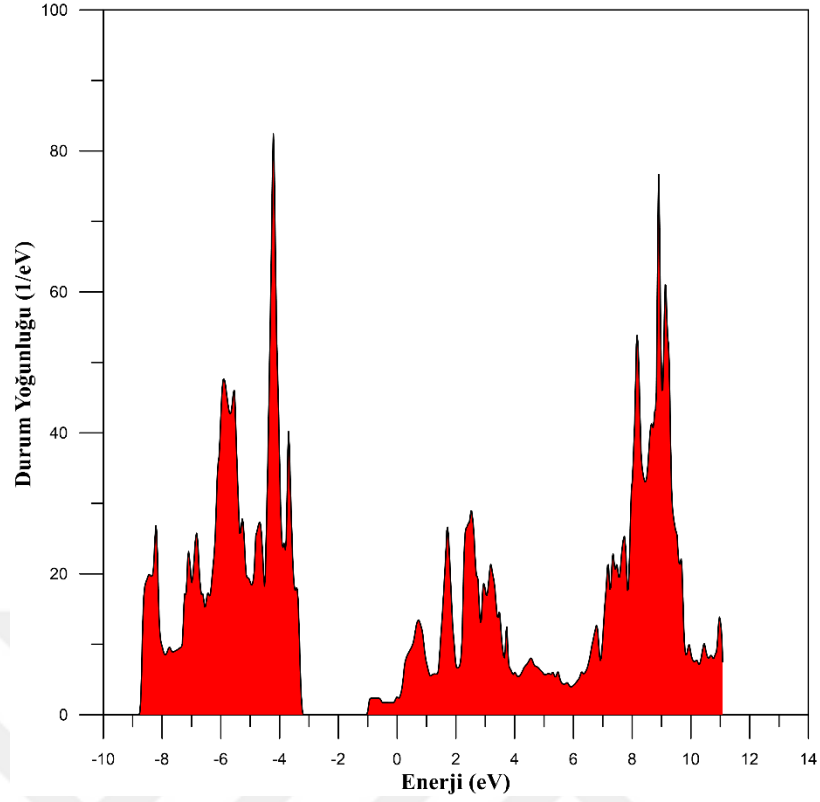
Şekil 4.191. V⁺³ katkı ve O⁻² boşluklu KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875} bileşiğinin kusur-2 için band yapı grafiği



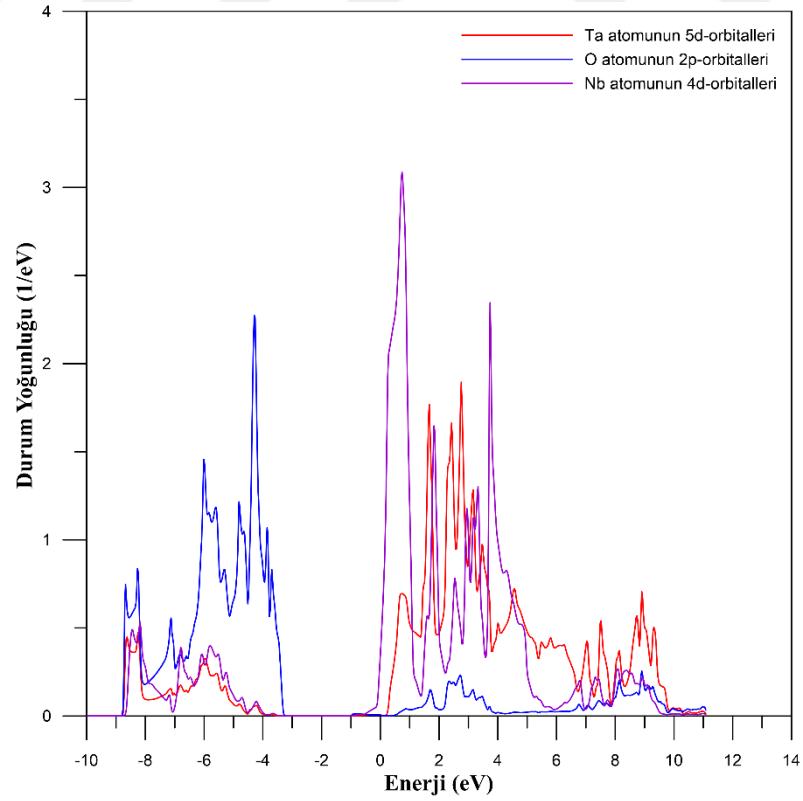
Şekil 4.192. Sb^{+3} katkılı ve O^{2-} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için toplam durum yoğunluğu eğrisi



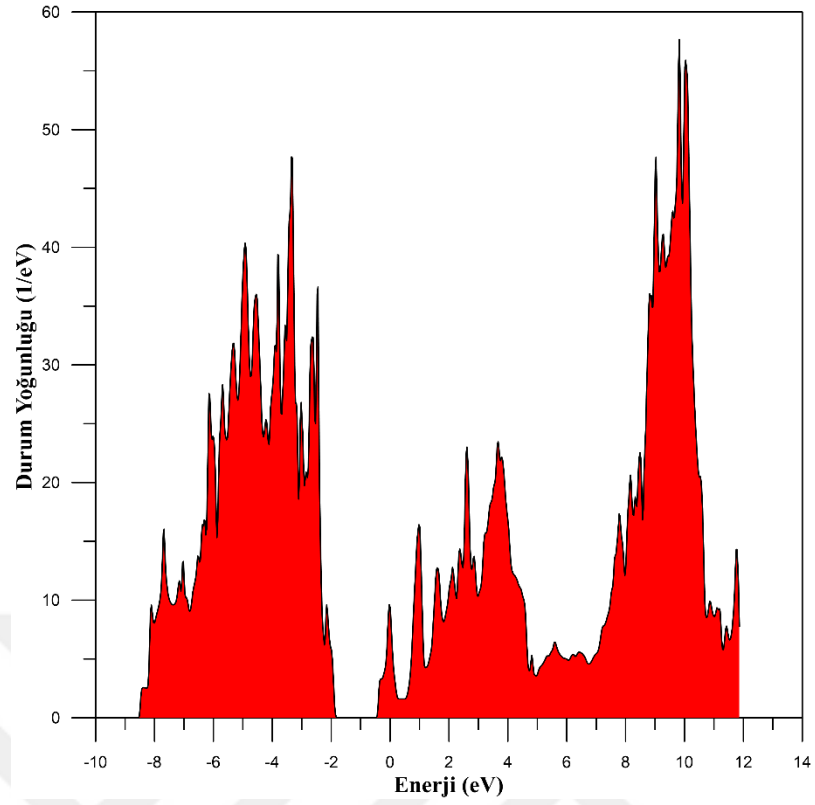
Şekil 4.193. Sb^{+3} katkılı ve O^{2-} boşluklu $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi



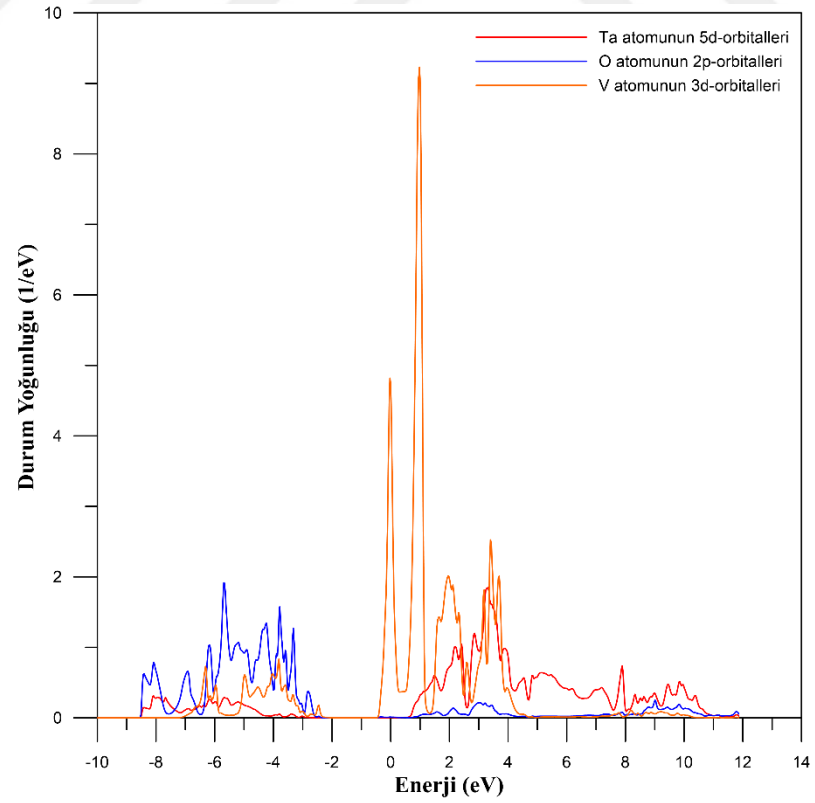
Şekil 4.194. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için toplam durum yoğunluğu eğrisi



Şekil 4.195. Nb^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi



Şekil 4.196. V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için toplam durum yoğunluğu eğrisi



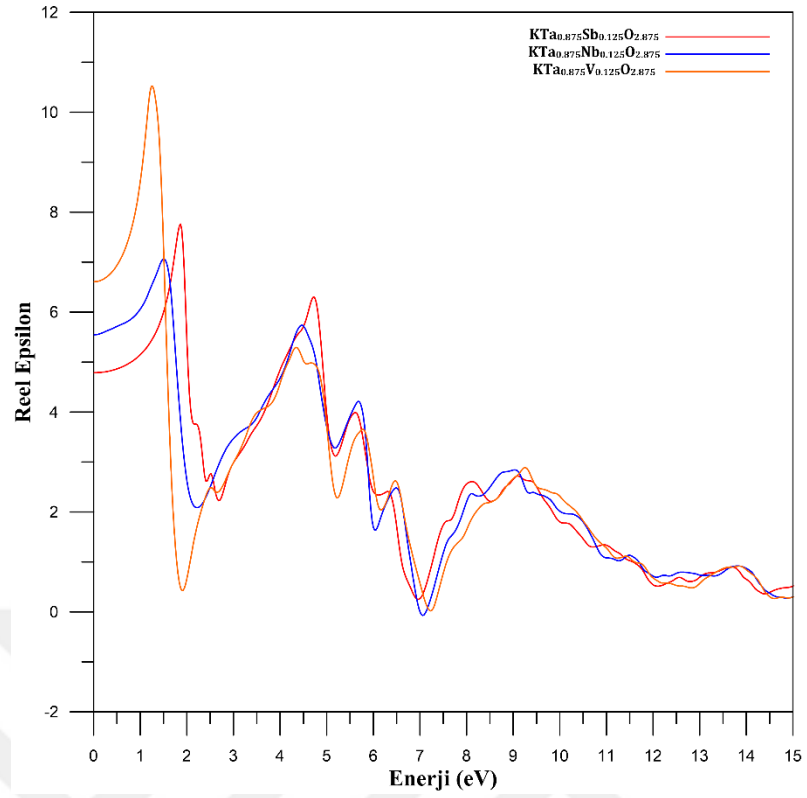
Şekil 4.197. V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $\text{KTa}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{O}_{2.875}$ bileşiğinin kusur-2 için kısmi durum yoğunluğu eğrisi

4.6.3. Kusurlu KTaO₃ bileşiklerinin optik özellikleri

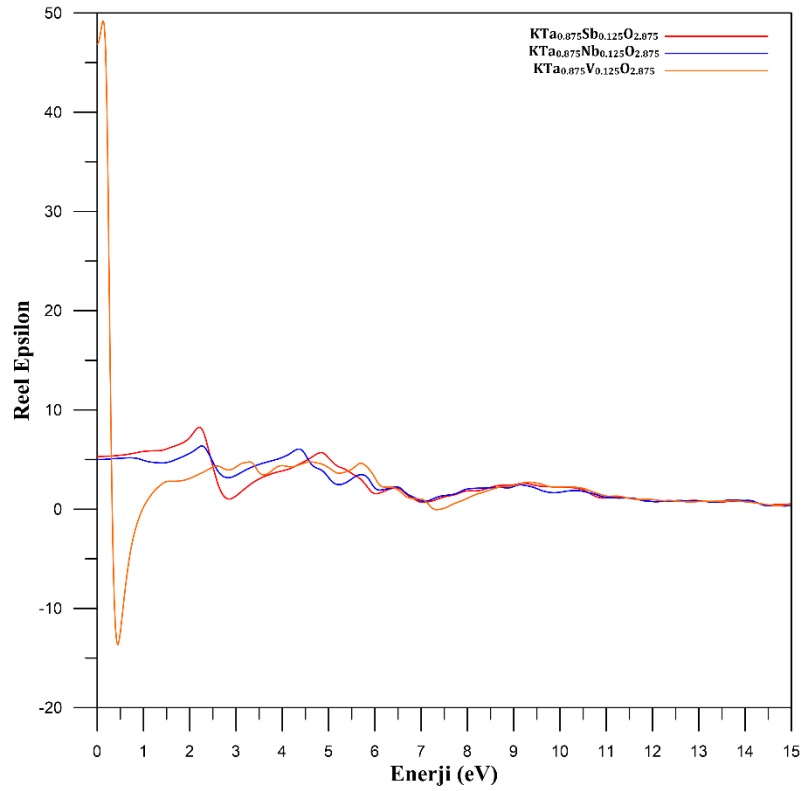
Sb⁺³, Nb⁺³ ve V⁺³ katkı ve O⁻² boşluklu KTaO₃ bileşiklerin optik özellikleri dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. Dielektrik fonksiyonları yardımıyla yansıma katsayıları (R), soğurma katsayıları (α), kırılma indisi (n), sönüm katsayısı ve enerji kayıp fonksiyonları (L) hesaplandı. KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}, KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875} ve KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875} bileşikleri için dielektrik sabitleri, ($\epsilon_1(o)$), sırasıyla 4,79, 5,55 ve 6,61 olarak hesaplandı (Kusur-1). KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875} ve KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875} bileşikleri en yüksek dielektrik sabitine kızıl altı bölgede ulaşırken KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875} bileşiği görünür bölgede ulaşmaktadır (Kusur-1). KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}, KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875} ve KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875} bileşikleri için dielektrik sabitleri, ($\epsilon_1(o)$), sırasıyla 5,31, 5,00 ve 46,87 olarak hesaplandı (Kusur-2). KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875} bileşiği en yüksek dielektrik sabitine kızıl altı bölgede ulaşırken KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875} ve KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875} ği görünür bölgede ulaşmaktadır (Kusur -2). Ayrıca reel dielektrik sabitinin 0-15 eV aralığında negatife düştüğü bölgelerde metalik davranış sergilediğini gösterir (Şekil 4.198). İmajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafiğinde oluşan pikler valans bandından iletim bandına geçen elektronların optik geçişlerini temsil etmektedir. Optik geçişleri temsil eden, ilk üç pik için enerji değerleri Çizelge 4.24' de verilmiştir. Kusur-1 ve Kusur2 için elde edilen reel ve imajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4.198-Şekil 4.201 de gösterilmektedir.

Çizelge 4.24. Sb⁺³, Nb⁺³ ve V⁺³ katkı ve O⁻² boşluklu KTaO₃ bileşikler optik geçişleri temsil eden ilk üç pik için enerji değerleri

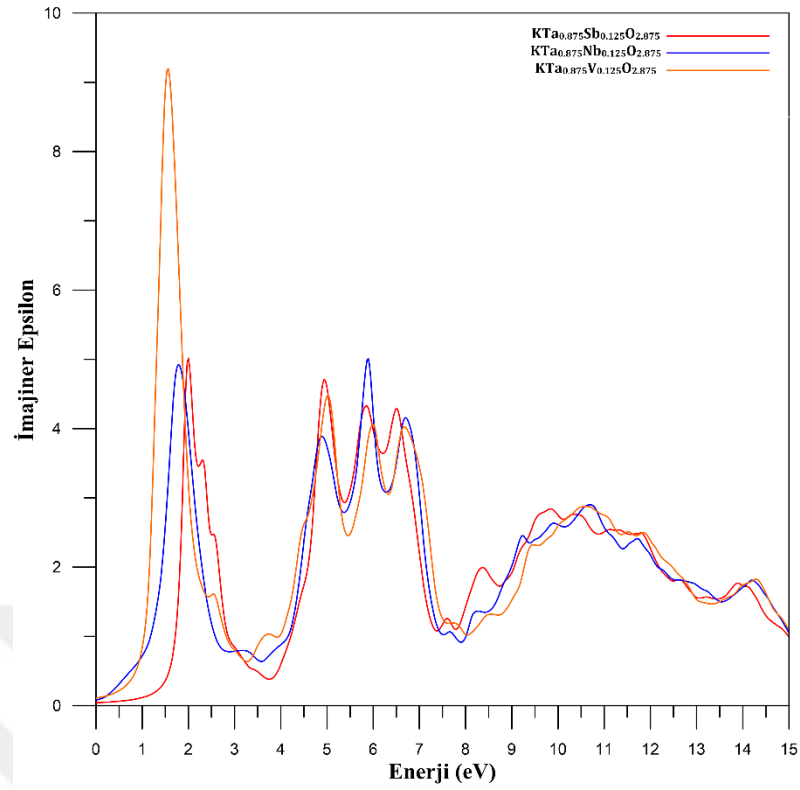
Kusur-1			
Bileşik	E ₁ (eV)	E ₂ (eV)	E ₃ (eV)
KTa _{0.875} Sb _{0.125} O _{2.875}	2,00	4,94	5,84-5,86
KTa _{0.875} Nb _{0.125} O _{2.875}	1,78	4,88	5,89
KTa _{0.875} V _{0.125} O _{2.875}	1,56	5,02	6,00
Kusur-2			
Bileşik	E ₁ (eV)	E ₂ (eV)	E ₃ (eV)
KTa _{0.875} Sb _{0.125} O _{2.875}	2,49	5,76-5,78	6,63-6,65
KTa _{0.875} Nb _{0.125} O _{2.875}	2,49-2,52	4,59	5,92
KTa _{0.875} V _{0.125} O _{2.875}	0,29	2,73	3,44



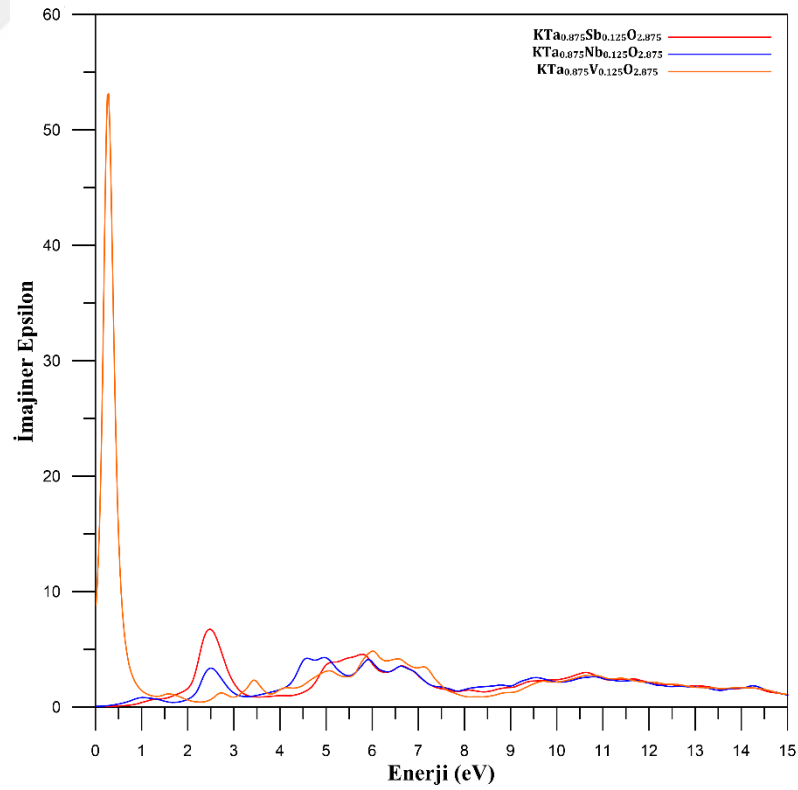
Şekil 4.198. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu KTaO_3 bileşiklerinin kusur-1 için reel dielektrik fonksiyonları



Şekil 4.199. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu KTaO_3 bileşiklerinin kusur-2 için reel dielektrik fonksiyonları

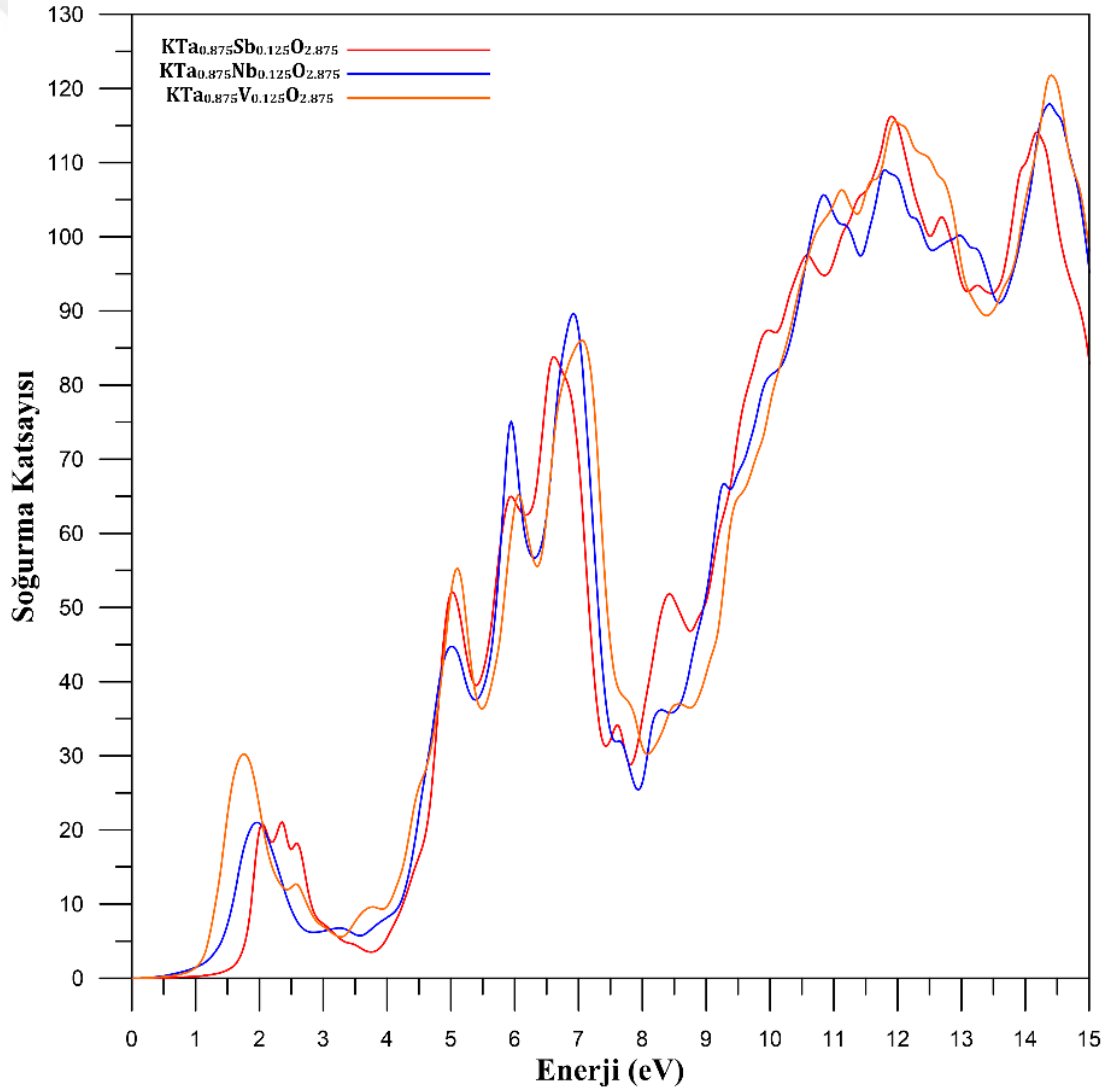


Şekil 4.200. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için imajiner dielektrik fonksiyonları

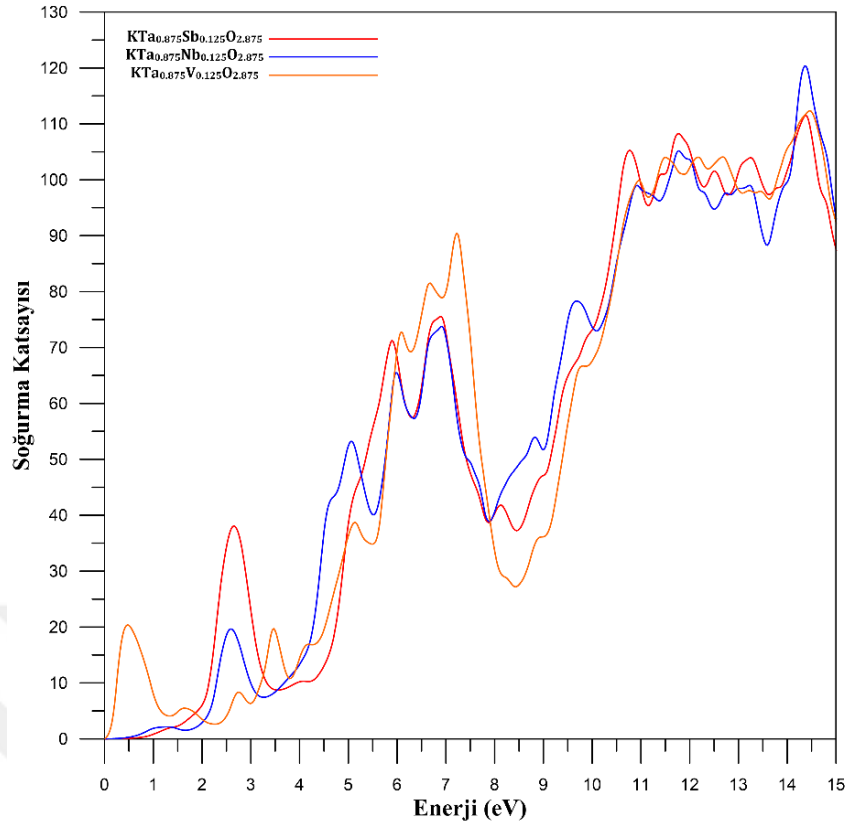


Şekil 4.201. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için imajiner dielektrik fonksiyonları

Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklere ait soğurma spektrumları Şekil 4.202 ve Şekil 4.203 de gösterilmektedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-1) bileşikleri için elde edilen temel soğurma sınırı (TSS) enerjileri yasak band hesaplamaları ile uyum içerisindedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-1) ilk pikleri görünür bölgededir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-2) bileşiğinin ilk piki kızılaltı bölgeye karşılık gelirken $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-2) bileşiklerinin ilk pikleri görünür bölgeye karşılık gelmektedir. Her iki kusur tipi için de soğurmanın en yüksek olduğu bölge ise elektromanyetik spektrumda morötesi bölgeye karşılık gelmektedir.

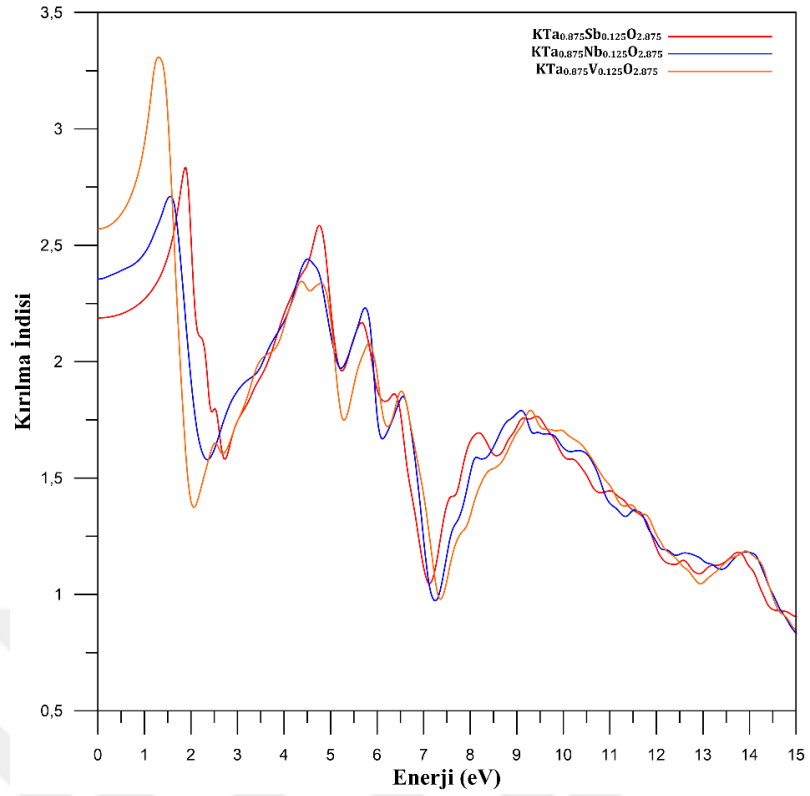


Şekil 4.202. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan soğurma spektrumu

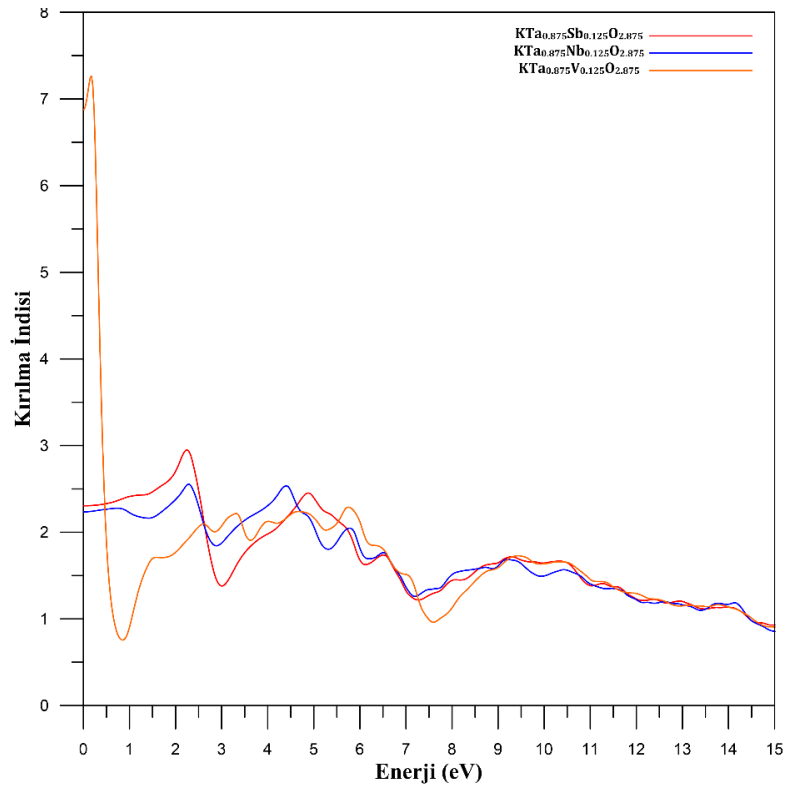


Şekil 4.203. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan soğurma spektrumu

$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiklerine ait kırılma indisi spektrumları Şekil 4.204 ve Şekil 4.205 de gösterilmektedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-1) bileşikleri için kırılma indisleri, $(n(0))$, sırasıyla 2,19, 2,35 ve 2,57 olarak hesaplandı. Ayrıca, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri en yüksek kırılma indisi değerine kızılaltı bölgede ulaşırken, $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek kırılma indisi değerine görünür bölgede ulaşmaktadır. En yüksek kırılma indisi değerleri ve bu değer karşılık gelen enerji değerleri Çizelge 4.25' de verilmiştir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-2) bileşikleri için kırılma indisleri, $(n(0))$, sırasıyla 2,31, 2,24 ve 6,88 olarak hesaplandı. Ayrıca, $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri en yüksek kırılma indisi değerine görünür bölgede ulaşırken, $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek kırılma indisi değerine kızılaltı bölgede ulaşmaktadır. En yüksek kırılma indisi değerleri ve bu değer karşılık gelen enerji değerleri Çizelge 4.28' de verilmiştir.



Şekil 4.204. Sb⁺³, Nb⁺³ ve V⁺³ katkılı ve O⁻² boşluklu KTaO₃ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan kırılma indisi spektrumu



Şekil 4.205. Sb⁺³, Nb⁺³ ve V⁺³ katkılı ve O⁻² boşluklu KTaO₃ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan kırılma indisi spektrumu

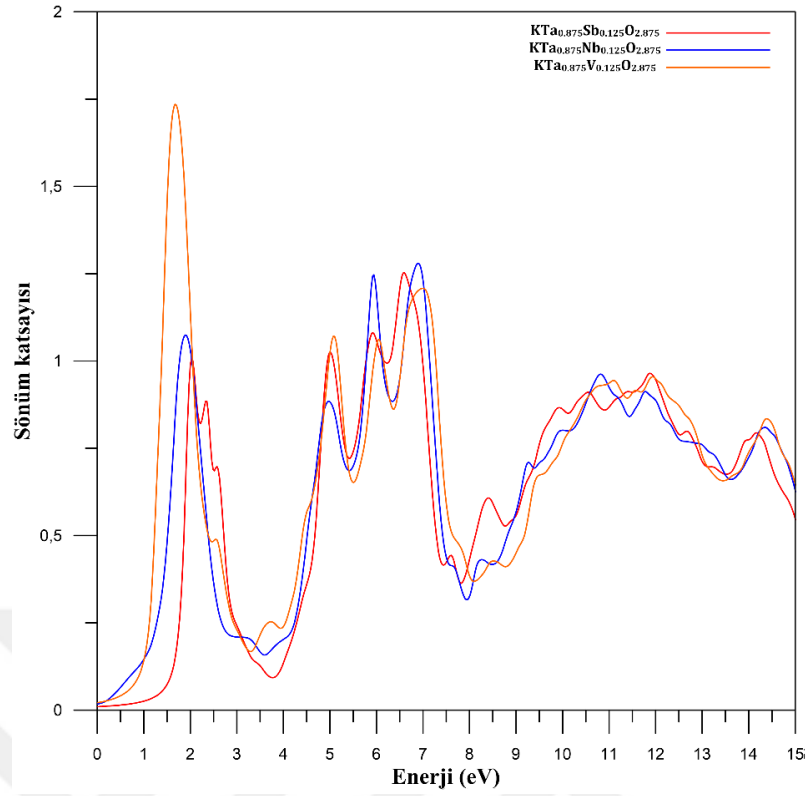
Çizelge 4.25. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için en yüksek kırılma indisi ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

Kusur-1		
Bileşik	Kırılma İndisi	Enerji değeri
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	2,83	1,86 eV-1,89 eV
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	2,71	1,54 eV-1,56 eV
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	3,31	1,29 eV-1,32 eV
Kusur-2		
Bileşik	Kırılma İndisi	Enerji değeri
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	2,95	2,24 eV
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	2,55	2,27 eV-2,30 eV
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	7,26	0,18 eV

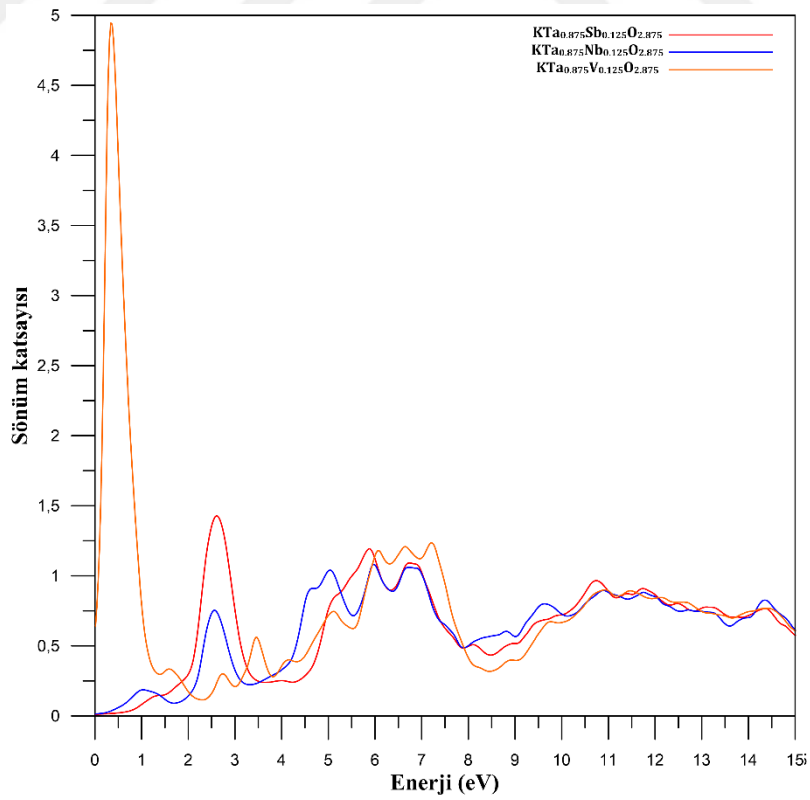
Kusur-1 için $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek sönüm katsayısı değerine kızılaltı bölge ile görünür bölge sınırında ulaşırken kusur-2 için ise $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek sönüm katsayısı değerine kızılaltı bölge içerisinde ulaşmaktadır. Her iki kusur tipi için ise $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri ise en yüksek sönüm katsayısı değerlerine görünür bölgede ulaşmaktadır. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için elde edilen en yüksek sönüm katsayısı ve bu katsayıya karşılık gelen enerji değeri Çizelge 4.26'da verilmiştir. Sönüm katsayısı spektrumunda mor ötesi bölgede görülen diğer pikler ise bandlar arasındaki optik geçişlere karşılık gelmektedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri için elde edilen sönüm katsayısının enerjiye bağlı grafiği Şekil 4.206 ve Şekil 4.207 de verilmiştir.

Çizelge 4.26. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için en yüksek sönüm katsayısı ve bu değere karşılık gelen enerji değeri

Kusur-1		
Bileşik	Sönüm Katsayısı	Enerji değeri
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	1,01	2,03 eV
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	1,07	1,86 eV-1,95 eV
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	1,74	1,67 eV
Kusur-2		
Bileşik	Sönüm Katsayısı	Enerji değeri
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	1,43	2,60 eV-2,63 eV
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	0,75	2,54 eV-2,60 eV
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	4,94	0,34 eV-0,37 eV

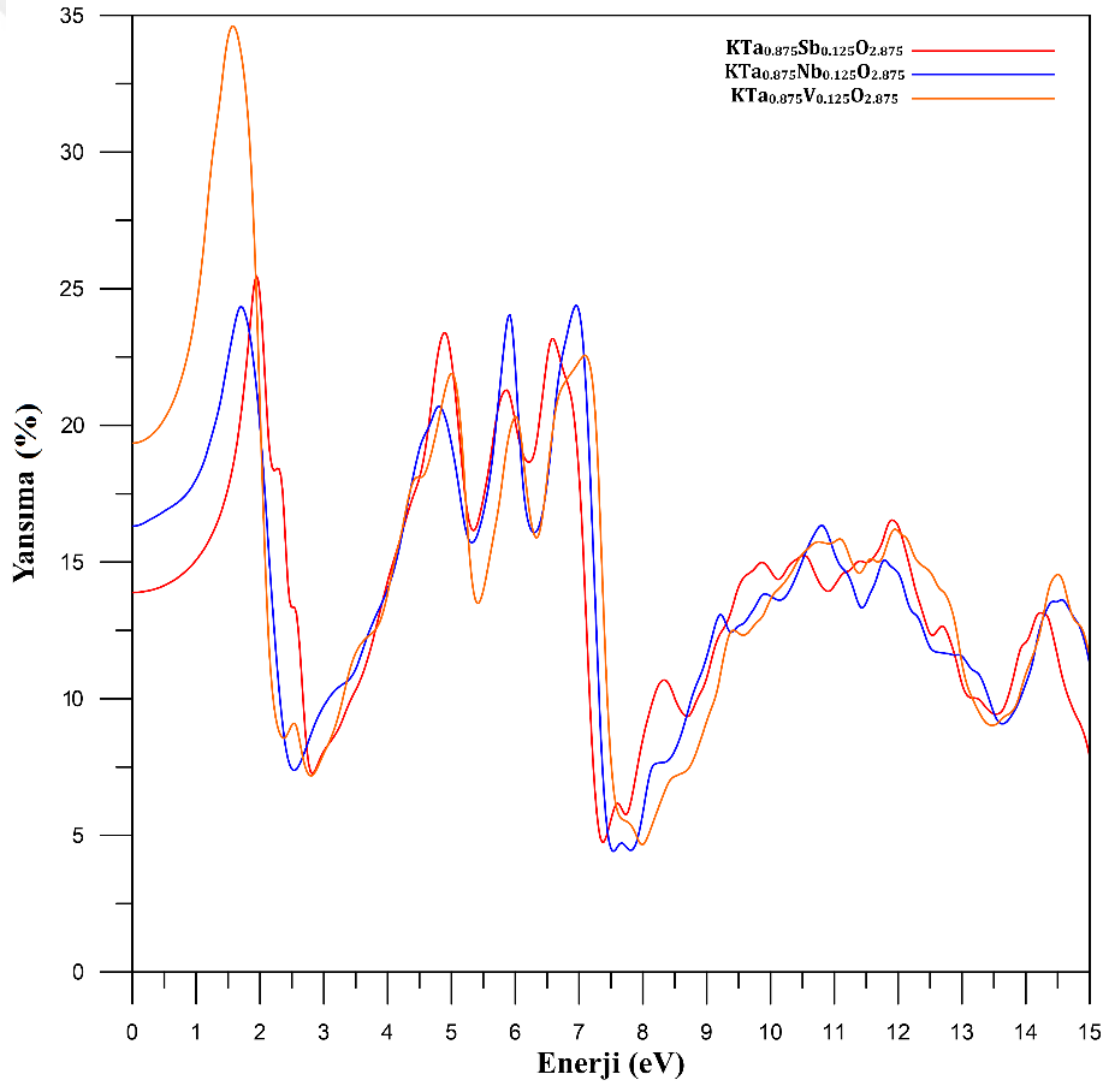


Şekil 4.206. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu

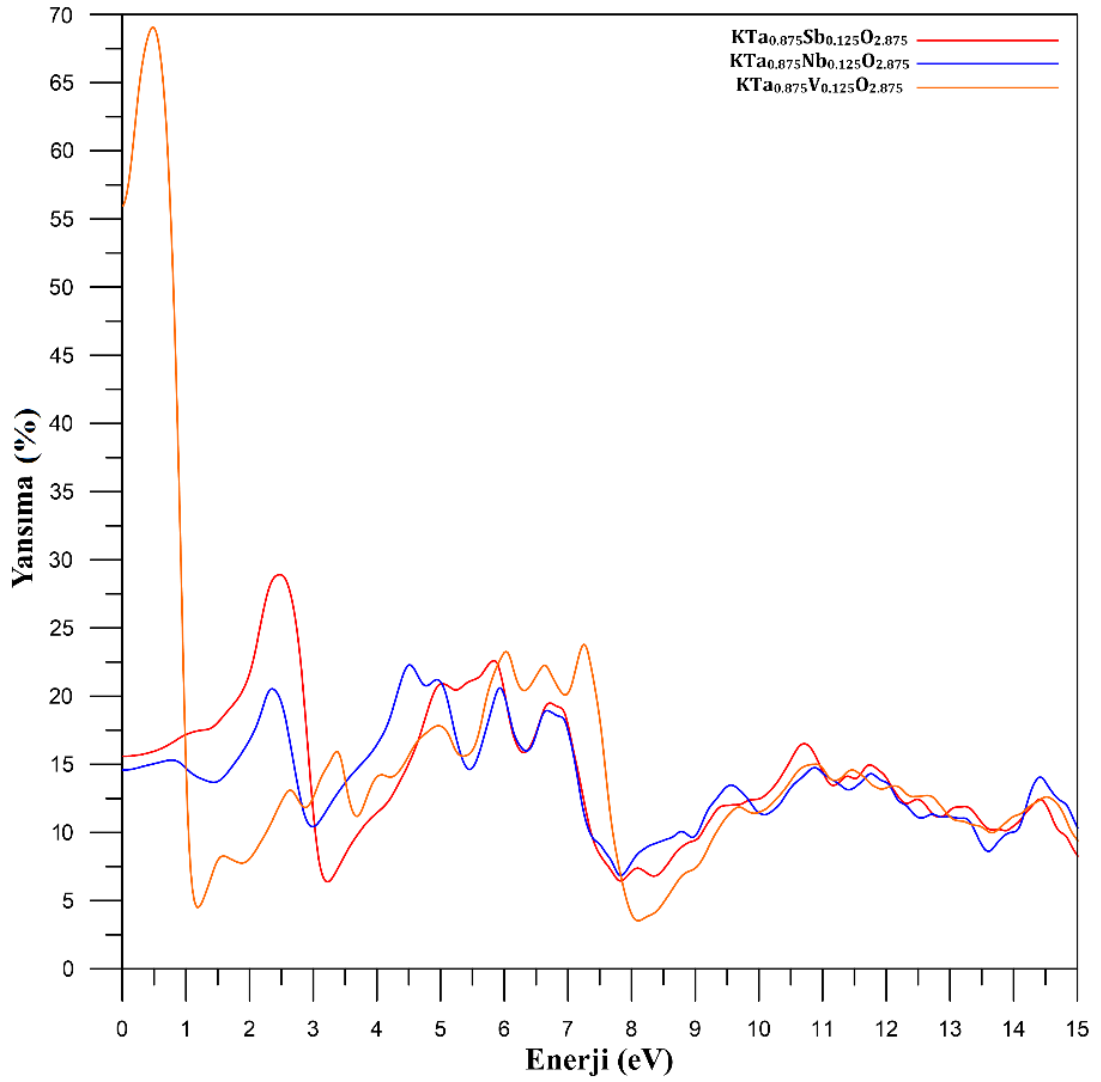


Şekil 4.207. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan sönüm katsayısı spektrumu

$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiklerine ait yansıma spektrumları Şekil 4.208 ve Şekil 4.209 da gösterilmektedir. Kusur-1 için $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiklerine ait yansıma başlangıç değerleri sırasıyla %14, %16 ve %19 dur. Kusur-2 için $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiklerine ait yansıma başlangıç değerleri sırasıyla %16, %15 ve %56 dur. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için elde edilen en yüksek yansıma değeri ve bu değere karşılık gelen enerji değeri Çizelge 4.27’de verilmiştir. Ayrıca yansıma spektrumu soğurma spektrumu ile benzerlik göstermektedir. Soğurma spektrumunda oluşan pikler yansıma spektrumunda da oluşmaktadır.



Şekil 4.208. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan yansıma spektrumu

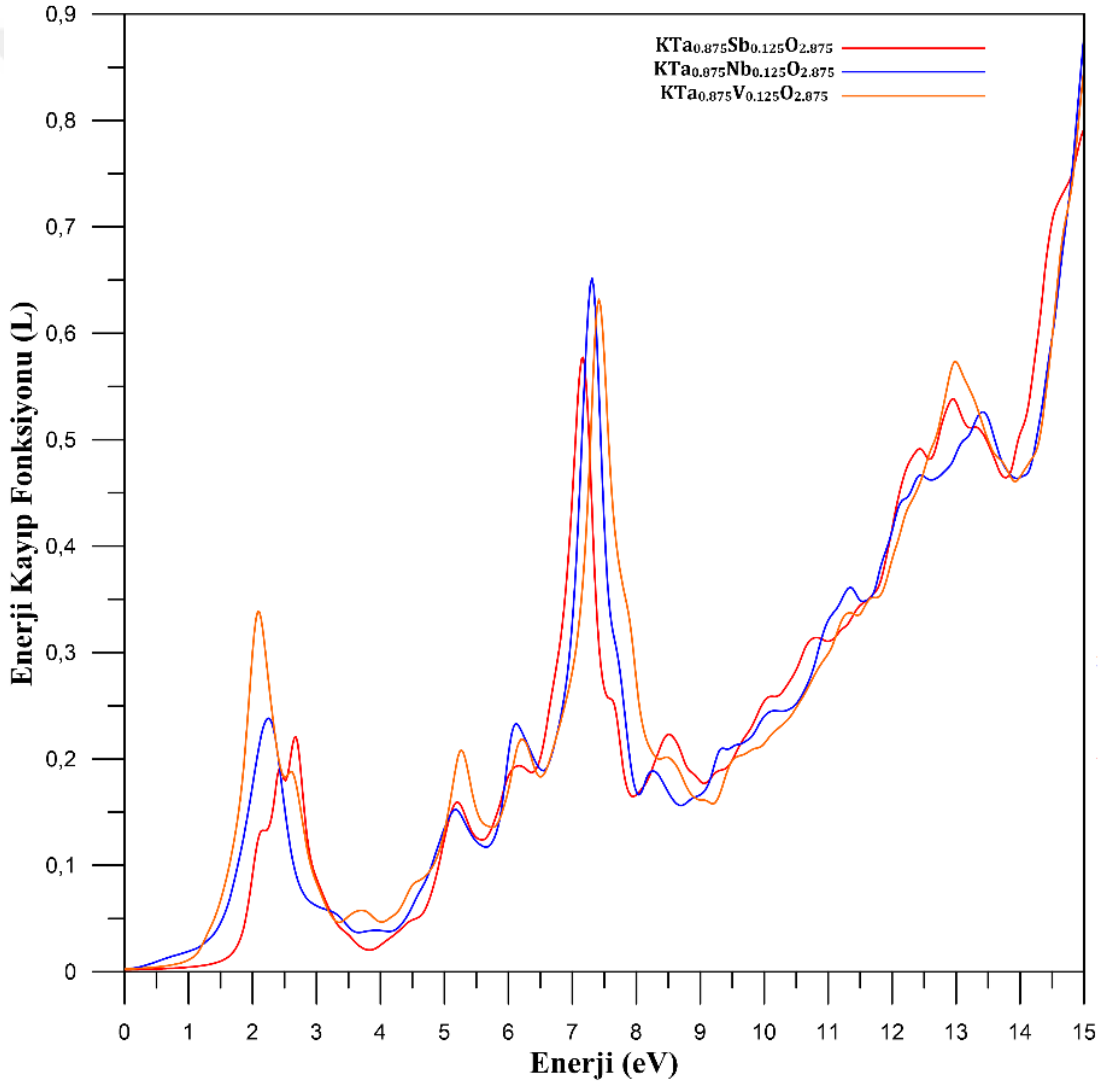


Şekil 4.209. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan yansıma spektrumu

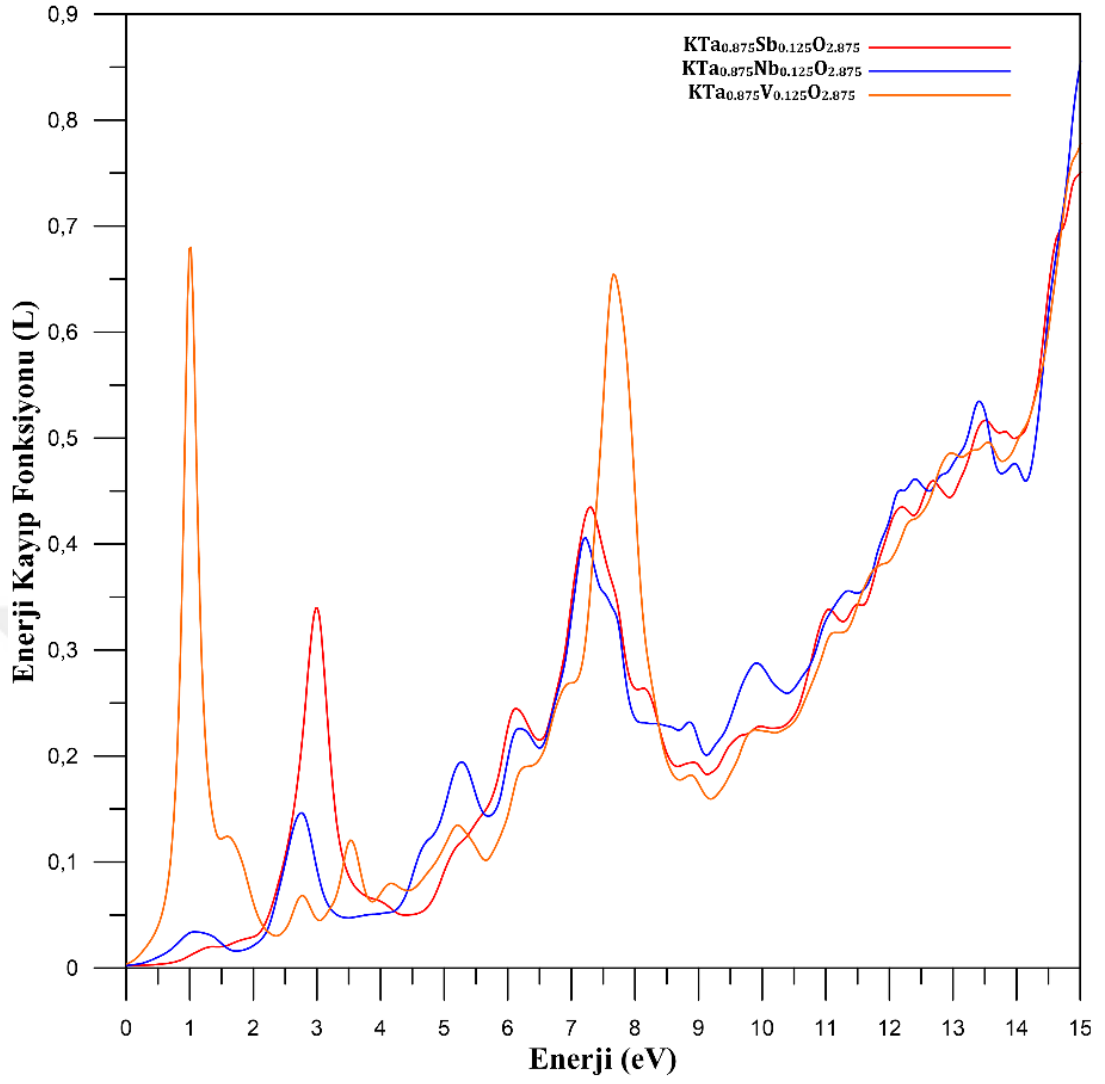
Çizelge 4.27. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için en yüksek yüzde yansıma değeri ve bu değere karşılık gelen enerji değeri.

Bileşik	Kusur-1	
	Yüzde Yansıma	Enerji değeri
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	% 25	1,89 eV-2,00 eV
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	% 24	1,59 eV-1,81 eV
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	% 35	1,54 eV-1,59 eV
Bileşik	Kusur-2	
	Yüzde Yansıma	Enerji değeri
$KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$	% 16	2,38 eV-2,57 eV
$KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$	% 15	2,35 eV-2,38 eV
$KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$	% 56	0,42 eV-0,53 eV

Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşikleri için enerji kayıp fonksiyonu spektrumu Şekil 4.210 ve Şekil 4.211 de gösterilmektedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri için (Kusur-1) enerji kayıp fonksiyonu morötesi bölgede maksimuma ulaşmaktadır. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği (kusur-2) için ise enerji kayıp fonksiyonu kızılaltı bölgede maksimuma ulaşmaktadır. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri için (Kusur-2) enerji kayıp fonksiyonu morötesi bölgede maksimuma ulaşmaktadır. Ayrıca enerji kayıp spektrumundaki keskin maksimumlar valans elektronlarının kollektif titreşimlerinden kaynaklanmaktadır.



Şekil 4.210. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin kusur-1 için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu



Şekil 4.211. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkı ve O^{-2} boşluklu KTaO_3 bileşiklerinin kusur-2 için hesaplanan enerji kayıp fonksiyonu spektrumu

5. TARTIŞMA VE SONUÇLAR

Bu tez çalışmasında Sb, Nb, V katkılı ve kusurlu KTaO_3 bileşiklerinin yapısal, elektronik ve optik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı WIEN2k simülasyon programı kullanılarak incelendi. Yapısal özelliklerin incelenmesinde LDA ve GGA yaklaşımları kullanıldı. Elektronik ve optik özelliklerinin incelenmesinde ise gradyent-düzeltilmeli Becke-Johnson potansiyeli kullanıldı. Yapısal hesaplamalar sonucu saf KTaO_3 elde edilen örgü sabiti, bulk modülü ve bulk modülünün basınca göre birinci türevi literatürde yer alan teorik ve deneysel çalışmalar ile uyum içinde olduğu tespit edildi. Ayrıca saf KTaO_3 için elde edilen yasak band aralığı deneysel çalışmalar ile uyum içinde olduğu tespit edildi. Hesaplamaların teorik ve deneysel çalışmalar ile uyum içersinde olması katkılı ve kusurlu yapılar için yapılan yapısal, elektronik ve optik hesaplamaların güvenilirliğini arttırmaktadır.

Sb^{+5} katkılı KTaO_3 bileşiklerinin Sb konsantrasyonuna bağlı olarak bulk modüllerinin azaldığı ve taban durum enerjilerinin arttığı tespit edildi. Ayrıca örgü parametreleri saf KTaO_3 bileşiğinin örgü parametresi ile karşılaştırıldığında daha küçük olduğu bulundu. $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$ bileşiğinin yasak band enerjisi 3,56 eV olarak hesaplandı. Bu enerji elektromanyetik spektrumda mor ötesi bölgeye karşılık gelmektedir. $\text{KTa}_{0.750}\text{Sb}_{0.250}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.625}\text{Sb}_{0.375}\text{O}_3$, $\text{KTa}_{0.500}\text{Sb}_{0.500}\text{O}_3$ ve $\text{KTa}_{0.375}\text{Sb}_{0.625}\text{O}_3$ bileşiklerinin yasak band enerjisi ise sırasıyla 2,77 eV, 2,48 eV, 1,66 eV ve 1,77 eV olarak hesaplandı. Bu enerji değerleri elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir. %25 ile %62,5 arasındaki Sb^{+5} katkısı ile yasak band enerjisi görünür bölgeye çekilerek verimi artmaktadır. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiğinin yasak band enerjisi 1,28 eV olup, elektromanyetik spektrumda kızıl atı bölgeye karşılık gelmektedir. $\text{KTa}_{0.250}\text{Sb}_{0.750}\text{O}_3$ bileşiği dar band aralıklı yarı iletkenidir. Yasak band enerjisindeki azalma ise Sb atomlarının 5s-orbitallerinden kaynaklanmaktadır. Sb katkısı arttıkça 5s-orbitallerinin iletkenlik bandı içerisinde etkisinin arttığı tespit edildi. Sb katkılı bileşiklerin optik özellikleri dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. $\text{KTa}_{0.875}\text{Sb}_{0.125}\text{O}_3$,

$KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşikleri için dielektrik sabitleri, $(\epsilon_1(o))$, sırasıyla 3,69, 3,62, 3,56, 3,52 3,46 ve 3,43 olarak hesaplandı. Dielektrik sabiti değeri kızıl altı bölgeden mor ötesi bölgeye kadar artış sergilerken mor ötesi bölgede düşüşe geçmiştir. Ayrıca reel dielektrik sabitinin 0-15 eV aralığında negatife düşmemesi bu malzemelerin 0-15 eV aralığında yarıiletken davranış sergilediğini gösterir. Ayrıca yasak band aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırları (TSS) için elde edilen enerji değerleri yasak band enerjileri ile uyumludur. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_3$ bileşiğinin TSS elektromanyetik spektrumda mor ötesi bölgeye karşılık gelmektedir ve dalga boyu ise 343,31 nm dir. $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ ve $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ bileşiklerinin TSS elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir ve dalga boyları ise sırasıyla 447,65 nm, 500,00 nm, 746,99 nm ve 725,15 nm dir. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiğinin TSS ise elektromanyetik spektrumda kızıl altı bölgeye karşılık gelmektedir ve dalga boyu ise 968,75 nm dir. Sb katkısı ile optik geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlendi. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$, $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$ ve $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ bileşikleri için soğurma elektromanyetik spektrumun görünür keskin bir artışa geçmektedir. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiği için soğurma başlangıç sınırı kızılaltı bölge iken, diğer Sb katkılı bileşikler için bu sınır elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir. Kırılma indisleri, $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiği hariç, kızılötesi bölgeden mor ötesi bölgeye kadar artış sergilemektedir. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiği ise görünür bölgede (2,74 eV civarı) düşüşe geçerken mor ötesi bölgede tekrar artış sergilemektedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_3$ ve $KTa_{0.750}Sb_{0.250}O_3$ bileşikleri için yansımaya başlangıç değerleri %10 dur. $KTa_{0.625}Sb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Sb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Sb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşikleri için ise yansımaya başlangıç değerleri %9 dur. Kızıl altı bölgede yansımaya değerleri hemen hemen sabit kalmaktadır. Görünür bölgede ise Kızılötesi bölgede yansıtma oranı hemen hemen sabit kalmıştır (%10). Görünür bölgede ise $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiği hariç Sb katkılı diğer bileşiklerin yansımaya oranında artış görülmektedir. $KTa_{0.250}Sb_{0.750}O_3$ bileşiği ise 2,80 eV civarında yansımaya oranında düşüş gözlenmektedir. Yansıtma oranı %11'den %13'e küçük bir artış sergilemektedir.

Sb katkıli bileşikler 0-15 eV aralığında en yüksek yansıtma oranına 5 eV ile 8 eV arasında ulaşmaktadır.

Nb⁺⁵ katkıli KTaO₃ bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA deęiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. Her iki potansiyel içinde Nb katkısı arttıkça taban durum enerjileri ve bulk modülünün basınca göre türevinin arttığı tespit edilmiştir. Bulk modülü ve örgü sabiti ise Nb katkısı ile azalmıştır. Bu azalışı Nb atomunun yarıçapının neden olduğu düşünölmektedir. Çünkü Nb atomunun yarıçapı 1,41 Å iken Ta atomunun yarıçapı 1,47 Å dur. Nb katkıli KTaO₃ bileşikleri yarıiletken bir malzemedir. Ayrıca band grafiklerinde iletkenlik bandının minimum ve valans bandını maksimum noktası Γ dır. KTa_{0.875}Nb_{0.125}O₃ bileşiğinin yasak band enerjisi 3,15 eV olarak hesaplandı. Bu enerji elektromanyetik spektrumda mor ötesi bölgeye karşılık gelmektedir. KTa_{0.750}Nb_{0.250}O₃, KTa_{0.625}Nb_{0.375}O₃, KTa_{0.500}Nb_{0.500}O₃, KTa_{0.375}Nb_{0.625}O₃ ve KTa_{0.250}Nb_{0.750}O₃ bileşiklerinin yasak band enerjisi ise sırasıyla 2,83 eV, 2,60 eV, 2,39 eV, 2,40 eV ve 2,39 olarak hesaplandı. Yasak band grafikleri incelendiğinde x=0,500, 0,625 ve 0,750 deęerleri için band enerjileri hemen hemen deęişmemektedir. Yasak band enerjileri elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir. Band yapı ve toplam durum yoğunluğu eğrileri bu bileşiğin yarıiletken özellikte olduğunu gösterir. Valans band içerisinde O atomunun 2p-orbitalleri baskındır. Nb katkısı ile valans band içerisinde zayıf oranda Nb atomunun 4p-orbitallerinin etkisi vardır. Ayrıca valans band içerisinde Ta atomunun 5d-orbitalleri ve Nb atomunun 4d-orbitalleri ile O atomunun 2p-orbitalleri arasında hibritleşme gözlenmektedir. Bu hibritleşme Ta ve Nb ile O atomu arasında kovalent baę olduğunu ortaya koymaktadır. İletkenlik bandında ise Ta atomunun 5d-orbitalleri ve Nb atomunun 4d-orbitalleri baskındır. Yasak band enerjisindeki azalma ise Nb atomlarının 4d-orbitallerinden kaynaklanmaktadır. Nb katkısı arttıkça 4d-orbitallerinin iletkenlik bandı içerisinde etkisinin arttığı bulundu. Nb katkıli bileşiklerin optik özellikleri Sb katkıli bileşiklerde olduğu gibi dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. KTa_{0.875}Nb_{0.125}O₃, KTa_{0.750}Nb_{0.250}O₃, KTa_{0.625}Nb_{0.375}O₃, KTa_{0.500}Nb_{0.500}O₃, KTa_{0.375}Nb_{0.625}O₃ ve KTa_{0.250}Nb_{0.750}O₃ bileşikleri için dielektrik sabitleri, ($\epsilon_1(o)$), sırasıyla 3,90, 4,04, 4,18, 4,31, 4,44 ve

4,57 olarak hesaplandı. Dielektrik sabiti değeri kızıl altı bölgeden mor ötesi bölgeye kadar artış sergilerken mor ötesi bölgede düşüşe geçmiştir. Ayrıca reel dielektrik sabitinin 0-15 eV aralığında negatife düşmemesi bu malzemelerin 0-15 eV aralığında yarıiletken davranış sergilediğini gösterir. Yasak band aralığına karşılık gelen temel soğurma sınırları (TSS) için elde edilen enerji değerleri, yasak band enerjileri ile uyumludur. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$ bileşiğinin TSS elektromanyetik spektrumunda mor ötesi bölgeye karşılık gelmektedir ve dalga boyu ise 3963,65 nm dir. $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşiklerinin TSS ise sırasıyla 2,83 eV, 2,60 eV, 2,39 eV, 2,40 eV ve 2,39 olarak hesaplandı ve dalga boyları ise sırasıyla 438,16 nm, 476,92 nm, 518,83 nm, 516,67 nm ve 518,83 nm dir. Nb katkısı ile optik geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlendi. TSS enerjileri elektronların Γ - Γ geçişlerine karşılık gelir. $KTa_{0.125}Nb_{0.875}O_3$, $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ ve $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ bileşikleri için soğurma elektromanyetik spektrumun görünür bölgesinde (yaklaşık 2,50 eV civarı) keskin bir artışa geçmektedir. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$, bileşikleri için ise bu artış mor ötesi bölgede gerçekleşmektedir. Nb katkılı bileşikler için soğurma başlangıç sınırı ise elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelmektedir. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri için kırılma indisleri, $(n(0))$, sırasıyla 1,98, 2,01, 2,04, 2,08, 2,11 ve 2,14 olarak hesaplandı. Ayrıca, en yüksek kırılma indisi mor ötesi bölgededir. Kırılma indisleri, elektromanyetik spektrumun kızılötesi bölgesinde ve görünür bölgesinde artış sergilemektedir. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$ ve $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$ bileşikleri için sönüm katsayısı mor ötesi bölgede keskin bir artışa geçmektedir. $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri için ise sönüm katsayısı görünür bölgede keskin bir artışa geçmektedir. En yüksek sönüm katsayısı değerlerine mor ötesi bölgede ulaşmaktadır. Kızıl altı bölgede ise sönüm katsayısı hemen hemen sabit kalmaktadır. $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}Nb_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri için yansımaya başlangıç değerleri sırasıyla %10,7, %11,3, %11,8, %12,2, %12,7 ve %13,2 dir. Kızıl altı bölgede yansımaya değerleri hemen hemen sabit kalmaktadır. Görünür

bölgede ise Nb katkılı bileşiklerin yansıtma oranında artış görülmektedir. $KTa_{0.625}Nb_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}Nb_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri 0-15 eV aralığında en yüksek yansıtma oranına 4 eV ile 5 eV arasında ulaşmaktadır. $KTa_{0.375}Nb_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}Nb_{0.750}O_3$ bileşikleri ise en yüksek yansıtma oranına 6 eV ile 7,50 eV arasında ulaşmaktadır.

V^{+5} katkılı $KTaO_3$ bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. Her iki potansiyel içinde V katkısı arttıkça taban durum enerjilerinin arttığı tespit edilmiştir. GGA method için bulk modülü ve örgü sabiti V katkısı ile azalmıştır. Bu azalışı V atomunun yarıçapının neden olduğu düşünülmektedir. Çünkü V atomunun kovalent yarıçapı 1,25 Å iken Ta atomunun kovalent yarıçapı 1,38 Å dur. V katkılı $KTaO_3$ bileşikleri yarıiletken bir malzemedir. Ayrıca band grafiklerinde iletkenlik bandının minimum ve valans bandını maksimum noktası Γ dir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiğinin yasak band enerjisi 2,54 eV olarak hesaplandı. Ayrıca $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiğinin yasak band aralığı içerisinde 1,41 eV ile 1,68 eV aralığında tuzak bandının oluştuğu görüldü. Valans band ile tuzak band arasındaki enerji değeri 1,40 eV hesaplandı. Yasak band enerjisi elektromanyetik spektrumda görünür bölgeye karşılık gelirken, tuzaklama bandı ise kızıl altı bölgeye karşılık gelmektedir. $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiklerinin yasak band enerjisi ise sırasıyla 1,01 eV, 0,74 eV, 0,51 eV, 0,53 eV ve 0,56 eV olarak hesaplandı. Yasak band grafikleri incelendiğinde $x=0,500$, $0,625$ ve $0,750$ değerleri için band enerjileri hemen hemen değişmemektedir. Valans band içerisinde O atomunun 2p-orbitalleri baskındır. V katkısı ile valans band içerisinde V atomunun 3d-orbitallerinin etkisi artmaktadır. Ayrıca valans band içerisinde Ta atomunun 5d-orbitalleri ve V atomunun 3d-orbitalleri ile O atomunun 2p-orbitalleri arasında hibritleşme gözlenmektedir. Bu hibritleşme Ta ve V ile O atomu arasında kovalent bağ olduğunu ortaya koymaktadır. İletkenlik bandında ise Ta atomunun 5d-orbitalleri ve V atomunun 3d-orbitalleri baskındır. Yasak band enerjisindeki azalma ise V atomlarının 3d-orbitallerinden kaynaklanmaktadır. V katkılı bileşiklerin optik özellikleri Sb ve Nb katkılı bileşiklerde olduğu gibi dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir.

$KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$,
 $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşikleri için dielektrik sabitleri, ($\epsilon_1(\omega)$),
sırasıyla 4,64, 5,71, 6,55, 7,55, 8,27 ve 9,13 olarak hesaplandı. Dielektrik sabiti
değeri kızıl altı bölgede artış sergilerken görünür bölgede düşüşe geçmiştir.
Ayrıca reel dielektrik sabitinin 0-15 eV aralığında negatife düştüğü bölgelerde
metalik davranış sergilediğini gösterir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$ ve
 $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$ bileşikleri yalnız mor ötesi bölgede metalik davranış
sergilemektedir. $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşikleri
ise hem görünür bölge hem de mor ötesi bölgede metalik davranış
sergilemektedir. Ayrıca yasak band aralığına karşılık gelen temel soğurma
sınırları (TSS) için elde edilen enerji değerleri, yasak band enerjileri ile
uyumludur. V katkısı ile optik geçiş enerjilerinin azaldığı gözlemlendi. V katkılı
bileşikler için soğurma elektromanyetik spektrumun kızılötesi bölgesinde artışa
geçmektedir. Görünür bölge içerisinde $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiği soğurma katsayısı
en yüksek malzemedir (2,7 eV civarı). V katkılı bileşikler için soğurmanın en
yüksek olduğu bölge ise elektromanyetik spektrumda morötesi bölgeye karşılık
gelmektedir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$, $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$,
 $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşikleri için kırılma indisleri, ($n(0)$),
sırasıyla 2,15, 2,39, 2,56, 2,75, 2,88 ve 3,02 olarak hesaplandı. Ayrıca, en yüksek
kırılma indisi değerine görünür bölgededir. Elektromanyetik spektrumun
görünür bölgesinde kırılma indisi en yüksek bileşik $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ dir. Kırılma
indisleri, elektromanyetik spektrumun kızılötesi bölgesinde artış
sergilemektedir. Kırılma indisleri görünür bölgede maksimum değere ulaşana
kadar artarken bu bölge içerisinde ikinci pik değerlerine mor ötesi bölgede
ulaşmaktadır. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiği en yüksek sönüm katsayısı değerine
morötesi bölgede ulaşırken diğer tüm V katkılı bileşikler en yüksek değerlerine
görünür bölgede ulaşmaktadır. Sönüm katsayısı değeri kızılötesi bölgede hemen
hemen sıfıra eşittir. V katkılı tüm bileşikler için sönüm katsayısı görünür bölgede
ilk piklerini verdikten sonra tekrar düşüşe geçmektedir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$,
 $KTa_{0.750}V_{0.250}O_3$, $KTa_{0.625}V_{0.375}O_3$, $KTa_{0.500}V_{0.500}O_3$, $KTa_{0.375}V_{0.625}O_3$ ve
 $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşikleri için yansıma başlangıç değerleri sırasıyla %13, %17,
%19, %22, %23 ve %25 dir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_3$ bileşiği en yüksek yansıma değerine

morötesi bölgede ulaşırken diğer tüm V katkılı bileşikler en yüksek değerlerine görünür bölgede ulaşmaktadır. Görünür bölgede ise en yüksek yansıma değeri (%52) $KTa_{0.250}V_{0.750}O_3$ bileşiğine aittir.

Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu (kusurlu yapı) $KTaO_3$ bileşiği için yapılan hesaplamalarda LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanıldı. İlk boşluk katkı atomu ile Ta atomu arasında yer alan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturuldu (Kusur-1). İkinci yapıda ise O^{-2} boşluğu Ta-Ta arasında bulunan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturuldu (Kusur-2). LDA ve GGA değiş-tokuş korelasyon potansiyelleri kullanılarak elde edilen Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerinin örgü sabiti, bulk modülleri ve bulk modüllerinin basınca göre birinci türevleri hesaplandı. O^{-2} boşluklarının farklı noktalarda olması yapısal özelliklerde hemen hemen bir değişikliğe neden olmamıştır. Katkı atomu ile Ta atomu arasında yer alan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturulan kusurlu yapılar (kusur-1) için elde edilen band yapılarından Nb^{+3} katkılı bileşik metalik karakter sergilediği bulunurken Sb^{+3} ve V^{+3} katkılı bileşikler yarıiletken karakter sergilemektedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiklerinin yasak band enerjileri sırasıyla 1,23 eV ve 0,27 eV tur. Yasak band enerjisi elektromanyetik spektrumda kızıl altı bölgeye karşılık gelmektedir. Ta-Ta arasında bulunan O^{-2} atomu çıkartılarak oluşturulan kusurlu yapıların (kusur-2) için elde edilen band yapılarından tamamı metalik karakter sergilemektedir. Nb^{+3} katkılı yapılarda O^{-2} boşluğunun yerinin değişmesi bileşiğinin karakteristik yapısını değiştirmemiştir. Sb^{+3} ve V^{+3} katkılı bileşiklerde O^{-2} boşluğunun yerinin değişmesi ile bileşiğin karakteristik yapısını değiştirmektedir. Sb^{+3} , Nb^{+3} ve V^{+3} katkılı ve O^{-2} boşluklu $KTaO_3$ bileşiklerin optik özellikleri dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri için dielektrik sabitleri, ($\epsilon_1(o)$), sırasıyla 4,79, 5,55 ve 6,61 olarak hesaplandı (kusur-1). $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri en yüksek dielektrik sabitine kızıl altı bölgede ulaşırken $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği görünür bölgede ulaşmaktadır (Kusur -1). $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri için dielektrik sabitleri, ($\epsilon_1(o)$), sırasıyla 5,31, 5,00 ve 46,87 olarak hesaplandı

(Kusur-2). $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek dielektrik sabitine kızıl altı bölgede ulaşırken $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ği görünür bölgede ulaşmaktadır (Kusur -2). Ayrıca reel dielektrik sabitinin 0-15 eV aralığında negatife düştüğü bölgelerde metalik davranış sergilediğini bulundu. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-1) bileşikleri için elde edilen temel soğurma sınırı (TSS) enerjileri yasak band hesaplamaları ile uyum içerisindedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-1) ilk piklerini görünür bölgededir. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-2) bileşiğinin ilk piki kızılaltı bölgeye karşılık gelirken $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-2) bileşiklerinin ilk pikleri görünür bölgeye karşılık gelmektedir. Her iki kusur tipi için de soğurmanın en yüksek olduğu bölge ise elektromanyetik spektrumda morötesi bölgeye karşılık gelmektedir. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-1) bileşikleri için kırılma indisleri, $(n(0))$, sırasıyla 2,19, 2,35 ve 2,57 olarak hesaplandı. Ayrıca, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri en yüksek kırılma indisi değerine kızılaltı bölgede ulaşırken, $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek kırılma indisi değerine görünür bölgede ulaşmaktadır. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ (Kusur-2) bileşikleri için kırılma indisleri, $(n(0))$, sırasıyla 2,31, 2,24 ve 6,88 olarak hesaplandı. Ayrıca, $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri en yüksek kırılma indisi değerine görünür bölgede ulaşırken, $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek kırılma indisi değerine kızılaltı bölgede ulaşmaktadır. Kusur-1 için $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek sönüm katsayısı değerine kızılaltı bölge ile görünür bölge sınırında ulaşırken kusur-2 için ise $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği en yüksek sönüm katsayısı değerine kızılaltı bölge içerisinde ulaşmaktadır. Her iki kusur tipi için ise $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri ise en yüksek sönüm katsayısı değerlerine görünür bölgede ulaşmaktadır. Kusur-1 için $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiklerine ait yansıma başlangıç değerleri sırasıyla %14, %16 ve %19 dur. Kusur-2 için $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiklerine ait yansıma başlangıç değerleri sırasıyla %14, %16 ve %19 dur. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$, $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri için (Kusur-1) enerji kayıp

fonksiyonu morötesi bölgede maksimuma ulaşmaktadır. $KTa_{0.875}V_{0.125}O_{2.875}$ bileşiği (kusur-2) için ise enerji kayıp fonksiyonu kızılaltı bölgede maksimuma ulaşmaktadır. $KTa_{0.875}Sb_{0.125}O_{2.875}$ ve $KTa_{0.875}Nb_{0.125}O_{2.875}$ bileşikleri için (Kusur-2) enerji kayıp fonksiyonu morötesi bölgede maksimuma ulaşmaktadır.



KAYNAKLAR

- Acquarone M., Ventura C.I., 2008. Spin wave excitations in the antiferromagnetic Heisenberg-Kondo model for heavy fermions. Eriřim Tarihi: 09.10.2018. <https://www.researchgate.net/publication/1758307>.
- Akkuř H., 2007. SbSI Kristalinin Elektronik ve Optik zellikleri: Yoęunluk Fonksiyoneli Teorisinin Uygulaması. ukurova niversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, 113s, ADANA.
- Ambrosch-Draxl C. ve Sofo J., 2006. Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method. *Computer Physics Communications*, 175, 1-14.
- Akbarzadeh A.R., Bellaiche L., Leung K., İniguez J., Vanderbilt D., 2004. Atomistic simulations of the incipient ferroelectric KTaO_3 . *Physical Review B*, 70, 054103.
- Bae H., Sigman J., Norton D.P., Boatner L.A., 2005. Surface treatment for forming unit-cell steps on the (001) KTaO_3 substrate surface. *Applied Surface Science*, 241, 271-278.
- Benrekia A.R., Benkhetto N., Nassour A., Driz M., Sahnoun M., Lebegue S., 2012. Structural, electronic and optical properties of cubic SrTiO_3 and KTaO_3 : Ab initio and GW calculations. *Physica B*, 407, 2632 – 2636.
- Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G., Kvasnicka, D., Luitz, J., 2014. An Augmented Plane Wave plus Local orbital program for Calculating the Crystal Properties. 14th ed. WIEN 2014.
- Bouafia H., Hiadsi S., Abidri B., Akriche A., Ghalouci L., Sahli B., 2013. Structural, elastic, electronic and thermodynamic properties of KTaO_3 and NaTaO_3 : Ab initio investigations. *Computational Materials Science*, 75, 1–8.
- Born, M., Oppenheimer J. R., 1927. Zur Quantentheorie der Molekeln. *Ann. Phys.*, 84, 457-460.
- Busico V., Carfagna C., Salerno V., Vacatello M., Fittipaldi F., 1980. The layer perovskites as thermal energy storage systems. *Solar Energy*, 24(6), 575-579.
- Cheong S. W., Mostovoy M., 2007. Multiferroics: a magnetic twist for ferroelectricity. *Nature Materials*, 6 13-20.
- Choi M., Oba F., Tanaka I., 2011. Hybrid density functional study of oxygen vacancies in KTaO_3 and NaTaO_3 . *Physical Review B*, 83, 214107.

- Çelik G., 2010. SrTiO₃ ve SrZrO₃ Kristallerinin Elektronik Band Yapısı ve Optik Özelliklerinin İncelenmesi. Çukurova Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, 76s, ADANA.
- Davidson, M. W., Lofgren, G. F., 1991. Photomicrography in the geological sciences. Journal of Geological Education, 39, 403–422.
- Dersim Fizik, 2018. Erişim Tarihi: 07.10.2018. <http://dersimfizik.blogspot.com/2014/03/elektromanyetik-kurumagore-isgn-yaps19.html>
- Eyi E.E., 2009. NaTaO₃ Kristalinin Elektronik ve Lineer Optik Özelliklerinin İncelenmesi. Çukurova Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, 79s, ADANA.
- Fock, V., 1930. Naherungs methode zur Losung des quanten-mechanischen Mehrkörper probleme, Z. Phys, 61, 126-148.
- Fritsche, L. ve Gu, Y. M., 1993. Binding properties of 3d transition metals in a generalized density-functional theory. Physical Review B, 48, 4259-4264.
- Geyer R. G., Riddle B., Krupka J., Boatner L. A., 2005. Microwave dielectric properties of single-crystal quantum paraelectrics KTaO₃ and SrTiO₃ at cryogenic temperatures. Journal of Applied Physics, 97, 104111.
- Glinchuk M.D., Laguta V.V., Bykov I.P., Rosa J., Jastrabik L., 1995. ESR investigations of nominally pure KTaO₃. Chemical Physics Letters, 232, 232-236.
- Golovina I.S., Kolesnik S.P., Btyksa V.P., Strelchuk V.V., Yanchuk I.B., Geifman I.N., Khainakov S.A., Svechnikov S.V., Morozovska A.N., 2012. Defect driven ferroelectricity and magnetism in nanocrystalline KTaO₃. Physica B, 407, 614-623.
- Grabowska E., 2016. Selected perovskite oxides: Characterization, preparation and photocatalytic properties-A review. Applied Catalysis B: Environmental, 186, 97-126.
- Grass M., Braun J., Postnikov A., Borstel G., Ünlü H., Neumann M., 1996. Full-potential photoemission calculations for KTaO₃. Surface Science, 352-354, 760-764.
- Hartree, DR., 1928. The wave mechanics of an atom with non-coulombic central field: parts I, II, III. Proc. Cambridge Phil. Soc., 24, 89-111.
- He Y., Zhu Y., Wu N., 2004. Mixed solvents: a key in solvothermal synthesis of KTaO₃. Journal of Solid State Chemistry, 177, 2985-2990.

- Hill N.A., 2000. Why Are There so Few Magnetic Ferroelectrics?. *Journal of Physical Chemistry B*, 104(29), 6694-6709.
- Himmetoglu B., Janotti A., 2016. Transport properties of KTaO_3 from first-principles. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28, 065502.
- Hohenberg P. ve kohn W., 1964. Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136, B864-B871.
- Hong N. H., Sakai J., Poirot N., Brize V., 2006. Room-temperature ferromagnetism observed in undoped semiconducting and insulating oxide thin films. *Physical Review B*, 73, 132404.
- Kato H. ve Kudo A., 2001. Water Splitting into H_2 and O_2 on Alkali Tantalate Photocatalysts ATaO_3 (A = Li, Na, and K). *J. Phys. Chem. B*, 105, 4285-4292.
- Klein A., Singh D.J., Urigar C.J., 1995. All electron study of gradient corrections to the local-density functional in metallic systems. *Physical Review. B*, 51, 4105 4109.
- King P.D.C., He R.H., Eknapakul T., Buaplet P., Mo S.K., Kaneko Y., Harashima S., Hikita Y., Bahramy M.S., Bell C., Hussain Z., Tokura Y., Shen Z.X., Hwang H.Y., Baumberger F., Meevasana W., 2012. Subband Structure of a Two-Dimensional Electron Gas Formed at the Polar Surface of the Strong Spin-Orbit Perovskite KTaO_3 . *Physical Review Letters*, 108, 117602.
- Klein R.S. ve Kugel G.E., 1995. Observation and interpretation of photocurrents in KTaO_3 : Li single crystals. *Optical Materials*, 4, 163-167.
- Kohn W. ve Sham L.J., 1965. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140, A1133-A1138.
- Koirala P., Gulec A., Marks L.D., 2017. Surface heterogeneity in KTaO_3 (001). *Surface Science*, 657, 15-19.
- Koller D., Tran F., Blaha P., 2012. Improving the modified Becke-Johnson exchange potential. *Physical Review B*, 85, 155109.
- Kronig R. De L., 1926. On the theory of the dispersion of X-rays. *J. Opt. Soc. Am*, 12, 547-557.
- Kubacki J., Molak A., Rogala M., Rodenbücher C., Szot K., 2012. Metal-insulator transition induced by non-stoichiometry of surface layer and molecular reactions on single crystal KTaO_3 . *Surface Science*, 606, 1252-1262.

- Lee C., Yang W., Parr G.R., 1988. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37, 785-789.
- Leung K., 2001. Transition-metal ion in KTaO_3 . *Physical Review B*, 65, 012102.
- Liu C., Li F., Ma L.P., Cheng H.M., 2010. Advanced materials for energy storage. *Advanced Materials* 22(8), E28-E62.
- Liu J.W., Chen G., Li Z.H. Zhang Z.G., 2007. Hydrothermal synthesis and photocatalytic properties of ATaO_3 and ANbO_3 (A=Na and K). *International Journal of Hydrogen Energy*, 32, 2269-2272.
- Marchelek M., Bajorowicz B., Mazierski P., Cybula A., Klimczuk T., Winiarski M., Fijalkowska N., Zaleska A., 2015. KTaO_3 -based nanocomposites for air treatment. *Catalysis Today*, 252, 47-53.
- Mavroides J. G., Kafalas J. A., Kolesar D. F., 1976. Photoelectrolysis of water in cells with SrTiO_3 anodes. *Applied Physics Letters*, 28, 241-243.
- Miller R.C. ve Spitzer W.G., 1963. Far Infrared dielectric Dispersion in KTaO_3 . *Physical Review*, 129, 94-98.
- Modak B. ve Ghosh S.K., 2017. Improving visible light photocatalytic activity of KTaO_3 using cation-anion dopant pair. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 159, 590-598.
- Murnaghan F.D., 1944. The Compressibility of Media under Extreme Pressures. *PNAS*, 30 (9), 244-247.
- Nishihata Y., kamishama O., Maeda H., Ishii T., Sawada A., Terauchi H., 1995. EXAFS study on the local structure in potassium tantalate. *Physica B*, 208 & 209, 311-312.
- Othman M.SH., 2009. Bazı Yarıiletkenlerin Elektronik, Elastik ve Optik Özelliklerinin Ab Initio Metodu ile İncelenmesi. Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, 138s, ANKARA.
- Öteleş B., 2011. Bazı Kuazi Moleküler Yapıların (SrTiO_3 - SrZrO_3) Elektronik Band Yapısı Ve Optik Özelliklerinin Temel Prensiplerle İncelenmesi. Çukurova Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, 105s, ADANA.
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., 1996. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77, 3865-3868.

- Perdew J.P., Burke K., Wang Y., 1996. Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system. *Physical Review B*, 54, 16533-16539.
- Perdew J.P. ve Wang Y., 1992. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, 45, 13244-13249.
- Perry C.H. ve McNelly T.F., 1967. Ferroelectric "Soft" Mode in KTaO_3 . *Physical Review*, 154, 456-458.
- Rao M.P., nandhini V.P., Wu J.J., Syed A., Ameen F., Anandan S., 2018. Synthesis of N-doped potassium tantalate perovskite material for environmental applications. *Journal of Solid State Chemistry*, 258, 647-655.
- Shi J., Guo L., 2012. ABO_3 -based photocatalysts for water splitting. *Progress in Natural Science: Materials International*, 22(6), 592-615.
- Sholl, D.S., Steckel, J.A., 2009. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Pratik Bir Giriş. Çev. Aydın, S., Körözlü, N. Nobel Yayın, 238s, Ankara.
- Sigman J., Norton D.P., Christen H.M., Fleming P.H., Boatner L.A., 2002. Antiferroelectric Behavior in Symmetric $\text{KNbO}_3/\text{KTaO}_3$ Superlattices. *Physical Review Letters*, 88, 097601.
- Song Q., Peng R., Xu H., Feng D., 2017. The spatial distribution of two dimensional electron gas at the $\text{LaTiO}_3/\text{KTaO}_3$ interface. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29, 315001.
- Tran F., Blaha P., 2009. Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential. *Physical Review Letters*, 102, 226401.
- Trybula Z., Miga S., Los Sz., Trybula M., Dec J., 2015. Evidence of polar nanoregions in quantum paraelectric KTaO_3 . *Solid State Communications* 209-210, 23-26.
- Tupitsyn I.I., Deineka A., Trepakov V.A., Jastrabik L., Kapphan S.E., 2001. Energy structure of KTaO_3 and $\text{KTaO}_3:\text{Li}$, *Physical Review B*, 64, 195111.
- University of Liverpool, 2017. Erişim Tarihi: 08.11.2017. [http://www.chemtube3d.com/solidstate/perovskite\(final\).htm](http://www.chemtube3d.com/solidstate/perovskite(final).htm).
- Usui H., Shibata S., Kuroki K., 2010. Origin of coexisting large Seebeck coefficient and metallic conductivity in the electron doped SrTiO_3 and KTaO_3 . *Physical Review B*, 2010, 205121.
- Wadehra N., Tomar R., Halder S., Sharma M., Singh I., Jena N., Prakash B., Sarkar A. D., Bera C., Venkatesan A., S. Chakraverty, 2017. Electronic structure

modification of the KTaO_3 single-crystal surface by Ar^+ bombardment. *Physical Review B*, 96, 115423.

Wang C., Qiu H., Inoue T., Yao Q., 2014. Band gap engineering of SrTiO_3 for water splitting under visible light irradiation. *International journal of hydrogen energy*, 39, 12507-12514.

Vikhnin V., Eden S., Aulich M., Kapphan S., 2000. The origin of the red luminescence in incipient ferroelectric KTaO_3 . *Solid State Communications*, 113 (8), 455-460.

Yagi S. ve Fujiura K., 2014. Electro-optic KTN devices. *Physics Procedia*, 56, 40-47.

Yalçın B.G., 2014. Bizmut ve Azot İçeren III-V Grubu Yarıiletken Alaşımların Fiziksel Özelliklerinin İncelenmesi. Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, 126s, SAKARYA.

Zhang H.M., wan X., Zhang Z.M., 2012. Studies of the g factors and the local structure of the orthorhombic Ni^+ center in KTaO_3 crystal. *Physica B*, 407, 2201-2204.

Zhao N., Wang Y., Wang Q., Hu W., 2012. First-principles calculations of the electronic structure and optical properties of $\text{K}_{1-x}\text{Na}_x\text{TaO}_3$ ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). *Journal of Solid State Chemistry*, 194, 37-42.

Zhu Z.Y., Wang S.Q., Fu Y.M., 2016. First-Principles Study of Properties of Strained $\text{PbTiO}_3/\text{KTaO}_3$ Superlattice. *CHIN. PHYS. LETT.*, 33 (2), 026302.

Zou Y., Hu Y., Gu H., Wang Y., 2009. Optical properties of octahedral KTaO_3 nanocrystalline. *Materials Chemistry and Physics*, 115, 151-153.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : İsmail YÜCEL
Doğum Yeri ve Yılı : Isparta, 1987
Medeni Hali : Bekar
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta : d1440108002@stud.sdu.edu.tr

Eğitim Durumu

Lise : Isparta Gülkent Lisesi, 2004
Lisans : AİBÜ, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü
Yüksek Lisans : SDÜ, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı

Proje Deneyimi

TÜBİTAK-4007, Isparta 2. Bilim Şenliği (2017), Atölye Lideri.

TÜBİTAK-4004, Sessiz Doğa-4 (2017), Eğitimci.

TÜBİTAK-4007, 1. Isparta Bilim Şenliği (2016), Atölye Lideri.

TÜBİTAK-4004, Gökyüzü Farkındalığı-2, (2015), Eğitimci.

SDÜ BAP 3296-YL2-12 nolu proje (2012-2017), YBCO Süperiletkenin Yapısal, Elektriksel ve Manyetik Özelliklerinin İncelenmesi, Araştırmacı.

Yayımları

SCI, SSCI ve AHCI tarafından taranan dergilerde yayımlanan teknik not, editöre mektup, tartışma, vaka takdimi ve özet türünden yayınlar dışındaki makale

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, The role of carbon (C) atoms on YBCO superconductor: DFT study, Optoelectronics and Advanced Materials-Rapid Communications, Vol. 11, No. 9-10, September-October 2017, p. 590-599.

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Ekrem Artuç, Effects of substitution on electronic and optic properties of Ga and P doped AlN nanosheets, Optik - International Journal for Light and Electron Optics, vol. 144, September 2017, 498-510.

A. M. Babanlı, İsmail Yücel, Ballistic conductance in a diluted magnetic semiconductor quantum ring, Chinese Journal of Physics, vol. 55, June 2017, pp. 755-759.

Turgut Fatih Kasalak, Arif Babanlı, Seyfettin Çakmak, İsmail Yücel, Structural and electronic properties of $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ ternary and $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ quaternary compounds. Optoelectronics and Advanced Materials – Rapid Communications, Vol. 10, No. 5-6, May-June 2016, p. 391 – 396.

Hakemli dergilerde yayımlanan teknik not, editöre mektup, tartışma, vaka takdimi ve özet türünden yayınlar dışındaki makale

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, The Structural and Electronic Properties of $\text{TlGa}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}_2$ ($x=0.00, 0.25, 0.50, 0.75$) Alloys, Süleyman Demirel University Faculty of Arts and Sciences Journal of Science, 2017, 12 (1): 30-40.

Ulusal toplantıda sunularak özet metin olarak yayımlanan bildiri

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Ekrem Artuç ve Arif Babanlı, XBr ($X=\text{Ag}, \text{Cu}, \text{Tl}$) Nano Yapıların Elektronik Özellikleri, Adım Fizik Günleri IV, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi, 2016.

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Ekrem Artuç ve Arif Babanlı, $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{S}$ ($x=0.25, 0.50, 0.75$) Bileşiklerinin Yapısal Ve Elektronik Özellikleri, Adım Fizik Günleri IV, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi, 2016.

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Ekrem Artuç ve Arif Babanlı, $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$ ($x=0, 0.25$) Alaşımının Elektronik Özellikleri, Yoğun Madde Fiziği İzmir Toplantısı, İzmir, 2015.

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Ekrem Artuç ve Arif Babanlı, TlInSe_2 ve $\text{Tl}_{0.75}\text{In}_{0.75}\text{Si}_{0.25}\text{Se}_2$ Alaşımının Elektronik Özellikleri, Adım Fizik Günleri IV, Kütahya, 2015.

Uluslararası toplantıda sunularak özet metin olarak yayımlanan bildiri

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Electronic and Optic Properties of Sb and Nb Doped KTaO_3 Compounds, Turkish Physical Society 33rd International Physics Congress, 6-10 September 2017, Bodrum/Turkey.

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Ekrem Artuç, Ga and P Doped AlN Nanosheets: First Principle Study, Turkish Physical Society 33nd International Physics Congress, 6-10 September 2017, Bodrum/Turkey.

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Investigation of ABO_3 (A: Sr, Ba, Na, K; B:Ta, Ti) Type Perovskite: Ab-Initio Calculations, Turkish Physical Society 32nd International Physics Congress, 6-9 September 2016, Bodrum/Turkey.

Turgut Fatih Kasalak, İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak and Arif Babanlı, Density Functional Study of Electronic Properties of $Bi_{2-x}Sb_xTe_{3-y}Se_y$, Turkish Physical Society 32nd International Physics Congress, 6-9 September 2016, Bodrum/Turkey.

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Ekrem Artuç ve Arif Babanlı, Electronic Properties of $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$ ($x=0, 0.25$) Alloys, 9th International Physics Conference of the Balkan Physical Union, 24-27 August 2015, İstanbul University, İstanbul / Turkey.

İsmail Yücel, Seyfettin Çakmak, Ekrem Artuç ve Arif Babanlı, The Structural And Electronic Properties of $CuBr_xCl_{1-x}$ ($x=0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) Compounds, 9th International Physics Conference of the Balkan Physical Union, 24-27 August 2015, İstanbul University, İstanbul / Turkey.