

T.C.
SÜLEYMAN DEMİREL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TOPOLOJİK YALITKANLAR

Turgut Fatih KASALAK

Danışman
Prof. Dr. Arif BABANLI

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
ISPARTA - 2017



© 2017 [Turgut Fatih KASALAK]

TEZ ONAYI

Turgut Fatih KASALAK tarafından hazırlanan "**Topolojik Yalıtkanlar**" 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. Arif BABANLI**
Süleyman Demirel Üniversitesi



Jüri Üyesi **Prof. Dr. Seyfettin ÇAKMAK**
Süleyman Demirel Üniversitesi



Jüri Üyesi **Prof. Dr. Bilender PAŞAOĞLU**
Süleyman Demirel Üniversitesi



Jüri Üyesi **Yrd.Doç. Dr. Ülkü BAYHAN**
Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi



Jüri Üyesi **Yrd.Doç. Dr. Serdar TEZ**
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.

Turgut Fatih KASALAK



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
İÇİNDEKİLER.....	iv
ÖZET	vi
ABSTRACT	vii
TEŞEKKÜR.....	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xii
1.GİRİŞ.....	1
2.KAYNAK ÖZETLERİ.....	5
3.TEMEL TEORİK BİLGİLER	9
3.1.Kristal Yapılar	9
3.2.Bazı Özel Kristal Yapılar	10
3.2.1.Sodyum Klorür (NaCl) Yapısı	10
3.2.2.Sezyum Klorür (CsCl) Yapısı	11
3.2.3.Sıkı Paketlenmiş Hegzagonal (hcp) Yapı.....	11
3.2.4.Rombohedral Yapı	12
3.3.Ters Örgü Vektörleri.....	12
3.4.Brillouin Bölgesi	13
4.YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ.....	15
4.1.Çok Cisim Problemi	15
4.2.Born-Oppenheimer Yaklaşımı	16
4.3.Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları	17
4.3.1.Hartree Yaklaşımı	17
4.3.2.Hartree-Fock Yaklaşımı	18
4.4.Yoğunluk Fonksiyonel Yaklaşımları	19
4.4.1.Thomas Fermi teorisi	19
4.4.2.Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi.....	20
4.4.3.Değiş-Tokuş Kolerasyon Fonksiyoneli	22
4.4.3.1.Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA)	22
4.4.3.2.Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA)	23
4.5.Tam potansiyel lineer-açısız-düzlem dalga (FLAPW) metodu	24
5.MATERYAL METOT	25
5.1.WIEN2k Programının Yapısı	25
5.1.1.Case.struct Dosyalarının Oluşturması.....	26
5.1.2.init_lapw Hesaplamaları	28
5.2.SCF Döngüleri.....	35
5.3.Hesaplama Özellikleri	35
5.3.1.Elektron Yoğunluğu.....	35
5.3.2.Durum Yoğunluğu (DOS).....	38
5.3.3.Band Yapısı	39
5.4.Hacim Optimizasyonu (V, c/a).....	42
5.5.Süper Hücre	44
6.BULGULAR	46
6.1.İkili Bileşikler Bi ₂ Te ₃ , Sb ₂ Te ₃ ve Sb ₂ Se ₃ 'ün Yapısal Özellikleri.....	46
6.2.Üçlü Bi _{2-x} Sb _x Te ₃ Bileşiklerinin Yapısal Özellikleri	49

6.3.Dörtlü $Bi_{2-x}Sb_xTe_{3-y}Se_y$ Bileşiklerinin Yapısal Özellikleri.....	52
6.4.İkili Bileşikler Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve Sb_2Se_3 'ün Elektronik Özellikleri.....	54
6.5.Üçlü $Bi_{2-x}Sb_xTe_3$ ($x=0.33, 0.66, 1, 1.33, 1.66$) Bileşiklerinin Elektronik Özellikleri	60
6.6.Dörtlü $Bi_{2-x}Sb_xTe_{3-y}Se_y$ ($x=y=0.33, 0.66, 1, 1.33, 1.66$) Bileşiklerinin Elektronik Özellikleri.....	67
7.TARTIŞMA VE SONUÇLAR.....	74
KAYNAKLAR.....	78
ÖZGEÇMİŞ.....	83



ÖZET

Doktora Tezi

TOPOLOJİK YALITKANLAR

Turgut Fatih KASALAK

Süleyman Demirel Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Arif BABANLI

Bu tez çalışmasında üç boyutlu topolojik malzemelerden Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 bileşiklerinin yapısal ve elektronik özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yöntemi kullanılarak incelenmiştir.

Topolojik durumların düzenlenmesi veya ayarlanması genellikle katkılama yöntemiyle gerçekleşmektedir. Bu sebeple $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ kimyasal formülü kullanarak tek tek atom katkılaması yapılarak üçlü $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşikleri elde edilmiştir. Aynı zamanda $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ kimyasal formülü kullanılarak atom katkılamasıyla $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ dördü bileşikleri elde edilmiştir. Elde edilen üçlü ve dördü bileşiklerin yapısal ve elektronik özellikleri (DFT) yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Ayrıca tüm bileşikler de spin-orbital etkileşimi dikkate alınarak band yapıları çıkarılmıştır.

Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 yapılarında yasak band enerji aralığı Γ yüksek simetri noktası üzerinde ortaya çıkmış ve burada direkt band aralığı gözlenmiştir. Sb_2Se_3 için valans bandı ile iletkenlik bandı arasındaki en yakın mesafe $K - \Gamma$ yüksek simetri noktaları arasında hesaplanmıştır. Band yapıları incelendiğinde, tüm ikili bileşiklerin yarıiletken özellik gösterdiği ortaya çıkmıştır. Tüm üçlü bileşiklerin elektronik özellikleri incelendiğinde ise, yasak band enerji aralığının Γ yüksek simetri noktası üzerinde ortaya çıkmıştır. Tüm üçlü ve dördü bileşikler dar-band aralığına sahip yarıiletken karakteri göstermiştir.

Anahtar Kelimeler: DFT, Elektronik Özellikler, Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı, Yapısal Özellikler.

2017, 85 sayfa

ABSTRACT

Ph D . Thesis

TOPOLOGICAL INSULATORS

Turgut Fatih KASALAK

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

Supervisor: Prof. Dr. Arif BABANLI

In this thesis, the structural and electronic properties of 3D topological materials such as Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 were investigated using density functional theory (DFT) method.

As is known, the regulation or regulation of topological situations usually takes place by means of doping. For this reason, ternary $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ and $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ compounds were obtained by performing single atom doped using $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ chemical formula. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ and $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ quaternary compounds were also obtained by atoms doped using the $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ chemical formula. The structural and electronic properties of the obtained ternary and quaternary compounds have been examined. In addition, band structures have been obtained for all compounds included the spin-orbital interaction.

In the case of Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 , the band gap appeared on the symmetry points Γ , where direct band gap is seen. For Sb_2Se_3 the closest distance between the valence band and the conductivity band is between symmetry points $K - \Gamma$. All binary compounds were examined in the band structures exhibit semiconducting properties. When the electronic properties of all the ternary compounds were examined, it has been seen that the band gap appears on the symmetry points Γ . All ternary and quaternary compounds show a semiconductor character with a narrow band gap.

Keywords: DFT, Electronic Properties, Generalized Gradient Approximation, Structural Properties.

2017, 85 pages

TEŞEKKÜR

Doktora tez arařtırmam süresince engin bilgisi ve desteęini esirgemeyen; karřılařtıęım zorluklarda bilgi ve tecrübesi ile yardımcı olan deęerli tez danıřmanım Prof. Dr. Arif BABANLI' ya teőekkürlerimi sunarım.

Tezimin yürütülmesinde bilgi ve tecrübeleriyle katkıda bulunan Prof. Dr. Seyfettin AKMAK'a teőekkürlerimi sunarım. Tezimin savunma aőamasında deęerli görüőlerini paylaőan Yrd. Do. Dr. Serdar TEZ ve Yrd. Do. Dr. Ülkü BAYHAN' a teőekkürlerimi sunarım.

Doktora programına bařladıęım zamandan beri samimi ve deęerli görüőlerini paylaőıp bana yol gösteren deęerli arkadaőım İsmail YÜCEL'e teőekkür ederim. 3998-D2-14 No'lu Proje ile tezimi maddi olarak destekleyen Süleyman Demirel Üniversitesi Bilimsel Arařtırma Projeleri Yönetim Birimi Baőkanlıęı'na teőekkür ederim.

Son olarak bana her zaman destek olan babam ve anneme; tezimin her aőamasında beni yalnız bırakmayan varlıęından güç aldıęım sevgili eőim Gamze KASALAK'a sonsuz sevgi ve saygılarımı sunarım.

Turgut Fatih KASALAK
ISPARTA, 2017

ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa
Şekil 3. 1. İki boyutlu örgü.....	10
Şekil 3. 2. NaCl kristali yapısı	10
Şekil 3. 3. Sezyum klorür kristali yapısı	11
Şekil 3. 4. hcp yapıdaki kristal yapısı	11
Şekil 3. 5. hcp ve fcc kristal yapılarının atomlarının istiflenme düzeni	12
Şekil 3. 6. Rombohedral yapının birinci Brillouin bölgesi	14
Şekil 5. 1. StructGen ekranı	26
Şekil 5. 2. İnititalize calculation ekranı	29
Şekil 5. 3. Elektron yoğunluğu ekranı	36
Şekil 5. 4. Durum yoğunluğu ekranı	38
Şekil 5. 5. Bandstructure ekranı.....	40
Şekil 5. 6. case.insp dosyası ekranı	41
Şekil 5. 7. Optimizasyon ekranı	43
Şekil 5. 8. Supercell ekranı	45
Şekil 6. 1. Bi ₂ Te ₃ bileşiğinin (a) Rombohedral İlkel Hücresi, (b) Hegzagonal Birim Hücresi, (c) Hegzagonal Birim Hücresinin Simetri Noktaları.....	47
Şekil 6. 2. Bi ₂ Te ₃ , Sb ₂ Te ₃ ve Sb ₂ Se ₃ ikili bileşiklerin kristal yapıları	48
Şekil 6. 3. Bi ₂ Te ₃ , Sb ₂ Te ₃ ve Sb ₂ Se ₃ bileşiklerin hacim-enerji grafikleri	49
Şekil 6. 4. Bi _{1.66} Sb _{0.33} Te ₃ , Bi _{1.33} Sb _{0.66} Te ₃ , BiSbTe ₃ , Bi _{0.66} Sb _{1.33} Te ₃ ve Bi _{0.33} Sb _{1.66} Te ₃ bileşiklerinin kristal yapıları	50
Şekil 6. 5. Bi _{1.66} Sb _{0.33} Te ₃ , Bi _{1.33} Sb _{0.66} Te ₃ , BiSbTe ₃ , Bi _{0.66} Sb _{1.33} Te ₃ ve Bi _{0.33} Sb _{1.66} Te ₃ bileşiklerinin hacim-enerji grafikleri	51
Şekil 6. 6. Bi _{1.66} Sb _{0.33} Te _{2.66} Se _{0.33} , Bi _{1.33} Sb _{0.66} Te _{2.33} Se _{0.66} , BiSbTe ₂ Se, Bi _{0.66} Sb _{1.33} Te _{1.66} Se _{1.33} ve Bi _{0.33} Sb _{1.66} Te _{1.33} Se _{1.66} dörtlü bileşiklerin kristal yapıları	53
Şekil 6. 7. Bi _{1.66} Sb _{0.33} Te _{2.66} Se _{0.33} , Bi _{1.33} Sb _{0.66} Te _{2.33} Se _{0.66} , BiSbTe ₂ Se, Bi _{0.66} Sb _{1.33} Te _{1.66} Se _{1.33} ve Bi _{0.33} Sb _{1.66} Te _{1.33} Se _{1.66} dörtlü bileşiklerin hacim-enerji grafikleri	54
Şekil 6. 8. Bi ₂ Te ₃ , Sb ₂ Te ₃ ve Sb ₂ Se ₃ ikili bileşiklerin band yapıları ve toplam durum yoğunlukları(TDOS).....	55
Şekil 6. 9. Bi ₂ Te ₃ , Sb ₂ Te ₃ ve Sb ₂ Se ₃ ikili bileşiklerin kısmi durum yoğunlukları	57
Şekil 6. 10. Bi ₂ Te ₃ , Sb ₂ Te ₃ ve Sb ₂ Se ₃ ikili bileşiklerin spin-orbital etkileşmesi dahil edilmiş band yapıları.....	59
Şekil 6. 11. Bi _{1.66} Sb _{0.33} Te ₃ , Bi _{1.33} Sb _{0.66} Te ₃ , BiSbTe ₃ , Bi _{0.66} Sb _{1.33} Te ₃ ve Bi _{0.33} Sb _{1.66} Te ₃ üçlü bileşiklerin band yapıları ve toplam durum yoğunlukları(TDOS)	61
Şekil 6. 12. Bi _{1.66} Sb _{0.33} Te ₃ , Bi _{1.33} Sb _{0.66} Te ₃ , BiSbTe ₃ , Bi _{0.66} Sb _{1.33} Te ₃ ve Bi _{0.33} Sb _{1.66} Te ₃ üçlü bileşiklerin kısmi durum yoğunlukları	64
Şekil 6. 13. Bi _{1.66} Sb _{0.33} Te ₃ , Bi _{1.33} Sb _{0.66} Te ₃ , BiSbTe ₃ , Bi _{0.66} Sb _{1.33} Te ₃ ve Bi _{0.33} Sb _{1.66} Te ₃ üçlü bileşiklerin spin-orbital etkileşimi dahil edilmiş band yapıları	66
Şekil 6. 14. Bi _{1.66} Sb _{0.33} Te _{2.66} Se _{0.33} , Bi _{1.33} Sb _{0.66} Te _{2.33} Se _{0.66} , BiSbTe ₂ Se, Bi _{0.66} Sb _{1.33} Te _{1.66} Se _{1.33} ve Bi _{0.33} Sb _{1.66} Te _{1.33} Se _{1.66} dörtlü	

bileşiklerin band yapıları ve toplam durum yoğunlukları(TDOS)	68
Şekil 6. 15. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ dördlü bileşiklerin kısmi durum yoğunlukları	71
Şekil 6. 16. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ dördlü bileşiklerin spin-orbital etkileşimi dahil edilmiş band yapıları..	73



ÇİZELGELER DİZİNİ

	Sayfa
Çizelge 6. 1. Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve Sb_2Se_3 bileşiklerinin optimizasyon verileri örgü sabiti a, c (Å), bulk modülü B (GPa) ve bulk modülünün basınca göre türevi(B').....	48
Çizelge 6. 2. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiklerinin optimizasyon verileri örgü sabiti a, c (Å), bulk modülü B (GPa) ve bulk modülünün basınca göre türevi(B')	50
Çizelge 6. 3. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiklerin atomlar arası mesafe.....	51
Çizelge 6. 4. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiklerinin optimizasyon verileri örgü sabiti a, c (Å), bulk modülü B (GPa), bulk modülünün basınca göre türevi(B') ve denge hacmi.....	53
Çizelge 6. 5. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiklerin atomlar arası mesafe.....	53
Çizelge 6. 6. Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve Sb_2Se_3 ikili bileşiklerin yasak band enerji aralıkları.....	55
Çizelge 6. 7. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ üçlü bileşiklerin yasak band enerji aralıkları	61
Çizelge 6. 8. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ dördü bileşiklerin yasak band enerji aralıkları	68

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

\AA	Angström
\vec{a}	Öteleme vektörü
ARPES	Açısal-çözümlü foto emisyon spektroskopisi
Bi	Bizmut
DFT	Yoğunluk fonksiyonel teorisi
DOS	Durum yoğunluğu
FLAPW	Tam potansiyel lineerize edilmiş düzlem dalga metodu
eV	Elektronvolt
E_g	Yasak band enerji aralığı
E_F	Fermi enerjisi
$E[n]$	Sistemin enerjisi
$E_{xc}[n(\vec{r})]$	Değiş tokuş-korelasyon fonksiyoneli
GGA	Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı
\vec{G}	Ters örgü vektörü
H	Hamiltonyen
\vec{k}	Dalga vektörü
LDA	Yerel yoğunluk yaklaşımı
PDOS	Kısmi durum yoğunluğu
RMT	Muffin-Tin yarıçapı
Ry	Ryberg
\vec{r}	Konum vektörü
Sb	Antimon
Se	Selenyum
STM	Tarama tünelleme mikroskobu
s, p, d, f	Orbital isimleri
\vec{T}	Örgü öteleme vektörü
Te	Tellür
TDOS	Toplam durum yoğunluğu
V_{xc}	Değişim korelasyon potansiyeli
Γ, K, M, A	Yüksek simetri noktaları
Z_A	Atom sayısı

1. GİRİŞ

Katıhal fiziğine konu olan yakın zamanda yapılmış en önemli çalışmalardan biri de teknolojik olarak büyük potansiyele sahip olduğu düşünülen ve topolojik yalıtkan olarak adlandırılan malzemelerdir. Bu malzemelerin en temel özelliklerinden bir tanesi iç kısımlarında yalıtkan olmasına karşılık yüzey veya kenarlarında iletken olması ve bu özelliklerinin de topolojik olarak yerel bozukluklardan korunaklı olmasıdır. Topoloji kavramının gelişimine ve fizikteki kullanımına bakıldığında topolojik kavramı 1700'lü yılların başında Königsberg köprüleri probleminin matematiksel çözümü sırasında Euler tarafından ortaya konulmuştur. Matematiğin en geniş çalışma alanlarından biri olarak, cebirsel ve geometrik topoloji, düğüm kuramı, küme kuramı, nokta-küme kuramı gibi temel çalışma alanlarının ortaya çıkmasına neden olmuştur. Topolojinin fizik alanındaki kullanımı, 1900'lerin başlarında önemli ölçüde Einstein tarafından geliştirilen görecelik kuramlarının içindeki on tane birbirleri arasında bağlantılı lineer olmayan denklemlerine dayanmaktadır. Genel relativite teorisinde topolojik tekil çözümlerin bulunması ile topoloji terimi fiziğin birçok uygulama alanında kullanımı yaygınlaşmıştır. 1960'ların ilk yıllarında Abdus Salam, Weinberg ve Glashow tarafından yüksek enerji fiziğinin en başarılı modellerinden biri olan Standart Modelde, henüz gözlemlenemeyen skirmiyon, monopol, instanton, aksiyon ve soliton gibi topolojik yapılar bulunmuştur (Hakkıoğlu, 2013). 1928 yılında Felix Bloch tarafından ortaya çıkarılan band teorisi, uzunca bir süre anlamlandırılmamıştır (Franz ve Molenkamp, 2013). Kuantum mekaniğinde Pancharatnam-Berry fazı (1984) ve Aharonov-Anandan fazı (1987) gibi topolojik fazlar kuramsal olarak keşfedilmiştir. Bu fazların deneysel olarak gözlemlenmesi, yeni teknolojiler ve malzemelerin gelişimini desteklemiştir. Berry fazının oluşturduğu yeni gelişimler, 2000'li yıllarda katı hal fiziğinde farklı topolojik etkileri oluşturmuştur. Süper iletkenlerin enerji bandı uzayı, Dirac tarafından geliştirilen göreceli kuantum mekaniğinde kütleli parçacığın enerji uzayını hatırlatmış ve yeni topolojik yapıların varlığını belirtmiştir. 1997 yılında topolojik malzemelerden Bizmut Tellür ve Bizmut Selenid'in termoelektrik ve elektronik yapı özellikleri üzerinde çalışmalar

yapılmıştır (Mishra vd., 1997). Bu dönemde topolojik malzemelerde özellikle kristal kusur özellikler üzerine çalışmalar yapılmıştır (Desai ve Dhar, 2000). Ayrıca 2000 yılında Bi_2Te_3 ve BaBiTe_3 bileşiklerinin elektronik yapıları üzerine çalışmalar gerçekleştirilmiştir (Larson vd.,2000). 2002 yılında deneysel olarak SrRuO olarak bilinen 24 malzemede p-tipi süper iletkenlik görülmüştür (Hakkıoğlu, 2013).

2004 yılında başlanan çalışmalarda (Urazhdin vd., 2004), teorik çalışma uzmanları tarafından band yalıtkanlarının fiziğinde topolojinin etkileri açıklanmış; böylece araştırmacıların kristal katılara olan bakış açısında devrim yapılmıştır. Topolojik yalıtkan band teorisi öncesi tüm bandlar temelde eşdeğer olarak düşünülürken; topolojik yalıtkanlar band teorisinde iki konumsal boyutta iki temel sınıf ve üç boyutta 16 sınıf ortaya atılmıştır. Katıların band teorisinden yaklaşık 80 yıl sonra kuantum sayısının yeni durumu tahmin edilmiştir (Franz ve Molenkamp, 2013).

Almanya'da Würzburg Üniversitesinde topolojik yapılarıdaki Dirac düğümü deneysel olarak gözlemlenmiştir. Bu malzemeler iki boyutlu topolojik yalıtkanlar ya da kuantum spin-hall yalıtkanlar olarak tanımlanmaktadır. İki boyutlu malzemeler, içlerinde yalıtkan ve kenarlarında sıfır direnç gösteren iletken yapılarıdır. Bu iki boyutlu malzemelerin sınırlarındaki enerji band uzayları, birbirlerine adeta bir topolojik spin-momentum düğümü atarak bağlanmaktadır. Bu çok basit görünen fiziksel olay, bu malzemeleri kuantum kozmolojiden spintronik'e; malzeme bilimlerinden kuantum kimyasına kadar çok geniş bir alanda çalışmakta olan araştırmacıların yakından ilgilendiği bir küçük laboratuvar deneye dönüşmüştür (Hakkıoğlu, 2013).

İki boyutlu topolojik yalıtkanlarla aynı zamanlı olarak, üç boyutlu topolojik yalıtkanların da bulunabileceği kuramsal olarak 2005 yılında ortaya konulmuştur. Bizmut tabanlı Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 gibi yapıların topolojik özellikler gösterdiği kanıtlanmıştır. 2007 yılında DFT yöntemi kullanılarak ilk prensip hesaplamalarıyla Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 malzemelerin elektronik yapıları üzerine teorik bir çalışma gerçekleştirilmiştir (Wang vd, 2007). Bugün yeni topolojik malzemelerin bulunması arayışları fizik, matematik ve kuantum kimyası gibi bilimlere içeren önemli bir araştırma alanı haline gelmiştir. Topolojik malzemeler üzerine yapılan son çalışmalarda, 2010 yılında Grafen

katkılı Bi_2Te_3 ve Bi_2Te_3 kristalinin termoelektrik ve yapısal elektronik özelliklerin incelendiği gözlenmiştir (Li vd., 2010). Aynı yılda p tipi Bizmut ve Antimon Tellürün dalga efektinin taşıma özelliklerini ele alan bir çalışma gerçekleştirilmiştir (Park vd., 2010). 2011 yılında Bi_2Te_3 doğal nokta defektleri ilk prensipler ışığında DFT yöntemi kullanılarak incelenmiştir (Hashibon ve Elsässer, 2011). Yine aynı yılda temel topolojik düzende optimize edilmiş $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ yapısına bakılmıştır (Ren vd., 2011). 2012 yılında yüksek basınç altında $\text{Bi}_2\text{Te}_3, \text{Sb}_2\text{Te}_3$ bileşiklerin taşıma özellikleri üzerine çalışmalar yapılmıştır (Jacobsen vd., 2012; Ma vd., 2012). Çift katmanlarının Bi_2Se_3 bileşiğinin topolojik durumlarına etkisi, Govaerts vd. (2014) tarafından araştırılmıştır.

Bu tez çalışmasında, üç boyutlu topolojik malzemelerden Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 ile topolojik olmayan malzemelerden Sb_2Se_3 bileşiklerinin yapısal ve elektronik özellikleri incelenmiştir. Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve Sb_2Se_3 ikili bileşiklerin yapısal özellikleri için enerji-hacim optimizasyonu işlemi yapılarak örgü sabitleri, bulk modülü, bulk modülünün basınca göre türevi ve denge hacim değerleri hesaplanmıştır. Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve Sb_2Se_3 ikili bileşiklerin elektronik özellikleri için band yapıları ile toplam ve kısmi durum yoğunlukları hesaplanmıştır. Hesaplanan değerler literatürdeki teorik ve deneysel çalışmalar ile karşılaştırılmıştır. Bilindiği gibi topolojik durumların düzenlenmesi veya ayarlanması genellikle katkılama yöntemiyle gerçekleşmektedir (Eremeev vd., 2012; Niu vd., 2012; Kushwaha vd., 2016). Bu sebeple $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ kimyasal formülü kullanılarak, tek tek Bizmut atomu çıkarılıp Antimon atomu katkılaması yapılarak üçlü $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşikleri elde edilmiştir. Aynı zamanda $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ kimyasal formülü kullanılarak Bizmut ve Tellür atomları çıkarılıp Antimon ve Selenyum atomlarının katkılanmasıyla $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ dördü bileşikleri elde edilmiştir. Ayrıca, elde edilen üçlü ve dördü bileşiklerin yapısal ve elektronik özellikleri incelenmiştir. İkili bileşiklerde olduğu gibi üçlü ve dördü bileşiklerde de yapısal özellikler için enerji-hacim optimizasyonu işlemi yapılarak örgü sabitleri, bulk modülü, bulk modülünün basınca göre türevi, denge hacmi değerleri hesaplanmıştır. Tüm bileşiklerin elektronik özellikleri için ise band

yapıları, toplam ve kısmi durum yoğunlukları hesaplanmıştır. Son olarak tüm bileşiklerde spin-orbital etkileşimi dikkate alınarak band yapıları çıkarılmıştır. Böylece tüm bileşiklerde spin-orbital etkileşiminin band yapılarında yarattığı değişimler incelenmiştir.

Bu çalışmanın ikinci bölümünde kaynak özetleri yer alırken; üçüncü bölümünde katıhal fiziğinin bazı temel kavramları özetlenmiştir. Dördüncü bölümde Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisinin tarihçesi ve dayandığı temel ilkeler açıklanmıştır. Beşinci bölümü oluşturan Materyal Metot'ta WIEN2k programını yapısı detaylı bir şekilde anlatılmıştır. Altıncı bölümde araştırmanın bulguları yer almış ve son bölümde ise sonuçlar değerlendirilmiştir.



2. KAYNAK ÖZETLERİ

Larson vd. (2000), termoelektrik bileşikler olan BaBiTe₃ ve Bi₂Te₃'ü ayrıntılı olarak ab initio yöntemi kullanarak elektronik yapılarını hesaplanmışlardır. Hesaplamaları yoğunluk fonksiyonel teorisindeki (DFT) tam potansiyel lineerize edilmiş düzlem dalga metodunu (FLAPW) kullanarak gerçekleştirilmiştir. Değişim korelasyon potansiyelini işlemek için Perdew, Burke ve Ernzerhof'un genel gradyan yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır. Her iki bileşik için spin-orbital etkileşimi dâhil edilerek band aralık değerlerini hesaplatılmıştır. Teorik olarak hesaplanan band aralığı değerleri deneysel verilerle aynı çıkmıştır. Bu iki bileşiğin bant yapılarının ayrıntılı bir şekilde karşılaştırarak, her ikisinin de etkin kütlelerin büyük oranda anizotropik olduğu ve büyüklük bakımından karşılaştırılabilir olduğu gösterilmiştir.

Urazhdin vd. (2004) araştırmalarında, Bi₂Se₃ ve Bi₂Te₃ gibi band aralığı dar olan yarıiletkenlerin katmanlarında tarama tünelleme mikroskopuyla (STM) sonlu aralıkta durum yoğunluklarını ve yüksek valans bandı durumlarının enerji aralığında baskılanmış iletimini göstermektedirler. Araştırmada, arakatman bağlantısının bulk dar-aralık elektronik yapısında güçlü bir etki meydana geldiği; Bi₂Se₃ ve Bi₂Te₃ bileşikleri ile diğer kalojenitlerin termoelektrik performans için önemli oldukları ortaya koyulmuştur.

Wang ve Cagin (2007) araştırmalarında, Bi₂Te₃ ve Sb₂Te₃ kristallerinin elektronik yapılarını FLAPW metoduyla incelemişlerdir. Araştırmada, sadece deneysel örgü parametreleri ve ölçeklendirilmiş atom koordinatlarına sahip rahat olamayan kristallere değil, aynı zamanda teorik yapı optimizasyonlarıyla belirlenen örgü parametreleri ve ölçeklendirilmiş atom koordinatlarına sahip rahat kristaller incelenmiştir. Bi₂Te₃'ün altı en düşük iletken-band kenarı ve altı en yüksek valans band kenarına sahip olduğu bulunmuştur. Bununla birlikte araştırmada, band kenar sayılarının Sb₂Te₃'de değişen yapısal parametrelerden dolayı valans elektronik topolojik dönüşümü içerisinde 6- 12 arasında değişeceği ortaya çıkarılmıştır.

Zhang vd. (2009) arařtırmalarında, Sb_2Te_3 , Sb_2Se_3 , Bi_2Te_3 ve Bi_2Se_3 stokiyometrik kristallerde katmanın ilk prensip elektronik yapı hesaplamalarının sonuçlarını göstermektedir. Yapılan hesaplamaların sonuçlarına göre; Sb_2Te_3 , Bi_2Te_3 ve Bi_2Se_3 'in topolojik yalıtkan olduđu Sb_2Se_3 ise topolojik yalıtkan olmadığı ortaya çıkmıştır. Zhang vd. (2009) arařtırmalarında topolojik yalıtkanların Γ yüksek simetri noktasında tekli Dirac konisinin basit ve güçlü yüzey durumuna sahip olduklarını göstermiştir.

Li vd. (2010), Grafen katkılı polikristal Bi_2Te_3 örneklerini, tek kristal Bi_2Te_3 'ün elektronik yapısı ve termoelektrik özelliklerini ilk prensip hesaplamaları; X-ray difraktometre, elektron tarama mikroskopu, Rietveld artırımı, termal ve taşıma ölçümleriyle incelemiřlerdir. Arařtırmada, Bi ve Te atomlarında Fermi seviyesinin yakınındaki durum yoğunlukları incelendiğinde p elektronlarının yoğun olduđu bulunmuřtur. Arařtırmanın sonuçları, grafen-katkılı Bi_2Te_3 'ün düşük termal iletkenlik özeliđi sergilediđi ve aynı zamanda yüksek deđer katsayısına sahip olduklarını göstermektedir.

Park vd. (2010) arařtırmalarında, p-tipi Bi ve Sb Tellürün termoelektrik taşıma özelliklerini (S seebeck katsayısı ve σ elektriksel iletkenlik) ilk prensiplerle tüm-elektron yoğunluk-fonksiyoneli yaklařımını kullanmıřlardır. Arařtırmada, taşıyıcı konsantrasyonun, bant aralıđı ve örgü sabitlerinin Seebeck katsayısının sıcaklık davranıřı üzerinde önemli bir etkiye sahip olduđu ve Sb_2Te_3 'teki hacim genişlemesinin 300K'de yüzde 5.5 oranında ($33 \mu V/K$) artış gösterdiđini ortaya çıkarılmıřtır. Elektronik yapı özelliklerine ek olarak, hacmin Seebeck katsayısı deđerini de etkidiđi belirlenmiřtir. Dolayısıyla Sb ile Bi atomlarının yer deđiřimiyle oluřan Sb_2Te_3 katkılanması ile Seebeck katsayısının artabileceđi ön görülmüřtür. Ayrıca, Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 'ün optimal taşıyıcı yoğunluđunun yaklařık 10^{19} cm^{-3} olduđu belirlenmiřtir.

Ren vd. (2011) topolojik yalıtkanlarda, tetradinamit yapıya sahip optimize edilmiř bulk-yalıtım davranıřını belirlemek için çeřitli kompozisyonlarda $Bi_{2-x}Sb_xTe_{3-y}Se_y$ katisının tekli kristal örneklerini sentezlenmiřlerdir. Arařtırmada, alıcı ve verici maksimum bulk-yalıtım davranıřı sunan ve diđer davranıřları telafi

eden içsel kompozisyonların serisinin var olduğu ortaya çıkarılmıştır. $\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}\text{Te}_{1.7}\text{Se}_{1.3}$ kompozisyonunun en düşük bulk taşıyıcı yoğunluğu elde edilmiş ve yüzey çalışmaları için en uygun kristal olduğu ön görülmüştür.

Eremeev vd. (2012), topolojik yalıtkanların herhangi bir saçılma kanalları olmaksızın topolojik yalıtkan taşıma rejimi içinde konumlandırılmış ideal ve izole Dirac konileri gibi bir yolla ayarlanabileceğini belirtmişlerdir. Araştırmada, ab-initio hesaplamaları sunmuş; spin-tekrar çözümlü fotoemiyon (ARPES) ve tarama tünel mikroskopisi (STM) deneyleri gösterilmiştir. Araştırmanın sonuçları; periyodik cetvelin dördüncü grup elemanlarına üçüncü eleman ilavesi ile ikili kalojenlerin (Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 ve Sb_2Te_3) etkili olarak ayarlanabileceğini göstermiştir.

Niu vd. (2012) araştırmalarında, katı-çözelti $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ de yalıtkan bulk durumlarını gerçekleştirmek ve topolojik yüzey durumlarının modüle edilmesi için teorik kanıt sunmaktadırlar. Araştırmada, $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ de bant inversiyonu meydana geleceği gösterilmiş ve tüm kompozisyonlarda band aralıkları boyunca Dirac noktasının, Sb konsantrasyonunu belirten x değerinin artışıyla bulk enerji aralığı içinde kalana kadar yukarı doğru hareket edeceği gösterilmiştir. Buna ek olarak araştırmada, x değerinin artışı ile belirgin doğal kusurların oluşması çok daha zor hale geleceğini ve bunun da gerçekten bulk yalıtımına neden olacağı belirtilmiştir.

Wu vd. (2015) araştırmalarında, topolojik yalıtkan Bi_2Te_3 'ün halka şeklindeki kirislerin üretimi için bir optik ortam olarak kullanılabileceğini deneysel olarak göstermektedirler. Düzgün altıgen morfolojisine sahip ultra ince Bi_2Te_3 malzemesi, nanoset solvotermal yöntemle başarıyla sentezlenmiştir.

Topolojik yalıtkan araştırmalarında uzun süredir devam eden mesele bulk elektronik durumlardan etkilenmeden karakterize edilmiş topolojik yüzey durumları için yüksek kaliteli platform sağlayan bulk tekli kristal malzemeyi bulmaktır. Kushwaha vd. (2016) araştırmalarında, dikey Bridgman yöntemiyle geliştirilen hafif Sn katkılı $\text{Bi}_{1.1}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ 'nin bulk kristalinin geliştirilmesiyle bu

meselenin üstesinden gelenebileceği göstermişlerdir. Araştırmada, açısız-
çözümlü foto emisyon spektroskopisi (ARPES), tarama tünelleme mikroskopisi
(STM) , X-ray difraktometre ve Raman saçılması cihazları kullanarak Sn-Bi-
 $x\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Sn}_y$ katkılaması incelenmiştir.



3. TEMEL TEORİK BİLGİLER

3.1. Kristal Yapılar

Katı malzemeler, atomların veya iyonların oluşturdukları düzene göre kristal, polikristal ve amorf olarak sınıflandırılmaktadır. Bir katının atomlarının konumları periyodikliğe sahipse kristal olarak adlandırılmaktadır (Hook ve Hall, 2013). Kristal, örgü ve bazdan oluşmaktadır. Örgü, kristali oluşturan atom veya atom gruplarının konumlarından ortaya çıkan geometrik desene verilen addır. Baz ise, örgü noktalarındaki atom veya atom gruplarına denir. Pek çok kristalin atomik yapısı yüksek bir simetriye sahip olması ile karakterize edilmekte ve çoğu zaman kristal yapılar, gösterdikleri simetriye göre sınıflandırılmaktadır. Üç boyutlu bir kristalde bir örgü, \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 gibi üç öteleme vektörü ile tanımlanmaktadır. Buna göre \vec{r} konumlu bir yerdeki atomdan bakıldığında, kristalin görünümü nasıl ise \vec{r}' konumlu bir yerde de aynı olur. Bu durumda konum vektörü şu şekilde ifade edilmektedir:

$$\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (3.1)$$

n_1, n_2, n_3 değerleri, tam sayı değişkenleridir. \vec{r}' ve \vec{r} noktalarından bakıldığında atomların dizilişi aynı olacak şekilde n tamsayı üçlüsü bulunabiliyorsa $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ değerleri, ilkel öteleme vektörleridir. Kristalin yapı taşı olan hücre, bu ilkel vektörlerle oluşmaktadır (Kittel, 1986). İlkel hücre düzenli yapının en küçük hacimsel birimi olarak tanımlanmaktadır. İlkel hücre ile tüm uzayı boşluk kalmayacak şekilde doldurmak mümkündür. İlkel hücre, tüm simetri özelliklerini gösteren Wigner-Seitz hücresi olarak adlandırılır (Aydoğan, 2011). Bazın tekrarlanmasıyla periyodik kristalin tümü ile oluşturulan ötelenme işlemlerinin yapısı Şekil 3.1.'de gösterildiği gibi, Bravais örgüsü denilen noktalar dizisi üzerinden oluşturulmaktadır.

\vec{G} ; Ters örgü vektörü,

\vec{T} ; Gerçek örgü vektörü olmak üzere;

$\exp(i\vec{G} \cdot \vec{T}) = 1$ ilişkisi vardır. Ters örgü noktaları için en genel öteleme vektörü

$$\vec{G} = v_1\vec{b}_1 + v_2\vec{b}_2 + v_3\vec{b}_3 \quad (3.2)$$

olup v_1, v_2, v_3 tamsayılarıdır ve ters örgü öteleme vektörleri $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ tür:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}; \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}, \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \quad (3.3)$$

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ kristal örgünün eksen vektörlerini; $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ ise ters örgünün eksen vektörlerini oluştururlar. V_c hacimi denklemi,

$$V_c = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3| \quad (3.4)$$

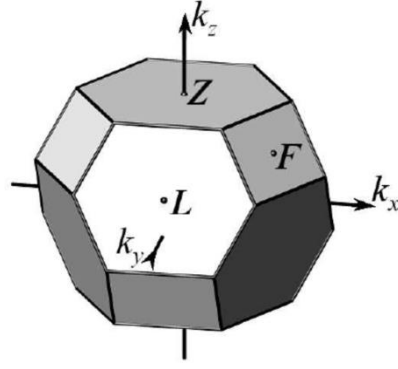
Ters örgü öteleme vektörleri,

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

şeklinde ifade edilir (Martin, 2004).

3.4. Brillouin Bölgesi

Brillouin bölgesi ters örgüde bir Wigner-Seitz ilkel hücresi olarak tanımlanmakta ve kırınım şartının geometrik yorumunu sunmaktadır. Her bir bölge içinde kırınım gerçekleşmemektedir. Sadece bölge sınırlarında kırınım gerçekleşmektedir (Aydoğan, 2011). Örneğin rombohedral yapının birinci Brillouin bölgesinin Wigner-Seitz hücresi Şekil 3.6. da gösterildiği gibi 14 yüzlüdür.



Şekil 3. 6. Rombohedral yapının birinci Brillouin bölgesi

Üç boyutta birinci Brillouin bölgesinde her özel nokta farklı bir harf ile veya bir sembolle gösterilir. Bu özel noktalara yüksek simetri noktaları adı verilir. Tüm kristal yapılar için Γ birinci Brillouin bölgesinin merkezine yani $k = (000)$ noktalarına karşılık gelir. Ayrıca yüksek simetri noktaları;

$$\Gamma \rightarrow [00 \frac{1}{2}] \rightarrow Z$$

$$\Gamma \rightarrow [\frac{1}{6} \frac{1}{3} \frac{1}{6}] \rightarrow L$$

$$\Gamma \rightarrow [\frac{1}{2} 00] \rightarrow F$$

sembolleri ile gösterilir (Melvin, 1974).

4. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ

Yoğunluk fonksiyonel teorisi, atomların ve moleküllerin kuantum davranışlarını tanımlayan temel denklemin yani Schrödinger denkleminin çözümlerini bulmak için kullanılan bir yaklaşımdır (Sholl ve Steckel, 2012). 1927’de Thomas (1927) ve Fermi (1927) birbirlerinden bağımsız olarak yoğunluk fonksiyonel teorisini gerçekleştirmişlerdir. Bu çalışmaları temel alan Hohenberg ve Kohn (1964) teoremleri ortaya çıkarılmış ve daha sonra Kohn-Sam (1965) teoremleri ile Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi’nin temelleri oluşturulmuştur. Atomlar hakkında bilinmek istenilen en temel şeyler, atomların enerjisini belirlemek ve atomlar civarında hareket edildiğinde enerjilerinin nasıl değiştiğini tespit etmektir. Bir atomun nerede olduğunu tanımlamak için, çekirdeğin ve elektronların nerede olduklarının tanımlanması gerekir. İlk olarak atomik çekirdeklerin sabit konumlarını belirlemek için elektron hareketini tanımlayan denklem çözülmelidir. Ardından, bir çekirdek topluluğunun alanı içinde hareket eden bir elektron topluluğu için elektronların en düşük enerji durumu bulunmalıdır. En düşük enerjili durum, elektronların taban durumu olarak ifade edilir (Sholl ve Steckel, 2012). Yoğunluk fonksiyonel teoremi çok elektronlu sistemlerin taban durum özelliklerini belirlemek için elektron yük yoğunluğu olan $\rho(\vec{r})$ ’yi temel değişken olarak kabul eder (Deligöz, 2007). Bu bölümde ilk olarak kuantum mekaniğinin en temel problemlerinden biri olan çok-cisim problemi ele alınmıştır. Ardından çekirdeklerin ve elektronların farklı matematiksel problemlere ayıran Born-Oppenheimer yaklaşımı açıklanmıştır. Bölüm sonunda dalga fonksiyonu ve yoğunluk fonksiyoneli yaklaşımları özetlenmiştir.

4.1. Çok Cisim Problemi

Schrödinger denklemi,

$$H\psi = E\psi \quad (4.1)$$

şeklinindedir. Burada ψ dalga fonksiyonu, E sistemin toplam enerjisidir. N parçacıklı sistemin H hamiltoniyen

$$H = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_I} \frac{1}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_I} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>I}^{N_I} \frac{Z_I Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (4.2)$$

şeklinde ifade edilir. Burada Z atom sayısını, M kütle, \vec{r} ve \vec{R} elektron ve çekirdeğin koordinatlarını ifade eder. Bunun yanında birinci terim elektronların kinetik enerjisi, ikinci terim çekirdeğin kinetik enerjisi, üçüncü terim elektronlar ve çekirdek arasındaki, dördüncü terim elektronlar arasındaki, beşinci terim ise çekirdekler arasındaki Coulomb etkileşimini göstermektedir (Güler, 2010). Denklem (4.2)'nin karmaşık yapısı nedeniyle çözümü kolay hale getirmek için çeşitli yaklaşımlar geliştirmek gerekir. Bu yaklaşımlardan biri Born-Oppenheimer Yaklaşımıdır.

4.2. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Born-Oppenheimer (1927) yaklaşımı çekirdeklerin ve elektronların farklı matematiksel problemlere ayırmaktadır. Bu yaklaşım çekirdeklerin içindeki her bir proton ve nötronun elektronun kütlesinden 1800 kat daha büyük olması sebebiyle elektronların çevrelerindeki değişimlere çekirdeklerin yapabileceklerinden çok daha hızlı şekilde karşılık vermesini temel alır (Sholl ve Steckel, 2012). Dolayısıyla çekirdeklerin kinetik enerjileri elektronlarınkinine göre ihmal edilebilir derecede küçüktür. Bunun yanı sıra çekirdek-çekirdek arasındaki etkileşimde aynı durum göz önüne alındığında sabit olarak düşünülebilir. Bu durumda denklem (4.2),

$$H_e = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_I} \sum_{I=1}^{N_I} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (4.3)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifade N_e tane elektronun, N_I tane çekirdeğin alanında hareketini tanımlayan hamiltonyeni belirtir. Tam enerji çekirdekler arası etkileşmeyi de ele almalıdır.

$$E_{\text{Top}} = E_{\text{elek}} + \sum_{I=1}^{N_I} \sum_{J>I}^{N_I} \frac{Z_I Z_J}{R_{IJ}} \quad (4.4)$$

Burada I ve J çekirdekleri belirtir. Çekirdek Born-Oppenheimer yaklaşımında elektronik problemin çözülmesi ile bulunan bir potansiyel enerji yüzeyinde hareket eder. Born-Oppenheimer yaklaşımı elektron ile çekirdeğin hareketi birbirinden ayrılmadığında geçersiz olacaktır.

4.3. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları

4.3.1. Hartree Yaklaşımı

Çok cisim problemini çözmek için başka bir yaklaşımda Hartree (1928) tarafından yapılmıştır. Hartree yaklaşımında çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımlarının toplamı olarak yazılır. Homojen değişmeyen bir sistem içinde dalga fonksiyonları basit düzlem dalgalar olarak alınabilir.

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_i \psi_i(\vec{r}_i) \quad (4.5)$$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \quad (4.6)$$

Burada i elektrona etki eden potansiyel,

$$V_i(\vec{r}) = V_{iyon}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \quad (4.7)$$

şeklinde verilir. Potansiyel, iyon ve Hartree potansiyelinin toplamıdır. (4.5) denkleminde yararlanılarak V_{iyon} ve $V_{Hartree}$ potansiyelleri,

$$V_{iyon}(\vec{r}) = -\sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{|\vec{r}-\vec{r}_{\alpha}|}, V_H(\vec{r}) = -\int d\vec{r}' \frac{r(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (4.8)$$

elde edilir. Hartree potansiyelindeki yoğunluk terimi

$$\rho(\vec{r}') = \sum_{i \neq j} |\psi_j(\vec{r}')|^2 \quad (4.9)$$

şeklinde verilir.

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i(\vec{r}) \quad (4.10)$$

Hartree denklemi

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{iyon}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) + \sum_{j \neq i} \int d\vec{r}' \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (4.11)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (4.11) orbitaller için öz uyumlu çözüldüğünde denklem (4.6) ile sistemin dalga fonksiyonu elde edilmiş olacaktır. Hartree yaklaşımı; nötral homojen bir sistemde katı içindeki elektronları tutan bağlanma enerjileri olamayacağını ifade ettiğinden iyi sonuçlar vermez. Değişim ve korelasyon etkileri Hartree yaklaşımında hesaba katılmadığı için genellikle kullanılmamaktadır.

4.3.2. Hartree-Fock Yaklaşımı

Atom ve molekül yapılarının incelenmesi için 1928 yılında D. Hartree tarafından Hartree denklemlerini yazmasıyla beraber Schrödinger denklemi, çok parçacık içeren sistemlere de uygulanmaya başlandı. Ancak bu yöntem elektronların antisimetrik dalga fonksiyonları ile temsil edilmesi gerektiğini hesaba katmamaktaydı.

Bu metoda antisimetrik dalga fonksiyonlarının eklenmesi V. Fock çalışmaları ile gerçekleşti. Böylece Hartree-Fock yaklaşımı adı verilen ve günümüzde halen geçerliliği olan teorinin temellerini atmıştır. Hartree-Fock metodu, çok cisimli bir kuantum sisteminin taban durum enerjisi ve taban durum dalga fonksiyonunun belirlenmesi için bir yaklaşımdır.

Bu yaklaşım, çok cisim problemini dış potansiyelde hareket eden tek parçacık problemi şekline indirgemektedir. Tek parçacık dalga fonksiyonları, etkileşen parçacıkların toplam enerjilerinin minimum değerinden bulunur (Ersoy, 2012).

Schrödinger denklemi

$$H\phi_n(r) = \varepsilon_n\phi_n(r) \quad (4.12)$$

şeklinde ifade edilirse burada ϕ_n elektron dalga fonksiyonu, her bir elektronun dalga fonksiyonunun spin orbitalleriyle çarpımlarından oluşur.

$$\phi = \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) = \Psi_1 r_1 \Psi_2 r_2 \Psi_3 r_3 \dots \Psi_N r_N \quad (4.13)$$

Elektronların antisimetrik özelliğini katmak için çarpım dalga fonksiyonları, antisimetrik bir \hat{A} operatörü tarafından tamamen simetrik hale getirilir;

$$\phi = \hat{A} \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \quad (4.14)$$

Antisimetrik operatör,

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum (-1)^\rho \hat{p} \quad (4.15)$$

şeklinde tanımlanır. \hat{p} , permütasyon operatörüdür aynı zamanda tüm elektron permütasyonlarının toplamıdır. Sonuç olarak bu yaklaşımda sistemin toplam dalga fonksiyonu ϕ_A , çekirdeğin Ψ_i tek parçacık dalga fonksiyonlarının bir Slater determinanı olarak adlandırılan bir determinant şeklinde yazılabilir. Sonuçta, (4.14) denklemi aşağıdaki gibi yazılabilir (Karakaya, 2012).

$$\phi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1 r_1 & \Psi_1 r_2 & \dots & \Psi_1 r_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_N r_1 & \Psi_N r_2 & \dots & \Psi_N r_N \end{vmatrix}, \phi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det[\Psi_1 \Psi_2 \dots \Psi_N] \quad (4.16)$$

4.4. Yoğunluk Fonksiyonel Yaklaşımları

4.4.1. Thomas Fermi teorisi

Thomas–Fermi modeli, çok cisim probleminin kuantum mekaniksel bir çözümüdür. Bu modelde, Schrödinger denklemini çözmek yerinen $n(\vec{r})$ elektron yoğunluğu kullanılarak tüm terimler elektron yoğunluk fonksiyoneli olarak yazılır ve sistemin toplam enerjisi bu şekilde minimize edilir (Yılmaz, 2012). Diğer bir deyişle çekirdek-elektron ve elektron- elektron etkileşmelerine ait ifadeler birleştirilip, atomun kinetik enerjisi elektronun yoğunluk fonksiyoneli olarak ifade edilir. Burada sistemin enerjisi,

$$E[n] = A_s \int d^3r n^{5/3}(r) + \int d^3r V_{dış}(r)n(r) + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} \quad (4.17)$$

şeklinde ifade edilir. Burada A_s katsayısı $A_s = \left(\frac{3}{10}\right) (3\pi^2)^{2/3}$ şeklindedir. Thomas-Fermi teorisi ön görülen bir atomun deęiş tokuş enerjisini dikkate almaması nedeniyle doğruluęu sınırlıdır. Dirac bu teoriyi geliştirerek deęiş tokuş enerjisin eklemiştir ancak kinetik enerjinin temsilinden kaynaklanan problemden dolayı tam doğru sonuçları vermemiştir (Deligöz, 2007).

4.4.2. Yoęunluk Fonksiyonel Teorisi

Geleneksel elektronik yapı metotları, atom çekirdeklerince oluşturulan elektrostatik potansiyel gibi bir dış potansiyel alanında hareket eden N tane elektronun Schrödinger denklemini yaklaşık olarak çözmeye çalışır. Fakat bu geleneksel elektronik yapı metotlarında N sayısının artması ile Schrödinger denkleminin çözülmesi oldukça uzun zaman alacaktır (Deligöz, 2007). Yoęunluk fonksiyonel teorisi (DFT), Kohn ve Hohenberg tarafından ispatlanmış olan iki temel matematiksel teorem ve 1960'ların ortalarında türettikleri bir dizi denklem üzerine inşa edilmiştir. Hohenberg ve Kohn tarafından ispatlanan ilk teorem şudur: Schrödinger denkleminde elde edilen taban durum enerjisi elektron yoğunluğunun fonksiyoneli (Sholl ve Steckel, 2012). Temel durumdaki tüm elektronik sistemlere uygulanan bir $F[n(\vec{r})]$ evrensel fonksiyoneli bilindiğinde verilen bir dış potansiyelde taban durum enerjisi kolay bir şekilde belirlenebilmektedir. $V_{dış}(\vec{r})$ potansiyel altında etkileşen parçacıklar sisteminde $n_0(\vec{r})$ taban durum yoğunluğunun belirlenmesi ile sistemin

özellikleri bilinebilmektedir (Yılmaz, 2012). Birinci teorem Schrödinger denklemini çözmek için kullanılabilecek bir elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olduğunu belirtir ancak fonksiyonelin gerçekte ne olduğunu belirtmez. İkinci teoremleri ise toplam fonksiyonelin enerjisini minimize eden elektron yoğunluğu, Schrödinger denkleminin tam çözümüne karşılık gelen doğru elektron yoğunluğudur. Doğru fonksiyonel formu bilinseydi fonksiyonelden elde edilen enerji minimize edilene kadar elektron yoğunluğu değiştirilebilirdi. Bu durum ilişkili elektron yoğunluğunu bulmak için bir tarif verir. Tarif edilen fonksiyoneli yazmanın yararlı bir yolu, $\psi_i(\vec{r})$ tek elektron dalga fonksiyonunu kullanarak $n(\vec{r})$ elektron yoğunluğunu,

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \psi_i^*(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) \quad (4.18)$$

toplu bir şekilde tanımlamaktır. Bu durumda enerji fonksiyoneli,

$$E[n(\vec{r})] = -\frac{\hbar^2}{m} \sum_i \int \psi_i^* \nabla^2 \psi_i d^3\vec{r} + \int V(\vec{r}) n(\vec{r}) d^3\vec{r} + \frac{e^2}{2} \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r} d^3\vec{r}' + E_{iyon} + E_{XC}[n(\vec{r})] \quad (4.19)$$

şekilinde yazılabilir. Burada ilk terimden itibaren sırasıyla elektronların kinetik enerjileri, elektronlar ve çekirdekler arasındaki Coulomb etkileşimleri, elektron çiftleri arasındaki Coulomb etkileşimleri, çekirdek çiftleri arasındaki Coulomb etkileşimleri ve $E_{XC}[n(\vec{r})]$ değiş tokuş-korelasyon fonksiyoneli ifade eder. Değiş tokuş korelasyon fonksiyoneli diğer tüm kuantum mekaniksel etkileşimleri barındırır.

Doğru elektron yoğunluğu her biri sadece tek bir elektron içeren denklemlerin bir araya gelmesiyle oluşan denklem setinin çözümünü içerecek şekilde ifade edileceğini Kohn ve Sam göstermişlerdir (Deligöz, 2007).

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) + [V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r})] \psi_i(\vec{r}) = \epsilon \psi_i(\vec{r}) \quad (4.20)$$

Kohn-Sam denklemlerinin çözümleri sadece üç uzaysal değişkene bağlı olan tek-elektron dalga fonksiyonları $\psi_i(\vec{r})$ dir. Burada $V_H(\vec{r})$ Hartree potansiyelidir.

$$V_H(\vec{r}) = e^2 \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r}' \quad (4.21)$$

Kohn-Sam denklemlerinin son potansiyeli V_{XC} tek-elektron denklemlerine yapılan deęiş-tokuş ve korelasyon katkılarını belirtir.

$$V_{XC}(\vec{r}) = \varepsilon_{XC}[n] + n(\vec{r}) \frac{\delta E_{XC}(\vec{r})}{\delta n(\vec{r})} \quad (4.22)$$

Burada δ fonksiyonelin türevini temsil etmesi amacıyla normal türev işareti d' den farklı olarak kullanılmıştır.

4.4.3. Deęiş-Tokuş Korelasyon Fonksiyoneli

Kohn, Hohenberg (1964) ve Sham (1965) Schrödinger denkleminin taban-durum enerjisi bulmak için bir enerji fonksiyonelinin enerjisini minimize ederek bulanabileceğini ve bunun da tek-parçacık denklem setinin öz-uyum çözümü bulunarak başarılabilirliğini göstermişlerdir. Ancak Kohn-Sam denklemlerini çözebilmek için deęiş tokuş-korelasyon fonksiyoneli, $E_{XC}[n(\vec{r})]$ belirlenmesi gereklidir. Deęiş-tokuş ve korelasyon enerjisini çözmek için birçok yolu vardır. Bunlardan en önemlileri yerel yoğunluk (LDA) ve genelleştirilmiş gradyent (GGA) yaklaşımı bunların en önemlileridir.

4.4.3.1. Yerel Yoęunluk Yaklaşımı (LDA)

Yoęunluk fonksiyoneli yaklaşımı ve Hartree-Fock (HF) yaklaşımı arasındaki fark, yoęunluğun fonksiyoneli olan E_{XC} deęişim korelasyon enerjisi ile HF deęişimi teriminin yer deęiştirmesidir. Deęişim korelasyon potansiyeli, yerel yoęunluk açısından deęişim korelasyon enerjisinin fonksiyonel türevidir ve homojen elektron gazı için bu, elektron yoęunluğunun deęerine baęlıdır. Homojen olmayan sistem için r noktasında deęişim korelasyon potansiyeli sadece r deki yoęunluğun deęerine baęlı deęil aynı zamanda r' ye yakın varyasyona da baęlıdır ve bu nedenle yoęunluk;

$$V_{XC}[n](r) = V_{XC}[n(r), \nabla n(r), \nabla(\nabla n(r)), \dots] \quad (4.23)$$

şeklinde ifade edilir.

Değiş-tokuş korelasyon enerjisi iki kısımda incelenirse, etkileşen bir homojen elektron sisteminin korelasyon enerjisinin belirlenmesi tam olarak bilinmemesinden dolayı korelasyon enerjisi $E_C[n]$ için durum karmaşıktır (Parr, 1989). Ancak homojen gazının birim hacimdeki değiş-tokuş enerjisi tam olarak bilindiği için $E_X[n]$ enerjisi tanımlanabilir.

$$\varepsilon_X^{hom} n(\vec{r}) = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} n(\vec{r})^{1/3} \quad (4.24)$$

n yoğunluğunda homojen elektron gazının parçacık başına değişim korelasyon enerjisi

$$E_{XC}^{LDA} = \int d^3\vec{r} n(\vec{r}) \varepsilon_{XC}^{hom}(n(\vec{r})) \quad (4.25)$$

şeklinde ifade edilir ve bu yerel yoğunluk yaklaşımı(LDA)dır (Dreizler ve Gross, 2012). Yerel yoğunluk yaklaşımı band hesaplamalarında oldukça yaygın bir şekilde kullanılır. Ancak buna rağmen bazı eksiklikleri vardır. Bu metod temelde homojen elektron gazı için kullanılır (Mutlugeldi, 2009).

4.4.3.2. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA)

Bu yaklaşımda da homojen elektron gazı göz önüne alınarak hesaplamalar yapılır. Yoğunluğun uzaysal değişimini hesaba katan yaklaşımlara denir. Diğer bir deyişle bu yaklaşımda $n(\vec{r})$ durum yoğunluğu her yerde aynı değildir. Değişim korelasyon enerjisi için GGA formalizmi,

$$E_{XC}^{GGA} = \int d^3\vec{r} n(\vec{r}) \varepsilon_{XC}(n, |\nabla^2|) \quad (4.26)$$

formunda verilir. Elektron yoğunluğunun gradyentinden elde edilen bilgiler bir GGA fonksiyoneli içine çok çeşitli yollarla dahil edilebildiğinden, çok sayıda farklı GGA fonksiyoneli vardır. Katılarda yaygın şekilde kullanılan fonksiyonellerden ikisi, (i) Perdew-Wang (1992) fonksiyoneli (PW91) ve (ii) Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) (1996) fonksiyonelleridir.

4.5. Tam potansiyel lineer-açısal-düzlem dalga (FLAPW) metodu

Periyodik katıların hesabında kullanılan bu metod da düzlem dalgalar kullanılmaktadır. Periyodik bir katının elektronik dalga fonksiyonu Bloch teoreminde,

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{i,\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \quad (4.27)$$

şeklinde ifade edilir. Burada \vec{G} örgü vektörüdür.

Düzlem dalgalar, Khon-Sam denklemlerinin sabit bir potansiyelde çözümlerdir. Khon- Sam denklemleri çok cisim probleminin çözümü için uygun formalizmi oluşturur. Bunlardan birisi olan FLAPW metodu matris denklemleri üzerinde diferansiyel denklemlerin tekrar formülize edilmesinde baz setlerini kullanılır. Khon-Sham yörüngeleri,

$$\psi = \sum c_G \phi_G \quad (4.28)$$

şeklinde seri açılımı yapılabilir. Burada ϕ_G baz fonksiyonudur.

5. MATERYAL METOT

5.1. WIEN2K PROGRAMININ YAPISI

Katıların yapısı çeşitli metotlar kullanılarak klasik mekanikten kuantum mekaniğine kadar incelenir. Karmaşık birçok atom içeren sistemler ancak bilgisayar simülasyonu yardımı ile teorik olarak incelenebilir. Bu amaçla günümüzde bir çok simülasyon metodları kullanılmaktadır, bunlardan biri de çok atom içeren karmaşık bir sistemin elektronik yapısını incelemeye genel olarak yoğunluk fonksiyonel teoriyi kullanan WIEN2k programıdır. Bu programın genel yapısı yoğunluk fonksiyonel teorisi dalga fonksiyonundan ziyade elektron yoğunluğunu ön planda tutar. Ayrıca elektron yoğunluğu hesaplamalarında değiş-tokuş ve korelasyon potansiyelini hesaplamalarına dahil eder.

Wien2k programı ile kristal yapıların aşağıda listelenen özellikleri incelenebilir:

- Band yapıları
- Elektron yoğunluğu
- Durum yoğunlukları
- Spin yoğunlukları
- Toplam enerji
- Kararlılık şartları
- Yapı optimizasyonu
- Fonon dispersiyonu
- Elektrik alan gradientleri
- Manyetik özellikler
- Mekanik özellikler
- X ışınları soğunum ve yayılım spektraları
- Fermi yüzeyleri
- Optiksel Özellikleri

Programın ilk arayüzünde incelenecek kristal yapının kaç atomdan oluşacağı, uzay grubu, örgü parametreleri ve atomik pozisyonları verilmelidir. Yani öncelikle ideal bir kristalin birim hücresi tanımlanır. Kristalin öteleme ve nokta grubu simetri işlemleri dahil edilerek ideal kristal yapı bozulmadan işlemlerin

```

MODE OF CALC=RELA 4
unit=ang 5
8.277004 8.277004 57.712259 5
90.000000 90.000000 120.000000 5
ATOM -1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000 6
MULT= 1 ISPLIT= 4 7
Te NPT= 781 R0=0.00001000 RMT= 2.5000 Z: 52.0 8
LOCAL ROT MATRIX:
1.00000000 0.00000000 0.00000000 9
0.00000000 1.00000000 0.00000000 9
0.00000000 0.00000000 1.00000000 9
ATOM -2: X=0.20690000 Y=0.20690000 Z=0.20690000
MULT= 2 ISPLIT= 4
-2: X=0.79310000 Y=0.79310000 Z=0.79310000
Te NPT= 781 R0=0.00001000 RMT= 2.5000 Z: 52.0 8
LOCAL ROT MATRIX:
1.00000000 0.00000000 0.00000000 9
0.00000000 1.00000000 0.00000000 9
0.00000000 0.00000000 1.00000000 9
ATOM -3: X=0.39900000 Y=0.39900000 Z=0.39900000
MULT= 2 ISPLIT= 4
-3: X=0.60100000 Y=0.60100000 Z=0.60100000
Bi NPT= 781 R0=0.00000500 RMT= 2.5000 Z: 83.0 8
LOCAL ROT MATRIX:
1.00000000 0.00000000 0.00000000 9
0.00000000 1.00000000 0.00000000 9
0.00000000 0.00000000 1.00000000 9
12 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS 10
-1 0 0 0.00000000
0 -1 0 0.00000000
0 0 -1 0.00000000 1
-1 0 0 0.00000000
0 0 -1 0.00000000
0 -1 0 0.00000000 2
0 -1 0 0.00000000
-1 0 0 0.00000000
0 0 -1 0.00000000 3
0 0 -1 0.00000000
-1 0 0 0.00000000
0 -1 0 0.00000000 4
0 -1 0 0.00000000
0 0 -1 0.00000000
-1 0 0 0.00000000
0 0 -1 0.00000000 5
0 -1 0 0.00000000
-1 0 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000 6
0 1 0 0.00000000
1 0 0 0.00000000 7
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
1 0 0 0.00000000 8
0 0 1 0.00000000
1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000 9
0 1 0 0.00000000
1 0 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000 10
1 0 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000 11

```

```
1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
```

12

“Case.struct” dosyadaki satırları tanımlamak gerekirse:

1.sıra: alaşım adını belirtir

2.sıra: Uzay grubunu(örgü tipi) belirtir (R –rombohedral örgü)

3.sıra: Birim hücrede eşdeğer olmayan atomların sayısı

4.sıra: Hesaplama modu (RELA – Bütün Relativistik çekirdek ve skaler relativistik valans, NREL – Relativistik olmayan hesaplama)

5. sıra: Örgü parametreleri

6.sıra: İlk atomun konumu

7.sıra: multiplicity,isplit

multiplicity – yapıda birbirine eş olan atomların sayısı

isplit – 2 d – elektronların e-g, t-2g e.g.: kübik

8.sıra : Atom ismi, NPT, RO, RMT, Z(Atom Numarası)

NPT- Radial ağ noktalar sayısı

RO- ilk radial ağ noktası (tipik bir şekilde 0.0005 ve 0.00005 arasında)

RMT – Atomik küre yarıçapı

9.sıra: Yerel dönme matris (ortogonal koordinat sisteminde)

10.Sıra: Uzay gurubunun simetri işlemlerinin sayısı. Sıfır olarak bırakılırsa, simetri işlemleri genelde otomatik olarak oluşturur.

Case.struct dosyasının oluşturulmasının ardından “initialize calc” komutu ile çıkan arayüzden “init_lapw”hesaplamaları başlatılır.

5.1.2. init_lapw Hesaplamaları

Wien2k programının ara yüzünde “Initialize calc” komutuna tıkladığında “init_lapw” komutu hesaplamaları başlatılabilir. Initialize calculation ekranı Şekil 5.2. de verilmiştir.

4, -1,1.0 N **occup:** spin başına işgal etme sayısı
4, -1,1.0 N **plot:** P- ayrı ayrı yörüngenin yoğunluğunu belirtir, N- bir boş
alanda ayrı ayrı yörüngenin yoğunluğunu hariç tutulması
C
He 3
2, -1, 1.0 N
2, -1, 1.0 N
2, 1, 0.5 N
2, 1, 0.5 N
2, 1, 0.5 N
2, -2,0.5 N
2, -2,0.5 N

x lstart : Atomik yoğunlukları meydana getirir.

Çekirdek durumlardan valans durumları ayırmak için bir enerji ve değiş tokuş
kolerasyon potansiyeli (V_{xc}) gerekir. Bunun için XC – potansiyel,

05 – LSDA,

13 – GGA,

Genellikle hesaplamalar da 13 değeri (GGA, Perdew ve arkadaşları 96) girilir.
Ayrıca bu komutla valans durumlardan çekirdek durumları ayırmak için kesme
enerji değeri Rydberg cinsinden girilmesi gereklidir. Varsayılan değer -6 Ry
değeridir.

case.in1_st :Burada matrislerin büyüklüğü ile en önemli parametreler
tanımlanır.

5 – 9 arasında APW

6 – 10 arasında LAPW

değiştirilebilir. APW veya LAPW (yani 1 veya 0 CONT/STOP).

-----case.in1_st-----

WFFIL EF= 0.50000 (WFFIL, WFPRI, ENFIL, SUPWF)

7.00 10 4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-NMT

0.30 5 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global
APW/LAPW)

0 0.30 0.000 CONT 1
 0 -4.30 0.001 STOP 1
 1 -2.54 0.002 CONT 1
 1 0.30 0.000 CONT 1
 2 0.30 0.005 CONT 1
 0.30 3 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global
 APW/LAPW)
 0 -0.71 0.002 CONT 1
 0 0.30 0.000 CONT 1
 1 0.30 0.000 CONT 1
 K-VECTORS FROM UNIT:4 -9.0 1.5 37 emin / de (emax=Ef+de) / nband

Dosyanın açıklanması:

1.Satır: **WFFIL**- Standart seçenektir case.vector dosyasında dalga fonksiyonunu yazar. **SUPWF**- Durağan dalga fonksiyonunu hesaplar. **WFPRI**- özvektörleri yazar.

2.Satır: rkmax, Imax, Insmax

rkmax-Rmt*Kmax yakınsamayı belirtir. Burada Rmt tam atomik küre çapının en küçüğüdür ve Kmax ise kesme dalga fonksiyonudur. Bu değer 5-9 arasında (APW+lo) veya 6-10 arasındaysa LAPW değerlerini alabilir.

Imax- Atomik kürelerin içinde parça dalgaları için L değeri maksimum alınır

Insmax- muffin-tin olmayan matris elemanların hesaplanmasında kullanılır.

3.Satır: Etrial, ndiff, Napw

Etrial- Radyal Schrödinger denkleminin düzenli çözümünde olduğu gibi $u_l(r, E_l)$ elde edilmesi için tüm E_l için varsayılan enerji değerini belirtir.

ndiff- İstisnaların sayısı

Napw- Bu atomun tüm evrensel l değerleri için 0 değerindeyse LAPW tabanı, 1 değerinde ise APW tabanı kullanılır.

4.Satır: l , E_l , de, switch, NAPWL

l - kısmi dalganın l si

E_l - L=1 için E_l

de- enerji artışı

de=0 bu $E(l)$ varsayılan enerji üzerine yazılır

de ≠ 0 bu artış kullanılarak rezonans enerji için araştırma yapılır. (RMT) Muffin-tin yarıçapına bağlı olan Radyal fonksiyonu $u_l(r, E_l)$ enerji ile değişir.

Switch- **de** ≠ 0 değil ise kullanılır

CONT- $E_{üst}$ veya E_{alt} her ikisini de bulsa bile işlem yapmaya devam eder.

STOP- Her ikisini bulsa da işlemi durdurur.

NAPWL –Bu atomun l ($l = 0,1,2,3$) değeri; LAPW – yöntemi için 1, APW – yöntemi için de 0 kullanılır. APW + l_0 metodu, APW kullanıldığında yakınsama olayı güçlükle gerçekleşen 3d gibi yörüngelerin dalga fonksiyonlarını bulmada kullanılır.

5.Satır: unit-number, Emin, Emax, nband

unit-number- İndirgenemez Brillouin bölgesinde k vektörlerinin hangi dosya numarasından okunacağını belirtir. Varsayılan değeri 4 tür ve **case.klist** dosyasına karşılık gelir(KGEN vasıtasıyla sağlanır). Bu değer değiştirilmemelidir.

Emin, Emax- Özdeğerlerin araştırılacağı enerji aralığını belirtir. Bu aralık kısa tutulduğunda bilgisayarın hesaplama süresi kısalmır. Yalnız işgal edilmemiş durumlar için DOS hesaplanırken enerji aralığı sınırlanabilir.

nband- özdeğer vektörlerinin numarası öteleme diyagonizasyonu ile hesaplanır. Istart da $nband = ne * 2.0 + 5$ için otomatik ayarlanır. Daha büyük değerleri için daha fazla işlemci zamanı gerekir.

case.in2_st :Bu dosyada, GMAX değeri değiştirilebilir (15-24 değerleri önerilir) yada Fermi enerjisini bulmak için farklı bir Brillouin bölgesi integrasyon metodu belirlenebilir.

----- top of file: case.in2 -----

TOT (TOT, FOR, QTL, EFG)

-1.2 32.000 0.5 0.05 1 (EMIN, # of electrons, ESEPERMIN, ESEPER0, iqtsave)

TETRA 0.0 (EF-method (ROOT, TEMP, GAUSS, TETRA, ALL), value)

0 0 2 0 2 2 4 0 4 2 4 4

0 0 1 0 2 0 2 2 3 0 3 2 4 0 4 2 4 4

14.0 (GMAX)

FILE (NOFILE, optional)

Dosyanın açıklaması:

1.Satır: switch, EECE

Switch

TOT- toplam değerlik yük yoğunluğunun küreler içinde ve dışında büyümesidir.

FOR- TOT aynısı gibidir, fakat bununla beraber "Pulay" kuvvet katkısı hesaplatılır.

QTL- kısmi yükler, -qtl komutu ile otomatik olarak ayarlanabilir.

EFG- elektrik alan gradiyentinin ayrışmasını hesaplar, -efg komutu ile otomatik ayarlanır.

ALM- bu case.radwf ve case.almbm dosyalarını oluşturur. Burada radyal dalga fonksiyonları ve küreler içindeki dalga fonksiyonunun A_{lm}, B_{lm}, C_{lm} katsayıları listelenir. case.almbm dosyası çok büyük olabilir.

CLM- sadece yük yoğunluğu katsayılarıdır

Not: TOT ve FOR standart seçeneklerdir, QTL durum yoğunlukları (veya enerji band yapıları) hesaplamaları için kullanılır.

EECE

Eğer EECE ayarlanırsa, belirlenmiş atomlar için yoğunluk ve açısal momentum hesaplar. Hybrid veya tam değişim hesaplamaları için kullanılır, runsp_lapw - eece komutu ile otomatik ayarlanır.

2.Satır: emin, ne, esepermin, eseper0, iqtlsave

emin- işgal edilmiş durumların aralığını tanımlamak için düşük enerjide kesmek

ne- enerji aralığında (birim hücre başına) elektronların numarası

esepermin- LAPW2

eseper0- minimum yasak band enerji aralığı büyüklüğüdür. Eğer -in1new seçeneği kullanılırsa değerler esepermin ve eseper0 sonuçları etkilenecektir.

iqtlsave- varsayılan değeri 1 dir bu değerde bu seçeneğe ait işlem yapılmaz.

3.Satır: efmod, eval

efmod- E_F nasıl belirlendiğini belirler

ROOT : E_F hesaplatılır ve k aralık integrasyonu kök örneği tarafından yapılır.

(Bu yalıtıcılar için kullanılabilirler, ancak metaller için zayıf yakınsama bulunmuştur.)

TEMP: E_F hesaplatılır burada herhangi özdeğer, eval'in genişletilen parametresi vasıtasıyla Fermi fonksiyonu sıcaklık kullanılarak genişletilir. Toplam enerji $T=0K$ 'da doğrulanır. (örneğin eval=0.0002 Ry değeri iyi Toplam enerji yakınsaması verir)

TEMPS: E_F hesaplatılır burada herhangi özdeğer, eval'in genişletilen parametresi vasıtasıyla Fermi fonksiyonu sıcaklık kullanılarak genişletilir. Toplam enerji eval vasıtasıyla belirtilen sıcaklıkta $-TS$ karşılık gelen değeri ile doğrulanır. (örneğin eval = 0,002 Ry yaklaşık $40^\circ C$ 'ye gelir)

GAUSS: yukarıda olduğu gibi E_F hesaplatılır fakat Gauss'un sınır metodu bir eval'in genişliğiyle kullanılır.

TETRA: E_F hesaplatılır, değişimli (eğer eval .eq. 0 ise) veya standart (eval .eg. 100) seçenekleriyle k uzay entegrasyonu tetrahedron metoduyla yapılır.

ALL: eval'in yanında tüm durumlar kullanılır. Bu belirtilen enerji aralığında yük yoğunlukları oluşturmak için kullanılabilir. Bu işlem için `-all X Y` komutu kullanılarak ayarlanabilir.

eval- efmod GAUSS veya TEMP(S) olarak ayarlandığında eval genişlemenin genişliğini (Ry) belirtir. Eğer efmod ALL olarak ayarlanırsa eval enerji penceresinin üst limitini belirtir.

5.Satır:

GMAX: yük yoğunluğu Fourier genişlemesinde maksimum G dir.(en geniş vektörün büyüklüğü) Kısa H bağları büyük değerlerine sahip(örneğin GMAX'ın 25 değeri) sistemler için gerekli olabilir.

x kgen: Brillouin alanında (BZ) k-ağı oluşturur. Tüm Brillouin alanında k-noktalarının sayısı belirtilmelidir.

case.klist: Brillouin alanında k noktalarının sayısı kontrol edilir ve birinci knoktası için enerji aralığı belirlenir

x dstart: Istart üretilen atom yoğunluklarının süperpozisyonu ile SCF döngüsü için bir başlangıç yoğunluğu oluşturur.

case.outputd : $GMAX > GMIN$ dan büyük olması kontrol edilmesi gerekir.

İnitalize calculation işlemleri tamamlandıktan sonra Wien2k ara yüzünden run SCF komutuyla SCF döngüleri işlemine geçilir.

5.2. SCF Döngüleri

LAPWO: (POTANSİYEL) Yoğunluktan potansiyeli oluşturur.

LAPW1: (BANDLAR) Valans bandlarını hesaplar. (Öz değer ve öz vektörleri oluşturur)

LAPW2: (RHO) Öz vektörlerden valans yoğunlukların değerlerini hesaplar.

LCORE: Çekirdek durumları ve yoğunlukların değerlerini hesaplar.

MIXER: Giriş ve çıkış yoğunluklarını karıştırıp yeni bir yoğunluk üretir. SCF işlemi giriş yoğunluğuna yakın yoğunluğa ulaşana kadar döngü devam edecektir. Yakınlık hassasiyeti `run_lapw -cc 0.0001` gibi terminal dosyası üzerinden uygulanacak komut ile ayarlanabilir.

5.3. Hesaplama Özellikleri

SCF döngüsü yakınsama hesaplamasından sonra durumlar yoğunlukları (DOS), band yapıları, optiksel özellikler veya X-ray spectra gibi çeşitli özellikler hesaplatılabilir. Bu işlemler için Wien2k ara yüzünden Tasks menüsünden seçim yapılması gereklidir.

5.3.1. Elektron Yoğunluğu

Wien2k programında elektron yoğunluğu hesaplamaları Şekil 5.3. de belirtilen ara yüzde yapılmaktadır.

ANG VAL NODEBUG 7

NONORTHO 8

.....

Dosya açıklaması:

1.satır :ix, iy, iz, idv - Birim hücrede 3 noktayı belirtir. (x,y,orjin) Düzlem belirlenmesi için orjinin koordinatlarını belirtir.

2.satır: ix, iy, iz, idv - Düzlem belirlenmesi için x'in yönünün koordinatlarını belirtir.

3.satır: ix, iy, iz, idv - Düzlem belirlenmesi için y'in yönünün koordinatlarını belirtir. (x ve y yönleri birbirlerine dik olmalıdır. Aksi durumda son satırda NONORTHO-dik olmayan seçeneği belirtilmelidir.)

4.satır: nxsh, nysh, nzsh - x, y, z yönlerinde en yakın komşu hücrelerin sayısını gösterir. Burada atomik konumlar oluşturulur. (Çizim alanı büyükse bazı atomların dışarıda kalmasını önlemek için bu sayıları artırmak gerekebilir)

5.satır: npx, npy, - Oluşturulacak grafikteki ağ noktaları sayısını gösterir.

6.satır: RHO-DIFF-OVER

RHO, yük veya potansiyel çizer.

DIFF, yoğunluk farkını çizer.

OVER, atomik yoğunlukların süper pozisyonunu çizer

7.satır: iunits, cnorm

iunits - ATU - yoğunluk (potansiyel) atomik birimlerde e/a.u³ (veya Ry) ANG - Yoğunluk e/Å³ de (potansiyeller için bu seçenek kullanılmaz.)

cnorm - VAL -case.clmval, r2v, vcoul dosyalar için kullanılır.

TOT - case.clmsum dosyalar için kullanılır (Mutlugeldi, 2009).

8.satır: ORTHO - NONORTHO

ORTHO, x ve y yönlerinin dik olmalarını belirtir.

NONORTHO, kullanılan çizim programının desteklemesi halinde yönler keyfi olarak verilebilir.

case.in5 dosyasının düzenlenmesinin ardından x lapw5 komutuyla elektron yoğunluğu hesaplatılabilir. Ardından rhoplot komutuyla grafik çizdirilebilir.

2 2 C-s

2 3 C-p

.....
Dosya açıklaması:

1.satır- Element veya bileşik adını belirtir.

2.satır- emin, delta, emax, broad

durum yoğunluğu için emin ve emax enerji aralığını belirtir, delta- enerji artışıdır. broad- gaus genişleme faktörüdür.

3.satır- ndos

ndos- DOS durumlarının sayısını belirtir.

4.satır- jatom, doscase, description

jatom- DOS'un hangi atom için hesaplanacağını belirtir. jatom= nat(eşdeğer olmayan atomlar sayısı) + 1

doscase- Kullanılan QTL dosyasındaki uygun sütunu belirtir. 1 toplam, 2...S, 3...P,demektir.

description - Durumların isimleri.

x tetra: tetrahedron metodunu kullanıp kısmi ve toplam durum yoğunlukları (DOS) hesaplar.

5.3.3. Band Yapısı

Task menüsünden "Bandstructure" komutu seçildiğinde Şekil 5.5. de belirtilen ekrandan band yapısı hesaplamaları yapılır.

Fermi switch- 0 – E_F 'yi çizmez, 1 – E_F düz çizgi şeklinde çizilir, 2 – E_F noktalı çizgi çizilir, 3 – E_F nokta nokta çizilir.

Fermi-level- “**case.scf**” dosyasındaki Fermi enerji değeri alınarak bu bölüme yazılmalıdır.

8.satır: number of bands for heavier plotting 1,1 - bandlar için en düşük ve en yüksek band indeksidir.

9.satır: jatom, jtape, size of heavier plotting

jatom- “case.qtl” dosyası mevcutsa jatom band karakteri çizilecek atomu belirler. “case.qtl” yok, yada sıfır ise bandkarakterini çizmez.

size of heavier plotting- Bandçiziminde kullanılacak dairelerin yarıçaplarının boyut faktörünü gösterir.

x spaghetti :Özdeğerleri kullanarak enerji band yapısını hesaplar.

plot band structure:Band yapısı grafiğini çizdirir. Grafikler istenilirse Xmgrace programı yüklenmesi halinde ayrıntılı bir şekilde bu program vasıtasıyla incelenebilir.

Not: Band yapısı çizdirilirken x spaghetti komutu sonucu hata oluşursa tüm “case.irrep” ve “case.qtl” dosyalarının silinmesi gerekebilir.

5.4. Hacim Optimizasyonu (V, c/a)

“Execution” menüsünden “optimize (V,c/a)” komutu ile Şekil 5.7. de gösterilen optimizasyon ara yüzünden hacim optimizasyonu işlemi yapılabilir.

Optimizasyon işlemine başlamadan önce öncelikle oluşturulan yapının “initialize calc.” menüsü hesaplamaları ve “run SCF” menüsünden de SCF hesaplamalarının yapılmış olması gereklidir. “optimize (V,c/a)” menüsü seçildiğinde öncelikle “save_lapw” komutuyla optimizasyon dosyalarının hangi isimle kaydedileceği belirlenir. Daha sonra bu verilen isim optimizasyon başlatılabilmesi için “optimize.job” dosyasında adreslenmesi gereklidir.

```

tic_vol_10.0 \
)
cp $i.struct tic.struct
# cp $i.clmsum tic.clmsum
# x dstart
# run_lapw -ec 0.0001 -in1new 3 -renorm
run_lapw -ec 0.0001
set stat = $status
if ($stat) then
echo "ERROR status in" $i
exit 1
endif
save_lapw ${i}
# save_lapw -f -d XXX $i
end

```

.....

“optimize.job” dosyasında “# save_lapw-f -d XXX \$i” satırında mutlaka save_lapw komutuyla daha önce optimizasyon işlemine başlanırken verilen isim XXX ile belirtilen bölüme yazılması gereklidir.

Örnek : # save_lapw -f -d **TiC_pbe_100k_rkm7** \$i

run optimize.job: Optimizasyon işlemi başlatır.

plot: hacim- enerji grafiğini çizdirir ve optimizasyon değerlerini verir(Blaha vd, 2014).

5.5. Süper Hücre

Wien2k programında süper hücre oluşturmak için “single program” menüsünden “supercell” komutu seçilerek “StructGen” ekranında oluşturduğumuz yapıyı x,y,z yönlerinde simetri izin verdiği ölçüde istediğimiz şekilde genişletebiliriz. Örnek vermek gerekirse supercell ekranıyla Şekil5.8. de gösterildiği gibi x,y ve z yönlerinde bir birim genişleme yapılabilir.

6. BULGULAR

Bu tez çalışmasında Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve Sb_2Se_3 topolojik yalıtkan malzemelerin yapısal ve elektronik özellikleri ele alınmıştır. Yapısal özellikleri incelemek için taban durum enerjisine karşılık gelen örgü sabitleri hesaplanmıştır. Örgü sabitlerine ek olarak Murnaghan (1944) denklemi kullanılarak bulk modülü ve bulk modülünün basınca göre türevi hesaplanmıştır. Elektronik özellikleri incelemek için band yapıları, kısmi (PDOS) ve toplam (TDOS) durum yoğunlukları hesaplandı. İkili bileşiklerin yanı sıra Bi_2Te_3 bileşiğine $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ kimyasal formülü kullanılarak Sb atomu ve $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ kimyasal formülü kullanılarak Sb, Se atomları katkılanmıştır. Bu yapılarda x ve y nin 0.33, 0.66, 1, 1.33, 1.66 değerleri kullanılarak farklı kompozisyonlarda üçlü ve dörtlü bileşikler elde edilmiştir. Bu katkılama işlemi ile topolojik yalıtkan malzemeleri tanımlayan Γ yüksek simetri noktasında tekli Dirac konisini bulk yapıda oluşumu üzerine incelemede bulunulmuştur.

Son olarak tüm yapılarda spin-orbital etkileşmesi göz önüne alınarak band yapıları çıkarılmıştır. Hesaplamalarda Tam Potansiyel Lineer Açısız-Düzlem Dalga (FLAPW) metodunu kullanan yoğunluk fonksiyonel teoriye dayalı Wien2k yazılımı kullanılmıştır. Tüm hesaplarda değiş-tokuş ve korelasyon etkileri için Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) seçilmiştir (Kohn ve Sham, 1965). Yapı hesaplamalarında 100 k-noktası ele alınırken valans durumlardan çekirdek durumlarını ayıran kesme enerjisi -6 Ry değeri belirlenmiştir. Tüm yapıların hesaplamalarında $R_{\text{mt}} \cdot K_{\text{max}}$ parametresi 7.0 olarak verilmiştir. Burada R_{mt} birim hücre içerisindeki en küçük çaplı atomun yarıçapıdır. K_{max} ise dalga vektörünü belirtir.

6.1. İkili Bileşikler Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve Sb_2Se_3 'ün Yapısal Özellikleri

Bizmut Tellür bileşiğinin kristal yapısını oluşturmak için örgü parametreleri $a=4.38 \text{ \AA}$, $c= 30.39 \text{ \AA}$ değerleri kullanılmıştır. Bi_2Te_3 'ün kristal yapısı Şekil 6.1. (a) da gösterildiği gibi rombohedral ilkel hücreye sahip olup uzay grubu $R\bar{3}m$ (No: 166) dır. Atomik pozisyonlar Te1 (0, 0, 0), Te2 (0.2095, 0.2095, 0.2095) ve

6.3. Dörtlü $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ Bileşiklerinin Yapısal Özellikleri

İkili ve üçlü bileşiklere benzer şekilde $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ kristali için hesaplamalarda rombohedral yapı uzay grubu ($R\bar{3}m$) (No: 166) olarak alınmıştır. Bileşiklere katkı yapılabilmesi için 15 atomdan oluşan $1 \times 1 \times 1$ süper hücre oluşturulmuştur. Diğer bileşiklerde olduğu gibi dörtlü bileşiklerde de 15 atomdan oluşturulmuş hegzagonal birim hücreye sahiptir. $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ bileşiklerinde x ve y ' in 0.33, 0.66, 1, 1.33, 1.66 değerleri için taban durum enerjileri hesaplanmıştır. Taban durum enerjisine karşılık gelen hacim değeri kullanılarak örgü sabitleri a ve c , bulk modülü (B), bulk modülünün basınca göre türevi (B') ve denge hacimleri (V_0) belirlenmiştir. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ dörtlü bileşiklerin kristal yapıları Şekil 6.6. de gösterilmiştir. Üçlü yapılara ait hesaplanan örgü sabitleri (a), bulk modülleri (B), bulk modülünün basınca göre türevi (B') ve denge hacimleri (V_0) Çizelge 6.4. de verilmiştir. Optimizasyon grafikleri Şekil 6.7. de gösterilmiştir. Ayrıca atomlar arası mesafelerde Çizelge 6.5. de verilmiştir. Çizelge 6.4. deki değerlere bakıldığında dörtlü $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ bileşiklerin örgü parametrelerinde küçülme gözlenmiştir. Kristal yapıda Bizmut (Bi) ve Tellür (Te) atomlarının oranının azalması ile yapıda hacimsel gevşeme olduğu görülmektedir.

İkili bileşiklerde valans ve iletkenlik bandını oluşturan orbitalleri incelemek için tüm ikili bileşiklerin kısmi durum yoğunlukları (PDOS) çıkarılmıştır. Valans ve iletkenlik bandını oluşturan atomik orbitaller Şekil 6.9. de verilmiştir. Şekil 6.9. (a) ya bakıldığında valans band yüksek enerjili ve düşük enerjili olmak üzere iki alt banddan oluşmaktadır. Yüksek enerjili alt band -5.12 eV ile Fermi seviyesi arasında yer alırken Tellür ve Bizmut atomlarının p-orbitalleri bu alt band içerisinde baskındır. Bu sonuçta Li vd. (2010) çıkardıkları sonuçlarla uyumlu olduklarını göstermektedir. Düşük enerjili alt band ise -8.20 eV ile -11.90 eV arasında oluşmaktadır. Düşük enerjili alt band içerisinde Bizmut ve Tellür atomlarının s-orbitalleri baskındır. İletkenlik bandına bakıldığında ise 0.29 eV ile 4.20 eV arasında Bizmut ve Tellür atomlarının p-orbitalleri baskındır. Bununla birlikte 4.20 eV ile üst enerji seviyeleri arasında p-orbitallerinin yansira Bizmut atomunun d-orbitalleri, f-orbitalleri ve Tellür atomunun d-orbitalleri zayıf oranda da olsa iletkenlik bandının içerisinde yer aldığı tespit edilmiştir.

Benzer şekilde Şekil 6.9. (b)'ye bakıldığında Sb_2Te_3 'ün valans bandı üç alt banddan oluştuğu görülmektedir. En yüksek enerjili alt band da Antimon ve Tellür atomlarının p-orbitalleri bu banda yoğun bir şekilde yer aldığı görülmekte daha düşük enerjili bir alt banda ise Antimon atomlarının s-orbitalleri baskın bir şekilde yer alır. Bu bandın altındaki diğer bir band ise Tellür atomlarının s-orbitalleri baskındır. En yüksek enerjili valans bandı -4.80 eV ile Fermi seviyesi arasında iken düşük enerjili band ise -7.47 eV ile -9.47 eV arasında yer alır. En düşük enerjideki band ise -10.4 eV da sonlanmaktadır. İletkenlik bandında ise 0.11 eV ile 3.80 eV arasında Antimon ve Tellür atomlarının p-orbitalleri baskın olmasının yanında 3.80 eV 'dan daha yüksek enerji değerlerinde çok daha zayıf oranda Antimon ve Tellür atomlarının d-orbitallerinin de yer aldığı görülmektedir.

Sb_2Se_3 yapısı için iletkenlik ve valans bandları Şekil 6.9. (c) de gösterilmiştir. Burada valans bandı yüksek ve düşük enerjili olmak üzere iki alt banddan oluşur. Yüksek enerjili alt band -5.24 eV ile Fermi seviyesi arasında yer alırken Selenyum ve Antimon atomlarının p-orbitalleri bu band da baskındır. Düşük enerjili alt band ise -7.15 eV ile -11.26 eV arasındadır ve bu aralıkta Antimon atomlarının s-orbitallerinin baskın bir şekilde yer aldığı görülmektedir.

Topolojik yalıtkanlar güçlü spin-orbital etkilesimi göstermektedir. Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve Sb_2Se_3 ikili bileşiklerde spin-orbital etkilesimi sonucunda ortaya çıkan band yapıları Şekil 6.10. da verilmiştir. Şekil 6.10. (a) ya bakıldığında spin-orbital çiftlenmesi sonucunda Γ yüksek simetri noktasında band aralığı 0.29 eV' dan 0.34 eV' ye çıktığı görülmektedir. Γ -M yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı ise 0.16 eV değerinde olduğu görülmektedir. Şekil 6.10. (b) ye bakıldığında spin-orbital etkileşmesi sonucunda Γ yüksek simetri noktasında band aralığının 0.11 eV' dan 0.25 eV' ye büyüdüğü görülmektedir. Bu değer aynı zamanda yasak band enerji aralığını göstermektedir. Şekil 6.10. (c) kontrol edildiğinde ise Γ yüksek simetri noktasında band aralığının 0.29 eV değerinden spin-orbital çiftlenmesi sonucunda 0.26 eV' ye azaldığı görülmektedir. Bu yapıda yasak band enerji aralığı K- Γ yüksek simetri noktaları arasında 0.22 eV değerindedir.

İkili bileşiklerde spin-orbital çiftlenmesi sonucunda band yapılarında Γ yüksek simetri noktasında band aralığı 0.138 eV luk artışıyla Sb_2Te_3 bileşiğinin en fazla etkilendiği ortaya çıkarken Sb_2Se_3 bileşiğinin 0.03 eV luk küçülmeye en az etkilendiği görülmektedir. Ancak Sb_2Se_3 bileşiğinde yasak band enerji aralığının K- Γ yüksek simetri noktaları arasında ortaya çıktığı Şekil 6.8. de görülmektedir. Burada spin-orbital çiftlenmesi sonucunda K- Γ yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığının 0.05 eV den 0.22 eV' ye büyüdüğü Şekil 6.10. dan görülmektedir. Spin-orbital çiftlenmesi sonucu Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 bileşiklerinde band yapılarında Γ yüksek simetri noktasında band aralığı büyümekte iken Sb_2Se_3 bileşiğinde küçülmektedir.

6.5. Üçlü $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ ($x=0.33, 0.66, 1, 1.33, 1.66$) Bileşiklerinin Elektronik Özellikleri

$\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ üçlü bileşiklerinin elektronik özelliklerini incelemek için band yapıları, toplam ve kısmi durum yoğunlukları hesaplanmıştır. İkili bileşiklerde olduğu gibi üçlü bileşiklerde de GGA değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanılarak yüksek simetri noktalarında band yapısı grafikleri ve toplam durum yoğunlukları Şekil 6.11. de gösterilmiştir. Üçlü bileşiklerin yasak band enerji aralıkları Çizelge 6.7. de verilmiştir. Bilindiği gibi Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 gibi üç boyutlu topolojik yalıtkanlar Γ noktasında yüzeylerinde tekli Dirac konisi içermektedir. Bu malzemelerin katmanlı yapıda Γ noktasında tekli Dirac konisinin ortaya çıkması ancak katkılama işlemleri ile gerçekleşmektedir. Bu sebeple tezin bu bölümünde $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ kimyasal formülü kullanarak tek tek Bi atomları çıkarılıp Sb atomları katkılanacaktır. Tüm üçlü bileşiklere bakıldığında (Şekil 6.11) Γ yüksek simetri noktasında iletkenlik bandı ile valans bandı arasında direk band aralığı olduğu görülmektedir. Buradaki yasak band enerji aralığı bir birine oldukça yakındır ve bu özelliği ile yarı iletken özellik göstermektedirler. Band enerjisi x değerine bağlı olarak lineer bir azalış göstermektedir. Çizelge 6.7. de verildiği gibi üçlü yapılarda Antimon (Sb) atomlarının sayısının artması ile iletkenlik bandı ile valans bandı arasındaki aralık küçülmektedir. $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ kimyasal formülünde Γ yüksek simetri noktasında tekli Dirac konisine en çok $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ üçlü bileşiğinde yaklaşmıştır.

Üçlü bileşiklerde valans ve iletkenlik bandını oluşturan orbitalleri incelemek için tüm üçlü bileşiklerin kısmi durum yoğunlukları (PDOS) çıkarılmıştır. Tezde yer alan üçlü bileşikler için valans ve iletkenlik bandını oluşturan atomik orbitaller Şekil 6.12. da verilmiştir. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$ için iletkenlik ve valans bandı grafiği Şekil 6.12. (a) da verilmiştir. Burada valans bandı yüksek ve düşük enerjili olmak üzere iki alt banddan oluşmaktadır. Yüksek enerjili alt band -4.84 eV ile Fermi seviyesi arasında değer alırken bu bandda başta Tellür atomlarının p-orbitalleri ile Antimon ve Bizmut atomlarının p-orbitalleri baskın şekilde yer almaktadır. Düşük enerjili bir alt band da bakıldığında -7.40 eV ile -11 eV arasında yer alırken burada da Tellür, Antimon ve Bizmut atomlarının s-orbitalleri baskındır. İletkenlik bandı göz önüne alındığında 0.26 eV ile 4.83 eV arasında başta Bizmut ve Antimon atomlarının p-orbitalleri ile Tellür atomlarının p-orbitalleri yer almaktadır.

Şekil 6.12. (b)'ye bakıldığında $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$ için valans bandının, valans bandına yakın yüksek enerjili alt band ile düşük banddan oluştuğu görülmektedir. Yüksek enerjili alt band -5.20 eV ile Fermi seviyesi arasında başta Tellür atomlarının p-orbitalleri ile Antimon ve Bizmut p-orbitallerinin baskın olarak yer aldığı görülmektedir. Düşük enerjili alt band -7.6 eV ile -11 eV arasındayken burada da Tellür ve Antimon atomlarının s-orbitalleri baskındır. İletkenlik bandına bakıldığında 0.23 eV ile 5 eV arasında Bizmut ve Antimon atomlarının p-orbitalleri büyük oranla yer alır.

Şekil 6.12. (c)'de BiSbTe_3 için valans bandı yüksek ve düşük enerjili olmak üzere iki alt banddan oluştuğu görülmektedir. Yüksek enerjili alt banda bakıldığında 5 eV ile Fermi seviyesi arasındayken Tellür, Bizmut ve Antimon atomlarının p-orbitalleri yer alırken düşük enerjili bandda bu atomların Tellür, Bizmut ve Antimon s-orbitalleri baskın şekilde yer alır. Bu bandın enerji aralığı -7.40 eV ile -11.43 eV değerleri arasındadır. İletkenlik bandı göz önüne alındığında 0.19 eV ile 4.78 eV arasında Bizmut ve Antimon atomlarının p-orbitalleri baskın bir şekilde yer aldıkları görülür.

Benzer şekilde Şekil 6.12. (d) ye bakıldığında $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ bileşiği için valans bandının 2 alt banddan oluştuğu görülebilir. Burada yüksek enerjili alt band -5.2 eV ile Fermi seviyesi arasında yer alırken başta Tellür atomlarının p-orbitalleriyle Antimon ve Bizmut atomlarının p-orbitalleri baskındır. Düşük

enerjili valans bandı ise -7.23 eV ile -11.65 eV arasında iken Antimon, Tellür ve Bizmut atomlarının s-orbitalleri yoğun oranda gözlenmektedir. İletkenlik bandı 0.13 eV ile 4.60 eV arasında yer alırken burada Antimon, Tellür ve Bizmut atomlarının p-orbitalleri büyük oranla yer alırken 4.60 eV dan daha yüksek enerji değerlerinde tüm atomların diğer orbitalleri gözlenmektedir.

$\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ bileşiği için Şekil 6. 12. (e)' ye dikkat edildiğinde burada da valans bandı iki alt banddan oluşur. Fermi seviyesine yakın yüksek enerjili alt banddaki enerji aralığı -5.18 eV ile Fermi seviyesi arasındadır. Bu band da Bizmut, Antimon ve Tellür atomlarının p-orbitalleri baskın bir şekilde yer alırken düşük enerjili alt band da -7.72 eV ile -11.4 eV arasında iken aynı atomların s-orbitalleri baskın bir şekilde yer alır. İletkenlik bandının 0.06 eV ile 4.9 eV arasında Antimon, Tellür ve Bizmut atomlarının p-orbitalleri yoğun bir şekilde oluşur.

Üçlü bileşiklerde spin-orbital etkileşmesi sonucunda ortaya çıkan band yapıları Şekil 6. 13. de verilmiştir. İkili bileşiklerde olduğu gibi Γ yüksek simetri noktasındaki band aralığı değişimleri ve yasak band enerji aralığı değerleri verilmiştir. Şekil 6. 13. (a) incelendiğinde $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$ bileşiğinde spin-orbital etkileşmesi sonucu Γ yüksek simetri noktasında band aralığı 0.27 eV değerinden 0.31 eV değerine yükseldiği görülmektedir. Burada Γ -M yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı 0.12 eV değerindedir. Şekil 6. 13. (b) ye bakıldığında $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$ bileşiğinde Γ yüksek simetri noktasında band aralığı spin-orbital etkileşmesi sonucunda 0.23 eV 'den 0.37 eV değerine kadar artışı görülmektedir. Γ -M yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı ise 0.12 eV değerindedir. Şekil 6. 13. (c) kontrol edildiğinde BiSbTe_3 üçlü bileşiğinin spin-orbital etkileşmesi sonucunda Γ yüksek simetri noktasında band aralığı 0.195 eV değerinden çok yüksek bir etkiyle 0.44 eV değerine kadar çıktığı görülmektedir. Γ -M yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı 0.04 eV değerine kadar düştüğü görülmektedir. Şekil 6. 13. (d)'ye bakıldığında $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ bileşiğinde Γ yüksek simetri noktasında band aralığı spin-orbital etkileşimi dahil edilmediğinde 0.13 eV iken spin-orbital etkileşimi ile 0.42 eV değerine çıktığı görülmektedir. Bu şekilden Γ -M yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı 0.06 değerinde olduğu görülmektedir. Son olarak üçlü $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiğinde spin-orbital etkileşimi sonucu Γ yüksek simetri noktasında band aralığının 0.067 değerinden büyük bir artışla 0.42 eV değerine kadar çıktığı Şekil 6.12. (e) de görülmektedir. Γ -M yüksek simetri noktaları yasak band enerji aralığı 0.07 eV değerinde olduğu görülür.

Üçlü bileşiklerden $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiğinin Γ yüksek simetri noktasında spin-orbital etkileşiminden band aralığının 0.35 eV luk bir artışla en fazla etkilendiği görülürken en az artışın ise 0.04 eV artış ile $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$ bileşiği olduğu Şekil 6. 13. den görülebilir. Ayrıca tüm üçlü bileşiklerde Γ yüksek simetri noktasında band aralığının açıldığı görülmektedir. Γ - M yüksek simetri noktaları arasında ise iletkenlik bandları ile valans bandlarının birbirlerine yaklaştıkları görülmektedir. İncelenen tüm üçlü bileşiklerde yasak band enerjisinin Γ - M yüksek simetri noktaları arasında ortaya çıktığı Şekil 6. 13. de görülmektedir.

6.6. Dörtlü $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ ($x=y=0.33, 0.66, 1, 1.33, 1.66$) Bileşiklerinin Elektronik Özellikleri

Dörtlü $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ bileşiklerin elektronik özelliklerini incelemek için band yapıları, toplam ve kısmi durum yoğunlukları hesaplanmıştır. Dörtlü bileşiklerin hesaplamalarında GGA değişim korelasyon enerjisi kullanılarak yüksek simetri noktalarında band yapısı grafikleri (Şekil 6.14) elde edilmiştir. Şekil 6. 14. e bakıldığında toplam durum yoğunlukların band yapı grafikleri ile uyumlu oldukları görülmektedir. Dörtlü bileşiklerin yasak band enerji aralığı değerleri, Çizelge 6.5. de verilmiştir. Bu bölümde $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ kimyasal formülü kullanılarak Bi ve Te atomları çıkarılıp Sb ve Se atomları katkılanacaktır. Katkılama sonucunda dörtlü bileşikler de yasak band enerji aralığı küçülmektedir. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se ve $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ bileşiklerinde Γ yüksek simetri noktasında direk band aralığı oluşurken $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ bileşiğinde direk olmayan band aralığı oluşur. Dörtlü bileşiklerin yasak band enerji aralıkları Çizelge 6.8. de verilmiştir. Çizelge 6.8. deki yasak band enerji aralığı değerlerine bakıldığında lineer bir küçülme olduğu görülmektedir. Bunun sebebi Selenyum (Se) ve Antimon (Sb) atomlarının sayısının artmasıyla yasak band enerji aralığının küçülmesidir.

Dörtlü bileşiklerin valans ve iletkenlik bandlarını incelemek amacıyla bileşiklerin kısmi durum yoğunlukları grafikleri Şekil 6.15. de çıkarılmıştır. Şekil 6.15. (a) ya bakıldığında $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$ dörtlü bileşiğinin valans bandının yüksek ve düşük enerjili iki alt banddan oluştuğu görülmektedir. Yüksek enerjili alt bandın enerji aralığı -5 eV ile Fermi seviyesine kadar iken bu band da başta Selenyum ve Tellür atomlarının p-orbitalleri yüksek oranda yer alırken bunun yanında Bizmut ve Antimon atomlarının p-orbitalleri belirgin bir şekilde yer alır. Düşük enerjili alt band -7.47 ile -11.09 enerji aralığındadır. Burada başta Tellür atomu olmak üzere Antimon ve Bizmut atomlarının s-orbitalleri baskın bir şekilde bulunur. İletkenlik bandı 0.12 eV ile 4.70 eV arasında yer alırken bileşikteki tüm atomların p-orbitalleri baskın bir şekilde yer alırken daha yüksek enerji değerlerinde Selenyum, Antimon ve Tellür atomlarının -d orbitalleri ve Bizmut atomlarının d ve f-orbitalleri zayıf bir şekilde yer alır.

Şekil 6.15. (b) kontrol edildiğinde $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$ nin valans bandı düşük ve yüksek enerjili iki alt banddan oluştuğu görülür. Yüksek enerjili alt band -5.1 eV ile Fermi seviyesi enerji aralığında iken başta Selenyum ve Tellür atomlarının p-orbitalleri ile Bizmut ve Antimon atomlarının p-orbitalleri yüksek oranda yer alır. Düşük enerjili alt band -7.5 eV ile -11 eV arasında değer alırken bu band da başta Tellür atomlarının s-orbitalleri ile Antimon ve Bizmut atomlarının s-orbitalleri baskındır. İletkenlik bandında 0.21 eV ile 5 eV arasında yapıyı oluşturan tüm atomların p-orbitalleri baskın olduğu görülmektedir.

BiSbTe_2Se bileşiğinin valans ve iletkenlik bandlarının kısmi durum yoğunlukları Şekil 6.15. (c) de verilmiştir. Burada valans bandı yüksek ve düşük enerjili iki alt banddan oluşmakta olup yüksek enerjili band -5 eV ile Fermi seviyesi arasındadır. Burada başta Selenyum ve Tellür atomlarının p-orbitalleri ile Antimon ve Bizmut atomlarının p-orbitalleri büyük oranla yer alır. Düşük enerjili alt band -7.74 eV ile -10.68 eV enerji aralığında olup bu bandı ilk olarak Antimon atomlarının s-orbitalleri ile Tellür ve Bizmut atomlarının s-orbitalleri büyük oranla oluşturur. İletkenlik bandı göz önüne alındığında enerji aralığı 0.14 eV ile 4.6 eV arasındaki değerlerde Bizmut, Antimon, Tellür ve Selenyum atomlarının p-orbitallerinin baskın olduğu görülmektedir.

Şekil 6.15. (d) 'ye bakıldığında $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ için valans bandının yüksek ve düşük enerjili iki alt banddan oluştuğu görülüyor. Burada yüksek enerjili alt

band -5.3 eV ile Fermi seviyesi arasında yer alırken başta Tellür ve Selenyum atomlarının p-orbitalleri ile Bizmut atomlarının p-orbitalleri büyük oranla yer alır. Düşük enerjili alt band -7.55 eV ile -10.52 eV arasında iken Antimon ve Bizmut atomlarının s-orbitallerinin baskın şekilde oluştuğu tespit edilmiştir. İletkenlik bandına dikkat edildiğinde 0.1 eV ile 4.4 eV enerji aralığında bileşiği oluşturan tüm atomların p-orbitalleri baskın bir şekilde yer aldığı gözlemlenmektedir.

Son olarak Şekil 6.15. (e) de oluşturulan grafik incelendiğinde $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ bileşiğinin valans bandının düşük ve yüksek enerjili iki alt banddan oluştuğu görülmektedir. Yüksek enerjili alt band -5.7 eV ile Fermi seviyesi arasındayken başta Selenyum ve Tellür atomlarının p-orbitalleri ile Bizmut ve Antimon atomlarının p-orbitallerinin baskın şekilde yer aldığı görülmektedir. Düşük enerjili alt band -7.4 eV ile -12 eV arasındayken Antimon, Tellür ve Bizmut atomlarının s-orbitallerinin büyük oranla oluşturduğu görülür. İletkenlik bandına bakıldığında 0.17 eV ile 5.1 eV arasında bileşiği oluşturan atomların p-orbitalleri baskın bir şekilde yer aldığı görülmektedir.

Dörtlü bileşiklerde spin-orbital etkileşmesi sonucunda ortaya çıkan band yapıları Şekil 6.16. de verilmiştir. Burada da diğer ikili ve üçlü bileşiklerde olduğu gibi Γ yüksek simetri noktasındaki yasak band enerji aralığı değerleri verilmiştir. Şekil 6. 16. (a) ya bakıldığında $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$ için Γ yüksek simetri noktasındaki band aralığının spin-orbital etkileşmesi sonucunda 0.221 eV' den 0.39 eV değerine kadar yükseldiği görülmektedir. $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında Fermi seviyesi ile en düşük enerjili iletkenlik bandı aralığı 0.14 eV değerindedir. Şekil 6. 16. (b) ye bakıldığında $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$ dörtlü bileşiğinin spin-orbital etkileşimi sonucunda Γ yüksek simetri noktasındaki band aralığının 0.11 eV den 0.44 eV ye yükseldiği görülür. $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı 0.11 eV değerini aldığı görülür. Şekil 6.16. (c) kontrol edildiğinde ise BiSbTe_2Se dörtlü bileşiğinin Γ yüksek simetri noktasında spin-orbital etkileşimiyle beraber band aralığının 0.14 eV den çok büyük bir değere 0.62 eV yükseldiği görülmektedir. $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı 0.13 eV değerinde olduğu görülür. Şekil 6.16. (d) incelendiğinde $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ dörtlü bileşiği için spin-orbital etkileşimi ile Γ yüksek simetri noktasında band aralığının 0.104 eV değerinden 0.49 eV değerine yükseldiği görülmektedir. Burada da $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı 0.15 eV değerindedir.

Son olarak Şekil 6.16. (e) incelendiğinde $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ dörtlü bileşiğinin spin-orbital etkileşimi sonucunda en Γ yüksek simetri noktasında band aralığı 0.04 eV değerinden büyük bir artışla 0.36 eV değerine ulaştığı görülmektedir. $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı ise 0.18 eV değerinde olduğu görülür.

Bu tezde incelenen dörtlü bileşiklerden BiSbTe_2Se bileşiğinin Γ yüksek simetri noktasında spin-orbital etkileşiminden band aralığının 0.476 eV luk bir artışla en fazla etkilendiği görülürken en az artışın ise 0.169 eV artış ile $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$ bileşiği olduğu Şekil 6.15. den görülebilir. Ayrıca üçlü bileşiklere benzer şekilde tüm dörtlü bileşiklerde Γ yüksek simetri noktasında band aralığının açıldığı görülmekteyken $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında iletkenlik bandları ile valans bandlarının birbirlerine yaklaştıkları görülmektedir. İncelenen tüm dörtlü bileşiklerde yasak band enerji aralığının Γ

7. TARTIŞMA VE SONUÇLAR

Bu çalışmada önemli üç boyutlu topolojik malzemeler Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 ve yarıiletken malzeme Sb_2Se_3 yapılarının yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. Elde edilen teorik sonuçlar literatürde yer alan deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırıldı. Bunun yanı sıra üç boyutlu topolojik malzemeler olan Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 yüzey band yapılarında Γ yüksek simetri noktasında tekli Dirac konisi içermekteyken 15 atomdan oluşturulmuş hücrenin band yapıları ele alındığında yarıiletken özellik göstermektedirler. Bu malzemelerde topolojik durumların düzenlemesi veya ayarlanması katkılama yöntemiyle (Urazhdin vd., 2004) gerçekleştirilmektedir. Bu tez çalışmasında $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ kimyasal formülleri kullanılarak (x ve y nin 0.33, 0.66, 1, 1.33 ve 1.66 değerlerinde) atom katkılarını yapılmıştır. Bileşiklerin yapısal ve elektronik özellikler DFT yöntemi temelli WIEN2k paket programı kullanılarak incelenmiştir. Tüm bileşikler için değiş-tokuş korelasyon potansiyel enerji fonksiyonu olarak GGA yaklaşımı seçilmiştir. Tüm bileşiklerin band yapı hesaplamaları yapılarak Γ yüksek simetri noktasındaki band aralığı özellikleri incelenmiştir. Taban durum enerjisine karşılık gelen örgü parametrelerini bulmak için geometrik optimizasyon yapılmıştır. Murnaghan (1944) denklemi kullanılarak örgü sabitleri, bulk modülü ve bulk modülünün basınca göre türevi hesaplanmıştır. Bi_2Te_3 (Wu vd., 2015; Humphry-Baker vd., 2014), Sb_2Te_3 (Zhang vd., 2015) ve Sb_2Se_3 (Zhang vd., 2009) ikili bileşiklerdeki taban durum enerjisine karşılık gelen örgü sabitleri literatürdeki değerleriyle uyum içerisinde olduğu bulunmuştur. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_3$, BiSbTe_3 , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_3$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ üçlü bileşiklerde Antimon atomlarının artışı ile yapılarıdaki atomların birbirleri arasındaki uzaklıkların azaldığı görülmekte olup hacimsel sıkışmanın olduğu tespit edilmiştir. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_{2.66}\text{Se}_{0.33}$, $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.66}\text{Te}_{2.33}\text{Se}_{0.66}$, BiSbTe_2Se , $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ ve $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ dördü bileşiklerde geometrik optimizasyon sonrasında Bizmut ve Tellür atomlarının yapılarıdaki oranlarının azalmasıyla atomlar arası uzaklıkların büyüdüğü görülmektedir ve hacimsel genişleme ortaya çıkmaktadır.

Bi_2Te_3 ve Sb_2Te_3 yapılarında yasak band enerji aralığı Γ yüksek simetri noktası üzerinde ortaya çıkmıştır ve burada direkt band aralığı görülmektedir. Sırasıyla

$\text{Bi}_2\text{Te}_3, \text{Sb}_2\text{Te}_3$ için Γ yüksek simetri noktasındaki band aralığı 0.29 eV ve 0.11 eV çıkmıştır. Sb_2Se_3 için valans bandı ile iletkenlik bandı arasındaki en yakın mesafe $K - \Gamma$ yüksek simetri noktaları arasındadır. Buradaki band aralığı 0.05 eV olarak bulunmuştur. İkili Bi_2Te_3 (Mishara vd., 1997), Sb_2Te_3 (Yavorsky vd., 2011) ve Sb_2Se_3 (Zhang vd., 2015) bileşiklerin bu yasak band enerji aralıkları literatürdeki değerleri ile karşılaştırıldıklarında uyumlu oldukları görülmektedir. Band yapılarına bakıldığında incelenen tüm ikili bileşikler yarıiletken özellik göstermektedirler. İkili bileşiklerde valans ve iletkenlik bandını oluşturan orbitalleri incelemek için kısmi durum yoğunlukları (PDOS) çıkarılmıştır. Burada çıkan sonuçlara göre ikili bileşiklerde iletkenlik bandında ve Fermi seviyesine en yakın valans bandında atomların p-orbitallerinin baskın olarak yer aldığı görülmüştür. Valans bandındaki düşük enerjili alt bandlar da ise atomların s-orbitallerinin baskın şekilde yer aldıkları görülmüştür.

$\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ yapısı kullanılarak $x=0.33, 0.66, 1, 1.33$ ve 1.66 değerleri verilerek yapılan atom katkılama işlemi sonrasında ortaya çıkan üçlü bileşiklerin elektronik özellikleri incelendiğinde yasak band enerjisi aralığının Γ yüksek simetri noktası üzerinde ortaya çıktığı görülmüştür. Bu noktada direkt band aralığı olduğu görülmekte olup incelenen tüm üçlü bileşikler yarıiletken özellik göstermektedirler. Üçlü bileşiklerin band yapılarında Γ yüksek simetri noktasında Dirac konisi oluşumuna en çok 0.07 eV luk band aralığı ile $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiğinde yaklaşılmıştır. $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$ bileşiğinde ise Γ yüksek simetri noktasındaki band aralığı 0.27 eV en yüksek değerde çıkmıştır. Buradan üçlü bileşiklerde x değerinin artışıyla diğer bir deyişle Antimon atomlarının sayısının artışı ile enerji band aralığının giderek küçüldüğü ve Dirac konisine yaklaşıldığı yorumu yapılabilir. Üçlü bileşiklerde kısmi durum yoğunluklarına (PDOS) bakıldığında ikili bileşiklerde olduğu gibi üçlü bileşiklerde iletkenlik bandında ve Fermi seviyesine en yakın valans bandında atomların p-orbitallerinin baskın olarak yer aldığı görülmüştür. Valans bandındaki düşük enerjili alt bandlar da ise atomların s-orbitallerinin baskın şekilde yer aldıkları görülmüştür.

$\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ kimyasal formülü kullanılarak $x=y=0.33, 0.66, 1, 1.33$ ve 1.66 değerleri için yapılan atom katkılama işlemi sonrasında ortaya çıkan dördümlü bileşiklerin elektronik özellikleri incelendiğinde Γ yüksek simetri noktasında

Dirac konisinin oluşumuna en çok 0.10 eV luk enerji band aralığı ile $\text{Bi}_{0.66}\text{Sb}_{1.33}\text{Te}_{1.66}\text{Se}_{1.33}$ dörtlü bileşiğinde yaklaşılmıştır. İncelenen dörtlü bileşikler arasında $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ bileşiği en düşük yasak band enerji aralığına sahiptir. Bu bileşiğin band yapısında K- Γ yüksek simetri noktaları arasında 0.04 eV luk enerji band aralığı ortaya çıkmıştır. Dörtlü bileşiklerde x ve y nin artışıyla band aralığının giderek küçüldüğü görülmüştür. Dörtlü bileşiklerde kısmi durum yoğunluklarına bakıldığında diğer bileşiklerde olduğu gibi dörtlü bileşiklerde iletkenlik bandında ve Fermi seviyesine en yakın valans bandında atomların p-orbitallerinin baskın olarak yer aldığı gözlenmiştir. Valans bandındaki düşük enerjili alt bandlar da ise atomların s-orbitallerinin baskın şekilde yer aldıkları görülmüştür.

Spin-orbital etkileşmeleri göz ardı edilerek yapılmış olan hesaplamalarda incelenen tüm bileşiklerin band yapıları karşılaştırıldığında Γ yüksek simetri noktasında tekli Dirac konisine $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiğinde yaklaşıldığı görülmüştür. Ayrıca tüm üçlü ve dörtlü bileşikler dar-band aralığına sahip yarıiletken karakteri göstermektedirler. Bu sebepten klasik yarıiletken uygulamaları için kullanışlıdır. Ayrıca bileşiklerin yasak band aralığı enerjileri elektromanyetik spektrumda infrared (IR) bölgeye karşılık gelmektedir. Bu nedenle incelenen bu bileşikler infrared detektörlerde kullanılabilirler.

Tüm bileşiklerde spin-orbital etkileşmesinin bileşiklerin band yapılarına olan etkisini incelemek amacıyla spin-orbital etkileşimi göz önüne alarak bileşiklerin band yapıları çıkarılmıştır. Tüm ikili bileşiklerde spin-orbital etkileşmeleri dahil edilerek yapılan band yapı hesaplamaları sonrasında Γ yüksek simetri noktasında band aralıklarının açıldığı görülmektedir. İkili bileşiklerde Γ yüksek simetri noktasında Sb_2Te_3 bileşiği 0.14 eV lik değerle en fazla enerji band aralığı artışına sahipken Sb_2Se_3 bileşiğinde 0.01 eV lik değerle en az enerji band aralığı artışına sahip olduğu görülmüştür. Ancak spin-orbital etkileşmeleri sonrasında Sb_2Se_3 bileşiğinde yasak band enerji aralığındaki büyüme değeri 0.17 eV tur. Bi_2Te_3 bileşiğinde $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralığı ise 0.16 eV'ye değerine düşmektedir. Sb_2Te_3 bileşiğinde yasak band enerji aralığı ise 0.25 eV değerine çıkmaktadır.

İkili bileşiklerde gözlemlendiği gibi üçlü bileşiklerde de spin-orbital etkileşmeleri dikkate alındığında Γ yüksek simetri noktasında yasak band enerji aralığının büyüdüğü görülmekte iken $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında yasak band enerji aralıklarının küçüldüğü görülmektedir. Üçlü bileşiklerde Γ yüksek simetri noktasında en fazla band enerji aralığına sahip bileşik 0.36 eV luk değer artışıyla $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ bileşiği iken en az band enerji aralığı artışı 0.05 eV değer ile $\text{Bi}_{1.33}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$ bileşiğidir. Üçlü bileşiklerdeki yasak band enerji aralıkları kontrol edildiğinde $\Gamma - M$ yüksek simetri noktaları arasında 0.04 eV luk değeri ile en az band aralığına sahip bileşik BiSbTe_3 tür. En fazla yasak band enerji aralığı ise 0.12 eV değeri ile $\text{Bi}_{1.66}\text{Sb}_{0.33}\text{Te}_3$ bileşiğidir. İncelediğimiz tüm üçlü bileşiklerde spin-orbital etkileşmesi dikkate alındığında yasak band enerji aralıklarının küçüldüğü görülmektedir.

Diğer bileşiklerde gözlemlendiği gibi dörtlü bileşiklerde de spin-orbital etkileşmeleri dikkate alındığında Γ yüksek simetri noktasında yasak band enerji aralığının büyüdüğü görülmektedir. Dörtlü bileşiklerde spin-orbital etkileşmesi dikkate alındığında Γ yüksek simetri noktasında enerji band aralığının en fazla arttığı bileşik BiSbTe_2Se dir. Bu bileşikte Γ yüksek simetri noktasında enerji band aralığı 0.62 eV değerine kadar çıkmıştır. Ancak spin-orbital etkileşmesi dikkat edildiğinde yasak band enerji aralıkları artışlarına göre dörtlü bileşikler değerlendirilecek olursa 0.14 eV değerlik artışla $\text{Bi}_{0.33}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_{1.33}\text{Se}_{1.66}$ bileşiğinde olduğu görülebilir. Sonuç olarak incelenen tüm yapıların spin-orbital etkileşmeleri sonucu artan band aralıkları sebebiyle bu malzemelerin yeni spintronik uygulamalar için umut vaat ettiği söylenebilir. Aynı zamanda direkt band aralıklarına sahip olmalarıyla klasik yarıiletken teknolojisi içinde enerji band aralığı kolayca değişebilen malzeme özelliği göstermektedirler.

KAYNAKLAR

- Aliabad, H.A.R. , Kheirabadi, M., 2014. Thermoelectricity and superconductivity in pure and doped Bi_2Te_3 with Se. *Physical Review B*, 433, 157-164.
- Aydoğan, Ş. , 2011. *Katıhal Fiziği*, 2. ed. Nobel Yayınevi, 39-48 s., Ankara.
- Blaha, P., Madsen, G., Kvasnicka, D., Luitz, J., 2014. WIEN2k. Vienna University of Technology Institute of Materials Chemistry, 2, 28.
- Born, M., Oppenheimer, J. R., 1927. Born-Oppenheimer approximation. *Annals of Physics*, 84, 457 p.
- Deligöz, E., 2007. Bazı İkili (Cds, Cdse, Cdte, Cdf₂, Albi, Bbi) Bileşiklerin Yapısal, Elektronik, Elastik, Termodinamik ve Titreşimsel Özelliklerinin AB INITIO Yöntemle İncelenmesi. Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, 39-56s., Ankara.
- Desai, C. F., Dhar, S. N., 2000. Crystal growth and defect study of BiSbTe_3 . *Philosophical Magazine Letter*, 80(6), 435-440.
- Dreizler, R. M., Gross, E. K. U., 2012. *Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many-Body Problem*. NATO ASI Series, 217-237 s., Newyork.
- Eremeev, S. V., Landolt, G., Menshchikova, T. V., Slomski, B., Koroteev, Y. M., Aliev, Z. S., Babanly, M. B., Henk, J., Ernst, A., Patthey, L., Eich, A., Khajetoorians, A. A., Hagemeister, J., Pietzsch, O., Wiebe, J., Wiesendanger, R., Echenique, P. M., Tsirkin, S. S., Amiraslanov, I. R., Dil, J. H., 2011. Atom-specific spin mapping and buried topological states in a homologous series of topological insulators. *Nature Communications*, 3, 635.
- Ersoy, E., 2012., Bazı Deforme Çekirdeklerde Denge Öncesi Nötron Yayınlanma Spektrumlarının Yeni Bir Yaklaşım Kullanılarak Hesaplanması. Nevşehir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, 43., Nevşehir.
- Fermi, E., 1927. A statistical method for determining some properties of the atoms. *Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Serie Ottava. Rendiconti*.

- Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali. Accademia Nazionale dei Lincei, Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali.,6, 602–607 p.
- Franz, M. , Molenkamp,L., 2013.Topological Insulators.Elsevier, 6-7 p. Würzburg.
- Govaerts, K., Park, K., De Beule, C., Partoens, B., Lamoen, D., 2014. Effect of Bi bilayers on the topological states of Bi_2Se_3 : A first-principles study. Physical Review B, 90(15), 155124.
- Güler, S., 2010. Örgü Sabiti Uyuşmayan Tek Cins Atomlu Heteroyapıların Elektronik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi. Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, 4-5 s., Edirne.
- Hahn, T. (Ed.), (2005). International Tables For Crystallography. The International Union of Crystallography by Springer, 15p. Dordrecht.
- Hakioğlu, T., 2013Erişim Tarihi: 04.01.2013
<https://anahtar.sanayi.gov.tr/tr/news/bilim-ve-kritik-teknolojilerde-yeni-devrim/368>.
- Hartree, D. R., 1928. The Wave Mechanics of an Atom with a non-Coulomb Central Field. Part III. Term Values and Intensities in Series in Optical Spectra. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 24(03), 426 p.
- Hashibon, A., Elsässer, C., 2011. First-principles density functional theory study of native point defects in Bi_2Te_3 . Physical Review B, 84(14), 144117.
- Hohenberg, P., Kohn, W., 1964. The Inhomogeneous Electron Gas. Physical Review, 136(3B), B864 p.
- Hook, J. R., Hall, H. E., 1991. Solid State Physics, The Manchester Physics Series,120 p., Manchester.
- Humphry-Baker, S.A. Schuh, C. A., 2014. Anomalous grain refinement trends during mechanical milling of Bi_2Te_3 . Acta Materialia, 75, 167–179.

- Jacobsen, M. K., Sinogeikin, S. V., Kumar, R. S., Cornelius, a. L., 2012. High pressure transport characteristics of Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , and BiSbTe_3 . *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 73(9),1154–1158.
- Karakaya, M., 2012. Yoğunluk Fonksiyon Teori (DFT) Metodu ile Kolin Bileşiklerinin Titreşim Analizleri, H ve C NMR Kimyasal Kaymalar. Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, 22-23s. Isparta.
- Kasalak, T. F., Babanlı, A., Çakmak, S., Yücel, İ., 2016. 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*, 10(5-6), 391-396.
- Kittel, C., 1986. *Katılmal Fiziğine Giriş*, Çev. Karaoğlu, B., Güven Kitap Yayın Dağıtım ltd. şti., 2-15 p. İstanbul.
- Kohn, W., Sham, L. J., 1965. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133–A1138 p.
- Kushwaha, S. K., Pletikosić, I., Liang, T., Gyenis, A., Lapidus, S. H., Tian, Y., Zhao, H., Burch, K. S., Lin, J., Wang, W., Ji, H., Fedorov, A. V., Yazdani, A., Ong, N. P., Valla, T., Cava, R. J., 2016. Sn-doped $\text{Bi}_{1.1}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ bulk crystal topological insulator with excellent properties. *Nature Communications*, 7, 11456.
- Larson, P., Mahanti,S., Kanatzidis,M.,2000. Electronic structure and transport of Bi_2Te_3 and BaBiTe_3 . *Physical Review B*, 61(12), 8162–8171.
- Li, A. H., Shahbazi, M., Zhou, S. H., Wang, G. X., Zhang, C., Jood, P., Peleckis,G., Du,Y., Cheng,Z. X., Wang,X. L., Kuo,Y. K., 2010. Electronic structure and thermoelectric properties of Bi_2Te_3 crystals and graphene-doped Bi_2Te_3 . *Thin Solid Films*, 518(24), 57e-60e.
- Ma, Y., Liu, G., Zhu, P., Wang, H., Wang, X., Cui, Q., Liu, J., Ma, Y., 2012. Determinations of the high-pressure crystal structures of Sb_2Te_3 . *Journal of Physics Condensed Matter*, 24(47), 475403.

- Martin, R. M., 2004. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, 75p., Newyork
- Melvin, L., 1974. *Symmetry Principle in Solid Sate and Molecular Physics*, 61p. Newyork.
- Mishara, S. K. , Satpathy,S., Jepsen,O., 1997. Electronic structure and thermoelectric properties of bismuth telluride and bismuth selenide.*Journal of Physics Condensed Matter*,9, 461.
- Murnaghan, F. D., 1944. The Compressibility of Media under Extreme Pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244–247.
- Mutlugeldi, C., 2009. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile Be Ve Ti Bazlı Sistemlerin Elektronik Yapılarının İncelenmesi. Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, 21-48 s., Ankara.
- Niu, C., Dai, Y., Zhu, Y., Yu, L., Han, S., Huang, B., 2012. Realization of tunable Dirac cone and insulating bulk states in topological $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$. *Scientific Reports*, 2, 976.
- Parr, R. G., 1989. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. *International Academy of Quantum Molecular Science*, 3, 5-15.
- Park, M. S., Song, J.-H., Medvedeva, J. E., Kim, M., Kim, I. G., Freeman, A. J., 2010. Electronic structure and volume effect on thermoelectric transport in p - type Bi and Sb tellurides.*Physical Review B*, 81(15), 155211.
- Perdew, J. P., Ernzerhof, M., Burke, K., 1996. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letter*, 77, 3865–3868.
- Perdew, J. P., Wang, Y., 1992. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, 45(23), 13244–13249.
- Ren, Z., Taskin, A. A., Sasaki, S., Segawa, K., Ando, Y., 2011. Optimizing $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ to approach the intrinsic topological regime.*Physical Review B*, 84 (16),

165311.

Sholl, D. S., Steckel, J. A., 2012. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi: Pratik bir Girişi, Çev. Aydın, S., Körözlü, N., Nobel Yayınevi, 2-35 s., Ankara.

Thomas, L. H., 1927. The calculation of atomic fields. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 23(5), 542 p.

Urazhdin, S., Bilc, D., Mahanti, S. D., Tessmer, S. H., Kyratsi, T., Kanatzidis, M. G., 2004. Surface effects in layered semiconductors Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 . Physical Review B, 69(8), 085313.

Wang, G., Cagin, T., 2007. Electronic structure of the thermoelectric materials Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 from first-principles calculations. Physical Review B, 76(7), 075201.

Wu, X., Wang, Q., Guo, Y., Wang, D., Wang, Y., 2015. Synthesis of ultrathin topological insulator Bi_2Te_3 nanosheets as an optical media for the generation of ring-shaped beams. Materials Letters, 159, 80–83.

Yavorsky, B. Y., Hinsche, N. F., Zahn, P., Mertig, I., 2011. Electronic structure and transport anisotropy of Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 . Physical Review B, 84, 165208.

Yılmaz, S., 2012. Zirkonyum Dioksit Kristalinin Yapısal ve Mekaniksel Özelliklerinin İncelenmesi. Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, 9s., Denizli.

Zhang, C., Peng, Z., Li, Z., Yu, L., 2015. Controlled growth of bismuth Antimony telluride $\text{Bi}_x\text{Sb}_{2-x}\text{Te}_3$ nanoplatelets and their bulk thermoelectric nanocomposites. Nano Energy, 15, 688–696.

Zhang, H., Liu, C., Qi, X., Dai, X., Fang, Z., Zhang, S., 2009. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. Nature Physics, 5(6), 438–442.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Turgut Fatih KASALAK
Doğum Yeri ve Yılı : Antalya , 1982
Medeni Hali : Evli
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta : tfatih@akdeniz.edu.tr

Eğitim Durumu

Lise : Tınaztepe Lisesi, 1999
Lisans : SDÜ, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik
Yüksek Lisans : SDÜ, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik

Mesleki Deneyim

SDÜ Bilgisayar Araştırma Uygulama Merkezi 2003-2004
Tudem Dershanesi 2004-2005
Akdeniz Üniversitesi Enformatik Bölüm Başkanlığı 2006-... (halen)

Yayımları

SCI,SSCI,AHCI İNDEKSLERİNE GİREN DERGİLERDE YAYINLANAN MAKALELER

Kasalak T.F., Babanlı A., Çakmak S. , Yücel İ., 2016 Structural and Electronic Properties of $Bi_{2-x}Sb_xTe_3$ Ternary and $Bi_{2-x}Sb_xTe_{3-y}Se_y$ Quaternary Compounds ", Optoelectronics and Advanced Materials-Rapid Communications, 10(5-6), 391-396.

Babanlı A.M., Artunç E., Kasalak T.F., 2015. Electron g-Factor in Diluted Magnetic Semiconductor Quantum Well with Parabolic Potential in the Presence of Rashba Effect and Magnetic Field. Zeitschrift Fur Naturforschung Section A-A Journal of Physical Sciences, 70, 109-114.

Babanlı A. , Artunç E., Kasalak T.F., 2015. Elastic Scattering in Kane Type Semiconductor Circular Dots. Acta Physica Polonica A, 127, 811-814.

HAKEMLİ KONGRE / SEMPOZYUMLARIN BİLDİRİ KİTAPLARINDA YER ALAN YAYINLAR

Kasalak Turgut Fatih, Babanlı A.,Çakmak S., Yücel İ., 2016. Density Functional Study of Electronic Properties of $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$. Turkish Physical Society 32 nd International Physics Congress, 381 s., Muğla.

Kasalak T.F., Babanlı A., 2015. Electronic Properties of Chairlike -GeC Sheets: A First Principle Study. International Science and Technology Conference 2015, .15 p., St. Petersburg.

Kasalak T.F., Babanlı A., 2015. Density Functional Theory Study of Germanene-Like GeX ($\text{X}=\text{B},\text{Al},\text{C}$) Honeycomb Lattice: Electronic Properties. 9th International Physics Conference of the Balkan Physical Union, 433 s., İstanbul

Kasalak M.A., Akar H., Kasalak T.F., 2015. Personal İnternet Usage of Employess And Cyberlacking Trends İn Antalya Hotel Businesses, International Journal of Arts And Sciences , 1, .21-21 p., Prag.

Kasalak T.F., Babanlı A., Artunç E., 2014. Rashba Spin-Orbital Etkileşmesi ve Parabolik Sınırlayıcı Potansiyel Olan Durumda Yarımagnetik Yarıiletkenlerde Elektronların Etkin g^* -Çarpanı. 20. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, P100-P100 s., Ankara.

Kasalak T.F., Kasalak G., Oral O., 2013. Üniversite 1.Sınıf Öğrencilerin Sosyal Paylaşım Sitelerini Kullanımına İlişkin Motivasyon Düzeyleri. Akademik Bilişim 2013, , 601-607 s., Antalya.

Sezgin E., Kasalak T.F., 2012. Türkiye'nin İnternet ve Genişbant Verilerinin Analizi. 14. Akademik Bilişim Konferansı, 331-338 s., Uşak.

Kasalak T.F., Babanlı P., Artunç E., 2012. Kuantum Noktalarında Rezonans Tünel Olayı. 29th International Physic Congress, 29, 203 s., Muğla.

Kasalak T.F., Babanlı P., 2011. Parabolik Kuantum Noktalarında Elektronların Enerji Spektrumları. 28th International Physics Congress, 28, 398 s., Muğla.

Kasalak T.F., Sezgin E., Oral O., Yücel F., Akbunar Ş., Uyar R., 2010. Üniversiteye Yeni Başlayan Öğrencilerin İnternete İlişkin Görüşleri (Akdeniz Üniversitesi Örneği). International Conference on New Trends in Education and Their Implications, 528-533 s., Konya.

Sezgin E., Yücel F., Oral O., Kasalak T.F., Akbunar Ş., Uyar R., 2010. Evaluation Of The Basic Computer Courses On Its Necessity And Content (Sample Of

Akdeniz University). 4th International Computer and Instructional Technologies Symposium, 962-966 s., Antalya.

