



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

FİZİK ANABİLİM DALI

**$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 BİLEŞİKLERİNİN
MEKANİKSEL VE ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN AB INITIO
YÖNTEMLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Mehmet Abdurrahman KORKMAZ

DANIŞMAN

Prof. Dr. Engin DELİGÖZ

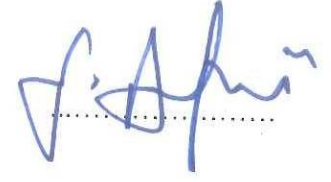
AKSARAY, 2019

Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 162310001 numaralı Yüksek Lisans öğrencisi, **Mehmet Abdurrahman KORKMAZ** tarafından hazırlanan "**In₂Ge₂Te₆, In₂Si₂Te₆, InGeTe₃ ve InSiTe₃ BİLEŞİKLERİNİN MEKANİKSEL VE ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN AB INITIO YÖNTEMLERİ İLE İNCELENMESİ**" adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof. Dr. Engin DELİGÖZ

Aksaray Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.



Üye: Doç. Dr. Hacı ÖZİŞİK

Aksaray Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.



Üye: Doç. Dr. Barış KINACI

İstanbul Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.



Tez Savunma Tarihi: 20/06/2019

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

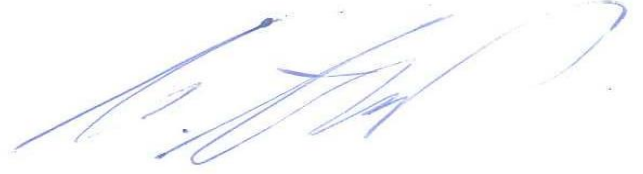
.....
Doç. Dr. Mehmet Ali HINIS
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

DOĞRULUK BEYANI

Yüksek lisans tezi olarak sunduğum bu çalışmayı, akademik kurallara ve bilimsel etik, ahlak ve geleneklere aykırı düşecek bir yol ve yardıma başvurmaksızın yazdığımı, yararlandığım eserlerin kaynakçada gösterilenlerden oluştuğunu, çalışmamda kullandığım verilerin orijinallliğini ve her türlü intihalden uzak olduğunu beyan ederim.

Enstitü tarafından belli bir zamana bağlı olmaksızın, tezimle ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması durumunda, ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçlara katlanacağımı bildiririm.

Mehmet Abdurrahman KORKMAZ



TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmanın gerçekleştirilmesinde değerli bilgilerini benimle paylaşan, kendisine ne zaman danışsam bana kıymetli zamanını ayırıp sabırla ve büyük bir ilgiyle bana faydalı olabilmek için elinden gelenden fazlasını sunan, her sorun yaşadığımda yanına çekinmeden gidebildiğim, güler yüzünü ve samimiyetini benden esirgemeyen ve gelecekteki mesleki hayatımda da bana verdiği değerli bilgilerden faydalanacağımı düşündüğüm çok değerli danışman hocam Prof. Dr. Engin DELİGÖZ' e teşekkürü bir borç biliyor ve şükranlarımı sunuyorum.

Yine çalışmamda konu, kaynak ve yöntem açısından bana sürekli yardımda bulunarak yol gösteren kıymetli Doç. Dr. Hacı ÖZİŞİK' a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Bugüne kadar bana maddi ve manevi her konuda destek vererek sabırlarını esirgemeyen sevgili eşim Fatma KORKMAZ, oğlum Abdullah Necib ve kızım Reyhan'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Mehmet Abdurrahman KORKMAZ
AKSARAY, 2019

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	i
İÇİNDEKİLER.....	ii
ÖZET.....	iv
ABSTRACT	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	vi
ÇİZELGELER DİZİNİ	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	viii
1. GİRİŞ	1
2. TEMEL TEORİK BİLGİLER	3
2.1 Kristal Özellikleri	3
2.2 Mekanik Özellikler	6
2.2.1 Hooke yasası.....	6
2.2.2 Elastik sabitler.....	7
2.2.3 Malzeme deneyleri.....	8
2.2.3.1 Çekme ve basma gerilmeleri	8
2.2.3.2 Çekme mukavemeti.....	10
2.2.4 Bulk modülü	11
2.2.5 Shear modülü	12
2.2.6 Young modülü	12
2.2.7 Poisson oranı.....	13
2.2.8 Çekme özellikleri	13
2.2.8.1 Süneklik	13
2.2.8.2 Akma noktası	14
2.2.8.3 Akma dayanımı.....	15
2.2.8.4 Çekme dayanımı	15
2.2.8.5 Kopma dayanımı.....	16
2.2.8.6 Tokluk	16
2.2.8.7 Yorulma dayanımı.....	16
2.2.9 Sertlik	16
2.2.9.1 Shore sertliği.....	17
2.2.9.2 Brinell sertliği	17
2.2.9.3 Rockwell sertliği	17
2.2.9.4 Vickers sertliği.....	17
2.2.10 B/G oranı	19
2.2.11 Debye sıcaklığı.....	19
2.2.12 Anizotropi faktörü.....	20
3. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ	21
3.1 Born-Openheimer Yaklaşımı	21
3.2 Schrödinger Denklemi	21
3.3 Hartree Metodu	22
3.4 Hartree – Fock (HF) Metodu	22
3.5 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi.....	23
3.6 Kohn – Sham Metodu.....	24
3.7 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı	25
3.8 Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı	26
4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA	27
4.1 Hesaplamalarla İlgili Detaylar	27
4.2 Yapısal Özellikler	27

4.3 Mekanik Özellikler	30
4.4 Elektronik Özellikler	39
4.5 Termodinamik Özellikler	42
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	47
KAYNAKLAR	49
ÖZGEÇMİŞ	54



YÜKSEK LİSANS TEZİ

$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 BİLEŞİKLERİNİN MEKANİKSEL VE ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN AB INITIO YÖNTEMLE İNCELENMESİ

Mehmet Abdurrahman KORKMAZ

**Aksaray Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı**

Danışman: Prof. Dr. Engin DELİGÖZ

ÖZET

Bu tez çalışmasında, $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin trigonal kristal yapısının yapısal, mekaniksel, anizotropi özellikleri, elektronik band yapıları ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisine dayanan ab initio metoduyla incelendi. Değiş tokuş enerjisinin hesabında genelleştirilmiş grandyent yaklaşımı (GGA-PBE) kullanıldı. Bileşiklerin elektronik band yapıları, elastik sabitleri, bulk modülü, Young modülü, shear modülü, Poisson oranları, sertlikleri, Debye sıcaklıkları, ses hızları ve anizotropi faktörleri ilk kez hesaplandı ve yorumlandı. Hesaplanan örgü parametreleri deneysel çalışmalar ile uyum içindedir. Tüm bileşikler yapısal ve mekaniksel yönden kararlılık göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 , InSiTe_3 , ab initio, Mekaniksel özellikler, Anizotropi, Band yapısı

Mayıs, 2019; 54 sayfa

M.Sc. THESIS

**INVESTIGATION OF MECHANICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES
OF $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 AND InSiTe_3 COMPOUNDS BY AB INITIO
METHOD**

Mehmet Abdurrahman KORKMAZ

**Aksaray University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics**

Supervisor: Prof. Dr. Engin DELİGÖZ

ABSTRACT

In study of this thesis, the structural, mechanical, anisotropy properties, electronic band structure and thermodynamic properties of $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 and InSiTe_3 compounds in trigonal crystal structure have been investigated using by ab initio method based on density functional theory. The exchange correlation energy were described the generalized gradient approximation (GGA-PBE) scheme. The electronic band structures, elastic constants, bulk modulus, Young's modulus, shear modulus, Poisson's ratios, hardness, Debye temperatures, sound velocities and anisotropy factors of these compounds have been calculated and commented for the first time. The calculated lattice parameters are in agreement with the available experimental data. The calculated results have shown that these compounds are both structural and mechanically stable in considered structure.

Keywords: $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 , InSiTe_3 , ab initio, Mechanical properties, Anisotropy, Band structure

May, 2019; 54 pages

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. a) Katı küre birim hücre gösterimi, b) Küçük küre birim hücre gösterimi, c) Atomların oluşturduğu bir hacim ve bu hacmin bir köşesinde birim hücrenin gösterimi.	4
Şekil 2.2. Farklı kristal sistemlerinin birim hücre geometrileri ve örgü parametreleri arasındaki ilişki.	5
Şekil 2.3. a) Çekme (Poisson), b) Basma, c) Kesme (Shear), d) Burulma gösterimi	10
Şekil 2.4. Çekme mukavemeti deneyi için hazırlanmış çubuk	11
Şekil 2.5. Kopana dek yüklenmiş sünek ve gevrek metallere ait çekme gerilmesi- birim şekil değişimi eğrilerinin şematik gösterimi	14
Şekil 2.6. Akma sınırı belli olan gerilme – uzama eğrisi.....	15
Şekil 2.7. Brinell, Vickers ve Rockwell sertliği ölçme yöntemleri	18
Şekil 4.1. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşikleri için kristal yapı.....	29
Şekil 4.2. InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için kristal yapı.....	29
Şekil 4.3. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiklerinin Young modülü, shear modülü, Poisson oranı ve sıkışabilirliğinin üç boyutta gösterimi	37
Şekil 4.4. InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin Young modülü, shear modülü, Poisson oranı ve sıkışabilirliğinin üç boyutta gösterimi	38
Şekil 4.5. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu.....	40
Şekil 4.6. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu.....	40
Şekil 4.7. InGeTe_3 bileşiğinin elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu	41
Şekil 4.8. InSiTe_3 bileşiğinin elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu	41
Şekil 4.9. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbest enerji ve termal genleşme katsayısının sıcaklıkla değişimi.....	43
Şekil 4.10. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbest enerji ve termal genleşme katsayısının sıcaklıkla değişimi.....	44
Şekil 4.11. InGeTe_3 bileşiğinin ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbest enerji ve termal genleşme katsayısının sıcaklıkla değişimi.....	45
Şekil 4.12. InGeTe_3 bileşiğinin ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbestenerji ve termal genleşme katsayısının sıcaklıkla değişimi.....	46

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiği için hesaplanan atomik kordinatlar	28
Çizelge 4.2. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiği için hesaplanan atomik kordinatlar	28
Çizelge 4.3. InGeTe_3 bileşiği için hesaplanan atomik kordinatlar	28
Çizelge 4.4. InSiTe_3 bileşiği için hesaplanan atomik kordinatlar	28
Çizelge 4.5. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan örgü sabitleri (a , c , Å), hacim (V , Å ³ /f.ü.), yoğunluk (ρ , g/cm ³) ve oluşum enerjisi (ΔH , eV/atom) ve diğer çalışmalar	30
Çizelge 4.6. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 için hesaplanan elastik sabitler (C_{ij} , GPa)	32
Çizelge 4.7. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 için hesaplanan bulk modülü (B , GPa), shear modülü (G , GPa), Young modülü (E , GPa), Poisson oranı (ν), Debye sıcaklığı (Θ_D , K), boyuna ses hızı (ϑ_l , m/s), enine ses hızı (ϑ_t , m/s), ortalama ses hızı (ϑ_m , m/s) ve sertlik (H , GPa)	34
Çizelge 4.8. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan A_1 , A_2 (anizotropi değerleri), A_B (bulk), A_G (shear) ve A^U (evrensel anizotropi indeksi) değerleri	35
Çizelge 4.9. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için Young modülü (E , GPa), shear modülü (G , GPa), Poisson oranı (ν) ve sıkışabilirliğin (β , TPa ⁻¹) maksimum ve minimum değerleri	36
Çizelge 4.10. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan yasak enerji aralıkları (E_g , eV)	39
Çizelge 4.11. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan sıfır nokta enerjileri	42

SİMGELER VE KISALTMALAR

A	Anizotropi
A_B	Bulk modülünün elastik anizotropi yüzdesi
A_G	Shear modülünün elastik anizotropi yüzdesi
A^U	Evrensel anizotropi indeksi
B	Bulk modülü
B_R	Bulk modülünün alt sınırı
B_V	Bulk modülünün üst sınırı
C_{ij}	Elastik sabitler
E	Young modülü
G	Shear modülü
G_R	Shear modülünün alt sınırı
G_V	Shear modülünün üst sınırı
H	Sertlik
k	Boltzman sabiti
ϑ_l	Boyuna ses hızı
ϑ_m	Ortalama ses hızı
ϑ_t	Enine ses hızı
V	Hacim
ρ	Yoğunluk
v	Poisson oranı
θ_D	Debye sıcaklığı
DFT	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
ELATE	Elastic Tensor Analysis
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
PAW	İzdüşümsel Birleştirilmiş Dalga
PBE	Perdew Burke Ernzerhof
MedeA	Materials Design Analysis
VASP	Vienna Ab initio Simulation Package

1. GİRİŞ

Gelişen teknoloji ile beraber yarıiletkenler günlük hayatımıza her geçen gün daha fazla girmekte ve askeri teknolojiden uzay teknolojisine, sağlık teknolojisinden nano teknolojiye kadar birçok farklı alanda kullanılmaktadır. Küçük band aralığına, düşük termal iletkenliğe, yüksek elektriksel iletkenliğe ve Seebeck katsayısına sahip yarıiletken malzemeler ise uygun termoelektrik özelliklerinden dolayı teknolojik yönden ön plana çıkmaktadır. Termoelektrik malzemeler atık ısıyı elektrik enerjisine dönüştürürken sera gazı salınımını kısıtlar. Bu tip malzemeler güneş ışığı altında oldukça güçlü birer soğurucu olduklarından dolayı çevreyi kirletmeden güneş enerjisinden doğrudan elektrik üreten fotovoltaiik cihazların üretiminde de çok büyük bir öneme sahiptirler. Bunlardan dolayı birçok teknolojik ve endüstriyel alanlarda farklı uygulamalara sahiptirler. Son yıllarda bu tip malzemelerin farklı fiziksel özellikleri üzerine pek çok deneysel ve teorik çalışma yapılmış ve bilim dünyasının ilgi odağı olmaya başlamıştır.

Termoelektrik uygulamalar yönüyle ön plana çıkan malzeme gruplarından birisi de $X_2Y_2Z_6$ [1-7] şeklindeki bileşiklerdir. Bu grubun bir üyesi olan $Cr_2Si_2Te_6$ bileşiği trigonal yapıda (uzay grubu $R\bar{3}$, No:146) Ouyard [1] ve ark. tarafından sentezlenmiştir. Marsh [2] tarafından aynı bileşiğin sentezi trigonal kristal yapısında $R\bar{3}$ (No:148) uzay grubunda yapılmış ve bileşiğin kristal özelliklerini belirlemiştir. Carteaux ve ark. [3] ise bu grubun başka bir üyesi olan $Cr_2Ge_2Te_6$ bileşiğinin sentezini $Cr_2Si_2Te_6$ bileşiği ile aynı yapıda (uzay grubu $R\bar{3}$, No:148) yapmış ve $Cr_2Ge_2Te_6$ bileşiğinin manyetik özelliklerini ve elektronik yapısını araştırmışlardır. $Cr_2Ge_2Te_6$ bileşiğinin ferromanyetik özellik gösterdiğini rapor etmişlerdir. Yang ve ark. [4] $Cr_2Ge_2Te_6$ bileşiğinin anizotropik termoelektrik özelliklerini incelemiş ve bu bileşiğin yüksek termoelektrik performans gösterdiğini rapor etmişlerdir. $Cr_2Ge_2Te_6$ bileşiğinin elektriksel özellikleri, termoelektrik özelliklerin sıcaklıkla değişimi ve elektronik band yapısı Tang ve ark. [5] tarafından araştırmıştır. Bu çalışmada $Cr_2Ge_2Te_6$ bileşiğinin düşük termal iletkenliğe sahip olduğu gösterilmiştir. Yeni bir çalışmada ise Liu ve Petrovic [6] tarafından $Cr_2Si_2Te_6$ ve $Cr_2Ge_2Te_6$ bileşiklerinin ferromanyetik ve paramanyetik durumlarının anizotropik manyetik entropi değişimleri incelenmiştir. Son zamanlarda, $In_2Ge_2Te_6$ bileşiği $Cr_2Si_2Te_6$ ve $Cr_2Ge_2Te_6$ bileşikleriyle aynı yapıda

(trigonal, uzay grubu $R\bar{3}$, No:148) Robin Lefevre ve ark. [7] tarafından sentezlenmiştir. Bu çalışmada ayrıca $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, InSiTe_2 , $\text{Cr}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ ve $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiklerinin Seebeck katsayısı, güç faktörü, direnç ve termal iletkenlik gibi transport özellikleri araştırılmış ve tüm bileşiklerin p tipi yarıiletken davranışı sergiledikleri ve düşük termal iletkenlikle iyi bir termoelektrik özellik gösterdikleri rapor edilmiştir.

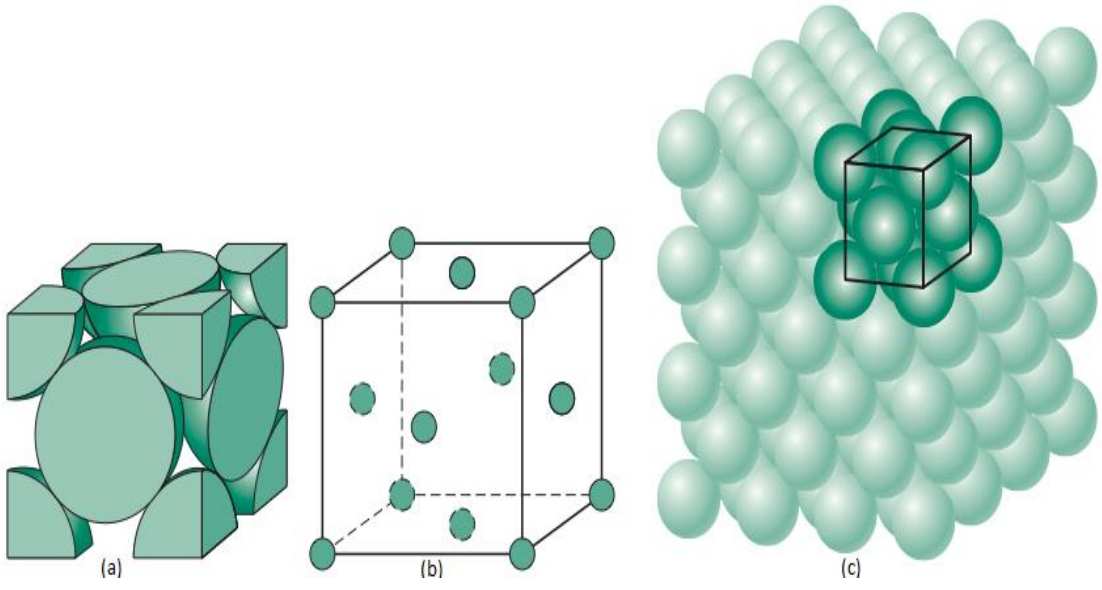
Bu tez çalışmasında $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin trigonal kristal yapısının yapısal özellikleri, elastik sabitleri, bazı mekaniksel ve anizotropi özellikleri, elektronik band yapıları, termodinamik özellikleri ab initio yöntemi kullanılarak araştırılmıştır. Bileşiklerin termoelektrik uygulamalarda sağlıklı kullanabilmesi için elektronik ve mekaniksel özelliklerinin ayrıntılı incelenmesi ve kararlılıklarının test edilmesi gerekmektedir. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerin birçok özelliğinin bu tez kapsamında ilk kez incelenecek olması, sonuçların termoelektrik malzemelerin geliştirilmesinde yeni bir bilimsel kapı açacağı gibi, aynı zamanda da bu malzemelerin daha geniş uygulama alanlarında kullanılabilmesine de olanak sağlayacağını beklemekteyiz. İncelediğimiz özellikler gelecekte yapılacak olan deneysel ve teorik çalışmalar için aynı zamanda bir kaynak teşkil edecektir.

2. TEMEL TEORİK BİLGİLER

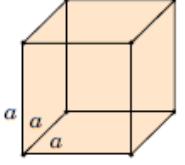
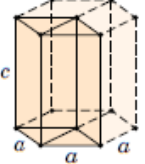
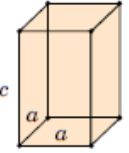
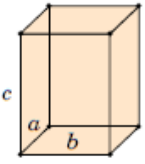
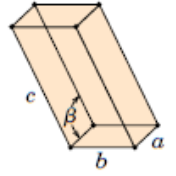
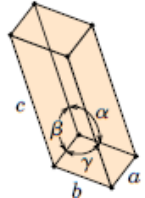
2.1 Kristal Özellikler

Katı malzemeler, iyonların ve atomların oluşturdıkları düzene göre sınıflandırılır. Kristal malzemede periyodik düzen mevcuttur. Atomik ölçekte uzun mesafelerde tekrar eden düzenli bir yapı oluştururlar. Katılaşma sırasında atomlar, en yakın komşu atomlara bağlanırken üç boyutta tekrar eden bir düzen içinde yerlerini alırlar. Bu oluşan yapıya kristal yapı veya kristal örgüsü adı verilir [8]. Normal katılaşma koşullarında, bütün metallerde, seramik malzemelerin çoğunda ve polimerlerin bir kısmında kristal yapı oluşur. Kristalleşmeyen malzemeler, genellikle atomik düzen bulunmaz. Kristal yapılar anlatılırken iyonların veya atomların, belirli çaplara sahip katı küreler şeklinde olduğu öngörülür. Katı küre atom modeli olarak adlandırılan bu modelde, en yakın komşuluğa sahip olan atomları temsil eden küreler birbiriyle temas halinde bulunur. Malzemelerin kristal yapılarına, yani iyonların, atomların ya da moleküllerin üç boyutlu olarak meydana getirdikleri düzene bağlıdır. Metaller de bulunan nispeten daha sade olanlardan, bazı polimer ve seramiklerde bundan son derece karmaşık olanlara kadar, uzun aralıkta düzene sahip çok sayıda farklı kristal yapı mevcuttur.

Kristal yapının tekrarlanan en küçük hacimsel birimine birim hücre denir [8]. Şekil 2.1' de yaygın olarak kullanılan bir atom düzenine ait katı küre modelidir. Kristal örgüde, atomların üç boyutlu dizilişlerinde bulundukları yerlere de örgü noktası denir. Şekil 2.2' de kübik, hekzagonal, tetragonal, rombohedral, ortorombik, monoklinik ve triklinik olmak üzere yedi adet kristal sistemi ve örgü parametreleri arasındaki ilişki gösterilmiştir.



Şekil 2.1. a) Katı küre birim hücre gösterimi, b) Küçük küre birim hücre gösterimi, c) Atomların oluşturduğu bir hacim ve bu hacmin bir köşesinde birim hücrenin gösterimi [9].

KRİSTAL SİSTEM	KENAR	AÇI	BİRİM HÜCRE GEOMETRİSİ
KÜBİK	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
HEKZAGONAL	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
TETRAGONAL	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
ROMBOHEDRAL (TRİGONAL)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
ORTOROMBİK	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
MONOKLİNİK	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
TRİKLİNİK	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

Şekil 2.2. Farklı kristal sistemlerinin birim hücre geometrileri ve örgü parametreleri arasındaki ilişki [9].

2.2 Mekanik Özellikler

Katı cisimlerin uygulanan kuvvete karşı gösterdiği davranışa mekanik özellik denir. Çeşitli zorlanmaların etkisiyle malzemede oluşan şekil değişiklikleri ve gerilmeler ölçüm ve gözlemle tespit edilebilir. Malzemelerin iç yapı özellikleri ve kullanma ortamının bu özellikler üzerindeki etkilerini karşılaştırabilmek için önce en çok kullanılan bazı terimlerinin tanımlanması gerekir.

2.2.1 Hooke yasası

Bir malzemenin davranışları incelenirken parça boyutlarından soyutlamak için kuvvet yerine kuvvet şiddeti anlamına gelen ‘’Zor’’, boyutlarda oluşan değişimler yerine ise ‘’Zorlanma’’ kullanılır. Kısaca zor birim alana etkiyen kuvvet, zorlanma ise şeklin birim boydaki değişimdir.

Zor ve zorlanma yeteri kadar küçük olduğu zaman her ikisi birbiriyle doğru orantılıdır. Bu orantıya esneklik modülü (E) denir [10] ve

$$\sigma = E\epsilon \quad (2.1)$$

şeklinde ifade edilir. Belirli şartlar altında zor ve zorlanma oranına Hooke yasası denir. Esneklik modülü artarsa malzemenin kalıcı şekil değişimi olmadan dayanabileceği kuvvet de artar. Ürün tasarımında önemli parametrelerden biridir. Malzemeye uygulanan zor sonunda cisimde hiçbir değişiklik olmuyorsa bu tür cisimlere rijit cisimler denir. Malzemeye uygulanan zor malzemede bir değişikliğe neden oluyorsa ve malzemede deformeye neden olup, zor etkisi kalktıktan sonra malzeme eski haline gelmiyorsa bu tür cisimlere plastik malzeme denir. Malzeme üzerine uygulanan zor malzemede bir değişikliğe neden oluyorsa ama zor ortadan kalktıktan sonra malzeme eski haline geliyorsa bu tür malzemelere esnek malzeme denir.

2.2.2 Elastik sabitler

Malzemelerin elastik özelliklerini incelemek için Hooke yasası tensör şeklinde

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl=1,6} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2.2)$$

ifade edilir [11].

Burada C_{ijkl} elastik sabit şeklinde tanımlanır. Elastik sabit zor tensörünün 9 bileşeni ile ε_{kl} zorlanma tensörünün 9 bileşeni arasındaki ilişkiyi kuran 81 elemanlı dördüncü mertebeden bir tensördür. ($i, j = 1, 2, 3$ $k, l = 1, 2, 3$)

Zor ve zorlanma bileşenlerinin simetrisinden dolayı C_{ijkl} tensörü yerine, C_{ij} şeklinde gösterilen tensör ifadesi elde edilebilir. Böylece 81 bileşenli C_{ijkl} yerine 36 bağımsız elastik sabit elde edilir. Ayrıca enerji işlemleri sonucunda elastik sabitlerin sayısı 36'dan 21'e indirgenmiş olur [12,13] ve

$$\sigma_i = C_{ij} \varepsilon_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6) \quad (2.3)$$

şeklinde ifade edilir.

Örneğin, kübik bir kristal yapısı için bağımsız elastik sabit sayısı (C_{11} , C_{12} , C_{44}) üç iken, trigonal kristal yapısında uzay grubu 148 için 7, uzay grubu 162 için ise 6'dır. Her iki uzay grubu için elastik sabitlerin matris gösterimi denklem 2.4 ve 2.5'te verilmiştir [14];

$$C_{trig} (In_2Ge_2Te_6, In_2Si_2Te_6) = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & -C_{15} & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & -C_{15} \\ & & & & C_{44} & C_{14} \\ & & & & & C_{66} \end{vmatrix} \quad (2.4)$$

$$C_{trig} (InGeTe_3, InSiTe_3) = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & C_{14} \\ & & & & & C_{66} \end{vmatrix} \quad (2.5)$$

Bir kristalin mekanik yönden kararlı olması için Born kararlılık [15] kriterlerini sağlamalıdır. Trigonal kristal yapısı için mekaniksel kararlılık kriterleri:

$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiklerinin trigonal kristal yapısı ($\bar{R}3$, No: 148) için;

$$C_{11} > |C_{12}|,$$

$$C_{44} > 0,$$

$$2C_{13}^2 < C_{33}(C_{11} + C_{12}),$$

$$2(C_{14}^2 + C_{15}^2) < C_{44}(C_{11} - C_{12}). \quad (2.6)$$

InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin trigonal kristal yapısı ($\bar{P}31m$, No: 162) için;

$$C_{11} > |C_{12}|$$

$$C_{11} - |C_{12}| > 0,$$

$$(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2 > 0,$$

$$(C_{11} - C_{12})C_{44} - 2C_{14}^2 > 0. \quad (2.7)$$

şeklinde ifade edilir.

2.2.3 Malzeme deneyleri

Her malzemenin kullanılacağı alanda yeterli olacak derecede özelliklere sahip olması beklenir. Malzemenin kendisinden beklenen bir hizmete uygun olup olmayacağını belirleyen en önemli kriter genellikle mekanik özelliklerdir. Bu özellikler gerek üretim, gerekse kullanım sırasında çeşitli deneyler ile belirlenir.

2.2.3.1 Çekme ve basma gerilmeleri

Malzemeye bir dış kuvvet uygulandığında, malzeme için bu dış kuvveti dengeleyen bir karşı kuvvet oluşur. Denge halinde birim yüzey alana düşen kuvvete gerilme (zor) (σ) denir [16].

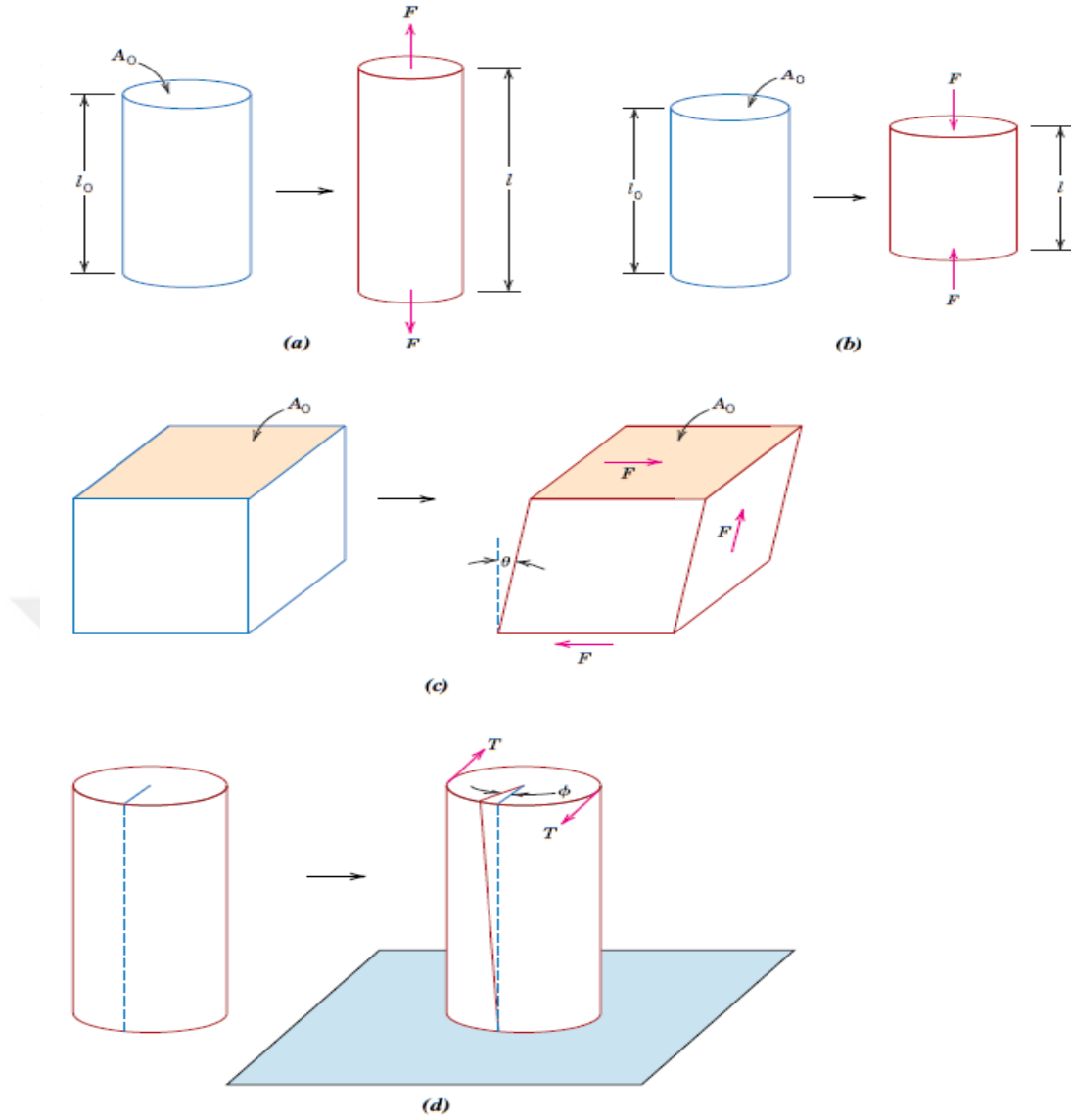
$$\sigma = \frac{F}{A_0} \quad (2.8)$$

şeklinde ifade edilir.

Kuvvetin uygulama yönüne göre gerilme ve çekme gerilmesi (σ_c), basma gerilmesi (σ_b), veya kesme gerilmesi olabilir. Gerilme etkisinde kalan malzemenin boyutlarında değişim olur. Malzeme boyutlarında birim uzunlukta meydana gelen deformasyon, uzama olarak (zorlanma) (ϵ) ile ifade edilir [17]. Malzemede çekme gerilmesi söz konusu ise uzama pozitifdir. Bu durumda uzama (ϵ_c) ile ifade edilir. Eğer basma gerilmesi söz konusu ise bu kez malzeme boyutlarında negatif uzama yani kısılma meydana gelir. İşareti göz önüne alınmaksızın boy kısılması da (ϵ_b) olarak ifade edilir. Kesme gerilmesi etkisinde kalan bir malzeme de meydana gelen uzama da (ϵ_s yada G) olarak gösterilir. Gerilme sonucu meydana gelen uzama biçimleri Şekil 2.3 de görülmektedir. Çekme ve basma gerilimleri sonucu ortaya çıkan uzama orijinal uzunluğun yüzdesi olarak ifade edilir. Uzama elastik yada plastik olabilir. Bu durumda

$$\epsilon = \frac{l-l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0} \quad (2.9)$$

şeklinde ifade edilir.



Şekil 2.3. a) Çekme (Poisson), b) Basma, c) Kesme (Shear), d) Burulma gösterimi [9].

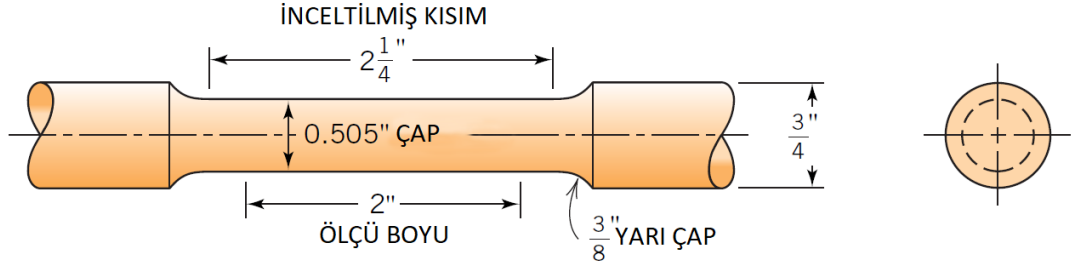
Kesme (makaslama yada shear modülü) geriliminde uzama, makaslama açısının tanjantı ile ifade edilir.

$$\epsilon_s = \tan \theta \quad (2.10)$$

2.2.3.2 Çekme mukavemeti

Çekme mukavemetinin belirlenmesi için özel olarak hazırlanmış deney çubuğu Şekil 2.4’ de gösterilmiştir. Bu çubuklar çekme deneyi makinesinin çenelerinde bağlanır ve eksenel bir yük yavaş yavaş artırılarak uygulanır. Kopmanın meydana geldiği andaki

yük aletin göstergesinden okunur. Numunenin orijinal kesit alanı bilindiğinden göstergeden okunan yük numunenin kesit alanına bölünerek gerilme miktarı hesaplanır [9].



Şekil 2.4. Çekme mukavemeti deneyi için hazırlanmış çubuk [9].

Çekme deneyi ile deney örneğinin, akma dayanımı, orantı sınırı, esneklik sınırı, çekme dayanımı, kopma dayanımı, kesit daralması, uzama ve akma noktası tayin edilebilir. Numunenin orijinal haldeki uzunluğu belirten noktalar arasındaki boy ölçülmek suretiyle plastik deformasyon da hesaba katılmış olur. Kopma uzaması, örnek boyunca oluşan toplam plastik boyut uzamasının ilk boyut uzunluğuna oranı olarak verilir.

2.2.4 Bulk modülü

Bir malzemenin üzerine basınç uygulandığında, hacmindeki değişim ile uygulanan basınç arasında oluşan orana bulk (hacim) modülü denir [18] ve aşağıdaki denklemle ifade edilir:

$$B = -\frac{F/A}{\Delta V/V} = -\frac{\Delta P}{\Delta V/V} \quad (2.11)$$

Bulk modülünün tersi ise sıkışabilirlik şeklinde (β) tanımlanır. Polikristal boyunca düzgün (uniform) zorlama altında Voigt (V) ve Reuss (R) yaklaşımına göre bulk modüllerinin sınır değerleri trigonal kristal yapısı için aşağıdaki gibi ifade edilir. [14, 19, 20].

$$B_V = [2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}]/9 \quad (2.12)$$

$$B_R = [(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2]/[C_{11} + C_{12} - 4C_{13} + 2C_{33}] \quad (2.13)$$

Hill yaklaşımına [21] göre 2.12 ve 2.13' de verilen denklemlerin ortalaması;

$$B = \frac{B_R + B_V}{2} \quad (2.14)$$

şeklinde ifade edilir.

2.2.5 Shear modülü

Shear modülü, makaslama zoruna ve tersinir deformasyonlara karşı gösterilen mukavemetin ölçüsüdür [20] ve

$$G = \frac{F/A}{\Delta_x/L} \quad (2.15)$$

şeklinde ifade edilir.

Polikristal boyunca düzgün (uniform) zorlama altında Voigt (V) ve Reuss (R) yaklaşımına göre Shear modüllerinin sınır değerleri trigonal kristal yapısı için aşağıdaki gibi ifade edilir. [14, 19, 20].

$$G_V = (7C_{11} - 5C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13} + 12C_{44})/30 \quad (2.16)$$

$$G_R = \frac{15}{2} \left[\frac{2C_{11} + 2C_{12} + 4C_{13} + C_{33}}{C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2} + \frac{3C_{11} - 3C_{12} + 6C_{44}}{C_{44}(C_{11} - C_{12}) - 2C_{14}^2} \right]^{-1} \quad (2.17)$$

Shear modülünün Hill yaklaşımına [21] göre ortalaması;

$$G = \frac{G_R + G_V}{2} \quad (2.18)$$

şeklinde verilir.

2.2.6 Young modülü

Young modülü, birim yüzeye etki eden kuvvetin, bağlı şekil değiştirme oranıdır ve

$$E = \frac{F/A_0}{\Delta_l/l_0} \quad (2.19)$$

şeklinde ifade edilir [21].

Young modülü büyüdükçe malzeme daha rijit hale gelir yani gerilme ile daha az şekil değişimi gösterir. Küçüldükçe daha elastik davranır. Young modülü, bulk modülü ve shear modülünden faydalanılarak [21]:

$$E = \frac{9GB}{G+3B} \quad (2.20)$$

şeklinde ifade edilir.

2.2.7 Poisson oranı

Elastik şekil değişimi sırasında malzeme hacminde değişiklik olur (plastik deformasyonda hacim sabit kalır). Çekme yönünde malzeme uzarken buna dik yönde kışılma gerçekleşir. Aradaki oran Poisson oranı şeklinde tanılanır. Yani, Poisson oranı (ν), dik doğrultudaki kuvvet ile aynı doğrultuda ki değişikliğe denir ve

$$\frac{\Delta l}{l_0} = -\nu \varepsilon \quad (2.21)$$

şeklinde ifade edilir [22].

Poisson oranı metaller için 0.28 ile 0.32 arasında değişir ve genelde 0.3 tür. Plastik şekil değişiminde hacim sabit kalır ve poisson oranı 0.5 değeri alır. Poisson oranı, bulk modülü ve shear modülünden faydalanılarak [22];

$$\nu = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (2.22)$$

denklemini ile hesaplanabilir.

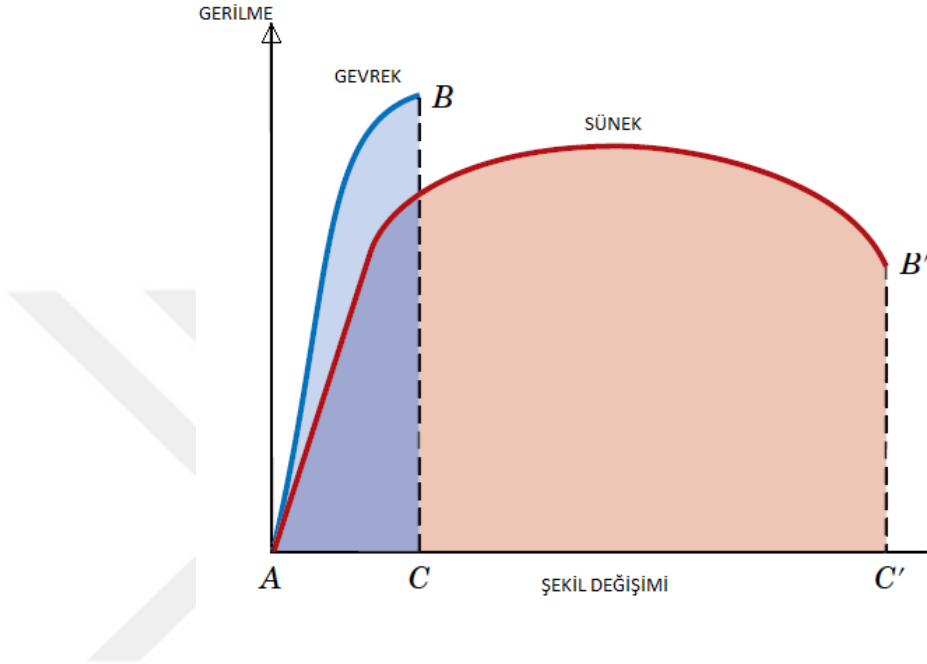
2.2.8 Çekme özellikleri

2.2.8.1 Süneklik

Süneklik, çekme gerilmesi altındaki malzemenin kırılmadan önceki kalıcı (plastik) deformasyon yapabilme özelliğidir [9]. Çok az veya hiç plastik deformasyon göstermeye malzemeler gevrek olarak adlandırılır. Sünekliğin ölçüsü olarak genellikle yüzde çekme uzaması (%UZ) veya yüzde kesit daralması kullanılır ve denklem 2.23' deki gibi ifade edilir.

$$\%UZ = \left(\frac{l_k - l_0}{l_0} \right) \times 100 \quad (2.23)$$

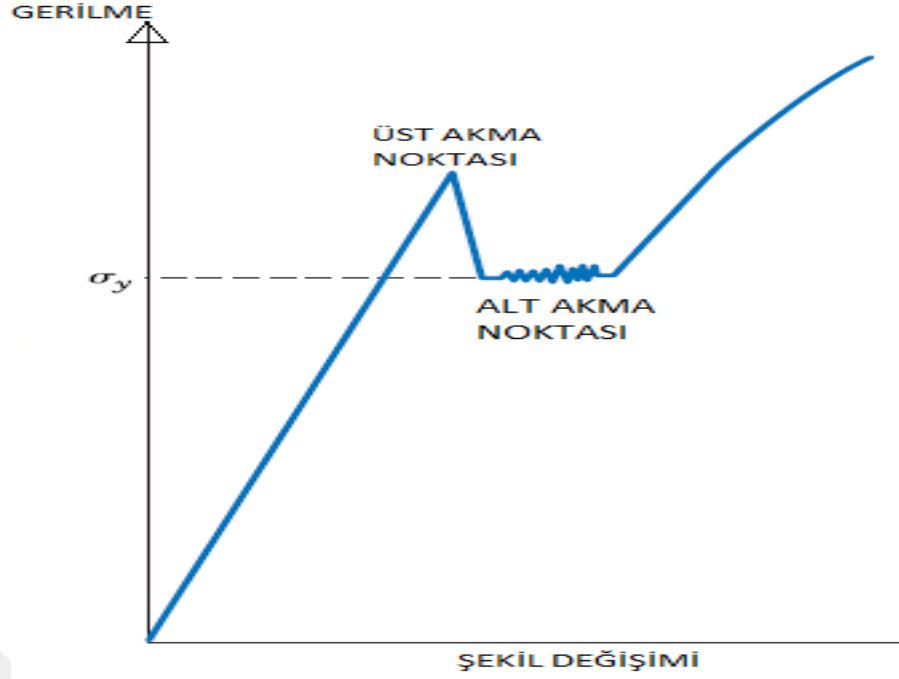
Ancak çekme sonucu meydana gelen uzama üniform olmayıp kopma noktasında yoğunlaşır. Bu nedenle süneklik ölçüsü olarak daha çok yüzde kesit daralması tercih edilir. Zor ve zorlanma eğrisi Şekil 2.5’ de gösterilmektedir.



Şekil 2.5. Kopana dek yüklenmiş sünek ve gevrek metallere ait çekme gerilmesi-birim şekil değişimi eğrilerinin şematik gösterimi [9].

2.2.8.2 Akma noktası

Malzemenin üzerindeki yük esneklik sınırını aşınca öyle bir gerilmeye gelinebilir ki, burada yük artmaksızın malzeme uzamaya devam eder ve hatta yükte biraz azalma olabilir. Erişilen bu gerilmeye akma noktası denir [23]. Gerilmenin ani olarak ilk düşme gösterdiği nokta üst akma noktası ve tekrar yükselmeye başladığı nokta da alt akma noktası denir. Akma sınırı belli olan gerilme - uzama eğrisi Şekil 2.6’ da gösterilmektedir. Bu olay az karbonlu ve düşük alaşımlı çeliklerde net olarak görülebilir.



Şekil 2.6. Akma sınırı belli olan gerilme – uzama eğrisi [9].

2.2.8.3 Akma dayanımı

Yüksek dayanımlı metaller belirli bir akma noktası göstermezler. Ama malzemenin sürekli bir deformasyona uğramaksızın yüklenebilecek maksimum gerilmenin bilinmesi istenir. Bu takdirde maksimum kullanılabilen gerilme olarak akma dayanımı kabul edilebilir. Bu da malzemenin gerilim uzama diyagramında ofset denen belirli miktarda bir kalıcı uzama göstermeye başladığı andaki gerilim olarak tanımlanır. Akma dayanımı için kabul edilecek ofset miktarı malzemenin özelliklerinde belirtilir. Ofset miktarı olarak en çok % 0.2 kalıcı uzama kullanılmaktadır [23].

2.2.8.4 Çekme dayanımı

Çekme dayanımı malzemenin kopmadan önce dayanabildiği, orijinal kesit alanına göre hesaplanan en yüksek gerilmedir. Gerilme uzama eğrisinin en yüksek noktasıdır. Kırılgan malzeme çekme dayanımı ve kopma dayanımı aynıdır. Sünek malzemede ise en yüksek çekme dayanımından sonra malzeme daha uzamaya devam eder ve orijinal kesit alanına göre hesaplanan gerilim azalır [24].

2.2.8.5 Kopma dayanımı

Kopma anındaki gerilme çekme dayanımıdır. Sünnek malzeme için çekme dayanımına kadar olan deformasyon örnek çubuğu boyunca üniformdur. Maksimum çekme gerilmesine gelince, örnekte bölgesel deformasyon olur ve yük taşıyan kesit alanı küçüldükçe yük azalır. Çekme sonucu oluşan deformasyon inform değildir ve kopma noktasında maksimumdur. Bu nedenle orijinal kesit alanına göre hesaplanan kopma gerilmesi sünnek malzeme de daima çekme dayanımından küçüktür. Kırılgan malzeme için çekme dayanımı ile kopma dayanımı kesişirler [25].

2.2.8.6 Tokluk

Metal bileşiğin kopmadan enerji emme yeteneğidir. Hesaplanırken gerilim-uzama eğrisinin altında kalan toplam alana eşittir. Metal bileşiğin hem elastik hem de plastik olarak toplam enerjisi emme kapasitesinin bir ölçüsüdür. Tokluk dayının ile sünekliliğin birleştirilmiş özelliğini belirleyen bir ölçüdür [26].

2.2.8.7 Yorulma dayanımı

Malzemeler işletme sırasında genellikle değişken yük etkisinde kalırlar. Sıcaklık sık sık değişirse, yorulma olayına termal genişleme ve büzölmelerin neden olduđu termal yorulma da katılır. Korozi ortamlarda yorulma olayının etkisi daha şiddetli kendini gösterir. Bu durumlarda malzeme daha kısa sürede korozyona uğrar buna korozyonlu yorulma denir. Yorulma etkisinde kalan bir malzeme de küçük bir çatlaklık aniden kopmaya neden olabilir. Bu sebeple yaşamsal tehlike taşıyan parçalar sık sık ultrasonik ve benzerleri kontrollere tabii tutularak mikro çatlakların olup olmadığı araştırılır [27].

2.2.9 Sertlik

Sertlik, bileşiğin kendisine batmak isteyen bir cisme karşı gösterdiği dirence denir. Her ne kadar temel bir bilgi vermez ise de, çabuk uygulanan, basit ve tahrip siz bir deney olduğundan endüstride malzemelerin karşılaştırılması amacı ile çok kullanılır.

Sertlik deneylerinde kesme ve aşınmaya dayanım çizik sertliği olarak minerolojide kullanılır. Mohs sertlik çizelgesine göre çeşitli mineraller birbirini çizme yeteneğine göre sıralanır.

Elastik sertlik (shore skleroskop sertliđi); silindirik elmas uçlu bir çekik ve sert çelik bilye belirli bir yükseklikten kendi ağırlığı ile malzeme üzerine düşürölür. Düşme sonunda geri zıplama yüksekliđi elastik sertliđin bir ölçüsü olarak kabul edilir [25]. Yumuşak malzemenin esneklik sınırı düşüktür bu nedenle daha çok enerji emer ve geri zıplama yüksekliđi daha az olur.

2.2.9.1 Shore sertliđi

20 gram ağırlığında bir bilye bir boru içerisinde muayene yapılacak malzeme üzerine shore sertliđi tespiti için düşürölür. Burada düşüş enerjisinin küçük bir kısmı malzeme üzerinde şekil deđiştirmeye harcanır. Sert malzemelerde bilyenin bırakmış olduđu iz küçüktür. Enerjinin geri kalan kısmı bilyenin yukarı doğru geri sıçramasına neden olur. Geri sıçrama yüksekliđi malzemenin sertliđinin bir ölçüsüdür. Shore sertliđini ölçmek için kullanılan alete skleroskop denir [25].

2.2.9.2 Brinell sertliđi

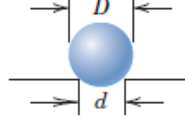
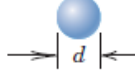
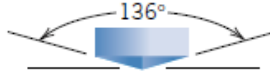
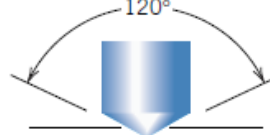
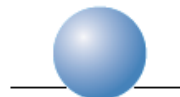
Brinell sertliđi, standart ölçülerde krom çeliğinden yapılmış bir bilye sertliđi ölçmek için metal yüzeyine belli bir süre bastırılarak kuvvet uygulanır. Bilyenin yüzeyde açmış olduđu izin ağız çapı ölçölür. Uygulanmış olan yük bu izin yüzey alanına bölünerek bulunur [25].

2.2.9.3 Rockwell sertliđi

Bu yöntemde sertlik derecesi doğrudan metal üzerinde oluşan izin derinliđi ölçölerek bulunur. Çeşitli batıcı uç ve yüklere göre çeşitli Rockwel sertlik derecesi sklaları hazırlanmıştır. Rockwell sertliđi verilirken kullanılan malzemelerin sklasıda beraberinde belirtilmelidir [25].

2.2.9.4 Vickers sertliđi

Vickers sertliđi, elmastan yapılmış, karşılıklı yüzeyleri arasında 136 derecelik bir açı bulunan kare kenarlı bir piramit uç kullanılarak ölçölün sertlik derecesidir. Vickers yöntemiyle en sert malzemelerin sertlik derecesi ölçölülebilir. Batıcı ucun metal yüzeyi üzerinde bıraktığı kare biçimli izin köşegen okunur. Yük/iz oranının yapılarak Vickers sertlik derecesi bulunur [25].

YÖNTEM	BATICI UÇ	BATICI UÇ ŞEKLİ		YÜK	SERTLİK DEĞERİNE AİT FORMÜL
		YAN GÖRÜNÜŞ	ÜST GÖRÜNÜŞ		
Brinell	10 mm çaplı küresel çelik veya tungsten karbür			P	$HB = \frac{2P}{\pi D[D - \sqrt{D^2 - d^2}]}$
Vickers	Elmas piramit			P	$HV = 1.854P/d_1^2$
Rockwell	Elmas koni: 1.588, 3.175, 6.35 ve 12.7 mm çaplı çelik küre	 	 	$\left. \begin{matrix} 60 \text{ kg} \\ 100 \text{ kg} \\ 150 \text{ kg} \end{matrix} \right\} \text{Rockwell}$ $\left. \begin{matrix} 15 \text{ kg} \\ 30 \text{ kg} \\ 45 \text{ kg} \end{matrix} \right\} \text{Rockwell-Yüzey}$	

Şekil 2.7. Brinell, Vickers ve Rockwell sertliği ölçme yöntemleri [28].

2.2.10 B/G oranı

Malzemelerde sertlik açısından B/G oranı önemlidir. Malzemenin Pugh kriterlerine göre B/G oranı 1.75' ten küçükse kırılğan, büyükse esnek olması beklenir [29,30].

2.2.11 Debye sıcaklığı

Isı kapasitesi, elastik sabitler ve erime sıcaklığı ile alakalı temel fiziksel özellik olan Debye sıcaklığı; katılar için, yüksek ve düşük sıcaklık bölgelerine ayırmak için kullanılır [29]. Debye sıcaklığı üstünde fononların dalga boyları küçük, altında ise büyüktür. Düşük sıcaklıklarda titreşimsel uyarılma sadece akustik titreşimlerden dolayı oluşur ve düşük sıcaklardaki Debye sıcaklığı elastik sabitlerden yararlanarak hesaplanır. Bu durumda denklem [31],

$$\theta_D = \frac{h}{k} \left[\frac{3n}{4\pi} \frac{N_A \rho}{M} \right]^{\frac{1}{3}} v_m \quad (2.24)$$

şeklinde ifade edilir. Denklemde verilen h plank sabiti, k Boltzman sabiti, n molekülde bulunan atom sayısı, N_A avogadro sayısı, M kütle, v_m ortalama ses hızı, ρ yoğunluk şeklindedir. Ortalama ses hızı:

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_t^2} + \frac{1}{v_l^2} \right) \right]^{-\frac{1}{3}} \quad (2.25)$$

denklemini ile gösterilir. Burada v_t enine, v_l boyuna ses hızlarıdır. Enine ve boyuna ses hızları:

$$v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (2.26)$$

$$v_l = \sqrt{\frac{3B+4G}{3\rho}} \quad (2.27)$$

şeklinde ifade edilen Navier denklemleriyle hesaplanır [32].

2.2.12 Anizotropi faktörü

İzotrop malzeme, fiziksel özellikleri yönden bağımsız olan malzeme olarak adlandırılır [33]. Anizotrop malzeme ise, fiziksel özellikleri yöne bağlı olan malzemelere denir [33]. Bu iki farklı durum kristal doğrultularında atom yoğunluğunun farklı olmasındandır. Anizotropi arttıkça yapısal simetri azalmaktadır [34]. Anizotropi değerinin 1'den farklı olması malzemelerin anizotrop olduğunu göstermektedir [35].

Anizotropi faktörü trigonal yapılar için,

$$A_1 = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}} \quad (2.28)$$

$$A_2 = \frac{4C_{44}}{C_{11}+C_{33}-2C_{13}} \quad (2.29)$$

şeklinde tanımlanmaktadır.

Bulk modülü (B) ve shear modülü (G) cinsinden, yüzde elastik anizotropiler [14,19]:

$$A_B = \frac{B_V - B_R}{B_V + B_R} \times 100\% \quad (2.30)$$

$$A_G = \frac{G_V - G_R}{G_V + G_R} \times 100\% \quad (2.31)$$

şeklinde hesaplanmaktadır. Sonuçlarda %0 değeri izotropiyi, %100 değeri ise en büyük elastik anizotropiyi göstermektedir [29]. Evrensel anizotropi indeksi ise

$$A^U = 5 \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} - 6 \quad (2.32)$$

şeklinde tanımlanır [36]. Hesaplanan değerlerin sıfırdan farklı olması anizotropinin ölçüsü olarak bilinir.

3. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ

N sayıda elektronu olan bir sistemi tümüyle tasvir edebilmek için toplam dalga fonksiyonu $\Psi(r_1, \dots, r_N)$ 'yi bilmek gerekir. Makroskopik bir madde yaklaşık 10²³ tane atom içerdiğinden, bir yaklaşım yapmadan toplam dalga fonksiyonunu belirlemek zordur. Hatta hesaplama süresi N sayısı arttıkça çok hızlı bir şekilde artar ve dolayısıyla da büyük N 'li sistemlerin çözümü iyice zorlaşır [37].

Yoğunluk fonksiyoneli Teorisi (DFT); atom, molekül ve katıların elektronik yapılarını hesaplayabilen başarılı bir teoridir. Temel kuantum mekanik yasalarından yararlanarak malzeme özelliklerini nicel olarak anlamayı amaçlar. Yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temel niceliği (büyüklüğü), $\psi(r)$ dalga fonksiyonu yerine alınan $n(r)$ elektron yoğunluğudur. İlgili bölüm farklı kaynaklardan derlenmiştir [38 - 41].

3.1 Born-Openheimer Yaklaşımı

Atomun çekirdeği elektronlara göre yaklaşık 2000 kat daha ağır olduğundan, çekirdek hareketi elektronların hareketi ile karşılaştırıldığında çok yavaş olur. Bu durumda sistemin dalga fonksiyonu sadece elektronların serbestlik derecelerine bağlı olarak düşünülebilir. Çekirdekler klasik mekanik yöntemleri ile belirlenmiş olan yerlerinde hareketsiz durmaktadır. Bu durum bize sabit bir çekirdek sistemindeki kuantum mekanik problemlerini inceleme imkânı sağlar [38].

3.2 Schrödinger Denklemleri

Elektron-çekirdek sisteminin rölativistik olmayan bir durumunda toplam enerjisi

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (3.1)$$

şeklinde dir. Burada $\hat{H}$, sistemin Hamiltonian operatörü olarak isimlendirilir [41]. Denklem 3.1 açık olarak

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right) + \sum_{i=1}^N v_{e-n}(r_i) + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|r_i - r_j|} \right] \psi = E\psi \quad (3.2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada N elektron sayısı, E elektronik enerji olmak üzere; ilk terim kinetik enerji, ikinci terim elektron-çekirdek potansiyel enerji ve üçüncü terim ise elektron-elektron potansiyel enerji operatörleridir. Denklem 3.2, farklı bir gösterim olarak;

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{e-n} + v_{e-e}\right)\psi = E\psi \quad (3.3)$$

şeklinde de yazılabilir. Bu denklemin çözümünde temel sorun dalga fonksiyonunun 3N tane elektronik koordinatın fonksiyonu olmasıdır.

3.3 Hartree Metodu

Hartree metodunda değiş tokuş ve korelasyon etkilerini hesaba katılmadığı için kullanışsızdır. Ancak Hartree-Fock ve Kohn-Sham metotlarının başlangıç noktasıdır. Çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonunu,

$$\psi = \phi_1\phi_2\phi_3...\phi_n = \prod \phi_i \quad (3.4)$$

şeklinde ifade edilen tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazmaya dayanır. Hartree enerjisi (E_H) olarak bilinen terimde ise

$$E_H = \frac{1}{2} \int \rho(r)v_H(r)dr = \frac{1}{2} \int \rho(r)dr \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' \quad (3.5)$$

etkileşme enerji hesabı için klasik Coulomb enerjisini dikkate alınır.

3.4 Hartree - Fock (HF) Metodu

Hartree Fock metodu, Hartree metodundan farklı olarak elektronların değiş-tokuş enerjisini ve dalga fonksiyonlarının anti simetrisini dikkate almaktadır. Hartree-Fock denklemi

$$\hat{f}\phi_i(r) = \varepsilon_i\phi_i(r) \quad (3.6)$$

şeklinde ifade edilir. Burada ε_i Hartree-Fock öz değerleri, f operatörü ise Fock operatörü göstermektedir. Yapılan yeni düzenlemeler ile Denklem 3.6

$$\varepsilon_i \phi_i(r) = \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{e-n}(r) + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' \right] \phi_i(r) - \sum_j \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \int dr' \frac{\phi_j^*(r') \phi_i(r')}{|r-r'|} \phi_j(r) \quad (3.7)$$

şeklinde ifade edilebilir. Denklem 3.7’de Hartree potansiyelini ve değiş tokuş potansiyelini (son terim) barındırmaktadır. Değiş tokuş etkileşiminin içerdiği yerel olmayan terim nedeniyle, yapılacak hesaplamalar Hartree yaklaşımı ve Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine göre daha uzundur [39].

N-elektronlu bir sistemin Hartree-Fock dalga fonksiyonu ise

$$\psi_{HF} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1, \sigma_1) & \phi_1(r_2, \sigma_2) & \cdots & \phi_1(r_N, \sigma_N) \\ \phi_2(r_1, \sigma_1) & \phi_2(r_2, \sigma_2) & \cdots & \phi_2(r_N, \sigma_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \phi_N(r_1, \sigma_1) & \phi_N(r_2, \sigma_2) & \cdots & \phi_N(r_N, \sigma_N) \end{vmatrix} \quad (3.8)$$

şeklinde ifade edilen bir-elektron dalga fonksiyonlarından oluşan bir determinanttır. Büyük temel setlerde bile elektron korelasyonunun tam olarak tanımlanamaması Hartree-Fock metodunun en büyük eksikliğidir. Bu durum Hartree-Fock teorisiyle hesaplanan enerjilerin gerçek değerinden daha yüksek olmasına neden olmaktadır.

3.5 Yoğunluk Fonksiyoneli Teoremi

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi elektron korelasyon problemine alternatif bir çözüm üretir. Hartree-Fock metodunda bir sistemde kullanılan dalga fonksiyonlarının yerini, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi sistemin elektron yoğunluk fonksiyonelleri almaktadır. Yani Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi uzayın herhangi bir noktasında lokalize olmuş elektron yoğunluğuyla ilgilenir. Teorinin temeli Hohenberg ve Kohn tarafından 1964’de iki önemli teoremle ile atılmıştır [41].

Teorem 1: $\rho(r)$ elektron yoğunluğu olmak üzere, harici potansiyeli çekirdekten kaynaklanan potansiyeli belirler. Bunun sonucu olarak da $\rho(r)$, toplam enerjiyi ve dalga fonksiyonunu belirler.

Teorem 2: Bir sistemin temel durumu için toplam enerjisi, elektron yoğunluğuna göre varyasyoneldir; yani $\rho(r)$ elektron yoğunluğu, taban durumunun mümkün olan minimum enerjisini hesaplamayı mümkün kılar.

Bu durumda toplam enerji

$$E[\rho] = T[\rho] + E_{e-n}[\rho] + E_{e-e}[\rho] = T[\rho] + \int dr \rho(r) v_{e-n}(r) + E_{e-e}[\rho] \quad (3.9)$$

şeklinde yazılır. Denklem 3.9’ da yer alan $T[\rho]$ kinetik enerji fonksiyoneli, $E_{e-e}(r)$ ise çekirdeklerden kaynaklanan potansiyel ifadesidir. Toplam enerji ifadesinde temel sorun, $E[\rho]$ fonksiyonelinin son derece karmaşık olması ve doğasının tam olarak bilinmemesidir.

3.6 Kohn – Sham Metodu

Bu metot, etkileşen gerçek elektron sistemi ile aynı elektron yoğunluğuna sahip olan etkileşmeyen hayali bir sistemden yola çıkar. Önce, etkileşmeyen bu hayali sistemin T_s kinetik enerjisini ve elektronik orbitalleri tanıtılır. T_s , hala tam olmamasına rağmen kinetik enerjiyi daha iyi tahmin eder [41].

Toplam elektronik enerji

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int dr \rho(r) v_{e-n}(r) + \frac{1}{2} \int dr \rho(r) v_H(r) + E_{xc}[\rho] \quad (3.10)$$

şeklindedir. Denklem 3.10 de değiş tokuş-korelasyon enerji fonksiyoneli haricindeki bütün terimler tam ve doğru bir şekilde hesaplanabilmektedir. Kohn-Sham metodu, çok cisim problemini, matematiksel olarak Hartree-Fock denklemlerine benzeyen bir elektron denklem takımına indirger. Bu denklem

$$\left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{e-n}(r) + v_H[\rho(r)] + v_{xc}[\rho(r)] \right\} \phi_i(r) = \varepsilon_i \phi(r) \quad (3.11)$$

şeklindedir. Buradaki değiş tokuş-korelasyon potansiyeli ($v_{xc}(r)$)

$$v_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \quad (3.12)$$

şeklindedir. Bu yöntemin kesinliğini bozan etken denklem 3.12 de yer alan E_{xc} terimidir. Bu terimin formu bilinmediğinden, yoğunluğun fonksiyoneli olarak yazmak zordur. Bunun için yerel yoğunluk yaklaşımı ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı olmak üzere iki farklı yaklaşım kullanılabilir.

3.7 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

Yerel yoğunluk yaklaşımında (LDA) kinetik enerji ifadesi elektron-gazı formülünden değil dalga fonksiyonundan hesaplanır [39]. Değiş tokuş-korelasyon enerjisi

$$E_{xc}[\rho] = \int dx \rho(r) e_{xc}(\rho(r)) \quad (3.13)$$

şeklinde ifade edilir. Buradaki homojen elektron gazının değiş tokuş enerji yoğunluğu

$$e_{xc}(\rho) = -\frac{3}{4\pi} (3\pi^2)^{1/3} \rho^{1/3} = -\frac{3}{4\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} r_s^{-1} \quad (3.14)$$

şeklindedir. Spin-polarize sistemler için genelleştirilen LDA' ya yerel spin yoğunluk yaklaşımı (LSDA) denir. Bu durumda değiş tokuş enerjisi

$$e_x(\rho_\uparrow, \rho_\downarrow) = e_x(\rho) \frac{(1+\xi)^{4/3} + (1-\xi)^{4/3}}{2} \quad (3.15)$$

şeklindedir.

LDA' nın yetersizlikleri şunlardır [42]:

- Toplam enerjiyi daha düşük tahmin eder; çünkü valans elektronlarını tam olarak hesaplar, fakat core elektronlarını eksik bağlar.
- Molekül ve katıların atomik enerjilerini fazla (yaklaşık 20%) hesaplar.
- Bağ uzunluklarını ekseriya yaklaşık 1% daha kısa hesaplar,
- Reaksiyon engellerini genellikle deneyden küçük verir,
- Zayıf bağlı sistemlerde (örneğin hidrojen bağları) büyük hatalara yol açar,
- Vander Waals bağlanmasını hesaba katmaz,
- Bazen polimorflar arasındaki enerji farkları yanlış olabilir((örneğin kuvartz–stishovite),
- Bazen taban durumu yanlış tahmin edebilir (örneğin Fe için ferromanyetik bcc yerine paramanyetik fcc önerir),
- Geçiş metal oksitlerde büyük hatalara yol açar,
- Pek çok durumda ayrışma ürünleri nötr atomlar olmaz, atomlar fiziksel anlamı olmayacak şekilde kesirsel yüklere sahip olabilir. Bu yetersizlikler, fonksiyonellerin daha da geliştirilmelerine yol gösterirler.

3.8 Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı

Genelleştirilmiş Gradyent yaklaşımı (GGA) yoğunluğun uzaysal değişimini de hesaba katan yaklaşımdır. Değiş tokuş korelasyon fonksiyoneli [38]

$$E_{xc}[\rho, \nabla \rho] = \int d\vec{r} F_{xc}(\rho, s) \rho(\vec{r}) e_x(\rho(\vec{r})) \quad (3.16)$$

şeklinde tanımlanır. Buradaki, $F_{xc}(\rho, s)$ iyileştirme çarpanı olup, hem yoğunluğa hem indirgenmiş s gradyentine bağlıdır ve

$$s = \frac{|\nabla \rho|}{2(3\pi)^{\frac{1}{3}} \rho^{\frac{4}{3}}(\vec{r})} \quad (3.19)$$

denklemleri ile ifade edilir. GGA yaklaşımı birçok durumda LDA' dan daha üstündür ve bu yüzden DFT hesaplamalarında yaygın bir şekilde kullanılmaktadır.

GGA pek çok sistem için özellikle bağ uzunlukları ve toplam enerjiyi daha iyi tahmin ettiği gösterilmiştir. Geliştirilmiş fonksiyoneller araştırmalarında önemli bir ilerleme, genelleştirilmiş gradyent yaklaşırması sayesinde olabilmekmiştir. Moleküllerde GGA hesaplarında bağ uzunlukları ve örgü sabitleri deneysel sonuçlardan büyük, bulk modülü ise küçük çıkmaktadır. GGA'nın en iyi başarısı demirin manyetik momenti üzerinde olmuştur. GGA, bcc demirin taban durumunu ferromanyetik olarak önermiştir. Ayrıca GGA yaklaşımı özellikle hidrojen bağlarının tanımlanmasında önemli sonuçlar vermiştir. Ayrıca, GGA kohesif enerji hesaplamalarındaki doğruluk LDA 'dan biraz daha iyidir [42].

4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA

4.1 Hesaplamalarla İlgili Detaylar

Son yıllarda teknolojinin gelişmesiyle birlikte malzemeler üzerindeki ön çalışmaları yüksek teknoloji destekli bilgisayar sistemlerinde tasarlamak mümkün hale gelmiştir. MedeA paket programı malzemelerin dinamik, elektronik, optik, manyetik ve termokimyasal özelliklerini hesaplamada başarılı ve doğru sonuçlar verdiği için araştırmacıların ilgi odağı haline gelmektedir [43, URL-1]. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) üzerine kurulu MedeA paket programında hesaplamalar VASP kodu kullanılarak yapılmaktadır [44, 45, URL-2].

Bu tez çalışmasında, $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin yapısal, elastik, elektronik ve termodinamik özellikleri MedeA paket programında yoğunluk fonksiyoneli teorisine dayanan genelleştirilmiş grandyent yaklaşımı (GGA-PBE) kullanılarak incelendi [46]. Hesaplamalarda elektron-iyon etkileşimi için PAW yaklaşımı kullanıldı [47]. İterasyon yaklaşımı (bloke Davidson) algoritması değeri $1.00\text{E}-07$ eV olarak alındı. K-point [48] değeri $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşikleri için $7 \times 7 \times 7$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için $7 \times 7 \times 6$ alındı. Tüm yapılarda kesme enerjisi için 500 eV değeri yeterli görüldü.

4.2 Yapısal Özellikler

$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşikleri trigonal (uzay grubu $R\bar{3}$, No: 148) kristal yapısında, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri ise trigonal (uzay grubu $P\bar{3}1m$, No: 162) kristal yapısında incelenmiştir. Hesaplamalar sonucu optimize edilmiş atomik koordinatlar Çizelge 4.1-4.4' de verildi. Geometrik optimizasyon yöntemi ile denge durumu ve bileşiklerin örgü sabitleri hesaplanıp Şekil 4.1 ve 4.2' de bileşiklerin kristal yapıları gösterildi.

Hesaplanan örgü sabitleri, hacim, yoğunluk ve oluşum enerjileri mevcut çalışmalar ile Çizelge 4.5' te gösterildi. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiği için hesaplanan yapısal özellikler deneysel çalışma [7] ile uyum içerisindedir. Diğer bileşikler için ilk kez yapısal özellikleri araştırılmıştır. Çizelge 4.5' te görüldüğü gibi oluşum enerjilerinin negatif olması ilgili yapıların termodinamiksel yönden kararlı olduğu göstermektedir. Oluşum

enerjilerinin negatif çıkması ayrıca bu yapıların sentezlenebilir olduğunu gösterir. InSiTe₃ bileşiği en düşük enerjiye sahip olduğu için en kararlı bileşiktir.

Çizelge 4.1. In₂Ge₂Te₆ bileşiği için hesaplanan atomik koordinatlar.

Atom	Wyckoff Konumu	x	y	z
Te	18f	0.682	0.014	0.583
In	6c	0	0	0.332
Ge	6c	0	0	0.053

Çizelge 4.2. In₂Si₂Te₆ bileşiği için hesaplanan atomik koordinatlar.

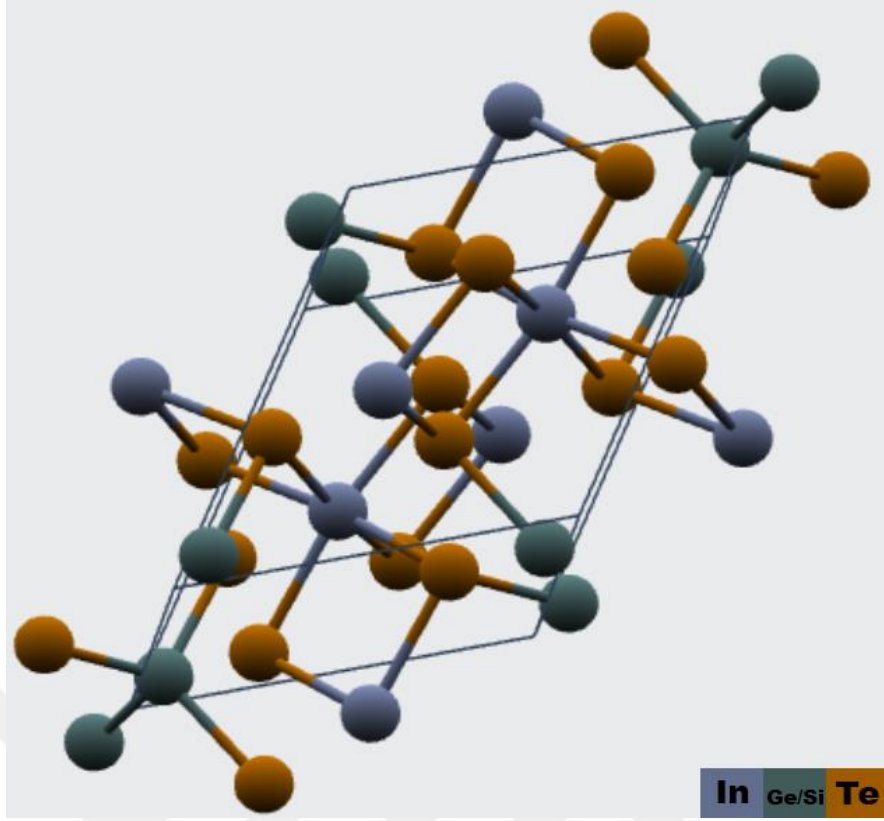
Atom	Wyckoff Konumu	x	y	z
Te	18f	0.671	0.004	0.584
In	6c	0	0	0.333
Si	6c	0	0	0.049

Çizelge 4.3. InGeTe₃ bileşiği için hesaplanan atomik koordinatlar.

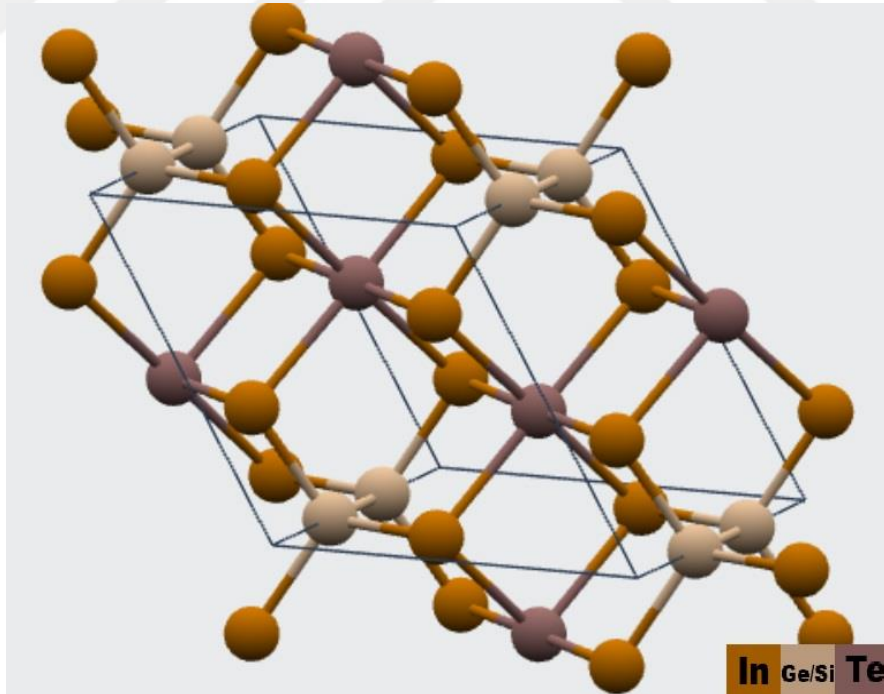
Atom	Wyckoff Konumu	x	y	z
Te	6k	0.651	0.999	0.748
In	2d	0.333	0.666	0.500
Ge	2e	0	0	0.658

Çizelge 4.4. InSiTe₃ bileşiği için hesaplanan atomik koordinatlar.

Atom	Wyckoff Konumu	x	y	z
Te	6k	0.662	0.999	0.748
In	2d	0.333	0.666	0.500
Si	2e	0	0	0.651



Şekil 4.1. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşikleri için kristal yapı.



Şekil 4.2. InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için kristal yapı.

Çizelge 4.5. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan örgü sabitleri (a, c, Å), hacim (V, Å³/f.ü.), yoğunluk (ρ , g/cm³) ve oluşum enerjisi (ΔH , eV/atom) ve diğer çalışmalar.

Bileşik	Yapı / Uzay Grubu / No	a	c	V	ρ	ΔH	Kaynak
$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$	Trigonal / $R\bar{3}$ / 148	7.23	23.05	1045.54	5.434	-0.15	Bu çalışma
		7.08	21.20	922.20	-	-	Deney*
$\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$		7.15	23.36	1035.88	5.056	-0.21	Bu çalışma
InGeTe_3	Trigonal / $P\bar{3}1m$ / 162	7.17	7.50	334.03	5.383	-0.19	Bu çalışma
InSiTe_3		7.15	7.70	341.87	5.107	-0.28	Bu çalışma

* Kaynak [7]

4.3 Mekanik Özellikler

$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri MedeA paket programında optimize edilmiş olup elastik sabitleri hacim korunumlu (volume conserving) [49] metodu kullanılarak ilk kez hesaplandı. Sonuçlar Çizelge 4.6'da verildi. Bir kristal yapının mekaniksel yönden kararlı olabilmesi için Born kararlılık [50] kriterlerinin sağlanması gerekmektedir. Trigonal yapı için kriterler;

$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiklerinin trigonal kristal yapısı ($R\bar{3}$, No: 148) için;

$$C_{11} > |C_{12}|,$$

$$C_{44} > 0,$$

$$2C_{13}^2 < C_{33}(C_{11} + C_{12}),$$

$$2(C_{14}^2 + C_{15}^2) < C_{44}(C_{11} - C_{12}). \quad (4.1)$$

InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin trigonal kristal yapısı ($P\bar{3}1m$, No: 162) için;

$$C_{11} > |C_{12}|$$

$$C_{11} - |C_{12}| > 0,$$

$$(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2 > 0,$$

$$(C_{11} - C_{12})C_{44} - 2C_{14}^2 > 0. \quad (4.2)$$

denklemleri ile ifade edilir. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri mekanik kararlılık şartlarını sağladığı için mekaniksel yönden kararlı bileşiklerdir.

Elastik sabitlerden C_{11} x eksen boyunca, C_{22} y eksen boyunca, C_{33} z eksen boyunca sıkıştırılmaya karşı direnci temsil etmektedir [51]. Trigonal yapıda olan bileşiklerinden $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ en büyük C_{11} değerine sahip olup, bu nedenle x eksen boyunca en büyük direnci gösterir. Tüm bileşikler için C_{33} ile C_{11} arasındaki fark yüksektir. Bu nedenle bu bileşiklerin yüksek anizotropiye sahip olması beklenir. Elastik sabit C_{44} malzemelerin sertlikleri ile ilgili bir gösterge olup, tüm bileşiklerin C_{44} değeri oldukça düşüktür. Bu nedenle bileşiklerin çok düşük bir sertlik değerine sahip olmaları beklenir. C_{44} değeri aynı zamanda kovalent bağın güçlülüğünün bir ölçüsü olarak bilinir. Hesaplanan C_{44} değerlerinin çok küçük olması bileşiklerde kovalent bağın hemen hemen olmadığını gösterir.

Bulk modülü, shear modülü, Young modülü, Poisson oranı, B/G oranı, sertlik, Debye sıcaklığı, boyuna ses hızı, enine ses hızı ve ortalama ses hızı deklemleri (2.12-14, 2.16-18, 2.20 ve 2.22) kullanılarak ilk kez hesaplandı ve sonuçlar Çizelge 4.7' de verildi.

Bir kristalin hacim değişimine karşı gösterdiği direnç bulk modülü olarak tanımlanmaktadır [20]. Hesaplanan bulk modülü değerleri tüm bileşikler için birbirine yakındır. Bu sebeple bileşikler yaklaşık olarak sıkıştırmaya karşı aynı direnci gösterir.

Çizelge 4.6. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan elastik sabitler (C_{ij} , GPa) .

Bileşik	Yapı / Uzay Grubu / No	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{15}	C_{33}	C_{44}	Kaynak
$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$	Trigonal / $R\bar{3}$ / 148	58.19	21.22	3.16	-0.11	0.23	7.13	3.66	Bu çalışma
$\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$		64.43	24.7	5.83	-0.01	0.95	6.72	16.64	Bu çalışma
InGeTe_3	Trigonal / $P\bar{3}1m$ / 162	58.18	19.77	2.54	0.01	-	8.25	6.40	Bu çalışma
InSiTe_3		62.59	20.54	2.35	0	-	9.8	4.08	Bu çalışma

Shear modülü, makaslama zoruna ve tersinir deformasyonlara karşı gösterilen mukavemetin ölçüsüdür [20]. Shear modülünün yüksek olması, atomlar arasındaki bağların kuvvetinin yüksek olmasıyla doğru orantılıdır. Bu duruma göre atomlar arası bağın en güçlü olduğu bileşiğin $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ olduğu görülmektedir.

Young modülü, malzemenin rijiditesi (katılığı) veya elastik şekil değiştirmeye karşı dayanıklılığının ölçüsüdür [52]. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin Young modülü daha yüksektir. Bu nedenle en rijit malzemedir. Yani uygulanacak bir gerilme sonucu şekil değişiminin en az olacağı malzemedir.

Poisson oranı, çekme boyunca enine sıkıştırma geriliminin boyuna sıkıştırma gerilimine oranı olarak tanımlanmaktadır [53]. Karakteristik bağlanma kuvveti hakkında bilgi vermektedir ve -1 ile 0.5 arasında değerler alır. Malzemenin Poisson oranı 0.5' e yaklaştıkça malzeme plastik özellik gösterir [53]. En yüksek Poisson oranına $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiği sahip iken, en düşük değere $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiği sahiptir. Tüm bileşiklerde iyonik bağ baskındır.

Sertlik için önemli kriterlerden biride B/G oranıdır. Pugh kriterlerine [30] göre B/G oranı 1.75' den az olması durumunda malzemenin kırılğan, yüksek olması durumunda ise esnek olarak sınıflandırılmaktadır. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin hepsinin B/G oranı 1.75 değerinden küçüktür. Bundan dolayı bileşiklerin tamamı kırılğan özelliğe sahiptirler.

Malzemede düşük ve yüksek sıcaklık bölgelerini ayırt etmede Debye sıcaklığı kullanılmaktadır. Bu sebeple Debye sıcaklığı yüksek olan bileşiğin termal iletkenliği yüksek olmaktadır. Genel olarak Çizelge 4.7' deki Debye sıcaklıklarının düşük olmasından dolayı tüm bileşiklerin termal iletkenliğinin düşük olması beklenmektedir ve bileşikler arasında $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ en yüksek termal iletkenliğe sahiptir.

En yüksek ses hızına $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin sahip olduğu görülmektedir. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri ise daha düşük ses hızına sahiptir. Çizelge 4.7'de yer alan sertlik değerleri incelendiğinde tüm sonuçlar 10 GPa' dan düşüktür. Bu nedenle tüm bileşikler yumuşak özellik gösterir.

Çizelge 4.7. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan bulk modülü (B, GPa), shear modülü (G, GPa), Young modülü (E, GPa), Poisson oranı (ν), Debye sıcaklığı (Θ_D , K), boyuna ses hızı (v_l , m/s), enine ses hızı (v_t , m/s), ortalama ses hızı (v_m , m/s) ve sertlik (H, GPa).

Bileşik	Yapı / Uzay Grubu / No	B	G	E	ν	B/G	Θ_D	v_l	v_t	v_m	H	Kaynak
$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$	Trigonal / $R\bar{3}$ / 148	13.3	8.64	21.22	0.23	1.54	127.5	2144	1265	1402	1.49	Bu çalışma
$\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$		14.92	13.8	30.97	0.15	1.08	165.8	2565	1651	1812	1.63	Bu çalışma
InGeTe_3	Trigonal / $P\bar{3}1m$ / 162	13.42	10.67	25.07	0.19	1.26	141	2267	1408	1552	1.45	Bu çalışma
InSiTe_3		14.61	9.94	24.28	0.22	1.47	141.7	2338	1397	1546	1.68	Bu çalışma

Hesaplanan anizotropi değerleri Çizelge 4.8’ de verildi. A_1 ve A_2 anizotropi değerlerinin 1’den farklı olması bileşiklerin anizotrop olduğunu göstermektedir. A_1 değeri (100) düzleminin, A_2 değeri ise (010) düzleminin anizotropi değerine karşı gelmektedir. A_B ve A_G anizotropi değeri % 0 ise malzeme elastik, izotropi % 100 ise malzeme en büyük elastik anizotropiyi göstermektedir. Çizelge 4.9’ da gösterildiği gibi bulk ve shear modülleri anizotropik özellik göstermektedir. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiği için bulk modüllerinin elastik anizotropi yüzdesi diğer bileşiklere göre daha yüksektir. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiği shear modüllerinin elastik anizotropi yüzdesi değeri yüksektir. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiği için evrensel anizotropi indeksi diğer bileşiklerden büyüktür. Bu bileşik değerlerine göre daha fazla anizotropiye sahiptir.

Çizelge 4.8. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan A_1 , A_2 (anizotropi değerleri), A_B (bulk), A_G (shear) ve A^U (evrensel anizotropi indeksi) değerleri.

Bileşik	Yapı / Uzay Grubu / No	A_1	A_2	A_B	A_G	A^U	Kaynak
$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$	Trigonal / $R\bar{3}$ / 148	0.12	0.25	0.49	0.34	7.03	Bu çalışma
$\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$		0.56	1.12	0.55	0.25	5.78	Bu çalışma
InGeTe_3	Trigonal / $P\bar{3}1m$ / 162	0.21	0.42	0.44	0.22	4.46	Bu çalışma
InSiTe_3		0.12	0.24	0.41	0.32	6.16	Bu çalışma

Anizotropiyi görsel olarak incelemek için ELATE [54] programını kullanarak Young modülü, shear modülü, Poisson oranı ve sıkışabilirliğin üç boyutta değişimleri incelendi. Oluşturulan eğriler Şekil 4.3-4.4’ de verildi. Şeffaf mavi renk ile gösterilen maksimum değeri, yeşil renk ise minimumu göstermektedir. Üç boyutlu gösterimde izotropik malzemenin şekli küreseldir. Malzemenin küresellikten sapmaları anizotropisinin bir ölçüsüdür. Elde edilen eğrilere göre, tüm bileşikler yüksek bir anizotropiye sahipti. Mekaniksel özelliklerin maksimum ve minimum değerleri Çizelge 4.9’ da verildi.

Çizelge 4.9 incelendiğinde; Young modülünde $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiği minimum 6.87 GPa ve maksimum 49.88 GPa değerlerini; $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiği için minimum 5.95 GPa ve

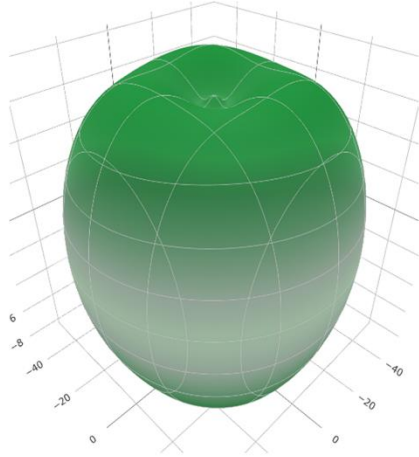
maksimum 53.73 GPa değerlerini; InGeTe₃ bileşiği için minimum 8.08 GPa ve maksimum 51.18 GPa değerlerini; InSiTe₃ bileşiği ise minimum 9.41 GPa ve maksimum 53.63 GPa değerlerini almaktadır. Shear modülünde In₂Ge₂Te₆ bileşiği minimum 3.65 GPa ve maksimum 18.49 GPa değerlerini; In₂Si₂Te₆ bileşiği minimum 4.78 GPa ve maksimum 20.12 GPa değerlerini; InGeTe₃ bileşiği minimum 6.32 GPa ve maksimum 19.25 GPa değerlerini; InSiTe₃ bileşiği minimum 4.05 GPa ve maksimum 21.05 GPa değerlerini almaktadır ve bütün bileşiklerde güçlü bir anizotropik özellik göstermektedir. Poisson oranı In₂Ge₂Te₆ bileşiği için minimum 0.03 ve maksimum 0.35 değerlerini; In₂Si₂Te₆ bileşiği için minimum -0.64 ve maksimum 0.58 değerlerini; InGeTe₃ bileşiği için minimum 0.02 ve maksimum 0.36 değerlerini; InSiTe₃ bileşiği için ise minimum 0.01 ve maksimum 0.41 değerlerini almaktadır ve yüksek anizotropi özelliğe sahiptirler. Lineer sıkışabilirlik ise In₂Ge₂Te₆ bileşiği için minimum 7.26 TPa⁻¹ ve maksimum 133.81 TPa⁻¹ değerlerini; In₂Si₂Te₆ bileşiği için minimum 1.67 TPa⁻¹ ve maksimum 145.9 TPa⁻¹ değerlerini; InGeTe₃ bileşiği için minimum 9.06 TPa⁻¹ ve maksimum 115.63 TPa⁻¹ değerlerini; InSiTe₃ bileşiği için ise minimum 9.27 TPa⁻¹ ve maksimum 97.59 TPa⁻¹ değerlerini almaktadır. Lineer sıkışabilirlik en yüksek anizotropiye sahip mekanik özelliktir. Elde edilen sonuçlar Çizelge 4.8’de verilen değerler ile uyum içindedir.

Çizelge 4.9. In₂Ge₂Te₆, In₂Si₂Te₆, InGeTe₃ ve InSiTe₃ bileşikleri için Young modülü (E, GPa), shear modülü (G, GPa), Poisson oranı (ν) ve sıkışabilirliğin (β , TPa⁻¹) maksimum ve minimum değerleri.

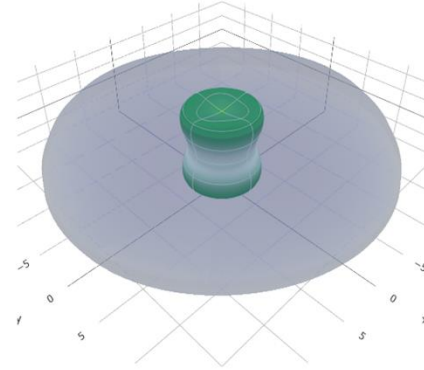
Bileşik	Yapı / Uzay Grubu / No	Young Modülü		Shear Modülü		Poisson Oranı		Lineer Sıkışabilirlik	
		E _{min}	E _{max}	G _{min}	G _{max}	ν_{min}	ν_{max}	β_{min}	β_{max}
In ₂ Ge ₂ Te ₆	Trigonal / R $\bar{3}$ / 148	6.87	49.88	3.65	18.49	0.03	0.35	7.26	133.81
In ₂ Si ₂ Te ₆		5.95	53.73	4.78	20.12	-0.64	0.58	1.67	145.9
InGeTe ₃	Trigonal / P $\bar{3}1m$ / 162	8.08	51.18	6.32	19.25	0.02	0.36	9.06	115.63
InSiTe ₃		9.41	55.63	4.05	21.05	0.01	0.41	9.27	97.59

In₂Ge₂Te₆

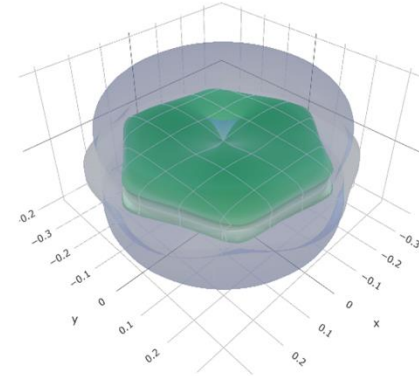
Young Modülü



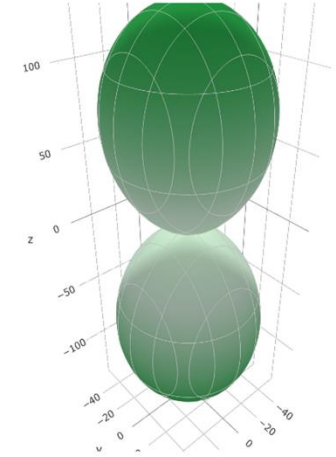
Shear Modülü



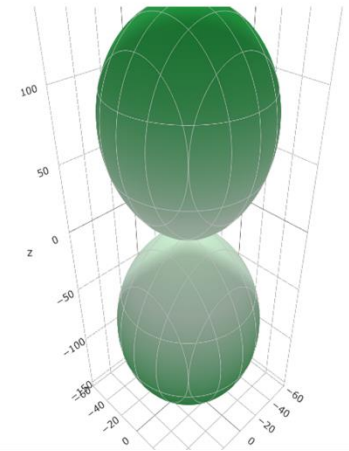
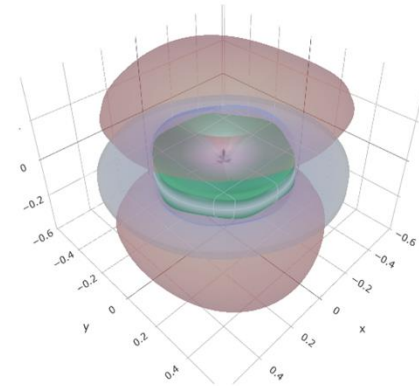
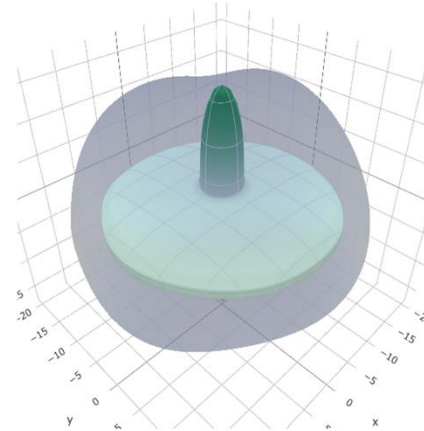
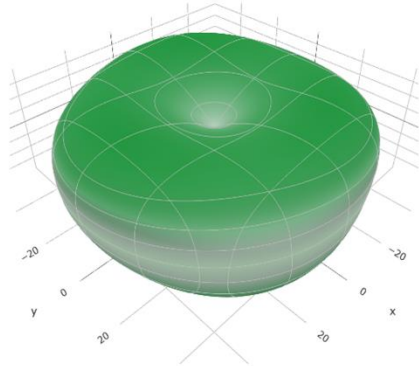
Poisson oranı



Lineer Sıkışabilirlik



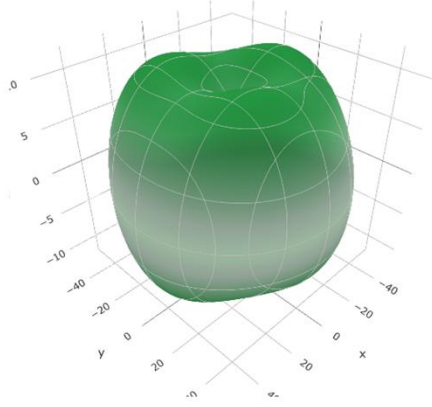
In₂Si₂Te₆



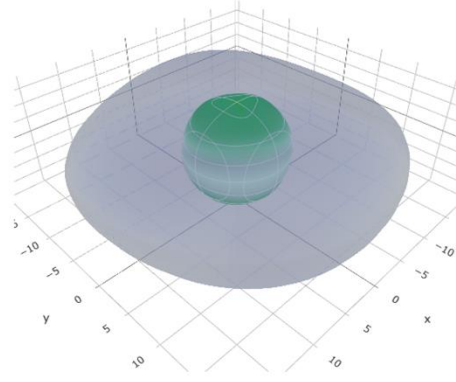
Şekil 4.3. In₂Ge₂Te₆ ve In₂Si₂Te₆ bileşiklerinin Young modülü, shear modülü, Poisson oranı ve sıkışabilirliğinin üç boyutta gösterimi.

InGeTe₃

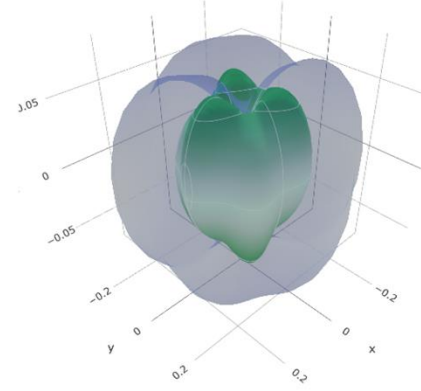
Young Modülü



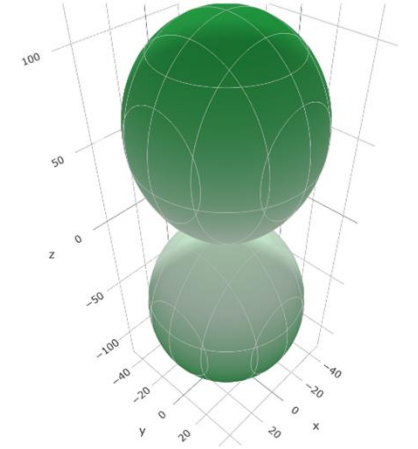
Shear Modülü



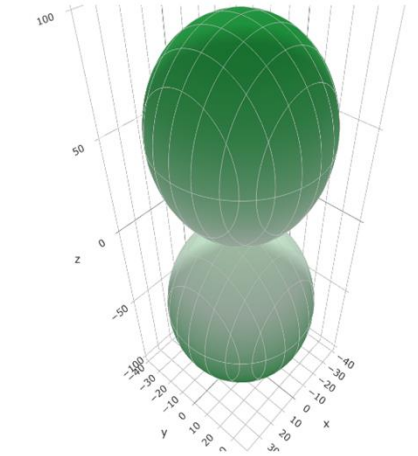
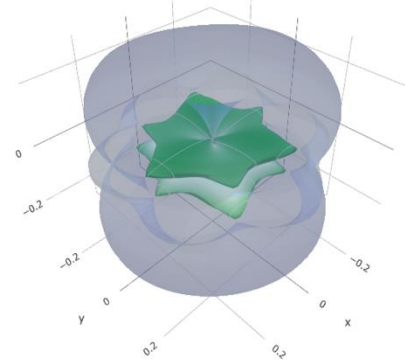
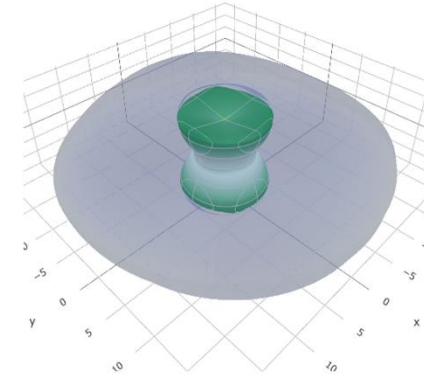
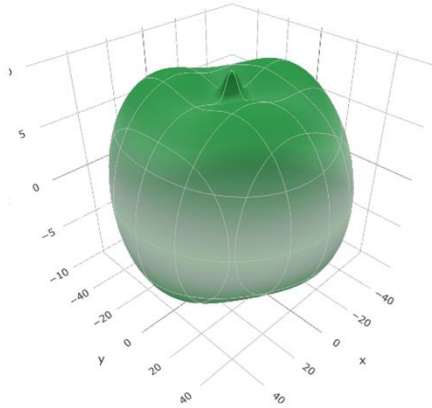
Poisson oranı



Lineer Sıkışabilirlik



InSiTe₃



Şekil 4.4. InGeTe₃ ve InSiTe₃ bileşiklerinin Young modülü, shear modülü, Poisson oranı ve sıkışabilirliğinin üç boyutta gösterimi.

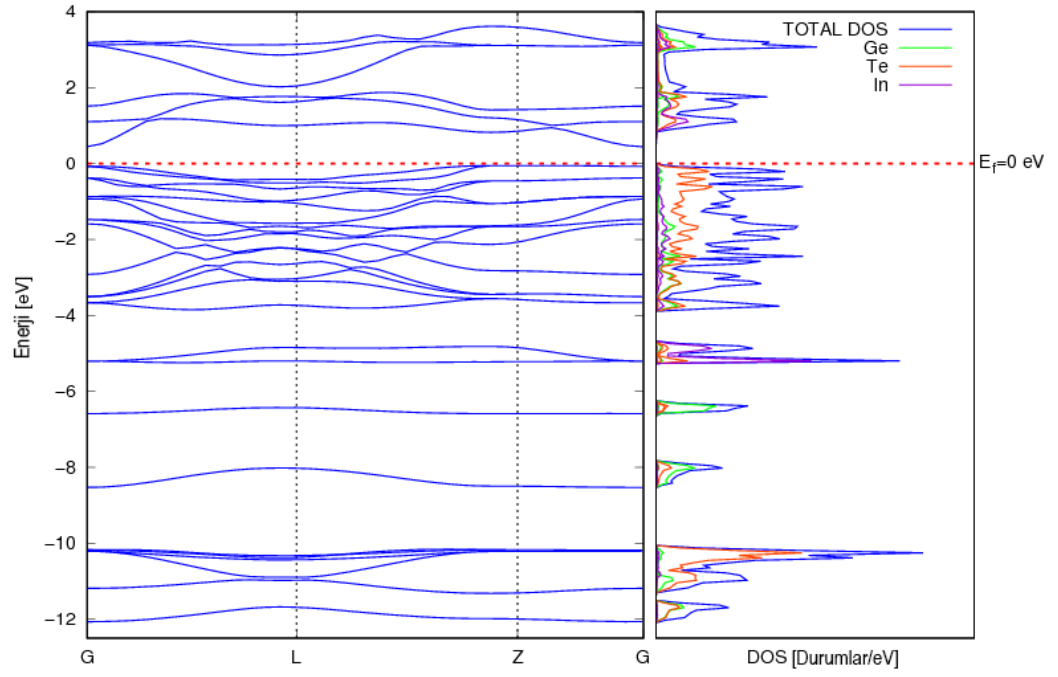
4.4 Elektronik Özellikler

$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için yüksek simetri yönlerindeki elektronik band yapıları ve durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4.5-4.8’ de gösterildi. Aynı kristal yapıda bulunan bileşiklerin band yapıları birbirine benzemektedir. Çizelge 4.10’ da ise hesaplanan yasak enerji aralıkları verildi. Fermi seviyesi sıfır (0 eV) alındı. Tüm bileşikler doğrudan band aralığına sahip olup yarıiletken karakter sergilemektedir. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ en yüksek yasak enerji aralığına sahip iken, $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ en düşük değere sahiptir. Tüm bileşiklerin düşük yasak enerji aralıklarına sahip olmaları, bu bileşikleri termoelektrik uygulamalar yönünden ön plana çıkaracaktır.

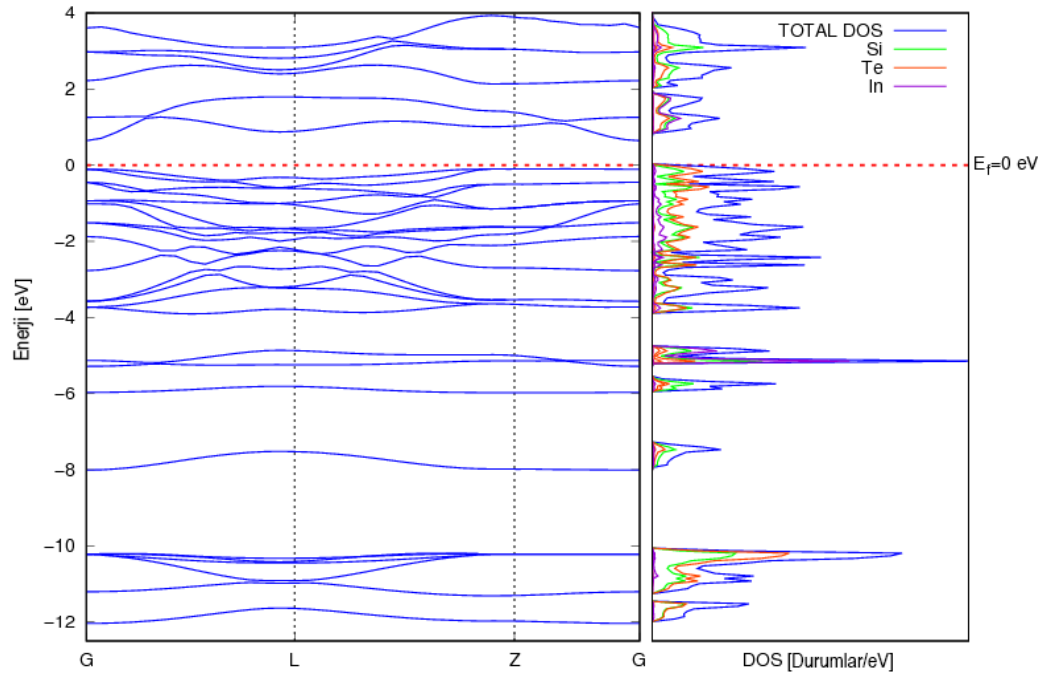
Çizelge 4.10. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan yasak enerji aralıkları (E_g , eV).

Bileşik	Yapı / Uzay Grubu / No	E_g	Kaynak
$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$	Trigonal / $R\bar{3}$ / no:148	0.49	Bu çalışma
$\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$		0.73	Bu çalışma
InGeTe_3	Trigonal / $P\bar{3}1m$ / no:162	0.69	Bu çalışma
InSiTe_3		0.75	Bu çalışma

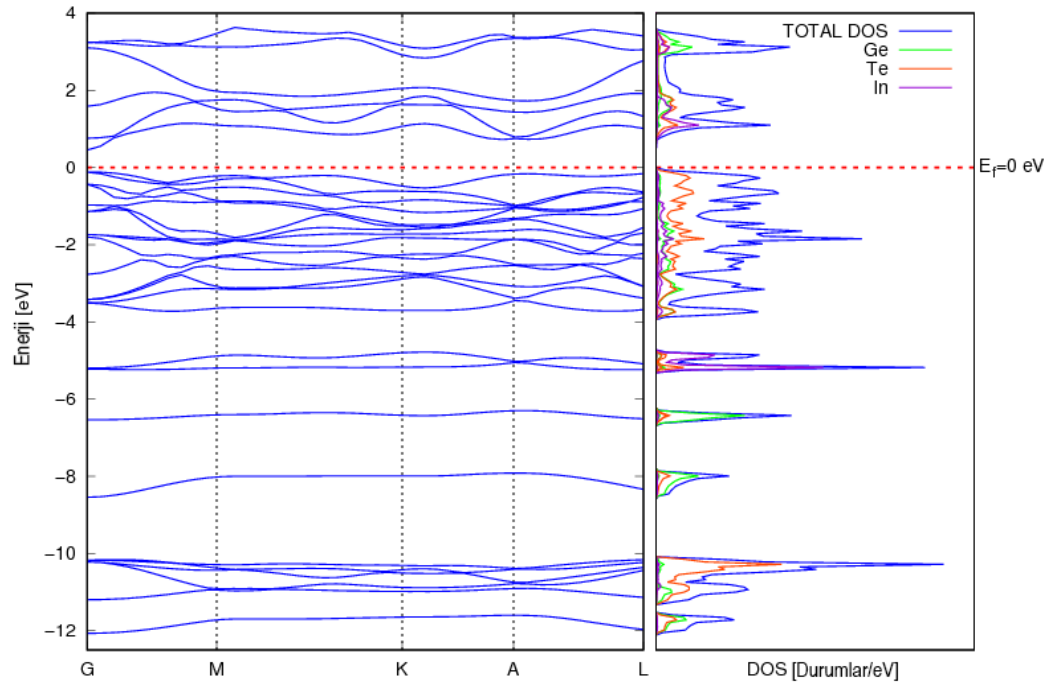
Şekil 4.5 – 4.8’ de verilen durum yoğunluğu eğrileri incelendiğinde valans bandlarında -12 ile -10 eV enerji aralığında Te atomları, -8 ile -6 eV enerji aralığında Ge/Si atomları, -5 eV civarında oluşan band eğrilerinde In atomları, -4 ile 0 eV enerji aralığında ise Te atomları baskındır. İletkenlik bandlarında ise Ge/Si atomları baskındır. En keskin pikler -10 eV ve -5 eV civarında oluşmuştur.



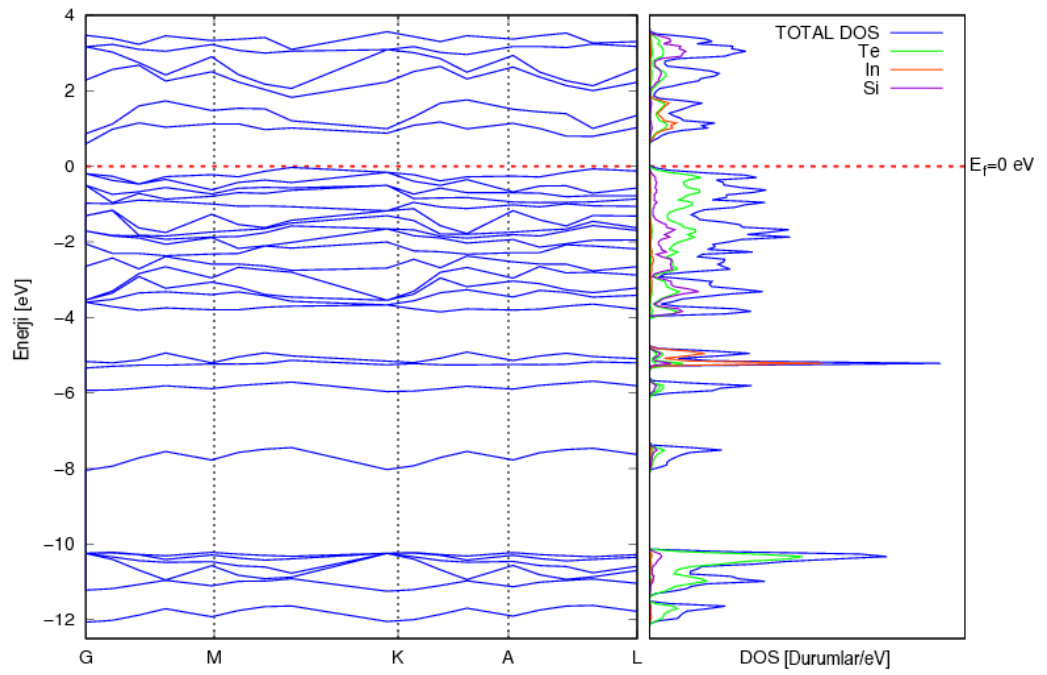
Şekil 4.5. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu.



Şekil 4.6. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu.



Şekil 4.7. InGeTe₃ bileşiğinin elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu.



Şekil 4.8. InSiTe₃ bileşiğinin elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu.

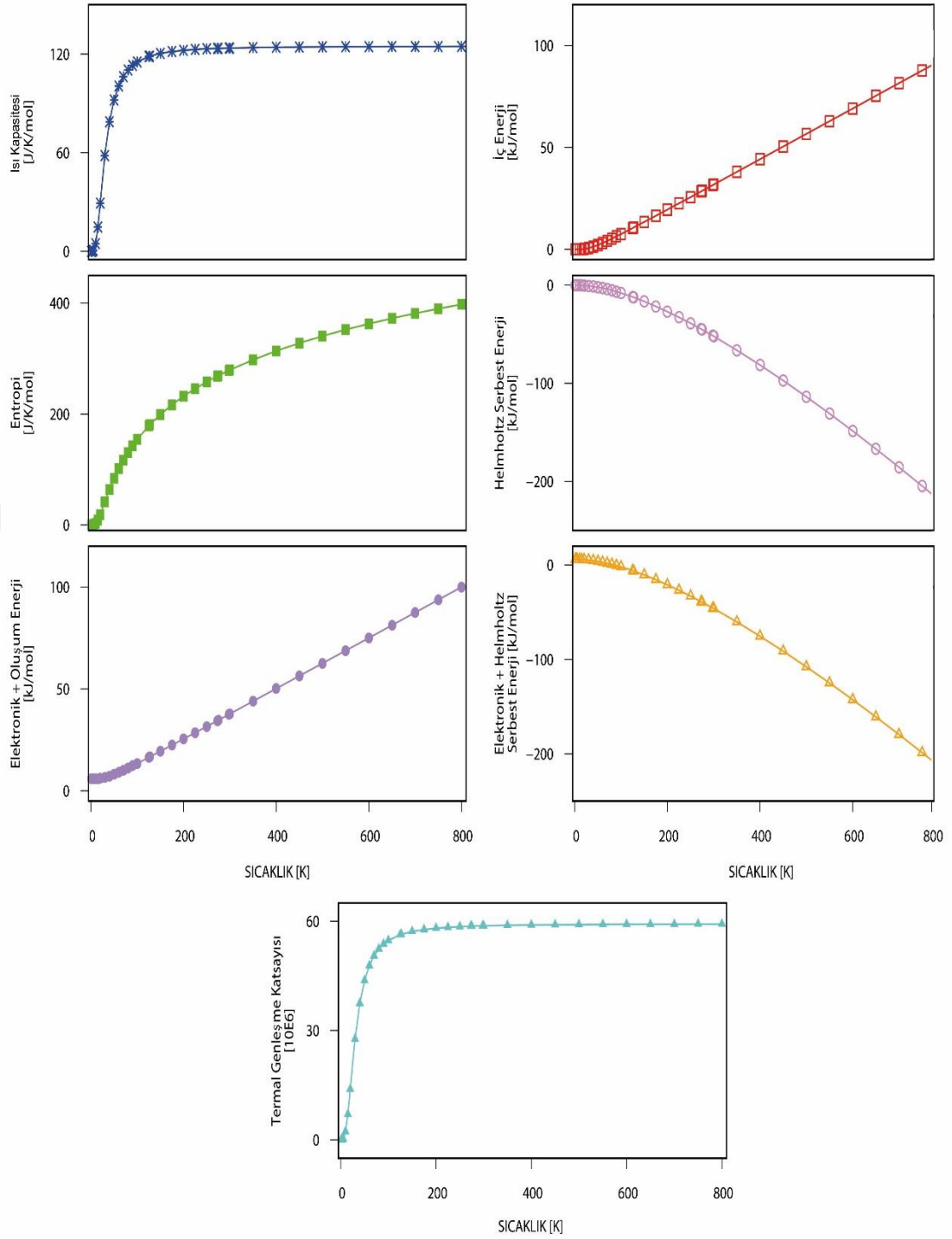
4.5 Termodinamik Özellikler

$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbest enerjisi ve termal genleşme katsayısının 0-800 K arasında sıcaklığa bağlı değişimleri MedeA paket programı ilk kez hesaplandı. Sonuçlar Şekil 4.9-4.12’ da verildi.

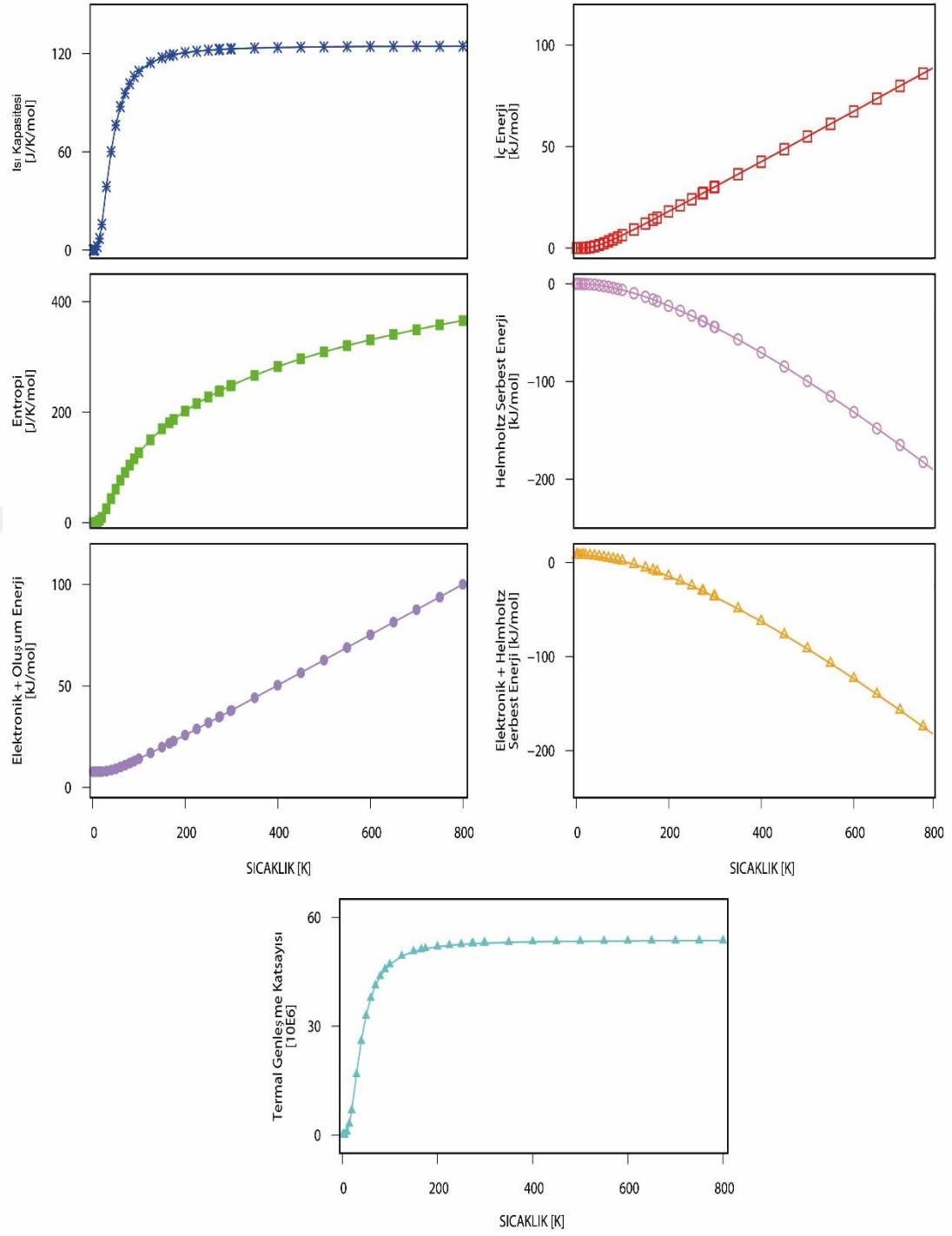
0 K’ e karşılık gelen serbest enerji sıfır nokta enerjisi olarak tanımlanmaktadır. Çizelge 4.11’ de sıfır nokta enerjisi en düşük $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiğine aittir. Şekil 4.9-4.12’ da bütün bileşiklerde ısı kapasitesi düşük sıcaklıklarda hızla artmakta ve T^3 davranışı sergilemektedir. Isı kapasitesi 200 K’in üzerinde değişim hızı düşüktür ve Dulong – Petit davranışı sergilemektedir. İç enerji grafiklerde de görüldüğü gibi bütün bileşiklerde hemen hemen doğrusaldır. Bileşiklerin entropi sıcaklık değişim eğrileri incelendiğinde düşük sıcaklıklarda entropi değerinin çok hızlı arttığı görülmektedir. 200 K’in üzerinde ise entropinin değişim hızı düşüktür. Helmholtz serbest enerji ise bütün bileşiklerinde hemen hemen doğrusal olarak azalmaktadır. Elektronik + oluşum enerjisi değişimi ise bütün bileşikler için doğrusal artış göstermektedir. Elektronik + Helmholtz serbest enerjisinin değişimi ise bütün bileşikler için doğrusal azalma görülmektedir. Termal genleşme katsayısı düşük sıcaklıklarda hızla artmaktadır. Termal genleşme katsayısının 150 K’nin üzerinde değişim hızı düşüktür.

Çizelge 4.11. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri için hesaplanan sıfır nokta enerjileri.

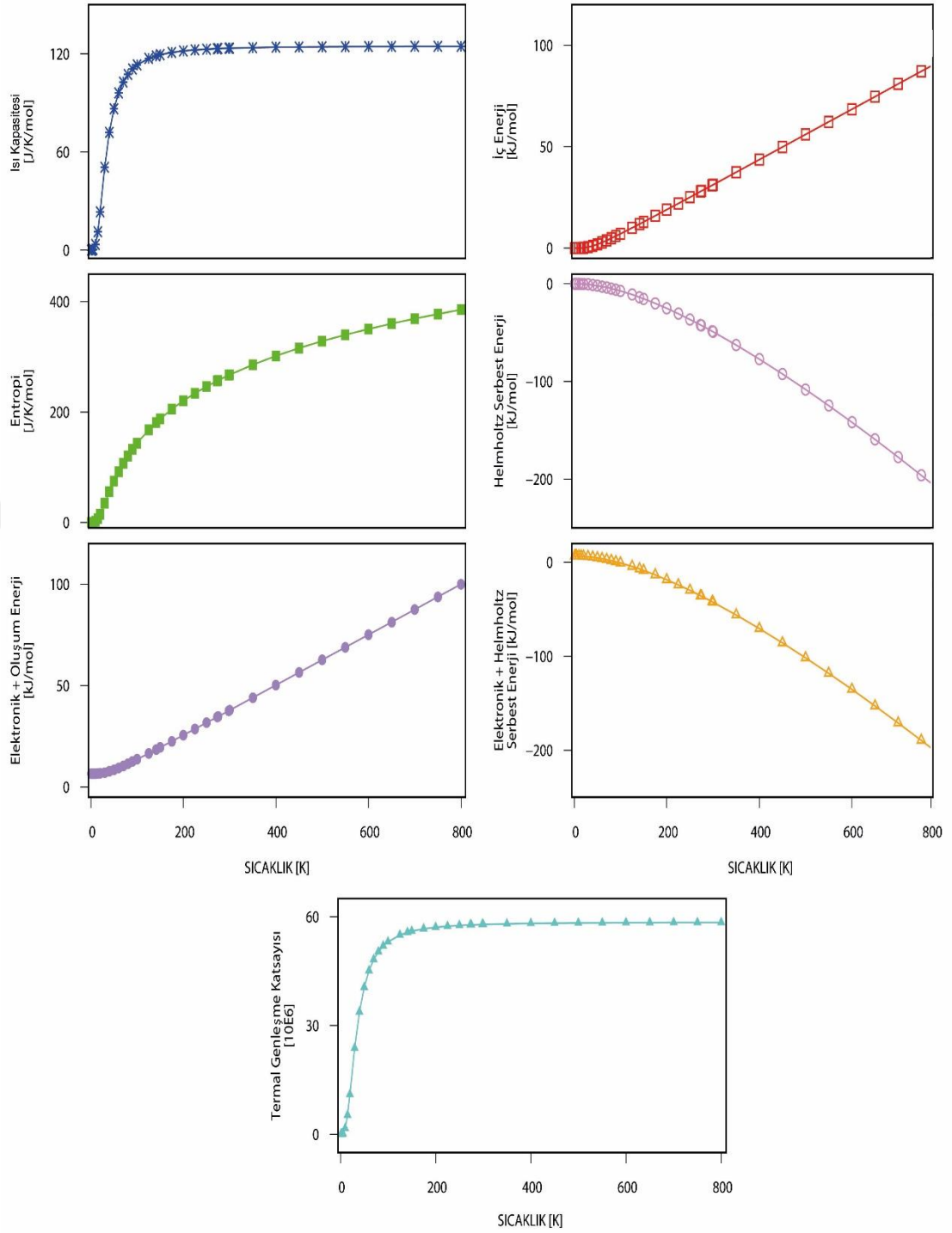
Bileşik	Yapı / Uzay Grubu / No	Sıfır Nokta Enerjisi (kJ/mol)	Kaynak
$\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$	Trigonal / $R\bar{3}$ / 148	5.96	Bu çalışma
$\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$		7.75	Bu çalışma
InGeTe_3	Trigonal / $P\bar{3}1m$ / 162	6.60	Bu çalışma
InSiTe_3		6.63	Bu çalışma



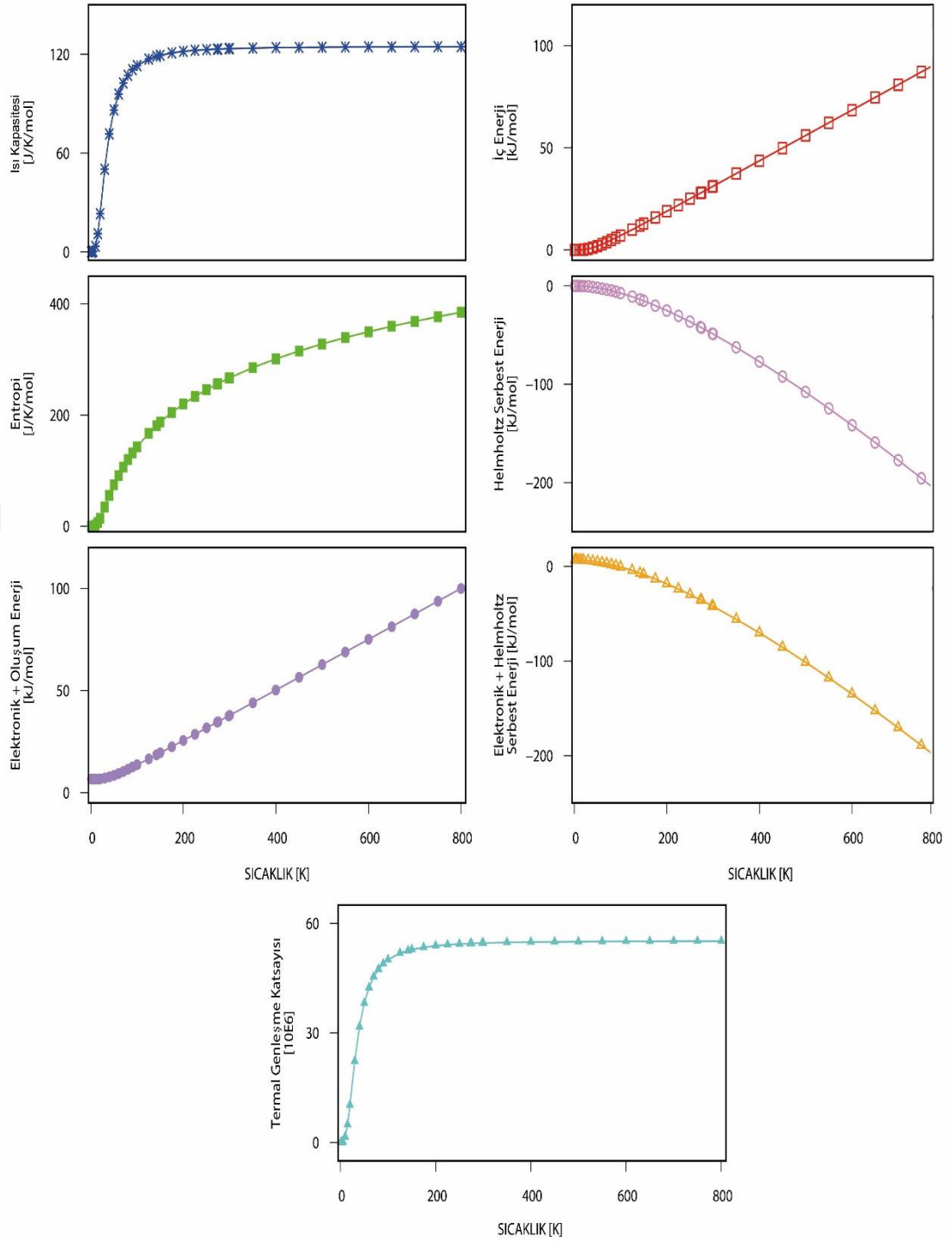
Şekil 4.9. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbest enerji ve termal genleşme katsayısının sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.10. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbest enerji ve termal genleşme katsayısının sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.11. InGeTe₃ bileşiğinin bileşiğinin ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbest enerji ve termal genleşme katsayısının sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.12. InSiTe_3 bileşiğinin ısı kapasitesi, iç enerji, entropi, Helmholtz serbest enerji, elektronik + oluşum enerjisi, elektronik + Helmholtz serbest enerji ve termal genleşme katsayısının sıcaklıkla değişimi.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiklerinin trigonal kristal (uzay grubu $R\bar{3}$, No: 148) yapısı ile InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin trigonal (uzay grubu $P\bar{3}1m$, No: 162) kristal yapısının yapısal, elastik, elektronik ve termodinamik özellikleri MedeA paket programında VASP kodu ile yoğunluk fonksiyoneli teorisine dayanan ab initio metot ile geliştirilmiş grandyent yaklaşımı (GGA) altında incelendi. Hesaplamalarda elektron-iyon etkileşimi için PAW yaklaşımı kullanıldı. Çalışmada elde edilen sonuçlar aşağıda özetlenmiştir.

1. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin yapısal özellikleri geometrik optimizasyon ile hesaplandı. Hesaplanan yapısal parametreler mevcut çalışmalar ile uyum içindedir.
2. Tüm bileşikler termodinamiksel olarak kararlı olup, bileşikler arasında en düşük oluşum enerjisi InSiTe_3 bileşiğin de gözlemlendi. Bu nedenle bu bileşik diğer bileşiklere göre daha kararlıdır.
3. Elastik sabitler hacim korunumlu yöntemi ile hesaplandı. Tüm bileşiklerin Born mekanik kararlılık şartlarını sağladığı görüldü.
4. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiği x eksenı boyunca, InSiTe_3 bileşiği ise z eksenı boyunca sıkıştırmaya karşı en büyük direnci göstermektedir.
5. Shear modülünün en yüksek değere sahip olduğu bileşik $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğidir. Bu sebeple atomlar arası bağın en güçlü bileşik olduğu görülmektedir.
6. Hesaplanan Young modülü $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiği için en yüksek değere sahiptir. Bu sebeple bükülmesi en zor olan bileşiktir.
7. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiği en yüksek, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiği ise en düşük Poisson oranına sahiptir.
8. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinin B/G oranı 1.75 değerinden küçüktür. Bundan dolayı bileşiklerin hepsi kırılğan özelliğe sahiptir.
9. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri arasında Debye sıcaklığı en yüksek olan bileşik $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ 'tür. En düşük değere sahip olan ise $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ 'tür. $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin diğer bileşiklerden daha yüksek termal iletkenliğe sahip olması beklenir.
10. $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşiklerinde en yüksek ses hızına $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin sahip olduğu görüldü.

11. Tüm bileşikler güçlü bir anizotropiye sahip olup, $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiğinin anizotropisi en yüksektir.
12. Hesaplanan elektronik band yapılarına göre tüm bileşikler doğrudan band aralığına sahip olup yarıiletken doğaya sahiptir.
13. En düşük sıfır nokta enerjisi $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bileşiğine aittir.
14. Bütün bileşiklerde ısı kapasitesi düşük sıcaklıklarda hızla artmakta ve T^3 davranışı sergilemektedir.
15. Bütün bileşiklerde iç enerji sıcaklıkla hemen hemen doğru oranda arttığı görülmektedir.
16. Düşük sıcaklıklarda entropi değerinin çok hızlı arttığı görülmektedir. 200 K'in üzerinde ise entropinin değişim hızı azaldığı gözlemlenmiştir.
17. Bileşiklerde Helmholtz serbest enerji sıcaklıkla yaklaşık olarak azalmaktadır.
18. Bütün bileşiklerde düşük sıcaklıklarda termal genleşme katsayısı değerinin çok hızlı arttığı görülmektedir. 150 K'in üzerinde ise değişim hızı azaldığı gözlemlenmiştir.
19. Tez çalışması kapsamında elde edilen sonuçlar değerlendirildiğinde $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, $\text{In}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, InGeTe_3 ve InSiTe_3 bileşikleri termoelektrik uygulamaları yönüyle ön plana çıkan bileşiklerdir.
20. Bu tez çalışmasında bileşiklerin birçok özelliğinin ilk kez incelenmesi termoelektrik malzemelerin geliştirilmesinde önemli bir rehber olacaktır. İncelediğimiz özelliklerin gelecekte yapılacak olan deneysel ve teorik çalışmalara bir kaynak teşkil etmesini beklemekteyiz.

KAYNAKLAR

1. Ouvrard, G., Sandre, E. ve Brec, R., 1988. Synthesis and crystal structure of a new layered phase: The chromium hexatellurosilicate $\text{Cr}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, Journal of Solid State Chemistry, 73, 27–32.
2. Marsh, R., E., 1988. The crystal structure of $\text{Cr}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$: Corrigendum, Journal of Solid State Chemistry, 77, 190-191.
3. Carteaux, V., Brunet, D., Ouvrard, G. ve Andre, G., 1995. Magnetic and electronic structures of a new layered ferromagnetic compound $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, Journal of Physics: Condensed Matter, 7, 69-87.
4. Yang, D., Yao, W., Chen, Q., Peng, K., Jiang, P., Lu, X., Uher, C., Yang, T., Wang, G. ve Zhou, X., 2016. $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$: High Thermoelectric Performance from Layered Structure with High Symmetry, Chem. Mater., 28, 1611–1615.
5. Tang, X., Fan, D., Guo, L., Tan, H., Wang, S., Lu, X., Cao, X., Wang, G. ve Zhou, X., 2018. Achieving higher thermoelectric performance for p-type $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ via optimizing doping, Appl. Phys. Lett. 113, 263902-263907.
6. Liu, Y. ve Petrovic, C., 2019. Anisotropic magnetic entropy change in Cr_2XTe_6 (X=Si and Ge), Phys. Rev. Materials, 3, 014001-014008.
7. Lefèvre, R., Berthebaud, D., Lebedev, O., Pérez, O., Castro, C., Gascoin, S., Chateigner, D. ve Gascoin, F., 2017. Layered tellurides: stacking faults induce low thermal conductivity in the new $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ and thermoelectric properties of related compounds, Journal Of Materials Chemistry A, 5, 19406–19415.
8. Uzun, H., Fındık, F. ve Salman, S., 2008. Malzeme biliminin temelleri, Değişim Yayınları, İstanbul.
9. Pearsall, W. G. ve wuff, j., 1964. The Stusture and Properties of Materials, Vol. I, Structure, John Wiley and Sons, New York.
10. Çolakoğlu, K., 1985. Temel Fizik, baskı 2, Hatiboğlu yayınları, Ankara.
11. Serway, R. A., Beichner, R. J., 2007. Fen ve Mühendislik için Fizik 1, Editör: Prof. Dr. Kemal Çolakoğlu, Palme Yayınları, Ankara.

12. Nguyen, M. D. ve Pettifor, D.G., 1999. Electronic structure, phase stability and elastic moduli of AB transition metal aluminides, *Intermetallics*, 7, 1095–1106.
13. Grimvall, G., 1986. *Thermophysical Properties of Materials*, North-Holland, Amsterdam.
14. Arab, F., Sahraoui, F., A., Haddadi, K., Bouhemadou, A. ve Louail, L., 2016. Phase stability, mechanical and thermodynamic properties of orthorhombic and trigonal MgSiN_2 : an ab initio study, *Phase Transitions*, 88, 0141-1594.
15. Wang, J., Yip, S., Phillpot, S. R. and Wolf, D., 1993. Crystal instabilities at finite strain, *Phys. Rev. Lett.*, 71, 4182-4185.
16. Hill, M. C., 1995. *Fizik*, baskı 1, Litaratür Yayıncılık, İstanbul.
17. Yalçın, H. ve Gürü, M., 2015. *Malzeme Bilgisi*, Palme Yayınevi, Ankara.
18. Borowitz, S., 1982. *Genel Fizik*, baskı 1, Bursa Üniversitesi Basımevi, Bursa.
19. Voigt, W., 1928. “*Lehrbuch der Kristallphysik*”, Teubner, Leipzig, Berlin.
20. Reuss, A., 1929. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grundder Plastizitätsbedingung für Einkristalle, *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 9, 49-58.
21. Hill, R., 1952. The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate, *Proc. Phys. Soc., Section A*, 65, 349-354.
22. Aydın, S., 2014. Ta_3B_4 -tipi TiX_2B_4 (X=Li, Na, Mg ve Ca) bileşiklerinin ilk-prensiplerle incelenmesi, *Politeknik Dergisi*, 18, 133-139.
23. Köksal, F., Köseoğlu, R., 2015. *Katıhal Fiziği*, 1. baskı, Nobel yayınları, Ankara.
24. Ahlatcı, H., 2003. Alüminyum-silisyum karbür kompozitlerin mekanik özelliklerine ve aşınma davranışına takviye boyutunun ve matris bileşiminin etkisi, *Doktora Tezi, İTÜ., Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul*.
25. Aker, A., 2015. Al-Si ötektik alaşımına yapılan katkı elementlerinin (Cu, Co, Ni, Sb ve Bi) mikroyapı ve fiziksel özelliklere etkisinin araştırılması, *Doktora Tezi, Erciyes Ünivrtesi, Fen bilimleri Enstitüsü, Kayseri*.
26. Kayalı, E. S., Ensari, C. ve Dikeç, F., 1996. *Metalik Malzemelerin Mekanik Deneyleri*, İTÜ Kimya-Metalurji Fakültesi Yayını, İstanbul.
27. Caton, M. J., Jones, J. W., Mayer, H., Stanzl, S. ve Allison J. E., 2003. Demonstration of an Endurance Limit in Cast 319 Aluminum, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 34A, 33-41

28. Hayden, H. W., Moffatt, W. G. ve Wulff, J., 1965. The structure and Properties of Materials, Mechanical Behavior, USA.
29. Ozisik, H., 2012. NaIn, NaTl, Na-As, K-As ve Rb-As bileşiklerinin yapısal, mekanik ve elektronik özelliklerinin ab initio yöntemlerle hesaplanması, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
30. Pugh S. F., 1954. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 45, 823-843.
31. Johnston, I., Keeler, G., Rollins, R. ve Spicklemire, S., 1996. Solid State Physics Simulations, The Consortium for Upper-Level Physics Software, John Wiley, New York, USA.
32. Schreiber, E., Anderson, O. L. ve Soga N., 1973. Elastic Constants and their Measurements, McGraw- Hill, New York, USA.
33. Özyar, Ü., 2014. TiSiSb, TiGeSb, ZrSiSb, ZrGeSb, HfSiSb ve HfGeSb bileşiklerinin elastik, elektronik ve titreşimsel özellikleri, Yüksek Lisans Tezi, Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Aksaray.
34. Callister, W.C. ve Rethwisch, D.G., 2013. Materials science and engineering, Kenan, John Wiley & Sons, USA.
35. Miao, N., Sa, B., Zhou, J., ve Sun, Z., 2011. Theoretical investigation on the transitionmetal borides with Ta₃B₄ type structure: A class of hard and refractory materials, Comp. Mater. Sci., 50,1559-1566.
36. Surucu, G., Kaderoglu, C., Deligöz, E. ve Ozisik, H., 2017. Investigation Of Structural, Electronic And Anisotropic Elastic Properties Of Ru-Doped WB₂ Compound By Increased Valence Electron Concentration, Materials Chemistry and Physics, 189, 90-95.
37. Kurth, S., Marques, M. A. L. ve Gross, E. K. U., 2005. Freie Introduction to Condensed Matter Physics, World Scientific, NJ, USA.
38. Oganov, A. R., 2002. Simulasyon Metodları Emu Notes In Mineralogy, 4, 83-170.
39. Sürücü, G., 2014. W_{1-x}Tc_xB₂ (x =0.1~0.9), Pd₃X (X= Ti, Zr, Hf) Alaşımlarının ve Ti_{n+1}GaN_n (n=1,2,3) vilesiklerinin ab initio yöntemlerle incelenmesi, Doktora Tezi, Gazi üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.

40. Özışık H., 2011. GeI_2 , Re_2C , La-Bi ve Ln_2O_3 ($\text{Ln}=\text{Sc, Y, La-Lu}$) bileşiklerinin yapısal, elektronik, mekanik ve titreşimsel özelliklerinin ab initio yöntemlerle incelenmesi, Doktora Tezi, Gazi üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
41. Dirac, P. A. M., 1933. Homogeneous variables in classical dynamics, Proc. Camb. Phil. Soc, 29, 389-400.
42. Deligöz, E., 2007. Bazı ikili (CdS , CdSe , CdTe , CdF_2 , AlBi , BBi) bileşiklerin yapısal, elektronik, elastik, termodinamik ve titreşimsel özelliklerinin ab initio yöntemle incelenmesi, Doktora tezi, Gazi üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
43. Kresse, G. ve Hafner, J., 1993. Ab initio molecular dynamics for liquid metals, Physical Review B, 47, 558-561.
44. Kresse, G. ve Furthmüller, J., 1996. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set, Comput. Mater. Sci., 6, 15-50.
45. Kresse, G. ve Furthmüller, J., 1996. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, Physical Review B, 54, 11169-11186.
46. Perdew, J. P., Burke ve K., Ernzerhof, M., 1996. Generalized Gradient Approximation Made Simple, Phys. Rev. Lett., 77, 3865-3868.
47. Kresse, G. ve Joubert, D., 1999. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, Phys. Rev. B, 59, 1758-1775.
48. Monkhorst, H. ve Pack, J., 1976. Special points for Brillouinzone integrations, Phys. Rev. B, 13, 5188-5192.
49. Yvon, L. ve Saxe, P., 2002. Symmetry general least-squares extraction of elastic data for strained materials from ab initio calculations of stress, Phys. Rev. B, 65, 104104-104118.
50. Deligoz, E., Ozisik, H., Ozisik B. H., 2018. Calculation of the stability and mechanical and phonon properties of NbRuB , TaRuB , and NbOsB compounds, Philosophical Magazine, 99, 328-346.
51. Deligoz, E., Ozisik, H. ve Colakoglu, K., 2014. Theoretical predictions of the structural, mechanical and lattice dynamical properties of XW_2 ($\text{X}=\text{Zr, Hf}$) Laves phases, Philosophical Magazine, 94, 379-392.
52. Young, A. F., Sanloup, C., Gregoryanz, E., Scandolo, S., Hemley, R. J. ve Mao, H. K., 2006. Synthesis of novel transition metal nitrides IrN_2 and OsN_2 , Phys. Rev. Lett, 14, 6989-6994.
53. Liu, Y., Hu, W. C., Li, D. J., Li, K. Jin, H. L., Xu, Y. X., Xu, C. S. ve Zeng, X. Q., 2015. Mechanical, electronic and thermodynamic properties of C14-type

AMg₂ (A=Ca, Sr and Ba) compounds from first principles calculations, Comp. Mater. Sci., 97, 75-85.

54. Gaillac, R., Pullumbi, P. ve Coudert, F. X., 2016. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors, Journal of Physics: Condensed Matter, 28, 275201. URL adres: <http://progs.coudert.name/elate>
Eriřim tarihi: 07.08.2018.

URL-1 Materials Design Kullanım Kılavuzu. < <http://www.materialsdesign.com>>, Son Eriřim tarihi: 07.08.2018.

URL-2 Vasp Kullanım Kılavuzu. < <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/vasp.html>>, Son Eriřim tarihi: 07.08.2018.



ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı : Mehmet Abdurrahman KORKMAZ
Adres :ANKARA
E-posta adresi : mehmetabdurrahmankorkmaz@gmail.com

EĞİTİM BİLGİLERİ (Kurum ve Yıl)

Lisans : Azerbaycan Devlet Pedagoji Üniversitesi,
Fizik bölümü, 2008 -2 013
Yüksek Lisans : Aksaray Üniversitesi, Fizik A.B.D., 2015-

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLERİ

1. Türkiye Atom Enerjisi Kurumu 2014-Devam

TEZDEN ÜRETİLEN YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER

1. M. A. Korkmaz, E. Deligöz, H. Özışık, “ $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ Bileşiğinin Mekanik Ve Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi”, 23. Yoğun Madde Fiziği – Ankara Toplantısı, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, 22 Aralık 2017.

DİĞER YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER

1. M. A. Korkmaz, E. Deligöz, H. Özışık, “ VCoSb Bileşiğinin Mekanik Ve Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi”, 22. Yoğun Madde Fiziği – Ankara Toplantısı, Ankara Üniversitesi, 16 Aralık 2016.