

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

**İKİ BOYUTLU BİZMUT İÇEREN İLİNGESEL
YALITKANLARIN KURAMSAL OLARAK
İNCELENMESİ**

DOKTORA TEZİ

Bahadır SALMANKURT

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK
Tez Danışmanı : Prof. Dr. Yusuf ATALAY
Ortak Danışman : Doç. Dr. Hikmet Hakan GÜREL

Haziran 2021

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ BOYUTLU BİZMUT İÇEREN İLİNGESEL
YALITKANLARIN KURAMSAL OLARAK
İNCELENMESİ

DOKTORA TEZİ

Bahadır SALMANKURT

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

BEYAN

Tez içindeki tüm verilerin akademik kurallar çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, görsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçların akademik ve etik kurallara uygun şekilde sunulduğunu, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunulduğunu, tezde yer alan verilerin bu üniversite veya başka bir üniversitede herhangi bir tez çalışmasında kullanılmadığını beyan ederim.

Bahadır SALMANKURT

30.06.2021

TEŞEKKÜR

Doktora eğitimim boyunca değerli bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım, her konuda bilgi ve desteğini almaktan çekinmediğim, araştırmanın planlanmasından yazılmasına kadar tüm aşamalarında yardımlarını esirgemeyen, teşvik eden, aynı titizlikte beni yönlendiren değerli danışman hocalarım Prof. Dr. Yusuf ATALAY ve Doç. Dr. Hikmet Hakan GÜREL’e teşekkürlerimi sunarım.

Bu tez çalışması, Doç. Dr. Hikmet Hakan GÜREL yürütücülüğündeki 114F453 nolu “Grafen Tabanlı Biyoalgılayıcılar” konulu Tubitak 3501 projesi tarafından desteklenmiştir. Bu konuda hocama teşekkürlerimi tekrardan sunarım.

Ayrıca maddi ve manevi açıdan desteklerini hiç esirgemeyen Anneme, Kardeşime ve özellikle rahmetli Babama şükranlarımı sunarım.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ	v
ŞEKİLLER LİSTESİ	vii
TABLolar LİSTESİ	xii
ÖZET	xiii
SUMMARY	xiv
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ	1
BÖLÜM 2.	
KAYNAK ARAŞTIRMASI	4
2.1. Hall Ailesi	6
2.1.1. Hall etkisi (HE).....	6
2.1.2. Tuhaf hall etkisi (THE).....	6
2.1.3. Spin hall etkisi (SHE).....	7
2.1.4. Kuantum hall etkisi (KHE).....	7
2.1.5. Kuantum Spin hall etkisi (KSHE).....	7
2.1.6. Kuantum tuhaf hall etkisi (KTHE).....	8
2.2. İlingesel Yalıtkanlar	9
BÖLÜM 3.	
MATERYAL VE YÖNTEM	12
3.1. Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı (YFK).....	12

3.2. Temel Set ve Yapay Potansiyeller.....	14
3.2.1. Temel set.....	14
3.2.2. Yapay potansiyeller.....	15
3.3. Kullanılacak Programlar ve Parametreleri.....	16
3.3.1. Quantum Espresso program parametreleri.....	16
3.3.2. Siesta program parametreleri.....	16

BÖLÜM 4.

ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA.....	17
4.1. Yapısal, Elektronik ve Titreşimsel Özellikler.....	17
4.1.1. Yapısal özellikler.....	17
4.1.2. Elektronik özellikler.....	18
4.1.3. Titreşimsel özellikler.....	21
4.2. Moleküler Dinamik (MD).....	22
4.2.1. Kusursuz durumlar için MD.....	24
4.2.2. Kusurlu durumlar için MD ve elektronik özellikleri.....	24
4.2.3. Kusurlu durumları iyileştirme özellikleri.....	27
4.3. Elektrik Alan Uygulanması.....	33
4.4. Germe Etkisinin İncelenmesi.....	35
4.5. Yüzeylerin İşlevselleştirilmesi.....	36
4.5.1. Etkileşim enerjileri ve yapılar.....	36
4.5.2. Elektronik özellikler.....	46
4.5.2.1. Manyetizasyon kazanmış durumlar.....	46
4.5.2.2. Manyetizasyon kazanmamış durumlar.....	49
4.5.2. MD ile kararlılıkların belirlenmesi.....	51
4.5. Moleküllerle Etkileşim.....	52
4.6.1. Saf yapıların moleküllerle etkileşimi.....	53
4.6.1.1. Küçük moleküllerle olan etkileşim.....	54
4.6.1.2. Büyük moleküllerle olan etkileşim.....	59
4.6.2. Boşluk kusurlu durumların moleküllerle etkileşimi.....	63
4.6.3. İşlevselleştirilmiş durumların moleküllerle etkileşimi.....	63
4.6.4. Yük ekleme/çıkarma etkileri.....	66

4.6.4.1. Küçük moleküllerle olan etkileşim.....	66
4.6.4.2. Büyük moleküllerle olan etkileşim.....	67

BÖLÜM 5.

SONUÇ VE ÖNERİLER.....	69
------------------------	----

KAYNAKLAR	71
-----------------	----

ÖZGEÇMİŞ	82
----------------	----



SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

2B	: İki Boyutlu
3B	: Üç Boyutlu
vdW	: van der Waals
GGY	: Genelleştirilmiş Gradyen Yaklaşımı
Ps	: Pikosaniye
Å	: Angstrom
BO	: Born-Oppenheimer
BFGS	: Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
BYY	: Bölgesel Yoğunluk Yaklaşımı
Cyt	: Sitozin
DA	: Dopamin
eV	: Elektronvolt
GMD	: Geçiş Metalleri Dikalkojenler
GR	: Grafen
H	: Manyetik Alan
HF	: Hartre-Fock
HK	: Hohenberg-Konh
HE	: Hall Etkisi
KS	: Kohn-Sham
KHE	: Kuantum Hall Etkisi
KTHE	: Kuantum Tuhaf Hall Etkisi
KSHE	: Kuantum Spin Hall Etkisi
KSHY	: Kuantum Spin Hall Yalıtkanlar
MD	: Moleküler Dinamik
PSS	: Periyodik Sınır Şartı
PBE	: Perdew-Burke-Ernzerhof

SYE	: Spin-Yörünge Etkileşimi
SHE	: Spin Hall Etkisi
SW	: Stone-Wales
THE	: Tuhaf Hall Etkisi
YFK	: Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramı
QE	: Quantum Espresso



ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1. GR'nin üstten ve yandan görünüşü, b) GR'nin elektronik band yapısı. Mavi ile gösterilen Fermi seviyesidir.....	4
Şekil 2.2. Bir adet geçiş metal atomu Fe ile işlevselleştirilmiş MoS ₂ yapısı.....	5
Şekil 2.3. a) 2B Bor-Nitrür üzerine tutunmuş CO ₂ molekülü. b) Çok yüksek elektrik alan etkisi altında meydana gelen şekil değişikliği c) Elektrik alan etkisinde kutuplanma.....	5
Şekil 2.4. Hegzagonal 2B Boron-Nitrat'da oluşturulmuş boşluk kusurları.....	6
Şekil 2.5. Hall Ailesinin davranışlarının 3 boyutlu gösterimi.....	8
Şekil 2.6. Hall Ailesinin davranışlarının 2 boyutlu gösterimi.....	9
Şekil 2.7. a) SYE dahil edildiğinde (turuncu olan band yapısı) p _y ile p _z -p _x bandları yer değiştirmektedir. b) bir yarımetalın SYE sonucunda band aralığının oluşması, m<0 ise bandların sırasının ters olmadığını işaret eder c) SYE sonucunda bandların yer değiştirmesi.....	10
Şekil 3.1. Çekirdek, öz (kor) elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş bir atom. Taralı bölge öz bölgesini göstermektedir.....	15
Şekil 4.1. (a) GaBi, InBi ve (b) GaBi ₃ , InBi ₃ yapısının üstten ve yandan görünümü. Yeşil renkle gösterilenler Ga ya da In, mor ile gösterilenler ise Bi atomunu temsil etmektedir. Ayrıca birim hücreler ise gri çizgiler ile gösterilmiştir.....	17
Şekil 4.2. GaBi'nin SYE olmadığı ve olduğu durumların band yapıları. Eg band aralığını göstermektedir.....	19
Şekil 4.3. InBi'nin SYE olmadığı ve olduğu durumların band yapıları. Eg band aralığını göstermektedir.....	19
Şekil 4.4. GaBi ₃ 'ün SYE olmadığı ve olduğu durumların band yapıları. Eg band aralığını göstermektedir.....	20
Şekil 4.5. InBi ₃ 'ün SYE olmadığı ve olduğu durumların band yapıları. Eg band	

aralığını göstermektedir.....	20
Şekil 4.6. Fonon dağınım grafikleri.....	21
Şekil 4.7. Kusursuz durumları için MD enerji sonuç grafikleri.....	24
Şekil 4.8. Bi atomunun eksikliği durumunda enerji grafikleri.....	25
Şekil 4.9. Ga ya da In atomu eksikliği durumundaki enerji grafikleri.....	26
Şekil 4.10. (a) GaBi, (b) InBi (c) GaBi ₃ ve (d) InBi ₃ için Bi atomu eksik durumları için band yapıları. Fermi seviyesi 0'a kaydırılmıştır.....	27
Şekil 4.11. (a) GaBi, (b) InBi (c) GaBi ₃ ve (d) InBi ₃ için In ya da Ga atomu eksik durumları için band yapıları. Fermi seviyesi 0'a kaydırılmıştır.....	28
Şekil 4.12. Bi atomu eksik olup Ge ile iyileştirilme durumları.....	29
Şekil 4.13. In ya da Ga eksik olup Ge ile iyileştirilme durumları.....	29
Şekil 4.14. (a) GaBi ve (b) InBi ₃ için MD hesabı sonucu oluşan SW kusurları yapı bozulması. Yeşil, mor, turuncu ve gri ile gösterilenler sırasıyla Ga, Bi, In ve Ge atomlarını temsil etmektedirler.....	30
Şekil 4.15. Bi atomu eksik olan durumlarda Bi ile iyileştirme durumları.....	31
Şekil 4.16. Ga ya da In atomu eksikliğinde kendi atomları ile iyileştirilme durumları.....	31
Şekil 4.17. Elektrik alan yönünün üstten ve yandan gösterimi.....	33
Şekil 4.18. SYE'nin var olmadığı durum için band yapıları. Elektrik alanın birimi V/A 'dur.....	34
Şekil 4.19. SYE'nin var olduğu durum için band yapıları. Elektrik alanın birimi V/A 'dur. Eg band aralığını ifade etmektedir.....	35
Şekil 4.20. SYE dâhilinde uygulanan elektrik alanın şiddetine bağlı olarak band aralıklarının ve örgü sabitlerinin yüzdesel değişimi.....	35
Şekil 4.21. Atomların bağlanma enerjileri.....	37
Şekil 4.22. İki boyutlu yapılardaki bölgelerin temsili. K köprü, B boşluk ve Ü ise üst olarak belirtilmiştir.....	37
Şekil 4.23. GaBi yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. Ga yeşil, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.....	38
Şekil 4.24. GaBi yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. Ga yeşil, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen	

atomlardır.....	39
Şekil 4.25. InBi yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. In turuncu, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.....	40
Şekil 4.26. InBi yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. In turuncu, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.....	41
Şekil 4.27. GaBi ₃ yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. Ga yeşil, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.....	42
Şekil 4.28. GaBi ₃ yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. Ga yeşil, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.....	43
Şekil 4.29. InBi ₃ yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. In soluk mor, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.....	44
Şekil 4.30. InBi ₃ yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. In soluk mor, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.....	45
Şekil 4.31. Al atomu ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade Al atomu üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.....	46
Şekil 4.32. B atomu ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade B atomu üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.....	47
Şekil 4.33. Ti atomu ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade Ti atomu üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.....	47
Şekil 4.34. V atomu ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları.	

Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade V atomu üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.....	47
Şekil 4.35. Na ve Li atomları ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade Na ve Li atomları üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir...	48
Şekil 4.36. C atomunun ilingesel malzemelerle işlevselleştirilmesi sonucu oluşan band yapıları.....	49
Şekil 4.37. Li ve Na atomunun ilingesel malzemelerle işlevselleştirilmesi sonucu oluşan band yapıları.....	50
Şekil 4.38. O atomunun ilingesel malzemelerle işlevselleştirilmesi sonucu oluşan band yapıları.....	51
Şekil 4.39. İşlevselleştirilmiş yapıların MD sonuçları.....	52
Şekil 4.40. Küçük moleküllerin etkileşim Enerjileri (eV cinsinden).....	53
Şekil 4.41. İki boyutlu yapıların CH ₄ ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, kahverengi ve pembe sırasıyla Bi, In, Ga, C ve H atomlarını temsil etmektedir.....	55
Şekil 4.42. İki boyutlu yapıların CO ₂ ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, kahverengi ve kırmızı sırasıyla Bi, In, Ga, C ve O atomlarını temsil etmektedir.....	56
Şekil 4.43. İki boyutlu yapıların H ₂ O ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, pembe ve kırmızı sırasıyla Bi, In, Ga, H ve O atomlarını temsil etmektedir.....	57
Şekil 4.44. İki boyutlu yapıların N ₂ ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil ve mavi sırasıyla Bi, In, Ga ve N atomlarını temsil etmektedir.....	58
Şekil 4.45. İki boyutlu yapıların H ₂ ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil ve pembe sırasıyla Bi, In, Ga ve H atomlarını temsil etmektedir.....	59
Şekil 4.46. İki boyutlu yapıların DA ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, mavi, kahverengi, kırmızı ve pembe sırasıyla Bi, In,	

Ga, N, C, O ve H atomlarını temsil etmektedir.....	61
Şekil 4.47. İki boyutlu yapıların Cyt ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, mavi, kahverengi, kırmızı ve pembe sırasıyla Bi, In, Ga, N, C, O ve H atomlarını temsil etmektedir.....	62
Şekil 4.48. GR'nin Cyt ile oluşturduğu kararlı durumlar. kahverengi, kırmızı, pembe ve mavi sırasıyla C, O, H ve N atomlarını temsil etmektedir.....	62
Şekil 4.49. İşlevselleştirilmiş ve saf InBi ve GaBi yapılarının molekülerle etkileşimlerinin karşılaştırılması.....	64
Şekil 4.50. İşlevselleştirilmiş ve saf InBi ₃ ve GaBi ₃ yapılarının molekülerle etkileşimlerinin karşılaştırılması.....	64
Şekil 4.51. Yük ekleme/çıkarma durumunda etkileşim enerjileri. vdw, n1 ve p1 sırasıyla nötr, sisteme 1 elektron eklenmiş ve sistemden 1 elektron çıkarılmış durumları temsil etmektedir.....	66
Şekil 4.52. Yük ekleme/çıkarma durumunda etkileşim enerjileri. vdw, n1 ve p1 sırasıyla nötr, sisteme 1 elektron eklenmiş ve sistemden 1 elektron çıkarılmış durumları temsil etmektedir.....	67
Şekil 4.53. Yük ekleme/çıkarma durumunda etkileşim enerjileri. vdw, n1 ve p1 sırasıyla nötr, sisteme 1 elektron eklenmiş ve sistemden 1 elektron çıkarılmış durumları temsil etmektedir.....	68

TABLÖLAR LİSTESİ

Tablo 4.1. QE programı ile elde edilen örgü sabitleri literatürdeki sonuçlarla birlikte gösterilmiştir. a ile gösterilen ifade bu çalışmaya aittir. Örgü sabiti Å cinsindendir. Band aralıkları ise (meV) cinsindendir.....	18
Tablo 4.2. Malzemelerin iyileştirme sonucunda son durumları ve kararlılıkları.....	32
Tablo 4.3. Küçük moleküllerin etkileşim enerjileri (eV cinsinden).....	54
Tablo 4.4. Büyük moleküllerin etkileşim enerjisi (eV cinsinden).....	60
Tablo 4.5. Bi eksik durumların moleküllerle etkileşim enerjileri (eV cinsinden)....	63
Tablo 4.6. Etkileşim enerjileri (eV cinsinden).....	64
Tablo 4.7. Etkileşim enerjileri (eV cinsinden).....	64

ÖZET

Anahtar kelimeler: Nanoteknoloji, Modelleme ve Simülasyon, Enerji depolama, Biyoteknolojik ilaç teknolojileri, Moleküler dinamik, Yoğunluk fonksiyonel kuramı, Elektronik özellikler

Bu çalışmada, nanoteknolojik malzemeler olarak bilinen ve bizmut içeren iki boyutlu ilingesel yalıtkanların özellikleri ve molekülerle etkileşimi yoğunluk fonksiyonel kuramına dayalı modelleme ve simülasyon programları ile incelenmiştir. Elde ettiğimiz örgü parametreleri ve band aralıkları literatürdeki sonuçlarla uyum içindedir. Fonon dağınım grafiğinde InBi ve GaBi kararlı gözükmemektedir. Kusursuz durumlar için yapılan moleküler dinamik hesaplarında tüm yapıların kararlı olduğu bulunmuştur. Moleküler dinamik sonuçlarına göre boşluk kusurlu durumlarda ise sadece InBi₃ için yapı bozulmaya uğramaktadır. Band yapıları incelendiğinde tüm boşluk kusurlu durumlarda ilingesel yalıtkan özelliklerinin ortadan kalktığı görülmektedir. Benzer şekilde, boşluk kusurlu durumları iyileştirmek için dışarıdan gönderilen atomlar InBi₃ ve InBi hariç genel olarak başarılı olmuşlardır. Yüzeye dik olarak elektrik alan uygulandığında GaBi ve InBi için band aralıkları artmakta, GaBi₃ ve InBi₃ için azalmaktadır. Elektrik alan uygulanması aynı zamanda örgü sabitinin artmasına neden olmaktadır. Yüzeyler belli atomlarla işlevselleştirildiğinde 1,60 – 6,50 eV arasında bağlanma enerjileri elde edilmiştir. Periyodik tabloda soldan sağa doğru gidildikçe genel olarak atomların bağlanma enerjisinin arttığı gözlemlenmektedir. C atomu ile işlevselleştirilen tüm malzemeler kararlıdır ve ilingesel yalıtkan özellik göstermeye devam etmişlerdir. Ayrıca bu kararlılık ve ilingesel özellik GaBi ve InBi'nin O atomu ile yaptığı etkileşimde de geçerlidir. Küçük moleküllerin saf yapılarla etkileşim enerjileri genel olarak zayıftır. Fakat saf GaBi₃ ve InBi₃'ün su ile yaptığı etkileşimde güçlü bir etkileşim enerjisi elde edilmiştir. Büyük moleküllerle etkileşim ise büyük enerjiye sahip olduğu görülmüştür. Son olarak sistemin yükünü değiştirmenin etkileşim enerjilerini pek etkilemediği saptanmıştır.

THEORETICAL INVESTIGATION OF Bi-CONTAINING TWO DIMENSIONAL TOPOLOGICAL INSULATORS

SUMMARY

Keywords: Nanotechnology, Modeling and Simulation, Energy storage, Biotechnological drug technologies, Molecular dynamics, Density functional theory, Electronic properties

In this study, the properties and interactions of Bi-containing two-dimensional topological insulators, known as nanotechnological materials, and their interaction with the molecules were investigated by modeling and simulation programs based on Density Functional Theory. The structural parameters and band gap values we have obtained are in accordance with the results in the literature. The phonon band structure results indicate that InBi and GaBi are stable in the ground state. According to the molecules dynamic results, the pristine structures are found to be stable. However, the results vacancy defect of molecular dynamics shows that only for InBi₃ the structure is disrupted. When the band structures are examined, it is seen that in all vacancy defect cases, the topological insulator properties were disappear. Likewise, the atoms sent from outside to heal the vacancy-defect conditions have generally been successful, except for InBi₃ and InBi. When the electric field is applied perpendicular to the surface, the band gaps increase for GaBi and InBi and decreases for GaBi₃ and InBi₃. The application of electric field also causes an increase in the lattice constant. When the surfaces are functionalized with certain atoms, binding energies between 1,60 – 6,50 eV have been obtained. In general, the binding energy of the atom increases from left to right in the periodic table. All materials functionalized with C atom are stable and continued to exhibit a topological insulator property. In addition, this stability and topological property are also available in the interaction of GaBi and InBi with O atom. Generally, small molecules have weak energy with pristine structures. However, a strong interaction energy was obtained for pristine GaBi₃ and InBi₃ with water. The interaction energy of the big molecules with the monolayers has bigger energies compared to others. Lastly, it has been determined that changing the total charge of the system does not affect the interaction energies so much.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Grafen (GR)'nin 2004 yılında sentezlenmesinden sonra iki boyutlu nano yapılara olan ilgi özellikle akademik çevre ve endüstride olağanüstü bir şekilde artmıştır. Sahip oldukları elektronik özelliklerinden dolayı yüksek hızlı elektronik ve optik cihazlar, enerji üretme ve depolama, hibrit malzemeler gibi alanlarda kullanımı yaygınlaşmaya başlamıştır. Diğer yandan sahip oldukları yüksek yüzey alanlarından ötürüde, optoelektronik, kimyasal ve biyolojik sensör, güneş hücreleri, lityum-iyon pilleri, magnetoelektronik, gaz tutma ve depolama gibi birçok çeşitli uyulama alanlarında önemli bir yere sahiptir.

Eşsiz özelliklere sahip yeni iki boyutlu malzemeleri keşfetmek adına hem teorik hem de deneysel yollar kullanılmaktadır. Bu zamana kadar yürütülen çalışmalarda, bal peteği yapısına sahip GR ile birlikte silisen, germanen, boron-Nitrat, stanen, fosforen örnek olarak verilebilir. Ayrıca geçiş metalleri ($M=Mo, W, Nb, Re, Ni$ ya da V) ile kalkojenlerin (VI-A grubu; $X=O, S, Se, Te$) oluşturduğu iki boyutlu geçiş metalleri-dikalkojenler (GMD) (MX_2 'li bileşikler) de mevcuttur. Bunlara ek olarak IV-A ve VI-A gruplarının oluşturabileceği AB ve AB_2 yapılı ($A= Si, Ge, Sn$; $B=S, Se, Te$) malzemeler de sahip oldukları özelliklerden dolayı dikkat çekmektedir.

İki boyutlu nano dünyada çok yeni ve ilginç özelliklere sahip malzemelerden biri de ilingesel (topolojik) yalıtkanlardır (ya da KSHY). Bu tür malzemeler hem iki hem de üç boyutlu bileşiklere sahiptirler. “Maddenin ilingesel fazları ve ilingesel faz geçişlerinin teorik keşfi” adlı çalışma ile 2016 Nobel fizik ödülünü alan bilim insanlarının (David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane ve J. Michael Kosterlitz) çalışmaları özellikle ilingesel yalıtkanlar için önemli olmuştur. Bu ödül, ilingesel yalıtkanların ne kadar yeni ve önemli olduğunu göstermektedir. Dolayısıyla bu tür malzemeler için yeni uygulama alanları araştırmak bir zorunluluk haline gelmiştir.

İlingesel yalıtkanlar yüksek yük taşıma mobilitesine sahiptir, spintronik ve kuantum hesaplama gibi alanlarda kullanılmaktadır. Bu özelliğe sahip malzemelerde, spin-yörünge etkileşimi incelendiğinde, valans bandı ile iletkenlik bantlarının yerlerinin sıra değiştirdiği (bant evrilmesi -band inversion- olarak adlandırılır) gözlemlenmektedir ki bu da ilingesel yalıtkan dediğimiz, yalıtkanın özel bir haline sahip olduğunun önemli bir göstergesidir. Böyle bir durumda malzemenin yüzeyi elektron iletebilen hale gelmektedir. Burada SYE, ilingesel özelliğe sebep olan tek etki değildir, fakat önemli bir yere sahiptir. Dolayısıyla SYE'ne sahip malzemelerden ilingesel yalıtkan özellikte bileşikler çıkması muhtemeldir.

Yeni yüksek spin-yörünge enerji bant aralıklı ilingesel yalıtkanlar bulmak adına büyük bir çaba sarf edilmeye devam etmektedir. Bu özelliklere sahip malzemelerin iki boyutlularını incelemek dikkat çekici sonuçlar verebilmektedir. Örneğin, iki boyutlu olarak, bal peteği yapısına sahip silisen, germanen ya da stanen gibi malzemeler önerilmiştir. İlingesel yalıtkan özelliğe sahip materyallerden bazıları özellikle Bi (Bizmut) içeren malzemelerde olması beklenmektedir çünkü periyodik tabloda SYE en yüksek olan element bizmuttur. Dolayısıyla bizmut içeren malzemelerin özelliklerini araştırmak, ilingesel yalıtkan özelliğine sahip bileşikleri bulmada faydalı olacaktır.

III-A grubu elementlerinin Bizmut ile yaptıkları ($X\text{-Bi}$, $X\text{-Bi}_3$; $X=\text{Ga, In}$) bileşikler bu konuda dikkat çeken malzemeler arasında bulunmaktadır. Dolayısıyla bu bileşiklerin keşfedilmeyen yeni özelliklerini ortaya çıkarmak literatüre önemli bir katkı sağlayacak ve teknolojiye hayatımızı kolaylaştıracak yeni malzemeleri keşfetmemize ışık tutacaktır.

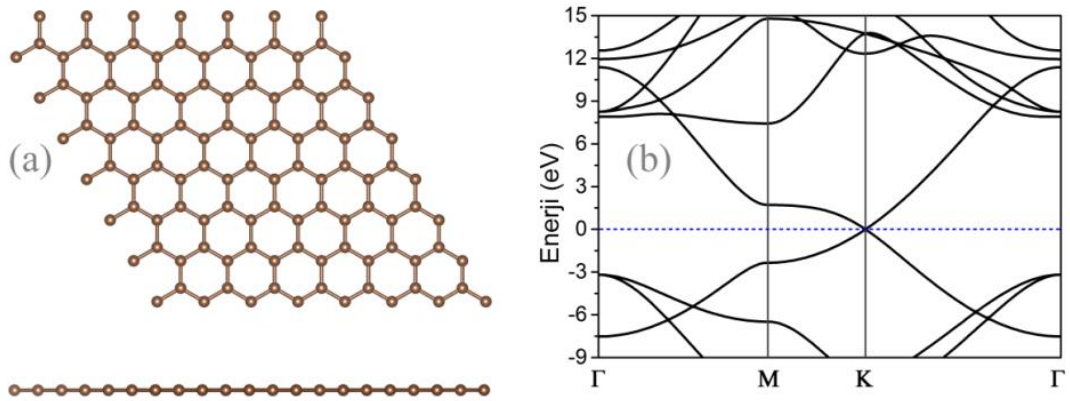
Bu çalışmada, Yoğunluk Fonsiyoneli Kuramı (YFK) kullanılarak, öncelikle, malzemelerin ($X\text{-Bi}$, $X\text{-Bi}_3$) yapısal ve elektronik özelliklerine bakılacak ve literatürde bulunan verilerle karşılaştırılacaktır. Malzemelerde oluşabilecek kusurların (atom eksikliği) ve Li, Na, Ti, V, B, C, O, Al gibi atomlarla işlevselleştirilmesi sonucunda yapısal (kararlılık) ve elektronik (band yapısı)

özelliklerinde oluşabilecek değişimler incelenecektir. Yüzeye dik elektrik alan uygulama ve yüzeyi germe etkisi de araştırılacaktır. Ayrıca H_2O , CO_2 , N_2 , H_2 , CH_4 , sitozin (Cyt) ve dopamin (DA) gibi moleküllerle etkileşimine bakılacaktır. Özellikle hidrojen (H_2) ve doğalgaz (çoğunlukla CH_4) tutabilme (depolama) özellikleri incelenecek, kusur ya da işlevselleştirme ile bu moleküllerin etkileşim enerjileri üzerine etkisi çalışılacaktır. Karbondioksit (CO_2) gibi çevreye zarar veren gazları tutma özelliğine de ayrıca bakılacaktır. Son olarak yük ekleme/çıkarmanın etkileşim enerjisini nasıl değiştirdiğine bakılacaktır. Yapılacak bu çalışmaların tümü daha önceden çalışılmadığından literatüre önemli bir katkı sağlayacaktır.



BÖLÜM 2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

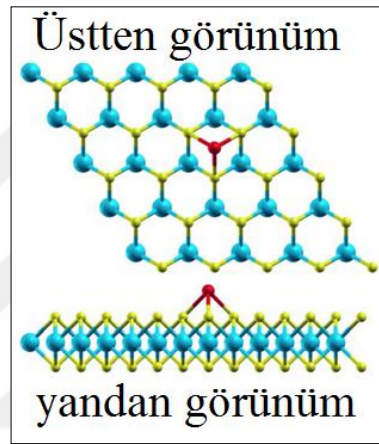
Andre Geim ve arkadaşları 2004 yılında bilim dünyası için çok önemli olan GR'ni keşfetmişlerdir ve bundan ötürü de 2010 yılında Nobel ödülüne layık görülmüşlerdir [1-2]. GR, bir atom kalınlığında iki boyutlu malzeme olup bal peteğine benzer bir dizilime sahiptir ve sadece C (karbon) atomlarından oluşmaktadır (Şekil 2.1.(a)) [3]. GR yarımetal bir özelliğe sahiptir ve band yapısı Şekil 2.1.(b) deki gibidir. Ayrıca yüksek elektrik-thermal iletkenlik ve mekanik dayanıklılığa da sahiptir [4-5]. Bu özelliklerin yanısıra kimyasal ve biyolojik sensör, optoelektronik, lityum-iyon pilleri, gaz tutma ve depolama gibi birçok çeşitli uygulama alanlarında önemli bir yer tutmaktadır [6-10]. Bilim insanları sadece GR ile yetinilemeyeceğini düşünmüş ve eşsiz özelliklere sahip yeni iki boyutlu malzemeleri keşfetmek adına hem kuramsal hem de deneysel çalışmalar yapmaya başlamışlardır.



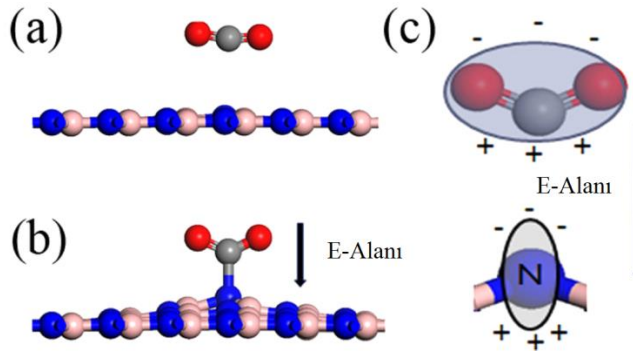
Şekil 2.1. (a) GR'nin üstten ve yandan görünüşü, (b) GR'nin elektronik band yapısı. Mavi ile gösterilen Fermi seviyesidir.

Bu zamana kadar yürütülen çalışmalarda, bal peteği yapısına sahip GR ile birlikte Silisen, Germanen, Boron-Nitrat, Stanen, Fosforen gibi kararlı yapıların farkına varılmıştır [11-15]. Ayrıca geçiş metalleri (M=Mo, W, Nb, Re, Ni ya da V) ile

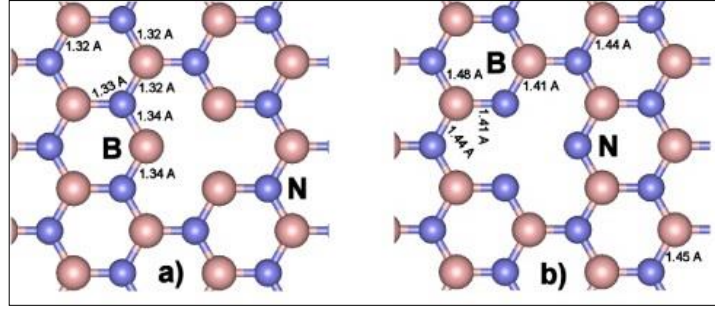
kalkojenlerin (VI-A grubu, $X=O, S, Se$ ve Te) oluşturduğu iki boyutlu geçiş GMD (MX_2 li bileşikler) de mevcuttur [16-18]. Bunlara ek olarak IV-A ve VI-A gruplarının oluşturabileceği AB ve AB_2 yapılı ($A= Si, Ge, Sn$; $B=S, Se, Te$) malzemeler de sahip oldukları özelliklerden dolayı dikkat çekmektedir [20-24]. Bu malzemelerin çoğunda atom boşluk kusuru oluşturma, atomlarla işlevselleştirme, elektrik alan uygulama ve yük ekleme/çıkarma gibi yöntemlerin uygulanmasıyla özelliklerinin değişimi incelenmiştir [10, 25-52]. Ayrıca birçok gaz ve biyolojik molekülleri tutma özelliklerine de bakılmıştır [53-63].



Şekil 2.2. Bir adet geçiş metal atomu Fe ile işlevselleştirilmiş MoS_2 yapısı [31].



Şekil 2.3. (a) 2B Bor-Nitrür üzerine tutunmuş CO_2 molekülü. (b) Çok yüksek elektrik alan etkisi altında meydana gelen şekil değişikliği. (c) Elektrik alan etkisinde kutuplanma [47].



Şekil 2.4. Hegzagonal 2B Boron-Nitrat'da oluşturulmuş boşluk kusurları [4].

İki boyutlu nano dünyada çok yeni ve ilginç özelliklere sahip malzemelerden biri de ilingesel (topolojik) yalıtkanlardır (ya da KSHY). Bunu anlamak için öncelikle Hall ailesini yakından tanımak gerekir.

2.1. Hall Ailesi

2.1.1. Hall etkisi (HE)

Bir manyetik alana koyulmuş olan bir iletken malzemenin içerisinde elektrik akımı aktığında, akımı oluşturan yük taşıyıcıları Lorentz kuvveti tarafından malzemenin kenarlarına doğru itilir. Böylece, akımın ve uygulanan manyetik alanın yönüne dik bir yönde potansiyel fark oluşur. Bu, Hall etkisi olarak adlandırılır. Hall etkisi yük taşıyıcılarının tipini belirlemede ve malzemedeki taşıyıcıların mobilitelerini (hareketliliği) ve yoğunluğunu ölçmede kullanılır [64-65].

2.1.2. Tuhaf hall etkisi (THE)

Hall Etkisinin keşfinden kısa bir süre sonra, Hall benzer bir çalışmayı Nikel, Kobalt gibi manyetik malzemeler üzerinden akım geçirerek yaptı. THE olarak adlandırılan bu etki dış manyetik alan varlığı olmaksızın gerçekleşir. Malzemenin manyetizasyonuna bağlı olarak bu etki oluşmuş olur. Burada dış manyetik alanın yerini manyetizasyon almış gibi görünse de işleme düzeneği farklıdır. Bu etki normal

Hall etkisine göre çok daha güçlüdür ve malzemenin manyetizasyonu ile hemen hemen doğru orantılıdır [64-65].

2.1.3. Spin hall etkisi (SHE)

SYE'den ötürü yük ve elektron spin akımları çiftlenir. SHE işte bu çifttenim etkisinden meydana gelmektedir. Hall etkisinde pozitif ve negatif yükler birbirine karşıt kenarlarda toplaşmaktaydı. Spin Hall etkisinde ise pozitif ve negatif yüklerin yerini spin-yukarı ve spin-aşağı durumlar almaktadır [64-65].

2.1.4. Kuantum hall etkisi (KHE)

1980 yılında, Kesikli (kuantize olmuş) Hall etkisi von Klitzing tarafından keşfedildi. Bu keşif ilk kuantize edilmiş Hall sayısını Hall ailesine kazandırmış oldu, iki boyutlu elektron gazının sürekli durum yoğunluğu, çok güçlü bir manyetik alan etkisi altında, Landau seviyeleri diye adlandırılan eşit ayrışık bölgelere ayrılırlar. Eğer bu iki komşu Landau seviyeleri arasında Fermi seviyesi var olursa, hacim taşıyıcıları sınırlandırılır, ama elektronlar malzemenin kenarından hareket edebilir. (Yani malzemenin içi yalıtkan yüzeyi iletken olur) [64-65].

Dış manyetik alan elektronların momentumlarını çiftleyip gerçek uzayda elektronların sikrotron hareketi yapmasına neden olur. Ayrışık seviyelerin oluşması için, elektronlar kazandıkları momentumu kaybetmeden tam turlarını tamamlamaları gerekir ki bunu çok büyük mobiliteye sahip elektronlar başarabilmektedir. Ayrıca elektronların iki boyutlu bir yapıda var olması gerekmektedir. Kenarlarda ise tek yönde ilerleyen kiral (chiral) kenar durumları oluşur ve iletkenlik bu durumlar tarafından sağlanır [64-65].

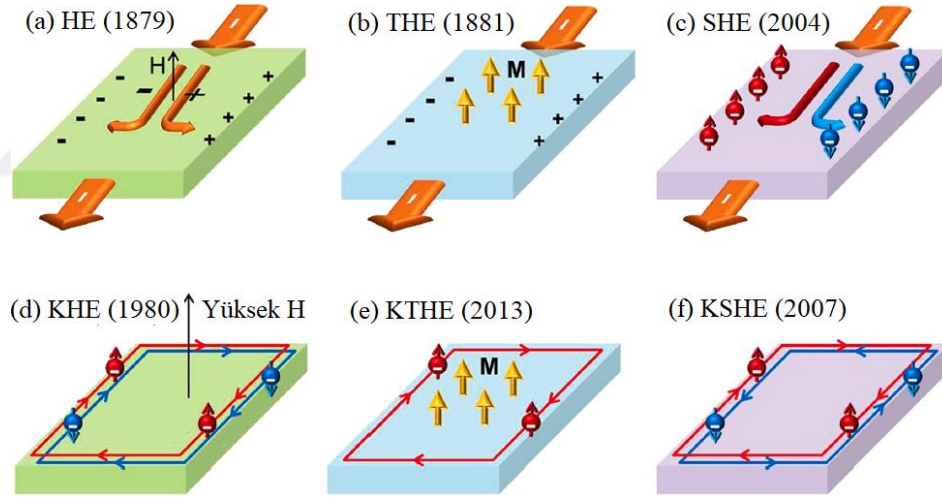
2.1.5. Kuantum spin hall etkisi (KSHE)

Herhangi bir dış manyetik alan olmadan oluşan bu etkide, valans ve iletkenlik bandlarının yerlerini değiştirebilecek kadar güçlü bir SYE varsa QSHE oluşur. Burada zaman geriçevrimli simetri korunduğundan dolayı kenarlardaki elektronların

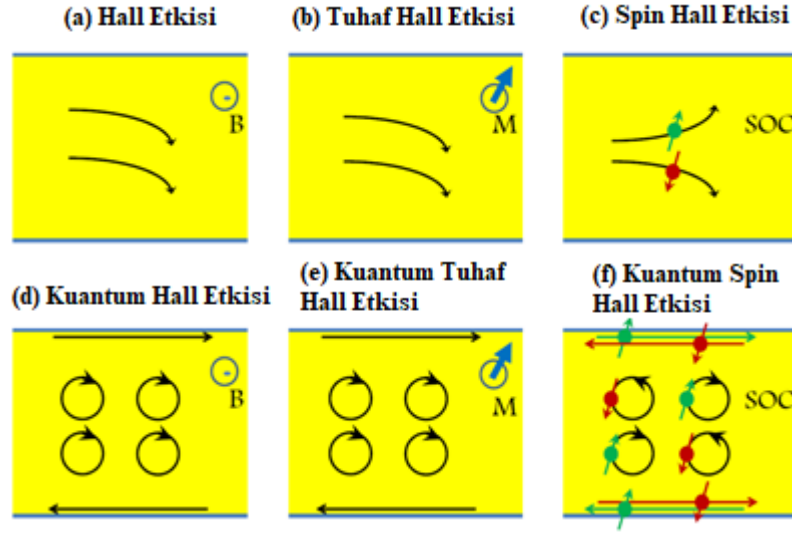
hem spin hem de hareket yönleri birbirine zıttır. Dolayısıyla kiral (chiral) kenar durumlarından farklı olarak sarmal durumlar söz konusudur. Burada aynı spin durumuna sahip tüm elektronlar aynı yönde hareket etmelidirler. Bu tez çalışmasında incelediğimiz malzemeler bu kategoride bulunmaktadır [64-65].

2.1.6. Kuantum tuhaf hall etkisi (KTHE)

Bu etkinin oluşabilmesi için hem yüksek spin-yörünge etkileşimi hem de manyetizasyon etkisi gerekmektedir. Manyetizasyon etkisinden dolayı zaman geriçevrimli simetri bozulacaktır. Bu durum ise özellikle kesikli spin-Hall yalıtkanlara manyetik bir özellik kazandırma ile mümkün olabilmektedir. Böylece, ilingsel özellik, kesikli hall yalıtkanındakinden farklı olarak ortaya çıkar [64-65].



Şekil 2.5. Hall silesinin davranışlarının üç boyutlu gösterimi [64].



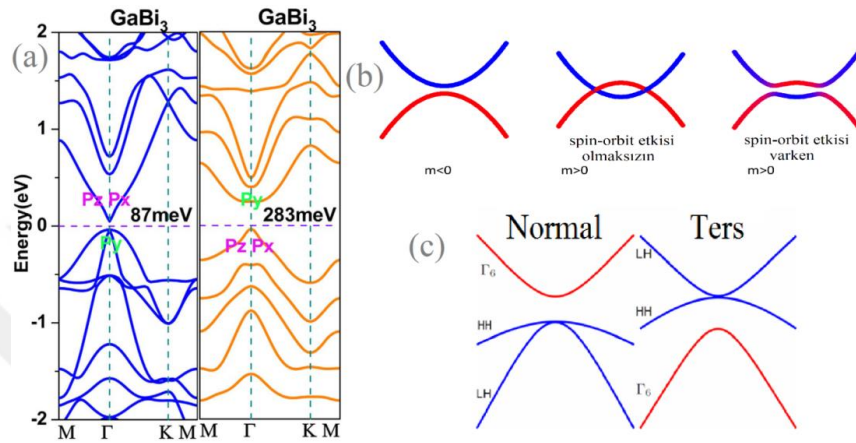
Şekil 2.6. Hall Ailesinin davranışlarının iki boyutlu gösterimi [65].

2.2. İlingesel Yalıtkanlar (KSHY)

Malzemelerin kenarındaki (2B) ya da yüzeyindeki (3B) elektronlar “korunan” bir durumda olduklarından, bu elektronların spinleri olağan bir yön değişim özelliğine sahip olmazlar. Aynı spin durumuna sahip tüm elektronlar aynı yönde hareket etmelidirler. Dolayısıyla spinleri birbirine zıt olan elektronlar zıt yönlerde hareket ederler. Bu durum ise elektron spin yönelimlerinin bilgiyi taşıma ve kodlamada kullanılabileceği, günümüzdeki cihazlardan daha etkili, hızlı ve ucuz ürünlerin ortaya çıkabileceği anlamına gelmektedir.

Son zamanlarda ilginç özelliklere sahip malzemelerden biri de ilingesel yalıtkanlardır. “Maddenin ilingesel fazları ve ilingesel faz geçişlerinin kuramsal keşfi” adlı çalışma ile 2016 Nobel fizik ödülünü alan bilim insanlarının (David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane ve J. Michael Kosterlitz) çalışmaları özellikle ilingesel yalıtkanlar için önemli olmuştur [64]. Bunlar, dönüş-tabanlı elektronik, optoelektronik, termoelektronik ve kuantum hesaplama gibi alanlarda gelecek vadetmektedir. Bunu sebeplerinden biri; bu yalıtkanlarda maddenin içi normal bir yalıtkanın özelliğini göstermesine rağmen, yüzeylerde spin-polarize olmuş band aralığı olmayan bir duruma sahiptir, yani iletkenidir. Bu durum zaman çevrimi simetrisi (time reversal symmetry) ile korunmaktadır [65-69]. SYE incelendiğinde

valans bandı ile iletkenlik bandının sırası değişebilmekte veya bu etki ile birlikte band aralığı oluşabilmektedir (Şekil 2.7.(b), Şekil 2.7.(c)). Yüksek SYE varlığında oluşan bu durum, malzemenin ilingesel yalıtkan olduğunun güçlü bir göstergesidir. Fakat her ilingesel yalıtkan için SYE'nin varlığı olmak zorunda değildir. Sadece zaman çevrimi simetrisi korunduğu durumlarda geçerlidir [70-74].



Şekil 2.7. a) SYE dahil edildiğinde (turuncu olan band yapısı) p_y ile p_z - p_x bandları yer değiştirmektedir. b) bir yarımetalın SYE sonucunda band aralığının oluşması, $m < 0$ ise bandların sırasının ters olmadığını işaret eder c) SYE sonucunda bandların yer değiştirmesi [71,73-74].

İki boyutlu ilingesel yalıtkanlarda yüzey durumlarının manyetik olmayan kirliliklere karşı dayanıklılığı üç boyutlu olanlarına göre daha iyi olduğundan, yukarıda bahsedilen alanlarda kullanımı - özellikle dönüş-tabanlı elektronik (spintronik) cihazlarda - daha uygun olacaktır [66]. Dolayısıyla yeni iki boyutlu ilingesel yalıtkanların keşfedilmesi, var olanların geliştirilmesi önemlidir. Ayrıca iki boyutlu malzemelerin diğer uygulama alanlarını da düşündüğümüzde teknolojiye daha iyi katkı sunabilir.

İki boyutlu yapılarda Kuantum hall yalıtkan etkisi, ilk olarak Kane ve Mele tarafından GR için önerilmiştir [75]. Küçük SYE'den dolayı, GR'nin band aralığı çok küçük ($\sim 10^{-3}$ meV) olmaktadır, ilingesel etkiyi görmek ancak uygulaması güç düşük sıcaklıklarda mümkün olabilmektedir. Bu yüzden yüksek SYE içeren bileşiklerin keşfine ihtiyaç vardır. Diğer yandan bu etkiyi çok çok düşük sıcaklıklarda HgTe/CdTe ve InAs/GaSb gibi kuantum kuyularında gözlemlemek

mümkün olmuştur [76-77]. Dolayısıyla, band aralığı ve SYE yüksek olan ilingesel yalıtkanları bulmak bir gereklilik haline gelmiştir [67].

Yeni yüksek spin-yörüngeye sahip ve enerji bant aralıklı ilingesel yalıtkanlar bulmak adına büyük bir çaba sarf edilmeye devam edilmektedir [65-74]. Böylesine bir özelliğe sahip materyaller özellikle bizmut içeren malzemelerde olması beklenmektedir çünkü periyodik tabloda SYE en yüksek olan element bizmuttur [78]. Bizmut içeren malzemelerin özelliklerini araştırmak, ilingesel yalıtkan özelliğine sahip bileşikler bulmada etkili olacaktır.

Bizmutun III-A grubu ile yaptıkları bileşikler, iki boyutlu, burkulmuş bal peteği yapısına sahip ilingesel yalıtkanların yeni bir kategorisini oluşturmaktadır. Yüksek spin-yörünge etkileşiminden dolayı olağandışı ilingesel karakter GaBi, InBi, TlBi, GaBi₃, InBi₃ gibi bileşiklerde gözlemlenmiştir [72-73]. Ayrıca bazı bileşiklerin de işlevselleştirme ile ilingesel yalıtkan özelliğine sahip olduğu görülmüştür [70,79]. Buradan şu sonucu çıkarabiliriz: İşlevselleştirme (functionalization) ile birlikte atom eksiltme (vacancy defect), elektrik alan uygulama ve yapıyı germe (strain) gibi etkilerle belki de daha büyük band aralıklı ilingesel yalıtkanlar bulunabilir, var olanların özellikleri değiştirilebilir.

BÖLÜM 3. MATERYAL VE YÖNTEM

Temeli YFK'na dayanan ab initio kuramları, kristallerin yapısal, elektronik ve dinamik gibi özelliklerini araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilmesidir. Yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temelleri 1960'lı yıllarda Hohenberg-Kohn (HK) ve Kohn-Sham (KS) tarafından atılmıştır [80-81].

Bu kurama girmeden önce Bohr-Oppenheimer (BO) yaklaşımı ve çok elektronlu sistemler için Hamiltonyen ifadesini tanımlayalım. BO yaklaşımına göre elektron ve iyonların hareketleri ayrıştırılabilir [82]. Buna bağlı olarak dalga fonksiyonu (Denklem 3.1)

$$\psi(r, R) = \psi_e(r, R)\psi_N(R) \quad (3.1)$$

şeklinde düşünülebilir. Böylece elektronlar için Hamiltonyen ifadesi (Denklem 3.2);

$$H = T + V_{ee} + V_{dış} = -\frac{\hbar}{2} \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i}{|R_i - r_j|} \quad (3.2)$$

şeklinde olur. İlk terim elektronların kinetik enerjisi, ikinci terim elektron-elektron etkileşimi ve son terim iyon-elektron etkileşimidir.

3.1. Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı (YFK)

YFK modelinin en büyük üstünlüğü, hesaplamalarda çok fazla atomun kullanılabilir olmasıdır. YFK modelindeki temel düşünce, enerji ifadesinin elektron yoğunluğu ρ ya bağlı olmasıdır. Bu yoğunluğa bağlı enerji $E(\rho)$ ile tanımlanarak toplam enerji

ifadesine eklenir. 1964'te HK, taban durumda katlı olmamış bir molekül için, taban durum molekül enerjisini, dalga fonksiyonunu ve moleküle ait bütün elektronik özelliklerini elektron olasılık yoğunluğuna $\rho(x,y,z)$ bağlı olarak hesaplamayı başardılar [80].

Fakat elektron-elektron etkileşimini, kuantum mekaniksel ifadelerden ötürü tanımlamak oldukça güç olmaktadır. Bunu aşmanın yolu elektronları birbiriyle etkileşmiyormuş gibi düşünmekten geliyor. Bu durumda, birbirleriyle etkileşiyor gözükmesi için gerekli olan katkı, değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim adı verilen yaklaşık bir potansiyel tarafından sağlanır. Bu durum KS tarafından gösterilmiştir [81].

KS, değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşimini Bölgesel Yoğunluk Yaklaşımı (BYY) ile elde etmiştir. İlerleyen zamanlarda Perdew, J. P., Burke, K., ve Ernzerhof, M. (PBE) tarafından Genelleştirilmiş Gradyen Yaklaşımı (GGY) önerilmiştir ve bazı durumlarda BYY'den daha iyi sonuçlar vermektedir [83]. Tüm bu ifadeleri düşünürsek çok elektronlu sistemler için Schrödinger denklemi, KS eşitliğine dönüşmüş olup birbiriyle etkileşmeyen elektronlar için aşağıdaki gibi yazılır (Denklem 3.3 ve Denklem 3.4);

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{KS}(r) \right] \phi_j(r) = \epsilon_j \phi_j(r) \quad (3.3)$$

$$V_{KS}(r) = V_{dış}(r) + e^2 \int dr' \frac{n(r')}{(r-r')} + \frac{\partial E_{dt-e}(n)}{\partial n(r)} \quad (3.4)$$

Burada $V_{dış}(r)$, iyonlardan kaynaklı dış potansiyel, ikinci ifade ise elektron-elektron etkileşiminden kaynaklı klasik potansiyeldir. $E_{dt-e}(n)$ enerjisi ise kuantum mekaniksel kaynaklı olup değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim enerjisidir ve yaklaşım yapıldığından (BYY-GGY) tam olarak bilinmemektedir. Ayrıca elektron yoğunluğu ise (Denklem 3.5)

$$n(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (3.5)$$

olarak verilir. Sistemin ne dalga fonksiyonu ne de toplam enerjisi için bir bilgiye sahip değiliz. Çünkü $E_{dt-e}(n)$ tam olarak bilinmemektedir. Bunu aşmak için denklemi öz uyumlu alan yöntemi ile çözmeliyiz. Başlangıçta bir yük yoğunluğu tahmin edilir. Bu yük yoğunluğu ile potansiyeller belirlenip Kohn-Sham denklemi çözülür. Elde edilen dalga fonksiyonları denklem 3.5 de yerine koyulur, yük yoğunluğu hesaplanır ve başlangıçta seçilen deneme yük yoğunluğu ile karşılaştırılır. Belli bir hassasiyette uyum elde edilene kadar bu işlem devam eder. $E_{dt-e}(n)$ yaklaşık olarak bulunur ve daha sonra enerji hesaplanmış olur.

Buraya kadar hamiltonyen ifadesinden bahsedilmesine rağmen sistemin dalga fonksiyonundan bahsedilmemiştir. Kohn-Sham eşitliğine göre bu dalga fonksiyonları birbiriyle etkileşmemektedir. Toplam dalga fonksiyonu hakkında bilgi sahibi olmadığımız için bir deneme fonksiyonu düşüneceğiz ve varyasyon ilkesinden yararlanacağız. Bu deneme fonksiyonunu ise temel setler ile sağlayacağız.

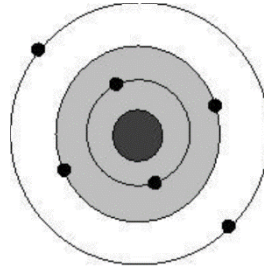
3.2. Temel Set ve Yapay Potansiyeller

3.2.1. Temel set

Temel set, atomik yörüngelerin matematiksel olarak ifade edilmesidir. Kuantum mekaniksel yöntemler kullanılarak moleküler yapı hesaplamalarının başarısı kullanılan yöntem kadar doğru setin seçimine de bağlıdır. Temel setleri oluşturma yollarından biri de düzlem dalgaları kullanmaktır. Bu çalışmada hem düzlem-dalgalar hem de atomik orbital yaklaşımları kullanılacaktır. Sistemi iyi tanımlayabilmek için çok sayıda düzlem dalgaya ihtiyaç vardır. Bu da hesaplama hızını düşürmektedir. Toplam düzlem dalga sayısını yapay potansiyel kullanarak düşünülebilir.

3.2.2. Yapay potansiyeller

Bir atom, çekirdek, öz elektronları ve değerlik elektronları olmak üzere üç parçadan oluşmuş bir sistem olarak düşünülebilir. Öz elektronları dolu orbitalleri temsil etmektedir. Örneğin $1s^2 2s^2 2p^2$ elektronik dizilimine sahip C atomunda (Şekil 3.1.), $1s^2$ ve $2s^2$ yörüngelerindeki elektronlar öz elektronlarıdır. Bu elektronlar genellikle çekirdeğin çevresinde yerleşirler. Çekirdekle öz elektronlarının oluşturduğu sisteme iyon özü (koru) denir. Bu özü dediğimiz yeri düzlem dalgalar ile temsil etmek istersek çok sayıda düzlem dalgaya ihtiyaç olacaktır. Bu da hesaplama zamanını çok arttıracaktır. Bunun üstesinden gelmenin yolu öz bölgesindeki elektronlar için bir yaklaşım yapmaktır. Öz bölgesindeki elektronlar farklı kimyasal çevrelerde dahi değişmez (yani kimyasal bağ yapmada etkisi oldukça azdır veya yoktur) halde kaldıklarından dolayı bunu yapmamızda sakınca yoktur. Dolayısıyla öz bölgesinde bulunan her bir elektron için bir hesaplama yapmak yerine, o bölge için, yapay bir dalga fonksiyonu ve potansiyel belirlemek çok faydalı olacaktır (sanki orada 1 elektron varmış gibi davranacaktır).



Şekil 3.1. Çekirdek, öz (kor) elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş bir atom. Taralı bölge öz bölgesini göstermektedir.

Bunu yapmanın yolu da yapay potansiyel kullanmaktır. Böylece hem hesaplanması gereken elektronların sayısını hem de düzlem dalga sayısını önemli bir şekilde azaltmış oluyoruz. Yapay potansiyeller, genelde, Norm-Conserving, Ultrasoft ve PAW olmak üzere üçe ayrılırlar. Bu çalışmada, iki boyutlu sistemler ve moleküller için daha iyi sonuç verdiği için düzlem dalga hesaplarında PAW metodu kullanılacaktır [85]. Ayrıca yük analizi yapmak daha sağlıklıdır.

3.3. Kullanılacak Programlar ve Parametreleri

3.3.1. Quantum espresso (QE) program parametreleri

Kullanılacak programlardan biri, düzlem dalga metodu ve yapay-potansiyele dayalı ve Fortran kodu ile yazılmış QE programdır [86]. Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim enerjisi, GGY-PBE ile tanımlandı [83]. Yapay potansiyel kullanımında PAW yöntemine başvuruldu [85]. Van der Waals (vdW) etkisi için Grimme metodu kullanılacaktır [87]. Geometrik iyileştirme Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) metodu ile gerçekleşti [87-91]. Fonon hesaplamaları ise süper hücreye ihtiyaç duymayan yoğunluk fonksiyonel pertürbasyon kuramından yaratıldığı görülmektedir [92]. Moleküler dinamik (MD) hesabı Verlet algoritması ile yapıldı [93]. Brillouin bölgesi integrali için gerekli olan özel k-noktaları Monkhorst-Pack yöntemi ile, metaller için gerekli olan özel durum ise Methfessel-Paxton ile yapıldı [94-95]. Yük analizi içinse Bader yöntemi tercih edilmiştir [96-97]. Şekilleri göstermek adına Vesta veya XcrysDen programlarından yararlanıldı [98-99].

3.3.2. Siesta program parametreleri

Siesta ise, QE'dan farklı olarak, nümerik atomik orbital metoduna dayalı, Fortran kodu ile çalışan ve yapay potansiyel kullanan bir programdır [100]. Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim enerjisi, GGY-PBE ile tanımlandığı gözlemlenmiştir. [83]. Geometrik iyileştirme BFGS methodu ile gerçekleştirildi [87-91]. MD hesabı Verlet algoritması ile yapıldı [93]. Brillouin bölgesi integrali için gerekli olan özel k-noktaları Monkhorst-Pack yöntemi ile, metaller için gerekli olan özel durum ise Methfessel-Paxton ile uygulandı [94-95]. Yük analizi içinse Bader yöntemi tercih edilmiştir [96-97]. Şekilleri göstermek adına Vesta veya XcrysDen programlarından yararlanıldı [98-99]. PAO.EnergyShift değeri 50 meV olarak alınmıştır.

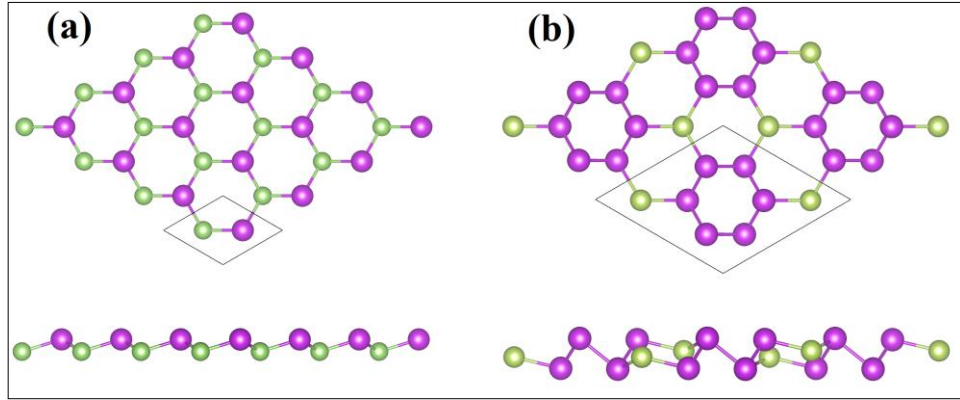
BÖLÜM 4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA

4.1. Yapısal, Elektronik ve Titreşimsel Özellikler

4.1.1. Yapısal özellikler

Örgü sabiti, bir sistemin özelliklerini belirlemede oldukça önemli bir yere sahiptir. İleriki bölümlerde yapılacak tüm hesaplamalar örgü sabitine dayalı olarak gerçekleştirilecektir.

Malzemelerin örgü sabitleri QE programındaki değişken hücre yöntemi ile bulunmuştur. Elde ettiğimiz değerler ve şekiller Tablo 4.1.'de ve Şekil 4.1.'de gösterilmektedir. Bu tablodan anlaşıldığı üzere önceki çalışmalardan elde edilen veriler ile sonuçlarımızın oldukça uyumlu olduğu gözükmektedir. Bu sonuç ilerde yapacağımız çalışmaların da sağlıklı bir şekilde sonuçlanabileceğini göstermektedir.



Şekil 4.1. (a) GaBi, InBi ve (b) GaBi₃, InBi₃ yapısının üstten ve yandan görünümü. Yeşil renkle gösterilenler Ga ya da In, mor ile gösterilenler ise Bi atomunu temsil etmektedir. Ayrıca birim hücreler ise gri çizgiler ile gösterilmiştir.

GaBi ile InBi için birim hücrede iki atom bulunurken GaBi₃ ve InBi₃ de ise sekiz atom bulunmaktadır. Buna bağlı olarak, Şekil 4.1.'de gösterildiği gibi, birim hücre GaBi ve InBi' de daha küçüktür.

Atomlar arası mesafelerdeki benzerlikler dikkate çarpılmaktadır. Örneğin GaBi ve GaBi₃ için Ga-Bi arasındaki en yakın mesafe, sırasıyla, 2,74 Å ve 2,76 Å'dur. InBi ile InBi₃ içinse bu değerler, sırasıyla, 2,90 Å ve 2,96 Å'dur. Ayrıca yapısı gereği GaBi₃ ve InBi₃ de Bi atomları birbirlerine oldukça yakındırlar ve bu değerler her iki yapı için 3,03 Å olarak belirlenmiştir. Bu değerler önceki kuramsal çalışmalarla son derece uyumludur [70,72-73].

Tablo 4.1. QE programı ile elde edilen örgü sabitleri literatürdeki sonuçlarla birlikte gösterilmiştir. a ile gösterilen ifade bu çalışmaya aittir. Örgü sabiti Å cinsindendir. Band aralıkları ise (meV) cinsindendir.

İncelenen Malzeme	Örgü Sabiti (Å)	Band Aralığı (meV)	Band aralığı (SYE) (meV)
GaBi	4,51 ^a ; 4,52[72]; 4,521[70]	109 ^a ;107[72]	183 ^a ; 169[72]
InBi	4,80 ^a ; 4,80[72]; 4,80[70]	172 ^a ;169[72]	200 ^a ; 175[72]
GaBi ₃	8,81 ^a ; 8,824[73]	77 ^a ;81[2]; 87[73]	281 ^a ; 283[73]
InBi ₃	9,11 ^a ; 9,121[73]	142 ^a ;169[2] ;169[73]	232 ^a ; 247[73]

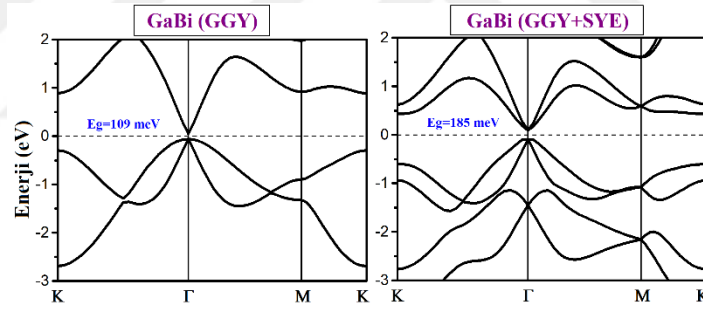
4.1.2. Elektronik özellikler

Bu malzemeleri seçmemize neden olan şey bunların elektronik özellikleriydi. Elektronların sahip oldukları spin manyetik momenti ile, elektronların orbitallerde hareketinden ötürü meydana gelen manyetik alanın arasındaki etkileşim, spin-yörünge etkileşimi (SYE) olarak adlandırılır. İlingesel yalıtkanlarda bu etkileşim, bilinen yalıtkanlardan farklı bir özelliğe sahip malzemelerin ortaya çıkmasına vesile olur. Bu etkileşmeyi Schrödinger denklemine relativistik düzeltme ile dahil etmek mümkündür.

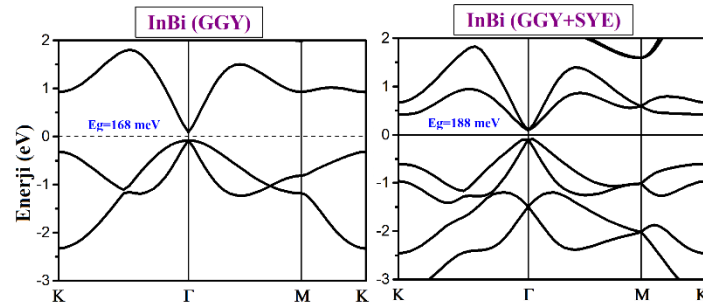
Son zamanlarda bilgi kaynaklarında ilingesel yalıtkanlar ile ilgili çalışmalarda artış görülmektedir. Bu tez çalışmasında benzer hesaplamalar yapılarak öncelikle çalışmanın doğruluğu gösterilecektir.

Benzer hesaplamalardan elde edilen sonuçlar Tablo 4.1.'de karşılaştırılmıştır. Ayrıca her bir yapı için band grafiklerini de çizilmiştir. Elde edilen sonuçlar önceki çalışmalar ile mükemmel bir uyum göstermektedir [70, 72-73].

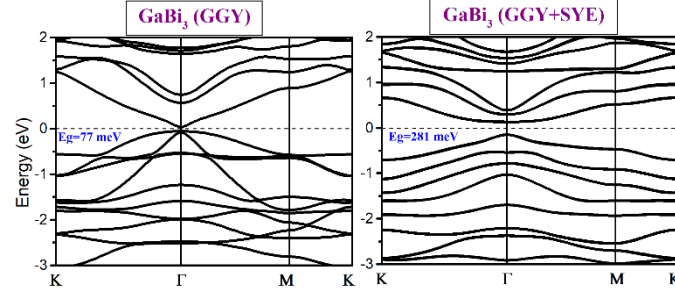
Elektronik band yapısı hesaplamalarında yapay potansiyel kullanıldığından atomların tüm elektronları hesaplama katılmaz. Bu hesaplama için Ga, Bi ve In atomları kullanılmaktadır. Ga için elektron dağılımı ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^1$), In için elektron dağılımı ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^1$) ve Bi için elektron dağılımı ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$) şeklindedir. Kalın punto ile gösterilenler değerlik elektronları olarak alındı, yani hesaplama dahil edilenler bunlardır. Grafiklerdeki (Şekil 4.2. ve Şekil 4.5. arasındaki) tüm bandlar bu elektronlar sayesinde oluşmaktadır. Diğerleri ise bağ yapmada çok etkili bir duruma sahip olmadıklarından hesaplamalara dahil edilmedi.



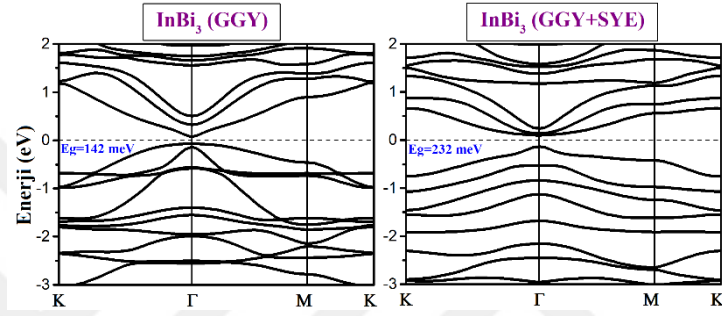
Şekil 4.2. GaBi'nin SYE olmadığı ve olduğu durumların band yapıları. Eg band aralığını göstermektedir.



Şekil 4.3. InBi'nin SYE olmadığı ve olduğu durumların band yapıları. Eg band aralığını göstermektedir.



Şekil 4.4. GaBi₃'ün SYE olmadığı ve olduğu durumların band yapıları. Eg band aralığını göstermektedir.



Şekil 4.5. InBi₃'ün SYE olmadığı ve olduğu durumların band yapıları. Eg band aralığını göstermektedir.

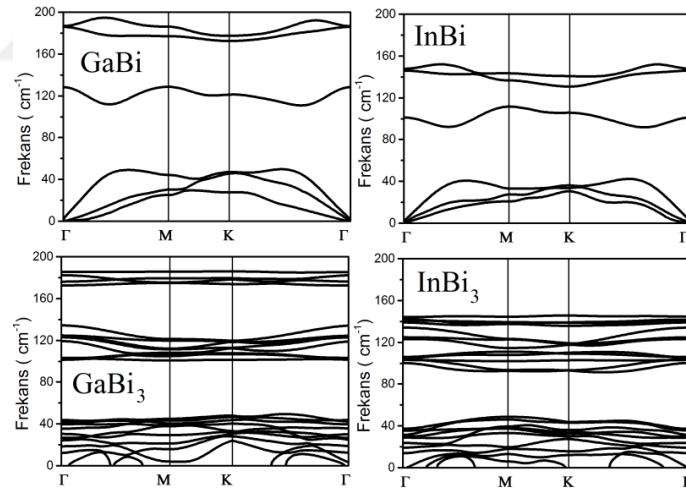
Bu grafikler incelendiğinde önemli sonuçlara varılmaktadır. Bunlardan ilki SYE olmadığı durumlarda band geçişleri doğrudan iken (Γ - Γ geçişi), SYE eklendiğinde dolaylı bir geçişe sebep olduğudur (Γ yakın bir noktadan – Γ). Bu ise malzemelerin optik özelliklerini değiştirebilmektedir. Dolayısıyla bu gibi malzemelerde yüksek SYE önemli bir durumdur. Ayrıca literatürde de aynı durum gözlemlenmiştir [70, 72-73]. Ayrıca en yüksek band aralığı GaBi₃'e aitken en düşüğü ise GaBi de bulunmaktadır. Band aralıkları meV mertebesinde oldukları için oldukça küçüktür.

İkinci olarak SYE hesaplamalara katıldığında band aralıklarının incelenen tüm malzemeler için arttığı gözlemlenmektedir. Bu ilingsel yalıtkan varlığını gösteren özelliklerden biridir. İlingsel yalıtkan olup olmadığını tam olarak anlamak için kenar (edge) band yapısı ve band evrilmesi (band inversion) durumunun da incelenmesi gerekir. Fakat bu tez çalışmasında bu durumlar incelenmeyecektir. Sadece band aralığı dikkate alınarak malzemelerin farklı şartlar altında ilingsel bir

yalıtkan özelliğe sahip olup olamayacağı konusunda bilgi edinilecektir. Bu yüzden sadece band yapısının SYE’de nasıl değiştiğini incelemek yeterli olacaktır.

4.1.3. Titreşimsel özellikler

Süper hücre yöntemine bağlı olmadan yapılan titreşimsel dağılım grafikleri Şekil 4.6.’da verilmiştir. Fonon dağılım grafiğinin en önemli özelliklerinden biri ilgili yapının taban durumu için dinamik olarak kararlı olup olmadığının belirlenmesine olanak sağlamaktadır. Kararlılığı belirlemenin yolu frekans değerlerinde bakmaktır. Eğer eksi değerli frekans değeri mevcutsa kararlı olmadığı söylenebilmektedir. Aksi halde yapı kararlıdır. Şekil 4.6. incelendiğinde GaBi ve InBi’nin kararlı, GaBi₃ ve InBi₃’ün ise kararlı olmadığı görülmektedir. Fakat bilgi kaynaklarında bu malzemelerin hepsinin kararlı ya da hepsinin kararsız olduğunu gösteren kuramsal çalışmalar bulunmaktadır [70, 72-73]. Kararlılık konusunda kesin bir sonuca ulaşmak için deneysel verilere ihtiyaç vardır.



Şekil 4.6. Fonon dağılım grafikleri.

Fonon dağılım grafiklerinden malzemelerin farklılıkları görülebilir. Örneğin atomların kütlelerine bağlı olarak titreşim frekansında değişimler meydana gelmektedir. Yapı aynı olmasına rağmen Ga içeren grafiklerin en yüksek enerjili titreşim frekansları In içerenlere göre daha fazladır. Bunun sebebi Ga atomunun In atomuna göre daha az kütleli olmasıdır.

GaBi fonon grafiğinde iki adet yasak fonon aralığı olduğu gözlemlenmektedir. Benzer bir durum InBi için de görülmektedir. Fakat daha düşük bir frekans değeri ve yasak band aralığı vardır. Bunun en önemli sebeplerinden biri Ga ile In arasındaki kütle farkıdır. Fonon yapılarında kütle çok önemli bir yerde olduğundan fonon hesaplamalarında sıklıkla bu ifadeden bahsedilmektedir. Ayrıca birim hücredeki atom sayısı da fonon modlarının sayısını belirler. İfade $3 \times N$ ile bulunur. N burada birim hücredeki atom sayısıdır. $3 \times 2 = 6$ olduğundan GaBi ve InBi de 6 fonon modu bulunmaktadır. Bunların 3 tanesi akustik geri kalanı ise optik fonon olarak adlandırılır.

GaBi₃ ve InBi₃ için birim hücrede 8 atom olduğundan toplamda 24 farklı fonon modu olması gerektiği bilinmektedir. Grafiklerden de bunlar görülmektedir. GaBi₃'ün fonon dağılım grafiğinde işgal ettikleri frekans değerleri GaBi ile benzerlik göstermektedir. Çünkü aynı atomlar birbirlerine göre benzer mesafelerde bulunmakta ve yapıyı oluşturmaktadırlar. Yapısal kısımda örgü sabitlerinin de benzer olduğu sonucunu düşünürsek sonuçların birbirine yakın olması oldukça olağandır. Ayrıca bu grafikte de iki tane band aralığı bulunmaktadır. InBi₃ grafiğinde ise üstteki bandlar bir alanda birleşmiş ve band aralığını ortadan kaldırmışlardır. Bir band aralığı bulunan tek malzemedir. In atomunun ağır olmasından ötürü üst seviyelerdeki band toplulukları bir araya gelerek var olabilecek yasak band aralığı yok olmuştur. Fonon hesaplamalarında elde edilen sonuçlar literatürde bulunanlarla uyum içerisindedir [70, 72-73].

Ga içeren malzemelerin akustik modları ile optik fonon modları arasındaki farkın fazla olması termal iletkenliğinin daha yüksek olmasına işaret etmektedir.

4.2. Moleküler Dinamik (MD)

MD hesaplamaları bir sistemin davranışını belli bir sıcaklık ve/veya basınçtaki davranışını küçük zaman aralıklarına ayırarak taklit edilmesini sağlar. Deneysel

sonuçlar ile karşılaştırıldığında, eğer hesaplama parametreleri iyi ayarlanırsa, oldukça uyumlu sonuçlar vermektedir.

MD hesaplamalarında en önemli parametrelerden biri zaman adım aralığıdır. Bu zaman adım aralığı ne kadar küçük olursa o kadar iyi sonuçlar elde edilecektir. Fakat taklit edilen titreşim süreleri o denli azalacağından hesaplamaların da süresi artmaktadır. Bu yüzden MD hesaplamalarında zaman aralıkları için orta noktayı (kısa hesaplama süresinde iyi sonuçlar) bulunması gerekir. Literatürdeki veriler bu aralığın 1 fs (10^{-15} s) olmasının uygun olduğunu göstermektedir.

MD hesaplamalarında gerçekçi sonuçlar elde etmek adına ps mertebelerine çıkmak gerekebilir. Bunu da hem zamandan kazanmak hem de gerçekçi sonuçlar elde edebilmek adına 5 ps olarak seçilmesinin uygun olduğu görülmektedir. Dolayısıyla hesaplamalar 5000 adımda gerçekleştirilmesi planlanılmıştır.

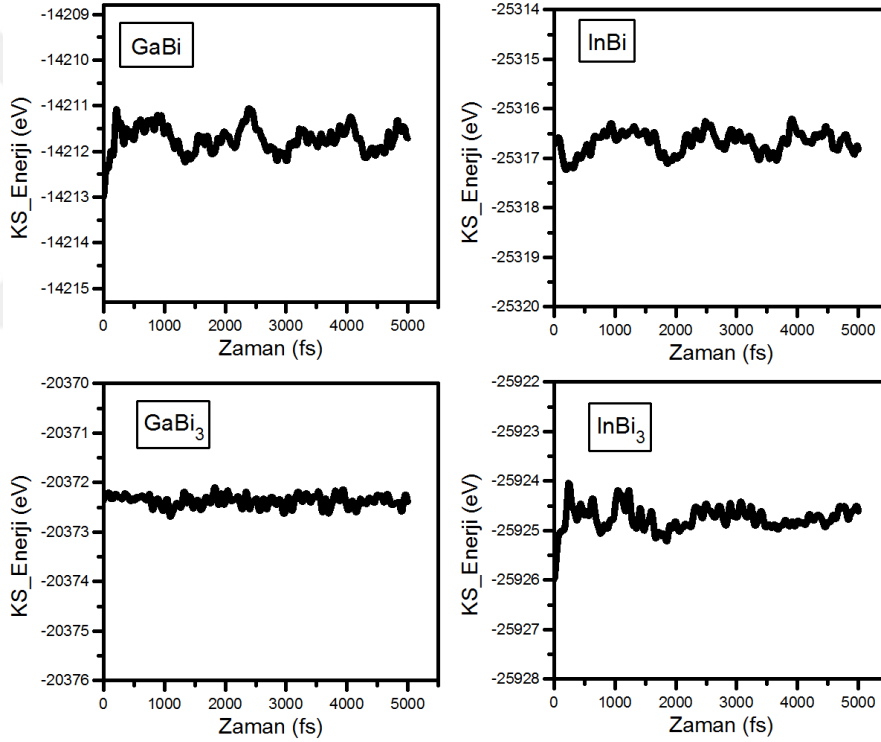
Hesaplamaların daha hızlı olması adına Siesta programının tercih edildiği görülmektedir. (QE ile Siesta sonuçları birbirine oldukça benzediği için bir sorun yaratmadığı görülmektedir). Sıcaklık değeri olarak oda sıcaklığı (300 K) uygun bulunmuştur. 300 K'de sistemin sıcaklığını sabit tutabilmek için Nosé termostat yöntemi kullanılmıştır. Bu yöntem, sistemi, sabit sıcaklık, sabit hacim ve sabit madde miktarında tutmayı hedeflemektedir, yani termodinamikten bilinen bir kanonik topluluk oluşturmaktadır. KS enerjisini (Potansiyel Enerji) de iyi bir şekilde dengede tutabildiği elde edilen sonuçlardan bilinmektedir. Hesaplamaları sağlıklı gerçekleştirmek adına GaBi ve InBi için 4x4, GaBi₃ ve InBi₃ için 2x2'lik süper-hücre kullanılmıştır.

Bu bölümde moleküler dinamik hesaplamaları 3 farklı şekilde gerçekleşecektir. Bunlar şu şekildedir; hesaplanan yapıların kusursuz durumları için MD, boşluk kusurlu durumlar için MD ve iyileştirme durumları için MD.

4.2.1. Kusursuz durumlar için md

Kusursuz durumlar, kristalin herhangi bir kusuru olmaksızın sahip olduğu yapı olarak bilinir. Atomlar olması gereken konumda bulunurlar. Doğada ise kristaller kusursuz değildir. Kusursuz durumlar için hesaplanan malzemelerin KS enerji grafikleri Şekil 4.7.'de verilmiştir.

Elde edilen bu verilerde salınımların belli enerji değerleri civarında olduğu ve çok fazla salınım gerçekleşmediği görülmektedir. Dolayısıyla sistemin 300 K'de 5 pikosaniye boyunca kararlılığını koruduğu görülmektedir.

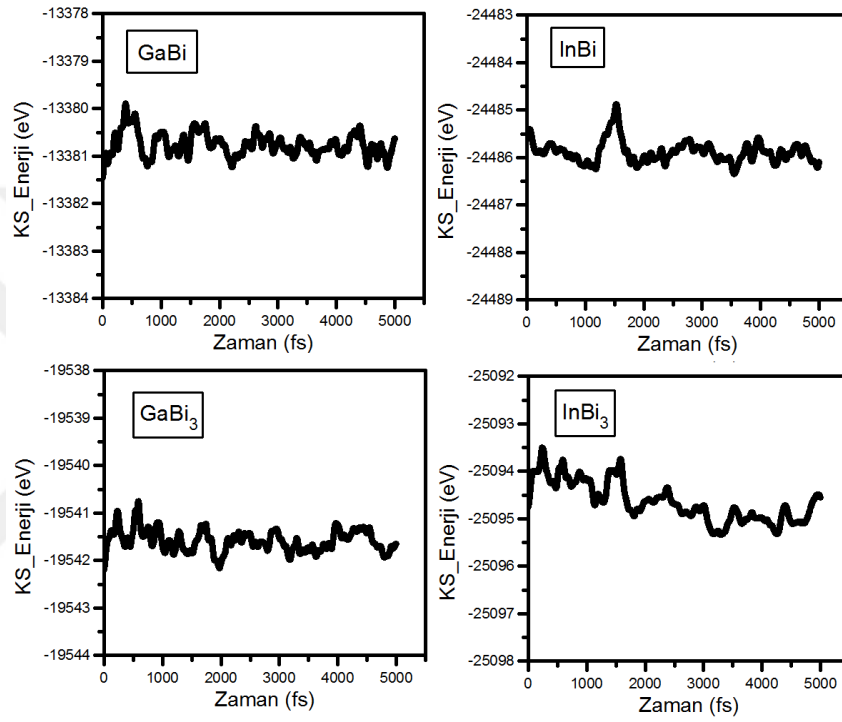


Şekil 4.7. Kusursuz durumları için MD enerji sonuç grafikleri.

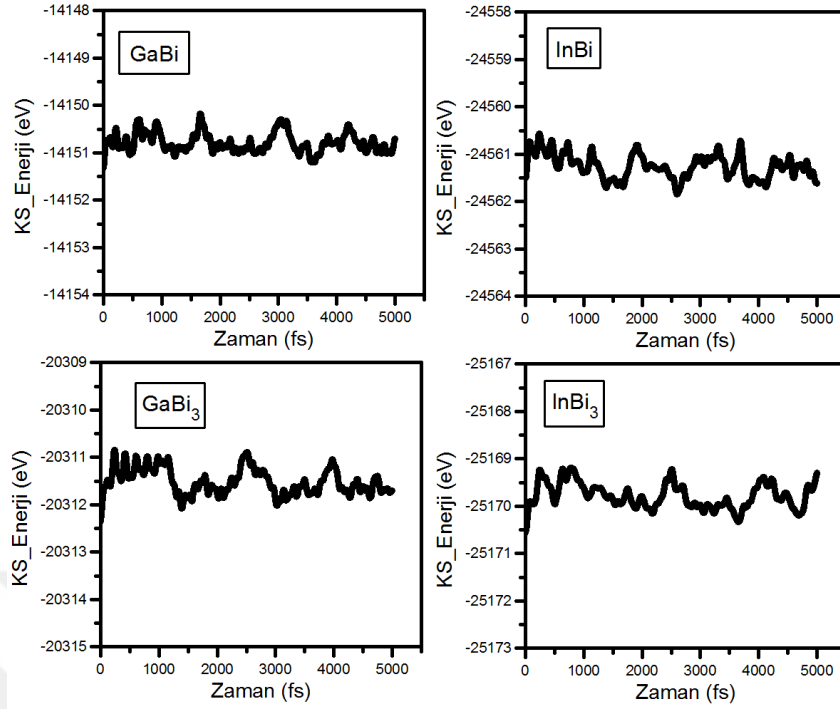
4.2.2. Kusurlu durumlar için md ve elektronik özellikleri

Doğada kristaller kusursuz değildir, kristallerin sentezlenmesi sırasında kristalde kusurlar oluşabilmektedir. Bu kusurlardan biri atom ya da atomların olması gerektiği yerde olmamasıdır. Bu durum boşluk kusuru (vacancy defect) olarak bilinir. Bunu iyi

betimleyebilmek adına, bu bölümde, ‘Ga’, ‘In’ ya da ‘Bi’ atomlarının eksikliği sonucunda oluşan durumları incelenmiştir. Bu çalışmada kusurlar 1/32 oranına bağlı olarak oluşturulmuştur. Bu kusurlu halin moleküler dinamik hesabı yapılmış ve sonuçlar Şekil 4.8. ve Şekil 4.9.’da gösterilmiştir. Kendi kendini iyileştirme ve yeniden yapılanma durumları moleküler dinamik verilerinden yola çıkarak tartışılmıştır.



Şekil 4.8. Bi atomunun eksikliği durumunda enerji grafikleri.



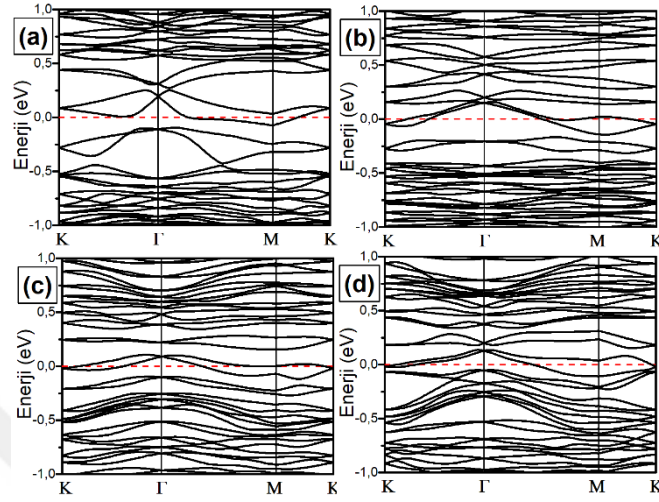
Şekil 4.9. Ga ya da In atomu eksikliği durumundaki enerji grafikleri.

Çıkarılan atomun komşu atomları tüm malzemeler için benzer davranış sergilemektedir. Hepsi boşluğu kapatmaya çalışmakta fakat kapatamamaktadır. Bu yüzden boşluk kusurlu yapıların hepsinde boşluğun kapanmadığı görülmektedir.

Moleküler dinamik hesaplarında sıcaklığın da etkisi göz önünde olduğu için yapılarda, özellikle boşluğun olduğu civarda, bir buruşma söz konusudur. Bu buruşma GaBi, InBi ve GaBi₃ için bölgesel olup yapının tamamını etkilememiştir. Yani boşluk kusuru olmasına rağmen bu yapılar kararlı bir şekilde bulunabilmişlerdir.

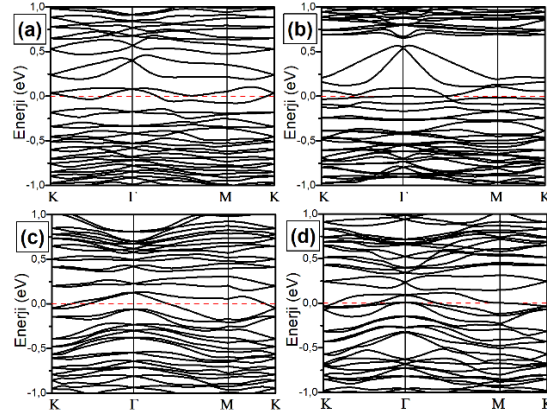
Fakat bu durum, Şekil 4.8.'deki grafikten anlaşılacağı üzere, Bi eksikliği bulunan InBi₃ için farklıdır. Bi eksikliği bulunan grafik ve atomik pozisyonlar incelendiğinde boşluk kusurunun bütün yapıyı bozduğu açık bir şekilde görülmektedir. In eksikliği durumunda ise kararlı olduğu bilinmektedir. Aynı yapının farklı atom eksiklerinde farklı davranmasının sebebi atomların yaptıkları bağlar ile ilgilidir.

Boşluk kusurlu durumların ilingesel yalıtkanlar için önemli bir özelliği ortaya çıkmıştır. Şekil 4.10. ve Şekil 4.11. boşluk kusurlu durumların band yapılarına aitlerdir.



Şekil 4.10. (a) GaBi, (b) InBi (c) GaBi₃ ve (d) InBi₃ için Bi atomu eksik durumları için band yapıları. Fermi seviyesi 0'a kaydırılmıştır.

Bu yapıların hepsinde SYE dahil edilmiştir. Bu grafiklerde Fermi seviyelerinin bandlar tarafından kesildiği gözükmemektedir. Yani, tüm durumlar iletken olduğunu için ilingesel özelliğin bozulduğu söylenebilmektedir. 1/32 oranında bir boşluğun bu tarz malzemeler için olumsuz bir etkiye sahip olduğu açıktır. Dolayısıyla, bu malzemelerin sentezlenmesi esnasında oldukça dikkat edilmeli ve kristaller iyi büyütülmelidir. Aksi halde ilingesel özelliklerin ortaya çıkması beklenen bir durum olmayacaktır.



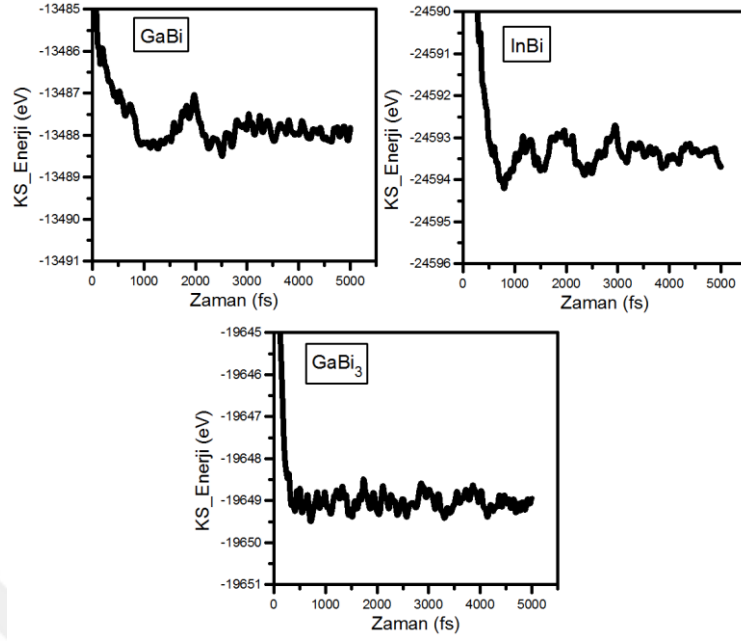
Şekil 4.11. (a) GaBi, (b) InBi (c) GaBi₃ ve (d) InBi₃ için In ya da Ga atomu eksik durumları için band yapıları. Fermi seviyesi 0'a kaydırılmıştır.

4.2.3. Kusurlu durumları iyileştirme özellikleri

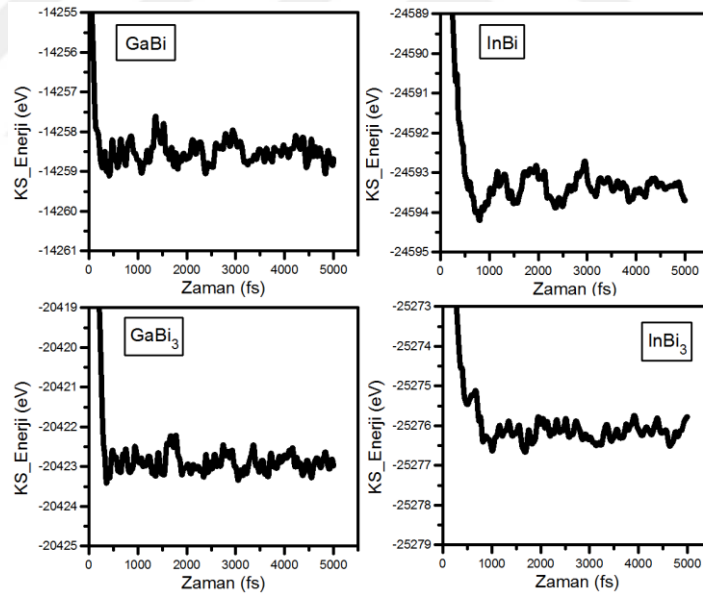
Önceki bölümlerde boşluk kusurlarının yapılar etkisi incelenmiş ve kusursuz bir iyileştirmenin var olamayacağı görülmüştür. Şimdi eğer dışarıdan bir atom gönderilirse bu atomun o kusuru kapatıp kapatamayacağı (kusursuz iyileştirme) durumlarını incelenecektir (Şekil 4.12. ve Şekil 4.13.).

Gönderilen bu atomlar Ga / In, Bi ve Ge olarak seçilmiştir. Çünkü bunlardan üçü yapıları oluşturan atomlardır. Diğer atom yani Ge ise yabancı bir atom olarak dahil edilecek olup bu etki de göz önüne alınmıştır.

Bu atomların ilgili boşlukları kapatabilme durumlarını incelemek adına şu adımlar gerçekleştirilmiştir; Başlangıçta, kusurlu durum için 5 ps moleküler dinamik hesabı sonucunda oluşan yapının atomik pozisyonları kullanılmıştır. Dışarıdan gönderilme durumlarını taklit edebilmek için boşluğa gönderilmesi düşünülen atom, boşluğun etrafında rastgele bir yere uygun bir uzaklık olacak şekilde yerleştirilmiştir. Bu atomun o boşluğu kapatıp kapatmama durumunu incelemek adına ise 5 ps daha hesaplama yapılmış ve elde edilen veriler incelenerek sonuca ulaşılmıştır. Bu hesaplamalara, kararsız olduğu için, Bi kusurlu durumdaki InBi₃ dahil edilmemiştir.

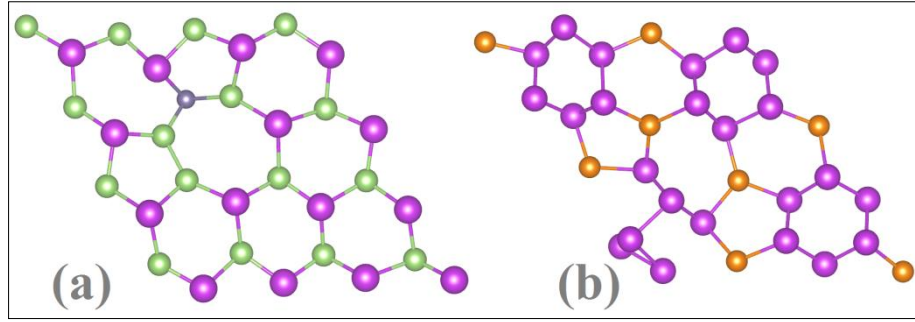


Şekil 4.12. Bi atomu eksik olup Ge ile iyileştirilme durumları.



Şekil 4.13. In ya da Ga eksik olup Ge ile iyileştirilme durumları.

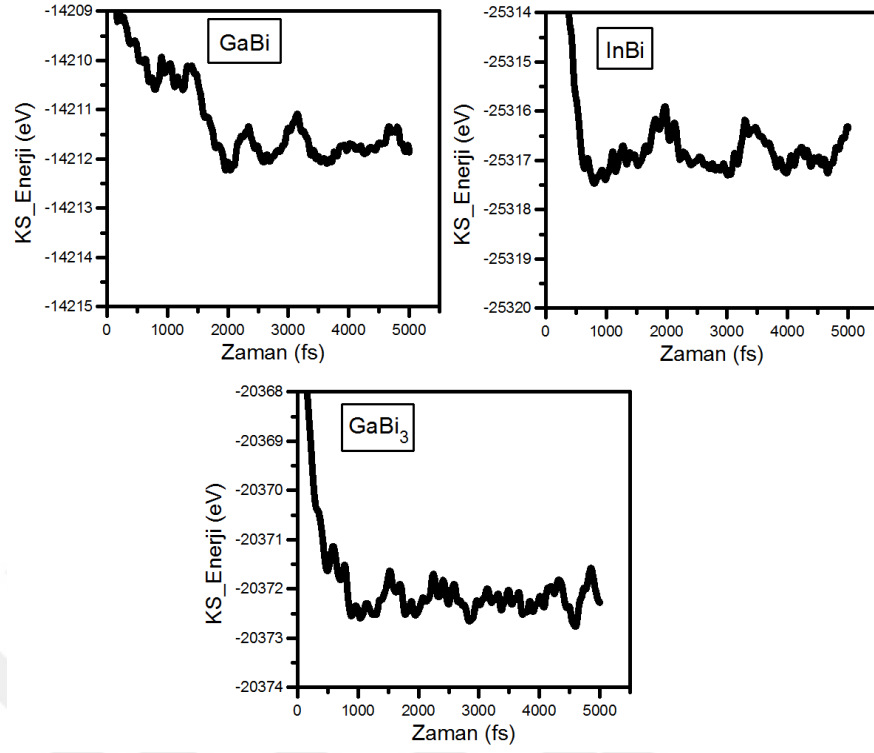
Oluşan boşluğun civarında yüksek bir potansiyel söz konusu olmaktadır. Bu potansiyelin gücüne bağlı olarak yapının iyileşme süreci farklılaşabilir. Eğer boşluğun potansiyeli yeterince yüksekse, boşluk atomu çekebilmeyi başarabilir ve kusursuz bir yapının elde edilmesine olanak sağlayabilir. Diğer yandan bu potansiyel yeterince güçlü değilse Stone-Wales (SW) denilen bir kusur oluşur (Şekil 4.14.).



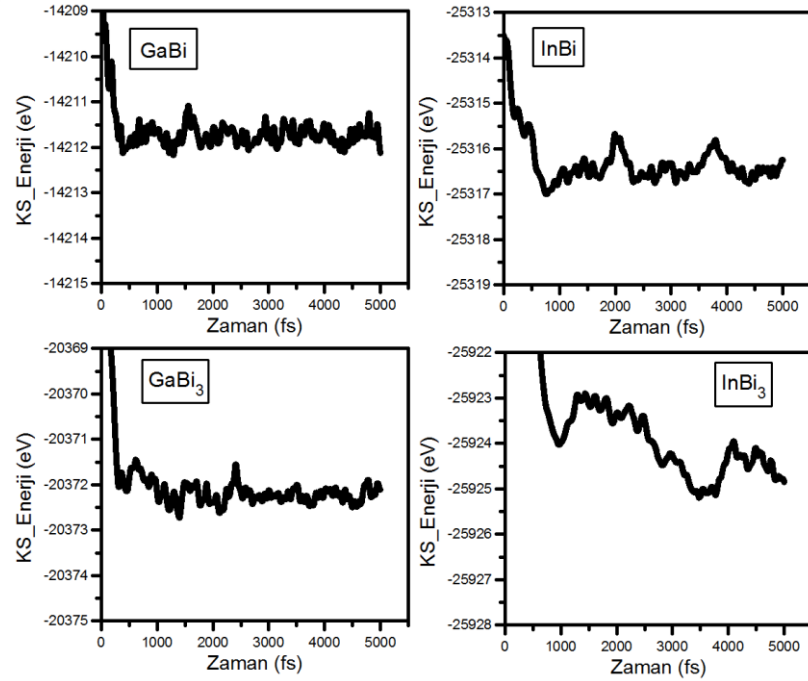
Şekil 4.14. (a) GaBi ve (b) InBi₃ için MD hesabı sonucu oluşan SW kusurları yapı bozulması. Yeşil, mor, turuncu ve gri ile gösterilenler sırasıyla Ga, Bi, In ve Ge atomlarını temsil etmektedirler.

Boşluk, kusursuz durumdakinden farklı bir şekilde bağ yaparak kapanır. Bunun sebebi, SW kusurlu durumu oluşturmak kusursuz durumu oluşturmaktan daha kolaydır, yani daha az enerji gerektirir. Ayrıca SW kusurlu durumdan kusursuz duruma geçmek için belli bir enerjiye ihtiyaç vardır.

Yapıların kararlılığının belirlenmesi adına MD grafikleri ve yapıların hesaplama sonucundaki atomik pozisyonları incelenmiştir ve sonuçlar Şekil 4.15. ve Şekil 4.16.'da gösterilmektedir.



Şekil 4.15. Bi atomu eksik olan durumlarda Bi ile iyileştirme durumları.



Şekil 4.16. Ga ya da In atomu eksikliğinde kendi atomları ile iyileştirilme durumları.

Ayrıca bu durumlar Tablo 4.2.'de verilmiştir. Elde edilen verilerden yararlanarak şu sonuçlara ulaşılmaktadır;

- a) GaBi_3 bileşiği hem boşluk kusurlu durumda hem de iyileştirme durumlarında kararlılığını koruyabilmektedir. Ga, Bi ve Ge atomları ile kusursuz bir iyileşme söz konusudur. Enerji grafiklerinde de salınımların kararlı bir şekilde olmasını da buna yorulabilmektedir.
- b) GaBi ise GaBi_3 'e göre benzerlik göstermektedir. Kararlılığı bozulmamaktadır. Fakat Şekil 4.14.'te gösterildiği gibi Bi kusuruna eklenen Ga atomlu durum için SW kusurlu durum oluşmaktadır.
- c) InBi bileşiğinde ise iyileşmeler kusursuz bir şekilde olmasına rağmen Bi eksikliği olan duruma Bi ile iyileştirme yapıldığında yapı bozulmaya uğramaktadır.
- d) En sıkıntılı yapı ise InBi_3 olarak görülmektedir. Bi eksikliği durumunda yapı bozulmaktadır. Bu yüzden iyileştirme durumlarına dahil edilmemiştir. In eksikliği durumunda In ile iyileştirilmeye çalışıldığında hem yapı bozulmakta hem de SW kusuru oluşmaktadır (Şekil 4.16.).

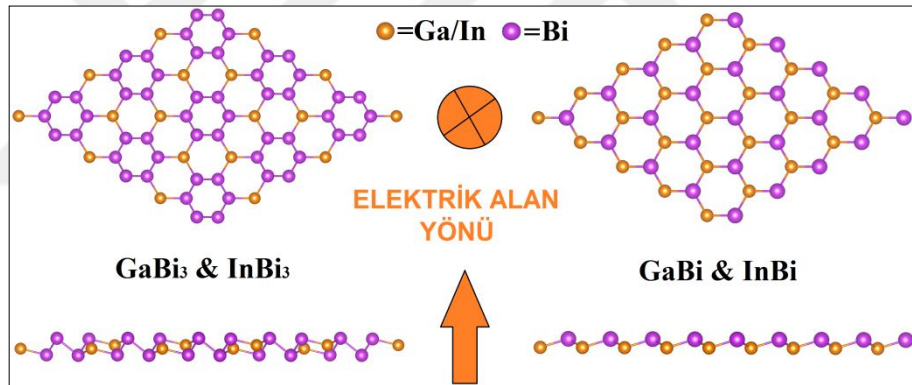
Tablo 4.2. Malzemelerin iyileştirme sonucunda son durumları ve kararlılıkları

Yapı	Çıkarılan atom	Eklenen atom	Durum	Kararlılık
GaBi	Bi	Bi	Normal	kararlı
GaBi	Bi	Ge	SW	kararlı
GaBi	Ga	Ga	Normal	kararlı
GaBi	Ga	Ge	Normal	kararlı
InBi	In	Ge	Normal	kararlı
InBi	In	In	Normal	kararlı
InBi	Bi	Bi	Normal	kararsız
InBi	Bi	Ge	Normal	kararlı
GaBi_3	Ga	Ga	Normal	kararlı
GaBi_3	Ga	Ge	Normal	kararlı
GaBi_3	Bi	Bi	Normal	kararlı
GaBi_3	Bi	Ge	Normal	kararlı
InBi_3	In	In	SW	kararsız
InBi_3	In	Ge	Bozuldu	Kararsız

Sonuç olarak bu malzemelerin 1/32 oranındaki kusurlu durumda elektronik band yapısı değişmekte ve bazı durumlarda ise kararlılık bozulmaktadır.

4.3. Elektrik Alan Uygulanması

İki boyutlu malzemelerin yüzeyine dik bir elektrik alan uygulamak elektronik özellikleri değiştirebilmektedir [41-49]. Böylece nanoteknoloji için uygun özelliklere sahip yapılar ortaya çıkabilmektedir. İncelenen ilingsel malzemeleri önemli kılan şey onların elektronik band yapılarıdır. Elektrik alan uygulamak sahip oldukları özellikleri değiştirilebilmektedir. Bu yüzden elektrik alan uygulanmaktadır. Elektrik alanın doğrultusu malzemeler üzerinde pek bir fark yaratmadığından Şekil 4.17.'de olduğu gibi uygulanmıştır. Uygulanan elektrik alanın yönünün değişmesinin (+z ya da -z) sonuçlara etkisi bulunmamaktadır.

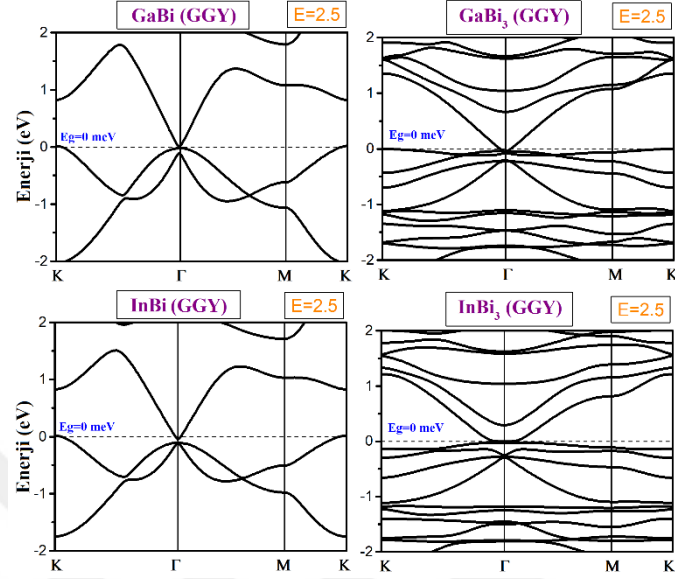


Şekil 4.17. Elektrik alan yönünün üstten ve yandan gösterimi.

Öncelikle SYE'nin var olmadığı durumlar incelenmiştir. Şekil 4.18. ve Şekil 4.19. incelendiğinde 2,5 V/Å değerindeki bir elektrik alanın yüzeye dik uygulanması sonucunda band aralıkları yok olmaktadır. Ayrıca örgü sabiti değerinin de değiştiği hesaplamalar sonucunda elde edilmiştir. Bu yüzden uygulanan elektrik alan değerleri 0,0 ile 2,5 V/Å arasında seçildiği görülmektedir.

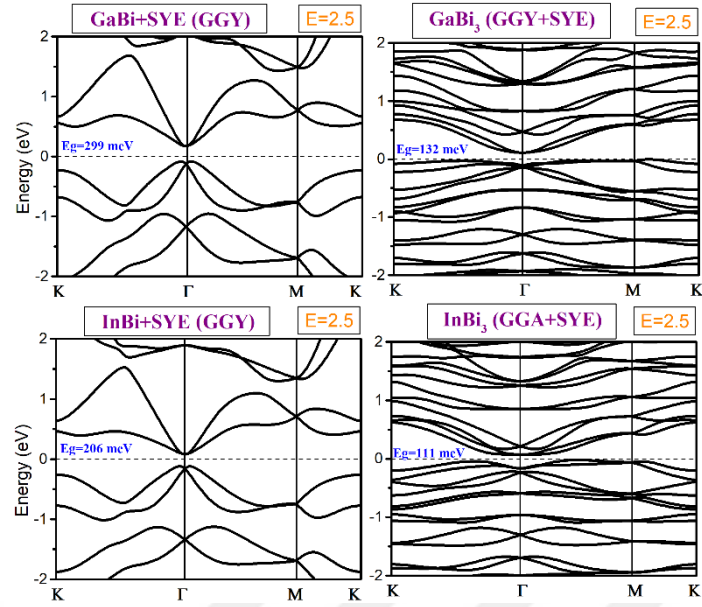
Elektrik alanın yönüne bağlı olarak atomlar arasında bir yük transferinin meydana geldiği sonucuna ulaşılmış ve dipol moment oluştuğu da hesaplamalar sonucunda

elde edilmiştir. Fakat bu tez çalışmasında bunlar ayrıntılı olarak incelenmeyeceğinden sonuçların verilmeyeceği söylenebilmektedir.



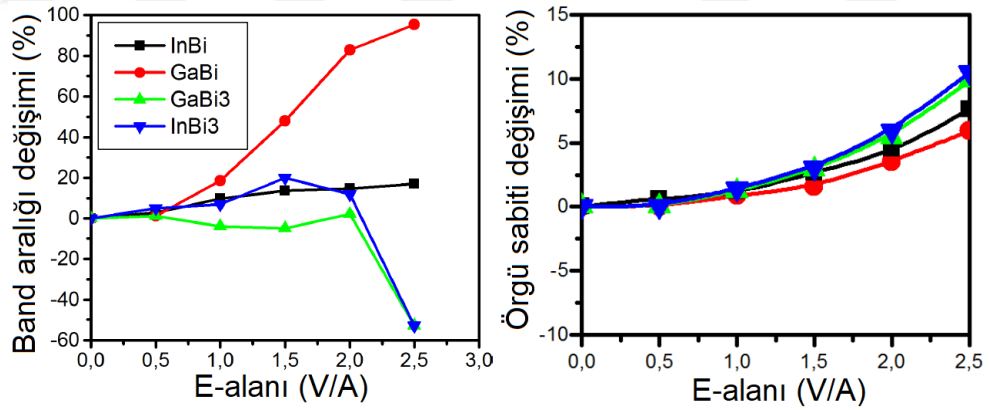
Şekil 4.18. SYE'nin var olmadığı durum için band yapıları. Elektrik alanın birimi V/Å 'dur.

SYE durumunda ise elektrik alan değeri 2,5 V/Å olsa bile band aralığı hala bulunmaktadır. Hatta GaBi ve InBi için arttığı görülmektedir. Yani SYE, elektrik alan altında bandların ortadan kaybolmasını engellemektir. Bu çok önemli bir sonuçtur ve yüksek SYE sahip malzemelerde de meydana gelebileceğinden literatüre faydalı bir bilgi olarak aktarılmıştır.



Şekil 4.19. SYE'nin var olduğu durumlar için band yapıları. Elektrik alanın birimi V/Å cinsindendir. E_g band aralığını ifade etmektedir.

Uygulanan elektrik alan şiddetine göre ayrıca tüm yapıların örgü sabitleri de artmaktadır ve bu durum Şekil 4.20.'de gösterilmiştir.



Şekil 4.20. SYE dâhilinde uygulanan elektrik alanın şiddetine bağlı olarak band aralıklarının ve örgü sabitlerinin yüzdesel değişimi.

4.4. Germe Etkisinin İncelenmesi

Literatürdeki çalışmalar yüzeyi germenin etkili olduğunu bildirmektedir. Boyut arttıkça örgü sabitleri de artmaktadır.

Diğer yandan germe etkisi altında yapıların band aralıkları azalmaktadır. Yapıların yüzeysel boyutu yaklaşık %5 gibi bir oranda arttığında hem SYE hem de spin-yörünge etkileşimsiz durumların band aralıklarının ortadan kaybolduğu gözükmemektedir.

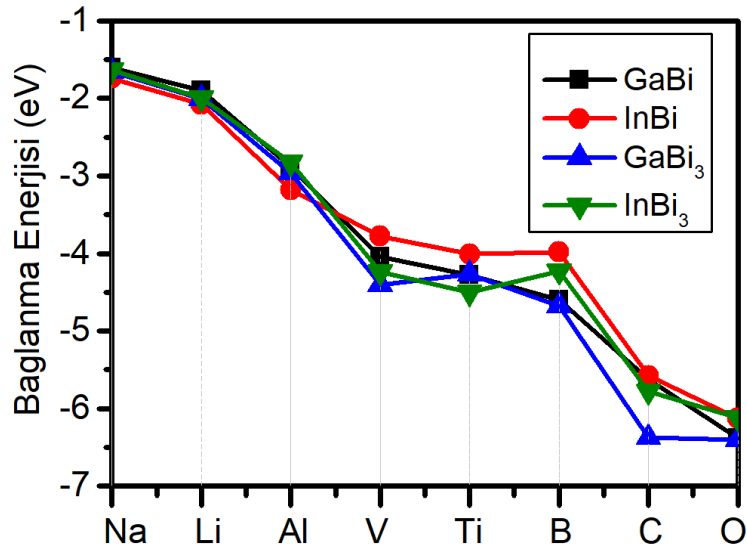
4.5. Yüzeylerin İşlevselleştirilmesi

4.5.1. Etkileşim enerjileri ve yapılar

İşlevselleştirmenin asıl amacı incelenen yapıların elektronik özelliklerinin değiştirebilmektir. Böylece nanoteknoloji için benzersiz özelliklere sahip yeni yapıların ortaya çıkması hedeflenmektedir.

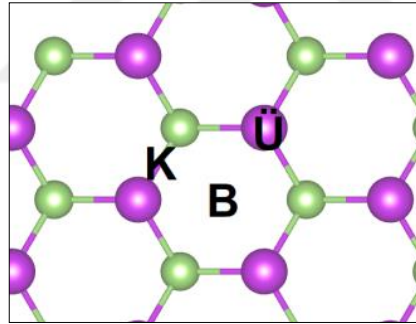
İşlevselleştirme işleminde GaBi ve InBi için 8, GaBi₃ ve InBi₃ içinse 6 farklı bölgeye atomlar yerleştirilip en uygun durumlar belirlenmiştir. En uygun enerjili durumlar dikkate alınmıştır. Enerjiler ise $E_b = E_{TOPLAM} - E_{ATOM} - E_{İLİNGESEL}$ formülü ile bulunmuştur. Burada E_{ATOM} sadece atomun enerjisi, $E_{İLİNGESEL}$ sadece iki boyutlu yapının enerjisi ve E_{TOPLAM} ise atomla iki boyutlu yapının enerjisidir.

Bu tez çalışmasındaki yüzeye bağlanan atomlar, 1,60 eV – 6,50 eV arasında değişen mertebede güçlü bir bağlanma enerjisine sahiptirler. Şekil 4.21.'de elde edilen verilere göre IA grubu elementleri, diğer çalışılan elementlere göre daha az bir enerji ile bağlanmaktadır. Bunu, geçiş elementlerinden olan V ve Ti izlemektedir. Burada farklı olarak Al atomunun bağlanma enerjisi de geçiş elementleri ile aynı mertebededir. Periyodik tablonun sağ tarafında bulunan III-A, IV-A ve VI-A grubu elementleri ile malzemeler arasında çok daha kuvvetli bir bağ bulunmaktadır. Küçük farklılıklar olmasına rağmen bağlanma kuvvetleri benzerlik göstermektedir. Enerji mertebeleri incelendiğinde bağlanmaların kovalent tipi yani kuvvetli bir bağlanmadan kaynaklanabileceği görülmektedir.



Şekil 4.21. Atomların bağlanma enerjileri.

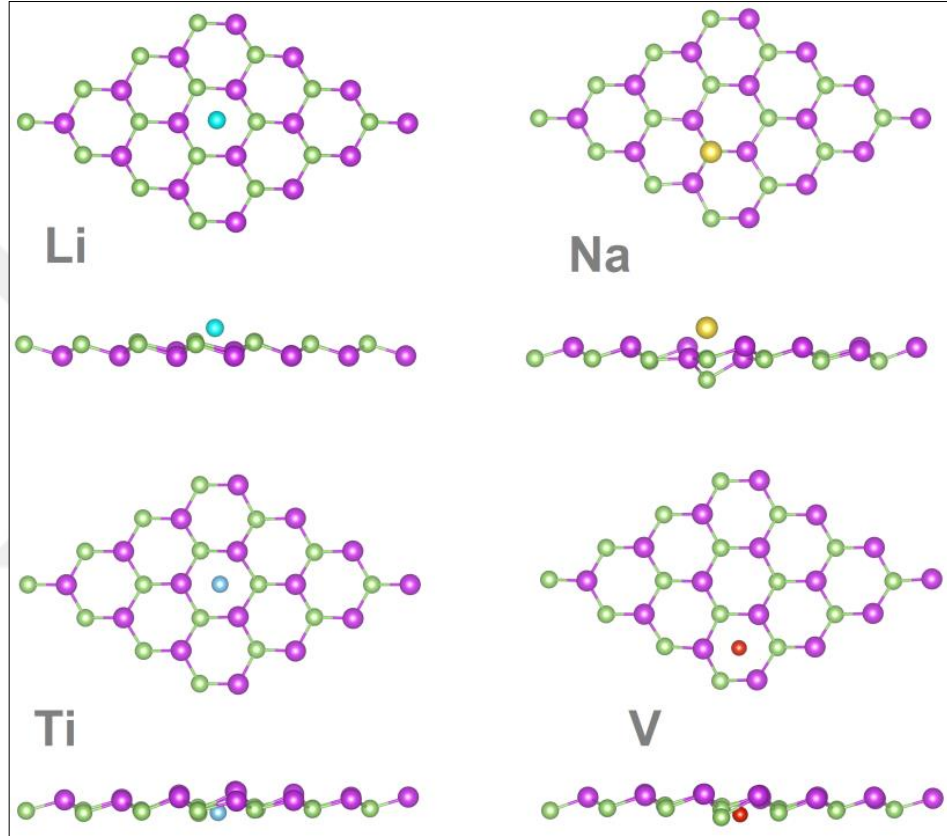
Şekil 4.22.'de atomların bölgeleri gösterilmektedir.



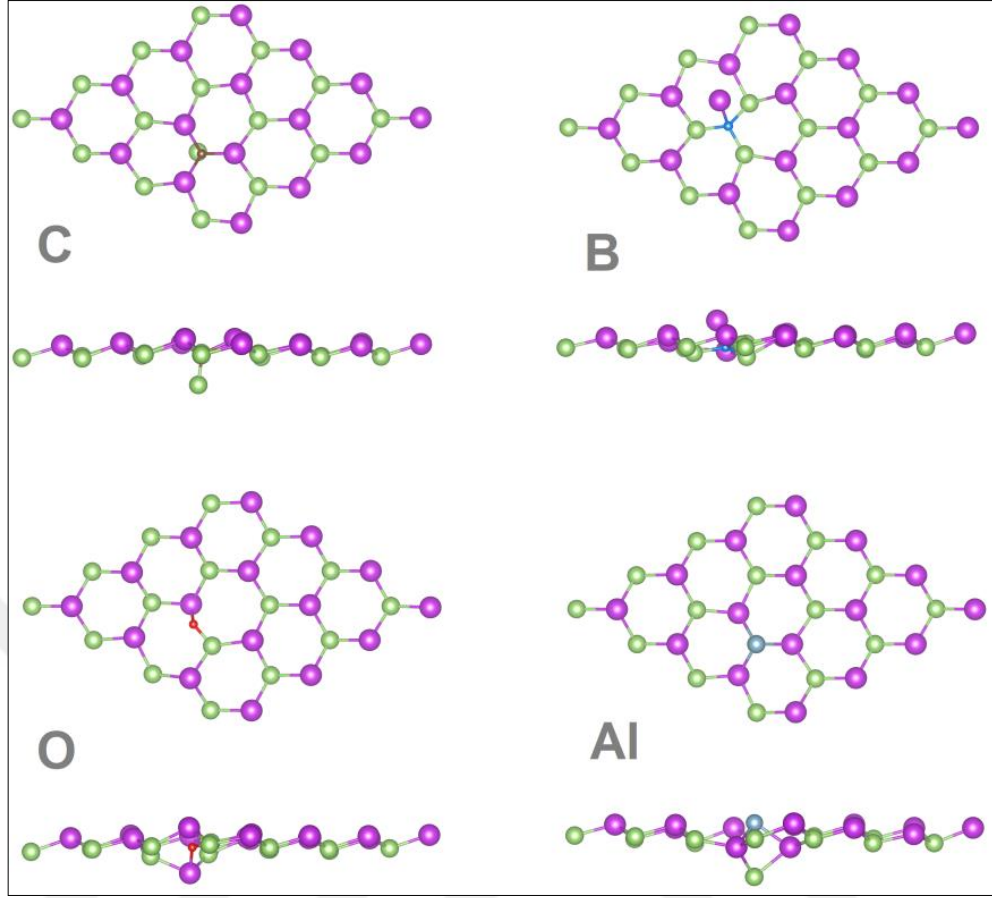
Şekil 4.22. İki boyutlu yapılarıdaki bölgelerin temsili. K köprü, B boşluk ve Ü ise üst olarak belirtilmiştir.

Bi atomlarının çekim gücünden dolayı Al atomu sisteme gönderildiğinde üst bölgesini tercih etmiş ve Ga atomunu iterek Ga'nın bulunduğu konuma yerleşmiştir. Bi-Al arası mesafe 2,87 Å'dur. B atomu sisteme gönderildiğinde üst bölgesini tercih etmiş ve Bi atomunu iterek Bi'nin bulunduğu konuma yerleşmiştir. Ga-B arası mesafe 2,15 Å'dur. C atomu sisteme gönderildiğinde üst bölgesini tercih etmiş ve Ga atomunu iterek Ga'nın bulunduğu konuma yerleşmiştir ve ittiği Ga ile bağ yaptığı görülmektedir. Ga-C arası mesafe 2,42 Å'dur. Li, Ti ve V ise boşluk kısmını tercih etmiştir. Na ise Ga'nın üst bölgesindedir. O atomu diğerlerinden farklı olarak Ga ve

Bi atomlarının arasına geçerek iki tane altıgeni yedigen hale getirmiş ve yapıyı oldukça değiştirmiştir. B, C, O, Al atomları ise büyük çapta bölgesel bozukluklara sebep olmuştur. Ayrıca B ve C, 4 yüzlü tetrahedron bir yapı oluşturmaya meyillidir. Bu durum literatürdeki çalışmalarda da gözükmemektedir [37, 101]. GaBi için bu durum Şekil 4.23. ve Şekil 4.24.'de gösterilmiştir.

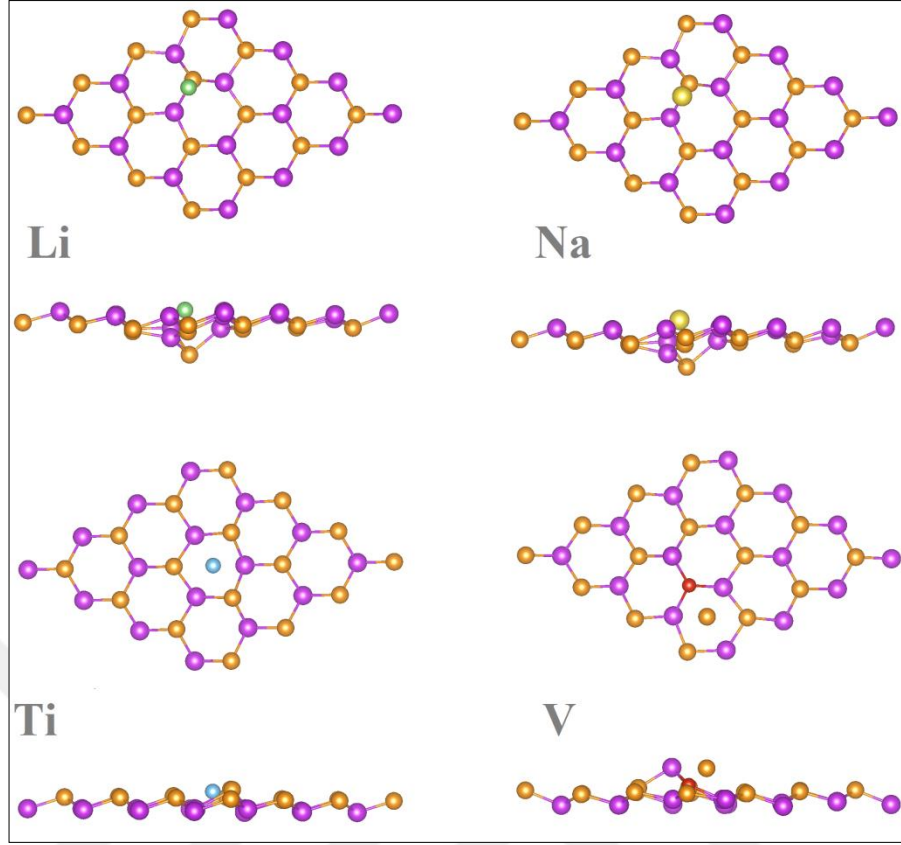


Şekil 4.23. GaBi yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. Ga yeşil, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.

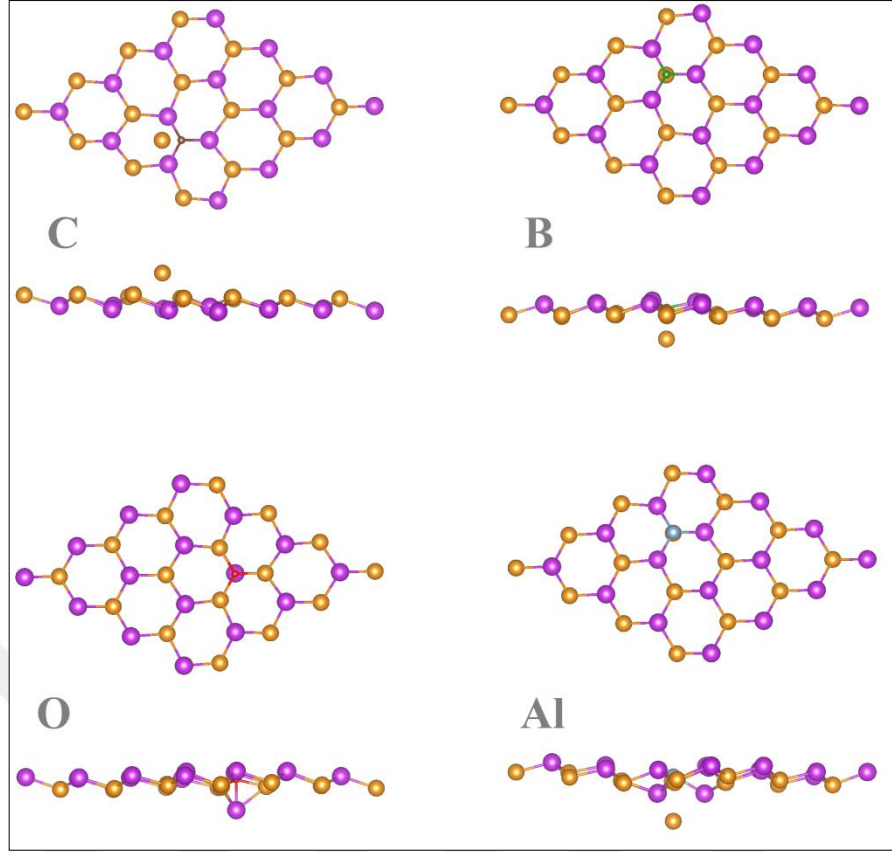


Şekil 4.24. GaBi yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. Ga yeşil, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.

Şekil 4.25. ve Şekil 4.26.'da InBi yüzeyi ile atomlar arasındaki etkileşimin en düşük enerji durumları gösterilmektedir.



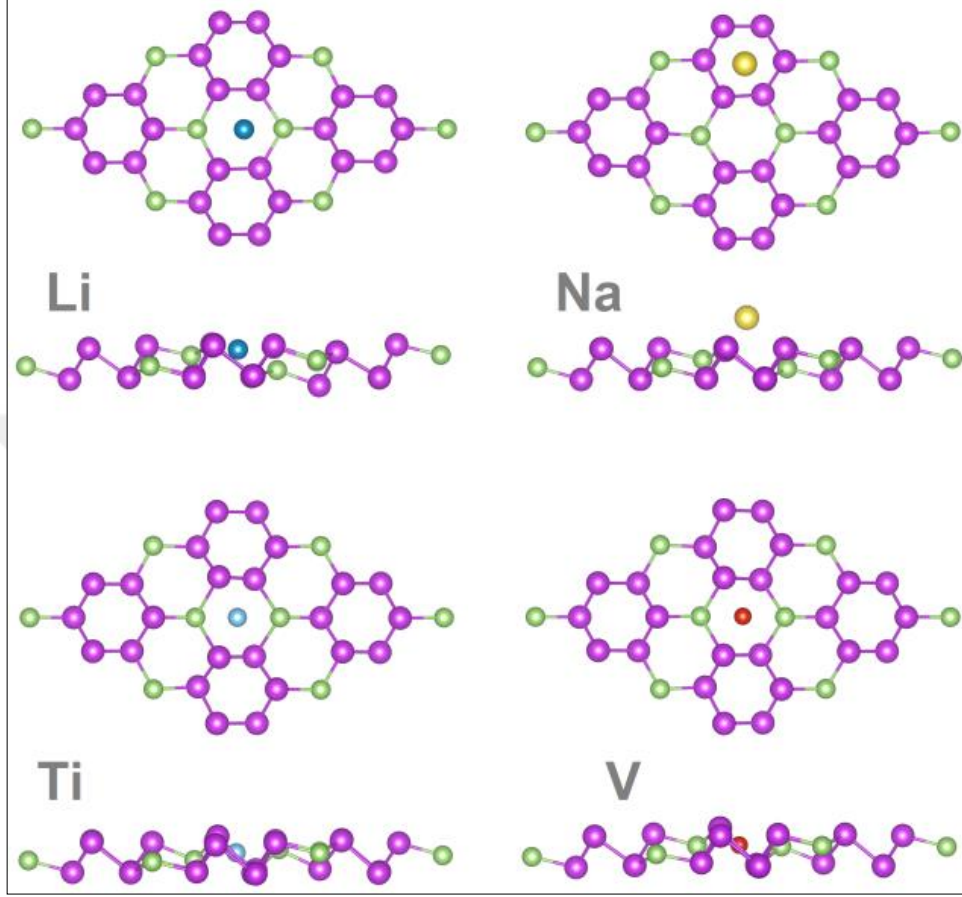
Şekil 4.25. InBi yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. In turuncu, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.



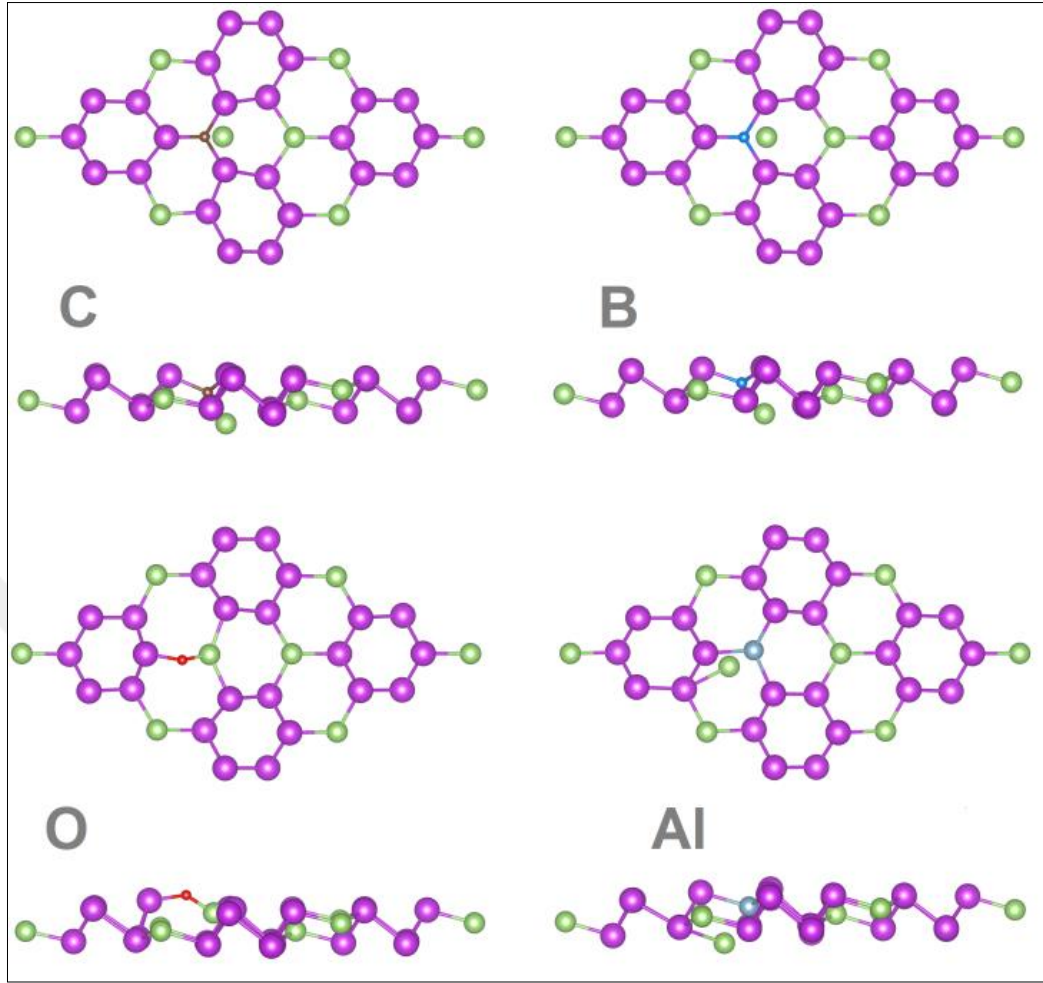
Şekil 4.26. InBi yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. In turuncu, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.

Bi atomlarının çekim gücünden dolayı Al atomu sisteme gönderildiğinde üst bölgesini tercih etmiş ve In atomunu iterek In'nin bulunduğu konuma yerleşmiştir. Bi-Al arası mesafe 2,84 Å'dur, GaBi sistemine göre daha küçüktür. B atomu sisteme gönderildiğinde Al atomuna göre daha düzenli olarak, üst bölgesini tercih etmiş ve Bi atomunu iterek Bi'nin bulunduğu konuma yerleşmiştir. In-B arası mesafe ise 2,38 Å'dur. C atomu sisteme gönderildiğinde B ve Al ile benzer davranışı sergilemektedir. In yerine geçmiştir ve Bi-C arası mesafe 2,39 Å'dur. Li atomun ise In atomunun bulunduğu konuma gelme eğilimi göstermektedir. In atomunu itmekte fakat Al, B ve C de olduğu gibi etkili bir bağlanma mekanizması oluşmamıştır. Na atomu da benzer davranışı sergilemiştir. O atomu GaBi durumdan farklı olarak Bi atomunun yerine geçmiştir. In-O arası mesafe 2,45 Å'dur. Ti atomu boşluk kısmında bulunmaktadır. V'de ise farklı bir durum ortaya çıkarmıştır. V atomu In atomunu bulunduğu konumundan çok daha farklı bir yere gitmesine vesile olmuştur.

GaBi₃ için en düşük enerjili durumlar Şekil 4.27. ve Şekil 4.28.'de gösterilmektedir.

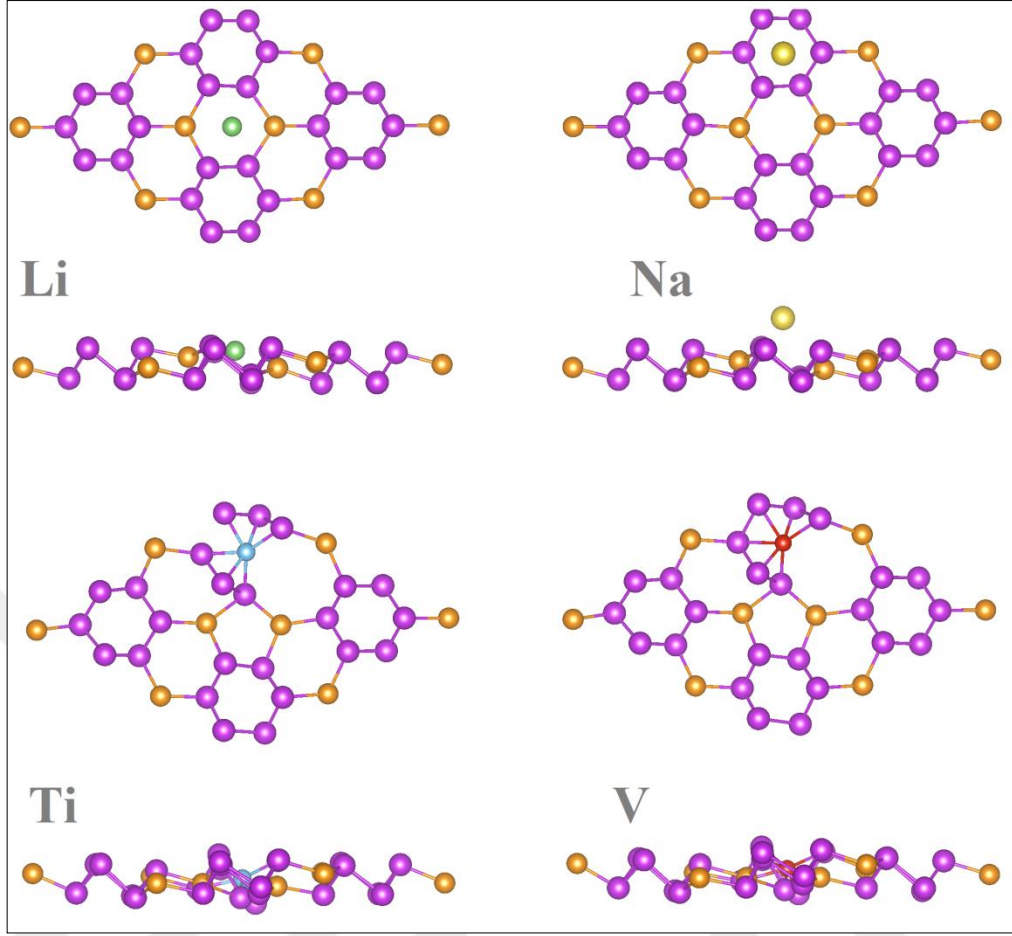


Şekil 4.27. GaBi₃ yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. Ga yeşil, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.

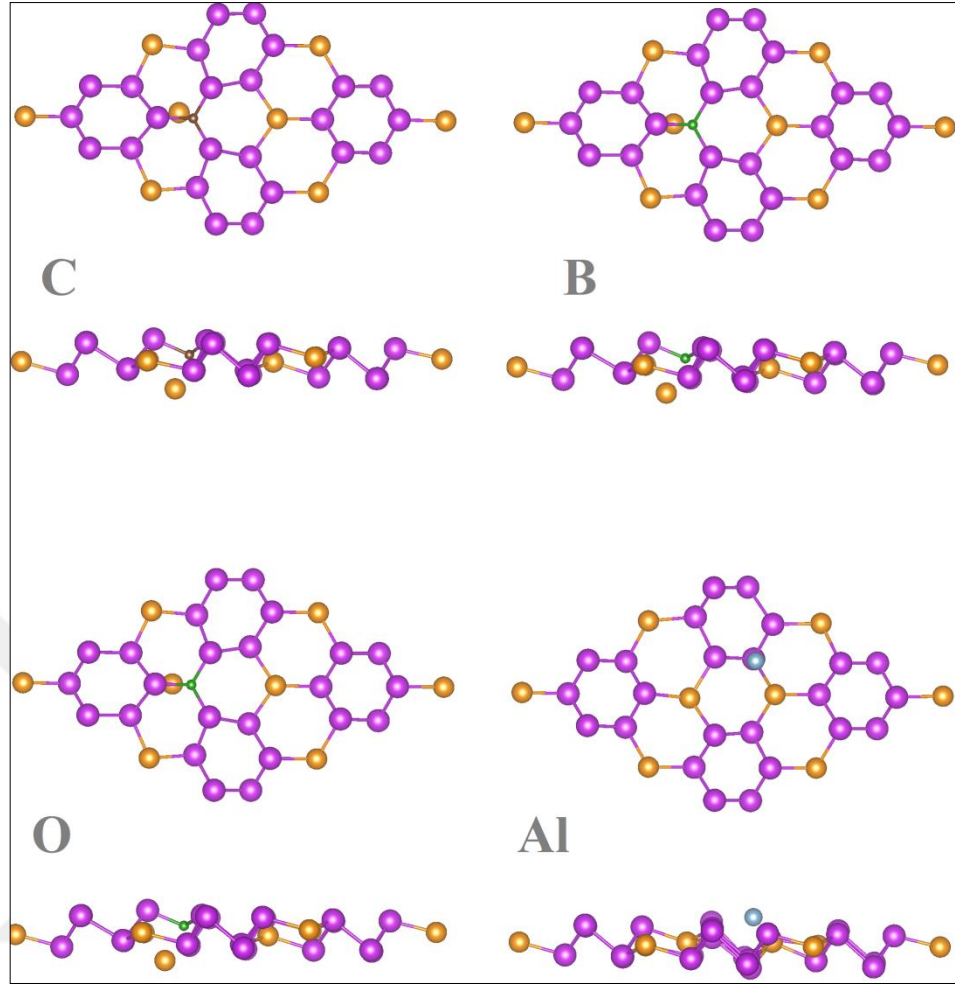


Şekil 4.28. GaBi₃ yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. Ga yeşil, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.

Al atomu gönderildiğinde Ga atomunun yerini alıp aşağıya doğru itilmiştir. B ve C atomları da benzer şekilde davranmışlardır fakat Bi ile yaptıkları bağların mesafesi Al atomunun durumuna göre daha küçüktür. Na ile Li boşluk kısmında bulunmaktadır. Fakat Na atomu sadece Bi atomlarının olduğu kısma gelirken Li ise hem Ga hem de Bi'nin bulunduğu boşluk kısmına konumlanmıştır. Ti ile V de Li ile aynı yerdedir. O atomu ise Ga ile Bi atomları arasına girerek yedigen bir durum ortaya çıkarmaktadır.



Şekil 4.29. InBi_3 yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. In turuncu, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.



Şekil 4.30. InBi₃ yüzeyine eklenen atomların yukarıdan ve yandan gösterimi. In turuncu, Bi ise mor ile gösterilmiştir. Diğer renkli olanlar ise eklenen atomlardır.

Al atomu gönderildiğinde Bi atomunun üstüne gelmiştir ve kuvvetli bir bağ yapacak mesafede bulunmaktadır. Fakat B ve C atomları In atomunun yerine geçmiştir. Bi-B ve Bi-C arası mesafeler sırasıyla 2,42 Å ve 2,40 Å olarak bulunmuştur ve Bi ile yaptıkları bağların mesafesi Al atomunun durumuna göre daha küçüktür. Na ile Li boşluk kısmında bulunmaktadır.

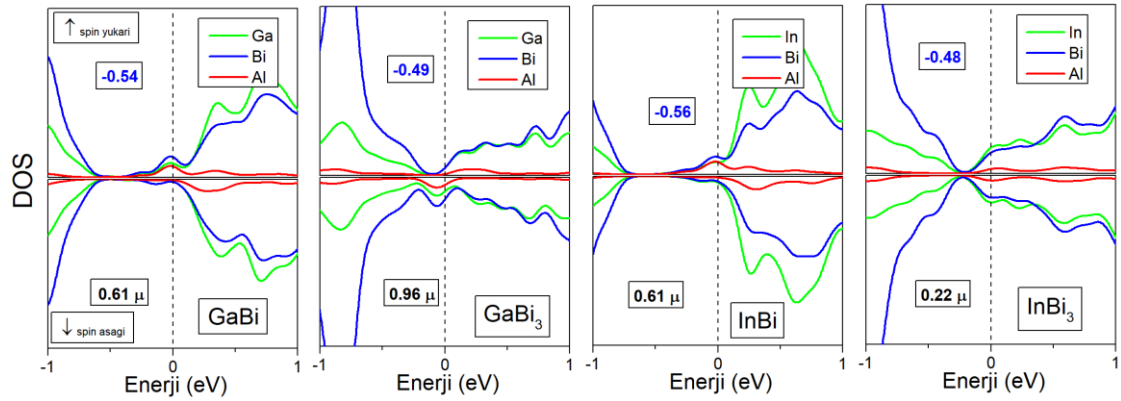
Fakat Na atomu sadece Bi atomlarının olduğu kısma gelirken Li ise hem In hem de Bi'nin bulunduğu boşluk kısmına konumlanmıştır. O atomu ise In ile Bi atomları arasına girerek yedigen bir durum ortaya çıkarmaktadır. Ti ve V ise benzer bölgesel bozukluklara sebep olmaktadır.

4.5.2. Elektronik özellikler

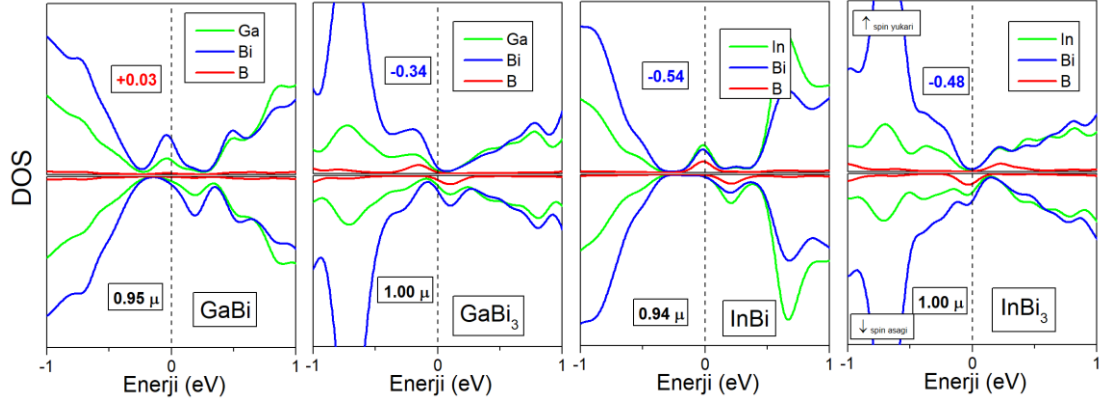
Malzemeler ilgili atomlarla işlevselleştirildiğinde birçok açıdan farklılık göstermektedir. Bunlar temel olarak şu şekilde düşünülebilir. Manyetik moment kazananlar, manyetik moment kazanmayıp hacim band yapısında değişim yaşayanlar.

4.5.2.1. Manyetizasyon kazanmış durumlar

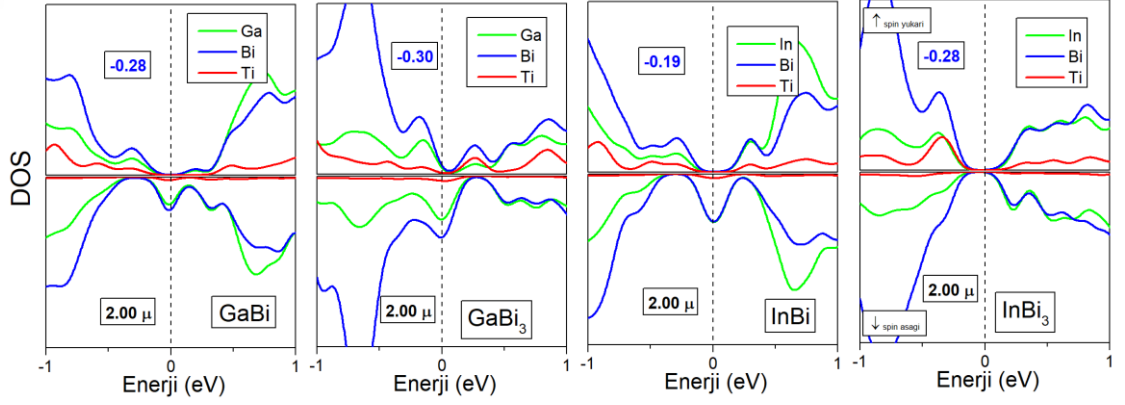
Malzemeler manyetik moment kazandıklarında KSHY'dan KASHY'a dönüşmektedir. Bu tez çalışması kapsamında bu etkiyi gösteren durumlar istenilenin aksine bir davranış sergileyebileceğinden dikkate alınmadığı gözlemlenmektedir. Yinede, spin ve durum yoğunluklarının davranışını gösterilmesi adına, manyetizasyon kazanan malzemelerin durum yoğunlukları incelenmiş ve bunlar Şekil 4.31.'den Şekil 4.35.'e kadar gösterilmiştir.



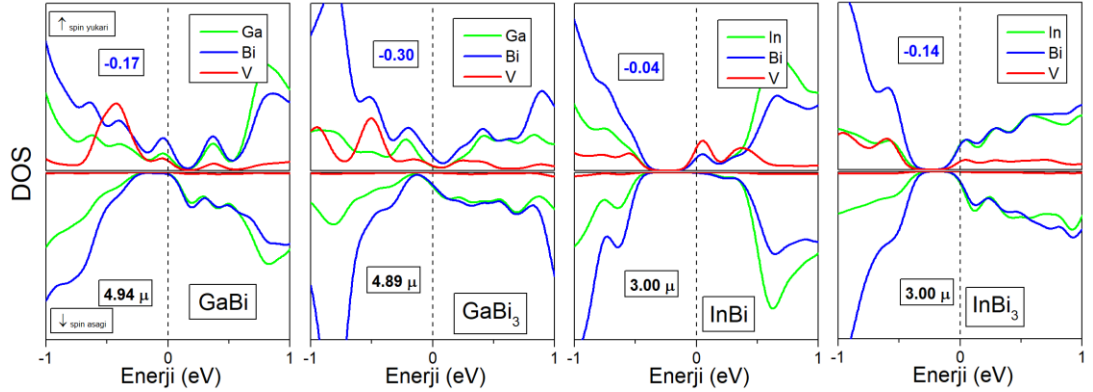
Şekil 4.31. Al atomu ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade Al atomu üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.



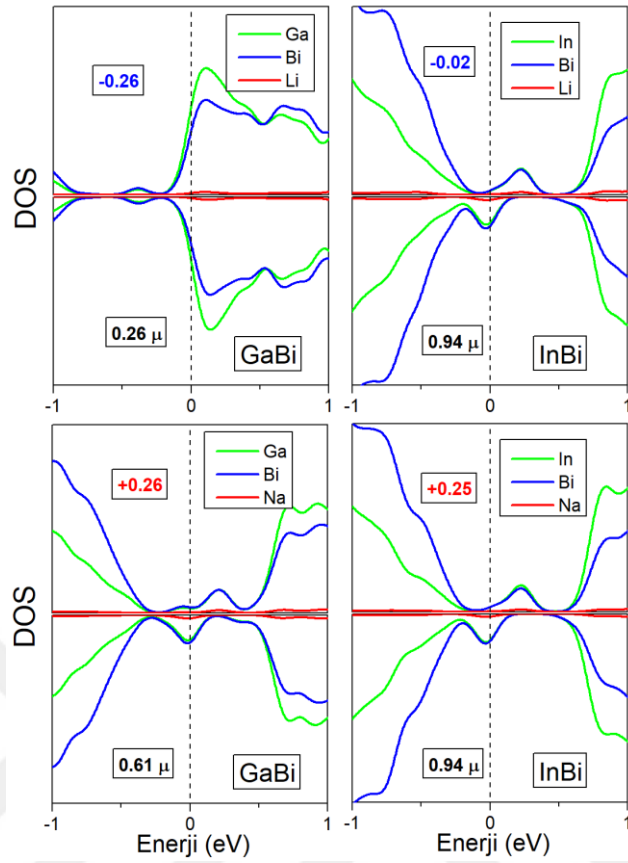
Şekil 4.32. B atomu ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade B atomu üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.



Şekil 4.33. Ti atomu ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade Ti atomu üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.



Şekil 4.34. V atomu ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade V atomu üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.



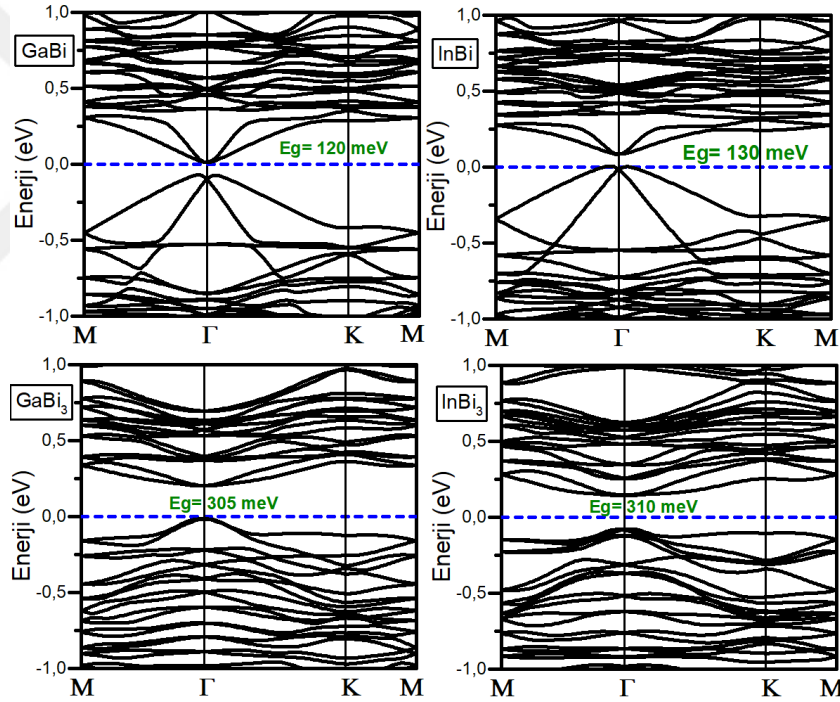
Şekil 4.35. Na ve Li atomları ile işlevselleştirilen malzemelerin durum yoğunlukları. Grafiklerin yukarısında belirtilen ifade Na ve Li atomları üzerindeki yükün değişimini gösterir (negatif olması yük fazlalığını işaret eder). Aşağısındaki ise manyetik moment değeridir.

Manyetizasyon kazanmış malzemelerin durum yoğunlukları Şekil 4.31.'den 4.35.'e kadar verilmiştir. Birim hücrede bulunan Ga/In ve Bi atomlarının sayısı işlevselleştirme için kullanılan atomlardan daha fazla olduğundan durum yoğunluklarında atomların katkılarındaki farklılıklar bulunmaktadır. Spin-yukarı ve spin-aşağı durum yoğunlukları arasındaki farkın büyük olması manyetik moment değerini de etkilemektedir. Özellikle Ti ve V atomlarının katkıları diğerlerine göre oldukça farklıdır. Birim hücrelerde bu atomlardan (Ti ve V) bir adet olmasına rağmen durum yoğunlukları bunlardan oldukça etkilenmiştir.

4.5.2.2. Manyetizasyon kazanmamış durumlar

Manyetizasyon kazanmamış durumların band aralıklarının olup olmamasına göre değerlendirme yapılacaktır. Burada C ve O ile işlevselleştirilmiş tüm durumların manyetik momentleri sıfır çıkmıştır. Ayrıca Li ve Na'nın GaBi_3 ve InBi_3 ile yapmış olduğu yapılarda da manyetik moment değeri de sıfır bulunmuştur. Eğer bu durumlar için hacim band aralıkları var ise KSHY durumunun varlığı söz konusu olabilir. Dolayısıyla bu durumlar dikkate alınmalı ve band yapıları incelenmelidir.

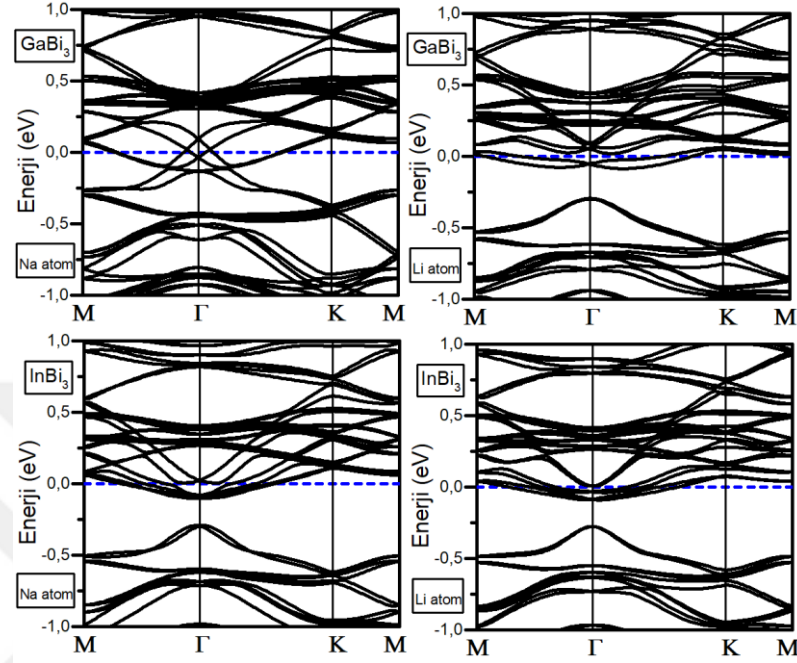
Şekil 4.26.'da C atomunun iki boyutlu yapılarla oluşturduğu durumların band yapıları gösterilmiştir.



Şekil 4.36. C atomunun ilingesel malzemelerle işlevselleştirilmesi sonucu oluşan band yapıları.

C atomu etkileşimde durum diğerleri göre farklıdır. Çünkü incelenen tüm yapıların ilingesel özellik gösterebilmesi muhtemeldir. Daha da önemli olan şey GaBi_3 ve InBi_3 ile C atomunun etkileşimi sonucunda band aralıkları saf duruma göre artmasıdır. Yani ilingesel özelliği daha iyi koruyabilecek bir durum yaratabilir. GaBi ve InBi de ise band aralığında – saf duruma göre – azalma mevcuttur.

Şekil 4.37.'de ise Li ve Na atomlarının yapmış olduğu etkileşimin band yapıları gösterilmektedir.

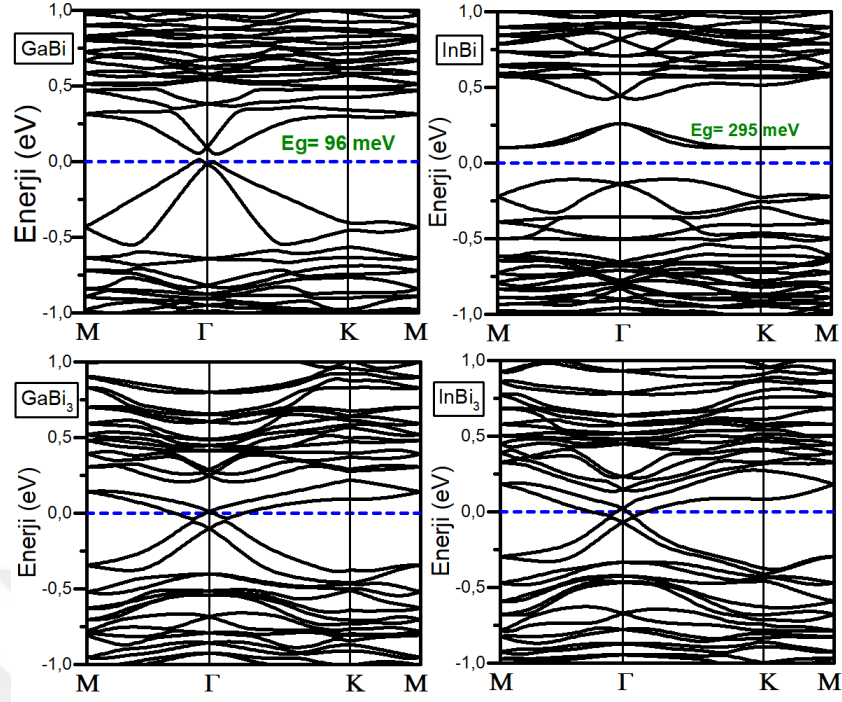


Şekil 4.37. Li ve Na atomunun ilingesel malzemelerle işlevselleştirilmesi sonucu oluşan band yapıları.

Li ve Na'nın GaBi_3 ve InBi_3 ile işlevselleştirilmesi sonucunda tüm durumlar için ilingesel özelliğin yok olduğu görülmektedir. Aynı grupta (I-A) bulunan bu malzemelerin benzer davranış göstermesi olağan bir durum olarak değerlendirilebilir.

Şekil 4.38.'de O atomu ile ilingesel yalıtkanların oluşturduğu yapının band yapısı gösterilmektedir.

O atomu ile etkileşimde ortaya çıkan durum GaBi_3 ve InBi_3 'ün ilingesel özelliğini bozmaktadır. Fakat InBi ve GaBi için durum farklıdır. İlingesel özelliğin korunabileceği gözükmektedir. InBi ile etkileşimde band aralığının arttığı gözükmektedir. Bu ilingesel yalıtkanlar için önemli bir sonuçtur.



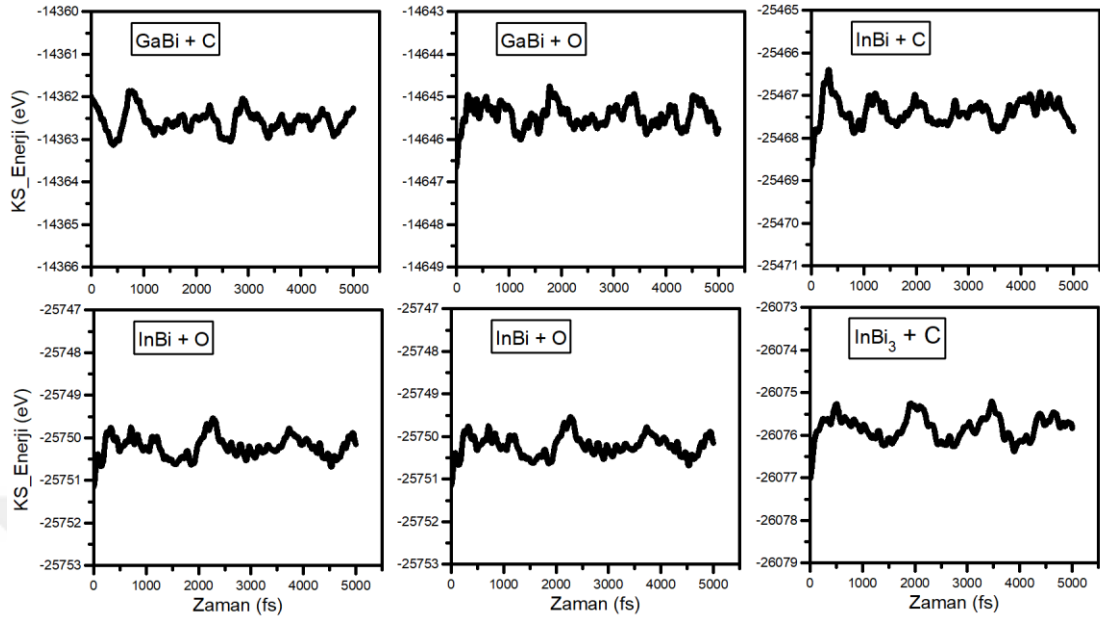
Şekil 4.38. O atomunun ilingesel malzemelerle işlevselleştirilmesi sonucu oluşan band yapıları.

Na atomu haricindekilerde yük transferleri iki boyutlu yapılardan işlevselleştirilen atoma doğru olmaktadır.

4.5.3. MD ile kararlılıklarının belirlenmesi

İşlevselleştirilen yapıların sadece band yapılarından yola çıkarak ilingesel özelliklerinin belirlenmesi yeterli olmamaktadır. Ayrıca bu yapıların kararlılık durumlarının da incelenmesi gereklidir. Bunu ise en iyi moleküler dinamik hesaplamaları yaparak anlamak mümkündür.

Şekil 4.39.'da işlevselleştirilip ilingesel özellikleri bozulmamış yapıların moleküler dinamik sonuçları verilmiştir. 5 ps, kararlılıklarının belirlenmesi için yeterli gözükmektedir. 300'K'de yapılan bu hesaplamalar, enerjideki salınımların belli değerler aralığında varlıklarını sürdürdüklerini ve bu salınımların çok büyük olmadığını göstermektedir. Yani grafikte verilen yapıların hepsi kararlı yapı davranışı göstermektedir. Böylece hem band özellikleri hem de kararlılıklarından ötürü bu yapıların ilingesel malzemeler olarak birçok alanda kullanılabileceği anlamına gelmektedir.



Şekil 4.39. İşlevselleştirilmiş yapıların MD sonuçları.

4.6. Moleküllerle Etkileşim

H₂O, CO₂, N₂, H₂, CH₄ gibi moleküller hayatımız için birçok alanda büyük öneme sahiptir.

Yeni nesil enerji kaynaklarından biri olan hidrojen gazı (H₂) gitgide artan enerji ihtiyacına güzel bir seçenek olabilir. Çünkü çevre dostudur ve yenilenebilir enerji kaynaklarındandır. Fosil yakıtlara alternatif olabilmektedir [102]. Böylesi bir durumda H₂ depolanmasına ihtiyaç duyulacaktır.

Bir diğer önemli molekül metan'dır (CH₄). Doğalgazda yaklaşık %70-90 civarında bulunmaktadır. Ülkemizin yaşadığı enerji sıkıntısına yardımcı olabilecek bir yol da gazı depolayabilmektedir. N₂ molekülü ise özellikle dondurulma işlemlerinde kullanılmaktadır.

Karbondiyoksit (CO₂) molekülünün çevreye zararları bulunmaktadır. Bu zararları en aza indirmek adına bu molekülü tutabilecek malzemeler geliştirilmesi gerekmektedir.

Yukarıda bahsedilen moleküllerin hayatımızdaki önemi ve işlevi açıktır. Depolama ya da molekül tutabilme özelliklerine sahip malzemelere ihtiyaç vardır. Bu ihtiyacın karşılanabilmesi için ilk aklımıza gelen iki boyutlu malzemelerdir. Çünkü iki boyutlu malzemelerin molekülleri tutabilmede etkili olduğu bilinmektedir [103].

Ayrıca, literatürde çok önemli bir yeri olan Dopamin (DA) ve Sitozin (Cyt) gibi moleküllerle bu yapıların etkileşimi de incelenecektir. Bu moleküller diğerlerine kıyasla büyüktürler.

DA, beynimizde, önemli bir sinir taşıyıcısı olarak görev yapar. Motivasyonu, dikkati ve öğrenmeyi büyük ölçüde etkiler [104]. Ölçsüz miktardaki DA seviyesi Parkinson, HIV, ilaç bağımlılığı, huzursuz bacak sendromu gibi nörolojik hastalıklara sebep olabilir.

Diğer yandan Cyt ise DNA ve RNA'nın yapıtaşlarından birisidir [105]. Bu çalışmada örnek olarak sadece Cyt alınmıştır. Ayrıca GR ile Cyt etkileşimi de incelenip literatür ile karşılaştırılmıştır.

Bu bölümde, incelenen malzemelerin moleküllerle etkileşimine bakılacak, etkileşim ve geometrik özellikleri belirlenerek depolama/tutma'da ne denli etkili oldukları araştırılacaktır. Ayrıca yük ekleme/çıkarma, işlevselleştirme ve kusur durumlarındaki etkileri de incelenecektir.

4.6.1. Saf yapıların moleküllerle etkileşimi

Tablo 4.3.'de moleküllerin etkileşim enerjileri verilmiştir. Etkileşim enerjisi aşağıdaki denklem (Denklem 4.1) ile bulunmaktadır.

$$E_{(\text{Etkileşim})} = E_{(\text{molekül}+\text{ikiboyutluyapı})} - E_{(\text{molekül})} - E_{(\text{ikiboyutluyapı})} \quad (4.1)$$

Burada $E_{(\text{Etkileşim})}$ etkileşim enerjisini vermektedir. $E_{(\text{molekül}+\text{ikiboyutluyapı})}$ molekül ile yapının, $E_{(\text{molekül})}$ sadece molekülün ve $E_{(\text{ikiboyutluyapı})}$ ise sadece yapının toplam enerjisidir. Elde edilen sonuçlar Şekil 4.40.'da gösterilmiştir.

4.6.1.1. Küçük moleküllerle olan etkileşim

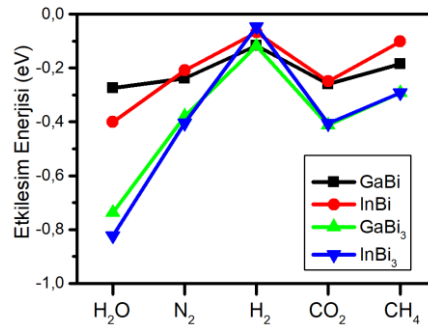
Tablo 4.3.'e baktığımızda, vdW etkisi (Grimme-D2) [82] dâhil edilmesine rağmen genelde zayıf bir etkileşim söz konusudur. Bir molekülün katı bir yüzeyde etkili bir şekilde tutunabilmesi için etkileşim enerjisinin en az -0,50 eV olması gerektiği literatürde belirtilmiştir [47].

Tablo 4.3. Küçük moleküllerin etkileşim enerjileri (eV cinsinden)

Küçük Moleküller	GaBi	InBi	GaBi ₃	InBi ₃
H ₂ O	-0,27	-0,40	-0,74	-0,82
N ₂	-0,24	-0,21	-0,38	-0,40
H ₂	-0,12	-0,07	-0,12	-0,05
CO ₂	-0,26	-0,25	-0,41	-0,41
CH ₄	-0,18	-0,10	-0,29	-0,29

Tüm moleküller arasında en az etkileşim enerjisine sahip olan H₂ molekülüdür. Dolayısıyla incelenen bu malzemelerin katkısız (pristine) hallerinin H₂ depolayıcı olarak kullanılması uygun değildir. İyi bir depolama için yüksek etkileşim enerjisine ihtiyaç vardır. H₂O molekülünün polar olması bağlanma enerjisini arttırmaktadır.

Methan molekülü için de oldukça zayıf bir etkileşim söz konusudur. Dolayısıyla bu molekül için de bu malzemeler iyi bir tutucu özellik göstermemektedir.

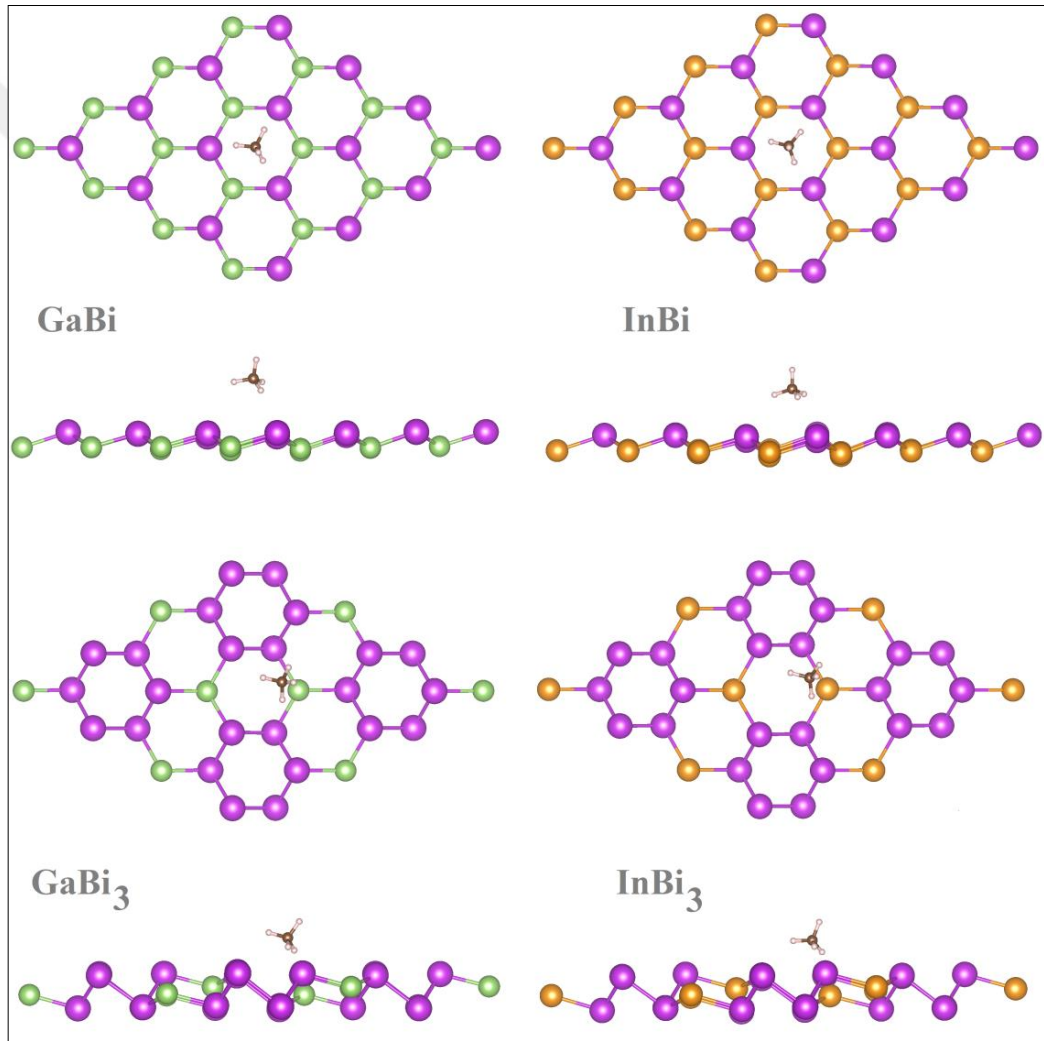


Şekil 4.40. Küçük moleküllerin etkileşim Enerjileri (eV cinsinden).

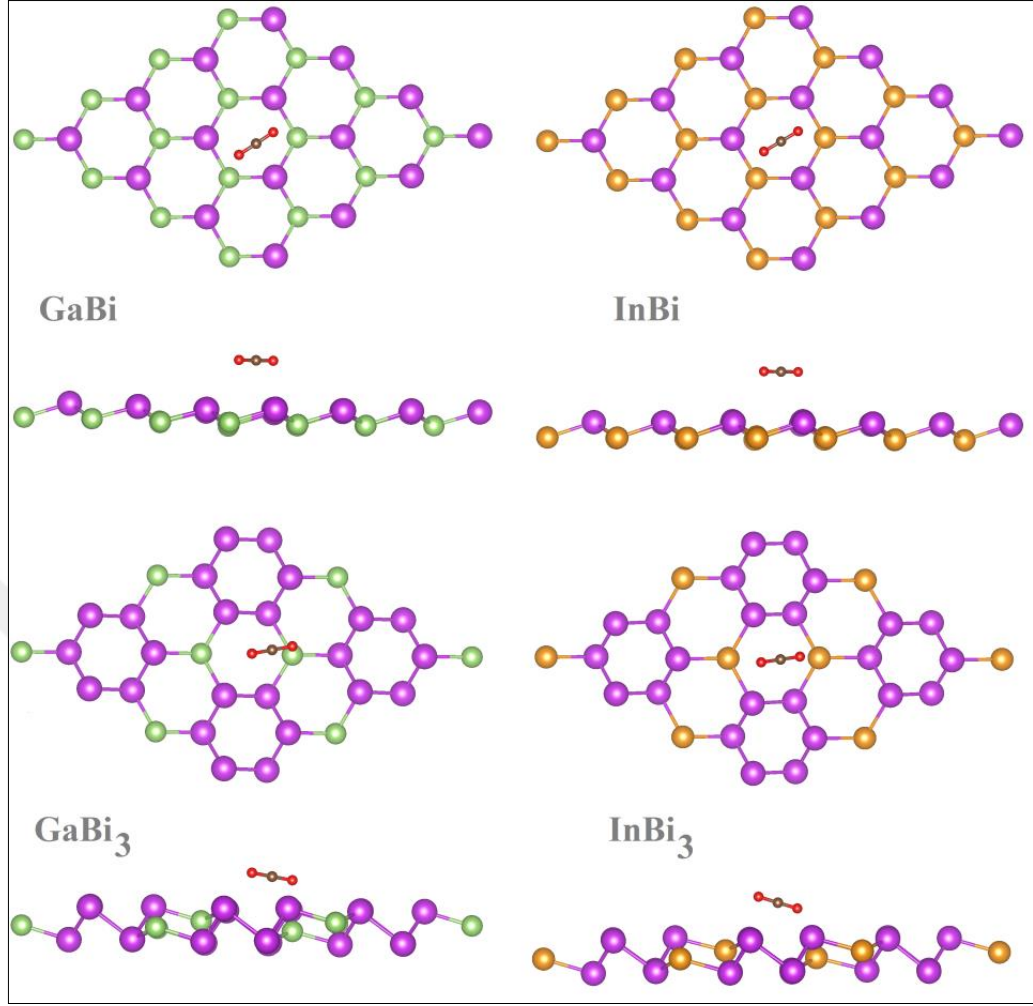
Şekil 4.40.'a baktığımızda Methan ve Hidrojen gazının tüm malzemeler ile yapmış olduğu etkileşim enerjileri mertebesi birbirine oldukça yakındır. Fakat H₂O, N₂ ve

CO₂ için farklılıklar gözlemlenmiştir. Örneğin bu moleküller için GaBi₃ ve InBi₃ ile yaptıkları etkileşim enerjileri GaBi ve InBi'ye göre daha fazladır. Bunun sebebi atomlar aynı olmasına rağmen farklı şekilde dizilim sergilemelerinden kaynaklanmaktadır. Moleküller arasında en çok etkileşim enerjisi su molekülü ile GaBi₃ ve InBi₃ arasındaki ortaya çıkmıştır. Bu enerjiler diğerlerine göre yüksektir ve genel olarak güçlü diyebileceğimiz bir etkileşim söz konusudur.

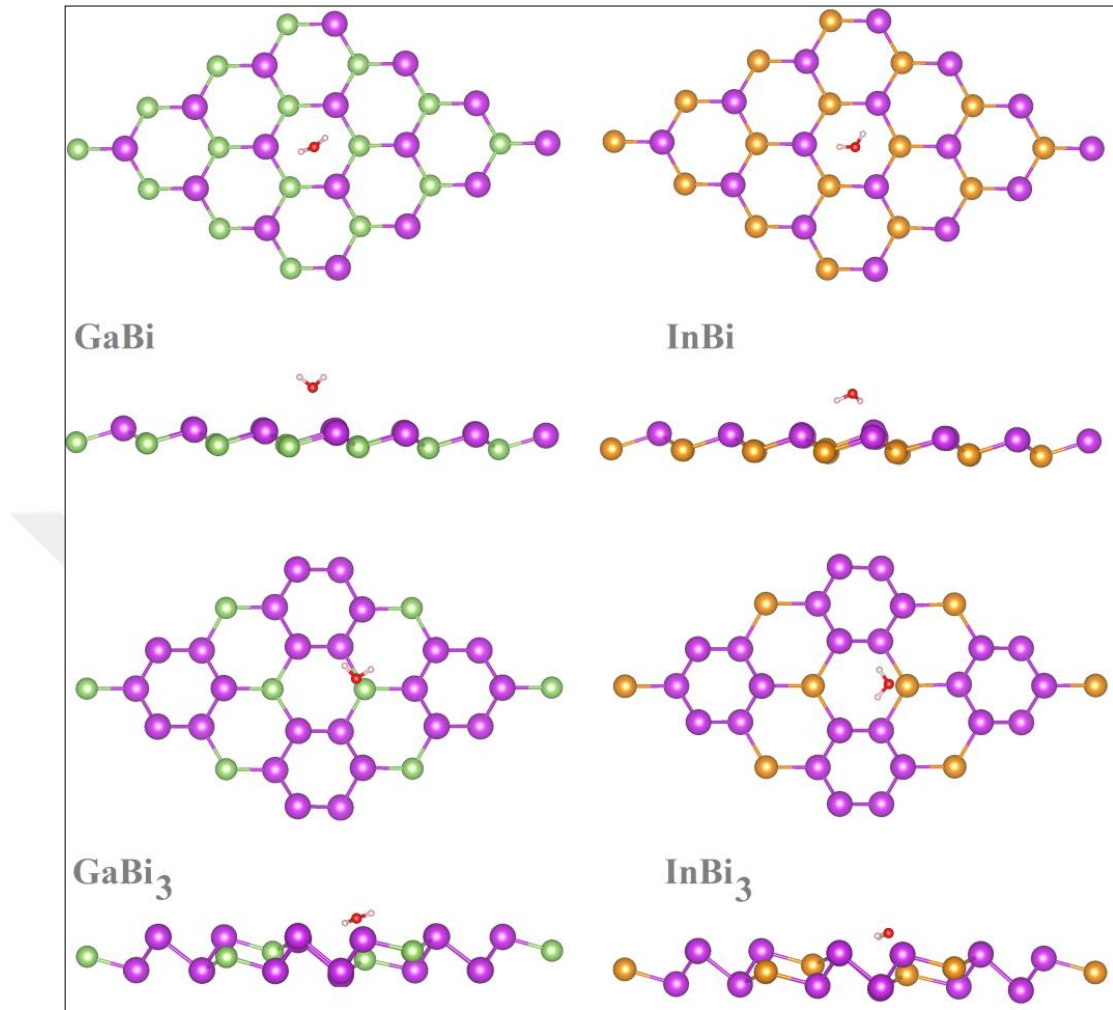
Şekil 4.41.'den Şekil 4.45.'e kadar, küçük moleküllerle iki boyutlu malzemelerin en uygun pozisyonları verilmiştir.



Şekil 4.41. İki boyutlu yapıların CH₄ ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, kahverengi ve pembe sırasıyla Bi, In, Ga, C ve H atomlarını temsil etmektedir.

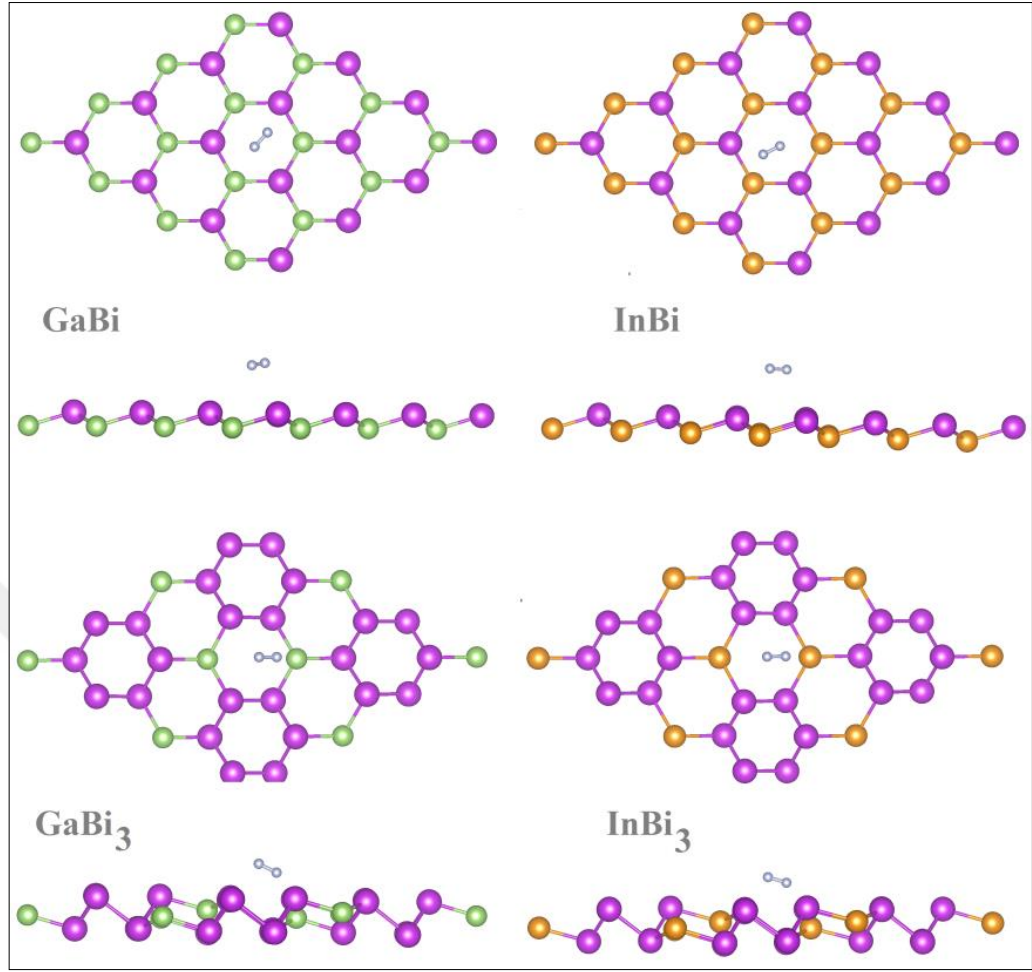


Şekil 4.42. İki boyutlu yapıların CO₂ ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, kahverengi ve kırmızı sırasıyla Bi, In, Ga, C ve O atomlarını temsil etmektedir.

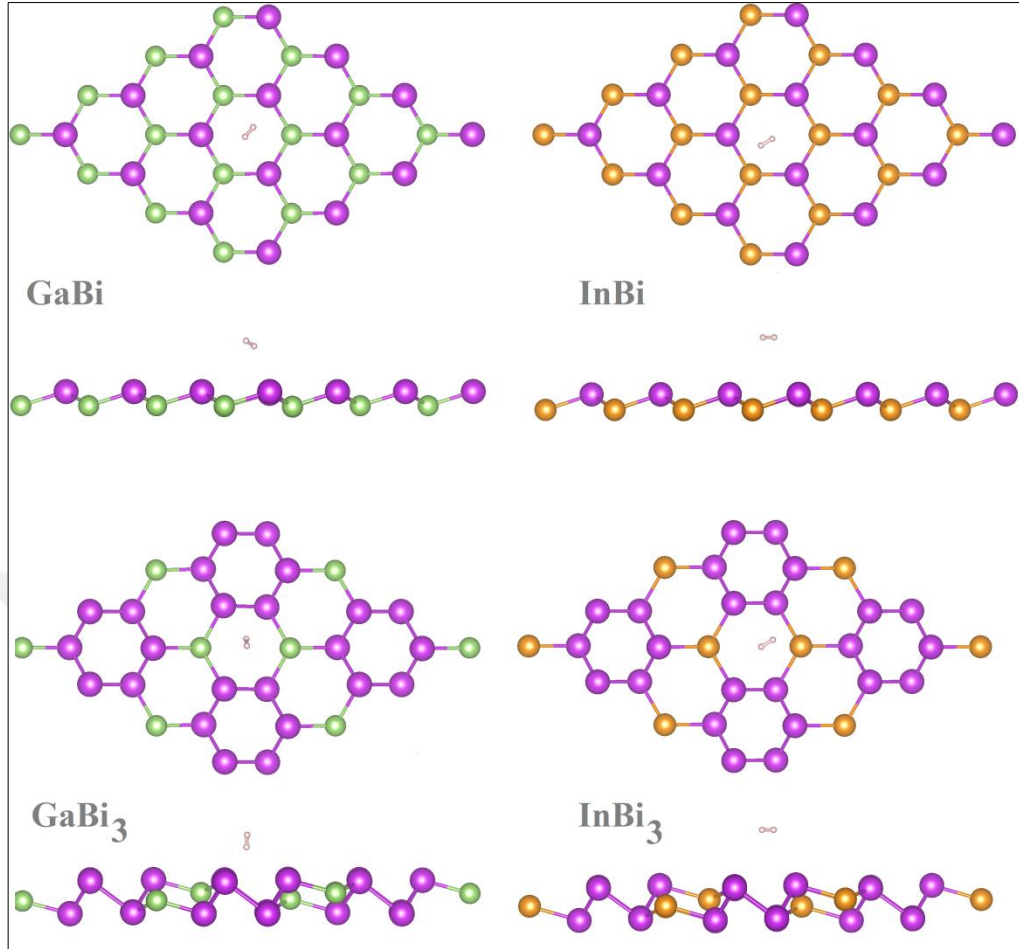


Şekil 4.43. İki boyutlu yapıların H₂O ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, pembe ve kırmızı sırasıyla Bi, In, Ga, H ve O atomlarını temsil etmektedir.

Elde edilen grafiklerde moleküllerin genelde uzak mesafeli bağ kurmak için ilingesel malzemelerin boşluk kısmını tercih ettikleri görülmektedir ve moleküllerle ilingesel yalıtkanlar arasındaki mesafeler kimyasal bağ sağlayacak kadar yakın değildir. Bu durum düşük etkileşim enerjileri olması gerektiğini ortaya çıkarmalıdır ki Tablo 4.3. bu durumu göstermektedir.



Şekil 4.44. İki boyutlu yapıların N_2 ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil ve mavi sırasıyla Bi, In, Ga ve N atomlarını temsil etmektedir.



Şekil 4.45. İki boyutlu yapıların H₂ ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil ve pembe sırasıyla Bi, In, Ga ve H atomlarını temsil etmektedir.

4.6.1.2. Büyük moleküllerle etkileşim

Bu çalışmada dikkate alınan ve büyük molekül olarak tanımlanan Cyt ve DA moleküllerinin etkileşim enerjileri Tablo 4.4.'de verilmiştir. Elde edilen verilerden gözümüze çarpan ilk şey bu çalışmada dikkate alınan iki boyutlu yapıların moleküllerle yaptıkları etkileşim sonucunda oluşan enerjinin büyük olmasıdır. Böylece bu malzemelerin DA ve Cyt gibi büyük moleküllerle güçlü bir etkileşim enerjisine sahip olduğunu kuramsal olarak gösterilmiş oldu. Bu etkileşimlerin yapıları Şekil 4.46. ve Şekil 4.47.'de gösterilmiştir.

Tablo 4.4. Büyük moleküllerin etkileşim enerjisi (eV cinsinden)

Yapılar	Cyt	DA
GaBi	-1,67	-1,39
InBi	-1,13	-1,36
GaBi ₃	-1,48	-1,56
InBi ₃	-1,54	-1,48
GR (Bu çalışma)	-0,81	-0,82
GR Deneysel [106]	-0,41	
GR Kuramsal [107]	-0,76	
GR Kuramsal [108]		-0,74

Bu çalışmada verilen diğer iki boyutlu malzemeler ile karşılaştırdığımızda GR'in daha az bir bağ ile bağlandığı gözükmemektedir. Bu çalışmadaki ilingsel yalıtkanlar özellikle büyük moleküller için yüksek etkileşim enerjisi sağlayabilir. Böylece molekülleri yüzeyde tutmak daha kolay olacaktır.

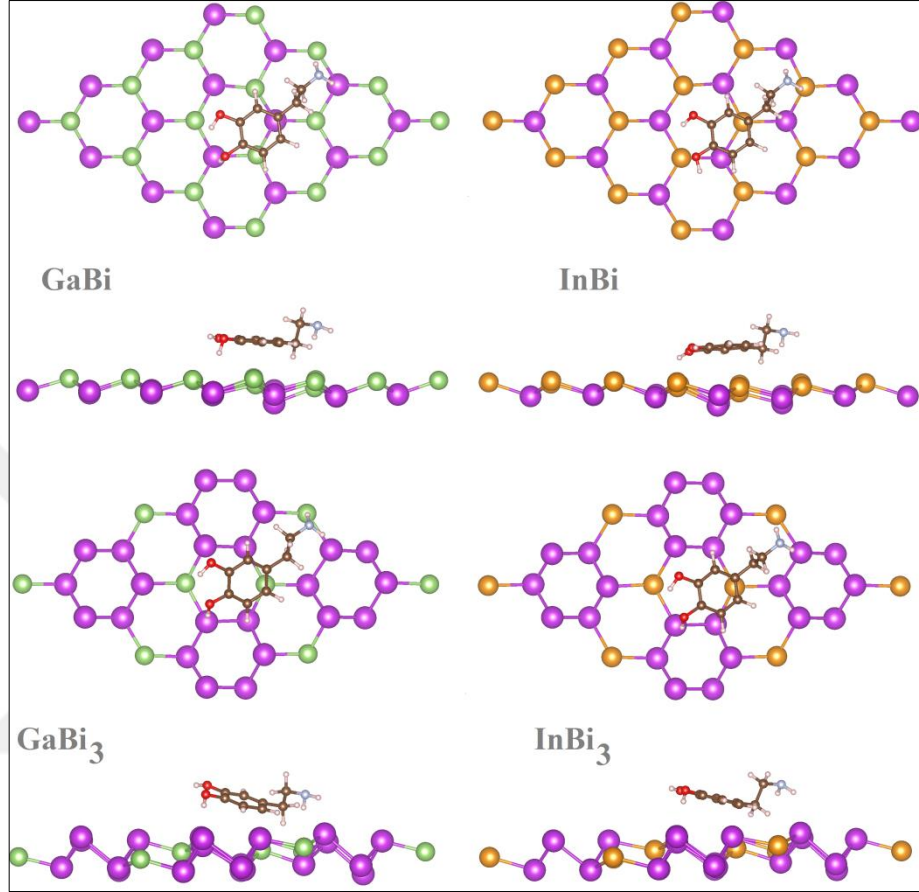
Tabloda görüldüğü üzere moleküllerin etkileşiminin en büyük olduğu yapılar Cyt için GaBi ve DA için InBi₃ olmuştur. Bu değerler 1,00 eV'den oldukça büyüktür. Bu malzemeler arasında InBi önemli bir yere sahiptir. Çünkü deneysel olarak Si (111) yüzeyinde sentezlenebilmektedir [109-110].

Şekil 4.48.'de GR'nin Cyt ile etkileşiminde oluşan en düşük enerjili durum gösterilmektedir. GR ile molekül arasındaki mesafe ise 3 Å civarındadır. Bu da etkileşimin uzak mesafeli olduğunu göstermektedir. Ayrıca bu elde edilen sonuçlar diğer nükleobazlarlar beraber literatüre kazandırılmıştır [105].

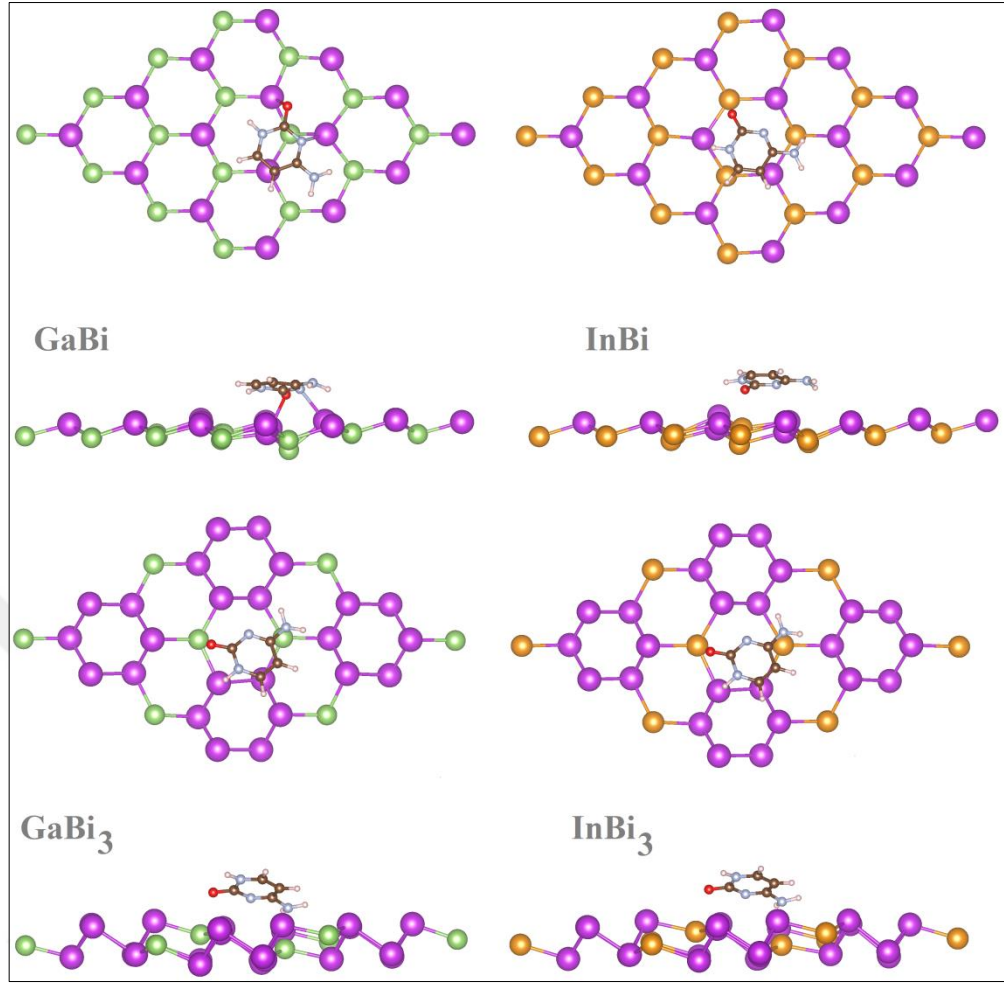
Benzer bir sonuç InBi, InBi₃, GaBi ve GaBi₃ için de geçerlidir. Fakat etkileşim enerjilerinin daha büyük olması sebebi ile aradaki mesafeler 3 Å'dan biraz daha azdır.

Elde edilen etkileşim enerjilerinin mertebesi uzak mesafeli etkileşimi ifade etmektedir ve GR-molekül arasındaki mesafenin mertebesi ile uyumludur. Elde

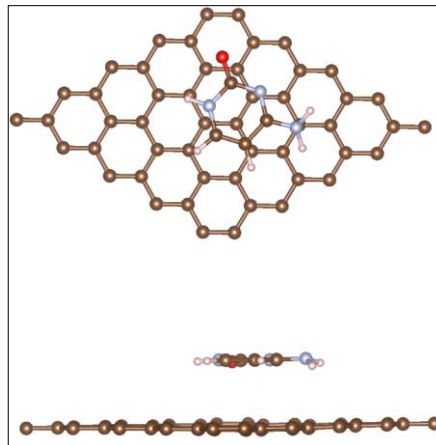
edilen bu sonuçlar bize YFK ile çalışmanın güvenli olduğunu ve kuramsal olarak çalışmanın literatüre önemli bir katkı sağlayacağını göstermektedir.



Şekil 4.46. İki boyutlu yapıların DA ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, mavi, kahverengi, kırmızı ve pembe sırasıyla Bi, In, Ga, N, C, O ve H atomlarını temsil etmektedir.



Şekil 4.47. İki boyutlu yapıların Cyt ile oluşturduğu kararlı durumlar. Mor, Turuncu, Yeşil, mavi, kahverengi, kırmızı ve pembe sırasıyla Bi, In, Ga, N, C, O ve H atomlarını temsil etmektedir.



Şekil 4.48. GR'nin Cyt ile oluşturduğu kararlı durumlar. Kahverengi, kırmızı, pembe ve mavi sırasıyla C, O, H ve N atomlarını temsil etmektedir.

4.6.2. Boşluk kusurlu durumların moleküllerle etkileşimi

Daha önceki bölümlerde yapılan hesaplamalarda InBi₃ hariç diğer yapıların moleküler dinamik sonuçları kararlı olarak bulunduğu bilinmektedir. Bu yüzden InBi₃ hariç Bi boşluk kusurlu durumun bazı moleküller ile etkileşimi incelenmiştir. Tablo 4.5.'de bu durumlarla ilgili etkileşim enerjileri gösterilmiştir.

Bazı küçük moleküller incelendiğinde farklı yüzeylerde farklı davranışların sergilendiğini görülmektedir. Örneğin GaBi'nin H₂O molekülü ile etkileşim enerjisi, daha önceki bölümlerde bahsedildiği üzere -0,27 eV olarak bulunmuştu. Sistemden Bi atomu çıkarıldığında bu enerji yaklaşık %97 artarak -0,53 eV olarak elde edilmiştir. InBi de ise durum benzer bir şekilde elde edilmiştir ve Bi atomu eksiltildiğinde etkileşim enerjisi %65 oranında artıp -0,66 eV olarak bulunmuştur. Fakat GaBi₃ ile elde edilen sonuç diğerlerinden farklıdır. Bi eksiltiğinde etkileşim enerjisinde bir azalma mevcut olmuştur. Bu değer -0,68 olarak hesaplanmış olup kusursuz duruma göre %9 azalmıştır.

Bu kusurlu durumların CO₂ ile etkileşiminde de benzer davranış gözlemlenmiştir. Bu durumlardaki etkileşim enerjileri GaBi, InBi ve GaBi₃ için sırasıyla -0,37, -0,35 ve -0,39 eV olarak bulunmuştur.

Tablo 4.5. Bi eksik durumların moleküllerle etkileşim enerjileri (eV cinsinden).

Moleküller	GaBi	InBi	GaBi ₃
H ₂ O	-0,53	-0,66	-0,68
Cyt	-1,85	-1,40	-1,72
CO ₂	-0,37	-0,35	-0,39

4.6.3. İşlevselleştirilmiş durumların moleküllerle etkileşimi

Bölüm 4.5.'de işlevselleştirmenin nasıl olduğu açıklanmıştı. İlgili atomlar için uygun konumlar aranmıştır. Böylece en uygun durumlu pozisyonlar bulunmuştu. Fakat işlevselleştirildiğinde bazı yapıların ilingsel özellikleri bozulmaktadır. Bu bölümde

işlevselleştirildiğinde kararlı olan ve ilingesel özelliği bozulmayan yapıların moleküllerle etkileşimi incelenmiştir. C atomu işlevselleştirildiğinde tüm yapıların ilingesel özelliği korunmaktaydı. Diğer yandan O atomunun sadece GaBi ve InBi ile etkileşimi sonucunda ilingesel özellik korunmaktadır. Dolayısıyla moleküllerle etkileşiminde önemli olabilecek yapılar bunlar olacaktır. Bu yapıların etkileşim enerjisi aşağıdaki denklem (Denklem 4.2) ile bulunmaktadır.

$$E_{\text{(Etkileşim)}} = E_{\text{(molekül+işlevliikiboyutluyapı)}} - E_{\text{(molekül)}} - E_{\text{(işlevliikiboyutluyapı)}} \quad (4.2)$$

Burada $E_{\text{(Etkileşim)}}$ etkileşim enerjisini vermektedir. $E_{\text{(molekül+işlevliikiboyutluyapı)}}$ molekül ile işlevli yapının, $E_{\text{(molekül)}}$ sadece molekülün ve $E_{\text{(işlevliikiboyutluyapı)}}$ ise sadece işlevli yapının toplam enerjisidir. Tablo 4.6. ve Tablo 4.7.'de etkileşim enerjileri verilmiştir.

Tablo 4.6. Etkileşim enerjileri (eV cinsinden).

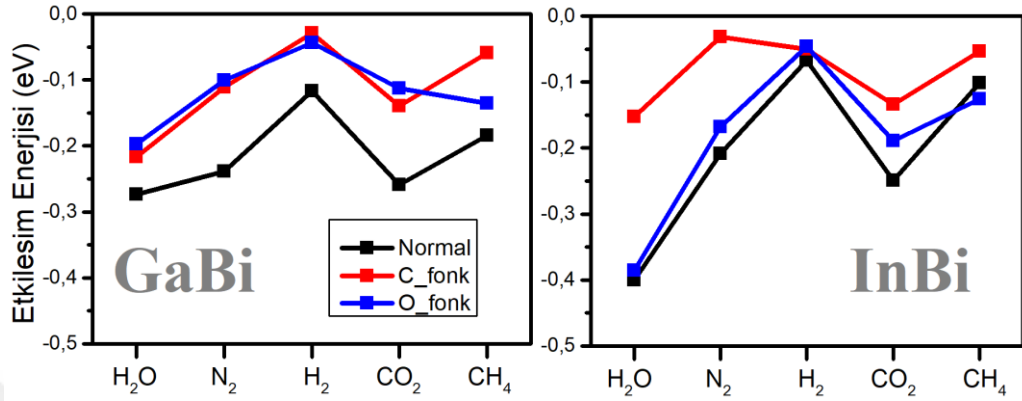
Moleküller	GaBi+C	InBi+C	GaBi3+C	InBi3+C
H ₂ O	-0,22	-0,15	-0,25	-0,22
N ₂	-0,11	-0,03	-0,13	-0,14
H ₂	-0,03	-0,05	-0,04	-0,08
CO ₂	-0,14	-0,13	-0,18	-0,18
CH ₄	-0,06	-0,05	-0,06	-0,07

Tablo 4.7. Etkileşim enerjileri (eV cinsinden).

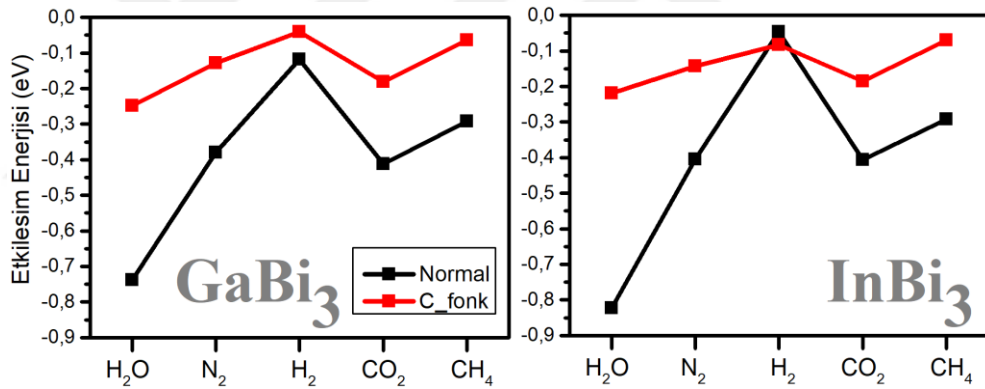
Moleküller	GaBi+O	InBi+O
H ₂ O	-0,20	-0,39
N ₂	-0,10	-0,17
H ₂	-0,04	-0,05
CO ₂	-0,11	-0,19
CH ₄	-0,14	-0,13

Tablodaki değerler oldukça düşüktür ve etkili bir bağlanmanın olmadığı göstermektedir. Elde edilen verilerden anlaşılacağı üzere etkileşim enerjileri saf durumdaki yapılara göre azalmıştır. Bunun sebebi işlevselleştirilen atomlarla

moleküller arasında uzun menzilli bir etkileşim olmasıdır. Bu durumda ilgili atom, molekülü yüzeyden daha da uzaklaştırmaktadır. Böylece yüzey ile etkileşim azaldığından molekülün yapışma etkisi de azalır.



Şekil 4.49. İşlevselleştirilmiş ve saf InBi ve GaBi yapılarının moleküllerle etkileşimlerinin karşılaştırılması.



Şekil 4.50. İşlevselleştirilmiş ve saf InBi₃ ve GaBi₃ yapılarının moleküllerle etkileşimlerinin karşılaştırılması.

Şekil 4.49. ve Şekil 4.50.'de saf (katkısız) durumların işlevselleştirilmiş yapılarla değişimi verilmiştir.

Genel olarak en çok fark H₂O molekülünde görülmektedir. En az fark ise H₂ molekülünde bulunmaktadır. Hatta InBi ve InBi₃ yapıları için etkileşim enerjilerinde az da olsa artış söz konusu olmaktadır.

Diğer moleküllerde ise eğilim benzerdir, yani işlevselleştirme söz konusu etkileşim enerjisini azaltmaktadır.

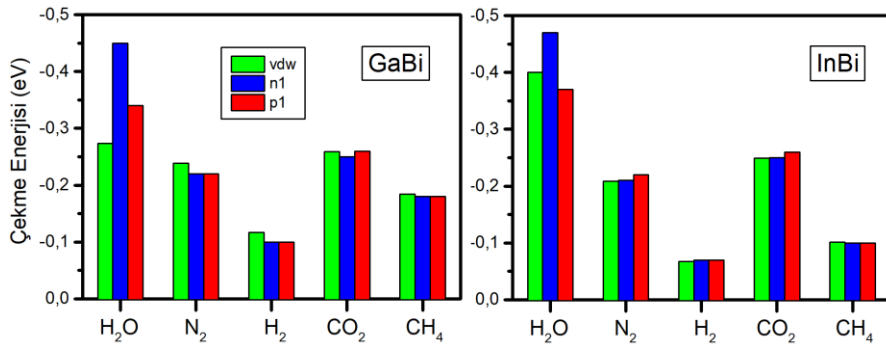
4.6.4. Yük ekleme/çıkarma etkileri

4.6.4.1. Küçük moleküllerde etkileşim

Sistemin (molekül + iki boyutlu yapı) tamamına yük eklemenin ya da o sistemden yük çıkarmanın etkileşim enerjisini değiştirebildiği bilinmektedir [105]. Bu bölümde yük ekleme/çıkarma durumlarının etkisi incelenecektir.

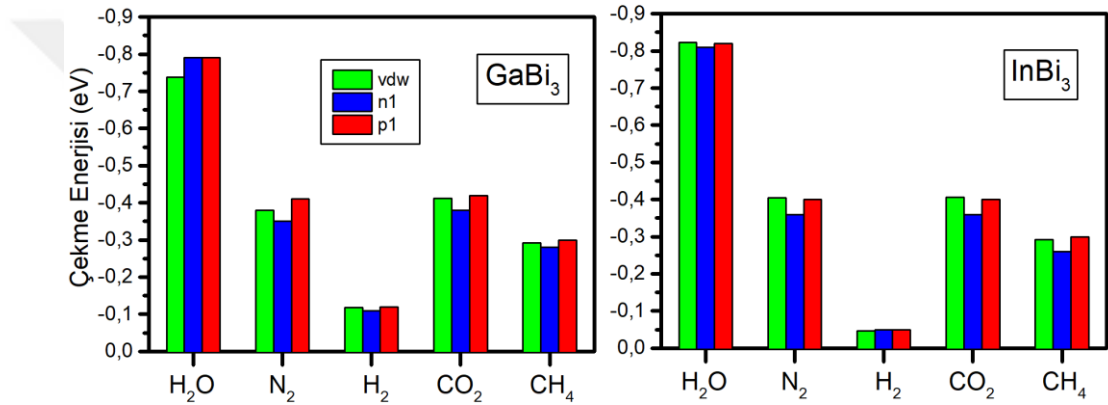
Yüksüz (nötr) durumlarla karşılaştırıldığında yüklü durumlarda sistemin etkileşim enerjisini bulmak oldukça zordur. Çünkü sistemin yükü değiştirildiğinde molekül ve yüzey arasındaki yük dağılımının nasıl olacağını bilinememektedir. Bu yüzden, enerjiyi, molekülü yüzeyden ‘çekilerek’ hesaplanması gerekmektedir. Bu işlemde molekül, yüzeyden +z yönünde çekilir (eğer yüzey x-y düzleminde ise). Süreç, molekül ile yüzey arasındaki etkileşimin ortadan kalkacağı ya da çok az olacağı seviyeye kadar devam eder. Son durumda (yani yüzeyle molekül arasındaki mesafenin en fazla olduğu durum) elde edilen enerji ile kararlı durumda elde edilen enerji farkı bize Çekme Enerjisini verir.

Yüksüz durumlar için Çekme yöntemi ile elde edilen enerji, Bölüm 4.6.1’de verilen denklem ile elde edilen enerji aynı sonucu vermektedir. Dolayısıyla bu yönteme güvenilmektedir.



Şekil 4.51. Yük ekleme/çıkarma durumunda etkileşim enerjileri. vdw, n1 ve p1 sırasıyla nötr, sisteme 1 elektron eklenmiş ve sistemden 1 elektron çıkarılmış durumları temsil etmektedir.

Şekil 4.51.'de GaBi ve InBi yapılarının yük ekleme/çıkarma durumlarında etkileşim enerjisindeki değişimler gösterilmiştir. Genel olarak yük ekleme/çıkarmanın etkileşim enerjisine etkisi çok az olmuştur. Sadece su moleküllerinin etkileşim enerjilerinde önemli değişimler gözlemlenmiştir. GaBi ile su molekülü arasında olan etkileşimde, sisteme yük eklendiğinde etkileşim enerjisi %66, yük çıkarıldığında ise %26 artmaktadır. Fakat bu durum InBi için farklıdır. Sisteme yük eklendiğinde etkileşim enerjisi %18 artarken, sistemden yük çıkartıldığında ise %8 azalmaktadır. Her iki durumda da etkileşim enerjisi 0,5 eV değerine ulaşamamıştır.

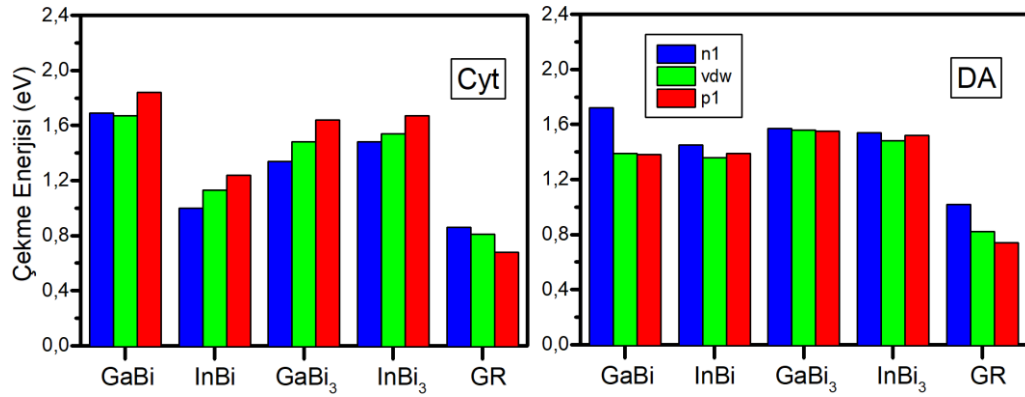


Şekil 4.52. Yük ekleme/çıkarma durumunda etkileşim enerjileri. vdw, n1 ve p1 sırasıyla nötr, sisteme 1 elektron eklenmiş ve sistemden 1 elektron çıkarılmış durumları temsil etmektedir.

Yük ekleme/çıkarmanın GaBi₃ ve InBi₃ için etkisi de oldukça azdır. Genel olarak konuşursak, bu ilingsel malzemeler ile moleküller arasında oluşan etkileşim enerjisini sistemin yükünü değiştirerek az da olsa etkileyebilmek mümkün gözükmektedir. Dolayısıyla yük ekleme/çıkarma beklendiği gibi büyük bir etki bırakamamıştır.

4.6.4.2. Büyük moleküllerde etkileşim

Büyük moleküllerin iki boyutlu yapılarla etkileşimi küçük moleküllerde olduğu gibi değildir. Burada yüksek bir etkileşim enerjisi mevcuttur ve sistemin yükünün değişmesi sonucunda etkileşim enerjilerinde de değişimler gözlemlenmiştir.



Şekil 4.53. Yük ekleme/çıkarma durumunda etkileşim enerjileri. vdw, n1 ve p1 sırasıyla nötr, sisteme 1 elektron eklenmiş ve sistemden 1 elektron çıkarılmış durumları temsil etmektedir.

Şekil 4.53. incelendiğinde, Cyt molekülünün yük ekleme/çıkarma durumundan oldukça etkilendiği görülmektedir. Fakat DA molekülü için aynısını söylemek oldukça zordur.

Cyt molekülünün özellikle InBi, GaBi₃ ve InBi₃ ile etkileşiminde sistemden yük çıkartıldığında etkileşim enerjisinde bir artış gözükmemektedir. Fakat sisteme yük eklendiğinde enerji azalmaktadır. GR ile etkileşimde ise bu durumun tam tersi bir davranış gözlemlenmektedir. Elde edilen bu sonuç literatürle uyum içindedir [105]. Dolayısıyla molekülün farklı yapılarlar etkileşiminde farklı sonuçlar elde edildiğini görülmektedir.

Diğer yandan DA molekülünün yük ekleme/çıkarma durumundan pek etkilenmediğini söylenebilir. Sadece GaBi ile etkileşiminde sisteme yük eklendiğinde etkileşim enerjisi artmaktadır.

BÖLÜM 5. SONUÇ VE ÖNERİLER

İki farklı modelleme programı kullanarak GaBi, InBi, InBi₃ ve GaBi₃ yapılarının özelliklerini ve bazı moleküllerle etkileşimlerini literatürdeki değerlerle karşılaştırarak incelenmiştir. Elde edilen veriler literatür ile uyum içindedir. Kristallerin kararlılığını belirlemede önemli rol oynayan titreşimsel özellikler ve moleküler dinamik hesaplamaları yapılmıştır. Elde edilen fonon dağılım grafiklerine göre saf yapıdaki InBi ve GaBi kararlı bulunmuştur. Diğer yandan, saf yapıdaki tüm malzemelerin moleküler dinamik sonuçları yapıların kararlı olduklarını göstermektedir. Literatürde ise sadece InBi'nin Si yüzeyi üzerine sentezlendiği bilinmektedir.

MD ile ayrıca boşluk kusurlu yapılar da incelenmiştir. Sadece InBi₃'ün yapısında bozunma meydana geldiği görülmektedir. Boşluk kusurlu yapıların elektronik özellikleri de çok önemli sonuçlar vermektedir. Tüm kusurlu durumların ilingsel yalıtkan özelliğini bozduğu görülmektedir. Fakat dışarıdan atom gönderilmesi ile beraber yapıların çoğunda (InBi₃ ve InBi hariç) iyileşme söz konusu olmuştur. Yüzeye dik olarak uygulanan elektrik alanın ise GaBi₃ ve InBi₃ için band aralıklarında azalmaya, diğerlerinde ise artışa neden olduğu görülmüştür. Bu etki esnasında, aynı zamanda örgü sabirleri de artmaktadır.

Kusursuz durumdaki bu yapılar belli atomlar ile işlevselleştirilmiştir. Bağlanma enerjileri 1,60 eV – 6,50 eV arasında olduğu hesaplanmıştır. Bu işlevselleştirilme sonucunda bu yapıların ilingsel özelliği çoğunlukla bozulmuştur. Şaşırtıcı bir şekilde C atomu ile işlevselleştirilen tüm yapıların ilingsel özelliği korunmaktadır. Ayrıca GaBi ve InBi'nin O ile yapmış olduğu etkileşimde de bu durum söz konusudur. Diğer yandan, kararlı oldukları da moleküler dinamik sonuçlarına göre ortaya çıkmıştır.

Küçük moleküllerin kusursuz yapılarla etkileşim enerjileri genellikle zayıftır. Sadece H_2O molekülünün $InBi_3$ ve $GaBi_3$ ile etkileşimi $-0,50$ eV'den fazla bulunduğu için yüksektir yorumu yapılabilir. Büyük moleküllerin etkileşim enerjileri $-1,00$ eV'den yüksek olduğu için kuvvetli bir etkileşimden bahsedilebilir. Sistemin yükünü değiştirmenin bağlanma enerjilerine etkisi oldukça az olmuştur.

Özellikle sentezlendiği bilinen $InBi$ yapısının biyoteknolojide önemli bir yeri olan DA molekülü ile etkileşiminin bu çalışmada incelenmesi literatüre katkı sağlayacaktır.



KAYNAKLAR

- [1] Geim, Andre K., Konstantin S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature materials*, 6(3), 183-191, 2007.
- [2] Dresselhaus, M. S., Araujo, P. T. Perspectives on the 2010 Nobel Prize in physics for graphene. *ACS nano*, 4(11), 6297-6302, 2010.
- [3] Balandin, A. A., Ghosh, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao, F., Lau, C. N. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano Letters*, 8(3), 902-907, 2008.
- [4] Azevedo, S., Kaschny, J. R., de Castilho, C. M., de Brito Mota, F. A theoretical investigation of defects in a boron nitride monolayer. *Nanotechnology*, 18(49), 495707, 2007.
- [5] Panigrahi, S., Bhattacharya, A., Banerjee, S., Bhattacharyya, D. Interaction of nucleobases with wrinkled graphene surface: dispersion corrected DFT and AFM studies. *The Journal of Physical Chemistry C*, 116(7), 4374-4379, 2012.
- [6] Kuila, T., Bose, S., Khanra, P., Mishra, A. K., Kim, N. H., Lee, J. H. Recent advances in graphene-based biosensors. *Biosensors and Bioelectronics*, 26(12), 4637-4648, 2011.
- [7] Bonaccorso, F., Sun, Z., Hasan, T., Ferrari, A. C. Graphene photonics and optoelectronics. *Nature Photonics*, 4(9), 611-622, 2010.
- [8] Yoo, E., Kim, J., Hosono, E., Zhou, H. S., Kudo, T., Honma, I. Large reversible Li storage of graphene nanosheet families for use in rechargeable lithium ion batteries. *Nano Letters*, 8(8), 2277-2282, 2008.
- [9] Ning, G., Xu, C., Mu, L., Chen, G., Wang, G., Gao, J., Wei, F. High capacity gas storage in corrugated porous graphene with a specific surface area-lossless tightly stacking manner. *Chemical Communications*, 48(54), 6815-6817, 2012.

- [10] Gürel, H. H., Ciraci, S. Effects of charging and electric field on graphene functionalized with titanium. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(27), 275302, 2013.
- [11] Vogt, P., De Padova, P., Quaresima, C., Avila, J., Frantzeskakis, E., Asensio, M. C., Le Lay, G. Silicene: compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon. *Physical Review Letters*, 108(15), 155501, 2012.
- [12] Dávila, M. E., Xian, L., Cahangirov, S., Rubio, A., Le Lay, G. Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene. *New Journal of Physics*, 16(9), 095002, 2014.
- [13] Xu, M., Liang, T., Shi, M., Chen, H. Graphene-like two-dimensional materials. *Chemical Reviews*, 113(5), 3766-3798, 2013.
- [14] Zhu, F. F., Chen, W. J., Xu, Y., Gao, C. L., Guan, D. D., Liu, C. H., Jia, J. F. Epitaxial growth of two-dimensional stanene. *Nature Materials*, 14(10), 1020-1025, 2015.
- [15] Liu, H., Neal, A. T., Zhu, Z., Luo, Z., Xu, X., Tománek, D., Ye, P. D. Phosphorene: an unexplored 2D semiconductor with a high hole mobility. *ACS nano*, 8(4), 4033-4041, 2014.
- [16] Mak, K. F., Lee, C., Hone, J., Shan, J., Heinz, T. F. Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor. *Physical Review Letters*, 105(13), 136805, 2010.
- [17] Cong, C., Shang, J., Wu, X., Cao, B., Peimyoo, N., Qiu, C., Yu, T. Synthesis and Optical Properties of Large-Area Single-Crystalline 2D Semiconductor WS₂ Monolayer from Chemical Vapor Deposition. *Advanced Optical Materials*, 2(2), 131-136, 2014.
- [18] Wang, Q. H., Kalantar-Zadeh, K., Kis, A., Coleman, J. N., Strano, M. S. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Nature Nanotechnology*, 7(11), 699-712, 2012.
- [19] Ding, Y., Wang, Y. Density functional theory study of the silicene-like SiX and XSi₃ (X= B, C, N, Al, P) honeycomb lattices: The various buckled structures and versatile electronic properties. *The Journal of Physical Chemistry C*, 117(35), 18266-18278, 2013.

- [20] Şahin, H., Cahangirov, S., Topsakal, M., Bekaroglu, E., Akturk, E., Senger, R. T., Ciraci, S. Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds: First-principles calculations. *Physical Review B*, 80(15), 155453, 2009.
- [21] Pan, L., Liu, H. J., Wen, Y. W., Tan, X. J., Lv, H. Y., Shi, J., Tang, X. F. First-principles study of monolayer and bilayer honeycomb structures of group-IV elements and their binary compounds. *Physics Letters A*, 375(3), 614-619, 2011.
- [22] Hsueh, H. C., Guo, G. Y., Louie, S. G. Excitonic effects in the optical properties of a SiC sheet and nanotubes. *Physical Review B*, 84(8), 085404, 2011.
- [23] Fei, R., Li, W., Li, J., Yang, L. Giant piezoelectricity of monolayer group IV monochalcogenides: SnSe, SnS, GeSe, and GeS. *Applied Physics Letters*, 107(17), 173104, 2015.
- [24] Hu, Y., Zhang, S., Sun, S., Xie, M., Cai, B., Zeng, H. GeSe monolayer semiconductor with tunable direct band gap and small carrier effective mass. *Applied Physics Letters*, 107(12), 122107, 2015.
- [25] Hu, W., Yang, J. Defects in phosphorene. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119(35), 20474-20480, 2015.
- [26] Şahin, H., Sivek, J., Li, S., Partoens, B., Peeters, F. M. Stone-Wales defects in silicene: Formation, stability, and reactivity of defect sites. *Physical Review B*, 88(4), 045434, 2013.
- [27] Zandiatashbar, A., Lee, G. H., An, S. J., Lee, S., Mathew, N., Terrones, M., Koratkar, N. Effect of defects on the intrinsic strength and stiffness of graphene. *Nature Communications*, 5, 2014.
- [28] Komsa, H. P., Kotakoski, J., Kurasch, S., Lehtinen, O., Kaiser, U., Krasheninnikov, A. V. Two-dimensional transition metal dichalcogenides under electron irradiation: defect production and doping. *Physical Review Letters*, 109(3), 035503, 2012.
- [29] Zhou, W., Zou, X., Najmaei, S., Liu, Z., Shi, Y., Kong, J., Idrobo, J. C. Intrinsic structural defects in monolayer molybdenum disulfide. *Nano Letters*, 13(6), 2615-2622, 2013.

- [30] Ma, Y., Dai, Y., Guo, M., Niu, C., Lu, J., Huang, B. Electronic and magnetic properties of perfect, vacancy-doped, and nonmetal adsorbed MoSe₂, MoTe₂ and WS₂ monolayers. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13(34), 15546-15553, 2011.
- [31] Cong, W. T., Tang, Z., Zhao, X. G., Chu, J. H. Enhanced magnetic anisotropies of single transition-metal adatoms on a defective MoS₂ monolayer. *Scientific Reports*, 5, 9361, 2015.
- [32] Ataca, C., Ciraci, S. Functionalization of single-layer MoS₂ honeycomb structures. *The Journal of Physical Chemistry C*, 115(27), 13303-13311, 2011.
- [33] Ding, Y., Wang, Y. Structural, electronic, and magnetic properties of adatom adsorptions on black and blue phosphorene: a first-principles study. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119(19), 10610-10622, 2015.
- [34] Lee, H., Ihm, J., Cohen, M. L., Louie, S. G. (2010). Calcium-decorated graphene-based nanostructures for hydrogen storage. *Nano Letters*, 10(3), 793-798, 2010.
- [35] Yu, D., Liu, Y., Sun, L., Wu, P., Zhou, W. Density functional study on the hole doping of single-layer SnS 2 with metal element X (X= Li, Mg, and Al). *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(1), 318-324, 2016.
- [36] Zhao, X., Xia, C., Wang, T., Dai, X. Electronic and magnetic properties of X-doped (X= Ti, Zr, Hf) tungsten disulphide monolayer. *Journal of Alloys and Compounds*, 654, 574-579, 2016.
- [37] Aktürk, O. Ü., Aktürk, E., Ciraci, S. Effects of adatoms and physisorbed molecules on the physical properties of antimonene. *Physical Review B*, 93(3), 035450, 2016.
- [38] Özçelik, V. O., Kecik, D., Durgun, E., Ciraci, S. Adsorption of group IV elements on graphene, silicene, germanene, and stanene: Dumbbell formation. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119(1), 845-853, 2014.
- [39] Tan, Q., Zhao, L. D., Li, J. F., Wu, C. F., Wei, T. R., Xing, Z. B., Kanatzidis, M. G. Thermoelectrics with earth abundant elements: low thermal conductivity and high thermopower in doped SnS. *Journal of Materials Chemistry A*, 2(41), 17302-17306, 2014.
- [40] Wang, Q., Yu, W., Fu, X., Qiao, C., Xia, C., Jia, Y. Electronic and magnetic properties of SnSe monolayers doped by Ga, In, As, and Sb: a first-principles study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(11), 8158-8164, 2016.

- [41] Yue, Q., Shao, Z., Chang, S., Li, J. Adsorption of gas molecules on monolayer MoS₂ and effect of applied electric field. *Nanoscale Research Letters*, 8(1), 1-7, 2013.
- [42] Nguyen, C. V., Hieu, N. N. Effect of biaxial strain and external electric field on electronic properties of MoS₂ monolayer: A first-principle study. *Chemical Physics*, 468, 9-14, 2016.
- [43] Shi, W., Wang, Z., Li, Z., Fu, Y. Q. Electric field enhanced adsorption and diffusion of adatoms in MoS₂ monolayer. *Materials Chemistry and Physics*, 183, 392-397, 2016.
- [44] Gürel, H. H., Topsakal, M., Ciraci, S. Effects of Charging and Perpendicular Electric Field on Graphene Oxide. In *Low-Dimensional and Nanostructured Materials and Devices* (61-290). Springer International Publishing, 2016.
- [45] Gürel, H. H., Özçelik, V. O., Ciraci, S. Effects of charging and perpendicular electric field on the properties of silicene and germanene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(30), 305007, 2013.
- [46] Gürel, H. H., Ciraci, S. Enhanced reduction of graphene oxide by means of charging and electric fields applied to hydroxyl groups. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(43), 435304, 2013.
- [47] Guo, H., Zhang, W., Lu, N., Zhuo, Z., Zeng, X. C., Wu, X., Yang, J. CO₂ capture on h-BN sheet with high selectivity controlled by external electric field. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119(12), 6912-6917, 2015.
- [48] Song, E. H., Yoo, S. H., Kim, J. J., Lai, S. W., Jiang, Q., Cho, S. O. External electric field induced hydrogen storage/release on calcium-decorated single-layer and bilayer silicene. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16(43), 23985-23992, 2014.
- [49] Sun, Q., Qin, G., Ma, Y., Wang, W., Li, P., Du, A., Li, Z. Electric field controlled CO₂ capture and CO₂/N₂ separation on MoS₂ monolayers. *Nanoscale*, 9(1), 19-24, 2017.
- [50] Tan, X., Tahini, H. A., Smith, S. C. Hexagonal boron nitride and graphene in-plane heterostructures: An experimentally feasible approach to charge-induced switchable CO₂ capture. *Chemical Physics*, 478, 139-144, 2016.
- [51] Xiao, B., Li, Y. C., Yu, X. F., Cheng, J. B. MXenes: Reusable materials for NH₃ sensor or capturer by controlling the charge injection. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 235, 103-109, 2016.

- [52] Sun, Q., Li, Z., Searles, D. J., Chen, Y., Lu, G., Du, A. Charge-controlled switchable CO₂ capture on boron nitride nanomaterials. *Journal of the American Chemical Society*, 135(22), 8246-8253, 2013.
- [53] Bui, V. Q., Pham, T. T., Le, D. A., Thi, C. M., Le, H. M. A first-principles investigation of various gas (CO, H₂O, NO, and O₂) absorptions on a WS₂ monolayer: stability and electronic properties. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 27(30), 305005, 2015.
- [54] Chen, X., Tan, C., Yang, Q., Meng, R., Liang, Q., Cai, M., Jiang, J. Ab Initio Study of the Adsorption of Small Molecules on Stanene. *The Journal of Physical Chemistry C*, 120(26), 13987-13994, 2016.
- [55] Yang, Q., Meng, R. S., Jiang, J. K., Liang, Q. H., Tan, C. J., Cai, M., Chen, X. P. First-Principles Study of Sulfur Dioxide Sensor Based on Phosphorenes. *IEEE Electron Device Letters*, 37(5), 660-662, 2016.
- [56] Luo, H., Cao, Y., Zhou, J., Feng, J., Cao, J., Guo, H. Adsorption of NO₂, NH₃ on monolayer MoS₂ doped with Al, Si, and P: A first-principles study. *Chemical Physics Letters*, 643, 27-33, 2016.
- [57] Ma, D., Wang, Q., Li, T., He, C., Ma, B., Tang, Y., Yang, Z. Repairing sulfur vacancies in the MoS₂ monolayer by using CO, NO and NO₂ molecules. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(29), 7093-7101, 2016.
- [58] Ou, J. Z., Ge, W., Carey, B., Daeneke, T., Rotbart, A., Shan, W., Russo, S. P. Physisorption-based charge transfer in two-dimensional SnS₂ for selective and reversible NO₂ gas sensing. *ACS nano*, 9(10), 10313-10323, 2015.
- [59] Vovusha, H., Sanyal, B. Adsorption of nucleobases on 2D transition-metal dichalcogenides and graphene sheet: a first principles density functional theory study. *RSC Advances*, 5(83), 67427-67434, 2015.
- [60] Prasongkit, J., Amorim, R. G., Chakraborty, S., Ahuja, R., Scheicher, R. H., Amornkitbamrung, V. Highly Sensitive and Selective Gas Detection Based on Silicene. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119(29), 16934-16940, 2015.
- [61] Xia, W., Hu, W., Li, Z., Yang, J. A first-principles study of gas adsorption on germanene. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16(41), 22495-22498, 2014.
- [62] Cai, Y., Ke, Q., Zhang, G., Zhang, Y. W. Energetics, charge transfer, and magnetism of small molecules physisorbed on phosphorene. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119(6), 3102-3110, 2015.

- [63] Lalitha, M., Nataraj, Y., Lakshmipathi, S. Calcium decorated and doped phosphorene for gas adsorption. *Applied Surface Science*, 377, 311-323, 2016.
- [64] Hirohata, A., Yamada, K., Nakatani, Y., Prejbeanu, L., Diény, B., Pirro, P., Hillebrands, B. Review on spintronics: Principles and device applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 166711, 2020.
- [65] Liu, C. X., Zhang, S. C., Qi, X. L. The quantum anomalous Hall effect: Theory and experiment. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 7, 301-321, 2016.
- [66] Ma, Y., Kou, L., Dai, Y., Heine, T. Two-dimensional topological insulators in group-11 chalcogenide compounds: M_2Te ($M= Cu, Ag$). *Physical Review B*, 93(23), 235451, 2016.
- [67] Chuang, F. C., Yao, L. Z., Huang, Z. Q., Liu, Y. T., Hsu, C. H., Das, T. Bansil, A. Prediction of large-gap two-dimensional topological insulators consisting of bilayers of group III elements with Bi. *Nano letters*, 14(5), 2505-2508, 2014.
- [68] Li, L., Zhang, X., Chen, X., Zhao, M. Giant topological nontrivial band gaps in chloridized gallium bismuthide. *Nano letters*, 15(2), 1296-1301, 2015.
- [69] Li, J., He, C., Meng, L., Xiao, H., Tang, C., Wei, X., Zhong, J. Two-dimensional topological insulators with tunable band gaps: Single-layer HgTe and HgSe. *Scientific Reports*, 5, 2015.
- [70] Freitas, R. R., de Brito Mota, F., Rivelino, R., de Castilho, C. M. C., Kakanakova-Georgieva, A., Gueorguiev, G. K. Tuning band inversion symmetry of buckled III-Bi sheets by halogenation. *Nanotechnology*, 27(5), 055704, 2016.
- [71] Weng, H., Yu, R., Hu, X., Dai, X., Fang, Z. Quantum anomalous Hall effect and related topological electronic states. *Advances in Physics*, 64(3), 227-282, 2015.
- [72] Freitas, R. R., de Brito Mota, F., Rivelino, R., de Castilho, C. M. C., Kakanakova-Georgieva, A., Gueorguiev, G. K. Spin-orbit-induced gap modification in buckled honeycomb XBi and XBi_3 ($X= B, Al, Ga, \text{ and } In$) sheets. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 27(48), 485306, 2015.

- [73] Liu, Q., Dai, Y., Ma, Y., Li, X., Li, T., Niu, C., Huang, B. Large gap Quantum Spin Hall Insulators of Hexagonal III-Bi monolayer. *Scientific Reports*, 6, 2016.
- [74] Chu, R. L., Shan, W. Y., Lu, J., Shen, S. Q. Surface and edge states in topological semimetals. *Physical Review B*, 83(7), 075110, 2011.
- [75] Kane, C. L., Mele, E. J. (2005). Quantum spin Hall effect in graphene. *Physical review letters*, 95(22), 226801, 2005.
- [76] König, M., Wiedmann, S., Brüne, C., Roth, A., Buhmann, H., Molenkamp, L. W., Zhang, S. C. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, 318(5851), 766-770, 2007.
- [77] Knez, I., Du, R. R., Sullivan, G. Evidence for helical edge modes in inverted InAs/GaSb quantum wells. *Physical Review Letters*, 107(13), 136603, 2011.
- [78] Fu, B., Ge, Y., Su, W., Guo, W., Liu, C. C. A new kind of 2D topological insulators BiCN with a giant gap and its substrate effects. *Scientific Reports*, 6, 2016.
- [79] Weng, H., Ranjbar, A., Liang, Y., Song, Z., Khazaei, M., Yunoki, S., Dai, X. Large-gap two-dimensional topological insulator in oxygen functionalized MXene. *Physical Review B*, 92(7), 075436, 2015.
- [80] Hohenberg, P., Kohn, W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B), B864, 1964.
- [81] Kohn, W., Sham, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133, 1965.
- [82] Born, M., Oppenheimer, R. Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 389(20), 457-484, 1927.
- [83] Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865, 1996.
- [84] Kresse, G., Furthmüller, J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, 6(1), 15-50, 1996.
- [85] Blöchl, P. E. Projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 50(24), 17953, 1994.

- [86] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Dal Corso, A. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(39), 395502, 2009.
- [87] Grimme, S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *Journal of computational chemistry*, 27(15), 1787-1799, 2006.
- [88] Broyden, C. G. The convergence of a class of double-rank minimization algorithms 1. general considerations. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 6(1), 76-90, 1970.
- [89] Fletcher, R. A new approach to variable metric algorithms. *The computer journal*, 13(3), 317-322, 1970.
- [90] Goldfarb, D. A family of variable-metric methods derived by variational means. *Mathematics of computation*, 24(109), 23-26, 1970.
- [91] Shanno, D. F. Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization. *Mathematics of computation*, 24(111), 647-656, 1970.
- [92] Baroni, S., De Gironcoli, S., Dal Corso, A., Giannozzi, P. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Reviews of Modern Physics*, 73(2), 515, 2001.
- [93] Verlet, L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Physical review*, 159(1), 98, 1967.
- [94] Monkhorst, H. J., Pack, J. D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, 13(12), 5188, 1976.
- [95] Methfessel, M. P. A. T., Paxton, A. T. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. *Physical Review B*, 40(6), 3616, 1989.
- [96] Henkelman, G., Arnaldsson, A., Jónsson, H. A fast and robust algorithm for Bader decomposition of charge density. *Computational Materials Science*, 36(3), 354-360, 2006.
- [97] Sanville, E., Kenny, S. D., Smith, R., Henkelman, G. Improved grid-based algorithm for Bader charge allocation. *Journal of computational chemistry*, 28(5), 899-908, 2007.

- [98] Momma, K., Izumi, F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *Journal of Applied Crystallography*, 44(6), 1272-1276, 2011.
- [99] Kokalj, A. XCrySDen-a new program for displaying crystalline structures and electron densities. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 17(3), 176-179, 1999.
- [100] Soler, J. M., Artacho, E., Gale, J. D., García, A., Junquera, J., Ordejón, P., Sánchez-Portal, D. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(11), 2745, 2002.
- [101] Kadioglu, Y., Üzengi Aktürk, O., Akturk, E., Ciraci, S. Functionalization of Single-Layer Nitrogene by Vacancy, Adatoms, and Molecules. *The Journal of Physical Chemistry C*, 121(11), 6329-6338, 2017.
- [102] Rao, C. N. R., Gopalakrishnan, K., Maitra, U. (2015). "Comparative study of potential applications of graphene, MoS₂, and other two-dimensional materials in energy devices, sensors, and related areas". *ACS applied materials & interfaces*, 7(15), 7809-7832, 2015.
- [103] Mendoza-Sánchez, B., Gogotsi, Y. "Synthesis of Two-Dimensional Materials for Capacitive Energy Storage". *Advanced Materials*, 28(29), 6104-6135, 2016.
- [104] Dang, C., Peng, M. Y. P., Huo, Z., Wu, L. Defective boron carbide monolayer as a chemical sensor for dopamine drug. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1188, 112948, 2020.
- [105] Gürel, H. H., Salmankurt, B. Binding mechanisms of DNA/RNA nucleobases adsorbed on graphene under charging: first-principles van der Waals study. *Materials Research Express*, 4(6), 065401, 2017.
- [106] Varghese, N., Mogera, U., Govindaraj, A., Das, A., Maiti, P. K., Sood, A. K., Rao, C. N. R. Binding of DNA nucleobases and nucleosides with graphene. *ChemPhysChem*, 10(1), 206-210, 2009.
- [107] Lee, J. H., Choi, Y. K., Kim, H. J., Scheicher, R. H., Cho, J. H. Physisorption of DNA nucleobases on h-BN and graphene: vdW-corrected DFT calculations. *The Journal of Physical Chemistry C*, 117(26), 13435-13441, 2013.
- [108] Fernández, A. C. R., Castellani, N. J. Noncovalent interactions between dopamine and regular and defective graphene. *ChemPhysChem*, 18(15), 2065-2080, 2017.

- [109] Dang, P., Rouvimov, S., Xing, H. G., Jena, D. Magnetotransport and superconductivity in InBi films grown on Si (111) by molecular beam epitaxy. *Journal of Applied Physics*, 126(10), 103901, 2019.
- [110] Hsu, C. H., Huang, Z. Q., Lin, C. Y., Macam, G. M., Huang, Y. Z., Lin, D. S., Huang, L. Growth of a predicted two-dimensional topological insulator based on InBi-Si (111)- 7×7 . *Physical Review B*, 98(12), 121404, 2018.



ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Bahadır SALMANKURT

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Yılı
Doktora	Sakarya Üniversitesi / Fen Bilimleri Enstitüsü / Fizik	2021
Yüksek Lisans	Kocaeli Üniversitesi / Fen Bilimleri Enstitüsü / Bilişim Sistemleri Mühendisliği	2019
Yüksek Lisans	Sakarya Üniversitesi / Fen Bilimleri Enstitüsü / Fizik	2014
Lisans	Ahi Evran Üniversitesi / Fen-Edebiyat Fakültesi / Fizik	2012
Lise	İzmit Lisesi	2006

İŞ DENEYİMİ

Yıl	Yer	Görev
2021-Halen	Sakarya Uygulamalı Bilimler Üniversitesi	Öğretim Görevlisi
2017-2021	Kocaeli Üniversitesi	Araştırma Görevlisi

YABANCI DİL

İngilizce

ESERLER (makale, bildiri, proje vb.)

Makale (SCI&SCI-E)

1. Gürel, H. H. ve B. Salmankurt “Quantum Simulation of the Silicene and Germanene for Sensing and Sequencing of DNA/RNA Nucleobases” Biosensors, 11(3), 59 (2021)

2. Gürel, H. H. ve B. Salmankurt. "Interaction between functionalized graphene with Ti/C and HISTIDINE/LEUCINE: effects of charging" *Physics of the Solid State*, 62(12), 2474-2481 (2020)
3. B. Salmankurt ve Sıtkı Duman "First-principles study of structural, mechanical, lattice dynamical and thermal properties of nodal-line semimetals $ZrXY$ ($X=Si,Ge$; $Y=S,Se$)" *Philosophical Magazine*, 97, 175-186 (2017)
4. B. Salmankurt ve Hikmet Hakan Gürel. "Binding mechanisms of DNA/RNA nucleobases adsorbed on graphene under charging: first-principles van der Waals study" *Mater. Res. Exp.* 4, 065401 (2017)
5. B. Salmankurt and Sıtkı Duman "Investigation of the structural, mechanical, dynamical and thermal properties of $CsCaF_3$ and $CsCdF_3$ " *Mater. Res. Exp.* 3, 045903 (2016)
6. B.G. Yalcin, B. Salmankurt ve Sıtkı Duman "Investigation of structural, mechanical, electronic, optical and dynamical properties of cubic $BaLiF_3$, $BaLiH_3$, and $SrLiH_3$ " *Mater. Res. Express* 3, 036301 (2016)
7. S. Bagci, B. G. Yalcin, H. R. Aliabad, S. Duman ve B. Salmankurt "Structural, electronic, optical, vibrational and transport properties of $CuBX_2$ ($X= S, Se, Te$) chalcopyrites. *RSC Advances*, 6(64), 59527-59540 (2016)

Makale (Diğer)

8. Salmankurt, B., ve Gürel, H. H. "Computational aspects of nanostructures: PW vs AO calculations" *AIP Conf. Proc.* 2075, 020001 (2019)
9. B. Salmankurt ve H.Hakan Gürel "Effects of electric field on the properties of 2D topological insulators" *AIP Conf. Proc.* 1935, 150003 (2018)
10. B. Salmankurt ve H. Hakan Gürel "Interaction of amino acids with adatoms (Ti, C and O) decorated graphene via effect of charging" *AIP Conf. Proc.* 1815, 050012 (2017)
11. K. F. Feyzioğlu, B. Salmankurt vd. "Theoretical study of the structural, electronic, dynamical and thermal properties of $LaSn_3$ and $LaPb_3$ " *AIP Conf. Proc.* 1815, 050003 (2017)
12. A. Kılıçarslan, B. Salmankurt vd. "Theoretical investigation of the structural, electronic, dynamical and thermal properties of YSn_3 and YPb_3 " *AIP Conf. Proc.* 1815, 050006 (2017)
13. B. Salmankurt ve H.Hakan Gürel "Modifying of gas adsorption on phosphorene" *AIP Conf. Proc.* 1815, 050007 (2017)
14. H. Hakan Gürel ve B. Salmankurt "Interaction mechanism of biomolecules on vacancy defected 2D materials" *AIP Conf. Proc.* 1815, 050005 (2017)
15. H.Hakan Gürel ve B. Salmankurt "Graphene based biosensors" *AIP Conf. Proc.* 1722, 080004 (2016)
16. A. Kılıçarslan, E. Bal, M. Dinç, B. Salmankurt vd. "First-principles studies of the atomic, elastic and vibrational properties of $BaNbO_3$ " *AIP Conf. Proc.* 1722, 220012 (2016)
17. E. Bal, M. Dinç, A. Kılıçarslan, B. Salmankurt, vd. "Structural, elastic and vibrational properties of $ScGa_3$ " *AIP Conf. Proc.* 1722, 220024 (2016)
18. H.Hakan Gürel ve B. Salmankurt "Biological application of graphene oxide" *AIP Conf. Proc.* 1722, 220010 (2016)

Konferanslar

19. 34th Turkish Physical Society international physics congress (TFD34) – 2018
20. 10th Jubilee international conference of the balkan physical union (BPU10) – 2018
21. 13th Nanoscience and nanotechnology conference (NanoTr-13) -2017
22. 33th Turkish Physical Society international physics congress (TFD33) – 2017
23. 32th Turkish Physical Society international physics congress(TFD32) – 2016
24. 12th Nanoscience and nanotechnology conference (NanoTr-12)-2016
25. 9th International physics conference of the balkan physical union (BPU9) – 2015
26. 30th Turkish Physical Society international physics congress (TFD30) – 2013

Projeler

27. TUBİTAK-3501 (114F453) – “Grafen Tabanlı BiyoAlgılayıcılar” - Bursiyer

HOBİLER

Kitap okumak, Futbol