



**YARIİLETKENLERİN
SABİT HACİMDE VE BASINÇTA ISI
KAPASİTELERİNİN EINSTEIN-DEBYE
YAKLAŞIMI KULLANILARAK İNCELENMESİ**

YÜSRA KOÇAK
YÜKSEKLİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
PROF.DR.BAHTİYAR MEHMETOĞLU
DOÇ.DR.EBRU ÇOPUROĞLU
Haziran – 2021
Her hakkı saklıdır.

T.C.
TOKAT GAZİOSMANPAŞA ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**YARIİLETKENLERİN SABİT HACİMDE VE BASINÇTA ISI
KAPASİTELERİNİN EİNSTEİN-DEBYE YAKLAŞIMI
KULLANILARAK İNCELENMESİ**

YÜSRA KOÇAK

TOKAT
Haziran - 2021

Her hakkı saklıdır.

Yüstra KOÇAK tarafından hazırlanan “Yarıiletkenlerin Sabit Hacimde ve Basınçta Isı Kapasitelerinin Einstein-Debye Yaklaşımı Kullanılarak İncelenmesi” adlı tez çalışmasının savunma sınavı 2 NİSAN 2021 tarihinde yapılmış olup aşağıda verilen Jüri tarafından Oy Birliği / Oy Çokluğu ile Tokat Gaziosmanpaşa Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü FİZİK Anabilim Dalı’nda da YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Danışman

Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

Gaziosmanpaşa Üniversitesi

.....

İkinci Danışman

Doç. Dr. Ebru ÇOPUPOĞLU

Gaziosmanpaşa Üniversitesi

.....

Üye

Doç. Dr. Mustafa Numan BAKIRCI

Gaziosmanpaşa Üniversitesi

.....

Üye

Doç. Dr. Hüseyin KOÇ

Alparslan Üniversitesi

.....

ONAY

.....

Prof. Dr. Mehmet GÜNEŞ
Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Müdürü

---/---/20--

TEZ BEYANI

Tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu tezin yazılmasında bilimsel ahlak kurallarına uyulduğunu, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunulduğunu, tezin içerdiği yenilik ve sonuçların başka bir yerden alınmadığını, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, tezin herhangi bir kısmının bu üniversite veya başka bir üniversitedeki başka bir tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

Yüsra KOÇAK

2 Haziran 2021

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

YARIİLETKENLERİN SABİT HACİMDE VE BASINÇTA ISI KAPASİTELERİNİN EİNSTEİN-DEBYE YAKLAŞIMI KULLANILARAK İNCELENMESİ

YÜSRA KOÇAK

TOKAT GAZİOSMANPAŞA ÜNİVERSİTESİ LİSANSÜSTÜ EĞİTİM
ENSTİTÜSÜ

FİZİK

(TEZ DANIŞMANI: PROF. DR. BAHTİYAR MEHMETOĞLU
(İKİNCİ DANIŞMAN: DOÇ. DR. EBRU ÇOPUROĞLU)

Bu tezde Einstein- Debye yaklaşımı dikkate alınarak bazı yarıiletkenlerin ısı kapasiteleri sıcaklığın geniş aralığında incelenmiştir. Formüllerden görüldüğü gibi öz ısının hassas hesaplanması Debye fonksiyonu için oluşturulan analitik formüllerden alınan sonuçlara bağlıdır. Einstein- Debye yaklaşımı için oluşturulan formüller Einstein ve Debye yaklaşımlarına göre arzu edilen hassaslıkta sonuçlar verdiği yapılan çalışmalardan görülmektedir. Bu nedenle tezde örnek olarak düşünülen yarıiletkenlerin ısı kapasitelerinin hesaplanması önerilen yöntem ve formüllere göre incelenmiştir. Literatürde Einstein-Debye yaklaşımına göre katıların termodinamik özelliklerinin incelenmesi ile ilgili az sayıda çalışma vardır. Önerilen tezde *Si, Ge, GaAs, InP, InAs* ve *ZnO* yarıiletkenlerinin ısı kapasitelerinin sıcaklığa göre değişmesi Einstein-Debye yaklaşımına göre hesaplanarak sonuçlar karşılaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlar *Si, Ge, GaAs, InP, InAs* ve *ZnO* yarıiletkenlerinin teknolojik uygulamalarında faydalı olacaktır.

2021, 61 SAYFA

ANAHTAR KELİMELE: Debye Yaklaşımı; Einstein-Debye Yaklaşımı; Isı Kapasitesi; Yarıiletkenler; .

ABSTRACT

MASTER THESIS

ANALYTICAL INVESTIGATION OF SPECIFIC HEAT CAPACITIES AT CONSTANT VOLUME AND PRESSURE OF SEMICONDUCTORS BY USING EINSTEIN-DEBYE APPROACH

YUSRA KOÇAK

**TOKAT GAZİOSMANPAŞA UNIVERSITY
GRADUATE EDUCATION INSTITUTE**

DEPARTMENT OF PHYSICS

**(SUPERVISOR:) PROF. DR. BAHTİYAR MEHMETOĞLU
(CO-SUPERVISOR: ASSOC. PROF. DR. EBRU ÇOPUROĞLU)**

In this thesis, taking into account the Einstein-Debye approach, the specific heat capacities of some semiconductors have been investigated in a wide range of temperatures. As can be seen from the formulas, the precise calculation of the self-heat depends on the results obtained from the analytical formulas created for the Debye function. It is seen from the studies that the formulas created for the Einstein-Debye approach give results with the desired precision according to the Einstein and Debye approaches. For this reason, the calculation of the specific heat capacities of semiconductors, which are considered as examples in the thesis, has been examined according to the proposed method and formulas. There are few studies in the literature on the investigation of thermodynamic properties of solids according to the Einstein-Debye approach. In the proposed thesis, the changes in the specific heat amount of *Si, Ge, GaAs, InP, InAs ve ZnO* semiconductors according to the temperature are calculated according to Einstein-Debye approach and the results are compared. The results obtained will be useful in technological applications of semiconductors.

2021,61 PAGE

**KEYWORDS: Debye Approach; Einstein-Debye Approach; Heat Capacity;
Semiconductors; .**

ÖNSÖZ

Çalışmalarım süresince bilgi ve tecrübeleriyle bana yol gösteren ve her türlü yardımı esirgemeyen danışman hocam Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU'na en içten teşekkürlerimi sunarım.

Tüm çalışmalarım boyunca yanımda olan, desteğini bir an olsun eksik etmeyen ve bana umut olan aileme çok teşekkür ederim.



Yüstra KOÇAK

2 Haziran 2021

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	i
ABSTRACT.....	ii
ÖNSÖZ	ii
İÇİNDEKİLER.....	iv
SİMGE VE KISALTMALAR	vi
ŞEKİL LİSTESİ.....	vii
ÇİZELGE LİSTESİ.....	viii
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ	7
2.1. Yarıiletkenler	7
2.1.1. Katkısız yarıiletkenler	9
2.1.2. Katkılı yarıiletkenler	10
3. MATERYAL ve YÖNTEM.....	13
3.1. Katıların Isı Miktarı İçin Einstein Modeli	13
3.2. Katıların Isı Miktarı İçin Debye Modeli.....	15
4. BULGULAR	19
4.1. Katıların Isı Miktarı İçin Einstein-Debye Modeli	19
4.2. Si,Ge,GaAs Yarıiletkenlerinin C_v ve C_p Isı Kapasitlerinin Einstein-Debye Modeli Kullanılarak İncelenmesi	22
4.3. InP,InAs,ZnO Yarıiletkenlerinin C_v ve C_p Isı Kapasitlerinin Einstein-Debye Modeli Kullanılarak İncelenmesi	32
5. TARTIŞMA ve SONUÇ	43
6. KAYNAKLAR	45
7. ÖZGEÇMİŞ.....	50

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler	Açıklama
A_0	Sabit
C_V	Sabit Hacim
C_P	Sabit Basınç
ε_F	Fermi enerji
$g(\omega)$	Birim aralıkta Fotonun Yoğunluğu
h	Planck Sabiti
$\hbar$	Planck Sabiti
k_B	Boltzmann sabiti
N_A	Avagadro Sayısı
s	Düğüm noktasındaki atom sayısı
T	Isı Kapasitesi
ν	Harmonik titreşim frekansı
μ	Kimyasal potansiyel
ω_D	Frekans
θ_E	Einstein Sıcaklığı
θ_D	Debye Sıcaklığı

Kısaltmalar	Açıklama
PPM	Milyonda bir birimlik madde miktarı

ŞEKİL LİSTESİ

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 1. Maddelerin iletkenliklerine göre bant aralıkları	7
Şekil 2. Katkısız yarıiletkenlerin bant aralıkları	10
Şekil3. Katkılı yarıiletkenlerin enerji bandı.....	11
Şekil4. P tipi yarıiletken.....	12
Şekil5. N tipi yarıiletken.....	12
Şekil 6. Elmasın molar ısı kapasitesinin sıcaklığa göre değişimi.....	15
Şekil7. Birkaç katının molar ısı kapasitesinin sıcaklığa göre değişimi	17
Şekil8.Gümüş için Debye ve Einstein yaklaşımlarının karşılaştırmalı sonuçları	18
Şekil9.Ge yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi.....	24
Şekil 10. Ge yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	26
Şekil11.Si yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi.....	27
Şekil12.Si yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	29
Şekil13.GeAs yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi.....	30
Şekil14.GeAs yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	32
Şekil15.InP yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi.....	34
Şekil16.InP yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	36
Şekil17.InAs yarıiletkeninin sabit hacimde ısı miktarının incelenmesi.....	38
Şekil18.InAs yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	39
Şekil19.ZnO yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi.....	41
Şekil20.ZnO yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi	42

ÇİZELGE LİSTESİ

Çizelge

Sayfa

Çizelge 1. Ge yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi.....	23
Çizelge 2. Ge yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	25
Çizelge 3. Si yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi	26
Çizelge 4. Si yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	28
Çizelge 5. GaAs yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi....	29
Çizelge 6. GaAs yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	31
Çizelge 7. InP yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi	33
Çizelge 8. InP yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	34
Çizelge 9. InAs yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi	36
Çizelge 10. InAs yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	38
Çizelge 11. ZnO yarıiletkeninin sabit hacimde ısı kapasitesinin incelenmesi.....	40
Çizelge 12. ZnO yarıiletkeninin sabit basınçta ısı kapasitesinin incelenmesi.....	41

1. GİRİŞ

Doğada tüm maddeler elektrik geçirme özelliğine göre iletken (~~metal~~), yalıtkan (~~cam~~) ve yarıiletken olarak üç gruba ayrılır. Yalıtkanlar, normal koşullar altında elektrik akımını iletmeyen bir malzemedir. Çoğu iyi yalıtkan, tek elementli malzemelerden ziyade bileşiklerdir ve çok yüksek dirençlere sahiptir. Değerlik elektronları atomlara sıkıca bağlıdır; bu nedenle, bir yalıtıcıda çok az serbest elektron vardır. Yalıtkanlara örnek olarak kauçuk, plastik, cam, mika ve başkalarını göstermek olur. İletkenler, elektrik akımını kolayca ileten bir malzemedir. Çoğu metal iyi iletkenidir. En iyi iletkenler, atoma çok zayıf bir şekilde bağlanmış tek bir değerlik elektronuna sahip atomlarla karakterize edilen; Bakır, gümüş, altın ve alüminyum gibi tek değerlik elektronlu malzemelerdir. Bu zayıf bağlı valans elektronları, atomdan kurtulmak için az miktarda enerji eklenmesiyle serbest elektron haline gelebilir. Bu nedenle, iletken bir malzemede serbest elektronlar akım taşımak için mevcuttur. Bir yarıiletken, elektrik akımı iletme özelliğinde iletkenler ve yalıtkanlar arasında bulunan bir malzemedir. Saf durumda bir yarıiletken ne iyi bir iletken ne de iyi bir yalıtkandır. Tek elementli yarı iletkenler Antimon, arsenik, astatin, bor, polonyum, tellür, silikon ve germanyumdur. Galyum arsenit, indiyum fosfit, galyum nitrür, silisyum karbür, silikon germanyum gibi bileşik yarıiletkenler de yaygın olarak kullanılır. Tek elementli yarı iletkenler, dört değerlik elektronlu atomlarla karakterize edilirler. Silikon, en yaygın kullanılan yarı iletkenlerdendir (Balkanski ve ark., 2000; Mishra ve Singh,2007; Grundmann, 2010; Fraser, 1986; Roy 2004).

Kristal yapıya sahip olan ve oda sıcaklığında çok az serbest elektron içeren maddelere yarıiletkenler denir. Yarıiletkenler oda sıcaklığında bir yalıtkan gibi davranır. Elektriksel direncine göre, iletken ve yalıtkan arasında bir değere sahip olurlar. Yarıiletkenlere uygun katkılar eklenirse kontrollü iletkenlik özelliği sağlanabilir. Bazı yarıiletken maddelere örnek olarak silikon, germanyum ve karbon gösterilebilir. Yarıiletkenler, transistörler, güneş pilleri, ışık yayan diyotlar (LED'ler) ve dijital ve analog entegre devreler dahil modern elektroniklerin temel yapı taşlarıdır.

Bir yarıiletkenin özelliklerinin modern yaklaşımı, bir kristal yapı içindeki ve ayrıca bir kafes içindeki elektronların ve deliklerin hareketini açıklayabilen kuantum fiziğine dayanmaktadır. Yarıiletken malzemelerin elektriksel iletkenliği, bir

metalinkinden farklı olarak sıcaklığın artması ile artar. Yarıiletken cihazlar, akımı bir yönde diğerine göre daha kolay geçirme, değişken direnç gösterme ve ışığa veya ısıya duyarlılık gibi bir dizi yararlı özelliği gösterebilir. Bir yarı iletken malzemenin elektriksel özellikleri, katkı maddelerinin kontrollü olarak eklenmesiyle veya elektrik alanlarının veya ışığın uygulanmasıyla değiştirilebildiğinden, yarıiletkenlerden yapılan cihazlar yükseltme, anahtarlama ve enerji dönüşümü için kullanılabilmektedir (Roy, 2004; Yacobi, 2003; Łukasiak ve Jakubowski, 2010).

Yarıiletkende elektrik akım iletimi, toplu olarak yük taşıyıcıları olarak bilinen serbest elektronların veya "deliklerin" hareketi yoluyla gerçekleşir. "Katkılama" olarak bilinen yarıiletken bir malzemeye katkı atomlarının eklenmesi, içindeki yük taşıyıcılarının sayısını büyük ölçüde artırır. Katkılı bir yarıiletken çoğunlukla serbest delikler içerdiğinde "p-tipi" olarak adlandırılırken, çoğunlukla serbest elektron içerdiğinde "n-tipi" olarak bilinir. Elektronik cihazlarda kullanılan yarıiletken malzemeler, p ve n tipi katkı maddelerinin yerini ve konsantrasyonunu kontrol etmek için hassas koşullar altında katkılanabilmektedir. Yarıiletken malzemelerin bazı özellikleri, 19. yüzyılın ortalarında ve 20. yüzyılın ilk yıllarında gözlemlenebilmiştir. Kuantum fiziğinin gelişmesi, 1948'de transistörün gelişmesine izin verdi. Bazı saf elementler ve birçok bileşikler yarıiletken özellikler sergilemesine rağmen, Silikon, Germanyum ve Galyum bileşikler elektronik cihazlarda en yaygın kullanılanlardır (Balkanski ve ark., 2000; Mishra ve Singh, 2007; Grundmann, 2010).

Yarıiletkenlerin ortaya çıkmasının tarihi, malzemelerin elektriksel özellikleri üzerine deneylerle başlar. Direncin negatif sıcaklık katsayısı, düzeltme ve ışığa duyarlılık özellikleri ile yarıiletkenler 19. yüzyılın başlarından itibaren gözlemlenmiştir. 1914 yılında Johan Koenigsberger, katı malzemeleri metaller, yalıtkanlar ve "değişken iletkenler" olarak sınıflandırdı. Felix Bloch, 1928'de elektronların atomik kafesler boyunca hareketine ilişkin bir teori geliştirdi. 1931 yılında, bant teorisi Alan Herries Wilson tarafından oluşturulmuş ve bant boşlukları kavramı geliştirilmiştir. Walter H. Schottky ve Nevill Francis Mott, potansiyel bariyer modellerini ve bir metal-yarıiletken bağlantısının karakteristiklerini geliştirdiler (Morris, 1990; Sze ve Ng, 2006; Zhang ve ark., 2017).

Yarıiletkenleri kullanan cihazlar, yarı iletken teorisi daha güvenilir cihazların inşası için bir rehber sağlamadan önce ilk başta deneysel bilgiye dayalı olarak inşa edildi. Alexander Graham Bell, 1880'de sesi bir ışık huzmesi üzerinden iletmek için selenyumun ışığa duyarlılık özelliğini kullandı.

Charles Fritts tarafından 1883 yılında selenyum ile kaplanmış metal bir plaka ve ince bir altın tabakası kullanılarak düşük verimli çalışan bir güneş pili inşa edildi; cihaz 1930'larda fotoğrafik ışık ölçerlerinde ticari olarak kullanışlı hale geldi (Grundmann, 2010). Kurşun sülfitten yapılan noktasal temaslı mikrodalga detektör redresörleri Jagadish Chandra Bose tarafından 1904'te kullanıldı; doğal kükürtlü kurşun veya diğer malzemeleri kullanan detektörü, radyonun geliştirilmesinde yaygın bir cihaz haline geldi. 1906'da H.J. Round, elektrik akımı silikon karbür kristallerinden geçtiğinde ışık yayılmasını gözlemledi, bu ışık yayan diyot olarak belirlendi. Oleg Losev, 1922 yılında benzer ışık yayılımını gözlemledi, ancak o sırada etkin pratik bir faydası yoktu. II. Dünya Savaşı'ndan önceki yıllarda, kızıl ötesi tespit ve iletişim cihazları, kurşun sülfür ve kurşun-selenid materyalleri üzerine araştırmalar yapılmasını sağladı. Bu cihazlar, gemileri ve uçakları tespit etmek, kızılötesi telemetreler ve sesli iletişim sistemleri için kullanıldı (Zhang ve ark., 2017; Abeles, 1963; Dong ve ark., 2001; Kim ve Kavany, 2016; Raya-Moreno ve ark., 2019; Kecik ve ark., 2018).

İkinci Dünya Savaşı sırasında tutarlı kalitede detektör geliştirmek için silikon malzemeler üzerinde önemli araştırma ve geliştirme yapıldı (Balkanski ve ark., 2000; Mishra ve Singh, 2007; Grundmann, 2010). Bir katıhal amplifikatörü geliştirmek için birçok çaba gösterildi, ancak bunlar yarıiletken malzemelerin sınırlı sayıdaki teorik çalışmalarından dolayı başarısız oldu (Grundmann, 2010). 1922 yılında Oleg Losev, radyo için iki uçlu, negatif direnç yükselteçleri geliştirdi. 1926 yılında Julius Edgard Lilienfeld, modern bir alan etkili transistöre benzeyen bir cihazın patentini aldı, ancak bu pratik değildi. Bardeen ve Brattain, yüzeyle ilgili olayların, Shockley, az sayıda yük taşıyıcılarının toplu iletimini tercih ederken, yeni cihazın çalışmasını inceledi. Yaklaşık bir ay sonra bir p-n tip bir bağlantı transistörü teorisi geliştirdi (Kecik ve ark., 2018). Shockley, Bardeen ve Brattain 1956'da bu çalışmalarına göre Nobel Fizik Ödülü'nü aldılar (John Bardeen ayrıca süperiletkenlik teorisini verdiği için 1972'de daha bir Nobel Ödülü aldı). Şubat 1948'de John Shive, çok ince bir germanyum levhanın (0,01 cm) zıt

taraflarına yerleştirilmiş yayıcı ve toplayıcıyla doğru çalışan bir nokta temas transistörünü geliştirdi. Bu konfigürasyonda, iletimin gerçekten yüzey boyunca değil, toplu halde gerçekleştiğini gösterdi (yayıcı ve toplayıcı arasındaki yüzey boyunca mesafe çok daha uzun olurdu) (Ross, 1998). Ancak o zaman, Shockley transistör ile ilgili teorisini bilim insanlarına (Ross, 1998; Riordan ve ark., 1999) sundu. Aynı yıl Jean Hoerni düzlemsel transistörü önerdi. Koruyucu görevi gören oksit aradan kaldırılmadı ve etkisizleştirici bir tabaka olarak işlev gördü. (Ross (1998)) Kademeli katkı vasıtasıyla tabana yerleşik bir elektrik alanı oluşturulabilirdi. Bu hetero-yapı düşüncesi, fabrikasyon problemleri nedeniyle kolaylıkla uygulamaya konulamadı (Perry, 2002).

Literatürden de görüldüğü gibi yarıiletken malzemelerin bazı özellikleri, 19. yüzyılın ortalarında ve 20. yüzyılın ilk yıllarında gözlemlendi. Kuantum fiziğinin gelişmesi ile, 1948'de transistörün ortaya çıkmasını sağladı. Bazı saf elementler ve birçok bileşik yarıiletken özellikler sergilemesine rağmen, silikon, germanyum ve galyum bileşikleri elektronik cihazlarda en yaygın kullanılanlardır (Zhang ve Ark., 2017). Bu elementlerin ticari olarak en önemlileri silikon ve germanyumdur. Silikon ve germanyum burada etkili bir şekilde kullanılır çünkü en dıştaki kabuklarında aynı anda eşit olarak elektron kazanma veya kaybetme yeteneği veren 4 değerlik elektronu vardır. İkili bileşikler, özellikle galyum arsenit, gruplar II ve VI, gruplar IV ve VI gibi grup III ve V' deki elementler arasında ve farklı grup IV elementler arasında, ör. silisyum karbür, yarıiletken özelliğine sahip olurlar (Liang ve Towe, 2018; Barbagiovanni ve ark., 2014).

Günümüzde bazı üçlü bileşikler, oksitler ve alaşımlar, organik bileşiklerden yapılan organik yarıiletkenler elektrik elektronik teknolojisinde yaygın olarak kullanılmaktadır. En yaygın yarıiletken malzemeler kristal katı maddelerdir, ancak amorf ve sıvı yarıiletkenler de bilinmektedir. Bunlar, hidrojene amorf silikon ve çeşitli oranlarda arsenik, selenyum ve tellür karışımlarını içerir. Bu bileşikler, daha iyi bilinen yarı iletkenler ile ara iletkenlik özelliklerini ve sıcaklıkla hızlı bir iletkenlik değişiminin yanı sıra, ara sıra negatif direnci paylaşırlar. Bu tür düzensiz malzemeler, silikon gibi geleneksel yarı iletkenlerin sert kristal yapısına sahip değildirler (Lee ve ark., 2015; Wehmeyer ve ark., 2017; Varshni, 1967; Anderson, 1970).

Günümüzde yarıiletken malzemeler modern teknolojinin her sektöründe kullanılmaktadır. Genellikle daha yüksek elektronik kalitede malzeme gerektirmeyen, kirliliklere ve radyasyon hasarına nispeten duyarsız olan ince film yapılarında kullanılırlar. Özellikle teknik amaçla yüksek sıcaklık malzemeleri yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu nedenle yarı iletken malzemelerin sıcaklığının artırılması gerekmektedir. Bu nedenle, bu malzemelerin farklı özellikleri sıcaklığa bağlı olarak değişim gösterir. Bu tezde yarıiletkenlerin termodinamik özelliklerinden öz ısı miktarlarının sıcaklığa bağlı olarak değişmesi teorik olarak incelenmiştir. Bilindiği gibi, katıların termal özelliklerini incelenmesi için literatürde farklı yöntemler vardır. Bu yöntemler içerisinde en yaygın olarak kullanılanları Einstein yaklaşımı, Debye modeli ve farklı yarıempirik yaklaşımlardır (Landau ve Lifshits, 1980; Einstein, 1907; Debye ,1912; McCombie, 1971).

Dulong- Petit yasasına göre katıların sabit basınçta atomik ısı kapasitesi, çok sayıda maddeler için 6.2' ye eşittir. Yapılan deneysel çalışmalar sıcaklığın küçük değerlerinde öz ısı miktarının değiştiğini göstermektedir. Yani küçük sıcaklıklarda Dulong- Petit yasasının geçerli olmadığı görüldü. Bu problemin çözümü Einstein (1907) tarafından Planck'ın yeni kuantum teorisi, katı maddeyi oluşturan parçacıkların hareketine uygulayan temel bir makalesinde verildi. Einstein yaklaşımına göre temel zorluklar şimdilerde çözülmüş olmasına rağmen, parçacıkların hareketinin ayrıntıları genel şekilde dikkate alınmadığından deneyle çok uyumlu bir sonuç beklenemezdi. Özellikle, Einstein'ın ısı kapasitesi formülü düşük sıcaklıklarda oldukça tatmin edici sonuçlar vermedi. Teorinin yetersizliklerinin giderilmesi için bir sonraki adım Debye (1912) tarafından gerçekleştirilmiştir (Debye, 1912; Ziman, 1965). Yakın zamanda Askerov ve Cankurtaran (Askerov ve Cankurtaran, 1994; Cankurtaran ve Askerov, 1996) çalışmasında Einstein ve Debye yöntemlerini birleştirerek katıların termodinamik özelliklerini incelemek için daha geniş kapsamlı yaklaşım olan Einstein- Debye yaklaşımını önerdiler. İncelemelerden görülür ki Einstein- Debye yaklaşımına göre yapılan hesaplama sonuçları deneysel verilerle daha çok uyum içerisindedir. Literatürde Einstein- Debye yaklaşımına göre katıların termodinamik özelliklerinin incelenmesi ile ilgili az sayıda çalışma vardır.

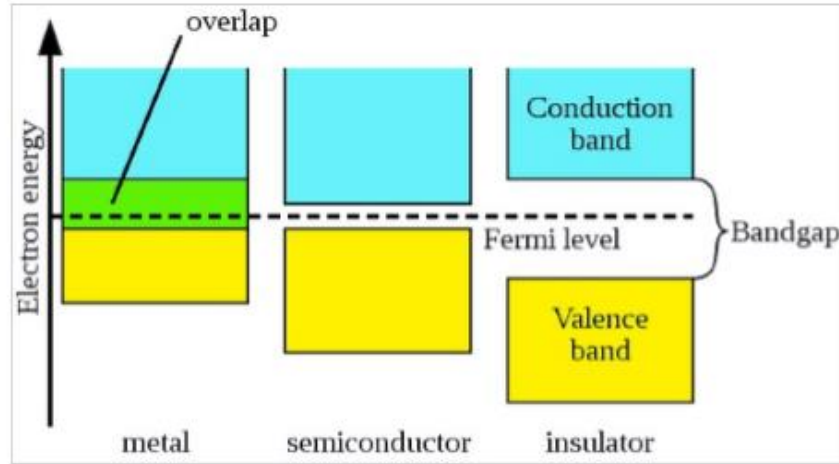
Önerilen tezde Einstein- Debye yaklaşımı dikkate alınarak bazı yarıiletkenlerin ısı kapasiteleri sıcaklığın geniş aralığında incelenecektir. Formüllerden görüldüğü gibi ısı kapasitesinin hassas hesaplanması Debye fonksiyonu için oluşturulan analitik formüllerden alınan sonuçlara bağlıdır. Einstein- Debye yaklaşımı için kaynak oluşturulan formüller (Askerov ve Cankurtaran, 1994; Cankurtaran ve Askerov, 1996) Einstein ve Debye yaklaşımlarına göre arzu edilen hassaslıkta sonuçlar verdiği yapılan çalışmalardan görülmektedir. Bu nedenle tezde örnek olarak düşünülen yarıiletkenlerin ısı kapasitelerinin hesaplanması önerilen yöntem ve formüllere göre incelenecektir.

Bu tezde, Askerov ve Cankurtaran (1994) çalışmasında Einstein ve Debye yöntemlerini birleştirerek katıların termodinamik özelliklerini incelemek için daha geniş kapsamlı yaklaşım olan Einstein- Debye yaklaşımını önerdiler. Einstein- Debye yaklaşımına göre yapılan hesaplama sonuçlarının deneysel verilerle daha çok uyum içerisinde olduğu tespit edildi (Eser ve ark., 2020; Eser ve Koç 2021; Mamedov 2014). Fakat bu gelişmelere rağmen literatürde Einstein- Debye yaklaşımına göre katıların termodinamik özelliklerinin incelenmesi ile ilgili az sayıda çalışma vardır. Bu tezde *Si, Ge, GaAs, InP, InAs ve ZnO* yarıiletkenlerinin ısı kapasitelerinin sıcaklığa göre değişimi Einstein- Debye yaklaşımına göre hesaplanarak incelenecektir. Alınan sonuçların *Si, Ge, GaAs, InP, InAs ve ZnO* gibi yarıiletkenlerin teknolojik uygulamalarında faydalı olacağı kanaatindeyim.

2. KAYNAK ÖZETLERİ

2.1. Yarıiletkenler

Metallerin iletkenlik özelliklerini önce terminolojik olarak anlatmağa çalışalım. Fermi enerji seviyesi iki bant arasındaysa, üstündeki banda iletim bandı ve altındaki banda değerlik (Valans) bandı denmektedir. Bilindiği gibi bant aralığı, değerlik ve iletim bandı arasındaki enerji farkına denmektedir. Bir metalde, Fermi seviyesi bir bant içindedir, bu nedenle değerlik ve iletim bantları örtüşür. Yalıtkanda büyük bir bant aralığı vardır. Bir yarıiletken, bir yalıtkan ile bir iletken arasında bir yerdedir: Tipik olarak 1eV düzeyinde bir bant aralığına sahiptir (Schwartz, 2014).



Şekil 1. Şekilden görüldüğü gibi metallerde bant aralığı yoktur, yarıiletkenler küçük bir bant aralığına ve yalıtkanlar büyük bir bant aralığına sahiptir. (Matthew Schwartz, Statistical Mechanics, Springer, 2019)

Bant aralığının enerji boyutunun yaklaşık olarak 1eV olması nereden geliyor? Bu soruya cevap vermek için her şeyden önce, Fermi dağılımına bakalım (Schwartz,2014):

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \varepsilon_F)} + 1} \quad (2.1.1)$$

Burada $\mu = \varepsilon_F$ durumu sadece mutlak sıcaklıkta $T = 0$ ' da tam olarak doğrudur, ancak bu durum metallerde gerçek olmaya çok yakın, çünkü $T \ll T_F$ değerlerini alır (örnek

olarak bakır için $T_F \approx 80000K$ and $\varepsilon_F \approx 7eV$ değerlerini alır). Burada serbest elektron gaz modelini kullanmıyoruz, bu nedenle ε_F Fermi enerjisini başka türlü hesaplayamayız. Fermi dağılımı $\varepsilon = \varepsilon_F$ durumunda $f(\varepsilon_F) = \frac{1}{2}$ olur. Bu, bir iletkende ε_F enerji seviyesinin %50 dolu olma olasılığına sahip olacağı anlamına gelir. Bir yalıtkan veya yarı iletken, elektronlar iletim bandına geçmek için bant aralığını geçmeleri gerekir. Bu nedenle, değerlik bandındaki boşlukların sayısı, iletim bandındaki uyarılma sayısı ile aynı olmalıdır ve bu nedenle Fermi dağılımı ε_F etrafında simetrik değerler almalıdır, başka bir deyişle, Fermi seviyesi bir bant aralığındayken, her zaman bant aralığının ortasındadır. Bu önemli gerçek tamamen geneldir ve aşağıdaki katkılı yarı iletkenleri anlamak için çok önemlidir.

Şimdi, oda sıcaklığında $k_B T = 0.025eV$ durumuna bakalım. Daha sonra, iletim bandının tabanında, $\varepsilon_c = \varepsilon_F + \frac{1}{2} \varepsilon_{bg}$ enerjisinde bir elektron bulma olasılığını hesaplayabiliriz:

$$f\left(\varepsilon_F + \frac{1}{2} \varepsilon_{bg}\right) = \frac{1}{\text{Exp}\left(\frac{\varepsilon_{bg}}{2k_B T}\right) + 1} \approx \text{Exp}\left(-\frac{\varepsilon_{bg}}{0.05eV}\right) \quad (2.1.2)$$

(2.1.2) fonksiyonun değerinin üstel olarak azaldığını görüyoruz. $\varepsilon_{bg} = 1eV$ olarak alırsak, iletim bandının tabanı sadece 10^{-9} olasılıkla dolu olma durumuna sahiptir. $\varepsilon_{bg} = 2eV$ olursa olasılık zaten 10^{-18} olur ve $\varepsilon_{bg} = 3eV$ de ise 10^{-27} değerine yaklaşır. Elektron sayısının $N_A \sim 10^{24}$ civarında olduğu göz önüne alındığında, bant aralığının yaklaşık $\varepsilon_{bg} = 1-2eV$ aralığında olabileceği sonucuna varabiliriz.

Bu benzersiz özelliklere sahip yarıiletkenler, elektrik akımını gerektiği gibi kontrollü bir şekilde iletmek için mükemmel bir malzemedir. İletkenlerin aksine, yarı iletkenlerdeki yük taşıyıcılar yalnızca dış enerji (termal) aktarımı nedeniyle ortaya çıkar. Belli sayıda Valans elektronunun enerji boşluğundan iletim bandına geçmesi nedeniyle eşit miktarda boşluklar, yani delikler bırakır. Elektronlardan ve boşluklardan kaynaklanan elektrik akımı iletimi de aynı derecede önemlidir. Yarıiletkenler aşağıdaki gibi önemli özelliklere sahiptirler:

1. Direnç: 10^{-10} m'ye kadar
2. İletkenlik: 10^{10} -6 mho / m'ye kadar
3. Sıcaklık dayanımı katsayısı: Negatif

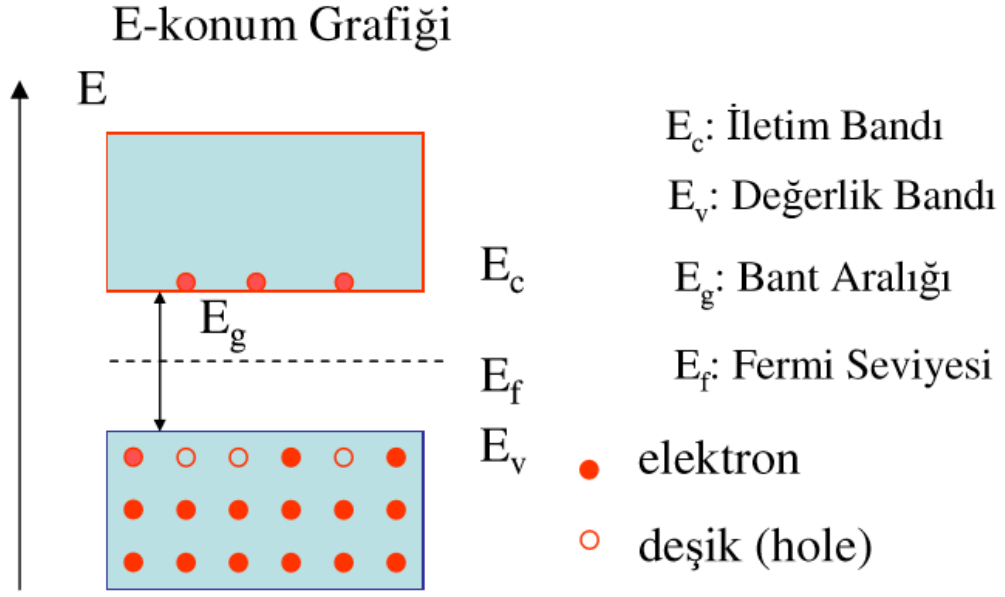
4. Akım Akışı: Elektronlar ve delikler vasıtasıyla gerçekleştirilir.
5. Yarı iletken, Sıfır Kelvin'de bir yalıtkan gibi davranır. Sıcaklığın artırılmasında iletken görevi görür.
6. Üstün elektriksel özelliklerinden dolayı yarı iletkenler, yarı iletken cihazları enerji dönüşümü, anahtarlar ve amplifikatörlere uygun hale getirmek için doping yoluyla değiştirilebilir.
7. Daha az güç kaybı.
8. Yarı iletkenler daha küçük boyuttadır ve daha az ağırlığa sahiptir.
9. Dirençleri iletkenlerden daha yüksek ancak izolatörlerden daha düşüktür.
10. Sıcaklık artışı ile yarı iletken malzemelerin direnci azalır ve tam tersi.

Yarı iletkenler genel olarak iki gruba ayrılır:

1. Katkısız yarıiletkenler
2. Katkılı yarıiletkenler

2.1.1. Katkısız yarıiletkenler

Basit bir tanımlamayla, katkısız yarıiletkenler, çok saf bir yarıiletken malzemeden oluşan maddelerdir. Katkısız yarıiletkenlere örnek olarak C, Si, Ge ve başka elementleri gösterebiliriz. Daha teknik terminolojide, katkısız bir yarı iletkenin, boşluk sayısının iletim bandındaki elektron sayısına eşit olduğu bir yarıiletken olduğu belirtilebilir. Bu tür yarı iletkenler durumunda yasak enerji boşluğu çok hassastır ve oda sıcaklığında mevcut olan az enerji bile valans elektronlarının iletim bandına geçmesi için yeterlidir. Katkısız bir yarıiletkenin bir başka karakteristik özelliği, bu tür malzemelerin Fermi seviyesinin, değerlik bandı ile iletim bandı arasında bir yerde bulunmasıdır. Bir yarıiletkenin uçlarına potansiyel fark uygulanırsa, elektronlar pozitif kutba doğru hareket ederken, delikler negatif kutba doğru hareket edecektir. Yarı iletken içindeki toplam akım, serbest elektronlar ve deliklerin hareketi nedeniyle oluşan akımların toplamıdır. Yarıiletkenin sıcaklığı artarsa, delik-elektron çiftlerinin sayısı artar ve yarı iletken boyunca akım artar fakat sıcaklık düşerse tersi olur. Katkısız yarıiletkenlerin bant yapısını Şekil 2'deki gibi gösterebiliriz:



Şekil 2. Katkısız yarıiletkenlerin bant yapısı ve $\varepsilon_F = \frac{1}{2} \varepsilon_g$ olur.

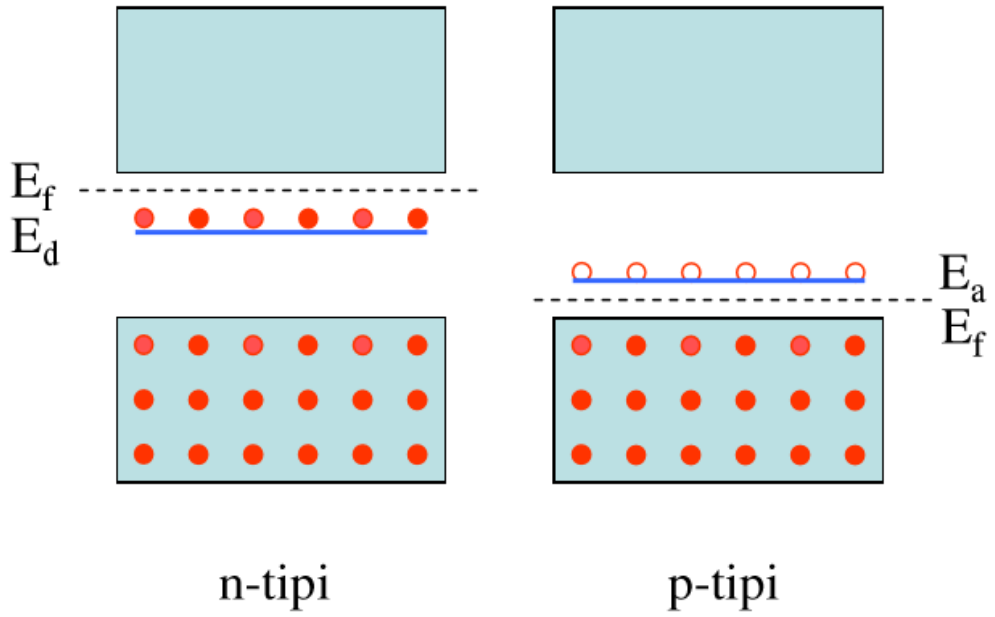
2.1.2. Katkılı yarıiletkenler

Yarıiletken malzemenin saf durumuna, çok küçük miktarlarda katkı ekleyerek bilinçli olarak oluşturulan yarıiletkenlerdir. Bu tür katkı eklenmesinin gerçekten çok küçük olduğu ve tipik bir katkı maddesinin yüz milyonda bir kısımlık parçasında konsantrasyona sahip olabileceği veya 0.01 ppm'ye eşdeğer olabileceği akılda tutulmalıdır. Katkılama için seçilen malzemeler, valans bandında 5 elektrona sahip olacak şekilde veya valans bandında sadece 3 elektrona sahip olacak şekilde seçilir.

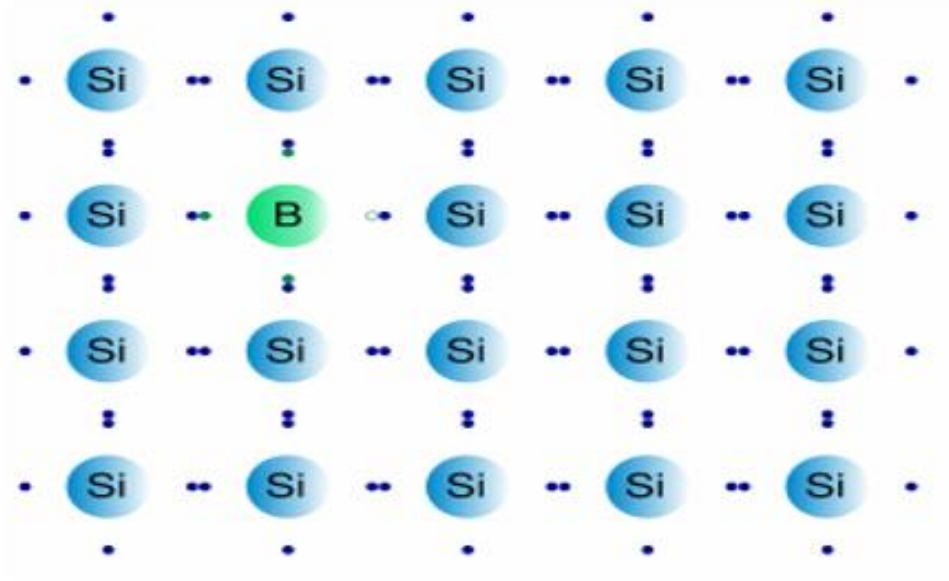
Buna göre, bu tür katkılar sırasıyla beş veya üç değerlikli katkılar olarak bilinir. Katkılama tipi ayrıca P-tipi ve N-tipi yarı iletkenler olmak üzere iki tip yarıiletken malzeme ortaya çıkarır. Bir beş değerlikli katkı, donör katkısı olarak bilinir, çünkü kovalent bağlanma için gerekli olmayan ve iletim bandına kaydırılmak üzere kolayca erişilebilen kristal yapıya ekstra bir elektron kazandırır. Bu elektron, değerlik bandında ona karşılık gelen bir deliğe yol açmaz, çünkü zaten fazladır, bu nedenle böyle bir malzeme ile doping üzerine, germanyum gibi temel malzeme deliklerden daha fazla elektron içerir, dolayısıyla isimlendirme N tipi katkılı yarıiletkenler olarak adlandırılır.

Öte yandan, Germanyum' a bor gibi üç değerlikli bir katkı maddesi eklendiğinde, üst kısımda tarif edilenin tam olarak ters işlemi nedeniyle ek veya ekstra delikler oluşur. Bu nedenle, alıcı olarak da bilinen bu katkı, bir P tipi yarıiletken oluşturur. Bu nedenle elektronlar n-tipindeki çoğunluk taşıyıcılarıdır (akımın), delikler ise azınlık taşıyıcılarıdır. Bunun tersi P tipi yarı iletkenler için geçerlidir. Diğer bir fark, katkılı yarı iletkenlerin Fermi seviyesinin, değerlik bandı ile iletim bandı arasında bir yerde olduğu halde, n-tipi durumunda yukarı doğru kayarken, bariz nedenlerden dolayı P-tipi durumunda aşağı doğru kaymasıdır (Şekil 3). P-tipi yarı iletken (Şekil 4) ve N-tipi yarı iletken (Şekil 5) gösterilmiştir.

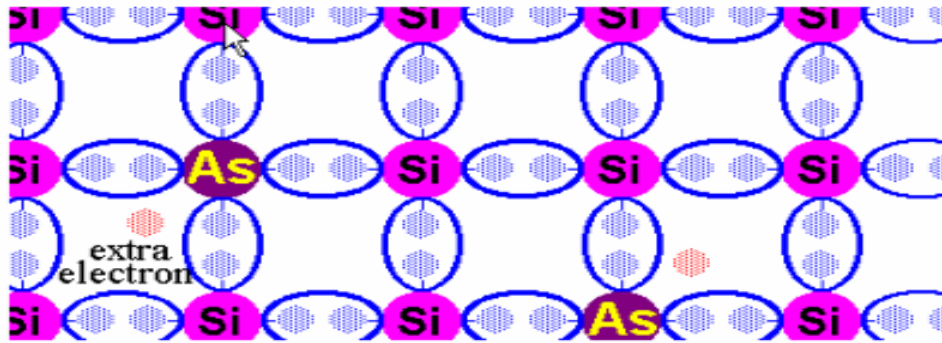
$$T=0^{\circ}\text{K}$$



Şekil 3. Katkılı yarıiletkenlerin enerji bandı



Şekil 4. P tipi yarıiletken (Schwartz, 2014)



Şekil 5. N tipi yarıiletken (Schwartz, 2014)

3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. Katıların Isı Miktarı İçin Einstein Modeli

Dulong-Petit Yasası, tüm katılar için sabit hacimde C_v molar ısı kapasitesinin $3R$ 'ye eşit olduğunu belirtir, burada R evrensel gaz sabitidir. 19. yüzyılın başlarında empirik olarak elde edilen bu sonuç, daha sonra sistemin ortalama enerjisi ile sıcaklığı arasında ilişki kuran genel bir teoremden kolayca türetilmiştir. Einstein yaklaşımında her molekülün üç serbestlik derecesine sahip harmonik bir osilatör olarak titreştiği kabul edilmektedir. Her bir serbestlik derecesi ortalama olarak $\frac{1}{2}k_B T$ kinetik enerjiye ve $\frac{1}{2}k_B T$ potansiyel enerjiye sahipti, dolayısıyla molekül başına ortalama toplam enerji:

$$E = 6 \times \frac{1}{2} k_B T = 3k_B T \quad (2.2.1)$$

olur. Her bir mol başına düşen enerji $3k_B T N_A$ olur, burada N_A Avagadro sayısıdır. Bu durumda molar ısı kapasiteni aşağıdaki gibi yazarız:

$$C_v = \frac{\partial E}{\partial T} = 3k_B N_A = 3R \quad (2.2.2)$$

Deneyssel olarak, sıcaklık kritik bir değerin üzerinde olduğu ve her malzeme için farklı olduğu sürece (2.2.2) formülü katı maddeler için oldukça iyi sonuçlar vermektedir. Bununla birlikte, sıcaklık kritik değerin altına düştüğünde Dulong ve Petit yasası başarısız olur ve $C_v \rightarrow 0$ olur. Klasik istatistik fizik (kinetik teori) bunun neden meydana geldiğine dair hiçbir ipucu vermez.

Einstein, Planck'ın siyah cisim deneyindeki kutunun duvarlarındaki moleküler titreşimleri incelemesinin aslında tüm katılarda moleküler titreşimlerin genel bir özelliği olduğunu fark etti. Buna göre, titreşimin ortalama enerjisi $3k_B T$ değil, denklem (2.2.3)'da verilen Planck'ın bir siyah cismin emisyon spektrumunun enerjisi olduğunu düşündü:

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (2.2.3)$$

Burada ν molekülün harmonik titreşim frekansıdır.

Yüksek sıcaklıkta $\frac{h\nu}{k_B T} \ll 1$ olduğundan

$$e^{h\nu/k_B T} - 1 \approx \left(1 + \frac{h\nu}{k_B T} + \dots \right) - 1 \approx \frac{h\nu}{k_B T} \quad (2.2.4)$$

elde edilmektedir. (2.2.4) denklemini (2.2.3) da yerine yazarsak ortalama enerjinin $\langle E \rangle \rightarrow k_B T$ olduğunu görürüz. Yani kinetik teoriden alınan sonuç alınır. Küçük sıcaklıklarda ise sonuç farklı olur. (2.2.3) formülünü kullanarak bir mol N_A molekülünün titreşim enerjisini aşağıdaki gibi yazarız:

$$E = 3N_A \langle E \rangle = \frac{3N_A h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (2.2.4)$$

Buradan molar ısı miktarını aşağıdaki gibi hesaplarız:

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3N_A \left(\frac{h\nu}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{h\nu/k_B T}}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (2.2.5)$$

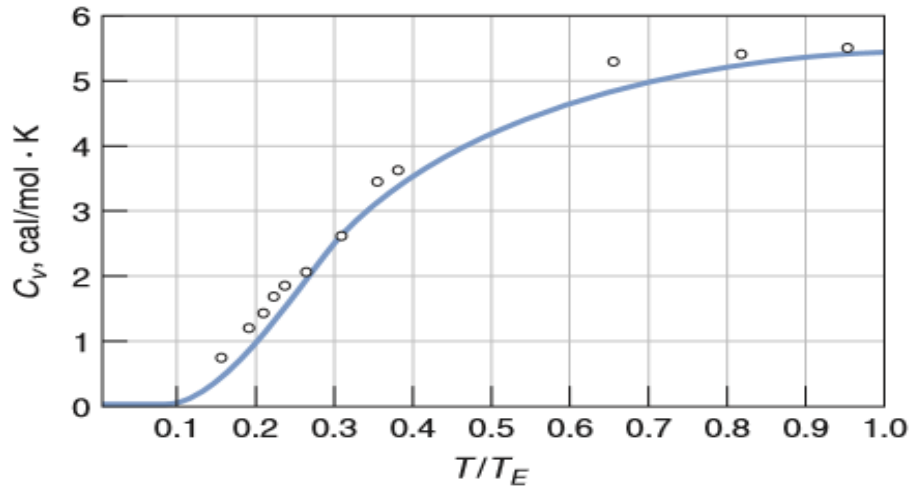
Burada $\theta_E = \frac{h\nu_E}{k_B}$ Einstein sıcaklığı olduğunu dikkate alırsak ısı kapasitesi için aşağıdaki formülü alırız:

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3N_A \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{e^{\theta_E/T} - 1} \quad (2.2.6)$$

Einstein yeni varsayımları kullanarak sıcaklığın tüm aralığında ısı kapasitelerinin değişimi için yeni formül almış oldu. Denklem (2.2.5)'de $T \rightarrow 0$ durumunu dikkate alırsak $C_V \rightarrow 0$ yaklaşır ve $T \rightarrow \infty$ yaklaştığında ise $C_V \rightarrow 3k_B N_A = 3R$ olur.

Şekil 6'da, elmas için, Einstein'ın yaklaşımından alınan (2.2.6) denkleminde ve deneyden alınan sonuçlar düşük sıcaklık değerleri için verilmiştir. Sonuçlardan

görüldüğü gibi Einstein'ın probleme yaklaşımı, Dulong ve Petit yasasına göre açıkça önemli bir gelişmeydi, ancak çok düşük sıcaklıklardaki sapmalara dikkat edilmesi gerekirdi. Debye, Einstein'ın çalışmasını geliştirerek molekülleri tek bir frekansla salınma yaklaşımını, sıfırdan maksimum ν_D değerine kadar değişen frekanslara sahip bağlı osilatörlerden oluşan bir sistemi dikkate alarak ısı miktarı için daha genel formül oluşturdu.



Şekil 6. Elmasın molar ısı kapasitesinin T 'ye göre değişmesi, ikincisi Einstein sıcaklığının birimleri cinsinden $T_E = \theta_E = \frac{h\nu_E}{k_B}$. Sürekli çizgi Einstein'ın yaklaşımının sonucudur (Kittel, 1966).

3.2. Katıların Isı Miktarı İçin Debye Modeli

Doğru dağılım bağıntısını kullanırsak, Brillouin bölgesi üzerinden integral alarak $g(\omega)$ elde ederiz ve Brillouin bölgesinde izin verilen k değerlerinin sayısının kristaldeki birim hücre sayısı olduğunu biliyoruz, bu yüzden otomatik olarak doğru sayıda serbestlik derecesi elde ederiz. Debye modelinde, bir ω_D frekansı tanımlayın ve bu durumda parçacık sayısını:

$$N = \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega \quad (2.3.1)$$

şeklinde yazarız. Burada N , kristaldeki birim hücrelerin sayısıdır ve $g(\omega)$ birim aralıktaki fonon yoğunluğudur. Bu durumda kristalde tüm hücrelerdeki atomların toplam enerjisini aşağıdaki gibi yazarız:

$$E = \frac{3V}{(2\pi)^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega(q)}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} dq \quad (2.3.1)$$

(2.3.1) formülü üzerinde gereken işlemler yapıldıktan sonra aşağıdaki gibi yazarız:

$$E = \frac{3V\hbar}{2\pi^3 v^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} d\omega . \quad (2.3.2)$$

(2.3.2) formülünde $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ değişenine geçirsek:

$$E = \frac{3Vk_B T}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar v} \right)^3 \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (2.3.4)$$

elde ederiz. Burada $x_{\max} = \frac{\hbar \omega_{\max}}{k_B}$. Denklemden $\theta_D = \frac{\hbar \omega_{\max}}{k_B}$ Debye sıcaklığını tanımlarsak (2.3.4) formülünü aşağıdaki gibi yazarız:

$$E = 3k_B N_A D_3 \left(\frac{\theta_D}{T} \right). \quad (2.3.5)$$

(2.3.5) formülünde $D_3 \left(\frac{\theta_D}{T} \right)$ Debye fonksiyonu olup aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$D_3 \left(\frac{\theta_D}{T} \right) = 3 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx . \quad (2.3.6)$$

Debye yaklaşımından alınan toplam enerji için (2.3.5) formülünü kullanarak sıcaklığın tüm değerlerinde geçerli olan ısı kapasitesini hesaplayabiliriz:

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3k_B N_A L_V \left(\frac{\theta_D}{T} \right) . \quad (2.3.7)$$

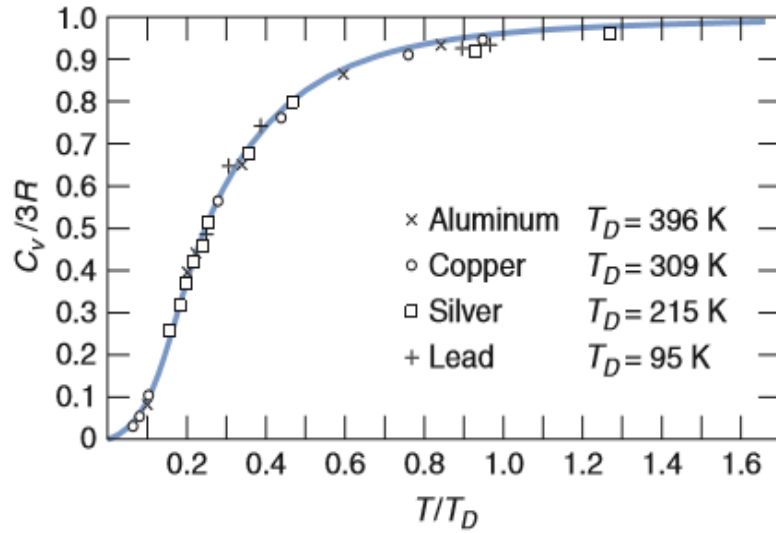
Burada $L_V \left(\frac{\theta_D}{T} \right)$ fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$L_V \left(\frac{\theta_D}{T} \right) = 4D_3 \left(\frac{\theta_D}{T} \right) - 3 \left(\frac{\theta_D}{T} \right) \frac{1}{e^{\theta_D/T} - 1} . \quad (2.3.8)$$

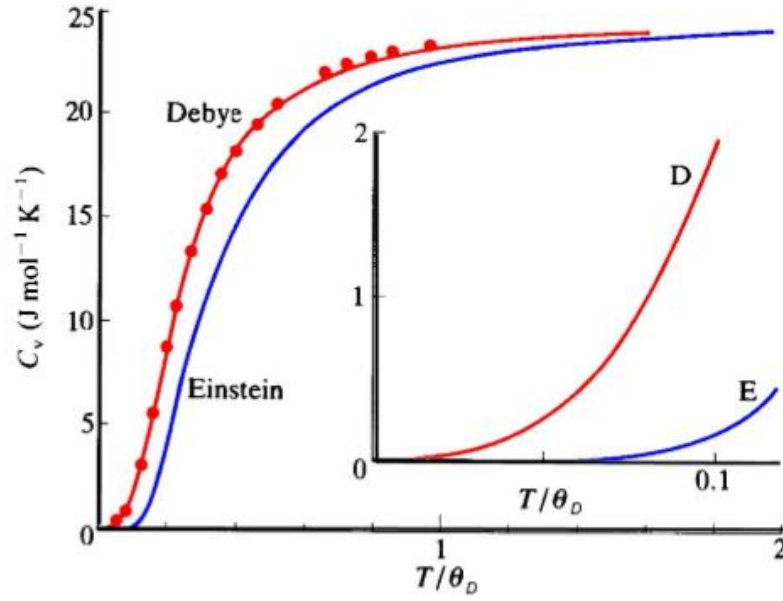
$L_V \left(\frac{\theta_D}{T} \right)$ fonksiyonun integral şeklini ise aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$L_V \left(\frac{\theta_D}{T} \right) = 3 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx . \quad (2.3.9)$$

Böylelikle sıcaklığın tüm aralığı için Debye yaklaşımı kullanılarak C_V ısı kapasitesi hesaplanabilmektedir.



Şekil 7. Birkaç katı maddenin molar ısı kapasitesi T 'ye karşı, ikincisi Debye sıcaklığı birimleri cinsinden $T_D = \theta_D = \frac{h\nu_D}{k_B}$. Sürekli eğri, Debye tarafından öngörülen yaklaşımın sonucudur (Kittel, 1966).



Şekil 8. Gümüş için Debye ve Einstein yaklaşımlarının karşılaştırmalı sonuçları (Kittel, 1966).

Şekil 7’de Debye yaklaşımından alınan sonuçlarla deneysel sonuçlar karşılaştırmalı olarak verilmiştir. İncelemeler göstermektedir ki Debye yaklaşımı tüm sıcaklık aralığında uyumlu sonuç vermektedir. Şekil 8’de ise gümüş için Debye ve Einstein yaklaşımlarından alınan karşılaştırmalı sonuçlar verilmiştir. Buradan görülüyor ki özellikle küçük sıcaklık değerlerinde Einstein yöntemi yetersiz kalmaktadır.

4. BULGULAR

4.1. Katıların Isı Miktarı İçin Einstein-Debye Modeli

Bir maddenin verilen dış koşullar altında ($x \equiv P, V$ ile gösterilir) öz ısı $C_x = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_x$, yani maddenin 1 gramının sıcaklığını 1°C artırmak için verilmesi gereken ısı miktarı olarak bilinir. Genelde, maddelerin ısı kapasiteleri sabit basınçta (C_p) ve sabit hacimde (C_v) ölçülür. Deneyler katılarda olduğu gibi C_p verildiğinde, genel bir termodinamik ilişki vasıtasıyla C_v buluna bilinir:

$$C_p(T) - C_v(T) = \frac{A_0 T}{T_m} (C_p(T))^2 \quad (3.1.1)$$

burada T_m erime sıcaklığı, A_0 sabit olup $A_0 = 5.12 \times 10^{-3} \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ değerini alır. Teorik olarak katı maddenin sıcaklığa bağlı olarak genişlemesini ve bunun sonucunda elastik özelliklerde meydana gelen değişiklikleri göz ardı etmek normaldir; bu ihmal sadece küçük hatalar içerir. Genel olarak, ısı kapasitelerini incelemek için verilen teoriler iki ayrı bölüme ayrılır:

- (a) 3R gram molekül başına sabit bir ısı kapasitesini (Dulong- Petit yasası) veren klasik teori (burada R, gram molekül başına gaz sabiti)
- (b) kuantum teorisi, ilk örnek Einstein (1907) ve Debye (1912) daha sonra ise Cankurtaran ve Askerov (1996) tarafından daha eksiksiz bir biçimde verilmiştir.

Klasik teoriye göre, katılar stabil olduğu için, ısı enerjisi sadece düğüm noktalarındaki bir dizi titreşimli parçacığın enerjisidir ve ortalama değer ise $3N_A k_B T$ eşit olup bu Dulong- Petit yasası olarak bilinir (N_A Avagadro sayısı, k_B Boltzmann sabit ve T ise mutlak sıcaklıktır). Burada $C_v(T) = 3N_A k_B$ 'dir ve öz ısı sıcaklıktan bağımsız olur. Örneğin, Dulong- Petit yasasına göre sabit basınçta atomik ısı kapasitesi, çok sayıda maddeler için 6.2' ye eşittir. Yapılan deneysel çalışmalar sıcaklığın küçük değerlerinde ısı kapasitelerinin değiştiğini gösterdi. Yani küçük sıcaklıklarda Dulong- Petit yasası geçerli olmadığı görüldü. Bu problemin çözümü Einstein (1907) tarafından Planck'ın yeni kuantum teorisi, katı maddeyi oluşturan parçacıkların hareketine

uygulanan temel bir makalesinde verildi. Bu yaklaşımda, katıdaki bir parçacığın sabit bir frekansla titreştiği varsayılarak ve N sayıda parçacıklar için ısı kapasitesi aşağıdaki gibi alınır (Askerov ve Cankurtaran, 1994):

$$C_V(T) = 3sNk_0 \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\theta_E}{T}}}{e^{\frac{\theta_E}{T}} - 1} \quad (3.1.2)$$

burada $\theta_E = \frac{\hbar \omega_0}{k_0}$ Einstein sıcaklığıdır. Einstein yaklaşımına göre temel zorluklar şimdi

çözülmüş olmasına rağmen, parçacıkların hareketinin ayrıntıları genel şekilde dikkate alınmadığından deneyle çok uyumlu bir sonuç beklenemezdi. Özellikle, Einstein'ın öz ısı formülü düşük sıcaklıklarda oldukça tatmin edici sonuçlar vermedi. Einstein teorisinin de belirttiği gibi, katının titreşim frekansları hakkında daha fazla bilgi edinmek önemlidir. Dinamik olarak kararlı bir sistemin parçacıklarının hareketini, sistemin bağımsız salınımlarının süper pozisyonu olarak düşünülür. Teorinin yetersizliklerinin giderilmesi için bir sonraki adım Debye (1912) (McCombie, 1971) tarafından gerçekleştirilmiştir. Debye ortaya çıkan yetersizliği dikkate alarak tüm sıcaklık aralığında katıların ısı kapasitesi için aşağıdaki formülü vermiştir (Schwartz, 2014; Kittel, 1966):

$$C_V = 3k_0 N_A L(T, \theta) \quad (3.1.3)$$

$$L(T, \theta) = (n+1)D_n \left(1, \frac{\theta_D}{T} \right) - n \left(\frac{\theta_D}{T} \right) \frac{1}{e^{\theta_D/T} - 1} \quad (3.1.4)$$

burada θ_D Debye sıcaklığıdır ve katılar için $n=3-5$ değerleri arasında değişir. Denklem

(3.1.4)'de $D \left(\frac{\theta_D}{T} \right)$ Debye fonksiyonu olup genel şekilde aşağıdaki gibi tanımlanır (Schwartz, 2014; Kittel, 1966):

$$D_n(\beta, x) = \frac{n}{x^n} \int_0^x \frac{t^n}{(e^t - 1)^\beta} dt. \quad (3.1.5)$$

Literatürde Debye fonksiyonu üzerine çoklu sayıda çalışmalar vardır. Son zamanlarda yapılan (Guseinov ve Mamedov, 2007) çalışmasında n boyutlu Debye fonksiyonu için daha hassas sonuçlar veren formül oluşturulmuştur:

$$D_n(\beta, x) = \frac{n}{x^n} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^N (-1)^i F_i(-\beta) \frac{\gamma(n+1, (i+\beta)x)}{(i+\beta)^{n+1}} \quad (3.1.6)$$

burada $F_i(-\beta)$ binomial katsayılarıdır (Gradshtein ve Ryzhik, 1971).

$$F_m(n) = \begin{cases} \frac{n(n-1)\dots(n-m+1)}{m!} & \text{for integer } n \\ \frac{(-1)^m \Gamma(m-n)}{m! \Gamma(-n)} & \text{for noninteger } n \end{cases} \quad (3.1.7)$$

ve $\gamma(n+1, (i+\beta)x)$ ise tam olmayan gamma fonksiyonu olup

$$\gamma(\alpha, y) = \int_0^y t^{\alpha-1} e^{-t} dt \quad (3.1.8)$$

Şeklinde tanımlanır. Debye yaklaşımından alınan sonuçların deneysel sonuçlarla uyum içinde olduğu görüldü. Böylece katıların öz ısılarının sıcaklığa göre değişiminin doğası teorik olarak açıklanmış oldu. Bu yaklaşım kullanılarak literatürde çok sayıda katı için öz ısılarının sıcaklığa göre değişimi incelenerek teknolojiye uygulanmasına büyük katkı sağlanmıştır (Neumann, 2004; Grimvall, 1999; Pyda ve ark., 1998; Gaur ve ark., 1978; Lu ve ark., 2005; Magomedov, 2002; Avsec ve Marcic, 2002; Eymet ve ark., 2002; Windsor ve Sinclair, 1976; Abu-Eishah, 2001; Pathak ve Pandya, 1975).

Son olarak Askerov ve Cankurtaran (1996) çalışmasında Einstein ve Debye yöntemlerini birleştirerek katıların termodinamik özelliklerini incelemek için daha geniş kapsamlı yaklaşım olan Einstein-Debye yaklaşımını önerdiler. Bu yaklaşıma göre öz ısı kapasitesi aşağıdaki formüle göre hesaplanabilir:

$$C_V = 3N_A k_B M \left(\frac{\theta_D}{T}, \frac{\theta_E}{T} \right), \quad (3.1.9)$$

burada θ_E Einstein sıcaklığıdır ve $M \left(\frac{\theta_D}{T}, \frac{\theta_E}{T} \right)$ fonksiyonu ise aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$M\left(\frac{\theta_D}{T}, \frac{\theta_E}{T}\right) = L_V\left(\frac{\theta_D}{T}\right) + (s-1)A\left(\frac{\theta_E}{T}\right), \quad (3.1.10)$$

burada s düğüm noktasındaki atom sayısı ve $L_V\left(\frac{\theta_D}{T}\right)$ ve $A\left(\frac{\theta_E}{T}\right)$ fonksiyonları ise aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$A\left(\frac{\theta_E}{T}\right) = \left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\frac{\theta_E}{T}}}{\left(e^{\frac{\theta_E}{T}} - 1\right)^2} = \left[\frac{\theta_E}{2T} \frac{1}{\sinh\left(\frac{\theta_E}{2T}\right)} \right]^2 \quad (3.1.11)$$

ve

$$L_V\left(\frac{\theta_D}{T}\right) = (n+1)D_n\left(1, \frac{\theta_D}{T}\right) - \frac{\theta_D}{T} \frac{n}{e^{\frac{\theta_D}{T}} - 1}. \quad (3.1.12)$$

İncelemelerden görülür ki, Einstein-Debye yaklaşımına göre yapılan hesaplama sonuçları deneysel verilerle daha çok uyum içerisindedir. Literatürde Einstein-Debye yaklaşımına göre katıların termodinamik özelliklerinin incelenmesi ile ilgili az sayıda çalışma vardır. Önerilen tezde Einstein-Debye yaklaşımı dikkate alınarak bazı yarıiletkenlerin ısı kapasiteleri sıcaklığın geniş aralığında incelenecektir. (3.1.3) ve (3.1.9) formüllerinden görüldüğü gibi öz ısının hassas hesaplanması Debye fonksiyonu için oluşturulan analitik formüllerden alınan sonuçlara bağlıdır. Einstein-Debye yaklaşımı için kaynak oluşturulan formüllerin (Cankurtaran ve Askerov, 1996), Einstein ve Debye yaklaşımlarına göre arzu edilen hassaslıkta sonuçlar verdiği yapılan çalışmalardan görülmektedir. Bu formüller dikkate alınarak bu tezde *Si, Ge, GaAs, InP, InAs* ve *ZnO* yarıiletkenleri için sabit hacimde ve sabit basınçta ısı kapasiteleri C_V ve C_P hesaplanmıştır.

4.2. *Si, Ge* ve *GaAs* Yarıiletkenlerin C_V ve C_P Isı Kapasitelerinin Einstein-Debye Yaklaşımına Göre Hesaplanması

Si yarıiletkeni yer yüzeyinde bol miktarda bulunan elementlerdendir. Yarıiletken özelliğine sahip olduğundan diyot, transistör ve kayıt özelliğine sahip elektronik malzeme olarak bilgisayar ve elektronik teknolojinin önemli bir kaynağı olmuştur.

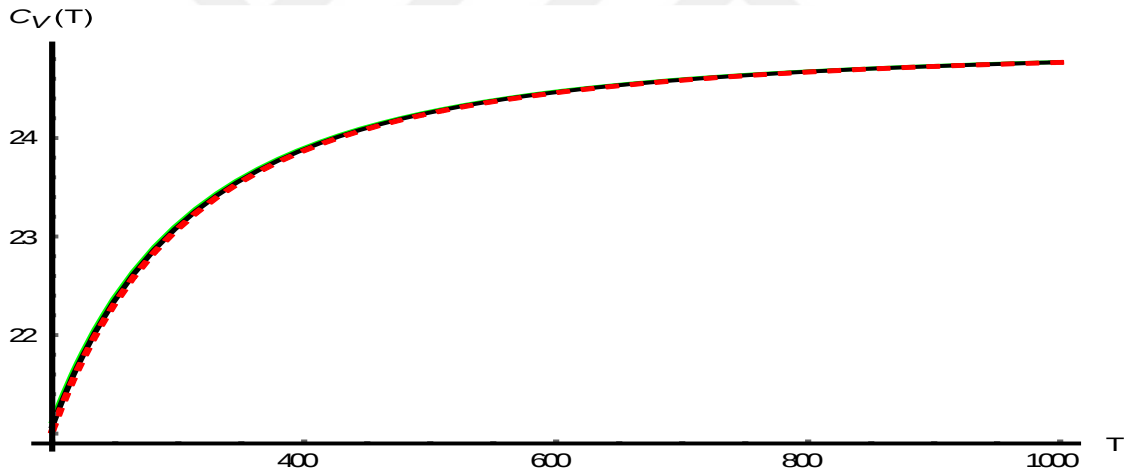
Özellikle bilgisayar yapımında yaygın olarak kullanılmaktadır. Ayrıca germanyum transistörler ve diyotlar uzun ömürlü olup düşük güç kaynakları olarak kullanılmaktadır. *GaAs* ise yüksek sıcaklıklarda yüksek verim göstermesinden dolayı cep telefonlarında güneş pillerinde yaygın olarak kullanılmaktadır.

Hesaplamalarımızda Mathematica 7.0 programlama dili kullanılarak (3.1.3)-(3.1.10) formülleri yardımıyla *Si, Ge* ve *GaAs* yarıiletkenlerinin $C_v(T)$ ve $C_p(T)$ öz ısı kapasitelerinin sıcaklığa göre değişimi Einstein-Debye yaklaşımı kullanılarak elde edilmiştir. Hesaplama sonuçları Çizelge 1-3 şeklinde verilmiştir. Ayrıca $C_v(T)$ ve $C_p(T)$ ısı kapasitelerinin sıcaklığa göre değişiminin karşılaştırmalı sonuçları $n = 2.9, 3.0$ ve 3.1 değerlerinde Şekil 1-3 de verilmiştir.

Çizelge 1. *Ge* yarıiletkeninin $C_v(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 374K$, $T_m = 1211K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$
200	21.1235	21.073	21.0256
220	21.7231	21.681	21.6397
240	22.1956	22.159	22.1241
260	22.5737	22.542	22.5117
280	22.8804	22.853	22.8261
300	23.1322	23.108	23.0844
320	23.3412	23.320	23.2988
340	23.5165	23.497	23.4787
360	23.6649	23.648	23.6309
380	23.7915	23.776	23.7609
400	23.9004	23.886	23.8726
420	23.9947	23.982	23.9694
440	24.0768	24.065	24.0537
460	24.1488	24.138	24.1276
480	24.2122	24.202	24.1927
500	24.2684	24.259	24.2504
520	24.3183	24.310	24.3017
540	24.363	24.355	24.3476
560	24.403	24.396	24.3887
580	24.4391	24.432	24.4257
600	24.4716	24.465	24.4591
620	24.5011	24.495	24.4894
640	24.5279	24.522	24.517
660	24.5524	24.547	24.5421
680	24.5747	24.570	24.5651
700	24.5952	24.591	24.5861
720	24.614	24.610	24.6055
740	24.6313	24.627	24.6233
760	24.6473	24.643	24.6397
780	24.6621	24.658	24.6549
800	24.6757	24.672	24.669

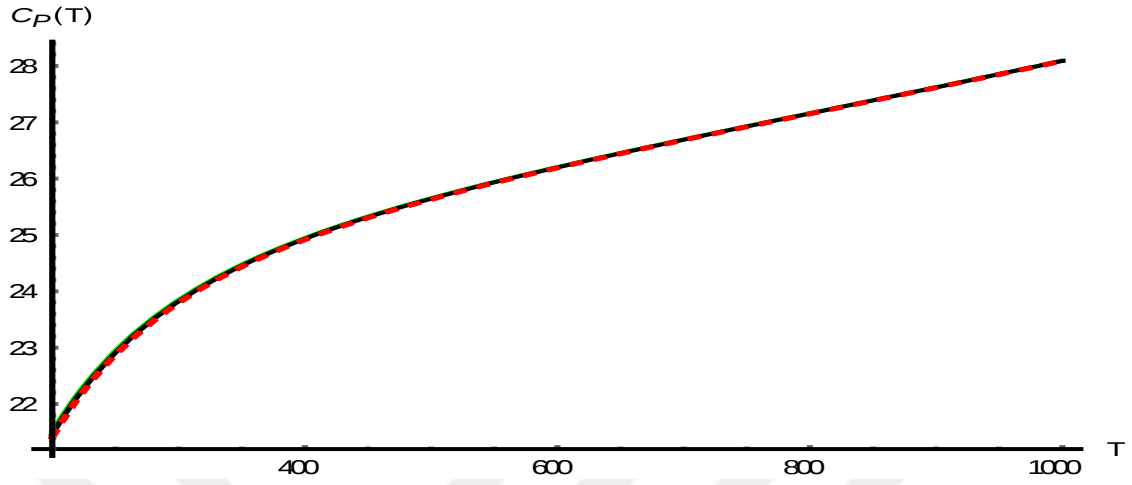
820	24.6884	24.685	24.682
840	24.7002	24.697	24.6942
860	24.7112	24.708	24.7055
880	24.7214	24.719	24.716
900	24.731	24.728	24.7259
920	24.7399	24.738	24.7351
940	24.7483	24.746	24.7437
960	24.7561	24.754	24.7518
980	24.7635	24.761	24.7594
1000	24.7704	24.769	24.7666
1020	24.7769	24.775	24.7733
1040	24.7831	24.781	24.7797
1060	24.7888	24.787	24.7856
1080	24.7943	24.793	24.7913
1100	24.7994	24.798	24.7966
1120	24.8043	24.803	24.8017
1140	24.8089	24.808	24.8064
1160	24.8132	24.812	24.811
1180	24.8174	24.816	24.8153
1200	24.8213	24.820	24.8193



Şekil 9. *Ge* yarıiletkeninin $C_V(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n=2.9$, kırmızı çizgi $n=3.0$, mavi çizgi ise $n=3.1$ değerlerine karşılık gelir)

Çizelge 2. Ge yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 374K$, $T_m = 1211K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$
200	21.5133	21.461	21.4117
220	22.1788	22.134	22.0919
240	22.7172	22.679	22.6422
260	23.1611	23.128	23.0957
280	23.5334	23.504	23.476
300	23.8509	23.825	23.8
320	24.1256	24.102	24.0803
340	24.3667	24.346	24.326
360	24.581	24.562	24.5443
380	24.7737	24.757	24.7404
400	24.949	24.934	24.9186
420	25.1099	25.096	25.0822
440	25.2591	25.246	25.2336
460	25.3985	25.387	25.375
480	25.5298	25.519	25.508
500	25.6542	25.644	25.6341
520	25.773	25.763	25.7543
540	25.887	25.878	25.8695
560	25.9969	25.989	25.9806
580	26.1034	26.096	26.0881
600	26.2071	26.200	26.1927
620	26.3083	26.301	26.2948
640	26.4075	26.401	26.3948
660	26.505	26.499	26.493
680	26.6012	26.595	26.5898
700	26.6962	26.691	26.6854
720	26.7903	26.785	26.7801
740	26.8837	26.879	26.874
760	26.9765	26.972	26.9674
780	27.069	27.065	27.0603
800	27.1612	27.157	27.153
820	27.2534	27.249	27.2455
840	27.3455	27.342	27.3381
860	27.4378	27.434	27.4307
880	27.5303	27.527	27.5235
900	27.6231	27.620	27.6166
920	27.7163	27.713	27.7101
940	27.8099	27.807	27.8041
960	27.9041	27.901	27.8986
980	27.999	27.996	27.9937
1000	28.0945	28.092	28.0895
1020	28.1907	28.188	28.186
1040	28.2878	28.286	28.2833
1060	28.3858	28.384	28.3815
1080	28.4847	28.483	28.4806
1100	28.5846	28.583	28.5808
1120	28.6855	28.684	28.6819
1140	28.7876	28.786	28.7842
1160	28.8908	28.889	28.8877
1180	28.9953	28.994	28.9924
1200	29.1011	29.100	29.0984

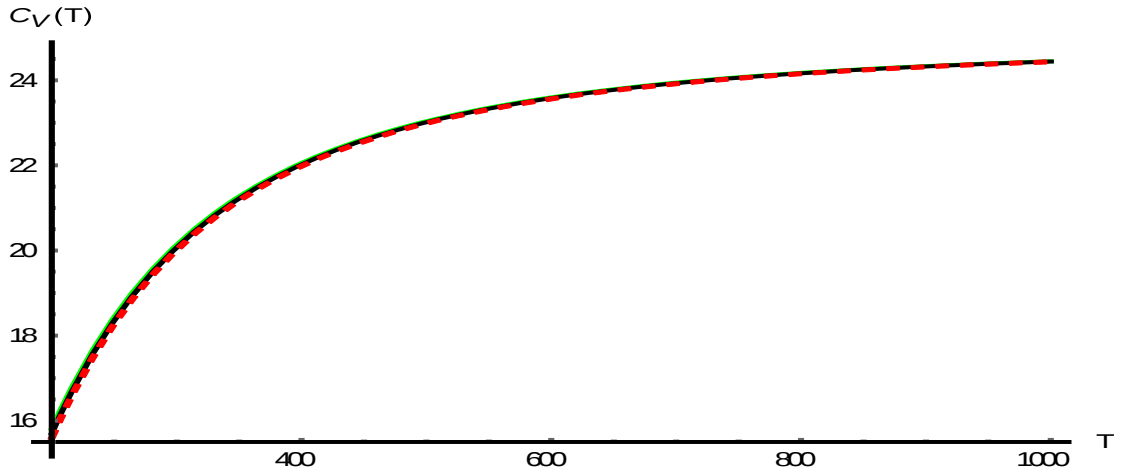


Şekil 10. *Ge* yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n=2.9$, kırmızı çizgi $n=3.0$, mavi çizgi ise $n=3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 3. *Si* yarıiletkeninin $C_v(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 640K$, $T_m = 1687K$)(Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$
200	15.8128	15.704	15.6006
220	17.0061	16.909	16.8169
240	18.0031	17.917	17.8344
260	18.8386	18.762	18.6879
280	19.542	19.473	19.407
300	20.1374	20.075	20.0161
320	20.6444	20.589	20.535
340	21.0787	21.028	20.9797
360	21.4528	21.407	21.3629
380	21.777	21.735	21.695
400	22.0594	22.021	21.9844
420	22.3067	22.272	22.2379
440	22.5242	22.492	22.4609
460	22.7166	22.687	22.6581
480	22.8873	22.860	22.8332
500	23.0395	23.014	22.9893
520	23.1757	23.152	23.129
540	23.298	23.276	23.2545
560	23.4083	23.388	23.3676
580	23.5079	23.489	23.4699
600	23.5983	23.580	23.5626
620	23.6806	23.663	23.647
640	23.7556	23.739	23.724

660	23.8241	23.809	23.7944
680	23.887	23.873	23.8589
700	23.9448	23.931	23.9182
720	23.998	23.985	23.9728
740	24.047	24.035	24.0232
760	24.0924	24.081	24.0698
780	24.1345	24.123	24.1129
800	24.1735	24.163	24.153
820	24.2098	24.200	24.1903
840	24.2436	24.234	24.225
860	24.2751	24.266	24.2573
880	24.3046	24.296	24.2876
900	24.3321	24.324	24.3159
920	24.3579	24.350	24.3424
940	24.3822	24.375	24.3673
960	24.4049	24.398	24.3906
980	24.4263	24.419	24.4126
1000	24.4465	24.440	24.4333
1020	24.4654	24.459	24.4528
1040	24.4834	24.477	24.4712
1060	24.5003	24.494	24.4886
1080	24.5163	24.511	24.5051
1100	24.5315	24.526	24.5207
1120	24.5459	24.541	24.5354
1140	24.5595	24.554	24.5494
1160	24.5724	24.568	24.5627
1180	24.5847	24.580	24.5754
1200	24.5964	24.592	24.5874

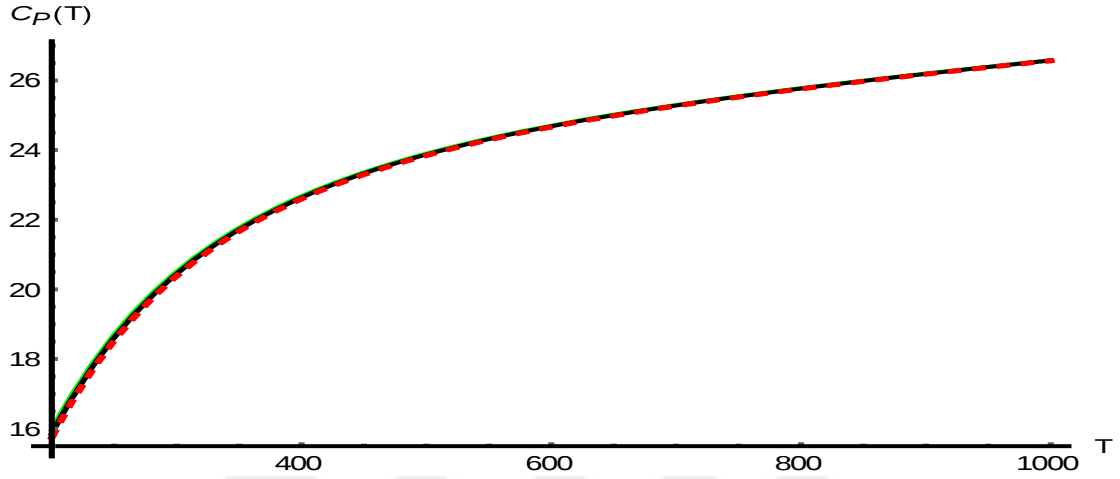


Şekil 11. Si yarıiletkeninin $C_v(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n=2.9$, kırmızı çizgi $n=3.0$, mavi çizgi ise $n=3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 4. Si yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 640K$, $T_m = 1687K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$
200	15.9669	15.856	15.7506
220	17.2029	17.104	17.0093
240	18.2446	18.156	18.0713
260	19.1261	19.047	18.9708
280	19.8764	19.805	19.7367
300	20.5193	20.455	20.3933
320	21.074	21.016	20.96
340	21.5563	21.503	21.4527
360	21.9786	21.930	21.8841
380	22.3509	22.307	22.2645
400	22.6815	22.641	22.6022
420	22.977	22.940	22.904
440	23.2428	23.208	23.1754
460	23.4835	23.452	23.4209
480	23.7025	23.673	23.6445
500	23.9031	23.876	23.849
520	24.0878	24.062	24.0373
540	24.2587	24.235	24.2115
560	24.4176	24.395	24.3733
580	24.5661	24.545	24.5245
600	24.7055	24.685	24.6662
620	24.8368	24.818	24.7998
640	24.961	24.943	24.9261
660	25.0791	25.062	25.046
680	25.1916	25.176	25.1602
700	25.2992	25.284	25.2695
720	25.4025	25.388	25.3742
740	25.5019	25.488	25.475
760	25.5979	25.585	25.5722
780	25.6908	25.678	25.6663
800	25.781	25.769	25.7576
820	25.8687	25.857	25.8463
840	25.9542	25.943	25.9327
860	26.0377	26.027	26.0172
880	26.1195	26.109	26.0998
900	26.1998	26.190	26.1808
920	26.2786	26.269	26.2604
940	26.3562	26.347	26.3386
960	26.4326	26.424	26.4157
980	26.5081	26.500	26.4918
1000	26.5827	26.575	26.567
1020	26.6566	26.649	26.6414
1040	26.7297	26.722	26.7151
1060	26.8023	26.795	26.7882
1080	26.8744	26.867	26.8608
1100	26.9461	26.939	26.9329

1120	27.0174	27.011	27.0046
1140	27.0884	27.082	27.076
1160	27.1591	27.153	27.1472
1180	27.2297	27.224	27.2181
1200	27.3002	27.294	27.2889

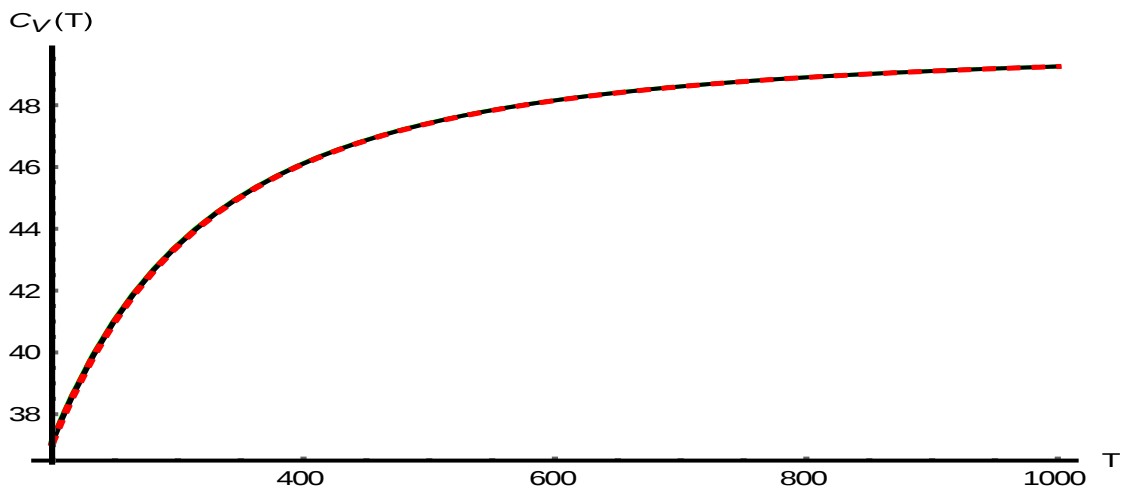


Şekil 12. *Si* yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 5. *GaAs* yarıiletkeninin $C_v(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 360K$, $\theta_E = 480K$, $T_m = 1513K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$
200	37.1387	37.092	37.0468
220	38.9616	38.922	38.8836
240	40.4429	40.409	40.376
260	41.657	41.627	41.5991
280	42.661	42.635	42.6104
300	43.4985	43.476	43.454
320	44.203	44.183	44.1635
340	44.8003	44.782	44.7651
360	45.3104	45.294	45.2788
380	45.7491	45.735	45.7207
400	46.1289	46.116	46.1031
420	46.4596	46.448	46.4362
440	46.7492	46.738	46.7278
460	47.0042	46.994	46.9845
480	47.2297	47.220	47.2116
500	47.43	47.422	47.4134
520	47.6088	47.601	47.5934
540	47.7689	47.762	47.7547
560	47.9129	47.906	47.8997

580	48.0428	48.037	48.0305
600	48.1604	48.155	48.1489
620	48.2672	48.262	48.2564
640	48.3645	48.359	48.3544
660	48.4532	48.448	48.4438
680	48.5345	48.530	48.5256
700	48.6091	48.605	48.6008
720	48.6777	48.674	48.6699
740	48.7409	48.737	48.7336
760	48.7994	48.796	48.7924
780	48.8534	48.850	48.8469
800	48.9036	48.900	48.8974
820	48.9501	48.947	48.9443
840	48.9935	48.991	48.988
860	49.0339	49.031	49.0287
880	49.0716	49.069	49.0667
900	49.1068	49.105	49.1022
920	49.1398	49.138	49.1355
940	49.1708	49.169	49.1667
960	49.1998	49.198	49.1959
980	49.2271	49.225	49.2235
1000	49.2528	49.251	49.2494
1020	49.277	49.275	49.2738
1040	49.2998	49.298	49.2968
1060	49.3213	49.320	49.3185
1080	49.3417	49.340	49.3391
1100	49.3609	49.360	49.3585
1120	49.3792	49.378	49.3769
1140	49.3965	49.395	49.3944
1160	49.4128	49.412	49.411
1180	49.4284	49.428	49.4267
1200	49.4432	49.442	49.4416

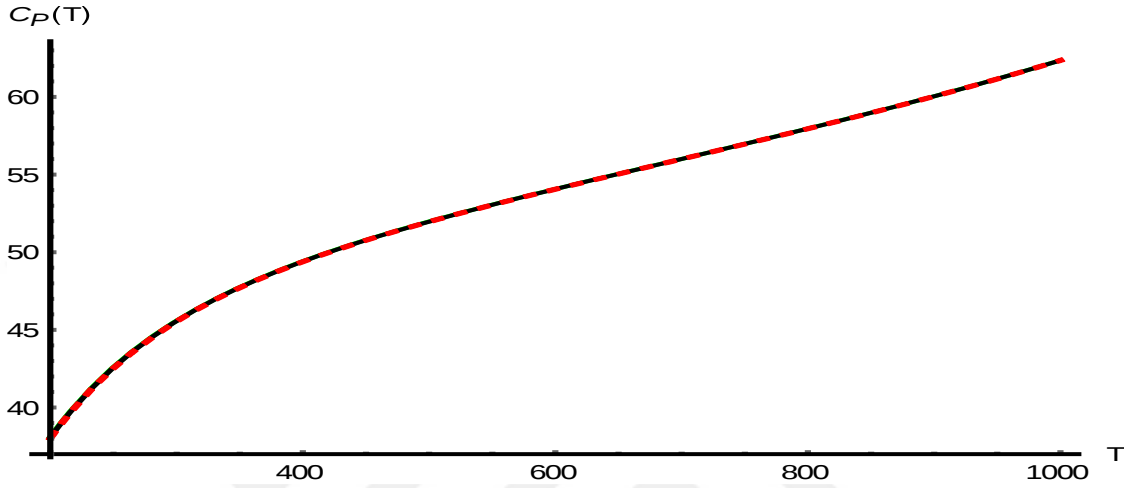


Şekil 13. *GaAs* yarıiletkeninin $C_V(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 6. *GaAs* yarıiletkeninin C_p (T) sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 360K$, $\theta_E = 480K$, $T_m = 1513K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$	(Boussaid ve ark., 2019)
200	38.1182	38.069	38.0214	
220	40.1574	40.115	40.0745	
240	41.8605	41.824	41.7887	
260	43.3002	43.268	43.2375	
280	44.5328	44.505	44.4776	
300	45.6014	45.576	45.5523	46.71
320	46.5393	46.517	46.4954	
340	47.3722	47.352	47.3327	
360	48.1203	48.102	48.0845	47.86
380	48.7995	48.783	48.7669	
400	49.4223	49.407	49.3925	
420	49.9988	49.985	49.9715	
440	50.5372	50.524	50.512	
460	51.0442	51.032	51.0208	
480	51.5251	51.514	51.5035	
500	51.9846	51.974	51.9644	51.77
520	52.4264	52.417	52.4076	
540	52.8538	52.845	52.8361	
560	53.2693	53.261	53.2527	
580	53.6755	53.668	53.6598	
600	54.0742	54.067	54.0594	55.14
620	54.4673	54.460	54.4533	
640	54.8562	54.850	54.843	
660	55.2425	55.236	55.2299	
680	55.6273	55.621	55.6154	
700	56.0118	56.006	56.0004	57.18
720	56.3969	56.391	56.3861	
740	56.7838	56.779	56.7735	
760	57.1733	57.168	57.1635	
780	57.5663	57.562	57.5569	
800	57.9636	57.959	57.9547	
820	58.3661	58.362	58.3575	
840	58.7746	58.770	58.7664	
860	59.1899	59.186	59.182	
880	59.6129	59.609	59.6053	
900	60.0443	60.041	60.037	
920	60.4851	60.482	60.4782	
940	60.9363	60.933	60.9296	
960	61.3987	61.396	61.3923	
980	61.8735	61.870	61.8673	
1000	62.3617	62.359	62.3558	
1020	62.8646	62.862	62.859	
1040	63.3835	63.381	63.3781	
1060	63.9198	63.917	63.9147	
1080	64.4752	64.473	64.4704	

1100	65.0515	65.049	65.0469	
1120	65.6507	65.649	65.6463	
1140	66.275	66.273	66.2709	
1160	66.9272	66.925	66.9233	
1180	67.6103	67.609	67.6066	
1200	68.3277	68.326	68.3242	



Şekil 14. *GaAs* yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitelerinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

4.3. *InP*, *InAs* ve *ZnO* Yarıiletkenlerinin C_v ve C_p Isı Kapasitelerinin Einstein-Debye Yaklaşımına Göre Hesaplanması

In önemli metallere biri olup değişik alaşımları ve bileşikleri teknolojinin farklı alanlarında yaygın kullanılmaktadır. Bunlara örnek olarak nükleer reaktörlerde kontrol çubuğu, fotoileticiler, kızılötesi detektörlerde, LCD ekranlar ve başka elektronik cihazlar gösterilebilir. *ZnO* doğal n tipi yarıiletken ve geniş bant aralığına sahip olduğundan ince film transistörlerinde ve ışık yayan diyotlarda yaygın olarak kullanılmaktadır.

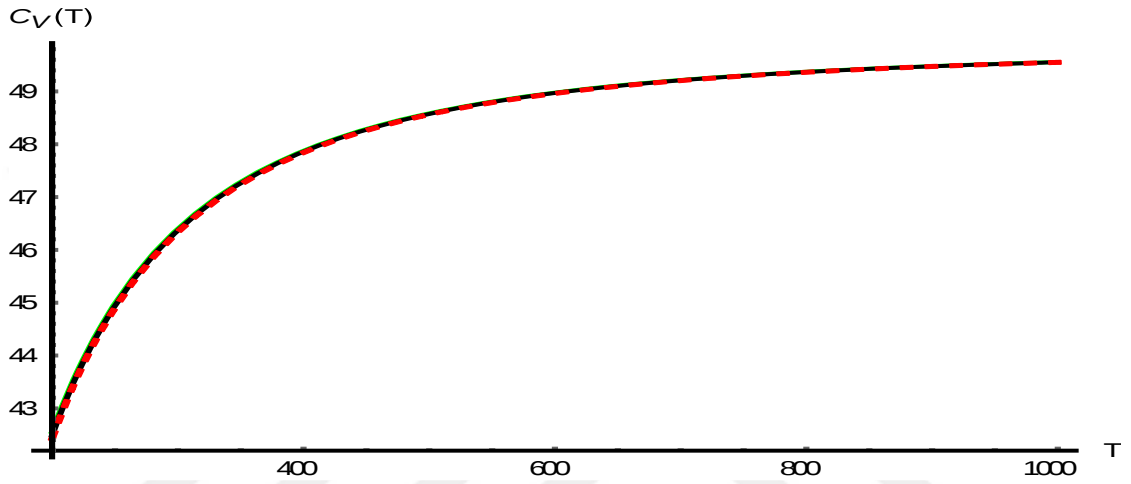
Bir önceki bölümde olduğu gibi, Einstein-Debye yaklaşımından elde edilen (3.1.3)- (3.1.10) formülleri kullanılarak *InP*, *InAs* ve *ZnO* yarıiletkenlerinin $C_v(T)$ ve $C_p(T)$ ısı kapasitelerinin sıcaklığa göre değişimi Mathematica 7.0 programı yardımıyla

hesaplandı. Hesaplama sonuçları Çizelge 1-3 de verilmiştir. Ayrıca $C_v(T)$ ve $C_p(T)$ ısı kapasitelerinin sıcaklığa göre değişiminin karşılaştırmalı sonuçları $n = 2.9, 3.0$ ve 3.1 değerlerinde Şekil 1-3 de verilmiştir.

Çizelge 7. InP yarıiletkeninin $C_v(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 425K$, $\theta_E = 229.4K$, $T_m = 1333K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$
200	42.5493	42.4877	42.4287
220	43.6989	43.6462	43.5956
240	44.6054	44.5598	44.516
260	45.3309	45.2912	45.2531
280	45.9195	45.8847	45.8512
300	46.403	46.3722	46.3426
320	46.8045	46.7771	46.7508
340	47.1414	47.1169	47.0934
360	47.4266	47.4045	47.3834
380	47.67	47.6501	47.631
400	47.8794	47.8613	47.8439
420	48.0607	48.0442	48.0284
440	48.2187	48.2036	48.1891
460	48.3572	48.3433	48.33
480	48.4792	48.4665	48.4542
500	48.5873	48.5756	48.5642
520	48.6835	48.6726	48.6621
540	48.7694	48.7593	48.7496
560	48.8465	48.8371	48.828
580	48.9159	48.9072	48.8987
600	48.9787	48.9704	48.9625
620	49.0355	49.0278	49.0204
640	49.0872	49.08	49.073
660	49.1343	49.1275	49.121
680	49.1774	49.171	49.1649
700	49.2169	49.2109	49.2051
720	49.2532	49.2475	49.242
740	49.2866	49.2812	49.2761
760	49.3174	49.3124	49.3075
780	49.3459	49.3412	49.3365
800	49.3724	49.3678	49.3634
820	49.3969	49.3926	49.3884
840	49.4197	49.4156	49.4117
860	49.4409	49.4371	49.4333
880	49.4608	49.4571	49.4535
900	49.4793	49.4758	49.4724
920	49.4966	49.4933	49.49
940	49.5128	49.5097	49.5066
960	49.5281	49.5251	49.5221
980	49.5424	49.5395	49.5367
1000	49.5558	49.5531	49.5504
1020	49.5685	49.5659	49.5634

1040	49.5804	49.578	49.5756
1060	49.5917	49.5894	49.5871
1080	49.6024	49.6002	49.598
1100	49.6124	49.6103	49.6082
1120	49.622	49.62	49.618
1140	49.631	49.6291	49.6272
1160	49.6395	49.6378	49.636
1180	49.6477	49.646	49.6443
1200	49.6554	49.6538	49.6522

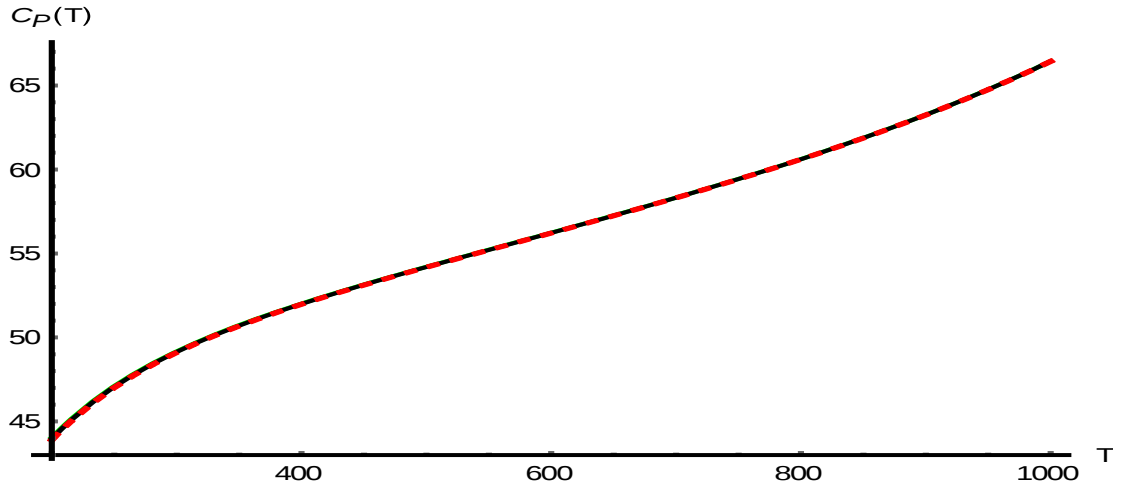


Şekil 15. *InP* yarıiletkeninin $C_V(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 8. *InP* yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 425K$, $\theta_E = 229.4K$, $T_m = 1333K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$	(Boussaid ve ark., 2019)
200	44.0329	43.9669	43.9036	
220	45.4366	45.3795	45.3247	
240	46.5993	46.5495	46.5016	
260	47.5832	47.5393	47.4972	
280	48.4324	48.3935	48.3562	
300	49.179	49.1443	49.1109	48.11
320	49.8465	49.8153	49.7854	
340	50.4526	50.4244	50.3973	
360	51.0105	50.9849	50.9603	50.21
380	51.5306	51.5072	51.4847	
400	52.0208	51.9993	51.9787	53.46
420	52.4876	52.4678	52.4487	

440	52.936	52.9176	52.9	
460	53.3701	53.3531	53.3367	
480	53.7935	53.7776	53.7623	
500	54.2088	54.1939	54.1797	54.28
520	54.6185	54.6046	54.5912	
540	55.0248	55.0117	54.9991	
560	55.4293	55.4169	55.405	
580	55.8336	55.8219	55.8107	
600	56.2392	56.2281	56.2175	57.31
620	56.6474	56.6368	56.6267	
640	57.0593	57.0493	57.0396	
660	57.4761	57.4665	57.4573	
680	57.8988	57.8897	57.8809	
700	58.3286	58.3199	58.3115	
720	58.7665	58.7581	58.75	
740	59.2135	59.2054	59.1976	
760	59.6706	59.6629	59.6554	
780	60.1391	60.1316	60.1244	
800	60.62	60.6128	60.6058	
820	61.1147	61.1077	61.1009	
840	61.6243	61.6175	61.611	
860	62.1504	62.1438	62.1374	
880	62.6944	62.6881	62.6819	
900	63.2583	63.2521	63.246	
920	63.8437	63.8377	63.8318	
940	64.4529	64.447	64.4413	
960	65.0884	65.0826	65.077	
980	65.7528	65.7472	65.7417	
1000	66.4495	66.4439	66.4385	
1020	67.182	67.1766	67.1713	
1040	67.9549	67.9496	67.9443	
1060	68.7734	68.7682	68.7629	
1080	69.6438	69.6386	69.6334	
1100	70.5738	70.5687	70.5635	
1120	71.5732	71.5681	71.5629	
1140	72.6543	72.6491	72.6439	
1160	73.8332	73.828	73.8228	
1180	75.1318	75.1265	75.1212	
1200	76.5805	76.5751	76.5696	

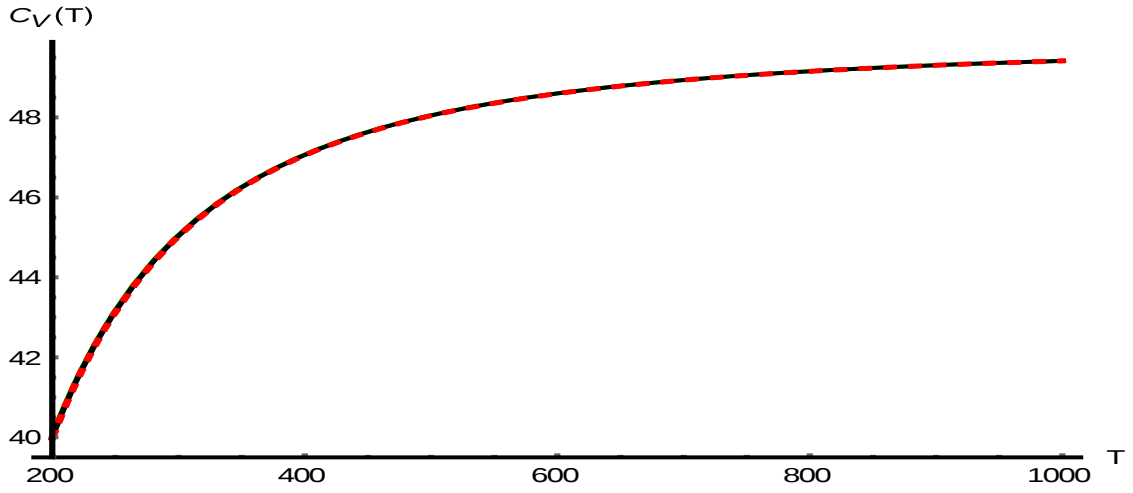


Şekil 16. *InP* yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 9. *InAs* yarıiletkeninin $C_v(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 280K$, $\theta_E = 425K$, $T_m = 1215K$)(Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$	(Boussaid ve ark., 2019)
200	40.0395	40.009	39.9804	
220	41.5042	41.479	41.4545	
240	42.6794	42.658	42.6371	
260	43.633	43.614	43.5966	
280	44.4151	44.399	44.3836	
300	45.0633	45.049	45.0356	46.57
320	45.6055	45.593	45.5811	
340	46.0631	46.052	46.0414	
360	46.4525	46.443	46.4331	
380	46.7863	46.777	46.7688	47.01
400	47.0744	47.066	47.0586	
420	47.3247	47.317	47.3104	
440	47.5434	47.537	47.5304	
460	47.7356	47.730	47.7237	47.89
480	47.9053	47.900	47.8944	
500	48.0558	48.051	48.0458	

520	48.19	48.185	48.1808	
540	48.31	48.306	48.3015	
560	48.4178	48.414	48.41	
580	48.515	48.511	48.5078	
600	48.6029	48.600	48.5962	
620	48.6826	48.679	48.6764	
640	48.7552	48.752	48.7494	
660	48.8214	48.819	48.816	49.21
680	48.8819	48.879	48.8769	
700	48.9374	48.935	48.9328	
720	48.9885	48.986	48.9842	
740	49.0355	49.034	49.0315	
760	49.0789	49.077	49.0752	
780	49.119	49.117	49.1157	
800	49.1562	49.155	49.1531	
820	49.1908	49.189	49.1879	
840	49.2229	49.222	49.2203	
860	49.2528	49.252	49.2504	
880	49.2807	49.280	49.2786	
900	49.3068	49.306	49.3049	
920	49.3312	49.330	49.3295	
940	49.354	49.353	49.3525	
960	49.3754	49.375	49.3741	
980	49.3955	49.395	49.3944	
1000	49.4144	49.414	49.4135	
1020	49.4322	49.432	49.4315	
1040	49.449	49.449	49.4485	
1060	49.4648	49.465	49.4645	
1080	49.4797	49.480	49.4796	
1100	49.4938	49.494	49.4939	
1120	49.5071	49.507	49.5074	
1140	49.5198	49.520	49.5202	
1160	49.5317	49.532	49.5323	
1180	49.543	49.544	49.5438	
1200	49.5538	49.554	49.5547	

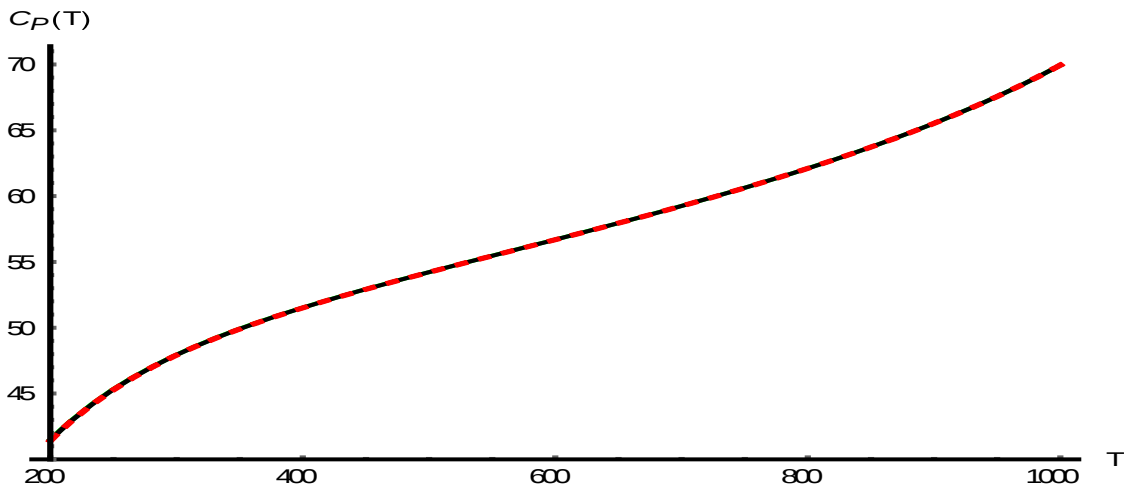


Şekil 17. *InAs* yarıiletkeninin $C_V(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 10. *InAs* yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 280K$, $\theta_E = 425K$, $T_m = 1215K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$	(Boussaid ve ark., 2019)
200	41.4842	41.452	41.4207	
220	43.23	43.202	43.176	
240	44.6915	44.668	44.6451	
260	45.9358	45.915	45.8955	
280	47.0128	46.995	46.9773	
300	47.9598	47.944	47.9283	47.95
320	48.8049	48.791	48.7768	
340	49.5699	49.557	49.5446	
360	50.2714	50.260	50.2485	49.38
380	50.9224	50.912	50.9016	
400	51.5333	51.524	51.5143	
420	52.1124	52.103	52.0949	
440	52.6662	52.658	52.6501	
460	53.2005	53.193	53.1855	52.75
480	53.7196	53.713	53.7057	
500	54.2275	54.221	54.2145	
520	54.7274	54.721	54.7153	
540	55.2222	55.216	55.2109	
560	55.7144	55.709	55.7037	56.22
580	56.2061	56.201	56.1961	
600	56.6995	56.695	56.6901	
620	57.1964	57.192	57.1876	

640	57.6986	57.694	57.6902	
660	58.2078	58.204	58.1999	58.41
680	58.7256	58.722	58.7181	
700	59.2537	59.250	59.2467	
720	59.7938	59.791	59.7872	
740	60.3477	60.345	60.3414	
760	60.9171	60.914	60.9111	
780	61.504	61.501	61.4984	
800	62.1106	62.108	62.1053	
820	62.739	62.737	62.734	
840	63.392	63.390	63.3873	
860	64.0723	64.070	64.0679	
880	64.7832	64.781	64.7791	
900	65.5285	65.527	65.5247	
920	66.3125	66.311	66.3091	
940	67.1405	67.139	67.1374	
960	68.0186	68.017	68.0158	
980	68.9544	68.953	68.9519	
1000	69.9572	69.956	69.955	
1020	71.0387	71.038	71.0369	
1040	72.2143	72.214	72.2129	
1060	73.5043	73.504	73.5033	
1080	74.9367	74.937	74.9362	
1100	76.5522	76.553	76.5523	
1120	78.4136	78.414	78.4144	
1140	80.6265	80.628	80.6282	
1160	83.3961	83.398	83.3991	
1180	87.2405	87.244	87.2459	
1200	95.3146	95.330	95.3378	

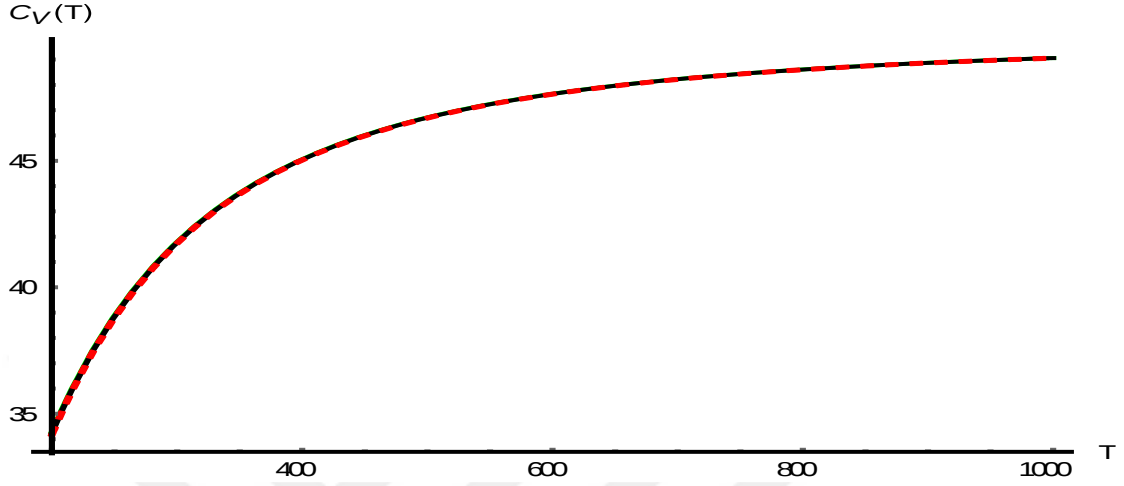


Şekil 18. *InAs* yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 11. ZnO yarıiletkeninin $C_v(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 400K$, $\theta_E = 554K$, $T_m = 2242K$) (Boussaid ve ark., 2019)

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$	(Boussaid ve ark., 2019)
200	34.2943	34.238	34.1849	
220	36.393	36.345	36.2995	
240	38.1303	38.089	38.0498	
260	39.5757	39.540	39.5057	
280	40.7856	40.754	40.7243	
300	41.805	41.777	41.7509	42.31
320	42.6696	42.645	42.6216	
340	43.4078	43.386	43.3649	
360	44.042	44.022	44.0035	44.61
380	44.5903	44.573	44.5555	
400	45.0669	45.051	45.0354	
420	45.4836	45.469	45.4548	
440	45.8496	45.836	45.8233	
460	46.1728	46.160	46.1486	47.11
480	46.4593	46.448	46.4371	
500	46.7145	46.704	46.694	
520	46.9426	46.933	46.9236	
540	47.1474	47.138	47.1297	
560	47.3317	47.323	47.3153	47.84
580	47.4983	47.491	47.4831	
600	47.6493	47.642	47.6351	
620	47.7866	47.780	47.7732	
640	47.9118	47.905	47.8992	
660	48.0261	48.020	48.0144	46.78
680	48.1309	48.125	48.1199	
700	48.2272	48.222	48.2168	
720	48.3158	48.311	48.306	
740	48.3975	48.393	48.3883	
760	48.4731	48.469	48.4643	
780	48.5431	48.539	48.5348	
800	48.608	48.604	48.6002	
820	48.6683	48.665	48.6609	
840	48.7245	48.721	48.7175	
860	48.7769	48.774	48.7703	
880	48.8259	48.823	48.8196	
900	48.8717	48.869	48.8657	
920	48.9145	48.912	48.9088	
940	48.9547	48.952	48.9493	
960	48.9925	48.990	48.9874	
980	49.028	49.026	49.0232	
1000	49.0615	49.059	49.0569	
1020	49.093	49.091	49.0886	
1040	49.1227	49.121	49.1186	
1060	49.1508	49.149	49.1469	
1080	49.1773	49.175	49.1736	
1100	49.2025	49.201	49.1989	
1120	49.2263	49.225	49.2229	
1140	49.2488	49.247	49.2457	

1160	49.2702	49.269	49.2673	
1180	49.2906	49.289	49.2878	
1200	49.3099	49.309	49.3073	

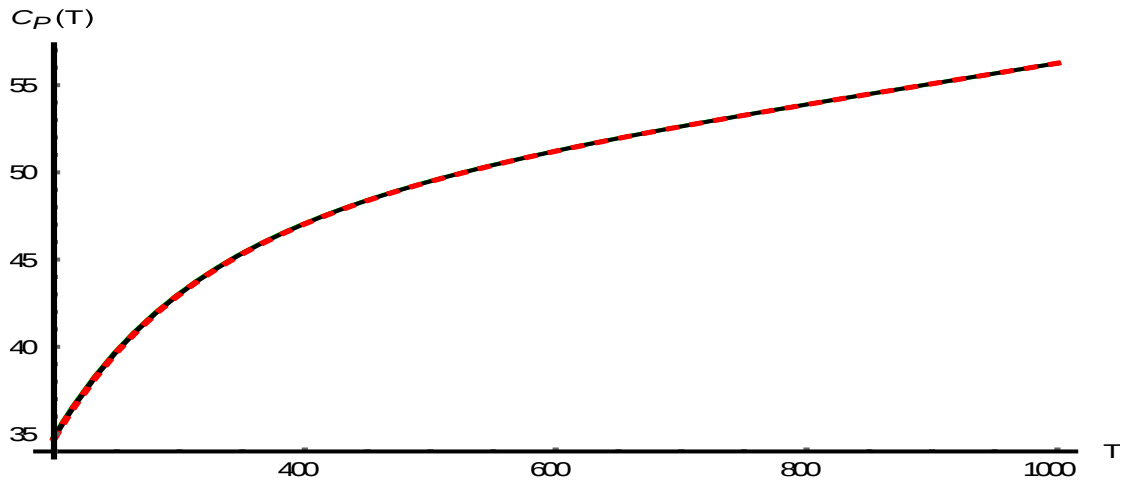


Şekil 19. ZnO yarıiletkeninin $C_V(T)$ sabit hacimde ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

Çizelge 12. ZnO yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi ($\theta_D = 400K$, $\theta_E = 554K$, $T_m = 2242K$) (Boussaid ve ark., 2019).

T	$n = 2.9$	$n = 3.0$	$n = 3.1$	(Boussaid ve ark., 2019)
200	34.8467	34.789	34.7338	
220	37.0811	37.032	36.9841	
240	38.9589	38.916	38.8749	
260	40.5481	40.511	40.4746	
280	41.904	41.871	41.8392	
300	43.0709	43.042	43.0135	42.55
320	44.0842	44.058	44.0329	
340	44.972	44.948	44.9259	
360	45.7566	45.735	45.7149	44.58
380	46.4558	46.437	46.418	
400	47.0841	47.067	47.0496	
420	47.6531	47.637	47.6215	
440	48.1723	48.157	48.1432	
460	48.6493	48.636	48.6224	49.13
480	49.0906	49.078	49.0657	
500	49.5015	49.490	49.4784	
520	49.8864	49.875	49.8649	
540	50.2489	50.239	50.2288	
560	50.5923	50.583	50.5735	52.04
580	50.9191	50.910	50.9015	

600	51.2316	51.223	51.215	
620	51.5318	51.524	51.5162	
640	51.8214	51.814	51.8066	
660	52.1016	52.095	52.0877	52.86
680	52.3739	52.367	52.3607	
700	52.6394	52.633	52.6268	
720	52.8989	52.893	52.887	
740	53.1534	53.148	53.1421	
760	53.4036	53.398	53.3928	54.17
780	53.6501	53.645	53.6399	
800	53.8937	53.889	53.8839	
820	54.1347	54.130	54.1254	
840	54.3738	54.369	54.3649	
860	54.6114	54.607	54.6029	
880	54.8478	54.844	54.8397	
900	55.0835	55.080	55.0757	
920	55.3188	55.315	55.3114	
940	55.554	55.550	55.5469	
960	55.7894	55.786	55.7826	
980	56.0253	56.022	56.0188	
1000	56.262	56.259	56.2558	
1020	56.4997	56.497	56.4938	
1040	56.7387	56.736	56.733	
1060	56.9792	56.976	56.9738	
1080	57.2214	57.219	57.2162	
1100	57.4655	57.463	57.4606	
1120	57.7119	57.710	57.7072	
1140	57.9606	57.958	57.9561	
1160	58.2118	58.210	58.2076	
1180	58.4659	58.464	58.4619	
1200	58.723	58.721	58.7192	



Şekil 20. *ZnO* yarıiletkeninin $C_p(T)$ sabit basınçta ısı kapasitesinin n farklı değerlerinde sıcaklığa göre değişmesi (siyah çizgi $n = 2.9$, kırmızı çizgi $n = 3.0$, mavi çizgi ise $n = 3.1$ değerlerine karşılık gelir).

5. TARTIŞMA ve SONUÇ

Malzemelerin termodinamik özellikleri, özellikle ısı kapasitesi için Debye fonksiyonlarının belirlenmesi, birçok yüksek kaliteli cihazın temelini oluşturan yapı malzemeleri olarak kullanılan katıların pratik uygulamalarında çok önemlidir. Özellikle de tüm teknolojik cihazların temelini oluşturan yarıiletkenlerin termodinamik özelliklerinin hassaslıkla incelenmesi çok önemlidir. Bu çalışmada yarıiletkenlerin fiziksel özelliklerinden olan öz ısı kapasitelerinin (sabit hacimde ve sabit basınçta) sıcaklığa göre değişmesi incelenmiştir. Bu yöntemlerden biriside son dönemlerde güncel çalışma konusu olan Einstein-Debye yaklaşımıdır. Önerilen tezde bu yaklaşım kullanılarak *Si, Ge, GaAs, InP, InAs ve ZnO* yarıiletkenlerinin ısı kapasitelerinin sıcaklığa göre değişmesi incelenmiştir. Hesaplamaların hassaslığı, Einstein-Debye yaklaşımında ortaya çıkan n boyutlu tamsayı ve tamsayı olmayan Debye fonksiyonlarının hassas, hızlı ve yeterli doğrulukta hesaplanmasına bağlıdır. Çalışmada, n 'nin tamsayı ve tamsayı olmayan değerlerinde Debye fonksiyonlarının hesaplanması için literatürde önerilen yöntem kullanılmıştır. Böylelikle Einstein-Debye yaklaşımına göre yarıiletkenlerin termal özellikleri daha hassas hesaplanabilmektedir.

Bu çalışmada, Debye fonksiyonları için geliştirilen formülün bir uygulaması olarak, *Si, Ge, GaAs, InP, InAs ve ZnO* kristallerinin C_p ve C_v ısı kapasitelerinin sıcaklığa göre değişmesi incelenmiştir. Sayısal sonuçların karşılaştırılması sonucunda, formülün deneysel sonuçlarla iyi bir uyum içinde olduğu açıkça görülmektedir. Literatürde genellikle adı geçen yarıiletkenlerin fiziksel özellikleri $n=3$ alınarak hesaplamalar yapılmıştır. Bu çalışmada $n=3$ sayısının civarında olan $n=2.9$ ve $n=3.1$ durumları içinde öz ısı miktarlarının sıcaklığa göre değişmesini inceledik ve sıcaklığın tüm aralığında önerilen yöntemin geçerli olduğu görüldü. n 'nin tamsayı ve tamsayı olmayan değerlerinde Debye fonksiyonları için (3.1.6) denklemi kullanılarak *Si, Ge, GaAs, InP, InAs ve ZnO* kristalleri için öz ısı kapasitelerinin (C_p ve C_v) hesaplamaları yapılmıştır. n 'nin tamsayı ve tamsayı olmayan değerleri için elde edilen sonuçları Çizelge (1-12) ve Şekil (6-17) olarak verilmiştir. Isı kapasitelerinin, C_p ve C_v 'nin sıcaklığa bağımlılığının hesaplama sonuçları ve deneysel veriler ile karşılaştırıldığında $n=2.9$ değerindeki sonuçların deneysel sonuçlara daha yakın olduğu görülmektedir.

Çizelge (6-17)'de *Si, Ge, GaAs, InP, InAs* ve *ZnO* için sonuçlar $n=3$, $n=2.9$ ve $n=3.1$ değerlerinde verilmiştir. Çizelgelerden görüldüğü gibi alınan sonuçlardan $n=2.9$ değerindeki hesaplama sonuçları deneysel sonuçlara daha yakındır. Ayrıca Şekil (6-17) 'den görüldüğü gibi n sayısının $n=3$, $n=2.9$ ve $n=3.1$ değerlerindeki sonuçların birbirine yakın olması da önerilen yöntemin yarıiletkenlerin fiziksel özelliklerinin hesaplanması için uygulanabilirliğini göstermektedir. Bu da bize önerilen yöntemi kullanarak yarıiletkenlerin ısı kapasitelerinin tüm sıcaklık aralıklarında daha hassas hesaplamaya olanak sağlayacaktır. Ayrıca bu tezden alınan sonuçlar ile *Si, Ge, GaAs, InP, InAs* ve *ZnO* yarıiletkenlerinin ve diğer yarıiletkenlerin de ısı kapasitesinden yola çıkarak diğer termodinamik özelliklerinin de belirlenebilmesi sağlanacaktır.

6. KAYNAKLAR

Abeles, B. (1963). Lattice thermal conductivity of disordered semiconductor alloys at high temperatures. *Physical Review*, 131(5), 1906

<https://doi.org/10.1103/PhysRev.131.1906>

Abu-Eishah, S. I. (2001). Correlations for the thermal conductivity of metals as a function of temperature. *International Journal of Thermophysics*, 22(6), 1855-1868
<https://doi.org/10.1023/A:1013155404019>.

Anderson, J.C. (1970) Conduction in thin semiconductor films, *Advances in Physics*, 19:79, 311-338, <http://doi.org/10.1080/00018737000101121>

Askerov, B. M., & Cankurtaran, M. (1994). Isobaric specific heat and thermal expansion of solids in the Debye approximation. *physica status solidi (b)*, 185(2), 341-348 <https://doi.org/10.1002/pssb.2221850204>

Avsec, J., & Marcic, M. (2002). Calculation of elastic modulus and other thermophysical properties for molecular crystals. *Journal of thermophysics and heat transfer*, 16(3), 463-468 <https://doi.org/10.2514/2.6702>

Balkanski, M., Wallis, R. F., & Wallis, R. F. (2000). *Semiconductor physics and applications* (Vol. 8). Oxford University Press.

Barbagiovanni, E. G., Lockwood, D. J., Simpson, P. J., & Goncharova, L. V. (2014). Quantum confinement in Si and Ge nanostructures: theory and experiment. *Applied Physics Reviews*, 1(1), 011302

<https://doi.org/10.1063/1.4835095>

Barron, T. H. K., Collins, J. G., & White, G. K. (1980). Thermal expansion of solids at low temperatures. *Advances in Physics*, 29(4), 609-730

<https://doi.org/10.1080/00018738000101426>.

Boussaid, O., Belgacem, C. H., & Fnaiech, M. (2019). Heat Capacity Calculation of Some Semiconductor Compounds Using Lambert W Function. *Silicon*, 11(3), 1673-1676 <https://doi.org/10.1007/s12633-018-9985-y>.

Cankurtaran, M., & Askerov, B. M. (1996). Equation of state, isobaric specific heat, and thermal expansion of solids with polyatomic basis in the Einstein-Debye approximation. *physica status solidi (b)*, 194(2), 499-507
<https://doi.org/10.1002/pssb.2221940207>

Debye, P. (1912) Concerning the theory of specific heat. *Ann Physik*, 39, 789-839
<http://dx.doi.org/10.1002/andp.19123441404>

Dong, J., Sankey, O. F., & Myles, C. W. (2001). Theoretical study of the lattice thermal conductivity in Ge framework semiconductors. *Physical review letters*, 86(11), 2361 <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.2361>

Einstein, A. (1989). The Collected Papers of Albert Einstein, Vol. 2, The Swiss Years: Writings, 1900–1909 (English Translation Supplement).

Eser, E., & Koç, H. (2021). Theoretical study of specific heat capacity of thermoelectric half-Heusler XNiSb (X= Sc, Tm) compounds. *Philosophical Magazine Letters*, 1-6. <https://doi.org/10.1080/09500839.2021.1874068>

Eser, E., Duyuran, B., Bölükdemir, M. H., & Koç, H. (2020). A study on heat capacity of oxide and nitride nuclear fuels by using Einstein-Debye approximation. *Nuclear Engineering and Technology*, 52(6), 1208-1212. <https://doi.org/10.1016/j.net.2019.11.012>

Eymet, V., Brasil, A. M., El Hafi, M., Farias, T. L., & Coelho, P. J. (2002). Numerical investigation of the effect of soot aggregation on the radiative properties in the infrared region and radiative heat transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 74(6), 697-718 [https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(01\)00280-1](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(01)00280-1).

Fraser, D. A. (1986). *The physics of semiconductor devices*. Clarendon Press.

Gaur, U., Mehta, A., & Wunderlich, B. (1978). Heat capacity measurements by computer-interfaced DSC. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 13(1), 71-84 <https://doi.org/10.1007/bf01909910>.

Glazov, V. M., & Pashinkin, A. S. (2000). Thermal expansion and heat capacity of GaAs and InAs. *Inorganic materials*, 36(3), 225-231 <https://doi.org/10.1007/BF02757926>

Gradshteyn, I. S., & Ryzhik, I. M. (2014). *Table of integrals, series, and products*. Academic press.

Grimvall, G. (1986). Thermophysical Properties of Materials, ser. *Selected Topics in Solid State Physics, E. Wohlfarth, Ed. Amsterdam: North-Holland*, 18.

Guseinov, I. I., & Mamedov, B. A. (2007). Calculation of integer and noninteger n-dimensional debye functions using binomial coefficients and incomplete gamma functions. *International Journal of Thermophysics*, 28(4), 1420-1426 <http://doi.org/10.1007/s10765-007-0256-1>

Haedler, A. T., Kreger, K., Issac, A., Wittmann, B., Kivala, M., Hammer, N., ... & Hildner, R. (2015). Long-range energy transport in single supramolecular nanofibres at room temperature. *Nature*, 523(7559), 196-199 <https://doi.org/10.1038/nature14570>.

Kecik, D., Onen, A., Konuk, M., Gürbüz, E., Ersan, F., Cahangirov, S., ... & Ciraci, S. (2018). Fundamentals, progress, and future directions of nitride-based semiconductors and their composites in two-dimensional limit: A first-principles perspective to recent synthesis. *Applied Physics Reviews*, 5(1), 011105. <https://doi.org/10.1063/1.4990377>.

Kim, K., & Kaviani, M. (2016). Thermal conductivity switch: Optimal semiconductor/metal melting transition. *Physical Review B*, 94(15), 155203 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.155203>.

Kittel, C., McEuen, P., & McEuen, P. (1996). *Introduction to solid state physics* (Vol. 8, pp. 105-130). New York: Wiley.

Landau, L. D., Lifshits, E. M., & Pitaevskii, L. P. (1980). *Statisticheskaya fizika* (Vol. 5). Pergamon.

Landsberg, P. T. (Ed.). (2014). *Problems in thermodynamics and statistical physics*. Courier Corporation.).

Lee, J. S., Lee, S., & Noh, T. W. (2015). Resistive switching phenomena: A review of statistical physics approaches. *Applied Physics Reviews*, 2(3), 031303 <https://doi.org/10.1063/1.4929512>.

Liang, Y. H., & Towe, E. (2018). Progress in efficient doping of high aluminum-containing group III-nitrides. *Applied Physics Reviews*, 5(1), 011107. <https://doi.org/10.1063/1.5009349>.

Lu, L. Y., Cheng, Y., Chen, X. R., & Zhu, J. (2005). Thermodynamic properties of MgO under high pressure from first-principles calculations. *Physica B: Condensed Matter*, 370(1-4), 236-242 <https://doi.org/10.1016/j.physb.2005.09.017>.

Łukasiak, L., & Jakubowski, A. (2010). History of semiconductors. *Journal of Telecommunications and information technology*, 3-9.

Magomedov, M. N. (2002). Thermodynamically consistent calculation of the Debye temperature using thermophysical data. *High temperature*, 40(4), 542-545 <https://doi.org/10.1023/A:1019615230262>.

Mamedov, B. A. (2014). Accurate analytical evaluation of heat capacity of nuclear fuels using Einstein–Debye approximation. *Nuclear Engineering and Design*, 276, 124-127 <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2014.05.038>.

Mishra, U., & Singh, J. (2007). *Semiconductor device physics and design*. Springer Science & Business Media.

Morris, P. R. (1990). *A history of the world semiconductor industry* (No. 12). IET.

Neumann, H. (2004). High-temperature heat capacity and lattice anharmonicity of LiGaO₂. *Crystal Research and Technology: Journal of Experimental and Industrial Crystallography*, 39(3), 245-254 <https://doi.org/10.1002/crat.200310178>.

- Pathak, P. D., & Pandya, N. M. (1975). Debye temperatures of KI and RbI and the anharmonic parameters of their potential functions. *Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*, 31(2), 185-188 <https://doi.org/10.1107/S0567739475000368>.
- Perron, J. C. (1967). Electrical and thermoelectrical properties of selenium-tellurium liquid alloys. *Advances in Physics*, 16(64), 657-666
<https://doi.org/10.1080/00018736700101765>.
- Perry, T. S. (2002). Not just blue sky [Herbert Kroemer]. *IEEE Spectrum*, 39(6), 32-37 <https://doi.org/10.1109/MSPEC.2002.1005636>
- Pyda, M., Bartkowiak, M., & Wunderlich, B. (1998). Computation of heat capacities of solids using a general Tarasov equation. *Journal of thermal analysis and calorimetry*, 52(2), 631-656 <https://doi.org/10.1023/A:1010188110516>
- Raya-Moreno, M., Rurali, R., & Cartoixa, X. (2019). Thermal conductivity for III-V and II-VI semiconductor wurtzite and zinc-blende polytypes: The role of anharmonicity and phase space. *Physical Review Materials*, 3(8), 084607 <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.084607>.
- Riordan, M., Hoddeson, L., & Herring, C. (1999). The invention of the transistor. In *More Things in Heaven and Earth* (pp. 563-578). Springer, New York, NY.
- Ross, I. M. (1998). The invention of the transistor. *Proceedings of the IEEE*, 86(1), 7-28 <https://doi.org/10.1109/5.658752>
- Roy, D. K. (2004). *Physics of semiconductor devices*. Universities Press.
- Schwartz, M.J. (2019). Statistical Mechanics, Spring 2019 Lecture 10: Quantum Statistical Mechanics 1.
- Sze, S. M., & Ng, K. K. (2006). *Physics of semiconductor devices*. John Wiley & sons.
- Varshni, Y. P. (1967). Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. *physica*, 34(1), 149-154
[https://doi.org/10.1016/0031-8914\(67\)90062-6](https://doi.org/10.1016/0031-8914(67)90062-6).
- Wehmeyer, G., Yabuki, T., Monachon, C., Wu, J., & Dames, C. (2017). Thermal diodes, regulators, and switches: Physical mechanisms and potential applications. *Applied Physics Reviews*, 4(4), 041304
<https://doi.org/10.1063/1.5001072>
- Windsor, C. T., & Sinclair, R. N. (1976). The Debye–Waller factor of nickel measured at high scattering vectors by pulsed neutron powder diffraction. *Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*, 32(3), 395-409 <https://doi.org/10.1107/S0567739476000934>.

Yacobi, B. G. (2003). *Semiconductor materials: an introduction to basic principles*. Springer Science & Business Media

Zhang, P., Valfells, Á., Ang, L. K., Luginsland, J. W., & Lau, Y. Y. (2017). 100 years of the physics of diodes. *Applied Physics Reviews*, 4(1), 011304 <https://doi.org/10.1063/1.4978231>

Ziman, J. M. (1972). *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge university press.

