

**Silisyum ve Germanyum Tabanlı Nano Yapıların Termal
Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyonları ile
Karakterizasyonu**

Ali KANDEMİR

Yüksek Lisans Tezi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Malzeme Bilimi ve Mühendisliği

Ağustos 2015

Bu tez çalışması Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu tarafından desteklenmiştir. Proje No: 113F096

JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI

Ali Kandemir'in "Silisyum ve Germanyum Tabanlı Nano Yapıların Termal Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyonlar ile Karakterizasyonu" başlıklı Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Anabilim Dalındaki Yüksek Lisans tezi 23 - 07 - 2015 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Anadolu Üniversitesi Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

	Adı -Soyadı	İmza
Üye (Danışman)	: Doç.Dr. Cem Sevik
Üye (İkinci Danışman):	Prof.Dr. Servet Turan
Üye	: Prof.Dr. Yüksel Ergün
Üye	: Doç.Dr. Ceyhun Bulutay

Anadolu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun tarih ve sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Enstitü Müdürü

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

SİLİSYUM VE GERMANİYUM TABANLI NANO YAPILARIN TERMAL ÖZELLİKLERİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONLARI İLE KARAKTERİZASYONU

Ali Kandemir

Anadolu Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman : Doç. Dr. Cem Sevik
İkinci Danışman : Prof. Dr. Servet Turan

2015, 76 sayfa

Termoelektrik malzemeler güç üretimi, enerji dönüşümü ya da katı-hal soğutma uygulamalarına muhtemel adaptasyonlarından dolayı birçok bilim insanının yoğun ilgisini çekmiştir. Bu çalışmada, termoelektrik malzeme aday olabilecek silisyum ve germanyum elementlerinden oluşan yapıların termal taşınım özellikleri Green-Kubo yöntemi kullanılarak analiz edilmiştir. Atomlar arası etkileşimleri tanımlamak için Tersoff potansiyeli kullanılmıştır. Silisyum ve germanyum (SiGe) sistemlerinden alaşımlar ve süper örgü yapılar incelenmek üzere seçilmiştir. Makro ve nano boyutlu olarak oluşturulan sistemlerde termal taşınım özellikleri denge moleküler dinamik benzetimi ile oda sıcaklığında hesaplanmış, elde edilen sonuçlar boyutsal olarak karşılaştırılmış. Sıcaklık değişiminin, geometrinin, periyodisitenin, kristal yönlenmenin, arayüz pürüzlülüğünün ve yüzey alanının SiGe tabanlı nano yapılardaki etkisi de ayrıca incelenmiştir. Bu tez çalışmasının sonucunda, SiGe bazlı malzemelerin örgüsel termal taşınım özellikleri hesaplanmış ve termoelektrik performansı yüksek olabilecek nano yapılar belirlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Moleküler dinamik; süper örgü; termal iletkenlik; nanotel; alaşım; termoelektrik.

ABSTRACT

Master of Science Thesis

THERMAL PROPERTIES CHARACTERIZATION OF SILICON AND GERMANIUM NANOSTRUCTURES WITH MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

Ali Kandemir

Anadolu University
Graduate School of Sciences
Materials Science And Engineering Program

Supervisor : Doç. Dr. Cem Sevik
Co-supervisor : Prof. Dr. Servet Turan

2015, 76 pages

Thermoelectric materials have captured considerable attention of researchers due to their possible adaptation in power generation, energy conversion, and solid-state cooling applications. In this work, thermal transport properties of silicon and germanium elements which are good candidates for thermoelectric materials were analyzed via Green-Kubo method. Tersoff was used to define the interaction between atoms. Alloys and superlattice structures from silicon and germanium (SiGe) systems were chosen to examine. At room temperature, thermal transport properties in produced macro and nano size systems were calculated via equilibrium molecular dynamic method, then obtained results were compared regarding the size. Besides, the effects of temperature change, geometry, periodicity, crystal orientation, interface roughness and surface area of the SiGe based nano structures were investigated. As a conclusion of this thesis work, lattice thermal transport properties of SiGe based materials were computed and possible nano structures having high thermoelectric performance were designated.

Keywords: Molecular dynamics; superlattice; thermal conductivity; nanowire; alloy; thermoelectrics.

TEŐEKKÜR

Bu tez alıŐmasının belirlenmesinde, desteklenmesinde ve gerekleŐmesinde emeĐini ve yardımlarını esirgemeyen danıŐmanım, deĐerli hocam Do. Dr. Cem Sevik'e teŐekkürlerimi bor bilirim.

Tezin tamamlanmasına katkıda bulunan ve problemlerin özölmesinde yardımcı olan sevgili hocam Prof. Dr. Servet Turan'a teŐekkürlerimi sunarım.

Ayrıca EskiŐehir'de bulunduĐum süre boyunca, desteklerini bir an olsun eksik etmeyen, her türlü kiŐisel ve akademik problemlerimde bana yardımcı olan, umutsuz kaldıĐım anlarda toparlanmamda destek olan, arkadaşlıkları ile bu tezin tamamlanmasında kuŐkusuz rol sahibi olan semi-doktor Ayberk Özden ve Mühendis Alper ınar'a sonsuz teŐekkürlerimi sunarım.

Ve son olarak, bu günlere gelmemde maddi manevi desteklerini esirgemeyen ve hep yanımda olan aileme sonsuz teŐekkürlerimi sunuyorum. Ayrıca, dualarını bir an olsun eksik etmeyen sevgisiyle beni bu günlere getiren anneaneme de teŐekkürlerimi sunmak isterim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ	v
1. GİRİŞ	1
2. YÖNTEM	9
2.1. Teorik Bilgiler	9
2.1.1. Kısaca Moleküler Dinamik	10
2.1.2. Green - Kubo Metodu	13
2.2. Simülasyon Detayları	15
3. BULGULAR VE TARTIŞMA	18
3.1. Silisyum-Germanyum Alaşımları	18
3.1.1. Yığın $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$	18
3.1.2. Silindirik $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Nanoteller	21
3.1.3. Dikdörtgensel $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Nanoteller	25
3.2. Silisyum-Germanyum Süper Örgüleri	28
3.2.1. Üç boyutlu Süper Örgüler	30
3.2.2. Süper Örgüye Sahip Silindirik Nanoteller	50
3.2.3. Süper Örgüye Sahip Dikdörtgensel Nanoteller	57
4. SONUÇ VE ÖNERİLER	65
KAYNAKLAR	70

ŞEKİLLER DİZİNİ

2.1. Teori, deney ve simülasyon arasındaki etkileşimin basit olarak şekilsel gösterimi	9
2.2. Moleküler dinamik simülasyonu akış şeması	12
3.1. 12x12x12 Kübik elmas silisyum süper hücresi	19
3.2. Örgü sabitine karşın germanyum yüzdesi grafiği	20
3.3. Yığın Si-Ge alaşımının termal iletkenliğe karşın germanyum yüzdesi grafiği ile bu konuda daha önce yapılmış deneysel ve hesaplamalı çalışmalar	21
3.4. Farklı çaplardaki ve yönlenmedeki (iç grafik <111> yönlenmesi) silindirik na-notel alaşımlarının örgü sabiti değerlerine karşın germanyum yüzdesi grafiği	22
3.5. Farklı çaplardaki ve yönlenmedeki $Si_{1-x}Ge_x$ nanotellerinin termal iletkenliğe karşın germanyum yüzdesi grafiği	23
3.6. Bazı silindirik $Si_{1-x}Ge_x$ nanotellerinin sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranışı	24
3.7. Farklı kenar uzunluklarına sahip karesel nanotel alaşımlarının örgü sabitlerine karşın germanyum yüzdesi grafiği	26
3.8. Saf karesel nanotellerinin kenar uzunluklarına karşın termal iletkenlik değişimi grafiği	26
3.9. Farklı kenar uzunluklarındaki $Si_{1-x}Ge_x$ karesel nanotellerinin termal iletkenliğe karşın germanyum yüzdesi grafiği	27
3.10. Farklı kenar uzunluklarındaki $Si_{1-x}Ge_x$ karesel nanotellerinin sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranışı	28
3.11. Kullanılan 48 birim hücre uzunluğundaki süper örgü yapılarının bazıları (a) dikdörtgensel P3 süper örgü yapısı (b) silindirik P12 süper örgü yapısı (c) 12-36 süper örgü yapısı (d) 18-30 süper örgü yapısı	29
3.12. Periyodisite değerine karşın üç yöndeki örgü parametresi değerleri .	31

3.13. Termal iletkenlik deęerine karřın süper örgü periyodisite grafięi (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	32
3.14. Bazı süper örgü yapıların sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranıřı (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	33
3.15. P12 süper örgü yapısının sıcaklık altında termal iletkenlik özellięinin detaylı grafięi (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	35
3.16. <111> süper örgü yapılarının periyodisite deęerine karřın (a) üç yöndeki örgü parametresi deęerleri. Ayrıca detaylı gösterim ile (b-c) dięer yönlerde ve (d) büyüme yönündeki örgü parametresi deęerleri	36
3.17. <111> süper örgü yapılarının termal iletkenlik deęerine karřın süper örgü periyodisite grafięi (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	37
3.18. <111> süper örgü yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranıřı (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	38
3.19. Üç farklı yöndeki örgü sabiti deęerine karřın silisyum süper örgü uzunluęu	40
3.20. Termal iletkenlik deęerine karřın silisyum süper örgü uzunluęu deęiřimi (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	41
3.21. Bazı periyodik olmayan süper örgü yapıların sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranıřı (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	43
3.22. <111> yönlenmesine sahip yapıların (a) üç farklı yöndeki örgü sabiti deęerine karřın silisyum süper örgü uzunluęu. Ayrıca detaylı gösterim ile (b-c) dięer yönlerde ve (d) büyüme yönündeki örgü parametresi deęerleri	44
3.23. <111> süper örgü yapıların termal iletkenlik deęerine karřın silisyum süper örgü uzunluęu deęiřimi (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	46
3.24. Bazı <111> yönlenmesine sahip periyodik olmayan süper örgü yapıların sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranıřı (a) büyüme yönü (b) dięer yönler	47

3.25. Ara yüzey pürüzlülüğü aralığına karşın termal iletkenlik değerinin pürüzsüz yapıya oranla değişimi (Si-Ge oranı tüm yapılarda korunmuş ve aynıdır.)	49
3.26. Periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerde büyüme yönündeki örgü sabiti değerine karşın periyodisite değeri (sağ eksen sadece 3nm(111) yapısını belirtmek için çizilmiştir.)	51
3.27. Periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerde büyüme yönündeki termal iletkenlik değerine karşın periyodisite değeri	52
3.28. Periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerin bazı yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimi	53
3.29. Periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerde büyüme yönündeki örgü sabiti değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu (sağ eksen sadece 3nm (111) yapısını belirtmek için çizilmiştir.) . .	54
3.30. Periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerin büyüme yönündeki termal iletkenlik değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu değişimi	55
3.31. Periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerin bazı yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimi	57
3.32. Periyodik süper örgüye sahip karesel nanotellerde büyüme yönündeki örgü sabiti değerine karşın periyodisite değeri	58
3.33. Periyodik süper örgüye sahip karesel nanotellerin büyüme yönündeki termal iletkenlik değerine karşın periyodisite değeri	59
3.34. Periyodik süper örgüye sahip karesel nanotellerin bazı yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimi	60
3.35. Periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerde büyüme yönündeki örgü sabiti değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu	61
3.36. Periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerin büyüme yönündeki termal iletkenlik değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu değişimi	62
3.37. Periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerin bazı yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimi	63

1. GİRİŞ

Fosil yakıt kaynaklarının azalması ve dünyadaki talebin artması ile sürdürülebilir ve yenilenebilir bir enerji kaynağı sağlamak 21. yüzyılda dünyadaki toplumların başlıca problemi olmuştur. Bu problemin üstesinden gelmek amacıyla bilim insanları bir çok farklı yenilenebilir enerji kaynağı üzerine araştırma çalışmaları yürütmektedirler [1]. Örneğin; fotovoltaikler, solar enerji, jeotermal enerji, hidroelektrik enerji, rüzgar enerjisi, biyoenerji gibi alanlar [2]. Bunların dışında gelecekte çok önemli rol oynayacağı düşünülen bir başka enerji kaynağı veya uygulama da termoelektrik malzemelerdir. Etkin termoelektrik etki gösteren malzemelere termoelektrik malzeme denir. Termoelektrik etki ise, sıcaklık farkının elektrik potansiyeli oluşturması (Seebeck etkisi) ya da elektrik potansiyelinin sıcaklık farkına neden olması (Peltier etkisi) olarak tanımlanabilir. Bu etki sayesinde günümüzde bir çok alanda termal enerjinin dönüşümü sağlanabilir, soğutma veya ısıtma gerektiren metotlara aday olabilir ve verimli kullanımı gerçekleştirebilir [3]. 1950lerde termoelektrik malzemelerin temel ilimi iyi anlaşılmasına başladığı zaman, termoelektrik alanı bir sıçrama göstermiş ve aşırı katkılanmış yarı iletken kristallerin iyi bir termoelektrik malzemeler olduğu keşfedilmiştir. Örneğin bizmut tellürid (Bi_2Te_3) bu çalışmalar sırasında keşfedilmiş ve ticarileşmiş bir termoelektrik malzemedir.

Bir malzemenin termoelektrik performansı yaklaşım yolu ile bulunmuş bir boyutsuz sabit ile ilişkilendirilebileceği anlaşılmıştır. Bu boyutsuz 'thermoelectric figure of merit' olarak ingilizcede yerini almış ZT sabiti şu şekilde ifade edilmektedir; $ZT = S^2 \sigma T / (\kappa_e + \kappa_L)$, burada S , σ , T ve κ sırasıyla, Seebeck katsayısı, elektriksel iletkenlik, sıcaklık ve termal iletkenliktir. Termal iletkenlikte ona katkıda bulunan elektronlar ve örgü titreşimlerinin etkisi yani fononlar olduğu için ikiye ayırabilir ve $\kappa = \kappa_e + \kappa_L$ olarak ifade edebiliriz [4]. 1960-1990 yılları arasında Bi_2Te_3 türevi malzemeler geliştirilerek (genelde alaşım oluşturma ve bileşik oluşturma ile) ZT sayısını yaklaşık 1'e yaklaştırmışlardır [5]. Başlangıçta çok büyük ilgi görmesine rağmen, bu malzemelerin üretiminde kullanılan metot ve hammaddelerin maliyetlerinden

dolayı ve ZT sayısının yani verimin daha fazla arttırılamamasından ötürü sadece belirli uygulamalarda kullanılan bu malzemeler, termoelektrik endüstrisinin yavaş gelişmesine sebep olmuştur.

1990 yılların sonlarına doğru var olan teknolojilerin gelişmesinden dolayı termoelektrik malzemeler yeniden ilgi duyulan malzemeler olmaya başlamıştır. Daha iyi performanslı termoelektrik malzemelerin bulunabileceği farkına varıldıktan sonra iki farklı araştırma alanı oluşmuştur. Bir tanesi ileri yığın termoelektrik malzemeler (Advanced Bulk Thermoelectric Materials) [6–9], diğeri ise düşük boyutlu malzemelerin kullanıldığı sistemlerdir [10–14]. Burada bizi ilgilendiren düşük boyutlu malzemelerin kullanıldığı sistemler olacaktır ve bu yüzden o alandaki gelişmelere bakacağız. Düşük boyutlu malzemelerin kullanıldığı sistemler konusunda yapılan tartışmalardan sonra baskın iki farklı düşünce dominant hale geldi. Bu düşüncelerden ilki bu tez konusunu kapsamayan kuantum sınırlandırmaları ile termoelektrik performansın yani ZT katsayısı ile doğrusal ilişkiye sahip $S^2 \sigma$ güç faktörünün arttırılması [15–18]. İkinci ve bu tez çalışmasının konusu kapsamı içinde olan düşünce ise elektriksel iletkenliği fazla etkilemeden, nano yapıların sunmuş olduğu farklı dizaynlar ile saçılım mekanizmaları sayesinde termal iletkenlikte meydana gelebilecek dramatik düşüşler sayesinde termoelektrik performansın arttırılmasıdır [13,19–21].

Buraya kadarki bölümde daha çok önemseyeceğimiz özelliğimizin termal iletkenlik olduğu belirlemiş olduk. Çünkü, ZT katsayısı ile ters orantıya sahip tek özellik olan termal iletkenlikteki düşüşler direk olarak katsayımızı arttıracaktır ve bunu yaparken de stratejimiz daha önce belirttiğimiz araştırma alanlarından ikincisi yani düşük boyutlu malzemeler olacaktır. Haliyle bu alanda baskın olan teknoloji nanoteknoloji olacaktır.

İlk olarak $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ süper örgülerinde yapılan deneyler sonucu fonon saçılmalarının etkileri ile termal iletkenliğin, elektriksel iletkenlikten çok daha fazla düşüş gösterdiği ispatlanınca [22], düşük boyutlu malzemeler için ZT katsayısının diğer parametreleri ile arttırılması görüşü yön değiştirmiş olmuştur. Özellikle termal iletkenliğin elektriksel iletkenliği etkilemeden düşüş gösterdiği yarıiletken malzemeler bu konsept altında değerlendirilmeye başlan-

mıştır. Bu yüzden literatürde ucuz, teknolojisi iyi bilinen adaylar olan silisyum ve germanyum nano yapıları ile ilgili bir çok çalışma bulunmaktadır.

Kim ve ark. [23] silisyum ve germanyum nanotellerini ele alıp, farklı yüzdelerdeki alaşımların termal iletkenlikteki değişimini incelemişler ve germanyum katkısı ile termal iletkenliğin azalabildiğini 40-420 K sıcaklık aralığında yaptıkları ölçüm ile göstermişlerdir. Yaptıkları çalışma da nanotellerin çap uzunluğunun değişiminin termal iletkenliği etkilemediğini söylemişlerdir. Bunun yanı sıra, Li ve ark. [24] 22, 37, 56 ve 115 nm çaplarındaki silisyum nanotellerdeki 20-320 K sıcaklığı aralığında yaptıkları termal iletkenlik ölçümlerinde açık bir şekilde termal iletkenliğin nanotellerde çap boyutuna bağlı olduğunu göstermişlerdir. Buldukları değerlerde ise yığın silisyuma göre silisyum nanotellerin iki ve daha fazla kat düşük termal iletkenlik değerine sahip olduğunu söylemektedirler. Martinez ve ark. [25] ise, *p*-tipi silisyum-germanyum alaşımların 100-300 nm aralığına sahip çaplardaki nanotellerinde yaptıkları çalışmada sınırlı ve boşluk fonon etkileşimlerinin etkili olduğunu düşündüğü yapılarda termal iletkenliğin 300 K sıcaklığında $1.1 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerine kadar düşebileceğini rapor etmişlerdir. Ayrıca çalışmalarında üç farklı nanoteli örnek olarak alıp, termoelektrik performansını farklı ölçümler sonucu yığın silisyum-germanyum alaşımından 300 K sıcaklığında iki kat yüksek, $ZT = 0.18$ bularak bir yön göstermişlerdir. Farklı bir çalışma olarak, Hochbaum ve ark. [13] pürüzlü silisyum 20-300 nm çaplarındaki nanotelleri incelemişler ve farklı yöntemler ile ürettikleri pürüzlü silisyum nanotellerin farklı sıcaklıklar altındaki termoelektrik özelliklerini ölçüp oda sıcaklığında 50 nm çapa sahip pürüzlü silisyum nanotelin termoelektrik performansının 0.6 değerine ulaşabileceğini göstermişlerdir. Ayrıca yaptıkları çalışmada, farklı yöntemlerle üretilmiş dahi olsa, nanotellerin çap boyutu azaldıkça termal iletkenliğin azaldığını açık bir şekilde göstermişlerdir.

ZT sabitinin silisyum ve germanyum elementlerinin kullanıldığı nano yapılardaki artışı bu alana daha fazla ilgi duyulmasına sebep olmuş ve Wang ve ark. [11] yaptıkları çalışmada, nanoyapılandırılmış *n*-tipi yığın silisyum-germanyum alaşımını kullanarak şimdiye kadar ki en güzel örnek çalışmalardan

birini ortaya koymuştur. 5-15 nm kristalitlere sahip olduğunu düşündükleri Nano-SiGe alaşım tozları ile elektronların ve fononların ortalama serbest gidimi arasındaki farkı kullanarak, termoelektrik uygulamalar için nanoyapılandırılmış malzemelerde örgü termal iletkenliğini elektriksel iletkenlikten fazla taviz vermeden düşürülebileceğini referans malzemelerini kullanarak çalışma içerisinde açık bir şekilde belirtmiştir. Çalışmaya göre, termal iletkenlikteki neredeyse yarı yarıya düşüşe karşılık, elektriksel iletkenlikte az kayıplar olduğu ve Seebeck katsayısında ise neredeyse bir değişiklik olmadığını bu sayede ZT sabitinin iyileştirilebileceğine kanıt olmuşlar ve referans malzemelerine göre yüzde 40 lık bir iyileştirme gerçekleştirip, termoelektrik performansı 900 santigrat derecede 1.3 olarak ölçmüşlerdir.

Bu çalışmaların dışında, 1997 de Cahill ve ark. [26] ince filmlerde yaptıkları çalışmalar sonucu düşük termal iletkenlik değeri elde ettiklerinden ve beklenmeyen sonuçlara ulaştıktan sonra, silisyum germanyum süper örgü yapıları da bir çok araştırmacının ilgisini çekmiştir. Borca-Tasciuc ve ark. [27] simetrik olarak gerilmiş katkısız Si/Ge süper örgü yapılarında farklı sıcaklıklar altında termal iletkenliğin değişimini incelemiştir. Moleküler demet epitaksi cihazında ürettikleri Si/Ge süper örgüleri ve ölçümlerini 3ω yöntemi ile yaptıkları çalışmada silisyum-germanyum alaşım ince filmlerinden daha düşük termal iletkenlik elde etmişler ve bu yüzden süper örgülerin çalışılması yönünde büyük bir adım atmışlardır. Daha sonra, Huxtable ve ark. [28] aynı üretim ve ölçüm yöntemi ile bu sefer Si/SiGe ve SiGe/SiGe süper örgü yapılarını farklı periyotlarda üretmişler ve farklı sıcaklık değerlerinde ölçümlerini yapmışlardır. Borca-Tasciuc ve ark. nın çalışmasında da gözlemlenebileceği gibi Huxtable ve ark. nında sıcaklığın etkisinin belli bir sıcaklık değerine kadar termal iletkenliği arttırma eğiliminde olduğu daha sonra ise bağımsız hale geldiği yönünde değinmişlerdir. Borca-Tasciuc ve ark. ın çalışmasının aksine periyot değişikliğinin termal iletkenliği etkilemediği yönünde bir söylemde bulunmuşlardır ama Cahill ve ark. nın çalışmasında da periyot değişiminin termal iletkenlik üzerinde bir etkisi olduğu belirtilmiştir. Bir kaç kafa karıştırıcı sonuca rağmen, Huxtable ve ark. nın vardığı en önemli sonuç, alaşım/alaşım süper örgü yapılarında

arayüzün bir etkisi ve önemi olmadığını göstermişlerdir. Nanotellerde Si/SiGe süper örgü yapıları inceleyen Li ve ark. [29], 58 ve 83 nm çaplarında ürettikleri nanotel süper örgülerde alaşımlardan kaynaklanan saçılım mekanizmalarının üstünde durarak termal iletkenliğin Si/SiGe süper örgü ince filmlere göre nanotellerde daha düşük değerler alabileceğini göstermişlerdir. Ayrıca çalışma da çap boyutu azaldıkça termal iletkenliğin azaldığını da bir kez daha raporlamışlardır.

Termal iletkenliğin etkili bir biçimde düşürülebildiği deneysel sonuçlar ile ortaya çıktıktan sonra bunun altında yatan sebepleri araştırmak üzere bir çok araştırmacı işin teorisine derinlemesine incelemeye çalışmış ve bir grup araştırmacı da termoelektrik malzemeler için uygun termal iletkenliğin daha düşük olabileceği yapıları teoriye dayalı matematiksel yaklaşımlar veya simülasyon metotları ile araştırmışlardır [30–40]. Genelde bu tür çalışmalar spesifik fenomenler üzerinde olup, açıklama getirme eğilimdedir. Örneğin; bükülüm etkisinin fonon termal iletkenliğine dielektrik nanotellerde Monte Carlo simülasyonları ile araştırılması [31] veya yüzey pürüzlülüğünün silisyum nanotellerde termal iletkenlik üzerindeki etkisinin moleküler dinamik benzetim yöntemi ile incelenmesi [32] gibi. Bu yüzden, literatürde çok sayıda bu tarz çalışma bulunmaktadır.

Konumuz ile ilgili çalışmalara göz atacak olursak, Donadio ve ark [41] silisyum nanotellerde denge moleküler dinamik hesaplamaları ile 4 nanometreden küçük nanotellerde termal iletkenliğin değişmediğini ve kristalin nanotellerin yüzeylerinde kontrollü bir şekilde oluşturulabilecek amorf silisyum fazı ile termal iletkenliğin yığın silisyuma göre 100 kat düşebileceğine dair bir çalışmada bulunmuşlardır. Chen ve ark. [42] germanyum nanotellerin yüzeylerinde silisyum kaplama ile termal iletkenlikte kritik düşüşler sağlanabileceğini denge dışı moleküler dinamik simülasyonları ile göstermişlerdir. Düşük termal iletkenlik değerine ulaşabilmek için, her kaplama kalınlığına göre belirli bir germanyum kalınlığı olması gerektiğini göstermişler ve kendi hesapları ile deneysel verileri birebir eşleştirebilmişlerdir. Arayüzlerde pürüzlülük yaratılabilirse, termal iletkenliğin daha da düşürülebileceği görüşünde bulunmuşlardır. Hu ve

ark. [43,44] da benzer olarak yapmış oldukları iki çalışmada da kabuk - çekirdek yapısı olarak tanımlanan silisyum çekirdek etrafına germanyum kabuk yapıları oluşturup denge dışı moleküler dinamik yöntemi ile termal iletkenlik değerlerini incelemişlerdir. Yüzey kesiti, tel uzunluğu ve sıcaklık etkilerine detaylı olarak incelendikten sonra bu tür sistemlerde termal iletkenliğin silisyum nanotellere göre yüzde 75 düşüş gösterdiğini ve potansiyel termoelektrik malzemeler olabileceğini söylemişlerdir.

Garg ve ark. [45] temel prensipler (First Principles) ile silisyum-germanyum alaşımındaki düzensizlik üzerinden termal iletkenlik incelemesi yapmış ve kütle düzensizliğinin harmonik olmayan saçılımları arttırdığını tespit etmişlerdir. Deneysel veriler ile birebir uyum sağlayan çalışmalarında, yüzde az yüzde 12 germanyum katkısı ile termal iletkenliğin minimum seviyelere düştüğünü tespit etmişlerdir. Cruz ve ark. [46] nano kristallere sahip silisyum-germanyum alaşımlarını denge moleküler dinamik metodunu kullanarak analiz etmiş, ortalama tane boyutuna göre bir model oluşturmaya çalışmışlardır. Sınır saçılımları ile düzensizlikten kaynaklı saçılımların etkinliğini tartıştıkları çalışmada, nano kristallerin kullanıldığı sistemlerde termal iletkenlik değerlerini yaklaşık $1 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ hesaplamışlardır. Nanotellerde silisyum-germanyum alaşımlarını inceleyen Chen ve ark. [47] denge dışı moleküler dinamik hesapları ile bazı tespitlerde bulunmuşlardır. Nanotellerde yüzde 5 germanyum katkısı ile silisyum nanotellerin termal iletkenlik değerini yarı yarıya azaltılabileceğini, yüzde 50 germanyum katkısı ile ise silisyum nanotellerin termal iletkenlik değerinin 5 kat azalabileceğini göstermektedirler.

Bir diğer taraftan silisyum ve germanyum elementlerinin potansiyelini ortaya çıkarmak üzere nano kompozit sistemler oluşturulup matematiksel yöntemler ve simülasyonlar ile incelenmiştir. Guo ve ark. [48] silisyum tabanlı nano kompozitler oluşturup, sınır saçılımları ile termal iletkenliğin düşürülebileceğini yapmış olduğu denge dışı moleküler dinamik hesaplar ile belirtmiştir. Yaptığı hesaplarda, termal iletkenliğin bu tür sistemlerde sıcaklık değişiminden etkilendiğini öne sürmüştür. Li ve ark. [49] da denge moleküler dinamik simülasyonları ile silisyum-germanyum nano kompozit sistemlerin termal iletkenlik

değerlerini hesaplamışlardır. Uzun dalga boyuna sahip fononların saçılımlarını kullanarak, farklı geometrilerdeki nano katkılar ile bu katkıların farklı boyutları ve oranlarına da bakarak termal iletkenlikte düşüşlerin analizini yapmışlar ve buna göre en uygun nano katkı modelini geliştirmişlerdir. Huang ve ark. [50] ise germanyum matris için silisyum nano telleri kullanarak oluşturduğu nano kompozit sistemlerde denge dışı moleküler dinamik benzetimi ile yaptığı hesaplamalarda termal iletkenliğin silisyum germanyum alaşımlarında elde edilen düşük değerlerden daha düşük olabileceğini göstermişlerdir.

Termoelektrik uygulamalara aday olan süper örgü sistemleride bu araştırmalarda kendine bir hayli yer bulmuştur. Dames ve ark. [51] Si/Ge süper örgü yapılarda fononların sorumlu olduğu termal iletkenlik katkısını derinlemesine teorik incelemiş ve bilinen süper örgü yapılara nazaran süper örgü nanotellerin termal iletkenliğinin iki veya daha fazla faktörde düşebileceğini belirtmiştir. Savic ve ark. [52] Monte Carlo metodunu kullanarak Si/Ge süper örgülerde boyutsallığın termal taşınımındaki etkisini incelemişlerdir. Landry ve ark. [53] da Si/Ge ve Si/SiGe süper örgülerde üzerinde denge dışı moleküler dinamik simülasyonları ile arayüzde oluşabilecek farklı pürüzlülükleri/durumları ve süper örgülerinin periyodikliğinin termal iletkenlik üzerindeki etkilerini hesaplamışlardır. Haskins ve ark. [54] ise farklı bir bakış açısı ile kuantum noktaları kullanarak oluşturdukları Si/Ge süper örgü sistemlerinin termal iletkenliği üzerine denge moleküler dinamik simülasyonları ile hesaplamalar yapmışlardır. Kuantum noktaların boyutu, şekli gibi etkenleri ve bu kuantum noktaların yüzde dağılımlarının termal iletkenliği nasıl değiştirdiklerini hesapladıktan sonra, termal iletkenliğin $1 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerinin altına düşebileceğini ve olası bir termoelektrik malzeme için ZT katsayısının yığın versiyonlarına göre 100 kat, alaşım versiyonlarına göre 10 kat geliştirilebileceğini belirtmişlerdir. Hu ve ark. [55] kabuk-çekirdek çalışmaları dışında Si/Ge süper örgü nanotellerin denge dışı moleküler dinamik benzetimi ile termal iletkenliğini incelemiş ve ultra düşük termal iletkenlik değerlerine erişilebileceğini öngörmüşlerdir. Si/Ge süper örgü nanotellerde termal iletkenliğin silisyum nanotellere göre yüzde 92 düştüğünü rapor etmişlerdir. Bunun sonucunda periyodik uzunluğu, yüzey ke-

sit kalınlığı optimize edilmiş süper örgü nanotellerin çok iyi bir termoelektrik malzeme adayı olduğunu belirtmişlerdir.

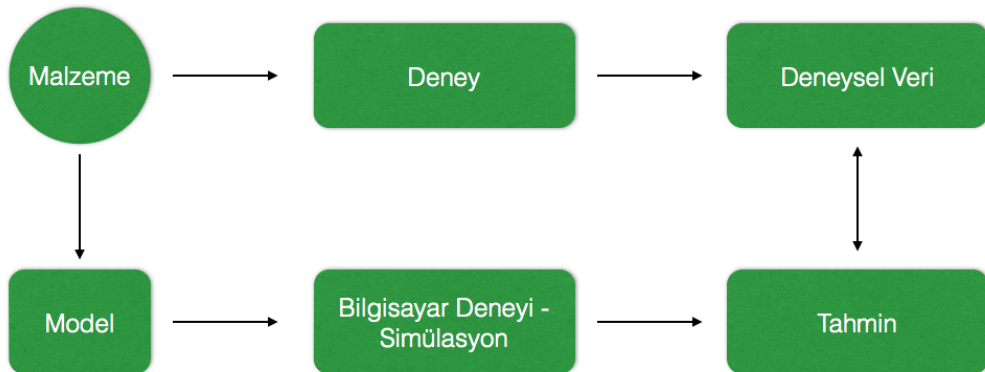
Potansiyel termoelektrik malzemelerin termal iletkenlik özelliğinin malzemenin yapısında terzilik ile aşırı indirgenebilmesi termoelektrik uygulamalar için büyük bir önem arz etmektedir. Bu yüzden, yüksek performanslı termoelektrik malzeme adayı olarak düşünülen silisyum ve germanyum sistemlerinin yığın ve düşük boyutlu olarak incelendiği bu tez çalışmasında süper örgü yapıların ve alaşımların ilk kez denge moleküler dinamik simülasyonları ile termal taşınım özellikleri incelenerek literatüre önemli bir katkıda bulunacağı düşünülmektedir.

Bu tez çalışmasında; 2. bölümde moleküler dinamik ve kullandığımız metot hakkında bilgi, ayrıca hesaplama yöntemimiz ve simülasyonları hangi koşullarda gerçekleştirdiğimiz hakkında detaylı bilgi verilmiştir. 3. bölümde bulgularımız ve onlara ait yorumlarımız, 4. bölümde de elde edilmiş önemli sonuçlar özet bir halde madde madde sıralanmıştır.

2. YÖNTEM

2.1. Teorik Bilgiler

Bu tez çalışması bilgisayar deneylerinden oluşmaktadır veya başka bir deyiş ile sanal deney olarak da adlandırılabilir. Bilgisayar deneyleri/simülasyonları, gerçek sistemleri bilgisayar ortamında tanımlayarak matematiksel ve mantıksal modellerin geliştirilip kullanılması ile gerçekleşen yöntemlerdir. Bu yöntemler, son zamanlarda teknolojinin bilgisayar gücünü dramatik olarak yükseltmesi ile, fizik, kimya ve malzeme bilimi alanlarında deney ile teori arasındaki bağlantıyı sağlayan müthiş bir araç haline dönüşmüştür. Bu aracın kullanılması ile elde edilen değerler bir çok deneysel çalışmaya yön göstermiş ve deneysel sonuçlar ile gösterdiği uyum sayesinde her çalışma grubu tarafından ihtiyaç haline dönüşen bir alana dönüşmüştür. Bunun yanı sıra bu simülasyonlar laboratuvar ortamında gerçekleştirilmesi zor veya pahalı ya da mümkün olmayan sistemler hakkında bilgi elde edebilmek amacıyla kullanılmaktadır. Malzeme bilimi dünyasında düşük boyutlu sistemlerin araştırılmasında bu durum karşımıza çıkmaktadır ve deneylerde deneme sayısının düşük ve denemelerin nokta atışı olması gerektiğinden, bilgisayarlı malzeme bilimi alanı içinde fizik ve kimya bilimini barındıracak şekilde bu sorunun çözümü olmaktadır. Bu felsefeyi anlatan grafik Şekil 2.1. gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Teori, deney ve simülasyon arasındaki etkileşimin basit olarak şekilsel gösterimi

2.1.1. Kısaca Moleküler Dinamik

Bu çalışmada moleküler dinamik simülasyon yöntemi kullanılmıştır. Uzun yıllardır kullanılan bu yöntem, malzeme özelliklerinin araştırılmasında, nano boyutta malzemelerin davranışlarının incelenmesinde kullanılmakta bunun dışında popülerliğini kazandığı biyolojik moleküllerin ve proteinlerin araştırılmasında kullanılmaktadır. Moleküler dinamik metodu, istatistik mekaniğine dayanan bilgisayar hesaplaması ve moleküler modellemenin birleştiği ve spesifikleştiği bir disiplindir [56]. Moleküler dinamik hesaplamalarında sistemi meydana getiren atomların hareket denklemleri Newton Dinamiği Yasası'na göre zamana bağlı olarak çözülür. Bir sistemin statik özelliklerinin yanında dinamik özelliklerinin de çalışılmasına olanak verir. Bu yöntem, çoğunlukla analitik çözümü tam olarak çözülemeyen sorunların sayısal çözümlerini elde etmeyi ve belirli sistemler için kurulan modellerin deneysel çalışmalar ile karşılaştırmasını amaçlar.

Bu yöntemin başlangıç noktası, sistemlerin fiziksel olarak yapılarının çok iyi bir şekilde tarif edilmesine bağlıdır. Sistem her iki türden de oluşabilir; bir kaç veya çok parçacıklı olarak, ve tanımlanması moleküllerin faz-uzay yörüngelerinin Newton yasasına uygun olarak hesaplanması ile gerçekleşir. Bu sırada yörüngeler ve hızlar Newton yasalarına göre hesaplanır. Oluşturulan sistem Newton hareket denklemleri ile ifade edilmektedir. Bu hareket denklemlerinin ilk integrasyonu atomik momentumu, ikincisi de konumları öğrenmemizi sağlar. Moleküler dinamik yönteminde hareket denklemleri nümerik yöntemler aracılığı ile her sonsuz küçüklükteki bir zaman adımında sonlu farklar metotları kullanılarak hesaplanır. Hareket denklemleri, nümerik yöntem ile çözülmeye başlamadan önce, yapıda bulunan atomların ilk hızları ve konumları ilk adım olarak kullanıcı tarafından verilir ve ardından kullanılan moleküler dinamik programı sonsuz küçüklükteki zaman adımlarında konum ve zamanları sürekli nümerik olarak belirleyerek sistemi çözer. En yaygın olarak kullanılan nümerik metotlardan biri Verlet algoritmasıdır. Bu algoritmada sistem her sonsuz küçüklükteki zaman adımı sonrası için sistemdeki atomların yeni konum ve hızlarını belirleyerek hareket denklemlerini hesaplar. Elde edilen yeni konum-

lar sayesinde sistemin statik ve dinamik özelliklerinin belirlenmesine olanak sağlar ve yapıdaki atomların davranışının anlaşılmasını sağlar. [57]

Bu bilgiler ışığında moleküler dinamik simülasyonu yöntemindeki işleyiş detaylı olarak Şekil 2.2. de gösterilmiş ve ayrıca bu işleyişi kısaca da şu şekilde sıralıyabiliriz;

- Hazırlık aşaması; Sistemimizin başlangıç durumunun belirlenmesi
- Denge aşaması; Sistemimizin integrasyonu ve enerjinin dengelenmesi
- Sonuç aşaması; Hesaplanan değerlerin alınması ve analizi

Buna göre, başlangıç koşullarının sisteme verilmesinden sonra, moleküler dinamik yöntemi her bir zaman adımı için sonlu farklar metodunu kullanarak aşağıda verilen denklemdeki hareket denklemini çözer.

$$F_i(t) = ma_i(t) = m \frac{\partial^2 r_i(t)}{\partial t^2} = -\frac{\partial U}{\partial r_i} \quad (2.1)$$

Burada, F_i t anında i 'inci atomun üzerine etkiyen kuvveti, m atomik kütle ve U sistemdeki parçacıkların oluşturduğu potansiyel enerjidir. r_i i 'inci atomun konumu ve zamana bağlı ikinci türevi de t anındaki atomun ivmesidir. Her bir moleküler dinamik adımı sonrası enerji değerlerini hesaplayarak sistemin denge durumuna gelmesini sağlayacaktır. Sistemin dengeye gelmesi yani sistemin normal dünyada bulunmayı tercih edeceği en kararlı olduğu duruma gelmesi hesaplanması gereken fiziksel sonuçlar için önem arz etmektedir. Sistemi temsil eden bu hareket denklemlerini çözmek için farklı yöntemler bulunmaktadır. Bu denklemler, Newton dinamiği veya Hamiltonyen dinamiği ile elde edilerek hesaplanır. Moleküler dinamik yönteminde ayrıca seçilen potansiyelin enerji ifadesinin önemi büyüktür çünkü sistemin davranışını o belirler. Bu sayede atomik simülasyon metotları olarak tanımlanan geniş ölçekli hesaplamalarla, etkileşen atomların yapısal, enerjik ve dinamik davranışları her adımda veya belli aralıklarında gözlemlenebilmektedir.

Gözlemlenmiş davranışlar programlama dillerinde yazılan analiz programları ile incelenerek sistemin durumunu anlaşılır hale getirip, öğrenmek



Şekil 2.2. Moleküler dinamik simülasyonu akış şeması

istediğimiz verileri bize sunmaktadır. Bu çalışmada da ücretsiz lisansa sahip olan LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [58] isimli klasik moleküler dinamik kodu kullanılarak moleküler dinamik hesaplamaları yapılmıştır. Hesaplamalar sonuçlarından elde edilen verilerde sistemlerimizin örgü sabitleri ve termal taşınım özellikleri incelenmiştir.

2.1.2. Green - Kubo Metodu

Malzemeler üzerinde ısı elektronik ve örgüsel olmak üzere temelde iki farklı mekanizma vasıtası ile iletilir. Elektronik iletim, malzeme içerisindeki serbest elektronların etkileşimi yoluyla ısı iletim mekanizmasıdır ve metaller dışında tüm malzemelerde örgüsel iletkenlik ile karşılaştırıldığında ihmal edilecek kadar düşüktür. Bu tez kapsamında ilgileneceğimiz örgüsel iletkenlik ise atomik salınımların (fononlar) harmonik olmayan etkileşimi yoluyla ısı iletimi mekanizmasıdır. Örgüsel termal iletkenlik moleküler dinamik benzetimleri sonucunda elde edilen fiziksel veriler kullanılarak farklı yöntemler ile hesaplanabilir fakat deneysel veriler ile uyumluluğu açısından genelde iki yöntem ön plana çıkar; Denge dışı moleküler dinamik hesapları çerçevesinde Fourier kanununun kullanılması (Direkt Metot) ve Denge moleküler dinamik benzetimleri çerçevesinde Green-Kubo yönteminin kullanılması (Green-Kubo Metodu). Direkt metot ile, sonlu sistemlere uygulanabilen denge dışı moleküler dinamik hesapları sonucunda elde edilen termal iletkenlik değeri, termal gradyan uygulanan bölgedeki atom sayısı, termal gradyan oluşturma yöntemi (Nose-Hoover, Langevin gibi) ve uygulanan termal gradyan miktarına oldukça bağlıdır ve hesaplar sırasında etkilerin çok dikkatli bir şekilde değerlendirilmesi gerekmektedir [59]. Direkt metot, deneysel yöntemle benzer olarak, sistemin iki ucuna sıcaklık farkı uygulanarak birim zamanda sistem üzerinden geçen ısı enerjisinin saptanması ve termal taşınım özelliklerinin fenomenolojik Fourier kanunu kullanılarak belirlenmesinden ibarettir [60]. Bu yöntem belirli uzunluktaki malzemelerin termal taşınım özelliklerini hesaplama açısından son derece elverişlidir. Green-Kubo yöntemi kadar kesin sonuç vermeyen bu yöntemin uygulanması esnasında ısı farkının miktarı, sabit sıcaklık bölgelerindeki atom-

ların sayısı ve termostat parametreleri gibi girdilerin termal taşınım üzerindeki etkilerinin minimuma indirilmesi için birçok test benzetimi yapmak gerekmektedir.

Green-Kubo yöntemi, malzemelerin termal taşınım özelliklerinin periyodik uç yöntemi ile sabit sıcaklık benzetimlerinin yapılması sonucu belirlenmesidir. Green-Kubo teorisine göre, bir malzemenin termal taşınım tensörü sistemin moleküler dinamik benzetimi ile hesaplanan ısı akım korelasyon fonksiyonu cinsinden,

$$K_{\mu\nu} = \frac{1}{Vk_B T^2} \int_0^\infty \langle J_\mu(0)J_\nu(t) \rangle dt \quad (2.2)$$

şeklinde yazılır. Burada, J ısı akımını, ve x, y, z cinsinden vektör bileşenlerini, V sistem hacmini, k_B Boltzmann sabitini ve T de sıcaklığı ifade eder. Denge moleküler dinamik benzetimleri sırasında ısı akım korelasyonu ise

$$J = \sum_{i=1}^N \epsilon_i v_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} r_{ji} (f_{ij}^i \cdot v_i) \quad (2.3)$$

yukarıda gösterilen eşitlik sayesinde hesaplanır [61]. Bu eşitlikte v_i atom hızlarını, r_{ij} yakın komşu çift mesafesini, f_{ij} kullanılan potansiyelden hesaplanan, i, j atomları arası kuvvetleri, ϵ_i ise atomun toplam enerjisini ifade eder ve

$$\epsilon_i = \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} U_{ij} \quad (2.4)$$

şeklinde yazılır. Burada v_i atom hızlarını, m_i atom kütlelerini U_{ij} ise atomlar arası etkileşim potansiyelini ifade eder.

Özet olarak Green-Kubo yöntemi, moleküler dinamik benzetimleri ile vektörel ısı akım korelasyon fonksiyonlarının (J) hesaplanması ve hesaplanan J kullanılarak örgüsel termal taşınım tensörünün belirlenmesinden ibarettir. Green-Kubo yöntemi ile malzemelerin uzunluk ile yakınsamış termal taşınım özellikleri direkt yöntemde olduğu gibi birtakım girdi değerlerine bağlı olmaksızın oldukça net bir kesinlikle belirlenir fakat klasik tanımı ile sonlu ve periyodik sistemlere uygulanamaz. Bu tez çalışmasında ise, Green-Kubo yöntemi sonlu ve periyodik olmayan sistemlerde denge moleküler dinamik

metodu ile ısı iletkenliğinin hesaplanması üzerine olmuştur. Bu hesaplama yöntemi Einstein'ın orta nokta yer değişiminin karesi yönteminin kullanılması ile mümkün olmuştur.

Malzemenin boyutları küçüldükçe, fonon sönümlenme sürecinde büyük boyutlu malzemeler ile karşılaştırıldığında farklılıklar oluşmaya başlar. Büyük hacimli malzemelerde fonon taşınımı zaman içerisinde Markovian veya yayınım sürecine ulaşır. Bu aşamada fononlar önceki çarpışmalar nedeniyle ilk andaki özelliklerine dair belleklerini kaybetmişlerdir. Büyük hacimli malzemeler üstünde yapılan ısı iletkenlik ölçümleri bu aşamanın sonucudur. Daha küçük bir malzemenin boyutları fononların bu aşamaya kadar seyahat etmesine izin vermiyorsa ölçülen ısı iletkenliği aynı malzemenin büyük hacimli örneğinden farklıdır. Gözlemlenen durumun sebepleri sırasıyla şöyle açıklanabilir, hacmin küçülmesi nedeniyle büyük dalga boyuna sahip bazı fononlar artık sistemde barındırılmaz ve fononlar yeterince çarpışma yaşamadan yüzeye ulaşır ve yüzeye çarpışır. Bu koşullarda Green-Kubo yöntemi ile ısı iletkenliği hesaplanırken ısı akım korelasyonları üzerinden integralin üst sınırının belirlenmesinde çelişkiler çıkmaktadır. Einstein orta nokta yer değişiminin karesi yönteminin ısı iletimine uygulanması ile nano yapıların ısı iletkenliğine dair tutarlı sonuçlar elde edilebileceği Kınacı ve ark. [61] tarafından gösterilmiştir. Bu yöntem sayesinde bu tez çalışmasındaki hesaplamalar gerçekleştirilmiştir.

2.2. Simülasyon Detayları

Daha önce bahsettiğimiz üzere, moleküler dinamik simülasyonlarını gerçekleştirmek üzere herkesin kullanımına açık geliştirilebilir bir program olan LAMMPS isimli klasik moleküler dinamik kodu kullanıldı. Bu sayede, gerekli görüldüğü durumlarda LAMMPS kodunun baz halinde gelen bazı modülleri modifiye edilerek program kişiselleştirilmiştir. Moleküler dinamik simülasyonu kullanılarak hesaplanan fiziksel parametrelerin geçerliliği simülasyon sırasında kullanılan parçacıklar arası etkileşim potansiyeline kuvvetli bir şekilde bağlıdır. Bu yüzden Si ve Ge sistemleri için geçerliliği literatürde defalarca test edilmiş

Tersoff [62] tipi etkileşim potansiyeli kullanılmıştır.

Simülasyonu yapılacak her yapının öncelikle denge durumundaki örgü parametresi tayini gerçekleştirilmiştir. 300 K sıcaklığında yapıların her üç yönde periyodik sınır koşullarına sahip olacak şekilde, 0.5 femtosaniye zaman adımlarında NPT izotermal-izobarik ensemble ile yani N parçacıklı sabit basınç (P) ve sabit sıcaklıkta (T) tüm bu sabitlikler korunarak 1,000,000 adımda hesaplamaları yapılmıştır. Bu hesaplamalar sonucu ortaya çıkan verilerden, o yapının 300 K sıcaklığında sahip olacağı düşünülen örgü parametre değerleri belirlenmiş ve yapılar o örgü sabitleri kullanılarak yeniden oluşturulmuştur. Bu denge durumları belirlenmiş olarak oluşturulan yapıların daha sonra termal taşınım özelliklerini belirleyeceğimiz hesaplarına geçilmiştir.

Termal iletkenlik tayini ise, denge durumları belirlenmiş yapıların 300 K sıcaklığında moleküler dinamik hesaplamaları ile gerçekleştirilmiştir. Tezin tamamında aksi belirtilmedikçe yapılan hesaplamalar 300 K sıcaklığında yapılmıştır. Öncelikle sistemler 0.5 femtosaniye zaman adımları ile 1,000,000 adımda NVT kanonik ensemble ile yani N parçacıklı sabit hacimli (V) ve sabit sıcaklıkta korunacak şekilde denge durumları bu şartlar altında sağlandıktan sonra, yine 0.5 femtosaniye zaman adımları ile veri alacağımız moleküler dinamik hesaplama kısmına geçilmiştir. Bu kısımda 6,500,000 adımda NVE mikrokronik ensemble, N parçacıklı sabit hacim ve sabit enerji korunacak şekilde sistemlerin simülasyonu yapılmıştır. Burada önemli olan sabit enerjiyi yapının koruyup koruyamamasıdır. Eğer denge şartları tam olarak sağlandıysa, sistem gerçek dünya yasası olan her sistem sahip olabileceği en düşük enerji seviyesinde bulunmak ister yasasına uyar ve bu şekilde yaptığımız simülasyonların doğruluk payından emin olmuş oluruz. Bu toplamda 3.75 nanosaniye süren simülasyon sonucunda termal iletkenlik tayini yapmak üzere verilerimizi almaktayız. Her bir sistem için aksi belirtilmediği takdirde doğruluk payı yüksek olacak şekilde 10 (on) farklı başlangıç atom hızı değerleri için simülasyon yapılmış ve verilerin ortalaması alınmıştır. Termal iletkenlik değerleri ise bir önceki kısımda bahsetmiş olduğumuz Einstein'ın termal iletkenlik ilişkisini kullanılarak elde edilmiştir. Bu bahsettiğimiz koşullardan farklı koşullarda simülasyon yaptığımız

mız tek sistem olan yığın silisyum-germanyum alaşımı sistemi o bölümde hem hatırlatma amaçlı hemde hangi koşullarda simülasyon yapıldığını belirtmek üzere bölüm içinde anlatılmıştır.

Simülasyonlar yapılırken sistemlerin üretilmesine ve incelenmesine yardımcı olan programlar bulunmaktadır. Bu amaçla, yapılar hazırlanırken doğruluğunu kontrol etmek için ve aynı zamanda simülasyon sırasındaki davranışlarını görselleştirmek üzere VMD (Visual Molecular Dynamics) [63] programı kullanılmıştır. VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis) [64] programı da ayrıca sistemleri üretirken ve kontrol ederken görselleştirme amaçlı kullanılmıştır. Bunun dışında elde edilen sonuçlar sonrasında, her yapı için on değer bulunduğundan ortalaması ve hata payı SEM (standard error of the mean) yani ortalamanın standart hatası isimli istatistik metodu kullanılarak hesaplanmıştır.

3. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu bölüm iki kısımdan oluşmaktadır. Öncelikle Si-Ge alaşımlarının termal taşınım özellikleri hem yığın hem de nanoteller olarak incelenecektir. Ardından Si-Ge süper örgü yapılarının termal taşınım özellikleri hem yığın hem de nanoteller olarak incelenecektir.

3.1. Silisyum-Germanyum Alaşımları

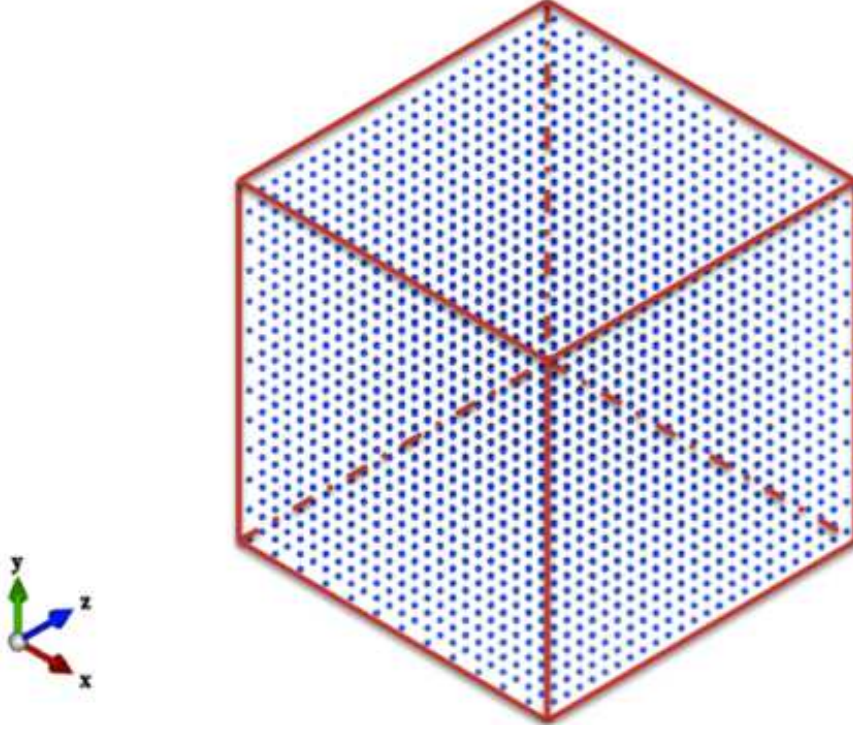
Çalışmalarımızın bu aşamasında öncelikle Si-Ge alaşımları yığinsal olarak basitçe incelenmiştir. Ardından silindirik nanoteller de germanyum içeriğinin termal iletkenliğe etkisi incelenmiş, bu kısmın son çalışması olarakta alaşımlama etkisi dikdörtgensel nanotellerde incelenmiştir.

3.1.1. Yığın $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$

İlk olarak, iyi bilinen ve literatürde çok çalışılmış yığın $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sistemi ile hem potansiyelimizi test etmeye, hem de sonuçlarımızın doğruluğu hakkında bir görüş almaya çalıştık.

Kristal yapısı kübik elmas olan saf silisyum yapısı $12 \times 12 \times 12$ süper hücre olarak oluşturuldu (Şekil 3.1.). Oluşturulan saf silisyum sistem moleküler dinamik simülasyonlarını kullanarak çözüldü. Ardından da bu sisteme farklı konsantrasyonlarda germanyum katkılanarak silisyum germanyum ($\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$) alaşımları oluşturacak şekilde sistemler kuruldu ve bu sistemlerin yaratabileceği farklılıklar göz önünde bulundurularak hesaplar genişletildi. En son olarak da saf germanyum sistemi moleküler dinamik simülasyonlarını kullanarak çözüldü. Moleküler dinamik (termal iletkenlik) hesaplamaları modifiye edilen LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) programı kullanılarak gerçekleştirildi. Hesaplarımızda termal iletkenlik kontrol mekanizmalarının anlaşılması amacıyla yönelik olarak, deneysel çalışmalar ile en kolay karşılaştırma yapabileceğimiz 300 K sabit sıcaklık kullanıldı. $\text{Si} - \text{Si}$, $\text{Ge} - \text{Si}$, $\text{Ge} - \text{Ge}$ atomlarının etkileşimleri ise bahsetmiş olduğumuz Tersoff potansiyeli

kullanılarak yapılmaktadır.

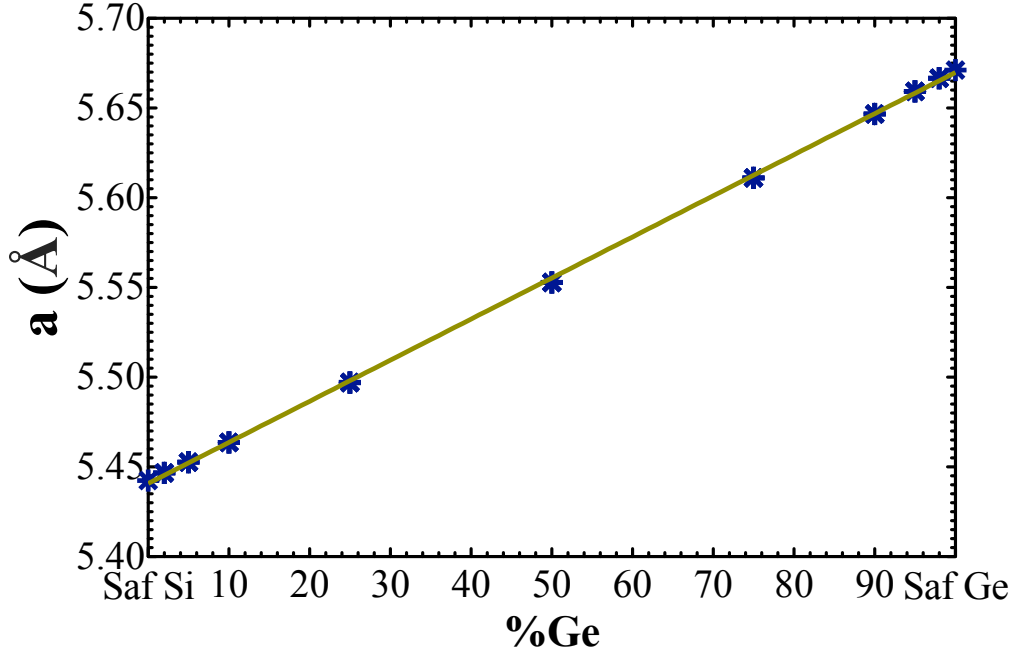


Şekil 3.1. 12x12x12 Kübik elmas silisyum süper hücresi

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sistemlerinin 0.00 (saf silisyum), 0.02, 0.05, 0.10, 0.25, 0.50, 0.75, 0.90, 0.95, 0.98, 1.00 (saf germanyum) gibi farklı x değerlerine karşılık gelen denge örgü sabitleri, 300 K sıcaklığında, moleküler dinamik simülasyonları ile belirlenmiştir.

Hesaplar sonucunda elde edilen örgü sabiti değerleri literatürde ki değerlerle uyumlu olup [65], ileride yapılacak olan hesapların güvenilirliğini belirtmiştir (Şekil 3.2.). Yapıdaki germanyum oranı arttıkça hücrede genişleme eğilimi olduğu ve bu eğilimin lineer olduğu açıkça gözükmemektedir. Elde edilen lineerlik, sabit sıcaklıkta kristal örgü parametreleri ile alaşım konsantrasyonu arasında lineer ilişki olduğunu ispatlayan, Vegard yasasına [66] bire bir uymaktadır.

Daha sonra denge durumu doğru olarak sağlanmış yapıların, termal iletkenlik tayini için gerekli hesaplara başlanmıştır. Sistemler 0.5 fs zaman adımları ile 1,000,000 adımda NVT ensemble ile denge durumuna getirilmiştir. Ardından yine 0.5 fs zaman adımları ile 6,500,000 adım NVE ensemble ile

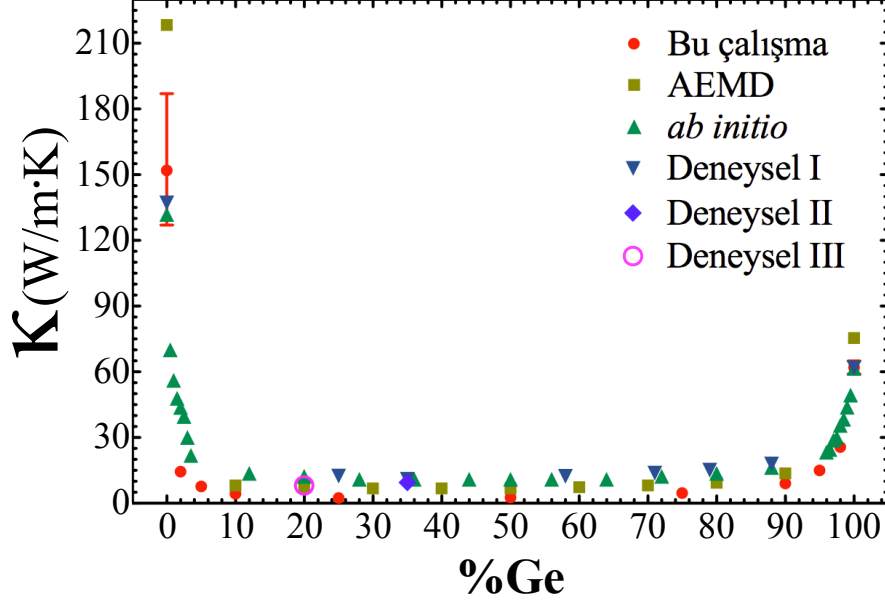


Şekil 3.2. Örgü sabitine karşın germanyum yüzdesi grafiği

sistem simülasyonu yapılmıştır. Altı farklı başlangıç atom hızı değerleri için yapılan simülasyonların ardından örgünün termal iletkenliği method bölümünde detaylı olarak açıklanan Einstein termal iletkenlik ilişkisi kullanılarak elde edilmiştir.

Sistemlerimiz izotropik olduğundan yöne bağımsızlığı sayesinde her yöndeki termal iletkenlik değerlerinin ortalaması alınmış olup, bunun sonucunda yığın sistem için kompozisyona karşı termal iletkenlik grafiği Şekil 3.3. de gösterilmiştir. Saf silisyum için termal iletkenlik katsayısı $152 \pm 15 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, saf germanyum için ise $62 \pm 3 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ olarak bulunmuştur. Bu değerler literatürde bulunan değerlerle ve deneysel çalışmalarla bire bir uyumludur. Alaşımlar içinde yaptığımız bu çalışma için literatürdeki diğer deneysel [11, 67, 68] ve hesaplamalı [45, 69] çalışmalar ile karşılaştırılmıştır. Karşılaştırma sonucu sonuçlarımızın çok uyumlu olduğu ve çalışmalardaki sonuçlar ile bizim sonuçlarımızın germanyum yüzdesine karşın termal iletkenlik değerine bağlı olan eğilimlerinin paralel olduğu gözlemlenebilir. Şekil 3.3. şunu gösteriyor, az miktarda germanyum katkısı ile silisyum yapısının termal iletkenliğinin çok etkili bir biçimde düştüğü ve Si-Ge alaşımlarının termal iletkenlik değerlerinin

saf yapılarına göre çok düşük olduğu söylenebilir. Bu davranıştaki en etkili mekanizmanın saçılım mekanizmaları ile kütle düzensizliği olduğu söylenebilir.



Şekil 3.3. Yığın Si-Ge alaşımının termal iletkenliğe karşın germanyum yüzdesi grafiği ile bu konuda daha önce yapılmış deneysel ve hesaplamalı çalışmalar

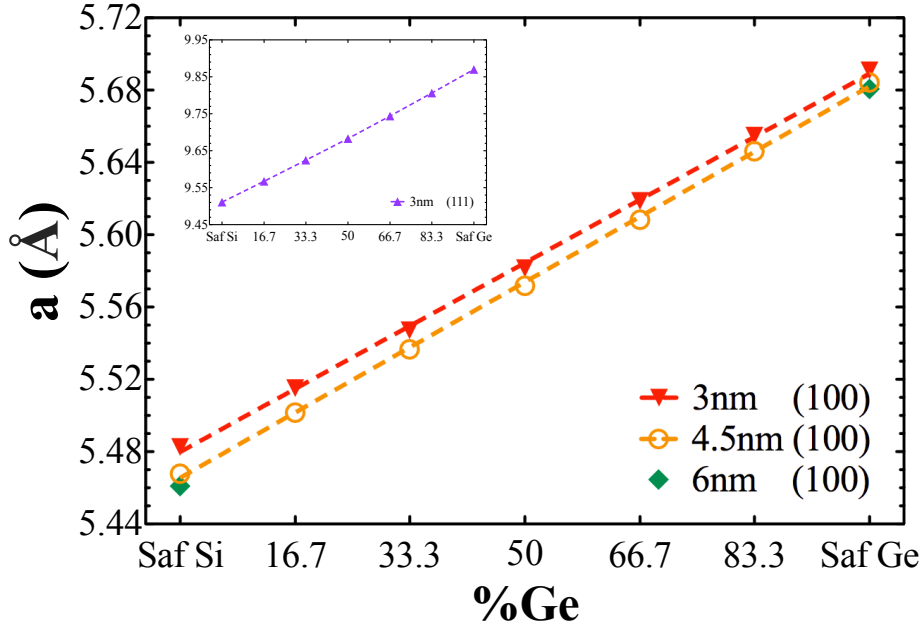
Bu yapmış olduğumuz hesaplamalar ile çok iyi bilinen bir sistemi ve kendi hesaplarımızı karşılaştırıp yapacağımız yeni hesaplamalara geçmeden önce yapacağımız yeni hesapların güvenilirliğini test etmiş olduk. Şekilden de anlaşıldığı üzere kullanmış olduğumuz potansiyel ve yöntemimiz gayet iyi ve kabul edilebilir bir hata payı ile çalışmakta ve diğer çalışmalarla uyumluluk göstermektedir. Bu sonuca ulaştıktan sonra nano dünyadaki durumu incelemek üzere nanotel hesaplamalarımıza geçebiliriz.

3.1.2. Silindirik $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Nanoteller

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ nanotelleri bölümünde ilk olarak silindirik nanotelleri ele alınmıştır. Nanoteller 48 birim hücre uzunluğunda farklı yarı çaplarda oluşturulmuştur. Kristal yönlenme farkını incelemek için ayrıca $\langle 100 \rangle$ yönlenmesinin yanında $\langle 111 \rangle$ kristal yönlenmesine göre de yapılar oluşturulmuş ve hesapla-

maları yapılmıştır.

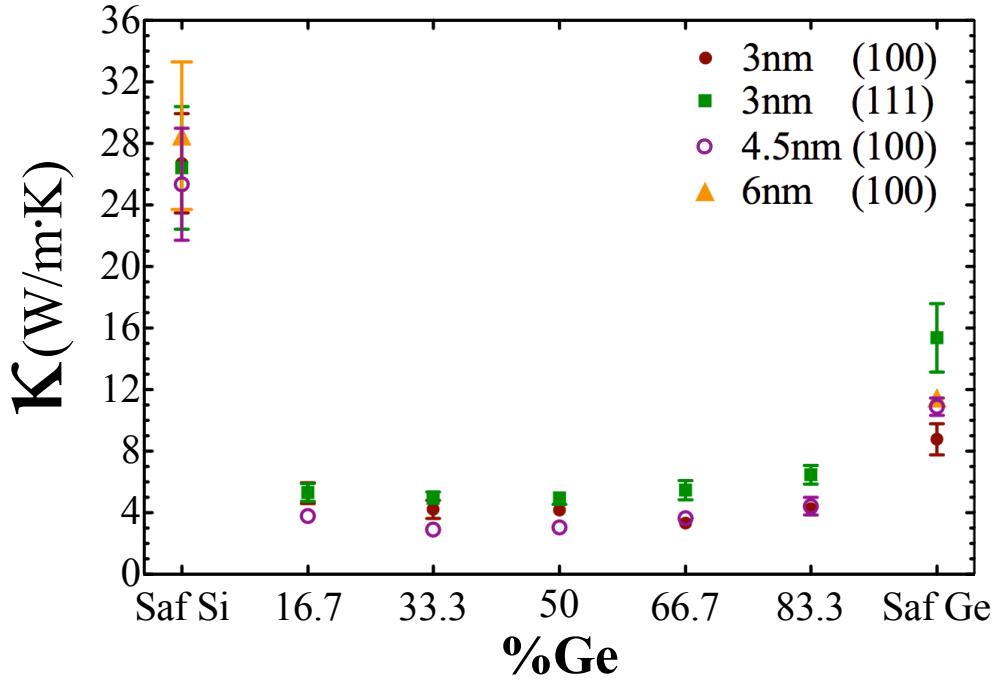
Sistemlerimizin termal iletkenlik tayini hesaplamalarına geçmeden önce doğru sonuçlar elde edebilmemiz için öncelikle denge durumlarındaki örgü parametreleri hesaplamalarına başlandı. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ silindirik nanotel sistemlerinin 0.00 (saf silisyum), 0.167, 0.333, 0.500, 0.667, 0.833, 1.00 (saf germanyum) gibi farklı x değerlerine karşılık gelen denge örgü sabitleri, 300 K sıcaklığında, moleküler dinamik simülasyonları ile belirlenmiş ve sonuçlar Şekil 3.4. de görülmektedir. Buna göre Vegard yasasının nanoboyuttada geçerliliğini her iki yönlenmede de sürdürdüğü görülmektedir. Ayrıca boyuta bağlı bir genişleme gözlenmektedir. Çap boyutu arttıkça atomların sayısı arttığı için birbirine olan bağlanma kuvvetlerinin de artması ile çap boyutuna bağlı bir trend görülmektedir. Bu davranış şöyle özetlenebilir çap boyutu arttıkça sistemler büzüşmektedir ve ayrıca germanyum içeriği arttıkça bu davranışın etkisi silisyuma göre azalmaktadır.



Şekil 3.4. Farklı çaplardaki ve yönlenmedeki (iç grafik <111> yönlenmesi) silindirik nanotel alaşımlarının örgü sabiti değerlerine karşın germanyum yüzdesi grafiği

Ardından, denge durumları belirlenmiş sistemlerin büyüme yönündeki

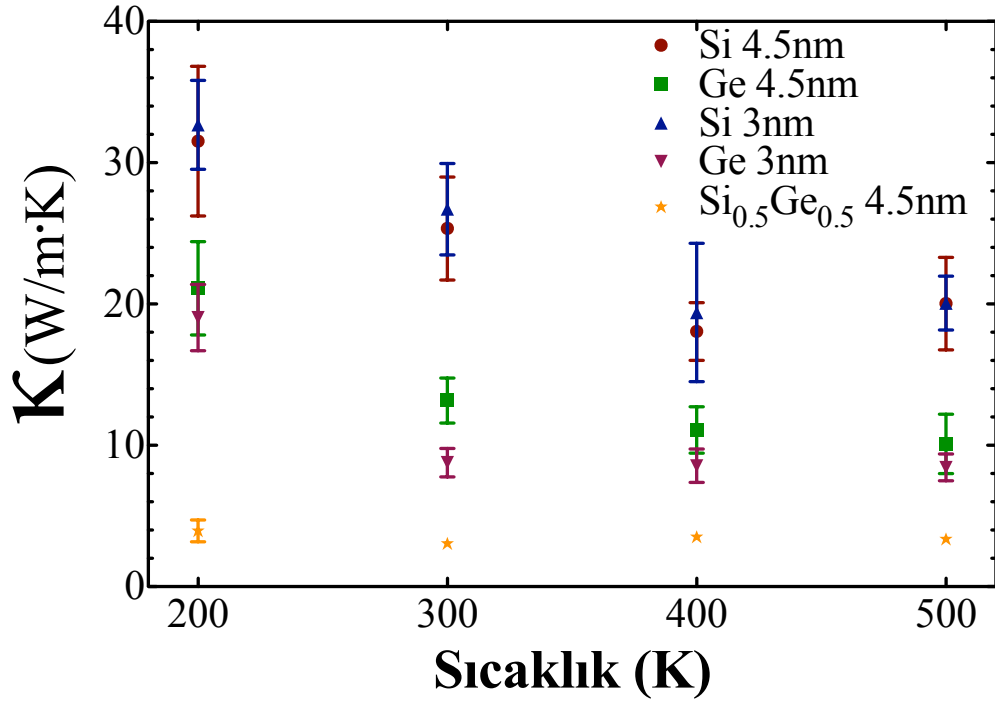
termal iletkenlik deęerleri hesaplanmış ve şekilde gösterilmiştir (Şekil 3.5.). Yine burada görüldüğü gibi aynı yönelime sahip saf yapılarda termal iletkenliğin boyuta baęlı bir ilişkisi ortaya çıkmakta, çap boyutu azaldıkça termal iletkenlikte azalma görülmektedir. 4.5 nm çapındaki yapı arada olduđu için hata payı ile birlikte göz yanılmasına sebep olsa dahi, saf silisyum ve germanyum için 3nm ve 6nm <100> yönelimine sahip yapılarda bu durum açıkça görülmektedir. Bunun haricinde yönelime baęlı bir yorumda çıkarılabilir ama bu yorumu alaşımlama etkisinden bahsederken söylemek daha yerinde olacaktır. Boyuta baęlı bu azalma etkisi daha önceki çalışmalarda da görülmektedir. Boyuta baęlı termal iletkenlik deęerlerinin deęişimi ayrıca literatürde Hochbaum ve ark. [13] ve Li ve ark. [24] tarafından silisyum nanotellerde ölçülerek görülmüştür. Burada fononların serbest gidimi sınır saçılmalarından dolayı limitlendiđi için boyuta baęlı azalma görülmektedir.



Şekil 3.5. Farklı çaplardaki ve yönlenmedeki $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ nanotellerinin termal iletkenliğe karşın germanyum yüzdesi grafiđi

Alaşımlama ile termal iletkenliğin etkili bir biçimde azaldığı ve sistemlerde en düşük termal iletkenlik deęerinin $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ civarında görüldüğü

gösterilmiştir. Yığın sistemlerde olduğu gibi saçılım mekanizmaları ve kütle düzensizliği yüzünden bu davranış gözükmemektedir. Bu mekanizmalara ek olarak boyut yönünden kısıtlamalarda eklenildiği zaman nanotellerde yığın malzemelere göre daha düşük termal iletkenlik gözlemlenebilir. Yöneline bağlı bir yorum yapmak gerekir ise, diğer sonuçlardan bahsetmeden erken olsa dahi, $\langle 100 \rangle$ kristal yönelimi $\langle 111 \rangle$ kristal yönelimine göre daha tercih edilebilir ve daha verimli olduğu söylenebilir çünkü $\langle 111 \rangle$ yönünde büyütülmüş yapılarda termal iletkenlik değerleri hem saf yapılarda hemde alaşımlanmış yapılarda yükseklik göstermektedir. Son olarak beklenildiği üzere saf germanyum nanotelleri saf silisyum nanotellerine göre daha düşük termal iletkenliğe sahiptir.



Şekil 3.6. Bazı silindirik $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ nanotellerinin sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranışı

Daha sonra, bu sistemlerden bazılarının sıcaklığa bağlı termal iletkenlik değeri değişimi de incelendi. Şekil 3.6. da görüldüğü üzere, saf silisyum ve saf germanyum sistemlerinde sıcaklığa bağlı bir düşüş gözlenmekte aynı zamanda boyuta bağlı, çap azaldıkça termal iletkenliğin azaldığına dair bir eğilim net olmamakla birlikte çıkarılabilmektedir. $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ silindirik nanotelinde

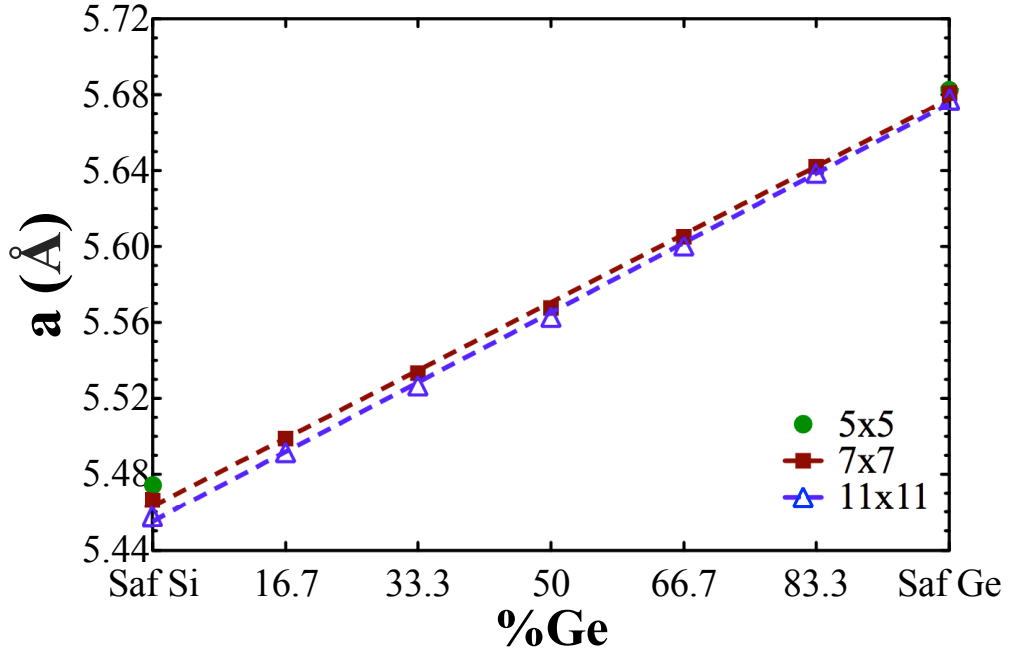
ise sıcaklığın termal iletkenliğin sıcaklıktan bağımsız olduğu görülmektedir. Sıcaklıktan etkilenen fononların bu sistemlerde barınmadığı veya üretilmediğinden kaynaklı olabilecek bu durum termal iletkenliğin sıcaklığa bağlı bir davranış sergilememesini sağlamaktadır.

3.1.3. Dikdörtgensel $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Nanoteller

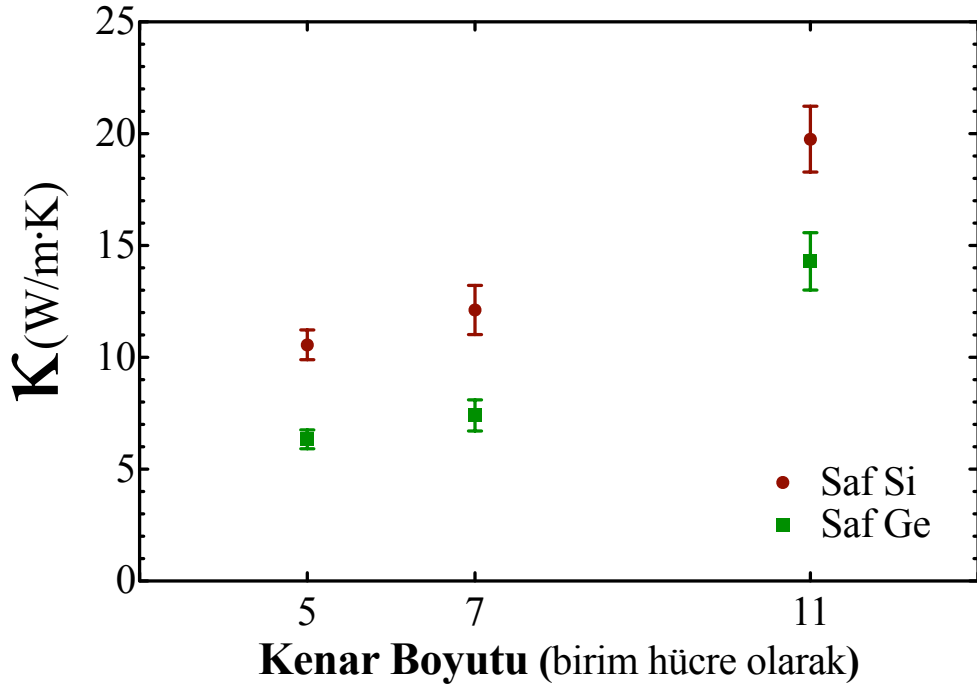
$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ nanotellerin ikinci kısmı olarak dikdörtgensel nanoteller ele alınmıştır. Nanoteller 48 birim hücre uzunduğunda ve farklı yüzey alanları veya kenar uzunluklarında oluşturulmuştur. Kristal yönlenme farkını bir önceki kısımda gerçekleştirdiğimiz için bu kısımda iyi sonuçlar veren yönlenme yani $\langle 100 \rangle$ yönünde büyütülmüş yapılar hazırlanılmıştır.

İlk olarak denge durumları hesaplamaları yapılmış ve bu hesaplamalar sonucu sistemlerin denge durumlarındaki örgü parametreleri çıkarılmıştır. Bu kısımda $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ dikdörtgensel nanotellere yapımız kübik yapı ve büyütme yönümüz $\langle 100 \rangle$ olduğu için kare nanoteller de diyebiliriz. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ karesel nanotel sistemlerinin kenar uzunlukları sırasıyla 5 birim hücre, 7 birim hücre ve 11 birim hücre seçilmiş, 300 K sıcaklığında, 0.00 (saf silisyum), 0.167, 0.333, 0.500, 0.667, 0.833, 1.00 (saf germanyum) gibi farklı x değerlerine karşılık gelen denge örgü sabitleri hesaplanmış ve elde edilen değerler Şekil 3.7. de gösterilmiştir. Germanyum oranı arttıkça sistemin genişlemekte olduğunu ve bu genişlemenin lineer olduğu açıkça görülmektedir. Vegard yasası bu tür sistemlerde de devam etmekte olduğu hesaplamalarımız ile beraber yeniden kanıtlanmıştır. Ayrıca silindirik nanotel alaşımlarında gördüğümüz davranışın aynısını burda da görmekteyiz. Yüzey alanı arttıkça veya kenar uzunlukları arttıkça örgü parametresi değerinde bir azalma olduğu ve bu azalmanın germanyum içeriği arttıkça etkisini kaybettiği görülmektedir. Benzeri bir yorumla bu davranış yığın atom sayısının artması ile beraber bağlanma kuvvetinin artması ve yüzey atomlarının serbestlik derecesinin azaldığı şekilde yorumlanabilir.

Boyutsal değişimin etkisini daha iyi anlatabilmek için Şekil 3.8. hazırlanmıştır. Termal iletkenliğin boyuta bağlı ilişkisi bu grafikten daha net çıkarıl-

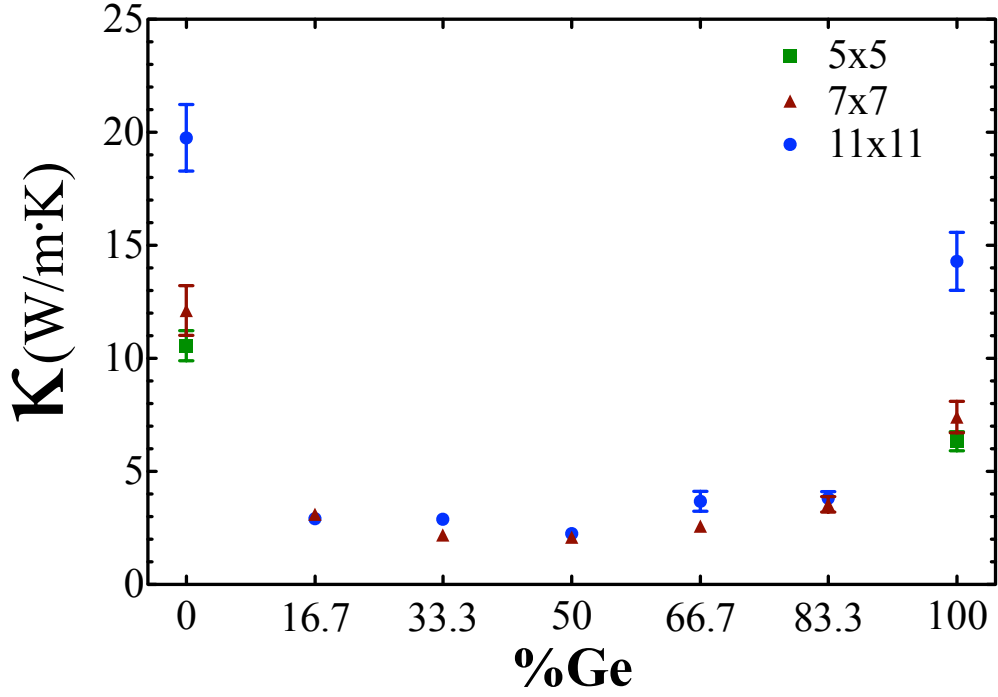


Şekil 3.7. Farklı kenar uzunluklarına sahip karesel nanotel alaşımlarının örgü sabitlerine karşın germanyum yüzdesi grafiği



Şekil 3.8. Saf karesel nanotellerinin kenar uzunluklarına karşın termal iletkenlik değişimi grafiği

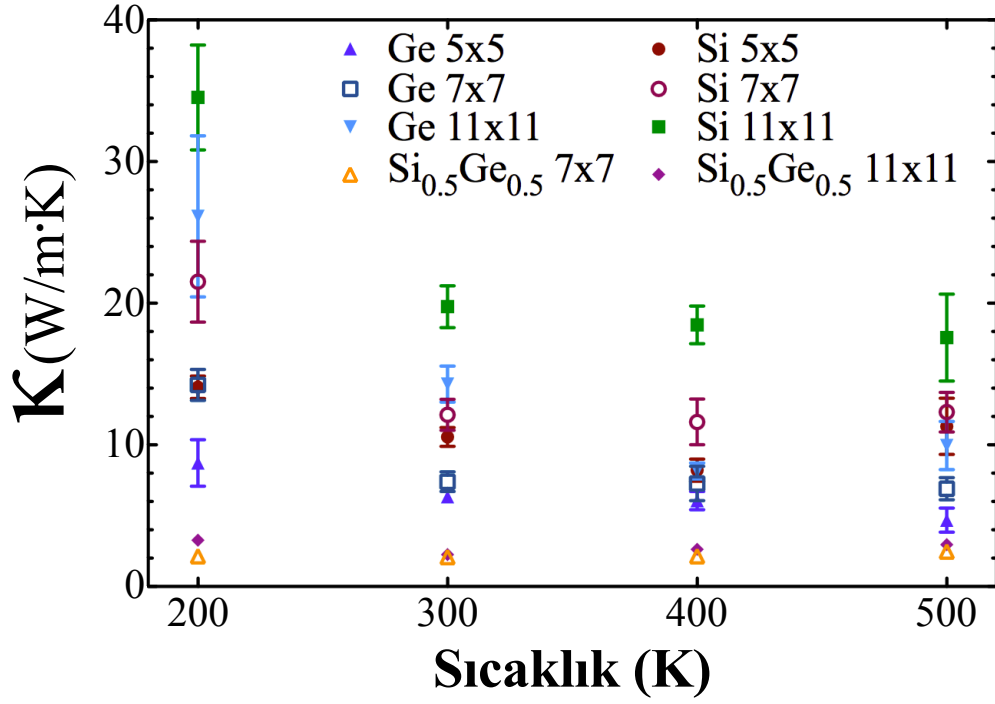
maktadır. Daha önce bahsettiğimiz gibi, saf sistemlerde yüzey alanı yada kenar uzunluğunu arttıkça termal iletkenliğin arttığı net bir şekilde görülmektedir. Ayrıca beklenildiği saf germanyum saf silisyuma göre daha az termal iletkenlik değerine sahiptir ve sistemin boyutuna bağlı olarak saf silisyumun saf germanyumdan daha düşük termal iletkenlik değeri aldığı durumlarda oluşmaktadır. Örneğin, 5x5 Saf Si ile Saf Ge 11x11.



Şekil 3.9. Farklı kenar uzunluklarındaki $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ karesel nanotellerinin termal iletkenliği karşın germanyum yüzdesi grafiği

Şekil 3.9. 48 birim hücre uzunluğuna sahip 7x7 ve 11x11 birim hücre karesel nanotel alaşımlarının germanyum içeriği değişimine göre termal iletkenlik değerlerinin değişimini göstermektedir. Dairesel nanotellerde karşımıza çıkan şekle benzer bir grafik çıkmaktadır. Az miktarda germanyum içeriği katkılanarak $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ yapılarının termal iletkenliğinin yaklaşık %75-80 aralığında düşürülebileceği ve en düşük termal iletkenlik değerinin $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ civarında olduğu net bir şekilde gözükmektedir.

Tüm saf Si ve Ge karesel nanotelleri ile en düşük termal iletkenliği gösterdiğini bildiğimiz $x = 0.5$ için 7x7 ve 11x11 alaşımlarının sıcaklık değişimi-



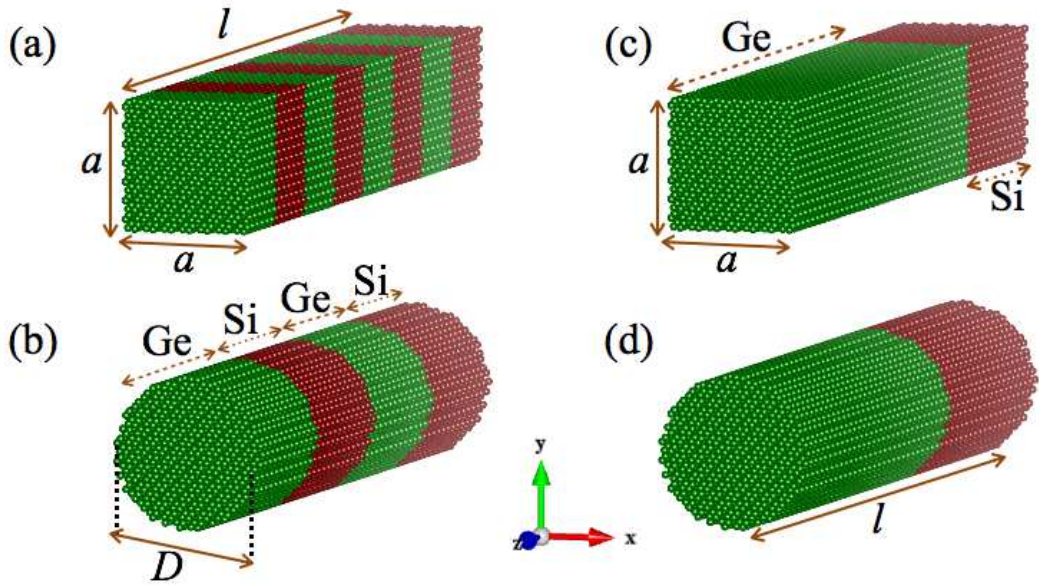
Şekil 3.10. Farklı kenar uzunluklarındaki $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ karesel nanotellerinin sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranışı

ne karşın termal iletkenlik değişimi 200-500 K sıcaklıkları arasında hesaplandı. Şekil 3.10. da görüldüğü üzere, saf silisyum ve saf germanyum karesel nanotelleri sıcaklığa bağlı olarak termal iletkenlik değerinde bir düşüş sergilemekte, boyuta bağlı davranışta aynı zamanda yeniden kendini göstermektedir. $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ karesel nanotellerde ise termal iletkenlik ile sıcaklık arasında bir ilişki olmadığı, boyuta bağlı termal iletkenliğin davranışı yine gözükmemektedir. Bir önceki kısımda benzerini gördüğümüz bu davranışların sebeplerinin aynı olduğu varsayılabilir.

3.2. Silisyum-Germanyum Süper Örgüleri

Bu bölümde silisyum-germanyum süper örgülerinin termal taşıma özellikleri incelendi. Sonuçlardan bahsetmeden önce, bu bölümün içeriği ile ilgili bilgi vermemiz faydalı olacaktır. Süper örgü yapılar hazırlanırken, kendi tanımlamamız ile iki farklı küme olarak oluşturuldu. Bu kümeler sırasıyla

'Periyodik süper örgü yapılar' ve 'Periyodik olmayan süper örgü yapılar'. İlk kümemizde, periyodik olarak silisyum atomları ve germanyum atomları dizilerek epitaksiyel Si/Ge ara yüzüne sahip farklı periyodik süper örgü yapılar oluşturulmuştur. Si-Ge-Si-Ge gibi olduğunu düşünürsek uzunluk bölü periyodisitenin iki katı ($l/2w$) tane Si_w-Ge_w şeklinde gösterilebilecek yapılardır. Bu çalışmadaki gösterimlerde bu yapılar P(w) olarak isimlendireceğiz ve w değeri periyodisite değeri olarak adlandırılacaktır; örneğin P3, periyodikliği üç anlamına gelmekte ve $l/6$ adet sıralanmış üçer birim hücreli silisyum ve germanyumdan oluşmaktadır. İki farklı periyodik süper örgü yapısı Şekil 3.11.a ve b de gösterilmiştir.



Şekil 3.11. Kullanılan 48 birim hücre uzunluğundaki süper örgü yapılarının bazıları (a) dikdörtgen P3 süper örgü yapısı (b) silindirik P12 süper örgü yapısı (c) 12-36 süper örgü yapısı (d) 18-30 süper örgü yapısı

Diğer kümemiz ise, periyodik olmayan süper örgü yapılar olarak adlandırılan ve Şekil 3.11.c ve d de gösterilen yapılarımızdır. Bu süper örgü yapılar birim hücre (BH) olarak gösterimde bulunduğumuz birim hücrelerle ifade edecek şekilde belirli birim hücre sayısında silisyum belirli birim hücre germanyum olacak şekilde, epitaksiyel Si/Ge ara yüzüne sahip farklı periyodik olmayan süper örgü yapılar olarak hazırlanmıştır. Yapılar geri kalan kısmında öncelikle silisyum birim hücresini ifade edecek sonradan germanyum birim

hücresini ifade edecek şekilde belirtilmiştir. Örneğin; 2-46, 2 birim silisyum 46 birim germanyum toplamda $\langle 100 \rangle$ yönünde büyütülmüş 48 birim hücreden oluşmaktadır.

Yapıların isimlendirilmesi ve şekilsel gösterimlerinden sonra, bu bölüm ile ilgili şu bilgileri de vermek doğru olur. Öncelikle dikdörtgensel yapılar hazırlanıp, her yönde periyodik sınır koşulları ile incelenip yığın veya 3 boyutlu süper örgü yapıların analizleri yapılmıştır. Bu kısım ilk kısım olarak karşımıza çıkacaktır. Üçüncü kısım da ise dikdörtgensel yapılar sadece büyütme yönü periyodik sınır koşulu ile incelendiği için süper örgüye sahip dikdörtgensel nanoteller olarak karşımıza çıkacaktır. İkinci kısım ise aynı şekilde sadece bir yönde periyodik sınır koşuluna sahip silindirik yapılar hazırlandıktan sonra, silindirik nanoteller olarak incelenmiş olup karşınıza çıkacaktır. Süper örgü teriminin kendi boyutsal çağrışımından dolayı bir kafa karışıklığı çıkarabileceği için ayrıntılı açıklanmasına ihtiyaç duyulmuş ve bu bilgiler ekstra olarak verilmiştir. Ayrıca bu bölümdeki bazı kısımlarda kristal yönlenmenin süper örgüler üzerindeki etkisini de incelemiş bulunacağız.

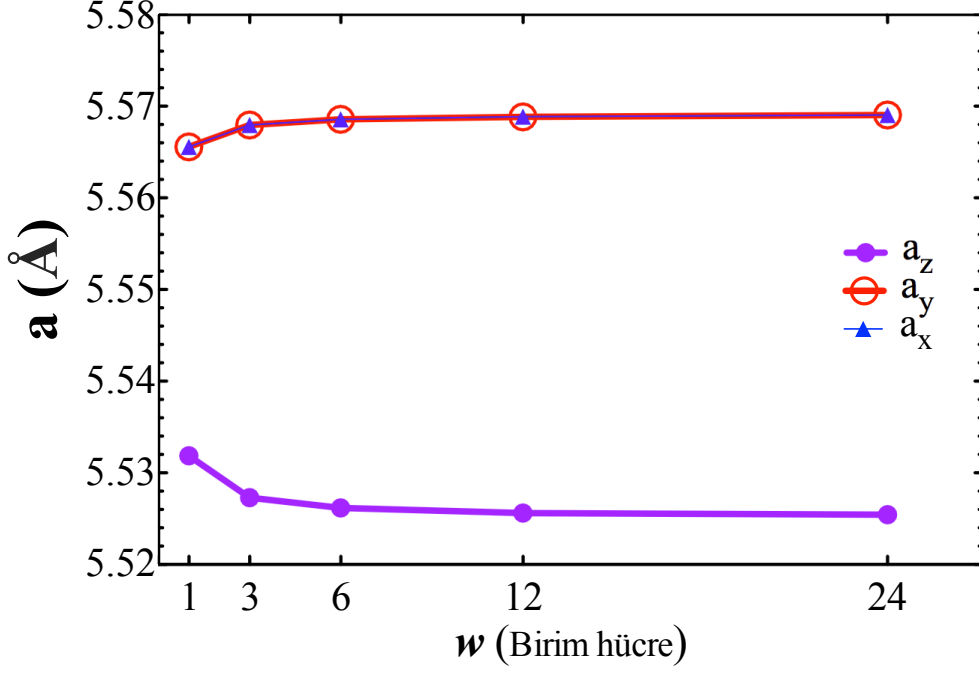
3.2.1. Üç boyutlu Süper Örgüler

Süper örgülerin ilk bölümünde ilk olarak bahsetmiş olduğumuz yığın veya 3 boyutlu süper örgüler incelendi. Hesaplamalarda aynı zamanda kristal yönlenmenin etkisini incelemek üzere bir önceki bölümümüzdeki gibi iki farklı yönlenmede bu etki araştırılmıştır.

-Periyodik süper örgü yapılar

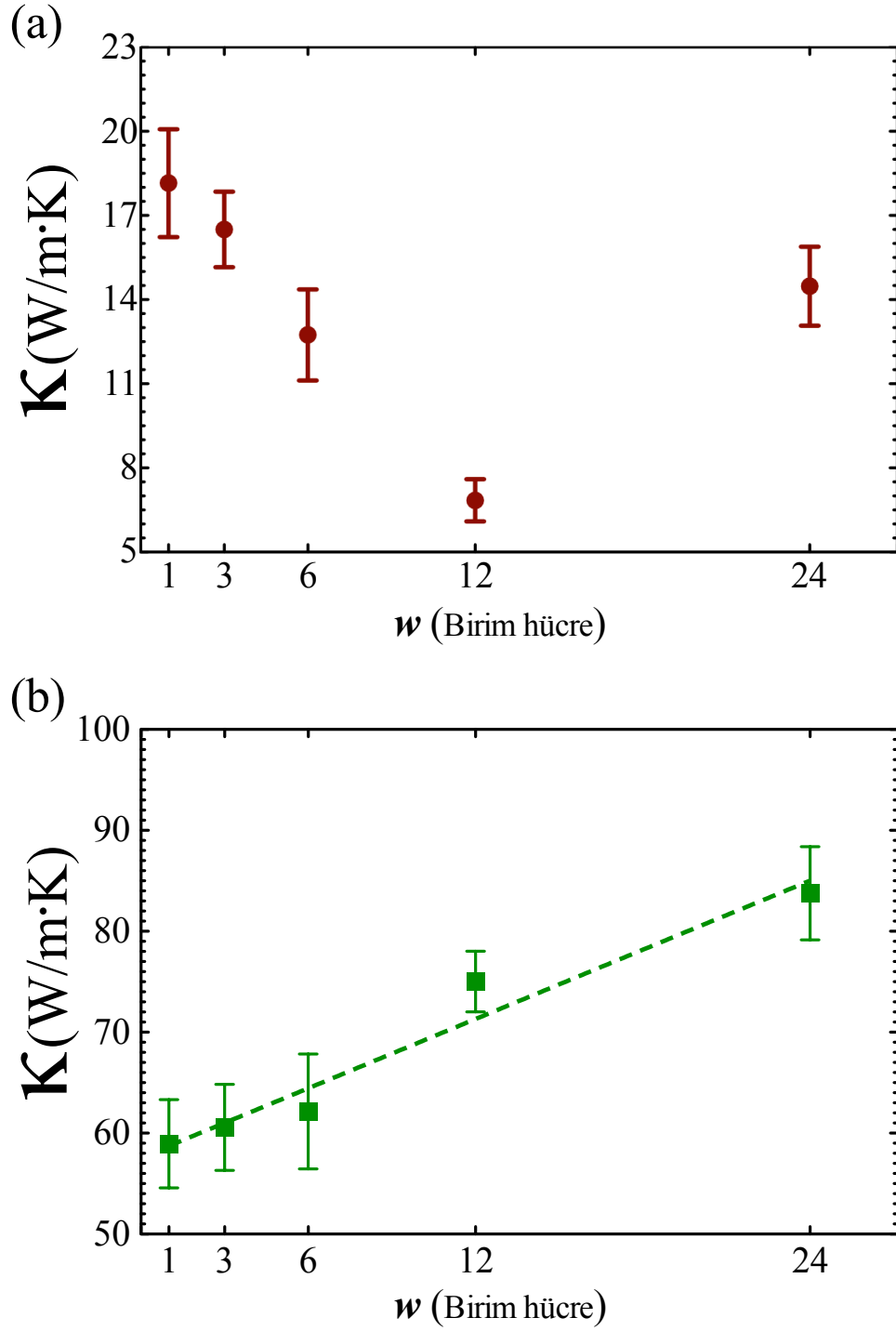
Periyodik süper örgülerde ilk olarak $\langle 100 \rangle$ kristal yönlenmesinde 48 birim hücre uzunluğundaki yapılar farklı periyodisite değerlerinde oluşturuldu. Bu yapıların termal iletkenlik tayini hesaplamalarına geçmeden önce doğru sonuçlar elde edebilmemiz için öncelikle denge durumlarını simüle edecek hesaplamalar yapıp, ardından örgü parametreleri belirlenmiştir. $w = 1, 3, 6, 12, 24$ gibi farklı periyodisite değerlerindeki yapıların tüm yönlerindeki örgü parametreleri hesaplanmış ve Şekil 3.12. de gösterilmiştir. Bu yapılardaki silisyum

ve germanyum atomlarının sayısı sabit kaldığı düşünülecek olursa, bu sonuçlar bize tuhaf bilgiler vermektedir. Öncelikle sistem büyüme yönünde bir daralma, diğer yönlerde ise bir rahatlama/genişleme göstermektedir. Tuhaf bir şekilde de arayüz sayısına bağlı olarak bir davranış görünmektedir. Arayüz sayısı arttıkça büyüme yönü genişlemekte, diğer yönler daralmaktadır.



Şekil 3.12. Periyodisite değerine karşın üç yöndeki örgü parametresi değerleri

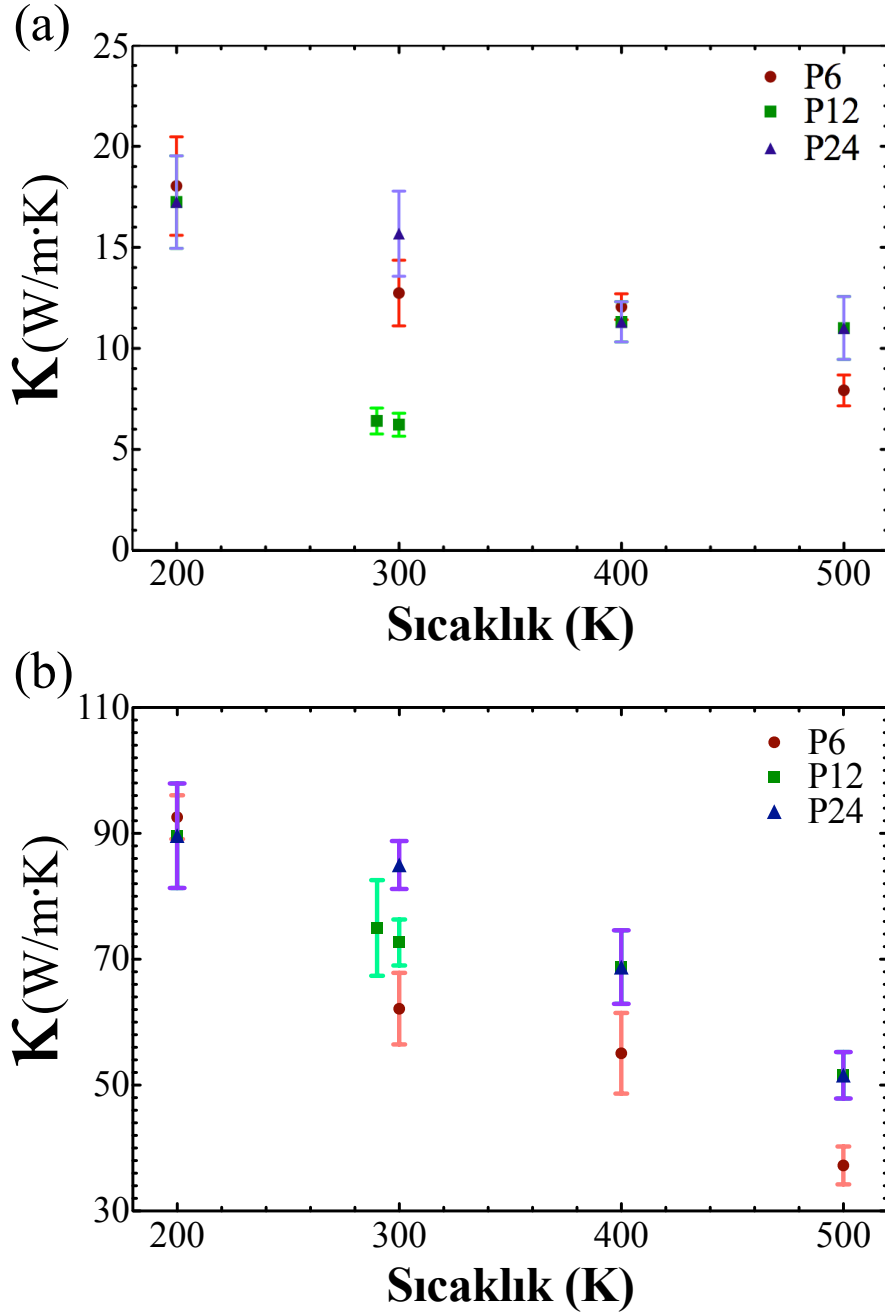
Denge durumları belirlenmiş sistemlerin periyodisiteye bağlı termal iletkenlik değerleri Şekil 3.13. de gösterilmiştir. Büyüme yönü farklı bir grafik, diğer yönlerde ise iki farklı yönün davranışı benzer olduğu için izotropik oldukları düşünülüp ortalamaları alınıp ayrı bir grafik olarak gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü üzere termal iletkenlik değeri büyüme yönünde periyodisite değeri arttıkça önce azalmakta sonra artmaktadır. Hu ve ark. [55] nın süper örgü yapılar için yaptığı çalışmada da bu tür bir davranış gözükmemektedir. Bu alışılmamış anomali olarak söyleyebileceğimiz davranışa ileride değineceğiz. Diğer yönlerde ise beklediğimiz gibi bir davranış görmekteyiz. Arayüz sayısı arttıkça termal iletkenlik değeri azalmakta ve bu azalmadaki davranış ise lineere yakın bir davranış göstermektedir.



Şekil 3.13. Termal iletkenlik değerine karşın süper örgü periyodisite grafiği (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

Büyüme yönündeki en düşük termal iletkenlik değeri ise $w = 12$ de görülmektedir. En yüksek değer ise $w = 1$ yani en çok arayüze sahip, arayüz

saçılımlarının ve kütle düzensizliklerinin en çok görülmesi beklenen yapıda gözükmemektedir.



Şekil 3.14. Bazı süper örgü yapıların sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranışı (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

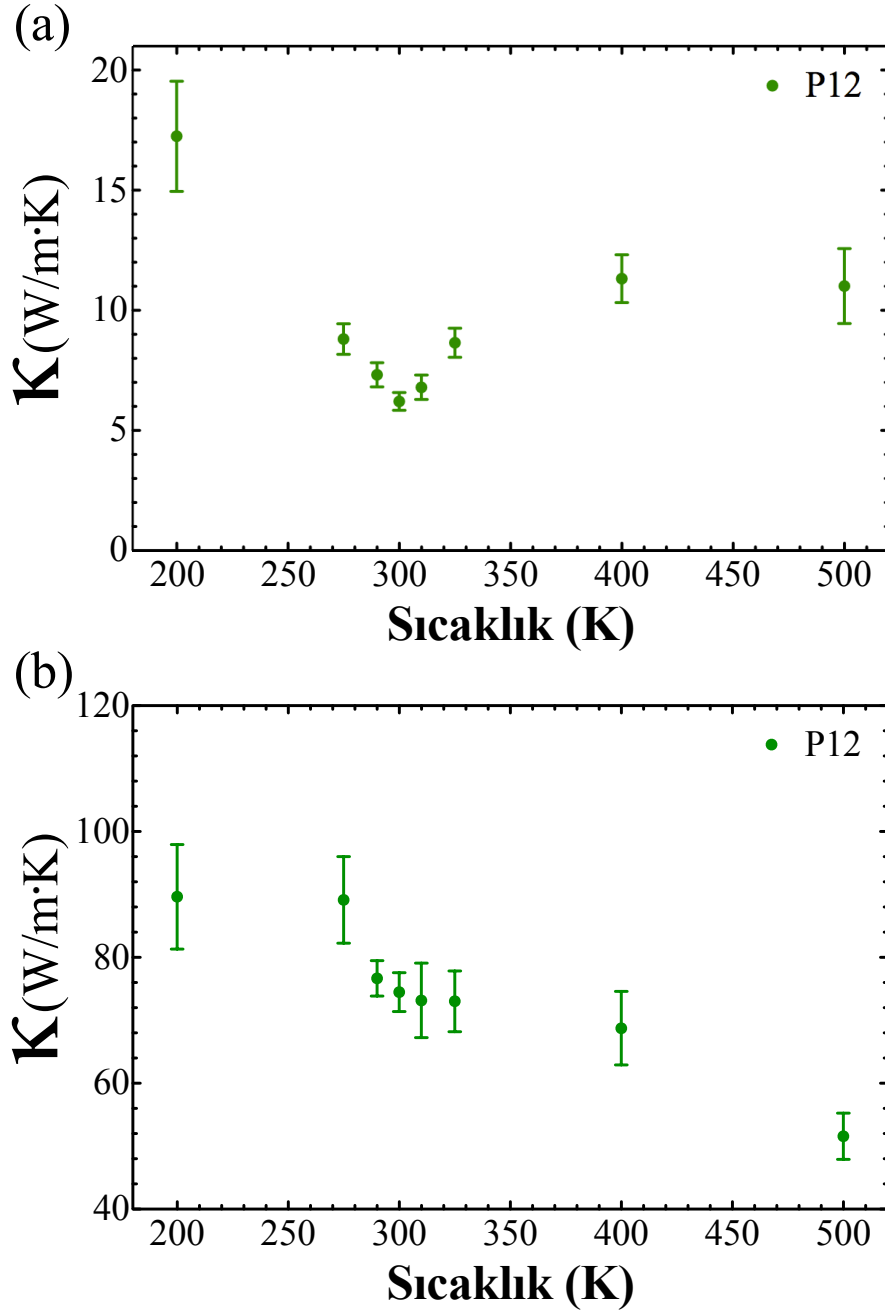
Ardından üç boyutlu süper örgü yapıların sıcaklık altındaki termal iletkenliğinin değişimi incelendi. Şekil 3.14. sıcaklık değişiminin süper örgü

yapılardaki etkisini göstermektedir ve yine büyüme yönü ile diğer yönler üzere iki ayrı grafik bulunmaktadır. Şekil 3.14.b de görüldüğü üzere, diğer yönlerde beklediğimiz davranış sergilenmektedir. Sıcaklık arttıkça termal iletkenlik azalmaktadır ve bu tüm yapılarda gözükmektedir. Şekil 3.14.a ya baktığımız zaman ise beklenen davranışı P6 ve P24'te görmekteyiz. P6 ve P24 süper örgü yapılarında sıcaklık arttıkça termal iletkenlikte lineer bir şekilde azalmaktadır. Lakin, en düşük termal iletkenlik değerini okuduğumuz P12 süper örgü yapısı 200-400-500 K sıcaklıklarında normal bir davranış sergilerken, 300 K ve etrafını göz önünde bulundurunca bir anomali göstermektedir.

Bu yüzden P12 süper örgü yapısında hatalı bir hesaplama yapıp yapmadığımızı öğrenmek için 290 K sıcaklığında fazladan bir küme daha test yapıldı ve şekilde gözükmektedir. Yine benzer sonuçlar elde edildikten sonra bu sonucun tuhaflığını yakından incelemek üzere 300 K etrafında P12 süper örgü yapısı için hesaplamalar yapılması zaruri olmuştur.

Şekil 3.15. bu anomali davranışı detaylı incelemek üzere hem büyüme yönünde hemde diğer yönlerde P12 süper örgü yapısının sıcaklığa karşın termal iletkenlik grafini göstermektedir. Şekilden net bir şekilde gözüktüğü üzere, 300 K civarında bu süper örgü yapısı alışılmadık bir davranış görülmekte ve spesifik bir sıcaklıkta büyüme yönünde en düşük termal iletkenliği göstermektedir. Diğer yönlerdeki sonuçlarda bir gariplik sezilmekte ama yinede beklenilene yakın bir davranış gözükmektedir. Sıcaklık arttıkça termal iletkenlik azalma davranışı göstermektedir. Şekil 3.15.a ise önemli bir grafik olarak bu tez içinde yer almıştır ve bu davranışın neden olduğuna dair üzerine gidilmesi ve sebebinin iyi anlaşılması gerekmektedir. Bu tez çalışmasının amacının dışına çıkan bu anomali davranış gelecekte yapılacak araştırmalar arasında yerini almıştır.

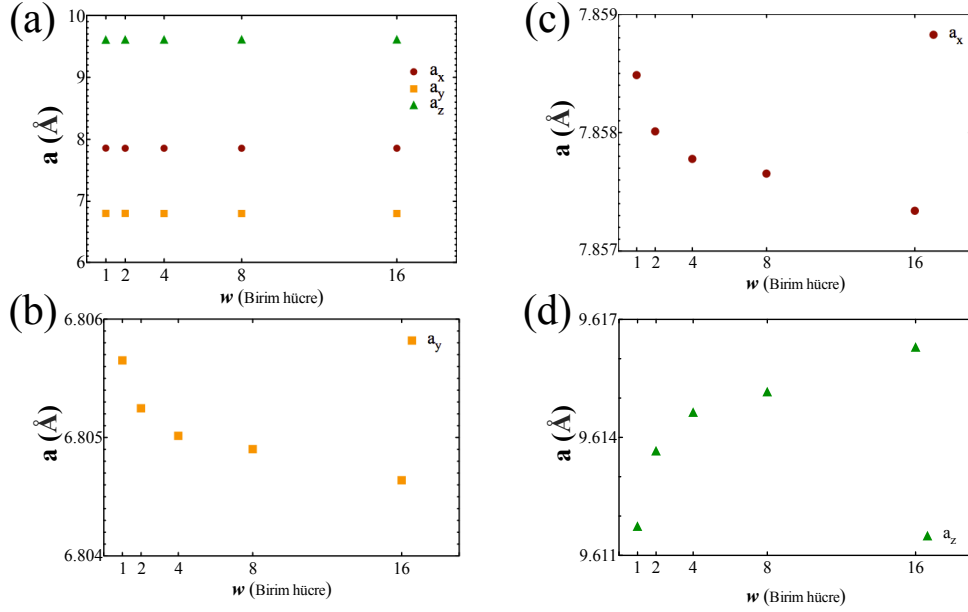
Üç boyutlu periyodik süper örgü yapılarda ayrıca kristal yönelmesinin etkisi de çalışıldı. $\langle 111 \rangle$ kristal yönelmesinde büyütülen süper örgü yapılar hazırlanıp, her yönde periyodik sınır koşullarına sahip olacak şekilde incelendi. Yapıların termal iletkenlik tayini hesaplamalarına geçmeden önce sistemlerimiz denge durumlarını getirilerek, yapılar hakkında doğru sonuçlar alabilmemiz için örgü parametreleri değerleri hesaplandı. $\langle 111 \rangle$ kristal yönelmesinde 32



Şekil 3.15. P12 süper örgü yapısının sıcaklık altında termal iletkenlik özelliğinin detaylı grafiği (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

birim hücre uzunluğundaki süper örgü yapılar $w = 1, 2, 4, 8, 16$ gibi farklı periyodisite değerlerinde hazırlanıp, üç yöndeki örgü parametreleri hesaplandı (Şekil 3.16.).

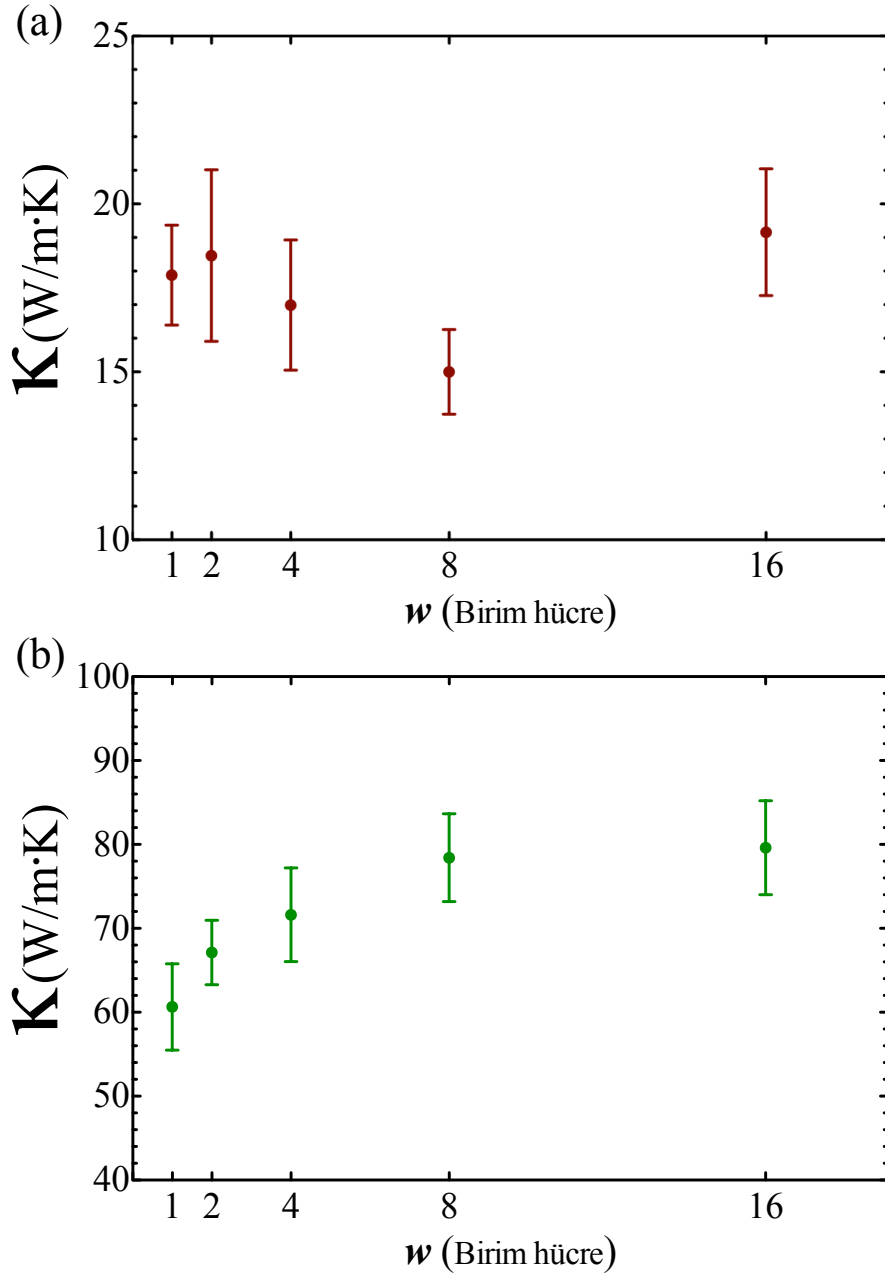
Şekil 3.16.a da görüldüğü üzere, bu yönlendirilmiş süper örgü yapılarında



Şekil 3.16. $\langle 111 \rangle$ süper örgü yapılarının periyodisite değerine karşın (a) üç yöndeki örgü parametresi değerleri. Ayrıca detaylı gösterim ile (b-c) diğer yönlerde ve (d) büyüme yönündeki örgü parametresi değerleri

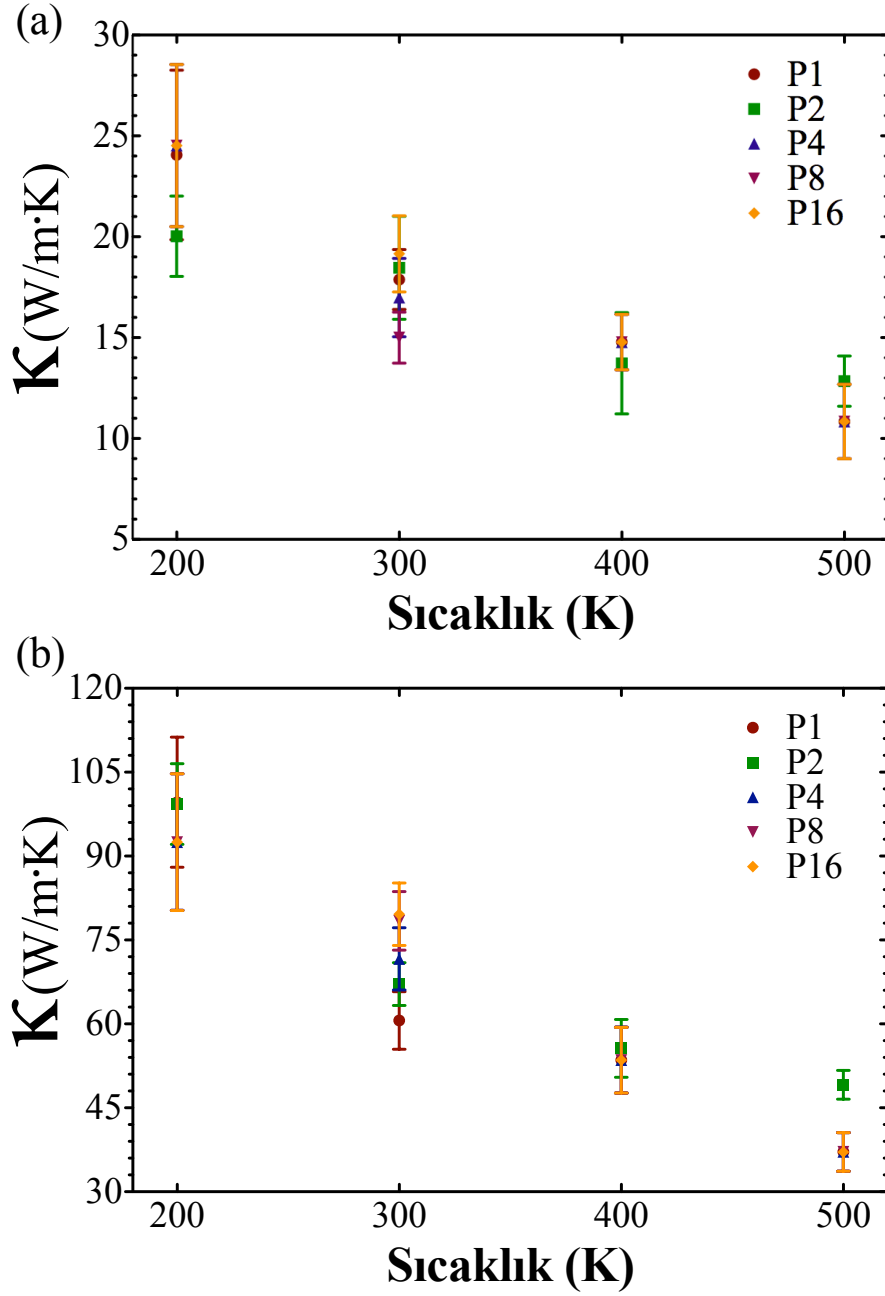
majör bir değişim gözükmemektedir. Örgü parametrelerinin her üç yönde de sabit olduğu yani sırasıyla, x yönündeki örgü parametresi yaklaşık 7.86 angstrom, y yönündeki örgü parametresi yaklaşık 6.81 angstrom ve z yönündeki örgü parametresi yaklaşık 9.62 angstrom diyebiliriz. Lakin, sonuçlara yakından baktığımız zaman (Şekil 3.16.b, c ve d) $\langle 111 \rangle$ yönlenmesindeki periyodik süper örgü yapıların $\langle 100 \rangle$ yönlenmesindeki periyodik süper örgü yapıların tam aksine bir davranış sergilediğini görmekteyiz. $\langle 100 \rangle$ yönlenmesindeki periyodik süper örgü yapılarda büyüme yönünde bir daralma, diğer yönlerde bir genişleme söz konusu iken, $\langle 111 \rangle$ yönlenmesindeki periyodik süper örgü yapılarda her ne kadar minör ölçekte bu değişikliği görsek, büyüme yönünde bir genişleme ve diğer yönlerde bir daralma görmekteyiz.

Sistemlerin denge durumlarındaki örgü parametreleri belirlendikten sonra bu parametreler kullanılarak hazırlanan $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip süper örgü yapıların termal iletkenlik değerleri periyodisiteye bağlı olarak hesaplandı. Şekil 3.17. hem büyüme yönündeki hemde diğer yönlerdeki termal iletkenlik değerlerinin periyodisiteye bağlı olarak değişimi gösterilmektedir. Büyüme



Şekil 3.17. $\langle 111 \rangle$ süper örgü yapılarının termal iletkenlik değerine karşın süper örgü periyodisite grafiği (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

yönünde öncelikle termal iletkenlik periyodisiteye bağlı olarak belirli bir değere kadar azalmakta ardından artmaktadır. Diğer yönlenmedeki yapılarımızda da bu şekilde karşılaştığımız davranış bize süper örgülerde minimum termal iletkenliğin spesifik bir periyodisite değerinde elde edildiğini göstermektedir.



Şekil 3.18. <111> süper örgü yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranışı (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

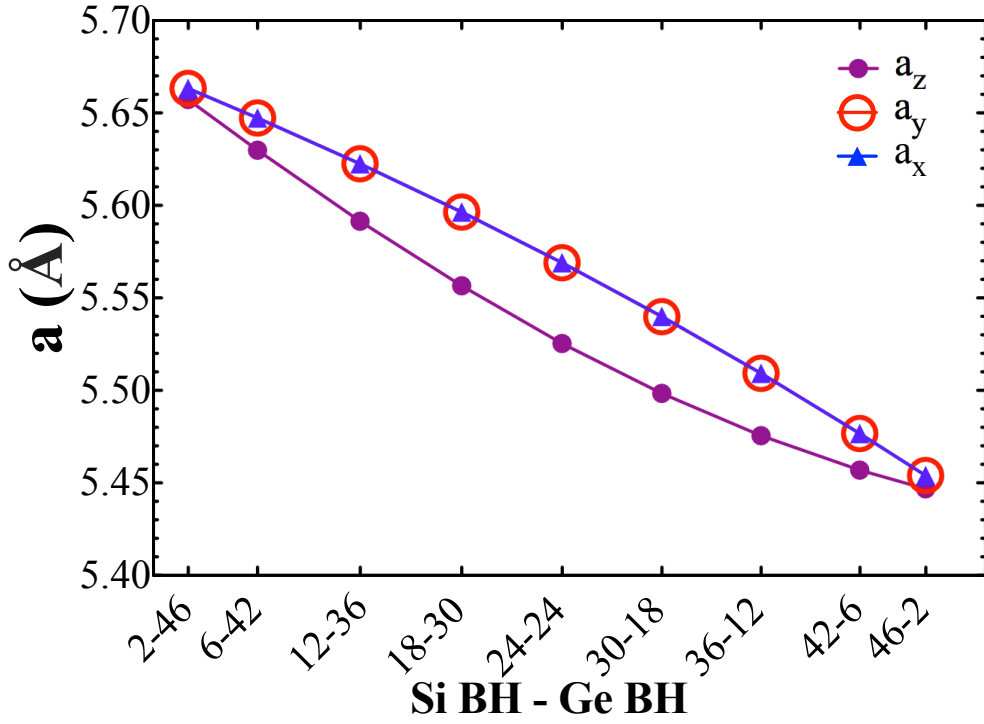
Bu durum için, periyodisite değeri 8 iken, en düşük termal iletkenlik değeri yaklaşık $15 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ elde edilmektedir. En yüksek termal iletkenlik değeri ise periyodisite değerleri 2 ve 16 da gözükmemektedir. Diğer yönlerdeki duruma bakıldığında zaman, Şekil 3.17.b de görüldüğü üzere, tahmin edilen davranış

sergilenmekte ve arayüz sayısı arttıkça termal iletkenlik düşmektedir. $\langle 100 \rangle$ yönlenmesindeki süper örgü yapılarda görmüş olduğumuz lineerlik durumuna karşın, $\langle 111 \rangle$ yönlenmesindeki süper örgü yapılarda diğer yönlerde periyodisite değeri arttıkça termal iletkenlik sabit bir değere yönelmektedir.

$\langle 100 \rangle$ yönünde büyütülmüş periyodik süper örgü yapılarda sıcaklık değişiminde P12 de görmüş olduğumuz anomaliden sonra, $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip süper örgü yapılarının tamamının sıcaklık altında termal iletkenlik davranışı hesaplandı ve Şekil 3.18. gösterilmektedir. Şekil 3.18.a ve b de görüldüğü üzere $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip süper örgü yapılarda bu anomalinin olduğuna dair bir bulguya rastlanmamıştır. Her iki grafikte görebileceğimiz gibi, termal iletkenlik değeri sıcaklık değişimi ile değişmektedir. Sıcaklık arttıkça fonon-fonon etkileşimlerinin, fonon-örgü etkileşimlerinin ve saçılma mekanizmalarının artmasından dolayı beklentimiz olan termal iletkenliğin azalması yönündeki trend beklediğimiz gibi lineer bir düşüş olarak gözükmektedir.

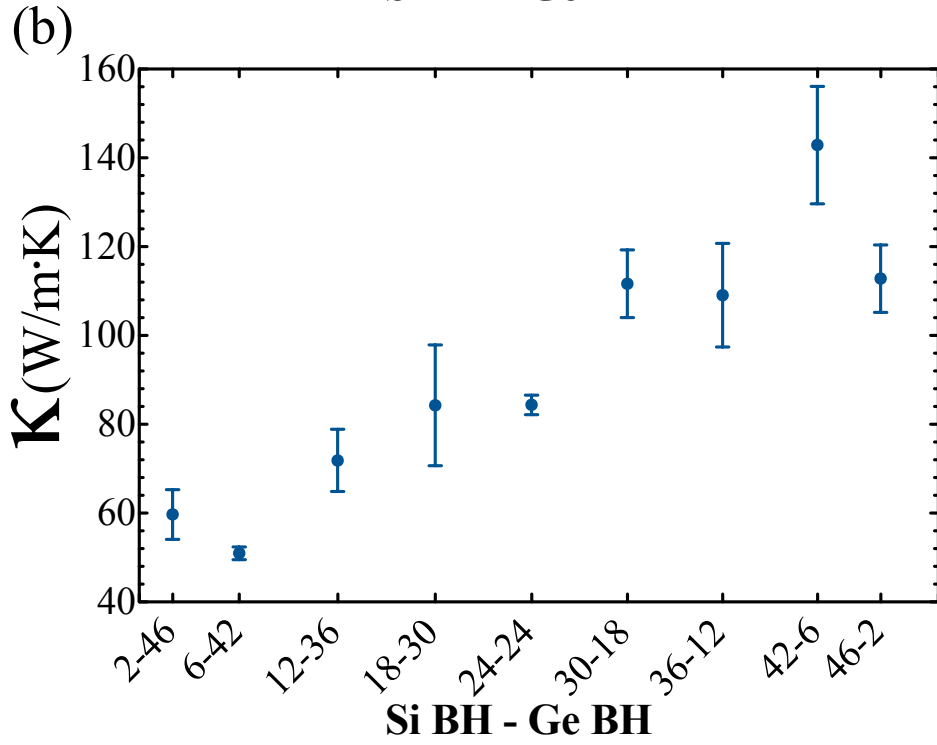
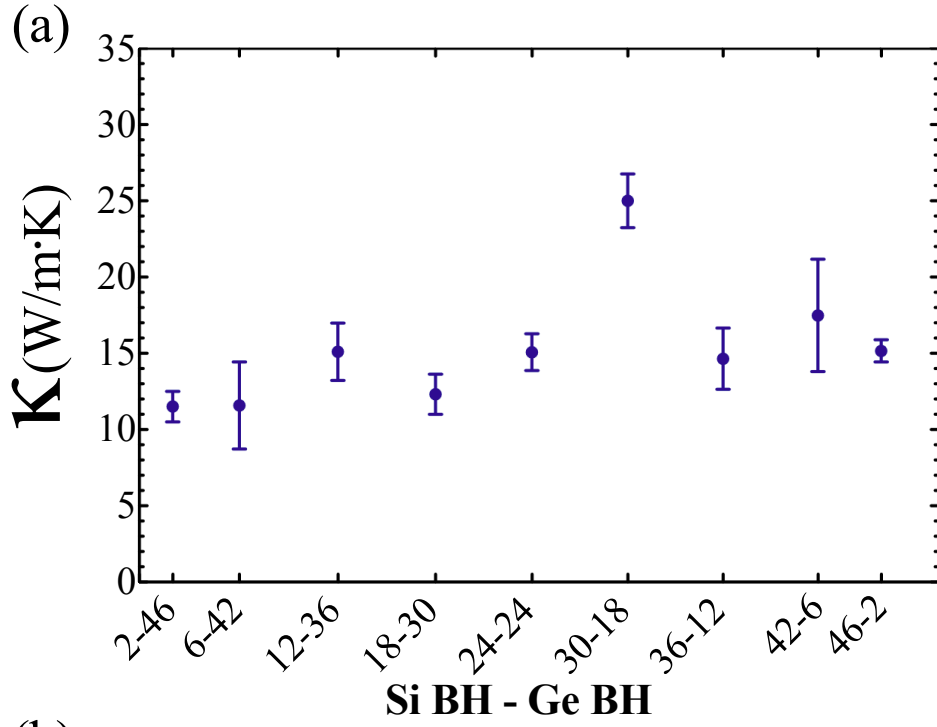
-Periyodik olmayan süper örgü yapılar

Periyodik olmayan süper örgü yapılarda da ilk olarak $\langle 100 \rangle$ kristal yönlenmesine sahip 48 birim hücre uzunluğundaki yapılar farklı silisyum birim hücre sayısına göre hazırlanıp, termal taşınım özelliklerinin değişimine bakıldı. Bu yapıların hesaplamalarına geçmeden önce doğru sonuçlar elde edebilmemiz için öncelikle denge durumları sağlanmış ve ardından örgü parametreleri belirlenmiştir. Silisyum süper örgü uzunluğu birim hücre olarak sırasıyla, 2, 6, 12, 18, 24 (periyodik süper örgü yapısından), 30, 36, 42, 46 seçildikten sonra yapılar hazırlanıp, tüm yönlerdeki örgü parametreleri hesaplanmış ve Şekil 3.19. da gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü üzere izotropik olmayan etki görülmekte olup yöne bağlı farklı değerler elde edilmektedir. Farklı yönlerdeki örgü sabitleri gösteriyor ki, büyüme yönündeki daralma diğer yönlerdekine göre başlangıçta daha baskın sonralarda ise diğer yönlerdeki daralma daha baskın olmaktadır. Silisyum atomların sayısı arttıkça sistemin daralma gösterdiği ve silisyum germanyum alaşımı simülasyonlarında gördüğümüz Vegard yasasına benzer davranış sergilenmektedir.



Şekil 3.19. Üç farklı yöndeki örgü sabiti değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu

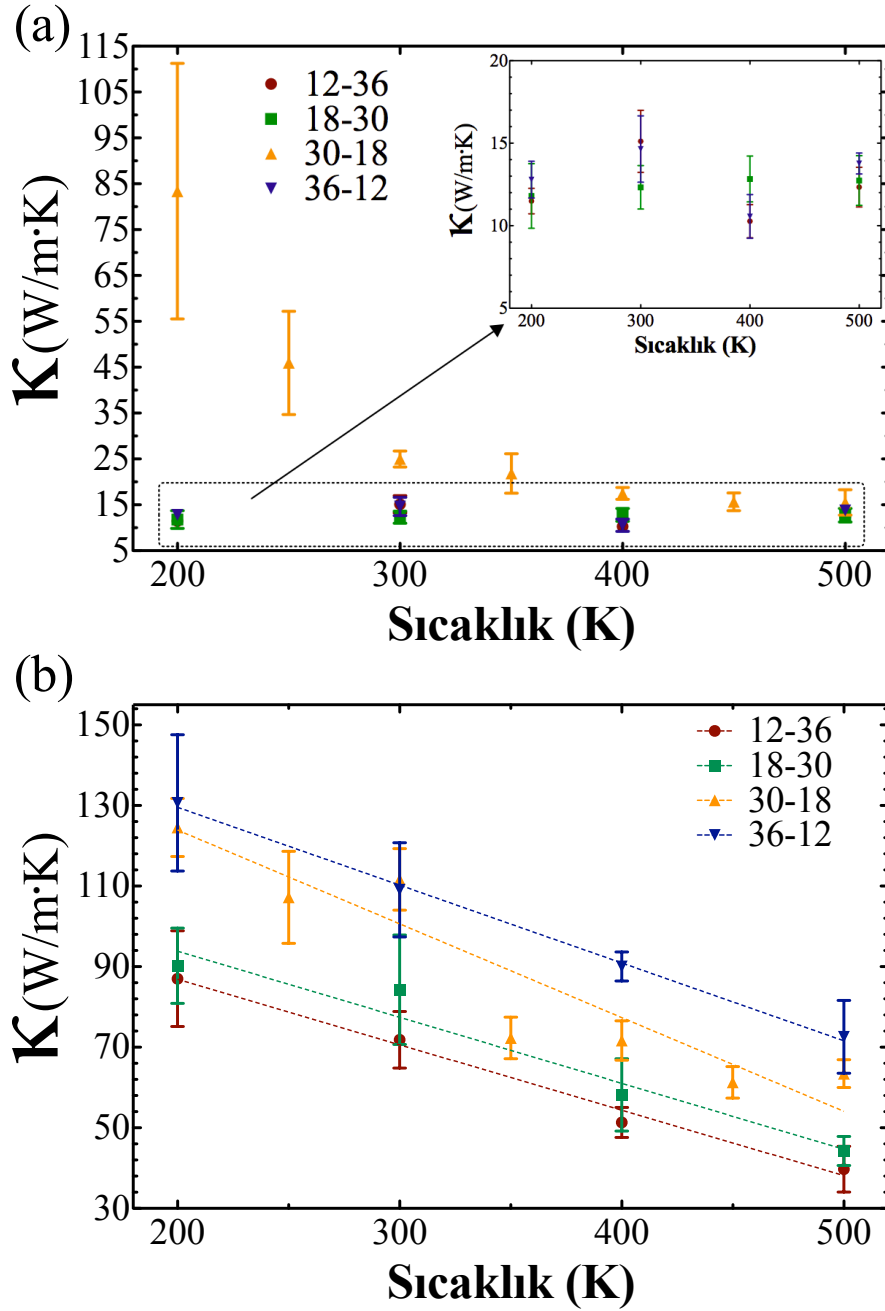
Sistemlerin denge durumları belirlendikten sonra periyodik olmayan süper örgülerde silisyum süper örgü birim hücre sayısındaki değişime göre termal iletkenlik değerleri hesaplandı. Şekil 3.20. periyodik olmayan süper örgü yapılarında termal iletkenliğin değişimini hem büyüme yönünde hemde diğer yönlerde göstermektedir. Şekil 3.20.a da görüldüğü üzere, $\langle 100 \rangle$ büyüme yönünde termal iletkenlik değeri silisyum süper örgü uzunluğuna göre artış ve azalışlar göstermektedir. Genel tabloya baktığımız zaman silisyum süper örgü uzunluğu arttıkça termal iletkenlik değeri artmaktadır denebilir. Lakin, hata paylarının da yardımı ile grafiğe başka bir göz ile bakacak olursak, 10-15 $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ aralığında bir band oluşmaktadır. 30-18 yapısı burada bir istisna göstermektedir ama yinede termal iletkenlik değerinin periyodik olmayan süper örgü yapılarında bir band oluşturduğu ve belli değerler aldığı görülmüştür. 30-18 yapısını da yakından incelediğimiz zaman periyodik süper örgü yapılarda P12 de görmüş olduğumuz bir anomali ile karşılaşacağımızı göreceğiz, o yüzden rahatlıkla istisna olarak yorumlayabiliriz. Bunun dışında, periyodik olmayan



Şekil 3.20. Termal iletkenlik değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu değişimi (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

süper örgü yapılarında diğer yönlerden almış olduğumuz sonuçlara bakacak olursak, termal iletkenlik değerinin silisyum süper örgü uzunluğuna bağlı olarak lineer bir artış gösterdiğini söyleyebiliriz. Vegard yasasının temel bakış açısından faydalanarak burada da, bir tür yasaya bağlı bir artış olabileceği öngürülebilir. Termal iletkenlik değeri germanyuma göre fazla olan silisyumun sistemdeki oranı arttıkça termal iletkenlik artmaktadır. Burada her bir küme bir başka değişle tampon veya halkalar (spacer-buffer) kendi kristal özelliğini göstererek sisteme katkıda bulunmaktadır.

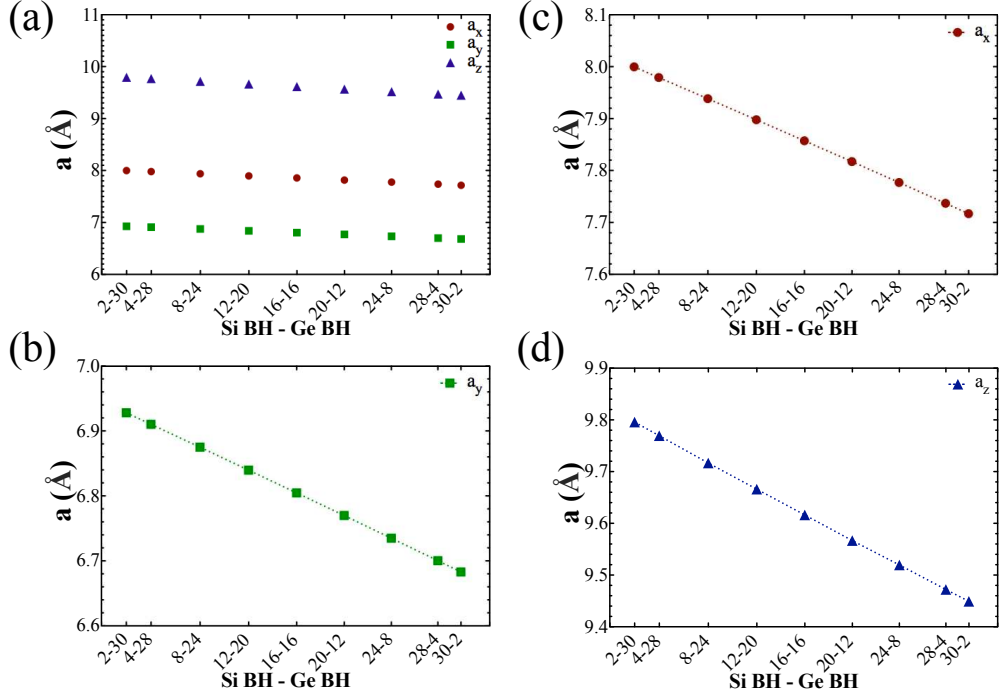
Sonraki aşama olarak, periyodik olmayan süper örgü sistemlerinin bazı yapılarının 200-500 K sıcaklık aralığındaki termal iletkenlik değerlerinin değişimini incelendi. Şekil 3.21. $\langle 100 \rangle$ kristal yönlenmesine sahip periyodik olmayan süper örgü yapılarından 12-36, 18-30, 30-18 ve 36-12 nin sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimini büyüme ve diğer yönler olarak iki farklı grafikte göstermektedir. Şekil 3.21.a büyüme yönündeki termal iletkenlik değerlerini sıcaklığa karşı göstermektedir ve ayrıca grafiğin için bazı yapıların gösterdiği davranışın iyi anlaşılması için belirli bir bölgeye yakınlaştırılmış grafik bulunmaktadır. Bu iki grafikten iç içe grafikten görüldüğü üzere, bahsetmiş olduğumuz 30-18 periyodik olmayan süper örgü yapısı diğer yapılardan farklı bir trend göstermektedir. Bu yüzden detaylı olarak bu yapı için ayrıca 250, 350 ve 450 K sıcaklıklarında da hesaplamalar yapılmıştır. Çıkan sonuç, sıcaklık azaldıkça termal iletkenliğin bu yapıda exponansiyel olarak arttığı yönündedir. Bu anomali davranış, daha önce periyodik süper örgü yapılarda P12 de bahsettiğimiz üzere gelecek araştırmalarımızın konusu olacaktır. Diğer periyodik olmayan yapılara baktığımız zaman içteki grafik bize şunu göstermektedir ki, bu tür yapılarda termal iletkenlik sıcaklığa bağlı bir fonksiyon değildir ve bir band aralığında bulunmaktadır. Buradaki bu davranışa sebep olan mekanizmaların, sıcaklıktan etkilenen fononların ve fonon etkileşimlerinin taşınma katılmadan etkisini yitirdiği veya bu tür fononların yapı içerisinde kaybolduğu söylenebilir. Şekil 3.21.b ise seçilmiş olan periyodik olmayan süper örgü yapılarının diğer yönlerdeki termal iletkenlik değerlerinin sıcaklık ile değişimini göstermektedir. Görüldüğü üzere, diğer yönlerde termal iletkenlik ile sıcaklık



Şekil 3.21. Bazı periyodik olmayan süper örgü yapıların sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranışı (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

ilişkisinde beklediğimiz davranışın 30-18 yapısı haricinde net olarak olduğunu söyleyebiliriz. Sıcaklık arttıkça diğer yönlerdeki termal iletkenlik lineer olarak azalmaktadır. 30-18 periyodik olmayan süper örgü yapısında ise termal iletkenlik sıcaklığa bağlı olarak azalmakta ve bu davranışın bizim hata payımız ile

lineerlikle exponansiyel trendleri arasında dolaştığını söyleyebiliriz. Bu çok değişiklik göstermeyen istisna haricinde periyodik olmayan süper örgü sistemlerinin diğer yönlerde termal iletkenlik ile sıcaklık ilişkisinde beklenen davranış gözlemlendi.



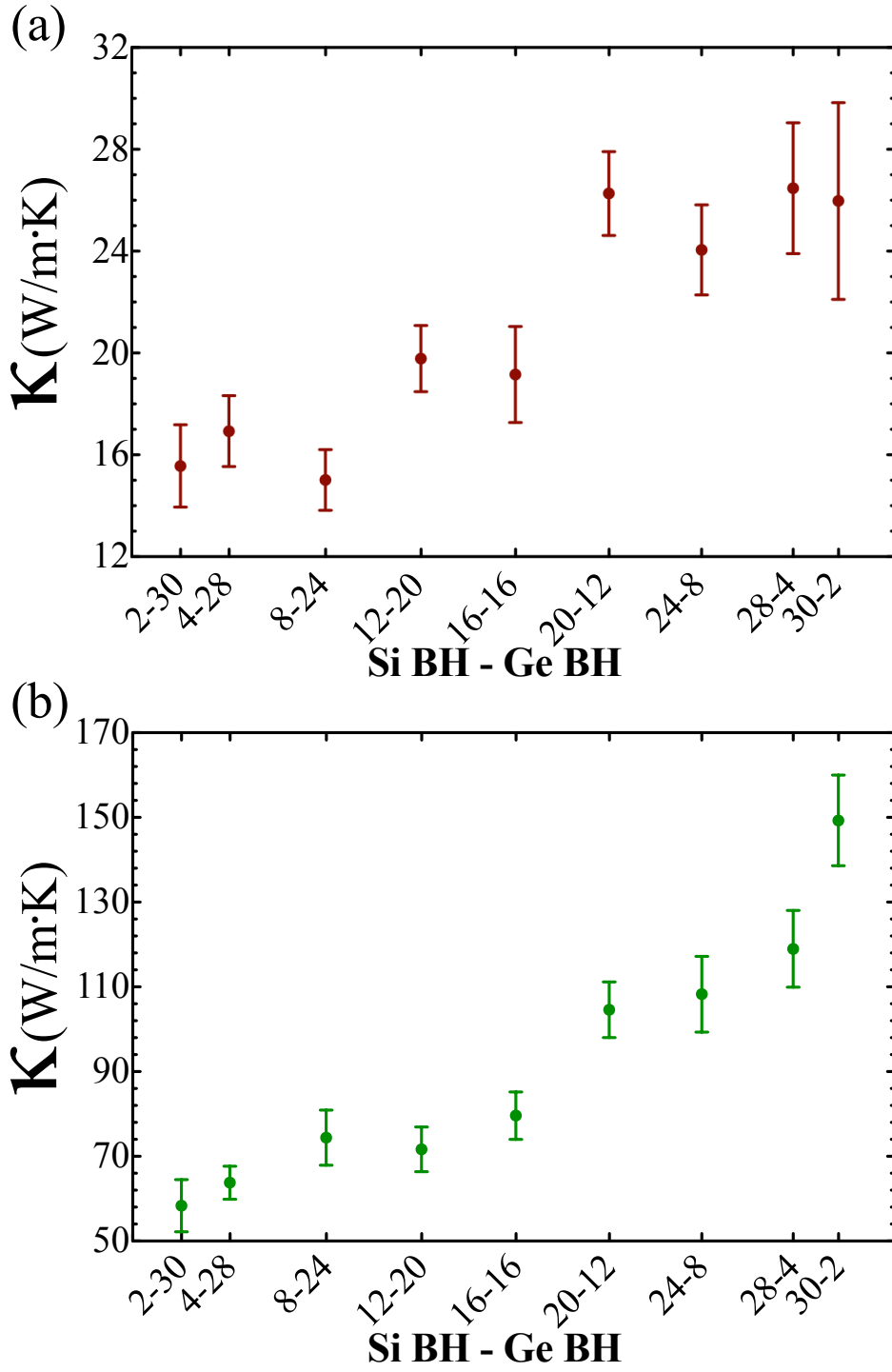
Şekil 3.22. $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip yapıların (a) üç farklı yöndeki örgü sabiti değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu. Ayrıca detaylı gösterim ile (b-c) diğer yönlerde ve (d) büyüme yönündeki örgü parametresi değerleri

Kristal yönlenmenin üç boyutlu periyodik olmayan süper örgü yapılarında da etkisi çalışıldı. $\langle 111 \rangle$ kristal yönlenmesinde büyütülen periyodik olmayan süper örgü yapılar hazırlanıp, her yönde periyodik sınır koşullarına sahip olacak şekilde incelendi. Termal iletkenlik analizi için yapılacak hesaplara geçmeden önce hazırladığımız yapılar denge durumlarına getirilerek, örgü parametre değerleri belirlendi. $\langle 111 \rangle$ yönünde büyütülmüş 32 birim hücre uzunluğundaki periyodik olmayan süper örgü yapılar, silisyum süper örgü uzunluğu birim hücre olarak sırasıyla, 2, 4, 8, 12, 16 (periyodik süper örgü yapısından), 20, 24, 28, 30 olacak şekilde seçilip, tüm yönlerdeki örgü parametreleri hesaplanmış ve Şekil 3.22. de gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü üzere, her yönde

silisyum süper örgü uzunluğu arttıkça örgü parametresi değerinde lineer bir daralma görülmektedir ve bu lineer azalma Vegard yasasını bize anımsatmakta ve bu yasanın benzeri bir davranış olduğunu göstermektedir.

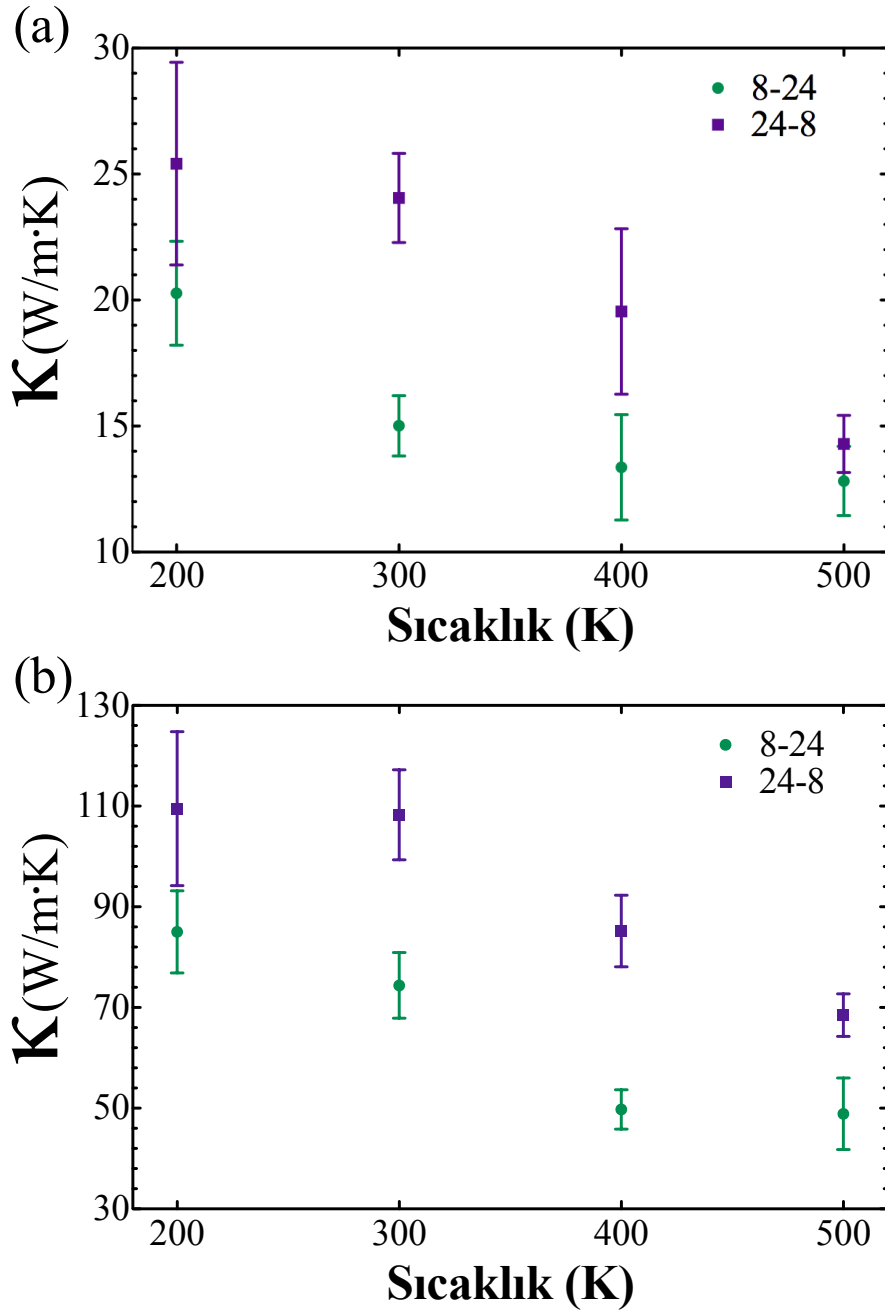
Periyodik olmayan süper örgü yapıların denge durumları belirlendikten sonra, $\langle 111 \rangle$ yönlenmesinde silisyum süper örgü uzunluğunun termal iletkenliğe etkisi incelendi. Şekil 3.23. de bu sistemlerde hem büyüme yönünde hemde diğer yönlerde elde edilmiş sonuçlar gösterilmektedir. Şekil 3.23.a da görüldüğü üzere, $\langle 111 \rangle$ büyüme yönündeki termal iletkenlik değeri silisyum süper örgü uzunluğuna göre çalkantılı şekilde artış göstermektedir. Belli silisyum süper örgü uzunluğu aralığında sabit, ama uzunluk artışı ile de bu sabitin diğer aralıklarda başka bir sabit değere doğru tırmandığı gözükmemektedir. Lakin, bu grafik lineer regresyon ile çözümlenirse, lineer bir artışın olduğu da çıkarılabilir. Kısaca bir sonuca varmak gerekirse, $\langle 111 \rangle$ yönelimine sahip bu tarz periyodik olmayan süper örgü yapıların termoelektrik malzemeler için uygun olmadığı gözükmemektedir. Düşük termal iletkenlik değeri diğer kristal yönelime göre elde edilememektedir. Bunun sebebinin örgü içerisinde üretilen fononların bu tür yapılarda $\langle 111 \rangle$ yönünde saçılım mekanizmalarından etkilenmeden iletkenliğe katkıda bulunabilirliğinin yüksek ihtimale sahip olduğunu düşündüğümüzden söylemekteyiz. Şekil 3.23.b ise diğer yönlerdeki termal iletkenliğin silisyum süper örgü uzunluğuna göre değişimini göstermektedir. Beklediğimiz gibi olan bu değişim, $\langle 100 \rangle$ kristal yönlenmesindeki karşılaştığımız etkiye benzerlik göstermektedir. Bu grafik için yapacağımız açıklamalar, $\langle 100 \rangle$ yönünde büyütülmüş periyodik olmayan süper örgü yapılarda bulunduğumuz açıklamalar ile benzer olacaktır. Burada silisyum süper örgü uzunluğu yani sistemdeki silisyum miktarı arttıkça termal iletkenlik artış göstermekte ve bu artış bu tür yapılar için geçerli olabilecek bir eşitlikteki eğim olarak düşünülebilecek lineer bir artışa benzemektedir. Bu durumunda sistemdeki silisyum miktarı ile beraber silisyumun sahip olduğu termal özellikler ile termal iletkenlik değerini yükseltmesi olarak söyleyebiliriz.

Bu kısımdaki son aşama olarak, $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip periyodik olmayan süper örgü sistemlerinden bazı yapıları 200, 300, 400 ve 500 K



Şekil 3.23. <111> süper örgü yapıların termal iletkenlik değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu değişimi (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

sıcaklıklarındaki termal iletkenlik değerleri hesaplanıp, bu sıcaklıklar altındaki değişimleri incelendi. Şekil 3.24. hem büyüme yönündeki hem de diğer yönler-



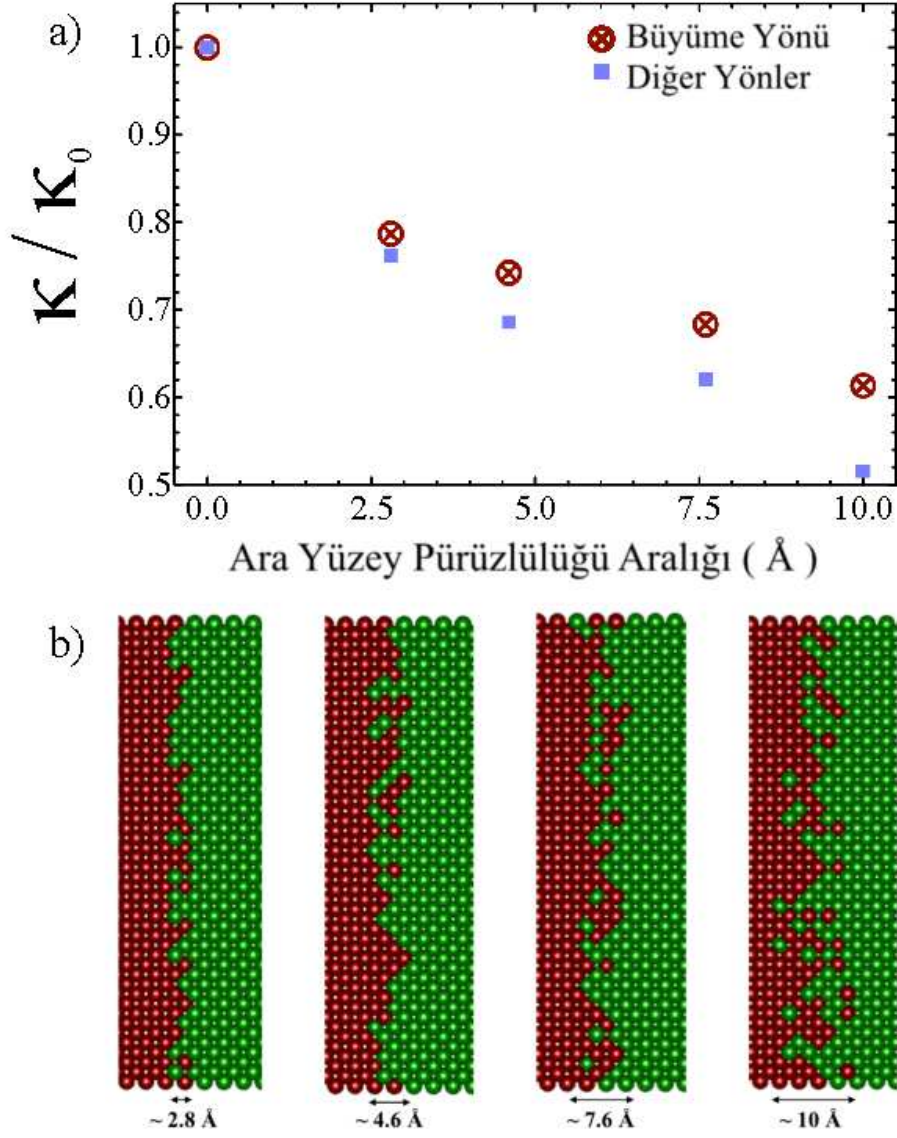
Şekil 3.24. Bazı $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip periyodik olmayan süper örgü yapıların sıcaklık altındaki termal iletkenlik davranışı (a) büyüme yönü (b) diğer yönler

deki seçilmiş olan birbirinin tersi olan 8-24 ve 24-8 periyodik olmayan süper örgü yapılarının termal iletkenliğine karşı sıcaklık grafiğini göstermektedir. İki şekilden de görüldüğü üzere, $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip periyodik olmayan süper örgü yapılarda termal iletkenlik sıcaklığın artışı ile beraber beklenildiği

gibi düşmektedir. Hem büyüme yönünde, hemde diğer yönlerde ise şu açık bir şekilde gözükmektedir ki, birbirinin tam tersi olan bu sistemlerin sıcaklığın altındaki termal iletkenlik değişimi de birbirinin simetrisi gibi gözükmektedir. 24-8 periyodik olmayan süper örgü yapısı öncelikle düşük bir eğimle azalmakta sonra yüksek eğimle azalmaktadır, diğer tarafta 8-24 periyodik olmayan süper örgü yapısı ise öncelikle yüksek eğimle azalmakta ardından düşük eğimle azalmaktadır.

Bir sonraki bölüme geçmeden önce, bu bölümü incelerken yapmış olduğumuz bir diğer hesaplamada bahsetmeliyiz. O da tüm yapılar için genelleme yapabileceğimiz lakin P24 yapısı özelinde yapmış olduğumuz ara yüzey pürüzlülüğünün termal iletkenliğe etkisi hesaplamasıdır.

Şekil 3.25.a süper örgü yapılarında ara yüzey pürüzlülüğünün termal iletkenliğe etkisini pürüzsüz yapısındaki termal iletkenlik değerine göreceli olarak çizimini göstermektedir. Bu hesaplamada $\langle 100 \rangle$ yönlenmesine sahip periyodik süper örgü yapılarından P24 süper örgü yapısı kullanılmış ve bu yapının diğer tüm süper örgü yapılarını taklit edebileceği düşünülmüştür. Şekil 3.25.b ise bu süper örgü yapısındaki ara yüzey pürüzlülüğünün nasıl olduğunu görsel olarak göstermektedir. Bu ara yüzey pürüzlülüğü yaratılırken Fick'in difüzyon hakkındaki yasası temel alınmıştır ve gerçeği yansıtacak oranlarla ara yüzey pürüzlülüğü yaratılmış, pürüzsüz hazırlanan bir yapının ısı işleme tabi tutularak getirilebileceği son hal benzetilmiştir. 300 K sıcaklığında yapılan bu hesaplamada, Şekil 3.25.a dan görüldüğü üzere, ara yüzey pürüzlülüğünün termal iletkenliğe her üç yönde de doğrudan bir etkisi olmaktadır. Ara yüzey pürüzlülüğünün aralığı arttıkça, termal iletkenlik değeri düşmekte, bu düşüş büyüme yönünde %40'lara, diğer yönlerde ise %50'lere varmaktadır. Ara yüzey pürüzlülüğünün aralığı daha fazla arttırıldığı zaman bir yerden sonra belli bir değere yakınsayacaktır. Lakin, sadece termal iletkenliğin düşürülmesi için yapmamız gereken bu işlem ara yüzey pürüzlülüğünün aralığının arttırılması ile alaşımlama etkisine yaklaşıcak ve istemediğimiz termoelektrik performansın artmasını engelleyecek olan yapıların elektriksel direncini arttıracaktır. Görüldüğü üzere de, çok az bir pürüzlülük dahi yapının her iki yönde de termal



Şekil 3.25. Ara yüzey pürüzlülüğü aralığına karşın termal iletkenlik değerinin pürüzsüz yapıya oranla değişimi (Si-Ge oranı tüm yapılarda korunmuş ve aynıdır.)

iletkenliğini %20-25 oranında azaltabilmektedir. Bu bilginin verimli kullanılması ile beraber termal iletkenliği düşük, termoelektrik verimliliği yüksek malzemelerin üretilmesi mümkündür. Keza, bu tür çalışma deneysel verileri açıklamak üzere Daily ve ark. [12] tarafından GaAs/AlAs süper örgülerinde de hesaplanmıştır. Ayrıca, Garg ve ark. [70] silisyum-germanyum süper örgüleri için ara yüzey pürüzlülüğünün termoelektrik malzemeler için önemine yapmış oldukları *ab-initio* hesaplamalı yöntemi ile dikkat çekmiş. En önemlisi ise, Na-

ture’da yayınlanan ve bahsetmiş olduğumuz bu bilginin en verimli kullanımını örnekleyen Pernot ve ark. [71] yapmış olduğu hem deneysel hem de hesaplamalı çalışmadır. Bu çalışmada ara yüzeyler üzerinden termal iletkenlik değerinin silisyumun amorf değerinin altına çekilebileceğini gösterip bunu deney ile ispat etmektedirler. Ara yüzeylerdeki pürüzlülüğünün termal iletkenliğe etkisinin nedenleri henüz tam olarak açıklanmamış fakat üzerlerinde görüşler bulunmaktadır. Burada kütle farklılıkları ile düzensizliklerin termal iletkenliği düşerebileceği ve saçılım mekanizmalarının etkisini arttırabileceği en önemli sebeplerdendir. Burada yüksek frekanslı fononların bu ara yüzeylerden dolayı ısıyı iletme kabiliyetlerini yitirmesi ise bir diğer sebeplerdendir.

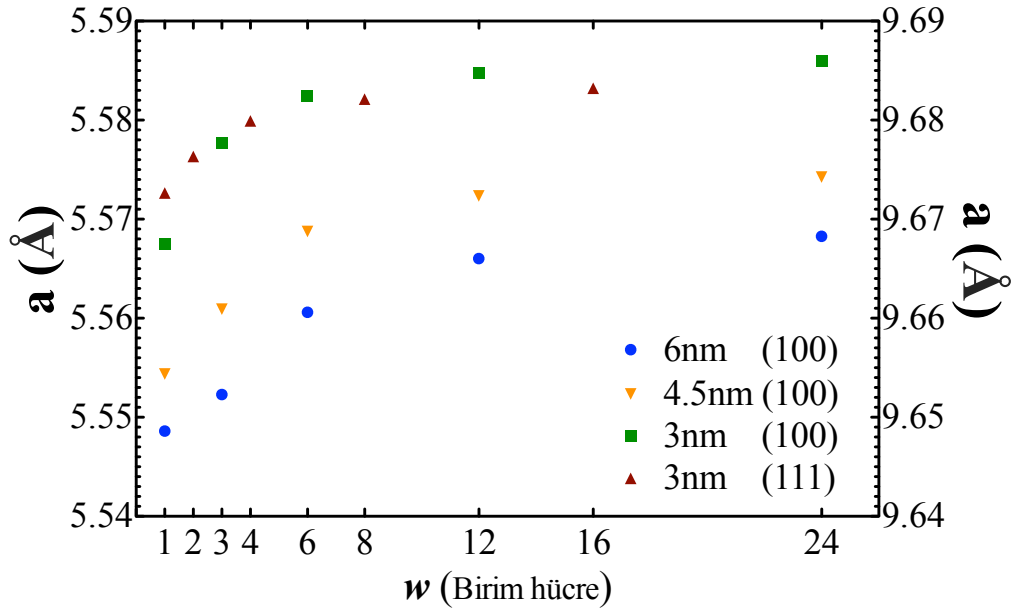
3.2.2. Süper Örgüye Sahip Silindirik Nanoteller

Süper örgülerin ikinci bölümünde silindirik nanoteller ele alınmıştır. Silindirik nanoteller süper örgü yapılar halinde hazırlanıp, periyodik ve periyodik olmayan süper örgüler halinde incelenmiş, ayrıca, kristal yönlenmesinin nano boyutta etkisinde incelenmiştir.

-Periyodik süper örgü yapılar

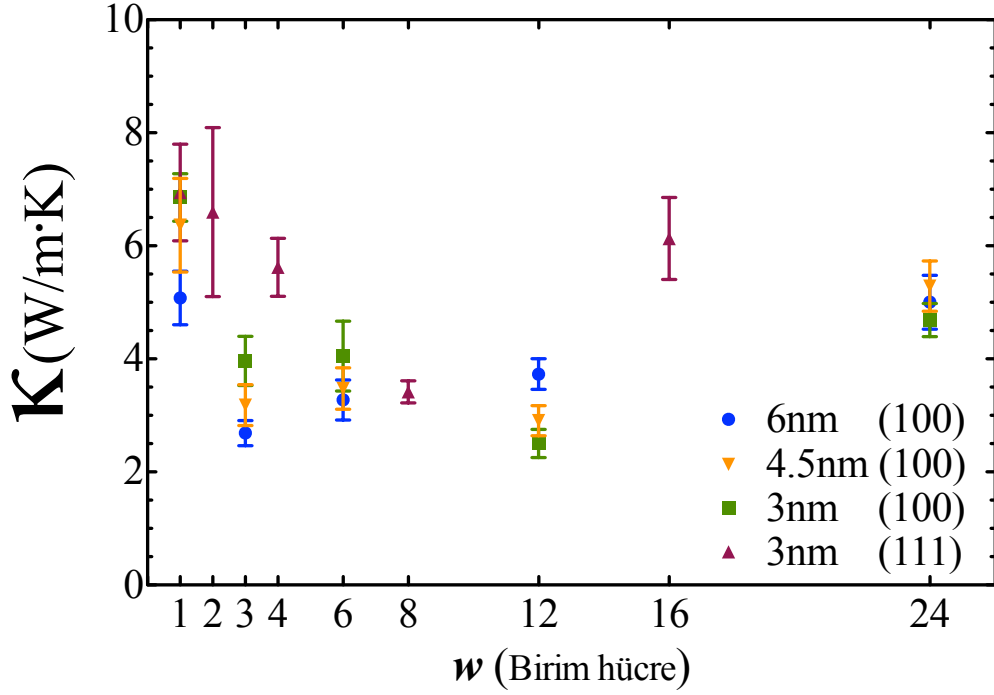
Periyodik süper örgü yapılara sahip silindirik nanotellerde öncelikle $\langle 100 \rangle$ yönlenmesine sahip ardından da $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip yapılar sırasıyla, 48 birim hücre ve 32 birim hücre uzunluğuna sahip olacak şekilde yapılar oluşturuldu. Bir önceki bölümde olduğu gibi, $\langle 100 \rangle$ yönlenmesine sahip silindirik nanotellerin periyodik süper örgü yapılarda $w = 1, 3, 6, 12, 24$ periyodisite değerleri, $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip silindirik nanotellerin periyodik süper örgü yapılarda ise $w = 1, 2, 4, 8, 16$ periyodisite değerlerinde sistemler oluşturuldu. Silindirik nanotellerin çapları, alaşımlarda olduğu gibi, 3nm 4.5nm ve 6nm olarak belirlendi. Kristal yönlenmenin etkisini anlayabilmek için de $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip yapılar için ise 3nm çapı seçildi. Oluşturulan bu yapıların ilk olarak denge durumları belirlendi ve periyodik sınır koşullarına sahip olan tek yönünde örgü parametresi tayini yapıldı. Şekil 3.26. her iki yönlenmedeki farklı çaplardaki periyodik süper örgüye sahip silin-

dirik nanotellerin büyüme yönündeki örgü sabitlerinin periyodisite ile değişimini göstermektedir. Bir önceki bölümden farklı olarak, her iki yönlenmede de periyodisite değeri arttıkça süper örgü yapılarında genişleme görülmektedir. Ek olarak ilk incelemelerimizden olan $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ bölümünde görmüş olduğumuz, nanotellerdeki çap uzunluğunun örgü parametresine etkisi de şekilde net olarak gözükmemektedir. Çap uzunluğu azaldıkça sistemler bir önceki kısımdan daha net şekilde genişleme eğilimi göstermektedirler. Buna yüzey atomlarının serbestliklerini çap boyutu düşük olan yapılarda gösterdiklerinden dolayı olduğunu söyleyebiliriz.



Şekil 3.26. Periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerde büyüme yönündeki örgü sabiti değerine karşın periyodisite değeri (sağ eksen sadece 3nm(111) yapısını belirtmek için çizilmiştir.)

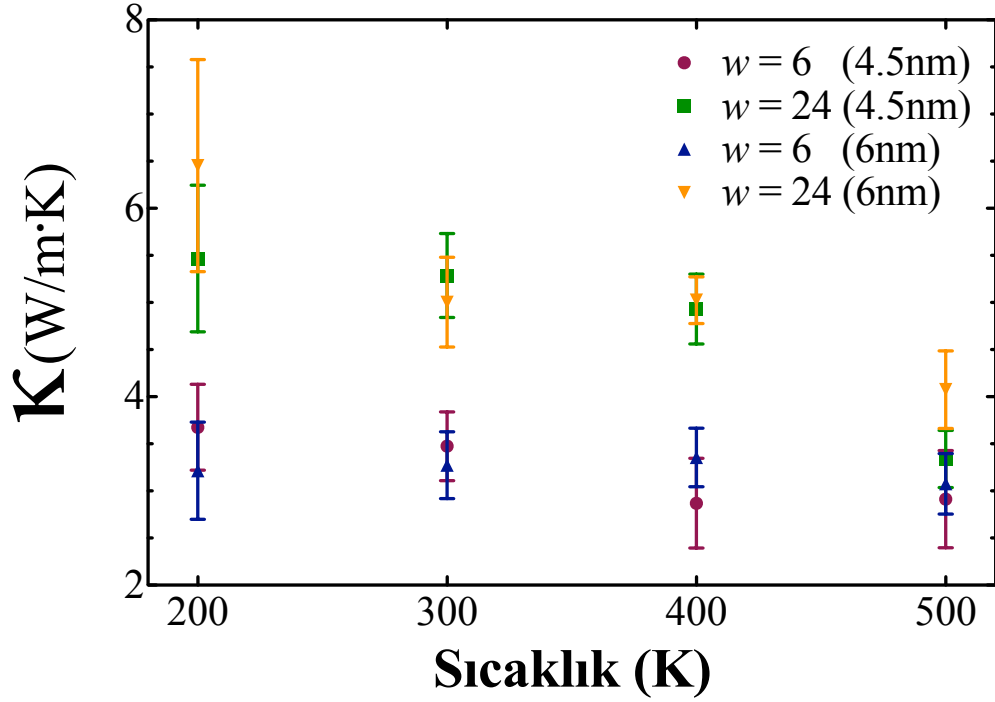
Denge durumları belirlenen periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerin büyüme yönündeki termal iletkenlik değerlerinin periyodisiteye bağlı olarak değişimi incelendi. Şekil 3.27. her iki yönleme sahip periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerdeki periyodisitenin termal iletkenlik üzerindeki etkisini göstermektedir. Genel olarak sonuçlara baktığımız zaman periyodisitenin termal iletkenlik üzerindeki etkisi bu tür sistemlerde yine alışılmadık bir davranış şeklinde karşımıza çıkmaktadır. Her bir sistem kendi-



Şekil 3.27. Periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerde büyüme yönündeki termal iletkenlik değerine karşın periyodisite değeri

sine ait spesifik bir periyodisite değerinde en düşük termal iletkenliği göstermektedir. $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip periyodik süper örgü yapısı şekilden de görüldüğü üzere, bulunduğu aralıklarda termoelektrik performans için en tercih edilmemesi gereken yapı olarak gözükmemektedir. En düşük termal iletkenlik değerini $w = 8$ de göstermekte ve bu değer yaklaşık $3.4 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ dir. $\langle 100 \rangle$ yönlenmesine sahip periyodik süper örgü yapılarına baktığımız zaman ise çapa bağlı bir trend gözükmemektedir. 6nm çapa sahip yapı en düşük termal iletkenlik değerini $w = 3$ te, 4.5nm çapa sahip yapı en düşük termal iletkenlik değerini $w = 12$ de, 3nm çapa sahip yapı ise en düşük termal iletkenlik değerini 12 de göstermektedir ve bu değerler sırasıyla 2.7 , 2.9 ve $2.5 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ dir. En düşük termal iletkenlik değerleri periyodisite değeri genel olarak 3, 8 ve 12 de gözükmemektedir ve $\langle 100 \rangle$ kristal yönelimi diğer yönelimlere termoelektrik malzemelerdeki termal iletkenliğe göre daha tercih edilebilir bir büyütme yönüdür.

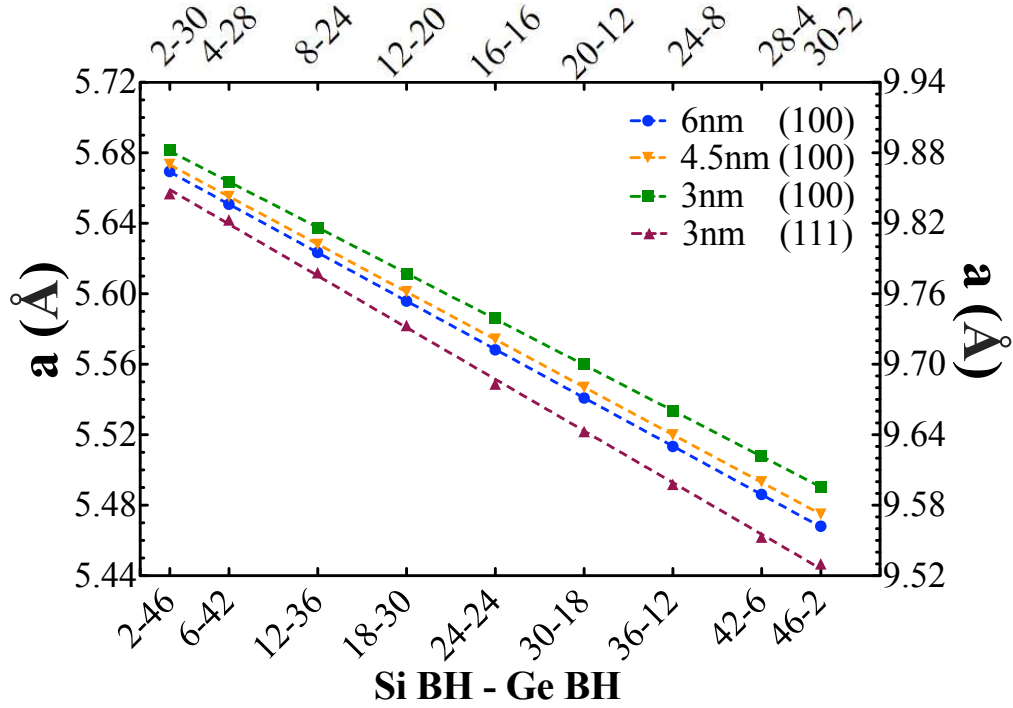
Daha sonra periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerden ter-



Şekil 3.28. Periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerin bazı yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimi

moelektrik performansı daha iyi olduğunu düşünülen kristal yönlenmeye sahip yapılardan, bir önceki bölümde de seçilmiş olan periyodisite değerlerine sahip olan yapılar seçilerek bu nanotellerde sıcaklık etkisinin daha iyi anlaşılması için 4.5nm ve 6nm lik çaplarda termal iletkenliğin 200-500 K sıcaklık aralığındaki değişimi incelenmiştir. Şekil 3.28. periyodisite değerleri 6 ve 24 için 4.5nm ve 6nm lik çaplardaki periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotellerin sıcaklık değişimine karşın büyüme yönündeki termal iletkenlik değişimini göstermektedir. Bu periyodisite değerleri için şu yorum rahatlıkla yapılabilir ki, şekilden görüldüğü üzere silindirik nanotel yapılarında çaptan bağımsız lakin periyodisite bağımlı bir trend sıcaklığın etkisinde rahatlıkla gözükmektedir. Periyodisite değeri 24 için daha net olmakla beraber 6 için de termal iletkenliğin sıcaklık altındaki değişimi azalma eğilimindedir ve bu eğilim yüzdece $w = 24$ için daha fazladır. Ayrıca, sıcaklık artışı ile beraber periyodik süper örgüye sahip silindirik nanotel sistemlerinde yapıların sıcaklık artışı ile termal iletkenlik değerleri periyodisiten bağımsız bir şekilde aynı değere yakınsamaktadır.

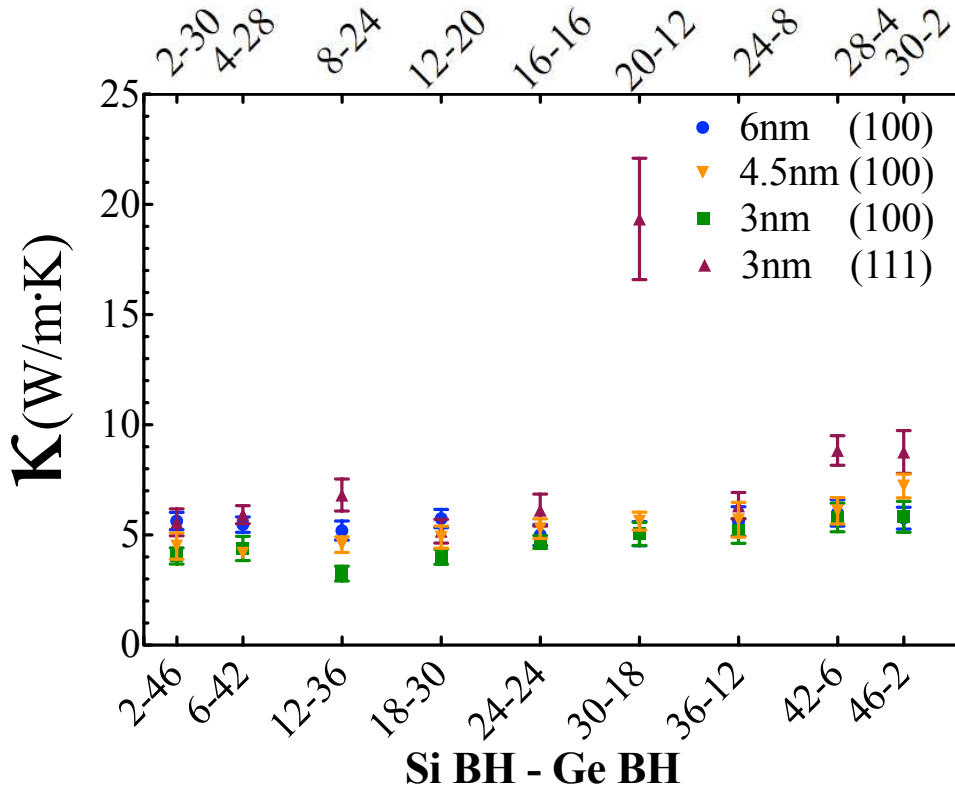
-Periyodik olmayan süper örgü yapılar



Şekil 3.29. Periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerde büyüme yönündeki örgü sabiti değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu (sağ eksen sadece 3nm (111) yapısını belirtmek için çizilmiştir.)

Silindirik nanotellerde periyodik olmayan süper örgü yapıların termal taşınım özellikleri incelendi. Kristal yönelmenin bu tarz sistemlerde etkisi de ayrıca incelenmiştir. Periyodik süper örgü yapılarda olduğu gibi, periyodik olmayan süper örgü yapısına sahip silindirik nanotellerde öncelikle $\langle 100 \rangle$ yönelmesine sahip ardından da $\langle 111 \rangle$ yönelmesine sahip yapılar sırasıyla, 48 birim hücre ve 32 birim hücre uzunluğuna sahip olacak şekilde oluşturuldu. Silisyum süper örgü uzunluğuna göre sınıflandırılan sistemlerde, $\langle 100 \rangle$ yönelmesine sahip yapılarda sırasıyla 2, 6, 12, 18, 24 (periyodik süper örgü yapısından), 30, 36, 42, 46 $\langle 111 \rangle$ yönelmesine sahip yapılarda ise sırasıyla 2, 4, 8, 12, 16 (periyodik süper örgü yapısından), 20, 24, 28, 30 silisyum süper örgü uzunlukları seçilip, $\langle 100 \rangle$ kristal yönelmesi için 3nm, 4.5nm ve 6nm, $\langle 111 \rangle$ kristal yönelmesi için ise 3nm çapları seçilerek yapılar hazırlanmıştır. Bu sistemlerin termal iletkenlik hesaplamalarına geçmeden

önce denge durumları sağlanmış ve ardından büyütme yönündeki örgü sabitleri belirlenmiştir. Şekil 3.29. farklı çaplara ve kristal yönlenmesine sahip periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerdeki örgü parametresinin silisyum süper örgü uzunluğuna göre değişimini göstermektedir. Vegard yasasının benzeri bir davranışı yeniden anımsamak ile beraber, silisyum süper örgü uzunluğu azaldıkça örgü parametresi değeri her sistem için artmaktadır bu yüzden sistemler genişlemektedir. Sistemdeki germanyum atomlarının sayısı arttıkça, germanyumun kendi örgü parametresi değerinin sistemdeki baskınlığı ortaya çıkmaktadır. Ayrıca, çap boyutu arttıkça yüzey atomlarının sayısının oranı yığın atomlarının sayısına göre azaldığı için boyut arttıkça periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerde de yapılar da dalma davranışı görülmektedir.

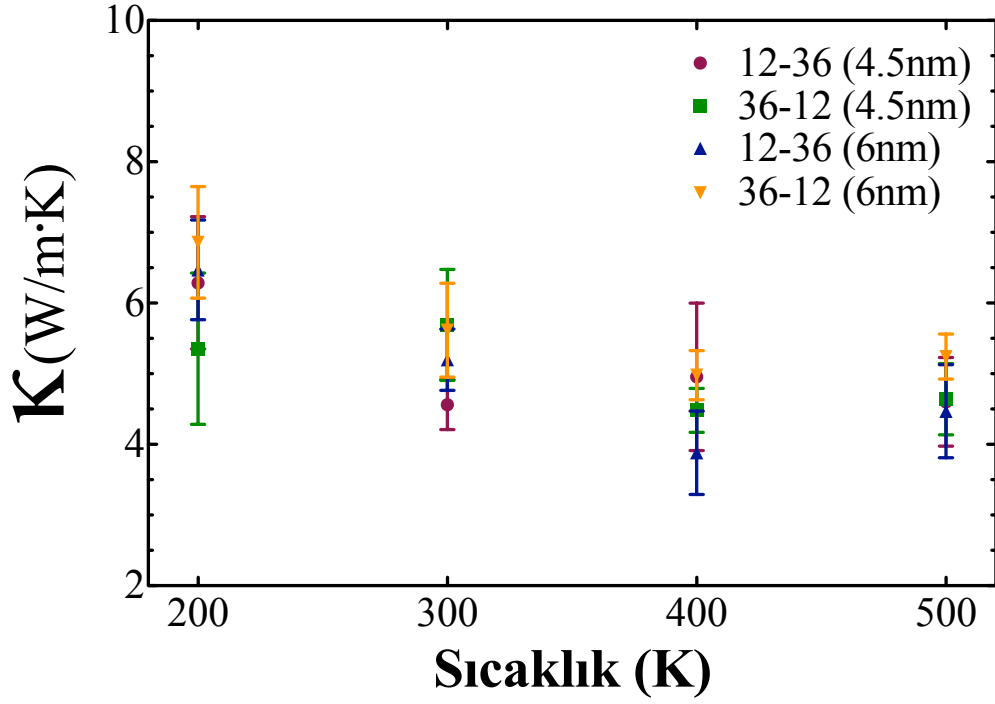


Şekil 3.30. Periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerin büyüme yönündeki termal iletkenlik değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu değişimi

Periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotel sistemlerinin

denge durumları belirlendikten sonra termal taşınım özellikleri ile ilgili hesaplamalara geçildi. Silindirik nanotellerde farklı çaplardaki ve farklı kristal yönlenmedeki periyodik olmayan süper örgüye sahip yapıların silisyum süper örgü uzunluğu değişimine göre büyüme yönündeki termal iletkenlik değişimi Şekil 3.30. da gösterilmiştir. Kristal yönlenmesi $\langle 111 \rangle$ olan 3nm çapındaki yapıya baktığımız zaman 30-18 de termal iletkenliğin bir çıkış yaptığını ve $20 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerine ulaştığını görmekteyiz. Bu değeri ihmal edecek olursak, $\langle 111 \rangle$ yönlenmesine sahip yapılarda termal iletkenliğin silisyum süper örgü uzunluğunun artması ile beraber düşük bir eğimle artış gösterdiği gözükmektedir. Sistemdeki silisyum atomlarının sayısı arttıkça belirli bir değere kadar kendini koruyabilen yapı bu değerden sonra termal iletkenliğinde artış göstermektedir. $\langle 100 \rangle$ yönlenmesine sahip yapılara baktığımız zaman daha önce periyodik olmayan süper örgülerde görmüş olduğumuz trendin devam ettiğini daha keskin bir şekilde görmekteyiz. $\langle 100 \rangle$ yönünde büyütülmüş silisyum nanotellerde termal iletkenlik değeri $5 \pm 1 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerinde bir band oluşturmaktadır ve silisyum süper örgü uzunluğundan bağımsızdır. Boyutsal değişiminin etkisi periyodik olmayan süper örgü yapıya sahip silisyum nanotellerde gözlemlenmemiştir. $\langle 100 \rangle$ yönünde büyütülmüş silisyum nanotellerin $\langle 111 \rangle$ kristal yönlenmesine sahip silisyum nanotellerden termal iletkenlik bakış açısı ile termoelektrik malzemeler için daha tercih edilebilir olduğu bir kez daha gözlemlenmiş ve bundan sonraki aşamamız olan dikdörtgenel nanotellerde bu yönlenmenin etkisine bakmamıza gerek kalmamıştır.

Silindirik nanotellerde son olarak periyodik olmayan süper örgülerin sıcaklık değişimi altındaki davranışı incelenmiştir. Şekil 3.31. periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerden $\langle 100 \rangle$ kristal yönlenmesine sahip 4.5nm ve 6nm çaplarındaki seçilmiş yapıların 200-500 K aralığında büyüme yönündeki termal iletkenlik değişimini göstermektedir. Şu açıkça görülmektedir ki, bu tarz nano yapılarda termal iletimden sorumlu fononların ilettime katılımlarının kısıtlanmasından dolayı sıcaklık değişimi ile beraber saçılımları ve fonon-fonon veya fonon-örgü etkileşimlerinin artması ile beraber termal iletkenlik sıcaklık artışıyla düşmekte lakin bu düşüş yüzdece az bir



Şekil 3.31. Periyodik olmayan süper örgüye sahip silindirik nanotellerin bazı yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimi

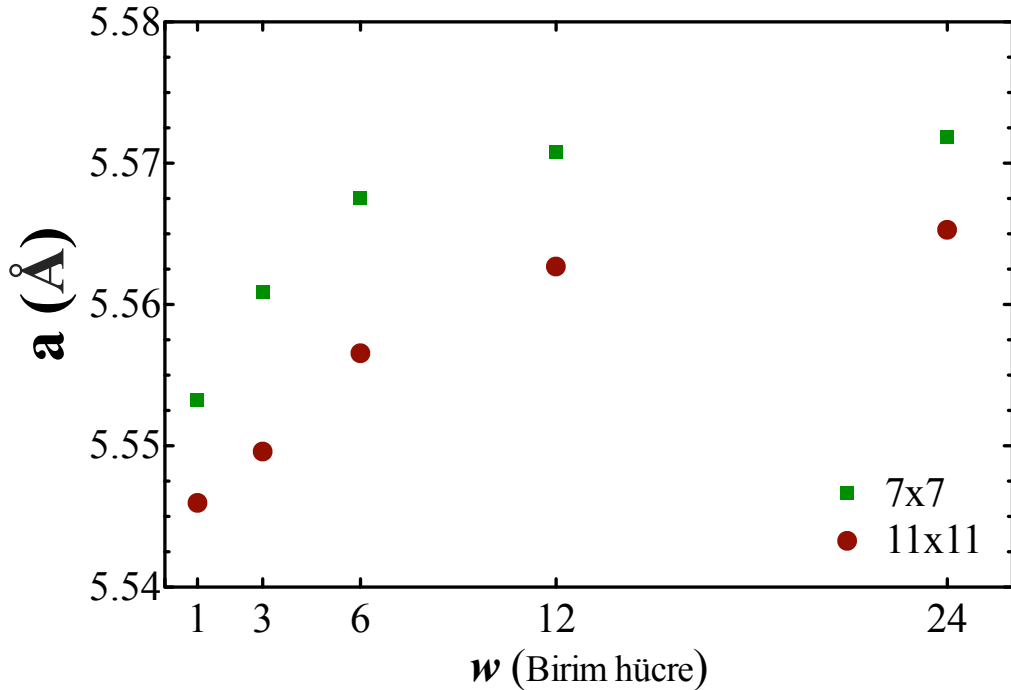
düşüş olmaktadır. Sıcaklığın değişimi ile boyuta bağlı bir trend veya silisyum örgü uzunluğuna bağlı bir trend periyodik olmayan süper örgü yapıya sahip silindirik nanotellerde gözlemlenmemiştir. Bu silisyum nanotellerde sıcaklık artışı ile termal iletkenlik $4 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerlerinin altına düşürülebileceği düşünülmektedir.

3.2.3. Süper Örgüye Sahip Dikdörtgensel Nanoteller

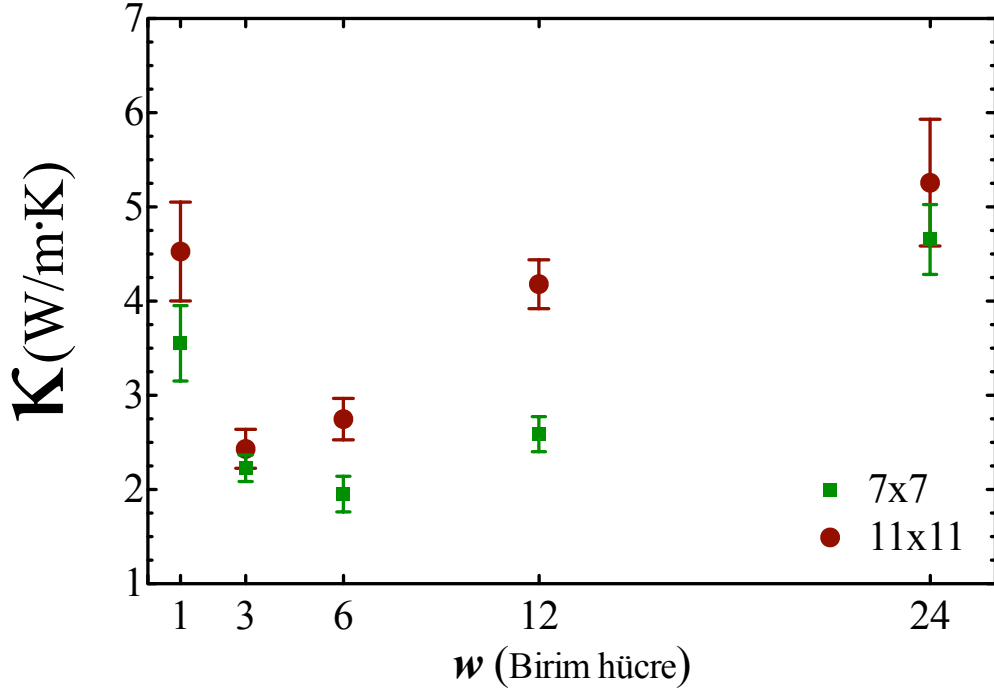
Süper örgü nano yapıların son bölümünde ise dikdörtgensel nanoteller dikkate alınmıştır. Dikdörtgensel nanotellerin süper örgü yapıları periyodik ve periyodik olmayan süper örgüler olmak üzere iki kısımdan oluşacak şekilde, bir önceki bölümlerde daha uygun olduğu ispatlanmış $\langle 100 \rangle$ kristal yönelimindeki sistemlerde termal taşınım özellikleri incelenmiştir.

-Periyodik süper örgü yapılar

Periyodik süper örgü yapılar sahip dikdörtgenel nanotellerde 48 birim hücreye sahip yapılar oluşturuldu. Periyodisite değerleri bir önceki bölümlerde olduğu gibi dikdörtgenel nanotellerde de 1, 3, 6, 12 ve 24 olarak seçilip $\langle 100 \rangle$ kristal yönlenmesine sahip sistemler üretildi. Bu dikdörtgenel nanotellerin kesit yüzeyindeki kenarları 7×7 ve 11×11 birim hücre kare olacak şekilde seçildi. Kristal yönlenmemiz $\langle 100 \rangle$ olduğu için kesit yüzeyindeki kenarlar birbirine eşittir ve bu yüzden sistemlerimizi karesel nanoteller olarak sınıflandırabiliriz. Periyodik süper örgü yapıya sahip karesel nanotellerde öncelikle oda sıcaklığındaki denge örgü sabitleri incelenmiş ve hesaplanan değerler Şekil 3.32. de gösterilmiştir. Şekilde görüldüğü üzere, her iki farklı boyuttaki karesel nanotel için periyodisite artışı ile beraber yapılar genişlemekte ve bir değere yakınsamaktadır. Daha öncede bahsetmiş olduğumuz, boyuta bağlı değişiklik bu grafikte de gözükmemektedir. Kesit alanı azaldıkça sistemlerdeki yüzey atomlarının sayısı arttığı için yapılar genişlemektedir.

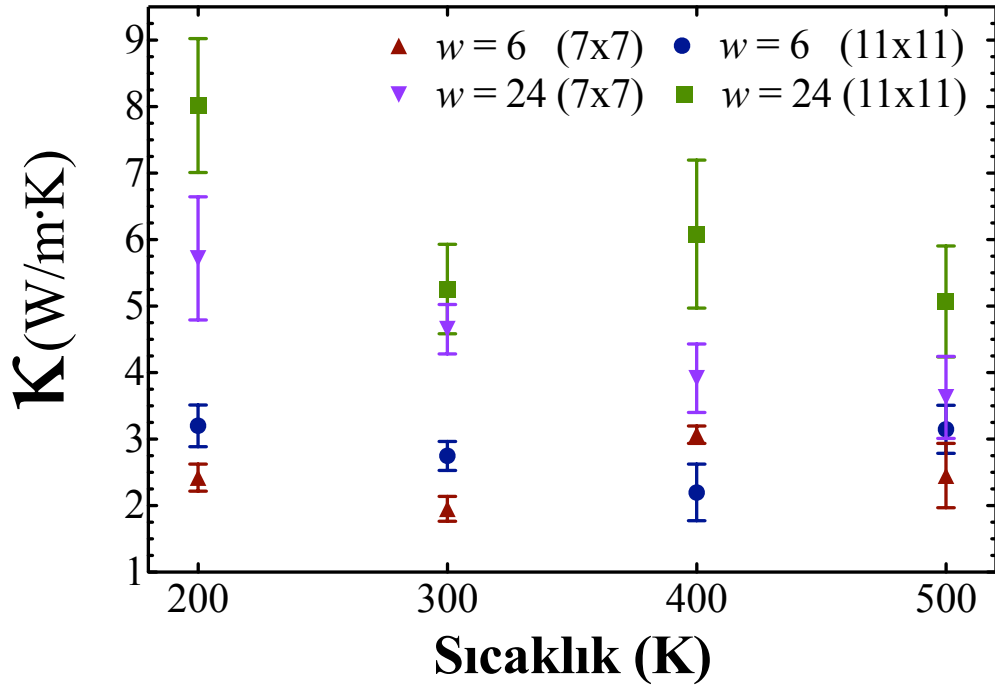


Şekil 3.32. Periyodik süper örgüye sahip karesel nanotellerde büyüme yönündeki örgü sabiti değerine karşın periyodisite değeri



Şekil 3.33. Periyodik süper örgüye sahip karesel nanotellerin büyüme yönündeki termal iletkenlik değerine karşın periyodisite değeri

Daha sonra, denge durumları belirlenen periyodik süper örgüye sahip karesel nanotellerin termal iletkenlik hesaplamalarına geçildi. Şekil 3.33. karesel nanotellerde periyodik süper örgüye sahip farklı kesit alanlarındaki yapıların periyodisite değişimine karşın termal iletkenlik değişimini göstermektedir. Periyodik süper örgüye sahip karesel nanotellerde, termal iletkenlik değerinin boyuta bağlı bir ilişkisi gözlemlenmektedir. Şekilde görüldüğü üzere, 7x7 karesel nanoteli 11x11 karesel nanoteline göre daha her periyodisite değerinde daha düşük termal iletkenlik değerine sahiptir. Periyodik süper örgülerde şu ana kadar görmüş olduğumuz ve sebebini açıklamaya çalıştığımız, periyodisite değerinin artışına göre termal iletkenliğin önce azalıp ardından artan bir eğilim göstermesi burada her iki yapıda da gözükmemektedir. 11x11 periyodik süper örgüye sahip karesel nanoteli en düşük termal iletkenlik değerini $w = 3$ iken yaklaşık $2.4 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerinde göstermektedir. 7x7 periyodik süper örgüye sahip karesel nanoteli ise şu ana kadar süper örgü bölümündeki en düşük termal iletkenliği $w = 6$ iken $1.9 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değerinde göstermektedir.

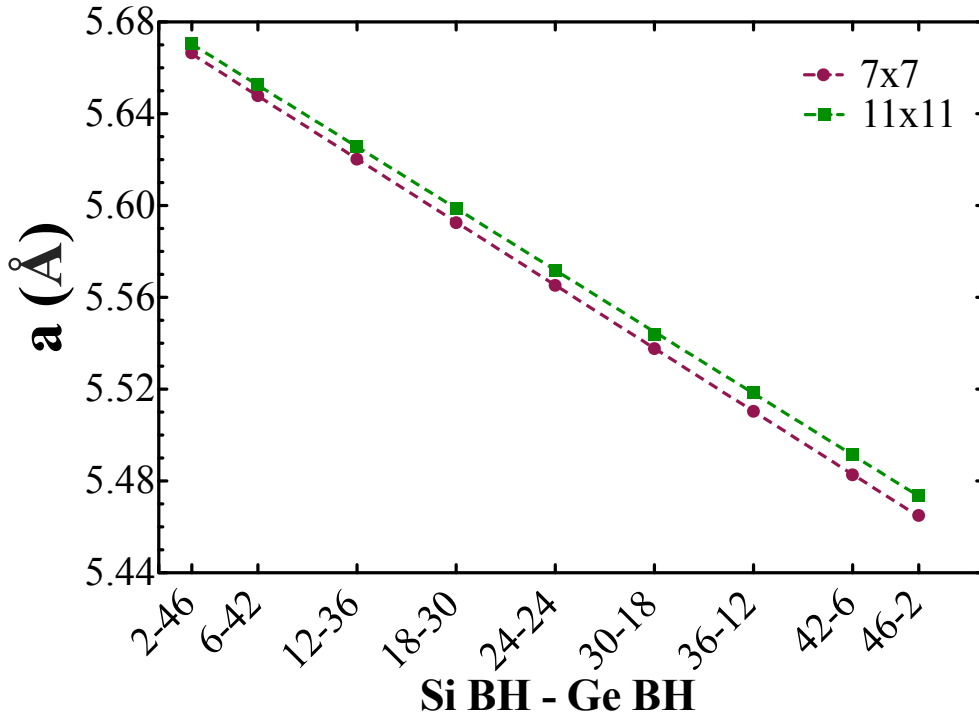


Şekil 3.34. Periyodik süper örgüye sahip karesel nanotellerin bazı yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimi

Karesel nanotellerde sıcaklığın termal iletimdeki etkisini incelemek üzere periyodik süper örgü yapılarından $w = 6$ ve 24 için her iki nanotel için termal iletkenliğin 200-500 K değerleri arasındaki değişimi hesaplandı. Şekil 3.34. 7x7 ve 11x11 karesel nanotel yapılarının belli periyodisite değerlerinin sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimini göstermektedir. Periyodisite değeri 24 için termal iletkenliğin her iki karesel nanotelde de sıcaklığın etkisi ile azalma eğiliminde olduğu gözükmektedir. Lakin, 7x7 karesel nanotelinde en düşük termal iletkenliği görmüş olduğumuz $w = 6$ için, her iki karesel nanotelde de termal iletkenlik değeri sıcaklık değişimi ile beraber belli bir değer aralığında gezinmekte olduğu söylenebilir. Periyodisite değeri 6 için sıcaklığın etkisinin alışılmışın dışında olduğu gözükmektedir. Silindirik nanotellerde de bu periyodisite değerleri için benzer bir durumla karşılaşılmış, aynı periyodisite değerlerine sahip nanoteller de benzeri davranışlar görüldüğü belirlenmiştir ve silindirik nanotellerde de periyodisite değeri 6 için bu salınımların olduğu lakin düşüş trendini sürdürdüğü görülmektedir.

-Periyodik olmayan süper örgü yapılar

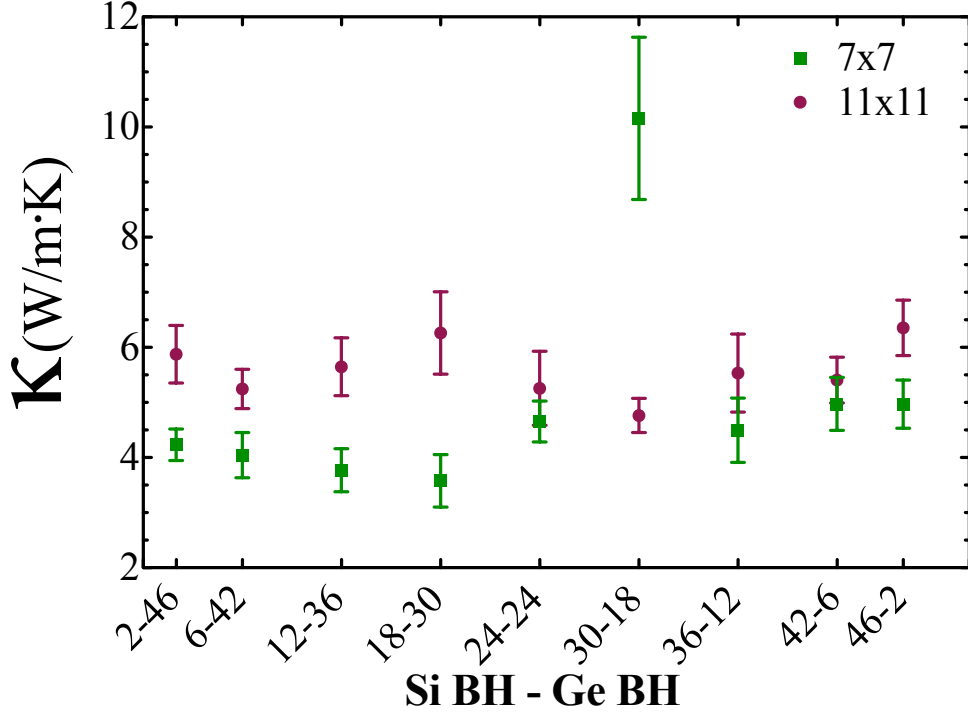
Karesel nanotellerde periyodik olmayan süper örgü yapıların silisyum süper örgü uzunluğuna göre termal taşınım özellikleri incelendi. Sadece $\langle 100 \rangle$ kristal yönlenmesini dikkate aldığımız bu bölümde, 48 birim hücreye sahip karesel nanoteller, silisyum süper örgü uzunluğuna göre sırasıyla 2, 6, 12, 18, 24 (periyodik süper örgü yapısından), 30, 36, 42, 46 birim hücre olarak seçilip, 7x7 ve 11x11 birim hücre kare kesitine sahip olacak şekilde hazırlandı. Periyodik olmayan süper örgü yapıya sahip karesel nanotellerin termal iletkenlik



Şekil 3.35. Periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerde büyüme yönündeki örgü sabiti değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu

ayını hesaplamalarına geçmeden önce denge durumlarındaki büyütme yönündeki örgü parametreleri belirlenmiştir. Şekil 3.35. farklı kesit alanlarında periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerdeki örgü parametrelerinin silisyum süper örgü uzunluğuna göre değişimini göstermektedir. Vegard yasasını bir kez daha anımsadığımız bu şekilde, bu yasaya benzeri bir davranış gözükmemekte ve silisyum süper örgü uzunluğu azaldıkça örgü parametreleri

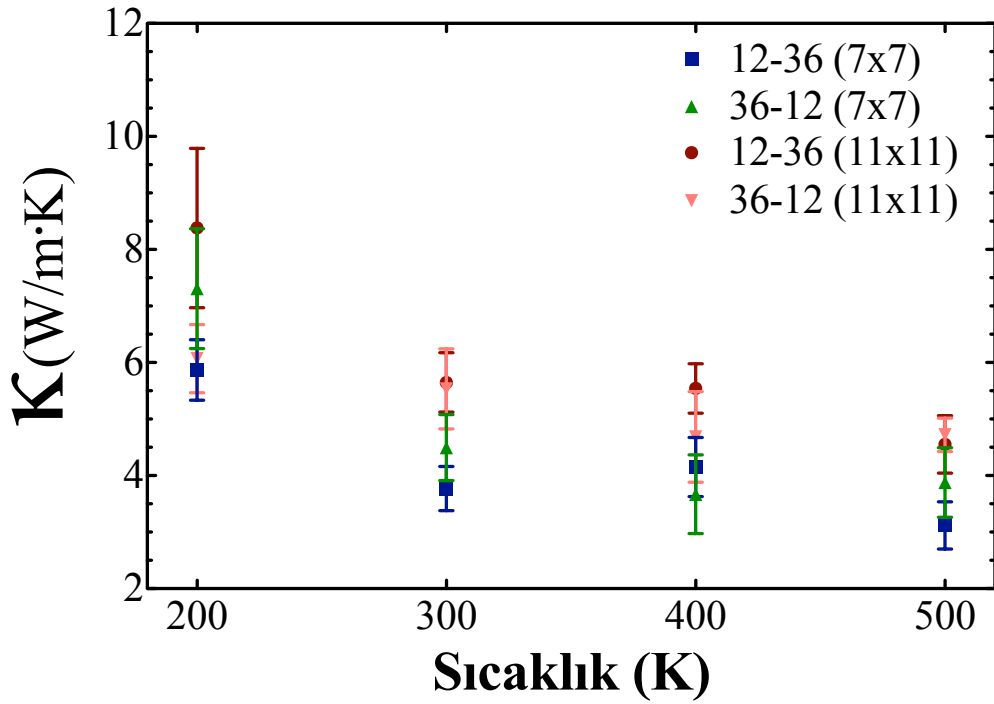
tresi değeri artmakta ve sistemler genişlemektedir. Sistemdeki silisyum atomların sayısı arttıkça, silisyumun kendi örgü parametresi değerinin sistemdeki baskınlığı arttığından dolayı sistem daralma eğilimindedir. Sistemlerin kesit boyutu arttıkça da yığın atomların yani tüm serbest elektronlarını paylaşmış ve bağlanma kuvveti fazla olan atomların sayısı arttığından dolayı sistemin merkezine doğru kuvvet arttığından dolayı, daralma eğilimi görülmektedir.



Şekil 3.36. Periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerin büyüme yönündeki termal iletkenlik değerine karşın silisyum süper örgü uzunluğu değişimi

300 K sıcaklığındaki denge durumları belirlenen periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotel sistemlerinin termal taşınım özellikleri ile ilgili hesaplamalarına geçildi. Karesel nanotellerin farklı kesit alanlarındaki periyodik olmayan süper örgüye sahip yapıların silisyum süper örgü uzunluğuna göre büyüme yönündeki termal iletkenlik değişimi Şekil 3.36. da gösterilmiştir. 7x7 kesit alanına sahip karesel nanotelde termal iletkenlik değeri bir önceki periyodik olmayan süper örgüye sahip yapılarda olduğu gibi 30-18 sisteminde bir çıkış göstermekte ve $10 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ civarında bir değerde okunmaktadır. Bu durum 30-18 sistemi ile ilgili araştırılması gereken bir durum olduğunu ortaya

çıkarmaktadır ve gelecekte yapılacak araştırmamızın planları arasında yerini almıştır. Onun dışında her iki kesit alanında periyodik olmayan süper örgü yapıya sahip karesel nanoteller termal iletkenlik değeri silisyum süper örgü uzunluğu değişimine göre belli bir değer etrafında salınım yapmaktadır. Termal iletkenlik 7x7 karesel nanoteli için $4\pm 1 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değeri etrafında 11x11 karesel nanoteli için ise $5.5\pm 1 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ değeri etrafında silisyum süper örgü uzunluğuna göre band oluşturmaktadır. Boyuta bağlı bir termal iletkenlik ilişkisi ayrıca gözlemlenmekte, kesit alanı azaldıkça periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerde termal iletkenlik değerinin azaldığı Şekil 3.36. da görülmektedir.



Şekil 3.37. Periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerin bazı yapılarının sıcaklık altındaki termal iletkenlik değişimi

Karesel nanotellerin son hesabı olarak periyodik olmayan süper örgülerin sıcaklık artışı altındaki davranışı incelenmiştir. Şekil 3.37. periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerden 7x7 ve 11x11 birim hücre kare sistemlerinden seçilmiş olan yapıların 200, 300, 400 ve 500 K sıcaklık değerlerinde büyüme yönündeki termal iletkenlik değişimini göstermektedir.

Şekilde görüldüğü üzere incelenen periyodik olmayan süper örgüye sahip karesel nanotellerde sıcaklık artışı ile beraber termal iletkenlik azalmaktadır. Boyutsal olarak incelendiğinde ise, daha düşük kesit alanına sahip karesel nanotel sistemlerinin termal iletkenlik değerinin düşük olduğu farklı sıcaklıklarda da görülmektedir.

4. SONUÇ VE ÖNERİLER

Yüksek performanslı termoelektrik malzemeler gelecekte bir kilometre taşı olacak ve hayatımızdaki her alanda bir etkiye sahip olacaktır. Bu yüzden, bu tez çalışmasında termoelektrik malzemelere potansiyeli değerlendirilmesi gereken, ucuz ve rahat bulunabilir bir aday olan silisyum-germanyum elementlerinden oluşan nano malzemeler seçilmiş ve termoelektrik performansın arttırılmasına yönelik bir yaklaşım değerlendirmeye alınıp, araştırılmıştır. Nano dünyada termoelektrik performansın arttırılması için ortaya atılan iki baskın düşünceden biri olan termal iletkenliğin, elektriksel direnç göstermeden düşürülerek termoelektrik performansın arttırılması düşüncesinin yol göstericiliği ile Si-Ge nano yapılarının termal taşınım özellikleri moleküler dinamik simülasyon yöntemini kullanılarak karakterize edilip, detaylı bir şekilde incelenmiştir. Bilgisayar deneyi diye tanımlayabileceğimiz bu yöntemde deneyin gerçeği yansıtması için silisyum ve germanyum elementlerinin etkileşimleri kabul gören Tersoff potansiyeli kullanılarak tanımlanmıştır. Farklı boyut ve geometrilerdeki $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ nano yapılar ve karşılaştırılması mümkün olabilsin diye $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ nano yapıları ile aynı geometri ve benzer boyutlardaki Si-Ge süper örgü nano sistemleri model olarak üretilip incelenmiştir. Ayrıca, karşılaştırma yapmak için Si-Ge süper örgü ve alaşımı üç boyutlu (yığın) olarak ele alınmıştır. Bu sistemlerde yapıların geometrileri ile boyutlarının dışında ayrıca sıcaklığın, kristal yönlenmenin ve ara yüzey pürüzlülüğünün termal iletkenlik üzerindeki etkileri de incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar aşağıdaki gibi sıralanabilir:

- Alaşımlama termal iletkenliğin düşürülmesinde çok etkili bir yöntemdir. Ayrıca, yüzdece az bir oranda yapılan germanyum katkısı ile silisyum-germanyum alaşımlarında termal iletkenlik etkili bir şekilde düşürülebilmektedir. Bu durum hem macro hemde nano boyutta geçerli olmaktadır. En düşük termal iletkenlik Si_xGe_x sistemlerinde $x = 0.5$ de görülmektedir.
- Si_xGe_x nanotellerinde yapıların örgü parametreleri kesit yüzeyinin boyutuna göre değişiklik göstermektedir. Boyut azaldıkça örgü parametresi

değeri yüzey atomlarının yığın atomlarına göre oranı arttığı için artmaktadır.

- Si_xGe_x nanotellerinde yapıların termal iletkenlik değerleri kesit yüzeyinin boyutu ile bağlantılı olarak trend göstermektedir. Boyut arttıkça termal iletkenlik değeri artmaktadır.
- Si_xGe_x nanotellerinde ayrıca sıcaklığın termal iletkenlik üzerindeki etkisi de incelenmiştir. Saf Si ve Saf Ge yapılarının termal iletkenlik değeri sıcaklık arttıkça azalma eğilimi göstermektedir fakat Si_xGe_x nano yapılarında $x = 0$ dan farklı değerler için termal iletkenlik değerinin sıcaklık değişiminden bağımsız olduğu görülmektedir.
- Si_xGe_x nano yapılarında $\langle 100 \rangle$ kristal yöneliminin termoelektrik malzemeler için termal iletkenlik bakış açısı ile daha uygun olduğu görülmüştür. Ayrıca, Si_xGe_x nano yapılarında geometrinin etkisine bakılmış, dikdörtgenel nanotellerin silindirik nanotellere göre benzer kesit alanları göz önüne alındığında daha düşük termal iletkenlik sergilediği görülmüştür.
- Üç boyutlu Si-Ge süper örgü sistemlerinde farklı kristal yönlenmelere sahip yapılarda büyüme yönündeki termal iletkenliğin periyodisiteye bağlı davranışları incelendi. Belirli bir periyodisite değerinde en düşük termal iletkenlik değerine ulaşıldığı ve periyodisite arttıkça termal iletkenliğin önce düşüş gösterip sonra arttığı gözlemlendi. Sıcaklık değişiminin etkisine bakıldığı zaman sıcaklık artışının bu tür yapılarda termal iletkenlik değerinin azalmasına sebep olduğu belirlendi.
- Üç boyutlu Si-Ge süper örgü sistemlerinde farklı kristal yönlenmelere sahip yapılarda büyüme yönündeki termal iletkenliğin silisyum süper örgü uzunluğuna bağlı değişimi incelendi. $\langle 100 \rangle$ kristal yönelimine sahip yapılarda termal iletkenliğin silisyum süper örgü uzunluğu değişimine göre belirli bir değer aralığında band oluşturduğu, $\langle 111 \rangle$ kristal yöneliminde ise silisyum süper örgü uzunluğu arttıkça termal iletkenliğin artma eğiliminde olduğu gözlemlendi. Sıcaklık değişiminin etkisine bakıl-

dığı zaman sıcaklık artışının $\langle 111 \rangle$ kristal yönelimine sahip yapılarda termal iletkenlik değerinin azalmasına sebep olduğu belirlendi. Buna karşın $\langle 100 \rangle$ kristal yönelimine sahip yapılarda termal iletkenlik üstünde sıcaklığın etkisi gözlemlenmedi.

- Si-Ge süper örgü yapılarda arayüz pürüzlülüğünün etkisi de incelendi. Buna göre arayüzdeki pürüzlülük aralığı 10 angstroma kadar arttıkça termal iletkenlik büyüme yönünde %40 a kadar, diğer yönlerde ise %50 e kadar kontrollü olarak düşürülebilmektedir.
- Süper örgüye sahip Si-Ge nanotellerinde kesit yüzeyinin boyutuna göre örgü parametrelerinin alaşım nanotellerinde olduğu gibi bir davranış olduğu yani boyut arttıkça sistemlerin daralma eğilimi gösterdiği gözlemlenmiştir.
- Süper örgüye sahip farklı kristal yönelimlerdeki ve çaplardaki Si-Ge silindirik nanotellerinde büyüme yönündeki termal iletkenliği periyodisiteye bağlı davranışları incelendiğinde, çap boyutuna bağlı bir ilişki gözlemlenmemiştir. Periyodisite değeri arttıkça farklı çaplardaki sistemlerin termal iletkenliği farklı periyodisite değerlerine kadar azalmakta ardından yükselme eğilimi göstermektedir. Her sistemin kendine özgü belirli bir periyodisite değerinde en düşük termal iletkenlik gösterdiği gözlemlenmiştir. Ayrıca silindirik Si-Ge süper örgü nanotellerinde bu sistemler için sıcaklık artışı ile termal iletkenliğin azalma eğilimi gösterdiği gözlemlenmiştir.
- Süper örgüye sahip farklı kristal yönelimlerdeki ve çaplardaki Si-Ge silindirik nanotellerinde büyüme yönündeki termal iletkenliği silisyum süper örgü uzunluğuna bağlı davranışları incelendiğinde, çap boyutuna bağlı bir ilişki gözlemlenmemiştir. Bu tarz yapılarda termal iletkenliğin silisyum süper örgü uzunluğu değişimine göre belirli bir değer aralığında band oluşturduğu ortaya çıkmıştır. Bu sistemler için silindirik Si-Ge süper örgü nanotellerinde sıcaklık artışı ile termal iletkenliğin azalma eğilimi gösterdiği gözlemlenmiştir.

- Üç boyutlu süper örgülerde olduğu gibi tek boyutlu süper örgü nanotellerde de farklı kristal yönelmelerinin termoelektrik malzemeler için termal iletkenlik bakış açısı ile uygunluğu araştırılmıştır. Bunun sonucunda SiGe alaşımlarında karşımıza çıkan sonuçların bir benzeri karşımıza çıkmaktadır. Süper örgü yapılarında $\langle 100 \rangle$ kristal yöneliminin termoelektrik malzemeler üretimi için daha uygun bir yönelim ortaya çıkmıştır. Ayrıca $\langle 100 \rangle$ kristal yöneliminin termoelektrik malzemenin performansını etkileyen diğer parametreler için de diğer yönelimlerden uygun olduğu Cavassilas ve ark. [72] yaptığı çalışmada vurgulanmaktadır.
- $\langle 100 \rangle$ kristal yönelmesine ve farklı kesit yüzeylerine sahip dikdörtgenel Si-Ge süper örgü nanotel sistemlerinde büyüme yönündeki termal iletkenliğin periyodisiteye bağlı davranışları incelendiğinde, kesit yüzeyi boyutuna bağlı bir ilişki gözlemlenmiştir. Boyut azaldıkça termal iletkenliğin süper örgüye sahip dikdörtgenel nanotellerde azaldığı görülmektedir. Her süper örgü yapıda gördüğümüz şekilde dikdörtgenel nanotellerde de periyodisite arttıkça termal iletkenlik önce azalma eğilimi ardından artma eğilimi göstermektedir ve her sistemin en düşük termal iletkenliği gösterdiği spesifik bir periyodisite değeri bulunmaktadır. Sıcaklık değişimi altında ise farklı iki tür davranış gözlemlenmiştir, termal iletkenliğin olabildiğince kısıtlandığı sistemlerde sıcaklık değişiminin termal iletkenliğe etki etmediği diğer sistemlerde ise sıcaklık artışının termal iletkenliğin düşüşü ile sonuçlandığı gözlemlendi.
- $\langle 100 \rangle$ kristal yönelmesine ve farklı kesit yüzeylerine sahip dikdörtgenel Si-Ge süper örgü nanotel sistemlerinde büyüme yönündeki termal iletkenliğin silisyum süper örgü uzunluğuna bağlı davranışları incelendiğinde, boyuta bağlı bir ilişki gözlemlenmiştir. Boyut azaldıkça termal iletkenliğin bu sistemlerde azaldığı görülmektedir. Bu tarz yapılarda termal iletkenliğin silisyum süper örgü uzunluğu değişimine göre belirli bir değer aralığında band oluşturduğu gözlemlendi. Ayrıca dikdörtgenel Si-Ge süper örgü nanotellerinde bu sistemler için sıcaklık artışı ile termal

iletkenliğin azalma trendi gösterdiği gözlemlenmiştir.

- Si_xGe_x nano yapılarında gözlemlendiği gibi, Si-Ge süper örgü nano yapılar da dikdörtgensel nanotellerin silindirik nanotellere göre benzer kesit alanları göz önüne alındığında daha düşük termal iletkenlik gösterdiği görülmüştür.
- Tüm hesaplar sonucu, termoelektrik performansı en yüksek olabileceği düşünülen yapılar belirlenmiş ve örgüsel termal taşınım özellikleri göz önüne alındığı zaman, süper örgü nanotel sistemlerinin en uygun sistem olduğu, bu yüzden bu tezdeki bilgilerden faydalanarak üretilebilecek Si-Ge termoelektrik malzemelerin termoelektrik performansının iyi değerlerde olacağı düşünülmektedir. En iyi sistemin ise, arayüz pürüzlülüğü ile dikdörtgen kesit yüzeyine sahip ve çap boyutu düşük Si-Ge süper örgü nanotel yapıları olduğu tahmin edilmektedir.

KAYNAKLAR

- [1] Charlier, R.H., “Renewable energy sources for fuel and electricity,” *Environ. Conserv.*, **22**, 380–381, 1995.
- [2] Herzog, A.V., Lipman, T.E. ve Kammen, D.M., “Renewable energy sources,” *Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS) Forerunner Volume Part 4C*, 2001.
- [3] Zhang, G., Zhang, Q., Bui, C., Lo, G. ve Li, B., “Thermoelectric performance of silicon nanowires,” *Appl. Phys. Lett.*, **94**, 213108, 2009.
- [4] Huang, W., Luo, X., Gan, C.K., Quek, S.Y. ve Liang, G., “Theoretical study of thermoelectric properties of few-layer mos2 and wse2,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 10866–10874, 2014.
- [5] Lalonde, A.D., Pei, Y., Wang H. ve Snyder, G.J., “Lead telluride alloy thermoelectrics,” *Mater. Today*, **14**, 526 – 532, 2011.
- [6] Morelli, D.T., Caillat, T., Fleurial, J.P., Borshchevsky, A., Vandersande, J., Chen, B. ve Uher, C., “Low-temperature transport properties of *p*-type cosb_3 ,” *Phys. Rev. B*, **51**, 9622–9628, 1995.
- [7] Medlin, D.L. ve Snyder, G.J., “Interfaces in bulk thermoelectric materials: A review for current opinion in colloid and interface science,” *Curr. Opin. Colloid. In.*, **14**, 226 – 235, 2009.
- [8] Wölfling, B., Kloc, C., Teubner, J. ve Bucher, E., “High performance thermoelectric tl_9bite_6 with an extremely low thermal conductivity,” *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 4350–4353, 2001.
- [9] Sales, B.C., Mandrus, D. ve Williams, R.K., “Filled skutterudite antimonides: A new class of thermoelectric materials,” *Science*, **272**, 1325, 1996.
- [10] Hicks, L.D., Harman, T.C., Sun, X. ve Dresselhaus, M.S., “Experimental study of the effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit,” *Phys. Rev. B*, **53**, R10493–R10496, 1996.
- [11] Wang, X.W., Lee, H., Lan, Y.C., Zhu, G.H., Joshi, G., Wang, D.Z., Yang, J., Muto, A.J., Tang, M.Y., Klatsky, J., Song, S., Dresselhaus, M.S., Chen, G. ve Ren, Z.F., “Enhanced thermoelectric figure of merit in

- nanostructured n-type silicon germanium bulk alloy,” *Appl. Phys. Lett.*, **93**, 193121, 2008.
- [12] Daly, B.C., Maris, H.J., Imamura, K. ve Tamura, S., “Molecular dynamics calculation of the thermal conductivity of superlattices,” *Phys. Rev. B*, **66**, 024301, 2002.
- [13] Hochbaum, A.I., Chen, R., Delgado, R.D., Liang, W., Garnett, E.C., Najarian, M., Majumdar, A. ve Yang, P., “Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires,” *Nature*, **451**, 163–167, 2008.
- [14] Akinari, M., Hiroyuki, W., Masahiro, K. ve Kimihiro, S., “Investigation of thermoelectric properties of si/ge multilayer with ultra-heavily b doping,” *Mater. Trans.*, **49**, 1723–1727, 2008.
- [15] Fleurial, J.P., Gailliard, L., Triboulet, R., Scherrer, H. ve Scherrer, S., “Thermal properties of high quality single crystals of bismuth telluride-part i: Experimental characterization,” *J. Phys. Chem. Solids*, **49**, 1237 – 1247, 1988.
- [16] Imai, H., Shimakawa, Y. ve Kubo, Y., “Large thermoelectric power factor in tis_2 crystal with nearly stoichiometric composition,” *Phys. Rev. B*, **64**, 241104, 2001.
- [17] Kong, W.J., Lu, L., Zhu, H.W., Wei, B.Q. ve Wu, D.H., “Thermoelectric power of a single-walled carbon nanotubes strand,” *J. Phys-Condens. Matt.*, **17**, 1923, 2005.
- [18] Wu, P.M., Gooth, J., Zianni, X., Svensson, S.F., Gluschke, J.G., Dick, K.A., Thelander, C., Nielsch, K. ve Linke, H., “Large thermoelectric power factor enhancement observed in inas nanowires,” *Nano Lett.*, **13**, 4080–4086, 2013.
- [19] Chen, G., “Thermal conductivity and ballistic-phonon transport in the cross-plane direction of superlattices,” *Phys. Rev. B*, **57**, 14958–14973, 1998.
- [20] Xu, W., Nazaretski, E., Lu, M., Hadim, H. ve Shi, Y., “Characterization of the thermal conductivity of $\text{la}_{0.95}\text{sr}_{0.05}\text{coo}_3$ thermoelectric oxide nanofibers,” *Nano Res.*, **7**, 1224–1231, 2014.

- [21] Zhao, X.B., Ji, X.H., Zhang, Y.H., Zhu, T.J., Tu, J.P. ve Zhang, X.B., “Bismuth telluride nanotubes and the effects on the thermoelectric properties of nanotube-containing nanocomposites,” *Appl. Phys. Lett.*, **86**, 062111, 2005.
- [22] Yang, G.C., *in Chemistry, Physics, and Materials Science for Thermoelectric Materials: Beyond Bismuth Telluride*. New York, NY, USA: Kluwer Academic/Plenum, 2003.
- [23] Kim, H., Kim, I., Choi, H. ve Kim, W., “Thermal conductivities of silxgex nanowires with different germanium concentrations and diameters,” *Appl. Phys. Lett.*, **96**, 233106, 2010.
- [24] Li, D., Wu, Y., Kim, P., Shi, L., Yang, P. ve Majumdar, A., “Thermal conductivity of individual silicon nanowires,” *Appl. Phys. Lett.*, **83**, 2934–2936, 2003.
- [25] Martinez, J.A., Provencio, P.P., Picraux, S.T., Sullivan, John P. ve Swartzentruber, B.S., “Enhanced thermoelectric figure of merit in sige alloy nanowires by boundary and hole-phonon scattering,” *J. Appl. Phys.*, **110**, 074317, 2011.
- [26] Lee, S.-M., Cahill, D.G. ve Venkatasubramanian, R., “Thermal conductivity of sige superlattices,” *Appl. Phys. Lett.*, **70**, 2957–2959, 1997.
- [27] Borca-Tasciuc, T., Liu, W., Liu, J., Zeng T., Song, D.W., Moore, C.D., Chen G., Wang K.L., Goorsky, M.S., Radetic, T., Gronsky, R., Koga, T. ve Dresselhaus, M.S., “Thermal conductivity of symmetrically strained si/ge superlattices,” *Superlattice Microst.*, **28**, 199–206, 2000.
- [28] Huxtable, S.T., Abramson, A.R., Tien, C., Majumdar, A., LaBounty, C., Fan, X., Zeng, G., Bowers, J.E., Shakouri, A. ve Croke, E.T., “Thermal conductivity of si/sige and sige/sige superlattices,” *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 1737–1739, 2002.
- [29] Li, D., Wu, Y., Fan, R., Yang, P. ve Majumdar, A., “Thermal conductivity of si/sige superlattice nanowires,” *Appl. Phys. Lett.*, **83**, 3186–3188, 2003.
- [30] Yang, X., To, A.C. ve Tian, R., “Anomalous heat conduction behavior in thin finite-size silicon nanowires,” *Nanotechnology*, **21**, 155704, 2010.

- [31] Liu, L., Huang, M., Yang, R., Jeng, M. ve Yang, C., “Curvature effect on the phonon thermal conductivity of dielectric nanowires,” *J. Appl. Phys.*, **105**, 104313, 2009.
- [32] Liu, L. ve Chen, X., “Effect of surface roughness on thermal conductivity of silicon nanowires,” *J. Appl. Phys.*, **107**, 033501, 2010.
- [33] Chen, Y., Li, D., Lukes, J.R., Ni, Z. ve Chen, M., “Minimum superlattice thermal conductivity from molecular dynamics,” *Phys. Rev. B*, **72**, 174302, 2005.
- [34] Volz, S.G. ve Chen, G., “Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of silicon nanowires,” *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 2056–2058, 1999.
- [35] Abs da Cruz, C., Termentzidis, K., Chantrenne, P. ve Kleber, X., “Molecular dynamics simulations for the prediction of thermal conductivity of bulk silicon and silicon nanowires: Influence of interatomic potentials and boundary conditions,” *J. Appl. Phys.*, **110**, 034309, 2011.
- [36] Mingo, N., Yang, L., Li, D. ve Majumdar, A., “Predicting the thermal conductivity of si and ge nanowires,” *Nano Lett.*, **3**, 1713–1716, 2003.
- [37] Li, X., Maute, K., Dunn, Ma.L. ve Yang, R., “Strain effects on the thermal conductivity of nanostructures,” *Phys. Rev. B*, **81**, 245318, 2010.
- [38] White, D.P. ve Klemens, P.G., “Thermal conductivity of thermoelectric $\text{si}_{0.8}\text{ge}_{0.2}$ alloys,” *J. Appl. Phys.*, **71**, 4258–4263, 1992.
- [39] Skye, A. ve Schelling, P.K., “Thermal resistivity of $\text{si}_{0.8}\text{ge}_{0.2}$ alloys by molecular-dynamics simulation,” *J. Appl. Phys.*, **103**, 113524, 2008.
- [40] Hao, F., Fang, D. ve Xu, Z., “Thermal transport in crystalline si/ge nanocomposites: Atomistic simulations and microscopic models,” *Appl. Phys. Lett.*, **100**, 091903, 2012.
- [41] Donadio, D. ve Galli, G., “Atomistic simulations of heat transport in silicon nanowires,” *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 195901, 2009.
- [42] Chen, J., Zhang, G. ve Li, B., “Impacts of atomistic coating on thermal conductivity of germanium nanowires,” *Nano Lett.*, **12**, 2826–2832, 2012.
- [43] Hu, M., Giapis, K.P., Goicochea, J.V., Zhang, X. ve Poulikakos, D., “Significant reduction of thermal conductivity in si/ge core-shell nanowires,”

- Nano Lett.*, **11**, 618–623, 2011.
- [44] Hu, M., Zhang, X., Giapis, K.P. ve Poulidakos, D., “Thermal conductivity reduction in core-shell nanowires,” *Phys. Rev. B*, **84**, 085442, 2011.
- [45] Garg, J., Bonini, N., Kozinsky, B. ve Marzari, N., “Role of disorder and anharmonicity in the thermal conductivity of silicon-germanium alloys: A first-principles study,” *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 045901, 2011.
- [46] Abs da Cruz, C., Katcho, N.A., Mingo, N. ve Veiga, R.G.A., “Thermal conductivity of nanocrystalline sige alloys using molecular dynamics simulations,” *J. Appl. Phys.*, **114**, 164310, 2013.
- [47] Chen, J., Zhang, G. ve Li, B., “Tunable thermal conductivity of si1xgex nanowires,” *Appl. Phys. Lett.*, **95**, 073117, 2009.
- [48] Guo, R. ve Huang, B., “Approaching the alloy limit of thermal conductivity in single-crystalline si-based thermoelectric nanocomposites: A molecular dynamics investigation,” *Sci. Rep.*, **5**, 9579, 2015.
- [49] Li, X. ve Yang, R., “Equilibrium molecular dynamics simulations for the thermal conductivity of si/ge nanocomposites,” *J. Appl. Phys.*, **113**, 104306, 2013.
- [50] Huang, X. ve Huai, X., “Molecular dynamics simulation of thermal conductivity in sige nanocomposites,” *Chinese Phys. Lett.*, **25**, 2973, 2008.
- [51] Dames, C. ve Chen, G., “Theoretical phonon thermal conductivity of si/ge superlattice nanowires,” *J. Appl. Phys.*, **95**, 682–693, 2004.
- [52] Savi, I., Donadio, D., Gygi, F. ve Galli, G., “Dimensionality and heat transport in si-ge superlattices,” *Appl. Phys. Lett.*, **102**, 073113, 2013.
- [53] Landry, E.S. ve McGaughey, A.J.H., “Effect of interfacial species mixing on phonon transport in semiconductor superlattices,” *Phys. Rev. B*, **79**, 075316, 2009.
- [54] Haskins, J.B., Kinaci, A. ve Çağın, T., “Thermal conductivity of sige quantum dot superlattices,” *Nanotechnology*, **22**, 155701, 2011.
- [55] Hu, M. ve Poulidakos, D., “Si/ge superlattice nanowires with ultralow thermal conductivity,” *Nano Lett.*, **12**, 5487–5494, 2012.
- [56] Kaya, S., *Metal nanoparçacıkların termal özellikleri moleküler dinamik*

- simülasyonu*, Yüksek Lisans Tezi, Pamukkale Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Denizli, 2012.
- [57] Haile, J.M., *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*. New York, NY, USA: John Wiley & Sons, Inc., 1992.
- [58] LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). <http://lammmps.sandia.gov>.
- [59] Sevik, C., Sevinçli, H., Cuniberti, G. ve Çağın, T., “Phonon engineering in carbon nanotubes by controlling defect concentration,” *Nano Lett.*, **11**, 4971–4977, 2011.
- [60] Lukes, J.R., Li, D.Y., Liang, X.G. ve Tien, C.L., “Molecular dynamics study of solid thin-film thermal conductivity,” *J. Heat Transfer*, **122**, 536–543, 2000.
- [61] Kinaci, A., Haskins, J.B. ve Çağın, T., “On calculation of thermal conductivity from einstein relation in equilibrium molecular dynamics,” *J. Chem. Phys.*, **137**, 014106, 2012.
- [62] Tersoff, J., “Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems,” *Phys. Rev. B*, **39**, 5566–5568, 1989.
- [63] VMD (Visual Molecular Dynamics). <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>.
- [64] VESTA (Visualization for Electronic and STructural Analysis). <http://jp-minerals.org/vesta/en/>.
- [65] Kasper, E., “Optical properties part 3, basic properties, growth and preparation methods of group iv heterostructures,” *Landolt-Brnstein Group III Condensed Matter*, **34C3**, 1–18, 2007.
- [66] Vegard, L., “Die konstitution der mischkristalle und die raumfüllung der atome,” *Z. Phys.*, **5**, 17–26, 1921.
- [67] Stöhr, H. ve Klemm, W., “über zweistoffsysteme mit germanium. i. germanium/aluminium, germanium/zinn und germanium/silicium,” *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **241**, 305–323, 1939.
- [68] Abeles, B., “Lattice thermal conductivity of disordered semiconductor alloys at high temperatures,” *Phys. Rev.*, **131**, 1906–1911, 1963.

- [69] Melis, C. ve Colombo, L., “Lattice thermal conductivity of $\text{si}_{1-x}\text{ge}_x$ nanocomposites,” *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 065901, 2014.
- [70] Garg, J. ve Chen, G., “Minimum thermal conductivity in superlattices: A first-principles formalism,” *Phys. Rev. B*, **87**, 140302, 2013.
- [71] Pernot, G., Stoffel, M., Savic, I., Pezzoli, F., Chen, P., Savelli, G., Jacquot, A., Schumann, J., Denker, U., Mönch, I., Deneke, Ch., Schmidt, O. G., Rampnoux, J. M., Wang, S., Plissonnier, M., Rastelli, A., Dilhaire, S. ve Mingo, N., “Precise control of thermal conductivity at the nanoscale through individual phonon-scattering barriers,” *Nat. Mater.*, **9**, 491–495, 2010.
- [72] Cavassilas, N., d’Ambrosio, S. ve Bescond, M., “Quantum simulations of hole transport in si, ge, sige and gaas double-gate pmosfets: orientation and strain effects,” in *Electron Devices Meeting (IEDM), IEEE International*, 2009.