



UÇAK ELEKTRİK-ELEKTRONİĞİNDE GaAs YARIİLETKENLERİNDE AZOT-ARSENİK YER DEĞİŞİMİNİN ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLER ÜZERİNDEKİ ETKİLERİ

İsmail YÜCEL*¹

Bağımsız Araştırmacı, Isparta/Türkiye
*Sorumlu Yazar: ismaillyucell@gmail.com

DOI: 10.57120/yalvac.1553785

Özet: Bu çalışmada, uçak teknolojisinde kullanılan GaAs yarıiletkenlerinde azot (N) katkısının elektronik ve optik özellikler üzerindeki etkileri incelenmiştir. GaAs'ın yüksek performanslı elektronik ve optoelektronik uygulamalardaki rolü göz önüne alındığında, azot katkısının etkileri teorik olarak değerlendirilmiştir. Çalışma, WIEN2k yazılımı kullanılarak Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) ile gerçekleştirilmiştir. GaAs'ın örgü sabiti 5,7515 Å, GaAs_{0,75}N_{0,25}'in ise 5,5413 Å olarak hesaplanmıştır. Azot katkısının örgü parametresinde belirgin bir azalmaya yol açtığı gözlemlenmiştir. Elektronik özelliklerde, yasak band enerjisinin katkısız GaAs için 1,63 eV, azot katkılı GaAs_{0,75}N_{0,25} için ise 0,61 eV olarak hesaplanmıştır. Bu, malzemenin yüksek hızlı ve verimli elektronik devrelerde daha etkili performans sağlama potansiyelini ortaya koymaktadır. Optik özelliklerde, GaAs'ın dielektrik sabiti 11,68, GaAs_{0,75}N_{0,25}'in ise 9,64 olarak hesaplanmıştır. Azot katkısının dielektrik fonksiyonları ve yansımaya katsayılarında belirgin değişikliklere yol açtığı, özellikle yansımaya katsayısında azalmaya neden olduğu bulunmuştur. Bu bulgular, uçak teknolojisindeki optik kaplamalar ve radar gizlilik uygulamaları için önemli olabileceği düşünülmektedir. Bu çalışma, GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin uçak teknolojisinde yüksek performanslı yarıiletkenler için potansiyel olarak değerlendirilmektedir. Azot katkısının etkileri, malzemelerin optimize edilmesi ve performanslarının artırılması için faydalı bilgiler sunmaktadır.

Anahtar kelimeler: Uçak teknolojileri, Havacılık teknolojileri, Güneş hücreleri, Lazer teknolojileri, Sensor teknolojileri, Elektronik özellikler, Optik Özellikler.

EFFECTS OF NITROGEN-ARSENIC SUBSTITUTION ON ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES IN GaAs SEMICONDUCTORS IN AIRCRAFT ELECTRICAL-ELECTRONICS

Abstract: This study investigated the effects of nitrogen (N) doping on the electronic and optical properties of GaAs semiconductors used in aircraft technology. Considering the role of GaAs in high-performance electronic and optoelectronic applications, the effects of nitrogen doping were evaluated theoretically. The study was carried out with Density Functional Theory (DFT) using WIEN2k software. It was shown that the lattice constant of GaAs was 5.7515 Å and that of GaAs_{0,75}N_{0,25} was 5.5413 Å. It was observed that nitrogen doping caused a significant decrease in the lattice parameter. In the electronic properties, the band energy was calculated as 1.63 eV for undoped GaAs and 0.61 eV for nitrogen-doped GaAs_{0,75}N_{0,25}. This reveals the potential of the material to provide more effective performance in high-speed and efficient electronic circuits. In optical properties, the dielectric constant of GaAs was calculated as 11.68 and that of GaAs_{0,75}N_{0,25} as 9.64. It was found that nitrogen doping caused significant changes in dielectric functions and reflection coefficients, especially a decrease in the reflection coefficient. These findings may be important for optical coatings and radar stealth applications in aircraft technology. This study evaluates the potential of GaAs and GaAs_{0,75}N_{0,25} components for high-performance semiconductors in aircraft technology. The effects of nitrogen doping provide useful information for optimizing the materials and improving their performance.

Keywords: Aircraft technologies, Aviation technologies, Solar cells, Laser technologies, Sensor technologies, Electronic properties, Optical Properties.

1. GİRİŞ

Modern havacılık teknolojileri, yüksek performanslı elektronik ve optoelektronik sistemlere duyulan ihtiyacı artırmıştır. Bu sistemlerin etkin çalışabilmesi, kullanılan malzemelerin özelliklerine doğrudan bağlıdır. Özellikle bileşik yarıiletkenler, uçaklardaki radar sistemleri, iletişim cihazları, sensörler ve güç yönetim sistemleri gibi kritik uygulamalarda önemli bir rol oynamaktadır. Bu bileşiklerin verimliliğini artırmak ve yeni teknolojilerin geliştirilmesi için malzemelerin detaylı analizi büyük bir önem taşımaktadır.

Güneş enerjisi ise gelecekte en güvenilir enerji kaynağı olarak kabul edilmektedir. Güneş enerjisini havacılıkta kullanmak, yenilenebilir enerjinin en umut verici uygulamalarından biri olarak öne çıkmaktadır. 1974 yılında güneş enerjili uçağın geliştirilmesinden bu yana, enerji elde etme ve depolama yöntemleri dünya genelinde önemli bir araştırma alanı haline gelmiştir [1].

İnce film fotovoltaik hücreleri, genellikle katı bir destek malzemesi üzerine uygulanan ince yarı iletken katmanlarından oluşmaktadır. Galyum arsenit (GaAs), ince film fotovoltaik hücreleri için yaygın olarak kullanılan bir malzemedir [2]. Ayrıca, GaAs güneş hücrelerinde [3-5], foto algılama sistemlerinde [6] ve lazer uygulamalarında [7-8] önemli bir role sahiptir.

Bu özellikler dikkate alındığında, GaAs yüksek verimlilikte güneş hücreleri üretimi için uygun bir malzeme olarak değerlendirilebilir ve uzay araçları ile yüksek irtifa uçaklarında enerji üretiminde avantajlar sunabilir. GaAs, RF ve mikrodalga devrelerinde, özellikle radyo frekansı amplifikatörleri için tercih edilebilir.

Bununla birlikte, GaAs, araştırmacılar arasında yaygın ve güncel bir çalışma malzemesi olarak öne çıkmaktadır. Son birkaç yılda gerçekleştirilen incelemeler, GaAs'ın özellikleri açısından önemli bulgular sunduğunu göstermektedir. Ali vd., Alüminyum Galyum Arsenit ($Al_{1-x}Ga_xAs$) yapısının yapısal, elektronik ve optik özelliklerini ilk prensip hesaplamalarıyla incelemiştir. Elde edilen sonuçlar, bant aralığı enerjisindeki önemli düşüş ve dielektrik fonksiyonunun uyumlu bulguları ile bu malzemenin çeşitli teknolojik uygulamadaki potansiyelini vurgulamaktadır [9]. Kumar vd., Sb ile doplanmış GaAs yarı iletken bileşiklerinin temel elektronik ve optik özelliklerini Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kullanarak araştırmıştır. Yapılan analizlerin, GaAs bileşiklerinin enerji bant aralığı ve doplanmış optik özellikleri açısından, bu malzemelerin çeşitli cihazlardaki uygulamalarına önemli katkılar sağlaması hedeflenmektedir. [10]. Abera ve Mekuye, Mn ile doplanmış GaAs'ın ferromanyetizmasını, manganez konsantrasyonunun manyetik özellikler üzerindeki etkisi ile birlikte incelemiştir. GaAs'ın Curie sıcaklığı, ferromanyetik davranışını belirleyen önemli bir faktör olarak tespit edilmiş ve yüksek manganez konsantrasyonlarıyla güçlü manyetik etkileşimlerin sağlandığı ortaya konulmuştur [11]. Cai vd., ultra geniş bant ve geniş açılı plazmonik ışık emicisi olarak tamamen dielektrik gallium arsenit (GaAs) metayüzeylerini önermiştir. GaAs tabanlı bu tasarımın, yüksek emilim değerleri ve mükemmel güneş enerjisi toplama özellikleri sunduğu gözlemlenmiştir [12]. Wu vd., tamamen dielektrik bir GaAs piramit nano yapısına dayanan maliyet etkin bir metamaterial plazmonik emici (MPA) tasarımı önermiştir. GaAs tabanlı bu emici, tam güneş spektrumunda yüksek emilim oranları ile dikkat çekmekte ve güneş enerjisi toplama uygulamaları için büyük bir potansiyel sunmaktadır [13].

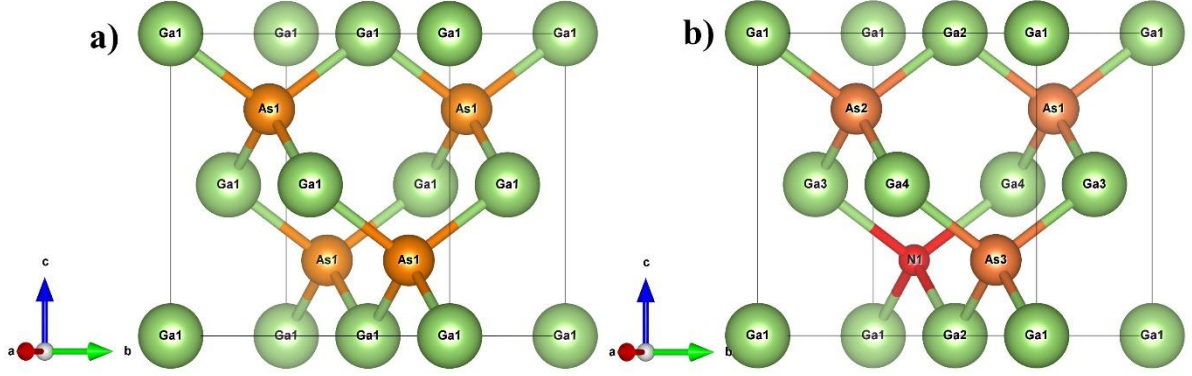
Kristal yapılarındaki kusurlar ve katkılar, malzemelerin yapısal, elektronik ve optik özelliklerinde değişikliklere yol açmaktadır. Bu çalışmada, GaAs bileşiğine arsenik (As) atomu yerine azot (N) atomunun katılanmasının yol açabileceği yapısal, elektronik ve optik değişimler incelenmiştir. GaAs yarıiletkenlerinde gerçekleştirilen bu tür değişikliklerin, havacılık elektroniklerinde kullanılan cihazların performansını nasıl etkileyebileceğini anlamak, tasarım süreçlerinin optimize edilmesine ve teknolojik gelişmelerin yönlendirilmesine katkı sağlayabilir. Bu bağlamda, çalışma GaAs'ın uçak teknolojisindeki potansiyel uygulamalarını değerlendirmek üzere önemli bilgiler sunmaktadır.

2. MATERYAL VE METOT

Bu çalışmada, GaAs ve $GaAs_{0.75}N_{0.25}$ bileşiklerinin band yapısı, durum yoğunluğu ve optik özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan WIEN2k simülasyon programı ile incelenmiştir [14-16]. Değiş tokuş ve korelasyon potansiyel enerji fonksiyonu için genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı uygulanmıştır [17]. Hesaplamalarda, $R_{MT} \times K_{MAX}$ parametresi 7 olarak seçilmiştir. R_{MT} parametresi, birim hücredeki en küçük atomun yarıçapını temsil etmektedir. K_{MAX} parametresi ise en büyük K vektörünün büyüklüğünü belirtmektedir. WIEN2k programına 500 k noktası girilmiştir. Hesaplamalar için kullanılan Brillouin bölgesindeki $k_x \times k_y \times k_z$ ağı, tüm bileşikler için $4 \times 4 \times 4$ boyutundadır. Çekirdek durumlarından valans durumlarını ayırmak amacıyla kesilim enerjisi -6 Ry olarak belirlenmiştir. GaAs bileşiği kübik örgüye sahiptir. Uzay grubu 216 (F43m) olup başlangıç örgü parametreleri ise literatürde yer alan deneysel çalışmalardan alınmıştır [18].

3. BULGULAR

GaAs ve $\text{GaAs}_{0,75}\text{N}_{0,25}$ bileşiklerinin örgü parametreleri hesaplamalarında, genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) değiş-tokuş korelasyon enerjisi kullanılmıştır. Hesaplamalarda kullanılan kübik örgüye sahip kristal yapılar Şekil 1'de gösterilmektedir. Elektronik ve optik özelliklerin incelenmesinde, ilk olarak her bileşenin örgü sabiti teorik olarak hesaplanmıştır. Başlangıç örgü parametresi, 5,6533 Å, literatürde yer alan deneysel verilere dayandırılmıştır [18]. Murnaghan hal denkleminde kullanılarak denge durumu için örgü parametresi hesaplanmıştır [19]. GaAs ve $\text{GaAs}_{0,75}\text{N}_{0,25}$ bileşikleri için hesaplanan örgü parametreleri sırasıyla 5,7515 Å ve 5,5413 Å olarak bulunmuştur. Bu sonuçlar, azot katkısının örgü parametresinde belirgin bir azalmaya yol açtığını göstermektedir.



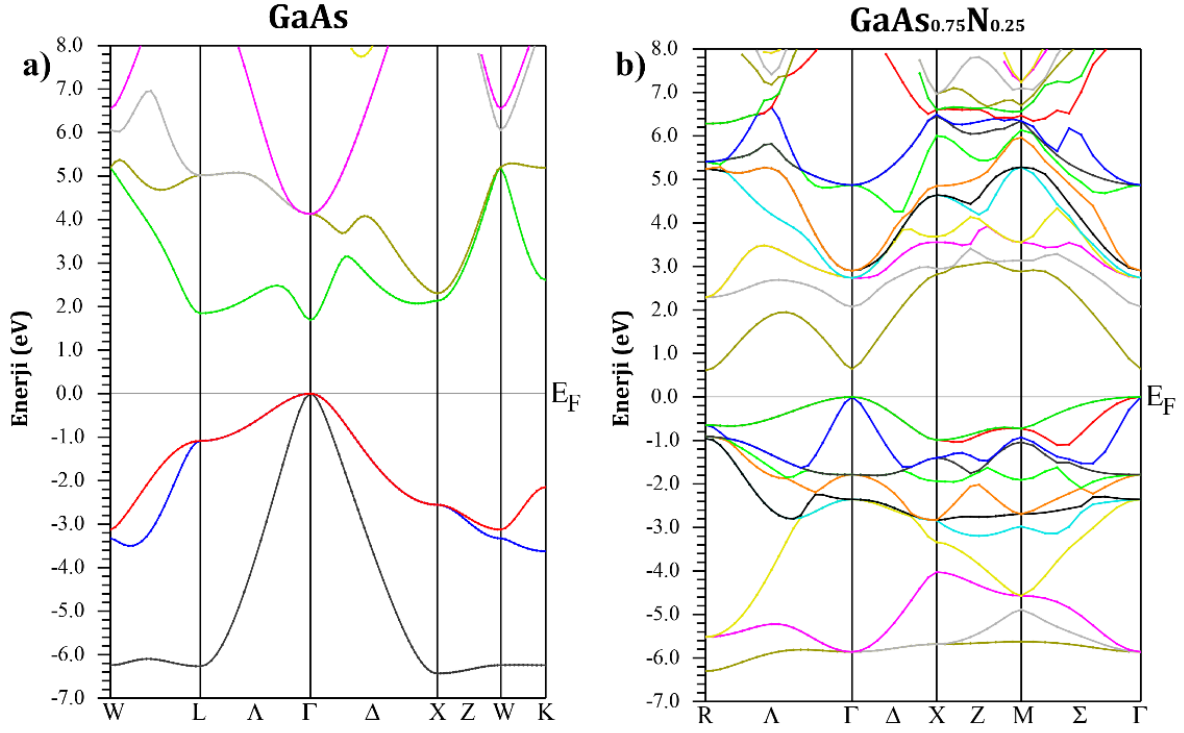
Şekil 1. Hesaplamalarda kullanılan kübik örgüye sahip kristal yapılar a) GaAs b) $\text{GaAs}_{0,75}\text{N}_{0,25}$

Katkısız ve azot (N) katkılı GaAs bileşiklerinin elektronik dizilimleri aşağıda verilmiştir:

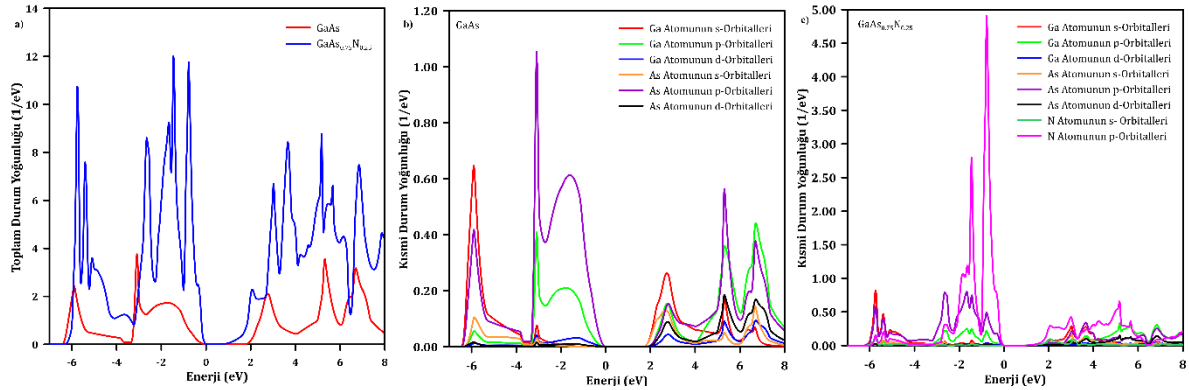
- Gallium (Ga): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^1$
- Antimon (Sb): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^3$
- Azot (N): $1s^2 2s^2 2p^3$

Elektronik bant yapısı grafikleri incelenirken, düşey ekseninde enerji ve yatay ekseninde yüksek simetri noktaları (Γ , R, X, M) gösterilmiştir. Fermi enerji düzeyi sıfır enerji noktası olarak kabul edilmiştir. Fermi seviyesinin altındaki bantlar valans bantlarını, üst kısmındaki bantlar ise iletkenlik bantlarını temsil etmektedir. Hesaplamalar, genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır [17]. Yasak band enerji hesaplamalarının doğruluğunu artırmak amacıyla, düzeltilmiş Tran-Blaha (TB-mBJ) değişim potansiyeli kullanılmıştır [20].

Katkısız ve N katkılı GaAs bileşiklerinin elektronik özellikleri, band enerji ve durum yoğunluğu hesaplamaları yoluyla incelenmiştir. GaAs ve $\text{GaAs}_{0,75}\text{N}_{0,25}$ bileşiklerinin band yapı grafikleri Şekil 2'de gösterilmektedir. Yasak band enerjileri literatürle karşılaştırıldığında, TB-mBJ değişim potansiyeli ile elde edilen 1,63 eV'lik değer, deneysel sonuçlarla uyum göstermektedir; literatürde yasak band enerjileri 1,61 eV [21], 1,56 eV, 1,64 eV [22] ve 1,42 eV [23] olarak rapor edilmiştir. $\text{GaAs}_{0,75}\text{N}_{0,25}$ bileşiğinde ise yasak band enerjisi 0,61 eV'ye düşmüştür. Bu sonuç, azot katkısının yasak band enerjisini belirgin şekilde azalttığını göstermektedir. Band yapı grafikleri (Şekil 2), GaAs ve $\text{GaAs}_{0,75}\text{N}_{0,25}$ bileşiklerinin yarıiletken bir malzeme olduğunu göstermektedir. Band yapı grafiklerinde iletkenlik bandının minimum noktası ve valans bandının maksimum noktası Γ noktasında yer almaktadır.

Şekil 2. GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin band yapı grafikleri

Durum yoğunluğu eğrileri, GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin yarıiletken özellikler taşıdığını doğrulamaktadır (Şekil 3). Valans bandında, Ga atomunun s- ve p-orbitalleri ile As atomunun p-orbitalleri belirgin bir şekilde etkili olmaktadır. İletkenlik bandında ise, Ga atomunun s- ve p-orbitalleri ile As atomunun p-orbitalleri yine önemli bir rol oynamaktadır. Ayrıca, Ga atomunun d-orbitalleri ve As atomunun s- ve p-orbitalleri, iletkenlik bandının oluşumunda daha az etkili olmaktadır. GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiğinin kısmi durum yoğunluğu grafikleri, valans ve iletkenlik bandlarının oluşumunda N atomunun p-orbitallerinin belirgin bir katkı sağladığını açıkça göstermektedir. Bu bulgu, azot katkısının yasak band enerjisini önemli ölçüde azaltmasında N atomunun p-orbitallerinin önemli bir rol oynadığını ortaya koymaktadır.

Şekil 3. Hesaplanan durum yoğunluğu grafikleri a) GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşikleri için toplam durum yoğunluğu grafiği b) GaAs bileşiği için kısmi durum yoğunluğu grafiği ve c) GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiği için kısmi durum yoğunluğu grafiği

GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin optik özellikleri dielektrik fonksiyonu üzerinden incelenmiştir. Dielektrik fonksiyonu elektronlar ile fotonlar arasındaki etkileşimi açıklamaktadır. Bir malzemenin optiksel özellikleri frekansa bağlı olan kompleks dielektrik fonksiyonuyla $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ tanımlanır. Dielektrik fonksiyonu ile malzemelerin karakteristik optik parametreleri olan kırılma indisi (n), soğurma katsayıları (α) ve yansımaya katsayıları (R) hesaplanabilir. Dielektrik fonksiyonun reel ($\epsilon_1(\omega)$) ve imajiner ($\epsilon_2(\omega)$) kısımlarının hesaplanmasında, sırasıyla, Denklem 1 ve Denklem 2 kullanılmıştır [24-25].

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \mathbf{p} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (1)$$

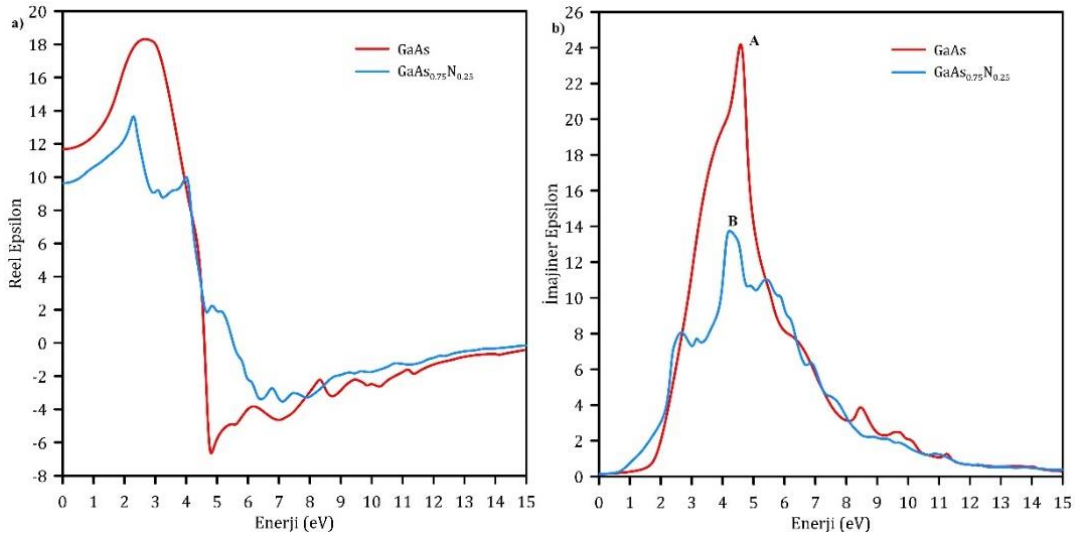
$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{V^2 e^2}{2\pi m^2 \omega^2} x \int d^3k \sum_{nn'} |kn|p|kn'|^2 f(kn)x[1 - f(kn')] \delta(E_{kn} - E_{kn'} - \omega) \quad (2)$$

$$n(\omega) = \left[2^{-1/2} \left(\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega) \right) \right]^{1/2} \quad (3)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{2^{1/2} \omega}{c} \left(\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right)^{1/2} \quad (4)$$

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|^2 \quad (5)$$

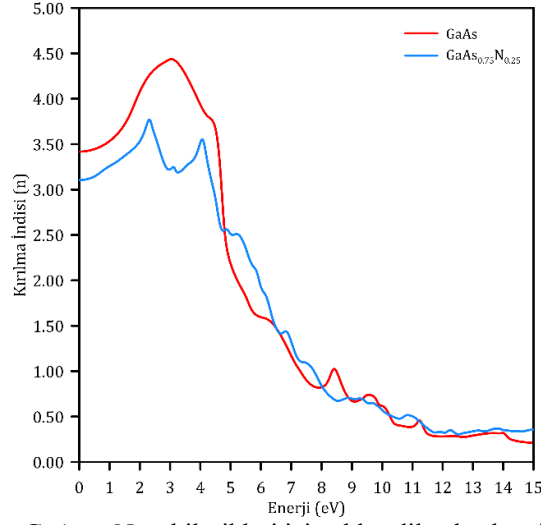
Dielektrik fonksiyonunun reel kısmı, bir malzemenin fiziksel özellikleri hakkında bilgi sağlarken, imajiner kısmı malzemedeki enerji kayıplarını yansıtır. GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin reel dielektrik fonksiyonlarının enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4'de gösterilmiştir. GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşikleri için dielektrik sabitleri $\varepsilon_1(\omega)$ sırasıyla 11,68 ve 9,64 olarak hesaplanmıştır. Literatürde yapılan incelemelerde $\varepsilon_1(\omega)$ değerleri şu şekildedir: Hadjab'ın çalışmasında 14,254, 10,645 ve 9,732 [26]; Ziane'da 9,85 ve 9,58 [27]; Othman'da ise 13,40 [28] olarak belirlenmiştir. Bu çalışmada GaAs için hesaplanan 11,68 değeri, literatürdeki diğer çalışmalarla tutarlılık sergilemektedir. Elde edilen sonuçlar, mevcut teorik verilerin geçerliliğini pekiştirerek, GaAs malzemesinin özelliklerinin anlaşılmasına katkı sağlamaktadır. GaAs için en yüksek dielektrik sabiti değeri 7,32 olarak bulunmuş ve bu değer 2,68 eV enerjiye karşılık gelirken; GaAs_{0,75}N_{0,25} için bu değer 13,66 olup, 2,30 eV enerjiye karşılık gelmektedir. Her iki bileşik için de reel dielektrik sabitinin 4,61 eV ile 15,0 eV ve 5,64 eV ile 15,0 eV enerji aralıklarında negatife düşmesi, malzemelerin bu enerji aralıklarında metalik davranış sergilediğini göstermektedir (Şekil 4 (a)). GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin imajiner dielektrik fonksiyonlarının enerjiye bağlı grafikleri Şekil 4 (b)'de verilmiştir. İmajiner dielektrik fonksiyonunun enerjiye bağlı grafiğinde gözlemlenen pikler, valans bandından iletim bandına geçiş yapan elektronların optik geçişlerini temsil etmektedir. Şekil 4(b)'de, A ve B olarak işaretlenen pikler, GaAs için imajiner dielektrik fonksiyonunun 4,58 eV'deki değeri 24,20 iken, GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiğinde 4,23 eV enerji seviyesinde bu değer 13,74'tür. Maksimum değerler açısından değerlendirildiğinde, N atomunun katkısının imajiner dielektrik fonksiyonunun değerini azalttığı, ancak enerji değerlerinin birbirine oldukça yakın olduğu görülmektedir.



Şekil 4. GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} reel ve imajiner dielektrik fonksiyonlarının enerjiye bağlı grafikleri a) Real dielektrik fonksiyonu b) İmajiner dielektrik fonksiyonu

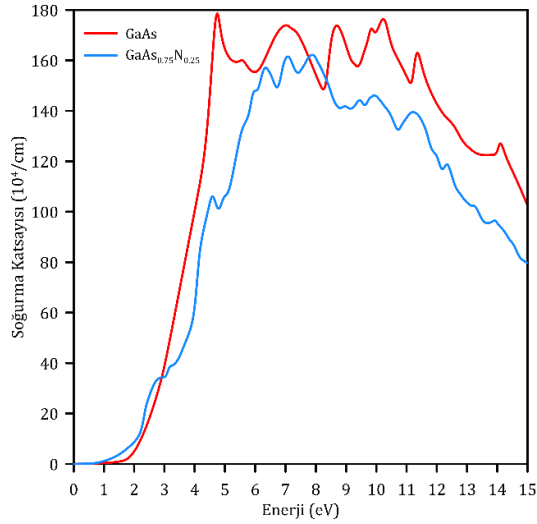
GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşikleri için elde edilen kırılma indisi spektrumu Şekil 5'te sunulmuştur. Bu bileşikler için hesaplanan kırılma indisleri, sırasıyla $n(0) = 3,42$ ve $n(0) = 3,10$ olarak belirlenmiştir. Literatürde yapılan incelemelerde $n(0)$ değerleri şu şekildedir: Hadjab'ın çalışmasında 3,775, 3,262 ve 3,119 [26]; Othman'da ise 3,81 [28] olarak belirlenmiştir. Hesaplanan $n(0)$ değeri, literatürde yer alan verilerle karşılaştırıldığında yüksek

bir uyum sergilemektedir. Kırılma indisleri, mor ötesi bölgesinde maksimum değerine ulaşmakta ve ardından azalma eğilimi göstermektedir. Ayrıca, azot katkısının kırılma indisinde gözle görülür bir azalmaya neden olduğu tespit edilmiştir.



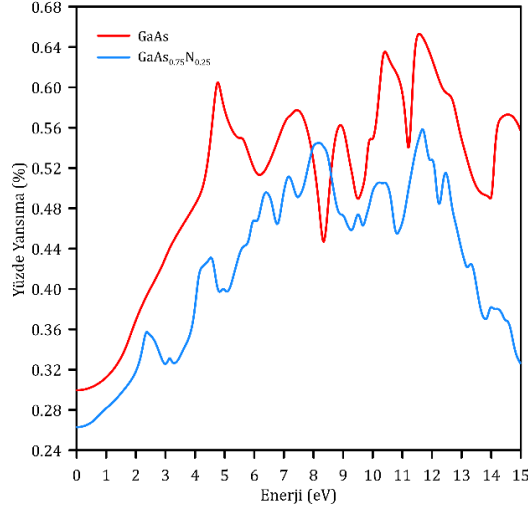
Şekil 5. GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşikleri için elde edilen kırılma indisi spektrumu

Ortamda yayılan ışığın şiddetinde meydana gelen azalma, soğurma katsayısı (α) ile tanımlanır. Soğurma katsayısı, yayılan ışığın malzemenin içine ne kadar derinlemesine nüfuz edebileceğini ölçen bir parametredir. Şekil 6'da gösterildiği gibi, soğurma katsayısı belirli bir sınırla sınırlıdır. Bu sınır, gönderilen ışığın enerjisinin yasak enerji aralığından daha düşük olduğu durumlarda ortaya çıkar; çünkü böyle bir enerji, valans bandındaki bir elektronu uyuracak yeterli enerjiye sahip değildir ve bu nedenle gelen ışık soğurulmaz. Soğurmanın başladığı minimum enerji noktası, temel soğurma noktası olarak tanımlanır. Şekil 6'da, GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin soğurma katsayılarının sırasıyla 1,67 eV ve 0,67 eV civarında başladığı görülmektedir. Bu değerler, yasak band enerjisine karşılık gelir ve GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin Γ noktasındaki soğurma başlangıç noktalarını temsil eder. Soğurma spektrumunda ortaya çıkan piksler, bandlar arası geçişlerin göstergesidir.



Şekil 6. GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşikleri için elde edilen soğurma spektrumu

GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşikleri için elde edilen yansımaya spektrumu Şekil 7'de sunulmuştur. Bu bileşenler için yansımaya spektrumunun başlangıç değerleri sırasıyla yaklaşık %30 ve %26 olarak belirlenmiştir. Yansımaya spektrumu, soğurma spektrumu ile benzerlik göstermektedir; özellikle, soğurma spektrumunda gözlemlenen maksimum piksler, yansımaya spektrumunda da belirgin bir şekilde ortaya çıkmaktadır. Bu gözlemler, azot katkısının optik karakteristik özelliklerden biri olan yansımaya katsayısında anlamlı bir azalmaya neden olduğunu ortaya koymaktadır.



Şekil 7. GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerini içeren elde edilen yansıma spektrumu

4. SONUÇ

Bu çalışmada GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin örgü parametreleri, elektronik ve optik özellikleri detaylı bir şekilde incelenmiş olup, elde edilen bulgular uçak teknolojisi bağlamında önemli sonuçlar sunmaktadır. Öncelikle, örgü parametreleri hesaplamaları sonucunda GaAs'ın örgü sabiti 5,7515 Å, GaAs_{0,75}N_{0,25}'in ise 5,5413 Å olarak hesaplandı. Azot katkısının örgü parametresinde belirgin bir azalmaya yol açtığı gözlemlenmiştir. Bu azalma, malzemenin mekanik ve termal özelliklerini etkileyebilir. Uçak teknolojisinde, yüksek performanslı elektronik bileşenler için dayanıklı ve hafif malzemelere ihtiyaç duyulmaktadır. Azot katkısının malzemenin örgü parametresindeki etkileri, bu bileşenlerin aerodinamik ve yapısal uygulamalar için optimize edilebileceğini göstermektedir.

Elektronik özellikler açısından, GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin yarıiletken özellikleri analiz edilmiştir. GaAs'ın yasak band enerjisi 1,63 eV olarak hesaplanmış, bu değer deneysel verilerle uyumludur. Azot katkısıyla yasak band enerjisinin 0,61 eV'ye düşmesi, GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiğinin enerji bant yapısında önemli değişikliklere yol açtığını göstermektedir. Bu değişiklikler, uçak teknolojisinde kullanılan yarıiletken cihazların yüksek hızlı ve yüksek verimli elektronik devrelerinde daha etkili performans sağlayabilir. Yasak band enerjisinin düşmesi, düşük enerji tüketimi ve yüksek frekansta çalışma kabiliyeti gibi avantajlar sunarak, gelişmiş elektronik sistemlerin tasarımında kullanılabilir.

Optik özellikler açısından yapılan analizler, dielektrik fonksiyonlarının enerjiye bağlı olarak değişimini ortaya koymuştur. GaAs'ın dielektrik sabiti 11,68, GaAs_{0,75}N_{0,25}'in ise 9,64 olarak hesaplanmıştır. Bu dielektrik özellikler, malzemelerin optik performansını ve ışıkla etkileşimini doğrudan etkiler. Uçak teknolojisinde, optik sistemler ve sensörler için yüksek dielektrik sabitlere sahip malzemeler tercih edilebilir. Ayrıca, imajiner dielektrik fonksiyonunda gözlemlenen değişiklikler, bu malzemelerin optik geçişlerdeki performansını etkileyebilir.

Soğurma katsayıları ve yansıma spektrumları, azot katkısının malzemenin optik özelliklerini etkilediğini ve yansıma katsayısında anlamlı bir azalmaya yol açtığını ortaya koymuştur. Bu bulgular, uçak teknolojisinde optik kaplamalar ve yüzey kaplamaları için malzemelerin seçimi ve tasarımı açısından önemlidir. Yansıma katsayısındaki değişiklikler, özellikle uçakların radar gizlilik özellikleri ve optik algılama sistemleri için kritik olabilir.

Sonuç olarak, GaAs ve GaAs_{0,75}N_{0,25} bileşiklerinin örgü parametreleri, elektronik ve optik özellikleri, uçak teknolojisinde yüksek performanslı yarıiletkenler için önemli bilgiler sunmaktadır. Azot katkısının bu özellikler üzerindeki etkileri, malzemelerin aerodinamik, yapısal ve elektronik uygulamalarda optimize edilmesi için faydalı olacağı düşünülmektedir. Bu çalışma, uçak teknolojisinde kullanılan yarıiletkenlerin geliştirilmesi ve performanslarının artırılması yönünde yol gösterici olabilir.

5. TEŞEKKÜR

Bu makalede bildirilen sayısal hesaplamalar WIEN2k programı kullanılarak Süleyman Demirel Üniversitesi Fizik Bölümü'nde gerçekleştirilmiştir. Süleyman Demirel Üniversitesi Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi Fizik Bölümü öğretim üyesi Prof. Dr. Seyfettin Çakmak'a teşekkür ederim.

6.KAYNAKLAR

- [1] Gao, X. Z., Hou, Z. X., Guo, Z., Chen, X. Q. (2015). Reviews of methods to extract and store energy for solar-powered aircraft. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 44, 96-108. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.11.025>
- [2] Chen, H. C., Lin, C. C., Han, H. V., Chen, K. J., Tsai, Y. L., Chang, Y. A., ... Yu, P. (2012). Enhancement of power conversion efficiency in GaAs solar cells with dual-layer quantum dots using flexible PDMS film. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 104, 92-96. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2012.05.003>
- [3] Geisz, J. F., Friedman, D. J. (2002). III–N–V semiconductors for solar photovoltaic applications. *Semiconductor Science and Technology*, 17(8), 769. <https://doi.org/10.1088/0268-1242/17/8/305>
- [4] Kosa, A., Stuchlikova, L., Harmatha, L., Mikolasek, M., Kovac, J., Sciana, B., ... Tlaczala, M. (2016). Defect distribution in InGaAsN/GaAs multilayer solar cells. *Solar Energy*, 132, 587-590. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2016.03.057>
- [5] Kurtz, S. R., Allerman, A. A., Jones, E. D., Gee, J. M., Banas, J. J., Hammons, B. E. (1999). InGaAsN solar cells with 1.0 eV band gap, lattice matched to GaAs. *Applied Physics Letters*, 74(5), 729-731. <https://doi.org/10.1063/1.123105>
- [6] Aissat, A., Bestam, R., Alshehri, B., Vilcot, J. P. (2015). Modeling of the absorption properties of Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y/GaAs quantum well structures for photodetection applications. *Superlattices and Microstructures*, 82, 623-629. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2015.01.019>
- [7] Kondow, M., Uomi, K., Niwa, A., Kitatani, T., Watahiki, S., Yazawa, Y. (1996). GaInNAs: A novel material for long-wavelength-range laser diodes with excellent high-temperature performance. *Japanese Journal Of Applied Physics*, 35(2S), 1273. <https://doi.org/10.1143/JJAP.35.1273>
- [8] Mal, I., Jayarubi, J., Das, S., Sharma, A. S., Peter, A. J., Samajdar, D. P. (2019). Hydrostatic pressure dependent optoelectronic properties of InGaAsN/GaAs spherical quantum dots for laser diode applications. *Physica Status Solidi (b)*, 256(3), 1800395. <https://doi.org/10.1002/pssb.201800395>
- [9] Ali, A., Anwar, A. W., Moin, M., Babar, M., & Thumu, U. (2024). Investigation of structural, mechanical, electronic and optical responses of Ga doped aluminum arsenide for optoelectronic applications: *By first principles*. *Heliyon*, 10(2). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e24597>
- [10] Kumar, A., Gupta, H., Kumar, A., Kumar, A., Sharma, S. K., Lal, B., & Iram, N. (2024). Optoelectronic properties of Sb doped GaAs: DFT investigation. *Indian Journal of Physics*, 1-10. <https://doi.org/10.1007/s12648-024-03273-6>
- [11] Abera, B., & Mekuye, B. (2024). Effects of manganese concentration and temperature on the ferromagnetism of manganese-doped gallium arsenide semiconductor. *Nano Select*, 5(3), 2300084. <https://doi.org/10.1002/nano.202300084>
- [12] Cai, B., Wu, L., Zhu, X., Cheng, Z., & Cheng, Y. (2024). Ultra-broadband and wide-angle plasmonic light absorber based on all-dielectric gallium arsenide (GaAs) metasurface in visible and near-infrared region. *Results in Physics*, 58, 107509. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2024.107509>
- [13] Wu, L., Yang, L., Zhu, X., Cai, B., & Cheng, Y. (2024). Ultra-broadband and wide-angle plasmonic absorber based on all-dielectric gallium arsenide pyramid nanostructure for full solar radiation spectrum range. *International Journal of Thermal Sciences*, 201, 109043. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2024.109043>
- [14] Schwarz, K., Blaha, P., Madsen, G. K. (2002). Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences. *Computer Physics Communications*, 147(1-2), 71-76. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(02\)00206-0](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00206-0)

- [15] Schwarz, K., Blaha, P. (2003). Solid state calculations using WIEN2k. *Computational Materials Science*, 28(2), 259-273. [https://doi.org/10.1016/S0927-0256\(03\)00112-5](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(03)00112-5)
- [16] Schwarz, K., Blaha, P., Trickey, S. B. (2010). Electronic structure of solids with WIEN2k. *Molecular Physics*, 108(21-23), 3147-3166. <https://doi.org/10.1080/00268976.2010.506451>
- [17] Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [18] Chmill, V. (2006). *Radiation tests of semiconductor detectors* (Doctoral dissertation, KTH). Erişim Adresi: <https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:10452/FULLTEXT01.pdf>.
- [19] Murnaghan, F. D. (1944). The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244-247.
- [20] Tran, F., Blaha, P. (2009). Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential. *Physical Review Letters*, 102(22), 226401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.226401>
- [21] Adewale, A. A., Yahaya, A. A., Agbolade, L. O., Yusuff, O. K., Azeez, S. O., Babalola, K. K., ... Chik, A. (2024). Optoelectronic and mechanical properties of gallium arsenide alloys: Based on density functional theory. *Chemical Physics Impact*, 8, 100594. <https://doi.org/10.1016/j.chphi.2024.100594>
- [22] Hachemi, M. H., Benchehima, M., Bencherif, K., Abid, H. (2022). The effect of N-incorporation on the structural and optoelectronic properties of GaP and GaAs for optical telecommunication applications: first-principles study. *Optik*, 262, 169282. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2022.169282>
- [23] Adachi, S. (1987). Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: Key properties for a variety of the 2–4- μ m optoelectronic device applications. *Journal of Applied Physics*, 61(10), 4869-4876. <https://doi.org/10.1063/1.338352>
- [24] De L. Kronig, R. (1926). On the theory of dispersion of x-rays. *Journal of the Optical Society of America*, 12(6), 547-557.
- [25] Ambrosch-Draxl, C., & Sofo, J. O. (2006). Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method. *Computer physics communications*, 175(1), 1-14. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2006.03.005>
- [26] Hadjab, M., Berrah, S., Abid, H., Ziane, M. I., Bennacer, H., & Yalcin, B. G. (2016). Full-potential calculations of structural and optoelectronic properties of cubic indium gallium arsenide semiconductor alloys. *Optik*, 127(20), 9280-9294. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2016.07.018>
- [27] Ziane, M. I., Bensaad, Z., Labdelli, B., & Bennacer, H. (2014). First-principles study of structural, electronic and optical properties of III-arsenide binary GaAs and InAs, and III-nitrides binary GaN and InN: Improved density-functional-theory Study. *Sensors & transducers*, 27(5), 374.
- [28] Othman, M., Kasap, E. R. G. Ü. N., & Korozlu, N. (2010). Ab-initio investigation of structural, electronic and optical properties of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ ternary and $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ quaternary semiconductor alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 496(1-2), 226-233. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2009.12.109>