



# XI. Yoğun Madde Fiziği İzmir Toplantısı

11 Mayıs 2024

*yymf<sup>35</sup>*

**ÖZET KİTAPÇIĞI**

Destekleyen

**Eduline**  
[www.eduline.com.tr](http://www.eduline.com.tr)

Yoğun Madde Fiziği – İzmir Toplantıları 2012 yılından beri ilkbahar aylarında yapılmaktadır. İzmir üniversiteleri arasında dönüşümlü yapılması öngörülen bu toplantılar İYTE dışında bu yıl ilk kez İzmir Ekonomi Üniversitesi ev sahipliğinde düzenlendi.

Bir gün süren etkinlikte yoğun madde fiziği alanındaki güncel araştırmaların sunulduğu 7 davetli konuşma ve 4 kısa sözlü sunumun yanısıra 30 çalışmanın sergilendiği poster oturumu yer aldı.

Toplantının gerçekleştirilmesinde emeği geçen tüm kişi ve birimlere teşekkürü borç biliriz.

11 Mayıs 2024

#### **Düzenleme Kurulu**

<b>Gürsoy Bozkurt AKGÜÇ</b>	İzmir Ekonomi Üniversitesi
<b>Hülya KARAASLAN</b>	İzmir Ekonomi Üniversitesi
<b>Göktuğ KARPAT</b>	İzmir Ekonomi Üniversitesi
<b>Tuğrul SENER</b>	İzmir Ekonomi Üniversitesi
<b>Uğur TIRNAKLI</b>	İzmir Ekonomi Üniversitesi

#### **Bilim / Danışma Kurulu**

<b>Ethem AKTÜRK</b>	Aydın Adnan Menderes Üniversitesi
<b>Emre ERDEM</b>	Sabancı Üniversitesi
<b>Devrim GÜÇLÜ</b>	İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü
<b>Oğuz GÜLSEREN</b>	Bilkent Üniversitesi
<b>Bekir Sıtkı KANDEMİR</b>	Ankara Üniversitesi
<b>Hasan ŞAHİN</b>	İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü
<b>Mehmet Emre TAŞGIN</b>	Hacettepe Üniversitesi

## **Davetli konuşmacılar ve konuşma başlıkları**

**Serkan ATEŞ** Katı Hal Kuantum Işık Kaynaklarının Polarizasyon  
*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü* Dinamiği

**Deniz AYBAŞ TÜMTÜRK** Alkali Atomlarla Hassas Manyetik Alan Ölçümleri  
*Bilkent Üniversitesi*

**Zafer GEDİK** “Eşlenik” Josephson Etkisi  
*Sabancı Üniversitesi*

**Gül GÜLPINAR** Düzensiz Manyetik Alan Etkisi Altındaki Enine Alan  
*Dokuz Eylül Üniversitesi* Ising Modelinin Termodinamik Geometrisi

**Mehmet GÜNEŞ** Katkısız Hidrojenlendirilmiş Amorf Silisyum İnce Film  
*Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi* Malzemelerde Staebler-Wronski Etkisi

**Onur TOKEL** Yarı-iletken Lazer Etkileşimleri ile Yonga İçerisinde  
*Bilkent Üniversitesi – UNAM* Hacimsel Nano-üretim

**R. Onur UMUCALILAR** Az Parçacıklı Kuantum Akışkanlarında Kesirli  
*Mimar Sinan Güzel Sanatlar Üni.* Kuantum Hall Fiziği

## TOPLANTI PROGRAMI

08:30 – 09:15		Kayıt
09:15 – 09:30		Açılış Konuşmaları
<b>1. Oturum</b>		<b>D: Davetli K: Kısa konuşma</b>
09:30 – 10:00	<b>Serkan Ateş</b> – <i>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü</i> Katı Hal Kuantum Işık Kaynaklarının Polarizasyon Dinamiği	D1
10:00 – 10:30	<b>Gül Gülpınar</b> – <i>Dokuz Eylül Üniversitesi</i> Düzensiz Manyetik Alan Etkisi Altındaki Enine Alan Ising Modelinin Termodinamik Geometrisi	D2
10:30 – 11:00		ARA – POSTER
<b>2. Oturum</b>		
11:00 – 11:30	<b>Zafer Gedik</b> – <i>Sabancı Üniversitesi</i> “Eşlenik” Josephson Etkisi	D3
11:30 – 12:00	<b>Mehmet Güneş</b> – <i>Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi</i> Katkısız Hidrojenlendirilmiş Amorf Silisyum İnce Film Malzemelerde Staebler-Wronski Etkisi	D4
12:00 – 12:15	<b>Gözde Özbal Sargın</b> – <i>Sabancı Üniversitesi</i> Karbon Bifenilen Ağının Gerilmeye Bağlı Anizotropik Termoelektrik Özellikleri	K1
12:15 – 12:30	<b>Oğuzhan Tekin</b> – <i>EduLine</i> EduLine – HPC Çözümleri	Sponsor Sunumu
12:30 – 14:00		ÖĞLE YEMEĞİ – POSTER
<b>3. Oturum</b>		
14:00 – 14:30	<b>Deniz Aybaşı Tümtürk</b> – <i>Bilkent Üniversitesi</i> Alkali Atomlarla Hassas Manyetik Alan Ölçümleri	D5
14:30 – 14:45	<b>Nahit Polat</b> – <i>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü</i> Kavite Eksiton Polaritonlarının Hiperspektral Görüntüleme Yöntemi ile İncelenmesi	K2
14:45 – 15:00	<b>Aynur Ayvalık</b> – <i>Ege Üniversitesi</i> NaSnX <sub>3</sub> ve KSnX <sub>3</sub> (X=Cl,Br,I) Perovskitlerde Alkali Metal ve Halojen Atomuna Bağlı Elektronik Özellikler	K3
15:00 – 16:00		ARA – POSTER
<b>4. Oturum</b>		
16:00 – 16:30	<b>Onur Tokel</b> – <i>Bilkent Üniversitesi – UNAM</i> Yarı-iletken Lazer Etkileşimleri ile Yonga İçerisinde Hacimsel Nano-üretim	D6
16:30 – 17:00	<b>Onur Umucalılar</b> – <i>Mimar Sinan Güzel Sanatlar Üniversitesi</i> Az Parçacıklı Kuantum Akışkanlarında Kesirli Kuantum Hall Fiziği	D7
17:00 – 17:15	<b>Gülşen Doğan</b> – <i>Dokuz Eylül Üniversitesi</i> Manyetik İki Katmanlı Sistemlerde Skyrmin Fazları	K4
17:15 – 18:30		SUNUMLARIN SONU
18:30		Akşam yemeği için buluşma





# Davetli Konuşmalar

## Katı Hal Kuantum Işık Kaynaklarının Polarizasyon Dinamiği

Çağlar Samaner, Serkan Paçal, ve Serkan Ateş

*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35433 İzmir*

Katı hal malzemelerdeki kuantum ışığıyıcılar, kuantum bilgi teknolojileri alanında birçok uygulama için gerekli tek-foton üretimi konusunda kritik bileşen olarak değerlendirilmektedir. Yarıiletken kuantum noktalar ve geniş bant aralığına sahip elmas gibi malzemelerde bulunan kusur merkezleri tek-foton kaynağı olarak çokça çalışılan sistemlerdendir. Son yıllarda, özellikle iki-boyutlu malzemelere olan ilginin artmasıyla farklı tiplerde tek-foton kaynakları literatüre kazandırılmıştır. Bu malzemelerden altıgen kristal örgüsüne sahip bor nitrür (hBN) içerisinde bulunan kusur merkezleri oldukça etkili tek foton kaynakları olarak büyük ilgi görmektedir. Yaklaşık 6 eV'luk geniş bir bant aralığına sahip altıgen bor nitrür, mükemmel bir yalıtkan olarak kabul edilmektedir. Ayrıca, ultraviyolede (UV) yakın kızılötesine (NIR) kadar geniş bir spektral aralıkta tek foton ışınması yapabilen farklı tiplerde optik-aktif kusurlara sahip olmasından dolayı kuantum teknolojilerindeki farklı uygulamalar için harika bir aday olarak öne çıkmaktadır. Bu sunumda, hBN kusur merkezlerinin optik özellikleri ile tek-foton üretimi için kullanılan kusur merkezleri üzerinden katı-hal sistemlerde bulunan kuantum ışık kaynaklarının polarizasyon dinamiği üzerine yapılan çalışmalar paylaşılacaktır [1]. Tek-foton mertebesindeki ışmanın polarizasyonunu etkileyen faktörlerin anlaşılması ve kontrol edilmesi bu ışık kaynaklarının kuantum anahtar dağıtımı gibi uygulamalarda etkin bir şekilde kullanılabilmesi açısından büyük önem taşımaktadır [2].

Bu çalışma 117F495 ve 121N768 numaralı TÜBİTAK projeleri ile desteklenmiştir.

### Kaynakça

1. A. Kumar, Ç. Samaner, C. Cholsuk, T. Matthes, S. Paçal, Y. Oyun, A. Zand, R. J. Chapman, G. Saerens, R. Grange, S. Suwanna, S Ateş, T. Vogl, "Polarization Dynamics of Solid-State Quantum Emitters", [ACS Nano 18, 7, 5270–5281 \(2024\)](#).
2. Ç. Samaner, S. Paçal, G. Mutlu, K. Uyanık, S. Ateş, "Free-Space Quantum Key Distribution with Single Photons from Defects in Hexagonal Boron Nitride". [Advanced Quantum Technologies, 2200059, 1–7 \(2022\)](#).

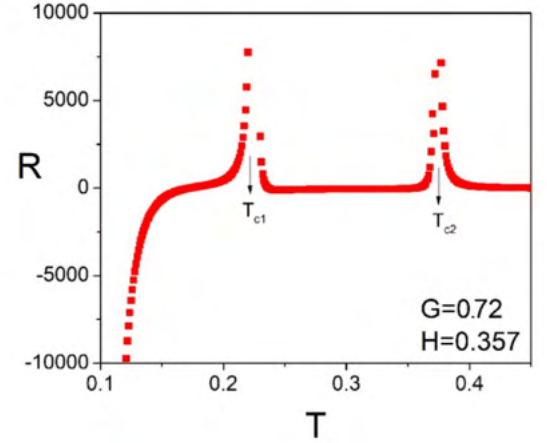
## Düzensiz Manyetik Alan Etkisi Altındaki Enine Alan Ising Modelinin Termodinamik Geometrisi

Gül Gölpinar, Fevzi Keleş

Dokuz Eylül Üniversitesi- Fizik Bölümü, 35160 İzmir

Enine alan Ising modeli ferro-elektriklerden kuantum bilgi teorisine geniş bir yelpazede uygulama alanına sahip iken alan düzensizliğin kritik olaylar üzerine etkileri uzun süredir ilgi odağı olmayı sürdürmektedir. Bu çalışmada düzgün enine alan ve donmuş bimodal rastgele boyuna alan içeren bir kuantum spin sisteminin termal faz geçişlerinin yakınındaki termodinamik geometrisi ayrıntılı bir şekilde çalışıldı. Faz geçişlerinin geometrik incelenmesinde önemli bir yeri bulunan termodinamik eğrilik denge istatistik mekaniği ile Riemann metrik geometrisini birleştiren bir yöntemle türetildi [1]. Enine alan teriminin ferroelektrik sistemlerdeki faz geçişi yakınında sıcaklıktan bağımsız hale gelen titreşim kipi ile ilişkisi nedeniyle metriğin tanımlandığı iki boyutlu manifold sıcaklık ve mıknatıslanmanın z bileşeni cinsinden yazılabildi ve Ruppeiner metrik elemanlarını ve Ricci eğriliğini veren kapalı ifadeler elde edildi.

Gibbs serbest enerjisi basit ve genelleştirilmiş ortalama alan kuramlarıyla elde edildi. Ricci skaleri için elde edilen sonuçlar basit ortalama alan kuramının hem kuantum hem de alan dalgalanmaları içeren bu sistemin termodinamik geometrisini betimlemede yetersiz kaldığı göstermektedir. Genelleştirilmiş yaklaşımda analize rastgele manyetik alan etkisi altındaki enine alan Ising modelinin kuantum etkilerin baskın olduğu bir boyutlu zinciri ile başlandı ve Suzuki-Trotter dönüşümü ile sistemin iki boyutlu klasik Ising modeline özdeşliğinden ve replika teorisinden yararlandı [2]. Rastgele manyetik alan etkisi altındaki kuantum Ising modelinin termodinamik eğriliği sürekli geçişler yakınında iraksama birinci dereceden geçişlerde ise sonlu sıçrama davranışı sergilemektedir [3].



**Şekil 1:** Termodinamik eğriliğin ardışıl iki kritik noktanın yakınında sıcaklıkla değişimi.  $G$  ve  $H$  enine ve boyuna rastgele alanları temsil etmektedir.

### Kaynakça

1. G. Ruppeiner, "Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory", *Reviews of Modern Physics*, **67**(3), 605 (1995).
2. T. Yokota, Y. Sugiyama, "Reentrant phase transitions in a quantum spin system with random fields", *Physical Review B*, **37**(10), 5657 (1988).
3. R. Erdem, N. Alata, G. Gölpinar "Ruppeiner geometry of isotropic Blume–Emery–Griffiths model", *The European Physical Journal Plus*, **135**(11), 1 (2020).

## “Eşlenik” Josephson Etkisi

**Zafer Gedik**

*Sabancı Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Tuzla 34956 İstanbul*

Kuantum mekaniği genel olarak parçacık sayısının korunduğu sistemlerle ilgilenir. Bu yüzden sayı operatörünün eşleniği olarak inşa edilen (olası) faz operatörleri, daha çok değişken parçacık (foton) sayılı problemlerin incelendiği kuantum optiğinde uygulama alanı bulmuştur. Ancak, yoğun madde fiziğinin çok parçacıklı sistemleri de faz operatörünün öz durumlarına çok yakın hallerde bulunabilirler. Bardeen – Cooper – Schrieffer (BCS) modeli, süperiletkenliğin aslında bir faz durumu olduğunu göstermiştir. Josephson ise iki süperiletken arasındaki faz farkının fiziksel bir büyüklüğe, Cooper çiftlerinin meydana getirdiği Josephson akımına, karşılık geldiğini bulmuştur. Bu konuşmada, diğer limitte, süperiletkenlerin atom çekirdeğinde olduğu gibi, sabit sayıda parçacığa sahip oldukları durumda, aralarında “faz akımı” oluşturmaları olasılığı tartışılacaktır.

### **Kaynakça**

1. Z. Gedik, “Quantum Phase in Nanoscopic Superconductors”, Journal of Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism **16**, 913–917 (2003).



## Katkısız Hidrojenlendirilmiş Amorf Silisyum İnce Film Malzemelerde Staebler-Wronski Etkisi: Malzemenin Nanoyapısında Mevcut Elektronik Kusurların İki Demetli Fotoiletkenlik Spektroskopisi ile Belirlenmesi

Mehmet Güneş<sup>1</sup>, Jimmy Melskens<sup>2</sup> and Arno H. M. Smets<sup>3</sup>

1. Mugla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Fen Fakültesi, FizikBölümü, Kotekli Yerleşkesi, Mugla, Türkiye

2. Eindhoven University of Technology, Netherlands

3. Photovoltaic Materials and Devices, Faculty of Electrical Engineering, Delft University of Technology, The Netherlands

Katkısız hidrojenlendirilmiş amorf silisyum (a-Si:H) malzemelerde 1977 yılında keşfedilen Staebler-Wronski etkisi, malzemenin güneş ışığı altında beklediğinde elektronik özelliklerini zamanla kaybetmesine neden olmaktadır. Bu etki amorf silisyum güneş hücre teknolojisinin gelişimine en büyük engeldir. Malzeme karanlıkta 150C'nin üzerinde ısı ileme tabi tutulduğunda ise kaybettiği elektronik özelliklerini tamamen geri kazandığı bu etkinin ışık ile yaratılan elektronik kusurlarda kaynaklandığı anlaşılmış olmasına rağmen, bugüne kadar yapılan bilimsel çalışmalar ışık ile yaratılan ve film büyütme sırasında nanoyapıda mevcut elektronik kusurların tam resmini ortaya koyamamıştır. Çok farklı deneysel yöntemlerle yapılan çalışmalar ilk başta elektron spin rezonans tekniğinin belirttiği tek tip elektronik kusur (tek elektronlu silisyum sallanan bağları-yüksüz özellikte) üzerine yoğunlaşmış olmasına rağmen, başka yöntemlerle elde edilen bulgular birden fazla özellikli elektronik kusurların, özellikle yüklü silisyum sallanan bağların varlığını da işaret etmektedir. Bu konuda binlerce yapılmış bilimsel çalışmalara rağmen, katkısız hidrojenlendirilmiş amorf silisyumun nanoyapısındaki elektronik kusurların çeşitleri, enerji dağılımları ve yoğunluklarının nasıl belirlendiği konusu tam anlaşılamamıştır. Mevcut elektronik kusur modelleride deneysel bulguların ortaya koyduğu Staebler-Wronski olayını tam açıklayamamaktadır.

Laboratuvarımızda gerçekleştirilen çalışmalar kapsamında, farklı nanoyapılara sahip katkısız hidrojenlendirilmiş amorf silisyum ince film malzemeler RF-PECVD büyütme sisteminde farklı silan gazı seyreltme oranlarında Delft Teknoloji Üniversitesinde büyütülmüştür. Cam taban malzeme üzerine özel Ohmik kontak mimarisi ile hazırlanan örnek malzemeler 430K'de ısı ileme bırakıldıktan sonra 300K'de kararlı durum fotoiletkenlik ve geliştirilmiş iki demetli fotoiletkenlik spektroskopisi yöntemleri ile analiz edildikten sonra vakumda 1 güneş ışık şiddeti altında ve sabit sıcaklıkta (25C) Staebler-Wronski etkisi yaratılıp tekrar aynı koşullarda karakterize edilmiştir. Enerjiye bağlı ham ac fotoiletkenlik spektrumu ve optik geçirgenlik spektrumlarından girişim saçaksız optik soğurma katsayısı spektrumu hesaplanmıştır. Hem ısı ileme sonrası hem de ışık altında bekletme sonrasında elde edilen optik soğurma katsayısı spektrumun analizinden katkısız hidrojenlendirilmiş amorf silisyumun yasak enerji aralığında yerleşmiş dört farklı Gauss tipi elektronik kusur dağılımı tespit edilmiştir. Literatürdeki gibi A, B, C, ve X adları ile adlandırılan elektronik kusur dağılımları film büyütme işlemi sırasında yaratılmış olan doğal elektronik kusurlar ve ışık ile yaratılmış Staebler-Wronski kusurları ile aynıdır, sadece yoğunlukları ışık altında bekletme süresi ile artmaktadır. Elde edilen bulgular, son zamanlarda benzer malzemelerde gerçekleştirilen Fourier transform fotocurrent spektroskopisi (FTPS) bulguları ile uyumludur, dört adet elektronik kusur dağılımını işaret etmektedir. Ayrıca, yakın zamanda gerçekleştirilen "time-domain pulsed" elektron paramagnetik rezonans (EPR) deneyleri de farklı özellikli iki adet paramagnetik silisyum sallanan bağlarına (elektriksel yüksüz) ait elektronik kusurların varlığını ortaya koymaktadır. Bu çalışmada elde edilen dört adet Gauss tipi elektronik kusurlardan 2 adet Gauss tipi elektronik kusur dağılımının EPR deneylerinin tespit ettiği elektronik kusurlar ile de uyumlu olduğu anlaşılmıştır.

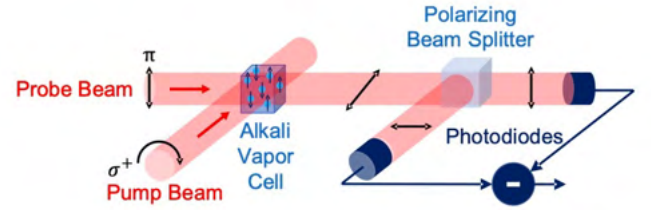
## Alkali Atomlarla Hassas Manyetik Alan Ölçümleri

Deniz Aybaş Tümtürk

Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800, Ankara

Manyetik alanın zamana ve pozisyona bağlı değişimi, içerisinde önemli bilgiler taşıyabilmektedir. Temel parçacık fiziği, kimyasal bağlar, biyolojik yapılar veya fiziki coğrafya kaynaklı olabilecek manyetik alan sinyallerinin hassas ölçümü bu bilgilere erişmek açısından önem taşımaktadır. Hassas manyetik alan ölçüm yöntemlerinden sıklıkla kullanılanları genellikle dondurucu düşüklikle sıcaklıklara inilmesini gerektirmektedir. Öte yandan, alkali atomlarla oda sıcaklığında manyetik alan ölçümü yapmak ve dondurucu sistemlerle rekabet edebilen hassaslıklara erişmek de mümkündür.

Bir cam küre içerisinde gaz halinde tutulan alkali atomlarına gönderilen dairesel kutuplu lazer ışınları, bu atomları seçilen bir dönüş yönüne taşır. Ortamdaki manyetik alan bu atomik dönüş dağılımını değiştirir. Sonrasında ise, doğrusal kutuplu lazer ışınıyla bu atomların kaçının ilk seçilen kutupta olduğu saptanır (Şekil 1). Bu şekilde optik yani ışıkla çalışan bir düzenekle ve oda sıcaklığında manyetik alan ölçümü yapılmış olur [1]. Bu ölçümlerin hassaslığını arttırmak için cam küre tasarımı ve içindeki atom türleri ile oynamak, farklı manyetik kalkan şekilleri kullanma ve ışığı kipleme gibi yöntemlere başvurulmaktadır. Hassas manyetik alan ölçümleri, axion veya karanlık foton gibi, var olduğu sanılan temel parçacıkların manyetik imzalarını aramak için kullanılmaktadır [2, 3].



Şekil 1: Optik olarak bir dönüş yönüne taşınmış alkali atomlarıyla ölçüm alan bir manyetometre.

Oda sıcaklığında çalışan manyetometrelerin heyecan verici uygulama alanlarından biri ise biyolojik ve kimyasal sinyaller açısından çok önemli olan nükleer manyetik rezonans ölçümleridir [4].

### Kaynakça

1. D. Budker, M. Romalis, “Optical magnetometry”, *Nature Physics* **3**, 227–234 (2007).
2. S. Afach, et al., “Search for topological defect dark matter with a global network of optical magnetometer”, *Nature Physics* **17**, 1396-1401 (2021).
3. M. Jiang, T. Hong, D. Hu, Y. Chen, F. Yang, T. Hu, X. Yang, J. Shu, Y. Zhao, X. Peng, J. Du, “Long-baseline quantum sensor network as dark matter haloscope”, *Nature Communications* **15**, 3331 (2024).
4. J. W. Blanchard, T. F. Sjolander, J. P. King, M. P. Ledbetter, E. H. Levine, V. S. Bajaj, D. Budker, A. Pines, “Measurement of untruncated nuclear spin interactions via zero- to ultralow-field nuclear magnetic resonance”, *Physical Review B* **92**, 220202(R) (2015).



## Yarı-iletken lazer etkileşimleri ile yonga içerisinde hacimsel nano-üretim

Rana A. Sabet, Aqıq Ishraq, Alperen Saltık, Mehmet Bütün, Onur Tokel

Bilkent Üniversitesi- Fizik Bölümü, 06800, Ankara

Silisyum (Si) modern teknolojinin temel taşlarından biridir. Bilgisayarlardan cep telefonlarına, akıllı ev sistemlerinden fotovoltaik teknolojilere kadar birçok alanda nano-üretim teknikleri ile Si yongalar sürekli daha çok fonksiyon taşıyabilmiştir. Günümüzde ise Moore yasası yavaşlamış, Richard Feynman'ın nano-teknolojiye atfedilen meşhur sözü, "there is more room at the bottom" yonga yüzeyi ile sınırlı kalmıştır. Burada bu diktayı sözlük anlamı ile alarak, yonga derinliklerinde nano-ölçekli etkileşimlerin ve nano-litografinin mümkün olabileceği tartışılacaktır.

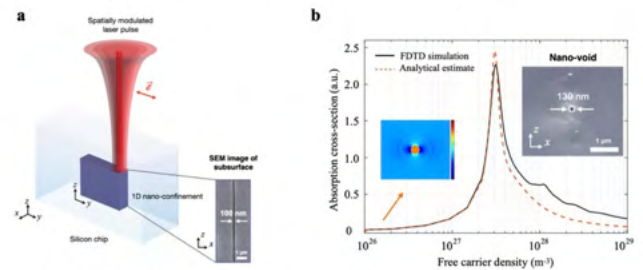
Silisyumda nano-üretim konvansiyel litografi teknikleri ile mümkün olabilmektedir. Fakat mevcut yaklaşımlar çok sayıda ve son derece kompleks üretim adımları içermekte, ve büyük finansal yatırımlar gerektirmektedir. Dahası, mevcut nano-üretim teknolojileri tamamen yonga yüzeyi ile sınırlıdır. Yeni ortaya çıkan lazer-temelli yonga-içi üç-boyutlu litografi ise bu problemleri eş-zamanlı olarak çözmek hedefi ile öne çıkmaktadır [1]. Bu paradigmada, yonganın şeffaf olduğu dalga-boylarında, nanosaniye ya da ultrahızlı atımlara sahip lazer demetleri, malzeme yüzeyinde bir değişim yapmadan, yonga derinliklerine ilerler, ve doğrusal-olmayan etkileşimler başlatırlar [1, 2]. Demet kendinden odaklanma ile (*self-focusing*) enerjisini lokal olarak malzemeye geçirerek, malzemenin kristal yapısını değiştirir. Bu şekilde 1- $\mu\text{m}$  çözünürlüğe ulaşmak mümkündür.

Bu yaklaşım şimdiden yonga içerisinde özgün optik etkilerin kapısını aralamaktadır. Bir örnek olarak literatürde ilk defa lazer-ile-yazılmış gömülü bölgelerin çevresinde çift-kırınım (*birefringence*) etkisini gözledik [3]. Bu etkiyi kullanarak yine ilk kez yonga içerisinde dalga-plakalarının üretimini mümkün olabileceğini önerdik [3], ve bu optik cihazların yüksek verim ile çalıştıklarını deneysel olarak teyit ettik.

## Kaynakça

1. O. Tokel, A. Turnalı, G. Makey, P. Elahi, T. Çolakoğlu, E. Ergeçen, Ö. Yavuz, R. Hübner, M. Borra, I. Pavlov, A. Bek, R. Turan, D. Kesim, S. Tozburun, S. Ilday, F. Ö. Ilday., "In-chip microstructures and photonic devices fabricated by nonlinear laser lithography deep inside silicon", *Nature Photonics*, 11, 639, (2017).
2. M. Chambonneau, D. Grojo, O. Tokel, F. Ö. Ilday, S. Tzortzakakis, S. Nolte, "In-volume laser direct writing of silicon", *Laser & Photonics Reviews*, 2100140, (2021).
3. A. Saltık, O. Tokel, "Laser-written wave plates inside the silicon enabled by stress-induced birefringence", *Optics Letters*, 49, 1, 49, (2024).
4. R. A. Sabet, A. Ishraq, A. Saltık, O. Tokel, "Laser nano-fabrication inside silicon with spatial beam modulation and non-local seeding", arXiv, <https://arxiv.org/abs/2302.13105v1>, (2023).

Bu ilerlemeler, Gauss tipi demetler kullanılarak yapılmıştır. Lazerin demetinin uzaysal dağılımı, odaklanmasına etki etmekte ve etkileşim bölgesini belirlemektedir [1]. Burada ise, Uzaysal Demet Desenleyici (*Spatial Light Modulator - SLM*), kullanılarak, lazer demeti holografik bir faz maslesi yardımı ile Bessel türü dağılıma çevrilmiştir. Bessel demetlerinin saçılıma-dayanıklı doğaları etkileşimin daha sınırlı bir bölgede oluşmasının mümkün olabileceğine işaret etmektedir (Şekil 1).



Şekil 1: (a) Desenlendirilmiş demetler ile yonga içinde üç-boyutlu nano-ölçekli yazma [4]. (b) Nano-boşluklar çevresinde akı yoğunlaşması ve kutuplama etkisi.

Bu şekilde 100-nm seviyesine kadar inilmiştir. Nano-yapıların ortaya çıkmasında nano-boşlukların demeti yükseltmesi ve lazer kutuplamasına bağlı özgün etkiler temel oluşturmaktadır [4]. Bu heyecan verici sonuçlar, nano-üretim silisyum yüzeyinden yonga içerisine taşınabileceğini işaret etmektedir.



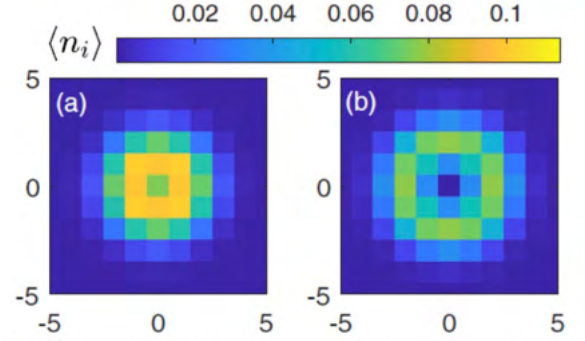
## Az parçacıklı kuantum akışkanlarında kesirli kuantum Hall fiziği

R. Onur Umucalılar

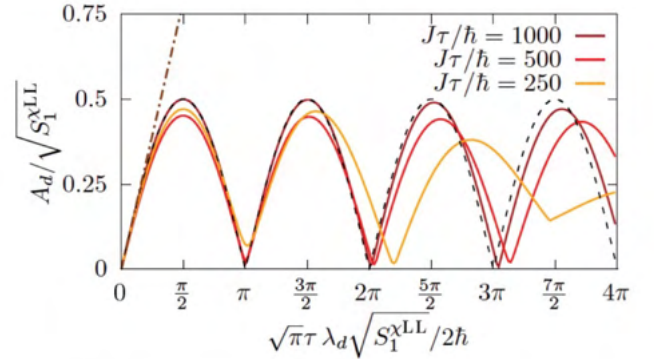
Mimar Sinan Güzel Sanatlar Üniversitesi, Fizik Bölümü, 34380, İstanbul

Kesirli kuantum Hall (KKH) etkisinin iki boyutlu elektron gazlarındaki keşfi ile başlayan ve kırk yılı aşkın bir süredir devam eden araştırmalar çerçevesinde, bu etkide ortaya çıkması beklenen kesirli yüklü ve bozon/fermion istatistiğinden farklı bir yer değiştirme istatistiğine uygun davranan kuaziparçacıkları (anyonları) gözlemlemek yoğun madde fizikçileri için önemli bir hedef haline gelmiştir. Yakın zamanda katı hal sistemlerinde belli bir türü gözlemlenen bu ilginç yer değiştirme istatistiğinin ve daha genel olarak da KKH fiziğinin kuantum simülasyonuna uygun alternatif sistemlerde araştırılması, nötr atomlar ve sonrasında da fotonlar için yapay manyetik alanların oluşturulması önerileriyle başlamış, bu çalışmalar yapay alanların deneysel olarak üretilmesi ve çok yakın zamanda da az parçacıklı KKH etkisi işaretlerinin hem fotonlar hem de atomlar için gözlemlenmesi ile doruğa ulaşmıştır.

Bu konuşmada, nötr parçacıklar için yapay manyetik alan yaratma yöntemlerine bir giriş yaptıktan sonra az parçacıklı KKH etkisi işaretlerinin gözlemlendiği son deneylere değinecek ve deney düzeneklerinin basit bir şekilde değiştirilmesi yoluyla iki ya da üç parçacıklı bir sistemde bile hemen hemen beklenen kesirli yoğunluk seyrelmesine sahip bir kuazideşik durumu (Şekil 1) oluşturulabileceğinden [1] ve KKH fiziğinin ayırt edici işaretlerinden olan kenar durumlarının zamana bağlı dış potansiyeller ile uyarılmasıyla ortaya çıkacak doğrusal ve doğrusal olmayan kuantum dinamiğinden (Şekil 2) bahsedeceğim [2].



**Şekil 1:** Yapay manyetik alan altında ve harmonik tuzak potansiyeli eklenmiş bir optik örgüde bulunan iki parçacık sistemleri için yoğunluk profilleri. (a) Tek bir örgü bölgesine yoğunlaşmış itici bir potansiyel yokken sistem KKH durumunda, (b) böyle bir potansiyel varken sistem kuazideşik durumunda bulunmaktadır.



**Şekil 2:** Tek frekanslı bir zamana bağlı uyarım altında üç parçacıklı kenar durumlarının dipol salınımlarının uyarılma büyüklüğüne ve süresine bağlılığı. Salınımların belli bir rejimde, (siyah kesikli çizgiyle gösterilen) iki seviyeli sistemlerin Rabi salınımları ile modellenebileceği görülmektedir.

## Kaynakça

1. R. O. Umucalılar, “Bulk density signatures of a lattice quasihole with very few particles”, *Phys. Rev. A* **108**, L061302 (2023).
2. A. Nardin, D. De Bernardis, R. O. Umucalılar, L. Mazza, M. Rizzi, I. Carusotto, “Quantum nonlinear optics on the edge of small lattice fractional quantum Hall fluids”, [arXiv:2403.10598 \[cond-mat.mes-hall\]](https://arxiv.org/abs/2403.10598) (2024).

# Kısa Konuşmalar



## Karbon Bifenilen Ağının Gerilmeye Bağlı Anizotropik Termoelektrik Özellikleri

Gözde Özbal Sargın<sup>1</sup>, Salih Demirci<sup>2</sup>, Kai Gong<sup>3</sup>, V.Ongun Özçelik<sup>1</sup>

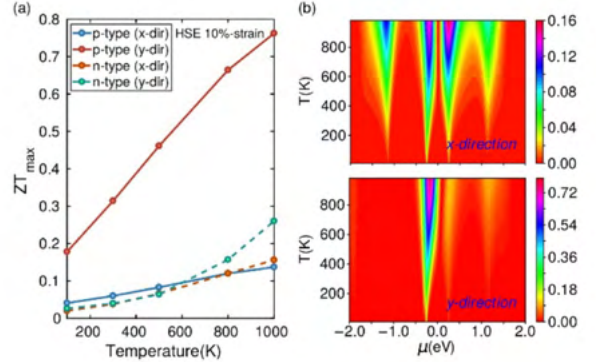
<sup>1</sup>Sabancı Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, 34956 İstanbul, Türkiye

<sup>2</sup>Kırıkkale Üniversitesi, Fizik Bölümü, 71450 Kırıkkale, Türkiye

<sup>3</sup>Department of Civil and Environmental Engineering, Rice University, Houston, TX, USA

Karbon bifenilen ağı kare, altıgen ve sekizgen karbon halkalarının periyodik dizilimiyle oluşmuş, tek katmanlı bir metaldir. Karbon bifenilen ağının 2021 yılında sentezlenmesi ile beraber, hem teorik hem deneysel araştırmalar ivme kazanmıştır. Bu çalışmada karbon bifenilen ağının gerinim altında stabilitesi, elektronik ve titreşimsel özellikleri ve bunlarla beraber termoelektrik özellikleri incelenmiştir. Kuvvet alanı moleküler dinamik simülasyonları ve fonon spektrumu analizleri karbon bifenilen ağının çift eksenli gerinim altında termal ve dinamik stabilitesini koruduğunu göstermiştir. %10'luk çift eksenli gerinim ile birlikte karbon bifenilen ağının bant boşluğu 0.53 eV elde edilmiş ve indirekt yarıiletken özellikler göstermiştir. Karbon bifenilen ağının x ve y-yönlerinde farklı fonon ve elektron iletim spektrumlarına sahip olması yüksek derecede yöne bağlı termoelektrik özellikleri göstereceğini öngörmemizi sağlamıştır. p/n-tipi ZT y-yönü boyunca oda sıcaklığında 0.31/0.06, 1000K'de ise 0.76/0.26 değerlerine ulaşmıştır. Karbon bifenilen ağının hem sentezlenmiş olması hem de termoelektrik veriminin diğer iki boyutlu yarıiletken karbon alotropları ile karşılaştırılabilir olması, karbon bifenilen ağını termoelektrik ve nanocihazlarda kullanılabilir yapmaktadır.

İki boyutlu karbon bazlı malzemeler birbirinden farklı periyodik dizimlere sahip olmalarıyla, farklı fiziksel ve kimyasal özellikler göstermektedirler. Karbon bazlı malzemelere, 2021 yılında sentezlenerek, yeni katılan metalik karbon bifenilen ağı, kare, altıgen ve sekizgen periyodik karbon halkalarından oluşmaktadır. [1] Karbon bifenilen ağının üretilmesi, elektronik, titreşimsel, mekanik, manyetik ve kuantum taşınım özelliklerinin yoğun olarak incelenmesine fırsat vermiştir. Bu çalışmada karbon bifenilen ağının gerinim altında termal ve dinamik stabilitesi, elektronik ve titreşimsel özellikleri ve bunlarla beraber termoelektrik özellikleri incelenmiştir. 400 birim hücre ile 10 ns'lik kuvvet alanı moleküler dinamik sonuçları, %10 gerilme altında dahi, karbon bifenilenin kristal yapısının yaklaşık 1500 Kelvin'e kadar korunduğunu göstermiştir. Elde edilen fonon spektrumuna göre dinamik stabilitesi de gerinim altında korunmaktadır. %10 gerilme ile birlikte karbon bifenilen ağının bant boşluğu 0.53 eV'ye ulaşmış ve yarıiletken özellikler göstermiştir. Fonon ve elektron iletim spektrumları, yüksek derecede yöne bağlı bulunmuştur. Uygulanan gerilmeye bağlı olarak, oda sıcaklığında, Seebeck katsayısı ve güç faktörü artarken, fonon termal iletimi



**Şekil 1:** (a) Farklı yönlerdeki p ve n-tipi  $ZT_{max}$  değerlerinin sıcaklığa bağlı değişimi, (b)  $ZT_{max}$  değerlerinin kimyasal potansiyel ve sıcaklığa bağlı değişimi.

x-yönünde %35, y-yönünde ise %20 azalmıştır. p/n-tipi ZT, y-yönü boyunca oda sıcaklığında 0.31/0.06, 1000K'de ise 0.76/0.26 değerlerine ulaşmıştır. (Şekil 1) Karbon bifenilen ağının hem başarıyla üretilebilmiş olması hem de termoelektrik veriminin diğer iki boyutlu yarıiletken karbon alotropları ile karşılaştırılabilir olması, karbon bifenilen ağına, termoelektrik ve nanocihazlarda potansiyel bir kullanım alanı yaratmaktadır.

### Teşekkür

Bu çalışma 123C159 nolu proje ile Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) tarafından desteklenmiştir.

### Kaynakça

1. Fan, Q., Yan, L., Tripp, M. W., Krejčí, O., Dimosthenous, S., Kachel, S. R., ... & Gottfried, J. M. (2021). Biphenylene network: A nonbenzenoid carbon allotrope. *Science*, 372(6544), 852-856.

## Kavite Eksiton Polaritonlarının Hiperspektral Görüntüleme Yöntemi ile İncelenmesi

**Nahit POLAT<sup>1</sup>, Ozan YAKAR<sup>1</sup>, Şahin Kaya ÖZDEMİR<sup>2</sup>, Sinan BALCI<sup>1</sup>**

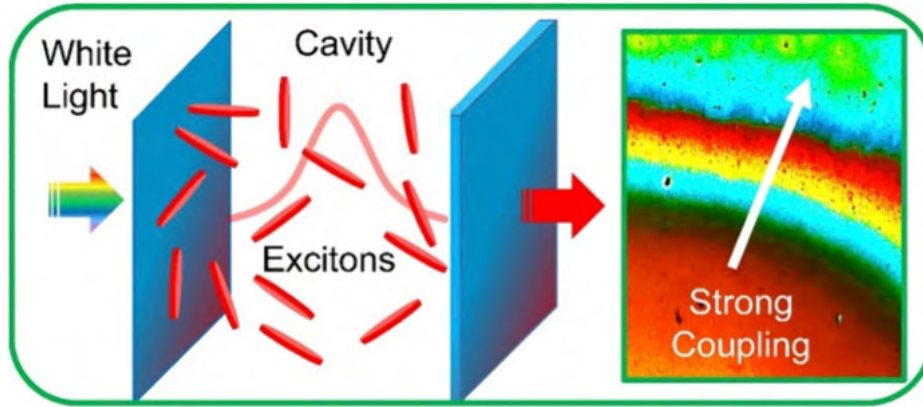
<sup>1</sup>*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35433 İzmir*

<sup>2</sup>*Department of Engineering Science and Mechanics, Pennsylvania State University, University Park, 16802 PA, USA*

Optik mikro boşluklarda oluşan fotonlar, spektral olarak uyumlu eksitonlarla etkileşime girerek, kavite eksiton polaritonları adı verilen hibrit parçacıklar oluştururlar. Eksiton ve kavite modlarına bağlı olan kuantum yayıcıların spektral çizgi genişliklerindeki değişimler, foton-eksiton etkileşiminin zayıf ve güçlü bağlantı rejimlerinde nasıl evrildiğini gösterir.

Bu çalışma, öncelikle eksiton polaritonlarında meydana gelen foton modlarının oluşumuna odaklanmaktadır. Bu modlar, fotonların kavite kalınlığına (iki yarı geçirgen kavite ayna arasındaki mesafe) bağlı spektral değişimlerini temsil eder ve optik mikro boşluklarda nasıl bir spektrum verdiğini anlamak için hiperspektral görüntüleme yöntemi kullanılır. Ayrıca, çalışma, optik mikro boşluğun içerisine yerleştirilen boya molekülleri (eksitonlar) ve mikro boşlukta hapsedilen fotonlar arasındaki güçlü eksiton-foton etkileşimini ortaya koymaktadır. Bu etkileşim, eksiton polaritonlarının görünür bölgedeki optik mikro boşlukta hiperspektral görüntüleme ile spektral ve uzamsal olarak haritalanabilmesini sağlamaktadır. Ek olarak, güçlü eksiton-foton etkileşimi sonucunda oluşan eigenstatelerin, kavite kalınlığına bağlı olarak ne ölçüde eksiton veya foton karakteristiği gösterdiği incelenmektedir.

Sonuç olarak, bu çalışma, foton-madde etkileşiminin hem spektral hem de uzamsal olarak nasıl kontrol edilebileceğini ve bu kontrolün yeni teknolojik uygulamalara nasıl yol açabileceğini göstermektedir. Özellikle, eksiton polariton oluşumunun anlaşılması, fotonik cihazların tasarımı ve geliştirilmesinde önemli bir rol oynamaktadır.



### Kaynakça

Polat, N., Yakar, O., Özdemir, S. K., & Balci, S. (2024). Hyperspectral Imaging of Exciton Polaritons in Optical Microcavities. *ACS Photonics*.



## NaSnX<sub>3</sub> ve KSnX<sub>3</sub> (X= Cl, Br, I) Perovskitlerde Alkali Metal ve Halojen Atomuna Bağlı Elektronik Özellikler

Aynur Ayvalık<sup>a</sup>, Zebih Çetin<sup>b</sup>, Mehmet Yağmurdokardeş<sup>b</sup>, Hümeysra Örücü<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Ege Üniversitesi-Malzeme Bilimi ve Mühendisliği, 35100 İzmir

<sup>b</sup> İzmir Yüksek Teknoloji Üniversitesi-Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

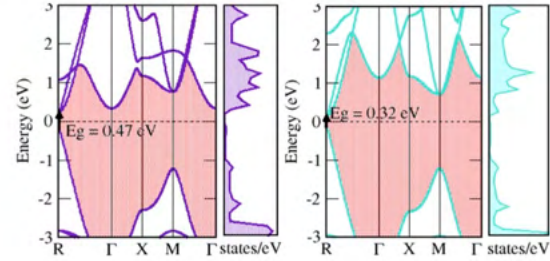
<sup>c</sup> Ege Üniversitesi- Fizik Bölümü, 35100 İzmir

Son yıllarda fotovoltaiik ve opto-elektronik teknolojisi sayesinde, uzay teknolojilerinden enerjiye, sağlıktan iletişime, bilgisayardan savunmaya farklı alanlarda geliştirilen pek çok cihaz hayatımıza girmiştir. Perovskitler ise opto-elektronik teknolojisinin vazgeçilmezlerindedir. Bu çalışmada, NaSnX<sub>3</sub> ve KSnX<sub>3</sub> (X= Cl, Br, I) kübik perovskit yapıların A ve X bölgelerindeki atomların, yapıların stabilitesine ve elektronik özelliklerine etkisi, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) temelli çalışan VASP (*vienna ab initio simulation package*) paket program kullanılarak araştırılmıştır. Her iki bölgedeki atomların bant aralığını etkilediği ancak yapıların dinamik stabilitesini deęiřtirmedięi görülmüřtür.

İdeal bir perovskit A'B''X<sub>3</sub> kimyasal formülasyonunda, kalsiyum titanat (CaTiO<sub>3</sub>) kristal yapısına yakın kristal özellik gösteren, köře paylaşımı BX<sub>6</sub> oktahedra zincirden oluşan, Pm3m uzay grubunda kübik bir yapıdır [1]. Elektronik ve optik özellikleri BX<sub>6</sub> oktahedral bölgenin belirledięi rapor edilmiřtir [2]. Bu çalışmada, önce KSnX<sub>3</sub> ve NaSnX<sub>3</sub> (X:Cl,Br,I) perovskitlerin geometri optimizasyonları yapılıp, örgü sabitleri, örgü hacimleri ve atomlar arası baę uzunlukları elde edilmiřtir. Sonrasında, elektronik hesaplamalar yapılıp, bant aralıęı deęerleri elde edilmiřtir (Tablo 1).

**Tablo 1:** KSnX<sub>3</sub> ve NaSnX<sub>3</sub> (X:Cl,Br,I) bileřiklerinin bant aralıęı deęerleri

Bileřikler	E <sub>g</sub> (eV)
KSnCl <sub>3</sub>	0.69
KSnBr <sub>3</sub>	0.32
KSnI <sub>3</sub>	0.17
NaSnCl <sub>3</sub>	0.86
NaSnBr <sub>3</sub>	0.47
NaSnI <sub>3</sub>	0.23



**řekil 1:** KSnBr<sub>3</sub>(solda) ve NaSnBr<sub>3</sub> (saęda) bileřiklerine ait bant yapıları ve durum yoęunlukları.

Çalışma sonucunda KSnX<sub>3</sub> ve NaSnX<sub>3</sub> (X: Cl, Br, I) perovskit yapıların dinamik kararlılık sergilemeyen doğrudan geçiřli bant aralıęına sahip yarıiletkenler olduęu görülmüřtür (řekil 1). Halojen anyonların klordan iyoda doęru deęiřtirildikçe, bant aralıęı deęerinin küçüldüęü, Na alkali katyonun K ile deęiřtirildięinde, yine bant aralıęının daraldıęı görülmüřtür. Elektronik özellikler, literatürde söylendięi gibi sadece BX<sub>6</sub> oktahedral bölge tarafından belirlenmemekte, A bölgesinde bulunan alkali katyondan da etkilenmektedir. Bant aralıęındaki deęiřimlerin atomların iyonik yarıçaplarından kaynaklandıęı, iyonik yarıçap küçüldükçe bant aralıęının küçüldüęü söylenebilir.

### Teřekkür

Bu arařtırmada yer alan tüm nümerik hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Bařarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleřtirilmiřtir.

### Kaynakça

1. Shojaei, F., & Yin, W. J., "Stability Trend of Tilted Perovskites", *Journal of Physical Chemistry C*, **122**(27), 15214–15219 (2018).
2. Handa, T., Yamada, T., Nagai, M., & Kanemitsu, Y., "Phonon, thermal, and thermo-optical properties of halide perovskites", *Physical Chemistry Chemical Physics* **22**(45), 26069–26087(2020).

## Manyetik İki Katmanlı Sistemlerde Skymion Fazları

Gülşen Doğan<sup>1</sup>, Ümit Akıncı<sup>2</sup>

*1 Nanabilim ve Nanomühendislik Anabilim Dalı, Dokuz Eylül Üniversitesi, 35390 İzmir, Türkiye*  
*2 Fizik Bölümü, Fen Fakültesi, Dokuz Eylül Üniversitesi, 35390 İzmir, Türkiye*

Manyetik skymionlar, topolojik olarak korunan nano ölçekli, nispeten kararlı kiral spin yapılarıdır ve şu anda yoğun bilimsel araştırmaların konusudur. Bu çalışmada, manyetik iki katmanlı sistemlerde skymion fazları Monte Carlo yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Hamiltoniyen parametrelerinin her bir katmandaki etkisi detaylı olarak incelenmiştir. Manyetik anizotropi varlığında sistemin ilginç fazlar sergilediği ortaya çıkmıştır.

Manyetik skymionlar, manyetizasyon yapısındaki küçük dönen topolojik kusurlardır. Bir manyetik skymion, manyetik bir malzemedeki spin konfigürasyonunun lokal bir vortexidir. İlk olarak model, Tony Hilton Royle Skyrme tarafından önerilmiştir. Bundan dolayı, Skymion, nükleer fizikçi Tony Skyrme'nin adını almıştır [1].

Topolojik özelliklerine, küçük boyutlarına ve yüksek hareketliliklerine sahip olan skymionlar, manyetik alanları manipüle etmek için gereken akım yoğunluklarından çok daha düşük akım yoğunluklarıyla manipüle edilebilir. Bu nedenle, skymionics, spintronik ve nanoelektronik alanlarında manyetik skymionlara dayalı gelişen teknolojileri ifade eder. Skymion'lar, olağanüstü kararlılıkları, nano yapılarda onları hareket ettirmek için gereken çok küçük akım yoğunlukları ve son derece küçük boyutları (örneğin birkaç nanometreye kadar) nedeniyle yeni nesil bilgi işleme cihazlarında bilgi taşıyıcıları olarak kullanılabilir. Manyetik skymionlar, Mühlbauer ve arkadaşlarının deneysel gözlemlerinden bu yana aktif olarak araştırılmaktadır [2]. Bu çalışmada, iki katmanlı manyetik sistemlerde skymion fazları incelenerek, manyetik anizotropi varlığının sistem üzerinde etkisi araştırılmıştır. Ortaya çıkan fazların açıkça Dzyaloshinskii–Moriya (DM) etkileşimi, anizotropi ve manyetik alan nedeniyle lokal enerjiler arasındaki rekabete bağlı olduğu gözlemlenmiştir.

### Kaynakça

1. Skyrme, T. H. R. (1961). A non-linear field theory. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, 260(1300), 127-138.
2. Mühlbauer, S., Binz, B., Jonietz, F., Pfleiderer, C., Rosch, A., Neubauer, A., Georgii, R., & Böni, P. (2009). Skymion lattice in a chiral magnet. Science, 323(5916), 915–919.

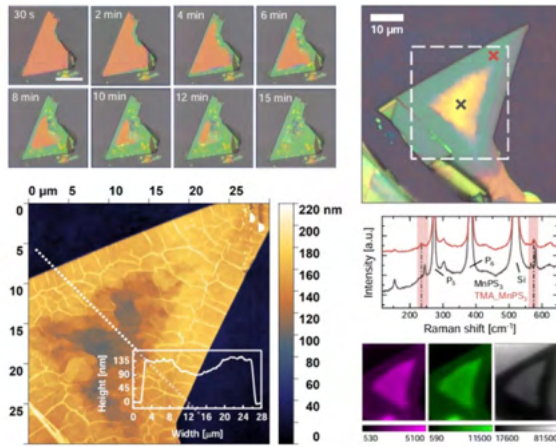
# Poster Sunumlari



Tetramethylammonium Katkılanmış MnPS<sub>3</sub>'te Ayarlanabilir ManyetizmaDoğukan Tutar<sup>1</sup>, Marco Gobbi<sup>2</sup>, Hasan Şahin<sup>1</sup><sup>1</sup>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü- Fotonik Bölümü, 35430 İzmir<sup>2</sup>Centro de Física de Materiales and Materials Physics Center, 200018 San Sebastián

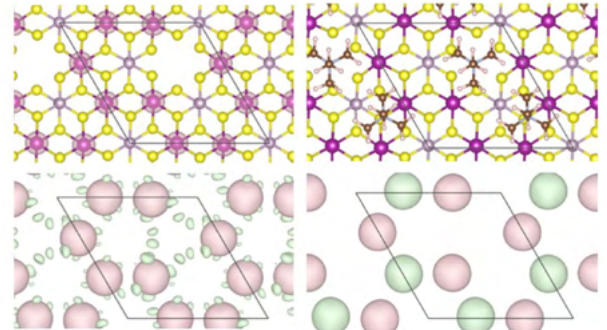
Bu çalışmada, MnPS<sub>3</sub>'e interkale edilmiş Tetramethylammonium (TMA) molekülünün MnPS<sub>3</sub> üzerindeki manyetik etkileri incelenmiştir. Raman spektroskopisi ve atomik kuvvet mikroskopisi gibi yöntemler kullanılarak interkale süreci gözlemlenilmiş ve interkale edilmiş moleküllerin manyetik davranışları dış düzlem ve iç düzlem manyetik alanlarda ölçümlerle sonuçlar desteklenmiştir. Sonuçlar, interkale edilen organik katyonların, Mn<sup>2+</sup> boşluklarının çoğunlukla aynı spin alt kafesinden çıkarılmasını sağlayacak şekilde uygun boyut ve yöne sahip olduğunu göstermektedir. Bu çalışma, van der Waals tipi 2D malzemelerin manyetik özelliklerinin çok bulunur organik moleküller ile değiştirilebilmesi açısından önemli bir yöntem sunmaktadır.

Bu çalışmada MnPS<sub>3</sub> kristaline interkale edilen TMA molekülünün sistemde kontrol edilebilir Mn boşlukları oluşturduğu ve manyetik tepkisini önemli ölçüde değiştirdiği yapılan deneyler ve teorik hesaplamalarla gösterilmiştir.



**Şekil 1:** Raman Haritaları ve Atomik Kuvvet Mikroskobu ile Ölçülen Morfoloji Analizi

DFT tabanlı [1] Teorik hesaplamalarımız kusursuz yüzeye sahip MnPS<sub>3</sub> kristalinin manyetik olduğunu ve spin diziliminin anti-ferromanyetik bir konfigürasyona sahip olduğunu göstermiştir [2]. Tek Mn kusurlu MnPS<sub>3</sub>'ün ise kusursuz MnPS<sub>3</sub>'ten farklı olarak ferromanyetik bir karaktere sahip olduğu bulunmuştur.



**Şekil 2:** Tek Mn-boşluklu MnPS<sub>3</sub> ve TMA-MnPS<sub>3</sub> için spin polarize yük yoğunlukları

Buna ek olarak, bu kristal yapıların TMA molekülü ile etkileşimleri de dikkat çekici sonuçlar ortaya koymuştur. TMA molekülünün kusursuz MnPS<sub>3</sub> yüzeyiyle etkileşimi manyetik temel durumu değiştirmezken, Mn eksikliğine sahip MnPS<sub>3</sub> kristalinin yüzeyi ile etkileşen TMA molekülünün ise yüzeyin manyetik temel durumunu ferromanyetik durumdan, anti-ferromanyetik duruma çevirdiği hesaplanmıştır. Bu manyetik faz geçişinin temel sebebi ise Mn eksikliği durumunda çıkartılan Mn atomuna bağlı S atomlarının boşta kalan elektronlarının yapıda net bir manyetik moment yaratmasıyken, TMA molekülünün yüzeye yaklaşması ile boşta kalan elektronların TMA ile etkileşerek net manyetik momenti ortadan kaldırmasıdır.

## Kaynakça

1. Kresse, G. & Furthmüller, J. "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set." Physical Review B vol. 54 11169–11186 (1996).
2. Joy, P. A. & Vasudevan, S. "Magnetism in the layered transition-metal thiophosphates M PS<sub>3</sub> (M =Mn, Fe, and Ni)". Phys. Rev. B 46, 5425–5433 (1992).



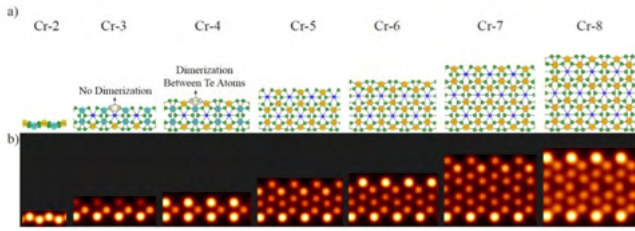
## Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> Manyetik Tek Katmanlı Nanoşeritler: Kenar Tipi ve Genişliğe Bağlı Elektronik ve Manyetik Özellikler

Ali Cem Demirok<sup>1</sup> ve Hasan Şahin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü - Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada, tek tabakalı nanoşerit Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> kristallerinin yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile incelenmiştir. Nanoşeritler, tek sayılı ve çift sayılı Cr katmanları olarak sınıflandırılıp incelenmiştir. Manyetik temel durumu ferromanyetik (FM) olan iki boyutlu Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> kristalinin, nanoşeritler şeklinde kesilmesi halinde manyetik temel durumunun anti-ferromanyetik (AFM) olarak değiştiği görülmüştür. Tek sayılı Cr katmanlı nanoşeritlerde, kenarlardaki Te atomları dimerleşme gerçekleşmezken, çift sayılı Cr katmanlı nanoşeritlerde dimerleşme gerçekleşmektedir. Ayrıca, nanoşeritlerin kohezif enerjilerinin, iş fonksiyonlarının ve örgü parametrelerinin nanoşerit genişliğine bağlı olarak arttığı hesaplanmış, bu artış trendi tek ve çift sayılı Cr katmanları için birbirinden bağımsız incelenmiştir.

İki boyutlu Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> kristalinin, çeşitli deneysel yöntemlerle sentezlenebilir olduğu geçmiş yıllarda kanıtlanmıştır [1]. Bu yapıların sentezi sonucunda ortaya çıkan olağandışı optik, manyetik ve elektronik özellikler ise bu malzemeye olan ilgiyi arttırmıştır.



**Şekil 1:** (a) Farklı genişlik ve kenar tipine sahip Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> nanoşeritlerinin geometrik yapıları, (b) STM görüntüleri.

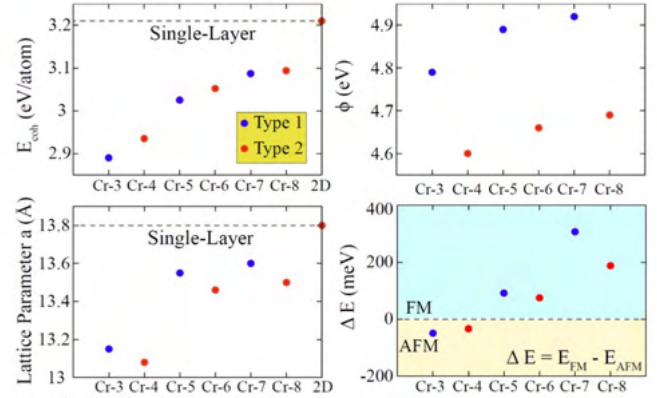
Tek tabakalı nanoşerit Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> yapılarının yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri, Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) kullanılarak yapılmış olup, projektör artırılmış dalga (PAW) potansiyelleri kullanılarak incelenmiştir. Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) fonksiyoneli biçimindeki genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA), değişim-korelasyon enerjisini tanımlamak için kullanılmıştır. Van der Waals (vdW) kuvvetleri DFT-D2 yöntemi kullanılarak dikkate alınmıştır. Cr atomlarının d orbitallerindeki güçlü elektronik korelasyonları dahil etmek için, Coulomb parametresi (U) ile değişim parametresi (J) arasındaki fark, U<sub>eff</sub>=2.0 eV olarak alınmıştır [2].

Farklı genişliklere sahip Cr kenarlı nanoşeritlerin optimize edilmiş yapıları Şekil 1'de gösterilmektedir. Bu genişlikler, iki Cr katmanı içeren en ince konfigürasyondan, sekiz Cr katmanı içeren en geniş

### Kaynakça

1. Gong, C.; Li, L.; Li, Z.; Ji, H.; Stern, A.; Xia, Y.; Cao, T.; Bao, W.; Wang, C.; Wang, Y.; others Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals. *Nature* 2017, 546, 265–269.A.
2. Song, C.; Xiao, W.; Li, L.; Lu, Y.; Jiang, P.; Li, C.; Chen, A.; Zhong, Z. Tunable band gap and enhanced ferromagnetism by surface adsorption in monolayer Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub>. *Physical Review B* 2019, 99, 214435.

konfigürasyona kadar incelenmiş ve Cr kenarlı nanoşeritlerin manyetik temel durumları Cr-2 için stripy-AFM, Cr-3 için truncated-stripy-AFM bulunmuştur. Ayrıca, geometrik optimizasyon hesapları sonucunda kenardaki tellür atomlarının yeniden yapılandığı görülmüştür. Ge ve Te atomları komşu atom olduklarında nanoşeridin kenarlarında dimerleşme görülmezken, Ge atomlarının kenarlardaki Te atomlarından uzaklaşması, Te-Te dimerleşmesine neden olmaktadır.



**Şekil 2:** Farklı genişlik ve kenar tipine sahip Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> nanoşeritlerinin kohezif enerjileri, iş fonksiyonları, örgü parametreleri ve temel durum enerjileri.

Buna ek olarak Şekil 2'de verildiği üzere bu yapıların kohezif enerjilerinin, iş fonksiyonlarının ve örgü parametrelerinin nanoşeridin genişliği ile doğrudan orantılı olarak arttığı görülmüştür.

Sonuç olarak, yapılan hesaplamalar sonucunda 2D-Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> kristalinden sentezlenebilecek tek boyutlu nanoşeritlerin, spintronik uygulamalar için gelecek vaad eden malzemeler olduğu gösterilmiştir.

# Kristal Alan Düzensizliğin spin-1 Blume Capel Modelinin Geometrik faz Eğrileri Üzerine Etkileri

Elif Sünneci<sup>1</sup>, Berat Yılmaz<sup>2</sup>, Dicle Yılmaz<sup>2</sup>, Gül Gülpınar<sup>1</sup>

*Institute of Materials Science and Nanotechnology, National Nanotechnology Research Center (UNAM), Bilkent University, 06800 Ankara  
Dokuz Eylül Üniversitesi-Fizik Bölümü, 35160 İzmir.*

Bu çalışmada  $p(\Delta_i) = \frac{1}{2} \{ \delta(\Delta_i - (1 + \alpha)\Delta) + \delta(\Delta_i - (1 - \alpha)\Delta) \}$  dağılımı ile betimlenen rastgele kristal alan içeren BC modelinin termodinamik geometrisi ortalama alan yaklaşımına özdeş olan en düşük yaklaşımlı küme değişim metodu ile Riemann metrik geometrisini birleştiren bir yaklaşımla incelendi. Ele alınan sistemin nokta değişkenleri tanımlanarak ve Gibbs serbest enerji ifadesi elde edildi. Bir sonraki aşamada Ruppeiner metriğini [1] kullanarak Ricci skalerini veren kapalı bir ifade türetildi.

Saf BC modelinden farklı olarak rastgele kristal alan içeren BC modelinin faz eğrileri alfanın değer aralıklarına göre üç ayrı topoloji sergiler. Termodinamik eğriliğin bu faz eğrilerinde yer alan kritik, üçlü kritik ve birinci dereceden geçişler yakınındaki davranışı elde edildi. Ruppeiner metriğinde Ricci skalerinin korelasyon fonksiyonu ile ilişkili olmasıyla uyumlu bir şekilde sürekli geçişler yakınında iraksama, kesikli geçişlerde ise sonlu sıçrama tekillikleri gözlemlendi [2,3].

## Kaynakça

1. G. Ruppeiner, Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory. *Reviews of Modern Physics*, **67**(3), 605 (1995).
2. H. Janyszek, R. Mrugala, Riemannian geometry and the thermodynamics of model magnetic systems. *Physical Review A*, **39**(12), 6515 (1989).
3. R. Erdem, N. Alata, Ruppeiner geometry of isotropic Blume–Emery–Griffiths model. *The European Physical Journal Plus*, **135**(11), 1-9 (2020).



## The Characterization of Flexible and Transparent Strain Gauge Sensors Based on AZO/Ag/AZO Thin Films Fabricated by Magnetron Sputtering

**Nurcin Karadeniz<sup>1</sup>, Saliha Arıca<sup>1</sup>, Merve Ekmekcioglu<sup>1,2</sup>, Mehtap Ozdemir<sup>1,2</sup>, Gulnur Aygun<sup>1</sup>, Lutfi Ozyuzer<sup>1,2</sup>**

(1) *Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, Turkey*

(2) *Teknoma Technological Materials Inc., IYTE Campus, Urla, 35430, Izmir, Turkey*

This study focused on the development of flexible and transparent strain gauge sensors. They are used to sensitively measure material deformation. AZO/Ag/AZO is produced based on flexible and transparent thin films. It was grown on different substrate materials and the performance of the sensors was examined in detail. The findings demonstrate the successful development of these new sensors that provide low cost and strong signal.

The development of flexible and transparent strain gauge sensors has significant interest in recent years due to their applications in wearable electronics, structural health monitoring, flexible touch screens, and many other fields [1]. It is mainly used to measure the deformation of materials or structures. Strain is defined as the proportion of the alteration in length to the initial length. The majority of strain gauges utilize the change in electrical resistance caused by material deformation to gauge the strain [2]. In this study, strain gauges sensors based on AZO/Ag/AZO flexible and transparent thin films which were grown on SLG, Polyimide (PI) and alumina substrates were produced by magnetron sputtering system. The initial sheet resistance, the temperature coefficient of resistance (TCR) and the gauge factor (GF), growth parameters and also structural and electrical properties of these strain gauges have been characterized. The thickness of the optimized SLG/AZO (30 min) thin film was measured as 25 nm and the thickness of the SLG/Ag (122 s) thin film was measured as 14 nm. The total thickness measurements of the film obtained after SLG/AZO/Ag/AZO thin film deposition were determined as 64 nm, surface resistance  $\sim 6 \Omega/\square$  and optical transmittance  $\sim 89\%$ . The thickness measurements of the film

obtained after PI/AZO/Ag/AZO thin film deposition were measured as 63 nm, surface resistance  $\sim 7 \Omega/\square$  and optical transmittance  $\sim 65\%$  (Uncoated PI - 66%). The thickness measurements of the film obtained after alumina /AZO/Ag/AZO thin film deposition were 53 nm and the surface resistance was measured as  $\sim 52 \Omega/\square$ . Thus, a new material was developed that effectively describes the sensor behavior under strain. The proposed material also highlights the difference between polyimide and alumina substrates. These substrates have been tested and their effect on the growth of Ag-AZO thin film is studied by monitoring sensor resistance. Besides gauge sensors based on Ag-AZO thin film strain which have gauge factor's value is between 2 and 5 and TCR is in value  $<10^{-3}$  are produced, low cost and enhancement of the signal are the successful results of this study.

**Acknowledgments:** This work was supported by TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) with the project number of 119F035. The authors would like to acknowledge the facilities of Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH.

### References

1. S. J. Paul, I. Elizabeth, B.K. Gupta, "Ultrasensitive wearable strain sensors based on a VACNT/PDMS thin film for a wide range of human motion monitoring", *ACS Applied Materials & Interfaces*, **13**(7), 8871-8879 (2021).
2. Y.C. Lu, C.Y. Chiang, Y.C. Chen, Y.C. Lin, T. Ono, Y.C. Tsai., "Study and fabrication of a flexible Zr-based metallic glass thin film strain gauge", *Japanese journal of applied physics*, **59**(SI), SIIG10 (2020).



## Rosette Shaped Tunable Chiral Metamaterials for Terahertz Waves

Yasemin Demirhan<sup>1,2</sup>, Çınar Karadeniz<sup>1</sup>, Merve Ekmekçiöğlü<sup>1,3</sup>, Hakan Altan<sup>4</sup>, Uros Ralevic<sup>5</sup>,

Danka Stojanovic<sup>5</sup>, Gulnur Aygun<sup>1</sup>, Lutfi Ozyuzer<sup>1,3</sup>

(1) Department of Physics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir

(2) Center for Materials Research, Integrated Research Centers, IZTECH, 35430, Izmir

(3) Teknoma Technological Materials Industrial and Trading Inc., 35430, Izmir

(4) Department of Physics, Middle East Technical University, 06800, Ankara

(5) Vinča Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, 101801, Serbia

Terahertz (THz) wave is being studied comprehensively in a wide range of applications from defense industry to wireless communications [1-2]. Generally, like the other portions of the electromagnetic spectrum, there is a need to develop frequency tunable and wide bandwidth sources and detectors. In particular for wireless communications, where compared to conventional technologies the THz band would allow for fast wireless data transfer rates there is a need to develop active and passive components that work in the mm wave and terahertz regions. The THz gap can be thought of as a transition between the electronic and optical regions. The frequency tunable metamaterial structures can be easily be scaled from the microwave to THz region, so the most proper candidates for filling the aforementioned THz gap [3-4].

For the improvement of the value of circular dichroism and optical activity, fabrication of the tunable chiral metamaterial devices is attracted lots of attention. There are various kind of phase change materials for chiral metamaterials but graphene is a promising candidate among them due to its superior properties specifically in the THz and far infrared region. In this study, a chiral metamaterial rosette structure is designed and fabricated on both sides of the sapphire substrates. A commercial COMSOL and CST Microwave Studio programs are used to design and investigate the chiral metamaterial. Numerical simulations are based on the interaction of the chiral structure with linear polarized light. In the experimental side, a conventional thermal evaporation and dc

magnetron sputtering methods are used for the deposition of gold and Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> films respectively. A single layer graphene is transferred on the Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> coated sapphire substrates, that is grown on a copper foil by chemical vapor deposition. UV lithography and ion beam etching techniques are applied for the patterning process. THz characterization measurements were carried out in order to assess the THz frequency response and to investigate the dynamically tunable chiroptical response using optical pumping. The active polarization manipulation capability of the Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>/graphene chiral metamaterial with frequency tunability are demonstrated both numerically and experimentally.

**Acknowledgment:** This research is partially supported by TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) project number 220N350 which is a bilateral project with Vinča Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia. We would like to thank to the Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH for experimental facilities.

### References

1. M. Tonouchi, "Cutting-edge THz Technology" *Nat. Photonics* **97**, (2007) .
2. L. Ozyuzer, A. E. Koshelev, C. Kurter, N. Gopalsami, Q. Li, M. Tachiki, K. Kadowaki, T. Yamamoto, H. Minami, H. Yamaguchi, T. Tachiki, K. E. Gray, W.-K. Kwok, U. Welp, "Emission of coherent THz radiation from superconductors", *Science* **318**, (2007) 1291.
3. Y. Demirhan, H. Alaboz, M. A. Nebioğlu, B. Mulla, M. Akkaya, H. Altan, C. Sabah and L. Ozyuzer "Fourcross shaped metamaterial filters fabricated from high temperature superconducting YBCO and Au thin films for terahertz waves" *Supercond. Sci. Technol.* **30** (2017) 074006.
4. Y. Demirhan, H. Alaboz, L. Ozyuzer, M. A. Nebioğlu, T. Takan, H. Altan, C. Sabah "Metal mesh filters based on Ti, ITO and Cu thin films for terahertz waves" *Optical and Quantum Electronics* **48**, (2016).

## Investigating Infrared Sensor Sensitivity Through Systematic Testing and Calibration Strategies

Çınar Karadeniz<sup>1</sup>, Gülnur Aygün<sup>1</sup>, Mehtap Özdemir<sup>1,2</sup>, Lütfi Özyüzer<sup>1,2</sup>

(1) Department of Physics, Izmir Institute of Technology, 35430, Urla-Izmir, Turkey

(2) Teknoma Technological Materials Inc., IYTE Campus, 35430, Urla-Izmir, Turkey

Infrared radiation (IR), which is also generally referred to as infrared light, is a type of electromagnetic radiation that's exceeding the wavelengths of visible light but is shorter than microwaves. IR generally includes wavelengths from around 750 nm to 1000  $\mu\text{m}$ . Nearly all black-body radiation from objects around room temperature is in the IR band. Additionally, with the technology advancing rapidly it has led to the development of small-size IR detection modules, offering improved sensitivity and reliability for industrial and consumer applications [1].

The evolution of small-size IR detection modules has been characterized by substantial advancements, and with innovations like the MCT (Mercury Cadmium Telluride) TE (Thermoelectric) cooled optically immersed photoconductive detector. Due to its tunable bandgap and high electron mobility, MCT is a highly effective semiconductor material for IR detection. It was seen that the stability and sensitivity of these detection modules were enhanced with the integration of thermoelectric cooling making them capable of operating effectively across a wide range of temperatures. As a result, these compact IR detection modules offer exceptional sensitivity and reliability.

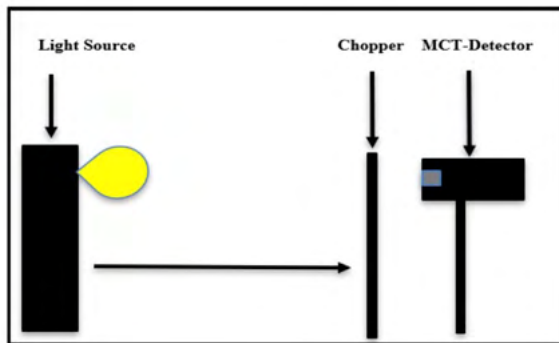


Figure 1: Schematic of Experiment

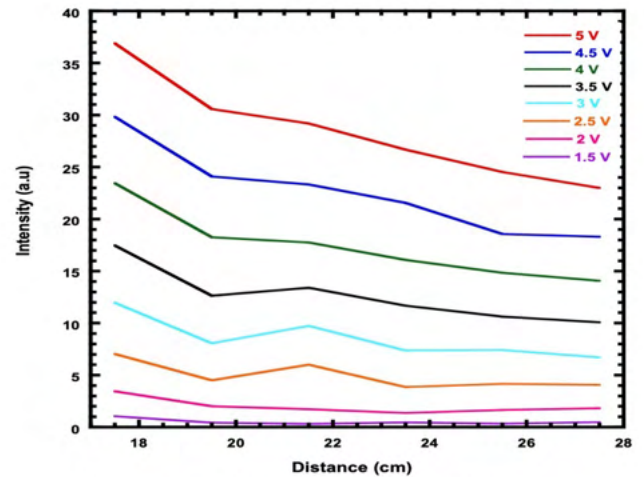


Figure 2: MCT Distance-Intensity Graph

This study consists of a thorough examination of SM-I-12 MCT Detector through systematic test and analysis concerning voltage output and sensing distance with a source of light as shown in Fig. 1. MCT detector is connected to a lock-in amplifier and data is collected by Labview program. The detector is capable of detecting wavelengths between 2-13  $\mu\text{m}$  and it has a frequency bandwidth of 10 Hz to 1 MHz [2]. Results of the study offer an understanding into quality assurance, calibration, optimization and placement strategies for better sensor accuracy in applications as seen in Fig. 2.

**Acknowledgments.** This work was supported by TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) project number 22AG014. The authors would like to acknowledge the facilities of Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH.

### References

1. F. Vatansever, and H. R. Michael, "Far infrared radiation (FIR): Its biological effects and medical applications: Ferne Infrarotstrahlung: Biologische Effekte und medizinische Anwendungen." *Photonics & lasers in medicine* 1(4) 255-266 (2012).
2. VIGO Photonics. "SM-I-12 Features". <https://vigophotonics.com/product/sm-i-12/> Retrieved 2024-04-22.



# Grafen Tabakasına Dik Yönde Uygulanan Statik Elektrik Alan Etkilerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine Dayanan İlk Prensipler Hesaplar ile İncelenmesi

Yılmaz Can YÜKSEK<sup>1</sup>, Oğuz GÜLSEREN<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800, Ankara, Türkiye

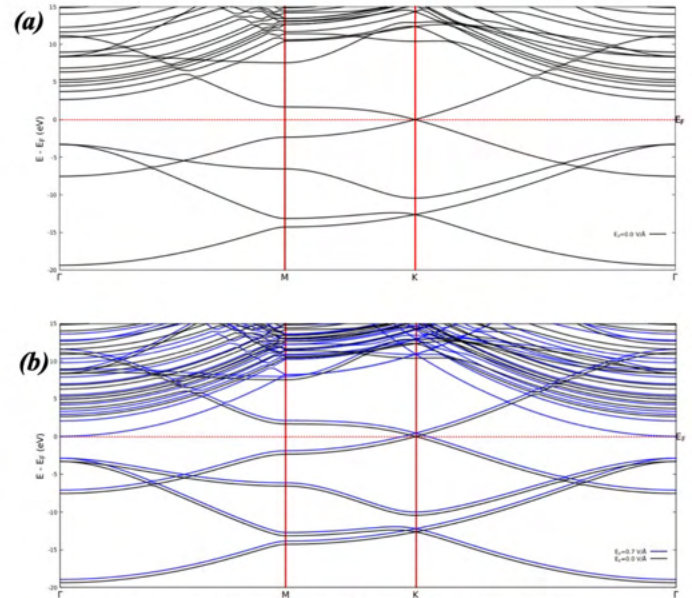
Bu çalışmada, nanoteknolojide geniş uygulama alanına sahip olan iki boyutlu (2D) malzemelerden tek katmanlı grafen tabakasına dik yönde statik elektrik alan uygulanarak grafenin elektronik ve optik özelliklerindeki değişim Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine (DFT) dayanan ilk prensip hesaplar ile incelenmiştir. Elektronik hesaplamalar kapsamında elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu, optik hesaplamalar kapsamında ise dielektrik fonksiyonu ve ışık emilimi grafikleri incelendi.

Grafen, nanoteknoloji uygulamalarında çokça kullanılan, karbon atomlarından oluşan ve bal peteği örgü yapısına sahip tek atom kalınlığında 2D bir malzemedir. Schrödinger denklemi, rölativistik olmayan parçacıkları yoğun madde fiziği çerçevesinde tasvir edebilirken, grafenin yük taşıyıcıları rölativistik parçacıklar gibi davrandığından dolayı Dirac elektronu olarak adlandırılır ve tasvir edilirken Dirac denklemi kullanılır [1]. Fermi enerjisini kesen karşılık gelen bantlar Dirac konisini oluşturur.

Elektrik alan uygulamak, malzemelerin çeşitli özelliklerini kontrol edebilmek için kullanılan bir yöntemdir [2]. Bu çalışmada yer alan hesaplamaların tamamı DFT'ye dayanan ilk prensipler kullanılarak Quantum ESPRESSO yazılımı ile gerçekleştirilmiştir [3]. Karbon atomu, Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) kullanılarak norm-korunumlu (Norm-conserving) pseudo-potansiyel [4] ile tasvir edilmiş, van der Waals etkileşimini hesaba katmak için değişim-korelasyon fonksiyoneli (XC fonksiyoneli) olarak VDW-DF2 [5] kullanılmıştır.

Elektronik bant yapısı incelendiğinde z-ekseninde uygulanan düşük elektrik alan değerleri için değerlik bandındaki kaymaların iletim bandındaki kaymalara göre daha az olduğu, uygulanan elektrik alan değeri

arttırıldığında ise değerlik ve iletim bandında kaydadeğer kaymalar olduğu görülmüştür. 0.7 V/Å üzerinde uygulanan elektrik alan büyüklüklerinde  $\pi^*$  bağına denk gelen bant Fermi seviyesinin altına kaymaya başlamıştır.



**Şekil 1:** (a) Grafen tabakası üzerinde elektrik alan uygulanmıyorken elde edilen bant diyagramı. (b) Grafen tabakası üzerine z-yönünde 0.7 V/Å büyüklüğünde uygulanan elektrik alan etkisiyle elde edilmiş bant diyagramı

**Teşekkür:** Bu araştırmada yer alan nümerik hesaplamaların tamamı TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.

## Kaynakça

- [1] A. K. Geim and K. S. Novoselov, The rise of graphene, Nature materials 6, 183 (2007)
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, science 306, 666 (2004)
- [3] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, et al., Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, Journal of physics: Condensed matter 21, 395502 (2009).
- [4] M. J. Van Setten, M. Giantomassi, E. Bousquet, M. J. Verstraete, D. R. Hamann, X. Gonze, and G. M. Rignanese, The pseudodojo: Training and grading a 85 element optimized norm-conserving pseudopotential table, Computer Physics Communications 226, 39 (2018).
- [5] K. Lee, É. D. Murray, L. Kong, B. I. Lundqvist, and D. C. Langreth, Higher-accuracy van der waals density functional, Physical Review B 82, 081101 (2010).

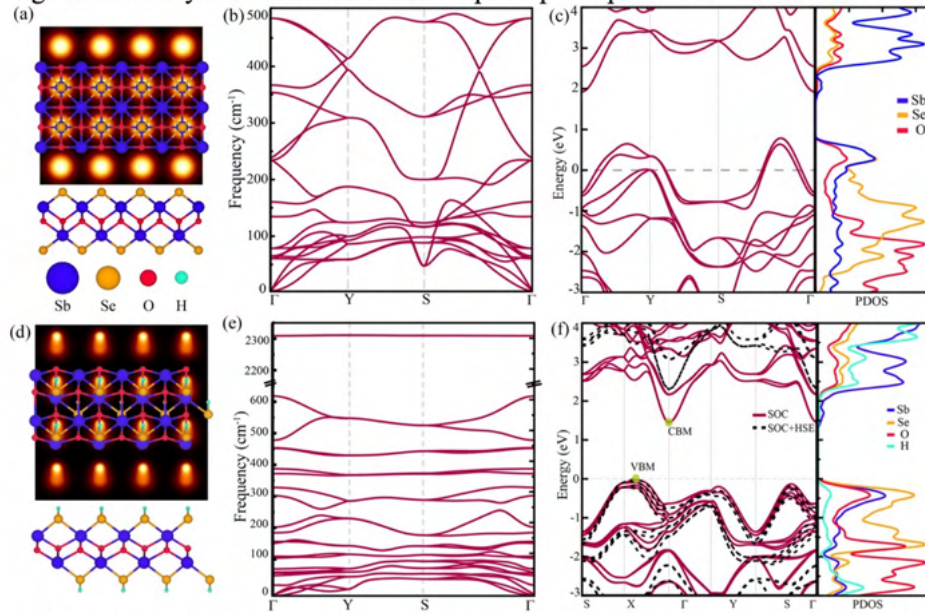


## Tek Katmanlı Antimon Okselenit ( $Sb_2O_2Se_2$ ) Öngörülmesi : Hidrojenleme Yoluyla Metalden Yarı İletkene Geçiş

Yağmur Bozkurt<sup>\*1</sup>, Zebih Çetin<sup>1</sup>, Mehmet Yağmurcukardeş<sup>1</sup>

Department of Photonics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Türkiye

İki boyutlu Bizmut Oksi-selenyum ( $Bi_2O_2Se$ ), ayırt edici yapı, yüksek elektron Hall hareketliliği (Wu ve diğerleri, 2017), ayarlanabilir bant aralığı ve atıl (inert) kararlılık gibi çeşitli özellikleri nedeniyle malzeme bilimi çalışmalarında büyük ilgi görmüştür. Kalkojen ve oksijen atomlarının farklı kalkojenlerle yer değiştirmesi ile çeşitli modifikasyonlara sahip çeşitli bir aileye sahiptir (Song, vd., 2019) (Yang vd., 2022) ve güncel literatürde bizmut atomunun başka bir 5A elementiyle değiştirilmesine yönelik herhangi bir çalışmaya rastlanmamıştır. Bu çalışmada Antimon oksiselenit ( $Sb_2O_2Se_2$ ) ve hidrojenlenmiş fazı ( $Sb_2O_2Se_2H_2$ ) ilk kez bilim dünyasına önerilecek olup, kristallerin yapısal, elektronik, titreşimsel ve mekanik özellikleri açısından Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi bazlı birincil prensip hesaplamaları kullanılarak incelenmiştir.



Şekil 1 a) Tek katmanlı  $Sb_2O_2Se_2$  üstten ve yandan görünümü, b) Fonon bant dağılımı, c) Elektronik bant yapısı ve atomik gösterimli kısmi durum yoğunluğu (PDOS) d) Tek katmanlı  $Sb_2O_2Se_2H_2$ 'nin üstten ve yandan görünümü, e) fonon bant dağılımı, f) Elektronik bant yapısı ve ona karşılık gelen atomik kısmi durum yoğunluğu

Hesaplamalar, Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) kullanılarak yapılmış olup elektronlar arasındaki değişim-korelasyon etkileşimleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) fonksiyoneli ile tanımlanmıştır. Elektronik bant dağılımlarının hesap Spin-yörünge (SOC) etkisi hesaba katılarak hesaplanmıştır.

Yapısal optimizasyonlar  $Sb_2O_2Se_2$ 'nin izotropik ( $3.62 \text{ \AA}$ ) bir yapıya sahip olduğunu,  $Sb_2O_2Se_2H_2$ 'nin ise düşük bir anizotropik özellik (anizotropik kafes parametreleri,  $a$ - $b$ :  $3.91$ - $4.15 \text{ \AA}$ ) sergilediğini ortaya çıkardı. Simüle edilmiş STM görüntüleri yüzeyde hidrojen atomlarının varlığını gösterir nitelikte bulunmuştur (Şekil 1.d). Fonon bantı dağılım hesaplamaları hem saf hem de hidrojenlenmiş  $Sb_2O_2Se_2$  kristallerinin dinamik

stabilitesini (Şekil 1.b, 1.e) kanıtlar. Elektronik olarak, saf  $Sb_2O_2Se_2$ 'nin metalik davranışının (Şekil 1.c), tüm yüzeydeki Se atomlarının Hidrojen atomlarıyla doyurulması yoluyla yarı iletken (Şekil 1.f) bir özelliğe dönüştürülebileceği bulunmuştur. Ek olarak, saf ve hidrojenlenmiş  $Sb_2O_2Se_2$ 'nin hesaplanan Raman spektrumları, bunların ayırt edici titreşim özelliklerini ortaya çıkardı; bu, iki yapı arasındaki yapısal farklılıkları ayırt etmek için gelecekteki deneyler için önemli bir göstergedir. Elastik hesapları ile mekanik kararlılığı doğrulanan  $Sb_2O_2Se_2H_2$ 'nin, yine mekanik olarak kararlı olan saf yapısından çok daha yumuşak olan anizotropik doğrusal elastik davranışa sahip olduğu bulunmuştur.

### Kaynakça

1. J. Wu, H. Yuan, M. Meng, C. Chen, Y. Sun, Z. Chen, W. Dang, C. Tan, Y. Liu, J. Yin, et al., *Nature Nanotechnology* 12, 530 (2017).
2. H.-Y. Song, X.-J. Ge, M.-Y. Shang, J. Zhang, and J.-T. L'u, *Physical Chemistry Chemical Physics* 21, 18259 (2019).
3. S. Yang, P. Luo, F. Wang, T. Liu, Y. Zhao, Y. Ma, H. Li, and T. Zhai, *Small* 18, 2105211 (2022).



## Anizotropik Tek Katmanlı Eğik $\alpha$ -Bi: Raman Spektrumuyla Tek Eksenli Gerininin Tanımlanması

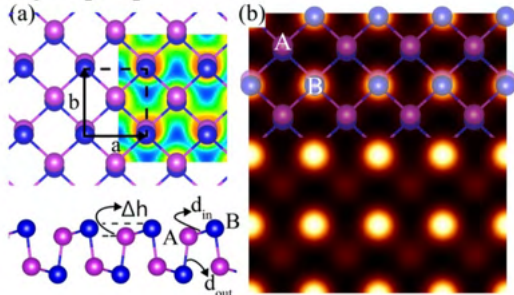
Kadir Can Doğan<sup>1</sup>, Zebih Çetin<sup>2</sup>, Mehmet Yağmurdokardeş<sup>2</sup>

<sup>1</sup>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü - Fizik Bölümü, 35430 İzmir

<sup>2</sup>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü - Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada, tek katmanlı  $\alpha$ -Bi'nin yapısal, titreşimsel, elektronik ve elastik özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmiştir. Yapısal optimizasyonlar,  $\alpha$ -Bi'nin eğimli siyah fosfor benzeri anizotropik yapıya sahip olduğunu göstermektedir. Fonon bandı dağılımları, kuantum moleküler dinamik simülasyonları ve doğrusal-elastik parametreler, sırasıyla  $\alpha$ -Bi yapısının dinamik, termal ve mekanik kararlılığını ortaya koymaktadır. Elektronik bant yapısı hesaplamaları,  $\alpha$ -Bi'nin dolaylı bant aralığına sahip yarı iletken davranış sergilediğini göstermektedir. Hem deliğin hem de elektronun etkili kütlelerinin yönelime bağlı olduğu ve elektronların daha anizotropik olduğu gösterilmiştir. Bu tür anizotropik etkin kütleler, tek katmanlı  $\alpha$ -Bi'deki yönelime bağlı taşıma özelliklerini ortaya çıkarır. Ayrıca,  $\alpha$ -Bi'nin oryantasyona bağlı elastik özellikleri, zigzag oryantasyona göre 45 derecelik açıda yapının auxetic davranış sergilediğini göstermektedir. Ek olarak, iki ana yönelim (zikzak ve koltuk yönleri) boyunca tek eksenli gerinimlerin tek katmanlı  $\alpha$ -Bi'nin titreşim özellikleri üzerindeki etkisi araştırılmıştır.  $\pm 5$  gerinim limitlerinde yapının hem sıkıştırma hem de germe deformasyonlarında fononik olarak kararlılık sergilediği gösterilmiştir. Tek eksenli gerinimler altında hesaplanan Raman spektrumları, uygulanan gerininin tipinin (sıkıştırma veya germe) ve yönünün Raman spektrum analizinden çıkarılabileceğini göstermektedir. Genel olarak, 2D  $\alpha$ -Bi'nin Raman spektrumundaki tepe konumları açısından gerinim kaynaklı modifikasyonlar, deneysel çalışmalarda meydana gelebilecek gerininin karakterizasyonu için yararlı bir araç olarak dikkat çekmektedir.

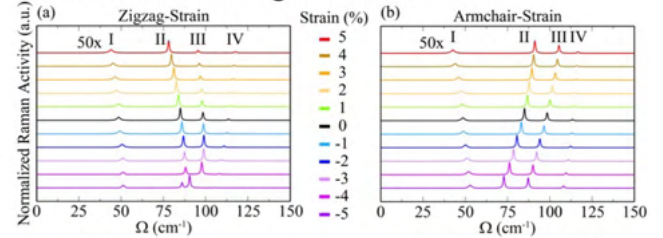
Son yıllarda piktojenler olarak da bilinen 5A grubu elementlerinden biri olan bizmut (Bi), en ağır radyoaktif olmayan element, güçlü içsel spin-yörünge bağlantısı (SOC), termoelektrik özellikleri, yüksek yüzey alanı, işlevselleştirme kolaylığı, düşük maliyetli, toksik olmayan, yüksek X-ışın zayıflama katsayısı, yüksek elektriksel ve magnetorezistans, arzu edilen katalitik aktivite ve yüksek stabilite gibi olağanüstü özelliklerinden dolayı büyük ilgi görmüştür.[1-2]



**Şekil 1:** Tek katmanlı  $\alpha$ -Bi yapısı için (a) kristal yapının üstten ve yandan görünüşleri ve (b) simüle edilmiş STM görüntüsü. (c) Üst Bi atomlarını içeren düzlem için karşılık gelen elf kontur haritası.

Çalışmamızda 2D  $\alpha$ -Bi yapısının anizotropik, yapısal, titreşimsel, elektronik ve elastik özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmiştir. Hesaplamalar Vienna ab-initio simulation package (VASP) kullanılarak yapılmış olup elektronlar

arasındaki değişim-korelasyon etkileşimleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) fonksiyoneli ile tanımlanmıştır.  $\alpha$ -Bizmuten'in kafes yapısı siyah fosfor ile benzer yapıdadır. Bununla birlikte;  $\alpha$ -Bi, yapının merkez simetrisini bozan, siyah fosfor kristal yapısından farklı olarak, düz atom katmanlarının eğilmesine neden olan yapısal bozulmaya uğrar.  $\alpha$ -Bi yapısı için düzlem içi anizotropik kafes parametreleri  $a/b=4.44/4.87$  Å olarak hesaplanmıştır.  $\alpha$ -Bi yapısı dinamik, termal ve mekanik kararlılık sergilemektedir.



**Şekil 2:** Tek katmanlı  $\alpha$ -Bi yapısının (a) ZZ ve (b) AC yönleri boyunca gerinim altında hesaplanan Raman spektrumları.

Raman spektrum hesaplamaları ise tek katmanlı  $\alpha$ -Bi yapısının dört adet Raman aktif moda sahip olduğunu göstermektedir. Ayrıca, tek eksenli zigzag (ZZ) ve koltuk yönü (AC) boyunca uygulanan gerinimlerin  $\alpha$ -Bi yapısının Raman spektrumuna etkisi incelenmiştir ve uygulanan gerininin karakteri Raman spektrumu aracılığıyla ayırt edilebilmektedir.

### Kaynakça

1. Zhou, W., Chen, J., Bai, P., Guo, S., Zhang, S., Song, X., Tao, L., Zeng, H. Two-dimensional pnictogen for field effect transistors. *Research* 2019,
2. Ersan, F., Kecik, D., Ozelik, V., Kadioglu, Y., Aktürk, O. U., Durgun, E., Aktürk, E., Ciraci, S. Two dimensional pnictogens: A review of recent progresses and future research directions. *Applied Physics Reviews* 2019, 6, 021308.



## Farklı Manyetik Durumlara Sahip Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub>'nin Yeni Tek Katmanlı Delikli Kristal Yapıları

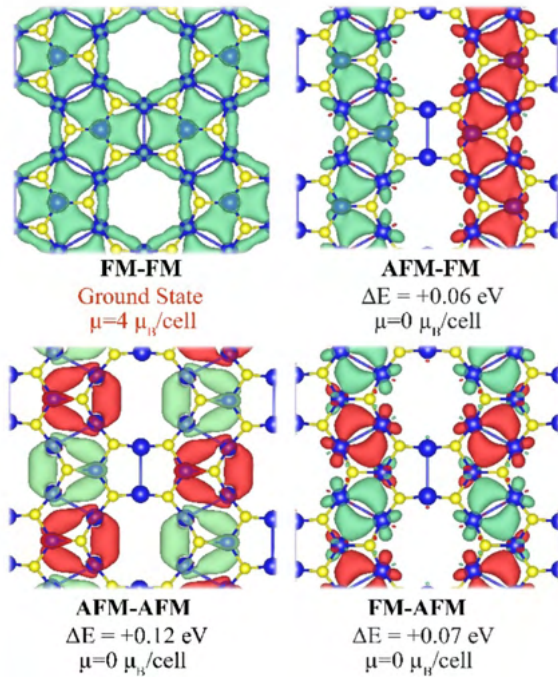
Tayfun Kutlu<sup>2</sup>, Onur Ercem<sup>1</sup>, Mehmet Yağmucukardeş<sup>2</sup>, Hasan Şahin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü - Fizik Bölümü, 35430 İzmir

<sup>2</sup>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü - Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada [1], çember yapılı geçiş metali kalkojenit kristallerinin sentezlenebilirliğini yakın zamanda ortaya koymuş olan deneylerin motivasyonu ile tek katmanlı Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub>'nin yapısal, elektronik ve titreşimsel özellikleri araştırılmıştır. Yoğunluk fonksiyonel teorisi tabanlı toplam enerji optimizasyonları ve dinamik kararlılık analizleri, bilinen 1T fazına sahip hafniyum disülfür kristallerinin Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub> kimyasal formülü ile temsil edilen delikli kristal yapısında stabilize olabildiğini göstermiştir. Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub> malzemesi ferromanyetik temel durum ile birlikte 4 farklı manyetik durum sergilemektedir. Tüm bu manyetik durumlar indirekt veya kuazi-indirekt bant aralıklı yarı iletken davranış sergilemektedir. Ayrıca, Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub>'nin her bir olası manyetik fazının düzlem içi sertlik ve Poisson oranı değerlerinin, uygulanan gerilmeye karşı belirgin bir açı bağımlılığına sahip olduğu gösterilmiştir. Kararlı kristal yapısı ve manyetik çeşitliliği, Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub>'nin manyeto-mekanik uygulamalar için önemli bir aday olabileceğini göstermektedir.

Son yıllarda yapılan çalışmalar [2] M<sub>8</sub>X<sub>12</sub> yapısına sahip kristallerin doğada var olabileceğini ve bu boşluklu yapıların aynı atom türlerine sahip geçiş metal dikalkojenit (TMD) grubundaki kristallerden sentezlenebileceğini göstermiştir. Bu yapıların TMD muadillerinden farklı elektronik, titreşimsel ve mekanik özellikleri bu grup malzemelere olan ilgiyi artırmıştır.



Şekil 1: Dört farklı manyetik faz için spin yoğunluğu grafikleri.

Bu çalışmada, Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub> ve HfS<sub>2</sub> kristallerinin yapısal, titreşimsel, elektriksel ve mekaniksel özellikleri kıyaslamalı olarak yoğunluk fonksiyoneli teorisi vasıtasıyla incelenmiştir. Hesaplamalar Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) kullanılarak yapılmış olup elektronlar arasındaki değişim-korelasyon etkileşimleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) fonksiyoneline Hubbard terimi de eklenilerek (GGA+U) ile tanımlanmıştır [3].

İlk olarak, toplam enerji optimizasyonları ve dinamik kararlılık analizleri, bilinen 1T fazının Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub> olarak dört ayrı manyetik faz durumunda delikli bir kristal yapı olarak stabilize edilebileceğini ortaya koymuştur.

Elektronik bant hesapları sonucunda ise, Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub>'nin manyetik fazlarının indirekt ve kuazi-indirekt bant boşlukları ile yarı iletken özelliğe sahipken, 1T yapısı geniş bir yasak bant boşluğuna sahip olduğu bulunmuştur.

Düzlem içi sertlik değerlerinin 1T-HfS<sub>2</sub>'de 103 N/m iken Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub>'nin manyetik fazlarında ise 44-21 N/m aralığında olması Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub>'nin manyetik fazlarının mekanik olarak kararlı olduğu ve ultra yumuşak bir yapıya sahip olduğunu göstermiştir.

Sonuç olarak, Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub>'nin 1T-HfS<sub>2</sub> fazından sentezlenebileceği ve 1T fazından farklı olarak manyetik bir yarı-iletken özelliğe sahip olduğu gösterilmiştir. Bu durum Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub> kristalini manyeto-mekanik uygulamaları için umut vaat eden özelliklere sahip bir malzeme haline getirmektedir.

### Kaynakça

1. T. Kutlu, O. Ercem, M. Yagmucukardes, H. Sahin "Novel Single Layers of Holey Crystalline Structures of Hf<sub>8</sub>S<sub>12</sub> with Diverse Magnetic States", Phys. Chem. Chem. Phys., (In-press - 2024)
2. Y. Peng, Q. Zhu, W. Xu, & J. Cao . "High Anisotropic Optoelectronics in Monolayer Binary M<sub>8</sub>X<sub>12</sub> (M= Mo, W; X= S, Se, Te).", ACS Applied Materials & Interfaces, 14(23), 27056-27062. (2022),
3. S. L. Dudarev, G. A. Button, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, & A. P. Sutton. "Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+ U study." Physical Review B, 57(3), 1505. (1998)



## Malign Melanom Kanser ve Kanser Kök Hücrelerinin Raman Spektroskopisi Yöntemiyle İncelenmesi

**Bensu Rüya Uslu<sup>1</sup>, Berrin Özdil Bay<sup>2,3</sup>, Hüseyin Aktuğ<sup>2</sup>, Günnur Güler<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 35430, İzmir*

<sup>2</sup>*Ege Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Histoloji ve Embriyoloji Anabilim Dalı, 35100, İzmir*

<sup>3</sup>*Süleyman Demirel Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Histoloji ve Embriyoloji Anabilim Dalı, 32200, Isparta*

Kanser kök hücreleri (KKH), kanser hücrelerinin küçük bir kısmını oluşturan kök hücreler gibi başka hücrelere dönüşebilme ve kendini yenileyebilme özelliğine sahip olan ve CD133 gibi hücre yüzeyi işaretlerini ekspres edebilen hücrelerdir. KKH'ler tedaviye dirençlidirler ve kanserin metastazı ve nüksetmesinde önemli yere sahiptirler [1]. Bu sebeple, KKH'lerin araştırılması önem arz etmektedir. Bu çalışma, Raman spektroskopisi yöntemi kullanılarak malign melanom modeli üzerinde KKH'ler ve kök hücre olmayan kanser hücrelerinin biyofiziksel açıdan karakterizasyonu üzerinedir.

Malign melanom (MM) melanositlerden gelişen ve genellikle güneşe korunmasız ve fazla maruziyet nedeniyle ortaya çıkan bir cilt kanseri türüdür. MM cilt kanserinin az yaygın bir türü olduğu hâlde cilt kanseri kaynaklı ölümlerin büyük bir kısmından sorumludur [2]. Bu çalışmada, malign melanom kanser kök hücreleri ve kök hücre olmayan kanser hücreleri CHL-1 bulk popülasyon hücre hattından akış sitometrisi yöntemiyle sort edilmiştir. Kanseri kök hücreleri "CD133+" kök hücre olmayan kanser hücreleri ise "CD133-" olarak tanımlanmıştır. CD133+, CD133- ve CHL-1 hücreleri  $10^6$  hücre/ml konsantrasyonunda hazırlanmıştır.

Raman spektroskopik ölçümleri Renishaw marka mikroskopa sahip konfokal Raman sistemi ile 532 nm dalga boyuna sahip lazer kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Spektrumlar; 400-4000  $\text{cm}^{-1}$  spektral aralığında, %50 lazer gücü, 20 s akümülyasyon zamanı ve mikroskopun x50 objektifi kullanılarak kaydedilmiştir.

Otuzar mikrolitrelik örnekler Perkin Elmer'in standart alüminyum kaplarına konularak tüm

hücre tipleri için mikroskopla tek hücreye odaklanarak en az 15 spektrum kaydedilmiştir. Verilerin analizi Origin ve Kinetics programları kullanılarak daha önceki çalışmalarımıza benzer bir şekilde gerçekleştirilmiştir [3]. Tüm spektrumlara 400-1800  $\text{cm}^{-1}$  fingerprint bölgesinde normalizasyon, smoothing ve baseline düzeltilmesi ön işlemleri uygulanmıştır. CD133+, CD133- ve CHL-1 hücrelerinin ortalama spektrumları hesaplanmıştır. Ortalama spektrumlar kullanılarak fark spektrumları hesaplanmıştır. Ayrıca, kaydedilen tüm spektrumlar kullanılarak temel bileşen ve hiyerarşik kümeleme analizleri gerçekleştirilmiştir.

Sonuç olarak CD133+, CD133- ve CHL-1 hücrelerinin başlıca; 700-800  $\text{cm}^{-1}$  aralığındaki nükleik asit, ~1000  $\text{cm}^{-1}$ 'deki fenilalanin, ~1100-1300  $\text{cm}^{-1}$  aralığındaki amid III ve lipit, 1300-1400  $\text{cm}^{-1}$  aralığındaki nükleik asit ve protein ve 1400-1700  $\text{cm}^{-1}$  aralığındaki protein, amid I ve lipit sinyallerinden dolayı biyofiziksel açıdan farklılaşma gösterdiği tespit edilmiştir [4].

**Anahtar Kelimeler:** Raman Spektroskopisi, Kanseri Kök Hücreleri, Malign Melanom

### Teşekkür

Bu çalışma TÜBİTAK 2209-A Üniversite Öğrencileri Araştırma Projeleri Destekleme Programı kapsamında desteklenmiştir (proje numarası: 1919B012203870).

### Kaynakça

1. Z. Yu, T.G. Pestell, M.P. Lisanti, R.G. Pestell, Cancer stem cells, *Int J Biochem Cell Biol* 44 (2012) 2144–2151.
2. McCourt, C., Dolan, O., & Gormley, G. (2014). Malignant melanoma: a pictorial review. *The Ulster medical journal*, 83(2), 103–110.
3. G. Güler, E. Acikgoz, N.Ü. Karabay Yavasoglu, B. Bakan, E. Goormaghtigh, H. Aktuğ, Deciphering the biochemical similarities and differences among mouse embryonic stem cells, somatic and cancer cells using ATR-FTIR spectroscopy, *Analyst* 143 (2018) 1624–1634.
4. Paraskevaïdi, M., Matthew, B. J., Holly, B. J., Hugh, B. J., Thulya, C. P. V., Loren, C., ... Bayden, W. 2021."Clinical applications of infrared and Raman spectroscopy in the fields of cancer and infectious diseases".

## Grafen/Silisyum Fotodedektörün Morötesi Bölgede Foto-tepkisinin Araştırılması

**Çiçek Kaplan, Cem Çelebi**

*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, Kuantum Aygıt Laboratuvarı  
35430 Urla, izmir*

Bu çalışmada, Kimyasal Buhar Biriktirme yöntemi ile üretilen p-tipi grafen ve n-tipi Silisyum (G/Si) bazlı Schottky bariyer fotodiyotunun fabrikasyonu ve bu fotodiyotun morötesi bölgede optoelektronik karakteristiklerinin grafen katman sayısına bağlılığı deneysel olarak incelenmiştir. Atmosferik basınçta ve aynı gün alınan ölçümlerde, her bir G/Si hetero eklemi için -0,5 ile 0,5 V arasında uygulanan öngerilim voltajında I-V ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Karanlık ortam koşulları altında alınan I-V ölçümleri 2, 4 ve 6 katmanlı grafen elektrotu sahip G/Si örneklerin tamamının düzeltici (rectifying) Schottky eklem karakteri sergilediği ancak ters doyma akımlarının ( $I_0$ ) farklı olduğu bulunmuştur. I-V ölçümlerinden elde edilen  $I_0$  değerleri kullanılarak 2, 4 ve 6 katmanlı grafen elektrotlu numunelerin Schottky bariyer yükseklikleri ( $\Phi_B$ ) saptanmıştır. İki katmanlı grafen elektrotu sahip örneğin  $\Phi_B$  değerine göre 4 katmanlı grafen elektrotlu örneğin  $\Phi_B$  değeri  $\sim 0,83$  eV düzeyine çıktığı ve ardından 6 katman için yaklaşık  $\sim 0,79$  eV'a düştüğü bulunmuştur. Elde ettiğimiz bu sonuçlar, G/Si fotodiyottaki düzeltme kuvvetinin, aygıt yapısında şeffaf iletken elektrot görevi gören grafen katmanlarının sayısı ile değiştirilebileceğini göstermektedir. Ayrıca, aygıtların morötesi bölgesindeki spektral tepkisini (R) belirlemek için sıfır ön gerilimde ve 250 – 400 nm dalga boyu aralığında foto-tepki ölçümleri gerçekleştirilmiştir. 2 katmanlı grafen elektrotlu aygıtla kıyasla, 4 katmanlı grafen elektrotlu örneğin spektral duyarlılığı 3 kat artmasına rağmen, 6 katmanlı grafen elektrotlu aygıtta 4 katmanlı grafen elektrotlu aygıtın spektral duyarlılığına göre yaklaşık %25 azalma olduğu belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar, 4 katmanlı grafenin ışık geçirgen bir elektrot olarak kullanılmasının, G/Si Schottky bariyer fotodiyotun derin morötesi bölgede ışığın hassas olarak algılanması için en uygun seçenek olduğunu ortaya koymuştur.



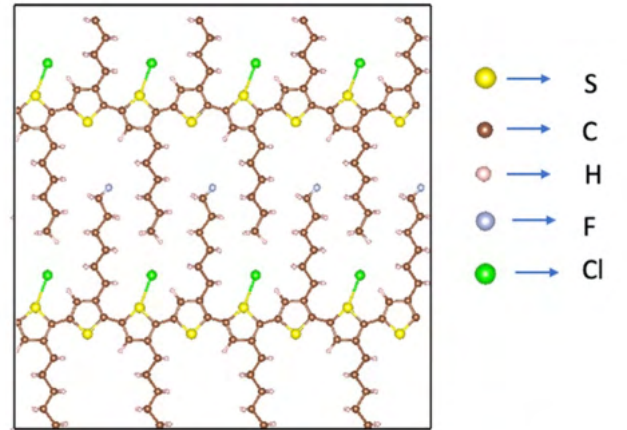
## Alkali ve Halojen Grubu Elementlerinin P3HT Polymer Yapısına Etkisi

Tuğçe Sevinç Dağ<sup>1</sup>, V. Ogun Özçelik<sup>1</sup>*Sabancı Üniversitesi – Malzeme Bilimi ve Nanomühendislik Programı, 34956 İstanbul / Türkiye*

Organik yarıiletkenlere dayalı fotovoltaik (PV) hücreleri, özellikle üretimdeki kolaylıkları nedeniyle ilgi çekicidir. Bunlardan Poly (3-hexylthiophene) (P3HT) organik uygulamalarda sık kullanılan konjuge polimerlerden biridir. Tek bir P3HT,  $\pi$ -konjuge tiyofen omurgası (backbone) ve alkil yan zincirlerinden oluşur (Şekil 1). P3HT’de düzenli (regioregular) ve düzensiz (regiorandom) olmak üzere iki farklı yapı mevcuttur. Düzensiz yapının aksine düzenli P3HT’de tüm yan zincirler aynı yönde sıralanır. P3HT’nin özelliklerini ayarlamaya yönelik yöntemler, spesifik uygulamalar için istenir. Farklı istiflenmeler ve morfoloji, malzemenin özelliklerinde belirleyici etkenlerdir [1].

Bu çalışmada, ilk olarak regioregular bir P3HT yapısı oluşturuldu ve yapı optimize edildi. Toplam enerji ve elektronik bant yapısı hesaplamaları VASP (Vienna ab-initio Simulation Package) [2] kullanılarak yapıldı. P3HT’nin hesaplanan bant aralığı 1.11 eV olup literatür ile uyumludur [3]. Katkılama, bir malzemenin elektronik ve termoelektrik özellikleri de dahil olmak üzere birçok özelliğini değiştirmek için sıklıkla kullanılan bir yöntemdir. Bu çalışmada amaç, P3HT yapısını işlevselleştirmek için halojen grubundan olan F ve Cl başta olmak üzere, farklı atom ve moleküller ile yapıyı katkılayarak polimerin yapısını incelemektir. Bunun için, ilki zincir uçlarını katkılayarak ve ikincisi uçtaki bir H atomunu çıkarıp yerine katkı atomunu bağlayarak olmak üzere iki farklı şekilde yapılar kuruldu ve kararlılığı incelemek adına

optimize edilmiş yapılar için bağlanma enerjileri hesaplandı. Zincir ucuna katkılama durumunda, F atomu eklenen yapılar bozulurken, Cl katkılanan yapı ise kararlı bulundu. Hidrojen çıkarılıp katkılama durumunda ise yapılar pozitif binding enerjiler ile bir bağlanma bariyeri gözlemlendi. Ayrıca, backbone etrafına Cl, F ve Na atomları bırakılarak hesaplamalar yapıldı ve Na eklenen yapının kararsız diğerlerinin kararlı olduğu gözlemlendi. Hesaplanan yapılar arasında minimum enerji ile en kararlı olan yapı, florlu yapıdır. Ayrıca, kararlı bulunan yapılar için elektronik bant yapıları çalışıldı.



Şekil 1: F ve Cl atomları ile katkılanmış P3HT

**Kaynakça:**

1. S. Dag, L. W. Wang, J. Phys. Chem. B, 114 (2010) 5997-6000.
2. G. Kresse, J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci. 6 (1996) 15-50.
3. V. O. Özçelik, Y. Li, W. Xiong, F. Paesani, J. Phys. Chem. C, 124 (2020) 4802-4809.

## Optimization of Large Area Magnetron Sputtering Deposited Thin Film Layers for Electrochromic Devices

Enver Deveci<sup>1,2</sup>, Polatkan Ozcan<sup>1</sup>, Merve Ekmekcioglu<sup>1,2</sup>, Gulnur Aygun<sup>1</sup>, Lutfi Ozyuzer<sup>1,2</sup> and Mehtap Ozdemir<sup>2</sup>

(1) Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, Turkey

(2) Teknoma Technological Materials Inc., IYTE Campus, Urla, 35430, Izmir, Turkey

The electrochromic devices promise significant advancements in energy efficiency, reducing energy consumption in buildings, current and future automotive industry glass, and wearable technology fields. As a result of these technological advancement, optimization of thin film deposited layers for electrochromic devices on large-area surfaces has been achieved in this study.

In recent years, new functional devices have been developed, especially through nanotechnology. These devices have influenced the mechanical, electrical, chemical, and optical properties of materials or systems. The production of electrochromic devices (ECDs) serves as a good example of the utilization of these new technologies. Through these electrochromic devices, it is aimed to increase energy savings in buildings and vehicles by up to 70%. This can contribute to the solution of the rapidly increasing global energy crisis caused by population growth [1]. Electrochromism is the phenomenon where the optical properties of the material, especially color or light transmittance, change due to the effect of an electric field [2].

In this study, the production of large-area thin film electrochromic devices was aimed. This electrochromic device will consist entirely of solid-state thin film layers. The use of liquid/gel electrolyte is more common in the electrochromic devices. However, the use of liquid/gel electrolyte can lead to problems over time due to issues such as evaporation and leakage.

When solid electrolyte is used, the aim is to develop a more durable and stable prototype of electrochromic device. Indium Tin Oxide (ITO) is the most preferred transparent conductive electrode in current electrochromic devices. The scarcity of Indium in nature and its high cost may limit its usage in future commercial devices. Therefore, in this study, Zinc Tin Oxide (ZTO)/Silver (Ag)/ ZTO has been used as an electrode. The reason for using Zinc Tin Oxide (ZTO) electrode instead of Indium Tin Oxide (ITO) electrode is to achieve better performance by providing lower surface resistance (<10 ohm/sqr) and higher light transmittance in the visible region [3,4]. Zinc Tin Oxide (ZTO), Tungsten Oxide (WO<sub>3</sub>), Tantalum Pentoxide (Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>), Nickel Oxide (NiO<sub>x</sub>), Aluminum (Al) films were grown using the large area magnetron sputtering method. The electrical, optical, and structural properties of all layers were investigated. Electrochemical measurements of the electrochromic layers WO<sub>3</sub> and NiO<sub>x</sub>, and ionic conductivity of the electrolyte layer Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, were conducted using an impedance analyzer. The obtained measurements will be provided along with their interpretations. The experimental results will be discussed and compared with literature.

This research was supported by The Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) with the TEYDEB project number 3192182. We would like to thank the Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH for experimental facilities.

### References

1. Glicksman, Leon R. "Energy efficiency in the built environment." *Physics Today* 61.7 (2008): 35-40.
2. Tabor, D. P., Roch, L. M., Saikin, S. K., Kreisbeck, C., Sheberla, D., Montoya, J. H., ... & Aspuru-Guzik, A. (2018). Accelerating the discovery of materials for clean energy in the era of smart automation. *Nature reviews materials*, 3(5), 5-20.
3. M. Ekmekcioglu, N. Erdogan, A.T. Astarlioglu, S. Yigen, G. Aygun, L. Ozyuzer, and M. Ozdemir, (2021). High transparent, low surface resistance ZTO/Ag/ZTO multilayer thin film electrodes on glass and polymer substrates. *Vacuum*, 187, 110100.
4. F. Turkoglu, H. Koseoglu, M. Ekmekcioglu, A. Cantas, M. Ozdemir, G. Aygun, and L. Ozyuzer. (2022). Development of ZTO/Ag/ZTO transparent electrodes for thin film solar cells. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 33(14). 10955-10964.



## Investigation of Electromagnetic Wave Shielding with Coated ZTO/Ag/ZTO Multilayer Thin Film Electrodes

Merve Ekmekçiöğlü<sup>1,2</sup>, Sanem Demirbaş<sup>1</sup>, Enver Deveci<sup>1,2</sup>, Cenkay Çelikli<sup>1,2</sup>, Sıla Akar<sup>1,2</sup>, Nursev Erdoğlan<sup>3</sup>, Taner Astarlıoğlu<sup>3</sup>, Gülnur Aygün<sup>1</sup>, Mehtap Özdemir<sup>1,2</sup>, Lütfi Özyüzer<sup>1,2</sup>

(1) Department of Physics, Izmir Institute of Technology, 35430, Urla, Izmir, Turkiye

(2) Teknoma Technological Materials Inc., IZTECH Campus, 35430, Urla, Izmir, Turkiye

(3) Turkish Aerospace Industries Inc., Advanced Material, Process and Energy Technology Center, 06980, Ankara, Turkiye

Utilized across various sectors such as military, aviation, telecommunications, medical devices, automotive, and electronics manufacturing, electromagnetic (EM) wave shielding aims to protect electronic devices from external influences, ensure signal integrity, and minimize EM interference. Many materials, such as flexible graphene sheets, metal nanowires, polymers, composites, and metal oxides (such as Transparent conductive oxide-TCO) in thin films, are employed to shield electronic devices [1].

TCO materials, such as indium tin oxide (ITO), zinc tin oxide (ZTO), aluminum zinc oxide (AZO), and fluorine doped tin oxide (FTO), are used as thin film electrodes [2]. Mainly, ITO electrodes are widely used in industrial applications as optically transparent and electrically conductive electrodes [3]. However, due to limited indium reserves, high costs, and inadequate electrode flexibility, ZTO thin film electrodes have been shown as the most promising candidate and have been extensively explored in recent years [4]. ZTO thin film electrodes offer many essential properties, such as high optical transparency, a broad bandwidth range, high refractive index, excellent photocatalytic activity, high dielectric transparency, outstanding photoconductivity, and photoluminescence. Furthermore, the deposition of Ag metal as an interlayer between two TCO electrodes has been comprehensively investigated to enhance electrical conductivity. Therefore, ZTO/Ag/ZTO multilayer thin film electrodes offer higher optical transmittance and lower surface resistance as an alternative to single-layer ITO thin film electrodes [5].

This study is related to deposition of ZTO/Ag/ZTO electrodes onto acrylic (Poly (methyl methacrylate)-PMMA) substrates using ZTO and Ag targets with a DC magnetron sputtering system. As a result, the crystal structure, morphological properties, stoichiometry, optical and physical properties of the produced thin film electrodes have been analyzed. The optical transmittance and sheet resistance results revealed that the  $Zn_2SnO_4/Ag/Zn_2SnO_4$  (ZAZ) multilayer thin film electrode achieves a low surface resistance of 8 ohm/square and an optical transmittance of 89.2% at 550 nm. As the most significant result, flexible multilayer ZAZ electrodes demonstrate exceptionally high performance in electromagnetic (EM) shielding, providing an impressive 35 dB reduction of electromagnetic radiation in range between 2 and 18 GHz. Our findings indicate that ZAZ multilayer thin film electrodes present promising attributes for EM shielding, offering enhanced optical transparency and reduced surface resistance compared to traditional single-layer ITO thin film electrodes.

**Acknowledgments.** This work was supported by TAI (Turkish Aerospace Industries) project number TM1001, KANITO. The authors would like to acknowledge the facilities of Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH.

### References

1. M. S. Saleem, M. B. Hanif, M. Gregor, M. Motola, A. F. Khan, "Nanostructured multi-layer  $MgF_2/ITO$  coatings prepared via e-beam evaporation for efficient electromagnetic interference shielding performance," *Applied Surface Science*, **596**, 153584 (2022).
2. F. Turkoglu, H. Koseoglu, M. Ekmekcioglu, A. Cantas, M. Ozdemir, G. Aygun, L. Ozyuzer, "Development of ZTO/Ag/ZTO transparent electrodes for thin film solar cells," *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, **33**(14), 10955-10964, (2022).
3. S. Ozbay, N. Erdogan, F. Erden, M. Ekmekcioglu, M. Ozdemir, G. Aygun, L. Ozyuzer, "Surface free energy analysis of ITO/Au/ITO multilayer thin films on polycarbonate substrate by apparent contact angle measurements," *Applied Surface Science*, **529**, 147111 (2020).
4. M. Ekmekcioglu, N. Erdogan, A. T. Astarlioglu, S. Yigen, G. Aygun, L. Ozyuzer, M. Ozdemir, "High transparent, low surface resistance ZTO/Ag/ZTO multilayer thin film electrodes on glass and polymer substrates," *Vacuum*, **187**, 110100 (2021).
5. S. Yigen, M. Ekmekcioglu, M. Ozdemir, G. Aygun, L. Ozyuzer, "Compact multilayer thin-film color filters and direct integration on white-light-emitting diodes for color conversion," *Applied Optics*, **60**, 8949-8955 (2021).

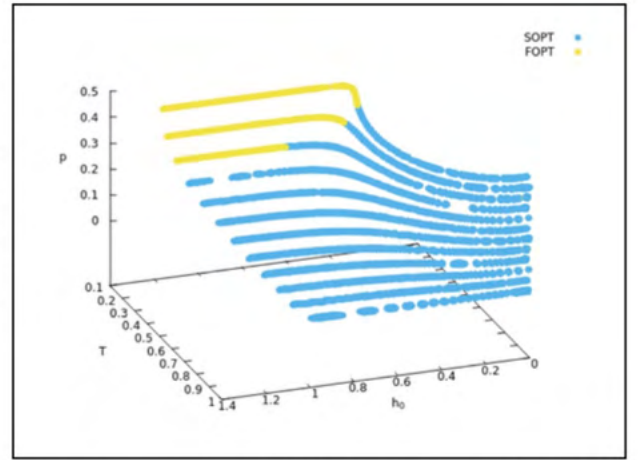
## Asimetrik Bimodal Olasılık Dağılımına Sahip Rastgele Alan Ising modelinin Denge dışı Özellikleri

Enes YILDIRIM, Gül GÜLPINAR

Dokuz Eylül Üniversitesi-Fizik Bölümü, 35390 İzmir

Saf spin modellerinin birçoğu safsızlıklar, eksik bağlar ve kusurlar içeren gerçek sistemlerin fiziksel özelliklerini açıklama kabiliyetleri sınırlıdır. Alan veya bağ parametrelerini rastgele dağılımlar ile örnekleyen düzensiz modeller, deneysel sonuçlar ile uyumlu sonuçlar elde etme kapasitesine sahiptir. Rastgele alan Ising modeli, bunlar arasında en basit ve sık kullanılan model olmayı sürdürmektedir [1]. Bu çalışmada kapsamında dış manyetik alanın  $P(h_i) = p\delta(h_i - h_0) + q\delta(h_i + \lambda * h_0)$  olasılık dağılımı ile örneklendiği özel durumu ele aldık. Burada  $p$  ve  $q$ ,  $i$ . sitenin iki farklı genliğe sahip manyetik alana maruz kalma olasılıkları,  $h_i$  rastgele alan,  $h_0$  alan şiddeti son olarak  $\lambda$  ise rekabet parametresini temsil eder.

Landau kuramından yararlanılarak denge faz eğrileri çizildi [2]. Şekil.1'de sabit asimetrik olasılık değerlerine karşılık gelen sıcaklık ve dış alan için faz eğrileri,  $\lambda = 1$  için elde edilmiştir. Çalışma kapsamında rekabet parametresinin etkisi de incelenmiştir. Asimetrik bimodal rastgele manyetik alan Ising sisteminin manyetik durulması, istatistiksel denge ve Onsager tersinmez termodinamik kuramlarını birleştiren bir yöntemle incelendi. Durulma zamanlarının kritik ve üçlü kritik noktalar yakınındaki sıcaklık davranışları kritik yavaşlama ile karakterize ıraksamalar sergilemektedir. Birinci dereceden geçişlerde ise sonlu atlamalar gözlemlenmiştir.



**Şekil 1.** Asimetrik  $p$  dağılımları için elde edilen indirgenmiş sıcaklık ( $kT/Jz$ ) ve dış alan ( $h_0/Jz$ ) değişimlerinin, birinci ve ikinci dereceden faz geçişlerini ifade edecek şekilde sınıflandırılarak elde edilmiş faz eğrileridir. Sarı noktalar 1. derece geçişleri (FOPT) temsil ederken mavi noktalar 2. derece (SOPT) faz geçişlerini temsil etmektedir.

### Kaynakça

1. A. Aharony, "Tricritical points in systems with random fields" Physical Review B **18**, 3318 (1978).
2. I. A. Hadjiagapiou, "In The random field Ising model with an asymmetric and anisotropic bimodal probability distribution ", Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. **389** 3945 (2010).



## The Growth and Characterization of Multilayer ZTO/Ag/ZTO (ZAZ) Thin Films by Large Area Magnetron Sputtering

Cenkay Çelikli<sup>1,2</sup>, Sıla Akar<sup>1,2</sup>, Sinan Eroğlu<sup>1</sup>, Nesrin Yakar<sup>1</sup>, Seda Açar<sup>3</sup>, Yiğitalp Okumuş<sup>3</sup>, Nursev Erdoğan<sup>3</sup>, Lutfi Özyüzer<sup>1,2</sup>, Mehtap Özdemir<sup>1,2</sup>

(1) Physics Department, İzmir Institute of Technology, Urla, 35430, İzmir, Türkiye

(2) Teknoma Technological Materials Industrial and Trading Inc., IZTECH Campus, Urla, 35430, Izmir, Turkey

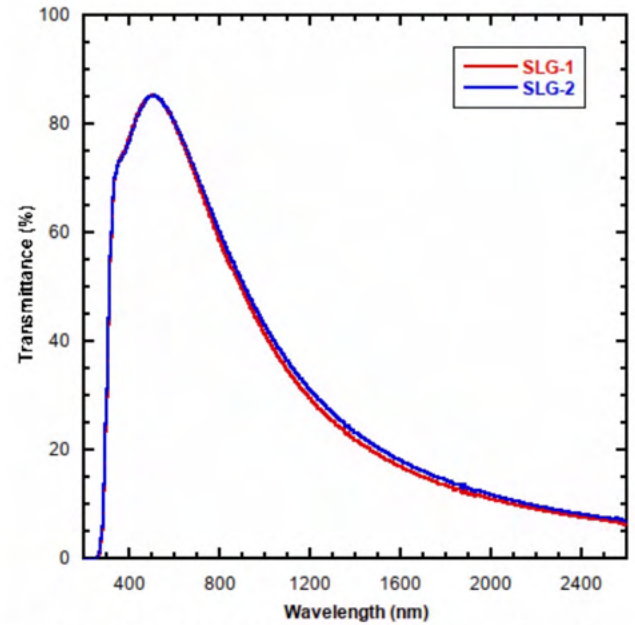
(3) Turkish Aerospace Industries Inc., 06980, Ankara, Türkiye

For the last 50 years, Transparent Conductive Oxides (TCOs) have been frequently used because of their unique properties, namely they transmit light and able to conduct electricity. Among the TCOs, ITO is considered to be the best for such purposes in most areas. However, Indium element is quite expensive due to its rarity and scarcity. That is why a ZTO based TCO may be a good alternative for ITO. It has similar properties when compared to ITO, and it is immensely easier to synthesize a ZTO based target. Its deposition can be done by using Magnetron Sputtering technique. Due to these qualifications, ZTO is used much more commonly in mass production than ITO. In this project, three layers are deposited on a Soda Lime Glass (SLG) substrate, namely ZTO/Silver (Ag)/ZTO in order. This structure is grown, and later its characterization is conducted.

**Table 1:** Data table of sample T-185

Sample Name	Optical Transmittance at 550nm (%)	Thickness (nm)	Surface Resistance ( $\Omega/\square$ )
SLG-1	83.85	66	8.24
SLG-2	83.91	73	7.75

Produced multilayer thin films are characterized by inspecting their structural, optical, and electrical properties. These thin films, that are grown using DC Magnetron Sputtering, show high optical transmittance and low surface resistance, which means the thin film acts as a conductive surface. In conclusion, it was detected that multilayer ZAZ thin films grown by DC Magnetron Sputtering exhibit high optical transmittance and low resistance.



**Figure 1:** Optical Transmittance values of sample T-185 between wavelengths of 200-2600 nm

### Acknowledgment

This research was supported by Turkish Aerospace Industries with TM1001 project.

We would like to thank the Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH for experimental facilities.

### References

1. F. Turkoglu, H. Koseoglu, M. Ekmekcioglu, A. Cantas, Ozdemir, M., G. Aygun, & L. Ozyuzer. (2022). Development of ZTO/Ag/ZTO transparent electrodes for thin film solar cells. *Journal of Materials Science. Materials in Electronics*, 33(14), 10955–10964.
2. Bozkurt, H., Merve Ekmekcioglu, Ozdemir, M., Gulnur Aygun, Lutfi Ozyuzer, & Canan Varlikli. (2021). Electroluminescence Properties and Stability of Super Yellow on ZAZ and ITO Anodes. *2021 5th International Symposium on Multidisciplinary Studies and Innovative Technologies (ISMSIT)*.



## Low Temperature Grown LiCoO<sub>2</sub> (LCO) Thin Film Cathodes in All-Solid-State Lithium-Ion Batteries by RF Magnetron Sputtering

**Polatkan Ozcan<sup>1,\*</sup>, Nazlican Esen<sup>1</sup>, Ugur Unal<sup>2</sup>, Ayten Cantas<sup>3</sup>, Lutfi Ozyuzer<sup>1,4</sup>, Mehtap Ozdemir<sup>4</sup>, Gulnur Aygun<sup>1</sup>**

(1) Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, Türkiye

(2) Department of Chemistry, KOC University, 34450, Istanbul, Türkiye,

(3) Department of Electric and Energy, Pamukkale University, 20160, Denizli, Türkiye

(4) TEKNOMA Technological Materials Inc., IZTECH Campus, Urla, 35430, Izmir, Türkiye

\* polatkanozcan@iyte.edu.tr

According to 2022 International Energy Agency report, global energy consumption is expected to reach 250 British Thermal Units (BTU) by 2050 due to the increasing use of electronic devices. To meet this energy demand, all solid-state lithium ion batteries developed using LCO, offer advantages such as safety and longevity. This study aims to facilitate the production of LCO by growing on titanium coated soda-lime glass (SLG) using RF magnetron sputtering method and achieving it at low temperatures, i.e. below 500 °C.

With the global increase in energy demand, according to the International Energy Agency (IEA) 2022 report, use of electronic devices such as phones, tablets, wearable electronics, laptops, and electrical vehicles will lead to a worldwide energy consumption reaching 250 BTU by 2050, this rate will approach the level of liquid fuel consumption [1]. Lithium-ion battery technology, which was mass-produced by Sony in 1991, has gathered significant interest due to its higher energy density and greater safety compared to Ni/Cd and Ni/MH batteries [2]. On the other hand, liquid electrolytes in lithium-ion batteries carry risks of leakage, burning, and explosion. To solve these problems, all solid-state lithium batteries (ASSLB) with non-flammable electrolytes with features that minimize dendrite formation are emerging as an important alternative. These batteries offer high gravimetric energy density, flexible and lightweight design, long cycle life, and particularly safety advantages [2]. In this study, LCO, which has drawn attention due to its high voltage applications, is considered as an important commercial cathode material. LCO has a theoretical specific capacity of 274 mAh/g and an actual specific capacity of 180 mAh/g with an operating voltage of about 4.6 V [3]. In this study, LCO thin films were grown onto titanium coated SLG substrates via RF magnetron

sputtering. The thickness of the coated films were 400 nm and they were in-situ annealed at various temperatures to achieve (104) XRD orientation. This is the required orientation to intercalate and deintercalate lithium ions [3]. The crystallisation and surface morphology of the films were thoroughly analyzed using several advanced techniques, including Scanning Electron Microscopy (SEM), Energy Dispersive X-Ray Analysis (EDX), X-Ray Diffraction (XRD), Raman Spectroscopy, X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) and Electrochemical Analysis. It is proved that through careful optimisation of crystal orientation, we have significantly enhanced the electrochemical performance of LCO thin films.

This study not only highlights the potential usage of LCO in ASSLBs but also demonstrates the positive effects of crystal orientation on the electrochemical performance, offering pathways for the improvements in battery design.

*This research was supported by The Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) with the project number 221M100. The authors would like to acknowledge the facilities of Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH.*

### References

1. IEA (2022), World Energy Outlook 2022, IEA, Paris <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2022>, Licence: CC BY 4.0 (report); CC BY NC SA 4.0 (Annex A).
2. Fang, J., Du, Y., Li, Z., Fan, W., Ren, H., Yi, H., Zhao, Q., ve Pan, F. 2024. "Surface Structures and Properties of High-Voltage LiCoO<sub>2</sub>: Reviews and Prospects."
3. Lin, J. Li, Z.-W. Yin, W. Huang, Q. Zhao, Q. Weng, Q. Liu, J. Sun, G. Chen, F. Pan, Structural Understanding for High-Voltage Stabilization of Lithium Cobalt Oxide. *Adv. Mater.* 2024, 36, 2307404
4. Ozbay, S., Erdogan, N., Erden, F., Ekmekcioglu, M., Ozdemir, M., Aygun, G., & Ozyuzer, L. (2020). Surface free energy analysis of ITO/Au/ITO multilayer thin films on polycarbonate substrate by apparent contact angle measurements. *Applied Surface Science*, 529, 147111.



## Large-Area LCO Thin Grown Films via Magnetron Sputtering

**Polatkan Ozcan<sup>1,\*</sup>, Nazlican Esen<sup>1</sup>, Gulnur Aygun<sup>1</sup>, Ugur Unal<sup>2</sup>, Ayten Cantas<sup>3</sup>, Lutfi Ozyuzer<sup>1,4</sup>, Mehtap Ozdemir<sup>4</sup>**

(1) Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, Türkiye

(2) Department of Chemistry, KOC University, 34450, Istanbul, Türkiye

(3) Department of Electric and Energy, Pamukkale University, 20160, Denizli, Türkiye

(4) TEKNOMA Technological Materials Inc., IZTECH Campus, Urla, 35430, Izmir, Türkiye

\*polatkanozcan@iyte.edu.tr

This study explores the deposition of lithium cobalt oxide (LCO) large area thin films via magnetron sputtering, optimized by eccentric substrate motion to enhance film uniformity on large area titanium-coated glass substrates. Advanced characterization techniques, including SEM, EDX, XRD, Raman, XPS, and electrochemical cyclic voltammetry, were employed to assess the structural, morphological, and electrochemical properties of the films. Insights gained from these analyses aim to refine fabrication processes and boost the performance of LCO based lithium-ion batteries.

The development of efficient lithium-ion battery components is crucial for enhancing the performance and sustainability of modern energy storage systems. Lithium cobalt oxide (LCO) thin films, known for their superior cathodic properties, are at the forefront of this technological advancement [1–3]. This study presents a novel methodology for the deposition of large-area LCO thin films using magnetron sputtering, a technique renowned for its ability to achieve high-quality films under high vacuum conditions with remarkable uniformity [4]. The process began with the precise design and manufacturing of a specialized vacuum chamber, detailed through CAD modeling in SolidWorks. 2-inch sputtering target was utilized, and film deposition was optimized by implementing an eccentric substrate movement technique on titanium-coated soda-lime glass substrates. This approach was designed to enhance film uniformity across large substrate areas.

To evaluate the structural, morphological, and electrochemical properties of the LCO films, a comprehensive analysis was conducted using several

advanced characterization techniques. These include Scanning Electron Microscopy (SEM) for surface morphology, Energy Dispersive X-ray Spectroscopy (EDX) for elemental composition, X-ray Diffraction (XRD) for crystallographic structure, Raman Spectroscopy for molecular interactions, X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) for chemical structure and Electrochemical Cyclic Voltammetry for electrochemical properties. The outcomes of these analyses are expected to provide deep insights into the microstructural features, chemical composition, and electrochemical behavior of the LCO thin films, thereby contributing to the optimization of fabrication processes and enhancing the performance of lithium-ion batteries.

*This research was supported by The Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) with the project number 122N516 under MERANET program. The authors would like to acknowledge the facilities of Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH.*

### References

1. Zhang, S., Qi, M., Guo, S., Sun, S., Wu, T., Zhang, H., Lu, S., Meng, F., Zhang, Q., Gu, L., Zhao, Z., Peng, Z., Jin, H., Ji, H., Lu, Y., Chan, T., Duan, R. and Cao, A., 2023. "Surface engineering of LiCoO<sub>2</sub> by a multifunctional nanoshell for stable 4.6V electrochemical performance, Energy Storage Materials". Volume 57, 289-298.
2. Li, Z., Yi, H., Ren, H., Fang, J., Du, Y., Zhao, W., Chen, H., Zhao, Q. and Pan, F. (2023). Multiple Surface Optimizations for a Highly Durable LiCoO<sub>2</sub> beyond 4.6 V. *Advanced Functional Materials*, 33(46), 2307913.
3. Yurttas, B., Maral, M., Erdem, A., & Ozyuzer, L. (2022). Development of single-use thin film electrodes based on Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> on In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: SnO<sub>2</sub> substrates with their biosensing applications. *Materials Today Communications*, 33, 104906.
4. Ozbay, S., Erdogan, N., Erden, F., Ekmekcioglu, M., Ozdemir, M., Aygun, G., & Ozyuzer, L. (2020). Surface free energy analysis of ITO/Au/ITO multilayer thin films on polycarbonate substrate by apparent contact angle measurements. *Applied Surface Science*, 529, 147111.



## Fabrication and Characterization of $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ (LLZO) Thin Films for All Solid-State Lithium Ion Battery Applications

**Nazlıcan Esen<sup>1,\*</sup>, Polatkan Ozcan<sup>1</sup>, Evren Ataman<sup>1</sup>, Ayten Cantas<sup>3</sup>, Lutfi Ozyuzer<sup>1,2</sup>, Mehtap Ozdemir<sup>1,2</sup>, Gulnur Aygun<sup>1</sup>**

(1) Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, Türkiye

(2) Teknoma Technological Material Inc., Iztech Campus, Urla, 35430, Izmir, Türkiye

(3) Department of Electric and Energy, Pamukkale University, Denizli, Türkiye

\*nazlicanesen@iyte.edu.tr

This study explores the fabrication and analysis of LLZO thin films for enhanced safety and efficiency in all solid-state batteries. We produced LLZO target via solid-state reaction for RF magnetron sputtering deposition. The characterisation techniques such as SEM, EDX, XRD, Raman, XPS, and Electrical Impedance Spectroscopy are employed to assess the films' properties. The findings highlight LLZO's promise as a good alternative to traditional battery technologies.

The evolution of electronic devices and the escalating demand for sustainable energy solutions have spotlighted the need for efficient energy storage. All solid-state lithium-ion batteries (ASSLIBs) emerge as a leading next-generation technology, offering high energy density and superior safety compared to conventional lithium-ion batteries (LIBs) [1]. Among various solid electrolytes, garnet-type materials, particularly  $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$  (LLZO), have garnered attention due to their high ionic conductivity and stability [2], [3]. This study highlights the potential of LLZO-based batteries to deliver high energy and safety levels in comparison to LIBs. We also address cost and sustainability aspects by exploring lifecycle assessments and proposing eco-friendly alternatives. Unlike liquid electrolytes, solid electrolytes prevent leakage and reduce flammability risks. LLZO, a promising solid garnet electrolyte, exemplifies these advantages with its robust mechanical properties and chemical stability.

LLZO is typically synthesized via solid-state reaction, a process involving the mixing of precursor powders, calcination, and subsequent sintering to achieve the desired crystalline structure and this method is favoured for its straightforwardness and effectiveness in producing high-quality materials [1]

In this study, we address the challenge of sourcing commercially unavailable LLZO targets by procuring necessary materials and producing LLZO targets in our laboratory. These targets are then used to deposit thin films via RF magnetron sputtering. We conduct comprehensive analyses using Scanning Electron Microscopy (SEM), Energy-Dispersive X-ray Spectroscopy (EDX), X-ray Diffraction (XRD), Raman spectroscopy, detailed X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS), and Electrical Impedance Spectroscopy to characterize the morphological, compositional, structural, electrical and electrochemical properties of LLZO thin films.

This study confirms the effectiveness of LLZO synthesized via solid-state reaction for use in safer, high-performance ASSLIBs, with detailed characterization underscoring its robust properties and potential in sustainable energy storage.

*This research was supported by The Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) with project number 122N410 under MERANET program.*

*The authors would like to acknowledge the facilities of Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH.*

### References

1. Ramakumar, S., Deviannapoorani, C., Dhivya, L. Lakshmi S. S. and Murugan, R. 2017. "Lithium garnets: Synthesis, structure, Li<sup>+</sup> conductivity, Li<sup>+</sup> dynamics and applications". *Progress in Material Science*, 88, 325-411.
2. Ulusoy, S., Gulen, S., Aygun, G., Ozyuzer, L., & Ozdemir, M. (2018). Characterization of thin film  $\text{Li}_0.5\text{La}_0.5\text{Ti}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$  electrolyte for all-solid-state Li-ion batteries. *Solid State Ionics*, 324, 226-232.
3. Ghorbanzade, P., Pesce, A., Gómez, K., Accardo, G., Devaraj, S., López-Aranguren, P., & del Amo, J. M. L. (2023). Impact of thermal treatment on the Li-ion transport, interfacial properties, and composite preparation of LLZO garnets for solid-state electrolytes. *Journal of Materials Chemistry A*, 11(22), 11675-11683.



## İki Boyutlu Van der Waals Manyetik Yapılardan Tek Katmanlı $Cr_xGd_{1-x}Cl_3$ ve $Cr_xEu_{1-x}Cl_3$ Stokiyometrisine Sahip $x=0.25, 0.50, 0.75$ Değerlerinde Elde Edilen Yapıların Elektronik ve Manyetik Özelliklerinin İncelenmesi

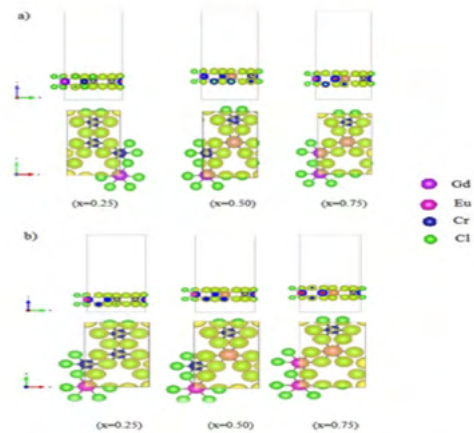
Nurcan KUTLUK KALKAN<sup>1,\*</sup>, Ethem AKTÜRK<sup>1,\*\*</sup>

<sup>1</sup>Aydın Adnan Menderes Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Aydın 09010, Türkiye.

Email: [nurcankutluk@yahoo.com](mailto:nurcankutluk@yahoo.com)<sup>\*</sup>, [ethem.akturk@adu.edu.tr](mailto:ethem.akturk@adu.edu.tr)<sup>\*\*</sup>

Hızla değişen, gelişen ve enerji ihtiyacının arttığı dünyada, elektronik alanında daha küçük boyutlarda, daha az enerji tüketen, daha hızlı ve birçok fonksiyonu içinde barındıran cihaz tasarımlarına olan ihtiyacı arttırmıştır. Böylelikle elektroniğe alternatif olabilecek Spintronik alanı gündeme gelmiş ve bu alanda ihtiyaçlara cevap verecek malzeme tasarımları hız kazanmıştır. Çalışmamızda iki boyutlu van der waals manyetik hibrit yapı olarak tasarladığımız  $Cr_xGd_{1-x}Cl_3$  ve  $Cr_xEu_{1-x}Cl_3$  stokiyometrisine sahip  $x=0.25, 0.50, 0.75$  değerlerindeki yapıların elektronik ve manyetik özelliklerini inceledik.

Spintronik alanında elektron spininden yola çıkarak, spin akımı elde edilebilecek özelliklere sahip yapıların elde edilmesinin belli zorlukları mevcuttur. Bu alanda kullanılabilir malzemelerde, yüksek manyetik anizotropi, oda sıcaklığının üzerinde bir kritik sıcaklık değeri vb. zorlukları aşabilecek yapısal özellikleri sunabilecek malzeme tasarımında iki boyutlu van der waals manyetik hibrit yapıların birçok çalışmayla avantaj sağladığı belirtilmiştir. [1,2,3] Spintronik alanında mevcut zorlukları aşabilecek özelliklere sahip yapılar elde edebilmek üzere yapılan çalışmada iki boyutlu tek tabakalı van der waals manyetik hibrit yapı olarak tasarlanan  $Cr_xGd_{1-x}Cl_3$  ve  $Cr_xEu_{1-x}Cl_3$  stokiyometrisine sahip  $x=0.25, 0.50, 0.75$  değerlerinde elde edilen yapıların elektronik ve manyetik özellikleri incelenmiştir. Manyetik yapıları daha iyi tanımladığı birçok çalışma ile belirtilen [4,5,6] Hubbard etkisini hesaplamalarımıza dahil etmek için Cr, Gd ve Eu atomlarına ait Hubbard etki (U) değerleri sırasıyla  $U=3.733, 2.999$  ve  $8.875$  eV olarak hesaplanmış, SOC etkisi ile birlikte tüm hesaplamalara dahil edilmiştir. Yapılara 1 FM ve 3 AFM spin yönelimi verilerek,  $Cr_xGd_{1-x}Cl_3$  stokiyometrisindeki yapıların sırasıyla, Stripy-AFM, Zigzag-AFM ve Neel AFM spin yönelimlerini ve  $Cr_xEu_{1-x}Cl_3$  stokiyometrisine sahip yapılarında FM, FM ve Zigzag-AFM spin yönelimlerini tercih ettiği görülmüştür. Elde edilen yapıların, elektronik bant yapıları incelendiğinde dolaylı bir bant aralığına sahip oldukları ve yarıiletken malzeme özelliği gösterdiği görülmüştür.



**Şekil 1:** a)  $Cr_xGd_{1-x}Cl_3$  ve b)  $Cr_xEu_{1-x}Cl_3$  stokiyometrisinde  $x=0.25, 0.50, 0.75$  değerlerine sahip yapılarıdaki atomlar arası yük geçişleri

Yapılara ait yük analizleri yapıldığında Cr, Gd ve Eu atomlarından Cl atomlarına yük geçişi olduğu teorik ve görsel olarak belirlenmiştir. Yapılara ait manyetik anizotropi enerjileri belirlenmiş olup, Tablo 1’de sunulmuştur.

**Tablo 1:**  $Cr_xGd_{1-x}Cl_3$  ve  $Cr_xEu_{1-x}Cl_3$  stokiyometrisinde  $x=0.25, 0.50, 0.75$  değerlerine sahip yapıların Manyetik Anizotropi değerleri

	$E_{MAE}$ (meV)					
	$Cr_xGd_{1-x}Cl_3$			$Cr_xEu_{1-x}Cl_3$		
[ukl]	0.25	0.50	0.75	0.25	0.50	0.75
[010]	1277	167	267	303	815	991
[100]	855	90	133	232	661	706
[110]	977	111	172	253	705	788
[111]	507	75	117	127	352	414

Yarıiletken yapıların, yüksek manyetik anizotropi enerjilerine sahip olduğu ve spintronik uygulamalarında kullanılabilir malzemeler içinde umut verici niteliklere sahip olduğu görülmüştür.



### Kaynakça

1. JF Sierra, J Fabian, RK Kawakami, S Roche, “Van der Waals heterostructures for spintronics and opto-spintronics”, *Nature Nanotechnology* volume 16, 856–868 (2021)
2. KS Burch, D Mandrus, JG Park, “Magnetism in two-dimensional van der Waals materials”, *Nature* volume 563, 47–52 (2018)
3. Yu Zhang , Hongjun Xu , Jiafeng Feng , Hao Wu , Guoqiang Yu and Xiufeng Han , "Magnetic two-dimensional van der Waals materials for spintronic devices", *Chinese Physics B*, Volume 30, Number 11(2021)
4. M. R. Ashwin Kishore, H. Okamoto , Lokanath Patra , R. Vidya , Anja O. Sjøstad , H. Fjellvåg and P. Ravindran, “Theoretical and experimental investigation on structural, electronic and magnetic properties of layered  $Mn_5O_8$ ”, *Chem. Phys.*, 18, 27885-27896 (2016)
5. Artur P. Durajski , Anita E. Auguscik , Radosław Szczęśniak , “Tunable electronic and magnetic properties of substitutionally doped graphene”, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 119, 113985(2020)
6. Subrata Das , M.D.I. Bhuyan , M.A. Basith, “First-principles calculation of the electronic and optical properties of  $Gd_2FeCrO_6$  double perovskite: Effect of Hubbard U parameter”, *Journal of Materials Research and Technology* Volume 13, 2408-2418,( 2021)

**Teşekkür:** Bu çalışmada yer alan tüm nümerik hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama merkezinde (Truba kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir. Bu çalışma Aydın Adnan Menderes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinasyonu Birimince FEF-21032 numaralı proje ile desteklenmiştir.

THz Modulation of VO<sub>2</sub>-Based Metamaterials**Bora Akyurek<sup>1</sup>, Yasemin Demirhan<sup>1,2</sup>, Lutfi OZYUZER<sup>1,3</sup>, Gulnur AYGUN<sup>1</sup>**<sup>1</sup>Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, Turkey.<sup>2</sup>Center for Materials Research, Integrated Research Centers, IZTECH, Urla, 35430, Izmir, Turkey.<sup>3</sup>Teknoma Technological Materials Inc., IZTECH Campus, Urla, 35430, Izmir, Turkey.

Digital Coding Metasurfaces (DCMS) offer a simpler and more effective approach than traditional Metasurfaces (MS) for various functionalities, particularly in the Terahertz (THz) range. Their simple unit cell design improves fabrication accuracy and scalability. The real innovation lies in the soft-coded DCMS, which allows full reconfigurability during operation. This advancement requires physical tuning or switching processes. In this work, vanadium dioxide (VO<sub>2</sub>) has been used as a tunable material as metasurface. This 1-bit encoded VO<sub>2</sub>-based tunable metasurface was designed, fabricated and tested in the frequency range of 0.50 to 0.75 THz. The DCMS demonstrated switchable beamsplitter functionality by changing the striped and checkerboard patterns of the surface to transition from beamsplitting to full reflection under thermal excitation. Measurements of the far-field patterns showed excellent agreement with simulation results, confirming the effectiveness of the proposed approach. This research marks a significant step forward in the development of tunable metasurfaces, with potential applications in various fields including communications, sensing and imaging.

In this work, a tunable coding beam splitter MM was designed as two distinct coding patterns checkerboard and stripe. They were fabricated by using several processes [1] and measured in the frequency range of 0.50 to 0.75 THz (Fig. 1 and Table 1). Strip and checkerboard patterns change the angle of reflection of the first waves depending on their pattern width and periodicity [2]. VO<sub>2</sub> has been used as a tunable material in a beam splitter metasurface [3].

Table 1. *Metasurface patterns and their layers*

Metasurface pattern	Unit cell	Layer
Stripe	0-bit	Au patch
	1/0 bit	VO <sub>2</sub>
	Substrate	Sapphire
	Spacer	PET
Checkerboard	0-bit	Au patch
	1/0bit	VO <sub>2</sub>
		Au patch
	Substrate	Sapphire
	Spacer	PET

**References**

1. H. Yuce, H. Alaboz, Y. Demirhan, M. Ozdemir, L. Ozyuzer, and G. Aygun, "Investigation of electron beam lithography effects on metal–insulator transition behavior of vanadium dioxide," *Physica Scripta*, vol. 92, no. 11, pp. 114007-114007, 2017.
2. A. Noori, B. Akyurek, Y. Demirhan, L. Ozyuzer, K. Guven, H. Altan, and G. Aygun, "Terahertz wavefront engineering using a hard-coded metasurface," *Optical and Quantum Electronics*, vol. 55, no. 8, 2023.
3. H. Alaboz, "Magnetron sputter grown metal doped vanadium oxide thin films for terahertz bolometers," 2018.

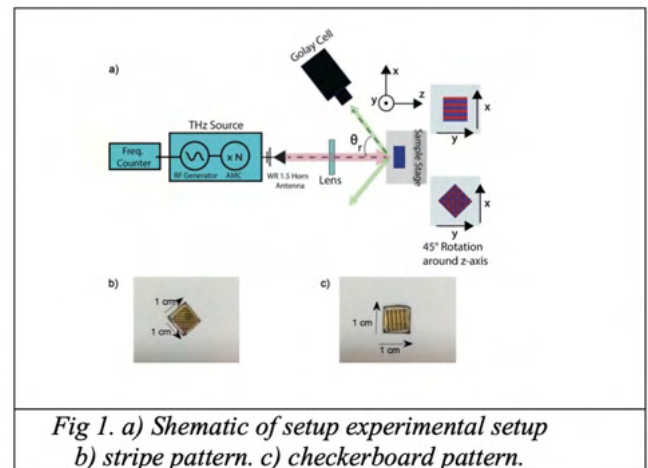


Fig 1. a) Schematic of setup experimental setup b) stripe pattern. c) checkerboard pattern.

The conductivity of the VO<sub>2</sub> was modified using a CW 915 nm laser beam to check the performance of the tunable layer. The tunability measurement results show that using a small amount of laser power significantly reduces the scattering pattern of the samples. The results were also investigated using the MATLAB scattering patterns. As reconfigurable MM, the manufactured samples have the potential to be used in THz communications systems.

This research was supported by The Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) with the project number of 119R038. We would like to thank the Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH for experimental facilities.



## Fluorine Effect During Electrical Characterization of VO<sub>2</sub> Thin Film Grown by Magnetron Sputtering

**Bora AKYUREK<sup>1</sup>, Yasemin DEMIRHAN<sup>1,2</sup>, Evren ATAMAN<sup>1</sup>, Ayten CANTAS<sup>3</sup>, Lutfi OZYUZER<sup>1,4</sup>, Gulnur AYGUN<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Department of Physics, Izmir Institute of Technology, 35430 Urla, Izmir, Türkiye

<sup>2</sup>Center for Materials Research, Integrated Research Centers, IZTECH, Urla, 35430, Izmir, Türkiye

<sup>3</sup>Department of Electric and Energy, Pamukkale University, 20160, Denizli, Türkiye

<sup>4</sup>TEKNOMA Technological Materials Inc., IZTECH Campus, Urla, 35430, Izmir, Türkiye

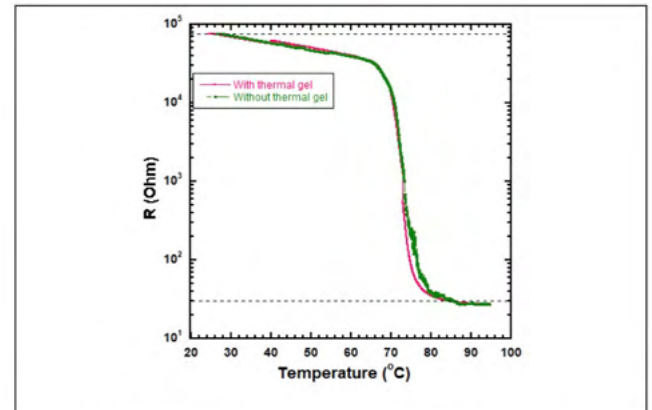
This study is focused on evaluating the effects of fluorine realized as a result of electrical measurements with thermal gel identified by X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) analysis. VO<sub>2</sub> thin films were grown under high vacuum by magnetron sputtering. Despite the presence of fluorine, detailed analyses using SEM, EDX, and XRD techniques revealed no observable changes in the morphological, elemental composition or crystal structure of the films. Moreover, Raman spectroscopy results also show coherence with these findings by confirming that the characteristic vibrational modes of VO<sub>2</sub> remained unchanged in the presence of fluorine. Additionally, thermal gel-assisted resistivity temperature measurements indicated the impact of fluorine contamination on the metal insulator transition between the insulating and metallic phases of VO<sub>2</sub> thin films. Even though the fluorine is not detected by the techniques named here, it is detectable on the surface of grown VO<sub>2</sub> thin films by means of a more detailed characterisation technique of XPS spectra. Consequently, our results indicate that fluorine introduced during the electrical measurement does not affect integrity or functionality of VO<sub>2</sub> thin films, reinforcing their potential usage for a wide range of practical applications.

VO<sub>2</sub> thin films grown by using magnetron sputtering undergo a transition from the insulating phase to the metallic phase around 68 °C, when heated from room temperature to 100 °C [1]. This phase transition makes them useful in various applications such as smart windows, electronic switches, THz modulators [2].

During electrical measurements aimed at determining the temperature-dependent metal-insulator transition, thermal gel is used to ensure better adhesion of the thin film to the substrate and improved temperature transitions (Fig. 1). XPS measurement results indicate that thermal gel used during electrical characterization leads to the fluorine realization on the surface of thin VO<sub>2</sub> film under high vacuum conditions inside of the probe station. This study investigates the fluorine addition during electrical characterisation of the thin film surface.

VO<sub>2</sub> thin films were characterized through X-ray Diffraction (XRD), Raman spectroscopy, and X-Ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) analyses. XRD analysis revealed the characteristic peaks at 37°, 39.5°, and 43.3° consistent with literature values indicating preserved crystal structure regardless of the presence of thermal gel during measurements [3]. Raman spectroscopy exhibited prominent peaks at 313 cm<sup>-1</sup>, 392 cm<sup>-1</sup>, 502 cm<sup>-1</sup>, and 617 cm<sup>-1</sup>, reaffirming the stability of vibration modes in VO<sub>2</sub> thin films despite

fluorine addition. Even though SEM, EDS, and XRD analysis showed no discernible alterations in surface morphology, elemental composition, or crystal structure, XPS analysis identified the fluorine on the film's surface.



*Fig 1. Resistivity measurement VO<sub>2</sub> thin films by using with thermal gel and without thermal gel.*

This research was supported by The Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) with project number 119R038. We would like to thank the Research and Application Center for Quantum Technologies (RACQUT) of IZTECH.

### References

1. H. Yuce, (2015). Characterization of Vanadium Oxide thin films grown by magnetron sputtering technique. Master's thesis, Izmir Institute of Technology.
2. A. Noori, B. Akyurek, Y. Demirhan, L. Ozyuzer, K. Guven, H. Altan, and G. Aygun, "Terahertz wavefront engineering using a hard-coded metasurface," *Optical and Quantum Electronics*, vol. 55, no. 8, 2023.
3. H. Kim, N. Charipar, M. Osofsky, S. B. Qadri, A. Piqué "Optimization of the Semiconductor-Metal Transition in VO<sub>2</sub> Epitaxial Thin Films as a Function of Oxygen Growth Pressure." *Applied Physics Letters*, 104, 081913, 2014.



## Üçgen Grafen Parçalarının Kümelerinde Manyetik Özellikler

**Bora Akyürek<sup>1</sup> ve R. Tuğrul Senger<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430 Urla, İzmir

<sup>2</sup> İzmir Ekonomi Üniversitesi, Fizik Bölümü, 35330 Balçova, İzmir

Zigzag kenarlı üçgen grafen parçaları yüksek manyetik moment taşırlar [1]. Sadece karbon elementi içeren bu yapılardaki mıknatıslanmanın mekanizması konvansiyonel ferromanyetik malzemelerden farklıdır.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (YFT) hesaplarına göre  $C_{n^2+4n+1}$  yapısındaki zigzag kenarlı üçgen grafen parçasının  $4(n-1)\mu_B$  büyüklüğünde manyetik momenti vardır. Yapının daha kararlı olmasını sağlamak için bu molekül kenardan hidrojen ile doyurulduğunda, “[n]triangulene” olarak da anılan  $C_{n^2+4n+1}H_{3n+3}$  molekülünün manyetik momenti  $(n-1)\mu_B$  olmaktadır [2]. Bu molekül ailesinden  $C_{22}H_{12}$  2017 yılında sentezlenmiştir [3].

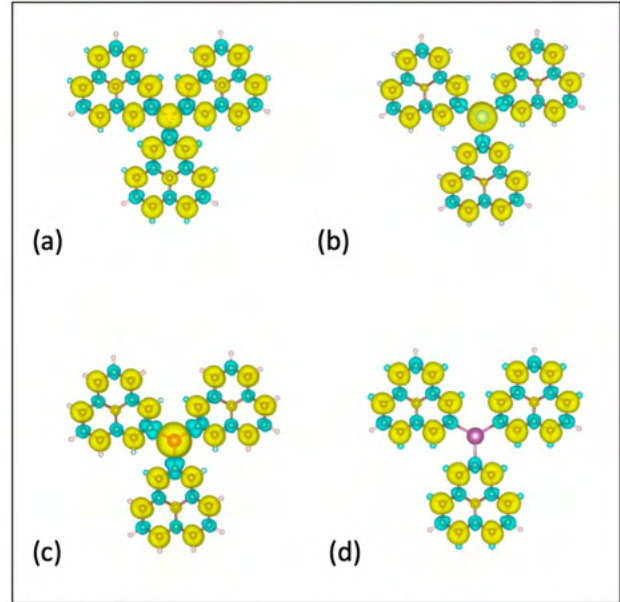
Bu çalışmanın amacı, taban durumu manyetik olan grafen üçgen parçalarını yapıtaşları olarak daha büyük manyetik moleküller veya periyodik yapılar tasarlamak ve elektronik özelliklerini incelemektir.

Tasarlanan moleküllerde toplam enerji hesapları, geometrik yapı optimizasyonu ve spin kutuplu yük yoğunluğu dağılımlarını elde etmek için YFT'ye dayanan yöntemler kullanıldı. Hesaplamalar Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) programı kullanılarak gerçekleştirildi.

İlk olarak, üç adet “[2] triangulene” molekülünün merkezi bir atom etrafında düzlemsel olarak birleştiren yapılar ele alındı. Bağlaç atom olarak C, Ti, V ve Sc atomları denendi. Şekil 1 ve Tablo 1’de bu yapıların YFT hesaplarının sonuçları verilmektedir. Yapıların taban durumu ferromanyetiktir. Merkezi atomun çeşidi yapının mıknatıslanma özelliklerini etkilemiştir. Merkez atomlar üzerinde de, Sc hariç, manyetik moment gözlenmiştir. Toplam manyetik momentler  $3\mu_B$  ve üzerindedir.

### Kaynakça

1. E. H. Lieb, “Two theorems on Hubbard model” Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989)
2. H. Şahin, R. T. Senger, S. Ciraci, “Spintronic properties of zigzag-edged triangular graphene flakes” J. Appl. Phys. **108**, 074301 (2010)
3. N. Pavliček *et al.*, “Synthesis and characterization of triangulene”, Nature Nanotech. **12**, 308 (2017)



**Şekil 1** Üçgen grafen parçaları farklı bağlantı atomları kullanılarak kümelenmiş haldedir spin-kutuplu yük yoğunlukları: (a) C, (b) Ti, (c) V, (d) Sc

Triangulene moleküllerinin periyodik olarak dizildiği kristal yapılarda da elektronik ve manyetik özelliklerin incelenmesini içeren çalışmalarımız sürmektedir. Grafen tabanlı bu yapıların nano ölçekli spintronik aygıtların tasarımında yer alabileceği düşünülmektedir.

**Tablo 1:** Bağlantı atomuna göre 3 triangulenli moleküllerin özellikleri

Bağlantı Atomu	Komşu karbon mesafesi (Å)	Manyetik moment ( $\mu_B$ )
C	1.43	4
Ti	2.31	4
V	2.02	5
Sc	2.73	3



## Nano gözenekli tek-katmanlı filtreler kullanarak suyun tuzdan arındırılması

Fethi Mehmet AKIŞ<sup>1</sup>, Ahmet TIĞLI<sup>2</sup>, Fatih ERSAN<sup>1</sup><sup>1</sup>Aydın Adnan Menderes Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 09010<sup>2</sup>Sinop Üniversitesi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği, 57000

Grafit, x-y düzleminde bal peteği şeklinde dizilmiş karbon atomları ve bu katmanlar arasındaki van der Waals (vdW) bağı ile z eksenine boyunca tekrar etmesi ile oluşmaktadır. 2004 yılında Novoselov ve Geim bahsedilen grafiti tabakalar arasındaki vdW bağından yararlanarak yapışkan bir bant yardımıyla katmanlarından ayırmış ve x-y düzleminde karbon atomlarının bal peteği dizilimi ile oluşmuş olan grafeni sentezlemişlerdir [1].

Bu keşif aynı zamanda grafen gibi iki boyutlu malzemelerin üç boyuttaki durumlarından çok farklı fiziksel özellikler sergilediğini göstermiştir. Çünkü makro boyutta etkili olan klasik fizik yasaları ve ortalamalar yerine nano boyutta kuantum etkiler daha baskın hale gelmektedir[2]. Malzemelerin gözenekli yapıya sahip olmaları ve gözeneklerin boyutlarına bağlı olarak filtreleme uygulamalarında kullanım alanı bulunmaktadır. Bu alanların başında deniz suyundan temiz su elde etme uygulamaları gelmektedir.

Dünyada bulunan su kaynaklarının çok büyük bir miktarını deniz suyu ve tuzlu sular oluşturmaktadır. Bu kaynakların kullanılabilmesi için arıtma işlemi yapılarak tatlı su elde edilmektedir. Bu çalışmada karbon tabanlı gözenekli yapıya sahip 2D Graphyne, Dodecagonal grafen ve Kagome grafen malzemelerin suyun tuzdan arındırılması için uygun filtreler olup olmadıkları kuantum mekaniğine dayalı olan yoğunluk fonksiyoneli teorisi (YFT) yardımı ile araştırılmıştır. YFT yardımı ile 3 yapının H<sub>2</sub>O molekülü, Na ve Cl atomlarının gözenekli yapı içerisinden difüz etmesi için gerekli olan bariyer enerjisi Nudged elastic band (NEB) yöntemi ile araştırılmıştır. Bu yapıların çeşitli bölgelerine H<sub>2</sub>O molekülü, Na ve Cl atomları yerleştirilerek tutunma enerjileri hesaplanmıştır. Bu hesaplamalar sonucu tutunma bölgeleri belirlenmiş ve yapıların elektronik bant yapıları incelenmiştir.

Bu çalışmadaki numerik hesaplamalar Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) paket program ve LAMMPS (Molecular dynamics simulation) paket programı kullanarak yapıldı. Değiş-tokuş ve korelasyon potansiyelleri genelleştirilmiş eğim yaklaşımı altında (GGA) Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) formundaki fonksiyoneller kullanılarak sistem Hamiltoniyenine dahil edildi.

Ardışık iterasyonlar sonucu elde edilen enerji değerleri arasında ki fark  $10^{-5}$  eV ve atomlar üzerine etkiyen Hellman-Feynman kuvveti 0.001 eV/Å olarak seçildi. Tek tabaka yapı elde edebilmek için tabakalar arası vakum 20Å olarak belirlendi. Yabancı atomun tabakalara tutunma enerjisi;

$$E_{T.E.} = E_{2 \times 2(\text{grafenyapı})} + E_{(\text{atom})} - E_{2 \times 2(\text{grafenyapı} + \text{atom})}$$

bağıntısı ile hesaplandı.

Bu çalışmada nano gözenekli tek-katmanlı üç yapıyı suyun tuzdan arındırılması için uygun filtreler olup olmadıkları araştırılmıştır. Araştırmada yapıların bariyer enerjileri hesaplandı. Bu hesaplamalar sonucunda Dodecagonal grafen ve kagome grafen yapıları suyun tuzdan arındırılması için yeterli bariyer enerjileri bulunmuştur. Ancak graphyne yapısı, su molekülü için yüksek bariyer enerjisine sahip olduğundan suyun tuzdan arındırılması için uygun bir filtre olmadığı sonucuna varılmıştır.

**Kaynakça**

1. Novoselov, 2014; SCIENCE, Vol 306, Issue 5696, pp. 666-669.
2. Russo, 2013; Hu, 2021 "Synthesis, properties and potential applications of porous graphene: a review" Nano-micro letters, 5(4), 260-273.

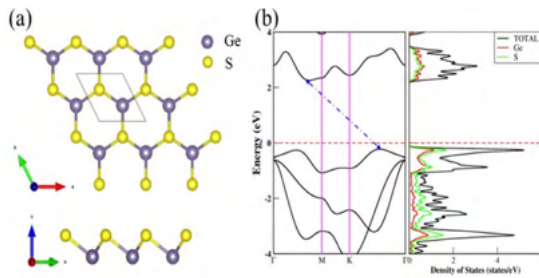
## Janus Benzeri Tek Katman GeS Kristalinin Balistik Termoelektrik Özellikleri

Hakan Asaf Fırat<sup>1</sup> ve R. Tuğrul Senger<sup>2</sup><sup>1</sup>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430 İzmir<sup>2</sup>İzmir Ekonomi Üniversitesi, Fizik Bölümü, 35330 İzmir

Bu çalışmada, Janus benzeri tek katman GeS'nin elektronik, titreşimsel özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak, balistik termoelektrik özellikleri ise Landauer-Büttiker formalizmi ile incelenmiştir. Elektronik bantları yapının yarıiletken olduğunu, fonon dağılım özellikleri ise yapının dinamik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Farklı sıcaklıklardaki termoelektrik verim ölçüleri (ZT) hesaplanmış, ticari olarak kullanılan termoelektrik malzemelerin ZT~1 değerinden büyük olduğu gösterilmiştir.

Malzemelerin boyutlarının azalmasıyla birlikte hacimsel durumlarına göre ZT değerlerinin artabildiği bilinmektedir. Bu nedenle düşük boyutlu malzemeler termoelektrik uygulamalar için önemli bir araştırma alanıdır. İki boyutlu Grup IV-VI büzölmüş (puckered) ortorombik yapılar çokça çalışılmış olsa da altıgen biçimindeki bükölmüş (buckled) yapıların elektronik ve optik özellikleri son zamanlarda derinlemesine incelenmektedir [1]. Düzlem dışı ayna simetrisine sahip olmayan yapılar Janus adıyla anılmaktadır. Janus MoSSe tek tabaka kristali öngörölmüş ve sentezlenmiştir [2].

Bu çalışmada, Janus benzeri tek katmanlı GeS kristalinin balistik termoelektrik özellikleri incelenmiştir.

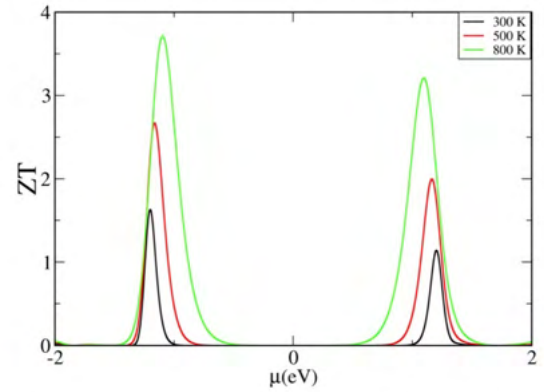


**Şekil 1:** Janus benzeri tek katman GeS'nin (a) üstten ve yandan görünümünü (b) elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.

## Kaynakça

1. R. Barbosa, D. Kuritza, G. Perin, R. H. Miwa, R. B. Pontes, J. E. Padilha "Electronic and optical properties of Janus-like hexagonal monolayer materials of group IV-VI", Physical Review Materials, 7 (1), 014001 (2023).
2. A.Y. Lu, H. Zhu, J. Xiao, C.P. Chuu, Y. Han, M.H. Chiu, C.C. Cheng, C.W. Yang, K.H. Wei, Y.M. Yang, Y. Wang, D. Sokaras, D. Nordlund, P. Yang, D.A. Muller, M. Y. Chou, X. Zhang, L.J. Li, "Janus monolayers of transition metal dichalcogenides", Nature Nanotechnology, 12 (8), 744-749 (2017).

Toplam enerji ve optimizasyon hesapları Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) yazılımı aracılığıyla geliştirilmiş Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) fonksiyoneli ve geliştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) kullanılarak yapılmıştır. Fonon bant yapıları ise küçük yer deęiřtirmeler metodu ile PHONOPY paketi kullanılarak elde edilmiştir.



**Şekil 2:** Janus benzeri tek katman GeS'nin, kimyasal potansiyele baęlı olarak 300 K, 500 K ve 800 K'deki ZT deęerleri.

Elektronik ve örgü termal iletkenlikleri balistik yöntemlerle hesaplanarak yapının termoelektrik parametreleri hesaplanmıştır.

Şekil 2'de göröldüğü üzere malzemenin 300 K'de p-tipi ve n-tipi ZT deęerleri sırasıyla 1.63 ve 1.14 olarak hesaplanmıştır. Bu da tek-katman GeS'nin termoelektrik uygulamalar için uygun bir malzeme olduğunu göstermektedir.



## Optically Transparent Thin Film Electroluminescent Displays Based on ZnS:Mn with Novel Multilayer Electrode

Kübra Aras<sup>1</sup>, Eray Ceyhan<sup>1</sup>, Polatkan Ozcan<sup>2</sup>, Gulnur Aygun<sup>2</sup>, Lutfi Ozyuzer<sup>2,3</sup>, Mehtap Ozdemir<sup>2,3</sup>

(1) Department of Photonics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, İzmir, Türkiye

(2) Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, İzmir, Türkiye

(3) Teknoma Technological Material Inc. IZTECH Campus, Urla, 35430, İzmir, Türkiye

This study addresses thin-film multilayer transparent electroluminescent displays, which represent a significant advancement in the field of optoelectronics. These displays attract attention due to their advantages such as high image quality, transparency, and low power consumption. In this study, the optical and electrical properties of multilayer structures deposited using ZnS:Mn material as the active layer are investigated. The obtained results indicate promising potential for the use of this technology in electronic devices. In the future, further development of this technology is likely to become widely adopted in a variety of applications.

The luminescence is a non-thermal process that occurs through the conversion of energy from certain excitation sources into light. The luminescent phenomenon can be observed in various forms such as bioluminescence, triboluminescence, photoluminescence, cathodoluminescence, and electroluminescence. Electroluminescence (EL) is the phenomenon by which a material emits light when an AC electric current is applied. Essentially, a semiconductor material under an electric field can emit light due to changes in energy levels. This phenomenon is the conversion of electrical energy into light. Prominent applications include dashboard indicators in cars, night illumination, certain wearable textile products, aviation, and defense industries.

Due to their high brightness and long lifetimes, recently, many studies have been conducted on thin-film EL devices consisting of a ZnS:Mn layer sandwiched between two insulating layers [1].

In this study, multilayer thin films with the architecture ITO/HfO<sub>2</sub>/ZnS:Mn/ZTO/Ag/ZTO, aimed for use in EL displays, were deposited on glass using RF magnetron sputtering technique. The modeling of the grown films is shown in Figure 1.

The deposited films were characterized and analyzed using photoluminescence spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS).

As a result of the analyses performed the thickness of the deposited ITO thin film is 197.3 nm, the surface

resistance is 18-20 ohms per square, and the optical transmittance at a wavelength of 550 nm is 85%. The thickness of the HfO<sub>2</sub> thin film is approximately 120 nm, and its optical transmittance at a wavelength of 550 nm is 86%. The thickness of the ZnS:Mn thin film is approximately 290 nm, and its optical transmittance at a wavelength of 550 nm is 71%. The thickness of the ZAZ thin film is 161 nm, and its optical transmittance at a wavelength of 550 nm is 62%. In the this study, the grown ZAZ thin film serves both as a dielectric spacer and an electrode [2]. Thus, two different functionalities are achieved from a single grown thin film.

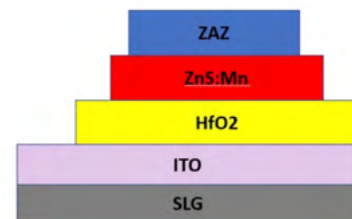


Figure 1. Model of the grown film

*This study is conducted with the support of TUBITAK (The Scientific and Technological Research Council of Turkey) TEYDEB project number 3210712 and IYTE Quantum Technologies Research and Application Center (RACQUT)*

### References

1. Sasakura, H., Kobayashi, H., Tanaka, S., Mita, J., Tanaka, T., and Nakayama, H., 1981. "The dependences of electroluminescent characteristics of ZnS: Mn thin films upon their device parameters." *Journal of applied physics*, 52(11), 6901-6906.
2. Turkoglu, F., Koseoglu, H., Ekmekcioglu, M., Cantas, A., Ozdemir, M., Aygun, G., and Ozyuzer, L., 2022. "Development of ZTO/Ag/ZTO transparent electrodes for thin film solar cells." *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 33(14), 10955-10964.



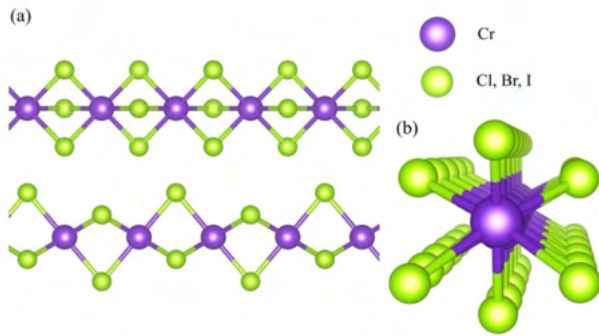
## Bir Boyutlu $\text{CrX}_3$ ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) Zincirlerinin Yapısal, Titreşimsel ve Elektronik Özellikleri

Şule Bektaş<sup>1</sup>, Yağmur Bozkurt<sup>1</sup>, Mehmet Yağmurlukardeş<sup>1</sup>, Hasan Şahin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü-Fotonik Bölümü, 35430, İzmir

Bu çalışmada bir boyutlu  $\text{CrX}_3$  ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) zincirlerinin yakın zamanda sentezlenmesinden motive olunarak yapısal, titreşimsel ve elektronik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak incelenmiştir.  $\text{CrCl}_3$  ve  $\text{CrBr}_3$  ün zincir yapıları anti-ferromanyetik temel duruma sahipken  $\text{CrI}_3$  ün ferromanyetik temel duruma sahip olduğu hesaplanmıştır. Buna ek olarak, zincir yapıların elektronik özellikleri elektronik bant yapısı üzerinden incelenmiş ve tüm zincir yapıların direkt veya indirekt bant aralığına sahip yarı iletken malzemeler olduğu görülmüştür. Ayrıca fonon bant dağılımları da bu zincir yapıların dinamik olarak kararlı olduğunu ve altta etkisi olmadan doğada bulunabileceklerini göstermiştir.

Lee ve arkadaşları tarafından 2023 yılında gerçekleştirilen çalışma bir boyutlu  $\text{MX}_3$  ( $\text{M}=\text{Cr}, \text{V}$ ;  $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) tipi zincir yapılarının karbon nano-tüp içinde sentezlenebilirliklerini ortaya koymuştur [1]. Bu çalışmanın sağladığı motivasyon ile burada Krom bazlı zincirlerin yapısal, titreşimsel ve elektronik özellikleri teorik olarak incelenmiştir.



Şekil 1: Tek-Boyutlu  $\text{CrX}_3$  ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) zincirlerinin yapısal yapısı.

Bu çalışmada  $\text{CrX}_3$  zincirlerinin yapısal, elektronik ve titreşimsel özellikleri Vienna ab initio Simulation Package (VASP) kullanılarak hesaplanmıştır. Elektronlar arasındaki değişim-korelasyon etkileşimleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı fonksiyoneline Hubbard terimi eklenilerek (GGA+U) tanımlanmıştır.

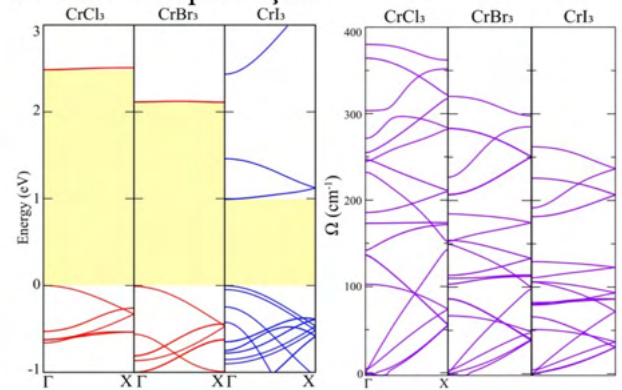
Tek boyutlu  $\text{CrX}_3$  zincir yapıları yüzey paylaşımli oktahedral yapıya sahiptir ve sadece tek yönde periyodikliğe sahiptir. Bu yapıların temel enerji optimizasyonu hesapları yapıldığında kristal örgü parametreleri,  $\text{CrCl}_3$ ,  $\text{CrBr}_3$  ve  $\text{CrI}_3$  için sırasıyla; 6.03, 6.30, 6.77 Å olarak bulunmuştur. Ayrıca manyetizma testleri sonucunda  $\text{CrCl}_3$  ve  $\text{CrBr}_3$  ün anti-ferromanyetik,  $\text{CrI}_3$  ün ise birim hücre başına  $6\mu_B$  manyetizmaya sahip olan bir ferromanyetik malzeme olduğu bulunmuştur.

### Kaynakça

1. Lee, Y., Choi, Y. W., Lee, K., Song, C., Ercius, P., Cohen, M. L., Kim, K., & Zettl, A. (2023). 1D Magnetic  $\text{MX}_3$  Single-Chains ( $\text{M} = \text{Cr}, \text{V}$  and  $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ). *Advanced Materials*.

Fonon bant dağılımları hesaplandığında herhangi bir sanal frekans değerinin bulunmaması bir boyutlu  $\text{CrX}_3$  zincirlerinin bir altta etkisi olmadan vakum ortamında stabil olduklarını göstermiştir.

Zincir yapıların elektronik bant yapısı incelendiğinde ise  $\text{CrCl}_3$  ve  $\text{CrI}_3$  ün direkt,  $\text{CrBr}_3$  ün ise indirekt bant aralığına sahip yarı-iletken malzemeler oldukları görülmüştür. Sırasıyla;  $\text{CrCl}_3$ ,  $\text{CrBr}_3$  ve  $\text{CrI}_3$  için bant aralıkları 2.48, 1.83 ve 0.99 eV olarak hesaplanmıştır.



Şekil 2: Tek-Boyutlu  $\text{CrX}_3$  ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) zincirlerinin elektronik bant ve fonon bant yapıları.

Sonuç olarak tek boyutlu  $\text{CrX}_3$  zincir yapılarından  $\text{CrCl}_3$  ve  $\text{CrBr}_3$  ün anti-ferromanyetik;  $\text{CrI}_3$  ün ise ferromanyetik olduğu bulunmuştur. Ayrıca, fonon bant hesaplamaları sonucunda tüm zincir yapıların dinamik olarak kararlı olduğu gösterilmiştir.  $\text{CrCl}_3$  ve  $\text{CrI}_3$  ün direkt;  $\text{CrBr}_3$  ün indirekt bant yapısına sahip yarı-iletkenler olduğu ise elektronik bant hesaplamaları ile bulunmuştur. Tek boyutlu zincir yapıların keşiflerinin kısıtlı sayıda olması bu yapı ailesinin değerini artırırken, yapılan hesaplamalar sonucunda, bu malzeme grubunun potansiyel nanocihaz uygulamalarında kullanılabileceği görülmüştür.



## Bazı Tiyobarbitürik Asit Ligandlarının Kristalografik ve Kuantum Mekaniksel İncelemeleri

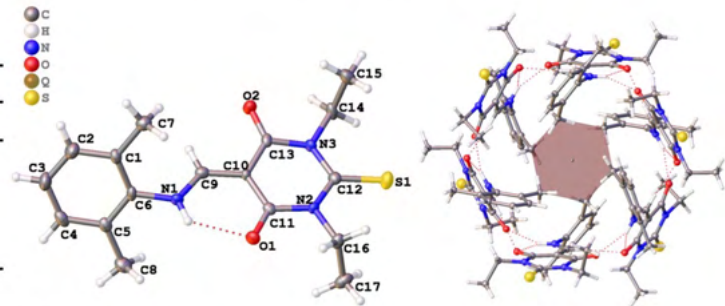
Büşra Emektar, Resul Sevinçek

Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 35900, İzmir

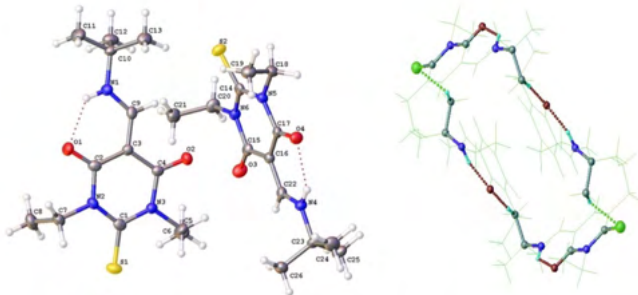
Bu çalışmada 5-(2,6-dimetilfenilamino)metilen-1,3-dietil-2-tiyobarbitürik asit ( $C_{17}H_{21}N_3O_2S$ ), 5-(t-bütilamino)metilden-1,3-dietil-2-tiyobarbitürik asit ( $C_{13}H_{21}N_3O_2S$ ) bileşiklerinin kristal yapıları tek kristal X-ışını kristalografisi yöntemi ile açıklanmıştır. Kristal yapıdaki moleküller arası etkileşimler ve bu etkileşimlerin oluşturduğu yüksek simetriye sahip şekillenimler incelenmiştir. Deneysel hesaplamaların yanında X-ışını verileri ile ortaya çıkan yapının elektronik verilerinin elde edilmesi için kuantum mekaniksel yöntemlerden olan DFT (Density Functional Theory) yani Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı kullanılarak hesaplanmıştır. Her iki bileşik için YFK hesaplamalarında Becke'nin üç parametrelili hibrit değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli B3LYP, baz seti olarak da 6-31G (d, p) kullanılmıştır. Ele alınan moleküllerin moleküler orbitalleri belirlenmiş ve bu moleküler orbitallerden en yüksek enerjili dolu orbital (HOMO) ve en düşük enerjili boş orbital (LUMO) orbitallerinin enerji farkları incelenmiştir. Bu moleküler orbital enerjilerinden yararlanarak kimyasal belirteçleri de hesaplanmıştır. Bunlara ek olarak her bir molekül için durum yoğunlukları (DOS) verileri de hesaplanmıştır.

**Tablo 1:** L1 Bileşğinin bağ uzunlukları

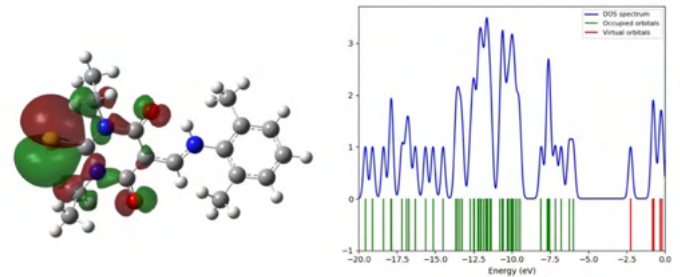
Atom	Atom	Uzunluk
S1	C12	1.665(2)
N1	C6	1.409(2)
N2	C11	1.475(2)



**Şekil 1:** L1 Bileşğinin Moleküler Yapısı ve Moleküler Arası Etkileşimleri



**Şekil 2:** L2 bileşğinin Moleküler Yapısı ve Moleküler Arası Etkileşimleri



**Şekil 3:** L1 Bileşğinin HOMO ve DOS Şekilleri

### Kaynakça

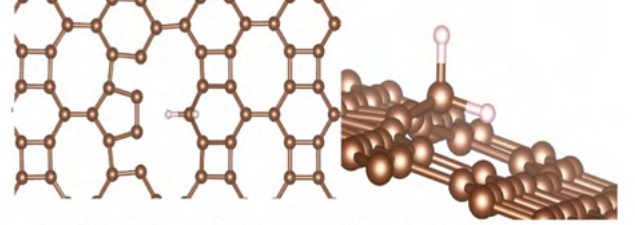
- Şen, B. (2015). Bazı tiyazoltiyon ve siklobütan türevlerinin kristalografik ve kuantum mekaniksel yöntemlerle yapısal karakterizasyonu. Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü
- Sevinçek, R. (2012). Bazı oksazolon türevlerinin yapısal ve fotofiziksel özelliklerinin incelenmesi. Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü.

## İki Boyutlu Karbon-Bifenilen Yapılarının Seçici Gaz Geçirgenliği

Ali Kumralbaş<sup>1</sup>, Yosra Mater<sup>2</sup>, Gözde Özbal Sargın<sup>1</sup>, Salih Demirci<sup>2</sup>, V. Ongun Özçelik<sup>1</sup>Sabancı Üniversitesi – Malzeme Bilimi ve Nanomühendislik Programı, 34956 İstanbul / Türkiye  
Kırıkkale Üniversitesi – Malzeme Bilimi ve Nanomühendislik Programı, 71450 Kırıkkale / Türkiye

Gaz ayırmak ve yakalamak için kullanılacak membranların tasarımı mekanik dayanıklılığa, kimyasal kararlılığa ve seçici geçirgenliğe sahip malzemeler gerektirir. İki boyutlu malzemeler, yüksek kararlılıkları ve kolay sentezlenebilir olmaları nedeniyle seçici gaz membranı uygulama alanlarında büyük ilgi görmektedir. Dört, altı ve sekiz üyeli atom halkalarından oluşan, tek tabakalı bir karbon allotropu olan bifenilen malzemesinin kimyasal kararlılığı yakın zaman önce gösterilmiş ve bu yapı deneysel olarak başarıyla sentezlenmiştir [1,2]. Sentezi, yüzey üzerinde bir interpolimer dehidroflorinasyon reaksiyonu içermekte ve bu da son derece düz bir yapı ile sonuçlanmaktadır. Bifenilen malzemesi, CO<sub>2</sub> ve metan gibi küçük molekülleri etkili bir şekilde hapsedebilecek ve adsorbe edebilecek gözenekler oluşturan sekiz üyeli halkalara sahiptir. Bu özellik, bifenileni artan atmosferik CO<sub>2</sub> seviyelerinin olumsuz etkilerini azaltmaya yönelik stratejiler geliştirmek için umut verici bir malzeme olarak konumlandırmaktadır.

Bu çalışmada sentez gazlarının (CO<sub>2</sub>, CO, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>) iki boyutlu bifenilen malzemesiyle olan etkileşimi yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanarak incelenmiştir. Bifenilen üzerindeki farklı karbon atomlarını çıkararak oluşturulan boşluk kusurlarının (Tip A, Tip B, Çift boşluk) gaz emilimi üzerine etkisi, yerel yük dağılımının değişimi ve bu yük dağılımının gaz geçirgenliğini nasıl etkilediği



Şekil 1: H<sub>2</sub> molekülünün boşluklu bifenilen üzerine bağlanarak CH<sub>2</sub> oluşturma sürecini gösteren 3D model.

incelenmiştir. Bu amaçla, bifenilen yüzeyinin geçirgenlik bariyeri her bir gaz molekülü için hesaplanmıştır (Tablo 1). Yük yoğunluğunun yüksek olan atomların kimyasal olarak daha reaktif olduğu saptanmıştır. Geçirgenliğin düşük olduğu durumlar için gazların yüzeye bağlanma enerjileri ve geometrileri belirlemiştir. Ayrıca, hidrojen ve oksijen moleküllerinin yüzeye bağlanmadan önce atomlarına ayrıldığı ve yüzeye atomlar halinde bağlandıkları gözlenmiştir. Bunlardan H<sub>2</sub> molekülü yüzeydeki karbon atomlarıyla reaksiyona girerek metilen (CH<sub>2</sub>) oluşturmada, O<sub>2</sub> ise OER sonucu parçalanarak yüzeye tutunmaktadır. Yapılan çalışmada, bifenilen yüzeyinin CO<sub>2</sub> ve CO gazlarını etkili bir şekilde filtrelediği ve yüksek sıcaklıklarda stabil kaldığı gözlemlenmiştir.

Tablo 1: Sentez gazlarının bifenilen yapısından geçebilmek için gerekli minimum enerji bariyerleri (eV cinsinden).

	H <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
Kusursuz yapı	4.2	8.2	9.2	10.7	9.9
Tek boşluklu (A)	3.2	4.2	6.5	8.3	6.2
Tek boşluklu (B)	1.7	4.8	4.0	8.6	6.4
Çift boşluklu	2.4	4.4	5.9	6.5	6.7

## Kaynakça

1. Fan, Q., et al., Biphenylene network: A nonbenzenoid carbon allotrope. Science, 2021. 372(6544): p. 852-856.
2. Gorkan, T., et al., Functional Carbon and Silicon Monolayers in Biphenylene Network. ACS Applied Electronic Materials, 2022. 4(6): p. 3056-3070.





İZMİR EKONOMİ ÜNİVERSİTESİ

Fen Edebiyat Fakültesi

Fizik Bölümü

*yimf<sup>35</sup>*

# Yoğun Madde Fiziği İzmir Toplantısı 2024

11 MAYIS 2024

08:30

İzmir Ekonomi Üniversitesi