

VIII. YOĐUN MADDE FİZİĐİ
İZMİR TOPLANTISI
19 NİSAN 2019
PROGRAM VE ÖZET KİTAPÇIĐI



Sizleri Yoğun Madde Fiziği (YMF)-İzmir Toplantısında aramızda görmekten büyük mutluluk duymaktayız. Bu yıl sekizincisi düzenlenmekte olan YMF-İzmir toplantısının amacı Yoğun Madde Fiziği ve ilgili alanlardaki bilimsel çalışmalara katkıda bulunmak, bilim insanları arasındaki bilgi alışverişini hızlandırmak ve yeni bilimsel ortaklıklara vesile olmaktır. Bu toplantının düzenlenmesinde emeği geçen tüm komite üyelerine, gönüllü öğrenci arkadaşlarıma, tüm katılımcılara, sponsorlarımız Eduline ve TeknoMa'ya, katkılarından dolayı İYTE Rektörlüğüne teşekkür ederiz.

YMF-İzmir Toplantısı Düzenleme Kurulu

TOPLANTI PROGRAMI		
08:30 – 09:00	Kayıt	
09:00 – 09:15	Açılış Konuşması	
1. Oturum		
09:15 – 09:45	Ç1	Ömer İlday (Bilkent Üniversitesi) Harnessing nonlinear feedback-driven laser-material interactions towards atomic-scale 3D printing
09:45 – 10:15	Ç2	Alpan Bek (Orta Doğu Teknik Üniversitesi) Amorf Silisyum Filmlerin Lazerle Kristalizasyonu
10:15 – 10:30	S1	Pınar Özden (Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi) E-7 Nematik Sıvı Kristalinin Kapasitans Yöntemiyle Elastik Özelliklerinin Belirlenmesi
10:30 – 11:00	ARA	
2. Oturum		
11:00 – 11:30	Ç3	Cem Sevik (Eskişehir Teknik Üniversitesi) Nanoboyut Kristallerin Moleküler Dinamik Simülasyonu: Etkileşim Potansiyeli Optimizasyonu ve Fononik Transport
11:30 – 12:00	Ç4	Nurdan Demirci Sankır (TOBB Üniversitesi) Çinko Oksit Nano Yapılar: Hiyerarşi, Desenleme ve Fotoelektrokimyasal Güneş Pili Uygulamaları
12:00 – 12:15	S2	Engin Durgun (Bilkent Üniversitesi) İki-boyutlu Katmanlı GaN Yapıları: van der Waals Etkileşimi ve Ötesi
12:15 – 12:30	S3	Özge Bayraklı Sürücü (Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi) ZnSnTe İnce Filmlerinin Malzeme ve Aygıt Karakterizasyonu
12:30 – 14:00	ÖĞLE YEMEĞİ	
3. Oturum		
14:00 – 14:30	Ç5	Özgür Oktel (Bilkent Üniversitesi) Ultra soğuk gazların kendini dengeleyen damlacıkları
14:30 – 15:00	Ç6	Mehmet Cengiz Onbaşlı (Koç Üniversitesi) Spin-dalga elektronığı için tümleşik malzeme ve bileşenler
15:00 – 15:15	S4	Barış Pekerten (Sabancı Üniversitesi) Majorana bilardolarının şeklini duyabilir miyiz?
15:15 – 16:00	POSTER	
4. Oturum		
16:00 – 16:30	Ç7	Şinasi Ellialtıoğlu (TED Üniversitesi) Metalol Molekülleri Yarıiletken Bir Yüzeyle Karşılaşırsa: Bir DFT Çalışması
16:30 – 16:45	S5	Gözde Özbal (İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü) Tek Tabakalı Yarıiletken Geçiş Metali Kalkojenitleri ve Oksitleri'nin Balistik Termoelektrik Özellikleri
16:45 – 17:00	S6	Atilla Eren Mamuk (Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi) Alkyl Bazlı Bazı Sıvı Kristallerin ve Karışımlarının Dielektrik Özelliklerinin Belirlenmesi
17:00 – 18:15	ARA	
18:15	Akşam yemeği için kampüsten Urla İskele'ye servis kalkacaktır	

SÖZLÜ SUNUMLAR

Amorf Silisyum Filmlerin Lazerle Kristalizasyonu

Alpan Bek

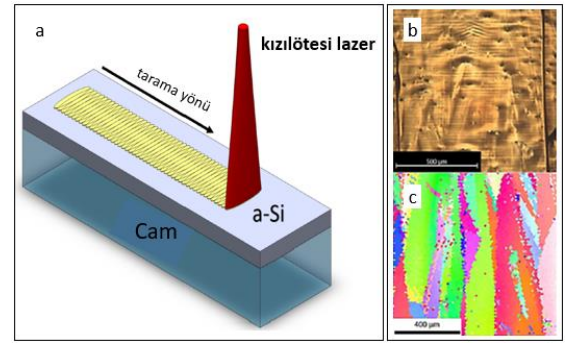
Orta Doğu Teknik Üniversitesi - Güneş Enerjisi Araştırma ve Uygulama Merkezi / Fizik Bölümü / Mikro ve Nanoteknoloji Programı, 06800 Ankara

Bu çalışmada cam alttaş üzerine elektron demet buharlaştırma yöntemi ile büyütülmüş amorf silisyum tabakalar lazerle kristalize edilmiştir. Kristalizasyon, bu amaca özel bir kısa atımlı kızılötesi lazer sisteminin çizgisel odağı yüzey üzerinde taranarak çok foton soğurması ile sağlanmıştır.

Günümüz fotovoltaik piyasasındaki en büyük pazar payı yaklaşık %90 ile kristal silisyum (c-Si) pul tabanlı gözlemlere aittir. Ancak avantajlarına rağmen pul tabanlı Si göze teknolojisinin dünya enerji pazarındaki yeri halen sınırlıdır. Bu konudaki en büyük engellerden biri yüksek malzeme giderlerine bağlı üretim maliyetinin yüksekliğidir. Aktif madde kullanımını optimize ederek üretim masraflarını düşürmeyi amaçlayan ince-film teknolojileri maliyet bariyerini aşarak fotovoltaik enerji dönüşüm teknolojilerini diğer teknolojilerle rekabet edebilir hale getirecek bir çözüm potansiyeli vaatmektedir. İnce film silisyumun lazer ile tavlama ya da kristallendirilmesi, ince film transistör üretimi gibi çok çeşitli platformlara da uygulanabilecek evrensel bir teknoloji gösterimidir.

Sunduğumuz çalışmada ince film poli-Si yaklaşımı ile tek kristal silisyuma yakın kalitede, milimetre ölçeğinde tane büyüklüğüne sahip polikristal (poli-Si) ince filmlerin büyütülmesi ve fotovoltaik hücre üretiminde kullanılması gösterilmektedir. Cam alttaş üzerine elektron demet buharlaştırma yöntemi ile katılanmış amorf silisyum tabakalar biriktirilerek ve kristalizasyon için özel olarak tasarlanıp geliştirilmiş lazer sisteminin çizgisel odağı bu yüzey üzerinde taranarak amorf silisyumun polikristal silisyuma dönüşümü sağlanmıştır (bkz. Şekil 1). Üretilen polikristal silisyum yine katılanmış ince bir amorf silisyum ile kaplanarak heteroeklem elde edilmiş, bu aygıtın üst ve alt kontakları metal termal buharlaştırılmasıyla oluşturularak aygıt üretimi tamamlanmıştır. Tüm üretim basamakları arasında optik, mekanik ve elektriksel ölçümler gerçekleştirilerek işlem

basamaklarının iyileştirilmesi sağlanmış, gerektiği durumlarda lazer sisteminde de iyileştirmelere gidilmiştir. Verimliliklerde artış eldesi için kenar yalıtımı ve plazmonik yapıların entegrasyonu gerçekleştirilmiştir [1].



Şekil 1: a) Lazer kristalizasyon şeması, b) kristalize filmin optik görüntüsü, c) aynı filmin EBSD* ile poli-Si tanecik dağılımı görüntüsü.
*Electron Back-Scatter Diffraction.

En iyi kristal silisyum üretimi parametreleri, lazerle aydınlatma akışına ve üzerinde silisyum kristallenmesinin olduğu alttaşın fiziksel koşullarına bağlıdır [2]. Uyguladığımız şartlar altında kristallenme mekanizmasının patlayıcı kristallenme (explosive crystallization) olduğuna dair güçlü veriler bulunmaktadır [3]. İnce film üretimi ve lazerle işlemeye ait çeşitli parametreler büyütülen poli-Si alanlarının büyüklük, şekil, kalınlık ve yönelimleri gibi fiziksel özelliklerini etkileyebilirler. Bu parametrelerin belirlenmesi ve en iyileştirmesi, verimli kristal silisyum ince film güneş gözeleri üretiminde önemli bir yer tutmaktadır. Bu çalışma 115M061 nolu TÜBİTAK projesi tarafından desteklenmiştir.

Kaynakça

1. K. Çınar, M. Karaman, and A. Bek, "Improvement of Laser-Crystallized Silicon Film Quality via Intermediate Dielectric Layers on a Glass Substrate", *ACS Omega*, **3**, 5846-5852 (2018).
2. Kamil Çınar, "Nanosecond Pulsed Infrared Laser Induced Crystallization of Amorphous Silicon Films For Potential Photovoltaic Applications", Doktora Tezi, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Ankara (2018)
K. Çınar, C. Yeşil, and Alpan Bek, "Revealing laser crystallization mechanism of silicon thin films via pulsed IR lasers", (2019) *hakem değerlendirmesinde. Arzu edenlere ön baskı gönderilecektir.*

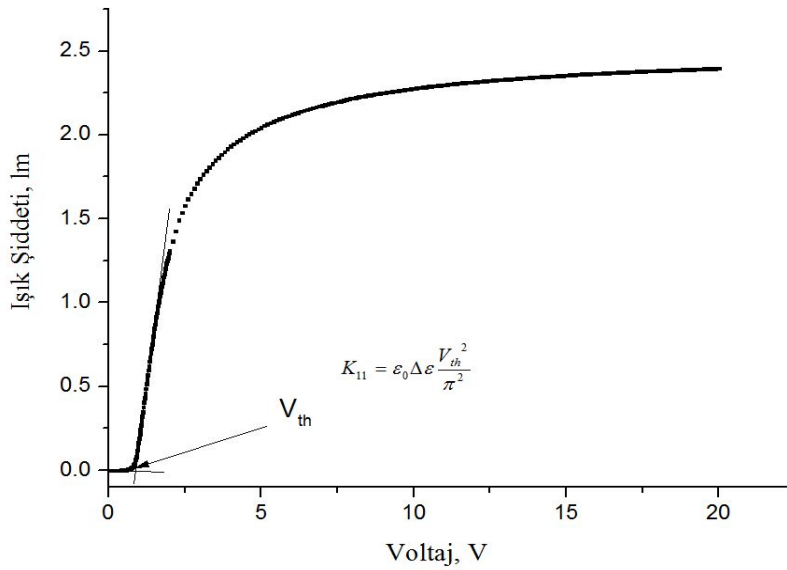
E-7 Nematik Sıvı Kristalinin Kapasitans Yöntemiyle Elastik Özelliklerinin Belirlenmesi

Pınar Özden

Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Sıvı ve Katı Kristaller Laboratuvarı, TR48000, Muğla/Türkiye

Sıvı kristaller, hem katı kristallerin hem de izotropik sıvıların özelliklerini sergileyen malzemelerdir. Sıvı kristallerin izotropik fazına en yakın fazı nematiktir. Diğer fazlarla kıyaslandığında, moleküller yüksek akışkanlığa sahiptir ve katmandan katmana kolaylıkla hareket ederler. Bu yüzden LCD ekranlarda nematik sıvı kristaller çoğunlukla kullanılmaktadır. Bu malzemelerin fiziksel özellikleri elektrik alanlar, manyetik alanlar, termik alanlar, yüzeyler, sınır koşulları gibi dış alanların etkisiyle değiştirilebilmektedir. Sıvı kristal teknolojisinde birçok uygulama bu malzemelerin termo-optik, elektro-optik ve manyeto-optik özelliklerine bağlıdır. Sıvı kristallerin teknolojik uygulamaları için elastik sabitlerin belirlenmesi önem arz etmektedir. Sıvı kristallerde moleküllerin yönelimine bağlı olarak nematik sıvı kristal hücrenin elektro-optik özelliklerini gösteren üç temel elastik sabiti bulunmaktadır. Bunlar yayılma(K_{11}), burulma(K_{22}) ve bükülme(K_{33}) elastik sabitleridir. LCD ekranlardaki eşik voltajı (V_{th}) sıvı kristallerin elastik sabitleriyle ilişkilidir [1-5].

Bu çalışmada elastik sabitlerin belirlenmesi için kapasitans-gerilim yöntemi kullanılmıştır. Ötektik karışımı E-7 nematik sıvı kristalin elastik sabitlerinin sıcaklığa bağlı değişimleri incelenmiştir. Yapılan çalışma sonucunda E-7'nin elastik sabitleri $K_{33} > K_{11} > K_{22}$ olarak bulunmuştur.



Şekil 1: Işık şiddetinin voltaja göre değişimi

Kaynakça

1. de Gennes, P. G. ve Prost, J. 1993. "The Physics of Liquid Crystals", 2. Baskı. Clarendon, Oxford.
2. Iam-Choon, K. ve Wu, S. T. 1993. "Optics and Nonlinear Optics of Liquid Crystals", World Scientific Pub Co Inc .
3. Kleman, M. ve Lavrentovich, O.D. 2003. "Soft Matter Physics: An Introduction", Springer, Verlag., New York.
4. Wu S. T., ve Yang D.K. 2006 "Fundamentals of Liquid Crystal Devices" Wiley
5. Singh S. ve Dunmur, D. A. 2002. "Liquid Crystals: Fundamentals", 1. Baskı, World Scientific.

Nanoboyut Kristallerin Moleküler Dinamik Simülasyonu: Etkileşim Potansiyeli Optimizasyonu ve Fononik Transport

Cem Sevik

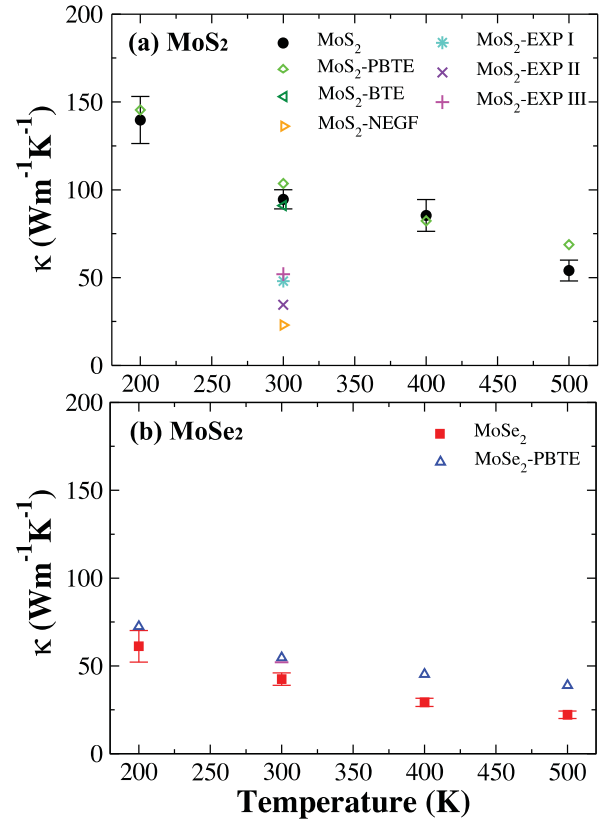
Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Eskisehir Technical University, Eskisehir TR 26555, Turkey

Grafen ve altıgen bor-nitrür gibi, katmanlı nanoyapıların sentezi ile artan çalışmalar iki-boyutlu sistemler olarak anılan yeni bir malzeme araştırma alanının oluşmasına yol açmıştır. Yıllar içerisinde, bu tür sistemlerin elektronik ve optik gibi temel fiziksel özelliklerinin yanı sıra termal özellikleri de yüksek teknolojik uygulamalardaki kritik rolü nedeniyle farklı yaklaşımlar kullanılarak kapsamlı bir şekilde araştırılmıştır. Söz konusu araştırmalarda, temel prensiplere dayalı yöntemlere ek olarak, özellikle kusurlar ve tane sınırları gibi düzensizlikler içeren büyük ölçekli sistemlerin simülasyonunda çok önemli avantajları olan klasik moleküler dinamik yaklaşımları da sıklıkla kullanılmıştır. Farklı uygulamalar, bu yöntemin performansının atomlar-arası etkileşim potansiyelinin tutarlılığına ve uygulanan termal transport hesaplama yöntemine önemli derecede bağlı olduğunu göstermiştir.

Araştırma ekibimiz de bu konuda yoğun olarak çalışmış ve özellikle Grafen, altıgen-BN, altıgen-AlN, MoS₂ MoSe₂, WS₂ ve WSe₂ gibi farklı iki boyutlu malzemelerin termal taşınım özelliklerini incelemiştir [1]. Her bir malzeme için parçacık sürüsü optimizasyonu ve makine öğrenmesi gibi yeni stokastik arama algoritmaları kullanarak Tersoff ve Stillinger-Weber tipleri gibi tutarlı atomlar-arası etkileşim potansiyelleri geliştirilmiştir. Ardından, farklı kuramsal hesaplama yöntemleri kullanılarak bahsi geçen malzemelerin termal taşınım özellikleri incelenmiştir. Şekil 1 de örnek olarak gösterildiği gibi, termal taşınım katsayıları için temel prensiplere dayalı yöntemler ile uyumlu sonuçlar elde edilmiştir. Ayrıca, sıcaklığa bağlı fonon frekans kaymaları da incelenmiş ve deneysel veriler ile tutarlılığı saptanmıştır.

Kaynakça

1. A. Mobaraki, *et al.*, “Validation of inter-atomic potential for WS₂ and WSe₂ crystals through assessment of thermal transport properties”, *Comp. Mat. Sci.* **144**, 92 (2018); A. Kandemir, *et al.*, “Thermal transport properties of MoS₂ and MoSe₂ monolayers”, *Nanotechnology* **27**, 055703 (2016); A. Kinaci, *et al.*, “Thermal Conductivity of BN-C nanostructures”, *Phys. Rev. B* **86**, 115410 (2012).; C. Sevik, *et al.*, “Influence of disorder on thermal properties of BN nanostructures”, *Phys. Rev. B* **86**, 075403 (2012); C. Sevik, *et al.*, “Characterization of thermal transport in low-dimensional boron nitride nanostructures”, *Phys. Rev. B* **84**, 085409 (2011); J Haskins, *et al.*, “Control of thermal and electronic transport in defect-engineered graphene nanoribbons”, *ACS Nano* **5**, 3779 (2011).



Şekil 1: MoS₂ ve MoSe₂ kristallerinin sıcaklığa bağlı termal taşınım katsayıları (siyah daire ve kırmızı kareler). PBTE, BTE, NEGF, EXPI, EXPII ve EXPIII referans verileri göstermektedir.

Özet olarak, ekibimiz geçmiş yıllarda özellikle temel prensiplere dayalı yaklaşımlar ile hesaplanamayacak yapıda sistemlerin termal özelliklerinin incelenmesi konusunda önemli tecrübe kazanmıştır. Konuşmamız da bu tecrübenin tarihsel gelişimi ve sonuçlarını anlatmak üzere kurgulanmıştır.

Çinko Oksit Nano Yapılar: Hiyerarşi, Desenleme ve Fotoelektrokimyasal Güneş Pili Uygulamaları

Nurdan Demirci Sankir*, Çiğdem Tuç Altaf, Nazrin Abdullayeva, Zeynep Tutumlu, Mehmet Sankir

TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi, Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Mühendisliği, 06560, Ankara

*nsankir@etu.edu.tr

Sunulan çalışmada çinko oksit (ZnO) nano yapıların üretim koşulları ve fiziksel özellikleri arasındaki ilişki incelenmiştir. Çinko anyon kaynağı ve solüsyon pH değeri gibi koşulların oluşan morfolojinin yüzey alanı, kristal yapı, oksijen boşlukları ve sonuç olarak güneş pili performansı üzerinde etkili olduğu saptanmıştır. ZnO nano yapıların düzenli hale getirilmesi ile UV bölgesindeki soğurmanın arttığı görülmüştür. Çalışmanın son kısmında ise düzenli nano yapıların, ZnO'nin büyüme kinetiği yavaş olan metal ince filmin nanosaniye fiber lazer ablasyonu ile desenlenmesine dayalı olan özgün yöntem özetlenmiştir. Ayrıca, ZnO nano yapıların perovskit yarıiletkenler ile heteroeklemlerinin oluşturulmasıyla elde edilen elektrotların fotoelektrokimyasal güneş pillerinde kullanımları açıklanmıştır.

ZnO geniş yasak bölge bant aralığına (3,34 eV), yüksek eksiton bağlanma enerjisine (60 meV) ve yüksek elektron taşıdırlığına sahiptir [1]. Bu özelliklerinden dolayı son yirmi yıl boyunca, boya duyarlı güneş pilleri, sensörler, foto katalizörler, ışık yayan diyotlar, alan etkili transistörler ve diğer uygulamalarda kullanılmaya başlanmıştır. Bu çalışmada, bir ve üç boyutlu ZnO nano yapılarda görülen hiyerarşinin optik ve fotoelektrokimyasal özellikler üzerine olan etkileri özetlenmiştir.

Bu çalışmada, bir ve üç boyutlu ZnO nano yapılarda görülen hiyerarşinin optik ve fotoelektrokimyasal özellikler üzerine olan etkileri özetlenmiştir.

Tablo 1'de verildiği üzere farklı deneysel parametreler kullanılarak hazırlanan ince filmlerin, maksimum dış kuantum verimleri (IPCE) artırılmıştır. Bu artışta oluşan morfolojinin yüzey alanı, kristal yapı ve özellikle oksijen boşluklarının etkili olduğu saptanmıştır.

Çalışmanın ikinci bölümünde hiyerarşik yapıların performans üzerine etkileri araştırılmıştır. Paslanmaz çelik folyo üzerine büyütülen ZnO nanoçubukların mekanik stres ile düzenli hale getirilmesi sonucunda artan soğurmaya bağlı olarak güneş pili verimlerinin arttığı görülmüştür (Şekil 1A). Ayrıca, nano yapıların desenlenmesi için nansaniye fiber lazer ile ZnO'nin büyüme kinetiği yavaş olan yüzeyler çizilerek kontrollü geometriler üretilmiştir (Şekil 1B).

Teşekkür

Bu çalışma 315M348 nolu proje ile Tübitak tarafından desteklenmiştir.

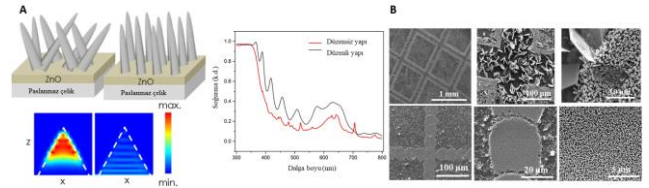
Kaynakça

1. Ü. Özgür, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Doğan, V. Avrutin, S.-J. Cho, H. Morkoç, "A comprehensive review of ZnO materials and devices", Journal of Applied Physics 98, 041301 (2005).
2. A.Kołodziejczak-Radzimska, T. Jesionowski, "Zinc Oxide-From Synthesis to Application: A Review", Materials, 7, 2833-2881 (2014).

Tablo 1: Kimyasal banyo büyüme yöntemi ile üretilen ZnO ince filmlerin bazı performans değerleri

Anyon kaynağı	Mak. IPCE (%)	Zn/O
Çinko asetat	11	4,41
Çinko nitrat (pH=5,6)	50	0,87
Çinko nitrat (pH=6,0)	74	0,92

Lazer parametreleri kontrol edilerek yüzeyin farklı bölgelerinde farklı ZnO nano yapıların büyümesi sağlanmıştır. Son olarak ZnO nano yapılar üzerine perovskit tabanlı yarıiletkenler kaplanarak bu yapıların fotoelektrokimyasal güneş pili performansları çalışılmış olup, elde edilen veriler ZnO-perovskit heteroeklemlerin solar hidrojen üretiminde kullanım potansiyellerinin yüksek olduğunu göstermiştir.



Şekil 1: A. Mekanik stres uygulanmasıyla nanoyapıların düzenli hale getirilmesi, B. Lazer ablasyon tekniği ile ZnO nano yapıların desenlenmesi.

İki-boyutlu Katmanlı GaN Yapıları: van der Waals Etkileşimi ve Ötesi

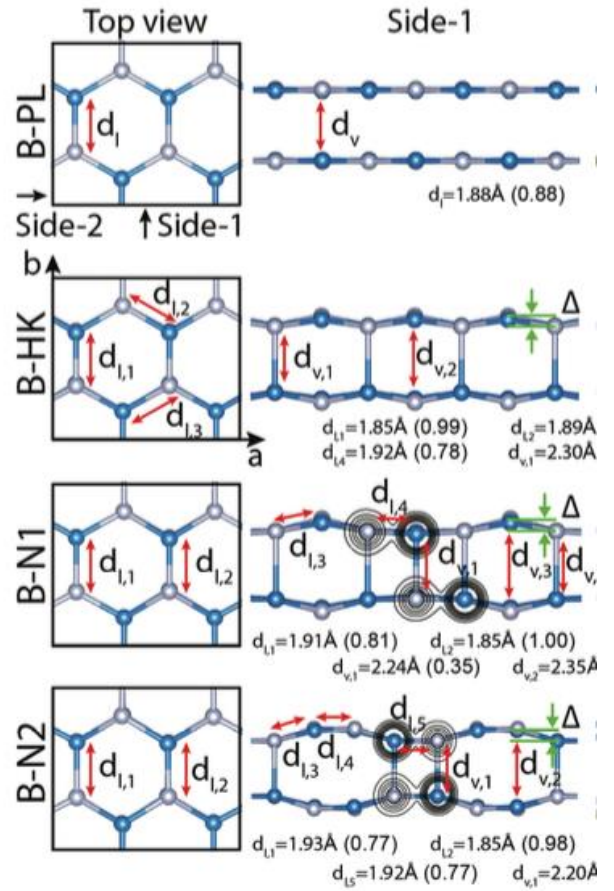
A. Önen, D. Keçik, S. Çıracı ve E. Durgun

UNAM-Ulusal Nanoteknoloji Araştırma Merkezi ve Malzeme Bilimleri ve Nanoteknoloji Enstitüsü,
Bilkent Üniversitesi, 06800, Ankara, Türkiye)

Tek katman GaN bal peteği örgüsünde düzlemsel kararlı yapıya sahiptir. GaN atomik katmanlarını üst üste yerleştirerek çok katman yapılar hatta üç-boyutlu (3B) periyodik yapılar elde etmek mümkündür. Bu katmanların birbiri arasında nasıl etkileşeceği, diğer bir deyişle zayıf van der Waals etkileşimi mi olacağı yoksa dik kuvvetli bağların mı oluşacağı anlaşılması gereken önemli bir problemidir. Bu çalışmamızda iki-katman GaN yapısından başlayarak bu problem üzerinde araştırmalar yaptık ve etkileşim kuvvetine göre oluşan farklı fazları belirledik.

3B GaN kristali lazer, detektör, LED gibi uygulamalarda kullanılan önemli bir yarı-iletkenidir. Yakın zaman önce ultra ince GaN'ın sentezlenmesi ile birlikte iki-boyutlu (2B) GaN yapıları da ümit vadede yeni sistemler olarak ilgi çekmektedir [1]. Teorik analizler tek katman GaN'ın bal peteği örgüsünde düzlemsel kararlı yapıya (h-GaN) sahip olabileceğini ve ilginç özelliklere sahip olduğunu ortaya koymuştur [2]. Çok katman GaN yapılarının nasıl oluşacağı ise net olarak bilinmemektedir. Katmanlar arasındaki etkileşim grafende olduğu gibi zayıf van der Waals şeklinde mi yoksa silisende olduğu gibi dik kimyasal bağlar oluşturacak kuvvette mi olacağı önemli bir problemidir.

Bu çalışmamızda yoğunluk fonksiyoneli kuramına dayanan ilk-prinsip hesaplama yöntemleri ile iki-, üç- ve çok-katman GaN yapılarını inceledik [3]. İlk önce katmanlar arası etkileşimi analiz ettik. Elde ettiğimiz sonuçlara göre katmanlı GaN yapılarının hem düzlemsel (vdW etkileşimi), hem de buruşuk (dik kimyasal bağlar) geometriler oluşturduğunu bulduk. Bunlara ek olarak vdW etkileşiminden kuvvetli, bağ oluşturma başlangıcı olarak kabul edilebilecek yeni bir bağlanma türü ve buna bağlı yeni allotroplar öngördük (Şekil 1). Bu sistemlerin kararlılık testleri yapıldıktan sonra elektronik yapılarını karşılaştırmalı olarak inceledik. Bunlara ek olarak fazlar arasında gerilim uygulayarak yük transferi ile geçişler olabileceğini gösterdik.



Şekil 1: İki-katman GaN yapısının, katmanlar arası etkileşimin türüne göre oluşan farklı allotropları

Elde ettiğimiz bulgular hem 2B katmanlı yapıların anlaşılması hem de uygulamaları için önem arz etmektedir.

Teşekkür: Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 117F241 numaralı proje kapsamında desteklenmektedir.

Kaynakça

1. D. Keçik, A. Onen, M. Konuk, E. Gurbuz, F. Ersan, S. Cahangirov, E. Akturk, E. Durgun, and S. Ciraci, Appl. Phys. Rev. 5, 011105 (2018).
2. A. Onen, D. Keçik, E. Durgun and S. Ciraci, Phys. Rev. B 93, 085431 (2016).
3. A. Onen, D. Keçik, E. Durgun, S. Ciraci, Nanoscale 10 (46), 21842-21850 (2018).

ZnSnTe İNCE FİLMLERİNİN MALZEME ve AYGIT KARAKTERİZASYONU

Özge BAYRAKLI SÜRÜCÜ^{1,2*}, Hasan Hüseyin GÜLLÜ³

¹Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi- Fizik Bölümü, 40100 Kırşehir

²Ortadoğu Teknik Üniversitesi- Güneş Enerjisi Araştırma ve Uygulama Merkezi, 06800Ankara

³Atılım Üniversitesi-Elektrik Elektronik Mühendisliği, 06836

İnce film güneş pilleri fotovoltavik endüstrisinde hatırı sayılır ölçüde önem kazanmıştır. İnce film amorf silisyum güneş pillerinde verim %14'ler civarında iken son günlerde popüler olan Cu(In,Ga)Se₂ (CIGS) ince film bazlı güneş pillerinde maksimum verim %20'lere ulaşmıştır [1,2]. Fakat CIGS'e dayalı güneş pillerinin maliyetleri, büyük ölçekli üretiminin zorluğu ve kendisini meydana getiren elementlerin bulunabilirliği bu yapılara bazı kısıtlamalar getirmektedir. Öte yandan, Cu₂ZnSnSe₄ (CZTSe) gibi Kesterit tabanlı güneş hücreleri Zn ve Sn gibi kendisini meydana getiren elementlerin In ve Ga elementlerine oranla daha ucuz ve doğada daha bol miktarda bulunmaları sebebiyle daha popüler olmaya başlamıştır [3].

Bu çalışmada, ZnSnTe (ZST) ince filmleri, ZnTe ve SnTe ikili bileşik katmanları halinde magnetron saçırma yöntemi ile soda-kireç cam ve n-Si yonga alttaşları üzerine kaplanmıştır. Doğada bol bulunan malzemeler temel alınarak ince film fotovoltaik alanında daha çok Se ve/veya S temelli yapılarda Zn ve Sn kullanımı araştırma konusu olsa da, bu yeni alanda Te temelli düşük Sn konsantrasyonlu ZST yapısı alternatif p-tipi geniş yasak enerji değerine sahip malzeme olarak üretilmiş ve karakterize edilmiştir. Üretim sonrası tavlama işlemleri ile, ince filmlerin kompozisyon, yapısal, yüzey morfolojisi, optik ve elektrik özellikleri incelenmiştir. Bunlara ek olarak, elektriksel iletkenlik değerlerini iyileştirmek için tavlama işlemlerinde uygulanan süre üzerinde optimizasyon çalışmaları yapılmıştır. Aygıt uygulaması olarak, ZST ince film tabakası In/p-ZST/n-Si/Ag heteroeklem yapısını elde etmek için n-Si yonga üzerine büyütülmüştür. Bu diyot yapısının detaylı elektriksel karakterizasyonu farklı sıcaklıklıklarda akım-voltaj ölçümleri yardımı ile yapılmıştır ve temel diyot parametreleri ve akım taşıma mekanizmaları belirlenmiştir.

Kaynakça

1. H. H. Güllü, Ö. Bayraklı, İ. Candan, E. Coşkun and M. Parlak, “Optical and electrical characteristics of thermally evaporated Cu_{0.5}Ag_{0.5}InSe₂ thin films”, Thin Solid Films 639 (2017) 29-35
2. Ö. Bayraklı, M. Terlemezoglu, H. H. Güllü and M. Parlak, “The effect of precursor sequence and post-annealing on the properties of Cu₂ZnSnSe₄ thin films deposited by the elemental thermal evaporation”, Materials Research Express 4 (2017) 86411
3. Ö. Bayraklı, M. Terlemezoglu, H. H. Güllü and M. Parlak, “Deposition of CZTSe thin films and illumination effects on the device properties of Ag/n-Si/p-CZTSe/In heterostructure”, Journal of Alloys and Compounds 709 (2017) 337–343

Ultra soğuk gazların kendini dengeleyen damlacıkları*

Mehmet Özgür Oktel

Bilkent Üniversitesi- Fizik Bölümü, 06800 Ankara

Ultra soğuk atom deneyleri havadan yüz bin kat daha seyrek gazlar üzerinde, nanokelvin mertebesinde sıcaklıklarda yapılmaktadır. Bu düşük sıcaklıklarda Boson sistemlerinde Bose-Einstein Yoğuşması görülmesinin ötesinde, sistemde etkileşimlerin önemi çok büyük olmaktadır. Genel olarak gaz atomları birbirlerini itecek şekilde etkileşiyorsa gaz mümkün olduğu kadar seyrek hale gelmek için genişleme eğiliminde olacaktır ve gazı tutmak için elektromanyetik kuvvetlerle oluşturulan bir tuzak gerekecektir. Aksine eğer etkileşimler atomların bir birini çekmesi yönünde ise gaz giderek küçülme eğiliminde olacak, Fermi sistemlerinin aksine bir Pauli basıncı olmadığı için, bu küçülme molekül oluşumu ve sıvı faza doğru bir çöküş gerçekleştirecektir.

Bu genel eğilime uymayan bir sistem ilk olarak 2015 yılında Stuttgart Üniversitesinde yapılan bir deneyde gözlemlendi [1]. Dipol etkileşimlerinin kuvvetli olduğu Disprosyum gazı ile yapılan deneyde çökmesi beklenen gazın her birinin içinde yaklaşık 1000 atom bulunan damlacıklara bölündüğü ve bu damlacıkların gözlem süresi boyunca kararlı olduğu gözlemlendi. Daha sonra yapılan deneyler ile bu sistemde çökmeye karşı dengeleyen basıncı kuantum dalgalanmalarının sağladığını gösterdi. Teorik olarak ilk olarak iki bileşenli karışımlar için ortaya konulan bu mekanizma [2], ortalama alan teorisi ötesindeki ilgileşimlerin (korelasyonların) önemini hem dipolar gazlar hem de karışımlar [3] için ortaya koydu.

Geçen yıl içerisinde yaptığımız çalışmalarla[4] kuantum dalgalanmalar tarafından dengelenen bu damlacık fazlarının sıcaklık dalgalanmalarına karşı da aşırı derece hassas olduğunu gösterdik. Dalgalanmaları kuantum ve sıcaklık kaynaklı diye ayırmadan yoğuşuk üzerindeki etkilerini tutarlı bir şekilde dikkate almak için Hartree-Fock-Bogolubov teorisini bu sistemlere uyarladık. Sıcaklığın, yoğuşma sıcaklığından çok daha düşük mertebelerde bile önemli olduğunu ve bu etkinin deney sonuçları ile sıfır sıcaklık teorisi arasındaki uyumsuzluğu açıklayabileceğini ortaya koyduk.

Bu konuşmada ultra soğuk gaz deneyleri hakkında genel bilgilerden sonra damlacık fazını ilginç kılan özelliklere ve bunların deneysel sonuçlarına yer vereceğiz. Sistemin dinamik özelliklerini, ve ani değişimlere tepkisini de özetleyeceğiz.

- Tübitak 1001- 116F215 proje numarası ile desteklenmektedir. Enes Aybar ile ortak çalışmalar.

Kaynakça

1. H. Kadau, M. Schmitt, M. Wenzel, C. Wink, T. Maier, I. Ferrier-Barbut, and T. Pfau, “Observing the Rosensweig instability of a quantum ferrofluid”, Nature (London) 530, 194(2016).
2. D. S. Petrov, “Quantum Mechanical Stabilization of a Collapsing Bose-Bose Mixture”, Phys. Rev. Lett. 115, 155302 (2015).
3. R. Cabrera, L. Tanzi, J. Sanz, B. Naylor, P. Thomas, P. Cheiney, and L. Tarruell, “Quantum liquid droplets in a mixture of Bose-Einstein condensates” Science 359, 301-304 (2018)
4. E. Aybar and M. Ö. Oktel, “Temperature-dependent density profiles of dipolar droplets”, Phys. Rev. A 99, 013620 (2019)

Spin-dalga elektroniği için tümleşik malzeme ve bileşenler

Mehmet Cengiz Onbaşlı

Koç Üniversitesi, Elektrik-Elektronik Mühendisliği Bölümü, Rumelifeneri Yolu Sarıyer 34450, Türkiye

Çok düşük Gilbert sönümleme sabiti olan yüksek kaliteli manyetik yalıtkan ince film demir garnetlerin geniş alanlarda 100 nm'den ince üretilmesi ve desenlenmesi yeteneğinin gelişmesi nedeniyle yakın zamanda entegre spin-dalga cihazlarına ilişkin araştırmalar hız kazandı. Bu sunumda, yitrium demir garnet ve tulyum demir garnet yalıtkan filmleriyle ve Platin kontaktlarla geliştirilen spin Seebeck etkisi, mikrodalga spin dalgakılavuzu ve spin kimyasal potansiyeli ölçümleri anlatılacaktır. Belirtilen sistemlerin klasik ve kuantum bilgi işleme mimarilerindeki önemi ve işlevi açıklanacaktır.

İnce film yalıtkan manyetik demir garnet filmler, 5 GHz'den en az 7 THz aralığında (Yttrium demir garnet'in 1. Brillouin bölgesi) ve çok düşük Joule ısınmasına sahip spintronik mantık devrelerinin üretilmesine olanak tanımaktadır. Her bir spintronik VE, VEYA ve DEĞİL mantık devresinin dalga temelli hesap kabiliyetleri sayesinde, 20'den fazla transistörle eşdeğer işlev görebilmektedir. Böylece üretim ve geometrik tasarım kısıtlamaları spintronik aygıt mimarileriyle basitleştirilebilmektedir. Belirtilen cihazlar 1-5 GHz bantlarında çalıştığından, antenler kullanarak temassız kablolu yapılar mümkün hale gelir ve entegre devrelerde dalga kılavuzu olarak çalıştırmak da kolaylaşmaktadır. Bu fonksiyonel yetenekler; araştırmacıların günümüzdeki transistörlerdeki Ohmik ısınma ve 20 nm altı üretim gibi pahalı üretim

süreçlerinden kaynaklanan gereksinimlerini ve maliyetleri aşmalarını sağlar [1].

Bu sunumda, ilk önce düşük nemlendirmeli ve düzlem içi (YIG, Y₃Fe₅O₁₂) ve düzlem dışı (TmIG, Tm₃Fe₅O₁₂) anizotropisine sahip manyetik ince filmler hakkındaki son çalışmalarımızı açıklayacağım [2]. Sunumun ikinci yarısında, manyetik ince filmler kullanarak çeşitli farklı spin cihazı uygulamalarımızı detaylandıracağız: 1) düşey yönelimli manyetik ince filmlerin geliştirilmesi [3], spin-yörünge torkları [4] ve spin kimyasal potansiyelinin kontrolü ve lokal ölçümü [5].

Kaynakça

1. A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga & B. Hillebrands, "Magnon Spintronics," *Nature Physics* **11**, 453 (2015).
2. M. C. Onbasli et al., "Pulsed laser deposition of epitaxial yttrium iron garnet films with low Gilbert damping and bulk-like magnetization," *APL Materials* **2**, 106102 (2014).
3. A. Quindeau et al., "Tm₃Fe₅O₁₂/Pt Heterostructures with Perpendicular Magnetic Anisotropy for Spintronic Applications," *Advanced Electronic Materials* (accepted).
4. M. Montazeri et al. "Magneto-optical investigation of spin-orbit torques in metallic and insulating magnetic heterostructures," *Nature Communications* **6**, 8958 (2015).
5. C. Du et al., "Control and local measurement of the spin chemical potential in a magnetic insulator," *Science* **357**, 195 (2017).

Majorana bilardolarının şeklini duyabilir miyiz?

Barış Pekerten

Sabancı Üniversitesi – Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, 34956 İstanbul

Topolojik yalıtkanlar ve üstüniletkenler, spintronik, kuantum termodinamiği ve kuantum bilgisayar uygulamalarıyla geçtiğimiz on yılın yoğun ilgi gören araştırma alanları arasındadır. Heyecan verici bu konuya kısa bir girişten sonra, Majorana bilardolarının, yani Majorana fermiyonları bulundurabilen sonlu büyüklükte ve herhangi bir şekildeki üstüniletken adacıklarının fermiyon eşliği geçişlerinden (parite geçişleri) söz edeceğim. Ardından, uygulanan manyetik alanın ve kimyasal potansiyelin değişimi ile oluşan fermiyon eşlik geçişlerinin ortalama yoğunluğunun bilardonun geometrik boyuna ve sınırlarına nasıl bağlı olduğunu gösteren elde ettiğimiz formüllerden bahsedeceğim. Sonra bu ortalama yoğunluk değerleri etrafındaki dalgalanmaların bilardonun klasik yörüngelerine nasıl bağlı olduğunu ifade edeceğim. Son olarak eşlik geçişleri aralıklarının istatistiğinin, sistemin normal durumundaki antiüniter simetrisi tarafından belirlenen bir rastgele matris topluluğu ile tanımlanabildiğine değineceğim. Böylece Mark Kac'ın ünlü sorusuna atıfla “Majorana bilardolarının şeklini (şekli hakkında bilgileri) eşlik değişim tayfını (spektrumunu) inceleyerek duyabildiğimizi” anlatacağım. [1-3]

Kaynakça (Times New Roman, Bold,10 punto)

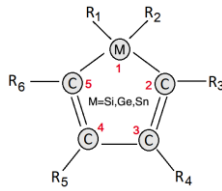
1. B. Pekerten, A. Teker, Ö. Bozat, M. Wimmer, and İ. Adagideli, Physical Review B 95 (2017)
2. A. M. Bozkurt, B. Pekerten, and İ. Adagideli, Physical Review B 97 (2018)
3. B. Pekerten, A. M. Bozkurt, and İ. Adagideli, arXiv 1812.11331 (2018)

Metalol Molekülleri Yarıiletken Bir Yüzeyle Karşılaşırsa: Bir DFT Çalışması

Çağıl Kaderoğlu¹ ve Şinasi Ellialtıoğlu²¹Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, Ankara²TED Üniversitesi, Temel Bilimler Birimi, Kolej, Ankara

Çok-fonksiyonlu moleküller, ilginç moleküler sistemlerin yapıtaşlarını oluşturmaları nedeni ile giderek artan bir önem kazanmaktadır. Örneğin, metalol moleküllerinin bilindik yarıiletken yüzeyleri ile biraraya getirilmesinin, farklı elektronik ve optik özelliklere sahip malzemelerin dizaynında yeni olanaklara yol açması beklenmektedir.

Çok-fonksiyonlu moleküllerden olan Metaloller (Şekil 1), ilginç elektronik ve foto-fiziksel özelliklere sahiptir.



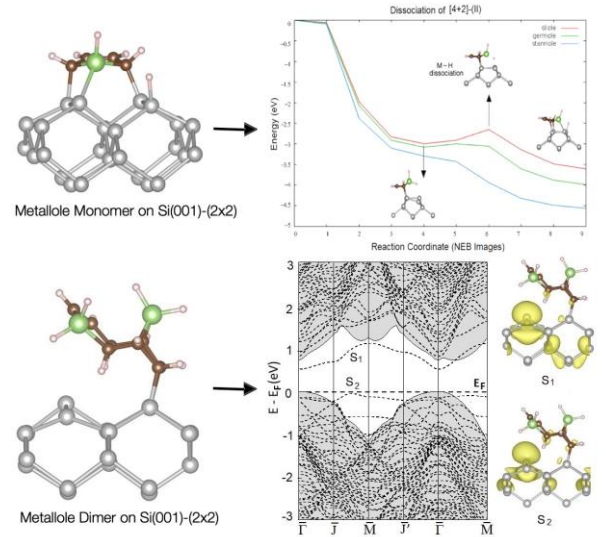
Şekil 1. Metalol molekülü

Bu çalışmada, Metalol (MC_4H_6 ; $M = Si, Ge, Sn$) molekülleri ile dekore edilmiş $Si(001)-(2 \times 2)$ yüzeyinin yapısal ve elektronik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) ile incelenmiştir. İlk olarak izole moleküllerin yapısal parametreleri belirlenmiştir. Daha sonra bu moleküllerin silisyum yüzeyine tutunabileceği sekiz farklı konfigürasyon ele alınmıştır. Bu hesaplamalar sırasında, Stanol-[4+2]-(II) modelinde moleküle bağlı bir H atomunun silisyum yüzeyine kendiliğinden ayrıştığı (dissociation) görülmüştür. Bu durum, tüm M atomları için $M-H$ ve $C-H$ ayrışmalarını içeren üç farklı ayrışma modelinin de incelenmesini gerektirmiştir.

Toplam enerji ve adsorpsiyon enerjisi hesaplarına göre, ayrışmamış modellerde Köprü-(I) tipi bağlanma, ayrışmış modellerde ise $M-H$ ayrışması en kararlı yapı olarak belirlenmiştir. Ayrıca, hem ayrışmamış hem de ayrışmış modeller arasındaki yapısal geçişlerin enerji bariyerleri belirlenmiştir. En yüksek bariyer değeri, [2+2]-(I)'den Köprü-(II) modeline geçişte gözlenmiştir.

Teşekkür

Bu çalışma Kalkınma Bakanlığı DPT2006K-120470 numaralı proje kapsamında desteklenmiştir.



Şekil 2. $M-H$ ayrışmasının enerji bariyeri (üst), silisyum yüzeyine tutunmuş metalol dimerlerinin enerji band grafiği (alt)

Çalışmanın son aşamasında, metalol moleküllerinin dimerleşmesi incelenerek, en kararlı dimer formunun $Si(001)-(2 \times 2)$ yüzeyine tutunması araştırılmıştır. İncelenen modeller arasında exodimer modelinin en kararlı bağlanma durumunu verdiği gözlenmiştir.

Elektronik yapı hesaplamalarına göre, temiz (2×2) silisyum yüzeyinin yaklaşık 0.05 eV olan enerji band aralığı, metalol monomerlerinin ve dimerlerinin adsorpsiyonuyla, sırasıyla, ~0.9 eV ve ~0.6 eV kadar genişlemiştir.

Tek Tabakalı Yarıiletken Geçiş Metali Kalkojenitleri ve Oksitleri'nin Balistik Termoelektrik Özellikleri

Gözde Özbal¹, Cem Sevik², R.Tuğrul Senger¹, Hâldun Sevinçli³

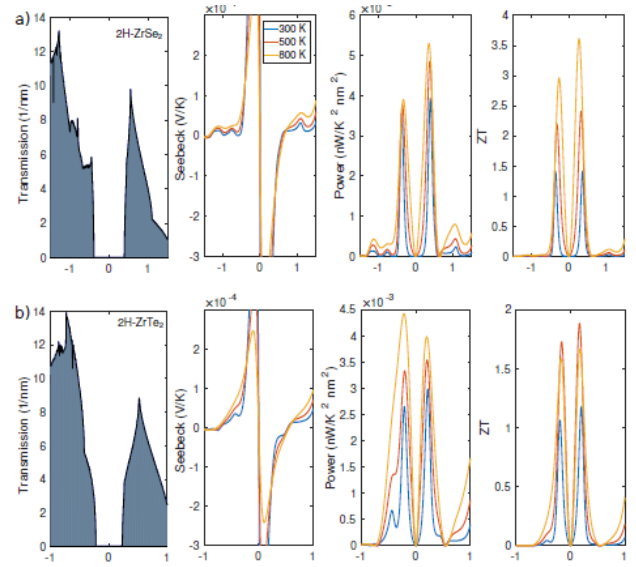
¹İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430 Urla, İzmir

²Eskişehir Teknik Üniversitesi, Makine Mühendisliği Bölümü, 26555, Tepebaşı, Eskişehir

³İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Bölümü, 35430 Urla, İzmir

Bu çalışmada, 2H ve 1T fazlarındaki geçiş metali kalkojenitleri ve oksitlerinin (iki boyutlu MX₂ kristalleri, M=Cr,Mo,W,Ti,Zr,Hf; X=O,S,Se,Te), balistik termoelektrik özellikleri, yoğunluk fonksiyoneli teorisi ve Landauer-Büttiker formülasyonları ile incelenmiştir. Bu geniş ailede yarıiletken özellik gösteren ve dinamik kararlılığa sahip yapıların taşınım ve termoelektrik özellikleri farklı sıcaklıklar için hesaplanmıştır. Oda sıcaklığında 2H fazındaki HfSe₂, ZrSe₂, ZrTe₂ ve HfS₂ malzemelerinin *p*-tipi termoelektrik performans katsayısı (*ZT*) değerleri 1'in üstünde bulunmuştur. Ayrıca HSE06 hibrit fonksiyonellerinin uygulanması ile değişen bant aralığı değerlerinin Seebeck katsayısı ve termoelektrik verim üzerindeki etkisi, dar bant aralığına sahip dört malzeme ve bir yarı-metal malzeme için analiz edilmiş ve termoelektrik verimlerinin yüksek sıcaklıklarda arttığı gözlemlenmiştir.

Termoelektrik malzemeler, Seebeck ve Peltier etkilerine dayanarak, sıcaklık farkı ile elektrik akımı üretimine ve voltaj farkı uygulanarak sistemin soğutulmasına olanak sağlarlar. Termoelektrik çevrimin verimi, boyutsuz performans katsayısı *ZT* ile belirlenir ve, $ZT = S^2GT/(\kappa_{ph} + \kappa_{el})$ ile verilir. Burada *S* Seebeck katsayısı, *G* elektronik iletkenlik, *T* sıcaklık, κ_{ph} termal iletkenliğe fononların katkısı ve κ_{el} termal iletkenliğe elektronların katkısıdır. *ZT*'nin, birbirleri ile ilişkili olan elektronik ve termal özellikleri içermesi sebebiyle, termoelektrik verimi maksimize edecek optimum parametreleri, elde etmek oldukça zordur. Uzun yıllar üç boyutlu yapılar üzerine çalışıldıktan sonra, düşük boyutlu yapıların artması ile yüksek verime sahip termoelektrik malzemelerin araştırılması yeni bir ivme kazanmıştır. Bir yandan grafenin termoelektrik veriminin nano-yapılandırma yöntemleri ile artırılması yönünde çalışmalar devam ederken[1], diğer yandan da geçiş metali kalkojenitleri ve oksitleri geniş bant aralıkları ve düşük termal iletkenlikleri ile ilgi çekmektedir[2]. Bu çalışmada, dinamik olarak kararlı ve yarıiletken 26 yapının, elektronik taşınım, termal taşınım ve termoelektrik özellikleri balistik limitte incelendi. Yapısal parametreler, yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak hesaplandı. Elektronik, fononik taşınım spektrumları ve termoelektrik katsayılar, yoğunluk fonksiyoneli hesapları ve Landauer-Büttiker formülasyonunun birleştirilmesiyle türetildi.



Şekil 1: 2H-ZrSe₂ ve 2H-ZrTe₂ için elektronik taşınım, Seebeck katsayısı, güç faktörü ve termoelektrik performans katsayısının, fermi enerjisi etrafında gösterimi.

Oda sıcaklığında maksimum *p*-tipi termoelektrik verim 2H-HfSe₂ için 1.57 olarak elde edilirken, bu değer 800 K'de *ZT* 3.30'a kadar yükseldi. Dar bant aralığına sahip seçilmiş malzemeler için ise HSE06 fonksiyoneli ile ilk prensip hesaplamaları yapılarak termoelektrik katsayıları hesaplandı.

Teşekkür

Bu çalışma 117F131 numaralı TÜBİTAK araştırma projesi kapsamında desteklenmiştir.

Kaynakça

1. R. D'Souza and S. Mukherjee, "Enhancement of thermoelectric figure-of-merit of graphene upon BN-doping and sample length reduction.", *Journal of Applied Physics* **124**, 124301 (2018).
2. G.Zhang, Y.W.Zang, "Thermoelectric properties of two-dimensional transition metal dichalcogenides ", *J. Mater. Chem. C* **5**, 7684 (2017).

Alkyl Bazlı Bazı Sıvı Kristallerin ve Karışımlarının Dielektrik Özelliklerinin Belirlenmesi

Atilla Eren Mamuk

Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Sıvı ve Katı Kristaller Laboratuvarı, TR48000, Muğla/Türkiye

Sıvı kristal bileşiklerinin önemli fiziksel özellikleri araştırmacılar için artan bir ilgi uyandırmaktadır. Sıvı kristal teknolojisindeki yaygın uygulamaları nedeniyle bu malzemelerin araştırılması, ekran ve sensör teknolojisi için oldukça önemlidir. Sıvı kristaller anizotropik özelliklere sahip oldukları için faz geçiş sıcaklığı, optik özellikler, dış fiziksel alanlar (elektrik alan, manyetik alan gibi) altındaki davranışları vb. fiziksel özelliklerinin üzerine yoğun çalışmaların gerçekleştirilmesine ihtiyaç duyulmaktadır. Sıvı kristaller zayıf elektriksel geçirgenliğe sahiptir ve dış elektrik alan altında kutuplanabilmektedirler. Dielektrik geçirgenlik makroskopik bir büyüklüktür ve dış elektrik alan ile makroskopik polarizasyona bağlıdır. Bu çalışmada, farklı türlerde alkyl bazlı çok özel sıvı kristallerin ve karışımlarının elektriksel ölçümleri, farklı sıcaklıklarda ve frekanslarda hem planar hem de normal yönelim durumları için izotropik sıvı fazdan katı kristalite faza kadar yapılmıştır. Ayrıca, söz konusu sıvı kristallerin dielektrik sabitleri termik alan altında incelenmiştir. Detaylı bilgi ve çalışma sunumda verilecektir.

POSTER SUNUMLARI

MOCVD ile Büyütülen InGaN/GaN Yapısının SEM Analizi

Ahmet Kürşat BİLGİLİ⁽¹⁾, Ömer AKPINAR⁽²⁾, Mustafa Kemal ÖZTÜRK⁽²⁾, Süleyman ÖZÇELİK^(1,2), Ekmel ÖZBAY⁽³⁾

¹ Gazi Üniversitesi Fen Fakültesi-Fizik Bölümü

² Gazi Üniversitesi- Fotonik Araştırma Merkezi

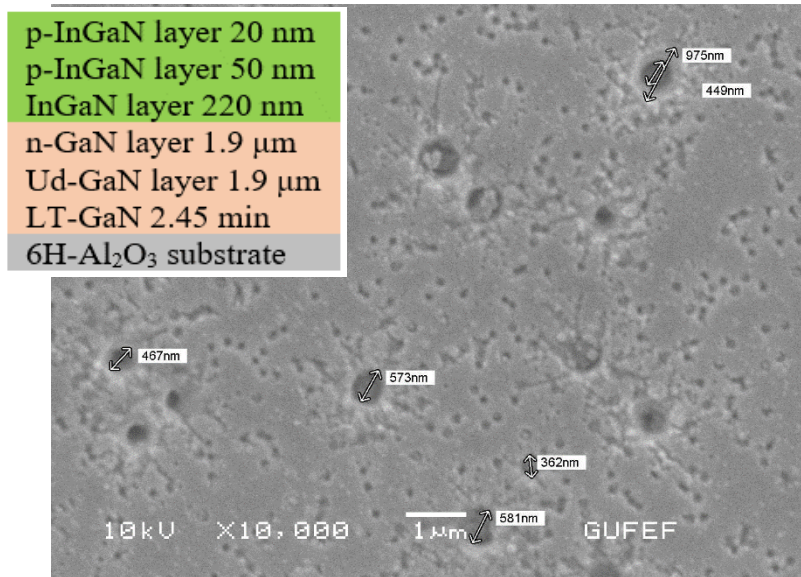
³ Bilkent Üniversitesi Fizik Bölümü

Özet

Bu çalışmada InGaN/GaN çoklu kuantum kuyusu yapı, Kimyasal Buhar Biriktirme (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) MOCVD yöntemi ile büyütülmüştür. Büyütme Safir (Al_2O_3) altaş üzerine yapılmıştır. Safirin üzerine direk olarak aktif tabakaların büyütülmesi masraflı ve zahmetli bir süreçtir. Çünkü iki yapı arasında örgü uyumsuzluğu ve ısıl genleşme katsayıları arasındaki farklılıklardan kaynaklanan çatlaklar oluşabilir. Buda oluşturulacak cihazın çalışmamasına ya da hatalı çalışmasına neden olabilir. Bu durumu engelleyebilmek için düşük sıcaklıkta bir GaN tampon tabaka ilk olarak safirin üzerine büyütülür. Bunun üzerine ise aktif tabakalar sorunsuz bir şekilde büyütülebilir. Bu operasyonun yapılmasına rağmen yine de sözünü ettiğimiz örgü uyumsuzluğu ve termal genleşme katsayıları arasındaki farklılıklar çatlaklar boyutunda olmasa da yüksek derecede dislokasyonlara neden olur. Bu yüksek dereceden olan dislokasyonlara tedirgin edici dislokasyonlar denir. Bu dislokasyonlar büyütülen yapının içinde mikro borular gibi davranır ve yapının elektriksel özelliklerine pozitif katkı yapabilir.

Bu çalışmada bu dislokasyon mikro borularının yüzeyde bittiği yer SEM(Scanning Electron Microscopy) ile görüntülenmiştir. Bunlara literatürde *Pinhole* yani iğne deliği diyoruz. *Pinhole*'lar SEM analizinde şekilde net bir şekilde görülmektedir. Bunların üzerinde bu deliklerin çapları hakkında da bilgi vardır. *Pinhole*'ların çapları randomizedir. Çünkü dislokasyon mikro borularının genişliği büyütme sırasında tamamen tesadüfi olarak oluşur. Bir standardı yoktur.

Anahtar Kelimeler: *Pinhole, dislokasyon, InGaN, GaN, SEM.*



InGaN/GaN yapının şeması ve SEM görüntüsü

Grafen Nanoşeritlerdeki Manyetik Safsızlıkların Spin-Spin Etkileşimleri

Anıl Kolay, Nejat Bulut, A. Devrim Güçlü

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü – Fizik Bölümü – 35433 - İzmir

Grafen, iki boyutlu karbon atomlarının bal peteği örgü yapısı, yüksek elektronik ve termal iletkenliğinden dolayı nanoelektronik bir malzeme olarak gelecek vaat etmektedir [1]. Buna ek olarak, nanoölçekli grafen yapılarında manyetik momentlerin oluşması nanoelektronik ve spintronik cihaz uygulamaları açısından önemlidir.

Manyetik momente sahip ve herhangi bir iki boyutlu yapı üzerinde konumlandırılmış safsızlık atomları birbirleri ile yapıya ait elektronlar aracılığıyla etkileşim içerisindedirler ve bu etkileşim Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY) olarak bilinir. Diğer bir yandan, grafendeki RKKY etkileşimi, diğer iki boyutlu yapıların aksine, safsızlık atomları arasındaki mesafeye bağlı olarak $1/R^3$ şeklinde azalır [2].

Bu çalışmada, periyodik sınır koşullu, 10516 atomdan oluşan zikzak grafen nanoşerit üzerine yerleştirilen iki manyetik safsızlık atomları arasındaki etkileşimi hesaplamak için kuantum Monte Carlo tekniği kullandık. Çalışmamız süresince, iki safsızlık atomlarından birini sabit tutup diğer atomu zikzak yönünde uzaklaştırarak ikisi arasındaki korelasyonu hesapladık ve bu işlemleri grafenin iki farklı alt örgüsü için tekrarladık. Sonuç olarak, safsızlık atomları nanoşeridin kenarlarından uzaktayken beklediğimiz gibi yığın grafenin sonuçları ile tutarlı sonuçlar elde ettik [3]. Fakat, safsızlık atomlarının kenar durumlarına yaklaştıkça önemli farklılıkların ortaya çıktığını gözlemledik. Dahası, grafen nanoşeridin, uzunluğunu sabit tutup genişliğini simetrik olarak ve gittikçe azaltarak, kenarlarından uzaktayken korelasyonu hesapladık ve başlangıçta kullandığımız grafen yapısının sonuçlarından farklı olduğunu ve genişliği azaldıkça değiştiğini gözlemledik. Ek olarak, sistemimizdeki kimyasal potansiyeli değiştirerek tutarlı sonuçlar elde ettik [4]. Diğer yandan, ortalama alan Hubbard (Mean-Field Hubbard Hamiltonian) modelini kullanarak ortalama alan yaklaşımını (Mean-Field Approximation) ile iki manyetik safsızlık atomları arasındaki etkileşimi hesapladık. Sonuç olarak, elde ettiğimiz verilerin kuantum Monte Carlo verileri ile farklı olduğunu gözlemledik [5,6]. Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 114F331 numaralı proje altında desteklenmiştir.

Kaynakça

1. A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109, (2009)
2. Kogan, E. Phys. Rev. B, 84, 115119, (2011)
3. A. D. Güçlü, and N.Bulut, Phys. Rev. B 91, 125403 (2015)
4. J.H. Sun, F.M. Hu, H.K. Tang, W. Guo, and H.Q. Lin, Journal of Applied Physics 113, 17B515(2013)
5. Annica M. Black-Schaffer. PhysRevB.81.205416
6. Annica M. Black-Schaffer. PhysRevB.82.073409

2-boyutlu MXene'lerin, fonon dinamik kararlılığının, yapısal ve elektronik özelliklerinin ilk prensipler yöntemi ile araştırılması

Berna Akgenc

Kırklareli Üniversitesi- Fizik Bölümü, 39020 Kırklareli

Bu çalışmada, 2-boyutlu geçiş metal karbürlerinin (Re_2C , Tc_2C , Mo_2C , W_2C , Os_2C , Ru_2C) yapısal, mekanik ve elektronik özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak ilk prensipler yöntemleri ile incelenmiştir. 4d/5d karbürlerinin 2-boyutta olabilecek mümkün T ve H fazları için fiziksel özellikleri araştırılmıştır. Spin polarize durumlar dikkate alındığında bütün karbürlerin metalik özellik gösterdiği gözlemlenmiştir. T fazındaki Mo_2C ve H fazındaki Mo_2C için sırası ile 0.08 ve 0.97 μB manyetik momentlere sahip olduğu bulunmuştur. T fazındaki Mo_2C , W_2C , Re_2C , Os_2C ve H fazındaki Mo_2C , W_2C , Re_2C , Ru_2C , Os_2C karbürlerinin kararlı oldukları gözlemlenirken, T fazındaki Ru_2C , Tc_2C ve H fazındaki Tc_2C 'nin kararlı olmadıkları gözlemlenmiştir. Kararlı olan yapılar için fonon modları hesaplanmıştır. Yüksek sıcaklıklarda yapılan moleküler dinamik simülasyon hesaplamalarında farklı karbürler için farklı sıcaklıklarda kararlılığın bozulduğu gözlemlenmiştir. Bu çalışma ile 2-boyutlu malzeme sınıfından olan MXene'ler için enerji depolamada ve spintronik uygulamalarda kullanılmak üzere, sentezlenmesi muhtemel olan yapılar ortaya koyulmuştur.

Tek katmanlı karbon atomlarının bal peteği şeklinde dizilimi, bilim camiasında yeni bir çağın başlamasına neden olmuştur. 2004 yılında, grafen malzemesinin keşfi ile 2 boyutlu malzemeler, yüksek teknoloji uygulamalarında deneysel ve teorik olarak oldukça sık kullanılmaya başlanmıştır [1].

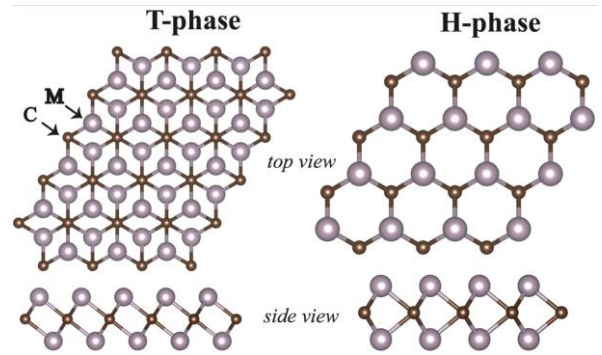
2011 yılında MAX fazında bilinen Ti_3AlC_2 bileşeninin hidroflorik asitte 2 boyutlu Ti_3C_2 katmanlarına ayrıştığı deneysel olarak gözlemlenmiştir [2]. Deneysel olarak sentezlenen bu malzeme; yeni nesil iki boyutlu MXene'ler olarak literatürdeki yerini almıştır. Böylelikle 2 boyutlu malzeme ailesine yeni bir üye daha eklenmiştir. MAX fazı olarak bilinen, katmanlı üç bileşenden oluşan karbitler ve nitratlar 60 farklı gruptan fazla sayıdadır.

Birden fazla M geçiş metali olan MXene'ler katı çözeltiler ve katmanlı fazlar olmak üzere iki şekilde olabilirler. Katı çözeltiler olanlar iki farklı geçiş metalinin rastgele dizilimi ile oluşurken, katmanlı MXene'ler, bir geçiş metalinin diğer geçiş metali ile sandwich şeklinde sıralanması ile tek veya çift katmanlı olarak oluşurlar.

MXene'lerin genel formülü $\text{M}_{n+1}\text{X}_n\text{T}_x$ ($n=1,2,3$) şeklinde verilmektedir. Burada M Sc, Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo, vb. geçiş metalini, X karbon veya azot atomunu ve T_x ise $-\text{OH}$, $-\text{O}$ veya $-\text{F}$ gibi yüzey uçlarını göstermektedir.

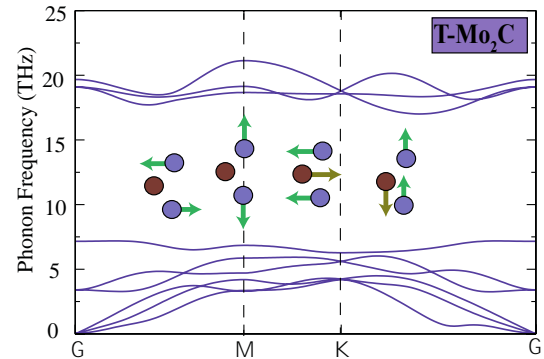
Kaynakça

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov "Electric field effect in atomically thin carbon films", *Science* **306**, 666-669 (2004).
2. M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, M. Barsoum "Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti_3AlC_2 ", *Adv. Mater.* **23**, 4248-4253 (2011).



Şekil 1: 2-boyutlu MXene'lerin -T ve -H fazındaki kristal yapısı.

Bu çalışmada, daha önce deneysel olarak sentezlenmemiş fakat teorik öngörülerle gelecekte sentezlenmesi muhtemel olan altı farklı geçiş metali için M_2AC formülü ile verilen yapıların fiziksel özellikleri incelenmiştir.



Şekil 2: 2-boyutlu Mo_2C 'nin T fazındaki fonon örgü dinamiği ve fonon modları.

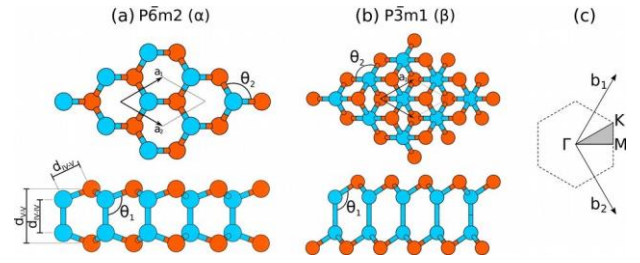
IV-V grup elementlerinden oluşturulmuş altıgen örgülü tek katmanlı kristallerin yapısal, titreşimsel, ve elektronik özellikleri

**Burak Özdamar^(a), Gözde Özbal^(b), Mustafa Neşet Çınar^(a), Koray Sevim^(b),
Gizem Kurt^(a), Birnur Kaya^(a), Hâldun Sevinçli^(a)**

*(a) İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Bölümü, İzmir
(b) İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, İzmir*

Periyodik tablonun IV. ve V. gruplarında bulunan elementlerden oluşturulan A_2B_2 ($A = C, Si, Ge, Sn, Pb; B = N, P, As, Sb, Bi$) kimyasal formülüne sahip altıgen örgülü tek katmanlı bileşiklerin yapısal, titreşimsel, ve elektronik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi yöntemiyle araştırıldı. P-6m2 ve P-3m1 uzay grubuna ait α ve β fazlarının dikkate alındığı bu çalışmada oluşturulan bütün yapıların dinamik olarak kararlı olduğu görüldü. SnAs ve PbAs yapılarının elektronik bant yapısında kuartik dispersiyon gösterdiği ilk defa raporlanmış oldu. CP, SiN, SiP, SiAs, GeN, GeP yapılarının geniş bant aralıkları sayesinde optoelektronik alanında kullanılmaya uygun olduğu gösterildi.

Grafenin 2004 yılında başarılı bir şekilde ayrıştırılması sonucu tek katmanlı bileşikleri konu alan araştırma potansiyeli büyük bir artış gösterdi. [1] Silikon, germanyum ve kalay gibi karbonla aynı grupta yer alan elementlerin tek katmanlı yapılarının sentezlenmesiyle de bu yapıların önemi bir kez daha ortaya koyulmuş oldu.[2] Bunların yanında V-IV-III-VI gruplarından elementlerin oluşturduğu bileşiklerin moleküler elektronik, gaz ölçümleme ve su ayrıştırma alanlarında kullanılabileceği anlaşıldı. [3] Aynı şekilde, IV-V grubu bileşiklerin gerek teorik gerek de deneysel yönden çeşitli araştırmalara konu olmalarına rağmen literatürde yapısal, titreşimsel, ve elektronik özellikleri hakkında eksiksiz bir referans bulunmamaktadır. Bu çalışmada IVA ve VA gruplarında bulunan elementlerden oluşturulan A_2B_2 ($A = C, Si, Ge, Sn, Pb; B = N, P, As, Sb, Bi$) kimyasal formülüne sahip altıgen örgülü tek katmanlı bileşiklerin P-6m2 ve P-3m1 uzay grubuna ait fazları bahsi geçen özellikleri bakımından hesaplamalı olarak araştırılmıştır. Yapıların kararlı geometrileri Şekil 1’de verilmiştir. Elektronik bant yapıları PBE ve HSE06 değişim ve korelasyon potansiyelleriyle hesaplanmış, ardından spin-orbit etkileşimi (SOC) de dahil edilmiştir. Toplam üç yapı (α -GeBi, α -SnBi, α -PbSb) PBE’ye SOC dahil edilmesiyle birlikte yarıiletken metalik karaktere dönmüştür. HSE06’ya dahil edilen SOC ise PbSb’nin elektronik karakterinde bir değişikliğe sebep olmamışsa da GeBi ve SnBi yapılarını dolaylı yarıiletken direkt yarıiletkenine çevirmiştir. CN, SiN, GeN, SnN, SiP, GeP, SnP, PbP, SnAs ve PbAs olmak üzere 10 yapıda valans bandı kenarında kuartik dispersiyon görülmüştür.



Şekil 1: Kristal örgü yapısının üst ve yandan görünüşü (a) P-6m2 (α fazı) (b) P-3m1 (β fazı) (c) Altıgen simetrisinin ters uzay örgüsü ve yüksek simetri noktaları

Fonon dispersiyon ilişkisi yapıların kararlılıkları için önemli bir ölçüttür. Hesaplarımızda, α fazlarına ait yapıların tümünün Γ noktası etrafında pozitif fonon frekanslarının olduğu, düzlem içi boyuna akustik (LA) ve enine akustik (TA) modların doğrusal olduğu ve düzlem dışı akustik modun karesel davrandığı görülmüştür; dolayısıyla tek katmanlı bu yapıların dinamik olarak kararlı olduğu anlaşılmıştır. Bahsi geçen yapıların sabit hacimde ısı sığaları 100 K, 300 K, 500 K ve 800 K sıcaklıklarda hesaplanmıştır. Ağır elementlerden oluşturulmuş olan yapıların fonon durum yoğunlukları (PDOS) düşük fonon frekanslarında daha yüksek olduğundan hafif elementli yapılara göre düşük sıcaklıklarda daha yüksek ısı sığasına sahip olduğu görülmüştür. Yapılar aynı zamanda su ayrıştırma işlemi için fotokatalitik etkinlikleri bakımından çalışılmış, elektronik bant yapısı sebebiyle SnP yapısının pH 0 ve pH 7’de su ayrıştırma için mükemmel bir aday olduğu görülmüştür.

Kaynakça

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science 306, 666 (2004).
2. S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Şahin, and S. Ciraci, Phys. Rev. Lett. 102, 236804 (2009).
3. J.-H. Lin, H. Zhang, X.-L. Cheng, and Y. Miyamoto, Phys. Rev. B 96, 035438 (2017).

Çoklu Terminall Moleküler Eklemlerde Isıl Doğrultma

Burak Özdamar, Hâldun Sevinçli

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Bölümü, İzmir

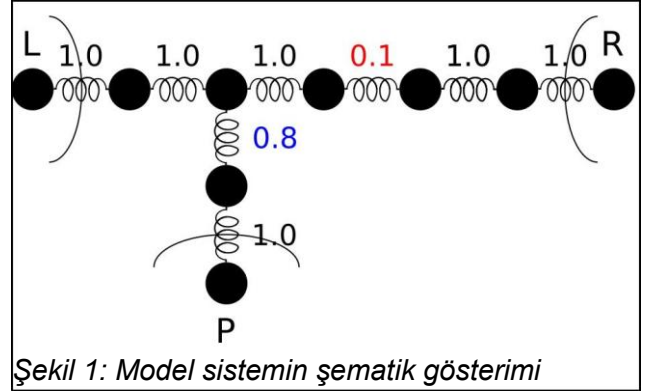
Elektriksel iletim kadar ısı iletim de günümüz teknolojisinde büyük bir alanı kaplamakta ve belirli bir amaca yönelik moleküller, kristaller veya heterosistemler teorik ve deneysel olarak öne sürülmektedir. Bu çalışmada ısı doğrultma gerçekleştirmek amaçlı atom zincirinden oluşturulmuş çoklu terminall yapılar sistematik bir biçimde konu edilmiştir. Doğrultma oranının %50'nin üstüne çıkartılabildiği konfigürasyonlar bulunmuştur.

Günümüz teknolojisinde bilgi, elektronlar ve fotonlar kullanılarak iletilmektedir. Isıl iletimin ön planda olduğu fononik aygıtların teorik olarak öne sürülmelerinin ardından ısı alanda da transistör ve diyot benzeri sistemler çalışılmaya başlanmıştır. Elektronik transistörlerde olduğu gibi ısı enerjisi de rektifikasyona, yani doğrultmaya uğratarak sistemin ısı iletiminin tek yönlü olarak sağlanması amaçlanır. Doğrultma etkisini oluşturan en önemli olgu, sistemin simetrisinin kırılması gerekliliğidir. Bunun için ikisi sol ve sağ rezervuar olmak üzere toplam üç kontaklı model bir sistem oluşturulmuştur (Şekil 1'deki L, R, P kısaltmaları sol, sağ, probe uçlusüne karşılıktır.) Bahsi geçen rezervuarlara sıcaklıklar atanarak merkez bölge üzerinden akan ısı akıları sistemin iki ayrı sürece tabi tutulmasıyla hesaplanmıştır.

$$R = \frac{(J_+ - J_-)}{\min(J_+, J_-)}$$

İlki, sol rezervuarın sıcaklığının sağ rezervuarından fazla olduğu ileri yönlü süreç (forward process, J_+); diğeri ise sıcaklık kabullerinin tam tersinin uygulandığı geri yönlü süreçtir (reverse process, J_-). Bu iki süreçte elde edilen ısı akıları kullanılarak doğrultma oranı yukarıdaki denkleme göre hesaplanmıştır. Isıl iletim tayfını (transmission spectrum) ve ardından ısı akılarını ve doğrultma oranını hesaplayan "ev yapımı" Python kodu ile atom zincirleri arasındaki yay sabitlerini, merkez bölgeye bağlanan probe sayısı gibi parametrelerin hepsini kontrol etmek mümkündür.

Isıl iletim, doğrultma ve rezervuar sıcaklıkları arasındaki ilişkiyi anlayabilmek için birbirleriyle merkez bölgedeki atom sayıları ve bu atomların arasındaki yay sabitleri cinsinden farklılaşan konfigürasyonlar sistematik olarak çalışılmıştır. Bazı sistemlerde doğrultma oranı %54'e kadar ulaşmıştır.



Şekil 1: Model sistemin şematik gösterimi

Tablo 1: Çalışılan bazı sistemlerin probe sıcaklıklarına göre doğrultma oranları (%)

Sistem	Sıcaklık	0.08	0.09	0.10
#1	Rekt.	53.46	53.66	53.82
Sistem	Sıcaklık	0.08	0.09	0.10
#2	Rekt.	8.97	9.35	15.43
Sistem	Sıcaklık	0.03	0.02	0.01
#3	Rekt.	30.82	39.36	50.75

Tablo 1'de de görüleceği üzere sözkonusu sistemlerin atomlarının arasındaki yay sabitleri değiştirilerek iletim tayfının değişimine uğratılması sonucu rezervuarlara akan ısıların farklılaşması, ve dolayısıyla doğrultma oranlarının değişiklik yapılabilmesi mümkündür.

Sıcaklığın ve sistem morfolojisinin birbiriyle ilişkisi model sistemin yardımıyla anlaşıldığından daha gerçekçi moleküllerle de benzer çalışmalar yapmak amaçlanmaktadır. Bunun için, basit yapısı ve örnek atom zincirini andırması sebebiyle 10 birim hücreden oluşan poliasetilen molekülü kullanılacaktır.

Kaynakça

- Ouyang, Tao, et al. "Ballistic thermal rectification in asymmetric three-terminal graphene nanojunctions." *Physical Review B* **82**, 245403 (2010).

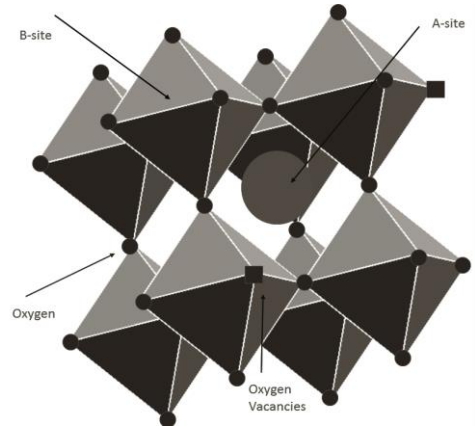
Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-δ} (BSCF) Perovskit Yapısının Sentezi, Karakterizasyonu ve Elektrokimyasal Analizi

Ecem Ezgi Özkahraman, Ahmet Aytekin, Efsun Tekneci, Emre Yusuf Göl

İYTE- Kimya Bölümü, 35433 İzmir

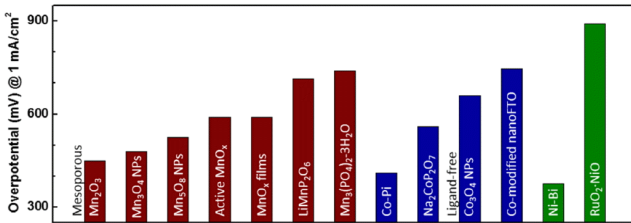
Suyun fotoelektrokimyasal ayrışması ve hidrojen üretimi ilereleyen süreçte enerji ihtiyacının karşılanması için önemli bir alternatif olarak görülmektedir. Perovskit yapıları ile ucuz ve yüksek verimlilikte elektrokimyasal katalizörler sentezlenerek bu hedefe ulaşılması planlanmaktadır. BSCF perovskit yapısı belirtilen metallerin nitrat tuzlarından EDTA-sitrat metoduyla bazik ortamda sentezlenmiş olup, karakterizasyonu yapılmış ve elektrokimyasal aktivitesi ölçülmüştür. Yapılan ölçümler BSCF yapısının umut vaat eden bir elektrokatalizör olduğunu göstermektedir.

Dünyanın artan enerji ihtiyacı var olan enerji kaynakları ile önümüzdeki yıllarda karşılanamayacak bir boyutta büyüyecektir. Alternatif enerji kaynaklarının arasında yenilenebilir enerji kaynakları ve özellikle güneş enerjisinin daha etkin kullanımı önemli bir araştırma konusu haline gelmiş durumdadır [1]. Güneş yakıtları güneş enerjisi kullanımının yoğunlaştığı çalışma konularından biridir. Suyun fotoelektrokimyasal ayrışmasında en önemli zorluklardan başında ucuz ve verimli katalizörlerin bulunamamış olmasıdır. Katalizörlerin overpotansiyel değerleri (Şekil 1) bu aşamada çok önemli bir durumdur. Perovskit yapıları (Şekil 2) üstün elektrokimyasal özellikleri nedeniyle suyun elektrokimyasal ayrışması için potansiyel katalizör adaylarından biridir. Bu çalışmada BSCF perovskit yapısının sentezi ve elektrokimyasal özellikleri araştırılmaktadır [2].



Şekil 2: ABO₃ perovskit yapısı

BSCF perovskit yapısı sol-gel yöntemiyle sentezlenmiştir. Elektrotlar yapımında katalizör mürekkepleri hazırlanmış ve spin-coating metodu ile flor katkılı kalay oksit ne Ni köpük üzerine kaplanmıştır. X-ray kırınımı, SEM ve BET kullanılarak karakterizasyonu gerçekleştirilen yapının elektrokimyasal ölçümleri döngüsel voltammetri (CV) kullanılarak bazik ortamda yapılmıştır. Ayrıca, sentezlenen yapının kararlılık ölçümleri zamana bağlı potansiyometri ve zamana bağlı amperometri ile gerçekleştirilmiştir. Sentezlenen perovskit yapısı ticari kullanımdaki en etkin katalizör olan IrO_x yapısından daha iyi elektrokimyasal sonuçlar vermiştir.



Şekil 1: Bazı metal oksitlerin overpotansiyel değerleri.

Kaynakça

1. N. S. Lewis and D. G. Nocera, "Powering the planet: chemical challenges in solar energy utilization" Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., **103**, 15729-15735 (2006).
2. L. Yang, M. Gao, B. Dai, X. Guo, Z. Liu and B. Peng, "Optimization of iron-doped Ni₃S₂ nanosheets by disorder engineering for oxygen evolution reaction" Electrochim. Acta, **191**, 813-820 (2016).

Grafen Kuantum Noktalarda Safsızlıkların Atomik Çökmesi ve Manyetik Korelasyonları

Erdoğan Bulut Kul, Mustafa Polat, Alev Devrim Güllü
İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü – Fizik Bölümü – 35433 – İzmir

Bir atomun, atom numarası olan 170 kritik değerinden fazlaysa, atomik çökme (“atomic collapse”) adı verilen, spontane elektron-pozitron çiftleri oluşumunu tetikleyen fenomen gözlemlenir[1]. Gerekli olan yüksek atomik yük değerlerinde bir atom doğada bulunmamaktadır. Bu nedenle gerçek atom üzerinde bir gözlem yapılamamıştır. Yapay olarak elde edilenlerde ise atomik çökme davranışını belirlemek zordur[2]. Grafen [1,3] ölçülmüş, relativistik hızdaki elektron iletim özelliği sayesinde, teorik olarak varlığı ispatlanmış fakat deneysel olarak gözlemlenememiş “atomik çökme” fenomenini düşük enerji skalasında gözlemlememize olanak tanır. Grafen üzerine, yüzey safsızlıkları ve yük düzensizlikleri eklenerek, atomik çökmenin gözlemlenmesine uygun, yapay bir atom davranışı göstermesi sağlanabilmektedir[4].

Bu çalışmada sıkı bağlama metodu ile grafen kuantum noktanın merkezinde, Coulomb potansiyeline dayalı bir safsızlık modelleyerek, literatürde analitik hesaplama ile bulunan, atomik çökme için gerekli olan potansiyel katsayısı olan beta değeri için uyumlu sonuç aldık. Bu aşamada spin etkilerini değerlendirebilmemize olanak tanıyan ortalama-alan Hubbard methoduyla, iki atom çıkarılmış grafen kuantum noktaları, aralarında farklı mesafeler olacak şekilde inceledik. Bunun sonucunda eğer çıkarılan iki atom da aynı alt ağ örgüden ise kuantum noktanın ferromanyetik, eğer farklı alt ağ örgülerden ise antiferromanyetik özellikte olduğunu dolayısıyla Lieb teoremiyle uyumlu olduğunu gözlemledik[5]. Çıkarılan bu atomların yerine Coulomb potansiyeline dayalı bir safsızlık koyduğumuzda ise, potansiyel arttıkça ferromanyetizmadan antiferromanyetizmaya faz geçişi olduğunu gözlemledik. Ayrıca çıkarılan atomlar arasındaki mesafe arttırıldığında veya potansiyel değeri arttırıldığında, atomik çökme durumundan bağımsız olarak safsızlıklar arası korelasyonun kaybolduğunu gözlemledik. Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 116F152 numaralı proje çerçevesinde desteklenmiştir.

Kaynakça

1. Valeri N. Kotov, Bruno Uchoa, Vitor M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, “Electron-Electron Interactions in Graphene: Current Status and Perspectives”, *Rev. Mod. Phys.* 84, 1067, (2012).
2. J. Schweppe, A. Gruppe, K. Bethge, H. Bokemeyer, T. Cowan, H. Folger, J. S. Greenberg, H. Grein, S. Ito, R. Schule, D. Schwalm, K. E. Stiebing, N. Trautmann, P. Vincent, and M. Waldschmidt, Observation of a Peak Structure in Positron Spectra from U+Cm Collisions *Phys. Rev. Lett.* 51, 2261, (1983)
3. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene”, *Rev. Mod. Phys.* 81, 109, (2009).
4. Wang, Yang & Wong, Dillon & Shytov, Andrei & W Brar, Victor & Choi, Sangkook & Wu, Qiong & Tsai, Hsin-Zon & Regan, William & Zettl, Alex & Kawakami, Roland & G Louie, Steven & S Levitov, Leonid & F Crommie, Michael, “Observing Atomic Collapse Resonances in Artificial Nuclei on Graphene”, *Science*, 10, 340(6133):734-7, (2013)
5. Elliott H. Lieb, “Two theorems on the Hubbard model”, *Phys. Rev. Lett.* 62, 1201 – Published 6 March 1989; Erratum *Phys. Rev. Lett.* 62, 1927 (1989)

Kagome Silisen: iki boyutlu epitaksiyel silisenin yeni bir egzotik formu

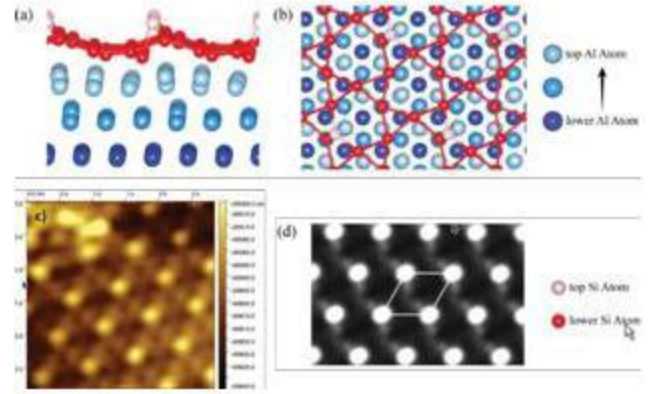
Fadıl Iyikanat¹ ve Hasan Sahin²¹ İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430 İzmir ² İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada [1] Al (111) yüzeyinde oluşmuş iki boyutlu epitaksiyel silisenin yeni bir formunu inceledik. Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM) gözlemleri, ARPES ölçümleri ve Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı (DFT) hesaplamaları, iki boyutlu $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ süper hücreli Kagome Silisen tabakasının 3×3 süper hücreli Al (111) yüzeyinde sentezlendiğini net bir şekilde ortaya koymaktadır. Bu yeni silisyum fazında atomik yeniden yapılanmaların oluştuğu bulunmuştur. Kagome Silisen tek tabakasının elektronik özelliklerinin tek tabaka silisene kıyasla farklı olduğu ortaya çıkarılmıştır.

İki boyutlu Kagome örgülerin etkileyici manyetik özelliklere (magnetic frustration), egzotik korelasyonlu elektronik yapıları (düz bantların oluşumu) ve Dirac elektronik durumlar ma sahip olabildikleri bilinmektedir.[2-3] Deneysel olarak henüz gözlemlenemese de daha önce grup-IV elementlerinin Kagome örgüleri hakkında öncül teorik çalışmalar yapılmıştır.[4] Diğer taraftan son yıllarda, tek tabakalı silisen ve germanen gibi grafen benzeri malzemelerin Au (111) ve Ag (111) gibi metal yüzeylerinde başarılı bir şekilde sentezlenebileceği gösterilmiştir.

Bu çalışmada deneysel gözlemlerimiz ve teorik hesaplamalarımız iki boyutlu Kagome örgüye sahip silisyum tabakasının Al (111) yüzeyi üzerinde oluştuğunu göstermiştir. Şekilde kuş bakışı ve yandan görünüşü verilen yapı $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ süper hücreli Kagome Silisen tabakasının 3×3 süper hücreli Al (111) yüzeyi üzerine konulmasıyla oluşmaktadır. Bu yapının sahip olduğu oluşum enerjisinin olası konfigürasyonlar arasında en yüksek değere sahip olduğu bulunmuştur.

Yük transferi analizleri Kagome Silisen tabakası ile metal yüzeyi arasında dikkat çekici miktarda yük alışverişinin gerçekleştiğini dolayısıyla silisyum tabakasının metal yüzeyiyle güçlü bir şekilde



Şekil 1: Al(111) yüzeyindeki Kagome Silisen tabakasının (a) yandan (b) kuşbakışı görünüşü. (c) Deneysel olarak gözlemlenen ve (d) simüle edilen STM görüntüleri.

etkileştiğini ortaya koymaktadır. Şekil 1 (c) ve (d)'de gösterilen deneysel olarak gözlemlenen ve simüle ettiğimiz STM görüntüleri oldukça benzerdir. Ayrıca tek tabaka Kagome Silisen malzemesinin metalik özellik gösterdiği bulunmuştur. Sistemin elektronik bant dağılımlarında Dirac konileri gözlemlenmiştir, fakat bunların Al(111) yüzeyinden kaynaklandığı gösterilmiştir.

Kaynakça

1. Y. Sassa, F. Johansson, A. Lindblad, M. Yazd i, K. Simonov, J. W. Weissenrieder, M. Muntwiler, F. Iyikanat, H. Sahin, H. Brune, T. Angot, E. Salomon, and G. Le Lay, "Kagome silicene: a novel exotic form of two-dimensional epitaxial silicon", Submitted to Nat. Commun.
2. L. Ye, M. Kang, J. Liu, F. von Cube, C. R. Wicker, T. Suzuki, C. Jo zwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, D. C. Bell, L. Fu, R. Comin, and J. G. Checkelsky, "Massive Dirac fermions in a ferromagnetic kagome metal", Nature, **555**, 638 (2018).
3. C. Barreateau, F. Ducastelle, and T. Mallah, "A bird's eye view on the flat and conic band World of the honeycomb and Kagome lattices: towards an understanding of 2D metal-organic frameworks electronic structure", J. Phys: Condens. Matter. **29**, 465302 (2017).
4. F. Matusalem, M. Marques, L. K. Teles, and F. Beckstedt, "Stability and electronic structure of two-dimensional allotropes of group-IV materials", Phys. Rev. B, **92**, 045436 (2015).

Çok ince mavi fosforenin eksiton özellikleri

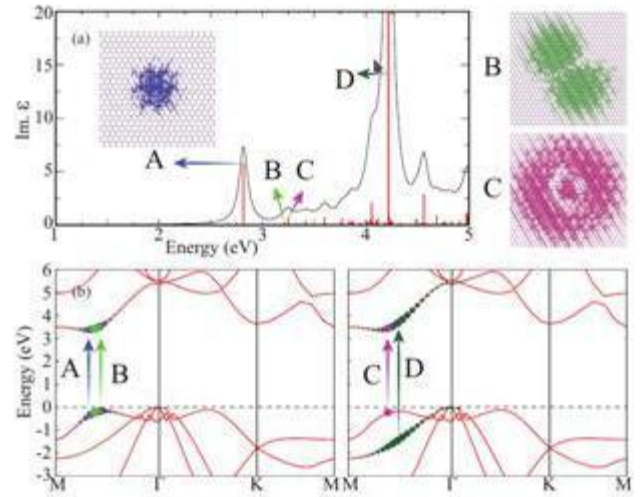
Fadıl İyikanat¹, R. Tugrul Senger¹ ve Hasan Sahin²¹ İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430 İzmir ² İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada [1] tek tabakalı ve farklı istiflenme tiplerine sahip iki tabakalı mavi fosforen malzemesinin elektronik ve optik özellikleri ilk-prinsipler (first-principles) ve çok-parçacık (many-body) hesaplamaları ile incelendi. Tek tabakalı mavi fosforen yüksek ve direkt olmayan bant aralığına sahiptir. G_0W_0 ve Bethe Salpeter yöntemleri ile gerçekleştirilen hesaplamalar gösterdi ki tek tabakalı mavi fosforendeki eksitonlar oldukça yüksek bağlanma enerjisine sahiptir. İki tabakalı mavi fosforenin elektronik bant dağılımlarının ve bant aralığının istiflenme tipine oldukça bağlı olduğu bulundu. Ayrıca iki tabakalı mavi fosforendeki yüksek osilatör kuvvetine sahip eksitonların bağlanma enerjileri, spektral pozisyonları ve oluşum mekanizmaları detaylı bir şekilde incelendi.

Son bir kaç yılda yapılan çalışmalarda tek tabakalı mavi fosforen malzemesinin Au (111) yüzeyi üzerinde sentezlendiği gösterilmiştir. [2-3] Sahip olduğu iki boyutlu yapı ve geniş bant aralığı sayesinde bu malzemedeki eksitonların malzemenin optik spektrumunu belirlemede oldukça önemli olacağı öngörülmektedir. Daha önce yapılan çalışmalarda bu malzemenin tek tabakalı formunun oldukça yüksek eksiton bağlanma enerjisine sahip olduğu rapor edilmiştir.[4]

Tek tabakalı mavi fosforenin G_0W_0 ve Bethe Salpeter metodları ile hesaplanmış optik spektrumu Şekil 1 (a)'da gösterilmektedir. Yapılan hesaplamalar tek tabakalı mavi fosforenin 3.36 eV'luk direkt olmayan elektronik bant aralığına sahip olduğunu ortaya koymuştur. Şekilde gösterildiği gibi malzemenin elektronik bant aralığının çok altında, A, B, ve C olarak isimlendirdiğimiz yüksek osilatör kuvvetine sahip eksiton pikleri ortaya çıkmaktadır. Hesaplamalar A, B ve C eksitonlarının sırasıyla 0.703, 0.307 ve 0.269 eV'luk eksiton bağlanma enerjisine sahip olduklarını gösterdi. Yüksek osilatör kuvvetine bağlı olarak, şekilde gösterilen eksiton dalga fonksiyonları A eksitonunun, B ve C eksitonuna kıyasla çok daha yerel olduğunu ortaya koymaktadır.

İki tabakalı mavi fosforenin optik spektrumunun malzemenin istiflenme tipine oldukça bağlı olduğu bulunmuştur. İki tabakalı mavi fosforende deşik



Şekil 1: Tek tabakalı mavi fosforenin (a) dielektrik fonksiyonunun sanal kısmı, osilatör kuvveti ve (b) G_0W_0 yaklaşımı ile elde edilen elektronik bant diyagramı.

(hole) ve elektronun aynı tabakada olduğu tabaka-içi eksitonun yanı sıra bir tabakada deşik bulunurken elektronun iki tabakaya yayıldığı, tabakalar arası karışık eksitonlar (mixed-interlayer excitons) bulundu. İki tabakalı geçiş metali dikalkojenitlerde gözlemlenen tabakalar arası eksitonlardan farklı olarak, bu tabaka-içi ve tabakalar-arası karışık eksitonların oldukça yüksek bağlanma enerjisine ve yüksek osilatör kuvvetine sahip olduğu bulundu.

Kaynakça

1. F. Iyikanat, E. Torun, R. T. Senger, H. Sahin, "Excitonic Properties in Ultra-thin Blue Phosphorene", To be Submitted.
2. J. L. Zhang, S. Zhao, C. Han, Z. Wang, S. Zhong, S. Sun, R. Guo, X. Zhou, C. D. Gu, K. D. Yuan, Z. Li, and W. Chen, "Epitaxial Growth of Single Layer Blue Phosphorus: A New Phase of Two-Dimensional Phosphorus", *Nano Lett.* **16** (8), 4903–4908 (2016).
3. W. Zhang, H. Enriquez, Y. Tong, A. Bendounan, A. Kara, A. P. Seitsonen, A. J. Mayne, G. Dujardin, H. Oughaddou, "Blue Phosphorene: Epitaxial Synthesis of Blue Phosphorene" *Small* **14**, 1804066 (2018).
4. C. E. P. Villegas, A. S. Rodin, A. Carvalho, A. R. Rocha, "Two-dimensional exciton properties in monolayer semiconducting phosphorus allotropes" *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 27829 (2016).

Mikrojel Koloit Kristal Yapının Deneysel Olarak Elastikliğinin İncelenmesi

Gizem Büşra Keller¹, Aşlı Gençaslan¹, Deniz Kaya¹

¹ *Akdeniz Üniversitesi, Fizik Bölümü, 07058 ANTALYA*

Mikrojel koloit parçacıklar, atomik veya moleküler sistemler için kristalizasyon ve camsı yapı oluşumu gibi fiziksel işlemleri inceleme için ideal bir deneysel model oluştururlar. Bu çalışmada PNIPAM (Poli(N-izopropilakrilamid)) moleküllü mikrojel koloit parçacıklar kullanılarak koloit kristal yapı oluşturulmuştur. Mikrojel parçacıklarının şişme ve büzülme dinamikleri koloit kristallerin elastik özelliklerini ve kristal tipleri arasındaki erime faz geçişini etkileyebilmektedir. Koloit parçacıklarının oluşturduğu kristalin esneklik özelliği farklı sıcaklık değerlerinde ölçüm yapılarak incelenmiştir. Video mikroskop yöntemi kullanılarak, farklı sıcaklık değerlerinde mikrojel parçacıklarının konum ve titreşim genliklerinin değişiminden (Mean Square Displacement-MSD) kristalin esneklik analizi yapılmıştır [1]. Bu sıcaklıklardaki kristalin esnekliği, parçacıkların ortalama titreşim miktarının parçacıklar arasındaki ortalama mesafeye oranlanmasıyla bulunmuştur. Artan sıcaklıkla birlikte gecikme zamanının fonksiyonu olarak çizilen MSD eğrisinden, esnekliğin azaldığı görülmüştür. Ölçüm alınan sıcaklık değerlerinde yapı homojen olmasına rağmen yapıyı oluşturan parçacıkların titreşim genliği birbirinden farklı olup, heterojen dağılım gösterdiği bulunmuştur. Bulunan kristal esneklik verileri literatürdeki veriler ile uyum içindedir [2].

Bu çalışma 116M396 numaralı TÜBİTAK projesi ile desteklenmiştir.

Kaynakça

1. J. C. Crocker at al., “Methods of digital video microscopy”, Journal of Colloid and Interface Science, **179**, 298-310 (1996).
2. A. M. Alsayed at al. , “Premelting at defects within bulk colloidal crystals”, Science, 309, 1207-1210 (2005).

InSe-SiGe Hetero çift katmanın Yapısal ve Elektronik Özellikleri

I. Eren,¹ ve H. Sahin²¹İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430, İzmir, Türkiye²İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430, İzmir, Türkiye

Yoğunluk Fonksiyonel Kuramına dayalı ilk ilkeler hesaplamaları yapılarak, InSe-SiGe heteroyapılarının istiflemeye bağımlı elektronik ve titreşim özellikleri incelenmiştir. 12 adet olası istifleme konfigürasyonu yapıldı ve ilgili elektronik bant yapıları hesaplandı. InSe ve SiGe tek tabakaları Tip-I heterostyapısını ve K noktasında direkt bant boşluğu oluşturmaktadır. Tüm istifleme tiplerinde, değerlilik ve iletim bantı noktalarında Si ve Ge atomik orbitallerinin hakim olduğu bulundu.

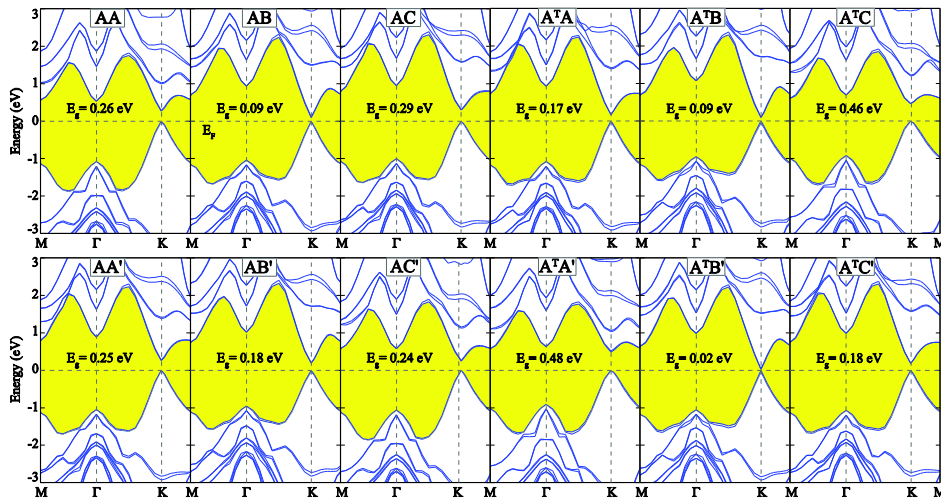
Son on yılda, ultra-ince iki boyutlu (2B) Karbon atomunun izolasyonu, yani grafen, bu alandaki malzemelerin araştırmalarına büyük ilgi uyandırmıştır. Ancak, enerji boşluğunun eksikliği optoelektronikteki cihaz uygulamaları potansiyelini sınırlandırmaktadır. Inse ve SiGe gibi alternatif tek tabaka malzemeler fotonik uygulamaları için uygun bant boşluklarına sahiptir.

Bu iki boyutlu malzemelere ek olarak, iki tek katmanın üst üste binmesiyle oluşan heteroyapılar, zengin elektronik ve optik özellikleri nedeniyle dikkat çekmiştir. Bu çalışmada, InSe ve SiGe tek tabakalarının yapısal, elektronik ve titreşim özelliklerini ve olası dikey heteroyapıları araştırılmıştır.[1]

Yapısal optimizasyonlar, elektronik ve manyetik konfigürasyonların belirlenmesi için

ilk-prinsip hesaplamaları yapılmıştır. Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramı kapsamında düzlem dalga projektörü ile arttırılmış dalga yöntemini *Vienna ab-initio Simulation Package* (VASP) programı ile kullanılmıştır.[2] Değişim korelasyonu enerjisi için Perdew-Burke-Ernzerhof formu olan genelleştirilmiş gradyan (GGA) yaklaşımı kullanılmıştır.

InSe ve SiGe tek katman yapılarının örgü sabitlerinin yakınlığı olası heteroyapılarının incelenmesine olanak sağlamıştır. Sabitlenmiş InSe malzemesinin üzerine SiGe dahil edilmesi, olası 12 farklı istiflemeye sebep olmaktadır. Şekil 1’ de gösterildiği gibi, bu istiflemelerde SiGe tek katmanı daha baskın olması elektronik-bant yapısında Tip-1 Bant Sıralanmasına neden olmakla birlikte bütün heteroyapılar direkt bant boşluğuna sahiptir.



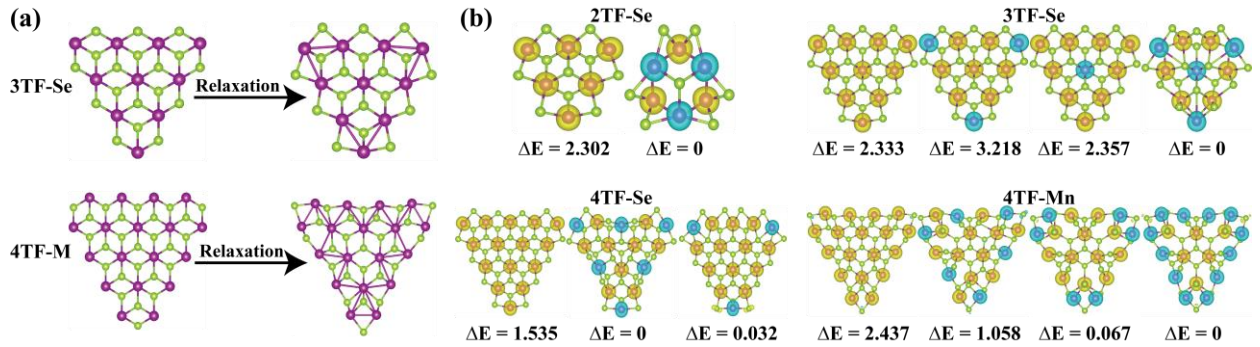
Şekil 1: Olası InSe-SiGe heteroyapılarının elektronik bant yapıları.

Kaynakça

1. I. Eren, M. Yagmurcukardes, and H. Sahin, “Structural and Electronic Properties of InSe-SiGe Heterobilayer”, to be submitted.
2. Kresse, G., Furthmuller, “J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set.”, Phys. Rev. B. 1996, 54, 11169.

Tek Tabaka MnSe₂: Kusura Toleransı ve Boyuta Bağlı FerromanyetizmasıI. Eren,¹ ve H. Sahin²¹İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430, İzmir, Türkiye²İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430, İzmir, Türkiye

Bu çalışmada MnSe₂ malzemesinin iki boyutlu tek tabakalarını, nanotellerini ve kuantum noktalarının yapısal, elektronik, titreşimsel ve manyetik durumlarını Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramı çerçevesinde inceledik. Titreşimsel analizler iki boyutlu yapının hem zemin durumunda bulunan Ferromanyetik (FM) hem de Antiferromanyetik (AFM) durumlarının stabil olduğunu gösterdi. Bu iki durumda elektronik yapıları metalik olmaktadır. Bunun yanı sıra iki boyutlu yapı kusurlara karşı stabilitesini, elektronik ve manyetik durumunu korumaktadır. İki boyutlu yapı, tek ve sıfır boyuta indirildiğinde ferromanyetikten antiferromanyetiğe geçiş göstermektedir.

Şekil 1: Üçgen MnSe₂ kuantum noktalarının manyetik karşılaştırması.

Grafenin başarılı bir şekilde sentezlenmesi, son on yılda iki boyutlu (2B) malzemeleri çok çalışılmış bir malzeme grubuna dönüştürmüştür. Grafenin manyetikliğinin yeterli olmayışı, son zamanlarda sensör ve veri depolama gibi çeşitli uygulamalarda kullanılabilecek yeni manyetik ultra-ince malzemelerin arayışına sebep olmuştur ve bundan dolayı çalışmamızda manyetik bir malzeme olan MnSe₂ yapısının tek tabakasında ve kusurlarında, nanotellerinde, ve kuantum noktalarında olası manyetik fazlar incelenmiştir.

Yapısal optimizasyonlar, elektronik ve manyetik konfigürasyonların belirlenmesi için ilk-prensip hesaplamaları yapılmıştır. Yoğunluk Fonksiyoneli kuramı kapsamında düzlem dalga projektörü ile artırılmış dalga yöntemini *Vienna ab-initio Simulation Package* (VASP) programı ile

kullanılmıştır.[2] Değişim korelasyonu enerjisi için Perdew-Burke-Ernzerhof formu olan genelleştirilmiş gradiyan yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır. Dudarev tarafından tarif edilen DFT+U yöntemi Mn atomlarının d-orbitalleri arasındaki güçlü korelasyonlar için dikkate alınmıştır ve efektif U parametresi 3.9 eV olarak seçilmiştir.

MnSe₂ yapısının tek tabakasını, bir ve sıfır boyutunun özelliklerini inceledik. Tek tabaka halindeyken FM halinin zemin durum enerjisi AFM hale göre daha uygundur. Kusurlar oluştuğunda bile FM ve metalik kalmaya devam etmektedir. Öte yandan bir boyuta indirildiğinde FM fazdan AFM faza geçmekle birlikte zigzag nanotelinin elektronik yapısı metalik iken armchair yapısı yarıiletken olmaktadır. Kuantum noktaları Şekil 1’ de gösterildiği gibi tek tabakanın aksine nanotellerde olduğu gibi AFM faza sahiptir.

Kaynakça

1. I. Eren, F. Iyikanat, and H. Sahin, “Defect Tolerant and Dimension Dependent Ferromagnetism in MnSe₂”, Submitted to J. Mater. Chem. C.
2. Kresse, G., Furthmuller, “J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set”, Phys. Rev. B. 1996, 54, 11169.

Structural, electronic and magnetic properties of point defects in polyaniline (C_3N) and graphene monolayers: A comparative study

K. Sevim¹ and H. Sevinçli²

¹Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Gülbahçe Kampüsü, 35430 Urla, Izmir, Turkey

²Department of Materials Science and Engineering, Izmir Institute of Technology, Gülbahçe Kampüsü, 35430 Urla, Izmir, Turkey

The newly synthesized two-dimensional polyaniline (C_3N) is structurally similar to graphene, and has interesting electronic, magnetic, optical, and thermal properties. Point defects in graphene has been studied extensively in the past and were shown to give rise to exciting features, like magnetization in an all carbon material. Here, performing spin-polarized density functional theory calculations, we investigate vacancy and Stone-Wales (SW) type point defects in monolayer C_3N . Our findings qualify the point defects in C_3N as possible alternatives for future spintronics applications.

We consider three defect types, Monovacancy (MV), Divacancy (DV) and SW defects. For graphene, these correspond to three structures, whereas for C_3N there are two possible structures for each defect type. The MV can be of C and N type, C_3N -MV(C) and C_3N -MV(N). Since DV and SW involve a pair of atoms, they can be (CC) or (CN) type. Namely, we have six defective structures of C_3N .

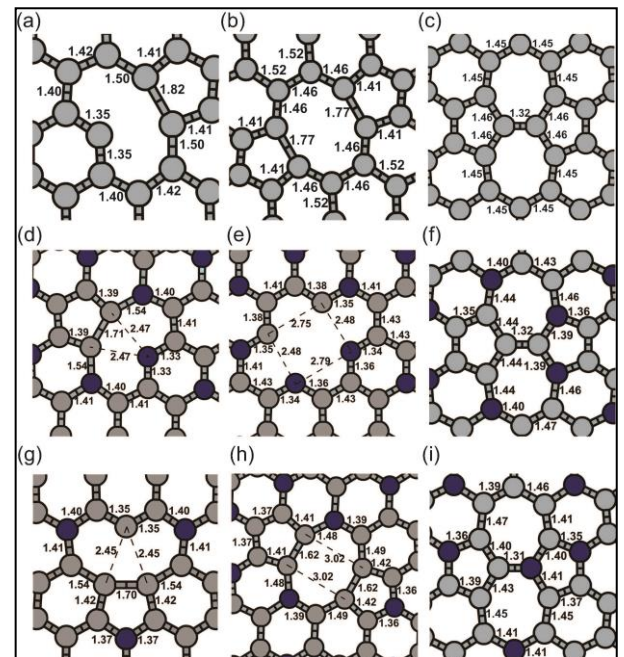
We note that both spin polarized and spin unpolarized computations are performed to obtain the most stable configurations. We compare and contrast the structural, electronic and magnetic properties of these defects with those in graphene. We show that both types of monovacancies, C_3N -MV(C) and C_3N -MV(N), result in pentagon-nonagon pairs (5-9 reconstruction) [1] with a two-coordinated atom and finite magnetic moment, like in graphene. Divacancies C_3N -DV(CC) and C_3N -DV(CN) have different geometrical features. The C_3N -DV(CN) reconstruction is similar to the divacancy in graphene having two pentagons and one octagon (5-8-5 reconstruction) [2] with no low-coordinated atoms, whereas C_3N -DV(CC) has four two-coordinated atoms and a finite magnetic moment. The SW defects in C_3N are structurally equivalent to the one in graphene (5-7-7-5 reconstruction) and are non-magnetic.

In contrast to their similarities in geometrical reconstructions, the monovacancies in C_3N have distinctive features from gr-MV. Unlike in graphene, removing an atom (or pairs of atoms for the cases of DV) from C_3N alters the stoichiometry of the super cell, i.e. not only the total number of electrons but the number of electrons per atom is also altered. Therefore, depending on the concentration and type of the removed atoms, the number of unpaired electrons will show variations. As a result, the Fermi energy crosses the bands and a range of magnetic

moments is gained.

We further investigate the robustness of the reconstructed structures and the changes in the magnetic moments by applying tensile and compressive biaxial strain.

Figure 1: Graphene and C_3N defect lattice structures



(a) graphene MV(gr-MV) (b) graphene DV(gr-DV) (c) graphene Stone-Wales(gr-SW) (d) C_3N -MV(C) (e) C_3N -DV(CC) (f) C_3N -SW(CC) (g) C_3N -MV(N) (h) C_3N -DV(CN) (i) C_3N SW(CN)

According to our study, vacancies in C_3N could be interesting for spintronics applications and could have advantages over graphene due to its finite band gap. It should be possible to create defects in C_3N using AC-TEM at around 80 kV like in graphene or at smaller energies because defect formation and cohesive energies are smaller than in graphene.

References

1. D. Ma, J. Zhang, Y. Tang, Z. Fu, Z. Yang, and Z. Lu, Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 13517 (2018).
2. F. Banhart, J. Kotakoski, and A. V. Krasheninnikov, ACS Nano 5, 26 (2011).

MgB₂ Yüzey Üzerinde Olası Germanen Yüzeylerinin İncelenmesi

Mehmet Başkurt ve Hasan Şahin

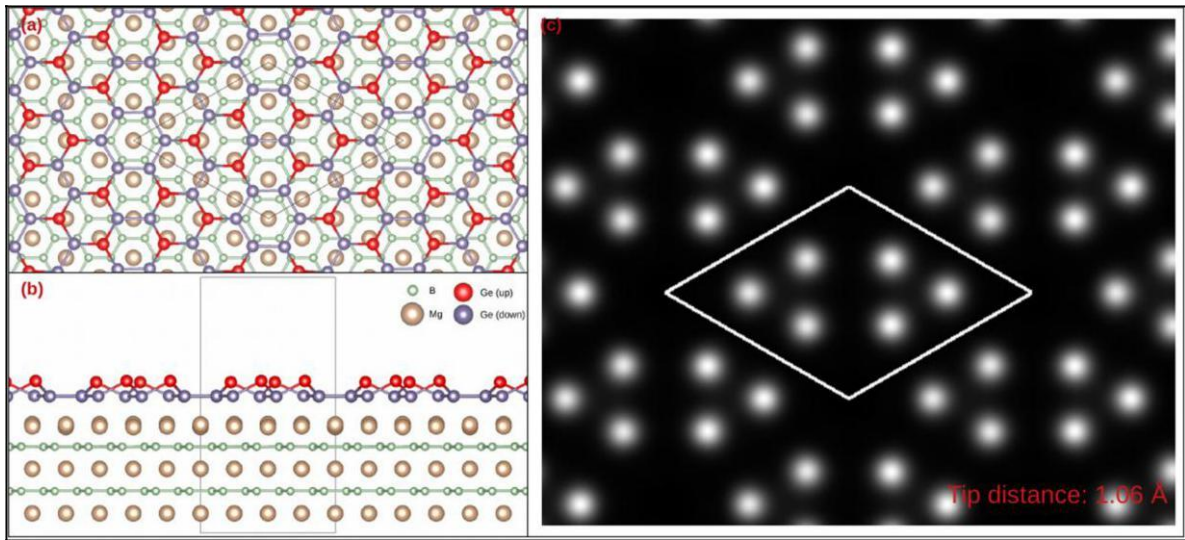
İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430, İzmir

Grafen analogu olan germanen bükülmüş (buckled) yapıya sahip, iki boyutlu, tek-tabaka bir yarı-metaldir. Grafene alternatif stabil ultra -ince kristal yapısı ve ayarlanabilir bant aralığı sebebiyle son zamanlarda ilgi odağı haline gelmiştir. Moleküler ışın epitaksisi (MBE) yöntemiyle germanen Au(111), Pt(111) gibi uyumlu yüzeyler üzerinde tek tabaka olarak büyütülebilmektedir. Bununla birlikte yeni germanen fazları arayışları ise hala devam etmektedir. Çalışmamızda[1] germanenin farklı MgB₂ yüzeyleri üzerinde ne şekilde kristaller oluşturacağı ve bunların ne gibi elektronik özelliklere sahip olacağı yoğunluk fonksiyoneli kuramı ile incelenmiştir.

Grafenin keşfinden bu yana, iki boyutlu kristaller malzeme biliminin ilgi odağı haline gelmiştir. Her ne kadar grafen stabil kristal yapısı ve benzersiz elektronik özellikleriyle ön plana çıksa da elektronik yapısında bir yasak bant aralığının bulunmaması optoelektronik uygulamalar açısından bir handikap yaratmaktadır. Bu sebeple bant aralığına sahip ultra-ince grafen benzeri kristallerin arayışı devam etmektedir.

Grafenin silisen ve germanen[2] gibi analogları grafene benzer olarak yarı-metalik elektronik bant dağılımına sahip olsalar da, spin-yörünge etkileşimleri sebebiyle küçük de olsa bant aralıklarına sahiptirler. Buna ek olarak, bu malzemelerin farklı yüzeyler üzerinde farklı

biçimlerde modifiye olmuş silisen ve germanenler oluşturuyor olmaları uygulamaları açısından zenginlik sunmaktadır. Çalışmamızda MgB₂ yüzeyleri üzerinde olası germanen yapıları incelenmiştir. Vienna *ab-initio* Simulation Package (VASP) kullanarak yapılan yoğunluk fonksiyoneli kuramı hesapları 4x4 süper-hücre MgB₂ yüzeyi üzerine 3x3 germanen süper-hücresinin örgü birimi ile uyumlu olduğunu göstermiştir. Bununla birlikte MgB₂ yüzeyinin topolojisine bağlı olarak farklı biçimlerde düzenlenmiş (reconstructed) germanen yapılarının oluşacağı öngörülmüştür. Bu yapılar ait elektronik bant yapıları ve STM görüntüleri teorik olarak elde edilmiştir.



Şekil 1: Germanenin yığın (bulk) MgB₂ yüzeyi üzerinde görüntüsü. a.) Üstten görünüm. b.) Yandan görünüm. c.) Simüle edilmiş taramalı tünelleme mikroskobu (STM) görüntüsü

Kaynakça

1. M Baskurt, H. Sahin, "Investigation of Germanene on Bulk MgB₂ Surface", to be submitted
2. M. E. Davilla, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G Le Lay, "Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene", New J. Phys, **16**, 095002 (2014)

Elektrosprey Methodu ile Perovskit Sentezi

Mehmet Özcan¹ ve Hasan Şahin¹

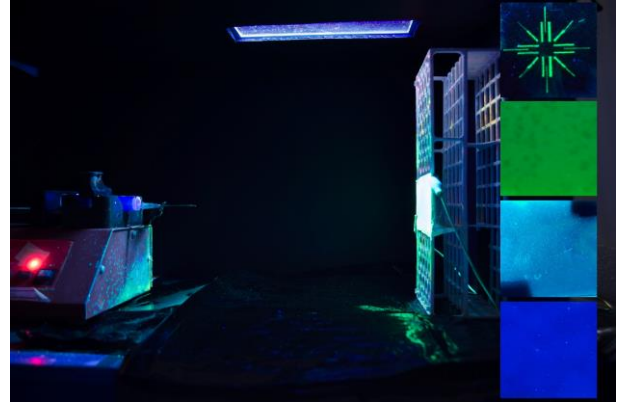
¹İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü - Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Son yıllardaki gelişmelere bakıldığında özellikle güneş enerjisi uygulamalarında kullanılan organik ve inorganik perovskit malzemelerin, ıslak kimya yöntemi ile sentezlenip sırasıyla santrifüj ve döndürmeli kaplama adımları ile istenilen substrat yüzeyine homojen olmayan film olarak kaplandığı görülmektedir. Bu çalışmada sezyum perovskit ($Cs_xPb_yBr_z$) malzemelerinin kontrollü bir şekilde sentezlenebilmesi ihtiyacına çözüm olabilecek olan elektrosprey yöntemi incelenmektedir. Elde edilen sonuçlar elektrosprey yönteminin sezyum perovskit sentezinde, çokça kullanılan ıslak kimya metodu yerine, hızlı ve ucuz bir alternatif olacağını göstermektedir.

Kolloidal yarıiletken nanokristal (NC) ailesinin bir üyesi olan sezyum perovskitler ($Cs_xPb_yBr_z$) yüksek fotoluminesans kuantum verimi (PLQY), kusur toleransı ve kolay ayarlanabilir renk gibi üstün optik özellikler sunmaktadırlar. Perovskit kristalleri, bilinen kovalent bağlı kristallere kıyasla zayıf atomik bağlara sahip olmalarının bir sonucu olarak, farklı fazlara ve boyutlara evrilme eğilimindedir. Bu özellik perovskitler için kolayca değişebilir bant aralığı, oda sıcaklığında sentezlenebilmesi gibi avantajlar sağlar.

Diğer taraftan ise malzemenin ıslak kimya ile sentezi ve uygulanması aşamasında farklı fazlarda ve büyüklüklerde malzeme oluşması saf olmayan perovskit film elde edilmesine ve malzeme homojenliğinin sağlanamaması gibi sorunlara sebep olmaktadır.

Islak kimya yöntemi ile perovskit sentezinde ortaya çıkan bir diğer önemli sorun ise atık ürünlerin çokluğu sebebi ile oluşan maliyettir. $Cs_xPb_yBr_z$ perovskit kristallerinin anti-çözücü eşliğinde oluşması sebebiyle, kristal yapıya katılmayan çok miktarda Cs^+ , Pb^{+2} , Br^- iyonları, oleik asit, oleylamın sürfaktanları, tolüen, hekzan, dimetilformamit kimyasalları atık maddeye dönüşmektedir.



Şekil 1: Elektrosprey sistemi ve kaplanan filmler

Çalışmamızda[1] dimetilformamid içinde çözülmüş olan $CsBr$ ve $PbBr_2$ tuzları sürfaktanlar eşliğinde elektrosprey yöntemi ile tolüen, sentrifüj, hekzan (dağıtıcı), döndürmeli kaplayıcı kullanılmadan direk nano-aygıt yüzeyine $Cs_xPb_yBr_z$ olarak aynı anda sentezlenerek film olarak kaplanabilmektedir.

Elektrosprey sisteminde[2] uygulanan voltaj, püskürtme hızı, çözücü miktarı v.b. parametrelerin kontrolüyle istenilen boyut ve fazda perovskit kristallerinden oluşan saf ve homojen yarıiletken filmler elde edilebilmiştir. Ayrıca cihaz uygulamalarında kullanılmak üzere maskeleme yoluyla film kaplama çalışması yapılmış ve başarılı olunmuştur.

Kaynakça

1. M. Ozcan, S. Ozen, G. Topcu, M. M. Demir, and H. Sahin, "Color Tunable Inorganic Perovskites via Electro spraying Method" *submitted to Journal of Physical Chemistry C* (2019).
2. Jaworek, A., ve Sobczyk, A. T., "Electrospraying route to nanotechnology: An overview" *Journal of Electrostatics*, **66**, 197-219 (2009).

CHARACTERIZATION OF ZnSnO THIN FILMS ON POLYMERS FOR FLEXIBLE OLEDs

Merve Ekmekcioglu¹, M. Ozdemir^{1,2}, L. Ozyuzer^{1,2}, G. Aygun¹

¹Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, TURKEY

²Teknoma Technological Materials Inc., Izmir Technology Development Zone, Urla, 35430, Izmir, TURKEY

Attracting interest around the world, research on organic light-emitting diodes (OLEDs) have become the most promising displays, lighting and power-saving, it has grown rapidly with the development of amorphous organic semiconductor materials of available today. Recently, remarkable progress has been observed in producing flexible electronics, so that flexible OLEDs open up a wide ranging of possibilities for applications in lightweight, portable, wearable and even deformable displays, sensors, as well as solid-state lighting [1]. The advantages of OLED in comparison with the existing liquid crystal display (LCD) technology, are self-emission, wide viewing angle, fast response time, simple structure, and low driving voltage [2].

For efficiency and uniform light emission in OLEDs, highly conductive and transparent anodes are required. Indium oxide doped with tin (ITO) due to its unique electrical and optical properties such as good conductivity (about $104 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$) and high transmittance ($\sim 85\%$) in the visible region owing to the large bandgap of about 3.70 eV has been most promising anodes among the transparent conductive oxides (TCO) thin film [3]. Aluminum-doped zinc oxide (AZO) is another TCO which is widely used for many applications on literature [4]. However, due to the scarcity of indium, alternative anodes that eliminate its use are highly desired [5]. For this reason, in this research Zn-Sn-O (ZTO) has been used as a replacement of ITO and its suitable candidacy as an anode in OLED production has been investigated.

Table 1: The Most Commonly Used Optical Transparent Electrodes

Material	Resistance Ω/sq	Transmittance %T
ITO	6.56	89
GZO	6.21	85
ITO/AZO	6.07	90
ITO/Au/ITO	5.6	72
ZTO	9.8	91
Graphene	20	91

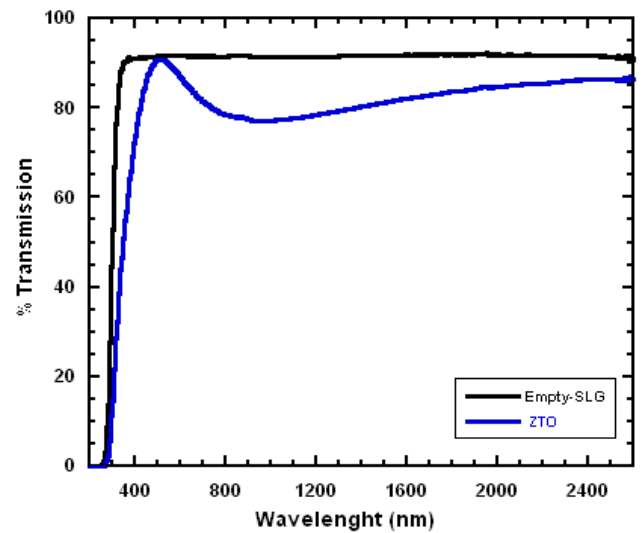


Figure 1: Optical Transmission graph of ZTO/SLG

In this thesis, the work was divided into two different parts. In the first part of the experimental work, ZTO have coated on soda lime glass (SLG) will be optimized by magnetron sputtering for flexible OLEDs. In the second part, advanced polymer substrates are necessary for the successful realization of obtaining high-performance flexible OLEDs. In this part, ZTO thin films will be deposited on flexible Polyethylene terephthalate (PET) substrates by magnetron sputtering.

References

1. M. Parstky, A. Basr, F. Benetti, M. Trapso, G. Norosk, **393**, 1033–1042 (2009).
2. A. Diroya, L. Vacsari, A. Bekas, G. Norask **2** (3), 160–174 (2011).
3. O. Tuna, Y. Selamet, G. Aygun, L. Ozyuzer., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **43** (2010).
4. F Turkoglu, H Koseoglu, S Zeybek, M Ozdemir, G Aygun, L Ozyuzer., *J. Appl. Phys.*, **16**, (2018).
5. M. Masis, F. Dauzou, Q. Jeangros, A. Dabirian, H. Lifka, R. Gierth, M. Ruske, D. Moet, A. Wyser, C. Ballif., *Adv Funct Mater.*, 26(3), 384–392, (2016).

Kurşunsuz BNT-BT Bazlı Seramik Kapasitörlerin BLT Katkısıyla Enerji Depolama Yoğunluklarının Arttırılması

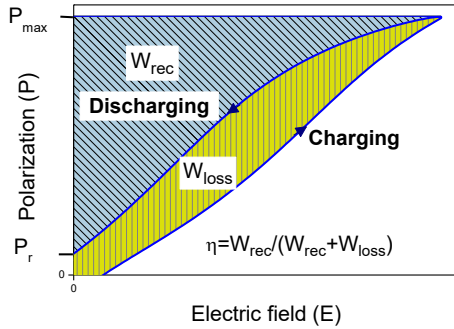
Merve Karakaya, Umut Adem

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü – Malzeme Bilimi ve Mühendisliği, 35430 İzmir

Relaksör ferroelektrikler yüksek enerji depolama kapasiteleri ve verimlilikleri sebebiyle yüksek güç gerektiren dielektrik kapasitör uygulamalarında tercih edilen malzemelerdir. Bu çalışmada $(\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{TiO}_3$ - $x\text{BaTiO}_3$ (BNT-BT) sisteminin morfortrofik faz sınırı (MPB) civarına denk gelen $x=0.08$ kompozisyonu seçilerek $\text{Bi}(\text{Li}_{2/3}\text{Ti}_{1/3})\text{O}_3$ (BLT)'nin farklı oranlarda katkısının enerji depolama yoğunluğuna etkisi incelenmiştir. BLT katkısıyla, dielektrik kırılma gücünün arttığı, kalıcı polarizasyonun azaldığı ve ancak maksimum polarizasyonun azaldığı gözlenmiştir. Enerji yoğunluğu oda sıcaklığında 0.73 J/cm^3 civarında elde edilmiştir.

Kurşunsuz seramik kapasitörler çevre dostu olmaları ve yüksek güç gerektiren birçok modern elektronik sistemlerde kullanılmaları sebebiyle kritik malzemelerdir [1, 2]. Seramik kapasitörler yüksek güç sağlamalarının yanında diğer enerji depolama sistemlerine göre çok daha düşük enerji yoğunluklarına sahiptirler. Enerji yoğunluğunu arttırmak daha küçük boyutlarda ve miktarlarda malzeme üretmek anlamına geldiğinden üretim maliyetlerini de azaltmak adına önem arz etmektedir. Enerji yoğunluğu polarizasyon-elektrik alan grafiğinden (Şekil 1) aşağıdaki formülle hesaplanır;

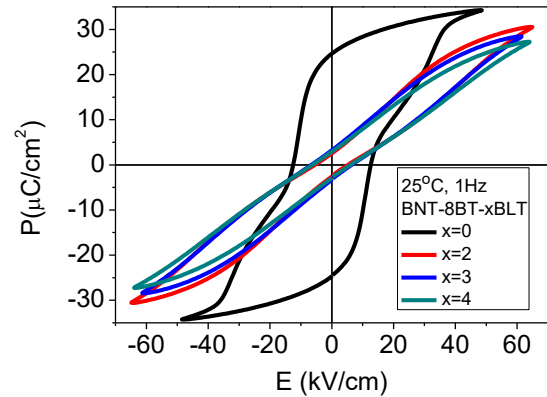
$$W_{rec} = \int_{P_r}^{P_{max}} E dP.$$



Şekil 1. Polarizasyon elektrik alan döngüsünden enerji depolama yoğunluğu ve kayıp enerji yoğunluğu hesaplamak için kullanılan alanların sematik gösterimi.

BNT bazlı sistemler kurşunsuz olmaları ve güçlü ferroelektrik özellikler göstermeleri sebebiyle son yıllarda yoğun bir şekilde çalışılmaktadırlar. BNT'nin nispeten düşük olan piezoelektrik özelliklerini arttırmak için BaTiO_3 gibi çeşitli sistemlerle MPB oluşturarak katkılama yapılabilmektedir [3, 4].

Bu çalışmada BNT-BT sistemi yüksek ferroelektrik ve piezoelektrik özelliği sebebiyle kullanılmıştır. Enerji yoğunluğunu arttırmak için referans [5]'e dayanılarak BLT katkılanmıştır. BLT katkılanması ile kalıcı polarizasyonun azaldığı, dielektrik kırılma gücünün ve enerji yoğunluğunun arttığı P-E döngülerinden (Şekil 2) gözlenmiştir ve enerji yoğunluğu $x=2,3,4$ BLT kompozisyonları için sırasıyla $0,73, 0,62$ ve $0,63 \text{ J/cm}^3$ olarak hesaplanmıştır.



Şekil 2. BNT-8BT-xBLT kompozisyonlarının polarizasyon elektrik alan (P-E) histerezis döngüleri.

Kaynakça

1. Barber, P., et al., *Polymer composite and nanocomposite dielectric materials for pulse power energy storage*. Materials, 2009. **2**(4): p. 1697-1733.
2. Domanos, M.T., et al., *Submicrosecond pulsed power capacitors based on novel ceramic technologies*. IEEE Transactions on Plasma Science, 2010. **38**(10): p. 2686-2693.
3. Xu, C., D. Lin, and K. Kwok, *Structure, electrical properties and depolarization temperature of $(\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{TiO}_3$ - BaTiO_3 lead-free piezoelectric ceramics*. Solid state sciences, 2008. **10**(7): p. 934-940.
4. Ma, C. and X. Tan, *Phase diagram of unpoled lead-free $(1-x)(\text{Bi}_{1/2}\text{Na}_{1/2})\text{TiO}_3$ - $x\text{BaTiO}_3$ ceramics*. Solid State Communications, 2010. **150**(33-34): p. 1497-1500.
5. Chen, P. and B. Chu, *Improvement of dielectric and energy storage properties in $\text{Bi}(\text{Mg}_{1/2}\text{Ti}_{1/2})\text{O}_3$ -modified $(\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2})_{0.92}\text{Ba}_{0.08}\text{TiO}_3$ ceramics*. Journal of the European Ceramic Society, 2016. **36**(1): p. 81-88.

Grafen/Au(111) Ortak Yüzey Hücrelerinin Elektronik ve Yapısal Özellikleri

Merve Yortanlı* ve Ersen Mete

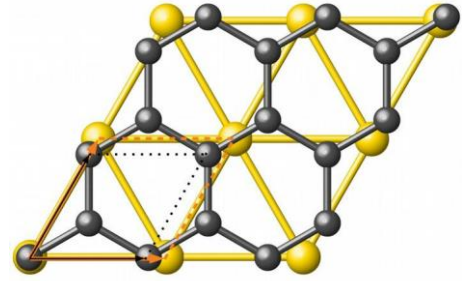
Balıkesir Üniversitesi, Fizik Bölümü, 10145 Balıkesir

Grafenin Au(111) yüzeyi üzerinde yüzey hücre modellerinin morfolojik ve elektronik özellikleri farklı değiş-tokuş fonksiyonelleri ile sistematik olarak incelendi. Uzun erişimli zayıf elektronik etkileşmelerin sonuçlar üzerinde belirleyici bir etkisi olduğu gösterildi. Oluşabilecek, ortak yüzey modellerine bağlı olarak altının iş fonksiyonu farklılaşmakta ve grafenin band yapısı n-tipi ve p-tipi katkılama davranışı sergilemektedir.

Son yıllarda, Au(111) yüzey üzerinde kendiliğinden düzenlenen tek tabakalar (SAM) ile grafen sandviç yapısı kontrol bazlı aygıt tasarımları (GFET), biyo-sensör ve foto-katod koruyucu gibi çeşitli uygulama alanlarında yer alan malzemelerdir. [1,2] Farklı tasarımlarda kullanıma potansiyelleri göz önünde bulundurulduğunda, Au(111) yüzeyi üzerine grafen kaplama yapısının elektronik ve kimyasal özelliklerinin iyi bilinmesi gerekmektedir. Yapılan deneysel çalışmalar grafenin altın yüzeyine zayıf (fizisorbe) bir elektronik etkileşme ile tutunduğunu göstermiştir. Bu etkileşmeler grafenin band aralığını değiştirecek bir etkiye sahip değildir. Ancak, Dirac noktasında ve Fermi enerji seviyesinde kaymalar gözlenmektedir.[3] Yürütülen hesapsal çalışmalarda da benzer sonuçlar elde edilmiştir. Hesapsal açıdan elde edilen sonuçlar seçilen değiş-tokuş ve korelasyon fonksiyoneline bağlıdır. Hesaplamalar, grafenin Fermi enerji seviyesi kayma miktarının (n-tipi ve p-tipi) adsorbe olduğu yüzeyle arasındaki denge mesafesine ve grafen/metal iş fonksiyonuna bağlı olduğunu ortaya koymaktadır.

Ortak yüzey hücreleri elde edebilmek için Şekil 1'de gösterilen grafen örgü vektörleri ile Au(111) örgü vektörleri arasındaki farklı açılar düşünüldü. Örgü uyumsuzluğundan karbon tabakasında meydana gelecek gerilme oranının %1'den küçük olduğu grafen kaplı (3×3) , $(3 \times \sqrt{3})$, $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$, (4×4) , ve (7×7) Au(111) yüzey hücreleri belirlendi. Bulunan bu yüzey modellerinin geometrik ve elektronik özelliklerini hem standart gradyen düzeltilmiş yerel yoğunluk yaklaşımı (GGA-PBE) [4] ve hem de dispersif etkileri içeren modern SCAN fonksiyoneli (SCAN+rVV10) [5] kullanarak sistematik şekilde inceledik.

Olası grafen/Au(111) yüzey hücrelerinin yapısına bağlı olarak bu sistemlerin elektronik özelliklerinde dikkat çeken farklılıklar ortaya çıkmaktadır. Örneğin, karbon tabakasının altın yüzeyinden yüksekliğinin ve grafenin yüzey üzerindeki oryantasyonunun altının iş fonksiyonunu önemli ölçüde değiştirdiği ve grafenin Fermi enerjisini kaydıracağı görülmüştür. Grafen/Au(111) yüzey geometrileri, denge mesafesi, fizisorbe bağlanma enerjileri, iş fonksiyonları ve band yapıları önceki çalışmalarla karşılaştırılmıştır.



Şekil 1: Au(111) üzerinde grafen. Altın (1×1) ve grafen birim hücreleri kesikli çizgilerle gösterilmiştir.

Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 116F174 proje numarasıyla desteklenmektedir.

Kaynakça

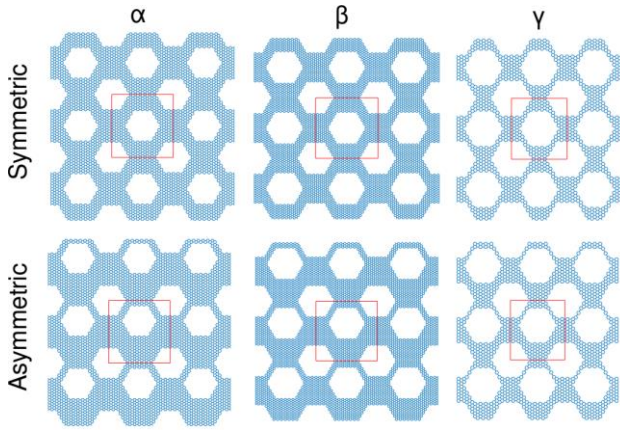
1. L. Newton, T. Slater, N. Clark and A. Vijayaraghavan, J. Mater. Chem. C **1**, 376 (2013).
2. H. Yan, K. T. Narasimha, J. Denlinger, F. H. Li, S.-K. Mo, J. N. Hohman, J. E. Dahl, R. M. Carlson, B. A. Tkachenko, A. A. Fokin, et al., Nano letters **18**, 1099 (2018).
3. Z. Klusek, P. Dabrowski, P. Kowalczyk, W. Kozłowski, W. Olejniczak, P. Blake, M. Szybowicz, and T. Runka, Applied Physics Letters **95**, 113114 (2009).
4. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
5. H. Peng, Z.-H. Yang, J. P. Perdew, and J. Sun, Phys. Rev. X **6**, 041005 (2016).

Anizotropik Grafen Antidot Örgülerde Kuasi Bir Boyutlu Davranış ve Yüksek Termoelektrik Verim

Mustafa Neşet Çınar, Hâldun Sevinçli

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Malzeme Bilimi ve Mühendisliği, 35460 İzmir/Türkiye

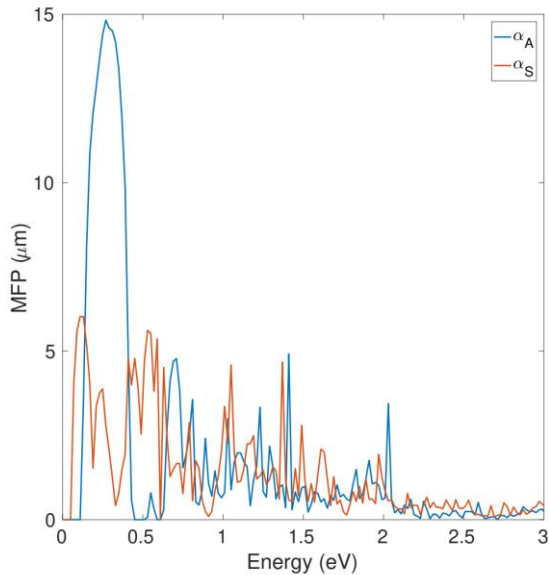
Üzerinde periyodik boşluklar (antidot) olan grafen yapılarına grafen antidot örgüler (graphene antidot lattices, GAL) adı verilmektedir. Bu çalışmada, altıgen antidot'lar içeren GAL yapıları simetri özelliklerine göre ele alınmıştır. Simetri kırılmasıyla bazı GAL yapılarda elektronların Fermi enerjisi etrafındaki enerjilerde kuasi bir boyutlu (quasi-one-dimensional, Q1D) davranış gösterdiği ortaya konmuştur. Ayrıca, Q1D GAL yapılarının taşınım ve termoelektrik özellikleri denge dışı Green fonksiyonları (non-equilibrium Green functions, NEGF) kullanılarak incelenmiştir. Sistem Hamiltonyeni π -orbital sıkı bağlama (tight-binding, TB) modeli kullanılarak oluşturulmuş ve orbital enerjilerine Anderson düzensizliği dahil edilerek (anizotropik) Q1D GAL için ortalama serbest yol (mean free path) hesaplanıp, aynı boyutta birim hücreye ve antidota sahip izotropik yapıninkine karşılaştırılmıştır. Bu karşılaştırma sonucunda Q1D enerjilerinde anizotropik yapının ortalama serbest yolunun izotropik yapıninkinden daha yüksek bir değere sahip olduğu görülmüştür. Ayrıca, anizotropik termoelektrik başarımların ölçütünün bant aralığı ile arttığı ve oda sıcaklığında 0.9'a kadar arttığı gözlenmektedir.



Şekil 1: GAL Yapıları
3 Farklı GAL yapısı (α , β , γ) için İzotropik ve anizotropik konfigürasyonlar simetrik ve asimetrik olarak gösterilmiştir.

Tablo 1: Yapılara ve sıcaklığa göre termoelektrik başarımların ölçütü

GAL tipi	300 K	500 K
α_A	0.5073	0.4720
α_S	0.2526	0.1636
β_A	0.5987	0.8346
β_S	0.4130	0.4056
γ_A	0.9442	1.4022
γ_S	0.5768	0.2549



Şekil 2: Ortalama Serbest Yol
Kırmızı ve mavi çizgiler α yapısının simetrik ve asimetrik konfigürasyonları için ortalama serbest yolu göstermektedir.

Grafen Kuantum Nokta Yapısında Atomik Çökme Durumu

Mustafa Polat¹, Erdoğan Bulut KUL², Alev Devrim GÜÇLÜ²

¹ İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, İzmir

² İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, İzmir

* E-mail Adresi: mustafapolat@iyte.edu.tr

Bir atomun proton numarası belirli bir eşiği aştığında, ortaya çıkan Coulomb alanı atomik çökme durumuna neden olur [1-3]. Çok büyük çekirdek yükü gerektirdiği için ($Z > 170$), atomik çökme durumuna ait herhangi bir bulguya çarpışma deneylerinde rastlanmamıştır. Fakat, yük taşıyıcılarının relativistik doğasından dolayı [4], atomik çökme durumu bir nokta kusur yüklenerek yada safsızlık eklenerek grafende rahatlıkla gözlenebilir [5]. Bu çalışmada grafen kuantum nokta yapısı üzerine rastgele dağıtılmış nokta kusurları yükleyenerek, ortaya çıkan Coulomb yüklü kusurların elektriksel özellikleri nasıl değiştirdiğini anlamaya çalıştık. Yöntem olarak, yüklenmiş nokta kusurların elektriksel özelliklerde yol açtığı değişiklikler sıkı bağlanma ve ortalama alan Hubbard modeli ile çözüldü ve analiz edildi. Coulomb sabiti, diğer bir deyişle nokta kusurun yük durumu, artırıldığında elektronlar bu yüklü nokta kusuru etrafında yarı bağlı durumlar oluşturmaktadır. Buna ek olarak, rastgele dağıtılmış çoklu yüklü nokta kusurların oluşturduğu yapı için elektron etkileşim etkileri ve manyetik özellikler yine aynı model yardımıyla çalışıldı [6]. Bizim sonuçlarımıza göre yüklü kusura yakın bölgelerde elektron perdeleme etkisi direk olarak elektron etkileşimleri ile ilgilidir ve kusur kaynaklı manyetizma güçlü bir şekilde Coulomb sabitine bağlıdır.

Kaynakça

- [1]. W. Greiner, B. Muller, J. Rafelski, Quantum Electrodynamics of Strong Fields (Springer, Berlin, 1985).
- [2]. I. Pomeranchuk, Y. Smorodinsky, J. Phys. USSR 9, 97 (1945).
- [3]. Y. B. Zeldovich, V. S. Popov, Sov. Phys. Usp. 14, 673 (1972).
- [4]. W. Mark, Physics Today 59, 1, 21 (2006).
- [5]. A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, L. S. Levitov, Phys. Rev. Lett. 99, 246802 (2007).
- [6]. A. Altıntaş, A.D. Güçlü, preprint arXiv:1711.09934 (2018).

Koloit Parçacıkların Etkileşim Potansiyel Enerjilerinin Video Mikroskop Yöntemiyle Ölçülmesi

Naim Tuna Toksöz¹, Deniz Kaya¹

¹ *Akdeniz Üniversitesi, Fizik Bölümü, 07058 ANTALYA*

Koloit parçacıkları arasındaki etkileşimler reolojik ve optik özellikler de dahil olmak üzere koloit süspansiyonların birçok yönünü kontrol eder. Bunlar, elektrostatik, van der Waals, hidrofobik, hidrasyon ve sterik etkileşimler olarak sınıflandırılır. Yoğun koloit süspansiyonların fiziksel özelliklerinin çoğu, koloit küresel parçacıklar arasındaki etkileşim potansiyeli tarafından belirlenir ve modifiye edilir. Örneğin, çift yönlü etkileşimin sıcaklık, hacim kesri ve sınır koşulları üzerindeki bağımlılığı aktif araştırma konusudur. Pratik uygulamalarda, çift yönlü etkileşim ölçümleri, süspansiyondaki parçacıkların yük durumu ve kimyasal ortamı hakkında ayrıntılı bilgi sağlar. Bu çalışmada, seçilen uygun polimer Poli(N-izopropilakrilamid (PNIPAAm) kullanılarak hazırlanan koloit süspansiyonlarda parçacıklar arası çift etkileşim potansiyel enerjilerini ölçmek için dijital video mikroskop yöntemi ve sıvı yapı teorisi kullanılmıştır. Dijital görüntü analizi sayesinde koloit süspansiyonların incelenmesi anlık ve gözlemlenebilir olarak gerçekleştirilmiştir. Sentezlenen koloit parçacıkların ısıya duyarlılığını ve büyüklüklerini kontrol ederek, bir optik mikroskop ile hareketleri kısıtlanmış geometriler içinde ve farklı sıcaklıklar altında etkileşimleri “eşzamanlı” olarak gözlemlenerek, fiziksel özellikleri ölçülmüştür. Çalışma sonucunda, video mikroskop yöntemi ile alınan veriler, görüntü işleme programı yardımıyla bir araya getirilerek koloit parçacıkların, çift etkileşim potansiyel enerjileri doğrudan hesaplanmıştır.

Bu çalışma, Türkiye Bilimsel ve Teknik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) tarafından, 116M396 projesiyle desteklenmiştir.

N-(4-Asetilfenil)-4-metilbenzensülfonamid'in Dielektrik Özelliklerinin İncelenmesi (PSASF)

Sefa Müftüoğlu^{1,a}, Burak Korkmaz^{2,b}, Esmâ Ahlatcıoğlu Özerol^{3,c}, Mustafa Okutan^{4,a}, Bahire Filiz Şenkal^{5,b}

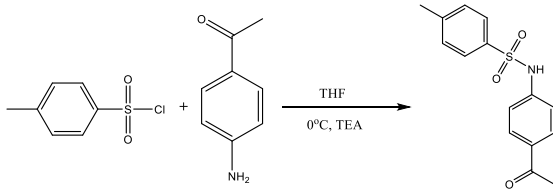
^aYıldız Teknik Üniversitesi- Fizik Bölümü, 34220 İstanbul

^bİstanbul Teknik Üniversitesi- Kimya Bölümü, 34469 İstanbul

^cYıldız Teknik Üniversitesi- Biyomühendislik Bölümü, 34220 İstanbul

Sülfonamid sülfonik asitlerin amidleridir. Literatüre bakıldığında, sülfonamidlerin bakteri ve bazı protozoalar dahil birçok mikroorganizmaya karşı geniş bir antimikrobiyal özelliklerinin olmasından dolayı ilaç sanayisinde geniş yer almaktadırlar [1]. Bunun yanı sıra biyosensör uygulamalarında [2], dielektrik alanında da çalışmalar bulunmaktadır. Dielektrik spektroskopisi malzemelerin kutuplanabilirlik özelliği açısından maddenin frekansa bağlı olarak elektronlar, atomlar, iyonlar, dipoller ve kendi ara yüzeyel etkileşimleri hakkında bilgi vermektedir.

Bu çalışma da N- (4-asetilfenil) -4-metilbenzensülfonamid (PSASF) sentezlemek amacıyla p-amino asetofeneon 1-metil-2-pirilidon (NMP) çözüldükten sonra reaksiyon sonucunda ortaya çıkacak olan HCl i tutmak amacıyla ortama trietil amin asit ilave edilmiştir. Soğutulan karışıma 4-metilbenzensülfonil klorür damla damla ilave edilmiştir. Reaksiyon karışımı 0 ° C'de 1 saat; oda sıcaklığında da 24 saat karıştırılmıştır. Reaksiyon karışımı önce buza dökülmüştür; elde edilen beyaz katı ürün suyla yıkanıp kurutulmuştur sonra etil alkol ile kristallendirilmiştir. PSASF numunesinin kimyasal karakterizasyonu için Fourier Transform Infrared Spektroskopisi ve dielektrik ölçümleri için dielektrik spektroskopisi kullanılmıştır.



Şekil 1: PSASF'nin sentezi

Kaynaklar

[1] B. He., S. Yan, "Electrochemical determination of sulfonamide based on glassy carbon electrode modified by Fe₃O₄/functionalized graphene". Int. J. Electrochem. Sci, 12, 3001-3011 (2017).

[2] D. Elbaum, S. K. Nair, M. W. Patchan, R. B. Thompson, D. W. Christianson, "Structure-based design of a sulfonamide probe for fluorescence anisotropy detection of zinc with a carbonic anhydrase-based biosensor". Journal of the American Chemical Society, 118(35), 8381-8387 (1996).

Cu₂ZnSnS₄ Thin Film Solar Cells with Graphene Window Layer

S. Hazal Gündoğan^{1,*}, Ayten CANTAŞ^{2,3}, C. Gökhan ÜNLÜ⁴, N. Gülin Birim¹, Mehtap Özdemir⁵, Gülnur Aygün², Lütfi Özyüzer^{2,5}

¹Department of Energy Engineering, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, TURKEY

²Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla 35430, Izmir, Turkey

³Department of Electric and Energy, Pamukkale University, Kinikli 20160, Denizli, Turkey

⁴Department of Biomedical Engineering, Pamukkale University, Kinikli 20160, Denizli, Turkey

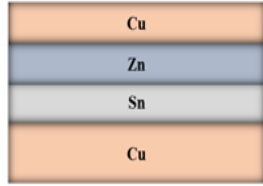
⁵Teknoma Technological Materials Inc., Izmir Technology Development Zone, Urla 35430, Izmir, Turkey

Thin film solar cells are one of the renewable energy sources with a bright future due to their advantages such as low cost, having a flexible structure according to the substrate used, being easy to install and portable, which allow a wide usage area and high energy cycle efficiency. Unlike crystalline silicon solar cells, thin film solar cells have low cost manufacturing. The quaternary compound of Cu₂ZnSnS₄ (CZTS) is a newly explored semiconductor photovoltaic material which is expected to be interesting for thin-film solar cell absorber. CZTS consists of Cu, Zn, Sn and S, which are fairly low cost, earth-abundant and environmentally friendly elements. Because of these advantages, CZTS is seen as a future replacement for CuInGaSe₂ (CIGS) solar cells in photovoltaic (PV) industry. The CZTS thin films show p-type conductivity, high absorption coefficient (10⁴ cm⁻¹) and a band gap of 1.45-1.5 eV that is ideal to achieve the highest solar-cell conversion efficiency [1,2]. It is currently reported that the highest efficiency for the CZTS based thin film solar cells is 12.6% which demanding further improvement [3]. The development of high efficiency Cu₂ZnSnS₄ (CZTS) thin film solar cells depends on the synthesis of phase pure CZTS absorbers. Due to the difficulties of preparation pure phase CZTS films (i.e., a film lack of secondary phases), the structural and compositional properties of CZTS films must be systematically studied.

In this project, it is aimed to fabricate CZTS based solar cells with graphene window layer in superstrate structure. Fluorine doped tin oxide (FTO) coated soda lime glass (SLG) is used as a substrate. Graphene is transferred on FTO coated SLG substrate which acts as a window layer. N-type ZnO is a buffer layer which is deposited by RF magnetron sputtering technique. In this project, p type semiconductor material CZTS is used as an absorber layer. CZTS absorber films are prepared by two independent stages. CZT precursors are grown on the substrates with deposition order from top to bottom Cu/Sn/Zn/Cu by using DC magnetron sputtering technique (Figure 1). Two different Zn deposition time was used for metallic precursor. The deposited precursors are sulfurized inside a quartz tube under sulfur and Argon atmosphere at 500 °C for 45 min. So far, all layers of solar cells has been grown and analyzed separately. XRD, SEM, EDX, Raman and Optical characterizations of each layers have been occurred. According to Raman analysis, both CZTS films have main vibration peak of kesterite CZTS. Both CZTS films have similar surface morphology. Some parts of the surface of films, different structures which assigned to Sn-S phases were detected. The high efficient CZTS based solar cells have Cu-poor Zn-rich composition. In this case, both CZTS films have Zn-rich composition. However, CZTS-1 has also Cu-poor composition where CZTS-2 is nearly stoichiometric in terms of Cu composition.

the characteristic D, G and 2D peaks of the graphene were found at 1372, 1600 and 2722 cm⁻¹, respectively. The D peak from these peaks indicates the presence of imperfections and impurities in the graphene. The I_D/I_G ratio should be 0 for an ideal quality graphene. In this study, this ratio is calculated as I_D/I_G = 0.6 and close to the ideal value.

a)



b)

Element	Deposition Time (s)	
	Parameter 1 (P1)	Parameter 2 (P2)
Cu (bottom)	220	220
Zn	210	140
Sn	150	150
Cu (top)	95	95

Figure 1: Stacking order from top to bottom.

SLG/FTO/Graphene structure has an optical transmission higher than 75% in the visible region. In summary, Cu-poor Zn-rich CZTS structure is successfully achieved and characterization of the film CZTS-1. SLG/FTO/Graphene structure has an optical transmission higher than 75% which is suitable for solar cells. Based on these results, the fabrication and electrical characterization of SLG/FTO/Graphene/ZnO/CZTS/Mo superstrate solar cells are in progress.

*This study was supported by Scientific Research Coordination Unit of Pamukkale University under the project number 2018HZDP041.

References

1. Cantas et al., J. Phys. D: Appl. Phys. (2018).
2. Turkoglu et al., Thin Solid Films, (2019).
3. Wang et al., Adv. Energy Mater. 4, 1301465 (2014).

Sezyum Kurşun Halojenür Perovskitlerde Cr Etkili Renk Değişiminin Deneysel ve Teorik Olarak İncelenmesi

Sercan Özen ve Hasan Şahin

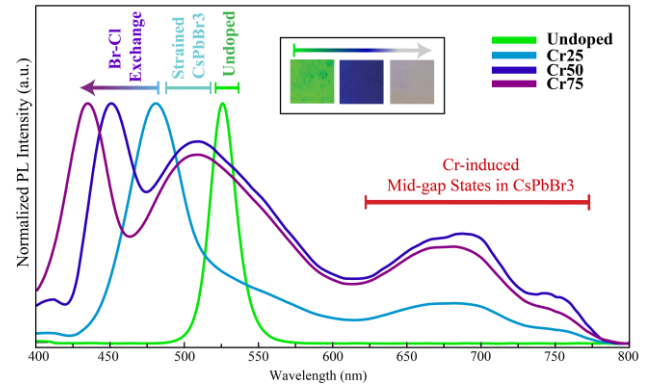
İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü – Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Çalışmamızda verimlilikleri, düşük üretim maliyeti ve kolay sentezlenebilmeleri nedeniyle son yıllarda ilgi odağı haline gelen inorganik sezyum perovskitlerin özelliklerinin Cr-katkı ile ne şekilde değiştiğini incelemekteyiz. Cr^{3+} iyonlarının perovskit kristal örgülerine dahil edilmesi, oda sıcaklığında anti-çözücü kullanılarak yeniden kristalizasyon yöntemini ile elde edildi. Hem Cr-katkılı hem de $\text{CsPbBr}_x\text{Cl}_{3-x}$ fazında kristal oluşumunun, CrCl_3 çözeltisinin konsantrasyonunun artırılmasıyla sağlandığı gösterilmektedir. Ayrıca katkılama prosedürünün, PL-spektrumunda $\text{CsPbBr}_x\text{Cl}_{3-x}$ alanlarından, Cr-katkısıyla daralmış kristallerden ve Cr katkılarının bant aralığı içerisinde oluşturduğu enerji durumlarından kaynaklanan üç farklı tipte tepe noktasının ortaya çıkmasına yol açtığı da gözlenmiştir. Ayrıca, koyu renkli morumsu ışık yayan Cr-katkılı perovskitlerin zaman içerisinde yüksek Renk Dönüşüm İndeksi (88) değerine sahip beyaz ışık yaydığı görülmüştür.

Kurşun halojenür perovskitler öne çıkan optik ve fotofiziksel özellikleriyle ışık yayan diyotlar, güneş pilleri, lazerler, gibi perovskite bazlı optoelektronik uygulamalar için ümit verici malzemelerdir. Bu malzeme sınıfı son zamanlarda düşük eksiton bağlanma enerjileri, güçlü ışık Emilimi, yüksek fotoluminesans kuantum verimi, dalga boyu ayarlanabilirliği ve uzun taşıyıcı ömrü gibi optik özelliklerinden dolayı büyük ilgi çekmektedir.

Bu çalışmada[1], Cr katkılamanın, inorganik halojenür perovskitlerin yapısal, optik ve elektronik özellikleri üzerindeki etkisi hem teorik hem de deneysel olarak incelenmiştir. İlk önce, Cr^{3+} iyonları ile katkılama oda sıcaklığında antisolvent kristalizasyon metodu ile sağlandı.

Sezyum kurşun halojenür perovskitlerin yapısal, optik ve elektronik özelliklerinde CrCl_3 katkı maddesi kaynaklı meydana gelen modifikasyonları incelemek için, Viyana ab initio Simülasyon Paketi (VASP) kullanılarak Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi temelli hesaplamalar yapıldı.[2] Yapılan simülasyonlarla, Cr-katkılanmasının bağ enerjileri bakımından tercih edilir olduğu, kristal yapısında meydana getirdiği germe etkisi, katkı atomlarının sebep olduğu enerji bant aralığı durumları gözlenerek, deneysel bulgular sonucunda elde edilen veriler ve ortaya konulan teorilerin doğruluğu kanıtlandı.



Şekil 1: Katkılı ve katkısız kristallerin fotoluminesans ölçümleri.

Yapısal karakterizasyon, katkılama işlemi gerçekleştirildiğinde Cs_4PbBr_6 fazından $\text{CsPbBr}_x\text{Cl}_{3-x}$ fazına bir geçiş olduğunu göstermektedir ve Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi kullanılarak yapılan enerji hesaplamaları bu fazın daha tercih edilir olduğunu göstermektedir. Ek olarak, Cr^{3+} iyonlarının örgü içerisine girmesi ile kristalde meydana gelen gerilmenin ve katkı atomlarının bir sonucu olarak birden fazla ışığa görülmektedir. Karışık halojenür perovskit alanlarının nemle güçlü etkileşimi nedeniyle, $\text{CsPbBr}_x\text{Cl}_{3-x}$ kristallerine karşılık gelen PL yoğunluğu zamanla önemli ölçüde azalır ve Cr-katkılı halojen perovskit numuneleri daha sonra berrak bir beyaz ışık emisyonu sergilemeye başlar.

Sonuçlarımız, Cr katkılı inorganik perovskitlerin, yüksek kuantum verimliliğine sahip tek fazlı beyaz ışık kaynakları için de umut verici adaylar olduğunu ortaya koymaktadır.

Kaynakça (Times New Roman, Bold,10 punto)

1. S. Ozen, T. Guner, G. Topcu, M. M. Demir and H. Sahin, "Experimental and First-Principles Investigation of Cr-driven Color Change in Cesium Lead Halide Perovskites", J. Appl.Phys., **Submitted** (2019).
2. G. Kresse and I. H. Sloan, "On the numerical solution of a logarithmic integral equation of the first kind for the Helmholtz equation", Numer. Math., **66**, 199–214 (1993).

Ortorombik CsPbI₃ Perovskitler: Kalınlığa Bağlı Yapısal, Optik ve Titreşimsel Özellikler

Sercan Özen ve Hasan Şahin

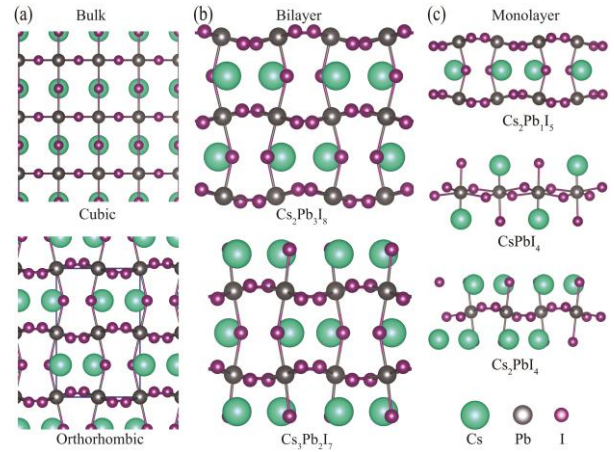
İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü – Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Sezyum kurşun halojenür perovskitler, aydınlatma, optoelektronik cihazlar, sensörler, tıbbi cihazlar ve diğer birçok alanda kullanım potansiyelleri nedeniyle son on yılda yaygın olarak çalışılmaktadır. Yumuşak kristal yapıları ve farklı fazlarının özellikleri dikkate alındığında, kalınlıklarına bağlı özelliklerinin araştırılması hala ucu açık ve araştırmaya değer bir sorudur. CsPbI₃ nanokristalleri sentezlendikten sonra, oda sıcaklığında stabil olan ortorombik faza dönmektedirler. Ortorombik kristalin titreşimsel hesapları, CsPbI₃ perovskit yapısının dinamik olarak stabil iki katmanlı ve tek katmanlı formlarının varlığının mümkün olduğunu ortaya koymaktadır. Malzemelerin inceltilmesi, optik ve elektronik özelliklerde değişiklik ile sonuçlanan bant boşluğunda değişime neden olur. Burada ortorombik CsPbI₃ perovskite nanokristallerin yığınsal, iki tabakalı ve tek tabakalı yapılarının kalınlığa bağlı yapısal, optik, elektronik ve titreşim özelliklerinin detaylı bir araştırmasını sunuyoruz..

Sezyum kurşun halojenür perovskitleri, elektronik ve optik özellikleri nedeniyle son yıllarda büyük dikkat çekmektedir. Farklı halojenler kullanılması ve farklı kristal boyutlarında sentezlenmeleriyle elde edilen yapıların bant aralığı enerjilerinin ortaya koydukları geniş aralık bilim insanlarını bu malzeme sınıfını lazerler, ışık yayan diyotlar ve güneş hücreleri gibi önemli alanlarda kullanılmaya yöneltmiştir. Sezyum kurşun halojenür perovskitleri arasında, CsPbI₃ perovskitleri, 1.73 eV'lik arzu edilen bant aralığı, stabilite ve termal direnç gibi önemli özellikler gösterir. Bu yapının özellikleri ve kararlılığı üzerine çalışmalar yapılsa da sergilediği özelliklerde kalınlığa bağlı olarak meydana gelen değişimleri inceleyen az sayıda çalışma vardır.

Bu çalışmada,[1] CsPbI₃ perovskitlerinin ilgi çekici özellikleri ve çeşitli malzemelerdeki katman azaltma çalışmalarının olağanüstü sonuçlarından ilham alarak, CsPbI₃ perovskit nanokristallerin katmana bağlı yapısal, elektronik, optik ve titreşimsel özelliklerine yoğunlaşıldı.

Viyana ab initio Simülasyon Paketi (VASP) kullanılarak Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi temelli hesaplamalar ile[2], CsPbI₃ kristallerinin yığınsal, iki katmanlı ve tek katmanlı formlarının yapısal, optik ve elektronik özellikleri incelendi.



Şekil 1: CsPbI₃ kristalinin farklı katman sayılarındaki yapıları.

Çalışmalar sonucunda, ortorombik CsPbI₃'ün, katman sayısına bağlı elektronik özelliklere ve optik yapıya sahip kararlı bir kristal olduğunun gösterilmesinin yanında enerji hesaplamaları ve titreşimsel kararlılık analizi yapılarak dinamik olarak kararlı, tek tabakalı ve çift tabakalı yapı formları belirlendi. CsPbI₃, kalınlığından bağımsız olarak direkt bir bant boşluğu gösterirken, yığından tek tabakaya inceltilğinde, malzemenin bant boşluğunun 1.8 eV'den 2.9 eV'ye çıktığı hesaplandı. Enerjiye bağlı optik tepki (dielektrik fonksiyon, emme katsayısı, yansıtma ve geçirgenlik) simülasyonları ise elektronik bant dağılımı hesaplamalarıyla tutarlı şekilde, malzemenin katman sayısı azaldıkça maviye kayma olduğunu ortaya koymuştur. Son olarak, ab-initio moleküler dinamik simülasyonlarımız kristalin tek katmanlı formunun makul sıcaklıklara kadar sabit kaldığını göstermiştir.

Kaynakça (Times New Roman, Bold,10 punto)

1. S. Ozen, F. Iyikanat, M. Ozcan, E. Tekneci, ve H. Sahin, "Orthorhombic CsPbI₃ Perovskites: Thickness-Dependent Structural, Optical and Vibrational Properties", J. Appl.Phys.,**Submitted** (2019).
2. G. Kresse and I. H. Sloan, "On the numerical solution of a logarithmic integral equation of the first kind for the Helmholtz equation", Numer. Math.,**66**, 199–214 (1993).

Kuantum tellerinde Rashba spin-orbital etkileşimi ve Magnetik alanda elektronların ÖZİSISI.

A. M. Babanlı, V. D. Sabyrov

Süleyman Demirel Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü, 32000 Isparta

Parabolik potansiyel, Magnetik alan ve Rashba spin-orbital etkileşimi olan durumda elektronların öz ısı hesaplandı. Dağılım fonksiyonu kullanılarak kuantum tel sisteminin öz ısını sıcaklığa bağlı değişimi incelendi. Sıcaklık arttıkça öz ısı maksimum değere ulaşır sonra azalarak sabit bir değere yaklaşmaktadır.

Bu çalışma düşük sıcaklıklarda kuantum tellerinde Rashba spin-orbital etkileşimi ve magnetik alan etkisinde olan elektronların öz ısı teorik olarak incellenmiştir. [1] çalışmasında Q dağılım fonksiyonu k dalga vektörüne bağlı olarak hesaplanmıştır. Bu ise sistemin termodinamik niceliklerinin k dalga vektörüne bağlı olmasına getirir. Biz bu çalışmamızda sistemin dağılım fonksiyonunu k dalga vektöründen bağımsız olarak ele alındı ve buna bağlı kuantum tel sistemin öz ısını hesapladık. Bu sistemin Hamiltonyeni (1) denklemiyle verilir [2].

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2 + \frac{\alpha}{\hbar}[\boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A})]_z + \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_z \quad (1)$$

Schrödinger denklemini çözerek elektronların enerji spektrumunu için aşağıdaki ifadeni

$$E_n = C_0 \left((2n + 2 - \alpha) + \sqrt{\left(\frac{n+1}{2}\right)b + d} \right) \quad (2)$$

bulduk [2]. Elektronların öz ısını hesaplamak için önce dağılım fonksiyonu

$$Q = \sum_{k,n=0}^N e^{-\beta E_n} \quad (3)$$

hesaplandı. Denklem (3)'de k-ya göre integrali hesaplanır ve n kuantum sayısına göre toplamanı Makleron formülünü kullanarak aşağıdaki ifadeni alırız:

$$Q = \frac{F}{\sqrt{\xi}} \text{Erf}[P\sqrt{\xi}] \left(\frac{1}{2}(e^{-H\xi} - e^{-A\xi}) + \frac{1}{8\xi} (4e^{-I\xi} - 4e^{-F\xi} + e^{A\xi}\sqrt{b\pi}\sqrt{\xi}(\text{Erf}[Z\sqrt{\xi}] - \text{Erf}[\theta\sqrt{\xi}])) \right) \quad (4)$$

Burada

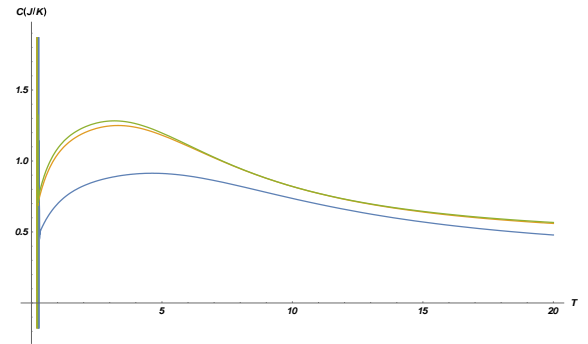
$$\xi = \beta C_0, \quad P = \frac{2\sqrt{D}}{\left(\frac{l_0}{l_B}\right)^2}, \quad F = \frac{2\sqrt{D}}{\sqrt{\pi}} \quad (5)$$

eşit olarak alındı.

Denklem (4) yardımıyla kuantum tel sisteminin öz ısı bulunur

$$C = \frac{\partial}{\partial T} \text{Ln}Q \quad (6)$$

Aşağıdaki şekil-1 de kuantum tel sisteminin sıcaklığa göre öz ısının grafiği verilmiştir.



Şekil 1: Sistemin öz ısı.

Burada $l_B = l_0$, $l_B = 2l_0$, $l_B = 4l_0$ sırasıyla mavi, turuncu ve yeşil renkli eğrilerini göstermektedir.

Hesaplamalar için şu değerler kullanılmıştır $g = -8$, $m = 0.04m_0$, $l_0 = 100 \times 10^{-9}\text{nm}$, $l_S = 100 \times 10^{-9}\text{nm}$ ve $N = 10$ [1].

Kaynakça

1. R. Khordad, H. R. Rastegar Sadehi. Solid State Communication 269 (2018) 118-124
2. A. Gharati, R. Khordad, Superlattices Microstruct. 51 (2012) 194.
3. S. Debal, B. Kramer, Phys. Rev. B71 (2005) 115322

Electromagnetically Induced Transparency via Three Photon Excitation In Cold Rydberg Atoms

Yağız Oyun¹, Özgür Çakır² and Sevilay Sevinçli¹

¹*İzmir Institute of Technology, Department of Photonics, 35430 Urla, İzmir, Turkey*

²*İzmir Institute of Technology, Department of Physics, 35430 Urla, İzmir, Turkey*

got.iyte.edu.tr

Electromagnetically induced transparency (EIT) is a quantum coherence phenomenon, in which the phase difference in excitation paths are utilized to interfere destructively, canceling out the absorption of the medium for probe laser. EIT was first observed in a two-photon scheme where a modified optical response is achieved by the interference of laser induced atomic state coherences at the resonance of transition [1]. EIT gave rise to many fascinating applications in quantum optics, such as slow light [2]. Rydberg-EIT media have been used to gain better understanding of quantum many body interactions [3,4]. Recently EIT in a four-level scheme was realized experimentally in a dressed state manner with Cs atoms, in which a strong middle state laser allows a transparency window to be opened for probe laser [5].

We investigate three photon EIT in a cold atomic ensemble that has a ladder type excitation scheme, in which the highest energy state is a Rydberg state. In order to include the dissipative dynamics of the system, we used von Neumann equation which involves Lindblad terms, followed by inclusion of Rydberg atom interactions. Starting from steady-state solutions without interactions we analyzed the system by using a self-consistent mean-field calculation to understand the interaction effects. As the interaction strength increases, we observed that transparency weakens, transparency window broadens and shifts away from the resonance as expected.

We acknowledge support from Scientific and Technological Council of Turkey (TÜBİTAK) Grant No. 117F372.

[1] S. E. Harris, J. E. Field, A. Imamoglu, Phys. Rev. Lett. 64, 1107 (1990).

[2] L. V. Hau, S. E. Harris, Z. Dutton, C. H. Behroozi, Nature 397, 594 (1999).

[3] J. D. Pritchard, D. Maxwell, A. Gauguet, K. J. Weatherill, M. P. A. Jones, C. S. Adams, Phys. Rev. Lett. 105, 193603 (2010).

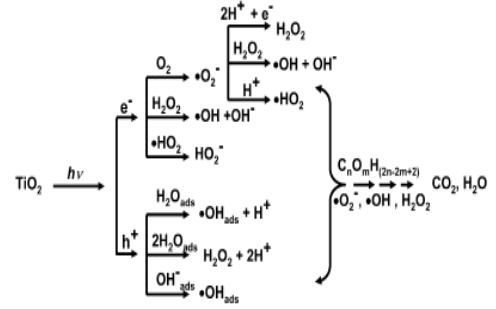
[4] O. Firstenberg, C. S. Adams, S. Hofferberth, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 49 152003 (2016).

[5] N. Sibalic, J. M. Kondo, C. S. Adams, K. J. Weatherill, Phys. Rev. A. 94, 033840 (2016).

Rutenyum Katkılandırılmış TiO₂ İnce Filmlerin Fotokatalitik Aktivitesinin İyileştirilmesiYeşim ALDURAN¹, M. ÖZDEMİR^{2,3}, G.AYGÜN^{2,3}, L.ÖZYÜZER^{2,3}¹Biyoteknoloji Bölümü, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Urla, 35430, İzmir, TÜRKİYE²Fizik Bölümü, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Urla, 35430, İzmir, TÜRKİYE³Teknoma Teknolojik Malzemeler SAN. TİC. LTD. ŞTİ., İzmir Teknoloji Geliştirme Bölgesi, İYTE Kampüsü, 35430, İzmir, TÜRKİYE

Yenilenebilir enerji kaynağı olan güneş enerjisinde temel sorun verimliliklerdir. Günümüzde ticari olarak kullanılan silikon temelli güneş panellerinin verimliliği %30 civarındadır. Bugün farklı yöntemlerle daha yüksek verim elde edilmeye çalışıldığında yüksek verim elde etmek çok masraflıdır ve bilim adamları yeni alternatifler aramaktadır. Güneş panellerinin belli bir açı ile kurulumu, havadaki tozlar, organik kirlilikler, su lekeleri, kömür ve dizel kaynaklı endüstriyel kirlilikler nedeniyle güneş ışınlarının fotovoltajik hücreler ile emilimi azalarak veriminin düştüğü gözlenmiştir kendi kendini temizlemeye dayalı yöntem kullanılabilir en etkili yöntemdir. Bu projedeki temel amaç, güneş panellerinin üst yüzeyini rutenyum (Ru) katkılandırılmış TiO₂ ile kaplayarak fotokatalitik özellikleri sayesinde yüzeydeki organik kirliliklerin kuvvetli oksitleyici ortam ile parçalanıp su, karbondioksit ve daha küçük moleküllere ayrışarak yağmur suları ile kendi kendini temizlemesini sağlamaktır. Böylece güneş emilimini maksimum seviyede tutarak, güneş panellerinin verimliliği artırılacaktır. Bu yöntem sayesinde güneş hücreleri, mekanik ve kimyasal yöntemlerin yüzeye vermiş olduğu zarara maruz kalmayacaktır. Hem maliyet düşürülecektir hem de zamandan tasarruf sağlanacaktır.

Önemli bir inorganik bileşik olan TiO₂; ekonomik oluşu, yüksek foto iletkenliği, hazır elde edilebilmesi özelliklerinden dolayı en çok kullanılan yarı iletken [1]. Doğal olarak TiO₂ üç farklı kristal yapısına sahiptir. Bunlar; rutil, anataz ve brookittir. Brookit ve anataz tüm sıcaklıklarda kararlıdır. Tek kararlı faz rutildir. Rutil fazı Anataz fazına göre daha sıkı paketlenmiş bir yapıdadır. Anataz fazı Rutil ve Brookit fazları ile karşılaştırıldığında en yüksek fotoaktiviteyi gösteren fazdır. Fotokatalizör, UV ışığın etkisi ile yüzeyde kuvvetli yükseltgen (oksidleyici) ortam oluşturan bir yarı iletken olarak tarif edilebilir. Fotokatalizör, ışık yolu ile aktifleşen bir katalizördür. Işığı absorbe ederek yüksek enerjili bir hale gelir ve bu enerjiyi reaktif maddelere transfer ederek kimyasal tepkimeyi başlatır [2]. Son zamanlarda TiO₂'nin fotokatalitik özelliğinden faydalanılmaktadır. Ayrıca yüksek sıcaklık gaz sensörleri, güneş pilleri, lityum pillerinde anot olarak, antibakteriyel olarak, kemik implantlarında biosensör ve biouyumlu malzeme olarak kullanılması TiO₂'nin önemli uygulamalarından bazılarıdır. TiO₂'nin yüksek afinitesi yüzey modifikasyonunu kolaylaştırır, ayrıca toksik özellik göstermemesi, kimyasal olarak kararlı olması, yüksek kırılma indisine, geniş bant aralığına ve tekrar kullanılabilirliğine sahip olması en önemli özellikleri arasında yer almaktadır [3]. TiO₂'nin fotokatalitik çalışma mekanizması hidroksil radikalı, hidrojen peroksit ve süperoksit gibi reaktif oksijen türlerini üreten kimyasal basamaklar içermektedir [4].



Şekil 1: Reaktif oksijen ve hidroksil (H₂O₂, ·O⁻², ·OH) zincir reaksiyonlarının şematik gösterimi [3].

TiO₂'nin yüzeyi morötesi (UV) ile uyarıldığı zaman yüzeydeki organik bileşikler parçalanarak zararsız olan su, karbondioksit ve daha küçük moleküllere dönüştürüp malzemenin kendi kendini temizlemesi sağlanmaktadır. TiO₂'nin elektromanyetik spektrumunun görünür bölge aralığının sınırlı olması (anataz için < 387 nm %5) görünür ışık altında fotokatalitik aktivitesinin düşük olması bu fotokatalizörlerin sınırlayıcı özelliklerinden biridir [5]. Bu nedenle yüzey yapısının modifikasyonu aracılığı ile fotokatalitik aktivitenin artırılması için Rutenyum (Ru) iyonları ile katkılama yapılacaktır. Diğer metal iyonlarına kıyasla Ru ile katkılandırılan TiO₂, örgü içerisinde yeni fazlar oluşturarak, fotojenlenmiş elektron-boşluk çiftlerinin birbirinden ayrılmasını, TiO₂ içerisinde yeni enerji seviyeleri oluşmasını ve elektron-boşluk rekombinasyonunun değişmesine neden olarak etkili dalga boyunu 400 nm'lere kadar uzatır [6].

Kaynakça

- [1] P.Mandal, S. Sharma, Renewable Sustainable Energy Review, "Progress in Plasmonic Solar Cell Efficiency Improvement: A Status Review", 2016, 65 – 537-552
- [2] M. Ozdemir, M. Kurt, L. Ozyuzer, G. Aygun, The European Physical Journal Applied Physics, "Comparison of photocatalytic properties of TiO₂ and fibers", 2016, 75: 30401
- [3] A. Fujishima, X. Zhang, Comptes Rendus Chimie, "Titanium dioxide photocatalysis; present situation and future approaches", 2006, 9 (5-6).750-760
- [4] L.Yao, J. He, Progress In Material Science, "Recent Progress in Antireflection and Self-Cleaning Technology – From Surface Engineering to Functional Surface", 2013, 64 93 – 123.
- [5] S.Yoo, M.S. " Oriented array of single crystal TiO₂ nanofibers by gas-phase etching, processing and characterization" , pp. 1-35 2005
- [6] A. D. Tryk, A.Fujishima, K. Honda, Electrochim. Acta 45, "Recent topics in Photoelectrochemistry: achievements and future prospects, 2000, 2363-2376.

Ultra-ince GaGeAs Kristallerinin Yapısal, Titreşimsel ve Elektronik Özellikleri

Yiğit Sözen ve Hasan Şahin

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

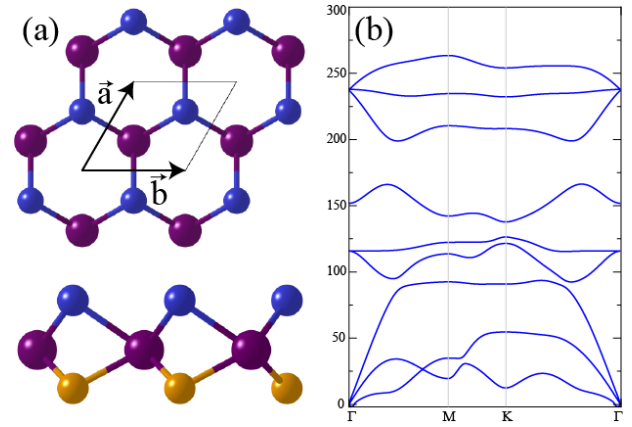
Çalışmamızda tek tabakalı GaGeAs kristallerinin yapısal, titreşimsel ve elektronik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile incelenmiştir. Toplam enerji optimizasyonu hesapları tek tabakalı GaAs malzemesinin Ge atomları ile güçlü bir şekilde etkileştiklerini ortaya koymuştur. Birim hücre başına bir Ge atomu ile yüzeyin modifiye edilmesi sonucu olarak ise 1H fazındaki GaGeAs kristalinin oluşabileceği öngörülmüştür. Malzemenin dinamik stabilitesi ise fonon hesapları yardımıyla test edilmiştir. Öngörülen malzemenin fonon spektrumunda negatif modlarının olmayışı bu kristalin stabil bir malzeme olduğunu ve uygun deneysel koşullarda sentezlenebileceğini göstermektedir.

Grafen benzeri iki boyutlu stabil kristallerin, çeşitli deneysel yöntemlerle sentezlenebilir olduğu geçmiş yıllarda kanıtlanmıştır. Bu yapıların sentezi sonucunda ortaya çıkan olağandışı optik ve elektronik özellikler ise bu malzemelere olan ilgiyi arttırmıştır.

Yakın zamanda ön görülmüş olan, az bükülmüş (low buckled) geometriye sahip tek katman GaAs kristalinin, kararlı bir yarı iletken malzeme olduğu teorik olarak ispatlanmıştır. Fiziksel ve titreşimsel özellikleri incelenmiş olmasına rağmen bu malzemenin farklı bir atomla ne şekilde etkileştiğini inceleyen bir çalışma bulunmamaktadır.

Son zamanlarda gerçekleşen deneysel ve teorik gelişmelerin verdiği motivasyonla, petek yapısına sahip tek katman GaAs yüzeyi, Ge atomu ile modifiye edilmiş ve modifikasyon sonucu oluşan GaGeAs kristalinin yapısal, titreşimler ve elektriksel özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak incelenmiştir.[1] İlk-prensip hesaplamaları Vienna ab-initio simulation package[2] (VASP) kullanılarak gerçekleştirilmiş olup elektronlar arasındaki değişim-korelasyon etkileşimleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı[3] (GGA) fonksiyoneli ile tanımlanmıştır.

Ge atomunun GaAs kristaline güçlü şekilde bağlanması sonucunda oluşan 1H fazındaki kristalin enerji optimizasyonu yapıldığında, elde edilen birim hücrenin örgü parametresi 3.8 Å bulunmuştur. Ga-Ge ve Ga-As atomları arasındaki bağ uzunluğu ise, sırasıyla 2.67 Å ve 2.50 Å'dur. Kristaldeki atomlar arasındaki bağların hem kovalent hem de iyonik özellik gösterdiği Bader analizi yapılarak ispatlanmıştır. Serbest atomların sahip olduğu toplam enerji, kristalin toplam enerjisinden çıkarılarak, birim hücre başına düşen kohezif enerji



Şekil 1: Tek katman 1H-GaGeAs'nin üstten ve yandan görünümü (a) ve bu malzemenin dinamik olarak stabil olduğunu gösteren fonon bant diyagramı (b)

miktarı hesaplanmıştır ve bu değer 9.45 eV olarak bulunmuştur.

Malzemenin dinamik olarak stabil olduğunun kanıtlanabilmesi için “ufak yerdeğiştirme yöntemi” kullanılarak fonon hesapları yapılmıştır. Toplamda 3 akustik ve 6 optik moda sahip olan bu malzemenin bu modlarından hiç birinin negatif değerlikli olmaması malzemenin teorik olarak stabil olduğunu göstermektedir.

Bunun yanısıra, tek katman GaGeAs kristalindeki elektronların, momentum uzayındaki davranışlarını incelemek için elektronik bant hesaplamaları yapılmıştır. Fermi seviyesini kesen iletim ve değerlik bantlarının var olması, malzemenin metalik olduğunu göstermiştir.

GaGeAs malzemesinin metalik doğası, onun, nanoteknoloji alanında üretilen nanocihazlarda yük ve ısı taşımında kullanılabilecek umut verici bir aday olduğunu göstermektedir.

1. Y. Sozen ve H. Şahin “Structural, electronic and vibrational properties of ultra-thin GaGeAs crystals”, to be submitted
2. G. Kresse and J. Hafner, “Ab initio molecular dynamics for liquid metals”, Phys. Rev. B **47**, 558-561, (1993).
3. S. Grimme, “Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction”, J. Comp. Chem. **27**, 1787 (2006).

Geçirgen ve İletken Hibrit ITO/Ag/ITO İnce Filmlerin Elektro-Tavlama ile iyileştirilmesi

Zemzem Uyanik^{1,*}, B. Ata¹, E. Meric², J. E. Martinez³, G. Aygun¹ and L. Ozyuzer¹¹*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430, Urla, İzmir, TÜRKİYE*²*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Makine Mühendisliği, 35430, Urla, İzmir, TÜRKİYE*³*Dokuz Eylül Üniversitesi, Nano Bilim ve Mühendislik, Buca, 35390, İzmir, TÜRKİYE*

Bu projenin temel amacı, indiyum kalay oksit (ITO) katmanları arasına iletken gümüş (Ag) katmanı ekleyerek ITO/Ag/ITO (IAI) ince filmlerinin yüzey direncinde önemli bir azalma, optik bant aralığında ise büyük bir artış ile yüksek optik geçirgenlik ve iletkenlik elde edilmesi sağlanacaktır. Yığın malzemeler arasında en düşük özdirence sahip olması nedeniyle metal gömülü katmanı olarak Ag tercih edilecektir. Metal Ag kullanımı elde edilecek elektrotları, optimize kaplama parametrelerine bağlı olarak elektriksel ve optiksel yönden iyileştirecektir. ITO üst katmanının iletkenliği esas olarak Ag ara katmanının kalınlığına bağlı olarak incelenecektir. ITO katmanlarının istiflenmiş IAI elektrotundaki görevi, metal yüzeydeki yansımayı azaltarak görünür spektral aralıktaki toplam geçirgenliği arttırmaktır. IAI çoklu katmanını inceledikten sonra elde edilen IAI ince filmlerinin kristalliğini iyileştirmek amacıyla elektro-tavlama işlemi uygulanacaktır. Böylece yüksek geçirgenlik ve iletkenlikte IAI üç katmanlı yüksek kaliteli malzemeler elektro-tavlama yöntemi ile üretilen olacaktır. Daha sonra elektro-tavlama IAI filmleri ile elektro-tavlama uygulanmayan IAI üç katmanlı yapı arasında karşılaştırma yapılacaktır. Elektrik akımının IAI ince filmler üzerindeki etkisini araştırarak elektronik aygıt ömrünün artırılması hedeflenip vakumda elektro-tavlamanın, endüstrideki uygulamalar için daha uygun bir teknik olduğu gösterilecektir.

Şeffaf iletken oksitler (TCO'lar), spektrumun görünür bölgesinde düşük elektromanyetik dalga emilimine sahip elektriksel iletken malzemelerdir. TCO'lar organik ışık yayan diyotlarda, güneş hücrelerinde, plazma ekran panellerinde, elektrokromik pencerelerde geçirgen elektrot olarak kullanılmaktadır. Yüzey ısıtıcısı olarak ise kameralar, lensler, aynalar, araba camları gibi çeşitli teknolojilerde kullanılmaktadır [1,2]. TCO'ların tavlama için en yaygın tavlama yöntemi ısı tavlama [3]. Son çalışmalarda elektrik akımı ile kendiliğinden ısınan elektro-tavlama, büyütülen filmlerin özelliklerini geliştirmek için ısı tavlama alternatif olarak gösterilmektedir [4-5]. Elektro-tavlama, birçok avantaj sunmaktadır. Tavlama sırasında harici bir ısıya gerek yoktur ve filme uygulanan elektrik akımıyla doğrudan joule ısı sağlanmaktadır. Bu durum hem safsızlık oluşumunu etkilemekte hem de çevre bileşenlerinin sisteme verdiği fazla ısı yüklemesini azaltmayı sağlamaktadır. Ayrıca, elektro-tavlama, termal olarak hassas alt taşlar için uygundur [4]. Isıl tavlama kıyasla elektro-tavlama esnasında kristalleşme düşük güç seviyelerinde daha hızlı bir şekilde başlar ve ilerler. Bunun nedeni ise joule ısısından gelen verimli enerji paylaşımıdır. Elektro-tavlamanın elektrik akımı uygulanan IAI ince film özellikleri üzerindeki etkilerini araştıran sınırlı çalışma vardır. Ag katmanı kaplama süresi ile IAI çoklu katmanının yüzey direnci değişmektedir [6]. Ag kalınlığı arttıkça elektron yoğunluğunda hızlı bir artış elektron hareketliliğinde ise bir azalma gözlemlenmektedir. Süreksizlik, IAI üç katmanlı ince filmin ara yüz bölgesine gömülü olan Ag tabakasının topaklaşması ve kristalli ITO tane sınırları boyunca bulunan oksijen tabakalarının Ag tabakalarına difüzyonu IAI ince filmin elektriksel ve optiksel olarak bozulmasına neden olmaktadır. Ag taneleri alt ITO katmanına bağlanırsa, IAI filmleri mükemmel korelasyon ile elektriksel ve optiksel performans gösterebilmektedir. IAI elektrotu için Auger elektron spektroskopisi derinlik profili yüksek formasyona bağlı olarak metal Ag ve ITO katmanları arasında ara yüzey reaksiyonu olmadığı sonucunu ortaya koymuştur [7]. Tavlama sıcaklığının yükseltilmesi, yüzey direncini düşürüp optik geçirgenliği arttırmaktadır [8]. Bu, IAI çoklu katmanı kristalliğindeki iyileşme ve Ag nin UV'ye yakın soğurma katsayısındaki azalmadan kaynaklanabilmektedir [9]. Vakumda elektro-tavlama IAI ince filmlerin sıcaklığı arttıkça, kristal fazların bir kısmı artmış ve tercih edilen oryantasyon (400) düzleminde ortaya çıkmıştır [10].

Bu çalışmada, ITO/Ag/ITO (IAI) çoklu katmanını vakum ortamını bozmadan Ag ve ITO (saflık %99.99, yüzde ağırlık SnO₂:InO₂ %90:%10) hedefleri kullanılarak DC miknatıssal saçtırma yöntemi ile silis ve borik oksit karışımından elde edilen düşük erime noktalı barosilikat cam üzerine Ar ve O₂ atmosferinde kaplanması hedeflenmektedir.

IAI ince filmlerinin yapısal özellikleri, Cu K_α radyasyonuna sahip (λ=0.154 nm) X-ışını kırınımı (XRD) (Philips X'Pert Pro) ile tavlama sıcaklığının bir fonksiyonu olarak karakterize edilecektir. Optik özellikleri ise 200-2600 nm dalga boyu aralığında olan spektrofotometre (PerkinElmer Lambda 950 UV/Vis/NIR Spektrofotometre) ile ölçülecektir. Yüzey direnci ölçümleri için Keithley 2424 kaynak metrisi kullanılarak dört nokta uç metodu uygulanacaktır.

Kaynakça

- [1] C. W. Tang and S. A. Vanslyke, *Apply. Phys. Lett.* 51, 913 (1987).
- [2] V. S. Reddy, K. Das, A. Dhar and S. K. Ray., *Semicond. Sci. Technol.* 21, 1747 (2006).
- [3] L. Kerkache, A. Layadi, E. Dogheche, D. Remiens, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 39, 184 (2006).
- [4] A. Rogozin, N. Shevchenko, M. Vinnichenko, M. Seidel, A. Kolitsch, W. Mooller, *Appl. Phys. Lett.* 89, 061908 (2006).
- [5] D. Lee, S. Shim, J. Choi, K. Yoon, *Appl. Surf. Sci.* 254, 4650 (2008).
- [6] C. H. Hong, Y. J. Jo, H. A. Kim, M. J. Park, and J. S. Kwak, *J Nanosci Nanotechnolgy.* 12(5):4163 7(2012).
- [7] Y. S. Park, H. K. Park, J. A. Jeong, H. K. Kim, K. H. Choi, S. I. Na, and D.Y.Kim, *J. of Electrochemical. Soc.*, 156 7H588-H594 (2009).
- [8] O. Tuna, Y. Selamet, G. Aygun, L. Ozyuzer, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 43, 055402 (2010).
- [9] J. H. Lee, K. Y. Woo, K. H. Kim, H.D. Kim, and T. G. Kim, *Optics Letters* 38(23):5055-8 (2013).
- [10] H Koseoglu, F Turkoglu, M. Kurt, M. D. Yaman, F. G. Akca, G Aygun and L. Ozyuzer, *Vacuum* 120, 8-13 (2015).