VII. YOĞUN MADDE FİZİĞİ İZMİR TOPLANTISI 13 NİSAN 2018 PROGRAM VE ÖZET KİTAPÇIĞI





Sizleri Yoğun Madde Fiziği (YMF)-İzmir Toplantısında aramızda görmekten büyük mutluluk duymaktayız. Bu yıl yedincisi 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, sponsorumuz TEKNOPARK-İZMİR'e, katkılarından dolayı İYTE Rektörlüğüne teşekkür ederiz.

YMF-İzmir Toplantısı Düzenleme Kurulu

VII. Yoğun Madde Fiziği – İzmir Toplantısı, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, 13 Nisan 2018

SÖZLÜ SUNUMLAR

Süperiletken Çip Üzerinde Kuantum Isı Makinesi

Özgür Müstecaplıoğlu (Koç Üniversitesi)

Isi makineleri düzensiz termal enerjiyi düzenli enerjilere dönüştüren cihazlardır. Termodinamik yasalarına göre her makine çalışırken düzenli enerji (iş) ile beraber düzensiz enerji de (isi) da üretmek zorundadır. Dışarı atılan ve kullanılmayan ısı enerjisini yararlı enerjilere dönüştürmek modern bir enerji tasarrufu stratejisidir. Ticari ve deneysel kuantum bilgisayar sistemlerinde süperiletken devreler öncü bir rol oynamaktadır. Konuşmamızda çip üzerinde süperiletken teller ile oluşturulmuş bir devre ile ısı enerjisini düzenli elektrik enerjisine dönüştürebilen bir sistemi tartışacağız. Tellerin periyodik olarak soğutulması ile efektif olarak bir Otto çevrimi elde edilebileceğini ve bu çevrimden elektriksel iş üretilebileceğini göstereceğiz [1]. Teller arasında ortaya çıkan kuantum korelasyonlar sayesinde benzer bir klasik Otto çevrimine göre daha çok güç üretebilmesi nedeniyle önerdiğimiz sistem özgün bir kuantum ısı makinesi olarak değerlendirilebilir. Atık enerji tasarrufu ile beraber süperiletken kuantum bilgisayar sistemleri için doğrudan entegre olabilen bir güç üreteci olarak da sistemimiz uygulanabilir.

[1] A. Ümit C. Hardal, Nur Aslan, Christopher M. Wilson, Özgür E. Müstecaplıoğlu, Phys. Rev. E 96, 062120 (2017).

Açık Kuantum Sistemlerinde Hafiza Etkileri

Göktuğ Karpat (İzmir Ekonomi Ü.)

Pratik hayatta karşılaşacağımız kuantum mekaniksel sistemler çevreleriyle kontrol edilmesi pek de mümkün olmayan bir şekilde etkileşmeye mahkumdurlar. Kuantum mekaniksel sistemlerin bu etkileşim sonucunda eşevrelilik ve çeşitli kuantum ilintileri gibi bazı önemli özelliklerini kaybettikleri bilinmektedir. Hafıza etkileri açısından bakıldığında, açık kuantum sistemlerinin zaman evrimlerini Markovian (hafızasız) süreçler ve Markovian olamayan (hafızalı) süreçler olarak ikiye ayırmak mümkündür. Son yılarda kuantum mekaniksel süreçlerde hafızayı anlamanın değişik fiziksel yollara dayanan pek çok farklı yöntemi ortaya atılmıştır. Bu konuşmada temel olarak açık kuantum sistemlerinde hafıza etkilerini karakterize etmenin farklı yolları tartışılacaktır.

Yüksek Güçlü Fiber Tabanlı Sistemler ve Yönlendirilmiş Enerji Uygulamaları

Aydın Yeniay

TÜBİTAK BİLGEM UEKAE Elektro-Optik ve Lazer Sistemleri Birimi, 41470 Gebze, Kocaeli

Bu bildiride yüksek güçlü fiber tabanlı lazer ve yükselticilerin ana mimari tasarımları ve performans kriterleri bazında güncel teknolojik gelişmelerin durumu incelenecektir. Ayrıca, bu lazerlerin yönlendirilmiş enerji uygulamaları, sistem bileşenleri, performans kriterleri ve güncel teknolojik seviyeler özetle sunulacaktır.

Yönlendirilmiş enerji uygulamalarında lazer ışın kalitesi (M²), güç ve verimlilik ile birlikte sistem performansını belirleyici bir parametredir [1]. Fiber tabanlı lazer ve yükselticiler, son yıllarda önemli teknolojik gelişmeler sağlaması ile verimlilik, ışın kalitesi. güç ölçeklenebilirliği ve dayanıklılık endüstriyel, medikal ve savunma bakımından uygulamalarında önemli kabiliyetler sağlamaktadırlar. Bu sistemler Yb katmanlı, geniş kip alanlı (LMA) silika fiber yapıları ile fiber Bragg ızgara (FBG) ve uygun fiber birleştiriciler monolitik olarak entegre edilerek oluşturulur. Bu yapılarda MOPA yapısı ışın kalitesini koruyarak güç artımı yapabilirliği yönünden ideal çözüm sunar. Ancak, çıkış gücü arttıkça (>3kW) ışın kalitesini yüksek tutmakta (M²<2) önemli engeller vardır. Sistemin termal kontrolünün yanı sıra termal tabanlı kip-dalgalanmaları (TMI) ve uyarılmış Raman saçılması (SRS) limitleri etrafında tasarımlar gerekmektedir. Fiber tabanlı MOPA konfigürasyonları tandem pompalama (tandem veya in-band pumping) yöntemi ile güç ölçeklenebilirliği ve ışın kalitesi bakımından önemli avantajlar sağlamaktadır [2].

Yönlendirilmiş enerji sistemleri genel olarak lazer, çıkış optikleri ve yönlendirme platformundan oluşur. Bu sistemlerin performansları hedef üzerine odaklayabildikleri toplam güç ve güç yoğunluğu ile belirlenir. Lazer kaynaklarından başlayıp hedefe kadar giden optik yolda lazer ışını çeşitli etkileşimlere maruz kalarak faz bozulmaları ve bu bozulmalara bağlı olarak ışın çapı genişlemesi ile hedef üzerinde odaklanır. Lazer ışının hedefteki odaklama bozulması (σ_T), maruz kaldığı her bir bozulmanın RSS olarak

$$\sigma_T = \sqrt{\sigma_{lazer}^2 + \sigma_{diff}^2 + \sigma_{optik}^2 + \sigma_{atm}^2 + \sigma_{stb}^2}$$

Burada σ_{lazer}^2 lazerin ışın kalitesinden kaynaklanan bozulma olup değeri M² ile quadratik olarak orantılıdır ve sistem performansında belirleyici rol oynar. $\sigma_{\scriptscriptstyle diff}$ terimi ise difraksiyondan kaynaklanan açısal bozulma olup dalga boyu ile doğru, ışın çıkış çap değeri ile ters orantılıdır. Çıkış optik çapının büyümesi uygun teleskobik sistemler ile mümkün olup atmosfer etkileşimi ve yönlendirme biriminin atalet değerleri göz önünde alınarak bütünlüğünde sistem değerlendirilmelidir [3]. σ_{optik}^2 terimi lazer çıkış optiklerinden (aynalar ve mercekler) kaynaklanan açısal bozulmaları ifade etmektedir. Özellikle yüksek güçlü lazer sistemlerinde malzeme ve kaplama özelliklerine bağlı olarak termal tabanlı katastrofik bozulma riskleri mevcuttur. Sistemlerde kullanılan kaplamaların yüksek güç altında oluşan yüzey ve faz bozulma değerleri (Zernike katsayıları) sistemin performansı açısından önemlidir [4]. σ_{atm}^2 terimi atmosferden kaynaklanan açısal bozulma değeri olup uzun ve kısa zamanlı (short-term, long-term) bozulmaları içermektedir. Atmosferdeki ısısal değişim ve rüzgar gibi etkilerden dolayı ışın yolu homojen bir yapıda değildir. Atmosfer büyük ve küçük boyut aralığında termal paketçiklerden oluştuğu varsayılarak modellenmektedir (Kolmogorov Türbülans Teorisi). Bu termal paketçikler kırınım indeksini değiştirerek ilerleyen laze ışınını hem genişletir, hem de hedef üzerinde gezinmesine yol açar [5]. σ_{stb}^2 terimi ise lazer optiklerini yönlendiren biriminden kaynaklanan mekanik titreşimler tabanlı açısal bozulma değeridir. Genel olarak sistemlerde elektro-mekanik kaba yönlendirme ve hassas yönlendirme döngüleri iç içe kullanılarak lazer ışınının hedef üzerinde stabilizasyonu sağlanabilmektedir. Yönlendirilmiş enerji uygulamaları geniş kapsamlı olup soft-kill [6] ve hard-kill [7] olarak sınıflandırılabilir.

soft-kill [6] ve hard-kill [7] olarak sınıflandırılabilir. Uygulamalara göre hedefte oluşturulmak istenen güç yoğunluğu ve ışın çap gereksinimleri ve üstte belirtilen bozulma değerleri doğrultusunda sistemlerin tasarım optimizasyonların yapılması önem arzeder.

Kaynakça

tonlanması ile belirlenir

- **1.** P. Sprangle, J. Peñano, B. Hafizi, and A. Ting, "Incoherent Combining of High-Power Fiber Lasers for Long-Range Directed Energy Applications," Journal of Directed Energy 2, 273-284 (2007).
- 2. S. Kalyoncu, "The Stability Analysis for In-Band Pumped Master Oscillator Power Amplifiers", Volume 8, Number 3, June 2016.
- **3.** Y. Öztürk et.al. "Teleskop aynalarının sabitlenme noktalarının sonlu eleman analiz yöntemiyle incelenmesi", SAVTEK 2018, 9. Savunma teknolojileri kongresi, 27-29 haziran 2018, ODTÜ, Ankara
- **4.** E. Y. Kaya et.al., "Yüksek güçlü lazer ışıması altında çok katmanlı aynaların yüzey bozulmaları", SAVTEK 2018, 9. Savunma teknolojileri kongresi, 27-29 haziran 2018, ODTÜ, Ankara.
- 5. N. Baci et.al. "Yapay sinir ağları ile Cn² tahmini", SAVTEK 2018, 9. Savunma teknolojileri kongresi, 27-29 haziran 2018, ODTÜ, Ankara.
- 6. T. Özbilgin, "Kamera sensörleri için lazerle kamaştırma analizi", SAVTEK 2018, 9. Savunma teknolojileri kongresi, 27-29 haziran 2018, ODTÜ, Ankara.
- **7.** E. Demirci et. Al.,"Yüksek güçlü lazer karbon çelik etkileşiminde atmosfer etkisi", SAVTEK 2018, 9. Savunma teknolojileri kongresi, 27-29 haziran 2018, ODTÜ, Ankara.

Güneş Enerjisi Çevirimi için PbTiO3 : Deney ve İlk prensiplerden öğrendiklerimiz

Ersen Mete^{1*}, Merve Yortanlı¹, Oğuz Gülseren², Şinasi Ellaitıoğlu³, Deniz Üner⁴

¹Balıkesir Üniversitesi, Fizik Bölümü, 10145 Balıkesir
 ²Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800 Ankara
 ³TED Üniversitesi, Temel Bilimler, 06420 Ankara
 ⁴ODTÜ, Kimya Mühendisliği Bölümü, 06800 Ankara

Güneş ışığının kimyasal bağlarda depolanması hem elektrik şebekesine bağımlılığı kaldırabilecek hem de fosil yakıtlara alternatif olabilecek yeni yakıt pillerinin geliştirilmesine olanak sağlamaktadır. Güneş ışığı kullanan termokimyasal çevirimler, yüksek sıcaklıkla indirgenebilecek (termal ayrışma) ve görece daha düşük sıcaklıkta CO₂ veya H₂O kullanarak oksitlenebilecek kararlı yapıya sahip malzemelere ihtiyaç duymaktadır. Bu termokimyasal çevirimin sıcaklık aralıklarında, PbTiO3 perovskitler, hem yapısal faz geçişleri göstermemeleri hem de termodinamik açıdan oksijen boşluklarının oluşumuna imkan vermeleri göz önüne alındığında bu amaca uygun olacak adaylardan biri olarak görülmektedir. PbTiO₃ yapısında, oksijen bağlarının zayıflatılması ve güneş ışığı altında reaktif olması için Co katkılama incelendi. Farklı Co konsatrasyonları için kurşun titanat tetragonal örgüsünde, oksijen bağları ve oksijen boşluğu oluşumu hibrit DFT yöntemleri ile ele alındı. Elektronik yapıda meydana gelen değişimlerin kökeni ilk prensip hesaplamaları ile araştırıldı. Optik soğurmada deneysel ve hesaplamalı yöntemlerin uyumlu olduğu gösterildi.

Deneysel ve teorik katıhal NMR spektroskopisi sonuçlarının aynı eğilimde birbirileri ile tutarlı sonuçlar verdiği görüldü. Deneysel NMR kimyasal kayma spektrumlarının Co konsantrasyonuna bağlı olarak teorik NMR sonuçları ışığında perovskit malzemelerin yapı tayinine yönelik yorumlanabileceği anlaşılmaktadır.

Yüzey oksıjen boşluklarının oluşumu ve yüzeye bağlanan su moleküllerinin etkileşimleri hesaplamalaı yöntemlerle incelendi. Yüzeydeki su mokelüllerinden H₂ eldesine yönelik ilk ip uçları elde edildi.

III-V Grubu Yarıiletken Heteroyapılar

Uğur Serincan

Anadolu Üniversitesi

III-V grubu yarıiletken heteroyapılar günümüzde çeşitli alanlarda kullanılmaktadır. Bu alanların içerisinde en önemlileri olarak ışık yayan diyotlar (light emitting diodes, LED), fotodedektörler, transistörler ve yüksek verimli güneş gözeleri gösterilebilir. Bu çalışmada, III-V grubu yarıiletken heteroyapılar moleküler demet epitaksi (molecular beam epitaxy, MBE) yöntemi kullanılarak büyütülmüş ve çeşitli karakterizasyon teknikleri kullanılarak incelenmiştir. İncelenen yapılar arasında Tip II InAs/GaSb süperörgüler (T2SL), Tip II InAs/InAsSb süperörgüler, InSb, InAsSb, GaInAsSb, GaAs/AlGaAs kuantum kuyu, THz fotodedektörler ve GaAs tabanlı yüksek verimli güneş gözeleri yer almaktadır. Milli olarak üretilen bu fotodedektörler hem orta dalga kızılötesi (MWIR) hem de uzun dalga kızılötesi (LWIR) bölgede çalışmaktadırlar. Fotodedektörlere ek olarak geleceğin teknoloji olarak gösterilen esnek GaAs tabanlı yüksek verimli güneş gözeleri de bu çalışma kapsamında çalışılmıştır. Milli olarak büyütülen GaAs tabanlı güneş gözeleri de bu şaşarılı bir şekilde alttaştan kaldırılmış ve esnek yüzey üzerine aktarılabilmiştir.

Teşekkür

Bu çalışma, Anadolu Üniversitesi BAP-1706F388, 1705F252, 1705F287, 1607F675, 1506F541, 1403F062, 1305F092 numaralı projeler ve TÜBİTAK-116F199 kodlu proje kapsamında desteklenmiştir.

Cu₂ZnSnS₄ (CZTS) Tabanlı Güneş Hücrelerinin Verimlilik Analizleri

Ayten Cantas ^{a,b*}, E. Meric^a, F. Turkoglu^a, F. G. Akca^a, M. Ozdemir^c, L. Ozyuzer^{a,c} and G. Aygun^a

a İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, Urla, 35430, İzmir, Türkiye b Pamukkale Üniversitesi, Elektrik ve Enerji Bölümü, Kınıklı, 20160, Denizli, Türkiye cTeknoma Teknolojik Malzemeler Ltd. Sti., İzmir Teknoloji Geliştirme Bölgesi, Urla, 35430, İzmir, Türkiye

> *İlgili Yazar: E-mail adres: abagdas@pau.edu.tr Tel: +90-258-2123788

[Anahtar kelimeler] CZTS, ince film güneş hücreleri, mıknatıssal saçtırma.

Cu₂ZnSnS₄'ün (CZTS) p-tipi yarıiletken bileşiği, ince film güneş hücrelerinde soğurucu katman olarak kullanılan ve yeni keşfedilen fotovoltaik malzemedir. CZTS soğurucu katmanı oluşturan Cu, Zn, Sn ve S elementlerinin oldukça düşük maliyetli olması, doğada bol miktarda bulunması, çevre dostu elementler olması ayrıca CZTS tabanlı güneş hücrelerinin teorik olarak %30 üzerinde verimlilik vaad etmesi bu soğurucu katman üzerine olan [1]. Bu avantajlardan dolayı CZTS güneş hücrelerinin, gelecekte fotovoltaik (PV) ilgivi arttırmıştır endüstrisinde CuInGaSe₂ (CIGS) güneş hücrelerinin yerine geçeceği düşünülmektedir. CZTS ince filmler p-tipi iletkenlik, yüksek soğurma katsayısı (10⁴ cm⁻¹), 1.45 ve 1.5 eV aralığında enerji bant değerine sahiptir ve bu özellikler yüksek verimli güneş hücrelerinin üretimi için idealdır [2]. Şu anda CZTS tabanlı ince film güneş hücreleri için en yüksek verimlilik % 12.6 olup bu değer teorik olarak hesaplanan %30 üzeri verimlilik değerinden düşük olup, daha fazla geliştirilmesi gerekmektedir [3]. Yüksek verimliliğe sahip Cu₂ZnSnS₄ (CZTS) ince film günes pillerinin geliştirilmesi, saf fazda CZTS soğurucuların elde edilmesine bağlıdır. İkincil faz olarak adlandırılan ve istenmeyen fazların oluşumunun engellenmesi konusundaki zorluklar nedeniyle, CZTS filmlerin yapısal özellikleri ve kompozisyonları sistematik olarak çalışılmalıdır. Bu çalışmada, CZTS soğurucu filmler birbirinden bağımsız iki aşamada hazırlanmıştır. CZT metalik öncüller, DC mıknatıssal saçtırma tekniği kullanılarak yukarıdan aşağıya Cu/Zn/Sn/Cu birikim sırasına sahip Mo kaplı soda-kireç cam alttaşlar üzerine büyütülmüştür. Büyütülen metalik öncüller, sülfür tozu kullanılarak 45 dakika boyunca 550 °C'de sülfürize edilmiştir. Son olarak, SLG/Mo/CZTS/CdS/ZnO/AZO güneş hücre yapısı üretilmiştir. CZTS soğurucu katmanın yapısal karakterizasyonu için Raman Spektroskopisi, X-Işını Kırınımı (XRD) ve Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) kullanılmıştır. Atomik kompozisyon oranı, Enerji Yayıcı Spektrometre (EDX) ve X-Işını Fotoelektron Spektroskopisi (XPS) nicel analizi kullanılarak incelenmiştir. Üretilen güneş hücrelerinin enine kesiti Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) ile görüntülenmiş ve hücrelerin fotovoltaik özellikleri I-V ölçümlerinden analiz edilmiştir.

* Bu çalışma TÜBİTAK 114F341 numaralı proje tarafından desteklenmektedir.

References

[1] D.G. Buldu et al, Physica Scripta 93, 024002 (2018).

[2] S. Yazici et al, Thin Solid Films 589, 563 (2015).

[3] W. Wang et al, Adv. Energy Mater. 4, 1301465 (2014).

CVD ile büyütülmüş İki boyutlu MoS₂ ve WS₂ tabanlı Optoelektronik Aygıtlar

Feridun Ay

Anadolu Üniversitesi, Elektrik-Elektronik Müh. Blm., 26555, Eskişehir

Grafen ile birlikte tek veya birkaç atomik katmandan (2B) oluşan yapılara olan ilgi her geçen gün artmaktadır. Özellikle 2B yapıların sahip oldukları sıra dışı optik ve elektronik özellikler, bu malzemelere dayalı potansiyel aygıtlara yönelik çalışmalar hız kazanmasında etken olmuştur. Bu çalışmada özellikle MoS₂ ve WS₂ geçiş metal dikalkojenitlerle (TMDC) ilgili grubumuzda elde edilen bulgular aktarılacaktır. CVD büyütme parametreleri ve etkileri tartışılacak ve elde edilen iki boyutlu tek atomik katmanlı yapıların karakterizasyonları raporlanacaktır. Bu iki yapıya bağlı transistör aygıtların üretimi ve alan etkili mobilite, akım Aç/Kapa oranı, and fotoduyarlılık gibi optoelektronik parametrelerin değerleri tartışılacaktır. MoS₂ ve WS₂ tabanlı aygıtlar ilk defa eş alttaş, benzer büyütme konfigürasyonu ve eş aygıt geometrilerine bağlı olarak karşılaştırılacaktır. Elde edilen sonuçlara göre WS₂'nin MoS₂'ye göre ortam koşullarından daha çok etkilendiği gözlemi aktarılacaktır.

Thermoelectrics as Functional Materials for Waste Heat Energy Harvesting and Solid State Cooling

Umut Aydemir

Koç University, Department of Chemistry, 34450, İstanbul

Since the discovery of the thermoelectric effects by Seebeck, Peltier and Thomson in the XIXth century, thermoelectricity has attracted attention for both fundamental and industrial reasons. Nowadays, this interest has been rejuvenated by the ever-growing worldwide energy demand and the concomitant environmental concerns. Globally, two-thirds of the energy produced is lost as waste heat. Among renewable energy sources, thermoelectricity stands for a possible alternative that could not only allow for waste-heat energy harvesting but could also replace compression-based refrigerators [1]. This versatile technology directly converts heat into electricity and vice-versa (Figure 1). Being vibration- and noise-free, reliable, scalable, and without hazardous emissions, solid-state thermoelectric generators can be considered as a clean and sustainable energy source.

The thermoelectric efficiency of a given material is quantified through the dimensionless thermoelectric figure of merit, zT, defined as zT = $\alpha^2 T / \rho \kappa$ where T is the absolute temperature, α is the thermopower (or Seebeck coefficient), ρ is the electrical resistivity and κ is the total thermal conductivity which is the sum of the lattice thermal conductivity, $\kappa_{\rm L}$, and the electronic thermal conductivity, $\kappa_{\rm E}$, in non-magnetic materials. Thus, a good thermoelectric material must strike a balance between a large α , low ρ , and low κ . Except for κ_L , all transport coefficients are interdependent via the majority carrier concentration, often measured by the Hall effect (n_H) . Normally, crystalline materials have a higher electrical mobility (μ_H) leading to a higher electrical conductivity, ($\sigma = 1/\rho = n_H e \mu_H$ where e is the electronic charge), than amorphous materials. On the other hand, amorphous materials have shorter phonon mean free paths, and display lower κ_L . Therefore, an ideal thermoelectric material should have a glass-like heat conduction of phonons and crystal-like electrical conduction of



Figure 1: Schematic view of a thermoelectric couple composed of an n-type and a p-type leg for either cooling (a) or power generation (b). A thermoelectric module (c) is composed of a certain number of couples connected electrically in series and thermally in parallel.

charge carriers, referred to as the "phonon-glass electron-crystal" (PGEC) concept, first introduced by Slack [2].

In my talk, I will discuss about the fundamentals of thermoelectric theory and devices, the basics of efficiency optimization, and how such devices are used in space and other technological applications. promising novel structure types With and compounds being reported on a frequent basis, Zintl phases as PGEC materials represent an important and incredibly diverse new class of thermoelectrics. Herein, I will explain what makes a material a Zintl phase and why their characteristics make them good thermoelectric materials. I will mention about the crystal structure, tunable electronic transport properties and glass-like lattice thermal conductivity of Ca₉Zn_{4+x}Sb₉ [3] and In_xCe_yCo₄Sb_{12+z} [4] as two Zintl phase representatives.

References:

- **8.** J. He, T. M. Tritt, "Advances in thermoelectric materials research: Looking back and moving forward", *Science*, **357**, 1369 (2017)
- 9. G. A. Slack, in CRC Handbook of Thermoelectricity, R. M. Rowe, Ed. (CRC Press, 1995), pp. 407–440
- **10.** S. Ohno, U. Aydemir, *et al.*, "Achieving zT > 1 in inexpensive Zintl phase Ca₉Zn_{4+x}Sb₉ by phase boundary mapping.", *Adv. Funct. Mater.*, **27**, 1606361 (2017)
- **11.** H. Li, X. Su, X. Tang, Q. Zhang, C. Uher, G. J. Snyder, U. Aydemir, "Grain boundary engineering with nanoscale InSb producing high performance In_xCe_yCo₄Sb_{12-z} skutterudite thermoelectrics", *J. Materiomics*, **3**, 273 (2017).

Molecular Level Investigation of Nanoscale Interface Thermal Resistance

Murat Barışık

İzmir Institute of Technology

The performance and reliability of Micro and Nano Electro Mechanical Systems (MEMS and NEMS) strongly depend on molecular level understanding of the heat and mass transport in nano-scale. For instance, the latten heat generated in these MEMS and NEMS needs to be removed by the heat transport either to the ambient or to a coolant. In such cases, the understanding of interface thermal resistance (ITR) observed between nano-scale device components and surrounding/confined fluid, as well as between suspended nano-particles and fluid medium in nano-fluidics coolants plays a critical role. In this presentation, we will focus on my molecular dynamics (MD) studies on nanoscale heat transfer. We target to characterize ITR for simple and complex liquid/solid couples. First, a phenomenological model which can predict the ITR as a function of the wall temperature will be introduced for Argon/Silver and Argon/Graphite interfaces. Analytical solutions employing this model as the coefficient of a Navier-type temperature jump boundary condition result in successful predictions of temperature distribution in nano-channels as thin as 5nm. Next, we will focus on Water/Silicon system. The wetting behavior of a pure silicon surface is studied with Water nano-droplets to properly tune the interaction parameters to recover the correct wetting behavior measured by experiments. Resultant ITR values are found to be in good agreement with the experimental measurements on hydrophobic surfaces. Further characterizations will be made on temperature and pressure dependence of ITR. Developing models for temperature jump boundary condition provide effective engineering solutions for nanoscale heat transfer problems.

Single cone Weyl fermions: chiral anomaly and equilibrium chiral magnetic effect

İnanç Adagideli

Sabancı Üniversitesi

The massless fermions of a Weyl semimetal come in two species of opposite chirality, in two cones of the band structure. As a consequence, the current j induced in one Weyl cone by a magnetic field B (the chiral magnetic effect, CME) is cancelled in equilibrium by an opposite current in the other cone. Here we show that superconductivity offers a way to avoid this cancellation, by means of a flux bias that gaps out a Weyl cone jointly with its particle-hole conjugate. The remaining gapless Weyl cone and its particle-hole conjugate represent a single fermionic species, with renormalized charge e^{a} and a single chirality pm set by the sign of the flux bias. As a consequence, the CME is no longer cancelled in equilibrium but appears as a supercurrent response $partial j/partial B=pm(e^{ast} e/h^2)$

Work was supported by TÜBİTAK Grant No. 114F163.

Katkılandırılmış MXene : Yeni Tip s-pd Bant Terslemesine Sahip Topolojik Yalıtkan

Erdem Balcı*, Ünal Özden Akkuş, Savaş Berber

Gebze Teknik Üniversitesi- Fizik Bölümü, 41400 Kocaeli

Yapılan çalışmada Si veya Ge katkılı $3x_3x_1$ Sc₂C(OH)₂ tek tabakaları yoğunluk fonksiyoneli teorisiyle araştırıldı. Katkılı sistemde yeni band tersleme mekanizması bulundu ve Z₂ teorisine göre topolojik insulator olduğu gösterildi. SOC eklenen sonuçlara göre band aralığı açılmaktadır. Bant terslemesine göre s-pd karışımı yeni bir topolojik yalıtkan oluşturmaktadır.

Bu $Sc_2C(OH)_2$ çalışmada MXene katkılanarak bir nontrivial enerji bant aralığının oluștuğu ve yaklaşık serbest elektron durumlarının bant tersleme mekanizmasına katıldığı bulundu. Genel olarak bant tersleme mekanizması bantlardaki orbital karakterinin değiş tokuşuna göre sınıflandırılır. Önceki çalışmalarda HgTe/CdTe kuantum kuyusunda s-p orbital terslemesi [1], stanene dumbbell yapısında p-p orbital terslemesi [2], bizmuttabanlı skutterudite'lerde d-p orbital terslemesi [3], actinitlerde d-f orbital terslemesi [4] ve d-d orbital terslemesi MXene'lerde [5] gösterildi. Biz bu çalışmada ilk defa üçlü orbital karışımı bant terslemesini öneriyoruz. Sistemimizde nontrivial bant aralığı Γ noktasında s ve p-d orbitallerinin değiş tokuşunun terslemesiyle oluşmaktadır. İletkenlik bantı ve valance bantı dokunmakta ve Г noktasında bantların pariteleri yer değiştirmektedir. Spin orbit ciftlenimi (SOC) ile bant aralığı açılır (Şekil 1); fakat parite değişimi aynen kalır [6].

Şekil 2'de üç sistem için bant tersleme durumu veya parite geçişi temsili gösterimle özetlenmiştir. Şeklin en solunda katkısız yapının CBM ve VBM bantlarının, ortasında ve sağında Ge veya Si katkılı sistemin SOC ile SOC'siz bantların pariteleri gösterilmektedir. Buradan sistemimizin topolojik yalıtkan özellikler gösterdiği anlaşılmıştır.



Şekil 1: Ge katkılı 3x3x1 Sc₂C(OH)₂ tek tabakasının SOC olmadan (üst panel), SOC dahil edilmiş (alt panel) orbital çözünürlüklü elektronik bant yapısı.



Şekil 2: Simetri analizine göre bant tersleme mekanizması. CBM ve VBM bantlarının paritelerinin gösterimi.

- 1. Bernevig B. A., Hughes T. L., and Zhang S.-C.,,"Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells", Science, 314,1757-1761 (2006).
- **2.** Tang P. et al., "Stable two-dimensional dumbbell stanene: A quantum spin Hall insulator", Phys. Rev. B, 90,121408 (2014).
- **3.** Yang M. and Liu W.-M., "The dp band-inversion topological insulator in bismuth-based skutterudites", Sci. Rep.-U.K., 4,5131 (2014).
- **4.** Zhang X., Zhang H., Wang J., Felser C., and Zhang S.-C.,"Actinide topological insulator materials with strong interaction", Science, 335,1464-1466 (2012).
- **5.** Si C., Jin K.-H., Zhou J., Sun Z., and Liu F.,"Large-Gap Quantum Spin Hall State in MXenes: d-Band Topological Order in a Triangular Lattice", Nano Lett., 16,6584-6591 (2016).
- 6. Erdem B., Ünal Özden A., and Savas B., "Doped Sc₂C(OH)₂ MXene: new type s-pd band inversion topological insulator", Journal of Physics: Condensed Matter, **30**,155501 (2018).

Topolojik Faz Geçişleri: Evrensel İstatistik ve Weyl Açılımı

Barış Pekerten

Sabancı Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, 34956 İstanbul

Düzensizlik içeren veya normal fazda klasik limiti kaotik olan topolojik üstüniletkenlerde Fermi enerjisi seviyesinde harici parametrelere (örneğin manyetik alan veya kimyasal potansiyele) bağlı olarak tek ve çift fermiyon paritesi arasındaki geçişleri ve bu geçişlerin istatstiğini inceledik. [1] Taban seviyesinin fermiyon paritesindeki bu geçişlerin uzun kablo limitinde Majorana Fermiyonlarının varlığına işaret ettiği bilinmektedir. [2] Bu sebeple bu geçişler yakın geçmişte yoğun ilgi konusu olmuşlardır. [3-10] Öncelikle bu sistemlerde ortalama parite geçiş yoğunluğu formülünü Weyl açılımı yoluyla çıkardık. Ardından bu geçişlerin dalgalanmalarının (altta yatan saçılımın ayrıntılarına ve sistemin geometrisine bağlı olarak) ortogonal Gauss, Poisson veya Poisson-altı olacak şekilde evrensel istatistikleri takip ettiklerini gösterdik. Böylece Beenakker vd. sonuçlarını daha gerçekçi kablo ve nokta geometrilerine genişlettik. [2] Ayrıca parite geçişlerinin sistemin normal hal özellikleri tarafından açıklandığını gösterdik.

- 1. B. Pekerten, A.M. Bozkurt ve İ. Adagideli, yazım aşamasında (2018)
- 2. C. W. J. Beenakker, J. M. Edge, J. P. Dahlhaus, D. I. Pikulin, S. Mi, and M. Wimmer, "Wigner-Poisson statistics of topological transitions in a Josephson junction," Phys. Rev. Lett., vol. **111**, p. 037001, 2013.
- 3. S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, "Topological insulators and superconductors: Tenfold way and dimensional hierarchy," New Journal of Physics, vol. **12**, no. 6, p. 065010, 2010.
- 4. K. T. Law and P. A. Lee, "Robustness of Majorana fermion induced fractional Josephson effect in multichannel superconducting wires," Phys. Rev. B, vol. 84, p. 081304, 2011.
- 5. C. W. J. Beenakker, D. I. Pikulin, T. Hyart, H. Schomerus, and J. P. Dahlhaus, "Fermion-parity anomaly of the critical supercurrent in the quantum spin-Hall effect," Phys. Rev. Lett., vol. **110**, p. 017003, 2013.
- 6. T. Yokoyama, M. Eto, and Y. V. Nazarov, "Josephson current through semiconductor nanowire with spinorbit interaction in magnetic field," Journal of the Physical Society of Japan, vol. 82, no. 5, p. 054703, 2013.
- 7. E. J. H. Lee, X. Jiang, R. Aguado, G. Katsaros, C. M. Lieber, and S. De Franceschi, "Zero-bias anomaly in a nanowire quantum dot coupled to superconductors," Phys. Rev. Lett., vol. **109**, p. 186802, 2012.
- 8. E. J. H. Lee, X. Jiang, M. Houzet, R. Aguado, C. M. Lieber, and S. De Franceschi, "Spin-resolved Andreev levels and parity crossings in hybrid superconductor-semiconductor nanostructures," Nat Nano, vol. 9, no. 1, p. 79, 2014.
- 9. W. Chang, V. E. Manucharyan, T. S. Jespersen, J. Nygård, and C. M. Marcus, "Tunneling spectroscopy of quasiparticle bound states in a spinful Josephson junction," Phys. Rev. Lett., vol. **110**, p. 217005, 2013.
- R. Ilan, J. H. Bardarson, H.-S. Sim, and J. E. Moore, "Detecting perfect transmission in Josephson junctions on the surface of three dimensional topological insulators," New Journal of Physics, vol. 16, no. 5, p. 053007, 2014.

Manyetik Uzay Grupları ile Manyetik Malzemelerin Sınıflandırılması ve İlişkilendirilmesi

Emre Tașcı¹, Samuel V. Gallego², Luis Elcoro², J. Manuel Perez-Mato², Mois Aroyo²

¹Fizik Mühendisliği Bölümü, Hacettepe Üniversitesi 06800 Ankara ² Yoğun Madde Fiziği Bölümü, Bask Üniversitesi 48080 Bilbao, İspanya

Grup teorisinin katıhal fiziğine uygulanması sonucu türetilen 1651 manyetik uzay grubu arasındaki ilişkilerin sistematik olarak uygulanmasıyla gerek ilgili tablolar, gerek çeşitli uygulamalar, gerekse 400'den fazla yayımlanmış yapının sınıflandırılmasıyla oluşturulan yeni bir manyetik malzeme veri tabanı açık erişim olarak sunulmuştur.

Daha önce manyetik malzemelerin sınıflandırılmasına ilişkin çeşitli çabaların [1,2] olmasına karşın, ortak bir standardın olmayışı dijital ortamda kolektif bir veri tabanının varlığını engelleye-gelmiştir. 2011 yılında Stokes ve Campell'in [3], 2013 yılında da Litvin'in [4] sistematik olarak tablolaştırdığı manyetik uzay gruplarının kapsamlı analizi sayesinde manyetik yapıların sınıflandırıl-ması ve ortak bir standart bulunma hedefi tekrar gündeme gelmiş, Uluslararası Kristallografi Birliği'nin (IUCr) olusturduğu 2015 vılında komisyonun geliştirdiği magCIF formatı standart kabul edilmiş ve bu sayede mevcut yapıların ortak bir çatı altında toplanabilmesine başlanabilmiştir.

Bilbao Kristallografi Sunucusu (Bilbao Crystal*lographic* Server – <u>http://www.cryst.ehu.es</u>) bünyesinde manyetik uzay gruplarının gerek tabular verilerini, gerekse bu verilerden yola geliştirdiğimiz uygulamaları çıkarak ve oluşturduğumuz veri tabanını sunucumuzda "Manyetik Simetri ve Uygulamaları" başlığı altında açık erişime sunmuş bulunmaktayız. Bu baslıcaları: uygulamaların MGENPOS ve **MWYCKPOS** sırasıyla manyetik uzav gruplarının simetri operatörlerini ve Wyckoff listelerken; Pozisyonlarını **IDENTIFY** MAGNETIC GROUP herhangi bir düzende (setting) verilmiş simetriyi tespit edip, standart

düzene dönüşüm matrisini de hesaplar, böylelikle farklı kaynaklardan gelen yapılar kıyaslanabilir; **MPOINT** ortak düzende manyetik nokta gruplarının tablolarını içerir; MAGNEXT ise uzay gruplarının sönüm kurallarını icermekle birlikte, tersinden gidilip, eldeki malzemenin saçılım sönüm kriterlerinden grubu da tespit edilebilir; simetri k-SUBGROUPSMAG verilen bir uzay grubunun manyetik belirli bir vönelime uygun altgruplarını dönüşüm matrisleriyle birlikte listeleyip olası geçiş yollarını gösterir; manyetik malzemelerin hızlı ve çevrimiçi görüntülenmesi için MVISUALIZE kullanılabilir ve bunlara ek ve asıl olarak MAGNDATA veri tabanında [5,6] detaylı olarak manyetik malzemelerin taranması yapılabilir.

Gerek malzeme veritabanının, gerekse manyetik grup tablolarının dijital ortamda uzay bulunmasından yola çıkarak, geliştirdiğimiz uvgulamalar yoluyla bu yapılar arasında hiyerarşik bağlantıların çıkarımları, olası faz geçişlerinin tespiti ve muhtemel ara yapıların öngörülmesi mümkün olmaktadır (Ba2CoGe2O7 bileşiğinin [7] iki fazı örneğinde olduğu üzere: iki yapının da aynı antiferromanyetik karakterde olmalarına karşın, simetriden ötürü sadece biri ferroelektrik kutuplanma, dolayısıyla da multiferroik özellik ihtiva edebilir).

^{1.} A. Oles, F. Kajzar, M. Kucab, W. Sikora, "Magnetic Structures Determined by Neutron Diffraction" Warszawa (1976).

^{2.} A. Oles, W. Sikora, A. Bombik, M. Konopka, "Magnetic Structure Determined by Neutron Diffraction. Description and Symmetry Analysis" Scientific Bulletins of the Stanislaw Staszic University of Mining and Metallurgy **1005** (1984).

^{3.} H.T. Stokes, B.J. Campbell, "ISO-Mag: Table of Magnetic Space Groups. ISOTROPY Software Suite" http://iso.byu.edu.

^{4.} D.B. Litvin, "Magnetic Group Tables: 1-, 2-, and 3-Dimensional Magnetic Subperiodic Groups and Magnetic Space Groups" Chester (2013).

S.V. Gallego, J.M. Perez-Mato, L. Elcoro, E.S. Tasci, R.M. Hanson, K. Momma, M.I. Aroyo, G. Madariaga. "MAGNDATA: towards a database of magnetic structures. I. The commensurate case." Journal of Applied Crystallography 49 1750-1776 (2016).

S.V. Gallego, J.M. Perez-Mato, L. Elcoro, E.S. Tasci, R.M. Hanson, M.I. Aroyo, G. Madariaga. "MAGNDATA: towards a database of magnetic structures. II. The incommensurate case." Journal of Applied Crystallography 49, 1941-1956 (2016).

^{7.} V. Hutanu, A. Sazonov, M. Meven, H. Murakawa, Y. Tokura, S. Bordács, I. Kézsmárki, B. Náfrádi, "Determination of the magnetic order and the crystal symmetry in the multiferroic ground state of Ba2CoGe2O7." Physical Review B **86**, 104401 (2012)

Magnetik nano-parçacıkların relaksasyon dinamiği

Ekrem Aydıner

Magnetik nano-parçacıklar nanomateryallerin özel bir türüdür. Son yıllarda, özellikle biyo-teknoloji alanında, bu parçacıklara olan ilginin arttığı görülmektedir. Uzaktan elektrik ve magnetik alan ile hareket ettirilebilen ve kontrol edilebilen magnetik nano-parçacıklar; kanser teşhisi, hedef hücrelerin işaretlenmesi, ilaç taşıma, kanser tedavisi, biyolojik sistemlerin iç yapısının görüntülemesi ve biyosensör yapımı gibi pek çok alanda kullanılmaktadır [1-4]. Süperparamagnetic olarak da bilinen magnetik nano-parçacıkların relaksasyon sürecinin Debye yasasına uyduğu yaygın olarak bilinmektedir. Fakat biyo-teknoloji alanında kompleks yapılar içerisinde kullanılan magnetik nano-parçacık sistemlerinde relaksasyon dinamiğinin Debye'nin üstel yasasından saptığı bir çok deneysel çalışmada gözlenmiştir [5-7]. Bu konuşmada, zayıf etkileşen magnetic nano-parçacıkların stokastik dinamiğinde olası bellek mekanizmaları dikkate alınarak, basit sistemler için korelasyon ve relaksasyon fonksiyonlarının operatör formalizmi kullanılarak nasıl elde edildiği gösterilecek ve relaksasyon dinamiği tartışılacaktır. Kompleks yapılar içinde magnetik nano-parçacıkların yavaş dinamiğinin biyo-teknoloji alanındaki anlamı ve önemi yorumlanmaya çalışılacaktır.

Kaynaklar:

[1] O. L. Gobbo, K. Sjaastad, M. W. Radomski, Y. Volkov, A. Prina-Mello. "Magnetic Nanoparticles in Cancer Theranostics". *Theranostics*. 5(11):1249-1263 (2015).

[2] M. Wu, M. Wu. "Magnetic nanoparticles in cancer diagnosis, drug delivery and treatment". *Molecular and Clinical Oncology*, 7, 738-746 (2017).

[3] A. Kumar, P. K. Jena, S. Behera, R. F. Lockey, S. Mohapatra, S. Mohapatra. "Multifunctional magnetic nanoparticles for targeted delivery". *Nanomedicine*. 6(1):64-9 (2010).

[4] J. Conde, J. T. Dias, V. Grazú, M. Moros, P. V. Baptista, J. M. de la Fuente, "Revisiting 30 years of biofunctionalization and surface chemistry of inorganic nanoparticles for nanomedicine". *Front Chem.* 2:48 (2014).

[5] M. Ulrich, J. G.arcia-Otero, J. Rivas and A. Bunde. "Slow relaxation in ferromagnetic nanoparticles: Indication of spin-glass behavior". *Phys. Rev. B* 67, 024416 (2003).

[6] A. Robert, E. Wandersman, E. Dubois, V. Dupuis, R. Perzynski. "Glassy dynamics and aging in a dense ferrofluid". *Europhysics Letters*, 75 (5), pp. 764-770 (2006).

[7] A. C. Gandhi, P. M. Reddy, T. S. Chan, Y. P. Ho and S. Y. Wu. "Memory effect in weakly-interacting Fe3O4 nanoparticles" *RSC Advances*, 5 (103), pp. 84782-84789 (2015)

Intrinsic magnetic properties of $Sm(Fe_{1-x}Co_x)_{11}Ti$ and Zr-substituted $Sm_{1-x}Zr_y(Fe_{0.8}Co_{0.2})_{11.5}Ti_{0.5}$ compounds with ThMn₁₂ structure toward the development of permanent magnets

P. Tozman, H. Sepehri-Amin, Y. K. Takahashi, S. Hirosawa, K. Hono National Institute for Materials Science, 1-2-1 Sengen, Tsukuba, Ibaraki 305-0047, Japan

There is an increase demand for a magnet which has comparable intrinsic hard magnetic properties with those of Nd₂Fe₁₄B. The intrinsic magnetic properties of the ThMn₁₂-type phases in Sm(Fe_{1-x}Co_x)₁₁Ti alloys with $0 \le x \le 0.3$ and Sm_{1-y}Zr_y(Fe_{0.8}Co_{0.2})_{11.5}Ti_{0.5} alloys with $0 \le y \le 0.3$ are potential candidate as a permanent magnet, as is shown in Fig. 1. Increasing Co substitution for Fe, from x = 0.1 to 0.3 increases the saturation magnetization ($\mu_0 M_s$) of the 1:12 phase from 1.35 T to 1.52 T, while the largest magnetic anisotropy field ($\mu_0 H_A$) of 10.9 T was achieved for x = 0.2 with $\mu_0 M_s = 1.43$ T and Curie temperature (T_c) 800 K. The saturation magnetization is increased by reducing Ti content where the phase stability is obtained by Zr substitutions for Sm. Increase of Zr in Sm_{1-y}Zr_y(Fe_{0.8}Co_{0.2})_{11.5}Ti_{0.5} from y = 0.1 to 0.3 decreases $\mu_0 M_s$ from 1.61 to 1.52 T. Although, the largest T_c of 830 K was found for the ThM₁₂-type phase in the (Sm_{0.8}Zr_{0.2})(Fe_{0.8}Co_{0.2})_{11.5}Ti_{0.5} alloy has comparable intrinsic hard magnetic properties with those of Nd₂Fe₁₄B and may exhibit maximum energy product with the optimized microstructure.



Fig. 1. The temperature dependence of (a) anisotropy field and (b) saturation magnetization of the ThMn₁₂-type phase in Sm(Fe_{0.8} Co_{0.2})₁₁Ti₁ and (Sm_{0.8}Zr_{0.2})(Fe_{0.8}Co_{0.2})_{11.5}Ti_{0.5} in compared with single crystal Nd₂Fe₁₄B [1,2]

[1] S. Hirosawa, Y. Matsuura, H. Yamamoto, S. Fujimura, M. Sagawa, and H.i Yamauchi, Magnetization and magnetic anisotropy of $R_2Fe_{14}B$ measured on single crystals, J. Appl. Phys 59 (1986) 873-879. [2] P. Tozman, H. Sepehri-Amin, Y. K. Takahashi, S. Hirosawa, K. Hono, Intrinsic magnetic properties of $Sm(Fe_{1-x}Co_x)_{11}Ti$ and Zr-substituted $Sm_{1-y}Zr_y(Fe_{0.8}Co_{0.2})_{11.5}Ti_{0.5}$ compounds with ThMn₁₂ structure toward the development of permanent magnets, submitted, 2018

La(Fe_{1-x}Mn_x)AsO Sisteminde Lokal Yapı ve Magnetik Korelasyonlar

<u>Muammer Yasin Hacısalihoğlu^{1,2,3}</u>, E. Paris³, B. Joseph⁴, A. Provino⁵, G. Lamura⁵, R. Cimberle⁵, A. Martinelli⁵, P. Manfrinetti⁵, G. Aquilanti⁴, K. Öztürk², P. Dore³, M. Putti⁵ and N. L. Saini³

¹Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi-Fizik Bölümü, 53100 Rize, Türkiye ²Karadeniz Teknik Üniversitesi-Fizik Bölümü 53100 Rize, Türkiye ³Roma La Sapienza Üniversitesi-Fizik Bölümü 00185 Roma, İtalya ⁴Elettra Sincrotrone, 34139 Trieste, İtalya ⁵CNR-SPIN, I-16152 Cenova, İtalya

Bu çalışmada, Tabakalı Demir-Tabanlı Süperiletkenler (Fe-TS) ailesinin 1111 tipinin süperiletken olmayan ana fazı LaFeAsO malzemesinde, Fe (aktif tabaka) yerine Mn yerdeğiştirmesinin sonucunda ortaya çıkan lokal yapı ve bu sistemin bazı fiziksel özellikleri EXAFS (Genişletilmiş X-Işını Soğurma İnce Yapısı), DC Magnetik ölçümler ve X-Işını Kırınımı gibi çeşitli tekniklerle incelenmiştir. Elde edilen sonuçlara göre değişen Mn katkı oranıyla lokal yapı ve Néel Sıcaklıkları (T_N) arasında korelasyon gözlenmiştir.

2008 yılında LaFeAsO_{1-x} F_x sisteminde süperiletkenliğin ~26 K'lik geçiş sıcaklığı ile keşfi komunitenin ilgisini bu yeni süperiletken aile üzerine çekmiş ve çeşitli kristal yapı ve kimyasal kompozisyona sahip yeni üyeler (1111, 122, 11 tipi vb.) kısa sürede keşfedilmiştir.

1111 tipi süperiletkenlerin, süperiletken olmayan LaFeAsO ana fazına çeşitli oranlarda Mn katkısı ile üretilen La(Fe_{1-x}Mn_x)AsO sisteminde artan Mn katkısı ile yapısal geçiş ve uzun mesafeli magnetik düzen baskılanmasına rağmen süperiletkenliğin ortaya çıkmaması bu katkıyı oldukça ilginç kılmaktadır. Çeşitli katkı oranları için La(Fe₁. $_xMn_x)AsO$ sisteminin Fe K- ve As K-kenarı X-Işını Soğurma Spektroskopisi ölçümlerinden elde edilen EXAFS analizleri sonucunda Fe-As bağ uzunluklarının ortalama kare relatif yerdeğiştirmeleri (σ^2), artan Mn konsantrasyonu ile kademeli bir artış göstermektedir. Bu durum katkı ile ortaya çıkan düzensizliğe işaret etmektedir.

Çeşitli Mn katkı oranları için EXAFS analizleri sonuçlarından elde edilen Fe-As ve Fe-Fe bağ uzunluklarından hesaplanarak bulunan Fe-Fe düzleminden As-yüksekliği (h_{As}) ve DC Magnetik (M-T) ölçümlerinden bulunan Néel Sıcaklıkları (T_N) arasında direkt korelasyon gözlenmiştir [1].



Şekil 1: Çeşitli Mn katkı oranları için Fe-As ve Fe-Fe bağ uzunluklarından hesaplanarak bulunan Fe-Fe düzleminden As-yüksekliği (h_{As}) (açık çemberler) ve DC Magnetik (M-T) ölçümlerinden bulunan Néel Sıcaklıkları (T_N) arasındaki korelasyon görülmektedir.

Kaynakça

1. M. Y. Hacısalihoğlu, Doktora Tezi, "Demir Tabanlı ve Benzer Yapılı Süperiletkenlere Elementel Katkının Nanoboyutta Yapısal Düzensizliklere Etkisinin İncelenmesi" *Karadeniz Teknik Üniversitesi*, Temmuz 2017, Trabzon, Türkiye

III-V Grubu Yariiletken Heteroyapılar

Afif Sıddıki

Ekendiz Tanay Center for Arts and Science

III-V grubu yarıiletken heteroyapılar günümüzde çeşitli alanlarda kullanılmaktadır. Bu alanların içerisinde en önemlileri olarak ışık yayan diyotlar (light emitting diodes, LED), fotodedektörler, transistörler ve yüksek verimli güneş gözeleri gösterilebilir. Bu çalışmada, III-V grubu yarıiletken heteroyapılar moleküler demet epitaksi (molecular beam epitaxy, MBE) yöntemi kullanılarak büyütülmüş ve çeşitli karakterizasyon teknikleri kullanılarak incelenmiştir. İncelenen yapılar arasında Tip II InAs/GaSb süperörgüler (T2SL), Tip II InAs/InAsSb süperörgüler, InSb, InAsSb, GaInAsSb, GaAs/AlGaAs kuantum kuyu, THz fotodedektörler ve GaAs tabanlı yüksek verimli güneş gözeleri yer almaktadır. Milli olarak üretilen bu fotodedektörler hem orta dalga kızılötesi (MWIR) hem de uzun dalga kızılötesi (LWIR) bölgede çalışmaktadırlar. Fotodedektörlere ek olarak geleceğin teknoloji olarak gösterilen esnek GaAs tabanlı yüksek verimli güneş gözeleri de bu çalışma kapsamında çalışılmıştır. Milli olarak büyütülen GaAs tabanlı güneş gözesi epikatmanları başarılı bir şekilde altaştan kaldırılmış ve esnek yüzey üzerine aktarılabilmiştir.

Teşekkür

Bu çalışma, Anadolu Üniversitesi BAP-1706F388, 1705F252, 1705F287, 1607F675, 1506F541, 1403F062, 1305F092 numaralı projeler ve TÜBİTAK-116F199 kodlu proje kapsamında desteklenmiştir.

Sıcaklığa Bağlı İdeal Olmayan Basit Bir Çözelti Modeli ile Ag-Cu Faz Diyagramında Dengedışı Katılaşma Problemlerinde Gerekli Yarı-Kararlı Faz Sınırları Tahmin Edilebilir mi?

Selis Önel

Hacettepe Üniversitesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 06800 Ankara

Denge dışı faz dönüşümleri içeren hızlı katılaşma işlemlerinde oluşan dendrit mikro/nano-yapının tahmini için kullanılan matematiksel modellerde faz sınırlarının faz diyagramında görülmeyen yarı-kararlı uzantılarının kullanılması gerekmektedir. Bu uzantıların basit dışdeğerbiçim yöntemleri ile kestirimi doğru sonuç vermemekte, karışık termodinamik modeller kullanılması ise sayısal hesaplamada güçlüklere sebep olmaktadır. Bu çalışmada sıcaklığa bağlı ideal olmayan basit bir çözelti modeli, denge faz diyagramından seçilen asgari veri ve termodinamik değerlerle birlikte kullanılarak *G* eğrileri doğru hesaplanabilmiş ve Ag-Cu faz diyagramı yarı-kararlı kısımları ile birlikte hesaplanmıştır.

Denge dışı faz ve mikro-yapılara sahip ileri malzemelerin üretiminde elde edilen 10⁶ C/s mertebelerinde yüksek soğutma hızlarında, katı-sıvı arayüzünde kinetik olayların çok hızlı gerçekleştiği ve genel veya yerel denge koşulu varsayımı yapılmasının uygun olmayacağı bilinmektedir [1,2]. Alaşımlarda hızlı katılaşma işlemlerinde faz dönüşümlerinin ve kristal büyümesinin simülasyonu için karmaşık arayüz kinetiklerinin ısı ve kütle aktarımı ve gerekirse akışkan ve katı mekaniği analizleri ile birlikte incelenmesi gerekmektedir.

Arayüz kinetikleri denge dışı koşullarda katı ve sıvı fazlar arası oluşan termodinamik sürüyücü kuvvete bağlıdır. Düşük ve orta büyüklükte sürüyücü kuvvetler için arayüz ilerleme hızı $V=-M\Delta G^*/V_m$ ile elde edilebilir [3]. M sıcaklığa bağlı mobilite ve $\Delta G^*/V_m$ arayüzdeki serbest enerji farkıdır. Bunun için arayüzde katı ve sıvının serbest enerjilerinin belirlenmesi gereklidir. Bu değerler hazır yazılımlar ile hesaplanabilir; ancak bir kristal büyüme modeline dahil edilip ısı ve kütle denklikleri ile birlikte eşzamanlı çözdürülemez. Dolayısı ile denge dışı faz dönüşümü sonucu oluşan kristal büyümesini tahmin etmek üzere oluşturulan kinetik modele ve çözümünde kullanılan bilgisayar koduna dahil edilecek basit analitik termodinamik bir model tercih edilmektedir.



Şekil 1: Sıcaklığa bağlı ideal olmayan bir çözelti modeli kullanılarak hesaplanan Ag-Cu yarı-kararlı faz diyagramı

Çalışmada, fazla serbest enerjiyi sıcaklıkla doğru orantılı tanımlayan ve "quasiregular" ve "subregular" çözelti modellerini birleştiren bir model kullanılmıştır [2,4,5]: $G^{xs}=(A+Bx_2)x_1x_2(1-T/\tau)$. A, B (J/mol) ve τ (K), seçilen ikili alaşım için tespit edilen sabit değerlerdir. Ag-Cu sistemi için hesaplanan yarı-kararlı faz diyagramı deneysel veriler [6] ile örtüşmektedir ve herhangi bir sıcaklıkta arayüzde oluşan ΔG^* değeri bir katılaşma modeli kapsamında hesaplanabilmektedir.

Kaynakça

- 1. DiVenuti AG, Ando T. A Dendrite Growth Model Accommodating Curved Phase Boundaries and High Péclet Number Conditions. Metallurgical and Materials Transactions A 1998;29A:3047.
- 2. Önel S, Ando T. Comparison and Extension of Free Dendritic Growth Models through Application to a Ag-15 Mass Pct Cu Alloy. Metallurgical and Materials Transactions A 2008;39:2449.
- **3.** Wilson HW. XX. On the velocity of solidification and viscosity of super-cooled liquids. Philosophical Magazine Series 5 1900;50:238.
- 4. Gaskell DR. Introduction to the Thermodynamics of Materials. New York: Taylor & Francis, 2003.
- 5. Önel S, Ando T.

Heycock CT, Neville FH. Complete Freezing-Point Curves of Binary Alloys Containing Silver or Copper Together with Another Metal. Philosophical Transactions of the Royal Society A 1897;189:25.

Yoğun Madde Fiziği – İzmir Toplantısı, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, 13 Nisan 2018

POSTER SUNUMLARI

ELODEA CANADENSIS YAPILARINDA, DIŞ FİZİKOKİMYASAL ETKİLERİN NANO ÖLÇEKTE İNCELENMESİ

Melahat Yağmur AKYÜREK¹, Beril BOLAYIRLI¹, Cahit DOĞAN², Damla KARAASLAN¹, Semra İDE,¹

Hacettepe Üniversitesi-Fizik Mühendisliği Bölümü,06800 Ankara-Türkiye Hacettepe Üniverstesi-Biyoloji Bölümü 06800 Ankara-Türkiye

Son yirmi yıldır,modern X-ışını kaynaklarının kullanılmaya başlanması ve detektör teknolojisindeki gelişmeler moleküler boyut ile mikro boyut arasında kalan yapısal farklılıkları ayrıntısı ile inceleme olanağı sağlamıştır. Bu bölgedeki yapısal incelemeler, nanoteknolojideki gelişmelere yapı-özellik bilgileri sağladığı için ayrıca önem taşımaktadır. Akısı yüksek Xışını kaynakları ile verimi ve duyarlılığı yüksek detektörler sayesinde incelenecek örnek içeriğinde bulunan nano boyutlu oluşumlardan saçılan yüksek şiddetli X-ışını verileri etkin bir biçimde ölçülebilir hale gelmiştir. Bu yöntemlerden biri de SAXS yöntemidir. Bu yöntem bir nanometreden yüzlerce nanometreye kadar farklı büyüklüklerde oluşumlar içeren malzemelerin yapılarının rahatlıkla incelenebilmesini sağlar. Farklı elektron yoğunluklarına sahip nano oluşumların büyüklükleri,şekilleri, yapı içerisindeki dağılımları,ara yüzey alanları ve birbirleri ile etkileşimleri gibi bilgilere ayrıntılı biçimde ulaşılır.

Her bitkinin fizikokimyasal etkiler altında yapısal değişimleri farklıdır. Bu çalışmada, *elodea canadensis* adlı tatlı su bitkisinde fizikokimyasal etkiler nanoskopik olarak incelenmiştir. Bu su bitkisinin, diğer bitki türlerine göre daha kolay ulaşılabilir olması, SAXS analizlerine uygun özelliklerde olması, kolay büyütülebilmesi ve dış etkilere hızlı yanıtlar verebilmesi onu deneysel çalışmalarda tercih edilir hale getirmiştir.

Bu araştırma, farklı tuz konsantrasyonlarında ,farklı çözeltilerdeki eriyikler ve farklı dalga boylarında ışık şiddetine maruz kalan *elodea canadensis* bitkisi ile gerçekleştirilmiştir. Yapısal değişimler nano ölçekte, SAXS yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Bu incelemeler sonucunda 1B 2B ve 3B nano oluşumlar için yapısal bilgiler elde edilmiştir (Şekil 1). Genel sonuç olarak çevre koşullarının bu bitkinin nanoskopik yapısı kullanılarak rahatlıkla takip edilebileceği gösterilmiştir.



Şekil 1: Farklı tuz konsantrasyonlarında vefarklı çözeltilere maruz bırakılmış elodea bitkisi için hacimsel, yüzeysel ve uzamsal boyutlarda jirasyon yarıçaplarının değişimi.

Kaynakça

 Salt tolerance and salinity effects on plants: a review Asish Kumar Paridaa, Anath Bandhu Dasa,b, a National Institute for Plant Biodiversity Conservation and Research, Nayapalli, Bhubaneswar 751015, Orissa, India b Regional Plant Resource Centre, Nayapalli, Bhubaneswar 751015, Orissa, India Received 18 September 2003; received in revised form 8 March 2004; accepted 8 June 2004 Available online 7 August 2004
 Models of aquatic plant productivity: a review of the factors that influence growth Genevieve M. Carr I, Hamish C. Duthie *, William D. Taylor

Department of Biology University of Waterloo, Waterloo, Ontario N2L 3G I, Canada Accepted 19 August 1997

The Effect of Metal Doping on TiO₂ for Photocatalytic Application

Y. Alduran¹, M. Ozdemir^{2,3}, L. Ozyuzer^{2,3}, G. Aygun²

²Department of Biotechnology, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, TURKEY ²Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430, Izmir, TURKEY ³Teknoma Technological Materials Inc., Izmir Technology Development Zone, Urla, 35430, Izmir, TURKEY

In this study, TiO_2 thin films doped with different metal will be fabricated using reactive magnetron sputtering technique. And then, they will be heat-treated to form TiO_2 phase at 600°C for 2 hours in air to obtain anatase phase of TiO_2 . The surface structure morphology and composition of films will examine by Scanning Electron Microscopy (SEM), Atomic Force Microscopy (AFM), X-ray Diffraction (XRD), X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS). The photocatalytic properties of doped TiO_2 will be investigated from adsorption behavior of them. Methylene Blue will be used as a model organic pollutant.

TiO₂ is a mostly used photocatalyst in degradation reaction of organic impurities for photocatalytic applications. Photocatalysis is a process that involves the interactions of light and semiconductor particles. This process does not only destroy bacteria but also produce of oxidative species that destroy chemical pollution in the water. As a result of the photocatalysis test on many semiconductors, The strong oxidation ability of TiO₂ under UV light, chemical stability, non-toxicity and non-expensive due to photocatalysis the most suitable for the semiconductor [1].

TiO₂ absorbs only 5% of solar spectrum energy. Due to the low surface area coating of TiO₂ particles, the photocatalytic activity for most aromatic compounds giving the reaction is very low. For this reason, a number of studies have been carried out to increase the photocatalytic activity through the modification of the surface structure [2]. There are some significant reaction steps between adsorbed oxygen and water molecules as essential molecules for the photooxidation process. Other important reaction included in reactive oxygen species and hydroxy group. Radical groups are presented in this photocatalytic process [3].



Figure 1. Schematic representation of some of the main processes occurring on a semiconductor particle, a, sorbtion of photon and electron-hole pair formation and migration of electron and hole: arrows marked (1) and (2) show electron-hole recombination at surface and bulk respectively, and those marked (3) reduction of accep tor and (4) oxidation of donor, b, On absorbtion of photon of energy hv, electrons are excited from valence band (VB) to conduction band (CB). There is transfer of electron to oxygen molecule to form superoxide ion radical COi) and transfer of electron from water molecule to VB hole to form [3].

References:

- 1. Ozdemir M., Kurt M., Ozyuzer L., Aygun G., "Comparison of photocatalytic properties of TiO₂ thin films and fibers", The European Physical journal Applied Physics 75, 30401, (2016).
- 2. Sonawane, R.S., Kale, B.B., Dongare, M.K., "Preparation and photo-catalytic activity of Fe-TiO₂ thin films prepared by sol-gel dip coating", Materials Chemistry and Physics 85, 52-57, (2004).
- 3. Banerjee, S., Gopal, J., Muraleedharan, P., Tyagi, A.K., Raj, B., "Physics and Chemistry of photocatalytic titanium dioxide:Visualization of bactericidal activity using atomic force microscopy", Current Science 90, 10, 1378-1383, (2006).

Tb₃Si₅N₉O Bileşiğinin Mekanik ve Elektronik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi

Mehtap Altay, Hacı Özışık, Havva Özışık, Engin Deligöz

Aksaray Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 68000, Aksaray

Nadir toprak elementlerinin oksonitridosilikatları RE₃[Si₅N₉O] ortorombik Pbcm (no: 57, Z=4) yapıda kristal oluşturdukları yeni yapılan bir çalışmadan bilinmektedir [1]. Bu çalışmada, aynı serinin deneysel sentezi yapılmamış Terbiyum oksonitridosilikat Tb₃[Si₅N₉O]'ın üzerine belirlenen yapı örnek alınarak kuramsal hesaplamalar yapılmıştır. Hesaplamalarda Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi-Genelleştirilmiş Gradyant Yaklaşımı (DFT-GGA) dahilinde elektron iyon etkileşimi için PAW (Projector-Augmented-Wave) düzlem dalga metodu ve elektron-elektron etkileşimi için ise Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) değiştokuş ve korelasyon terimi temel alındı ve VASP paket programı kullanıldı [2-4]. Elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu (DOS) hesaplanarak yorumlandı. 2. dereceden elastik sabitler (C_{ij}) "zor-zorlama" yöntemi [5] kullanılarak elde edildi ve bileşiğin polikristal elastik modülleri (Bulk ve Young modülü, Poisson oranı) ve evrensel anizotropi faktörü hesaplanarak yorumlandı.

1970'lerde Silisyum Nitrür ve Sialon seramiklerin yoğunlaşmasında katkı maddesi olarak İtriyum oksitleri ve nadir topraklar araştırılmaya başlanmıştır [6]. Oksonitridosilikatlar sınıfı, oksosilikatlar ve nitridosilikatlar sınıflarına benzer yapısal özellikler gösteren kesişim olarak görülür [1].

Bu çalışmada, deneysel olarak henüz sentezlenmemiş Tb₃[Si₅N₉O] bileşiğinin temel durum mekanik ve elektronik özellikleri, aynı seri oksonitridosilikat bileşiklerinin deneysel ortorombik yapısı örnek alınarak belirlendi. Hesaplamalarda 6x2x3Monkhorst-Pack k-noktası ağı ve 500 eV kesilim enerjisi kullanıldı. Enerji minimizasyonu sonucu elde edilen Tb₃Si₅N₉O örgü parametreleri Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1: $Tb_3Si_5N_9O$ için hesaplanan temel durum örgü sabitleri (a, b, c; Å), enerji (E_0 , eV/u.c) ve hacim (V_0 , $Å^3/u.c.$) değerleri

a	b	с	E_{θ}	V_{θ}
5.0216	16.2604	10.7555	-593.59775	878.22

Tb₃Si₅N₉O kristalinin hesaplanan temel durumunda Brillouin bölgesi yüksek simetri noktaları boyunca elektronik band yapısı elde edildi ve 2.508 eV dolaylı

Kaynakça

- D. Wilhelm, M. Seibald, D. Baumann, K. Wurst, H. Huppertz, "Further Representatives of the Type RE₃[Si₅N₉O] (RE= Dy-Er, Yb)", Eur. J. Inorg. Chem. 2018, 731–738 (2018).
- 2. G. Kresse, J. Furthmüller. "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set" Phys. Rev. B, **54**:11169, 1996.
- 3. G. Kresse, D. Joubert. "From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method", Phys. Rev. B, **59**:1758, 1999.
- 4. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", Phys. Rev. Lett., 77, 3865, 1996.
- 5. Y. Le Page, P. Saxe, "Symmetry-general least-squares extraction of elastic data for strained materials from ab initio calculations of stress", Phys. Rev. B 65, 104104 (2002).
- 6. K. Liddell, D. P. Thompson, "The crystal structure of Y₃Si₅N₉O and revision of the compositions of some high nitrogen-containing M±Si±O±N (M~Y, La) phases", Journal of Materials Chemistry, **11**, 507-512 (2001).

 $(X \rightarrow \Gamma)$ band aralığına sahip yarıiletken karakter sergilediği görüldü.

Elastik sabitler "zor-zorlama" yöntemi [5] kullanılarak hesaplandı ve Tablo 2'de listelendi. Bileşik incelenen yapıda mekanik kararlılık şartlarını sağladığından deneysel olarak sentezlenebileceği öngörüldü. Elastik sabitleri kullanılarak polikristal Bulk modülü (B), Kayma modülü (G), Young modülü (E), Poisson oranı(υ) ve Evrensel Anizotropi faktörü (A^U) ilk bu çalışmada hesaplanarak Tablo 3'de sunuldu.

Tablo 2: Tb₃Si₅N₉O kristali için hesaplanan elastik sabitleri (C_{ij} , GPa)

C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₂₂	C ₂₃	C ₃₃	C ₄₄	C ₅₅	C ₆₆
297	85	99	345	109	321	109	108	105

Tablo .	3: Tb ₃ Si ₅ N ₉	0 kr	istal	i içi	n hesap	lanan Bul	lk, Kayı	na,
Young	modülleri	<i>(B,</i>	<i>G</i> ,	<i>E</i> ;	GPa),	Poisson	orani	ve
evrense	el anizotropi	i faki	törü					

В	G	Е	υ	Au
171.6	108.8	269.6	0.24	1.03

Sonuç olarak; Tb₃Si₅N₉O katısının mekanik olarak kararlı, dolaylı band aralığına sahip ve sert yarıiletken bir malzeme olduğu söylene bilinir.

Characterization of High Quality VO₂ Thin Films Fabricated by DC Magnetron Sputtering Technique

Bengü Ata^a, Yasemin Demirhan^a, Mehtap Özdemir^{a,b}, Gülnur Aygün^a, Lütfi Özyüzer^{a,b}

^aDepartment of Physics, Izmir Institue of Technology,, 35430 Urla, Izmir, Turkey ^bTeknoma Technological Materials Ltd, 35430 Urla, Izmir, Turkey

Vanadium dioxide (VO₂) is a promising material because of its metal-insulator transition (MIT) phenomena with remarkable changes in its optical, electrical properties temperatures at around VO₂ undergoes 68 °C [1]. а first-order phase transformation at this critical temperature T_{MIT} of ~68 °C. The material presents an insulator state with a monoclinic structure below T_{MIT}, but behaves as a metal state with a tetragonal rutile structure above T_{MIT} [2,3]. The remarkable changes in optical and electrical properties make them suitable for various applications such as electronic switches, thermal sensors, optical data storage disks, thermochromic smart windows, metamaterial filters, bolometers, field effect transistor (FET), thyristor and so on.

In this work; VO_2 thin films deposited by DC magnetron sputtering at 550 °C on sapphire (Al₂O₃) substrate due to its good thermal conductivity.The



Figure 1: Temperature dependence of resistivity

 VO_2 film on sapphire substrate showed a metal-insulater (M–I) transition at a temperature of 68°C with four orders of change in resistivity, with a small hysteresis width of $3.2^{\circ}C$ for temperature [4]. The crystal structure of the thin films was investigated by X-ray diffraction (XRD), and the crystallinety of the thin film was estimated from the full-width at half-maximum (FWHM). Within the result of the of the MIT transition by voltage triggering, it is possible to obtain current induced MIT transition in VO₂ based circuit components. With our high quality VO₂ samples we aim to obtain current induced thyristor device.

References

1. F.J. Morin 1959 Phys. Rev. Lett., 3 34

2. Fillingham P J 1967 J. Appl. Phys. 38 4823

3. Guiton B S, Gu Q, Prieto A L, Gudiksen M S, Park H and Amer J Chem. Soc 127 498 (2005)

4. H Yuce, H Alaboz,Y Demirhan,M Ozdemir,L Ozyuzer,G Aygun 'Investigation of electron beam lithography effects on metal–insulator transition behavior of vanadium dioxide'' Phys. Scr. 92, 114007 8pp (2017)

MgB₂-tipi Düzlemsel Bor katmanına sahip MgAlB₄ bileşiğinin K, Ca, Sc ve Ti ile Katkılanması

Sezgin Aydın

Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 06500, Teknikokullar, Ankara

MgAlB₄ bileşiğinde Al-katmanının K, Ca, Sc ve Ti katmanlarıyla değiştirilmesi sonucu elde edilen hipotetik bileşiklerin yapısal, mekanik ve dinamik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi kapsamında genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı seçilerek ilk-prensipler hesaplamaları ile incelendi. Norm-korunumlu pseudopotansiyeller kullanıldı. Tasarlanan hipotetik bileşiklerin termodinamik kararlılıklarını incelemek için oluşum entalpileri, mekanik kararlılıklarını incelemek için elastik sabitleri ve dinamik kararlılıklarını incelemek için fonon dispersiyon eğrileri hesaplandı.

 $MgAlB_4$ (veya $Mg_{0.5}Al_{0.5}B_2$) bileşiği [1], grafen benzeri düzlemsel bor katmanına sahip olmak gibi ilginç yapısal özelliklere sahip olan [2] ve 40K civarında süperiletken özellikler sergileyen [3] MgB_2 bileşiği Al ile katkılanarak elde edilir.

Bileşiğin kristal yapısı (Şekil 1) metalik katmanlar arasına yerleşmiş düzlemsel altıgen geometrili (grafen-benzeri) bor katmanlarından oluşur.



Şekil 1. MgAlB₄'ün kristal yapısı

Kaynakça

- 1. J. Q. Li, L. Li, F. M. Liu, C. Dong, J. Y. Xiang, Z. X. Zhao, "Superconductivity, superstructure, and structure anomalies in Mg_{1-x}Al_xB₂", Phys. Rev. B. **65**, 132505 (2002)
- 2. G. Akopov, M. T. Yeung, R. B. Kaner, "Rediscovering the Crystal Chemistry of Borides", Adv. Mater. 29, 1604506 (2017)
- 3. J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani and J. Akimitsu, "Superconductivity at 39 K in magnesium diboride", Nature **410**, 63 (2001).

Bu katmanlı yapı sayesinde çok farklı katkılama süreçleri uygulanabilir. Mg katmanı benzer alkali elementlerle değiştirilebilir. Bor katmanı C ve N gibi diğer hafif elementlerle katkılanarak değişik fiziksel özellikler hedeflenebilir. Diğer taraftan, bu çalışmada olduğu gibi, Al yerine diğer metaller kullanılarak bileşiğin özellik yelpazesi üzerinde değişiklikler yapılabilir.

Bilindiği üzere, bu tür katkılama süreçleriyle meydana getirilen geometrik ve kimyasal değişimler bileşiğin özelliklerini değiştirirler ve kristal yapısını kararsız hale getirebilirler. Bu nedenle, tasarlanmış geometrilerin kararlılık testlerinin yapılması oldukça önemlidir.

Yapılan hesaplamalar sonucunda, Al-katmanı yerine M=K, Ca, Sc ve Ti katmanı içeren MgMB₄ bileşiklerinin tamamının mekanik kararlı olduğu görüldü. Bununla birlikte, K, Ca ve Sc katkılı bileşiklerin dinamik kararlı oldukları, Ti katkılanmış bileşiğin Γ-noktası etrafında gözlenen negatif fonon frekanslarından dolayı dinamik kararsız olduğu gözlendi.

FR-4 Alttaş ile 5,8 GHz Frekans Bandına Yönelik Metamalzeme Hasatlayıcı

Fulya Bağcı, Emrullah Karakaya, Barış Akaoğlu

Ankara Üniversitesi- Fizik Mühendisliği Bölümü, 06100 Ankara

Bu çalışma kapsamında sayısal yöntemler kullanılarak baskı devrelerde sıkça kullanılan FR-4 alttaş üzerinde 5,8 GHz lisanssız frekans bandında elektromanyetik hasatlama yapabilen bir metamalzeme yapısı tasarlanmıştır. Hasatlama verimliliği çalışma frekansında %77 olup 5,8 GHz'i çevreleyen 1 GHz'lik bant aralığında verimlilik %50'nin üzerindedir. Metamalzemeler FR-4 alttaşlar üzerinde fabrike edilerek benzetim sonuçlarının doğruluğu test edilecektir.

Kablosuz haberleşme teknolojilerindeki gelişmeler insan yaşam alanları çevresindeki elektromanyetik radyasyonu artırmaktadır. Bu elektromanyetik enerjilerin hasatlanarak enerji kaynaklarının daha etkin ve verimli kullanımı günümüzde önemini giderek artırmaktadır. Bu bağlamda, elektromanyetik enerjinin metamalzemeler aracılığı ile toplanması yeni bir hasatlama yaklaşımı olarak göze carpmaktadır [1]. Metamalzemeler hasatlayıcı kullanıldıklarında metamalzemelere olarak eklenen devre elemanı üzerinden yüksek soğurma gerçekleştirilmektedir.

Bu çalışmada 1,6 mm kalınlıkta arka yüzü tamamen bakır kaplı FR-4 alttaş üzerinde periyodik dizili LC rezonatörler kullanılarak 5,8 GHz Uzun Vadeli Evrim (LTE) bandında %77 verimlilikle hasatlama yapabilen bir metamalzeme yapısı tasarlanmıştır. Çalışma ticari bir yazılım programı olan CST Microwave Studio kullanılarak gerçekleştirilmiştir. 15 mm örgü sabitine sahip metamalzeme hasatlayıcı tasarımının birim hücresi geometri değerleri ve uyarım şekli ile birlikte Şekil 1.a'da gösterilmiştir. Arka toprak düzlemi ile üst düzlem arasında, direnç elemanının 1 mm altında alttaşı delen bir bakır tel (via) bulunmaktadır. Bu bakır tel arka düzlemde ters yönde indüklenen yüzey akımlarının ön düzlemdeki devre elemanınca toplanabilmesi için dirençten en uygun mesafe yerleştirilmiştir. Metamalzemenin öteve alttaşında (FR-4 plaka), bakır elemanlarda ve direnç elemanında soğurulan elektromanyetik dalga gücünün gönderilen elektromanyetik dalganın gücüne oranı olan verimlilik değerleri frekansa göre Şekil 1.b'de gösterilmiştir. gücünün Gönderilen dalganın %91'i metamalzeme tarafından soğurulmakta olup bu enerjinin %13'ü FR-4 dielektrik alttaşta, %1,04 kadarı ise bakır metallerde 1s1 olarak kaybolmaktadır. Gücün arta kalan %77'si, değeri optimize edilmiş 65 Ω'luk direnç tarafından AC güç olarak depo edilmektedir. FR-4 alttaşlar ucuz ve rahat bulunabilen alttaşlar olduğundan tercih edilmiştir; fakat bu alttaslarda soğurma oranı biraz yüksek olduğundan devre elemanının verimliliği nispeten düşük olmaktadır. Calışmanın devamında metamalzeme hasatlayıcı örneği üretilerek soğurma ve verimlilik değerleri Ankara Üniversitesi Mikrodalga Araştırma Laboratuvarı'nda bulunan horn antenler ve ağ analizörü aracılığıyla ölçülecektir. Benzetim sonuçlarının doğruluğu sınanacaktır.



Şekil 1: a. Metamalzeme birim hücresi ,b. hasatlama verimliliği.

Teşekkür: Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 116E188 no'lu proje ve Ankara Üniversitesi tarafından 17B0443006 no'lu proje ile desteklenmektedir. **Kaynakça**

1. T. S. Almoneef, O. M. Ramahi, "Metamaterial electromagnetic energy harvester with near unity efficiency", Appl. Phys. Lett. **106**, 153902 (2015).

Kuantum Spin Hall Cihazlarında İş Çıkarımı ve Landauer İlkesi

Ahmet Mert Bozkurt

Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Sabancı Üniversitesi, Orhanlı-Tuzla, İstanbul, Türkiye

Landauer ilkesine gör her bir bilgi bitini silmek, en az kT ln2 kadar enerji harcanmasına yol açar. Bunun yanında boş bir bit, kT ln2 kadar enerji çıkarabilmek üzere kullanılabilir. Bu makalede nükleer spinler içeren kuantum spin Hall cihazlarında ısı ve yük taşınımına odaklandık. Sözkonusu sistemlerde, kuantum spin Hall cihazına bağlı olan haznelerdeki ısı enerjisini nükleer spinlerin oluşturduğu Maxwell Cini (Maxwell's Demon) hafıza kaynağının indüklediği yük akımı sayesinde kullanılabilir elektrik enerjisine çevirildiğini gösterdik. Ayrıca hafıza kaynağı olarak kullanılan nükleer spinleri "hazırlamak" için uygulanan akımın enerji kaybına neden olduğunu ve böylelikle Landauer limitine uyduğunu gösterdik. Kuantum Bilgi Motoru olarak adlandırılan bu sistem, elektriksel cihazlarda kullanılabilecek alternatif bir enerji depolama yöntemidir.

Farklı Oranlarda ZnO Katkılı CuO Arayüzey Tabakalı Al/p-Si (MS) Diyotların Kapasitans-Voltaj (C-V) ve Kondüktans-Voltaj (G/□-V) Karakteristiklerinin İncelenmesi

Hayriye Gökçen ÇETİNKAYA^a, Seçkin ALTINDAL YERİŞKİN^b

^a Fizik Bölümü, Fen Fakültesi, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye ^b Kimya Mühendisliği Bölümü, Mühendislik Fakültesi, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye

Doğru ve ters öngerilim kapasitans-voltaj (C-V) ve kondüktans-voltaj (G/ \Box -V) karakteristikleri çeşitli oranlarda (katkısız, %0.5 ve %2) katkılanmış (ZnO-katkılı CuO) arayüzey tabakalı Al/p-Si (MS) kontaklar için 10kHz ve 1MHz ac sinyal altında oda sıcaklığında incelendi. C⁻²-V grafiğinden faydalanılarak diyotlar için bariyer engel yüksekliği (\Box_B) Fermi enerji seviyesi (E_F), arayüzey durum yoğunluğu (N_{ss}), tüketim tabakası kalınlığı (W_D) gibi temel parametreler hesaplandı. Arayüzey katkılama farkının (%0.5, %2 ZnO katkılı ve katkısız CuO) elektriksel temel parametreler üzerindeki etkisine bakıldı ve arayüz katkılama oranı farklılığının elektriksel parametreleri güçlü bir şekilde etkilediği gözlendi. Voltaja bağlı arayüzey durum yoğunluğu yüksek ve düşük frekans için (C_{LF}-C_{HF}) Hill-Coleman metoduyla hesaplanırken, seri direnç (R_S) ise C-V ve G/ \Box -V dataları kullanılarak Nicollian ve Brews metodu ile bulunmuştur. Bu sonuçlar, arayüzeyin (ZnO katkılı CuO), MS tipi diyot/kontağın elektriksel özellikleri üzerinde etkili olduğu ve MS yapının performansını geliştirdiğini göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: (ZnO katkılı CuO) Arayüzey tabakaları; Arayüzey durumları; seri direnç (Rs)

Çeşitli oranlarda ZnO katkılı CuO arayüzey tabakalı Al/p-Si (MS) Diyotlarının Akım-Voltaj (I-V) Karakteristiklerinin Oda Sıcaklığında İncelenmesi

Hayriye Gökçen ÇETİNKAYA^a, Seçkin ALTINDAL YERİŞKİN^b

^a Fizik Bölümü, Fen Fakültesi, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye ^b Kimya Mühendisliği Bölümü, Mühendislik Fakültesi, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye

Farklı oranlarda (katkısız, %0.5 ve %2) katkılanmış (ZnO-katkılı CuO) arayüzey tabakalı Al/p-Si (MS) kontaklarının elektriksel karakteristiklerini belirlemek için doğru ve ters öngerilim altında akım-voltaj (I-V) ölçümleri alındı. Deneysel sonuçlar, (%2 ZnO katkılı CuO) arayüzey tabakanın katkısız ve daha düşük oranda (%0.5 ZnO katkılı CuO) katkılaması yapılan diyotlar ile kıyaslandığında daha yüksek doğrultma oranı ve daha düşük kaçak akıma sahip olduğu gözlendi. Seri direnç (R_s) etkisi ohm kanunu ve Cheung foksiyonu ile herbir diyot için hesaplandı ve uyumlu olduğu gözlendi. Her bir diyot için yüzey durumlarının enerji dağılımı (N_{ss}) doğru öngerilim I-V grafiğinden faydalanılarak voltaja bağlı bariyer engel yüksekliği (Φ_B) ve idealite faktörü (n) hesaplandı. N_{ss} değerlerinin yüksek katkılı (%2 ZnO katkılı CuO) diyotda diğerlerine göre daha düşük çıktığı gözlendi. Bu sonuçlar, arayüzey tabaka katkı seviyesinin (ZnO katkılı CuO) MS tipi diyot/kontağın elektriksel özellikleri üzerinde oldukça etkili olduğunu ve MS yapısının performansını geliştirdiğini göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: Akım-voltaj (I-V) karakteristiği; (ZnO katkılı CuO) Arayüzey tabakaları; Yüzey durumları ve seri direnç etkisi.

Fourcross Metamaterial Filters Fabricated from YBCO Superconducting Thin Films and Au Thin Films for Terahertz Applications

Yasemin Demirhan^{1,*} Hakan Altan², Batuhan Mulla¹, Cumali Sabah³, Lutfi Ozyuzer¹

¹Department of Physics, Izmir Institute of Technology, Urla, 35430,Izmir,Turkey ²Department of Physics, Middle East Technical University, Çankaya, 06800, Ankara, Turkey ³Department of Electrical and Electronics Engineering, Middle East Technical University - Northern Cyprus Campus, Güzelyurt, Turkey

Terahertz (THz) radiation is part of the electromagnetic spectrum lying between microwaves and the infrared. This region covers frequencies ranging from 0.3 - 10 THz and wavelengths from 1 mm to 0.03 mm. Organizations involved in military and defense are requesting the development of many Technologies such as handheld THz radar systems that work in this frequency range to remotely detect the presence of explosive materials, poison gases, ceramic weapons, and biological warfar eagents like viruses and bacteria [1-3]. The unique properties of superconducting materials allow them to be utilized in a number of ways for THz device applications.

Momentarily, Josephson based metamaterials propose a lot of important and attractive opportunities for novel metamaterial structures. In this study, we present a new, unique fourcross shaped metamaterial THz filter fabricated from both gold thin films and YBa₂Cu₃O_{7-d} high T_c superconducting thin films. The designed fourcross shaped rectangular filter structure consists of periodic metallic rings where strip lines are located at the sides of the ring. To investigate the temperature-dependent resonance behavior and confirm the measurements, simulations are carried out at temperatures above and well below T_c. With the specified mesh dimensions, the simulated YBCO fourcross filter design establishes a stop band at both 0.412 THz and 0.765 THz for 20 K (Fig. 1). These resonances shifted to 0.410 THz and 0.760 THz at 40 K, respectively.

Furthermore, a resonance shift to 0.390 THz and 0.734 THz at 60 K is also observed. Metamaterial filters are fabricated by using ebeam lithography and ion beam etching techniques.



Figure 1: Simulation results of YBCO fourcross filter.

Terahertz time-domain spectroscopy measurements validated the design predictions for both the center frequencies and bandwidths of the resonances due to the fourcross structures. The resonance switching of the transmission spectra was investigated by lowering the temperature below the critical transition temperature. This resonance switching effect is not observed in filters madeup of metals. This novel fourcross rectangular resonator with a temperature-dependent resonance behaviour holds great potential for active, tunable and lowloss THz devices.

References

- 1. M. Tonouchi,"Cutting edge THz technology" Nat. Photonics 97, 1 (2007).
- 2. L. Ozyuzer et al., "Emission of THz waves from superconductors" Science 318, 1291 (2007).
- **3.** Y. Demirhan et al., "Fourcross shaped metamaterial filters fabricated from high temperature superconducting YBCO and Au thin films for terahertz waves" Supercond. Sci. Technol. **30** (2017) 074006 (9pp).

Acknowledgment

This research is partially supported by TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) project number 114F091.

(1-x)BaTiO₃-xBi(Li_{1/3}Ti_{2/3})O₃ Sisteminde Elektrokalorik Etkinin Ölçülmesi

Tuğçe Demirtay, Umut Adem*

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

Elektrokalorik etki (EKE), dielektrik malzemelerde bulunan ve adiabatik koşullar altında ferroelektrik bir malzemeye uygulanan elektrik alanla malzemedeki dipolar entropinin değişmesinden kaynaklanan sıcaklık değişikliğidir.

Yaydığı halokarbon gazları ile sera etkisi ve ozon tabakasının incelmesine neden olup küresel ısınma ve iklim değişikliğini tetikleyen mevcut soğutma teknolojilerine alternatif olma potansiyeli taşıyan elektrokalorik etki, daha verimli ve çevre dostu bir soğutma teknolojisine temel oluşturmaktadır. Elektrokalorik soğutucularda kullanılmak üzere henüz yeterince yüksek olmayan EKE'yi arttırmak için elektrokalorik etkiye etki eden temel mekanizmaların daha iyi anlaşılması gerekmektedir.

kadar ölçülmüş yüksek Şu ana en etki $PbZr_{0.95}Ti_{0.05}O_3(PZT)$ 'de 12 Κ olarak bulunmuştur[1]. Kurşun elementinin toksik oluşu kurşunsuz baryum titanat bazlı çalışmaları ön plana çıkartmıştır. Bu çalışmalar arasında kurşun gibi valnız elektron çiftine sahip Bi-bazlı sistemler umut vericidir.

(0.05≤x≤0.2) (1-x)BaTiO₃-xBi(Li_{1/3}Ti_{2/3})O₃ katı çözelti sisteminde, malzeme kompozisyonu değiştikçe bir morfotropik faz sınırı bölgesi oluştuğu gösterilmiş ve difüzyon kinetiğinden kaynaklanan çekirdek-kabuk yapısının varlığı kanıtlanmıştır[2]. Morfotropik faz sınırı bölgesinde farklı polarizasyon yönelimlerinin varlığı, dielektrik ve piezoelektrik özelliklerde artışa neden olurken elektrik alan vardımıyla dipol yöneliminin daha kolay gerçekleşmesini sağlar ve EKE'de artışa neden olur[3].

Katı hal sentezi ile üretilen ve x-ışını kırınımı deneyleriyle kristal simetrileri belirlenen malzemelerde dielektrik ve ferroelektrik ölçümlerle elde edilen ilk sonuçlara bakıldığında, çekirdek kabuk yapısının morfotropik faz sınırından gelen katkıyı minimize ettiği görülmüştür. Çalışmadaki yeni hedef, difüzyonu kolaylaştırarak çekirdek kabuk yapısından kurtulmak olarak belirlenmiş, bu

Kaynakça

- 1. M. Valant, "Electrocaloric materials for future solid-state refrigeration Technologies", Progress in Materials Science 57, 980–100 (2012).
- **2.** Ma, C. and X. Tan, "Morphotropic phase boundary and electrical properties of lead-free (1-x)BaTiO₃- xBi(Li_{1/3}Ti_{2/3})O₃ ceramics", Journal of Applied Physics, **107**, 124108-6 (2010).
- **3.** Wang X, Tian F, Zhao C, "Giant electrocaloric effect in lead-free Ba_{0.94}Ca_{0.06}Ti_{1-x}Sn_xO3 ceramics with tunable Curie temperature", Applied Physics Letters, **107**, 0–5, (2015)

amaçla sinterleme öncesi toz parçacık boyutu nanometre mertebesine düşürülmüştür. Bu şekilde sentezlenen malzemelerde sıcaklığa bağlı dielektrik ölçümler çekirdek kabuk yapısının olmadığına işaret etmiştir. Buna karşın daha önce rapor edilen calismadan[2] farklı olarak, sıcaklığa bağlı dielektrik sabiti elektriksel kutuplanma ve ölçümleriyle, sıcaklık arttıkça ferroelektrik fazın antiferroelektrik benzeri bir faza dönüştüğü, daha sonra sıcaklığın daha da arttırılmasıyla paraelektrik hale geldiği gözlenmiştir. Sıcaklığa bağlı elektriksel kutuplanma ölçümleri ve Maxwell denklemlerinden hesaplanan EKE, sıcaklığa bağlı olarak çizdirildiğinde, ferroelektrik-antiferroelektrik faz geçiş sıcaklığı civarında en yüksek olduğu gözlenmektedir (Şekil1). Bu sıcaklık artan $Bi(Li_{1/3}Ti_{2/3})O_3$ oranıyla oda sıcaklığına yaklaşmaktadır. En yüksek EKE 0.97BaTiO3- $0.03Bi(Li_{1/3}Ti_{2/3})O_3$ (97BT-3BLT) kompozisyonunda 22 kV/cm elektrik alan altında 0.64°C olarak ölçülmüştür.



Şekil 1: Tüm kompozisyonlar için sıcaklığa bağlı elektrokalorik sıcaklık değişimi değerleri.

Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 315M241 no'lu proje kapsamında desteklenmektedir.

Al/CdS-PVA/p-Si (MPS) Schottky Diyotların Hazırlanması ve Elektrik ile Dielectric Özelliklerinin Geniş Bir Frekans, sıcaklık ve Elektrik Alan Altında İncelenmesi

Perihan DURMUŞ[,]

*Gazi Üniversitesi, Fen-Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara-Türkiye

Yariiletken aygıtların temelini teşkil eden metal-yariiletken (MS) Schottky diyotlarının performansını artırmak ve özellikle metal arayüzeyinde oluşan potansiyel engelinin biçimi, arayüzey tuzak yükleri ile yalıtkan veya polimer arayüzey tabakasının temel elektriksel ve dielektrik özellikleri üzerine etkisini detaylıca inceleyebilmek amacıyla polimer arayüzey tabakalı (MPS) tipi Schottky diyotları hazırlanacaktır. Gerek yarıiletken kristallerin yapımı ve gerekse fabrikasyon sırasında bu aygıtlarda çok sayıda makro ve mikro büyüklükte kristal bozuklukları oluşur ve yapının performansını olumsuz yönde etkiler. Bu nedenle, hazırlanacak CdS-PVa arayüzeyli (MPS) Schottky diyotların temel elektriksel ve dielektriksel özellikleri admitans spektroskopi (C-V ve G/\Box -V) ve akım-voltaj (I-V) deneysel ölçüm metotları kullanılarak geniş bir frekans ve sıcaklık aralığında incelenecektir. Böylece, metal-yarıiletken arayüzeyinde oluşan engel yüksekliğinin biçimi ve temel iletim mekanizmaları hakkında detaylı bir bilgi elde edilmesi hedeflenmektedir.

Anahtar kelimeler: Al/(%7 Zn- PVA)/p-Si; Anormal pik ne negatif kapasitans; Frekans ve voltaja bağlılık; Frekansa bağlı temel elektriksel parametreler.

ESERLER

- A. Kaya, E. Marıl, Ş. Altındal, İ. Uslu, "The comparative electrical characteristics of Au/n-Si (MS) diode with and without a %2 graphene cobalt-doped Ca₃Co₄Ga_{0.001}O_x interfacial alyer at room temperature", Microelectron. Eng., 149 (2016)166-171.
- Y. Şafak Asar, T. Asar,, Ş. Altındal, S. Özçelik, "Dieelctric spectroscopy studies and ac electrical conductivity on (AuZn)/TiO₂/p-GaAS (110) M1s structures", Phylosophical Magazine, 95 (2015) 2885-2898.
- H.G. Çetinkaya,A. Kaya, Ş. Altındal, S. Koçyiğit, "Electrical and dielectric properties of Au%1graphene(GP)+Ca_{1.9}Pr_{0.1}Co₄O_x doped poly(vinyl alchol)/n-Sinstructure as function of temperature and voltage",Can J. Phys, 93 (2015)2014-0628.
- 4. H.G. Çetinkaya, D.E. Yıldız, Ş. Altındal, "Electrical and dielectric properties of Au%1graphene(GP)+Ca_{1.9}Pr_{0.1}Co₄O_x doped poly(vinyl alchol)/n-Sinstructure as function of temperature and voltage",Can J. Phys, 93 (2015)2014-0628.
- H.G. Çetinkaya,D.E. Yıldız and Ş. Altındal, "On the negative capacitance behavior in the forward bias of Au/n-4H-SiC (MS) and comparison between MS and Au/TiO₂/n-4H-SiC (MIS) type diodes both in dark and under 200W illumination intensity" International Journal of Modern Physics B, 29 (2015) 1450237.

Yoğun Madde Fiziği – İzmir Toplantısı, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, 13 Nisan 2018 Al/Bi4Ti3O12/n-Si SCHOTTKY BARİYER DİYOTLARIN SICAKLIĞA BAĞLI ELEKTRİKSEL KARAKTERİZASYONU

Perihan DURMUŞ[,]

*Gazi Üniversitesi, Fen-Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara-Türkiye

Bu çalışmada arayüzeysel bizmut titanat, BTO, tabakanın Schottky bariyer diyotların elektriksel karakteristikleri ve akım iletim mekanizmaları üzerindeki etkilerinin incelenmesi amacıyla üretilen Al/p-Si ve Al/BTO/n-Si Schottky bariyer diyotların elektriksel karakterizasyonu 120 K ile 380 K aralığındaki beslem voltajına bağlı akım ve admitans ölçümleri yardımıyla gerçekleştirilecektir. Schottky bariyer diyotların seri direnç değerleri Ohm yasası, Cheung-Cheung yöntemi ve admitans yöntemi kullanılarak hesaplanacaktır. Arayüzeysel BTO tabakadan dolayı Al/BTO/n-Si Schottky bariyer diyotun idealite faktörü ve sıfır-beslem potansiyel engel yüksekliği değerleri daha yüksek çıkması beklenmektedir. Eğer idealite faktörünün değeri birden büyük çıkarsa ve sıfır beslem engel yüksekliği artan sıcaklıkla artarsa bu durumda termiyonik emisyondan ziyade diğer akım iletim mekanizmaları tartışılacaktır. Ayrıca arayüzey tuzaklarının enerji ve beslem voltajı profili sırasıyla akım ve kapasitans verilerinden elde edilecek ve bir biriyle karşılaştırılacaktır. Tükenim kapasitansı yöntemiyle üretilen Schottky bariyer diyotların difüzyon potansiyeli ve potansiyel engel yüksekliği değerleri elde edilecek ve sıcaklıkla değişimi analiz edilecektir.

Anahtar kelimeler: Schottky Bariyer Diot, Akım İletim Mekanizması.

ESERLER

- Altındal, Ş. (1993). Al-SiO_x-pSi Aygıtların ve Günes Pillerinin Elektriksel Karakteristikleri.
 Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 52–74.
- [2] Altındal, Ş., Parlaktürk, F., Tataroğlu, A., Parlak, M., Sarmasov, S. N. and Agasiev, A. A. (2008). The Temperature Profile and Bias Dependent Series Resistance of Au/Bi₄Ti₃O₁₂/SiO₂/n-Si (MFIS) Structures. *Vacuum*, 82(11), 1246–2510.
- [3] Aydemir, U., Taşcıoğlu, İ., Altındal, Ş. and Uslu, İ. (2013). A Detailed Comparative Study on the Main Electrical Parameters of Au/n-Si and Au/PVA, Zn/n-Si Schottky Barrier Diodes. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 16(6), 1865–1872.
- [4] Bengi, A., Altındal, Ş., Özçelik, S., Agaliyeva, S. T. and Mammadov, T. S. (2008). Analysis of Temperature Dependent Electrical Characteristics of Au/n-GaAs/GaAs Structures in a Wide Temperature Range. *Vacuum*, 83(2), 276–281

[5] Braun, F. (1875). Über die Stromleitung durch Schweflmetalle. Annalen der Physik, 229(12), 556–563.

Fabrication of All Solid State Li Ion Battery Using LiLaTiO Electrolyte

M. 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

In this study, all solid-state thin-film batteries will be fabricated using lithium lanthanum titanate oxide (LLTO) thin films as electrolyte, vanadium pentoxide (V_2O_5) as anodes and lithium manganese oxide (LiMn₂O₄) cathodes. For fabrication of battery, firstly, cathode layer MnO₂ films will be grown on SLG using magnetron sputtering technique, and then lithium metal will be thermally evaporated on it. Moreover, respectively, LLTO solid state electrolyte and LiV₂O₅ anode layer will be deposited on cathode film using again magnetron sputtering technique. The morphology of films will be evaluated by scanning electron microscopy (SEM) analyses. The phase structures and the chemical bonding structures of them will be determined using X-ray diffraction (XRD) and Raman Spectroscopy. The chemical state and atomic concentration will be investigated by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). Moreover, ionic conductivity will be measured by Impedance Analyzer.

All solid-state Lithium ion battery has become an important focus on the research due to its higher safety, higher energy density and wider operating temperature. Especially, thin film lithium batteries which are less than 15 µm thick, have important applications such as video cameras, portable computers and telephones and its application such as in zero-emission vehicles, medical instruments, aerospace industry and military. The batteries consist of a cathode and an anode electrode separated by an electrolyte enabling ion transfer between the two electrodes. Baba et al. fabricated thin film batteries using LiPON as an electrolyte, V_2O_5 as an anode and LiMn₂O₄ as cathode by means of RF magnetron sputtering [1]. They achieve increase the capacity with increasing the cycle number up to 20 cycles. However, in this study LLTO which is studied in our previous project will be used as an electrolyte. LLTO, which is a fast lithium ion conductor and used in rechargeable lithium ion batteries. Li_{3x}La_{(2/3)-x}TiO₃ has the perovskite structure ABO₃ with A = Li, La, and B =Ti. This series of materials are considered to have fast lithium transportation and the bulk ionic conductivity as high as 1 x 10⁻³ S.cm⁻¹ at room temperature when x=0.11 [2]. Vanadium pentoxide (V_2O_5) has played important roles in lithium ion

batteries due to its unique crystalline structure. Vanadium is also cheap and easily derived from existing mineral deposits like Mn, and its oxides are attractive cathode materials due to accommodation of three stable oxidation states (V^{5+} , V^{4+} and V^{3+}) within its closely packed oxygen structure. Meanwhile, more attention has been paid to cathode film of LiMn₂O₄ owing to their high energy density, low cost and environmental friendliness [1]. The electrodes are scarcely air sensitive.



Figure 1: Cross sectional view

*This research is supported by TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) project number 114M044.

REFERENCES

- M. Baba, N. Kumagai, N. Fujita, K. Ohta, K. Nishidate, S. Komaba, H. Groult, D. Devilliers, B. Kaplan, "Fabrication and electrochemical characteristics of all-solid-state lithium-ion rechargeable batteries composed of LiMn₂O₄ positive and V₂O₅ negative electrodes", Journal of Power Sources 798, 97–98, (2001).
- 2. Y. Xiong, H. Tao, J. Zhao, H. Cheng, X. Zhao, "Effects of annealing temperature on structure and optelectric properties of ion-conducting LLTO thin films prepared by RF magnetron sputtering", Journal of Alloys and Compounds 509, 1910–1914 (2011).

Yoğun Terahertz Lazer Radyasyonu Altındaki İki-boyutlu Kuantum Halkasının Optik Özellikleri

D. Gül Kılıç¹, S. Şakiroğlu², İ. Sökmen²

¹Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35390, İzmir ²Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 35390, İzmir

Bu çalışmada, manyetik alandaki iki-boyutlu kuantum halka sisteminin doğrusal ve üçüncümertebe doğrusal olmayan optik soğurma katsayıları ve bağıl kırılma indisi değişimleri üzerine yüksekfrekanslı yoğun lazer alanının etkileri teorik olarak incelenmiştir. Elektronik enerji spektrumu için yüksekfrekans Floquet yaklaşımı, optik katsayılar için kompakt yoğunluk-matrisi formalizmi kullanılmıştır. Elde edilen nümerik sonuçlar, sistemin optik özelliklerinin, uygun dış alan değerleri ve yapı parametrelerinin seçimiyle kontrol edilebileceğini göstermektedir.

Son yıllarda, nano-ölçekli sistemlerin kuantum kontrolü geniş bir ilgi konusu olmuştur [1]. Bu calışmaların temel motivasyonu, optoelektronik cihaz tasarımı için ayarlanmış elektronik ve magneto-optik düşük-boyutlu özelliklere sahip variiletken nanoyapıların kullanılabilirliğidir [2]. Özellikle, boyut ve şekillerindeki yüksek esneklik nedeniyle halka geometrili yapılar kuantum girişim etkilerinin çalışılması için uygun zemin oluşturmaktadır [3]. Öte istenilen çalışma frekansına vandan. sahip nanoyapıların elde edilmesi dış alanlar kullanılarak da mümkün olmaktadır[4]. Rezonant-olmayan, yoğun THz lazer radyasyonu, bu yapıların hapsetme potansiyelini modüle ederek, elektronik spektrumunu ve optik yanıtını önemli ölçüde değiştirmektedir[5].

Bu çalışmada, monokromatik dairesel polarize yüksek-frekanslı yoğun lazer alanı altındaki ikiboyutlu kuantum halka sisteminin elektronik ve optik özellikleri teorik olarak araştırılmıştır. Tanımlandığı düzleme dik düzgün bir dış manyetik alan altındaki kuantum halkanın geometrisi, parabolik hapsetme potansiyeli ve merkezine lokalize Gaussian pik ile betimlenmiştir. THz lazer radyasyonunun etkisi yüksek-frekans Floquet yaklaşımı altında, etkin kütle yaklaşımı kullanılarak ele alınmış, doğrusal ve doğrusal olmayan optik soğurma katsayıları ve bağıl kırılma indisi değişimleri kompakt yoğunluk-matrisi formalizminden hesaplanmıştır. Nümerik sonuçlar, düzgün dış manyetik alanın ve kuantum halkanın geometrik boyutunun sistemin optik cevabında önemli değişimlere neden olduğunu ortaya koymaktadır. Ayrıca, optik katsayıların rezonant pik konumlarının ve büyüklüklerinin yoğun lazer alanı ile kontrol edilebileceğini göstermektedir. Bu çalışmadan elde edilen sonuçların, kuantum halka sistemlerinin optik özelliklerinin anlaşılmasında katkı sağlaması beklenmektedir.



Şekil 1: Foton enerjisinin fonksiyonu olarak (a) optik soğurma katsayısının ve (b) bağıl kırılma indisi değişimlerinin lazer-giydirme parametresine bağlılığı.

- **1.** W. Xie, "Effect of an electric field on the nonlinear optical rectification of a quantum ring", Physica B, **443**, 60–62 (2014).
- C.M. Duque, R.E. Acosta, A.L. Morales, M.E. Mora-Ramos, J.H. Ojeda, E. Kasapoglu, C.A. Duque, "Optical coefficients in a semiconductor quantum ring: Electric field and donor impurity effects", Optical Materials 60, 148–158 (2016).
- **3.** K. Yun, W. Sheng, L. Xianli, "Electron energy states in a two-dimensional GaAs quantum ring with hydrogenic donor impurity in the presence of magnetic field", Journal of Semiconductors **36**, 032003 (2015).
- 4. D. Laroze, M. Barseghyan, A. Radu, A.A. Kirakosyan, "Laser driven impurity states in two-dimensional quantum dots and quantum rings", Physica B 501, 1-4 (2016).
- 5. M. G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, D. Laroze, "Laser driven intraband optical transitions in twodimensional quantum dots and quantum rings", Optics Communications 383, 571-576 (2017).

Dinamik spin orbit etkileşimi bazlı spin transistörü

Fahriye Nur Gürsoy

Sabancı Üniversitesi- Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, 34956 İstanbul

Spin tabanlı aygıtlar, enformasyon iletiminde elektronun yük özelliği yerine spin özelliğini kullanmayı amaçlamaktadır. Bu aygıtların geliştirilmesi, bilgi teknolojisinin geleceği için önemli bir adım olarak görülmektedir.

Biz bu projede zamana bağlı spin orbit etkileşimi içeren mezoskopik sistemlere odaklandık. İki boyutlu elektron gazı (2BEG) bazlı sistemlere uygulanan AC kapı gerilimi ile dinamik, yani zamana bağlı bir Rashba Spin orbit etkileşimi oluşturulabilir. Önceki çalışmalarda ayar dönüşümleri ve Onsager bağıntıları kullanılarak konuma bağlı Rashba etkileşiminin varlığında spin akımı ile çalışan bir transistörün elde edilebileceği teorik olarak gösterilmiştir [1]. Aynı ayar dönüşümü altında Rashba spin orbit etkileşiminin zamana bağlı seçilmesi ise spinmotif kuvveti oluşturulmasında kullanılabilir [2]. Bu iki konsepti birleştirerek bir yandan dinamik Rashba etkileşimi ile spin akımının oluşturulduğu, diğer yandan da homojen olmayan bir Rashba etkileşimi ile bu spin akımının tespit edildiği bir transistor tasarlamayı hedefliyoruz. Dinamik Rashba etkileşiminin zamanda periyodik olduğu durumda Floquet Hamiltonyen methodu [3,4] kullanarak dinamik iletim genliklerini nümerik olarak elde ettik. Bu iletim genliklerini kullanarak dinamik Rashba etkileşiminin oluşturduğu alternatif akımı hesapladık.

- 1. I. Adagideli, V. Lutsker, M. Scheid, Ph. Jacquod, and K. Richter, "Spin Transistor Action from Hidden Onsager Reciprocity", Physical Review Letters **108**, 236601 (2012).
- 2. C. Gorini, R. Raimondi, P. Schwab, "Onsager relations in a two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling", Phys. Rev. Lett. **109**, 246604 (2012).
- 3. H. Shirley, "Solution of the Schrodinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time", Phys. Rev. **138**, B979,1965.
- M. V. Moskalets, "Scattering Matrix Approach to Non-Stationary Quantum Transport", Imperial College Press, 2012.

Biyolojik Transistör Yapımı İçin Uygun Meyve DNA Yapılarının İzolasyonu ve Karakterizasyonu

¹Hatice Hatipoğlu, ¹Semra İde, ¹Damla Karaarslan

¹Hacettepe Üniversitesi, Fizik Mühendisliği, Beytepe, 06800, Ankara

Bu çalışmada farklı meyvelerden DNA'lar başarılı bir biçimde izole edilerek, elde edilen makromoleküler yapılar SAXS ve WAXS yöntemleri ile incelenmiştir. Portakal ve çilek meyvesi için SAXS bölgesinde yapılan incelemeler sonucunda DNA'nın kristal yapısı ile ilgili birim hücre parametreleri ile uyuşan profiller saptanmıştır. Nano ölçekte yapılan karşılaştırmalı incelemeler sonucunda meyvelerin atomik bağ serbestlikleri hakkında bilgiler de elde edilmiştir.

DNA transistör teknolojisi, DNA sekanslamanın düşük maliyetli ve etkili bir analizini sağlar. İnsan genetiği hakkında bilgi edinmek kadar, tüketilen gıdaların genetiği hakkında bilgi sahibi olmak da insan sağlığı için büyük önem arz etmektedir. [1]

Elma, portakal ve çilek meyvelerine uygun DNA İzolasyon protokolü uygulanarak DNA'lar elde edilerek mikroskop altında incelenmiştir. (Şekil 1). DNA'ların SAXS bölgelerindeki profilleri (Şekil 2) çıkarılarak, makromoleküler yapılar ve etkin yarıçapları hakkında bilgiler elde edilmiştir. (Tablo 1)

Tablo 1: Makromoleküler yapılar ve etkinyarıçapları.

	Hacimsel (3B)	Çubuk (1B)	Plaka (2B)
	R _g (Å)	R _g (Å)	$R_g(\text{\AA})$
Elma	349.2±1.1	242.9±1.3	138.9±3.2
Portakal	292.4±0.8	184.3±1.4	84.8±2.2
Çilek	220.7±0.5	152.3±0.3	90.3±0.3

Portakal ve çilek için SAXS profillerinde görülen piklerin DNA'nın b birim hücre parametresine uyduğu görülmüştür. Büyük etkin yarıçapların 1B-3B yapılara karşılık gelmesi ile atomik bağ serbestlikleri hakkında bilgi edinmek mümkün olmuştur.





Şekil 2: SAXS profilleri.

Elde edilen bilgiler sonucunda DNA yapıların uzunlukları, nano ölçekli şekillenimleri ve farklı amino asitler ile etkileşimleri incelenmiştir.

Teşekkür

Bu çalışmaTÜBİTAK tarafından (Proje No:117F204 kapsamında) desteklenmektedir.

Kaynakça

1. Binquan Luan, Gustavo Stolovitzkya, Glenn Martynaa, "Slowing and controlling the translocation of DNA in a solid-state nanopore", Nanoscale, 4, 1068-1077 (2012).

FARKLI ALOE VERA TÜRLERİNE AİT BİYOJELLER İLE İNCE FİLM TASARIMLARI VE NANOSKOPİK YAPILARININ İNCELENMESİ

Melike Belkıs Kaya¹, Damla Karaarslan¹, Semra İde¹

¹Hacettepe Üniversitesi- Fizik Mühendisliği Bölümü, Beytepe 06800- Ankara

Aleo vera bitkisi kabuğu içerisinde bulundurduğu jel fazın nemlendirici, onarıcı ve iyileştirici etkileri nedeniyle gerek kozmetik, gerek tıbbi açıdan uzun yıllardır kullanılmaktadır. Aloe vera bitkisinin binlerce çeşidi vardır ve bu çeşitler arasından Türkiye'de bulunan beş tanesi seçilerek, laboratuvar ortamında cam alttaş üzerine farklı aloe vera jellerinden organik ince filmler hazırlanmıştır. Kurumaya bırakılan bu filmler SAXS (Küçük Açıda X-Işını Saçılması) yöntemi ile incelenerek içerisindeki bir, iki ve üç boyutlu nano oluşumların boyutları İgor Pro.6.10. program ile belirlenerek, hesaplanarak, bu nano oluşumların birbirlerine göre dağımları ab initio yöntemi ile DAMMIN programında modellenmiştir.



Şekil 1. Farklı aloe vera bitkileri ve hazırlanmış örneklerin görünümü.



Şekil 2. Hazırlanmış örnekler için I(Arbitrary Unit)-q(Å⁻²) saçılma grafikleri.

Kaynakça

[1] T.Reynolds, A.C.Dweck, Aloe vera leaf gel: a review update, 1999.

Teşekkür: TÜBİTAK 214Z049 numaralı proje kapsamında çalışılan örümcek ipeği flament yapılarının kaplanmasında kullanılabilecek kaplama jeli araştırmalarının bir kısmı bu çalışmada sunulmaktadır.

GSM ve Wi-Fi Bantlarına Yönelik İki Katmanlı Metamalzeme Hasatlayıcı

Emrullah Karakaya¹, Fulya Bağcı¹, A. Egemen Yılmaz², Barış Akaoğlu¹

¹Ankara Üniversitesi- Fizik Mühendisliği Bölümü, 06100 Ankara ²Ankara Üniversitesi- Elektrik-Elektronik Mühendisliği Bölümü, 06830 Ankara

GSM ve Wi-Fi bantlarının içinde bulunan 0,9 GHz, 1,8 GHz, 2,6 GHz ve 5,8 GHz frekanslarında elektromanyetik hasatlama yapabilen iki katmanlı bir metamalzeme yapısı tasarlanmıştır. Tasarım ticari bir elektromanyetik benzetim ortamı aracılığıyla gerçekleştirilmiştir. Söz konusu frekanslara ait toplam ortalama verimliliğin %50'nin üzerinde olduğu tespit edilmiştir.

Metamalzemeler doğada gözlenmeyen bir takım ilginç elektromanyetik özellikler gösterebilen (negatif kırılma, tersine Doppler etkisi, vb.) dalga boyu altı periyodiklikte kompozit malzemelerdir. Metamalzemelerin önemli bir uygulaması rezonant soğuruculardır. soğurucularda Metamalzeme soğurmanın artırılması için, arka düzlem bakır ile kaplanarak iletim, ön düzlemdeki rezonatörler impedansı havanın impedansına eşit olacak sekilde ayarlanarak yansıma en aza indirilmektedir. Metamalzeme hasatlayıcılarda soğuruculardan farklı olarak elektromanyetik enerji dielektrik alttaş yerine bir devre elemanı üzerinden (direnç, diyot, vb.) soğurulmaktadır [1].

Bu çalışmada iki adet 3 mm kalınlıkta bakır kaplı PTFE (Teflon) alttaş kullanılarak, GSM ve Wi-Fi bantlarını kapsayan 0,9 GHz, 1,8 GHz, 2,6 GHz ve 5,8 GHz'e yönelik metamalzeme tabanlı bir elektromanyetik enerji hasatlayıcı tasarlanmıştır. Tasarlanan yapının üzerine gelen elektromanyetik dalganın enerjisinin dört frekans bandında ortalama olarak %50'si yapıya entegre edilen devre elemanları üzerinden depolanabilmektedir. Yapının tasarlanmasında CST Microwave Studio elektromanyetik yazılım programı kullanılmıştır. 0,9 GHz ve 1,8 GHz bantlarının hasatlanması ön katman tarafından; 2,6 GHz ve 5,8 GHz bantlarının hasatlanması arka katman tarafından gerçekleştirilmektedir. Dört bant üzerinden hasatlama yapabilen tasarımda ayrık halka rezonatörler kullanılmıştır. Yapı üzerinde daha az devre elemanı kullanılarak maliyeti azaltmak için söz konusu rezonatörler Şekil

1'de görüldüğü gibi ayrık bölgelerinden bir metalik halka ile birleştirilmiştir. Böylece 0,9 GHz, 1,8 GHz, 2,6 GHz ve 5,8 GHz frekanslarında hasatlama islemi için birim hücrede iki adet devre elmanı (direnç) kullanılmıştır. İlerleyen çalışmalarda dirençler yerine doğrultucu devre tasarımı yapılarak depo edilen AC güç DC güce çevrilecektir. Ankara Mikrodalga Üniversitesi Laboratuvarı'nda hasatlama verimliliği ölçümleri gerçekleştirilecektir. Sonuç olarak ortamda elektromanyetik dalgalardan bulunan faydalanılarak düşük güçte ama kullanılabilir elektrik enerjisi elde edilmesi amaçlanmaktadır.



Şekil 1: İki katmanlı olarak tasarlanan metamalzeme tabanlı elektromanyetik enerji hasatlayıcı birim hücresi.

Teşekkür: Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 116E188 no'lu proje ve Ankara Üniversitesi tarafından 17B0443006 no'lu proje ile desteklenmektedir. **Kaynakça**

1. M. Parstky, A. Basr, F. Benetti, M. Trapso, G. Norosk, "Nonlinear nonrelative example journal and shifts", Journal of Tranps Triology **393**, 1033–1042 (2009).

ZrIrX (X=Bi,Sb) yarı-Heusler Bileşiklerinin Çeşitli Fiziksel Özelliklerinin İlk-İlkeler Hesaplamaları ile Araştırılması

İsmail Küçükünlü¹*, Cansu Çoban²

¹Balıkesir Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 10145 Balıkesir ²Balıkesir Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, 10145, Balıkesir

Bu çalışmada kübik MgAgAs (C1_b) yapıdaki ZrIrX (X=Bi,Sb) bileşiklerinin yapısal, elastik, elektronik ve optik özellikleri Genelleştirilmiş Gradyen Yaklaşımı (GGA) altında, Perdew, Burke ve Ernzernhof'un geliştirdiği (PBE) fonksiyoneli ile Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)'ne [1, 2] dayanan ab-initio metodu ile hesaplandı. Bu çalışmada, öncelikle bileşiklerin optimize örgü sabiti (a), bulk modülü (B), bulk modülünün basınca göre türevi (B'), elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu (DOS) 0 GPa'da Murnaghan hal denklemine [3] fit edilerek bulundu. Elastik sabitler "zor-zorlanma" yöntemi [4] kullanılarak farklı basınç değerleri için hesaplandı ve bileşiklerin MgAgAs yapıda mekaniksel olarak kararlı olduğu görüldü. Buradan elde edilen veriler yardımı ile Zener anizotropi faktörü, Young modülü, Poisson oranı, v. s. gibi diğer elastik özellikler de basınç altında hesaplandı. Örgü sabitlerinin literatürdeki sonuçlarla uyumlu olduğu, elastik sabitlerin kararlılık kriterlerini sağladığı, ZrIrX (X=Bi,Sb)'nin dar bant aralıklı yarıiletkenler olduğu, bant aralığının basınçla arttığı ve optik özelliklerin basınçla önemli bir

değişim sergilemediği belirlendi.

Kaynakça

1. P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136 384 (1964).

2. W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A 140 1133 (1965).

3. F. D. Murnaghan, "The compressibility of media under extreme pressures", Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 50:244-247 (1944).

4. Y. Le Page, P. Saxe, Phys Rev B, 65(10) 104104 (2002).

Development of nanofilm layers and polymer electrolyte for electrochromic devices

J. E. Martinez Medina^{1, 2}, Zemzem Uyanik², Yesim Alduran², Ugur M. Ulutanir^{2,3}, M. Niyazi Kayi^{2,3}, Sehriban Zeybek², Yasemin Demirhan^{2,3}, Mehtap Ozdemir^{2,3}, Elif Sahin Isgin¹, Gulnur Aygun², Lutfi Ozvuzer^{2,3}

¹Dokuz Eylül Üniversitesi-Nanobilim ve Nanomühendislik Bölümü, 35390 Izmir, Turkey ²İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü-Fizik Bölümü, 35430 Izmir, Turkey ³Teknoma Technological Materials Ltd, IZTEKGEB, IZTECH Campus, Urla, Izmir, Turkey

Electrochromism is the property of certain materials which involves a change from a bleaching state to a colored state as effect either by the action of an electrical voltage or current. In this work, a multilayer electrochromic device (ECD) will be assembled by DC magnetron sputtering [1], where indium tin oxide (ITO) film layers, due to both high electrical conductivity and high transparency in the visible spectrum (~85%) will be used as electrodes. Since tungsten oxide (WO₃) layers serve as cathodic coloring under charge extraction, they are complementary with each other in the ECD, following the order ITO/WO₃/Electrolyte/NiO_x/ITO/Glass[2]. Then by applying the potential on the ITO layers in the ECD, a transition from a transparent state to the colored state will be reached where its reversible color process and its optical transmittance in the visible region will be studied. However to ensure a good performance of the ECD, a polymer electrolyte has to be developed and characterized by IR, NMR, UV-Vis-NIR techniques.

Electrochromic devices (ECD) are formed by materials that are capable of continuously and reversibly modulating their color, usually from a bleaching state to a colored one, with the application of a small electric current (~1 V). The electric current induces in them a reaction of reduction (gain of electrons) or oxidation (loss of electrons) that modifies the range of energies in which the compound interacts with visible light. For this reason, such materials are called electrochromic and have a wide range of applications in technology, mainly for intelligent windows.

Figure 1: Transition from a bleaching (transparent) state to a colored state (blue) in a ECD.

In this work will be studied the configuration $ITO/WO_3/Electrolyte/NiO_x/ITO/Glass$ [2] which is supposed to be a great performans against another configurations by using the same layers.

Then the ECD will be developed by DC magnetron sputtering technique [1] at room temperature and high vacuum conditions which will allow us to carry out the deposition of the different films on a glass substrate of 15x15 cm² where also a polymer electrolyte will be developed to ensure a good performance of the EDC. Then the coloring/bleaching process and the optical transmission spectra in the visible region will be determined.

Figure 2: *Five-layer structure for a typical ECD*. **Kaynakça**

- H. Koseoglu, F. Turkoglu, M. Kurt, M. D. Yaman, F. G. Akca, G. Aygun, L. Ozyuzer, "Improvement of optical and electrical properties of ITO thin films by electroannealing", Vacuum 120, 8-13 (2015).
- 2. M. Wang, X. Diao, G. Dong, Y. He, Q. Liu, "Optical, electrical, and electrochemical properties of indium tin oxide thin films studied in different layer-structures and their corresponding inorganic all-thin-film solid-

state electrochromic devices", Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films 35, 021512 (2017).





Nanoscale Direct Writing by Near-Field Electrospinning Method

Aileen Noori¹, Mehtap Özdemir^{1, 2}, Lütfi Özyüzer^{1, 2}, Gülnür Aygün¹, Özge Sağlam³

¹ Department of Physics, İzmir Institute of Technology, İzmir, TR35430, Turkey ² Teknoma Technological Materials Ltd., IYTE Campus, İzmir, TR35430, Turkey ³ Izmir University of Economics, Faculty of Engineering, Sakarya Cad. 156, Izmir

In this project, a new type of low-cost nano/micro manufacturing technique will be implemented which does not require any advanced facilities or any photo mask as in photolithography technique. The nanofibers produced by the near-field electrospinning (NFES) method will be directly plotted on the substrate for nano size patterning. The nanofibers produced at a diameter of about 300 nm will be combined with a 200 nm precision platform and platform guiding software. Thus, while the structure of the fibers is kept under control by NFES method, the positions of the nanofibers will be precisely adjusted on the collector.

Nanofibers are used as building blocks to enhance the performance of advanced technological devices due to their intriguing physical and chemical properties. Despite numerous nanofiber production methods, the electrospining method is a preferred one due to the continuous production of a wide variety of polymers and high-yield fabrication of nanofibers. In this project, near-field electrospinning method will be used not only to produce nanofibers but also to pattern substrates using nanofibers.

Firstly, the electrospinning system will be engaged with a platform, its platform guiding software and a camera. Then, polyethylene oxide (PEO) will be prepared in different concentrations and viscosity tests of the polymer solutions with a rheometer will be performed. Afterwards, the appropriate values of parameters will be investigated by electrospinning directly on the substrate. The variables worked on are the applied voltage, (ii) the distance between the needle and the collector, (iii) the velocity of the platform, (iv) the concentration and viscosity of the polymer solution, (v) injector pump velocity (v) the temperature of the substrate. Finally, the patterns from the nanofibers using optimum values of variables will be produced with the following procedure. The glass substrate will be coated by magnetic sputtering. Then, the fibers will be directly written on the substrate and the uncovered areas will be etched by reactive ion etching. Finally, the nanofibers will be stripped off and electrode arrays will be obtained. The morphology of electrode arrays will be observed by atomic force This work is supported by the Scientific and Technological Research Council of Turkey (Project no. 217M144). References

1. M. Ozdemir, E. Celik, U. Cocen, "Effect of viscosity on the production of Alumina Borate nanofibers via electrsopinning", Journal of Materials and Technology 47

6, 735–738.(2013)

2. Z.Huanga, Y. Zhangb, M. Kotakic, S. Ramakrishna, "A review on polymer nanofibers by electrospinning and their applications in nanocomposites", Journal of Composites Science and Technology 63 2223–2253. (2003)

microscopy and structure of nanofibers will be examined by the scanning electron microscopy (SEM). The preliminary studies for the nanofiber production shown in Figure 1 and 2, were carried out, but the diameters of the nanofibers were not produced in a consistent manner. Therefore, it is important to install the set-up mentioned above and systematically study the values parameters to perform lithographic patterning.



Figure 1. Nanofibers formed by PVP at 10kV.



Figure 2. SEM images of nanofibers formed by PEO at 10kV

INVESTIGATION OF DEPOSITION TIME EFFECT OF CdS BUFFER LAYER ON THE CONVERSION EFFICIENCY OF MAGNETRON SPUTTERED Cu₂ZnSnS₄ THIN FILM SOLAR CELLS

Ece Meric^{1,*}, A. Cantas¹, F. G. Akca¹, F. Turkoglu¹, D. G. Buldu¹, L. Ozyuzer^{1,2}, M. Ozdemir^{1,2}, G. Aygun¹

¹Izmir Institute of Technology, Department of Physics, 35430 Urla ²Teknoma Technological Materials Inc., Izmir Technology Development Zone, 35430 Urla

The aim of this work is to understand effect of deposition time of CdS buffer layer on CZTS solar cell efficiency. Two steps process were used to fabricate CZTS absorber layers. Firstly, CZTS metallic precursors were deposited on molybdenum (Mo) coated soda lime glasses (SLG) via DC magnetron sputtering method. This method was allowed to control thickness of the layers [1,2]. Secondly, all precursors were sulfurized inside a graphite box using sulfur powder under Ar gas atmosphere. CdS buffer layer deposited on CZTS absorber layer using chemical bath deposition (CBD) method at 85°C with variety of times (60, 75 and 90 min) in order to form p-n junction. Then, ZnO and Al dopped ZnO (AZO) layers were deposited on CdS to complete solar cell device.

 Cu_2ZnSnS_4 (CZTS) as an absorber layer for thin film solar cells is a good candidate due to its low cost and earth abundant contrary to Cu(In,Ge)Se₂ (CIGS). CZTS has a direct bandgap of 1.4-1.6 eV and a large optical absorption coefficient of about 10⁴ cm⁻¹. Therefore, it is an ideal absorber layer for photovoltaic devices [3]. Besides, CdS is one of the most promising buffer layer for solar cell applications because of its n-type semiconductor characteristic, high band gap energy (in the bulk form $E_g=2.42 \text{ eV}$) for thin film solar cells [4] and well lattice match with the heterojunction interface. Bulk form of CdS has refractive index of 2.52 at 600 nm wavelength which makes this material suitable for solar cell applications [5]. Although other techniques have been used for the deposition of CdS, chemical bath deposition (CBD) is the best to obtain uniform, adherent, transparent and stoichiometric CdS thin films [6].

Structural characterization of samples was done by using Raman Spectroscopy, XRD and EDX analysis. Furthermore, the surface morphology was determined by SEM analysis in order to investigate uniformity. J-V curves were obtained for SLG/Mo/CZTS/CdS/ZnO/AZO structure. The solar cell photovoltaic characteristic of solar cells were studied and dependence on CdS deposition time were found. The highest efficiency was obtained for the lowest deposition time of CdS. Therefore, buffer layer thickness plays a crucial role for solar cell efficiency.



* This research is partially supported by TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) project number 114F341

REFERENCES

1. S. Yazici, M. A. Olgar, F. G. Akca, M. Kurt, G. Aygun, E. Tarhan, E. Yanmaz, and L. Ozyuzer, "Growth of Cu₂ZnSnS₄ absorber layer on flexible metallic substrate for thin film solar cell applications", Thin Solid Films 589, 563, (2016).

- **2.** D. G. Buldu, A. Cantas, F. Turkoglu, F. G. Akca, E. Meric, M. Ozdemir, E. Tarhan, L. Ozyuzer, G. Aygun "Influence of sulfurization temperature on Cu₂ZnSnS₄ absorber layer on flexible titanium substrates for thin film solar cells" Physica Scripta, 93, 024002 (2017).
- **3.** K. Ito, T. Nakazawa "Electrical and optical properties of stannite-type quaternary semiconductor thin films" Japanese Journal of Applied Physics, 27, 2094 (1988).
- **4.** N.S. Das, P.K. Gosh, M.K. Mitra, K.K. Chattopadhyay "Effect of film thickness on the energy band gap of nanocrystalline CdS thin films analyzed by spectroscopic ellipsometry" Physica E, 42, 8, 2097 (2010).
- 5. F. Lisco, P.M. Kaminski, A. Abbas, J.W. Bowers, G. Claudio, M. Losurdo, J.M. Walls "High rate deposition of thin film cadmium sulphide by pulsed direct current magnetron sputtering" Thin Solid Films, 574, 43 (2015).
- **6.** W.D. Park "Optical constants and dispersion parameters of CdS thin film prepared by chemical bath deposition" Transactions on Electrical and Electronic Materials, 13, 196 (2016).

CaGe₃ Bileşiğinin Mekanik ve Elektronik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi

Seda Özdemir, Havva Özışık, Hacı Özışık, Mehtap Altay, Engin Deligöz

Aksaray Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 68000, Aksaray

Bu çalışmada tetragonal yapıda (I4/mmm, No. 139) kristalize olduğu bilinen CaGe₃ bileşiğinin yapısal, mekanik ve elektronik özellikleri VASP paket programında Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kullanılarak hesaplandı. Hesaplamalarda elektron iyon etkileşimi için PAW düzlem dalga metodu ve elektron-elektron etkileşimi için ise Perdew-Burke- Ernzerhof (PBE) değiş-tokuş ve korelasyon terimi temel alındı. Geometrik optimizasyon sonucu elde edilen örgü parametrelerinin deneysel verilerle uyumlu olduğu bulundu. Elektronik band yapısı ve durum yoğunluğu (DOS) hesaplanarak yorumlandı. Elastik sabitler "zor-zorlama" yöntemi kullanılarak hesaplandı ve bileşiğin mekaniksel olarak kararlı olduğu bulundu. Buradan elde edilen veriler yardımı ile polikristal mekanik özellikler hesaplandı.

Son yıllarda Silisyum ve germanyum elementlerinin metallerle yaptığı bileşikler üzerine, güneş hücreleri, termoelektrik, süperiletkenlik ve optoelektronik gibi birçok teknolojik uygulama için kapsamlı çalışmalar yapılmıştır [1]. Fakat bildiğimiz kadarıyla incelediğimiz CaGe₃ bileşiğiyle ilgili olan tek çalışma Schnelle ve arkadaşları tarafından yapılandır ve bileşiğin tetragonal yapıda (uzay grup no:139, I4/mmm) sentezlenerek süperiletkenlik özellikleri incelenmiştir [2].

Hesaplamalarda 8x8x8 Monkhorst-Pack k-grid ve 400 eV kesilim enerjisi kullanıldı. Hesaplanan örgü parametreleri, taban durum enerjisi ve hacmi mevcut deneysel verilerle birlikte Tablo 1'de listelendi.



Şekil 1: Tetragonal GaGe3 kristal görünümü

CaGe₃ kristalinin hesaplanan temel durum parametreleri kullanılarak 1. Brillouin bölgesi yüksek simetri noktaları boyunca elektronik band yapısı elde edildi. Metalik özellik sergilediği görüldü.

Tablo 1: CaGe₃ için hesaplanan temel durum örgü sabitleri (a, c; Å), enerji (E₀, eV/f.u.) ve hacim (V₀, Å³/f.u.) değerleri

a	с	E ₀	Vo	Kaynak
7.7260	11.2960	-16.597	84.28	Bizde
7.6920	11.3314		83.80	Deney ^[2]

Elastik sabitleri "zor-zorlama" yöntemi kullanılarak hesaplandı [3] ve Tablo 2'de verildi. Malzemenin incelenen yapıda mekaniksel olarak kararlı olduğu görüldü. Elde edilen elastik sabitleri yardımı ile polikristal elastik modülleri belirlendi ve Tablo 3^{te} verildi.

Tablo 2: $CaGe_3$ için hesaplanan elastik sabitleri (C_{ij} , GPa)

C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₃₃	C ₄₄	C ₆₆
108.3	17.9	30.5	92.6	29.6	26.7

Tablo 3: CaGe₃ kristali için hesaplanan Bulk, Kayma, Young modülleri (B, G, E; GPa), Poisson oranı ve Vicker sertlik (Hv, GPa) değerleri

	<u> </u>			
В	G	Е	υ	$H_{\rm v}$
51.9	32.0	79.7	0.244	5.7

Kaynakça

- **1.** M. Kumar, N. Umezawa, M. Imai, "Structural, electronic and optical characteristics of SrGe₂ and BaGe₂: A combined experimental and computational study", Journal of Alloys and Compounds, **630**, 126-132 (2015).
- 2. W. Schnelle, A. Ormeci, A. Wosylus, K. Meier, Y. Grin, U. Schwarz, "Dumbells of Five-connected Ge atoms and Superconductivity in CaGe₃", Inorg. Chem. 51, 5509-5511 (2012).
- **3.** Y. Le Page and P. Saxe, "Symmetry-general least-squares extraction of elastic data for strained materials from ab initio calculations of stress", Phys. Rev. B **65**, 104104 (2002).

The effect of nanometer thin film metal-metal combination in quantum-step lasers on terahertzapplications with thermal and PVD deposition

S. Rouhi¹, M. Ozdemir^{1,2}, M.Ekmekcioglu¹, E. Meric¹, Y. Alduran¹, L. Ozyuzer^{1,2}, A. Szerling³, K. Kosiel³, J.L.Reno⁴, 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

³Department of Micro- and Nanotechnology of Wide Bandgap Semiconductors, Institute of Electron Technology, Warsaw,

POLAND

⁴Sandia National Laboratories, Department 1123, MS 0601, Albuquerque, NM 87185-0601, USA

Unlike typical interband semiconductor lasers that emit electromagnetic radiation through the recombination of electron-hole pairs across the material band gap, QCLs are unipolar and laser emission is achieved through the use of intersubband transitions in a repeated stack of semiconductor multiple quantum well heterostructures, an idea first proposed in the paper "Possibility of amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice. Additionally, in semiconductor laser diodes, electrons and holes are annihilated after recombining across the band gap and can play no further part in photon generation[1].

One of the purposes of this project is to produce THz QCLs that can operate at temperatures close to room temperature. Because the highest working temperature for QCLs today is around 200 K, the need for cryogenic cooling prevents the widespread use of QCLs. For this reason, using a thermoelectric cooler, THz QCLs capable of operating at controllable temperatures are needed.

The GaAs used as a pad must be thin to prevent the increase in temperature in the structure when current is applied during the operation of QCLs. For this reason, prior to the start of Cu-Cu adhesion studies, a commercially available standard thickness of 625 μ m thick receiver washers was diluted to 200 μ m thickness. 8 mm x 8 mm interlaced GaAs receiver plates were attached to the metal base using wax for sanding and polishing. The bonded GaAs receiver washers were sanded with 2500 SiC sandpaper and polished with 9 - 3 - 0.25 μ m Al2O3 solutions, respectively[2].



Table 1: Schematic diagram for metal-metal bonding

Refrencess:

- Faist, Jerome; Federico Capasso; Deborah L. Sivco; Carlo Sirtori; Albert L. Hutchinson; Alfred Y. Cho (April 1994). Science. 264 (5158): 553–556. Bibcode:1994Sci...264..553F
- 2. Szymański, M., Szerling, A., Kosiel, K. Ve Płuska, M. 2016. J. Phys. D: Appl. Phys. 49, 275102.
- Szerling, A., Kosiel, K. Szymańskib, M., Wasilewskic, Z., Gołaszewskaa, K., Łaszcza, A., Płuskaa, M., Trajnerowicza, A., Sakowicza, M., Walczakowskid, M., Pałkad, N. ve Jakiełae, R. Piotrowskaa, A. 2010. Proc. of SPIE Vol. 9199 919903-2

Yüksek Sıcaklık Basınç Reaktör Sistemi Tasarımı ve İmalatı

Elements	Thicknesses @wg cm(-1)
Cu	44.87
Ag	47.49
Au	48.69
Ni	54.43
Pt	57.92
Та	66.08
Ti	78.10

Figure 1:

Waveguide losses prepared for different metals

After thinning of the GaAs susceptor with a thickness of 200 μ m, thinning of the Ta thin film with a thickness of 10 nm and then with a thin film of Cu thin film with a thickness of 500 nm were carried out on the GaAs layer using the growth parameters described in detail in the section of the Ta growth experiments and the Cu growth experiments in the 1 st development. The surface characterization of the obtained films was investigated using AFM and mean rms values were found to understand the surface roughness [3].

*This research is supported by TUBITAK (Scientific and Technical Research Council of Turkey) project number 215E113.

Yusuf Samancıoğlu^{1*}, Ç. Elif Demirci², Selçuk Aktürk²

¹Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Optisyenlik Programı, 48700, Muğla, Marmaris ²Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Fizik Bölüm, 48000, Muğla

* ysamancioglu@mu.edu.tr

Günümüz teknolojilerinin mikro boyuttan, nano boyuta doğru ilerlediği ve yeni malzemelerin daha efektif kullanılabilmesi için etki yüzeyinin arttırılması üzerine çalışmalar yürütülmektedir. Laboratuvar şartlarında geliştirilen yeni malzemelerin hem etkin olarak kullanılmasını hem de nano boyuta indirgenebilmesi için yüksek sıcaklık ve basınç reaktörü (otoklav) ile yapılan çalışmalar literatürde öne çıkmaktadır. Tasarlanan yüksek sıcaklık basınç reaktörü oda sıcaklığından 300 derece santigrat sıcaklığa, 15-20 bar basınca dayanıklı çelik malzemeden ve teflon malzemeden üretilmiştir. Ayrıca reaktör üzerinde sisteme gaz giriş çıkışını sağlayacak bağlantılar yer almaktadır. Böylelikle kullanıcılar reaksiyonlarını durdurmadan gaz ilavesi yapabilecek ya da ortamdan analiz amaçlı gaz numunesi alabileceklerdir.

Prototip olarak tasarımı tamamlanan yüksek sıcaklık basınç reaktörü; nano boyutta malzemelerin üretimini sağlamada, bilim insanlarının çalışmalarında ve maden, boya, kağıt, tekstil v.b. sektörlerde kullanım potansiyeline sahiptir. Bu özelliklerin yanı sıra dışarıdan mantolama ile ısı kaybı en aza indirilebilmektedir. Tasarıma dahil edilen ekstra bağlantılarla ortamdaki gaz miktarı ve/veya basınç miktarlarının ayarlanabilir olmasıyla malzeme boyutunun kontrolünü kendi elimizde tutmamıza yardımcı olmaktadır. Tasarım özgürlüğünün kullanıcının elinde olması, istenen ebatta ve yerli sermaye kullanılarak üretilebilir olması en büyük avantajıdır.

La_{1-x}A_xMnO₃ (A= Ca, Na) Perovskit Manganit Bileşiklerinde Sinterleme Süresinin Curie Sıcaklığı Üzerine Etkisi

Yusuf Samancıoğlu^{1*}

¹Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Optisyenlik Programı, 48700, Muğla, Marmaris *ysamancioglu@mu.edu.tr

ABO3 formundaki perovskit manganit bileşikler, (katkılama ideal durumda vapılmamıs) iken antiferromanyetik ve yalıtkan özellik gösterirken Abölgesine yapılan +1 ve/veya +2 değerlikli element katkısı ile yeni oluşan perovskit yapı ferromanyetik ve iletken özellik kazanmaktadır. Perovskit manganit yapılarda elektriksel ve manyetik özelliklerin katkılamalar ile değiştirilebilir olması ve yığın olarak kolayca üretilebilir olmasının yanında, gösterdikleri yüksek MKE nedeniyle perovskit yapıların soğutucu elemanı olarak kullanımı üzerine son yıllarda yoğun çalışmalar yapılmaktadır. Bu çalışmada ideal durumda yalıtkan ve antiferromanyetik özellik gösteren LaMnO₃ bileşiğinde La⁺³ eksilterek yerine aynı oranda Ca⁺² ve/veya Na⁺¹ katkılanmıştır. Ca⁺² ve Na⁺¹ katkılanan La_{1-x}A_xMnO₃ bileşikleri sol-jel metodu kullanılarak üretilmiştir. Sıcaklığa bağlı yapılan mıknatıslanma ölçümlerinden Curie geçiş sıcaklıkları (T_C) tespit edilmiştir.

 La_{0.60}Ca_{0.30}Na_{0.10}MnO₃, La_{0.60}Ca_{0.25}Na_{0.15}MnO₃ bileşikleri sırasıyla sinterleme sıcaklığı 1000°C'de sabit tutularak 24 saat ve 72 saat olmak üzere ısıl işleme tabi tutulmuştur. Tablo 1'de katkılamalara göre sinterleme süresinin Curie sıcaklığına etkisi yer almaktadır.

Tablo 1: $LaAMnO_3$ perovskit manganit bileşlerinin ısıl işlem süresine bağlı T_C değerleri

Bileşikler	24 saat	72 saat
	T _C (K)	T _C (K)
$La_{0.60}Ca_{0.40}MnO_{3}$	249	246
La _{0.65} Ca _{0.35} MnO ₃	248	248
La0.60Ca0.35Na0.05MnO3	249	251
La0.60Ca0.30Na0.10MnO3	244	243
La0.60Ca0.25Na0.15MnO3	245	245

Elektrokalorik Soğutma Uygulamaları için BaTiO₃ temelli ferroelektrik malzemeler

Keriman Şanlı, Umut Adem*

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

Bu çalışmada, Ba_{0.8}Sr_{0.2}Ti_{1-x}Zr_xO₃ ($0 \le x \le 0.1$) ferroelektrik sistemi için, kompozisyona bağlı elektrokalorik sıcaklık değişimi değerleri hesaplanarak, elektrokalorik etkinin farklı mekanizmalarda nasıl değiştiği araştırılmaktadır. Seramik malzemeler katı-hal sentezi yönetimiyle üretilmiş, kristal yapı değişiklikleri XRD deneyleriyle belirlenmiş, dielektrik ölçümlerle faz geçiş sıcaklıklarına karar verilmiş ve faz diyagramı doğrulanmıştır. Sıcaklığa bağlı elektriksel kutuplanma ölçümleri ve Maxwell denklemleri kullanılarak, tüm kompozisyonlar için elektrokalorik sıcaklık değişim değerleri (ΔT) elde edilmiştir.

Elektrokalorik etki (EKE), dielektrik malzemelerde elektrik alan uygulanarak, malzemenin dipollerinin düzenlenmesinden ya da rastgeleleştirilmesinden kaynaklanan entropi değişiminin, adiyabatik ortamda malzemenin sıcaklığının artmasıyla veya azalmasıyla dengelenmesi olarak tanımlanabilir.

Elektrokalorik etki üzerine yapılan çalışmaların ana motivasyonu, gaz sıkıştırmaya dayalı soğutma teknolojisine alternatif olarak daha verimli ve çevre dostu bir sisteme zemin hazırlamaktır. EKE'nin şu ana kadar soğutma uygulamalarında kullanılamamasının nedeni, bu malzemelerdeki elektrik alan altında elde edilen sıcaklık değişiminin henüz istenilen değere ulaşamamış olmasıdır.

Ferroelektrik malzemelerde, ferrolektrikparaelektrik faz geçiş sıcaklığı (Curie sıcaklığı) civarında, elektriksel dipollerin elektrik alana hassasiyeti yüksek olduğundan, daha yüksek sıcaklık değişimi görülmektedir[1]. Ferroelektrik malzemelerde meydana gelen birinci dereceden faz geçişi gösteren kompozisyonlarda, faz geçişi esnasında polarizasvondaki keskin değişim vüksek elektrokalorik etkiye neden olmaktadır[2]. Fakat bu yüksek etki birinci dereceden faz geçişinin doğası gereği dar bir sıcaklık aralığında gerçekleşmektedir. BaTiO₃ bazlı ferroelektriklerde farklı sıcaklıklarda bulunan farklı ferroelektrik fazların faz geçiş sıcaklıkları, katkılama stratejileriyle birbirlerine yaklaştırılabilir ve böylece daha geniş bir sıcaklık aralığında göreceli olarak yüksek AT görülebilir. Bu çalışmada, perovskit yapının A ve B pozisyonlarına, Sr ve Zr katkısıyla, ferroelektrik faz geçiş sıcaklıkları birbirlerine ve oda sıcaklığına yaklaştırılmıştır. Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO₃ (x=0) kompozisyonu için, elektrokalorik sıcaklık değişimi Curie sıcaklığı civarında, 13 kV cm⁻¹ elektriksel alan altında 0.57 K olarak hesaplanmıştır (Şekil 1). Düşük Zr katkısı için (x=0.03 ve 0.05) bu değer fazla azalmamış fakat daha geniş bir sıcaklık aralığına yayılmış; x=0.07 kompozisyonunda ise faz geçiş sıcaklıkları üst üste çakışmasına rağmen, ΔT 'nin oldukça azaldığı gözlenmiştir.



Şekil 1: Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO₃'nin sıcaklığa bağlı elektrokalorik sıcaklık değişimi (Δ T). İçresimde sıcaklığa bağlı histerisis eğrilerinden elde edilen elektriksel kutuplanma sıcaklık grafiği gösterilmiştir.

Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 315M241 no'lu proje kapsamında desteklenmektedir.

Kaynakça

1. M. Valant, "Electrocaloric materials for future solid-state refrigeration Technologies", Progress in Materials Science **57**, 980–100 (2012).

2. B. Asbani, Z.Kutnjak, and M. El Marssi, 'Lead free Ba_{0.8}Ca_{0.2}(Zr_xTi_{1-x})O₃ ceramics with large electrocaloric effect', APL Materials, 106, 042902 (2015).

ITO-Based Double Glass Capacitive Touch Sensing

Ugur M. Ulutanir^{1,2}, M. Niyazi Kayi^{1,2}, Sehriban Zeybek², Yasemin Demirhan^{1,2}, Zemzem Uyanik¹, Yesim Alduran¹, J. E. Martinez Medina¹, Mehtap Ozdemir^{1,2}, Gulnur Aygun¹, Lutfi Ozyuzer^{1,2}

¹Department of Physics, İzmir Institute of Technology, İzmir, TR35430, Turkey ²Teknoma Technological Materials Ltd., IYTE Campus, İzmir, TR35430, Turkey

Touch sensitive technologies are one of the hot topics of nowadays. They take a very important place in our lives. Even in simplest electronical devices we are using touch sensitive technologies. In touch sensing screens, basic principle is to create a capacitance between your finger and the screen.

In this work, ITO is grown on the surface of the soda-lime glass (SLG) using magnetron sputtering technique. A grid pattern is created with grown ITO which is consisting of "driving" and "sensing" hair-thin lines. Driving lines are longitudinal lines and they provide constant electric current. Sensing lines are horizontal lines and they detect the electric current.

Part	Dielectric Thickness (in mm)	Capacitance value (Avg. in pF)
Тор	2.48	16.3
Middle (air)	2.46	9.6
Bottom	2.45	19.9

 Table 1: Capacitance and thickness values of ITO Coated Glass.

These lines are intersecting, and they create a grid-shaped pattern. Their intersection points are serving as electrodes and when you touch to screen, it is sensing that, then your finger forms a capacitor and with an electrode on the screen and the resulting capacitance shows where you touch onto the screen.



Figure 1: *ITO Coated Glass* (Which is grown in our laboratory)

Indium Tin Oxide (ITO) is a conductive and transparent material. ITO coated glasses have resistivity less than 1.3×10^{-4} ohm.cm and they have light transmittance more than 85% in UV visible spectroscopy [1,2]. In our samples, ITO thin films fabricated with thickness of 230 nm on 10 cm x 7 cm SLG substrate via magnetron sputtering technique. Copper (Cu) photoresist masks used to create unique patterns with photolithography technique in order to prepare the most effective and distinctive sensors. The features of our samples will be tested by MSP-CAPT-FR2633 MSP CapTIvate Driver Card which was bought from Texas Instruments.

Deposited of ITO Thin Films By Large Area DC Magnetron Sputtering on Glass

Z. Uyanık¹, Y. Demirhan¹, S. Rouhi¹, Y. Alduran^{1,,2}, Y. E. Martinez Medina^{1,,3}, M. Ozdemir^{1,,4} L. Ozyuzer¹, G. Aygun¹

¹Izmir Institude of Technology, Department of Physics, 35430,Urla, Izmir, TURKEY ²Izmir Institude of Technology, Department of Biotechnology, Urla, 35430, Izmir, TURKEY ³Dokuz Eylül University, Deparrment of Nanotechnology, Buca, 35390, Izmir, TURKEY ⁴Teknoma Technological Materials Inc., Izmir Technology Development Zone, Urla, 35430, Izmir, TURKEY

Indium tin oxide (ITO) occupies a critical key position in the advancement of transparent conductive oxide (TCO) by virtue of optical dispersion properties in the visible region of the e-m spectrum and low resistivity. Structural, electrical and optical characteristics of ITO allows it to be useful to a wide range of nano-scale technologies such as OLEDs, LCDs, Solar Cells, Plasma display panels, transparent heat reflacting and electrochromic windows [1-2]. The research aims to grow ITO thin film with a complete electrical and optical properties on a large area substrates. The growth of high quality ITO thin film on small area such as microscope glass (2x2 cm2) is controlled by DC Magnetron Sputtering [3-4].

We investigated the effects of vaccuum annealing on structural, electrical and optical features of large area coated ITO thin films. The growth was actualized on 2, 3 and 4 mm thick and 90x60 cm² window glasses used as magnetron sputtering source, annealing process aplied to glasses which is obtained after coating with different thicknesses. Annealing was done in a chamber pumped with turbo moleculer pump (TMP) down to 2.0×10^{-6} Torr where the sample was heated. It remains at the set temperature for exactly one hour. We have received the crystallizations of ITO film in the (222)plane with increasing annealing temperature.



Şekil 2: ITO Coated Glasses



Şekil 1: Transmission vs Wavelength of ITO glass

Samples transmittance was measured by a spectroscopic ellipsometer in the range of 280 to nm and observed transmittance was 850 approximately %85 in the visible region. High transmittance due to large bandgap of ITO about 3.70 eV. Additionally, using van der Pauw method to measure the tempereture dependent resistivity of the photolithographically patterned films. The measurements were done between 77-300 K range. Our results show that the resistivity was better than ohm.cm at room temperature. The 2.8×10^4 resistivity vs temperature behaviour of the films was similar to that of metals i.e. the resistivity increased with the increasing temperature [5].

References:

- 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.** G. Brauer, Surface and Coating Technology **112**, 358 (1999)
- O. Tuna, Y. Selamet, G. Aygun, F. Turkoğlu, L.Ozyuzer, Journal of Optoelectronics and Advanced Meterials Symposia 1, 404-407 (2009)
- 5. O. Tuna, Y. Selamet, G. Aygun, L.Ozyuzer, Journal of Physics D: Apply. Phys. 43, 055402 (2010)

Altın (111) Yüzeyi Üzerinde Fonksiyonlandırılmış Karborantiyoller

Merve Yortanlı^a, Ersen Mete^a, Mehmet Fatih Danışman^b

^aBalıkesir Üniversitesi, Fizik Bölümü, 10145 Balıkesir ^bOrta Doğu Teknik Üniversitesi, Kimya Bölümü, 06800, Ankara

Altın (111) yüzeyi üzerinde fonksiyonlandırılmış izole karborantiyol (dikarbaklosododekarboran) türevlerinin en kararlı konfigürasyonları ve bağlanma enerjileri dispersif düzeltilmiş yoğunluk fonksiyoneli teorisi (vdW-DFT) ile incelendi. COOH, COH, F, Cl fonksiyonelli karborantiyol izomerlerinin tutunduğu Au(111) yüzeyi, daha önceki deneysel çalışmalarda gözlenmiş birim hücrelerdir.

Tiyol (R-S-H) bazlı kendiliğinden düzenlenen tek tabakalar (SAM), moleküler elektronik, biyosensör ve nanoteknolojik çalışmalar başta olmak üzere birçok alanda uygulamaya sahip sistemlerdir. [1] Özellikle organik elektronik aygıtların tasarımlarında kullanılan metal elektrotların iş fonksiyonu, bu elektrotlar üzerine tutunan farklı tiyol SAMlerin dipol momentlerinin ayarlanmasıyla değişebilmektedir.

Dikarbakloso-dodekaboran tivoller $(C_2B_{10}H_{12}S_{-})$ kısaca karborantiyol ya da CT), karbon ve sülfür atomlarının konumları ile oynayarak molekülün dipol momentini değiştirmeleri ve geometride herhangi bir bozulma göstermemeleri nedeniyle bu için oldukça amaç uygun bileşiklerdir. Karborantiyollerin kimyasal stabilizasyonu ve neredeyse küresel geometride olması göz önüne alındığında, tiyol SAMlerin temel özelliklerini incelemek birçok farklı uygulamada ve kullanılabilecek filmleri hazırlamak için karborantiyolleri moleküller haline benzersiz getirmektedir.

Dispersif kuvvetlerin etkisi, molekül-molekül ve molekül-yüzey gibi sistemlerde oldukça önemlidir. Yapılan hesaplamalarda bu kuvvetlerin varlığı SCAN+rVV10 fonksiyoneli ile sağlanmıştır. [2] SCAN+rVV10, sadece moleküler sistemler için değil aynı zamanda katı ve katmanlı yapılar için de mükemmel geometrik ve enerjitik sonuçlar vermektedir. Bu çalışmada farklı fonksiyonel gruplar (COOH, COH, F, Cl) içeren CT türevlerinin Au (111) yüzeyi üzerine oluşturduğu filmlerin elektronik ve kristal yapıları vdW düzeltilmiş yoğunluk fonksiyoneli teorisi hesaplamaları ile inceledik. Ayrıca moleküllerin yüzey üzerine bağlanma enerjileri, filmlerin yüzey geometrileri ve uzun menzilli düzenlilik parametreleri tartışılarak daha önceki deneysel çalışmalarla kıyaslandı.



Şekil 1. vdW-DFT metodu ile optimize edilen gaz fazında 1 ve 7 atomlarının konumuna bağlı olarak fonksiyonlandırılmış iki karborantiyol izomeri (soldaki COH-m1, sağdaki COOH-m9)

Kaynakça

- 1. J. C. Love, L. A. Estroff, J. K. Kriebel, R. G. Nuzzo, G. M. Whitesides, "Self-assembled monolayers of thiolates on metals as a form of nanotechnology ", Chem. Rev., 105 (4), 1103-1170, (2005).
- 2. H. Peng, Z.-H. Yang, J. Sun, J. P. Perdew, "Versatile van der Waals density functional based on

meta-generalized gradient approximation", Phys. Rev. X, 6, 041005 (2016).

DÜŞÜK KATKI ORANLI KALAY OKSİT İNCE FİLMLER ÜZERİNE KATKILAMA ALTLIK SICAKLIĞININ ETKİSİ

Ahmet Battal¹ ve Bahattin Düzgün²

¹Muş Alparslan Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, 49100, Muş ²Atatürk Üniversitesi, K. K. Eğitim Fakültesi, 25420, Erzurum

Sunulan bu çalışmada Spray pyrolysis metodu kullanılarak farklı altlık sıcaklıklarında Antimon ve Florun aynı anda katkılandığı çifte katkılı Kalay Oksit ince filmler (SnO₂:Sb:F) optik cam altlık üzerine fabrike edildi. Antimonun düşük oranda katkılanması ile hazırlanan SnO₂:Sb:F ince filmlerin fiziksel özelliklerine altlık sıcaklığının etkisi araştırılmaya çalışıldı. Şekil 1'de görülen XRD sonuçları; literatür ile son derece uyumlu olacak şekilde filmlerin tetragonal yapıya sahip polikristal özellikte olduğunu ve (101), (200) ve (210) düzlemleri boyunca baskın yönelimlerin olduğunu göstermiştir [1,2,3]. Ancak filmlerin tercihli yönelimleri altlık sıcaklığından etkilenmeksizin daima (200) düzlemi boyunca olmuştur. SEM ve AFM resimleri de ince filmlerin altlık sıcaklığından etkilendiğini gösterirken film yüzeylerinin homojen ve nanokristal yapılardan oluştuğunu da resimlemiştir. Filmlerin %80 üzerinde optik geçirgenliğe ve direkt geçişli yasak enerji aralığına sahip olmasından ötürü saydam iletken oksitlerin ihtiyaç duyulduğu optoelektronik alanlarda kullanılabilme potansiyeli elde edilmiştir. En iyi film özelliklerinin elde edildiği 400 °C altlık sıcaklığında elde edilen SnO₂:Sb:F ince filmlerin 28.8 mΩ/cm² tabaka direncine ve 3.84x10¹⁹/cm³ taşıyıcı konsantrasyonuna sahip olduğu bulunmuştur. Spray metodu kullanılarak elde edilen çifte katkılı SnO₂:Sb:F ince filmlerin altlık sıcaklığından aşırı derecede etkilendiği sonucuna ulaşılmıştır. Dolayısıyla spray pyrolysis metodu gibi kimyasal tekniklerin kullanılmasıyla elde edilecek ince filmlerin özelliklerini etkileyen altlık sıcaklığı parametresinin çok iyi bir biçimde ayarlanması gerektiği çıkarımında bulunulmuştur [4].



Şekil 1. 320-480°C taban sıcaklıklarında elde edilen 0,05 M ağırlıkça %30 F ve %4 Sb katkılı AFTO ince filmlerin xışınları kırınım deseni

Kaynaklar

[1] B. Thangaraju, Thin solid films, 402, (2002), 71.

[2] K. Ravichandran, G. Muruganantham, B. Sakthivel and P. Philominathan, Journal of Ovonic Research, 5, (2009), 63.

[3] E. Mokaripoor and M.M. Bagheri-Mohagheghi, Mater Sci: Mater Electron 27, (2016), 2305–2314.

[4] A. H. Yuwono, T.Arini, L. H. Lalasari, N.Sofyan, G. Ramahdita, A.Nararya, F. Firdiyono, L. Andriyah, A.Subhan, International Journal of Technology, 7, (2017), 1336-1344.