



# YOĞUN MADDE FİZİĞİ İZMİR TOPLANTISI

15 Nisan 2016



**PROGRAM VE ÖZET  
KİTAPÇIĞI**

Sizleri Yoğun Madde Fiziği (YMF)-İzmir Toplantısında aramızda görmekten büyük mutluluk duymaktayız. Bu yıl beşincisi düzenlenmekte olan YMF-İzmir toplantısının amacı Yoğun Madde Fiziği ve ilgili alanlardaki bilimsel çalışmalara katkıda bulunmak, biliminsanları arasındaki bilgi alış-verişini hızlandırmak ve yeni bilimsel ortaklıklara vesile olmaktır. Bu toplantının düzenlenmesinde emeği geçen tüm komite üyelerine, gönüllü öğrenci arkadaşlarıma, tüm katılımcılara, sponsorumuz Eduline'a, maddi ve manevi her türlü katkıda bulunan İYTE Rektörlüğüne teşekkürü bir borç bilirim. Bu vesile ile bu toplantının tüm Türkiye çapında yoğun madde fiziği alanındaki bilimsel birikime katkıda bulunacağını düşünerek, YMF-İzmir toplantısının herkes için en güzel, en verimli şekilde geçmesi umudu ile iyi toplantılar dilerim.

YMF- İzmir Toplantısı Düzenleme Komitesi adına  
Doç. Dr. Alev Devrim Güçlü

### **Düzenleme Kurulu**

- Alev Devrim Güçlü (İYTE)
- Hamza Polat (Dokuz Eylül Üniv.)
- Şeref Kalem (TÜBİTAK UEKAE)

### **Bilim Kurulu**

- Şinasi Ellialtıođlu (TED Üniv.)
- Ođuz Gülseren (Bilkent Üniv)
- İsmet İnönü Kaya (Sabancı Üniv.)
- Hamza Polat (Dokuz Eylül Üniv.)
- Tuđrul Senger (İYTE)

### **Organizasyon**

- Serkan Ateş (İYTE)
- Özgür Çakır (İYTE)
- Cem Çelebi (İYTE)
- Damla Yeşilpınar (İYTE)
- Dilce Özkendir (İYTE)
- Hazan Özkan (İYTE)
- Korhan Çakmak (İYTE)
- Abdülmenaf Altıntaş (İYTE)
- Selma Mayda (İYTE)
- Sevil Altuđ (İYTE)
- Ulaş Özdemir (İYTE)
- Zafer Kandemir (İYTE)

<b>TOPLANTI PROGRAMI</b>		
08:30 – 09:00		<b>Kayıt</b>
09:00 – 09:15		<b>Açılış Konuşması</b>
<b>1. Oturum</b>		
<b>Oturum Başkanı: Şinasi ELLİALTIOĞLU (TED Üniversitesi)</b>		
09:15 – 09:35	Ç1	Oğuz GÜLSEREN (Bilkent Üniversitesi) “Atomistik faz geçişlerinin ultra hızlı lazer kullanarak uyarılan konvektif kuvvetler ile Brownian hareketinin dengelenerek kolloidal nanoparçacıklar ile gerçekleştirilmesi ve kontrolü”
09:35 – 09:55	Ç2	Bekir KANDEMİR (Ankara Üniversitesi) “Grafende Analog Gravite ve Ötesi”
09:55 – 10:15	Ç3	Kemal ÇELEBİ (Bilkent Üniversitesi) “Grafen Nanodeliklerinden Moleküler Akışlar”
10:15 – 10:30	S1	Arzu KARAYEL (Hitit Üniversitesi) “Grafen Tabanlı Yeni Nesil Süperkapasitör Modeller”
10:30 – 11:00		<b>ÇAY-KAHVE ARASI</b>
<b>2. Oturum</b>		
<b>Oturum Başkanı: Bekir KANDEMİR (Ankara Üniversitesi)</b>		
11:00 – 11:20	Ç4	Ceyhun BULUTAY (Bilkent Üniversitesi) “Hesaplamalı nano-NMR”
11:20 – 11:35	S2	Levent SUBAŞI (İstanbul Teknik Üniversitesi) “Dönen Raşba bağlı Fermi Gazların Süperakışkan Fazları”
11:35 – 11:50	S3	Göktuğ KARPAT (Universidade Estadual Paulista) “Time-invariant entanglement and sudden death of non-locality”
11:50 – 12:05	S4	İskender YALÇINKAYA (Sabancı Üniversitesi) “Yapay Manyetik Alan Etkisinde İki Boyutlu Kuantum Yürüyüşü”
12:05 – 13:30		<b>ÖĞLE YEMEĞİ</b>
<b>3. Oturum</b>		
<b>Oturum Başkanı: Ceyhun BULUTAY (Bilkent Üniversitesi)</b>		
13:30 – 13:50	Ç5	Aşkın KOCABAŞ (Koç Üniversitesi) “Beyin Fonksiyonlarının Optik Kontrolü”
13:50 – 14:10	Ç6	Sedat NİZAMOĞLU (Koç Üniversitesi) “Biyomalzemeler ile Tümlleştirilmiş Fotonik Aygıtlar”
14:10 – 14:30	Ç7	Hümeyra ÇAĞLAYAN (Abdullah Gül Üniversitesi) “Düşük İndisli Malzemeler ve Nanofotonik Uygulamaları”
14:30 – 14:50	Ç8	Emre SARI (İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü) “III-Nitrür Kuantum Elektrosuğurma Modülatörleri”
14:50 – 15:20		<b>ÇAY-KAHVE ARASI</b>
<b>4. Oturum</b>		
<b>Oturum Başkanı: Levent SUBAŞI (İstanbul Teknik Üniversitesi)</b>		
15:20 – 15:40	Ç9	Uğur TIRNAKLI (Ege Üniversitesi) “From Boltzmann-Gibbs Statistics to Tsallis Statistics: A Case Study For The Standard Map”
15:40 – 16:00	Ç10	Ümit AKINCI (Dokuz Eylül Üniversitesi) “Çok Katmanlı Nanotüplerin Manyetik Histerezis Özellikleri”
16:00 – 16:15	S5	Murat TAŞ (İstanbul Kemerburgaz Üniversitesi) “Küçük Band Aralıklı Heusler Yarıiletkenlerin Kuazi-parçacık Band Yapıları”
16:15 – 16:30	S6	Barış ÇAKMAK (Koç Üniversitesi) “Quantum Correlations and Coherence in Spin-1 Heisenberg Chains”
16:30 – 17:30		<b>POSTER ve KOKTEYL</b>
18:00		<b>Akşam yemeği için kampüsten Urla İşkeleye servis kalkacaktır</b>

# Çağrılı Konuşmacılar

## Atomistik faz geçişlerinin ultra hızlı lazer kullanarak uyarılan konvektif kuvvetler ile Brownian hareketinin dengelenerek kolloidal nanoparçacıklar ile gerçekleştirilmesi ve kontrolü

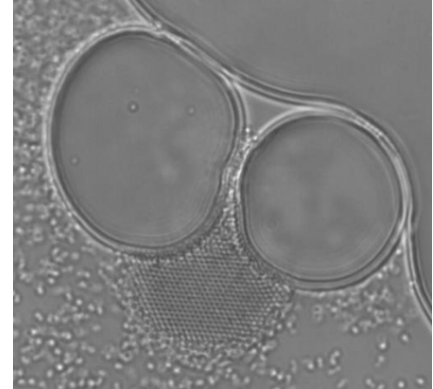
**Serim Ilday, Gürsoy B. Akgüç, Onur Tokel, Ghaith Makey, Özgün Yavuz, Ihor Pavlov, F. Ömer Ilday, Oğuz Gülseren**

*Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800 Ankara*

Kolloidal bilim doğada yaygın olan faz geçişlerini anlamamızda çok yardımcı olmaktadır. Ancak, bu geçişler yavaş cereyan eden termal denge veya dengeye çok yakın denge sistemlerde incelenmekte olup, büyük kristaller oluşturmak veya faz geçişlerini gözlemek saatler hatta günler sürebilmektedir. Ayrıca, yavaş denge sistemlerinde camı geçişleri gibi yarı-dengeli fazları yakalamak zordur. Bu çalışmada, dinamik ve dengeden uzak sistemlerde stokastik kuvvetler ve doğrusal olmayan dinamiklerin etkisi altında yüzlerce parçacık içeren büyük kolloidal kristallerin oluşması incelenerek ve katı-sıvı-gaz fazları arasındaki geçişler zahmetsizce ve saniyeler içinde gözlemlenerek çalışıldı. Ayrıca, bu sistem bize camı yapılar gibi yarı kararlı fazları çok kısa bir süre içinde oluşturma ve dinamik olarak yakalama imkanı vermektedir. Bu sistem aynı şekilde kontrollü olarak kare ve altıgen örgüleri birbirlerine dönüştürme imkanı verdiği gibi kristal kusurlarının (çizgisel kusurlar, nokta kusurları, düzlemsel kusurlar gibi) oluşumunu ve ilerlemesini gözleme fırsatı sağlamaktadır.

Kristal oluşumu ve faz geçişleri bir ultra hızlı lazer tarafından uyarılan konvektif kuvvetler ile güçlü Brownian hareketi arasındaki etkileşimin sonucudur: (i) konvektif kuvvetler femtosaniye lazer atımlarının doğrusal olmayan soğurumu ile oluşturulan güçlü termal eğim sonucu akışkan hızındaki değişimler ile oluşur ve parçacıkları hedefe doğru sürükler ki sonucunda kristal oluşumu meydana gelir, (ii) güçlü Brownian hareketi ise bu sistemde örgü titreşimleri gibi davranır ve birkaç saniye içinde faz geçişleri, kusur oluşumu ve yayılması ve örgü dönüşümlerini gözlemlemeyi mümkün kılar. Sonuç olarak, bu benzersiz sistem bize çeşitli katı hal olayları altında yatan mekanizmaları

anlamamıza yardımcı olabilecek hızlı ve esnek bir sistemdir.



Bu çalışmada, ayrıca polystirene nanoparçacıkların sadece konvektif kuvvetler ile güçlü Brownian hareketi etkisiyle dinamik olarak kendiliğinden bir araya gelmeleri ve desen oluşumu ve bunların kontrolü incelendi. Bu fiziksel kuvvetler aracılığı ile rassal süreçleri yöneterek ortaya çıkan desen üzerinde kapsamlı kontrol elde edebiliyoruz: lazeri açıp kapatarak desen oluşumu-bozulması-tekrar oluşturulması gerçekleştirilmiştir. Bir desen lazer gücü değiştirilerek bir diğerine dönüştürülebilmektedir. Aynı şekilde, bir desen bulunduğu pozisyondan başka yerlere bir kaç saniye içinde lazer ışını hareket ettirerek taşınabilmektedir. Burada özellikle vurgulamak isteriz ki bu bir optik yakalama veya cımbızlama etkisi değildir. Ultra hızlı lazer sadece çoklu foton soğurumuyla oluşturulan termal eğim sonucu ortaya çıkan konvektif kuvvetler yardımıyla kolloidal nanoparçacıkları yönlendirilmesi için kullanılmaktadır.

## GRAFENDE ANALOG GRAVİTE ve ÖTESİ

**B.S. Kandemir**

*Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi Fizik Bölümü, 06100 Tandoğan Ankara*

Negatif kozmolojik sabitli (2+1) boyutlu Einstein kütle çekim teorisi, Banados-Teitelboim- Zanelli[1] (BTZ) kara deliği olarak adlandırılan kara delik çözümlerine sahiptir. Bu çözümler, açısal momentumu ve kütlesi ile karakterize edilen iki boyutlu dönen kara deliklere karşılık gelir. BTZ metriğinin yapısı Beltrami trompeti yüzeyinin metriği ile konformal olarak ilişkilidir[2]. Bu ilişkiden yola çıkılarak, BTZ kara deliğinin olay ufku karşılık gelen bölümü, üç boyut içerisine gömülebilir. Grafenin düşük enerjili elektron uyarımları kütesiz Dirac denkleminle tanımlandığından ve bu denklem konformal kovaryans özelliğine sahip olduğundan, Beltrami trompeti şekilli grafen yüzeyi üzerindeki Dirac psödo parçacıklarından, BTZ arka planında hareket eden Dirac parçacıklarının özellikleri elde edilebilir. BTZ kara deliğini bir grafen yüzeyi ile modellemek için, Beltrami trompeti metriği biçimine sahip olan BTZ arka planındaki Dirac denklemi kurulmuştur ve aşağıdan sınırlı olmayan Hamiltonyenler için varyasyonel yöntemlerden kesikli baz kümesi yöntemi kullanılarak Dirac parçacıklarının enerji özdeğerleri bulunmuştur. Boyutsuz parametreler kullanılarak, manyetik alan, elektrik alan ve aralık açan kütle terimlerinin etkisi altındaki bir grafen yüzeyinin enerji değerleri ile bulunan enerji özdeğerleri karşılaştırılarak, BTZ metriği parametreleri ile grafen parametreleri arasındaki ilişkiler elde edilmiştir. Bu yolla, BTZ kara deliğinin, dış manyetik ve elektrik alanlar ile aralık açan kütle terimi etkisi altındaki bir grafen yüzeyine karşılık gelen olası bir laboratuvar modeli önerilmiştir. Ayrıca, BTZ kara deliğinin farklı uzay-zamanlara karşılık gelen bazı özel durumları da göz önüne alınmış ve bunların grafen yüzeyi ile benzer modellemeleri bulunmuştur.

**Bu çalışma Türkiye Bilimsel ve Teknik Araştırmalar Kurumu (TÜBİTAK) tarafından 113F103 nolu araştırma projesi kapsamında desteklenmiştir.**

### **Kaynakça**

1. M. Banados, C. Teitelboim, J. Zanelli, "The black hole in three-dimensional spacetime", Physical Review Letters 69,1849 (1992).
2. M. Cvetič, G. W. Gibbons, "Graphene and the Zermelo optical metric of the BTZ black hole", Annals of Physics, 327 2617 (2012).

## Grafen Nanodeliklerinden Moleküler Akışlar

**Kemal Çelebi**

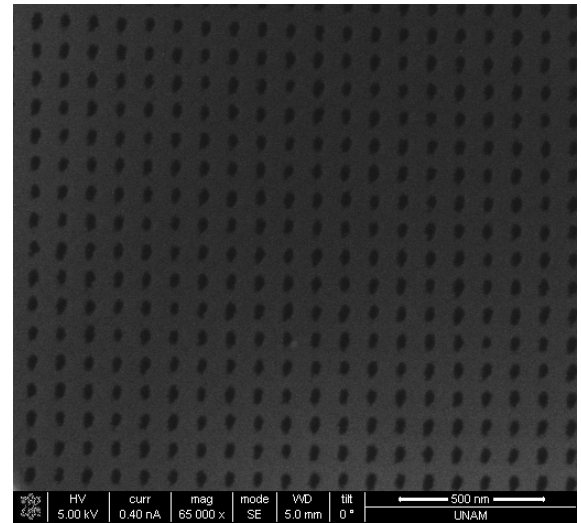
*Bilkent Üniversitesi, UNAM - Malzeme Bilimleri ve Nanoteknoloji Enstitüsü, 06800, Ankara*

Grafen, üstün mekanik özellikleri ve en küçük atomlara karşı bile mükemmel bir bariyer oluşturması sayesinde ideal bir membran platformu olarak düşünülebilir. Nano ölçekte deliklendirilmiş grafen, moleküllerin delik ile etkileşime girmeden geçiş yapmasına izin verdiğinden balistik akışların deneysel olarak çalışılmasına imkan sağlamaktadır. Teknolojik açıdan bakıldığında ise, geçirgenlik membran kalınlığı ile ters orantılı olduğundan grafen membranlar geleneksel membranlara göre  $10^3$ - $10^6$  kat daha yüksek performans ortaya koyabilmektedir.

Nano akışkanlık, düşük sayıda molekülün birbirleri ve kendilerini çevreleyen ortam ile klasik olmayan şekilde etkileşime girmeleri sebebiyle klasik akışkanlar mekaniği ile açıklanamamaktadır. Son yıllarda karbon nanotüp ve grafen alanlarındaki gelişmeler, gaz ve su moleküllerinin nanometre seviyesinde etkileşimlerinin çalışılmasına izin vermiştir. Örneğin nanotüp platformları ile plug-flow, stokastik akışlar ve Grotthus mekanizması gibi bilimsel fenomenler deneysel olarak gösterilebilmiştir. Grafen ise, nanotüplerden farklı olarak, pratik olarak sıfır kalınlıkta açıklıklar sağlayabilmektedir. Bu tür açıklıklar nano ölçekte olduğunda moleküler geçişler sırasında molekül-molekül ve molekül-delik etkileşimlerinin engellenmesine sebep olabilir.

Bu çalışmada [1] iki atom kalınlığında serbest asılı grafen, odaklanmış galyum iyonları ile 10 nm seviyesinde kontrollü çaplarda deliklendirilmiş ve bu deliklerden gaz ve su molekülleri geçirilerek moleküler akışların iki boyutlu nano deliklerde nasıl davrandığı çalışılmıştır. Böylelikle ilk defa atmosfer basıncında efüzyon gözlemlenebilmiş ve balistik rejimden kolektif akışa geçiş karakterize edilmiştir. Elde edilen membranlar, literatürdeki veya endüstrideki membranlardan

binlerce kat daha yüksek geçirgenlik sergilemiştir. Dolayısıyla grafen, gelecekte yeni nesil yüksek performanslı membranlardan yapıtaş olma yolunda önemli bir potansiyel sergilemektedir.



Şekil 1. Galyum iyonları (FIB) ile deliklendirilmiş serbest asılı grafen.

### Kaynakça

1. K. Celebi, J. Buchheim, R. Wyss, A. Droudian, P. Gasser, I. Shorubalko, J. Kye, C. Lee, HG Park, Science, 344, 6181, 289, (2014).



## Hesaplamalı nano-NMR

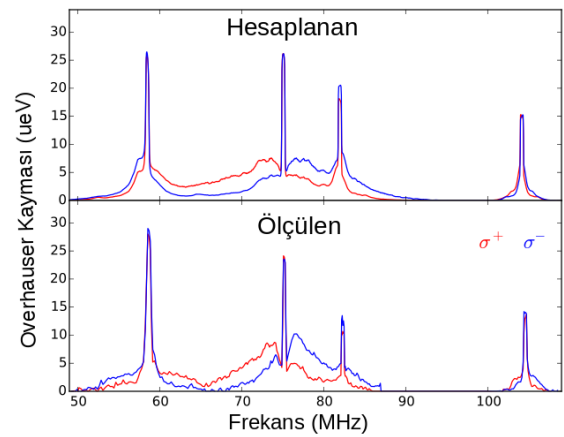
Ceyhun Bulutay

Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800 Ankara

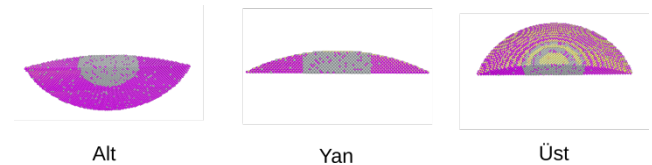
Malzeme bilimi ve yeni gelişen kuantum teknolojileri açısından yarıiletken nanoyapılar ve özellikle kuantum noktaları (KN'ları) önemli yere sahiptir. Başlıkta geçen "nano-NMR" deyimini, makroskopik ölçekli örnekler yerine, tek bir nano boyutlu yapı üzerinde işlevsel olacak özgün bir NMR türevini vurgulamak için kullanılmaktadır. Bu çalışmada InGaAs KN'larında optik algılamalı NMR yöntemi çerçevesinde atomik hassasiyette NMR izge hesaplamaları deneyle karşılaştırılmalı olarak verilmektedir..

NMR, Avogadro ölçeğinde çekirdek (spin) içeren yapıların anlaşılması için sıklıkla kullanılan bir yöntemdir. Fakat tek bir KN'sının normal NMR ile incelenmesi, kutuplamadaki yetersizlik ve işaretin gürültünün altında kalması nedeniyle mümkün değildir. Yeni geliştirilen optik algılamalı ters izge NMR olarak adlandırılan deneysel yöntemle bu başarılmış, [1] daha sonra ilk yapı analizleri model tabanlı olarak ele alınmıştır [2]. Sunulan bu çalışmada ise üretilmiş bir KN'sının deneysel olarak ölçülmüş NMR verisinden yola çıkılarak (Şekil 1) ne tür bir atomik yapıya sahip olabileceği üzerine hesaplamalar yapılmış ve deneyle oldukça yakın izgeli bir yapıya ulaşılmıştır. (Şekil 2)

Sunumda bu yeni teknik, optik algılamalı nano-NMR hakkında genel bilgi verilecek, sonrasında atomik düzeyde yapı algılaması ve kuantum denetim uygulamalarına değinilecektir.



Şekil 1: Üretilmiş bir KN'sının hesaplanmış ve ölçülmüş NMR izgelerinin karşılaştırması



Şekil 2: Yukarıda NMR izgesi verilen KN'sının atomik yapısının çeşitli yönlerden kesit görüntüsü. Burada, mor renkli atomlar galyum, gri renkliler indiyum, sarı renkliler ise arsenik atomlarına karşılık gelmektedir.

**Teşekkür:** Bu çalışma TÜBİTAK 114F409 no'lu proje çerçevesinde desteklenmektedir.

### Kaynakça

1. E. A. Chekhovich, vd. "Nuclear magnetic resonance inverse spectra of InGaAs quantum dots: atomistic level structural information", *Nature Nanotechnology* **7**, 650 (2012).
2. C. Bulutay, E. A. Chekhovich, ve A. I. Tartakovskii "Nuclear magnetic resonance inverse spectra of InGaAs quantum dots: atomistic level structural information", *Physical Review B* **90**, 205425 (2014).

## Beyin Fonksiyonlarının Optik Kontrolü

**Aşkın Kocabaş**

*Koç Üniversitesi – Fen Fakültesi, 34450 İstanbul*

Beyin milyarlarca sinir hücresinin trilyonlarca bağlantı kurması ile oluşan doğadaki en karmaşık yapıdır. Beyin, bu karmaşık yapısına rağmen kendi iç networkünü uyumlu bir şekilde organize ederek canlıların davranışlarını çok hassas bir şekilde oluşturabilmektedir.

Bu karmaşık mekanizmanın nasıl çalıştığının anlaşılması günümüzün en zor problemlerinden biridir. Bu problem 302 sinir hücresi ve yaklaşık 7000 bağlantı bulunduran, en basit sinir sistemine sahip *Caenorhabditis elegans* (*C. elegans*) organizmasında bile oldukça karmaşık bir problemdir. Bu karmaşık probleme yeni bir yaklaşım olarak, sinir sistemini kontrol ederek nasıl çalıştığını anlamayı hedefledik. Bu yaklaşımı uygulayabilmek için optik proteinler ve çok hassas optik görüntüleme sistemleri kullanarak, hareket halinde olan *C.elegans* canlısının davranışlarını tamamen kontrol etmeyi hedefledik.

Özellikle canlının yiyecek ararken sinyal işleme kabiliyetini üzerine odaklandık. Elde ettiğimiz sonuçlar karmaşık sinir sistemi içerisinde belirli sinirlerin bütün sinir sistemini kontrol etmeyi sağlayan özel bir bağlantı yapısına sahip olduğunu tespit ettik. Bu sinirler dışarıdan gönderilen optik sinyaller sayesinde canlının ileri geri, sağa sola dönüşü gibi temel hareketlerin tamamen dışarıdan kontrol etmemize olanak sağlamaktadır. Bu konuşmada yaptığımız çalışmalar sırasında kullandığımız optik proteinler ve geliştirdiğimiz optik sistemler hakkında ayrıntılı bilgiler verilecektir. Bunlara ek olarak şuan geliştirdiğimiz beyin görüntüleme sistemleri ve bu metotların tamamlayıcı bir şekilde beyin fonksiyonlarının optik kontrolü için nasıl kullanılabileceği hakkında bilgiler verilecektir.

## Biyomalzemeler ile Tümlleştirilmiş Fotonik Aygıtlar Sedat Nizamoglu

*Elektrik-Elektronik Mühendisliđi  
Koç Üniversitesi, Rumeli Feneri Yolu  
34450 Sarıyer, İstanbul, Türkiye*

Harici bir ışık kaynađı dokudan geđtiđi zaman, saçılma ve sođurulmaya uğramakta ve tipik 1/e-penetrasyon derinlikleri yüzlerce mikrometre seviyelerinde olmaktadır[1-2]. Günümüzde bu ışık penetrasyon problemini aşmak için bir hasta ya da canlı gövdesi içerisine fiber optik kateter veya lens bazlı endoskoplar ile ışık gönderilmekte ve algılanmaktadır. Bu cihazlar klasik olarak mevcut olan standart cam veya plastik gibi malzemelerden yapılmış olup, ancak genel olarak biyolojik olarak uyumlu değildir. Bu cihazlar yalnızca vücuttaki hedef dokuya yakın bir ışık kaynađı getirmek için kullanılmakta ve bu nedenle, tıbbi işlemde kısa bir süre sonra vücuttan çıkarılmaktadır. Bu sebeplerden dolayı, doku derinliklerine ışık yollanması ciddi sınırlamalardan dolayı kısıtlıdır.

Bu öncelikli sorunu çözmek için, tamamen biyouyumlu ve biyobozunur malzemelerden yapılmış olan fotonik aygıtlar geliřtirdik. Bu aygıtlar, ayarlanan biyolojik özellikleri ile vücuda implant edilebilir, işlevini yerine getirdikten sonra da kademeli olarak emilerek yok olabilmektedir. Konuşmamızda, tedavi, algılama ve ışık üretimi yapan biyomalzeme tabanlı aygıtları tartışacağız[3-6].

### Kaynakça

1. D. S. Richardson & J. W. Lichtman, "Clarifying tissue clearing," Cell 162, 246–257 (2015)
2. S. L. Jacques, "Optical properties of biological tissues: a review," Phys. Med. Biol. 58, R37–R61 (2013).
3. S. Nizamoglu, M. C. Gather, M. Humar, M. H. Choi, S. H. Kim, K. S. Kim, S. K. Hahn, G. Scarcelli, M. Randolph, R. W. Redmond, S. H. Yun, "Bioabsorbable polymer optical waveguides for deep-tissue photomedicine," Nature Communications 7, 10374 (2016).
4. M. Choi, J. W. Choi, S. Kim, S. Nizamoglu, S. K. Hahn, ve S. H. Yun, "Light-guiding hydrogels for cell-based sensing and optogenetic synthesis in vivo," Nature Photonics 7, 987 (2013).
5. S. Nizamoglu, K. B. Lee, M. C. Gather, K. S. Kim, M. Jeon, S. Kim, M. Humar, S.-H. Yun, "A Simple Approach to Biological Single-Cell Lasers Via Intracellular Dyes" Advanced Optical Materials 3, 1197 (2015)
6. S. Nizamoglu, M. C. Gather, and S. H. Yun, "All-biomaterial laser using vitamin and biopolymers," Advanced Materials 25, 5943-5947 (2013).

## Düşük indisli malzemeler ve nanofotonik uygulamaları

**Hümevra Çağlayan**

*Abdullah Gül Üniversitesi, Elektrik & Elektronik Mühendisliği Bölümü  
38039, Melikgazi, Kayseri*

Dielektrik sabiti (permittivity) sıfıra yakın veya çok yüksek olan genel olarak ekstrem parametrelere sahip metamateryaller son zamanlarda ilgi olduğu olan konulardan biridir. Elektromanyetik dalgaları malzemenin özelliklerini (dielektrik sabiti gibi) değiştirerek kontrol etmek, pek çok yeni aygıt ve bileşeni elde etmemize fırsat sağlar. Bu konuşmada, düşük indisli ( $n \ll 1$ ) olan malzemeleri ve bunların nanofotonik uygulamalarını tanıtacağım.

### III-Nitrür kuvantum elektroşğurma modölatörleri

**Emre Sarı**

*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, İzmir*

Yarıiletken büyütme ve fabrikasyon tekniklerindeki gelişmeler sayesinde güneş paneli, LED tabanlı aygınlama, ekran, görüntüleme ve optik iletişim gibi teknolojiler ile her geçen gün daha yaygın bir şekilde karşılaşmaktayız. Bu teknolojilerin en önemlileri arasında geniş bant aralığına sahip III-Nitrür malzeme sisteminde dayalı aydınlatma ve ekran teknolojilerini göstermek mümkündür. Bu konuşmada III-Nitrür malzeme sisteminin uygulama alanlarını genişletmek amacıyla gösterdiğimiz elektroşğurma modölatörlerinin fizikinden ve uygulamalarından bahsedeceğiz.

# From Boltzmann-Gibbs statistics to Tsallis statistics: A case study for the standard map

Ugur Tirnakli

*Department of Physics, Faculty of Science, Ege University, 35100 Izmir, Turkey*

(Dated: March 25, 2016)

As well known, Boltzmann-Gibbs statistics is the correct way of thermostatically approaching ergodic systems. On the other hand, nontrivial ergodicity breakdown and strong correlations typically drag the system into out-of-equilibrium states where Boltzmann-Gibbs statistics fails. For a wide class of such systems, it has been shown in recent years that the correct approach is to use Tsallis statistics instead. Here we show how the dynamics of the paradigmatic conservative (area-preserving) standard map exhibits, in an exceptionally clear manner, the crossing from one statistics to the other. Our results unambiguously illustrate the domains of validity of both Boltzmann-Gibbs and Tsallis statistics [1]. Since various important physical systems can be reduced to conservative low-dimensional maps, our results are expected to enlighten and enable an improved interpretation of diverse experimental and observational results.

---

[1] U. Tirnakli and E. P. Borges, *Sci. Rep.* **6** (2016) 23644.

## Çok katmanlı nanotüplerin manyetik histerezis özellikleri

Ümit Akıncı

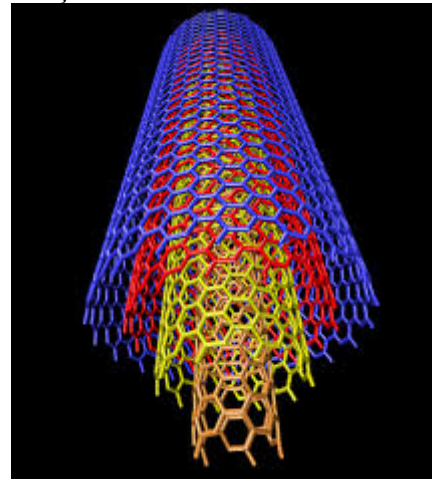
*Dokuz Eylül Üniversitesi- Fizik Bölümü, 35160 İzmir*

Manyetik nanotüpler ilaç iletiminden biyoayırıştırma, çeşitli biyomedikal uygulamalardan sensör yapımına kadar geniş uygulama alanlarına sahiptir [1,2,3]. Bu yapıların, sahip oldukları geometriden kaynaklı olarak, uzunluk, çap veya katman sayılarının değiştirilmesi gibi yollarla manyetik özellikleri ayarlanabilir. Buna ek olarak, içlerine başka malzemelerin yerleştirilmesi ile çekirdek-kabuk (core-shell) nano yapılar oluşturulabilir.

FePt ve Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> gibi nanotüpler, çekirdek kabuk modelleri ile ele alınıp, manyetik özellikleri çeşitli teorik yöntemlerle hesaplanabilir [4]. Etkin alan yaklaşımı [5] ve Monte Carlo simülasyonları [6] bu çözüm yöntemlerinin en sık kullanılanlarıdır. Bu yöntemler sıklıkla tek katmanlı nanotüp geometrisine uygulanmıştır.

Bu sunumda çok katmanlı ve farklı geometrilerdeki manyetik nanotüplerin manyetik histerezis özellikleri incelenecektir. İlgili sistemler, model olarak çekirdek-kabuk geometrisinde anizotropik Heisenberg modeli ile ele alınıp, yöntem olarak etkin alan yaklaşımı ile elde edilen sonuçlar gözden geçirilecektir. Özellikle çoklu histerezis

davranışı gibi farklı davranışlar gözden geçirilecek, kalıcı manyetizasyon, koersif alan, histerezis döngü alanı gibi karakteristik niceliklerin değişimi için elde edilen sonuçlar tartışılacaktır.



**Şekil 1:** *Tipik bir çok katmanlı nanotüp (<http://www.nanotech-now.com/nanotube-buckyball-sites.htm> adresinden alınmıştır)*

### Kaynakça

1. H. B. Zeng, P. S. Liu, W. P. Cai, S. K. Yang, X. X. Xu, "Controllable Pt/ZnO porous nanocages with improved photocatalytic activity", J. Phys. Chem. C, **49**, 19620, (2008).
2. K. Nielsch, F.J. Castano, C.A. Ross, R. Krishnan, "Magnetic properties of template-synthesized cobalt/polymer composite nanotubes", Journal of Applied Physics **98**, 034318, (2005).
3. S. J. Son, J. Reichel, B. He, M. Schuchman, S. B. Lee, "Magnetic nanotubes for magnetic-field-assisted bioseparation, biointeraction, and drug delivery", J. Am. Chem. Soc., **127**, 7316, (2005).
4. Y. C. Su, R. Skomski, K. D. Sorge, D. J. Sellmyer, "Nanotube magnetism", Applied Physics Letters, **84**, 1525 (2004).
5. T. Kaneyoshi, "Some characteristic properties of initial susceptibility in a Ising nanotube" Journal of Magnetism and Magnetic Materials **322**, 3014 (2010).
6. E. Konstantinova, "Theoretical simulations of magnetic nanotubes using monte carlo method", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **320**, 2721, (2008).

# Sözlü Sunumlar



## Grafen Tabanlı Yeni Nesil Süperkapasitör Modeller

Arzu Karayel<sup>1</sup>, Oğuz Gülseren<sup>2</sup>

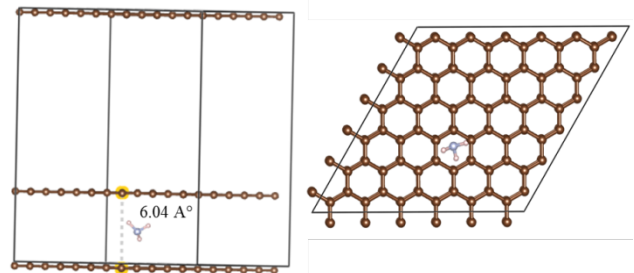
<sup>1</sup>Hitit Üniversitesi, Fizik Bölümü, 19030 Çorum

<sup>2</sup>Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800 Ankara

Süperkapasitörler, yüksek güç kapasiteleri ve uzun döngü ömürleri nedeniyle elektriksel enerji depolama aygıtları olarak büyük ilgi toplamaktadır [1,2]. Bu alanda son yıllarda çok ciddi araştırmalar yapılmaktadır. Süperkapasitörlerin aktif malzeme özellikleri, elektrotların üretim yöntemleri, elektrolit seçimleri ve aygıt geometrileri oldukça önem kazanmıştır. Başta otomotiv endüstrisi olmak üzere, mobil telefonlar, mobil elektronik aygıtlar gibi birçok elektronik endüstrisinin öncelikli konusu olan süperkapasitörler, enerji depolama limitleri açısından geliştirilerek birçok farklı uygulamada kullanılabilirler. Süperkapasitörlerin maksimum enerji depolama özelliklerini geliştirilebilmek için hem kullanılacak elektrotların hem de elektrolitlerin farklı kombinasyonlarının oluşturulması gerekmektedir.

Süperkapasitörlerde, elektrot malzemesi olarak kullanılan temel malzeme grafendir. Grafen elektrotlar, geniş yüzey alanları ve yüksek elektriksel iletkenlikleri nedeniyle tercih edilirler [3]. Yapılan tasarımlarda elektrot malzemesi olarak iki tabakalı grafen ve elektrolit olarak da amonyak ( $\text{NH}_3$ ) kullanıldı. Grafen-tabanlı süperkapasitörler, iki grafen katman (bilayer) arasına  $\text{NH}_3$  yerleştirilerek oluşturuldu. Bunlar, temel prensip hesaplamalar ile modellendi ve özellikleri araştırılarak enerji depolama performanslarını geliştirmeye dayalı aygıt tasarımları yapıldı. Yapılan hesaplamalarda yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan düzlem dalga sanki-potansiyel metodu kullanıldı. Değiş-tokuş potansiyeli yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) ile tarif edildi.

Hesaplamalara tek tabaka (monolayer) grafen üzerinde  $\text{NH}_3$  molekülünün optimizasyonu ile başlandı.  $\text{NH}_3$  molekülünün farklı pozisyonları (hollow, top, bridge) ve oryantasyonları (up, down) gözönüne alınarak farklı sistemler oluşturuldu ve literatürde bulunan çalışmaların aksine en kararlı durum “bridge” olarak bulundu [4]. Tek katmanlı grafen çalışmasındaki bu en kararlı bridge durumu alınıp üzerine bir katman daha yerleştirilerek iki katmanlı grafen sistemine geçildi (Şekil 1).



**Şekil 1:** Bilayer grafen arasında  $\text{NH}_3$  molekülünden oluşmuş optimize süperkapasitör model

Hesaplamalar, AA\_istifli ve AB\_istifli olarak yapıldı ve AA\_istifli durumun daha düşük enerjili olduğu, aralarında 18.8 meV enerji farkı olduğu görüldü. AA\_istifli durum için  $\text{NH}_3$  molekülünün sayısı artırılarak elektrolit konsantrasyonunun etkisi araştırıldı ve kararlı durumlar belirlendi. Tüm kararlı durumların elektronik durum yoğunlukları (DOS) hesaplanarak bunlara dayanan kuantum kapasitans değerleri hesaplanacaktır.

**Teşekkür:** Bu çalışma 114F118 nolu proje ile TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

### Kaynakça

1. G. Wang, L. Zhang, J. Zhang, “A Review of Electrode Materials for Electrochemical Supercapacitors”, Chem. Soc. Rev., **41**, 797–828 (2012).
2. B. E. Conway, “Electrochemical Supercapacitors: Scientific Fundamentals and Technological Applications”, Kluwer Academic, NewYork (1999).
3. J. L. Xia, F. Chen, J. H. Li, et al. “Measurement of the quantum capacitance of graphene”, Nat. Nano technol., **4**, 505–9 (2009).

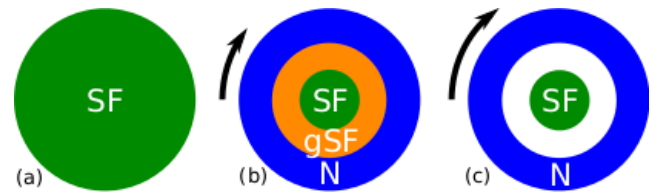
## Dönen Raşba bağlı Fermi Gazların Süperakışkan Fazları Enis Doko<sup>1</sup>, Ahmet Levent Subaşı<sup>2</sup>, Menderes Işkın<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Koç Üniversitesi, Fizik Bölümü, 34450, İstanbul

<sup>2</sup>İstanbul Teknik Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 34469, İstanbul

İki boyutta Raşba spin-momentum bağlı atomik Fermi gazının adyabatik döndürülmesi sonucunda temel durumda oluşan süperakışkan fazların incelendiği çalışmada, süperakışkanlığın Coriolis etkisi ile kırılan Cooper çiftleri yoluyla ortadan kalması için gerekli kritik dönme hızı, harmonik tuzak içinde oluşan yoğunluk, akım ve düzen parametresi değişik Raşba ve etkileşim kuvvetleri için hesaplanmıştır.

Spin-momentum etkilerinin iki boyutlu Fermi gazı için yoğunlaşmayı kuvvetlendireceği ve zayıf etkileşimler için gazın BCS-BEY evrimini süreceği bilinmektedir. [1] Diğer taraftan tuzaklanmış bir gazın döndürülmesi sonucu açılma momentum taşımayan süperakışkan faz ve bütün olarak dönen normal faz arasında bir ayrılma göstermesi beklenmektedir. [2] Bu iki etkinin bir arada ele alınması sonucunda bazı durumlarda bu etkilerin aynı yönde sonuçları olması bazı durumlarda ise ters yönde etkin olmaları söz konusu olabilmektedir. Bu çekişmenin ilginç bir sonucu olarak gazın içinde bulunduğu tuzakta değişik dağılımların gözlemlenmesi beklenmektedir. [3] (Şekil 1)



Şekil 1: Dönme altında süperakışkan gaz yoğunluğunun temsili görüntüsü

Yarı-klasik yerel yoğunluk yaklaşımı ötesinde yapılan tam kuantum mekaniksel Bogolibov-de Gennes formülasyonu ile sistem için elde edilen sonuçlar sunulacaktır.

### Kaynakça

1. L. He and X. Huang, "BCS-BEC Crossover in 2D Fermi Gases with Rashba Spin-Orbit Coupling", Phys. Rev. Lett. **108**, 145302 (2012)
2. I. Bausmerth, A. Recati, and S. Stringari, "Destroying Superfluidity by Rotating a Fermi Gas at Unitarity", Phys. Rev. Lett. **100**, 070401 (2008)
3. E. Doko, A. L. Subaşı, M. Iskin, "Rotating a Rashba-coupled Fermi gas in two dimensions", Phys. Rev. A **93**, 033640

## Time-invariant entanglement and sudden death of non-locality

**Göktuğ Karpuz**

*Faculdade de Ciências, UNESP - Universidade Estadual Paulista, Bauru, SP, 17033-360, Brazil*

We investigate both theoretically and experimentally the dynamics of entanglement and non-locality for two qubits immersed in a global pure dephasing environment. We demonstrate the existence of a class of states for which entanglement is forever frozen during the dynamics. At the same time non-local correlations, quantified by the violation of the Clauser-Horne-Shimony-Holt (CHSH) inequality, either undergo sudden death or trapping of non-local properties.

Understanding correlations of genuine quantum nature is essential both for the fundamentals of quantum theory and for the applications of quantum information science. Recent studies have revealed that there exists numerous different types of purely non-classical correlations present in quantum systems, and they all prove to be relevant in the implementation of various tasks. Among them, entanglement can be argued to be the most fundamental. Apart from being a concept as old as quantum theory itself, entanglement is the main resource of quantum computation and quantum information processing. Realistic quantum mechanical systems are, however, very sensitive to their surroundings and, as a consequence, their characteristic quantum traits tend to rapidly disappear. In fact, under certain conditions, entanglement can

be lost completely in a finite time rather than asymptotically, a striking phenomenon known as the sudden death of entanglement.

In this work, we first theoretically study the time evolution of both entanglement and quantum non-locality, as quantified by the concurrence and the CHSH inequality violation, respectively, for Bell-diagonal states under a simple global pure dephasing model. We demonstrate that while the amount of entanglement remains time-invariant for a particular class of Bell-diagonal states, the degree of violation of quantum nonlocality can suffer sudden death and thus disappear in a finite time interval rather than asymptotically. Then, we report on an experiment with photonic qubits demonstrating our theoretical results.

## Yapay manyetik alan etkisinde iki boyutlu kuantum yürüyüşü

İskender Yalçınkaya, Zafer Gedik

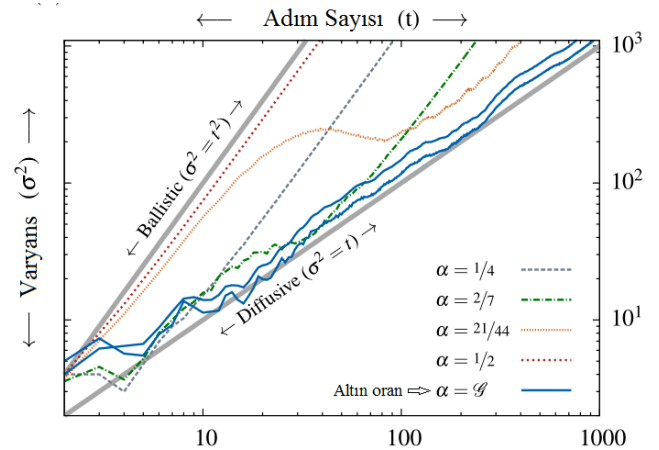
*Sabancı Üniversitesi- Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, 34956 Tuzla, İstanbul*

Yapay manyetik alan etkisindeki kesikli zaman kuantum yürüyüşlerinin (KY'lerinin) kare örgü üzerinde yayılım özelliklerini ve para-konum dolaşıklığını inceledik. Yapay manyetik alanı Peierls yerleştirilmesi yöntemi ile sisteme dahil ettik. Kontrol değişkenini birim hücreden geçen manyetik akının akı kuantumuna oranı olarak seçtik. Bu durumda, henüz az sayıda adım atılmışken sabit bir manyetik alanın örgü merkezinde yerleşmiş bir ilk halin örgü üzerine yayılmasını hızlandırdığını ancak adım sayısı arttıkça dalga fonksiyonunun büyük ölçüde yerel kaldığını tespit ettik. Ayrıca, özel olarak seçtiğimiz bazı rasyonel akı oranları ve kısıtlı adım sayıları için yayılımın baskılanabileceğini hatta tersine döndürülebileceğini gösterdik. Akı oranını irrasyonel bir sayı seçmemiz durumunda, çok sayıda adım atılsa bile KY'nün iyi bilinen balistik yayılım yerine klasik rastgele yürüyüşte (RY'te) olduğu gibi difüzyif yayılım gösterdiğini ve yürüyücünün merkezde bulunma olasılığının manyetik alan olmayan duruma göre dikkate değer ölçüde fazla olduğunu gösterdik. Son olarak, manyetik alanın varlığı ile para ve konum serbestlik derecelerinin uzun zaman ölçeklerinde dahi neredeyse azami dolaşık kaldığını gösterdik.

Bir kuantum bilgisayar, kuantum sistemlerinin klasik bilgisayarlar ile benzetilmelerindeki güçlüğü ortadan kaldıracak bir cihaz olarak ilk kez Feynman tarafından ortaya atılmıştır. Günümüzde aşırı soğutulmuş atom sistemleri, incelenmek istenen kuantum sisteminin deneysel olarak oldukça iyi kontrol edilebilen bir benzerini yapmak konusunda iyi bir adaydır. Böyle sistemler, lazer ışınları tarafından oluşturulmuş bir optik örgü üzerinde aşırı soğutulmuş yüksüz atomları tuzaklama yolu ile oluşturulabilir. Ancak söz konusu atomlar yüksüz olduklarından, kuantum Hall etkisi ve topolojik fazlar gibi durumları benzetmek kaçınılmaz olarak elektrik ve manyetik alan etkilerinin sistem üzerinde yapay olarak oluşturulmasını gerektirir. Son zamanlarda, atom ve ışık etkileşimini kullanarak optik örgülerde ayarlanabilir yapay ayar alanları oluşturulabilmektedir. [1]

KY'ü, RY'nin kuantum karşılığı olarak ortaya atılmış ve ilk aşamada RY'nin yayılım hızının karesi kadar bir hızla yayılması nedeniyle ilgi odağı olmuştur. Daha sonra KY'ler ile yeni kuantum algoritmalarının oluşturulabileceği ve onların evrensel kuantum hesaplama için bir model olduğu gösterilmiştir. Ayrıca, KY'nin topolojik fazlar, Anderson yerelleşmesi, elektriksel kırılım gibi olayların benzetilmesi için kullanılabilirliği gösterilmiştir. [2]

Optik örgüler üzerindeki son deneysel çalışmalar KY'lerinin yapay ayar alanları altında gerçekleşmesine olanak sağlamaktadır. Örneğin, yüklü bir parçacığın elektrik alan etkisi altında davranışının bir boyutlu optik örgüde KY'ü tarafından taklit edilebildiği gösterilmiştir [3]. Ayrıca, yapay manyetik alan



**Şekil 1:** Farklı manyetik akı ( $\alpha$ ) değerleri için yürüyüşün yayılımı

etkisi altında KY'nin fotonik devreler ile gerçekleştirilebileceğine dair bir öneri de mevcuttur [4].

Bu çalışmamızda, yapay manyetik alan etkisi altında KY'nin kare örgü üzerinde dinamiklerini inceledik [5]. Bunun için KY'nin dalga fonksiyonuna yöne ve konuma bağlı fazlar ekledik. Bu fazlar, düzgün bir manyetik alan etkisi altındaki yüklü bir parçacığı temsil eden Hamiltonyende en yakın komşular arasındaki zıplama terimlerine eklenen Peierls fazlarına karşılık gelmektedir. Böylece yürüyüşün yayılım özelliklerini birim hücreden geçen manyetik akıyı değiştirerek kontrol edebildik. Çalışmamızın, günümüz teknolojisi ile deneyi yapılabilir ve bazı sonuçlarımız doğrulanabilir. Ayrıca çalışmamızın, çeşitli ayar alanları etkisi altındaki çok parçalı kuantum sistemlerinin benzetilmesinde yararlı bir adım olabileceğini düşünüyoruz.

**Kaynakça**

1. J. Dalibard, F. Gerbier, G. Juzeliunas, P. Öhberg, "Colloquium: Artificial gauge potentials for neutral atoms", Rev. Mod. Phys., **83**, 1523 (2011).
2. S. E. Venegas-Andraca, "Quantum walks: a comprehensive review", Quantum Inf. Process **11**, 5, 1015-1106 (2012).
3. M. Genske, W. Alt, A. Steffen, A. H. Werner, R. F. Werner, D. Meschede, A. Alberti, Phys. Rev. Lett. **110**, 190601 (2013).
4. O. Boada, L. Lovo, F. Sciarrino, Y. Omar, arXiv:1503.07172 [quant-ph].
5. İ. Yalçınkaya, Z. Gedik, "Two-dimensional quantum walk under artificial magnetic field", Phys. Rev. A **92**, 042324 (2015).

## Küçük band aralıklı Heusler yarıiletkenlerin kuazi-parçacık band yapıları

**Murat Taş**

İstanbul Kemerburgaz Üniversitesi, Temel Bilimler Bölümü, 34217 İstanbul

Heusler yarıiletkenleri, spin elektronığı ve termoelektrik gibi farklı uygulamalar için uygun malzemelerdir. Çalışmamızda, FLAPW metodu çerçevesinde GW yaklaşımıyla bir grup (yaklaşık) sıfır band aralığına sahip (XX')YZ formüllü Heusler yarıiletkenin kuazi-parçacık band yapıları incelenmiştir. Analizlerimiz, Si ve GaAs gibi sp elektron tabanlı yarıiletkenlerin aksine, çok-parçacık etkileşmelerden kaynaklanan düzeltmelerin bu sistemlerin band yapılarını çok az değiştirdiğini, band aralıklarını ise sadece 0.2 meV mertebesinde arttırdığını göstermiştir. Bu sonuç, standart DFT tabanlı yaklaşımların çalışılan sistemlerin elektronik özelliklerini tanımlamak için yeterli olduğunu göstermektedir. Ek olarak, sistemlerin band aralıklarının farklı örgü sabitleri ve farklı sp elementleri ile nasıl değiştiği de incelenmiştir.

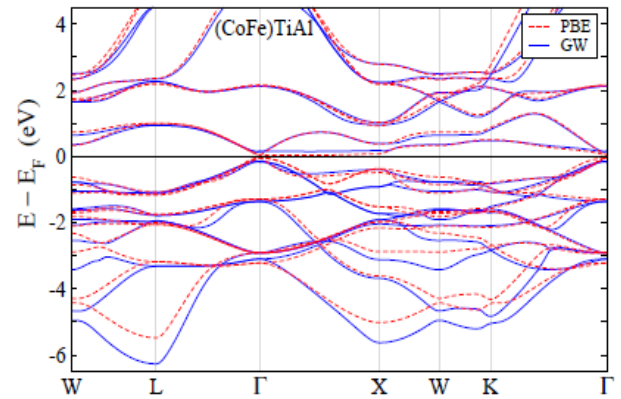
Bilindiği üzere yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT), malzemelerin taban durum özelliklerini açıklayabilmekte ancak yasak enerji band aralıklarını ve optik özelliklerini açıklayamamaktadır. DFTnin bu eksikliğini ve çok-parçacık etkileşmelerin kuvvetli olduğu sistemlerin özelliklerini GW yaklaşımıyla başarıyla açıklayabilmektedir.

Dar d-bandlarına sahip geçiş elementlerini içermesinden dolayı Heusler bileşiklerinde etkileşmelerin kuvvetli olması beklenir. Dolayısıyla, bu sistemlerde GW yaklaşımının performansı test edilebilir. Bu sebeple, (XX')YZ formülüne sahip bir grup Heusler yarıiletken malzemenin elektronik özelliklerini DFT-GGA ve FLAPW metodu çerçevesinde GW yaklaşımıyla çalıştık.

Taban durum hesapları, FLAPW metodu uygulanarak yazılan FLEUR koduyla [1] ile hesaplandı. Boş orbitalleri doğru şekilde tanımlamak için mevcut her element için lokal orbitaller kullanılmıştır. hesapların sonuçları kullanılarak tek atımlık GW olarak bilinen  $G_0W_0$  hesapları ise SPEX koduyla [2] yapılmıştır. Şekil 1 de, örnek olarak (CoFe)TiAl için her iki yaklaşım ile hesaplanan band

yapıları gösterilmiştir. Görüldüğü gibi çok-parçacık etkileşmeleri, elektronik band yapısı üzerinde küçük bir etkiye sahiptir. Bu gözlem, çalışılan diğer sistemler için de geçerlidir. Yasak enerji aralığındaki değişiklik ise 0.2 eV civarındadır.

**Şekil 1:** (CoFe)TiAl yarıiletkeninin PBE ve GW yaklaşımları ile hesaplanmış band yapısı



Sistemlerin örgü sabitleri 6 Å civarındayken band araliksız oldukları gözlenmiştir.[3]

### Kaynakça

1. www.flapw.de. Parstky, A. Basr, F. Benetti, M. Trapso, G. Norosk, "Nonlinear nonrelative example journal and shifts", Journal of Transps Triology **393**, 1033–1042 (2009).
2. C. Friedrich, S. Blügel, and A. Schindlmayr, "Efficient implementation of the GW approximation within the all-electron FLAPW method", Physical Review B **81**, 12510 (2010).
3. M. Tas, E. Şaşıoğlu, I. Galanakis, C. Friedrich, and S. Blügel, "Quasiparticle band structure of the almost-gapless transition-metal-based Heusler semiconductors", arXiv:1603.04677v1

## Quantum Correlations and Coherence in Spin-1 Heisenberg Chains

A. L. Malvezzi (1), G. Karpat (1, 2), B. Çakmak (3), F. F. Fanchini (1), T. Debarba (4), R. O. Vianna (5)

*1 Faculdade de Ciências, UNESP - Universidade Estadual Paulista, Bauru, SP, 17033-360, Brazil*

*2 Turku Center for Quantum Physics, Department of Physics and Astronomy, University of Turku, FI-20014, Turun yliopisto, Finland*

*3 Department of Physics, Koç University, İstanbul, Sarıyer 34450, Turkey*

*4 Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Campus Cornélio Procópio. R. Alberto Carazzai, 1640, Cornélio Procópio, PR, 86300-000 - Brazil.*

*5 Departamento de Física - ICEx - Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Pres. Antonio Carlos 6627, Belo Horizonte, 31270-901, Brazil*

We explore quantum and classical correlations along with coherence in the ground states of spin-1 Heisenberg chains, namely the one-dimensional XXZ model and the one-dimensional bilinear biquadratic model, with the techniques of density matrix renormalization group theory. Exploiting the tools of quantum information theory, that is, by studying quantum discord, quantum mutual information and three recently introduced coherence measures in the reduced density matrix of two nearest neighbor spins in the bulk, we investigate the quantum phase transitions and special symmetry points in these models. We point out the relative strengths and weaknesses of correlation and coherence measures as figures of merit to witness the quantum phase transitions and symmetry points in the considered spin-1 Heisenberg chains. In particular, we demonstrate that as none of the studied measures can detect the infinite order Kosterlitz-Thouless transition in the XXZ model, they appear to be able to signal the existence of the same type of transition in the bilinear biquadratic model. However, we argue that what is actually detected by the measures here is the SU(3) symmetry point of the model rather than the infinite order quantum phase transition. Moreover, we show in the XXZ model that examining even single site coherence can be sufficient to spotlight the second-order phase transition and the SU(2) symmetry point.

The investigation of many-body quantum systems have revealed very interesting and deep physical concepts such as quantum phase transitions (QPT). QPTs are abrupt changes in the ground state of a quantum many-body system as one or more parameters of the Hamiltonian is varied at absolute zero temperature [1]. In contrast to thermal phase transitions, which are driven by thermal fluctuations in the system, QPTs are driven by quantum fluctuations stemming from the uncertainty principle. However, it is also possible to see the effects of a QPT at sufficiently low but finite temperatures where the quantum fluctuations are not washed away by the thermal effects. Traditionally, phase transitions are classified based on the non-analytic behavior in the derivatives of the ground state energy. A more involved type of phase transition, which does not fit to the traditional classification scheme, is known as the Kosterlitz-Thouless (KT) transition. In this case, there is no divergence or discontinuity in the derivatives of the ground state energy and no symmetry breaking thus KT transitions are said to be of infinite order [2]. Quantum many-body systems possess correlations of various different nature due to the interaction among their constituents. Therefore, in addition to the traditional ways of witnessing quantum phase transitions, it has been recently suggested that the tools of quantum information theory [3, 4] can also be exploited to characterize the transition points (TPs) of quantum phase transitions. Especially, in quantum spin models, the behavior of entanglement, quantum discord and many other correlation measures have been investigated. Recently, a new line of research has

emerged that concerns itself with the characterization and quantification of quantum coherence contained in a quantum state. Based on these new quantum coherence measures, similar analysis have been done in the ground states of several spin chains. However, many of these studies focusing on quantum correlations in spin chains have been done for spin-1/2 systems. On the other hand, spin-1 models have richer phase diagrams and show more complex physical phenomena, yet, methods for obtaining the ground state of such systems are rather more involved.

In this talk, we will consider two very well known one dimensional spin-1 Heisenberg models, namely, the spin-1 XXZ chain and the spin-1 bilinear biquadratic chain. Here we obtain the ground state of these systems by making use of the methods of density matrix renormalization group theory (DMRG). Then, we extensively investigate the behavior of mutual information, quantum discord and three recently introduced coherence measures namely, relative entropy of coherence, l1 norm of coherence and Wigner-Yanase skew information, for the reduced density matrix of two nearest neighbor spins in the bulk. Our analysis lets us establish relations between the phase transitions and symmetry points in the considered spin-1 Heisenberg chains and the studied correlation and coherence measures [5].

**Kaynakça**

1. S. Sachdev, Quantum Phase Transitions, (Cambridge University Press, Cambridge, 2011).
2. X.-G. Wen, Quantum Field Theory of Many-Body Systems (Oxford University Press, USA, 2004).
3. R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, Rev. Mod. Phys. 81, 865 (2009)
4. K. Modi, A. Brodutch, H. Cable, T. Paterek, and V. Vedral, Rev. Mod. Phys. 84, 1655 (2012).
5. A. L. Malvezzi, G. Karpat, B. Çakmak, F. F. Fanchini, T. Debarba and R. O. Vianna, arXiv:1602.03731 [quant-ph].



# Poster Sunumları

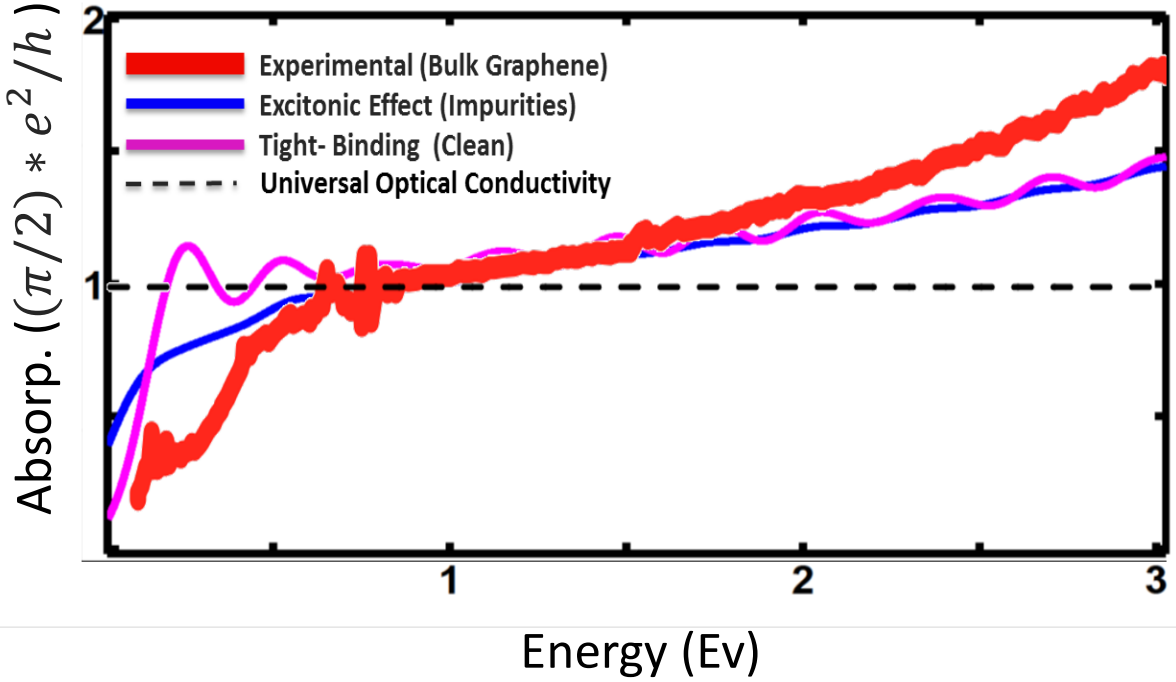
## Grafen Kuantum Noktalarının Optik Özellikleri

A. ALTINTAŞ, H. U. ÖZDEMİR, K. ÇAKMAK, A.D. GÜÇLÜ

*Fizik Bölümü, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Urla 35430, İzmir, Türkiye*

5514 atomdan oluşan saf ve saf olmayan grafen kuantum noktalarının (GKN) optiksel iletimini teorik olarak inceliyoruz [1]. Hesaplamamızda Tight Binding ve Mean Field Hubbard yaklaşımlarını kullanıyoruz. Saf olmayan durumu modellemek için ek olarak rasgele üretilmiş bir potansiyel modeli sisteme dahil ediyoruz. GKN için bulduğumuz optiksel iletim değeri, isole tek tabakalı düzlemsel grafen yapısı için değeri  $(\pi/2) * e^2/h$  olan evrensel optik iletim değerine çok yakın olduğunu gözlemliyoruz [2,3]. Düzensizlik oluşturmak için eklenen potansiyelden kaynaklı Fermi seviyesinde

oluşan elektron-hole anormalliklerinin, electron-electron etkileşimi de hesaba katılınca, kaybolduğunu ve optiksel iletimini de bozukluklara karşı güçlü kıldığını gözlemliyoruz.



Şekil 1: Optik soğurma spektrumu

## Kaynakça

1. A. D. Güçlü, P. Potasz, and P. Hawrylak, “Zero-energy states of graphene triangular quantum dots in a magnetic field”, Phys. Rev. B **88**, 155429-(2013).
2. Nair, R. R. et al, “Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene”, Science **320** 5881-1308 (2008).
3. Kin Fai Mak et al, “Seeing Many-Body Effects in Single- and Few-Layer Graphene: Observation of Two-Dimensional Saddle-Point Excitons”, Phys. Rev. B **106**, 046401-(2011).

## Synthesis and Nitrogen doping of graphene grown by CVD

Alper Yanılmaz<sup>1\*</sup>, Hasan Aydın<sup>1</sup>, Nesli Yağmucukardeş<sup>1</sup> ve Yusuf Selamet<sup>2</sup>  
*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, Gülbahçe, Urla, İzmir*

In this work, we report a plasma treatment strategy to obtain nitrogen doped CVD synthesized graphene (N-Graphene) with optimized growth and doping conditions. Pristine and doped graphene samples were characterized by Raman Spectroscopy. Additionally, the change in the intensities of D, G and G' peaks and the shift of G and G' peak positions were also investigated after doping process to estimate charge carriers.

Graphene is one of the members of carbon nanostructures. Due to its  $sp^2$  hybridization and one atom thickness, graphene breaks so many records in terms of strength, electrical and heat conduction. These novel properties of graphene open a wide range of applications in nanodevices such as field effect transistors (FETs), transparent electrodes, transistors and supercapacitors.

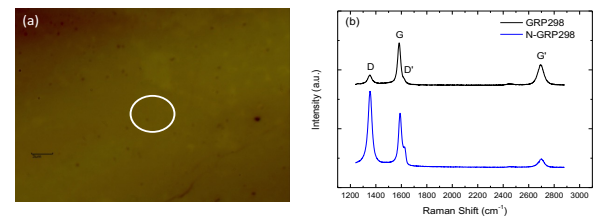
However, for some applications such as a high on/off ratio of FETs, and an increase in conductivity of transparent electrodes, semiconducting graphene is essential [1, 2]. In the literature, there are several techniques about nitrogen-doping of graphene [3]. In this work, we doped graphene with nitrogen by using plasma treatment method.

In this study, we grew large area graphene with methane and ethylene on copper foil at low pressure by CVD. After the growth, the graphene films were transferred to Si/SiO<sub>2</sub> wafer then samples were doped in the plasma chamber. The chamber pressure was reduced down to ~30mTorr in 5 min. Then nitrogen was introduced into the chamber to create plasma by applying a radio-frequency forward power of 30W.

All Raman Spectra results carried out by Ar<sup>+</sup> ion laser 488 nm (2.54eV) excitation with a 600

grooves/mm grating to see all G, G' and D peaks of N-graphene and pristine graphene in a single spectrum

We used Raman Spectroscopy to characterize N-graphene. Since the intensity ratio of G' and G peaks ( $I_{G'}/I_G$ ) is dependent on doping, the intensity ratio of D and D' peaks is to probe the nature of defects ( $I_D/I_D'$ ) and intensity ratio of D and G peaks ( $I_D/I_G$ ) give an information about the relationship between the crystallite size and nitrogen doping level owing to the defects these intensity ratios were calculated. Additionally, the shift of G peak position was also investigated after doping process



**Figure 1.** (a) Optical image and (b) Raman spectra of N-GRP298. Circle indicates where the Raman spectra were collected. Deconvolution of G' peak points multilayer graphene growth in that region as seen from pristine graphene spectrum.

### References

1. X. Wang, X. Li, L. Zhang, Y. Yoon, P.K. Weber, H. Wang, J. Guo, H. Dai, N-doping of graphene through electrothermal reactions with ammonia, *Science*, **324** (2009) 768-771.
2. X. Wang, Y. Ouyang, X. Li, H. Wang, J. Guo, H. Dai, Room-temperature all-semiconducting sub-10-nm graphene nanoribbon field-effect transistors, *Physical review letters*, **100** (2008) 206803.
3. H. Wang, T. Maiyalagan, X. Wang, Review on recent progress in nitrogen-doped graphene: synthesis, characterization, and its potential applications, *Acs Catalysis*, **2** (2012) 781-794.

Kama Türü Örneklerde Kolesterik Sıvı Kristallerin Morfolojik ve Termotropik  
Özellikleri: Optiksel Çalışma

Arif NESRULLAZADE<sup>1</sup>, Zübeyit TAĞIYEV<sup>2</sup>, Şahin BAYRAMOV<sup>2</sup>,

Atilla Eren MAMUK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Fizik Bölümü, Sıvı ve Katı Kristaller Laboratuvarı, 48000 Muğla,

TÜRKİYE

<sup>2</sup> Azerbajjan Medikal Üniversitesi, Biyolojik ve Medikal Fizik Bölümü, Bakü, AZERBAYCAN

Sıvı kristaller, üç boyutta düzene sahip katı kristaller ile üç boyutlu sıvılar arasında kısmen düzene sahip anizotropik malzemelerdir. Kolesterik (*Ch*) sıvı kristaller sıvı kristal malzemelerin özel bir türüdür. *Ch* sıvı kristaller optiksel olarak aktifler, dikroizm gösterirler, negatif optiksel anizotropi ve kiral yapılar sergilerler, optiksel olarak da çift eksenli anizotropik malzemelerdir. Sıra dışı optiksel özellikleri, *Ch* sıvı kristalleri temel araştırmalarda, teknik ve teknolojik uygulamalarda önemli malzemeler olarak yapmaktadır.

Literatürden bilinen bilimsel araştırma çalışmalarında, *Ch* sıvı kristallerin mezomorfik ve morfolojik özelliklerinin araştırılması, ince ve kalın sandviç hücrelerde, nadir olarak da değişen kalınlığa sahip hücrelerde gerçekleştirilmiştir. O ise *Ch* sıvı kristallerin kiral yapılarından dolayı kama türü örnekleri kullanarak incelenmesi, söz konusu sıvı kristallerin mezomorfik, morfolojik ve termotropik özellikleri ile ilgili daha fazla bilgi vermektedir.

Bu çalışmada, *Ch* sıvı kristallerin özgün olan ve özgün olmayan tekstürlerini, morfolojik ve termotropik özelliklerini ve yapısal düzen özelliklerini farklı eğim açısına sahip kama türü örnekleri ile açıkladık ve yorumlamaya çalıştık. Ayrıca malzemelerin tekstürlerindeki defektif oluşumlar ve topolojileri üzerine çalışmalar yapıldı. Bu çalışmada ortoskopik/konoskopik gözlemlerle optik polarizasyon mikroskopisi yöntemi kullanıldı. Özgün olan ve özgün olmayan tekstürler, farklı türde defektif oluşumlar ve elde edilen sonuçlara ait yorumlar çalışmamızda verilecektir.

## Spin-Yörünge Etkileşimli Çift Kuantum Telinin Enerji ve Spin Özelliklerine Zeeman ve Stark Etkileri

Bircan Gişi<sup>1</sup>, Yenil Karaaslan<sup>1</sup>, Serpil Şakiroğlu<sup>2</sup>, İsmail Sökmen<sup>2</sup>

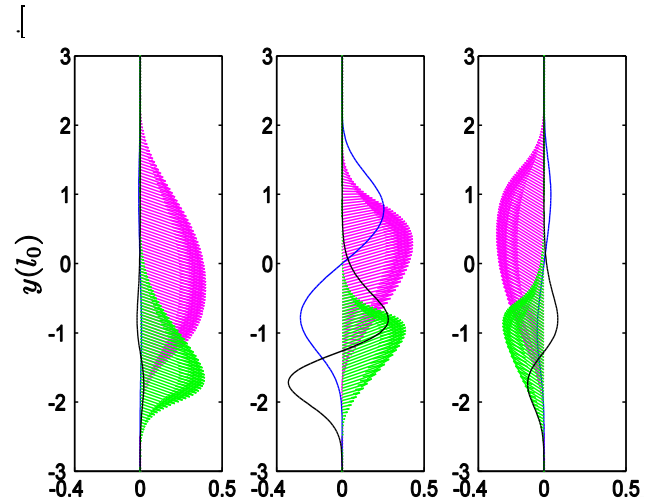
<sup>1</sup>Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35390, İzmir

<sup>2</sup>Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 35390, İzmir

Bu çalışmada spin-yörünge etkileşimleri varlığında, simetrik anharmonik potansiyeli ile tanımlanan çift kuantum telinin elektronik ve spin özellikleri üzerine düzlem-içi manyetik alandan kaynaklanan Zeeman ve büyüme doğrultusunda uygulanan elektrik alanın yarattığı Stark etkileri incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar, içsel mekanizmaların ve dış parametrelerin enerji bant yapısını önemli ölçüde değiştirdiğini ve spin desenleri üzerinde izlerini bıraktığını göstermektedir.

Son yıllarda modern yarı iletken büyüme tekniklerinin gelişmesi değişen şekillere ve boyutlara sahip kuantum kuyu, kuantum tel ve kuantum nokta gibi düşük-boyutlu hapsedilmiş sistemlerin elde edilmesine olanak sağlamaktadır [1]. Bu nano yapıların elektronik ve spin özellikleri elektrik ve optik modülasyon teknolojisinde artan veri işleme hızına, düşük elektrik tüketimine sahip yeni cihazların araştırılmasında temel rol oynamaktadır. Yük taşıyıcılarının hapsedilmesi elektronik, spin özelliklerini değiştirmektedir [2]. Kuantum hesaplama, spin-alan etkili transistörler ve spin filtreleri uygulamalarında önemli potansiyele sahip olan bu sistemlerin elektronik ve spin özelliklerinin incelenmesi kaçınılmaz olmuştur.

Bu çalışmada, Rashba ve Dresselhaus spin-yörünge çiftlenimi etkisi altında yük taşıyıcılarının bir potansiyel bariyeri ile ayrılmış iki çukurdan oluşan çift kuyu potansiyeli ile hapsedilmesi ile oluşan çift kuantum telinin enerji band yapısı, spin desenleri üzerine düzlem-içi manyetik alan ve elektrik alan etkileri incelenmiştir. Schrödinger denkleminin nümerik çözümü Galerkin yöntemine dayalı olan bir boyutta sonlu elemanlar yönteminden elde edilmiştir[3].



**Şekil 1:** Güçlü Rashba ve Dresselhaus spin-yörünge etkileşimleri ( $\Delta_R=0.2$ ,  $\Delta_D=0.1$ ) varlığında  $B=3$  T ve  $\phi=\pi/4$  yönelimli manyetik alan için elektrik alan yokluğunda (pembe) ve varlığında (yeşil) üç farklı yayılma momentumuna ait spin yapıları

Manyetik alan, elektrik alan ve spin-yörünge çiftleniminin birlikte varlığı daha karmaşık enerji dağılımına ve spin yapılarının oluşmasına sebep olmaktadır. Elde edilen sonuçların sistemin elektronik, spintronik ve taşınım gibi özelliklerinin anlaşılmasında katkı sağlaması beklenmektedir.

### Kaynakça

1. P. Pedram, M. Mirzaei, S.S. Gousheh, "Accurate energy spectrum for double-well potential:periodic basis", *Molecular Physics* **108**, 1949-1955 (2010).
2. M. Governale, U. Zülicke, "Spin accumulation in quantum wires with strong Rashba spin-orbit coupling", *Physical Review B* **66**, 073311 (2002).
3. B. Gisi, Y. Karaaslan, S. Sakiroglu, E. Kasap, H. Sari, I. Sokmen, " Effects of an in-plane magnetic field on the energy dispersion, spin texturing and conductance of double quantum wires", *Superlat. Micr.* **91**, 391 (2016).

## Grafen Yüzeyinde Kayan Grafen Parçacığı

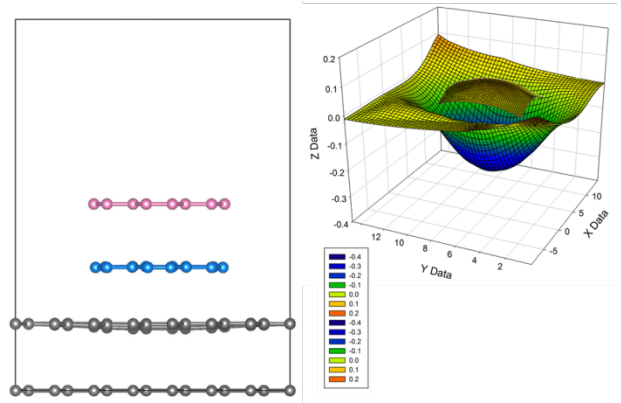
Ceren Tayran<sup>1</sup>, Ceren Sibel Sayın<sup>2</sup>, Oğuz Gülseren<sup>2</sup><sup>1</sup>Gazi Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06500 Ankara<sup>2</sup>Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800 Ankara

Mekanik sistemlerde sürtünme ve kayganlık kontrolü için iki temas eden yüzeyin birbirlerine göre hareketlerini anlamak temel esastır. Nanoteknoloji geliştikçe yeni sistemlerin tasarımında sürtünmenin aynı makroskobik düzeyde olduğu gibi nanoölçekte de anlaşılması gerekir. Bu çalışma alanı nanotriboloji olarak adlandırılır. Nanoteknoloji ve tribolojide merak uyandırıcı malzemelerden biri de grafitir. Tabakalar arası bağlanma (zayıf van der waals bağlar) tabaka içi bağlanmadan (güçlü kovalent bağlar) çok daha zayıf olduğundan tabakalar birbirinden kolaylıkla ayrılabilir. Bu durum grafitte kaygan olma ve düşük sürtünme özelliği kazandırır

Grafen ve grafit yüzeylerinde atomik kuvvet mikroskobu ve bundan geliştirilen sürtünme kuvvet mikroskobu ile nanotriboloji çalışmaları yapılmaktadır [1]. Bu çalışmalar moleküler dinamik metotlar [2], istatistiksel modeller [3] ve yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) [4] ile başarılı bir şekilde açıklanmaktadır. Ancak DFT çalışmalarının sayısı çok azdır. Buna dayanarak bu çalışmada grafen parçacığı ile sonsuz grafen yüzeyi arasındaki sürtünme kuvveti yoğunluk fonksiyoneli teorisine (DFT) dayanan atomik bir modelle yapılacaktır. Çalışmada, deneysel çalışmalar referans alınarak grafen yüzeyinde kayan grafen parçacığı olmak üzere bir model tasarlandı.

Optimize olmuş sistemdeki grafen parçacığı incelendiğinde, sonlu grafen parçacığındaki doymamış bağlardan dolayı köşelerde yeniden yapılanma meydana gelir. Ayrıca, sabit grafen parçacığı ile optimize olan grafen parçacığı arasındaki mesafenin arttığı, optimize olan grafen parçacığı ve yüzey arasındaki mesafelerin azaldığı görüldü.

Aslında sabit olan parçacık ve yüzey optimize olan iki tabakayı birbirine yaklaştırıyor. Bunun sonucunda sistemde bir deformasyon oluşuyor ve optimize olan sonsuz grafen yüzeyinde çukurlaşma, sonlu grafen parçacığına ise tümsekleşme görüldü (Şekil 1).



Şekil 1: Grafen yüzeyinde kayan grafen parçacığı

**Teşekkür:** Bu çalışma 114F162 nolu proje ile TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir

#### Kaynakça

1. M. Dienwiebel, G. S. Verhoeven, N. Pradeep, J. W. M. Frenken, J. A. Heimberg, H. W. Zandbergen, "Superlubricity of Graphite", *Physical Review Letters* **92**, 126101 (2004).
2. M. M. van Wijk, M. Dienwiebel, J. W. M. Frenken, and A. Fasolino, "Superlubric to stick-slip sliding of incommensurate graphene flakes on graphite", *Physical Review B* **88**, 235423 (2013).
3. G. S. Verhoeven, M. Dienwiebel, and J. W. M. Frenken, "Model calculations of superlubricity of graphite", *Physical Review B* **70**, 165418 (2004).
4. M. Reguzzoni, A. Fasolino, E. Molinari, M.C. Righi "Potential Energy Surface for Graphene on graphene: Ab initio derivation, analytical description, and microscopic interpretation", *Physical Review B* **86**, 245434 (2012).

## Yeni Nesil Güneş Pillerinde Ara Yüzey Modifikasyonu ile Verimin Arttırılması

**Duygu Akın Kara<sup>1\*</sup>, Görkem Oylumluoğlu<sup>1</sup>, Mesude Zeliha Yiğit<sup>2</sup>, Koray Kara<sup>3</sup>, Çisem Kırbıyık<sup>4</sup>,  
Mustafa Can<sup>2</sup>, Mahmut Kuş<sup>4</sup>.**

<sup>1</sup> *Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 48000, Kötekli/Muğla*

<sup>2</sup> *İzmir Katip Çelebi Üniversitesi, Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Mühendislik Bilimleri Bölümü, 35620,  
Çiğli/İzmir*

<sup>3</sup> *Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 42250, Selçuklu/Konya*

<sup>4</sup> *Selçuk Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 42250, Selçuklu/Konya*

Perovskite tabanlı yeni nesil organik-inorganik hibrit güneş pilleri, düşük maliyetleri ve kısa zamanda % 20 ye ulaşan verim değerleri nedeniyle büyük ilgi görmektedir. Bu güneş pillerinde, perovskite soğurucu katman olarak kullanılmakta olup ABX<sub>3</sub> yapısındadır: A organik bir katyon (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>I), B metal katyon (Pb) ve X ise halojen (I, Br, Cl) şeklindedir. Perovskite güneş pillerinde tekrarlanabilirlik, verim ve stabilite çözülmesi gereken problemler olarak görülmekte ve bu sorunları aşmak için birçok çalışma yapılmaktadır. Yeni nesil güneş pillerinde perovskite katmanının morfolojisi pilin verimliliğini doğrudan etkilemekte ancak tek başına yeterli olmamaktadır. Bu bağlamda, ara yüzeydeki kayıpların azaltılması verimli ve yüksek

performanslı güneş pili üretmede oldukça önemlidir. Bu çalışmada, ITO yüzeyi, yüzey aktif grubunda Flor (2F) bağlı kendiliğinden organize tek katman moleküller olan SAM(Self Assembled Monolayer) molekülleri ile modifiye edilerek ITO/PEDOT:PSS ara yüzeyindeki kayıpların azaltılması ve anot tarafına boşlukların geçişinin kolaylaştırılması üzerinde durulmuştur. Bu modifikasyon işlemi sonrasında ITO/PEDOT:PSS/CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>/PCBM/Ag yapısında tamamen çözünür süreçlerle elde edilen düzlemsel yapıdaki yeni nesil güneş pillerinde arayüzeylerin iyileştirilerek verimin arttırıldığı gözlemlenmiştir.

## İki Boyutlu WS<sub>2</sub> İnce Filmlerinin Yüzey, Arayüzey ve Optik Özellikleri

Yusuf Koçak, Emre Gür

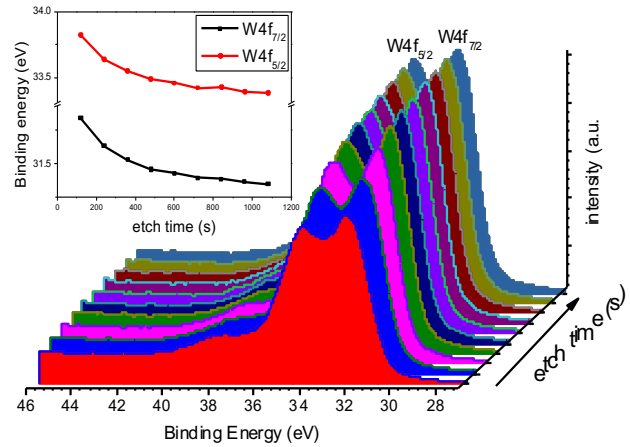
Atatürk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 25240 Erzurum

WS<sub>2</sub> ince filmleri radyo frekans magnetron saçırma (RFMS) tekniği ile farklı büyütme şartlarında ve farklı alttaşlar (Cam, Silisyumun farklı tipleri vb.) üzerine birkaç tabakadan 700nm ye kadar büyütüldü. Büyütülen ince filmler üzerine, RF gücü, alttaş sıcaklığı, kalınlık ve alttaşların türü gibi büyütme şartlarının etkisi X-ışını difraksiyonu (XRD), X-ışını fotoelektron spektroskopisi (XPS), Raman spektroskopisi (RS), Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ve optik absorpsiyon ölçümleri ile incelendi. XRD çalışmaları büyütme şartlarının malzemenin kristal yapısı üzerinde oldukça büyük bir etkiye sahip olduğunu göstermiştir. Yüksek RF gücünde ve daha kalın filmlerde (002) düzlemine ait pikler daha baskın olarak gözlenmişken, ince filmlerin hepsinde (10*l*) ve (11*l*) (*l*=0,1,2,3) düzlemlerine ait pikler de gözlenmiştir. Raman ölçümlerinden düzlem içi (E<sub>2g</sub><sup>1</sup>) ve düzlem dışı (A<sub>1g</sub>) titreşim modları sırasıyla 352 cm<sup>-1</sup> ve 418 cm<sup>-1</sup> olmak üzere iki mod gözlenmiştir. W4f<sub>7/2</sub> ve W4f<sub>5/2</sub> derinlik profiline bağlı XPS ölçümleri ile bağlanma enerjileri farklı büyütme şartlarında yaklaşık olarak sırasıyla 31.5eV ve 33.8eV olarak gözlenmiştir. Yine XPS spektrumlarından sülfüre ait S2p<sub>3/2</sub> ve S2p<sub>1/2</sub> pikleri sırasıyla 161.88eV ve 163.18eV bağlanma enerjilerinde gözlenmiştir. Optik soğurma ölçümlerinden büyütülen ince filmlerin bant aralığı enerjisi filmin kalınlığına bağlı olarak az bir değişim olduğu görülmüş ve yaklaşık değerinin 1.3eV olduğu bulunmuştur.

Grafenin sahip olduğu üstün özelliklerinden dolayı, benzer yapıda olmaları ve grafen ile kıyaslandığında bazı ekstra özelliklere sahip olmalarından dolayı geçiş metal-dikalgonit'leri (TMDCs) üzerine yapılan araştırmalar son yıllarda artmıştır. Grafen ile kıyaslandığında bu malzemelerin belirli bir bant aralığının olması yarıiletken aygıt teknolojisi için eşsiz uygulama alanları açmıştır. Öyle ki bu malzemelerin elektronik, optik, mekanik, kimyasal ve ısıl özellikleri araştırmacılar tarafından son yıllarda yoğun bir şekilde çalışılmış ve çalışılmaya devam etmektedir. İki boyutlu geçiş metali dikalgonitler bu bağlamda umut verici malzemelerdir [1].

Tungsten disülfür (WS<sub>2</sub>), fotovoltaik güneş hücreleri, kuru yağlayıcılar, katalizörler, lityum iyon pillerindeki elektrotlar, triboloji gibi birçok uygulama alanı olan TMDC'lerin grubundan olan bir yarıiletken malzemedir. Polikristal filmlerin uygulamalarına bağlı olarak yüksek anizotropik yapısı tip-1 ve tip-2 yapılarından birine göre büyür.

Tip-1 yapısı kristalin c-ekseninin alttaş üzerine dik yönde büyümesi ve tip-2 yapısı ise kristalin c-ekseninin alttaş üzerine paralel büyümesi demektir [2].



Şekil 1: WS<sub>2</sub> ince filminin derinlik XPS profili.

Yukarıdaki şekilde derinlik profili XPS ölçümü gözükmektedir. Şeklin içine yerleştirilmiş küçük şekilde ise W4f<sub>7/2</sub> ve W4f<sub>5/2</sub> piklerinin bağlanma enerjisinin derinlikle değişimi gözükmektedir. Tungsten için her iki bağlanma enerjisinde derinlikle azaldığı gözlenmektedir.

### Kaynakça

1. Wang QH, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman JN, Strano MS. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. Nature nanotechnology, 7(11) 699-712 (2012).
2. Deepthi B, Barshilia HC, Rajam K, Konchady MS, Pai DM, Sankar J, et al. Structure, morphology and chemical composition of sputter deposited nanostructured Cr-WS<sub>2</sub> solid lubricant coatings. Surf Coat Technol. 205(2):565-74 (2010).



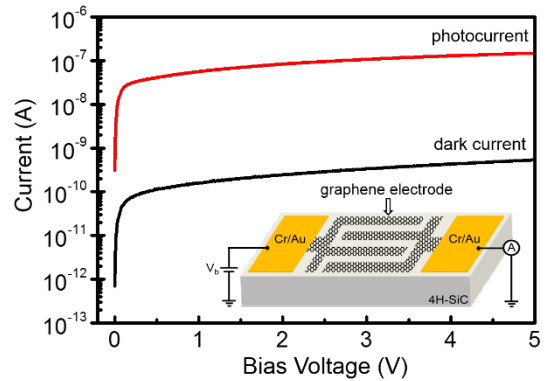
## Epitaksiyel grafen kontakt elektrotların optoelektronik aygıtlarda uygulamaları

E. Kuşdemir, D. Özkendir, D. Yeşilpınar, C. Çelebi

*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü*

Üstün elektriksel iletkenliği ve mekanik mukavemeti gibi öne çıkan özellikleri nedeniyle ışık geçirgen, tek atom kalınlığındaki grafenin yeni nesil fotodetektör ve fotovoltaiik güneş pillerinde kontakt elektrotu olarak kullanımı araştırılmaktadır. ITO, Ni/Au, Ti ve Ti/W gibi diğer optik geçirgen iletkenlerden farklı olarak grafen 200-400 nm dalgaboyu aralığında %90 geçirgenliğe sahiptir [1]. Yüksek ultraviyole radyasyon geçirgenliği ve sıfır bant aralığı sayesinde grafenin, özellikle de UV bölgede çalışan fotodetektörlerde kullanımı arzu edilmektedir. UV duyarlı silisyum karbür (SiC) yarıiletken kristalleri üzerinde grafenin epitaksiyel büyütme teknikleri ile, hiçbir aktarma prosesine gerek kalmaksızın elde edilebildiği bilinmektedir [2,3].

Bizim çalışmamızda homojen, tek katman epitaksiyel grafen, yüksek sıcaklıkta tavlama tekniğiyle ultra yüksek vakum altında SiC yarıiletken kristali üzerine büyütülmüştür. Bu çalışmamızda bizler epitaksiyel grafen/SiC arayüzündeki Schottky bariyerine dayanan özgün bir grafen-yarıiletken-grafen (GSG) tipi UV duyarlı fotodetektör aygıtı üreterek bu aygıtın karakterizasyonunu yaptık. Üretilen GSG aygıtı (resimde görülmektedir) optik geçirgen 20 grafen elektrottan oluşmaktadır. GSG aygıtımızın performansı 254 nm dalgaboylu UV ışığın altında ve karanlıkta karakterize edilmiştir. Grafen elektrotlu örneklerimiz konvensiyonel düşük kaçak akımlı metal-yarıiletken-metal (MSM) tipi fotodetektörlerin tipik I-V karakteristiği ile birlikte mükemmel fotoakım tersinirliği ve yüksek cevap hızı özelliği göstermektedir [4]. Deneysel olarak elde edilen sonuçlar, epitaksiyel grafenin özellikle de SiC bazlı optoelektronik aygıtlarda ışık geçirgen iletken olarak kullanılabilceğini göstermektedir.



**Şekil-1:** Epitaksiyel grafen/ 4H-SiC GSG fotodetektörünün karanlık akım ve fotoakım grafikleri.

**Kaynakça**

1. Chang S J, Lin T K, Su Y K, Chiou Y Z, Wang C K, Chang S P, Chang C M, Tang J J and Huang B R 2006 Homoepitaxial ZnSe MSM photodetectors with various transparent electrodes Mater. Sci. Eng. B 127 164–8
2. De Heer W A, Berger C, Wu X, Sprinkle M, Hu Y, Ruan M, Strosio J A, First P N, Haddon R, Piot B et al. 2010 Epitaxial graphene electronic structure and transport J. Phys. D. Appl. Phys. 43 374007
3. Seyller T, Bostwick A, Emtsev K V, Horn K, Ley L, McChesney J L, Ohta T, Riley J D, Rotenberg E and Speck F 2008 Epitaxial graphene: a new material Phys. status solidi 245 1436–46
4. Kuşdemir E, Özkendir D, Fırat V, Çelebi C 2015 Epitaxial graphene contact electrode for silicon carbide based ultraviolet photodetector J. Phys. D. Appl. Phys. 48 95104

## Tek Tabaka MoS<sub>2</sub>'nin Sınır Kusurlarının Elektronik, Manyetik ve Transport Özellikleri

Fadıl İyikanat<sup>[1]</sup>, H. Sevinçli<sup>[2]</sup> ve R. T. Senger<sup>[1]</sup>

[1] İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430 İzmir

[2] İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Malzeme Bölümü, 35430 İzmir

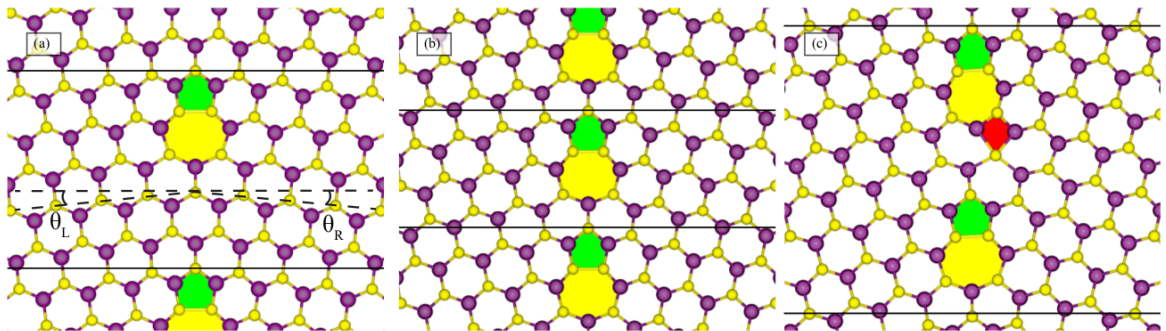
Bu çalışmada sınır kusurları içeren tek tabakalı MoS<sub>2</sub>'nin yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli kuramı kullanılarak incelendi. Oluşturulan sınır kusurları geometrik olarak tamamen optimize ettirilip, yapısal kararlılıkları çalışıldı. Daha önceki çalışmalar ile uyumlu bir şekilde oluşturulan sınır kusurlarının manyetik özellikler gösterebileceği bulundu. Kuantum iletkenlik hesapları, tek tabaka MoS<sub>2</sub>'nin yük taşınım özelliklerinin sınır kusurlarına hassas bir şekilde bağlı olduğunu gösterdi. Ayrıca tek tabaka MoS<sub>2</sub>'deki çizgisel kusurların spintronik uygulamalarında önemli olabileceği bulundu.

Tek tabaka MoS<sub>2</sub> üretiminde bir çok farklı yöntem kullanılmaktadır.[1,2] Bu yöntemlerin hepsinde MoS<sub>2</sub>'nin sentezlenmesi sırasında kaçınılmaz olarak çok çeşitli kusurlar oluşmaktadır. Bunlardan bazıları nokta kusurları, sınır kusurları ve ortamda bulunan yabancı atomlar olarak sıralanabilir. Bu kusurlar yük taşıyıcıları için saçılma bölgeleri veya tuzak bölgeleri olarak görülebilir ve bu kusurlar malzemelerin bir çok özelliğini engelleyebilir veya kullanışlı hale getirebilir. Bu yüzden oluşabilecek kusurların tek tabaka MoS<sub>2</sub>'nin özelliklerini nasıl etkilediğinin çalışılması oldukça önemlidir.

Sınır kusurları ile bir araya getirilen farklı yönelime sahip MoS<sub>2</sub> tabakaları, üç farklı yönelim açısı için Şekil 1'de gösterilmiştir. İncelenen sınır kusurlarının hepsinde sol yönelim açısı ( $\theta_L$ ) ve sağ yönelim açısı ( $\theta_R$ ) eşittir. İncelenen yapı sınır kusurları yönünde periyodiktir. Ayrıca sınır kusurunu oluşturan sol ve sağ bölgelerdeki MoS<sub>2</sub>'lerinin farklı atom kombinasyonları da incelenmiştir.

Farklı yönelim açıları ve farklı atom kombinasyonları Şekil 1'de gösterildiği gibi çok farklı kusur tiplerine sebep olmaktadır (5, 7, 4 ve hatta 8 tipi kusurlar). Önceki çalışmalar ile uyumlu bir şekilde oluşan sınır kusurlarında dikkate değer miktarlarda manyetik moment ortaya çıktığı görülmüştür.[3] Sınır kusurlarındaki metal atomlarının konumlanmasına bağlı olarak incelenen sistemin manyetik momentinin kontrol edilebileceği gösterilmiştir. Yapılan kuantum yük taşıma hesapları, MoS<sub>2</sub>'de oluşan çizgisel kusurların MoS<sub>2</sub>'nin iletkenliğini oldukça düşürdüğünü göstermiştir. Ayrıca sınır kusurları boyunca metal atomlarında oluşan manyetik moment sebebiyle MoS<sub>2</sub>'nin spin kutuplu yük taşıma özelliğine sahip olabileceği bulunmuştur.

Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 114f397 no'lu proje kapsamında desteklenmiştir.



**Şekil 1** (a) 13.2°, (b) 21.8° ve (c) 27.8° lik yönelim açılına sahip sınır kusurları içeren MoS<sub>2</sub>'nin kuş bakışı görünüşü. Sarı, yeşil ve kırmızı bölgeler sırasıyla 5, 7 ve 4 tipi kusurları göstermektedir.

**Kaynakça**

1. B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, and A. Kis "Single-layer MoS<sub>2</sub> transistor", Nat. Nanotechnol. **6**, 147–150 (2011).
2. S. Najmaei, Z. Liu, W. Zhou, X. Zou, G. Shi, S. Lei, B. I. Yakobson, J. -C. Idrobo, P. M. Ajayan, and J. Lou "Vapour phase growth and grain boundary structure of molybdenum disulphide atomic layers", Nat. Mater. **12** 754–759 (2013).
3. Z. Zhang, X. Zou, V. H. Crespi, and B. I. Yakobson "Intrinsic Magnetism of Grain Boundaries in Two-Dimensional Metal Dichalcogenides", ACS Nano **7 (12)**, 10475-10481 (2013).

## HUBBARD MERDİVENİNDE İŐARET PROBLEMİ

**Gökhan Öztarhan, Nejat Bulut**

*Fizik Bölümü, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Gülbahçe, Urla 35430*

Numerik işaret problemi çok-tanecik sistemlerinin numerik simülasyonlarında fonksiyonel integrallerinin pozitif tanımlı bir değeri almamasıyla ortaya çıkan başlıca problemlerden biridir. Çalışmamızda işaret probleminin Hubbard merdiveni model parametrelerine olan bağıllığını inceliyoruz. Özellikle, işaretin ortalama değerinin atlama parametresi  $t_1$ , elektron yoğunluğu  $\langle n \rangle$ , Coulomb potansiyelinin sayısal değeri  $U$  ve sıcaklığın tersi  $\beta$ 'ya bağılı olarak nasıl değıştiğini araştırıyoruz. Amacımız bu modelde işaretin değerini neyin belirlediğini anlamaktır.

## Demir Nanoteller Üzerindeki Oksitlemenin Çekme Sonucu Oluşan Deformasyonlara Etkisi

Gürcan Aral ve Enver Tarhan

*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Gülbahçe, Urla, İzmir*

Reaktif metalik demir (Fe) maddelerinin yüzeyleri kolayca oksitlenir. Bu doğal oksit tabakaları, özellikle yüzey-hacim oranları bakıldığında, nano seviyelerde oldukça önem arz etmektedir. Nano teknolojik verimlilik süreçlerinde, metalik Fe nanotellerin (NT) yüzeyleri üzerinde oluşan doğal oksit tabakalarının mekaniksel deformasyon olaylarına ve mekanizmalarına etkilerinin temellerini anlamak, ayrıca bunlara karşılık gelen mekaniksel sabitleri bulmak önemlidir [1,2]. Özellikle gerilme testlerinin makro boyutta ki örneklerin mekanik özelliklerinin belirlenmesindeki kullanımı çok yaygın olsa da, nano boyuttakilerin testlerine uygulanması son derece zordur. Bu testler nano boyutlu örneklerdeki deneysel zorluklar nedeniyle pratik değildir ve sadece Young modülü ve dayanıklılık gibi basit mekanik testler ile sınırlıdır [2]. MD simülasyonları reaktif kuvvet alanı (ReaxFF) potansiyel modeli ile bu Fe NT'lerinin mekanik deformasyon davranışlarının atomistik seviyede anlaşılmasına etkili bir araçtır [3]. ReaxFF potansiyel modeli atomlar arasındaki bağ oluşmalarını ve bağların kırılması; ve ayrıca atomlar hareket ettiği ve doğal olarak yerel ortamlarının değiştirdikleri için atomlar arasındaki yük değişmesine izin veren etkileşimleri de içermektedir [3,4]. Bu çalışmada, belirli bir çap ve uzunlukta saf metalik, su ve oksijen molekülleri ile oksitlenmiş silindirik Fe NT'lerin, çekme sonucu oluşan deformasyon olaylarına yüzeyde oluşan oksit tabakalarının etkilerinin elastik ve inelastik rejimlerdeki deformasyon davranışları ayrıntılı olarak

karşılaştırdık ve bunlara karşılık gelen mekanik sabitlerini bulduk. Elastik modülleri, Yield strength, Kritik stres değerleri, gibi mekaniksel sabitlerin oksit tabakasının kalınlığına bağlı olarak azaldıklarını gözlemledik. Gerilme deformasyon mekanizması ve davranışlarının elastik bölgede incelenmesi sonucu saf ve oksit Fe NT'ler için yalnızca twinning deformasyon mekanizması etkin olduğunu bulduk. İnelastik deformasyonlar, {112} kayma düzlemlerinde üzerinde oluşan kısmi dislokasyonlar ile başlamıştır. Bu dislokasyonlar <111> doğrultusunda ilerleyerek sonuçta olarak birbirlerine paralel stacking faultları çiftlerini oluşturdu. Bu stacking faults ise twin deformasyonlarının sınırlarına karşılık gelmekte olduğunu ve oksitlenmeden bağımsız olduklarını gözlemledik. Sonuç olarak, yüzeyde oluşan kusurlu oksit tabakası Fe NT'lerin daha kolay deformasyonuna başlamasına neden olmaktadır. Burada elde ettiğimiz sonuçlar Fe metalik NT'lerin endüstride uygulamalarında, örneğin; yeni aletlerin tasarlanması, geliştirilmesi, üretimi, kontrolü, sentezleri ve optimizasyonları için en elverişli koşulların seçilmesi gibi uygulamalarda, büyük katkı sağlayabilir.

### Kaynakça

1. T. Zhu and J. Li, Progress in Materials Science **55**, 710 (2010).
2. P. Landau, Q. Guo, P. Hosemann, Y. Wang, and J. R. Greer, Materials Science and Engineering A **612**, 316 (2014).
3. M. Aryanpour, A. C T van Duin, and J. D. Kubicki, J. Phys. Chem. A **114**, 6298 (2010).
4. K. I. Nomuro, R. K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta, Computer Physics Communications **178**, 73 (2008)

## Sensitivity of tin dioxide thin film to toluene vapor

**H. Mustafa Çakmak**

**Faculty of Education, Mustafa Kemal University, Hatay 31001, Turkey**

Thin film was deposited on quartz substrates by vacuum evaporation of tin metal. For the purpose of converting tin film to tin oxide (SnO<sub>2</sub>), heat treatment procedure under O<sub>2</sub> flow was achieved at the temperature of 800°C, for 2h. Morphological, structural and gas sensing properties of the film were investigated by using Scanning Electron Microscopy (SEM), X-Ray diffractometer (XRD). SEM measurements have revealed that deposited tin dioxide film is composed of micro/nanoparticles. The heat-treated film indicated two strong reflection peaks which can be indexed to a tetragonal SnO<sub>2</sub> crystal structure. Gas sensing characteristics of the film was investigated for different concentrations of toluene vapor. It was found that the sensor is highly sensitive to toluene vapor.

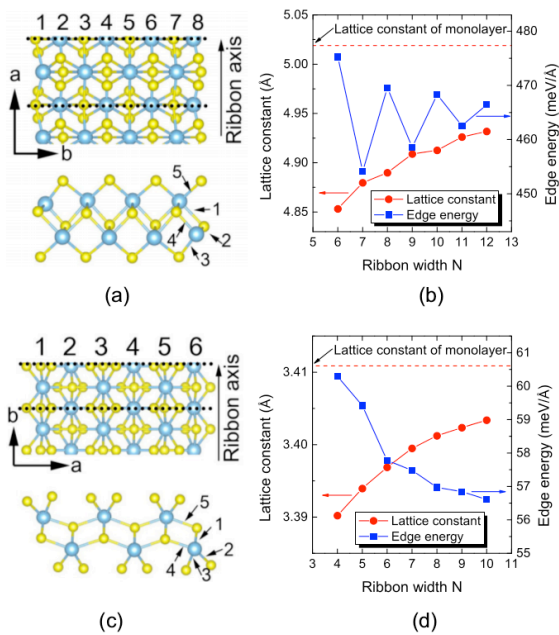
TiS<sub>3</sub> Nanoşeritler

Hediye Duygu Özaydın

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü- Fizik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada, yoğunluk fonksiyoneli teorisi (YFT) kullanarak, TiS<sub>3</sub> nanoşeritlerin elektronik özellikleri, taşıyıcı devinirliği ve gerginlik tepkisi hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlara göre, TiS<sub>3</sub> nanoşeritlerin elektronik özellikleri periyodik yönüne (a veya b eksen yönlü) göre değişmektedir. Bütün **a**-eksenli TiS<sub>3</sub> şeritler metalik taban durumuna sahipken, **b**-eksenli TiS<sub>3</sub> şeritlerin direkt bant aralığına sahip olduğu bulunmuştur. Ayrıca, kenar atomlarının etkisini minimize etmek için hidrojen ile pasive edilen nanoşeritlerden **a**-ekseni boyunca periyodik olanların metalik elektronik yapısını koruduğu, manyetik momentlerinin ise arttığı, **b**-ekseni boyunca periyodik olan şeritlerin ise yasak bant aralığının arttığı görülmüştür.

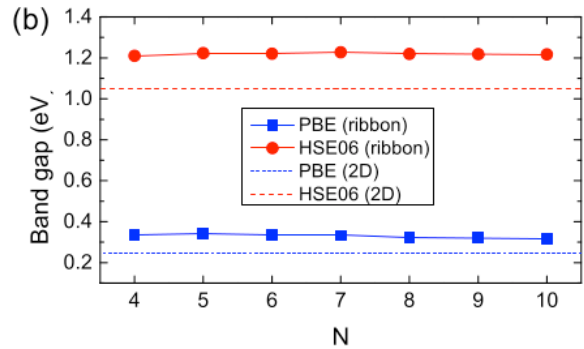
Yakın zamanda sentezlenen ultra-ince malzemelerden olan TiS<sub>3</sub> geçiş-metali kalkojenitidir ve nanoşerit halide deneysel olarak elde edilmiştir [1-2]. Tek-katman TiS<sub>3</sub> üzerine yapılmış hesaplamalı teorik çalışmalar olsa da, bir boyutlu nanoşeritlerin yapısı (Şekil 1) ve elektronik özellikleri ile ilgili kapsamlı bir çalışma bulunmamaktadır. Bu sebeple bu çalışma TiS<sub>3</sub> nanoşeritler ile ilgili cevaplanmamış soruların yanıtı bulanabilir.



**Şekil 1:** (a) 8-**a**-TiS<sub>3</sub> NŞ yukarıdan ve yandan görüntüsü. **a** ve **b** 2-boyutlu TiS<sub>3</sub> tabakasının birim vektörleri ve kesikli çizgi 8-**a**-TiS<sub>3</sub> NŞ için birim hücredir. Kenar atomlarının bağları 1-5 olarak isimlendirilerek gösterilmiştir. (b) Farklı kalınlıktaki **a**-TiS<sub>3</sub> NŞ kafes sabiti ve kenar enerjisi değerleri gösterilmiştir. Kırmızı kesikli çizgi 2-boyutlu tek tabaka TiS<sub>3</sub> için **a**-eksenindeki kafes birim vektörünün

değeridir. (c) ve (d) aynı şekilde ancak 6-**b**-TiS<sub>3</sub> NŞ için elde edilmiş sonuçları göstermektedir.

Hesaplamalar YFT tabanlı VASP programı ile yapılmıştır. Hesaplamalar sonucunda elde edilen sonuçlar göstermektedir ki, **a**-ekseni ve **b**-ekseni boyunca periyodik olan TiS<sub>3</sub> şeritlerin elektronik karakteristiği birbirinden tamamen farklıdır. Farklı genişlikteki **a**-ekseni boyunca periyodik olan nanoşeritler metalik ve manyetik özellik gösterirken, **b**-ekseni boyunca periyodik olan nanoşeritler yarıiletken ve manyetik olmadığı bulunmuştur. Aynı zamanda **b**-ekseni boyunca periyodik olan nanoşeritlerin yasak bant aralığının şeridin genişliğinden bağımsız olduğu sonucu elde edilmiştir (Şekil 2).



**Şekil 2:** Bant aralığının farklı şerit genişliklerine bağlı değişim grafiği. Hem GGA-PBE hem de HSE06 sonuçları verilmiştir. Kesikli çizgi 2-boyutlu TiS<sub>3</sub> tek-katmanın bant aralığına karşılık gelmektedir.

Bütün bunların yanısıra, tekeksenli gerilme altında **b**-TiS<sub>3</sub> NŞ 'lerin enerji-bant diyagramındaki değişikliklere bakılınca (maksimum %10 gerilmeye kadar), bant aralığının gerilme arttıkça arttığı sonucuna varılmıştır.

## Kaynakça

1. I. Ferrer, J. Ares, J. Clamagirand, M. Barawi, and C. Sanchez, Thin Solid Films **535**, 398 (2013).
2. J. O. Island, M. Barawi, R. Biele, A. Almazan, J. M. Clamagirand, J. R. Ares, C. Sanchez, H. S. J. Van der Zant, J. V. Alvarez, R. D'Agosta, I. J. Ferrer, and A. Castellanos-Gomez, Adv. Mater. **27**, 2595 (2015).

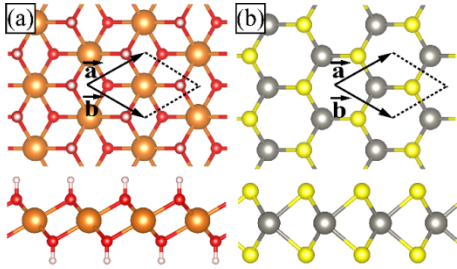
## İKİ KATMANLI $Mg(OH)_2$ - $WS_2$ HETEROYAPISINDA İNDİREKT-DİREKT BANT GEÇİŞİ

Mehmet YAĞMURCUKARDEŞ

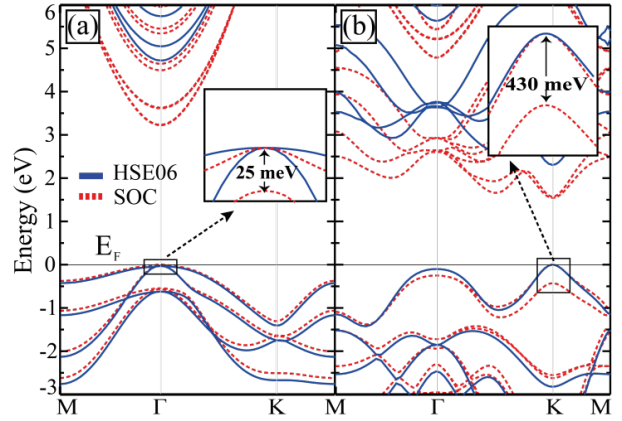
*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü- Fizik Bölümü, 35430 İzmir*

Magnezyum hidroksit ( $Mg(OH)_2$ ) iki boyutlu tek katmanlı yapıların en yeni üyesi olarak henüz sentezlenmiş bir malzemedir[1]. Yapılan deneysel çalışmada  $Mg(OH)_2$  nin sentezlenmesine ek olarak tek katmanlı  $MoS_2$  ile oluşturduğu iki katmanlı heteroyapının da fiziksel özellikleri çalışılmıştır. Biz bu çalışmada  $Mg(OH)_2$  ve  $WS_2$  tek katmanlı yapılarının ve bu iki yapının oluşturduğu iki katmanlı heteroyapının elektronik ve optik özelliklerini yoğunluk fonksiyonel teorisi metodlarını kullanarak çalıştık. İndirekt yasak bant aralığına sahip olan iki katmanlı heteroyapının uygulanan dik dış elektrik alan altında direkt bant aralığı karakterini gösterdiği hesaplandı. Yapılan  $G_0W_0$  hesaplamaları heteroyapıda görülen katman içi salınım gücünün katmanlar arası salınım gücünden daha büyük olduğu gösterildi

Geçtiğimiz 10 yılda grafen, karbon atomlarının iki boyutlu balpeteği örgüsü şeklinde dizilmesiyle oluşan yapı, üzerine yapılan çalışmalar iki boyutlu malzemelere olan ilgiyi arttırmıştır. Grafeni takiben III-V grubu bileşiklerinin tek katmanlı altıgen yapıları ve geçiş metali dikalgenlerinin (GMD) tek katmanlı yapıları da hem deneysel olarak sentezlenmiş hemde teorik olarak büyük ilgi uyandırmıştır. Bir alkalin metal hidroksit grubu üyesi olan  $Mg(OH)_2$  malzemesi de tek katmanlı olarak henüz sentezlenmiştir. İki boyutlu tek katmanlı yapılar üzerine yapılan çalışmalara ek olarak bu yapıların oluşturduğu olası heteroyapılarında fiziksel özellikleri genişçe çalışılmıştır.



**Şekil 1:** Tek katmanlı (a)  $Mg(OH)_2$  ve (b)  $WS_2$  yapılarının yukarıdan görünümü. Siyah vektörler ile hesaplamalarda kullanılan birim hücre gösterilmiştir



**Şekil 2:** Tek katmanlı (a)  $Mg(OH)_2$  ve (b)  $WS_2$  yapılarının elektronik bant yapıları Fermi enerjisi en yüksek değerlilik bandı seviyesine göre ayarlanmıştır.

Yaptığımız hesaplamalarda tek katmanlı  $Mg(OH)_2$  ve  $WS_2$  yapılarının direkt bant aralığı karakterine sahip yarı iletkenler oldukları gösterilmiştir. Bu iki yapının oluşturduğu iki katmanlı heteroyapının ise değerlilik ve iletim bant uçlarını farklı malzemelerden alan indirekt karakterli bir yarı iletken olduğu hesaplanmıştır. Buna ek olarak uygulanan dış elektrik alan altında belirli bir değerle beraber bu bant karakterinin indirekten direkte geçiş yaptığı hesaplanmıştır. Ayrıca bu tek katmanlı yapıların ve oluşturdukları heteroyapının optik özellikleri karşılaştırmalı olarak hesaplanmıştır.

### Kaynakça

1. A. Suslu, K. Wu, H. Sahin, B. Chen, S. Yang, H. Cai, T. Aoki, S. Horzum, J. Kang, F. M. Peeters, and S. Tongay, "Unusual Dimensionality Effects and Surface Charge Density in 2D  $Mg(OH)_2$ ", Scientific Reports 6, 20525 (2016).



## Co katkılanmış $PbTiO_3$ perovskit yapılarda enerji durumlarının standart ve hibrit yoğunluk fonksiyonelleri ile incelenmesi

**Merve Yortanlı<sup>a</sup>, Oğuz Gülseren<sup>b</sup>, Deniz Üner<sup>c</sup>, Şinasi Ellialtıoğlu<sup>d</sup>, Ersen Mete<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Balıkesir Üniversitesi, Fizik Bölümü, 10145 Balıkesir

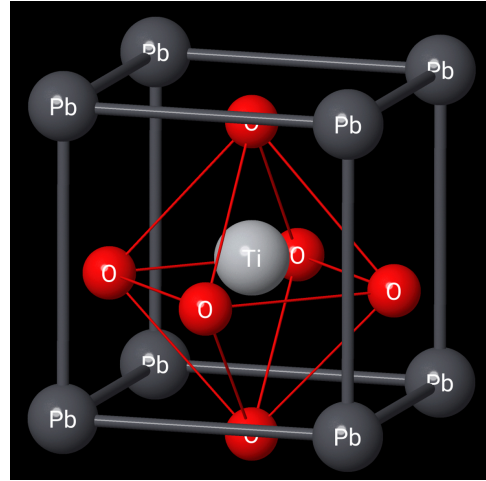
<sup>b</sup>Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800 Ankara

<sup>c</sup>Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Kimya Mühendisliği, 06800 Ankara

<sup>d</sup>TED Üniversitesi, Temel Bilimler, 06420 Ankara

Kurşun titanat külçe yapısı içinde çeşitli sayıda ve konfigürasyonda kobalt dopanlarının oluşma enerjileri ve bu safsızlıkların elektronik band aralığında konum ve mahiyetleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi hesaplamaları ile incelendi. Yerel yoğunluğa bağlı standart değiş-tokuş ve korelasyon (XC) fonksiyonellerinin yarıiletken bant aralıklarını deneysel değerlere göre düşük bulması sebebiyle modern hibrit yaklaşımları kullanıldı. Hartree-Fock değiş-tokuş enerjisi katılmış DFT fonksiyonellerinin bu fiziksel sistemlerin elektronik yapısını deneysel verilerle örtüşecek şekilde daha başarılı tasvir ettiği görüldü.

Son yıllarda, güneş ışığından faydalanarak  $CO_2$  ve  $H_2O$ 'dan elektro, foto ve termokimyasal oksijen ayrıştırma yoluyla yenilenebilir kimyasal yakıtların elde edilmesi konusunda perovskit yapılar öne çıkmaktadır.[1] Bu konuda  $PbTiO_3$  perovskit malzemesi bu amaca uygun olacak adaylardan biri olarak yeni çalışmalarda yer almaya başlamıştır.[2] Modern hibrit yoğunluk fonksiyonelleri  $ABO_3$  stokiyometrisindeki materyallerde oksijen difüzyonu mekanizmalarının belirlenmesinde, oksijen boşluk oluşum enerjilerinin ve bunlara ait enerji durumlarının deneysel gözlemlerle uyuşacak biçimde türetilmesinde başarılı sonuçlar vermektedir. Kübik yapıdaki  $PbTiO_3$  763K sıcaklığında faz geçişi yaparak tetragonal bir kristal örgüye sahip olmaktadır. Geniş bant aralığı X- $\Gamma$  arasında 3.4 eV civarında iken standart yoğunluk fonksiyoneli hesaplamaları 1.7 eV gibi düşük bir değer vermektedir. Kurşun titanat için yaptığımız yerel olmayan tam (exact) değiş-tokuş ile takviye edilmiş yoğunluk fonksiyoneli hesaplamaları sonucu deneysel aralık değerini türetilabileceği gösterilmiştir.



**Şekil 1:**  $PbTiO_3$  konvansiyonel birim hücresi

Pb yerine yapılacak Co katkılmasının örgüde meydana getireceği yerel bozulmalar, buna bağlı olarak oksijen bağlanma enerjisindeki değişimler ve enerji bant yapısı üzerindeki etkileri hesaplanmıştır.

### Kaynakça

1. M. Ezbiri, K. M. Allen, M. E. Galvez, R. Michalsky, A. Steinfeld, “Design Principles of Perovskites for Thermochemical Oxygen Separation”, ChemSusChem **8**, 1966--1971 (2015).
2. T. Xu, T. Shimada, Y. Araki, J. Wang, T. Kitamura, “Multiferroic Domain Walls in Ferroelectric  $PbTiO_3$  with Oxygen Deficiency”, Nano Lett. **16**, 454–458 (2016).

## YOĞUN LAZER ALANI ALTINDAKİ ÇİFT-BARİYER YAPILARDA ELEKTRON TAŞINIMI

Neslihan Akıncı<sup>1</sup>, Mehmet Batı<sup>1,2</sup>, Dilara Gül Kılıç<sup>1</sup>, Serpil Şakiroğlu<sup>2</sup>, İsmail Sökmen<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35390, İzmir

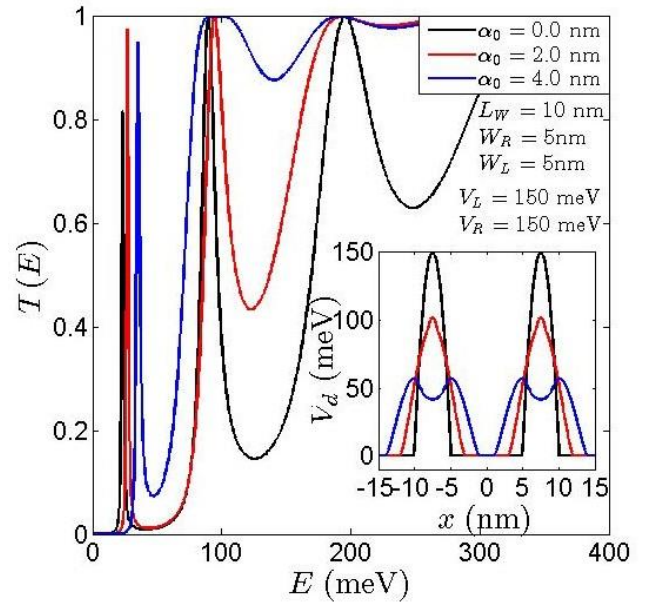
<sup>2</sup>Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 35390, İzmir

Bu çalışmada, yüksek-frekanslı yoğun lazer alanı altındaki simetrik ve asimetric ters parabolik çift-bariyer kuantum sistemlerinde rezonant tünelleme teorik olarak incelenmiştir. Floquet yaklaşımı çerçevesinde ele alınan lazer alanının, farklı yapı parametreleri için potansiyel profili üzerindeki etkisi araştırılmıştır. Dengedışı Green fonksiyonu metodu kullanılarak geçiş katsayısının nümerik hesabı gerçekleştirilmiş sonuçlar tipik GaAs kuantum sistemi için verilmiştir.

Düşük-boyutlu yarı iletken yapı üretimindeki son dönem gelişmeleri, nanoyapılara dayalı elektronik cihazların karakteristiklerinin belirlenmesinde önem arz eden elektron taşınımının kontrol edilebilirliği için yeni olanaklar sağlamaktadır [1]. Bir-boyutlu kuantum yapılarda elektronik taşınımın ve rezonant tünellemenin anlaşılması, yüksek performanslı elektronik devrelerin geliştirilmesi açısından önem taşıdığından, teorik ve deneysel araştırmaların yoğun çalışılan bir problemi olmuştur. Simetrik ve asimetric çift bariyer kuantum sistemlerine dayalı rezonant tünelleme diyotları ve transistörleri yeni-nesil elektronik devreler olarak göze çarpmaktadır. Düşük-boyutlu kuantum sistemlerinde rezonant tünelleme karakteristiklerinin, dış alanlara (elektrik, manyetik veya lazer) ve yapının geometrik parametrelerine bağlılığının anlaşılması ve kontrol edilebilirliğinin sağlanması teknolojik açıdan oldukça önemlidir [2,3].

Bu çalışmada, yüksek-frekanslı, rezonant olmayan, yoğun lazer alanı ile kontrol edilebilen simetrik ve asimetric ters parabolik çift-bariyer yapılarda rezonant tünelleme için taşınım karakteristikleri teorik olarak araştırılmıştır. Farklı yapısal faktörler için tünelleme geçiş katsayısı, sonlu farklar metoduna dayalı dengedışı Green fonksiyonu kullanarak analiz edilmiştir [4]. Elde edilen sonuçlar, yüksek-frekanslı yoğun lazer alanının potansiyel profilini önemli ölçüde değiştirdiğini göstermektedir. Ayrıca, tünelleme geçiş

katsayısının kuyu genişliğine, bariyer genişliğine/yüksekliğine ve yoğun lazer alanın şiddetine güçlü bir şekilde bağlı olduğunu ortaya koymaktadır. Elde edilen sonuçların devre uygulamalarında rehberlik etmesi beklenmektedir.



**Şekil 1:** Yoğun lazer alanı altındaki simetrik ters parabolik çift-bariyer sistemi için geçiş katsayısının elektron enerjisine göre değişimi.

### Kaynakça

1. S. Aktaş, A. Bilekkaya, F.K. Boz, S.E. Okan, Superlatt. Microst. 85 (2015) 266-273
2. S. Aktaş, M. Yılmaz, Physica E 75 (2016) 47-51
3. F.Z. Meghoufel, S. Bentata, S. Terkhi, F. Bendahma, S. Cherid Superlatt. Microstruct. 57 (2013) 115
4. M. Batı, S. Sakiroğlu, İ. Sökmen, Chin.Phys.B 25 (2016) 057307

[Na-Dekore Edilmiş BC<sub>3</sub> Katmanının 7H<sub>2</sub> Depolama Özelliklerinin İncelenmesi ]

[Sezgin Aydın ]

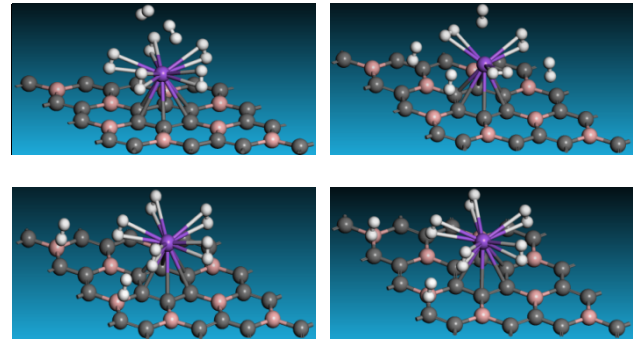
[Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 06500 Ankara ]

[Enerji, insanlık tarihi boyunca her yönüyle en temel ihtiyaçlardan biri olmuştur ve günümüzde büyük oranda fosil yakıtlar kullanılarak elde edilmektedir. Fosil yakıt kullanımı çeşitli dezavantajlara sahiptir, örneğin bu tür yakıtlar çevreyi kirletirler, küresel ısınmaya katkıda bulunurlar ve miktar olarak sınırlıdır. Bu nedenle, her geçen gün artan enerji ihtiyacından dolayı çevreci, yenilenebilir ve ekonomik alternatif kaynaklara ihtiyaç duyulmaktadır. Hidrojen bunlardan biridir ve depolanmasındaki teknolojik zorluklara rağmen yenilenebilir olması, çevreci olması, bol miktarda bulunması, hafif ve yüksek enerji yoğunluğuna sahip olması gibi avantajlara sahiptir]

[Grafen, bor-katkılı grafen [1, 2], bor ve azot katkılı grafen, metal-dekore edilmiş grafen ve alkali-dekore edilmiş grafen [3, 4] gibi sistemler hidrojen depolama için yaygın bir şekilde kullanılan materyallerdir. Düzlemsel kalabilen BC<sub>3</sub> bunlara örnek olarak verilebilir [5]. Literatürde bu katmanın Ca-dekore edilmiş halinin hidrojen depolama özellikleri incelenmiştir.

Bu çalışmada, tek-terafı ve kapasiteyi artırmak için iki-terafı Na-dekore edilmiş BC<sub>3</sub> tabakasının 7H<sub>2</sub> (iki-teraf için 14H<sub>2</sub>) depolama özellikleri DMol<sup>3</sup> programı kullanılarak araştırıldı. Hesaplamalar yoğunluk fonksiyoneli teorisi kapsamında atomik baz setleri kullanılarak yapıldı. Hidrojen moleküllerinin farklı başlangıç geometrilerine bağlı olarak optimizasyonlar sonucunda elde edilen 4-farklı sistemin (Şekil 1) bağlanma, yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. H<sub>2</sub>-başına hesaplanan ortalama bağlanma enerjilerinin 0.2 eV'den daha büyük olduğu ve bu tür uygulamalarda beklenen enerji aralığına düştüğü belirlendi. Hidrojen depolama süreçlerinin başlangıç geometrilerinden

etkilendiği, bu sayede aynı kimyasal formüle sahip farklı uzaysal geometrilerin elde edilebileceği, sadece dekore-edilen metalin değil bor katkılı tabakanın da H<sub>2</sub>-depolama süreçlerinde önemli bir rol oynadığı görüldü. Sonuç olarak, bu çalışma ile teorik olarak sunulan alternatif geometri Na ile dekore edilmiş 7H<sub>2</sub>-BC<sub>3</sub> sistemlerin hidrojen depolama uygulamalarında tercih edilebileceği gösterilmiş oldu.]



Şekil 1: Na-dekore edilmiş BC<sub>3</sub> tabakası için 7H<sub>2</sub> tutunma geometrileri]

## [Kaynakça

1. J. Li, X. Wang, K. Liu, Y. Sun, L. Chen, "High hydrogen-storage capacity of B-adsorbed graphene: first-principles calculation", Solid State Comm. **152**, 386-389 (2012)
2. X. Wang, Z. Zeng, H. Ahn, G. Wang, "First-principles study on the enhancement of lithium storage capacity in boron doped graphene", App. Phys. Lett. **95**, 183103 (2009)
3. F. D. Wang, F. Wang, N. N. Zhang, Y. H. Li, S. W. Tang, H. Sun, Y. F. Chang, R. S. Wang, "High-capacity hydrogen storage of Na-decorated graphene with boron substitution: first-principles calculations", Chemical Physics Lett. **555**, 212-216 (2013)
4. H. An, C.-S. Liu, Z. Zeng, C. Fan, X. Ju, "Li-doped B<sub>2</sub>C graphene as potential hydrogen storage medium", App. Phys. Lett. **98**, 173101 (2011)
5. Z. Yang, J. Ni, "Hydrogen storage on calcium-decorated BC<sub>3</sub> sheet: A first principles study", App. Phys. Lett. **07**, 252117 (2010)

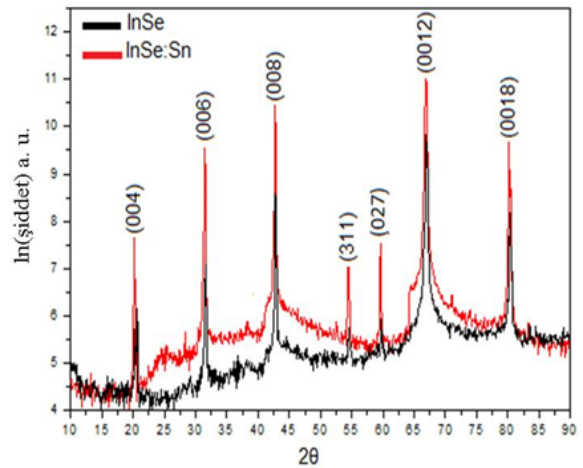
## InSe ve InSe: Sn Kristallerinin Transmisyon Faktörlerinin, Tavlama Süresine Bağlı Değişimi

Burcu AKÇA<sup>1</sup>, Salih ERZENEĞLU<sup>2</sup>, Bekir GÜRBULAK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ardahan Üniversitesi, Bilgisayar Mühendisliği, 75000, Ardahan  
<sup>2,3</sup>Atatürk Üniversitesi, Fizik Bölümü, 25040, Erzurum

Bu çalışmada Bridgman/Stockbarger metoduyla büyütülmüş InSe ve InSe:Sn yarıiletken kristallerinin transmisyon faktörlerinin, tavlama süresine bağlı değişimleri incelenmiştir. Bu kristallerin yapısal ve örgü parametreleri X-ışını kırınım yöntemi (XRD) ve enerji ayırmalı X-ışını tekniği (EDX) kullanılarak analiz edilmiştir. InSe ve InSe: Sn kristallerinin hegzagonal yapıda oldukları ve 2θ pik değerinde birbirlerine oldukça yakın değerler aldıkları tespit edilmiştir. InSe ve InSe: Sn; XRD spektrumu Şekil 1’ de verilmiştir. Çalışmamızda, ihtiyaca göre kullanılacak numunelerde hangi amaç güdülyorsa ona göre tavlama süresi ve sıcaklığı belirlenebileceği, öyleki amaç daha soğuru bir numuneyse transmisyon faktörünü azaltacak yönde, daha geçirgen bir numuneyse de transmisyon faktörünü arttıracak yönde bir işlem yapılabileceği sonucu ortaya çıkmıştır.

Deneyde, şiddeti 100mCi olan Am-241 radyoaktif kaynağının 59,5 keV enerjili fotonları ve enerji ayırmalı X-ışını spektrometresi kullanılmıştır. Camberra DSA-1000 spektrum analizörü 4096 kanala ayarlanarak 600 saniyelik sayımlar numuneli ve numunesiz olarak en az üç kez tekrarlanmıştır ve ortalamaları alınmıştır. Alınan ölçüler MATLAB-R2007a programında işlenerek OriginPro 7.5 programına aktarılmıştır ve foton şiddet alanları hesaplanmıştır. Daha sonra grafikler için OriginPro 8.0 programı kullanılmıştır. Tavlama süresinde 0 dakikadan başlayarak 10 dakika artışlarla 60 dakikaya, tavlama sıcaklığında ise 50°C den başlayarak 50°C artışlarla numunelerin yandıkları en son sıcaklığa çıkmıştır.



Şekil 1: InSe ve InSe: Sn için XRD spektrumu

Yanma sıcaklığı InSe için 300°C iken, InSe: Sn için 350°C olarak belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar grafiksel olarak verilmiştir [1].

### Kaynakça

1. B. Akça, S. Z. Erzenoğlu, B. Gürbulak, “Measurement of  $\gamma$ -ray transmission factors of semiconductor crystals at various annealing temperature and time” Indian Journal of Pure & Applied Physics **53** (1), 49-55 (2015).

## Vitamin B<sub>12</sub> 'nin elektronik özelliklerinin orbitaller-arası Coulomb etkileşimleri içeren Haldane-Anderson modeli çerçevesinde incelenmesi

**Selma Mayda, Zafer Kandemir ve Nejat Bulut**

*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430, İzmir*

Bu çalışmamızda, vitamin B<sub>12</sub> 'nin (C<sub>63</sub>H<sub>88</sub>CoN<sub>14</sub>O<sub>14</sub>P) elektronik özelliklerini, orbitaller-arası Coulomb etkileşimleri içeren çok-orbitalli Haldane-Anderson modelini [1] kullanarak inceledik. Burada, vitamin B<sub>12</sub> 'de bulunan kobalt (Co) atomunun 3d orbitallerini safsızlık atomu, diğer orbitalleri ev sahibi yapı olarak tanımladık. Haldane-Anderson modelinin parametrelerini yoğunluk fonksiyoneli teorisini (YFT) kullanarak hesapladık ve molekülün elektronik yapısını elde ettik. Daha sonra, Hirsch-Fye kuantum Monte Carlo (HFKMC) [2] algoritmasını kullanarak safsızlık manyetik korelasyon fonksiyonlarını ve safsızlık orbitallerinin doluluk oranlarını hesapladık. Bu sonuçları, YFT hesapları ve orbitaller-arası etkileşimlerin hesaba katılmadığı YFT+KMC hesapları ile karşılaştırdık. Sonuç olarak, orbitaller-arası Coulomb etkileşimleri eklendiğinde, safsızlık elektronları arasında yüksek manyetik korelasyonların oluştuğunu ve daha önce bulduğumuz sıçrama mevkilerinin kaybolmadığını gördük.

### **Kaynakça**

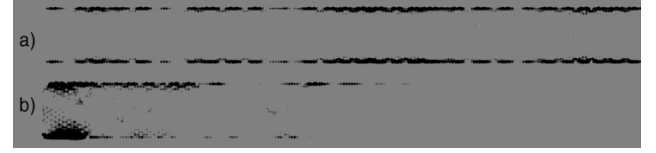
1. F. Haldane and P. Anderson, “Simple Model of Multiple Charge States of Transition-metal Impurities in Semiconductors”, Physical Review B, 13, 2553-2559, (1976).
2. J. E. Hirsch and R. M. Fye, “Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals”, Phys.Rev.Lett., 56, 2521-2524, (1986).

## Grafen Nanoşeritlerde Metal-Yalıtkan Geçişinin Sıkı-Bağlanma Yaklaşımı ile Gözlemlenmesi

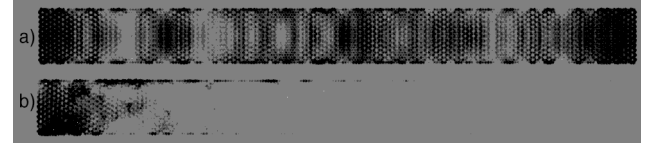
H. U. Özdemir, K. Çakmak, A. Altıntaş, A. D. Güçlü

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, Gülbahçe, Urla, İzmir

Özdirenci, kuantum özdirenciden ( $h/e^2$ ) yüksek olan metallerin düşük sıcaklıklarda Anderson lokalizasyonunu(AL) göstermesi beklenir[1]. AL şimdiye kadar birçok malzemede gözlemlenmesine karşılık, grafen nanoyapılarda electron-boşluk göletleri ve bu göletler arası balistik elektron transferinden dolayı gözlemlenememiştir [2]. Daha önceki teorik çalışmalarda K ve K' bandları arası saçılmaları dikkate almayan uzun mesafeli düzensiz sistemler değerlendirilmiştir[3,4]. Bu teorik çalışmada 9764 atomluk ve 55.5 nm uzunluğunda grafen nanoşerite kısa mesafeli düzensizlikler ekleyerek zamana bağlı sıkı-bağlanma yaklaşımı ile kenar ve yığın atomlarında metal yalıtkan geçişini gözlemledik ve lokalize dalga fonksiyonları elde ettik.



**Şekil 1:** Zamanın  $10^7/h$  olduğu anda (a) saf ve (b) kısa mesafe düzensizlik eklenmiş sistemde elektron yoğunluğunun kenar atomlarına dağılımı.



**Şekil 2:** Zamanın  $10^7/h$  olduğu anda (a) saf ve (b) kısa mesafe düzensizlik eklenmiş sistemde elektron yoğunluğunun yığın atomlarına dağılımı.

**Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 114F331 no'lu proje kapsamında desteklenmiştir.**

### Kaynakça

1. P.W. Anderson, “Absence of Diffusion in Certain Random Lattices”, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
2. L. A. Ponomarenko, A. K. Geim, A. A. Zhukov, R. Jalil, S. V. Morozov, K. S. Novoselov, I. V. Grigorieva, E. H. Hill, V. V. Cheianov, V. I. Fal'ko, K. Watanabe, T. Taniguchi and R. V. Gorbachev, “Tunable Metal–Insulator Transition in Double-Layer Graphene Heterostructures”, Nature Physics **7**, 958–961 (2011).
3. G. Schubert, H. Feshke “Metal-to-Insulator Transition and Electron-Hole Puddle Formation in Disordered Graphene Nanoribbons”, PRL **108**, 066402 (2012).
4. Aaron Bostwick, Jessica L. McChesney, Konstantin V. Emtsev, Thomas Seyller, Karsten Horn, Stephen D. Kevan, and Eli Rotenberg, “Quasiparticle Transformation during a Metal-Insulator Transition in Graphene”, PRL **103**, 056404 (2009)

## Elektrik ve Manyetik Alanların Etkisi Altında Spin-Yörünge Etkileşimli Çift Kuantum Telinin Enerji Dispersiyonu ve İletkenliği

Yenal Karaaslan<sup>1</sup>, Bircan Gişi<sup>1</sup>, Serpil Şakiroğlu<sup>2</sup>, İsmail Sökmen<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35390, İzmir

<sup>2</sup>Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 35390, İzmir

Bu çalışmada Rashba ve Dresselhaus spin-yörünge etkileşimlerinin hesaba katıldığı çift kuantum telinin enerji spektrumları ve sıfır-sıcaklık balistik iletkenliği üzerine elektrik ve manyetik alanın kombine etkisi teorik olarak araştırılmıştır. Elde edilen sonuçlar, enerji dağılımının ve sistemin enerji spektrumu ile doğrudan hesaplanabilen balistik iletkenliğinin spin-yörünge etkileşimlerinin yanı sıra elektrik ve manyetik alanların şiddetine ve sistemin potansiyel profiline çok hassas olarak bağlı olduğunu göstermiştir.

Son zamanlarda, yüksek performanslı cihazlardaki potansiyel uygulamaları sayesinde, farklı yöntemlerle külçe yapısındaki yük taşıyıcılarının hareket yönlerinin sınırlandırılması ile elde edilen düşük-boyutlu yarı iletken hetero-yapıların fiziksel özellikleri yoğun bir şekilde çalışılmaktadır [1]. Bu düşük-boyutlu yapıları oluşturmanın bir yolu, bir hapsedme potansiyeli yardımı ile yük taşıyıcılarının hareketini kısıtlamaktır. Düşük-boyutlu yapılarda bilgi işleme için elektron yükünün yanı sıra spininin de hesaba katılmaya başlanmasıyla üretilen yeni cihazlar, mevcut yarı iletken cihazlara oranla daha güçlü, küçük ve hızlı karakteristikler sunmaktadır [2]. Böylesi spintronik yapılarda spin serbestlik derecesinin kontrol edilebilirliğini sağlayan temel mekanizmalardan biri spin-yörünge etkileşimidir. İki boyutlu elektron gazı yapıları için spin-yörünge etkileşiminin iki türü söz konusudur: hapsedme potansiyelinin terslenme asimetrisinden kaynaklanan Rashba ve kristal yapının külçe terslenme asimetrisinden kaynaklanan Dresselhaus spin-yörünge etkileşimleri [3]. Teorik olarak modellenilen düşük-boyutlu sistemlerin gerçek hayattaki olası uygulamaları için somut ve etkili bir yönlendirme sağlaması bakımından, spin-yörünge etkileşimleri gibi içsel etkilerinin yanı sıra pratik uygulamalarda maruz kalabilecekleri elektrik ve manyetik alan gibi dış faktörlerin etkisi altındaki fiziksel davranışlarının incelenmesi de önem arz etmektedir [4,5].

Bu bağlamda, bu çalışmada fizik ve kimyada uzun yıllardır bilinen ve tünelleme gibi fiziksel bir olgunun anlaşılmasına da katkı sağlayan simetrik çift kuyu potansiyeli ile tanımlanan kuantum telinin elektronik yapısı incelendi [5]. Dik bir dış manyetik ve elektrik alan etkisi altındaki, Rashba ve Dresselhaus spin-yörünge etkileşimlerinin hesaba katıldığı etkileşen çift kuantum tel sisteminin enerji özdeğer ve özfonksiyonları, Schrödinger denkleminin birinci kuantizasyon yöntemi çözümü ile elde edildi. Sistemin enerji spektrum davranışının ve buna bağlı olarak doğrudan elde edilebilen sıfır-sıcaklık mükemmel balistik iletkenlik davranışının uygulanan dış elektrik ve manyetik alana, spin-yörünge etkileşimleri ve potansiyel profiline güçlü bir şekilde bağlı olduğu görüldü. Yarı iletken büyütme tekniklerindeki hızlı gelişmeler farklı geometrik şekillerdeki düşük-boyutlu yapıların oluşturulmasına olanak tanıdığı için, çalışmamızın literatüre ve teknolojik gelişmelere katkı sağlamasını beklemekteyiz.

### Kaynakça

1. J.H. Davies, "The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction", Cambridge University Press, Cambridge, England, 1998.
2. S.A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S. Von Molnar, M.L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, D.M. Treger, "Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future", *Science* **291**, 1488-1495 (2001).
3. S. Zhang, R. Liang, E. Zhang, L. Zhang, Y. Liu, "Magnetosubbands of semiconductor quantum wires with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling", *Physical Review B* **73**, 153316-(1-7) (2006).
4. J-R. Shi, B-Y. Gu, " Magnetoconductance oscillations of two parallel quantum wires coupled through a potential barrier", *Physical Review B* **55**, 9941-9948 (1997).
5. Y. Karaaslan, B. Gisi, S. Sakiroglu, E. Kasapoglu, H. Sari, I. Sokmen, "Spin-orbit interaction and magnetic field effects on the energy dispersion of double quantum wire", *Superlattices and Microstructures* **85**, 401-409 (2015).