Katmanlı ve Katmansız Yapılarda Kalınlığa Bağlı Değişen Elektronik ve Titreşimsel Özellikler

Mehmet Yağmurcukardeş

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü-Fotonik Bölümü, 35430 İzmir-Türkiye

Karbon atomlarının bal peteği örgüsünde sp^2-hibritleşmesi yaparak meydana getirdiği grafenin, grafit malzemesinin en küçük yapıtaşı (tek katmanı) olarak başarılı bir şekilde sentezi benzeri bir çok yeni malzemenin bulunmasına ön ayak olmuştur. Grafen ve benzeri birçok yeni malzeme katmanlı yığın yapılarından ayrıştırılarak farklı kalınlıklarda kontrollü bir şekilde sentezlenebilmektedir. Yakın zamanda gelişen deneysel yöntemler yığın durumunda katmanlı yapıya sahip olmayan malzemelerin de iki boyutlu ince formlarının sentezlenebileceğini başarılı şekilde ortaya koymuştur. Bu konuşma, katmanlı ve katmansız yapılarda malzeme kalınlığı ile değişen elektronik ve titreşimsel özelliklere odaklanacaktır. Katmanlı PbI_2 ve katmansız Fe_2O_3 malzemeleri üzerine elde ettiğimiz teorik sonuçlar sunulacaktır.

Grafen[1] ve MoS_2[2] gibi malzemeler katmanlı yığın yapılarında zayıf van der Waals (vdW) tipi zayıf kuvvetlerle etkileşen iki boyutlu (2B) malzemelerdir. Bu yapılarda var olan zayıf vdW kuvvetleri katmanların ayrıştırılmasını ve kontrollü katman sayısının sentezini mümkün kılmaktadır. Örneğin, MoS_2 yapısı yığın durumundan tek katmanlı duruma indirgendiğinde elektronik olarak endirekt yasak bant aralığından direkt yasak bant aralığına sahip yarı-iletken özellik sergileyeceği rapor edilmiştir.

Katmanlı yığın yapıları bulunmayan Hematit (Fe_2O_3)[3] gibi ultra ince malzemeler de yakın zamanda başarılı şekilde deneysel olarak sentezlenerek 2B malzemeler ailesine katılmıştır. Katmanlı yığın yapıları olmaması sebebi ile bu malzemelerde farklı yönelime sahip 2B formlar elde edilebilir ve bu yapılar kalınlığa bağlı olarak keskin değişen özellikler sergileyebilirler. Gerek katmanlı gerekse katmansız yığın yapısına sahip bu malzemelerde malzeme kalınlığının titreşimsel spektrum üzerinden anlaşılabilmesi fonon modları üzerinden mümkündür.

İlk çalışmamız da katmanlı yapıların katman sayısı ile değişen elektronik ve titreşimsel özellikleri yakın zamanda sentezlenmiş olan PbI_2 özelinde rapor edilmiştir. PbI_2 malzemesinde 3 katman ve daha kalın yapılarda endirekt-direkt yasak bant aralığı geçişi bulunmuştur. Ayrıca, titreşimsel olarak indirgenmiş monoatomik (doğrusal) zincir modeli (LCM), düşük frekanslı titreşimsel modların katman sayısına bağımlılığının oldukça doğru açıklanmasını sağladığı gösterilmiştir. Ek olarak, Raman spektrumunun katmanlı PbI_2'de katmanlar arası etkileşim gücünü incelemek için güçlü bir analiz olduğu gösterilmiştir.

Bir diğer çalışmamızda ise, katmanlı yığın durumuna sahip olmayan Fe_2O_3 te değişen malzeme kalınlığının malzeme özelliklerine olan keskin etkileri rapor edilmiştir. Elde ettiğimiz sonuçlar tek katmanlı, az katmanlı 2B ve yığın durumlarının elektronik ve titreşimsel spektrumlar üzerinden ayırt edilebileceğini göstermiştir. Yüzey atomlarının yapısal olarak yeniden yapılanması malzemenin yarı-iletkenden metallik özelliğe geçişine yol açtığı bulunmuştur.

Sonuç olarak yukarı da özetlediğimiz iki farklı çalışma, katmanlı yada katmansız yığın durumuna sahip malzemelerde kalınlıkla malzeme özelliklerinin nasıl değiştiği ve Raman spektrum ölçümlerinin malzeme kalınlığını tayin etmede önemli bir yöntem olduğu Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi tabanlı hesaplamalar ile rapor edilmiştir.

Kaynakça

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films Science" **306**, 666 (2004).
2. J. N. Coleman et al., "Two-Dimensional Nanosheets Produced by Liquid Exfoliation of Layered Materials", Science, **331**, 568 (2011).
3. A. P. Balan et al., "Exfoliation of a non-van der Waals material from iron ore hematite" Nature Nanotechnology, **13** 602 (2018)